

**INSTITUTO POLITÉCNICO DE TOMAR
ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA**

Departamento de Engenharia Química e do Ambiente

QUÍMICA I (1º Ano/1º Semestre)

2ª Série de Exercícios

ESTRUTURA DE ÁTOMOS E MOLÉCULAS

Tomar (2003)

Teoria Quântica e Estrutura Electrónica dos Átomos

1. Sabendo que a energia mínima necessária para remover um electrão do metal tungsténio é 8.8×10^{-9} J, calcule:
 - a) A energia necessária à remoção de 1 mole de electrões
 - b) A velocidade de cada electrão ejectado por acção de fotões de $\lambda = 200$ nm.
2. Quando átomos de cobre são submetidos a um feixe de electrões de alta energia pode ocorrer a ejeção de um dos seus electrões 1s. Então, um electrão 2p pode transitar para a orbital 1s ocorrendo emissão de raios X de $\lambda = 0.154$ nm. Calcule a diferença entre a energia da orbital 2p e da orbital 1s do átomo de cobre.
3. Calcule o comprimento de onda máximo capaz de dissociar a molécula de oxigénio (energia de dissociação = 550 kJ/mol)
4. Calcule a massa (em movimento) que é possível associar a 1 mol de fotões ultravioleta de comprimento de onda igual a 3×10^{-7} m. Se esses fotões incidirem numa placa de cobre, com que energia cinética fica cada electrão arrancado, sabendo que a energia mínima necessária para remover um electrão do cobre é 6.6×10^{-19} J.
5. A energia cinética máxima com que são ejectados electrões de uma superfície metálica, sob acção de luz ultravioleta de comprimento de onda 300 nm é 0.455 eV ($1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}$ J). Determinar a energia dos mesmos electrões quando ligados à estrutura do metal, no estado fundamental.
6. Qual é o comprimento de onda de um fotão emitido durante uma transição do estado $n = 5$ para $n = 2$, no átomo de hidrogénio? A constante de Rydberg é $R = 109677.6 \text{ cm}^{-1}$
7. Qual o nº máximo de electrões que podem estar no nível com número quântico principal $n = 3$? Justificar
8. Um átomo de oxigénio tem no total 8 electrões. Escreva os quatro números quânticos para cada um deles, no estado fundamental.

9. De acordo com a teoria quântica, qual ou quais das seguintes orbitais atômicas não pode existir: 2s, 2d, 3p, 3f, 4f e 5s. Justificar a resposta.

Tabela Periódica e Variação das Propriedades Físicas

10. Considere os seguintes átomos: ${}^2\text{He}$; ${}^3\text{Li}$; ${}^4\text{Be}$; ${}^5\text{B}$; ${}^{10}\text{Ne}$; ${}^{11}\text{Na}$.

- Escreva a configuração electrónica daqueles átomos, no estado fundamental
- Indique a configuração electrónica do ião Na^+ e compare com a do Ne.
- Interprete a menor diferença de energia existente entre electrões 2s e 2p, relativamente a electrões 1s e 2s
- Qual das substâncias reagirá mais facilmente com água, originando iões positivos?
- Ordene os átomos por ordem crescente de tamanhos (raio atómico)

11. Explicar o aumento de energia de ionização de Na para Cl. (refira-se à carga nuclear efectiva)

12. Considere a configuração electrónica dos seguintes átomos:

A: $1s^2 2s^2 2p^6$; B: $1s^2 2s^2 2p^5$; C: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$; D: $1s^2 2s^2 2p^5 3s^1 3p^1$

- Indique os átomos que se encontram no estado fundamental
- Qual dos átomos no estado fundamental apresenta maior energia de ionização? Justificar
- Qual dos átomos possui maior electronegatividade? Justificar

Ligação Química: Conceitos Fundamentais

13. Baseado no conceito de electronegatividade preveja o tipo de ligação química presente nos seguintes compostos: HBr e NaBr

14. Calcular a energia de rede no $\text{CaCl}_2(\text{s})$, com base nos seguintes dados: entalpia de sublimação do Ca(s): $\Delta H_{\text{subl}} = 121 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; $\Delta H_{\text{f}}^\circ(\text{CaCl}_2) = -795 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; energia de ionização do cálcio: $589.5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$; afinidade electrónica do cloro: $-348 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

15. Faça a representação de Lewis para cada uma das moléculas ou iões que correspondem às seguintes fórmulas química: OF_2 , NH_3 , N_2H_4 , BCl_3 , NO_2^- e HCOOH .
16. Justificar porque motivo as ligações carbono - oxigénio têm diferente comprimento no monóxido de carbono e no ião carbonato.
17. Descreva algumas características e um composto iónico, como o KF , que o distinguem de um composto covalente, como o C_6H_6 (benzeno).
18. Indicar a geometria molecular das seguintes moléculas ou iões: ozono, O_3 , dióxido de carbono, CO_2 e amoníaco, NH_3 e ião carbonato, CO_3^{2-} .
19. A molécula de OCS possui um momento dipolar mais elevado ou mais baixo que a molécula de CS_2 . Justificar.

Teorias da Ligação Química

20. Considere os seguintes pares de orbitais atómicas pertencentes a núcleos adjacentes: a) $1s$ e $1s$; b) $1s$ e $2p_x$; c) $2p_x$ e $2p_y$; d) $3p_y$ e $3p_y$; e) $2p_x$ e $2p_x$; f) $1s$ e $2s$. Quais podem coalescer e formar uma ligação sigma? Quais podem coalescer e formar uma ligação pi? Quais não podem coalescer (não há formação de qualquer ligação)? Admita que o eixo dos xx é o eixo internuclear, ou seja, a linha que une os núcleos dos dois átomos.
21. Utilizar a hibridação de orbitais atómicas para descrever as ligações na molécula de AsH_3 .
22. Justificar que a ligação química em O_2^{2-} é mais fraca que em O_2 , mas em O_2^+ é mais forte (recorrer ao conceito de orbitais moleculares)
23. Coloque as seguintes espécies químicas por ordem de estabilidade: Li_2 , Li_2^+ e Li_2^- . Utilize diagramas de orbitais moleculares para justificar a escolha.