

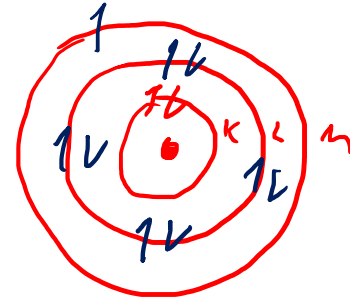
Moléculas diatômicas

Modelo de Lewis

Carga nuclear efetiva

$-3d$
 $-3p$
 $-2p$
 $-2s$
 $-1s$

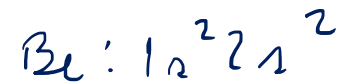
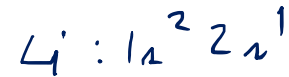
- Regra de Slater: $Z_{ef} = Z - S$
 - Z_{ef} = carga nuclear efetiva;
 - Z = carga nuclear;
 - S = constante de blindagem
- Escrevemos: (1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d,4f) etc



Carga nuclear efetiva

- Regra de Slater: $Z_{ef} = Z - S$

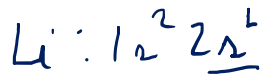
- Z_{ef} = carga nuclear efetiva;
- Z = carga nuclear;
- S = constante de blindagem



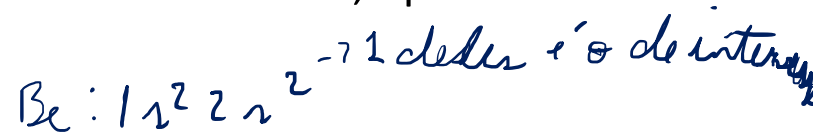
- Escrevemos: (1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d,4f) etc

I. **Se o elétron mais externo é um elétron s ou p:**

- Cada um dos outros elétrons do mesmo grupo (ns,np) contribui com 0,35 para S;
- Cada elétron da camada (n-1) contribui com 0,85 para S;
- Cada elétron na camada (n-2) ou menor contribui com 1,0 para S.



$$Z_{ef} = 3 - 0 - 1,7 - 0 = \underline{1,3}$$



$$Z_{ef} = 4 - 0,35 - 1,7 - 0 = \underline{1,95}$$

Carga nuclear efetiva

- Regra de Slater: $Z_{ef} = Z - S$
 - Z_{ef} = carga nuclear efetiva;
 - Z = carga nuclear;
 - S = constante de blindagem
- Escrevemos: (1s) (2s,2p) (3s,3p) (3d) (4s,4p) (4d,4f) etc
 - I. **Se o elétron mais externo é um elétron s ou p:**
 - Cada um dos outros elétrons do mesmo grupo (ns,np) contribui com 0,35 para S;
 - Cada elétron da camada (n-1) contribui com 0,85 para S;
 - Cada elétron na camada (n-2) ou menor contribui com 1,0 para S.
 - II. **Se o elétron mais externo está em um orbital d ou f:**
 - Cada um dos outros elétrons do mesmo grupo (nd,nf) contribui com 0,35 para S;
 - Cada elétron da camada (n-1) ou menor contribui com 1,0 para S.

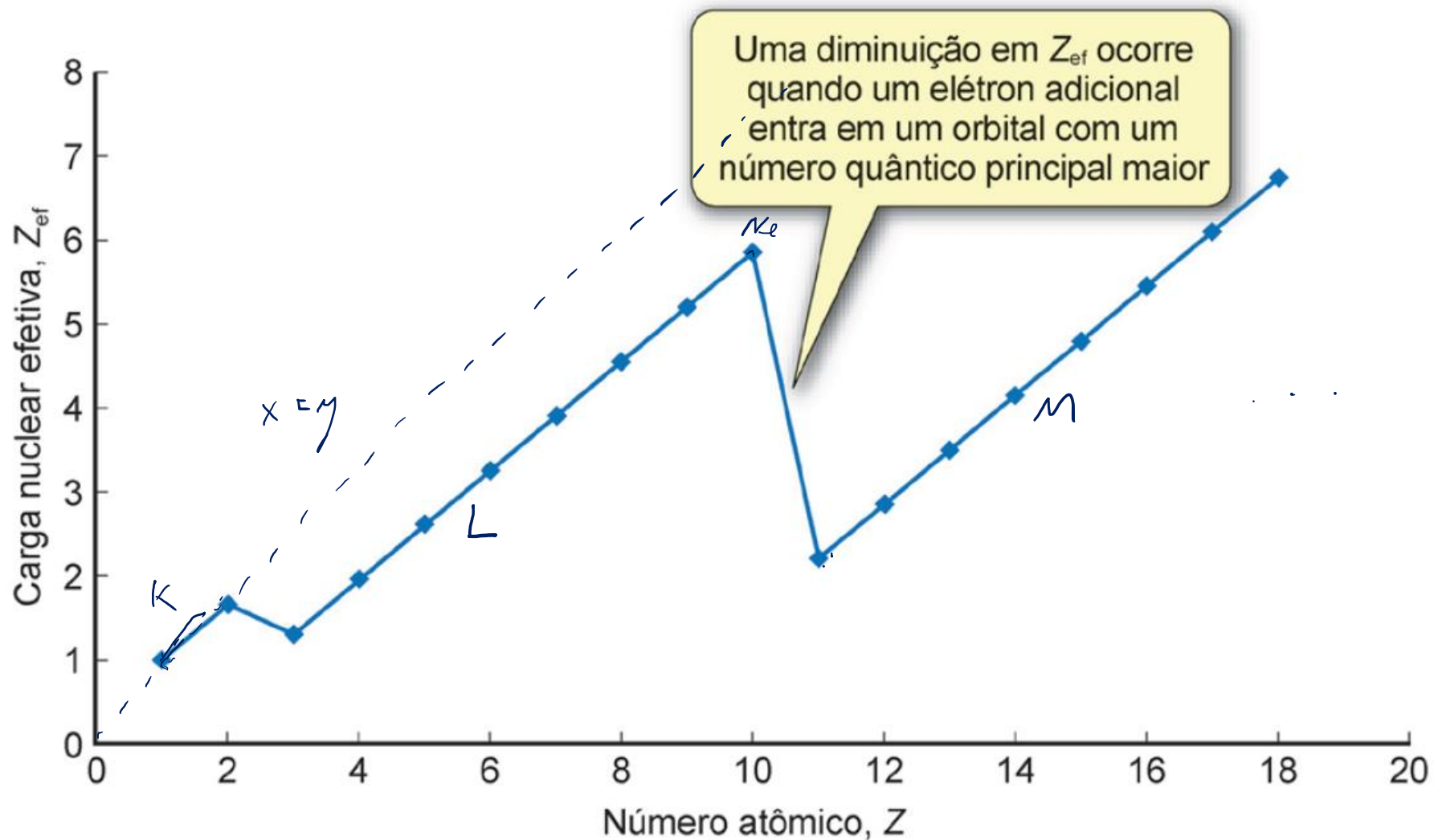


Figura 2.30 A variação da carga nuclear efetiva (Z_{ef}) para os elementos do hidrogênio até o argônio. Os valores são calculados usando-se as regras de Slater.

Raio \Rightarrow Ligação $\Rightarrow \frac{1}{2}$ distância da ligação química
 H_2, O_2

Raio atômico/pm

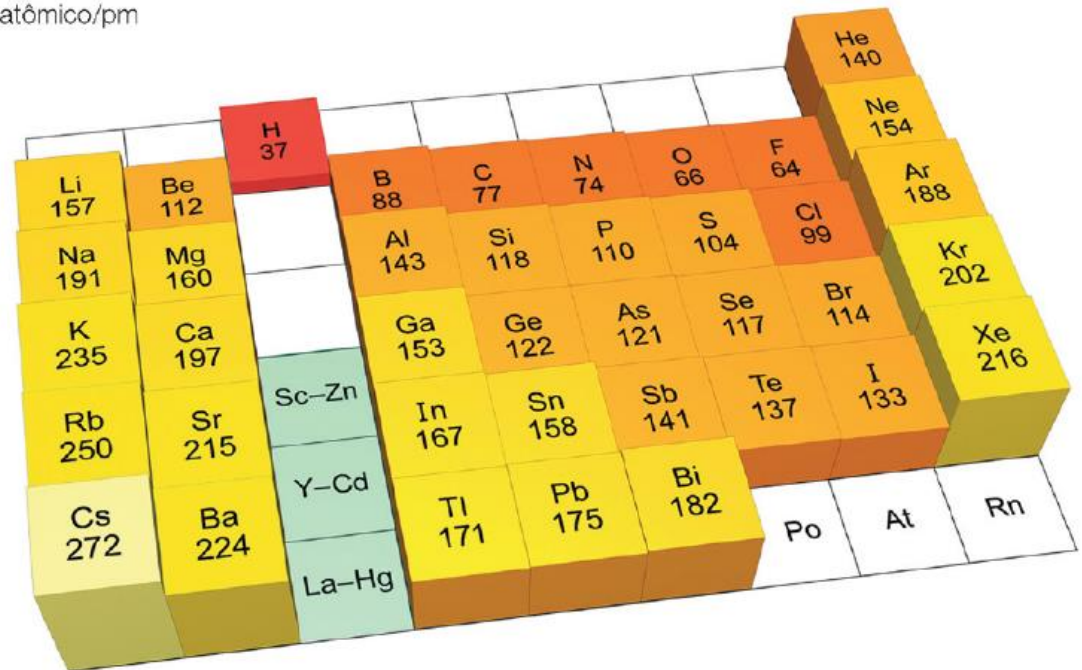
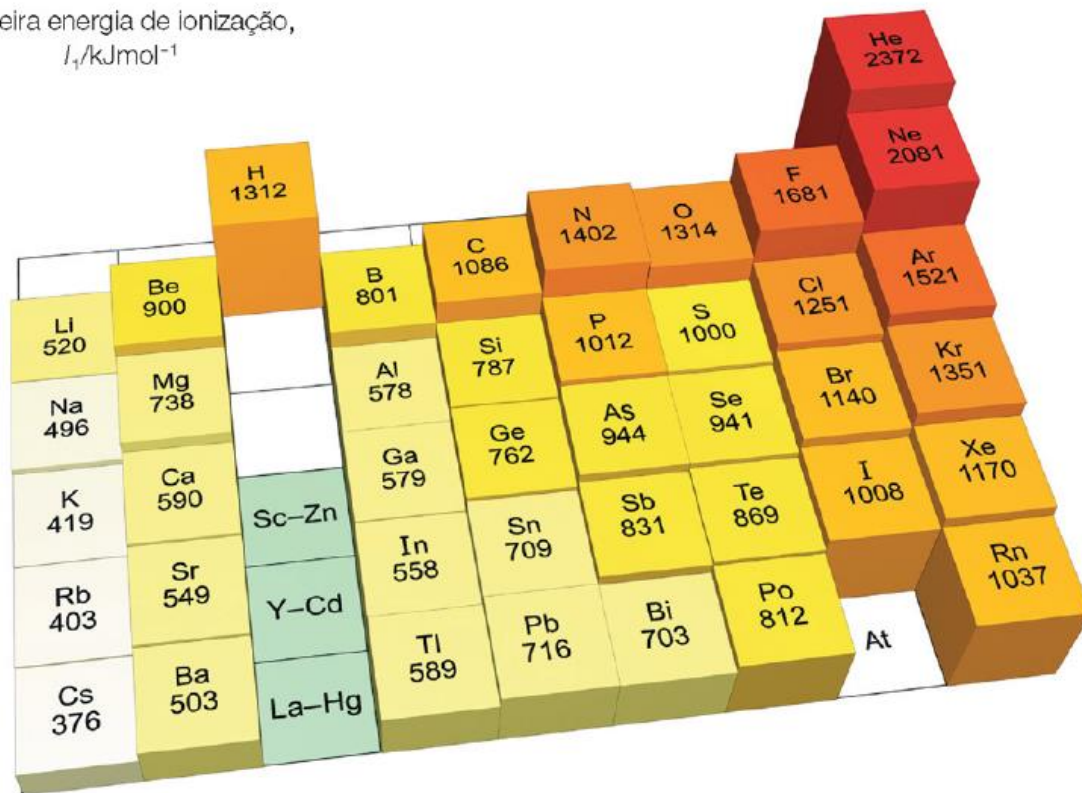


Figura 2.31 Os raios atômicos dos elementos do bloco s e do bloco p.

Primeira energia de ionização,
 I_1/kJmol^{-1}



Sempre endotérmica!

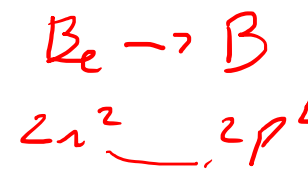
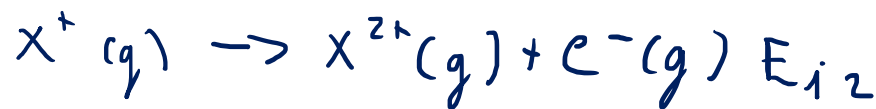
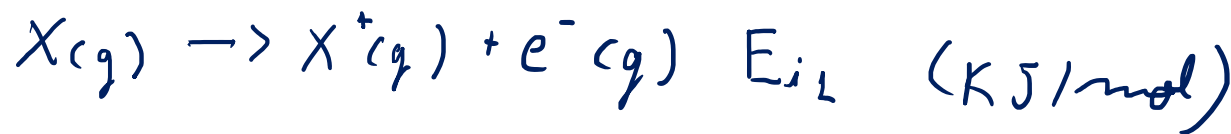
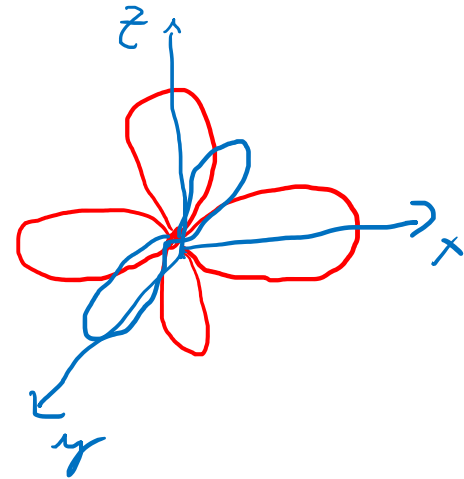
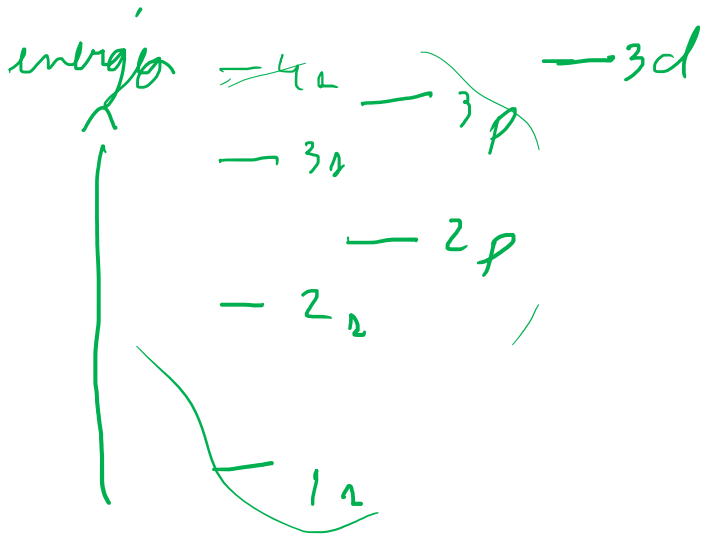
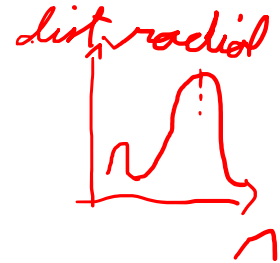
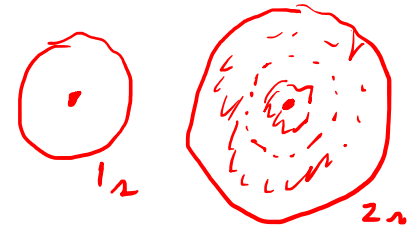


Figura 2.32 As primeiras energias de ionização para os elementos do bloco s e do bloco p.



Representações
incorretas



orbital
atômico:

- forma
- energia

Tabela 2.6 Energias de ionização (kJ mol^{-1}) para os elementos com $Z = 1$ até $Z = 20$. Para um determinado átomo, a linha vermelha representa a remoção de um elétron da camada mais baixa, daí o grande salto no valor observado de I .

Elemento	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8
H	1312							
He	2372	5251						
Li	520	7298	11815					
Be	900	1757	14849	21007				
B	801	2427	3660	25026	32827			
C	1086	2353	4620	6223	37831	47277		
N	1402	2856	4578	7475	9445	53567	64360	
O	1314	3389	5300	7469	10990	13327	71331	84078
F	1681	3374	6050	8408	11023	15164	17868	92038
Ne	2081	3952	6122	9371	12177	15238	19999	23070
Na	496	4562	6910	9543	13354	16613	20117	25496
Mg	738	1451	7733	10543	13630	18020	21711	25661
Al	578	1817	2745	11577	14842	18379	23326	27466
Si	787	1577	3232	4356	16091	19806	23780	29287
P	1012	1907	2914	4964	6274	21267	25431	29872
S	1000	2252	3357	4556	7004	8496	27107	31720
Cl	1251	2298	3822	5159	6540	9362	11018	33604
Ar	1521	2666	3931	5771	7238	8781	11995	13842
K	419	3052	4420	5877	7975	9590	11343	14944
Ca	590	1145	4972	6491	8153	10496	12270	14206

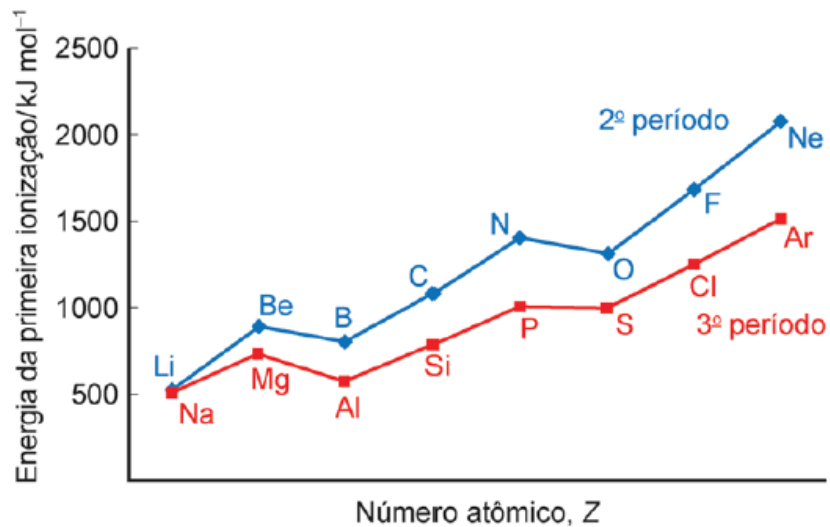


Figura 2.33 A variação da primeira ionização para os elementos do segundo e terceiro períodos.

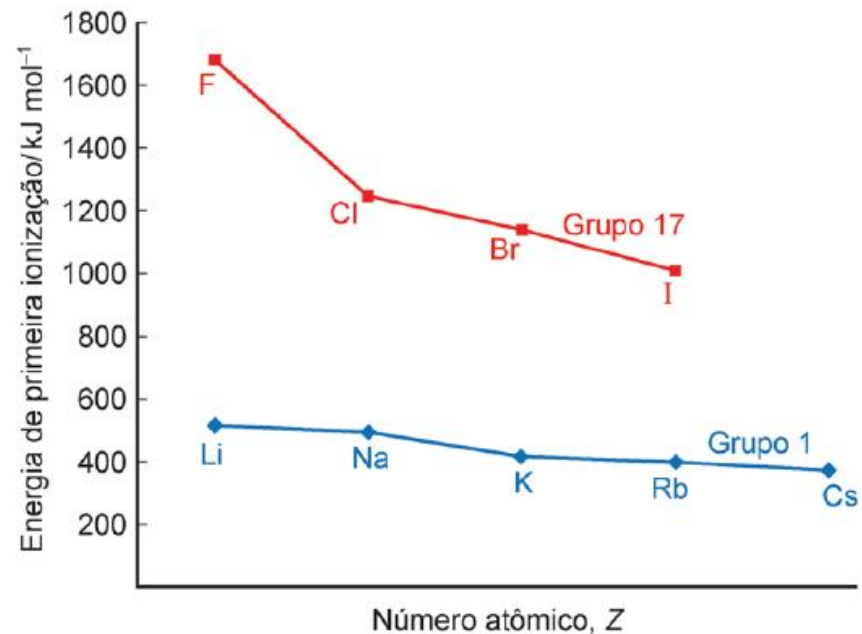
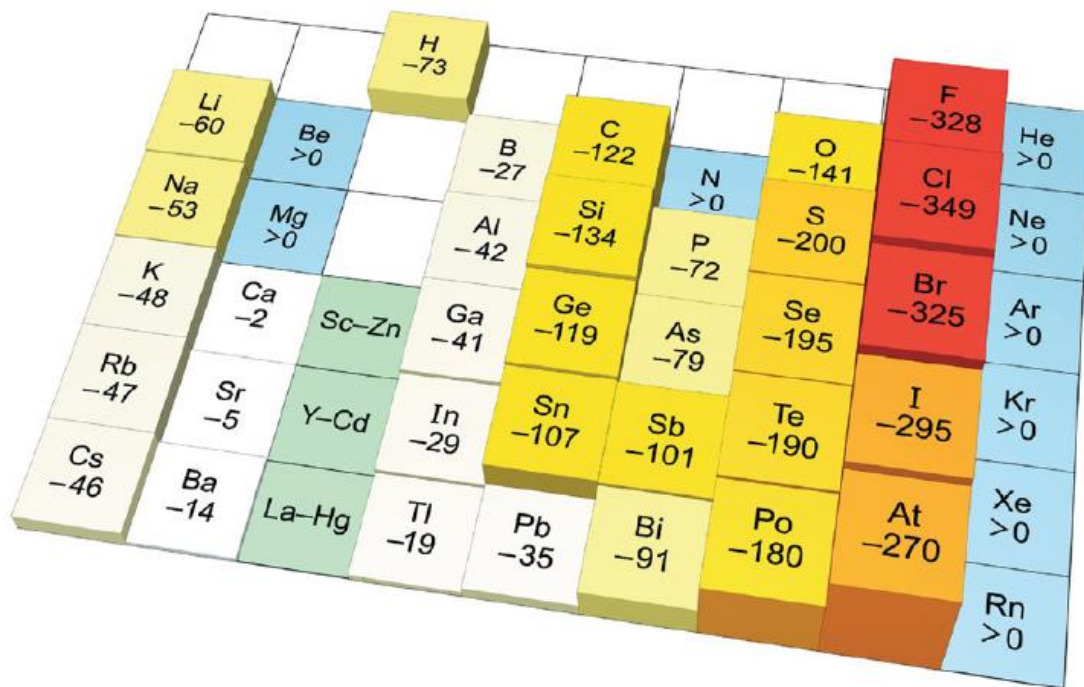


Figura 2.34 A variação das primeiras energias de ionização para os elementos dos Grupos 1 e 17.

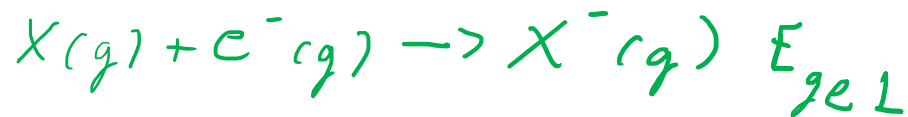
Primeiras energias de ganho de elétrons, $E_{ge}/\text{kJ mol}^{-1}$



1ª energia: pode ser endotérmica ou exotérmica!

2ª energia: sempre endotérmica, pois se adiciona e^- a um ânion!

Figura 2.35 As primeiras energias de ganho de elétrons para os elementos do bloco s e do bloco p. Para os elementos com valores endotérmicos, E_{ge} não é conhecida com exatidão.



Moléculas diatômicas

covalente \Rightarrow eletroneg com eletroneg

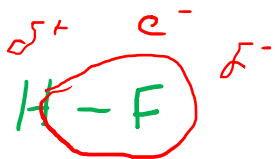
iónica \Rightarrow eletroneg com eletroposit.

metálica \Rightarrow eletroposit com eletroposit

Ligação química



Figura 3.1 Os tipos de ligação podem ser imaginados como um espectro, com a ligação covalente em um dos extremos e a ligação iônica no outro.



*Redox.
Nº oxidação*

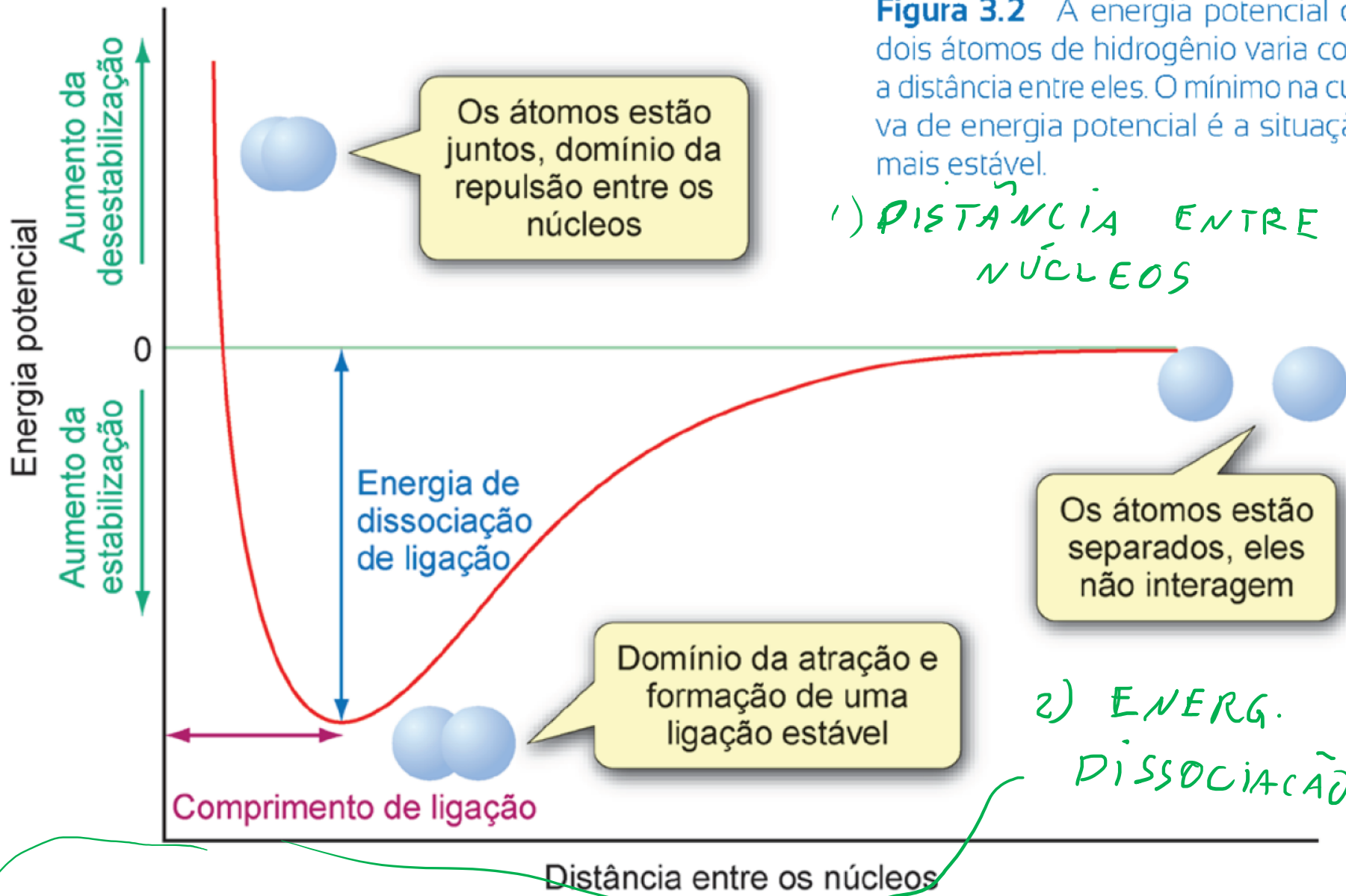
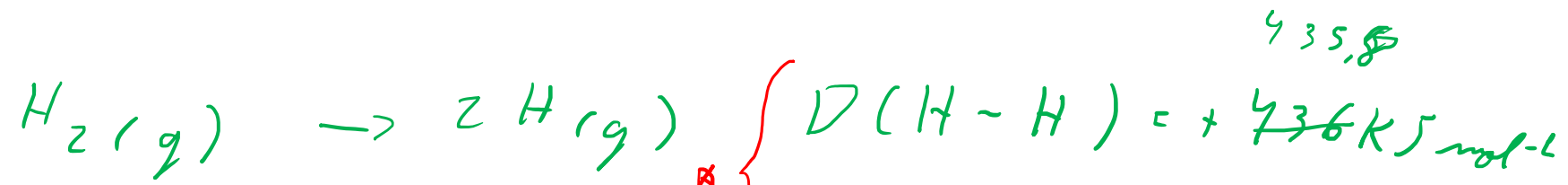


Figura 3.2 A energia potencial de dois átomos de hidrogênio varia com a distância entre eles. O mínimo na curva de energia potencial é a situação mais estável.

1) DISTÂNCIA ENTRE NÚCLEOS

2) ENERG. DISSOCIAÇÃO

Entalpia de dissociação



* média: $+297,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ \neq $D(H-F) > \text{média}$

$$\Delta D = D(x-y) - \left(\frac{D(x-x) + D(y-y)}{2} \right)$$

Eletronegatividade (χ)

χ^P

- É o poder de um átomo em uma molécula em atrair o elétron para si.
- Eletronegatividade de Pauling (χ^P)
 - Pauling percebe que moléculas diatômicas heteronucleares (XY) tem sempre entalpia de dissociação maior que a média das homonucleares (X_2 e Y_2);
 - Ele conclui que essa diferença é uma medida do caráter iônico dessa ligação XY, e chama de eletronegatividade.
 - Escala de Pauling: $\chi^P = 4$ para o Flúor;

$\chi^P: |\chi^P(X) - \chi^P(Y)| = (\Delta D)^{1/2}$
Eletroneg. Pauling unid. = eV

$\Delta D < D(X-Y) - \frac{D(X-X) + D(Y-Y)}{2}$
entalpia med. dissoc. exp. - média

Eletromegatidade de Pauling, χ^p

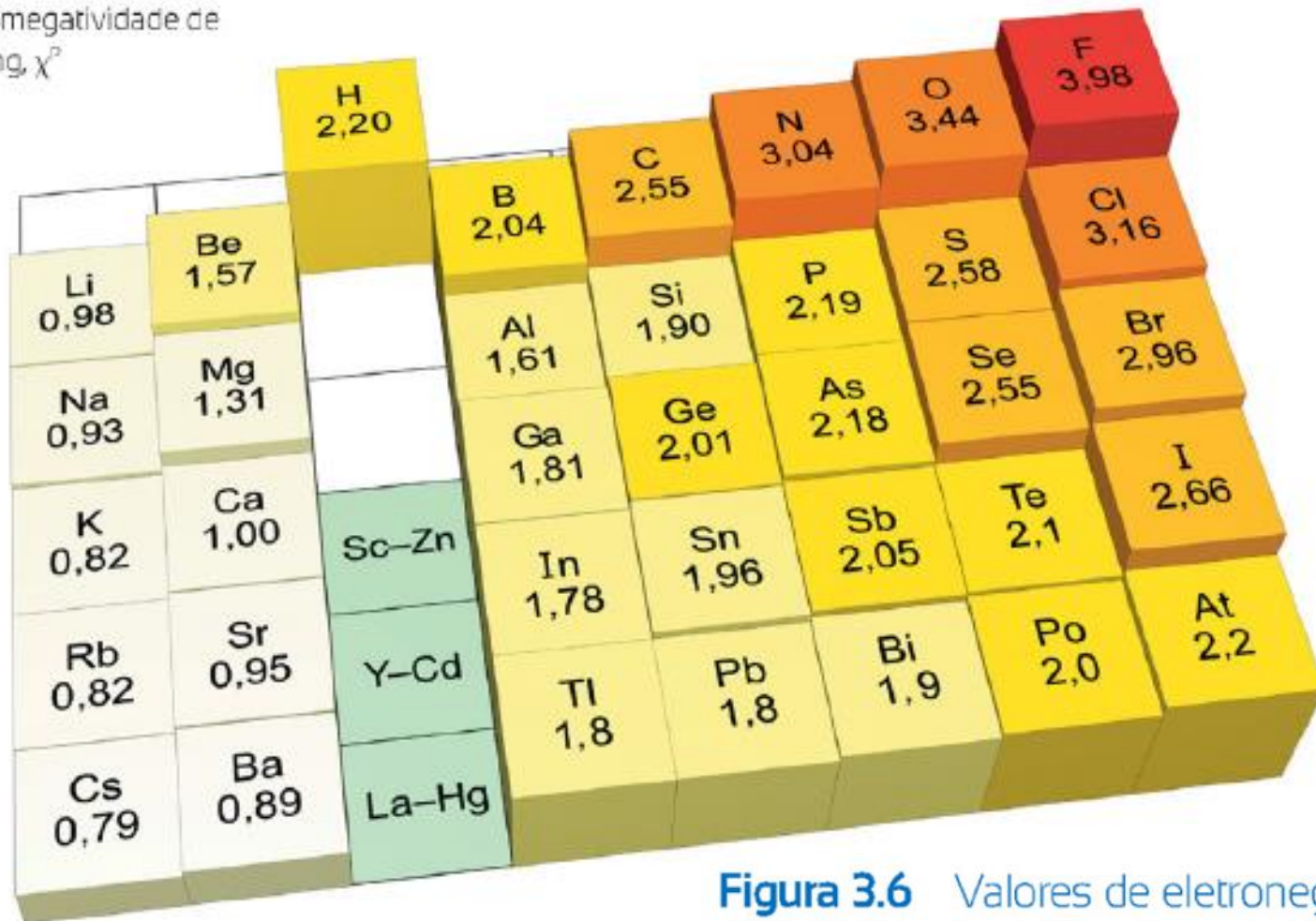


Figura 3.6 Valores de eletronegatividade de Pauling (χ^p) para os elementos dos blocos *s* e *p*. Embora Pauling tenha originalmente utilizado um valor de 4 para o flúor, o valor atualmente usado é ligeiramente menor para tornar as eletronegatividades mais autoconsistentes.

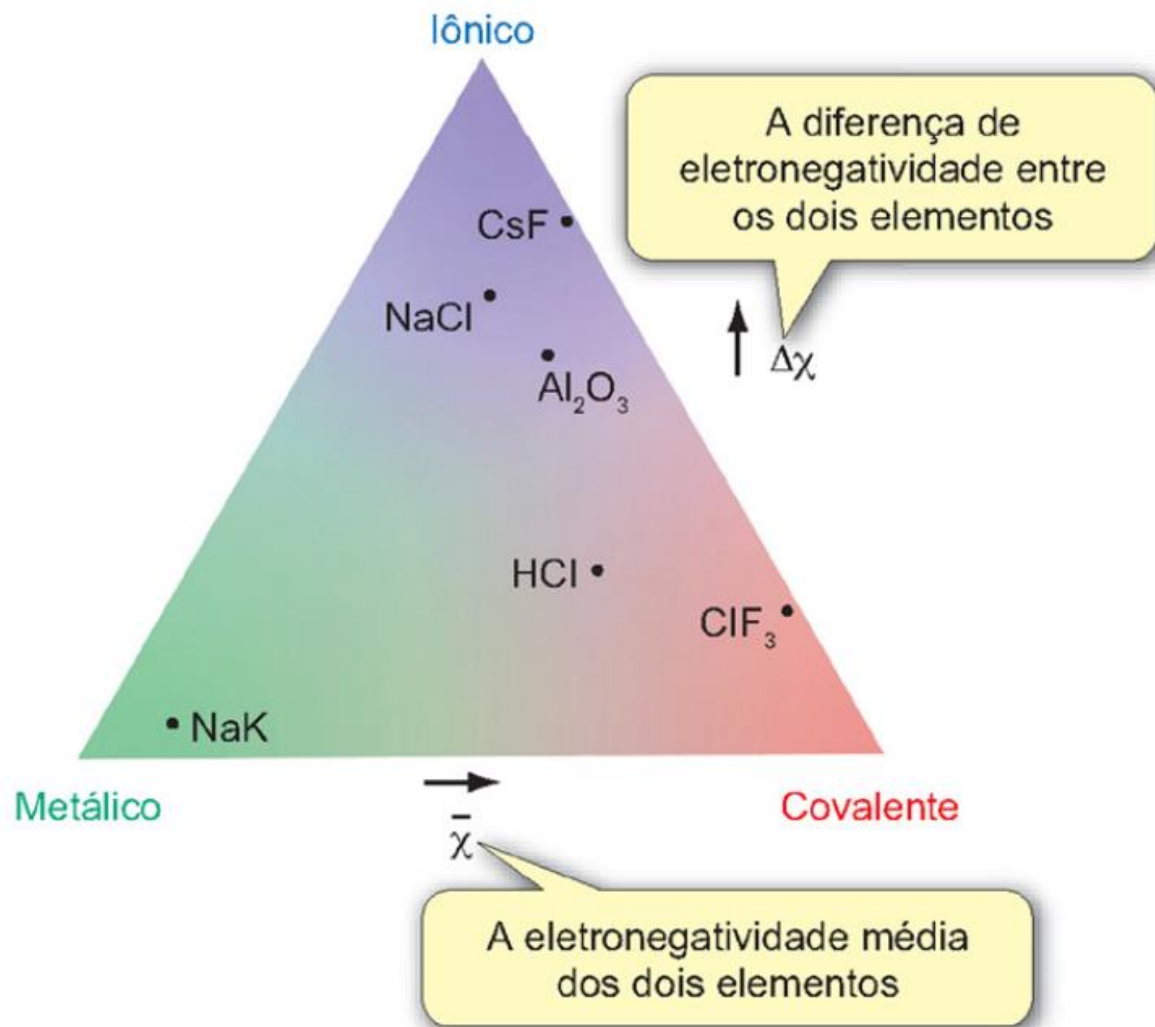


Figura 5.31 Um triângulo de tipos de ligação. Para um composto binário, o tipo de ligação pode ser previsto por representação gráfica da diferença de eletronegatividade para os dois átomos em função de sua eletronegatividade média.