

028511729

NOTA TÉCNICA
IEAv/NT-020/83
07 OUT 1983

MOMENTO DO DIPOLO ELÉTRICO DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS

por

ABEL ROSATO ^{**+}

**Centro Técnico Aeroespacial
Instituto de Estudos Avançados
Rodovia dos Tamelos, Km 5,5
12.200-São José dos Campos - SP
Brasil**

* Professor do Instituto Tecnológico da
Aeronáutica
+ Este trabalho foi em parte financiado
pela FINEP nº 4/3/82/0530.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO -----	Pág. 1
2. CÁLCULO DO MOMENTO DIPOLAR -----	Pág. 3
3. APLICAÇÕES -----	Pág. 6
A. Molécula HF -----	Pág. 6
B. Outras Moléculas -----	Pág. 11
4. CONCLUSÕES -----	Pág. 15
Referências -----	Pág. 17

ABSTRACT

The electric dipole moment of some diatomic molecules is calculated using the Variational Cellular Method. The results obtained for the molecules CO, HB, HF and LiH are compared with other calculations and with experimental data. It is shown that there is strong dependence of the electric dipole moment with respect to the geometry of the cells. It is discussed the possibility of fixing the geometry of the problem by giving the experimental value of the dipole moment. *(Arar)*

ABSTRACT

O momento do dipolo elétrico de algumas moléculas diatômicas é calculada^o usando o Método Celular Variacional. Os resultados obtidos para as moléculas CO, HB, HF e LiH são comparada^s com outros cálculos e com os resultados experimentais. Mostra-se que há uma forte dependência do momento do dipolo elétrico com a geometria das células. Discute-se a possibilidade de se fixar a geometria do problema dando o valor experimental do momento do dipolo. *(Arar)*

1. INTRODUÇÃO

A razão pela qual estamos calculando o momento dipolar para algumas moléculas diatômicas (heteronucleares) de camadas eletrônicas completas, não está ligada às importantes funções que esta quantidade desempenha na Física Atômica e Molecular. Assim, apesar de saber que a intensidade de transição vibração-rotação de um estado eletrônico de uma molécula diatômica, depende essencialmente da variação do momento dipolar com a distância interatômica, ou que o conhecimento desta quantidade é essencial nos cálculos de vida média radiativa⁽¹⁾, o motivo que nos levou a estudar o momento dipolar de moléculas diatômicas utilizando-se do Método Celular Variacional está ligado à necessidade de se ter um critério mais rigoroso, do que o atualmente usado (vide cap. 2 que se segue) para escolha de um parâmetro importante do MCV.

Este parâmetro, que é a posição do plano separador das células que envolvem os átomos da molécula, influencia de maneira significativa a curva de potencial, e as consequentes propriedades espectroscópicas da molécula diatômica. Quando a molécula diatômica é homonuclear o plano separador deve necessariamente passar pelo meio da distância internuclear, e como sempre, ser perpendicular ao eixo de simetria da molécula. Nestas condições, não há problema na escolha de sua localização. O problema surge quando a molécula é heteronuclear, visto que nesta situação, as regiões separadas pelo plano devem ser diferentes. Para uma dada distância internuclear e para uma dada localização do plano, se tem fixado o tamanho das células 1 e 2 que envolvem os átomos 1 e 2 da molécula, de acordo com a Fig. 1. Conforme o plano se move para a direita ou para a esquerda os raios das esferas inscritas 1 e 2, que envolvem os átomos, variam. Qualquer quantidade física ligada à molécula, que depende do tamanho dos átomos, irá variar por consequência.

O momento dipolar, ou o momento do dipolo elétrico, é uma quantidade com estas características e depende fortemente da localização do plano separador. Pensou-se então em se utilizar desta quantidade para se estabelecer um critério de escolha da posição do plano: - o plano seria localizado numa posição tal que o valor do momento dipolar correspondente fosse o mais próximo possível do valor experimental.

2. CÁLCULO DO MOMENTO DIPOLAR

A expressão matemática do momento dipolar no MCV é dada por⁽²⁾

$$\vec{\mu} = 2,541 \times [(Z_2 - Q_2 - \bar{Q}/3)a_1 - (Z_1 - Q_1 - \bar{Q}/3)a_2] \hat{k} \text{ (em Debye.)}$$

Na expressão acima Q_1 e Q_2 são as cargas eletrônicas dentro das esferas inscritas 1 e 2 da Fig. 1, e \bar{Q} é a carga total na região intercelular, isto é, a região localizada entre as células e as esferas inscritas. Z_1 e Z_2 da Fig. 1. Estas cargas não são necessariamente iguais ao número de prótons dos átomos 1 e 2, visto que para efeito de simplificação dos cálculos, aqueles elétrons pertencentes a estados atômicos bastante localizados, quer do átomo 1 quer do átomo 2, são incorporados aos respectivos núcleos. Em consequência disto, Z_1 ou Z_2 correspondem as cargas positivas líquidas oriundas da subtração do número de prótons pelo número de elétrons que foram incorporados ao núcleo. É evidente, que nesta situação, as cargas eletrônicas Q_1 ou Q_2 e \bar{Q} correspondem somente às cargas dos elétrons que não pertencem a estes estados tão localizados. a_1 e a_2 são os raios das esferas inscritas 1 e 2, o número 2,501 é o fator de conversão

do momento dipolar em unidades $(e \cdot a_0)$ para a unidade Debye, ($1D = 10^{-18}$ unidades CGS), e o versor \hat{k} , indo de O_1 para O_2 , é o versor do eixo de simetria das moléculas.

O cálculo do momento dipolar segue então a seguinte linha de desenvolvimento no Método Celular:

- a experiência nos dá a distância interatômica $\overline{O_1 O_2}$ da Fig. 1, que também é a soma dos raios a_1 e a_2 das esferas inscritas 1 e 2 daquela figura. Entretanto, a posição do plano separador PP' ao longo do eixo da molécula, que determina o tamanho das esferas 1 e 2, não fica ainda definido. Para tal, se escolhe os raios a_1 e a_2 de sorte que a relação entre eles seja igual à relação entre os raios covalentes dos átomos correspondentes. Assim se $(r_c)_1$ é o raio covalente do átomo localizado no ponto O_1 da Fig. 1, e $(r_c)_2$ é o raio covalente do outro átomo, então a_1 e a_2 são escolhidos de maneira que

$$a_1/a_2 = (r_c)_1/(r_c)_2 \quad (2)$$

$$a_1 + a_2 = \overline{O_1 O_2} = R_e \quad (3)$$

- as cargas Q_1 e Q_2 são determinadas de uma maneira idêntica no Método Celular. Se o elétron pertence ao orbital α , a probabilidade dele estar na célula i , $P_{i\alpha}$, é determinada a partir da Eq. (30) da referência 3, onde naturalmente se tem que a soma desta quantidade para as três células do problema é igual a um. Como se conhece a ocupação do orbital molecular α , isto é, o máximo número de elétrons que o orbital comporta, (2 elétrons se o orbital é σ , 4 se o orbital é π , δ , etc.) pode-se determinar a fração de carga

de ocupação em cada uma das células do problema devido ao orbital α . Somando estas frações para todos os orbitais se obtém a carga total eletrônica nas diferentes células. Na mesma referência 3, a expressão 37 determina a densidade de carga $\eta_{i\alpha}(r)$, esfericamente simétrica, num ponto \vec{r} dentro da esfera inscrita i , devido ao orbital α . A partir daí se determina a carga eletrônica dentro da esfera inscrita i devido ao orbital α , e que posteriormente somando para todos os orbitais nos fornece as cargas Q_1 e Q_2 da Eq. 1.

- Quanto à carga \bar{Q} , carga eletrônica total na região entre as células e as esferas inscritas, ela poderá ser obtida a partir das cargas já determinadas no parágrafo anterior. Assim, tendo a carga total na célula i e a carga total na esfera inscrita i , por diferença, encontraremos a carga na região entre a célula e a esfera i . Fazendo o mesmo para as outras células, e somando, encontraremos a carga intercelular \bar{Q} total da molécula. Esta carga \bar{Q} poderá também ser determinada de uma outra maneira quando o programa do MCV for corrido para o caso em que as duas calotas esféricas (as duas células atômicas) se juntarem numa única esfera. Isto faz com que a região intercelular 3 seja nula visto que a esfera externa 3 coincide com a célula 3. Então, se Q_T é a carga eletrônica total a ser distribuída entre os orbitais, Q_i é a carga eletrônica na esfera inscrita i , e se Q'_i é a carga eletrônica na região intercelular i , então

$$Q_T = (Q_1 + Q'_1) + (Q_2 + Q'_2) + \bar{Q}, \quad (4)$$

ou seja

$$\bar{Q} = Q_1' + Q_2' = Q_T - (Q_1 + Q_2 + Q_3). \quad (5)$$

Neste caso, basta conhecer as cargas Q_i nas esferas inscritas e o número de elétrons da molécula, Q_T , para imediatamente determinar \bar{Q} .

3. APLICAÇÕES

A. Molécula HF

A primeira molécula a ser estudada foi a molécula HF cujos resultados preliminares aparecem na referência 2. Procuramos aqui completar aqueles cálculos iniciais através do levantamento da curva de potencial da molécula e da determinação das constantes espectroscópicas correspondentes. Foi somente para esta molécula que levantamos a curva de potencial. Para as outras que se seguem, o MCV foi aplicado somente para a distância interatômica correspondente à posição de equilíbrio R_e , e somente para esta distância obtivemos a energia dos orbitais, a energia global e o momento dipolar.

O estado fundamental da molécula HF é o estado $X^1\Sigma^+$ correspondente à seguinte configuração eletrônica de camada completa, $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^4$. Dado que o orbital 1σ é proveniente do orbital $1s$ do Flúor, que é fortemente ligado⁽⁴⁾, os dois elétrons deste orbital foram incorporados à carga positiva $Z = 9$ do Flúor, o que fez com que a carga eletrônica total Q_T da molécula fosse igual a oito elétrons, e que a carga positiva da célula do átomo de Flúor passasse a ser $Z=7$.

Os raios covalentes dos átomos desta molécula são: $(r_c)_H = 0,30 \text{ \AA}$ e $(r_c)_F = 0,64 \text{ \AA}$ ⁽⁵⁾. Isto nos dá o valor 0,47 para a relação entre os raios covalentes. Sabendo que a distância interatômica do equilíbrio é $R_e = 1,733 \text{ a}_0$ ⁽⁶⁾, e usando as eqs. 2 e 3, obtemos para os raios a_1 e a_2 das

esferas inscritas os valores $a_1 = a_F = 1,1789 a_0$ e $a_2 = a_H = 0,5541 a_0$. Os valores do parâmetro α da "exchange" são aqueles obtidos por Schwarz⁽⁷⁾, exceto para o Hidrogênio, onde usamos o valor $\alpha_2 = \alpha_H = 0,7723$. Com isto, as cargas Q_1 e Q_2 nas esferas inscritas foram obtidas e seus valores respectivos são: $Q_1 = 4,883$ e $Q_2 = 0,112$ em unidades da carga do elétron. Para a carga intercelular foi encontrado o valor $\bar{Q} = 1,556$. Por meio destes dados e utilizando-se da eq. (1) obtém-se o valor $\vec{\mu} = -1,14$ k em unidades Debye para o momento dipolar. Como o eixo \hat{k} vai do centro da esfera inscrita 1 para o centro da esfera inscrita 2, isto é, do átomo de Flúor para o átomo de Hidrogênio, o resultado obtido nesta aproximação nos diz que o momento dipolar da molécula HF é um vetor dirigido do H para o F. Outros resultados obtidos por outros métodos dão para o sentido deste vetor, o sentido positivo do vetor \hat{k} , indicando que o momento dipolar não está sendo bem calculado nesta aproximação.

No sentido de tentar melhorar este resultado do valor do momento dipolar, vamos escolher os raios das esferas inscritas de uma maneira diferente. Vamos considerar que a razão a_1/a_2 não seja somente proporcional à razão dos raios covalentes dos átomos, mas que seja proporcional à razão do produto dos raios covalentes pela eletronegatividade dos átomos. Assim, ao invés de usar a equação 2, vamos considerar para aquela equação o valor

$$a_1/a_2 = f_1(r_c)_1/f_2(r_c)_2 \quad (6)$$

onde f_i é a eletronegatividade do átomo i . Como $f_1 = f_F = 4,0$ e $f_2 = f_H = 2,1$, a relação a_1/a_2 se torna agora igual a 0,24. Com este valor da relação a_1/a_2 e para $R_e = 1,733 a_0$, obtemos para a_1 o valor $1,3976 a_0$ e para a_2 o valor $0,3354 a_0$.

Utilizando-se do MCV e com estes valores dos raios das esferas inscritas, e considerando os outros parâmetros constantes, obtivemos para as cargas nas esferas inscritas os valores $Q_1 = 5,819$, $Q_2 = 0,017$ e para a carga intercelular o valor $\bar{Q} = 0,846$. Com estes valores o momento dipolar resulta igual a $1,72 \text{ \AA}$ em unidades Debye em unidades da carga eletrônica. Este resultado nos dá um vetor de mesmo sentido que o vetor obtido por meio de outros métodos de cálculo e de módulos em excelente acordo com o resultado experimental, cujo valor é $1,73^{(8)}$.

Desde que esta nova posição do plano separador nos fornece um valor do momento dipolar muito melhor do que a posição anterior, vamos verificar se o mesmo acontece para outras quantidades físicas de interesse e que dependem deste parâmetro. Na Tabela I estão as energias dos orbitais da molécula HF, sendo que na primeira coluna estão os resultados provenientes de um cálculo SCF-LCAO, e nas duas últimas os resultados para as duas posições possíveis do plano separador.

TABELA I. Energia dos Orbitais da Molécula HF, em Ry, para a distância

$$R_e = 1,733 a_0$$

	LCAO ^(a)	MCV ^(b)	MCV ^(c)
1 σ	-52,28	-48,53	-48,46
2 σ	- 2,95	- 2,19	- 2,17
3 σ	- 1,13	- 0,95	- 0,83
1 π	- 0,93	- 0,82	- 0,83

União Carbônica

a) vide referência 8.

b) posição do plano separador oriundo da equação 2.

c) posição do plano separador oriundo da equação 6.

Levantamos também a curva de potencial da molécula HF para as duas posições do plano separador e os resultados para as várias distâncias inter nucleares estão mostrados na Tabela II.

Tabela II. Curva de Potencial da Molécula HF para as duas Posições do Plano Separador, em Rydbergs.

$R(a_0)$	Energia ^(a)	Energia ^(b)
1,00	- 200,8012	- 200,5229
1,20	- 200,4239	-
1,40	- 200,4853	- 201,1201
1,50	- 200,5014	- 201,1258
1,60	- 200,5165	- 201,1183
1,733	- 200,5131	- 201,0742
1,80	- 200,5110	- 201,0485
1,90	- 200,5084	- 201,0039
2,00	- 200,4723	- 201,9551

a) Com o plano na posição dada pela equação 2.

b) Com o plano na posição dada pela equação 6.

Uma vez obtida a curva de potencial, algumas constantes espectroscópicas, tais como, frequência vibracional do estado fundamental ω_e , a energia de dissociação D_e , a distância interatômica do equilíbrio R_e , etc. podem ser imediatamente obtidas. R_e é a posição R para o qual a energia potencial é mínima, e é fácil ver que $R_e \approx 1,60 a_0$ para a situação a da Tabela II e $R_e \approx 1,50 a_0$ para o caso b. A energia de dissociação da molécula é a diferença entre a energia dos átomos separados e a energia no ponto de equilíbrio. A energia dos átomos separados da molécula HF é dada por $-199,8186^{(9)} \text{ Ry}$. Com isto, a energia de dissociação no caso a fica igual 9,49 eV, enquanto

que para o caso b ela fica igual a 17,78 eV. O resultado experimental é igual a 6,40⁽¹⁰⁾ eV. Ajustando uma parábola à curva de potencial obtida na Tabela II, pode-se determinar a frequência de vibração do estado fundamental da molécula, visto que a frequência vibracional ω_e e o coeficiente do termo de segunda ordem A da parábola ajustada estão ligados por⁽¹¹⁾

$$2A = 5,8883 \times 10^{-2} \mu \omega_e^2 \text{ dyn/cm}$$

onde, μ é a massa reduzida da molécula. Assim foi possível determinar ω_e , cujo valor para o caso a é igual a 4.262 cm^{-1} e 3.915 cm^{-1} para o caso b. O resultado experimental é $\omega_e = 4.138 \text{ cm}^{-1}$. Na Tabela III estão os valores das constantes espectroscópicas discutidas acima, juntamente com os resultados experimentais.

TABELA III - Constantes Espectroscópicas da Molécula HF para as duas situações do plano Separador

	MCV ^(a)	MCV ^(b)	Exp ^(c)
$R_e (a_0)$	1,60	1,50	1.733
$D_e (eV)$	9,49	17,78	6,40
$\omega_e (\text{cm}^{-1})$	4262	3,915	4138
$E(\text{global})^{(d)}$	-200,5165	-201,1258	-201,0540

a) Plano separador na posição dada pela equação (2)

b) Plano separador na posição dada pela equação (6)

c) Referência 10.

d) Para $R. = R_e$

B. Outras Moléculas

As outras moléculas estudadas foram as moléculas BH, CO, e LiH. Para estas moléculas no entanto, os cálculos foram feitos somente para a distância internuclear de equilíbrio, distância esta correspondente às determinações experimentais. Procurou-se comparar o momento dipolar obtido para estas moléculas usando-se as duas opções que se tem para a posição do plano separador.

O estado fundamental da molécula BH é o estado $X^1\Sigma^+$ correspondente à configuração eletrônica de camada fechada $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2$. Os raios covalentes dos átomos desta molécula são: $(r_c)_H = (r_c)_B = 0,88 \text{ \AA}$ e $(r_c)_C = 0,30 \text{ \AA}^{(5)}$. A relação entre os raios covalentes é pois igual a 2,933. Sendo a distância interatômica de equilíbrio dada experimentalmente por $R_e = 1,2325 \text{ \AA} = 2,3299 a_0$, a equação (2) nos dá para a_1 e a_2 os valores, $a_1 = a_B = 1,7375 a_0$ e $a_2 = 0,5924 a_0$. Entretanto, levando em conta a eletronegatividade dos átomos B e H, a equação (6) nos fornece para a relação a_1/a_2 o valor 2,7933, e com isto os raios das esferas inscritas adquirem os valores $a_1 = 1,7157 a_0$ e $a_2 = 0,6142 a_0$. Os resultados gerais para a molécula BH, levando em conta estas duas posições do plano separador, estão apresentados na Tabela IV, correspondentes à posição internuclear $R_e = 2,3299 a_0$.

TABELA IV - Valor das Cargas, energia dos orbitais e momento dipolar tanto para as duas posições do plano separador como para outros resultados teóricos ou experimentais. As energias estão em Rydberg e o momento dipolar em Debye.

	MCV ^(a)	MCV ^(b)	LCAO ^(c)
Q	1,496	1,441	-
Q	0,180	0,206	-
Q	0,950	0,982	-
1	-13,33	-13,34	-15,40
2	- 0,84	-0,85	- 1,30
3	- 0,43	-0,43	- 0,69
e ^(d) global	- 50,4044	-50,4098	- 50,1242
μ	0,44	0,11	0,99

a) conforme posição do plano separador dado pela equação (2)

b) conforme posição do plano separador dado pela equação (6)

c) conforme Referência 8.

d) Para $R = 2.3299 a_0$.

O estado fundamental da molécula CO é o estado $X^1\Sigma^+$ correspondente à configuração eletrônica $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 4\pi^4 1\sigma^2 5\sigma^2$. Os raios covalentes dos átomos desta molécula são dados por $(r_c)_C = (r_c)_C = 0,772 \text{ \AA}$ e $(r_c)_O = 0,66 \text{ \AA}$.⁽⁵⁾ A relação entre os raios covalentes é igual a 1,1698 e sendo a distância internuclear de equilíbrio dada por $R_e = 2,132 a_0$, obtemos para os raios das esferas inscritas os valores $a_1 = a_C = 1,1494 a_0$ e $a_2 = a_O = 0,9826$. Entretanto, levando-se em conta a eletronegatividade da maneira discutida antes para as outras moléculas, estes raios passam a ser um pouco diferentes, ou seja, $a_C = 1,161500$ e $a_O = 0,9705$. Os resultados do MCV para estas duas posições do plano separador, estão mostrados na Tabela V.

Tabela V. Valor das cargas, energia dos orbitais, e momento dipolar tanto para as duas posições do plano separador discutidas no texto, quanto para outros cálculos teóricos e experimentais relacionados com a molécula CO.

	MCV ^(a)	MCV ^(b)	LCAO ^(c)	Exp. ^(d)
Q ₁	1,417	1,508	-	-
Q ₂	2,946	2,829	-	-
\bar{Q}	3,336	3,360	-	-
1 σ	-37,60	-37,63	-41,42	-
2 σ	-20,06	-20,04	-22,71	-
3 σ	- 1,85	- 1,84	- 3,00	-
4 σ	- 1,04	- 1,04	- 1,46	-
1 π	- 0,84	- 0,82	- 1,17	-
5 σ	- 0,52	- 0,53	- 0,96	-
E ^(e) (global)	-226,0243	-225,9879	-224,6872	-226,7540
μ	1,99	2,68	0,73	0,11

a) posição do plano separador dada pela eq. (2)

b) posição do plano separador dada pela equação (6)

c) conforme Referência 8.

d) Conforme Referência 8.

e) Para $R = 2.132 a_0$

O estado fundamental da molécula LiH é o estado $X^1\Sigma^+$ correspondente à configuração eletrônica $1\sigma^2 2\sigma^2$. Tomando para o raio covalente do Li o valor $2,5255 a_0$ e para o raio covalente do H o valor anterior, obtemos para a re

lação dos raios covalentes o valor 0,2776. Para a distância interatômica do equilíbrio $R_e = 3,015 a_0$, os raios das esferas inscritas adquirem os valores $a_1 = a_{Li} = 2,3599 a_0$ e $a_2 = a_H = 0,6551$. Levando-se em conta a eletro-negatividade dos átomos desta molécula da maneira indicada antes para as outras moléculas, estes valores de a_1 e a_2 passam a ser $a_1 = 1,9046 a_0$ e $a_2 = 1,1104 a_0$. Para estas duas situações do plano separador o MCV apresenta para a energia dos orbitais, para os valores das cargas e momento dipolar os resultados da Tabela VI.

Tabela VI . Cargas nas esferas inscritas, energia dos orbitais e momento dipolar da molécula LiH. Energias estão em Rydberg e o momento dipolar em Debye.

	MCV ^(a)	MCV ^(b)	LCAO ^(c)	Exp. ^(d)
Q_1	2,378	2,095	-	-
Q_2	0,119	0,607	-	-
$\bar{Q}\sigma$	0,626	0,775	-	-
1σ	-3,82	-3,72	4,89	-
2σ	-0,37	-0,39	-0,61	-
$E^{(e)}$ (global)	-15,8889	-15,9128	-15,9332	-16,1404
μ	3,34	-1,14	6,41	5,88

a) Posição do plano separador dada pela equação (2)

b) Posição do plano separador dada pela equação (6)

c) vide referência 8.

d) vide referência 8.

4) Para $R = 3.015 a_0$

4. CONCLUSÕES

A escolha da posição que o plano separador corta o eixo de simetria da molécula, posição esta que posteriormente acaba por determinar os raios das esferas inscritas que envolvem os átomos da molécula é uma decisão bastante importante no MCV, especialmente no que diz respeito à determinação do momento do dipolo elétrico da molécula.

Assim, por exemplo, na molécula CO, Tabela V, para uma variação no raio da esfera 1, $a_1 = a_c$, de aproximadamente 1%, se obtém uma variação da ordem de 6% na carga dentro desta esfera. O momento dipolar, entretanto, varia de 35%. Para a molécula BH, enquanto uma variação de 1% no raio da esfera que envolve o átomo de Boro, produz na carga Q_1 dentro desta esfera uma variação de 4%, a variação no momento dipolar correspondente é da ordem de 75%. Mais dramático, entretanto, é o que acontece com a molécula LiH. Uma variação de 20% no raio da primeira esfera e de 70% no raio da segunda, causa uma variação de aproximadamente 630% no momento dipolar. Isto demonstra a extrema sensibilidade desta quantidade física com respeito a variações nos raios das esferas. Outras quantidades já não são tão sensíveis. A energia global, percentualmente varia pouco, ou quase nada, nestas três situações; a energia do orbital mais alto varia de 2%, 0% e 5% respectivamente nas situações acima.

Enquanto que para a molécula HF a escolha da posição do plano separador feita de acordo com a equação 6 nos levou a um resultado excelente para o momento dipolar desta molécula, o mesmo já não aconteceu com a molécula LiH. Para esta molécula a melhor escolha dos raios das esferas é aquela feita de acordo com a equação 2, isto é, usando a relação dos raios covalentes dos átomos. Na própria molécula HF, as outras propriedades moleculares que dependem da posição do plano separador, tais como energia de ligação, distân

cia internuclear de equilíbrio etc., parecem adquirir melhores valores quando se usa a opção especificada na equação 2 para a escolha da posição do plano separador.

É de se concluir que se a escolha da posição do plano separador feita de acordo com a razão dos raios covalentes dos átomos não é uma boa escolha, ainda assim, ela continua a ser melhor que a escolha que leva em conta a eletronegatividade, conforme a equação 6, especialmente para as moléculas estudadas HF, BH, CO e LiH.

REFERÊNCIAS:

- 1) George C.Lie, J.Chem. Phys. 60, 299 (1974)
- 2) Abel Rosato, IEAv/NT-016/83, 24 JAN 83
- 3) Luiz G.Ferreira e José R.Leite, Phys. Rev. 18, 335, (1978)
- 4) F.Herman e S.Skillman, Atomic Structure Calculations", Prentice Hall, N.Jersey, 1964
- 5) L.Pauling, "The Nature of the Chemical Bond" Cornell University Press, 1960, 3ª ed., pág. 224
- 6) G.Herzberg, "Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules", Van Nostrand, 1950
- 7) K.Schwarz, Phys. Rev. 85, 2466,(1972)
- 8) Bernard J.Ransil, Rev. Mod. Phys. 32, 239, (1960)
- 9) E.Clementi, IBM J. Res. Develop. 9, 2, (1965)
- 10) G.Herzberg, "Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules", Van Nostrand, 1950, pág. 536
- 11) G.Herzberg, "Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules", Van Nostrand, 1950, pág. 98