

Química Quântica  
2ª lista de exercícios

- 1) Encontre os nós radiais do orbital 3s do átomo de hidrogênio.
- 2) Encontre o raio mais provável para o elétron no orbital 2p do átomo de hidrogênio.
- 3) Calcule o valor médio de (a)  $r$  e (b)  $r^2$  para o elétron nos orbitais 1s e 2s do átomo de

hidrogênio, dada a integral:  $\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$  para  $n > -1$  e  $a > 0$ .

- 4) Confirme que os orbitais 1s e 2s são mutuamente ortogonais.
- 5) Calcule a probabilidade de encontrar o elétron do átomo de hidrogênio na posição do núcleo para o caso dos orbitais 1s, 2s e 3s.
- 6) Encontre a constante de normalização das seguintes funções: (a)  $\Psi(r, \theta, \phi) = Ne^{(-Zr/a_0)}$  e

(b)  $\Psi(r, \theta, \phi) = N \frac{r}{a_0} e^{(-r/2a_0)} \sin(\theta) e^{i\phi}$ . A seguinte integral é necessária:

$$\int \sin^n(ax) dx = \frac{-\sin^{n-1}(ax) \cos(ax)}{na} + \frac{n-1}{n} \int \sin^{n-2}(ax) dx \text{ para } n > 0.$$

- 7) Mostre que a degenerescência de uma camada eletrônica do átomo de hidrogênio é igual a  $2n^2$ .
- 8) Quais das seguintes transições são permitidas no espectro de emissão de um átomo? (a)  $2s \rightarrow 1s$ , (b)  $2p \rightarrow 1s$ , (c)  $3d \rightarrow 2p$ , (d)  $5d \rightarrow 2s$ , (e)  $5p \rightarrow 3s$ , (f)  $6p \rightarrow 4f$ .
- 9) Calcule o valor médio da energia potencial e cinética de um elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio (Dica: calcule primeiro o valor médio da energia potencial e depois obtenha o valor médio da energia cinética através do valor da energia total do estado fundamental).
- 10) (a) Calcule a ordem de ligação e mostre que a molécula de  $\text{Ne}_2$  não deveria ser estável.

- 1) Há dois nós radiais:  $r=1,9 a_0$  e  $r=7,1 a_0$
- 2)  $4 a_0$
- 3) **1s:** (a)  $1,5 a_0$ , (b)  $3,0 a_0^2$ ; **2s:** (a)  $6,0 a_0$ , (b)  $42,0 a_0^2$
- 4) Mostre que a integral  $\int \Psi_{1s}^* \Psi_{2s} d\tau = 0$ .

$$5) \text{ 1s: } Prob = \frac{1}{\pi} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \quad \text{2s: } Prob = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \quad \text{3s: } Prob = \frac{1}{27\pi} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3$$

$$6) \text{ (a) } N = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \quad \text{(b) } N = \frac{1}{8\pi^{1/2} a_0^{3/2}}$$

- 7) Leve em conta o spin do elétron e mostre que a fórmula funciona para alguns valores de  $n$ .
- 8) Permitidas: (b), (c) e (e).
- 9)  $\langle V \rangle = 2E_{1s} = -1 u.a.$  e  $\langle T \rangle = -E_{1s} = 0,5 u.a.$



sobreposição entre os dois orbitais atômicos a seguir, um em cada núcleo, deveria gerar um orbital molecular do tipo ligante, antiligante ou não-ligante (assuma que os orbitais atômicos têm energias semelhantes e que os coeficientes  $c_1$  e  $c_2$  são positivos). Se a combinação for ligante ou antiligante, diga se os orbitais moleculares obtidos são do tipo  $\sigma$ ,  $\pi$  ou  $\delta$ :

(a)  $c_1 3d_z^2 + c_2 3d_z^2$

(b)  $c_1 3d_{x^2-y^2} - c_2 3d_{x^2-y^2}$

(c)  $c_1 1s + c_2 3d_{xz}$

(d)  $c_1 3d_{yz} + c_2 3d_{yz}$

(e)  $c_1 2p_x + c_2 3d_z^2$

18) Considere uma molécula diatômica formada ao longo do eixo z. Diga se os orbitais atômicos a seguir, dos átomos envolvidos na ligação, contribuem para a formação de orbitais moleculares do tipo  $\sigma$ ,  $\pi$  ou  $\delta$ :

(a)  $p_y$

(b)  $p_z$

(c)  $d_z^2$

(d)  $d_{xz}$

(e)  $d_{xy}$

19) O arsênio pode ser usado como dopante para o germânio. Que tipo de semicondutor é obtido neste processo de dopagem?

20) Para que as bandas sejam formadas, é necessário que os átomos envolvidos se aproximem. Explique a razão deste pré-requisito básico.

21) A retirada de elétrons de um sistema diatômico pode fazer com que a ligação química seja fortalecida ou enfraquecida. Explique como isto pode ocorrer?

22) Sob condições de pressão extremas, como as encontradas em Júpiter e Saturno, seria possível encontrar hidrogênio metálico. Faça um diagrama mostrando a formação de bandas neste material (assuma um arranjo linear).

17)(a) ligante,  $\sigma$  (b) antiligante,  $\delta$  (c) não-ligante (d) antiligante,  $\pi$  (e) não-ligante

18)  $\sigma$ : (b) e (c)  $\pi$ : (a) e (d)  $\delta$ : (e)

19) Semicondutor do tipo n.