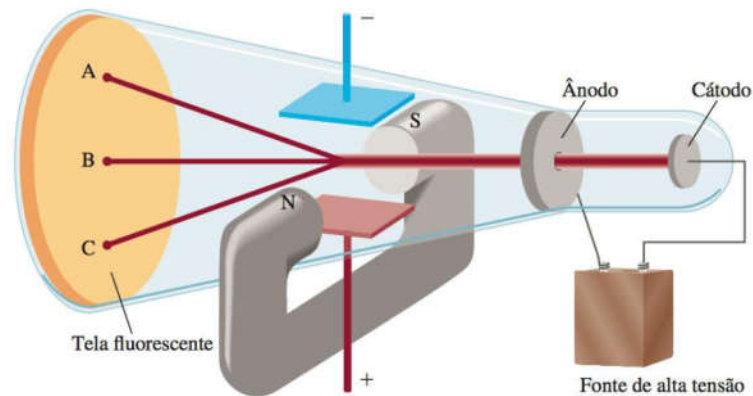


Aula 2 QE

Estrutura do Átomo

Cap. 2 e 7 R. Chang

Elétron



Carga do Elétron

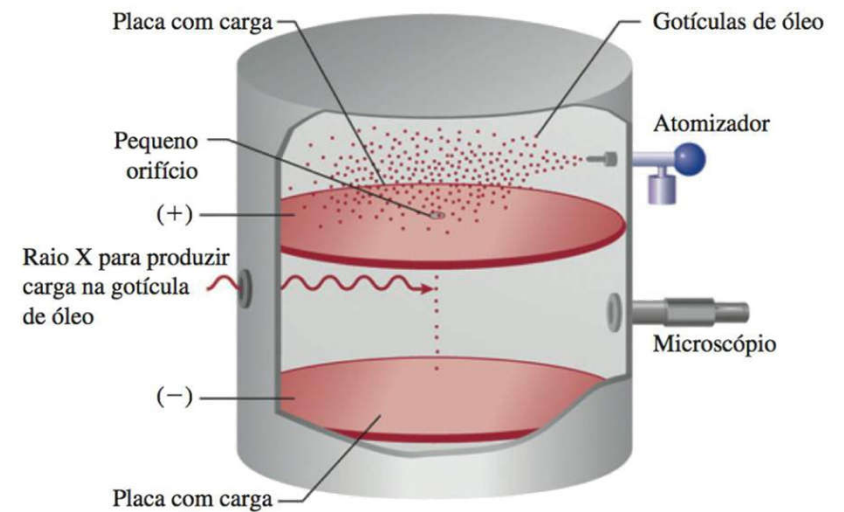


Figura 2.5 Diagrama esquemático da experiência da gota de óleo de Millikan.

R. A. Millikan (1856-1953). Físico Americano Nobel de Física em 1933.

$$1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \quad 9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$$

J. J. Thomson (1856-1940). Físico Inglês Nobel de Física em 1906.

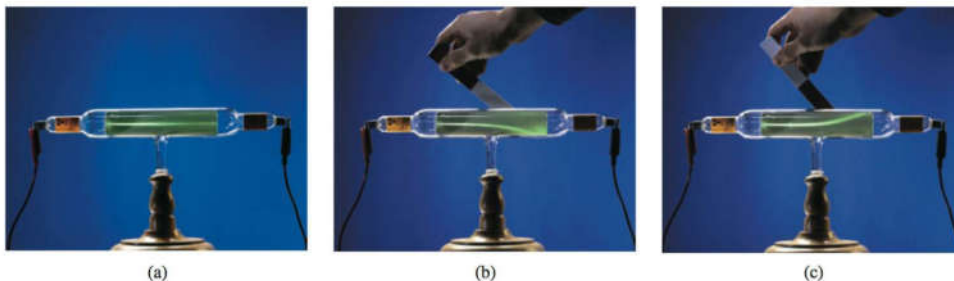
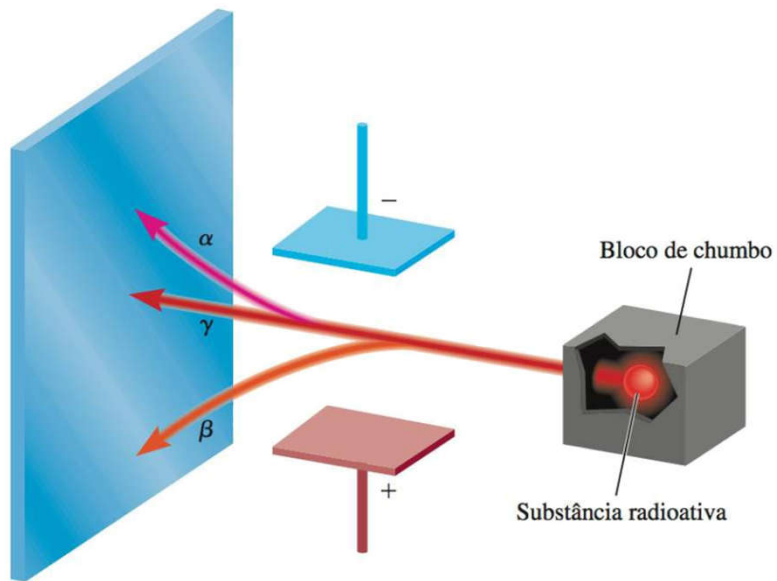
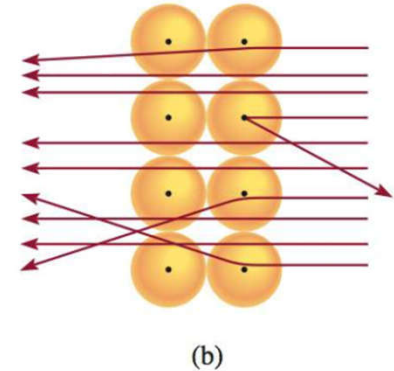
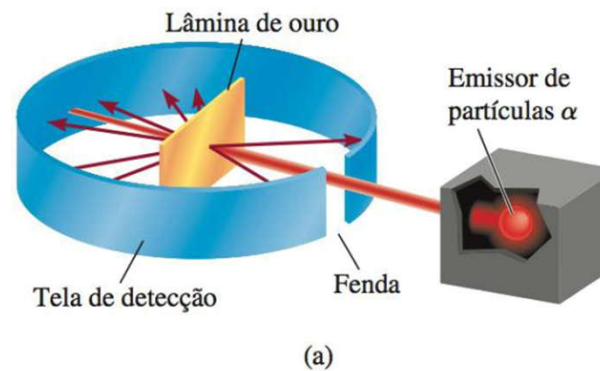


Figura 2.4 (a) Um raio catódico produzido em uma ampola seguindo do cátodo (esquerda) para o ânodo (direita). O raio em si é invisível, mas a fluorescência do revestimento de sulfeto de zinco sobre o vidro faz com que apareça em verde. (b) O raio catódico é dobrado para baixo quando o ímã se desloca na sua direção (c) Quando a polaridade do ímã é invertida, o raio curva-se na direção oposta.

Partículas α , β e γ .

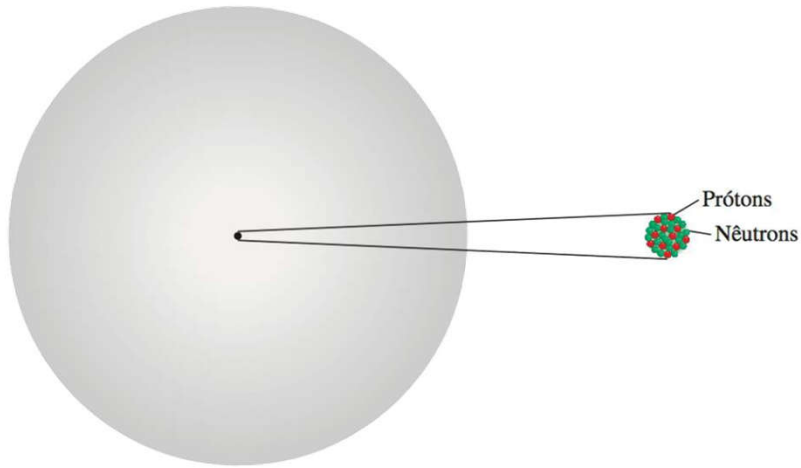


α hélio duplamente ionizado
 β elétron
 γ neutron



E. Rutherford (1856-1953). Físico Neozelandês Nobel de Química em 1908.

Neutron



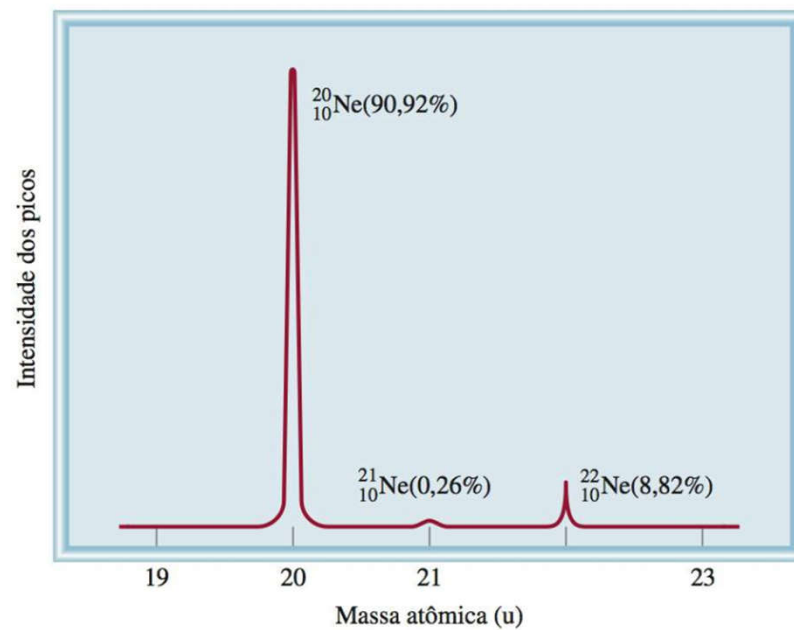
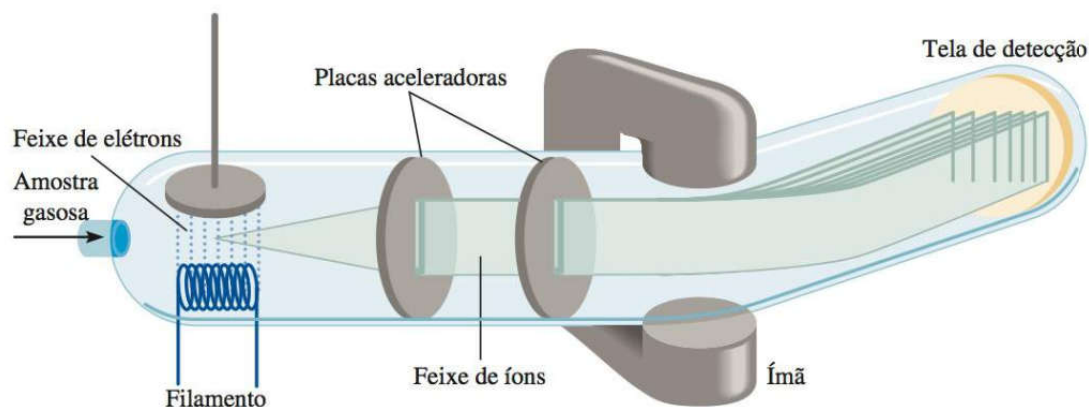
J. Chadwick (1891-1972). Físico Inglês Nobel de Física em 1935.

Tabela 2.1 Massa e carga das partículas subatômicas

Partícula	Massa (g)	Carga	
		Coulomb	Unidades de carga
Elétron*	$9,10938 \times 10^{-28}$	$-1,6022 \times 10^{-19}$	-1
Próton	$1,67262 \times 10^{-24}$	$+1,6022 \times 10^{-19}$	+1
Nêutron	$1,67493 \times 10^{-24}$	0	0

Número de massa $\rightarrow$
 Número atômico $\rightarrow$ ${}^A_Z\text{X}$ $A = Z + N$

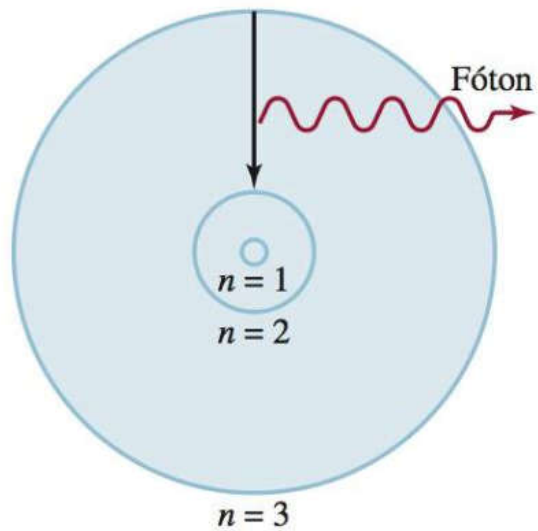
Espectrômetro de massas



Abundância Isotópica

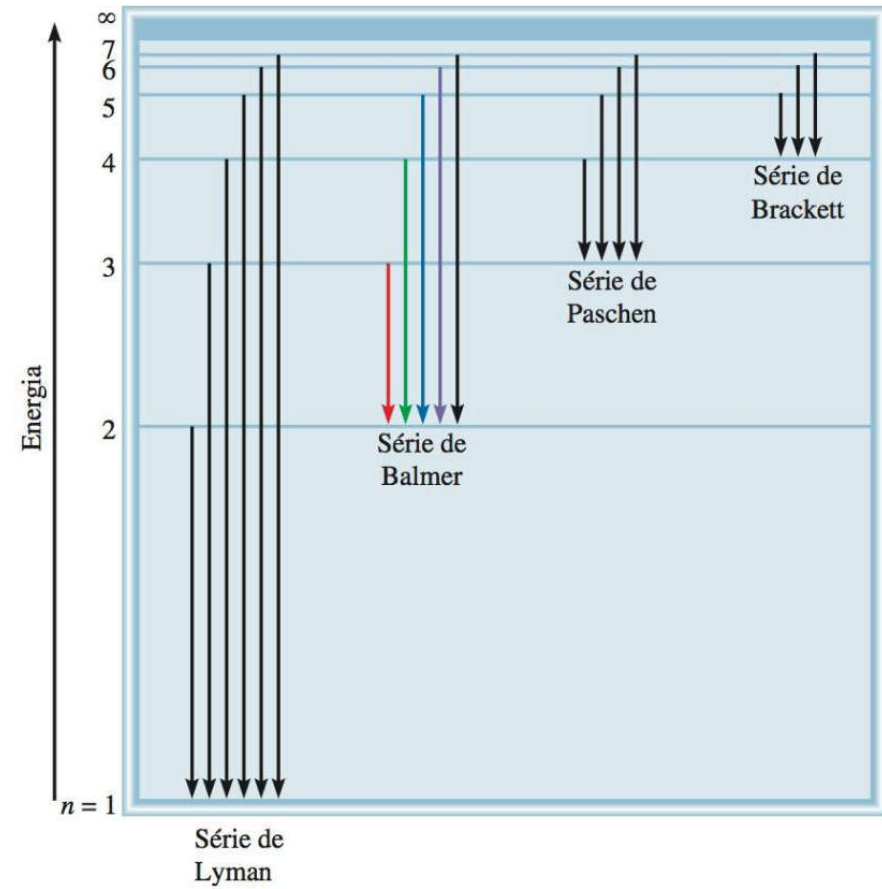
F. W. Aston (1877-1945). Químico e Físico Inglês Nobel de Química em 1922.

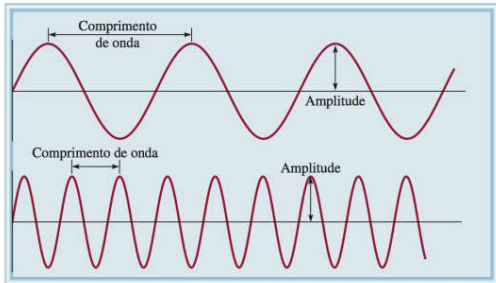
Modelo de Bohr (Teoria Quântica)



$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

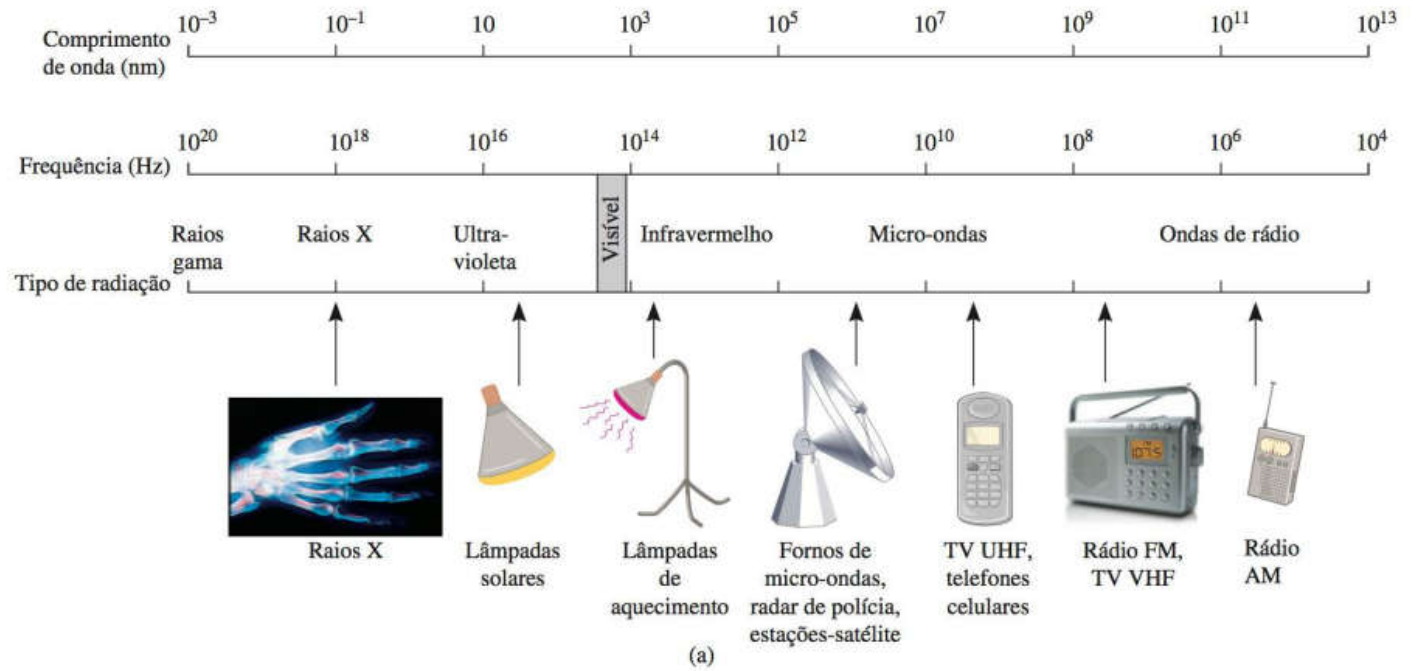
Rydberg





$$E = h\nu$$

$$E = hc/\lambda$$



(b)

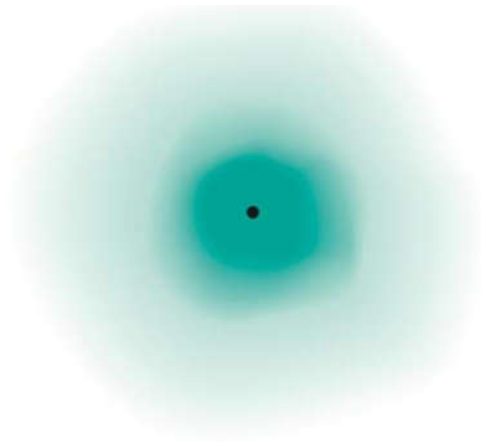


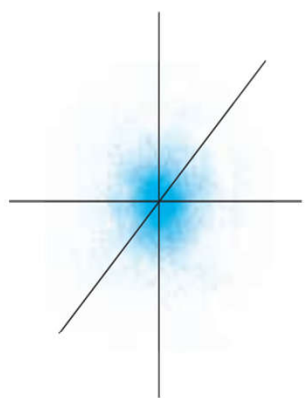
Figura 7.15 Representação da distribuição de densidade eletrônica ao redor do núcleo de um átomo de hidrogênio. Há uma elevada probabilidade de encontrar o elétron mais perto do núcleo.

Densidade eletrônica → região de maior probabilidade de encontrar o elétron



Orbital

N^{os} Quânticos



Distribuição da
densidade eletrônica



1s

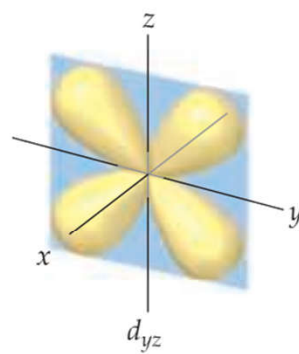


2s

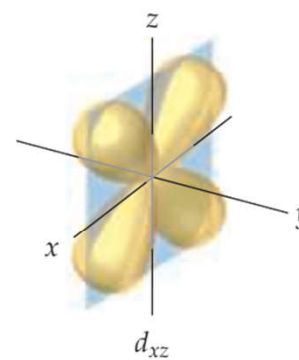


3s

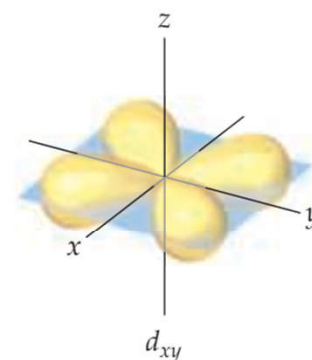
Contorno



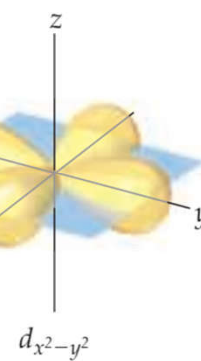
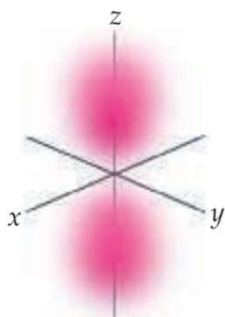
d_{yz}



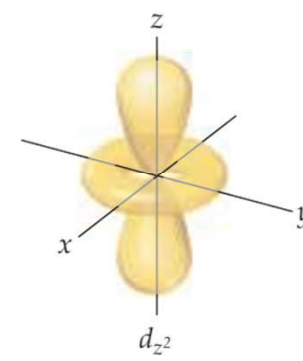
d_{xz}



d_{xy}

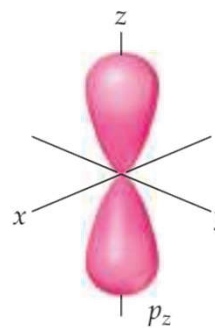


$d_{x^2-y^2}$

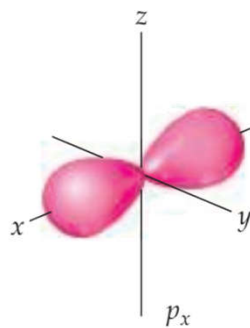


d_{z^2}

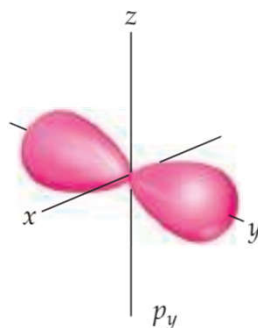
(a)



p_z



p_x



p_y

(b)

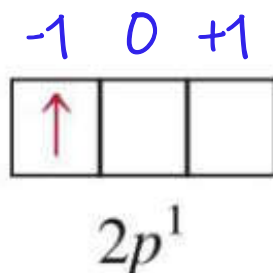
Número quântico principal (n)

Número quântico de momento angular (ℓ)

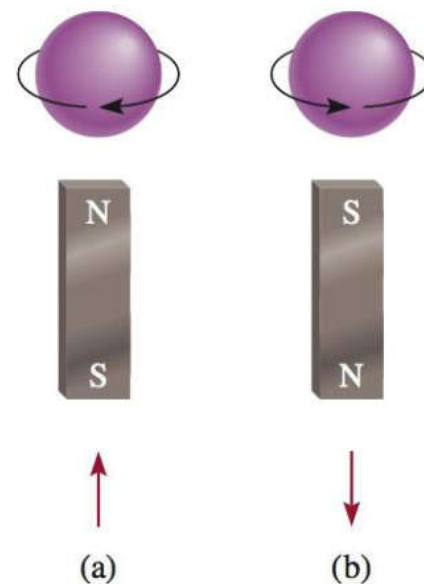
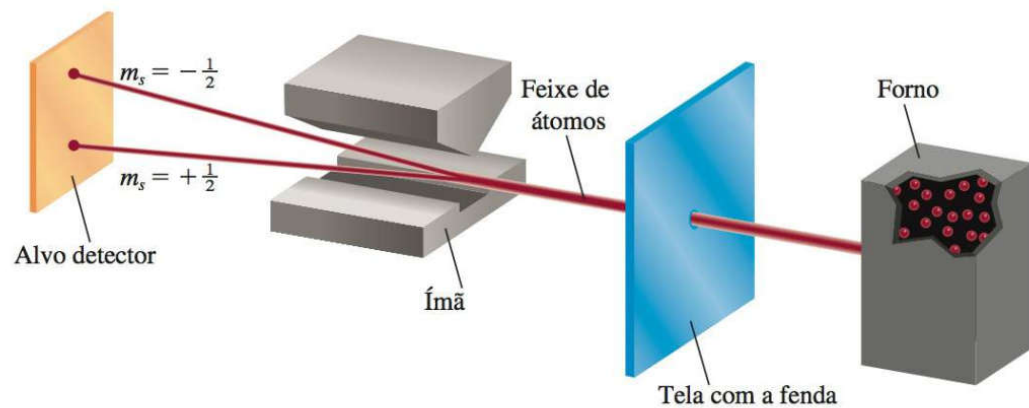
ℓ	0	1	2	3
Nome do orbital	s	p	d	f

Número quântico magnético ($m\ell$)

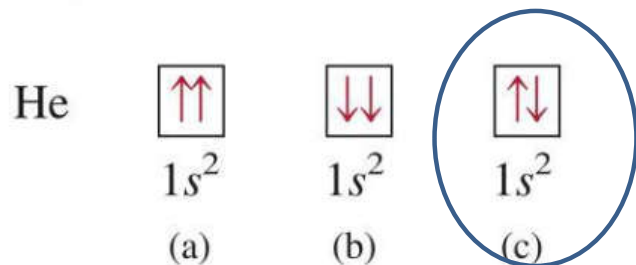
$-\ell, (-\ell + 1), \dots 0, \dots (+\ell - 1), +\ell$ Orientação do orbital no espaço



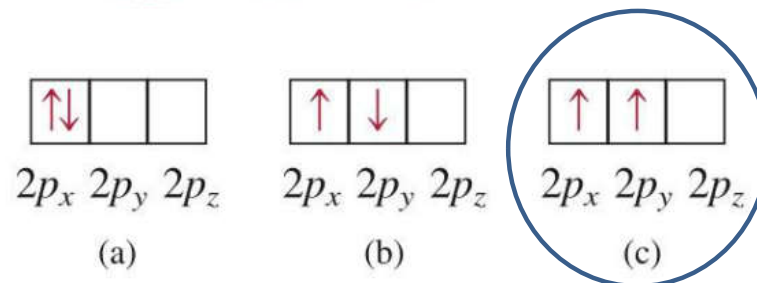
Número quântico de spin eletrônico (m_s)



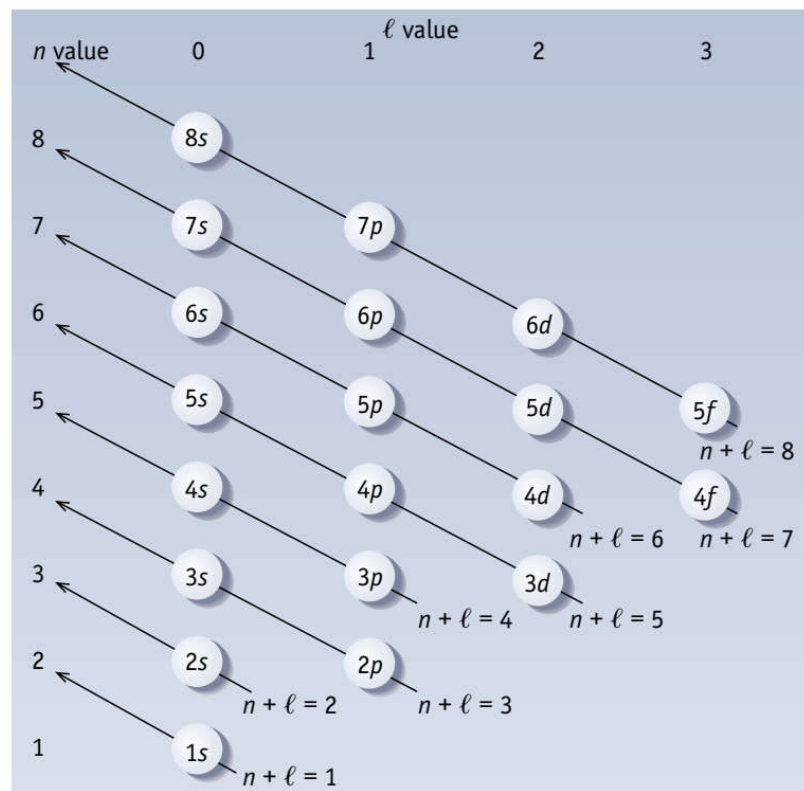
Princípio de exclusão de Pauli

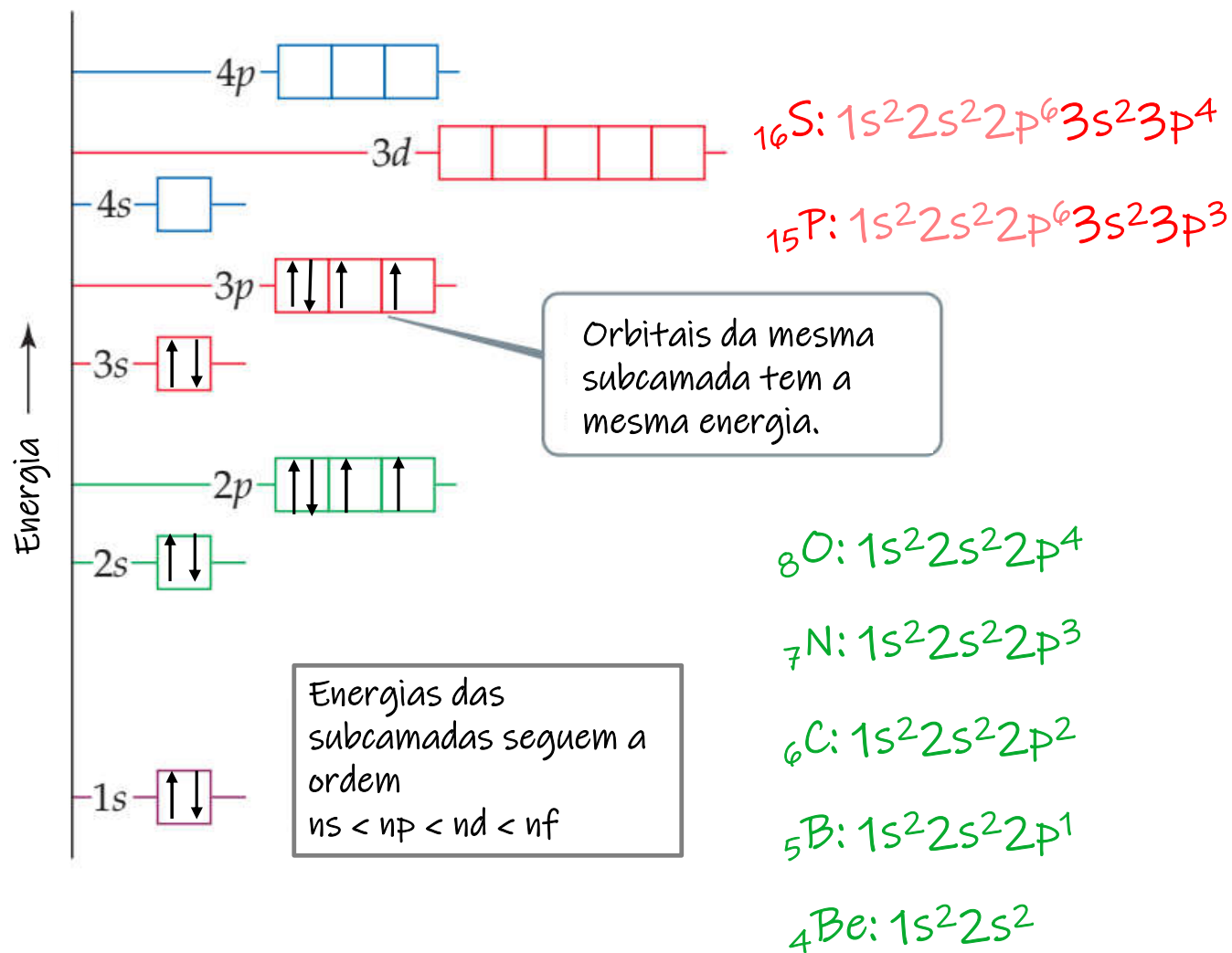


Regra de Hund



Elétrons, Níveis de Energia e Subníveis de Energia (Orbitais)





Diamagnetismo e paramagnetismo

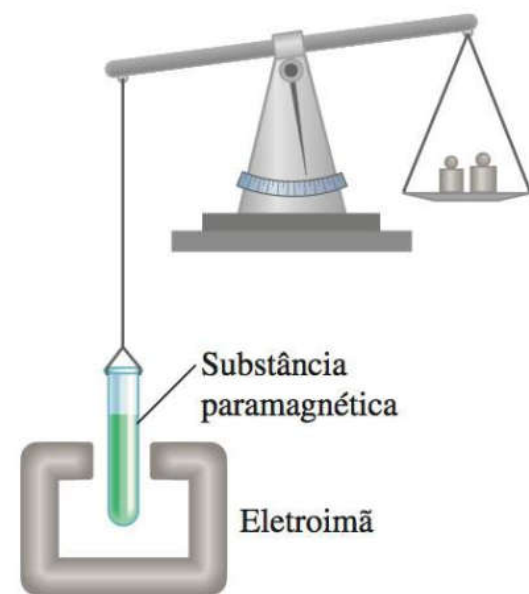
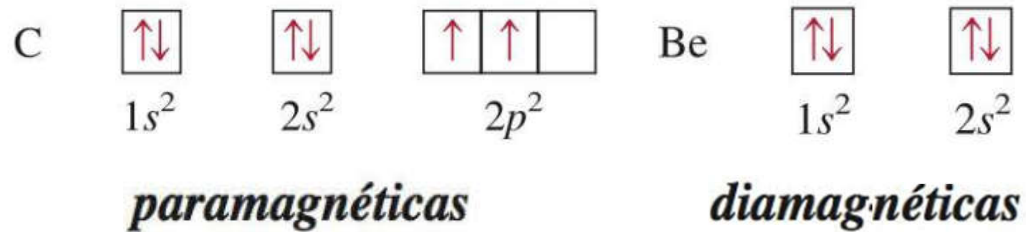
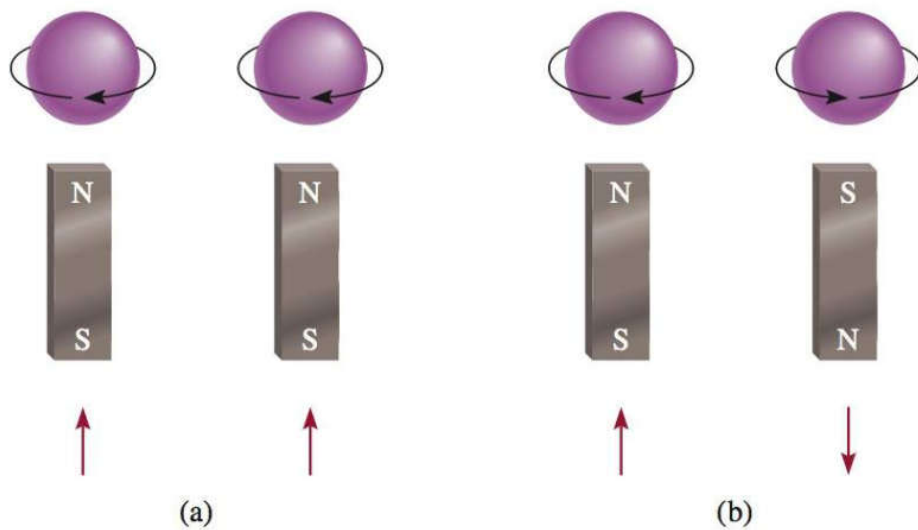


Tabela periódica

Cap 6, 7 Brown

← Aumento no caráter metálico

Aumento no caráter metálico ↓

1A 1	2A 2																	3A 13	4A 14	5A 15	6A 16	7A 17	8A 18
1 H																		5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3 Li	4 Be																	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
11 Na	12 Mg	3B 3	4B 4	5B 5	6B 6	7B 7	8B 8 9 10			1B 11	2B 12							31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn							49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd							81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
55 Cs	56 Ba		71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg											
87 Fr	88 Ra	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110	111	112								114		116		

	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
	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

Metals: Yellow background
Metalloids: Pink background
Non-metals: Light blue background

Figura 7.12 Tabela periódica, mostrando metais, metalóides, não-metais e tendências no caráter metálico.

Carga Nuclear Efetiva

- A tabela periódica moderna: organiza os elementos em ordem crescente de número atômico.

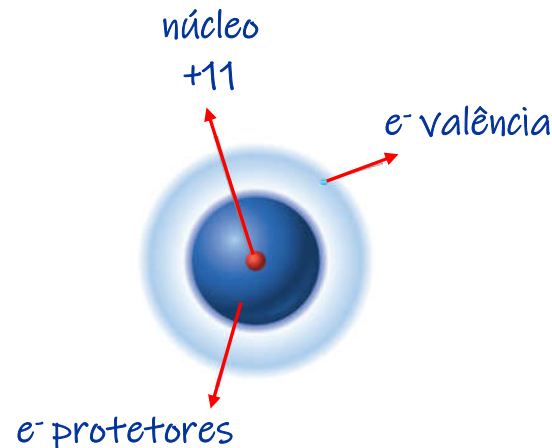
Carga nuclear efetiva

- A carga nuclear efetiva é a carga sofrida por um elétron em um átomo polieletrônico.
- A carga nuclear efetiva não é igual à carga no núcleo devido ao efeito dos elétrons internos.

$$Z_{\text{eff}} = Z - S$$

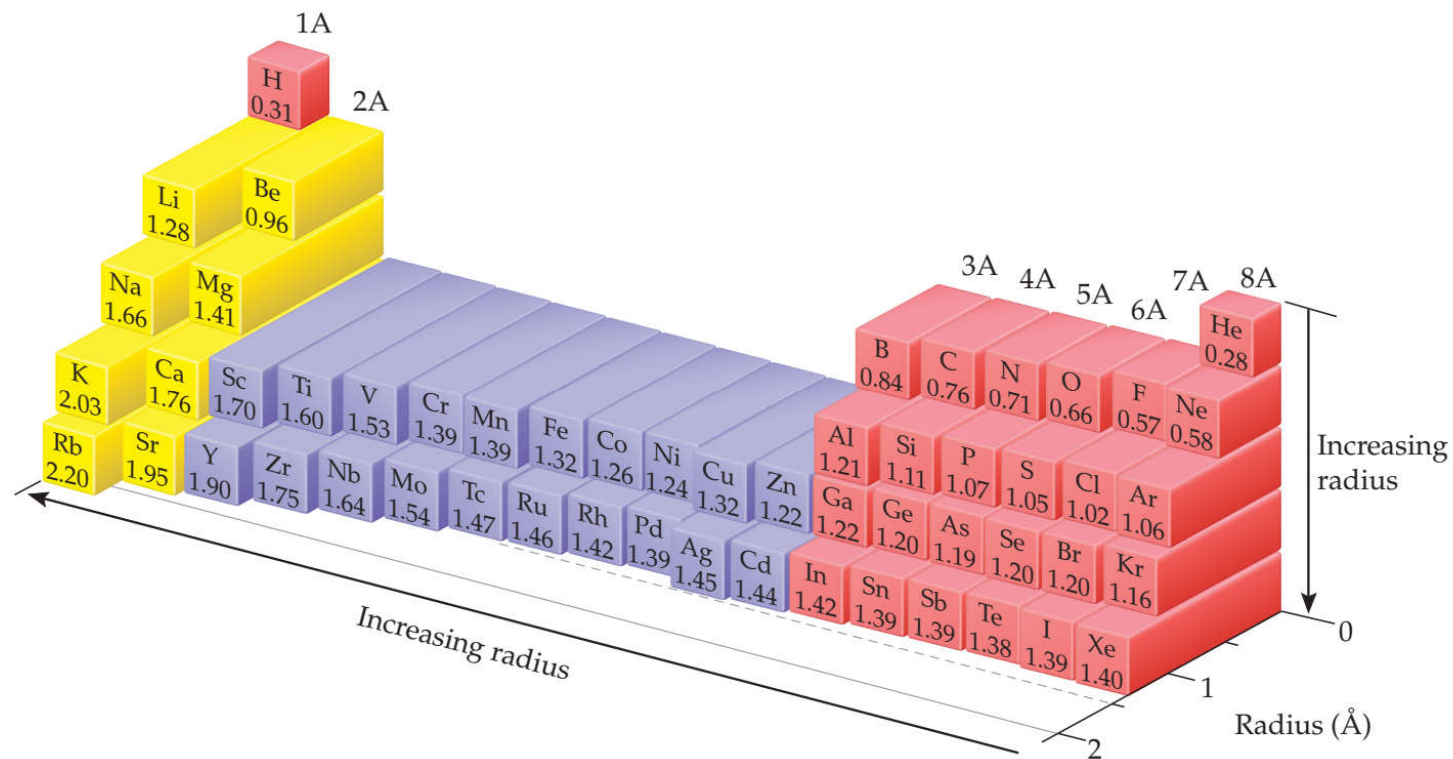
número médio de elétrons protetores

aumenta a distância do núcleo



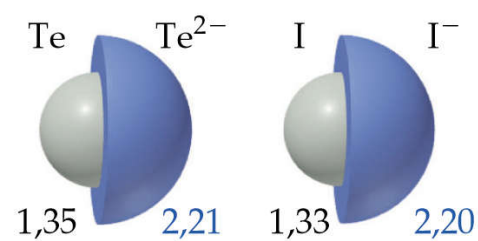
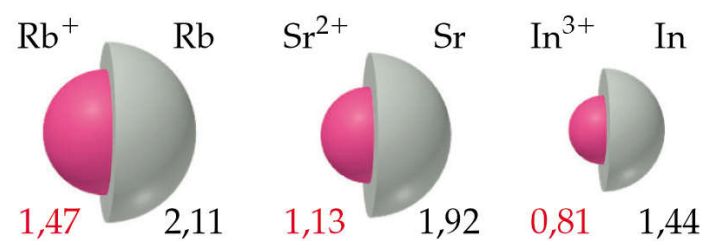
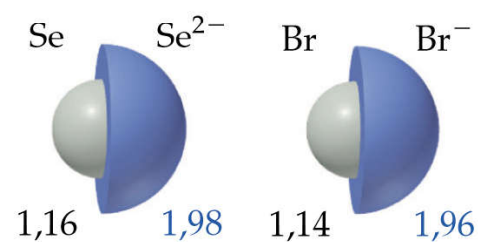
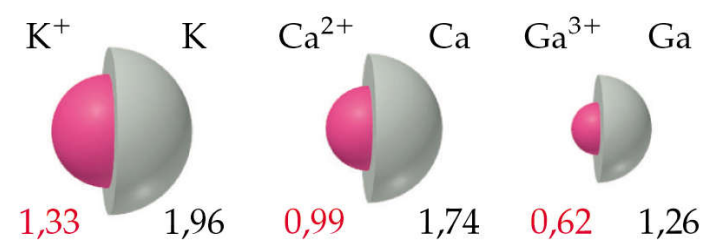
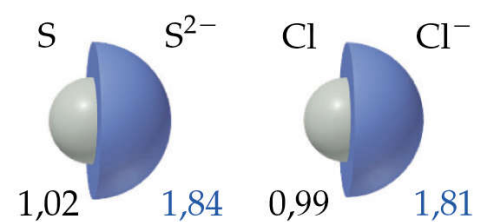
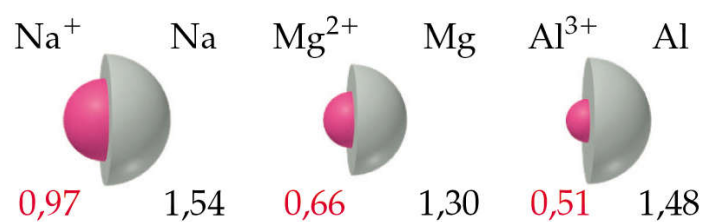
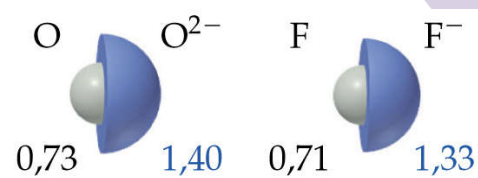
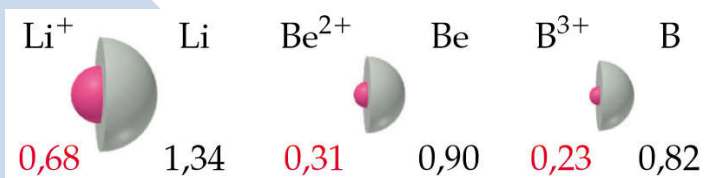
Tamanho dos átomos e dos íons

Tendências periódicas nos raios atômicos



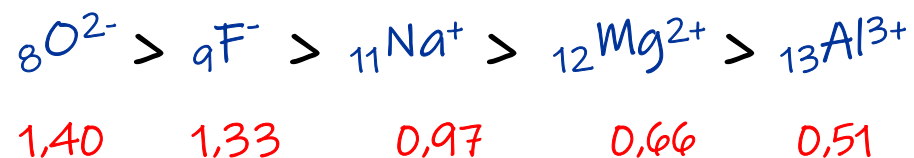
Tamanho dos átomos e dos íons

 Na ⁺ 1.16	 Mg ²⁺ 0.86	 Al ³⁺ 0.68	 S ²⁻ 1.70
 Na 1.66	 Mg 1.41	 Al 1.21	 S 1.05



Tamanho dos átomos e dos íons

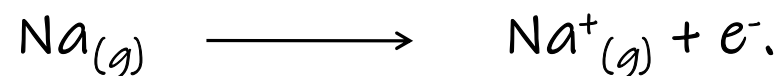
Espécies Isoeletrônicas



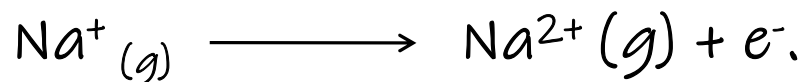
Qual íon tem raio menor Fe^{2+} ou Fe^{3+} ?

Energia de ionização

- A primeira energia de ionização, I_1 , é a quantidade de energia necessária para remover um elétron de um átomo gasoso:



- A segunda energia de ionização, I_2 , é a energia necessária para remover um elétron de um íon gasoso:



- Quanto maior a energia de ionização, maior é a dificuldade para se remover o elétron.

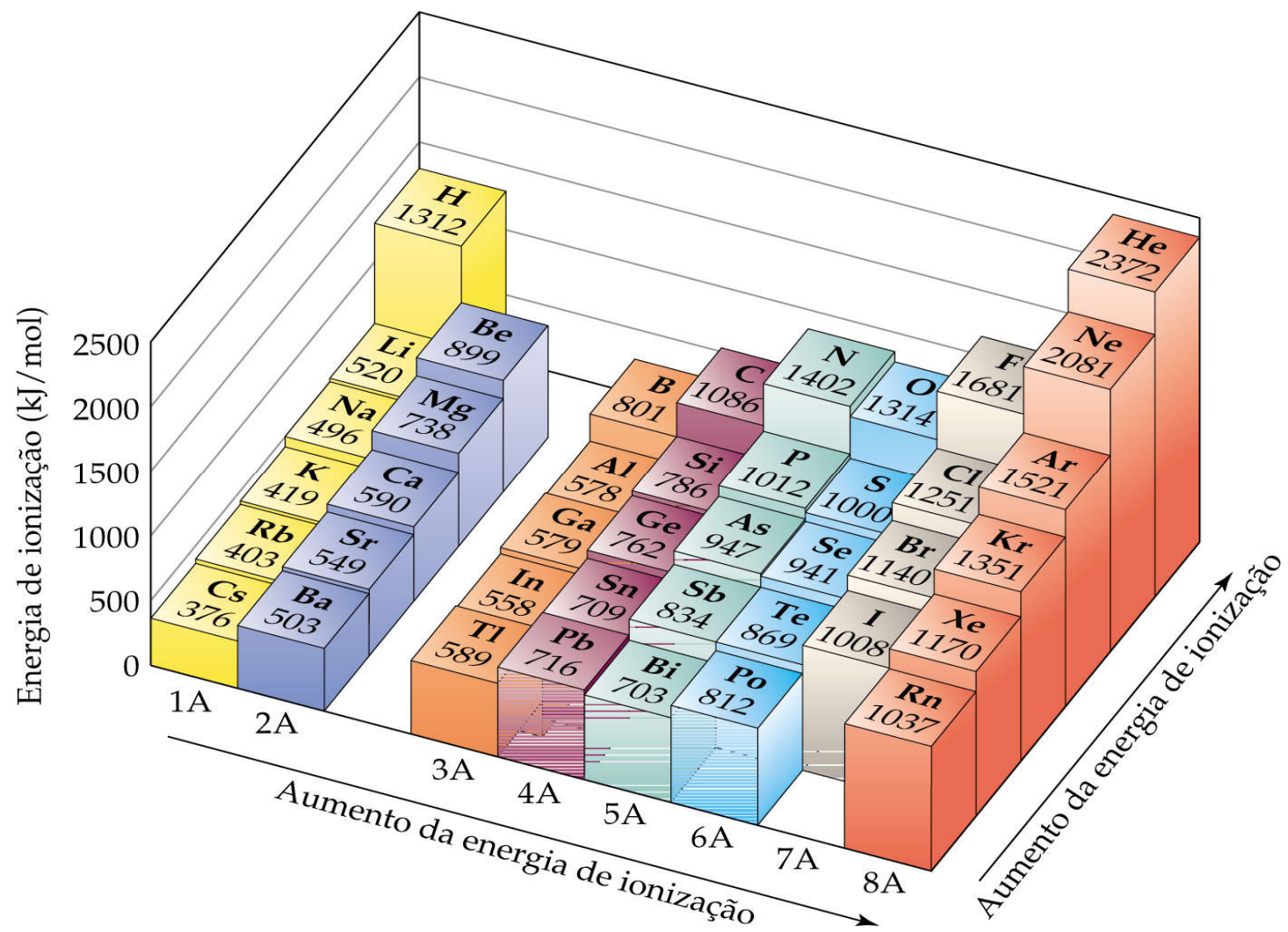
Energia de ionização

Variações nas energias de ionização sucessivas

- Há um acentuado aumento na energia de ionização quando um elétron mais interno é removido.

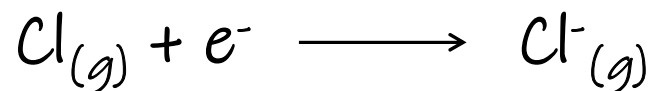
TABELA 7.2 Valores das energias de ionização sucessivas, I , para os elementos do sódio até o argônio (kJ/mol)

Elemento	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	496	4.560	elétrons dos níveis mais internos				
Mg	738	1.450	7.730				
Al	578	1.820	2.750	11.600			
Si	786	1.580	3.230	4.360	16.100		
P	1.012	1.900	2.910	4.960	6.270	22.200	
S	1.000	2.250	3.360	4.560	7.010	8.500	27.100
Cl	1.251	2.300	3.820	5.160	6.540	9.460	11.000
Ar	1.521	2.670	3.930	5.770	7.240	8.780	12.000

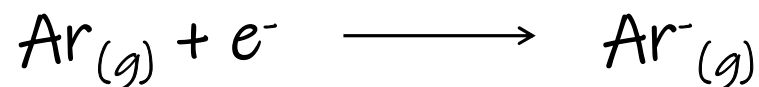


Afinidades eletrônicas

- A afinidade eletrônica é o oposto da energia de ionização.
- A afinidade eletrônica é a alteração de energia quando um átomo gasoso ganha um elétron para formar um íon gasoso:



- A afinidade eletrônica pode ser tanto exotérmica (como o exemplo acima) quanto endotérmica:



Afinidades eletrônicas

H -73							He >0
Li -60	Be >0	B -27	C -122	N >0	O -141	F -328	Ne >0
Na -53	Mg >0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar >0
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr >0
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe >0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A

Ligações químicas, símbolos de Lewis e a regra do octeto

Símbolos de Lewis

TABELA 8.1 Símbolos de Lewis

Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
Li	[He]2s ¹	Li ·	Na	[Ne]3s ¹	Na ·
Be	[He]2s ²	·Be·	Mg	[Ne]3s ²	·Mg·
B	[He]2s ² 2p ¹	·B·	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	·Al·
C	[He]2s ² 2p ²	·C·	Si	[Ne]3s ² 3p ²	·Si·
N	[He]2s ² 2p ³	·N:	P	[Ne]3s ² 3p ³	·P:
O	[He]2s ² 2p ⁴	:O:	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	:S:
F	[He]2s ² 2p ⁵	·F:	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	·Cl:
Ne	[He]2s ² 2p ⁶	:Ne:	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	:Ar:

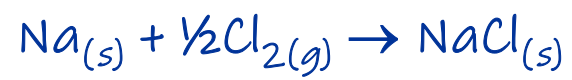
Ligações químicas, símbolos de Lewis e a regra do octeto

A regra do octeto

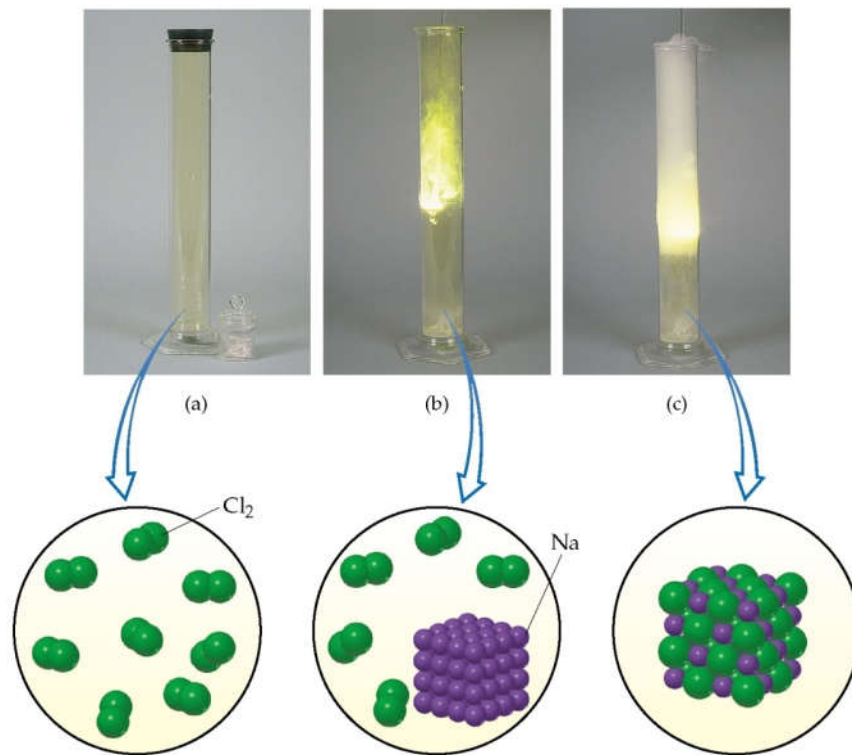
- Todos os gases nobres, com exceção do He, têm uma configuração s^2p^6 .
- A regra do octeto: os átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que eles estejam rodeados por 8 elétrons de valência (4 pares de elétrons).
- **Cuidado:** existem várias exceções à regra do octeto.

Ligação iônica

Considere a reação entre o sódio e o cloro:



$$\Delta H_f^\circ = -410,9 \text{ kJ}$$



Ligação iônica

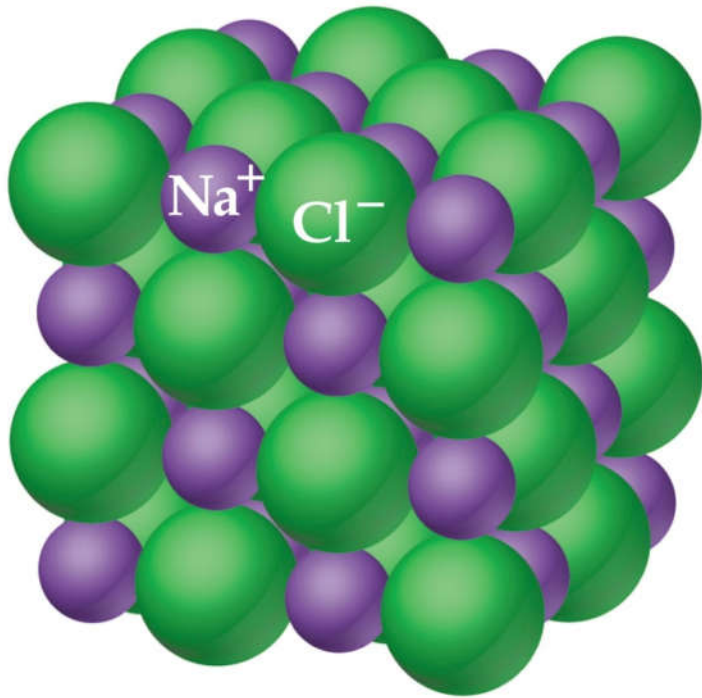
- A reação é violentamente exotérmica.
- Inferimos que o NaCl é mais estável do que os elementos que o constituem. Por quê?
- O sódio perdeu um elétron para se transformar em Na^+ e o cloro ganhou o elétron para se transformar em Cl^- . Observe: Na^+ tem a configuração eletrônica do Ne e o Cl^- tem a configuração do Ar.
- Isto é, tanto o Na^+ como o Cl^- têm um octeto de elétrons circundando o íon central.



Ligação iônica

- O NaCl forma uma estrutura muito regular na qual cada íon Na^+ é circundado por 6 íons Cl^- .
- Similarmente, cada íon Cl^- é circundado por seis íons Na^+ .
- Há um arranjo regular de Na^+ e Cl^- em 3D.
- Observe que os íons são empacotados o mais próximo possível.
- Observe que não é fácil encontrar uma fórmula molecular para descrever a rede iônica.

Ligação iônica



$$\Delta H_{\text{Reticular}} = \kappa \frac{Q_1 Q_2}{d}$$

Modelo da Ligação iônica

- A energia reticular depende das cargas nos íons e dos tamanhos dos íons:

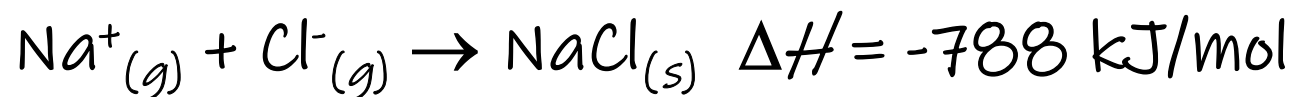
κ é uma constante ($8,99 \times 10^9 \text{ J m/C}^2$),

Q_1 e Q_2 são as cargas nas partículas e d é a distância entre seus centros.

Ligação iônica

Energias envolvidas na formação da ligação iônica

- A formação de $\text{Na}^+_{(g)}$ e $\text{Cl}^-_{(g)}$ a partir de $\text{Na}_{(g)}$ e $\text{Cl}_{(g)}$ é endotérmica.
- A reação $\text{NaCl}_{(s)} \rightarrow \text{Na}^+_{(g)} + \text{Cl}^-_{(g)}$ é endotérmica ($\Delta H = +788 \text{ kJ/mol}$).
- A formação de uma rede cristalina a partir dos íons na fase gasosa é exotérmica:

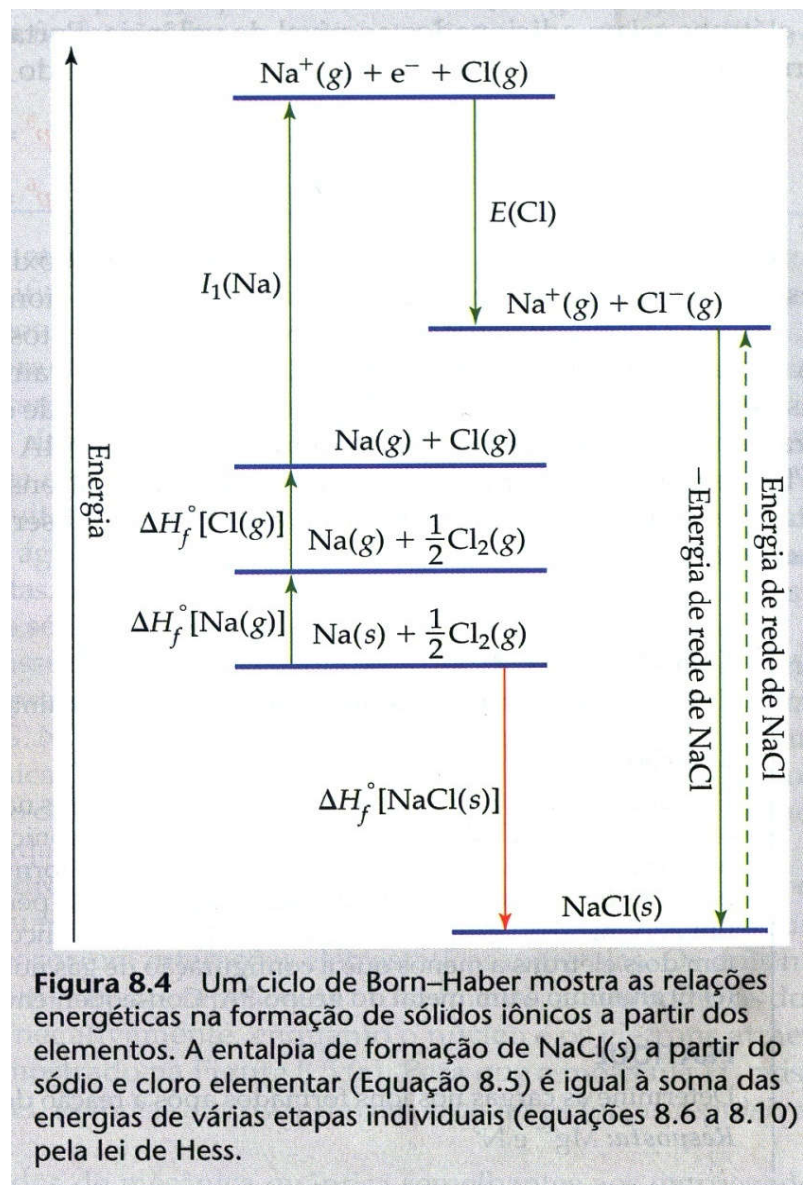


Ligação iônica

CICLO DE BORN-HABER

Energias envolvidas na formação da ligação iônica

- A energia de rede aumenta à medida que:
- As cargas nos íons aumentam
- A distância entre os íons diminui



-Energia reticular: energia necessária para dissociar completamente um mol de composto iônico sólido nos seus íons em estado gasoso.

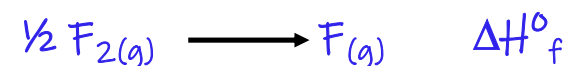
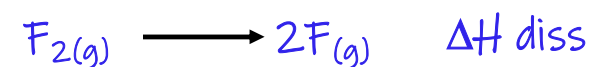
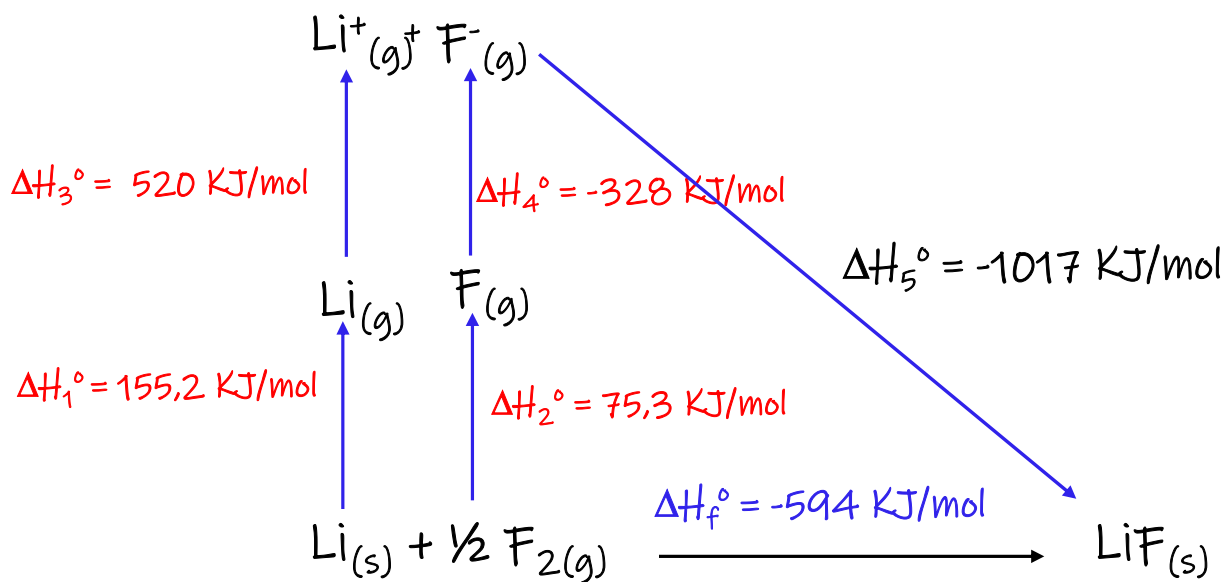
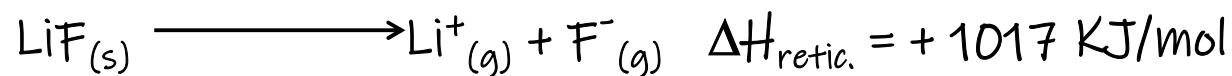
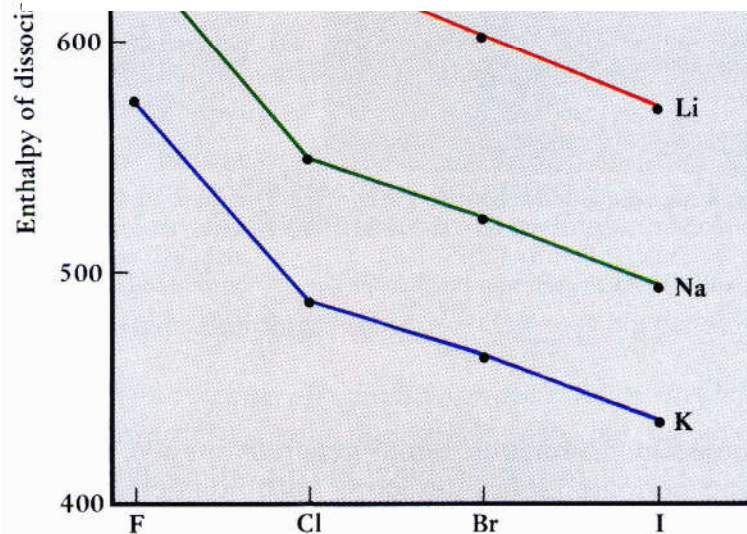


TABELA 8.2 Energias de rede para alguns compostos iônicos

Composto	Energia de rede (kJ/mol)	Composto	Energia de rede (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl ₂	2.326
LiCl	834	SrCl ₂	2.127
LiI	730	MgO	3.795
NaF	910	CaO	3.414
NaCl	788	SrO	3.217
NaBr	732	ScN	7.547
NaI	682		
KF	808		
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		



Cargas diferentes



Cargas iguais



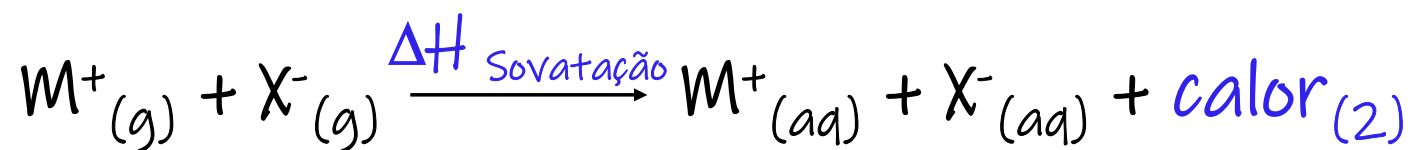
Solubilidade X Temperatura

—solubility in water→ ←melting temperature—
KCl < KBr < KI KCl > KBr > KI

This is indeed the case, as seen in the following table.

COMPOUND	MELTING TEMPERATURE	SOLUBILITY IN WATER
KCl	776 °C	34.7 (at 20 °C)
KBr	730 °C	53.5 (at 0 °C)
KI	686 °C	127.5 (at 0 °C)

- Energia de dissociação: $\Delta H_{\text{reticular}}$ (Endotérmico)
- Energia de solvatação: $\Delta H_{\text{solvatação}}$ (Exotérmico)

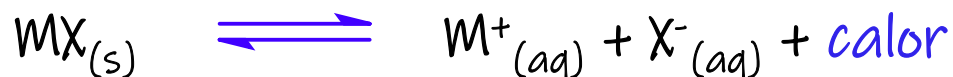


$$\text{calor}_{(1)} > \text{calor}_{(2)}$$



$\uparrow T \longrightarrow$ Aumenta a solubilidade

$$\text{calor}_{(1)} < \text{calor}_{(2)}$$



Diminui a solubilidade $\longleftarrow T \uparrow$