

EXERCÍCIOS ORBITAIS MOLECULARES

(1) (a) Quais são as similaridades e as diferenças entre orbitais atômicos e orbitais moleculares? (b) Por que o orbital molecular ligante de H_2 está com energia mais baixa do que o elétron em um átomo de hidrogênio? (c) Quantos elétrons podem ser colocados dentro de cada OM de uma molécula?

(2) (a) Por que o orbital molecular antiligante do H_2 está com energia mais alta que o elétron em um átomo de hidrogênio? (b) O princípio de exclusão de Pauli se aplica aos OMs? Explique, (c) Se dois orbitais p de um átomo se combinam com dois orbitais p de outro, quantos OMs serão formados? Explique.

(3) Considere o íon H_2^+ . (a) Esboce os orbitais moleculares do íon e desenhe seu diagrama de nível de energia. (b) Quantos elétrons há no íon H_2^+ ? (c) Escreva a configuração eletrônica do íon em termos de seus OMs. (d) Qual é a ordem de ligação no H_2^+ ? (e) Suponha que o íon seja excitado pela luz para que um elétron se mova de um OM de baixa energia para um de alta. Você espera que o íon H_2^+ no estado excitado fique estável ou se desintegre? Explique.

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

(5) (a) Esboce os orbitais moleculares σ e σ^* que possam resultar da combinação de dois orbitais atômicos $2p_z$. (b) Esboce os OMs π e π^* que resultam da combinação de dois orbitais atômicos $2p_x$. (c) Coloque os OMs dos itens (a) e (b) em ordem crescente de energia, supondo que não haja mistura de orbitais $2s$ e $2p$.

(6) (a) Qual é a probabilidade de se encontrar um elétron no eixo internuclear se o elétron ocupa um orbital molecular π ? (b) Para uma molécula diatômica homonuclear, quais as similaridades e as diferenças existentes entre o OM π_{2p} resultante dos orbitais atômicos $2p_x$ e o OM π_{2p} , resultante dos orbitais atômicos $2p_y$ (c) Por que os OMs π_{2p} são de energia menor do que os OMs π_{2p}^* ?

(7) (a) Quais são as relações entre ordem de ligação, comprimento de ligação e energia de ligação? (b) De acordo com a teoria de orbital molecular, poder-se-ia esperar que Be_2 ou Be_2^+ existissem? Explique.

(8) Explique o seguinte: (a) o íon *peróxido*, O_2^{2-} , tem uma ligação mais longa que o íon *superóxido*, O_2^- . (b) As propriedades magnéticas de B_2 são coerentes com o fato de os OMs π_{2p} serem mais baixos em energia que o OM σ_{2p} .

(9) (a) O que significa o termo *diamagnetismo*? (b) Como uma substância diamagnética responde a um campo magnético? (c) Quais dos seguintes íons são diamagnéticos: N_2^{2-} , O_2^{2-} , Be_2^{2+} ou C_2^{2-} ?

(10) (a) O que significa o termo *paramagnetismo*? (b) Como se pode determinar experimentalmente se uma substância é paramagnética? (c) Quais dos seguintes íons são paramagnéticos: O_2^+ , N_2^{2-} e Li_2^+ , O_2^{2-} ? Se o íon é paramagnético, quantos elétrons desemparelhados ele possui?

(11) Dê a configuração eletrônica do orbital molecular para cada um dos seguintes cátions: (a) B_2^+ ; (b) Li_2^+ ; (c) N_2^+ ; (d) Ne_2^{2+} . Em cada caso, indique se a adição de um elétron ao íon aumentaria ou diminuiria a ordem de ligação da espécie.

(12) Determine a ordem de ligação e o comportamento magnético dos seguintes: (a) CO ; (b) NO^- ; (c) OF^+ ; (d) NeF^+ .

(13) Determine as configurações eletrônicas para CN^+ , CN e CN^- . Calcule a ordem de ligação para cada um e indique quais são paramagnéticos.

(14) (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 $\text{N} - \text{O}$ em NO , NO^+ e NO^- e descreva as propriedades magnéticas de cada um. (c) Quais moléculas diatômicas homonucleares neutras são isoeletrônicas dos íons NO^+ e NO^- (mesmo número de elétrons)?