



Universidade Federal do Paraná
 Dep. Química – Curso de Licenciatura e Bacharelado em Química
 Nona Lista de Exercícios de Química-Quântica C (CQ115)
 Professor Eduardo Lemos de Sá

1ª Questão: Os orbitais moleculares da molécula abaixo foram obtidos pelo método Hartree-Fock. A partir destas informações, caracterize qualitativamente os orbitais HOMO-2, HOMO-1, HOMO, LUMO e LUMO+1, LUMO+2 e determine as suas energias

Center	Atomic	Coordinates (Angstroms)		
Number	Number	X	Y	Z
1	25	0,077670	0,002179	0,000000
2	8	0,488362	-0,809536	-1,290270
3	8	0,488372	-0,809527	1,290272
4	8	0,710025	1,444376	-0,000007
5	8	-1,646499	0,234351	0,000005
6	1	-2,263834	-0,531781	0,000002

Orbital Molecular			21 (ocupado)	22 (ocupado)	23(ocupado)	24(ocupado)	25(Virtual)
Autovalor /u.a.		Autovalor /u.a.	-0,404280	-0,376160	-0,359030	-0,356670	-0,218350
Centro número	Átomo	Função					
1	Mn	1S	0,000000	-0,055120	0,000000	0,000000	-0,010820
		2S	0,000000	0,038660	0,000000	0,000000	0,008500
		3S	0,000000	0,033190	0,000000	0,000000	0,017280
		4PX	0,000000	-0,032780	0,000000	0,000000	0,002910
		4PY	0,000000	0,091870	0,000000	0,000000	0,042230
		4PZ	-0,169040	0,000000	0,024630	-0,007150	0,000000
		5PX	0,000000	0,005360	0,000000	0,000000	-0,019120
		5PY	0,000000	-0,016730	0,000000	0,000000	-0,020510
		5PZ	0,053650	0,000000	0,001750	0,001360	0,000000
		6PX	0,000000	-0,003170	0,000000	0,000000	0,006020
		6PY	0,000000	0,002650	0,000000	0,000000	0,006520
		6PZ	-0,000540	0,000000	0,003440	-0,000660	0,000000
		7D 0	0,000000	0,078280	0,000000	0,000000	0,296050
		7D+1	0,013950	0,000000	0,046220	-0,015940	0,000010
		7D-1	-0,054610	0,000000	0,015930	-0,001230	0,000000
		7D+2	0,000000	-0,026400	0,000000	0,000000	0,229780
		7D-2	0,000000	0,101870	0,000000	0,000000	0,596690
		8D 0	0,000000	-0,017860	0,000000	0,000000	0,059090
		8D+1	-0,034090	0,000000	0,019420	-0,006330	0,000000
		8D-1	0,056260	0,000000	-0,012690	0,004620	0,000000
		8D+2	0,000000	-0,002300	0,000000	0,000000	0,054010
		8D-2	0,000000	0,044730	0,000000	0,000000	0,164270
2	O	1S	-0,018780	0,001970	0,001070	-0,000200	-0,000260

		2S	0,054000	-0,009760	-0,004850	0,001100	-0,001980
		3S	0,006830	0,019000	0,011300	-0,003090	0,012880
		4PX	0,175280	-0,150750	-0,342510	0,044620	0,181250
		4PY	-0,278520	-0,196230	-0,015410	-0,400980	-0,135210
		4PZ	-0,096960	0,139180	-0,048250	0,257770	0,174410
		5PX	0,089890	-0,074630	-0,161100	0,020320	0,106520
		5PY	-0,143970	-0,081070	-0,004920	-0,190960	-0,078680
		5PZ	-0,080730	0,082340	-0,017080	0,119300	0,114260
3	O	1S	0,018780	0,001970	-0,001070	0,000200	-0,000260
		2S	-0,054010	-0,009760	0,004850	-0,001100	-0,001980
		3S	-0,006830	0,019000	-0,011300	0,003090	0,012880
		4PX	-0,175290	-0,150740	0,342510	-0,044620	0,181240
		4PY	0,278520	-0,196230	0,015410	0,400980	-0,135220
		4PZ	-0,096970	-0,139170	-0,048260	0,257770	-0,174410
		5PX	-0,089900	-0,074630	0,161100	-0,020320	0,106520
		5PY	0,143960	-0,081080	0,004920	0,190970	-0,078680
		5PZ	-0,080730	-0,082340	-0,017080	0,119300	-0,114250
4	O	1S	0,000000	-0,008700	0,000000	0,000000	0,000880
		2S	0,000000	0,025810	0,000000	0,000000	0,002500
		3S	0,000000	-0,000840	0,000000	0,000000	-0,027260
		4PX	0,000000	0,504150	-0,000010	0,000000	-0,304000
		4PY	0,000000	-0,016160	0,000000	0,000000	0,229150
		4PZ	0,357860	-0,000010	-0,302350	-0,385800	0,000000
		5PX	0,000000	0,234590	0,000000	0,000000	-0,175270
		5PY	0,000000	0,008040	0,000000	0,000000	0,145130
		5PZ	0,151950	0,000000	-0,140790	-0,181530	0,000000
5	O	1S	0,000000	-0,034980	0,000000	0,000000	-0,015410
		2S	0,000000	0,082910	0,000000	0,000000	0,030930
		3S	0,000000	0,108330	0,000000	0,000000	0,080660
		4PX	0,000000	-0,165600	0,000000	0,000000	-0,025210
		4PY	0,000000	0,333340	0,000000	0,000000	0,099500
		4PZ	0,386770	0,000000	0,521180	-0,130410	0,000000
		5PX	0,000000	-0,103570	0,000000	0,000000	-0,020050
		5PY	0,000000	0,165800	0,000000	0,000000	0,059810
		5PZ	0,187800	0,000000	0,275540	-0,069520	0,000000
6	H	1S	0,000000	-0,064580	0,000000	0,000000	-0,052380
		2S	0,000000	-0,048740	0,000000	0,000000	-0,071440

Orbital Molecular			26 (Virtual)	27 (Virtual)	28 (Virtual)	29 (Virtual)	30 (Virtual)
Autovalor /u.a.		Autovalor /u.a.	-0.21402	-0.16941	-0.14213	-0.13695	-0.01273
Centro número	Átomo	Função					
1	Mn	1S	0.00000	0.09770	0.00525	0.00000	0.09823

		2S	0.00000	-0.05781	-0.00486	0.00000	-0.05651
		3S	0.00000	-0.01513	-0.00903	0.00000	0.65943
		4PX	0.00000	-0.09325	-0.01180	0.00000	0.04093
		4PY	0.00000	0.00397	-0.16256	0.00000	0.00454
		4PZ	0.02824	0.00000	0.00000	-0.15920	0.00000
		5PX	0.00000	0.02084	0.02129	0.00000	0.09605
		5PY	0.00000	0.01005	0.03112	0.00000	-0.02974
		5PZ	-0.00806	0.00000	0.00000	0.02815	0.00000
		6PX	0.00000	-0.06863	-0.01236	0.00000	-0.58601
		6PY	0.00000	0.00100	-0.07314	0.00000	-0.26685
		6PZ	0.00593	0.00000	0.00000	-0.07663	0.00000
		7D 0	-0.00001	-0.32553	0.55999	0.00000	0.02977
		7D+1	0.66269	0.00000	0.00000	-0.24287	0.00000
		7D-1	0.26345	0.00000	0.00001	0.66124	0.00000
		7D+2	0.00000	0.63300	0.24603	-0.00001	-0.05970
		7D-2	0.00000	-0.09016	-0.33596	0.00000	0.03592
		8D 0	0.00000	-0.10260	0.19720	0.00000	0.01416
		8D+1	0.17626	0.00000	0.00000	-0.09745	0.00000
		8D-1	0.04977	0.00000	0.00000	0.23026	0.00000
		8D+2	0.00000	0.19974	0.08108	0.00000	-0.05249
		8D-2	0.00000	-0.04863	-0.13421	0.00000	0.03390
2	O	1S	-0.00133	-0.00462	0.01182	0.02112	0.02584
		2S	0.00016	0.00473	-0.01486	-0.02776	-0.04726
		3S	0.02247	0.04588	-0.11547	-0.20149	-0.21451
		4PX	0.29254	-0.23526	0.00615	0.05533	0.08650
		4PY	0.14079	0.04545	-0.29896	-0.07456	0.02137
		4PZ	0.06139	0.07260	-0.04883	-0.35546	-0.01447
		5PX	0.17669	-0.14670	0.01200	0.04976	0.05195
		5PY	0.09128	0.02952	-0.20653	-0.07484	-0.00287
		5PZ	0.04325	0.04912	-0.05638	-0.26654	-0.04085
3	O	1S	0.00133	-0.00462	0.01182	-0.02112	0.02584
		2S	-0.00016	0.00474	-0.01486	0.02776	-0.04726
		3S	-0.02247	0.04588	-0.11547	0.20149	-0.21451
		4PX	-0.29255	-0.23526	0.00615	-0.05533	0.08650
		4PY	-0.14079	0.04545	-0.29896	0.07457	0.02137
		4PZ	0.06140	-0.07260	0.04883	-0.35546	0.01447
		5PX	-0.17669	-0.14670	0.01200	-0.04976	0.05195
		5PY	-0.09128	0.02952	-0.20652	0.07484	-0.00287
		5PZ	0.04326	-0.04912	0.05638	-0.26654	0.04085
4	O	1S	0.00000	-0.00480	-0.02268	0.00000	0.01609
		2S	0.00000	0.00381	0.02842	0.00000	-0.02410
		3S	0.00000	0.05718	0.22338	0.00000	-0.16301
		4PX	0.00000	-0.25680	-0.10432	0.00000	0.07717
		4PY	0.00000	-0.05365	-0.38302	0.00000	0.03846
		4PZ	-0.23957	0.00000	0.00000	-0.25172	0.00000

		5PX	0.00000	-0.15876	-0.09233	0.00000	0.06411
		5PY	0.00000	-0.04704	-0.29113	0.00000	0.08400
		5PZ	-0.14627	0.00000	0.00000	-0.15841	0.00000
5	O	1S	0.00000	0.03901	0.00781	0.00000	0.05951
		2S	0.00000	-0.07196	-0.01516	0.00000	-0.12195
		3S	0.00000	-0.27624	-0.04247	0.00000	-0.49655
		4PX	0.00000	-0.30430	0.03439	0.00000	0.14328
		4PY	0.00000	0.15344	-0.07700	0.00000	0.18511
		4PZ	0.21257	0.00000	0.00000	-0.13034	0.00000
		5PX	0.00000	-0.24540	0.02852	0.00000	0.17105
		5PY	0.00000	0.10491	-0.03400	0.00000	0.18354
		5PZ	0.14278	0.00000	0.00000	-0.08507	0.00000
6	H	1S	0.00000	0.05690	0.03755	0.00000	0.06801
		2S	0.00000	0.08325	0.05173	0.00000	0.56671