TLQ - Aula Prática

Felipe B. Pinto 61387 - MIEQB

5 de janeiro de 2022

Conteúdo

Questão 2 Be$_2$

ψ_3 : $+0.70\,S_A - 0.04\,P_{z\,A} + 0.70\,S_B + 0.04\,P_{z\,B}$

ψ_4 : $+0.75\,S_A + 0.04\,P_{z\,A} - 0.75\,S_B + 0.04\,P_{z\,B}$

ψ_5 : $+0.10\,S_A + 0.67\,P_{z\,A} + 0.10\,S_B - 0.67\,P_{z\,B}$

ψ_6 : $+0.70\,P_{y\,A} + 0.70\,P_{y\,B}$

ψ_7 : $+0.70\,P_{x\,A} + 0.70\,P_{x\,B}$

ψ_8 : $+0.72\,P_{x\,A} - 0.72\,P_{x\,B}$

ψ_9 : $+0.72\,P_{y\,A} - 0.72\,P_{y\,B}$

ψ_{10} : $-0.13\,S_A + 0.76\,P_{z\,A} + 0.13\,S_B + 0.76\,P_{z\,B}$

Questão 3 N$_2$

ψ_3 : $+0.50\,S_A - 0.23\,P_{z\,A} + 0.50\,S_B + 0.23\,P_{z\,B}$

ψ_4 : $+0.75\,S_A + 0.25\,P_{z\,A} - 0.75\,S_B + 0.25\,P_{z\,B}$

ψ_5 : $+0.63\,P_{y\,A} + 0.63\,P_{y\,B}$

ψ_6 : $+0.63\,P_{x\,A} + 0.63\,P_{x\,B}$

ψ_7 : $+0.40\,S_A + 0.60\,P_{z\,A} + 0.40\,S_B - 0.60\,P_{z\,B}$

ψ_8 : $+0.82\,P_{y\,A} - 0.82\,P_{y\,B}$

ψ_9 : $+0.82\,P_{x\,A} - 0.82\,P_{x\,B}$

ψ_{10} : $-1.09\,S_A + 1.16\,P_{z\,A} + 1.09\,S_B + 1.16\,P_{z\,B}$

Questão 4 HF

$\psi_2 : +0.15\,S_H + 0.95\,S_F - 0.08\,P_{z\,F}$

$\psi_3 : -0.53\,S_H + 0.41\,S_F - 0.70\,P_{z\,F}$

$\psi_4 : +1.00\,P_{x\,F}$

$\psi_5 : +1.00\,P_{y\,F}$

$\psi_6 : +1.05\,S_H - 0.52\,S_F + 0.82\,P_{z\,F}$

Questão 5 BF

$\psi_3 : -0.10\,S_B + 0.09\,P_{z\,B} + 0.94\,S_F - 0.11\,P_{z\,F}$

$\psi_4 : -0.35\,S_B - 0.18\,P_{z\,B} + 0.39\,S_F + 0.81\,P_{z\,F}$

$\psi_5 : +0.25\,P_{x\,B} + 0.92\,P_{x\,F}$

$\psi_6 : +0.25\,P_{y\,B} + 0.92\,P_{y\,F}$

$\psi_7 : +0.91\,S_B - 0.46\,P_{z\,B} - 0.09\,S_F + 0.27\,P_{z\,F}$

$\psi_8 : +0.99\,P_{y\,B} - 0.42\,P_{y\,F}$

$\psi_9 : +0.99\,P_{x\,B} - 0.42\,P_{x\,F}$

$\psi_{10} : +0.68\,S_B + 1.12\,P_{z\,B} - 0.79\,S_F + 0.70\,P_{z\,F}$

Questão 6 CO

$\psi_3: +0.24\,S_C + 0.17\,P_{zC} + 0.77\,S_O - 0.21\,P_{zO}$

$\psi_4: -0.56\,S_C - 0.06\,P_{zC} + 0.64\,S_O + 0.61\,P_{zO}$
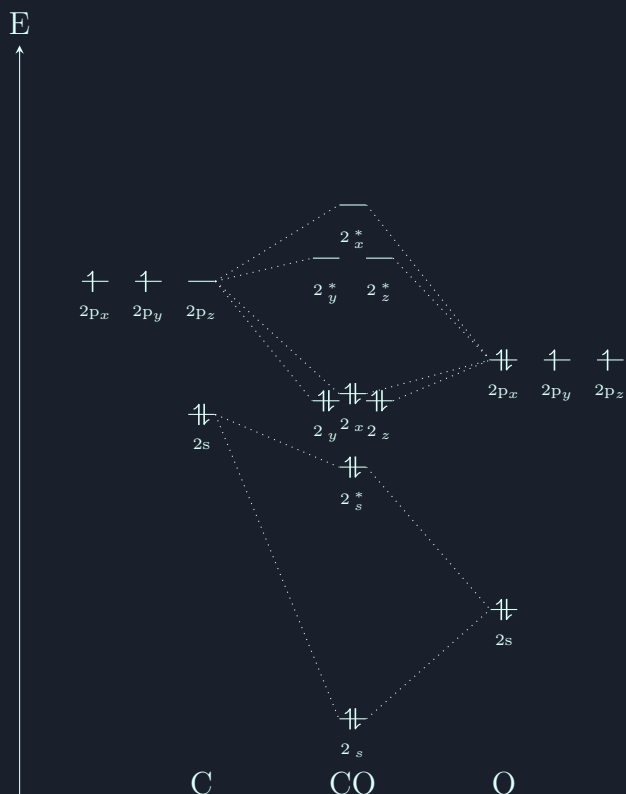
$\psi_5: +0.45\,P_{xC} + 0.79\,P_{xO}$

$\psi_6: +0.45\,P_{yC} + 0.79\,P_{yO}$

$\psi_7: +0.75\,S_C - 0.57\,P_{zC} - 0.05\,S_O + 0.44\,P_{zO}$

$\psi_8: +0.93\,P_{yC} - 0.66\,P_{yO}$

$\psi_9: +0.93\,P_{xC} - 0.66\,P_{xO}$

$\psi_{10}: +0.94\,S_C + 1.21\,P_{zC} - 1.04\,S_O + 0.96\,P_{zO}$

Questão 7   BeH$_2$

ψ_2 : $+0.55\,S_{\text{Be}} + 0.40\,S_{\text{H}_1} + 0.40\,S_{\text{H}_2}$

ψ_3 : $+0.51\,P_{z\,\text{Be}} + 0.40\,S_{\text{H}_1} - 0.40\,S_{\text{H}_2}$

ψ_6 : $+1.27\,S_{\text{Be}} - 0.84\,S_{\text{H}_1} - 0.84\,S_{\text{H}_2}$

ψ_7 : $+1.51\,P_{z\,\text{Be}} - 1.08\,S_{\text{H}_1} + 1.08\,S_{\text{H}_2}$

Questão 8   H$_2$O

ψ_2 : $+0.84\,S_{\mathrm{O}} - 0.12\,P_{z\,\mathrm{O}} + 0.16\,S_{\mathrm{H}_1} + 0.16\,S_{\mathrm{H}_2}$

ψ_3 : $+0.61\,P_{y\,\mathrm{O}} + 0.45\,S_{\mathrm{H}_1} - 0.45\,S_{\mathrm{H}_2}$

ψ_4 : $+0.54\,S_{\mathrm{O}} + 0.76\,P_{z\,\mathrm{O}} - 0.29\,S_{\mathrm{H}_1} - 0.29\,S_{\mathrm{H}_2}$

ψ_5 : $+1.00\,P_{x\,\mathrm{O}}$

ψ_6 : $+0.82\,S_{\mathrm{O}} - 0.76\,P_{z\,\mathrm{O}} - 0.77\,S_{\mathrm{H}_1} - 0.77\,S_{\mathrm{H}_2}$

ψ_7 : $+0.96\,P_{y\,\mathrm{O}} - 0.81\,S_{\mathrm{H}_1} + 0.81\,S_{\mathrm{H}_2}$