

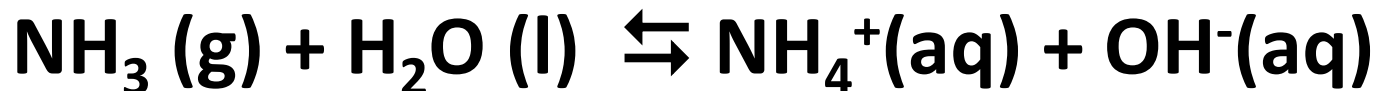
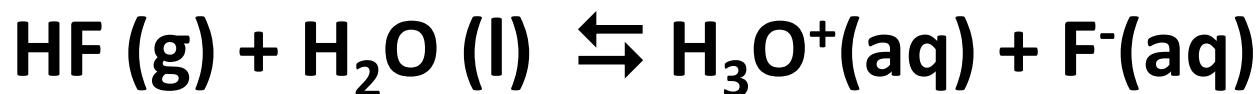
Ácidos e bases (Atkins, Princípios de Química, cap. 11)

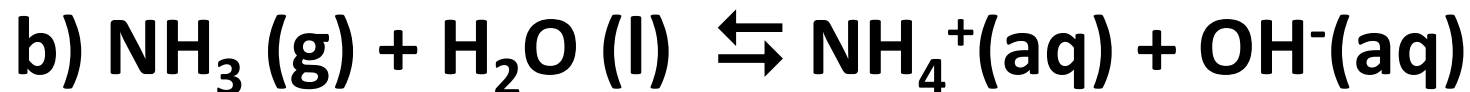
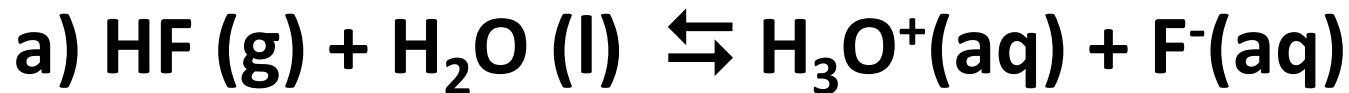
Ácidos e bases, segundo a teoria de Bronsted

Ácidos de Bronsted >> doadores de prótons

Bases de Bronsted >> receptores de prótons

Exemplos





Note que a água participa nos dois equilíbrios de forma distinta:

em "a" como receptora de H^+

em "b" como doadora de H^+

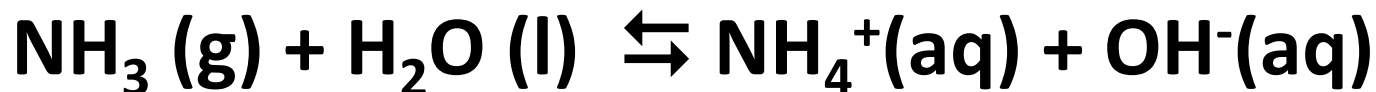
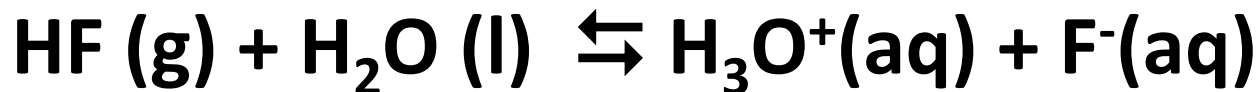
(anfiprótica)

Pense: Onde estão localizadas as cargas, majoritariamente, nas espécies envolvidas?

Onde estudar??

Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 11

Note que as equações estão corretamente indicadas na forma de **um equilíbrio** entre as espécies envolvidas

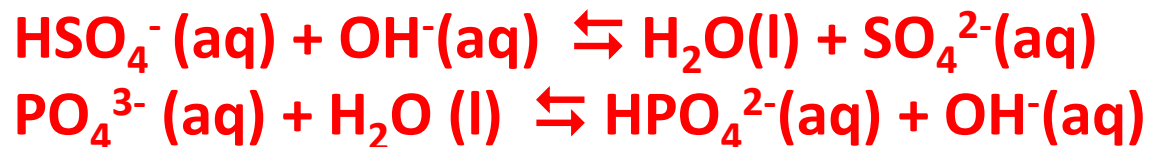


A população de espécies dependerá das **constantes destes equilíbrios**

Um ácido "forte", gera uma base conjugada "fraca" indicando que o equilíbrio estará deslocado para a direita (quando se considera o sentido do ácido doando o próton).

O inverso é válido para as bases fortes

Pense: Quem são os ácidos e bases conjugadas nas seguintes equações?

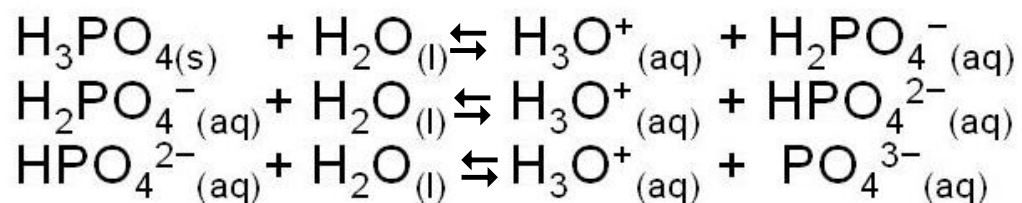
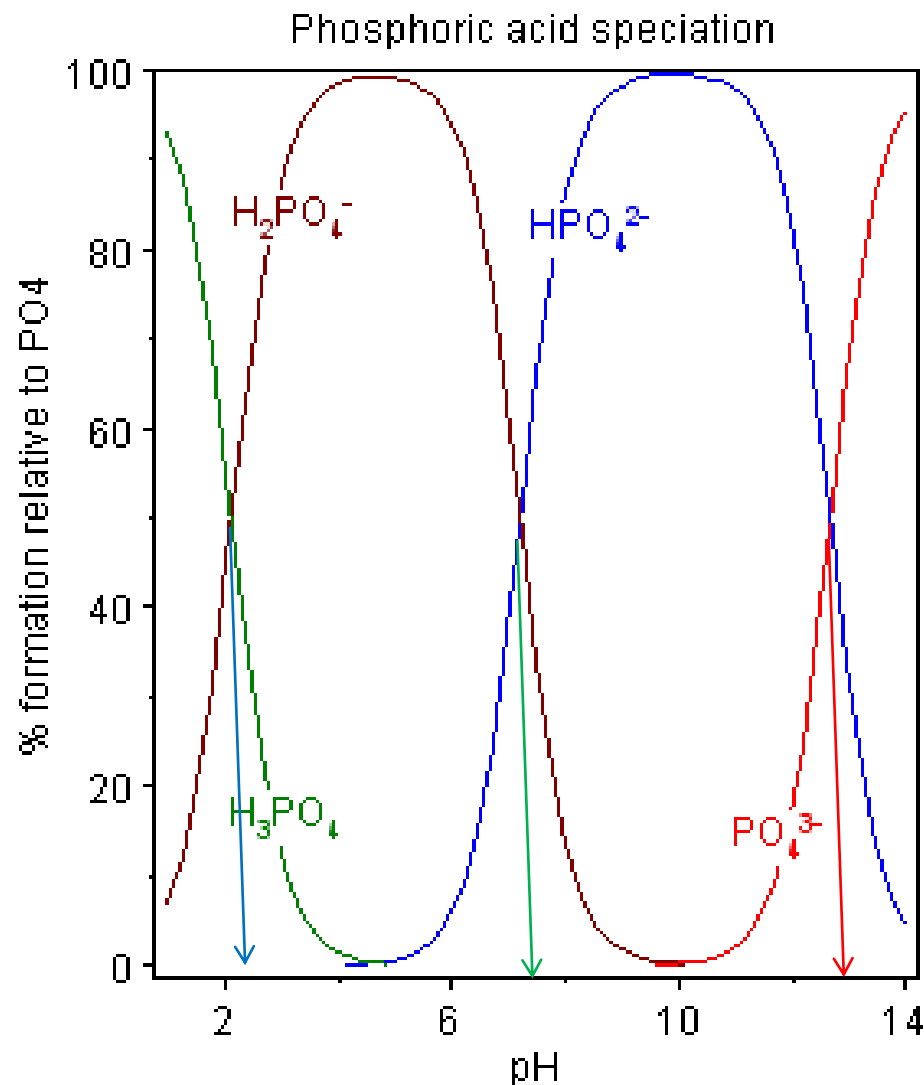
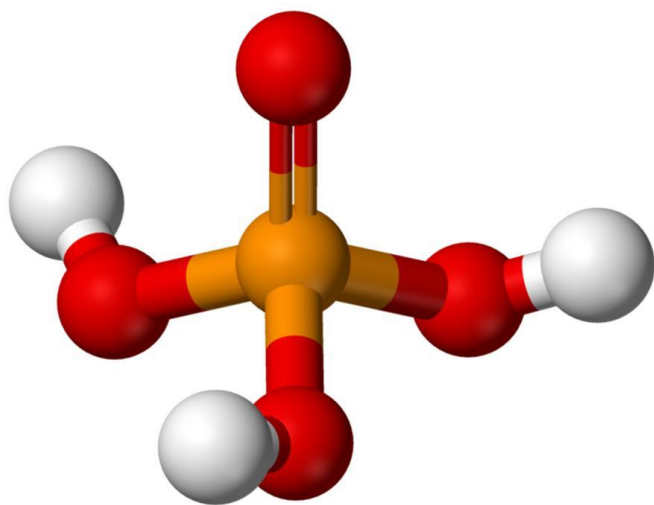


Onde estudar??

Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 11

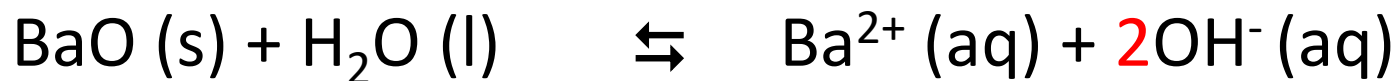
Ácidos polipróticos

Ex. ácido fosfórico



$$\begin{aligned} K_{\text{a}1} &= 7.25 \times 10^{-3} & \text{pKa} &= 2,1 \\ K_{\text{a}2} &= 6.31 \times 10^{-8} & \text{pKa} &= 7,2 \\ K_{\text{a}3} &= 4.80 \times 10^{-13} & \text{pKa} &= 12,3 \end{aligned}$$

Óxidos ácidos e óxidos básicos - Exemplos

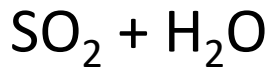
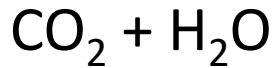


Em geral: óxidos de não metais dão origem a óxidos ácidos, por outro lado, os metais geram óxido básicos

Pense: como deve ocorrer a transferência de elétrons nas reações indicadas acima?

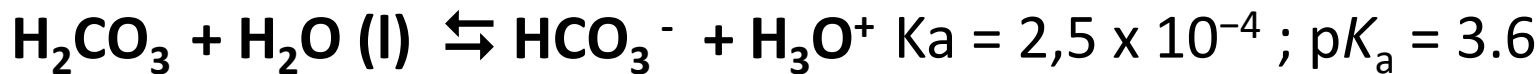
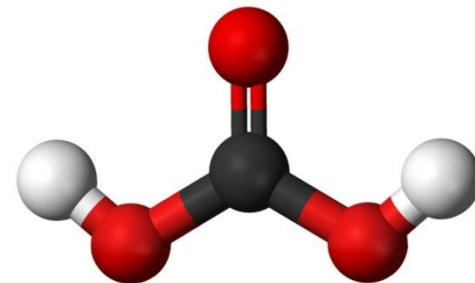
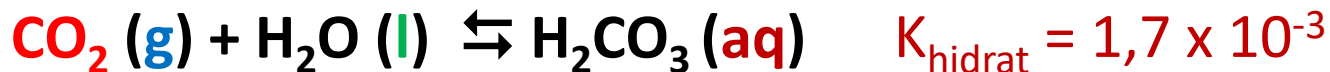
empregue as teorias conhecidas sobre ligações químicas para prever as estruturas envolvidas

Alguns oxi-ácidos importantes para sistemas biológicos e/ou com aplicações industriais - interações com a água



Pense: quais são os equilíbrios envolvidos?
Como ocorre a transferência de elétrons?

Resolução



A solubilidade do CO_2 em água é relativamente baixa ($K = 1,7 \times 10^{-3}$).

Em condições normais de pressão de CO_2 , há pouco H_2CO_3 (aq) >> consequentemente, a concentração de H_3O^+ também será baixa.

O pH de soluções aquosas de CO_2 depende da pressão parcial de CO_2

Sob pressão atmosférica (1 atm) a $\text{pCO}_2 = 3,5 \times 10^{-4}$

pCO_2 (atm)	pH	$[\text{CO}_2]$ (mol/L)	$[\text{H}_2\text{CO}_3]$ (mol/L)	$[\text{HCO}_3^-]$ (mol/L)	$[\text{CO}_3^{2-}]$ (mol/L)
$3,5 \times 10^{-4}$	5.65	$1,18 \times 10^{-5}$	$2,00 \times 10^{-8}$	$2,23 \times 10^{-6}$	$5,60 \times 10^{-11}$
$2,5 \times 10^0$	3.72	$8,40 \times 10^{-2}$	$1,43 \times 10^{-4}$	$1,89 \times 10^{-4}$	$5,61 \times 10^{-11}$

1 atm de ar

Resolução >> $\text{SO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ (encontre informação na literatura sobre as constantes dos equilíbrios de SO_2 em água)

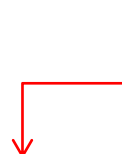
Ácidos e bases segundo as definições de LEWIS

>> **Ácidos** (A) recebem um par de elétrons

>> **Bases** (B:) doam um par de elétrons

Tipicamente, quando se mistura: $A + B: \rightleftharpoons A-B$

ligação covalente



Pense: na definição ácido-base de Lewis, como se enquadra a mistura $H^+ + H_2O$

Ácidos e bases de Lewis não necessitam da definição de Bronsted de transferência de prótons para serem considerados como ácidos ou bases

O exemplo dos compostos de Boro

B >> 5 elétrons

$1s^2$

$2s^2$ $2p^1$

O Boro forma compostos como o BF_3 .

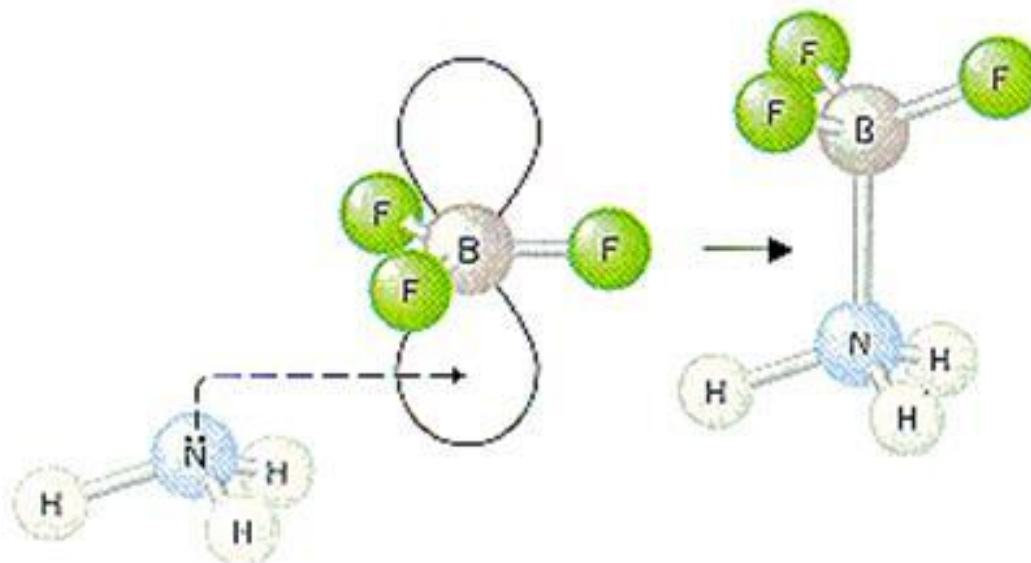
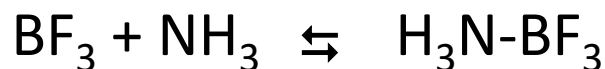
Pense: qual a estrutura do BF_3 ?

Quais seriam os orbitais envolvidos na ligação B-C??

Pode-se considerar um híbrido sp^2 para o B, formando 3 ligações σ sp^2 -p, sendo que um orbital p do B permanece vazio

O orbital vazio pode receber um par de elétrons.

Por exemplo

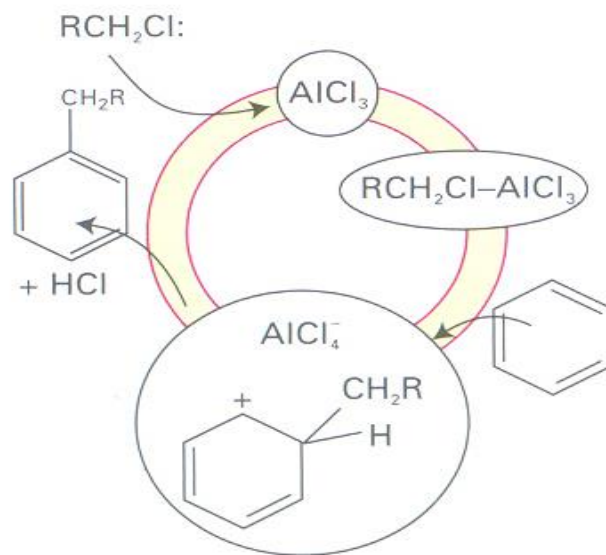


BF_3 é um ácido de Lewis bastante forte e usado em reações químicas, inclusive em processos industriais de síntese



Igualmente, o Al, da mesma família do B, forma ácidos de Lewis de extrema importância em reações em escala industrial

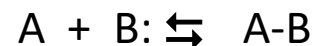
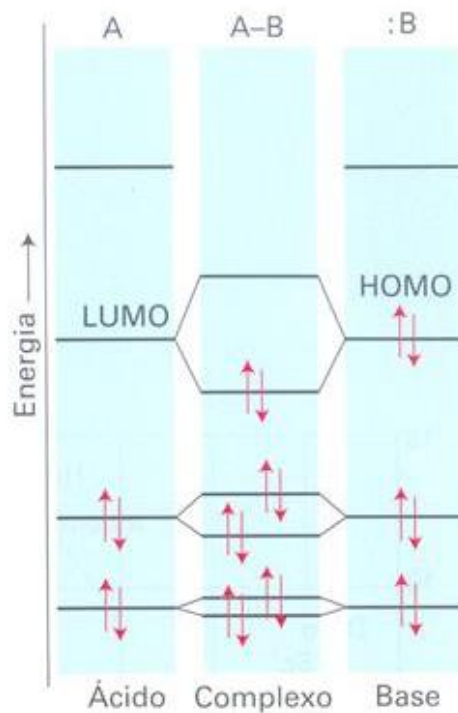
**ex. Alquilação
de Friedel-Crafts**
(com frequência se usa
 AlCl_3 no lugar de BF_3 ,
pois é mais barato)



Pense: Como é a distribuição de elétrons no AlCl_3 e como este composto atua como ácido de Lewis? Qual seria o intermediário formado?

O complexo ácido - base de Lewis leva a formação de uma molécula mais estável

O orbital HOMO da base (cheio) e o LUMO do ácido (vazio), ao interagirem, dão origem a dois novos orbitais moleculares, sendo que o orbital ligante (ocupado pelo par de elétrons originalmente da base) estará num patamar de energia mais baixo do que os orbitais precursores



Exercícios no cap ácido base do Atkins (cap 11)

11.1, 11.2, 11.4, 11.11, 11.12, 11.13, 11.39, 11.47, 11.48