

QFL – 1242, FÍSICO-QUÍMICA II

PROVA 3 – 03/12/2020

PROVA B

1. Quanto seria a energia do estado fundamental do átomo de hélio (**em unidade kJ/mol**) se ignorássemos completamente o termo de repulsão eletrônica?
2. Calcule os dois máximos da coordenada radial, $r_{max,1}$ e $r_{max,2}$, do orbital $3p$ do átomo de hidrogênio.
3. Explique qual é o procedimento de separação de variáveis utilizado para facilitar a resolução da equação de Schrödinger do átomo de hidrogênio.
4. A nomenclatura dos orbitais d é devido à dependência angular das funções de onda e a relação entre coordenadas cartesianas e esféricas. Mostre, por exemplo, que d_{xy} e $d_{x^2-y^2}$ são, de fato, proporcionais à xy e x^2-y^2 , respectivamente.
5. A aproximação de Koopmans considera que a energia do orbital do elétron de valência é o valor aproximado da energia de ionização do átomo. Estime a energia de ionização do sódio (**em unidade kJ/mol**) a partir do diagrama abaixo, o qual mostra alguns níveis de energia do hidrogênio, lítio e sódio.

