

2ª Lista de Exercícios
QUI125 – Química Fundamental

1- O que é entalpia de ligação? As entalpias de ligação de moléculas poliatômicas são valores médios, enquanto as das moléculas diatômicas podem ser determinadas com precisão. Por quê?

2- A partir dos seguintes dados, calcule a entalpia média da ligação N–H.



3- Determine o ΔH para cada uma das reações na fase gasosa:

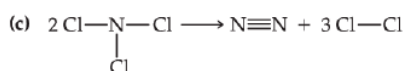
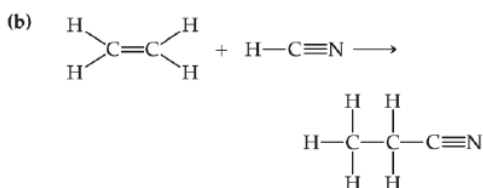
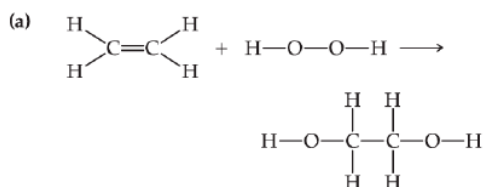


TABELA 8.4 Entalpias médias de ligação (kJ/mol)

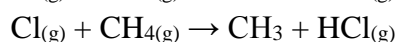
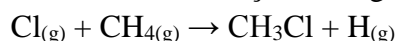
Ligações simples

C–H	413	N–H	391	O–H	463	F–F	155
C–C	348	N–N	163	O–O	146		
C–N	293	N–O	201	O–F	190	Cl–F	253
C–O	358	N–F	272	O–Cl	203	Cl–Cl	242
C–F	485	N–Cl	200	O–I	234		
C–Cl	328	N–Br	243			Br–F	237
C–Br	276			S–H	339	Br–Cl	218
C–I	240	H–H	436	S–F	327	Br–Br	193
C–S	259	H–F	567	S–Cl	253		
		H–Cl	431	S–BR	218	I–Cl	208
Si–H	323	H–Br	366	S–S	266	I–Br	175
Si–Si	226	H–I	299			I–I	151
Si–C	301						
Si–O	368						
Si–Cl	464						

Ligações múltiplas

C=C	614	N=N	418	O ₂	495
C≡C	839	N≡N	941		
C=N	615	N=O	607	S=O	523
C≡N	891			S=S	418
C=O	799				
C≡O	1.072				

4- Com base em considerações energéticas, qual das seguintes reações ocorrerá mais facilmente?

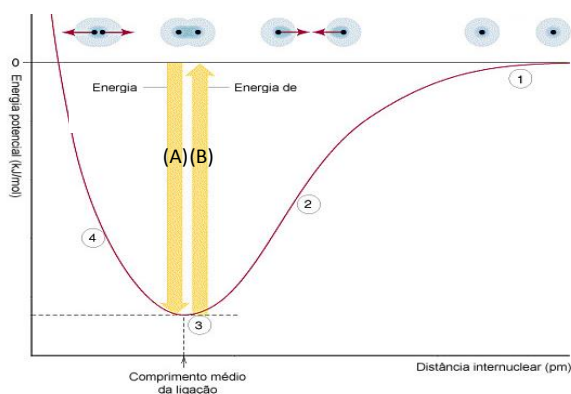


5- As substâncias iônicas KF, CaO e ScN são isoeletrônicas (têm o mesmo número de elétrons). Examine as energias de rede para cada uma destas substâncias e explique a tendência observada:

$$\text{KF } \Delta H_{\text{rede}} = 808 \text{ kJ/mol}; \text{ CaO } \Delta H_{\text{rede}} = 3414 \text{ kJ/mol}; \text{ ScN } \Delta H_{\text{rede}} = 7547 \text{ kJ/mol}$$

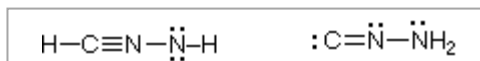
6- Explique por que a energia de rede do cloreto de lítio (861 kJ/mol) é maior que a do cloreto de rubídio (695 kJ/mol), sabendo-se que os íons têm arranjo semelhantes na rede cristalina.

- 7- Desenhe o diagrama de Born-Haber para a formação do composto LiCl, e escreva a fórmula para a obtenção da Energia de Rede.
- 8- Considere a formação do composto CaO. Com base nos dados abaixo calcule a segunda afinidade eletrônica do oxigênio.
 Dados (em kJ/mol): $\Delta H_{\text{sublimação}}$ do Ca: 192, $\Delta H_{\text{dissociação}}$ do O₂: 495; 1^a EI do Ca: 590; 2^a EI do Ca: 1146; 1^a AE do O: -141; ΔH_{rede} : - 3511; $\Delta H_{\text{formação}}$ do CaO: - 635
- 9- Defina eletronegatividade e explique a diferença entre eletronegatividade e afinidade eletrônica.
- 10- Interprete o gráfico abaixo:



- 11- Coloque as ligações em cada um dos conjuntos em ordem crescente de polaridade: (a) C-F, O-F, Be-F; (b) N-Br, P-Br, O-Br; (c) C-S, B-F, N-O.
- 12- Coloque as seguintes ligações em ordem crescente de caráter iônico (utilize escalas de eletronegatividade encontradas na bibliografia): a ligação lítio-flúor em LiF, a ligação potássio oxigênio em K₂O, a ligação nitrogênio-nitrogênio em N₂, a ligação enxofre-oxigênio em SO₂, a ligação cloro-flúor em ClF₃.
- 13- Desenhe a estrutura de Lewis para as seguintes moléculas e íons: (a) SiH₄; (b) CO; (c) SF₂; (d) H₂SO₄ (H ligado a O); (e) ClO₂⁻; (f) NH₂OH; (g) BH₃; (h) AsF₆⁻; (i) XeF₄ (j) I₃⁻, (k) PCl₃, (l) PCl₅, (m) PCl₄⁺; (n) PCl₆⁻
- 14- Escreva as estruturas de ressonância para o cátion nitril, NO₂⁺ e do cloreto de nitrila, ClNO₂ (N é o átomo central).

15- Determine a carga formal de cada átomo dos seguintes íons e moléculas. Identifique a estrutura de energia mais baixa (mais estável) em cada um dos itens.



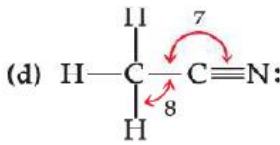
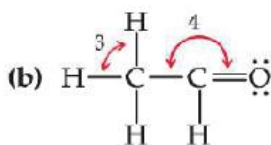
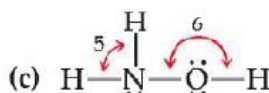
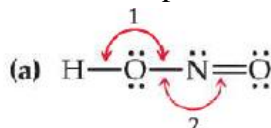
16- Explique por que o composto PF_5 existe, enquanto o composto NF_5 não.

17- Utilizando-se do modelo VSEPR, descreva a geometria das moléculas/íons e coloque em ordem crescente os ângulos $\text{H}-\text{N}-\text{H}$ de (a) NH_4^+ , (b) NH_3 , (c) NH_2^-

18- As ligações $\text{Be}-\text{H}$ na molécula do hidreto de berílio (BeH_2) são polares e, apesar disso, o momento de dipolo da molécula é zero. Explique.

19- Utilizando-se do modelo VSEPR, determine o arranjo e a geometria molecular dos seguintes íons e moléculas: (a) CBr_4 ; (b) BCl_3 ; (c) NF_3 ; (d) SO_3 ; (e) CS_2 ; (f) SeF_4 ; (g) XeF_4 ; (h) BrO_3^- ; (i) ICl_4^- ; (j) H_3O^+ . Quais dessas moléculas são polares?

20- Dê os valores aproximados para os ângulos de ligações indicados nas seguintes moléculas:



21- Disponha as seguintes moléculas em ordem crescente de momento de dipolo: H_2O ; H_2S ; H_2Te e H_2Se .

22- Indique o conjunto de orbitais híbridos usado pelo átomo central, a geometria dos orbitais atômicos híbridos, e a geometria da molécula, em cada um dos seguintes íons e moléculas: (a) BF_3 , (b) AsF_3 , (c) H_2S , (d) SO_3 .

23- Descreva a estrutura do formaldeído, CH_2O (átomo de carbono é o átomo central) em termos de orbitais híbridos, ângulos de ligações e orbitais responsáveis pela formação das ligações σ e π .

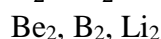
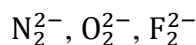
24- Esboce os orbitais moleculares do íon H_2^- e desenhe o respectivo diagrama de níveis de energia.

(a) Calcule a ordem de ligação em H_2^- .

(b) Suponha que o íon seja excitado por um fóton, de forma que um elétron se mova de um OM de menor energia para um de maior. Você espera que o íon H_2^- , neste estado excitado, fique estável?

25- Quais os orbitais moleculares formados a partir da combinação dos orbitais atômicos p ? Coloque-os em ordem de energia crescente, considerando que não haja interação cruzada entre orbitais $2s$ e $2p$ (ex. moléculas diatômicas dos elementos mais pesados do 2º período, O_2 , F_2 e Ne_2).

26- Usando a teoria de orbitais moleculares prediga quais das seguintes moléculas diatômicas serão estáveis:



27- Desenhe o diagrama de energia dos OMs dos seguintes íons: N_2^+ , N_2^{2+} e N_2^{2-}

(c) Dê a ordem de ligação esperada para cada espécie.

(d) Quais dessas espécies são paramagnéticas?

(e) O orbital ocupado de mais alta energia (HOMO) tem caráter σ ou π ?

28- A configuração eletrônica do estado fundamental do íon C_2^{n-} é $\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \sigma_{2p}^2$. Qual a carga do íon e sua ordem de ligação?

29- O que significa o termo paramagnetismo?

(f) De acordo com a teoria do orbital molecular, quais dos íons são paramagnéticos: O_2^+ , N_2^- , Li_2^+ , O_2^{2-} .