

Física para Ciências Biológicas - 2017

Lista de Exercícios 5 A - Casa

Data: Junho 2017

Todas as figuras encontram-se no final desta lista

1. O potencial de Lennard-Jones, dado pela expressão $U(r) = a[(\frac{b}{r})^{12} - 2(\frac{b}{r})^6]$, é um modelo matemático simples que representa a variação de energia potencial de uma molécula em função da distância interatômica. Considere uma molécula descrita por um potencial em que $a = 3\text{eV}$ e $b = 2\text{\AA}$ (Angstroms).
 - (a) Qual o significado de a ? e b ? **Determine analiticamente.**
 - (b) Grafique a energia potencial $U(r)$ nas unidades adequadas, indicando os valores no ponto de equilíbrio.
 - (c) Para quais valores de r os átomos se atraem ou se repelem?
 - (d) Qual o valor da energia potencial quando a distância entre os átomos for muito grande ($r \rightarrow \infty$)?
 - (e) O que acontece se a energia total da molécula é $\leq 0\text{eV}$?
2. A energia de ionização do átomo de potássio K é 4.4eV e a afinidade eletrônica do átomo de Cloro Cl é 3.7eV . Na figura 1 estão representadas energias de interação dos átomos de K e Cl em função da distância interatômica.
 - (a) Quanto “custaria” a formação dos íons infinitamente separados, a partir dos átomos neutros?
 - (b) Identifique na figura a curva correspondente ao estado ligante, ou seja em que se forma uma molécula.
 - (c) Uma vez que os átomos formam uma molécula (KCl) é necessário ceder energia ao sistema para separá-lo em átomos neutros. Estime a partir do gráfico a energia e o comprimento de onda que deveria ter um fóton para dissociar a molécula.
 - (d) Qual a energia necessária para separar a molécula em íons? Discuta.
3. Na figura 2 estão representadas esquematicamente duas combinações entre os orbitais atômicos do átomo de hidrogênio na molécula de H_2 , e as respectivas densidades eletrônicas resultantes ψ^2 :
 - (a) Discuta a ordem de energia para esses estados eletrônicos.
 - (b) Esses estados são diferenciados como “ligante” e “antiligante”: explique e discuta essa terminologia.
 - (c) Identifique na figura 2 qual a curva de energia potencial para cada combinação.
 - (d) Dessa figura, qual a energia de dissociação da molécula?
4. Na figura 3 estão apresentados esquemas aproximados de níveis eletrônicos ocupados das moléculas de água e de metano, em eV, e um gráfico experimental da medida do potencial de ionização (IP) da molécula de metano (medida a partir da emissão de fótoelétrons).

- (a) Quantos elétrons de valência tem a molécula de água? E quantos tem a molécula de metano? Todos os estados eletrônicos estão representados?
- (b) Explique o que significa serem as energias negativas.
- (c) O número de átomos das duas moléculas é diferente, mas o número de níveis (energias) é o mesmo: isto faz sentido? Por quê?
- (d) Existe acordo teórico-experimental para os resultados do metano? Interprete e discuta.
- (e) Qual a energia de ionização que você estimaria para a molécula de água? Qual a frequência do fóton necessária para promover essa ionização?
5. Na figura 4 são apresentados esquemas aproximados dos espectros de níveis eletrônicos ocupados das moléculas amônia (NH_3) e metanol (CH_3OH), em eV.
- (a) Quantos elétrons de valência tem a molécula de amônia? E quantos tem a molécula de metanol? Estão representados níveis de caroço? Identifique-os.
- (b) Para cada molécula, qual a energia e o comprimento de onda do fóton incidente que promova a ionização?
- (c) Na figura 5 estão ilustrados orbitais moleculares de valência da molécula de amônia para alguns de seus níveis eletrônicos. Relacione cada um dos orbitais ao diagrama de níveis correspondente, justificando sua resposta.

Unidades

Newton $1N = 1kg.m/s^2$	Joule $1J = 1N.m$	Watt $1W = 1J/s$
Volt $1V = 1J/C$	Farad $1F = 1C/V$	Debye (não SI) $1D \simeq 3,33 \cdot 10^{-30} C.m$
Eletronvolt $1eV = 1,6 \times 10^{-19} J$		$1J = 0,624 \times 10^{19} eV$
$1mol = 6,022 \times 10^{23}$	$e \approx 2,718$	
$1pX = 10^{-12} X$	$1nX = 10^{-9} X$	$1\mu X = 10^{-6} X$
$1mX = 10^{-3} X$	$1kX = 10^3 X, \forall X$	

Constantes Físicas Seleccionadas

$G = 6,67 \times 10^{-11} Nm^2/kg^2$	$\varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} C^2/Nm^2$	$1/(4\pi\varepsilon_0) \approx 9 \times 10^9 Nm^2/C^2$
$c = 2,998 \times 10^8 m/s$	$e = 1,6 \times 10^{-19} C$	$\hbar = h/(2\pi)$
$m_e = 9,109 \times 10^{-31} kg$	$m_n \approx m_p = 1,675 \times 10^{-27} kg$	$h = 6,626 \times 10^{-34} J.s$
$a_0 = 0.0529 nm$		

Formulário:

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

$$v_x = \frac{dx}{dt}$$

$$v = \omega R = \frac{d\theta}{dt} R$$

$$x(t) = A \cos(\omega t + \phi) + B$$

$$\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx}$$

$$\frac{d}{dx} \sin(ax + b) = a \cos(ax + b)$$

$$Z = R + iI$$

$$\vec{F}_G = \frac{GMm}{r^2} \hat{e}$$

$$\vec{F}_E = q\vec{E}$$

$$W = \int \vec{F} \cdot d\vec{r}$$

$$K = \frac{1}{2}mv^2$$

$$E_T = K + U$$

$$C = \frac{Q}{V}$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

$$y(x, t) = A \cos(kx - \omega t + \phi)$$

$$|v| = \lambda f = \lambda/T = \omega/k$$

$$\frac{d^2}{dt^2} y(x, t) = v^2 \frac{d^2}{dx^2} y(x, t)$$

$$y = A \cos(kx - \omega t + \phi_1 + \nu)$$

$$\sin \nu = \frac{A_2}{A} \sin(\phi_2 - \phi_1)$$

$$\bar{\omega} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \quad ; \quad \bar{k} = \frac{k_1 + k_2}{2}$$

$$v_f = \bar{\omega}/\bar{k} \quad ; \quad v_g = \Delta\omega/\Delta k$$

$$E = pc$$

$$E_f = W + eV_{\text{corte}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$$\vec{P} = m\vec{v}$$

$$a_x = \frac{dv_x}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$$

$$x(t) = A \sin(\omega t + \phi) + B$$

$$\frac{d}{dx} \alpha x^n = \alpha n x^{n-1}$$

$$\frac{d}{dx} \cos(ax + b) = -a \sin(ax + b)$$

$$Z^* = R - iI$$

$$\vec{F}_E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qq}{r^2} \hat{e}$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{p}}{r^3}$$

$$W = \Delta K$$

$$U_g = mgh$$

$$V = Ed$$

$$I = \frac{V}{R}$$

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\frac{1}{RC} Q(t)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi f$$

$$v = \sqrt{\mathcal{T}/\mu}$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{1}{2} \mu \omega^2 A^2$$

$$A^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\phi_2 - \phi_1)$$

$$y = 2A \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t\right) \cos(\bar{k}x - \bar{\omega}t)$$

$$\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 \quad ; \quad \Delta k = k_2 - k_1$$

$$d \sin \theta = n\lambda \quad ; \quad d \sin \theta = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda$$

$$m(v) = m_0 / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

$$p = h/\lambda$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar f = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

$$\omega = \sqrt{k/m}$$

$$i^2 = -1$$

$$|Z|^2 = Z^* Z$$

$$\vec{p} = q\vec{d}$$

$$\Phi_{(\text{sup})} = \frac{Q_{(\text{int})}}{\epsilon_0}$$

$$W = -\Delta U$$

$$U_x = \frac{1}{2} k x^2$$

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon}$$

$$\frac{d}{dt} U = VI = P$$

$$I(t) = I_0 e^{-\frac{t}{\tau_c}}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$P = \varepsilon v$$

$$E = \hbar f$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

$$P(x) = |\psi(x)|^2$$

$$P(\text{a-b}) = \int_a^b P(x) dx$$

$$E_n = \frac{(Ze)^2}{a_0 8\pi\epsilon_0} \frac{1}{n^2}$$

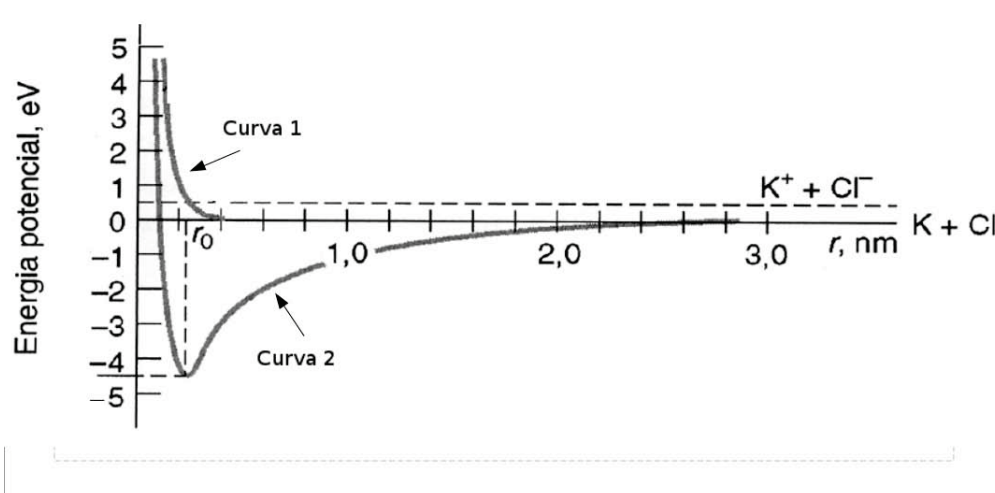


Figura 1: Energia de interação dos átomos de K e Cl em função da distância interatômica

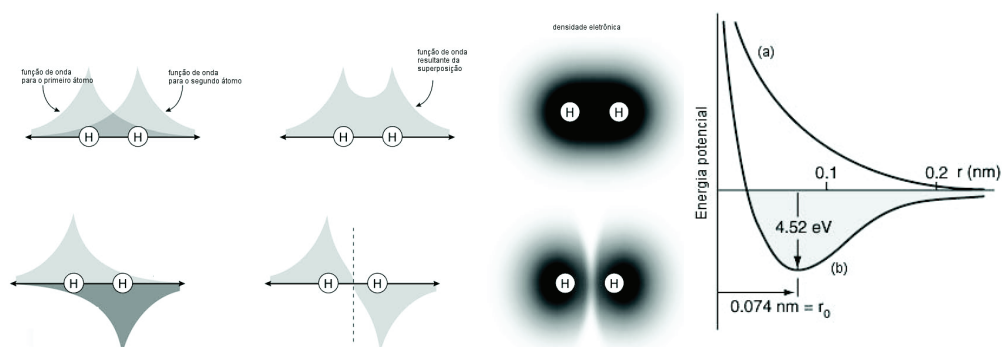


Figura 2: Representação de orbitais moleculares e energias potenciais para a molécula de hidrogênio.

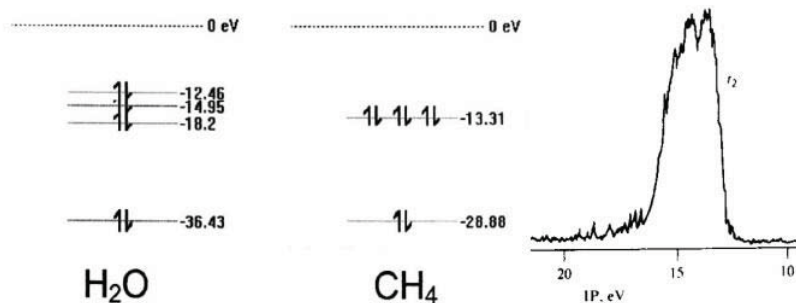


Figura 3: Representação do espectro de energia de níveis eletrônicos ocupados das moléculas de água e de metano, e medida de emissão de fotoelétrons para a molécula de metano.

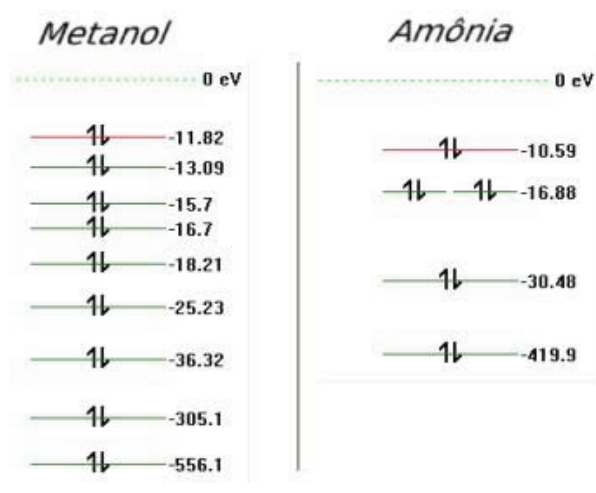


Figura 4: Representação do espectro de energia de níveis eletrônicos ocupados das moléculas de amônia (NH_3) e metanol (CH_3OH).

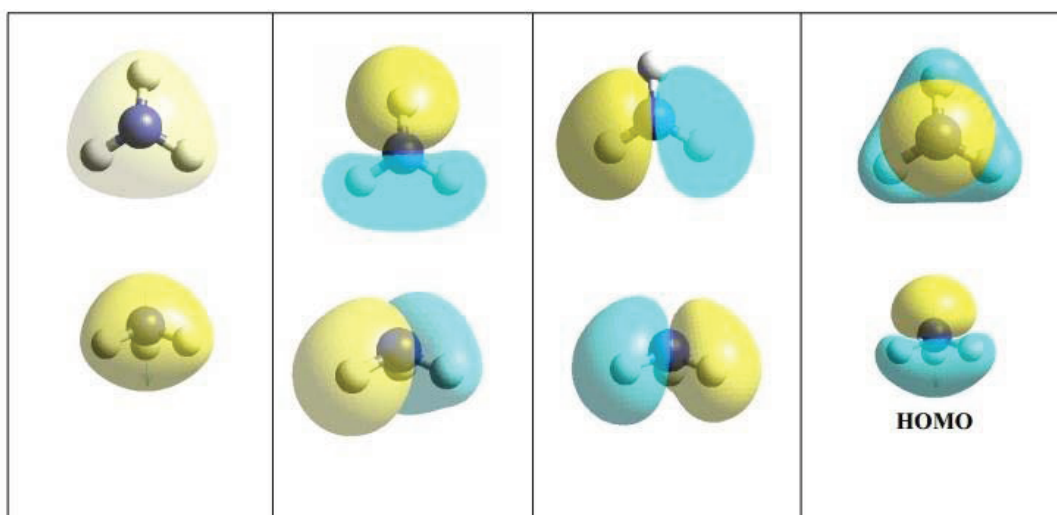


Figura 5: Representação de orbitais moleculares de valência da molécula de amônia (NH_3).