

#### 4ª Lista de Exercícios QE

**01.** (a) Qual é a diferença entre orbitais híbridos e orbitais moleculares? (b) Quantos elétrons podem ser colocados em cada OM de uma molécula? (c) Os orbitais moleculares anti-ligantes podem conter elétrons?

**02.** (a) Se você combinar dois orbitais atômicos em dois átomos diferentes para fazer um novo orbital, este é um orbital híbrido ou um orbital molecular? (b) Se você combinar dois orbitais atômicos em um átomo para fazer um novo orbital, este é um orbital híbrido ou um orbital molecular? (c) O princípio de exclusão de Pauli (Seção 6.7) se aplica aos OMs? Explique.

**03.** Considere o íon  $H_2^+$ . (a) Esboce os orbitais moleculares do íon e desenhe seu diagrama de nível de energia. (b) Quantos elétrons existem no íon  $H_2^+$ ? (c) Desenhe a configuração eletrônica do íon em termos de seus OMs. (d) Qual é a ordem das ligações em  $H_2^+$ ? (e) Suponha que o íon seja excitado pela luz de modo que um elétron se mova de um OM de energia mais baixa para um de energia mais alta. Você esperaria que o íon  $H_2^+$  no estado excitado fosse estável ou se desintegrasse? Explique.

**04.** (a) Esboce os orbitais moleculares do íon  $H_2^-$  e desenhe seu diagrama de nível de energia. (b) Escreva a configuração eletrônica do íon em termos de seus OMs. (c) Calcule a ordem dos títulos em  $H_2^-$ . (d) Suponha que o íon seja excitado pela luz, de modo que um elétron se mova de um orbital molecular de energia mais baixa para um orbital molecular de energia mais alta. O que você esperaria sobre o íon  $H_2^-$  no estado excitado? Explique.

**05.** Faça um desenho que mostre todos os três orbitais 2p em um átomo e todos os três orbitais 2p em outro átomo. (a) Imagine os átomos se aproximando para se ligar. Quantas ligações  $\sigma$  os dois conjuntos de

#### 4ª Lista de Exercícios QE

orbitais 2p podem formar um com o outro? (b) Quantas ligações  $\pi$  os dois conjuntos de 2 orbitais p podem formar um com o outro? (c) Quantos orbitais anti-ligantes, e de que tipo, podem ser feitos a partir dos dois conjuntos de orbitais 2p?

**06.** (a) Qual é a probabilidade de encontrar um elétron no eixo internuclear se o elétron ocupar um orbital molecular  $\pi$ ? (b) Para uma molécula diatômica homonuclear, que semelhanças e diferenças existem entre o OM  $\pi 2p$  feito dos orbitais atômicos 2px e o OM  $\pi 2p$  feito dos orbitais atômicos 2py? (c) Como os OMs  $\pi^* 2p$  formados a partir dos orbitais atômicos 2px e 2py diferem dos OMs  $\pi 2p$  em termos de energias e distribuição de elétrons?

**07.** (a) Quais são as relações entre a ordem, o comprimento e a energia do vínculo? (b) De acordo com a teoria orbital molecular, seria esperado que existisse  $\text{Be}_2$  ou  $\text{Be}_2^+$ ? Explique.

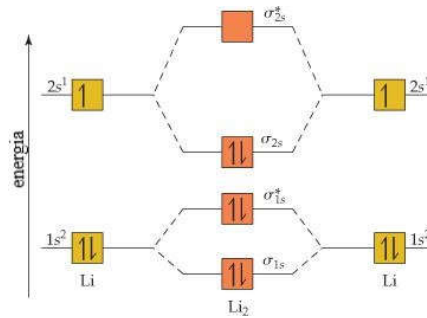
**08.** Explique o seguinte: (a) O íon peróxido,  $\text{O}_2^{2-}$ , tem um comprimento de ligação mais longo do que o íon superóxido,  $\text{O}_2^-$ . (b) As propriedades magnéticas de  $\text{B}_2$  são consistentes com os OMs  $\pi 2p$  sendo menores em energia do que os OMs  $\sigma 2p$ . (c) O íon  $\text{O}_2^{2+}$  tem uma ligação O-O mais forte que o  $\text{O}_2$ .

**09.** (a) O que significa o termo diamagnetismo? (b) Como uma substância diamagnética responde a um campo magnético? (c) Qual dos seguintes íons você esperaria ser diamagnético:  $\text{N}_2^{2-}$ ,  $\text{O}_2^{2-}$ ,  $\text{Be}_2^{2+}$ ,  $\text{C}_2^-$ ?

**10.** (a) O que significa o termo paramagnetismo? (b) Como alguém pode determinar experimentalmente se uma substância é paramagnética? (c) Qual dos seguintes íons você esperaria que fosse paramagnético:  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{N}_2^{2-}$ ,  $\text{Li}_2^+$ ,  $\text{O}_2^{2-}$ ? Para os íons que são paramagnéticos, determine o número de elétrons desemparelhados.

#### 4ª Lista de Exercícios QE

11. Usando as Figuras a seguir como guias, desenhe a configuração do elétron orbital molecular para (a)  $B_2^+$ , (b)  $Li_2^+$ , (c)  $N_2^+$ , (d)  $Ne_2^{2+}$ . Em cada caso, indique se a adição de um elétron ao íon aumentaria ou diminuiria a ordem de ligação das espécies.



	Large 2s-2p interaction			Small 2s-2p interaction		
	$B_2$	$C_2$	$N_2$	$O_2$	$F_2$	$Ne_2$
$\sigma_{2p}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\pi_{2p}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\pi_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma_{2s}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma_{2s}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Bond order	1	2	3	2	1	0
Bond enthalpy (kJ/mol)	290	620	941	495	155	—
Bond length (Å)	1.59	1.31	1.10	1.21	1.43	—
Magnetic behavior	Paramagnetic	Diamagnetic	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic	—

12. Se assumirmos que os diagramas de nível de energia para moléculas diatômicas homonucleares mostrados na figura da questão 11 podem ser aplicados a moléculas diatômicas heteronucleares e íons, preveja a ordem das ligações e o comportamento magnético de (a)  $CO^+$ , (b)  $NO^-$ , (c)  $OF^+$ , (d)  $NeF^+$ .

13. Determine as configurações eletrônicas para  $CN^+$ ,  $CN$  e  $CN^-$ . (a) Qual espécie tem a ligação C-N mais forte? (b) Qual espécie, se houver, tem elétrons desemparelhados?

#### 4ª Lista de Exercícios QE

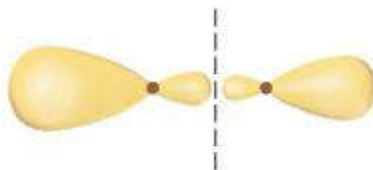
14. (a) A molécula de óxido nítrico, NO, perde prontamente um elétron para formar o íon  $\text{NO}^+$ . Por que isso é consistente com a estrutura eletrônica do NO? (b) Preveja a ordem das forças de ligação N – O em NO,  $\text{NO}^+$  e  $\text{NO}^-$ , e descreva as propriedades magnéticas de cada uma. (c) Com quais moléculas diatômicas homonucleares neutras os íons  $\text{NO}^+$  e  $\text{NO}^-$  são isoeletrônicos (o mesmo número de elétrons)?

15. Considere os orbitais moleculares da molécula  $\text{P}_2$ . Suponha que os OMs da diatômica da terceira linha da tabela periódica sejam análogos aos da segunda linha. (a) Quais orbitais atômicos de valência de  $\pi$  são usados para construir os OMs de  $\text{P}_2$ ? (b) A figura a seguir mostra um esboço de um dos OMs para  $\text{P}_2$ . Qual é o rótulo para este OM? (c) Para a molécula  $\text{P}_2$ , quantos elétrons ocupam o OM da figura? (d) Espera-se que  $\text{P}_2$  seja diamagnético ou paramagnético? Explique.



16. A molécula de brometo de iodo, IBr, é um composto interhalogênico. Suponha que os orbitais moleculares de IBr sejam análogos à molécula diatômica homonuclear  $\text{F}_2$ . (a) Quais orbitais atômicos de valência de I e de Br são usados para construir os OMs de IBr? (b) Qual é a ordem das ligações da molécula IBr? (c) Um dos OMs de valência de IBr é esboçado aqui. Por que as contribuições orbitais atômicas para este OM são diferentes em tamanho? (d) Qual é o rótulo do OM? (e) Para a molécula IBr, quantos elétrons ocupam o OM?

#### 4ª Lista de Exercícios QE



17. Uma molécula  $AB_5$  adota a geometria mostrada aqui. (a) Qual é o nome desta geometria? (b) Você acha que há algum par de elétrons sem ligação no átomo A? Por que ou por que não? (c) Suponha que os átomos B sejam átomos de halogênio. Você pode determinar exclusivamente a qual grupo na tabela periódica o átomo A pertence?

