

Departamento de Química Inorgânica  
Química Geral I (IQG-114) Prof. Roberto Faria  
1ª Lista de Exercícios - Teoria Atômica e Classificação Periódica

ATENÇÃO: Nas provas, não será permitido o uso de calculadora gráfica, somente calculadora com mostrador apenas numérico; também não será permitido o uso de *tablet*, celular e Tabela Periódica.

- 1) Defina e descreva o que é o método científico, explicando também, o mais claramente possível, a distinção entre lei, hipótese e teoria.
- 2) Usando a Teoria Atômica de Bohr, descreva o que acontece quando um átomo absorve luz.
- 3) Do que consiste o espectro de emissão de um elemento? Como esse espectro é explicado pela Teoria Atômica de Bohr?
- 4) Considere todas as raias conhecidas para o hidrogênio (use a lista de linhas indicadas como de baixa resolução na Homepage). a) Aplicando a equação de Rydberg, calcule o valor de  $\lambda$  para cada transição eletrônica, permitindo fazer a atribuição de cada linha espectral; utilize o valor teórico de  $1,096\,775\,8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$  para a constante de Rydberg ( $R_H^\lambda$ ); b) Uma vez feitas as atribuições, calcule você mesmo a constante de Rydberg,  $R_H^\lambda$ , para cada uma das séries do espectro de emissão do hidrogênio pelo coeficiente angular do gráfico  $1/\lambda$  versus  $((1/n_1^2) - (1/n_2^2))$ ; c) Aplicando a equação de Rydberg, calcule a energia de ionização do H em  $\text{cm}^{-1}$  (valor experimental  $1,096\,787\,717 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ).
- 5) Considere as raias conhecidas para o íon  $\text{Li}^{2+}$  e as respectivas atribuições segundo o Modelo Atômico de Bohr (veja na Homepage). a) Aplicando a Eq. de Rydberg, calcule a constante de Rydberg, ( $R_{\text{Li}}^\lambda$ ) para cada uma das séries que equivalem às de Lyman e Balmer no átomo de H pelo coeficiente angular do gráfico  $1/\lambda$  versus  $((1/n_1^2) - (1/n_2^2))$ ; b) Considerando a expressão teórica, obtida por Bohr,  $R^\lambda = \mu Z^2 e^4 / (8\epsilon_0^2 h^3 c)$ , onde  $\mu$  é a massa reduzida do átomo,  $Z$  é o número atômico,  $e$  é a carga do elétron,  $\epsilon_0$  é a permissividade do vácuo,  $h$  é a constante de Planck e  $c$  é a velocidade da luz), explique o resultado obtido para  $R_{\text{Li}}/R_{\text{H}}$ . (Massas: próton =  $1,672\,621\,898 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; nêutron =  $1,674\,927\,471 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; elétron =  $9,109\,383\,56 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ;  ${}^6_3\text{Li}$  =  $6,015\,122\,795 \text{ g mol}^{-1}$ ;  $N_A$  =  $6,022\,140\,857 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ).
- 6) Considere as linhas do espectro de emissão do deutério para a série de Lyman (veja na Homepage): a) calcule a constante de Rydberg para esta série pelo coeficiente angular do gráfico  $1/\lambda$  versus  $((1/n_1^2) - (1/n_2^2))$ ; b) utilizando os valores de  $R_{\text{H}}^\lambda$  obtidos para o hidrogênio anteriormente, calcule a razão  $R_{\text{H}}/R_{\text{D}}$ ; c) Explique porque as linhas para o deutério são diferentes das linhas do hidrogênio; (Massas: próton =  $1,672\,621\,777 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; nêutron =  $1,674\,927\,351 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; elétron =  $9,109\,382\,91 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ; dêuteron,  $\text{D}^+$  =  $3,34358348 \times 10^{-27} \text{ kg}$ )
- 7) Preveja se as linhas espectrais do deutério são deslocadas para o vermelho ou para o azul, em relação às linhas espectrais do H? Justifique sua resposta. Verifique se a sua previsão concorda com os valores experimentais. (Massas: próton =  $1,672\,621\,777 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; nêutron =  $1,674\,927\,351 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ; elétron =  $9,109\,382\,91 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ; dêuteron,  $\text{D}^+$  =  $3,34358348 \times 10^{-27} \text{ kg}$ )
- 8) O que é uma figura de difração? Qual deve ser a abertura de uma fenda para que um elétron, a uma velocidade de 10 m/s, possa difratar por essa fenda?
- 9) Deduza a Eq. de De Broglie a partir das Eqs. de Einstein e de Planck. Descreva o experimento que prova a natureza ondulatória do elétron.

10) Dê a configuração eletrônica dos elementos de nº atômico 19 ao 54 e indique quais desses elementos são paramagnéticos. Explique a razão de ser das configurações eletrônicas tidas como exceções, ou seja, aquelas que, com exceção dos metais alcalinos, apresentam um ou nenhum elétron no orbital s.

11) Utilizando o diagrama das energias dos orbitais 4d e 5s para elétrons com spin  $\alpha$  e  $\beta$  (veja Figura ao final desta lista de exercícios, adaptada do artigo de Rich, R. L. & Suter, R. W. *J. Chem. Educ.* **1988**, 65(8), 702), dê a configuração eletrônica dos elementos de número atômico 39(Y) até 48(Cd).

12) Explique, com base nos diagramas de Rich e Suter, porque os elementos do primeiro período de transição perdem os dois elétrons 4s ao formarem íons  $M^{2+}$ .

13) A partir das expressões matemáticas das funções de onda dos orbitais atômicos, dadas a seguir, esboce o gráfico de cada uma dessas funções contra distância ao núcleo do átomo ao longo dos eixos (a) z; (b) x; (c) y (Obs. 1: considere sempre as direções positivas e negativas dos eixos; Obs. 2: No caso dos orbitais s, mostre também o formato do orbital do ponto de vista de um diagrama de contorno que englobe, por exemplo, 99% da onda estacionária, indicando as regiões de fase positiva e negativa.):

$$\psi_{1,0,0} = \psi(1s) = A_0 \exp(-r/a_0);$$

$$\psi_{2,0,0} = \psi(2s) = A_1 (2 - r/a_0) \exp(-r/2a_0);$$

$$\psi_{3,0,0} = \psi(3s) = A_2 (27 - 18(r/a_0) + 2(r/a_0)^2) \exp(-r/3a_0);$$

$$\psi_{2,1,0} = \psi(2p_z) = A_3 (r/a_0) \exp(-r/2a_0) \cos \theta;$$

$$\psi_{2,1,\pm 1} = \psi(2p_x) = A_4 (r/a_0) \exp(-r/2a_0) \sin \theta \cos \phi;$$

$$\psi_{3,1,0} = \psi(3p_z) = A_6 (6 - r/a_0)(r/a_0) \exp(-r/3a_0) \cos \theta;$$

$$\psi_{3,1,\pm 1} = \psi(3p_x) = A_6 (6 - r/a_0)(r/a_0) \exp(-r/3a_0) \sin \theta \cos \phi;$$

$$\psi_{3,2,0} = \psi(3d_{z^2}) = A_7 (r/a_0)^2 (3\cos^2\theta - 1) \exp(-r/3a_0);$$

$$\psi_{3,2,\pm 1} = \psi(3d_{xz}) = A_7 (r/a_0)^2 \exp(-r/3a_0) \sin \theta \cos \theta \cos \phi;$$

$$\psi_{3,2,\pm 2} = \psi(3d_{x^2-y^2}) = A_7 (r/a_0)^2 \exp(-r/3a_0) \sin^2 \theta \cos 2\phi;$$

onde  $a_0$  é o raio de Bohr e  $A_n$  é uma constante.

14) Faça um esboço do gráfico de raio atômico contra nº atômico para os elementos de número atômico 3 ao 18 e explique a razão de ser do formato dessas curvas.

15) Faça um esboço do gráfico do primeiro potencial de ionização, P.I., contra nº atômico para os elementos de número atômico 3 ao 18 e explique: a) porque o potencial de ionização do B é menor que o do Be; b) porque o P.I. do O é menor do que o do N; c) porque o P.I. do C é maior que o do B; d) porque o P.I. do Na é menor do que o do Li.

16) Considere os seguintes valores para a primeira energia de ionização, em  $\text{kJ mol}^{-1}$ , para os elementos dos grupos 15 e 16:  ${}^7\text{N}(1402,331)$ ,  ${}^8\text{O}(1313,942)$ ,  ${}^{15}\text{P}(1011,811)$ ,  ${}^{16}\text{S}(999,5886)$ ,  ${}^{33}\text{As}(947,02)$ ,  ${}^{34}\text{Se}(940,961)$ ,  ${}^{51}\text{Sb}(834)$ ,  ${}^{52}\text{Te}(869,29)$ ,  ${}^{83}\text{Bi}(702,94)$ ,  ${}^{84}\text{Po}(812,089)$ . Explique a inversão da sequência a seguir, que ocorre a partir do par Te/Sb:  $\text{O} < \text{N}$ ;  $\text{S} < \text{P}$ ;  $\text{Se} < \text{As}$ ;  $\text{Te} > \text{Sb}$ ;  $\text{Po} > \text{Bi}$ , utilizando o conceito de separação dos orbitais atômicos em dois níveis de energia,  $\alpha$  e  $\beta$ , dependendo do spin do elétron.

17) Defina afinidade ao elétron. Para cada par a seguir, indique qual espécie tem a maior afinidade ao elétron explicando porque: a) S ou Cl; b) S ou  $\text{S}^-$ ; c) O ou S.

18) Considerando a afinidade ao elétron, A.E., de um elemento químico igual ao  $-\Delta H$  do processo de adição de um elétron a esse elemento, em fase gasosa, explique porque: a) A.E. do Cl é maior do que a do S; b) A.E. do Cl é maior do que a do F; c) A.E. do Cl é maior do que a do Br; d) A.E. do N é menor do que a do C.

19) Considerando a afinidade ao elétron, A.E., de um elemento químico igual ao  $-\Delta H$  do processo de adição de um elétron a esse elemento, em fase gasosa, explique sequência  $N < P < As < Sb > Bi$ , utilizando o conceito de separação dos orbitais atômicos em dois níveis de energia,  $\alpha$  e  $\beta$ , dependendo do spin do elétron. Valores de  $\Delta H$  em eV: N(0,07), P(-0,74651), As(-0,8140), Sb(-1,047418), Bi(-0,942).

20) Considere os valores para a primeira energia de ionização, em kJ/mol, para os elementos mais pesados (quinto e sexto períodos da Tabela Periódica) dos grupos 13 ao 17:  ${}_{49}\text{In}(558,299)$ ,  ${}_{81}\text{Tl}(589,360)$ ,  ${}_{50}\text{Sn}(708,570)$ ,  ${}_{82}\text{Pb}(715,60)$ ,  ${}_{51}\text{Sb}(834)$ ,  ${}_{83}\text{Bi}(702,94)$ ,  ${}_{52}\text{Te}(869,29)$ ,  ${}_{84}\text{Po}(812,089)$ ,  ${}_{53}\text{I}(1008,393)$ ,  ${}_{85}\text{At}(890)$ . a) Explique porque para os grupos 13 e 14 o elemento mais pesado tem energia de ionização maior; b) Explique porque para os grupos 15 a 17 o elemento mais pesado tem energia de ionização menor.

Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd

