

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° 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 θ graus em torno do eixo z . Se um dado átomo tem coordenadas iniciais (x_1, y_1, z_1) , após girar θ 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,

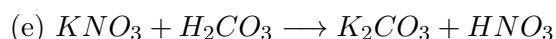
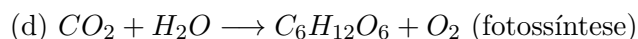
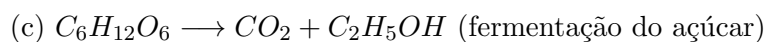
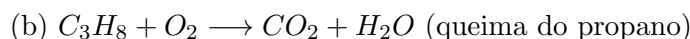
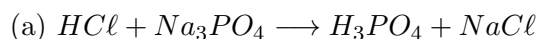
$$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

- (a) Com a matriz de rotação acima, se uma molécula da água girar 180° , 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 α graus e depois girar β 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 π apropriadamente ocupados resulta no seguinte conjunto de equações lineares nos coeficientes orbitais atômicos desconhecidos, c_r , juntamente com a energia molecular orbital, ε :

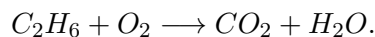
$$\begin{cases} c_1(\alpha - \varepsilon) + c_2\beta = 0 \\ c_1\beta + c_2(\alpha - \varepsilon) + c_3\beta = 0 \\ c_2\beta + c_3(\alpha - \beta) = 0 \end{cases}$$

Para cada valor de ε 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 ?