

Química I

2º exame - 30-1-2018

①

$$\text{He} \rightarrow \lambda = 58,5 \text{ nm}$$

$$I = 10 \text{ mA}$$

$$\text{pot. net.} = 16,2 \text{ eV}$$

$$a) E_{\text{rad}} = h\nu = 3,40 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{\text{cin}} = 162 \text{ eV} \\ = 2,60 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_0 = E_{\text{rad}} - E_{\text{cin}} \\ = 8,0 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 4,85,4 \text{ KJ/mol}$$

de acordo com os dados tabela é Metal I

b) A energia calculada é $E_{\text{remoc}}(\text{eV})$ que corresponde à energia calculada para o estado sólido. A EI é um processo que se refere ao estado gasoso.

$$c) \lambda = \frac{h}{mv}$$

$$E_{\text{cin}} = \frac{1}{2} mv^2$$

$$v = \sqrt{\frac{2 \times 3,6 \cdot 10^{-18}}{9,109 \cdot 10^{-31}}} = 2,38 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

$$\lambda = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{9,109 \cdot 10^{-31} \times 2,38 \cdot 10^6} = 3,05 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$d) \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta p = m \Delta v = 9,109 \cdot 10^{-31}$$

$$\Delta x \geq 5,8 \cdot 10^{-5} \text{ m}$$

e) o metal pertence ao grupo 1 da tabela periódica. Tem EI_1 baixo e EI_2 muito superior $< EI_1$



a) T.R.P.E.C.V.

$N = 5e^-$

$2O = 2 \times 2e^- = 4e^-$ (2 pares "duplos")

Carga⁺ = -1

$8e^- \rightarrow 4 \text{ pares} \iff$

$\iff 2 \text{ pares duplos}$

AX_2

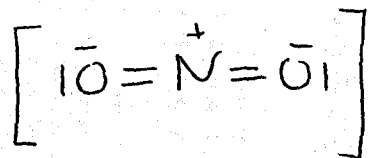
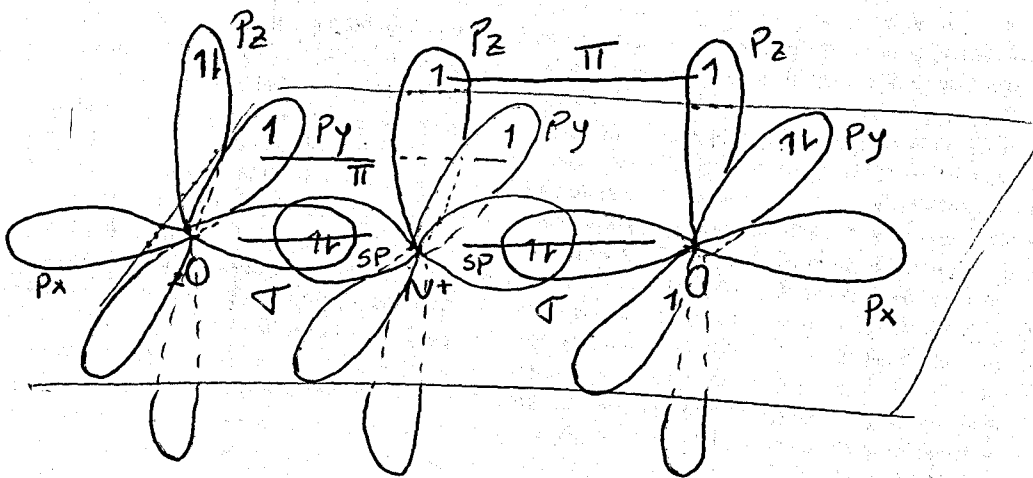
Geom. pares e linear

Geom. da molécula linear $\text{O}-\overset{180^\circ}{\text{N}}-\text{O}$

b) T.E.V.

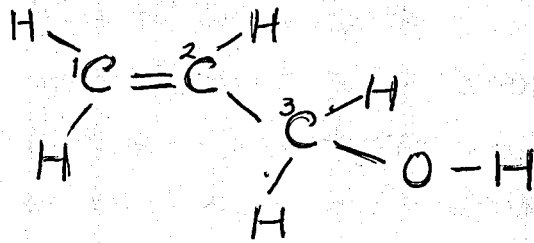
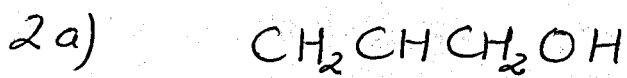
N hibrida em sp $N^+ (sp)^1 (sp)^1 p_y^1 p_z^1$

$1O 2s^2 2p_x^1 2p_y^2 2p_z^1$ $2O 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^2$



Lig N-O dupla (σ ($sp^1 N$ e $p_x^1 O$) + π ($p_y^1 N$ ou $p_z^1 N$ com $p_y^1 O$ ou $p_z^1 O$ conforme representado)

2 pares maõ partilhados em cada O



T.R.P.E.C.V.

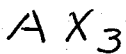
$${}^1\text{C} = 4e^-$$

$$2\text{H} = 2 \times 1 = 2e^-$$

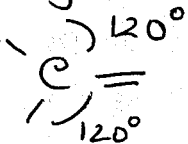
$${}^2\text{C} = 2e^- \text{ par duplo}$$

$$8e^- \rightarrow 4 \text{ pares} \iff$$

1 par duplo + 2 par simples



- Geometria dos pares é triang. plana
- Geometria em torno ${}^1\text{C}$ triangular plana



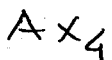
$${}^3\text{C} = 4e^-$$

$${}^2\text{C} = 1e^-$$

$$2\text{H} = 2 \times 1e^-$$

$$\text{O} = 1e^-$$

$$8e^- \rightarrow 4 \text{ pares}$$



- Geometria dos pares é tetraédrica
- Geometria em torno ${}^3\text{C}$ tetraédrica $\angle e^- \approx 109^\circ$

$${}^2\text{C} = 4e^-$$

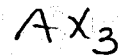
$$\text{H} = 1e^-$$

$${}^3\text{C} = 1e^-$$

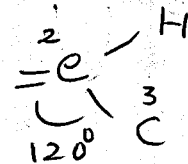
$${}^1\text{C} = 2e^- \text{ (par duplo)}$$

$$8e^- \rightarrow 4 \text{ pares} \iff 1 \text{ par duplo} + 2 \text{ par simples}$$

1 par duplo + 2 par simples



- Geometria dos pares é triang. plana
- Geometria em torno ${}^2\text{C}$ triangular plana

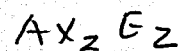


$$\text{O} = 6e^-$$

$$\text{H} = 1e^-$$

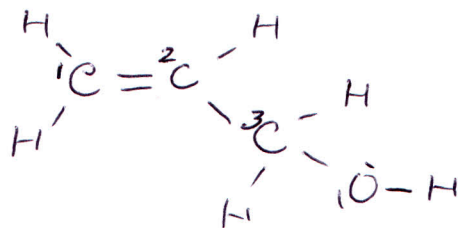
$${}^3\text{C} = 1e^-$$

$$8e^- \rightarrow 4 \text{ pares}$$



- Geometria dos pares é tetraédrica
- Geometria em torno de O Angular $\angle \text{H-O-H} \approx 109^\circ$

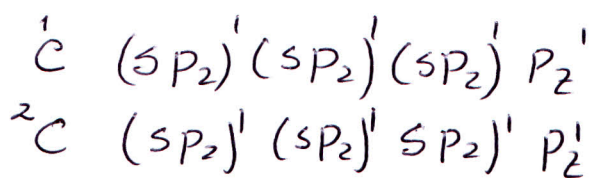
2b) T.E.V.



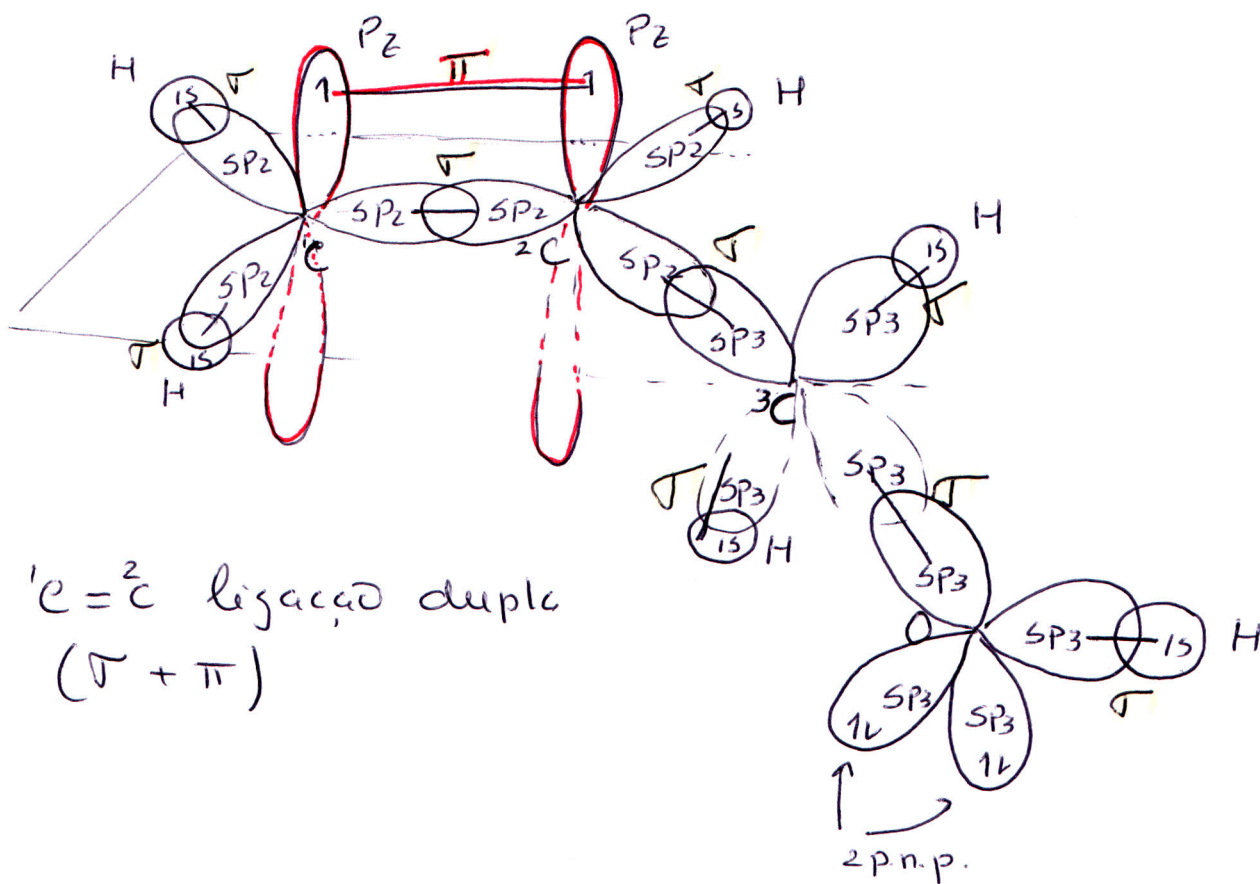
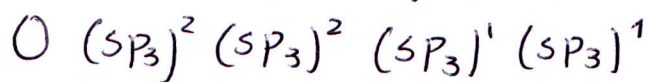
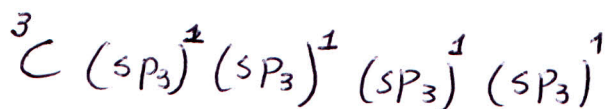
^1C e ^2C hibridam em sp^2

^3C hibrida em sp^3

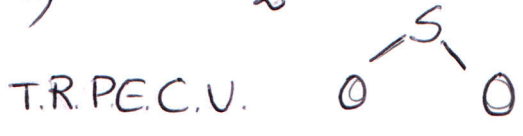
O hibrida em sp^3



H 1s¹



$^1\text{C} = ^2\text{C}$ ligação dupla
 ($\sigma + \pi$)

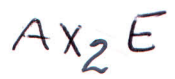


$S = 6e$

$2O = 2 \times 2e = 4e$ (2 pares duplos)

$10e \Rightarrow 5 \text{ pares} \Rightarrow$

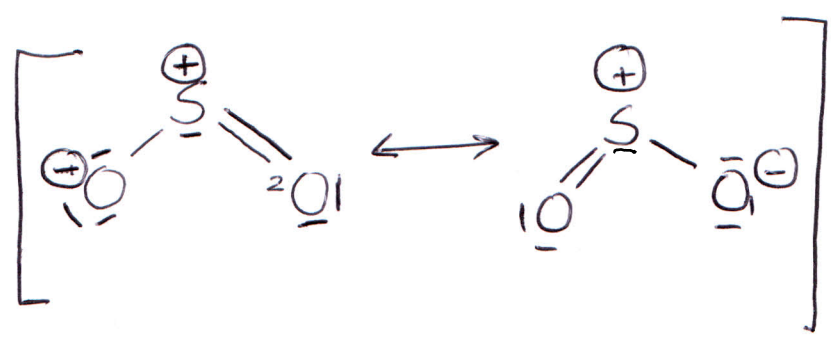
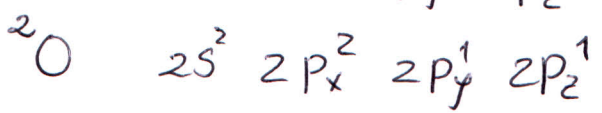
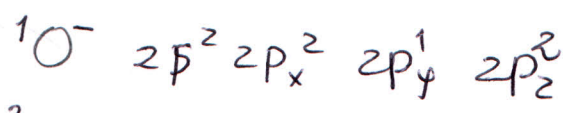
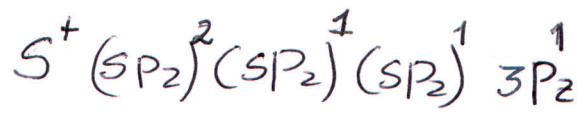
$\Leftrightarrow 2 \text{ pares duplos} + 1 \text{ par simples}$



• Geometria dos pares: triangular plano

• Geometria da molécula Angular

2b T.E.V.



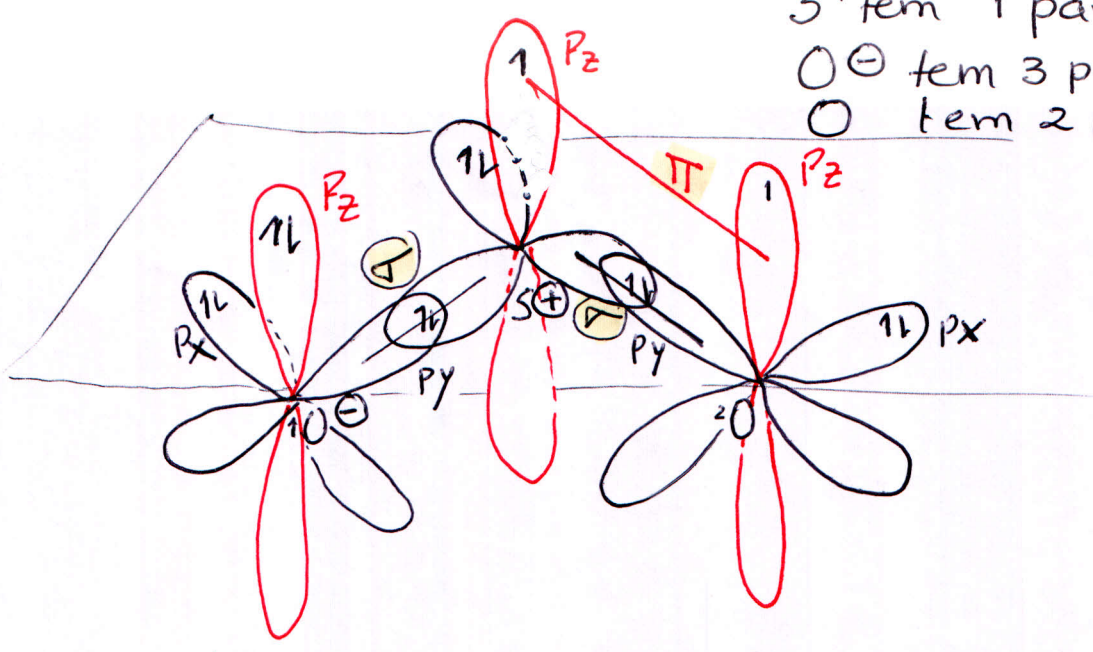
2 F. Ressonâncias

ligação S-O ($\sigma + \frac{1}{2} \pi$)

S^+ tem 1 par \bar{n} partilhado

O^- tem 3 pares \bar{n} partilhados

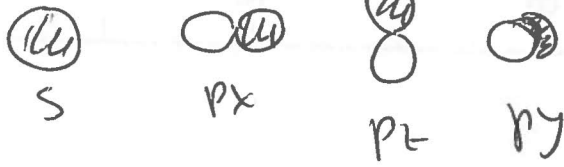
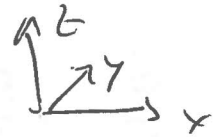
O tem 2 pares \bar{n} partilhados



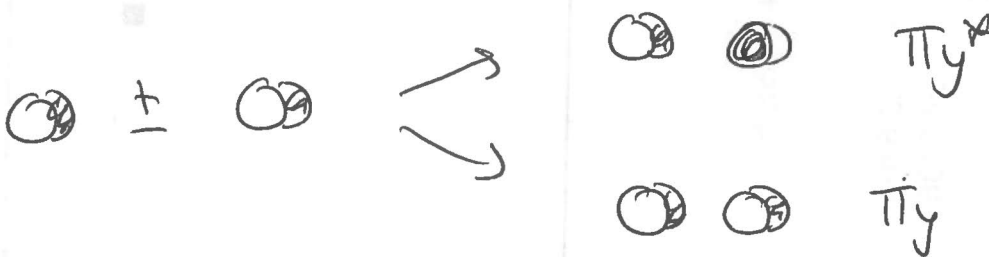
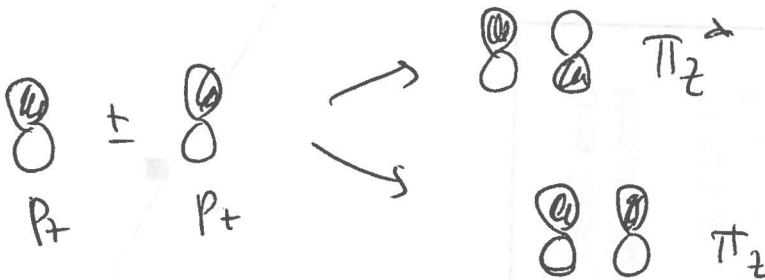
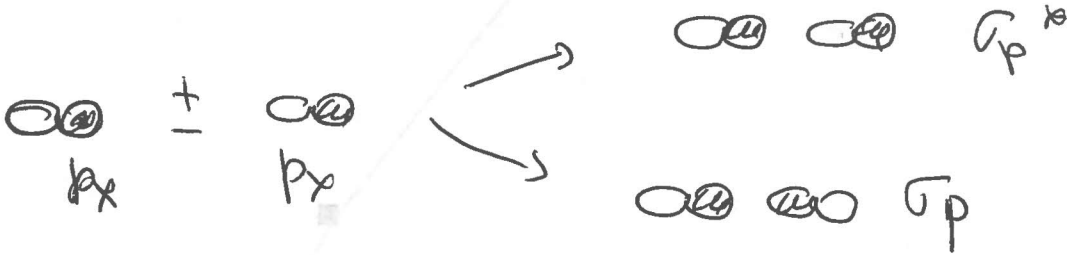
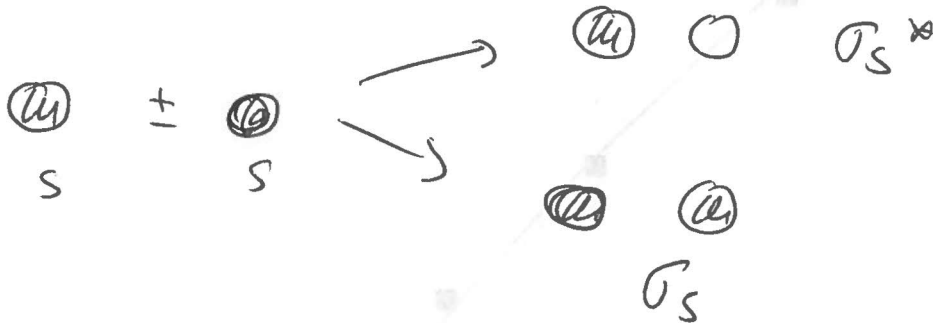
3) $X = Cl$ ou F

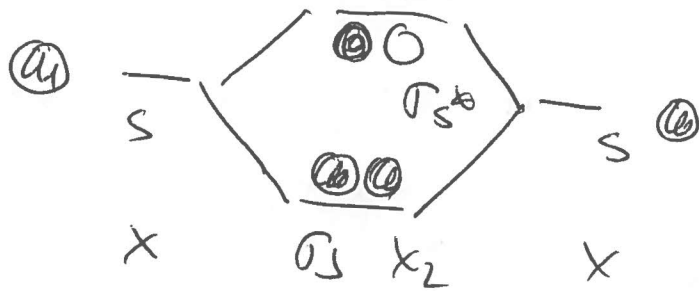
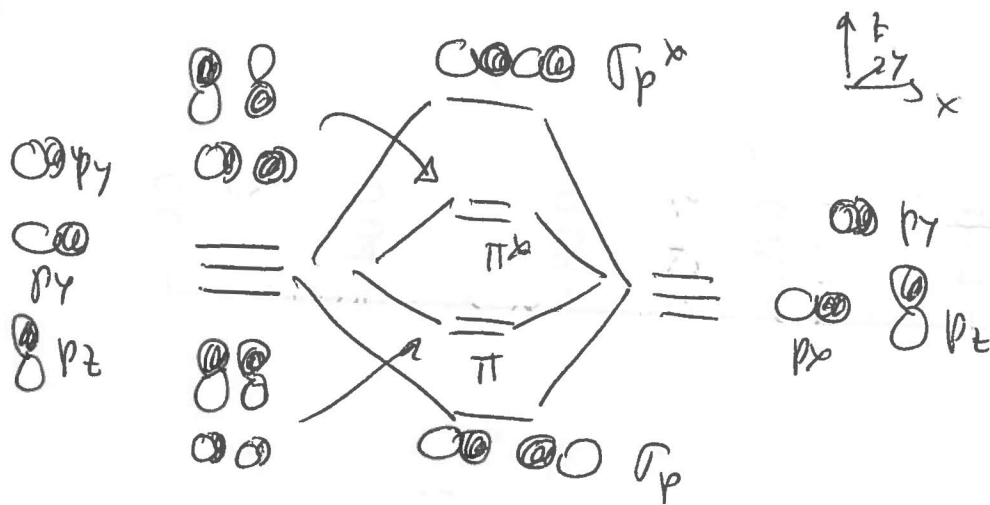
a)

Orbitais dos fragmentos:



Combinações possíveis:





— $E(\sigma_s, \sigma_s^*) < E(\sigma_p, \sigma_p^*, \pi, \pi^*)$ porque σ_s e σ_s^* derivam das orbitais s enquanto as outra derivam das orbitais p e

• $E(s) < E(p)$

— $E(\sigma_p) < E(\pi) \wedge E(\sigma_p^*) > E(\pi^*)$

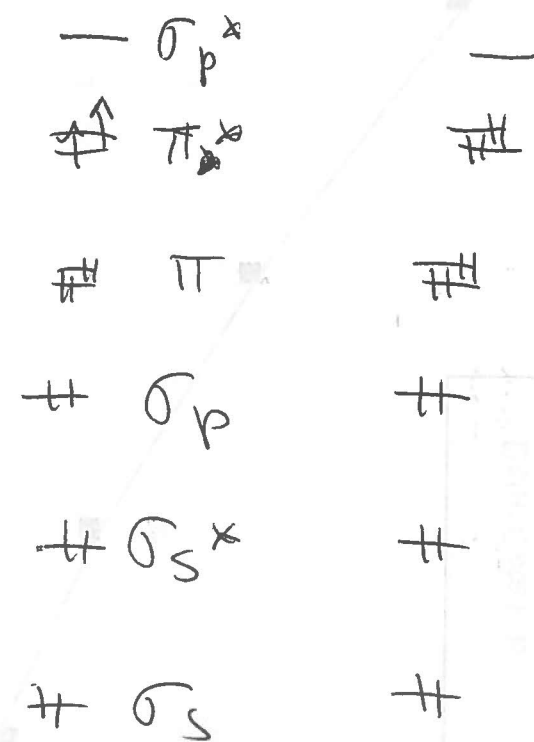
porque nas orbitais σ_p e σ_p^* a coalescência é de topo e portanto
 Duas feições é coalescência lateral que

existe nas orbitais π e π^* .

— π_z e π_y (assim com π_z^* e π_y^*)

não degeneradas porque derivam de orbitais degeneradas (p_y e p_z) e têm o mesmo tipo de nodos e nós.

b)



O_2 $f_2 \rightarrow$ todos os e^- 's emparelhados \rightarrow diamagnético

\uparrow 2 e^- 's desemparelhados \rightarrow paramagnético

$O_2 \rightarrow$ botijca A (paramagnético)

$F_2 \rightarrow$ u B (diamagnético)

c) $r(F) = \frac{d_{F-F}}{2} = \frac{1,42}{2} = 0,71 \text{ \AA}$

$r(O) = \frac{d_{O-O}}{2} = \frac{1,21}{2} = 0,60 \text{ \AA}$

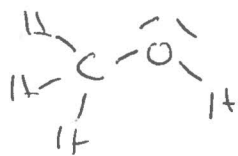
$OL_{F_2} = \frac{8-6}{2} = 1$

$OL_{O_2} = \frac{8-4}{2} = 2$

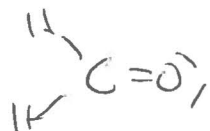
$r(F)$ cifraza se a ligazur simples.

$r(O)$ " " " duplas.

d)



$d_{C-O} = 0,77 + 0,60 = 1,37 \text{ \AA}$



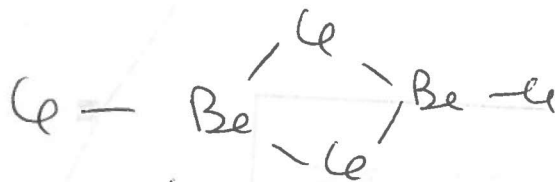
$d_{C-O} = 0,66 + 0,60 = 1,26 \text{ \AA}$

A distâncias de ligazur $C=O$ no formoldeido é wellen esturade $\frac{1}{2}$ do que no metanol, porque o nevo carbenke que dispous par

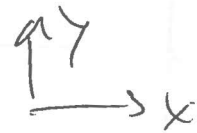
O O é respectante a ligações duplas que é o que existe no formaldeído.

No caso do metanol, a ligação C-O é 2 simples e por isso o erro do raio covalente do O respectante a ligações duplas leva a erro em por defeito na estimativa do comprimento de ligação ($1,31 < 1,41 \text{ \AA}$).

4)



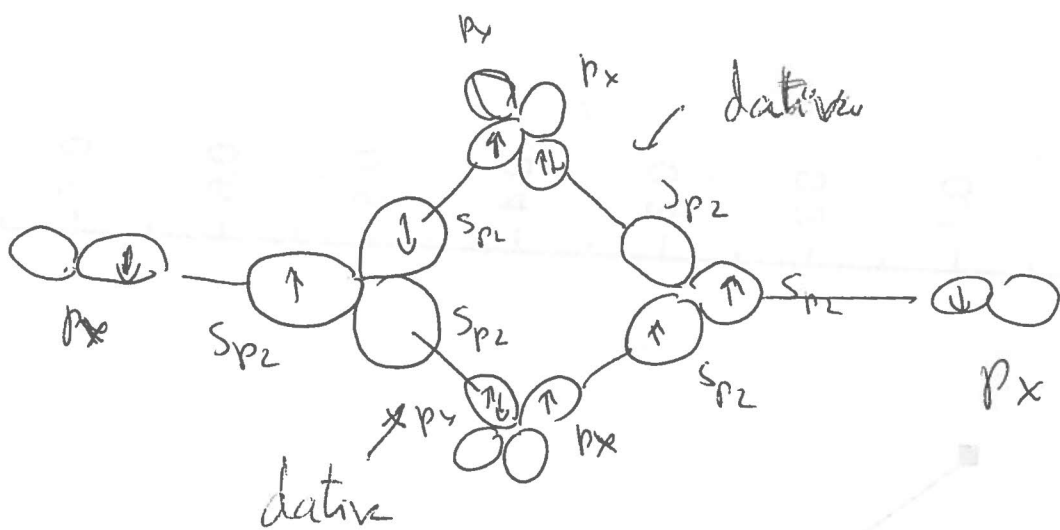
geometria triangular plana $\angle \approx 120^\circ$



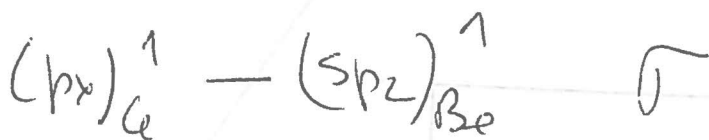
Be \rightarrow híbrido sp^2

Be $(sp^2)^1 (sp^2)^1 (sp^2)^1 p_z^0$

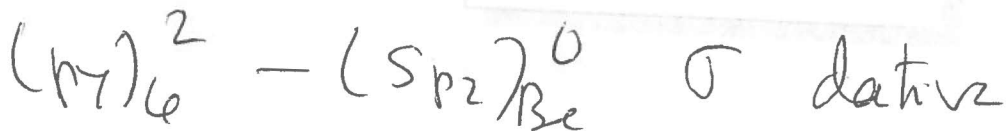
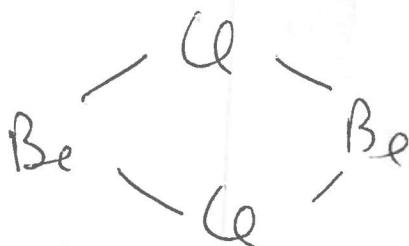
Cl $2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$



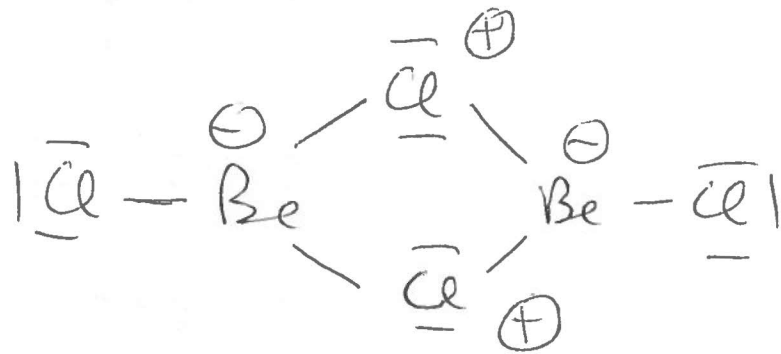
Ligações Terminais:



Ligações em ponte

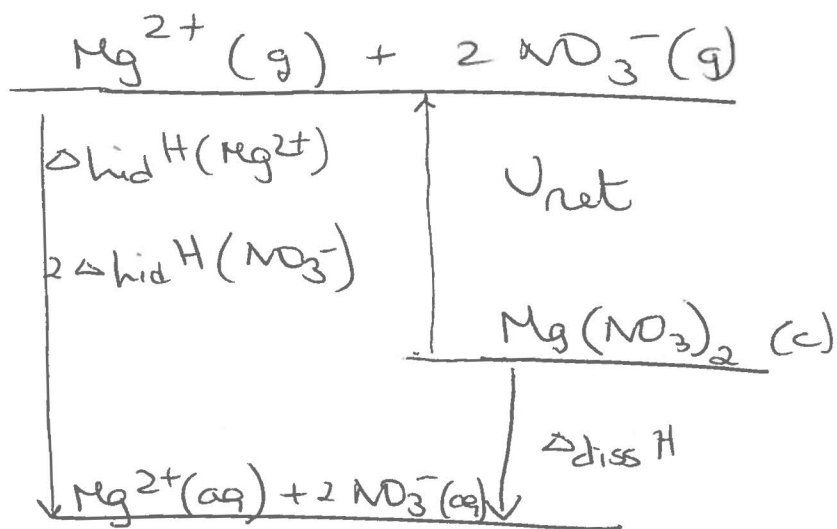


cada Cl ainda tem 3 pares de elétrons
 e cada Be tem o orbital p_z vazio



- ~~8/14/14~~ Be tem um orbital vazio \rightarrow
 \rightarrow Be₂Cl₄ ácido de Lewis

5



$$\begin{aligned}
 U_{\text{net}} &= \Delta_{\text{dissol}} H(\text{Mg}(\text{NO}_3)_2) - \Delta_{\text{hid}} H(\text{Mg}^{2+}) - \\
 &\quad - 2\Delta_{\text{hid}} H(\text{NO}_3^-) \\
 &= -23 + 947 + 2 \times 890 = 2704 \text{ kJ/mol}
 \end{aligned}$$

$$U_{\text{net}} = 2704 = \frac{1,214 \cdot 10^5 \times 3 \times 2 \times 1}{65 + r_{\text{NO}_3^-}} \left(1 - \frac{34,5}{65 + r_a} \right)$$

Desprezando esse 1^o e aproximando o termo referente à repulsão das nuvens eletrônicas:

$$r_{\text{NO}_3^-} = 204,38 \text{ pm}$$

Validade de aproximação:

$$1 - \frac{34,5}{65 + 204,38} = 0,87 \Rightarrow \text{válida}$$

válida
a
aproximação

6

a) $MgBr_2, KCl, KF \rightarrow$ sólidos iônicos

U_{net} aumenta com o cange e diminui com o raio

$U_{net}(MgBr_2)$ é a maior de todas porque os iões têm cange $+2$ e -2 .

$r(Cl^-) > r(F^-) \Rightarrow U_{net}(KCl) < U_{net}(KF)$

logo:

$U_{net}(KCl) < U_{net}(KF) < U_{net}(MgBr_2)$

$PF(KCl) < PF(KF) < PF(MgBr_2)$

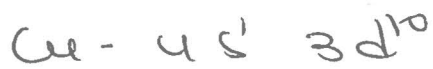
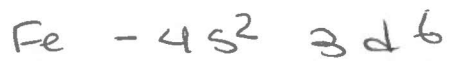
b) diamante \rightarrow sólido covalente
 $Fe, Cu \Rightarrow$ metais

O diamante é um sólido covalente. O tipo de ligação existente é covalente, com uma estrutura tridimensional de carbonos sp_3 e portanto apresenta energia de ligação muito elevada.

Isto justifica o seu ponto de fusão ser o mais elevado.

Nos metais, o que tiver maior $E_{coerção}$ é o que tem maior PF. A $E_{coerção}$ é directamente proporcional ao grau de preenchimento de banda de valência. Quanto maior for o nº de electrões nos níveis ligantes de banda de valência, e menor o número de electrões nos níveis antiligantes, maior será esta energia.

Assim :



Energia Cu < Energia Fe \Rightarrow
 \Rightarrow PF (Cu) > PF (Fe)

Logo:

PF diamante > PF (Fe) > PF (Cu)

c) NH_3 , NF_3 , NCl_3 \rightarrow sólidos moleculares
polares
 NH_3 - tem pontes de hidrogênio
(H ligado a um átomo muito
electronegativo, N)

NH_3 , NF_3 , NCl_3 - forças de Van der Waals.

Além das pontes de hidrogênio, o NH_3 tem
o PF mais elevada.

NF_3 e NCl_3 são suficientemente grandes
para as forças de Keesom e Debye serem
importantes. As forças de London são
as mais importantes.

NCl_3 é uma molécula maior que NF_3

$\alpha(\text{NCl}_3) > \alpha(\text{NF}_3) \Rightarrow$ forças de London de
 NCl_3 maiores do que as de NF_3 .

PF (NCl_3) > PF (NF_3)

PF (NF_3) < PF (NCl_3) < PF (NH_3)

15
7)

a) Isolantes no estado sólido e no estado líquido:

0,5

NH_3 , NF_3 , NCl_3 porque são substâncias moleculares.

C diamante porque é um sólido covalente

b) Isolantes no estado sólido, mas condutores no estado líquido:

0,5

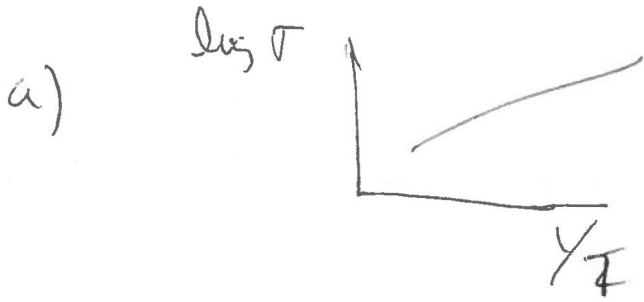
HgBr_2 , KCl e KF porque são sólidos iônicos.

c) Condutores no estado sólido e no estado líquido:

0,5

Fe e Cu porque são metais.

8)



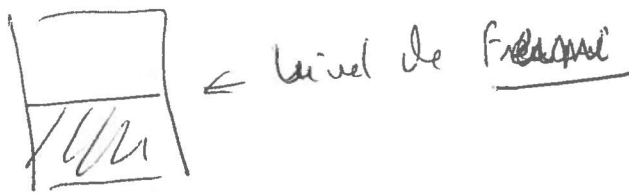
Conductor metálico $\sigma \uparrow$ y $T \downarrow$

ex: Cu



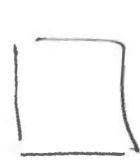
Semiconductor extrínseco,
un ejemplo Ge dopado con As.

b) Conductor metálico



banda incompletamente
procedida

Semicondutor extrínseco



Bande de ^{condução} ~~valência~~ (vazia)



níveis dos impurezas

→ vazias - tipo P

→ cheias " N



Bande de valência (preenchida)