F-888A – Prova I Substitutiva – 05/12/2018

ATENÇÃO: TODAS AS RESPOSTAS DEVEM SER JUSTIFICADAS.

1) Supondo que átomos sejam esferas rígidas que se tocam, qual a fração do espaço é preenchida por átomos em uma estrutura:
(a) cúbica primitiva, (0.5)
(b) cúbica de face centrada (fcc), (0.5)
(c) hexagonal compacta (hcp), (0.5)
(d) cúbica de corpo centrado (bcc), (0.5)
(e) diamante (0.5)

2) Calcule o fator de estrutura $S_{hkl}=\sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{-2\pi i(hx_{\alpha}+ky_{\alpha}+lz_{\alpha})}$ para as seguintes estruturas:
(a) cúbica de face centrada (fcc), (0.5)
(b) cúbica de corpo centrado (bcc), (0.5)
(c) diamante (0.5)
(d) Para os casos nos ítens (a) e (b), encontre as condições que os índices *hkl* devem satisfazer para que uma dada reflexão seja observada (1.0).

3) Demonstre que a rede recíproca de uma rede fcc é uma rede bcc, e vice-versa. (2.5)
PS: $\boldsymbol{g}_1=2\pi\dfrac{\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}$ e permutações cíclicas.

4) (a) Discuta a configuração eletrônica de uma molécula de O_2 em termos de níveis de energia determinados por ligações covalentes entre orbitais atômicos. (PS: oxigênio tem número atômico Z=8) (1.0)
(b) Com base no ítem (a), discuta se a força da ligação química é equivalente a uma ligação covalente simples, dupla, ou tripla. (0.5)
(c) Explique por quê a molécula de O_2 tem um momento magnético espontâneo. (0.5)
(d) Qual a molécula mais estável: O_2^+ ou O_2^- ? Por quê ? (0.5)