



BC&T - BC0104 - Interações Atômicas e Moleculares
Terceira Lista de Exercícios

- 1) Qual o papel da aproximação de Born-Oppenheimer na definição de uma estrutura molecular?
- 2) Quais as propriedades fundamentais que a função de onda do H_2 deve obedecer? Qual a função de onda do estado de mais baixa energia do H_2 baseada na teoria da ligação de valência? Qual o estado de spin deste sistema de dois elétrons?
- 3) Esboce um gráfico da energia eletrônica em função da distância internuclear para uma molécula diatômica e identifique a distância de equilíbrio e a energia de dissociação.
- 4) Qual as principais características de uma função de onda baseada na teoria da ligação de valência?
- 5) O que caracteriza uma ligação σ e uma ligação π ? Qual combinação de orbitais dá origem a uma ligação σ e a uma ligação π ?
- 6) Em que consiste o processo de “hibridização” e porque ele é necessário? Quais são os tipos de hibridização do carbono e qual o ângulo formado entre as ligações químicas formadas por estes orbitais? Quais orbitais são combinados nos vários tipos de hibridização?
- 7) Considere a hibridização sp . Quais as combinações que geram os orbitais hibridizados e qual o formato dos orbitais? Justifique seus desenhos em termos da interferência construtiva e destrutiva entre orbitais. O que acontece com os orbitais que não sofreram hibridização? Eles são capazes de realizar uma ligação química? Indique as hibridizações nos carbonos do $CHCH$, $CH_2=CH_2$, $H_2C=O$, CH_4 , $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$ e NH_3CH_2COOH (glicina).
- 8) O que é um orbital molecular? Qual a diferença da função de onda baseada na teoria da ligação de valência e na teoria do orbital molecular? Justifique sua resposta ilustrando a diferença em $\Psi^*\Psi$ das duas teorias quando aplicadas a descrição da ligação química da molécula de H_2 ?
- 9) Faça o diagrama de orbitais moleculares para o H_2 . Escreva a função de onda para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado.

10) Qual o critério fundamental que deve ser obedecido para que seja possível combinar orbitais atômicos na formação de um orbital molecular?

11) Faça o diagrama de orbitais moleculares para as moléculas de N_2 , O_2 , F_2 . Qual a ordem de ligação destas moléculas?

12) Considere a molécula de HF. Escreva qualitativamente a função de onda para o orbital sigma ligante na teoria do orbital molecular e na teoria da ligação de valência.

13) Escreva o Hamiltoniano da Molécula de H_2^+ e do átomo de H. Qual os termos que são exclusivos da molécula de H_2^+ ?

14) Qual o orbital molecular ligante da molécula de H_2^+ e qual a sua energia? Apresente seus resultados em termos das integrais entre orbitais. Identifique os termos presentes na solução do átomo de H e os termos que são exclusivos da molécula de H_2^+ .

15) O que é eletronegatividade e como ela altera se manifesta na teoria do orbital molecular? Qual a diferença qualitativa entre uma ligação σ na molécula de H_2 e na molécula de HF?

16) Enuncie o princípio variacional.

17) Qual a relevância do quociente de Reyleigh (a razão do valor esperado de H e a normalização da função de onda) no princípio variacional.