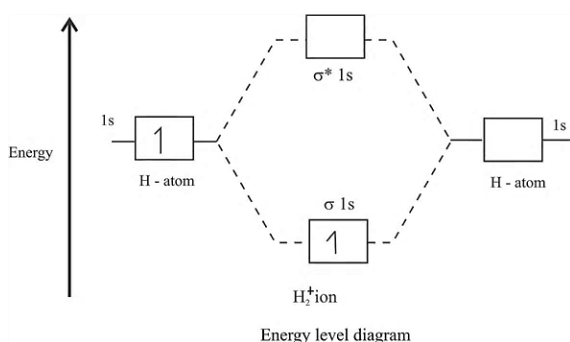


LISTA 10 – TOM

1.a) H_2^+ : $(\sigma_{1s})^1$

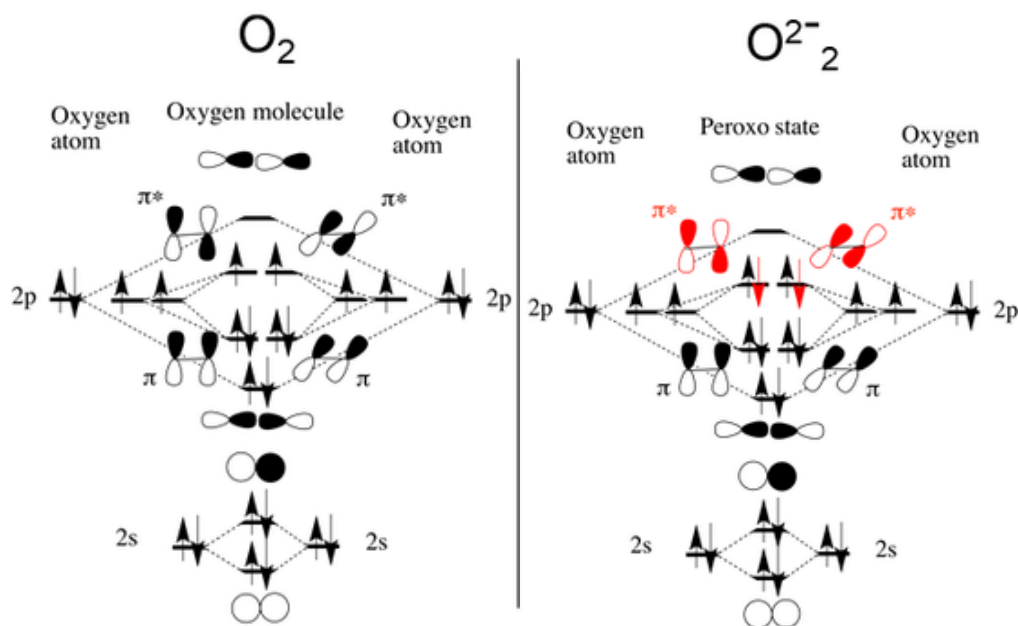


b) Ordem de Ligação: $\frac{\text{Número de elétrons ligantes} - \text{Número de elétrons antiligantes}}{2} = \frac{1}{2}$

c) H_2^+ apresenta ligação mais fraca se comparada com a molécula H_2 , se verificar a ordem de ligação o H_2^+ é de $\frac{1}{2}$ e da H_2 é 1.

2.a) O_2^{2-} : $(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2p})^2(\pi_{2p})^4(\pi_{2p}^*)^4$

Analizando o diagrama de orbitais moleculares verificamos que o O_2 é paramagnético pois apresenta dois elétrons desemparelhados, já o O_2^{2-} por ganhar dois elétrons estes preenchem os orbitais antiligantes tornando a molécula diamagnética.



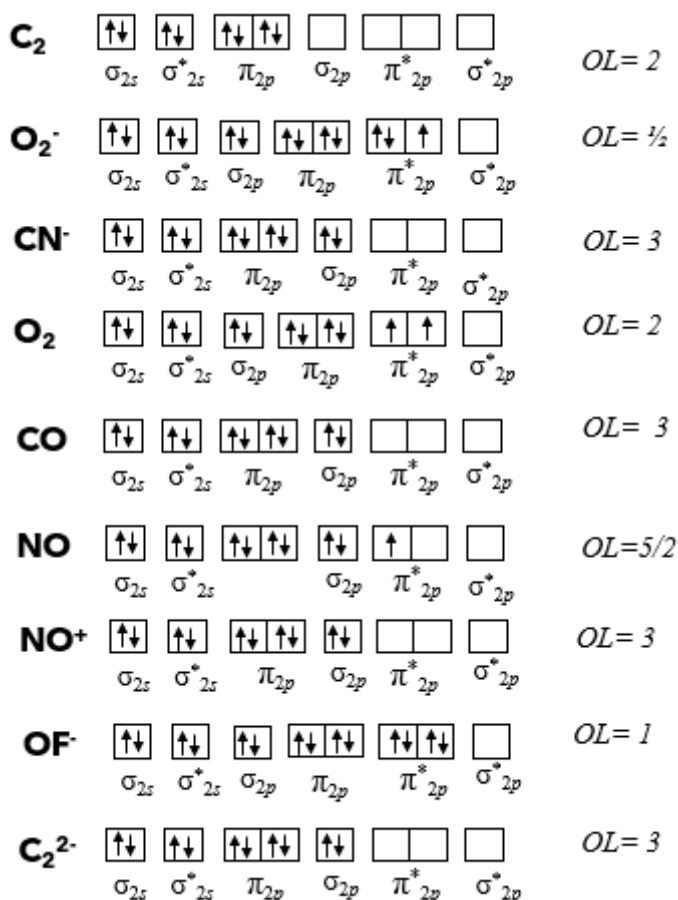
b) Na molécula de O_2 é composta de uma dupla ligação sendo uma de tipo σ e outra do tipo π . Para o peróxido observa-se apenas uma ligação simples do tipo σ .

$$c) OL(O_2) = \frac{8 - 4}{2} = \frac{4}{2} = 2$$

$$OL(O_2^{2-}) = \frac{8 - 6}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

d) A ligação na molécula de O_2 tem menor comprimento que do superóxido (O_2^{2-}). Pois, quanto maior a OL mais forte a ligação e menor o comprimento de ligação.

3) Ordem de ligação igual a 3. CN^- , CO , NO^+ e C_2^{2-}



b) Paramagnéticos O_2^- , O_2 , NO .

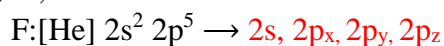
c) OL fracionarias O_2^- , O_2 , NO .

4- a) Um Orbital Híbrido é uma interpenetração, isso é, mistura de funções matemáticas, que originam novos orbitais, de modo favorável à formação de uma geometria adequada para a ligação química. Um OM é uma função matemática que descreve tendências a um comportamento de uma nuvem eletrônica em uma molécula. A construção deste modelo matemático é feita a partir da combinando orbitais atômicos.

b) Um orbital molecular pode acomodar no máximo dois elétrons, tendo eles necessariamente spins oposto.

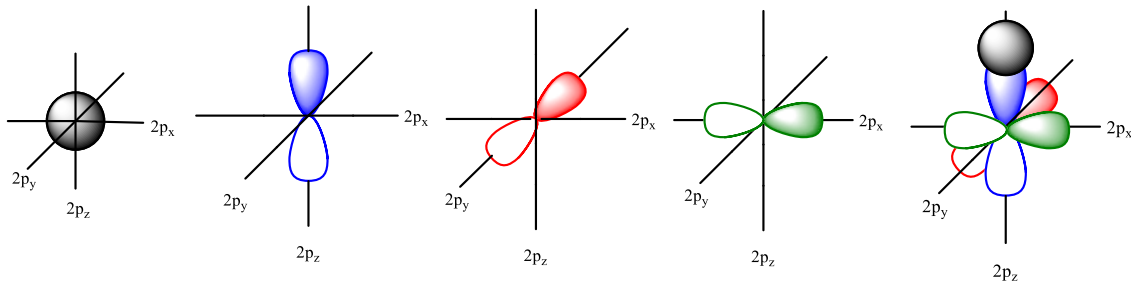
c) é possível ocupação de orbitais antiligantes, mas esta ocupação é desfavorável à ligação.

5-a) $H; 1s^1$

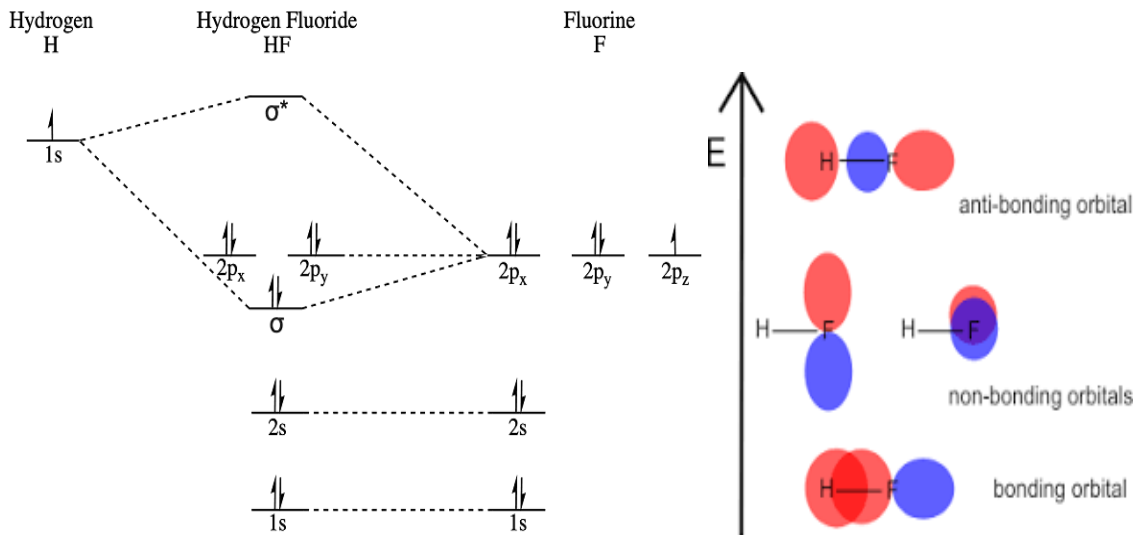


Observa-se 5 orbitais atômicos e portanto espera-se também 5 orbitais moleculares.

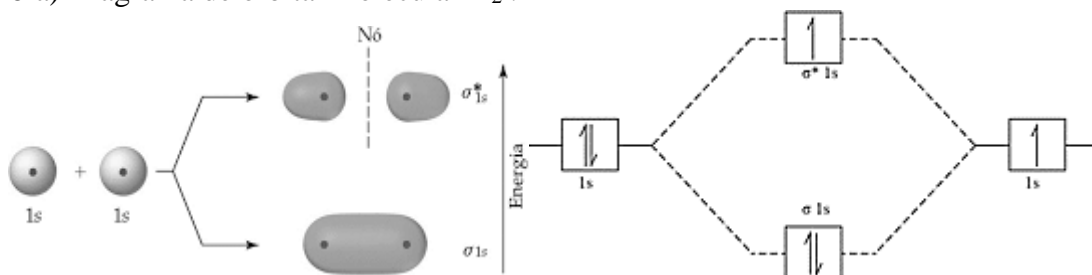
- b) Observe no diagrama de orbitais molecular que 8 elétrons de valência ocupariam 4 orbitais moleculares.
 c) A ligação ocorre na direção p_z , portanto p_x e p_y são considerados orbitais não ligantes.



d) diagrama de orbital molecular HF



6-a) Diagrama de orbital molecular H_2^- :



b) No diagrama de energia, o orbital de ligação ocupa 2 elétrons e o orbital anti-ligante ocupa apenas um elétron. $H_2^-: \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^*$

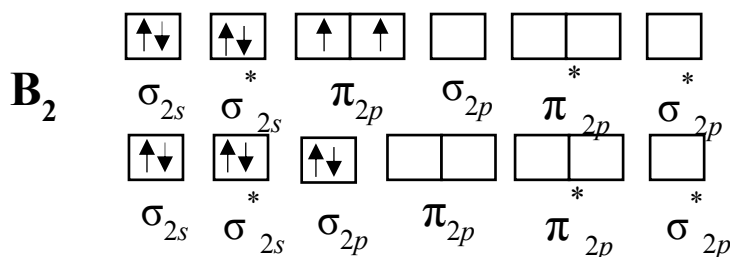
c) Ordem de Ligação: $\frac{\text{Número de elétrons ligantes} - \text{Número de elétrons antiligantes}}{2} = \frac{1}{2}$

d) deve-se destacar que o orbital ligante possui um aumento de densidade eletrônica entre os núcleos, de modo que um elétron nesse orbital é atraído por ambos os núcleos, fortalecendo a ligação. Por sua vez, o orbital antiligante possui um plano nodal entre os núcleos, de modo que um elétron nesse orbital é fortemente excluído da região internuclear. Para o íon H_2^- apresenta 2 elétrons no orbital ligante, ao excitar um desses

elétrons para o orbital antiligante, ocorrerá um enfraquecimento da ligação, pois haverá apenas 1 elétron no orbital ligante e 2 elétrons no orbital antiligante, contribuindo para instabilidade da molécula.

7-a) Ao comparar as ligações entre dois átomos, quanto maior a ordem de ligação, mais curto o comprimento da ligação e maior a energia de ligação. Ou seja, a ordem de ligação e energia de ligação estão diretamente relacionadas, enquanto a ordem de ligação e comprimento de ligação estão inversamente relacionadas.

b) Se o orbital molecular σ_{2p} tiver menor energia que o orbital molecular π_{2p} , não haverá dois elétrons desemparelhados e molécula de B_2 , esta seria diamagnética. Trocando a ordem de energia entre σ_{2p} e π_{2p} , teremos um elétron não emparelhado em cada orbital π_{2p} degenerado, o que explica o paramagnetismo observado de B_2 .



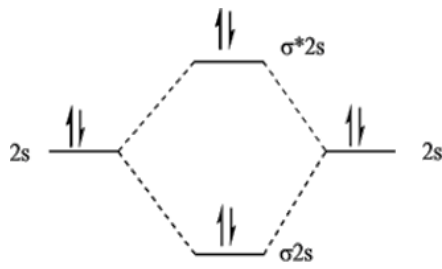
8-a) Substâncias com elétrons desemparelhados são atraídos por um campo magnético. Esta propriedade é chamada de paramagnetismo.

b) O termo diamagnético utilizado para designar o comportamento de materiais que são constituídos de átomos cujas camadas eletrônicas são fechadas, de modo que não há momento de dipolo magnético atômico resultante. Estes materiais na presença de campos magnéticos são repelidos, ao contrário dos materiais paramagnéticos. O diamagnetismo é um efeito quântico mas é tão fraco que normalmente não pode ser observado.

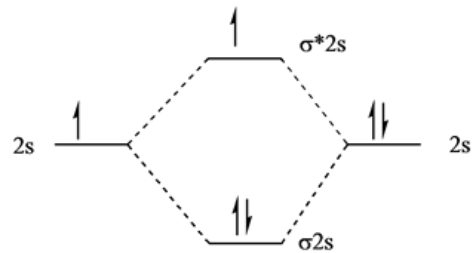
c) N_2^{2-} , com 2 elétrons desemparelhados; O_2^{2-} diamagnético, Be_2^{2+} , diamagnético e C_2^- , com 1 elétron desemparelhado.

9-a) Estes parâmetros referentes à ligação química da seguinte forma quanto maior for a ordem de ligação, isto é, quanto maior for a densidade eletrônica na região situada entre dois átomos ligados numa molécula, que se traduz num aumento do carácter duplo ou triplo da ligação, maior é o valor da energia de ligação e conseqüentemente menor o comprimento da ligação

b) Be_2 tem uma ordem de ligação igual a zero e não é energeticamente favorecida em detrimento dos átomos isolados. Logo, não se espera que Be_2 exista. Be_2^+ tem uma ordem de ligação de 0,5 que apresenta ligeira estabilidade energética. Provavelmente existirá, sob condições experimentais especiais, porém será instável.



Be_2 O.L.= 0



Be_2^+ O.L.= $\frac{1}{2}$

10-a) Partindo do conceito de orbital que é a região na eletrosfera do átomo em que é máxima a probabilidade de se encontrar o elétron, os orbitais atômicos representam a localização em que o elétron provavelmente pode ser encontrado no átomo, os orbitais atômicos se unem para formar os moleculares. Assim, os orbitais moleculares descrevem a provável localização em uma molécula como um todo. Os orbitais atômicos são denominados s, p, d, f e os orbitais moleculares são classificados como ligante e anti-ligante. Os orbitais atômicos s, p, d e f têm formas fixas. No entanto, os orbitais moleculares podem mudar de forma, dependendo da hibridação em que estão. A principal diferença entre orbital atômico e molecular é que os elétrons em um orbital atômico são influenciados por um núcleo positivo, enquanto os elétrons de um orbital molecular são influenciados por dois ou mais núcleos, dependendo do número de átomos em uma molécula.

B) Um elétron no orbital molecular ligante do H_2 é fortemente atraído pelos dois núcleos, este é mais estável (com energia mais baixa) do que no orbital 1s do átomo de hidrogênio. Cada orbital comporta dois elétrons no máximo, um de cada spin obedecendo o princípio exclusão de Pauli.