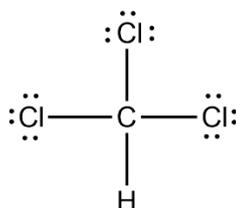
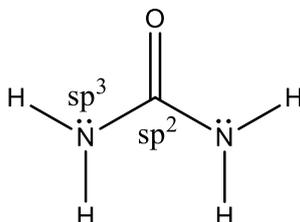


Lista 9- TLV

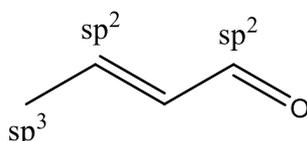
1) O átomo de carbono presente na estrutura está realizando 4 ligações, portanto possui uma hibridização sp^3 , o que leva à uma geometria tetraédrica da molécula. Sendo assim, o carbono utiliza esses orbitais híbridos para realizar a ligação. O hidrogênio utiliza o elétron presente em orbital 1s e os átomos de cloro utilizam um elétron presente no orbital 3p para realizar a ligação.



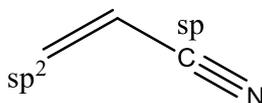
2) a) O átomo de nitrogênio faz 3 ligações, portanto seguindo a TLV, sua hibridização é sp^3 , onde o quarto orbital abriga o par de elétron. O carbono utiliza um orbital p puro para realizar a ligação dupla, portanto é de hibridização sp^2



b) O carbono terminal está fazendo 4 ligações simples, portanto utiliza orbitais sp^3 , enquanto que os outros estão fazendo uma ligação dupla, portanto sp^2 .

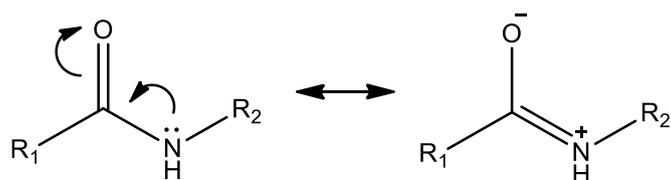


c) O carbono que faz uma ligação dupla utiliza um orbital p puro, logo possui hibridização sp^2 . O carbono que faz uma ligação tripla está utilizando 2 orbitais p puro para isso, portanto sua hibridização se torna sp .



3) a) O carbono está realizando uma ligação dupla com o oxigênio, portanto sp^2 . O nitrogênio está realizando 3 ligações simples e possui seu par de elétrons, portanto geometria sp^3 .

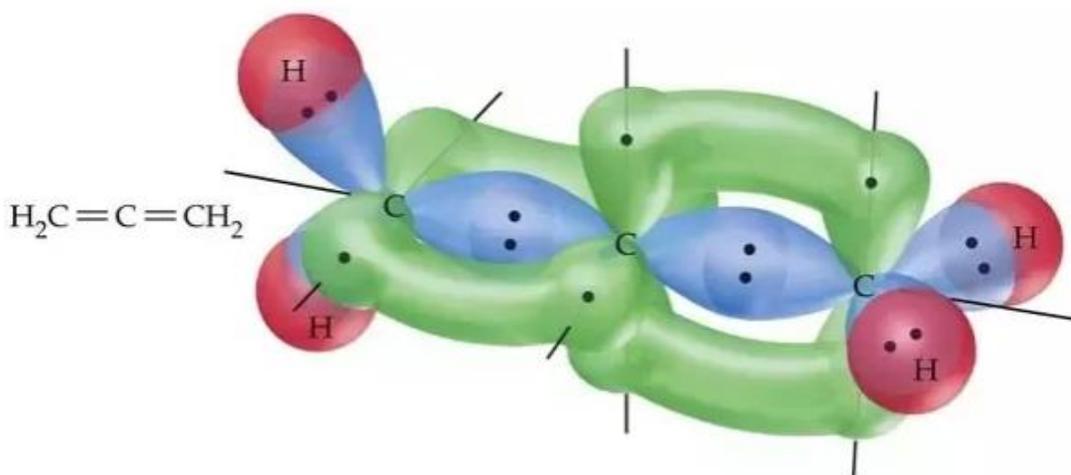
b) O par de elétrons do nitrogênio pode entrar em ressonância com a ligação dupla, produzindo outra estrutura cujo oxigênio abriga o par de elétrons e, portanto, possui carga negativa, enquanto o nitrogênio, cujo par de elétrons formou uma ligação dupla, possui carga positiva. A estrutura mais importante é a neutra, pois é a que apresenta a menor energia e, portanto, é a mais estável e próxima da estrutura real.



c) O surgimento de uma ligação dupla entre o carbono e o nitrogênio faz com que esses átomos agora possuam uma hibridização sp^2 , que é de geometria trigonal planar, conferindo essa característica à ligação. A estrutura de ressonância também indica o sítio negativo (oxigênio) e positivo (nitrogênio) da molécula.

4) a) Os carbonos da ponta estão fazendo uma ligação dupla e 2 simples, portanto, são de hibridização sp^2 . O carbono central, por estar realizando duas ligações duplas, necessita de dois orbitais p puros para isso, logo possui hibridização sp .

b) Ambos os orbitais p do carbono central são ortogonais entre si. Sendo assim, após realizar uma ligação dupla com um dos carbonos, é necessário que o outro carbono tenha seu orbital p alinhado com o último orbital p do carbono central para que a ligação dupla ocorra, fazendo com que a molécula deixe de ser linear.



c) Assumindo que o eixo da ligação é o eixo z, os orbitais sp do carbono central são responsáveis pelas ligações sigma sobrepondo os orbitais sp^3 dos carbonos da ponta. As ligações duplas são formadas pela sobreposição dos orbitais p_x e p_y do carbono central com os orbitais p dos carbonos da ponta. As ligações C-H são formadas pela sobreposição dos orbitais sp^3 do carbono com os orbitais 1s do hidrogênio.

5- a) Assumindo 100g de amostra (apenas para facilitar o cálculo), a partir da percentagem de massa de bromo e flúor podemos inferir o equivalente molar.

$$\text{Br} = \frac{45,69 \text{ g}}{79,90 \text{ g/mol}} = 0,5718 \text{ mol}$$

$$\text{F} = \frac{54,31 \text{ g}}{18,99 \text{ g/mol}} = 2,8599 \text{ mol}$$

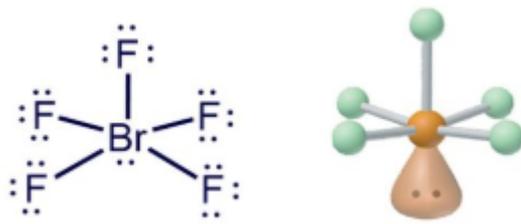
Em posse destes valores, efetua-se o cálculo para obter a proporção mínima entre os números inteiros.

$$\text{Br} = \frac{0,5718}{0,5718} = 1,00$$

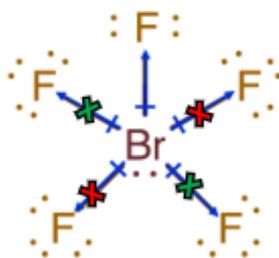
$$\text{F} = \frac{2,8599}{0,5718} = 5,001$$

A fórmula mínima ou empírica é dada por: BrF_5 .

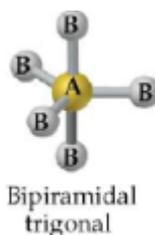
b) hibridização sp^3d^2



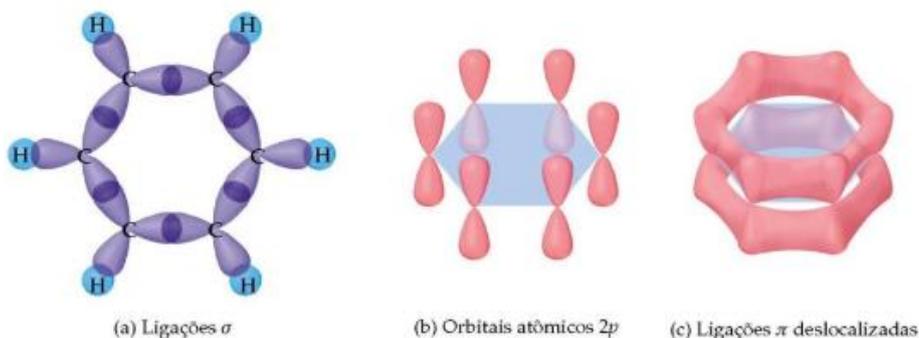
c) Sim, pois os vetores que indicam as ligações químicas polares, eles se anulam na base quadrada. No entanto, para a ligação vertical não há vetor para anular caracterizando uma molécula polar. A presença de pares de elétrons contribui para a polaridade.



Uma possível estrutura alternativa seria uma bipirâmide trigonal que apesar de ser apolar e representar bem as 5 ligações com os fluoretos, não representaria o par de elétrons livres tornando-se uma representação não realista da molécula.

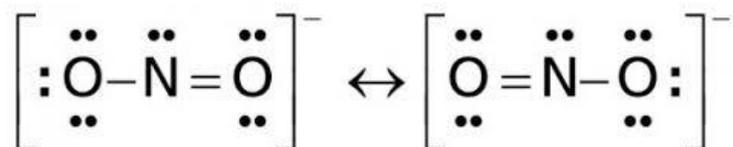


6- a) Em uma ligação π localizada, a densidade eletrônica é concentrada estritamente entre os dois átomos que formam a ligação. Em uma ligação π deslocalizada, os orbitais p paralelos em mais de dois átomos adjacentes se sobrepõem e a densidade eletrônica é espalhada por todos os átomos que contribuem com os orbitais p de toda a rede. Existem duas regiões de sobreposição, acima e abaixo da ligação σ da molécula.

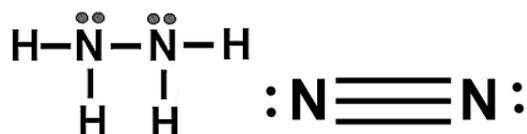


b) A existência de mais de uma estrutura de ressonância é uma boa indicação que a molécula deve apresentar ligações π deslocalizadas.

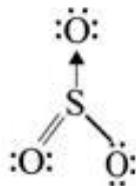
c) A existência de mais de uma forma de ressonância para o NO_2^- indica que este possui ligação π deslocalizada. De uma perspectiva do orbital, a geometria em torno de N é trigonal planar; portanto, a hibridização de N é sp^2 , isso deixa um orbital p em N e um orbital em cada átomo de O perpendicular ao plano trigonal da molécula, com esta orientação tem-se ligação π deslocalizadas. Fisicamente, os dois comprimentos das ligações N-O são iguais, indicando que as duas ligações N-O são equivalentes;



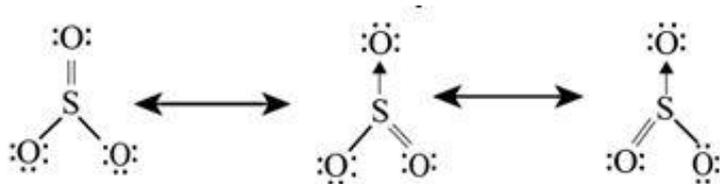
7- Para a N_2H_4 a hibridização dos átomos de N são sp^3 . Eles não apresentam orbitais p puros (não hibridizados) para realização de ligação do tipo π . Já para o caso do N_2 o átomo N apresenta hibridização sp , portanto, este tem 2 orbitais p puros em cada nitrogênio disponível para duas ligações π formando uma tripla ligação.



8-a) Hibridização sp^2 e geometria trigonal planar.

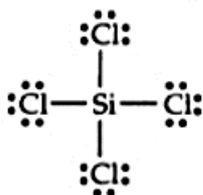


b) sim, pelo menos mais duas estruturas.



c) As múltiplas estruturas de ressonância indicam ligação π deslocalizada. Todos os átomos apresentam hibridização sp^2 . E, portanto, todos tem, orbitais p livres perpendicular ao plano da molécula, orientação ideal para sobreposição π . Como resultado é uma nuvem π deslocalizada em todo o plano da molécula.

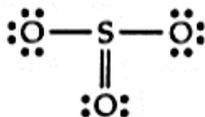
9- a) $SiCl_4$, $32e^-$, $16e^-$ pares, quatro destes pares em torno do Si, cuja a hibridização é sp^3 com geometria tetraédrica.



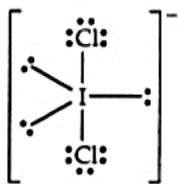
b) HCN , $10e^-$, $5e^-$ pares, 2 deste em torno do C, cuja hibridização sp com geometria linear.



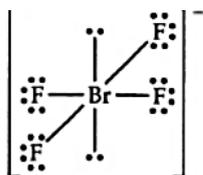
(c) SO_3 $24e^-$, $12e^-$ pares, 3 deste em torno do S, cuja hibridização sp^2 com geometria trigonal planar. Vale lembrar que este apresenta mais estruturas de ressonância.



d) ICl_2^- , $22e^-$, $11e^-$ pares, 5 deste em torno do I, cuja hibridização sp^3d com geometria bipiramidal trigonal.



e) BrF_4^- , $36e^-$, $18e^-$ pares, 6 deste em torno do Br, cuja hibridização sp^3d^2 com geometria octaédrica.



10- a) Permanecem no nível de valência 2 orbitais p não hibridizados, estes podem formar 2 ligações π

b) Para a formação da tripla ligação tem-se uma ligação de sobreposição frontal tipo σ e 2 ligações de sobreposição lateral do tipo π .

c) A rotação de uma molécula em torno do eixo de ligação sigma é muito mais fácil, pois as ligações sigma são formadas pela sobreposição frontal. A rotação em torno de uma ligação sigma pode ser feita sem interromper a sobreposição orbital ou a densidade eletrônica da ligação, sem quebrar a ligação.

A ligação π é formado pela sobreposição lateral dos orbitais atômicos perpendiculares ao eixo internuclear. Essa sobreposição π trava os átomos na posição e dificulta a rotação. Além disso, apenas uma pequena torção destrói a sobreposição dos orbitais p e quebra a ligação π .