

QUÍMICA QUÂNTICA QFL-1242

4ª Lista de Exercícios

- Dê a configuração eletrônica e a ordem da ligação no estado fundamental das seguintes espécies: (a) H_2^+ ; (b) N_2 e (c) O_2 .
- Entre as moléculas N_2 , NO , O_2 , C_2 , F_2 e CN , quais seriam estabilizadas (a) pela adição de um elétron e formação de AB^- , (b) pela remoção de um elétron e formação de AB^+ ?
- Dê o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares do BrCl e a respectiva configuração eletrônica do estado fundamental. É provável que a ligação no BrCl seja mais curta do que no BrCl^- ?
- Disponha as espécies O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} na ordem crescente do comprimento de ligação.
- Utilize a Teoria do Orbital Molecular para explicar por que a energia de dissociação do N_2 é maior que a energia de dissociação do N_2^+ , mas que a energia de dissociação do O_2^+ é maior que do O_2 .
- As constantes de força para as moléculas diatômicas na série de B_2 a F_2 são dadas na Tabela abaixo. A ordem apresentada é o que você esperaria? Explique.

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

- As energias correspondentes aos orbitais moleculares ligante e antiligante da íon molecular H_2^+ são:

$$E_{\pm} = E_{1s} + \frac{J \pm K}{1 \pm S}$$

Dê o significado de cada um dos termos J , K e S . Qual(is) deles possui(em) análogo clássico? Qual(is) deles é(são) responsável(is) por fornecer estabilidade à molécula diatômica?

- Dado que um orbital híbrido sp é

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s + 2p_z)$$

Construa um segundo orbital híbrido sp , ξ_2 , levando em consideração que este além de ser normalizado, deve ser ortogonal a ξ_1 .

9. Mostre que os orbitais híbridos sp^3 são ortonormais.

$$\psi_1 = \frac{1}{2}(2s + 2p_x + 2p_y + 2p_z)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2}(2s - 2p_x - 2p_y + 2p_z)$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}(2s + 2p_x - 2p_y - 2p_z)$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}(2s - 2p_x + 2p_y - 2p_z)$$

10. Usando o método de Hückel, mostre que o orbital molecular π , correspondente a energia, $E = \alpha - \beta$ da molécula de eteno é

$$\psi_\pi = \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{za} + 2p_{zb})$$

11. Usando o método de Hückel, escreva o determinante secular para o butadieno, benzeno, ciclobutadieno e piridina. Note que na piridina, temos dois tipos de átomos (C e N) que irão contribuir para a formação dos orbitais moleculares π .

Sugestões:

- <http://demonstrations.wolfram.com/BondingAndAntibondingMolecularOrbitals/>
- <http://demonstrations.wolfram.com/LCAOApproximationToBondingMolecularOrbitalInHydrogen/>
- <http://demonstrations.wolfram.com/MolecularOrbitalsForFirstAndSecondRowDiatomicMolecules/>