



LISTA DE EXERCÍCIOS DE QUÍMICA GERAL B

01) Empregando a tabela periódica, explique como variam, ao longo do período e dos grupos, o raio atômico, o raio iônico, a primeira energia de ionização, a afinidade eletrônica, a eletronegatividade e a polarizabilidade.

02) A polarizabilidade e a hiperpolarizabilidade são propriedades muito importantes na descrição de alguns fenômenos, desde as ligações secundárias, até processos óticos lineares e não lineares. **(a)** Sabendo disso, explique o que é a polarizabilidade. **(b)** Qual dos seguintes átomos é mais polarizável: oxigênio (O), enxofre (S), selênio (Se) ou Telúrio (Te)? **(c)** Que tipo de moléculas tem tendência a ter polarizabilidades elevadas? **(d)** Qual é a relação entre polarizabilidade e ligações secundárias?

03) Os átomos de quase todos os elementos podem se combinar, formando ligações e gerando substâncias cujas energias são sempre menores do que a soma das energias que esses átomos teriam, se permanecessem completamente separados. Em outras palavras: pode-se dizer que um composto químico é formado apenas se proporcionar uma situação de estabilidade energética (termodinâmica) maior que aquela envolvendo seus constituintes isoladamente. Explique porque isto ocorre.

04) Quando dois átomos, dois íons, ou ainda duas moléculas, estão quimicamente ligados entre si, ficam posicionados a certa distância um do outro, a qual é estável enquanto as condições de temperatura e pressão não se alteram. Esta distância é denominada de *distância de equilíbrio* da ligação química ou *distância interatômica de equilíbrio* (d_e ou r_o). Com base nessa informação, responda as questões a seguir:

(a) As ligações químicas podem ser representadas por uma curva, chamada de curva de energia potencial de ligação química. Sabendo disso, faça um gráfico para representar esta curva de energia potencial de ligação e diga quais são as forças que atuam para que a *distância de equilíbrio* da ligação química (*distância interatômica de equilíbrio*) ocorra e qual é a natureza de cada uma dessas forças.

(b) A energia potencial de ligação química pode ser representada por uma equação matemática, a qual é independente do tipo de ligação. Sabendo disso, represente qual é essa equação usada para representar a energia potencial da ligação química e explique o que significa cada um de seus termos.

05) A formação de uma ligação covalente a partir de seus átomos separados é endotérmica ou exotérmica? Explique e demonstre graficamente.

06) Na Tabela 1, apresentada a seguir, foi cometido um erro: foi feita uma inversão no tipo de ligação de dois dos materiais apresentados. Corrija o erro, justificando a sua correção.

Tabela 1. Tipo de ligação e propriedades de alguns tipos de materiais.

Material	Tipo de ligação química	Temperatura de fusão (°C)
NaCl	Iônica	801
C (diamante)	Covalente	$\cong 3550$
$-(CH_2-CH_2)_n-$	Iônica e covalente	$\cong 120$
Cu	Metálica	1085
SiO ₂	Covalente e secundária	1700
Ar	Secundária (dipolo induzido)	-189
H ₂ O	Secundária (dipolo permanente)	0

07) Desenhe as estruturas de Lewis para as seguintes espécies e atribua a carga formal para cada um dos átomos:

(a) N₂; (b) O₂; (c) Cl₂; (d) CH₄; (e) C₂H₂; (f) C₂H₄; (g) C₂H₆; (h) C₂H₆O; (i) CO₂; (j) CH₅N; (k) CH₂O; (l) NO₃Cl; (m) BeCl₂; (n) BF₃; (o) H₃PO₃ (diácido); (p) SO₂; (q) SO₃; (r) CO; (s) NO; (t) H₃PO₂ (monoácido); (u) HClO₄; (v) COCl₂; (w) N₂O₄; (x) NO₂; (y) CO₂ e (z) SCl₂.

08) Os complexos ácido-base de Lewis são formados por uma reação entre um ácido e uma base de Lewis, sabendo disso: **(a)** explique como ocorre a formação do BF_3NH_3 a partir de moléculas de BF_3 e NH_3 em termos de ácidos e bases de Lewis. **(b)** Quem é o ácido e quem é a base de Lewis? Explique sua conclusão.

09) Desenhe a estrutura de Lewis de cada uma das seguintes espécies e identifique-as como ácido ou base de Lewis: (a) H^+ ; (b) Al^{3+} ; (c) CN^- ; (d) NO_2^- ; (e) CH_3O^- (o átomo de C é o átomo central).

10) A polarizabilidade pode ser definida como uma medida da facilidade com que a nuvem eletrônica de um átomo ou íon pode ser distorcida, em função do efeito de dipolo de um campo elétrico externo, tendo desta forma uma maior dispersão de elétrons (maior deslocalização). Dessa forma, átomos ou íons grandes são altamente polarizáveis. Com base neste conceito, explique o caráter ácido do cátion B^{3+} .

11) Explique como ocorre a formação do Al_2Cl_6 a partir de moléculas de AlCl_3 em termos de ácidos e bases de Lewis. Quem é o ácido e quem é a base de Lewis? Explique sua conclusão. O boro também forma o BF_3 , dessa forma, explique porque não existe o dímero B_2F_6 .

12) O sulfamato de amônio ou sulfamidato ($\text{NH}_4\text{OSO}_2\text{NH}_2$) é um herbicida inorgânico, que ainda é usado como dessecante e como arbusticida. Este composto contém o ânion sulfamato, $\text{H}_2\text{NOSO}_2^-$, o qual, pode ser imaginado como sendo formado pela reação entre o ânion amideto, NH_2^- e o trióxido de enxofre, SO_3 , por meio de uma reação ácido-base de Lewis. Já, os Bicarbonatos são sais que contêm o ânion bicarbonato e, quimicamente são resultantes de uma reação de salificação parcial. O bicarbonato mais importante é o bicarbonato de sódio, que devido a sua solubilidade relativamente baixa, é um intermediário no processo de obtenção do carbonato de sódio. O íon bicarbonato, HCO_3^- pode ser formado pela reação entre o gás carbônico, CO_2 e o ânion hidróxido, OH^- , que também é uma reação ácido-base de Lewis.

(a) Com base nessas informações, represente as estruturas de Lewis das espécies químicas envolvidas nas reações citadas acima, com as estruturas de ressonância quando houver e a carga formal de cada um dos átomos envolvidos no processo.

(b) Com base nas Estruturas de Lewis, represente as reações químicas de formação dos íons sulfamato e bicarbonato.

(c) Indique se houve ou não mudança na carga formal dos átomos envolvidos na formação das novas espécies químicas.

13) Faça a representação das estruturas de ressonância para as seguintes moléculas e mostre o híbrido de ressonância para cada uma delas:

(a) Fenol ($\text{C}_6\text{H}_6\text{O}$); **(b)** Ânion clorato (ClO_3^-); **(c)** Anilina ($\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$); **(d)** Ânion tiocianato (SCN^-); **(e)** ânion periodato (IO_4^-); **(f)** Pirrol ($\text{C}_4\text{H}_5\text{N}$).

14) Os seguintes íons orgânicos contendo oxigênio possuem energia extra de estabilização de ressonância: **(i)** HCO_2^- (ânion formiato) e **(ii)** $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ (ânion oxalato). Para cada uma delas escreva: **(a)** As estruturas de Lewis. **(b)** As estruturas de ressonância. **(c)** A carga formal de cada átomo. **(d)** Diga dentre as duas espécies químicas qual apresenta a ligação C–O mais forte e a mais curta. Explique sua conclusão.

15) As seguintes moléculas (ou íons) possuem energia extra de estabilização de ressonância: **(i)** SO_3 e **(ii)** SO_4^{2-} . Para cada uma delas escreva: **(a)** As estruturas de Lewis. **(b)** As estruturas de ressonância. **(c)** A carga formal de cada átomo. **(d)** Diga dentre as duas espécies químicas qual apresenta a ligação S–O mais forte e a mais curta. Explique sua conclusão.

16) O ácido cianico (HOCN) e o ácido isociânico (HNCO) diferem-se pela posição dos elétrons, mas não constituem estruturas ressonantes. A perda de um próton pelo ácido cianico leva ao mesmo ânion que se forma pela perda de um próton pelo ácido isociânico. **(a)** Sabendo disso, mostre a estrutura de Lewis para os dois ácidos e para o ânion comum entre os mesmos e **(b)** explique essas observações.

17) Sabendo que o carbono tem valência quatro em quase todos os compostos e que pode formar cadeias e anéis de átomos, responda as seguintes questões: **(a)** Desenhe três estruturas para a molécula de C_3H_4 . **(b)** Determine a carga formal de cada átomo. **(c)** Veja se as três estruturas podem apresentar ou não estruturas de ressonância e explique sua conclusão.

18) Os seguintes íons orgânicos contendo oxigênio possuem energia extra de estabilização de ressonância: **(i)** HCO_2^- (ânion formiato) e **(ii)** $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ (ânion oxalato). Para cada uma delas escreva: **(a)** As estruturas de Lewis. **(b)** As

estruturas de ressonância. (c) A carga formal de cada átomo. (d) Diga dentre as duas espécies químicas qual apresenta a ligação C–O mais forte e a mais curta. Explique sua conclusão.

19) As seguintes moléculas (ou íons) possuem energia extra de estabilização de ressonância: (i) SO_3 e (ii) SO_4^{2-} . Para cada uma delas escreva: (a) As estruturas de Lewis. (b) As estruturas de ressonância. (c) A carga formal de cada átomo. (d) Diga dentre as duas espécies químicas qual apresenta a ligação S–O mais forte e a mais curta. Explique sua conclusão.

20) Uma ligação simples carbono-carbono possui uma energia de ligação média de 348 kJ mol^{-1} . Que comprimento de onda da luz é necessário para fornecer energia suficiente para quebrar esta ligação C–C? Este comprimento de onda está localizado em qual região do espectro eletromagnético?

21) Têm-se as seguintes moléculas: (i) NHCH_2 , (ii) NH_2CH_3 e (iii) HCN . Sabendo disso, (a) escreva a estrutura de Lewis para cada uma, com as respectivas cargas formais de cada átomo, (b) prediga qual delas terá a ligação C–N mais forte. Explique sua conclusão

22) A tabela abaixo representa os comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação entre átomos de carbono em algumas moléculas orgânicas.

Ligação	Comprimento médio de ligação (pm)	Energias de dissociação de ligação (kJ mol^{-1})
C–C	154	348
C=C	134	612
C=C*	139	518
C≡C	120	837

*No benzeno

Explique os valores dos comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação entre átomos de carbono apresentados na tabela acima.

23) A tabela abaixo representa os comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação para as moléculas diatômicas dos halogênios.

Moléculas	Comprimento médio de ligação (pm)	Energias de dissociação de ligação (kJ mol^{-1})
F_2	142	146
Cl_2	199	230
Br_2	228	181
I_2	268	139

Explique os valores dos comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação, para tais moléculas.

24) A tabela abaixo representa os comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação para as moléculas diatômicas dos ácidos dos halogênios.

Moléculas	Comprimento médio de ligação (pm)	Energias de dissociação de ligação (kJ mol^{-1})
HF	109	543
HCl	135	419
HBr	151	354
HI	171	287

Explique os valores dos comprimentos de ligação médios e as energias médias de ligação, para tais moléculas.

25) Desenhe as estruturas de Lewis e prediga a geometria molecular, com base na Teoria de Repulsão por Pares de Elétrons da Camada de Valência, para as seguintes espécies:

(a) HCN ; (b) NO_2F ; (c) $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$; (d) O_3 ; (e) NO_2 ; (f) H_3CCl ; (g) PO_4^{3-} ; (h) NF_3S ; (i) SO_3^{2-} ; (j) NCl_3 ; (k) OF_2 ; (l) $\text{P}(\text{CH}_3)_3\text{F}_2$; (m) SbCl_5 ; (n) TeBr_4 ; (o) BrCl_4^+ ; (p) IF_3 ; (q) ClF_3 ; (r) ICl_2^- ; (s) XeF_2 ; (t) TeF_6 ; (u) PCl_6^- ; (v) IF_5 ; (w) XeOF_4 ; (x) XeO_2F_2 ; (y) BrF_4^- e (z) XeF_4 .

26) Explique, com base nas considerações da Teoria VSEPR, os valores observados para os ângulos de ligação no seguinte grupo de moléculas isoeletrônicas (possuem o mesmo número de elétrons): CH_4 ($109,5^\circ$); H_2O ($104,5^\circ$); NH_3 ($107,3^\circ$); NF_3 ($102,1^\circ$) e OF_2 ($103,8^\circ$).

27) Existem três estruturas possíveis para a molécula de $\text{PF}_3(\text{CH}_3)_2$, onde o átomo de fósforo é o átomo central. **(a)** Represente as três estruturas para esta molécula. **(b)** Encontre o arranjo espacial e a geometria para cada uma delas **(c)** Explique como valores de momento de dipolo obtidos experimentalmente podem ser utilizados para distingui-las.

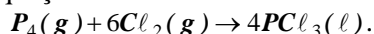
28) Embora nitrogênio e fósforo sejam do mesmo grupo, o fósforo forma dois cloretos, PCl_3 e PCl_5 , enquanto o nitrogênio forma somente um, NCl_3 . Dessa forma, **(a)** Escreva a estrutura de Lewis para os três cloretos, **(b)** Utilizando o modelo VSEPR, preveja o arranjo eletrônico e a geometria de cada um, **(c)** Explique por que o nitrogênio forma somente um cloreto e o fósforo dois.

29) De acordo com o modelo VSEPR, os pares de elétrons isolados (não ligantes) em uma molécula do tipo AX_4E ou do tipo AX_3E_2 ocupam as posições equatoriais ao invés das axiais, **(a)** explique porque. **(b)** Embora o tipo de arranjo eletrônico nestes dois casos seja o mesmo, explique porque as geometrias das moléculas são diferentes. **(c)** Encontre as estruturas de Lewis, o arranjo eletrônico e a geometria para as moléculas de IF_4^+ e de ClF_3 , utilizando-as para exemplificar as afirmações anteriores.

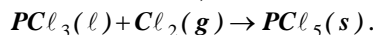
30) Uma mistura de SbCl_3 e GaCl_3 numa razão de 1:1 (usando dióxido de enxofre líquido como solvente) produz um composto iônico sólido de fórmula empírica GaSbCl_6 . Porém, existe uma controvérsia, não se o composto formado é $(\text{SbCl}_2)^+(\text{GaCl}_4)^-$ ou $(\text{GaCl}_2)^+(\text{SbCl}_4)^-$. **(a)** Com base nestas informações, represente a estrutura de Lewis para os dois ânions e prediga a geometria molecular de cada um deles. **(b)** Sabe-se que o cátion tem estrutura angular. Baseado neste fato prediga qual das duas fórmulas é mais provável de existir. Justifique sua resposta.

31) O telúrio (Te) é um elemento muito perigoso, assim poucos pesquisadores trabalham com ele. Sabendo disso, prediga fórmulas de compostos desse elemento com flúor (F) tais que exibam as seguintes geometrias: **(i)** Angular, **(ii)** Pirâmide trigonal; **(iii)** Bipirâmide trigonal e **(iv)** Octaédrica. Para cada uma das estruturas formadas determine o arranjo eletrônico espacial (orientação espacial).

32) O fósforo reage diretamente com uma quantidade limitada de cloro para formar um líquido tóxico incolor, o tricloreto de fósforo, conforme mostra a equação abaixo:



Entretanto, quando excesso de cloro está presente ou quando o tricloreto de fósforo reage com mais cloro, é produzido o pentacloreto de fósforo, um sólido cristalino amarelo-claro, conforme mostra a equação abaixo:



O pentacloreto de fósforo é um sólido iônico constituído de cátions PCl_4^+ e ânions PCl_6^- , que sublima a 160°C para um gás de moléculas de PCl_5 . Sabendo disso, **(a)** preveja as estruturas de Lewis com os possíveis ângulos de ligação para PCl_3 , PCl_5 , PCl_4^+ e PCl_6^- . **(b)** Indique como a polaridade dessas moléculas poderia ser utilizada para identificá-las.

33) Têm-se as seguintes espécies químicas, representadas abaixo:



Para cada uma delas encontre: **(a)** as estruturas de Lewis, incluindo as estruturas de ressonância quando apropriado **(b)** as cargas formais de cada átomo, **(c)** o arranjo eletrônico, **(d)** geometria de cada espécie química e **(e)** preveja como varia o ângulo de ligação O–N–O nas três espécies químicas. Explique seu raciocínio.

34) Têm-se as seguintes espécies químicas, representadas abaixo:



Para cada uma delas encontre: **(a)** as estruturas de Lewis, incluindo as estruturas de ressonância quando apropriado, **(b)** as cargas formais de cada átomo, **(c)** o arranjo eletrônico, **(d)** geometria de cada espécie química e **(e)** preveja como varia o ângulo de ligação Cl–P–Cl nas três espécies químicas. Explique seu raciocínio.

35) Os halogênios formam compostos entre si. Tais compostos, chamados interhalogênios, têm fórmula XX' , XX'_3 , XX'_5 e XX'_7 , onde X está representando o átomo de halogênio mais pesado. Dessa forma, **(a)** preveja as estruturas de Lewis, a geometria com os possíveis ângulos de ligação para cada molécula. **(b)** Por que não encontramos o halogênio mais leve no átomo central de tais moléculas?

36) A seguir, encontram-se listadas uma série de afirmações obtidas por resultados experimentais. Dessa forma, utilizando o modelo VSEPR, explique, justificando sua resposta, os resultados experimentais encontrados:

a) A geometria do pentacloreto de fósforo (PCl_5) é uma bipirâmide trigonal.

- b)** No carbonato de sódio (Na_2CO_3), o ânion carbonato é planar e todas as ligações são iguais.
- c)** A geometria do radical dióxido de nitrogênio (NO_2) é angular e possui um ângulo de ligação O–N–O de $134,1^\circ$.
- d)** No tiocianato de amônio (NH_4SCN), o cátion amônio é tetraédrico e todos os seus ângulos das ligações H–N–H são de $109^\circ 28'$.
- e)** Na molécula do ácido nitroso (HNO_2), o ângulo da ligação O–N–O, para a forma sin é de 114° , já para a forma anti é de 111° .

37) Uma determinada molécula apresenta quatro pares de elétrons em torno do átomo central. Com base nesta informação, responda as seguintes questões:

- a)** Como essa molécula pode ter uma geometria piramidal? Explique e faça a representação.
- b)** Como essa molécula pode ter uma geometria angular? Explique e faça a representação.
- c)** Quais seriam os ângulos de ligação previstos em cada caso? Justifique sua resposta.

38) Baseado na teoria de hibridização, represente as estruturas, prediga a geometria molecular, a hibridização do átomo central, e os ângulos de ligação, para as seguintes espécies químicas:

- (a) CO_2 ; (b) C_2H_2 ; (c) N_2O ; (d) SO_3 ; (e) CO_3^{2-} ; (f) NO_2^- ; (g) SO_2 ; (h) C_2H_6 ; (i) BF_4^- ; (j) XeO_3 ; (k) BrO_3^- ; (l) SF_2 ; (m) NH_2^- ; (n) AsF_3 ; (o) SOF_4 ; (p) SF_4 ; (q) PF_4^- ; (r) ICl_3 ; (s) BrF_3 ; (t) XeF_2 ; (u) I_3^- ; (v) SF_6 ; (w) SnCl_6^{2-} ; (x) XeOF_4 ; (y) XeF_4 e (z) IF_7 .

39) Faça um desenho esquemático dos seguintes orbitais envolvidos em ligações químicas: **(a)** ligação σ entre os orbitais atômicos $2s$ e $2p_z$; ligação σ entre $2p_z$ e $2p_z$. Para cada ligação, faça a combinação das funções de onda e os coeficientes envolvidos na formação de cada um dos orbitais. **(b)** orbitais híbridos sp^3d e sp , com os respectivos ângulos de ligação entre esses orbitais híbridos, bem com a combinação das funções de onda de cada um deles.

40) A benzina é uma molécula altamente reativa com fórmula molecular C_6H_4 , que pode ser detectada somente em baixas temperaturas. Está relacionada com o benzeno em função dos seis átomos de carbono presentes no anel. Sabendo disso, responda: **(a)** Qual a estrutura de Lewis da molécula? **(b)** Encontre a hibridização dos átomos de carbono na benzina **(c)** Com base no seu entendimento sobre hibridização, explique por que esta molécula deve ser altamente reativa.

41) O ânion tetrafluorborato, BF_4^- é um complexo ácido-base de Lewis formado quando trifluoreto de boro é passado sobre um fluoreto metálico, sabendo disso: **(a)** represente e explique como ocorre a formação do BF_4^- a partir de moléculas de BF_3 e íons F^- em termos de ácidos e bases de Lewis. **(b)** Determine a hibridização do átomo de boro no BF_3 **(c)** Após a formação do ânion tetrafluorborato, BF_4^- haverá mudança na hibridização deste átomo? Justifique sua resposta.

42) A molécula de tetrafluoreto de xenônio, pode ser imaginada como sendo formada pela reação entre o difluoreto de xenônio, XeF_2 e o gás flúor, F_2 . **(a)** Sabendo disso represente a estrutura do XeF_2 , do F_2 e do XeF_4 , com o arranjo espacial e a geometria de cada espécie. **(b)** Represente a reação de formação do XeF_4 . **(c)** Indique se houve ou não mudança na hibridização do Xe e explique sua conclusão.

43) Escreva a fórmula estrutural (espacial) das seguintes espécies químicas. **(a)** XeF_2O ; **(b)** ICl_2^- ; **(c)** TeF_5^- ; **(d)** SeO_4^{2-} . **(i)** Em cada caso, mostre qual a hibridação do átomo central e quais orbitais são usados para formar as ligações sigma (σ) e pi (π), caso existam. **(ii)** A partir da hibridização dos átomos centrais, encontre a geometria de cada uma das espécies apresentadas acima.

44) Baseado na Teoria da Ligação de Valência (TLV), escreva a fórmula estrutural (espacial) das seguintes espécies químicas. **(a)** XeOF_4 ; **(b)** CO_2 ; **(c)** SO_4^{2-} ; **(d)** PO_2F . **(i)** Em cada caso, mostre qual a hibridação do átomo central e quais orbitais são usados para formar as ligações sigma (σ) e pi (π), caso existam. **(ii)** A partir da hibridização dos átomos centrais, encontre a geometria de cada uma das espécies apresentadas acima. **(iii)** Preveja os prováveis ângulos de ligação para cada uma das espécies químicas supracitadas.

45) Empregando a teoria de hibridização, escreva as estruturas para as espécies com um átomo central rodeado por outros: CCl_2F_2 ; SO_3 ; PF_6^- ; NO_3^- ; ClO_4^- ; KrF_2 ; RuO_4 ; MnO_4^- ; H_2CO . Represente a formação dos orbitais híbridos de cada um deles com base nessa informação, prediga qual a geometria de cada espécie.

46) **(a)** Diga quais os orbitais moleculares formados a partir da combinação das funções de onda dos orbitais atômicos p ? **(b)** Coloque-os em ordem crescente de energia, considerando que não haja interação entre orbitais $2s$ e $2p$ (ex. moléculas diatômicas dos elementos mais pesados do 2º período, O_2 , F_2 e Ne_2).

47) (a) Esboce os orbitais moleculares do íon H_2^- e desenhe o respectivo diagrama qualitativo de níveis de energia para esta molécula. (b) Escreva a configuração eletrônica do íon em termos de seus orbitais moleculares (OM). (c) Calcule a ordem de ligação para o íon H_2^- . (d) Suponha que o íon seja excitado pela luz, para que um elétron se mova de um OM de menor energia para um de maior. Você espera que o íon H_2^- no estado excitado fique estável?

48) Usando a teoria dos orbitais moleculares (TOM) prediga quais das seguintes moléculas diatômicas serão estáveis:

a) N_2^{2-} ; O_2^{2-} ; F_2^{2-} ?

b) Be_2 ; B_2 ; Li_2 ?

49) O oxigênio, O_2 , pode adquirir um ou dois elétrons para transformar-se no íon O_2^- (íon peróxido), ou O_2^{2-} (íon superóxido). Sabendo disso desenhe: (a) o diagrama dos níveis de energia do O_2 e (b) do íon peróxido. (c) Qual a ordem de ligação O–O no O_2 ? (d) Como se modifica esta ordem quando se adicionam elétrons ao O_2 para formar o O_2^- ? Justifique sua resposta (e) As substâncias ditas diamagnéticas são fracamente repelidas por um campo magnético. Essa propriedade está associada à presença de elétrons emparelhados. Por outro lado, as substâncias com elétrons desemparelhados ou paralelos são fortemente atraídas por campos magnéticos. Utilizando esta informação, prediga se a molécula de O_2 e o íon O_2^- serão ou não paramagnéticos. Justifique sua resposta. (f) Qual o orbital HOMO (SOMO) e o LUMO nas duas espécies.

50) Os gases nobres são espécies químicas monoatômicas. Sabendo disso, utilize as três teorias: (a) Teoria Estrutural de Lewis, (b) Teoria da Ligação de Valência e (c) Teoria do Orbital Molecular para explicar porque não existe a molécula diatômica do gás neônio, Ne_2 .

51) O carbeto de cálcio (CaC_2) apresenta o íon acetileto (C_2^{2-}). Sabendo disso desenhe: (a) o diagrama dos níveis de energia do C_2 e (b) do íon acetileto. (c) Qual a ordem de ligação C–C no C_2 ? (d) Como se modifica esta ordem quando se adicionam elétrons ao C_2 para formar C_2^{2-} ? Justifique sua resposta. (e) As substâncias ditas diamagnéticas são fracamente repelidas por um campo magnético. Essa propriedade está associada à presença de elétrons emparelhados. Por outro lado, as substâncias com elétrons desemparelhados ou paralelos são fortemente atraídas por campos magnéticos. Utilizando esta informação, prediga se a molécula de C_2 e o íon C_2^{2-} serão ou não paramagnéticos. Justifique sua resposta.

52) Utilizando a Teoria do Orbital Molecular (TOM) simples, esboce um diagrama de energia qualitativo para as moléculas diatômicas neutras do B_2 e do F_2 . (a) A partir delas encontre a distribuição eletrônica e a ordem de ligação para cada uma. (b) Explique o que ocorrerá com a ordem e o comprimento de ligação das mesmas se forem acrescentados dois elétrons aos orbitais LUMO de cada uma delas. (c) Explique porque os diagramas qualitativos de energia para essas duas moléculas são diferentes em termos de energia.

53) Represente os diagramas qualitativos de energia do orbital molecular para as moléculas neutras C_2 e F_2 . (a) A partir deles encontre a distribuição eletrônica para cada uma. (b) Determine a ordem de ligação para cada uma delas. (c) Preveja qual delas será diamagnética ou paramagnética. Explique sua conclusão, (d) Encontre os orbitais HOMO (SOMO) e LUMO de cada uma das moléculas, (e) O que ocorrerá com a ordem e o comprimento de ligação se forem acrescentados elétrons aos orbitais LUMO de cada molécula? Explique sua conclusão, (f) Explique porque os diagramas de energia para as duas moléculas são diferentes em termos de energia.

54) A região E da ionosfera encontra-se a 50 - 90 milhas acima da superfície terrestre. Nessa região detectou-se uma variedade de íons positivos, tais como: N_2^+ , NO^+ , O_2^+ , Li_2^+ e Be_2^+ . (a) Sabendo disso, construa o diagrama dos níveis de energia para a formação do NO e do NO^+ . (b) Qual das duas espécies será a mais estável? Justifique sua resposta através da ordem e do comprimento de ligação. (c) Alguma delas será diamagnética ou paramagnética? Justifique.

55) Diga para cada um dos pares de moléculas, qual é a que apresenta maior valor de ordem de ligação:

a) Li_2 ou Li_2^+ ; b) C_2 ou C_2^+ ; c) O_2 ou O_2^+ ; d) F_2 ou F_2^+ .

Diga ainda qual é a que apresenta maior comprimento de ligação. Justifique sua resposta.

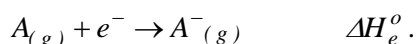
56) Utilize a TOM para prever a ordem de ligação e o número de elétrons desemparelhados para cada uma das seguintes moléculas: a) N_2^+ ; b) N_2^- ; c) F_2^+ ; d) F_2^- ; e) Ne_2^+ ; f) H_2^- ; g) C_2^+ ; h) C_2 ; i) C_2^- .

Para cada uma delas calcule a ordem de ligação e explique como ela varia se for acrescentado um elétron aos orbitais HOMO (SOMO) ou LUMO de cada uma delas.

57) (a) Utilizando as combinações lineares das funções de onda dos orbitais atômicos 3s e 3p, faça a representação das formação dos orbitais moleculares para as moléculas diatômicas homonucleares do terceiro período da Tabela Periódica. **(b)** Esboce os diagramas qualitativos de energia dos orbitais moleculares, para cada uma dessas moléculas. **(c)** Escreva as configurações eletrônicas prováveis para a camada de valência das moléculas diatômicas formadas pelos elementos do terceiro período da tabela periódica (Na₂ a Ar₂). **(d)** Calcule a ordem de ligação para cada molécula. **(e)** Preveja quais moléculas terão ligações mais fortes, e quais tem tendência a se dissociar.

58) Discuta a molécula do íon cianeto, CN⁻, em termos dos três tipos de teoria de ligação: **(a)** Teoria Estrutural de Lewis, **(b)** Teoria de Ligação de Valência e **(c)** Teoria do Orbital Molecular.

59) A Afinidade Eletrônica (E_a) indica a quantidade de energia liberada por um átomo, no estado gasoso, quando se adiciona um elétron à sua eletrosfera, Termodinamicamente, ela é conhecida como entalpia de ganho de elétron, ΔH_e^o , que é a variação da entalpia padrão por mol de átomos quanto um átomo na fase gasosa recebe um elétron, conforme mostra a equação abaixo:



Neste caso, a E_a é obtida pela diferença de energia entre as espécies:

$$E_a = E(A, g) - E(A^-, g)$$

A afinidade eletrônica de uma molécula pode ser definida de maneira semelhante à que foi utilizada para átomos. As afinidades eletrônicas das moléculas do O₂ e NO são pequenas (ambas são de aproximadamente 87,923 kJ mol⁻¹) enquanto que as do CN e C₂ são elevadas (368,857 e 341,643 kJ mol⁻¹, respectivamente). **(a)** Sabendo disso, represente os diagramas qualitativos do orbital molecular para as moléculas de O₂, NO, C₂ e CN. **(b)** Em termos da teoria de orbitais moleculares explique porque as afinidades eletrônicas das moléculas do O₂ e NO são pequenas enquanto que as CN e C₂ são elevadas. Explique sua conclusão.

60) A teoria do orbital molecular é um modelo mecânico-quântico para a descrição da ligação química, onde algumas moléculas, embora não estáveis à temperatura ambiente, podem ser analisadas através de cálculos teóricos. **(a)** Sabendo disso, construa o diagrama dos níveis de energia para as moléculas hipotéticas do NF e do NF⁺. **(b)** Qual das duas espécies será a mais estável? Justifique sua resposta através da ordem e do comprimento de ligação. **(c)** Alguma delas será diamagnética ou paramagnética? Justifique sua resposta. **(d)** Os diagramas de energia do orbital molecular, utilizado para ambas as espécies pode ser o mesmo? Explique sua conclusão.

61) O óxido nítrico (NO – Nitric Oxide) vem sendo estudado por diversas áreas relacionadas à saúde, uma vez que a diminuição de sua biodisponibilidade está relacionada a doenças arteriais, coronarianas, ósseas entre outras. Por outro lado, evidências vêm demonstrando que o exercício pode ser um efetivo meio não medicamentoso para aumentar a biodisponibilidade de NO e prevenir ou controlar as doenças correlacionadas. Neste sentido, são necessários estudos para levantamento das produções já realizadas para elaboração de perspectivas futuras e possíveis aplicações clínicas do exercício na prevenção de doenças relacionadas à diminuição da biodisponibilidade de NO. **(a)** A molécula de óxido nítrico, NO, perde facilmente um elétron para formar o íon NO⁺. Por que isso é coerente com a estrutura eletrônica de NO? **(b)** Determine a ordem dos comprimentos da ligação N–O em NO, NO⁺ e NO⁻ e descreva as propriedades magnéticas de cada um. **(c)** Quais moléculas diatômicas homonucleares neutras são isoeletrônicas (possuem o mesmo número de elétrons) dos íons NO⁺ e NO⁻?

62) Utilizando a TOM simples, esboce um diagrama qualitativo de energia para a molécula diatômica de NaCl. Utilize as energias de ionização dos átomos para o posicionamento relativo dos níveis de energia dos orbitais atômicos. Escreva as fórmulas das combinações lineares de orbitais atômicos do OM ocupado de maior energia (HOMO) e do OM vazio de menor energia (LUMO). Para cada OM, preveja qual coeficiente cNa ou cCl é o de maior valor, e justifique o porquê.