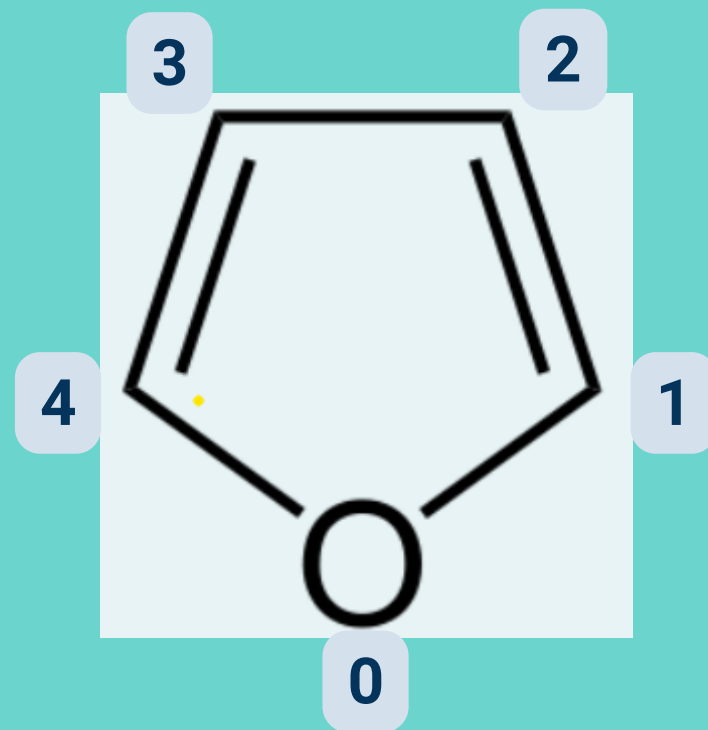


METODO DE HUCKEL

ANGELO (11201810095)

MOLÉCULA DE IDOL



MATRIZ SECULAR

$$\begin{bmatrix} -5. & -2. & 0. & 0. & -2. \\ -2. & 0. & -2.75 & 0. & 0. \\ 0. & -2.75 & 0. & -2.25 & 0. \\ 0. & 0. & -2.25 & 0. & -2.75 \\ -2. & 0. & 0. & -2.75 & 0. \end{bmatrix}$$

NÍVEIS DE ENERGIA

E0= -6.6310387026637185

E1= -3.2271226057951408

ORBITAL HOMO - E2= -1.8462160810011774

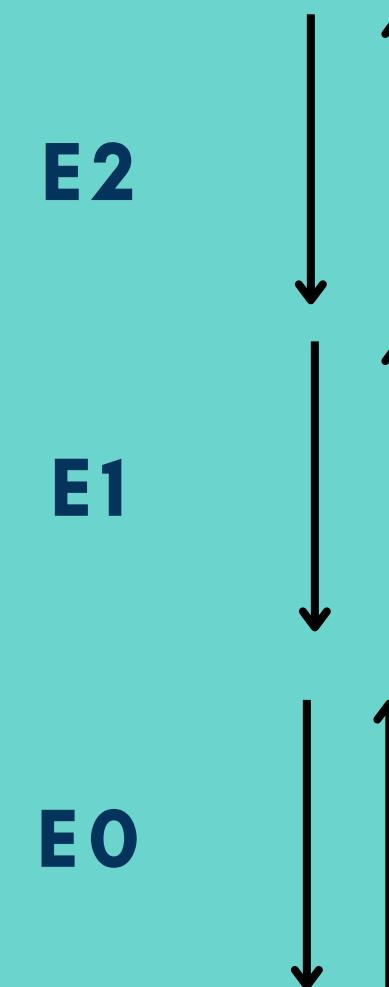
ORBITAL LUMO ----- E3= 2.60816130845886

A DIFERENÇA ENTRE AS
ENERGIAS ENTRE OS
ORBITAIS HOMO E LUMO NOS
INDICA QUE A MOLÉCULA
TEM DIFICULDADE DE TER
OCUPAR A CAMADA DE E5
DE ENERGIA DO ORBITAL
MOLECULAR

E4= 4.0962160810011765

DIAGRAMA DE NÍVEIS DE ENERGIA

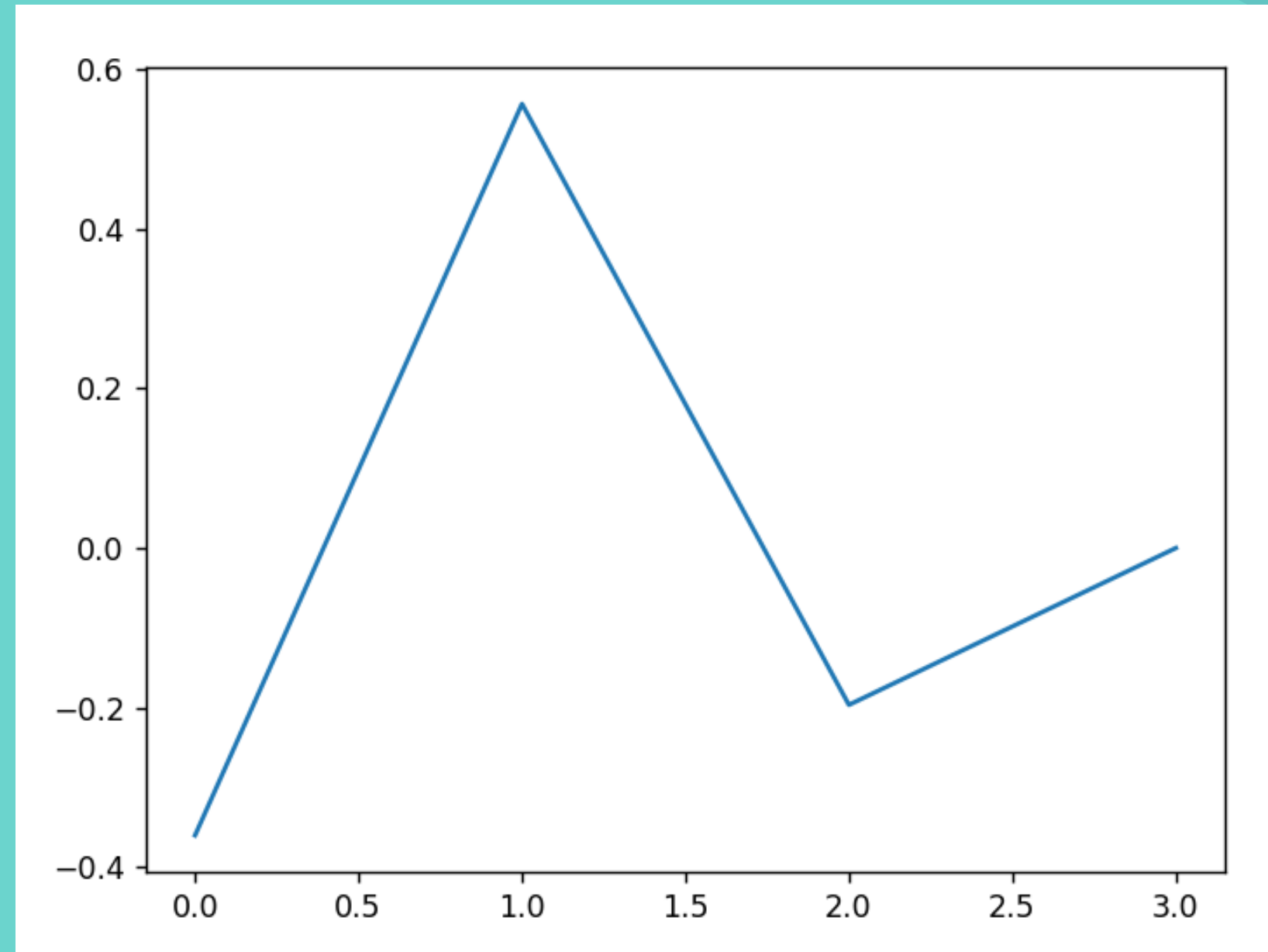
PODEMOS PERCEBER QUE ESSA MOLÉCULA
TEM SEUS PRIMEIROS 3 ORBITAIS
COMPLETAMENTE PREENCHIDOS DANDO
UMA CARACTERÍSTICA DE NÃO MUITO ATIVO
ELETRONICAMENTE



ORDEM DE LIGAÇÃO PARA CADA LIGAÇÃO EM CADA NÍVEL DE ENERGIA

A ORDEM DE LIGAÇÃO ESTÁ NO EIXO Y E NO EIXO X ESTÁ AS LIGAÇÕES ENTRE OS ÁTOMOS 0 E 1 NO NUMERO 0
A LIGAÇÃO ENTRE OS ÁTOMOS 1 E 2 NO NUMERO 1
E ASSIM POR DIANTE

PODEMOS PERCEBER QUE AS MAIORES ORDENS DE LIGAÇÃO ESTÃO NA DUPLA LIGAÇÃO ENTRE OS CARBONOS 1 E 2, INDICANDO ASSIMETRIA NA MOLECULA



POPULAÇÃO ELETRÔNICA DE CADA ATOMO

O GRÁFICO MOSTRA A POPULAÇÃO ELETRÔNICA DOS ÁTOMOS ENUMERADOS CONFORME SLIDES ANTERIORES

PODEMOS PERCEBER UMA CONCENTRAÇÃO DE ELÉTRONS PRÓXIMO AO CARBONO 1 INDICANDO QUE A MOLÉCULA TEM ASSIMETRIA ELETRÔNICA. O QUE NOS MOSTRA É QUE O PAR DE ELÉTRONS LIVRE NO OXIGÊNIO ACABA SE DESLOCANDO PARA UM LADO DA MOLÉCULA.

