



Conceitos básicos em química

Aula 1

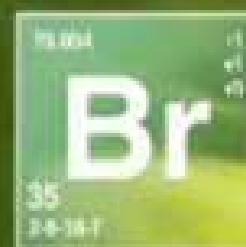


O que é a química?

É Tudo!!!



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



reaking



d

Visão de hoje...



O mundo vive de química...

A comprehensive overview of chemical-free consumer products

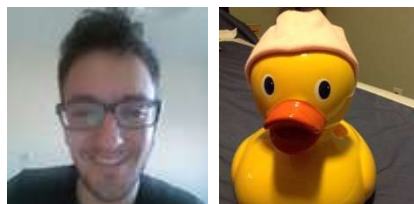
Alexander F. G. Goldberg¹ and CJ Chemjobber^{2*}

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 N/S, Shel J, WY 80441, USA, *e-mail: alexgold@weizmann.ac.il

References

1. 'Chemical Free' cosmetics from 1921 up to the 1950s
2. 'Chemical Free' detergents and household cleaners from 1921 up to the 1950s
3. 'Chemical Free' beverages from 1921 up to the 1950s
4. 'Chemical Free' food items from 1921 up to the 1950s
5. 'Chemical Free' supplements from 1921 up to the 1950s

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 cchemjobber@weizmann.ac.il.

Competing financial interests

The authors declare no competing financial interests. Should you have any queries, please contact the corresponding author for more information.



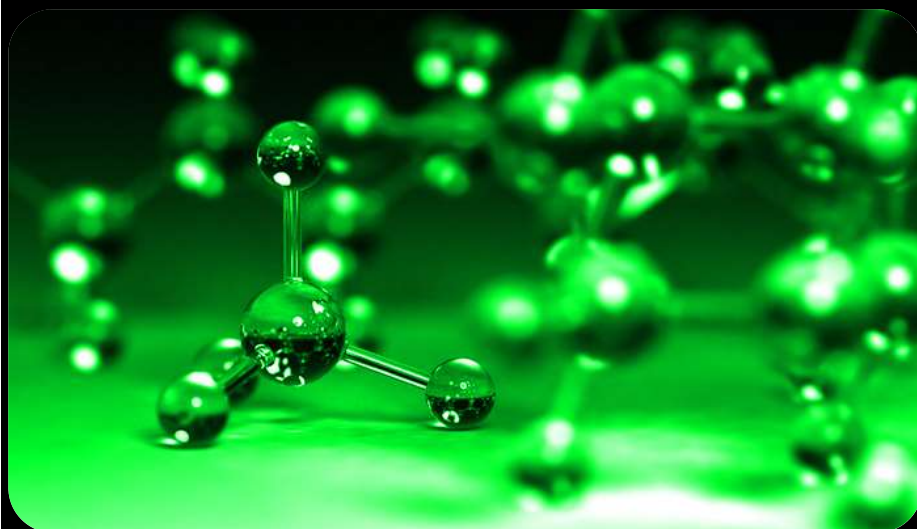
Surge anos 90s

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...



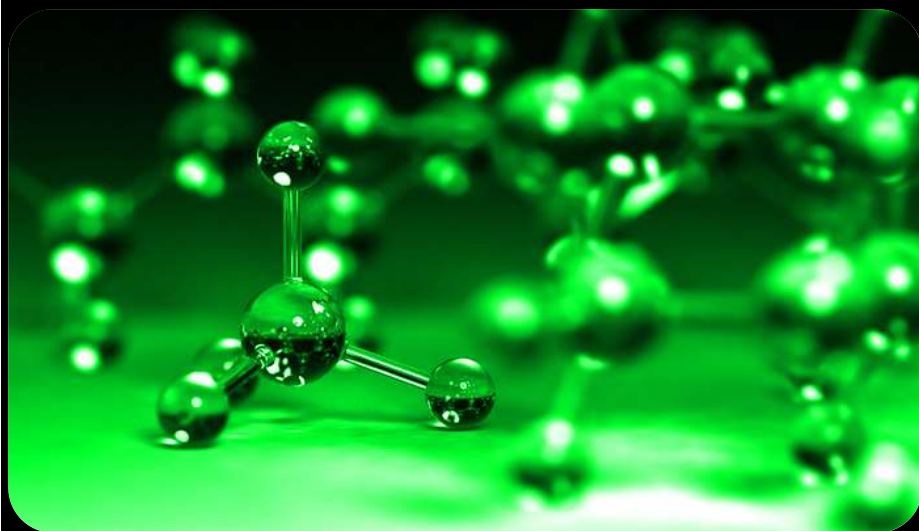
Química Verde



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)

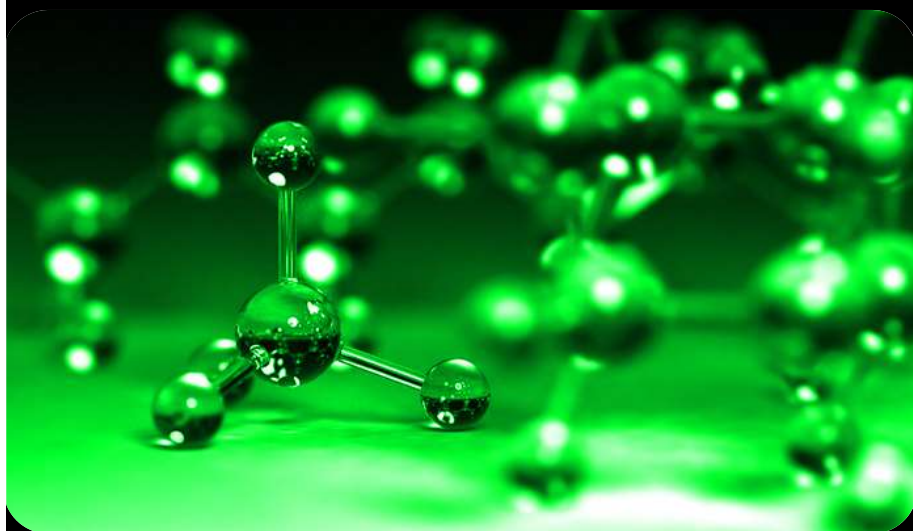


O sucesso da química verde não resulta da sustentabilidade...

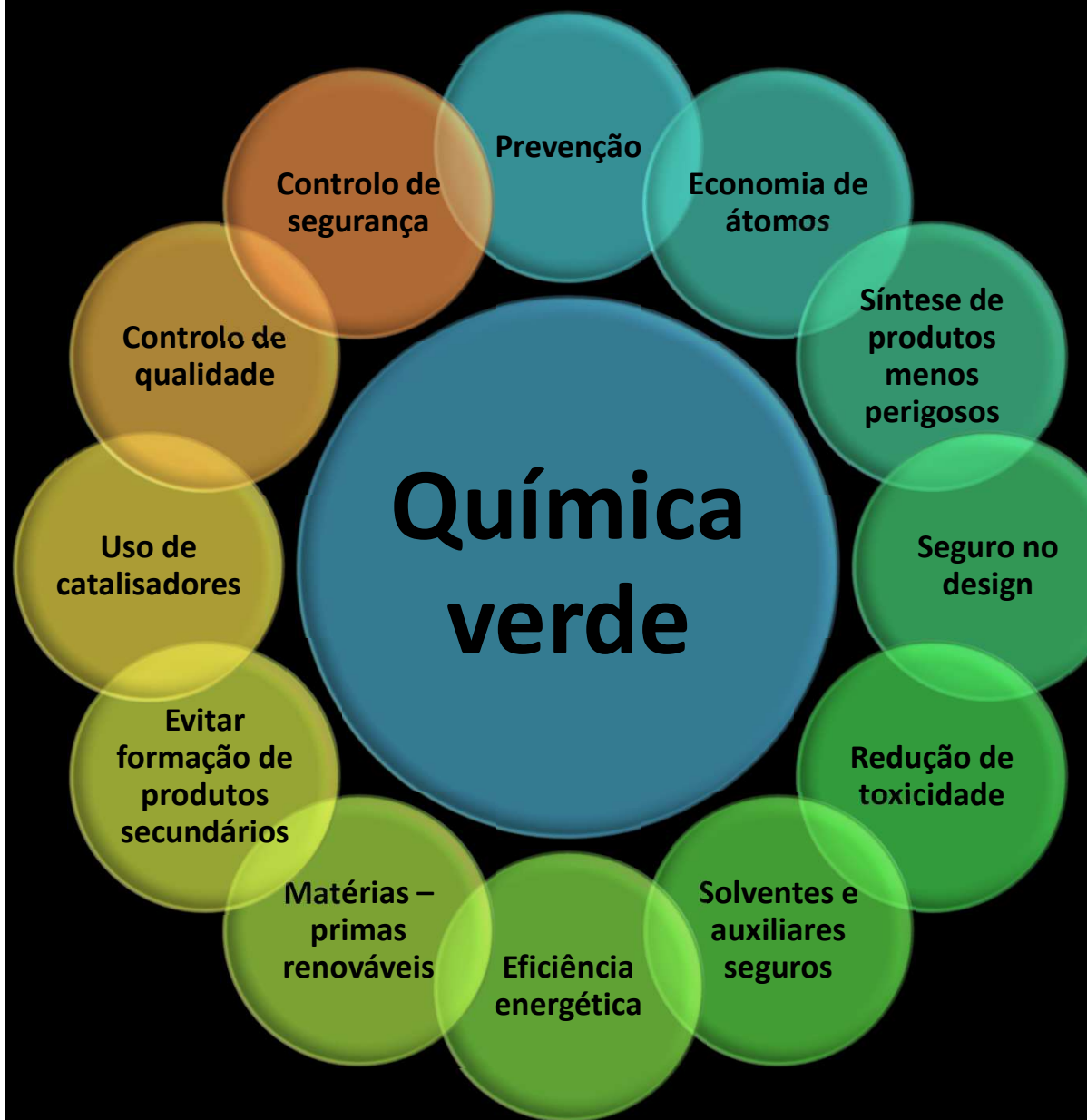
A sustentabilidade é uma das suas consequências...

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?

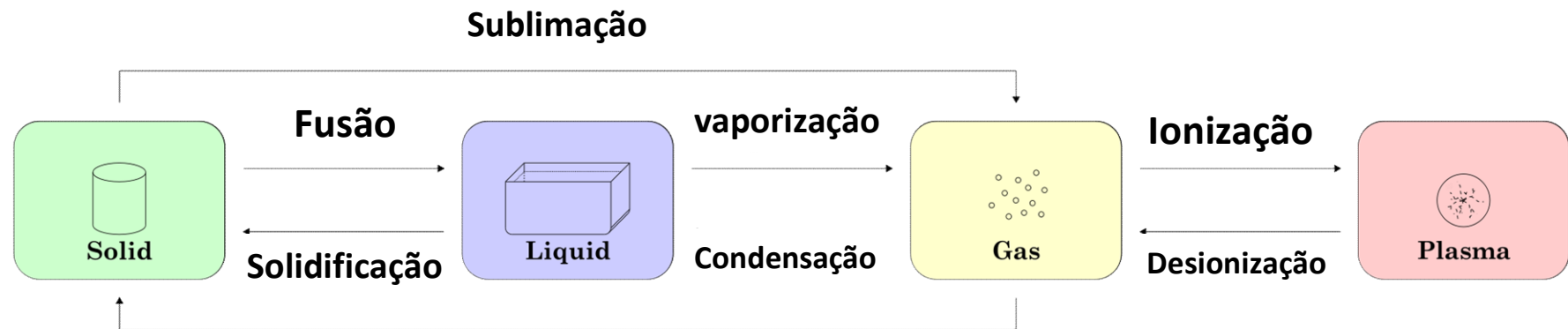
$$\text{Fator E} = \text{Quantidade Resíduo (kg)}/\text{Produto (kg)}$$

	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

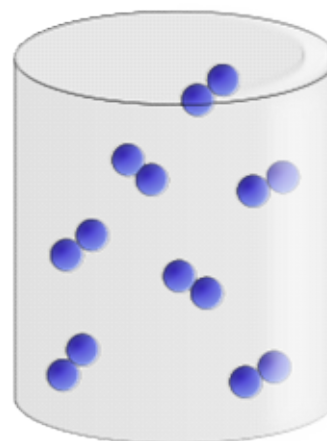
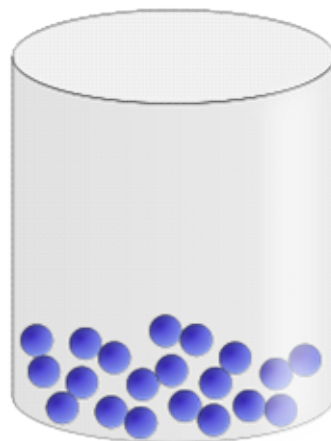
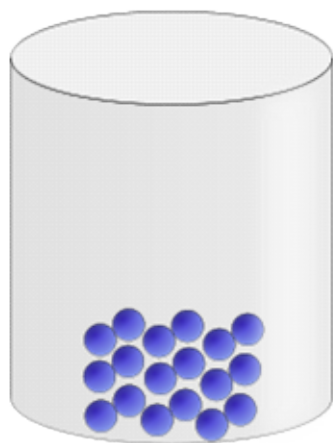
Estados da Matéria



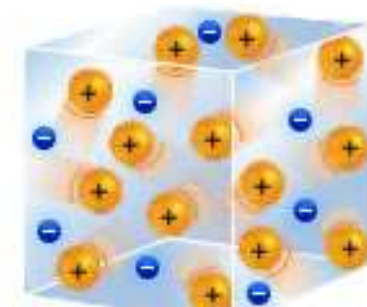
Estados da Matéria



Ressublimação



Íons 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



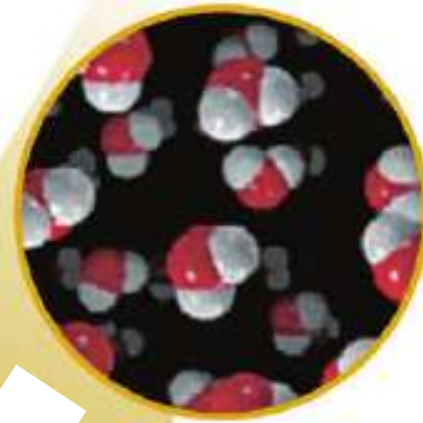
Photos: Charles D. Winters

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

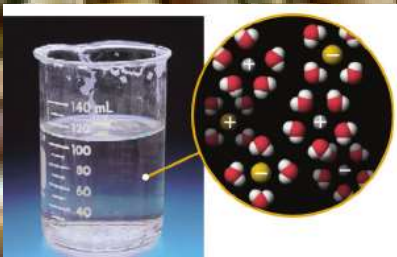
elementos combinados em
razões fixas

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)

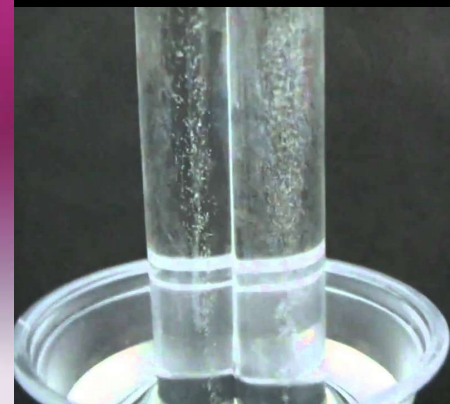


Alumínio (Al)



Oxigénio (O₂)

Hidrogénio (H₂)



Tinta de antimónio e chumbo



Babilónia



Nebuchadnezzar 605-562 AC



Newton 1643-1727

					18 VIII A 8A
					2 He Helium 4.003
5	6	7	8	9	10
B Boron 10.811	C Carbon 12.011	N Nitrogen 14.007	O Oxygen 15.999	F Fluorine 18.998	Ne Neon 20.180
13	14	15	16	17	18
III A 3A	IV A 4A	V A 5A	VIA 6A	VII A 7A	VIII A 8A
Al Aluminum 26.982	Si Silicon 28.086	P Phosphorus 30.974	S Sulfur 32.066	Cl Chlorine 35.453	Ar Argon 39.948
31	32	33	34	35	36
Ga Gallium 69.732	Ge Germanium 72.61	As Arsenic 74.922	Se Selenium 78.09	Br Bromine 79.904	Kr Krypton 84.80
49	50	51	52	53	54
In Indium 114.818	Sn Tin 118.71	Sb Antimony 121.760	Te Tellurium 127.6	I Iodine 126.904	Xe Xenon 131.29
81	82	83	84	85	86
Tl Thallium 204.383	Pb Lead 207.2	Bi Bismuth 208.980	Po Polonium [208.982]	At Astatine 209.987	Rn Radon 222.018
113	114	115	116	117	118
Uut Ununtrium unknown	Flerovium [289]	Ununpentium unknown	Livermorium [298]	Unseptium unknown	Ununoctium unknown

Obcecado pelas propriedades sexuais do antimónio.

Como o antimónio 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)

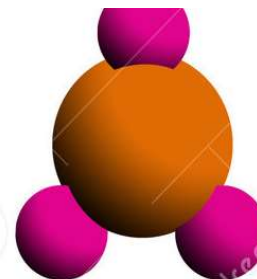
Juntando elementos temos...

Moléculas

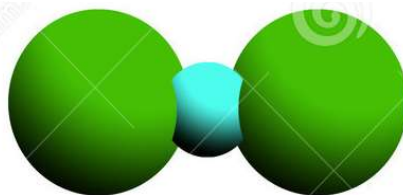
Água



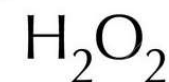
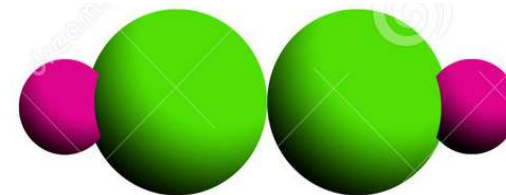
Amônia



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

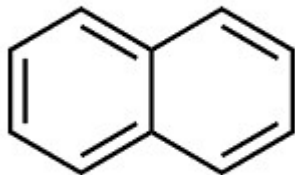
Temperatura influencia as propriedades físicas...



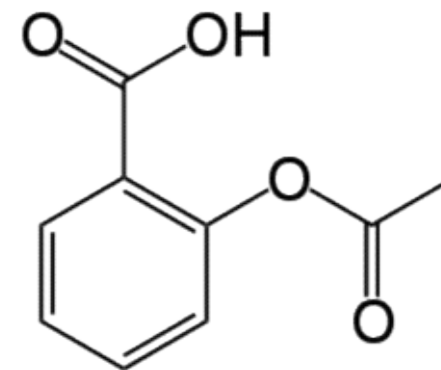
Mudanças Físico-Químicas



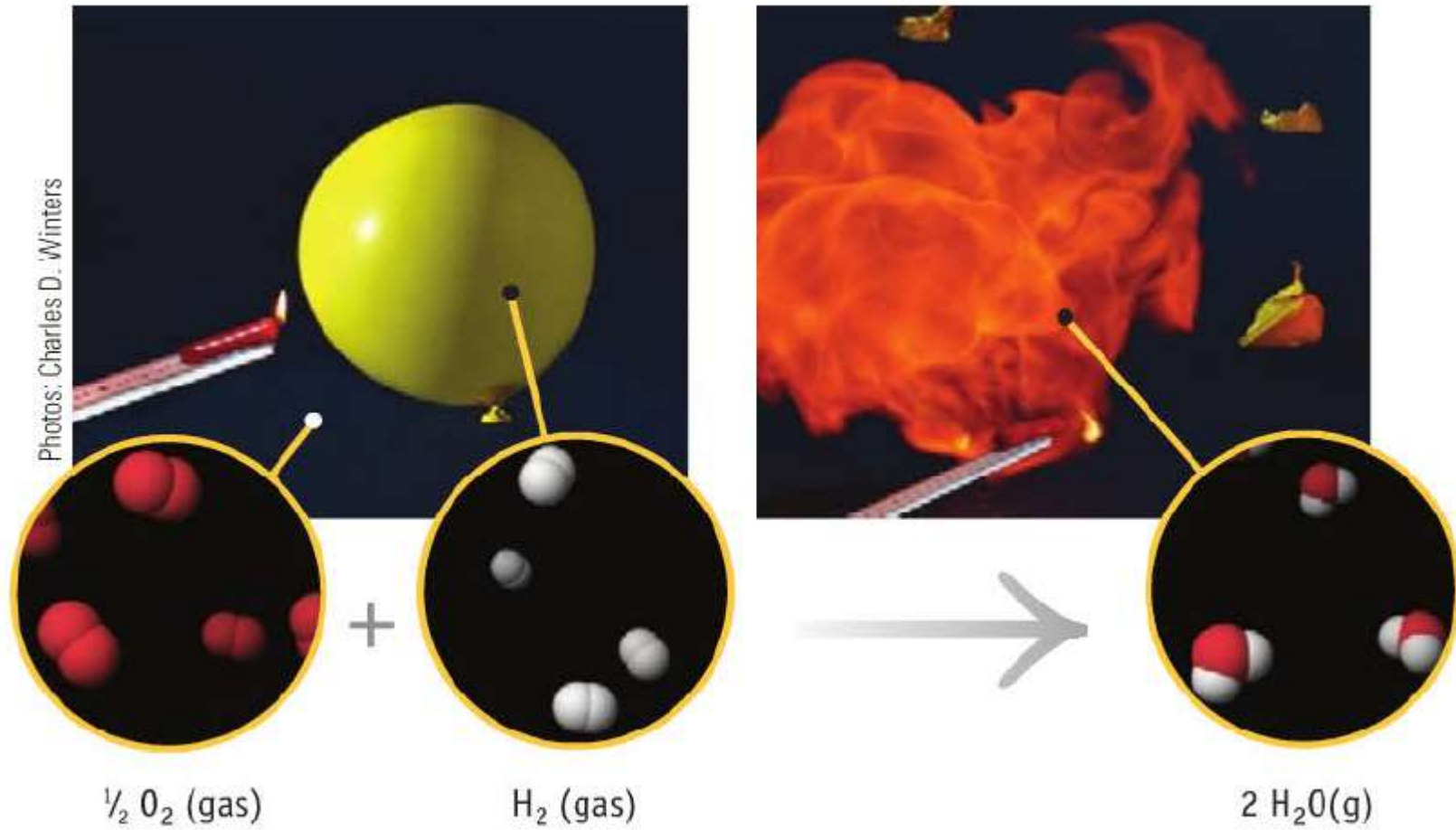
Naftaleno é uma substancia branca e sólida a 25 °C. Tem um ponto de ebulição a 80.2 °C

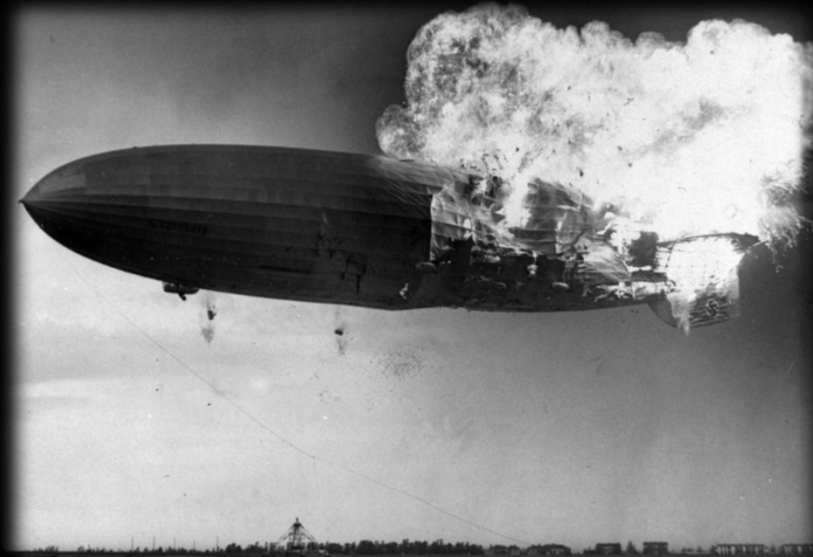


Aspirina é uma substancia branca e sólida 25 °C. Tem um ponto de ebulição a 135° C



Mudança Química



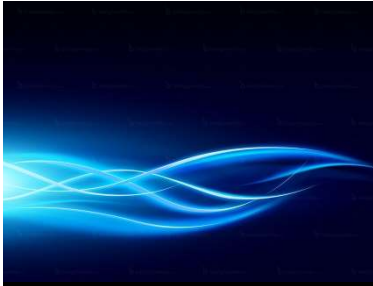


Hindenburg, construído pela Luftschiffbau-Zeppelin GmbH, na Alemanha.

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



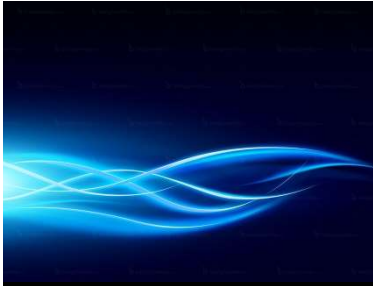


Energia princípios básicos

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**.

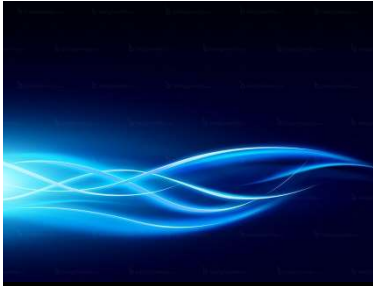
Energia cinética esta associada:

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

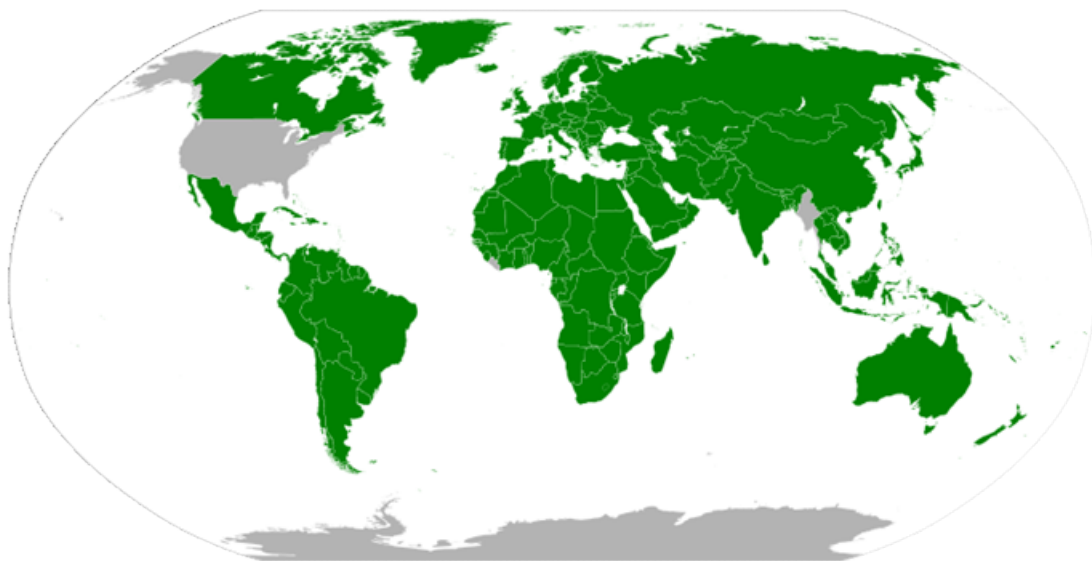
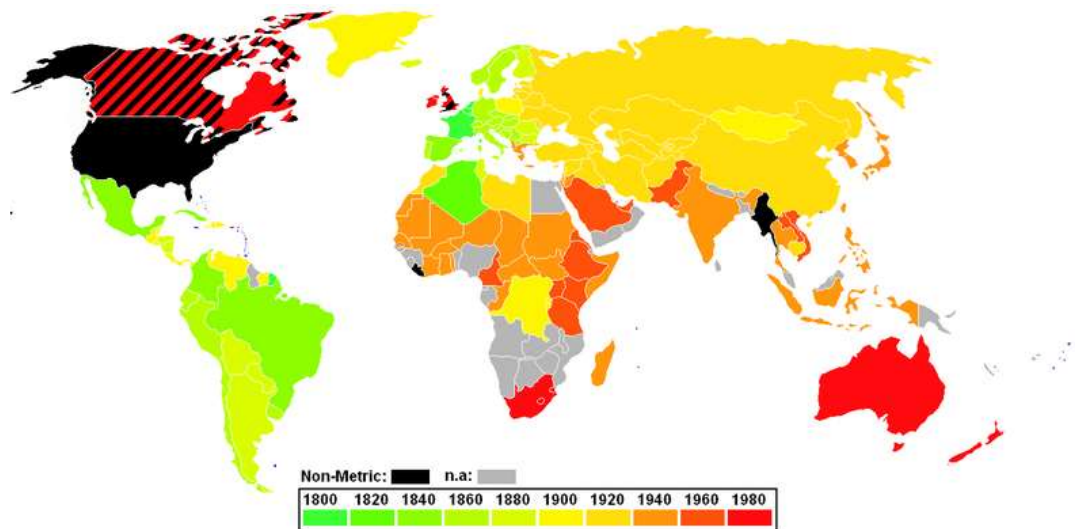


Energia electrostática



Energia térmica
e radiante

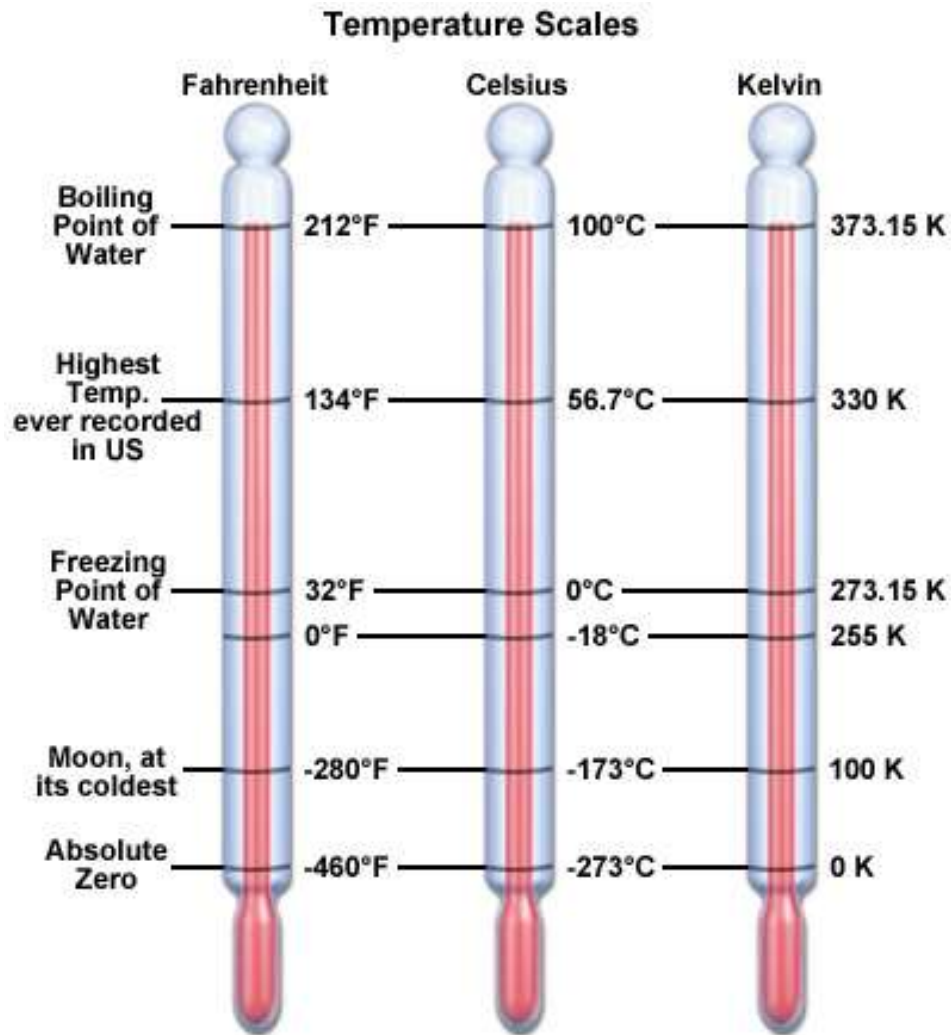
Unidades



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.

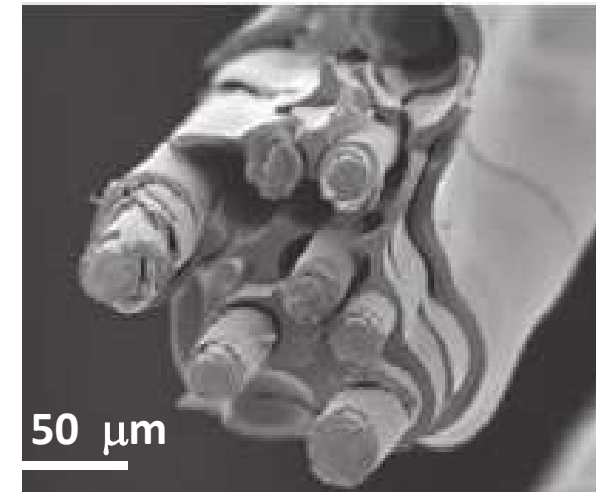
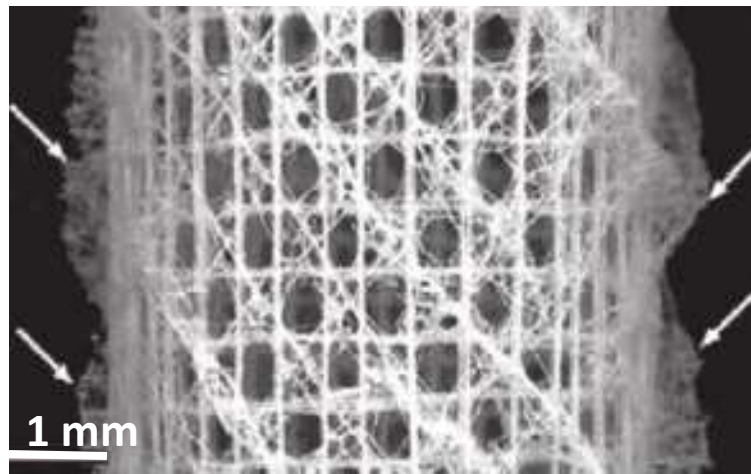
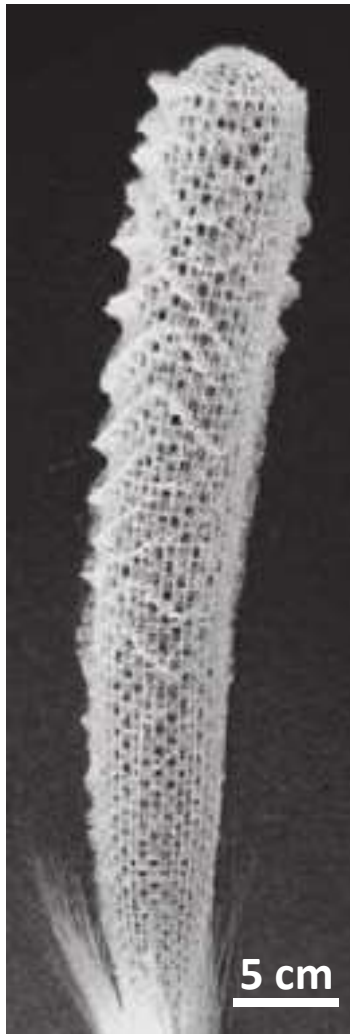
Comprimento volume e massa



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

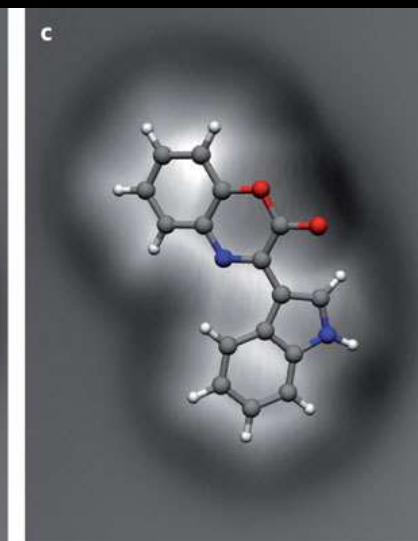
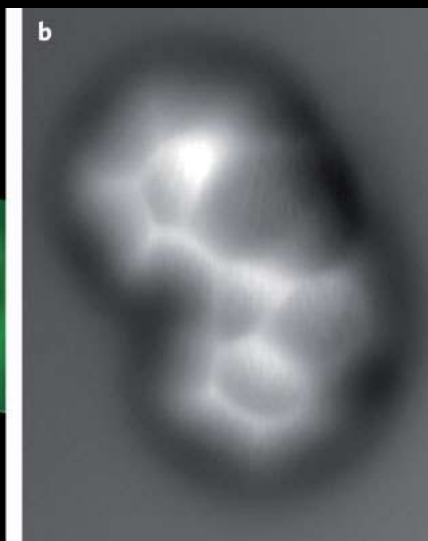
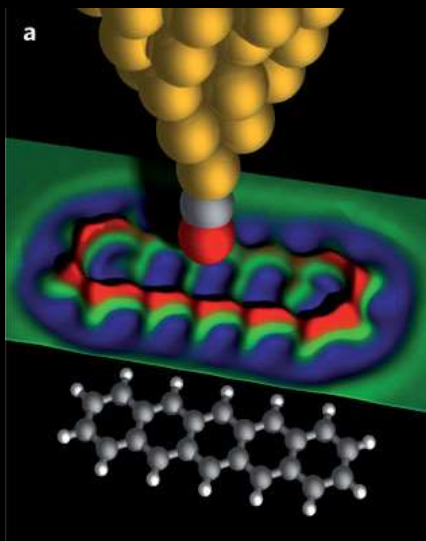
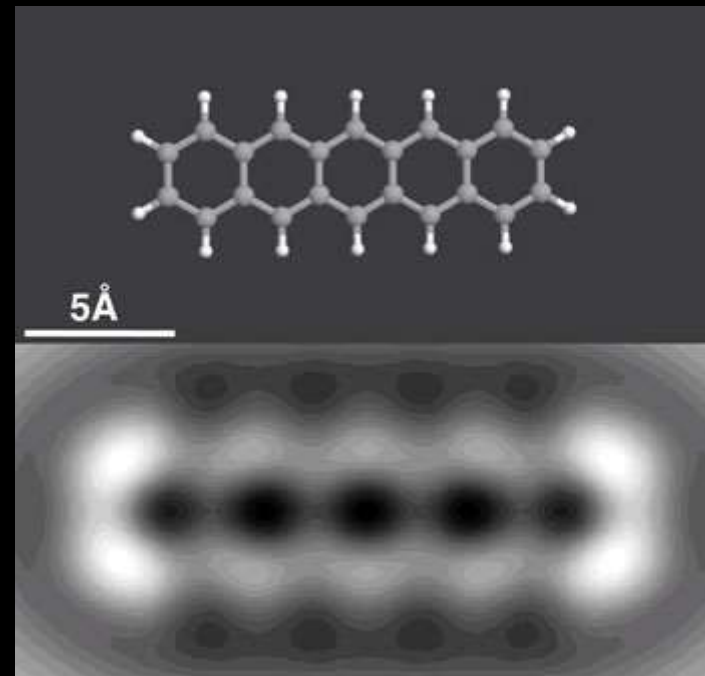
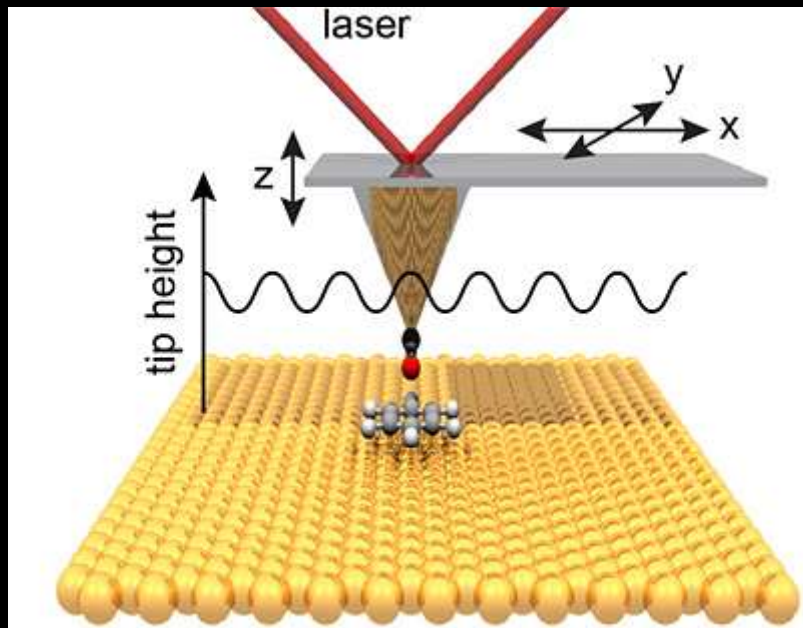


Fragmento mostrando a estrutura de rede da esponja

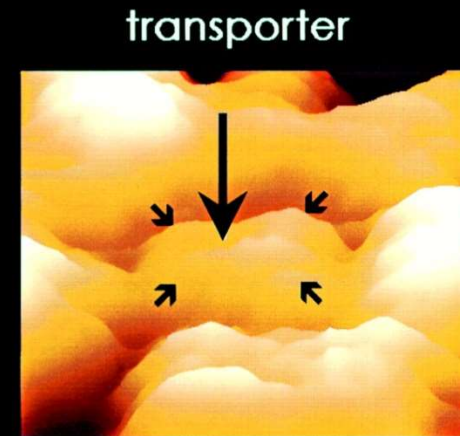
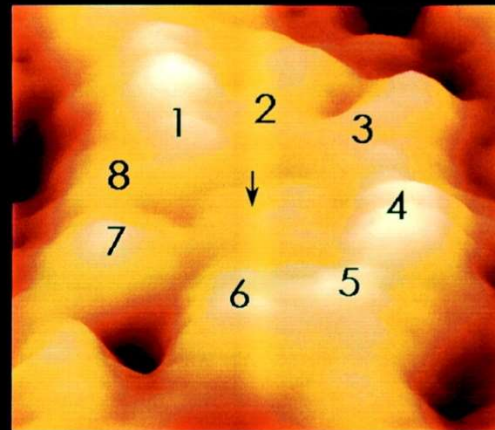
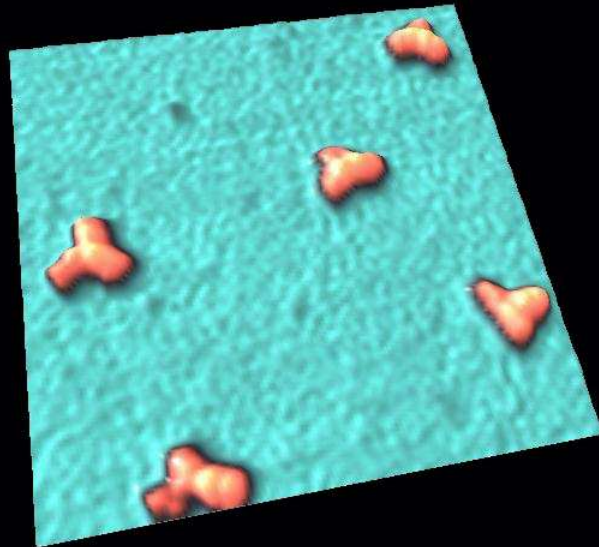
Ampliação mostrando a estrutura do nanocomposito

Exosqueleto de uma esponja do mar Euplectelia

Microscopia de Força atômica

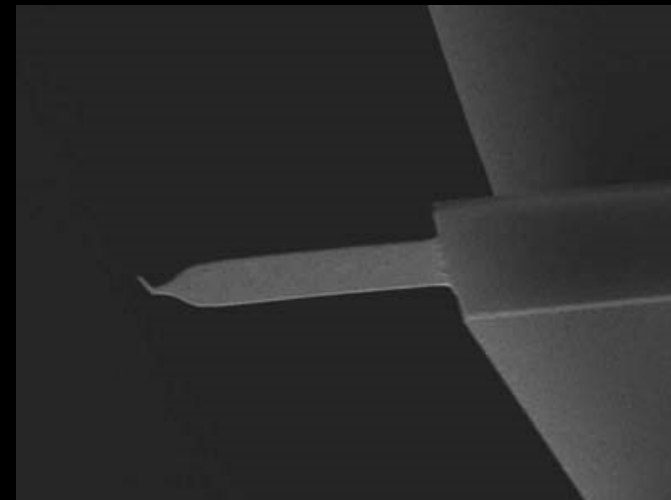
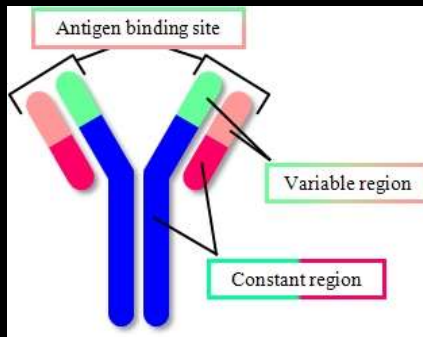


Nuclear pore complex



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

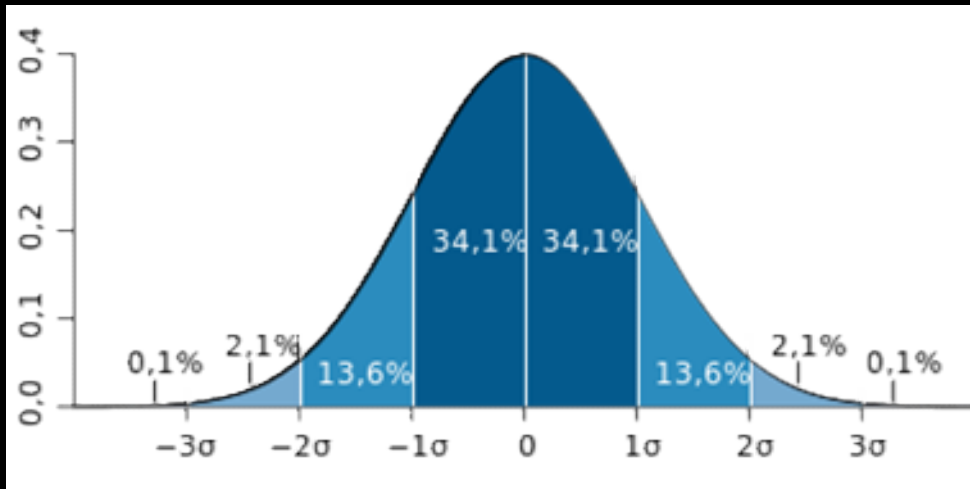
“O desvio de uma série de medições é igual á raiz quadrada da soma dos quadrados dos desvios de cada medição em relação á média dividida pelo número de medições menos 1 “

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

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

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

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

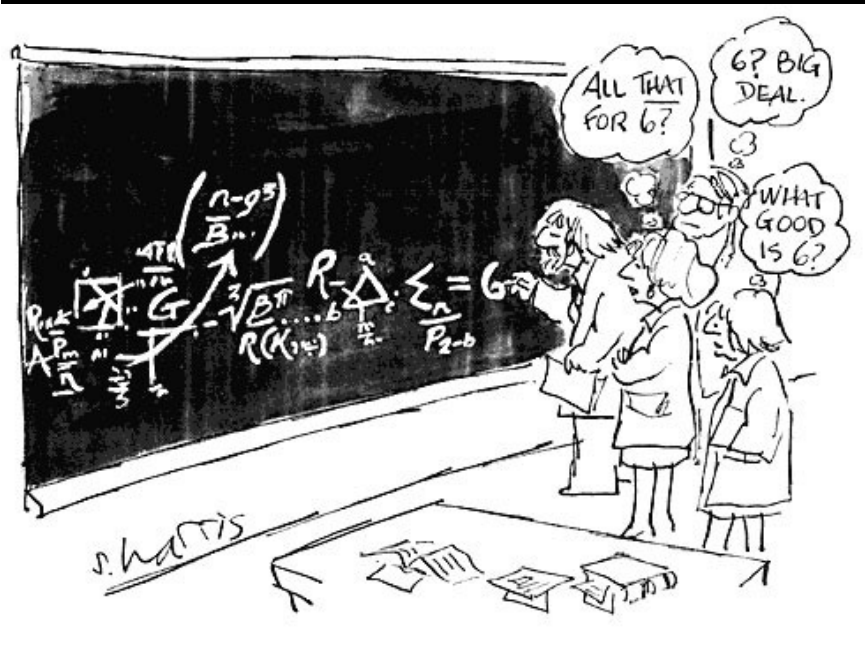
Determinação	Massa medida (g)
1	9,990
2	9,993
3	9,973
4	9,980
5	9,982

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

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

$$x_i - \bar{x}$$

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



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

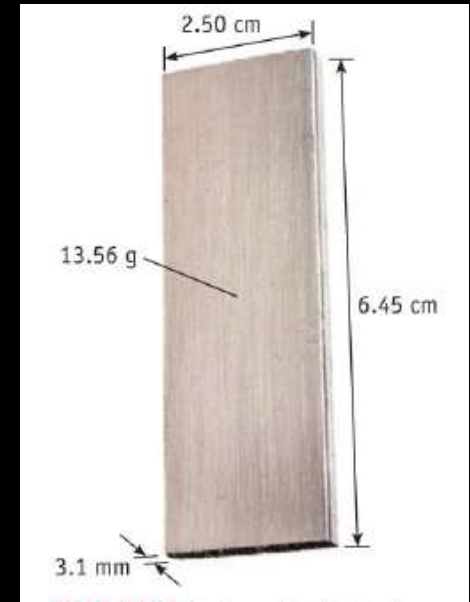


**KEEP
CALM
&
FOLLOW
THE RULES**

- 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



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

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



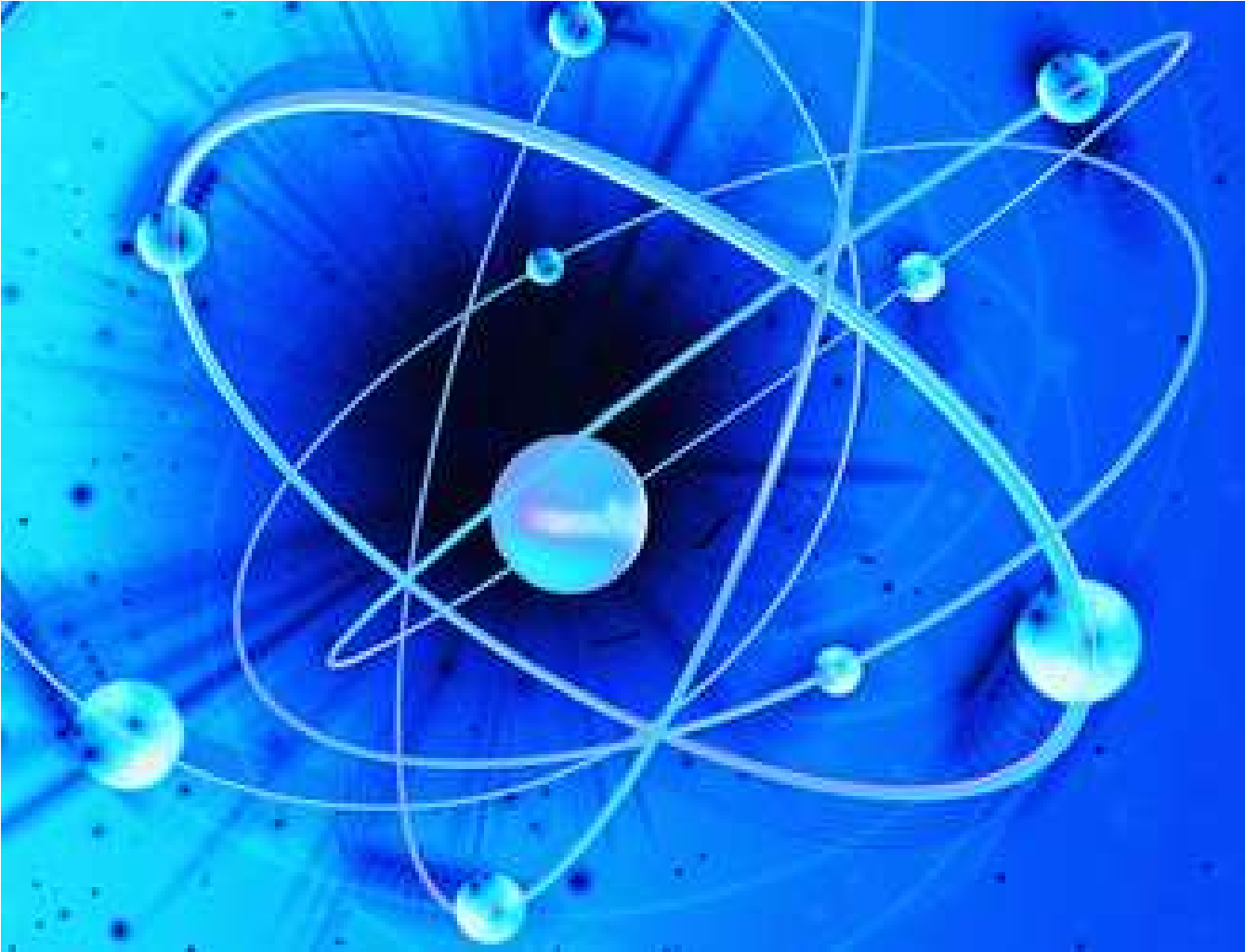
Conversão de unidades

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

Número e
unidade
original

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

Novo
número nova
unidade

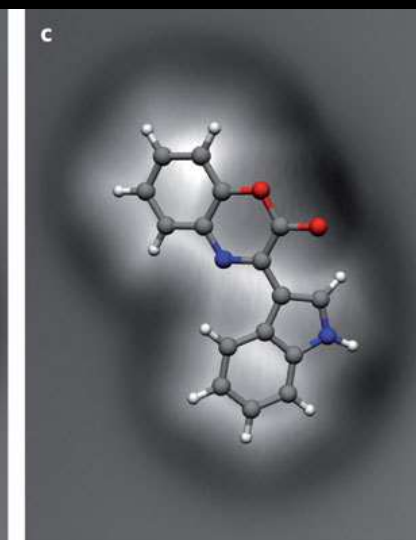
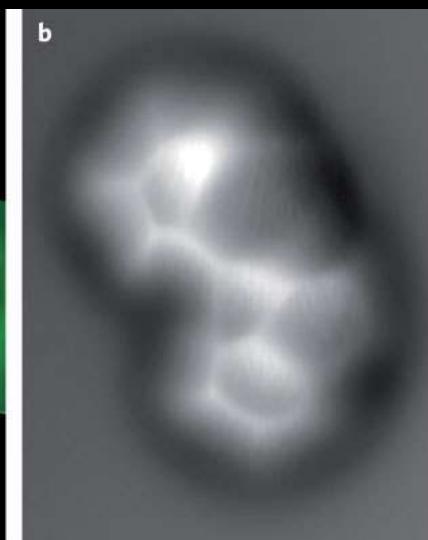
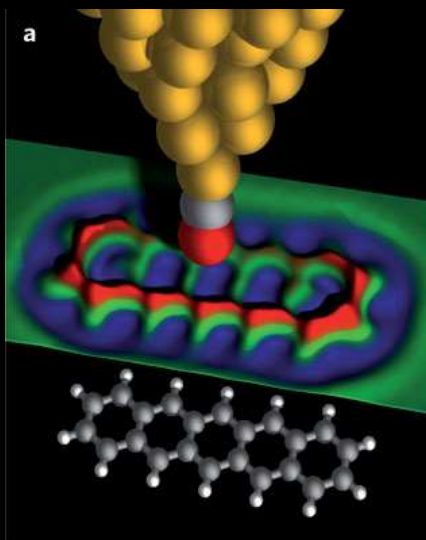
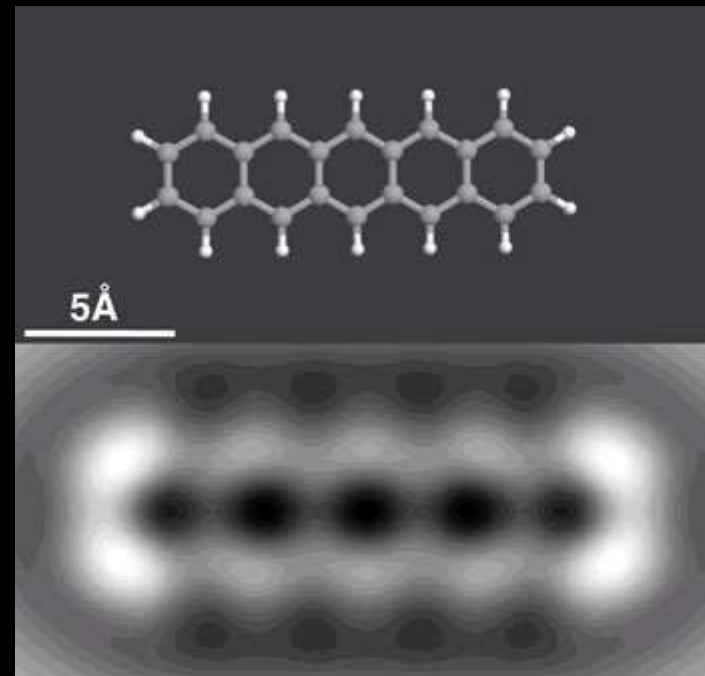
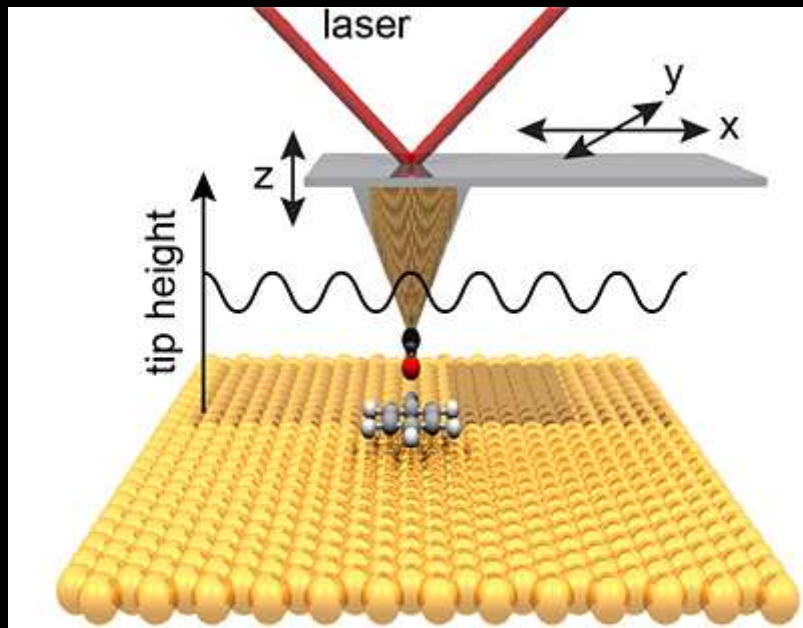


**Átomos,
moléculas
e íons**

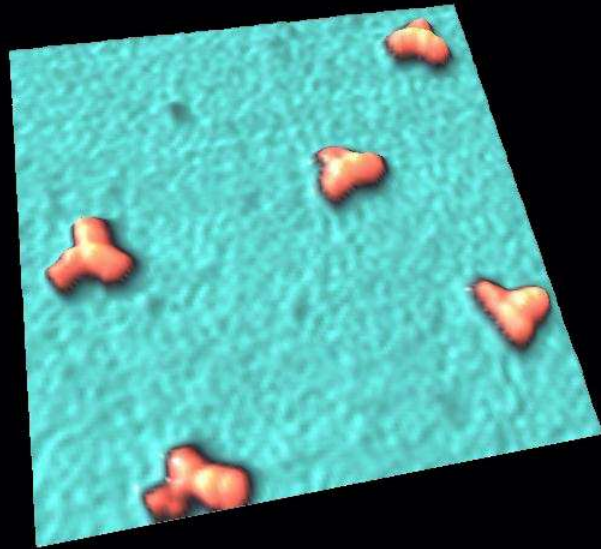
Aula 2



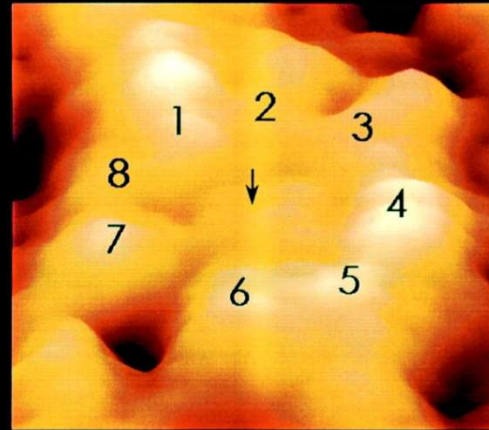
Microscopia de Força atômica



Microscopia de Força atómica

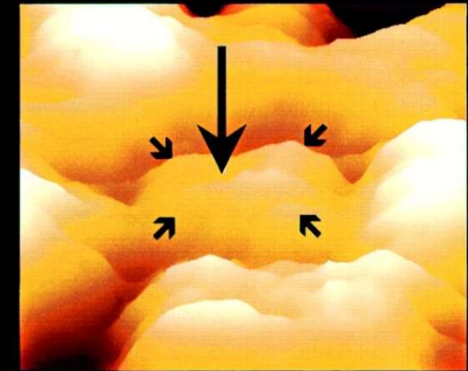


Nuclear pore complex

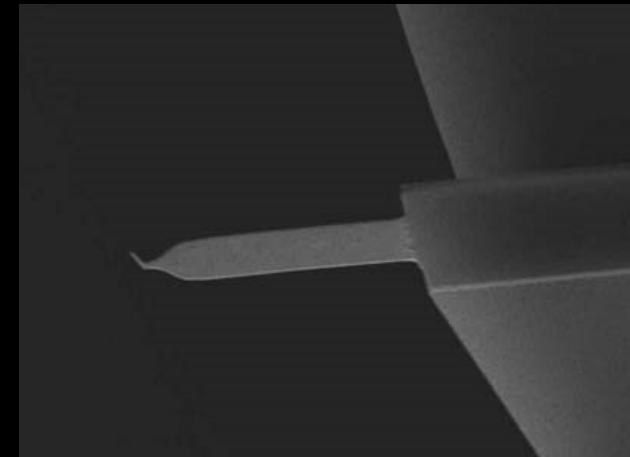
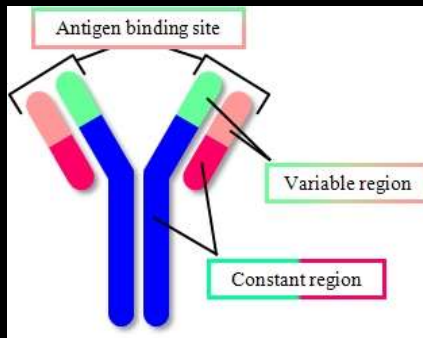


50 nm

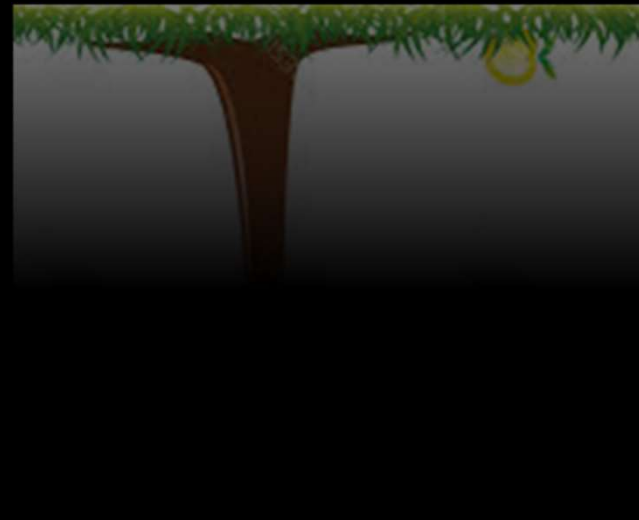
transporter



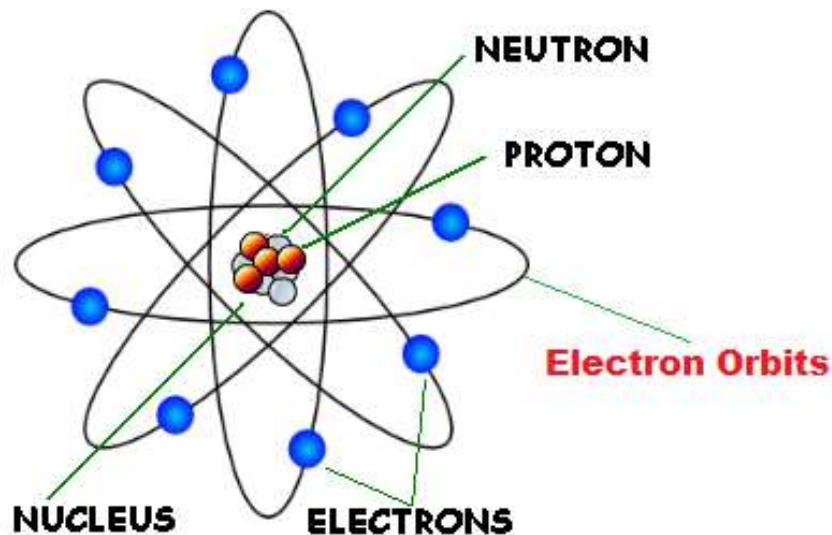
25 nm



modelo



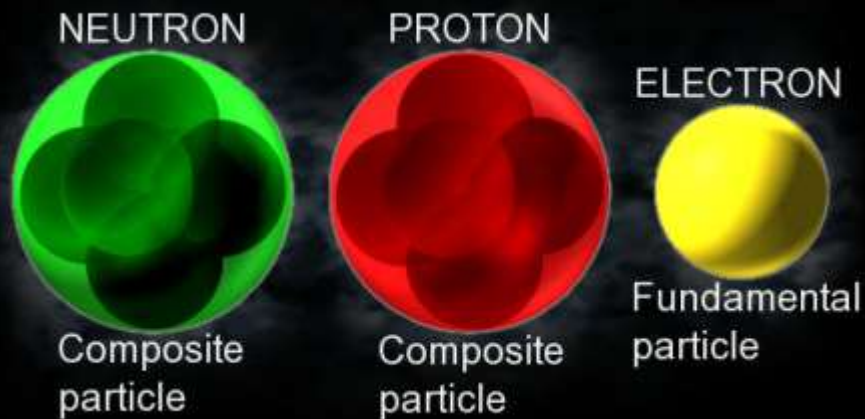
Estrutura atômica



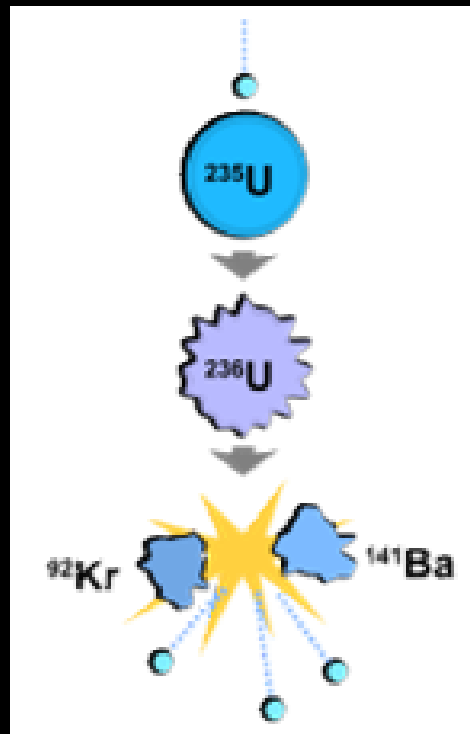
Em 1900 através dos trabalhos de Joseph John Thompson e Ernest Rutherford foi estabelecido o modelo de atômico

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

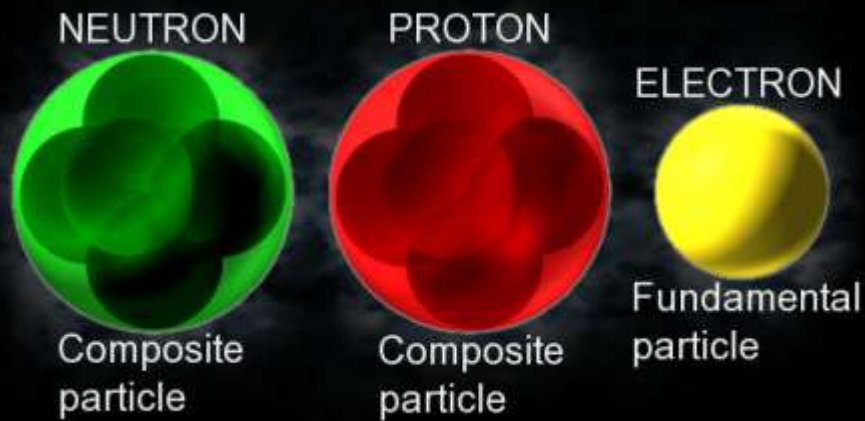
Em um átomo eletricamente neutro, o numero de elétrons é igual ao numero de prótons



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.



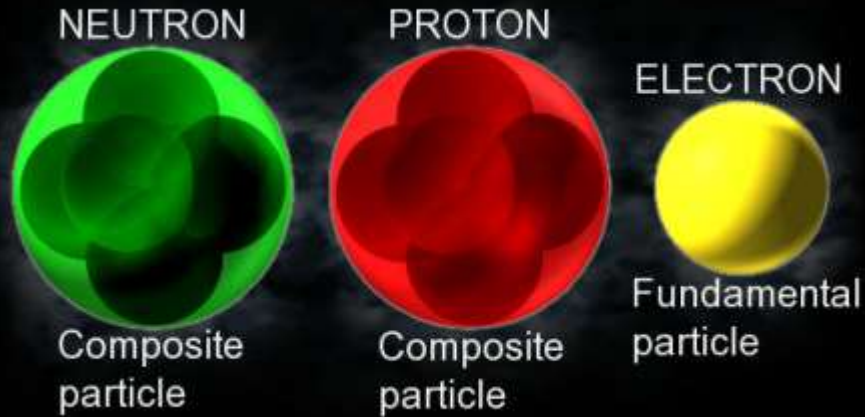
O **neutron** é essencial para a produção de energia nuclear dado que está envolvido nas reacções em cadeia.



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

13	14	15	16	17	18
					VIIIA
					2
					He

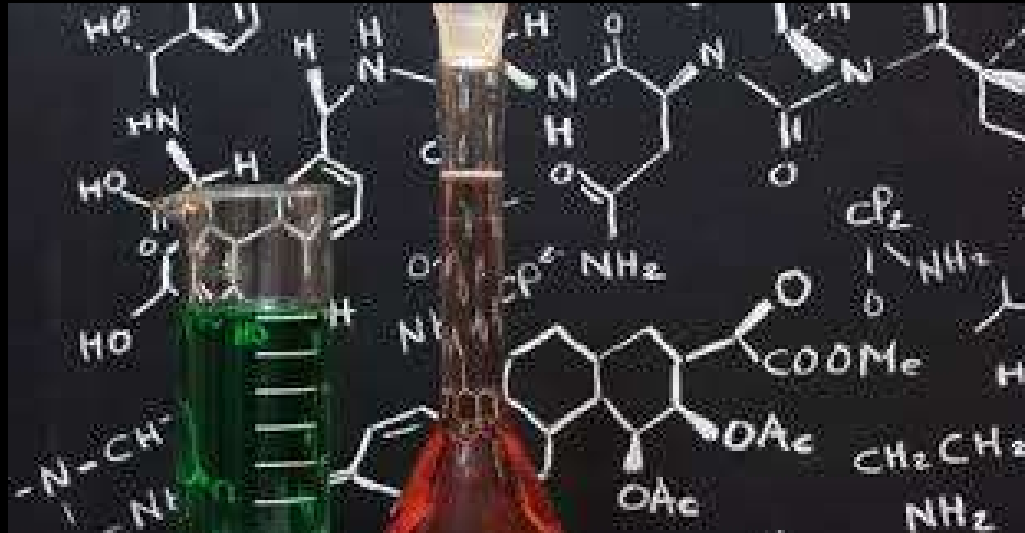
O número de prótons do núcleo é dado por **Z**

10	12	14	16	18	20
Boro	Carbono	Nitrogénio	Oxigénio	Fluoreto	Neón
B	C	N	O	F	Ne

Unidade de massa atômica

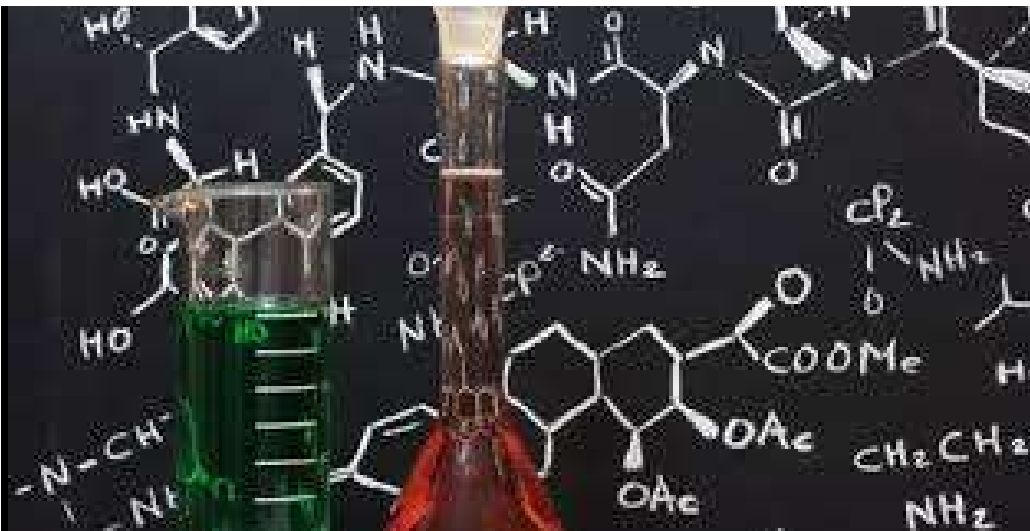


Lavosier (1743-1794)



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

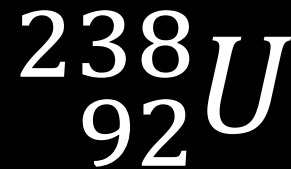


A Protons + neutrons

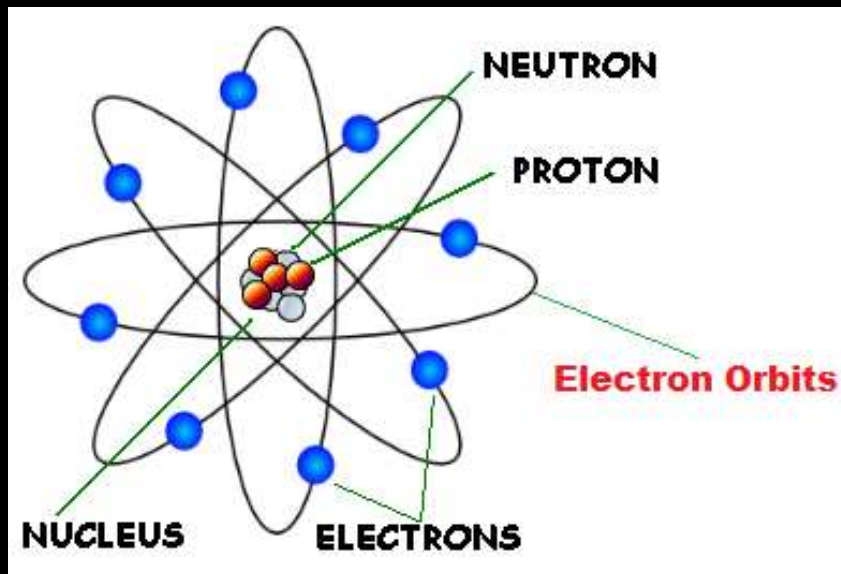
Número de massa

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

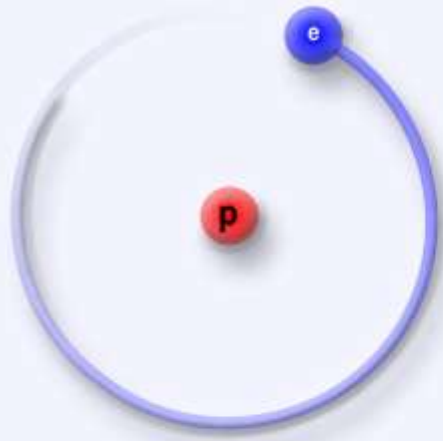
Os átomos que possuem o mesmo número atômico e números e massa diferentes denominam-se isótopos

Todos os átomos tem o mesmo número de protons.

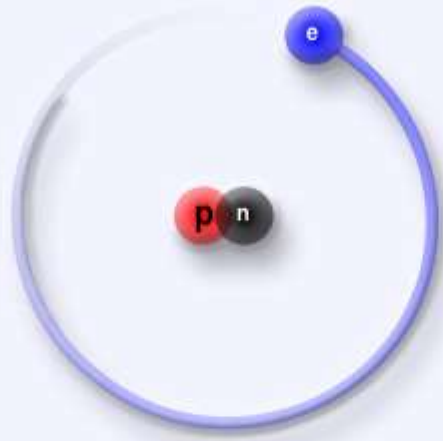
Então o que muda?

Número de neutrons é diferente!

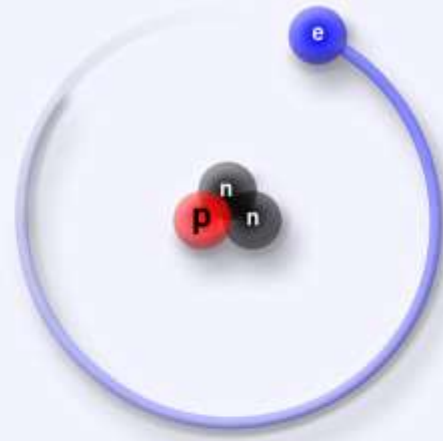
Isótopos hidrogênio



Prótio



Deutério



tritrio

${}^2_1\text{H}$ 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

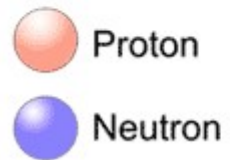
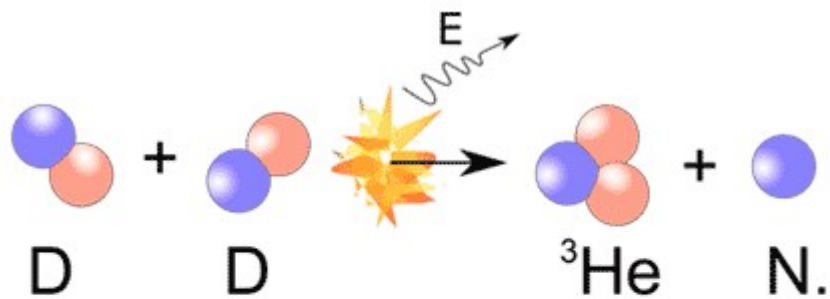
Curiosidade : Em cada copo que você bebe, 0,001% D_2O

${}^2_1\text{H}$ Deutério

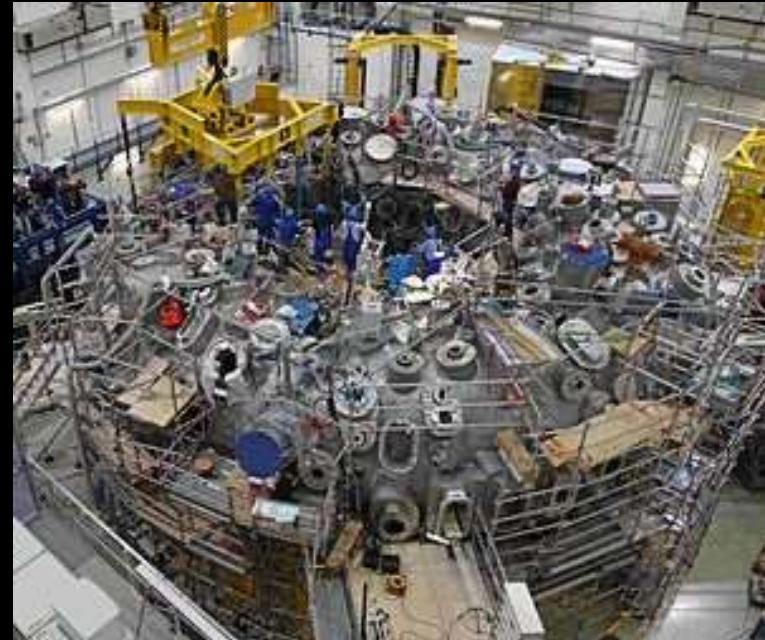


O gelo produzido com água deuterada é mais denso que água
 $-1,11 \text{ g/cm}^3$

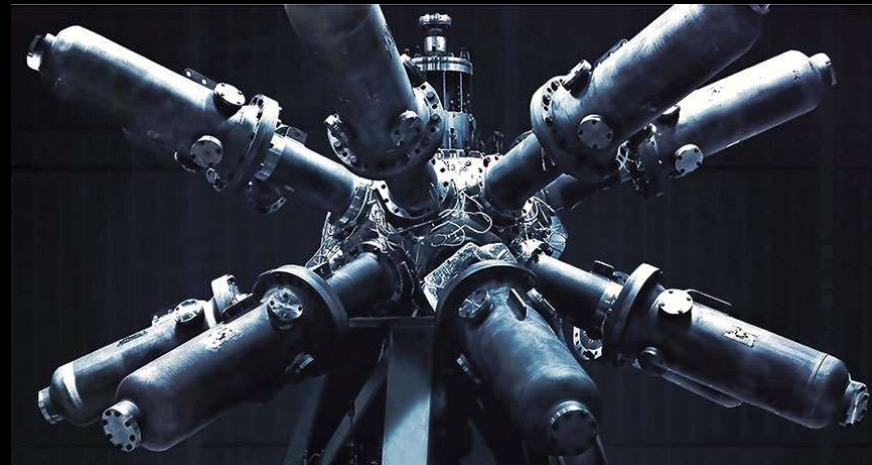
2_1H Deutério



<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.

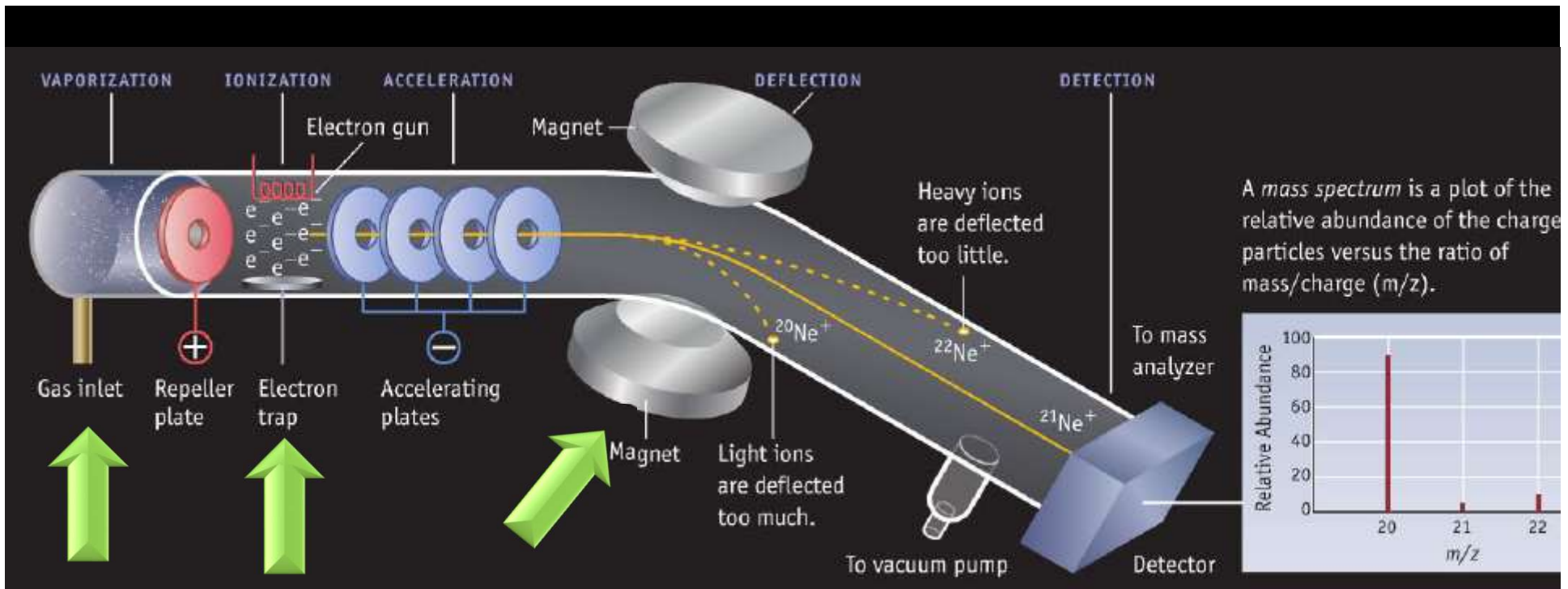
Abundância isotópica



Uma amostra de água de um lago consistirá quase inteiramente em água na qual os átomos de hidrogênio 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%

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



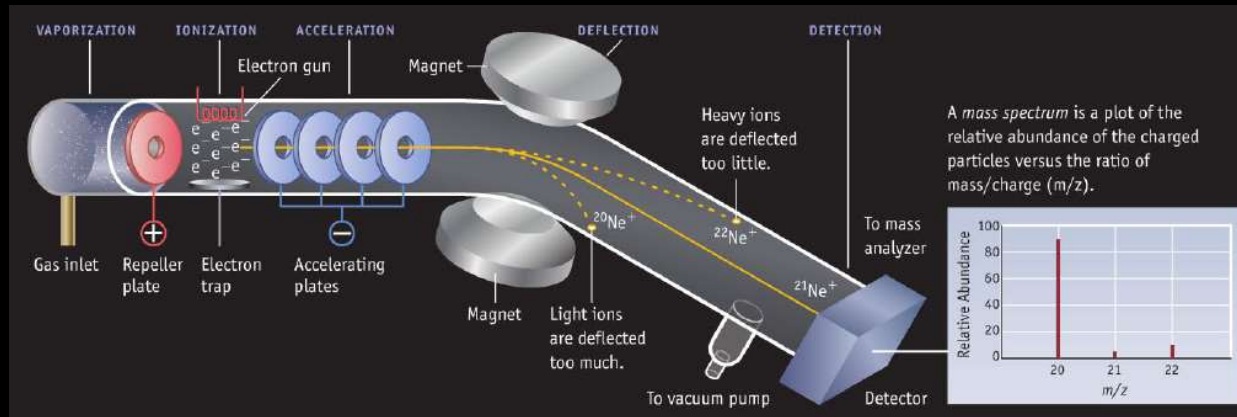
A amostra é introduzida na câmara de ionização com vapor

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 média 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

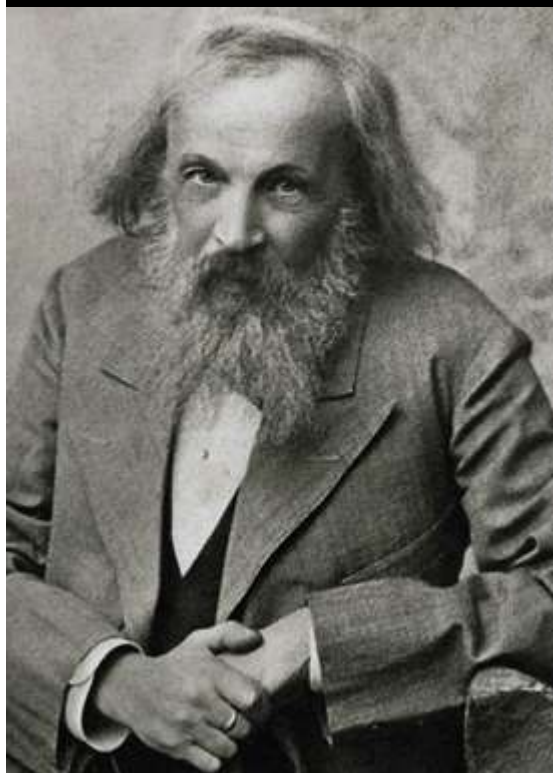
Element	Symbol	Atomic Weight	Mass Number	Isotopic Mass	Natural Abundance (%)
Hydrogen	H	1.00794	1	1.0078	99.985
	D*		2	2.0141	0.015
	T†		3	3.0161	0
Boron	B	10.811	10	10.0129	19.91
			11	11.0093	80.09
Neon	Ne	20.1797	20	19.9924	90.48
			21	20.9938	0.27
			22	21.9914	9.25
Magnesium	Mg	24.3050	24	23.9850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

Tabela periódica

The image shows a periodic table of elements. Each element is represented by a small photograph of its physical form. The noble gases (Helium, Neon, Argon, Krypton, Xenon) are highlighted with large, colorful text labels on the right side of the table. The elements are arranged in rows and columns, with their atomic numbers and symbols visible in the top-left corner of each cell.

1																	2	He																																																																																	
3	4																	5	6	7	8	9	10	Ne																																																																											
11	12																	13	14	15	16	17	18	Ar																																																																											
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	Kr																																																																																	
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	Xe																																																																																	
55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118																																				
101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200

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

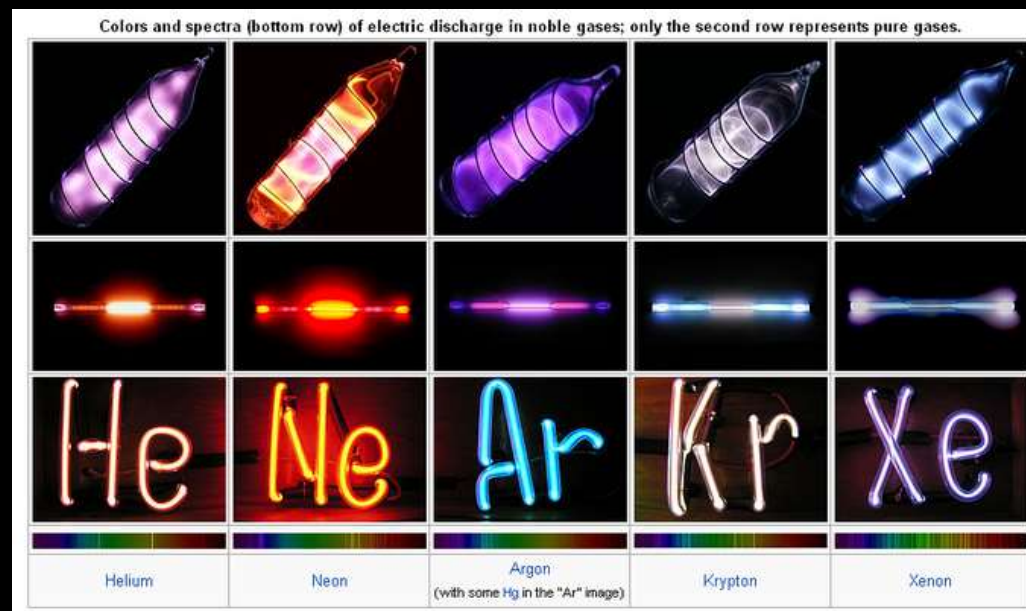
2	He Helium 4.003
10	Ne Neon 20.180
18	Ar Argon 39.948
36	Kr Krypton 84.80
54	Xe Xenon 131.29
86	Rn Radon 222.018
118	Uuo Ununocium unknown

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



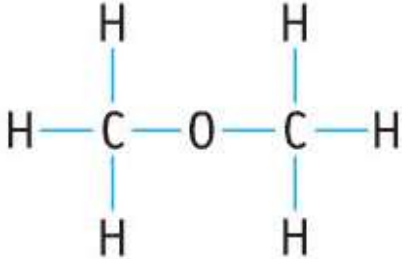

Exemplos...

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		

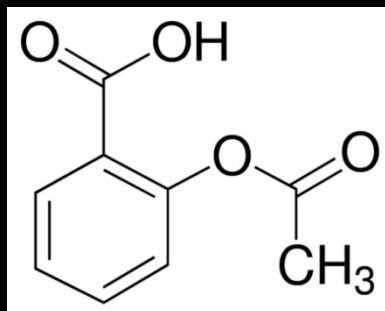


I U P A C

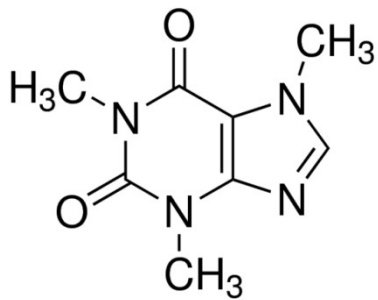
International Union of Pure
and Applied Chemistry

International Union of Pure
and Applied Chemistry

Nomes dos compostos químicos

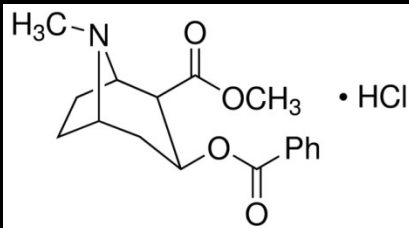


2-Acetoxybenzoic acid,
O-Acetylsalicylic acid,
ASA,
Acetylsalicylic acid,
Aspirin



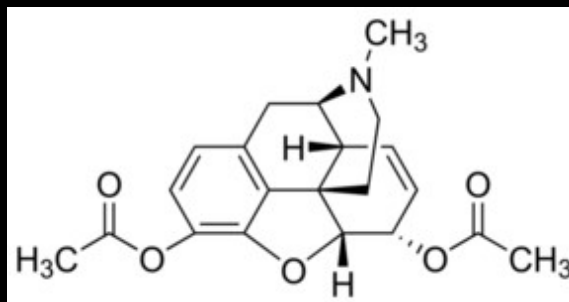
1,3,7-Trimethylxanthine
1,3,7-Trimethylpurine-2,6-dione

Cafeína

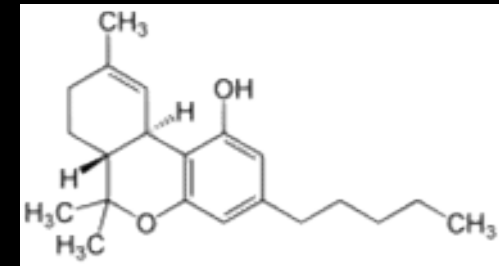


methyl (1R,2R,3S,5S)-3-(benzoyloxy)-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylate

Cocaína

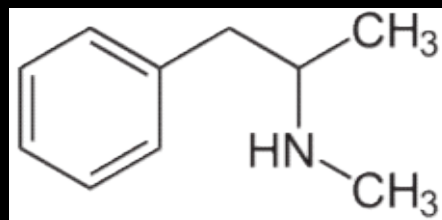


(5α,6α)-7,8-didehydro-4,5-epoxy-17-methylmorphinan-3,6-diol diacetate **Heroína**



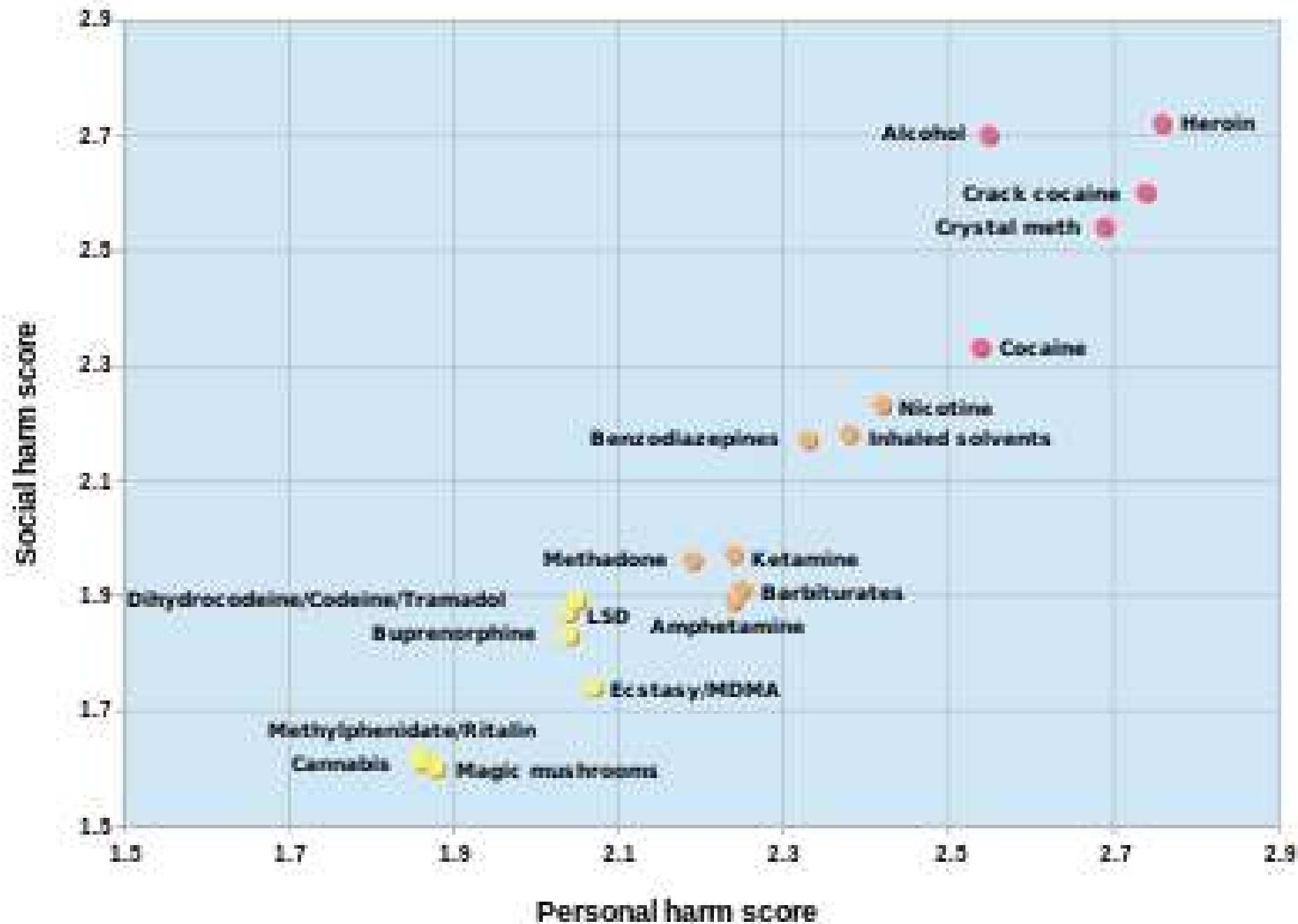
(-)-(6aR,10aR)-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6a,7,8,10a-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-1-ol

Cannabis THC



N-methyl-1-phenylpropan-2-amine

Crystal meth

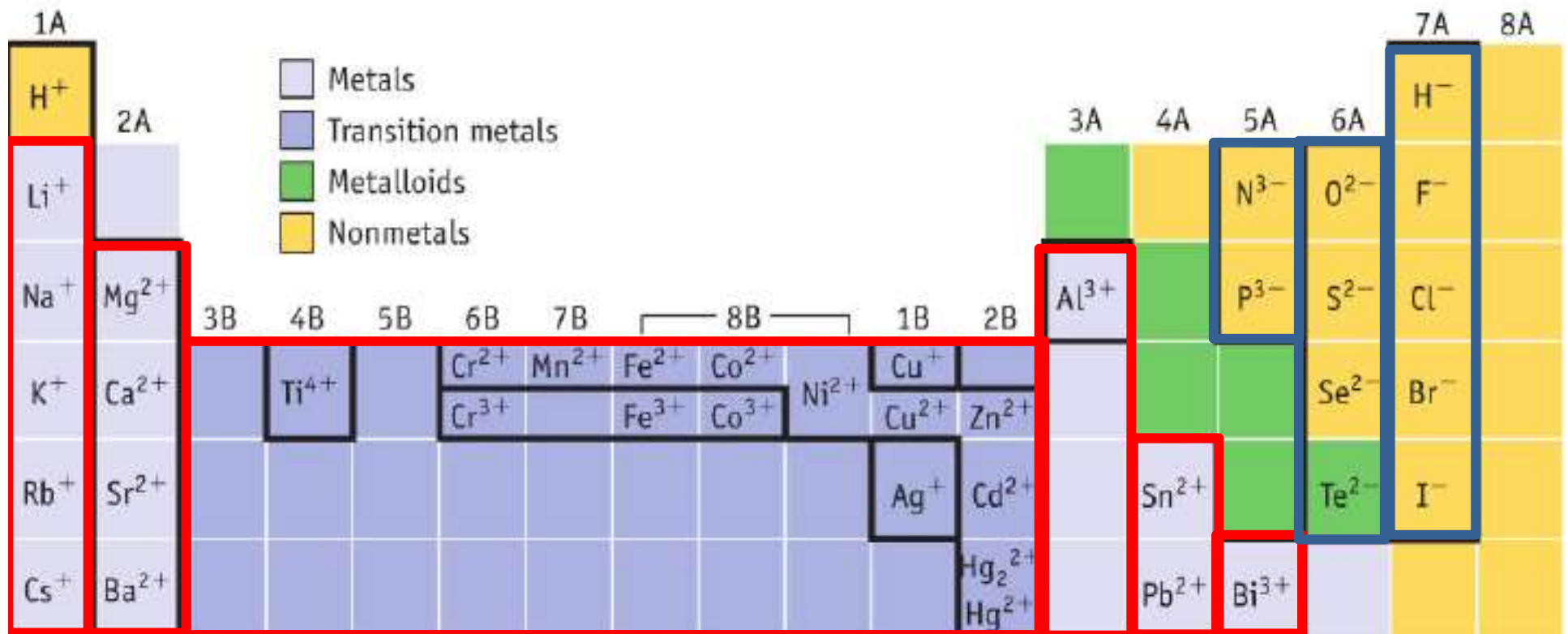


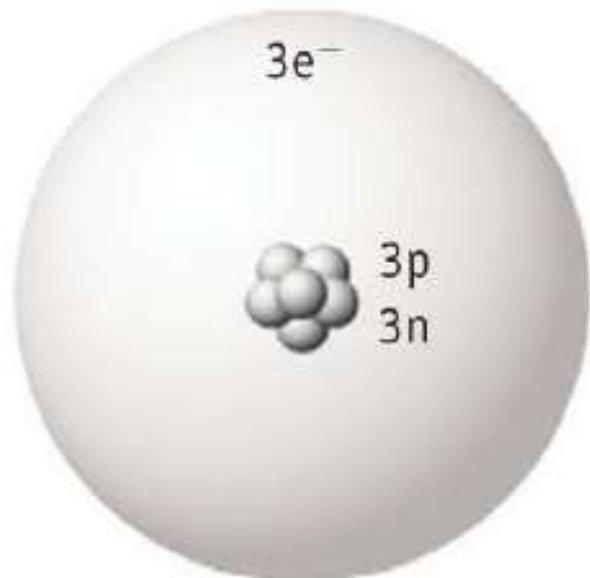
Compostos iônicos – íons



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

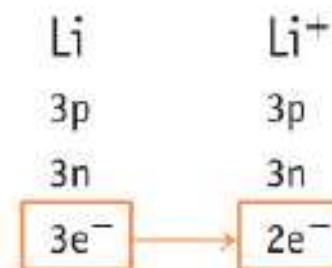




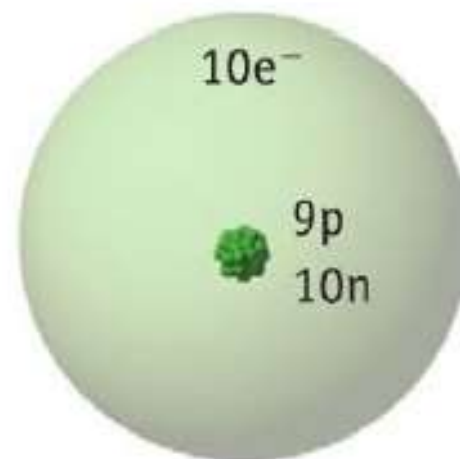
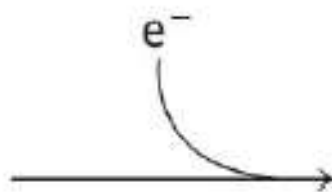
Lithium, Li



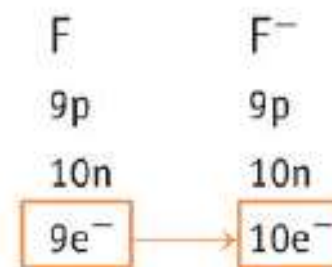
Lithium ion, Li⁺



Fluorine, F



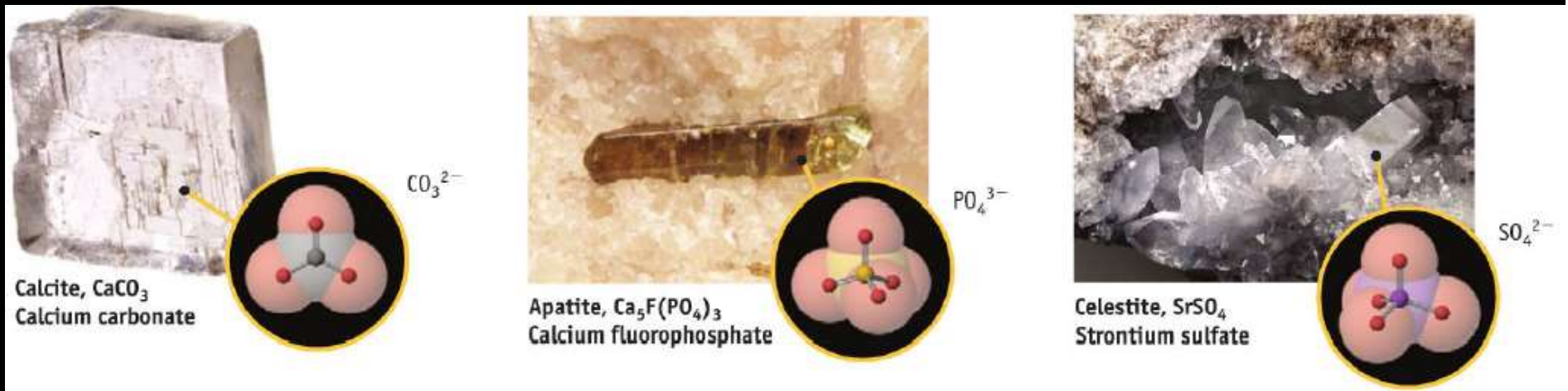
Fluoride ion, F⁻



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 6ª os que contêm oxigénio denominam-se oxiânions e o seu nome está relacionado com o numero de átomos de oxigénio

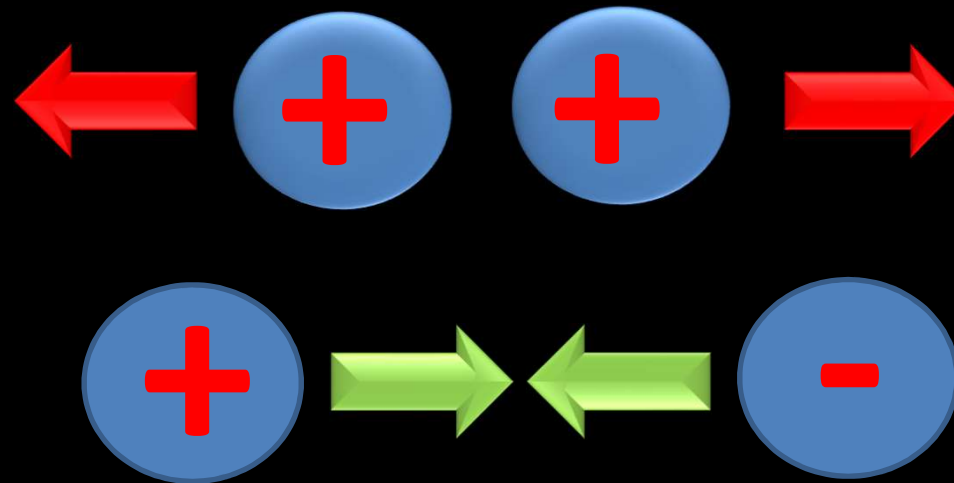
Grupo 7A	
ClO_4^-	Íon per clorato
ClO_3^-	Íon clor ato
ClO_2^-	Íon clor ito
ClO^-	Íon hipo clorito



Aumento do número de átomos de oxigénio

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

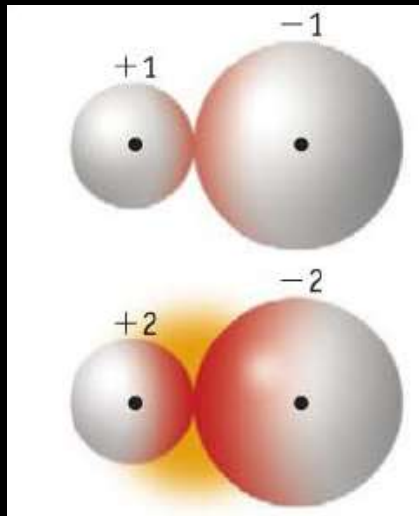
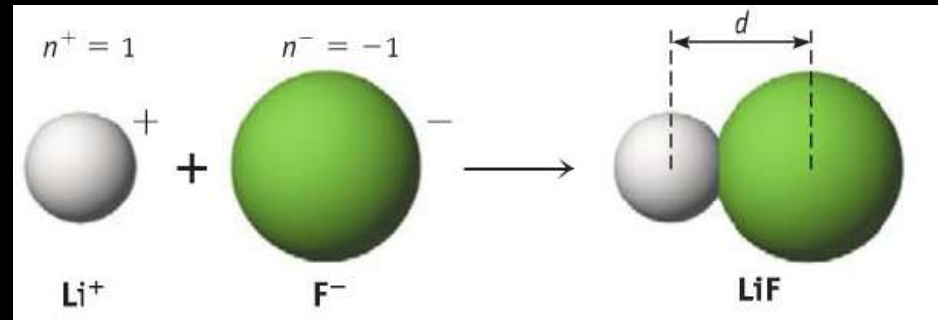
$$\text{Força} = -K_e \frac{q_1 \times q_2}{d^2}$$

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

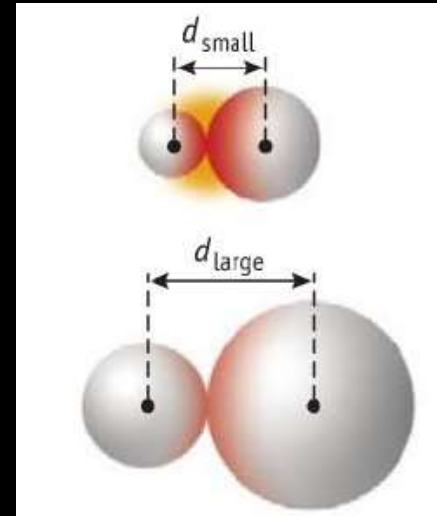


Augustine Charles de
Coloumb
(1736-1806)

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



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



À medida que a distância diminui a força de atração

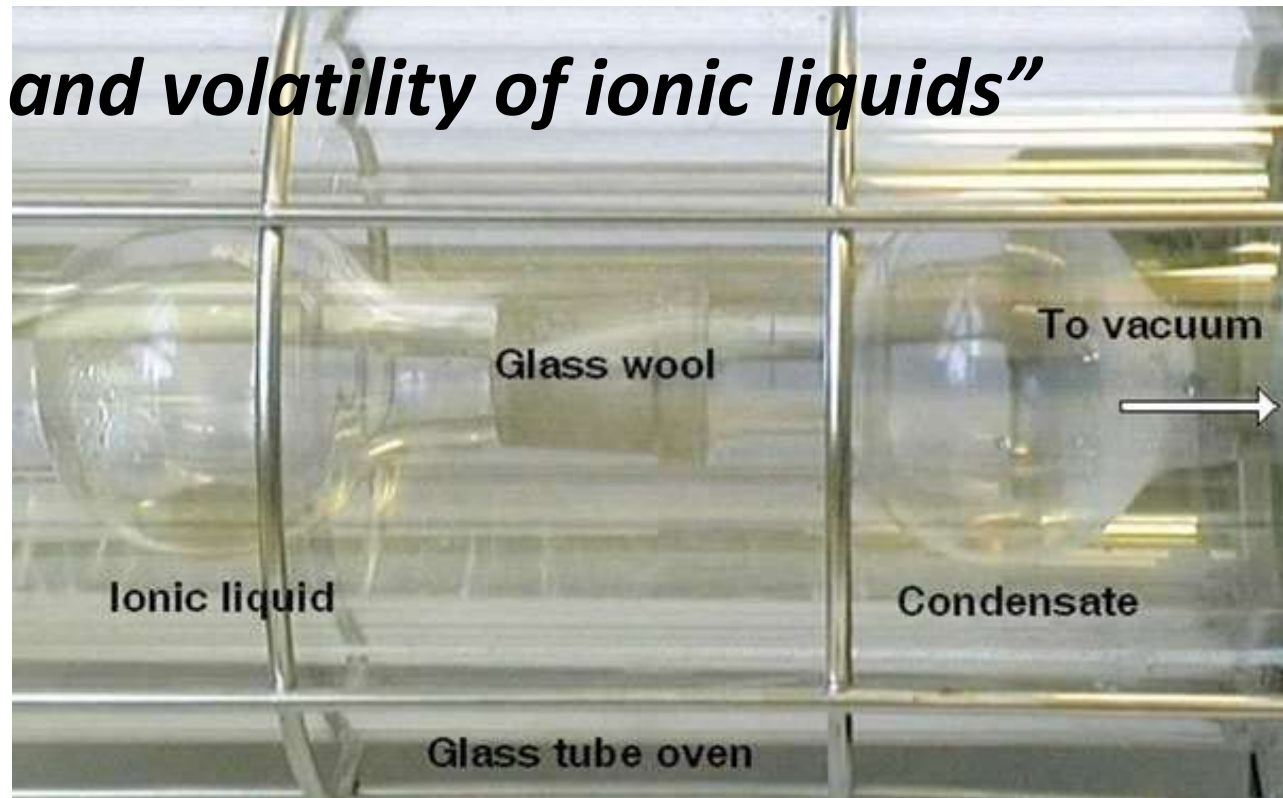


Líquidos iónicos

- ❑ 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



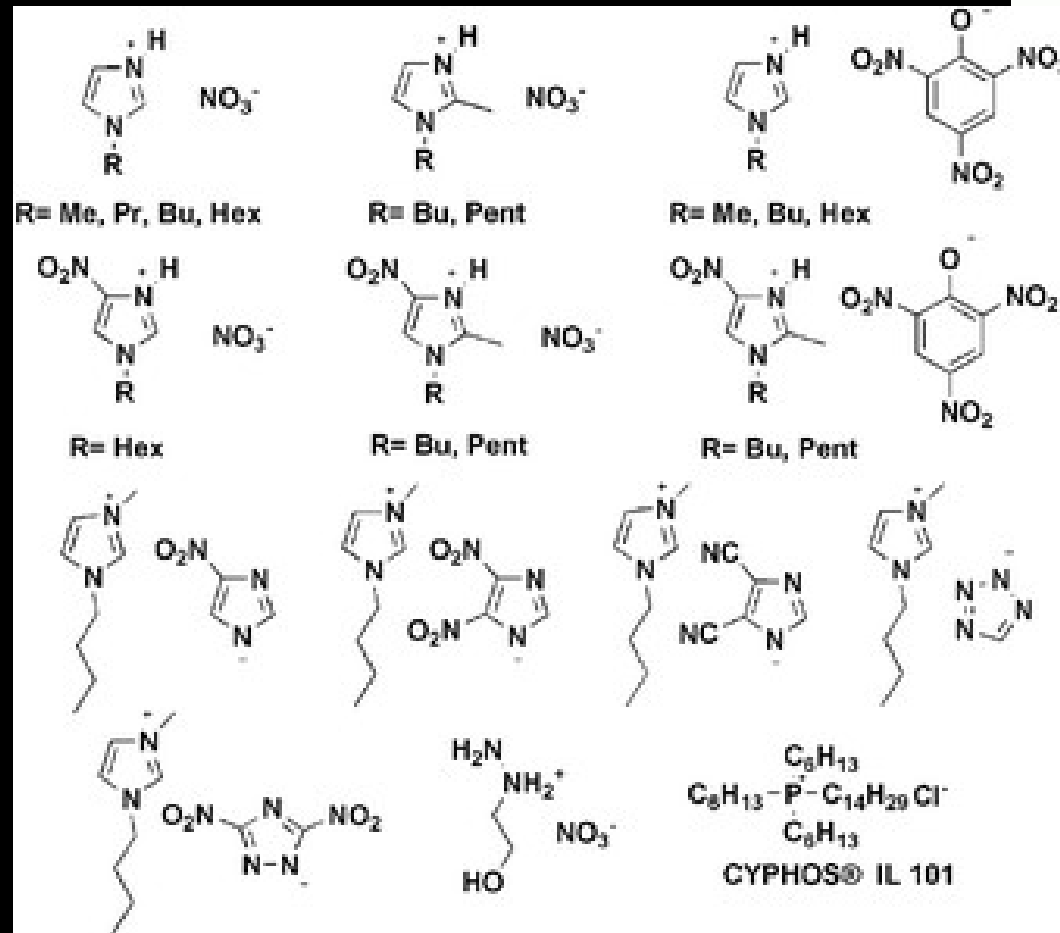
“Combustible ionic liquids by design: is laboratory safety another ionic liquid myth?”



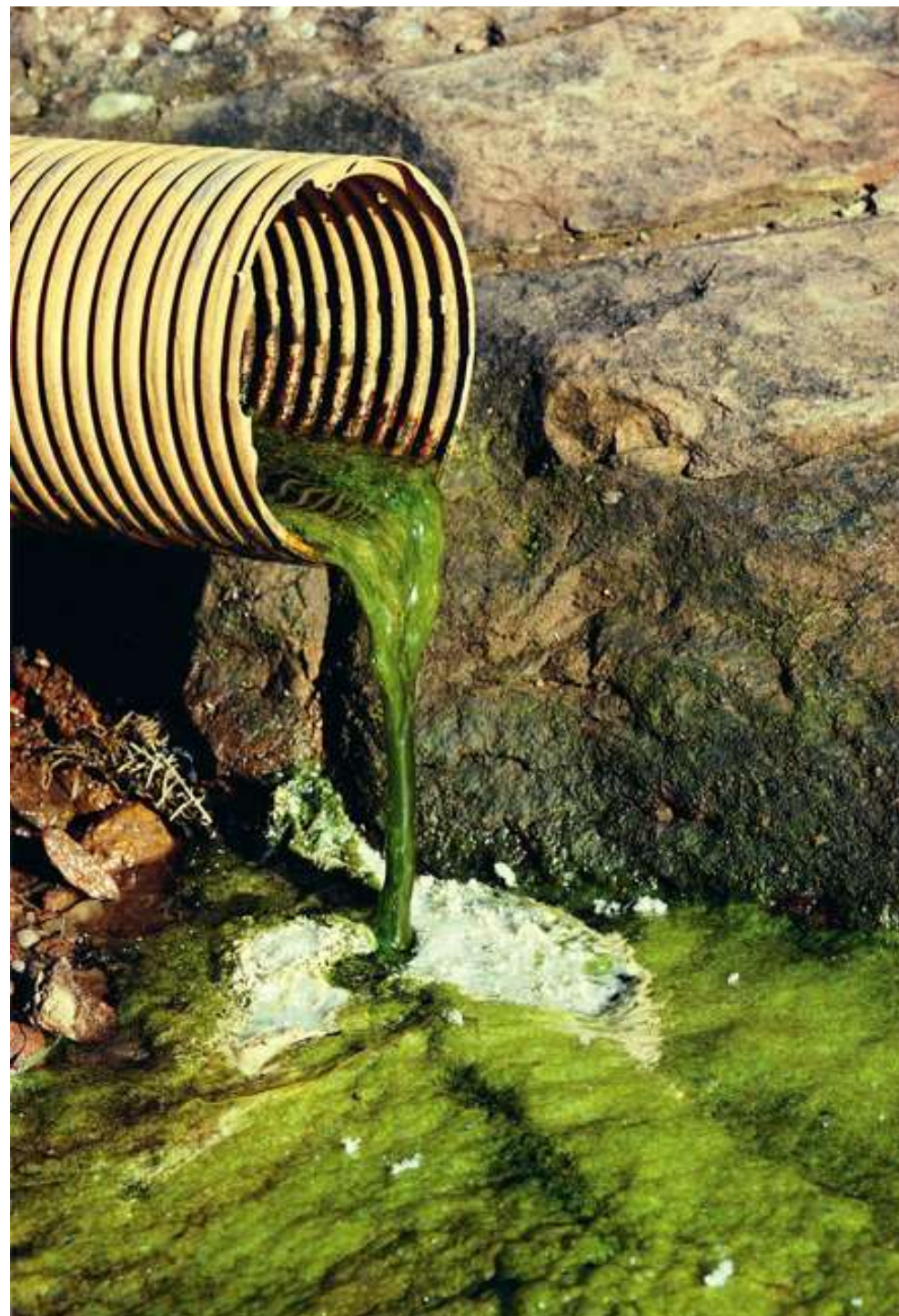
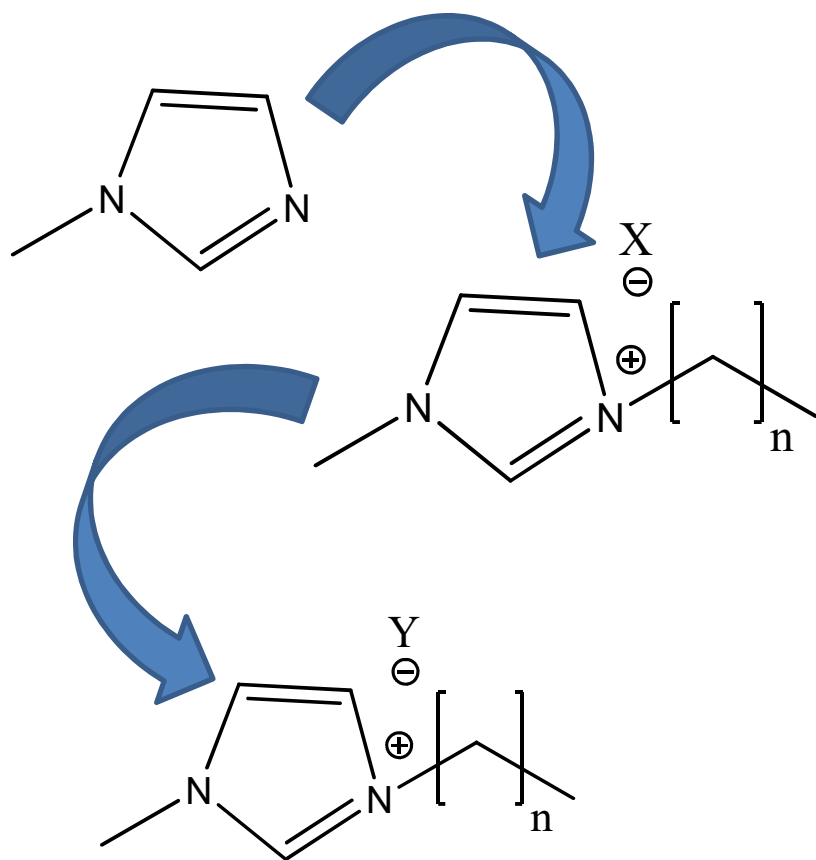
[1-Bu-3-H-IM][NO₃]

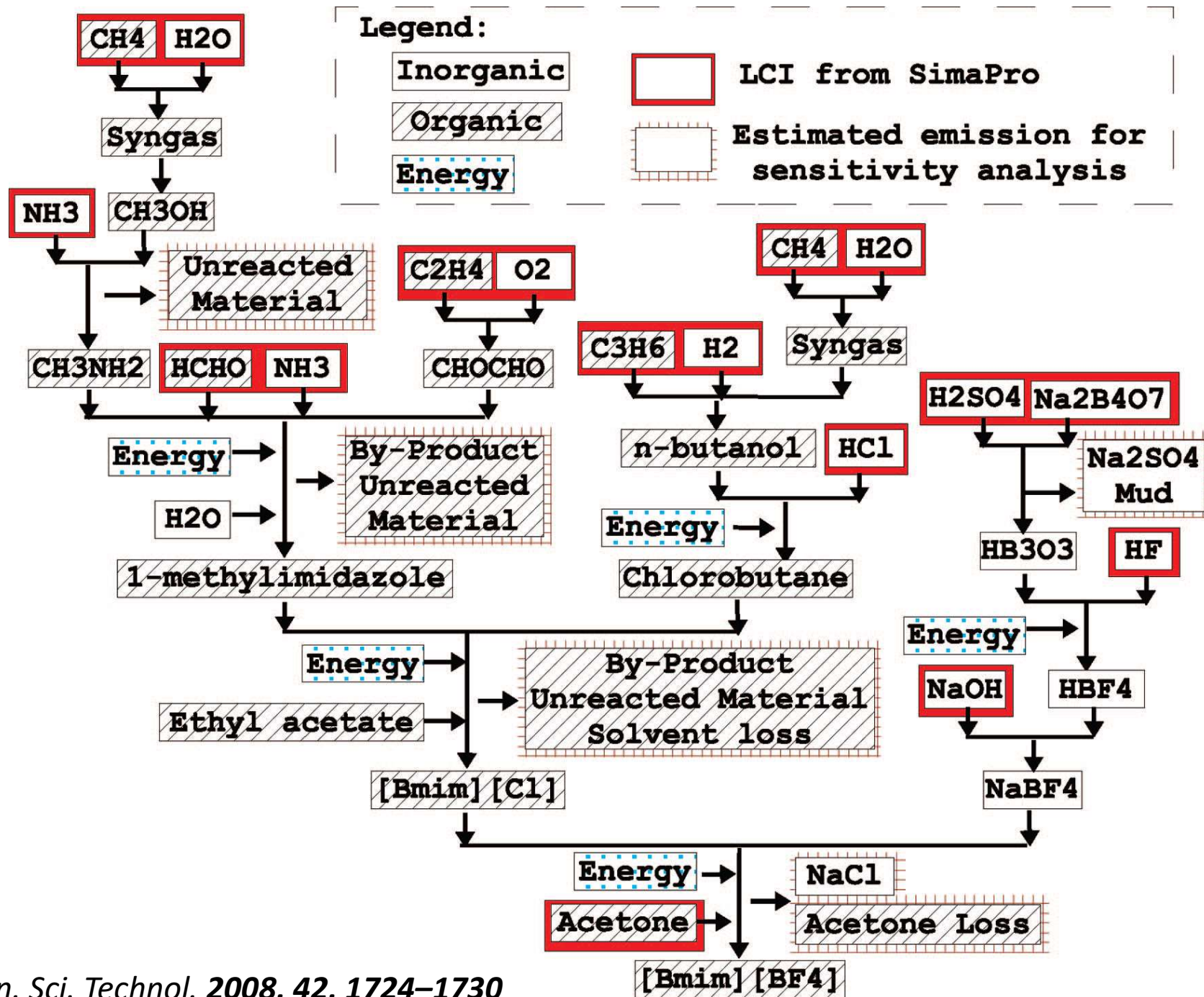
Chem. Commun., 2006, 2554-2556

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.

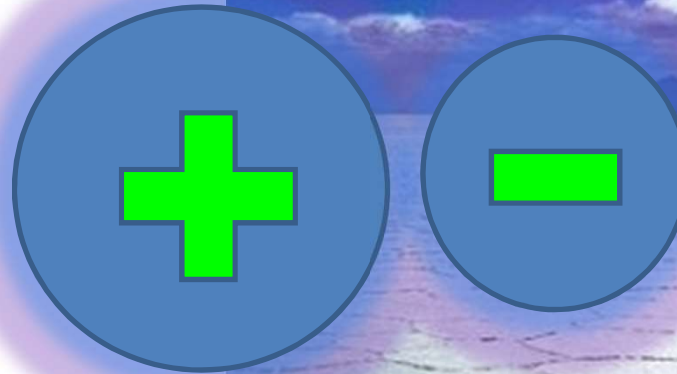
Aquatic Toxicology (2010),4, 290-297

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

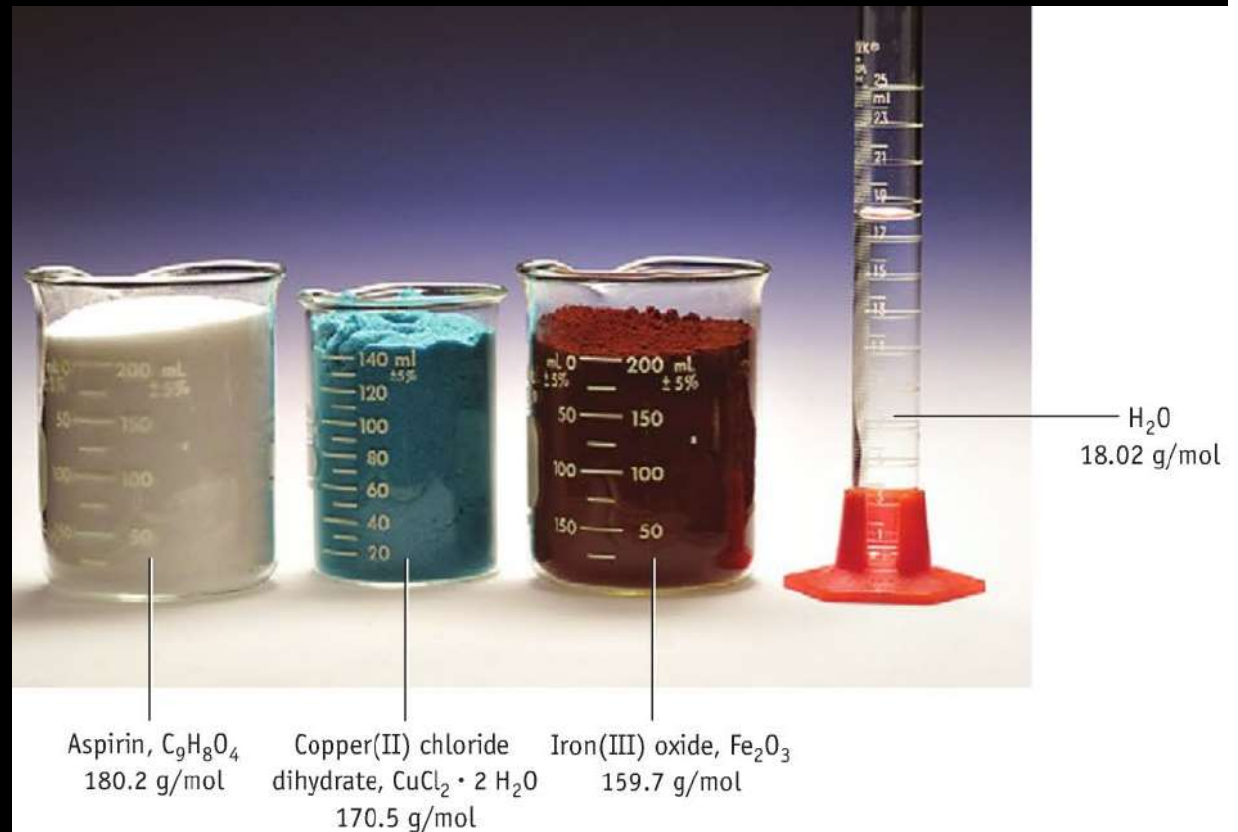
Um mol contém sempre o mesmo número de partículas não importa qual a substância

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



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

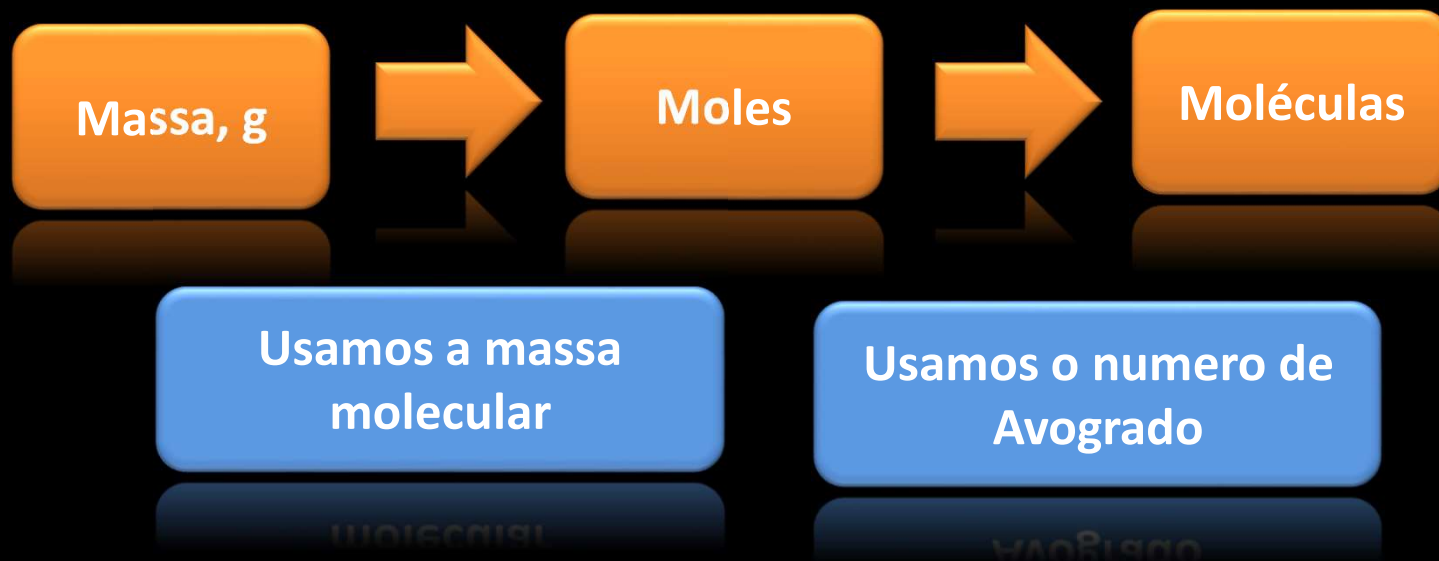
Constante dos gases perfeitos

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

Constante de Faraday

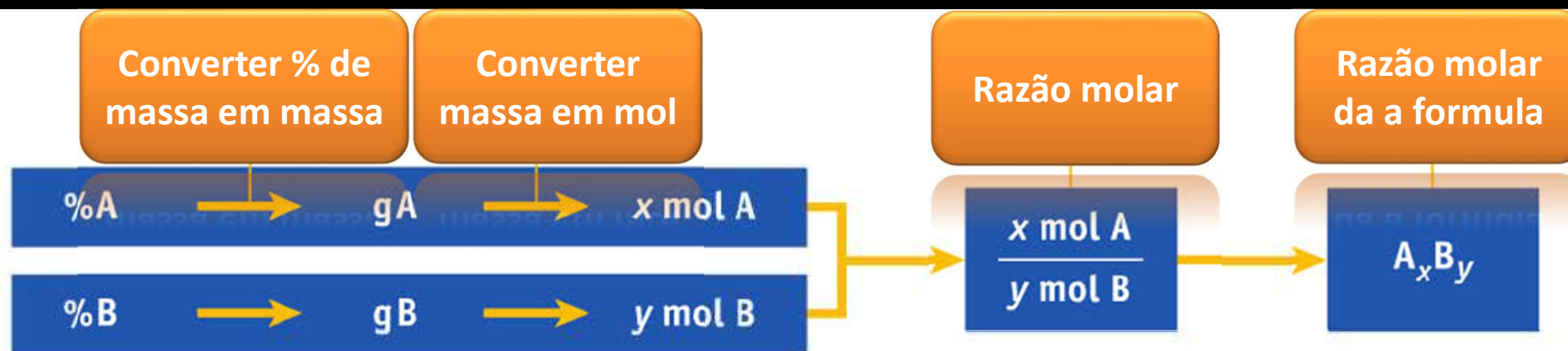
$$F = e N_A = 96485,33289 \text{ Cmol}^{-1}$$

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

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 22.989	12 Mg Magnesium 24.305											13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.064	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 69.723	32 Ge Germanium 72.61	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80
37 Rb Rubidium 84.464	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.96	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 101.906	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 Lanthanide Series	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 [209]	85 At Astatine [209]	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.021	88 Ra Radium 226.025	89-103 Actinide Series	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [265]	109 Mt Meitnerium [268]	110 Ds Darmstadtium [269]	111 Rg Roentgenium [272]	112 Cn Copernicium [285]	113 Uut Ununtrium [288]	114 Fl Flerovium [289]	115 Uup Ununpentium [288]	116 Lv Livermorium [293]	117 Uus Ununseptium [294]	118 Uuo Ununoctium [294]

57 La Lanthanum 138.905	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 288.1	102 No Nobelium 289.101	103 Lr Lawrencium [262]

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

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

Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr

Estrutura dos átomos e tendências periódicas

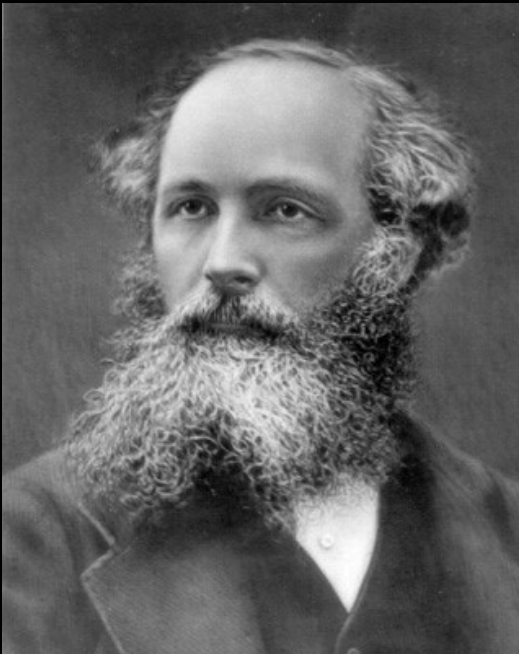
Aula 2

Radiação electromagnética

LUZ

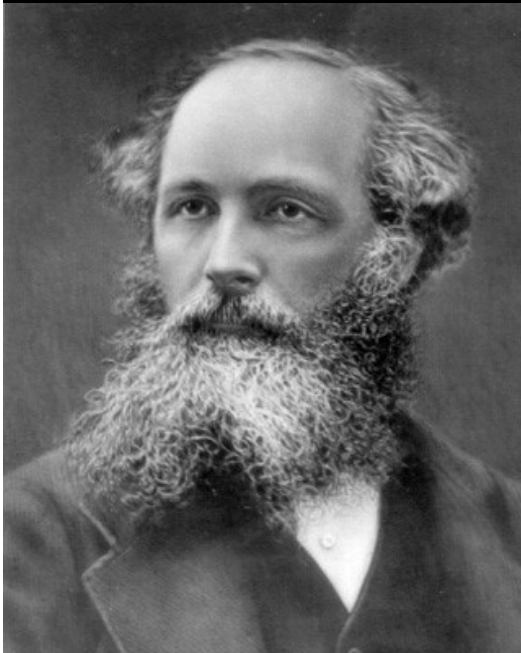
Em 1864 James Clerk Maxwell desenvolveu uma teoria matemática para descrever a luz e a outras formas de radiação - oscilação ou tipo de onda, campo eléctrico e magnético.

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

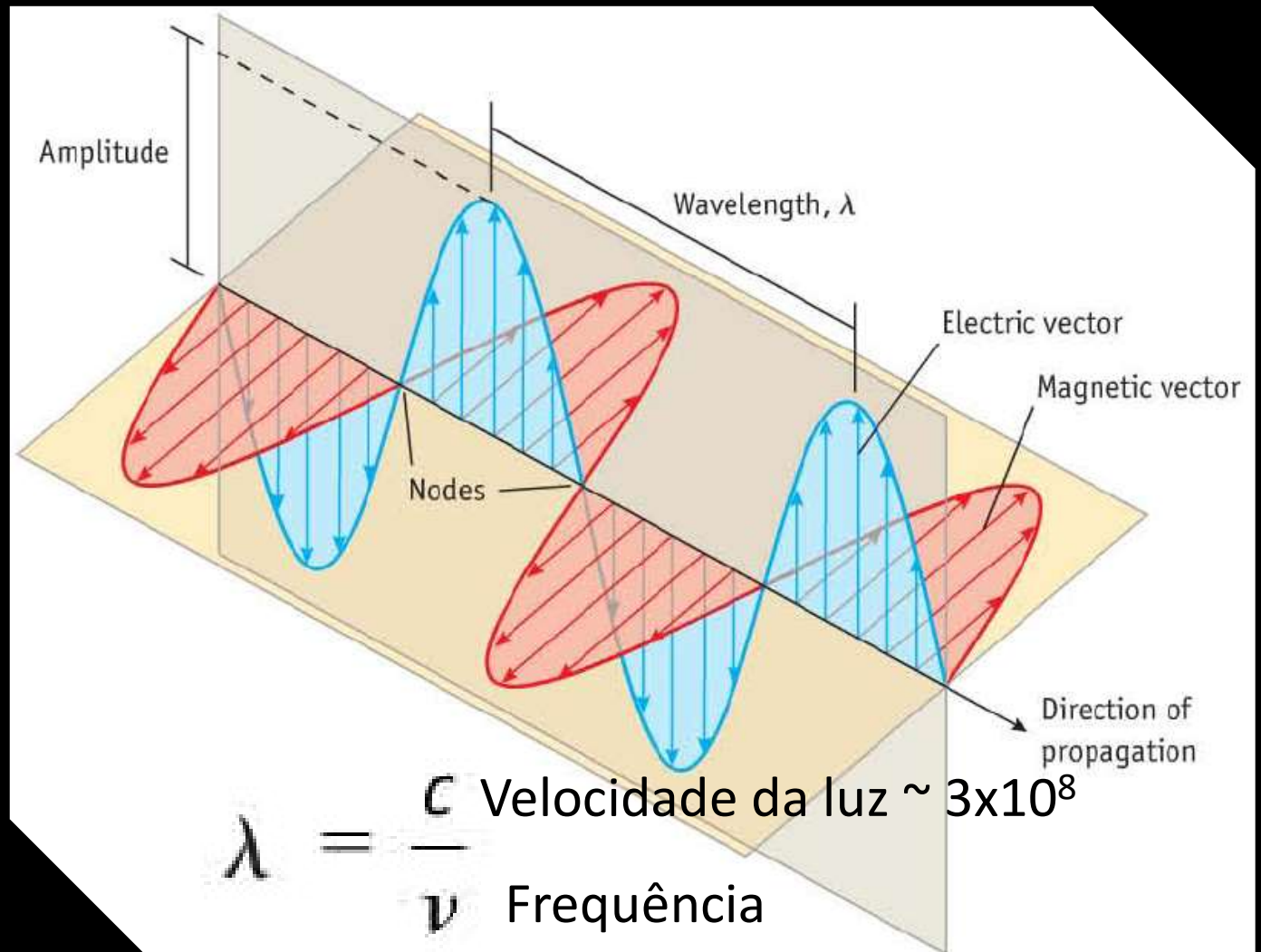


James Clerk Maxwell
1831-1879





James Clerk Maxwell
1831-1879



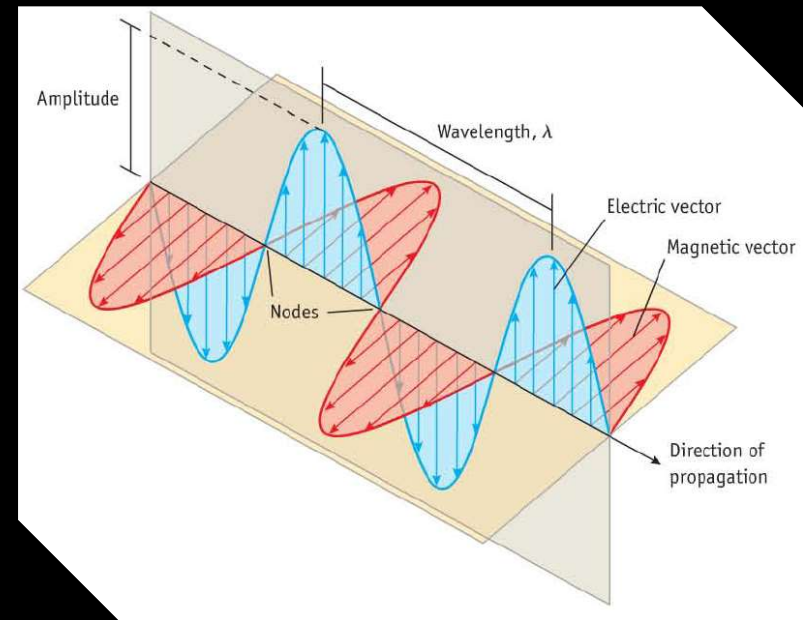


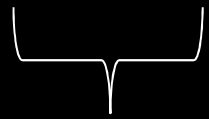
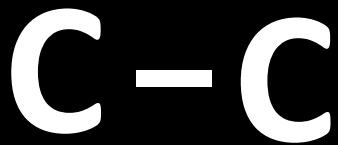
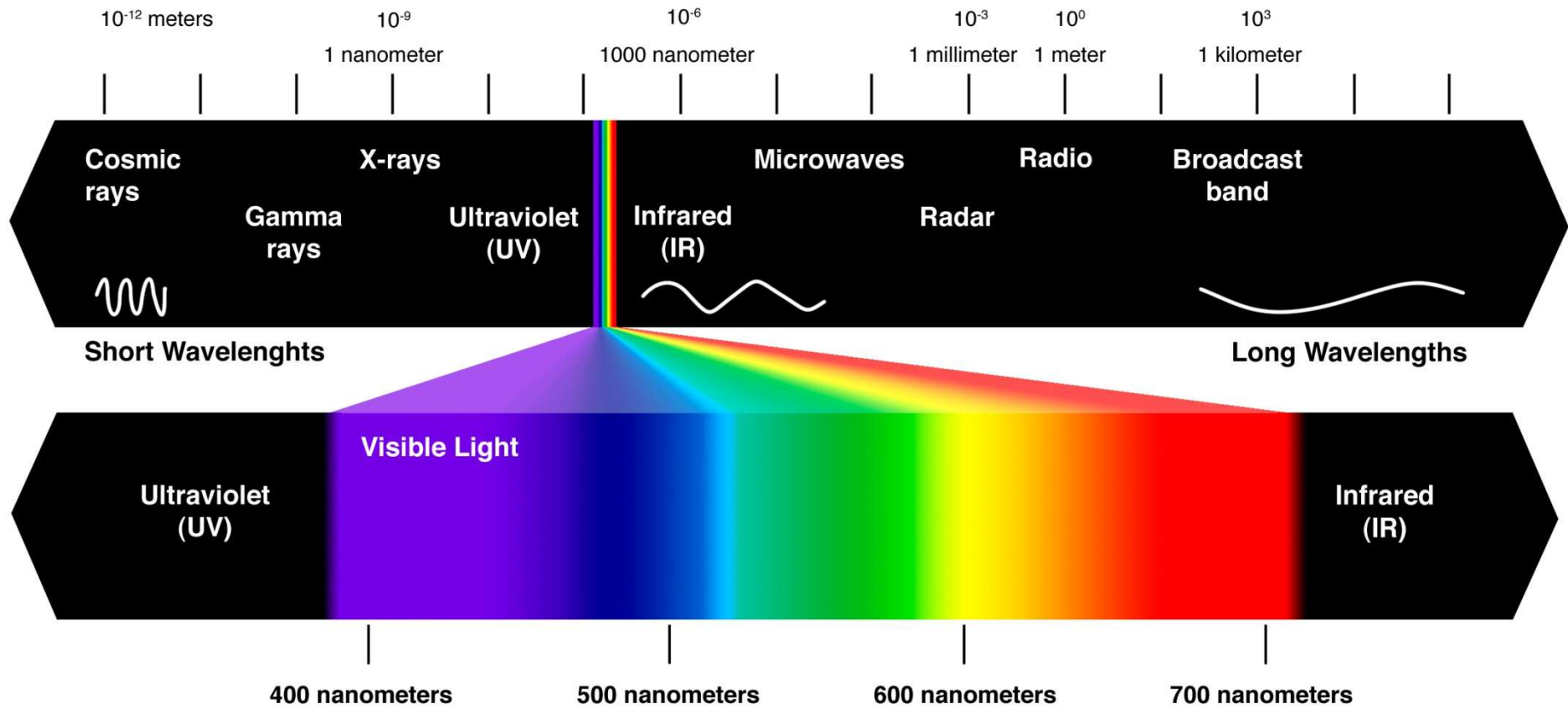
Radiação electromagnética

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

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

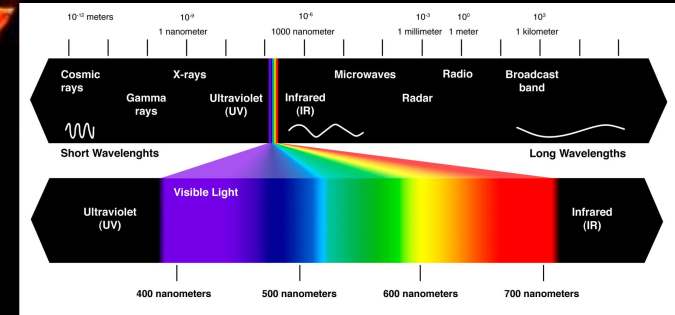
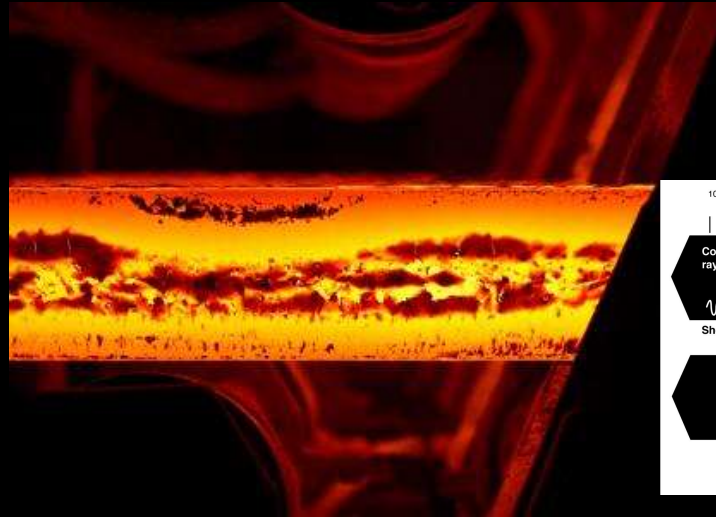
Luz visível não permite ter resolução a este nível

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

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

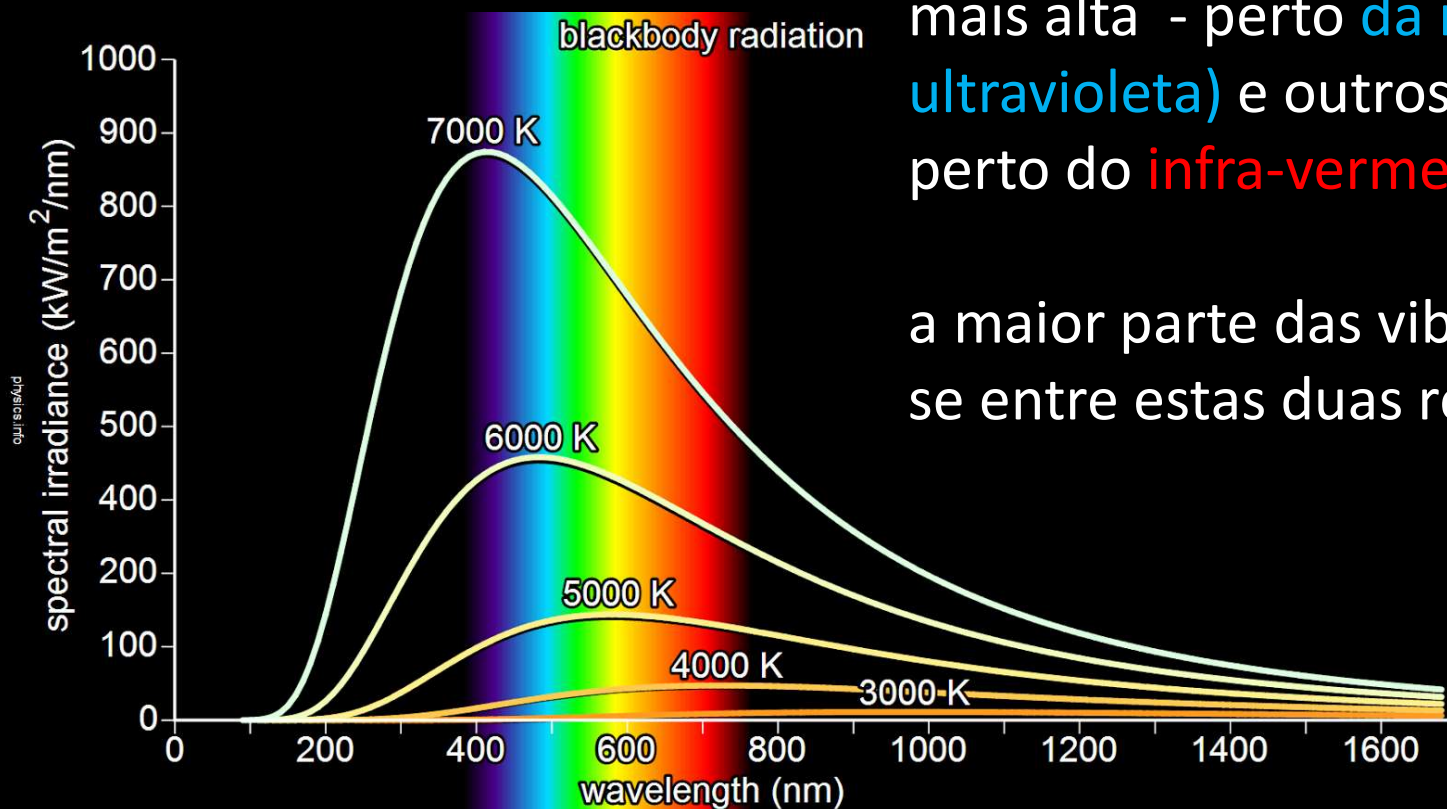
Planck quantizou as energias - apenas são determinadas energias são permitidas - Mecânica quântica

Equação de Planck

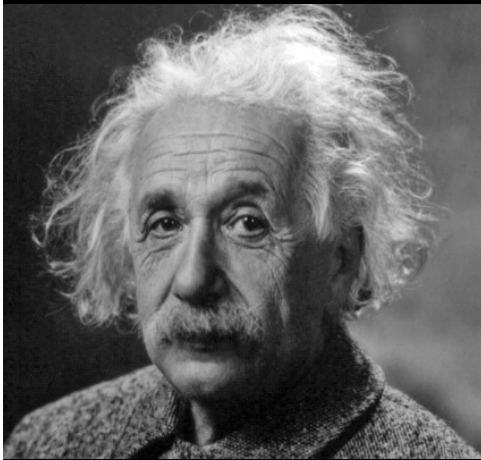
$E = nh\nu$; $h=6,6260693 \times 10^{-34}$ J.s – constante de Planck
apenas são determinadas energias são permitidas

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

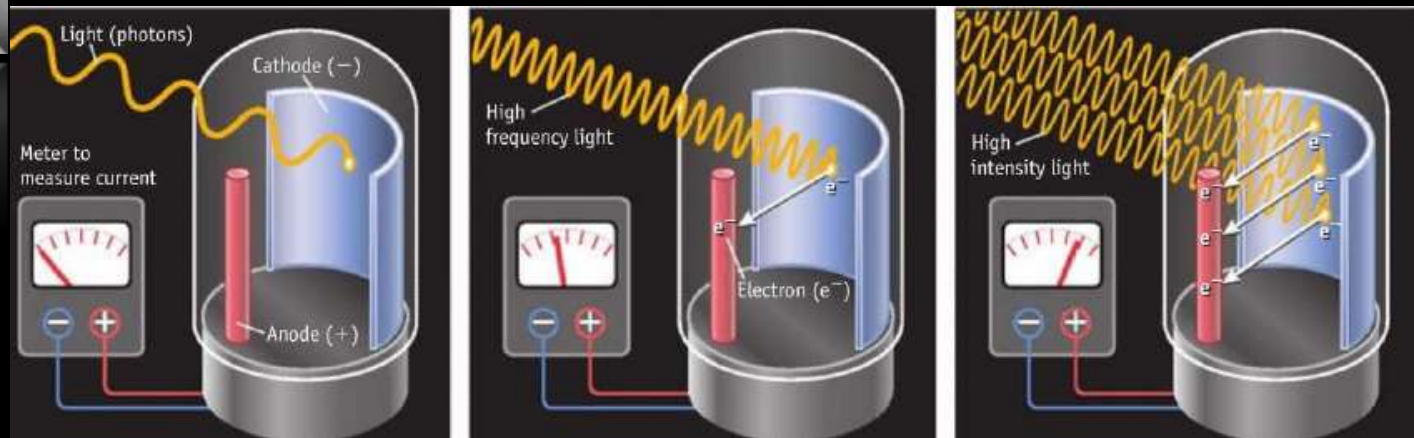


Albert Einstein
1879-1955

"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**

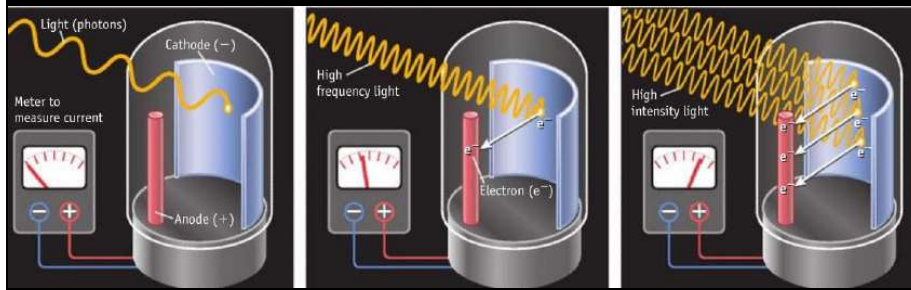
Efeito é uma observação de que muitos metais emitem electrons quando a luz incide sobre eles



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

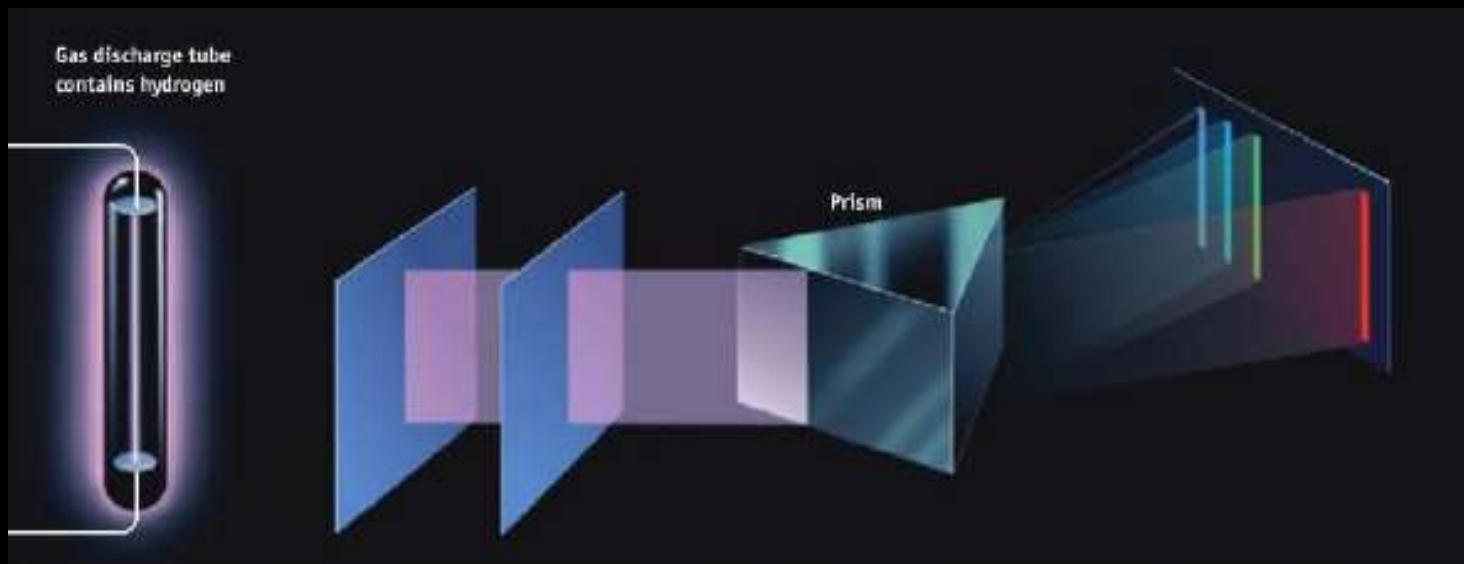


Niels Bohr
1885-1962



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

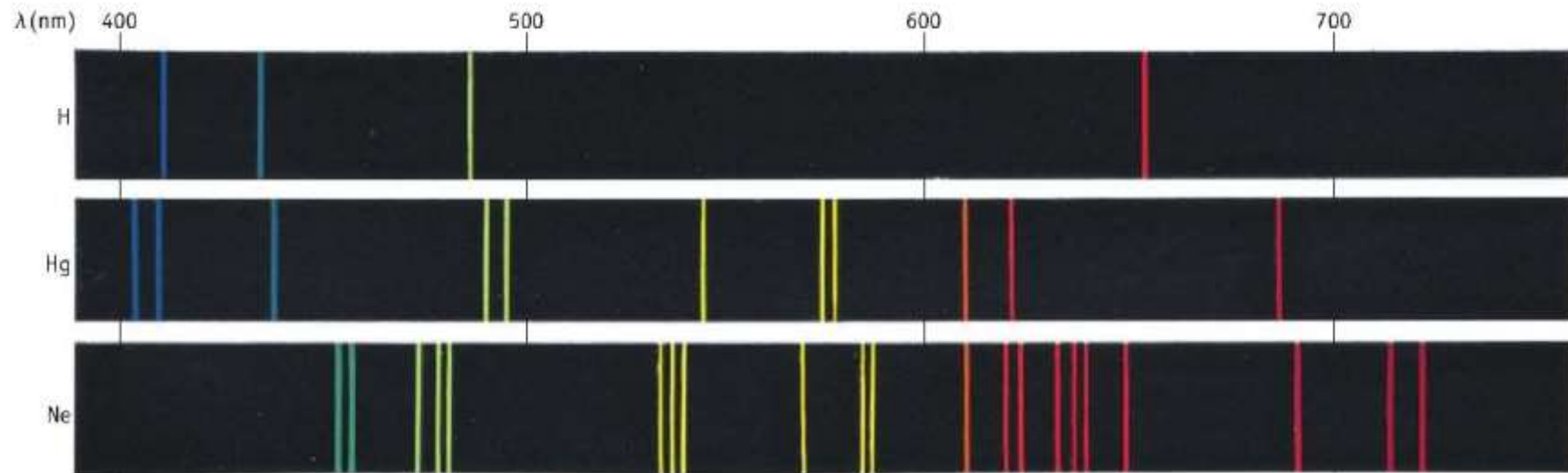


FIGURE 6.7 Line emission spectra of hydrogen, mercury, and neon. Excited gaseous elements produce characteristic spectra that can be used to identify the elements as well as to determine how much of each element is present in a sample.

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.

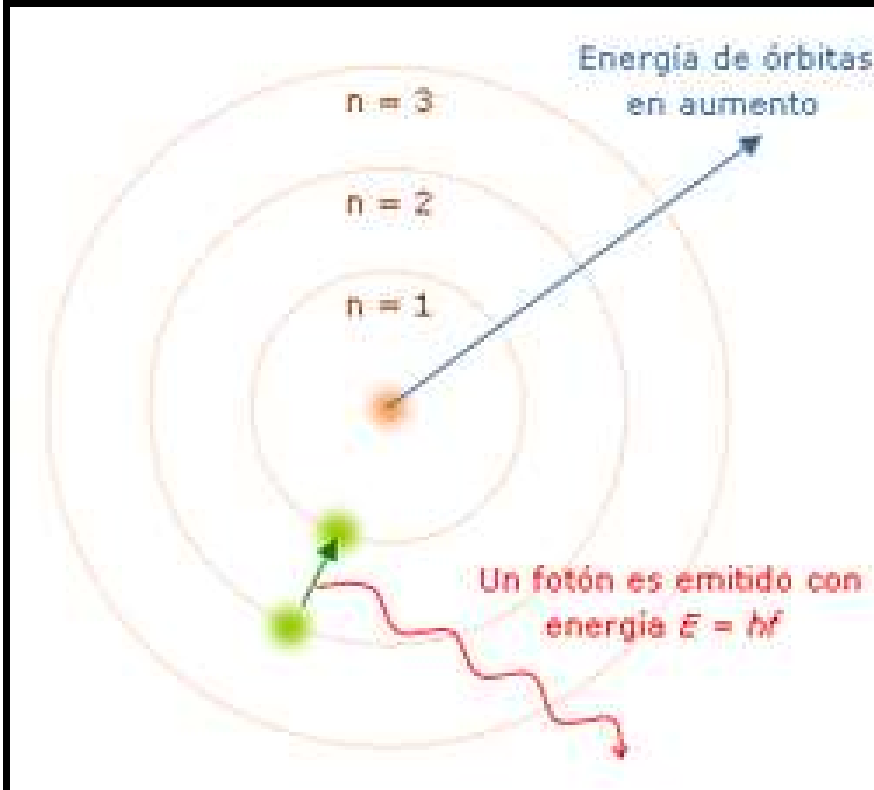
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ em que } n > 2$$

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

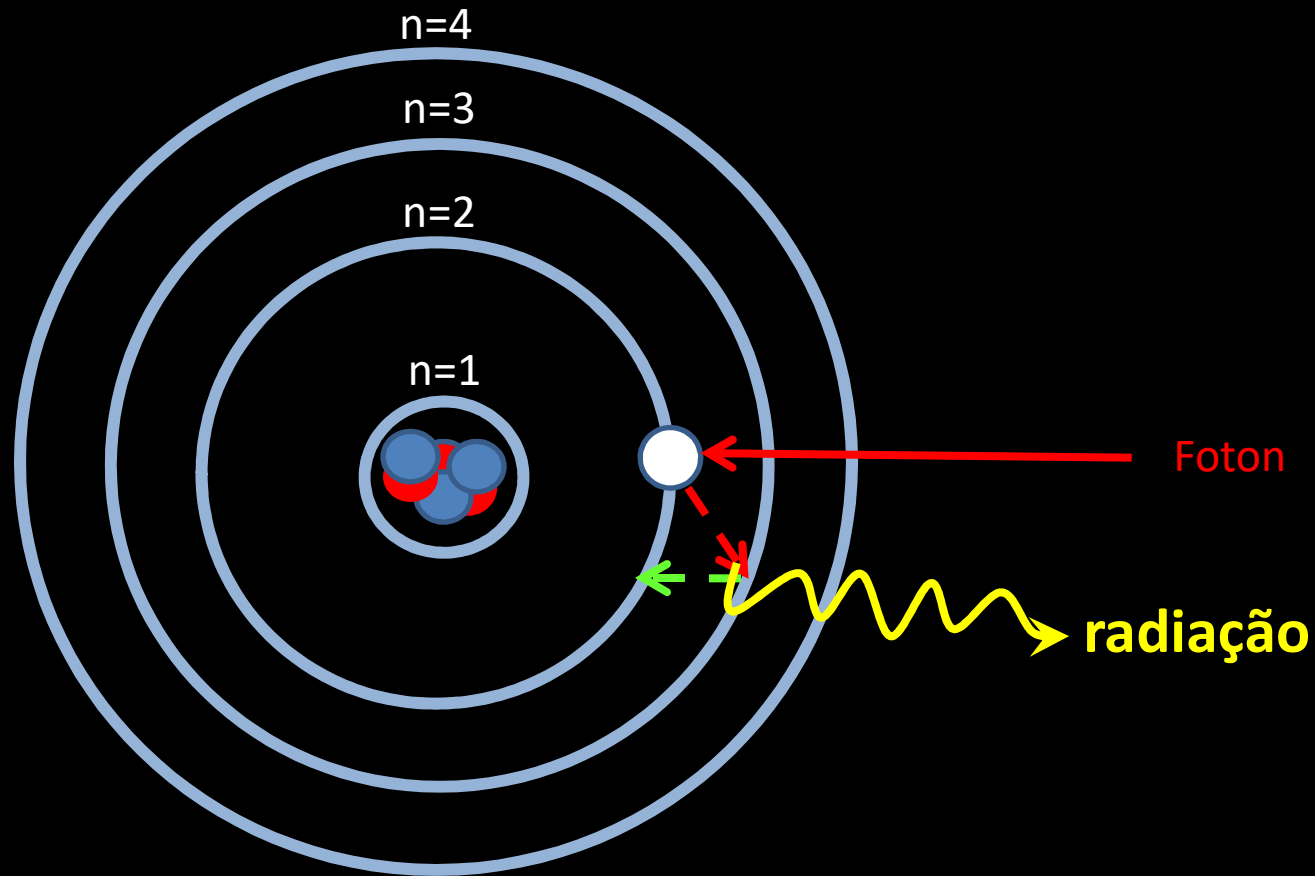
O **comprimento de onda** da radiação emitida quando um dado eletron é excitado está relacionada com o **nível energético** para onde esse eletron foi enviado.



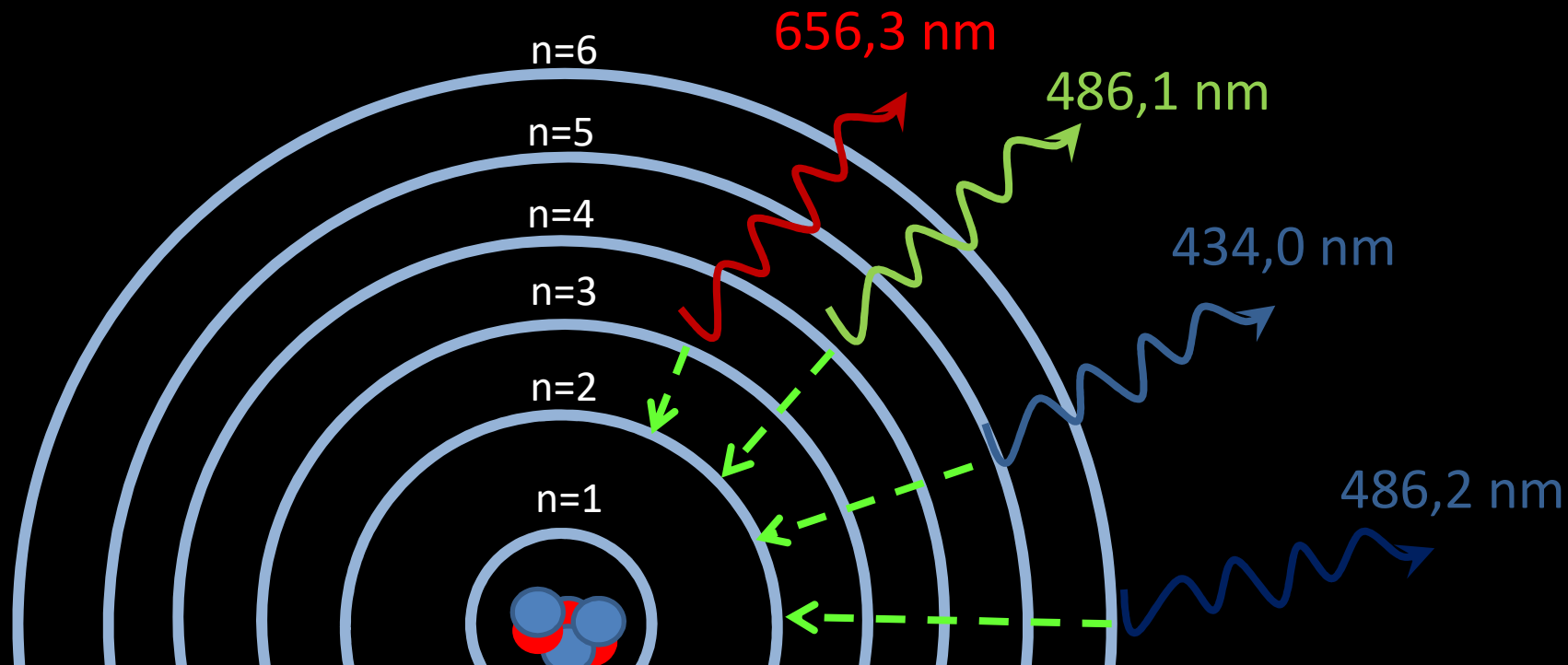
Niel Bohr que idealizou um modelo para estrutura electrónica dos átomos -

explicar o porquê de os átomos apresentarem espectros de emissão característicos

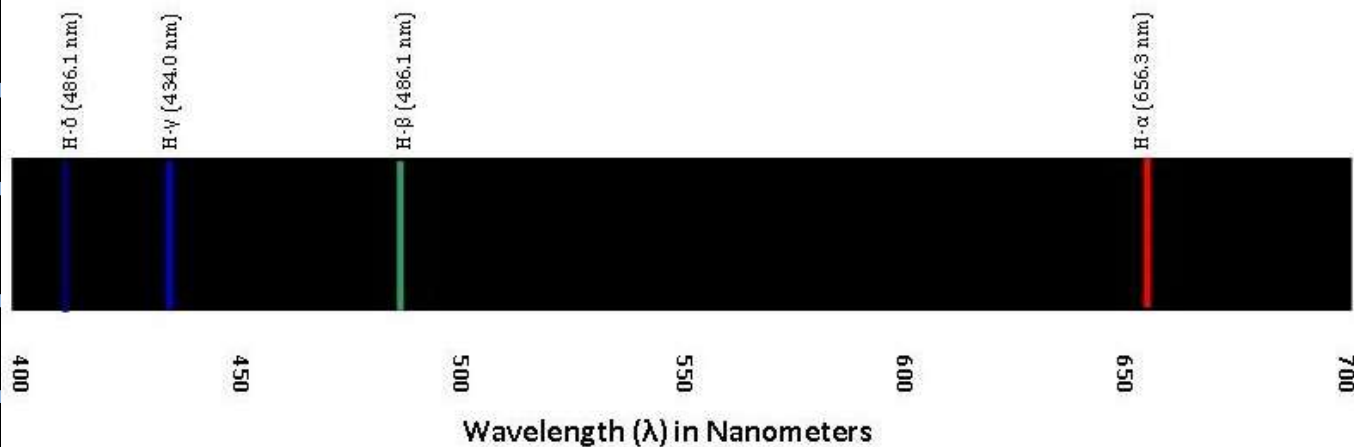
Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr



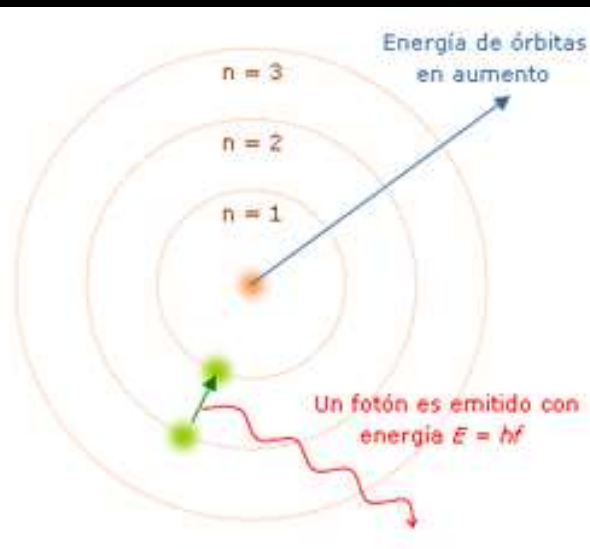
Espectros de linhas atômicas e niels bohr



Balmer Series for Hydrogen Atom



Modelo de Borh do átomo de hidrogénio



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

Existência de **órbitas correspondentes a níveis de energia específicos** - quando o electrón está em um destes níveis o sistema está estável.

Combinação da quantização da energia com as leis da física clássica

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

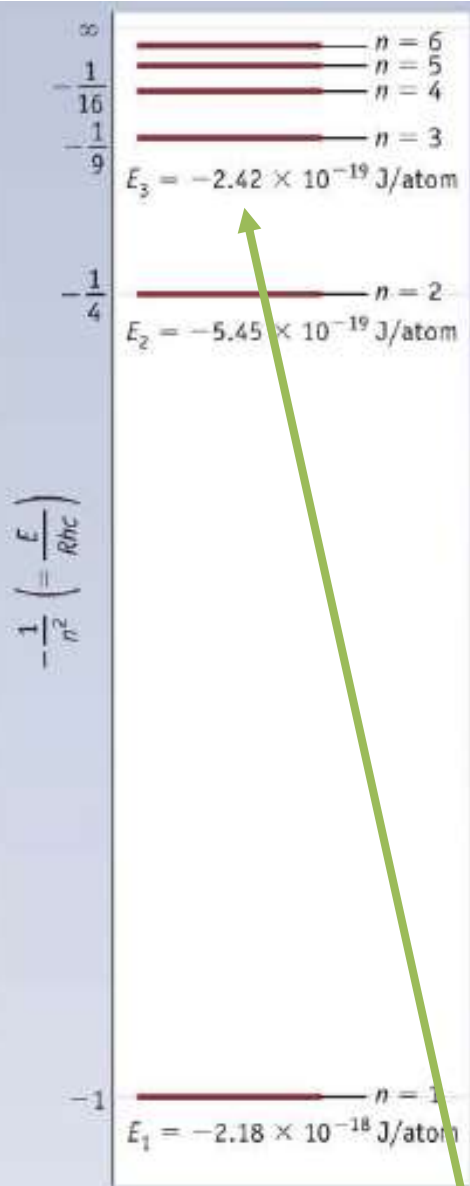
Onde E_n é a energia total do electrón no n ésimo nível

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

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

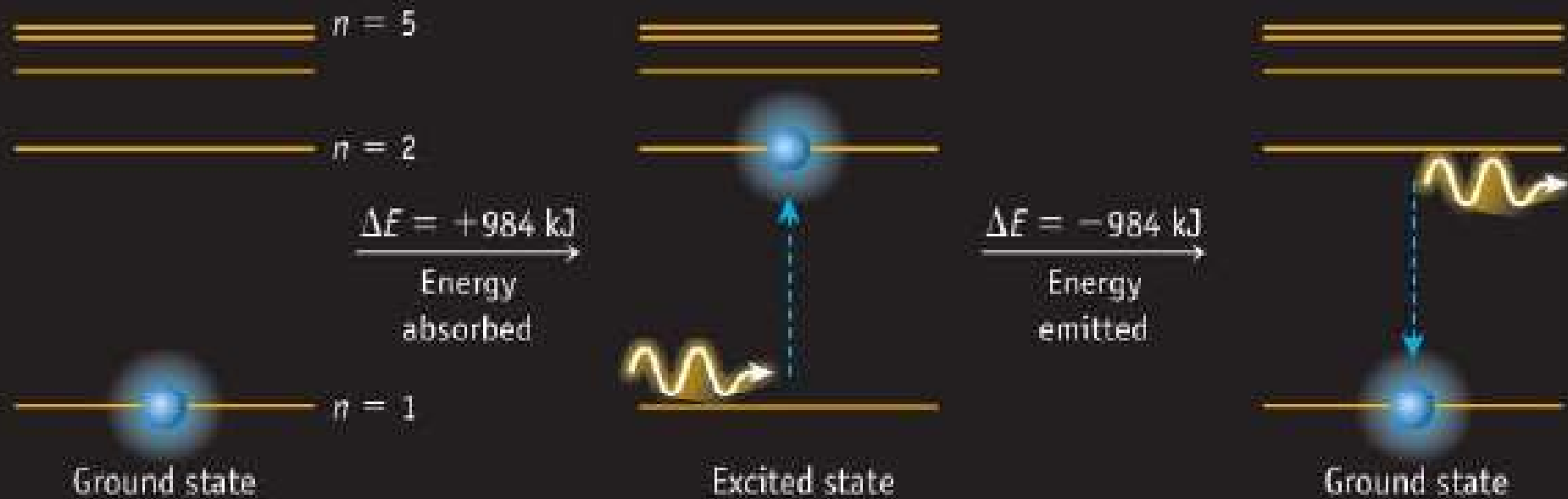
c é a velocidade da Luz - $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

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



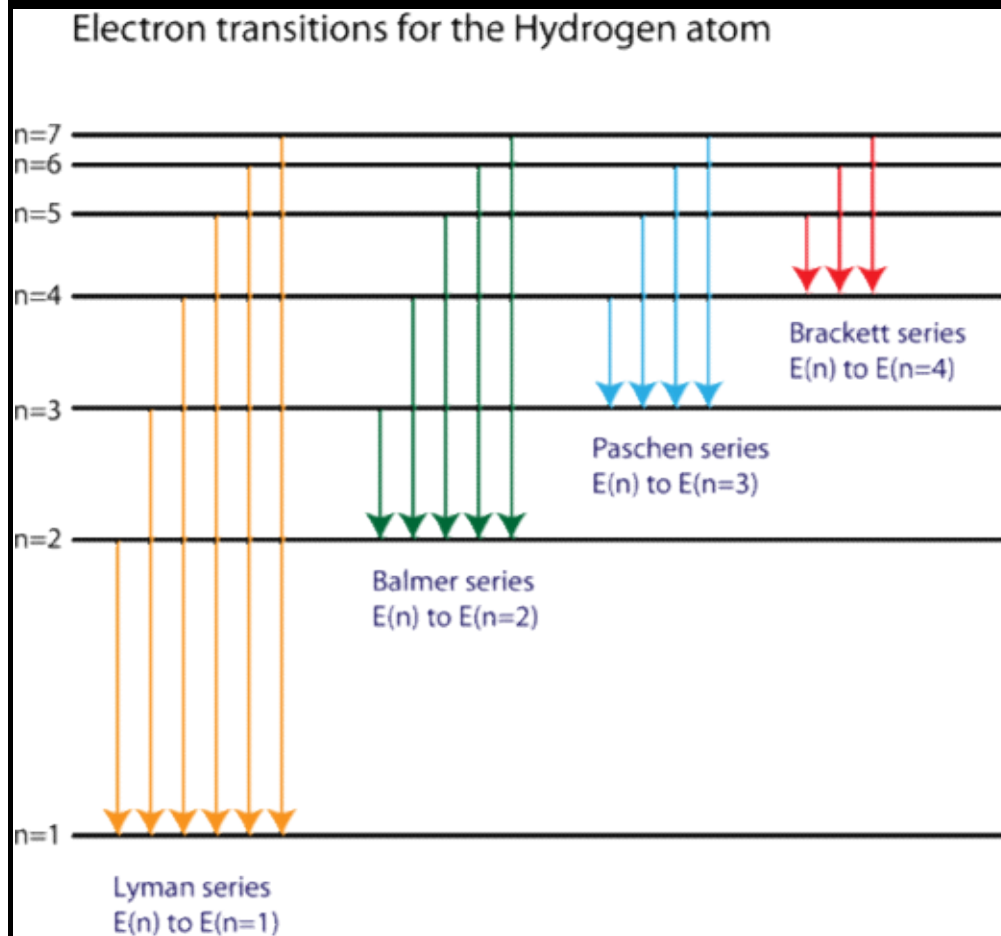
RESUMO

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

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



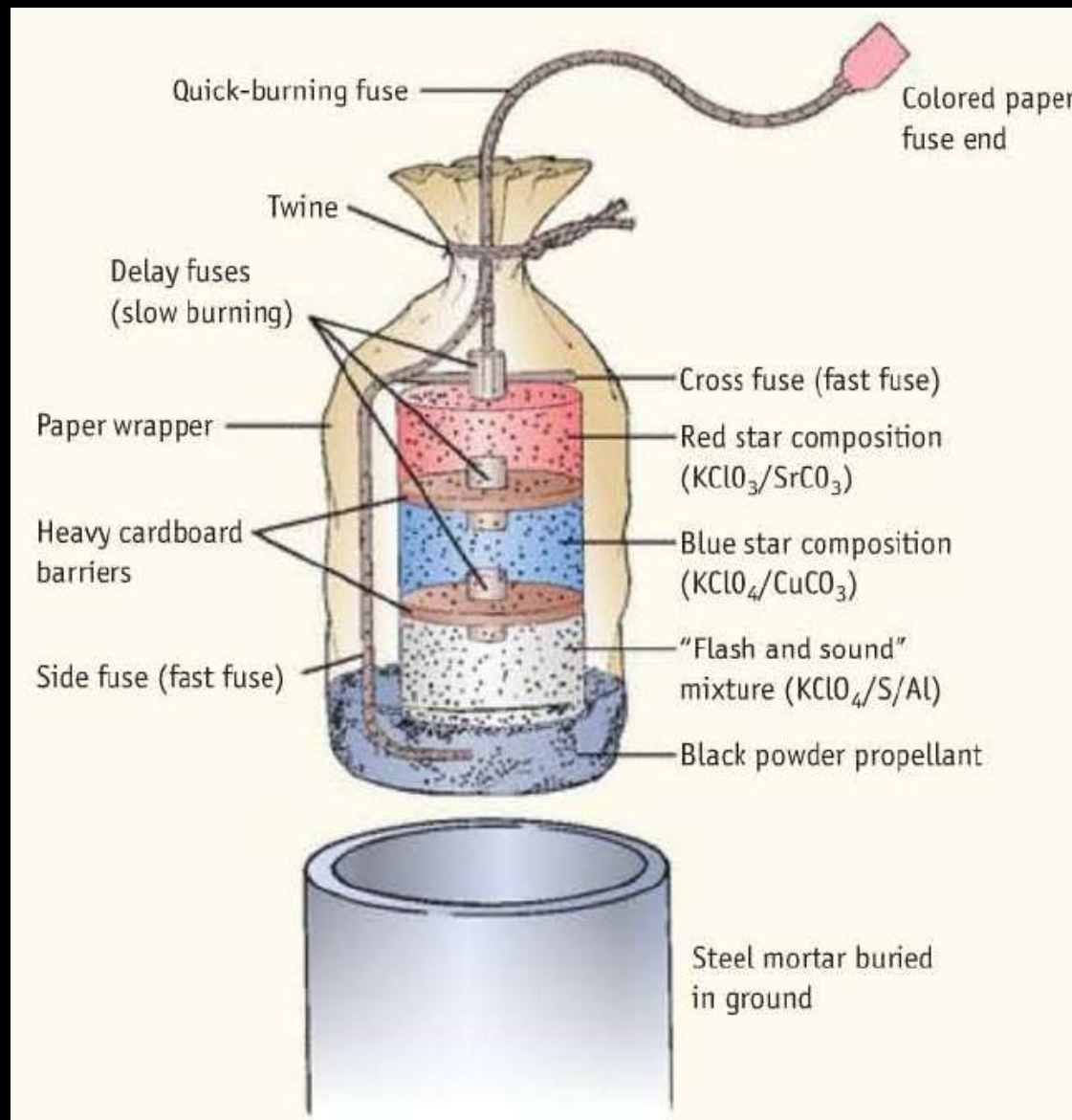
Emissão Atômica



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**

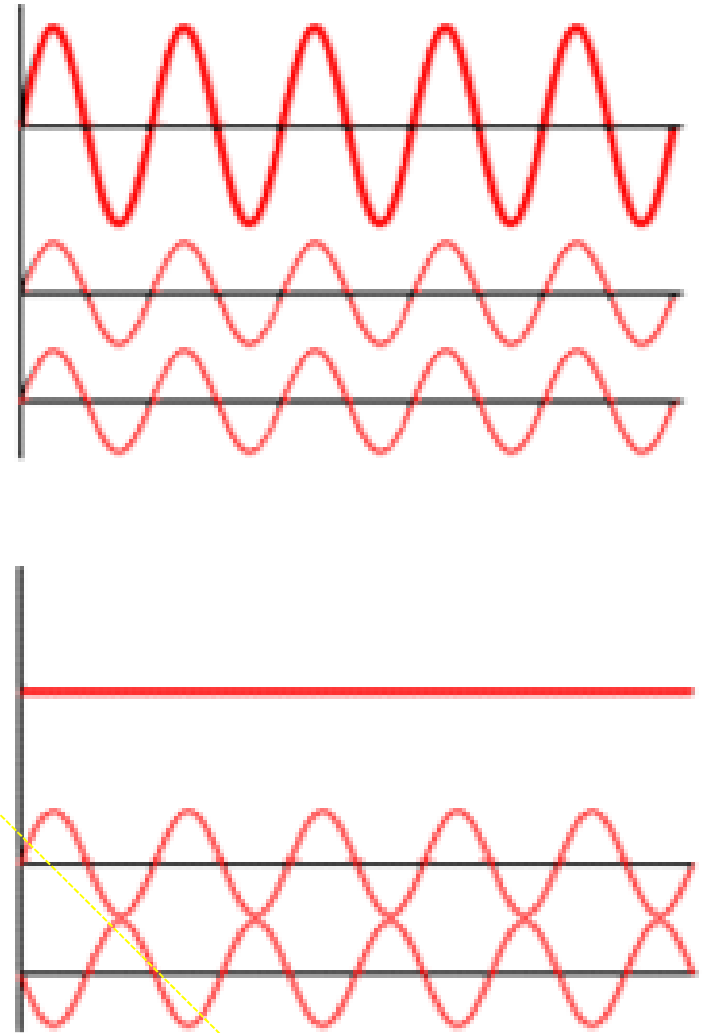
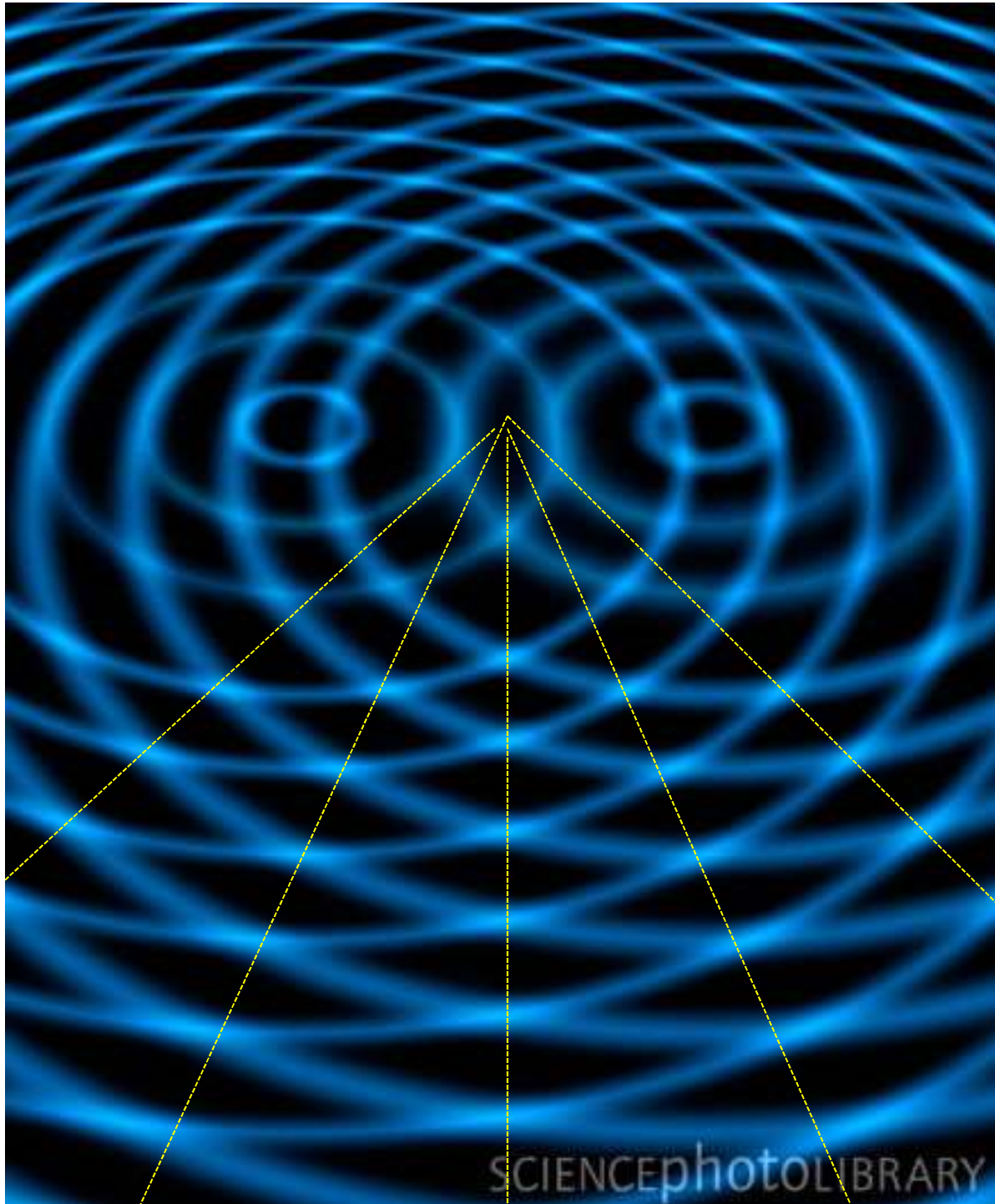
Tal como a radiação eletromagnética, a matéria apresenta igualmente uma dualidade onda-partícula.

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

Difração
as ondas cooperar entre si.

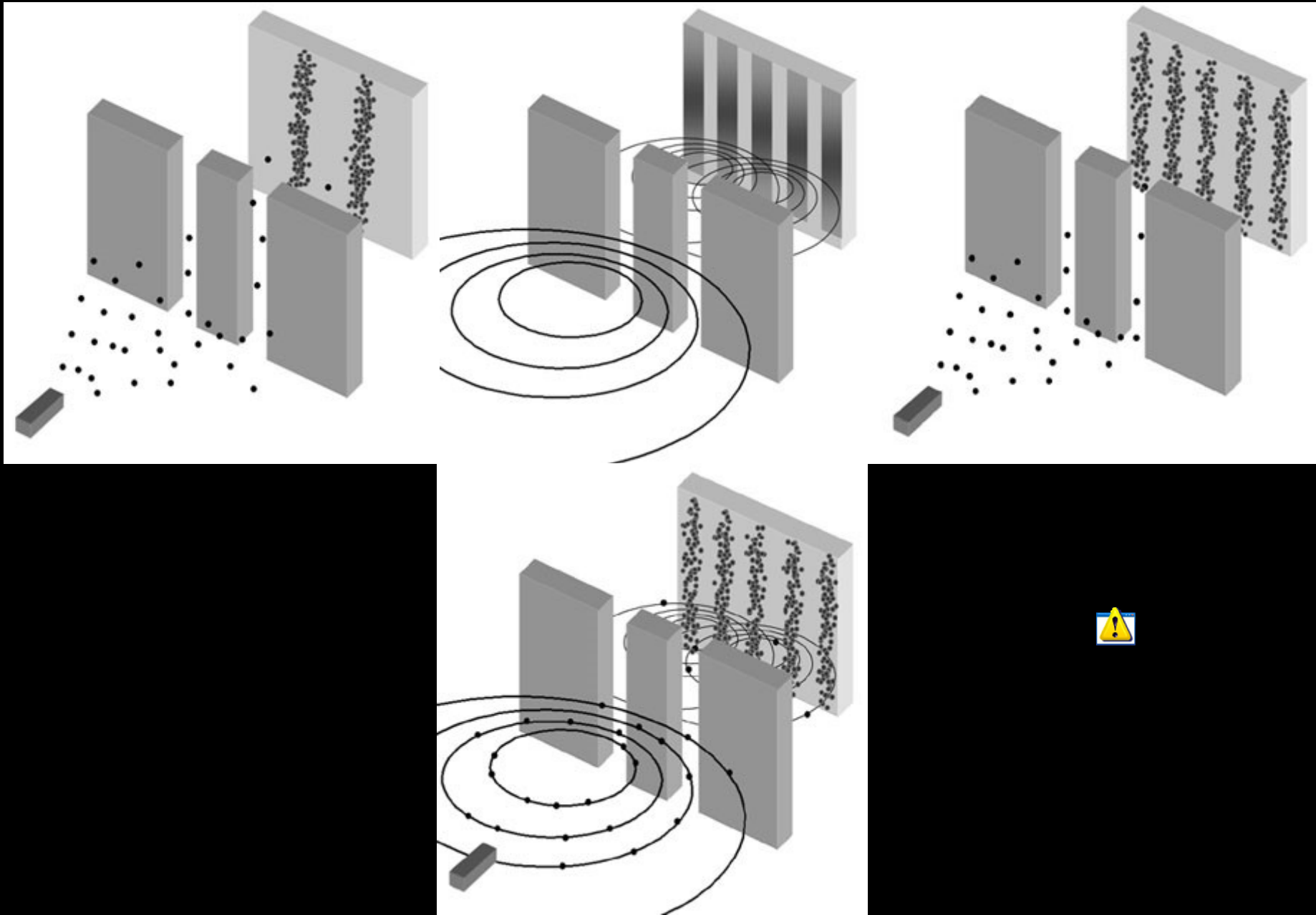


Interferência

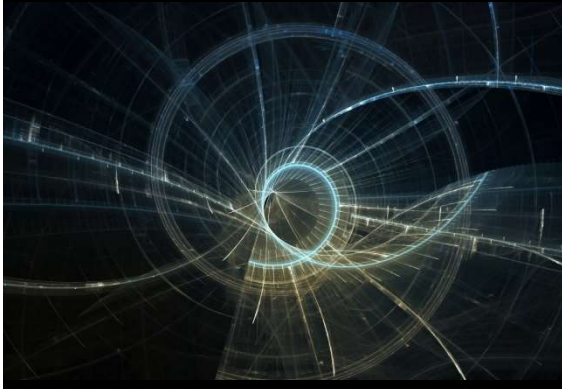


SCIENCEPHOTOLIBRARY

As comprovações experimentais de Broglie



Mecânica quântica

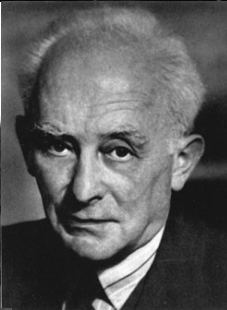
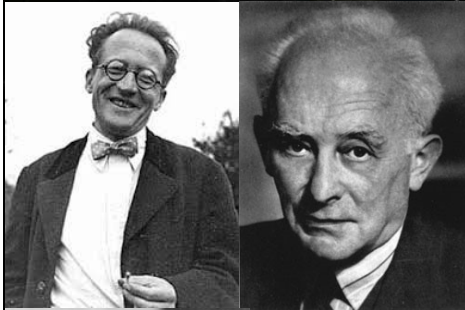


Como a dualidade partícula onda afeta o nosso modelo de arranjo dos elétrons nos átomos ?

Erwin Schrodinger (1887-1961)

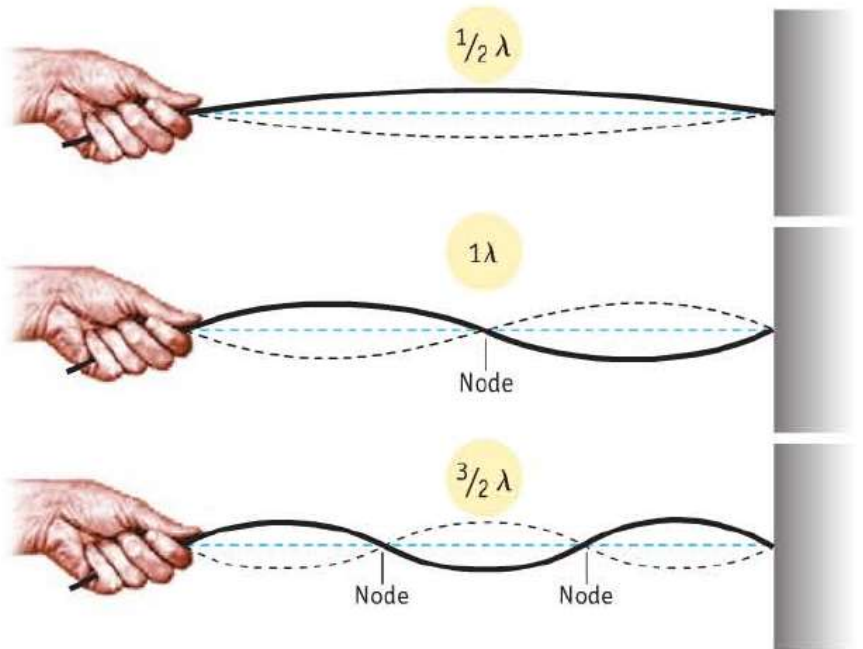
Max Born (1882-1970)

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

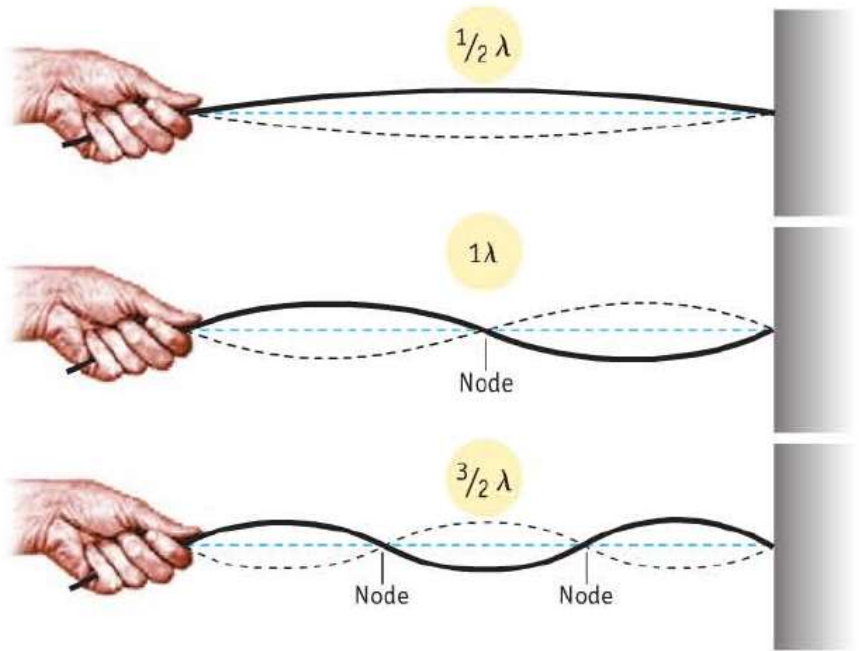


Corda estacionaria – onde apenas algumas vibrações são permitidas para essas ondas estacionarias. - **vibrações são quantizadas**

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).

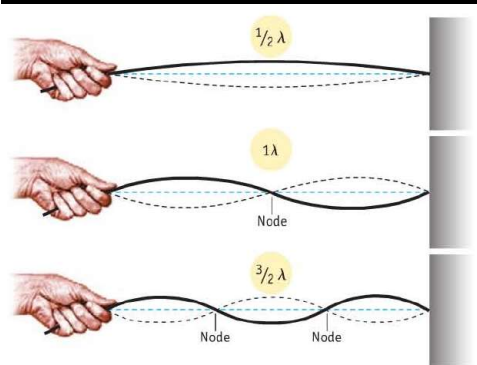
Somente **certas funções são consideráveis aceitáveis** e **cada uma esta associada a um valor de energia** - isto é, **a energia de um elétron no átomo é quantizada**



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

3 números inteiros

n, l, m_l – números quânticos.



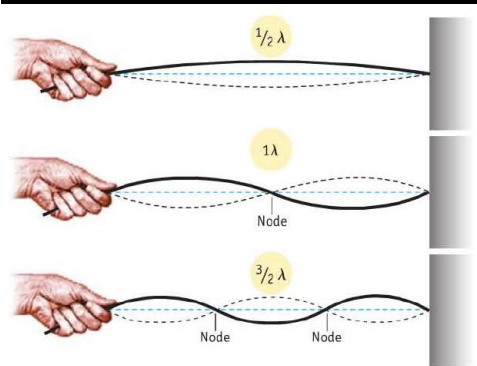
O próximo passo para entender o ponto de vista da mecânica quântica é explorar o **significado físico da onda psi (Ψ)**

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

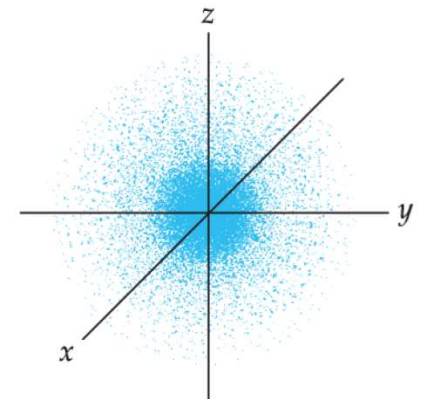
Quanto maior for Ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron

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

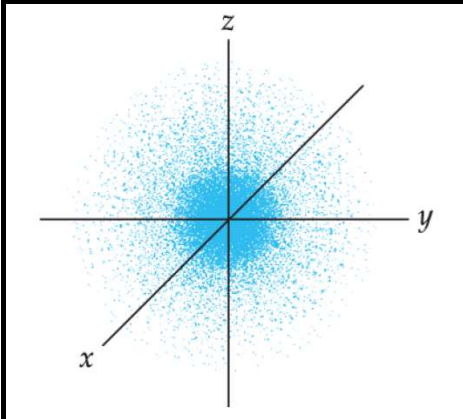
Quanto maior for ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron.

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?

Periodic Table of the Elements

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 22.989	12 Mg Magnesium 24.305											13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.064	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 69.723	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 84.464	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.96	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 101.906	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 Lanthanide series	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 [209]	85 At Astatine [209]	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.021	88 Ra Radium 226.025	89-103 Actinide series	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [265]	109 Mt Meitnerium [268]	110 Ds Darmstadtium [269]	111 Rg Roentgenium [272]	112 Cn Copernicium [285]	113 Uut Ununtrium [288]	114 Fl Flerovium [289]	115 Uup Ununpentium [288]	116 Lv Livermorium [293]	117 Uus Ununseptium [294]	118 Uuo Ununoctium [294]

57 La Lanthanum 138.905	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 261	102 No Nobelium 269.101	103 Lr Lawrencium [262]

Alkali Metal	Alkaline Earth	Transition Metal	Basic Metal	Semimetal	Nonmetal	Halogen	Noble Gas	Lanthanide	Actinide
alkali metal	alkaline earth	transition metal	basic metal	semimetal	nonmetal	halogen	noble gas	lanthanide	actinide

Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

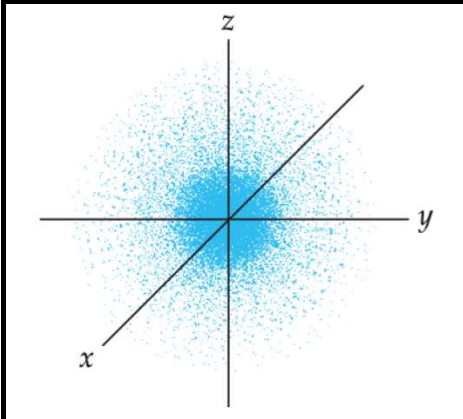
Estrutura dos átomos e tendências periódicas

Aula 4

Questões fundamentais desta matéria

- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- QUAL A FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?

Números quânticos e orbitais



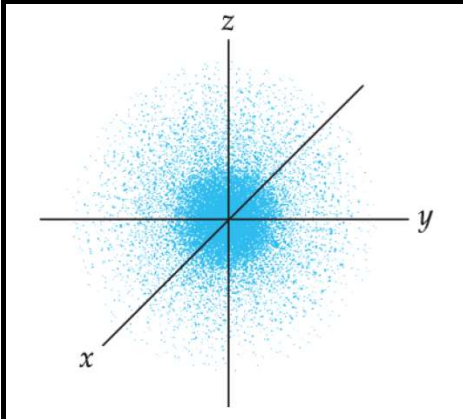
A **função de onda** para um elétron em um átomo descreve um **orbital atômico**.

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

Números quânticos e orbitais

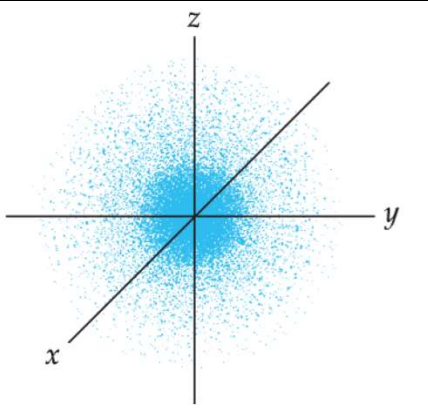


Numero quântico principal n – pode ter qualquer numero inteiro de 1 até infinito - define o tamanho do orbital.

Quanto **maior for n maior** será o **tamanho do orbital**

Átomo pode ter dois ou mais eletrons com o mesmo número quântico principal (n)

Esses electrons estão na **mesma camada electrónica.**



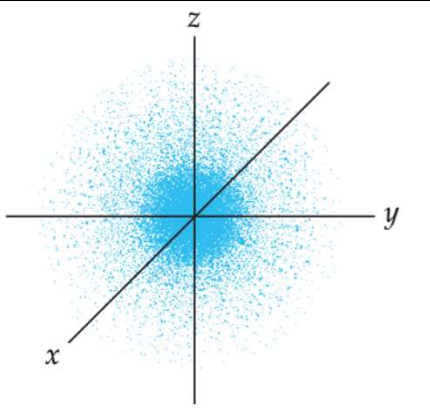
l é o número quântico de momento angular da orbital

Os orbitais de uma camada electrónica podem estar agrupados em subcamadas cada uma das quais caracterizadas por um valor de l diferente -

Valor de l	Classificação o subcamada
0	s
1	p
2	d
3	f

Momento angular orbital que define a forma característica de um orbital – diferentes valores de l correspondem a diferentes formas de orbitais

O valor n limita o número de subcamadas possíveis para cada camada. **$L = n - 1$**



m_l - é o *número quântico magnético* e

E está relacionado com a orientação no espaço dos orbitais dentro de uma subcamada.

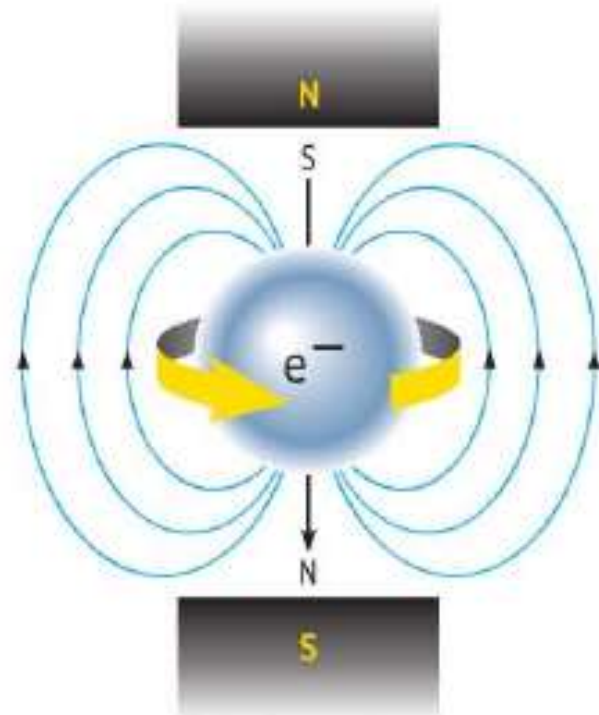
Orbitais em uma determinadas subcamada diferem na sua orientação.

O valor de m_l | pode variar entre $+l$ e $-l$ com 0 incluído

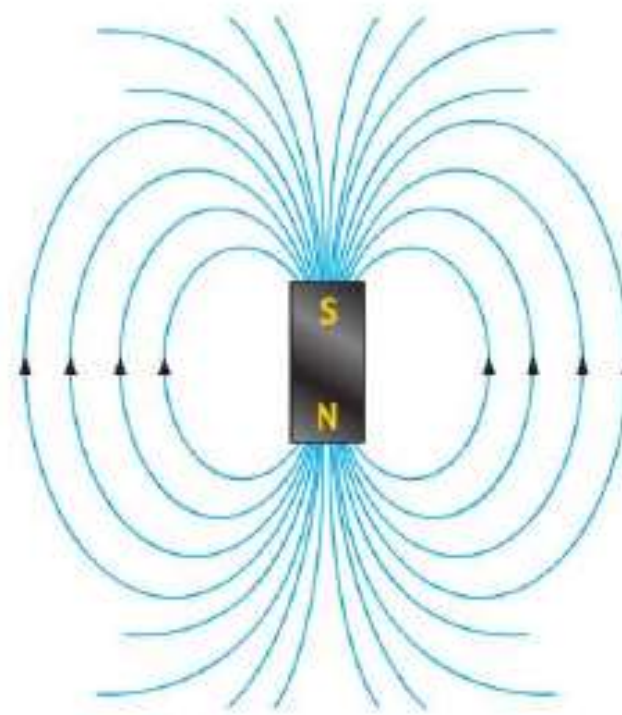
$n = 3 \rightarrow l = 2 \rightarrow m_l$ pode ter a 5 valores $-2, -1, 0, 1, 2,$

	Numero quântico
Camada	n
subcamada	l
Orbital	ml

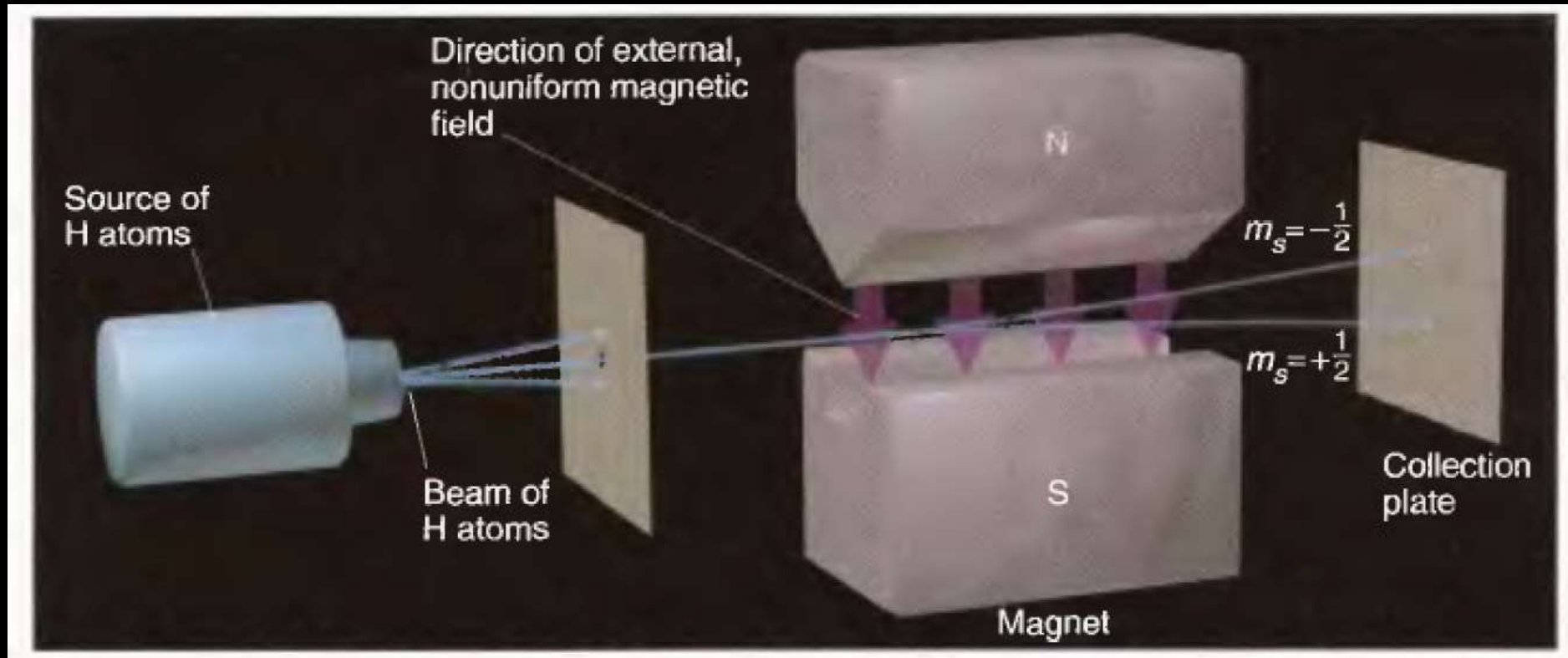
Spin – rotação do electron



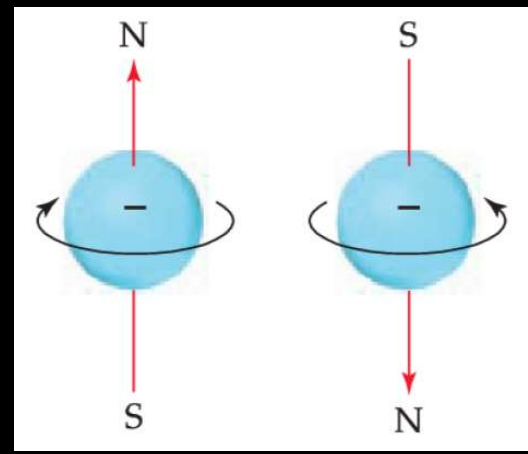
(a) Electron spin



(b) A bar magnet



$$m_s = +1/2$$



$$m_s = -1/2$$

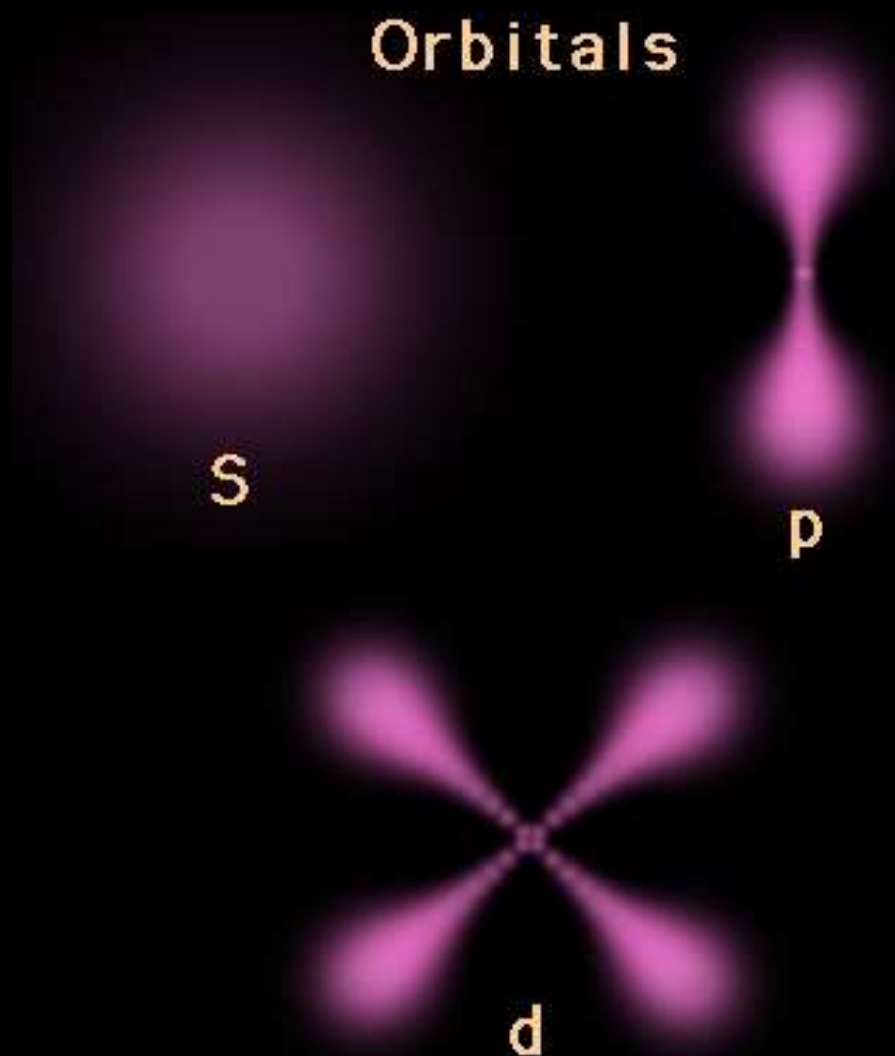
QUAL A FORMA DO ORBITAL

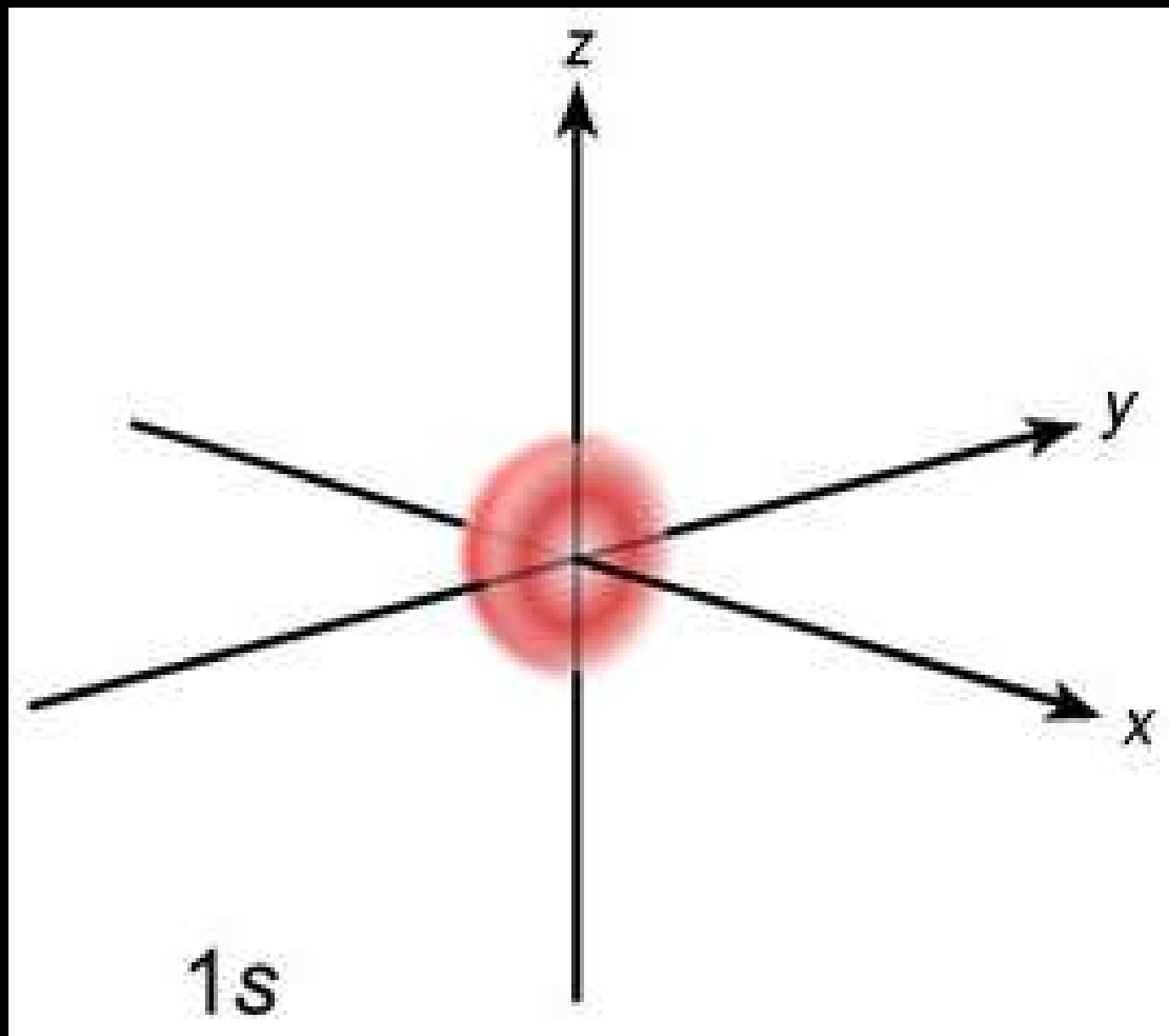
Orbitals

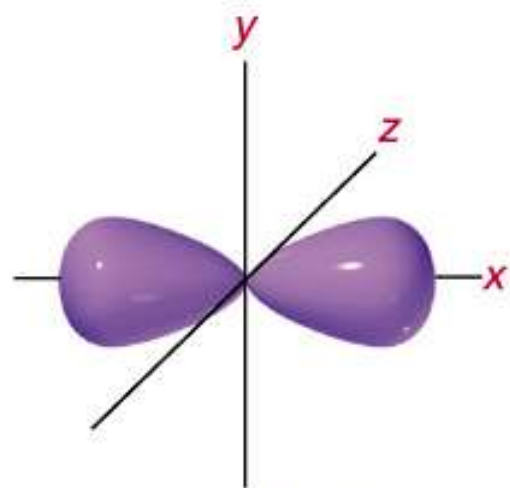
s

p

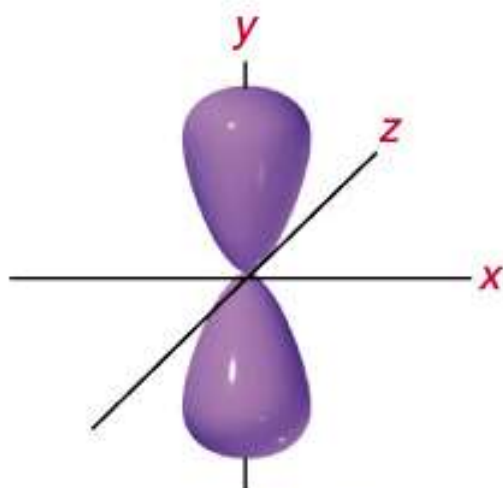
d



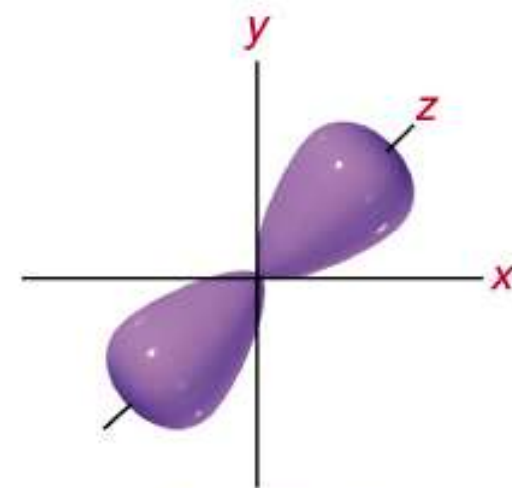




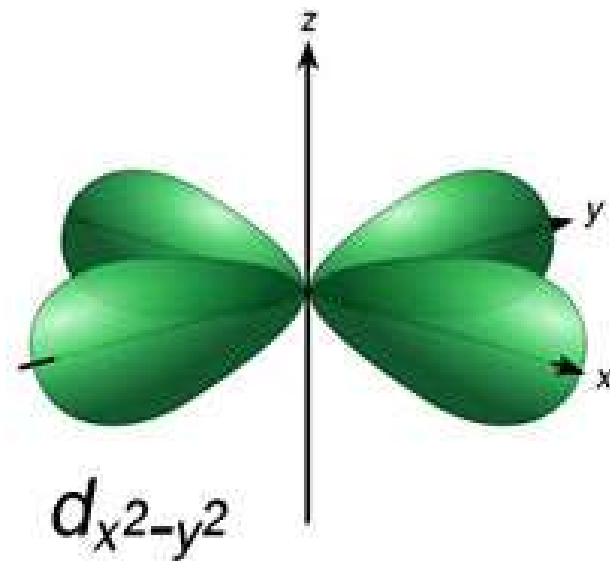
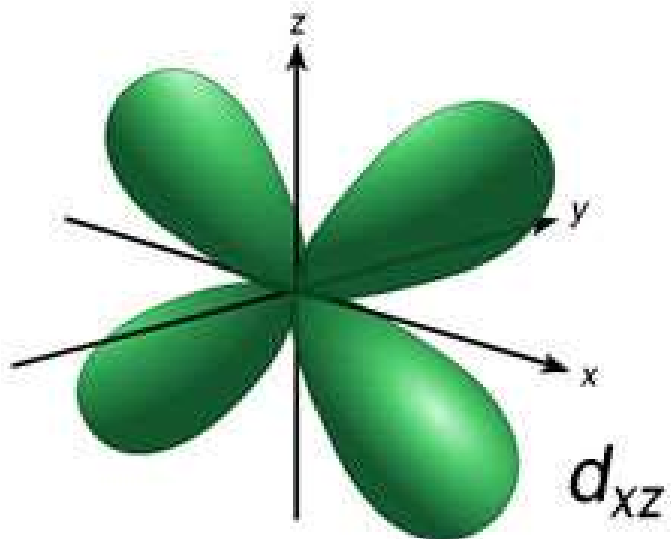
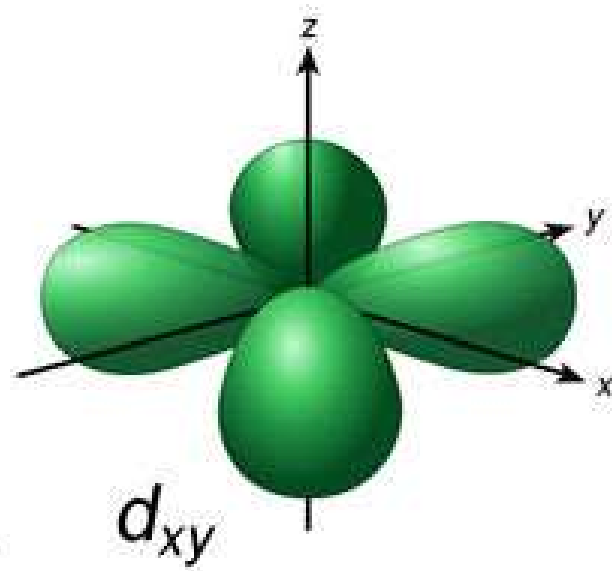
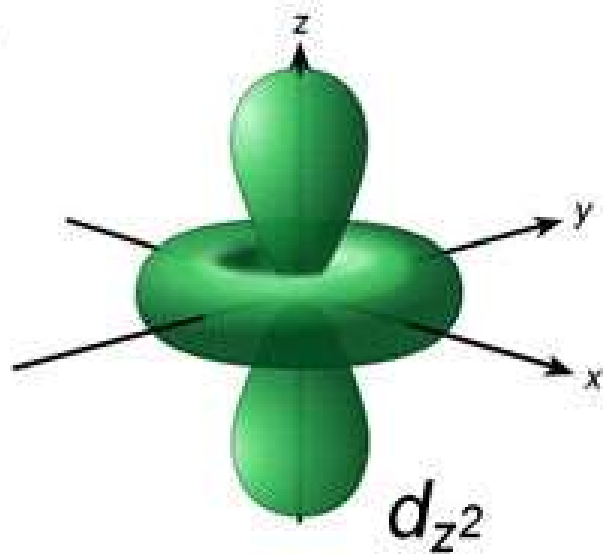
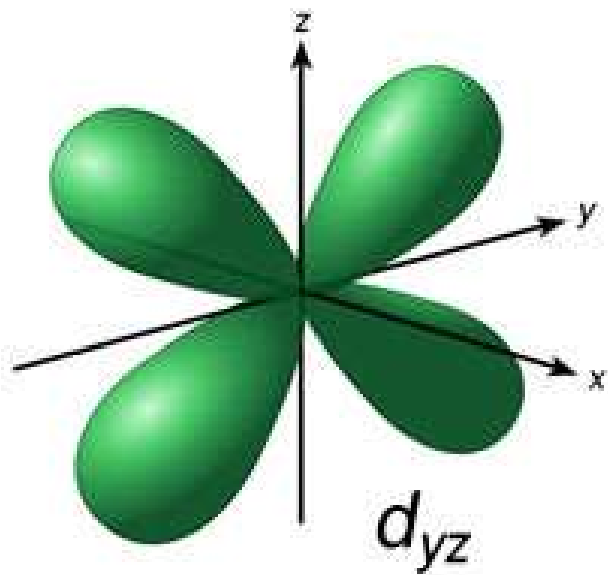
$2p_x$ orbital



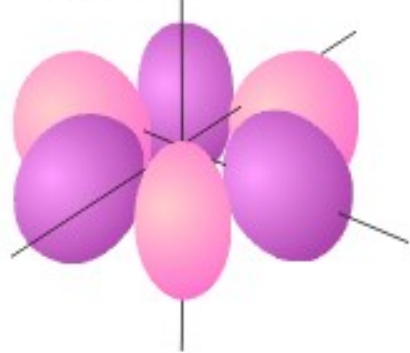
$2p_y$ orbital



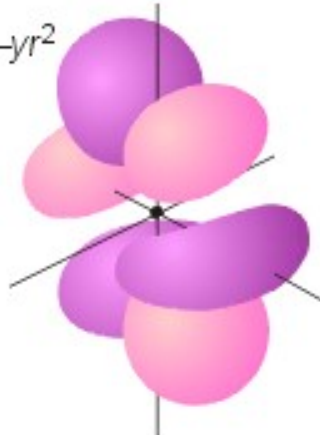
$2p_z$ orbital



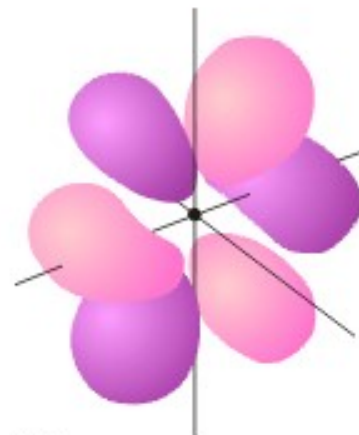
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



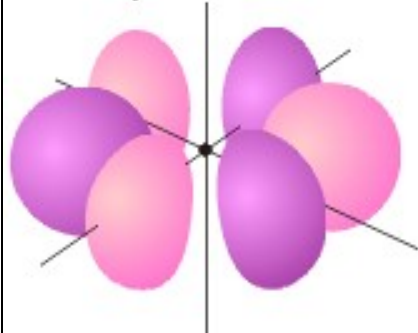
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



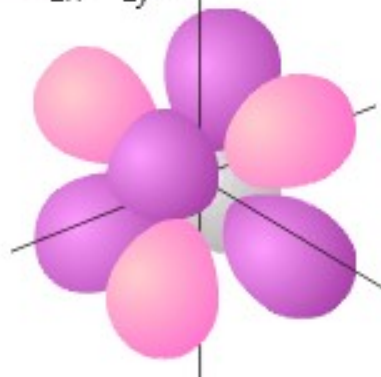
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



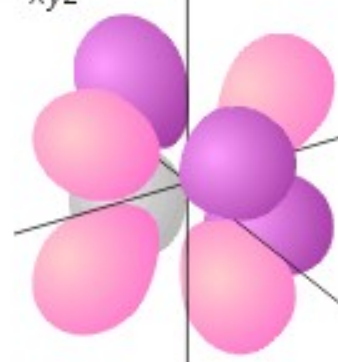
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



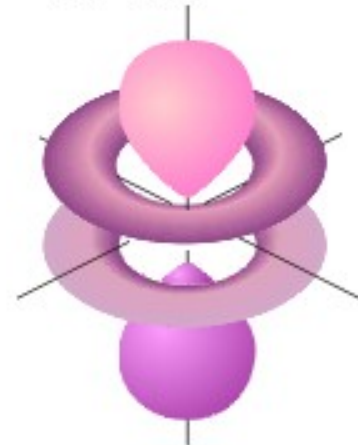
$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$



$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA– O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?

- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?

- NÚMEROS QUÂNTICOS

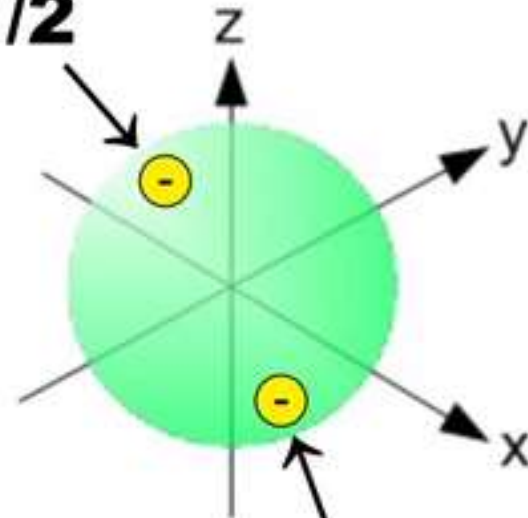
1s orbital

$$n = 1$$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$

$$m_s = +1/2$$

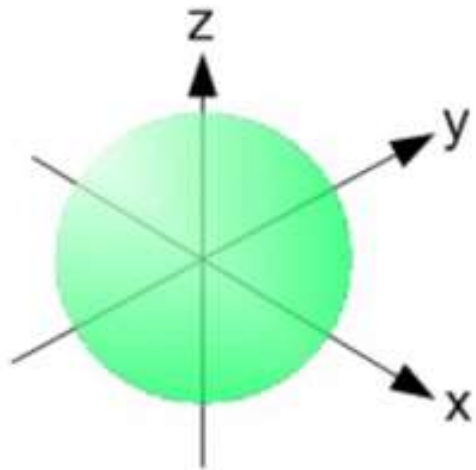


$$m_s = -1/2$$

$n = 2$

$l = 0$

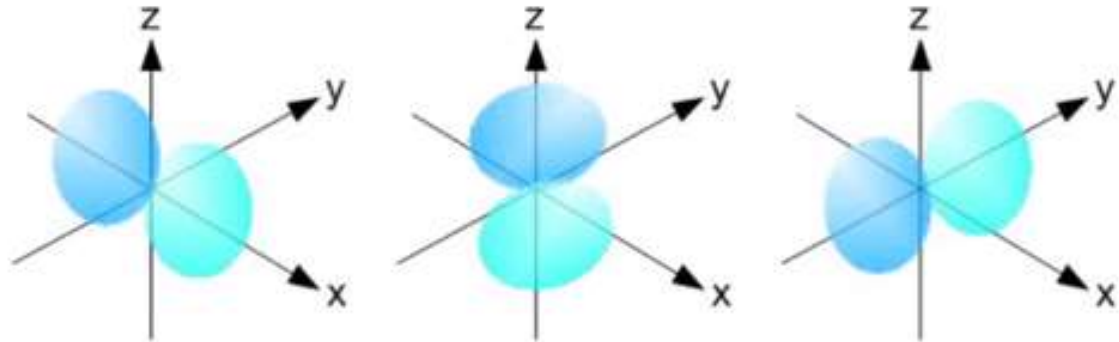
2s orbital



$m_l = 0$

$l = 1$

2p orbitals

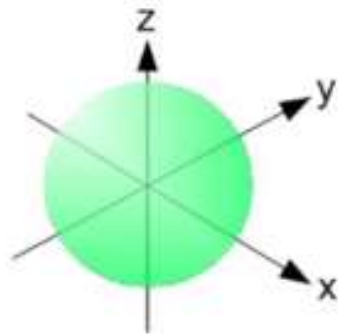


$m_l = -1, 0, 1$

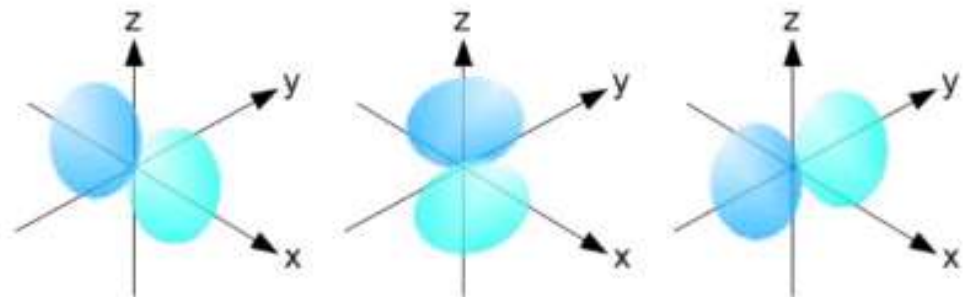


$n = 3$

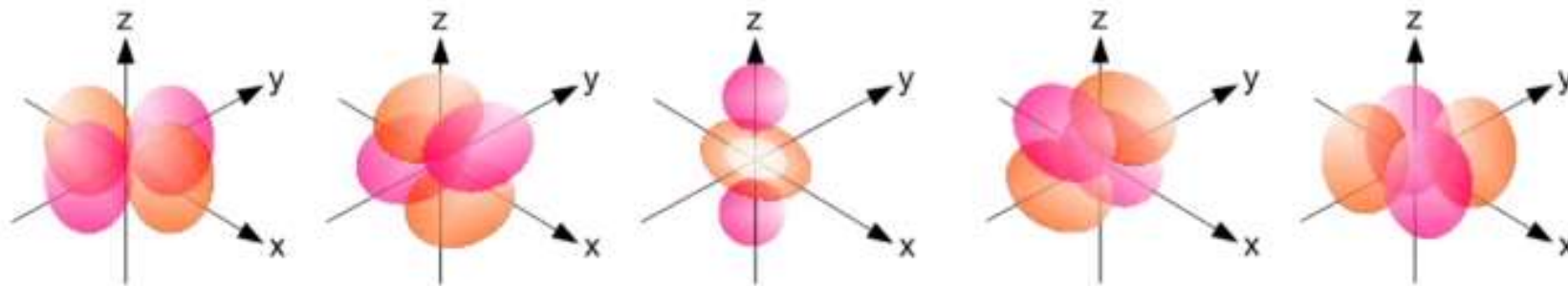
**$l = 0$
3s orbital**

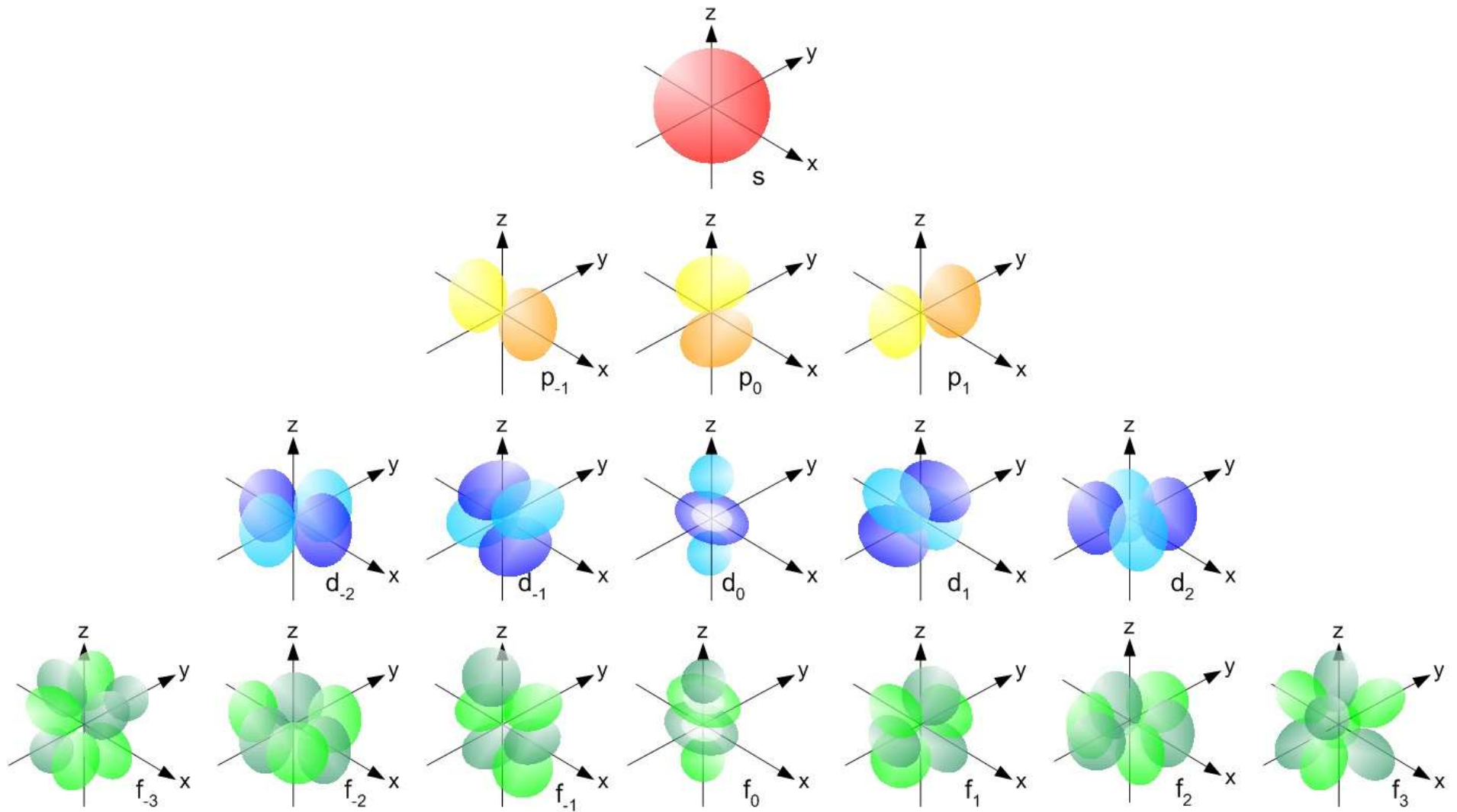


**$l = 1$
3p orbitals**

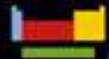


**$l = 2$
3d orbitals**

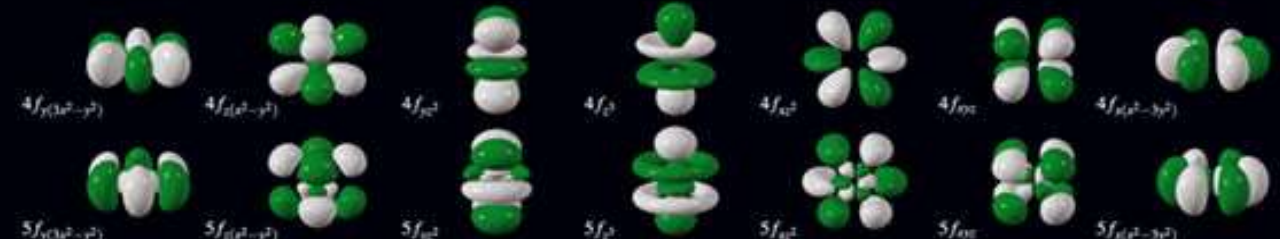
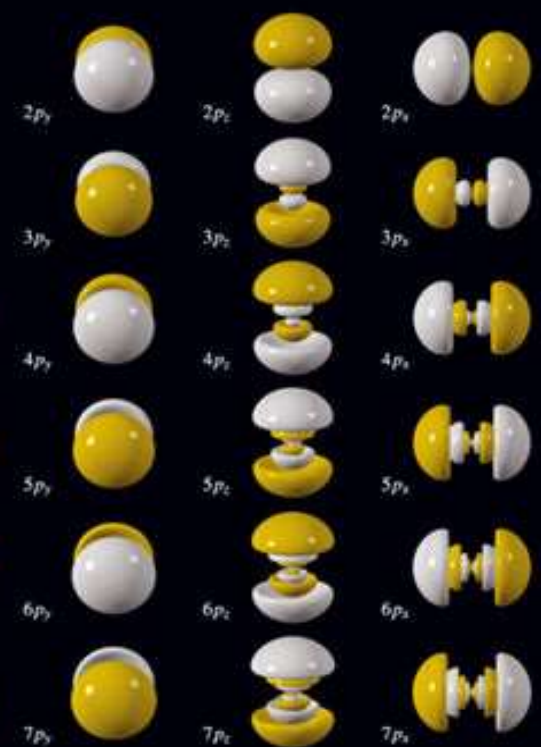
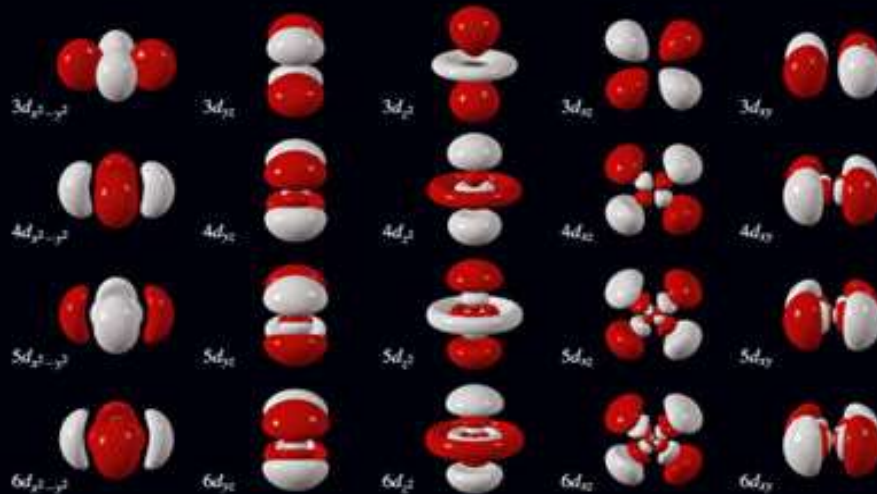




The Orbitron gallery of atomic orbitals



1s
2s
3s
4s
5s
6s
7s



s

p

d

e

f

1



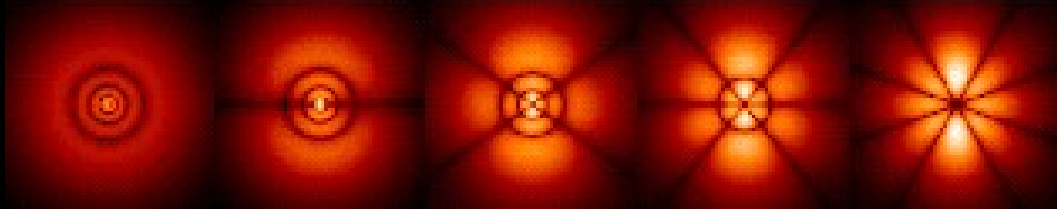
2

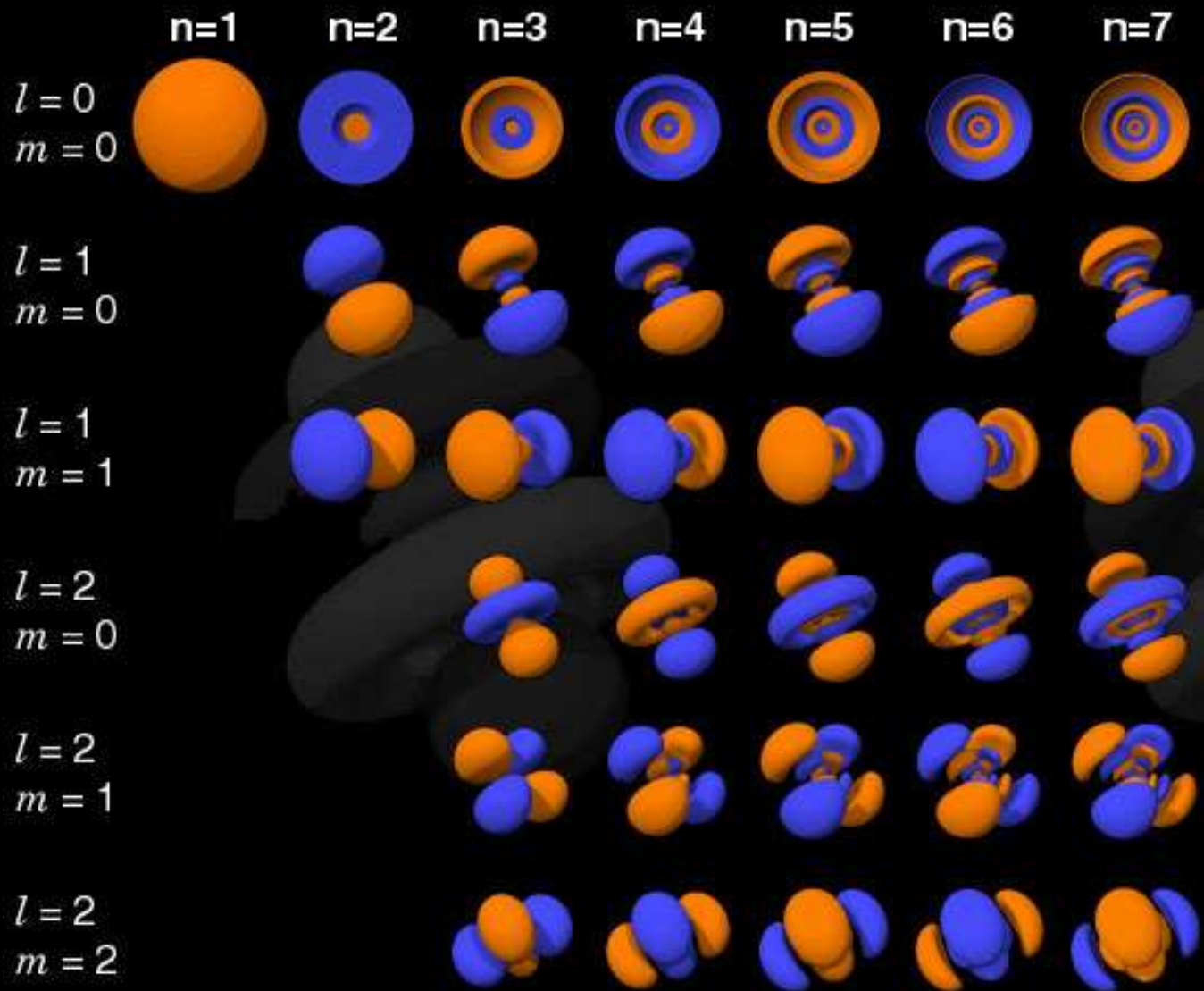


3



4

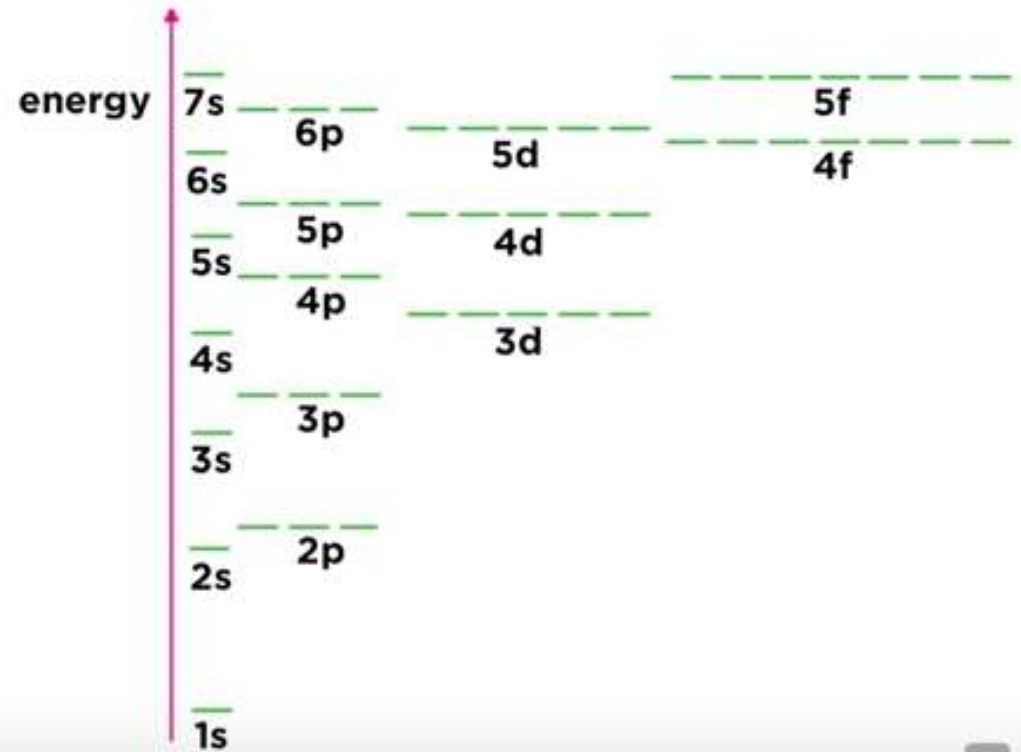
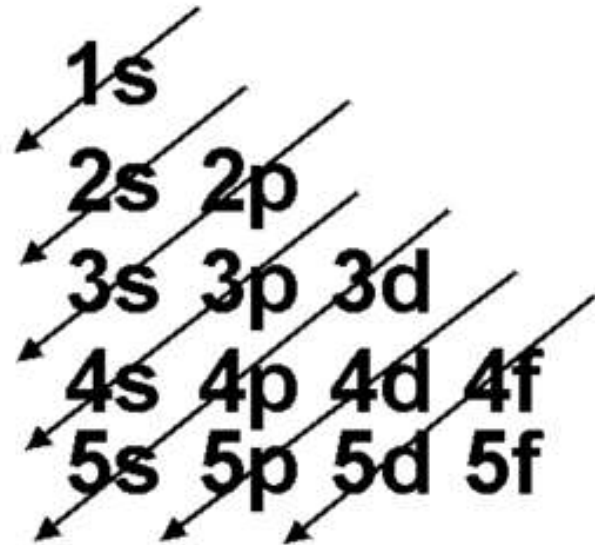


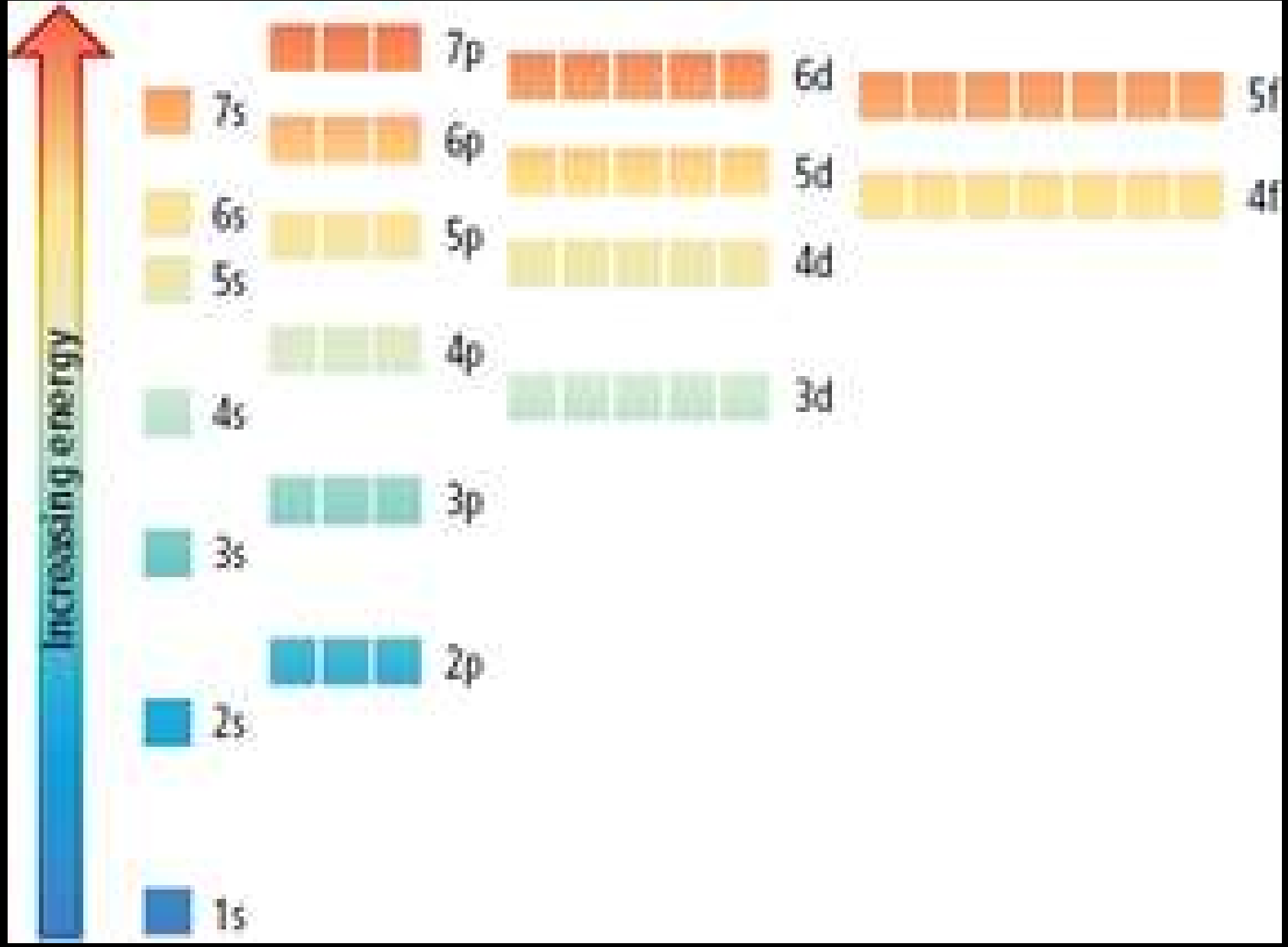


- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NÍVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NÍVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NÍVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS

- **FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS**

Aufbau Principle





hydrogen 1 H 1.0079																	helium 2 He 4.0026				
lithium 3 Li 6.941	beryllium 4 Be 9.0122															boron 5 B 10.811	carbon 6 C 12.011	nitrogen 7 N 14.007	oxygen 8 O 15.999	fluorine 9 F 18.998	neon 10 Ne 20.180
sodium 11 Na 22.990	magnesium 12 Mg 24.305															aluminum 13 Al 26.982	silicon 14 Si 28.086	phosphorus 15 P 30.974	sulfur 16 S 32.065	chlorine 17 Cl 35.453	argon 18 Ar 39.948
potassium 19 K 39.098	calcium 20 Ca 40.078	scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867	vanadium 23 V 50.942	chromium 24 Cr 51.996	manganese 25 Mn 54.938	iron 26 Fe 55.845	cobalt 27 Co 58.933	nickel 28 Ni 58.693	copper 29 Cu 63.546	zinc 30 Zn 65.39	gallium 31 Ga 69.723	germanium 32 Ge 72.61	arsenic 33 As 74.922	selenium 34 Se 78.96	bromine 35 Br 79.904	krypton 36 Kr 83.80				
rubidium 37 Rb 85.468	strontium 38 Sr 87.62	yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224	niobium 41 Nb 92.906	molybdenum 42 Mo 95.94	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07	rhodium 45 Rh 102.91	palladium 46 Pd 106.42	silver 47 Ag 107.87	cadmium 48 Cd 112.41	indium 49 In 114.82	tin 50 Sn 118.71	antimony 51 Sb 121.76	tellurium 52 Te 127.60	iodine 53 I 126.90	xenon 54 Xe 131.29				
cesium 55 Cs 132.91	barium 56 Ba 137.33	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.97	hafnium 72 Hf 178.49	tantalum 73 Ta 180.95	tungsten 74 W 183.84	rhenium 75 Re 186.21	osmium 76 Os 198.23	iridium 77 Ir 192.22	platinum 78 Pt 195.08	gold 79 Au 196.97	mercury 80 Hg 200.59	thallium 81 Tl 204.38	lead 82 Pb 207.2	bismuth 83 Bi 208.98	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]			
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 * *	lanthanum 103 La [202]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	ununilium 110 Uun [271]	unununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [273]	ununquadium 114 Uuq [289]								

* Lanthanide series

lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.04
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

** Actinide series

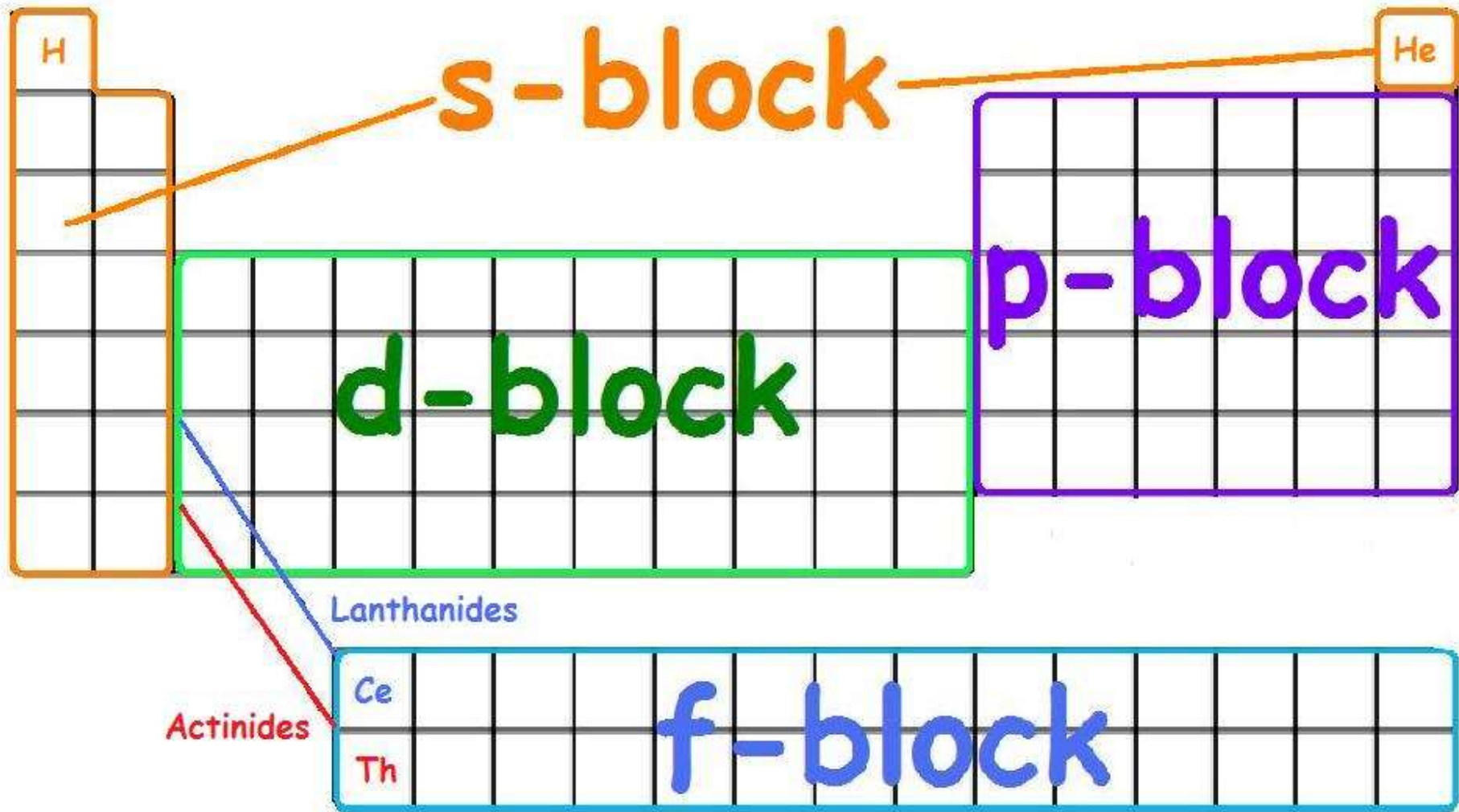
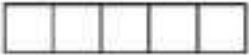

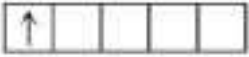



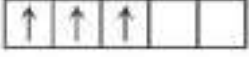

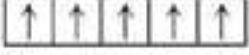

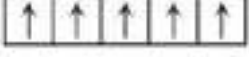

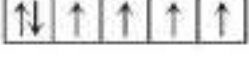



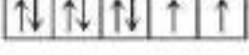

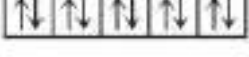





TABLE 7.4 Orbital Box Diagrams for the Elements Ca Through Zn

		<i>3d</i>	<i>4s</i>
Ca	[Ar]4s ²		
Sc	[Ar]3d ¹ 4s ²		
Ti	[Ar]3d ² 4s ²		
V	[Ar]3d ³ 4s ²		
Cr*	[Ar]3d ⁵ 4s ¹		
Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²		
Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²		
Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²		
Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²		
Cu*	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹		
Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²		

Periodic Table of the Elements

1 1IA 11A																	18 VIIIA 8A
1 H Hydrogen 1.0079	2 IIA 2A											13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 He Helium 4.0026
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.01218											5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.998403	10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.989768	12 Mg Magnesium 24.305	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 VIII 8	9 VIII 8	10 VIII 8	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 Al Aluminum 26.981539	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.95591	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.847	27 Co Cobalt 58.9332	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98.9072	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.9055	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.8	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.29
55 Cs Cesium 132.90543	56 Ba Barium 137.327	57-71	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	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 196.9665	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98037	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine 208.9871	86 Rn Radon 222.0176
87 Fr Francium 223.0197	88 Ra Radium 226.0254	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 Uuq Ununquadium [289]	115 Uup Ununpentium unknown	116 Uuh Ununhexium [288]	117 Uus Ununseptium unknown	118 Uuo Ununoctium unknown
Lanthanide Series	57 La Lanthanum 138.9055	58 Ce Cerium 140.115	59 Pr Praseodymium 140.90765	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium 144.9127	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.9655	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967		
Actinide Series	89 Ac Actinium 227.0278	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactinium 231.03626	92 U Uranium 238.0289	93 Np Neptunium 237.0482	94 Pu Plutonium 244.0642	95 Am Americium 243.0614	96 Cm Curium 247.0700	97 Bk Berkelium 247.0700	98 Cf Californium 251.0796	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.0854	101 Md Mendelevium 258.1	102 No Nobelium 259.1008	103 Lr Lawrencium [262]		
	Alkali Metal	Alkaline Earth	Transition Metal	Basic Metal	Semimetals	Nonmetals	Halogens	Noble Gas	Lanthanides	Actinides							

- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL .
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA.
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NUMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)

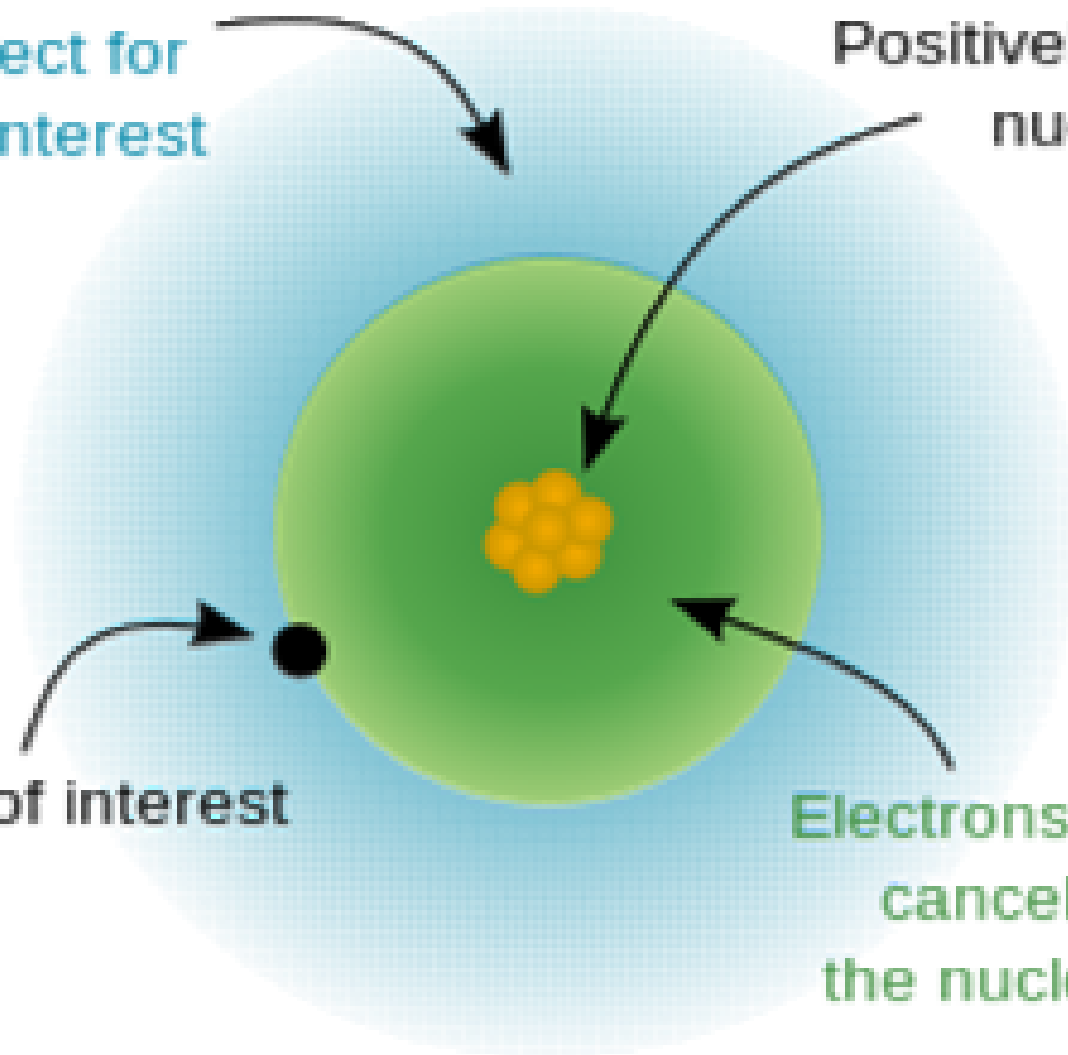
Carga nuclear efectiva – $Z^* = Z - s$

Electrons outside
have no effect for
electron of interest

Positively charged
nucleus

Electron of interest

Electrons in between
cancel some of
the nuclear charge



Regras de Slater

Electrão de interesse em orbital **s** ou **p**

0,35 para os electrons no mesmo nível de energia (mesmo n).

0,85 para os electrons no nível de energia imediatamente abaixo ($n-1$).

1 para os electrons nos nível de energia seguintes ($n-2$).

Electrão de interesse em orbital **d** ou **f**

0,35 para os electrons no mesmo nível de energia (mesmo n).

1 para os electrons nos nível de energia seguintes.

Qual o papel do spin?

Paramagéticos vs dimagnéticos

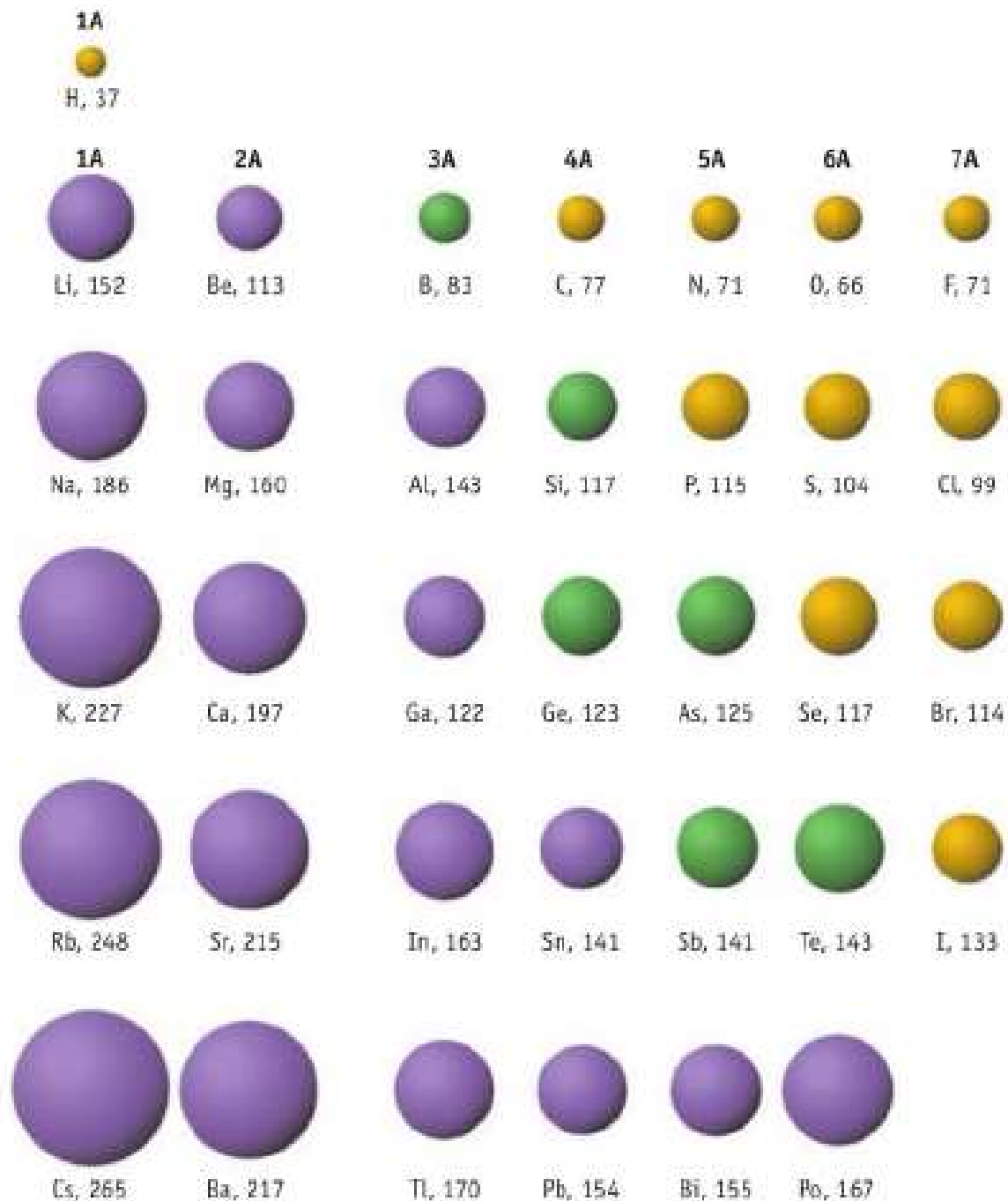
			1s	2s	2p
Lithium	Li	$1s^2 2s^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\square \square \square
Beryllium	Be	$1s^2 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\square \square \square
Boron	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \square \square
Carbon	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \square
Nitrogen	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \uparrow \uparrow
Oxygen	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow
Fluorine	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow
Neon	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$

TABLE 7.4 Orbital Box Diagrams for the Elements Ca Through Zn

		<i>3d</i>	<i>4s</i>
Ca	[Ar]4s ²		
Sc	[Ar]3d ¹ 4s ²		
Ti	[Ar]3d ² 4s ²		
V	[Ar]3d ³ 4s ²		
Cr*	[Ar]3d ⁵ 4s ¹		
Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²		
Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²		
Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²		
Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²		
Cu*	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹		
Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²		

- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)

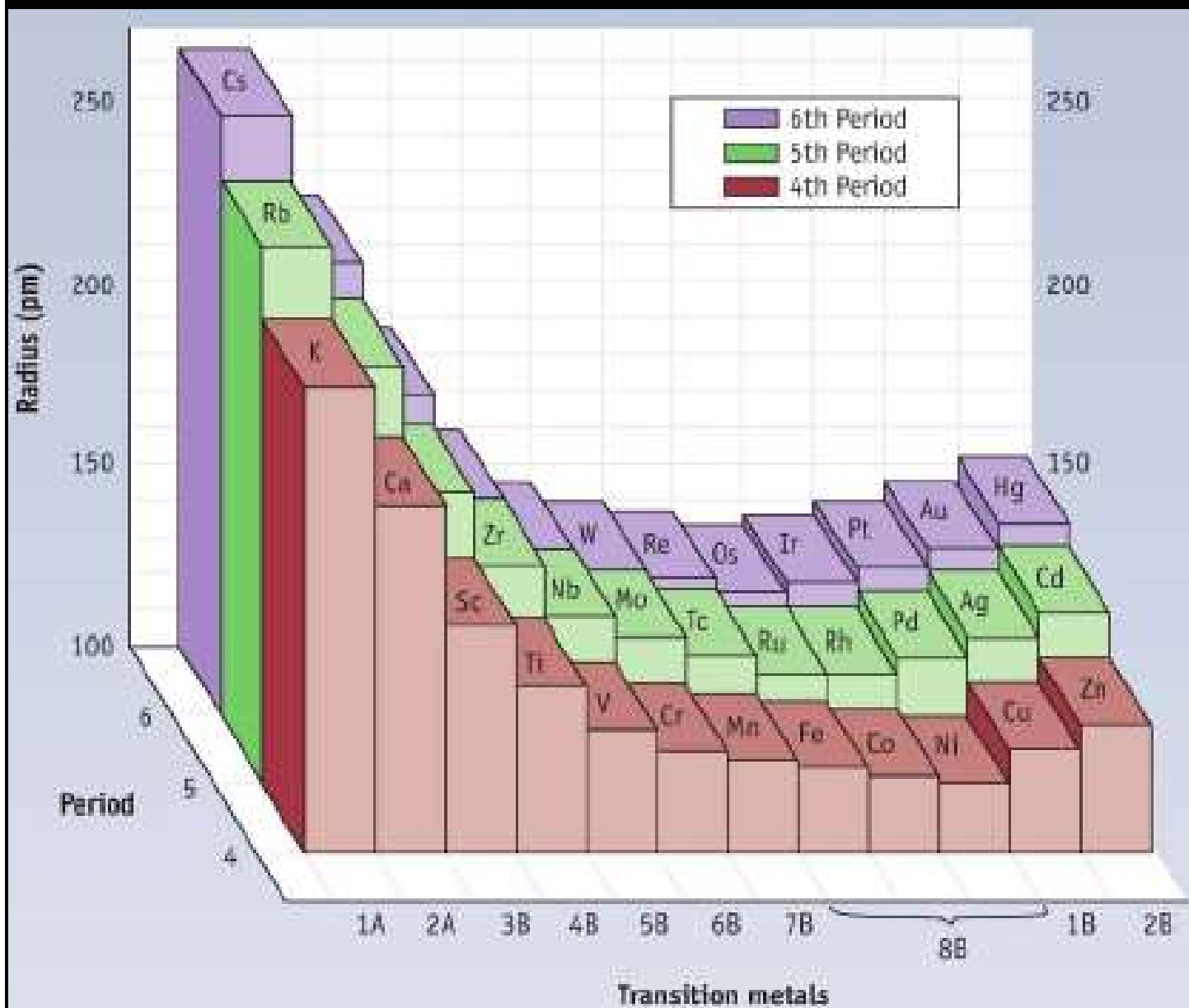
- **RAIO ATÔMICO**



Raio atômico

Tamanho do raio é determinado pelos elétrons da camada mais externa.

Raio atômico



- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)
- RAIO ATÔMICO

- **ENERGIA DE IONIZAÇÃO**

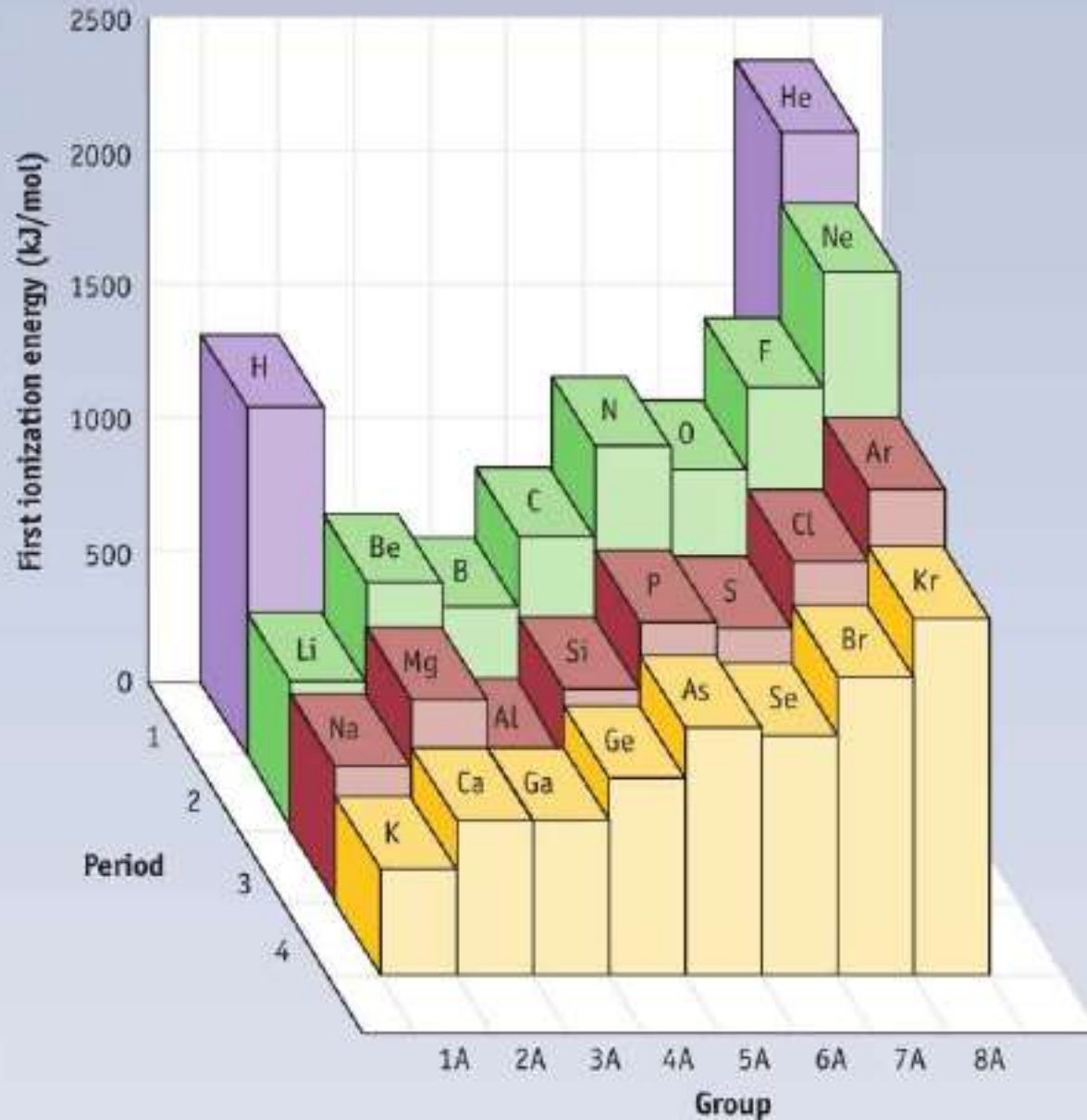
Energia de ionização

É a energia necessária para remover um elétron de um átomo na fase gasosa

TABLE 7.5 First, Second, and Third Ionization Energies for the Main Group Elements in Periods 2–4 (kJ/mol)

2nd Period	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
1st	513	899	801	1086	1402	1314	1681	2080
2nd	7298	1757	2427	2352	2856	3388	3374	3952
3rd	11815	14848	3660	4620	4578	5300	6050	6122
3rd Period	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
1st	496	738	577	787	1012	1000	1251	1520
2nd	4562	1451	1817	1577	1903	2251	2297	2665
3rd	6912	7732	2745	3231	2912	3361	3826	3928
4th Period	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
1st	419	590	579	762	947	941	1140	1351
2nd	3051	1145	1979	1537	1798	2044	2104	2350
3rd	4411	4910	2963	3302	2735	2974	3500	3565

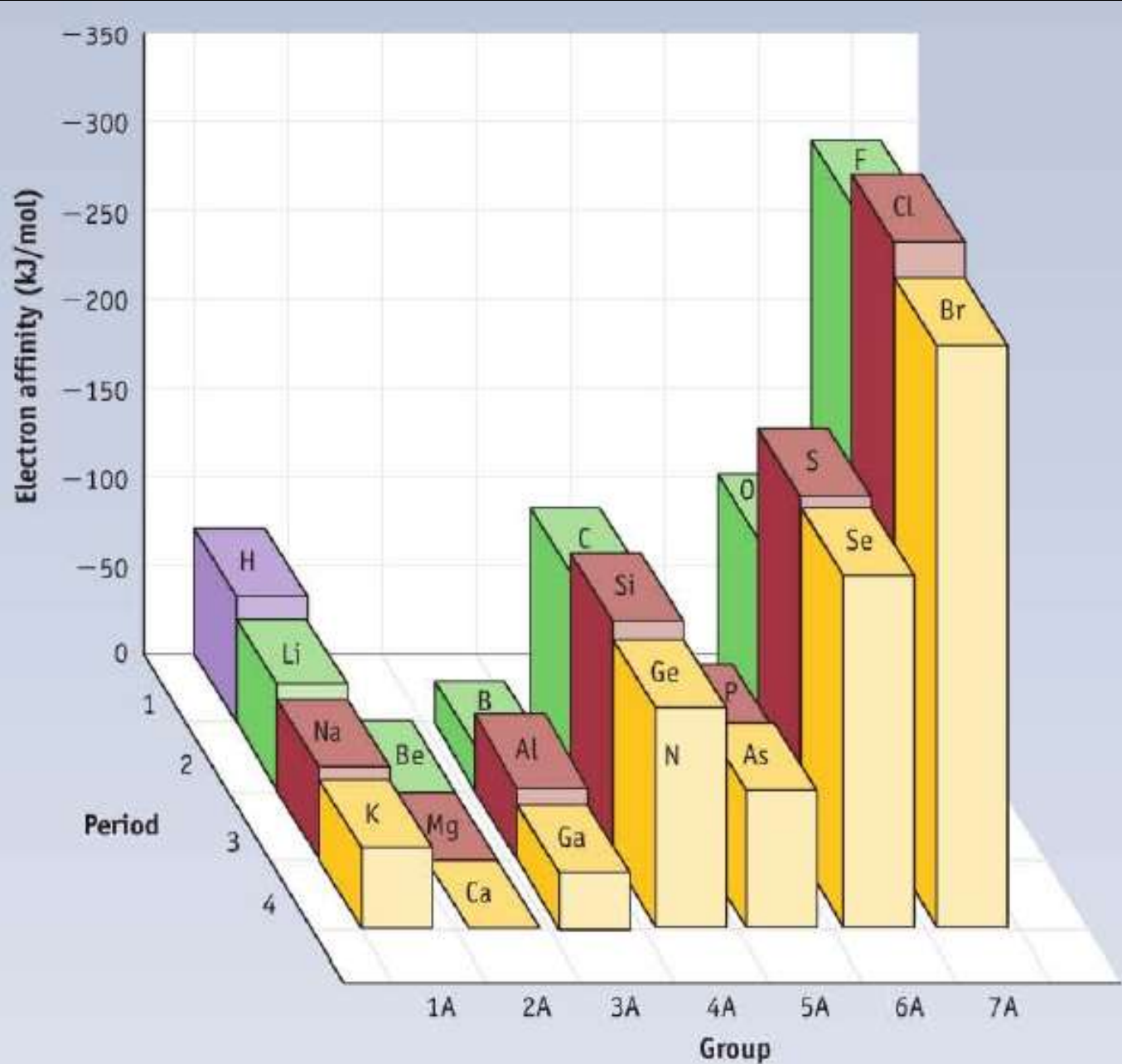
Primeira energia de ionização



- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)
- RAIO ATÔMICO
- ENERGIA DE IONIZAÇÃO

- **AFINIDADE ELECTRÔNICA**

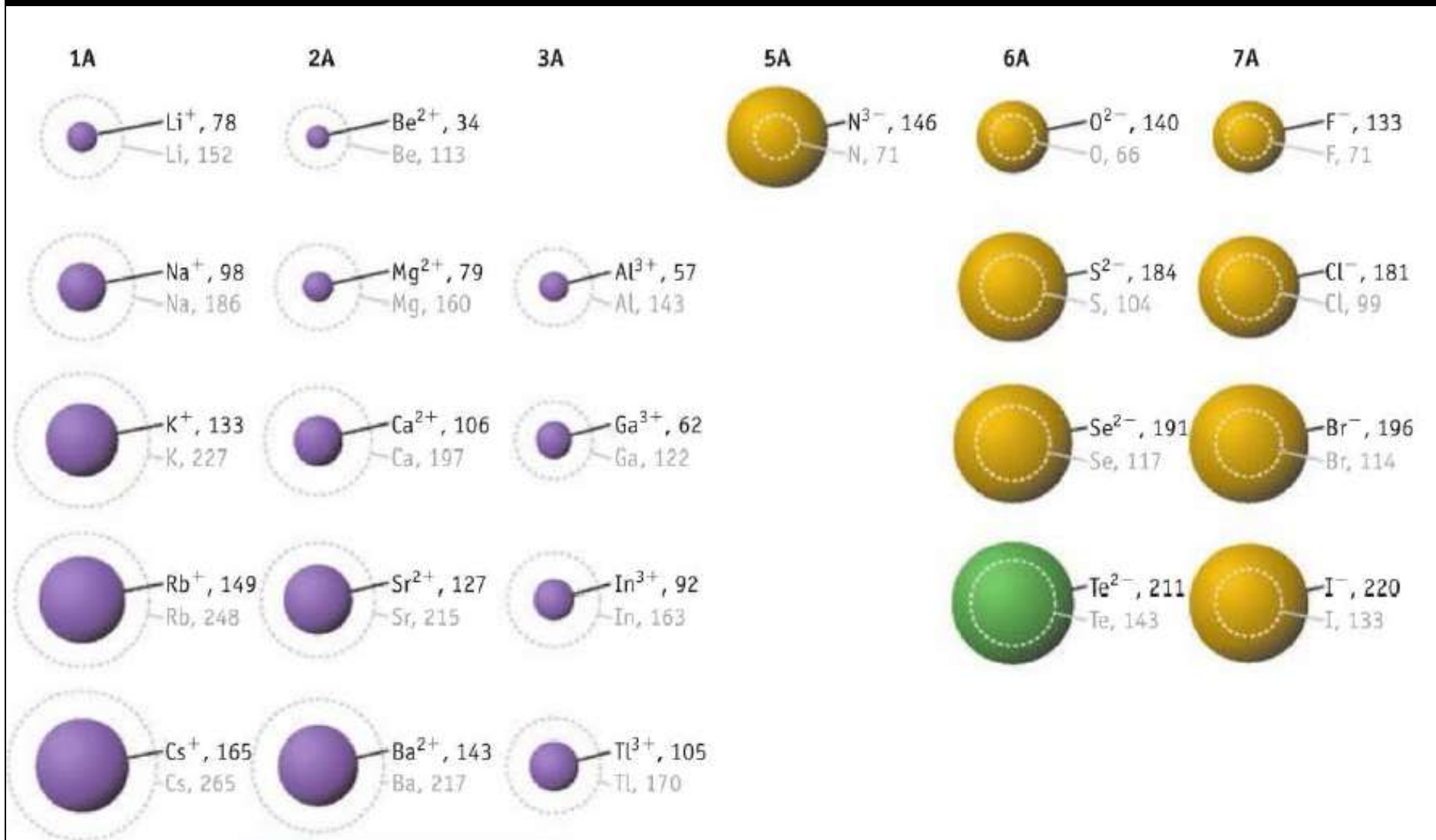
Afinidade electrónica



- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)
- RAIO ATÔMICO
- ENERGIA DE IONIZAÇÃO
- AFINIDADE ELECTRÔNICA

- **RAIOS IÔNICOS**

Raios iônicos



- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)
- RAIO ATÔMICO
- ENERGIA DE IONIZAÇÃO
- AFINIDADE ELECTRÔNICA

- RESUMO.

1. Um átomo neutro possui dois electrons com $n=1$, oito electrons com $n=2$, oito electrons com $n=3$ e dois electrons com $n=4$. Supondo que se encontra no seu estado fundamental dê as seguintes informações:

Número atômico

Número total de electrons s

Número total de electrons p

Número total de electrons d

O elemento é um metal, um não metal ou um metalóide?

2. Organize os seguintes átomos em ordem crescente de energia ionização: Si, K, P e Ca.

3. Quais os seguintes ions são menos prováveis de serem encontrados em compostos químicos; Cs^+ , In^{4+} ; Fe^{4+} , Te^{-2} .

4. Responda às seguintes questões:

Entre os elementos S, Se e Cl qual possui o maior raio atômico?

Qual possui o maior raio, Br ou Br⁻ e explique detalhadamente porquê?

Qual dos seguintes elementos deveria ter a maior diferença entre a primeira e segunda energia de ionização: Si, Na, P ou Mg?

Qual dos seguintes elementos possui o maior raio atômico; N, P ou As?

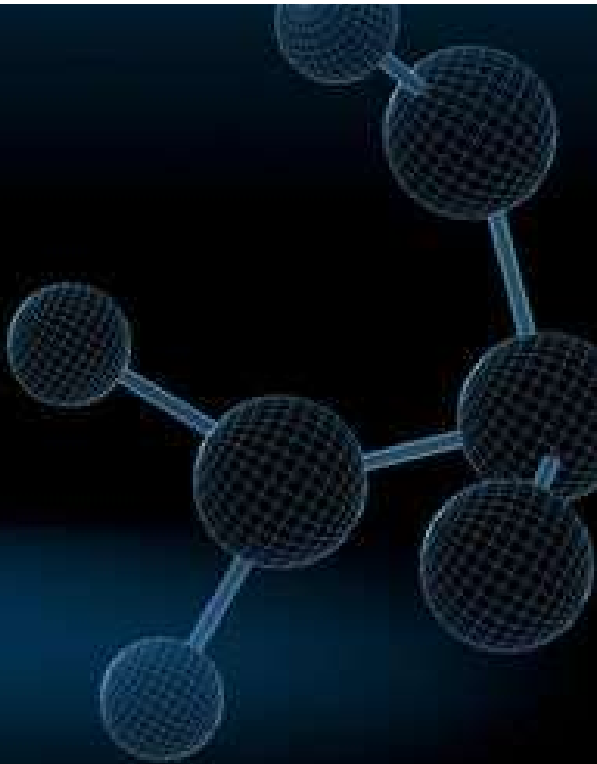
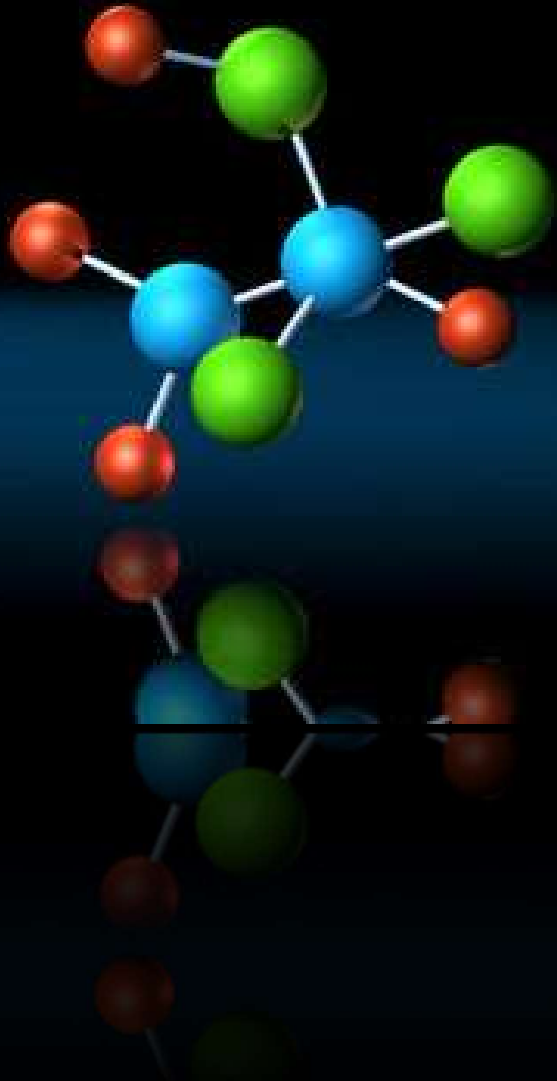
Qual deles seguintes elementos ui o maior raio iônico: O²⁻, N³⁻ ou F⁻.

5. Compare os elementos Na, B, Al e C em relação às seguintes propriedades:

Qual tem o maior raio atômico.

Qual tem a entalpia de adição electrónica mais negativa?

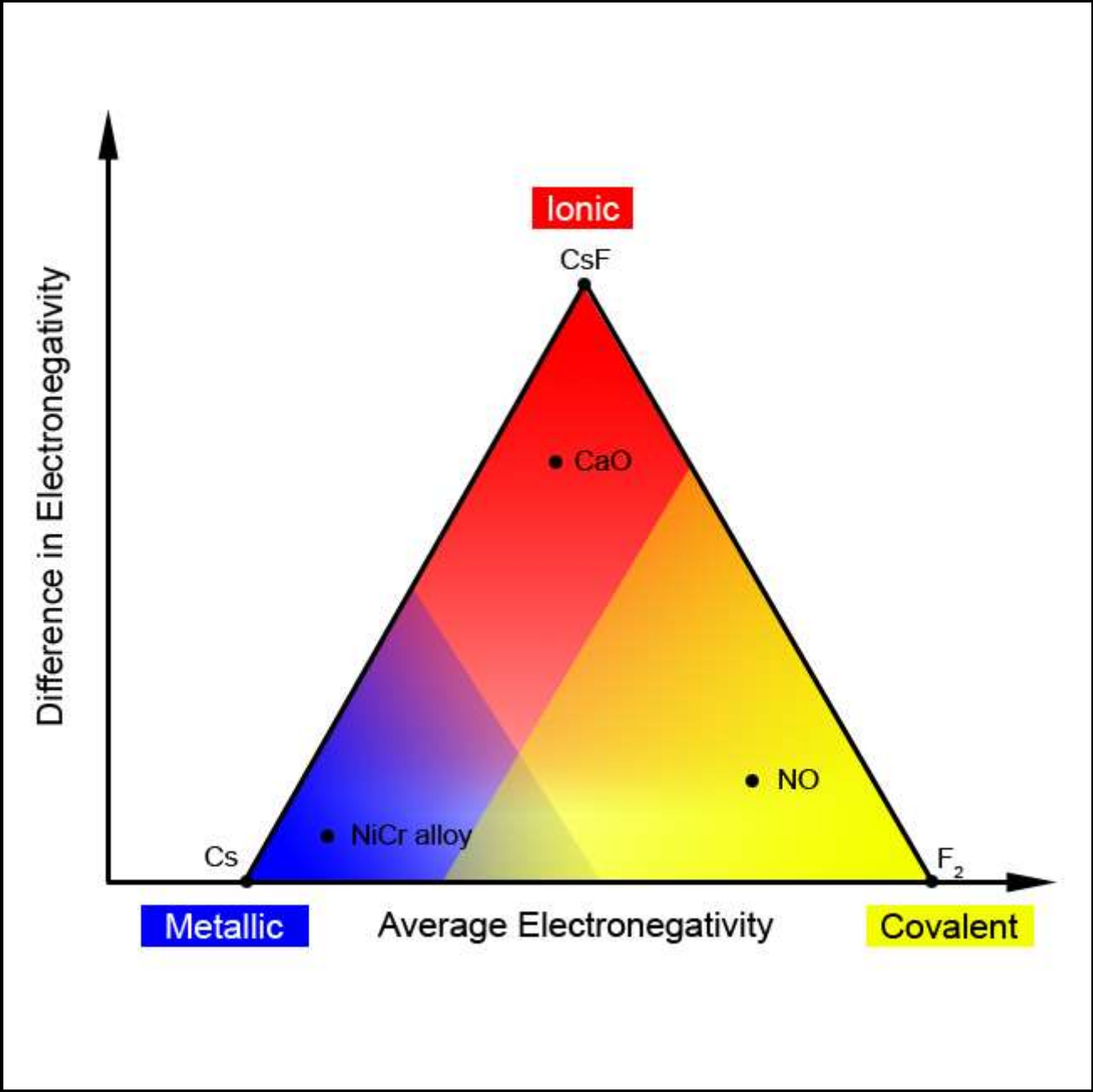
Coloque os elementos na ordem crescente de energia de ionização.



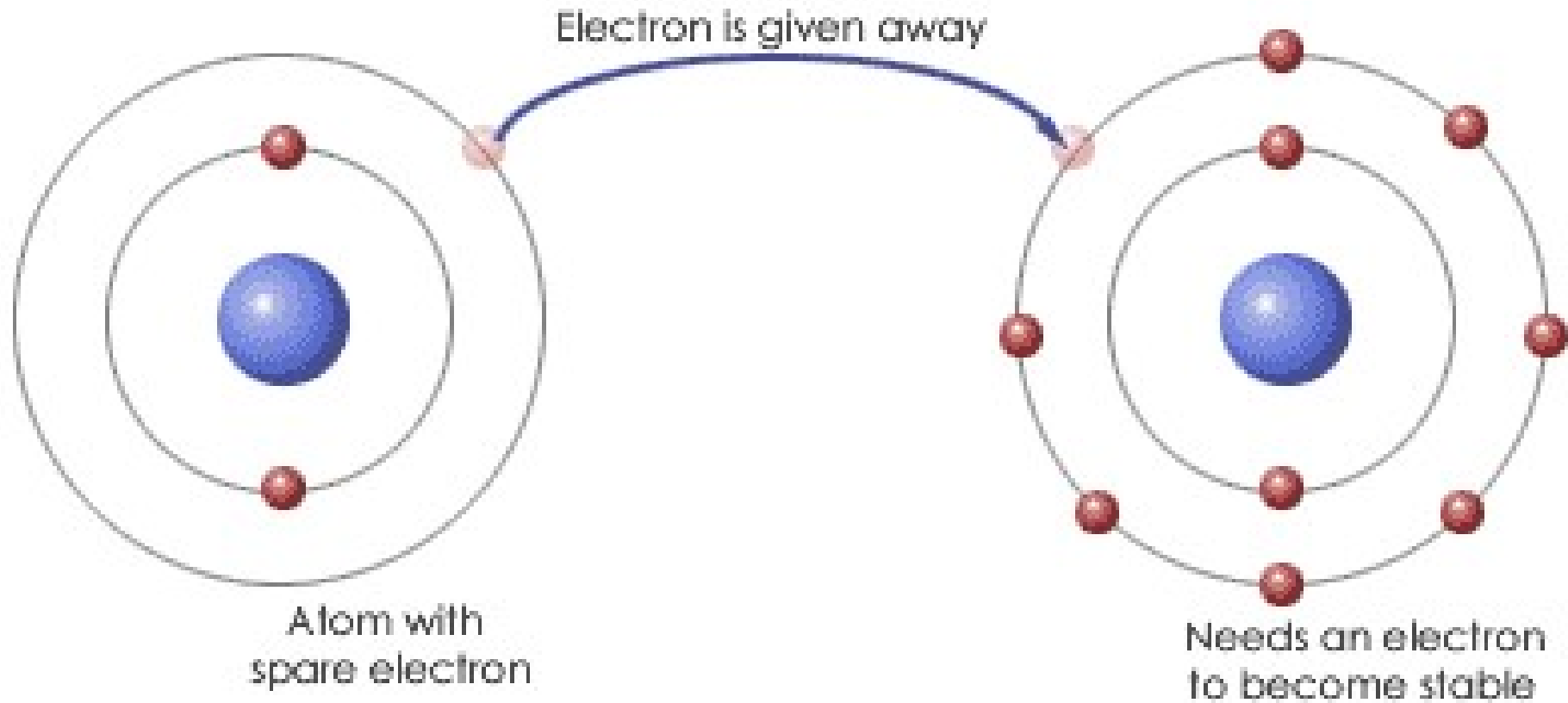
ação e rutura ecular

Aula 5

- Formação de ligações químicas – o que é uma ligação química?
- Quais os tipos de ligação química?
- Que electrons estão envolvidos?

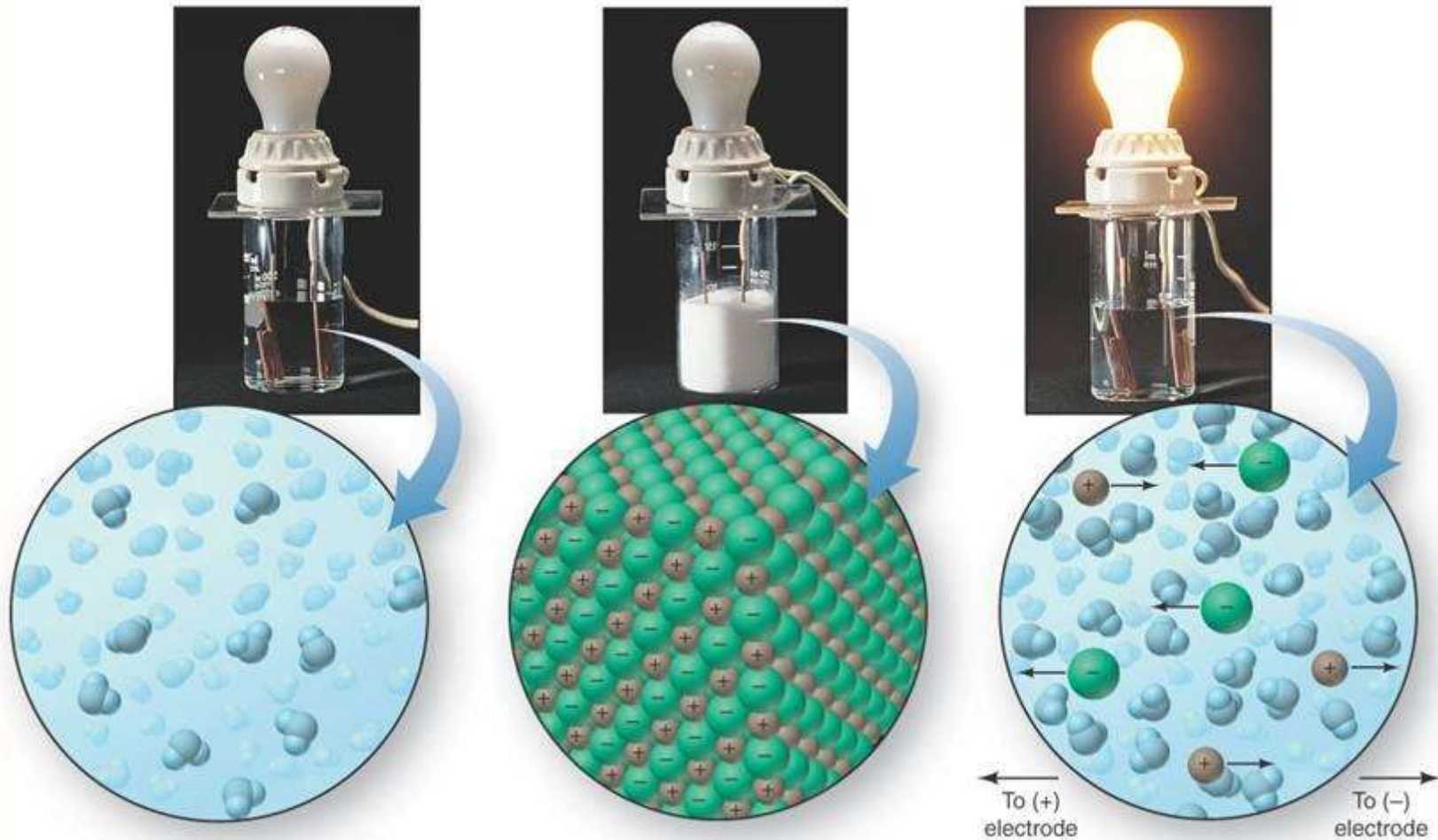


Ligação iônica



Ligação iônica

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



A Distilled water does not conduct a current

B Positive and negative ions fixed in a solid do not conduct a current

C In solution, positive and negative ions move and conduct a current

Ligação iônica

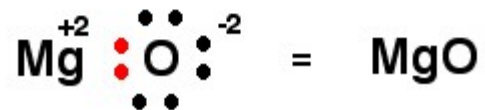
Compound	Melting Point (°C)	Boiling Point (°C)
NaI	660	1304
KBr	734	1435
NaBr	747	1390
CaCl ₂	782	> 1600
NaCl	801	1413
MgO	2852	3600

Ligação iônica

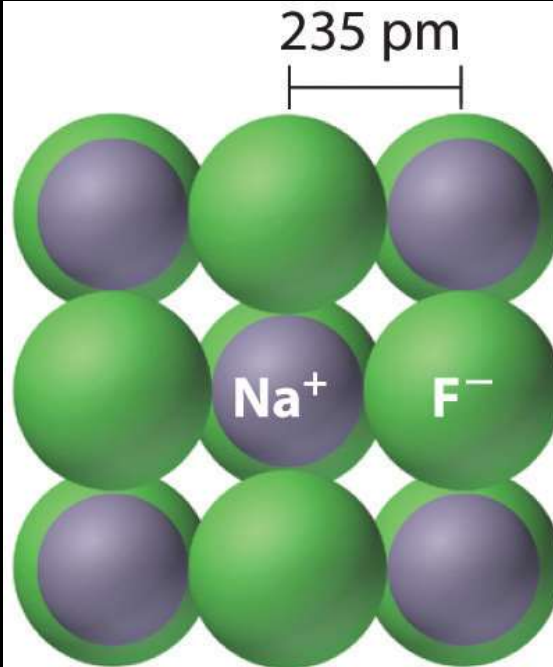
Magnesium Oxide



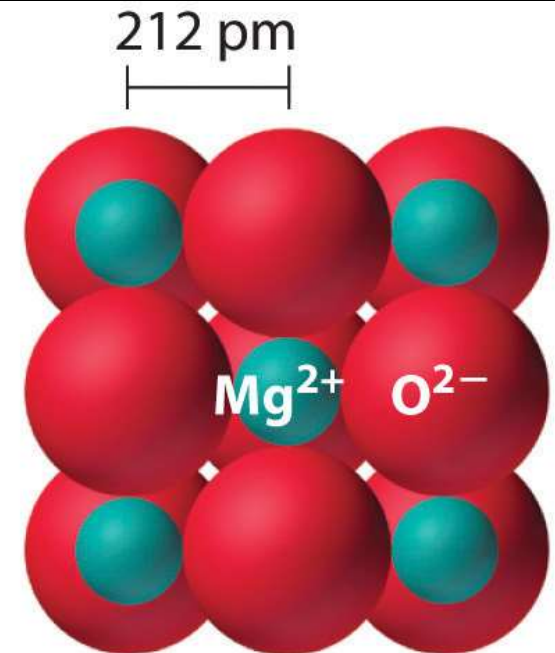
Magnesium loses 2 electrons, and Oxygen gains 2 electrons to have an Octet.



C. Ophardt, c. 2003

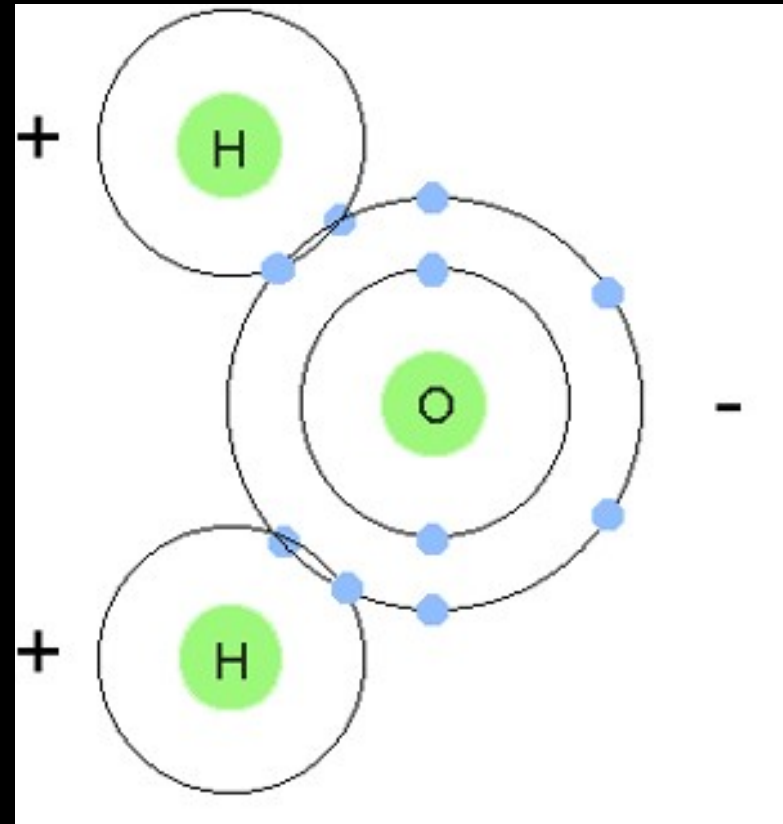
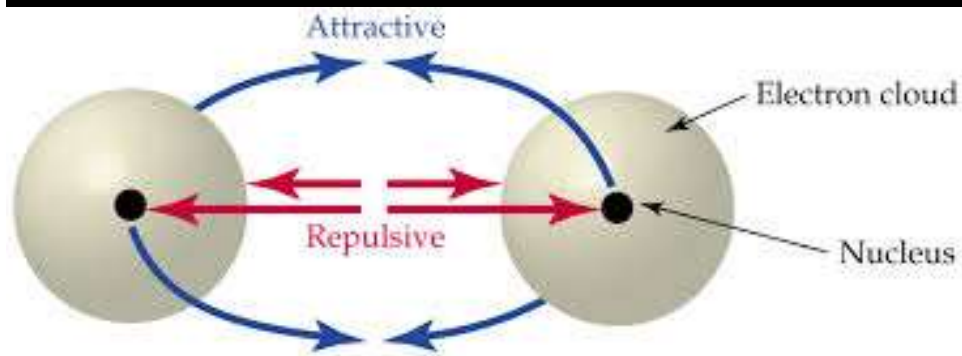
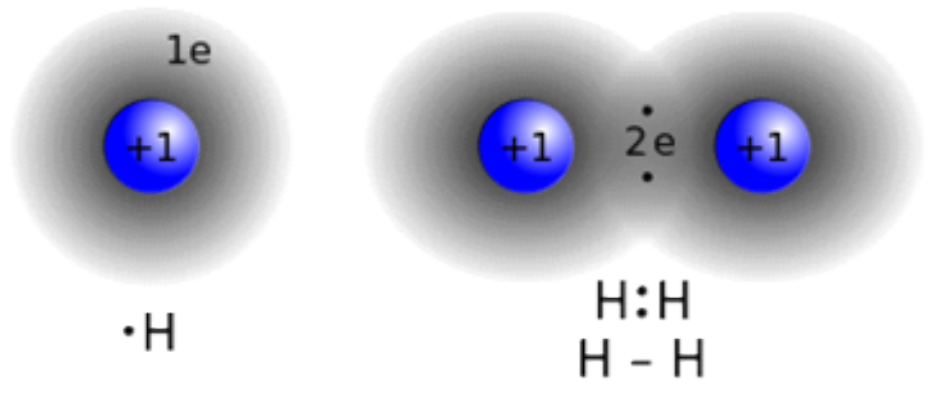


NaF



MgO

Ligação covalente

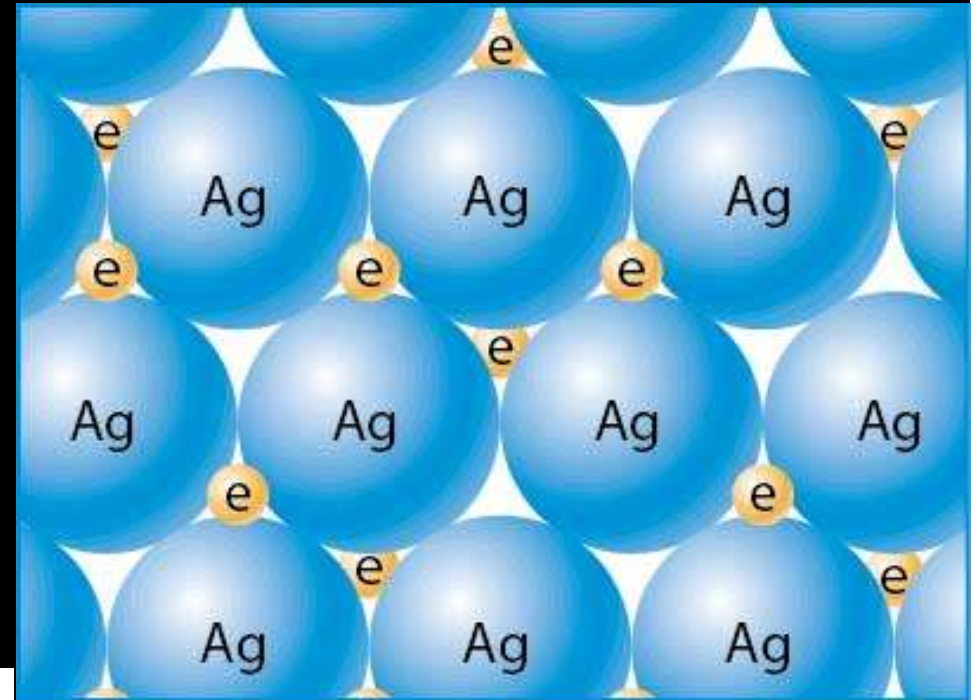


Ligação metálica

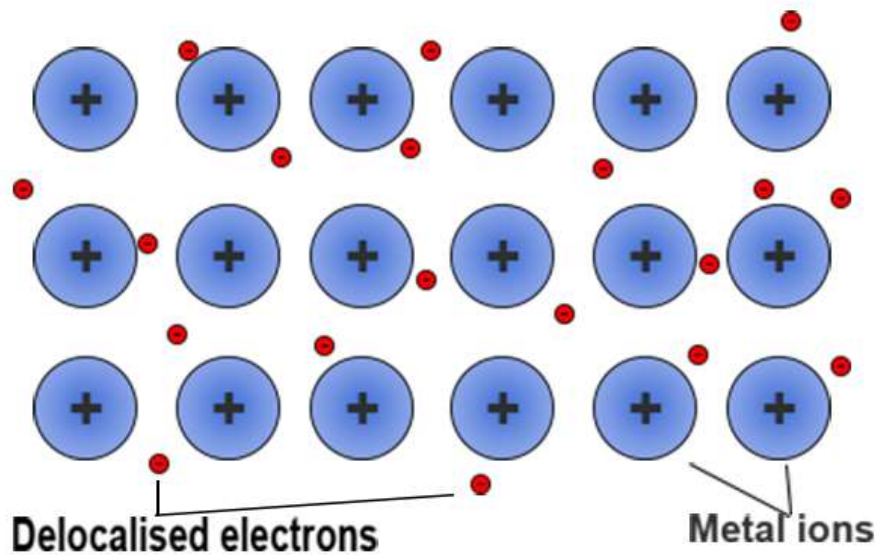
Modelo do mar de elétrons

Os elétrons estão confinados ao metal por meio de atrações eletrostáticas

. Apesar de confinados os elétrons possuem mobilidade.



Robin Storesund



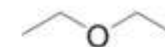
Tipos de Ligação



Ionic Bonds

Metallic Bonds

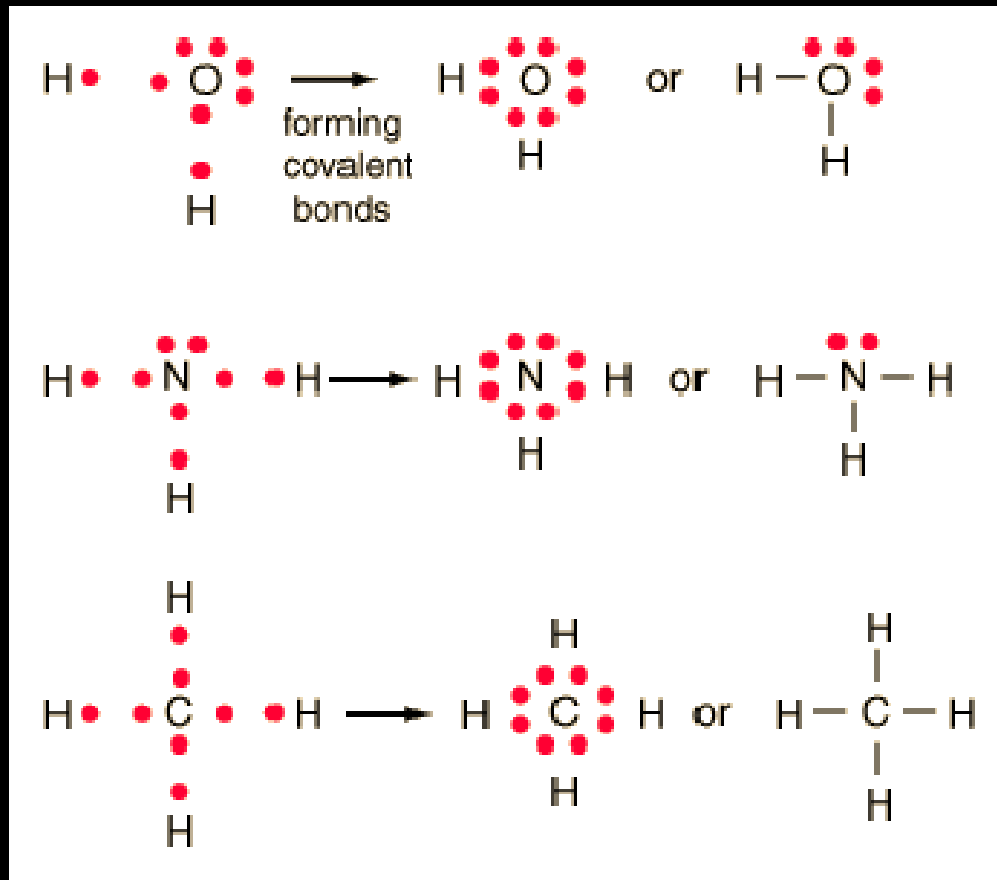
Covalent Bonds



Name	Sodium n-butoxide	n-butanol	Diethyl ether
Chemical Formula	$C_4H_7O^- Na^+$	C_4H_7OH	$C_4H_{10}O$
Strongest non-covalent interaction	Ionic interaction	Hydrogen bonding	Dipole-dipole
Boiling Point	>260 °C	117 °C	35 °C

Chemical	Interatomic bond type	Network or molecular	Phase or state
quartz, SiO_2	covalent	network	solid
water, H_2O	covalent	molecular	liquid
oxygen, O_2	covalent	molecular	gas
salt, NaCl	ionic	network	solid
iron, Fe	metallic	network	solid
carbon dioxide, CO_2	covalent	molecular	gas

- Gilbert Lewis
- Símbolos de Lewis – O que são como se escrevem?

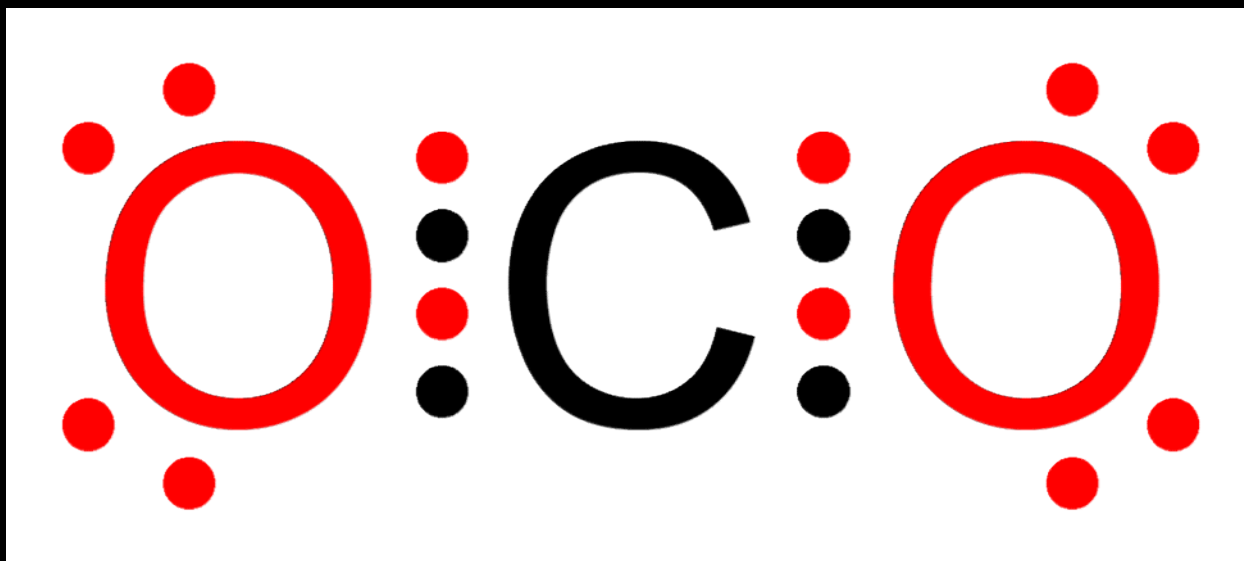


Gilbert Newton Lewis
1845-1946

TABLE 8.2 Lewis Dot Symbols for Main Group Atoms

1A ns^1	2A ns^2	3A ns^2np^1	4A ns^2np^2	5A ns^2np^3	6A ns^2np^4	7A ns^2np^5	8A ns^2np^6
Li ·	·Be·	· $\overset{\cdot}{\text{B}}$ ·	· $\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{N}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{F}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{Ne}}}$ ·
Na ·	·Mg·	· $\overset{\cdot}{\text{Al}}$ ·	· $\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{Si}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{P}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{S}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{Cl}}}$ ·	· $\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{Ar}}}$ ·

- Gilbert Lewis
- Símbolos de Lewis – O que são como se escrevem?
- Regra do octeto - o que é e como funciona?

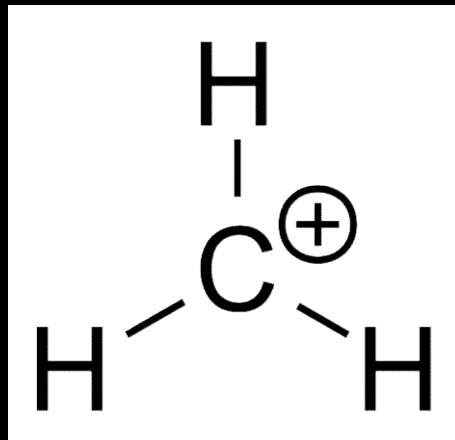
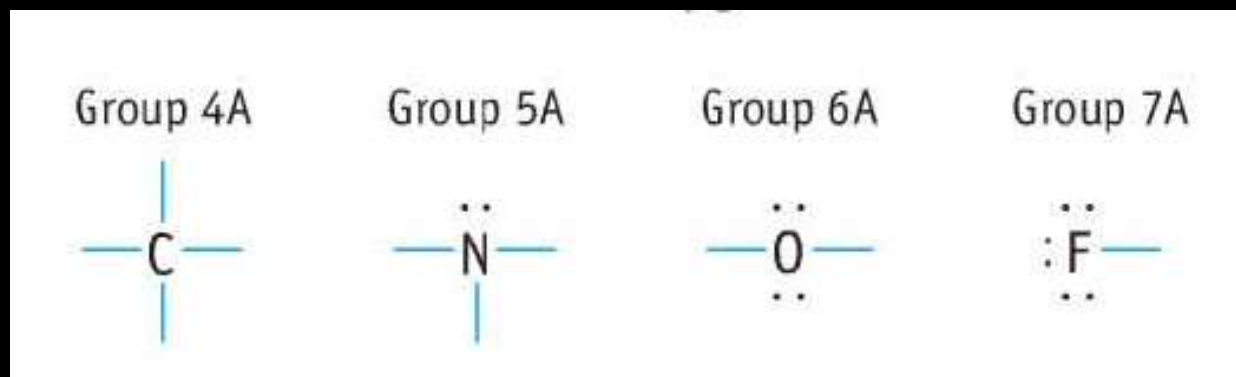


Regras de Lewis

1. Determinar o rearranjo do átomo central. O átomo central deverá ser aquele com menor afinidade electrónica.
2. Determinar o número de elétrons de valência para cada átomo e o número de pares de electrons disponíveis
3. Colocar um par elétrons entre cada átomo e formar uma ligação.
4. Usar todos os pares remanescentes como pares isolados em torno do átomo terminal (excepção hidrogénio) de modo a que cada átomo esteja rodeado por oito elétrons.
5. Se nenhum par de elétrons de valência permanecer após formar as ligações e completar os octetos terminais e caso o átomo central não tiver um octeto de elétrons então as ligações múltiplas deverão ser criadas entre o átomo central.

- Gilbert Lewis
- Símbolos de Lewis – O que são como se escrevem?
- Regra do octeto - o que é e como funciona?
- Como a camada de valência está relacionada com reactividade?
- Como se desenham as estruturas de Lewis?

Compostos com hidrogénio



George Andrew Olah
Prémio Nobel da química 1994

lements

13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	18 VIII 8A
5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.998403	2 He Helium 4.00260
10 Ne Neon 20.1797	13 Al Aluminum 26.981539	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973762	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.4527
18 Ar Argon 39.948	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92159	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904
36 Kr Krypton 83.80	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.90447
54 Xe Xenon 131.29	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98037	84 Po Polonium (209.9824)	85 At Astatine 208.9871
86 Rn Radon 222.0176					

Compostos com hidrogénio

TABLE 8.3 Lewis Structures of Common Hydrogen-Containing Molecules and Ions of Second-Period Elements

Group 4A		Group 5A		Group 6A		Group 7A		
CH ₄ methane	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	NH ₃ ammonia	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \ddot{\text{N}} \quad \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	H ₂ O water	$\text{H} \quad \ddot{\text{O}} \quad \text{H}$	HF hydrogen fluoride	$\text{H} \quad \ddot{\text{F}} \quad \cdot$	
C ₂ H ₆ ethane	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	N ₂ H ₄ hydrazine	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \ddot{\text{N}} \quad \ddot{\text{N}} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	H ₂ O ₂ hydrogen peroxide	$\text{H} \quad \ddot{\text{O}} \quad \ddot{\text{O}} \quad \text{H}$			
C ₂ H ₄ ethylene	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{C} = \text{C} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	NH ₄ ⁺ ammonium ion	$\left[\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} \right]^+$	H ₃ O ⁺ hydronium ion	$\left[\begin{array}{c} \text{H} \quad \ddot{\text{O}} \quad \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} \right]^+$			
C ₂ H ₂ acetylene	$\text{H}-\text{C} \equiv \text{C}-\text{H}$	NH ₂ ⁻ amide ion	$\left[\begin{array}{c} \text{H} \quad \ddot{\text{N}} \quad \text{H} \\ \\ \cdot \end{array} \right]^-$	OH ⁻ hydroxide ion	$\left[\begin{array}{c} \ddot{\text{O}} \quad \text{H} \\ \\ \cdot \end{array} \right]^-$			

- Gilbert Lewis
- Símbolos de Lewis – O que são como se escrevem?
- Regra do octeto - o que é e como funciona?
- Como a camada de valência está relacionada com reactividade?
- Como se desenham as estruturas de Lewis?

- Oxiácidos (HNO_3 , H_2SO_4 , H_3PO_4 , HClO_4)
- Estruturas isoelectrónicas
- Compostos baseados em carbono

Compostos baseados em carbono

- Regras
- Todas as moléculas orgânicas seguem a regra do octeto
- O carbono faz 4 ligações.
- O nitrogênio forma 3 ligações.
- O oxigênio forma 2 ligações.
- O hidrogênio 1 ligação.
- Ligações múltiplas são formadas entre carbono, nitrogênio e oxigênio
- O oxigênio forma ligações múltiplas com outros elementos
- O carbono só forma ligações múltiplas com oxigênio e nitrogênio
- Começa-se sempre pelas ligações simples e pares isolados só depois se formam as ligações múltiplas.

Carga formal

$$\text{carga formal} = EV - \left[EPI + \frac{1}{2} EL \right]$$

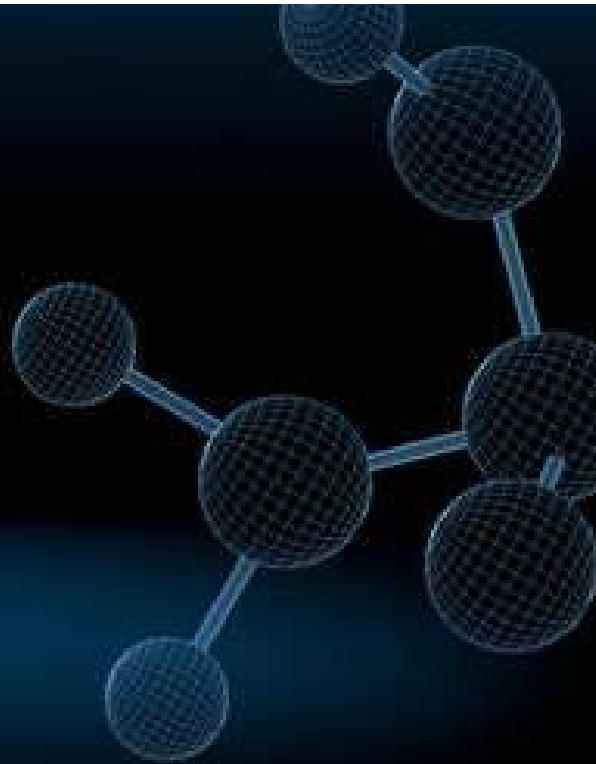
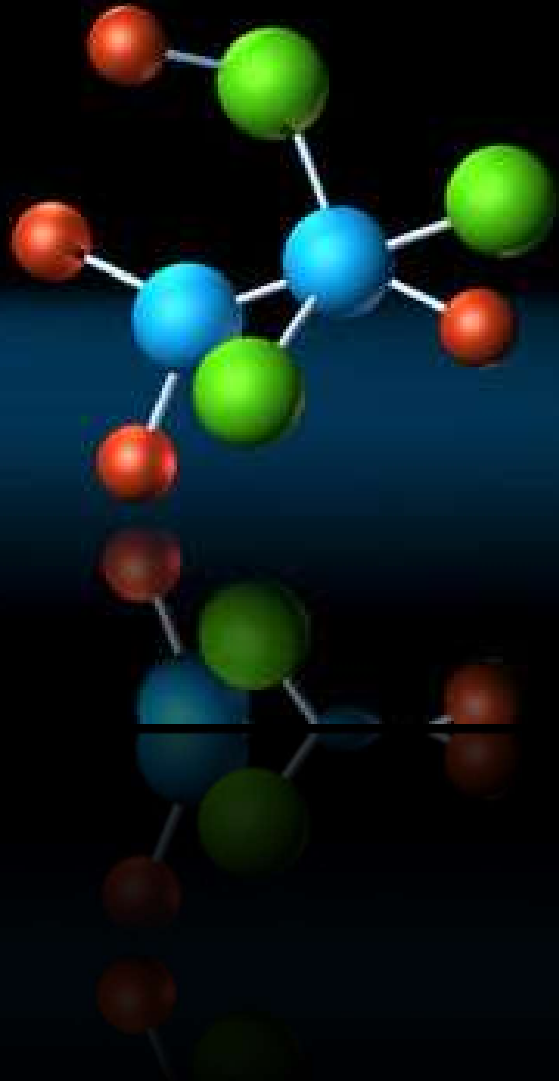
- EV - electrons de valência
- EPI - os electrons nos pares isolados
- EL - os electrons que fazem parte das ligações.

Excepções á regra do octeto

- Moléculas e ions que possuam menos que 4 pares de electrons no átomo central
- Os que têm mais que 4 pares de electrons no átomo central
- E os que têm um número impar de electrons

TABLE 8.6 Lewis Structures in Which the Central Atom Exceeds an Octet

Group 4A	Group 5A	Group 6A	Group 7A	Group 8
SiF_5^- 	PF_5 	SF_4 	ClF_3 	XeF_2
SiF_6^{2-} 	PF_6^- 	SF_6 	BrF_5 	XeF_4



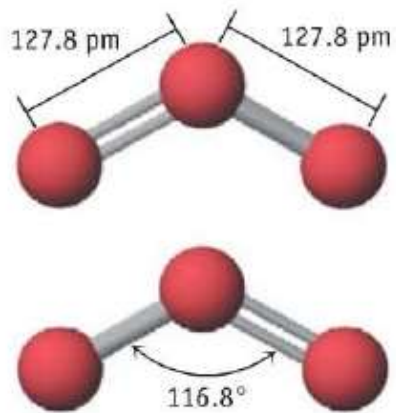
Ligação e estrutura molecular

Aula 6

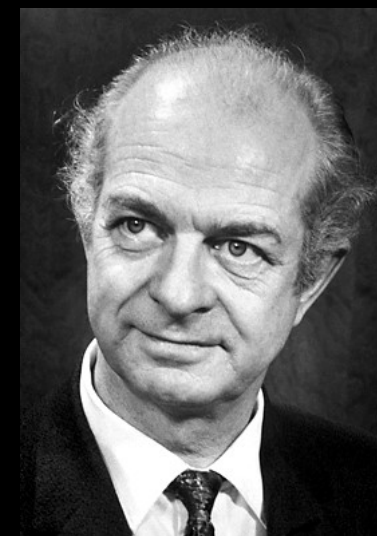
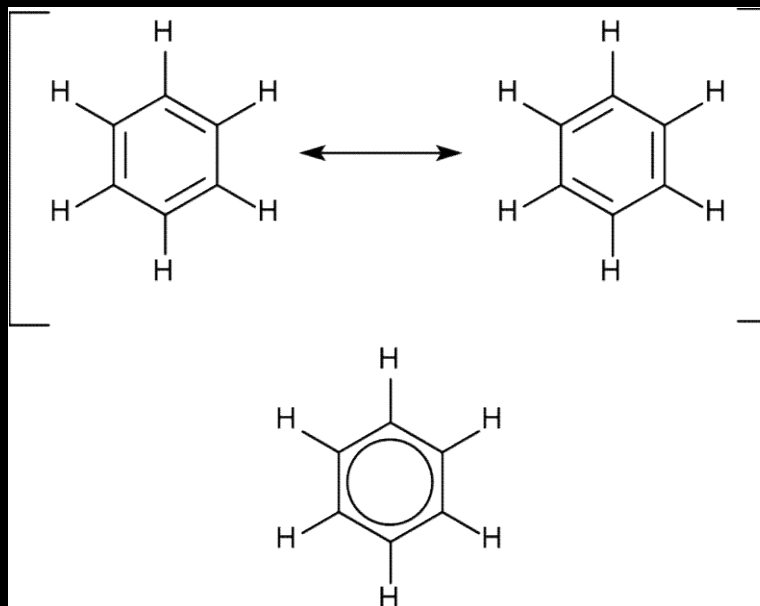
Questão: A ligação simples entre dois átomos de Oxigênio é de 132 pm e a ligação dupla é de 121,1 pm.

uNa molécula de ozônio (O_3) o tamanho da ligação entre os átomos de oxigênio é de 127,8 pm.

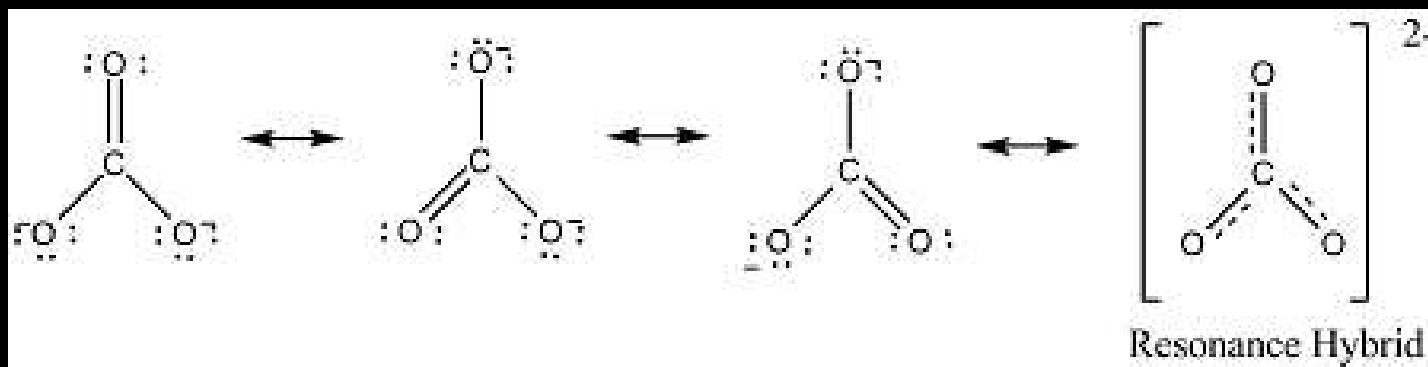
PORQUÊ???



Ozone, O_3 , is a bent molecule with oxygen-oxygen bonds of the same length.



Linus Pauling
1901-1994



Questão: porquê que o O_3 é uma molécula angular?

Forma das moléculas e Lewis



Linear



Trigonal planar



Tetrahedral



Trigonal bipyramidal



Octahedral

Método de repulsão dos pares de electrons no nível de valência (RPENV)

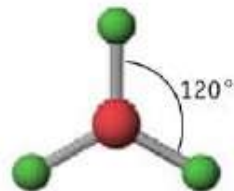
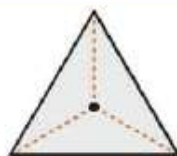
VSEPR - Valence shell electron pair repulsion)

Linear



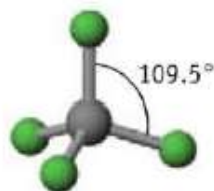
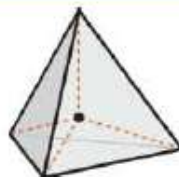
AX_2
Example: BeF_2

Trigonal-planar



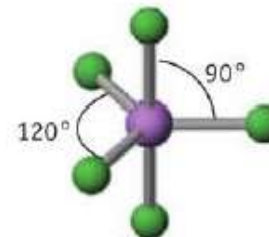
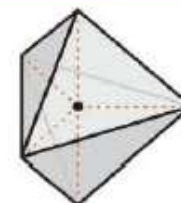
AX_3
Example: BF_3

Tetrahedral



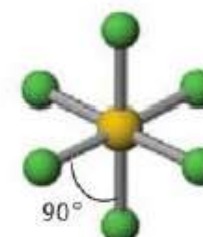
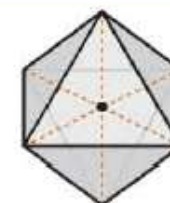
AX_4
Example: CF_4

Trigonal bipyramidal



AX_5
Example: PF_5

Octahedral

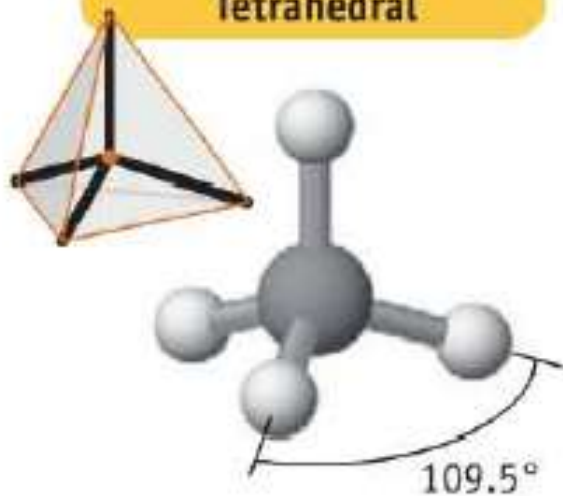


AX_6
Example: SF_6

Questão: e se houver um ou dois pares de electrons livres?

FOUR ELECTRON PAIRS
Electron Pair Geometry = tetrahedral

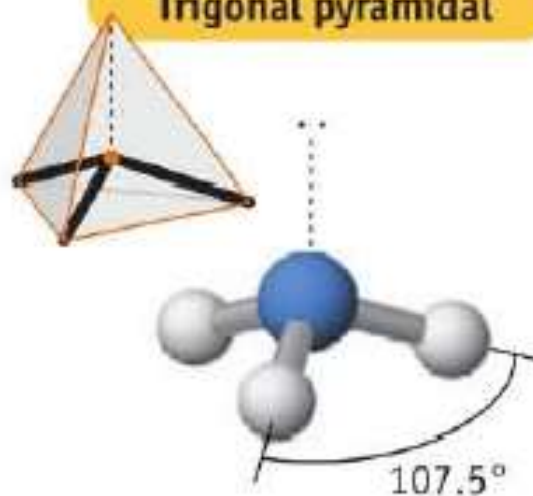
Tetrahedral



Methane, CH₄
4 bond pairs
no lone pairs

(a)

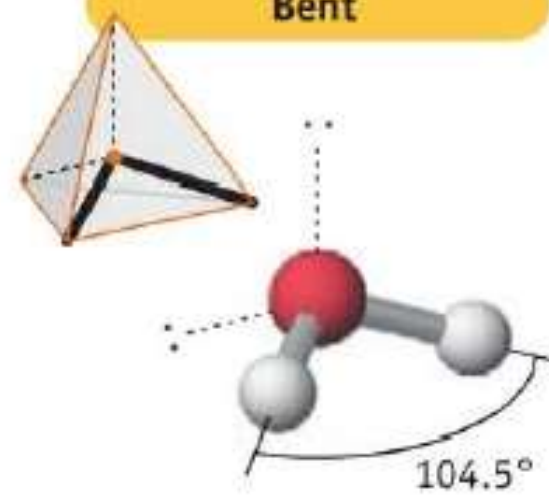
Trigonal pyramidal



Ammonia, NH₃
3 bond pairs
1 lone pair

(b)

Bent



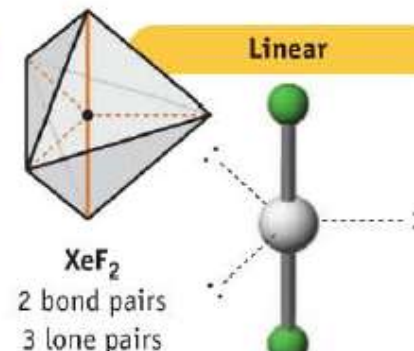
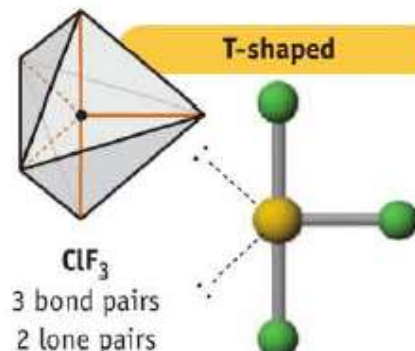
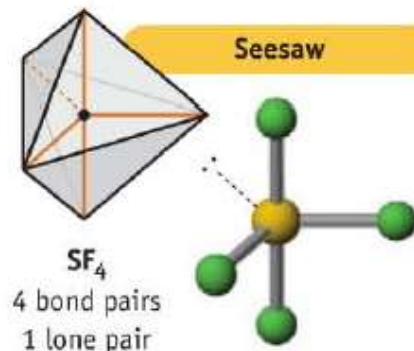
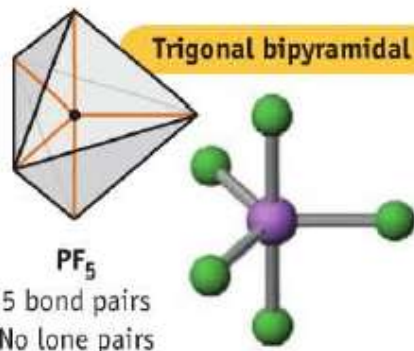
Water, H₂O
2 bond pairs
2 lone pairs

(c)

Questão: o angulo diminui porquê?

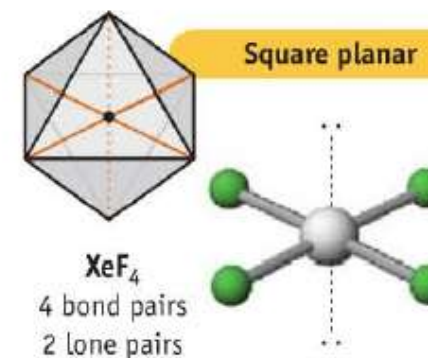
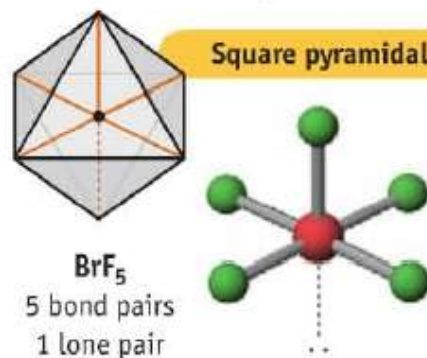
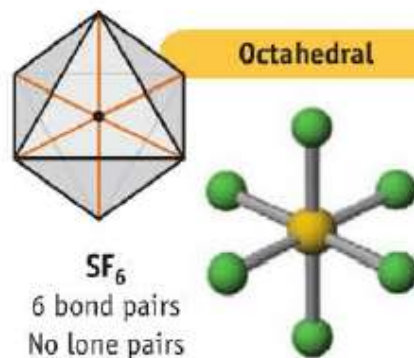
FIVE ELECTRON PAIRS

Electron-Pair Geometry = trigonal bipyramidal

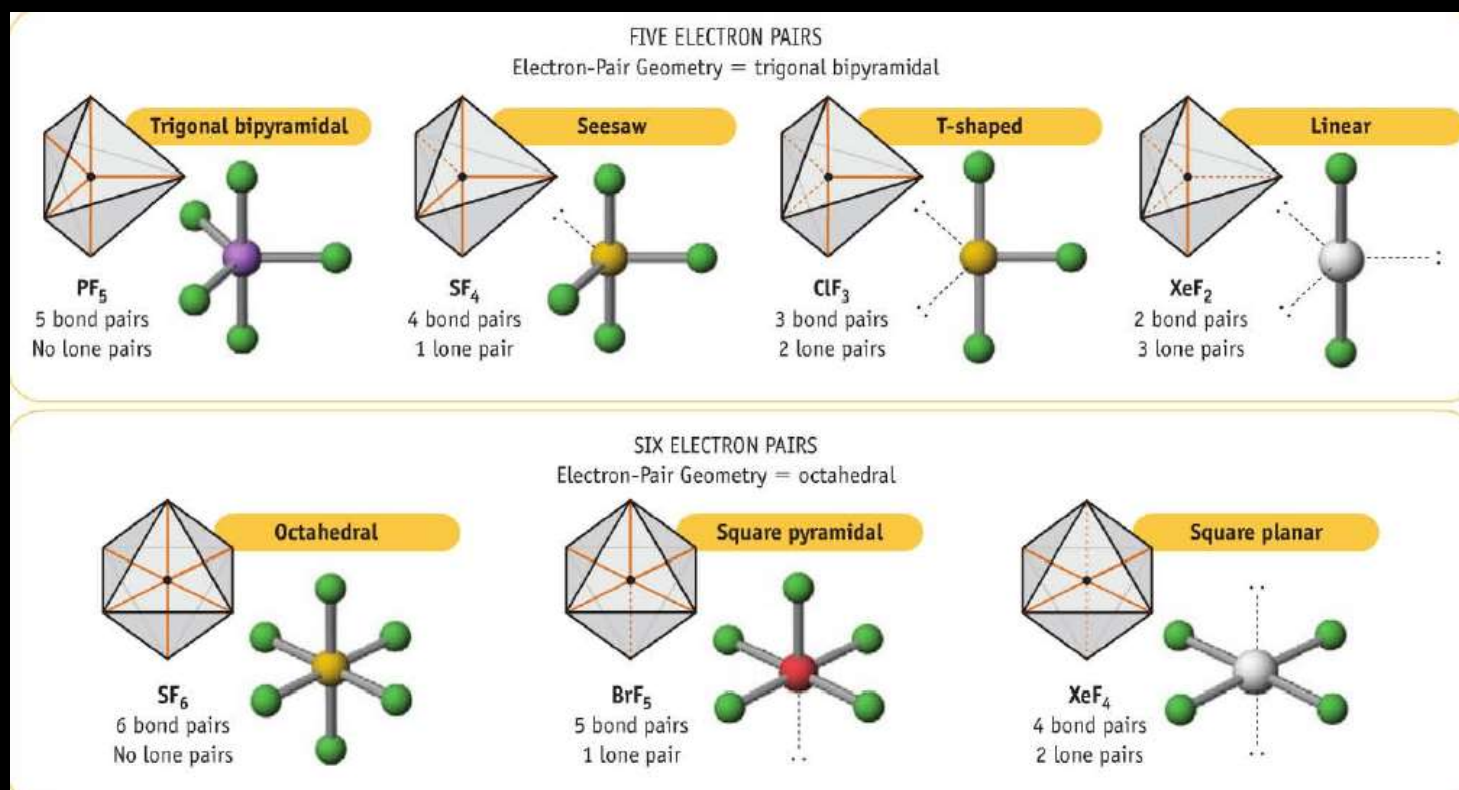


SIX ELECTRON PAIRS

Electron-Pair Geometry = octahedral



Exemplo: ClF_2^- ; ClF_3 ClF_4^- ClF_5

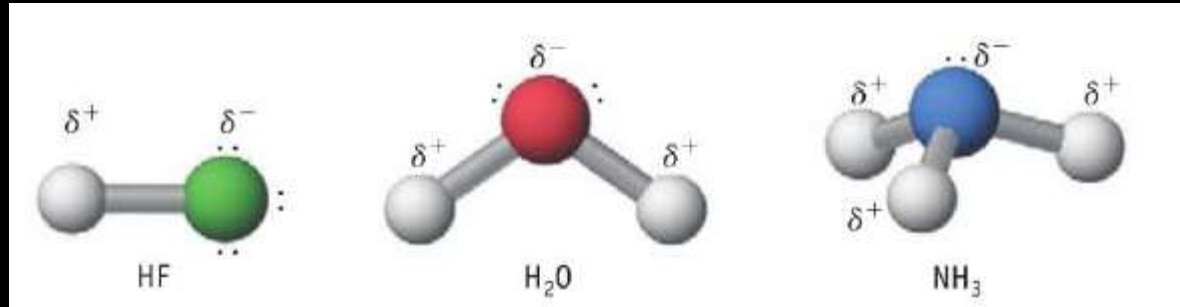
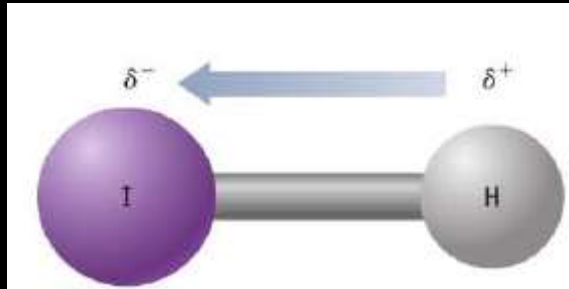


Questão: ligações duplas influenciam a geometria?

Polaridade

Questão: O que é a polaridade?

Questão: O que é a polaridade ?



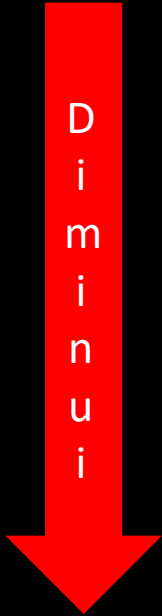
átomos diferentes produzem uma ligação polar

Electronegatividade



1A		2A												3A	4A	5A	6A	7A
Li 1.0	Be 1.6											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0		
Na 0.9	Mg 1.3	3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	Al 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.2		
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.4	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.7	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.8	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.6	Br 3.0		
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.3	Nb 1.6	Mo 2.2	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.3	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.8	Sn 2.0	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.7		
Cs 0.8	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.4	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.3	Au 2.5	Hg 2.0	Tl 1.6	Pb 2.3	Bi 2.0	Po 2.0	At 2.2		

<1.0
 1.5-1.9
 2.5-2.9
 1.0-1.4
 2.0-2.4
 3.0-4.0



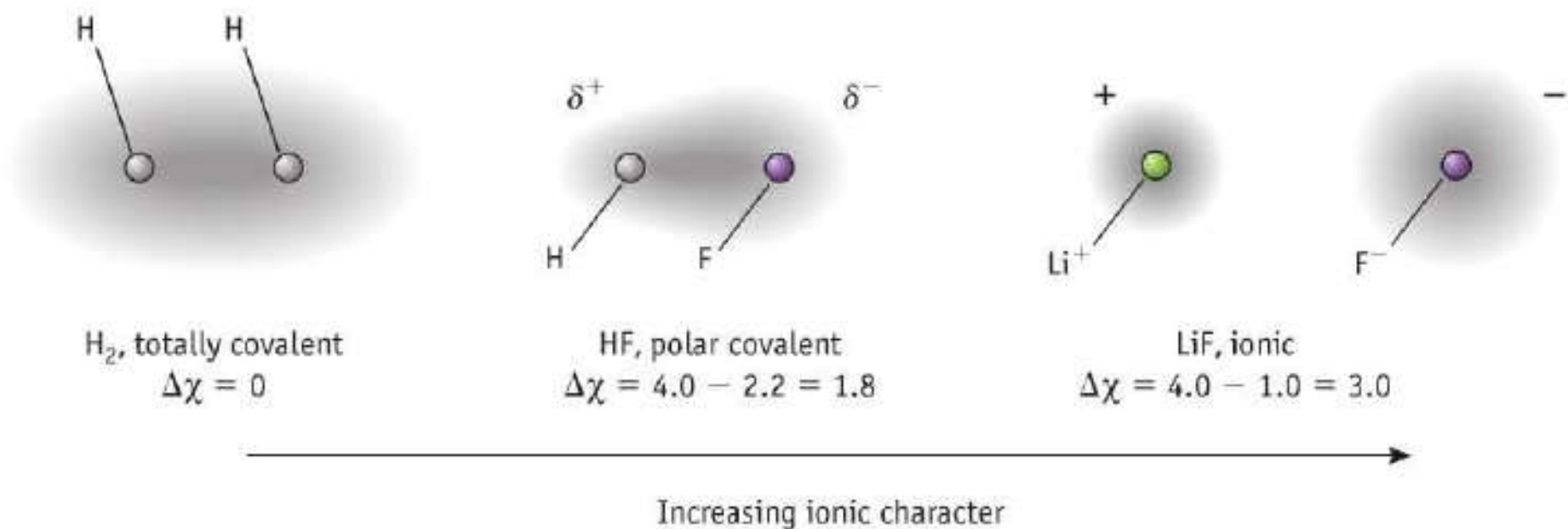
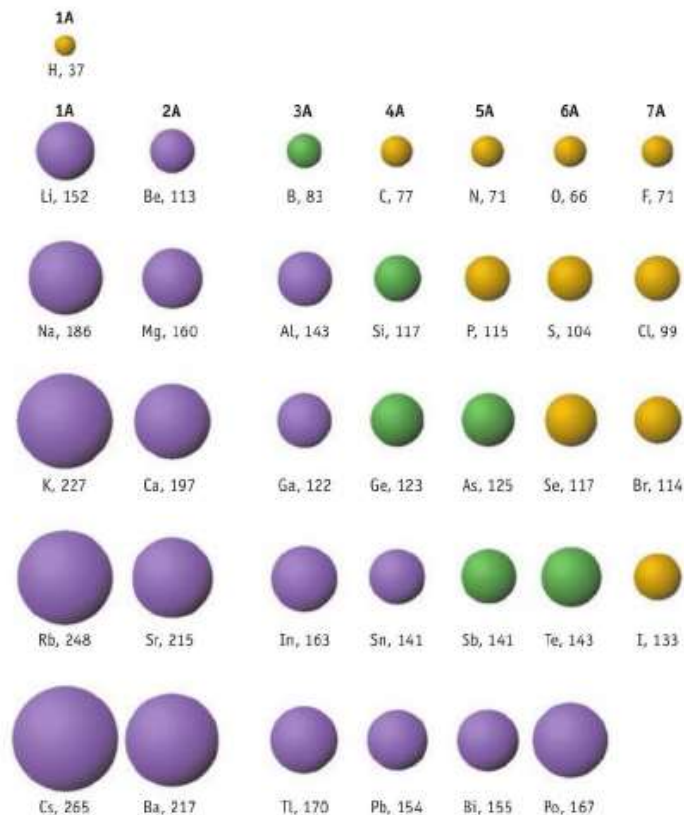


FIGURE 8.10 Covalent to ionic bonding. As the electronegativity difference increases between the atoms of a bond, the bond becomes increasingly ionic.

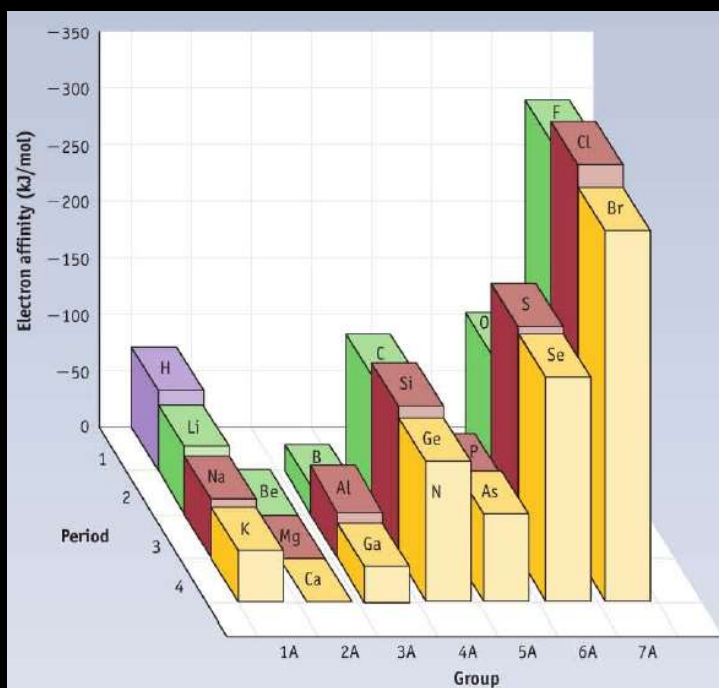
Electronegatividade



Raio atômico

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	
H 1.0																	
Li 1.0	Be 1.6											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.3											Al 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.2	
K 0.8	Ca 1.0	3B	4B	5B	6B	7B	8B				1B	2B	Ga 1.8	Ge 2.0	As 2.2	Se 2.6	Br 3.0
Rb 0.8	Sr 1.0	Sc 1.4	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.7	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	In 1.8	Sn 2.0	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.7	
Cs 0.8	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.4	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.3	Au 2.5	Hg 2.0	Tl 1.6	Pb 2.3	Bi 2.0	Po 2.0	At 2.2	

<1.0
 1.5-1.9
 2.5-2.9
1.0-1.4
 2.0-2.4
 3.0-4.0

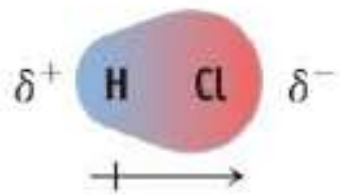


Afinidade eletrônica

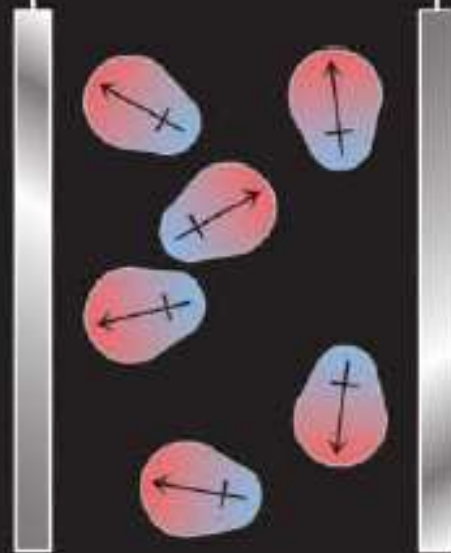
Polaridade

Questão: BF_3 é uma molécula polar?

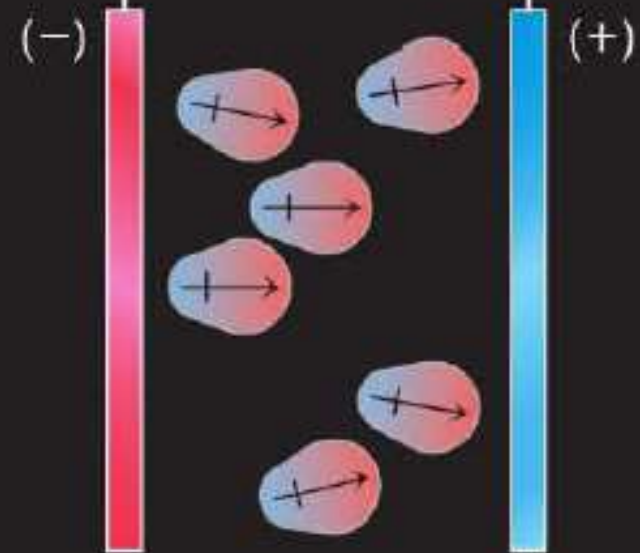
Momento dipolar



Electric Field OFF



Electric Field ON



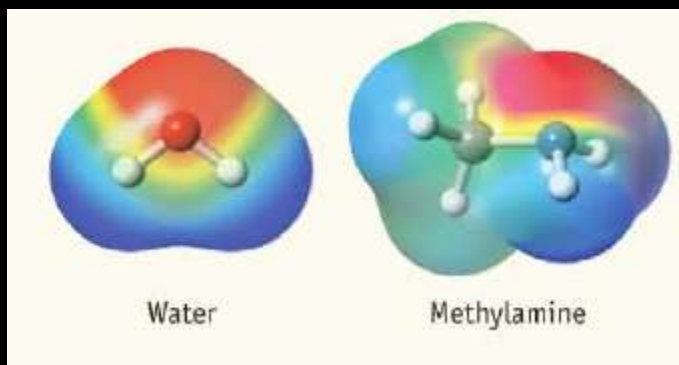
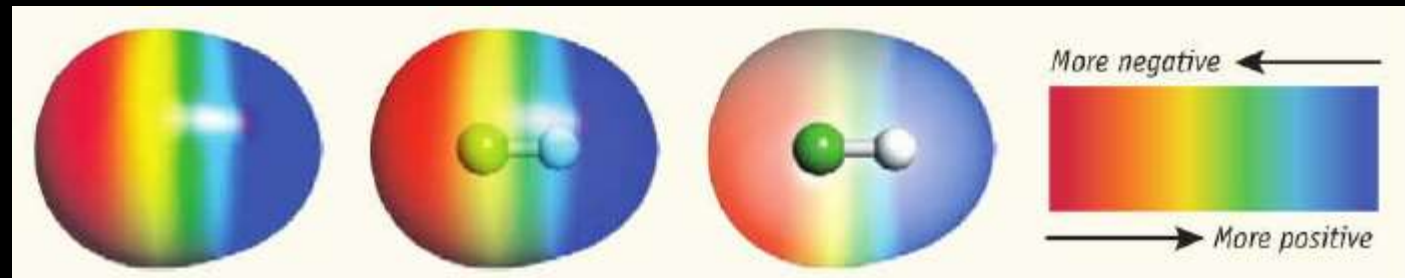
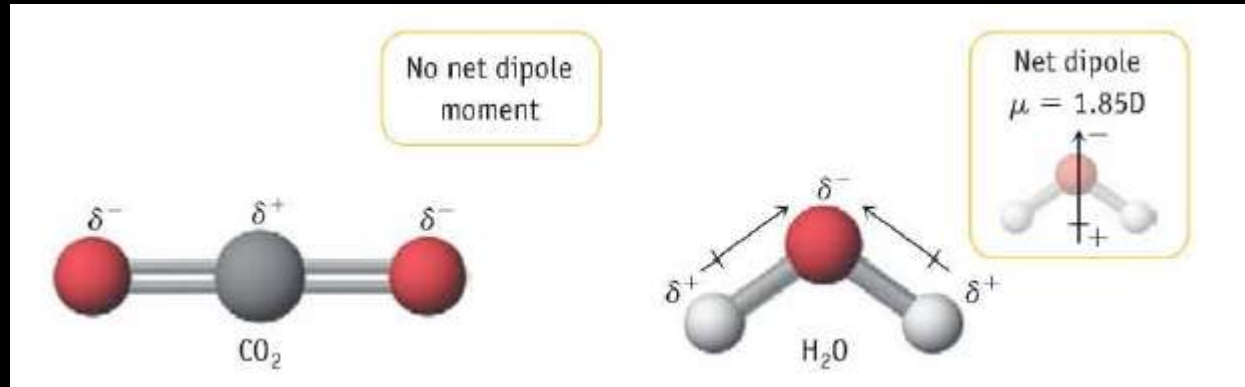
$$\mu = q \times d$$

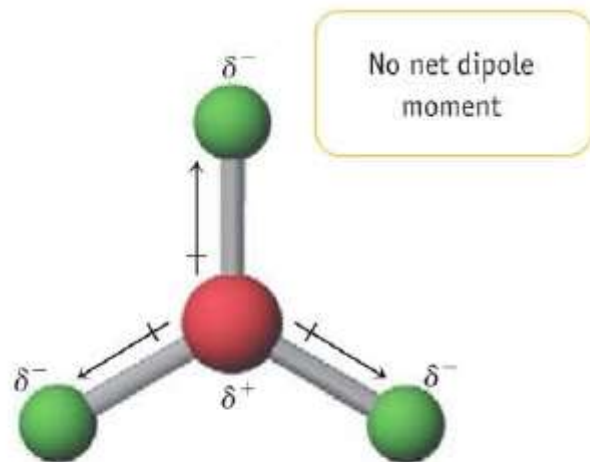
Momento dipolar

TABLE 8.7 Dipole Moments of Selected Molecules

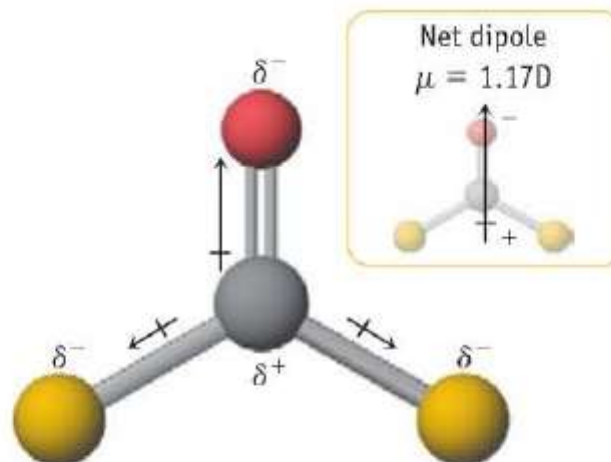
Molecule (AX)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AX ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	1.47	trigonal pyramidal	CH ₄	0	tetrahedral
NF ₃	0.23	trigonal pyramidal	CH ₃ Cl	1.92	tetrahedral
BF ₃	0	trigonal planar	CH ₂ Cl ₂	1.60	tetrahedral
			CHCl ₃	1.04	tetrahedral
			CCl ₄	0	tetrahedral

Momento dipolar

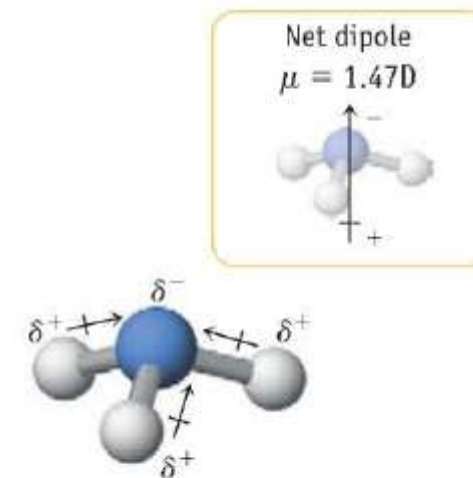




BF₃



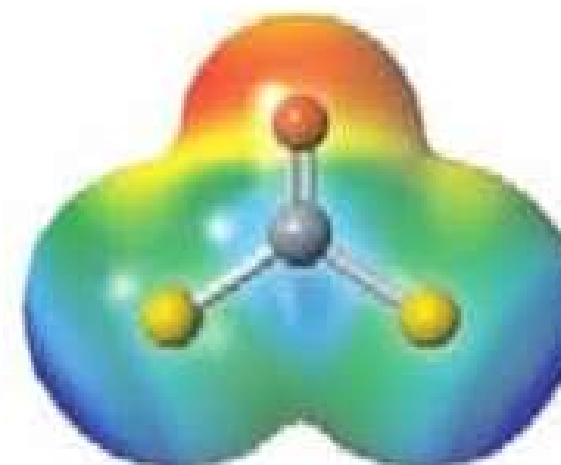
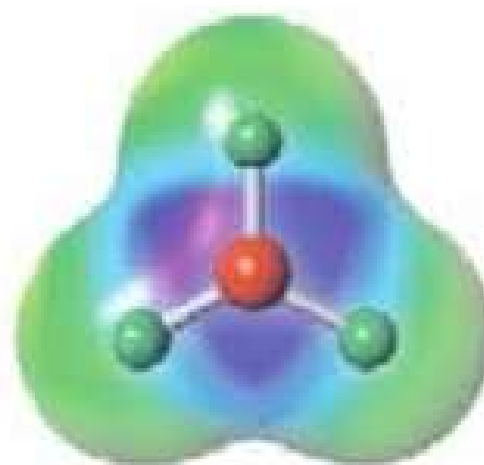
Cl₂CO



NH₃

Active Figure 8.14 Polar and nonpolar molecules of the type AX₃. In BF₃, the negative charge on the F atoms is distributed symmetrically, so the molecular dipole is zero. In contrast, in Cl₂CO and NH₃, the negative charge in the molecules is shifted to one side and the positive charge to the other side.

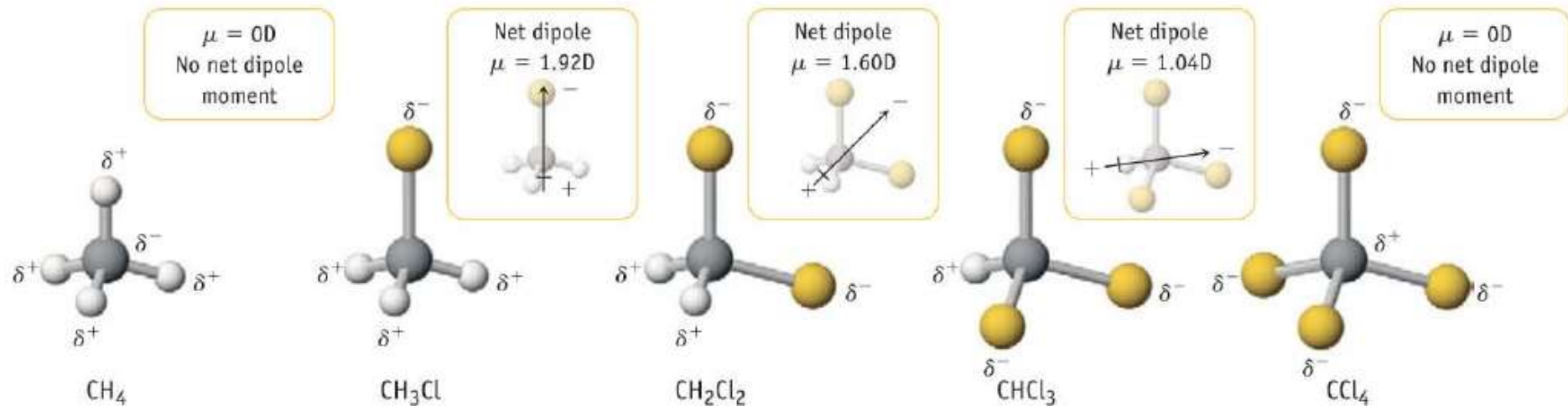
Molecule	Calculated Partial Charges	Calculated dipole
BF ₃	B = 0.44, F = -0.15	0
Cl ₂ CO	O = -0.21, C = 0.23, Cl = -0.01	1.25
NH ₃	N = -0.40, H = 0.13	1.58



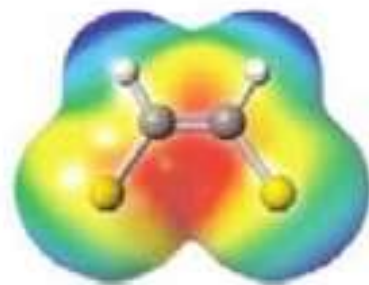
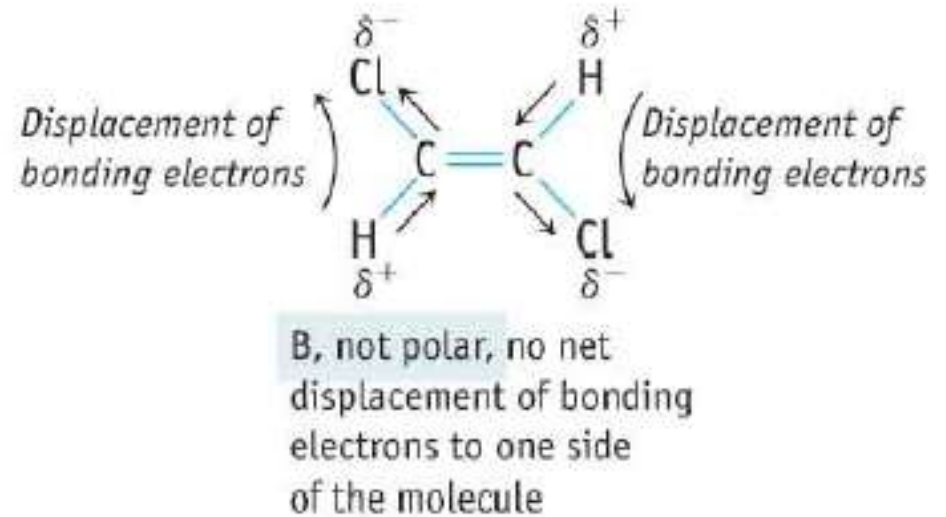
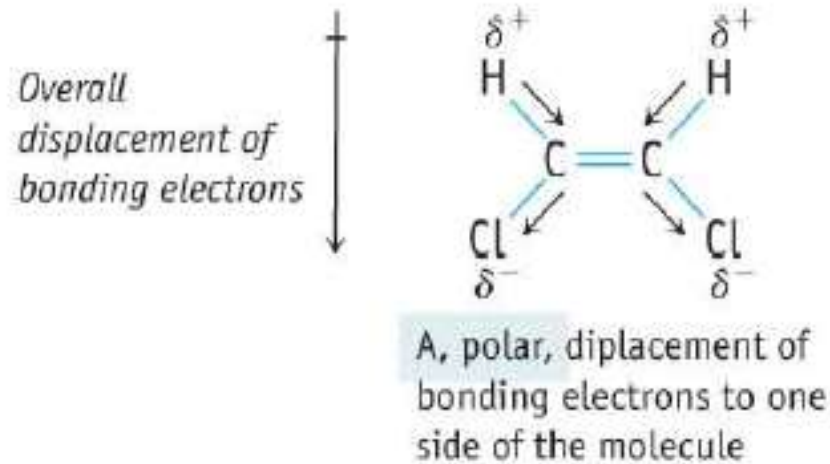
Polaridade

Questão: qual será a molécula mais polar CH_3Cl ou CHCl_3 ?

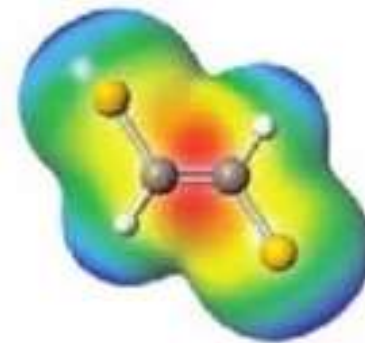
Polaridade



Polaridade



Molecule A



Molecule B

Polaridade

Questão: como é que a electronegatividade influencia o comprimento de ligação?

Comprimento de ligação

TABLE 8.8 Some Average Single- and Multiple-Bond Lengths in Picometers (pm)*

		Single Bond Lengths									
		Group									
	1A	4A	5A	6A	7A	4A	5A	6A	7A	7A	7A
	H	C	N	O	F	Si	P	S	Cl	Br	I
H	74	110	98	94	92	145	138	132	127	142	161
C		154	147	143	141	194	187	181	176	191	210
N			140	136	134	187	180	174	169	184	203
O				132	130	183	176	170	165	180	199
F					128	181	174	168	163	178	197
Si						234	227	221	216	231	250
P							220	214	209	224	243
S								208	203	218	237
Cl									200	213	232
Br										228	247
I											266

Multiple Bond Lengths

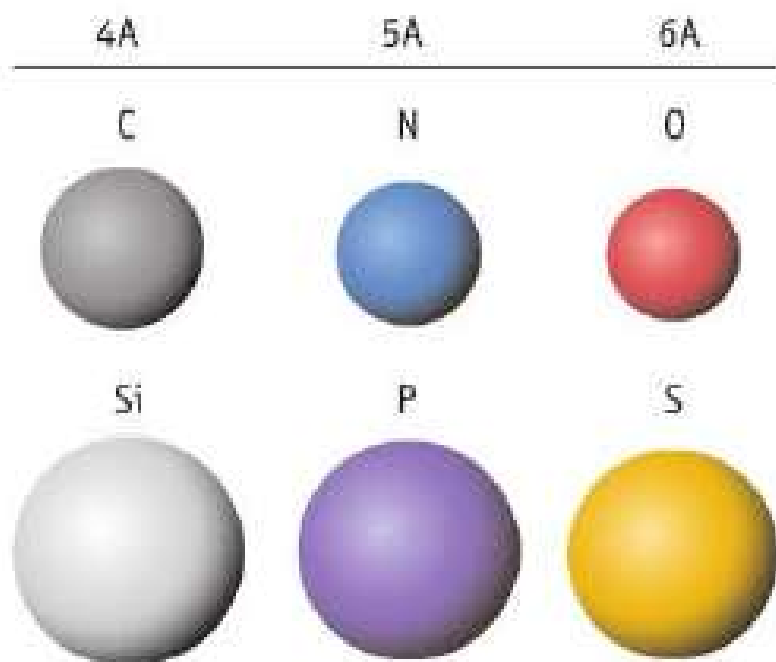
C=C 134 C≡C 121

C=N 127 C≡N 115

C=O 122 C≡O 113

N=O 115 N≡O 108

Comprimento de ligação



Relative sizes of some atoms of Groups 4A, 5A, and 6A.

Bond lengths are related to atom sizes.

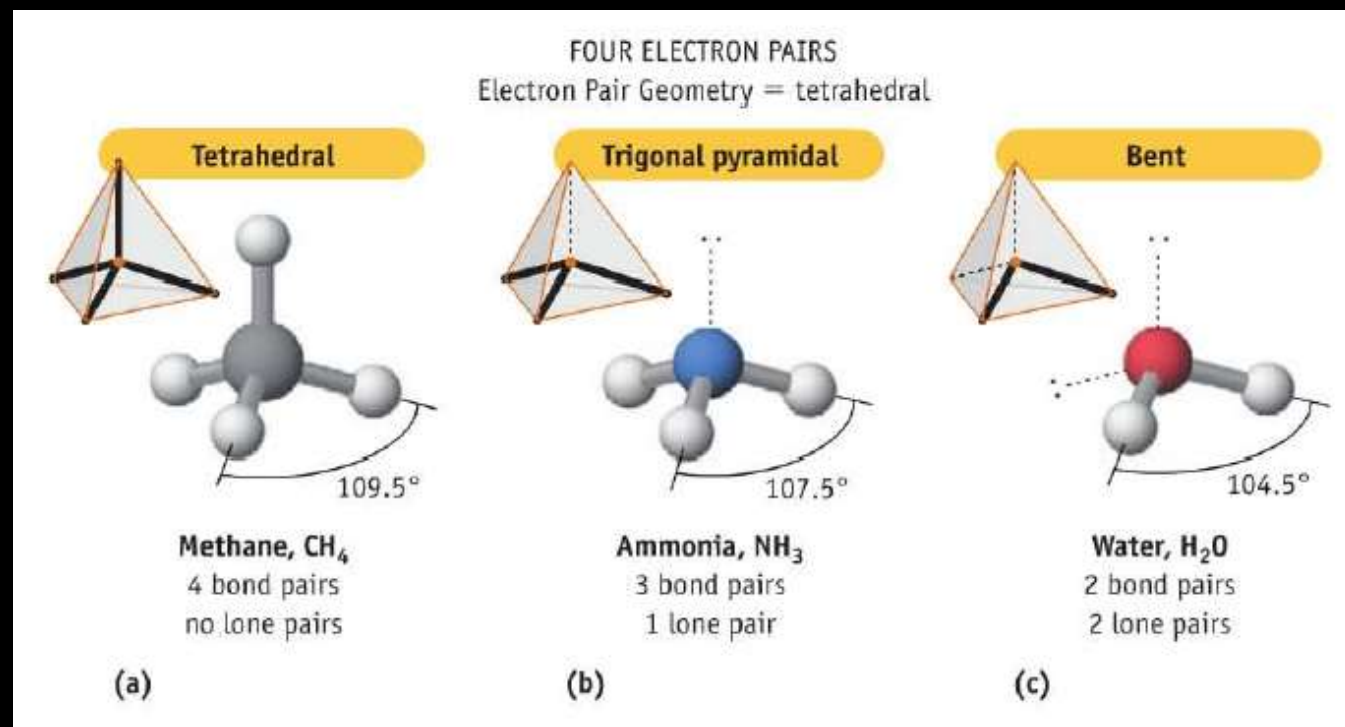
C—H	N—H	O—H
110	98	94 pm
Si—H	P—H	S—H
145	138	132 pm

Periodic Table of the Elements

Legend for element categories:

- Alkali Metal (Pink)
- Alkaline Earth (Purple)
- Transition Metal (Blue)
- Stable Metal (Orange)
- Semimetals (Green)
- Nonmetals (Light Blue)
- Halogens (Yellow)
- Noble Gas (Light Green)
- Lanthanides (Light Yellow)
- Actinides (Red)

Questão: Como é que um carbono pode formar ligação tetraédrica ($109,5^\circ$) e simplesmente fazer 4 ligações?



Hibridização



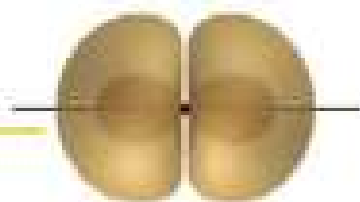
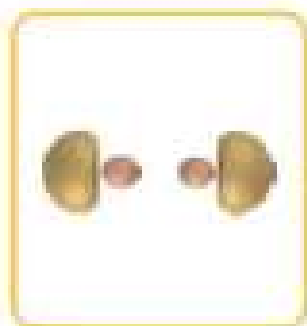
Formação de orbitais híbridos

Arrangement of Hybrid Orbitals

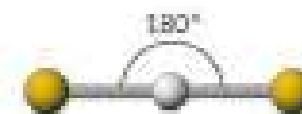
Geometry

Example

Two electron pairs
 sp

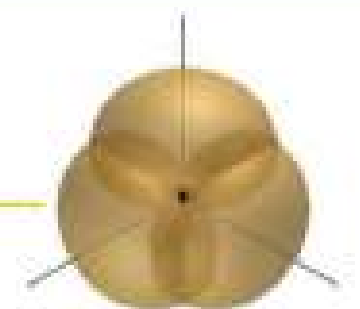


Linear

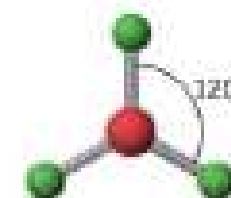


BeCl_2

Three electron pairs
 sp^2

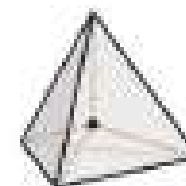
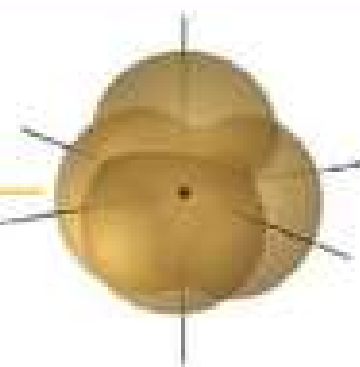
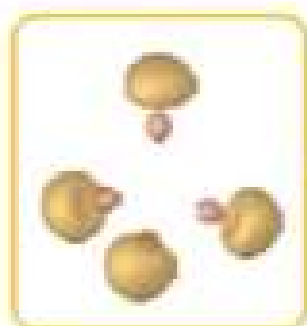


Trigonal-planar

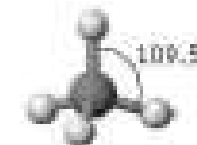


BF_3

Four electron pairs
 sp^3

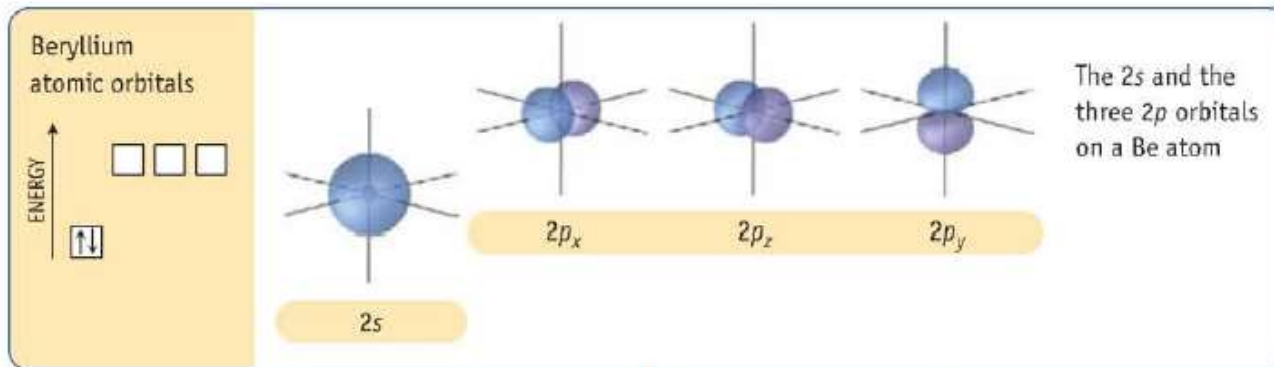


Tetrahedral

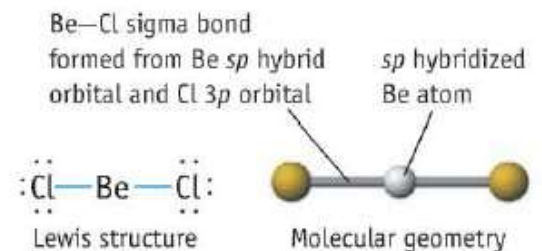
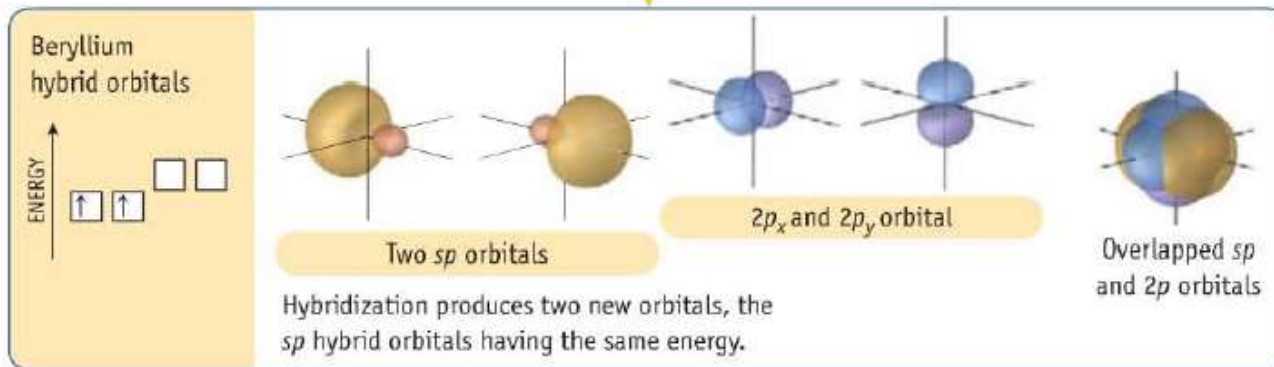


CH_4

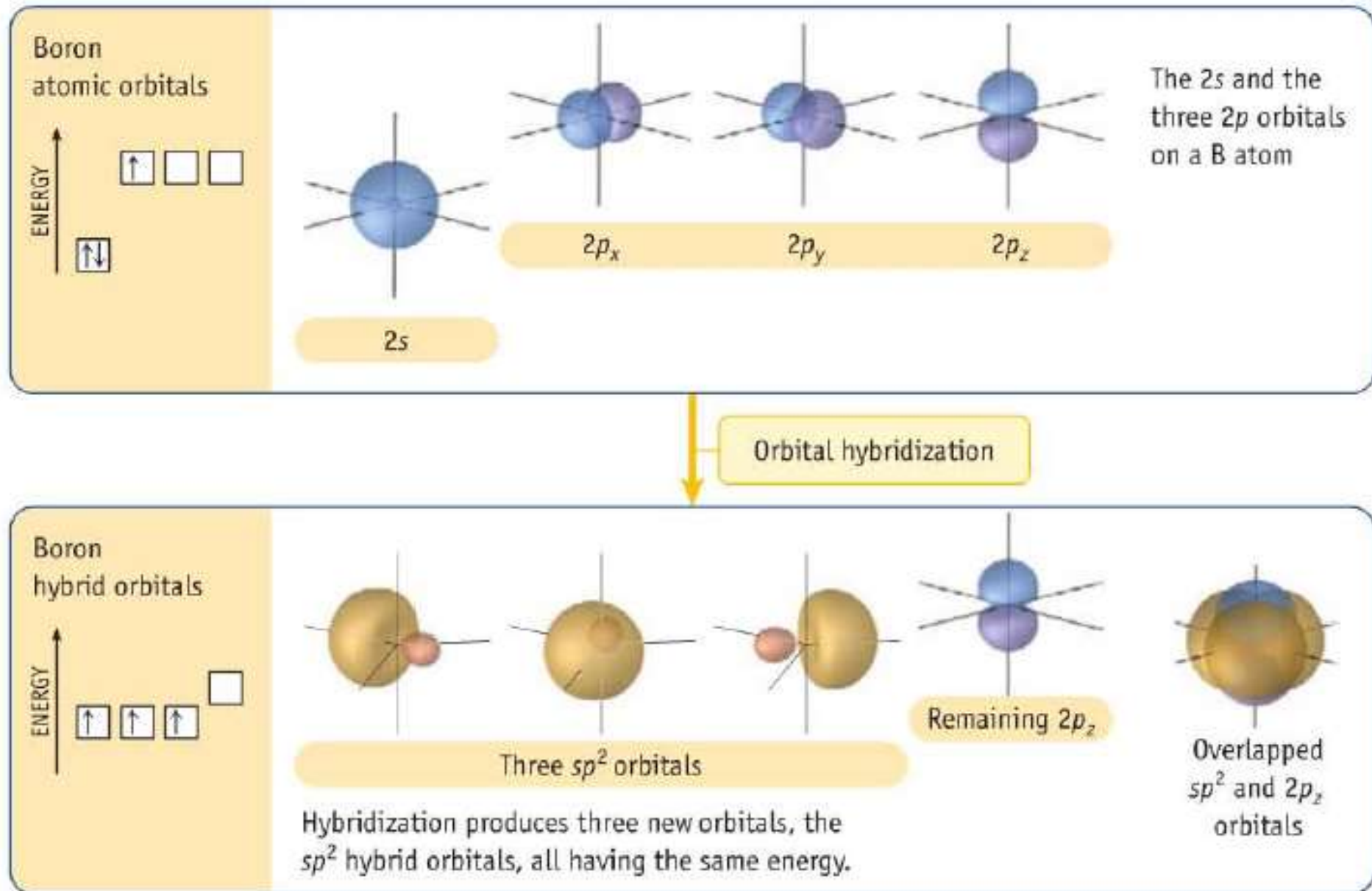
Hibridação Sp



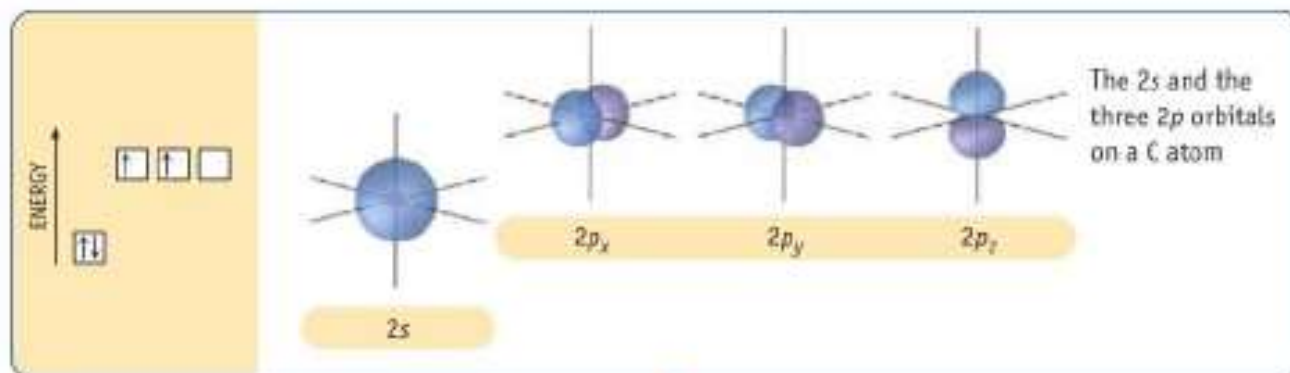
Orbital hybridization



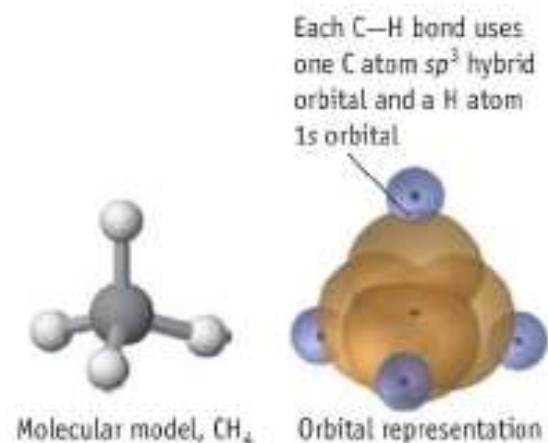
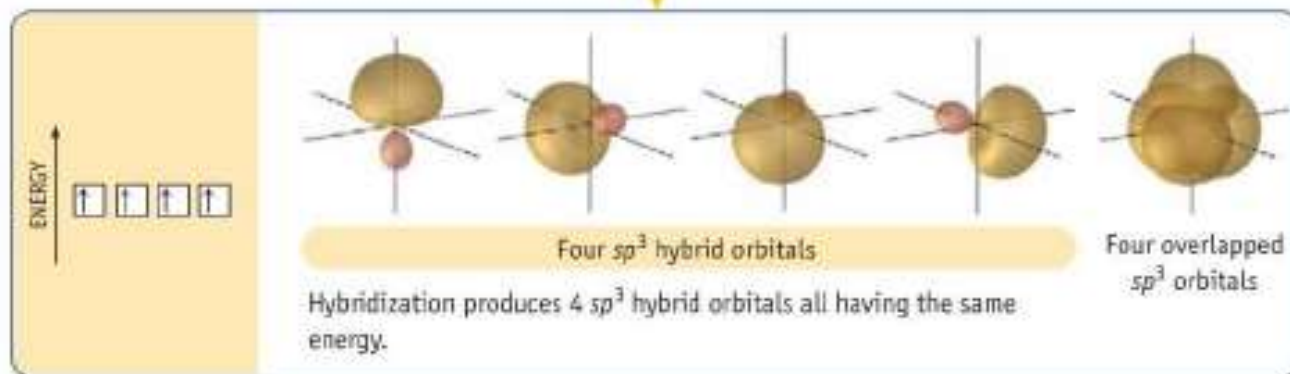
Hibridação sp^2



Hibridação sp^3



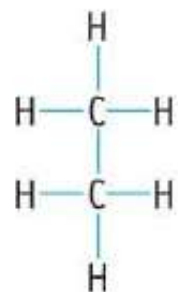
Orbital hybridization



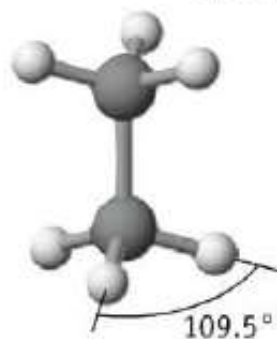
Pausa!!!!

Falar de complexos

Questão: Será que já conseguimos descrever uma molécula através da teoria de ligação de valência?
Exemplo: Metanol CH_3OH



Lewis structure



Molecular model

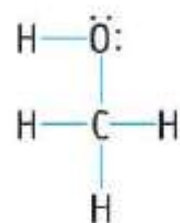
C—H bond is formed from overlap of C atom sp^3 hybrid orbital and H 1s orbital.



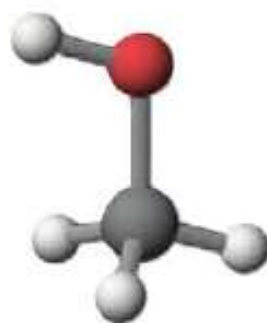
Orbital representation

C—C bond is formed from overlap of C atom sp^3 hybrid orbitals.

sp^3 hybridized carbon atom.



Lewis structure



Molecular model

O—H bond formed from O atom sp^3 hybrid orbital and H 1s orbital.

Lone pairs use sp^3 hybrid orbitals on O atom.

C—O bond formed from O and C sp^3 hybrid orbitals.

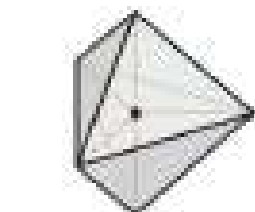
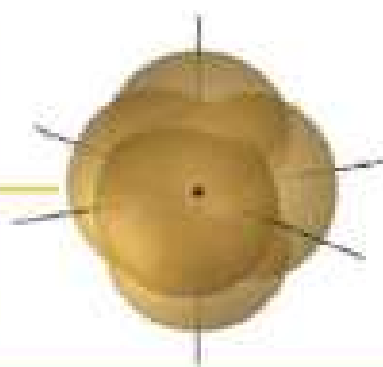
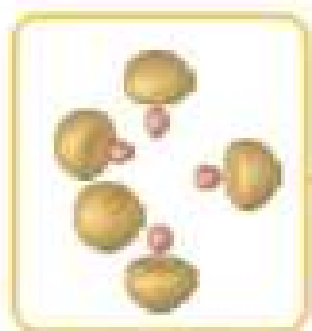
C—H bond formed from C atom sp^3 hybrid orbital and H 1s orbital.



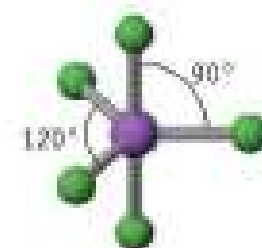
Orbital representation

Questão: Então e no caso do PF_5 e SF_6 ?

Five electron pairs
 sp^3d

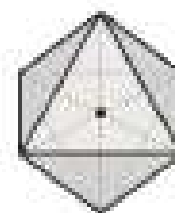
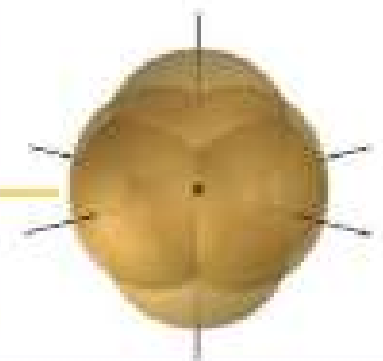
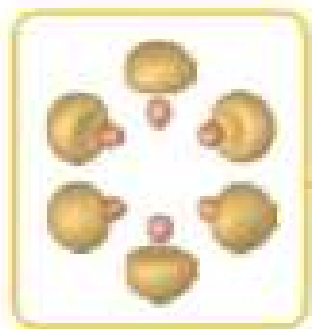


Trigonal-bipyramidal

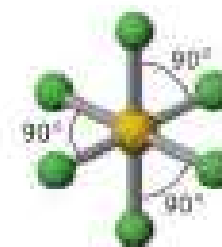


PF_5

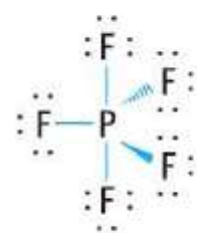
Six electron pairs
 sp^3d^2



Octahedral



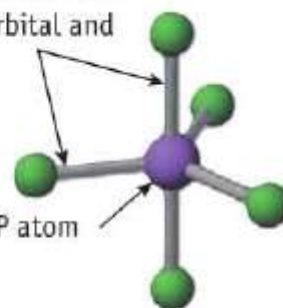
SF_6



Lewis structure and
electron-pair geometry

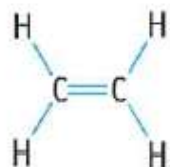
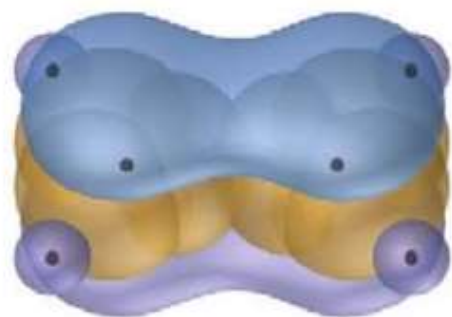
Sigma bonds formed from
P sp^3d hybrid orbital and
F $2p$ orbital

sp^3d hybridized P atom

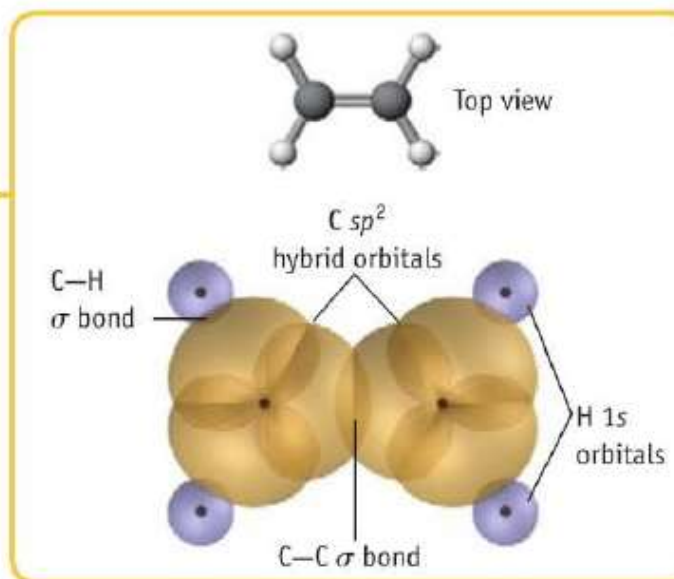


Molecular model

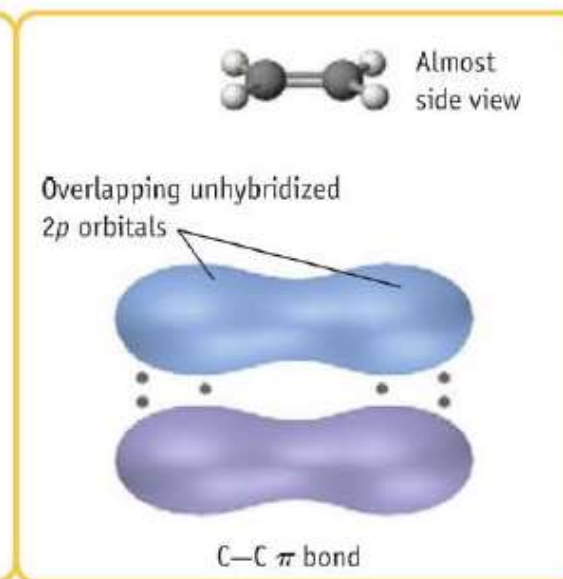
Questão: Então e se a ligação for múltipla?



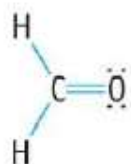
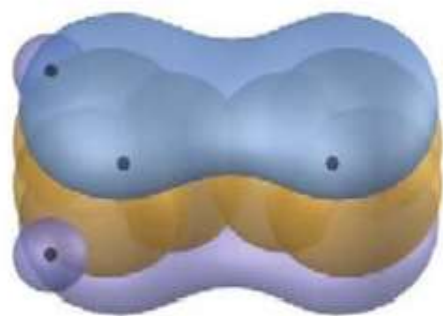
(a) Lewis structure and bonding of ethylene, C_2H_4 .



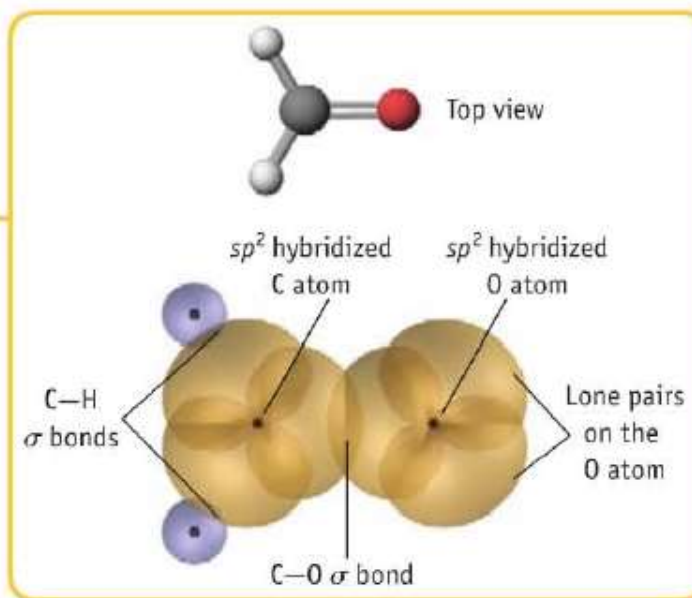
(b) The $C-H\ \sigma$ bonds are formed by overlap of C atom sp^2 hybrid orbitals with H atom $1s$ orbitals. The σ bond between C atoms arises from overlap of sp^2 orbitals.



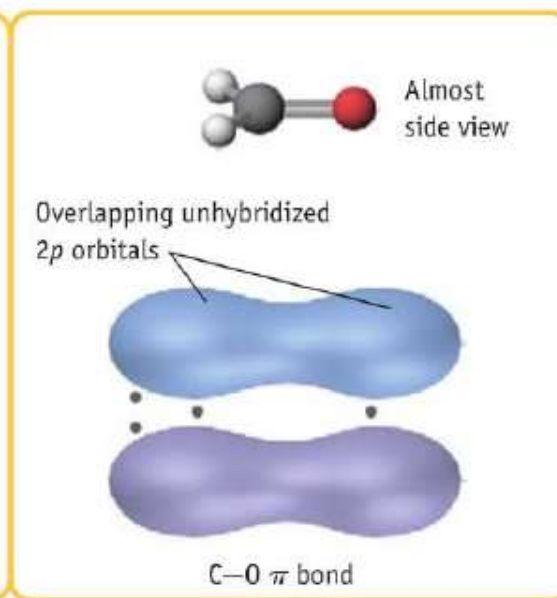
(c) The carbon-carbon π bond is formed by overlap of an unhybridized $2p$ orbital on each atom. Note the lack of electron density along the $C-C$ bond axis from this bond.



(a) Lewis structure and bonding of formaldehyde, CH_2O .



(b) The C-H σ bonds are formed by overlap of C atom sp^2 hybrid orbitals with H atom $1s$ orbitals. The σ bond between C and O atoms arises from overlap of sp^2 orbitals.



(c) The C-O π bond comes from the side-by-side overlap of p orbitals on the two atoms.

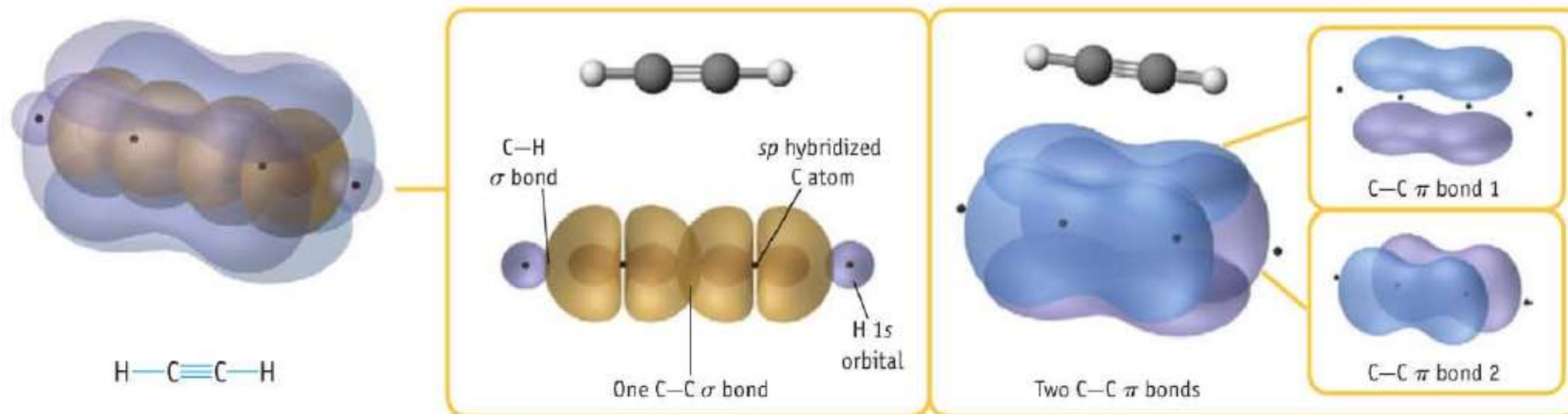
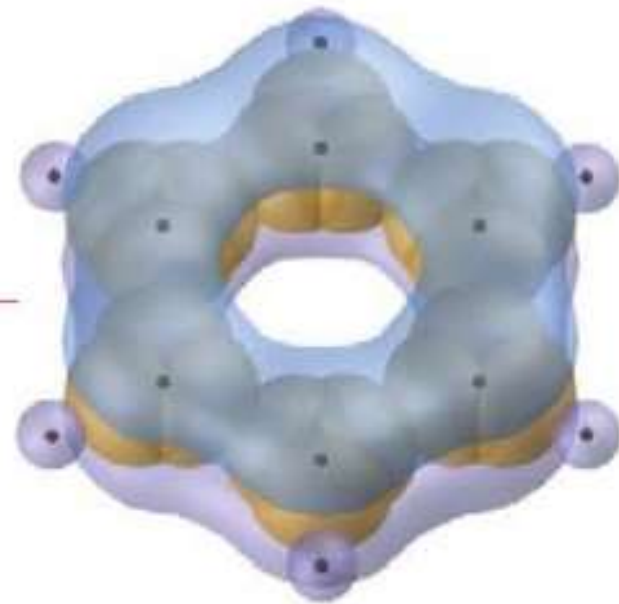
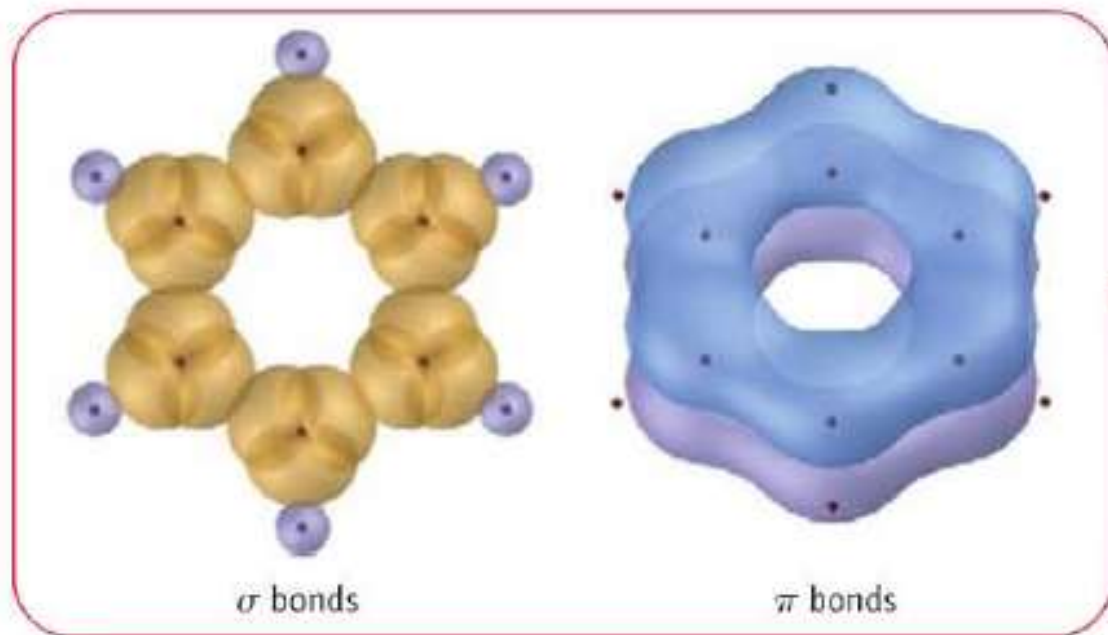
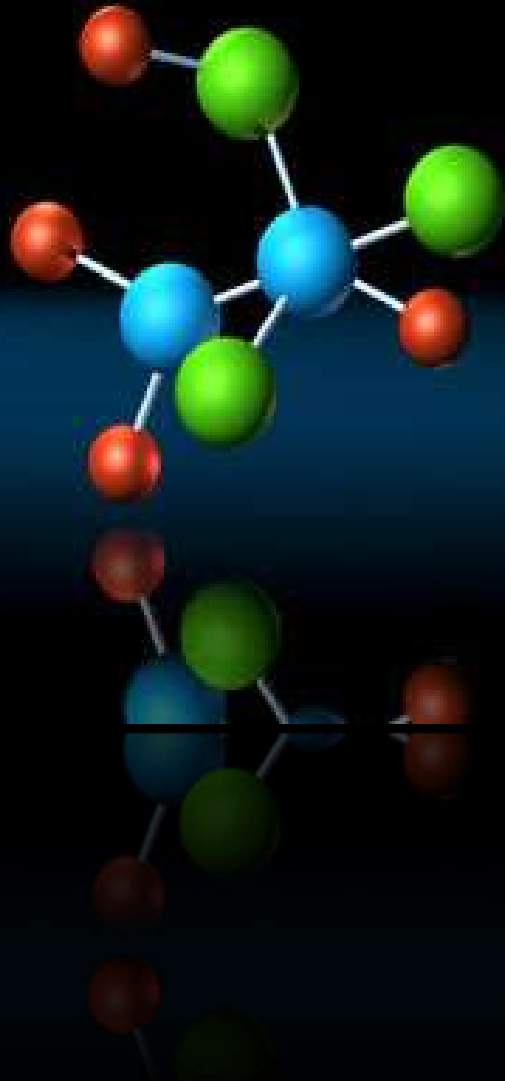


FIGURE 9.12 Bonding in acetylene.



σ and π bonding in benzene

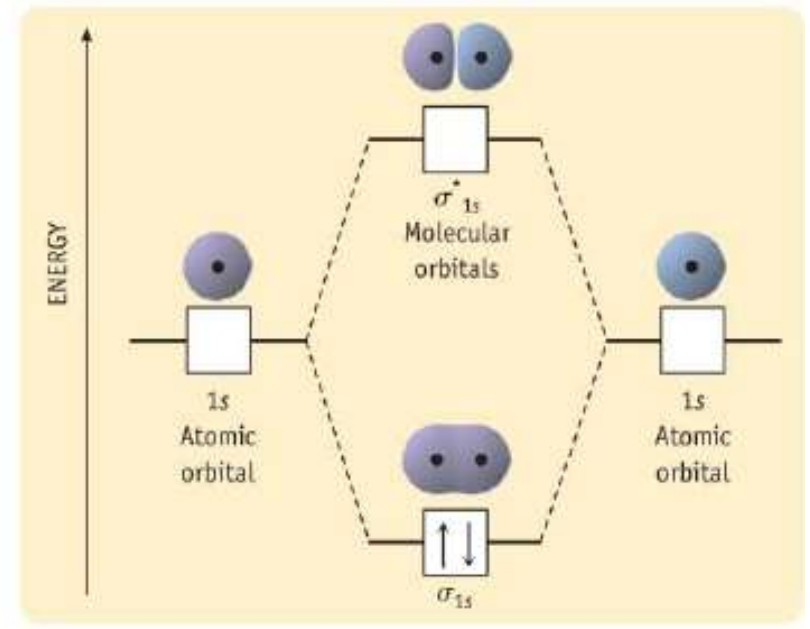
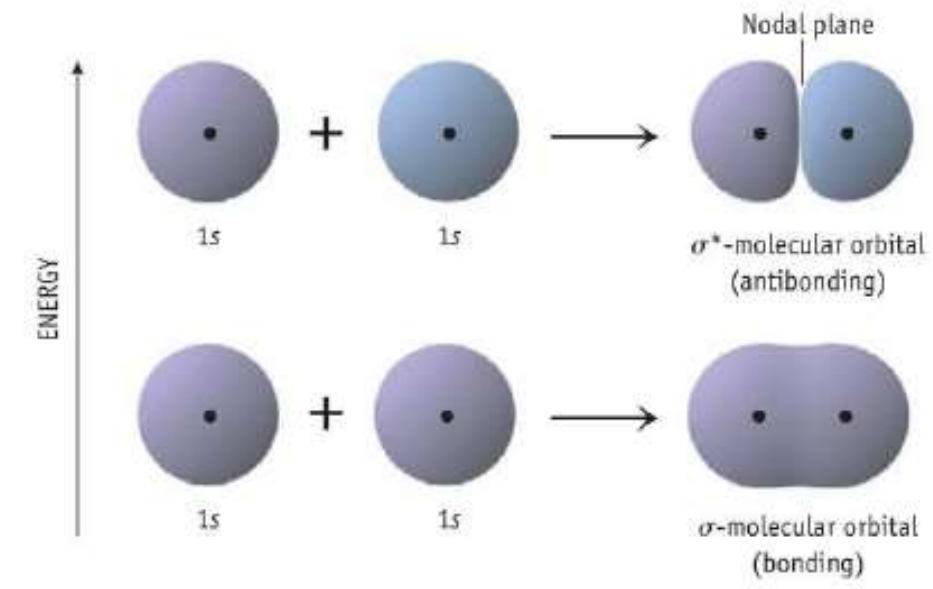


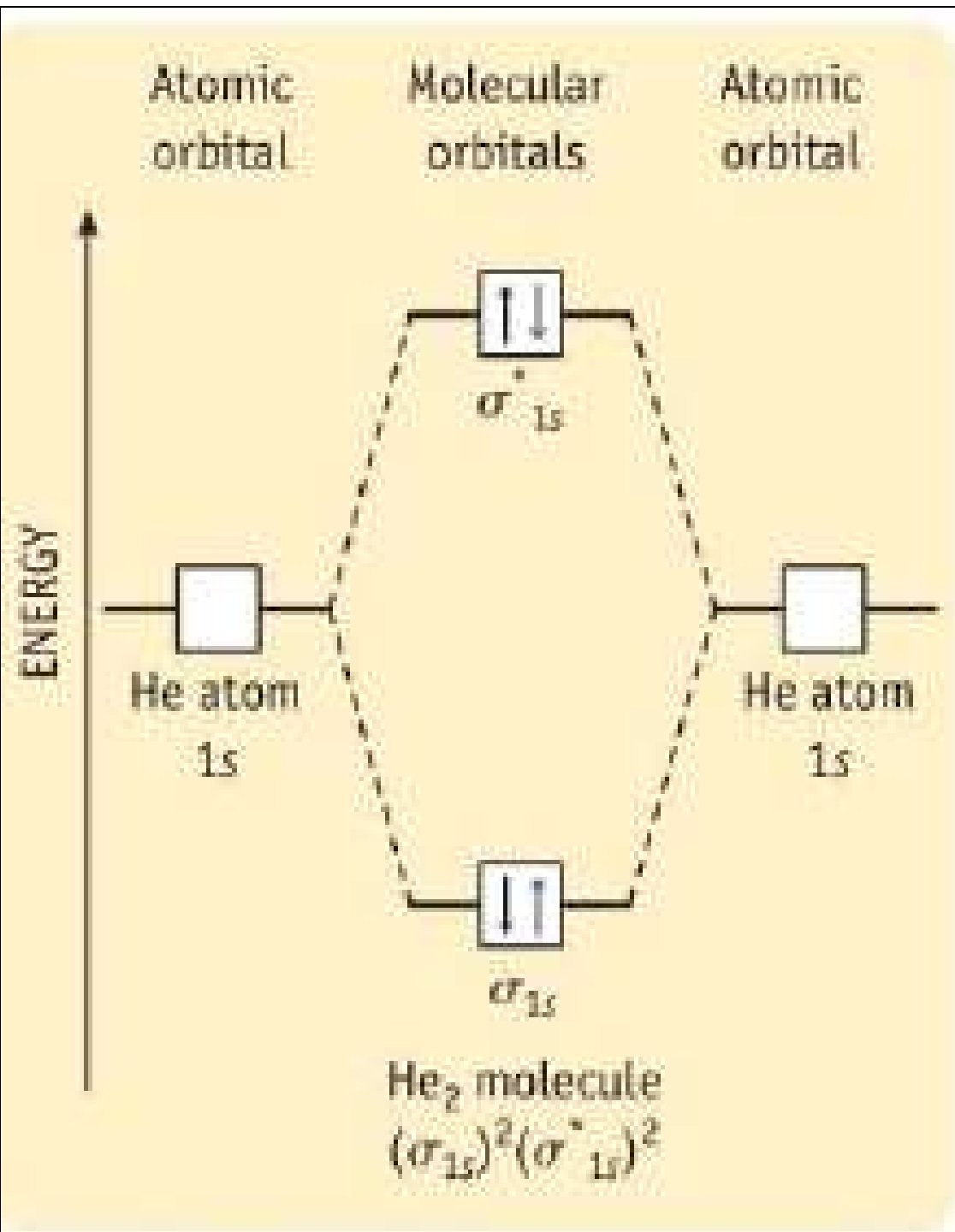
*Estrutura molecular e
ligações de orbitais e
orbitais híbridas*

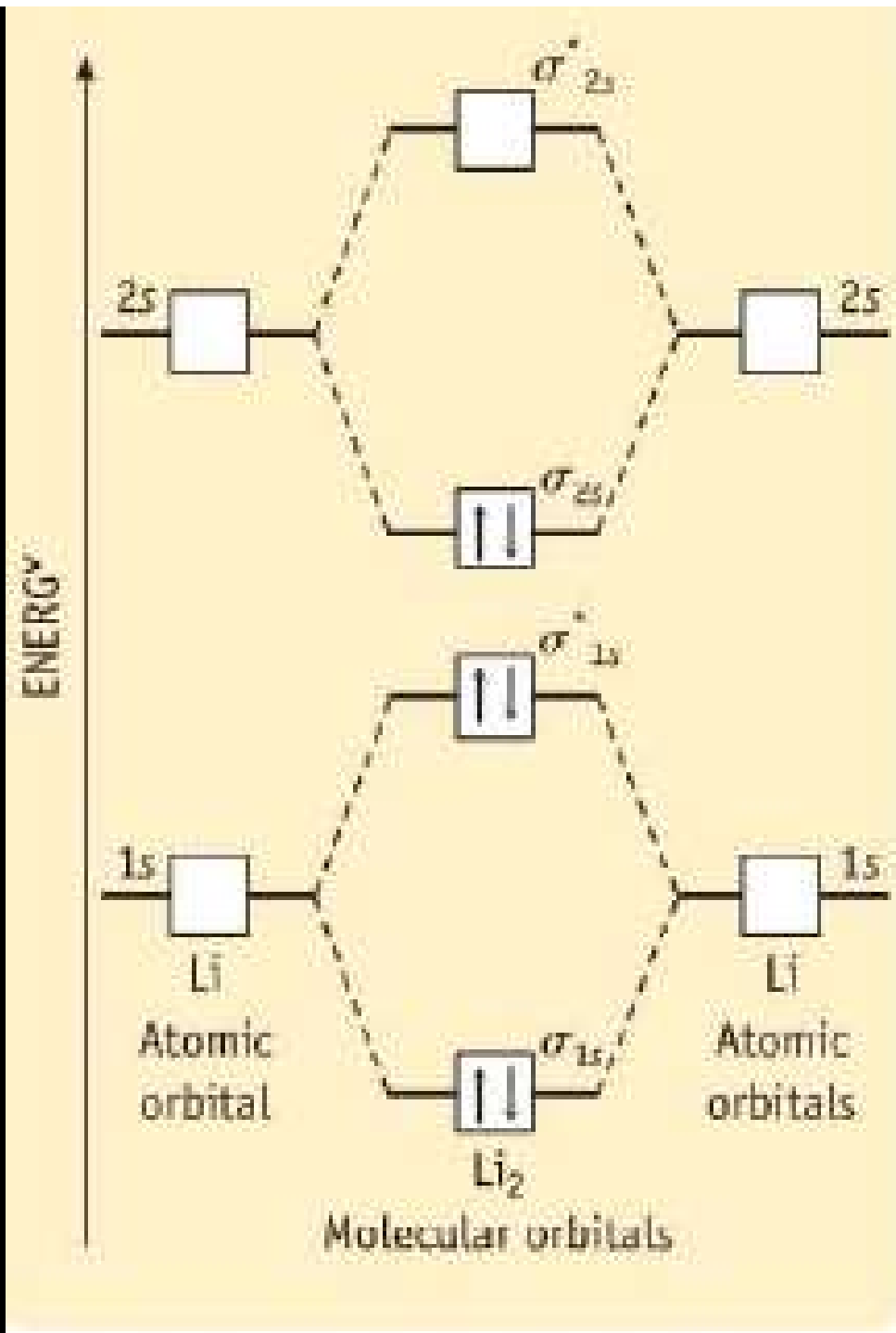
Aula 7

Teoria das orbitais moleculares (TOM)

- Quando *dois orbitais atômicos* sobrepõem formam sempre *dois orbitais moleculares* - Um orbital ligante e outro antiligante
- O *orbital ligante possui uma menor energia* do que os orbitais atômicos originais e que os orbitais não ligantes .
- Os electrons da molécula são atribuídos de acordo com a *regra de Hund* e o *princípio de exclusão* de Pauli.

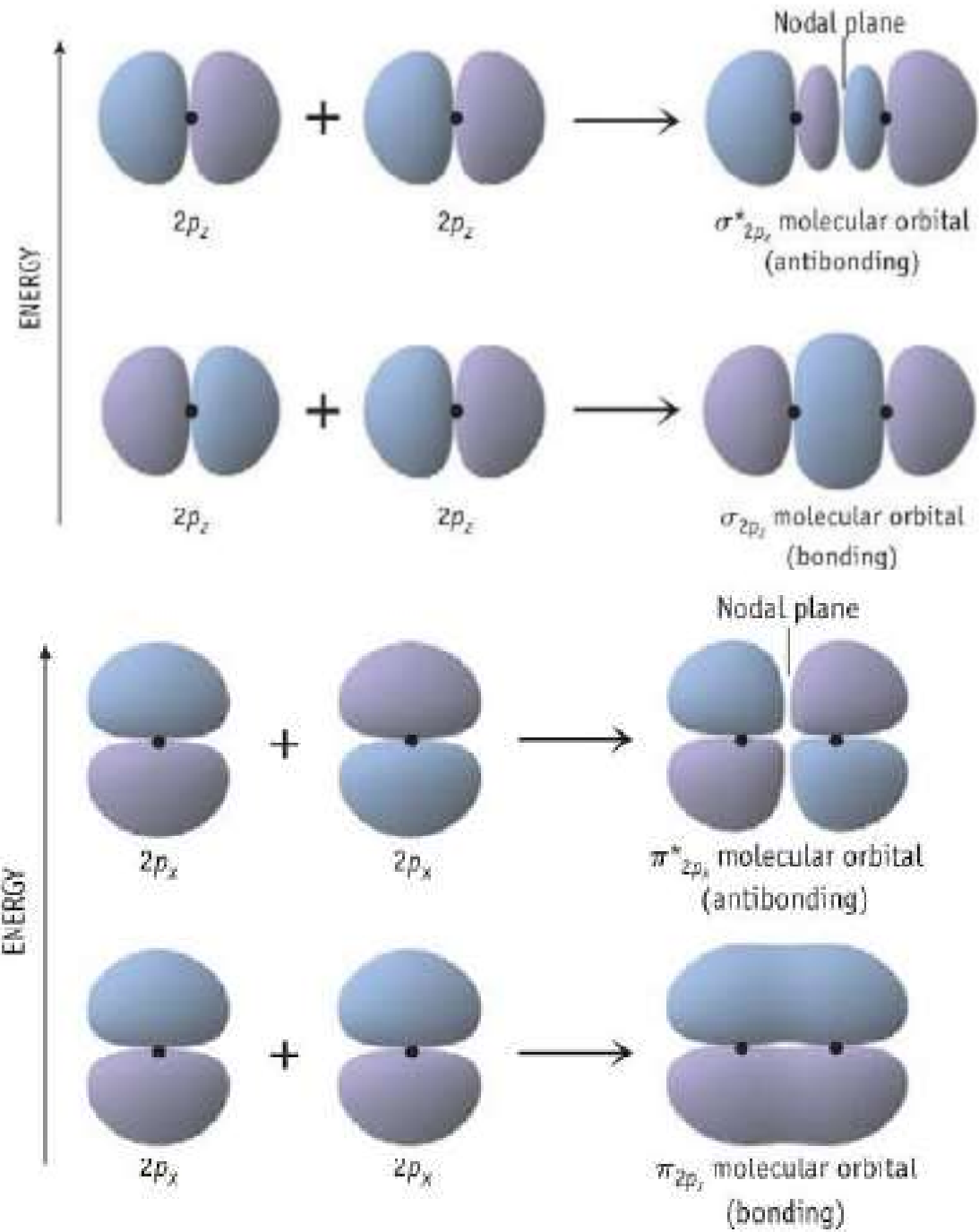


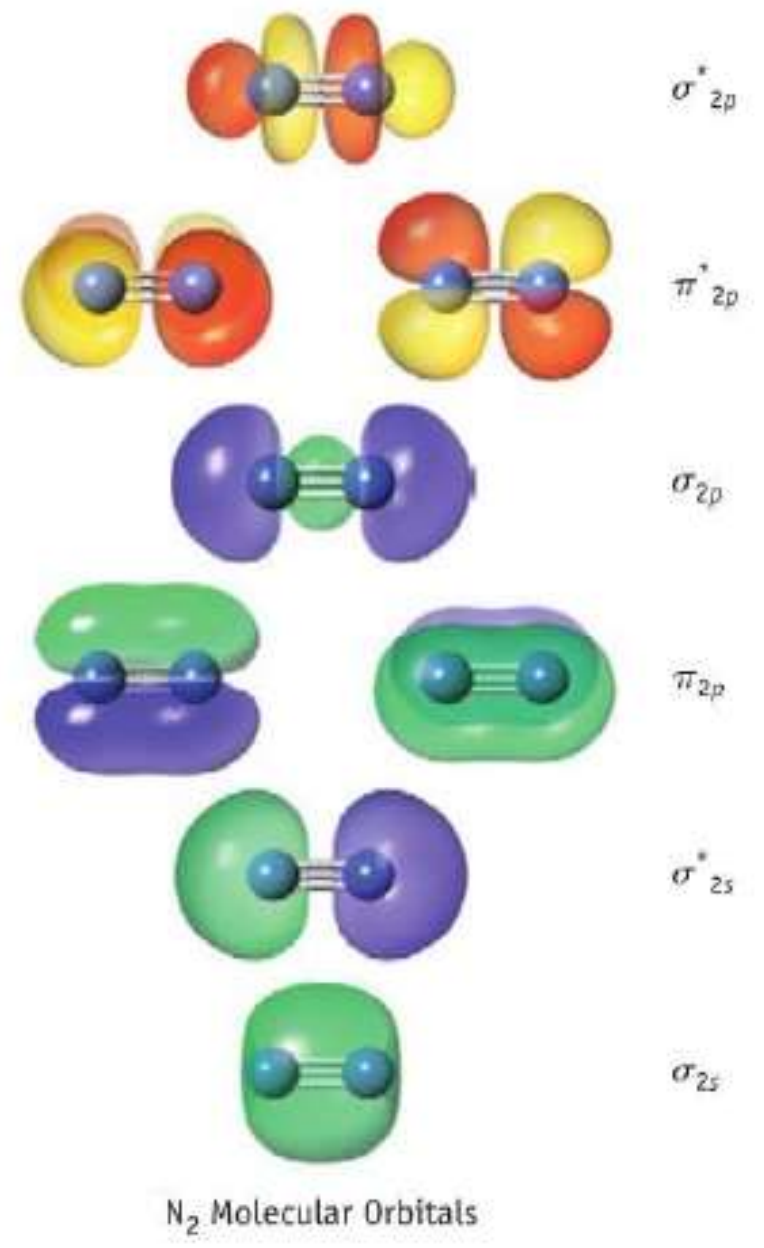
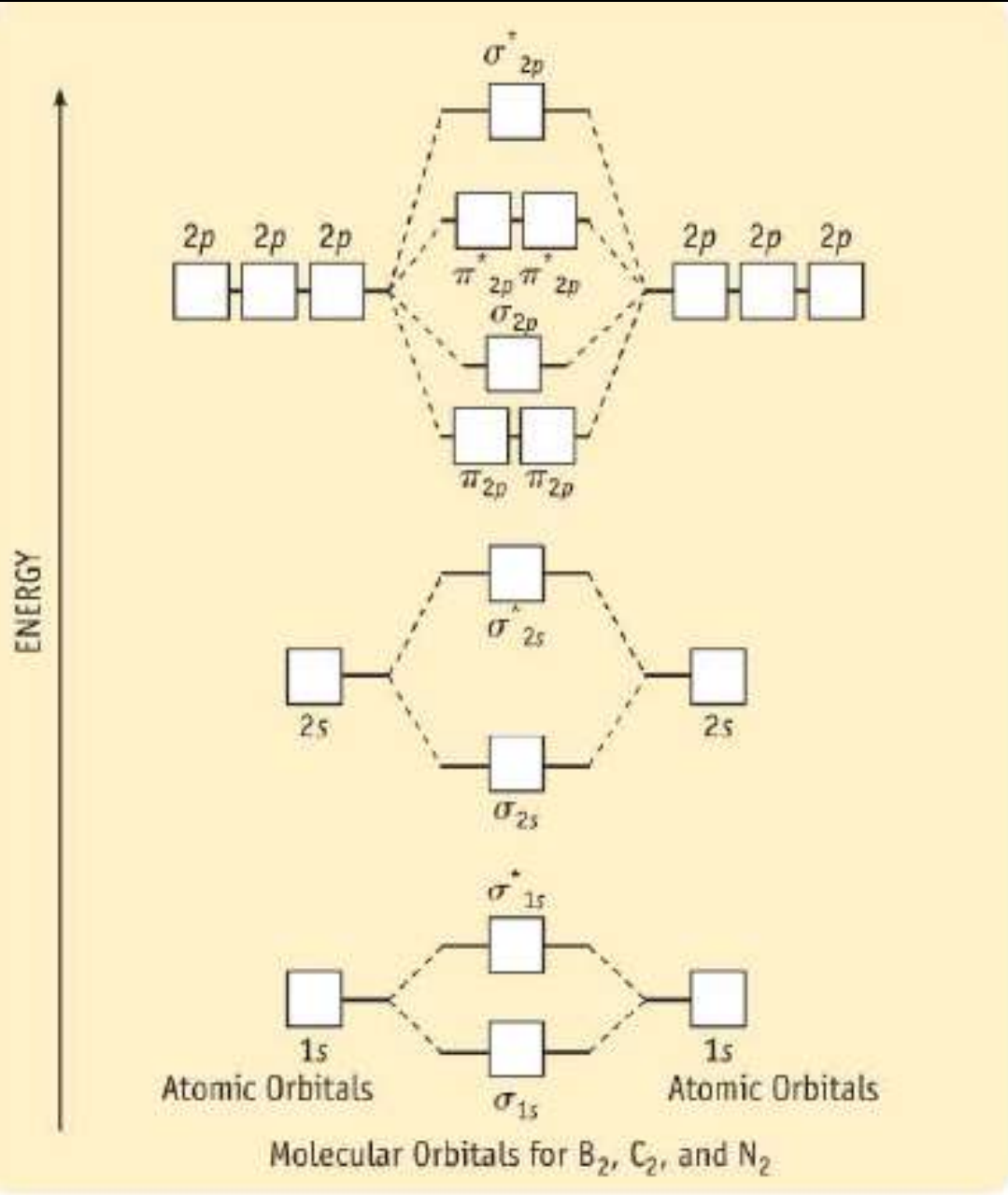




Ligação química

- 3 formas de representar
- Lewis
- Teoria de ligação de valência.
- Teoria das orbitais moleculares.





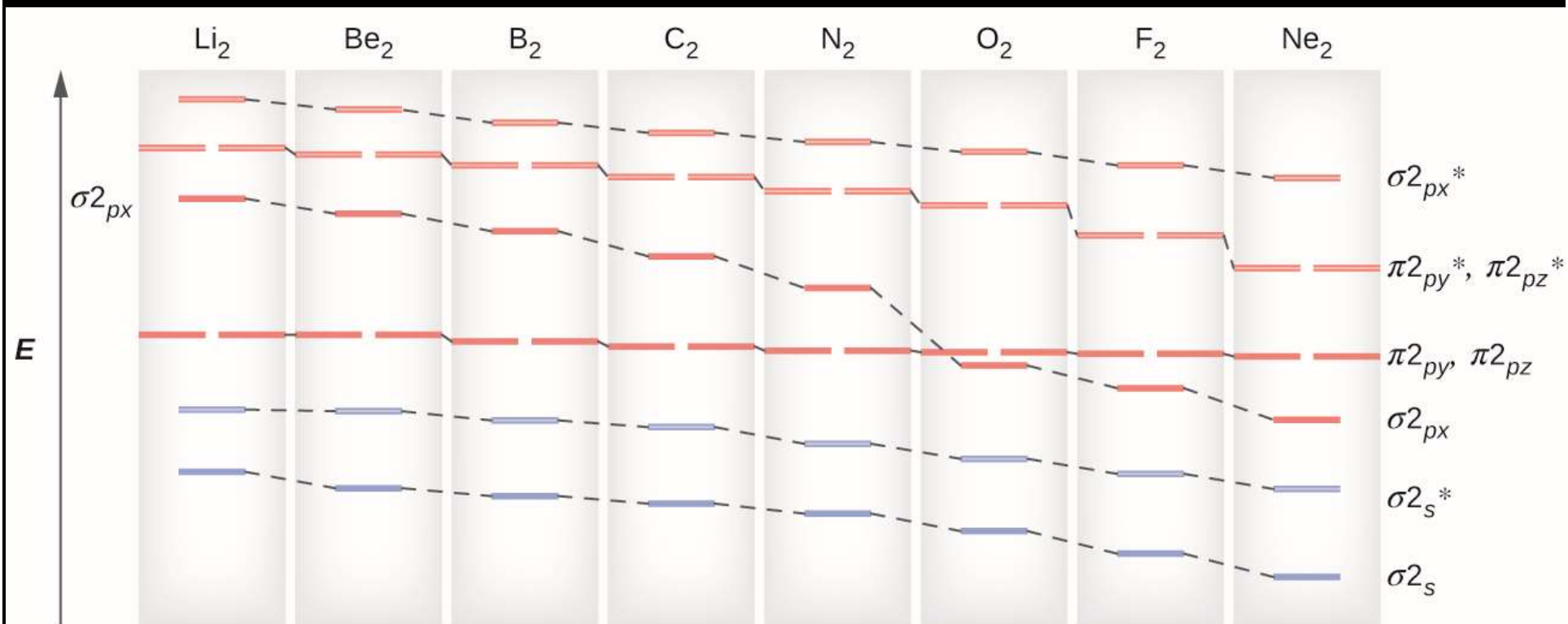
































TABLE 9.1 Molecular Orbital Occupations and Physical Data for Homonuclear Diatomic Molecules of Second-Period Elements

	B ₂	C ₂	N ₂		O ₂	F ₂
σ_{2p}^*				σ_{2p}^*		
π_{2p}^*				π_{2p}^*		
σ_{2p}				π_{2p}		
π_{2p}				σ_{2p}		
σ_{2s}^*				σ_{2s}^*		
σ_{2s}				σ_{2s}		
Bond order	One	Two	Three		Two	One
Bond-dissociation energy (kJ/mol)	290	620	945		498	155
Bond distance (pm)	159	131	110		121	143
Observed magnetic behavior (paramagnetic or diamagnetic)	Para	Dia	Dia		Para	Dia



Gases

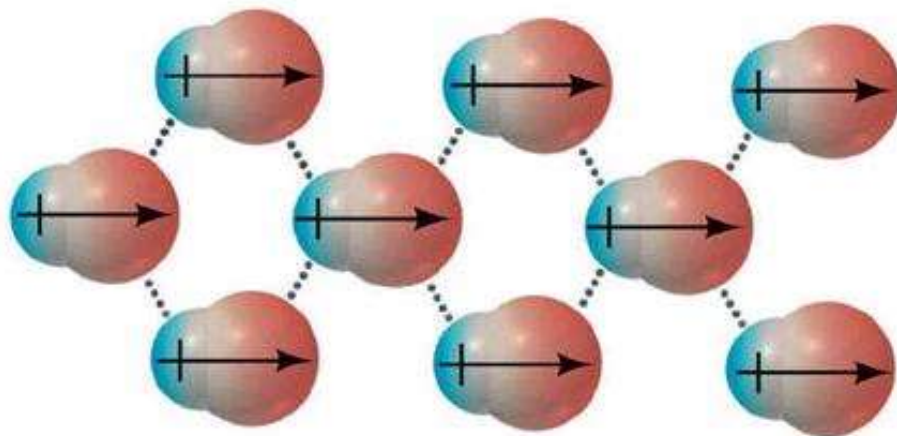
Aula 8



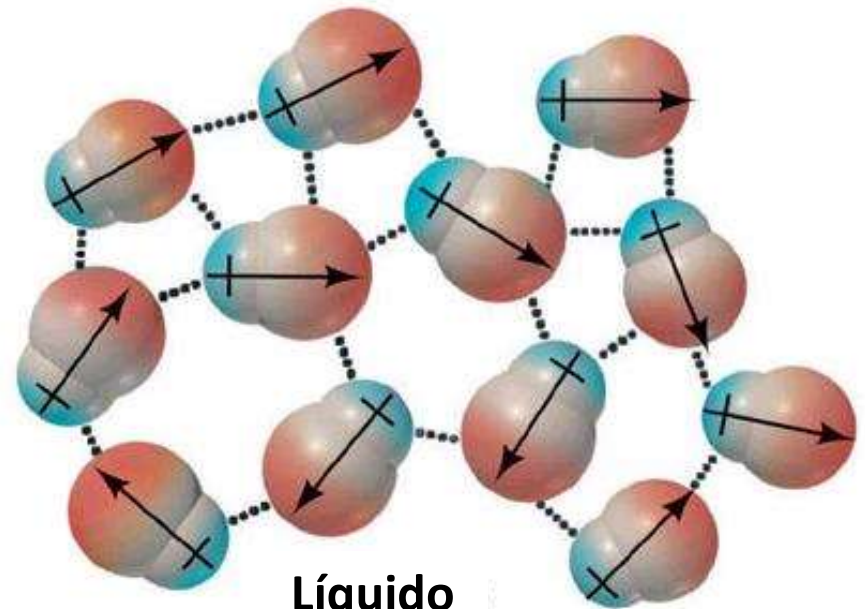
Questão: Porquê que um gás é um gás?

Porquê?

Forças Intermoleculares



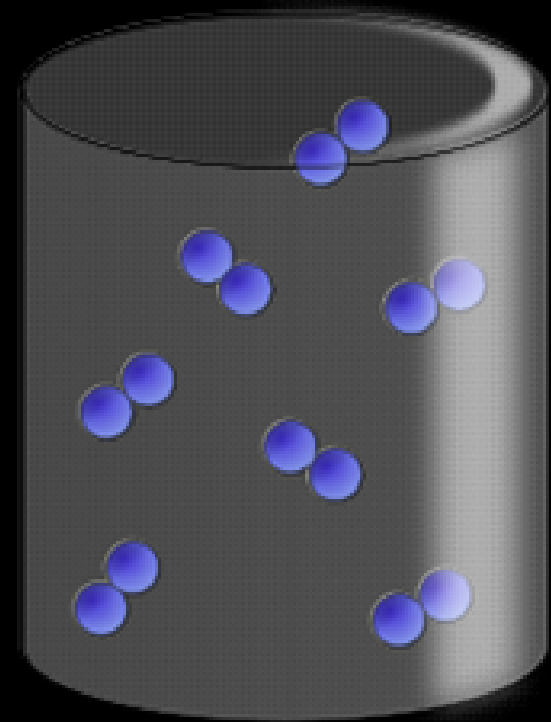
Sólido



Líquido

São forças que mantêm as moléculas unidas umas com as outras

**Porque que é que não
representei as forças
Intermoleculares nos gases?**



Porque não existem... ??

Características dos gases

Gases são altamente compressíveis

Termicamente expansíveis

Baixa densidade

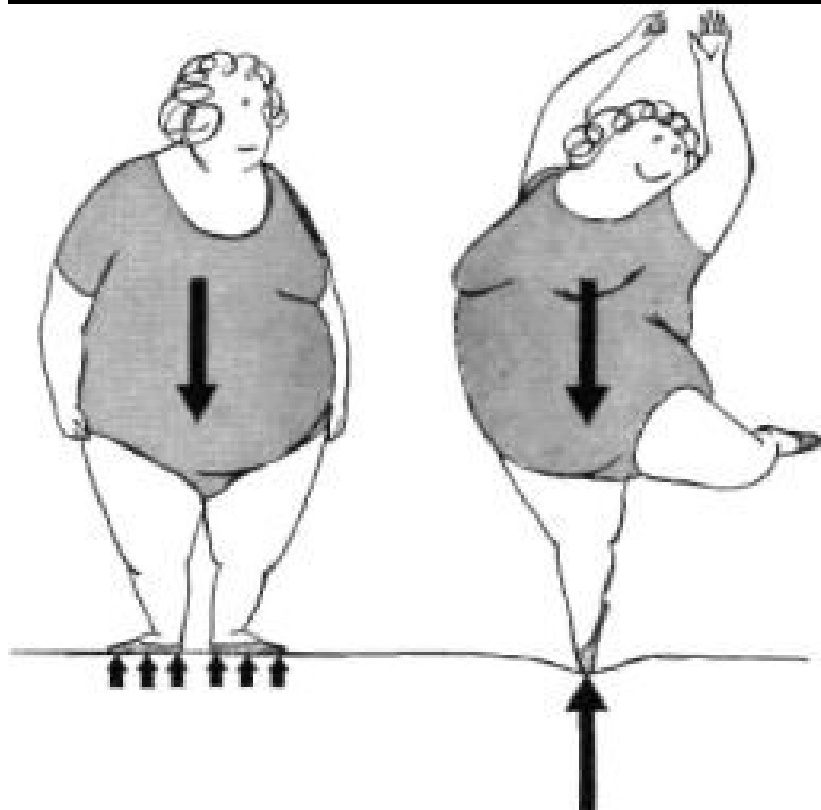
Baixas viscosidades

Infinitamente miscíveis uns nos outros

Pressão

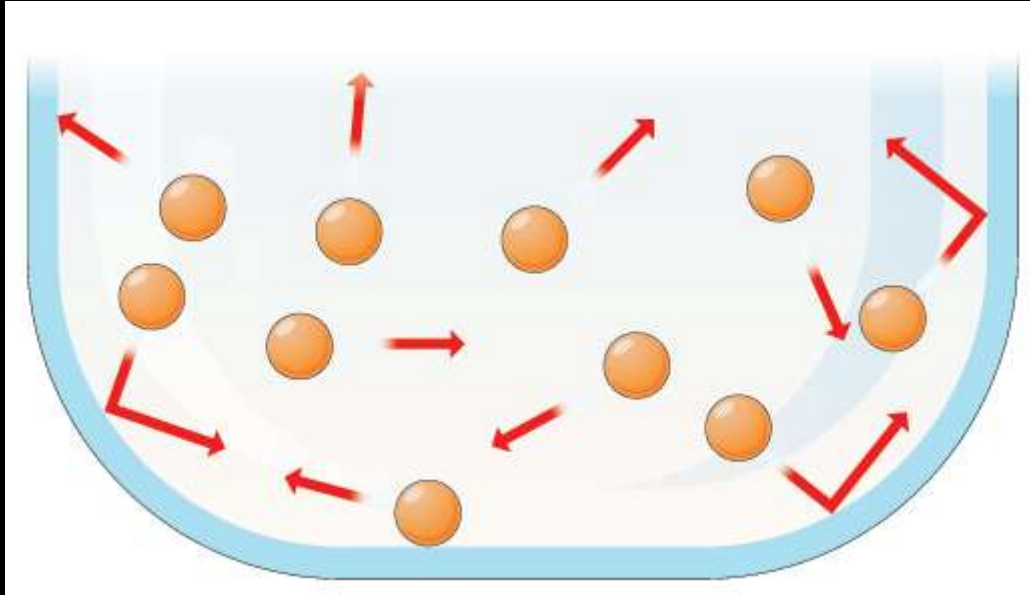


O que é a pressão?



$$P = \frac{F}{A}$$

O que é a pressão?



E que num gás resulta das colisões que as moléculas fazem com as paredes de um recipiente

$$P = \frac{F}{A}$$

Em SI – Pascal (Pa)



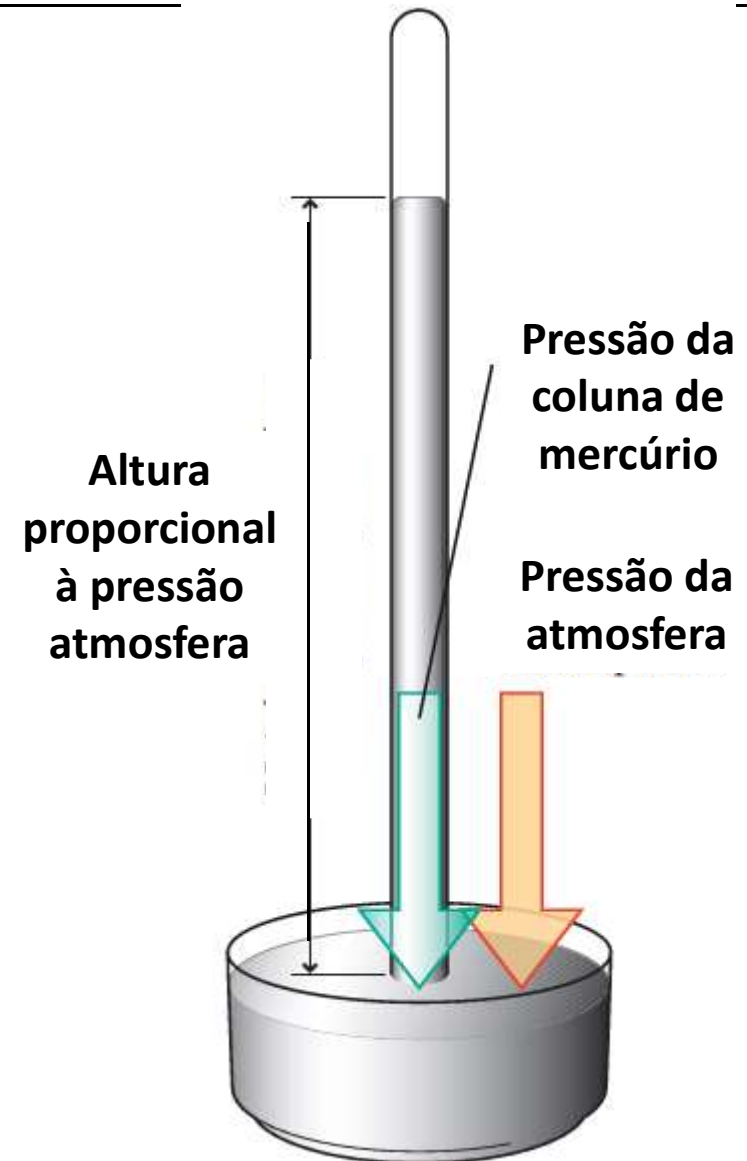
Blaise Pascal - (1623 - 1662 físico, matemático, filósofo moralista e teólogo francês.

Como é que medimos a pressão?

Barómetro

Inventado por Torricelli

$$P = \frac{F}{A} = \frac{mg}{A} = \frac{\rho Vg}{A} = \frac{\rho Ahg}{A} = \rho hg$$



Como é que medimos a pressão?

Unidade SI (Pa)

$$1 \text{ Pa} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2} = 1 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$$

Unidades Convencionais

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa} = 100 \text{ kPa}$$

$$1 \text{ atm} = 1.013\,25 \times 10^5 \text{ Pa} \\ = 101.325 \text{ kPa}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ Torr}$$

$$1 \text{ Torr (1 mmHg)} = 133.322 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ atm} = 14.7 \text{ lb} \cdot \text{inch}^{-2} \text{ (psi)}$$



Lei dos Gases

Lei de Boyle

Experiencia simples com um tubo em U:

Adicionou mercúrio gradualmente esse tubo

Notou que quanto mais Mercúrio adicionava mais comprimido era o volume de ar na ponta do tubo

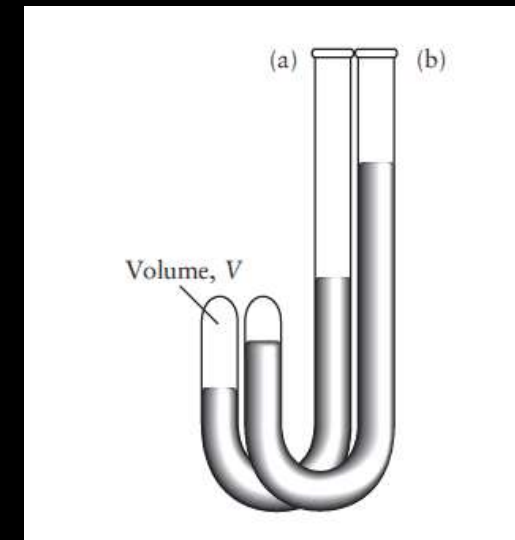
Concluindo

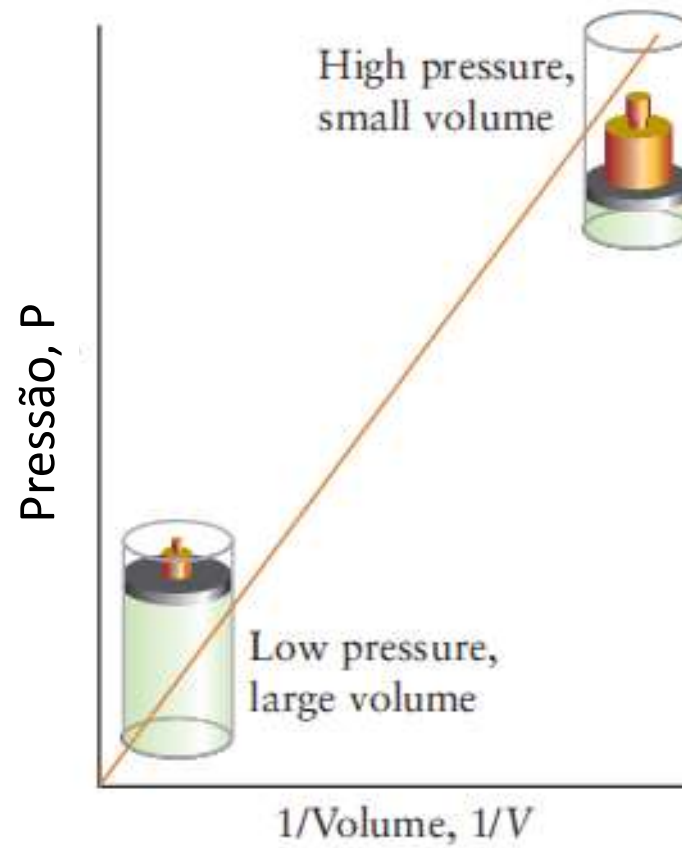
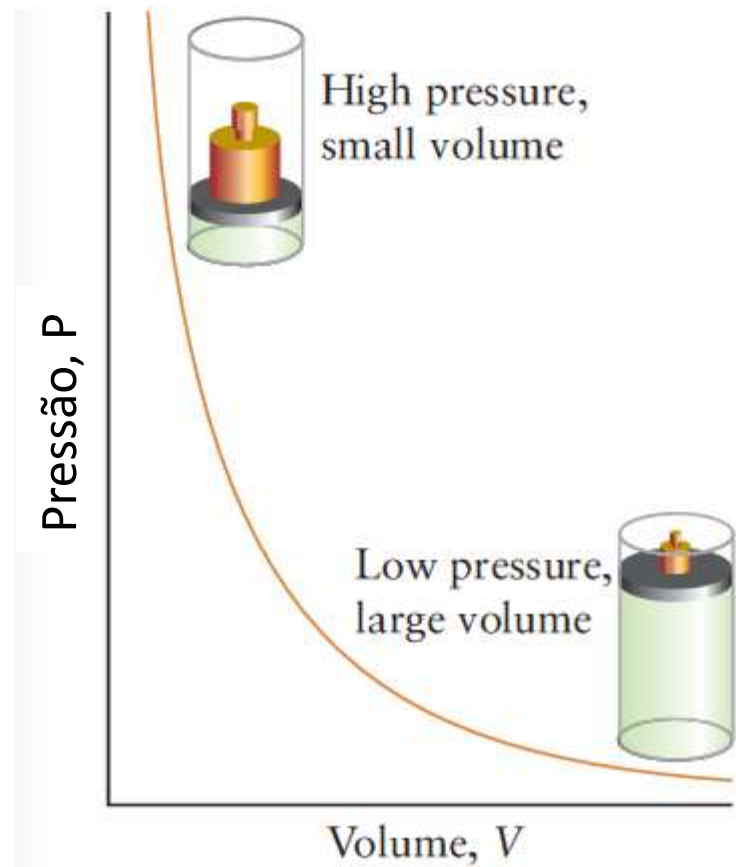
que o volume variava na razão e inversa da pressão

$$V = \frac{1}{P} \text{ ou simplesmente } PV = \textit{constante}$$



Robert Boyle (Lismore, 25 de janeiro de 1627 — Londres, 31 de dezembro de 1691) foi um filósofo natural, químico e físico irlandês





$$V = \frac{1}{P} \text{ ou simplesmente } PV = \textit{constante}$$

$$P_1V_1 = P_2V_2$$

Lei dos Gases

Gay-Lussac

Que a pressão constante o volume do gás aumenta medida que a temperatura aumenta .

Volume \propto temperatura absoluta
ou simplesmente $V = constante \times T$

Pressão \propto temperatura absoluta
ou simplesmente $P = constante \times T$

Esta Lei é actualmente conhecida por
Lei de Charles

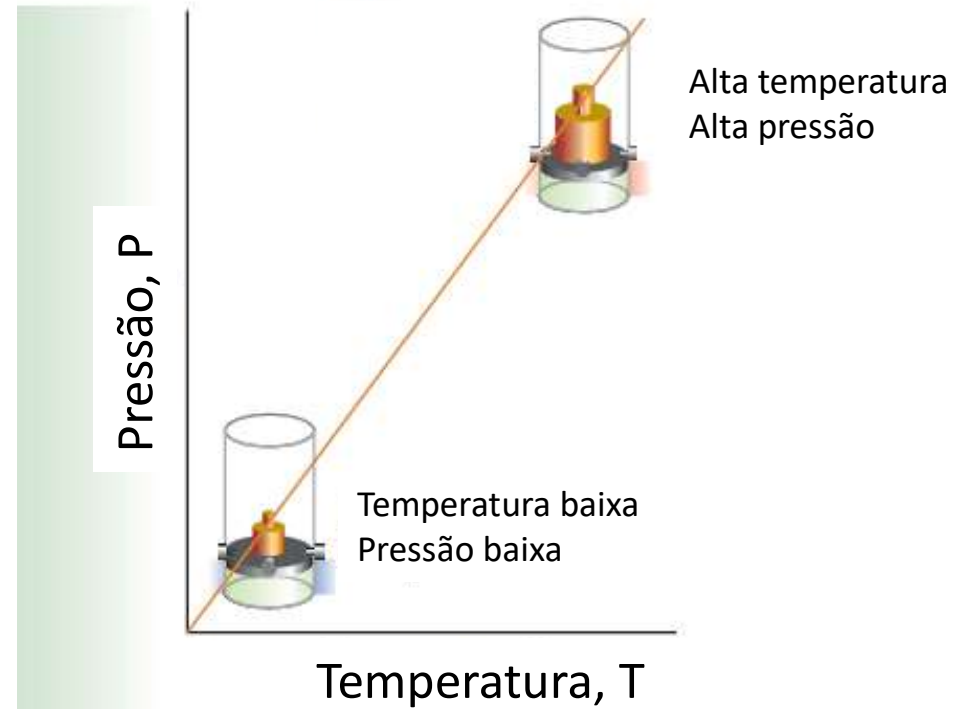
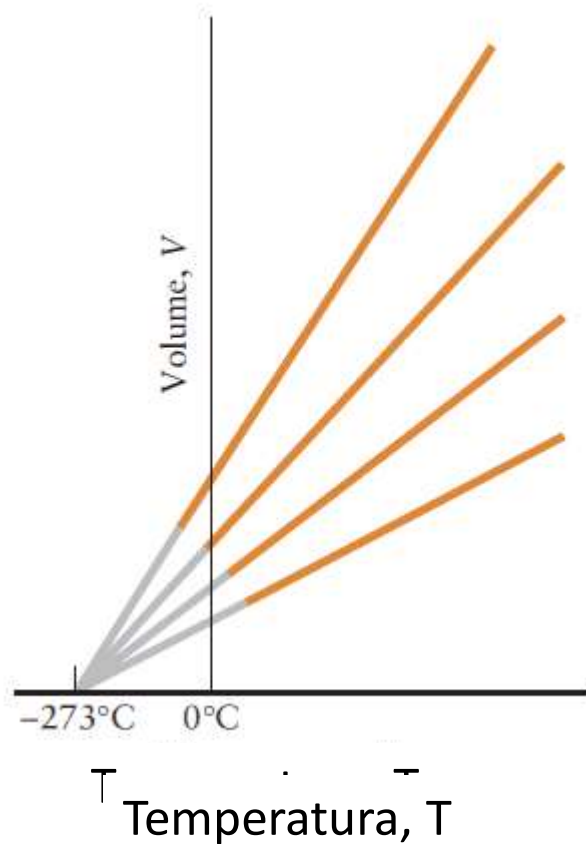


Joseph Louis Gay-Lussac (1778 -1850)
físico e químico francês



Jacques Charles
(1746 - 1823) físico,
inventor e químico francês
foi o primeiro a fazer voar
um balão a gás, em 1783.

Lei dos Gases



Volume \propto temperatura absoluta

$$V = \text{constante} \times T$$

Pressão \propto temperatura absoluta

$$P = \text{constante} \times T$$

Lei dos Gases

Lei de Avogrado:

“Que nas mesmas condições de pressão e temperatura, um dado número de moléculas ocupa o mesmo volume independentemente da sua entidade química “

$$\text{Volume molar} = \frac{\text{Volume}}{\text{quantidade}}$$

$$V_m = \frac{V}{n}$$



**Lorenzo Romano
Amedeo Carlo
Avogadro,**
(1776 - 1856) advogado
e físico italiano

Lei dos Gases

Ideal gas	22.41
Argon	22.09
Carbon dioxide	22.26
Nitrogen	22.40
Oxygen	22.40
Hydrogen	22.43

Os volumes molares de vários gases a 0 °C e 1 atm eram bastante próximos

$$V_m = \frac{V}{n}$$

Lei dos Gases

Lei de Boyle

$$PV = \text{constante}$$

$$\frac{PV}{T} = \text{constante}$$

Lei Charles-Lussac

$$\frac{P}{T} = \text{constante}$$

$$\frac{V}{T} = \text{constante}$$

$$\frac{PV}{nT} = \text{constante}$$

Lei de Avogrado

$$V_m = \frac{V}{n}$$

$$PV = \text{constante} \times n \times T$$

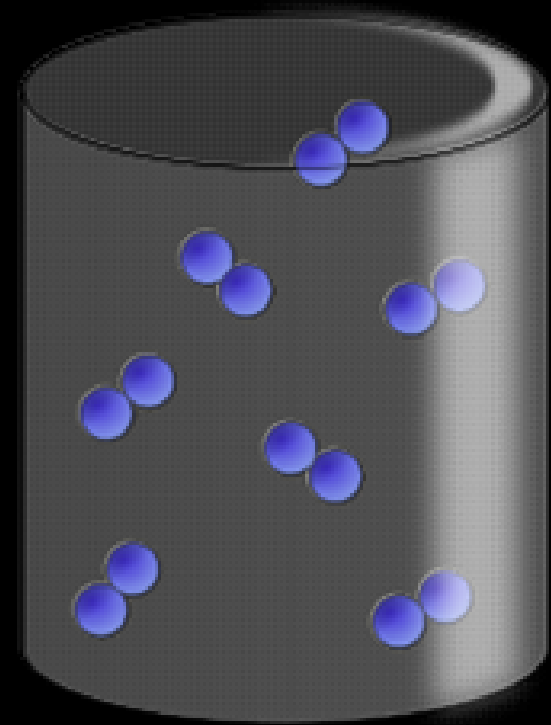
**Equação dos gases
perfeitos**

$$PV = R \times n \times T$$

$$\begin{aligned} &8.205\ 74 \times 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{atm}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \\ &8.314\ 47 \times 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{bar}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \\ &8.314\ 47 \text{ L}\cdot\text{kPa}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \\ &8.314\ 47 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \\ &62.364 \text{ L}\cdot\text{Torr}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \end{aligned}$$

Porque é que os gases são perfeitos?...

Ausência de Forças intermoleculares



Densidade de Um Gás

$$\textit{densidade} = \frac{m}{V} = \frac{nM}{V} = \frac{\left(\frac{PV}{RT}\right)M}{V} = \frac{PM}{RT}$$

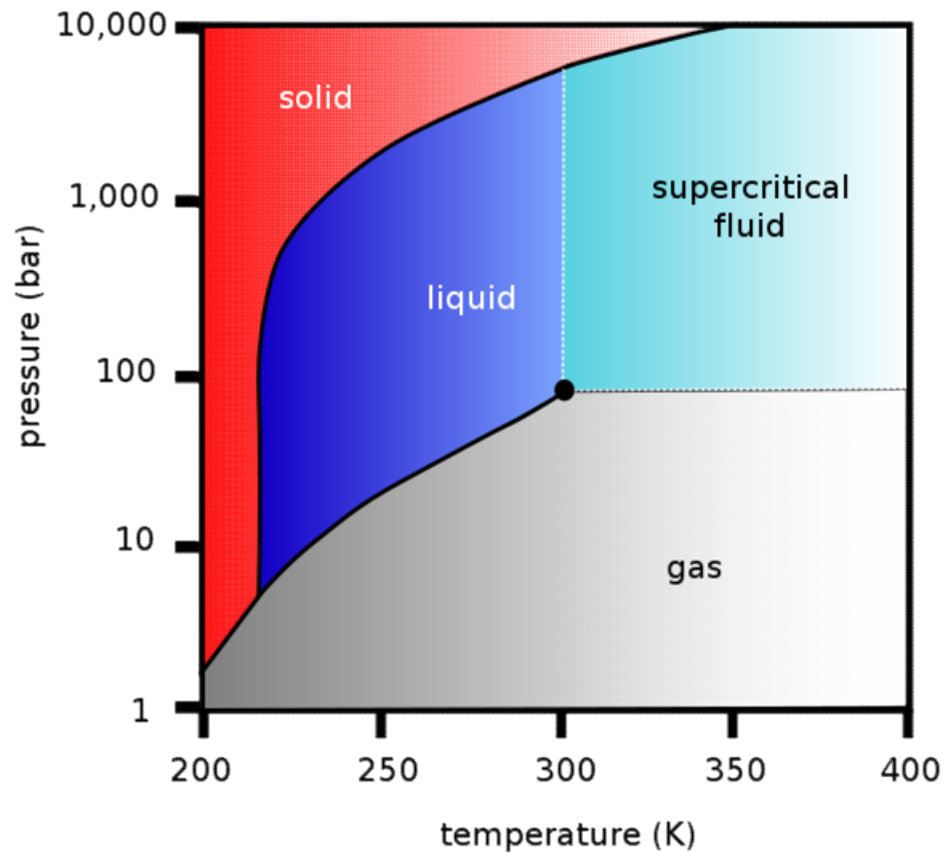
O que é que esta equação nos diz ?

“Que a densidade de um gás *umenta* com a pressão

“Que *diminui* com a temperatura”

Gases possuem uma baixa densidade...

Densidade de Um Gás



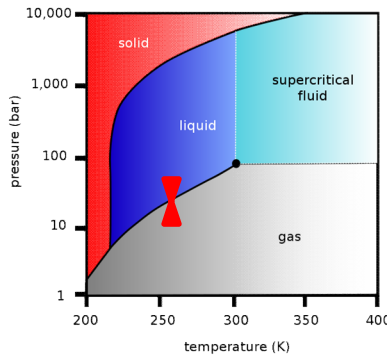
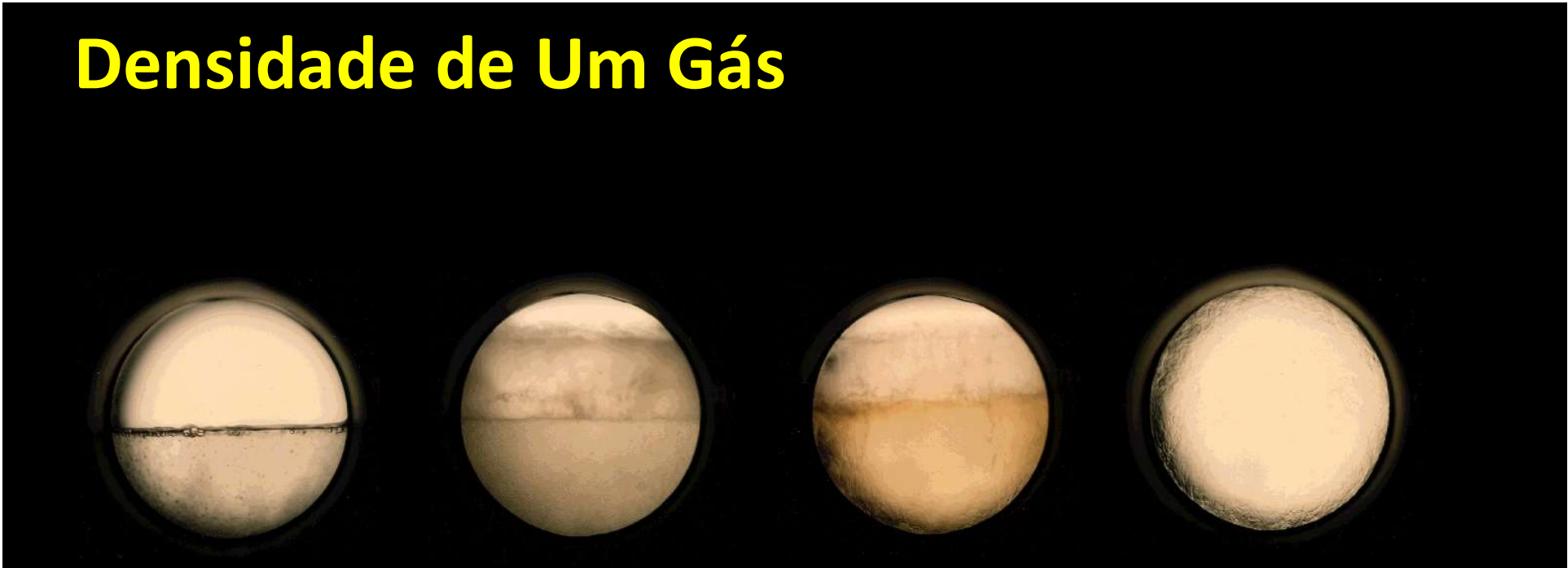
Fluido supercrítico:

é qualquer substância cuja temperatura e pressão e estão acima do seu ponto crítico.

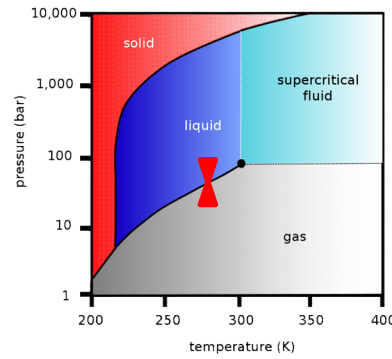
Ponto crítico:

Ponto a partir do qual é impossível definir se um fluido é líquido ou gasoso

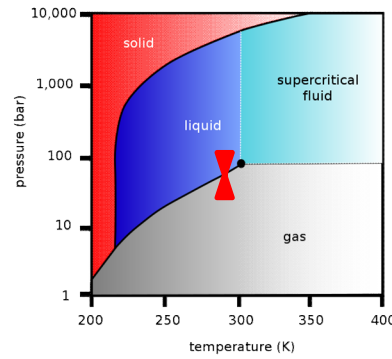
Densidade de Um Gás



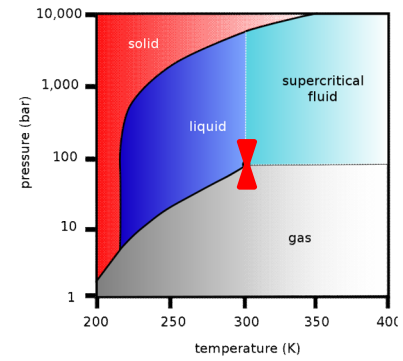
Pressão de vapor
CO₂ 298 K 60 bar



Aumentando T



Aumentando T

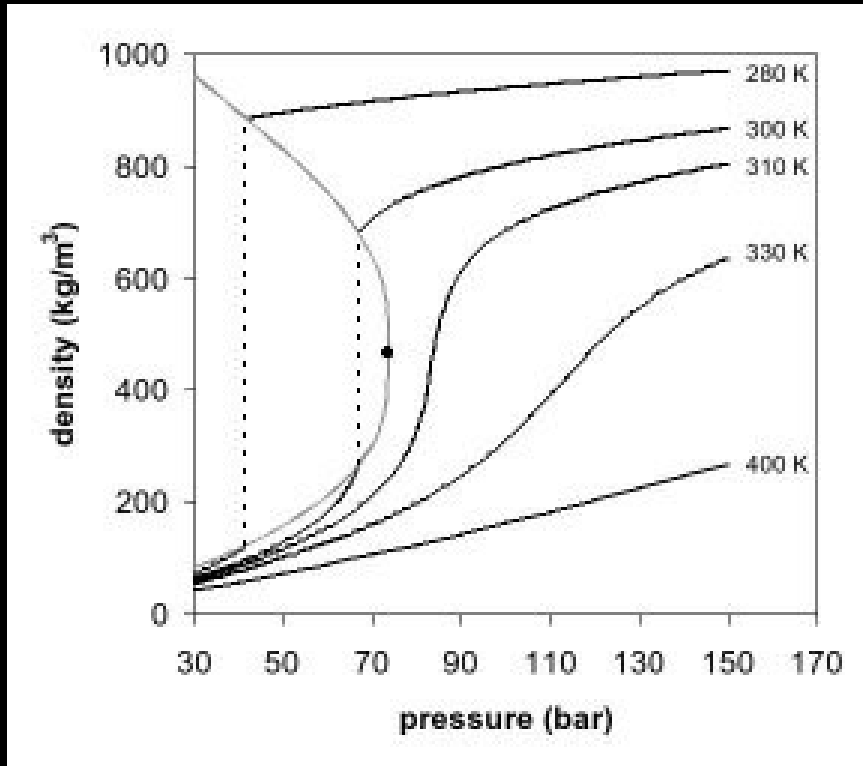


O Menisco desaparece
PONTO CRITICO

Table 1. Critical properties of various solvents (Reid et al., 1987)

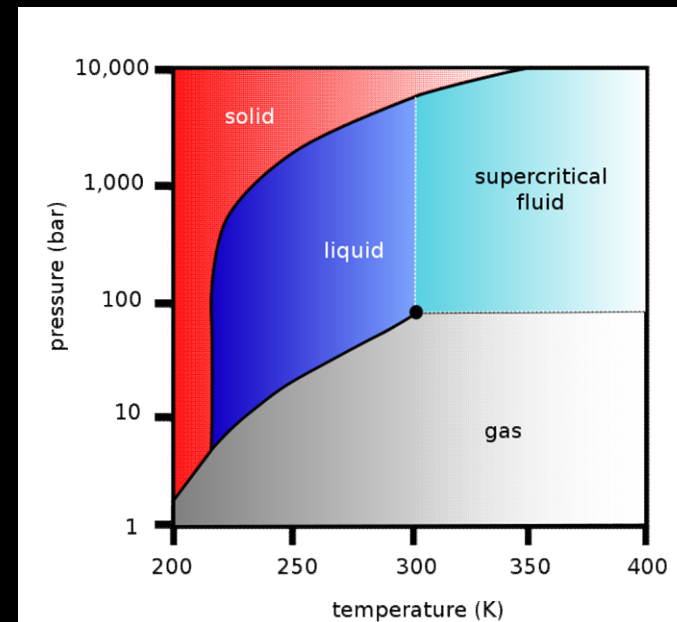
Solvent	Molecular weight	Critical temperature	Critical pressure	Critical density
	g/mol	K °C	MPa (atm)	g/cm ³
<u>Carbon dioxide</u> (CO ₂)	44.01	304.1 (31,1)	7.38 (72.8)	0.469
<u>Water</u> (H ₂ O) (acc. IAPWS)	18.015	647.096 (374.1)	22.064 (217.755)	0.322
<u>Methane</u> (CH ₄)	16.04	190.4 (-82,6)	4.60 (45.4)	0.162
<u>Ethane</u> (C ₂ H ₆)	30.07	305.3(32,3)	4.87 (48.1)	0.203
<u>Propane</u> (C ₃ H ₈)	44.09	369.8(96,8)	4.25 (41.9)	0.217
<u>Methanol</u> (CH ₃ OH)	32.04	512.6(239,6)	8.09 (79.8)	0.272
<u>Ethanol</u> (C ₂ H ₅ OH)	46.07	513.9(340.9)	6.14 (60.6)	0.276
<u>Acetone</u> (C ₃ H ₆ O)	58.08	235.(235,1)	4.70 (46.4)	0.278

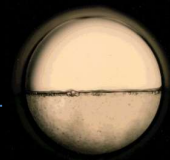
Densidade de Um Gás



DENSIDADE !!!

Com pequenas alterações na densidade do CO₂ podemos alterar a solubilidade dos compostos em CO₂

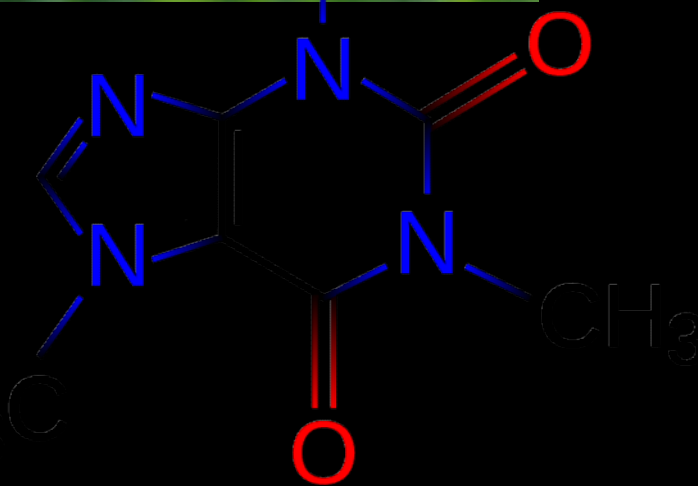




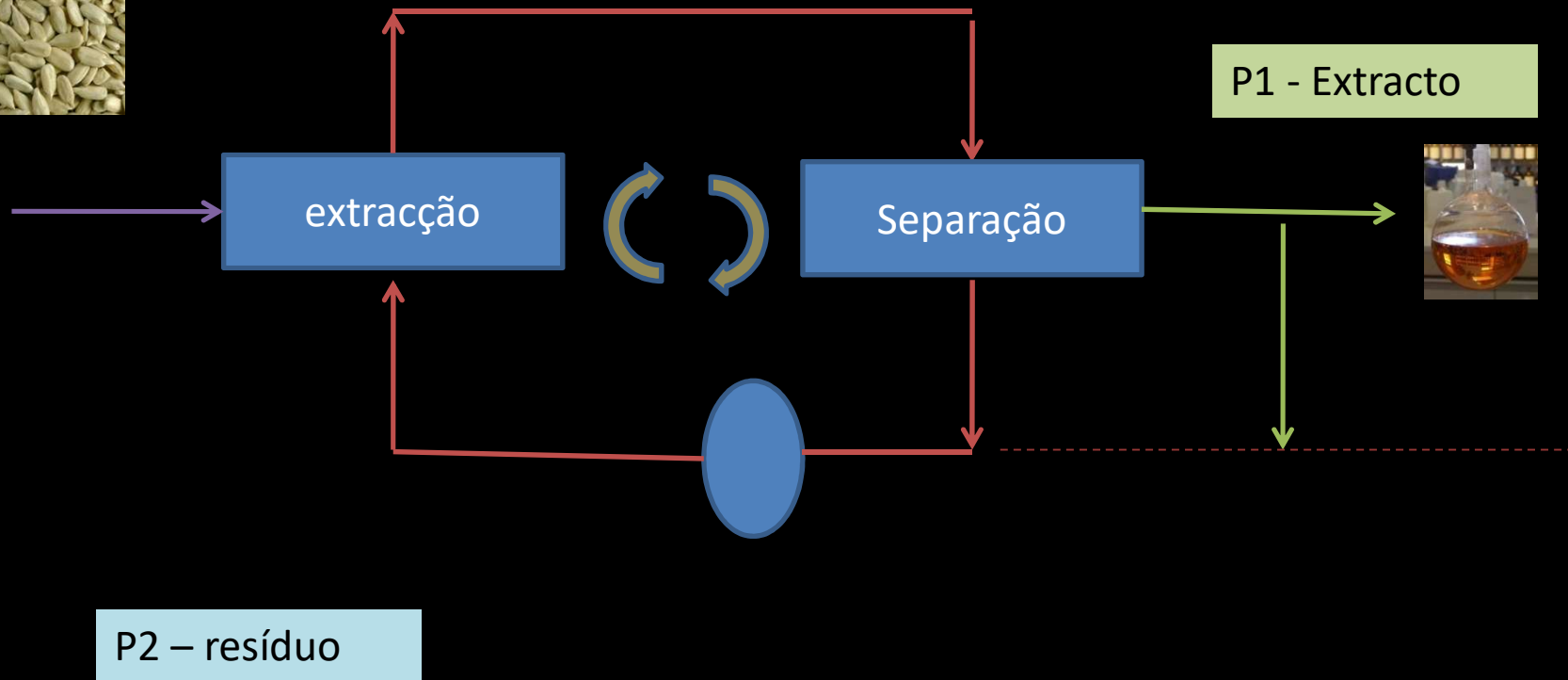
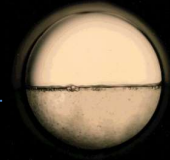
• *Sistema de extração de produtos naturais*

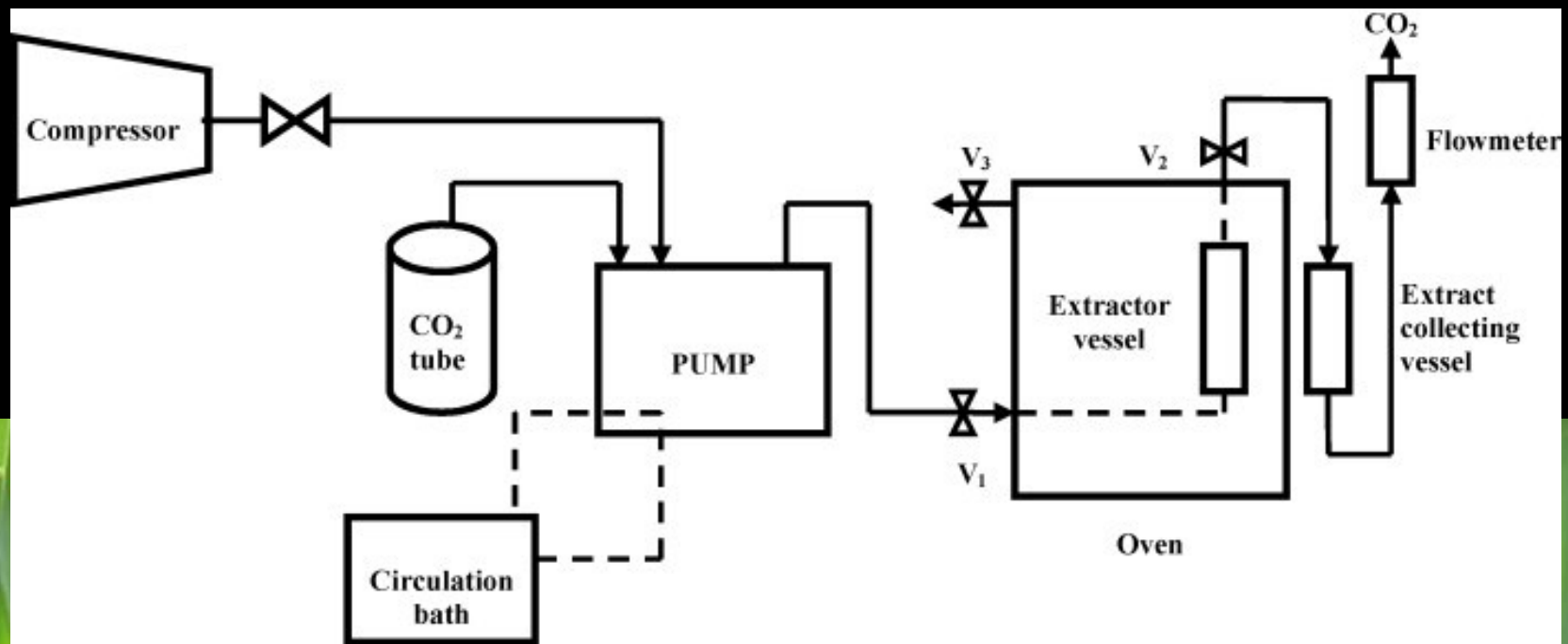
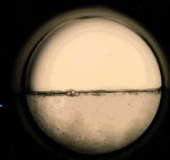


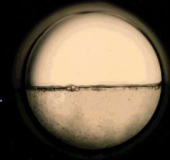
H₃C



• *Sistema de extração de sólidos*

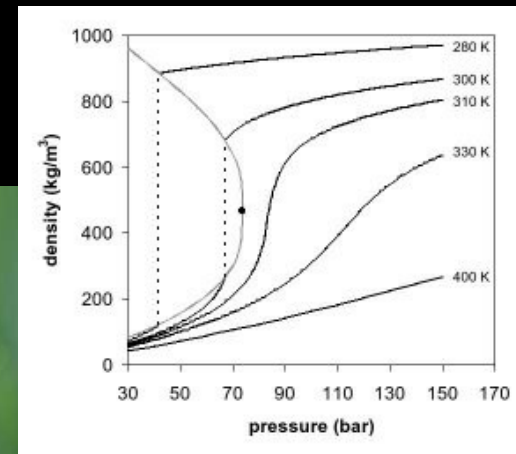






•Parâmetros que influenciam o processo de extracção de sólidos

•Pressão
•Temperatura
•Densidade
•Razão de solvente (scCO₂)



Misturas de gases

Jonh Dalton foi o primeiro a calcular a pressão de uma mistura de gases

“Uma mistura de gases que não reagem entre si comporta-se como um gás puro e único”

Colocou uma certa quantidade de oxigénio num recipiente e obteve uma pressão de 0,6 atm.

E colocou nesse mesmo recipiente nitrogénio até que a pressão fosse igual a 0,4 atm

Então e o que acontecerá se colocar estas duas quantidades juntas?

A pressão da mistura era de 1 atm, isto é a *soma das pressões parciais dos gases*



John Dalton (1766 -1844) foi um químico, meteorologista e físico inglês. Foi um dos primeiros cientistas a defender que a matéria é feita de pequenas partículas, os átomo

Misturas de gases

$$P_{total} = P_A + P_B + \dots$$

$$x_a = \frac{n_a}{n_t} \quad x_a = \frac{n_a}{n_a + n_b}$$

$$PV = nRT$$

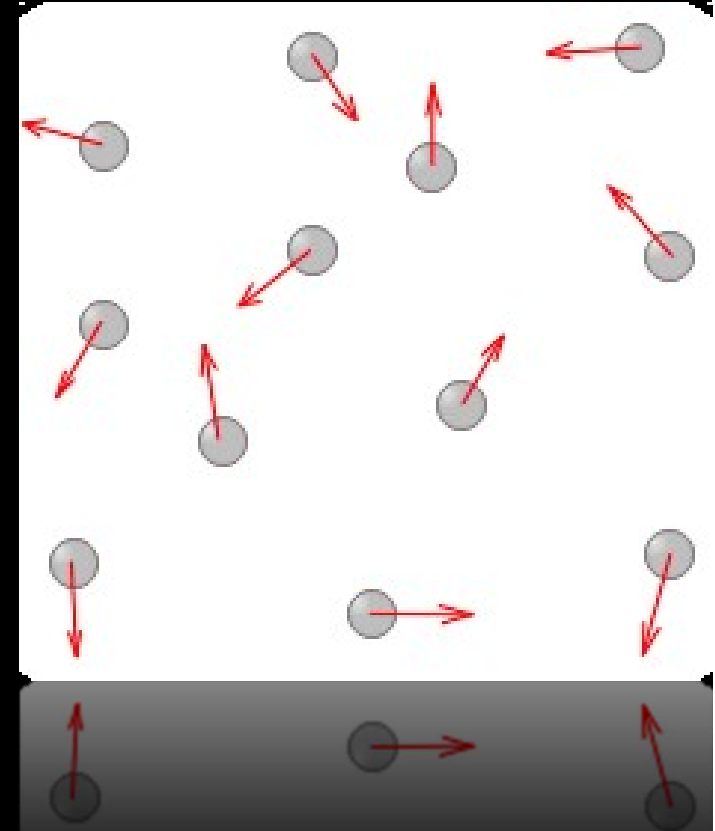
$$P_a = \frac{n_a RT}{V} = x_a \frac{nRT}{V} = x_a P$$

$$P_a = x_a P$$



Movimento molecular

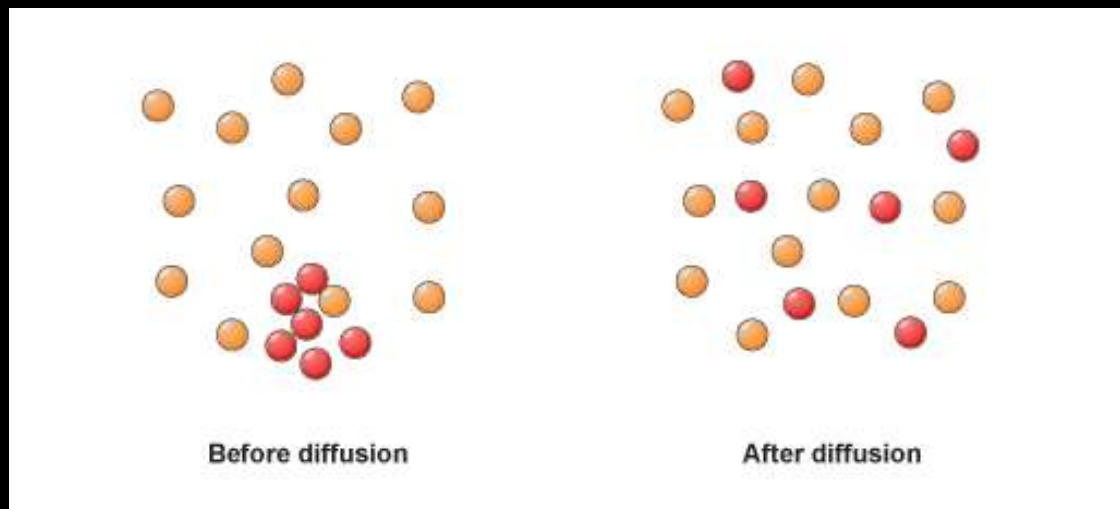
- Não há interacção das moléculas excepto durante a colisão
- Neste caso as moléculas viajam com uma **velocidade média** que aumenta com a **temperatura**
- Compreender como é que essa **velocidade** está correlacionada com o aumento de **temperatura** e peso molecular



Movimento molecular

Existem dois fenómenos que vamos ter compreender.

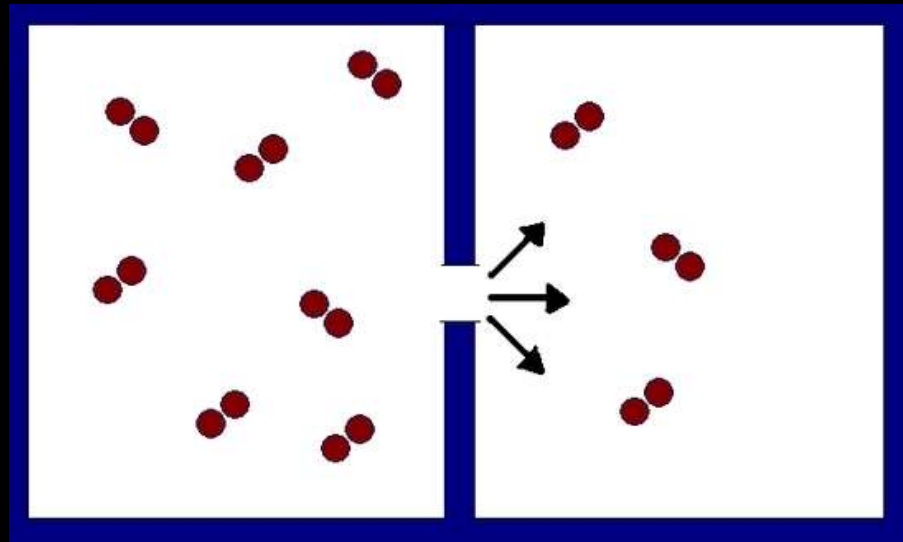
Difusão



Em que a difusão explica a dispersão dos perfumes

Movimento molecular

Efusão



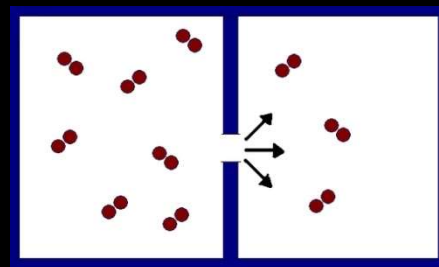
Alta pressão

Baixa pressão

A efusão é definida com a fuga de um gás para o vácuo através de uma abertura (pinhole)

Efusão

“A *temperatura constante* a velocidade de efusão de um gás é *inversamente proporcional* a sua massa molecular”

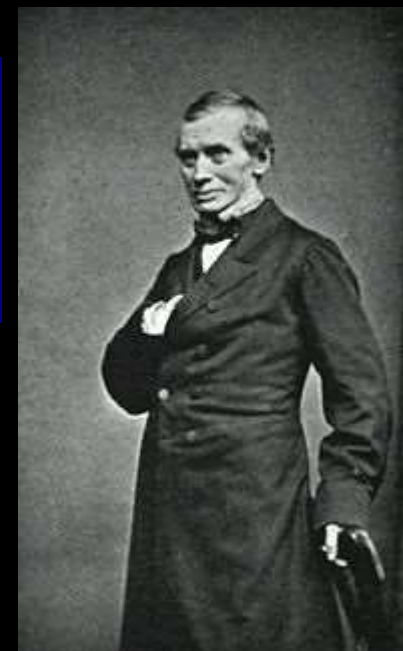


$$\text{velocidade de efusão} \propto \frac{1}{\sqrt{\text{massa molecular}}}$$

$$\text{velocidade de efusão} \propto \frac{1}{\sqrt{M}} \quad \text{Lei de Graham}$$

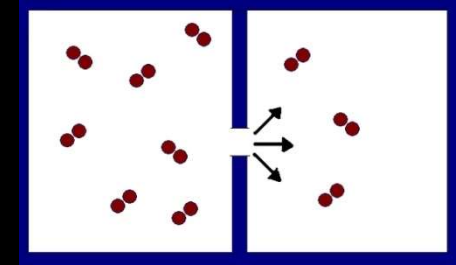
A velocidade de efusão é proporcional à velocidade média das partículas e consequente será inversamente proporcional a sua massa molecular

$$\text{velocidade de efusão} \propto \text{velocidade média} \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$$



Thomas Graham (1805 -1869) foi um químico escocês, conhecido por suas pesquisas na difusão de gases e líquidos na química dos colóides.

Porque é que isto é importante ?



$$\frac{\text{Velocidade de efusão das moléculas A}}{\text{Velocidade de efusão das moléculas B}} = \frac{1/\sqrt{M_A}}{1/\sqrt{M_B}} = \sqrt{\frac{M_B}{M_A}}$$

Como o tempo de efusão é inversamente proporcional à taxa de efusão, isto para a mesma quantidade de A e B então podemos definir:

$$\frac{\text{Tempo para A se difundir}}{\text{Tempo para B se difundir}} = \frac{1/\sqrt{M_A}}{1/\sqrt{M_B}} = \sqrt{\frac{M_B}{M_A}}$$

Esta relação é bastante importante para estimar a massa molar de uma substância comparativamente a outra de massa molecular conhecida

Como é que a efusão está então relacionada com a temperatura ?

$$\frac{\text{velocidade de efusão na } T_2}{\text{velocidade de efusão na } T_1} = \sqrt{\frac{T_2}{T_1}}$$

Como a taxa de efusão é proporcional á velocidade média das moléculas

Nós podemos inferir que a velocidade de efusão é proporcional à raiz quadrada da temperatura

$$\text{velocidade média} \propto \sqrt{T}$$

Esta relação começa a revelar talvez a importância da temperatura

$$\text{velocidade média} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}$$

Velocidade média das moléculas de um gás directamente proporcional á raiz quadrada da temperatura e inversamente proporcional à raiz da massa molecular

Resumindo os gases até este ponto...

$$PV = R \times n \times T$$

Equação de estado

$$P_a = x_a P$$

Misturas de gases

$$\textit{velocidade média} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}$$

Relação permite compreender o impacto da temperatura no comportamento de um gás

Agora e se um gás não tiver um comportamento ideal?

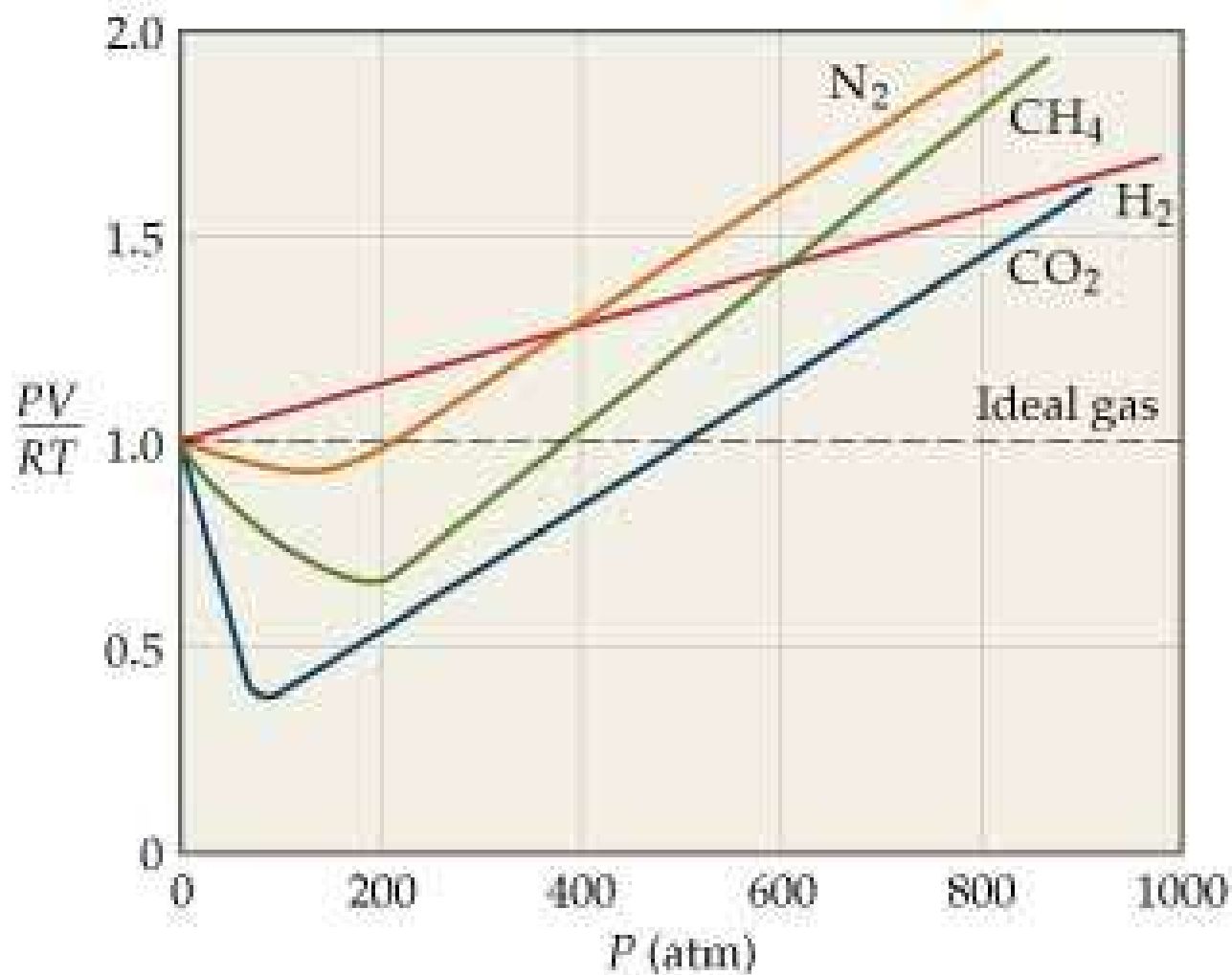
Estamos a falar de *gases reais*.

Isto é vamos assumir que as forças intermoleculares até são de facto importantes ...

Em que situações poderão ser importantes?

- Forças **repulsivas** a actuar durante a **expansão** e forças **atractivas** a funcionar durante a **compressão**
- No fundo o *balanço das forças atractivas e repulsivas* irá depender da **pressão volume** e **temperatura**
- **Vamos imaginar** alta pressão onde as partículas estão muito juntas então as força repulsivas irão dominar.
- Este facto até pode fazer com que o gás se torne menos compressível

Comportamento não ideal gases



Agora de que maneira é que poderá afectar a relação do gás com V e T ?

$$PV = R \times n \times T$$

Nós sabemos que o volume = 0 é uma condição impossível. Pois as moléculas de um gás ocupam um volume

$$P = \frac{nRT}{V - nb}$$

Então o Volume de um recipiente é dado por:

$$V - nb$$

Onde nb é o volume ocupado pelas moléculas de gás

$$P = \frac{nRT}{V - nb}$$

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

A pressão depende da frequência de colisões e da força de cada colisões.

Ambas situações são reduzidas pelas forças atractivas que actuam com uma força proporcional concentração (n/V) das moléculas na amostra.

Então podemos introduzir um factor de redução da pressão

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2 C$$

$$-a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

Equação de estado de van der Waals

Equação de estado de van der Waals

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

Synoptic Table 1.6* van der Waals coefficients

	$a/(\text{atm dm}^6 \text{ mol}^{-2})$	$b/(10^{-2} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1})$
Ar	1.337	3.20
CO ₂	3.610	4.29
He	0.0341	2.38
Xe	4.137	5.16

Resumindo os gases até este ponto...

$$PV = R \times n \times T$$

Equação de estado

$$P_a = x_a P$$

Misturas de gases

$$\textit{velocidade média} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}$$

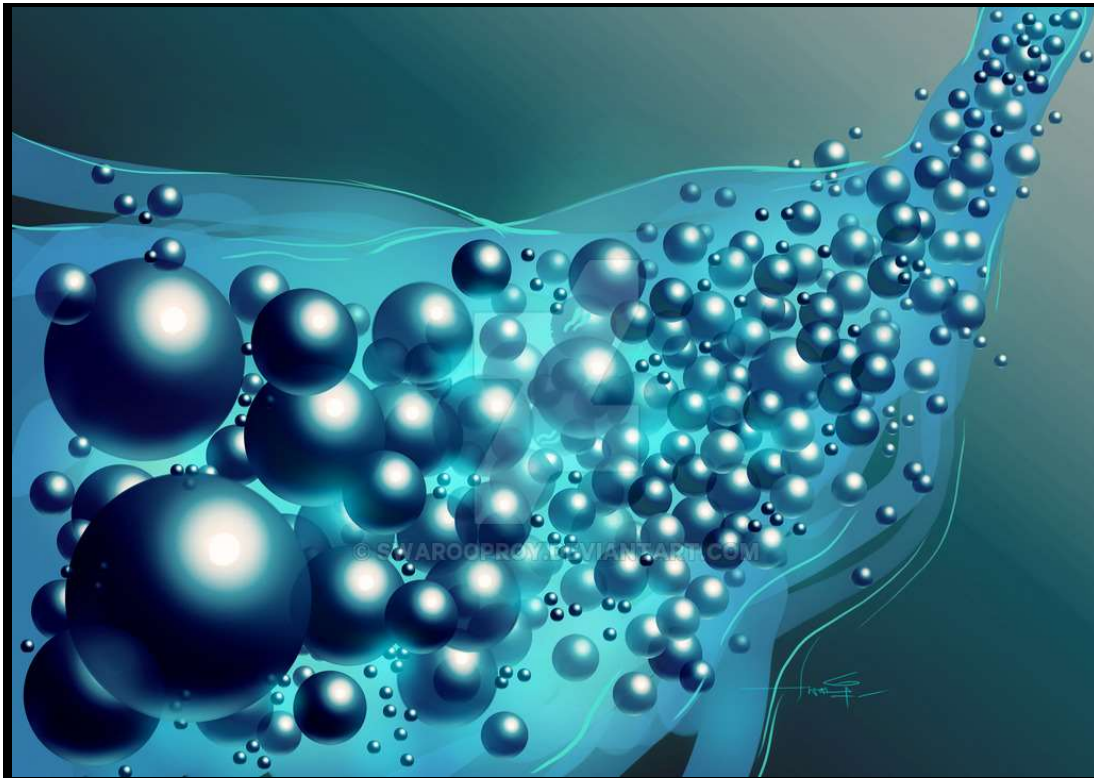
Relação permite compreender o impacto da temperatura no comportamento de um gás

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

Gás real

Table 1.7 Selected equations of state

	Equation	Reduced form*	Critical constants		
			p_c	V_c	T_c
Perfect gas	$p = \frac{RT}{V_m}$				
van der Waals	$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$	$p = \frac{8T_r}{3V_r - 1} - \frac{3}{V_r^2}$	$\frac{a}{27b^2}$	$3b$	$\frac{8a}{27bR}$
Berthelot	$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{TV_m^2}$	$p = \frac{8T_r}{3V_r - 1} - \frac{3}{T_r V_r^2}$	$\frac{1}{12} \left(\frac{2aR}{3b^3} \right)^{1/2}$	$3b$	$\frac{2}{3} \left(\frac{2a}{3bR} \right)^{1/2}$
Dieterici	$p = \frac{RTe^{-a/RTV_m}}{V_m - b}$	$p = \frac{e^2 T_r e^{-2/T_r V_r}}{2V_r - 1}$	$\frac{a}{4e^2 b^2}$	$2b$	$\frac{a}{4bR}$
Virial	$p = \frac{RT}{V_m} \left\{ 1 + \frac{B(T)}{V_m} + \frac{C(T)}{V_m^2} + \dots \right\}$				



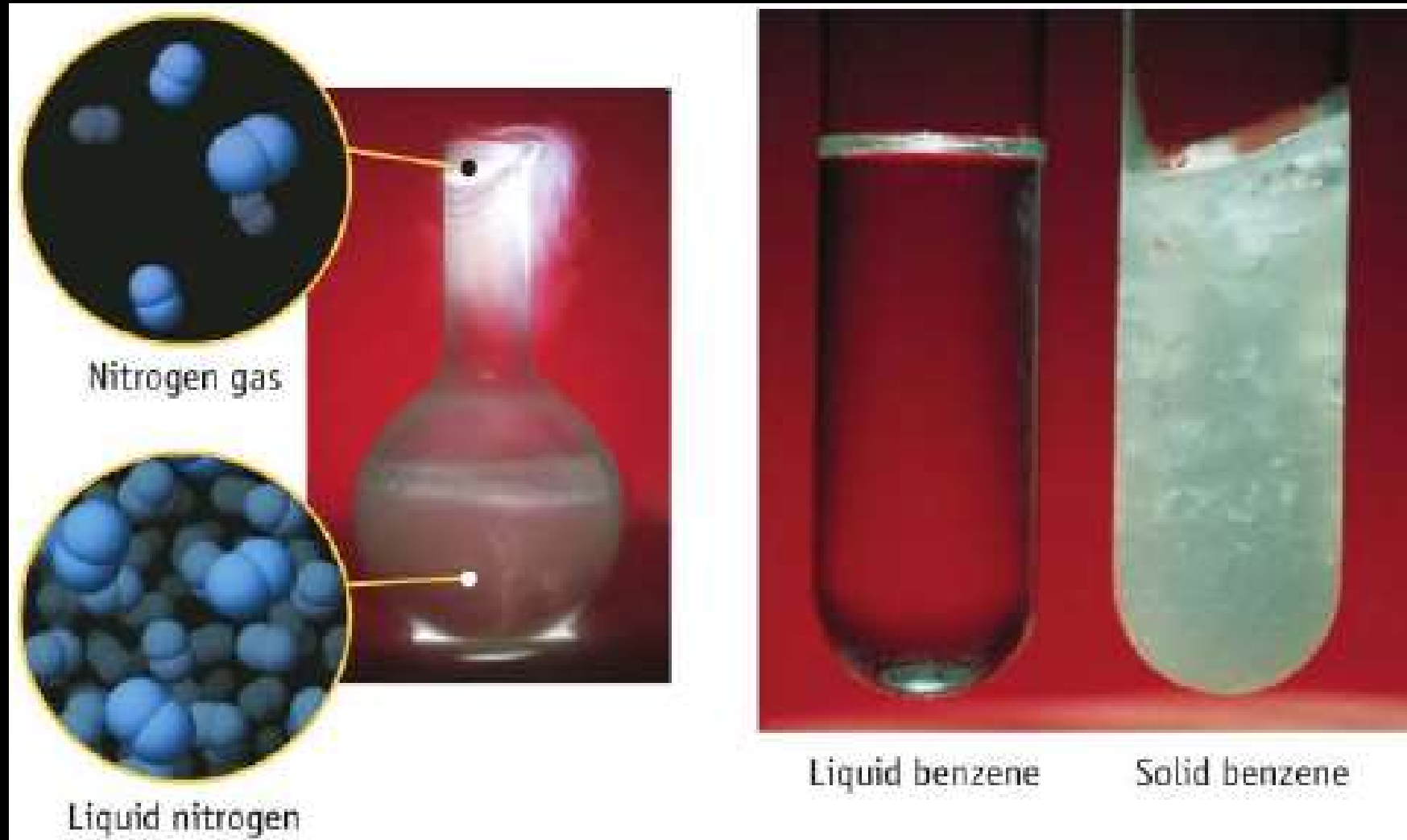
Forças intermoleculares

Aula 9

Forças intermoleculares

- Forças intermoleculares têm um grande efeito sobre as propriedades das moléculas.
- **Directamente relacionadas:**
 - Ponto de ebulição fusão
 - Energia necessária para converter sólidos em líquidos, líquidos em gases, ...
 - Com a solubilidade de gases, líquidos e sólidos em diferentes solventes
 - Cruciais em bioquímica - DNA, proteínas

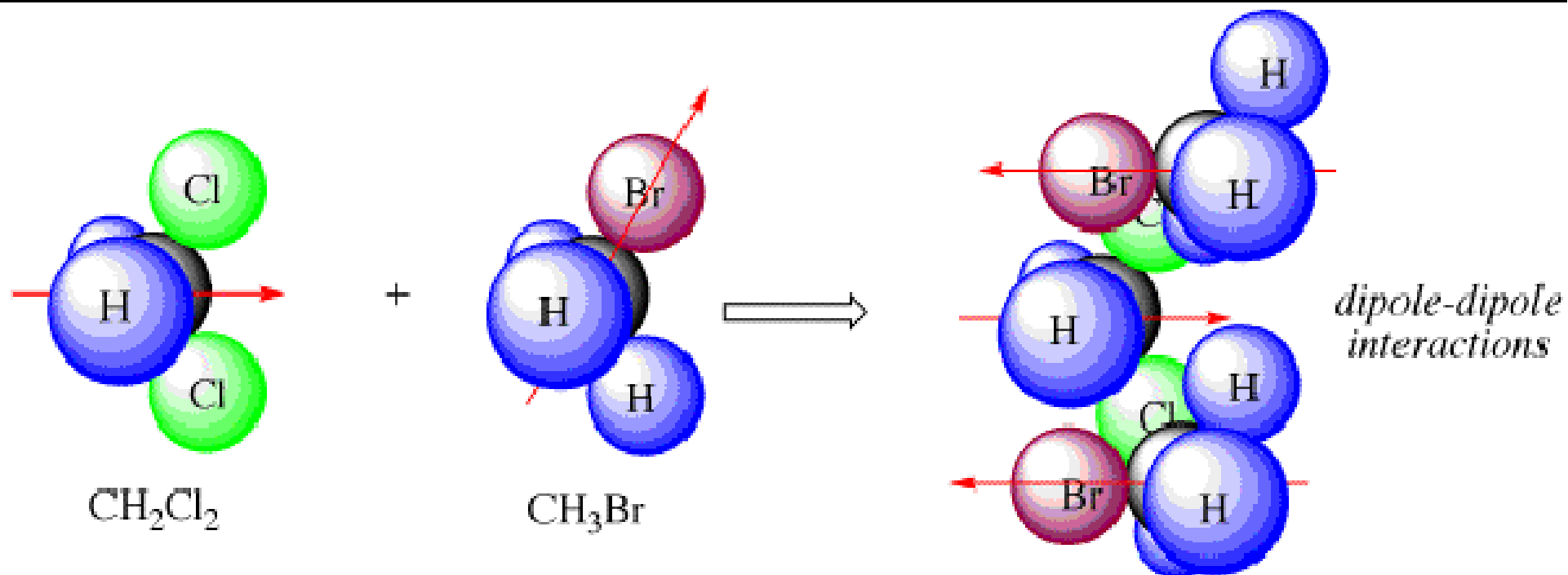
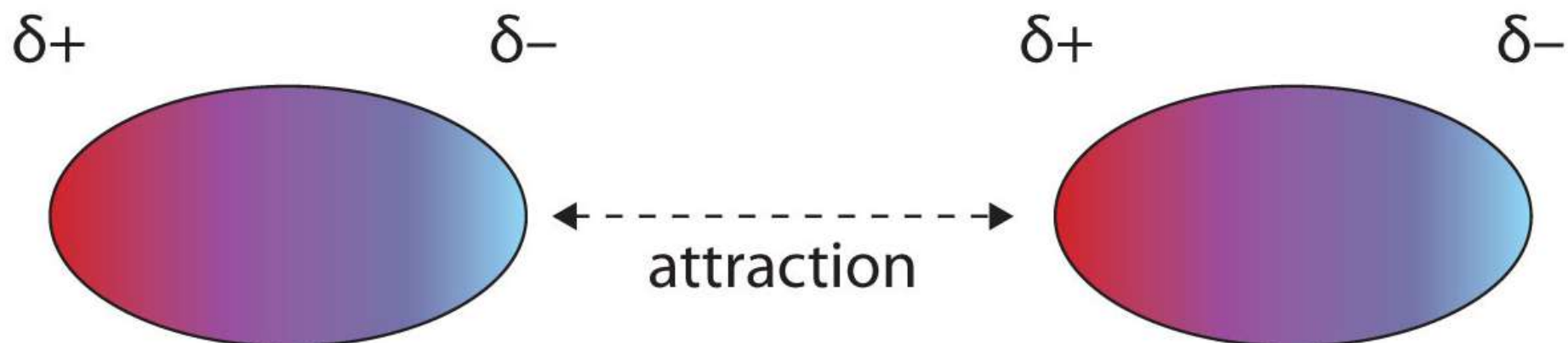
Forças intermoleculares



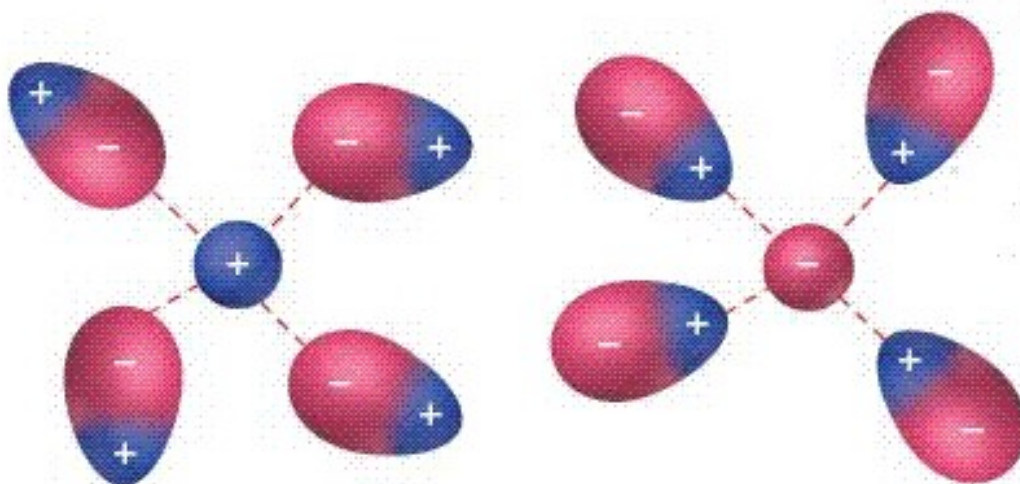
Forças intermoleculares

- Denominam-se de forças de **van der Waals**
- Moléculas com dipolos permanentes - (forças dipolo-dipolo).
- Moléculas polares e apolares - (forças de dipolo-dipolo induzido) - (Forças de Debye)
- Moléculas apolares - (forças de dipolo induzido-dipolo induzido) - (Forças de dispersão de London)
- Ligações de Hidrogénio

Dipolo-Dipolo

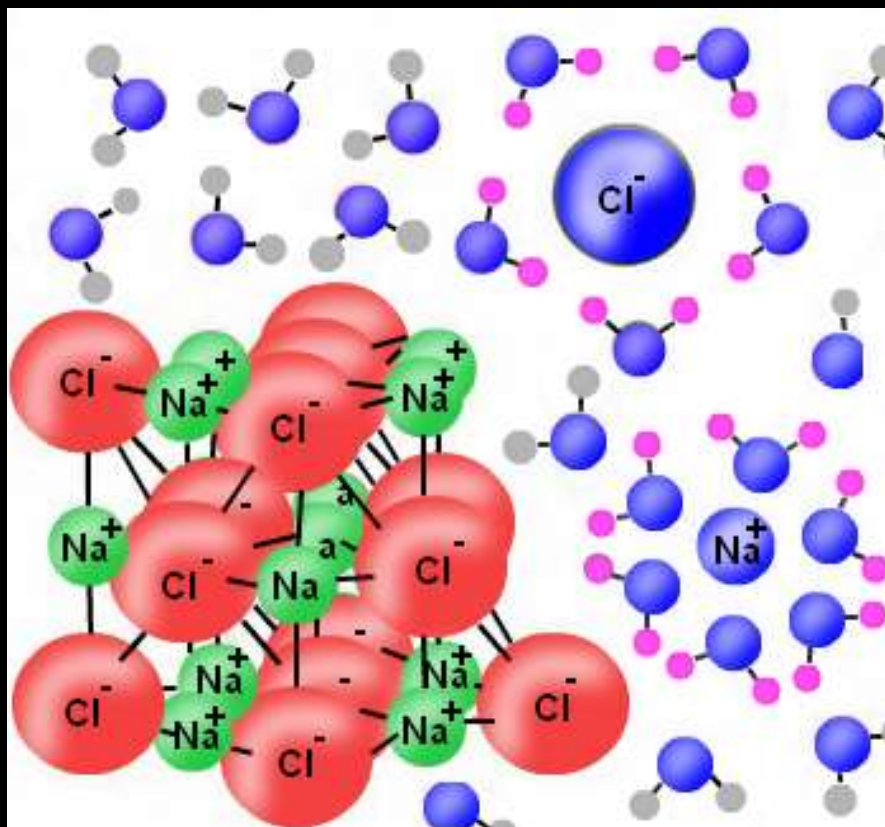


Ion-Dipole



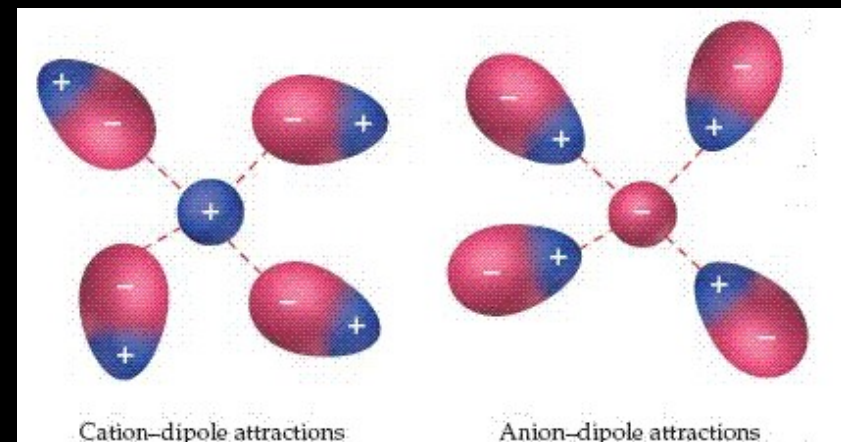
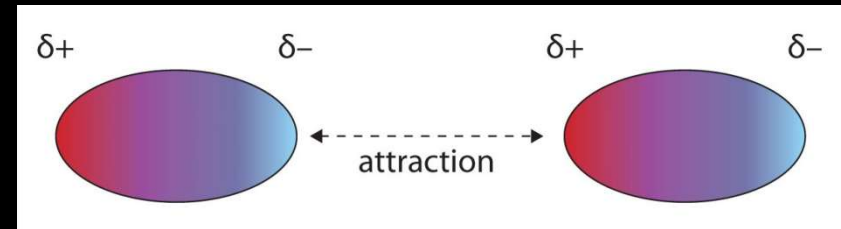
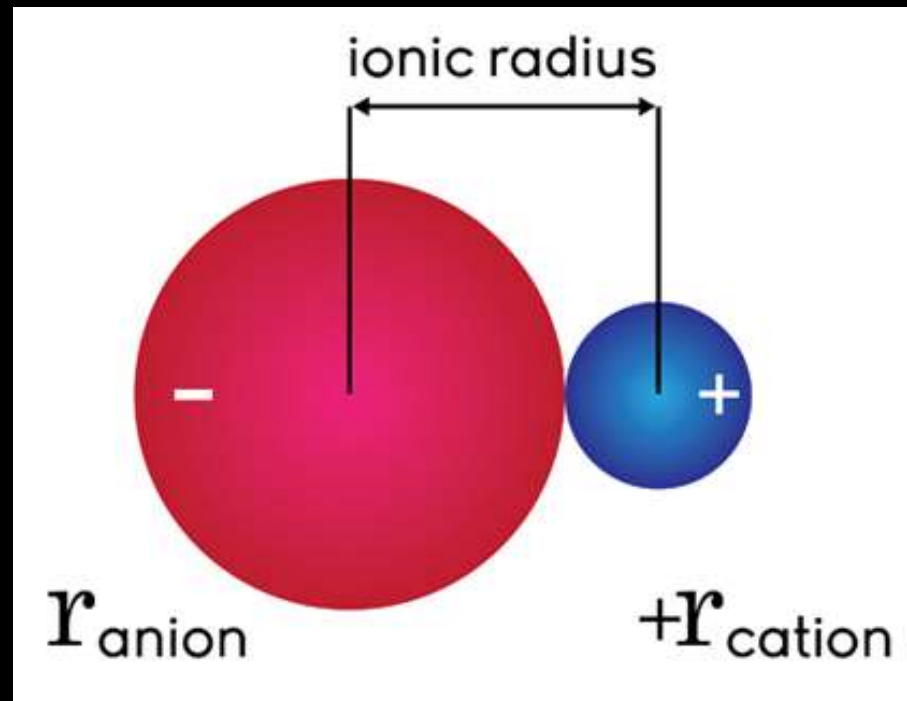
Cation-dipole attractions

Anion-dipole attractions



Questão: Quais as interacções mais fortes?
Ligação iónica ou ion-dipolo ou dipolo-dipolo?

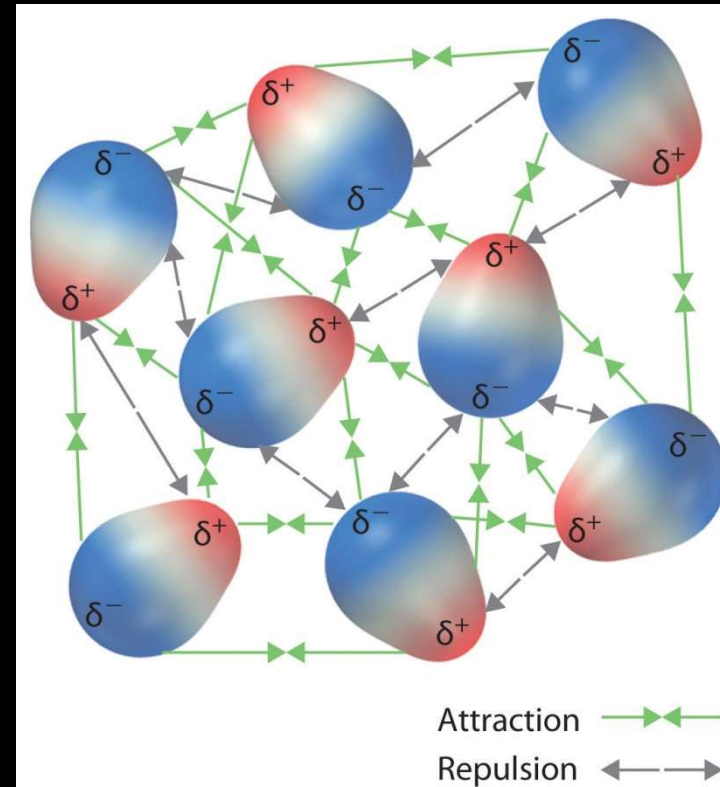
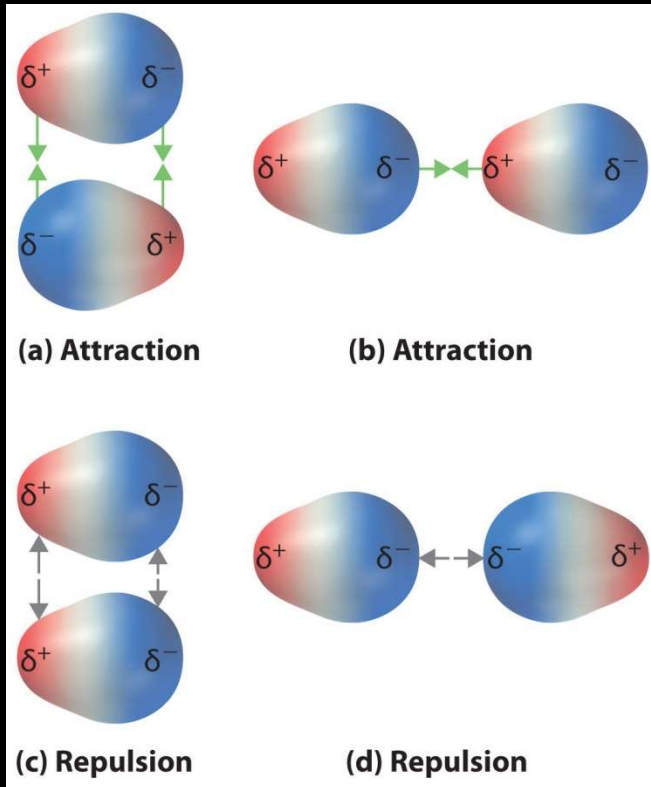
Quais as interações mais fortes?



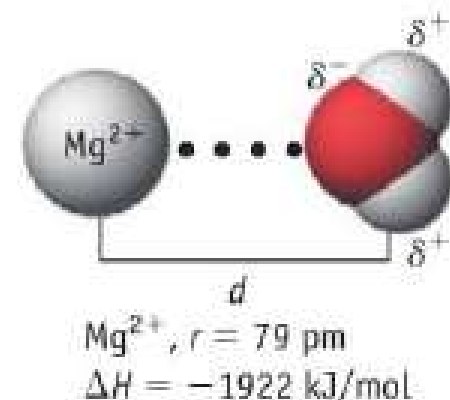
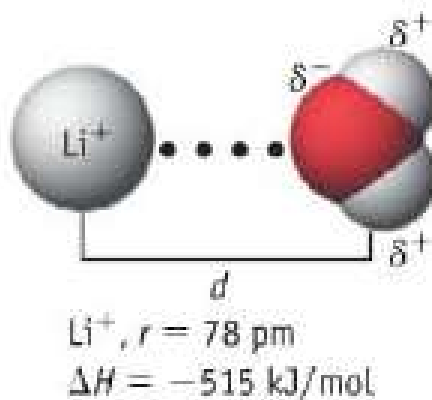
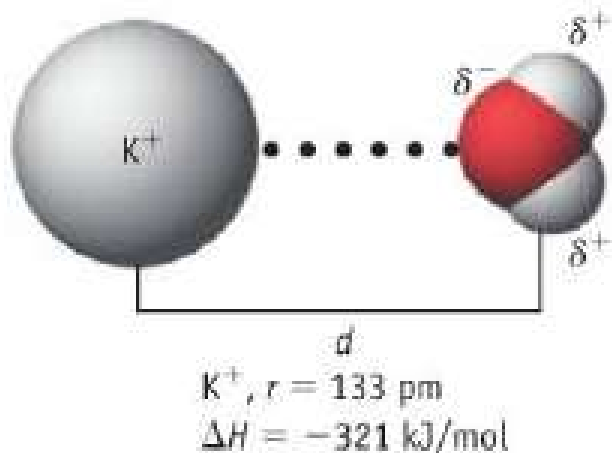
$$E_p = \frac{|\mu_1 \mu_2|}{r^2}$$

$$E_p = \frac{|\mu_1 \mu_2|}{r^3}$$

Quais as interações mais fortes?



Quais as interacções mais fortes?



Increasing force of attraction; more exothermic enthalpy of hydration

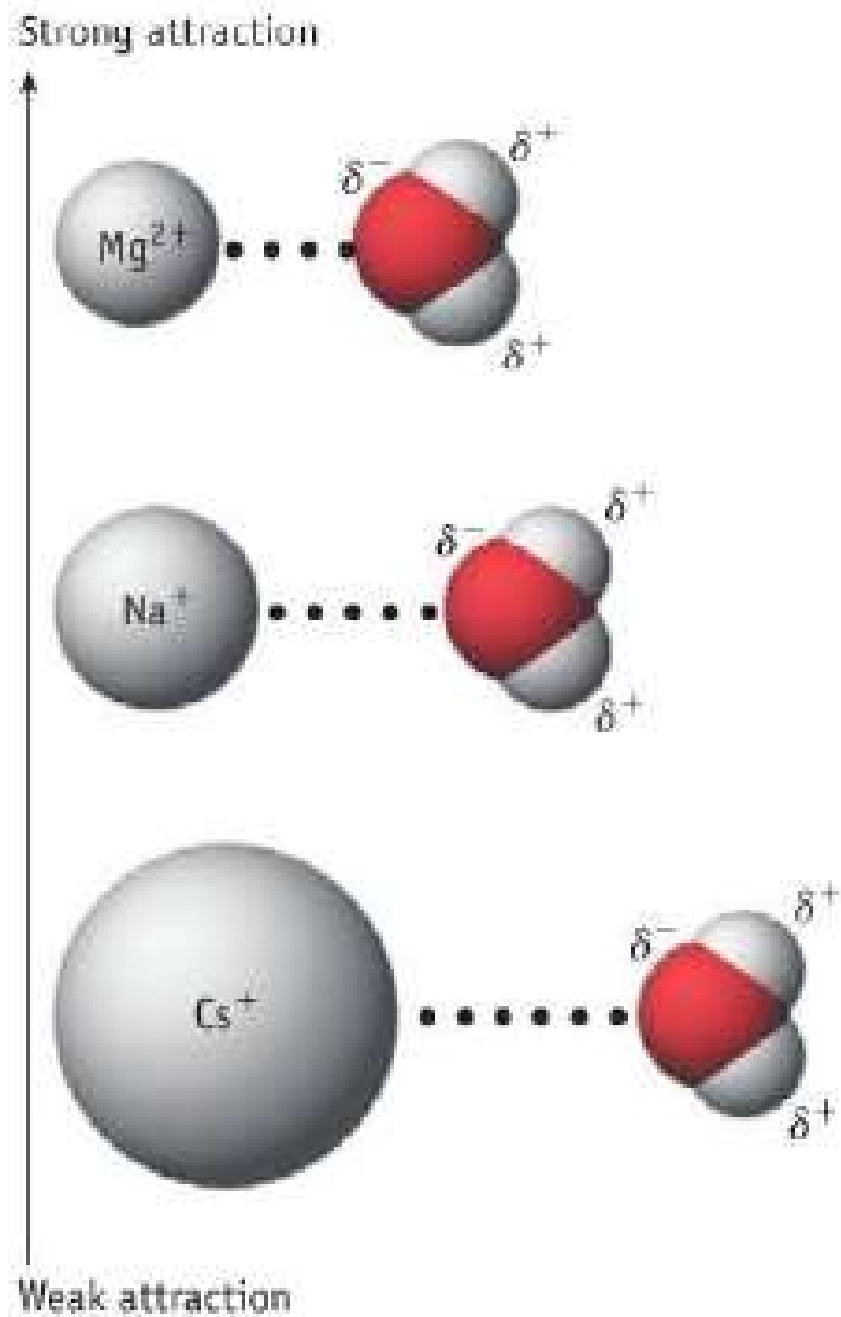
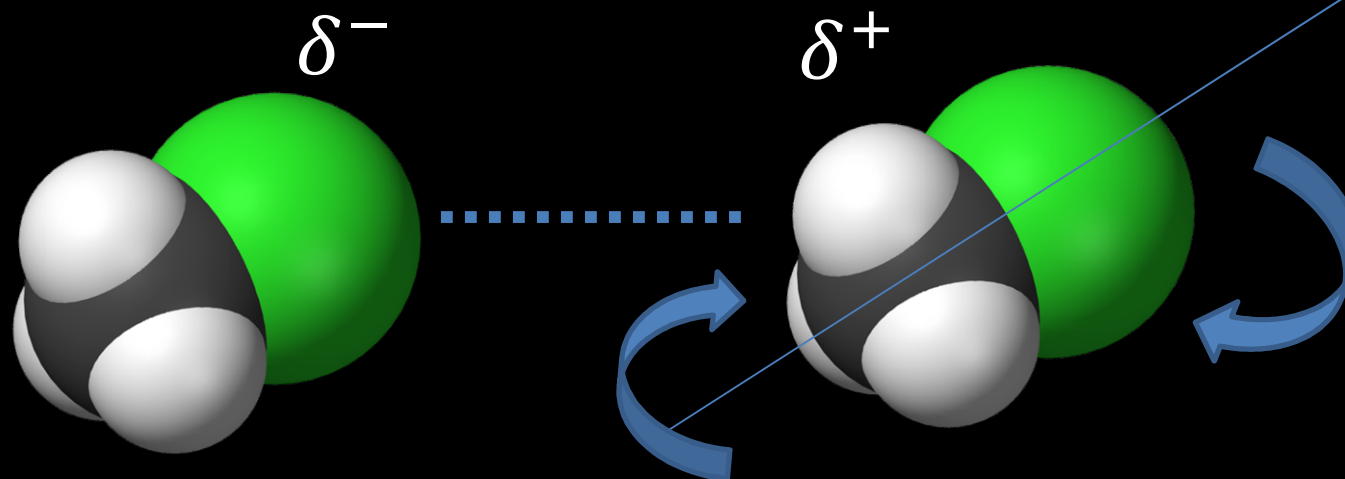
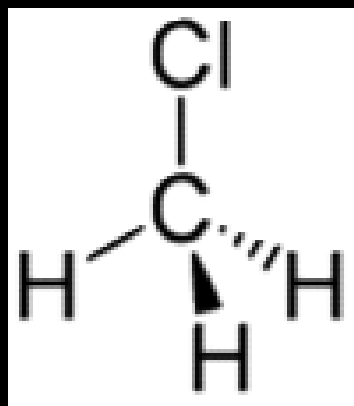


TABLE 12.1 Radii and Enthalpies of Hydration of Alkali Metal Ions

Cation	Ion Radius (pm)	Enthalpy of Hydration (kJ/mol)
Li ⁺	78	-515
Na ⁺	98	-405
K ⁺	133	-321
Rb ⁺	149	-296
Cs ⁺	165	-263

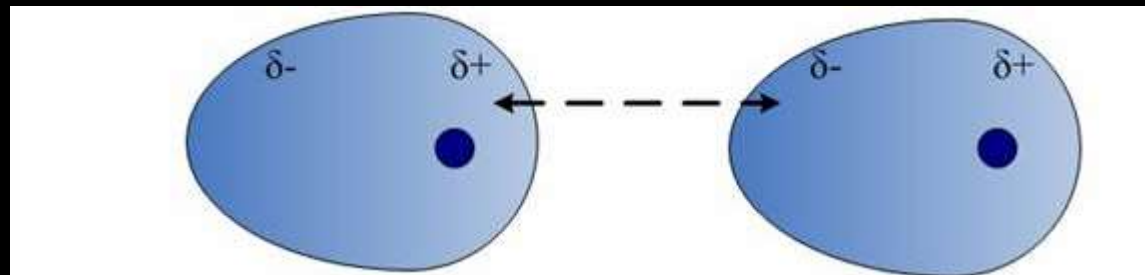
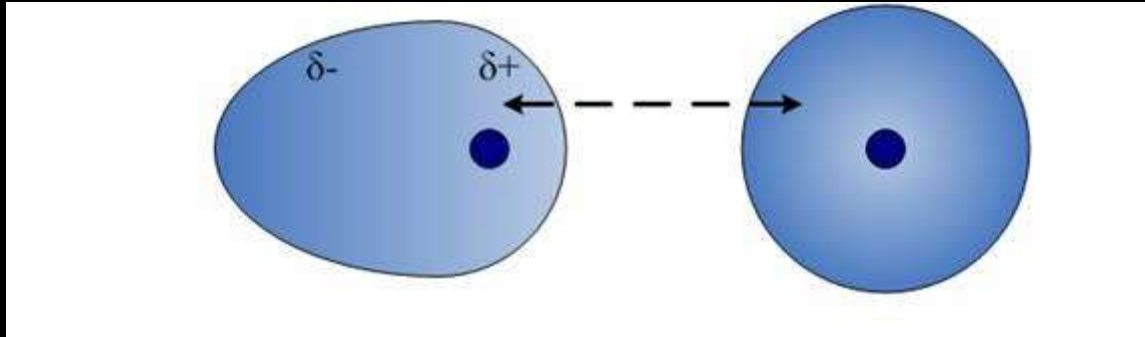
Questão: dipolos em fase gasosa existem? Serão mais intensos ou mais fracos?

Como são os dipolos na fase gasosa?

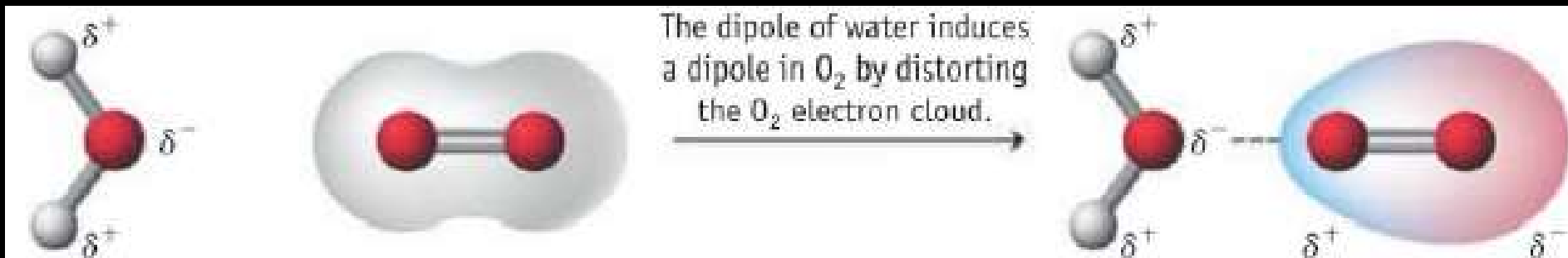


$$E_p = \frac{|\mu_1 \mu_2|}{r^6}$$

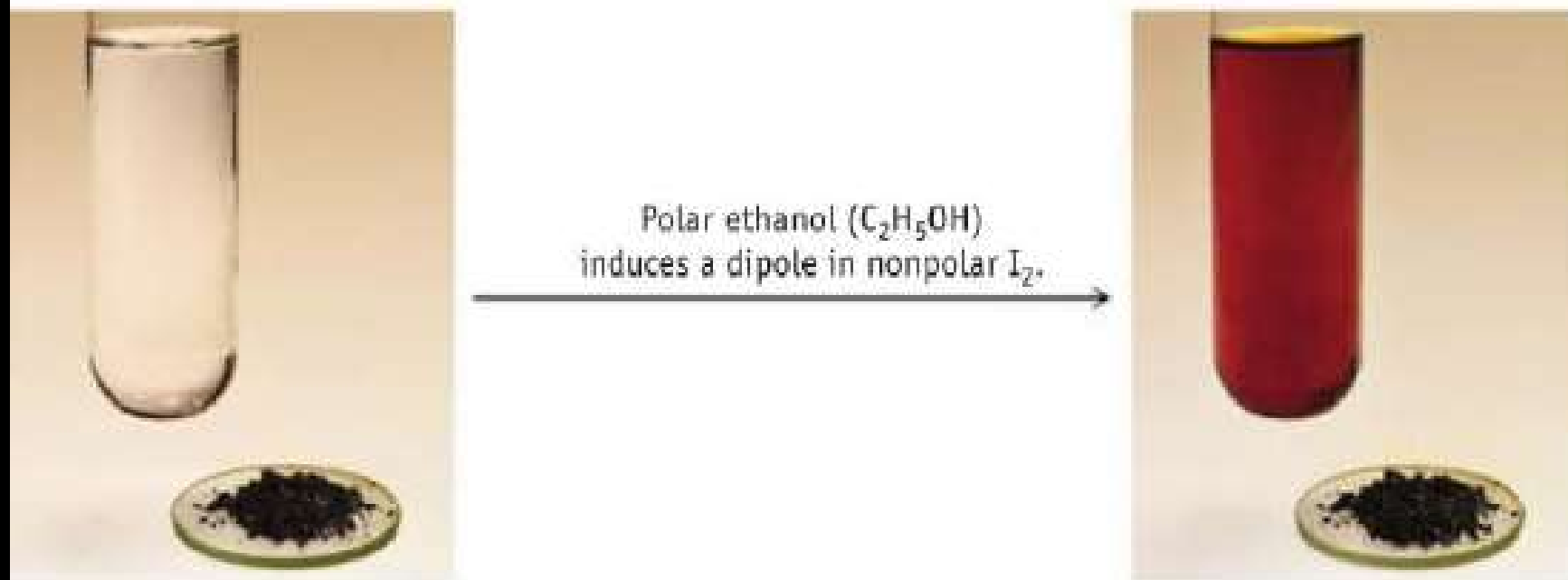
dipolo -dipolo induzido



dipolo -dipolo induzido



(b)



dipolo-dipolo induzido

TABLE 12.3 The Solubility of Some Gases in Water*

	Molar Mass (g/mol)	Solubility at 20 °C (g gas/100 g water) [†]
H ₂	2.01	0.000160
N ₂	28.0	0.00190
O ₂	32.0	0.00434

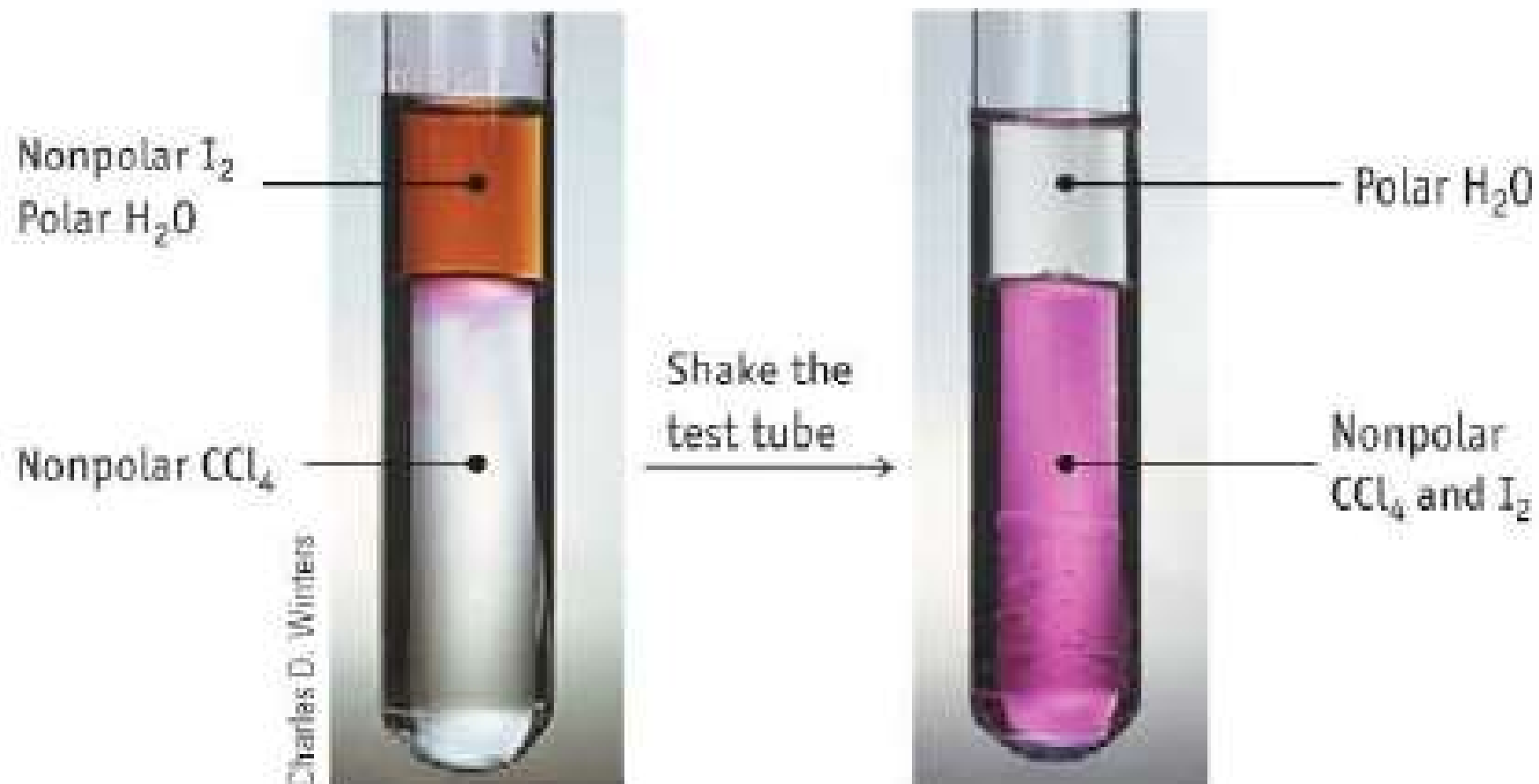
* Data taken from J. Dean: *Lange's Handbook of Chemistry*, 14th Ed., pp. 5.3–5.8, New York, McGraw-Hill, 1992.

† Measured under conditions where pressure of gas + pressure of water vapor = 760 mm Hg.

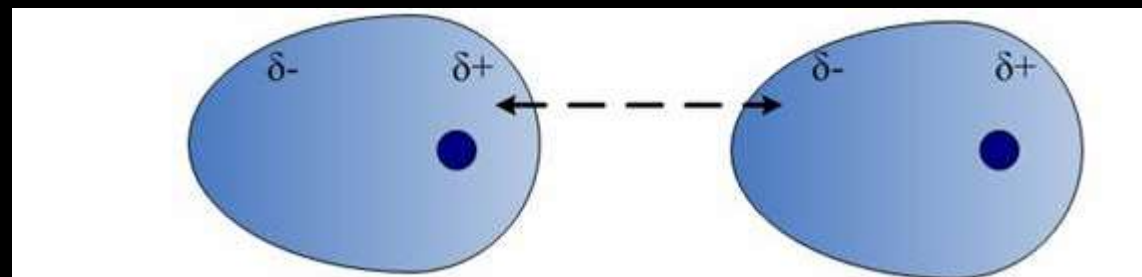
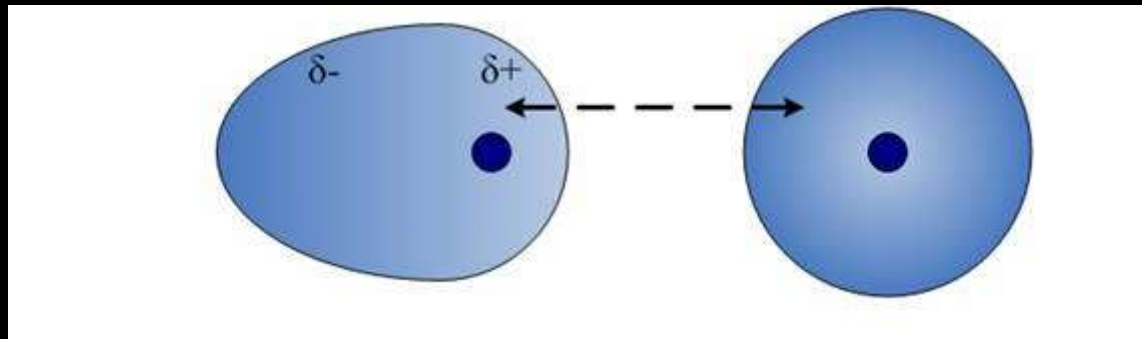
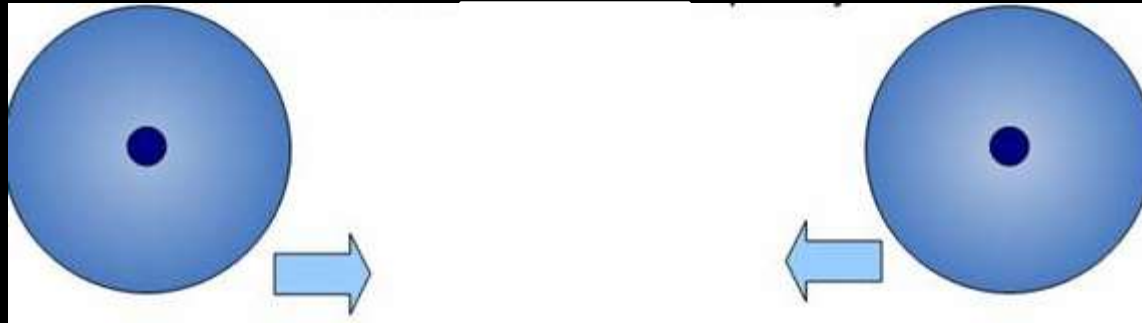
TABLE 12.4 Enthalpies of Vaporization and Boiling Points of Some Nonpolar Substances

	$\Delta_{\text{vap}}H^\circ$ (kJ/mol)	Element/ Compound BP (°C)
N ₂	5.57	−196
O ₂	6.82	−183
CH ₄ (methane)	8.2	−161.5
Br ₂	29.96	+58.8
C ₆ H ₆ (benzene)	30.7	+80.1
I ₂	41.95	+185

dipolo-dipolo induzido e...



Dipolo induzido-dipolo induzido

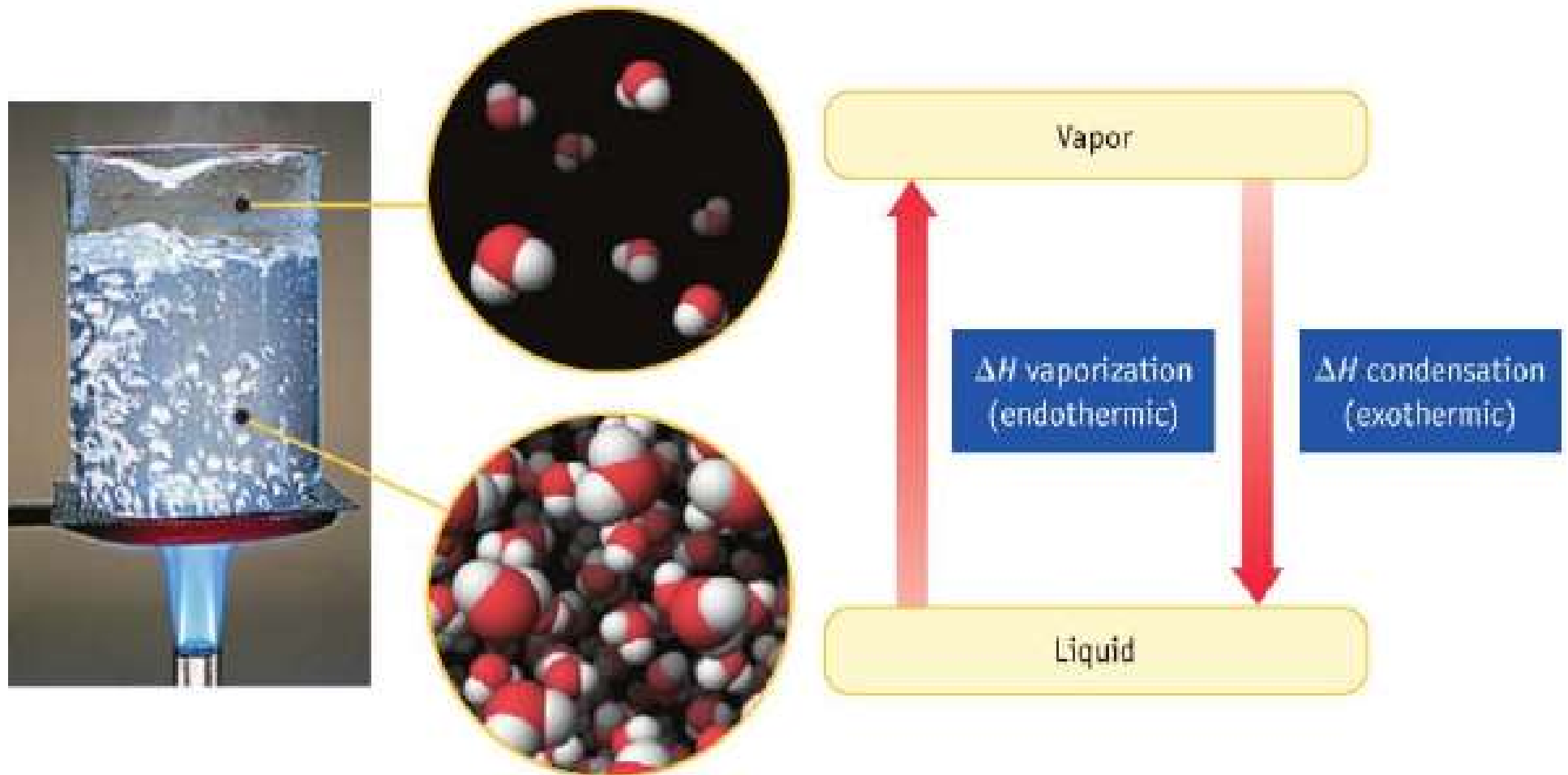


As forças intermoleculares estão intimamente ligadas às propriedades físicas da matéria...

Por exemplo: influenciam o ponto de ebulição, fusão, pressão de vapor, viscosidade, etc..

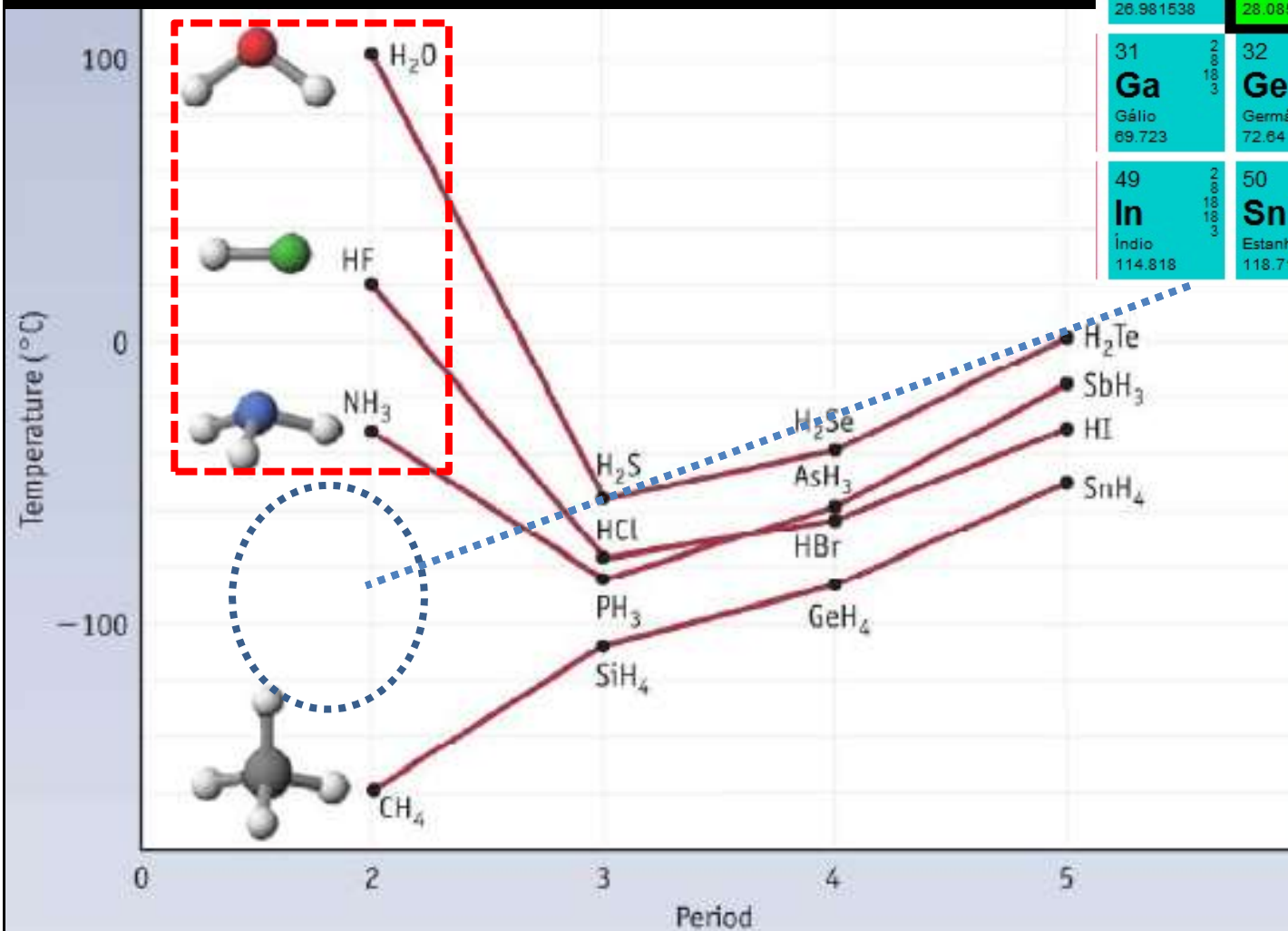
Porquê?

Ponto de ebulição

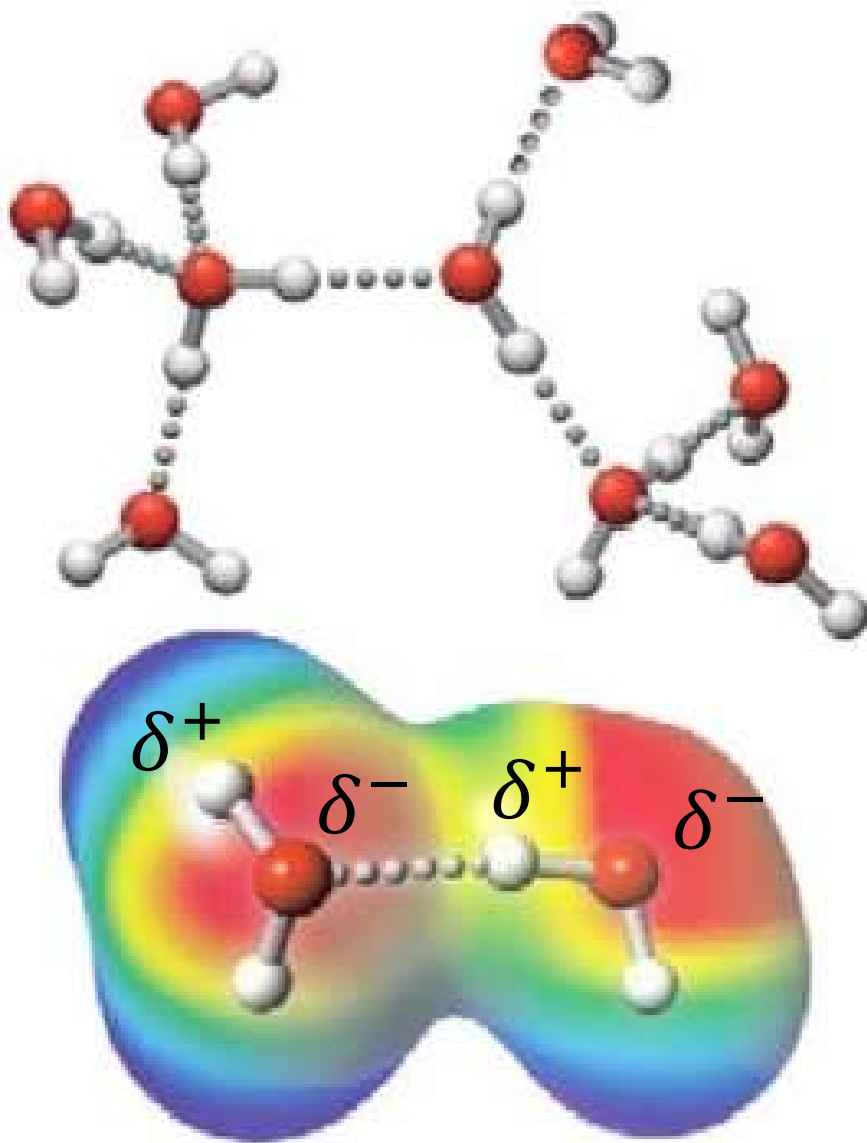


Ponto de ebulição

13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA
5 B Boro 10.811	6 C Carbono 12.0107	7 N Nitrogênio 14.00674	8 O Oxigênio 15.9994	9 F Flúor 18.9984032
13 Al Alumínio 26.981538	14 Si Silício 28.0855	15 P Fósforo 30.973761	16 S Enxofre 32.066	17 Cl Cloro 35.453
31 Ga Gálio 69.723	32 Ge Germânio 72.64	33 As Arsênio 74.92160	34 Se Selênio 78.96	35 Br Bromo 79.904
49 In Índio 114.818	50 Sn Estanho 118.710	51 Sb Antimônio 121.780	52 Te Telúrio 127.60	53 I Iodo 126.90447



Ligações de hidrogénio



Questão: Todos os compostos polares que ctenham oxigénio fazem ligações de hidrogénio?

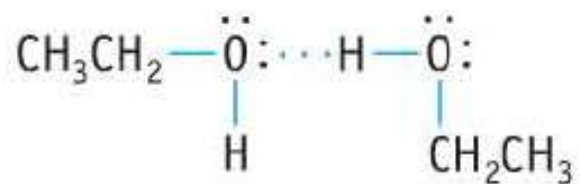
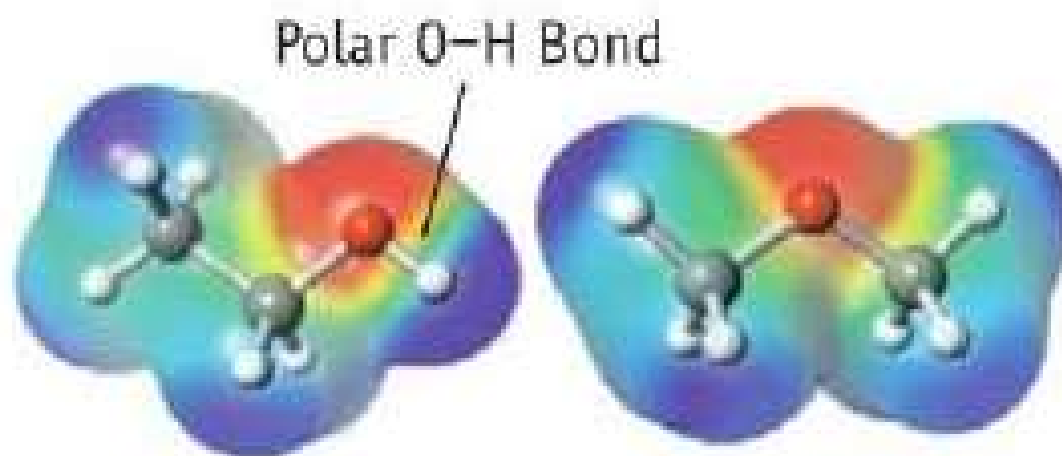
Porquê?



Ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$



Dimethyl ether, CH_3OCH_3



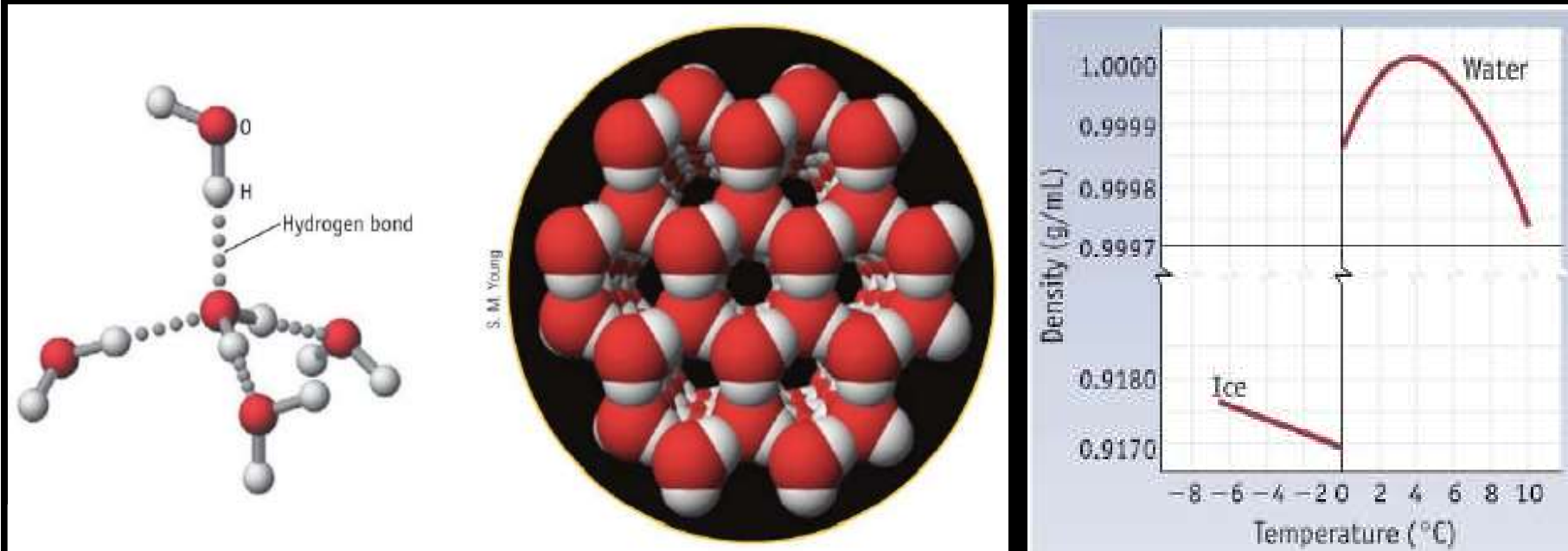
hydrogen bonding in ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

Ligações de hidrogénio

Types of Hydrogen Bonds [X—H - - - :Y]



Ligações de hidrogénio -propriedades incomuns da água



Sólido menos denso que o líquido.

Densidade aumenta com a temperatura entre 0-4°C.

Elevada capacidade calorífica

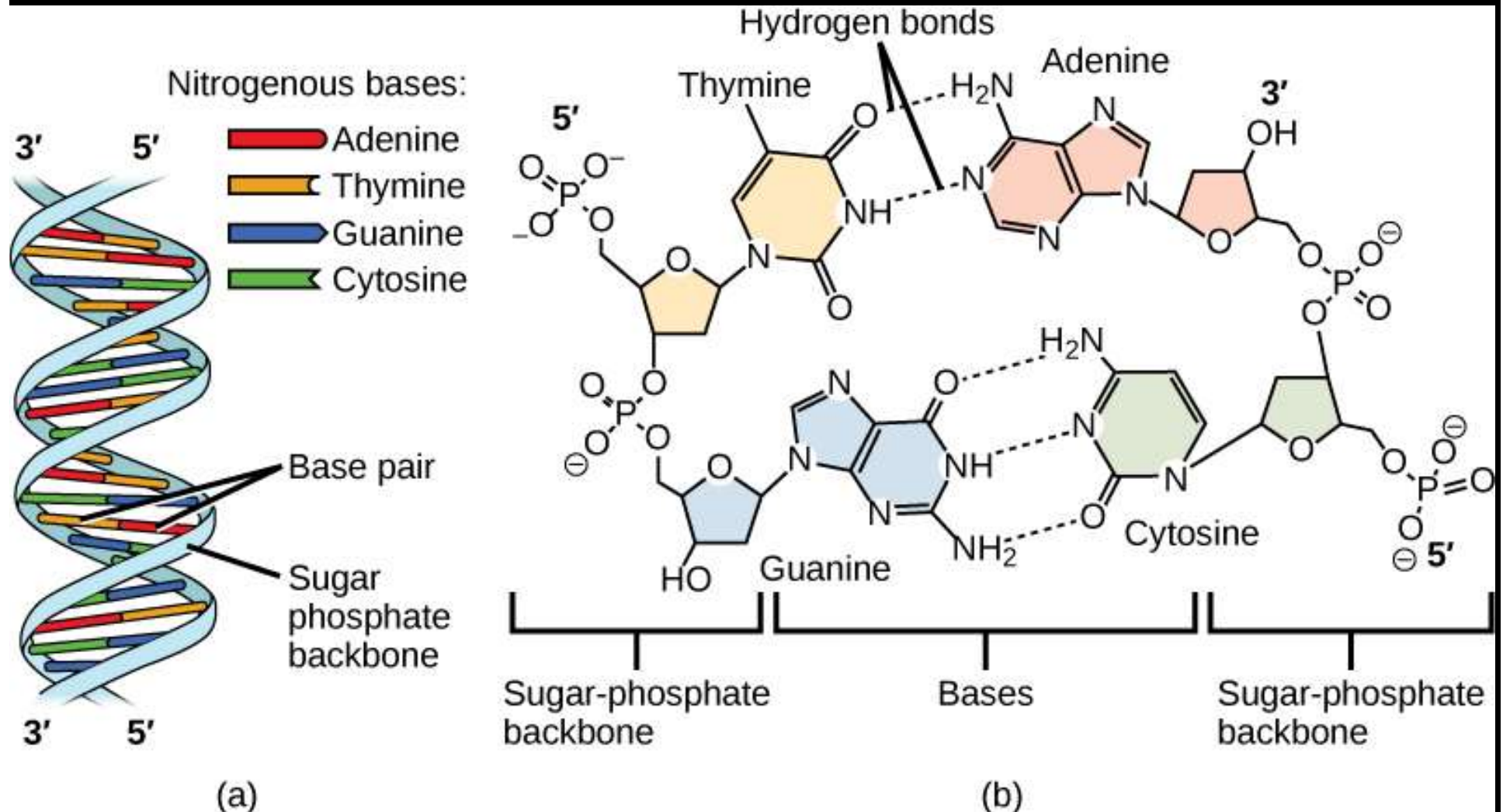
Capacidade calorífica da água



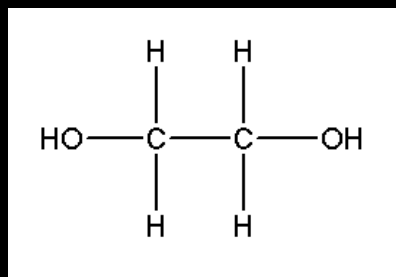
Heat Capacities of a Few Substances	
Substance	Heat Capacity $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
Diamond	6.1
Argon gas	20.8
Aluminium	24.2
Water (ice)	38.1
Water (liquid)	75.3
Water (steam)	37.5
Ammonia (NH_3)	80.1

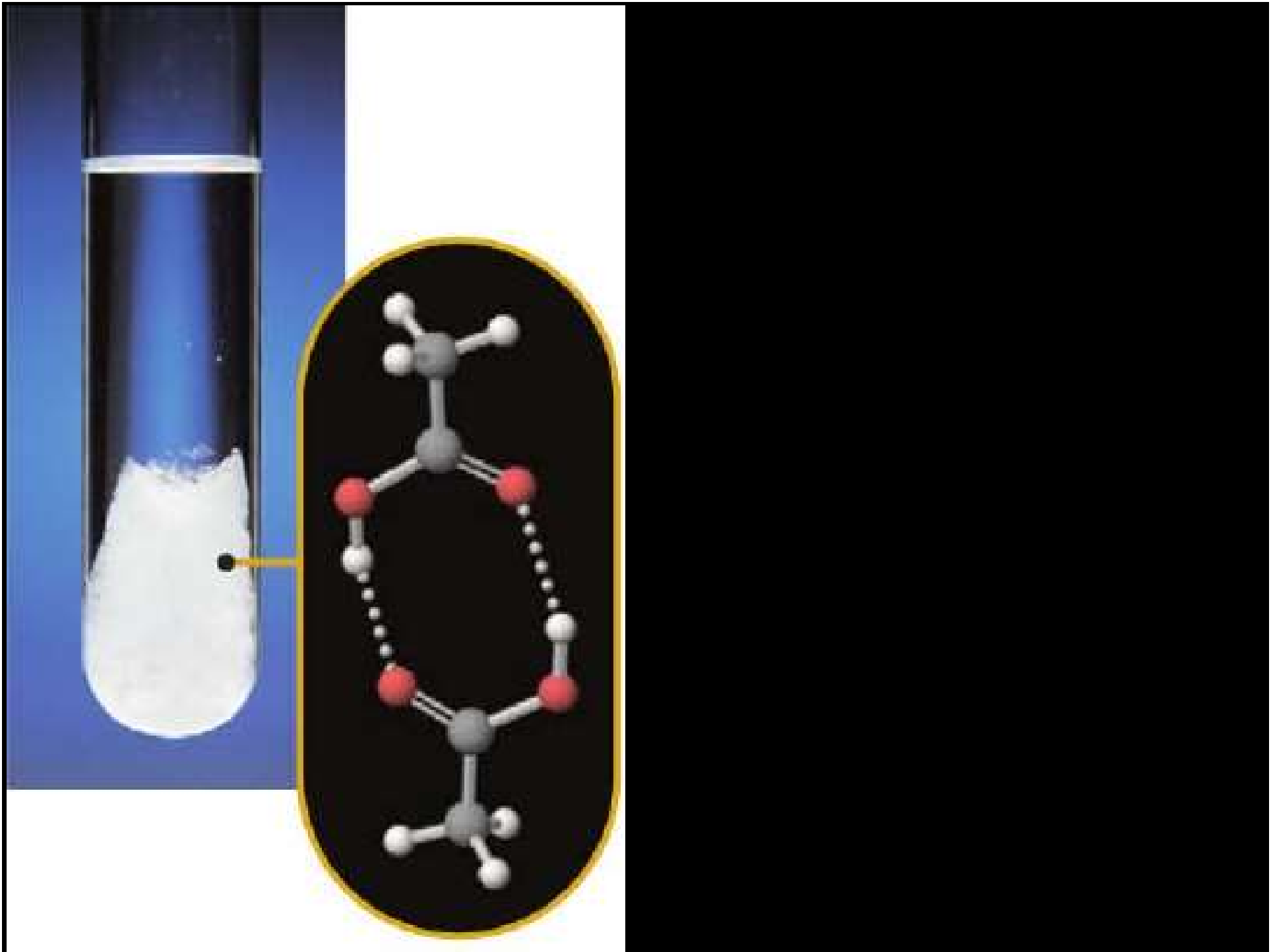
Capacidade Calorífica – Estabelece uma relação entre a quantidade de calor fornecida a um corpo e a variação de temperatura verificada por este.

Pontes de hidrogénio na Biologia

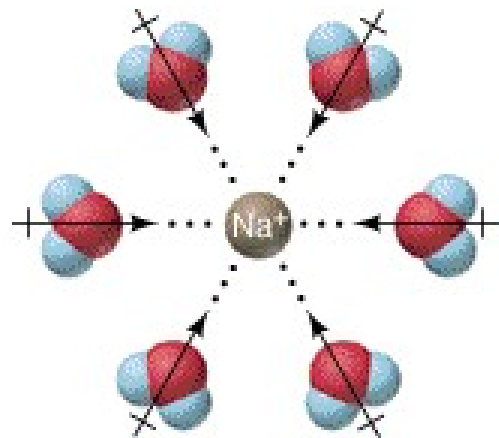


Ligações de hidrogénio





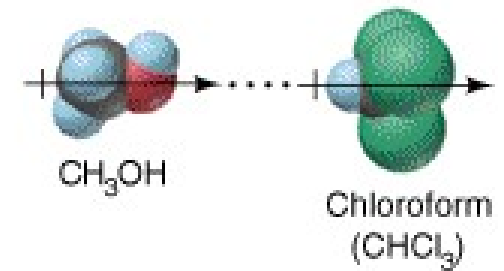
Forças intermoleculares resumo



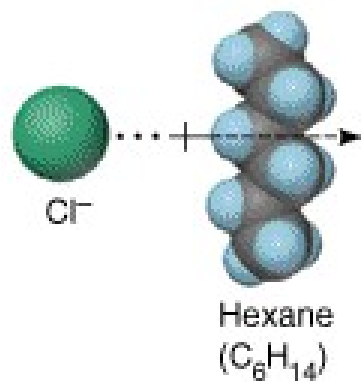
Ion-dipole



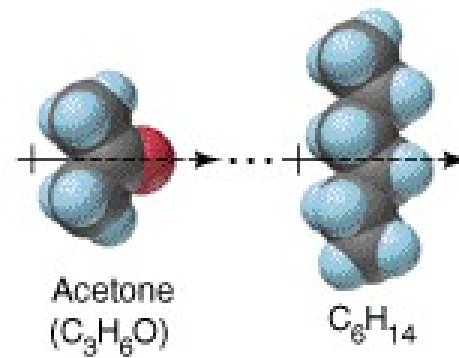
H bond



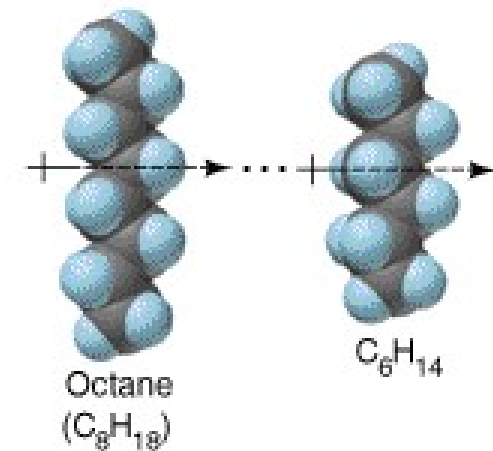
Dipole-dipole



Ion-induced dipole



Dipole-Induced dipole



Dispersion

Forças intermoleculares resumo

TABLE 12.5 Summary of Intermolecular Forces

Type of Interaction	Factors Responsible for Interaction	Approximate Energy (kJ/mol)	Example
Ion-dipole	Ion charge, magnitude of dipole	40–600	$\text{Na}^+ \dots \text{H}_2\text{O}$
Dipole-dipole	Dipole moment (depends on atom electronegativities and molecular structure)	20–30	$\text{H}_2\text{O} \dots \text{CH}_3\text{OH}$
Hydrogen bonding, $\text{X}-\text{H} \dots :\text{Y}$	Very polar X—H bond (where X = F, N, O) and atom Y with lone pair of electrons	5–30	$\text{H}_2\text{O} \dots \text{H}_2\text{O}$
Dipole/induced dipole	Dipole moment of polar molecule and polarizability of nonpolar molecule	2–10	$\text{H}_2\text{O} \dots \text{I}_2$
Induced dipole/induced dipole (London dispersion forces)	Polarizability	0.05–40	$\text{I}_2 \dots \text{I}_2$