

## PSI5005 Fotônica e Eletrônica Molecular

Terceira lista de exercícios

- 1.- Classificar os modos normais de vibração de uma molécula plana quadrada  $ML_4$ , de um complexo octahedrico  $ML_6$  e de um complexo tetrahedrico  $ML_4$
- 2.- Para as moléculas do problema (1) determinar os modos normais ativos infravermelho e Raman
- 3.- Considerar uma molécula constituída por três átomos idênticos situados nos vértices de um triângulo equilátero cuja simetria é  $D_{3h}$ 
  - (a) Determinar as simetrias de todos os orbitais simétricos que podem ser formados a partir das funções atômicas “s” e “p” respectivamente.
  - (b) Achar combinações lineares das funções atômicas que constituam uma base de funções ortonormais.
- 4.- Considerar os orbitais moleculares (MOs) obtidos a partir de dois orbitais atômicos (AOs). Na condição de co-valência fraca ( $H_{01} \ll H_{11} - H_{00}$ ), determinar os níveis de energia ligante e antiligante dos MOs. Determinar as funções de onda dos MOs em função dos orbitais AOs.
- 5.- Mostrar que o potencial adiabático do problema E-e apresenta três mínimos quando são consideradas as constantes vibracionais de segunda ordem.
  - (a) Calcular a posição dos três mínimos
  - (b) Determinar a energia de estabilização  $E_{JT}$