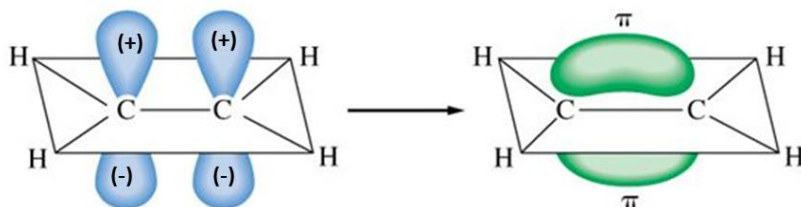


Lista de Exercícios 3 – Espectroscopia Eletrônica

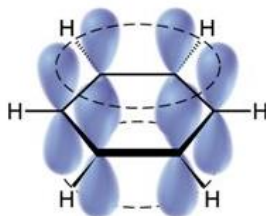
1. Na figura abaixo, mostra-se uma representação das ligações π na molécula de etileno ($\text{CH}_2=\text{CH}_2$):



Onde os dois lóbulos estão fora do plano descrito pelos átomos. No estado fundamental do etileno apenas os orbitais ligantes estão preenchidos. Determine o grupo pontual do etileno e atribua a espécie de simetria (representações irredutíveis) para as ligações π .

2. Construa as combinações lineares adaptadas a simetria dos orbitais moleculares do trifluoreto de boro (BF_3).

3. Considerando apenas os orbitais que participam da conjugação π (p_z) do benzeno (figura abaixo), construa o diagrama dos orbitais moleculares a partir das combinações lineares adaptadas a simetria, verifique se a transição eletrônica $\text{HOMO} \rightarrow \text{LUMO}$ ($E_{1g} \rightarrow E_{2u}$) é permitida por dipolo elétrico.



4. Considerando o ânion alílico $[\text{H}_2\text{CCHCH}_2]^-$:

a) Qual a simetria dessa molécula?

b) Quais as simetrias (representações irredutíveis) dos orbitais moleculares do tipo π nessa molécula?

c) Verifique se há pelo menos uma transição permitida por dipolo elétrico entre esses orbitais moleculares?

5. Quais as regras de seleção que explicam a ocorrência das transições eletrônicas, e qual a relação entre as regras de seleção e os valores da absorvidade molar ($\epsilon / \text{M}^{-1} \text{cm}^{-1}$).