

Química I - 1º teste

1) Para o electrão:

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

$$E_{\text{cin}} = 30 \text{ eV} \\ = 4,806 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$v^2 = 2 \frac{E_{\text{cin}}}{m}$$

$$v = \sqrt{\frac{2 \times 4,806 \cdot 10^{-18}}{9,109 \cdot 10^{-31}}} = 3,248 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$$

Hipótese de De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 3,248 \cdot 10^6}$$

$$\lambda = 2,24 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Para o neutrão:

$$\lambda = \frac{h}{m v}$$

$$v = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{1,675 \cdot 10^{-27} \times 2,24 \times 10^{-10}} \\ = 1,77 \cdot 10^3 \text{ m/s}$$

2)

	C	N	O	F
EI	11,3	14,5	13,6	17,4

os elementos pertencem ao mesmo grupo de TP. De uma modo geral a EI aumenta ao longo de um período porque aumenta a Z_{ef}

$$C - S(2p) = 3 \times 0,35 + 2 \times 0,85 = 2,75$$

$$Z_{ef} = 6 - 2,75 = 3,25$$

$$N - S(2p) = 4 \times 0,35 + 2 \times 0,85 = 3,1$$

$$Z_{ef} = 7 - 3,1 = 3,9$$

$$O - S(2p) = 5 \times 0,35 + 2 \times 0,85 = 3,45$$

$$Z_{ef} = 8 - 3,45 = 4,55$$

$$F - S(2p) = 6 \times 0,35 + 1 \times 0,85 = 3,8$$

$$Z_{ef} = 9 - 3,8 = 5,2$$

De um elemento para o outro o Z aumenta de 1 unidade mas S aumenta apenas 0,35 (porque o e^- mais exterior está no mesmo grupo de Slater e portanto contribui com 0,35). Assim, Z_{ef} vai aumentando de 0,65 quando se passa de um elemento para outro no 2º período

2
A variação de E_I para N e para F é justificável nos termos expostos.

No entanto o N apresenta uma maior E_I , do que seria de esperar. Tal deve-se a uma conf. electrónica ($1s^2 2s^2 2p^3$) em que as orbitais p estão todas semi-preenchidas. Tal situação é de grande estabilidade, daí que arrancar um e^- do N, require mais energia (E_I) que o esperado.

Por outro lado o O apresenta uma E_I , menor que o esperado.

O $1s$ O⁺ tem uma conf. com as orbitais p todas semi-preenchidas, ao qual também está associada uma estabilidade especial. Este efeito sobrepõe-se ao efeito do aumento de Z_{ef} que se fez sentir no período e é responsável pela diminuição do E_I de N para O.
Concluindo: - N tem maior E_I que esperado.

- O tem menor E_I que esperado.

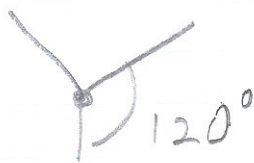
3 - a)



T.R.P.E.G.V.

$$\begin{aligned} \text{C} &= 4e^- \\ 3\text{O} &= 3 \times 2e^- && 3 \text{ pares 'duplos'} \\ \text{Carga} &= +2e^- \\ \hline \text{TOTAL} &= 12e^- \quad \underline{\underline{L2}} \\ &&& 6 \text{ pares} \Rightarrow \underline{\underline{3}} \\ &&& \text{pares pares 'duplos'} \end{aligned}$$

AX_3

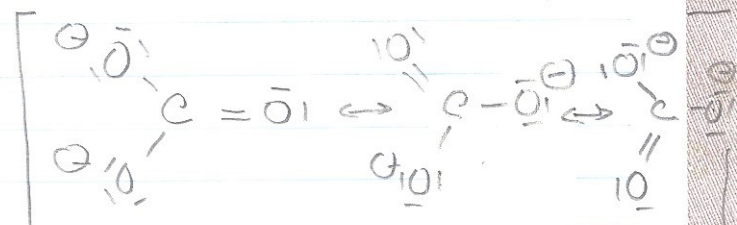


- Distrib. espacial 3 pares $e^- \rightarrow$ triang. plano
- Geom. em torno de C \rightarrow triang. plano

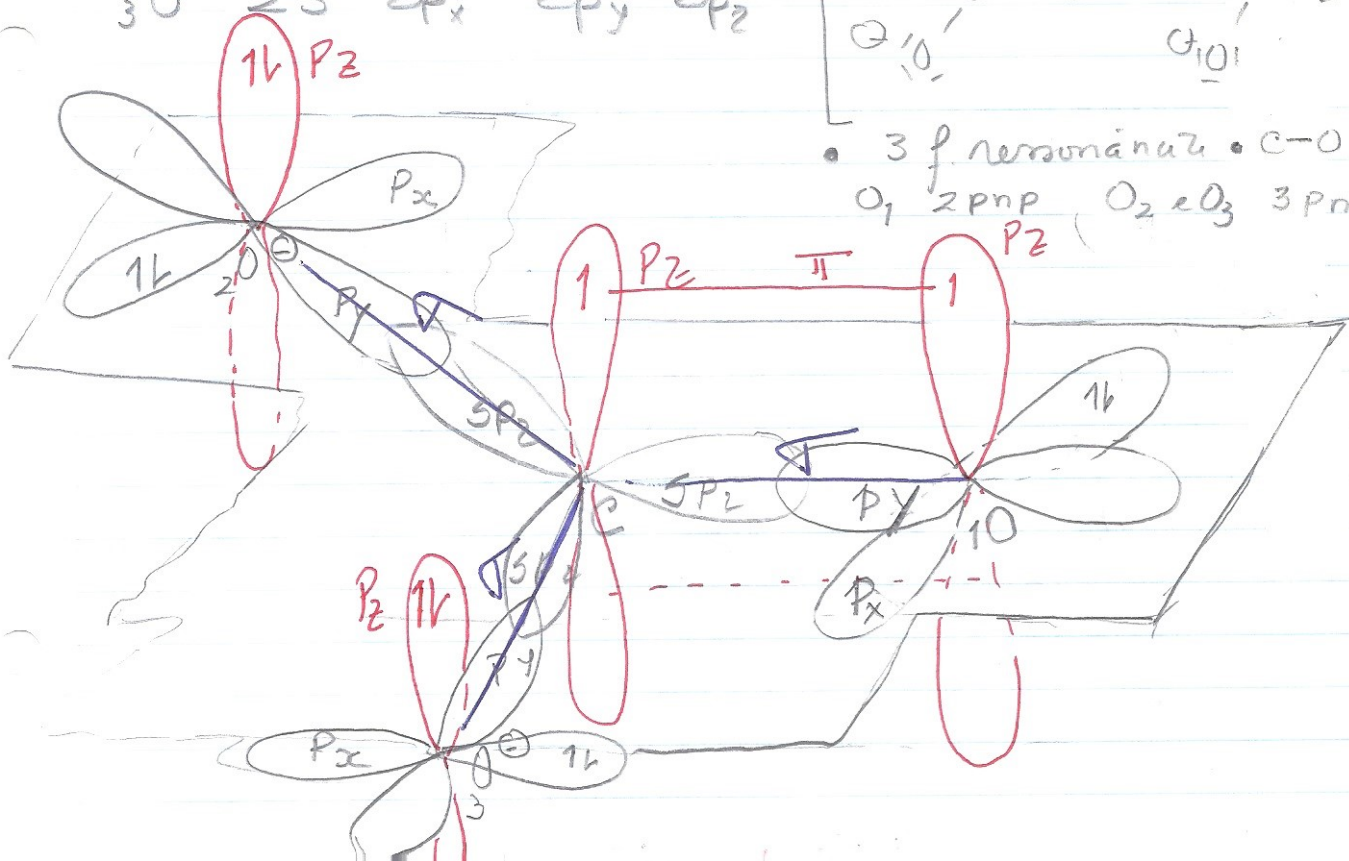
b) T.E.V. C $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$

C hibrida em sp^2 C $(sp^2)^1 (sp^2)^1 (sp^2)^1 2p_z^1$

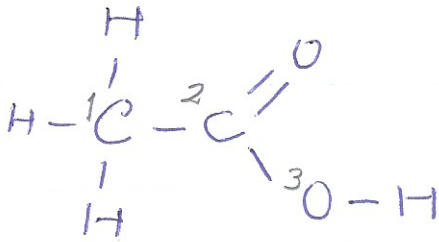
1O $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
 2O $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^2$
 3O $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^2$



- 3 f. ressonância • C-O lig $\sigma + \pi$
 O_1 2 pnp, O_2 e O_3 3 pnp

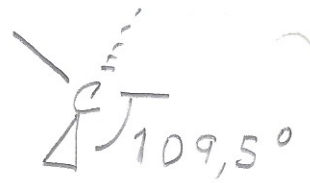


3 a)



$$\begin{array}{r} {}^1\text{C} = 4 \\ 3\text{H} = 3 \times 1\text{e}^- \\ {}^2\text{C} = 1\text{e}^- \\ \hline 8\text{e}^- \end{array}$$

4 pares AX_4



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

- Distrib. espacial par e^- tetraédrica
- Geometria em torno C tetraédrica

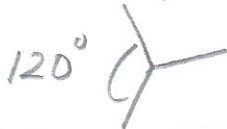
$$\begin{array}{r} {}^2\text{C} = 4\text{e}^- \\ {}^1\text{C} = 1\text{e}^- \\ \text{O} = 2\text{e}^- \\ {}^3\text{O} = 1\text{e}^- \\ \hline 8\text{e}^- \end{array}$$

4 pares = 1 'duplo'

+ 2 'simples' (= 3)

AX_3

- Distrib. espacial 3 par e^- triangular plano
- Geometria em torno de C triangular plano



$$\begin{array}{r} {}^3\text{O} = 6\text{e}^- \\ \text{H} = 1\text{e}^- \\ {}^2\text{C} = 1\text{e}^- \\ \hline 8\text{e}^- \end{array}$$

AX_4

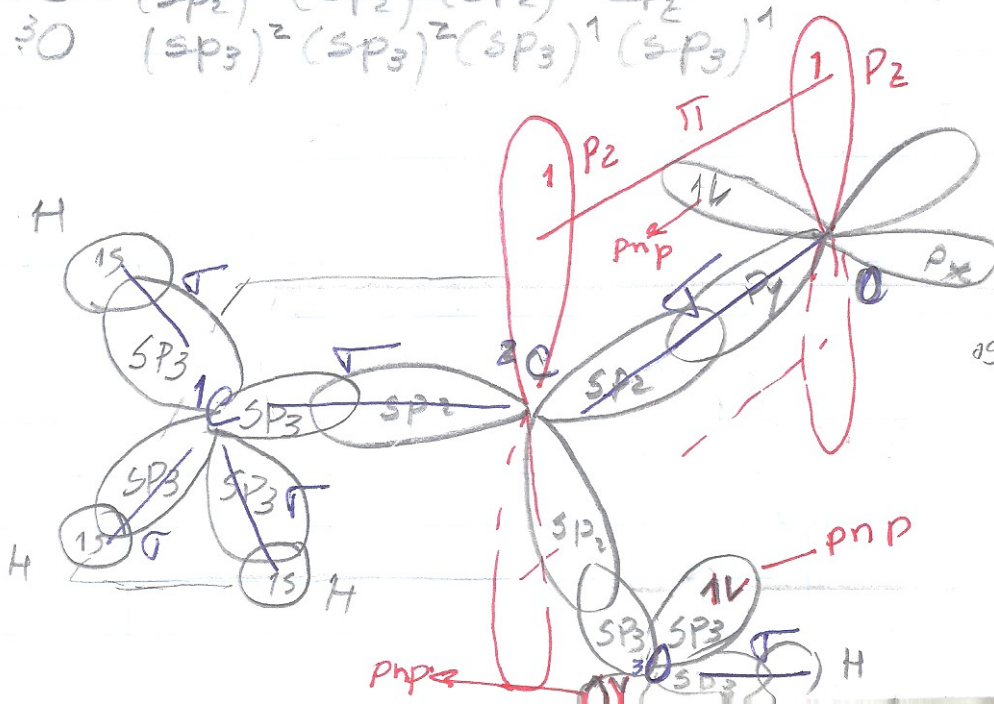
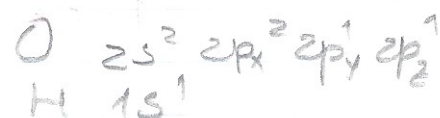
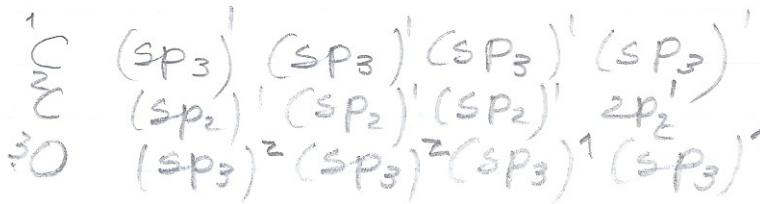
4 pares

- Distrib. espacial 4 par e^- tetraédrica

- Geometria em torno de O tetraédrica



b) TEV

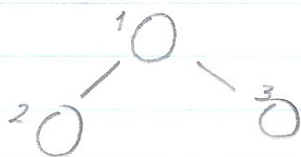


as O tem 2 pnp cada

3

 O_3

a) TRPECV



$$I_0 = 6 \text{ e}^-$$

$${}^2_0\text{O} = 2e^- \text{ per duplo}$$

$30 = 2e$ par duplo

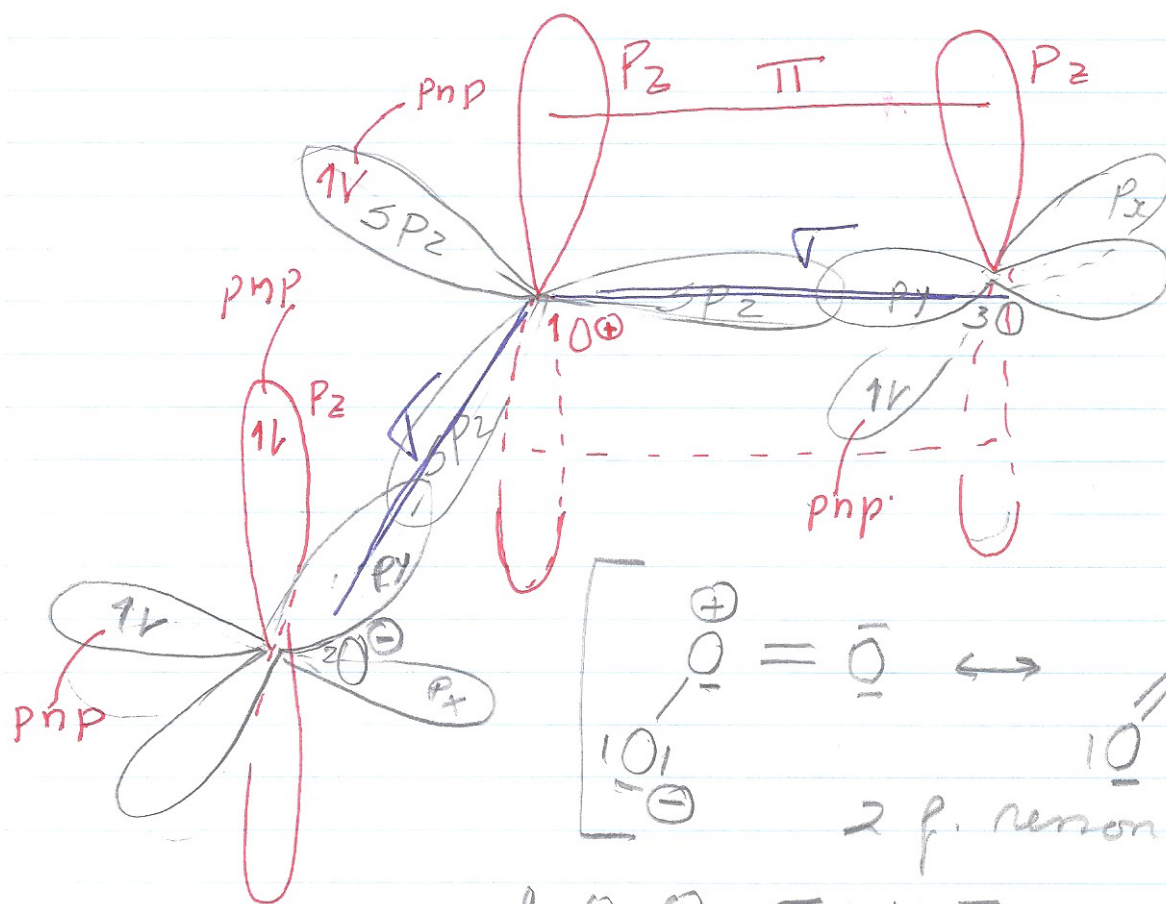
$10 \in \mathbb{Z}$



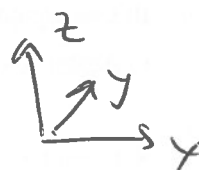
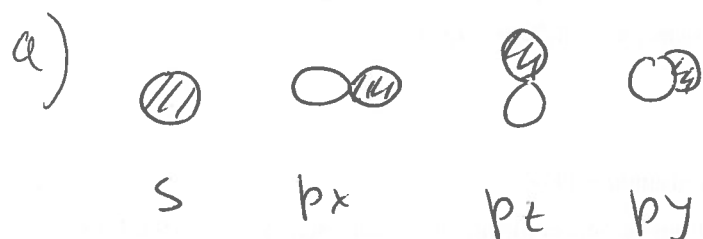
5 paires; 2 "duplos" + 1 simples AX_3

- Distrib. espacial pares e \rightarrow triang. plana
- Geometria molecular \rightarrow Angular

b) TEV. $1^0 \oplus 2^1 (sp_2) (sp_2) 1^1 (sp_2) 2^1 p_z$ $3^0 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
 $2^0 \ominus 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^2$

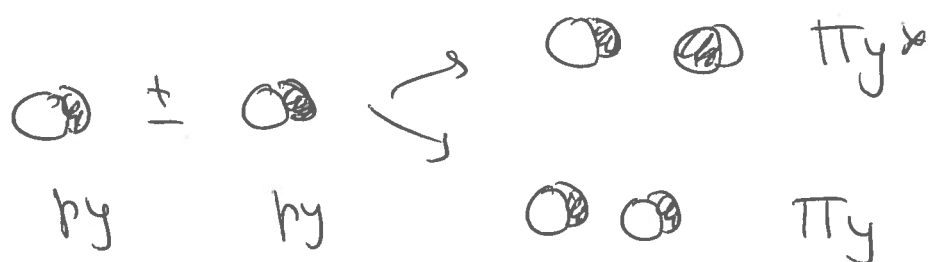
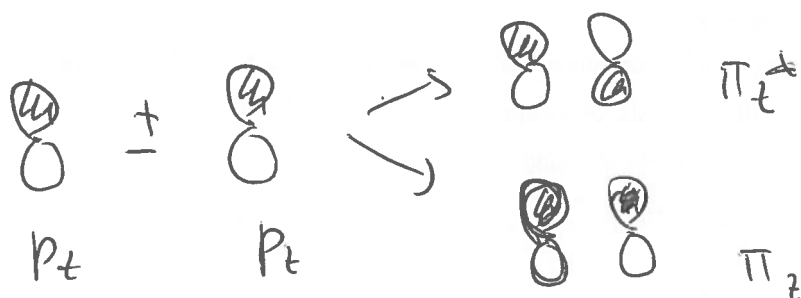
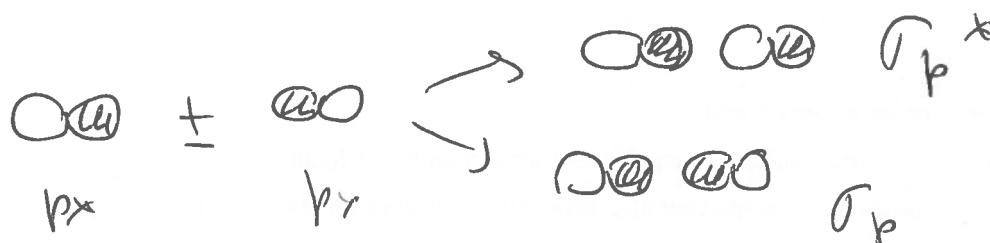
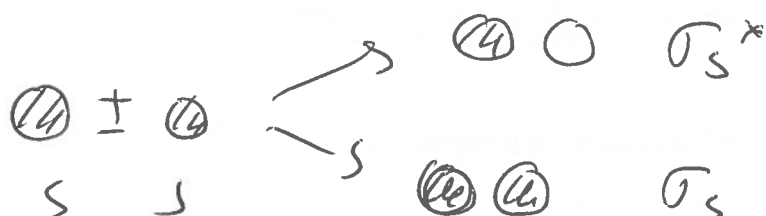

$$\lg 0-0 \quad \sigma + \frac{1}{2} \pi$$

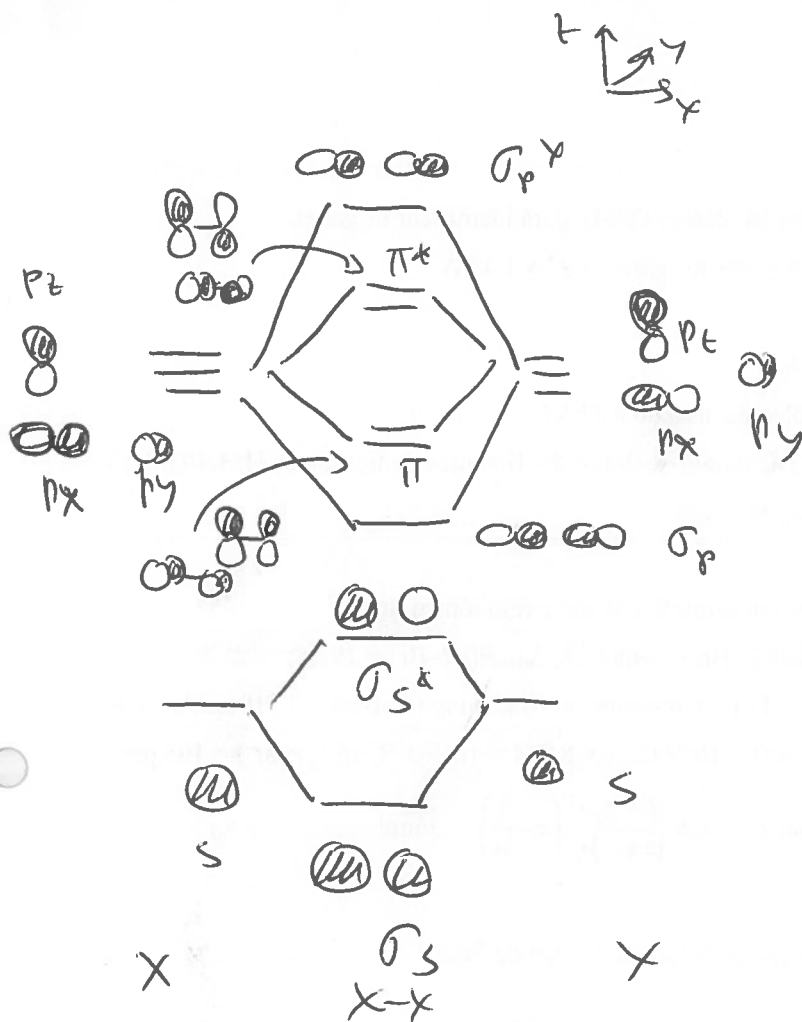
4) Orbitais de valência de X:



Quer para $X=0$, quer para $X=F$ não é
preciso considerar ligação s-p

● Combinações possíveis:





σ_p^*	—	—	σ_p^*
π^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	π^*
π	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	π
σ_p	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	σ_p
σ_s^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	σ_s^*
σ_s	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	σ_s
	O_2		F_2

— Orbitais antiligantes têm energia superior \Rightarrow ligantes correspondentes.

— $E(\sigma_s, \sigma_s^*) < E(\sigma_p, \sigma_p^*, \pi, \pi^*)$ porque $E(s) < E(p)$

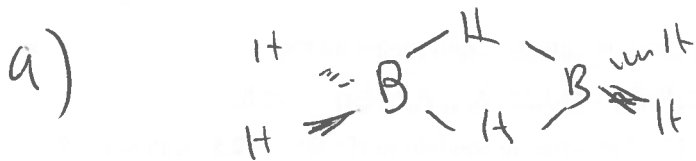
— $E(\sigma_p) < E(\pi) \wedge E(\sigma_p^*) > E(\pi^*)$ porque a sobreposição é maior.

b) B $\rightarrow F_2$ (diamagnético)
A $\rightarrow O_2$ (paramagnético)

$$c) \quad OL_{O_2} = \frac{8-4}{2} = 2 \rightarrow \text{maior componente de ligas: } 1, 21 \text{ \AA}$$

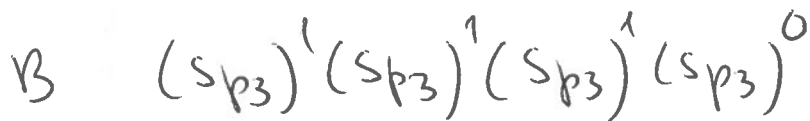
$$OL_{H_2} = \frac{8-6}{2} = 1 \rightarrow \text{maior componente de ligas: } 1, 42 \text{ \AA}$$

5)



geometria em torno do B: tetraédrica \Rightarrow

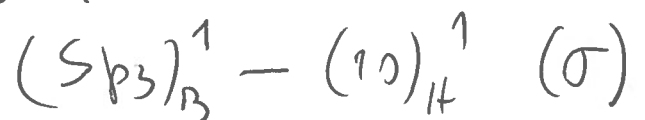
=s hibridiza sp^3



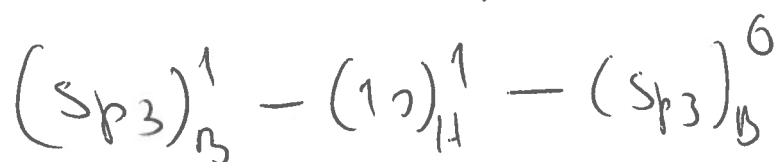
H (s)



ligas B-H terminais:



ligas B-H-B em ponte



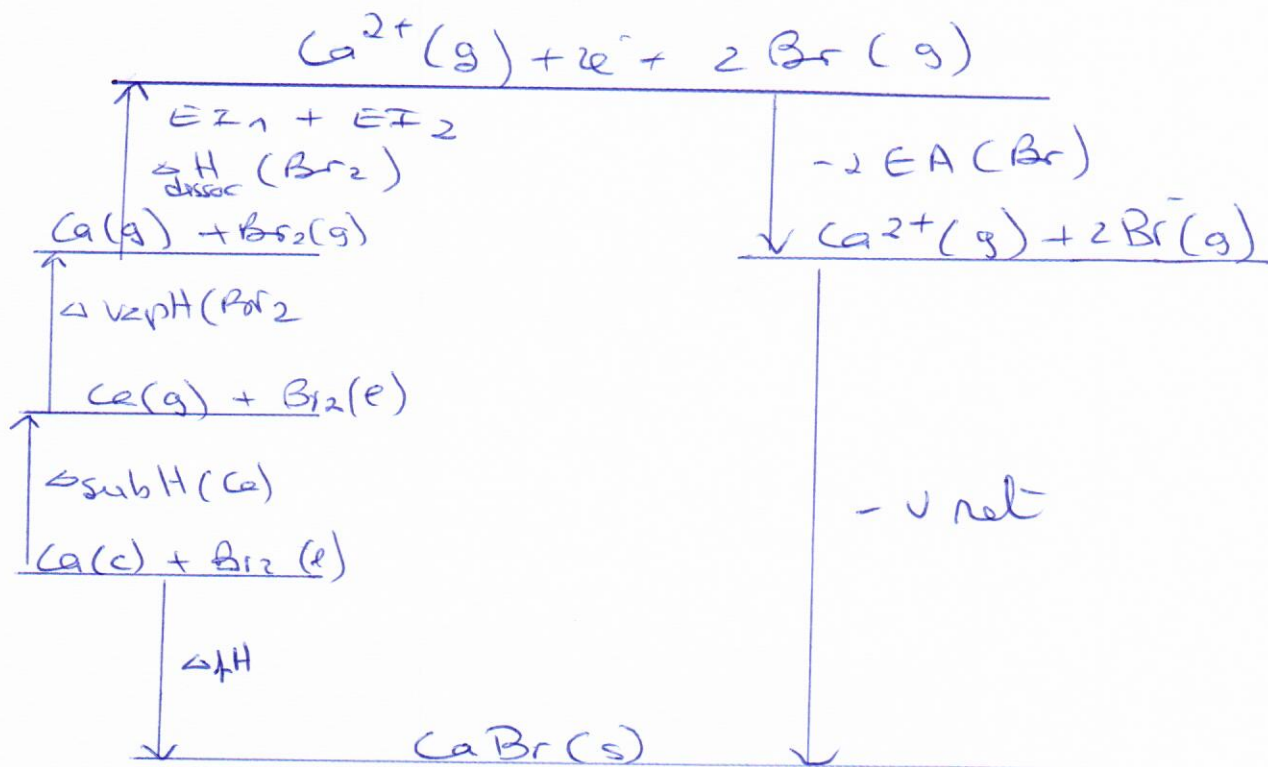
→ ligações deficientes em electrões:
2 e^- 's para 2 ligações.

b) ligação B-H terminais: $d = 1,19 \text{ \AA}$
(mais fortes)

ligação B-H-B em ponte: $d = 1,33 \text{ \AA}$
(mais fracas: deficientes em e^- 's)

6)

3



$$\Delta_f H^\circ = \Delta_{\text{sub}}H + \Delta_{\text{vap}}H + E_{I1} + E_{I2} - 2EA - U_{\text{ret}} + \Delta_{\text{dissoc}}H$$

$$U_{\text{ret}} = \Delta_{\text{sub}}H + \Delta_{\text{vap}}H + E_{I1} + E_{I2} - 2EA - U_{\text{ret}} + \Delta_{\text{dissoc}}H$$

$$= 2170,96 \text{ kJ/mol}$$

$$U_{\text{ret}} = \frac{N A Z_1 Z_2 e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

$$[\text{Ca}^{2+}] \Rightarrow n = 9$$

$$[\text{Br}^-] \Rightarrow n = 10$$

$$\left. \begin{array}{l} n = 9 \\ n = 10 \end{array} \right\} \text{média } n = 9,5$$

$$r_0 = 2,88 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$R(\text{Br}^-) = 195 \text{ pm} = 1,95 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$r_0 = r(\text{Br}^-) + r(\text{Ca}^{2+})$$

$$r(\text{Ca}^{2+}) = 2,88 \cdot 10^{-10} - 1,95 \cdot 10^{-10} = 0,93 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$= 93 \text{ pm}$$

$$= 0,93 \text{ \AA}$$

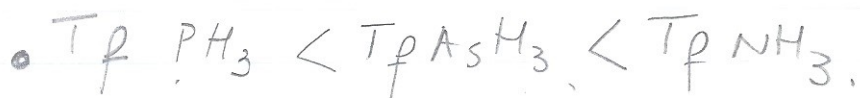
7. a) C diamante sólido covalente
Cu e Fe metais

Nos metais a T_f depende da Energia Coesa, a qual depende do grau de preenchimento da banda d. O Cu e o Fe têm todos os níveis ligantes preenchidos, mas o Cu tem mais elétrons nos níveis antiligantes, logo terá menor energia de coesão e portanto menor T_f que o Fe.

O diamante apresenta o maior T_f pois é um sólido covalente, com uma rede tridimensional de ligações covalentes entre os vários átomos de C (sp^3) e o que apresenta maior T_f .
Logo:



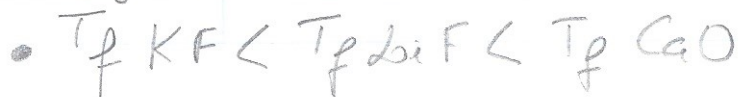
b) NH_3 , PH_3 e AsH_3 , subst. moleculares. Todas apresentam Forças de Keesom, Debye e London. Só o NH_3 apresenta pontes de H. Será o que tem maior ponto de fusão. O AsH_3 apresenta maiores forças de London que o PH_3 pois tem uma maior nuvem eletrônica e portanto uma maior polarizabilidade α . Tanto o PH_3 como AsH_3 têm f. Keesom e Debye desprezíveis pois têm + 15 e.



c) KF , CaO e LiF sólidos iônicos. $T_{\text{fusão}}$ é tanto maior quanto maior for a U_{ret} . A U_{ret} depende de: $U_{\text{ret}} \propto \frac{Z_1 Z_2}{r}$. CaO é o que tem maior $Z_1 Z_2 = 4$

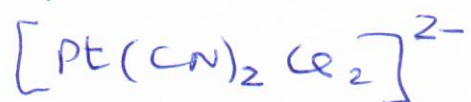
logo terá maior T_f . O KF tem um r maior que o LiF , pois o íon K^+ tem um maior raio iônico que o Li^+ . Logo KF terá uma menor U_{ret} , logo uma menor T_f .

Logo:



8 a)

composto de coordenação



elemento central - Pt

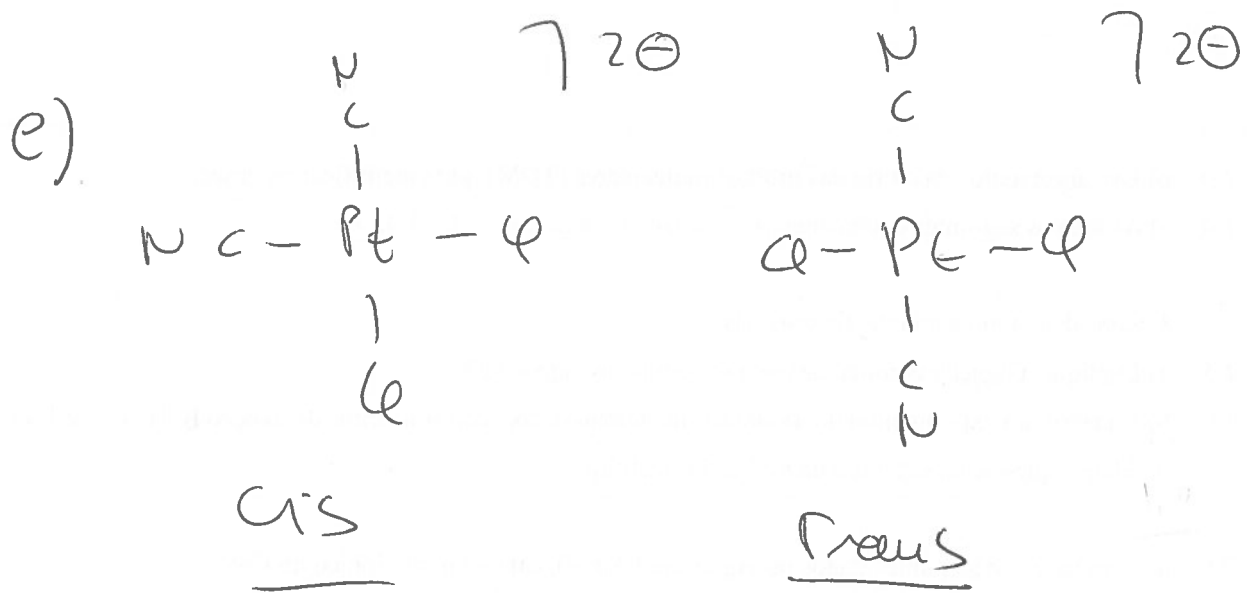
ligandos. CN^- ; Cl^-

b)

e.o. $\rightarrow Pt^{2+}$

conf. eletrônica $\rightarrow d^8$

NC = 4



d) desdobramento dos orbitais d do metal

