

Interações Atômicas e Moleculares: Prova 1, 17 de abril 2014

Nome: _____ Turma: _____

1, 1. (9 p) Considere o potencial de um elétron num poço quadrado infinito, centrado em $x = 0$: $V(x) = 0$ para $-L/2 < x < L/2$, e ∞ fora desta faixa. Mostre, que a função de onda $\psi(x) = A \cdot \sin \frac{2\pi x}{L}$ para $-L/2 < x < L/2$, e 0 fora desta faixa, satisfaz a equação de Schrödinger e as condições de contorno. Quanto é a energia do elétron? Normalize a função de onda, isto é, determine a constante A . Dica: a primitiva de $\sin^2 x$ é $\frac{1}{2}(x - \sin x \cdot \cos x)$.

1, 2. (9 p) Considere o potencial de um elétron num poço quadrado infinito, centrado em $x = 0$: $V(x) = 0$ para $-L/2 < x < L/2$, e ∞ fora desta faixa. Mostre, que a função de onda $\psi(x) = A \cdot \cos \frac{3\pi x}{L}$ para $-L/2 < x < L/2$, e 0 fora desta faixa, satisfaz a equação de Schrödinger e as condições de contorno. Quanto é a energia do elétron? Normalize a função de onda, isto é, determine a constante A . Dica: a primitiva de $\cos^2 x$ é $\frac{1}{2}(x + \sin x \cdot \cos x)$.

2, 1. (4 p) Quanto são energia, momento angular e componente z do momento angular de um elétron $2p_z$ num íon Li^{++} (Li: é o terceiro elemento do sistema periódico).

2, 2. (4 p) Quanto são energia, momento angular e componente z do momento angular de um elétron $3p_z$ num íon He^+ (He é o segundo elemento do sistema periódico).

3, 1. (4 p) Uma ligação σ é sempre composta de 2 orbitais s ? Senão, dê um exemplo de um caso contrário. Por que uma ligação σ se chama σ ?

4, 1. (4 p) Um átomo de carbono no estado fundamental tem apenas dois elétrons em orbitais “semi-cheias” (2 elétrons $2p$). Porém, o carbono frequentemente faz quatro ligações (i. e. em metano, eteno, acetileno, e outras moléculas). Dê o nome e a explicação do fenômeno responsável por isto.

4, 2. (4 p) Um átomo de carbono dentro de uma molécula frequentemente faz quatro ligações químicas. Porém, a geometria das quatro ligações do carbono difere de molécula para molécula (metano: geometria tetraédrica; eteno: planar; acetileno: linear). Dê o nome e a explicação do fenômeno responsável por isto.

5, 1. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula de O_2 (O: $Z = 8$)? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

5, 2. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula de C_2 (C: $Z = 6$)? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

6, 1. (3 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). Os elétrons ejetados dos orbitais $2\sigma_g$ das moléculas de N_2 têm energia cinética de $9.02 \cdot 10^{-19}$ J. Quanto é a energia de um elétron num orbital $2\sigma_g$ de N_2 ?

6, 2. (3 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). Os elétrons ejetados dos orbitais $1\pi_u$ das moléculas de N_2 têm energia cinética de $7.26 \cdot 10^{-19}$ J. Quanto é a energia de um elétron num orbital $1\pi_u$ de N_2 ?

Bom Desempenho!