

Exercício #3

Isabella B. — 11810773

1. Usando a aproximação de HMO, como são calculadas as propriedades:

- **Ordem de ligação**

A ordem de ligação concerne primariamente o quanto dois átomos estão ligados, de tal forma que podemos notar, pela discussão do cálculo de ψ , que é possível utilizar

$$P_{ij} = \sum_{\psi \text{ ocupados}} n c_i c_j$$

onde temos n sendo o número de elétrons em cada ψ , i e j índices de cada par de átomos em todos os orbitais moleculares ocupados, e c se refere à mesma constante usada na equação de ψ .

- **Índice de valência livre**

A valência livre pode ser tomada como a diferença entre a maior ordem de ligação possível e a total real. Temos então

$$\mathcal{F}_i = N_r - \sum_{\psi \text{ ocupados}} \sum_j P_{ij}$$

onde N_r é um parâmetro experimental da ordem de ligação máxima teórica, que deve ser próxima de um átomo fazendo o máximo de ligações que pode. Para o carbono, por exemplo, $N_r = 4.732$.

- **Carga atômica parcial**

A carga parcial pode ser calculada partindo, novamente, do cálculo inicial de ψ , onde notamos que as contribuições de termos de átomos distintos porém ser ignoradas (na integral de overlap), de tal forma que terminamos com o somatório

$$\rho_i = \sum_{\psi \text{ ocupados}} n c_i^2$$

e este, então, que nos dá a densidade de elétrons em um átomo i e, portanto, podemos encontrar a carga parcial do átomo tomando

$$q_i = 1 - \rho_i$$

2. Calcule os valores dessas propriedades para as moléculas:

- **Ânion ciclopentadienil**
- **Furano (carbono sp^3 do ciclopentadienil substituído por oxigênio)**