

Interações Atômicas e Moleculares: Prova 1, 23 de março 2017

Nome: _____ Turma: _____

1. (2 p) A função de onda independente do tempo de uma partícula livre ($V(x) = 0$) de massa m é $\psi(x) = A \cdot e^{ikx}$. Use operadores para achar momento linear e energia total da partícula em função da posição.
2. (4 p) Explique (em palavras, sem fórmulas) o método de Hartree-Fock. Para que ele é usado? Quais os passos do método?
3. (2 p) Tomando como eixo z o eixo que liga os dois átomos de uma molécula diatômica homonuclear, descreva o orbital da ligação ligante composto pelos dois orbitais atômicos $2p_z$: Se trata de uma ligação σ ou π ? O orbital da ligação tem quantos lóbulos? Ele tem simetria *gerade* ou *ungerade*?
4. (2 p) As eletronegatividades de Pauling de hidrogênio e cloro são $\chi_{P,H} = 2.20$ e $\chi_{P,Cl} = 3.16$. A ligação química na molécula de HCl (ácido clorídrico) é polar ou apolar? Os elétrons da ligação se encontram mais perto do átomo de hidrogênio ou de cloro? Justifique as suas respostas.
5. (4 p) A molécula de butadieno (C_4H_6) é uma cadeia de 4 átomos de carbono com 6 átomos de hidrogênio anexos. Definimos o plano dos átomos de carbono como plano xy . Aplicando as aproximações de Hückel, queremos calcular as propriedades dos orbitais moleculares tipo π compostos pelos 4 orbitais $2p_z$ dos átomos de carbono. Monte a matriz hamiltoniana usada no método de Hückel. Quantos orbitais moleculares existem? Quantos destes são ocupados por elétrons? Quais as energias dos orbitais moleculares? Qual é a energia total dos elétrons π ? E a energia de formação da ligação π ? E a energia de deslocação?
Dica: a energia de uma ligação π entre dois átomos de carbono é $2\alpha + 2\beta$.

Bom Desempenho!