

Interações Atômicas e Moleculares - 2018.1

Lista 1: Moléculas

1. O que significa a aproximação orbital?
2. (a) Explique o princípio de exclusão de Pauli.
(b) Qual o papel da aproximação de Born-Oppenheimer na definição de uma estrutura molecular?
3. Esboce um gráfico da energia eletrônica em função da distância internuclear para uma molécula diatômica e identifique a distância de equilíbrio e a energia de dissociação.
4. Qual a função de onda do estado de mais baixa energia do H_2 baseada na teoria da ligação de valência? Qual o estado de spin deste sistema de dois elétrons?
5. Quais as principais características de uma função de onda baseada na teoria da ligação de valência?
6. O que caracteriza uma ligação σ e uma ligação π ? Qual combinação de orbitais dá origem a uma ligação σ e a uma ligação π ?
7. Mostre que $\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s \pm 2p_z)$ é normalizado.
8. Em que consiste o processo de “hibridização” e porque ele é necessário? Quais são os tipos de hibridização do carbono e qual o ângulo formado entre as ligações químicas formadas por estes orbitais? Quais orbitais são combinados nos vários tipos de hibridização?
9. Indique as hibridizações dos carbonos nas moléculas de $CHCH$, $CH_2=CH_2$, $H_2C=O$, CH_4 .
10. O que é um orbital molecular? Qual a diferença da função de onda baseada na teoria da ligação de valência e na teoria do orbital molecular? Justifique sua resposta ilustrando a diferença em $\psi^*\psi$ das duas teorias quando aplicadas à descrição da ligação química da molécula de H_2 ?
11. Qual o critério fundamental que deve ser obedecido para que seja possível combinar orbitais atômicos na formação de um orbital molecular?

12. Faça o diagrama de orbitais moleculares para o H_2 . Escreva a função de onda para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado.
13. Usando a teoria do orbital molecular, discuta porque não é possível a existência da molécula diatômica de hélio, He_2 .
14. Faça o diagrama de orbitais moleculares para as moléculas de N_2 , O_2 , F_2 . Qual a ordem de ligação destas moléculas?
15. As constantes de força para as moléculas diatômicas indo de B_2 até o F_2 são B_2 : $350 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, C_2 : $930 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, N_2 : $2260 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, O_2 : $1140 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ e F_2 : $450 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. É a ordem que você esperava? Explique.
16. Utilizando a ordem de ligação b , julgue quais dos pares seguintes possuem maior energia de dissociação: N_2 e N_2^+ ; F_2 e F_2^+ .
17. Mostre explicitamente que um orbital s de um átomo de hidrogênio e um orbital p_x de um outro átomo de hidrogênio têm superposição zero.
18. O que é eletronegatividade e como ela se manifesta na teoria do orbital molecular? Qual a diferença qualitativa ente uma ligação σ na molécula de H_2 e na molécula de HF ?
19. Vamos considerar a molécula diatômica heteronuclear CO . As energias de ionização de um elétron a partir dos orbitais atômicos de valência do átomo de carbono e do átomo de oxigênio são:
 O_{2s} : $3,116 \text{ MJ mol}^{-1}$, O_{2p} : $1,524 \text{ MJ mol}^{-1}$, C_{2s} : $1,872 \text{ MJ mol}^{-1}$
e C_{2p} : $1,023 \text{ MJ mol}^{-1}$.
(a) Use estes valores e construa os diagramas de energia para o CO . (b) Quais são as designações dos orbitais moleculares do CO ? (c) Qual é a configuração eletrônica do estado fundamental do CO ? (d) Qual é a ordem de ligação?