

Lista de exercícios

Átomos multieletrônicos.

- 1- O que significa a aproximação orbital para os átomos multieletrônicos? Descreva detalhadamente
- 2- Defina o que é o chamado efeito de blindagem em estruturas atômicas.
- 3- Os orbitais de átomos multieletrônicos são degenerados (possuem a mesma energia) para um mesmo valor de n ? Explique a sua resposta.

Teoria da Ligação de Valência (TLV)

- 4- (a) Explique o princípio de exclusão de Pauli. (b) Qual o papel da aproximação de Born-Oppenheimer na definição da estrutura molecular?
- 5- Quais são os critérios fundamentais que devem ser obedecidos para que seja possível combinar orbitais atômicos na formação do orbital molecular?
- 6- (a) Explique porque a TLV é uma teoria incompleta, a diferença da teoria dos orbitais moleculares. (b) Em que consiste o processo de promoção, hibridização, e porque estes conceitos são necessários?. (c) Quais são os tipos de hibridização do elemento carbono. Diga em cada um destes casos a qual configuração geométrica corresponde.
- 7- Explique o conceito de ressonância molecular.
- 8- Diga como afeita o conceito de promoção no caso do elemento Berílio. Para isso, escreva qual a configuração eletrônica antes e depois da promoção. (Be: $Z = 4$).
- 9- Desenhe, nomeie e designe no diagrama da TLV todos os orbitais atômicos e todas as ligações da molécula diatômica de nitrogênio, N_2 . (N: $Z = 7$).
- 10- Uma molécula de N_2 em 2 ligações π e 1 ligação σ , todas devido à superposição dos 3 orbitais p de cada átomo de N. Isto é verdade ou mentira?, ou seja, você concorda com isto? Explique e discuta sua resposta usando o diagrama de orbitais atômicos da TLV para descrever a distribuição eletrônica desta molécula.

- 11- Use a teoria de ligação de valência para sugerir o ângulo de enlace na molécula da água (H_2O). Determine o momento de dipolo esperado considerando o ângulo obtido.
- 12- A configuração do estado fundamental do átomo de carbono (C) sugere que este átomo seria capaz de formar somente duas ligações pela teoria de ligação de valência. Contudo, o carbono é tetravalente, como no caso da molécula de metano CH_4 . Explique como isso é possível (a tetravalência do carbono)?
- 13- 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?

Teoria do Orbital Molecular (TOM)

- 14- O que é ordem de ligação? Como podemos utilizar este número para determinar a estabilidade de uma molécula? Quais outras informações podemos extrair sobre uma ligação molecular a partir do seu número de ligação.
- 15- Identifique a ordem de ligação e coloque em ordem crescente de comprimento de ligação as seguintes espécies: O_2^+ , O_2 , O_2^- , O_2^{2-} .
- 16- Mostre que $\Delta E = (J-K)/(1-S)$ para o orbital anti-ligante ψ_- do H_2^+ .
- 17- Use um diagrama de níveis de energia da TOM e diga quais propriedades magnéticas para as seguintes moléculas: B_2^+ e C_2^+ . ($B: Z = 5$, $C: Z = 6$). Responda qual destes íons é mais estável.
- 18- Usando a teoria do orbital molecular, explique por que é observado o fenômeno mostrado na figura abaixo, ou seja, por que o nitrogênio (N_2) líquido não "sente" o efeito do campo magnético e por que o oxigênio (O_2) liquefeito é afetado pelo campo magnético. Se a mesma experiência fosse realizada com o íon de nitrogênio (N_2^+), o que você esperaria que ocorresse? Explique sua resposta.
- 19- Represente a distribuição de elétrons no diagrama de energia nos orbitais moleculares e determine a ordem de ligação das seguintes moléculas diatômicas: (a) O_2 , (b) O_2^+ , (c) N_2 , (d) N_2^+ , (e) He_2^{2+} , (f) F_2 .
- 20- O que é eletronegatividade e como ela altera e se manifesta na teoria do orbital molecular? Qual a diferença qualitativa entre uma ligação σ na molécula de H_2 e na molécula de HF ?
- 21- Duas moléculas diatômicas que são importantes para o bem-estar da humanidade são o NO e o N_2 ; a primeira é um poluente e um neurotransmissor, e a última é fonte de nitrogênio das proteínas e de outras biomoléculas. Use as configurações de NO e do N_2 para prever qual destas moléculas é provável que tenha o comprimento de ligação menor. Argumente a sua resposta.