

ZAB1033 – Fundamentos da Estrutura Eletrônica da Matéria

3ª Lista de Exercícios

- 1 - Calcule a energia cinética média e a energia potencial média de um elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio.
- 2 – Escreva a expressão da função de distribuição radial de um elétron num orbital 2s num átomo hidrogenoide e determine o raio mais provável de encontrar o elétron.
- 3 – Qual o momento angular orbital de um elétron nos orbitais (a) 1s, (b) 3s, (c), 2p e (d) 3d?
- 4 – Calcule os valores permitidos de j para (a) um elétron num orbital d e (b) para um elétron num orbital f .
- 5 – Entre as transições seguintes, quais as permitidas num espectro de emissão de um átomo? (a) $2s \rightarrow 1s$, (b) $2p \rightarrow 1s$, (c) $3d \rightarrow 2p$, (d) $5d \rightarrow 2s$, (e) $5p \rightarrow 3s$
- 6 – Escreva a configuração eletrônica do Ni^{2+} . Quais os valores possíveis dos números quânticos do spin total S e M_S desse íon?
- 7 – Que termos atômicos são possíveis com a configuração eletrônica (a) ns^1np^1 , (b) ns^1nd^1 , (c) np^1nd^1 ?
- 8 – Dê os possíveis símbolos dos termos para (a) $\text{Li}[\text{He}]2s^1$, (b) $\text{Na}[\text{Ne}]3p^1$.
- 9 – Um átomo pode apresentar as configurações eletrônicas $[\text{Rn}] 5f^{14}7s^27p^1$ e $[\text{Rn}] 5f^{14}6d^17s^2$. (a) Encontre os possíveis termos atômicos. (b) Dentre os termos quais transições são permitidas? (c) Calcule a energia de cada um dos termos. (d) Faça um diagrama dos níveis de energia. (e) Identifique no diagrama quais as possíveis estruturas finas e calcule a separação $\Delta\tilde{\nu}$ em função da constante de acoplamento spin-órbita.

Equações

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Harmônicos esféricos

l	m_l	Y_{lm_l}
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	0	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$
1	± 1	$\mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$
2	0	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$

Funções de onda radiais de átomos de hidrogenoides

Orbital	n	l	R_{nl}
1s	1	0	$2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\rho/2}$
2s	2	0	$\frac{1}{8^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} (2-\rho)e^{-\rho/2}$

$$\rho = \frac{2Zr}{na}$$