

# Interações Atômicas e Moleculares: Prova 1, 1 de agosto 2014

Nome: \_\_\_\_\_ Turma: \_\_\_\_\_

1, 1. (3 p) Quanto são energia e momento angular de um elétron  $4f$  num íon  $\text{Li}^{++}$  (Li: é o terceiro elemento do sistema periódico).

1, 2. (3 p) Quanto são energia e momento angular de um elétron  $3d$  num íon  $\text{He}^+$  (He é o segundo elemento do sistema periódico).

2, 1. (6 p) Explique o método de aproximação de Born-Oppenheimer.

3, 1. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula iônica de  $\text{C}_2^+$  (C:  $Z = 6$ )? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

3, 2. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula iônica de  $\text{O}_2^+$  (O:  $Z = 8$ )? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

4, 1. (4 p) Numa experiência de espectroscopia de fotoelétrons, uma amostra de  $\text{N}_2$  é iluminada por uma lâmpada de hélio (comprimento de onda: 58.43 nm). Que raio tem que ter o analisador para detectarmos os fotoelétrons ejetados do orbital  $2\sigma_g$  ( $\varepsilon_i = -2.50 \cdot 10^{-18}$  J) das moléculas de  $\text{N}_2$ , aplicando um campo elétrico de 100 V/m?

4, 2. (4 p) Numa experiência de espectroscopia de fotoelétrons, uma amostra de  $\text{N}_2$  é iluminada por uma lâmpada de hélio (comprimento de onda: 58.43 nm). Que raio tem que ter o analisador para detectarmos os fotoelétrons ejetados do orbital  $1\pi_u$  ( $\varepsilon_i = -2.67 \cdot 10^{-18}$  J) das moléculas de  $\text{N}_2$ , aplicando um campo elétrico de 100 V/m?

5, 1. (4 p) Em uma molécula diatômica heteronuclear, naquela a sobreposição dos orbitais atômicos pode ser desprezada, o que pode-se dizer sobre o “ângulo de mistura”  $\zeta$  e sobre os orbitais moleculares e suas energias, no caso que a diferença de energia entre os orbitais atômicos envolvidos na ligação é grande (em comparação ao integral de ressonância).

6, 1. (4 p) A molécula de tolueno,  $\text{C}_7\text{H}_8$ , é constituída por um anel benzênico no plano  $xy$  com um grupo  $\text{CH}_3$  anexo (veja o desenho mal-feito em baixo). Os orbitais moleculares são constituídos pelos sete orbitais  $2p_z$  dos sete átomos de carbono,  $\chi_i$ ,  $i = 1, \dots, 7$ . Escreve a matriz hamiltoniana que é usada no método do princípio variacional usando as aproximações de Hückel. Quantos orbitais moleculares  $\psi$  existem? Quantos destes são ocupados no estado fundamental?

Bom Desempenho!

