

- 1) a) Esquematize o diagrama de OM para a molécula de F_2 .
 (1,0 ponto) Observe a variação energética ao fazer o diagrama. $F (Z=9)$



- b) Qual a ordem de ligação, OL? E o que este valor indica?

2) (1,0 ponto)

As funções para a molécula de H_2^+ , ϕ_+ e ϕ_- de acordo com OM-LCOA

são:

$$\phi_+ = (2+2S)^{-1/2} (1s_A + 1s_B)$$

$$\phi_- = (2-2S)^{-1/2} (1s_A - 1s_B)$$

e podem ser explicadas em forma gráfica para os dois átomos da molécula.

- a) desenhe a função isolada $1s$ para o átomo A e B:



- b) desenhe a função ϕ_+ e ϕ_+^2 : (A)----- (B)
 o que ϕ_+^2 significa? =

- c) qual o formato para a função ϕ_- nos átomos?



- d) e para ϕ_-^2 ? (A)----- (B)
 o que significa ϕ_-^2 =

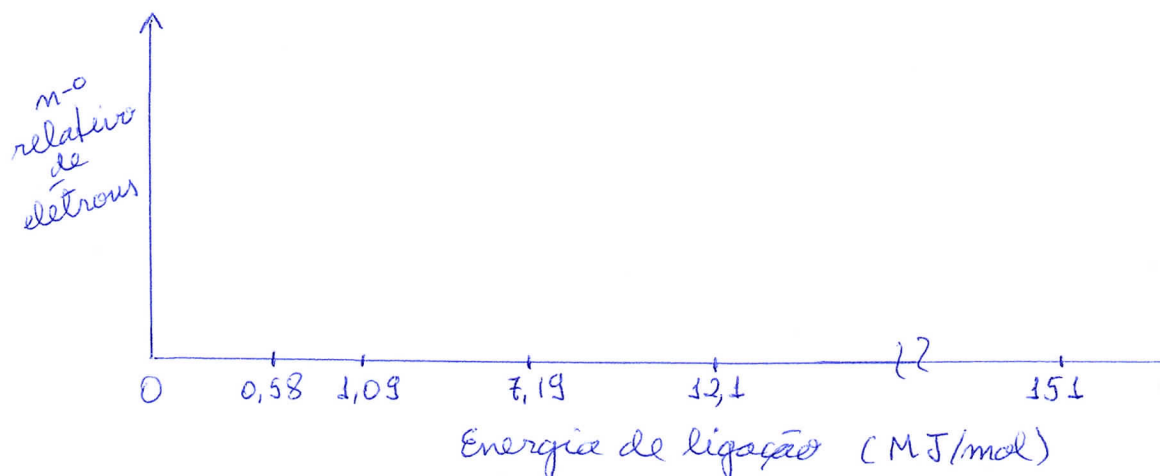
- 3) a) Esquematize o diagrama de OM para a molécula de HCl com sua distribuição de elétrons. H ($Z=1$); Cl ($Z=17$)
(2,0 pontos)



- b) Qual a interação do orbital $3s_{Cl}$ e os $2s_{Cl}$, $2p_{Cl}$ com o orbital $1s_H$? =
- c) Quantos são os orbitais não-ligantes?
orbital não-ligante = orbital antiligante? () Sim; () Não
- d) Qual é a ordem de ligação?
- e) construa a estrutura de Lewis para o HCl e faça a analogia dos pares de elétrons não-ligantes de Lewis com os do diagrama de OM.
- f) O orbital ligante está mais próximo de qual átomo de HCl?
- g) Ao quebrar a molécula de HCl o quê resulta?
- h) Qual a carga formal sobre o H e Cl?

4)

Simule um espectro PES (espectro de fotoelétrons) para o átomo de Al ($Z=13$) no diagrama: (1,0 ponto)
 indique a intensidade relativa e o n.º de elétrons



5) Do conjunto de quatro números quânticos (n, l, m_l, m_s) para um elétron em um átomo, qual não é correto? (0,5 ponto)

- a) 4, 2, 0, $+\frac{1}{2}$
- b) 3, 3, -3, $-\frac{1}{2}$
- c) 2, 0, +1, $+\frac{1}{2}$
- d) 4, 3, 0, $+\frac{1}{2}$
- e) 3, 2, -2, $-\frac{1}{2}$

6) Dê uma característica do,

(0,5 ponto)

a) modelo de Thomson :

b) modelo de Rutherford :

c) modelo de Bohr :

d) equação de Schrödinger :

7) (3,0 pontos)
A carga nuclear efetiva permite entendermos a periodicidade da tabela periódica com respeito ao raio atômico, a energia de ionização, a afinidade eletrônica e a eletronegatividade.

a) O que é a carga nuclear efetiva?

b) calcule a carga nuclear efetiva para o átomo de Si ($Z=14$).

8) (3,0 pontos)

a) Qual o termo espectroscópico para o Li ($Z=3$) no estado fundamental?

b) E na configuração excitada $1s^2 2s \rightarrow 2p^1$?

c) Qual o esquema esperado (níveis de energia) considerando a interação coulombiana, de troca eletrostática e a interação spin-orbita?

d) é possível verificar alguma linha de emissão? Quantas?