



Interação entre a luz e a matéria: conceitos fundamentais. Átomos, moléculas, soluções e modelos de moléculas

Caracterização de Biomoléculas - BBM5007

Profa. Dra. Patricia Targon Campana

Grupo de Biomateriais e Espectroscopia



pcampana@usp.br



sciencenebula.tumblr.com



Sala 339C – Titanic



[/Campana.PT](https://www.facebook.com/Campana.PT)



ramal: 3091-8883



[@profaPCampana](https://twitter.com/profaPCampana)



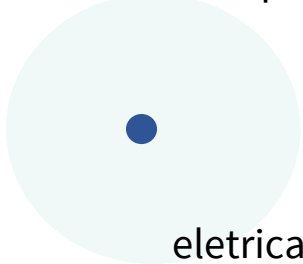
Conteúdo:

- Átomos, moléculas
- Soluções
- Modelos de moléculas
- Fenômenos de interação da luz com a matéria



Átomos, moléculas

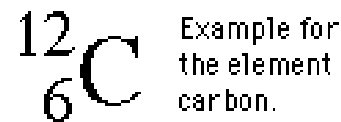
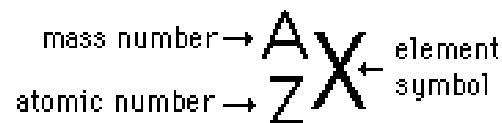
- Matéria: composta por prótons, nêutrons, e elétrons (átomos)



Núcleo: 20.000 x < que o átomo

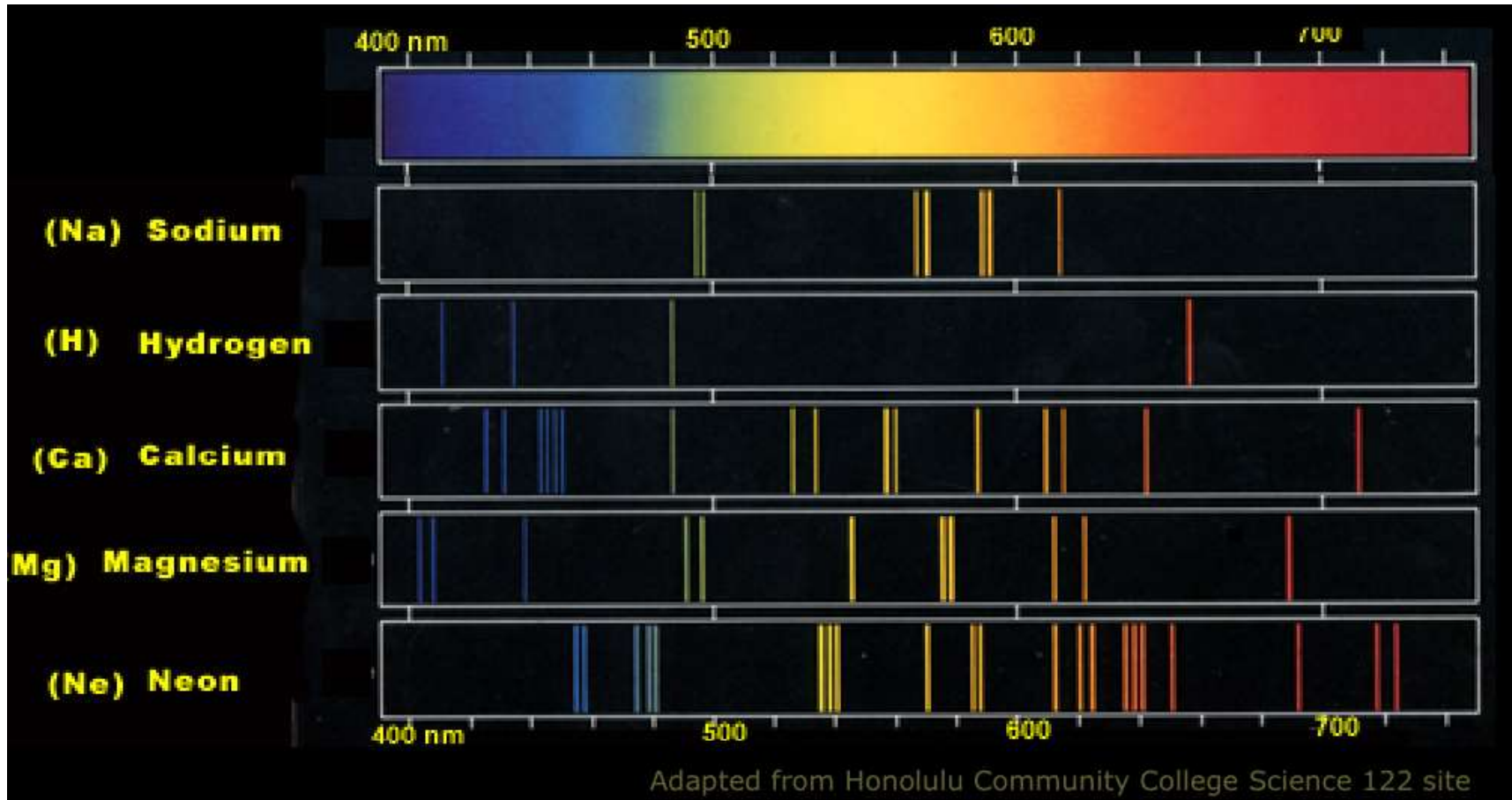
Parte externa ao núcleo: no. elétrons = no. de prótons (átomo eletricamente neutro em condições normais).

- Elemento químico: um átomo com um número específico de prótons no núcleo (número atômico). Os átomos de um mesmo elemento podem diferir no número de nêutrons (chamados isótopos deste elemento). São representados por um símbolo, com seu número atômico e seu número de massa (soma dos nêutrons e prótons no núcleo) como mostra a figura abaixo:





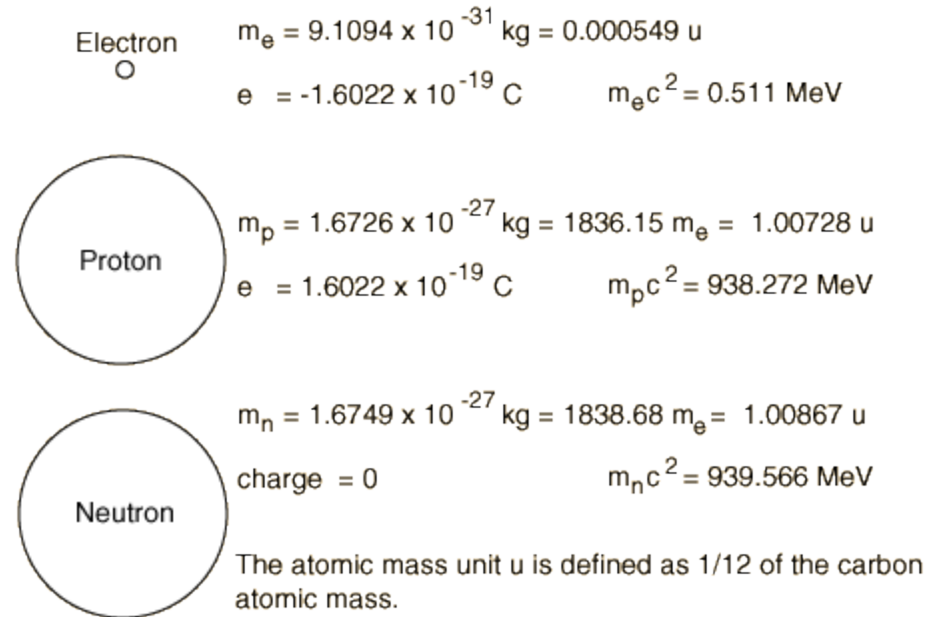
- Podem ser identificados por sua “digital espectral”. Tanto pela forma da linha de seu espectro, quanto por cores no caso de átomos excitados.





Constituição dos átomos

- Os prótons, nêutrons, e elétrons possuem carga e massa definida
- Se modelarmos estas partículas como esferas duras (modelo bastante longe do real, mas que serve ao propósito de entender suas propriedades), elas têm os tamanhos relativos como mostra a figura a seguir:

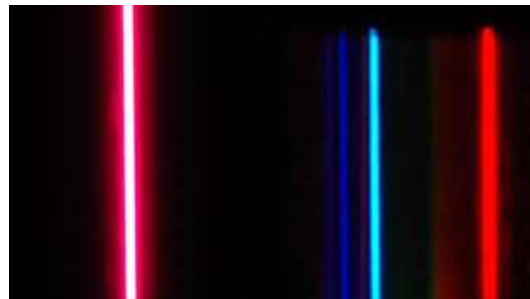
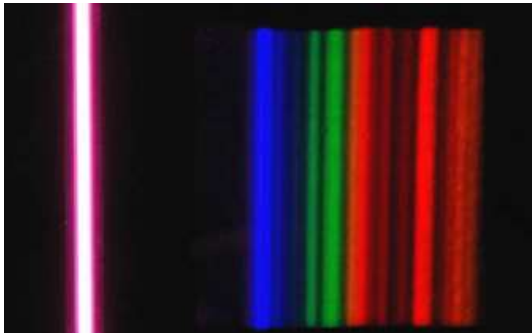


- Prótons e nêutrons = partículas constituídas de 3 quarks cada. Parecem ter “densidade efetiva” e um raio atribuído de $1,2 \times 10^{-15} \text{ m}$.
- Elétron: partícula fundamental (lépton). Milhares de vezes menor que o próton, o elétron parece não ter estrutura.

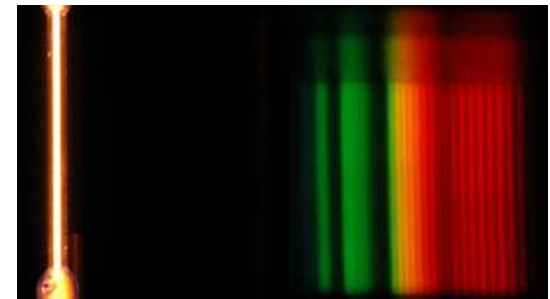
Propriedades atômicas

- Elétrons associados aos átomos = propriedades mensuráveis que exibem “quantização”.
- Encontrados normalmente em estados de energia quantizados relativos a menor energia possível dentro daquele átomo (**estado fundamental**)
- Podem também existir nos estados de energia mais alta (**estados excitados**), como se pode ver nos espectros de linha abaixo:

¹⁸
Ar



⁷
N





- **Momento angular orbital e momento eletrônico de spin:** propriedades associadas como os níveis de energia dos elétrons. Também são quantizadas e deram origem aos números quânticos (tabela periódica e Princípio da Exclusão de Pauli).

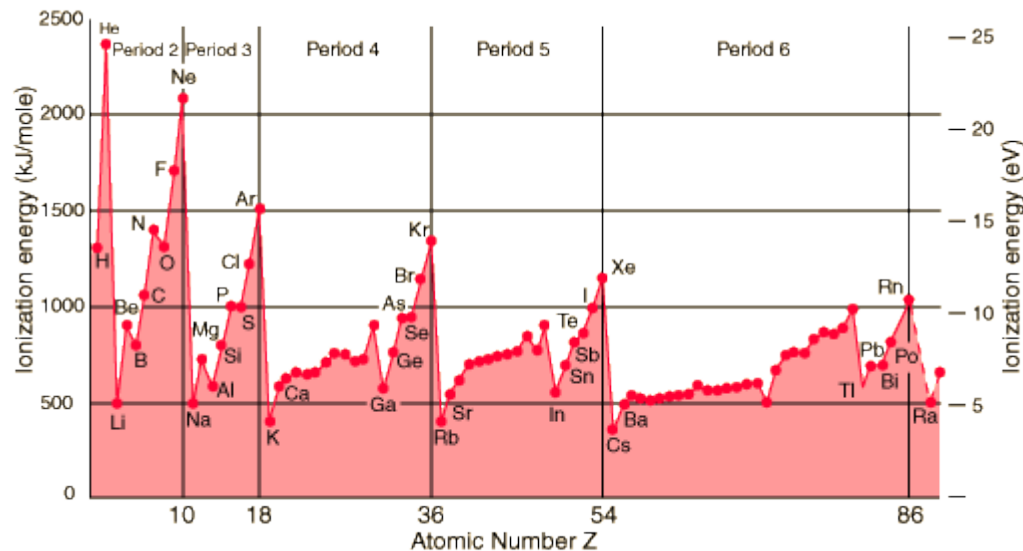
| State | Principal quantum number n | Orbital quantum number l | Magnetic quantum number m_l | Spin quantum number m_s | Maximum number of electrons |
|-------|---------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|------------------------------|-----------------------------|
| 1s | 1 | 0 | 0 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 2 |
| 2s | 2 | 0 | 0 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 2 |
| 2p | 2 | 1 | -1,0,+1 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 6 |
| 3s | 3 | 0 | 0 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 2 |
| 3p | 3 | 1 | -1,0,+1 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 6 |
| 3d | 3 | 2 | -2,-1,0,+1,+2 | $+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ | 10 |

| | |
|------------------|---------|
| s -- sharp | $l = 0$ |
| p -- principal | $l = 1$ |
| d -- diffuse | $l = 2$ |
| f -- fundamental | $l = 3$ |
| g | $l = 4$ |
| h | $l = 5$ |
| ... | |

- O preenchimento dos estados eletrônicos é ditado pela energia, ou seja, o primeiro estado a ser preenchido é sempre o de menor energia, seguido do segundo de menor energia e assim por diante, sempre respeitando o Princípio da Exclusão de Pauli (notação espectroscópica)

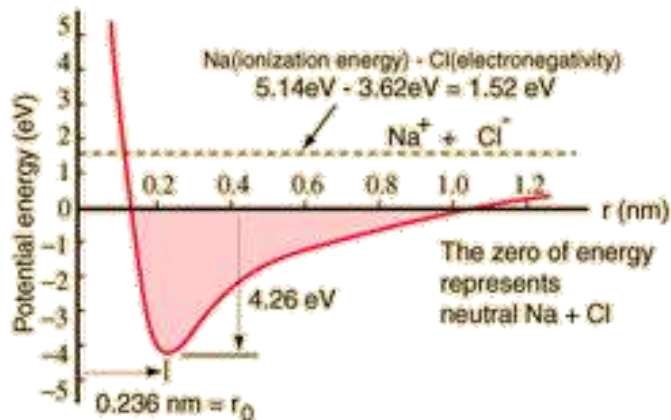
Energias de ionização

- Energia necessária para remover um elétron do átomo neutro (mínimo para metais alcalinos e cresce nas linhas da tabela periódica)
- Exemplos: Sódio: 496 kJ/mol (5,14 eV) por átomo
- Neônio: 2081 kJ/mol (21,56 eV)/átomo.
- esta energia é a primeira a ser considerada na formação das ligações químicas

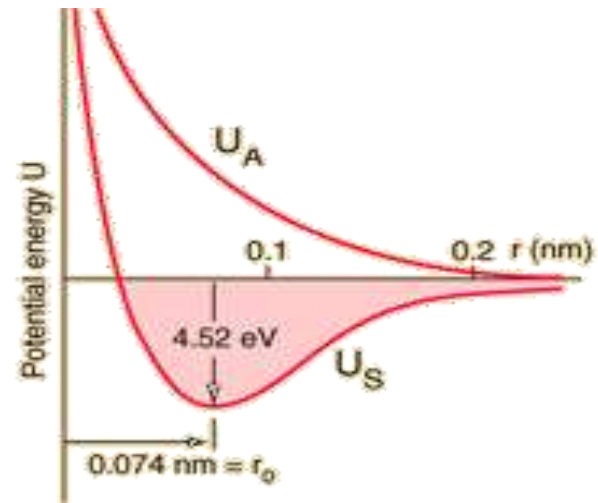


Ligações químicas

- Compostos químicos: se formam a partir da junção de um ou mais átomos. São estáveis quando a energia total da combinação é menor que a energia dos átomos separados.
- O chamado "estado ligado" implica numa rede de forças atrativas entre os átomos chamada ligação química.
- Ligação covalente: um ou mais pares de elétrons são compartilhados por dois átomos
- Ligação iônica: um ou mais elétrons de um átomo são removidos e anexados a outro átomo resultando em íons negativos e positivos que se atraem mutuamente
- Ligações metálicas: As propriedades dos metais sugerem que seus átomos possuam fortes ligações, mas os elétrons ainda assim se movem com facilidade dentro destes materiais. No entanto, as observações de suas propriedades levam a crer que a ligação metálica se pareça mais com "íons positivos num mar de elétrons"



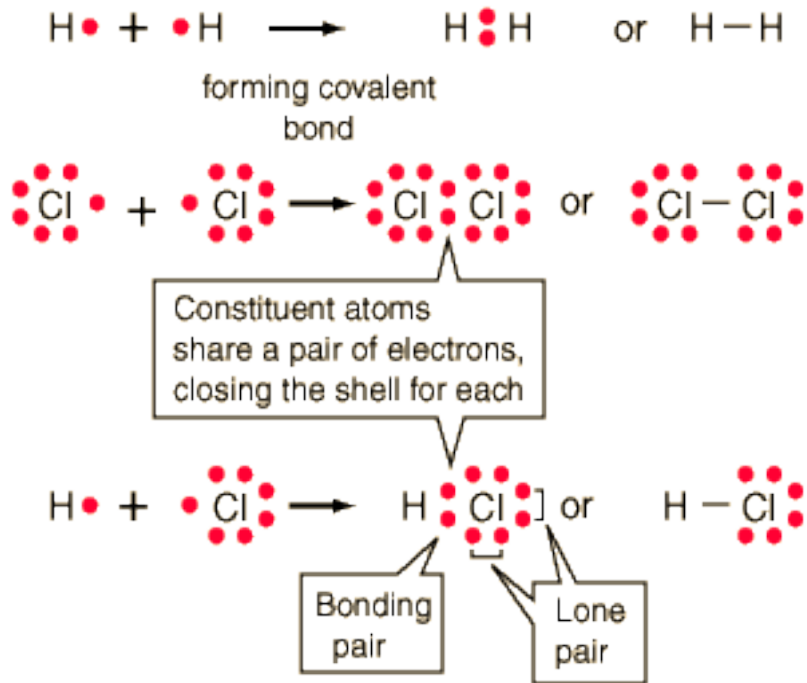
cloreto de sódio (iônico)



hidrogênio molecular (covalente)



Ligação covalente:



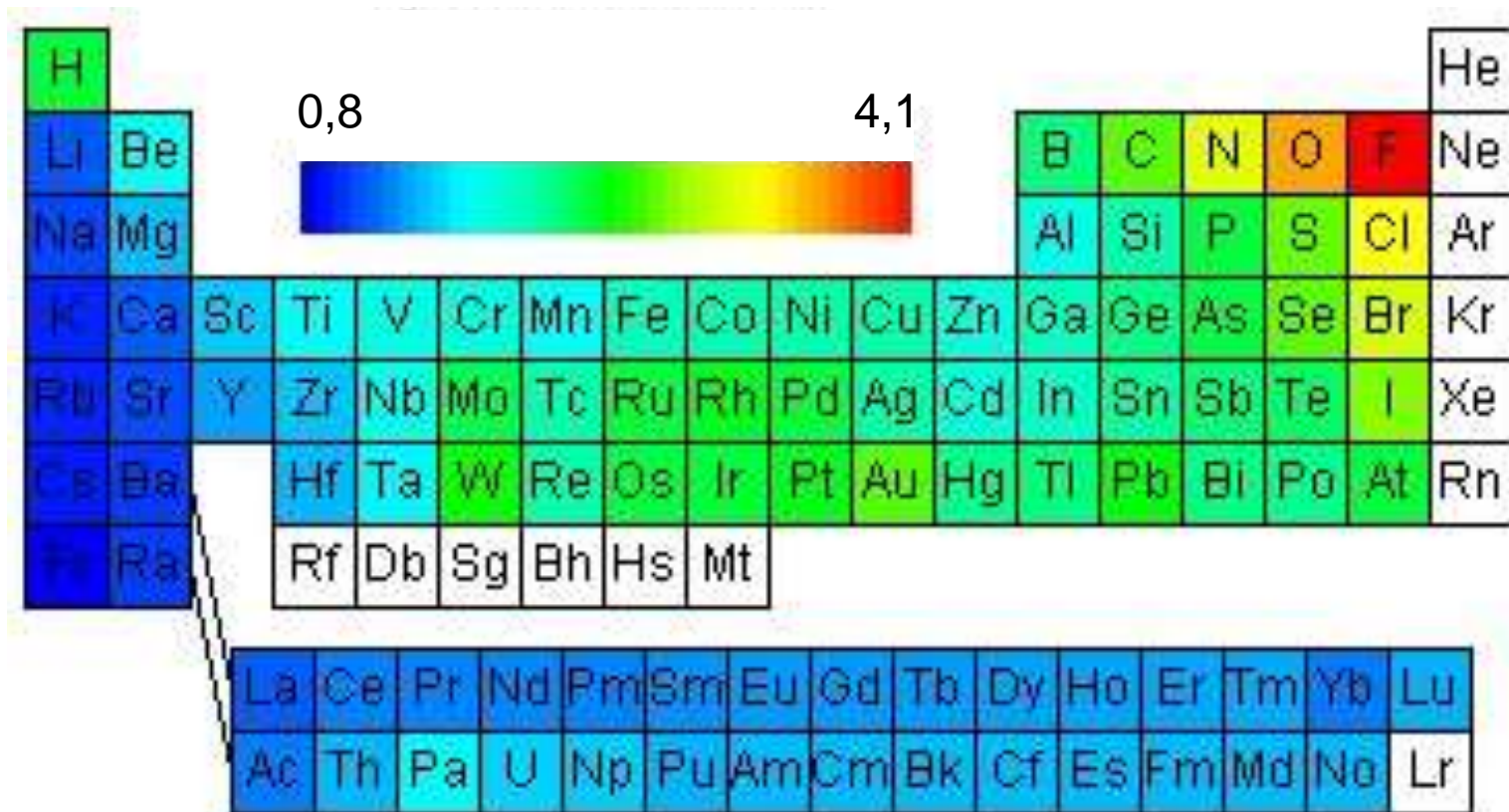
Ligações covalente polares: são ligações covalentes nas quais o par de elétron compartilhado "passa mais tempo" ao redor do átomo não-metálico do que com o outro átomo. Nestes casos, há uma separação parcial de cargas de forma que um átomo é levemente mais positivo que o outro, ou levemente mais negativo. Esta ligação poderá induzir um momento de dipolo na molécula formada.

Esta habilidade de atrair a nuvem eletrônica para si é chamada eletronegatividade



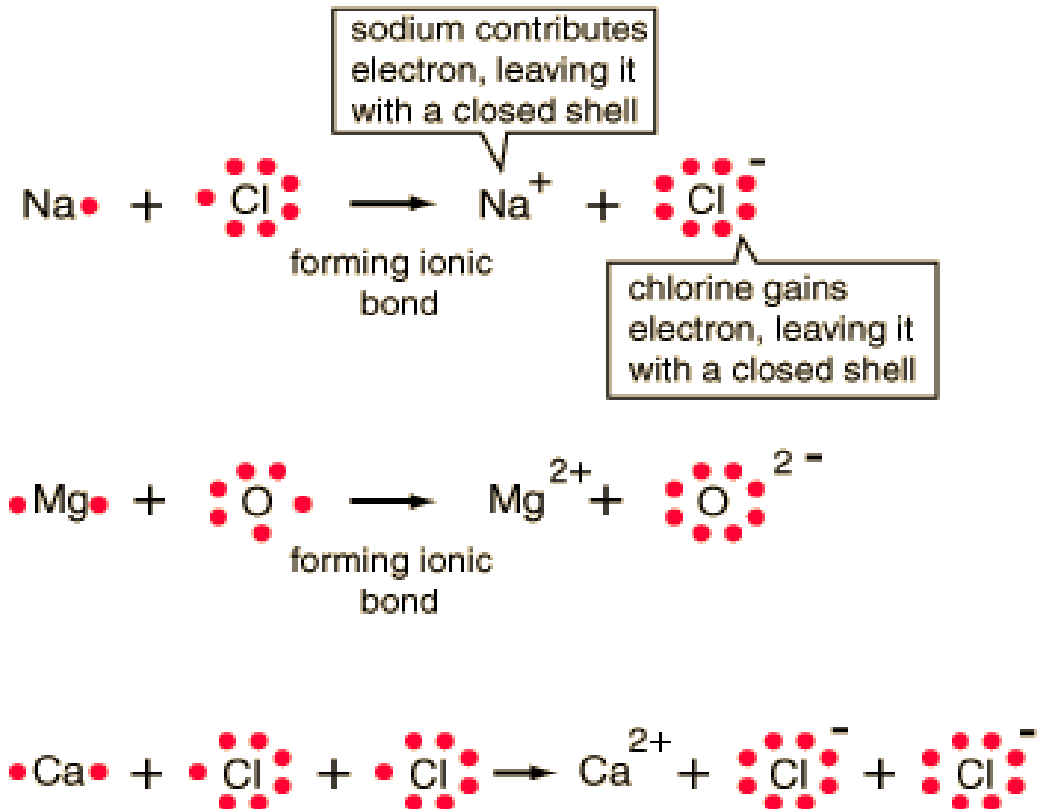
Eletronegatividade

medida do “quanto um átomo numa molécula pode atrair elétrons para ele mesmo”





Ligação iônica:





Soluções

As **forças intermoleculares** explicam a formação de um líquido!

Gases → Energia cinética \gg Forças Intermoleculares

Líquidos → **Energia cinética \sim Forças Intermoleculares**

Sólidos → Energia cinética \ll Forças Intermoleculares

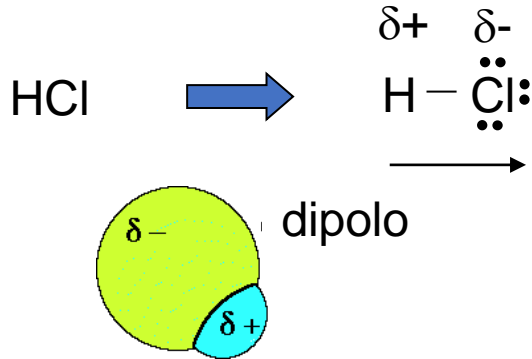


- entre moléculas
- fracas (quando comparadas as intramoleculares)
- menos direcionais, porém de alcance mais longo
(quando comparadas as ligações covalentes)
- são de natureza eletrostática
- são classificadas em três tipos:
 - Dipolo-dipolo
 - Forças de dispersão (London)
 - Pontes de hidrogênio



Caso 1: moléculas diatômicas:

Átomos diferentes:



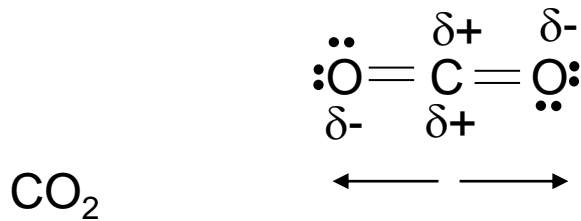
Átomos idênticos:



carga líquida nula

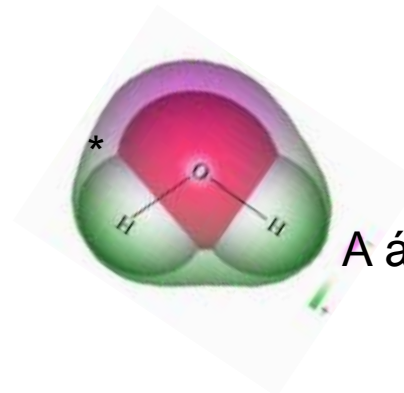
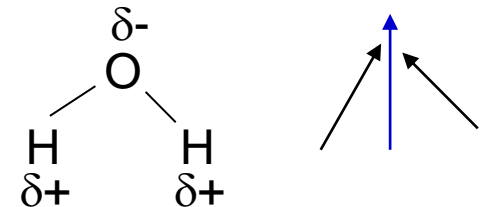
Caso 2: três ou mais átomos formando uma molécula: para que ela seja polar, são necessárias duas condições:

1. conter ligações que formem dipolos
2. ser assimétrica



momento dipolar total nulo

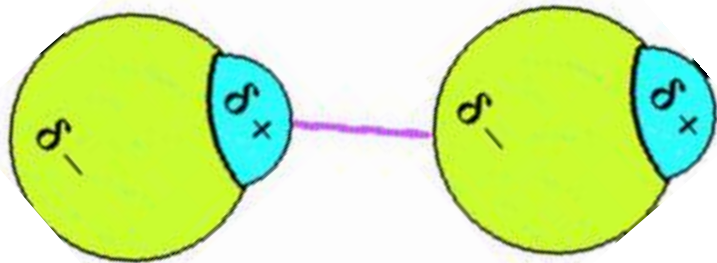
H₂O



A água é uma molécula polar

1.1. Dipolo-dipolo

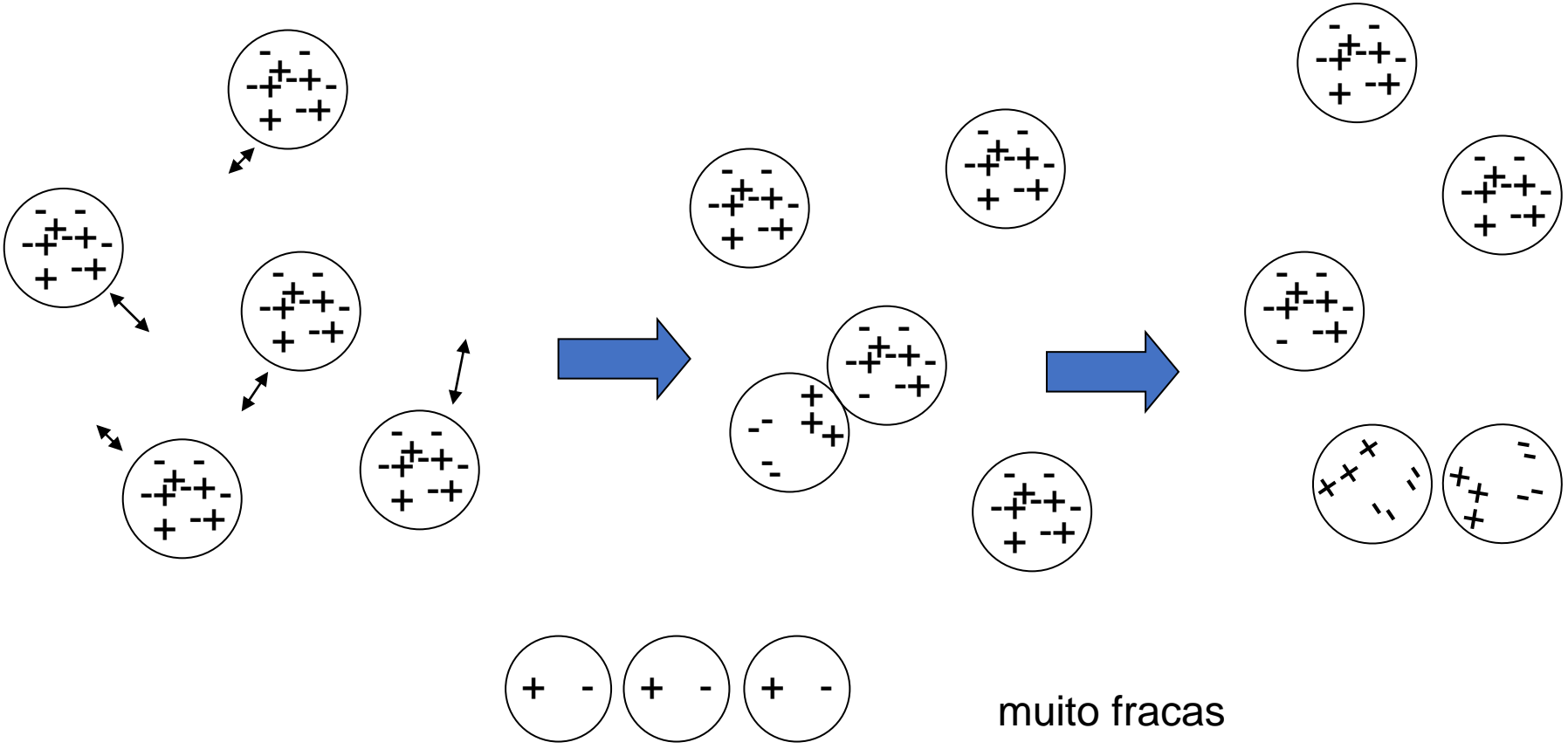
HCl





1.2. Forças de dispersão (London ou dipolo-induzidas)

Se originam das flutuações momentâneas que ocorrem nas nuvens eletrônicas em um átomo ou molécula.

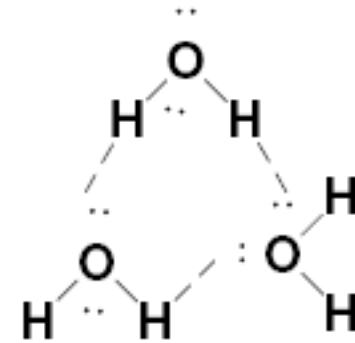




1.3. Pontes de hidrogênio

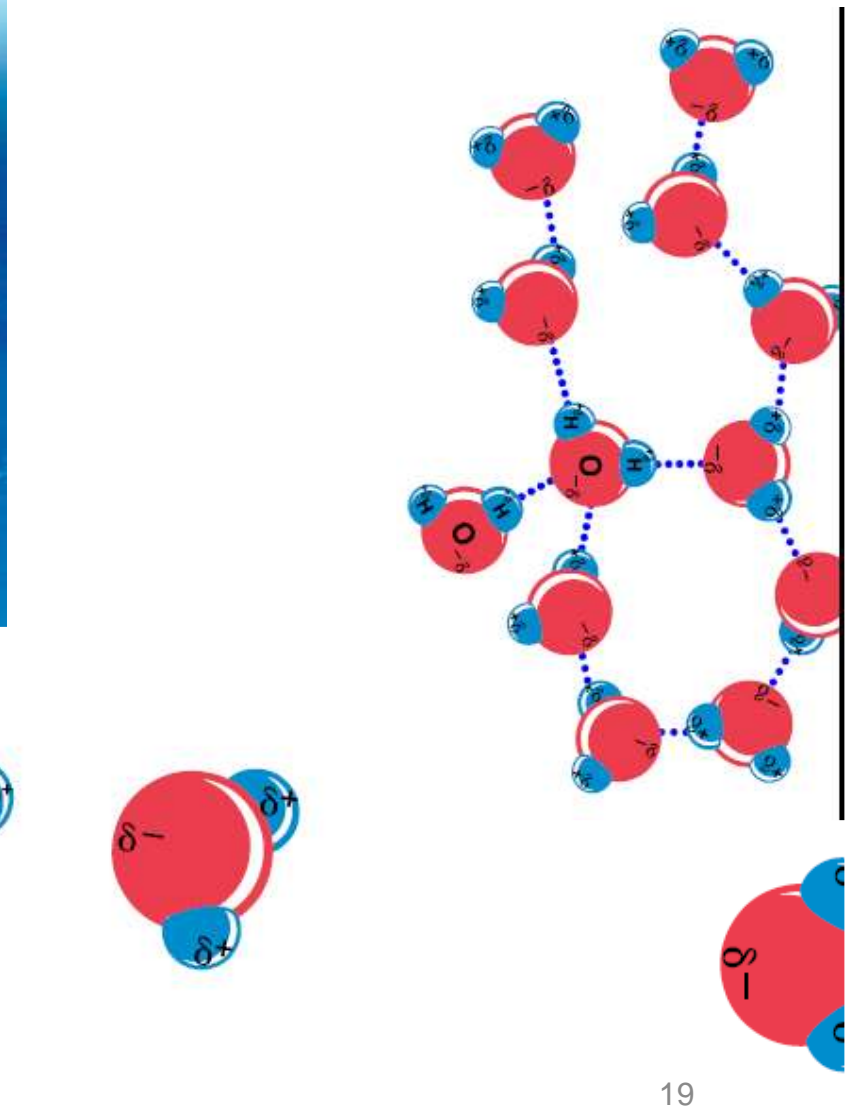
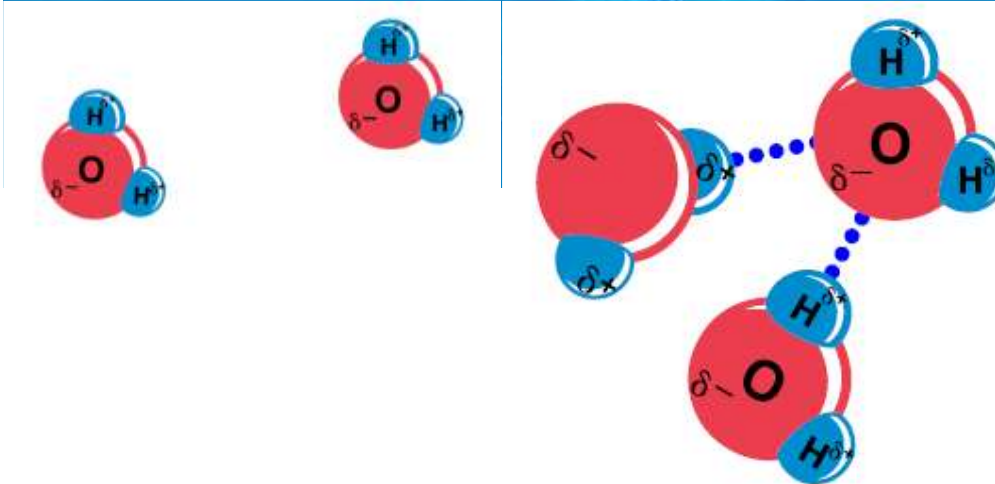
Grupos O – H , N – H, ou F – H que forneçam o H, e o outro átomo (O, N, ou F) que proporcione o par isolado de elétrons

Pode ser vista como a forma mais forte de interação dipolo-dipolo: moléculas muito polares e grande estabilidade



Intensidade relativa das forças intermoleculares:

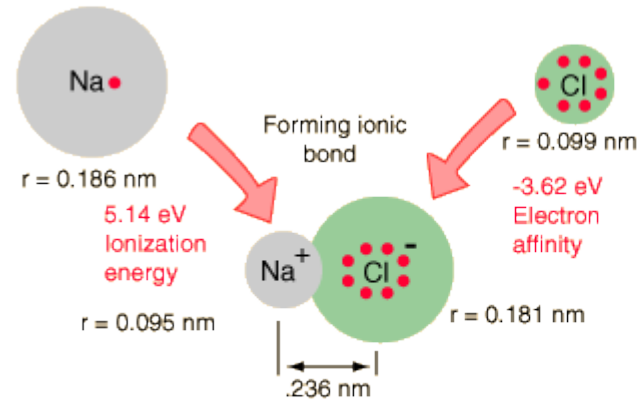
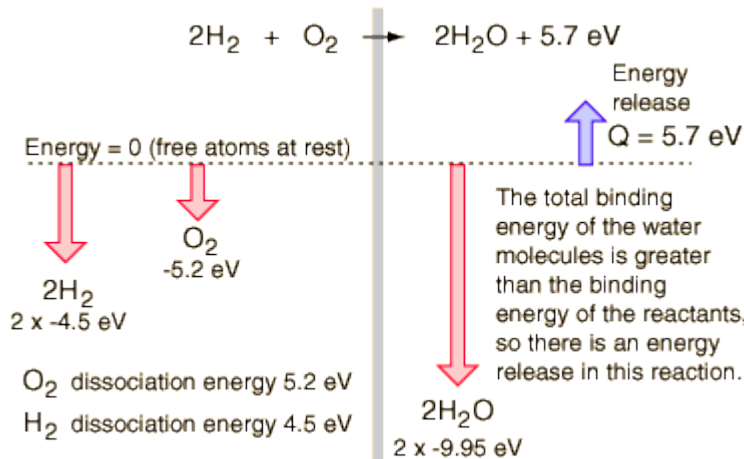
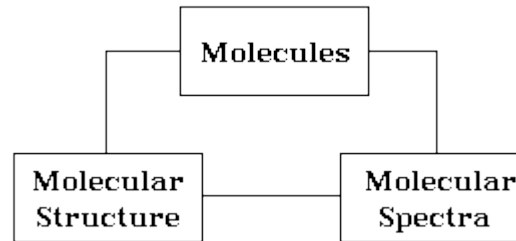
Ponte de Hidrogênio > Dipolo-dipolo > Forças de London





Propriedades das moléculas

- O entendimento da estrutura molecular vem da informação do espectro molecular. Sua investigação é paralela com a investigação da estrutura atômica e a maior parte destes estudos é a descrição das ligações químicas formadas entre os átomos. O espectro molecular pode fornecer informações sobre a força (espectro vibracional) e sobre o comprimento das ligações (espectro rotacional)



Energy balance

| |
|-----------------------------|
| 5.14 eV Ionization energy |
| -3.62 eV Electron affinity |
| -6.10 eV Coulomb attraction |
| <hr/> |
| -4.58 eV |

But the dissociation energy of NaCl is measured to be -4.26 eV. The difference is +0.32 eV attributed to Pauli repulsion.

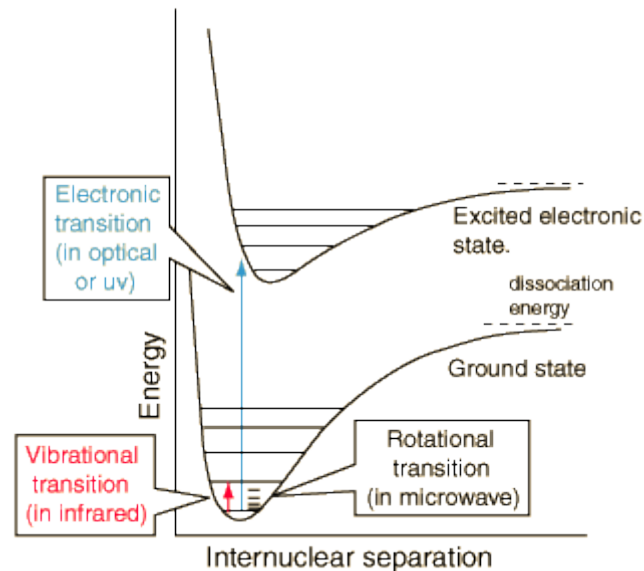
Electric potential energy

$$\frac{-Ke^2}{r} = \frac{-1.44 \text{ eV nm}}{0.236 \text{ nm}} = -6.1 \text{ eV}$$

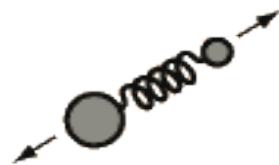
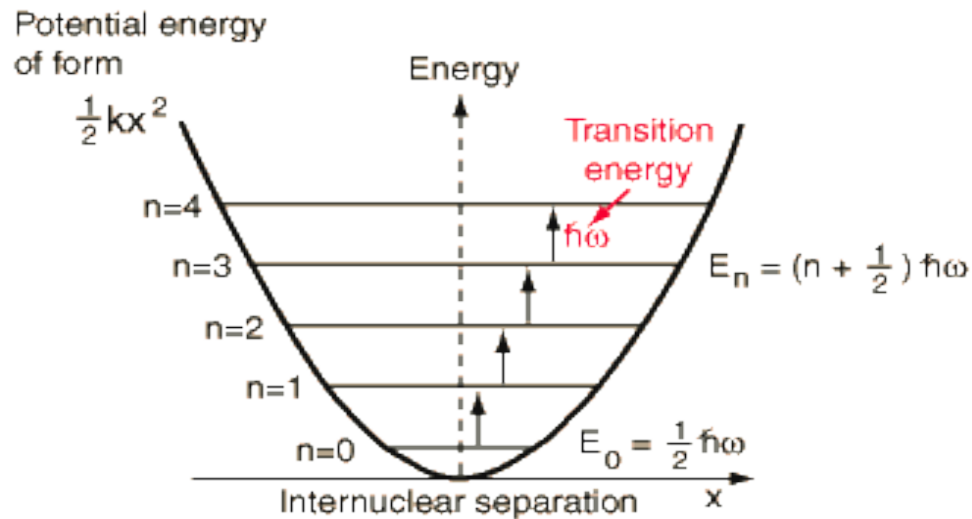


Espectro molecular

- **Aproximação de Born-Oppenheimer**
- separa as propriedades eletrônica, vibracional, e rotacional das moléculas
- **Assume que:**
- **A função de onda eletrônica depende das posições do núcleo** mas não de suas velocidades (movimento nuclear muito mais lento que o eletrônico)
- **O movimento nuclear (rotação e vibração) não tem seu potencial afetado pelas velocidades dos elétrons**

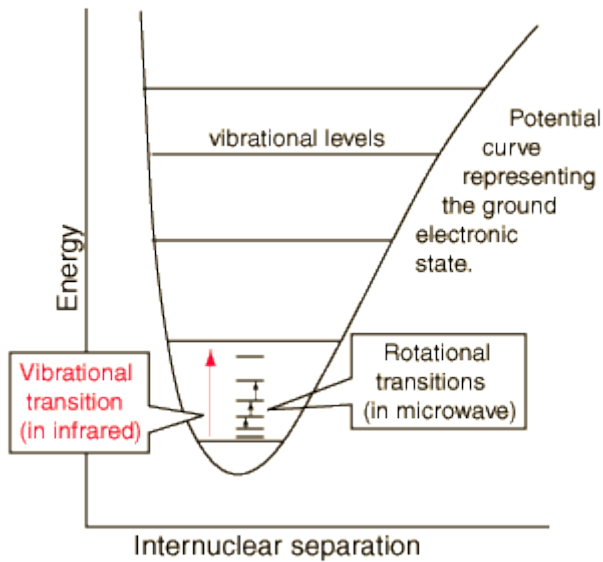
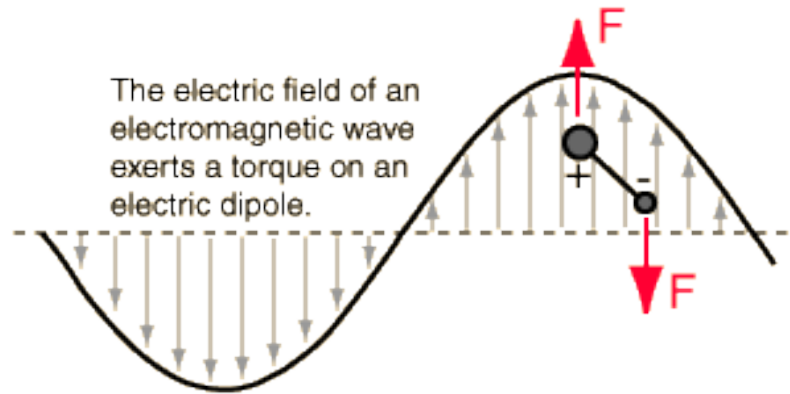


Vibrational Spectra of Diatomic Molecules



$x=0$ represents the equilibrium separation between the nuclei.

Rotational Spectra



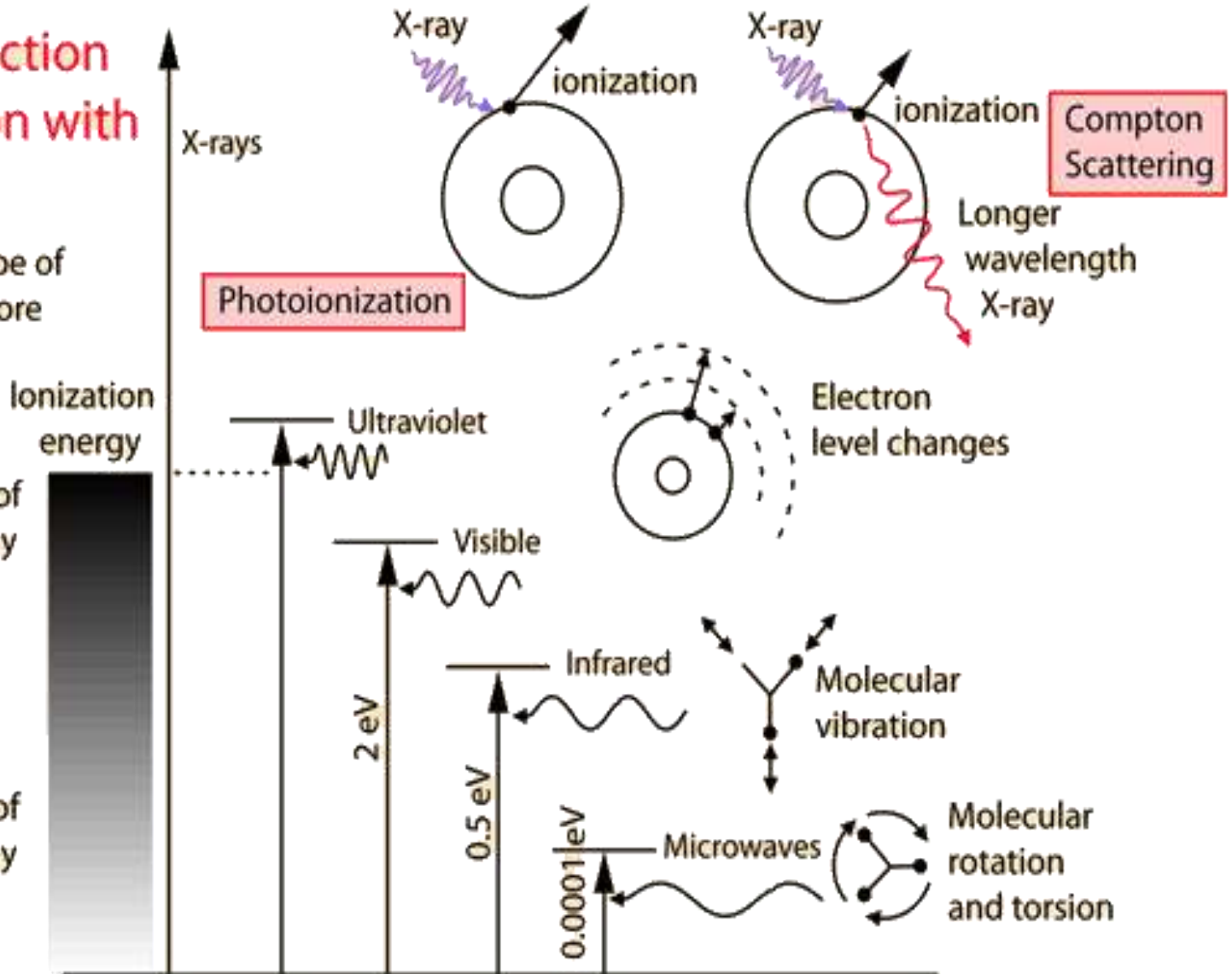
Usando o “Modelos de moléculas”

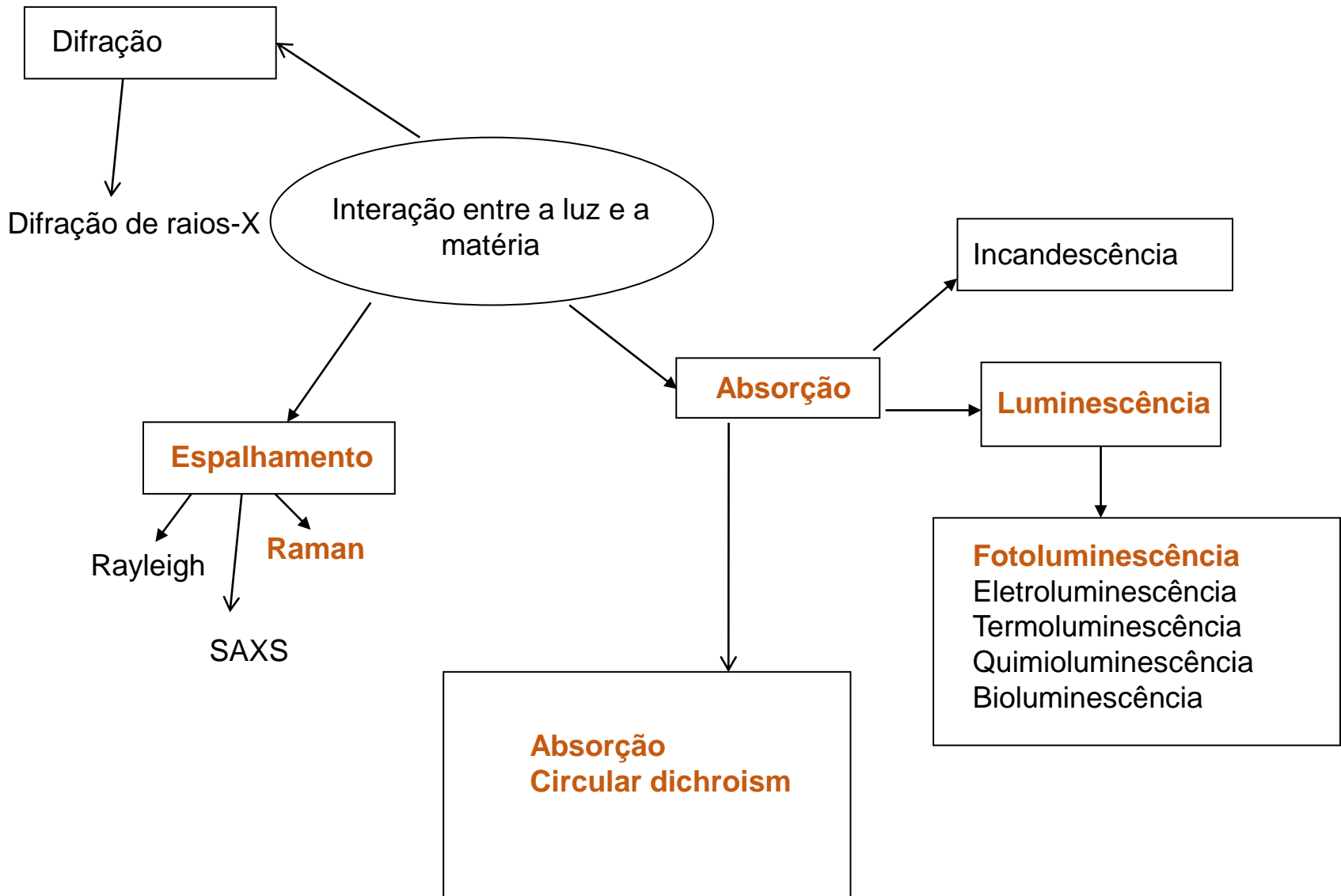
The interaction of radiation with matter.

Click on any type of radiation for more information.

Large number of available energy states, strongly absorbed.

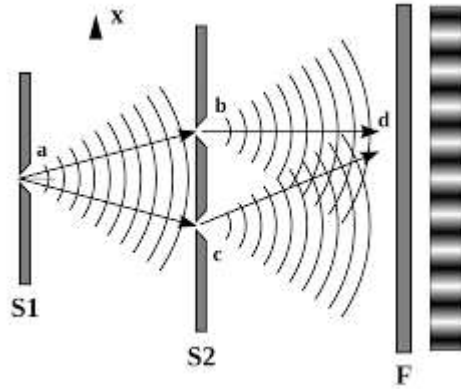
Small number of available energy states, almost transparent.







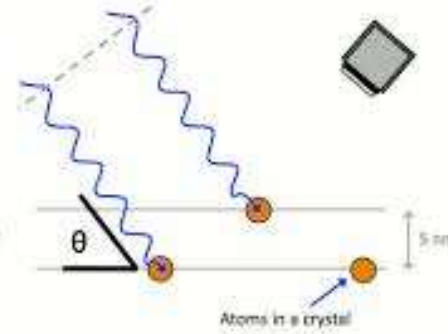
X-Ray Diffraction



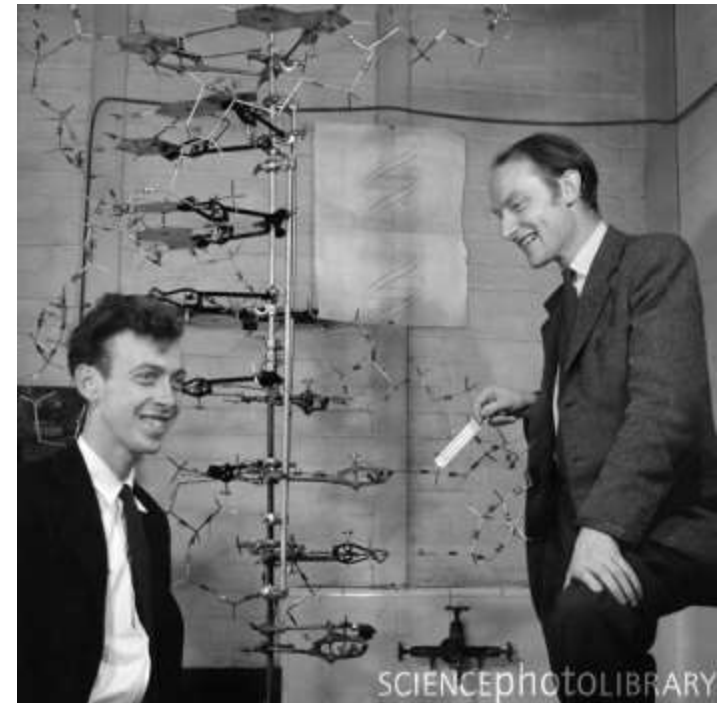
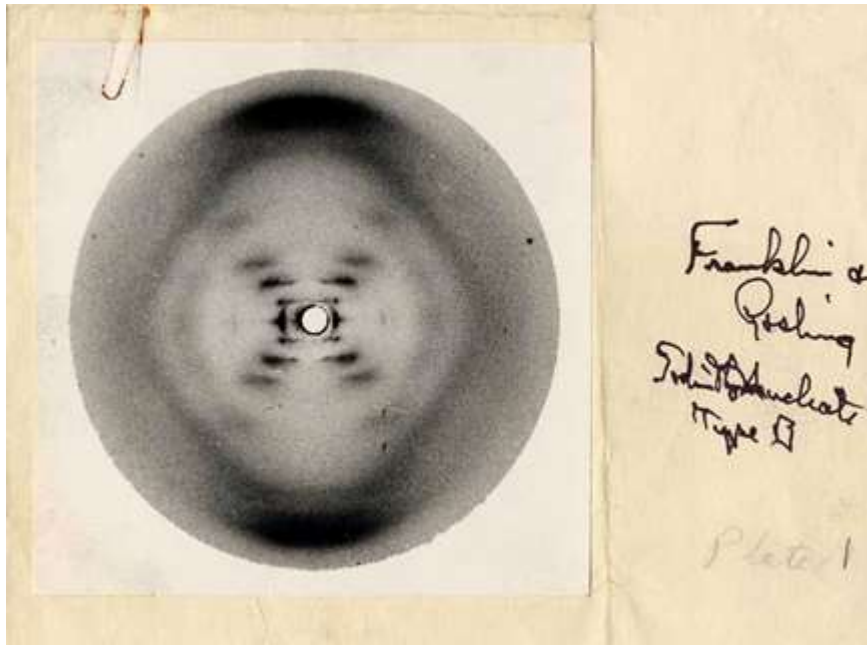
X-rays hitting the material; Wavelengths are lined up

At some angle

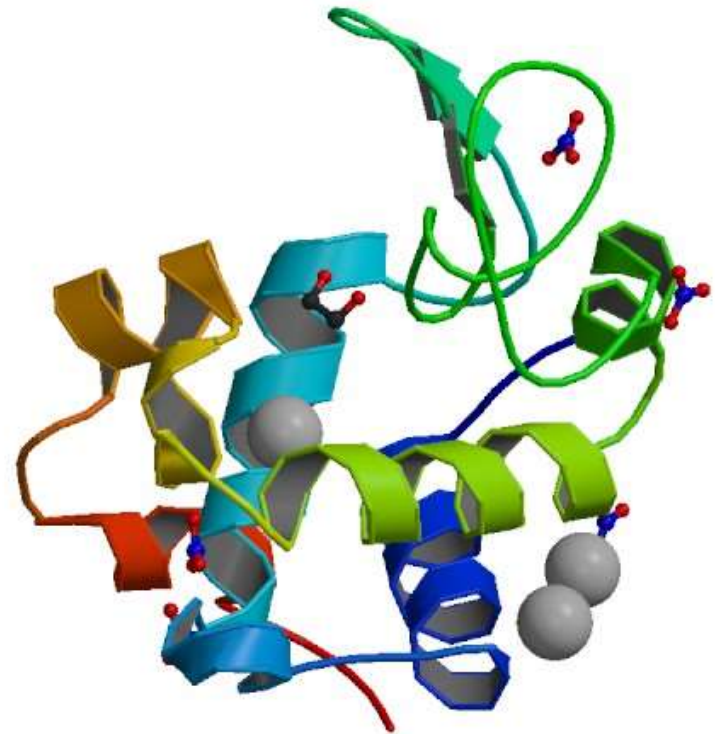
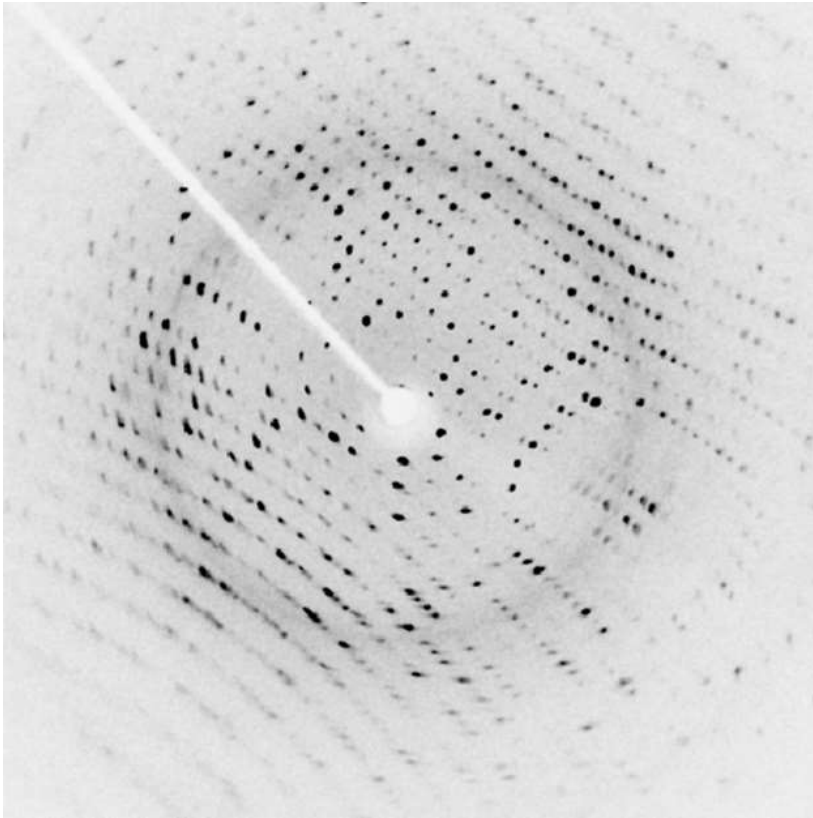
1

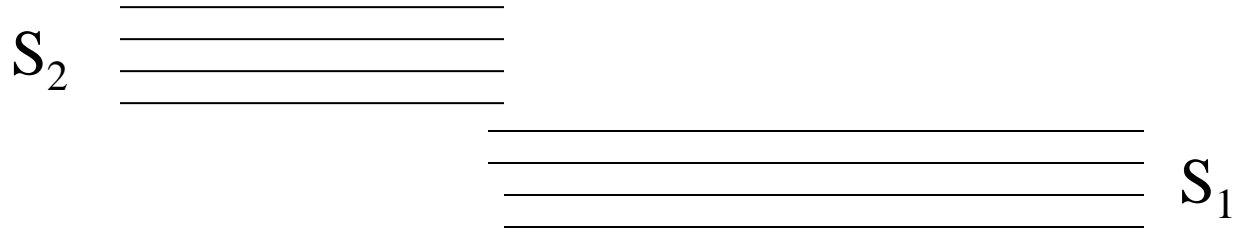


Rosalind Franklin e Ray Gosling

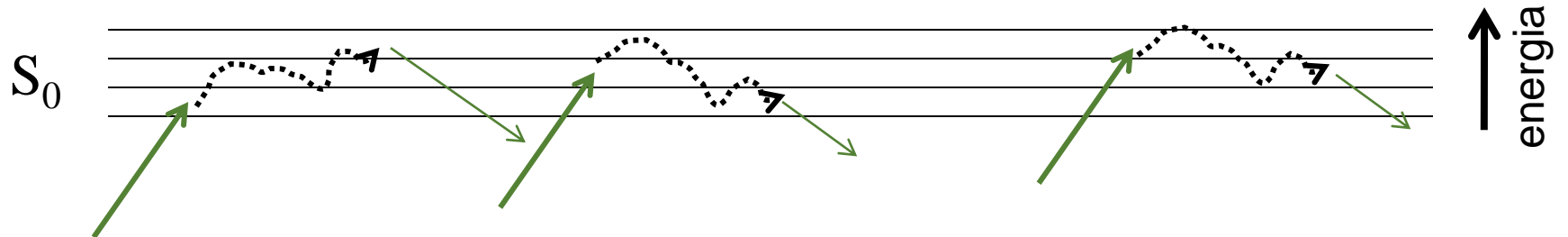


SCIENCEPHOTOLIBRARY



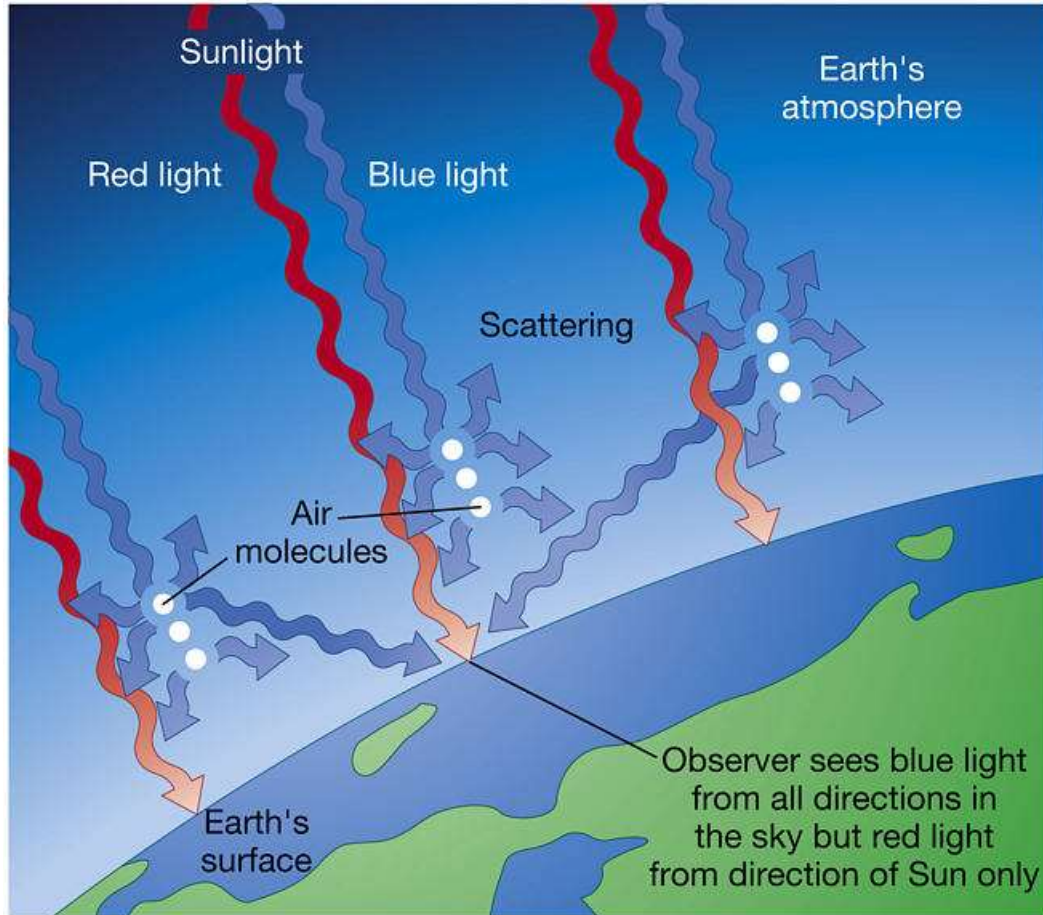


Espalhamento

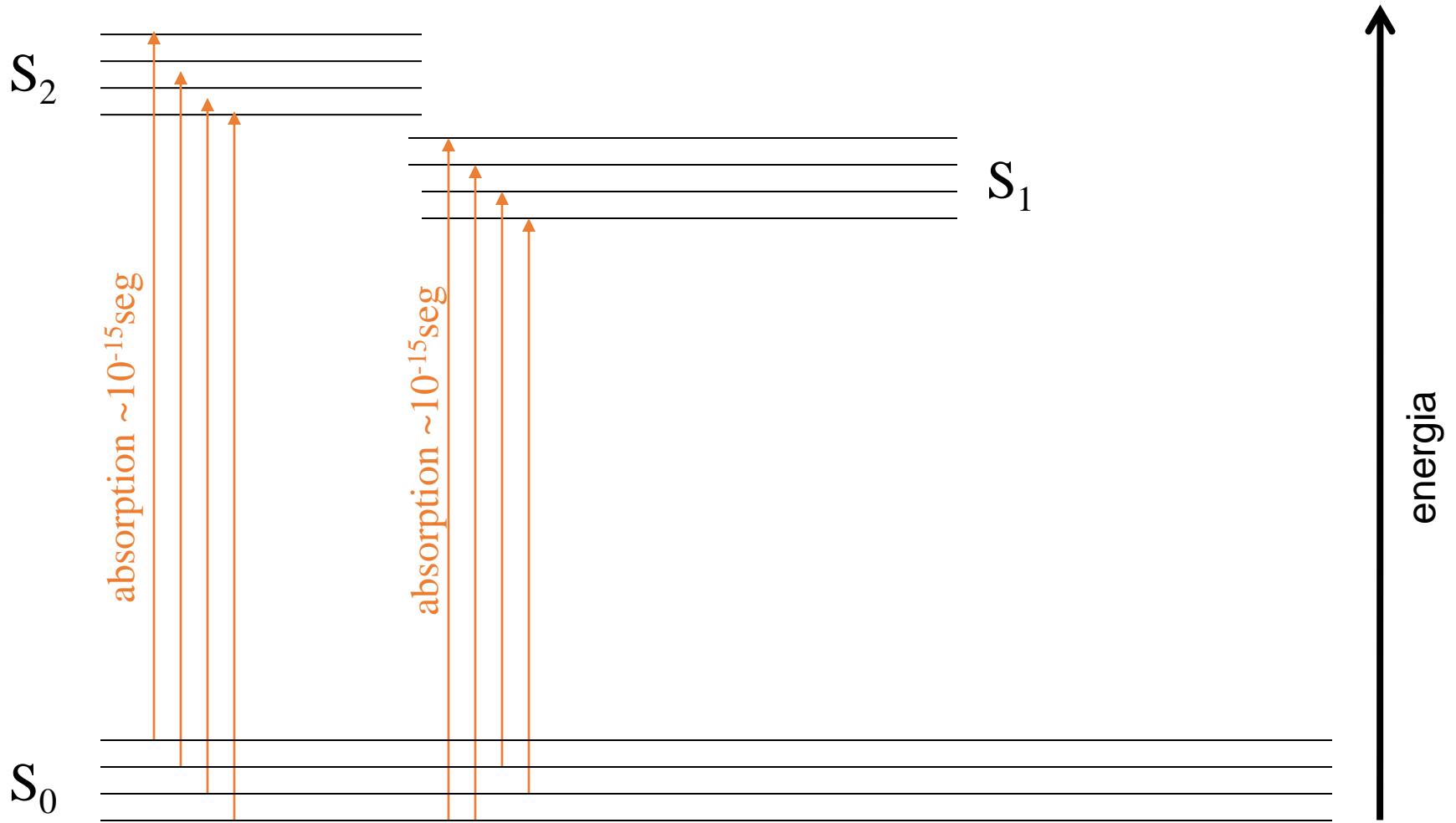




Espalhamento



Copyright © 2005 Pearson Prentice Hall, Inc.





Eilhardt Wiedemann (1888)*: “all those phenomena of light which are not solely conditioned by the rise in temperature”

orgânicos:

hidrocarbonetos aromáticos

Fluoresceína

Rhodamina

Cumarina

Políenios

Aminoácidos (Trp, Tyr, Phe)

Compostos luminescentes

inorgânicos:

ions lanthanides (Eu^{3+} , Tb^{3+})

doped glass (Nd, Mg, Ce, Sn, Cu e Ag)

crystals (ruby, ZnS, CdS, ZnSe, GaS)

minerais

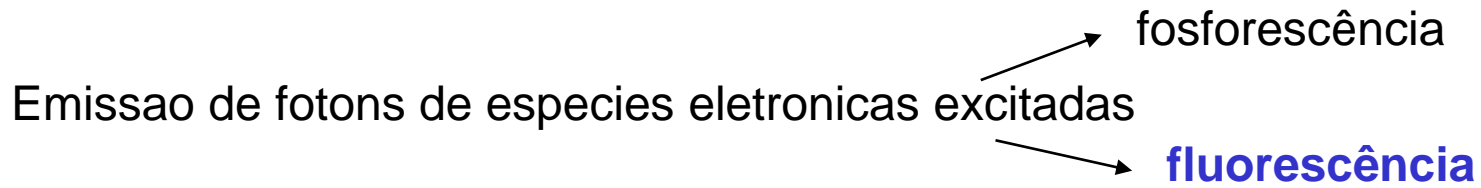
Organometálicos:

ruthenium complexes

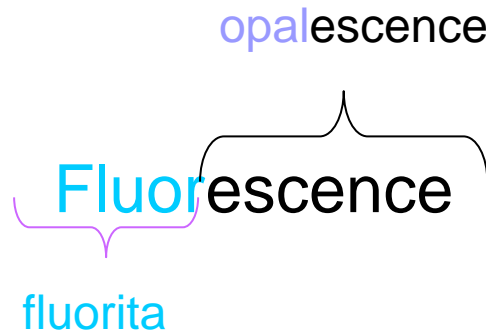
ions terra-raras complexes

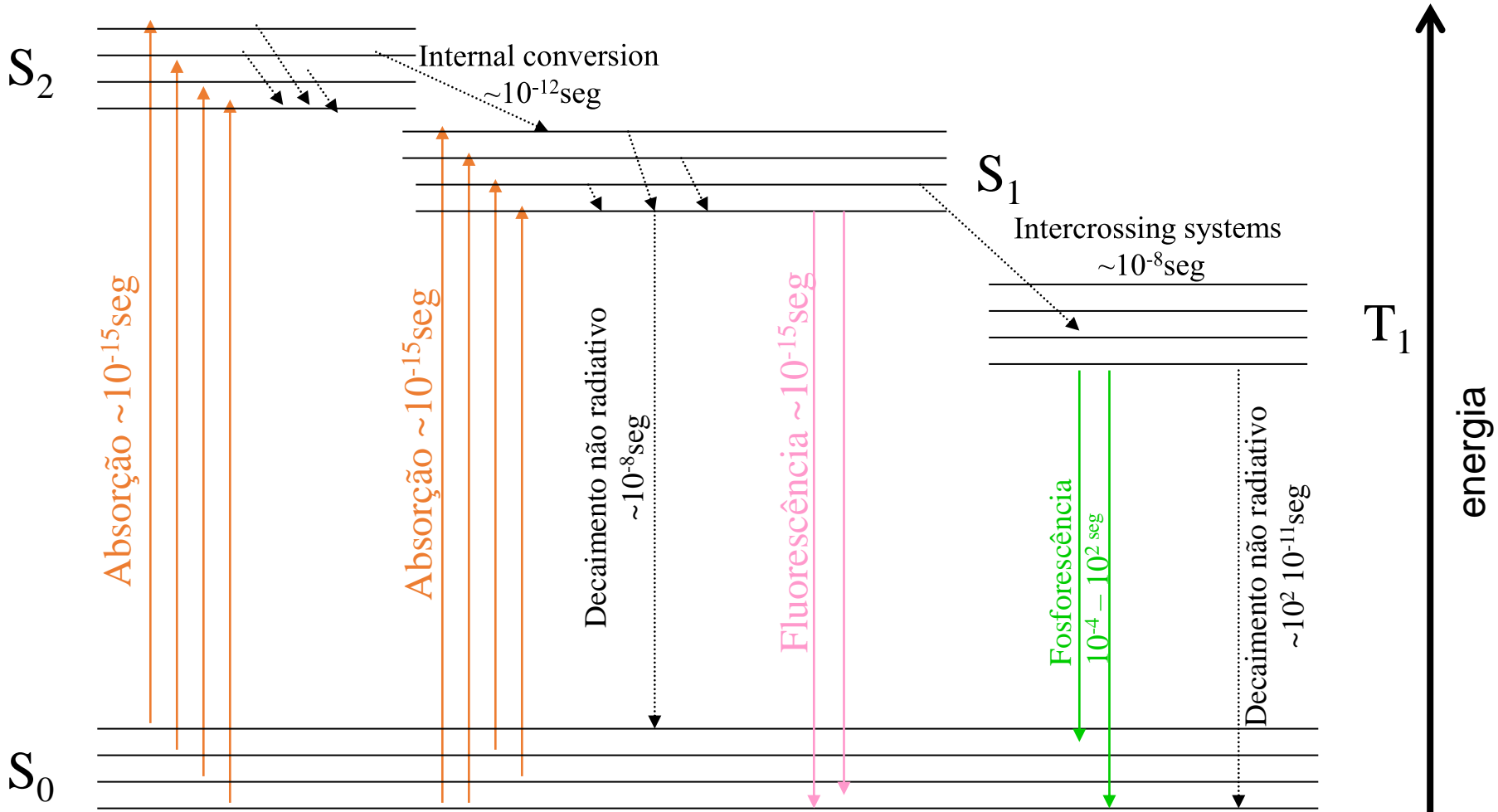
quelant fluorogenics complexes

Fotoluminescência



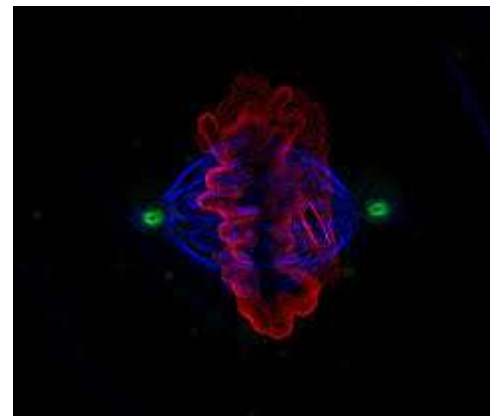
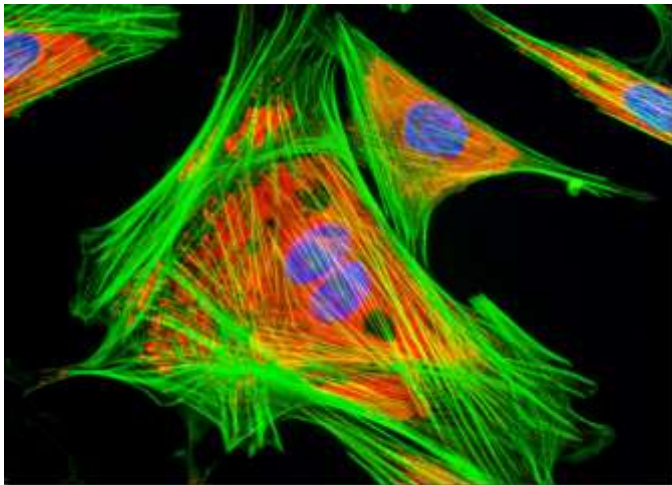
Stokes, 1852.



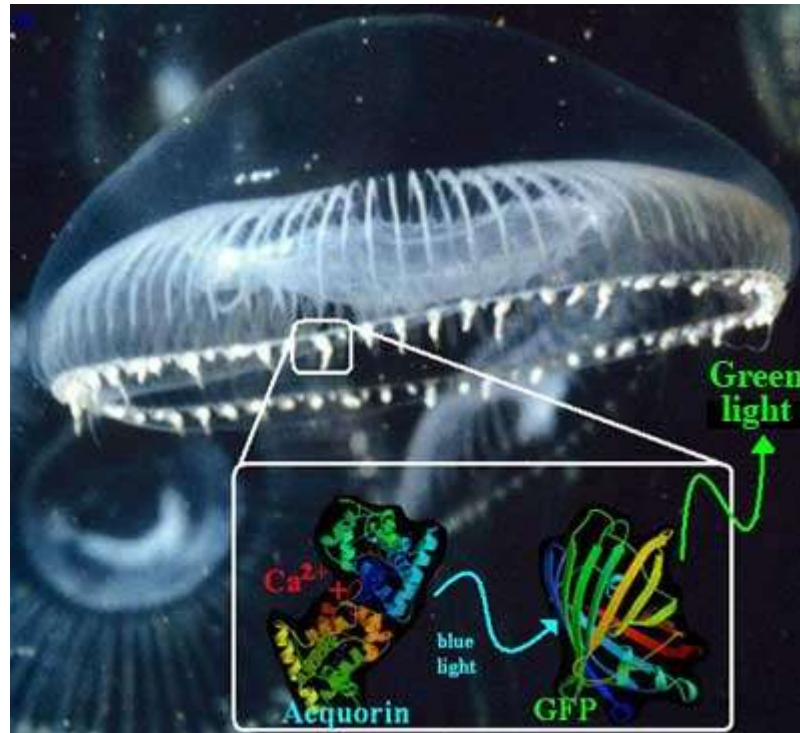


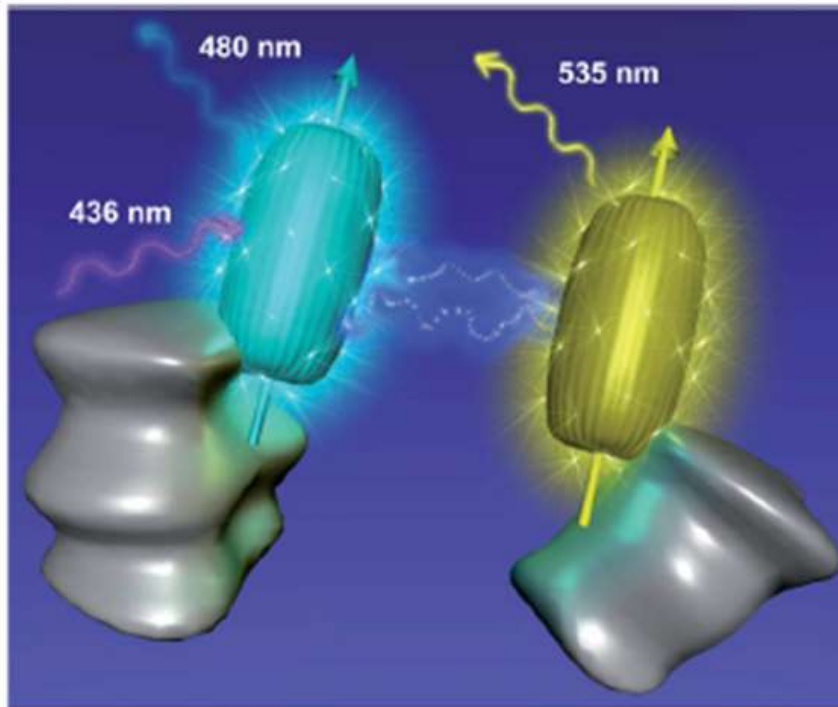


Testes diagnósticos

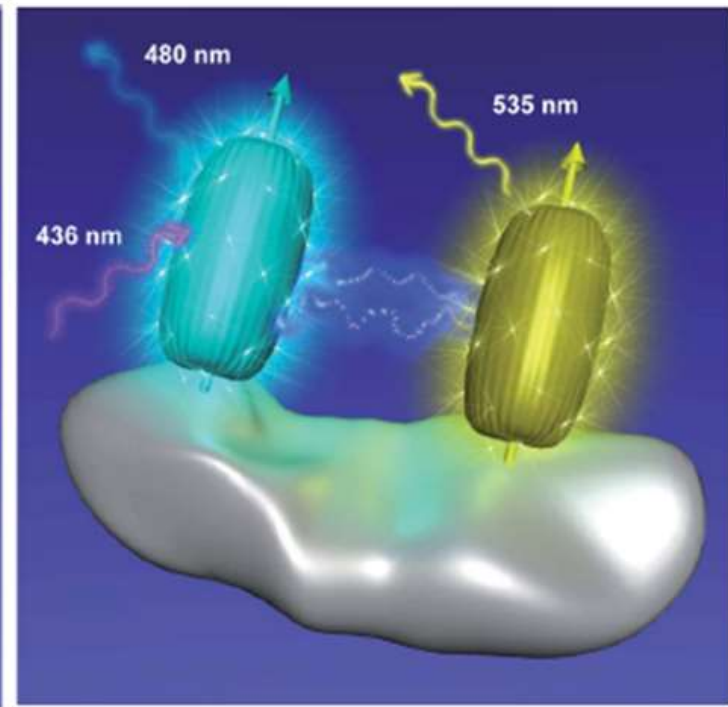


microscopia





A



B



Referências

Em adição à bibliografia recomendada no curso:

Físico-química (de preferencia do Atkins)