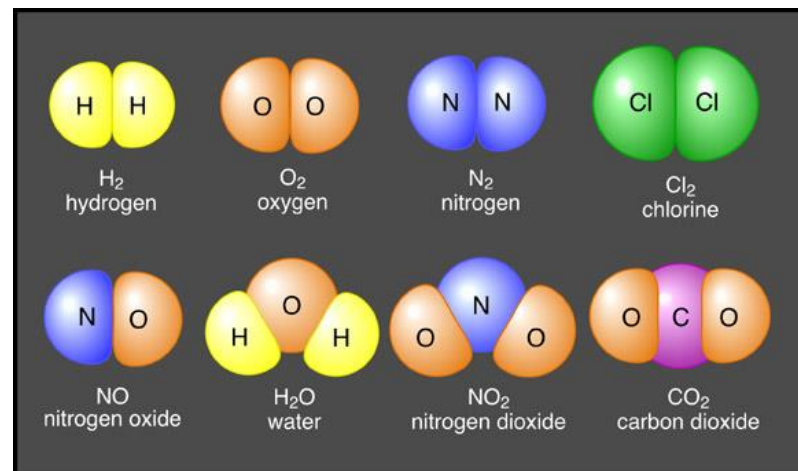
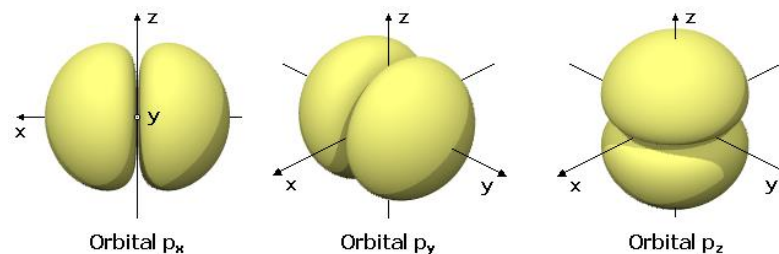


Aula 1 –

Revisão - Tabela Periódica

Transformações Químicas



Conteúdo da aula:

A Tabela Periódica

Propriedades Periódicas:

(raios atômicos, raios iônicos, potenciais de ionização, eletronegatividade, afinidade eletrônica)

Estrutura molecular e ligação química

Transformações Químicas

Verificação da ocorrência de uma reação química

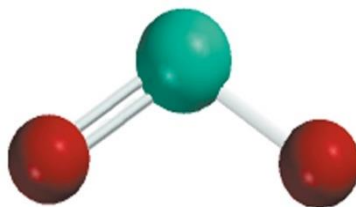
Equações químicas

Aspectos qualitativos de reações químicas

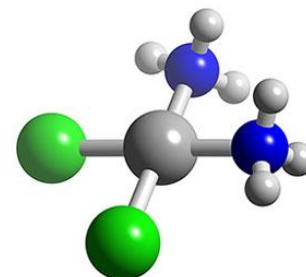
Química Inorgânica



apolar



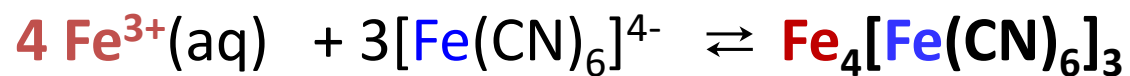
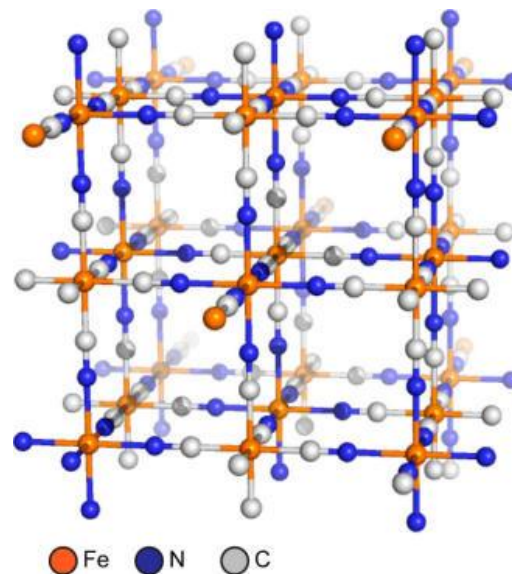
polar



Isômero ativo



Azul da Prússia



A **Química Inorgânica** compreende o estudo da estrutura e reatividade de todos os elementos químicos e seus principais compostos. Para alunos de Engenharia, têm especial importância os compostos com interesse industrial.

Para racionalizar as **propriedades dos elementos** usamos algumas propriedades que ajudam a classificá-los e a prever muitas de suas características físico-químicas. É o caso dos **potenciais de ionização**, **eletronegatividade**, **afinidade eletrônica**, **raio atômico** (covalente e iônico).

Baseado em suas **configurações eletrônicas**, também é possível prever as reatividades dos elementos, isto é, que tipo de compostos irão formar mais facilmente, com que outros elementos tenderão a reagir, sua estabilidade térmica ou em solução aquosa, sua tendência a explodir, etc.

As propriedades aqui citadas permitem prever o tipo de **ligação química** que cada elemento poderá formar e, a partir das ligações formadas, as **propriedades** dos compostos formados. Assim, **compostos covalentes**, **iônicos**, **metálicos**, **poliméricos**, **moleculares**, etc. apresentam **propriedades físicas e químicas** bem diferentes, que refletem o tipo de sua **estrutura**, que é resultados das **ligações químicas** presentes.



Dmitri Mendeleiev (1834 - 1907)

entrou para a história da Química ao ordenar os elementos químicos então conhecidos, numa Tabela, após verificar que as suas propriedades se repetiam de forma periódica.

A constatação da existência de regularidades periódicas nas propriedades físicas e químicas dos elementos, aliada à necessidade de sistematizar toda a informação já disponível, levou ao desenvolvimento da chamada **Tabela Periódica dos Elementos**, que ao longo do tempo foi sendo aperfeiçoada.

THE PERIODICITY OF THE ELEMENTS

The Elements	Their Properties in the Free State	The Composition of the Hydrogen and Organic-metallic Compounds	Symbols and Atomic Weights	The Composition of the Saline Oxides	The Properties of the Saline Oxides	Small Periods or Series
	t σ d Δ	RH_n or $R(CH_3)_n$	B A	R_2O_n	$d^2 \frac{(2A + n^2/16)}{d^2} \sqrt{v}$	
Hydrogen	(1) [2] [3] [4]	[5]	H [6]	1 = 1	[8] [9] [10] [11]	
Lithium	180° — 0.39 12	—	Li 7	1 = 1	0.917 19.6 < -30	1
Beryllium	(300°) — 1.64 15	—	Be 9	2 = 2	2.0 15 - 9	2
Boron	(1800°) — 2.5 44	—	B 11	3 = 3	3.06 16.3 + 26	
Carbon	>(3500°) — <3.9 6	—	C 12	— 4	1.9 39 10	
Nitrogen	-203° — <2.7 16	—	N 14	— 4	>1.9 <38 <19	
Oxygen	<-200° — <1.9 16	—	O 16	1 = 3* - 5*	1.64 66 < 5	
Fluorine	— — —	—	F 19	—	—	
Sodium	98° 0.71 0.98 23	—	Na 23	1 = 1	—	
Magnesium	560° 0.27 1.74 14	—	Mg 24	2 = 2	Na ₂ O 2.6 24 - 22	3
Aluminium	600° 0.23 2.6 11	—	Al 27	— 3	3.5 22 - 3	
Silicon	(1900°) 0.08 2.3 12	—	Si 28	— 3	Al ₂ O ₃ 4.0 26 + 13	
Phosphorus	44° 1.28 2.3 14	—	P 31	— 3* 4* 5* 6*	2.95 45 - 52	
Sulphur	114° 0.07 2.07 15	—	S 32	— 2 - 4* 5* 6*	2.39 59 62	
Chlorine	-35° — — 37	—	Cl 35.5	— 3 - 5* - 7*	1.96 82 87	
Potassium	58° 0.84 0.97 45	—	K 39	1 = 1	—	
Calcium	(800°) — 1.6 25	—	Ca 40	2 = 2	2.7 55 - 55	4
Sodium	— — — (23)	—	Na 23	—	2.65 25 60	
Titanium	(3500°) — (5.1) (9.4)	—	Ti 48	— 3 - 4 - 5	4.2 38 (+ 5)	
Vanadium	(3000°) — 5.5 22	—	V 51	— 3 - 4 - 5	2.9 42 67	
Chromium	(3300°) — 5.5 89	—	Cr 52	— 3 - 4 - 5	2.74 78 95	
Manganese	(1800°) — 7.5 79	—	Mn 55	— 3* 4 - 6* 7*	—	
Iron	1400° 0.12 7.8 72	—	Fe 56	— 3* 4 - 6*	—	
Cobalt	(1400°) 0.12 8.0 69	—	Co 59	— 3* 4 - 6*	—	
Nickel	1350° 0.17 8.7 68	—	Ni 59	— 3* 4 - 6*	—	
Copper	1084° 0.09 8.8 72	—	Cu 63	1 = 1	Ca ₂ O 2.9 24 - 24	5
Zinc	925° — 2.3 72	—	Zn 65	—	—	
Gallium	30° — 5.96 12	—	Ga 70	— 3 - 4 - 5	—	
Germanium	900° — 0.47 18	—	Ge 72	— 3 - 4 - 5	—	
Arsenic	500° 0.06 5.7 13	—	As 75	— 3 - 4 - 5*	—	
Selenium	317° — 4.8 16	—	Se 79	— 3 - 4 - 5*	—	
Bromine	-7° — 2.1 36	—	Br 80	— 3 - 4 - 5*	—	
Iodine	59° — 1.5 127	—	I 127	— 3 - 4 - 5*	—	
Barium	(900°) — 2.5 55	—	Ba 137	— 2*	—	
Strontium	(900°) — 2.5 55	—	Y 90	— 3*	—	
Yttrium	(1500°) — 4.1 22	—	Zr 90	— 3 - 4 - 5*	—	
Zirconium	(1500°) — 4.1 22	—	Nb 94	— 3 - 4 - 5*	—	
Nickel	— — 8.6 12	—	Mo 96	— 3 - 4 - 5*	—	
Molybdenum	— — 8.6 12	—	—	—	—	
Ruthenium	(3000°) 0.10 12.2 84	—	Ru 101	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Rhodium	(1900°) 0.08 12.1 86	—	Rh 104	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Palladium	1500° 0.12 11.4 89	—	Pd 106	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Silver	960° 0.19 10.5 10	—	Ag 108	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Cadmium	920° 0.01 8.0 13	—	Cd 112	— 2*	—	
Indium	176° 0.46 7.4 14	—	In 115	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Tin	300° 0.03 7.3 16	—	Sn 118	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Antimony	482° 0.12 6.7 18	—	Sb 120	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Tellurium	425° 0.17 6.4 20	—	Te 128	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Iodine	114° — 4.9 36	—	I 127	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Cesium	37° — 1.88 71	—	Cs 133	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Barium	(900°) — 2.5 55	—	Ba 137	— 2*	—	
Lanthanum	(900°) — 2.5 55	—	La 138	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Cerium	(700°) — 6.0 21	—	Ce 140	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Dysprosium	(900°) — 6.5 22	—	Dy 142	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Ytterbium	— — (6.9) (25)	—	Yb 173	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Tantalum	— — 10.4 18	—	Ta 182	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Tungsten	(1500°) — 10.1 9.6	—	W 184	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Osmium	(3500°) 0.07 22.5 8.5	—	Os 191	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Iridium	3000° 0.07 22.4 8.6	—	Ir 193	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Platinum	1775° 0.03 21.5 9.4	—	Pt 196	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Gold	1845° 0.14 19.2 10	—	Au 198	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Mercury	-39° — 10.6 15	—	Hg 200	— 2* 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Thallium	304° 0.01 11.8 17	—	Tl 204	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Lead	327° 0.09 11.8 18	—	Pb 206	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Bismuth	268° 0.14 9.8 21	—	Bi 208	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Thorium	— — 11.1 21	—	Th 232	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	
Uranium	(800°) — 18.7 13	—	U 240	— 3 - 4 - 5 - 6 - 8	—	

Número Atômico — 1 100794 — Peso Atômico
H — Símbolo Químico
 Hidrogênio — Nome do Elemento

■ Hidrogênio ■ Metais ■ Semi-metais ■ Não-metais ■ Gases nobres

NOVA TABELA PERIÓDICA

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Latest News – Chem. Eng. News

Web Date: January 5, 2016

With the addition of four new elements, the seventh row of the periodic table is officially full, the [International Union of Pure & Applied Chemistry \(IUPAC\)](#) announced on Dec. 30.

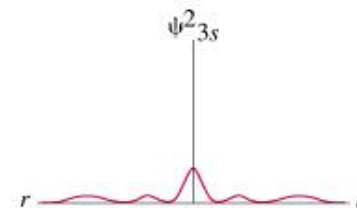
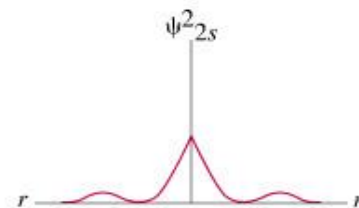
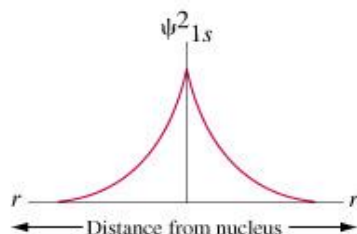
ORBITAIS

$$1s \quad \Psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

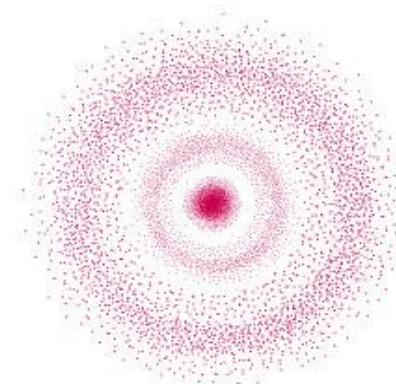
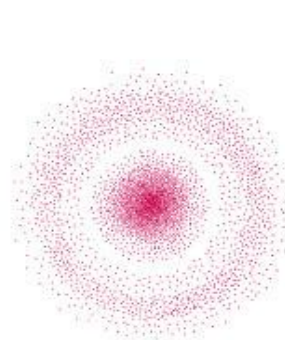
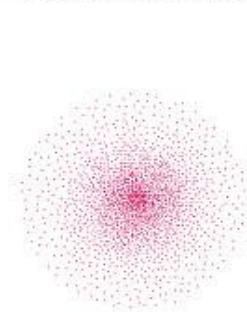
$$2s \quad \Psi = -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

$$3s \quad \Psi = \frac{1}{9} \left(\frac{1}{3\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(3 - \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{9a_0^3} \right) e^{-r/3a_0}$$

Obtidos pela
resolução da equação
de Schrodinger



A forma do orbital s



Representam a
região no espaço
onde é mais provável
encontrar o elétron.



(a) 1s

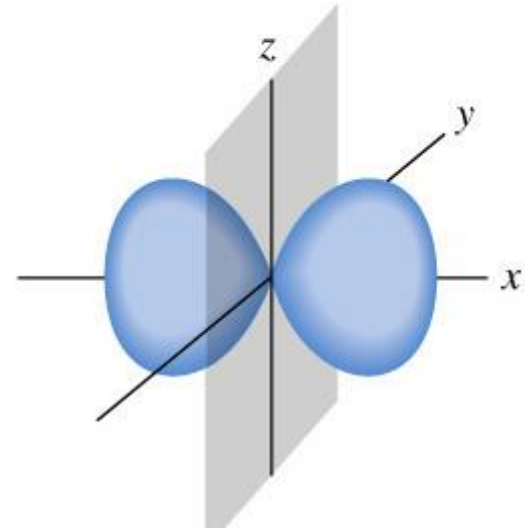
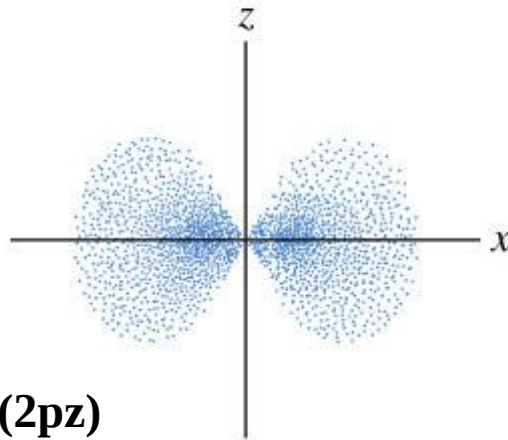
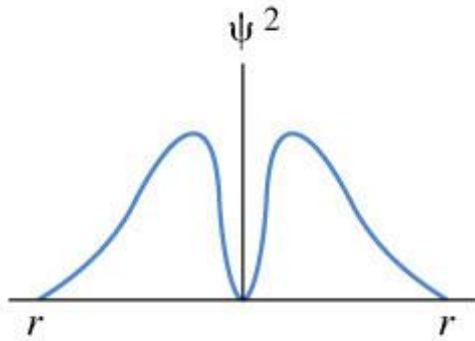


(b) 2s

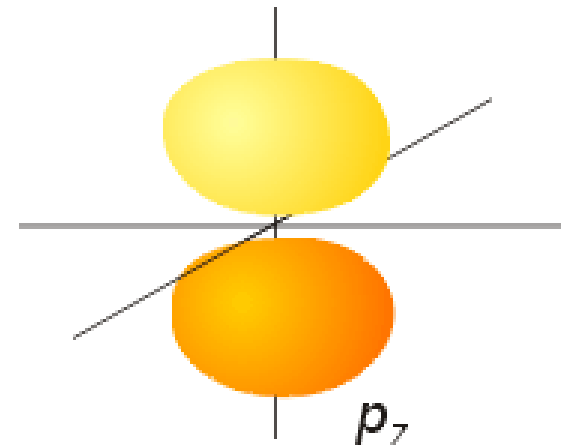
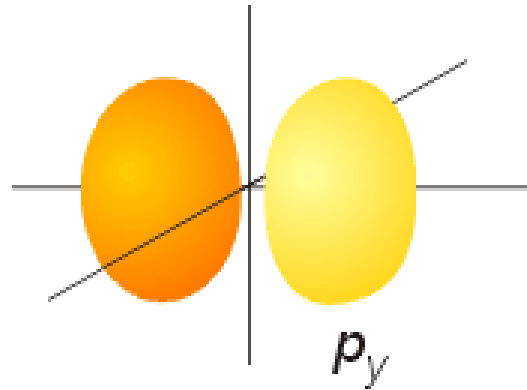
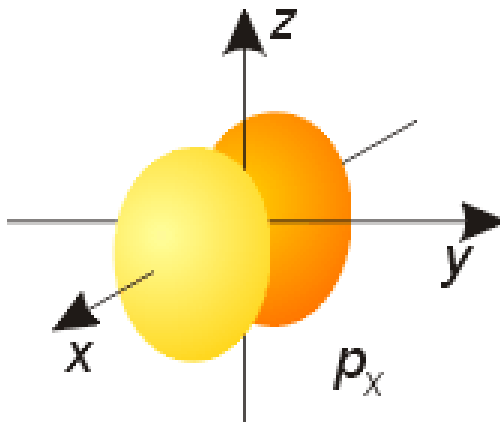


(c) 3s

A forma do orbital p



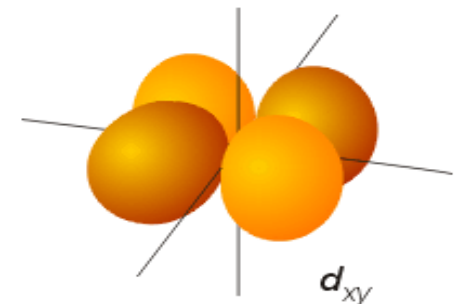
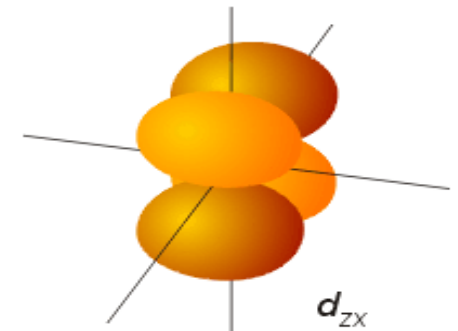
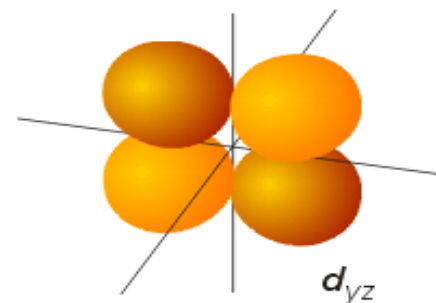
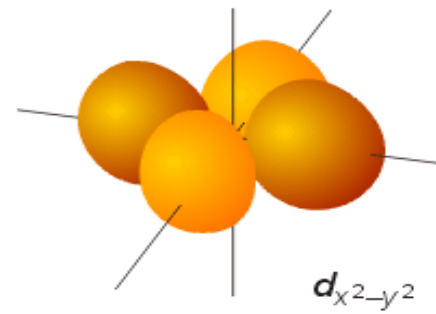
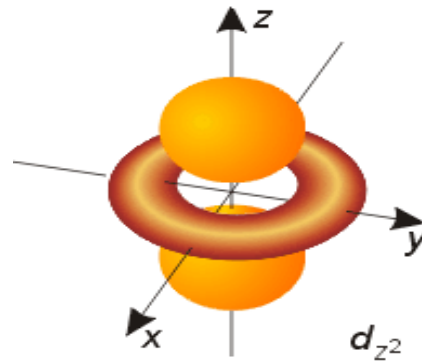
$$\Psi = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^5} \right)^{1/2} r e^{-r/2a_0} \begin{cases} \cos\theta & (2pz) \\ \sin\theta \cos\phi & (2px) \\ \sin\theta \sin\phi & (2py) \end{cases}$$



Orbitais d

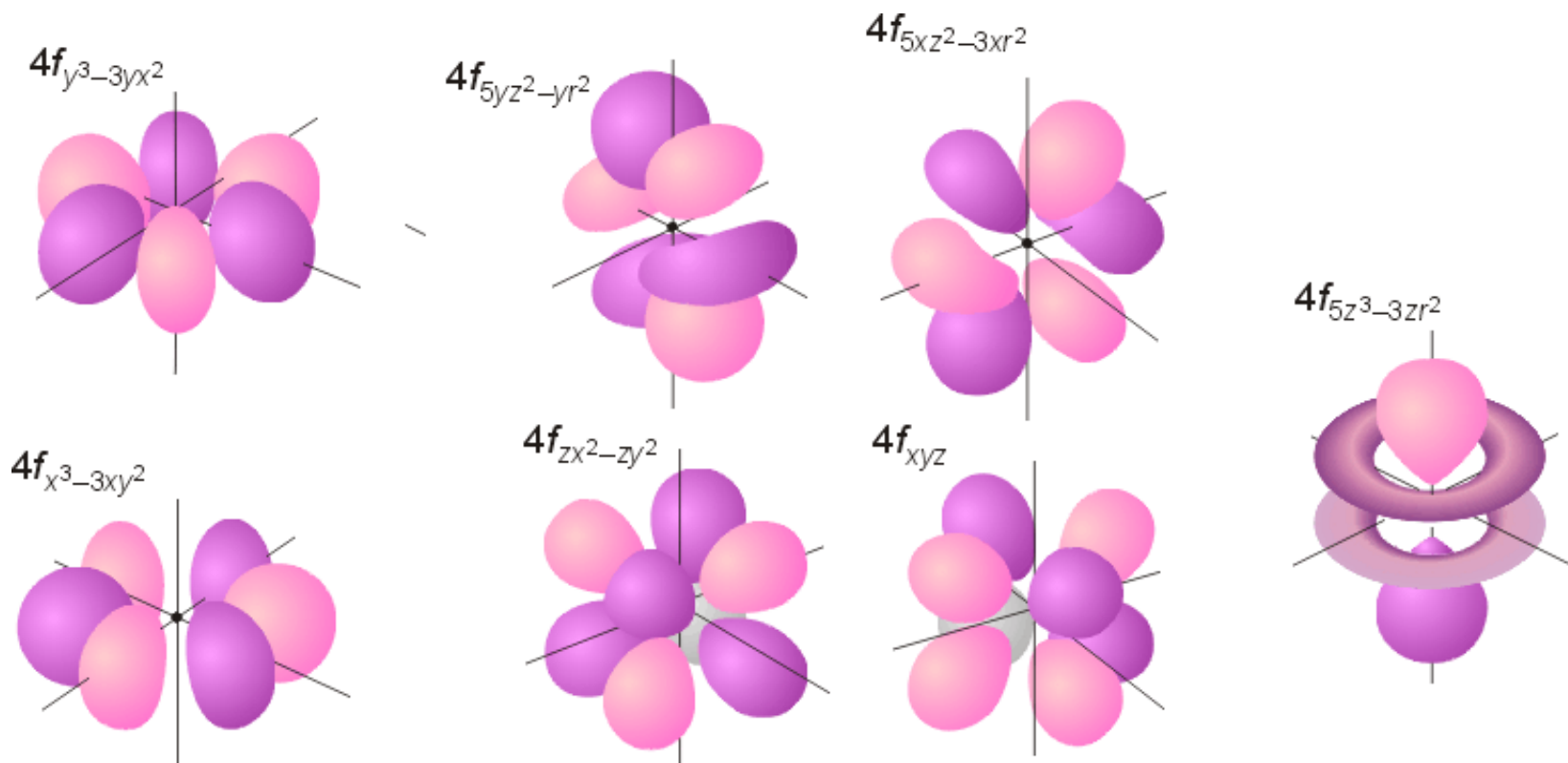
Metais de Transição

Acomodam até 10 elétrons e dependendo do **estado de oxidação do metal**, estes orbitais podem estar parcialmente preenchidos.



Orbitais f

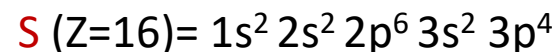
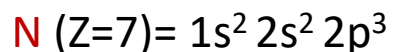
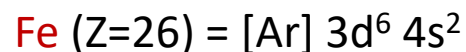
Lantanóides e Actinóides



Podem acomodar até 14 elétrons

A **Tabela Periódica** representa um arranjo dos elementos químicos segundo as características eletrônicas dos átomos de cada elemento.

Ex.: **estrutura eletrônica**



A Tabela é dividida em **períodos e grupos**, numerados segundo as recomendações da IUPAC. Os **períodos** constituem as linhas horizontais, enquanto os **grupos** (anteriormente denominadas famílias) representam as linhas verticais ou colunas.

Os **elementos principais** são aqueles dos blocos **s** e **p**. Os elementos do chamado bloco **d** (com exceção do Grupo 12: zinco, cádmio e mercúrio) são denominados **elementos de transição**, e correspondem a elementos em que estão sendo preenchidos os elétrons nos orbitais do tipo d.

Os elementos em que elétrons nos orbitais do tipo **f** estão sendo preenchidos, são denominados **elementos de transição f** e subdivididos em **lantanóides** no caso dos elementos mais leves, com número atômico (**Z**) de 57 a 71 (anteriormente e ainda chamados de **lantanídeos**) e em **actinóides**, mais pesados, com número atômico de 89 a 103 (anteriormente e comumente chamados de **actinídeos**).

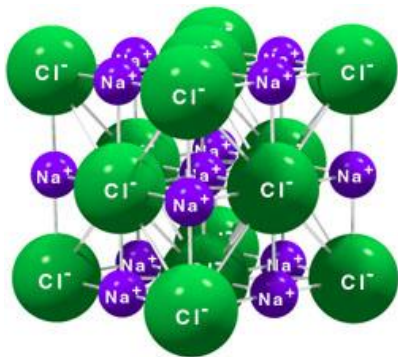
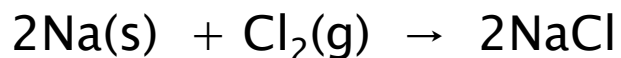
Finalmente, os **elementos representativos** são os membros dos três primeiros períodos (do H ao Ar).

A **configuração eletrônica** do átomo vai determinar suas **propriedades estruturais** e também a sua **reatividade**, ao formar compostos com átomos do mesmo elemento ou de outros elementos.

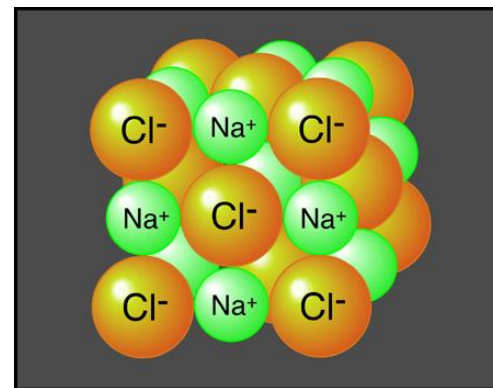
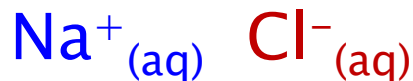
Os **elementos nos períodos 1 e 2**, com estrutura eletrônica s^1 e s^2 , respectivamente, tendem a perder esses elétrons mais externos, formando **cátions** mono- ou divalentes. São os metais alcalinos e alcalino-terrosos, como : Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Ba^{2+}

Os **elementos no período 17**, denominados **halogênios**, com estrutura eletrônica $s^2 p^5$ tendem ao contrário a receber um elétron, completando a camada mais externa (estrutura de gás nobre), como: F^- , Cl^- , Br^- , I^-

Assim, a reação entre esses elementos em lados opostos da Tabela Periódica tendem a formar **compostos iônicos**.



em solução aquosa:



Propriedades Periódicas

Certas propriedades características dos átomos, particularmente seus raios e as energias associadas à remoção ou à adição de elétrons, mostram variações periódicas regulares com o número atômico. Estas propriedades são de grande importância para entender e explicar muitas das propriedades químicas dos elementos.

Li



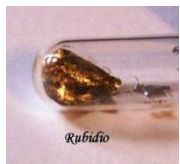
Na



K



Rb



O conhecimento destas tendências permite aos químicos **interpretar dados** e **prever comportamentos químicos**, assim como **estimar parâmetros estruturais**, sem recorrer aos dados tabelados de cada elemento químico

Metais alcalinos

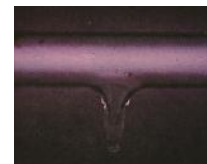
He



Ne



Ar



Kr



Gases Nobres

Raio Atômico

Os raios atômicos aumentam à medida que descemos num grupo (no. atômico crescente) e, dentro dos blocos **s** e **p**, diminuem da esquerda para a direita, ao longo de um período.

Ânions são maiores e **cátions** são menores que os átomos que lhes deram origem, devido ao balanço de carga e interação eletrostática.

Na

O

Na⁺

O²⁻

Têm importância no estudo de compostos iônicos



Energia de rede cristalina

$$E = \frac{ANZ^+Z^-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{NB}{r^n}$$

A Equação representa a energia total para um mol de um cristal em função de r , considerando as contribuições devidas à **atração eletrostática** (primeiro termo) e à **repulsão na superposição das nuvens eletrônicas dos íons** (segundo termo).

E = energia total em um mol de um cristal

Z^+ e Z^- = número de carga dos íons

e = carga do elétron = $1,6 \times 10^{-19}$ C

ϵ_0 = permissividade do vácuo = $8,85 \times 10^{-12}$ C² J⁻¹ m⁻¹

r = distância de separação dos íons

A = constante de Madelung

N = constante de Avogadro

B = constante de repulsão

n = expoente de Born

$$E = \frac{Z^+Z^-e^2}{4\pi\epsilon r}$$

E = energia eletrostática entre um par de íons

Z^+ e Z^- = número de carga dos íons

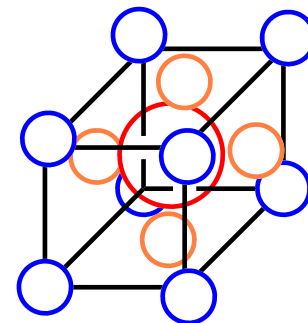
ϵ = permissividade do meio

r = distância de separação dos íons

Tabela de raios atômicos,* em pm

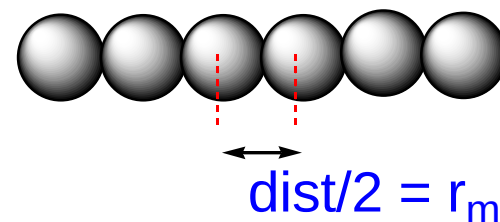
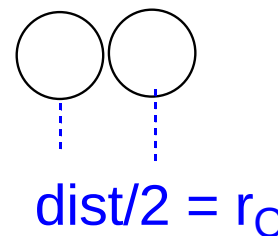
* considerou-se número de coordenação 12.

Li 157	Be 112		B 88	C 77	N 74	O 66	F 64
Na 191	Mg 160		Al 143	Si 118	P 110	S 104	Cl 99
K 235	Ca 197		Ga 153	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114
Rb 250	Sr 215		In 167	Sn 158	Sb 141	Te 137	I 133
Cs 272	Ba 225		Tl 171	Pb 175	Bi 182		
V 135	Cr 129	Mn 137	Fe 126	Co 125	Ni 125	Cu 128	Zn 137



Questão:

Como são determinados experimentalmente os raios atômicos?



Raio covalente – de um elemento não-metálico é definido como a metade da distância internuclear entre átomos vizinhos de um mesmo elemento, numa molécula.

Raio metálico – de um elemento metálico é definido como a metade da distância experimental determinada entre os centros de átomos vizinhos mais próximos, num sólido.

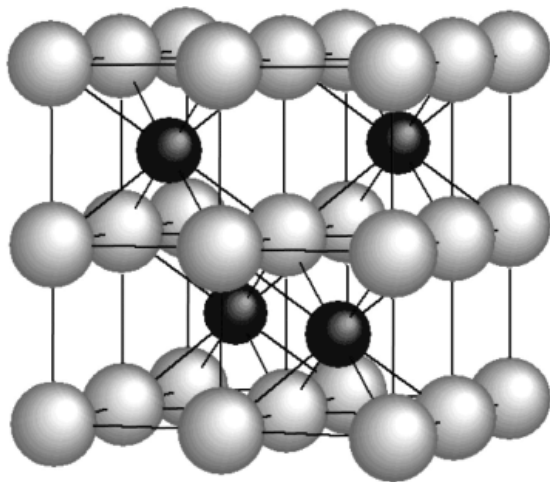
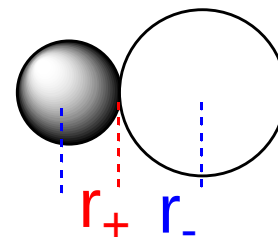
Raio iônico – está relacionado à distância entre os centros de cátions e ânions vizinhos, numa rede cristalina. Para dividir esta distância e determinar r_+ e r_- , há algumas sugestões, como por exemplo:

MgO

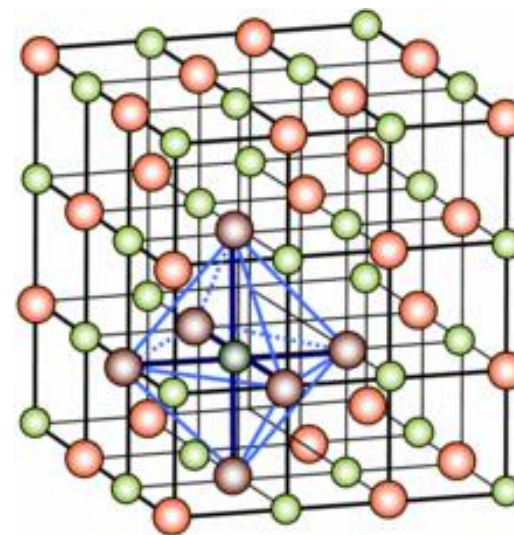
Distância, $d = r_+ + r_-$
determinada por difração de raios X

$d = 212 \text{ pm}$

Raio $\text{O}^{2-} = 140 \text{ pm}$; raio $\text{Mg}^{2+} = 212 - 140 = 72 \text{ pm}$



Óxido de cério

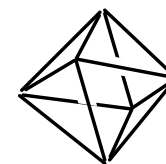


Cloreto de sódio

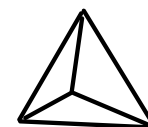
Tabela de raios iônicos, pm*

Li ⁺ 59 (4) 76 (6)	Be ²⁺ 27 (4)		B ³⁺ 11 (4)	N ³⁻ 146	O ²⁻ 135 (2) 138 (4) 140 (6) 142 (8)	F ⁻ 128 (2) 131 (4) 113 (6)
Na ⁺ 99 (4) 102 (6) 118 (8)	Mg ²⁺ 49 (4) 72 (6) 89 (8)		Al ³⁺ 39 (4) 53 (6)	P ³⁻ 212	S ²⁻ 184 (6)	Cl ⁻ 181 (6)
K ⁺ 138 (6) 151 (8) 159 (10) 161 (12)	Ca ²⁺ 100 (6) 112 (8) 128 (10) 134 (12)		Ga ³⁺ 62 (6)	As ³⁻ 222	Se ²⁻ 198 (6)	Br ⁻ 196 (6)
Rb ⁺	Sr ²⁺ 118 (6) 125 (8) 144 (12)		In ³⁺ 80 (6) 92 (8)		Te ²⁻ 221 (6)	I ⁻ 220 (6)
Cs ⁺ 167 (6) 174 (8) 188 (12)	Ba ²⁺ 100 (6) 112 (8) 128 (10) 134 (12)		Tl ³⁺ 89 (6) Tl ⁺ 150 (6)			

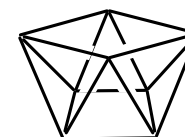
No. coordenação



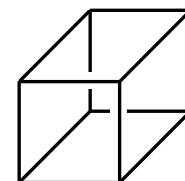
6



4



8



8

* número de coordenação entre parênteses

Energia de Ionização

Corresponde à **energia necessária para remover 1 elétron** (o mais externo) de um dado átomo. É uma medida da facilidade com que este elétron pode ser removido.

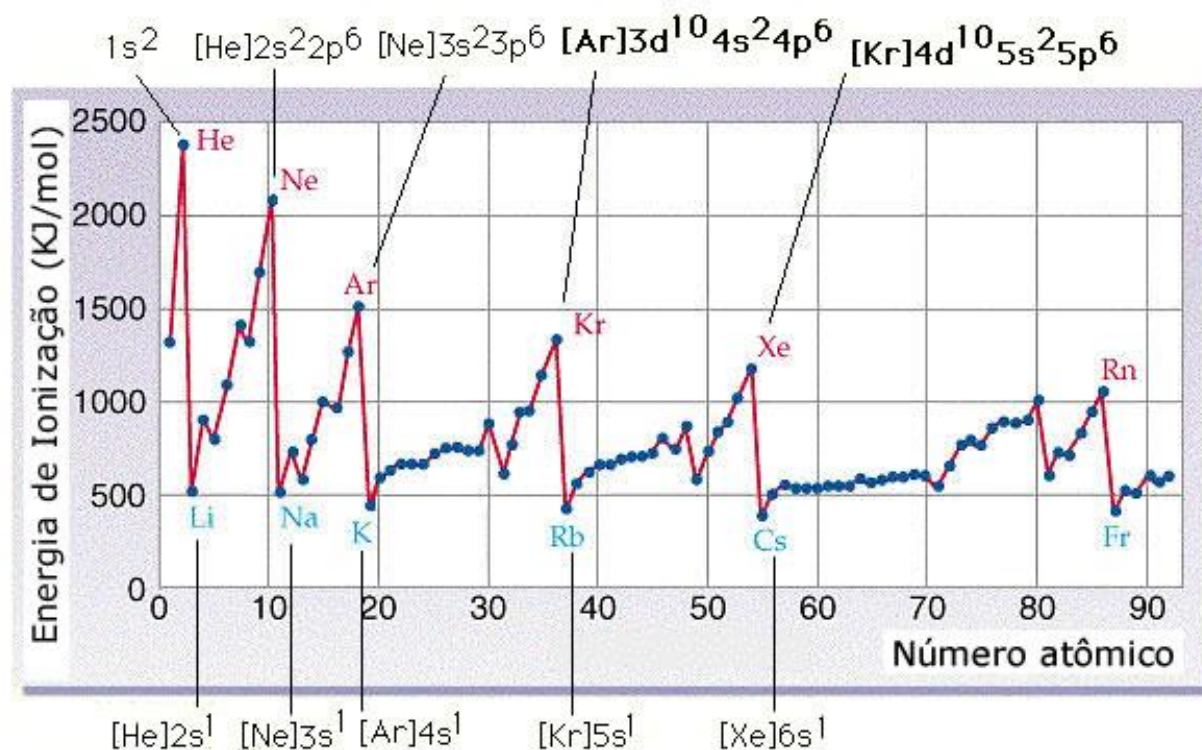
As energias de ionização, **EI** (1ª., 2ª., 3ª., etc...) podem ser expressas em **eV**, ou como entalpias de ionização, em **kJ/mol**, a 298 K

$$1 \text{ eV} = 96,485 \text{ kJ/mol}$$

$$EI \propto Z_{\text{ef}}^2 / n^2$$

EI diminui ao longo de um grupo e aumenta ao longo de um período (à medida que $n =$ no. atômico principal aumenta)

A diferença entre entalpia de ionização e **EI** é de $5/2 \text{ RT}$.



Eletronegatividade

A **eletronegatividade** de um elemento é a **capacidade que um átomo deste elemento tem de atrair elétrons para si quando faz parte de um composto** (participa de uma ligação química).

Elemento altamente eletronegativo:

forte tendência a atrair ou adquirir elétrons

H - X **X** atrai mais o par de elétrons da ligação que **H**

Importância: polarização de ligações químicas



Este conceito auxilia na justificativa de energias de ligação e previsão da polaridade de ligações e de moléculas.

A **eletronegatividade** em geral aumenta ao longo de um período e diminui ao longo de um grupo

Eletronegatividade

A **eletronegatividade** foi definida de várias maneiras:

A definição de **L. Pauling**, χ_P , relaciona-se com energias envolvidas na formação da ligações químicas.

Pela definição de **R. Mulliken**, χ_M , a eletronegatividade seria determinada como a metade da energia de ionização mais a afinidade eletrônica (expressas em eV)

$$\chi_M = \frac{1}{2} (EI + E_{AE})$$

ou $\chi_M = \frac{1}{2} (EI + E_{AE}) / 540$ para EI e AE expressas em kJ/mol.

$$\chi_P = 1,35 (\chi_M)^{1/2} - 1,37$$

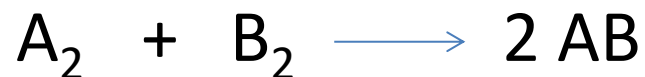
Uma terceira definição, de **A.L. Allred** e **E. Rochow**, χ_{AR} , baseia-se na idéia de que a eletronegatividade é determinada pelo campo elétrico na superfície do átomo.

$$\chi_{AR} = 0,744 + (3590 Z_{ef} / r^2)$$



Raio covalente, pm

Pela definição de L. Pauling, χ_P



$$|\chi_P(A) - \chi_P(B)| = (\Delta D)^{1/2}$$

D = entalpia de dissociação da ligação

$$\Delta D = D(A-B) - \frac{D(A-A) + D(B-B)}{2}$$

$$1 \text{ eV} = 96,485 \text{ kJ/mol}$$

Usando valores de ΔD em kJ/mol:

$$|\chi_P(A) - \chi_P(B)| = 0,102 (\Delta D)^{1/2}$$

Valores de ΔD em eV:

elemento	χ_P
F	3,98
Cl	3,16
Br	2,96
I	2,66
O	3,44
S	2,58
N	3,04
P	2,19
H	2,20

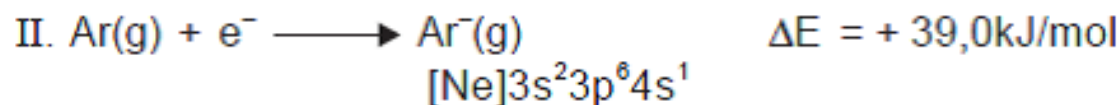
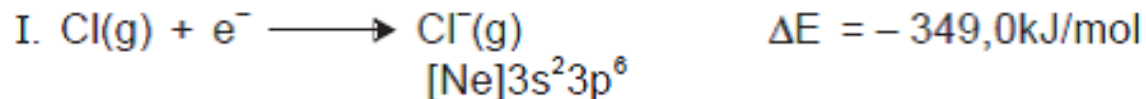
Tabela de eletronegatividades

	H							He
χ_P	2,20							5,5
χ_M	3,06							
χ_{AR}	2,20							
	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
χ_P	0,98	1,57	2,04	2,55	3,04	3,44	3,98	
χ_M	1,28	1,99	1,83	2,67	3,08	3,22	4,43	4,60
χ_{AR}	0,97	1,47	2,01	2,50	3,07	3,50	4,10	5,10
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
χ_P	0,93	1,31	1,61	1,90	2,19	2,58	3,16	
χ_M	1,21	1,63	1,37	2,03	2,39	2,65	3,54	3,36
χ_{AR}	1,01	1,23	1,47	1,74	2,06	2,44	2,83	3,30
	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
χ_P	0,82	1,00	1,81	2,01	2,18	2,55	2,96	3,0
χ_M	1,03	1,30	1,34	1,95	2,26	2,51	3,24	2,98
χ_{AR}	0,91	1,04	1,82	2,02	2,20	2,48	2,74	3,10

As eletronegatividades dos elementos **diminuem** ao longo de um **grupo** e **aumentam** ao longo de um **período**

Mesmo com diminuição do raio atômico, a eletronegatividade **aumenta** no mesmo **período** (em que a mesma camada está sendo completada). No caso do **grupo**, a eletronegatividade **diminui** (camadas mais externas estão sendo preenchidas)

Afinidade Eletrônica



A entalpia de **ganho de 1 elétron** pode ser um processo exotérmico ou endotérmico.

$$\Delta H = -E_{\text{AE}} - 5/2 (RT)$$

Essa diferença $5/2 (RT)$ é frequentemente ignorada.

A **afinidade eletrônica** de um elemento é determinada em grande parte pela energia do orbital não-preenchido de menor energia (LUMO) do átomo no seu estado fundamental.

Orbitais de fronteira – são os orbitais mais afetados ao se formar uma ligação química

HOMO = *higher occupied molecular orbital*

LUMO = *lower unoccupied molecular orbital*

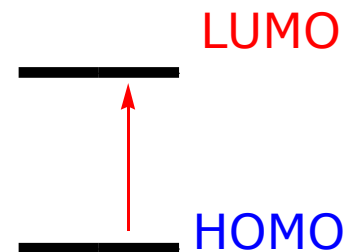
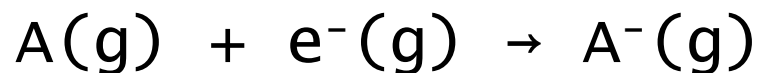


Tabela de afinidades eletrônicas – E_a /kJ/mol

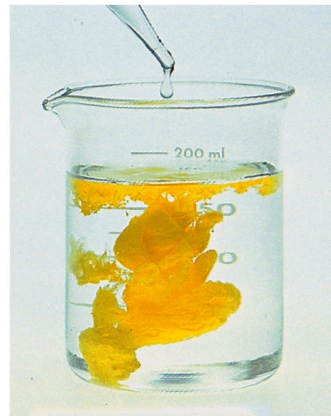
H							He
72							-48
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
60	≤ 0	27	122	-8	141	328	-116
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
5,3	≤ 0	43	134	72	200	349	-96
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
48	2	29	116	78	195	325	-96
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
47	5	29	116	103	190	265	-77



$$E_a = E(A, g) - E(A^-, g)$$

A **afinidade eletrônica**, **E_a** , é a diferença de energia entre os átomos gasosos e os correspondentes íons gasosos, à temperatura de 0 K.

REATIVIDADE QUÍMICA



Detecção de intermediários de reação

Detecção de vestígios de sangue

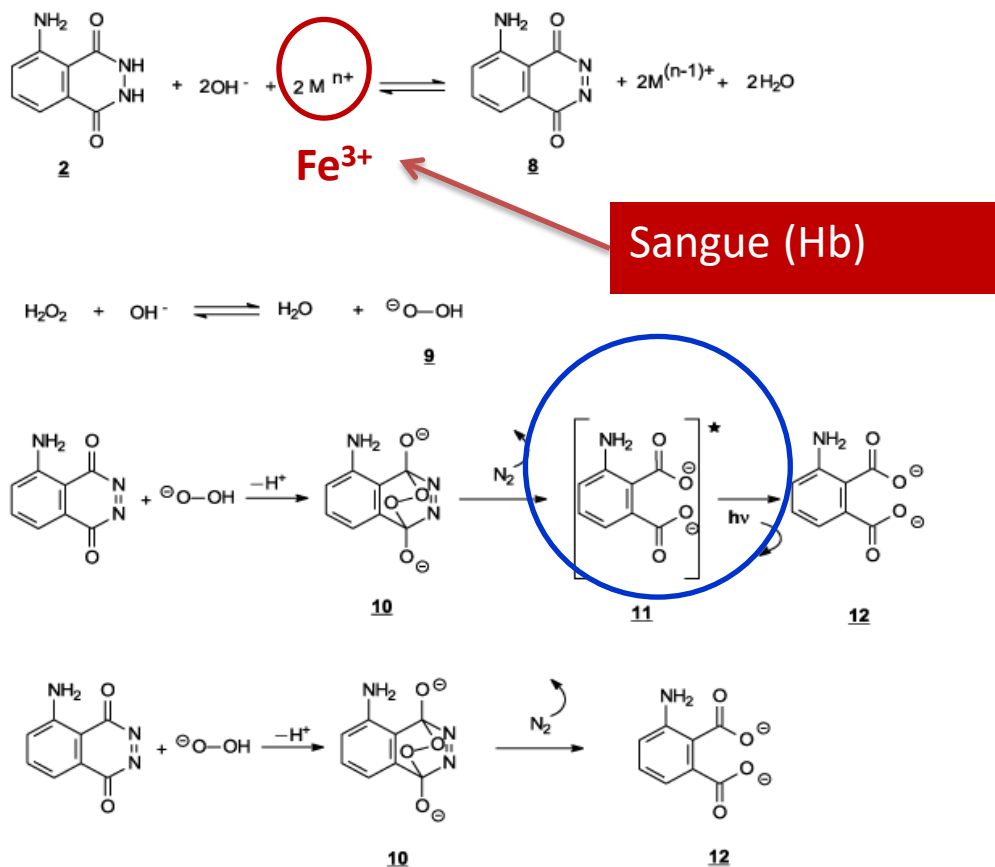


Figura 2. Proposta mecanística de Albertin e colaboradores⁴ para a reação quimiluminescente do luminol em meio alcalino e na presença de um íon de metal de transição (M^{n+}), utilizando o H_2O_2 como agente oxidante

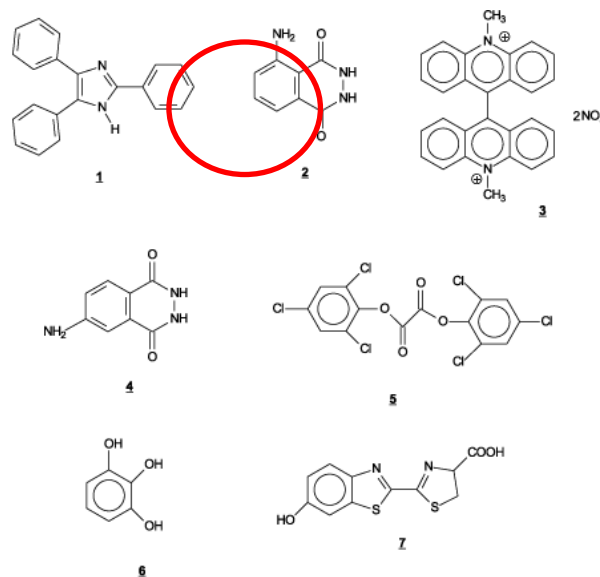


Figura 1. Exemplos de compostos que participam como substratos de reações quimiluminescentes: 1 lofina, 2 luminol, 3 lucigenina, 4 isoluminol, 5 etanodioato de bis(2,4,6-triclorofenila), 6 pirogalol e 7 luciferina

Luminescência



Transformações Químicas

Aspectos Qualitativos

- Tipos de reação
- Espécies em solução

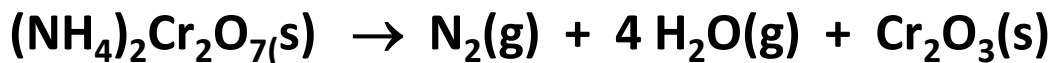
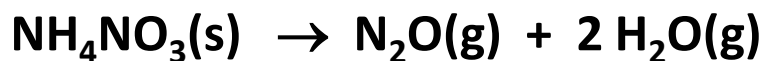
Aspectos Quantitativos

- Quantidades de reagentes e produtos
- Reagente limitante
- Rendimento de reação

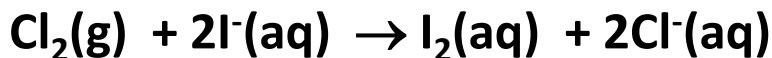
Transformações Químicas

- podem ocorrer nos três estados da matéria.
- Mas, em geral, são mais estudadas em solução aquosa, já que 2/3 de nosso planeta é formado por rios, lagos e oceanos, e o organismo humano é constituído de ~ 70% de água.

Exemplos no estado sólido:

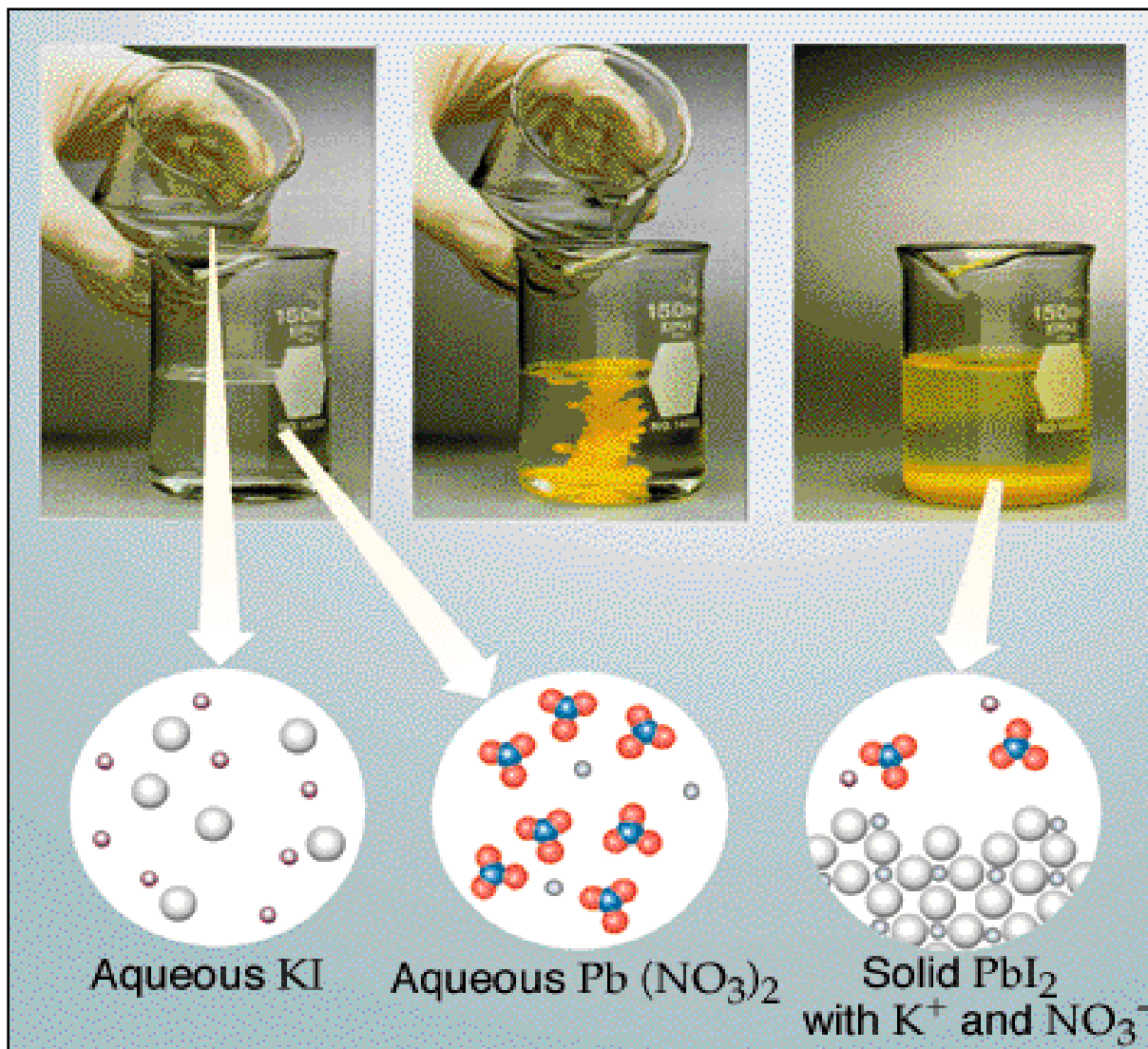


Exemplos em solução:



*Ao escrever a equação química correspondente a uma reação química, procura-se **dar o máximo de informação possível**: estado físico das substâncias, estequiometria da reação, se é um equilíbrio, etc.*

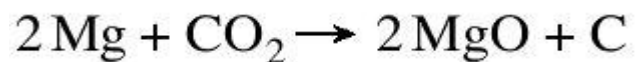
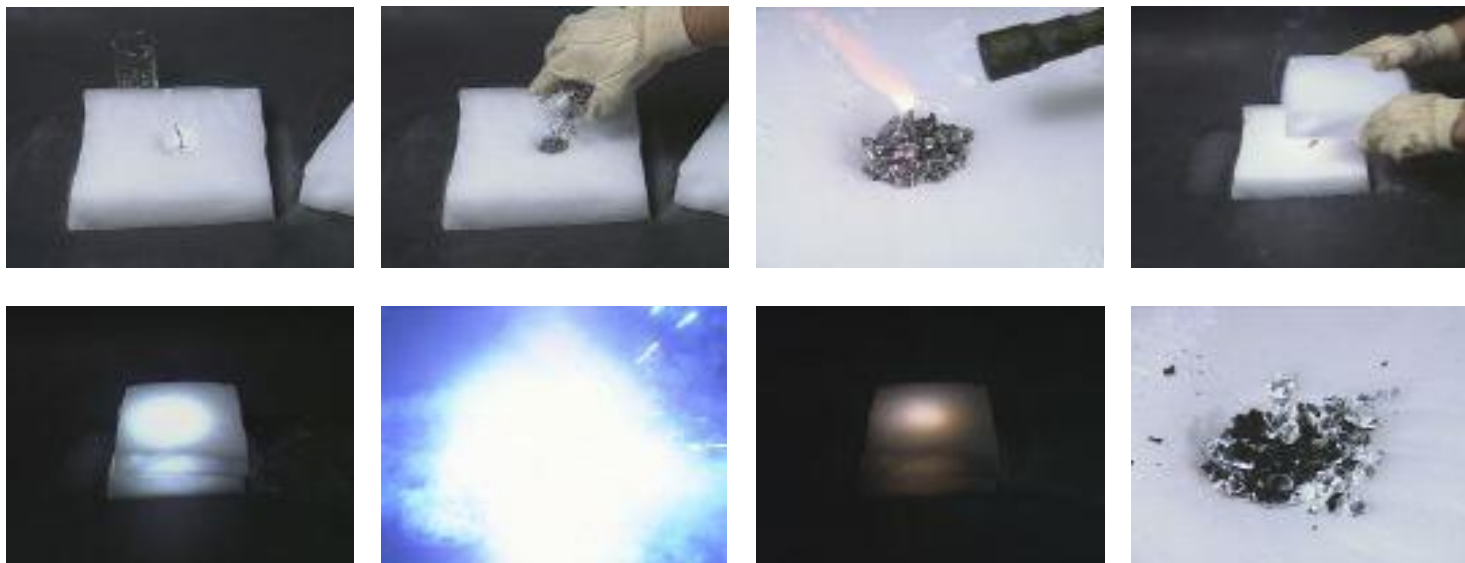
Verificação da ocorrência de reação química



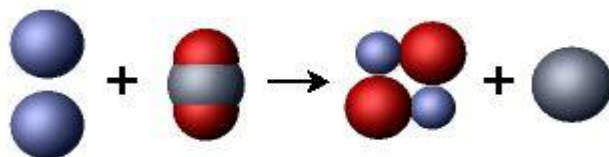
Para constatar a ocorrência de uma reação, procuram-se evidências experimentais da transformação havida:

- *liberação de produtos gasosos,*
- *formação de produtos coloridos ou desaparecimento de cor característica dos reagentes,*
- *formação de precipitado (produto pouco solúvel), ou dissolução de precipitado,*
- *Liberação ou consumo significativo de energia,*
- *Emissão de luz,*
- *etc.*

Magnésio é colocado na cavidade de um bloco de gelo seco e, posteriormente aquecido



Produtos

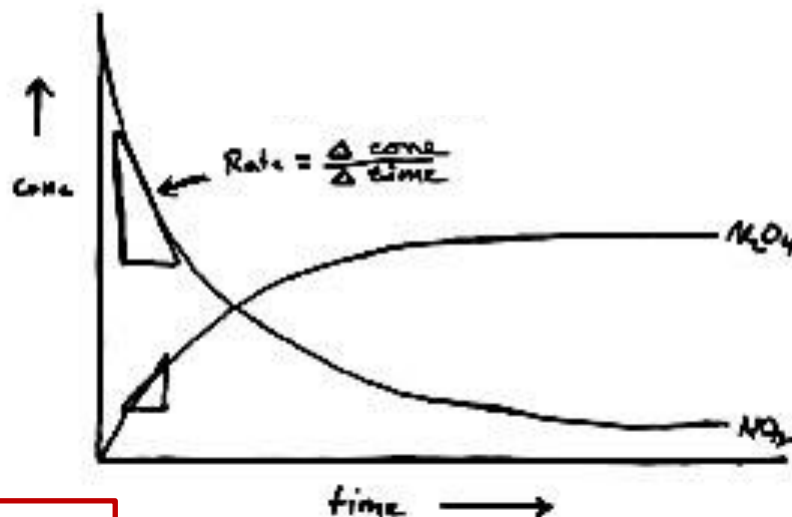
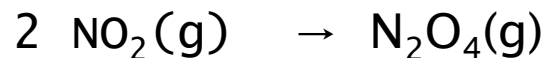


Monitoramento de Reações Químicas

Acompanhamento do consumo de reagentes ou formação de produtos

Deteção de intermediários

Reação ocorrendo:



Verificação da ocorrência de uma reação química:

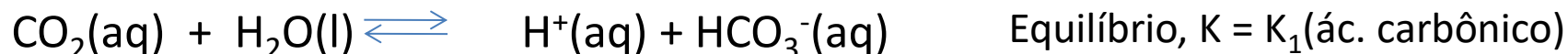
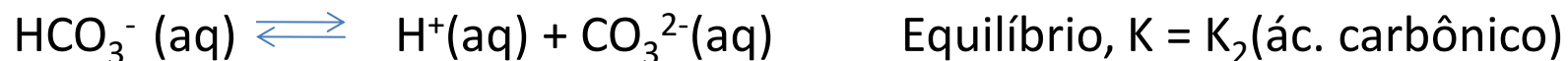
Variações nas propriedades físicas;

Variações de temperatura;

Emissão de luz;

Captação de intermediários reativos

Reações em solução:



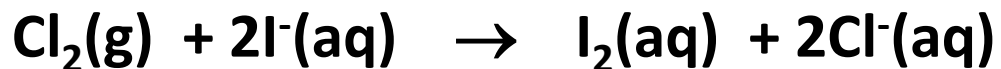
Reações no estado sólido:



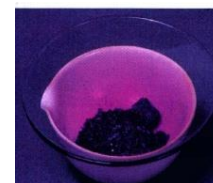
Decomposição térmica

Decomposição da substância, com aquecimento controlado, verificando-se a **perda de massa** e analisando-se o(s) produto(s) formado(s).

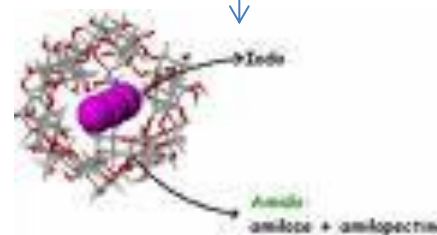
Reações em solução:



Gás esverdeado



Sólido violeta



Dissolvido em solução
de amido = azul

Dissolvido em
clorofórmio = violeta



Monitoramento de Reações

Uso de propriedades físicas e químicas

Métodos espectroscópicos (UV/Vis, IR, RMN, EPR, CD, etc.)

Métodos cromatográficos (LC, GC, HPLC)

Espectrometria de massa (ESI-MS), etc.

Na indústria:

Análise de metais e ligas na siderurgia

Fluorescência de Raio -X (XRF)

Análise qualitativa e quantitativa de

Amostras sólidas:

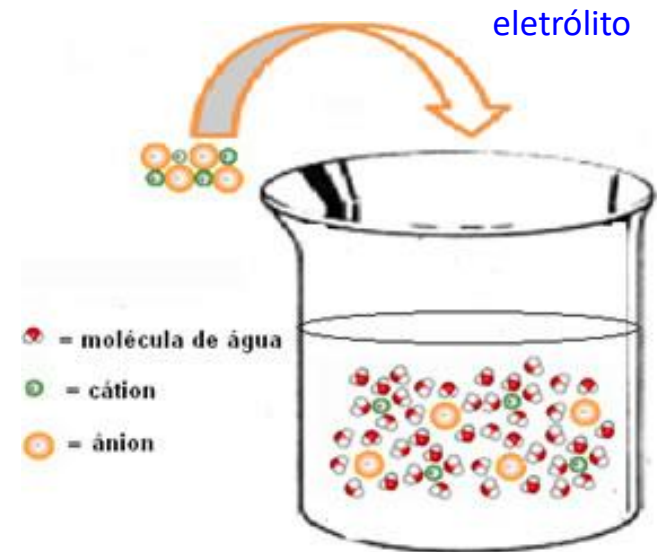
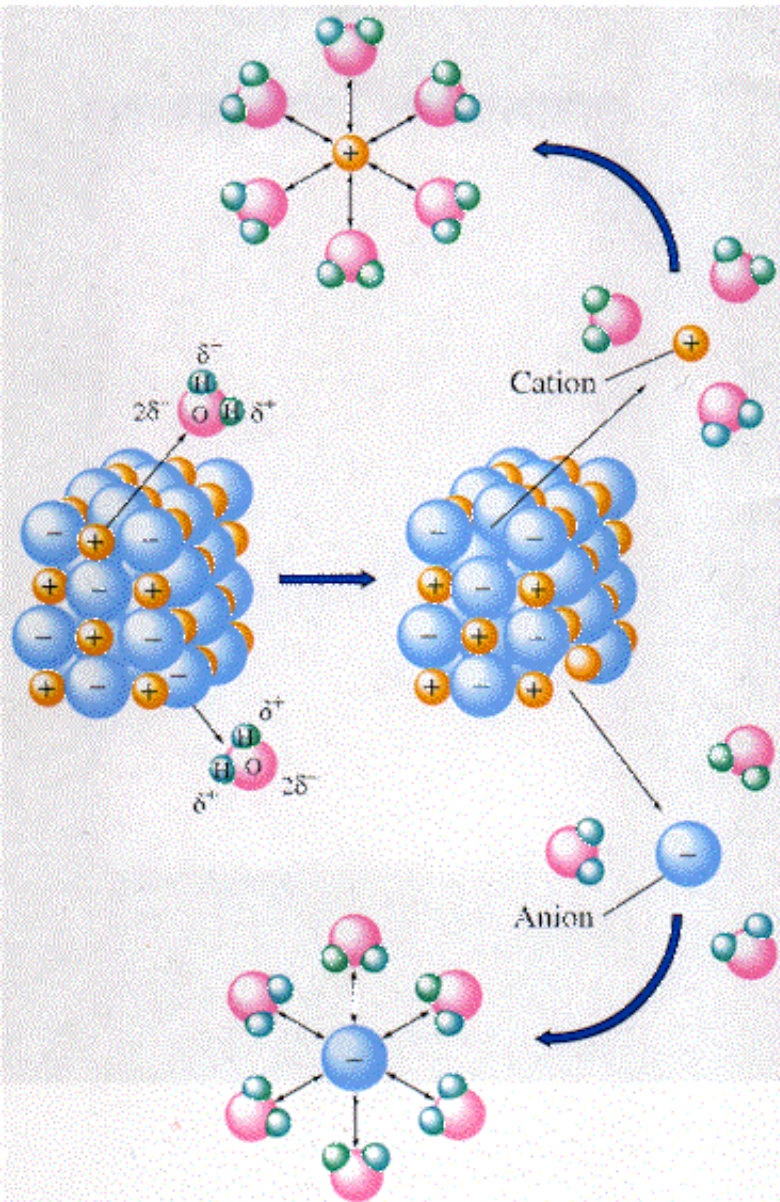
Al, Mg, Si, P, Sb, Sn, Pd, Ag, Ru, Mo, Zr, Se, Bi, Pb, Ta, Hf, Re, W,
Zn, Cu, Ni, Co, Fe, Mn, Cr, V e Ti

Ligas: aços inox, ligas de cobre, ligas de níquel, bronzes , etc.

Dissolução de compostos iônicos
em água



Formação de íons hidratados

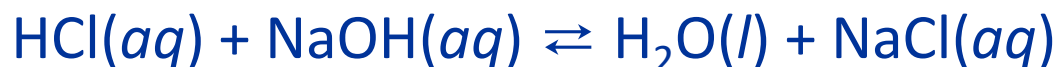


Reações em solução

Em geral, utilizam-se equações iônicas.

- **Equação iônica:** utilizada para realçar a reação entre íons.

- **Equação global:** todas as espécies listadas:



- **Equação iônica completa:** lista *todos* os íons:



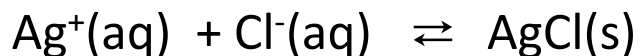
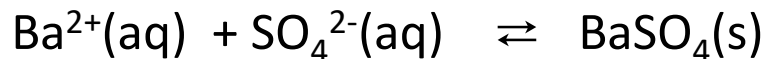
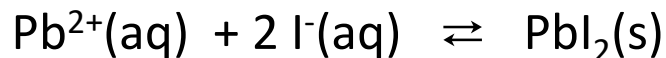
- **Equação iônica simplificada:** lista somente íons *que sofrem reação*:



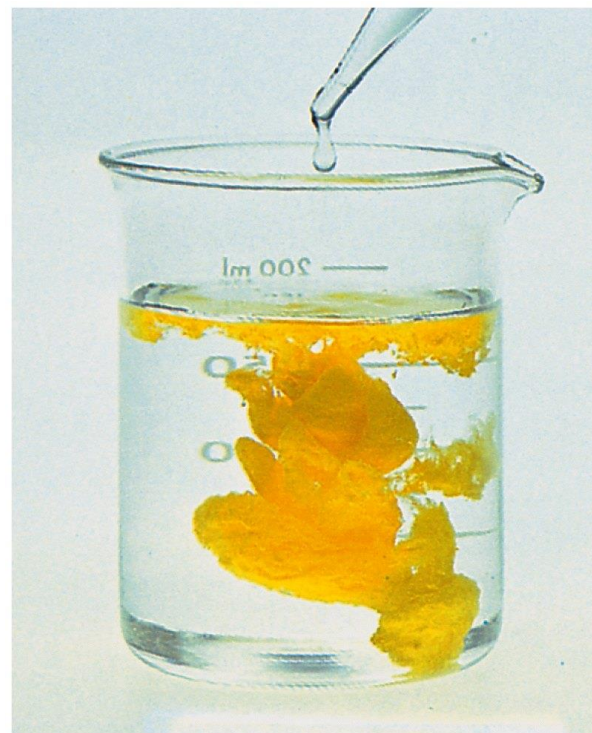
Protagonistas vs. coadjuvantes

Reações de precipitação: formação de composto pouco solúvel

- Quando duas soluções são misturadas e um sólido é formado, o sólido é chamado de um **precipitado**.

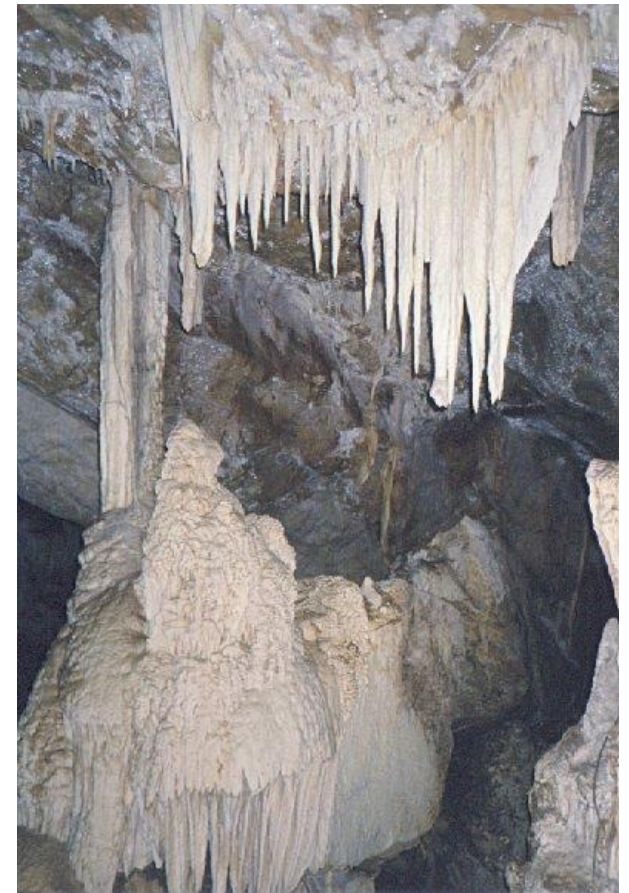


Para haver precipitação, a **solubilidade** do composto na solução tem que ser atingida.



Stalactites e Stalagmites

Formações em cavernas de rochas carbonatadas
Dissolução e re-precipitação



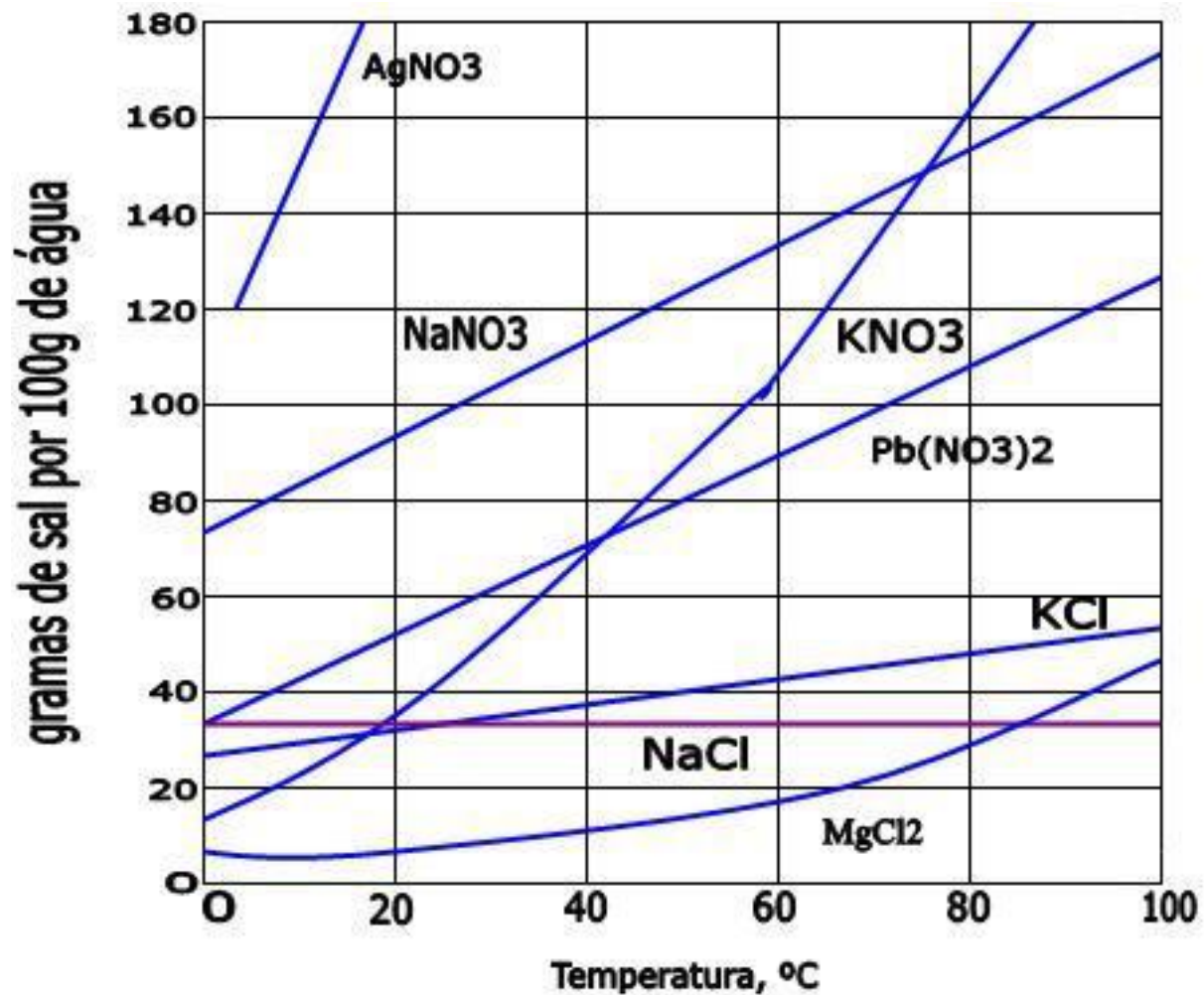
Reações de precipitação

Permitem, por exemplo, recuperar metais de águas e efluentes industriais, possibilitando seu descarte dentro das normas ambientais.

TABELA 4.1 Regras de solubilidade em água para compostos iônicos comuns

Compostos iônicos solúveis		Exceções importantes
Compostos contendo	NO_3^-	Nenhuma
	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	Nenhuma
	Cl^-	Compostos de Ag^+ , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}
	Br^-	Compostos de Ag^+ , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}
	I^-	Compostos de Ag^+ , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}
	SO_4^{2-}	Compostos de Sr^{2+} , Ba^{2+} , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}
Compostos iônicos insolúveis		Exceções importantes
Compostos contendo	S^{2-}	Compostos de NH_4^+ dos cátions de metais alcalinos e Ca^{2+} , Sr^{2+} e Ba^{2+}
	CO_3^{2-}	Compostos de NH_4^+ e dos cátions de metais alcalinos
	PO_4^{3-}	Compostos de NH_4^+ e dos cátions de metais alcalinos
	OH^-	Compostos dos cátions de metais alcalinos e Ca^{2+} , Sr^{2+} e Ba^{2+}

Curvas de Solubilidade



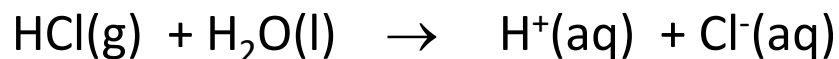
Reações de Neutralização

Ácidos, Bases e Sais

- Dissociação = os íons componentes do sólido se separam em solução.
- Ionização = uma substância neutra forma íons em solução.
- **Ácido** = substâncias que se ionizam para **formar H^+ em solução** (por exemplo, **HCl**, **HNO₃**, **CH₃CO₂H**, limão, lima, vitamina C).
- Ácidos com **um** próton ácido são chamados **monopróticos** (por exemplo, **HCl**).
- Ácidos com **dois** prótons ácidos são chamados **dipróticos** (por exemplo, **H₂SO₄**).
- Ácidos com **muitos** prótons ácidos são chamados **polipróticos** (por exemplo, **H₃PO₄**).

Reações ácido-base

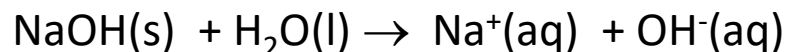
Ácidos de Bronsted - substâncias que liberam íons H^+ em solução (por exemplo, HCl , HNO_3 , CH_3CO_2H , limão, lima, vitamina C).



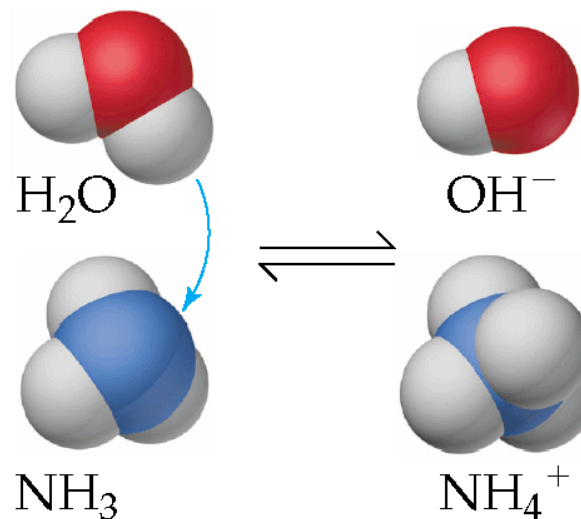
Ácidos são classificados como **fortes** ou **fracos**, dependendo da % de sua dissociação em íons, isto é, da concentração livre de $[H^+(aq)]$ presente na solução.

Reações ácido-base

Bases de Bronsted - substâncias que liberam íons OH^- em solução (por exemplo, NaOH , NH_3 , $\text{Ca}(\text{OH})_2$, leite de magnésia).

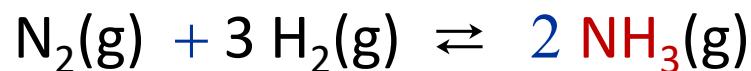
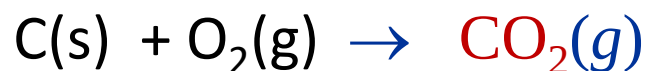


Há uma competição entre a amônia (NH_3) e o íon (OH^-) pelo proton.



Reações de Síntese

a partir dos elementos:



Condições experimentais

Algumas reações ocorrem à temperatura e pressão ambientes, enquanto outras exigem condições mais drásticas :

- altas T e P
- presença de catalisadores

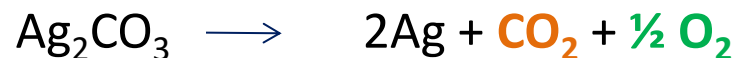
Reações de Decomposição

no estado sólido, em geral demandam energia térmica:

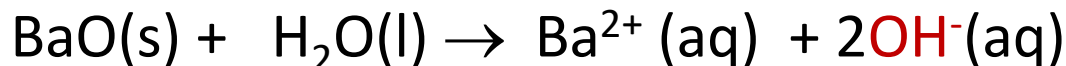
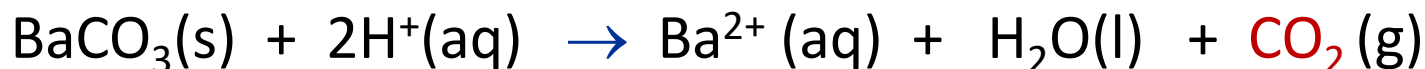


A partir da quantidade de gás liberado, pode-se determinar a pureza do material de partida.

Rendimento da reação



Em solução:



Reações Redox ou de óxido-redução

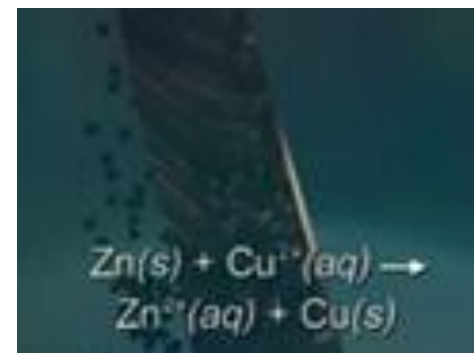
Oxidação e redução

- Quando um metal sofre corrosão, ele perde elétrons e forma cátions:



- Oxidado: o átomo, a molécula ou o íon torna-se mais carregado positivamente.
 - A oxidação corresponde à perda de elétrons.
- Reduzido: o átomo, a molécula ou o íon torna-se menos carregado positivamente.
 - A Redução envolve o ganho de elétrons.

barra de Zn mergulhada em
solução de **sulfato de cobre(II)**



Diferentes estados de oxidação do vanádio

metavanadato de amônio, NH_4VO_3 produto comercial

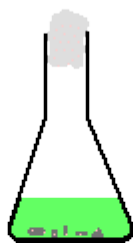
Reduzindo vanádio(V) em etapas até vanádio(II)

VO_2^+ - cátion dioxovanádio(V), $[\text{VO}_2(\text{H}_2\text{O})_4]^+$.



Oxidation state = +5

VO_2^+



This isn't a new oxidation state. The green is a mixture of the original yellow and the blue that is being produced.



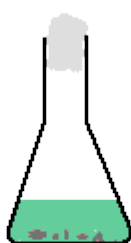
Oxidation state = +4

VO^{2+}



Oxidation state = +4

VO^{2+}



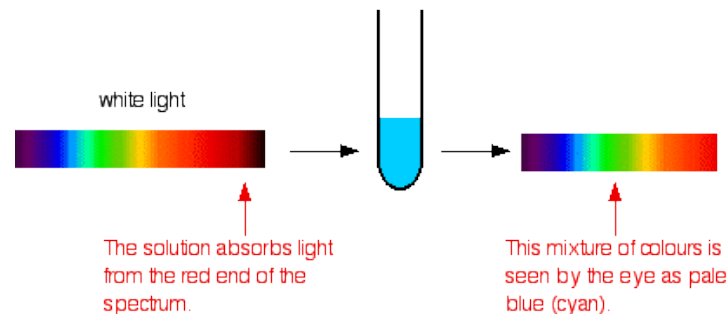
Oxidation state = +3

" $\text{V}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$ "



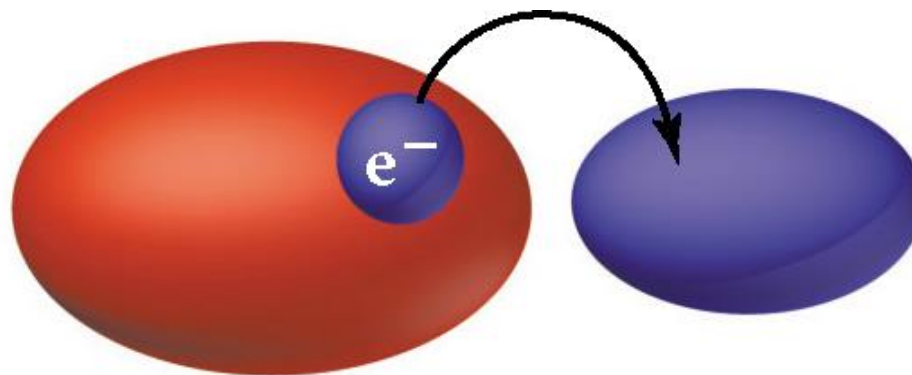
Oxidation state = +2

$\text{V}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$



Reações Redox

Oxidação e redução



Substância
oxida
(perde
elétron)

Substância
reduz
(ganha
elétron)

Reações Redox

Oxidação de metais por ácidos e sais

- Os metais são oxidados por ácidos para formarem sais:



- Durante a reação, $2\text{H}^+(\text{aq})$ é reduzido para $\text{H}_2(\text{g})$.
- Os metais também podem ser oxidados por outros metais:



- Neste caso, o Fe é oxidado para Fe^{2+} e o Ni^{2+} é reduzido para Ni.

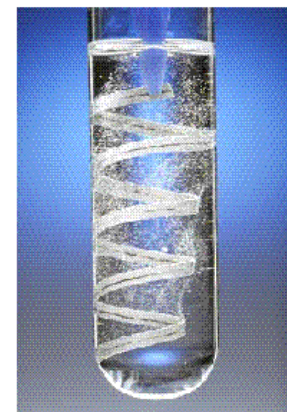
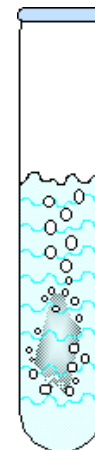


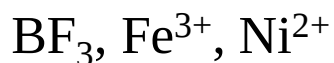
Figure 4.5 A ribbon of magnesium reacts with aqueous HCl to give H_2 gas and aqueous MgCl_2 . (C. D. Winters)

Reações de complexação

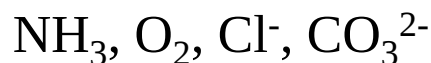
Pode ser considerada uma reação do tipo ácido-base :



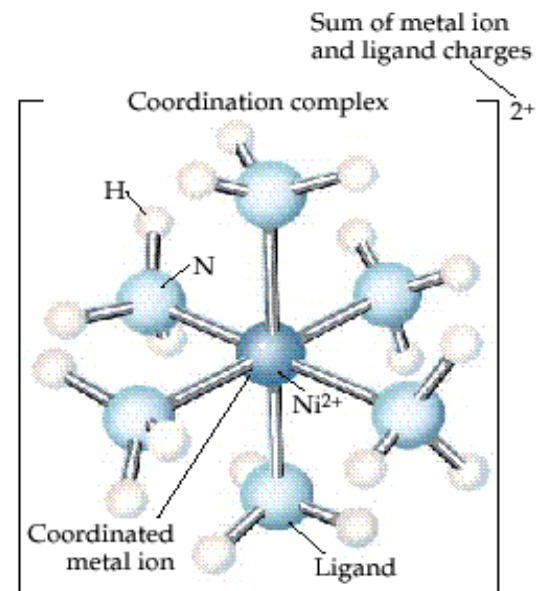
**Receptor de
par de elétrons**



**Doador de
par de elétrons**



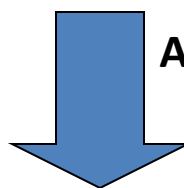
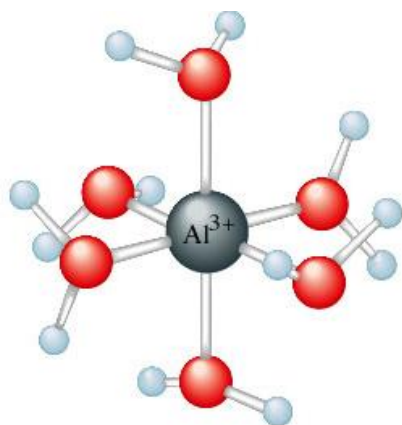
**Composto formado por
ligações covalentes
coordenadas**



EQUILÍBRIOS DE COMPLEXAÇÃO

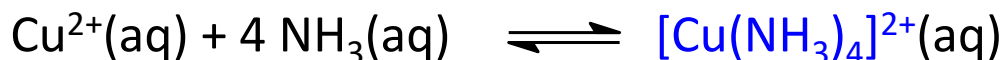
Um cátion metálico (íon central), com orbitais de valência desocupados, pode alojar pares eletrônicos de moléculas neutras ou íons negativos (ligantes ou agentes complexantes) formando **complexos** ou **compostos de coordenação**.

- Em solução aquosa os íons metálicos formam aquo-complexos



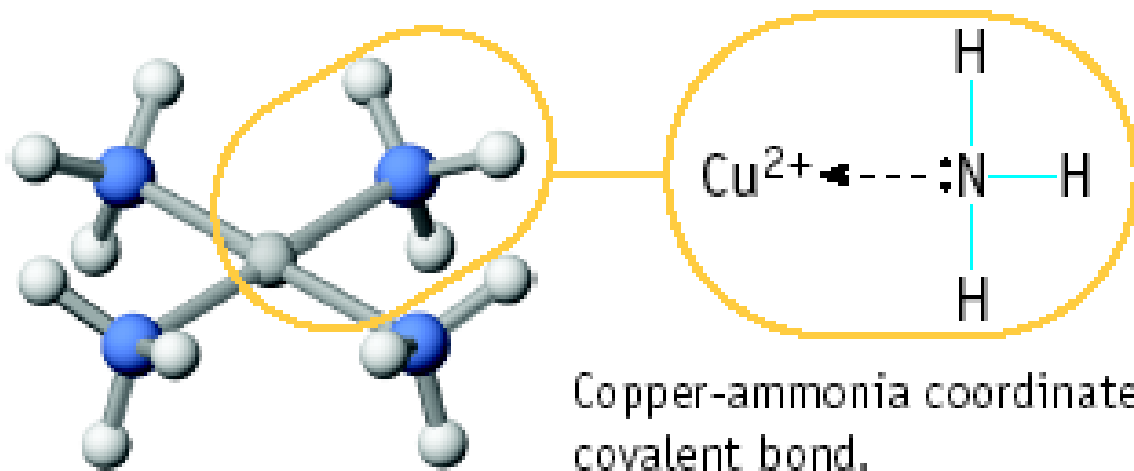
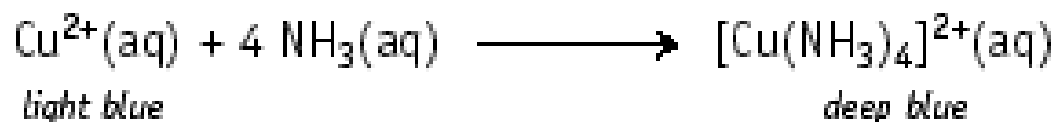
Adição de ligantes: Cl^- , NH_3

Novos complexos formados pela substituição de moléculas de água na esfera de coordenação do íon metálico

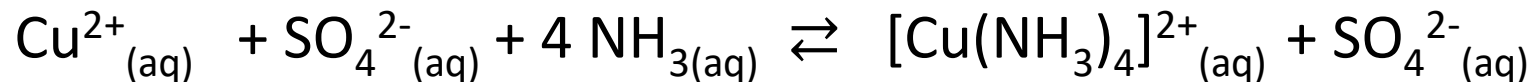
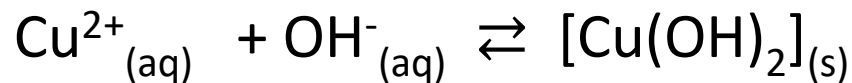
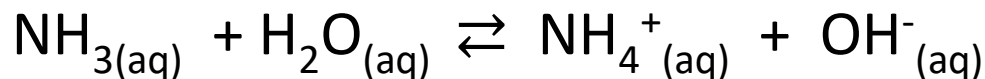
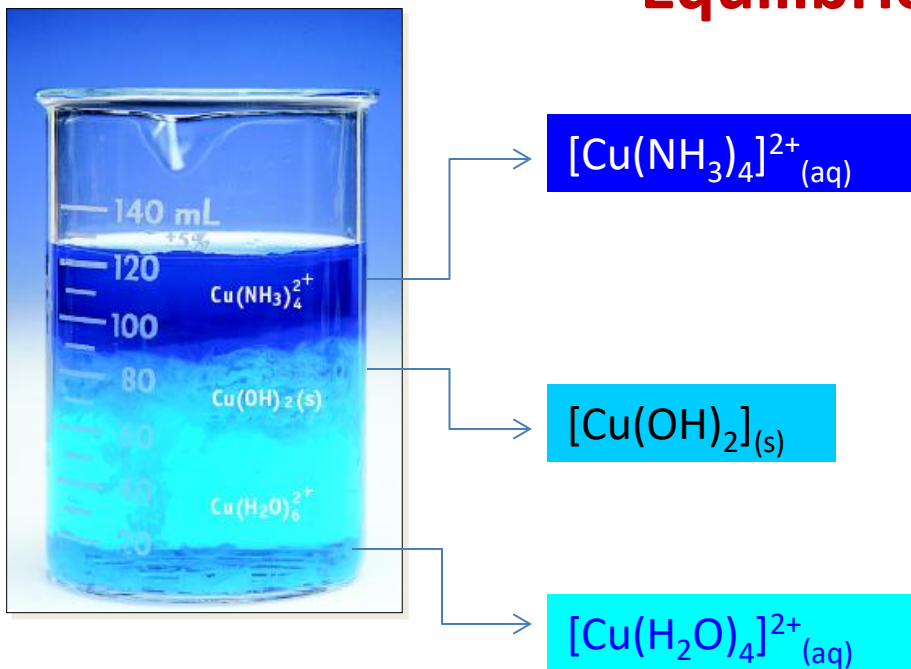


Ácidos e Bases de Lewis

A combinação de íons metálicos (**ácidos de Lewis**) com bases de Lewis como H_2O ou NH_3 leva à formação de *íons complexos*

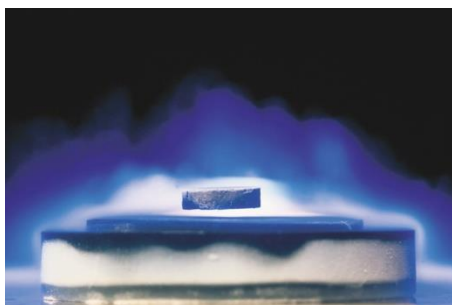


Equilíbrios Simultâneos

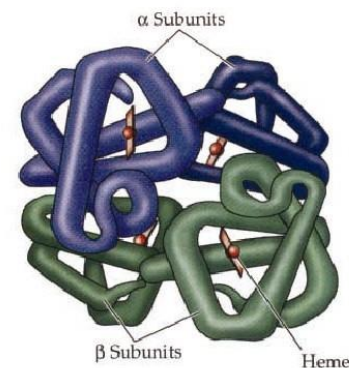
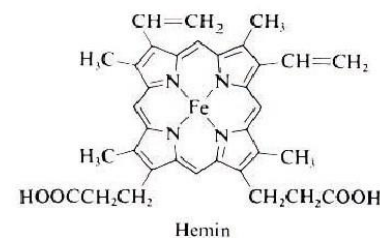
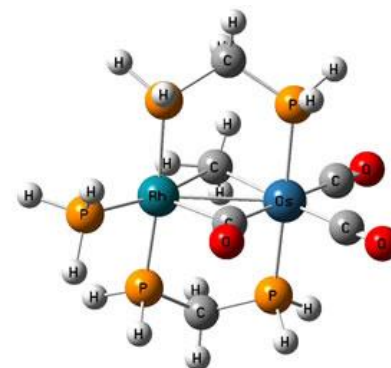
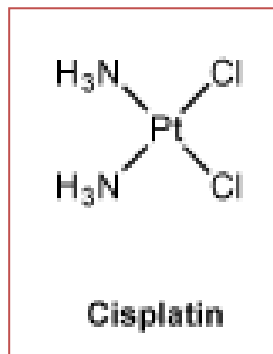


Na Química moderna, estes **complexos ou compostos de coordenação**, especialmente aqueles envolvendo **metais de transição**, ocupam papel de destaque em inúmeros campos:

- **Catálise**
- Bioinorgânica ou Química Inorgânica Biológica
- **Materiais / Biomateriais**
- Farmacologia
- **Nanotecnologia**
- etc.



Estrutura vs. Reatividade



Trabalho no LABORATÓRIO



Equipe



No Laboratório:

Vitor Zamarion
Paola Corio
+ monitores
+ técnicos

Vidrarias e Materiais



Reagentes



Instrumentos



Planejamento



Execução



Relatórios



Caderno de Laboratório



Segurança em laboratório

Trabalho consciente (planejamento prévio)

Cuidados básicos

🔍 Regras a serem obedecidas

Uso de dispositivos de proteção individual
(óculos, avental, luvas)

Capela

Aquecimento e resfriamento

Ler o arquivo:

Manual de Segurança – IQUSP

e assinar declaração, antes de entrar no laboratório



Bibliografia:

1. Shriver & Atkins – *Química Inorgânica*, Bookman, 2008, 4a. Ed. , cap. 1- Estrutura Atômica, p. 25 e cap. 2- Estrutura molecular e Ligação, p. 57.
2. D.W. Oxtoby, N.H. Nachtrieb, W.A. Freeman – *Chemistry, a science of change*, Saunders, 1994, 2a. ed.
3. P. Atkins e L. Jones - *Chemistry: Molecules, Matter, and Changes*, W.H. Freeman, New York, 1997.
4. J.C. Kotz e P. Treichel Jr. - *Chemistry and Chemical Reactivity*, Saunders College Publ., Fort Woeth, 1999, 4a. ed.
5. T.L. Brown, H.E. LeMay Jr., B.E. Bursten e J.R. Burdge, *Química – uma ciência central*, Pearson-Prentice Hall, São Paulo, 2005, 9a. ed.
6. C.E. Housecroft e A.G. Sharpe – *Inorganic Chemistry*, Prentice Hall, 2001, 1a. Ed.