## LIGAÇÕES QUÍMICAS

- 1. Ao reagir com metais, o Br aceita um elétron para formar Br -, presente por exemplo no KBr ou o CaBr<sub>2</sub>. Mas não encontramos compostos como K<sub>2</sub>Br ou CaBr. Explique esse fato em termos de energia dos orbitais.
- 2. Indique a condutividade e mostre o mecanismo de condução dos seguintes compostos: a) NaCl (fundido) b) NaCl (solução aquosa) c) NaCl (sólido) d) CCl<sub>4</sub> (líquido)
- 3. Por que os compostos iônicos geralmente apresentam elevadas temperaturas de fusão, enquanto a maioria dos compostos covalentes simples tem baixas temperaturas de fusão?
- 4. Uma substância XY, formada a partir de dois elementos diferentes, entra em ebulição a −33° C. É mais provável que XY seja uma substância iônica ou covalente? Explique.
- 5. Explique o elevado ponto de fusão do diamante.
- 6. a) O que você entende por número de coordenação? b) Por que os cristais iônicos não apresentam número de coordenação 12? c) O que você espera que ocorra com o número de coordenação dos íons em um cristal iônico quando diminui a relação entre o raio de cátion e do ânion?
- 7. Como o arranjo dos compostos iônicos influencia seu ponto de fusão, sua dureza e sua dutilidade?
- 8. Um dos processos para a obtenção de sal de cozinha consiste em evaporar a água do mar, obtendo-se cristais de NaCl. Explique porque os compostos iônicos, ao se solidificarem, formam cristais.
- 9. Apresentamos a seguir a energia liberada (kJ/mol) na formação do reticulado de alguns sais de Li+ e F-, em kJ/mol: NaF: 923; MgF<sub>2</sub>: 2957; AlF<sub>3</sub>: 5497; LiF: 1033; LiCl: 845; LiBr: 797; LiI: 739. Explique estes valores.
- 10. Explique por que o aumento do caráter covalente de uma ligação iônica implica em maior estabilidade dos compostos iônicos. Quais fatores contribuem para aumento do caráter covalente da ligação iônica?
- 11. Por que o diamante e o sal grosso (NaCl) tem durezas tão diferentes se ambos são sólidos cristalinos?
- 12.a) O que significa o termo *sobreposição* quando o mesmo se relaciona aos orbitais atômicos dos átomos? b) Represente a sobreposição entre os orbitais de dois átomos, cada um possuindo um elétron de valência em seu orbital 1s. c) Represente a sobreposição entre os orbitais de dois átomos, cada um possuindo um elétron de valência em seu orbital 2p. d) Idem, cada um possuindo dois elétrons na camada 2p. Represente esquematicamente.
- 13. A sobreposição de orbitais atômicos para a formação de uma ligação covalente dá origem a quantos orbitais moleculares? Quais são as características desses orbitais moleculares?
- 14. Para os átomos do segundo período da tabela periódica, é correto afirmar que os orbitais antiligantes só começarão a ser ocupados por elétrons quando os orbitais ligantes estiverem completamente preenchidos?
- 15.a) Esboce uma ligação  $\sigma$  construída a partir de orbitais p. b) Esboce uma ligação  $\pi$ . c) Numa ligação dupla, qual ligação geralmente é rompida inicialmente: uma  $\sigma$  ou uma  $\pi$ ? Explique.
- 16. Defina ordem de ligação segundo a teoria dos orbitais moleculares.
- 17. Utilize o diagrama de energia para os orbitais moleculares (OM) para moléculas homonucleares fornecido na apostila e explique por que as moléculas de B<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> são paramagnéticas. Compare a ordem de ligação do O<sub>2</sub><sup>+</sup> e do O<sub>2</sub><sup>-</sup> com a molécula de origem.
- 18. Explique o tipo de hibridação apresentada pelo carbono no etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), eteno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), etino (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>) e 1-2 propadieno (C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>). Desenhe as moléculas destes hidrocarbonetos indicando os ângulos esperados de ligação, o tipo de cada orbital molecular e os orbitais de origem de cada orbital molecular.

- 19. Dados quatro orbitais atômicos, um s e três p's, e a configuração de quatro orbitais híbridos resultantes, sp<sup>3</sup>, explique as diferenças em forma e orientação destes orbitais.
- 20. Qual é a designação para os orbitais híbridos formados a partir de: (a) um s e dois p; (b) um s e três p.
- 21.a) Começando pela distribuição dos elétrons nos orbitais do átomo de boro em seu estado fundamental, descreva as etapas necessárias para obter os orbitais híbridos apropriados para a formação do BF<sub>3</sub>. b) Qual o tipo dos orbitais híbridos do átomo de B e dos orbitais moleculares no BF<sub>3</sub>? c) Desenhe no espaço estes orbitais. d) Existem orbitais atômicos de valência no B que não sofrem hibridação? Caso sim, como eles estão orientados em relação aos orbitais híbridos?
- 22. As moléculas BF<sub>3</sub> e SO<sub>3</sub> são descritas como trigonais planas. Essa informação define exatamente seus ângulos de ligação? Por quê?
- 23. Qual é a ordem de ligação do íon He<sub>2</sub><sup>+</sup>?
- 24. Considerando as moléculas CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NF<sub>3</sub> e BF<sub>3</sub>, quais delas possuem um momento dipolo elétrico resultante e quais não possuem? Explique levando em conta as eventuais hibridizações.
- 25.a) Se os orbitais de valência de um átomo são híbridos *sp*, quantos orbitais *p* não hibridizados permanecem no nível de valência? Quantas ligações pi o átomo pode formar? Isto depende do número de elétrons no nível de valência? b) Quantas ligações sigma e pi geralmente fazem parte de uma ligação tripla? c) De que modo ligações múltiplas trazem rigidez às moléculas?
- 26. Usando a teoria dos orbitais moleculares, explique por que  $O_2^+$  possui ligações mais fortes que  $O_2$ , enquanto  $N_2^+$  possui ligações mais fracas do  $N_2$ .
- 27.O que você espera que ocorra com o ponto de fusão de um polímero se forem formadas ligações covalentes entre as cadeias poliméricas? Qual a influência destas ligações sobre a fusibilidade de plásticos?
- 28. Por que a vida e baseada no elemento carbono? Por que não existem formas de vida baseadas no silício?
- 29. Comente a seguinte afirmação: "As ligações químicas são ou 100% iônicas ou 100% covalentes". Exemplifique analisando o caráter covalente ou iônico das ligações em F<sub>2</sub>, NF<sub>3</sub>, CF<sub>4</sub>, BF<sub>3</sub>, BeF<sub>2</sub> e LiF.
- 30. Quais as diferenças entre ligações intermoleculares e intramoleculares? Diferencie-as quanto à intensidade.
- 31. Caracterize as forças intermoleculares que agem nas substâncias moleculares. Como estas forças influenciam as propriedades físicas destas substâncias?
- 32. Por que as substâncias moleculares geralmente apresentam baixos pontos de fusão, reduzida dureza e baixa solubilidade em água? Como você explica o fato dos açúcares terem alta solubilidade em água?
- 33.a) Como uma molécula polar difere de uma apolar? b) Quais fatores afetam o momento de dipolo de uma molécula diatômica? c) Qual das seguintes moléculas deve ter momento dipolo diferente de zero (explique): Cl F; CO; CO<sub>2</sub>; H<sub>2</sub>O?
- 34. Por que água e etanol (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH) formam uma mistura homogênea? Explique como a adição de um soluto a um solvente pode aumentar o ponto de ebulição da solução.
- 35. Por que a adição de NaCl faz com que a água congele a temperaturas mais baixas?
- 36. Explique por que uma molécula grande ou mais pesada, geralmente, tem ponto de ebulição maior que as moléculas menores ou mais leves, mesmo considerando que as duas moléculas sejam compostas pelos mesmos átomos.
- 37. Por que o malcheiroso gás sulfídrico (H2S) tem ponto de ebulição mais elevado do que HCl?

- 38.O que são plásticos? O que os torna tão úteis? Quais os tipos de ligações químicas presentes nestes materiais?
- 39.O que são cerâmicas? Quais os tipos de ligações químicas presentes nos materiais cerâmicos? O que você espera da condutividade elétrica de uma cerâmica?
- 40. Por que o congelamento da água resulta em expansão e não em contração de volume?
- 41. Quais orbitais atômicos estão envolvidos na ligação que liga o grupo metila (CH<sub>3</sub>) à ligação dupla no propeno H<sub>2</sub>C=CH-CH<sub>3</sub>? Qual o tipo de ligação formada?
- 42. Usando a teoria dos orbitais moleculares, apresente a distribuição eletrônica do C<sub>2</sub>.
- 43. Comente a seguinte afirmação: "Uma molécula só pode ser paramagnética se possuir elétrons desemparelhados ocupando orbitais moleculares ligantes". Exemplifique.
- 44. Discuta a seguinte afirmação: "orbitais híbridos só são formados para abrigar elétrons que irão participar de ligações químicas."
- 45.O raio atômico da prata é 144 pm e sua densidade 10,5 g.cm<sup>-3</sup>. Sua estrutura cristalina é CFC ou CCC?
- 46. Seja um cristal iônico de XY com estrutura do NaCl. Calcule a menor relação  $R_{\rm X}$  /  $R_{\rm Y}$  para que esta estrutura seja possível (R é o raio iônico). Explique.
- 47. Mostre a configuração eletrônica do íon  $H_2^+$ . Desenhe o diagrama de energia e compare a OL desse íon com  $He_2^+$  e com o  $H_2$ . Podemos esperar que o íon  $H_2^+$  exista? A ligação química H-H é mais forte ou mais fraca no  $H_2^+$  em comparação com o  $H_2$ ? Justifique sua resposta.
- 48. Considere as configurações do estado fundamental para as moléculas diatômicas homonucleares de Li<sub>2</sub> ao Ne<sub>2</sub>, e faça uma correlação com as seguintes características: ligação tripla; ligação  $\pi$ , ligação  $\sigma$ , paramagnética; diamagnética e ligação dupla.