



LISTA DE EXERCÍCIOS 12

CONTEÚDOS TRABALHADOS:

- Teoria do orbital molecular (TOM).

EXERCÍCIOS:

- 1) O íon H_2^+ pode ser detectado espectroscopicamente. Em relação a ele, faça o que se pede: **a)** dê a configuração eletrônica em termos de orbital molecular; **b)** qual a ordem de ligação? **c)** a ligação no íon é mais ou menos forte que na molécula H_2 ?
- 2) A reação de sódio com oxigênio gera, dentre outros produtos, o Na_2O_2 , onde o ânion é o peróxido: O_2^{2-} . Escreva a configuração eletrônica deste íon em termos de orbital molecular e compare com a configuração do O_2 de acordo com os seguintes aspectos: **a)** caráter magnético; **b)** número líquido de ligações sigma e pi; **c)** ordem de ligação; **d)** comprimento da ligação O—O.
- 3) Considerando a seguinte lista de espécies C_2 , O_2^- , CN^- , O_2 , CO , NO , NO^+ , C_2^2 identifique o que se pede: **a)** espécies que tem ordem de ligação igual a 3; **b)** espécies paramagnéticas; **c)** espécies com ordem de ligação fracionárias.
- 4) Em relação à teoria dos orbitais moleculares, responda:
 - a) Qual é a diferença de um orbital híbrido para um orbital molecular?
 - b) Quantos elétrons se adicionam em cada orbital molecular de uma molécula?
 - c) Orbitais antiligantes podem ser ocupados por elétrons?
- 5) Utilizando os conceitos da teoria de orbital molecular, responda:
 - a) Utilizando os orbitais de valência do hidrogênio e do flúor, quantos orbitais moleculares seriam esperados para a molécula de HF?
 - b) Quantos dos orbitais respondidos no item anterior seriam ocupados por elétrons?
 - c) A diferença de energia entre os orbitais de valência e o de caroço do Flúor faz com que praticamente não haja interação entre o orbital $1s(\text{H})$ e $2s(\text{F})$, de forma que a ligação acontece apenas entre os orbitais $2p(\text{F})$ e $1s(\text{H})$. Desenhe uma figura

mostrando a orientação dos 3 orbitais 2p do F e sua interação com o orbital 1s do H, considerando que o eixo de ligação é o z. Neste caso, quais dos orbitais 2p realmente fazem parte da ligação?

d) Os orbitais atômicos que não fazem parte da ligação acabam, na explicação mais aceita, no mesmo nível de energia que seus orbitais atômicos quando a molécula se forma. A esses orbitais dá-se o nome de orbitais não-ligantes. Faça o esquema do diagrama dos níveis de energia para o HF considerando esta informação e calcule a ordem de ligação.

6) Sobre o íon H_2^- :

a) Esboce os orbitais moleculares do íon H_2^- e desenhe o respectivo diagrama de nível de energia;

b) Escreva a configuração eletrônica do íon em termos de seus OMs;

c) Calcule a ordem de ligação em H_2^- ;

d) Suponha que o íon seja excitado pela luz, para que um elétron se mova de um orbital molecular de menor energia para um de maior. Você espera que o íon H_2^- no estado excitado fique estável? Explique.

7) Explique o seguinte:

a) O íon peróxido, O_2^{2-} , tem uma ligação mais longa que o íon superóxido, O_2^- .

b) As propriedades magnéticas de B_2 são coerentes com o fato de os OMs π_{2p} serem mais baixos em energia que o OM σ_{2p} .

8) Responda: **a)** o que significa o termo diamagnetismo? **b)** como uma substância diamagnética responde a um campo magnético? **c)** quais dos seguintes íons são diamagnéticos: N_2^{2-} , O_2^{2-} , Be_2^{2+} ou C_2^- ?

9) Responda:

a) Quais são as relações entre ordem de ligação, comprimento de ligação e energia de ligação?

b) De acordo com a teoria de orbital molecular, poder-se-ia esperar que Be_2 ou Be_2^+ existissem? Explique.

10) Explique:

- a)** Quais são as similaridades e as diferenças entre orbitais atômicos e orbitais moleculares?
- b)** Por que o orbital molecular ligante de H_2 está com energia mais baixa do que o elétron em um átomo de hidrogênio? Quantos elétrons podem ser colocados dentro de cada OM de uma molécula?