

ZAB1033 – Fundamentos da Estrutura Eletrônica da Matéria

6ª Lista de Exercícios

- 1 – O símbolo do termo para o estado fundamental do N_2^+ é $^2\Sigma_g$. Qual é o spin total e o momento angular orbital total da molécula?
- 2 – Um dos estados excitados da molécula de C_2 tem uma configuração para os elétrons de valência que é dada por $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 1\pi_u^3 2\pi_g^1$. De a multiplicidade e a paridade do termo.
- 3 – O coeficiente de absorção molar de uma substância dissolvida em hexano é $855 \text{ dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$ a 270 nm. Calcule a redução percentual da intensidade do feixe de luz com esse comprimento de onda que atravessa uma camada de 2,5 mm de solução com concentração de $2,22 \text{ mmol dm}^{-3}$.
- 4 – O coeficiente de absorção molar de um soluto a 540 nm é $286 \text{ dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Quando a luz com esse comprimento de onda passa através de uma célula de 6,5 mm, contendo uma solução do soluto, a absorção de 46,5% da luz. Qual a concentração da solução?
- 5 – A absorção associada a uma determinada transição começa em 230 nm, tem um máximo a 260 nm e termina a 290nm. O valor do máximo do coeficiente de absorção molar é $1,21 \times 10^4 \text{ dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Estime o coeficiente de absorção integrado, admitindo que a banda tenha uma forma triangular.
- 6 – Os seguintes dados foram determinados na absorção do Br_2 dissolvido em tetracloreto de carbono numa célula de 2,0 mm. Calcule o coeficiente de absorção molar do Br_2 .

$[Br_2] \text{ (mol dm}^{-3}\text{)}$	0,0010	0,0050	0,0100	0,0500
T (%)	81,4	35,6	12,7	$3,0 \times 10^{-3}$

- 7 – As bandas de absorção eletrônica de muitas moléculas em solução tem a forma de uma gaussiana com meia largura, a meia altura de 5000 cm^{-1} . Estime o coeficiente de absorção integrado de uma banda com (a) $\epsilon_{max} \approx 1 \times 10^4 \text{ dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$ e (b) $\epsilon_{max} \approx 5 \times 10^2 \text{ dm}^3\text{mol}^{-1}\text{cm}^{-1}$

- 8 – Supondo que uma substância tenha uma banda com perfil gaussiano dado por $\epsilon = \epsilon_{max} e^{-x^2}$ onde $x = \frac{\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{max}}{\sqrt{2A}}$ onde A é uma constante, calcule o coeficiente de absorção integrado.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \pi^{1/2}$$

- 9 – Supondo que uma substância tenha uma banda com perfil gaussiano dado por $\epsilon = \epsilon_{max} [1 - k(\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_{max})^2]$ onde k, ϵ_{max} e $\tilde{\nu}_{max}$ são constantes. Calcule o coeficiente de absorção integrado.