

# 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 290 nm. 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  $5000 \text{ cm}^{-1}$ . 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.

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

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  $\epsilon_{max}$  e  $\tilde{\nu}_{max}$  são constantes e  $k = 1/\tilde{\nu}_{max}^2$ . Calcule o coeficiente de absorção integrado.