BC&T – BC0104 – Interações Atômicas e Moleculares
Quarta Lista de Exercícios

Universidade Federal do ABC

1) A molécula de HCl tem um momento de dipolo de aproximadamente 1D. Qual o valor da carga efetiva presente em cada átomo da ligação química ?

2) a) Defina o que é polarizabilidade. b) Qual a contribuição à energia do sistema quando aplicamos um campo elétrico a uma molécula (dipolo e dipolo induzido)?

3) O que é permissividade elétrica do meio e como ela pode ser medida ? Em um processo de solvatação de um sal iônico, como a permissividade do solvente pode alterar as interações soluto-soluto e soluto-solvente ?

4) Derive o limite assintótico da interação dipolo-dipolo e carga-dipolo. Escolha uma orientação conveniente.

5) Derive a expressão da media térmica de interação entre dois momentos de dipolo permanentes. Devemos usar o mesmo procedimento para calcular a média térmica de um sistema dipolo-dipolo induzido ? Justifique.

6) De exemplos de sistemas soluto-solvente que interagem via carga-dipolo, dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido, dipolo induzido – dipolo induzido. Em que situação você espera uma alta solubilidade ?

7) Dê exemplos de sistemas que interagem majoritariamente por interações de dispersão e por pontes de hidrogênio. Considere uma estrutura modelo de DNA. Indique os locais em que temos majoritariamente interações de dispersão, carga – solvente, ligações de hidrogênio.

8) Escreva as expressões, e indique a sua natureza, de todas as interações atrativas que dependem em $1/r^6$.

9) Cite quais são as condições favoráveis para a formação de ligações de hidrogênio. Dê exemplos de sistemas em que elas são muito importantes na definição de propriedades físico químicas.

10) Indique quais moléculas são polares e qual a direção do vetor de momento de dipolo. C_6H_6 , H_2O, O_2, O_3, H_2O_2, CH_3Cl.

11) A polarizabilidade por volume da água é de 1.48×10^{-24} cm^3 . Calcule o momento de dipolo induzido nesta molécula quando aplicamos um campo de 1 kV/cm^{-1}.