

**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 A2 de Exercícios - Aplicações na Química - Matrizes e Sistemas**

1. O estudo de simetria desempenha um papel vital em análise da estrutura, ligação e espectroscopia da molécula. Uma operação de simetria é definida como uma operação realizada em uma molécula que a deixa aparentemente inalterada. Por exemplo, se uma molécula de água é girada em  $180^\circ$  em torno de uma linha perpendicular ao plano molecular e passando pelo átomo central de oxigênio, a estrutura resultante é indistinguível da original. Considere um caso geral de uma rotação de uma molécula de  $\theta$  graus em torno do eixo  $z$ . Se um dado átomo tem coordenadas iniciais  $(x_1, y_1, z_1)$ , após girar  $\theta$  graus em torno do eixo  $z$ , mostra-se que ele terá coordenadas  $(x_2, y_2, z_2)$ , onde

$$x_2 = x_1 \cos \theta - y_1 \sin \theta$$

$$y_2 = x_1 \sin \theta + y_1 \cos \theta$$

$$z_2 = z_1,$$

ou, matricialmente,

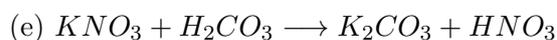
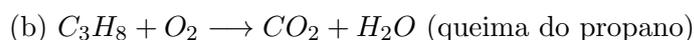
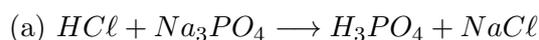
$$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

- (a) Com a matriz de rotação acima, se uma molécula da água girar  $180^\circ$ , identificando um dos seus átomos pelo ponto  $A(x_1, x_2, x_3)$ , após a rotação o mesmo átomo ocupará qual ponto no espaço?
- (b) Se a molécula da água girar  $\alpha$  graus e depois girar  $\beta$  graus, seria equivalente a girar  $\alpha + \beta$  graus? Justifique como interpretar isso matricialmente.
2. No modelo de Hünckel, o resultado de minimizar a energia dos orbitais moleculares  $\pi$  apropriadamente ocupados resulta no seguinte conjunto de equações lineares nos coeficientes orbitais atômicos desconhecidos,  $c_r$ , juntamente com a energia molecular orbital,  $\varepsilon$ :

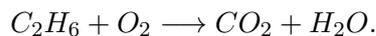
$$\begin{cases} c_1(\alpha - \varepsilon) + c_2\beta = 0 \\ c_1\beta + c_2(\alpha - \varepsilon) + c_3\beta = 0 \\ c_2\beta + c_3(\alpha - \beta) = 0 \end{cases}$$

Para cada valor de  $\varepsilon$  dado, encontramos os coeficientes orbitais atômicos  $c_i$ .

- (a) Para  $\varepsilon = \alpha$ , mostre que  $c_2 = -c_1$  e que  $c_3 = 0$ .
- (b) Para  $\varepsilon = \alpha + \sqrt{2}\beta$ , mostre que  $c_2 = \sqrt{2}c_1$  e que  $c_3 = c_1$ .
- (c) Para  $\varepsilon = \alpha - \sqrt{2}\beta$ , mostre que  $c_2 = -\sqrt{2}c_1$  e que  $c_3 = c_1$ .
3. Equilibrar as seguintes equações químicas, via sistemas lineares:



4. O etano ( $C_2H_6$ ) queima em oxigênio para produzir óxido de carbono (IV)  $CO_2$  e vapor. O vapor se condensa para formar gotículas de água. A equação dessa reação química é dada por



Faça o seu balanceamento.

5. Tome três ingredientes diferentes  $A, B$  e  $C$ , para produzir uma certa substância química. Os ingredientes  $A, B$  e  $C$  devem ser dissolvidos na água separadamente antes de interagirem para formar o produto químico. Suponha que a solução contendo  $A$  a  $1,5 \text{ g/cm}^3$  combinada com a solução  $B$  a  $3,6 \text{ g/cm}^3$  combinada com a solução  $C$  a  $5,3 \text{ g/cm}^3$  produz  $25,7 \text{ g}$  do produto químico. Se a proporção para  $A, B, C$  dessas soluções forem substituídas por  $2,5; 4,3$  e  $2,4 \text{ g/cm}^3$ , respectivamente (enquanto os volumes permanecem os mesmos), então  $22,36 \text{ g}$  de produto químico é produzido. Finalmente, se as proporções forem  $2,7; 5,5$  e  $3,2 \text{ g/cm}^3$ , respectivamente, então  $28,14 \text{ g}$  do produto químico é produzido. Quais são os volumes (em centímetros cúbicos) das soluções contendo  $A, B$  e  $C$  ?