



Conceitos básicos em química

Aula 1

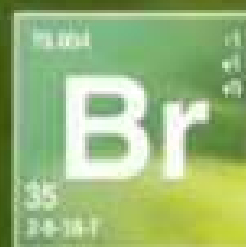


O que é a química?

É Tudo!!!



Visão da química nos anos 70,80 e 90...



eaking



d

Visão de hoje...



O mundo vive de química...

A comprehensive overview of chemical-free consumer products

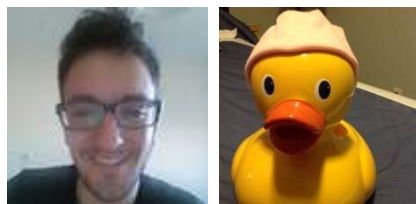
Alexander F. G. Goldberg¹ and CJ Chemjobber^{2*}

Manufacturers of consumer products, in particular edibles and cosmetics, have broadly employed the term 'Chemical free' in marketing campaigns and on product labels. Such characterization is often incorrectly used to imply — and interpreted to mean — that the product in question is healthy, derived from natural sources, or otherwise free from synthetic components. We have examined and subjected to rudimentary analysis an exhaustive number of such products, including but not limited to lotions and cosmetics, herbal supplements, household cleaners, food items, and beverages. Herein are described all those consumer products, to our knowledge, that are appropriately labelled as 'Chemical free'.

A comprehensive overview of chemical-free consumer products

Alexander F. G. Goldberg¹ and CJ Chemjobber^{2*}

Manufacturers of consumer products, in particular edibles and cosmetics, have broadly employed the term 'chemical free' in marketing campaigns and on product labels. Such characterization is often incorrectly used to imply — and interpreted to mean — that the product in question is healthy, derived from natural sources, or otherwise free from synthetic components. We have examined and subjected to rudimentary analysis an exhaustive number of such products, including but not limited to lotions and cosmetics, herbal supplements, household cleaners, food items, and beverages. Herein are described all those consumer products, to our knowledge, that are appropriately labelled as 'chemical free'.



¹Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel, 9870 Road 40 M/S, Shel, WY 80441, USA, *e-mail: alexgold@weizmann.ac.il

References

1. 'Chemical Free' cosmetics: <http://bit.ly/121m4>
2. 'Chemical Free' beauty: <http://bit.ly/121m4>
3. 'Chemical Free' beauty: <http://www.fox.com/2013/10/10/chemical-free-beauty/>
4. 'Chemical Free' app: <http://www.fox.com/2013/10/10/chemical-free-app/>

Acknowledgments

CJ Chemjobber thanks the Weizmann Institute for providing the opportunity to work on this project. A.F.G. thanks the Israeli Foundation for Research and Development for funding.

Author contributions

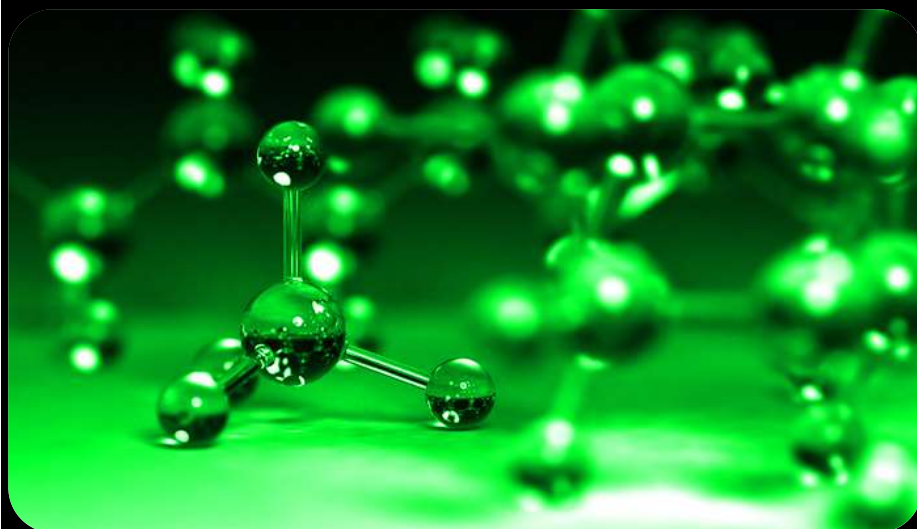
Both authors contributed equally to the manuscript.

Additional information

Correspondence should be addressed to alexgold@weizmann.ac.il or cjobber@weizmann.ac.il.

Competing financial interests

The authors declare no competing financial interests. They would like to thank the Weizmann Institute for funding.



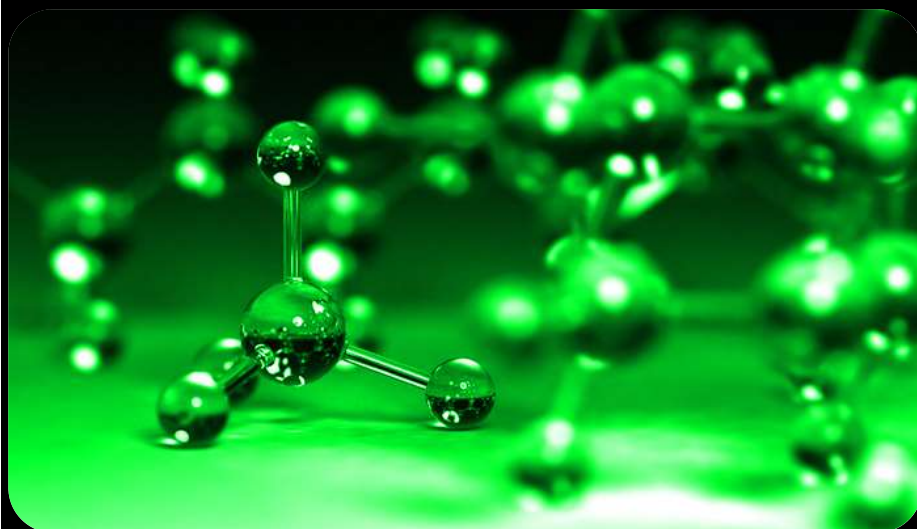
Surge anos 90s

Nova tendência na maneira como a questão dos resíduos químicos deve ser tratada

Alternativa que evite ou minimize a produção de resíduos, em detrimento da preocupação exclusiva com o tratamento do resíduo no fim da linha de produção...



Química Verde



Química Verde

“A invenção, desenvolvimento e aplicação de produtos e processos químicos para reduzir ou eliminar o uso e a geração de substâncias perigosas”

Termo proposto na década de 90 por **Paul Anastas** (US-EPA)

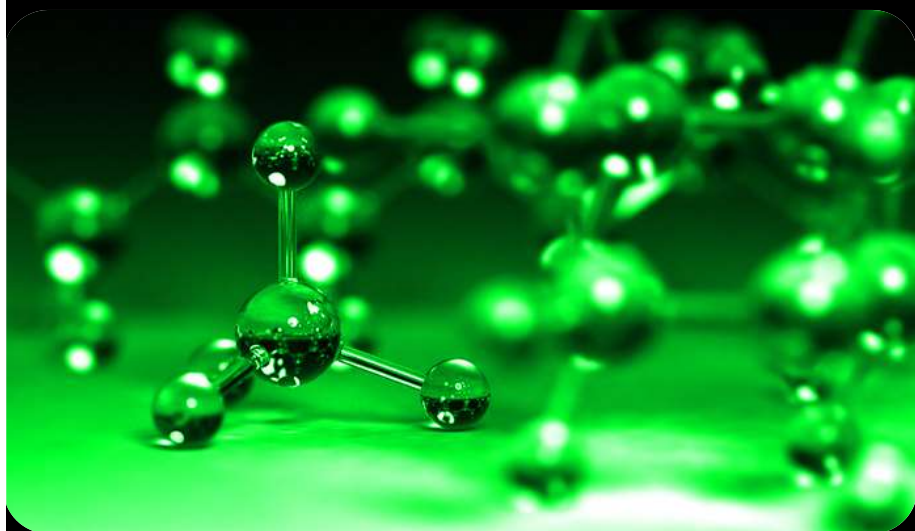


O sucesso da química verde não resulta da sustentabilidade...

A sustentabilidade é uma das suas consequências...

O sucesso está na rentabilidade, eficiência, lucro...

Resumindo Química verde Implica...



- O uso de fontes renováveis ou recicladas de matéria-prima;
- Aumento da eficiência de energia, ou a utilização de menos energia para produzir a mesma ou maior quantidade de produto;
- Evitar o uso de substâncias persistentes, bioacumulativas e tóxicas.



- O design de produtos químicos deve ser
A utilização de energia
(As substância
(Eliminar sempre que
| possível o uso de
| solventes ou
: substâncias auxiliares e
| quando utilizadas estas
substancia deverão ser
inócuas.
explosões e incêndios

Como Quantificar?

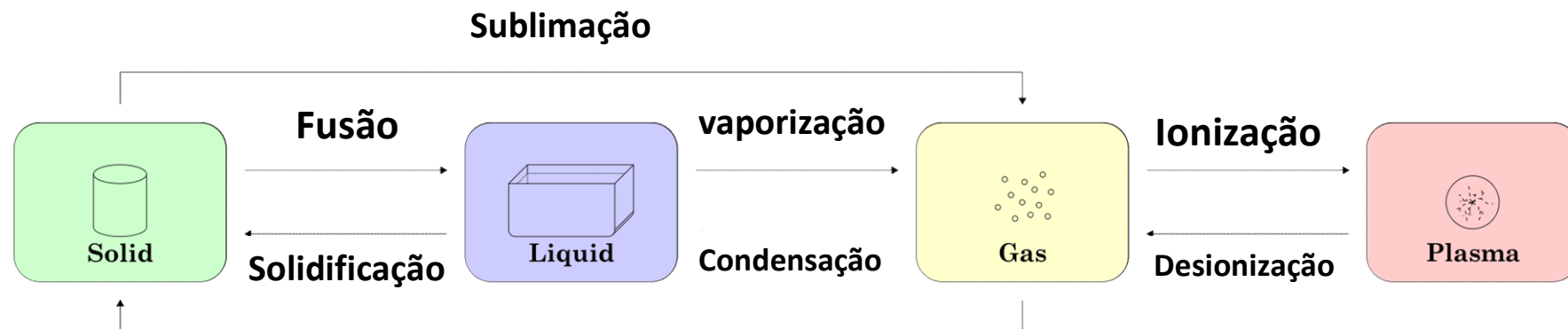
$$\text{Fator E} = \text{Quantidade Resíduo (kg)}/\text{Produto (kg)}$$

	Produção (ton)	Fator E
Refinarias/petróleo	10^6 - 10^8	<0,1
Química Pesada	10^4 - 10^6	<1 - 5
Química fina	10^2 - 10^4	5 - >50
Indústria Farmacêutica	10 - 10^3	25 - >100

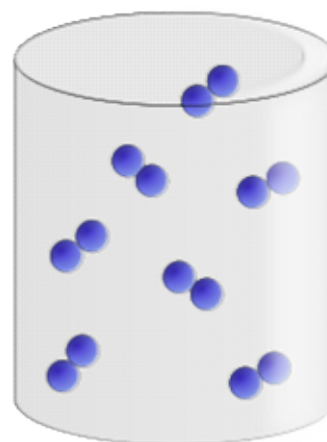
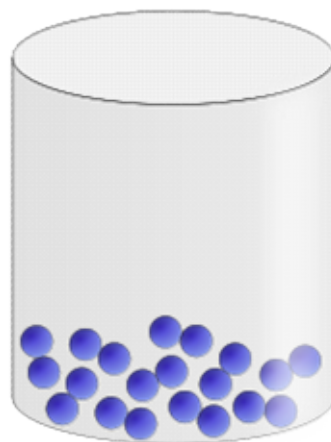
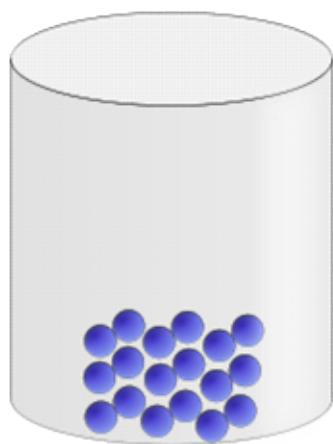
Estados da Matéria



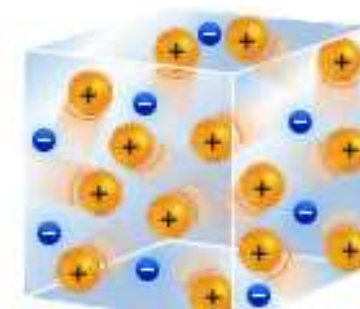
Estados da Matéria



Ressublimação



Iões e electrões



PLASMA

TEMPERATURA ou ENERGIA

Exemplo – Bromo



Bromo sólido e líquido

Ponto de fusão – 265,8 K ou -7,2 °C

Bromo gás líquido

Ponto de ebulição – 332 K ou 59 °C

Macroscópico



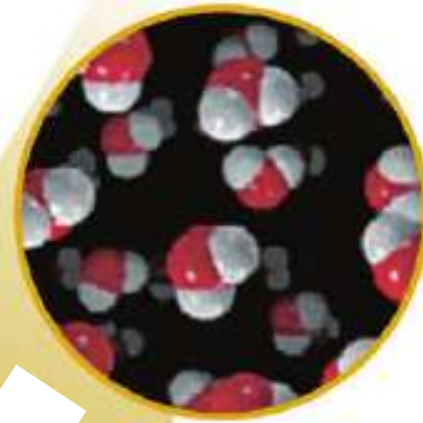
Photos: Charles D. Winters

Macroscopic

Observado

Imaginação

Representado



Par

Molecular



Representação

Substâncias

Matéria

sólida líquida ou gás

Mistura heterogênea

composição não uniforme.

Misturas

Mais de uma substância
na sua composição

Mistura homogênea

Composição totalmente
uniforme.

Compostos

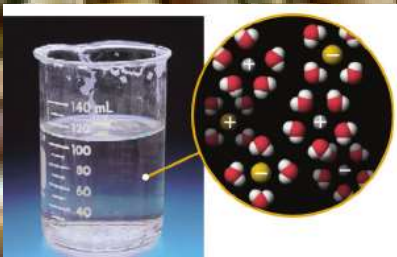
elementos combinados em
razões fixas

Substâncias puras.

Composição fixa, não
pode ser purificada

Elementos

não podem ser subdivididos por
processos físicos ou químicos



Purificação



Elementos



Mercúrio (Hg)



Enxofre (S)



Cobre (Cu)



Ferro (Fe)

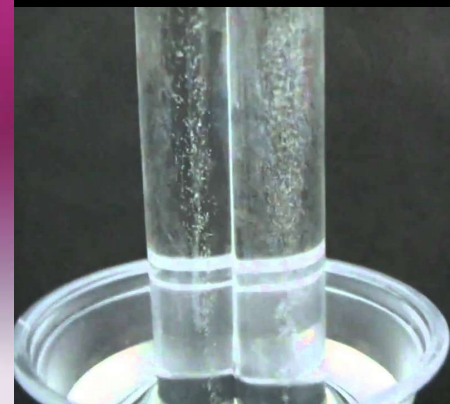


Alumínio (Al)



Oxigênio (O₂)

Hidrogênio (H₂)



Tinta de antimônio e chumbo



Babilônia



Nebuchadnezzar 605-562 AC



Newton 1643-1727

					18 VIII A 8A
					2 He Helium 4.003
5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.180
13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
31 Ga Gallium 69.732	32 Ge Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.09	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 84.80
49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.29
81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [208.982]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018
113 Uut Ununtrium unknown	114 Fl Flerovium [289]	115 Uup Ununpentium unknown	116 Lv Livermorium [293]	117 Uus Ununseptium unknown	118 Uuo Ununoctium unknown

Obcecado pelas propriedades sexuais do antimônio.

Como o antimônio é um semi-metal – Hemafrodita

Os últimos elementos em Dezembro 2015...

5 B boron [10.80, 10.83]	6 C carbon [12.00, 12.02]	7 N nitrogen [14.00, 14.01]	8 O oxygen [15.99, 16.00]	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18
13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon [28.08, 28.09]	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur [32.05, 32.08]	17 Cl chlorine [35.44, 35.46]	18 Ar argon 39.95
31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine [79.90, 79.91]	36 Kr krypton 83.80
49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3
81 Tl thallium [204.3, 204.4]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
113	114 Fl flerovium	115	116 Lv livermorium	117	118

Elemento 113 – Descoberto pela equipa do Riken instituto liderada por Kosuke Morita unúntrio (Uut)

Elementos 115, 117 e 118 – descoberto pela colaboração conjunta de equipas Russas (Dubna), norte-americanas (california, Oak Riedge), ununpêntio (Uup), unuséptio (Uus) e o ununóctio (Uuo)

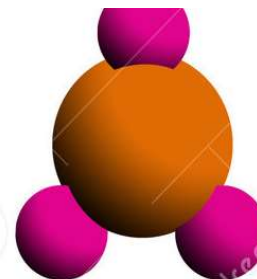
Juntando elementos temos...

Moléculas

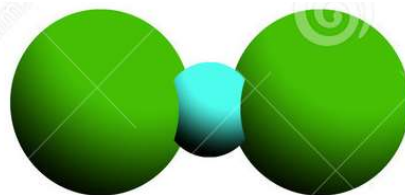
Água



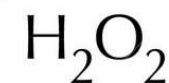
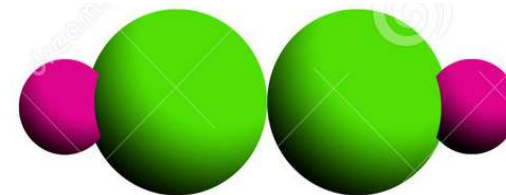
Amônia



Dióxido de Carbono



Peróxido de hidrogénio





Propriedades físicas

Propriedade	Avaliação
cor	Qual a cor qual a sua intensidade
Estado da matéria	Sólido líquido ou gás, sólido qual o formato das suas partículas?
Ponto de fusão	Em que temperatura o sólido se funde?
Ponto de ebulição	Em que temperatura um líquido entra em ebulição (1 atm)
Densidade	Qual a densidade da substância?
Solubilidade	Qual é a densidade da substância pode ser dissolvida em um dado volume de água ou outro solvente
Condutividade eléctrica	Se a substância conduz electricidade
Maleabilidade	Facilidade com que um sólido pode ser deformado
Ductilidade	Facilidade com que um sólido pode ser transformado em um fio
Viscosidade	Facilidade com que um líquido flui



$$\textit{densidade} = \frac{\textit{massa}}{\textit{volume}}$$

Propriedades físicas





Propriedades

Propriedades extensivas

Dependem da quantidade da substância presente. Por exemplo, a quantidade de calor obtida através da queima da gasolina.

Propriedades intensivas

Não dependem da quantidade da substância presente. Por exemplo, qualquer quantidade de gelo irá derreter a 0°C .



Temperatura (°C)	Densidade da água
0 (ice)	0.917
0 (liq water)	0.99984
2	0.99994
4	0.99997
10	0.99970
25	0.99707
100	0.95836

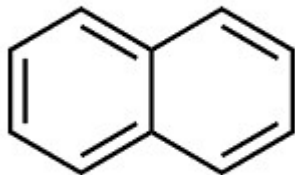
Temperatura influencia as propriedades físicas...



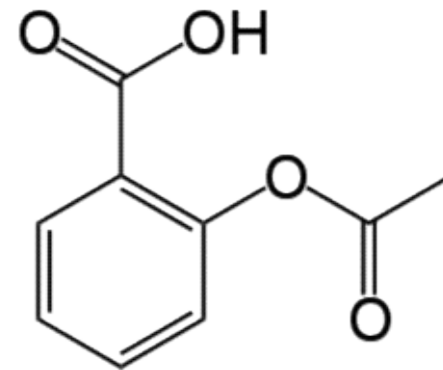
Mudanças Físico-Químicas



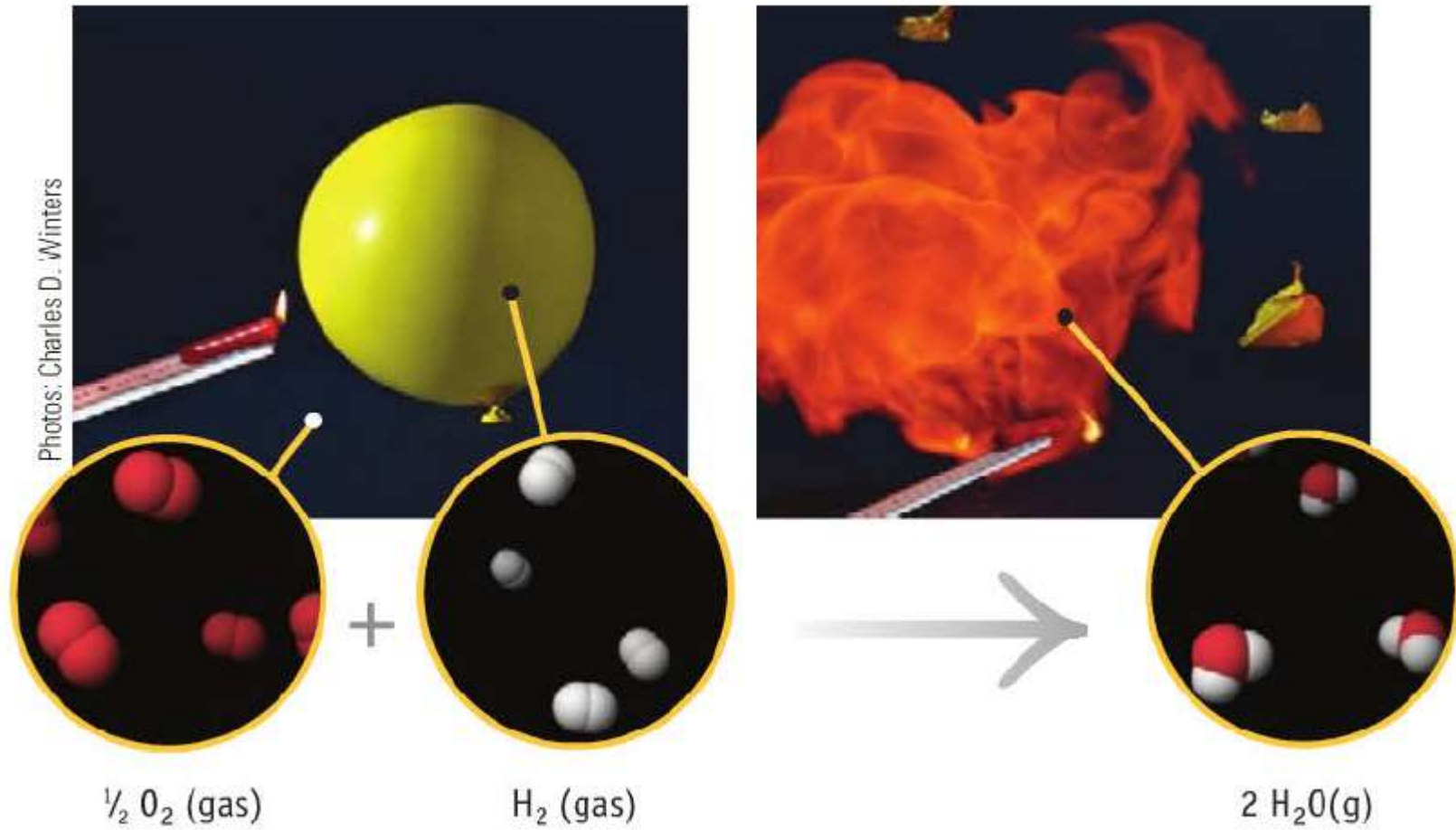
Naftaleno é uma substancia branca e sólida a 25 °C. Tem um ponto de ebulição a 80.2 °C

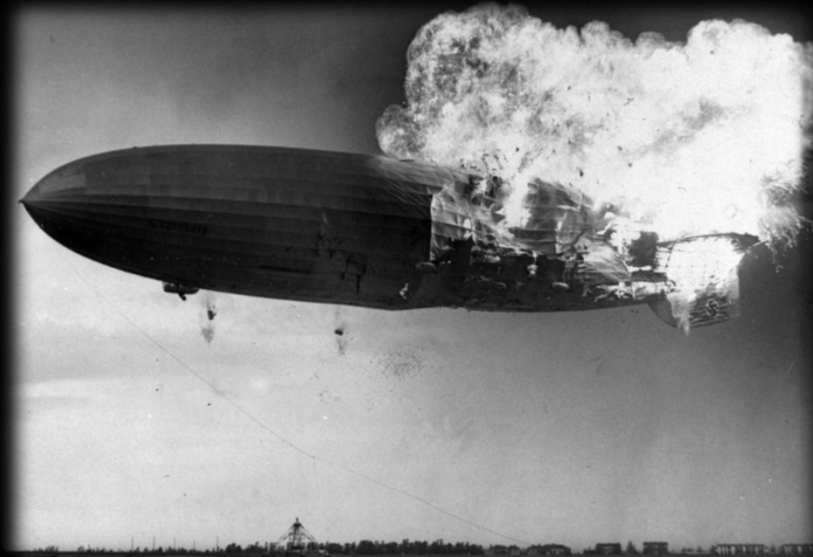


Aspirina é uma substancia branca e sólida 25 °C. Tem um ponto de ebulição a 135° C



Mudança Química



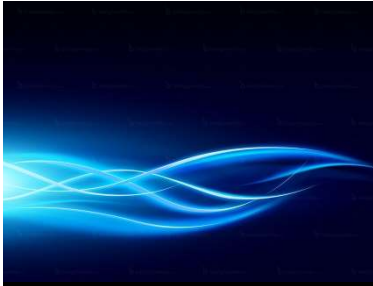


Hindenburg, construído pela Luftschiffbau-Zeppelin GmbH, na Alemanha.

Seu primeiro voo foi em 1936. usado em 63 voos durante 14 meses até o seu fim trágico em 6 de maio de 1937

Morrem 91 pessoas



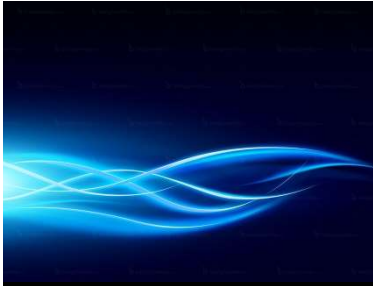


Energia princípios básicos

A **energia** é crucial para muitas das mudanças químicas e físicas e é definida como a capacidade de gerar trabalho

...Nós realizamos trabalho contra a lei da gravidade quando carregamos um peso

E a energia provêm dos alimentos que comemos



A energia pode ser classificada em **potencial** ou **cinética**.

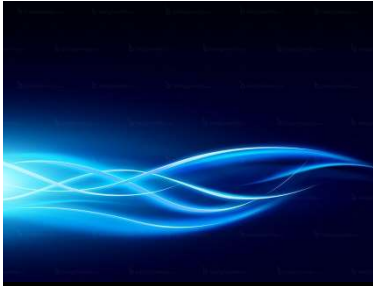
Energia cinética esta associada:

Ao movimento dos átomos moléculas ou íons em nível submicroscópico. *Energia térmica*

Movimento de objetos macroscópicos – *Energia Mecânica*

Movimento de elétrons em um condutor- *Energia Elétrica*.

Compressão e expansão dos espaços entre moléculas na transmissão do som - *Energia Acústica*



A energia pode ser classificada em **potencial** ou **cinética**.

A energia **potencial** resulta da posição ou do estado de um objecto.

- Energia gravitacional
- Armazenada em uma mola estendida
- Armazenada em combustíveis energia química
- Associada com a separação de correntes eléctricas (electroestática)



Energia potencial



Energia mecânica



Energia química



Energia térmica



Energia mecânica

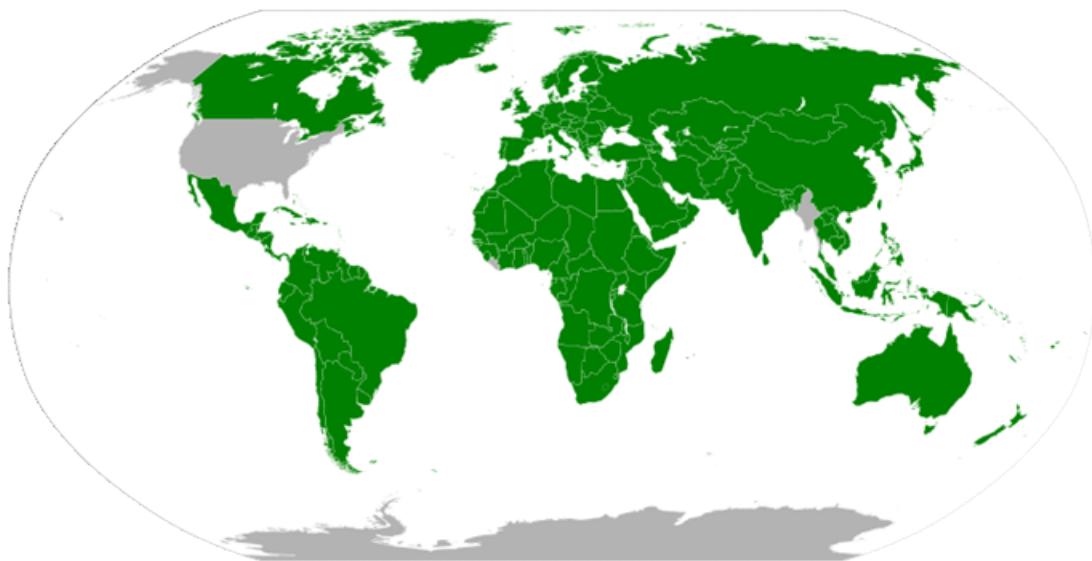
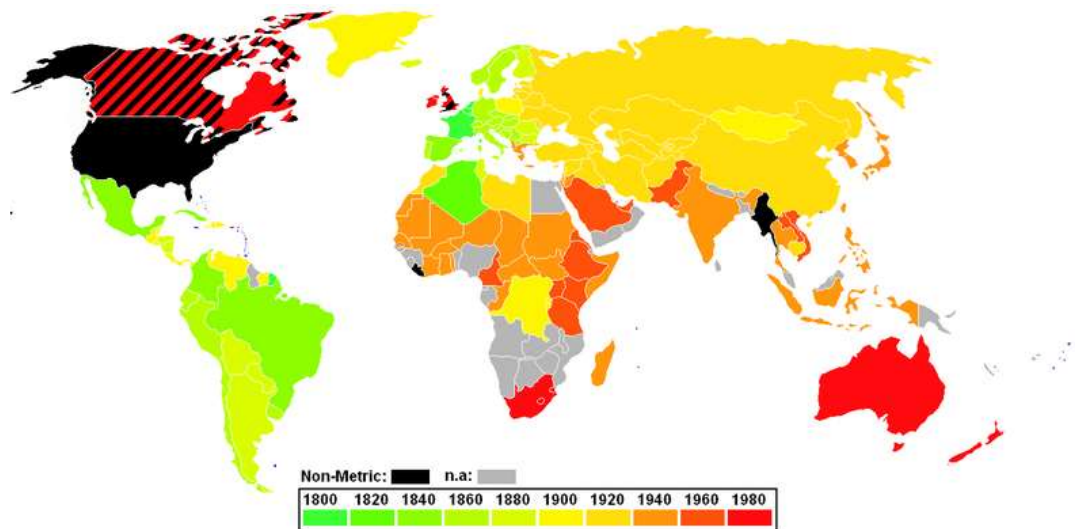


Energia electrostática



Energia térmica
e radiante

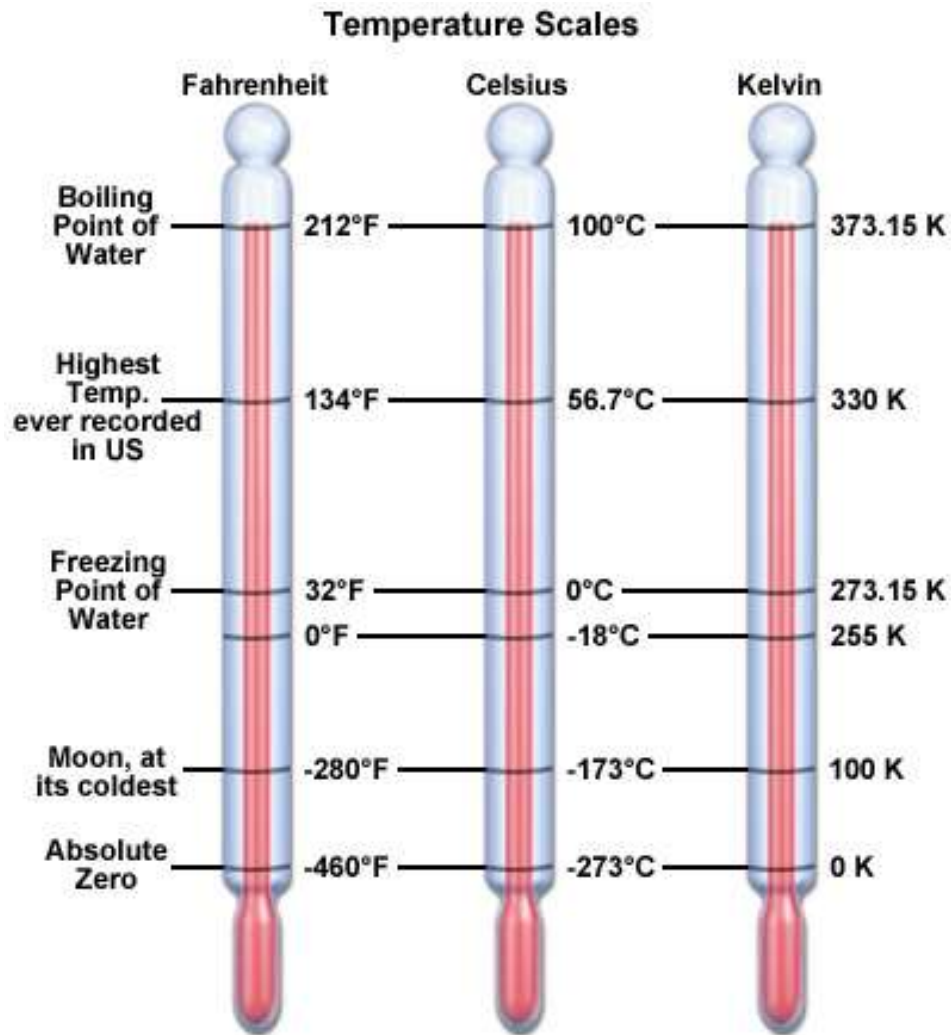
Unidades



Algumas unidades do sistema SI

Nome	Símbolo	Quantidade	Expressas em termos de outras unidades do SI	Expressas em unidades SI
radian	rad	ângulo		$m \cdot m^{-1}$
hertz	Hz	Frequência		s^{-1}
newton	N	Força .peso		$kg \cdot m \cdot s^{-2}$
pascal	Pa	Pressão	N/m^2	$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$
joule	J	Energia trabalho e calor	$N \cdot m$	$kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$
watt	W	Potencia	J/s	$kg \cdot m^2 \cdot s^{-3}$
coulomb	C	Carga eléctrica		$s \cdot A$
volt	V	Potencial eléctrico	W/A	$kg \cdot m^2 \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
farad	F	Capacitância eléctrica	C/V	$kg^{-1} \cdot m^{-2} \cdot s^4 \cdot A^2$
ohm	Ω	Resistência eléctrica e impedância	V/A	$kg \cdot m^2 \cdot s^{-3} \cdot A^{-2}$
siemens	S	Condutividade eléctrica	A/V	$kg^{-1} \cdot m^{-2} \cdot s^3 \cdot A^2$
Tesla	T	Campo magnético	Wb/m^2	$kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
Lumen	lm	Fluxo luminoso	$cd \cdot sr$	cd
lux	lx	Iluminância	lm/m^2	$m^{-2} \cdot cd$
becquerel	Bq	Radiactividade (decaimento por tempo)		s^{-1}
katal	kat	Actividade catalítica		$mols^{-1}$

Escalas de temperatura



As unidades de Kelvin e Celcius têm a mesma dimensão



William Thomson, 1º barão Kelvin (Lorde Kelvin).

Irlandês 1824-1907 físico, matemático e engenheiro britânico.

Contribuições na análise matemática da electricidade e termodinâmica.

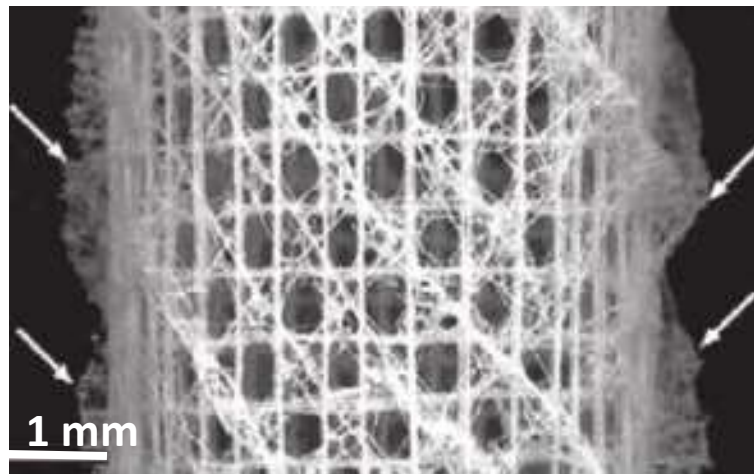
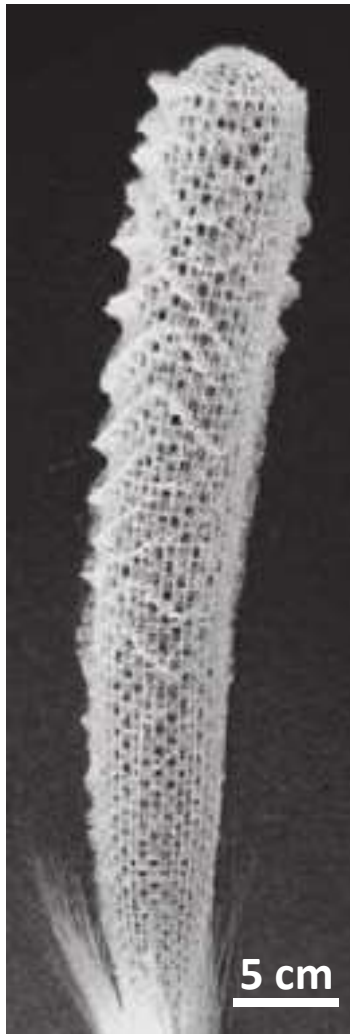
Comprimento volume e massa



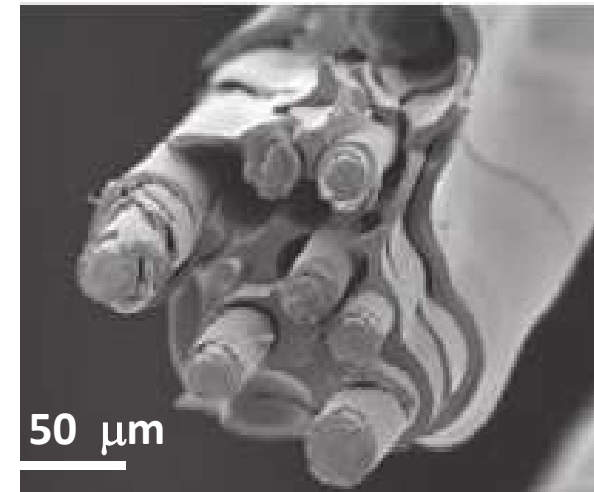
Múltiplo	Nome	Símbolo	Submúltiplo	Nome	Símbolo
10^0	metro	m	10^0	metro	m
10^1	decâmetro	dam	10^{-1}	decímetro	dm
10^2	hectómetro	hm	10^{-2}	centímetro	cm
10^3	quilómetro	km	10^{-3}	milímetro	mm
10^6	megametro	Mm	10^{-6}	micrometro	μm
10^9	gigametro	Gm	10^{-9}	nanometro	nm
10^{12}	terametro	Tm	10^{-12}	picometro	pm
10^{15}	petametro	Pm	10^{-15}	fentómetro	fm
10^{18}	exametro	Em	10^{-18}	atometro	am
10^{21}	zetametro	Zm	10^{-21}	zeptómetro	zm
10^{24}	iotametro	Ym	10^{-24}	ioctómetro	ym

Comprimento volume e massa

Escala molecular



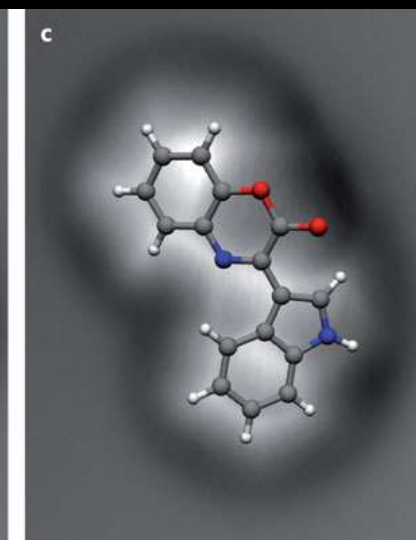
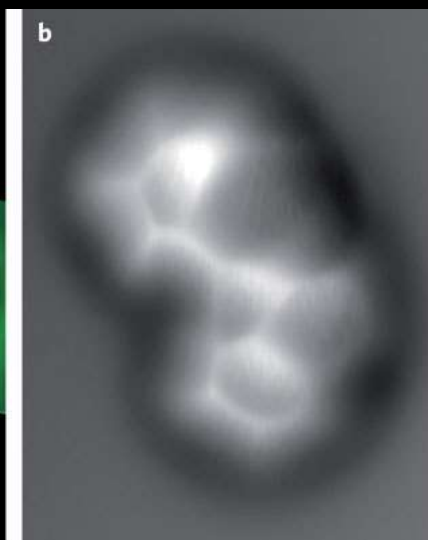
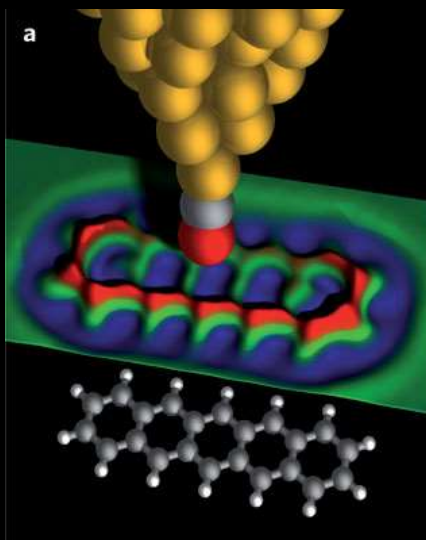
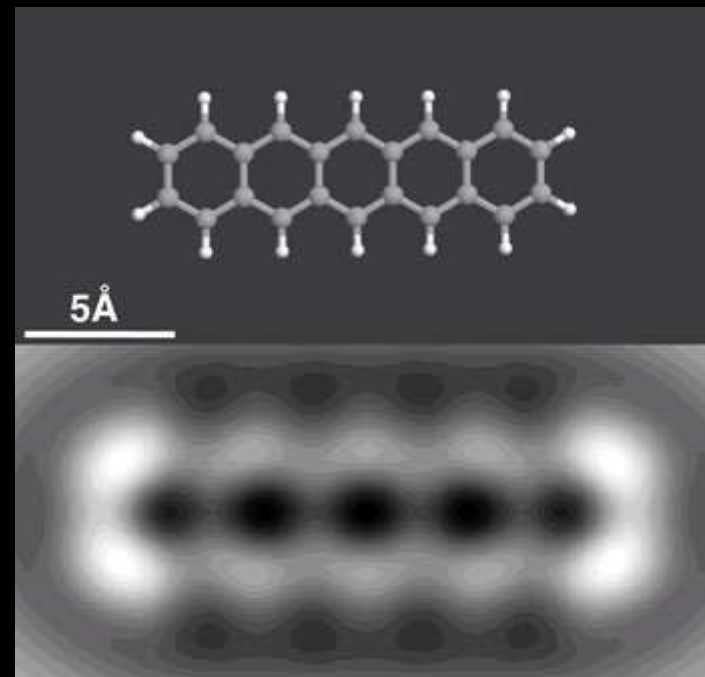
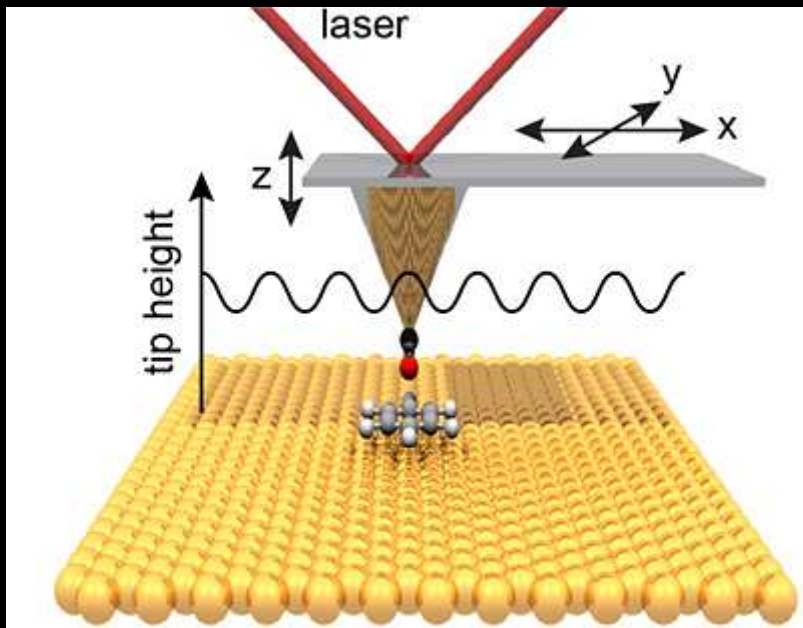
Fragmento mostrando a estrutura de rede da esponja



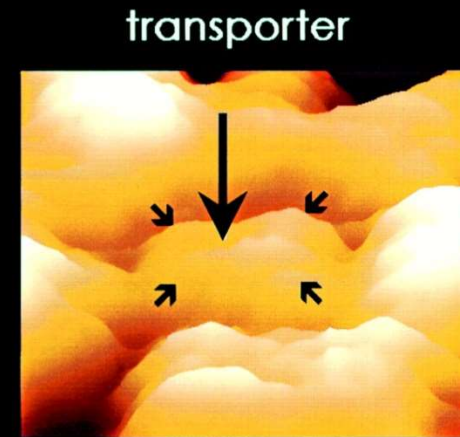
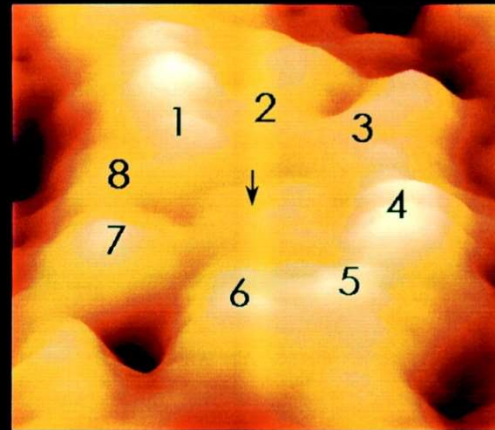
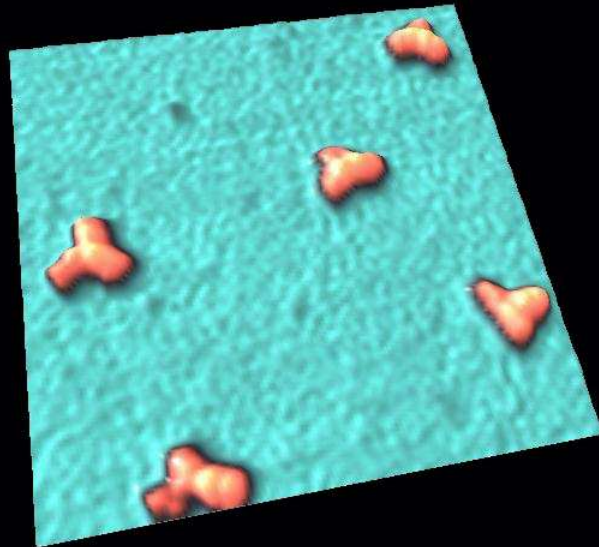
Ampliação mostrando a estrutura do nanocomposito

Exosqueleto de uma esponja do mar Euplectelia

Microscopia de Força atômica

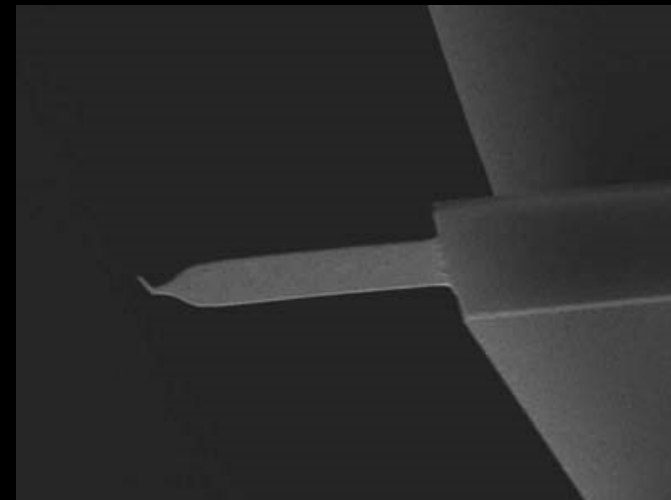
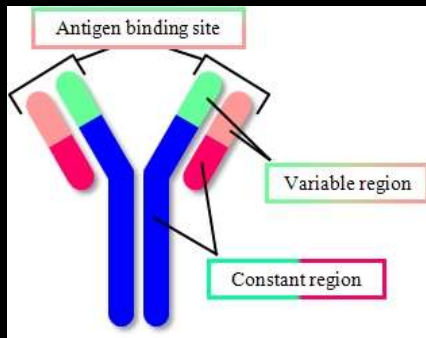


Nuclear pore complex



50 nm

25 nm



Ponta de silício ou de nitreto de silício (Si_3N_4)



Medidas, rigor e erro



Precisão, exactidão e erro



Pouca precisão e exactidão



Boa precisão e pouca exactidão



Boa precisão e exactidão

Precisão é o grau de variação de resultados de uma medição. A precisão tem como base o desvio-padrão de uma série de repetições da mesma análise

Exactidão consiste no grau de conformidade de um valor medido ou calculado em relação à sua definição ou com respeito a uma referência padrão

Erro



As medições experimentais podem apresentar erros devido a dois motivos básicos.

- Primeiro podem ocorrer **erros determinados** que são causados por instrumentos defeituosos ou falhas de operador
- Segundo são os chamados de **erros indeterminados** ou aleatórios que decorrem da incerteza de uma dada medição
- Uma das maneiras de avaliar o erro indeterminado em um determinado resultado é calcular o **desvio padrão**.

Desvio padrão

ERROR

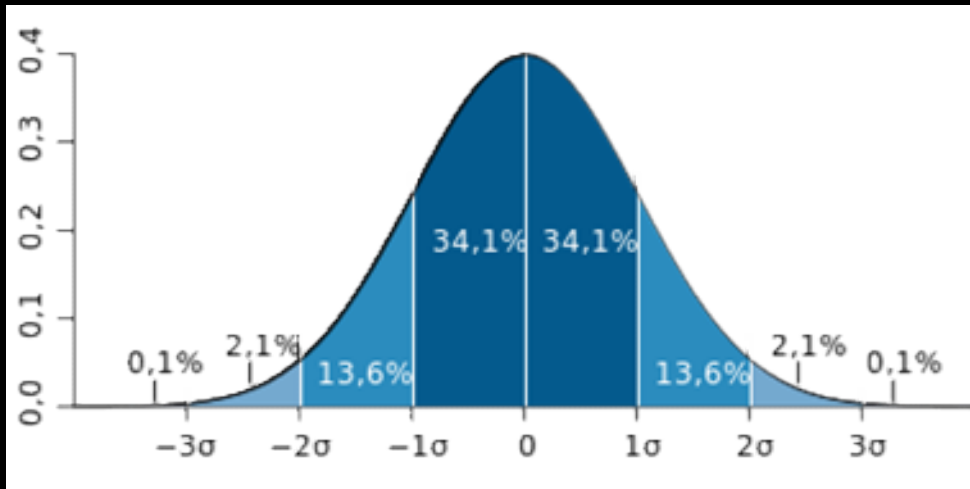
“O desvio de uma série de medições é igual á raiz quadrada da soma dos quadrados dos desvios de cada medição em relação á média dividida pelo número de medições menos 1 “

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}$$

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Desvio padrão

ERROR



Em uma distribuição normal
ou Gaussiana

68% dos valores encontram-se a uma distancia da média inferior a um desvio padrão

95% dos valores a uma distancia da média inferior a duas vezes o desvio padrão

99,6% dos valores encontram-se a uma distância da média inferior a três vezes o desvio padrão

Exemplo

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \sqrt{\frac{2,6 \times 10^{-5}}{5-1}} = 0,008$$

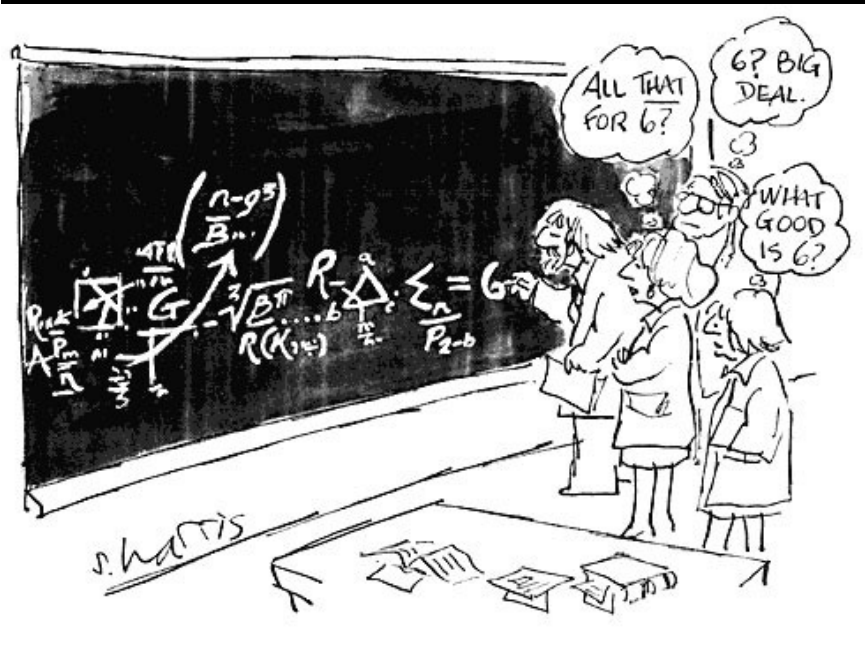
Determinação	Massa medida (g)
1	9,990
2	9,993
3	9,973
4	9,980
5	9,982

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$\bar{x} = 9,984$$

$$x_i - \bar{x}$$

$$\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = 2,6 \times 10^{-5}$$



Algarismos significativos -

O conjunto de dígitos de uma dada medida física que contribuem para determinação da exactidão dessa mesma medida

- São todos aqueles contados, da esquerda para a direita, a partir do primeiro algarismo diferente de zero é

Exemplos:

45,30cm > tem **quatro** algarismos significativos;

0,0595m > tem **três** algarismos significativos; e

0,0450kg > tem **três** algarismos significativos.



KEEP
CALM
&
FOLLOW
THE RULES

- Zeros entre dois algarismos significativos são **significativos** – 103 tem 3 algarismos significativos
- Os zeros à direita de um número diferente de zero e também à direita de uma virgula são significativos – no número 2,50 **o zero é significativo**
- Zeros que são marcadores de posição **não são significativos**
 - Os primeiros são números decimais com zeros antes no primeiro algarismo diferente de zero .
Exemplo em 0,00**18** só o 1 e o 8 é que são significativos.
 - Números com zeros à direita que precisam de lá estar para indicar a magnitude do número.
exemplo: **230** tem apenas dois algarismos significativos
230,1 tem 4 algarismos significativos

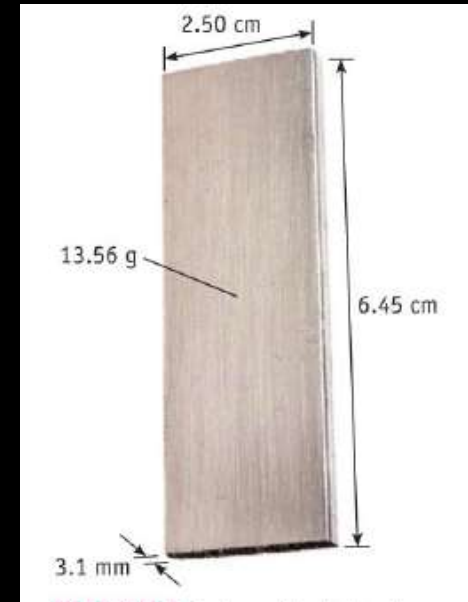


**KEEP
CALM
&
FOLLOW
THE RULES**

- Em **cálculos** com medidas de grandezas utilizamos algumas regras
- **Adição** - O número de algarismos significativos irá ser igual ao número de menor quantidade de dígitos.
 - $0,12 + 1,9 + 10,925 = 12,925$
 $=12,9$
- **Multiplicação ou divisão** – O número de algarismos significativos será determinado pela grandeza do algarismo com menor número de algarismo significativos.

Exemplo - calculo da densidade do metal

Medição	Dados obtidos	Algarismos significativos
Massa do metal	13,56 g	4
comprimento	6,45 cm	3
largura	2,50 cm	3
espessura	0,31 cm	2



$$6,45 \times 2,50 \times 0,31 = 4,99 = 5,0$$

$$\text{densidade} = \frac{13,56}{5,0} = 2,7 \text{ g/cm}^3$$



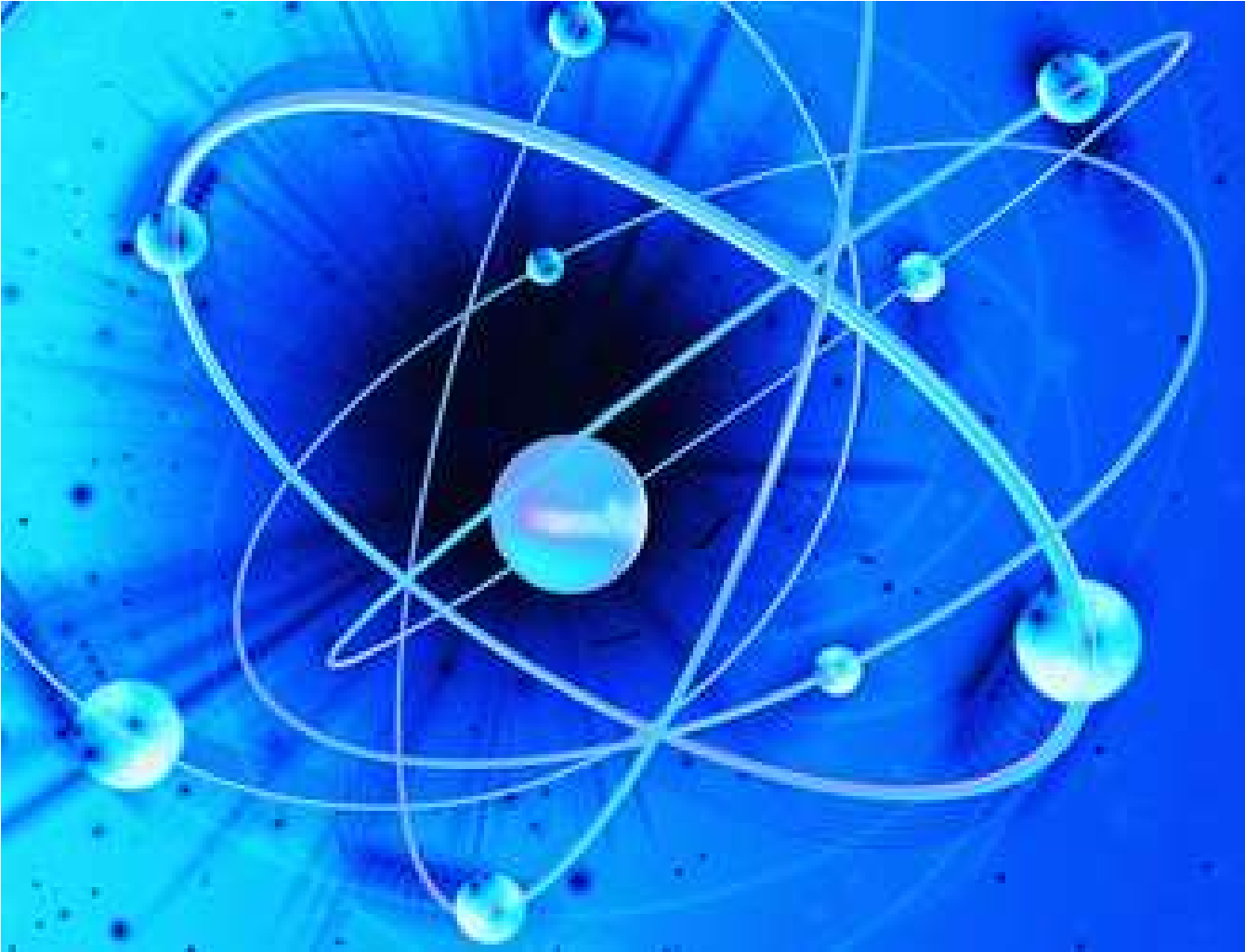
Conversão de unidades

$$3,1 \text{ mm} \times \frac{1 \text{ cm}}{10 \text{ mm}} = 0,31 \text{ cm}$$

Número e
unidade
original

$$\times \left[\frac{\text{Nova unidade}}{\text{Unidade original}} \right] =$$

Novo
número nova
unidade

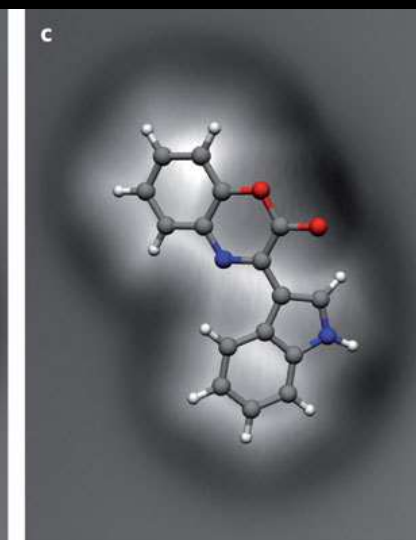
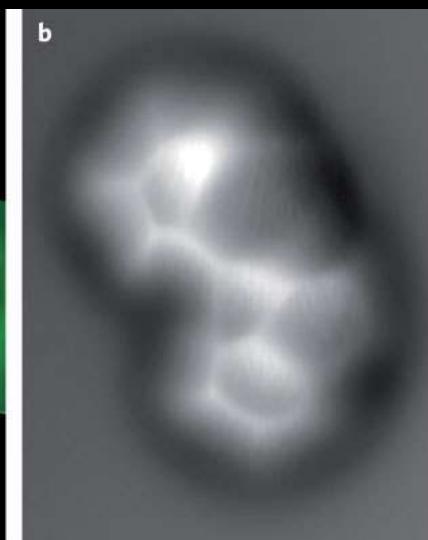
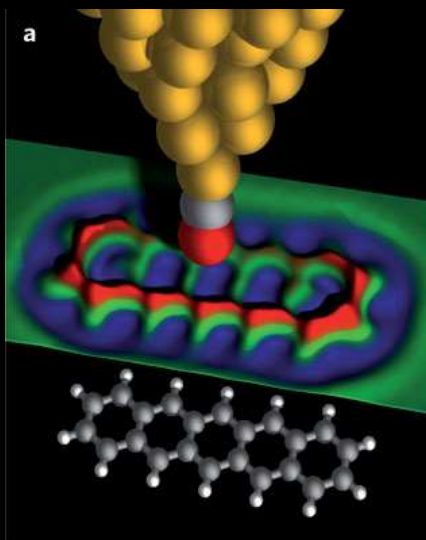
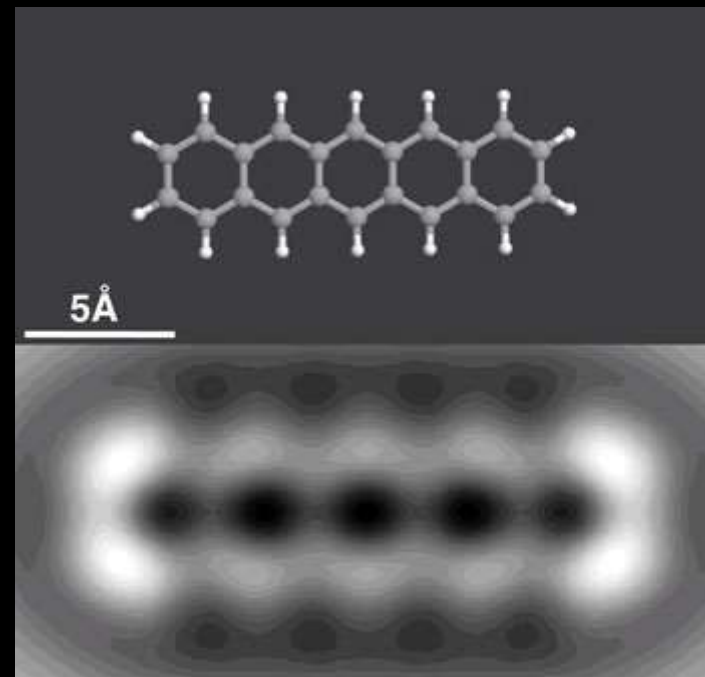
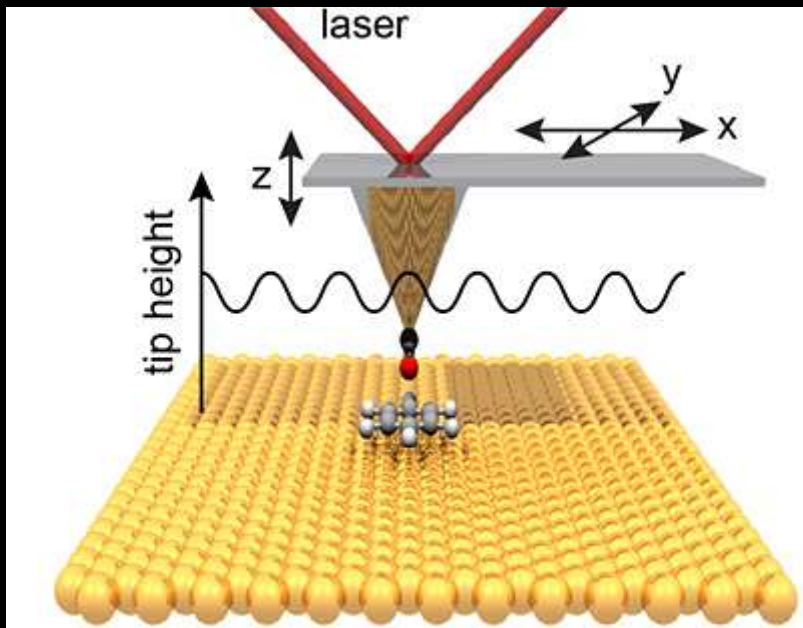


**Átomos,
moléculas
e íons**

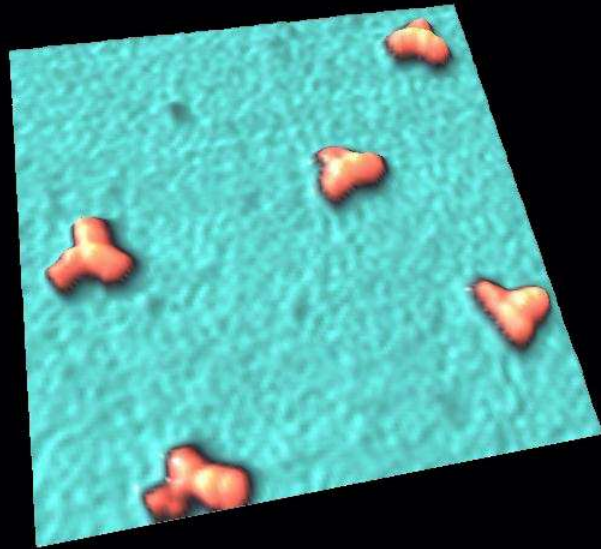
Aula 2



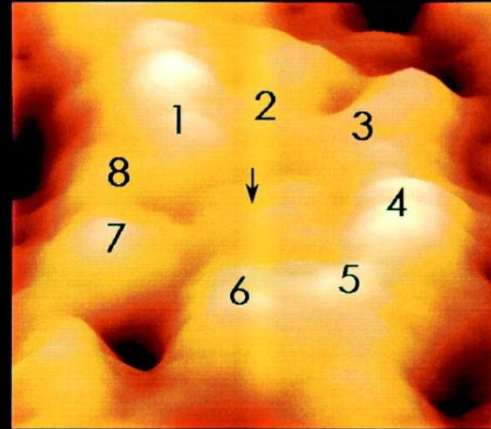
Microscopia de Força atômica



Microscopia de Força atómica

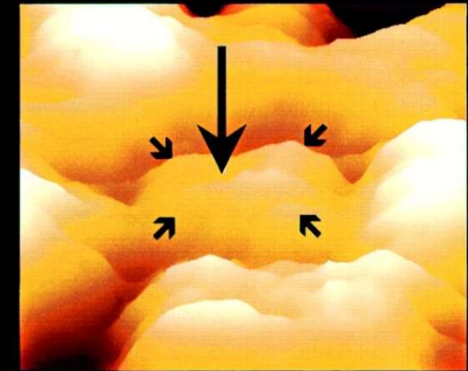


Nuclear pore complex

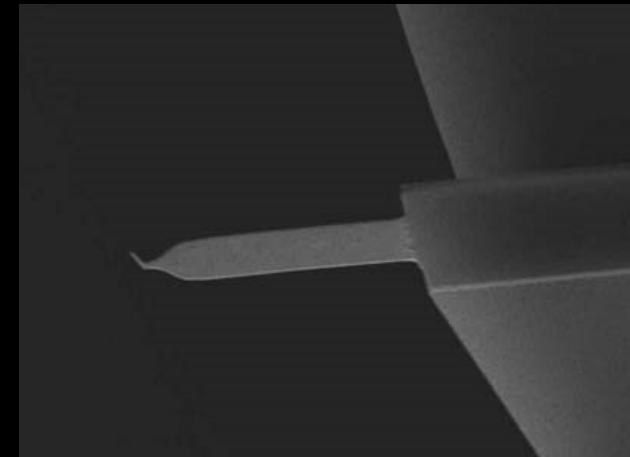
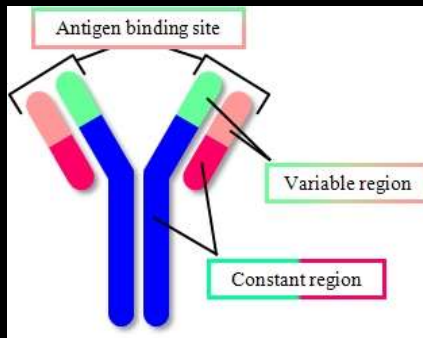


50 nm

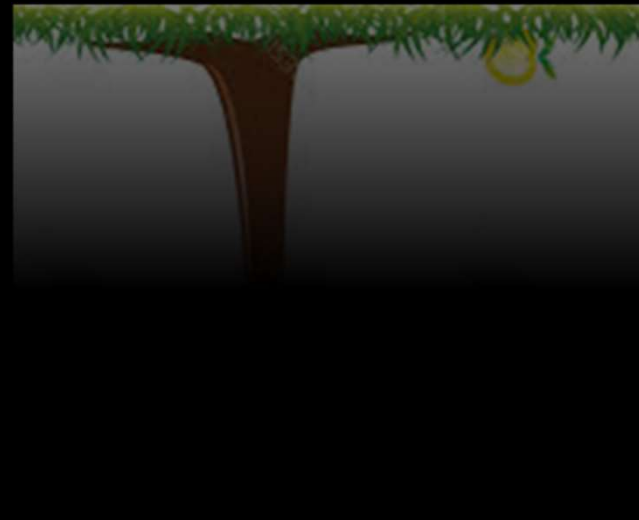
transporter



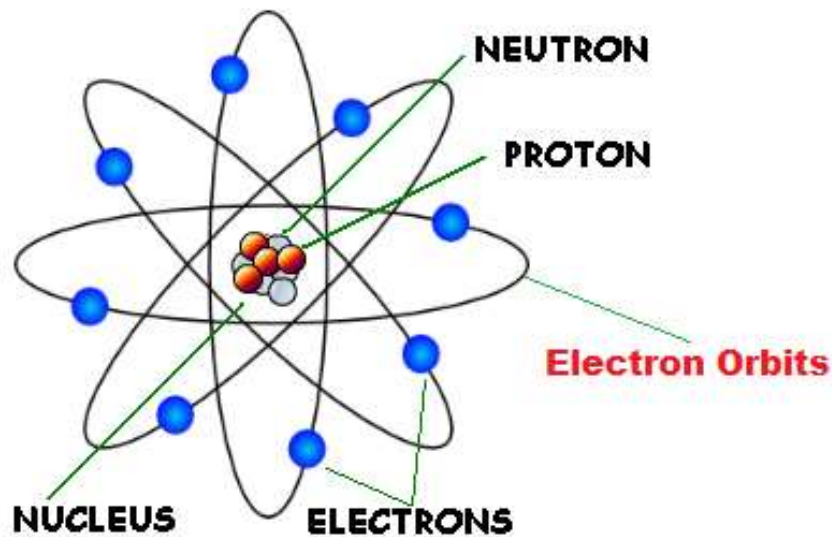
25 nm



modelo



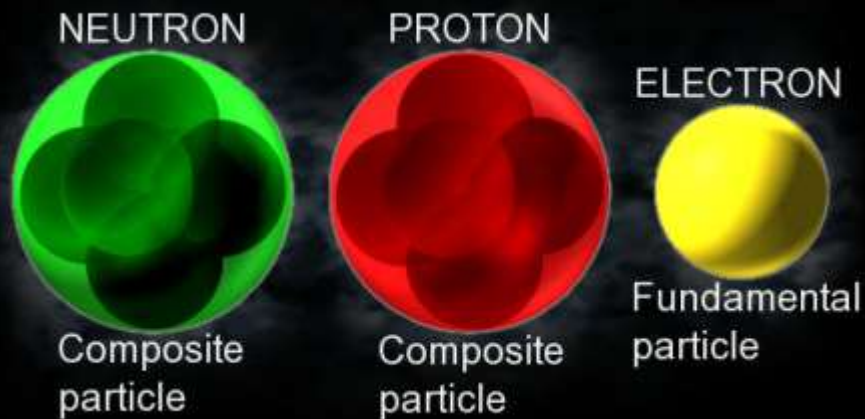
Estrutura atômica



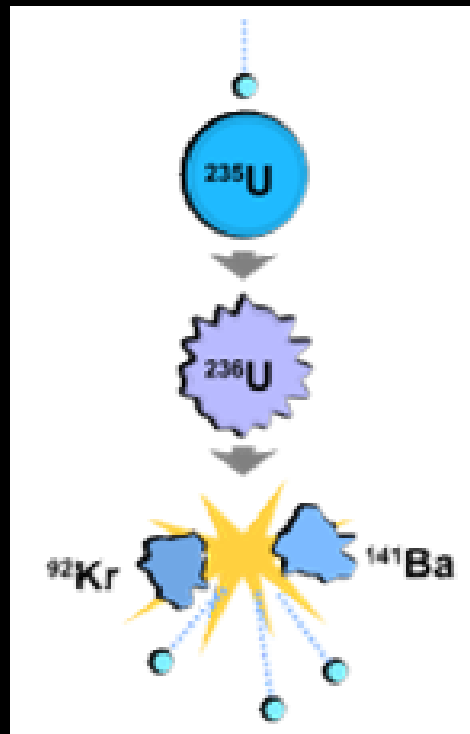
Em 1900 através dos trabalhos de Joseph John Thompson e Ernest Rutherford foi estabelecido o modelo de atômico

O modelo coloca prótons e os nêutrons mais pesados em um núcleo pequeno e os elétrons ocupam a maior parte do volume.

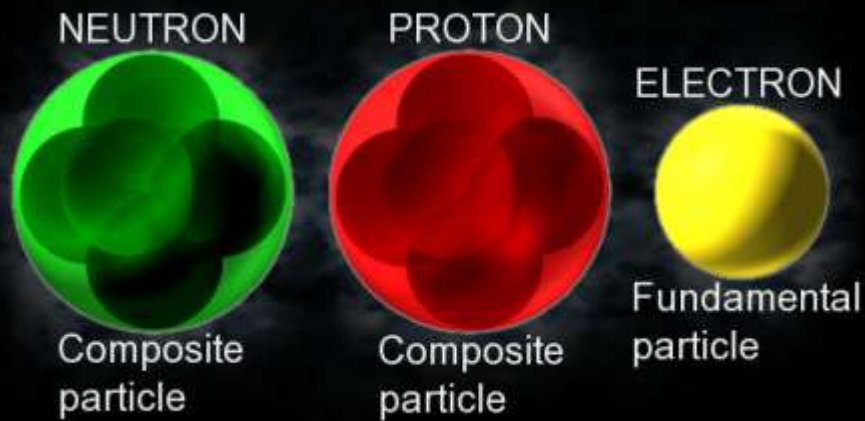
Em um átomo eletricamente neutro, o número de elétrons é igual ao número de prótons



O **neutron** é uma partícula subatômica sem carga eléctrica com um massa ligeiramente superior ao protão 1,008664904 unidades de massa atómica, cerca de 0,1% mais pesado que o proton.



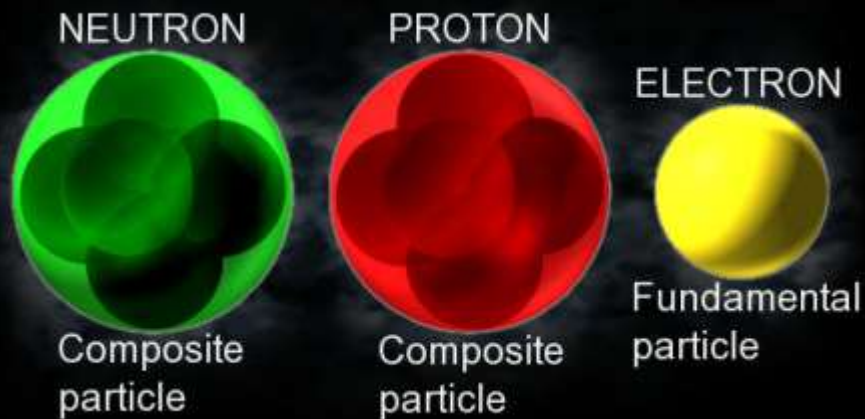
O **neutron** é essencial para a produção de energia nuclear dado que está envolvido nas reacções em cadeia.



O **Proton** (primeiro) é uma partícula subatômica com uma carga eléctrica positiva

O número de protons - Define a propriedade de cada elemento

“cada elemento tem um número definido de protons”



O **electron** é uma partícula subatômica carregada negativamente.

- E é considerada uma partícula elementar pois não se conhecem os seus componentes ou algum tipo de subestrutura .
- A massa de um electron é 1836 x menor que a do protão
- As propriedades químicas dos elementos e moléculas dependem em grande parte dos electrões.

8	← Atomic Number
O	← Chemical Symbol
Oxygen	← Element Name
15.999	← Atomic Mass

Estrutura atômica

As **propriedades químicas** dos elementos e moléculas dependem em grande parte dos electrões...

- Todos os átomos de um dado elemento têm o mesmo número de protons no núcleo
- O **hidrogênio** é o elemento mais simples com apenas um proton no seu núcleo

1	Novo Original
1A	
1	2
H	IIA
Hidrogénio 1.00794	
3	4
2	2
Li	Be
Lítio 6.941	Berílio 9.012182

13	14	15	16	17	18
					VIIIA
					2
					He

O número de prótons do núcleo é dado por **Z**

10.811	12.0107	14.003064	15.999	18.99840325	20.1898
Boro	Carbono	Nitrogênio	Oxigênio	Fluor	Neônio
B	C	N	O	F	Ne

Unidade de massa atômica



Lavosier (1743-1794)



Jonh Dalton (1766-1844)

- Dalton sugeriu que as combinações de elementos envolvessem átomos e propôs uma escala relativa para as massa atômicas
- Para simplificar escolheu 1 para hidrogénio no qual baseou a sua escala
- Hoje usamos uma escala relativa - carbono como referência. 6 protons e 6 e neutrons no núcleo



- *Uma unidade de massa atômica, 1 u, corresponde a 1/12 da massa de um átomo de carbono com seis protons e seis neutrons...*

Número de massa

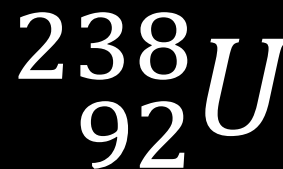


A Protons + neutrons

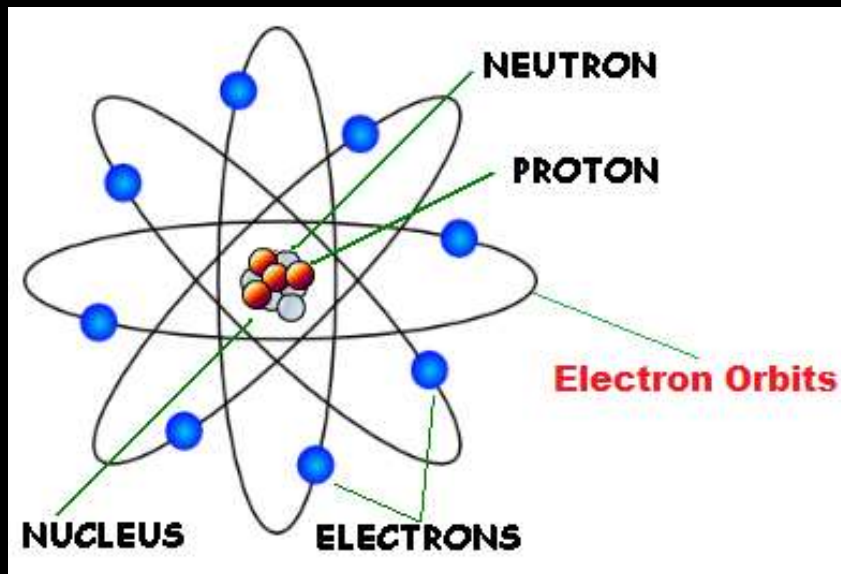
Número de massa

Número atômico

A
Z **X** Elemento



isótopos



Nem todos os átomos de uma amostra de ocorrência natural de um determinado elemento possuem a mesma massa

Exemplo: o boro em dois tipos de átomos um com massa de 10 e outro com massa de 11

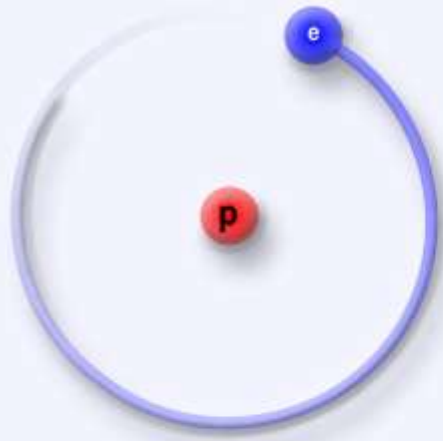
Os átomos que possuem o mesmo número atômico e números e massa diferentes denominam-se isótopos

Todos os átomos tem o mesmo número de protons.

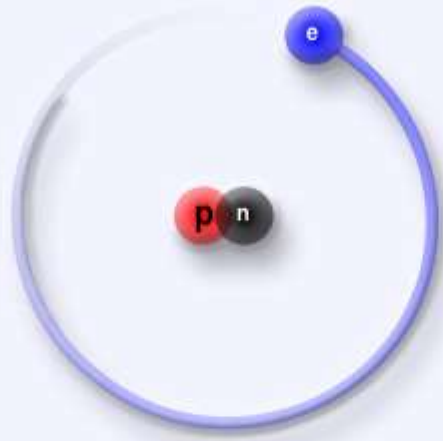
Então o que muda?

Número de neutrons é diferente!

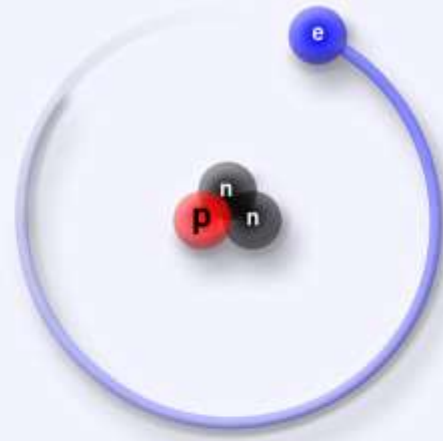
Isótopos hidrogênio



Prótio



Deutério



tritrio

2_1H Deutério aplicações



É usado com isótopo não radioactivo para estudar reacções químicas

Quimicamente semelhante ao hidrogénio mas apresenta um padrão distinto em espectroscopia de infravermelho e de massa

Bastante útil para estudar compostos químicos por ressonância magnética nuclear (D_2O).

Funciona também com moderador em alguns tipos de reactor nucleares

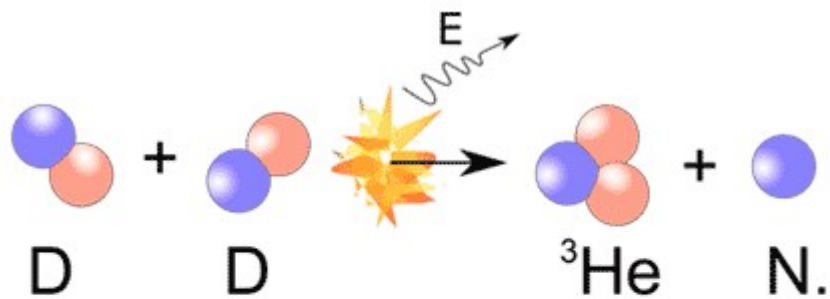
Curiosidade : Em cada copo que você bebe, 0,001% D_2O



${}^2_1\text{H}$ Deutério



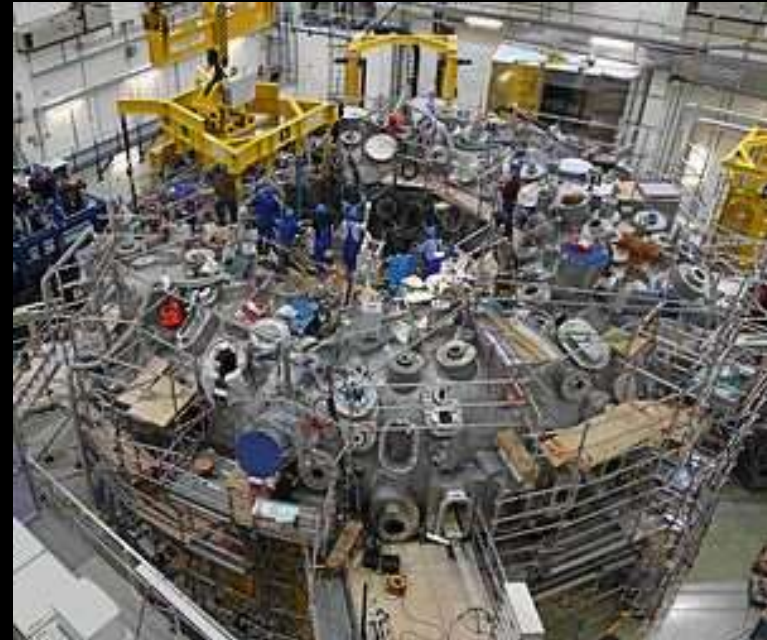
O gelo produzido com água deuterada é mais denso que água
 $-1,11 \text{ g/cm}^3$

2_1H Deutério

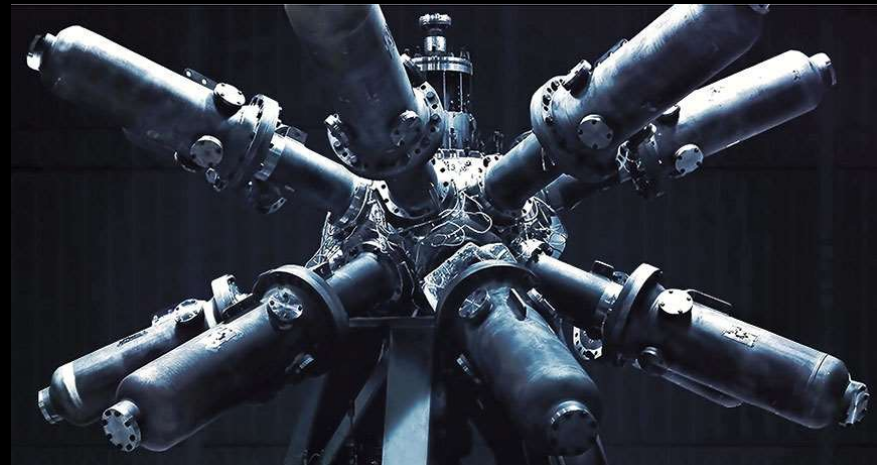


 Proton
 Neutron

<http://fusion.srubar.net>



Wendelstein7X



${}^3_1\text{H}$ Tritio aplicações



O trítio é raro na natureza tempo de meia vida de 12,4. produzido pela radiação cósmica na parte superior da atmosfera.

A maior parte é produzido através da fissão do ${}^6\text{Li}$ -



Ou também produzido em alguns reactores nucleares.

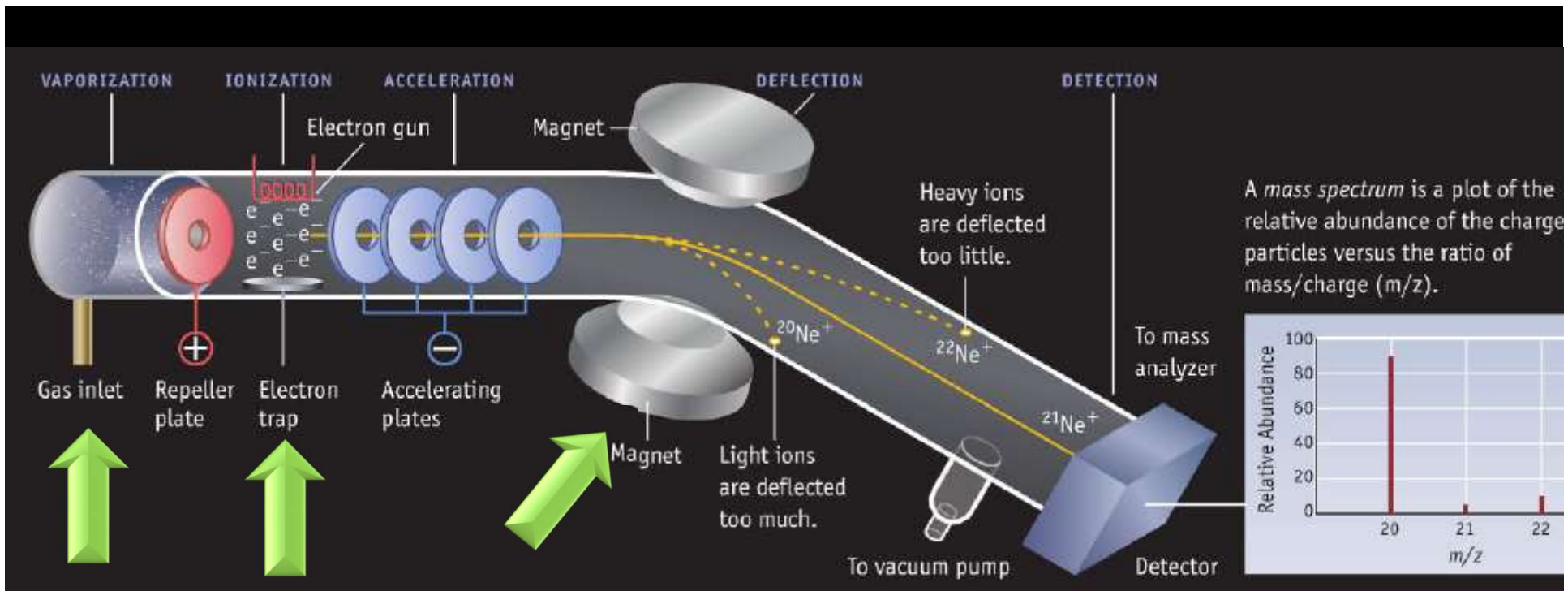
Abundância isotópica



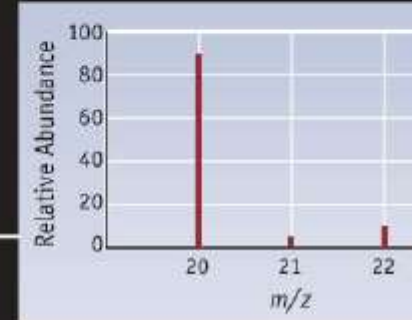
Uma amostra de água de um lago consistirá quase inteiramente em água na qual os átomos de hidrogénio consistem no isótopo ^1H .

No entanto algumas moléculas poderão ter deutério. Esse resultado pode ser previsto porque a Abundância de ^1H na terra é de 99,985%

$$A = \frac{\text{numero de atomos de um dado isotopo}}{\text{número total de átomos de todos os isotopos do desse elemento}} \times 100$$



A mass spectrum is a plot of the relative abundance of the charge particles versus the ratio of mass/charge (m/z).



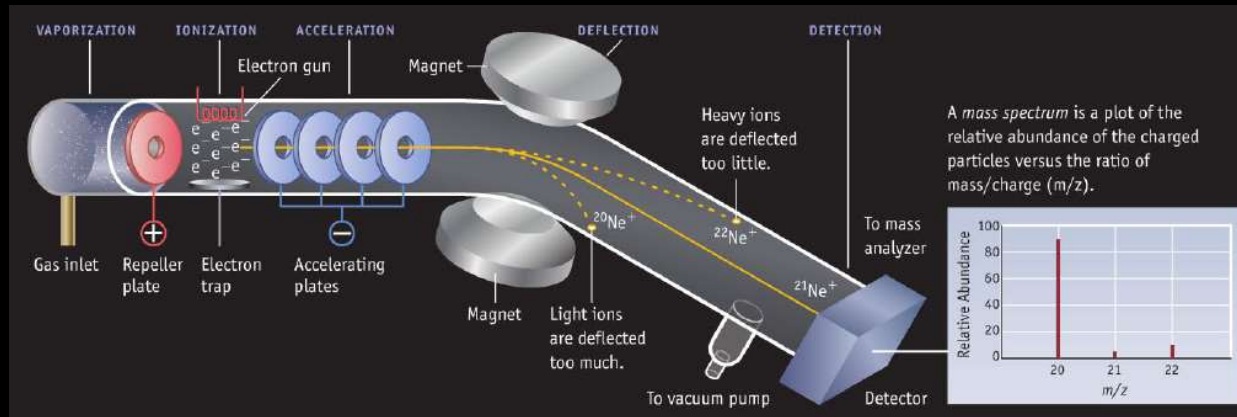
A amostra é introduzida na camera de ionização com vapor

Bombardeada com electrons de alta energia que promovem o arranque de electrons os átomos ou moléculas da amostra

Um campo magnético que é perpendicular a direcção do feixe das partículas carregadas.

Este campo promove a curvatura do feixe e o raio da curvatura depende também da velocidade de aceleração e do campo magnético da massa e da carga das partículas.

Espectroscopia de massa



- Pequenas quantidade de amostra são requeridas
- A amostra terá de ser vaporizada
- Um ou mais electrões terão de ser removidos do átomos para os átomos ou moléculas ficarem como íons positivos
- É necessário um acelerador de íons campo elétrico – placas de aceleração
- Um campo magnético para defletir a corrente iônica
- Os íons com maior massa e menor carga (1+) serão menos deflectidos
- Os átomos atingem a placa detectora produzindo uma pequena corrente que á amplificada

Peso atômico



O peso atômico é a media dos pesos dos vários isótopos relativamente a sua abundancia

.

$$\text{Peso atômico} = \frac{(\% \text{ de abundancia do isótopo } 1)}{100} \times \text{massa do isotopo } 1 + \dots$$

Peso atómico

Element	Symbol	Atomic Weight	Mass Number	Isotopic Mass	Natural Abundance (%)
Hydrogen	H	1.00794	1	1.0078	99.985
	D*		2	2.0141	0.015
	T†		3	3.0161	0
Boron	B	10.811	10	10.0129	19.91
			11	11.0093	80.09
Neon	Ne	20.1797	20	19.9924	90.48
			21	20.9938	0.27
			22	21.9914	9.25
Magnesium	Mg	24.3050	24	23.9850	78.99
			25	24.9858	10.00
			26	25.9826	11.01

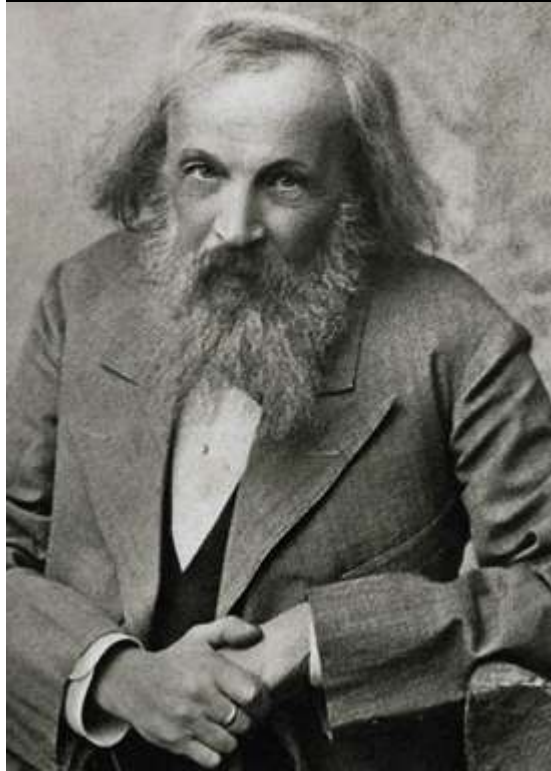
Tabela periódica

The image displays a periodic table of elements, where each element is represented by a small photograph of its natural state. The noble gases are highlighted with their symbols in large, colorful letters on the right side of the table:

- He (Helium) - White
- Ne (Neon) - Red
- Ar (Argon) - Blue
- Kr (Krypton) - Orange
- Xe (Xenon) - Purple

The table includes elements from Hydrogen (1) to Oganesson (118), with the Lanthanide and Actinide series shown as separate rows at the bottom. The noble gases He, Ne, Ar, Kr, and Xe are highlighted with their symbols in large, colorful letters on the right side of the table.

Dimitri Mendeleev



1834-1903

Ordenou os 60 elementos químicos conhecidos de sua época na ordem crescente de peso atômico

TABELLE II

REIHEN	GRUPPE I. — R ² O	GRUPPE II. — RO	GRUPPE III. — R ² O ³	GRUPPE IV. RH ⁴ RO ²	GRUPPE V. RH ³ R ² O ⁵	GRUPPE VI. RH ² RO ³	GRUPPE VII. RH R ² O ⁷	GRUPPE VIII. — RO ⁴
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Cd=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=106.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	—
9	(—)	—	—	—	—	—	—	—
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	—
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	—

Figure 2.5 Dimitri Mendeleev's 1872 periodic table. The spaces marked with blank lines represent elements that Mendeleev deduced existed but were unknown at the time, so he left places for them in the table. The symbols at the top of the columns (e.g., R²O and RH⁴) are molecular formulas written in the style of the 19th century.

Vertical ficavam os elementos com propriedades químicas

Grupos verticais, ou as chamadas famílias químicas.

Dimitri Mendeleev

	H 1.01										
He 4.00	Li 6.94	Be 9.01	B 10.8	C 12.0	N 14.0	O 16.0	F 19.0				
Ne 20.2	Na 23.0	Mg 24.3	Al 27.0	Si 28.1	P 31.0	S 32.1	Cl 35.5				
Ar 40.0	K 39.1	Ca 40.1	Sc 45.0	Ti 47.9	V 50.9	Cr 59.0	Mn 54.9	Fe 55.9	Co 58.9	Ni 58.7	
	Cu 63.5	Zn 65.4		Ge 72.6	As 74.9	Se 79.0	Br 79.9				
Kr 83.3	Rb 85.5	Sr 87.6	Y 88.9	Zr 91.2	Nb 92.9	Mo 95.9	Tc (99)	Ru 101	Rb 103	Rd 106	
	Ag 108	Cd 112	In 115	Sn 119	Sb 122	Te 128	I 127				
Xe 131	Ce 138	Ba 137	La 139	Hf 179	Ta 181	W 184	Re 180	Os 194	Ir 192	Pt 195	
	Au 197	Hg 201	Tl 204	Pb 207	Bi 209	Po (210)	At (210)				
Rn (222)	Fr (223)	Ra (226)	Ac (227)	Th (232)	Pa (231)	U (238)					



Elementos com propriedades químicas semelhantes

Metais alcalinos

Metais alcalinos-terrosos

Metais de transição

Metais

Semi-metal

Não metais

Halogéneos

Gás nobre

1 H Hydrogen 1.008																	2 He Helium 4.003						
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012																	5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.180
11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305																	13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.098	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.933	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.732	32 Ge Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 84.80						
37 Rb Rubidium 84.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.906	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.868	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.29						
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.327	57-71	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [208.982]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018						
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [268]	110 Ds Darmstadtium [269]	111 Rg Roentgenium [272]	112 Cn Copernicium [277]	113 Uut Ununtrium unknown	114 Fl Flerovium [289]	115 Uup Ununpentium unknown	116 Lv Livermorium [293]	117 Uus Ununseptium unknown	118 Uuo Ununoctium unknown						

lantanídeos

Actíneos

57 La Lanthanum 138.906	58 Ce Cerium 140.115	59 Pr Praseodymium 140.908	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium 144.913	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.966	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.925	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.930	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.934	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967
89 Ac Actinium 227.028	90 Th Thorium 232.038	91 Pa Protactinium 231.036	92 U Uranium 238.029	93 Np Neptunium 237.048	94 Pu Plutonium 244.064	95 Am Americium 243.061	96 Cm Curium 247.070	97 Bk Berkelium 247.070	98 Cf Californium 251.080	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.095	101 Md Mendelevium 258.1	102 No Nobelium 259.101	103 Lr Lawrencium [262]

Alkali Metal	Alkaline Earth	Transition Metal	Basic Metal	Semimetal	Nonmetal	Halogen	Noble Gas	Lanthanide	Actinide
--------------	----------------	------------------	-------------	-----------	----------	---------	-----------	------------	----------



Kali turgidum

Grupo 1 A - Os metais alcalinos Têm este nome porque reagem muito facilmente com a água formando formam hidróxidos. Estes metais também reagem facilmente com o oxigênio produzindo óxidos.

Grupo 2A- Os Metais Alcalino-Terrosos tem baixa densidade, são coloridos e moles. Todos são sólidos. Os Metais Alcalino-Terrosos também formam hidróxidos fortemente básicos.

Ambos reagem com **Halogênios** formando sais.

Juntamente com os gases nobres são os únicos grupos q não são constituídos por metais .

5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999
13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066
31 Ga Gallium 69.732	32 Ge Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972
49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6
81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [208.982]

Semimetal ou metalóide são elementos químicos que exibem tanto características de metais quanto de não-metais, quer nas propriedades físicas, quer nas químicas.

São semi-condutores termicos e electricos....

BN – nitreto de boro utilizado no fabrico de LED ultravioleta

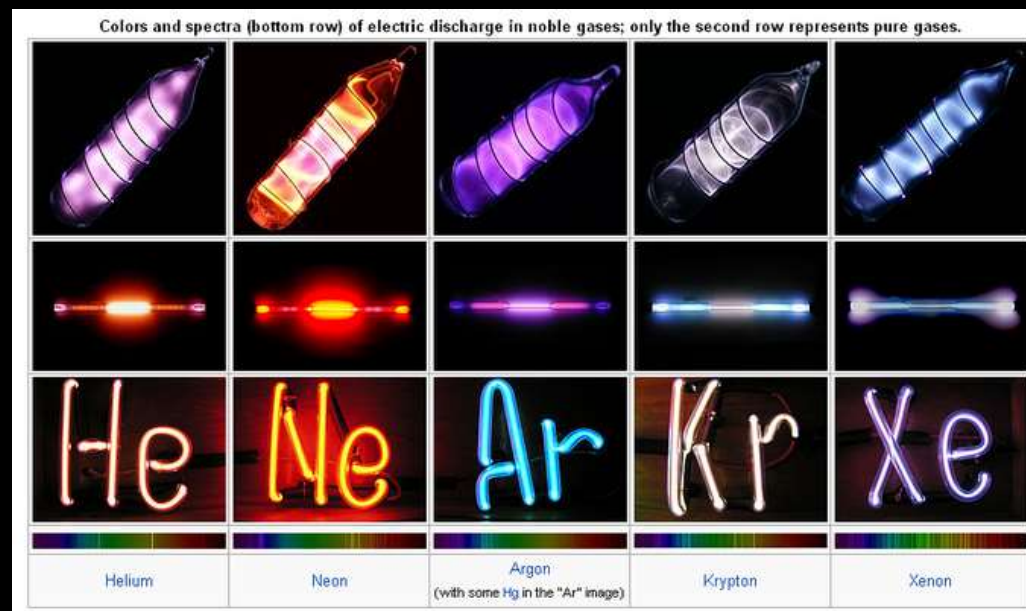
2	He Helium 4.003
10	Ne Neon 20.180
18	Ar Argon 39.948
36	Kr Krypton 84.80
54	Xe Xenon 131.29
86	Rn Radon 222.018
118	Uuo Ununocium unknown

Os **gases nobres** são todos gases inodoros, incolores, monoatômicos de baixa reatividade química.

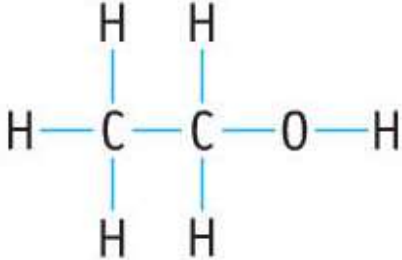

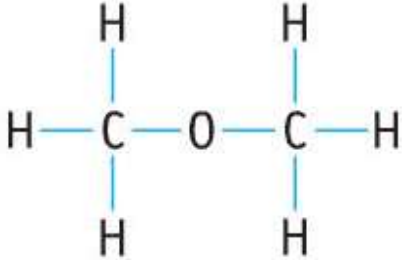

Exemplos...

Argônio - utilizado em lâmpadas de bulbo para prevenir a oxidação do filamento de tungstênio.

Hélio - Cilindros de mergulho em grandes profundidades para evitar a toxicidade do nitrogênio



Moléculas compostos e formulas

NAME	MOLECULAR FORMULA	CONDENSED FORMULA	STRUCTURAL FORMULA	MOLECULAR MODEL
Ethanol	C_2H_6O	CH_3CH_2OH		
Dimethyl ether	C_2H_6O	CH_3OCH_3		

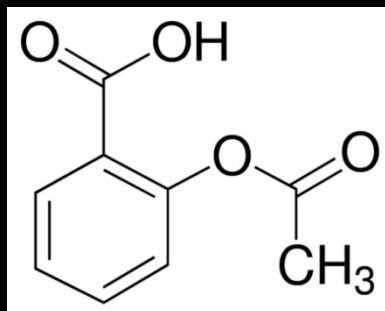


I U P A C

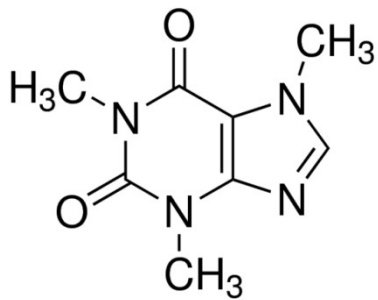
International Union of Pure
and Applied Chemistry

International Union of Pure
and Applied Chemistry

Nomes dos compostos químicos

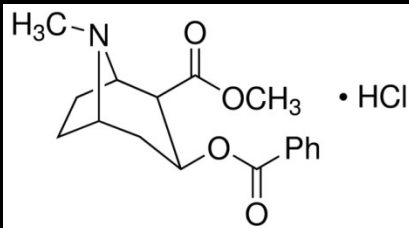


2-Acetoxybenzoic acid,
O-Acetylsalicylic acid,
ASA,
Acetylsalicylic acid,
Aspirin



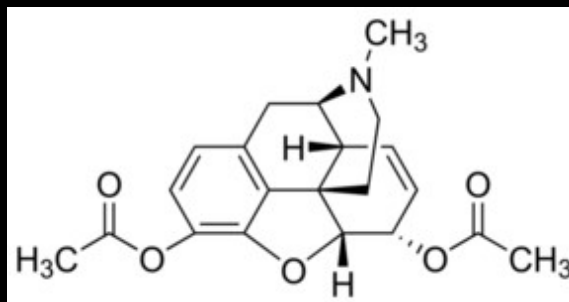
1,3,7-Trimethylxanthine
1,3,7-Trimethylpurine-2,6-dione

Cafeína



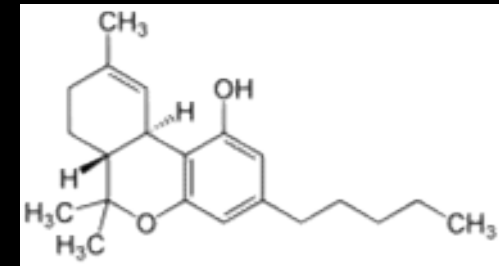
methyl (1R,2R,3S,5S)-3-(benzoyloxy)-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylate

Cocaína



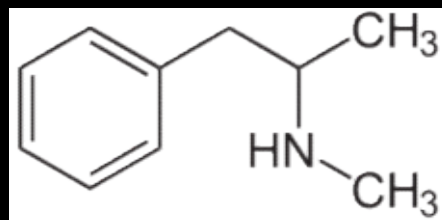
(5α,6α)-7,8-didehydro-4,5-epoxy-17-methylmorphinan-3,6-diol diacetate

Heroína



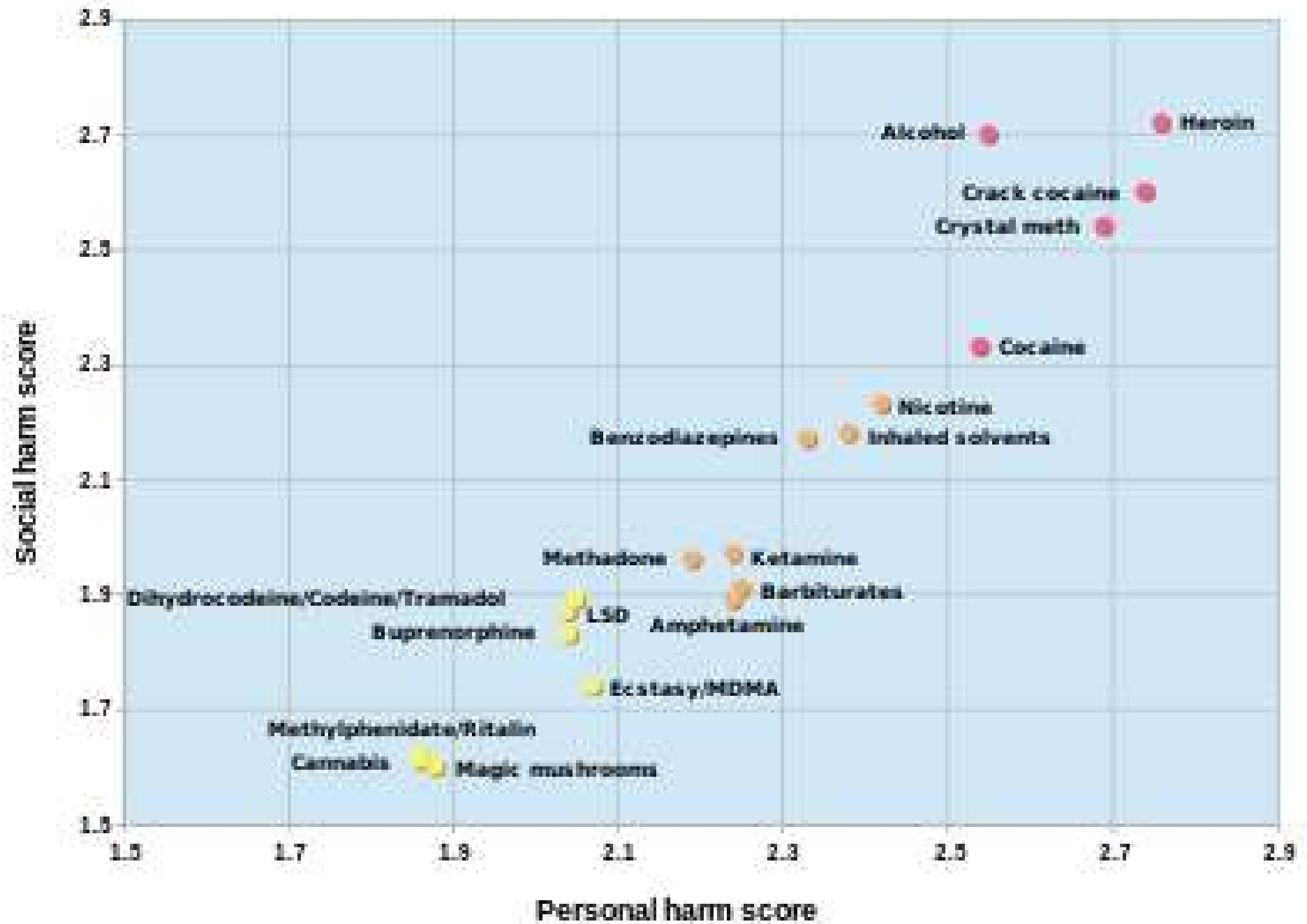
(-)-(6aR,10aR)-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6a,7,8,10a-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-1-ol

Cannabis THC



N-methyl-1-phenylpropan-2-amine

Crystal meth

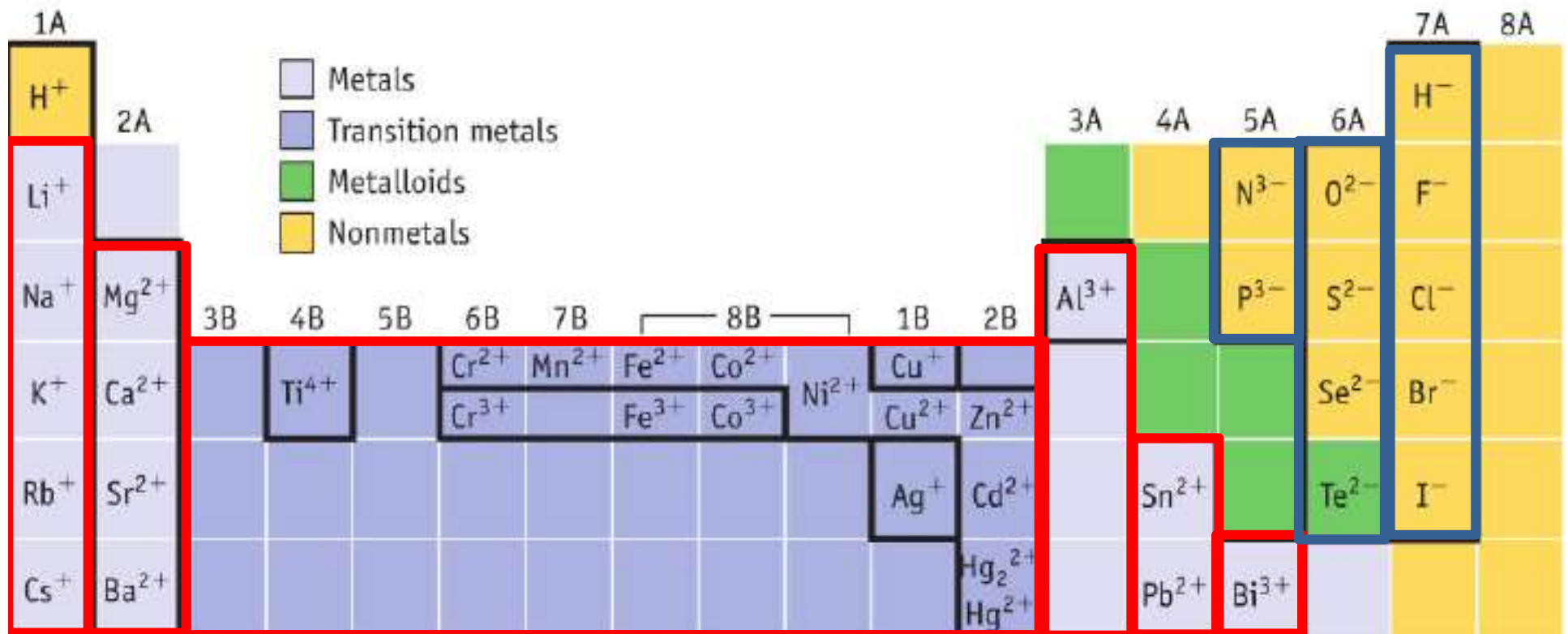


Compostos iônicos – íons



Nome Comum	Nome químico	Formula	Iões envolvidos
Calcita	Carbonato de cálcio	CaCO_3	Ca^{2+} ; CO_3^{2-}
Fluorita	Fluoreto de cálcio	CaF_2	Ca^{2+} ; F^-
Gipsita	Sulfato de cálcio dihidratado	$\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	Ca^{2+} ; SO_4^{2-}
Hematita	Óxido de ferro (III)	Fe_2O_3	Fe^{3+} ; O^{2-}
Ouro-pigmento	Sulfeto de Arsénio	As_2S_3	As^{3+} ; S^{2-}

Metals geralmente perdem um ou mais elétrons
 Não metais geralmente ganham um ou mais elétrons
 O número de elétrons ganhos e perdidos irá seguir a configuração electrónica de um gás nobre

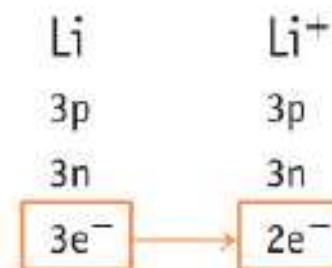




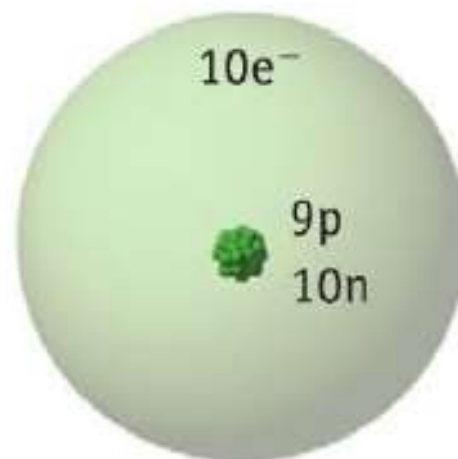
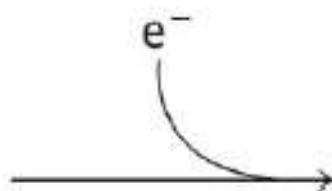
Lithium, Li



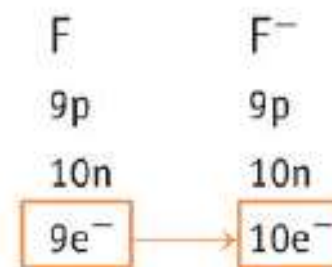
Lithium ion, Li⁺



Fluorine, F



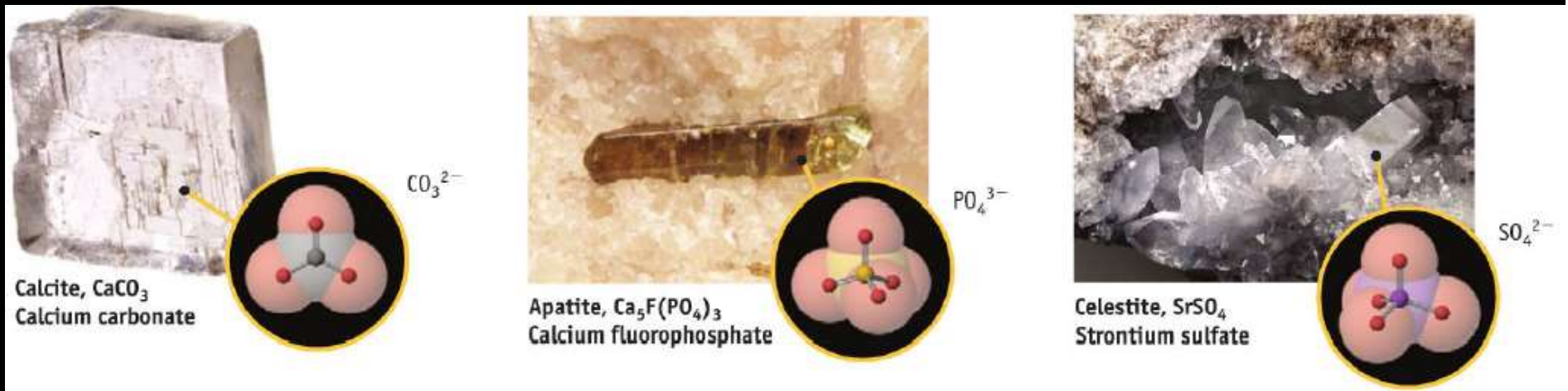
Fluoride ion, F⁻



Iões poliatômicos

São compostos por dois ou mais e em conjunto têm uma carga eléctrica

Os iões carbonato tem uma carga negativa -2
Enquanto o íon amônio, NH_4^+



Nomenclatura

Fórmula	Nome	Formula	Nome
CATION			
NH ⁴⁺	Íon amônio		
ANIONS			
Grupo 4A		Grupo 7A	
CN ⁻	Íon cianeto	ClO ⁻	Íon hipoclorito
CH ₃ COO ⁻	Íon acetato	ClO ₂ ⁻	Íon clorito
CO ₃ ²⁻	Íon carbonato	ClO ₃ ⁻	Íon clorato
HCO ₃ ⁻	Íon hidrogenocarbonato	ClO ₄ ⁻	Íon perclorato
C ₂ O ₄ ²⁻	Íon oxalato		
Grupo 5A		Metais de transição	
NO ₂ ⁻	Íon nitrito	CrO ₄ ²⁻	Íon cromato
NO ₃ ⁻	Íon nitrato	Cr ₂ O ₇ ²⁻	Íon dicromato
PO ₄ ³⁻	Íon fosfato	MnO ₄ ⁻	Íon permanganato
HPO ₄ ²⁻	Íon hidrogeno fosfato		
H ₂ PO ₄ ⁻	Íon dihidrogeno fosfato		

Nomenclatura

Fórmula	Nome
Grupo 6A	
OH^-	Íon hidroxilo
SO_3^{2-}	Íon Sulfito
SO_4^{2-}	Íon Sulfato
HSO_4^-	Íon hidrogenosulfato



Regras dos nomes

Cátions: assumem o nome do metal – ions alumínio

Ou se for metal de transição - Co^{2+} ion cobalto (II) ou ion cobalto Co^{3+} (III). O ion Amônio NH_4^+

Anions: que podem ser monoatômicos ou poliatômicos

Monoatômico negativo -

elementos não metálicos do grupo 7A –2 Halogénios – denominam-se de íons Haletos – a terminação é “eto”

Íons negativos poliatômicos do grupo 6^a os que contêm oxigénio denominam-se oxiânions e o seu nome está relacionado com o numero de átomos de oxigênio

Ions negativos poliatômicos do grupo 6^a os que contêm oxigênio denominam-se oxiânions e o seu nome está relacionado com o número de átomos de oxigênio

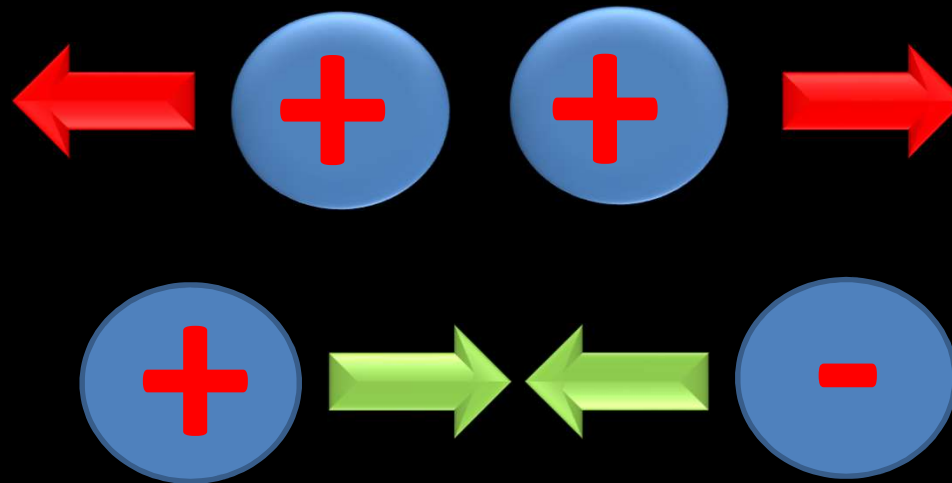
Grupo 7A	
ClO_4^-	Íon per clorato
ClO_3^-	Íon clor ato
ClO_2^-	Íon clor ito
ClO^-	Íon hipo clorito



Aumento do número de átomos de oxigênio

Propriedades dos compostos iónicos

O que acontece quando partículas carregadas se aproximam?



Quão forte é a força de atracção ou repulsão entre as duas cargas?

1795

Forças existente entre partículas carregadas podiam ser quantificadas

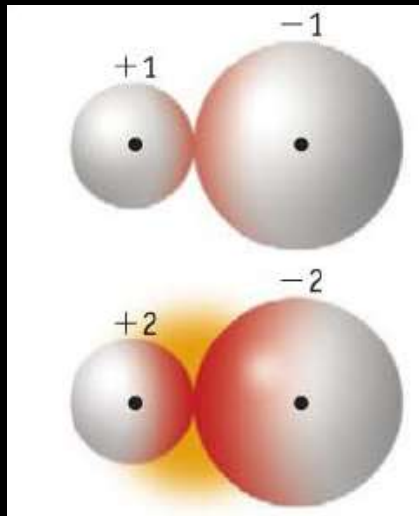
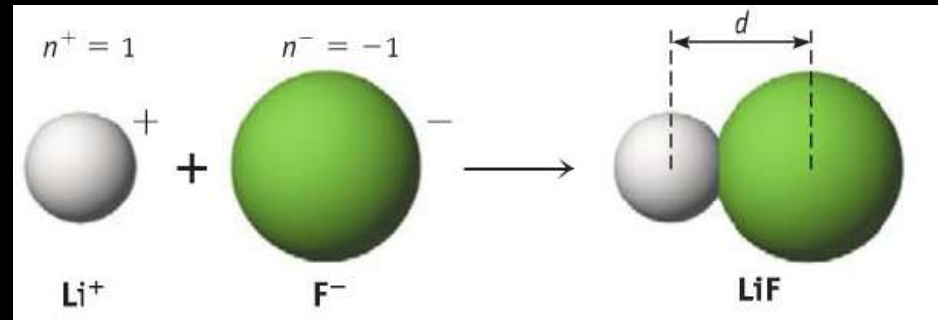
$$\text{Força} = -K_e \frac{q_1 \times q_2}{d^2}$$

$$K_e = 8,98 \times 10^9 \text{ N.m}^2/\text{C}^2$$

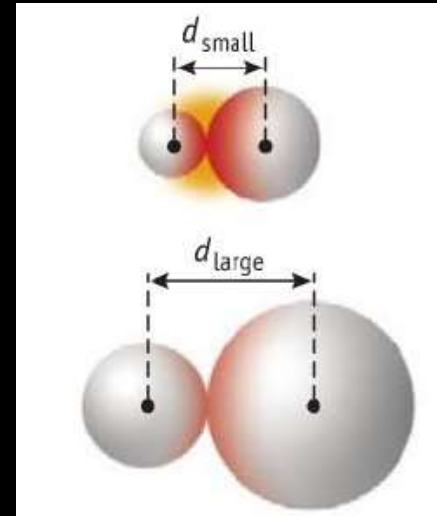


Augustine Charles de
Coloumb
(1736-1806)

$$\text{Força} = -K_e \frac{q_1 \times q_2}{d^2}$$



À medida que carga dos ions aumenta aumenta igualmente a força de atração



À medida que a distância diminui a força de atração

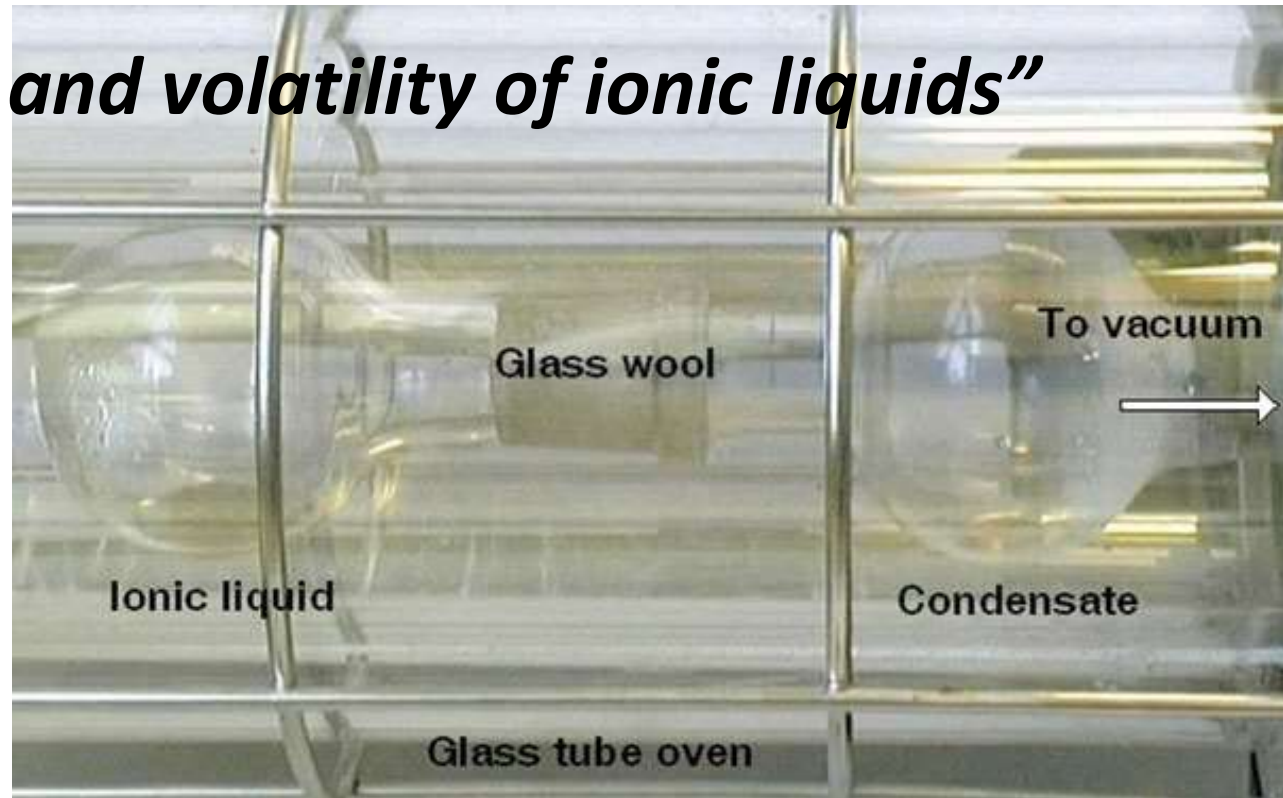


Líquidos iónicos

- ❑ Sais com um ponto de fusão inferior a 100°C
- ❑ Pressão de vapor negligenciável
- ❑ Elevada condutividade iónica
 $0,1-80 \text{ mScm}^{-1}$
- ❑ Ampla janela Electroquímica
4-5.7 V
- ❑ Termoestáveis.
- ❑ Não inflamáveis
- ❑ Verdes, seguros, não tóxicos...

Líquidos iónicos Volátiles

“The distillation and volatility of ionic liquids”



Nature **439**, 831-834 (2006)

Kaboom Ionic liquids



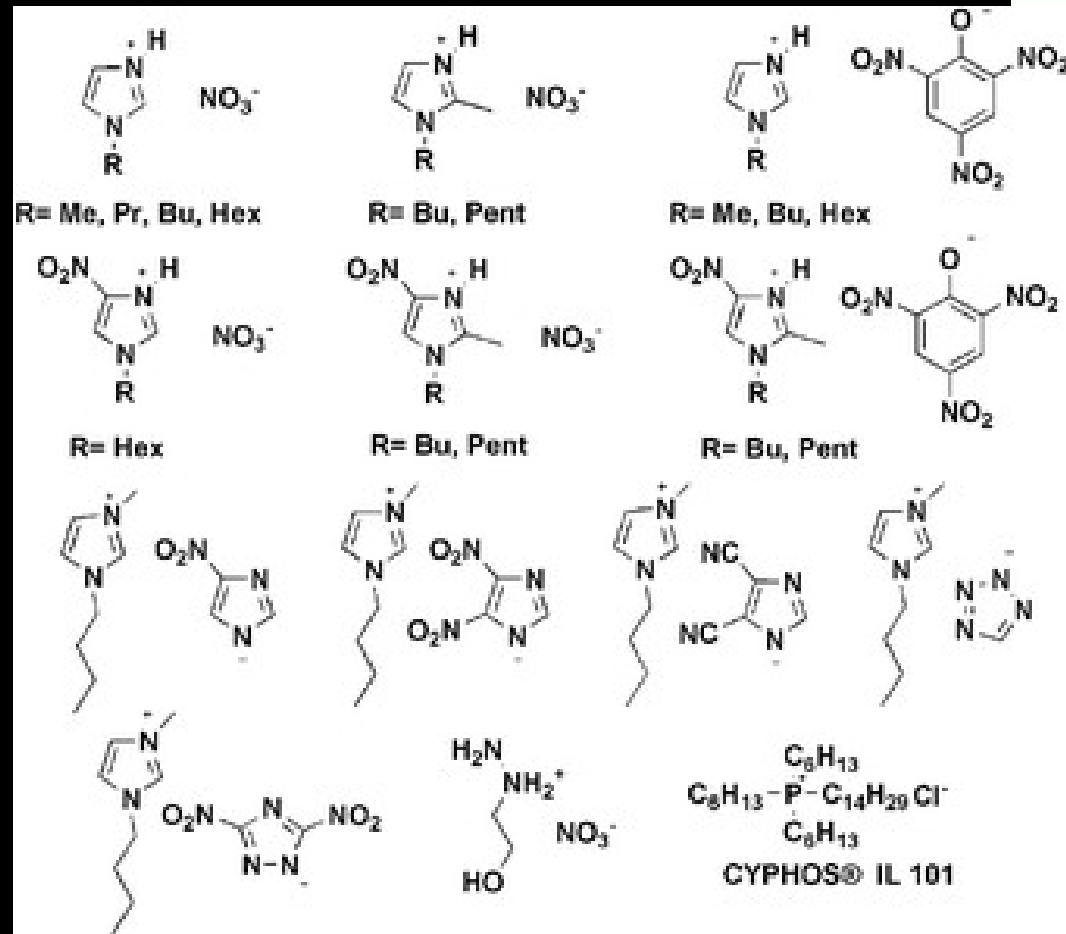
“Combustible ionic liquids by design: is laboratory safety another ionic liquid myth?”



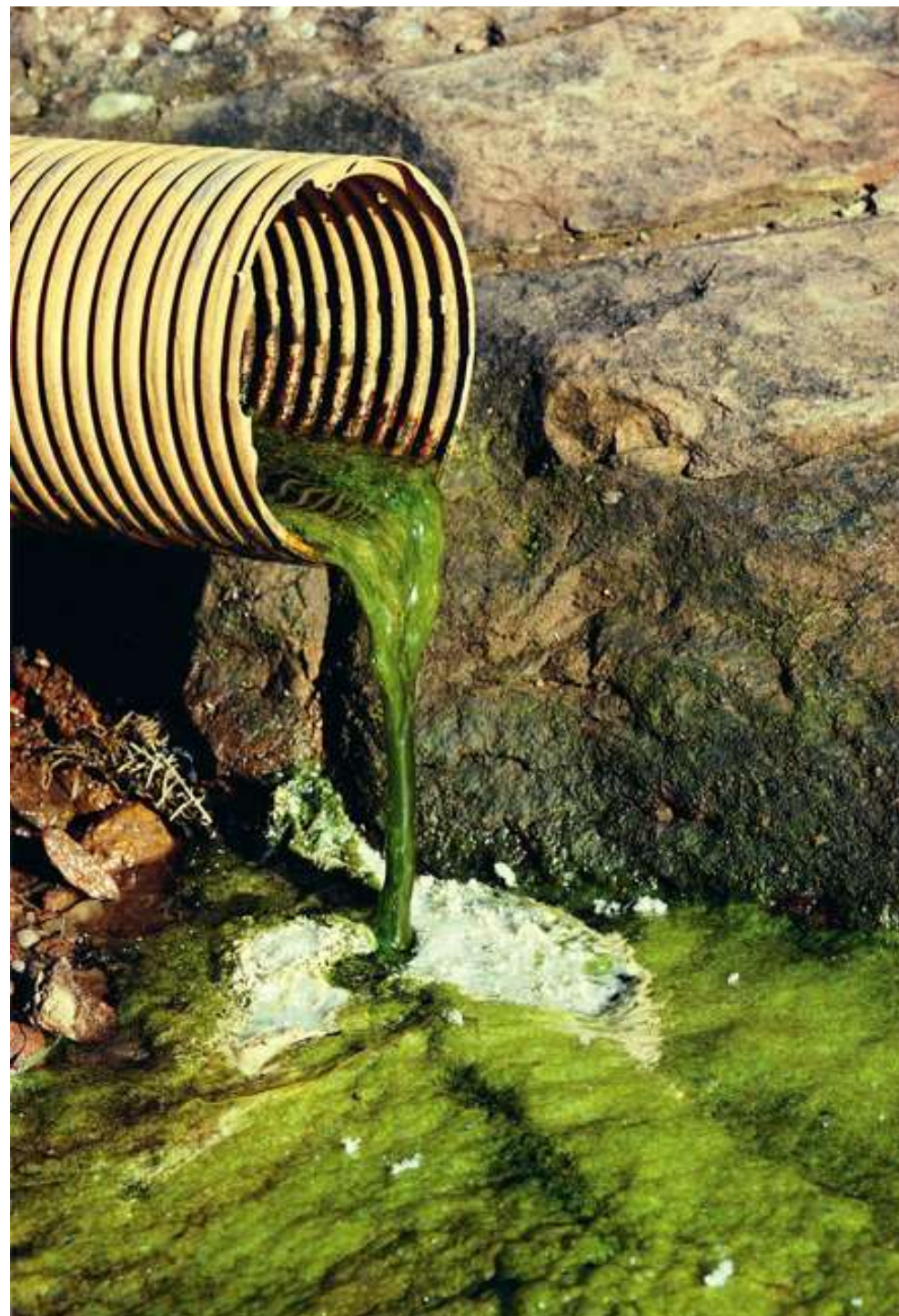
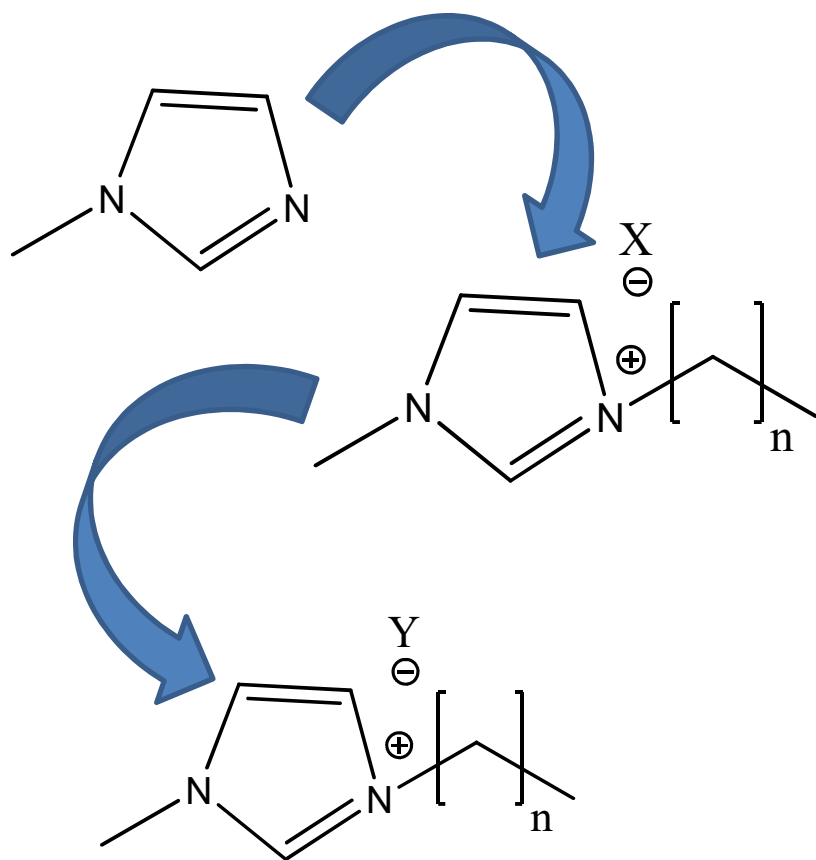
[1-Bu-3-H-IM][NO₃]

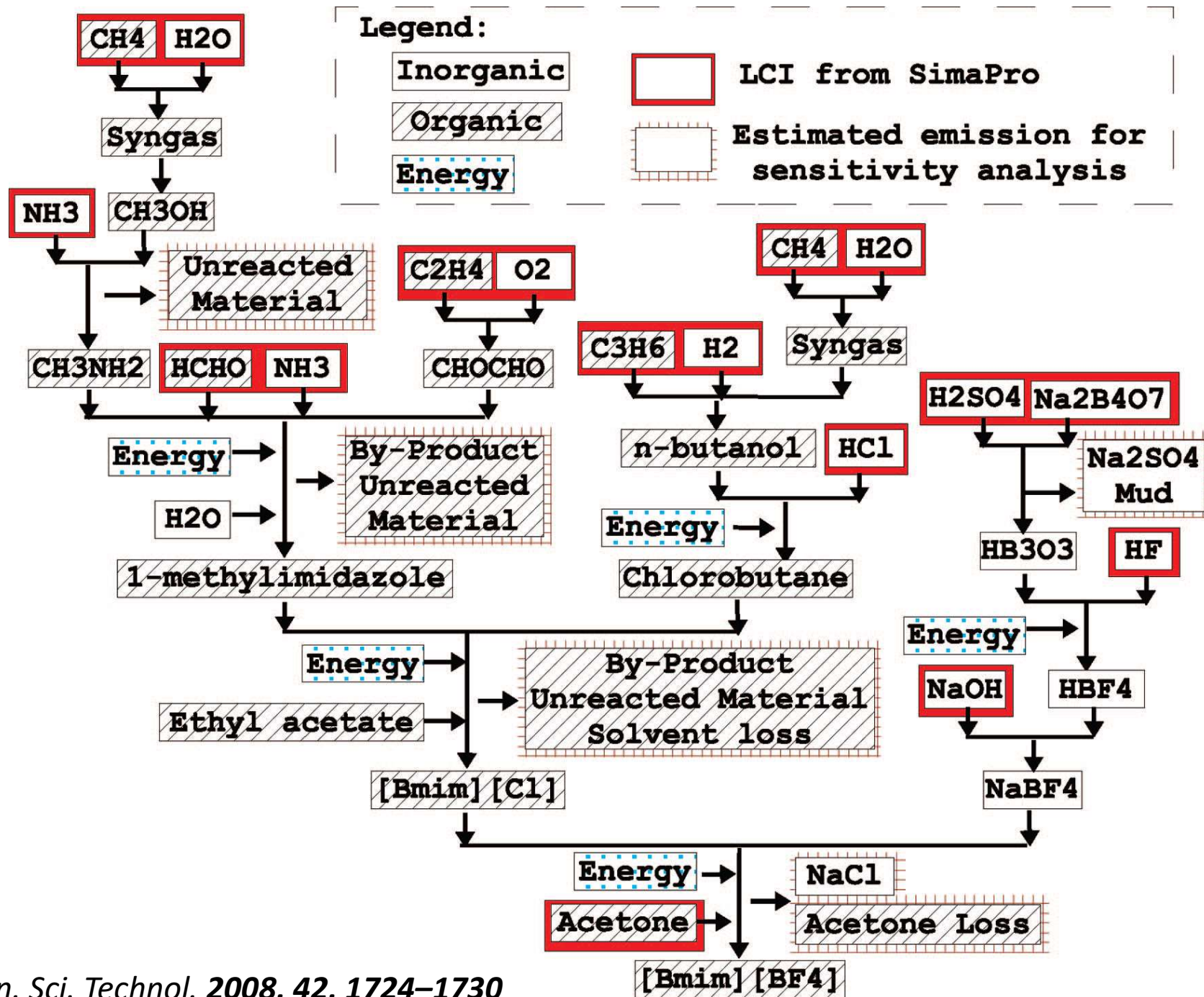
Chem. Commun., 2006, 2554-2556

Kaboom



Líquidos Iónicos Green (RED)





Toxicidade

líquidos iónicos

Acute effects of 1-octyl-3-methylimidazolium bromide ionic liquid on the antioxidant enzyme system of mouse liver

Ecotoxicology and Environmental Safety (2008), 3, 903-908.



Assessing the toxicity on [C3mim][Tf2N] to aquatic organisms of different trophic levels.

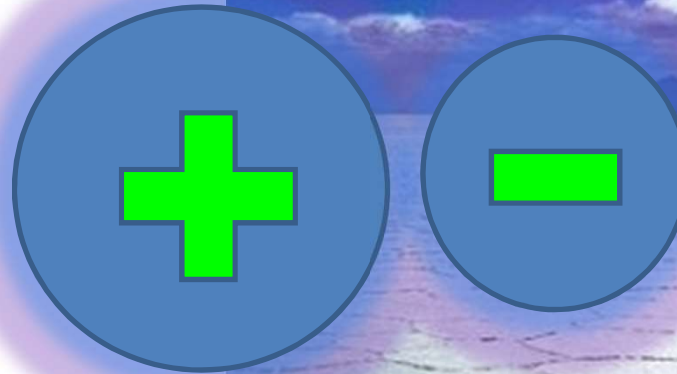
Aquatic Toxicology (2010),4, 290-297

Environmental fate and toxicity of ionic liquids: a review.

Water Research (2010),2, 352-72.

Líquidos iônicos

SAIS



***Limite é a nossa
criatividade!***

Átomos moléculas e o mol

Um **mol** é a quantidade de uma substância que possui um número de unidades fundamentais (átomos, moléculas ou outras partículas) igual ao número de átomos presentes em exactamente 12 g do isótopo do carbono 12

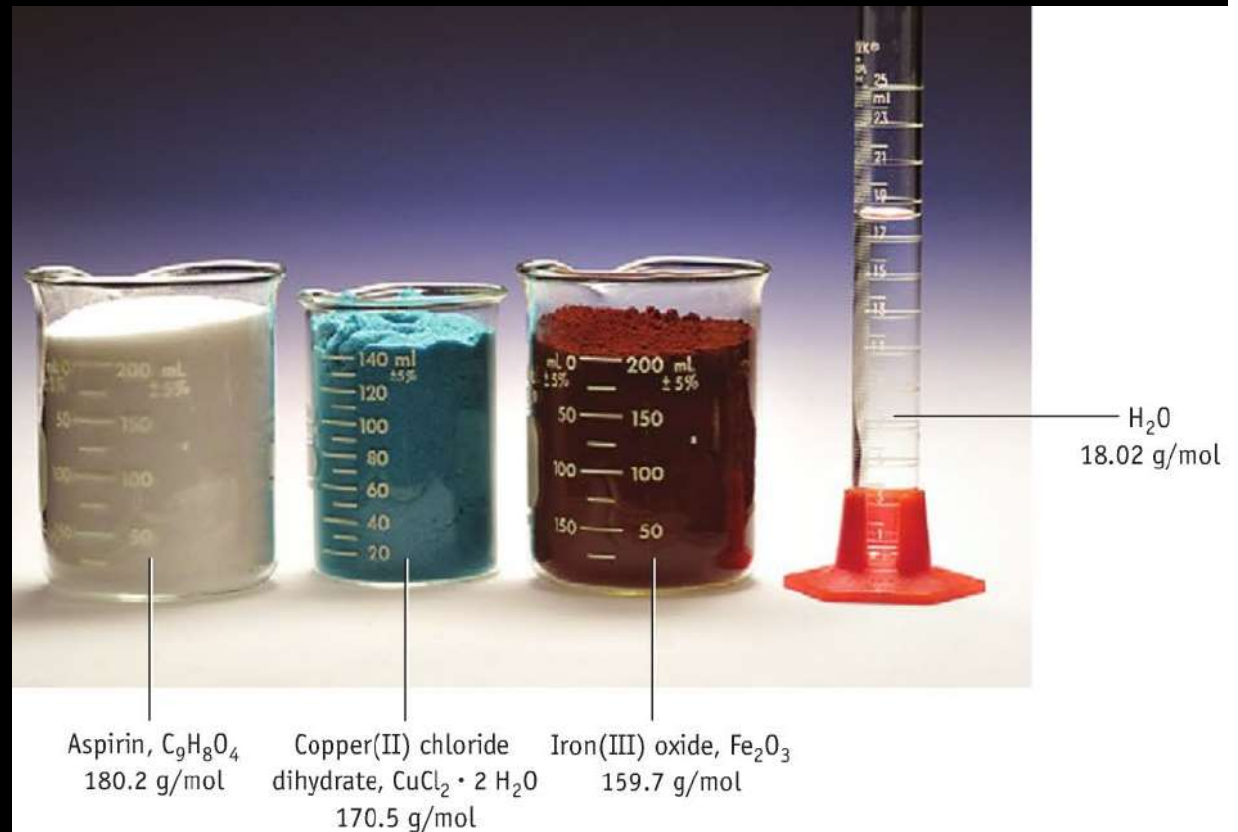
Um mol contém sempre o mesmo número de partículas não importa qual a substância

$$1 \text{ mol} = 6,02214129 \times 10^{23}$$



Átomos moléculas e o mol

A massa em gramas de um mol de átomo de qualquer elemento ($6,02214129 \times 10^{23}$ átomos desse elemento) é a Massa Molar (M)





Amadeu Avogadro

1776-1856

Existe uma relação direta entre o Número de Avogadro e outras constantes importantes

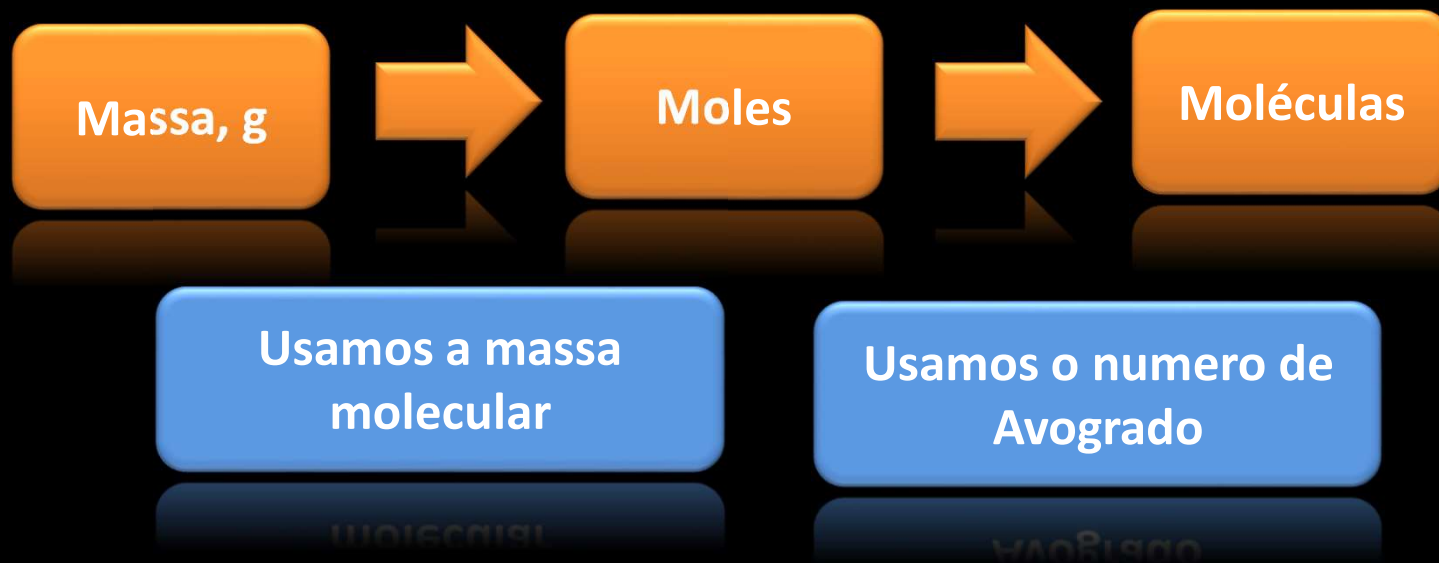
Constante dos gases perfeitos

$$R = K_B N_A = 8,34144598 \text{ Jmol}^{-1}$$

Constante de Faraday

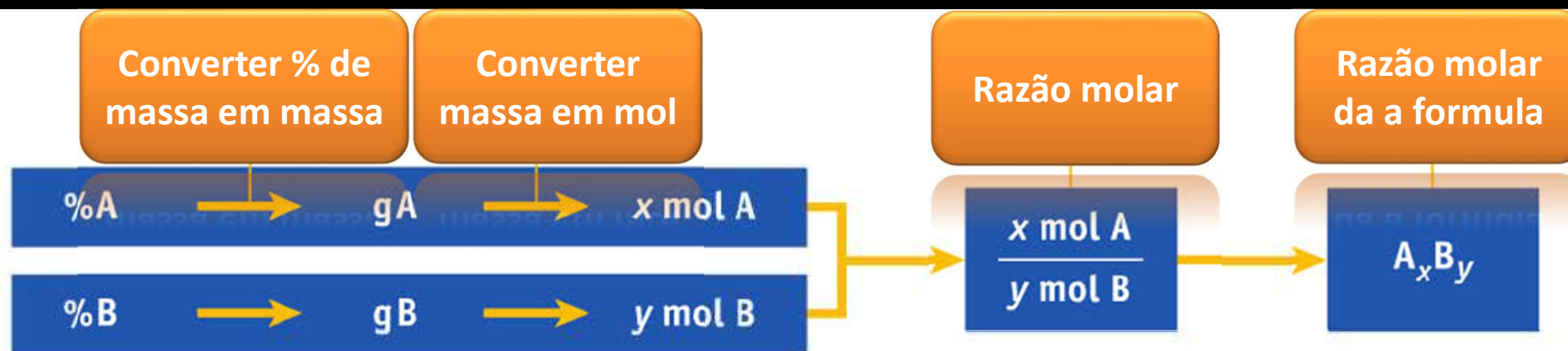
$$F = e N_A = 96485,33289 \text{ Cmol}^{-1}$$

Átomos moléculas e o mol



Fórmulas empíricas e moleculares

Como é possível chegar a formula de um composto sabendo as quantidades relativas de cada um dos seus constituintes?



Periodic Table of the Elements

A standard periodic table of elements with 118 elements. The elements are color-coded by groups: Alkali Metals (red), Alkaline Earths (orange), Transition Metals (yellow), Basic Metals (green), Semimetals (light green), Nonmetals (blue), Halogens (purple), Noble Gases (dark purple), Lanthanides (light blue), and Actinides (dark blue). Each element cell contains its symbol, name, atomic number, and atomic weight.

Two rows of elements representing the Lanthanide and Actinide series. The Lanthanide series (row 1) includes elements from Lanthanum (La, 57) to Lutetium (Lu, 71). The Actinide series (row 2) includes elements from Actinium (Ac, 89) to Lawrencium (Lr, 103). Each cell contains the element's symbol, name, atomic number, and atomic weight.

A legend showing color-coded boxes for element groups: Alkali Metal (red), Alkaline Earth (orange), Transition Metal (yellow), Basic Metal (green), Semimetal (light green), Nonmetal (blue), Halogen (purple), Noble Gas (dark purple), Lanthanide (light blue), and Actinide (dark blue).

Two rows of elements representing the Lanthanide and Actinide series in shorthand notation. The Lanthanide series (row 1) includes elements from La to Lu. The Actinide series (row 2) includes elements from Ac to Lr. Each cell contains the element's symbol and atomic number.

Two rows of elements representing the Lanthanide and Actinide series in shorthand notation. The Lanthanide series (row 1) includes elements from La to Lu. The Actinide series (row 2) includes elements from Ac to Lr. Each cell contains the element's symbol and atomic number.

Estrutura dos átomos e tendências periódicas

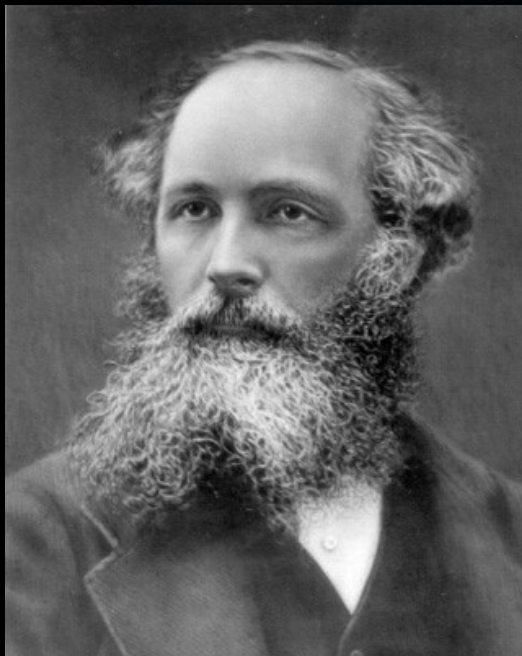
Aula 2

Radiação electromagnética

LUZ

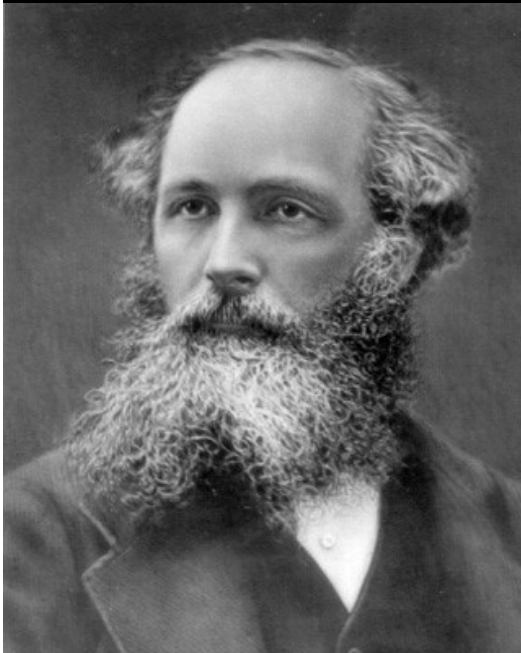
Em 1864 James Clerk Maxwell desenvolveu uma teoria matemática para descrever a luz e a outras formas de radiação - oscilação ou tipo de onda, campo eléctrico e magnético.

Luz visível, raio x microondas sinais de radio e televisão passaram a denominar-se de **Radiação Electromagnética**

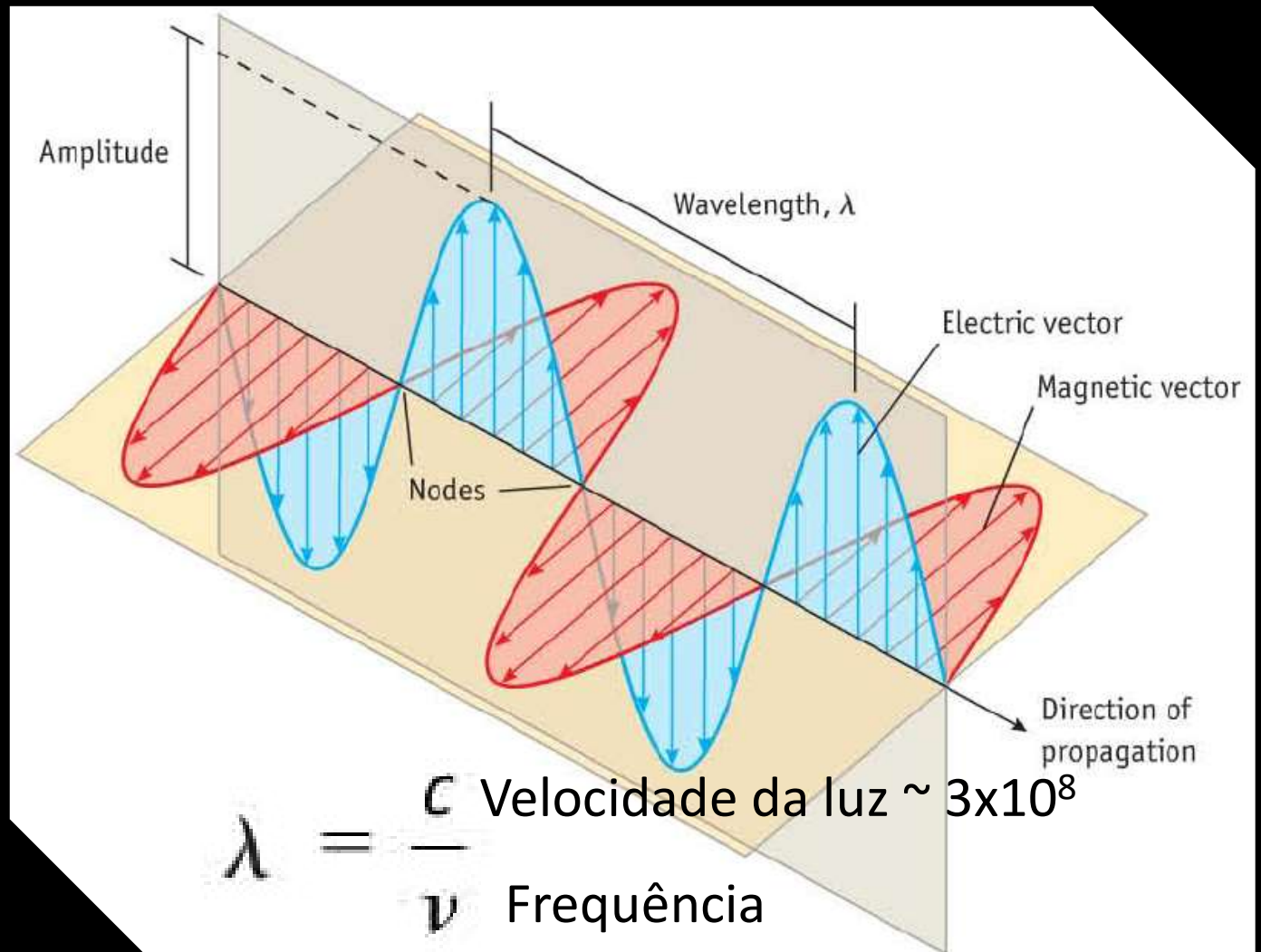


James Clerk Maxwell
1831-1879





James Clerk Maxwell
1831-1879



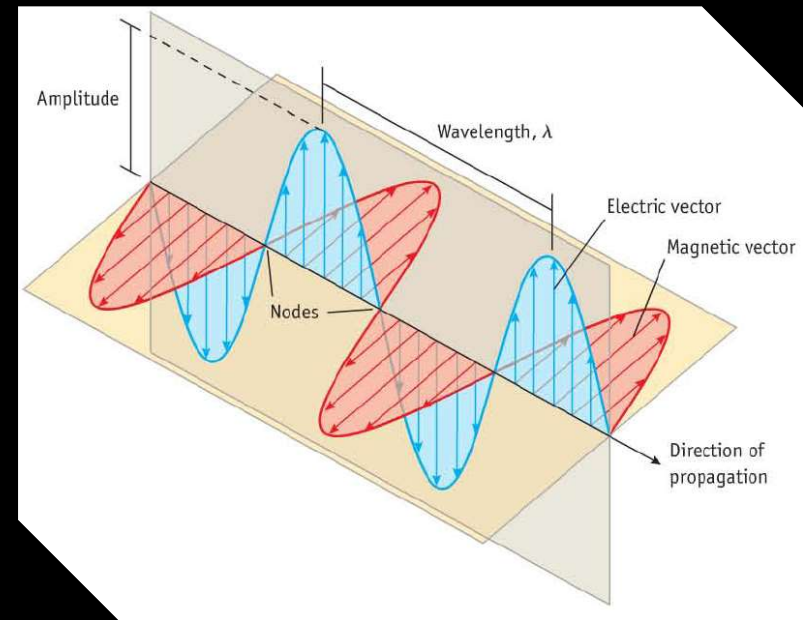


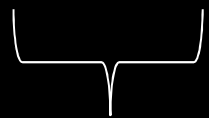
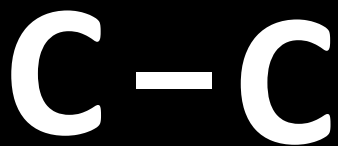
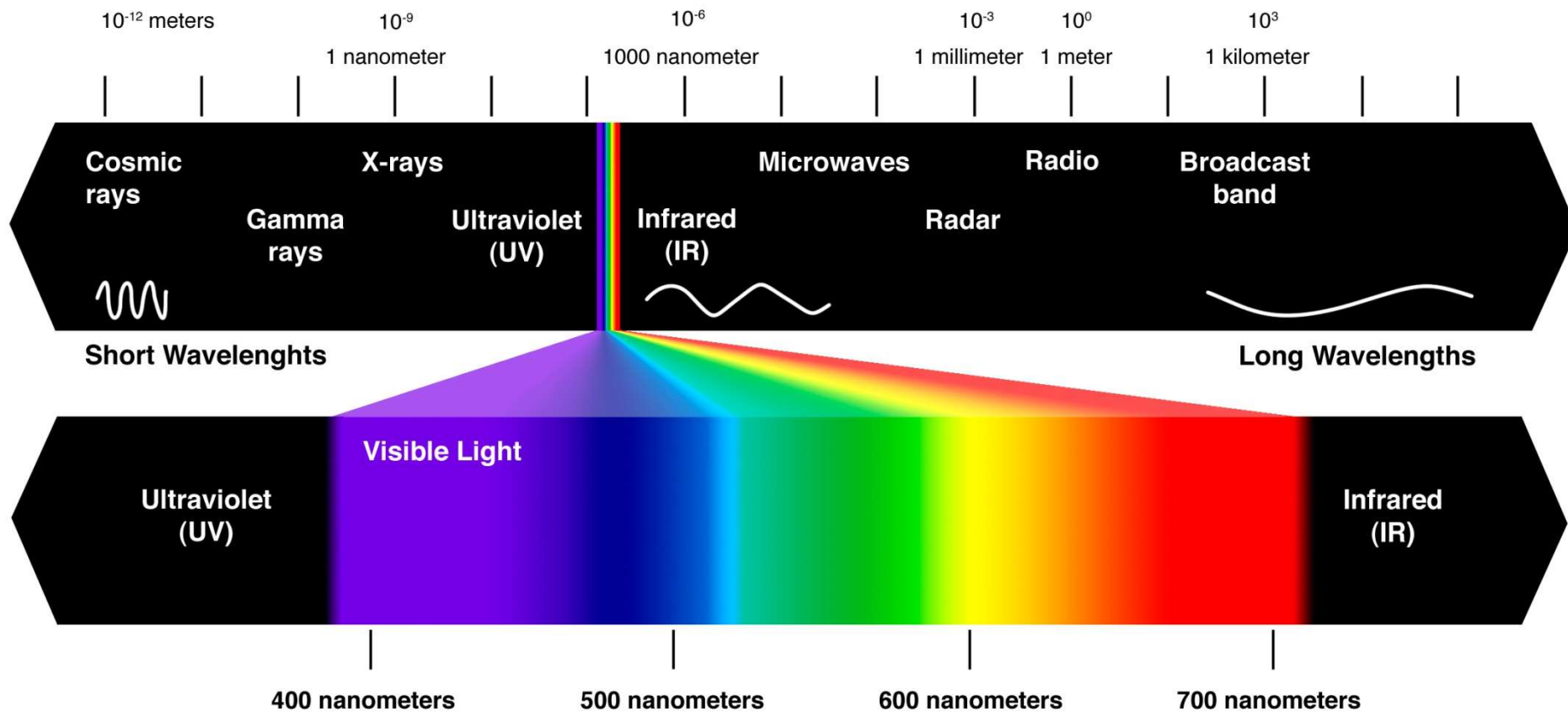
Radiação electromagnética

$$c \left(\frac{m}{s} \right) = \lambda(m) \times \nu \left(\frac{1}{s} \right)$$

Comprimento de onda – **lambda (λ)**
é definido com a distancia entre um determinado ponto sobre uma onda e o ponto correspondente no próximo ciclo de onda – **distancias entre cristas**

Frequência - niu (ν) - que se refere ao número de ondas que passam por um determinado ponto em alguma unidade de tempo, geralmente por segundo 1/s - Hertz





0,15 nm

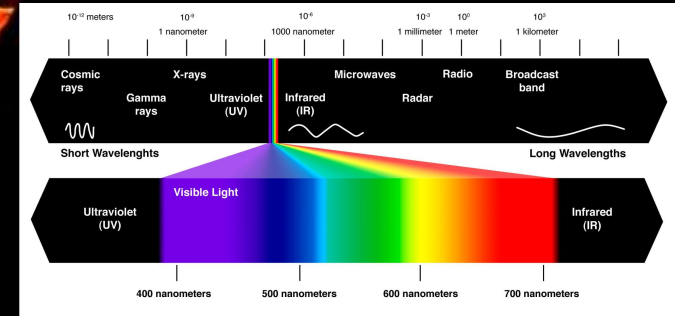
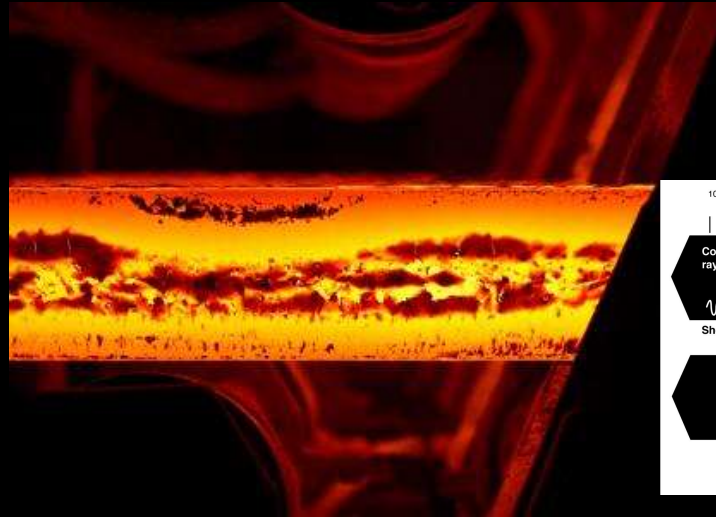
Luz visível não permite ter resolução a este nível

Raio-X tem comprimentos de onda entre 0,01 - 10 nm

Quantização: Planck, Einstein, Energia e fotons



Max Planck
1858-1946



- Corpos quando são aquecidos emitem luz
- Aço quando aquecido tem várias cores de acordo com a temperatura
- Transformação da energia térmica em luz

Qual era o problema?

física clássica -a intensidade da luz deveria aumentar até que o aço passa-se a emitir luz ultravioleta que é invisível para o olho humano. Este facto não sucede - **catástrofe ultravioleta**.

Equação de Planck

Planck veio com a ideia de que a radiação eletromagnética produzida por um corpo aquecido provinha da vibração dos átomos -

oscilador. Nem todos vibrariam com a mesma frequência...

Oscilador - frequência fundamental de oscilação – e só podiam vibrar nessa frequência ou em alguma que fosse um múltiplo de um número inteiro da primeira

$$E = nh\nu ; h=6,6260693 \times 10^{-34} \text{ J.s} - \text{constante de Planck}$$

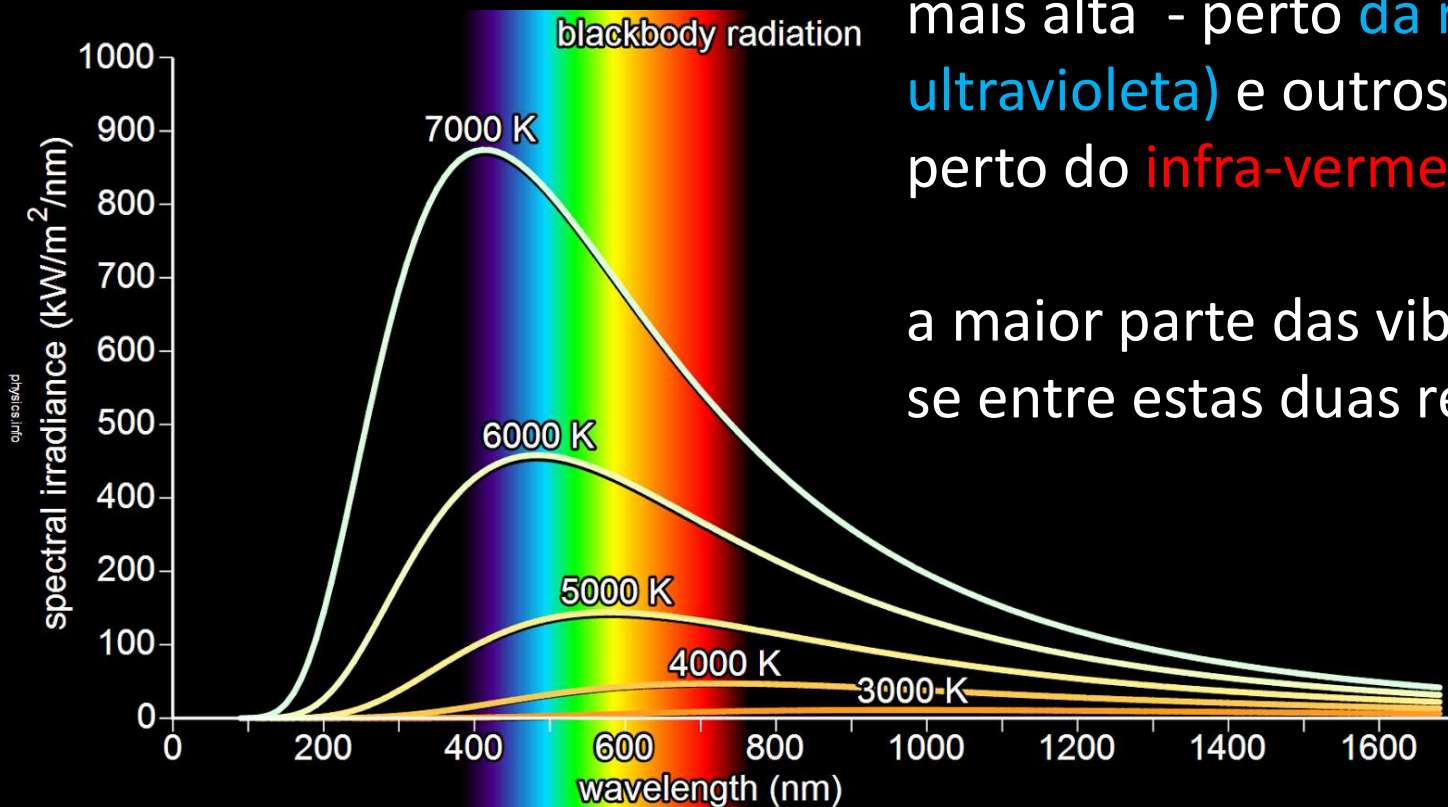
Planck quantizou as energias - apenas são determinadas energias são permitidas - Mecânica quântica

Equação de Planck

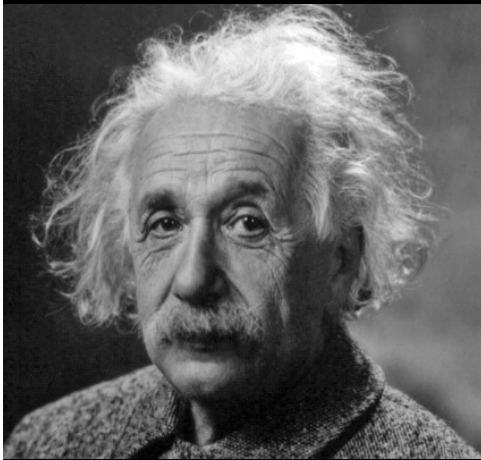
$E = nh\nu$; $h=6,6260693 \times 10^{-34}$ J.s – constante de Planck
apenas são determinadas energias são permitidas

Uns vibrariam com uma frequência mais alta - perto da região azul (ou ultravioleta) e outros mais baixo perto do infra-vermelho.

a maior parte das vibrações situava-se entre estas duas regiões



Einstein e o efeito fotoelétrico

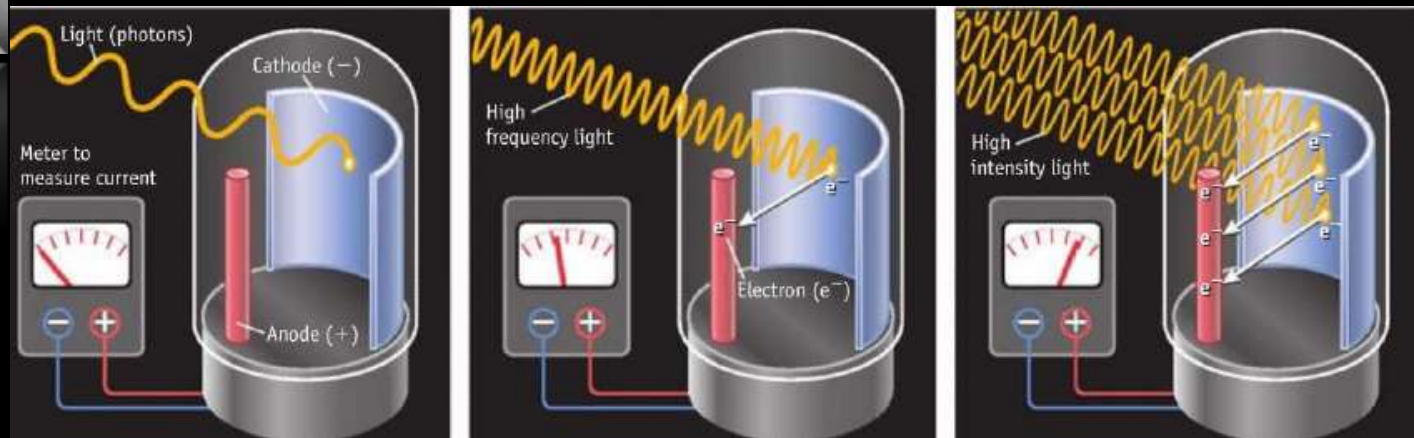


Albert Einstein
1879-1955

"Duas coisas não têm limites: o universo e a estupidez humana. ... Mas, no que respeita ao universo, ainda não adquiri a certeza absoluta."

Einstein incorporou as ideias de Plank para o a explicação do **efeito fotoelétrico**

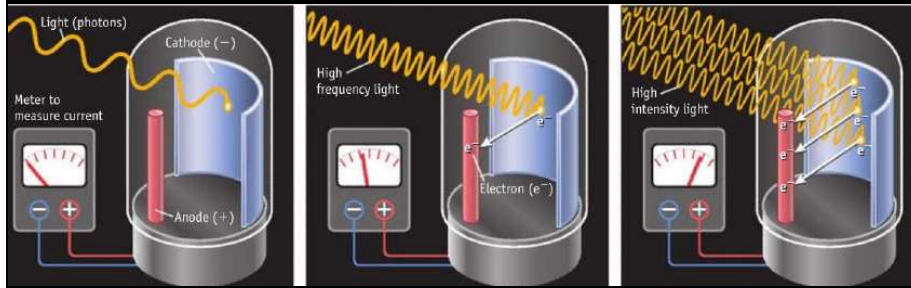
Efeito é uma observação de que muitos metais emitem electrons quando a luz incide sobre eles



frequência baixa nenhum electron é emitido

frequência está acima de um mínimo - frequência crítica,

aumentando a intensidade da



Einstein conclui que as observações experimentais poderiam ser explicadas pela combinação da equação de Planck

Que luz apresenta propriedades semelhantes às partículas.

Einstein chamou a estas *partículas sem massa* - **FOTONS**

Radiação electromagnética tem propriedades de **onda** mas pelo efeito fotoelétrico a luz comporta-se como uma **partícula**

Como é possível a radiação electromagnética ser ambas?

Dualidade onda-partícula

Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr

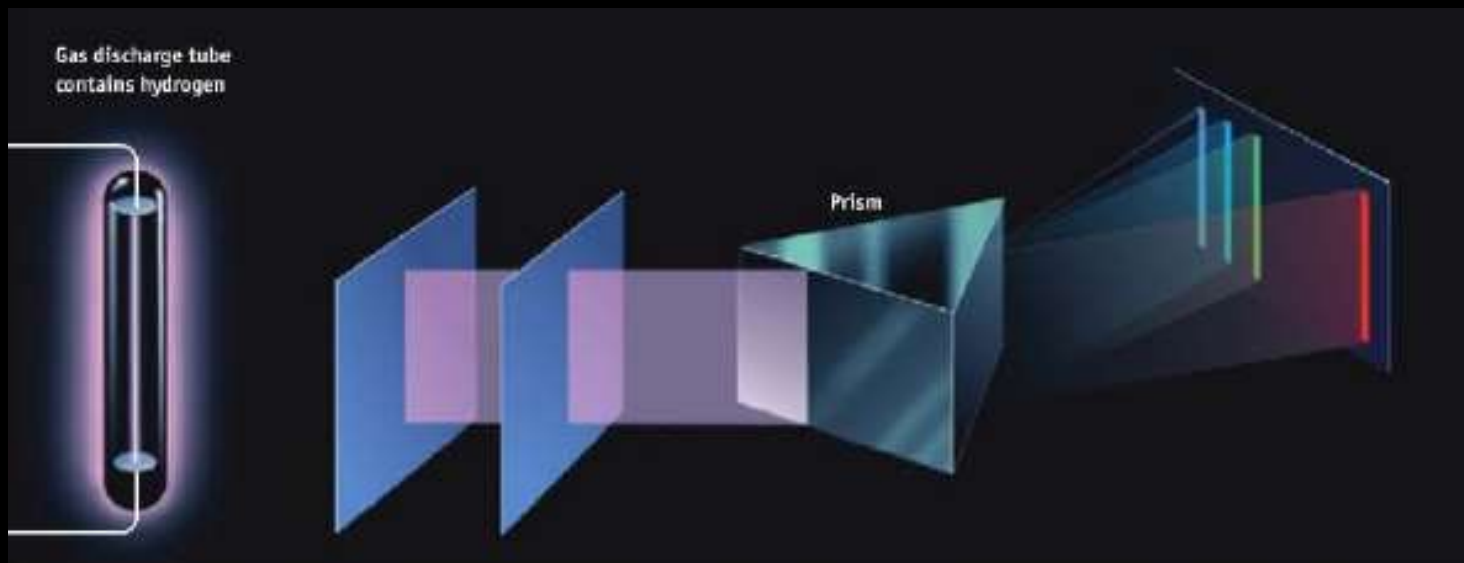


Niels Bohr
1885-1962



Se uma alta voltagem é aplicada aos átomos de um elemento em fase gasosa a baixa pressão, os átomos observem energia e são ditos excitados . Luz dos “neons”

A luz emitida pelos átomos excitados era composta por apenas alguns valores discretos de comprimento de onda.



Espectro de emissão de linhas

Diferente do espectro de emissão da luz do sol e da luz emitida por um corpo quente.

Cada elemento apresenta um espectro de emissão único.

Este facto permite inclusive a análise química de um determinado composto

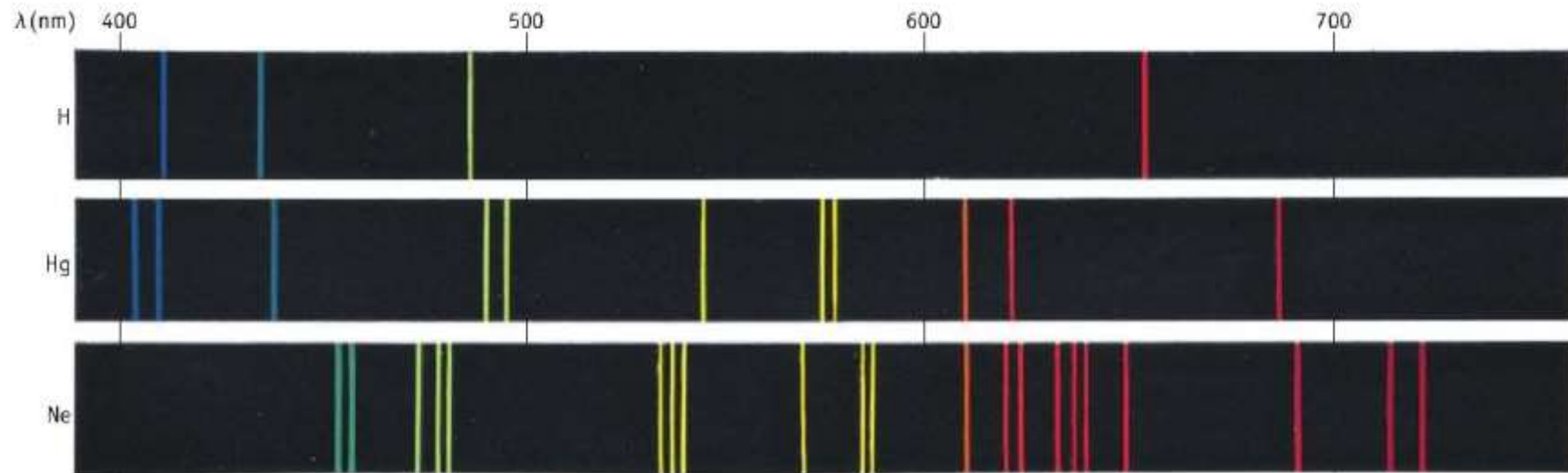


FIGURE 6.7 Line emission spectra of hydrogen, mercury, and neon. Excited gaseous elements produce characteristic spectra that can be used to identify the elements as well as to determine how much of each element is present in a sample.

The word "neon" is written in a stylized, glowing font with colors transitioning from red to yellow to green to blue, set against a dark brick wall background.

Um dos **objetivos do século XX** - explicar o porquê de os átomos gasosos emitirem luz apenas em determinadas frequências

Relação matemática entre os comprimentos de onda observados.
Padrão regular implica uma explicação lógica.

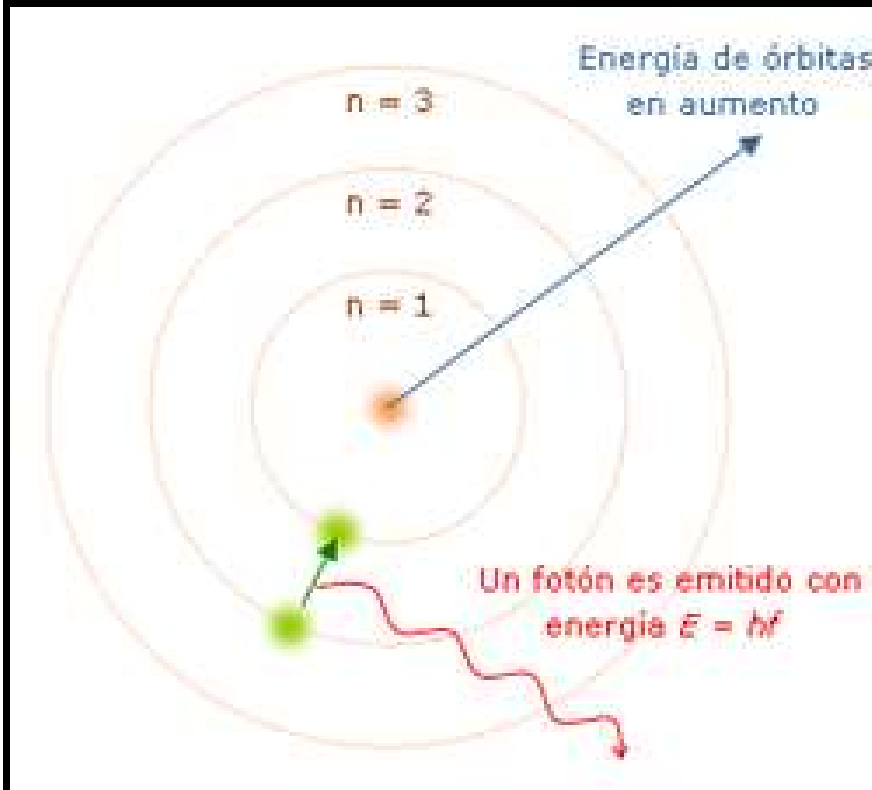
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ em que } n > 2$$

e R é a constante de Rydberg =
 $1,0974 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

O **comprimento de onda** da radiação emitida quando um dado elétron é excitado está relacionada com o **nível energético** para onde esse elétron foi enviado.

neon

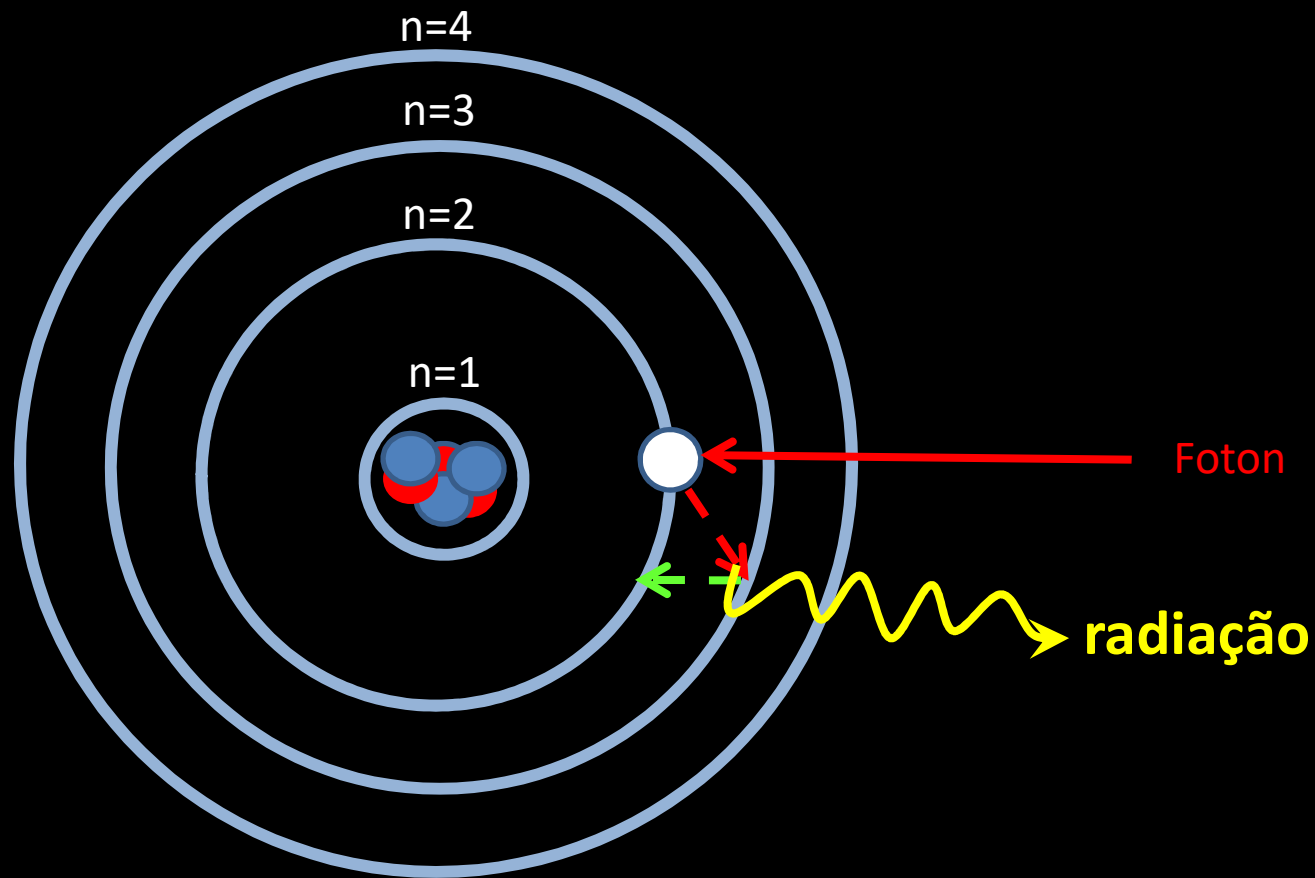
O **comprimento de onda** da radiação emitida quando um dado eletron é excitado está relacionada com o **nível energético** para onde esse eletron foi enviado.



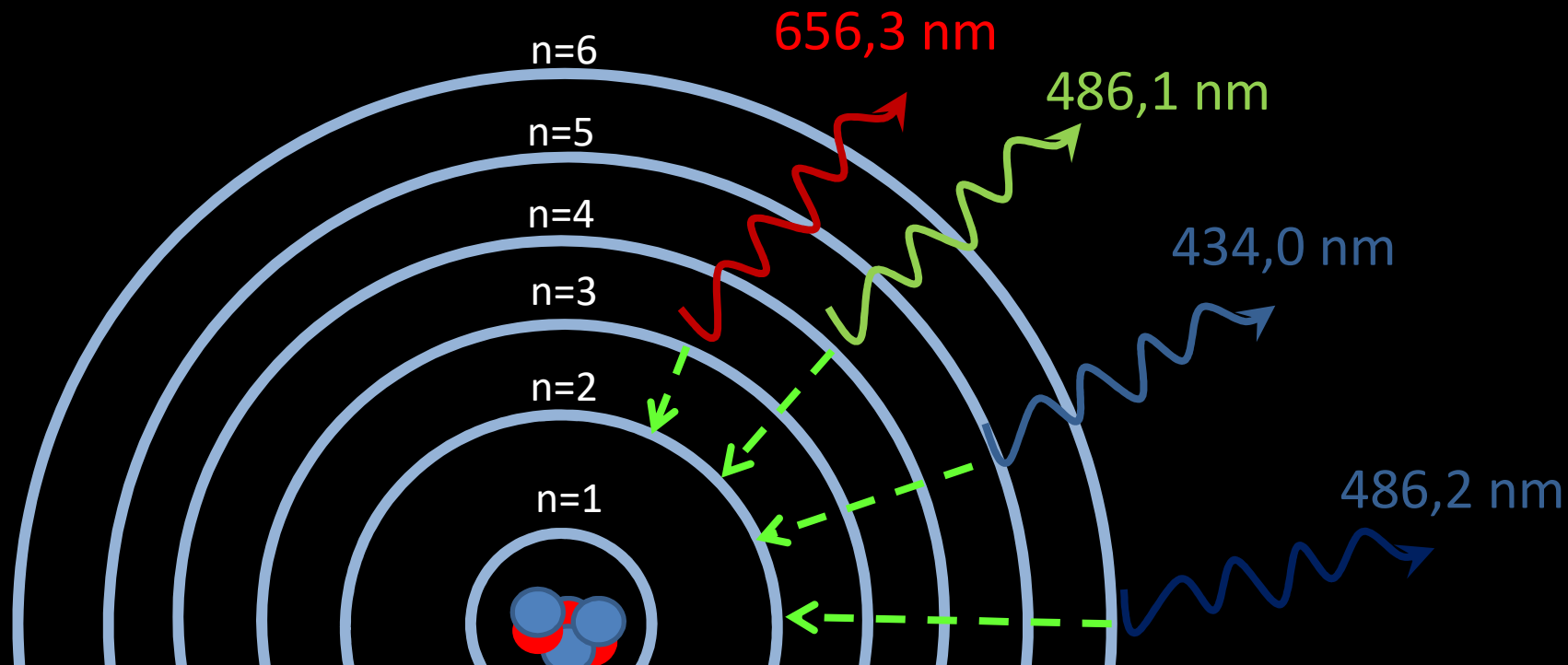
Niel Bohr que idealizou um modelo para estrutura electrónica dos átomos -

explicar o porquê de os átomos apresentarem espectros de emissão característicos

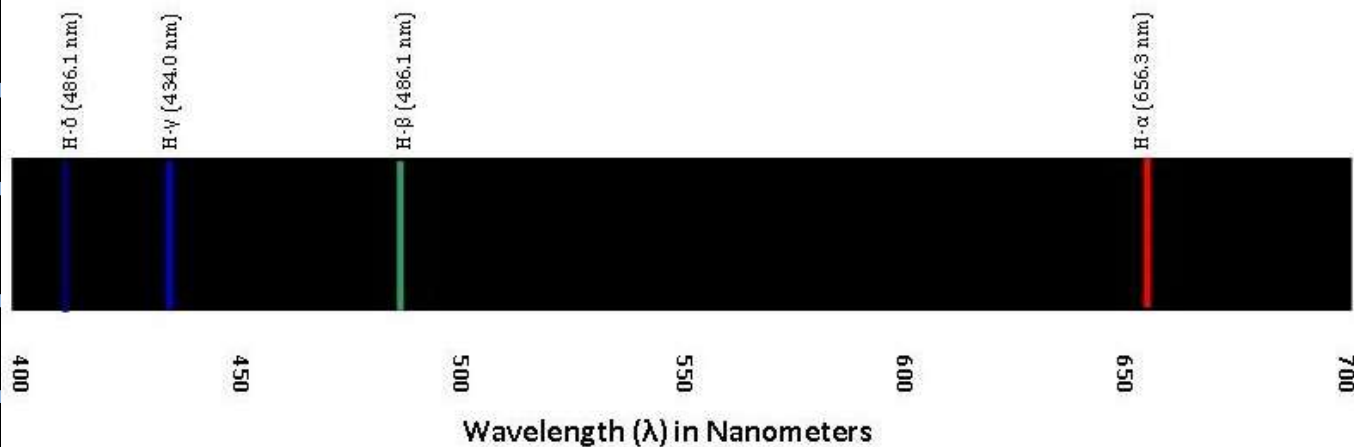
Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr



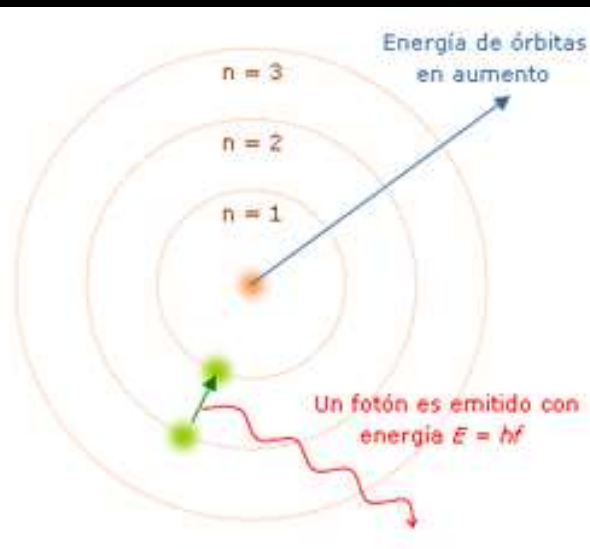
Espectros de linhas atômicas e niels bohr



Balmer Series for Hydrogen Atom



Modelo de Borh do átomo de hidrogénio



Bohr introduziu a **quantização** na descrição da **estrutura electrónica**

Existência de **orbitas correspondentes a níveis de energia específicos** - quando o electron está em um deste níveis o sistema está estável.

Combinação da quantização da energia com as leis da física clássica

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}$$

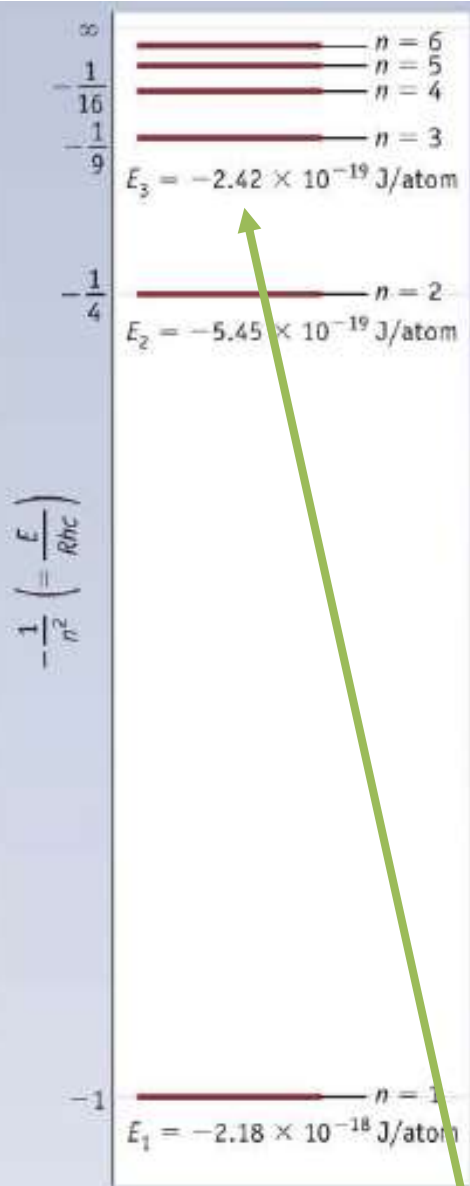
Onde E_n é a energia total do electron no enésimo nível

R é a constante de Ryberg - $1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

h é a constante de Planck - $6,36 \times 10^{-34} \text{ Js}$

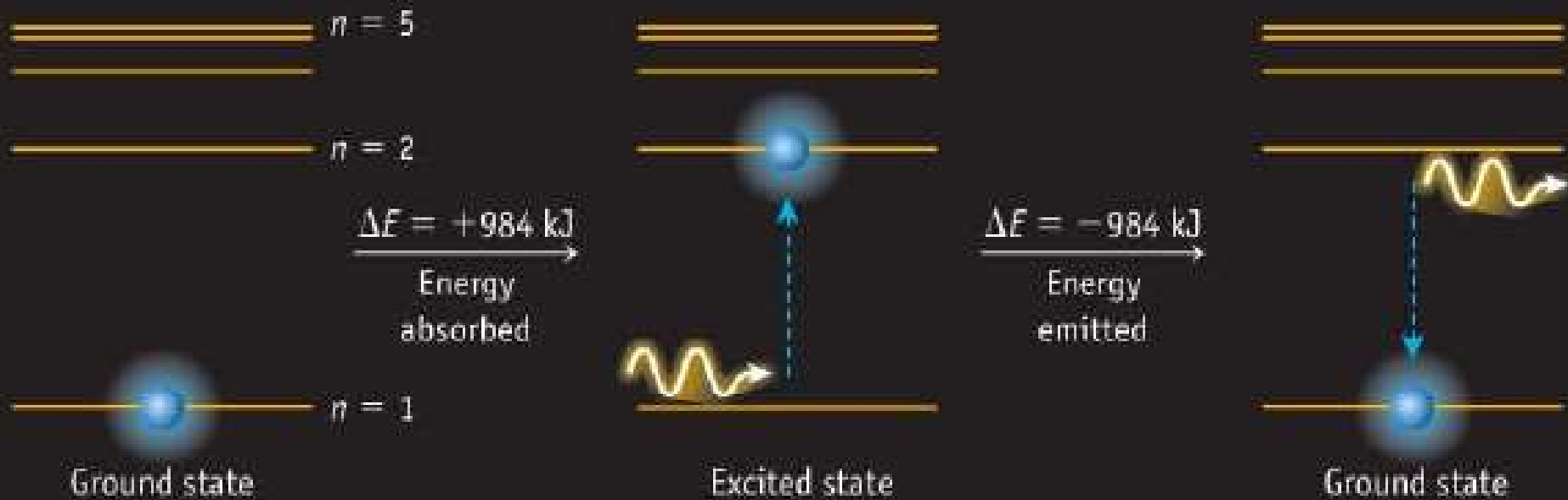
c é a velocidade da Luz - $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

n é o número quântico principal



• Estado Fundamental

- n é o número quântico principal e define as energias das orbitas que são permitidas no átomo de H
- A **energia de um elétron** em uma orbita tem valor negativo porque o elétron possui uma menor energia na orbita do quando se encontra livre.
- O zero da energia ocorre quando o elétron está completamente livre do núcleo
- O átomo com os elétrons no seu nível mais baixo diz-se no seu estado fundamental.
- Uma vez que a energia depende **$1/n^2$** os níveis de energia são progressivamente mais próximos entre si com o aumento do n



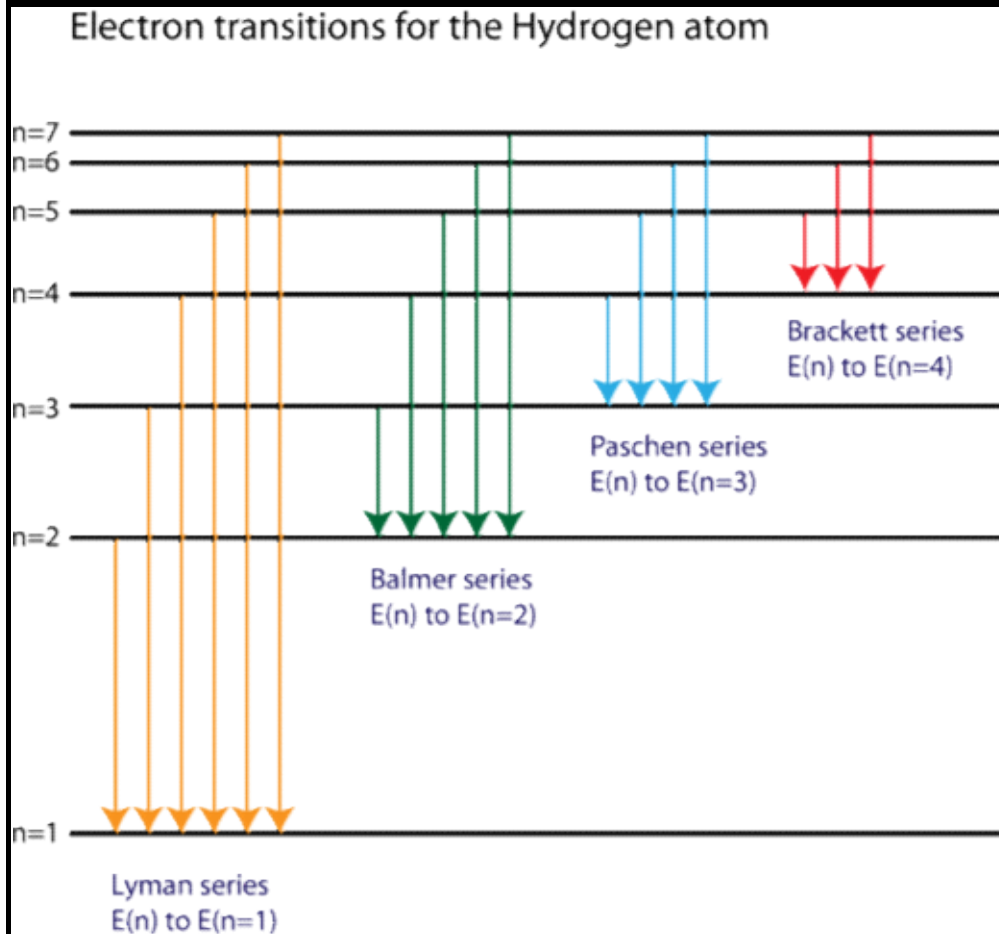
RESUMO

A teoria de Bohr descreve os electrons contendo somente orbitas e com energias especificas.

Um eletron move-se de um nível para o para o outro se a energia for absorvida ou libertada

Teoria de Bohr e os espectros dos átomos excitados

$$\Delta E = E_{final} - E_{inicial} = -Rhc \left(\frac{1}{n_{final}^2} - \frac{1}{n_{inicial}^2} \right)$$



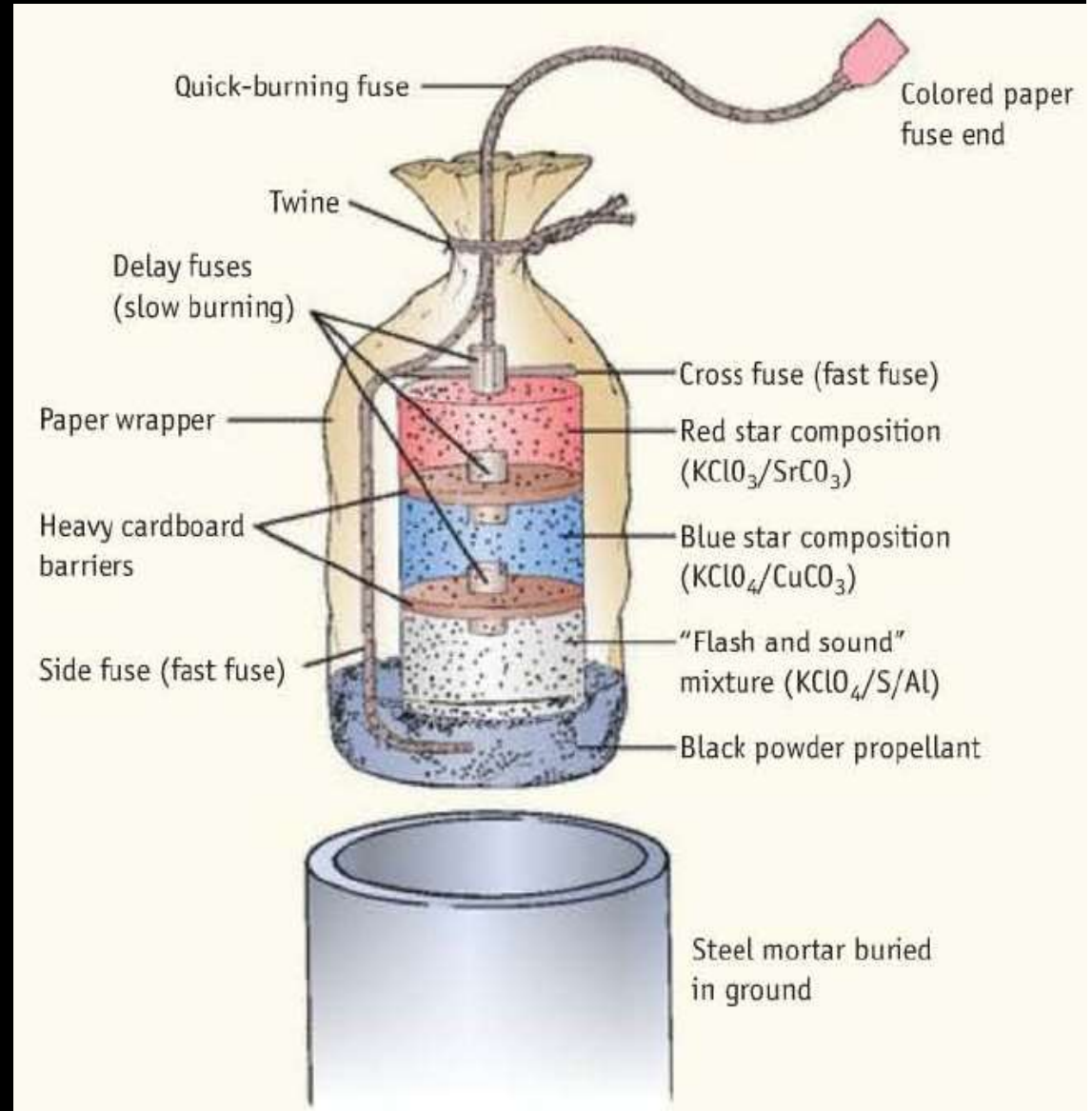
Emissão Atômica



NaCl

SrCl₂

H₃BO₃



Dualidade partícula-onda

O Einstein através do efeito fotoelétrico demonstrou que a luz que geralmente era considerada uma onda também podia exibir propriedades de uma partícula.

Louis Victor de Broglie questionou se a **matéria** também poderia **exibir propriedades de onda**?

E em 1925 propôs que um elemento livre de massa m movendo-se a uma velocidade v dever ter um comprimento de onda λ

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

“onda de matéria”

Revolução – ligou as propriedades do elétron com **partícula** (massa e velocidade) **às propriedades de onda** (comprimento de onda)



Louis Victor de Broglie
1892-1987



Clinton Joseph Davisson
1881 -1958
Lester Germer
1896 -1971

Massa de um electron
 $9,1093897 \times 10^{-31}$ Kg

As comprovações experimentais de Broglie foram obtidas em 1927 por C.J Davidson e L.H Germer

Descobriram que a **difração**, uma propriedade de ondas era igualmente possível em um **feixe de elétrons**

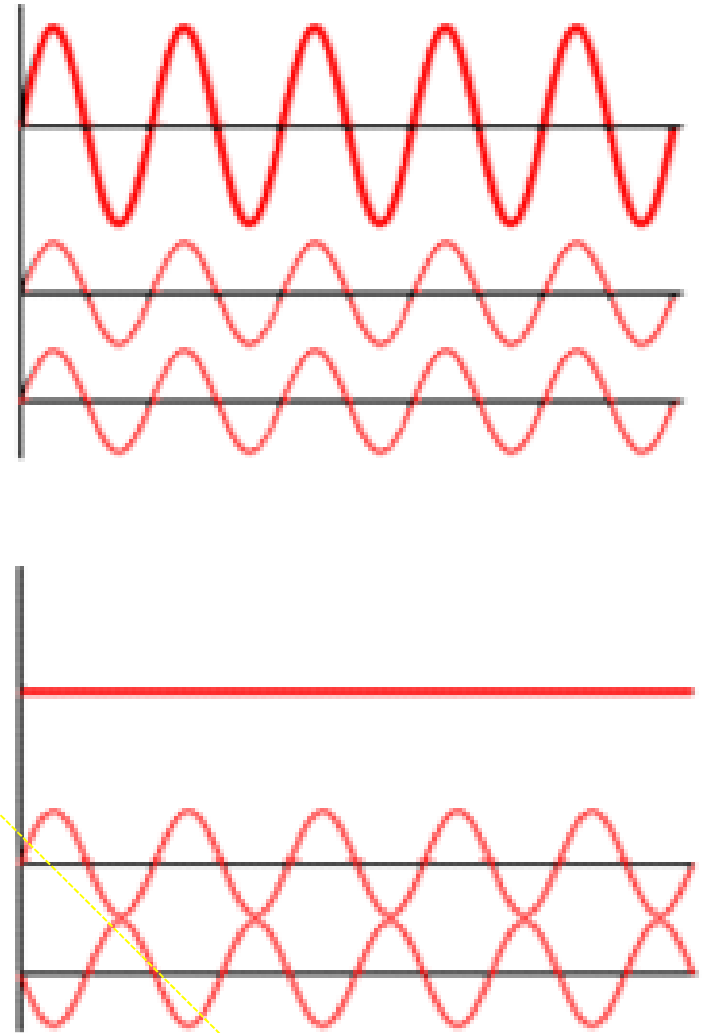
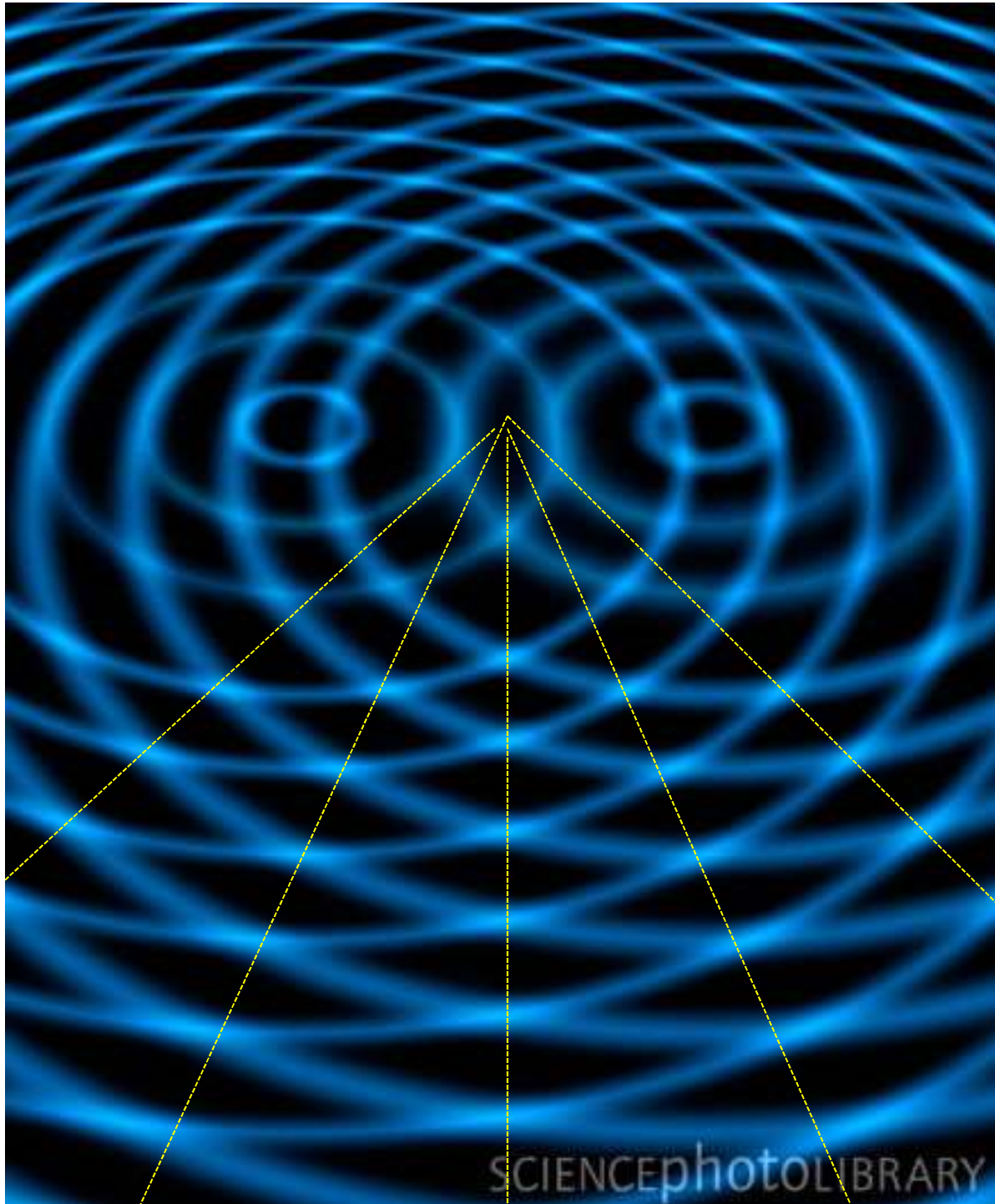
Tal como a radiação eletromagnética, a matéria apresenta igualmente uma dualidade onda-partícula.

Em um caso a ***matéria comporta-se com partículas em outros comportam-se como ondas***

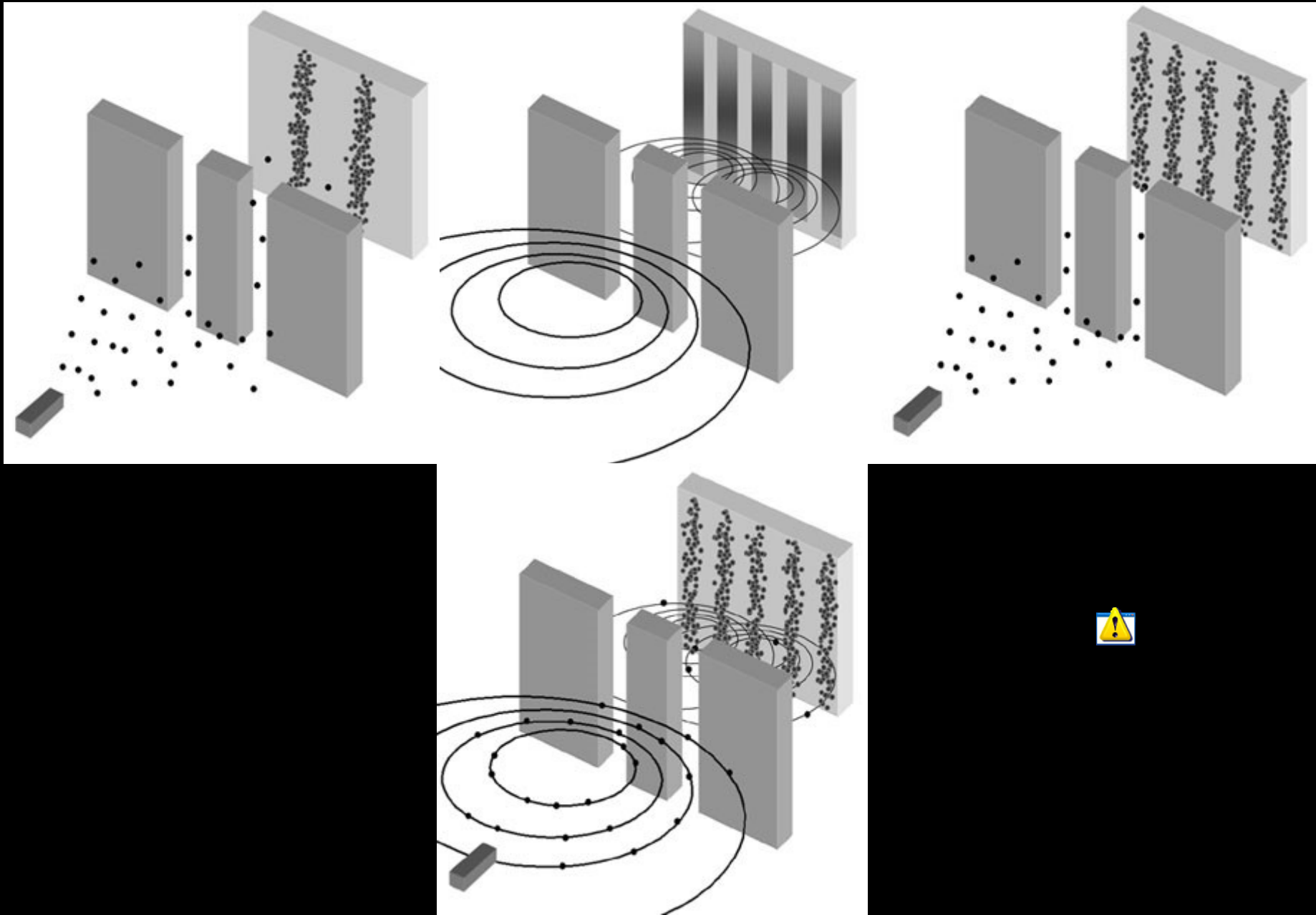
Difração
as ondas cooperar entre si.



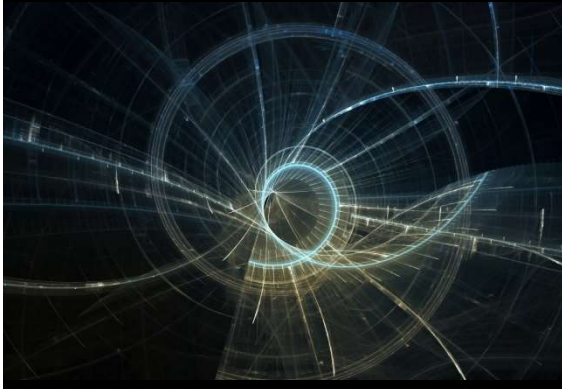
Interferência



As comprovações experimentais de Broglie



Mecânica quântica

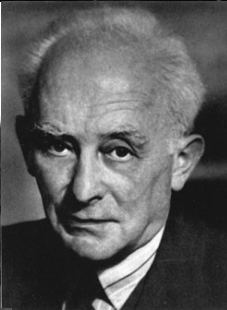
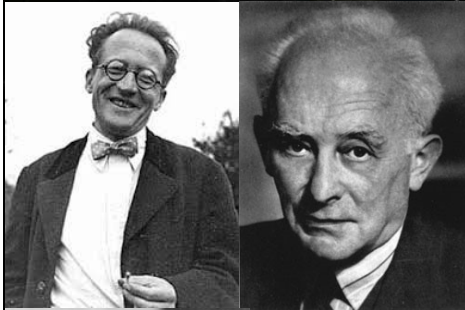


Como a dualidade partícula onda afeta o nosso modelo de arranjo dos elétrons nos átomos ?

Erwin Schrodinger (1887-1961)

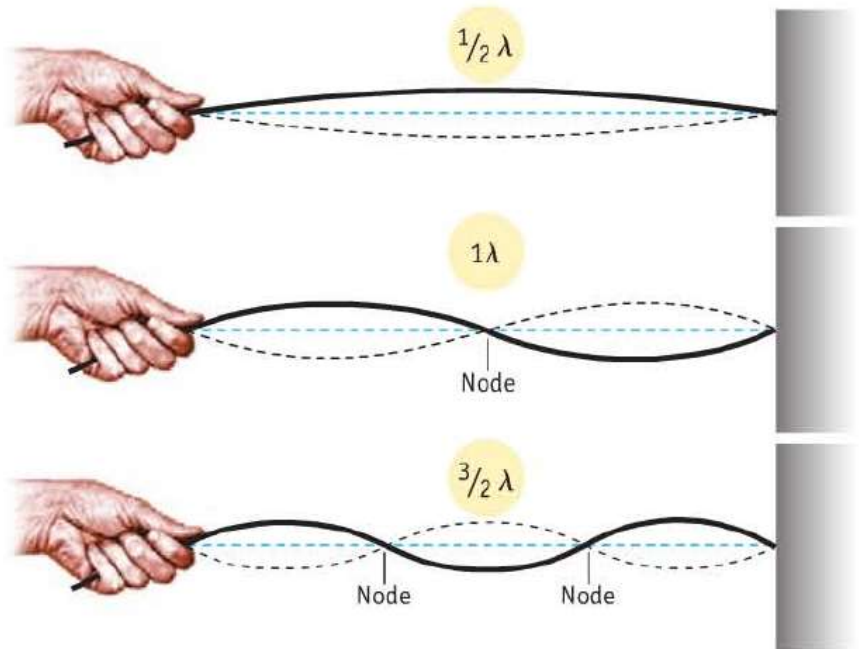
Max Born (1882-1970)

Werner Heisenberg (1901-1976)



Schrodinger - um elétron pode ser descrito com uma onda de matéria e desenvolveu um modelo para os elétrons nos átomos que veio a ser denominado de **mecânica quântica** ou **ondulatória**

O ideal para entender o comportamento ondulatório é pensar num sistema de cordas fixas e.g. como uma guitarra

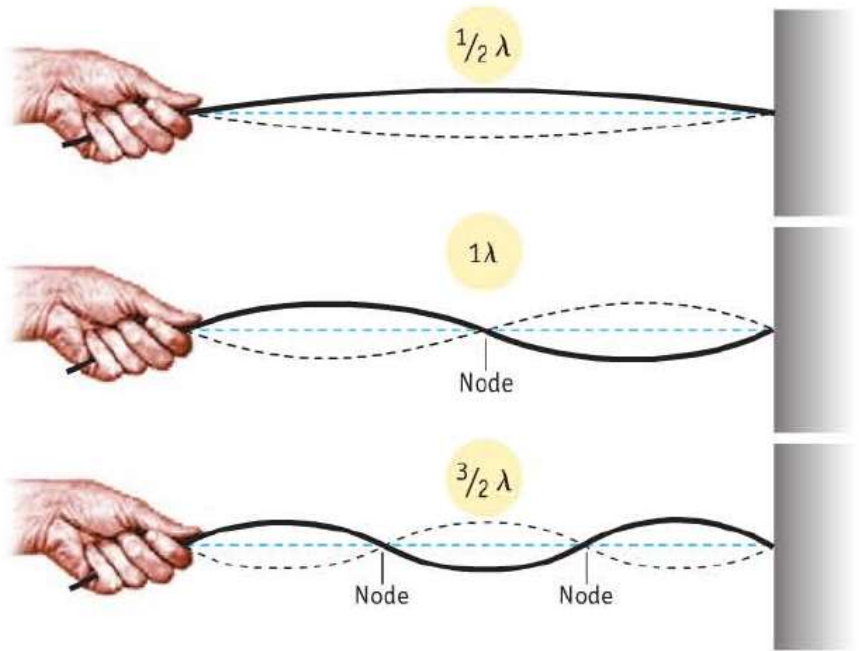


Corda estacionaria – onde apenas algumas vibrações são permitidas para essas ondas estacionarias. - **vibrações são quantizadas**

Schrodinger mostrou **apenas certas ondas de matéria são possíveis** para um elétron no átomo.

Para descrever essas ondas de matéria foram desenvolvidas **funções de onda** designada pela letra grega Psi (ψ).

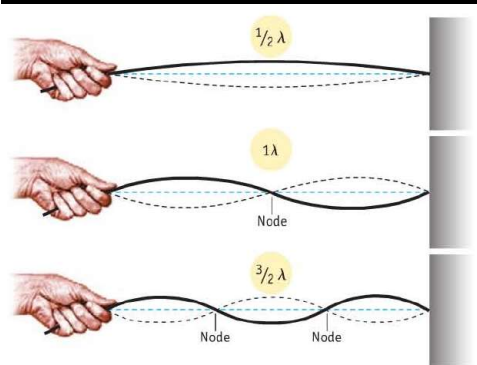
Somente **certas funções são consideráveis aceitáveis** e **cada uma esta associada a um valor de energia** - isto é, **a energia de um elétron no átomo é quantizada**



As soluções para equação de Schrodinger num espaço tridimensional dependem de:

3 números inteiros

n, l, m_l – números quânticos.



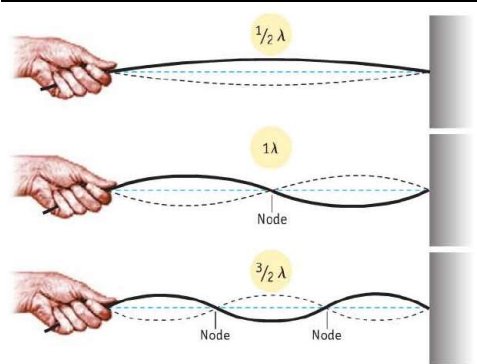
O próximo passo para entender o ponto de vista da mecânica quântica é explorar o **significado físico da onda psi (Ψ)**

Max Born

O valor da função de onda e um dado ponto do espaço (x,y,z) é a *amplitude* (altura) de onde de matéria do elétron. E esse valor tem uma magnitude e pode ter sinal positivo ou negativo

psi (Ψ) descreve todas as propriedades espaciais de uma partícula (frequência, comprimento de onda, amplitude)

A função de onde diz-nos que a partícula comporta-se como tivesse distribuída no espaço.



O quadrado do valor da função de onda Ψ^2 está relacionado com a probabilidade de encontrar um electron em uma pequena região do espaço – Ψ^2 – **densidade de probabilidade**

Pode-se calcular a massa de um objecto a partir da densidade e do volume e podemos calcular a probabilidade de encontrar o electrão a partir de um pequeno volume e Ψ^2 .

A probabilidade de encontrar um electron em um determinado volume é proporcional a Ψ^2

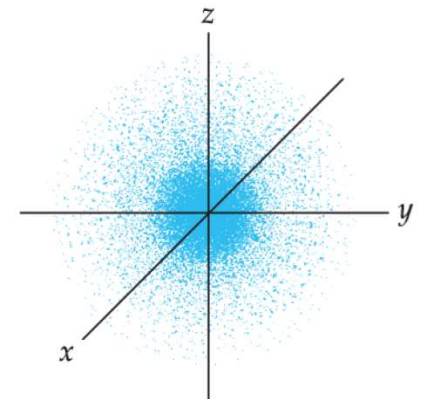
Quanto maior for Ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron

A probabilidade de encontrar um electron em um determinado volume é proporcional a ψ^2

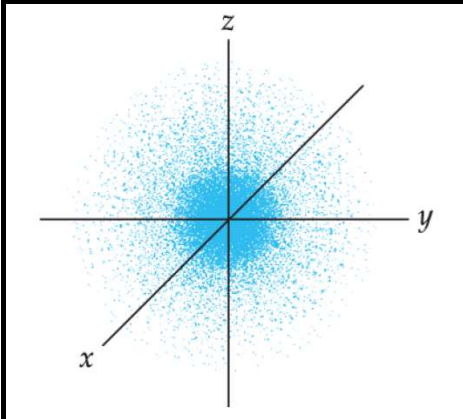
Quanto maior for ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron.

Heisenberg - que para um pequeno objecto como um átomo é impossível determinar com precisão a sua posição e a sua energia

Princípio da incerteza de Heisenberg



Números quânticos e orbitais



A **função de onda** para um elétron em um átomo descreve um **orbital atômico**.

Conhecemos a energia desse elétron mas apenas a região do espaço em que provavelmente esteja localizado.

Quando um elétron tem uma **função de onda particular** diz-se que “ocupa” um determinado orbital.

Cada orbital é descrito por 3 números quânticos N, l, m_l

Exercícios 1 – Equação de Plank, átomo de Borh, mecânica quântica

1. A luz verde tem um comprimento de onda $5,0 \times 10^2$ nm. Qual a energia em J de um fóton de luz verde? Qual a energia em J de 1 mol de fótons de luz verde?
2. A linha mais proeminente do espectro de emissão do mercúrio está a 396,15 nm. Qual é a frequência dessa linha. Calcule a energia de um fóton com esse comprimento de onda? de uma mole desses mesmos fotons?
3. A linha mais proeminente no espectro do mercúrio é encontrada em 253,632 nm. Outras linhas são situadas em 365,015 nm, 404,656 nm, 435,833 nm e 1013,975 nm.
 - a. Qual dessas linhas representa a luz mais energética
 - b. Qual a frequência da linha mais proeminente e qual a energia de um foton dessa mesma linha.
4. Calcule o comprimento de onda, frequência de onda e a frequência da luz emitida quando um electron muda do $n=3$ para $n=1$ no átomo de Hidrogénio. Em que região do espectro essa radiação está localizada.
5. Calcule o comprimento de onda em nm associado com uma bola de golf de 46 g que se move a uma velocidade de 30 m/s. A que velocidade deveria viajar a bola para que o comprimento de onda seja $5,6 \times 10^{-3}$ nm?