



Universidade Federal do Paraná
Dep. Química – Curso de Licenciatura e Bacharelado em Química
Oitava 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 Number	Atomic Number	Coordinates (Angstroms)		
		X	Y	Z
1	16	-0,036765	0,178364	0,000000
2	8	1,390123	0,941292	0,000000
3	8	-0,036765	-0,987056	1,347602
4	8	-1,452453	0,909905	0,000000
5	8	-0,036765	-0,987056	-1,347602
6	1	0,837562	-0,935247	-1,813513
7	1	0,837562	-0,935247	1,813513

Orbital Molecular			16 (ocupado)	17 (ocupado)	18 (ocupado)	19 (ocupado)	20 (ocupado)
Autovalor /u.a.		Autovalor /u.a.	-0,385110	-0,369410	-0,359570	-0,351030	-0,348110
Centro número	Átomo	Função					
1	S	1S	0,000000	-0,028660	0,000000	0,000000	0,011360
		2S	0,000000	-0,021080	0,000000	0,000000	0,016340
		3PX	0,000000	-0,014330	0,000000	0,000000	0,009770
		3PY	0,000000	-0,012490	0,000000	0,000000	-0,028510
		3PZ	-0,011760	0,000000	0,023280	0,039670	0,000000
		4PX	0,000000	0,057970	0,000000	0,000000	-0,162120
		4PY	0,000000	0,242570	0,000000	0,000000	-0,016300
		4PZ	0,142180	0,000000	0,158020	0,034480	0,000000
2	O	1S	0,000000	-0,010400	0,000000	0,000000	-0,000800
		2S	0,000000	0,051040	0,000000	0,000000	-0,016000
		3S	0,000000	-0,079350	0,000000	0,000000	0,082900
		4PX	0,000000	0,001220	0,000000	0,000000	-0,340650
		4PY	0,000000	0,458920	0,000000	0,000000	0,416270
		4PZ	0,014790	0,000000	0,536660	-0,373660	0,000000
		5PX	0,000000	0,045990	0,000000	0,000000	-0,202430
		5PY	0,000000	0,236810	0,000000	0,000000	0,192380
		5PZ	-0,021750	0,000000	0,258880	-0,211870	0,000000

3	O	1S	-0,002620	0,001220	-0,006490	0,007030	0,009610
		2S	0,024970	-0,024900	0,034080	-0,011920	-0,021090
		3S	-0,064000	0,087090	-0,054520	-0,035350	-0,034910
		4PX	-0,234620	0,094360	-0,041990	0,120920	0,084780
		4PY	0,126350	0,172220	-0,343980	-0,139520	-0,013810
		4PZ	0,413910	-0,149380	-0,009120	-0,100660	-0,023170
		5PX	-0,131390	0,038320	-0,013050	0,040250	0,049770
		5PY	0,031310	0,099120	-0,207700	-0,078220	-0,010050
		5PZ	0,233690	-0,132840	0,023710	-0,048860	-0,010820
4	O	1S	0,000000	-0,006060	0,000000	0,000000	-0,003340
		2S	0,000000	0,025360	0,000000	0,000000	0,028140
		3S	0,000000	-0,026170	0,000000	0,000000	-0,078410
		4PX	0,000000	0,093070	0,000000	0,000000	-0,338160
		4PY	0,000000	0,449320	0,000000	0,000000	-0,389570
		4PZ	0,267750	0,000000	0,212700	0,584070	0,000000
		5PX	0,000000	0,017060	0,000000	0,000000	-0,190950
		5PY	0,000000	0,208030	0,000000	0,000000	-0,167400
		5PZ	0,125570	0,000000	0,079560	0,298620	0,000000
5	O	1S	0,002620	0,001220	0,006490	-0,007030	0,009610
		2S	-0,024970	-0,024900	-0,034080	0,011920	-0,021090
		3S	0,064000	0,087090	0,054520	0,035350	-0,034910
		4PX	0,234620	0,094360	0,041990	-0,120920	0,084780
		4PY	-0,126350	0,172220	0,343980	0,139520	-0,013810
		4PZ	0,413910	0,149380	-0,009120	-0,100660	0,023170
		5PX	0,131390	0,038320	0,013050	-0,040250	0,049770
		5PY	-0,031310	0,099120	0,207700	0,078220	-0,010050
		5PZ	0,233690	0,132840	0,023710	-0,048860	0,010820
6	H	1S	-0,014490	-0,007590	0,010390	-0,025560	0,027130
		2S	-0,002040	-0,001450	-0,001100	-0,002700	0,007600
7	H	1S	0,014490	-0,007590	-0,010390	0,025560	0,027130
		2S	0,002040	-0,001450	0,001100	0,002700	0,007600

Orbital Molecular			21 (virtual)	22 (virtual)	23 (virtual)	24 (virtual)	25 (virtual)
Autovalor /u.a.		Autovalor /u.a.	-0,144080	-0,084370	-0,043010	0,021610	0,049490
Centro número	Átomo	Função					
1	S	1S	0,356990	0,000000	0,097770	0,051130	0,000000
		2S	0,862600	0,000000	0,353830	0,168200	0,000000
		3PX	0,014030	0,000000	0,053990	0,440680	0,000000
		3PY	-0,213400	0,000000	0,543090	-0,108340	0,000000
		3PZ	0,000000	0,590190	0,000000	0,000000	0,111150
		4PX	-0,048210	0,000000	0,102910	0,854950	0,000000
		4PY	-0,104390	0,000000	0,794380	-0,367210	0,000000
		4PZ	0,000000	0,692780	0,000000	0,000000	0,274390
2	O	1S	0,022170	0,000000	0,042940	0,032440	0,000000
		2S	-0,047750	0,000000	-0,069620	-0,030230	0,000000
		3S	-0,156850	0,000000	-0,388340	-0,394520	0,000000
		4PX	0,274790	0,000000	0,422230	0,168270	0,000000
		4PY	0,224890	0,000000	-0,044930	0,246360	0,000000
		4PZ	0,000000	-0,306680	0,000000	0,000000	0,050870
		5PX	0,194540	0,000000	0,375680	0,184050	0,000000
		5PY	0,151170	0,000000	-0,001650	0,253160	0,000000
		5PZ	0,000000	-0,214610	0,000000	0,000000	-0,044590
3	O	1S	0,044990	0,040780	-0,033710	-0,030020	-0,044640
		2S	-0,094400	-0,076850	0,053150	0,058410	0,081770
		3S	-0,288370	-0,304360	0,294550	0,287430	0,507300
		4PX	-0,078020	-0,036940	0,058200	0,036790	0,265020
		4PY	-0,236440	-0,287770	-0,011430	-0,028890	-0,028580
		4PZ	0,280850	0,135550	-0,154670	0,177030	0,190680
		5PX	-0,053340	-0,000920	0,040390	0,177970	0,391710
		5PY	-0,170910	-0,243380	0,035620	-0,038390	-0,064520
		5PZ	0,191020	0,150380	-0,152850	0,274960	0,278580
4	O	1S	0,023170	0,000000	0,031750	-0,053470	0,000000
		2S	-0,040570	0,000000	-0,054760	0,082150	0,000000
		3S	-0,209120	0,000000	-0,277190	0,542040	0,000000
		4PX	-0,280670	0,000000	-0,372700	0,235340	0,000000
		4PY	0,240110	0,000000	-0,128590	-0,218870	0,000000
		4PZ	0,000000	-0,314550	0,000000	0,000000	-0,015290
		5PX	-0,205340	0,000000	-0,312630	0,307150	0,000000
		5PY	0,170180	0,000000	-0,075470	-0,182080	0,000000
		5PZ	0,000000	-0,224300	0,000000	0,000000	-0,048580
5	O	1S	0,044990	-0,040780	-0,033710	-0,030020	0,044640

		2S	-0,094400	0,076850	0,053150	0,058410	-0,081770
		3S	-0,288370	0,304360	0,294550	0,287430	-0,507300
		4PX	-0,078020	0,036940	0,058200	0,036790	-0,265020
		4PY	-0,236440	0,287770	-0,011430	-0,028890	0,028580
		4PZ	-0,280850	0,135550	0,154670	-0,177030	0,190680
		5PX	-0,053340	0,000920	0,040390	0,177970	-0,391710
		5PY	-0,170910	0,243380	0,035620	-0,038390	0,064520
		5PZ	-0,191020	0,150380	0,152850	-0,274960	0,278580
6	H	1S	0,047430	-0,019930	-0,058880	-0,126070	0,129790
		2S	0,119890	-0,035840	-0,122800	-0,733890	1,126040
7	H	1S	0,047430	0,019930	-0,058880	-0,126070	-0,129790
		2S	0,12	0,04	-0,122800	-0,733890	-1,126040