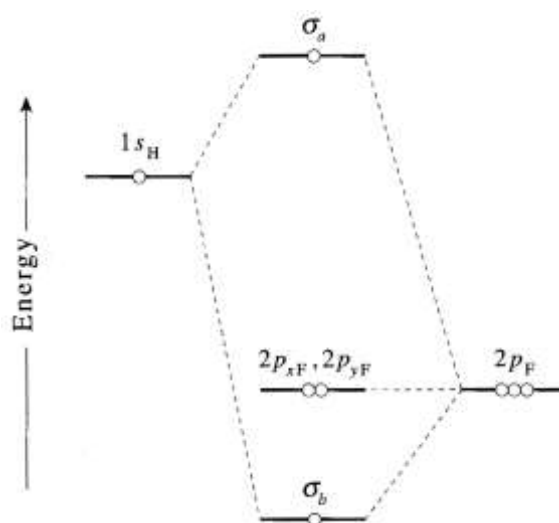


# QFL – 1242, FÍSICO-QUÍMICA II

## PROVA 4 – 18/01/2021

### PROVA E

- Um dos orbitais híbridos  $sp^2$  é dado pela combinação linear  $\psi = s + \sqrt{2} p_z$ . Obtenha a constante de normalização desse orbital híbrido.
- A partir do diagrama de energia dos orbitais moleculares de HF da figura abaixo, compare a estabilidade relativa das moléculas HF, OH e  $\text{OH}^-$ .



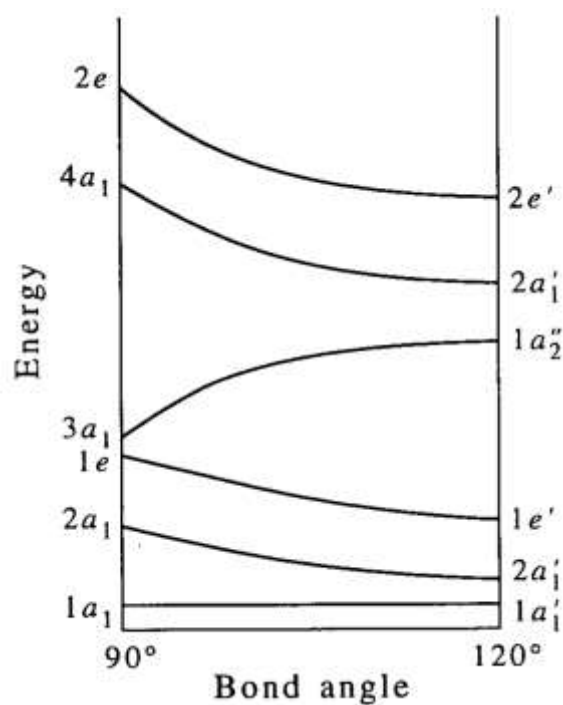
- A tabela abaixo contém a descrição e energia dos orbitais moleculares para  $\text{H}_2\text{O}$ . Escreva a configuração eletrônica da  $\text{H}_2\text{O}$  a partir dos dados da tabela.

**Table 8.1** Molecular Orbitals for the Ground State of the  $\text{H}_2\text{O}$  Molecule with  $R(\text{O}-\text{H}) = 0.9581 \text{ \AA}$ ,  $\angle \text{H}-\text{O}-\text{H} = 105^\circ$

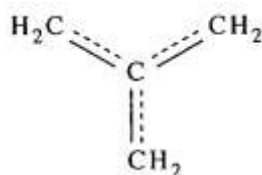
| Molecular<br>Orbital | COEFFICIENTS IN $\varphi_i = \sum_j C_{ij} \chi_j$ |                 |                   |                                   |                   |                   |                                   | Orbital<br>Energy $\epsilon_i$ (eV) |
|----------------------|----------------------------------------------------|-----------------|-------------------|-----------------------------------|-------------------|-------------------|-----------------------------------|-------------------------------------|
|                      | $\varphi_1(1s)$                                    | $\varphi_2(2s)$ | $\varphi_3(2p_z)$ | $\varphi_4(\text{H} + \text{H}')$ | $\varphi_5(2p_x)$ | $\varphi_6(2p_y)$ | $\varphi_7(\text{H}' - \text{H})$ |                                     |
| $1a_1(\varphi_1)$    | 1.0002                                             | 0.0163          | 0.0024            | -0.0033                           | 0                 | 0                 | 0                                 | -557.27                             |
| $2a_1(\varphi_2)$    | -0.0286                                            | 0.8450          | 0.1328            | 0.1781                            | 0                 | 0                 | 0                                 | -36.19                              |
| $3a_1(\varphi_3)$    | -0.0258                                            | -0.4601         | 0.8277            | 0.3441                            | 0                 | 0                 | 0                                 | -13.20                              |
| $4a_1(\varphi_4)$    | -0.086                                             | -0.833          | -0.642            | 1.061                             | 0                 | 0                 | 0                                 | 13.7                                |
| $1b_1(\varphi_5)$    | 0                                                  | 0               | 0                 | 0                                 | 1                 | 0                 | 0                                 | -11.79                              |
| $1b_2(\varphi_6)$    | 0                                                  | 0               | 0                 | 0                                 | 0                 | -0.5428           | 0.7759                            | -18.55                              |
| $2b_2(\varphi_7)$    | 0                                                  | 0               | 0                 | 0                                 | 0                 | -1.013            | 1.230                             | 15.9                                |

<sup>a</sup> From F. O. Ellison and H. Shull, *J. Chem. Phys.* **23**, 2348 (1955).

4. A figura ao lado é um diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares de  $\text{XH}_3$  em função do ângulo  $\text{H—X—H}$ . O ângulo é  $120^\circ$  para  $\text{XH}_3$  planar, enquanto que ângulo menor que  $120^\circ$  indica que a molécula não é planar. A nomenclatura significa que “e” é um orbital molecular duplamente degenerado. Considerando esses orbitais moleculares, determine se as moléculas  $\text{BH}_3$  e  $\text{NH}_3$  são planares ou não planares.



5. Aplicando a teoria de Hückel ao trimetilenometano,



obtem-se que as energias dos orbitais moleculares são dadas por  $E_i = \alpha + m_i\beta$ , onde  $\alpha$  e  $\beta$  representam as integrais de Coulomb e de troca, respectivamente, e os quatro valores de  $m_i$  são:  $\sqrt{3}$ , 0, 0 e  $-\sqrt{3}$ . Calcule o valor da energia de deslocalização.