

Química  
Inorgânica  
Licenciatura  
Ciências  
Exatas

# ACIDEZ E BASICIDADE

## Brönsted-Lowry 4

Química Inorgânica I

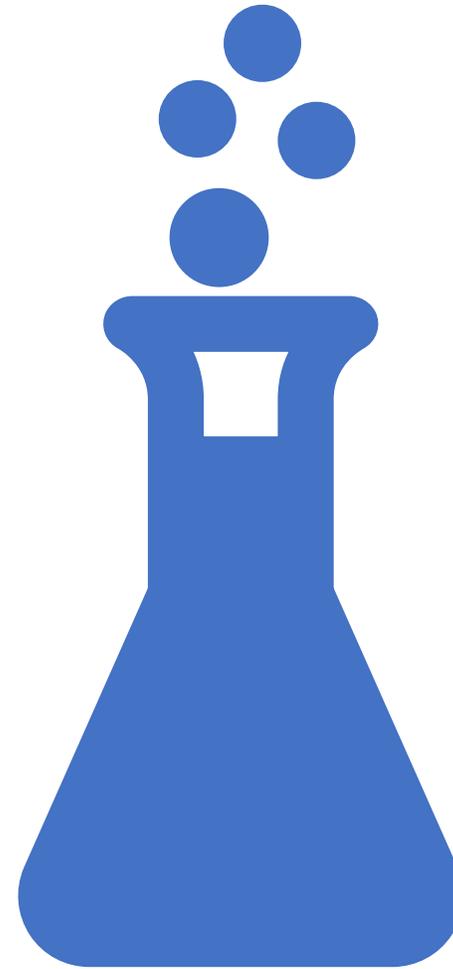
$2\text{KNO}_3 + \text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{K}_2\text{CO}_3 + 2\text{HNO}_3$

Prof. Dr. Ubirajara Pereira Rodrigues Filho



## Acidez e Basicidade de Brønsted-Lowry em Fase Gasosa

- **Afinidade protônica**



# Afinidade Protônica

- Grandeza termodinâmica que mede a basicidade em fase gasosa.
- AP tem uma relação direta com a polarizabilidade molecular média.

Obs.: A AP pode ser usada para estimar a basicidade sigma (ligação simples) numa reação ácido-base de Lewis como veremos mais tarde.

# Afinidade Protônica e Polarizabilidade

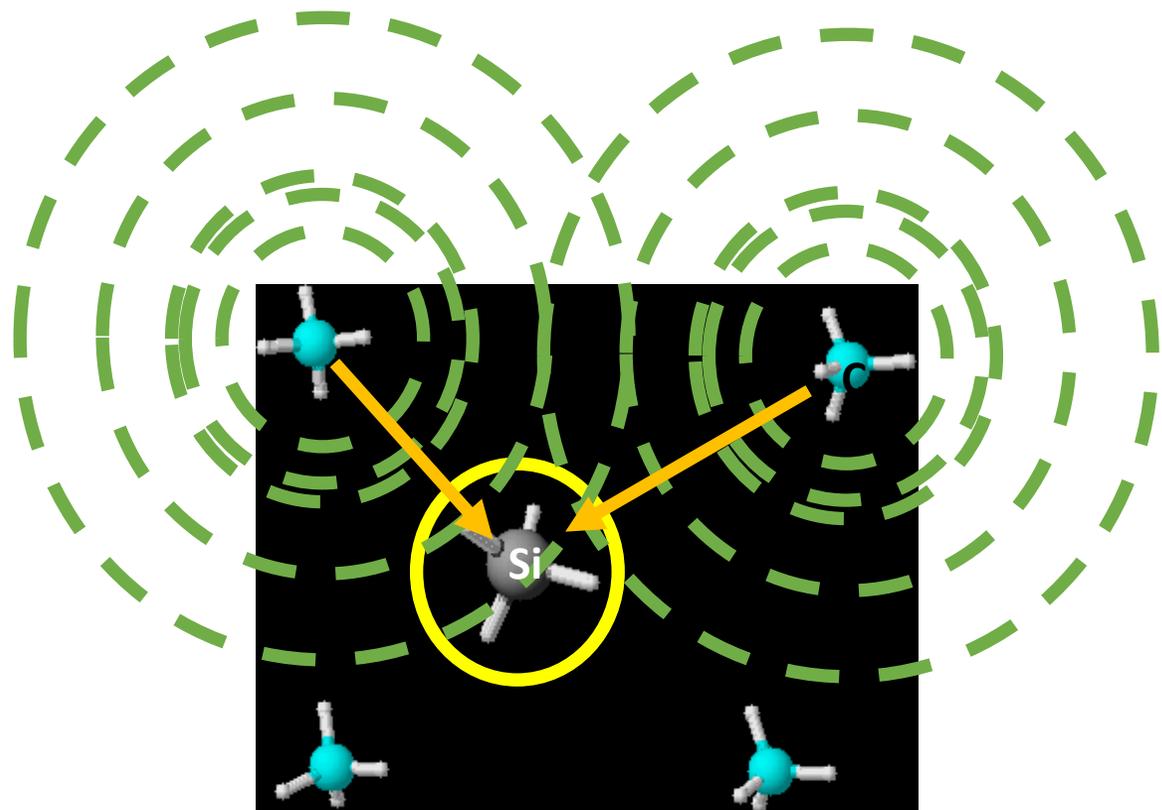
- Muitos pesquisadores acreditam que a polarizabilidade efetiva ( $\alpha_d$ ) é a grandeza que mais influencia na AP. Antes de estabelecer esta correlação é importante definirmos polarizabilidade efetiva.

Polarizabilidade( $\alpha$ ) é capacidade que um átomo ou molécula tem de mudar sua distribuição eletrônica em resposta a um campo elétrico externo (E), ou uma carga nas suas proximidades. A seguinte equação define a polarizabilidade em função do campo elétrico externo e do momento de dipolo induzido (p) por H.

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}$$

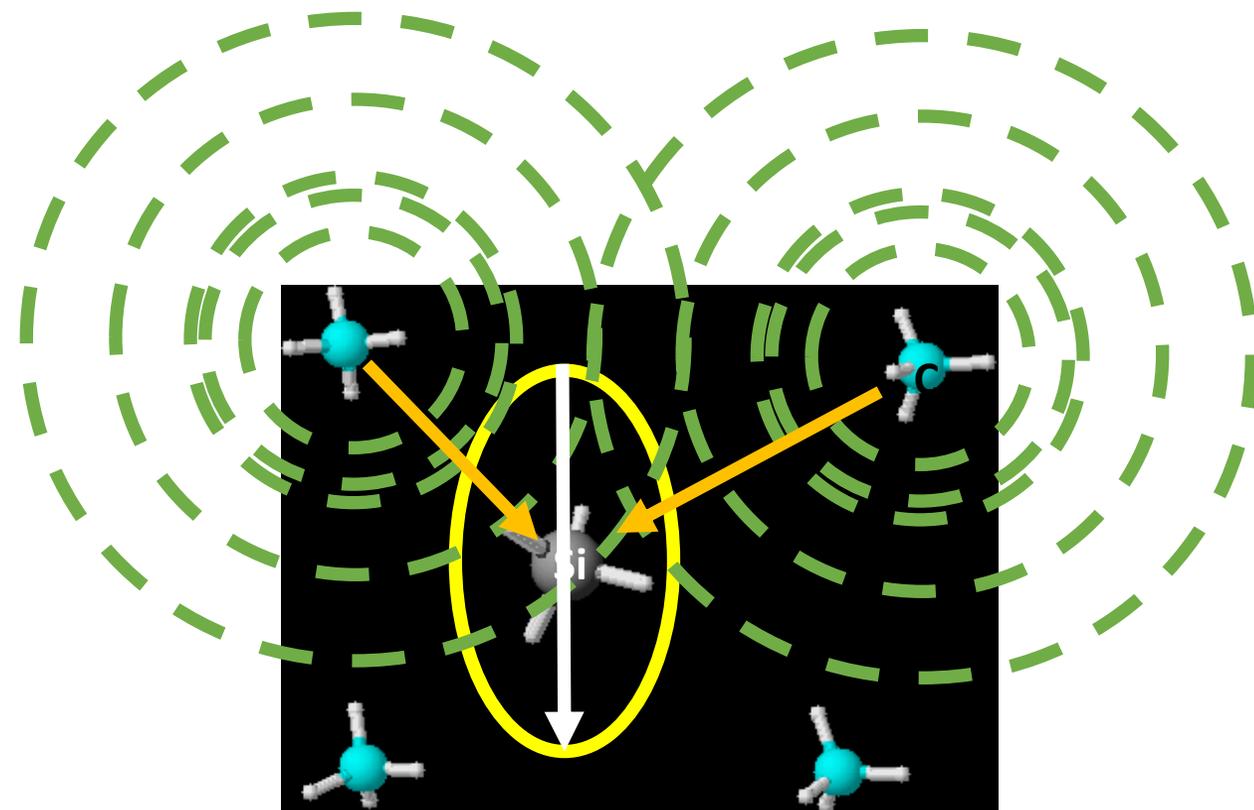
Veja: <http://www2.chemie.uni-erlangen.de/software/petra/manual/manual-16.html>

## Antes de Polarizar



--- Campo Elétrico projetado  
— Densidade Eletrônica

## Após Polarizar



--- Campo Elétrico projetado  
— Densidade Eletrônica

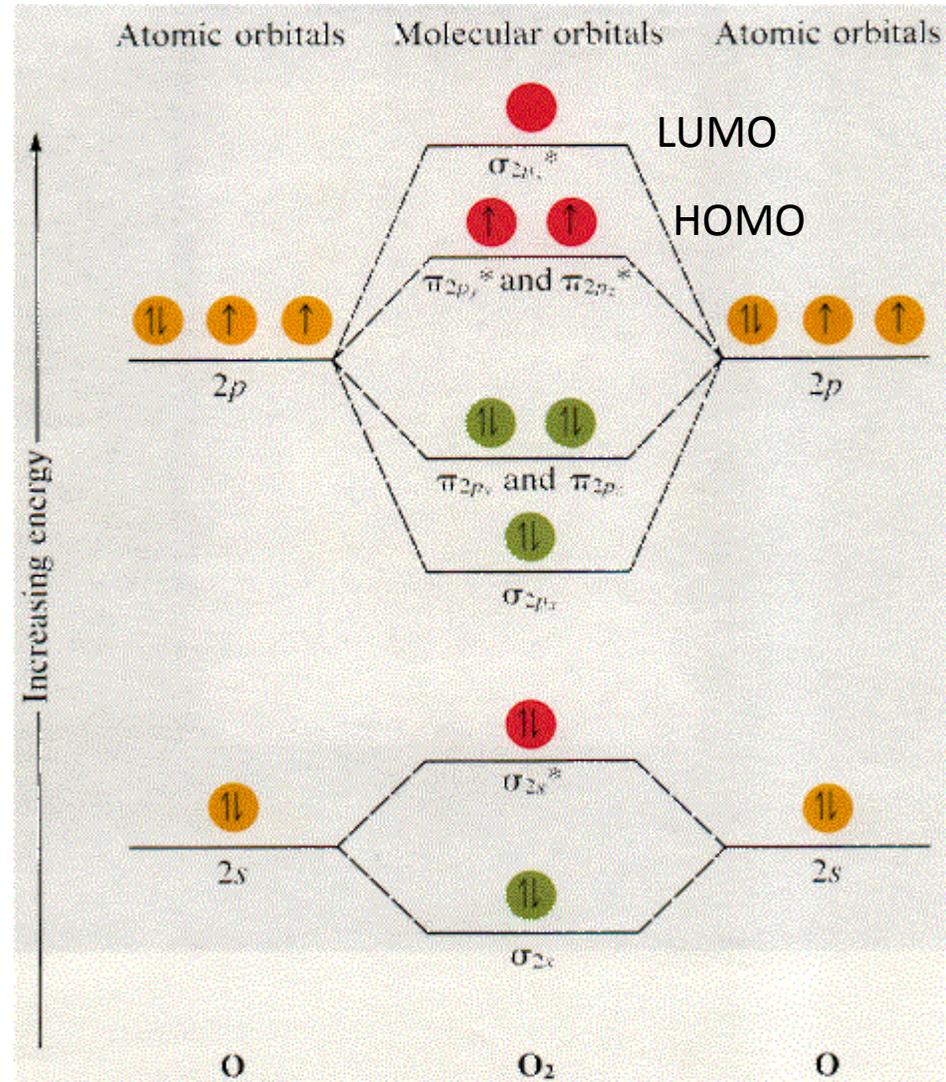
# Polarizabilidade e Orbitais Moleculares

$$\alpha \approx \left( \frac{2}{3\Delta} \right) e^2 \langle r^2 \rangle$$

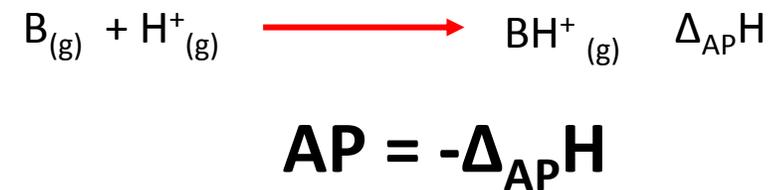
$r$  = raio molecular médio

$$\Delta = E_0 - E_n;$$

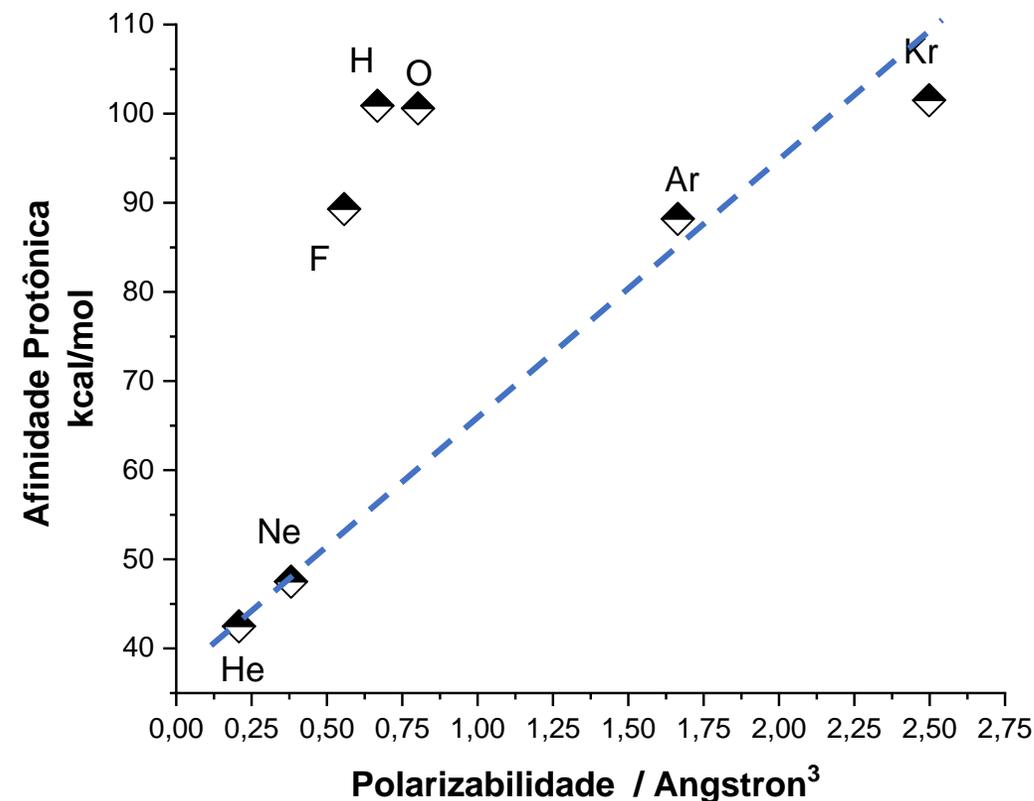
$$\Delta \approx |E_{HOMO} - E_{LUMO}|$$



# Afinidades Protônicas (APs)



Base (B)	AP (kcal/ mol)	Polarizabilidade Experimental $\text{\AA}^3$
He	42,5	0,208
Ne	47,5	0,381
F	89,3	0,557
Ar	88,2	1,664
O	100,6	0,802
H	100,9	0,667
Kr	101,5	2,498

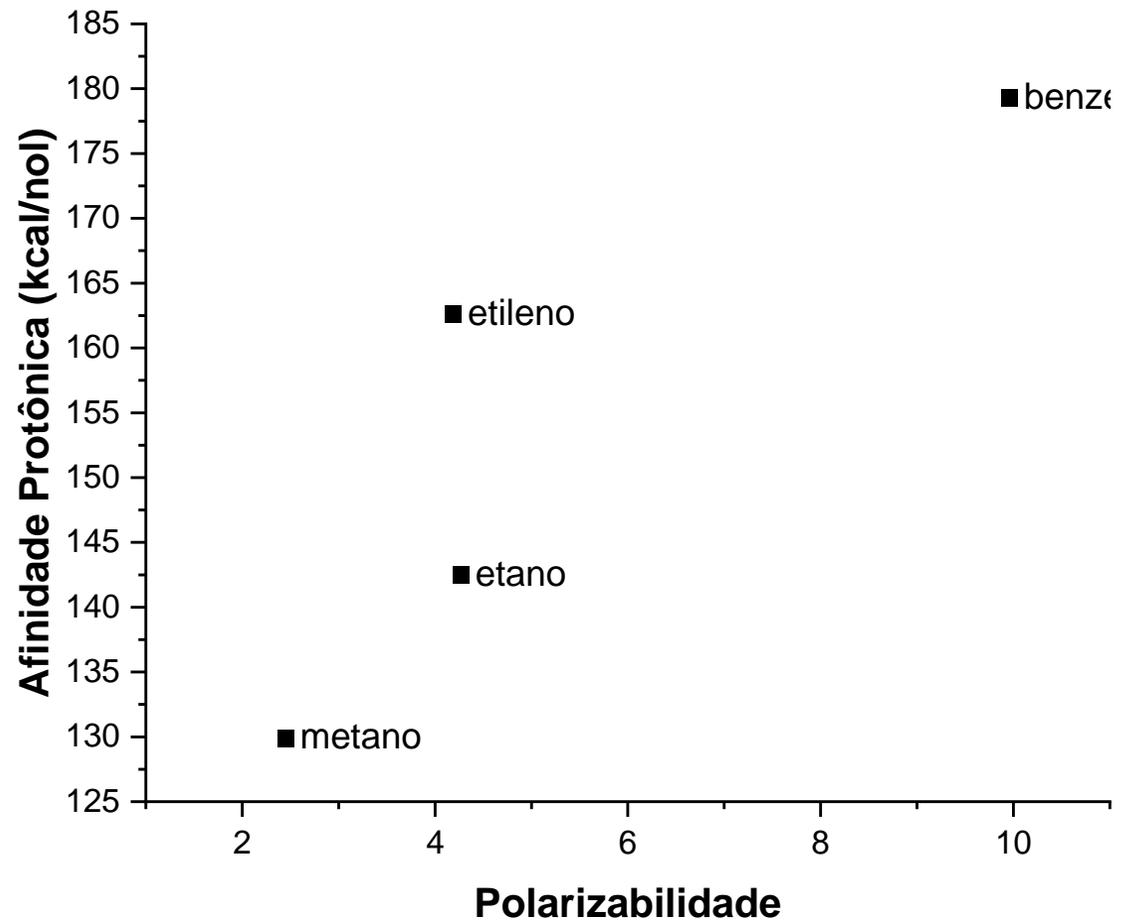


Fonte:

<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Value=1%2C1000&VType=PA&VUnit=kcal%2Fmol&Formula=&AllowExtra=on&Units=CAL>

<https://cccbdb.nist.gov/pollistx.asp>

# Afinidade Protônica em Hidrocarbonetos



# Afinidade Protônica Fluorados

