

QUIM7031 – Química Inorgânica Avançada – 2018/1º

Lista de Exercícios 2 – Átomos Polieletrônicos

1. Qual é o significado de cada um dos seguintes termos: configuração eletrônica, termo espectroscópico e estado eletrônico?
2. Faça um diagrama esquemático dos níveis de energias orbitais para o átomo de hidrogênio, para os estados $n = 1, 2, 3$ e 4 . Verifique o grau de degenerescência para cada nível. Faça o mesmo para os átomos polieletrônicos
3. A rigor, não se pode aplicar o modelo orbital para sistemas com mais de um elétron. Discuta quais os méritos e as restrições no uso do modelo orbital para se racionalizar as propriedades dos átomos polieletrônicos.
4. No átomo de Li a diferença de energia entre os termos ${}^2S_{1/2}$ da configuração eletrônica $1s^2 2s^1$ e ${}^2P_{1/2}$ da configuração eletrônica $1s^2 2p^1$ é de $14\,904\text{ cm}^{-1}$. Entretanto para Li^{2+} a diferença de energia entre os termos ${}^2S_{1/2}$ da configuração eletrônica $2s^1$ e ${}^2P_{1/2}$ da configuração eletrônica $2p^1$ é de apenas $2,4\text{ cm}^{-1}$. Como racionalizar esta observação?
5. Escreva as possíveis combinações lineares de orbitais na configuração eletrônica $1s^1 2p^1$, que sejam antissimétricas com respeito à permuta de elétrons.
6. Utilize a regra de Hund para prever os termos espectroscópicos do estado fundamental para as configurações eletrônicas de f^1 a f^{14} .
7. Derive os termos espectroscópicos do átomo de carbono na configuração eletrônica do estado fundamental, através da construção de uma tabela de microestados. Faça o mesmo, para a configuração eletrônica do primeiro estado excitado
8. Faça uma estimativa do número atômico efetivo para o elétron mais energético, a partir das energias de ionização dos metais de transição $3d$. Tente racionalizar a variação dos dados observados.
9. Estime os valores dos parâmetros B e C de Racah para Ti^{2+} .