

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

Nome: _____ Turma: _____

1, 1. (9 p) Mostre, que a função de onda $\psi(x) = C x e^{-\alpha x^2/2}$, onde $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$, satisfaz a equação de Schrödinger para o potencial do oscilador harmônico, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Quanto é a energia da partícula? E quanto é a constante C ?

Talvez a seguinte integral imprópria possa ajudar: $\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$

2, 1. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula de Li_2 (Li: $Z = 3$)? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

2, 2. (4 p) Qual a configuração dos elétrons de ligação no estado fundamental da molécula de Be_2 (Be: $Z = 4$)? Faça o diagrama de níveis de energia desta molécula. Qual a ordem de ligação?

3, 1. (3 p) A viscosidade do ar em 0°C é $17.4 \mu\text{Pa} \cdot \text{s}$. Quanto ela é em 50°C ?

3, 2. (3 p) A viscosidade do ar em 0°C é $17.4 \mu\text{Pa} \cdot \text{s}$. Quanto ela é em 100°C ?

4, 1. (5 p) Calcule o fator de empacotamento da estrutura cristalina cúbica I, ou bcc (body centered cubic), uma estrutura cúbica com átomos nos cantos e nos centros dos cubos.

4, 2. (5 p) Calcule o fator de empacotamento da estrutura cristalina cúbica F, ou fcc (face centered cubic), uma estrutura cúbica com átomos nos cantos e nos centros das faces.

5, 1. (4 p) Descreva a estrutura de bandas de energia de um condutor. Como varia a condutividade elétrica de um condutor em função da temperatura? Por quê?

5, 2. (4 p) Descreva a estrutura de bandas de energia de um semiconductor. Como varia a condutividade elétrica de um semiconductor em função da temperatura? Por quê?

Bom Desempenho!