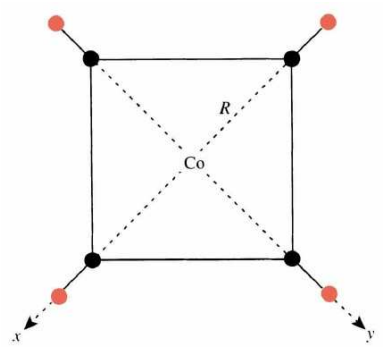
Fundação Universidade Federal de Pelotas
Cursos de Bach. em Química e Bach. em Química industrial
Disciplina de Álgebra linear e Geometria analítica
Prof. Dr. Maurício Zahn
Lista A1 de Exercícios - Aplicações na Química

1. Considere o ion planar $[Co(CN_4)]^{2-}$, mostrado esquematicamente na ilustração abaixo. O Co central encontra-se na origem, e os quatro ligantes CN^- coordenam-se nele nos eixos x e y; R é a distância interatômica $Co - C$ (os átomos de carbono estão representados pelas esferas pretas e os átomos de nitrogênio por esferas vermelhas)

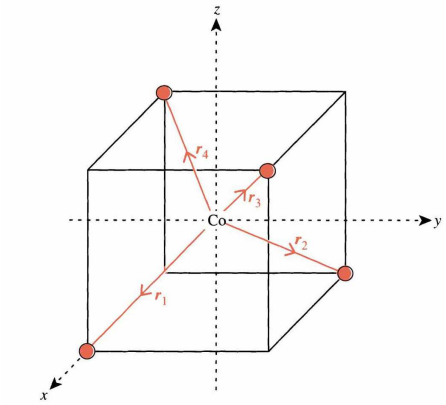


   (a) Identifique os vetores unitários direcionados para cada um dos quatro ligantes CN^-.

   (b) Encontre os vetores especificando uma das mais curtas e uma das mais longas distâncias $C - C$, e determine seus comprimentos em termos de R.

2. Um átomo de hélio está se movendo com uma velocidade $\vec{v} = 20\vec{i} - 15\vec{j}$ m/s. Qual é o módulo de sua velocidade?

3. O ion complexo $[CoC\ell_4]^{2-}$ assume uma geometria tetraédrica, onde o Co encontra-se no centro de um cubo de lado $2a$, e as espécies $C\ell^-$ estão localizadas em vértices alternados do cubo; a distância interatômica $Co - C\ell$ é denotada por R. Os eixos coordenados foram escolhidos para passar pelos centros de pares opostos das faces do cubo, com o Co localizado na origem, conforme figura abaixo.



   (a) Dado que as coordenadas dos quatro ligantes $C\ell^-$ são $(a, -a, -a)$, $(-a, a, -a)$, (a, a, a) e $(-a, -a, a)$, escreva a representação algébrica dos quatro vetores r_1, r_2, r_3 e r_4, direcionados do centro Co (0,0,0) aos quatro ligantes.

(b) Encontre o comprimento de algum dos vetores $Co - C\ell$, e disso expresse a em termos de R.

(c) Encontre um vetor associado à distância interligada, e disso, expresse-a em termos de R.

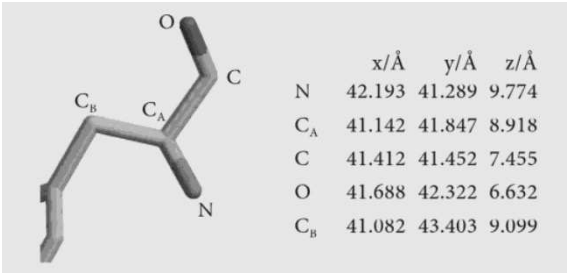
4. A molécula de metano CH_4 é organizada como se o átomo de carbono estivesse no centro de um tetraedro regular com quatro átomos de hidrogênio nos vértices. Se os vértices estão marcados em $(0,0,0)$; $(1,1,0)$; $(1,0,1)$ e $(0,1,1)$ [note que todas as seis arestas têm comprimento $\sqrt{2}$, e então o tetraedro é regular], qual é o cosseno do ângulo entre os raios indo do centro $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ para os vértices?

5. Um ion movendo-se em uma solução tem duas forças agindo sobre si, uma força resistiva do meio com um vetor de $(3, \sqrt{7}, 3)$ e uma força eletromagnética de um campo elétrico com um vetor de $(-5, 3, 4)$. Qual é o ângulo entre estes dois vetores?

6. [Para quem já estudou Cálculo] Qual é o trabalho w realizado pelo vetor força $\vec{F} = 3t\vec{i} + 3\vec{j}$ Newtons em uma partícula de velocidade $\vec{v} = 5\vec{i} - t\vec{j}$ m/s no intervalo de tempo $0 < t < 3$, onde

$$w = \int_0^3 \vec{F} \cdot \vec{v}\, dt\,?$$

7. As coordenadas atômicas na ilustração abaixo formam parte da "espinha dorsal" de uma proteína. Calcule os ângulos $O - C - C_A$, $C - C_A - N$ e os comprimentos CO e C_AN.



	x/Å	y/Å	z/Å
N	42.193	41.289	9.774
C_A	41.142	41.847	8.918
C	41.412	41.452	7.455
O	41.688	42.322	6.632
C_B	41.082	43.403	9.099

8. Usando os dados abaixo, calcule os comprimentos e os ângulos de ligação da molécula da água. As coordenadas estão em ângstrons ($\mathring{A}$)

	x	y	z
O	2,0317	-1,1893	-1,0464
H_1	1,1374	-1,0385	-0,7880
H_2	2,5201	-0,4437	-0,7383

9. A naftalia cristalina possui uma célula unitária monoclínica, definida pelos vetores $\vec{a} = a_2\vec{j} + a_3\vec{k}$, $\vec{b} = b_1\vec{i}$ e $\vec{c} = c_2\vec{j}$, onde $||\vec{a}|| = 0,824$ nm, $||\vec{b}|| = 0,600$ nm, $||\vec{c}|| = 0,866$ nm e o ângulo entre $\vec{a}$ e $\vec{c}$ é $\beta = 122,9°$.

(a) Determine os valores de b_1 e c_2.

(b) Usando a fórmula do produto escalar para $\vec{a} \cdot \vec{c}$ em termos dos módulos destes vetores, determine o valor de a_2.

(c) Através da fórmula do módulo de $\vec{a}$, encontre os valores possíveis para a_3.

10. Os três orbitais híbridos sp^2 podem ser expressos vetorialmente por

$$\vec{\psi}_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}\vec{k}; \quad \vec{\psi}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{i} - \frac{1}{\sqrt{6}}\vec{k} \quad \vec{\psi}_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\vec{i} - \frac{1}{\sqrt{6}}\vec{k}.$$

Determine os ângulos entre estes orbitais híbridos.