

QFL-1242 - Físico-Química II

Lista de Exercícios III

- Use uma função tentativa na forma $\phi = \cos \lambda x$ com $-\pi/2\lambda < x < \pi/2\lambda$ em que λ é um parâmetro variacional para calcular a energia do estado fundamental do oscilador harmônico.
- Identifique $\hat{H}^{(0)}$, $\hat{H}^{(1)}$, $\psi^{(0)}$ e $E^{(0)}$ para os seguintes problemas:
 - Um oscilador governado pelo potencial

$$V(x) = \frac{k}{2}x^2 + \frac{\gamma}{6}x^3 + \frac{b}{24}x^4 \quad (1)$$

- Uma partícula confinada pra mover na região $0 \leq x \leq a$ com potencial

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & 0 < x < a/2 \\ V(x) &= b & a/2 < x < a \end{aligned}$$

- Um átomo de hélio
- Um átomo de hidrogênio em um campo elétrico de de força E . O operador hamiltoniano do sistema é:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + eEr\cos\theta \quad (2)$$

- Usando o resultado do problema 3(d), calcule a correção de primeira ordem para energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio em um campo elétrico de força E .
- Escreva o operador hamiltoniano em unidades atômicas para o átomo de hélio. Estenda seu procedimento para o átomo de lítio.
- Seja a configuração eletrônica $1s^1 2s^1$ correspondente a um átomo de hélio excitado. Escreva as possíveis funções de onda associadas a essa configuração na forma de determinantes de Slater e também como produto de uma função espacial por outra de spin.
- Dada a função de onda $\psi(1, 2) = 1s\alpha(1)1s\beta(2) - 1s\alpha(2)1s\beta(1)$ encontre sua constante de normalização sabendo que a parte espacial já esta normalizada. Represente a função de onda normalizada na forma de um determinante de Slater.
- Utilizando a teoria do orbital molecular explique por que uma molécula diatômica estável de hélio He_2 não pode ser encontrada na natureza.
- Use a teoria do orbital molecular para explicar porque a energia de dissociação do N_2 é maior que do N_2^+ , mas a energia de dissociação do O_2^+ é maior que do O_2 .
- As constantes de força das moléculas diatômicas B_2 até F_2 são dadas na tabela abaixo. Essa é a ordem esperada? Explique.

Molécula diatômica	k / $N.m^{-1}$
B_2	350
C_2	930
N_2	2260
O_2	1140
F_2	450

10. Qual das seguintes moléculas N_2 , NO , O_2 , C_2 , F_2 e CN deve se esperar uma estabilização pela: (a) adição de um elétron para formar AB^- . (b) remoção de um elétron para formar AB^+ .
11. As energias de ionização para os orbitais $2s$ e $2p$ do átomo de oxigênio são $3,116$ e $1,524 \text{ MJ.mol}^{-1}$, respectivamente, enquanto as energias de ionização para esses mesmos orbitais do átomo de carbono são $1,872$ e $1,023 \text{ MJ.mol}^{-1}$, respectivamente. Use esses dados para construir um diagrama de níveis de energia de orbitais moleculares para molécula de CO . Qual a configuração eletrônica do estado fundamental do CO ? Qual a ordem de ligação? O monóxido de carbono é paramagnético ou diamagnético?
12. Aplicando a teoria de Hückel na molécula de ciclobutadieno, resolva os itens a seguir:
- Construa o determinante secular de Hückel para essa molécula.
 - Expanda o determinante secular e encontre os valores de energia permitidos em função de α e β .
 - Construa um diagrama de níveis de energia para os elétrons π do ciclobutadieno e calcule a energia dos orbitais π dessa molécula.
 - Sabendo que a energia dos orbitais π do eteno é $2\alpha + 2\beta$, calcule a energia de deslocalização do ciclobutadieno. Existe alguma estabilização referente a deslocalização dos elétrons para essa molécula?
13. Construa, mas sem resolver, o determinante secular de Hückel para as seguintes moléculas:
- Naftaleno.
 - Hexatrieno.
 - Piridina.
 - biciclobutadieno.