

QFL-1221 – Estrutura e Propriedade de Compostos Orgânicos

Lista 2: Ligações Químicas Localizadas

1. Classifique cada ligação como covalente polar, covalente apolar ou iônica.

- a) O-H b) N-H c) Na-F d) C-Mg e) S-H f) C-F g) C-O

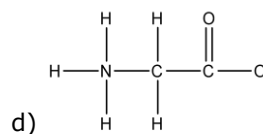
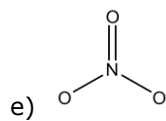
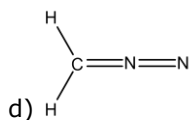
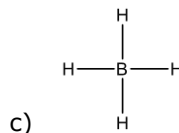
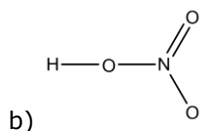
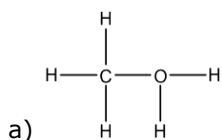
2. Usando símbolos δ^- e δ^+ , indique a direção da polaridade nas ligações covalentes abaixo.

- a) C-O b) N-H c) C-Mg d) O-H e) C-N f) S-H

3. Predizer todos os ângulos de ligação nas moléculas abaixo.

- a) CH_3Cl b) $\text{CH}_2=\text{CHCl}$ c) H_2CO_3 d) acetona e) benzeno f) ácido benzóico

4. Indique a carga formal para cada um dos átomos das moléculas abaixo e determine a carga total das espécies.

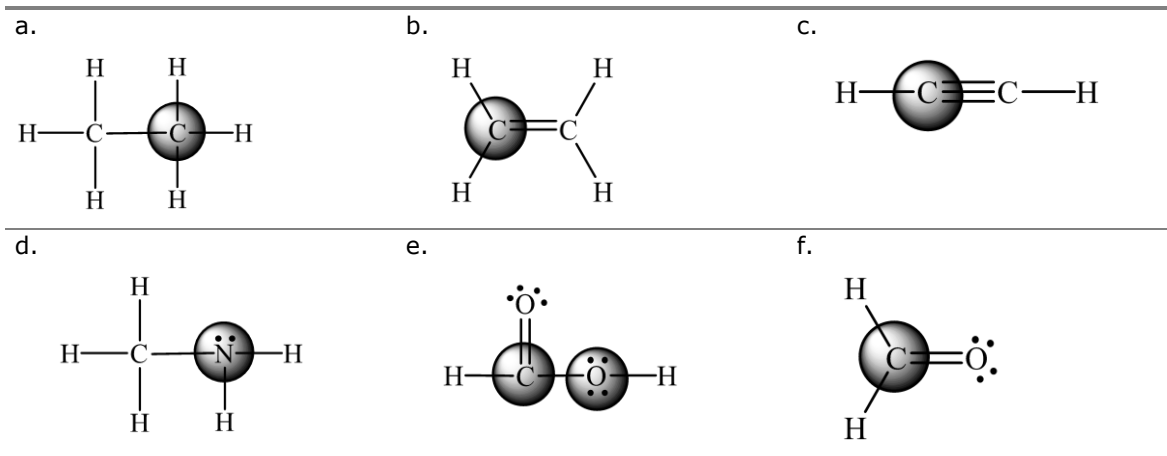


5. Considere a molécula de cianeto de hidrogênio, cuja fórmula molecular é HCN.

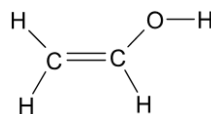
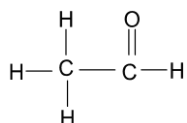
- Qual a hibridização do átomo de nitrogênio e do átomo de carbono?
- Quais são os tipos de orbitais envolvidos nas ligações entre C e N? Desenhe os orbitais que estão sofrendo sobreposição.
- Qual o tipo de orbital onde se encontra o par de elétrons não compartilhado do N?
- Faça o diagrama de energia em que seja mostrado o átomo de carbono não hibridizado (estado fundamental) passando para o estado hibridizado.

6. Qual das interações resultará em uma maior sobreposição: $1s + 2p$ ou $1s + 3p$?

7. Indique a hibridização e os ângulos de ligação de cada átomo destacado:



8. A energia de ligação pode ser utilizada para determinar a estabilidade relativa de isômeros constitucionais. Um dos isômeros mostrados abaixo é rapidamente convertido no outro e não pode ser isolado. Justifique qual dos isômeros abaixo é o mais estável.



9. a) Indique a estrutura de Lewis para um composto de fórmula H_2CCCH_2 . Importante: Note que o átomo central é um dos átomos de carbono e que os átomos de hidrogênios estão ligados aos outros átomos de carbono.
- b) Indique a hibridização de cada um dos átomos de carbono. Justifique fazendo uma representação gráfica das ligações que indique a estrutura tridimensional da molécula. Mostre também os ângulos de ligação.
- c) Faça o mesmo para CH_3CN e para H_2CNH .

10. Faça uma descrição detalhada da estrutura da molécula de CO_2 . Esta descrição deve conter:

- diagrama de energia comparando os orbitais no estado fundamental (orbitais s, p) e os orbitais hibridizados do carbono na molécula de CO_2 (em escala). Faça o mesmo para o átomo de oxigênio;
- estrutura de Lewis, ângulos de ligação e forma da molécula, mostrando e classificando as ligações envolvidas;
- diagrama de energia para os orbitais moleculares da molécula de CO_2 , procurando classificar cada orbital de forma apropriada (σ , σ^* , π e π^*);
- Qual é o HOMO do CO_2 ? E o LUMO?

Obs: Não é preciso responder por itens. O importante é incluir estas informações na resposta.

11. Qual deve ser a ordem de ligação do íon He_2^+ ? Você esperaria que este íon fosse mais estável relativamente ao átomo de He e o íon He^+ separados? Explique. Inclua na resposta um diagrama dos níveis de energia dos orbitais moleculares do He_2^+ .
12. Porque é esperado que uma σ ligação C–C, formada pela sobreposição sp^2-sp^2 , seja mais forte que uma ligação σ formada pela sobreposição sp^3-sp^3 ?
13. A partir da molécula de ácido fluorídrico (HF)
- Escreva a distribuição eletrônica de ambos os átomos envolvidos.
 - Desenhe os orbitais moleculares para a molécula de HF a partir dos orbitais atômicos do hidrogênio e do flúor, levando em consideração a diferença de eletronegatividade entre eles. Lembre-se de indicar as energias relativas de cada orbital no diagrama.
- Dica: consulte a tabela sobre energia de orbitais de diferentes átomos no material de aula.