

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 $3d$ num íon Li^{++} (Li é o terceiro elemento do sistema periódico).

1, 2. (3 p) Quanto são energia e momento angular de um elétron $4f$ num íon 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 B_2^+ (B: $Z = 5$)? 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 F_2^+ (F: $Z = 9$)? 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 N_2 é iluminada por uma lâmpada de hélio (comprimento de onda: 58.43 nm). Quanto é o campo elétrico que temos que aplicar no analisador de raio 10 cm para detectar os fotoelétrons ejetados do orbital $2\sigma_g$ ($\varepsilon_i = -2.50 \cdot 10^{-18}$ J) das moléculas de N_2 ?

4, 2. (4 p) Numa experiência de espectroscopia de fotoelétrons, uma amostra de N_2 é iluminada por uma lâmpada de hélio (comprimento de onda: 58.43 nm). Quanto é o campo elétrico que temos que aplicar no analisador de raio 10 cm para detectar os fotoelétrons ejetados do orbital $1\pi_u$ ($\varepsilon_i = -2.67 \cdot 10^{-18}$ J) das moléculas de N_2 ?

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” ζ e sobre os orbitais moleculares e suas energias, no caso que a diferença de energia entre os orbitais atômicos envolvidos na ligação é pequena (em comparação ao integral de ressonância).

6, 1. (4 p) A molécula de naftaleno, C_{10}H_8 , é constituída por dois anéis benzênicos no plano xy (veja o desenho mal-feito em baixo). Os orbitais moleculares são constituídos pelos dez orbitais $2p_z$ dos dez átomos de carbono, χ_i , $i = 1, \dots, 10$. Escreve a matriz hamiltoniana que é usada no método do princípio variacional usando as aproximações de Hückel. Quantos orbitais moleculares ψ existem? Quantos destes são ocupados no estado fundamental?

Bom Desempenho!

