



## LISTA DE EXERCÍCIOS 12

### CONTEÚDOS TRABALHADOS:

- Teoria do orbital molecular (TOM).

### EXERCÍCIOS:

- 1) O íon  $\text{H}_2^+$  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  $\text{H}_2$ ?
- 2) A reação de sódio com oxigênio gera, dentre outros produtos, o  $\text{Na}_2\text{O}_2$ , onde o ânion é o peróxido:  $\text{O}_2^{2-}$ . Escreva a configuração eletrônica deste íon em termos de orbital molecular e compare com a configuração do  $\text{O}_2$  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  $\text{C}_2$ ,  $\text{O}_2^-$ ,  $\text{CN}^-$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}^+$ ,  $\text{C}_2^2$  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  $\text{H}_2^-$ :

**a)** Esboce os orbitais moleculares do íon  $\text{H}_2^-$  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  $\text{H}_2^-$ ;

**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  $\text{H}_2^-$  no estado excitado fique estável? Explique.

**7)** Explique o seguinte:

**a)** O íon peróxido,  $\text{O}_2^{2-}$ , tem uma ligação mais longa que o íon superóxido,  $\text{O}_2^-$ .

**b)** As propriedades magnéticas de  $\text{B}_2$  são coerentes com o fato de os OMs  $\pi_{2p}$  serem mais baixos em energia que o OM  $\sigma_{2p}$ .

**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:  $\text{N}_2^{2-}$ ,  $\text{O}_2^{2-}$ ,  $\text{Be}_2^{2+}$  ou  $\text{C}_2^-$ ?

**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  $\text{Be}_2$  ou  $\text{Be}_2^+$  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?