

5930300 – Química Quântica
Lista 4

1. As quatro funções de onda que descrevem os orbitais moleculares de Hückel do butadieno estão descritas abaixo. Mostre que ψ_2 está normalizada e que é ortogonal a ψ_3 .

$$\psi_1 = 0,3717.2p_{z1} + 0,6015.2p_{z2} + 0,6015.2p_{z3} + 0,3717.2p_{z4}$$

$$\psi_2 = 0,6015.2p_{z1} + 0,3717.2p_{z2} - 0,3717.2p_{z3} - 0,6015.2p_{z4}$$

$$\psi_3 = 0,6015.2p_{z1} - 0,3717.2p_{z2} - 0,3717.2p_{z3} + 0,6015.2p_{z4}$$

$$\psi_4 = 0,3717.2p_{z1} - 0,6015.2p_{z2} + 0,6015.2p_{z3} - 0,3717.2p_{z4}$$

2. Os níveis de energia para os orbitais de Hückel do naftaleno, $C_{10}H_8$ são $E_i = \alpha + m_i\beta$, onde os 10 valores possíveis de m_i são 2,3028, 1,6180, 1,3029, 1,0000, 0,6180, -0,6180, -1,0000, -1,3029, -1,6180 e -2,3028. Calcule a energia do estado fundamental dos elétrons π do naftaleno.
3. A partir do resultado do exercício anterior, calcule a energia de deslocalização do naftaleno.
4. Calcule as energias de Hückel dos elétrons π do ciclobutadieno. Qual será a multiplicidade de spin do estado fundamental dessa molécula? Compare a estabilidade do ciclobutadieno com a de duas moléculas de etileno isoladas. Quais conclusões podem ser tomadas a respeito dessa molécula a partir desses resultados?
5. Construa o determinante secular de Hückel para a piridina (C_5H_5N).
6. Usando o método de Hückel, determine quais das geometrias da molécula (linear ou triangular) H_3^+ abaixo é a mais estável. Repita esse processo para as moléculas H_3 e H_3^- .

