



**UAlg FCT**

UNIVERSIDADE DO ALGARVE  
FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E FARMÁCIA

# **Teoria da Ligação Química**

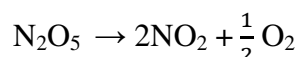
## **Caderno de Exercícios**

**Curso: Bioquímica e  
Mestrado Integrado em Engenharia  
Biológica**

**Ano Letivo 2012/2013**

**Wenli Wang**

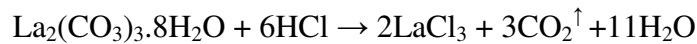
1. O bórax é formulado como  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ . Use a tabela periódica para calcular o seu peso molecular.
2. Uma amostra pura de cálcio metálico pesando 1,35 g foi totalmente convertida em 1,88 g de CaO puro. Se o peso atómico do oxigénio é 16,0 g/mol, qual é o peso atómico do cálcio?
3. Uma amostra de  $\text{K}_2\text{CO}_3$  pesando 27,6 g foi tratado com uma série de reagentes que converteram todo o carbono em  $\text{CN}^-$ , originando o composto  $\text{K}_2\text{Zn}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]_2$ . Quantos gramas deste composto foram obtidos?
4. Uma molécula em fase gasosa tem a fórmula  $\text{N}_2\text{O}_5$ . Uma ampola contém  $1,00 \times 10^{-4}$  g de  $\text{N}_2\text{O}_5$ . Quantas moléculas de  $\text{N}_2\text{O}_5$  conterão nesta ampola? Se o  $\text{N}_2\text{O}_5$  sofrer decomposição segundo a reacção



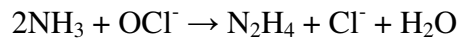
Quantas moléculas ficarão na ampola no final desta reacção? A amostra ainda pesaria  $1,00 \times 10^{-4}$  g ?

5. Após sofrer combustão, 1 volume de um composto gasoso constituído de hidrogénio, carbono e nitrogénio produziu 2 volumes de  $\text{CO}_2$ , 3,5 volumes de  $\text{H}_2\text{O}$  e 0,5 volume de  $\text{N}_2$ , que foram medidos nas mesmas condições de temperatura e pressão. Qual é a fórmula empírica do composto?
6. Uma amostra de óxido de ferro pesando 1,60g foi aquecida numa corrente de gás hidrogénio até ser completamente convertida em 1,12g de ferro metálico. Qual é a formula empírica do óxido?
7. Um composto puro contém 36,854% de nitrogénio e 63,146% de oxigénio em peso. Qual é a fórmula empírica do composto?
8. Ao queimar 0,210g de um composto constituído somente de carbono e hidrogénio, recuperou-se 0,660g de  $\text{CO}_2$ . Qual é a fórmula empírica deste composto?
9. 1,000g de uma mistura de óxido cuproso ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ) e de óxido cúprico ( $\text{CuO}$ ) foi reduzida a 0,839 g de Cu metálico. Qual era o peso do CuO na amostra original?
10. Calcule a massa máxima de  $\text{CO}_2$  que pode ser produzidos a partir de 12,0 g de CO pela reacção  $2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$ .

11. Calcule a quantidade mínima de HCl deveria ser adicionada na seguinte reacção para 2,00 g de  $\text{La}_2(\text{CO}_3)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  ser totalmente consumido. Quantos gramas de  $\text{LaCl}_3$  seriam produzidos?



12. Uma química queria preparar hidrazina ( $\text{N}_2\text{H}_4$ ) a partir da reacção:



E, para isto, misturou 3,6 mol de  $\text{NH}_3$  com 1,5 mol de  $\text{OCI}^-$ . Quantos mols de hidrazina poderiam ser obtidos?

13. O olho humano é mais sensível nos comprimentos de onda em torno de 500 nm. Qual é a frequência correspondente a este comprimento de onda?
14. A energia mínima necessária para se remover um electrão da superfície do césio metálico é igual a  $3,14 \times 10^{-19}$  J. Determine o comprimento de onda máximo da luz capaz de produzir uma corrente de foto-electrões do Cs metálico.
15. Supondo que a luz incidente sobre a superfície do césio metálico possua um comprimento de onda 600 nm, determine a velocidade do electrão ejectado.
16. Se uma linha de absorção em  $\lambda = 600$  nm for observada, qual seria a separação entre os níveis de energia correspondente a este comprimento de onda?
17. Aplicando o modelo atómico de Bohr para o átomo de Hidrogénio,
- Calcule o menor raio de orbita do electrão.
  - Calcule a energia de um átomo de Hidrogénio no seu estado de menor energia.
  - Calcule o comprimento de onda da linha de emissão para a transição  $n=2$  para  $n=1$ .
  - Calcule o comprimento de onda da linha de emissão para a transição  $n=3$  para  $n=2$ .
18. Calcule o comprimento de onda de De Broglie para:
- Uma massa de 1,0 g com uma velocidade de  $1,0 \text{ m s}^{-1}$ ;
  - A mesma massa e com uma velocidade de  $1,00 \times 10^5 \text{ km s}^{-1}$ ;
  - Um átomo de He com uma velocidade de  $1000 \text{ m s}^{-1}$ .  
( $m_{\text{He}} = 4,0026 \mu$ ,  $1 \mu = 1,6605 \times 10^{-27} \text{ kg}$ )

19. Considere um electrão numa caixa unidimensional de  $L = 1,0 \text{ nm}$ .
- Calcule a energia mínima do electrão.
  - Calcule a diferença em energia entre os níveis  $n=2$  e  $n=1$ .
  - Como é que variam os valores calculados nas alíneas anteriores se o comprimento de caixa aumentasse para o duplo ( $L=2,0 \text{ nm}$ )?
20. O movimento vibracional das moléculas diatómicas pode ser descrito aproximadamente pelo modelo do oscilador harmónico. Sabendo que, para a molécula **HI**, a distância de equilíbrio  $R = 160 \text{ pm}$  e a constante de força da ligação  $k = 313,8 \text{ Nm}^{-1}$ . Calcule para as moléculas **HI** e **DI** ( $m_{\text{H}} = 1,008 \mu$ ,  $m_{\text{D}} = 2,014 \mu$ ,  $m_{\text{I}} = 126.904 \mu$ ,  $1\mu = 1,6605 \times 10^{-27} \text{ kg}$ )
- a frequência clássica em hertz.
  - a energia mínima vibracional.
  - o comprimento de onda dos fotões correspondentes à transição de  $n=1$  para  $n=0$ .
21. Mostre todas as possíveis combinações de números quânticos para um electrão em cada um dos seguintes orbitais: **1s**, **3p**, **4d** e **5f**. Determine o número de combinações com a mesma energia, ou a degenerescência, de cada orbital.
22. Mostre todas as possíveis combinações de números quânticos para um electrão num orbital **5g**.
23. Quantos orbitais existem no nível  $n=5$ ?
24. Considere um orbital **2p<sub>z</sub>** e sua função de onda. Qual seria o valor de  $\theta$  se  $r$  estivesse contido no plano  $xy$ ? Calcule o valor de  $\psi(2p_z)$  quando  $r$  estiver nesta condição. Estenda este raciocínio para  $\psi(2p_x)$  e  $\psi(2p_y)$  para considerando que  $r$  esteja contido nos planos  $yz$  e  $xz$ , respectivamente.

Dados:

Velocidade da Luz,  $c = 2,9979 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$ ,

$W \rightarrow$  Watt, unidade de potência,  $1W = 1 \text{ Js}^{-1}$ ,

constante de Planck,  $h = 6,6262 \times 10^{-34} \text{ Js}$ ,

Massa de electrão,  $m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ,

Carga de electrão,  $e = 1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ ,

Constante de permissividade do vácuo,  $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \text{ C}^2 \text{ m}^{-1}$ ,

Constante de Avogadro,  $N_A = 6,02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ,

25. O orbital  $2s$  possui um nó, mas ele se constitui numa superfície esférica. Determine o valor de  $r$  em  $a$  onde ocorre esta superfície nodal.
26. Calcule a distância de máxima probabilidade de densidade radial do orbital  $1s$ .
27. Calcule a energia de ionização para o átomo de hidrogénio.
28. Calcule a 2ª energia de ionização para o átomo de hélio, He.
29. Calcule a 3ª energia de ionização para o átomo de lítio, Li.
30. Determinar o comprimento de onda de um fóton emitido pela transição de  $n=4$  para o estado fundamental no átomo de hidrogénio.
31. Escreva um conjunto de números quânticos para cada um dos electrões do átomo Berílio.
32. Escreva um conjunto de números quânticos para cada um dos electrões do átomo boro.
33. Escreva a configuração electrónica do primeiro estado excitado do átomo Li, e esta configuração electrónica pode corresponder quantos estados?
34. Escreva a configuração electrónica do estado fundamental do átomo oxigénio, e esta configuração electrónica pode corresponder quantos estados?
35. Qual é o número quântico de spin  $S$  para o estado fundamental do átomo de
  - a) Carbono, C
  - b) Nitrogénio, N
  - c) Oxigénio, O
36. Escreva as configurações electrónicas do estado fundamental das seguintes espécies:  $\text{Li}^+$ , B,  $\text{O}^{2-}$ , Mg e  $\text{Se}^{2-}$
37. Identifique e agrupe as espécies isoelectrónicas, e mostre a configuração electrónica do estado fundamental, dos seguintes átomos e iões:  $\text{Na}^+$ , H,  $\text{H}^-$ , Ne,  $\text{Be}^{2+}$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{S}^{2-}$ ,  $\text{F}^-$ , He,  $\text{N}^{3-}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  e  $\text{He}^+$
38. Escreva as configurações electrónicas do estado fundamental dos seguintes iões:  $\text{V}^{2+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Ag}^+$ , e  $\text{Pt}^{2+}$
39. Identifique quais dos seguintes átomos ou iões possuem orbitais  $s$ ,  $p$  ou  $d$  semi-preenchidos, no estado fundamental:  $\text{Cl}^-$ , N,  $\text{Be}^+$ , C,  $\text{Mg}^{2+}$ , S e  $\text{Mn}^{2+}$ .

40. Baseando-se nas configurações electrónicas, explique por que o átomo de hélio tem uma energia de ionização maior do que do hidrogénio, enquanto que a energia de ionização do lítio é menor.
41. Baseando-se nas configurações electrónicas, explique os valores relativos de  $I_1$  entre o átomo Zn e o átomo Ga.
42. Baseando-se nas configurações electrónicas, explique os valores relativos de  $I_1$  entre o átomo Li e o átomo Na.
43. Baseando-se nas configurações electrónicas, explique os valores relativos de  $I_1$  entre o átomo F e o átomo O.
44. Baseando-se nas configurações electrónicas, explique os valores relativos de  $I_1$  entre o átomo N e o átomo O.
45. As energias calculadas pelo método de Hartree-Fock para B, B<sup>+</sup> e B<sup>2+</sup> são respectivamente,  $-24,52906 E_h$ ,  $-24,23759 E_h$  e  $-23,37599 E_h$ , ( $E_h$  – hartree, ua). Use estes dados para calcular  $I_1$  e  $I_2$ , em quilojoule por mol ( $\text{kJ mol}^{-1}$ ). (Dados:  $1E_h = 4,35975 \times 10^{-18} \text{ J}$   $N_A = 6,02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ )
46. Usando os valores da energia de ionização e/ou da afinidade electrónica, calcule as energias do átomo He,  $E_0(\text{He})$  e do ião H<sup>-</sup>,  $E_0(\text{H}^-)$ .  
(dados:  $I_1(\text{He}) = 2372,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $I_2(\text{He}) = 5250,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $I_1(\text{H}) = 1312,0 \text{ kJ mol}^{-1}$  e  $A(\text{H}) = 72,77 \text{ kJ mol}^{-1}$ )
47. Calcule a variação de energia observada nas seguintes reacções:
- $\text{Ca}(\text{g}) + 2 \text{Cl}(\text{g}) \rightarrow \text{Ca}^{2+}(\text{g}) + 2 \text{Cl}^-(\text{g})$
  - $\text{Ca}^{2+}(\text{g}) + 2 \text{Cl}^-(\text{g}) \rightarrow \text{Ca}(\text{g}) + 2 \text{Cl}(\text{g})$
  - $\text{Na}^+(\text{g}) + \text{Cl}^-(\text{g}) \rightarrow \text{Na}(\text{g}) + \text{Cl}(\text{g})$
  - $\text{Na}(\text{g}) + \text{F}(\text{g}) \rightarrow \text{Na}^+(\text{g}) + \text{F}^-(\text{g})$
  - $\text{Cs}(\text{g}) + \text{F}(\text{g}) \rightarrow \text{Cs}^+(\text{g}) + \text{F}^-(\text{g})$
- (dados:  $I_1(\text{Ca}) = 589,8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $I_2(\text{Ca}) = 1145,5 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $I_1(\text{Na}) = 495,8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $I_1(\text{Cs}) = 375,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $A(\text{Cl}) = 349,0 \text{ kJ mol}^{-1}$  e  $A(\text{F}) = 328,0 \text{ kJ mol}^{-1}$ )

48. Usando os resultados do problema anterior, calcule a distância limite entre um átomo de Cs e um de F antes que ocorra a transferência de um elétron para formar um par iônico.
49. Usando os resultados do problema 47, calcule a distância limite entre um átomo de Na e um de F antes que ocorra a transferência de um elétron para formar um par iônico.
50. O sólido iônico KI tem a estrutura do NaCl ou do CsCl ?  
(Dados:  $r(\text{K}^+) = 1,33 \text{ \AA}$  e  $r(\text{I}^-) = 2,16 \text{ \AA}$ .)
51. Explique porque o LiF possui a ligação iônica mais forte dentro dos haleto alcalinos.
52. Explique por que os íons isoeletrônicos  $\text{F}^-$  e  $\text{Na}^+$  possuem raios iônicos tão diferentes.
53. Utilize os raios iônicos de  $\text{Cl}^-$  e  $\text{K}^+$  para estimar o raio de van der Waals do átomo Ar.
54. Escreva as estruturas de Lewis para cada um dos seguintes compostos. Se ocorrer ressonância, escreva todas as formas ressonantes possíveis.
- |                          |                           |
|--------------------------|---------------------------|
| a) $\text{SiH}_4$        | b) $\text{ClO}_3^-$       |
| c) $\text{OCl}^-$        | d) $\text{NO}^+$          |
| e) $\text{COS}$          | f) $\text{SO}_2$          |
| g) $\text{NO}_2^-$       | h) $\text{ClO}_4^-$       |
| j) $\text{SO}_3$         | k) $\text{AlH}_4^-$       |
| l) $\text{CH}_2\text{O}$ | m) $\text{CH}_3\text{OH}$ |
55. Calcule as cargas formais para o problema anterior.
56. Utilize estruturas de Lewis e aplique o modelo RPEV para prever as geometrias de  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  e  $\text{H}_2\text{O}$ . Quais teriam os ângulos tetraédricos exactos.
57. Explique por que o  $\text{NH}_3$  e o  $\text{BH}_3$  devem apresentar ângulos de ligação bastante distintos?
58. Quais das seguintes moléculas triatómicas são lineares:  $\text{CS}_2$ ,  $\text{XeF}_2$ ,  $\text{SF}_2$ ,  $\text{HNO}$  e  $\text{HCN}$  ?

59. Para cada uma das seguintes moléculas e iões, escreva a estrutura de Lewis, calcule o número de pares electrónicos de valência, pares de ligação, e pares isolados a volta do átomo central. Utilizando a teoria RPEV, faça uma previsão da geometria para cada um.

- |                    |                     |
|--------------------|---------------------|
| a) $\text{OF}_2$   | b) $\text{PF}_3$    |
| c) $\text{BF}_4^-$ | d) $\text{ICl}_4^-$ |
| e) $\text{IF}_2^-$ | f) $\text{ClO}_3^-$ |

60. Quais das seguintes moléculas são polares:

- |                   |                         |                  |
|-------------------|-------------------------|------------------|
| a) $\text{CO}_2$  | b) $\text{H}_2\text{O}$ | c) $\text{CH}_4$ |
| d) $\text{PCl}_5$ | e) $\text{NO}$          | f) $\text{NF}_3$ |

61. Utilize a TLV para descrever as ligações e a geometria das seguintes moléculas:

- |                  |                  |                         |                           |
|------------------|------------------|-------------------------|---------------------------|
| a) $\text{CH}_4$ | b) $\text{NH}_3$ | c) $\text{H}_2\text{O}$ | d) $\text{C}_2\text{H}_6$ |
|------------------|------------------|-------------------------|---------------------------|

62. Utilize a TLV para descrever as ligações e a geometria das seguintes moléculas:

- |                   |                           |                          |                |
|-------------------|---------------------------|--------------------------|----------------|
| a) $\text{BCl}_3$ | b) $\text{C}_2\text{H}_4$ | c) $\text{CH}_2\text{O}$ | d) $\text{NO}$ |
|-------------------|---------------------------|--------------------------|----------------|

63. Utilize a TLV para descrever as ligações e a geometria das seguintes moléculas:

- |                  |                           |
|------------------|---------------------------|
| a) $\text{CO}_2$ | b) $\text{C}_2\text{H}_2$ |
|------------------|---------------------------|

64. Utilize a TLV para descrever as ligações e a geometria das seguintes moléculas:

- |                   |                  |                  |                   |
|-------------------|------------------|------------------|-------------------|
| a) $\text{PCl}_5$ | b) $\text{SF}_4$ | c) $\text{SF}_6$ | d) $\text{XeF}_4$ |
|-------------------|------------------|------------------|-------------------|

65. Utilize a TLV para descrever as ligações no aleno,  $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$ . A sua descrição deve mostrar porque o grupo  $\text{C}=\text{C}=\text{C}$  é linear e por que os planos formados pelos dois grupos  $\text{CH}_2$  são perpendiculares entre si.

66. Construa a estrutura de Lewis do  $\text{N}_2\text{F}_2$ , que apresenta a seguinte estrutura:  $\text{F}-\text{N}=\text{N}-\text{F}$ . A molécula é plana mas não linear, existindo na forma dos isómeros *cis* e *trans*. Que tipo de hibridação do átomo de nitrogénio é consistente com estas estruturas?

67. Desenha a estrutura de Lewis do  $\text{N}_3^-$ , cuja estrutura é  $\text{N}=\text{N}=\text{N}^-$ . Esta molécula é linear? Sabendo que o ácido  $\text{HN}_3$  não é uma molécula linear, que tipo de hibridação do átomo de nitrogénio é consistente com estas estruturas?

68. Para cada uma das seguintes espécies, escreva a configuração electrónica de menor energia, calcule a ordem da ligação e indique a propriedade magnética.

- a)  $\text{Li}_2$                       b)  $\text{B}_2$                       c)  $\text{N}_2$                       d)  $\text{Ne}_2^+$

69. Que molécula, em cada um dos seguintes pares, teria maior energia de ligação?

- a)  $\text{F}_2, \text{F}_2^+$                       b)  $\text{NO}, \text{NO}^-$                       c)  $\text{BN}, \text{BO}$   
 d)  $\text{NF}, \text{NO}$                       e)  $\text{Be}_2, \text{Be}_2^+$                       f)  $\text{O}_2, \text{O}_2^+$

70. Escreva um exemplo de molécula neutra, estável, e de um ião estável, ambos isoelectrónicos ao  $\text{N}_2$ .

71. Todas as seguintes formas de oxigénio podem ser facilmente preparadas:  $\text{O}_2, \text{O}_2^+, \text{O}_2^-, \text{O}_2^{2-}$ . Explique a ligação em cada espécie.

72. Conhecidas as seguintes energias das orbitais atómicas,

$$\text{H: } E(1s) = -13,64 \text{ eV}$$

$$\text{F: } E(2s) = -26,12 \text{ eV}; \quad E(2p) = -18,6 \text{ eV}$$

$$\text{Cl: } E(3s) = -25,31 \text{ eV}; \quad E(3p) = -15,88 \text{ eV}$$

$$\text{Br: } E(4s) = -24,13 \text{ eV}; \quad E(4p) = -12,52 \text{ eV}$$

faça os diagramas de energia de orbitais moleculares para as moléculas HF, HCl e HBr.

73. Compare as razões apresentadas pelas teorias RPEV e de orbitais moleculares para prever uma geometria angular para o  $\text{H}_2\text{O}$ .

74. Faça uma previsão das geometrias das seguintes moléculas triatómicas:

- a)  $\text{OBO}$                       b)  $\text{CNC}$                       c)  $\text{Li}_3^+$                       d)  $\text{CO}_2^+$   
 e)  $\text{O}_3^+$                       f)  $\text{F}_3^+$                       g)  $\text{O}_3$                       h)  $\text{CO}_2^-$

75. Faça uma previsão das geometrias das seguintes moléculas triatómicas:

- a)  $\text{CCN}$                       b)  $\text{CCO}$                       c)  $\text{FCO}$                       d)  $\text{FOO}$   
 e)  $\text{FNO}$                       f)  $\text{FCN}$                       g)  $\text{NCO}$                       h)  $\text{C}_3$