

### 3ª Lista de Exercícios de Interações Atômicas e Moleculares - 1º quadrimestre 2016

#### Questões

- 1-) O que são forças intramoleculares e intermoleculares
- 2-) Explique e discuta as forças intramoleculares e intermoleculares em gases, líquidos e sólidos.
- 3-) O que são as forças de Van der Waals? Quais os tipos e quais as características destas forças.
- 4-) (a) Discuta as propriedades elétricas de moléculas. (b) O que são: dipolos elétricos, polaridade molecular, polarização. Qual a relação entre o índice de refração e polarização.
- 5-) Descreva procedimentos experimentais para determinação do momento de dipolo elétrico de uma molécula
- 6-) O que são os n-polos elétricos? Quais são os tipos? Esboce arranjos de cargas elétricas que correspondem a um monopolo, dipolo, quadrupolo, octopolo, e discuta as razões para as diferentes dependências dos campos elétricos com as distâncias entre as cargas.
- 7-) Explique as propriedades microscópicas em líquidos. O que é uma função de distribuição radial e para que serve na descrição de sistemas condensados?
- 8-) Descreva as teorias que tratam os movimentos moleculares em líquidos..
- 9-) Classifique as moléculas ( $ClF_3$ ,  $O_3$ ,  $H_2O_2$ ,  $SO_3$ ,  $XeF_4$ ,  $SF_4$ ) quanto à polaridade. Justifique as respostas.
- 10-) Calcule a resultante de dois momentos de dipolo, com módulos de 1,5D e 0,8D, que fazem entre si um ângulo de  $109,50^\circ$ .
- 11-) A polarizabilidade volumar de  $H_2O$  é  $1,48 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$ . Calcule o momento de dipolo da molécula (além do momento de dipolo permanente) induzido por um campo elétrico externo de intensidade  $1000 \text{ V/cm}$ .

**12-)** Discuta as relações entre as propriedades termodinâmicas nos líquidos

**13-)** Discuta as diferenças e semelhanças em termos das ligações e estrutura em: a) líquidos; b) sólidos metálicos; c) cristais iônicos;

**14-)** Diamante é um dos materiais mais duros conhecido. Explique isto em termos de sua estrutura.

**15-)** Que tipo de radiação é mais adequado para o estudo de sólidos e cristais e por quê?

**16-)** Explique por que o saldo de forças atrativas entre moléculas polares diminuem quando a temperatura aumenta. Compare isto com a dependência da temperatura da polarização molar de substâncias polares sob a ação de um campo externo

**17-)** (a) Discuta os princípios da teoria de bandas. (b) Como o caráter iônico de um sólido iônico é refletido no sistema de bandas? (c) O que são sólidos isolantes, condutores e semicondutores. (d) Quais as características destes materiais em termos da estrutura eletrônica?

**18-)** Mostre que o potencial de Lennard-Jones pode ser escrito como:

$$u(r) = \epsilon \left( \frac{r^*}{r} \right)^{12} - 2\epsilon \left( \frac{r^*}{r} \right)^6$$

onde  $r^*$  é o valor no qual  $u(r)$  tem um mínimo. Determine também a força devido ao potencial.

**19-)** O cromo cristaliza em uma estrutura cúbica de corpo centrado com uma densidade  $7,20 \text{ g.cm}^{-3}$  a  $20^\circ \text{C}$ . Calcule o comprimento de uma célula unitária e a distância entre os planos sucessivos 110, 200 e 111.

**20-)** A densidade da prata a  $20^\circ \text{C}$  é  $10,50 \text{ g.cm}^{-3}$  e tem uma célula unitária cúbica. Dado os primeiros ângulos de difração de Bragg que são:  $\theta = 19,10^\circ$ ;  $22,17^\circ$ ;  $32,33^\circ$ ;  $38,82^\circ$ ;  $40,88^\circ$ , ache o tipo de célula unitária e seu tamanho. Sendo o comprimento incidente é  $\lambda = 154,433 \text{ pm}$ .

**21-)** Mostre que a equação de Bragg pode ser escrita como:

$$\text{sen}^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2)$$

O grafite é conhecido por cristalizar em uma estrutura cúbica, suponha que uma amostra de pó de grafite tenha os seguintes ângulos de reflexão:  $15,66^\circ$ ;  $18,17^\circ$ ;  $26,13^\circ$ ;

$\text{sen}^2\theta$	Divisão por 0,0729	Conversão do Valor Inteiro	hkl
0,0729	1	3	111
0,0972	1,33	4	200

Tabela 1: Ângulos de Difração do Grafite

31,11°; 32,71° e 38,59° usando raios x com  $\lambda=154,433$  pm, complete a tabela abaixo, determine o tipo de célula unitária e determine seu comprimento.

**22-)** O ângulo de difração de Bragg de segunda ordem do plano 222 de um cristal de potássio é  $\theta=27,43^\circ$ , quando o comprimento de onda da radiação-x é  $\lambda=70,926$  pm. Dado que o potássio existe em uma rede cúbica de corpo centrado, determine o comprimento da célula unitária e a densidade do cristal.

**23-)** Demonstre a lei de Bragg