

NHBQ007-22- Fundamentos de Química

Lista de Exercícios 2

1. Defina o que é um sólido e quais são suas principais características físicas. Em um sólido cristalino, o que é uma célula unitária? Descreva a importância dela na estrutura dos sólidos.
2. O que são alótropos? Dê exemplos e explique como eles podem apresentar diferenças em suas propriedades. O que são polimorfos? Explique qual a diferença entre polimorfos e alótropos e forneça exemplos.
3. Defina qual é o conceito de empacotamento de átomos em uma estrutura cristalina, e como isso altera as propriedades dos materiais. Como este empacotamento resulta em diferentes estruturas cúbicas? Descreva os tipos de estruturas cúbicas. Desenhe estas estruturas e estime a quantidade de átomos existentes no interior da célula unitária de cada estrutura.
4. Como é calculada a eficiência de empacotamento para as estruturas cúbicas simples (SC), cúbica de corpo centrado (BCC) e cúbica de face centrada (FCC). Para cada uma dessas estruturas, calcule a eficiência de empacotamento, descrevendo o processo adotado para o cálculo. Qual a relevância da eficiência de empacotamento?
5. Explique conceitualmente a teoria de ligação de valência (TLV). Discuta como esta teoria explica a formação de ligações covalentes em termos dos orbitais atômicos.
6. Quais as diferenças entre as ligações sigma (σ) e pi (π) na TLV? Dê exemplos de moléculas que contenham essas ligações e descreva como ocorre a sobreposição dos orbitais em cada tipo de ligação. Faça a representação com diagramas da sobreposição dos orbitais envolvidos.
7. Explique o que se entende por hibridização de orbitais segundo a TLV. Por que a TLV utiliza orbitais híbridos ao invés de conjuntos de orbitais atômicos?
8. Sugira uma hibridização apropriada para o átomo central de cada espécie:
 - a. SiF_4
 - b. $[\text{NO}_2]^+$
 - c. NF_3
 - d. F_2O
 - e. $[\text{H}_3\text{O}]^+$

f. AlH_3

g. CS_2

h. BF_3

9. Se os orbitais atômicos de valência de um átomo possuem hibridização sp , quantos orbitais p não hibridizados permanecem no nível de valência? Quantas ligações π o átomo pode formar? Quantas ligações σ e π geralmente fazem parte de uma ligação tripla? De que modo ligações múltiplas trazem rigidez às moléculas?
10. Por que o ângulo de ligação da água é menor que o ângulo de ligação em NH_3 ? Qual a hibridização do O e do N nestes casos?