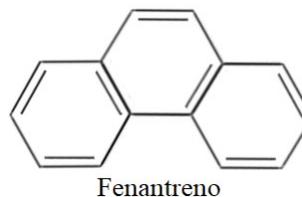
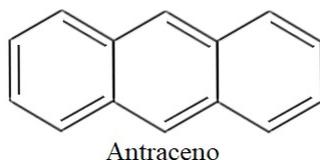


ZAB1033 – Fundamentos da Estrutura Eletrônica da Matéria

4ª Lista de Exercícios

- 1 – Dê a configuração eletrônica e a ordem da ligação no estado fundamental do (a) H_2^- , (b) N_2 , (c) CO , (d) NO e (e) CN^- .
- 2 – A partir das configurações eletrônicas dos estados fundamentais do B_2 e do C_2 , diga que molécula terá maior energia de dissociação de ligação.
- 3 – Dê o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares do XeF e a respectiva configuração eletrônica do estado fundamental. É provável que a ligação do XeF seja mais curta que a do XeF^+ ?
- 4 – Escreva os determinantes seculares do (a) H_3 linear, (b) H_3 cíclico, admitindo as aproximações de Huckel.
- 5 – Escreva os determinantes seculares para o (a) antraceno e (b) fenantreno admitindo as aproximações de Huckel e usando os orbitais $\text{C}2p$ como base.



- 6 – Construa e resolva as equações seculares de Huckel para os elétrons π do C_3H_4 . Expresse a energia em termos de α e β .
- 7 – Construa e resolva as equações seculares de Huckel para os elétrons σ do HF . Expresse a energia em termos de α_H , α_F e β .
- 8 – Construa e resolva as equações seculares de Huckel para os elétrons π do NO_3^- . Expresse a energia em termos de α_N , α_O e β .