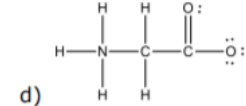
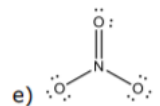
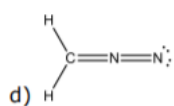
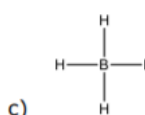
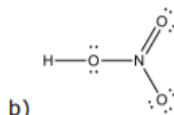
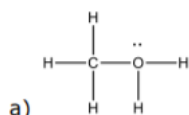
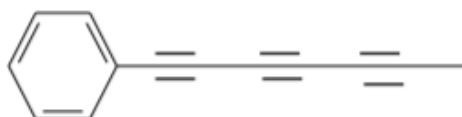


#### Lista 4 – Ligações Químicas Localizadas

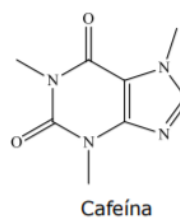
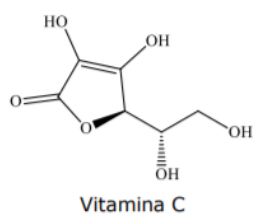
1. Explique as principais diferenças entre a teoria da ligação de valência e a teoria dos orbitais moleculares. O que são orbitais ligantes e antiligantes?
2. Considerando o conceito de hibridização, responda:
  - a) Explique por meio de desenhos as hibridizações que resultam na formação dos orbitais  $sp^3$ ,  $sp^2$  e  $sp$ .
  - b) Dê exemplos de moléculas que contenham carbonos com cada uma dessas hibridizações.
  - c) Quais são os ângulos de ligação característicos dessas hibridizações?
  - d) Para que uma hibridização possa ocorrer, quais são as características esperadas para os orbitais?
3. Indique a carga formal para cada um dos átomos das moléculas abaixo e determine a carga total das espécies:



4. A estrutura abaixo é da 1- fenilepta-1,3,5-triino. Essa substância possui propriedades antimicrobianas e, quando irradiada com luz ultravioleta, apresenta atividade contra larvas de mosquitos e nematóides.



- Sobre a estrutura dessa substância, pode-se afirmar que
- a) possui 12 átomos de carbono com hibridização  $sp^2$ .
  - b) possui 12 ligações  $\sigma$  carbono-carbono.
  - c) não possui carbonos com hibridização  $sp^3$ .
  - d) possui 3 átomos de carbono com hibridização  $sp$ .
  - e) possui 9 ligações  $\pi$  carbono-carbono.
5. Qual é a hibridização de cada átomo de carbono, oxigênio e nitrogênio nas seguintes substâncias?



6. Dê a estrutura da acetona e indique todas as ligações  $\sigma$  e  $\pi$  que a compõem. Quais orbitais interagem em cada uma dessas ligações? Faça o mesmo para a acetonitrila.
7. Desenhe o diagrama de orbitais moleculares para a molécula de  $H_2$ .
8. Faça uma descrição detalhada da estrutura da molécula de  $CO_2$ . Esta descrição deve conter
- diagrama de energia para a configuração eletrônica do átomo de carbono e de oxigênio no estado fundamental;
  - diagrama de energia para a configuração eletrônica do átomo de carbono e de oxigênio hibridizado, na mesma escala do diagrama do item a;
  - diagrama de energia para os orbitais moleculares da molécula de  $CO_2$ , procurando classificar cada orbital de forma apropriada;
  - hibridização de todos os átomos envolvidos;
  - estrutura de Lewis, ângulos de ligação e forma da molécula;
  - mostrar e classificar todas as ligações envolvidas.
- Obs: Não é preciso responder por itens. O importante é incluir estas informações na resposta.
9. 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  $He_2^+$ .
10. Porque é esperado que uma  $\sigma$  ligação C-C, formada pela sobreposição  $sp^2-sp^2$ , seja mais forte que uma ligação  $\sigma$  formada pela sobreposição  $sp^3-sp^3$ ?