



Conceitos básicos em química

Aula de apresentação



Calendário



2018



Março

5	Apresentação
7	estrutura e tendências periódicas
9	1 - técnicas básicas de laboratório
12	estrutura e tendências periódicas
14	ligação e estrutura molecular
16	2 - Extração de DNA do tomate
19	ligação e estrutura molecular
21	ligação e estrutura molecular
23	3 - propriedades das substâncias iônicas e moleculares

Abril

2	ligação e estrutura molecular
4	Exercícios
6	4 - solubilidade de sólidos em líquidos
9	Gases
11	Forças intermoleculares
13	5 - reações químicas
16	Exercícios
18	líquidos e soluções
20	6 - Titulações de produtos comerciais
23	reações químicas/estequiometria
25	Exercícios
27	7 - equilíbrio ácido base

Maio

2	Exercícios
4	P1
7	correção da P1/Equilíbrio químico
9	Equilíbrio químico
11	8 - variação de entalpia
14	ácido base
16	equilíbrio em meio aquoso
18	9 - reatividade de metais
21	SBQ
23	SBQ
25	10 - Eletroquímica
28	Energia e reações químicas
30	Exercícios

Junho

4	Calor e 1ª Lei da Termodinâmica
6	Exercícios
8	Livre
11	entropia e energia Livre
13	Exercícios
15	Livre
18	electroquímica
20	Exercícios
22	P2
25	Exercícios
27	Exercícios
29	Psub

RULES!

1. You SHALL!

2. You WILL!

3. You MUST!

Regras no
laboratório

3. You MUST!

INSTRUÇÕES SOBRE AS AULAS DE LABORATÓRIO

1. O aluno **não poderá** entrar no laboratório de bermudas, saia e sandálias.
2. O aluno **deve trazer** e usar sempre no laboratório o **avental**. Deve também **obrigatoriamente** usar **óculos de segurança**. Não é permitido o uso de lentes de contato no laboratório.
3. Será dada uma explicação sobre detalhes de técnica e cuidados a serem tomados, antes de cada experimento.
4. A experiência e o respectivo relatório são feitos por **tripas de alunos**.
5. O **relatório** deve ser entregue **impreterivelmente** na aula prática seguinte à realização do experimento.

LEITURA OBRIGATÓRIA

Diretrizes de Segurança do IQUSP e aquelas especificadas e disponíveis em <http://disciplinas.stoa.usp.br>

INSTRUÇÕES SOBRE O RELATÓRIO

Resumo (1/2 página)

- Objetivos
- Resumo das técnicas utilizadas
- Conclusões

Introdução (1-4 páginas)

- Geral para o particular

Tratamento e discussão dos resultados

- Apresentam os resultados e discutem os resultados obtidos.

Conclusão

Referencias



Avaliação

Avaliação

$$A = \frac{xP + yL}{x + y} \geq 5,0 \quad \text{Se } P \geq 5,0 ; x = 2 \text{ e } y = 1$$
$$P < 5,0 ; y = 0$$

$$P = \frac{P_1 + P_2}{2}$$

P_1 e P_2 = 2 melhores notas entre 3 provas efetuadas.

L = Média dos Relatórios

Frequência mínima no laboratório = 75%

Avaliação substitutiva = peso 2

Recuperação: somente se $3,0 \leq A < 5,0$

Média final (2ª. Avaliação) = $(2.REC + A)/3$

Avaliação



Grupo facebook – QFL0137 -2017

<https://www.facebook.com/groups/1566983953593037/>



Grupo facebook – QFL0137 -2017

4 videos sobre um tema científico geral

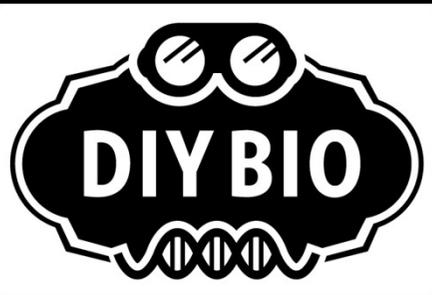
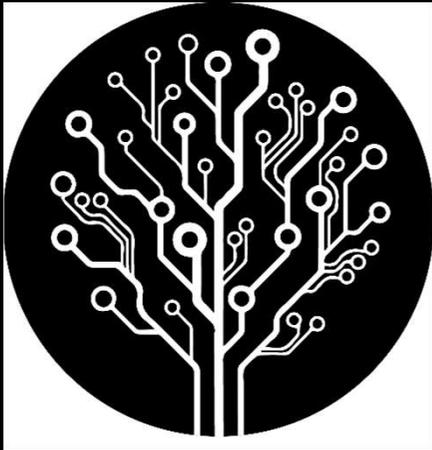
Post a comentar o video

0,25 pontos por cada video – **1 ponto somado** a um das provas (P1,P2 ou Psub)

Avaliação



Avaliação



Grupo max - 7 pessoas

Desenvolver uma ideia do ponto de vista conceptual que poderá ser revolucionaria para a humanidade 😊

Tema livre dentro das temáticas BioHacking e Do-it-yourself

1 semestre para fazer – contando a partir de agora

Apresentar o projecto de uma forma autoexplicativa em video 5-6 minutos.

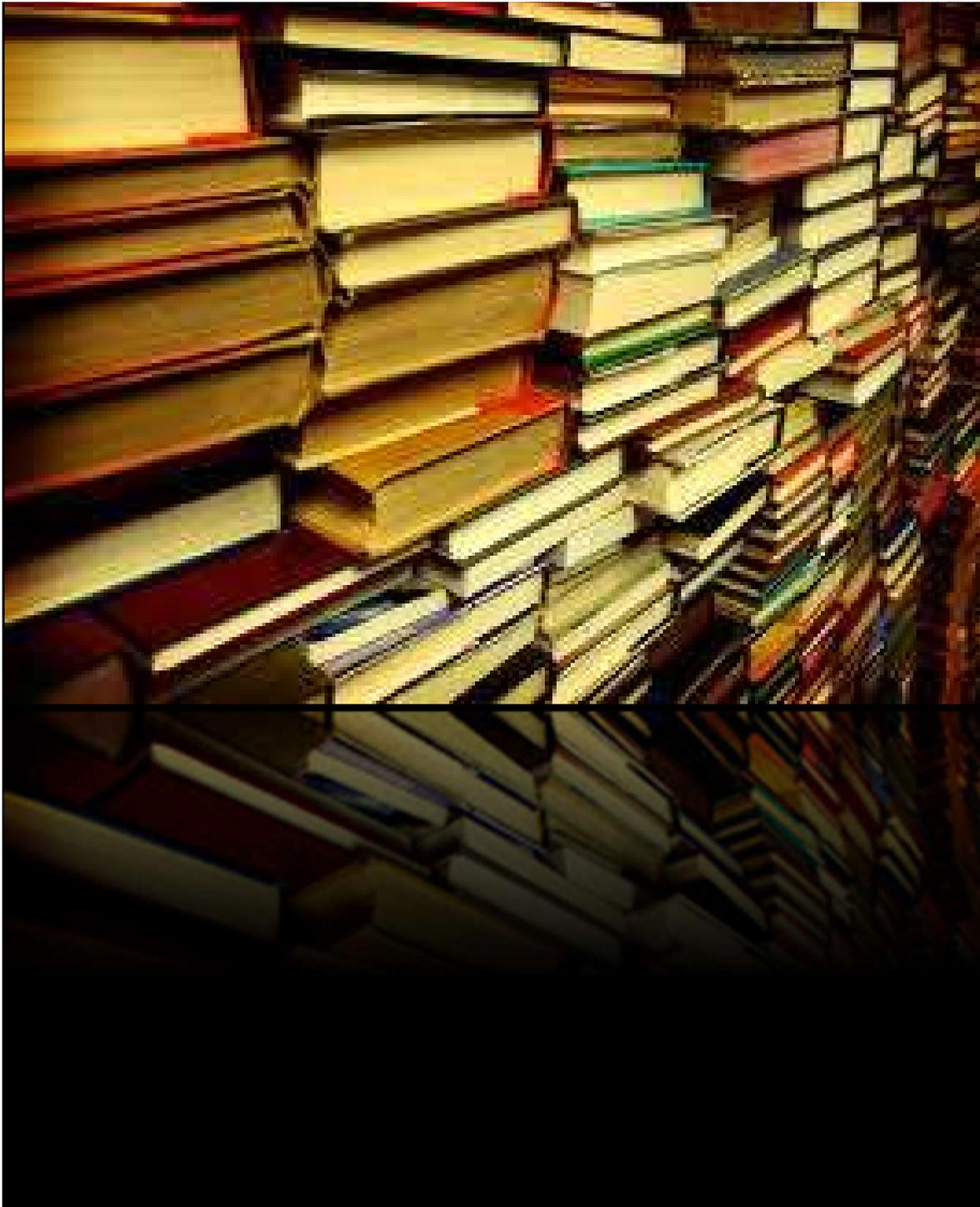
Avaliação

- 10 – 2,25 pontos na média
- 9,5 – 1,95 pontos na média
- 9,0 – 1,85 pontos na média
- 8,5 -1,5 pontos na média
- 8,0 -1,0 pontos na média

Exemplo

<https://www.youtube.com/watch?v=mSTYLpcO37Y>

	Provas	Laboratorio	Nota final	com biohaking			
MEDIA GERAL FARMA	6,3	7,5	6,7	8,4	APROVADOS	70	91%
					REPROVADOS	7	9%



Livros recomendados

1) P.W. Atkins, L. Jones, *Chemistry: Molecules, Matter and Change*, 4^a. ed. e post., W.H. Freeman, New York American Books, New York, 1999.

2) J.C. Kotz, P. Treichel Jr, *Chemistry and Chemical Reactivity*, 4^a. ed. e posteriores, Saunder College Pub., N. York, 1999.

3) T. L. Brown, H. E. LeMay, B. E. Bursten, C. J. Murphy, P. Woodward, *Chemistry – The Central Science*, Pearson Prentice Hall, 11th Ed. 2009 e posteriores.

4) J.B. Russell, *Química Geral*, Mc Graw-Hill, 1982.

5) A. Burrows, J. Holman, A. Parsons, G. Pilling e G. Price, *Chemistry3 - Introducing inorganic, organic and physical chemistry*, Oxford University Press, 2009.



Contactos

Bloco 8 – superior sala 865

pvidinha@iq.usp.br

Whats app - (11)975485345

Grupo facebook – QFL0137

<https://www.facebook.com/groups/1566983953593037/>

STOA -Moodle

<http://disciplinas.stoa.usp.br/>



Conceitos básicos em química

Aula 1

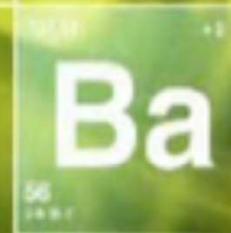
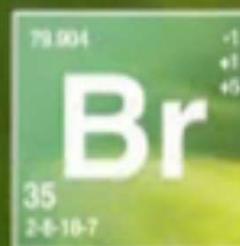


O que é a química?

É Tudo!!!



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



Visão de hoje...



O mundo vive de química...

A comprehensive overview of chemical-free consumer products

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

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

A comprehensive overview of chemical-free consumer products

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

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



¹Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel, 9870 Road 40 M/S, Shel, WY 82445, USA, *e-mail: alexgold@weizmann.ac.il

References

1. 'Chemical Free' cosmetics from 1920 up to 1960
2. 'Chemical Free' detergents and laundry soaps from the 1950s to the 1980s
3. 'Chemical Free' beauty products from 1950 to the 1980s
4. 'Chemical Free' food items from 1950 to the 1980s
5. 'Chemical Free' beverages from 1950 to the 1980s

Acknowledgments

CJ Chemjobber thanks the Weizmann Institute for providing the opportunity to work on this project. A.F.G.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. They would like to thank the Weizmann Institute for funding.



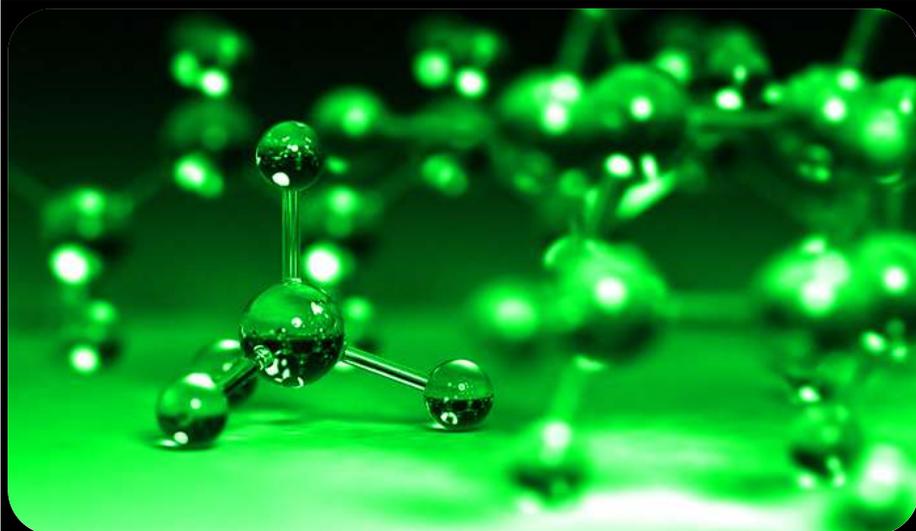
Surge anos 90s

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

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



Química Verde



Química Verde

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

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



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

A sustentabilidade é uma das suas consequências...

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

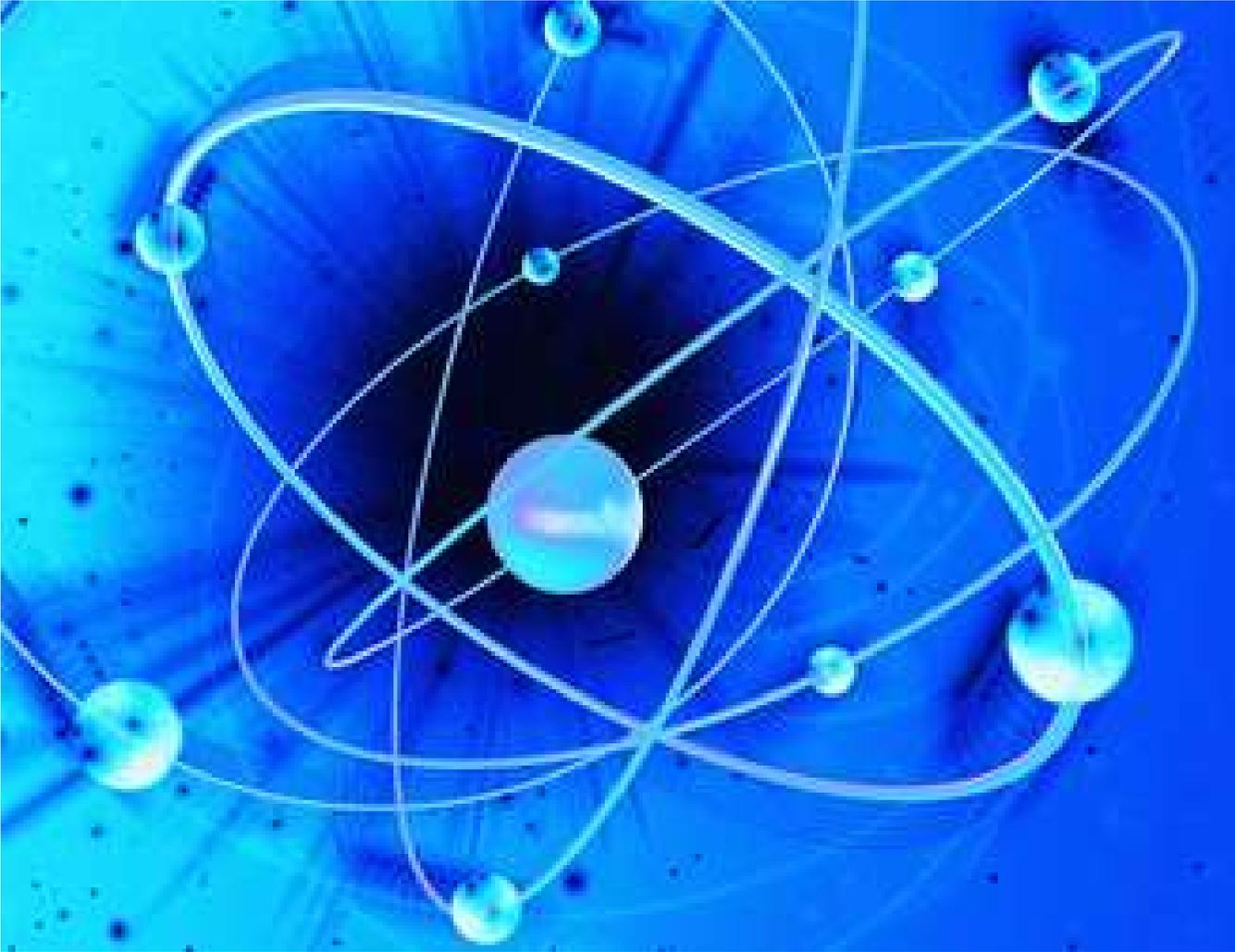
Resumindo Química verde Implica...



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



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

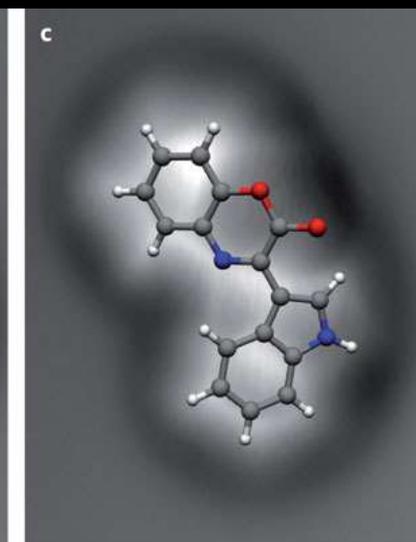
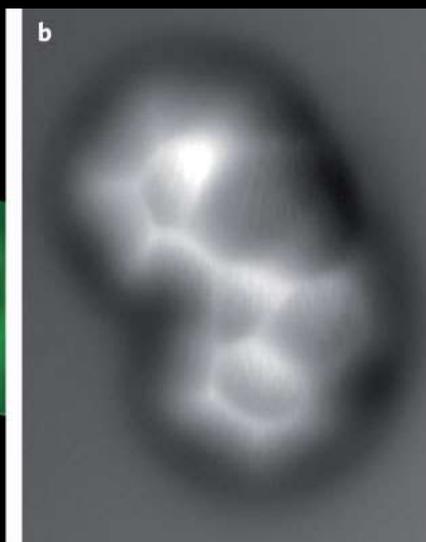
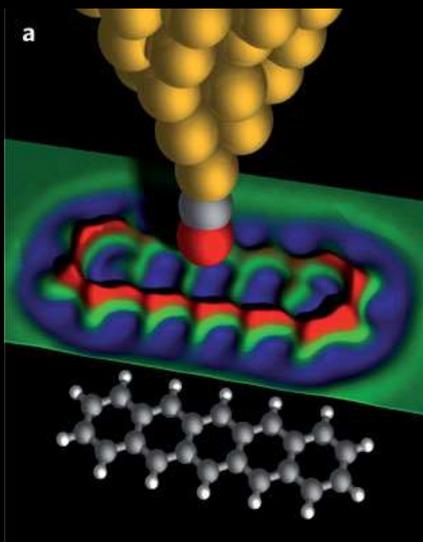
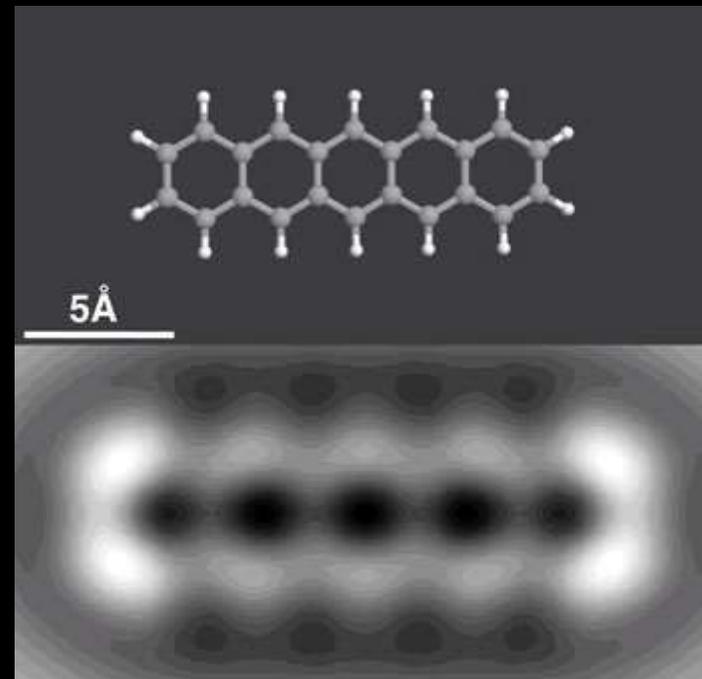
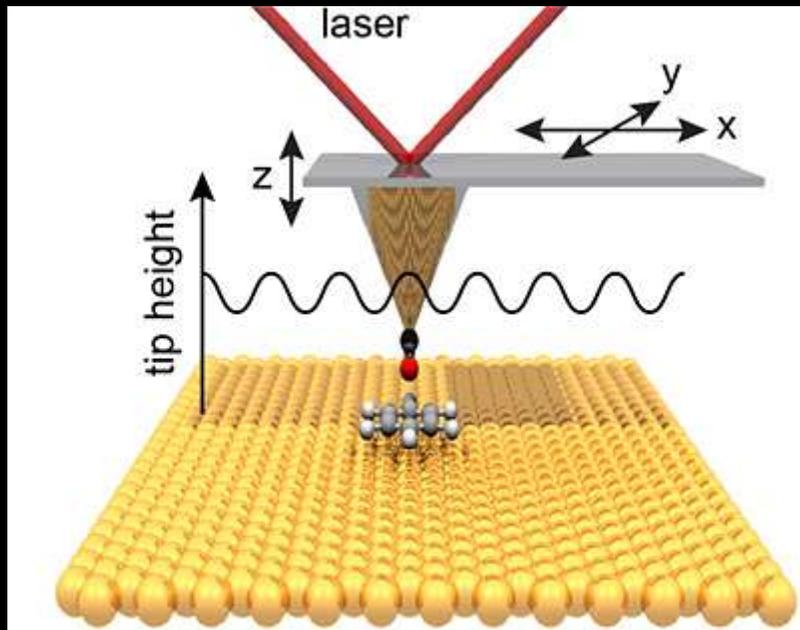


**Átomos,
moléculas
e íons**

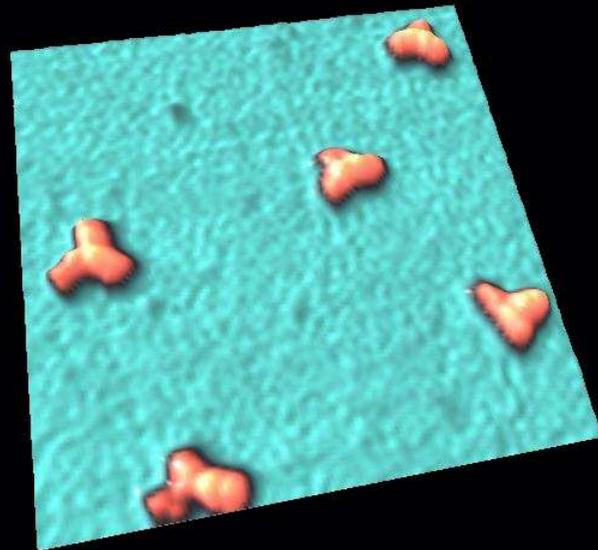
Aula 2



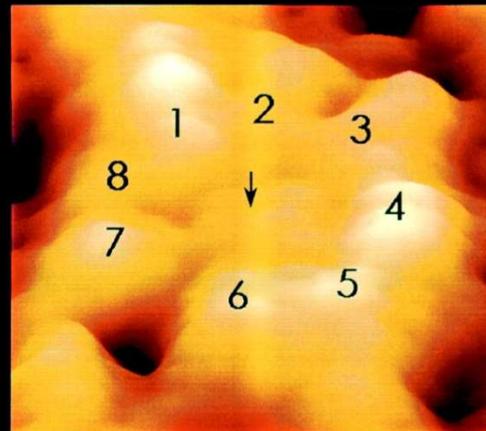
Microscopia de Força atômica



Microscopia de Força atómica

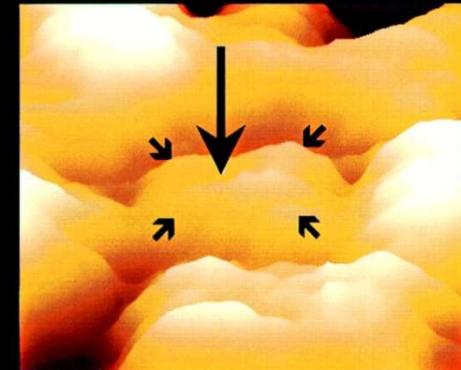


Nuclear pore complex

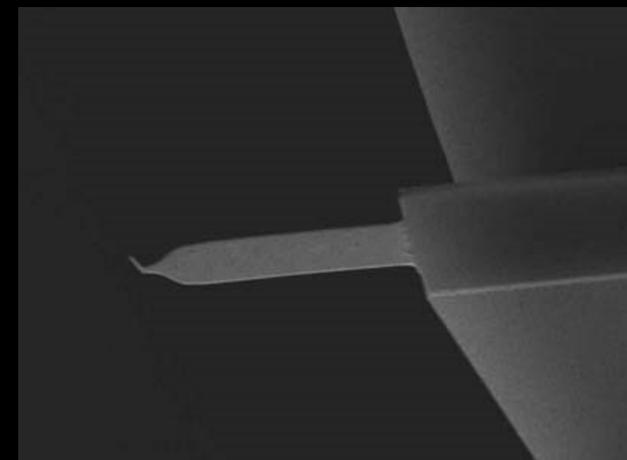
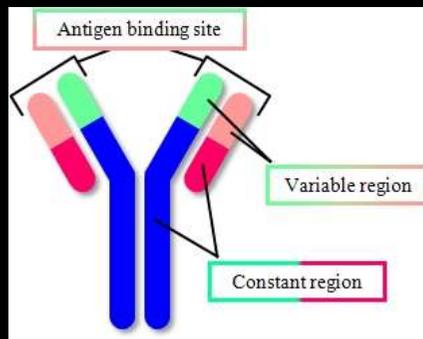


50 nm

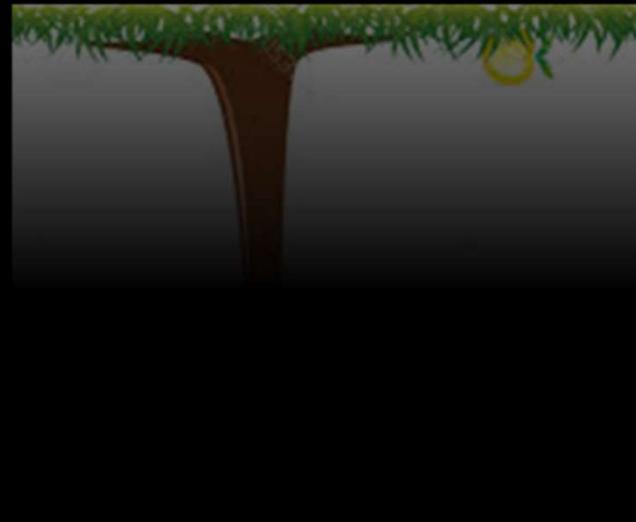
transporter



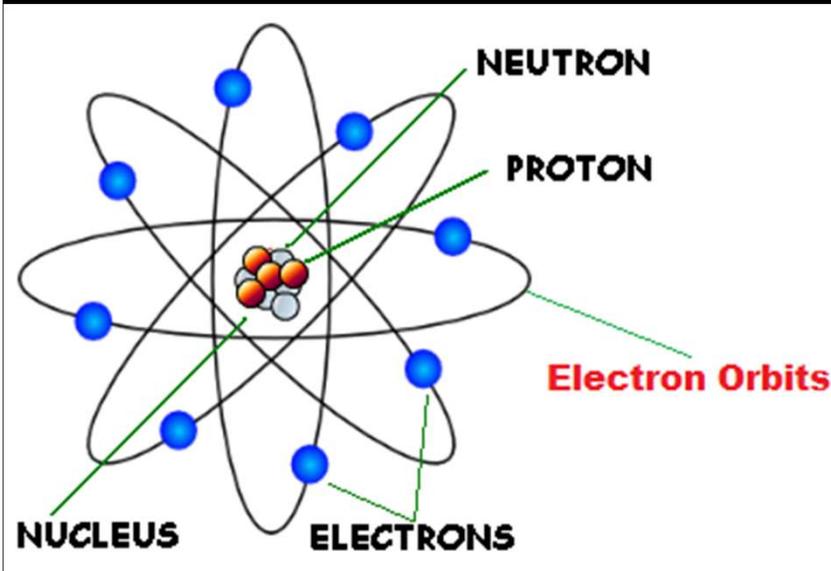
25 nm



modelo



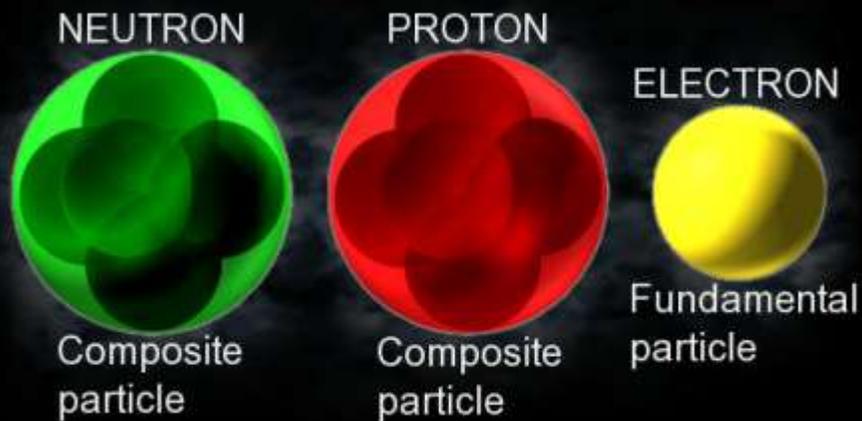
Estrutura atômica



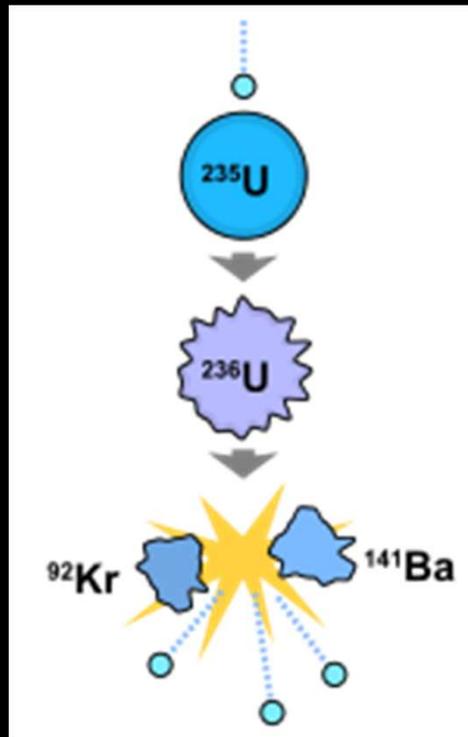
Em 1900 através dos trabalhos de Joseph John Thompson e Ernest Rutherford foi estabelecido o modelo de atômico

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

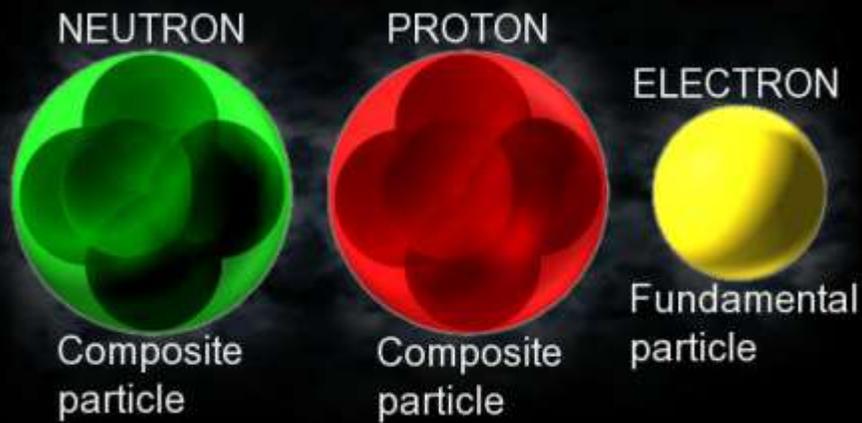
Em um átomo eletricamente neutro, o número de elétrons é igual ao número de prótons



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



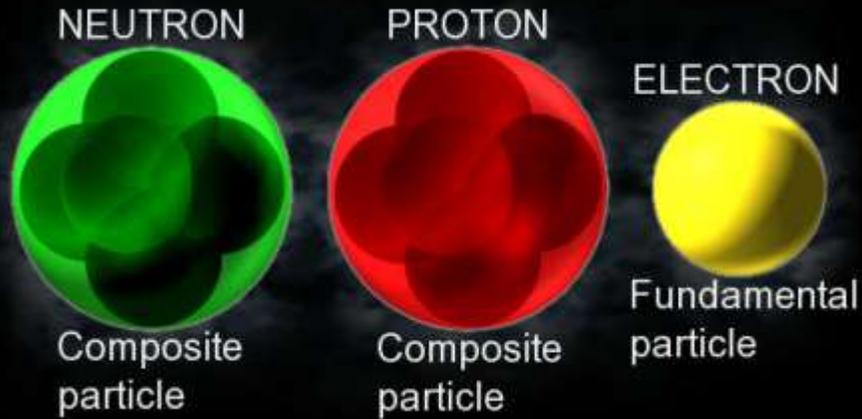
O **neutron** é essencial para a produção de energia nuclear dado que está envolvido nas reacções em cadeia.



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

O número de protons - Define a propriedade de cada elemento

“cada elemento tem um número definido de protons”



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

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

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

Estrutura atômica

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

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

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

13	14	15	16	17	18
					VIIIA
					2
					He

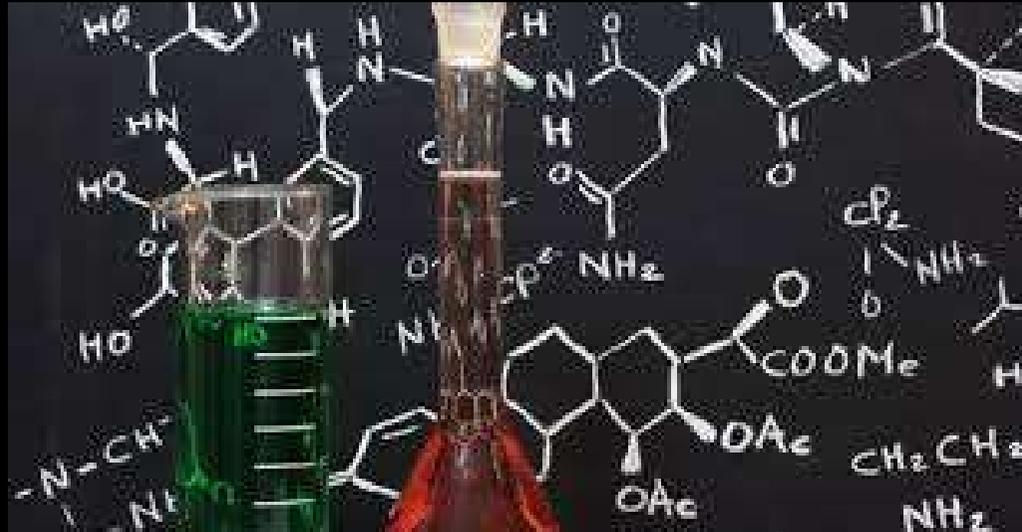
O número de prótons do núcleo é dado por **Z**

10.811	12.0107	1.00794	15.999	18.9984035	20.1797
Boro	Carbono	hidrogénio	Oxigénio	Floco	Neón
B	C	H	O	F	Ne

Unidade de massa atômica

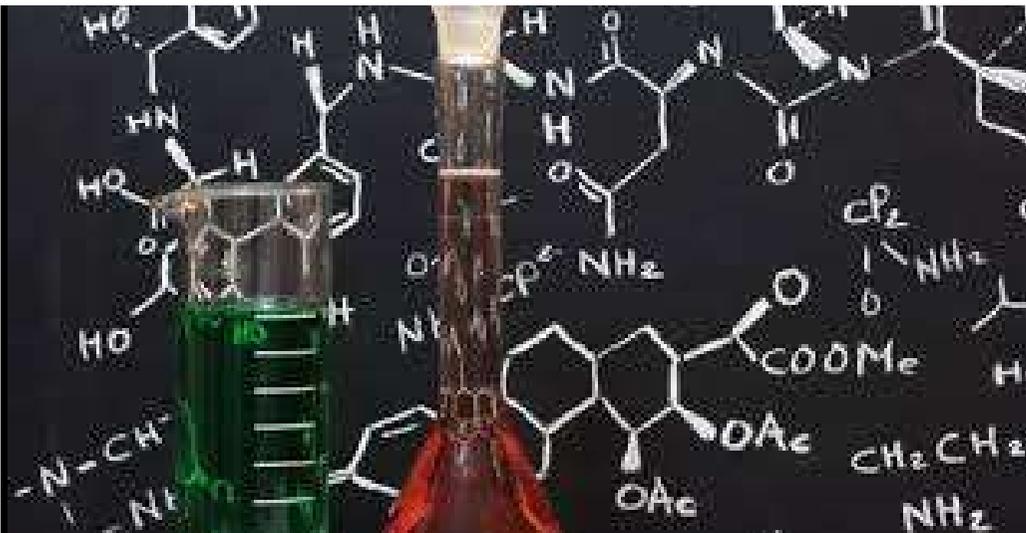


Lavosier (1743-1794)



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

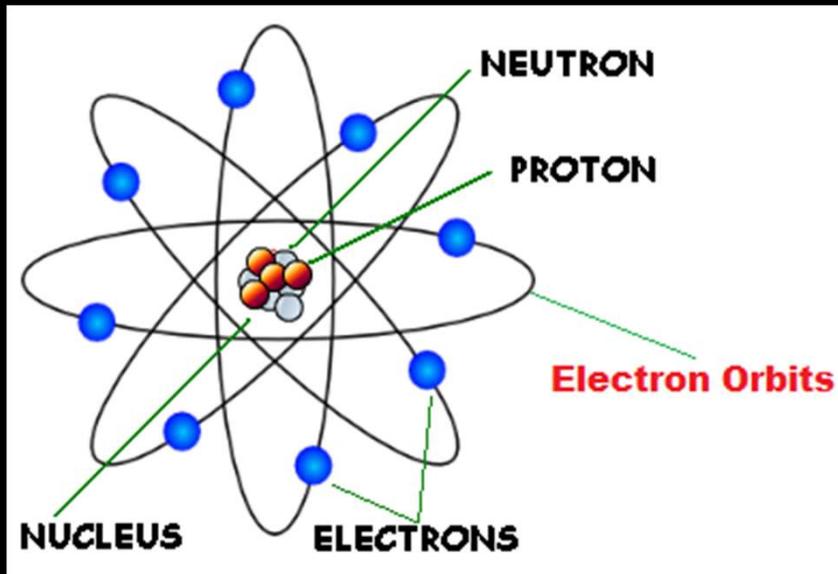
Número de massa

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

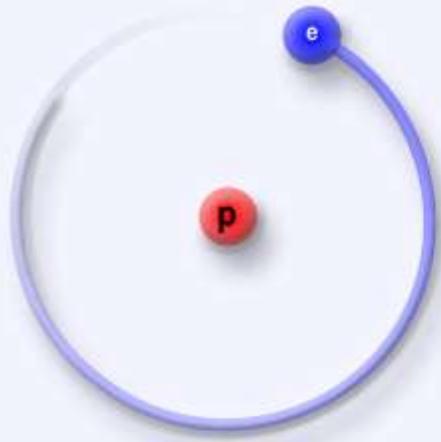
Os átomos que possuem o mesmo número atômico e números e massa diferentes denominam-se isótopos

Todos os átomos tem o mesmo número de protons.

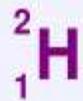
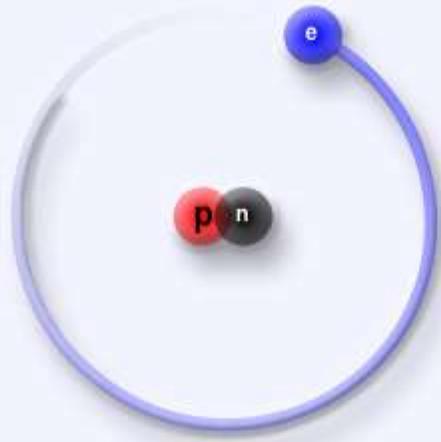
Então o que muda?

Número de neutrons é diferente!

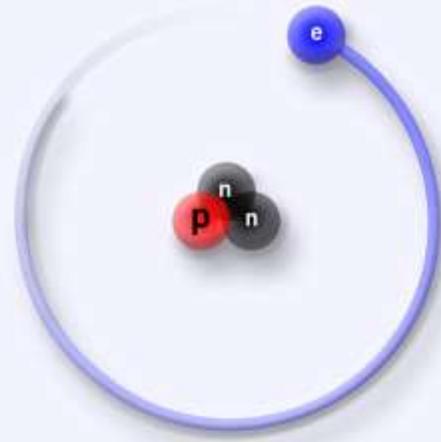
Isótopos hidrogênio



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

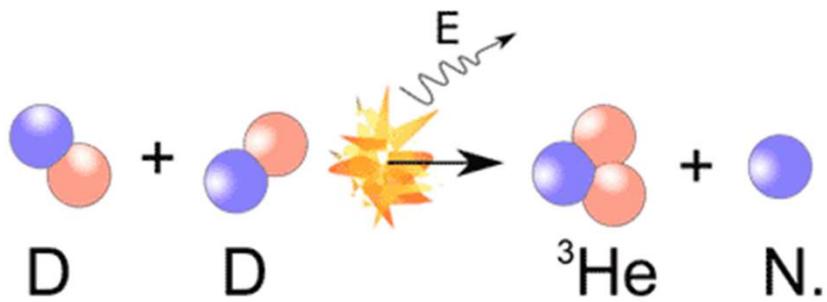
Curiosidade : Em cada copo que você bebe, 0,001% D_2O

2_1H Deutério



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

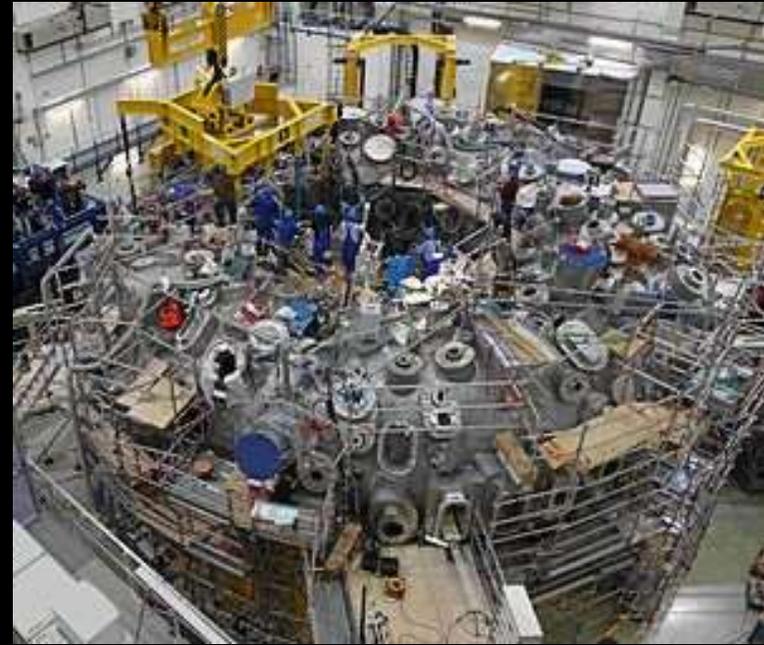
2_1H Deutério



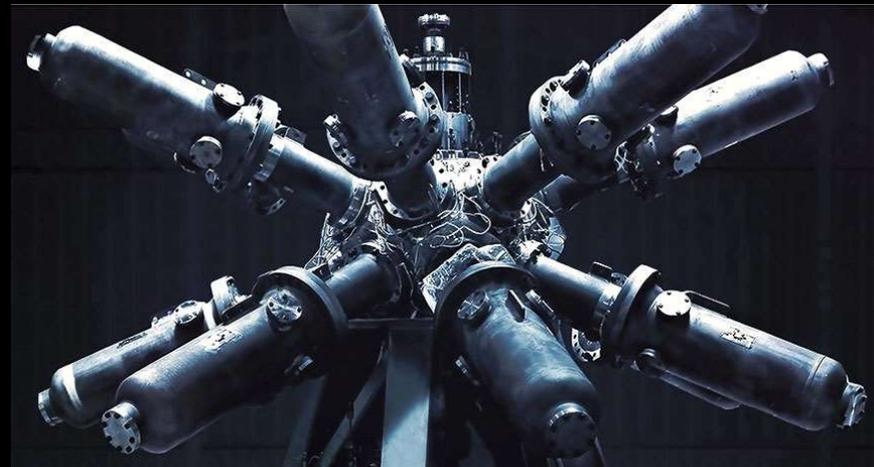
 Proton

 Neutron

<http://fusion.srubar.net>



Wendelstein7X



${}^3_1\text{H}$ Tritio aplicações



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

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



Ou também produzido em alguns reactores nucleares.

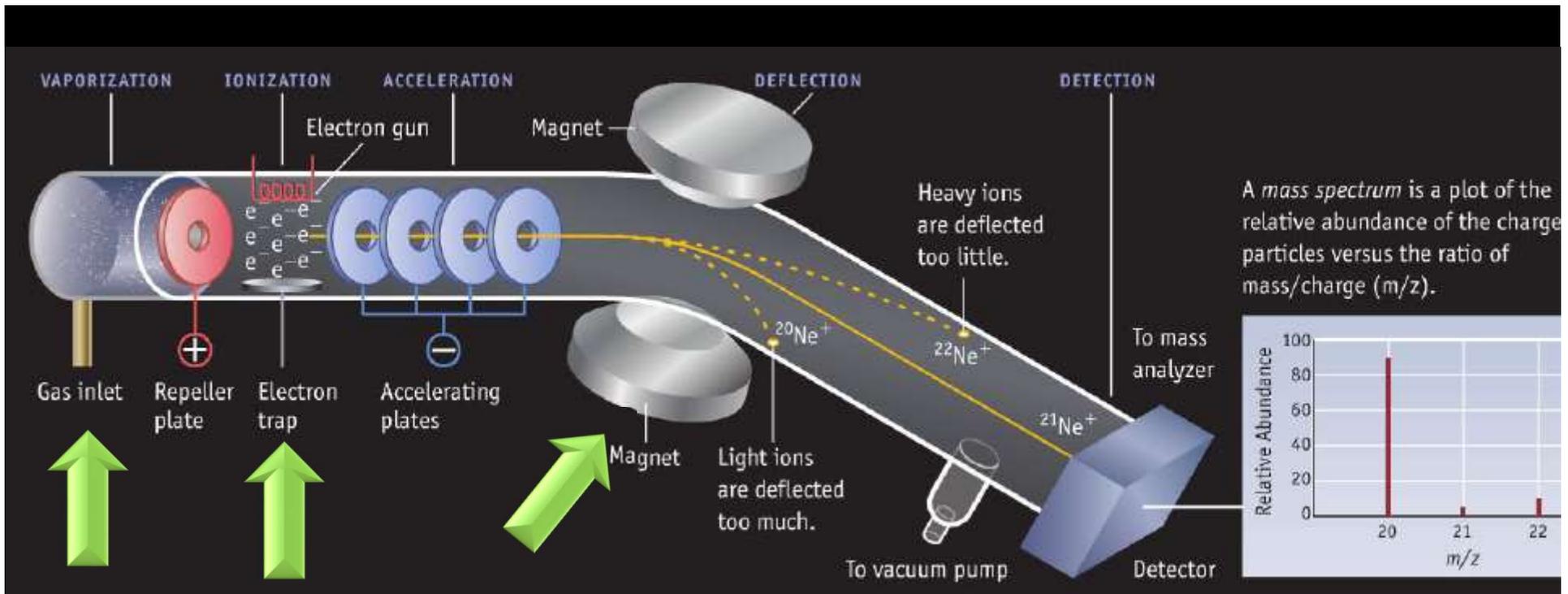
Abundância isotópica



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

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



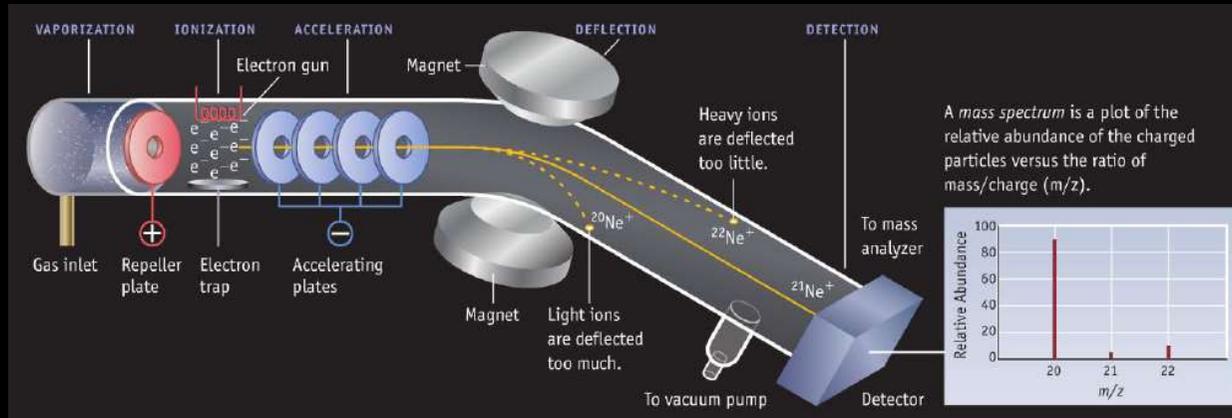
A amostra é introduzida na câmara de ionização com vapor

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

.

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

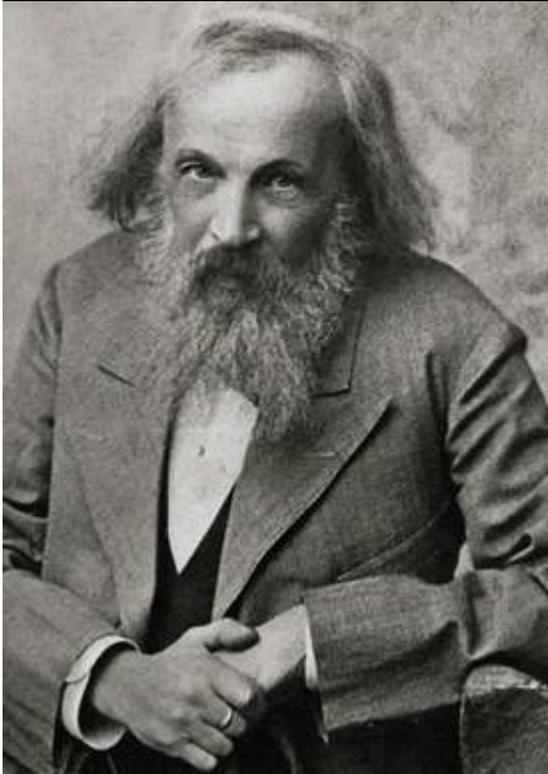
Peso atómico

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 displays a periodic table where each element is represented by a small photograph of the element in its natural state. The noble gases are labeled with their symbols: He, Ne, Ar, Kr, Xe. The table is arranged in rows and columns, with the noble gases forming a vertical column on the right side. The elements are numbered from 1 to 118. The noble gases are labeled as follows: He (Helium), Ne (Neon), Ar (Argon), Kr (Krypton), and Xe (Xenon). The other elements are represented by small photographs of the element in its natural state, showing various colors and textures. The table is set against a black background.

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=108.
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 Dmitri 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 [289]	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

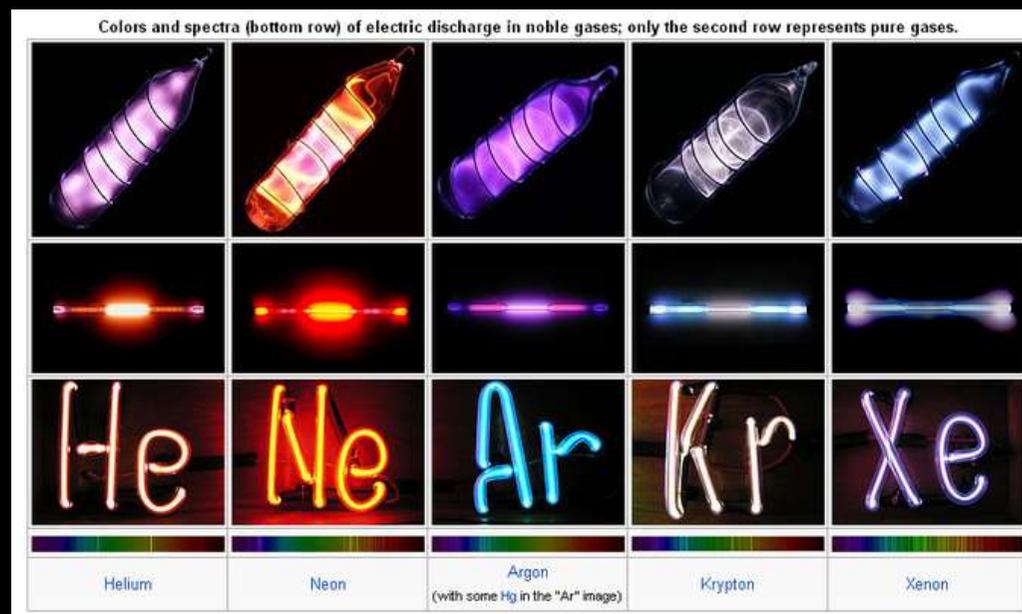
2	He Helium 4.003
10	Ne Neon 20.180
18	Ar Argon 39.948
36	Kr Krypton 84.80
54	Xe Xenon 131.29
86	Rn Radon 222.018
118	Uuo Ununoctium unknown

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

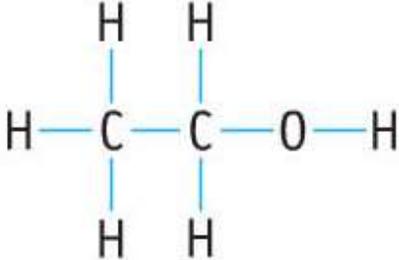
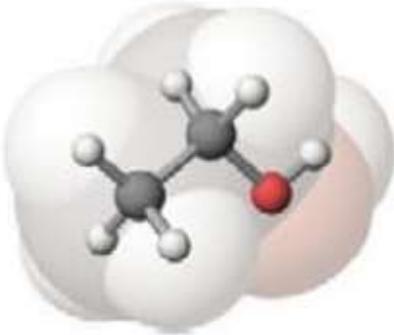
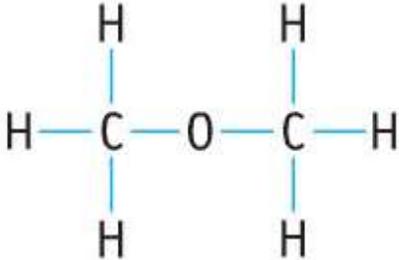
Exemplos...

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		

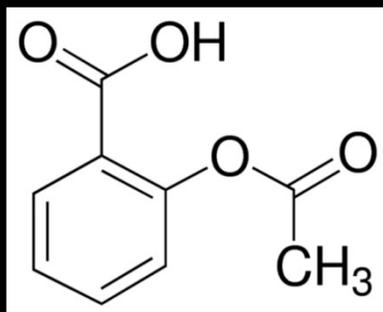


I U P A C

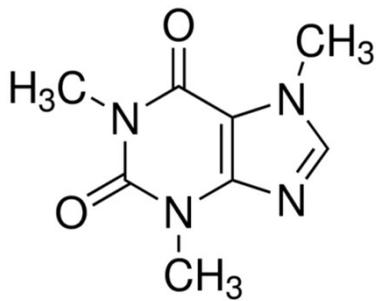
International Union of Pure
and Applied Chemistry

International Union of Pure
and Applied Chemistry

Nomes dos compostos químicos

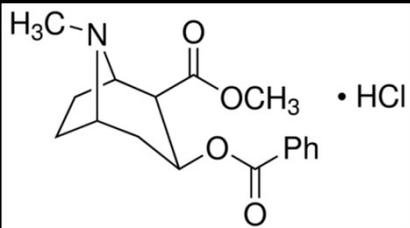


2-Acetoxybenzoic acid,
O-Acetylsalicylic acid,
ASA,
Acetylsalicylic acid,
Aspirin



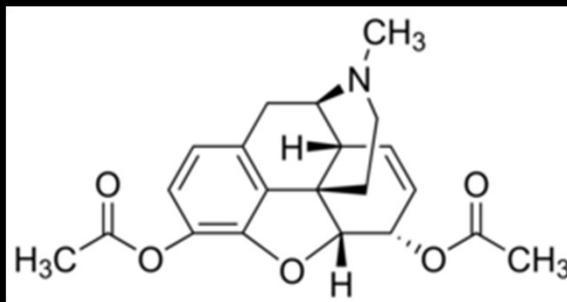
1,3,7-Trimethylxanthine
1,3,7-Trimethylpurine-2,6-dione

Cafeína



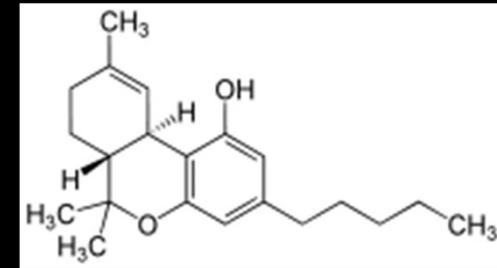
methyl (1R,2R,3S,5S)-3-(benzoyloxy)-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylate

Cocaína



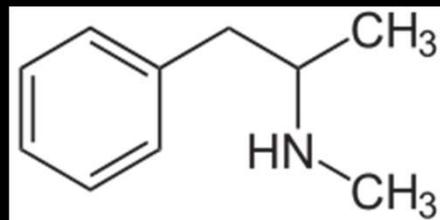
(5 α ,6 α)-7,8-didehydro-4,5-epoxy-17-methylmorphinan-3,6-diol diacetate

Heroína



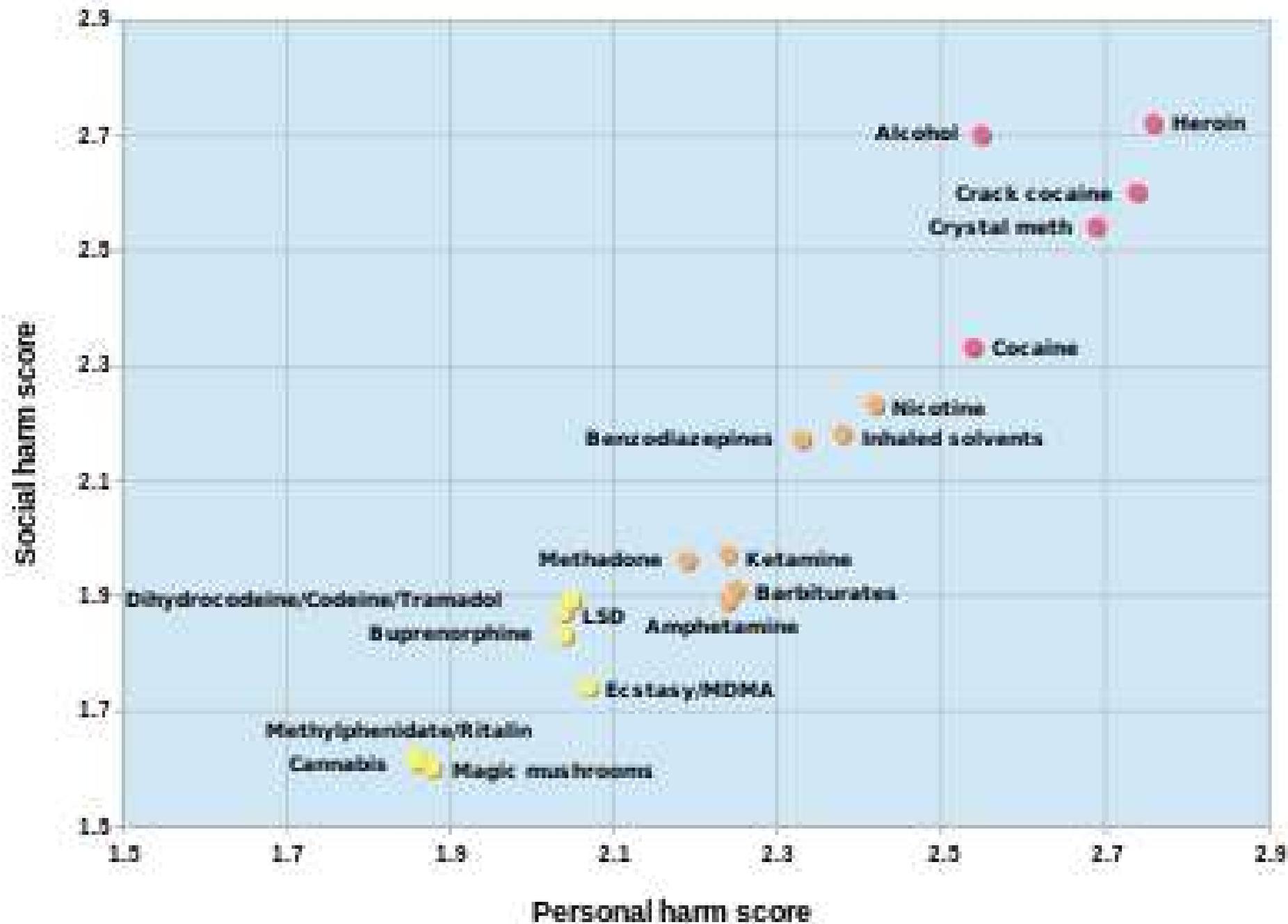
(-)-(6aR,10aR)-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6a,7,8,10a-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-1-ol

Cannabis THC



N-methyl-1-phenylpropan-2-amine

Crystal meth

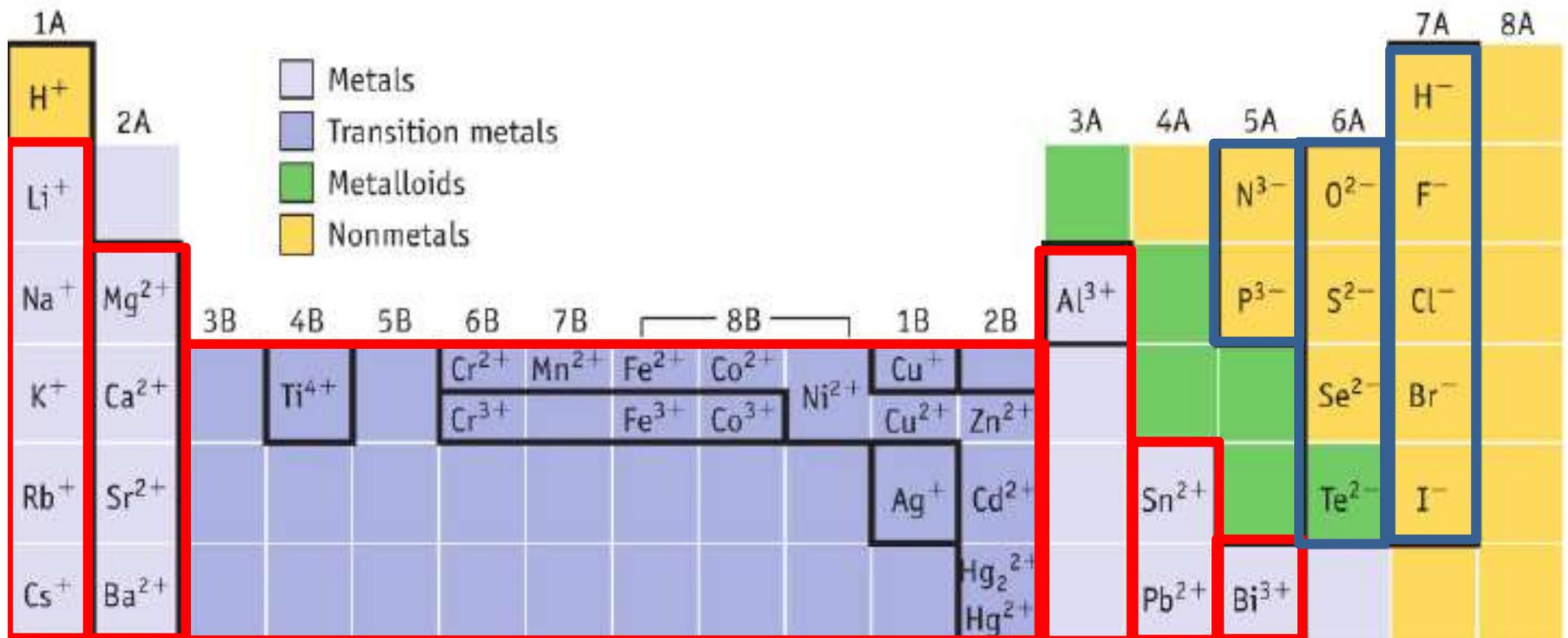


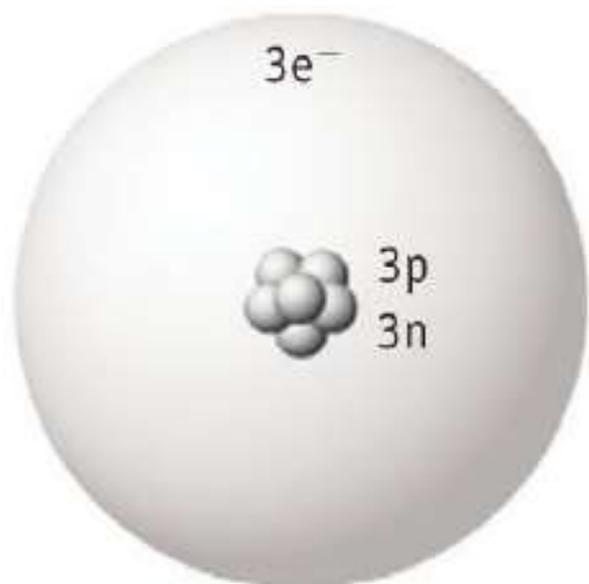
Compostos iônicos – íons



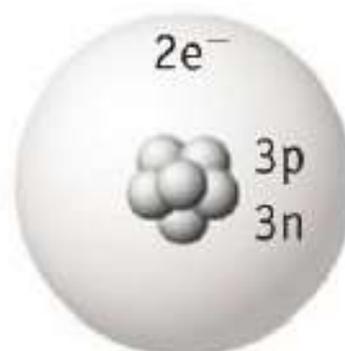
Nome Comum	Nome químico	Formula	Iões envolvidos
Calcita	Carbonato de cálcio	$CaCO_3$	Ca^{2+} ; CO_3^{2-}
Fluorita	Fluoreto de cálcio	CaF_2	Ca^{2+} ; F^-
Gipsita	Sulfato de cálcio dihidratado	$CaSO_4 \cdot H_2O$	Ca^{2+} ; SO_4^{2-}
Hematita	Óxido de ferro (III)	Fe_2O_3	Fe^{3+} ; O^{2-}
Ouro-pigmento	Sulfeto de Arsénio	As_2S_3	As^{3+} ; S^{2-}

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

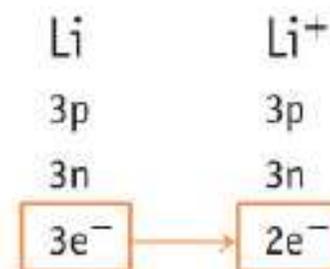




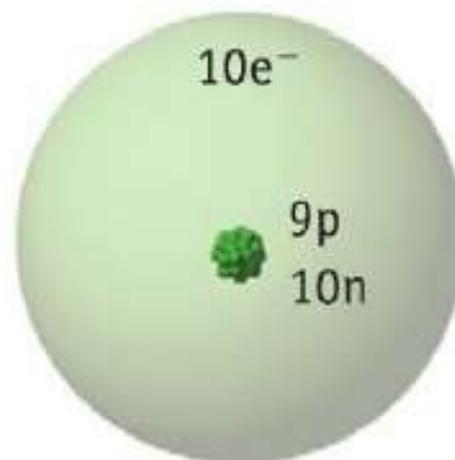
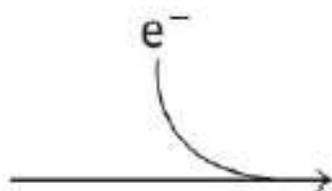
Lithium, Li



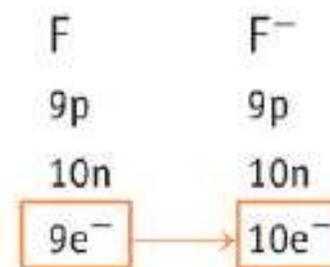
Lithium ion, Li⁺



Fluorine, F



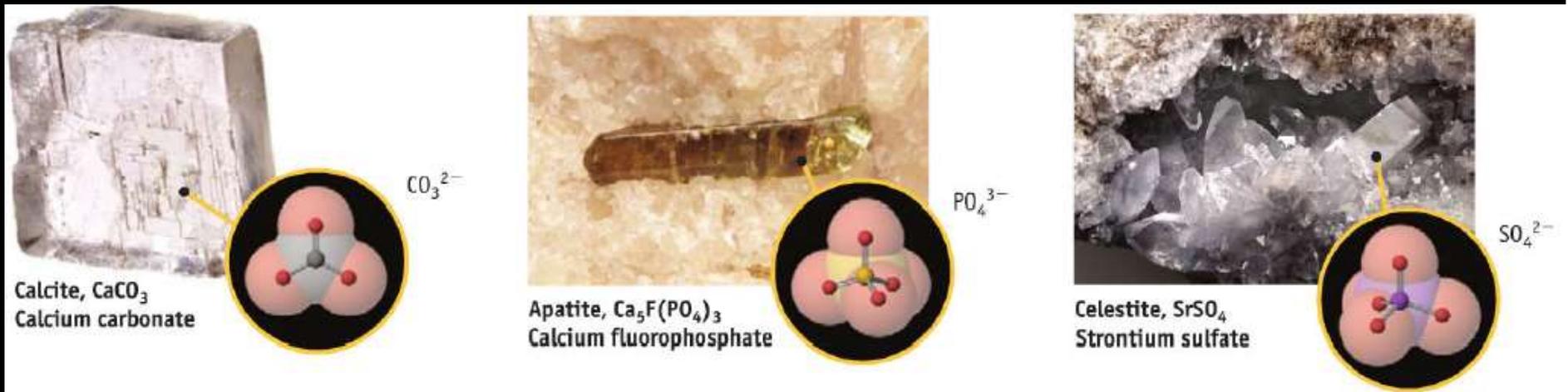
Fluoride ion, F⁻



Iões poliatômicos

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

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



Nomenclatura

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

Nomenclatura

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



Regras dos nomes

Cátions: assumem o nome do metal – ions alumínio

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

Anions: que podem ser monoatômicos ou poliatômicos

Monoatômico negativo -

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

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

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

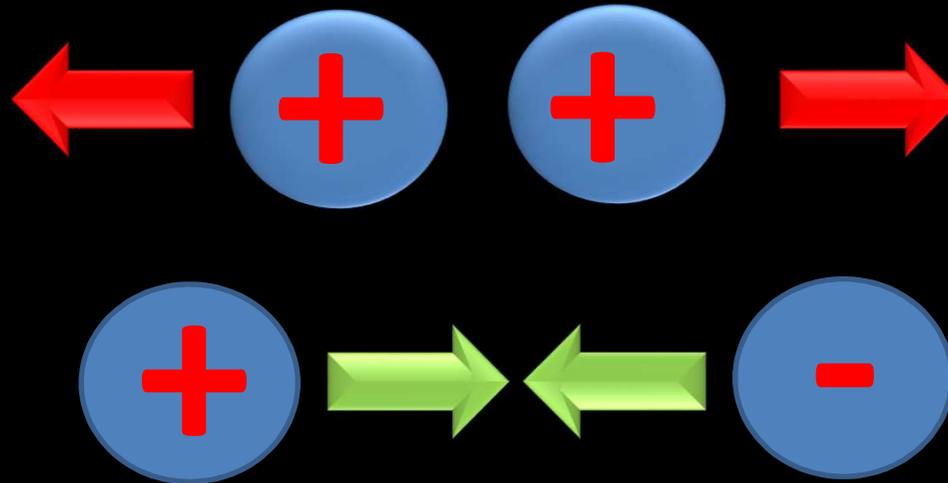
Grupo 7A	
ClO_4^-	Íon per clorato
ClO_3^-	Íon clor ato
ClO_2^-	Íon clor ito
ClO^-	Íon hipo clorito



Aumento do número de átomos de oxigênio

Propriedades dos compostos iónicos

O que acontece quando partículas carregadas se aproximam?



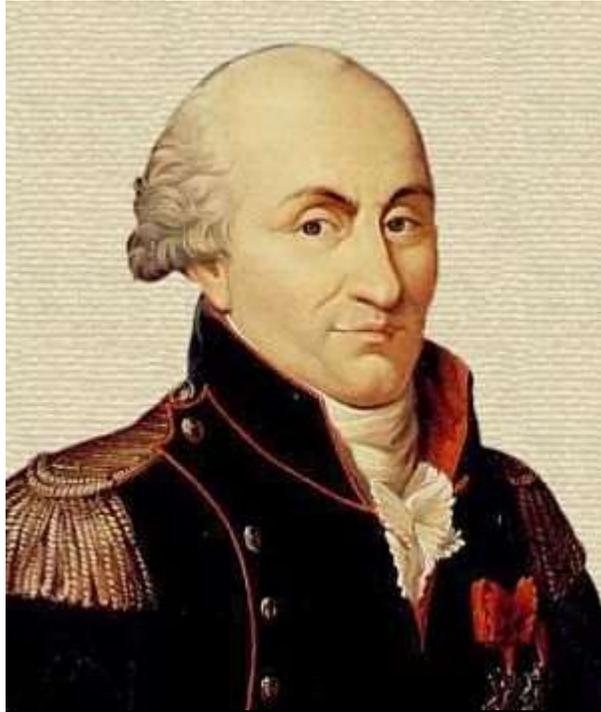
Quão forte é a força de atracção ou repulsão entre as duas cargas?

1795

Forças existente entre partículas carregadas podiam ser quantificadas

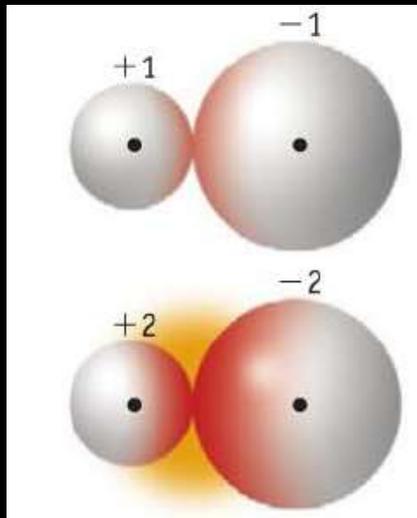
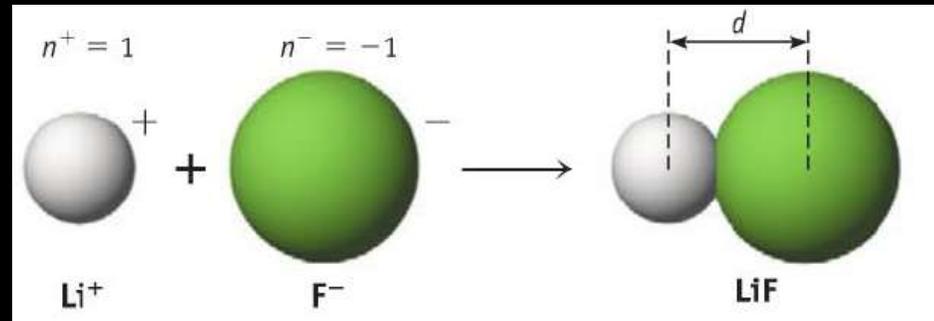
$$\text{Força} = -K_e \frac{q_1 \times q_2}{d^2}$$

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

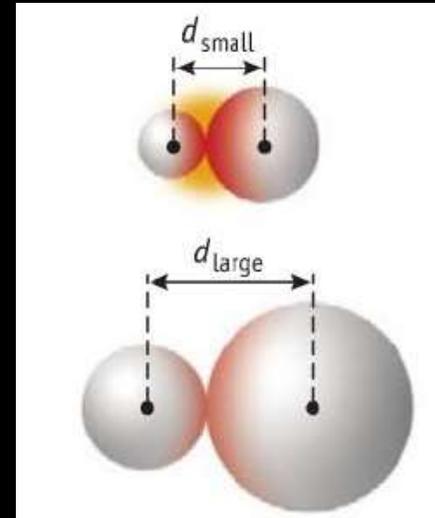


Augustine Charles de
Coloumb
(1736-1806)

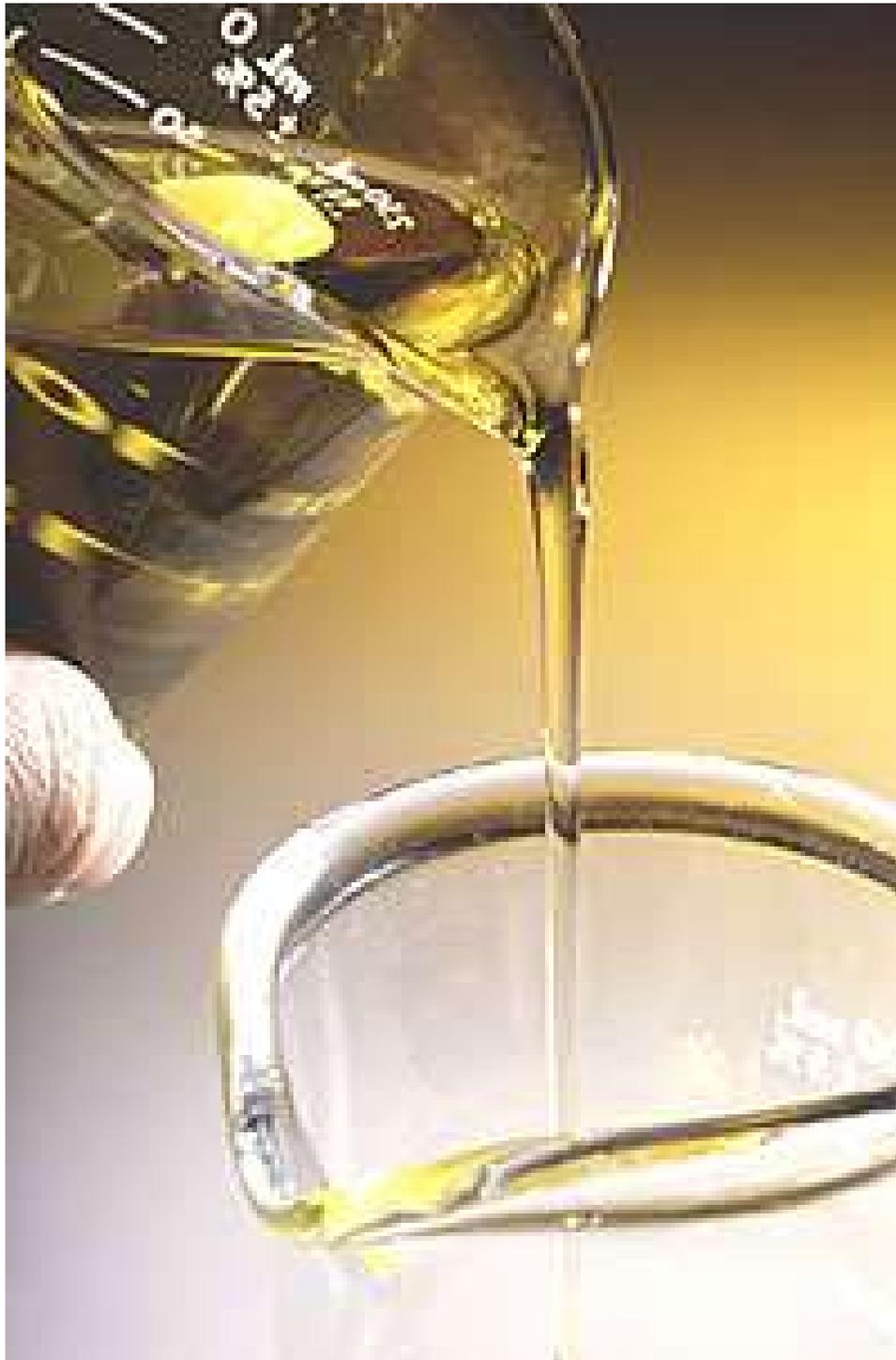
$$\text{Força} = -K_e \frac{q_1 \times q_2}{d^2}$$



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



À medida que a distância diminui a força de atração

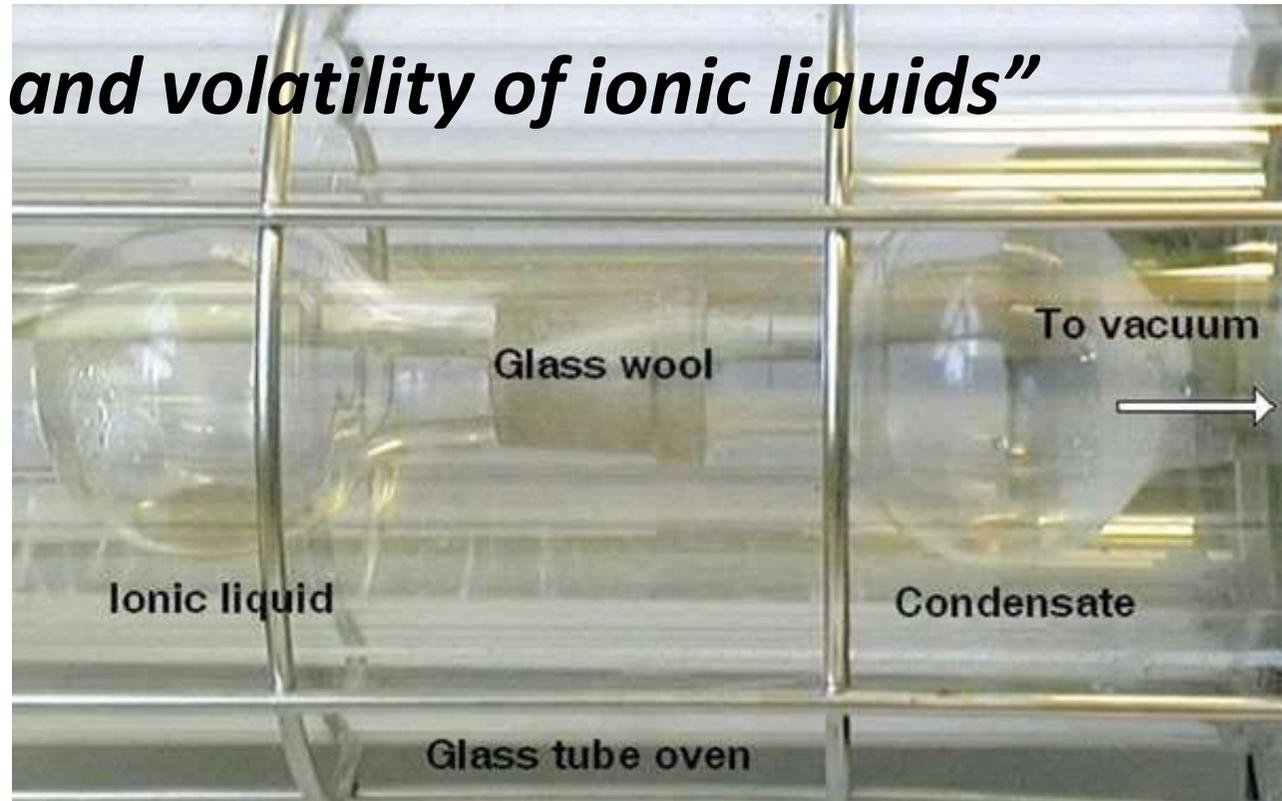


Líquidos iónicos

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

Líquidos iónicos Volátiles

“The distillation and volatility of ionic liquids”



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

Kaboom Ionic liquids



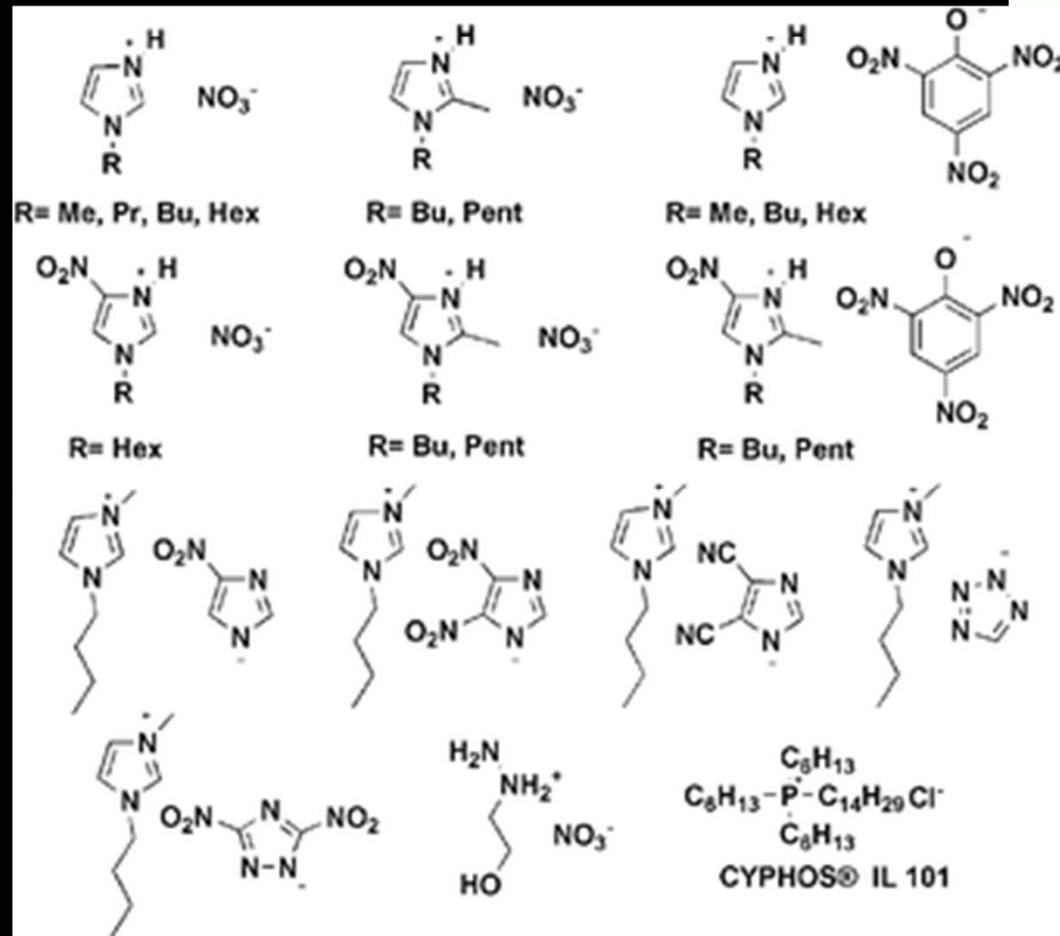
“Combustible ionic liquids by design: is laboratory safety another ionic liquid myth?”



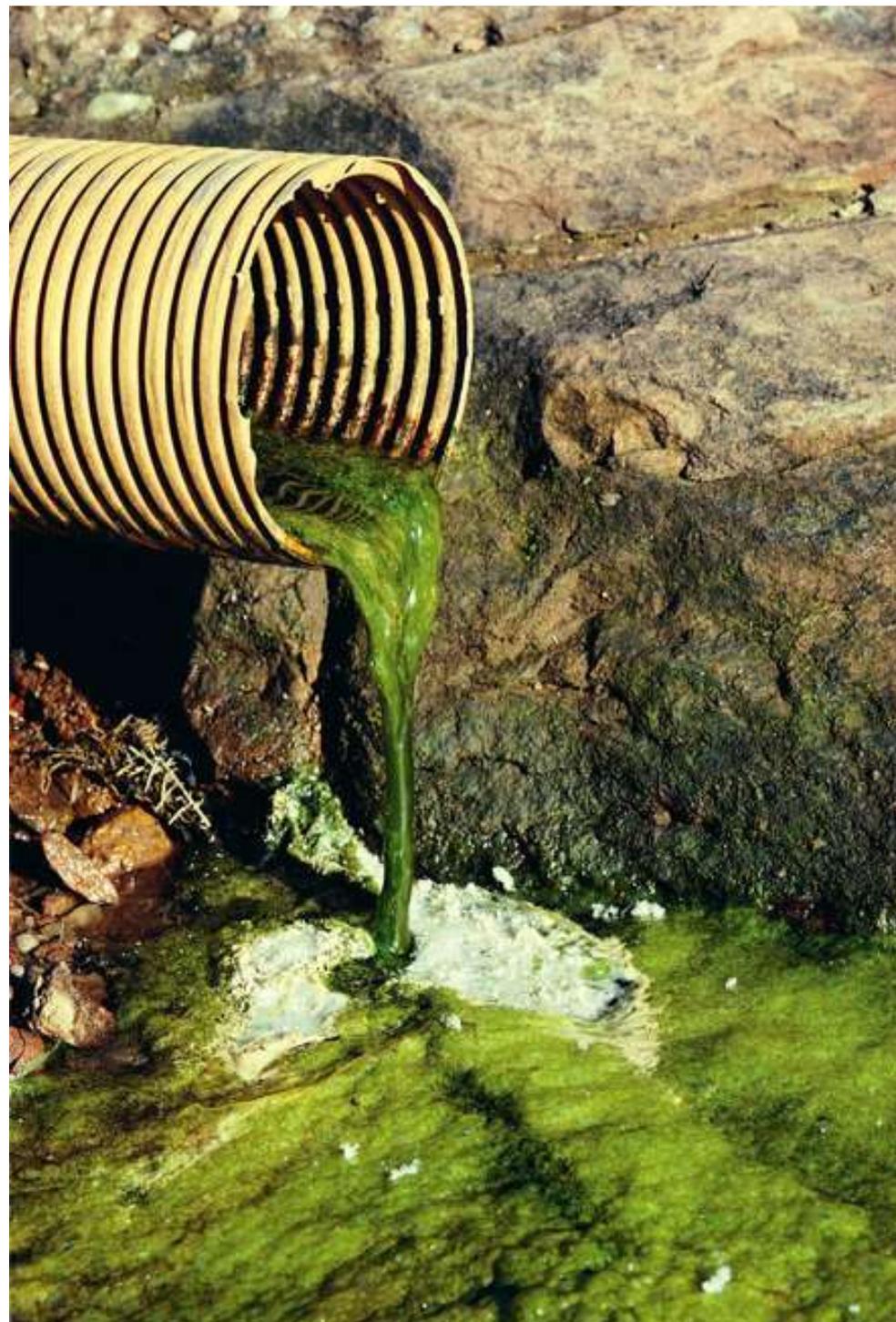
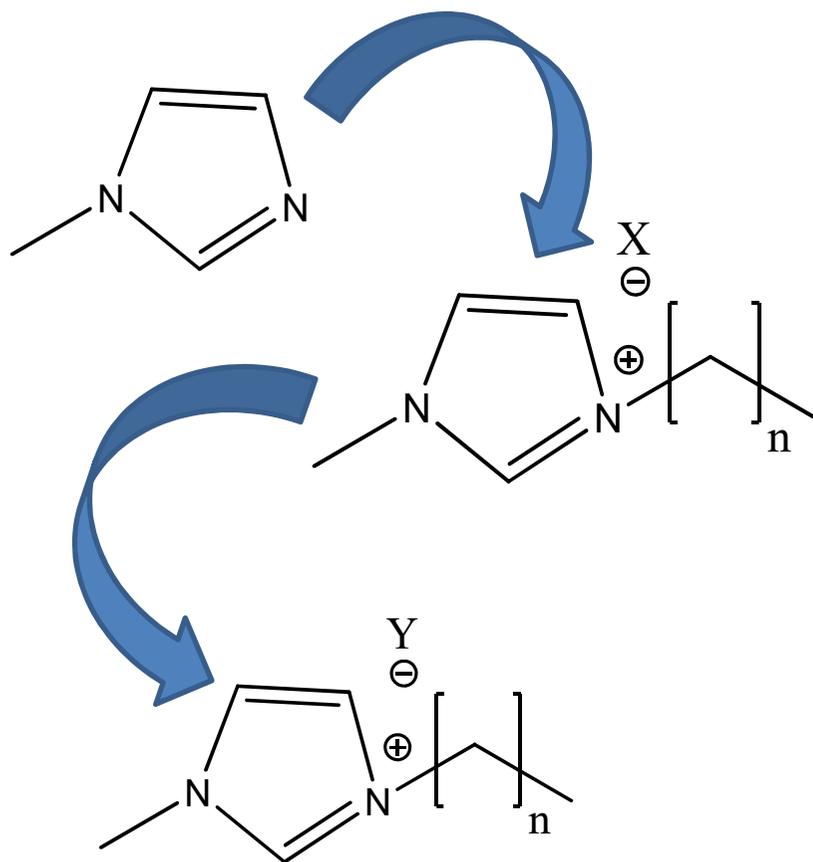
[1-Bu-3-H-IM][NO₃]

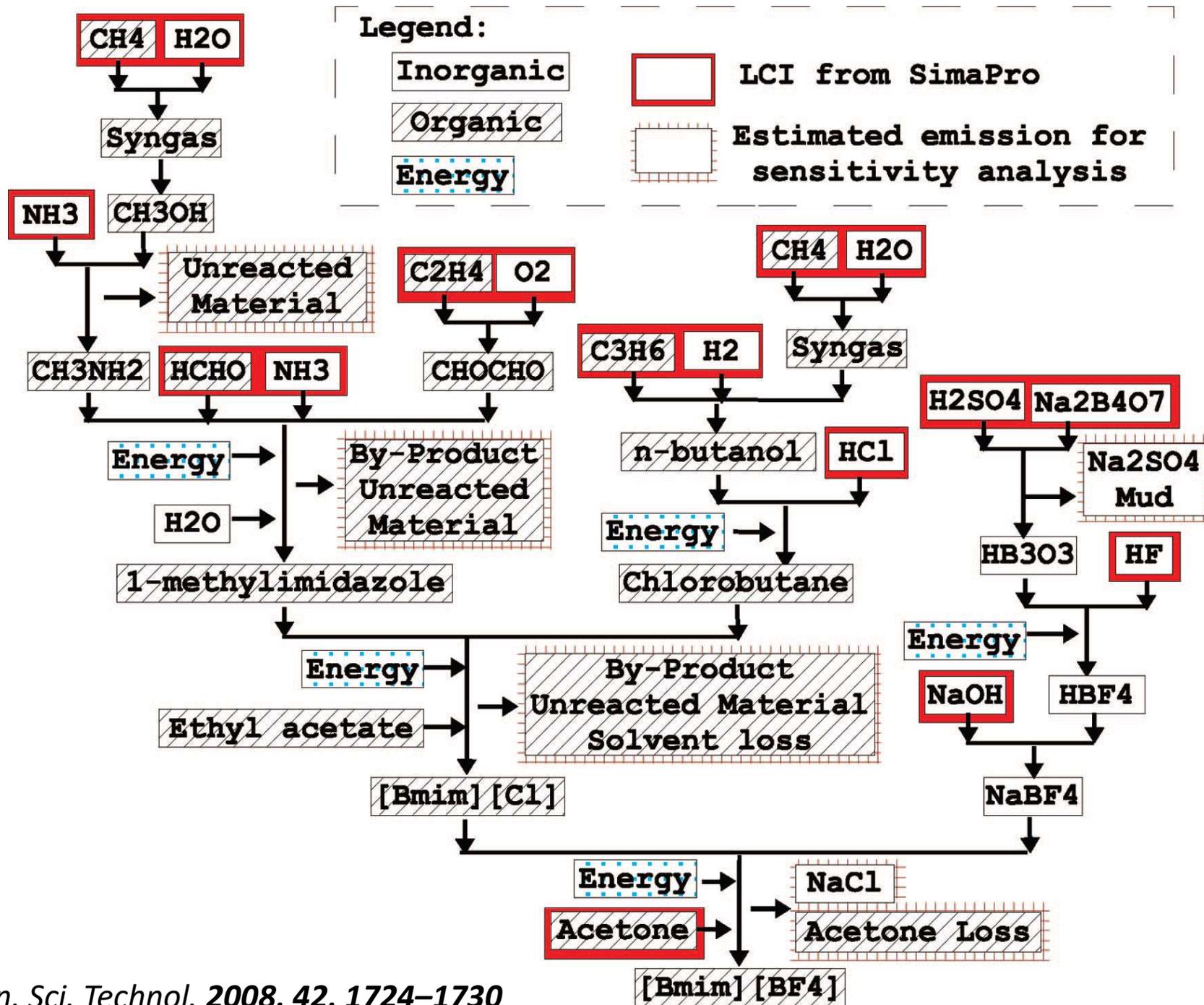
Chem. Commun., 2006, 2554-2556

Kaboom



Líquidos Iónicos Green (RED)





Toxicidade

líquidos iónicos

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

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



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

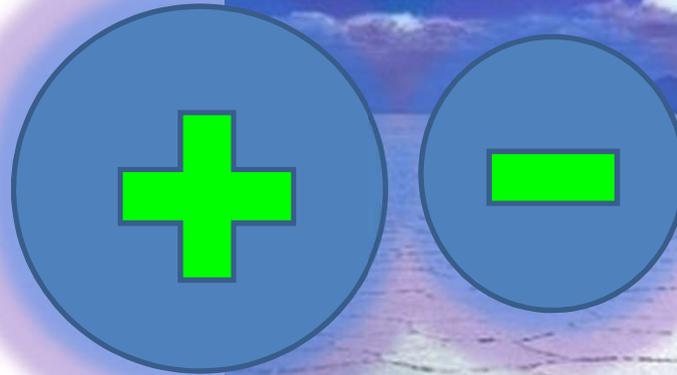
Aquatic Toxicology (2010),4, 290-297

Environmental fate and toxicity of ionic liquids: a review.

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

Líquidos iônicos

SAIS



***Limite é a nossa
criatividade!***

Átomos moléculas e o mol

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

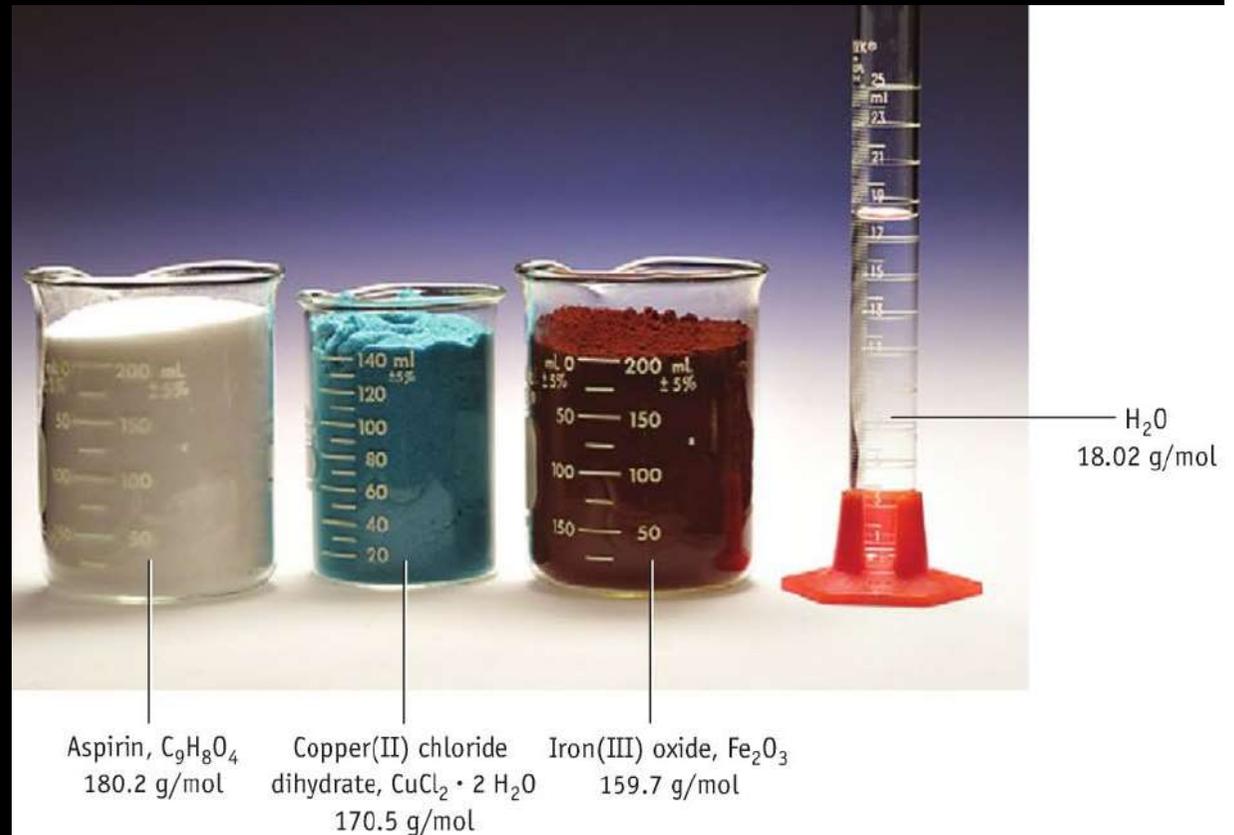
Um mol contém sempre o mesmo número de partículas não importa qual a substância

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



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 Avogrado

1776-1856

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

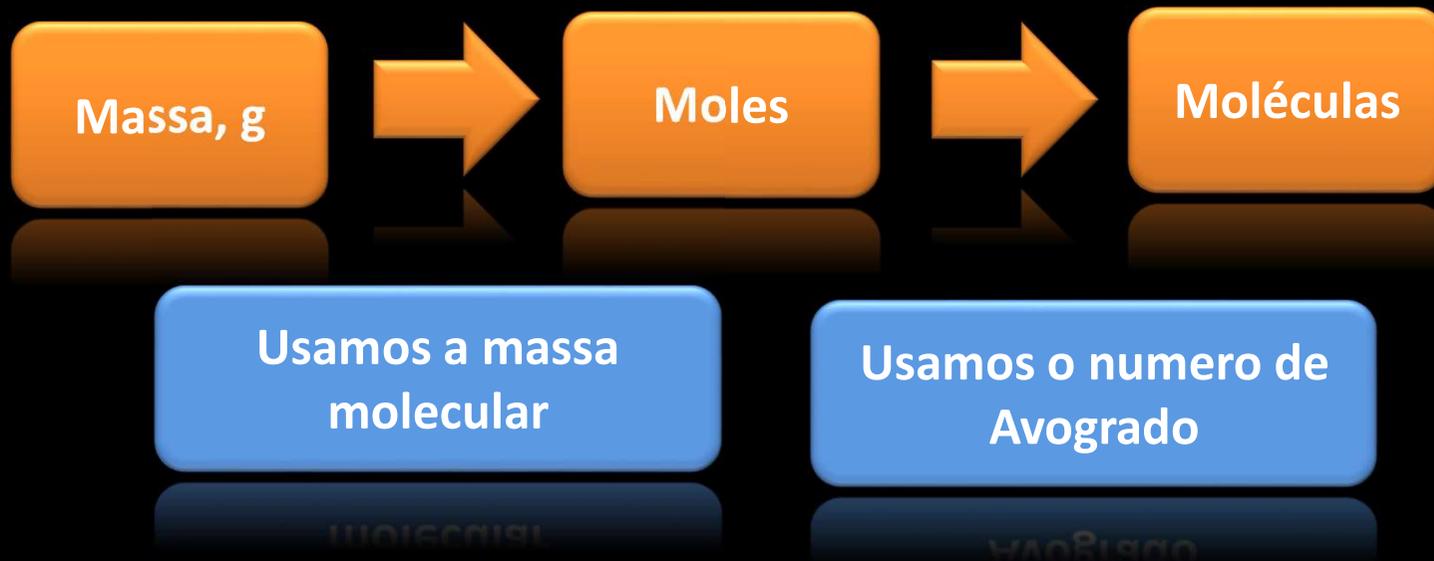
Constante dos gases perfeitos

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

Constante de Faraday

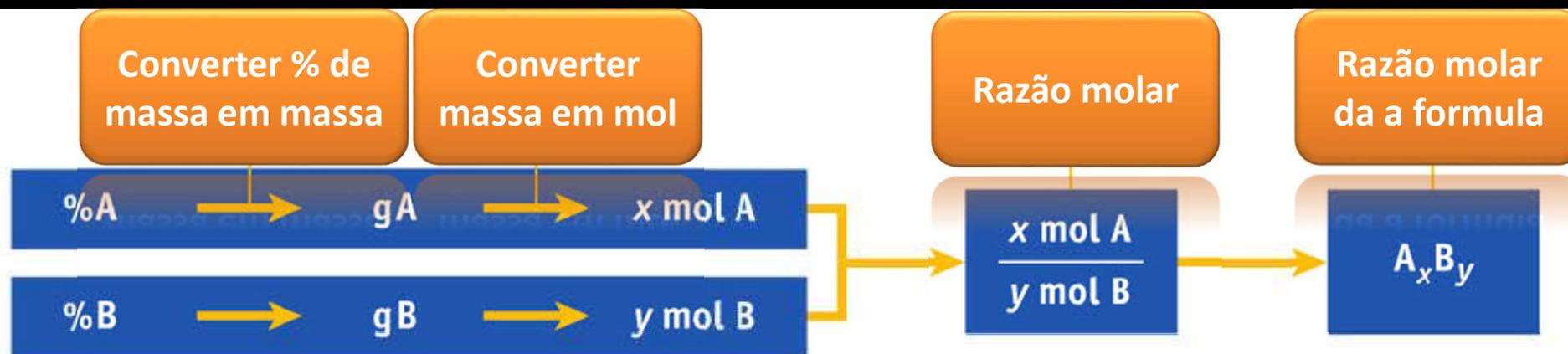
$$F = e N_A = 96485,33289 \text{ Cmol}^{-1}$$

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?



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 32.064	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 72.63	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.94
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 95.94	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 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]	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 [271]	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 138.906	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]	102 No Nobelium 259.101	103 Lr Lawrencium [260]

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

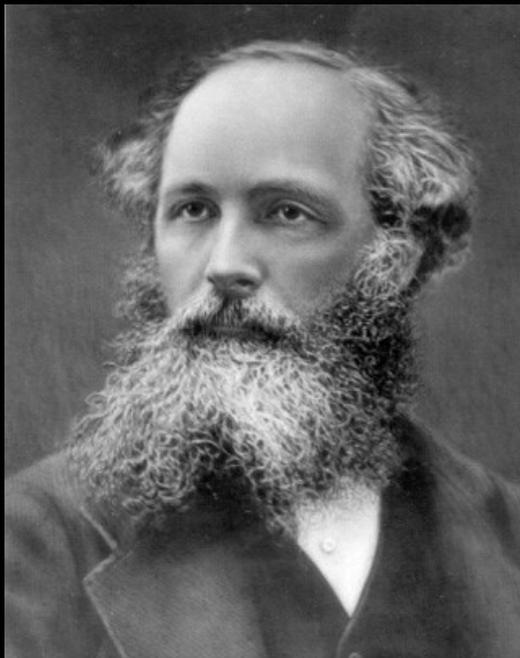
Aula 2

Radiação electromagnética

LUZ

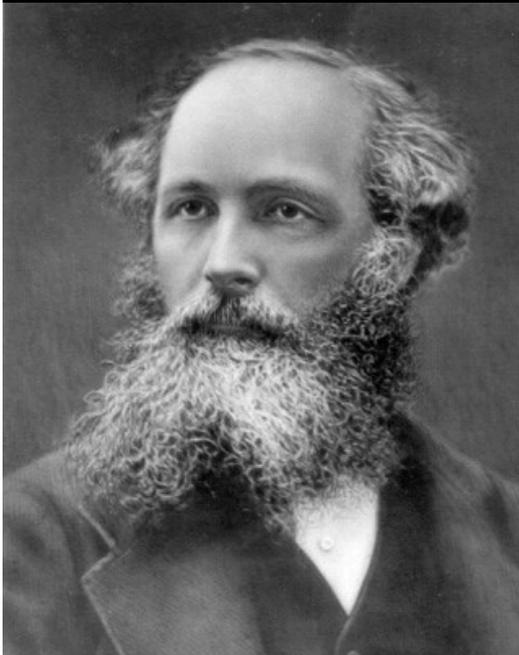
Em 1864 James Clerk Maxwell desenvolveu uma teoria matemática para descrever a luz e a outras formas de radiação - oscilação ou tipo de onda, campo eléctrico e magnético.

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

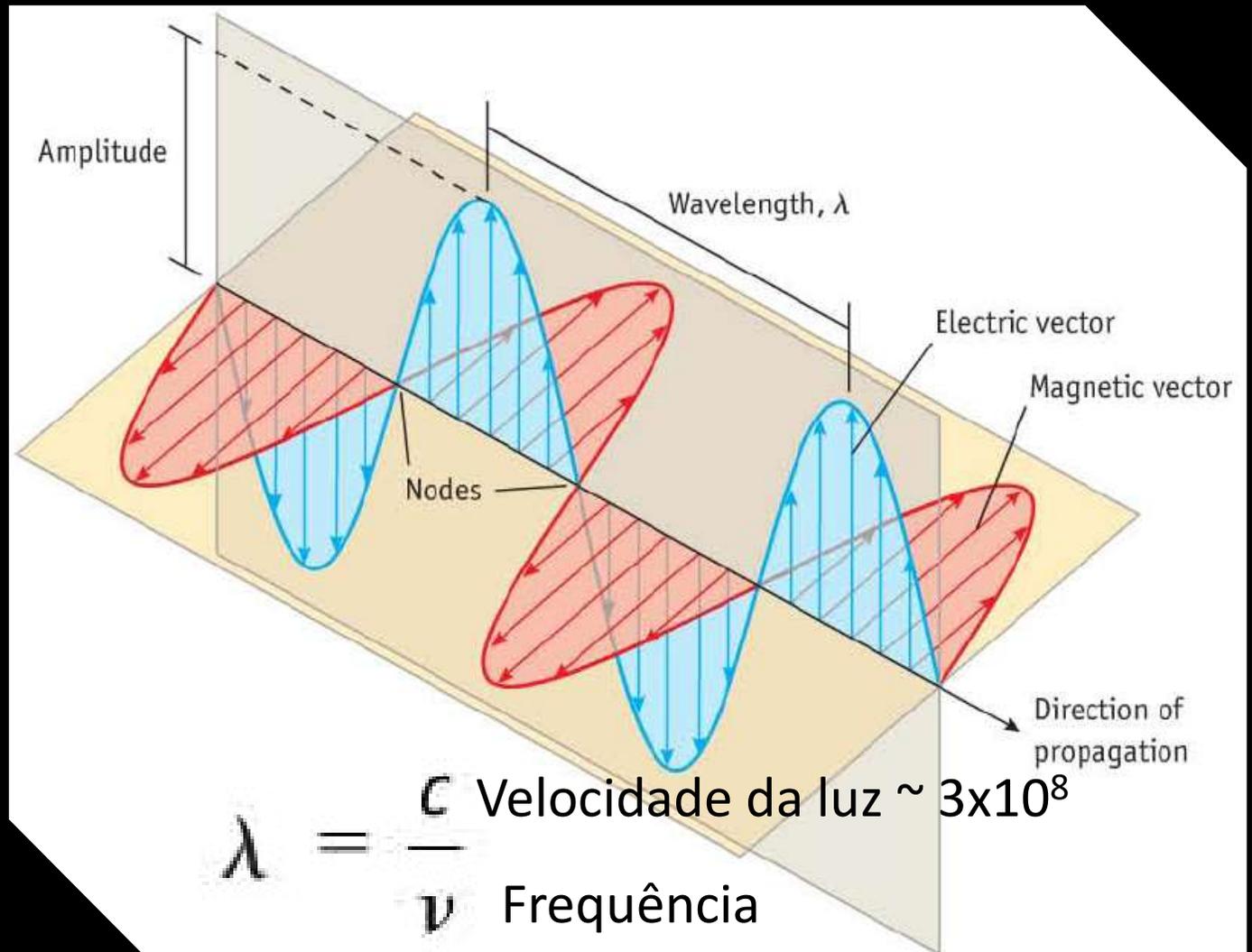


James Clerk Maxwell
1831-1879





James Clerk Maxwell
1831-1879



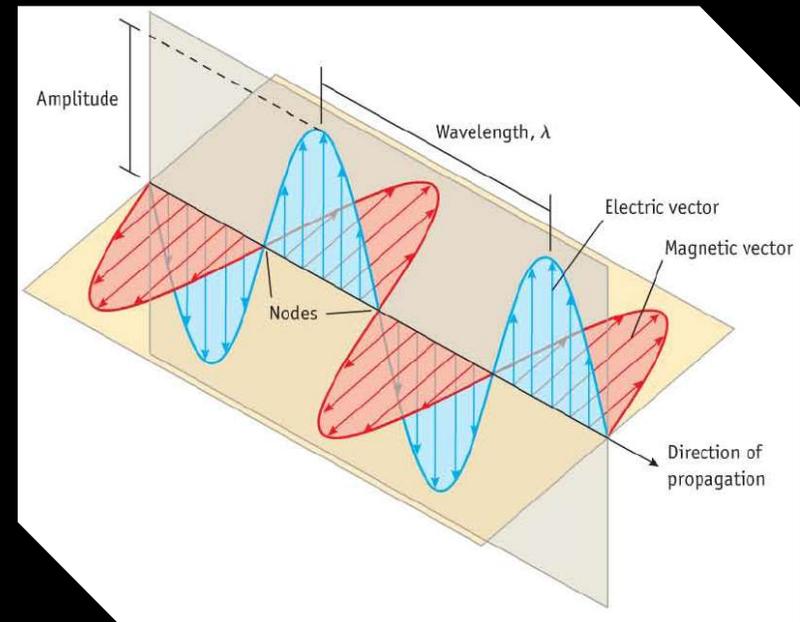


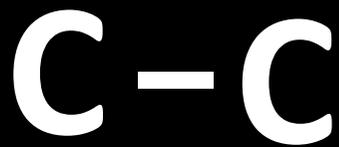
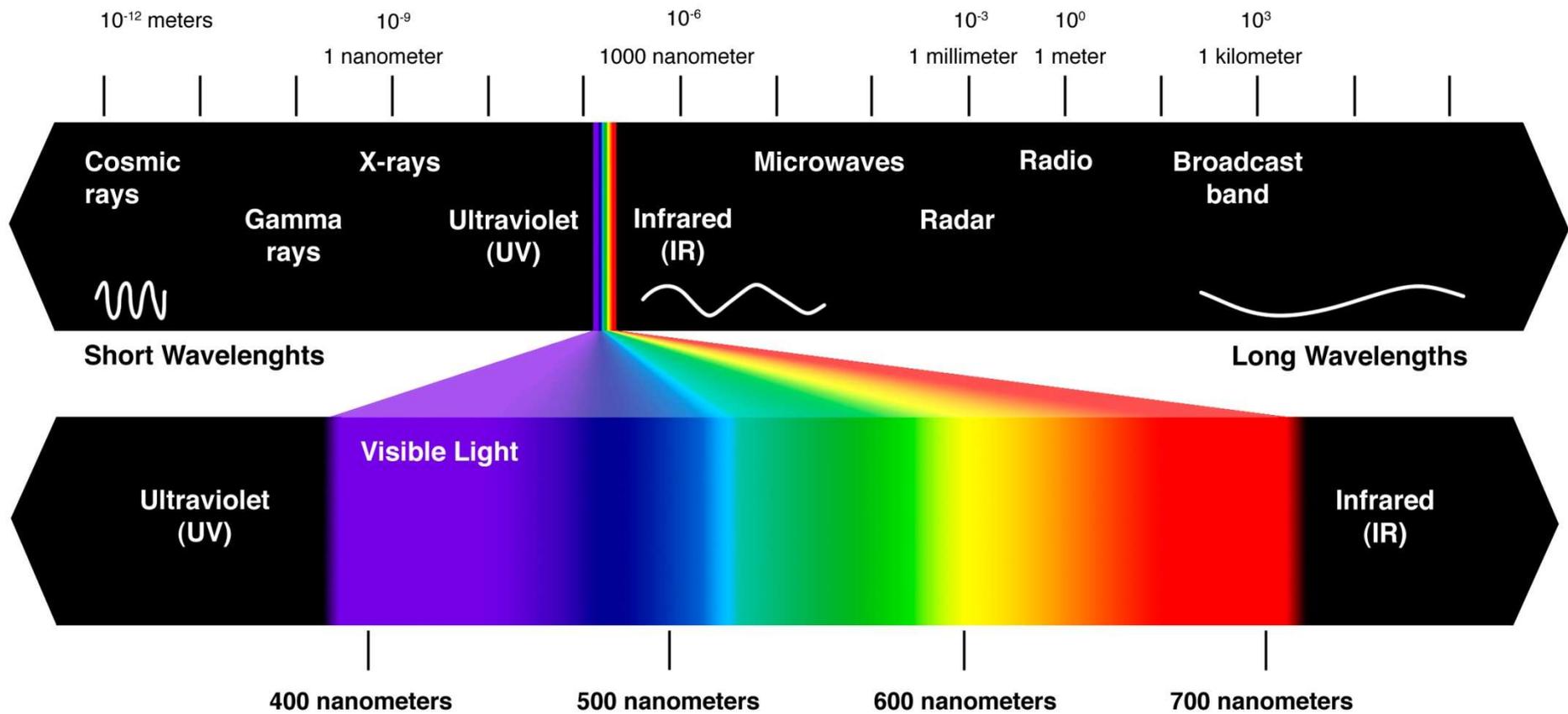
Radiação electromagnética

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

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

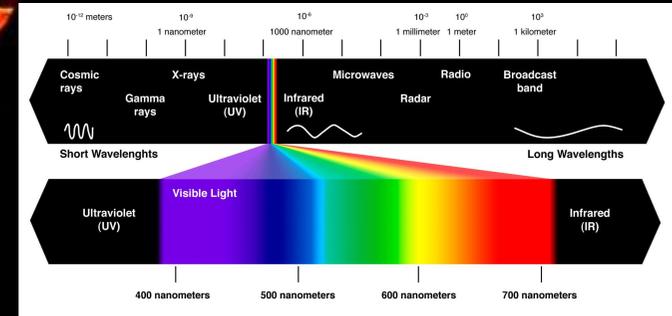
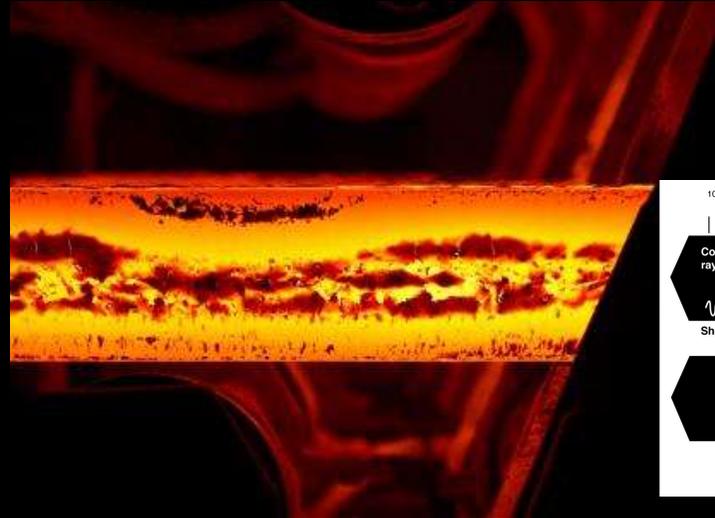
Luz visível não permite ter resolução a este nível

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

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

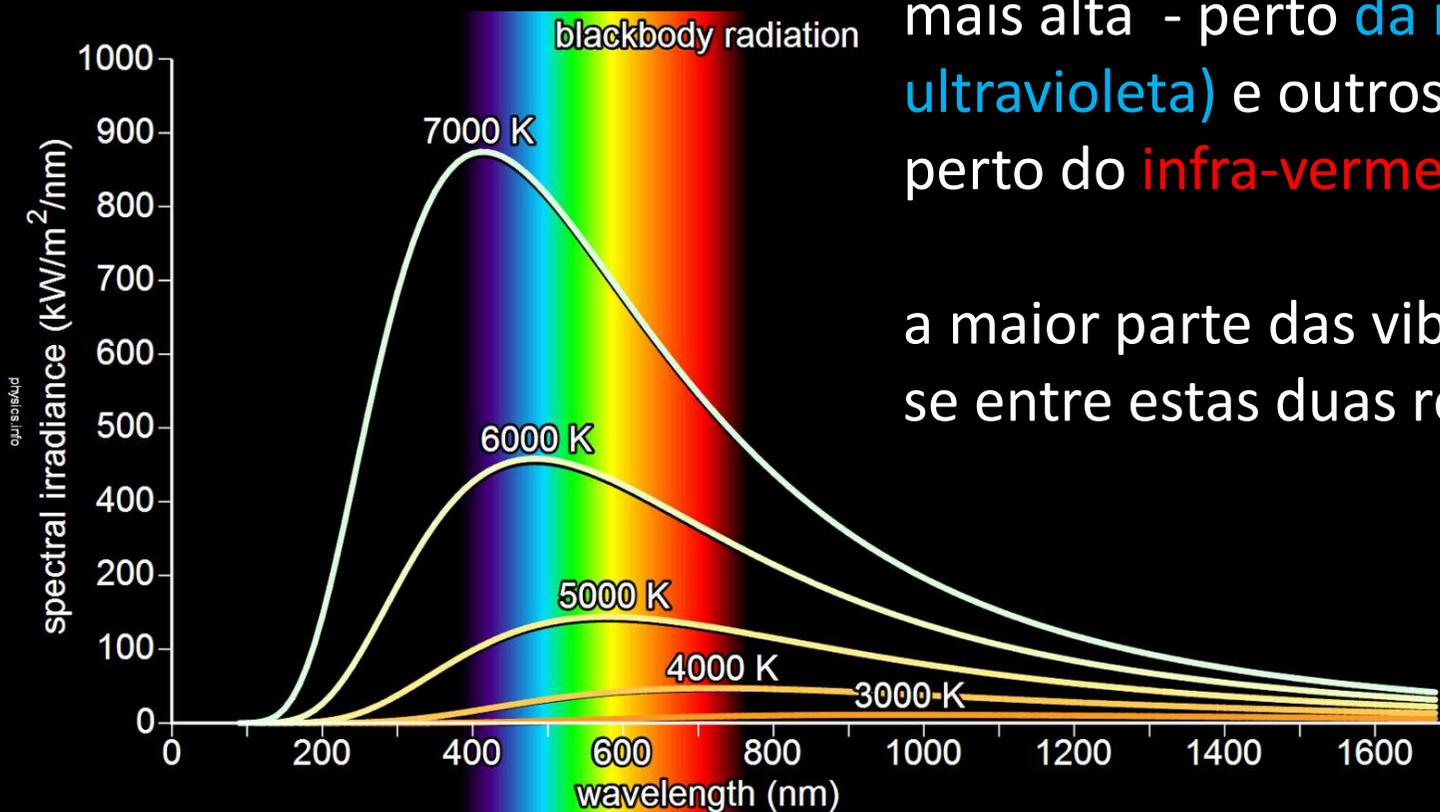
Planck quantizou as energias - apenas são determinadas energias são permitidas - Mecânica quântica

Equação de Planck

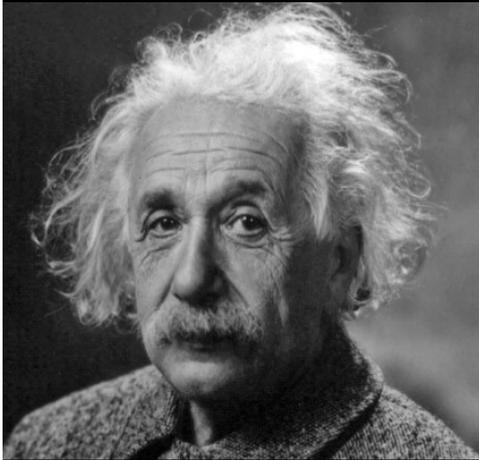
$E = nh\nu$; $h=6,6260693 \times 10^{-34}$ J.s – constante de Planck
apenas são determinadas energias são permitidas

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

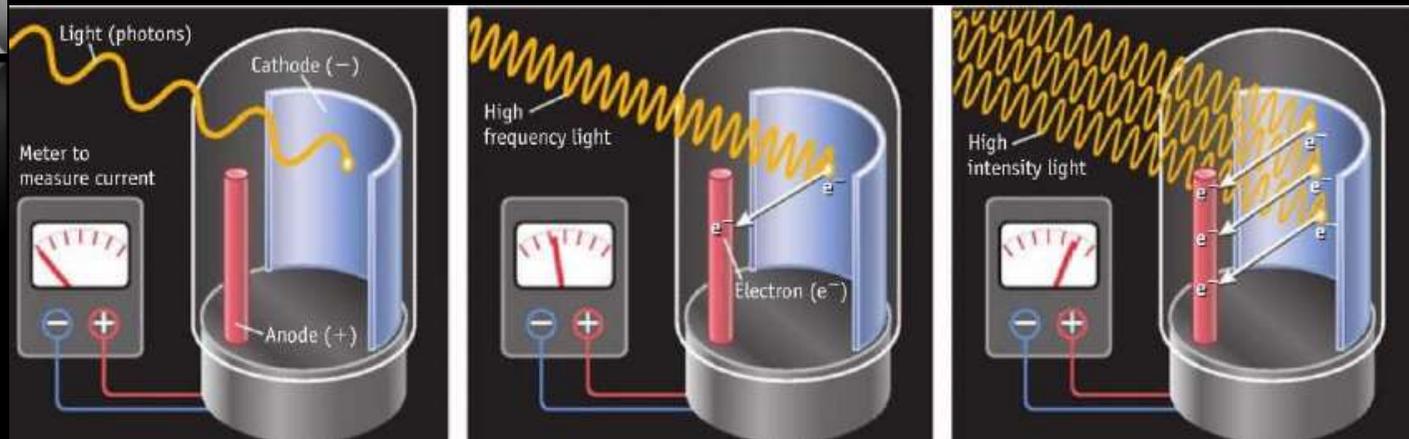


Albert Einstein
1879-1955

"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**

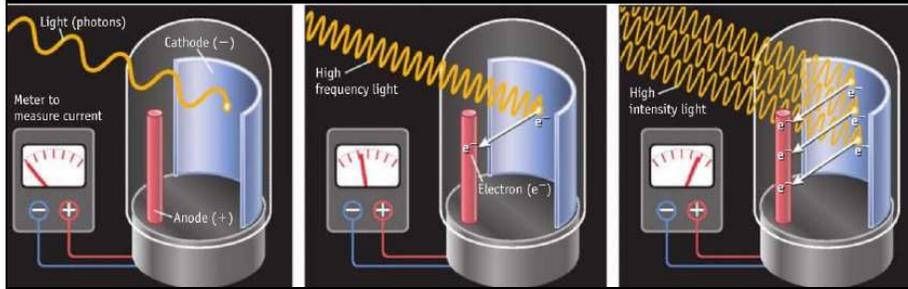
Efeito é uma observação de que muitos metais emitem electrons quando a luz incide sobre eles



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

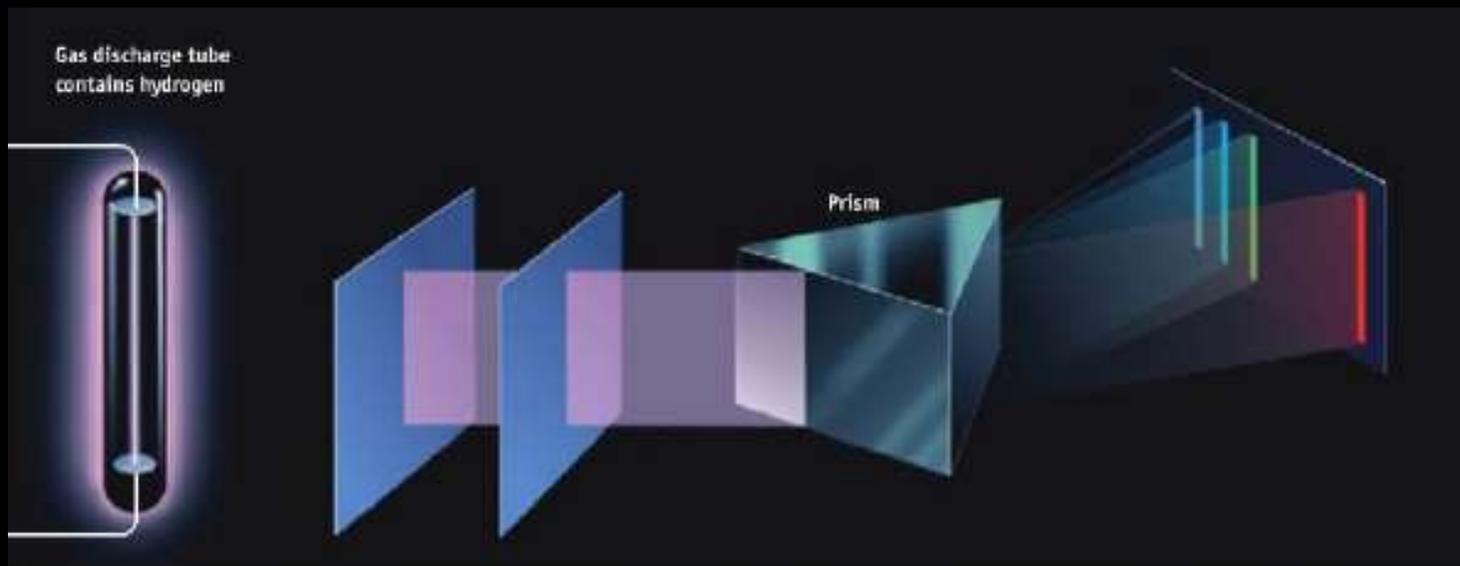


Niels Bohr
1885-1962



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

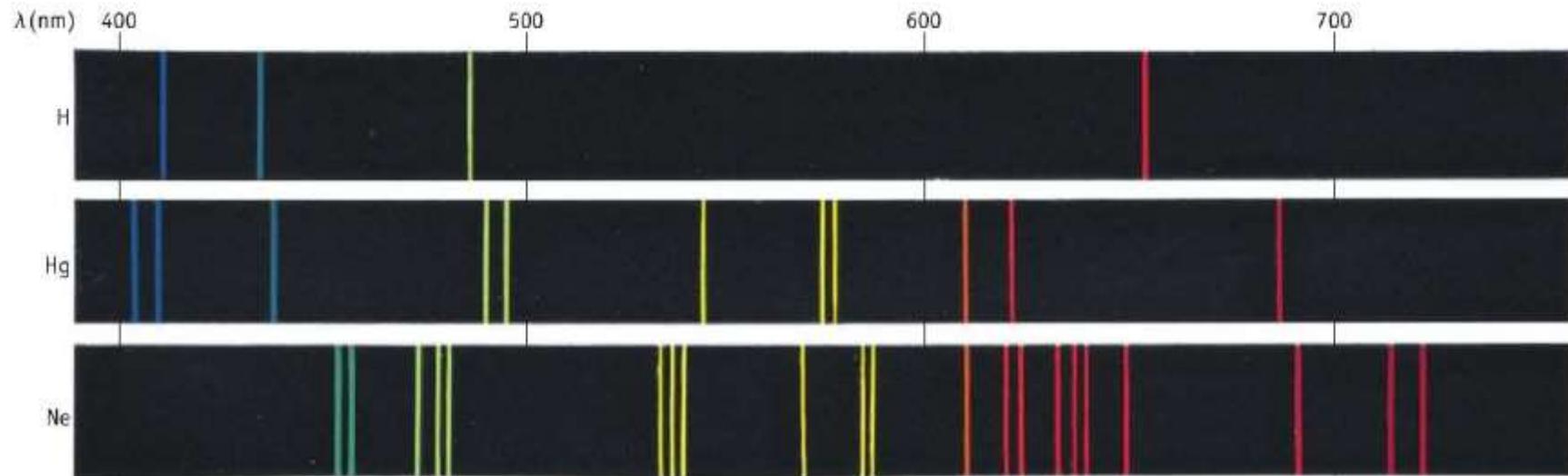


FIGURE 6.7 Line emission spectra of hydrogen, mercury, and neon. Excited gaseous elements produce characteristic spectra that can be used to identify the elements as well as to determine how much of each element is present in a sample.

The word "neon" is written in a stylized, glowing font with colors transitioning from red to yellow to green to blue.

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.

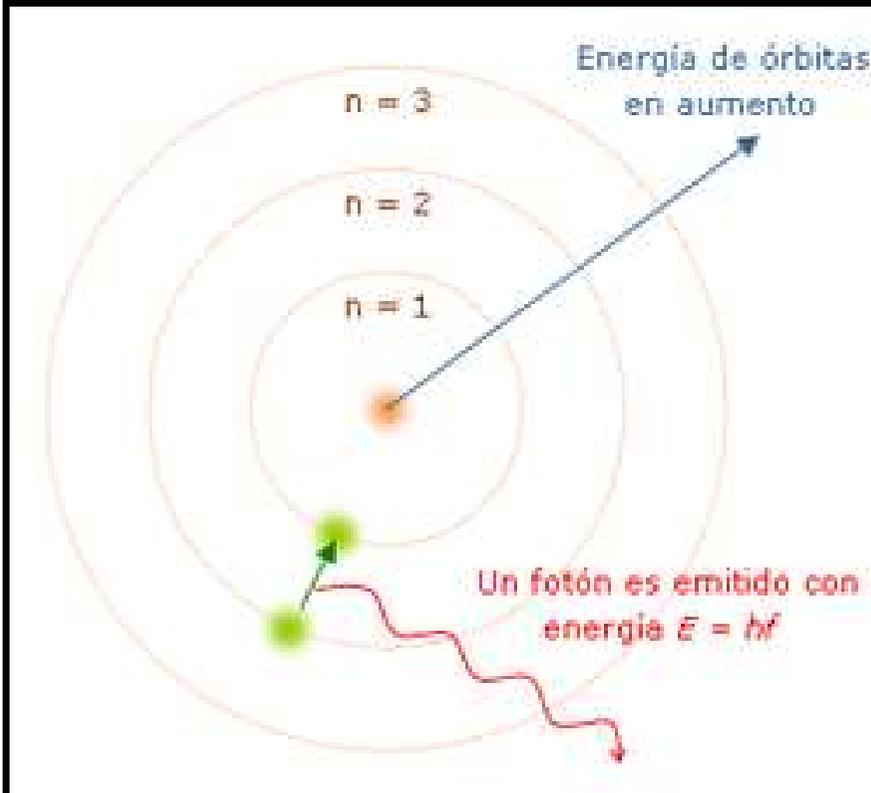
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ em que } n > 2$$

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

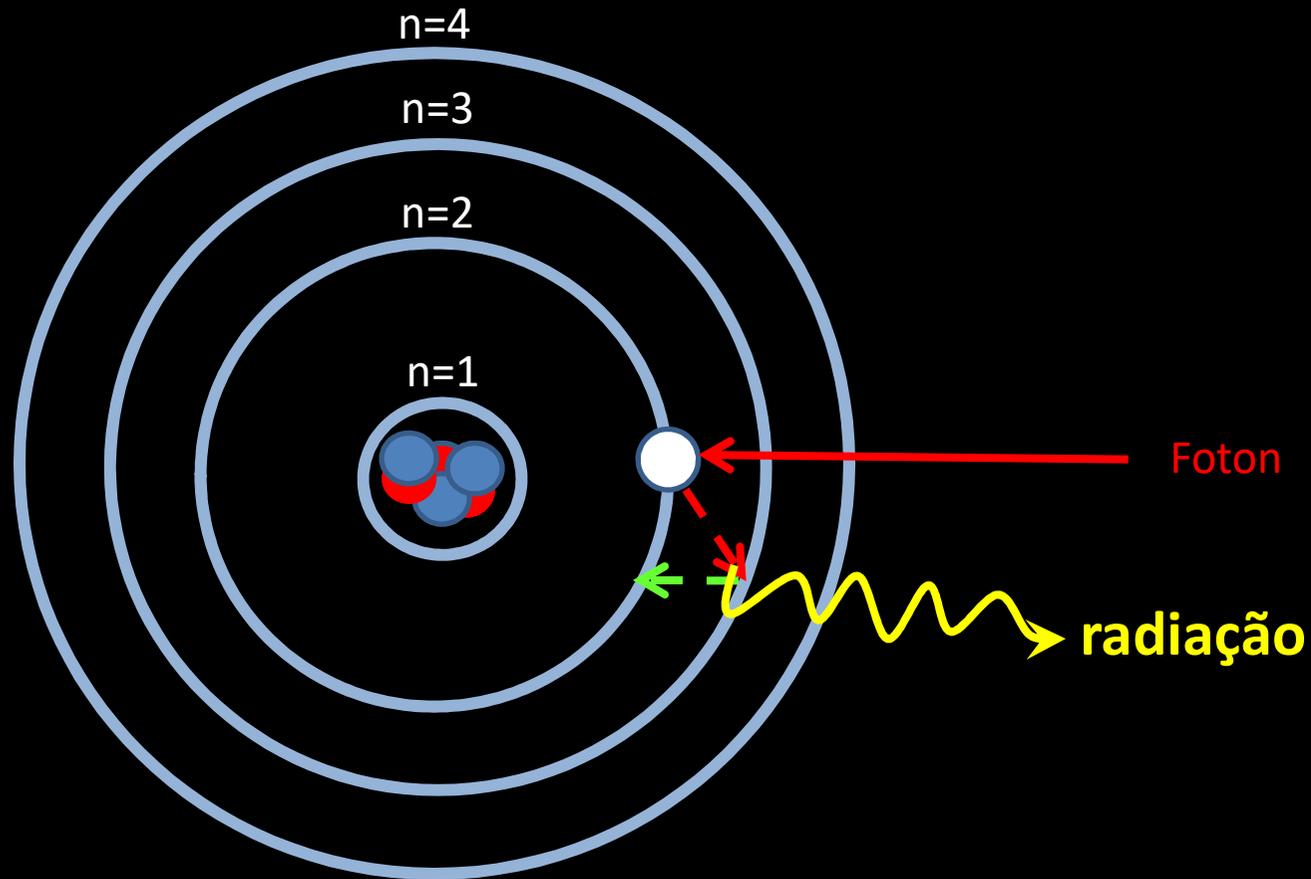
O **comprimento de onda** da radiação emitida quando um dado eletron é excitado está relacionada com o **nível energético** para onde esse eletron foi enviado.



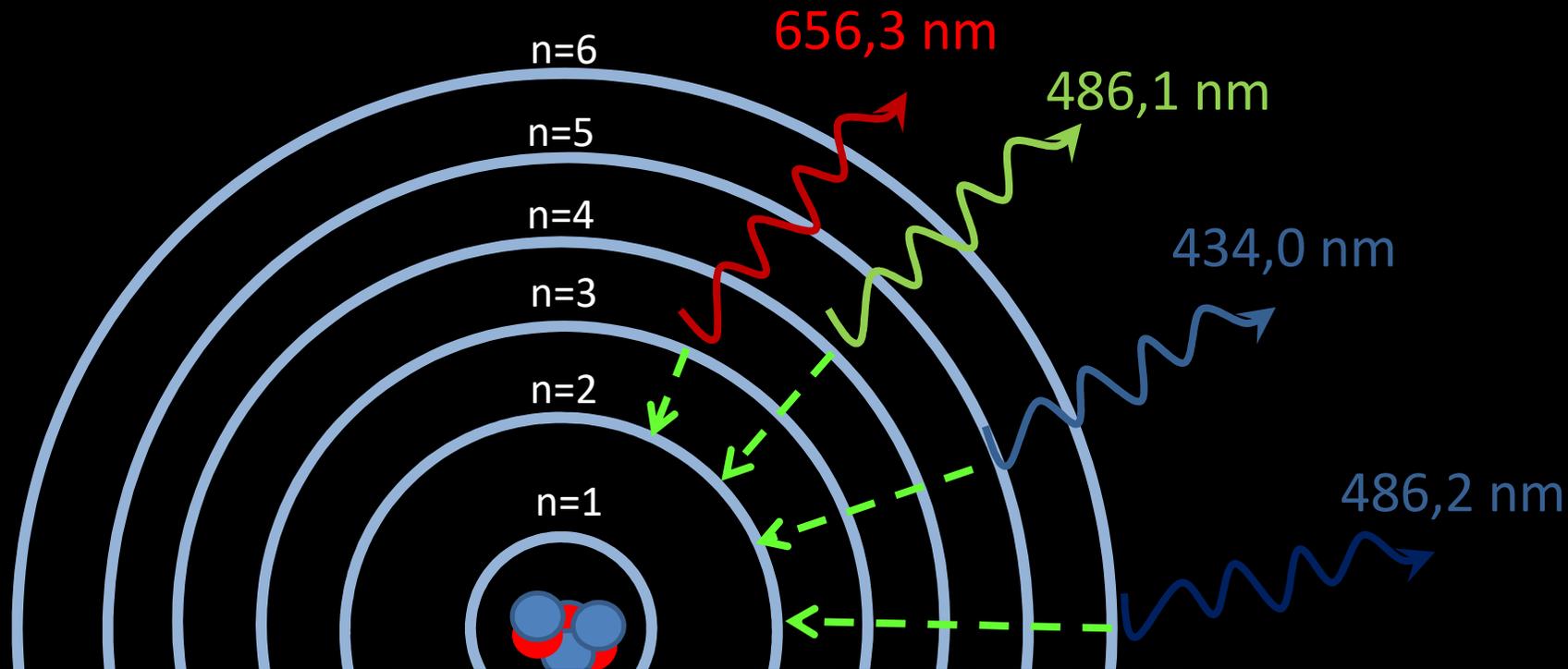
Niel Bohr que idealizou um modelo para estrutura electrónica dos átomos -

explicar o porquê de os átomos apresentarem espectros de emissão característicos

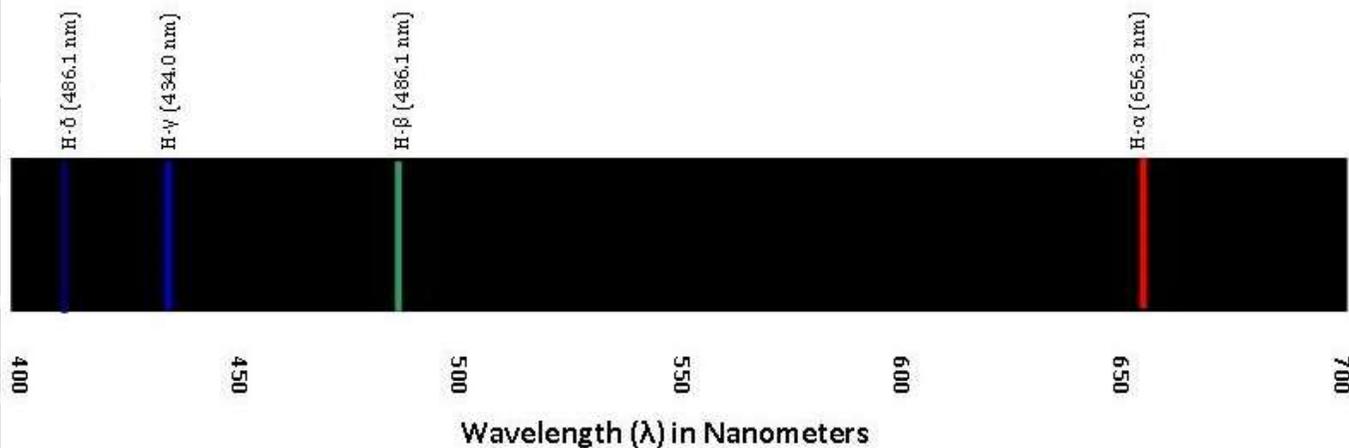
Espectros de linhas atômicas e Niels Bohr



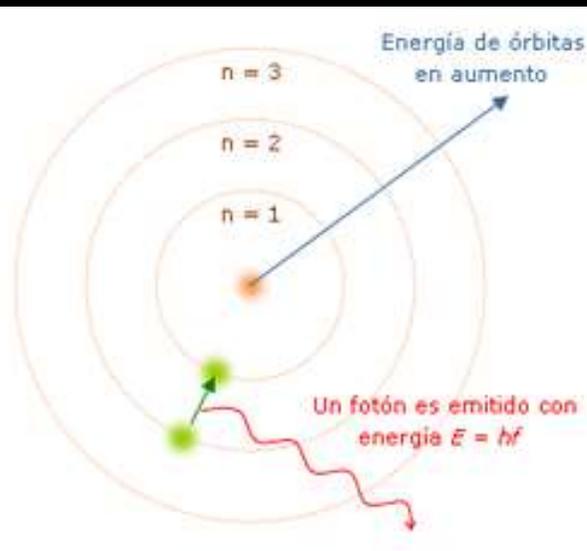
Espectros de linhas atômicas e niels bohr



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 electron está em um deste níveis o sistema está estável.

Combinação da quantização da energia com as leis da física clássica

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

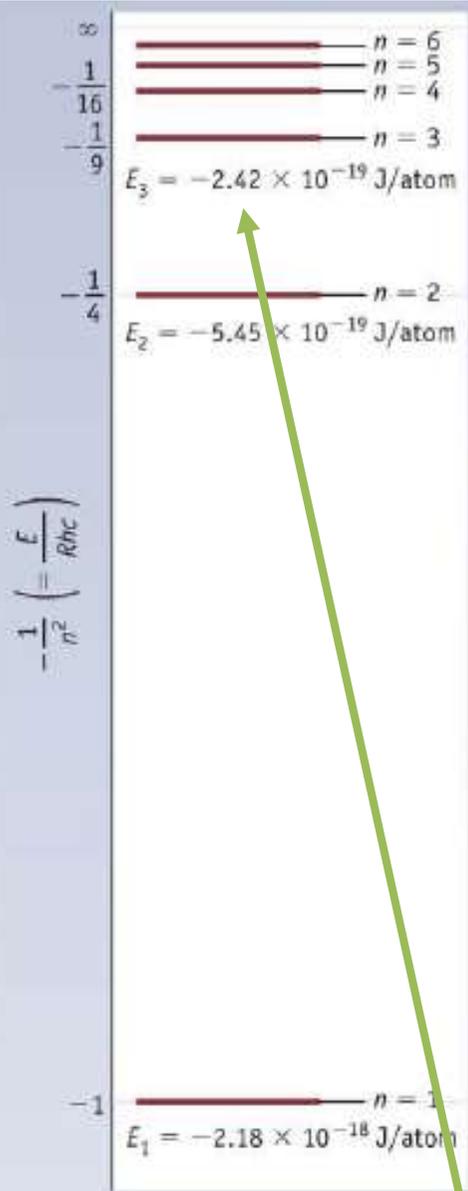
Onde E_n é a energia total do electron no enésimo nível

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

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

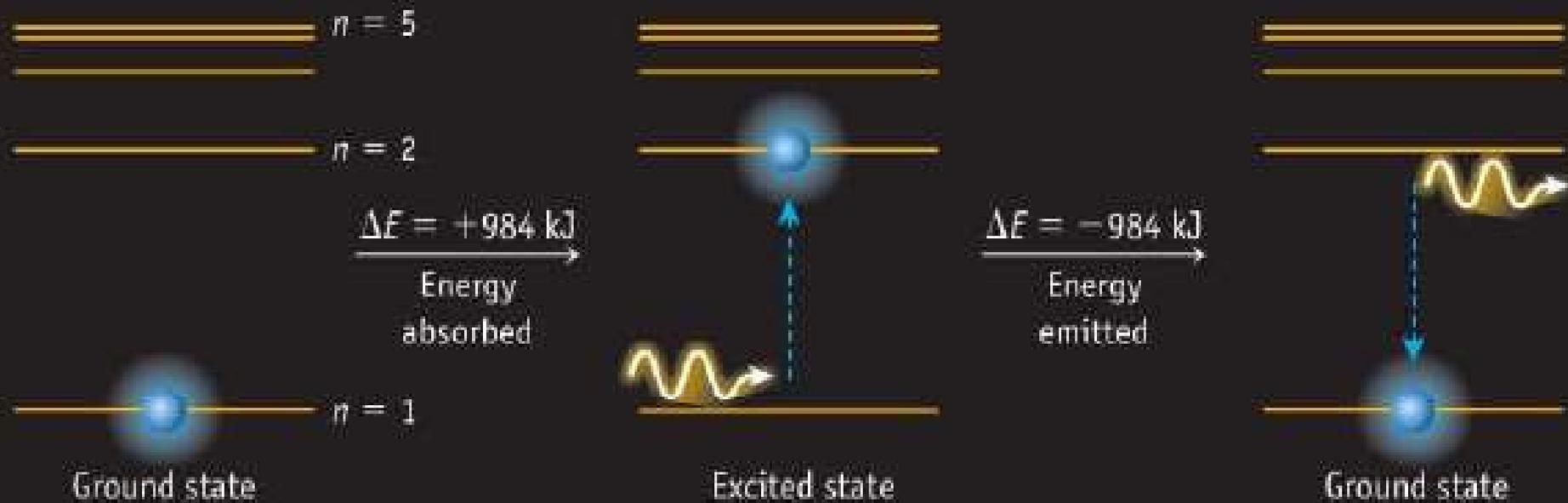
c é a velocidade da Luz - $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

n é o número quântico principal



• Estado Fundamental

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



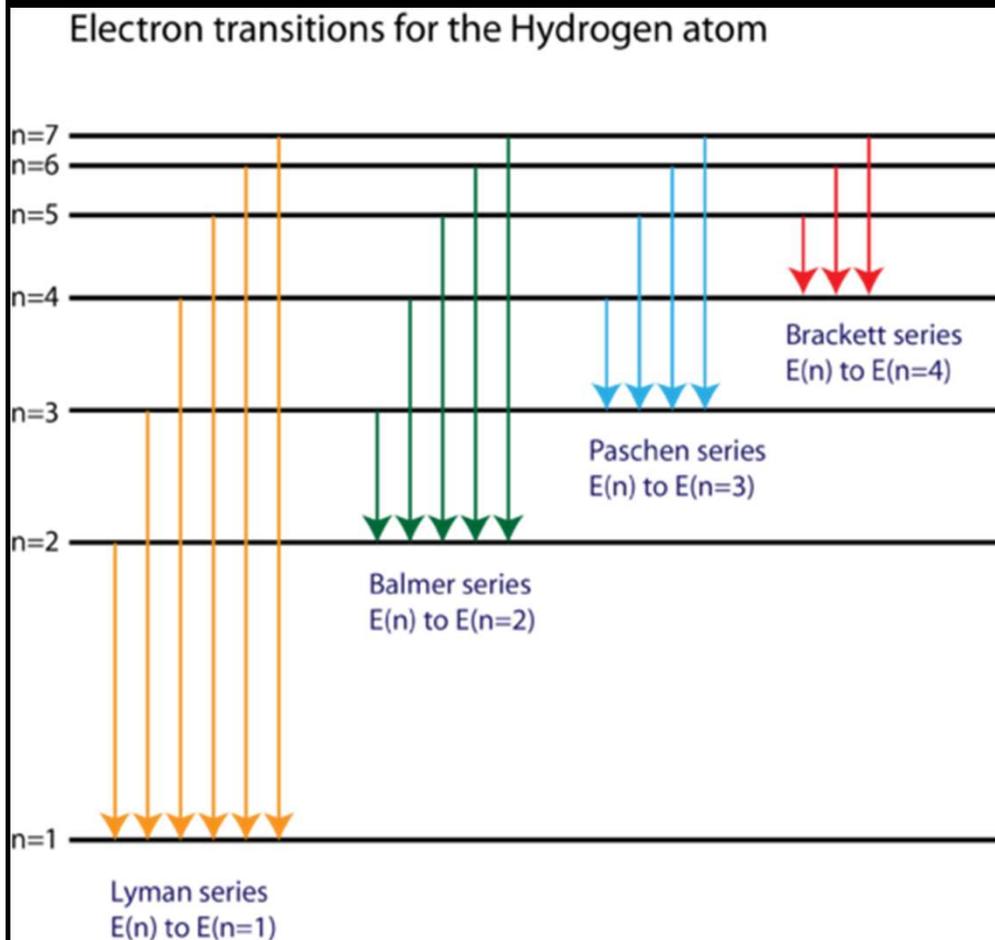
RESUMO

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

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

Teoria de Bohr e os espectros dos átomos excitados

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



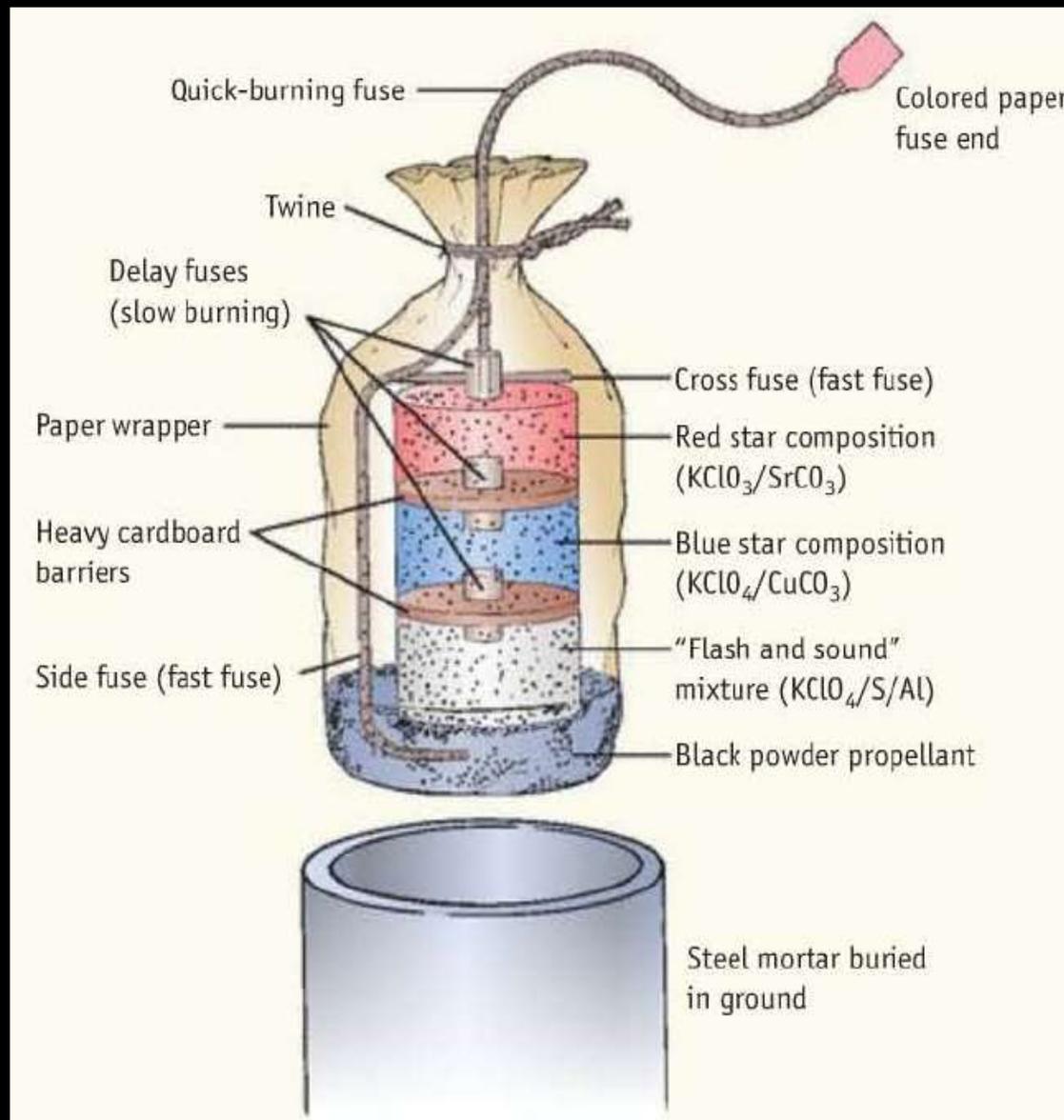
Emissão Atômica



NaCl

SrCl₂

H₃BO₃



Dualidade partícula-onda

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

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

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

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

“onda de matéria”

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



Louis Victor de Broglie
1892-1987



Clinton Joseph Davisson
1881 -1958
Lester Germer
1896 -1971

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

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

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

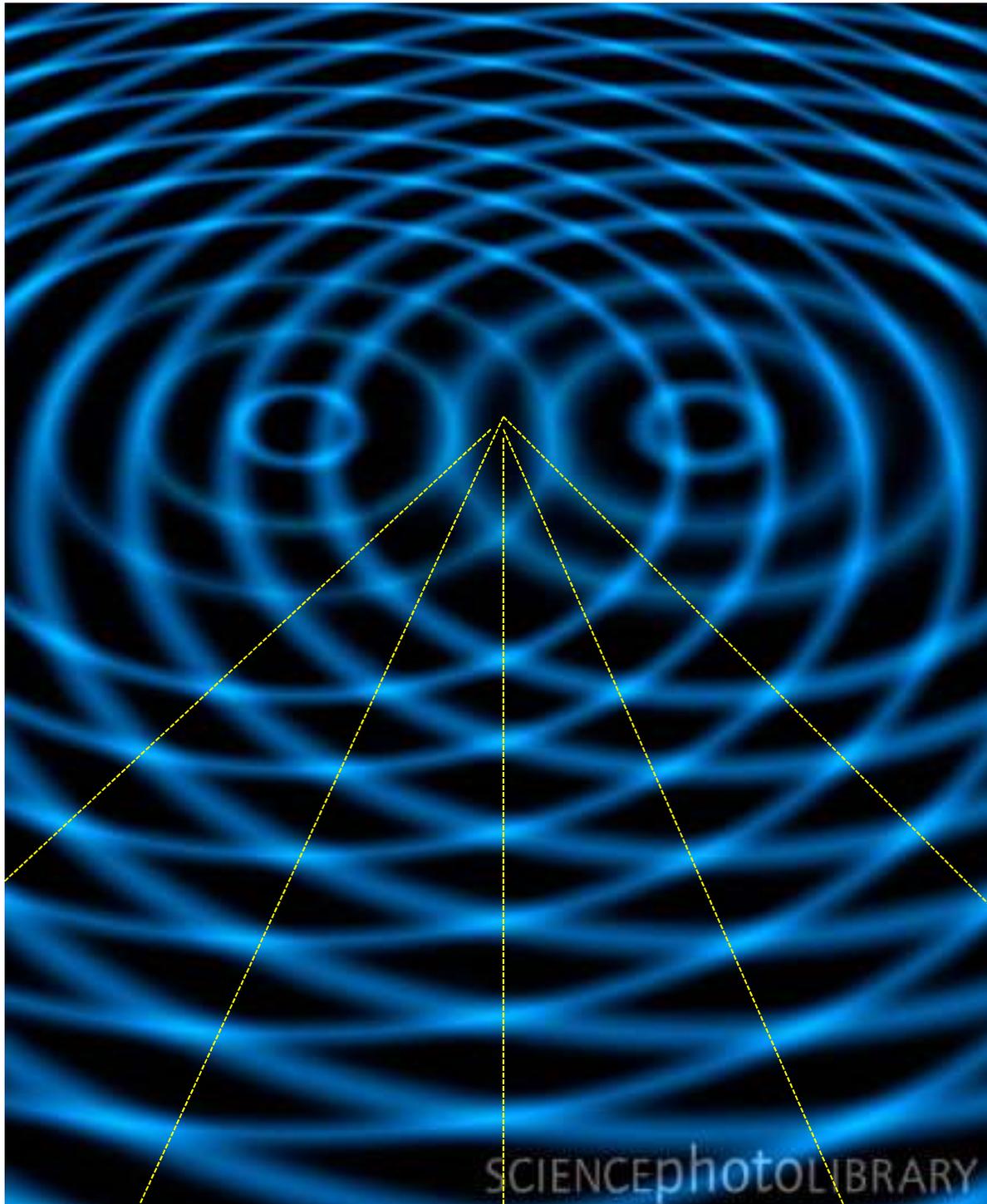
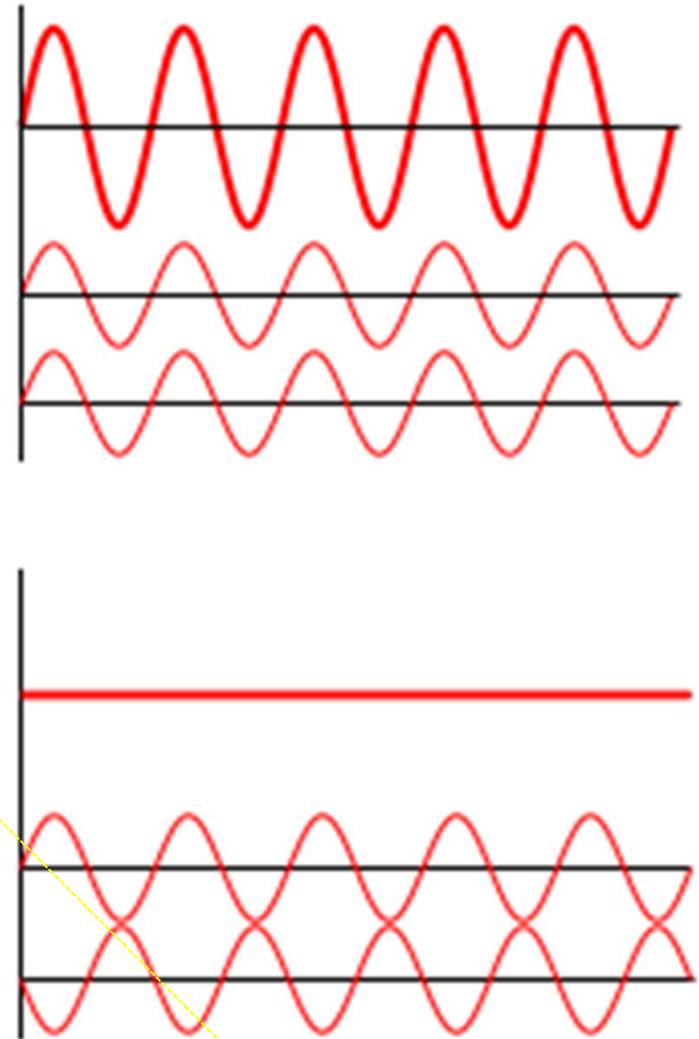
Tal como a radiação eletromagnética, a matéria apresenta igualmente uma dualidade onda-partícula.

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

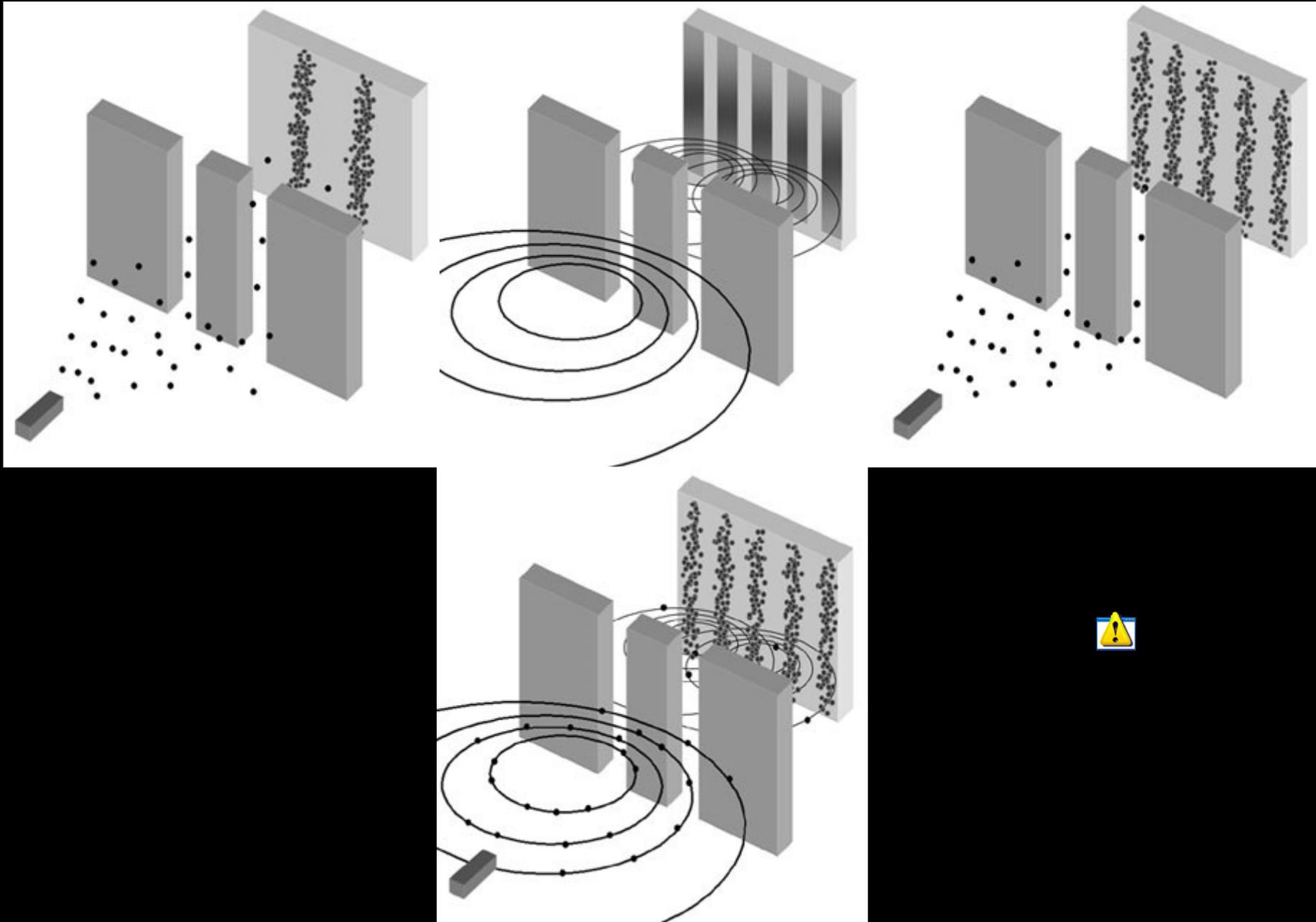
Difração
as ondas cooperar entre si.



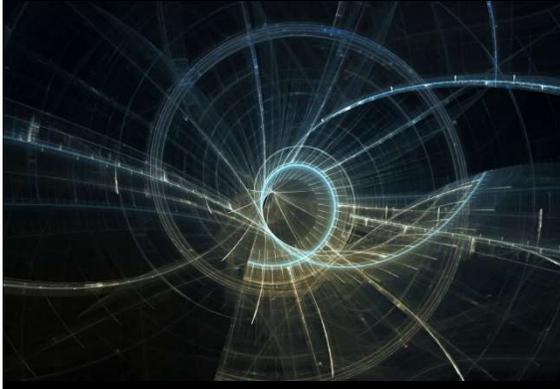
Interferência



As comprovações experimentais de Broglie



Mecânica quântica

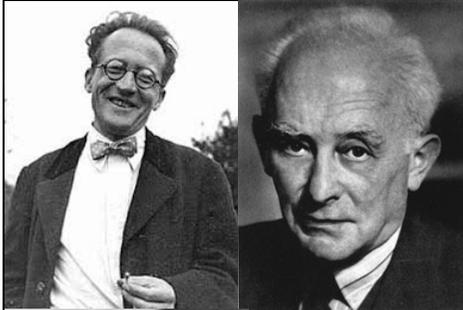


Como a dualidade partícula onda afeta o nosso modelo de arranjo dos elétrons nos átomos ?

Erwin Schrodinger (1887-1961)

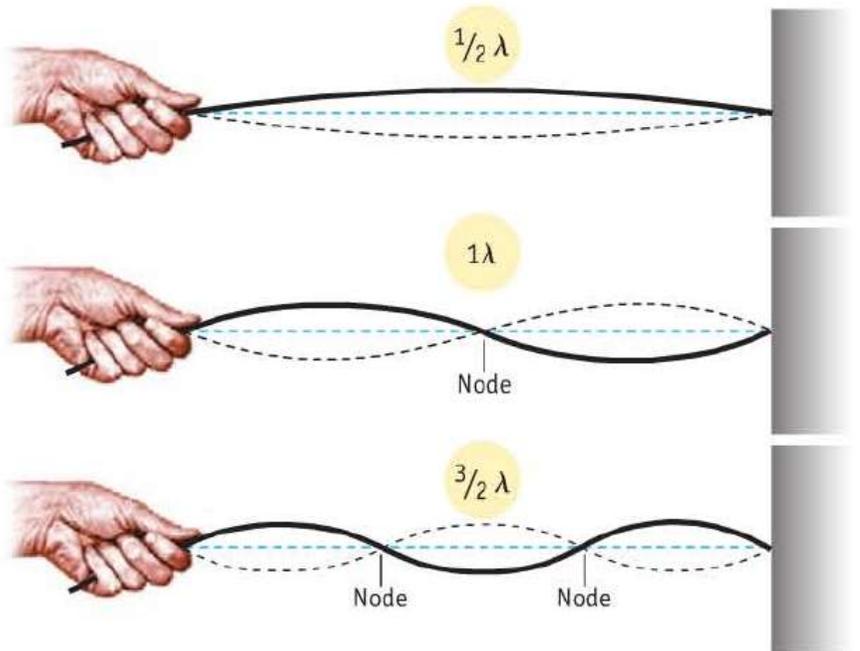
Max Born (1882-1970)

Werner Heisenberg (1901-1976)



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

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

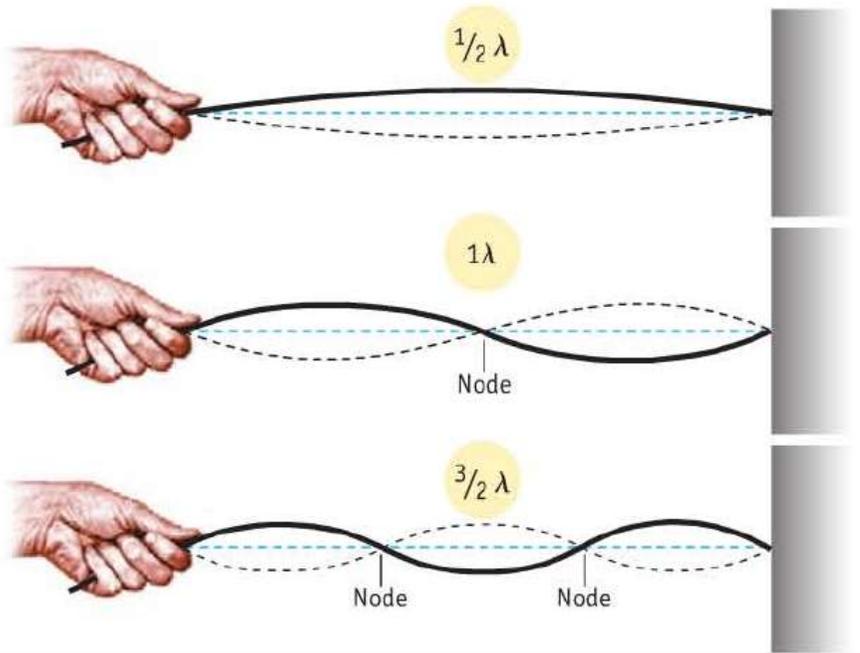


Corda estacionaria – onde apenas algumas vibrações são permitidas para essas ondas estacionarias. - **vibrações são quantizadas**

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

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

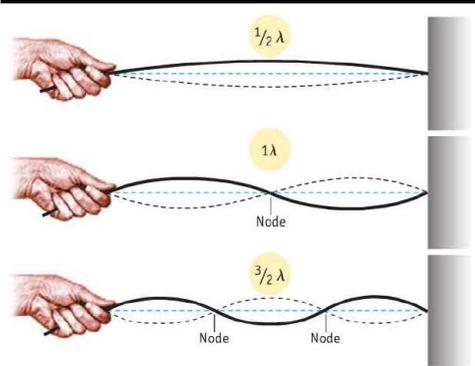
Somente **certas funções são consideráveis aceitáveis** e **cada uma esta associada a um valor de energia** - isto é, **a energia de um elétron no átomo é quantizada**



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

3 números inteiros

n, l, m_l – números quânticos.



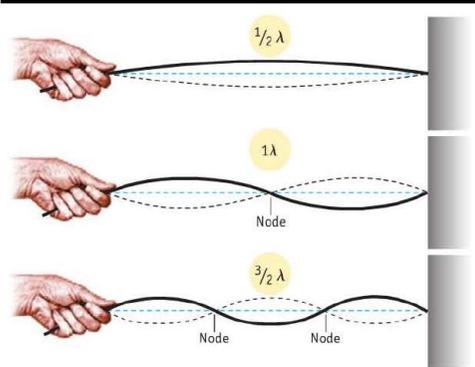
O próximo passo para entender o ponto de vista da mecânica quântica é explorar o **significado físico da onda psi (Ψ)**

Max Born

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

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

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



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

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

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

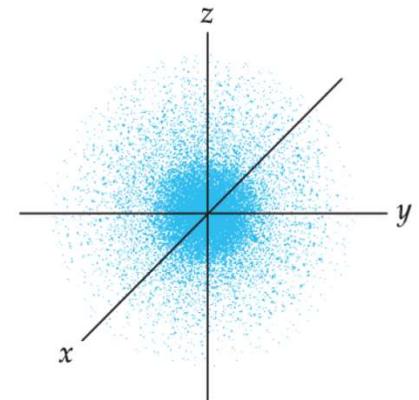
Quanto maior for Ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron

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

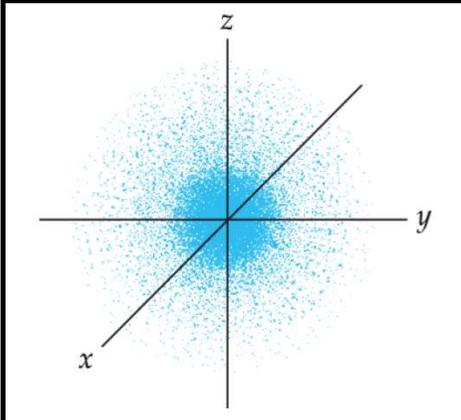
Quanto maior for ψ^2 maior será a probabilidade de encontrar o electron.

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

Princípio da incerteza de Heisenberg



Números quânticos e orbitais



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

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

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

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

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

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

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 32.064	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 72.63	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.972	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.80
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 95.94	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 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]	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 [271]	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 138.906	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]	102 No Nobelium 259.101	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

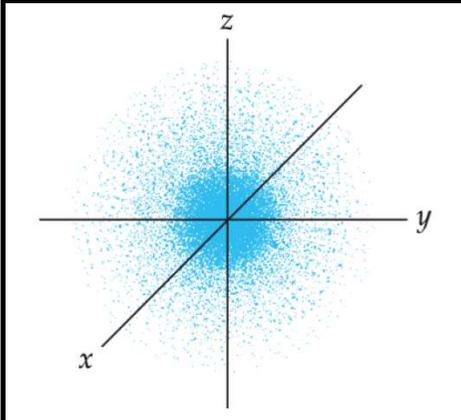
Estrutura dos átomos e tendências periódicas

Aula 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



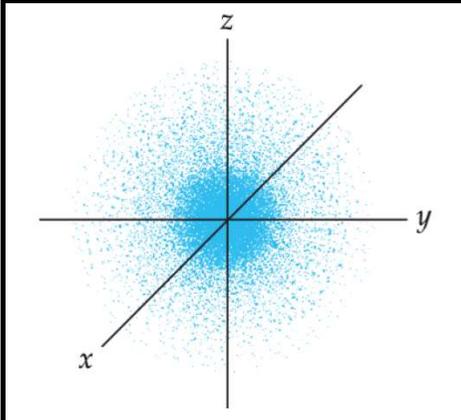
A **função de onda** para um elétron em um átomo descreve um **orbital atômico**.

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

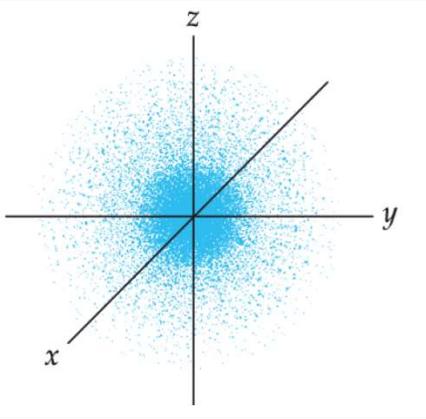


Numero quântico principal n – pode ter qualquer numero inteiro de 1 até infinito - define o tamanho do orbital.

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.**



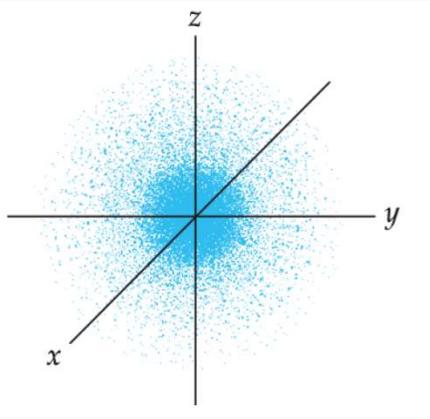
l é o número quântico de momento angular da orbital

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.

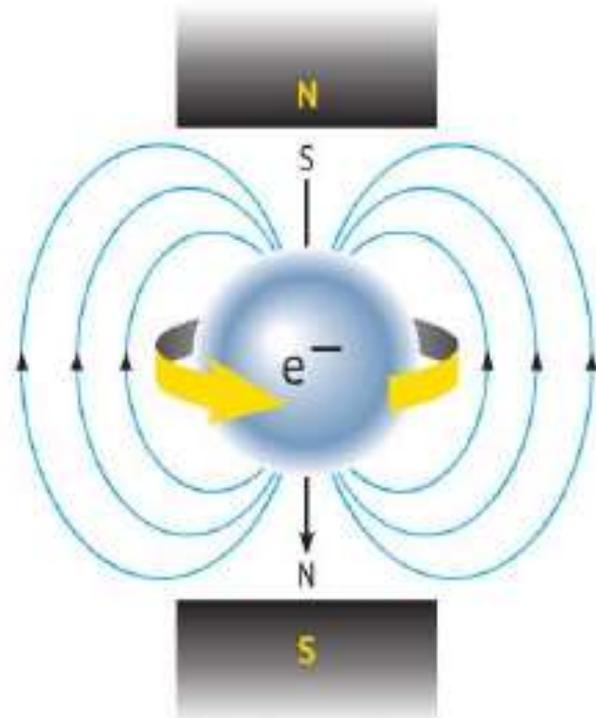
Orbitais em uma determinadas subcamada diferem na sua orientação.

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

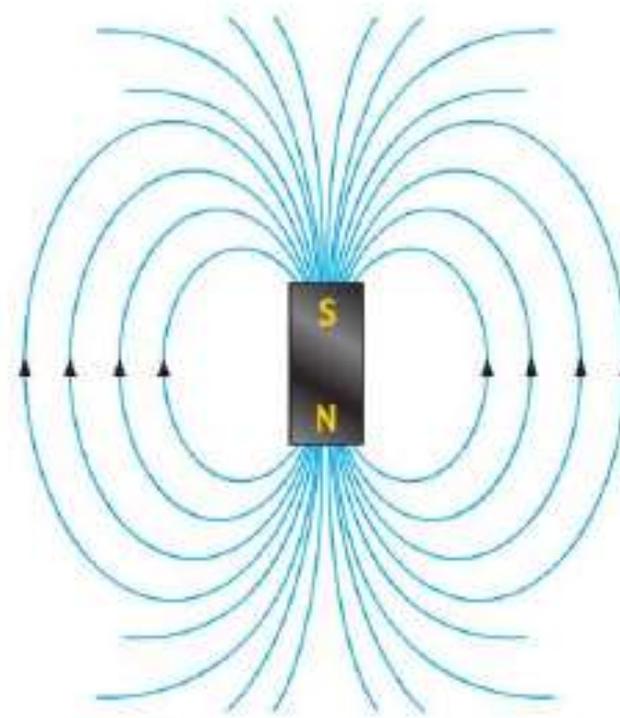
$n = 3 \rightarrow l = 2 \rightarrow m_l$ pode ter a 5 valores $-2, -1, 0, 1, 2,$

	Numero quântico
Camada	n
subcamada	l
Orbital	ml

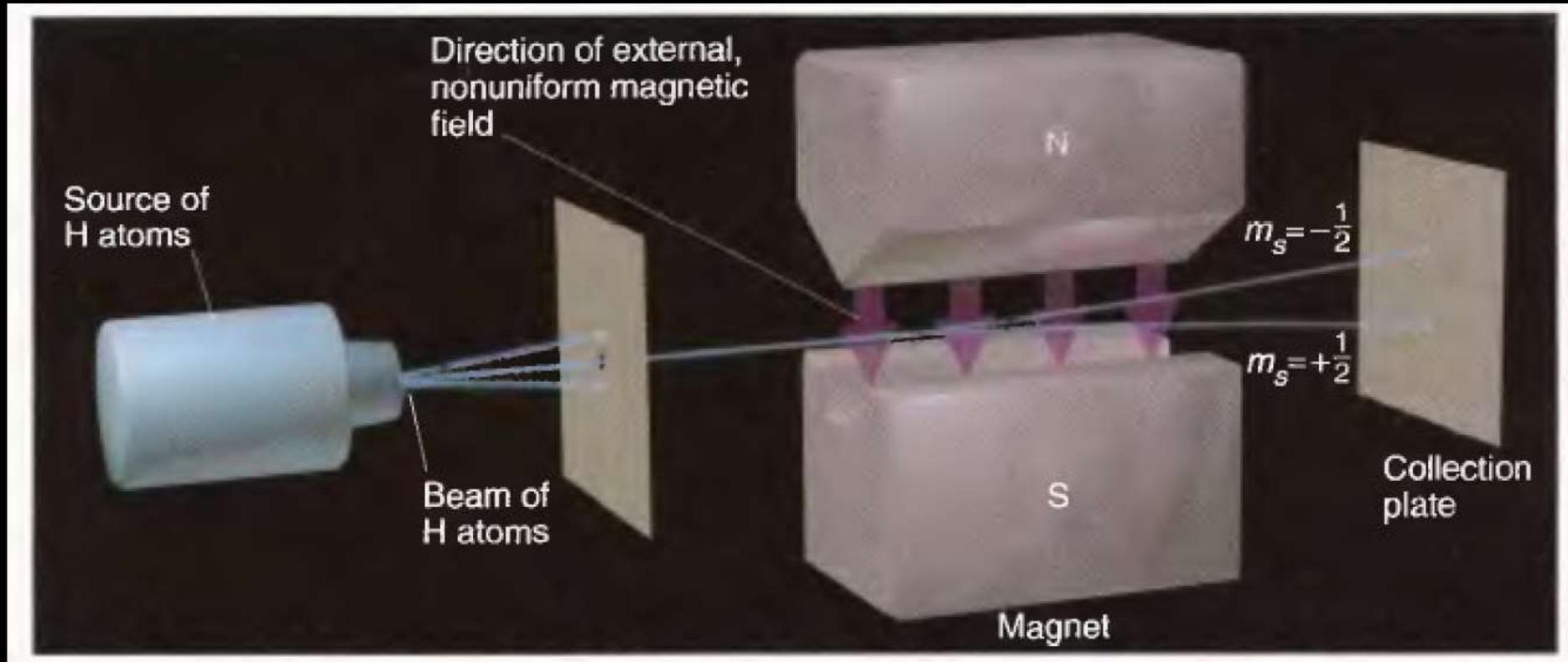
Spin – rotação do electron



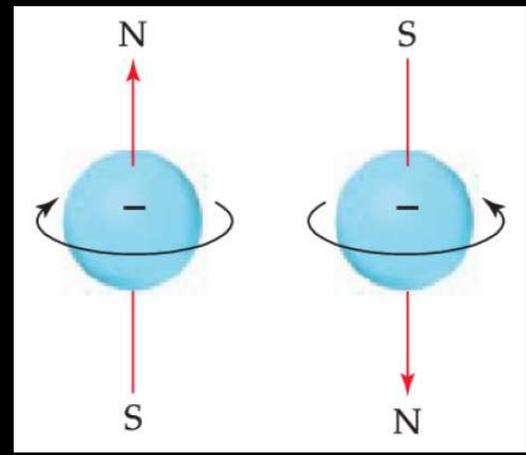
(a) Electron spin



(b) A bar magnet



$$m_s = +1/2$$



$$m_s = -1/2$$

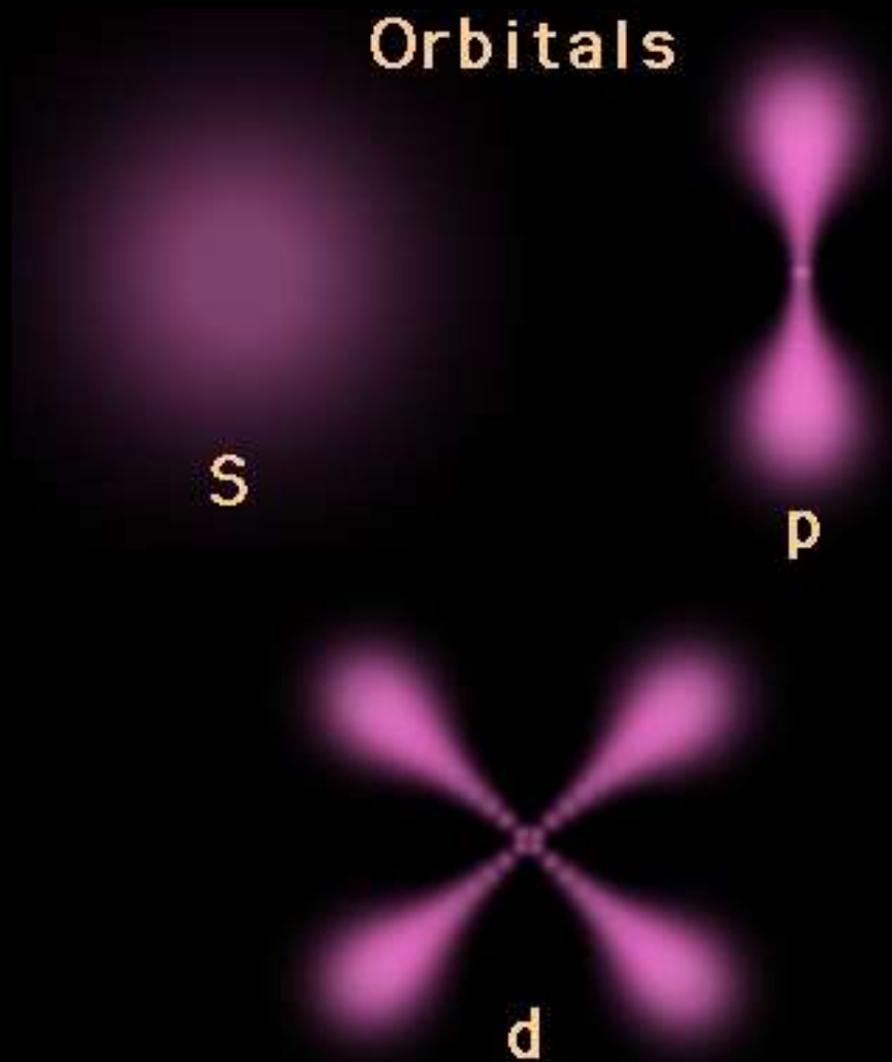
QUAL A FORMA DO ORBITAL

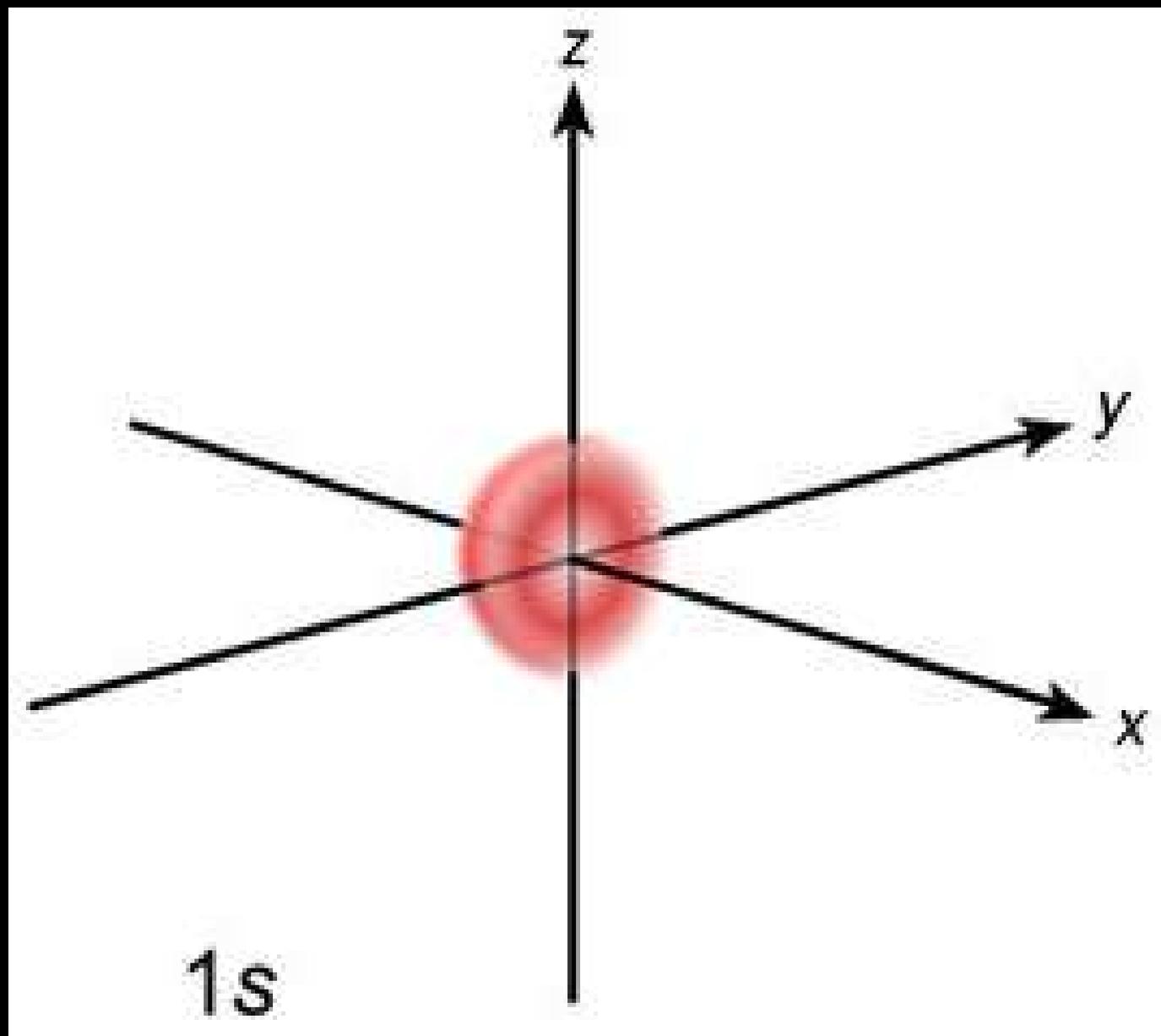
Orbitals

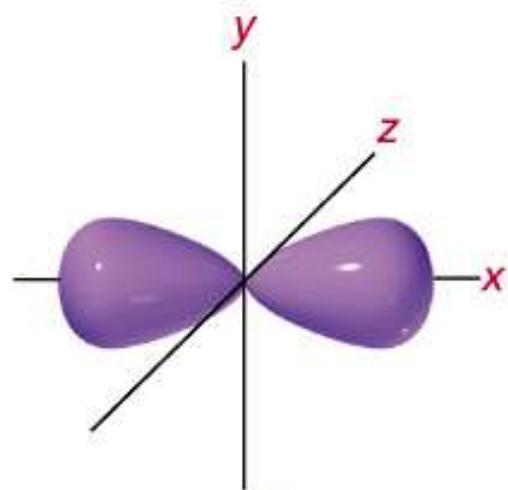
s

p

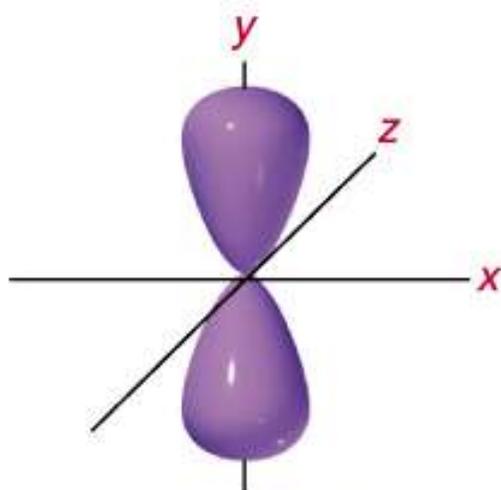
d



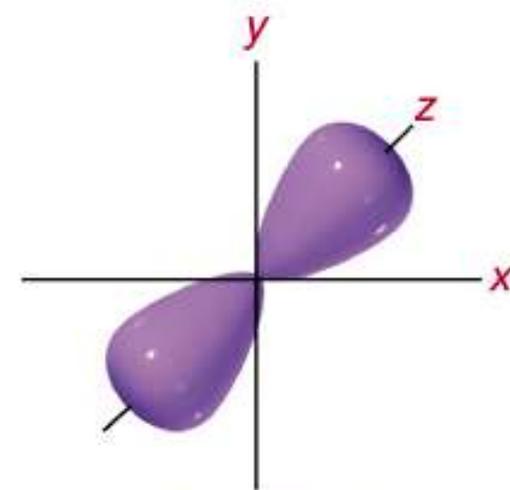




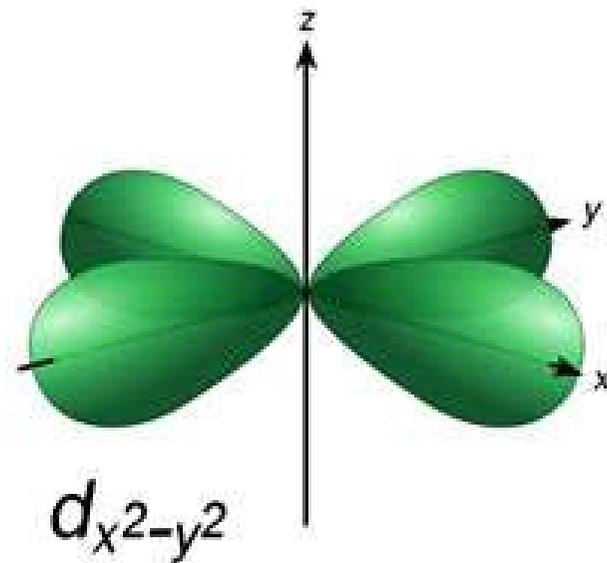
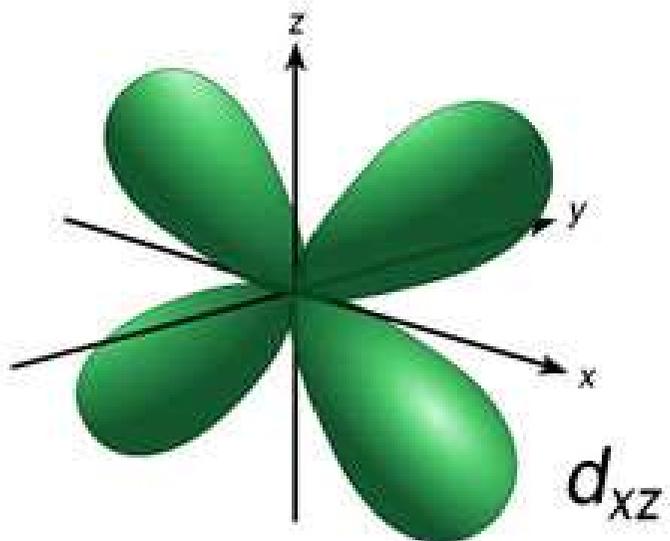
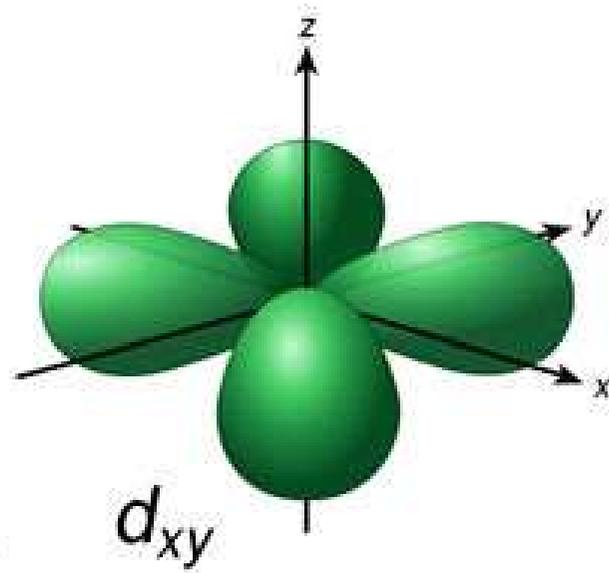
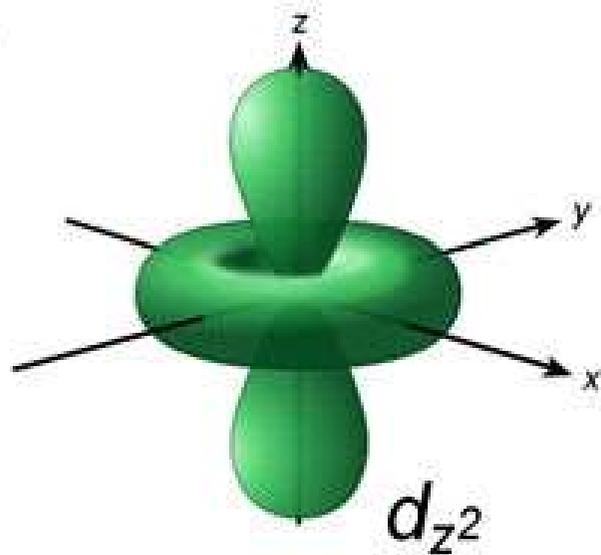
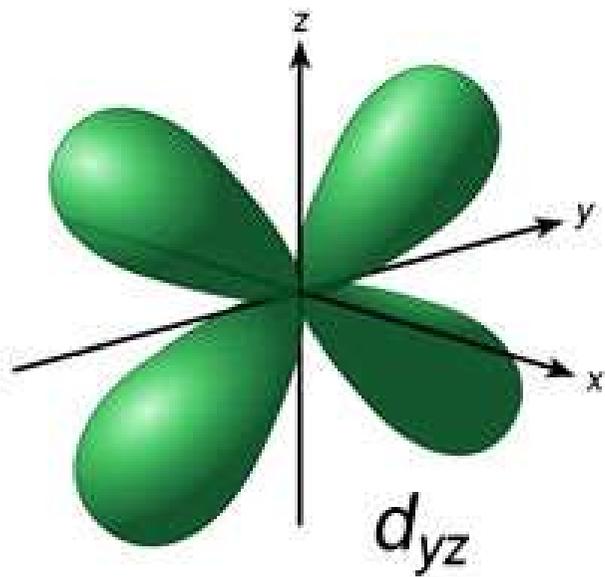
$2p_x$ orbital



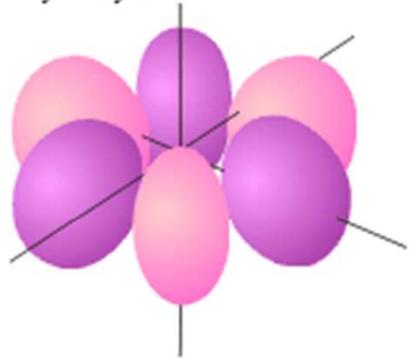
$2p_y$ orbital



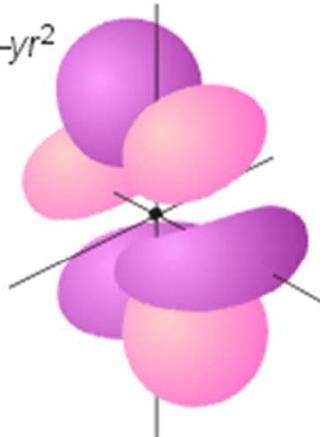
$2p_z$ orbital



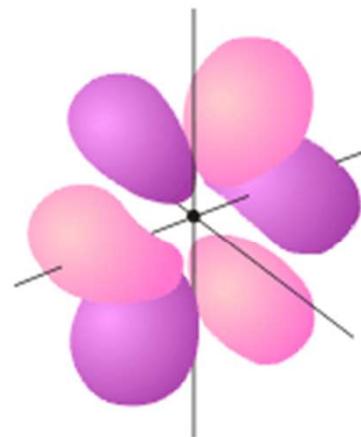
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



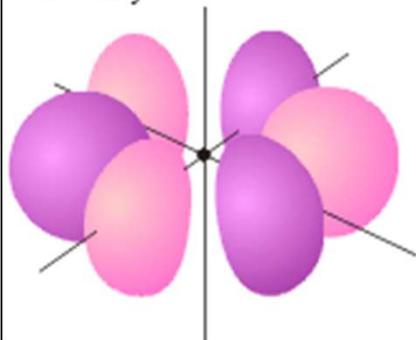
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



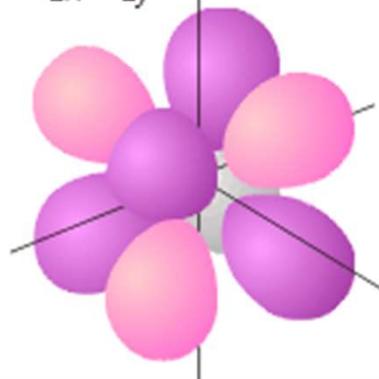
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



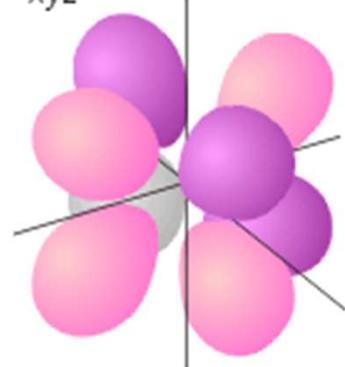
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



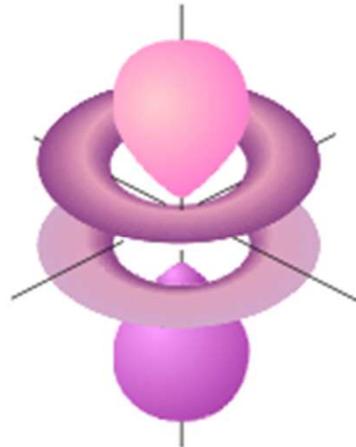
$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$



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



- 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

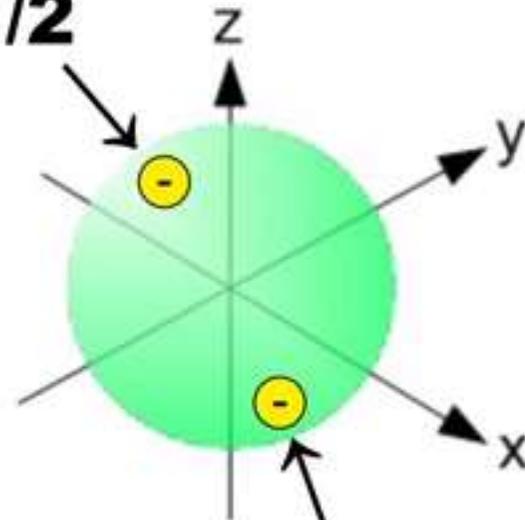
1s orbital

$$n = 1$$

$$l = 0$$

$$m_l = 0$$

$$m_s = +1/2$$

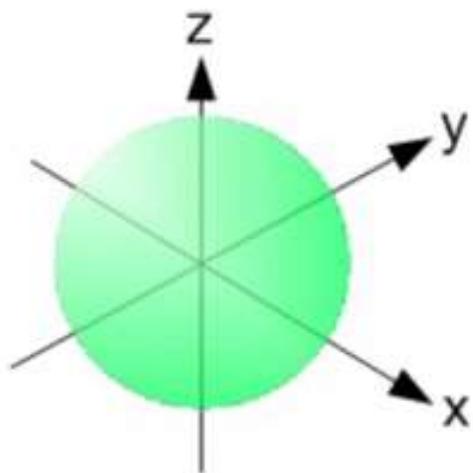


$$m_s = -1/2$$

$n = 2$

$l = 0$

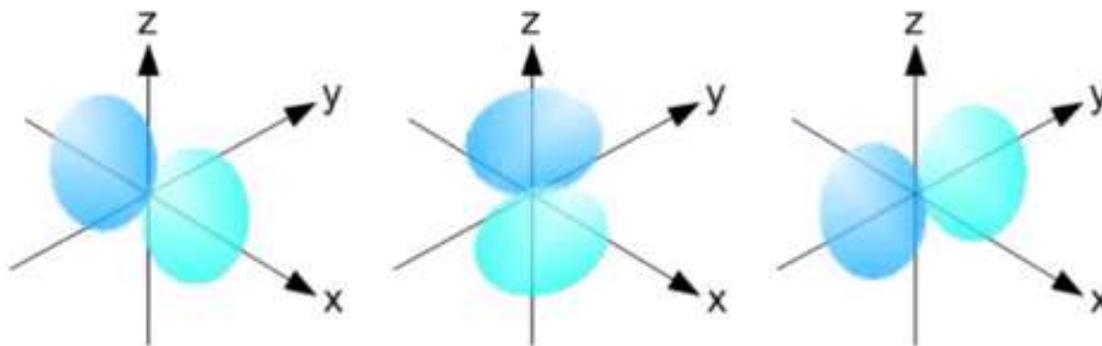
2s orbital



$m_l = 0$

$l = 1$

2p orbitals

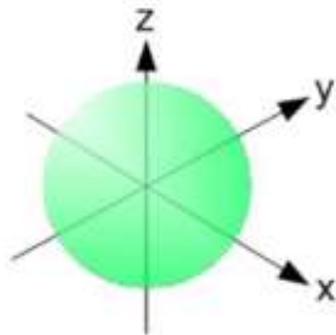


$m_l = -1, 0, 1$

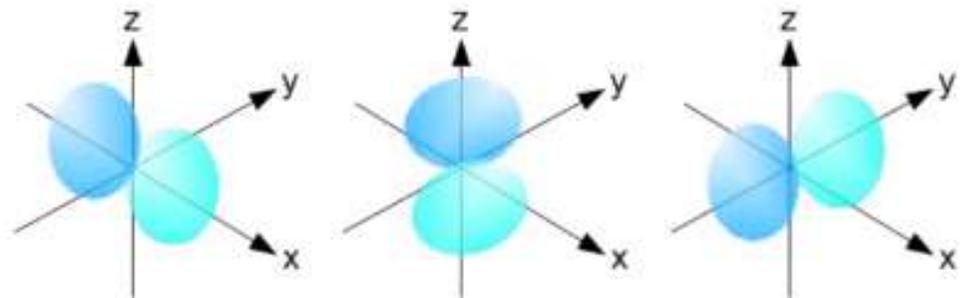


$n = 3$

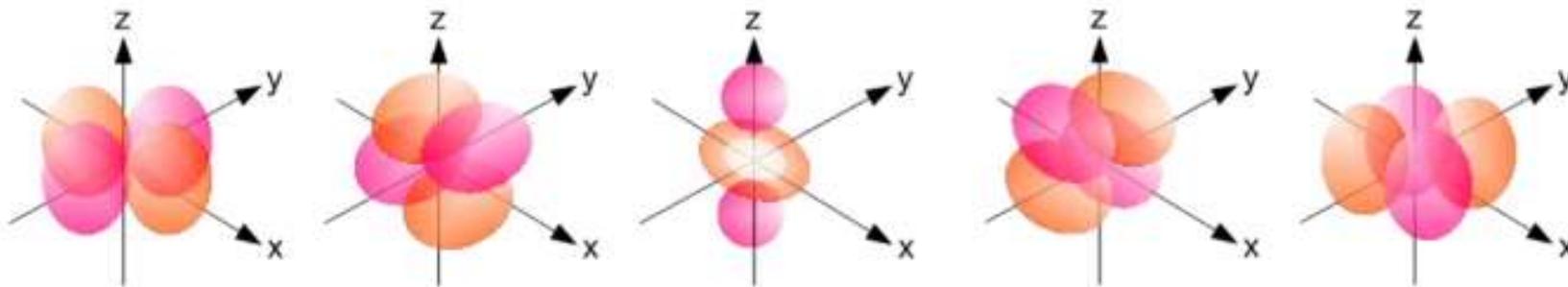
**$l = 0$
3s orbital**

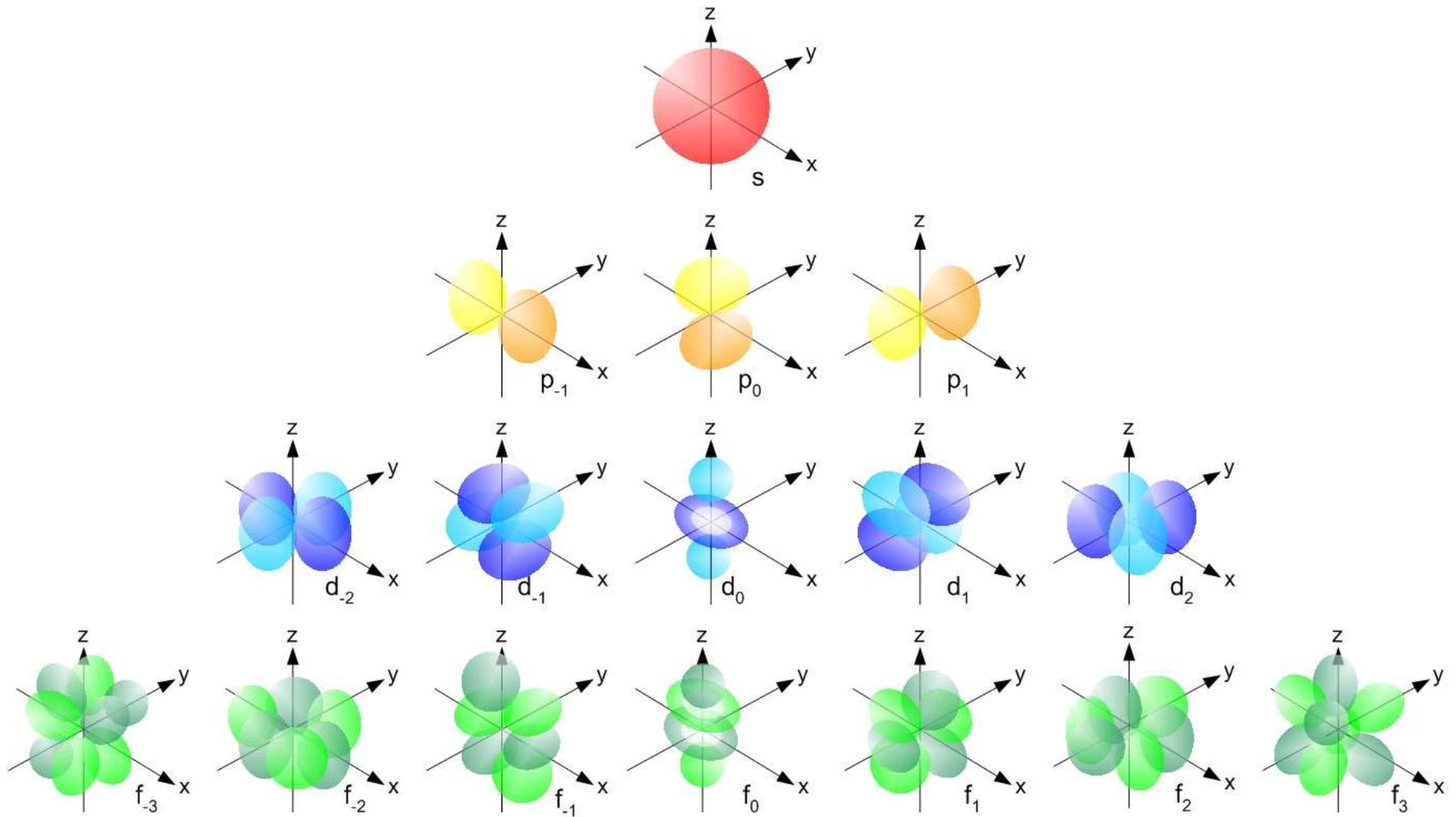


**$l = 1$
3p orbitals**

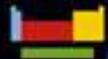


**$l = 2$
3d orbitals**

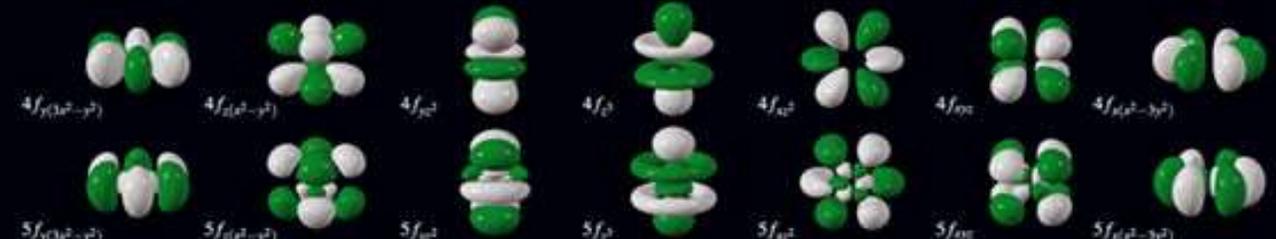
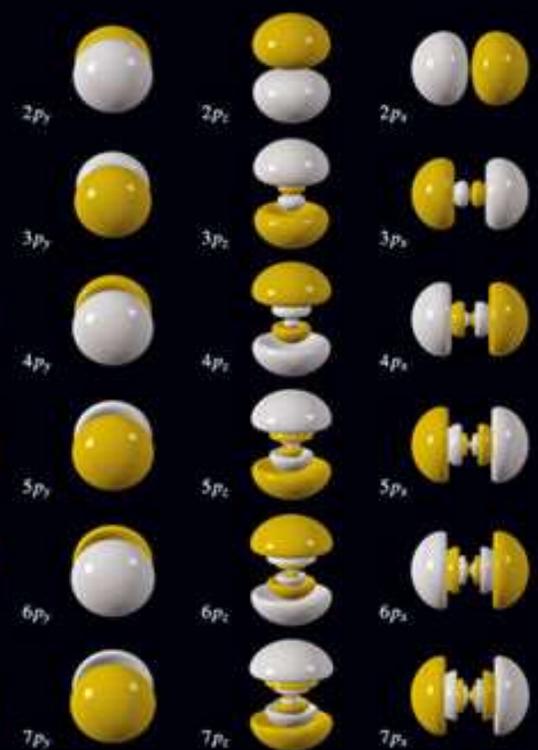
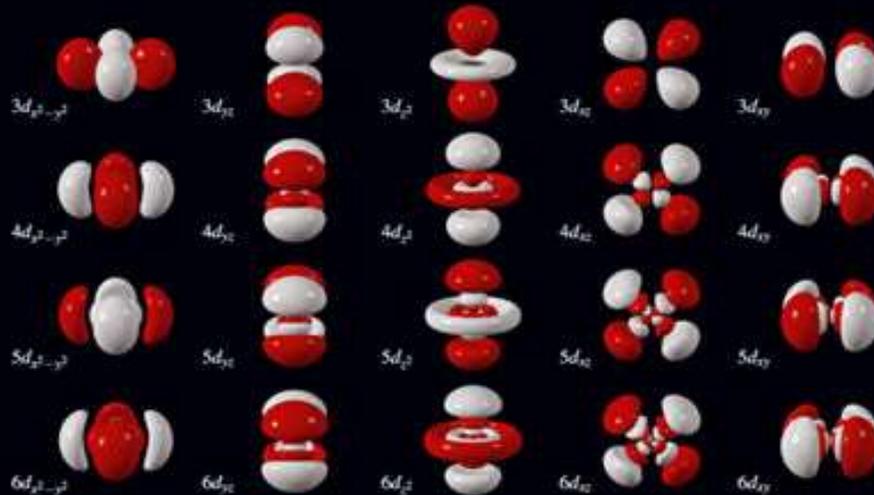




The Orbitron gallery of atomic orbitals



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



s

p

d

e

f

1



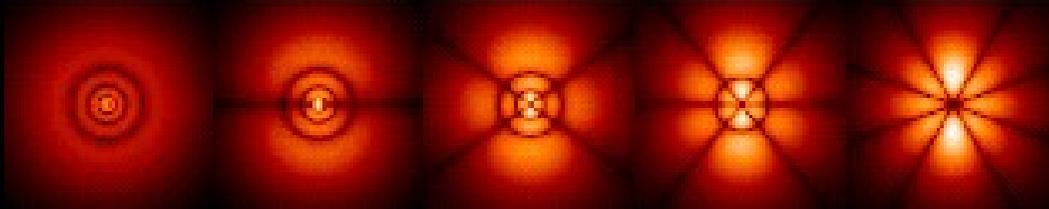
2

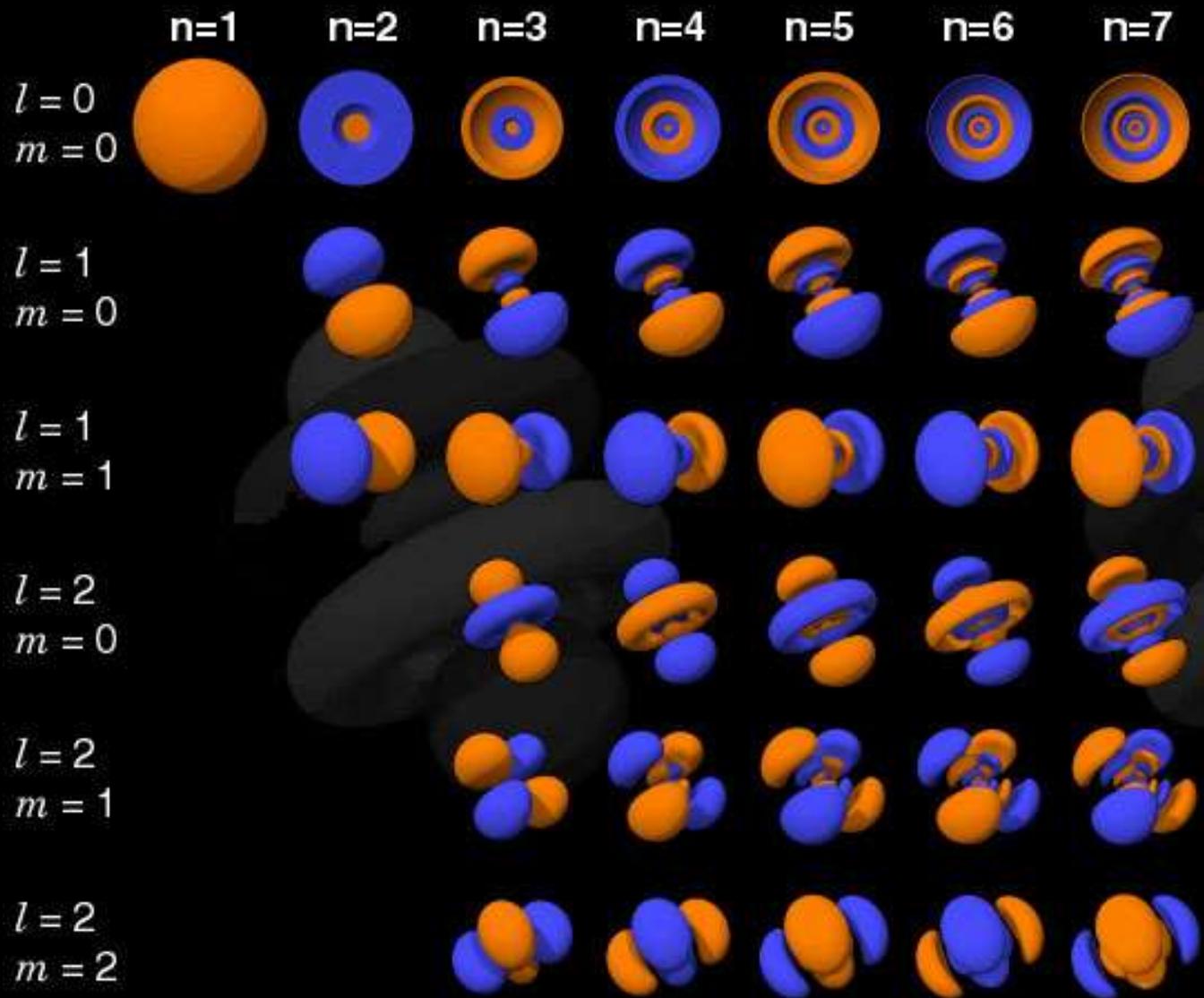


3



4

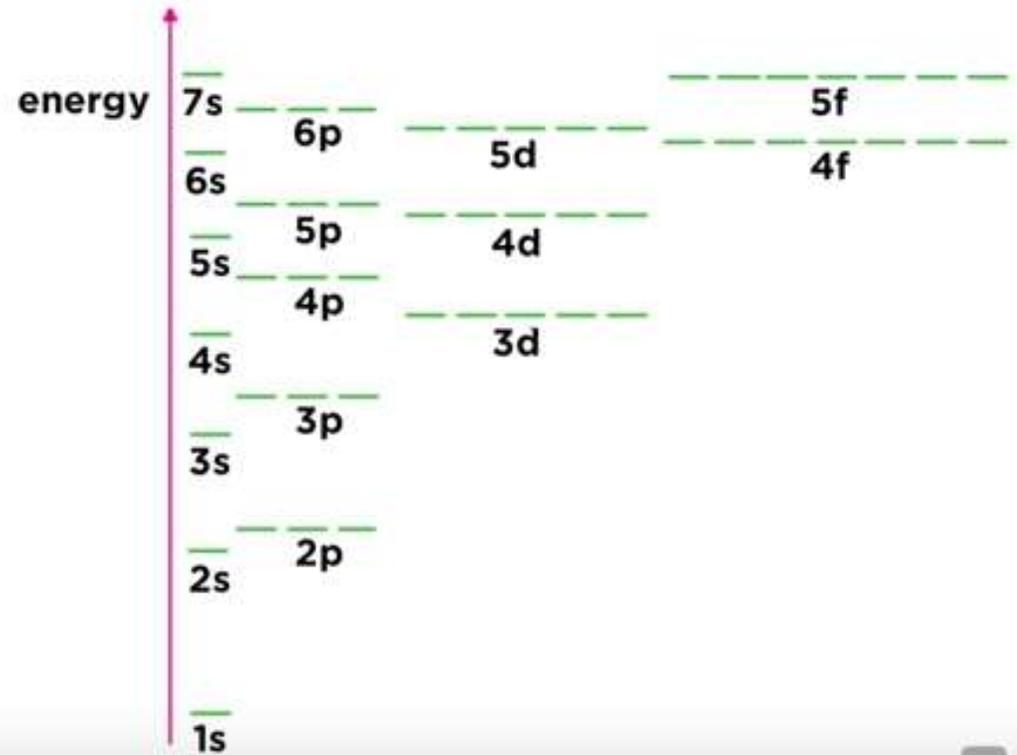
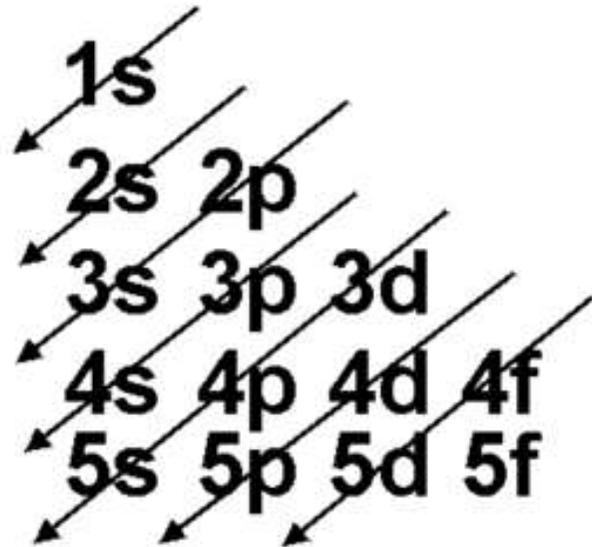


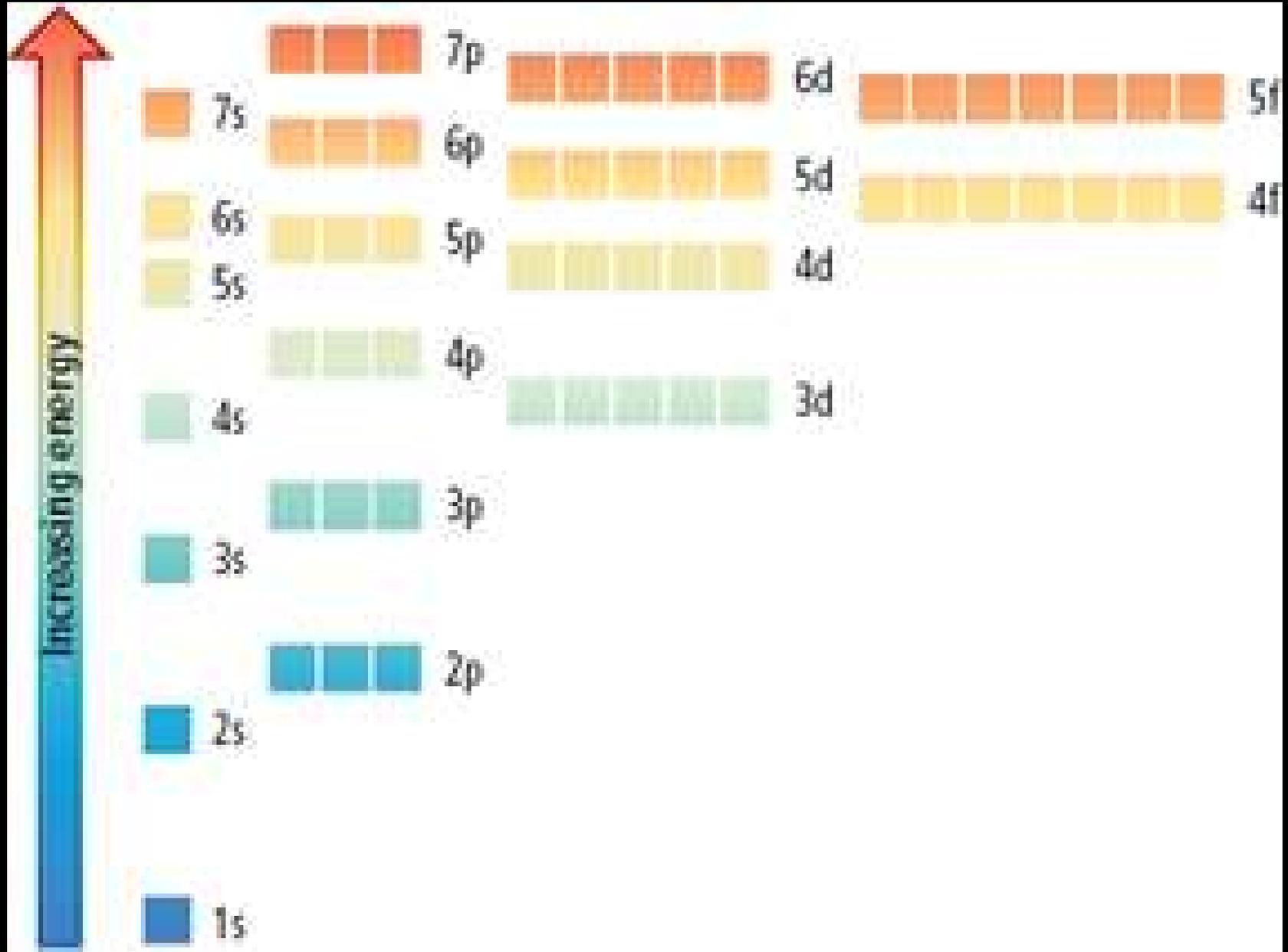


- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NÍVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NÍVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NÍVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS

- **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	paladium 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 [203]	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

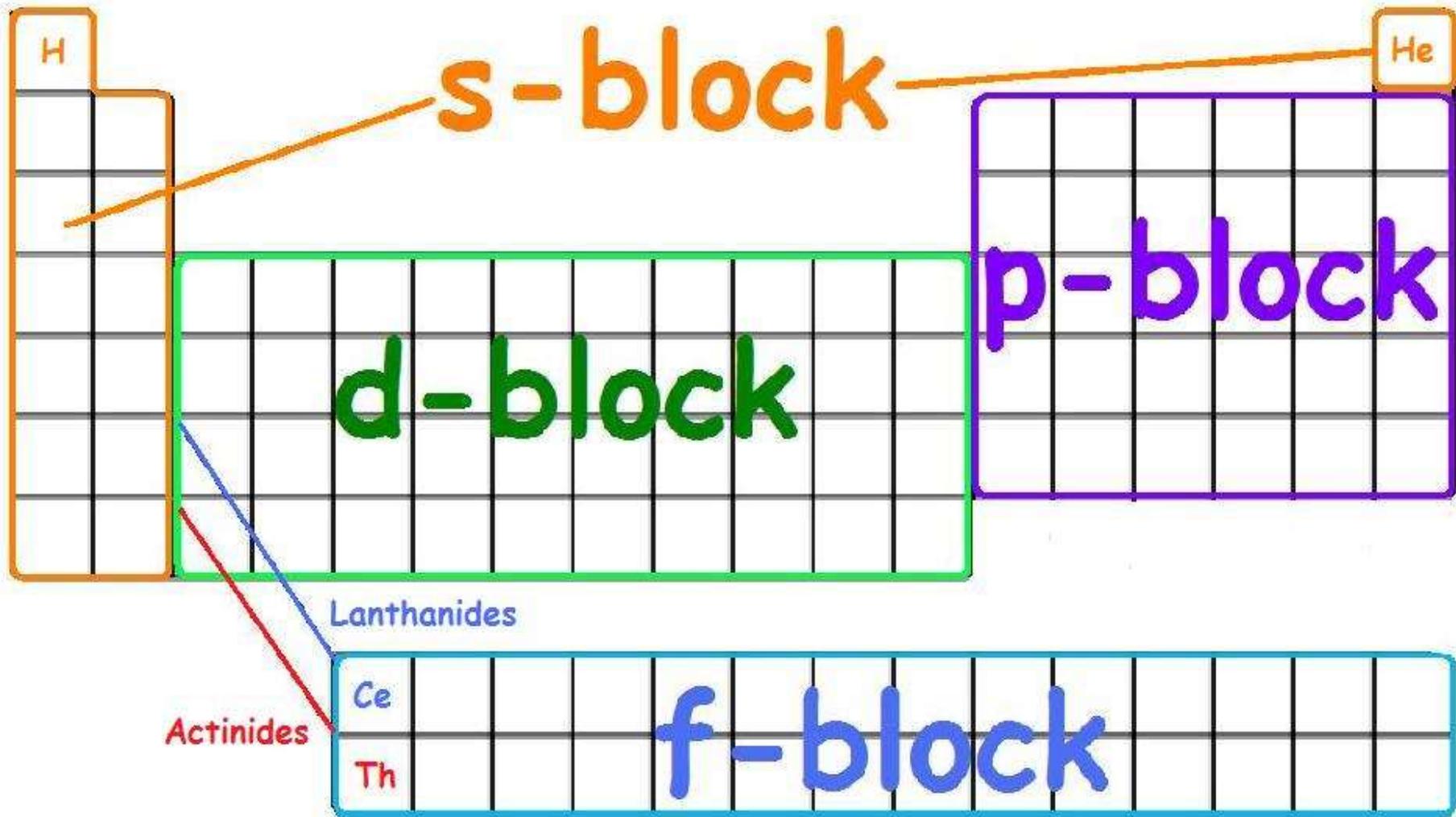


TABLE 7.4 Orbital Box Diagrams for the Elements Ca Through Zn

		<i>3d</i>	<i>4s</i>
Ca	[Ar]4 <i>s</i> ²		
Sc	[Ar]3 <i>d</i> ¹ 4 <i>s</i> ²		
Ti	[Ar]3 <i>d</i> ² 4 <i>s</i> ²		
V	[Ar]3 <i>d</i> ³ 4 <i>s</i> ²		
Cr*	[Ar]3 <i>d</i> ⁵ 4 <i>s</i> ¹		
Mn	[Ar]3 <i>d</i> ⁵ 4 <i>s</i> ²		
Fe	[Ar]3 <i>d</i> ⁶ 4 <i>s</i> ²		
Co	[Ar]3 <i>d</i> ⁷ 4 <i>s</i> ²		
Ni	[Ar]3 <i>d</i> ⁸ 4 <i>s</i> ²		
Cu*	[Ar]3 <i>d</i> ¹⁰ 4 <i>s</i> ¹		
Zn	[Ar]3 <i>d</i> ¹⁰ 4 <i>s</i> 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 4.00260
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 127.6	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, 208.9824)	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 231.03686	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 257.0851	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^*)

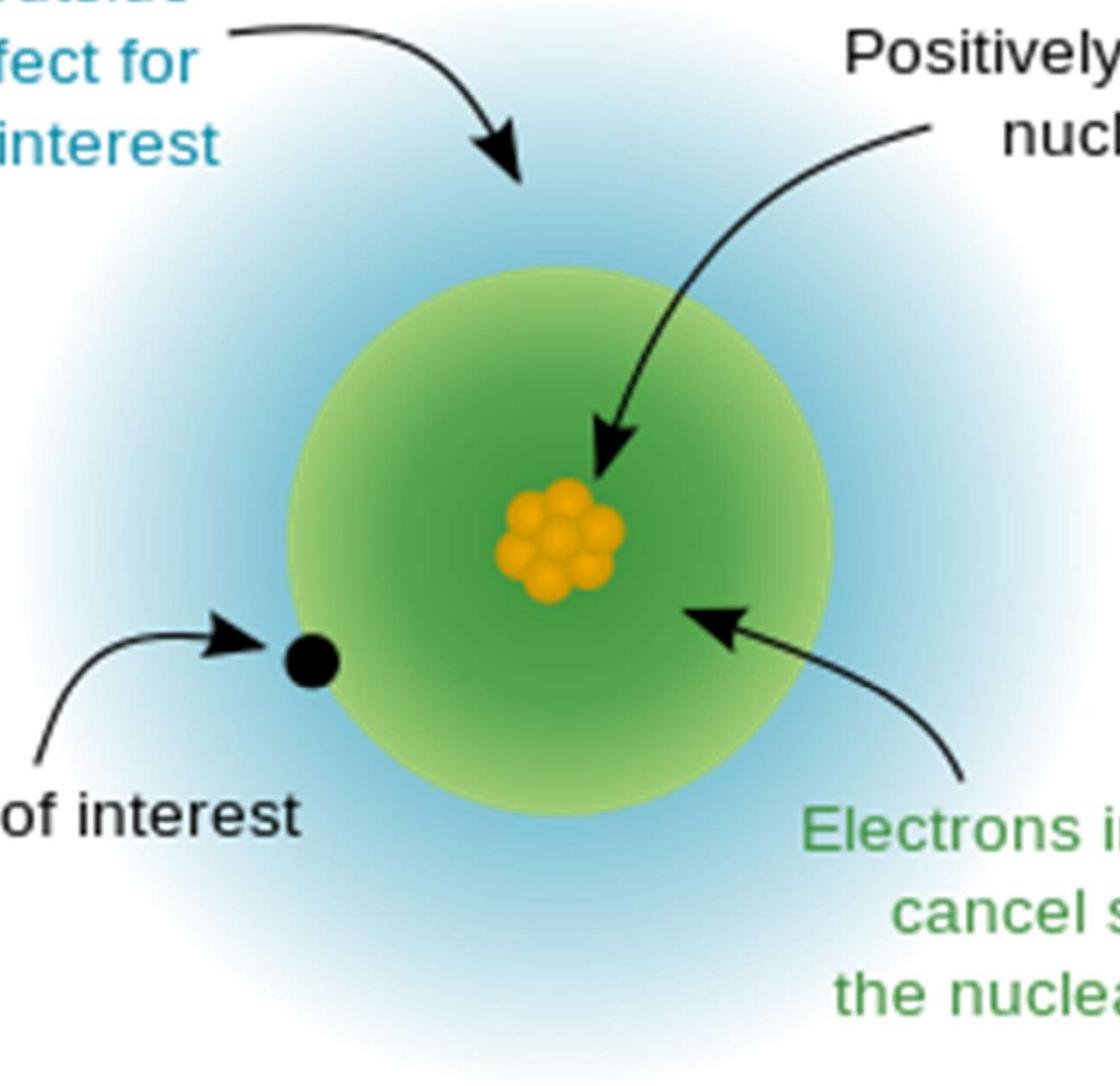
Carga nuclear efectiva – $Z^* = Z - s$

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).

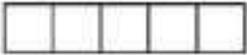
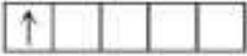
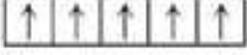
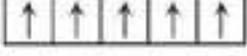
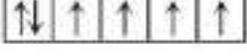
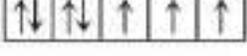
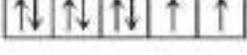
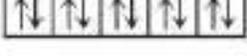
1 para os electrons nos nível de energia seguintes.

Qual o papel do spin?

Paramagéticos vs dimagnéticos

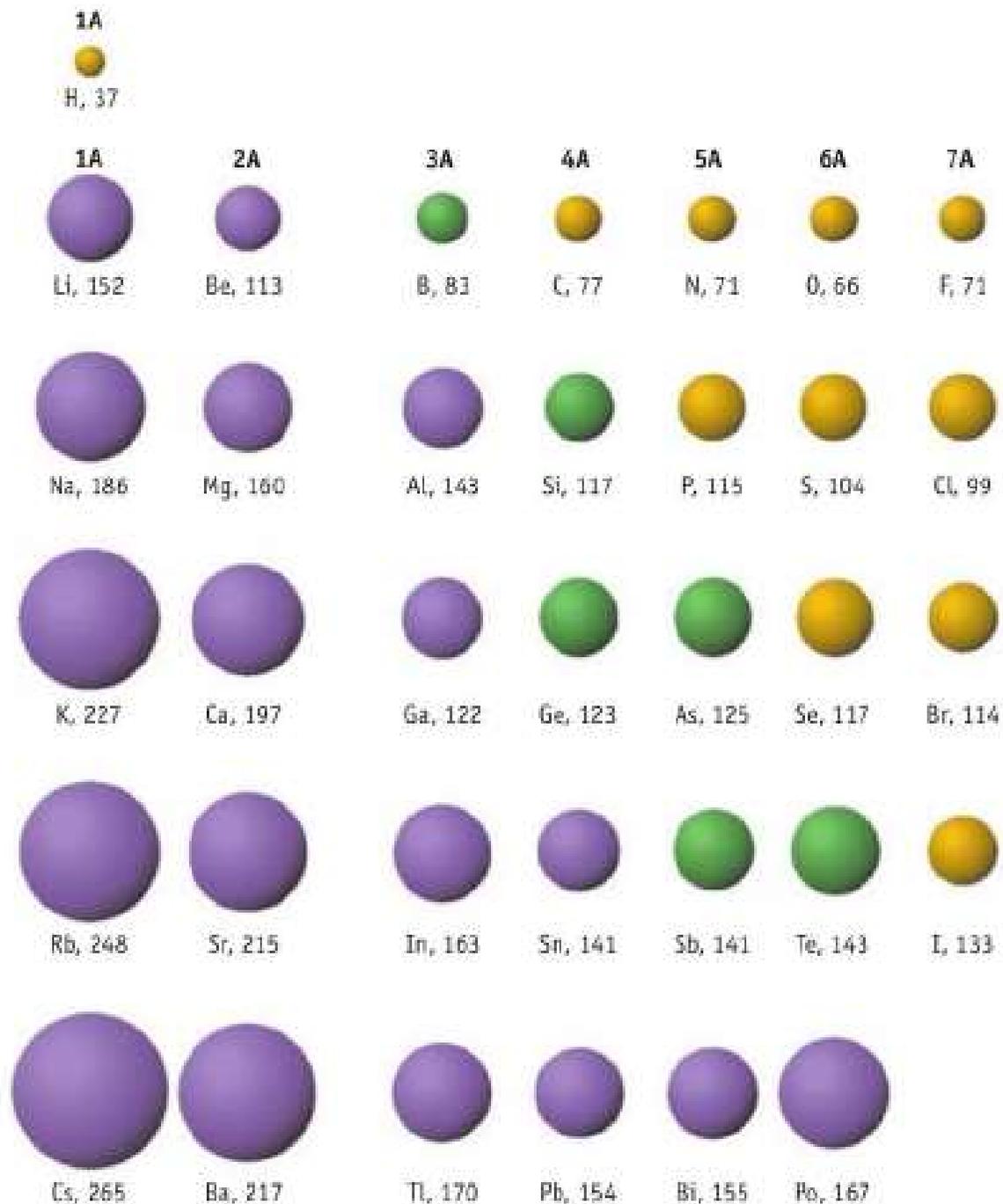
			1s	2s	2p
Lithium	Li	$1s^2 2s^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\square \square \square
Beryllium	Be	$1s^2 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\square \square \square
Boron	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow \square \square
Carbon	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\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^*)

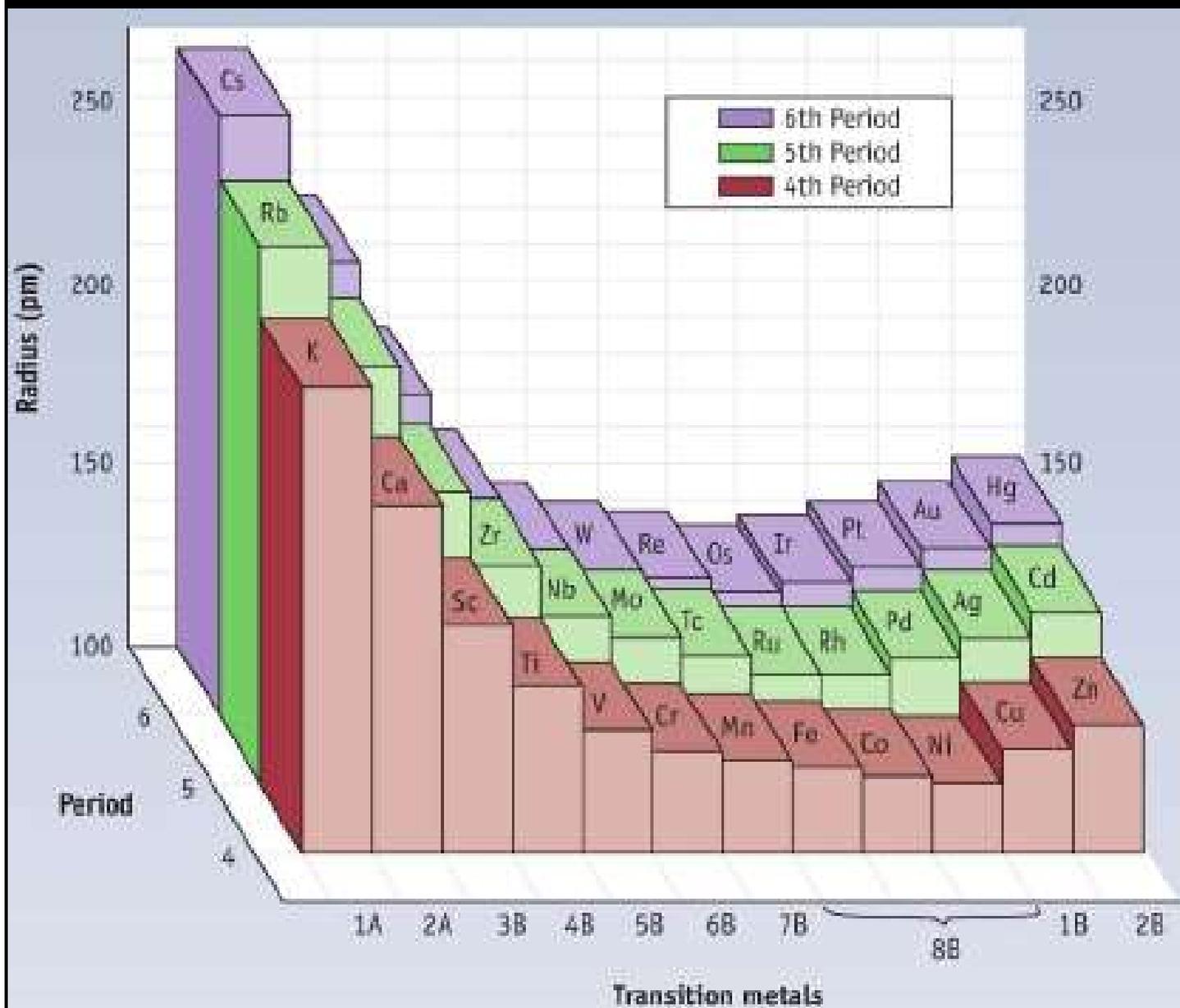
- **RAIO ATÔMICO**



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**

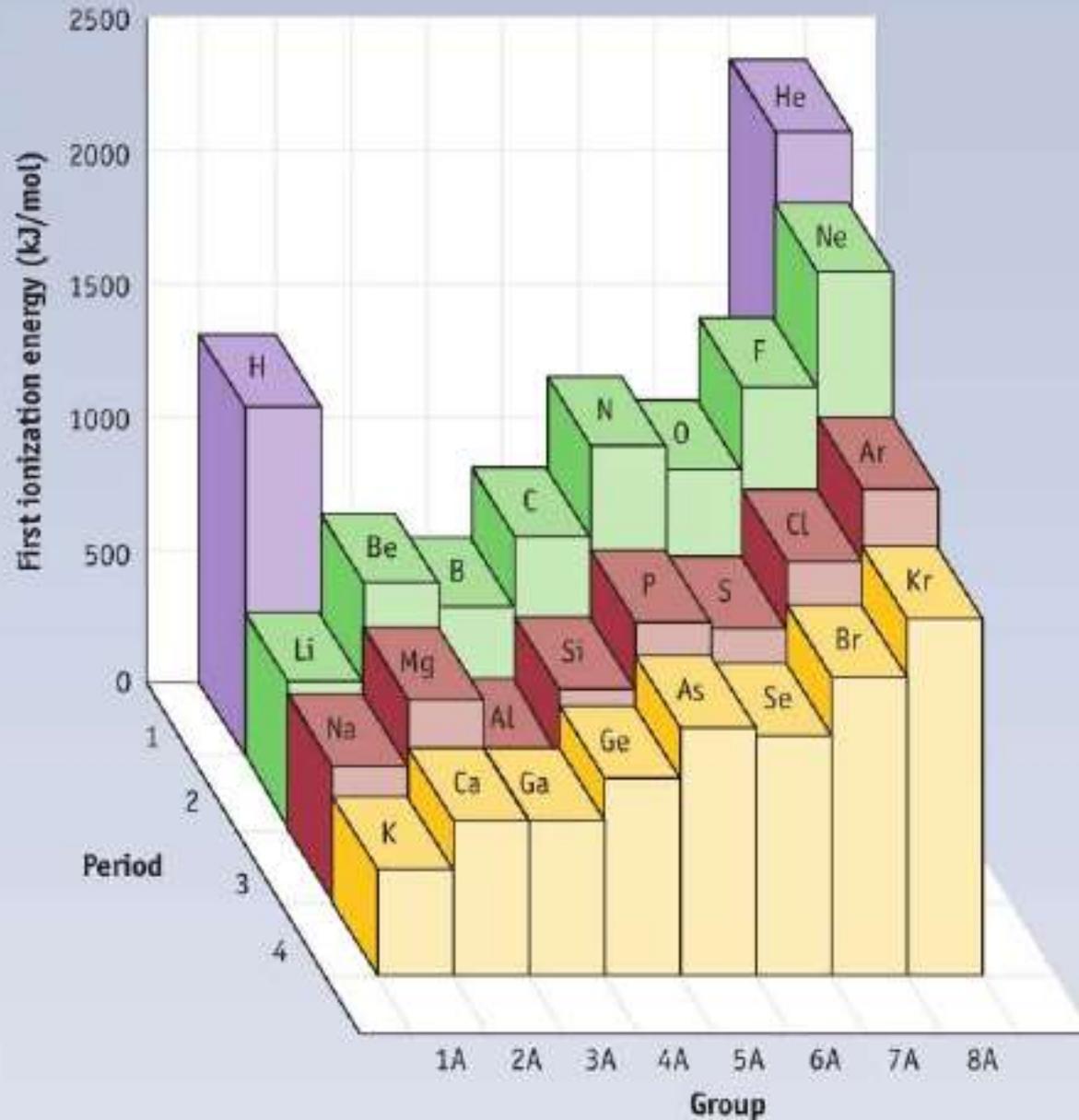
Energia de ionização

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

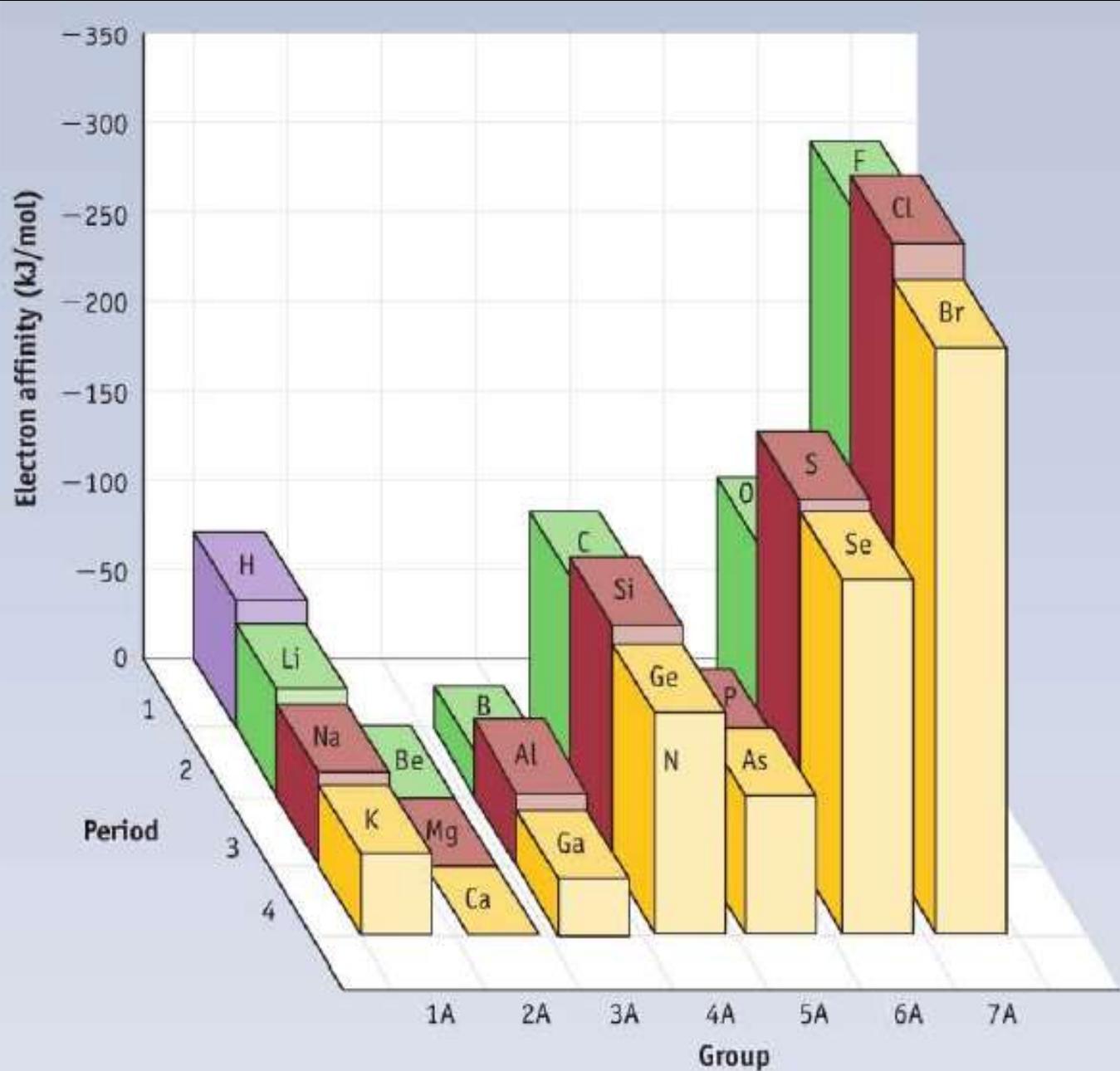
Primeira energia de ionização



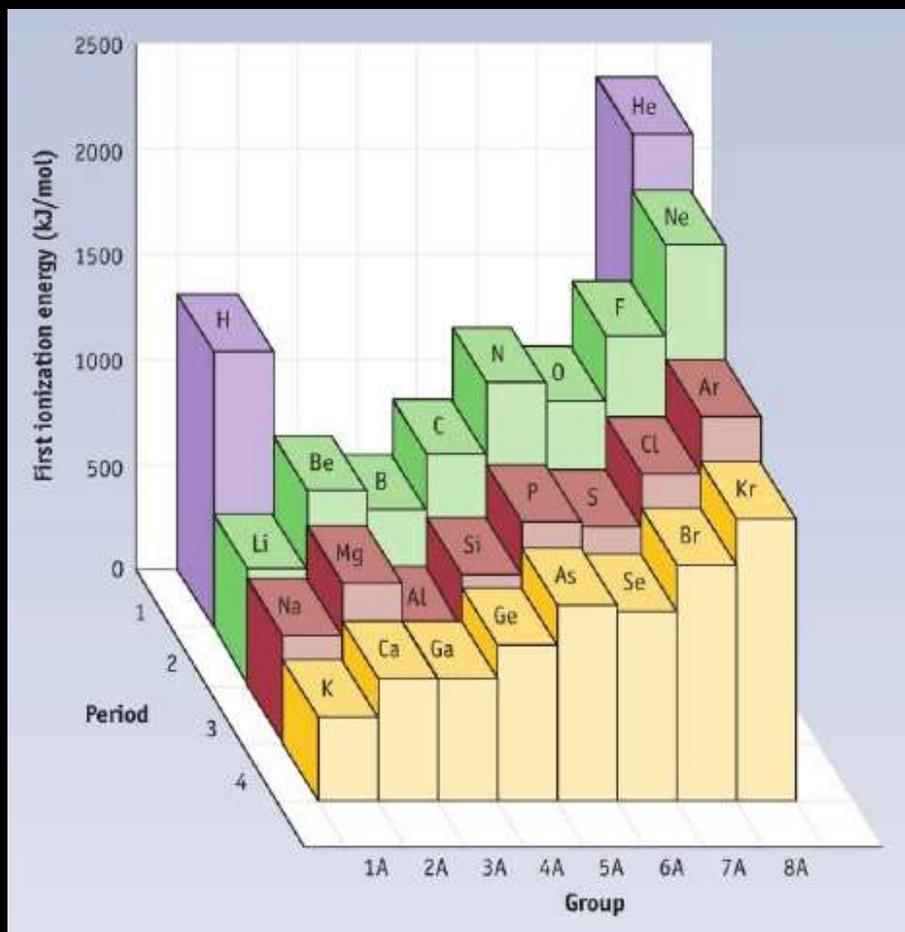
- ORBITAL – O QUE É UM ORBITAL?
- NIVEIS DE ENERGIA – O QUE É UM NIVEL DE ENERGIA?
- FORMA DO ORBITAL? - COMO PODEMOS SABER?
- QUANTOS ORBITAIS PODEM EXISTIR POR NIVEL DE ENERGIA?
- NÚMEROS QUÂNTICOS
- FORMA DE PREENCHER OS ORBITAIS
- CARGA NUCLEAR EFECTIVA (Z^*)
- RAIO ATÔMICO
- ENERGIA DE IONIZAÇÃO

- **AFINIDADE ELECTRÔNICA**

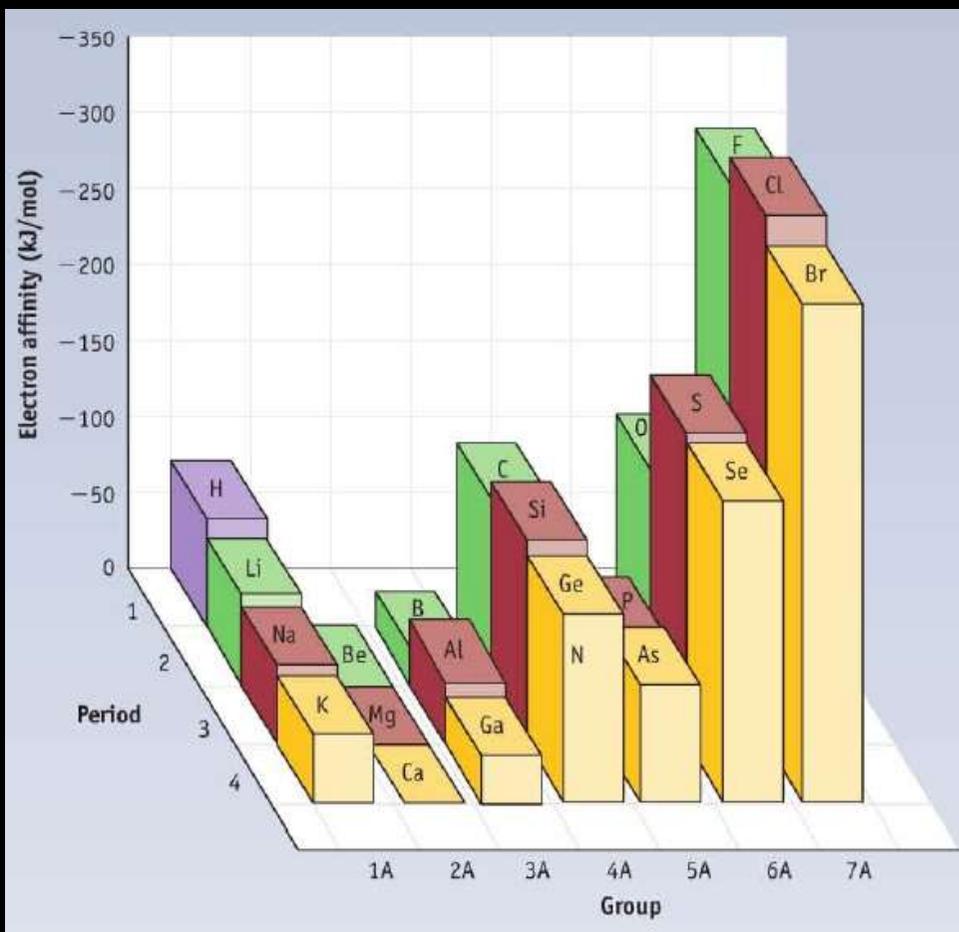
Afinidade electrónica



Primeira energia de ionização



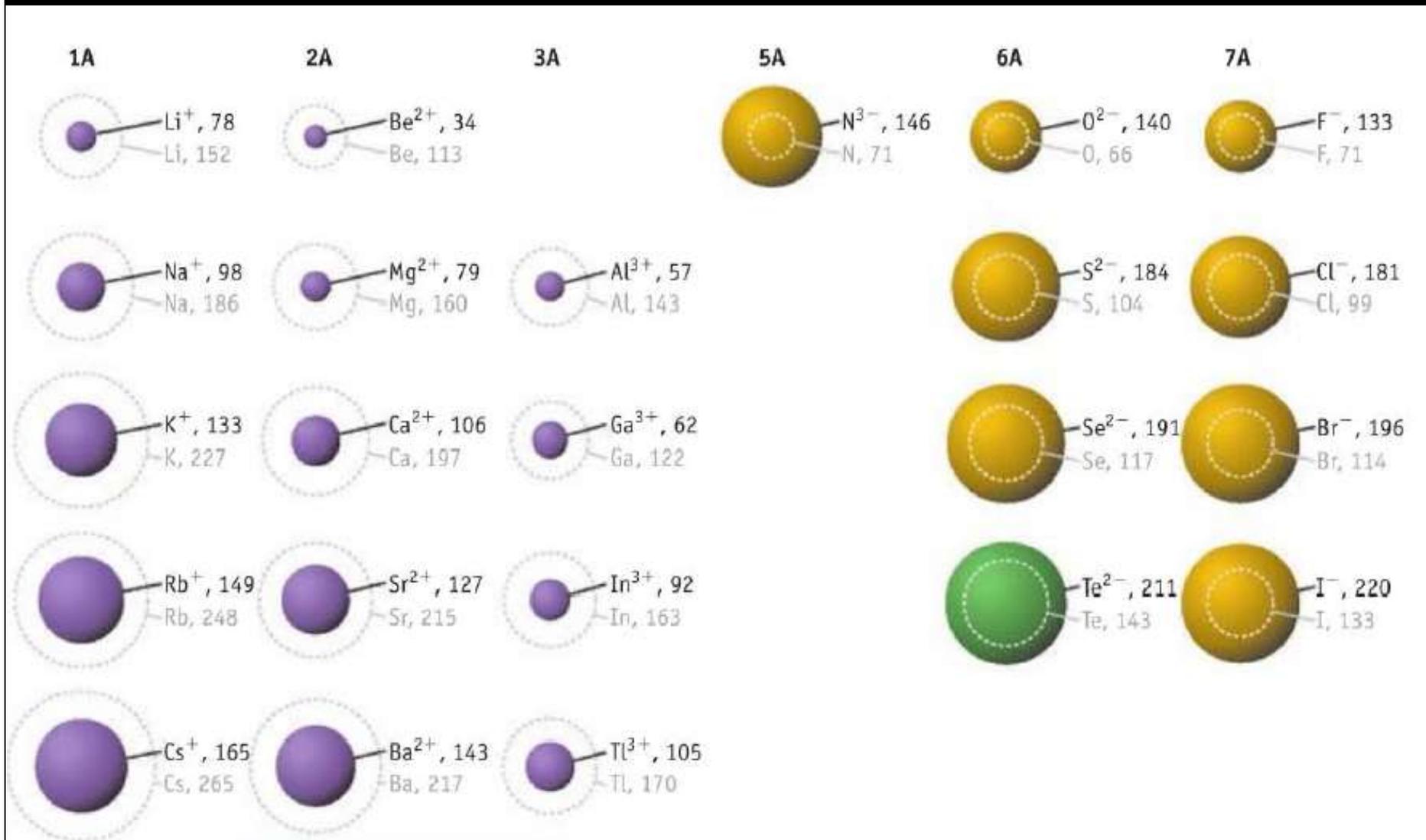
Afinidade electrónica



- 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?

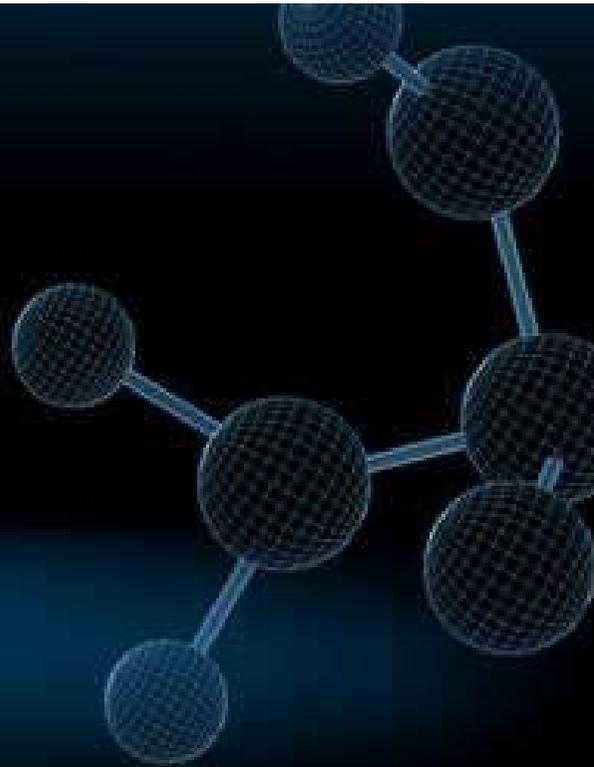
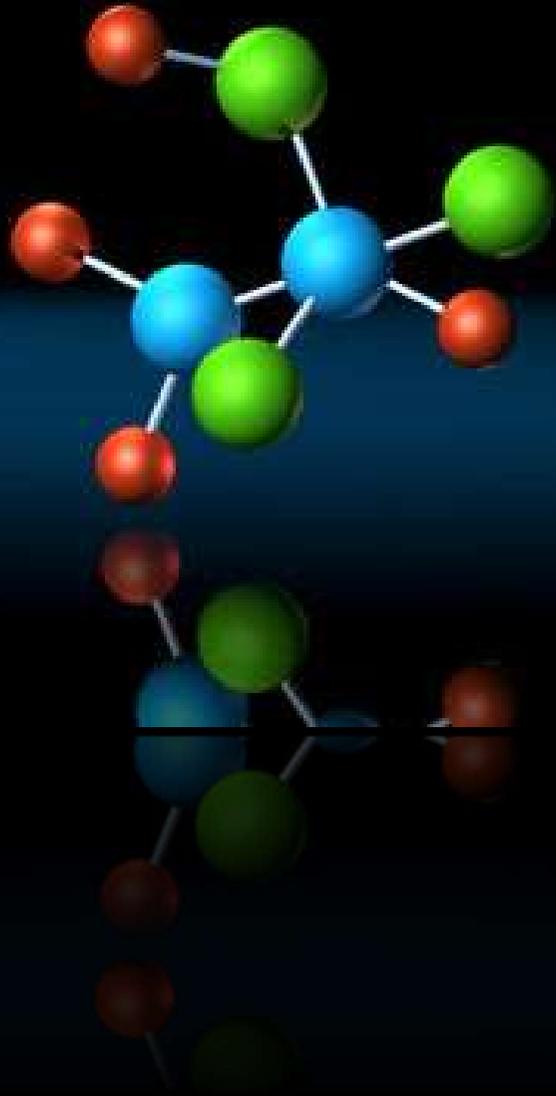
Qual deles seguintes elementos ui o maior raio iônico: O^{2-} , N^{3-} ou F^- .

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?

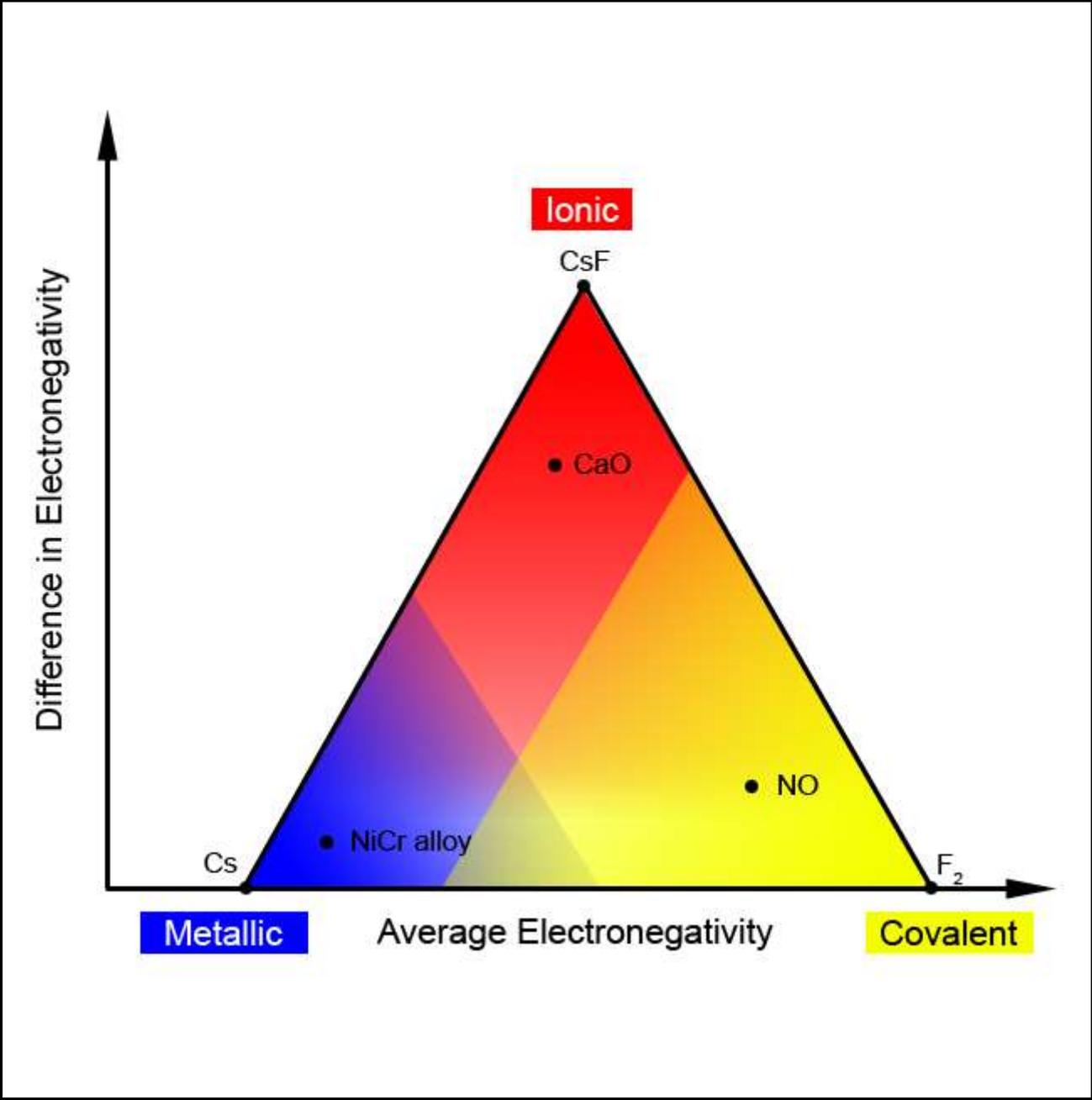
Coloque os elementos na ordem crescente de energia de ionização.



Ligação e estrutura molecular

Aula 5

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



- 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 ·	·B ·	·C ·	·N ·	:O ·	:F ·	:Ne :
Na ·	·Mg ·	·Al ·	·Si ·	·P ·	:S ·	:Cl ·	:Ar :

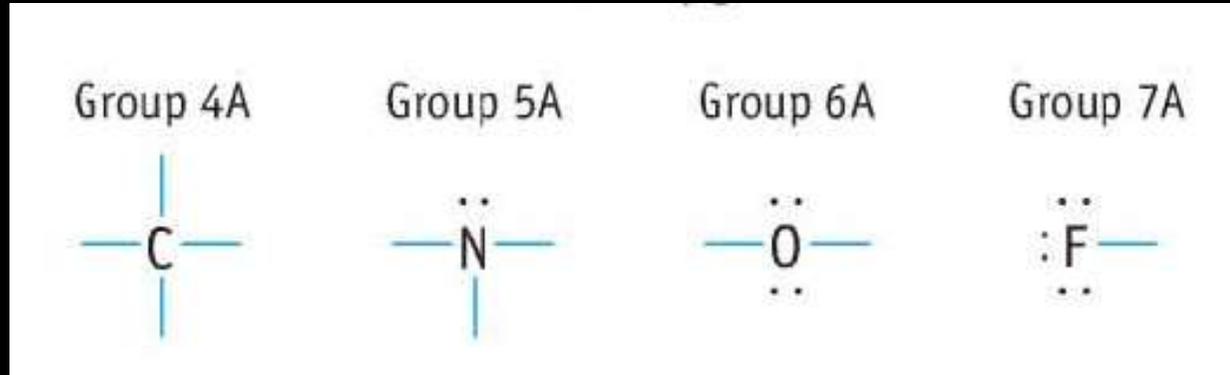
- Gilbert Lewis
- Símbolos de Lewis – O que são como se escrevem?
- Regra do octeto - o que é e como funciona?

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



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

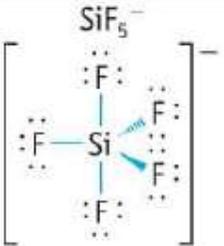
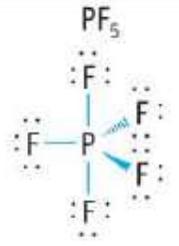
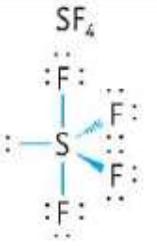
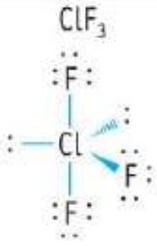
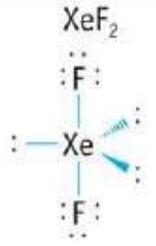
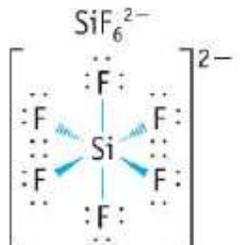
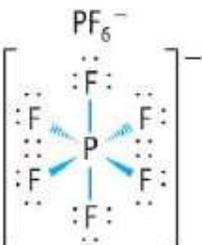
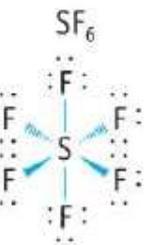
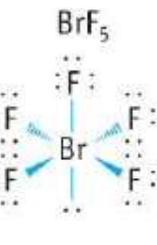
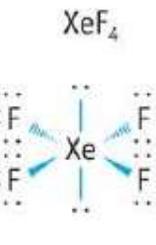
$$\text{carga formal} = EV - \left[EPI + \frac{1}{2} EL \right]$$

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

Excepções á regra do octeto

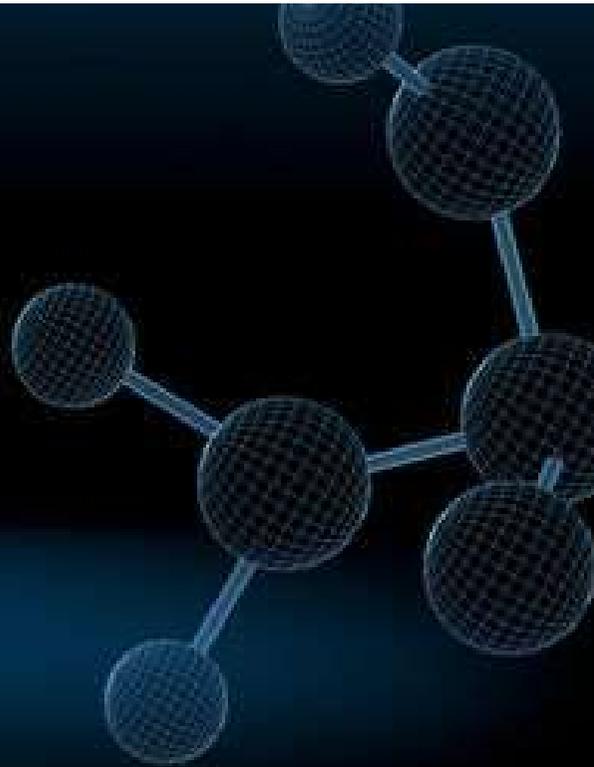
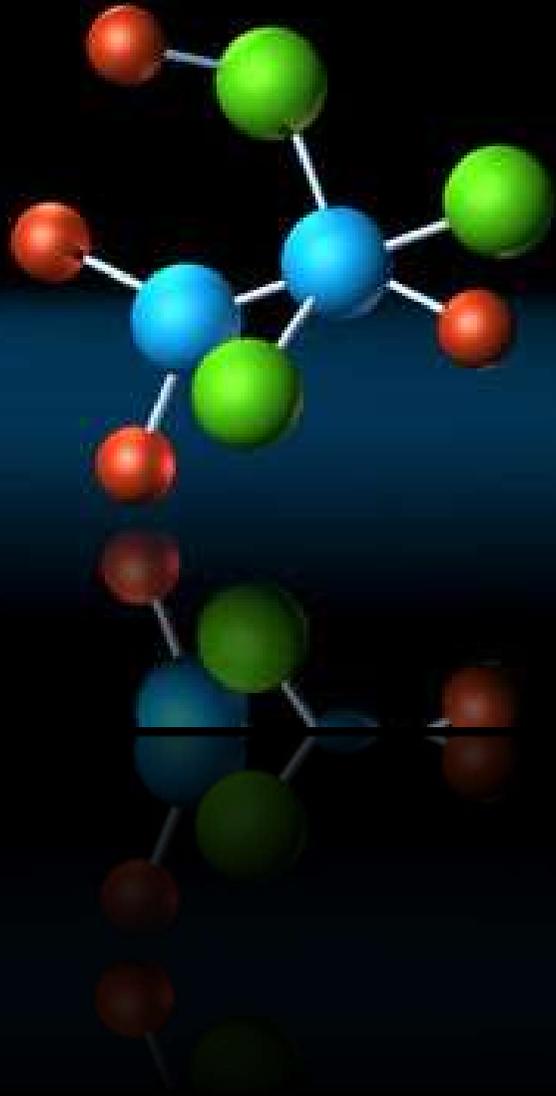
- Moléculas e ions que possuam menos que 4 pares de electrons no átomo central
- Os que têm mais que 4 pares de electrons no átomo central
- E os que têm um número impar de electrons

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 

Periodic Table of the Elements

1 1IA 11A																	18 VIII 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 74.92159	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 127.6	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, 208.9824)	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 (252)	100 Fm Fermium 257.0851	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							



Ligação e estrutura molecular

Aula 6

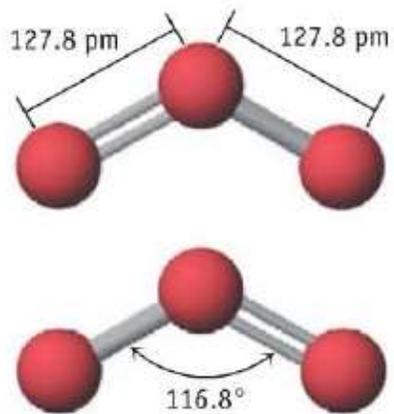
- Ressonância – o que é? E para que serve?
- Carga formal de estruturas híbridas
- Forma das moléculas e Lewis
- Método de repulsão dos pares de electrons no nível de valência (RPENV ou VSEPR - Valence shell electron pair repulsion)
- Polaridade
- Electronegatividade

Questão: A ligação simples entre dois átomos de Oxigênio é de 132 pm e a ligação dupla é de 121,1 pm. Na molécula de ozônio (O_3) o tamanho da ligação entre os átomos de oxigênio é de 127,8 pm.

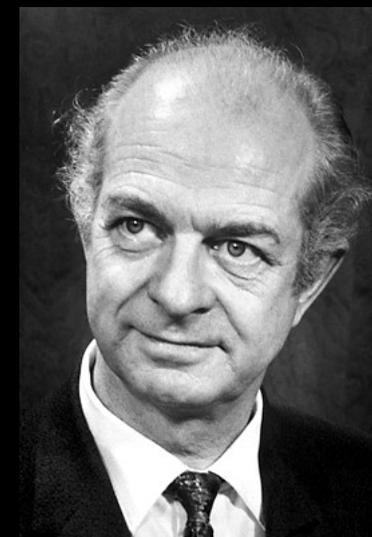
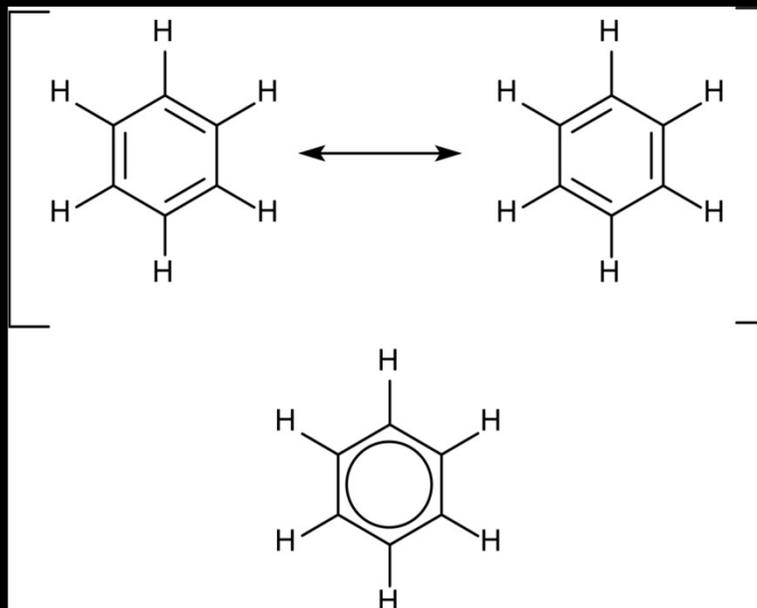
PORQUÊ???

Questão: As cargas formais variam com a ressonância?
Exemplo: NO_3^-

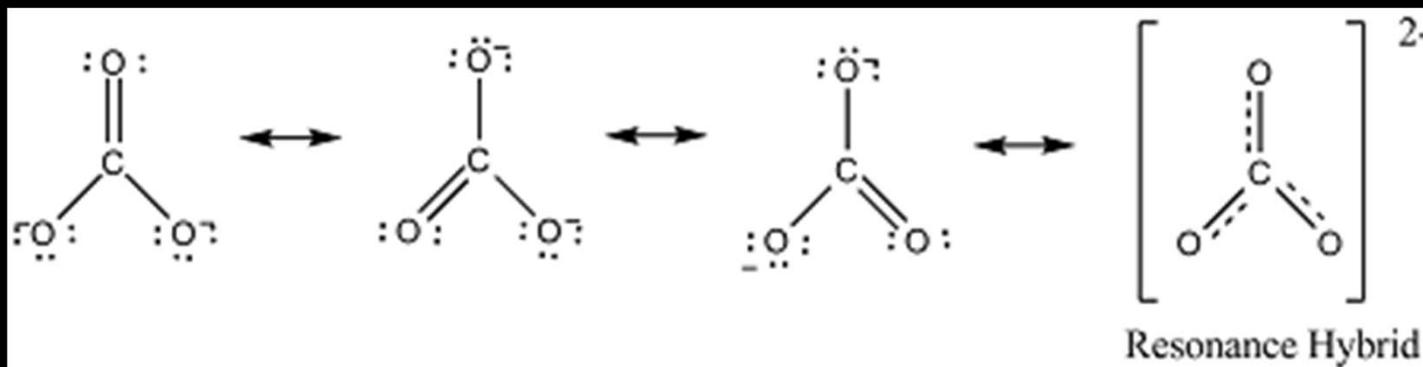
PORQUÊ???



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)

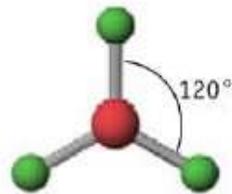
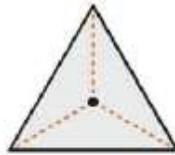
VSEPR - Valence shell electron pair repulsion)

Linear



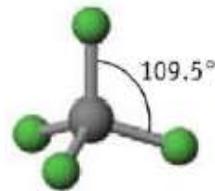
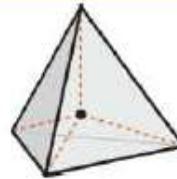
AX_2
Example: BeF_2

Trigonal-planar



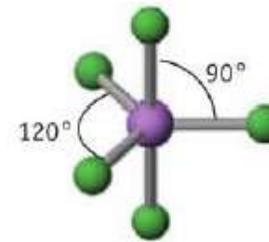
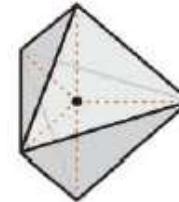
AX_3
Example: BF_3

Tetrahedral



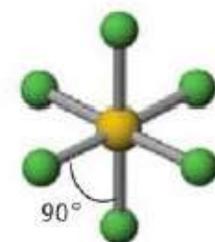
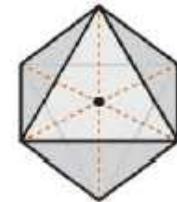
AX_4
Example: CF_4

Trigonal bipyramidal



AX_5
Example: PF_5

Octahedral

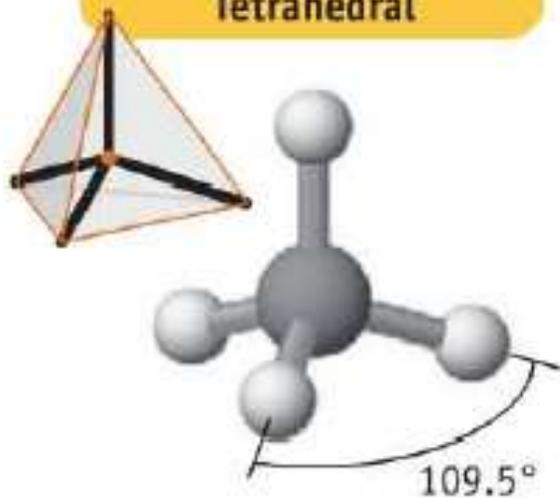


AX_6
Example: SF_6

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

FOUR ELECTRON PAIRS
Electron Pair Geometry = tetrahedral

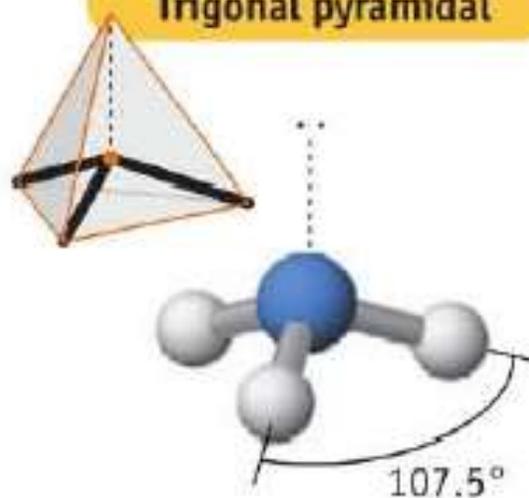
Tetrahedral



Methane, CH_4
4 bond pairs
no lone pairs

(a)

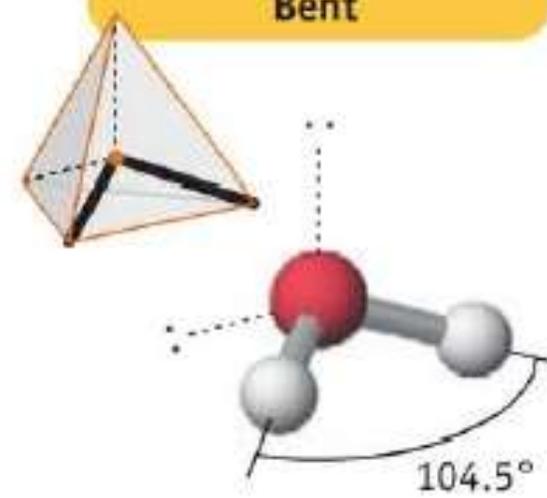
Trigonal pyramidal



Ammonia, NH_3
3 bond pairs
1 lone pair

(b)

Bent



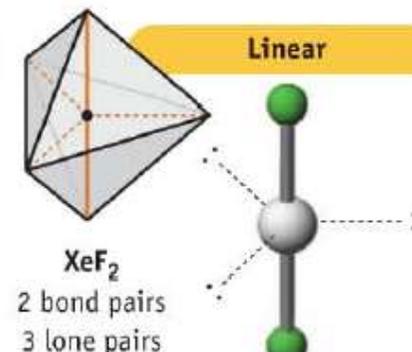
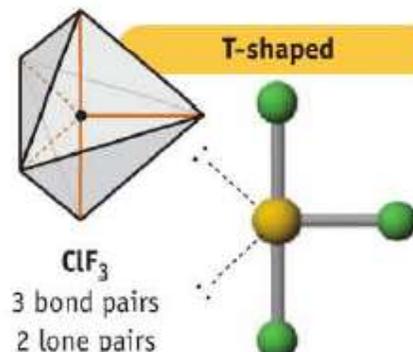
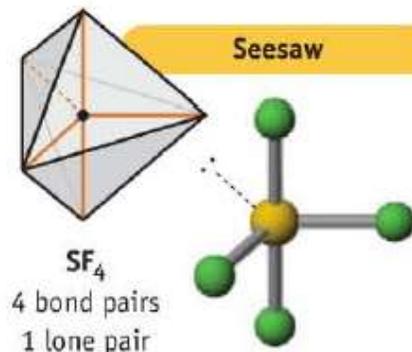
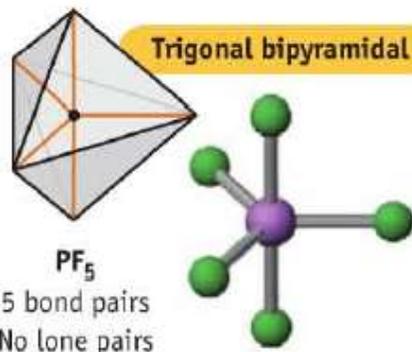
Water, H_2O
2 bond pairs
2 lone pairs

(c)

Questão: o angulo diminui porquê?

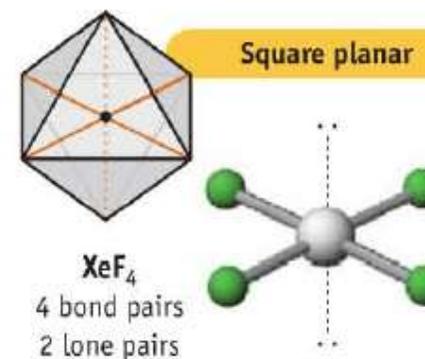
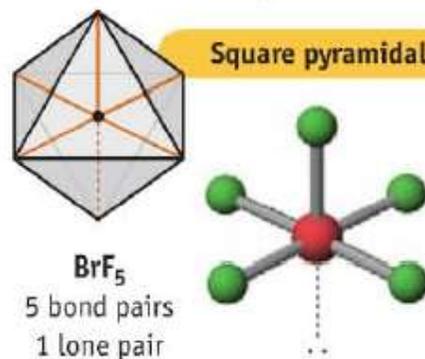
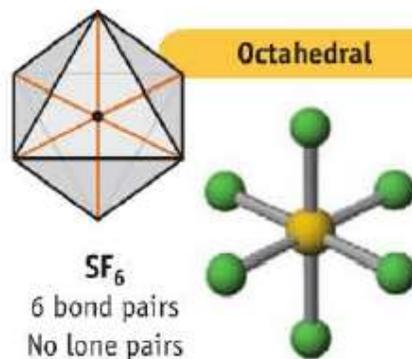
FIVE ELECTRON PAIRS

Electron-Pair Geometry = trigonal bipyramidal



SIX ELECTRON PAIRS

Electron-Pair Geometry = octahedral



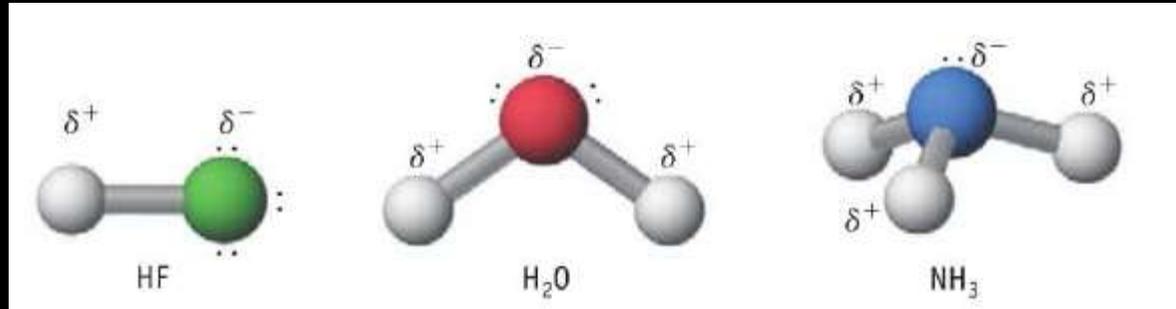
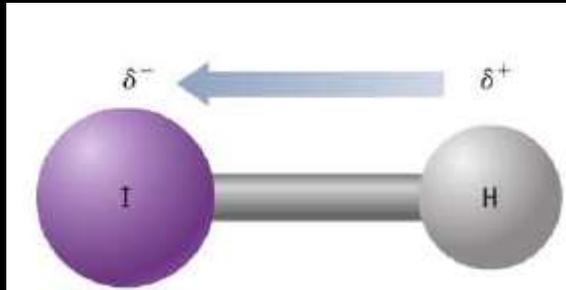
Exemplo: ClF_2^- ; ClF_3 ClF_4^- ClF_5

Questão: ligações duplas influenciam a geometria?

Polaridade

Questão: O que é a polaridade?

Questão: O que é a polaridade ?



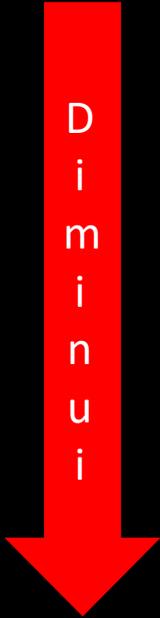
átomos diferentes produzem uma ligação polar

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



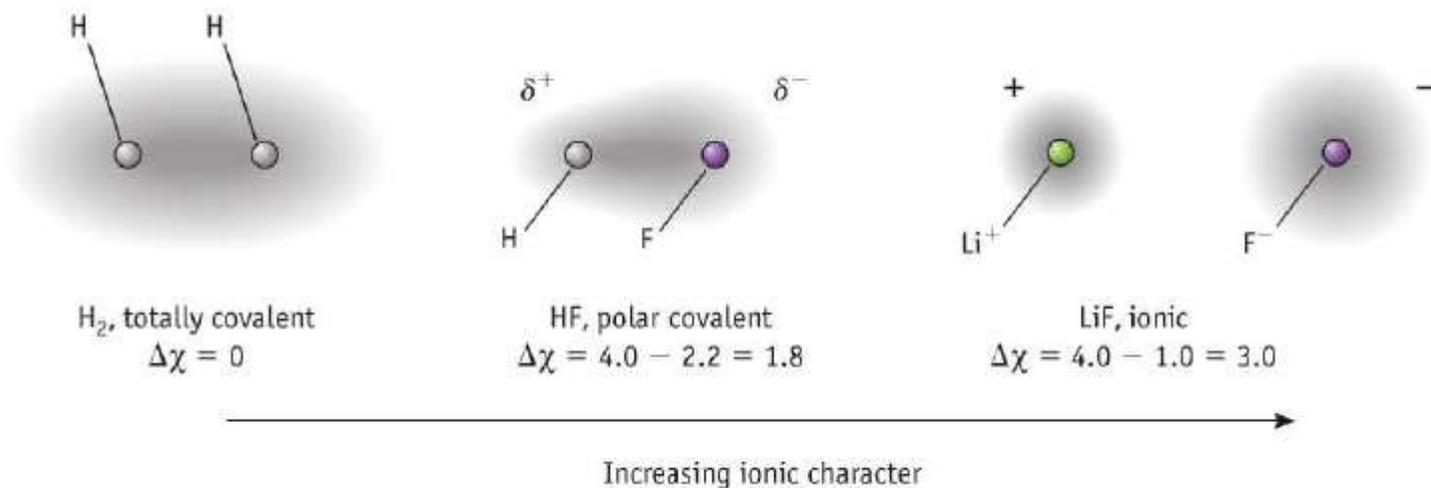
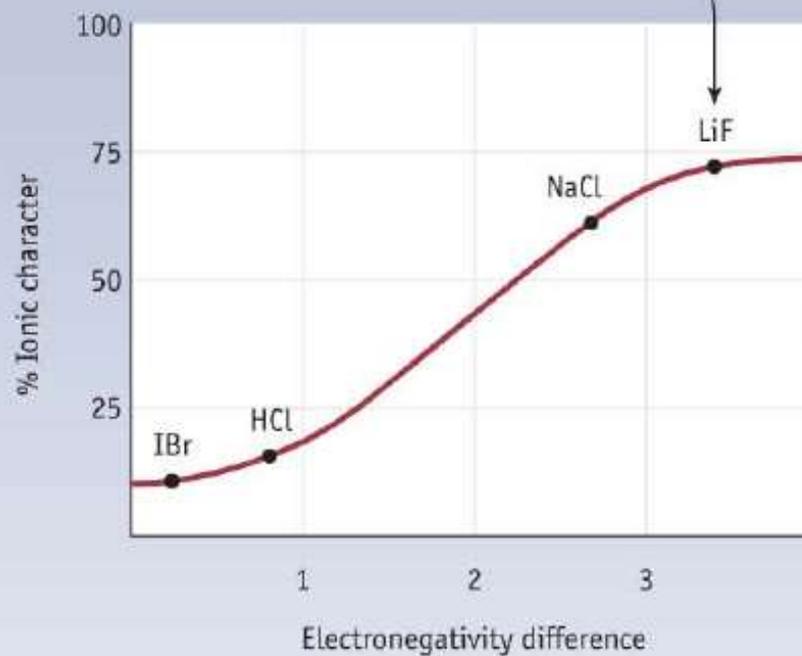
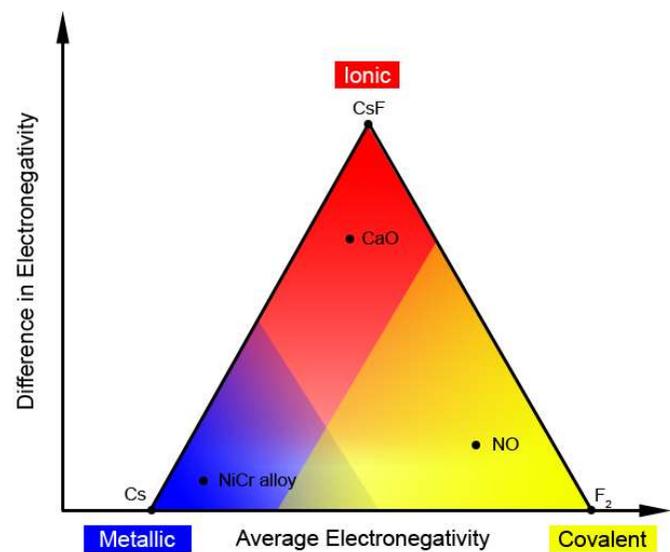
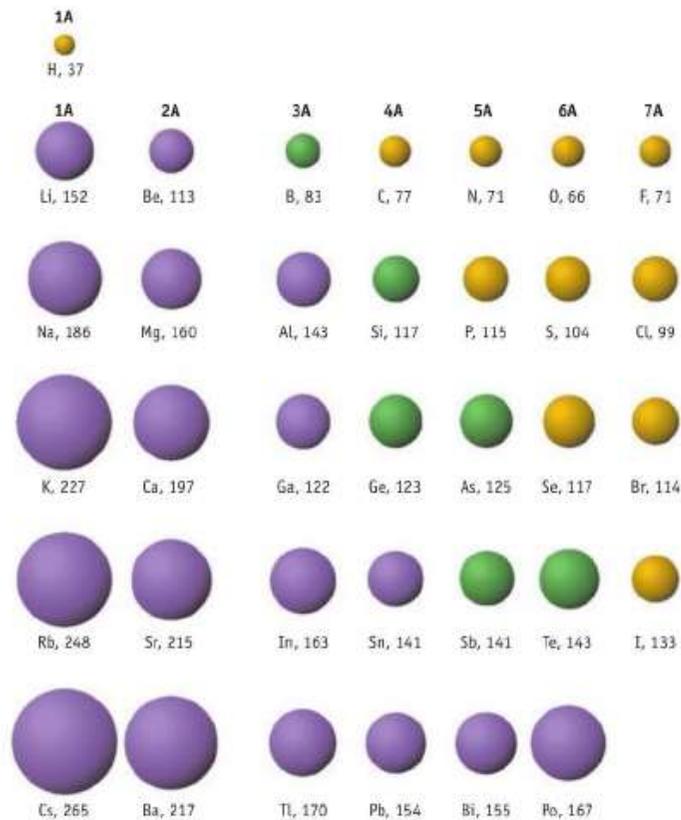


FIGURE 8.10 Covalent to ionic bonding. As the electronegativity difference increases between the atoms of a bond, the bond becomes increasingly ionic.



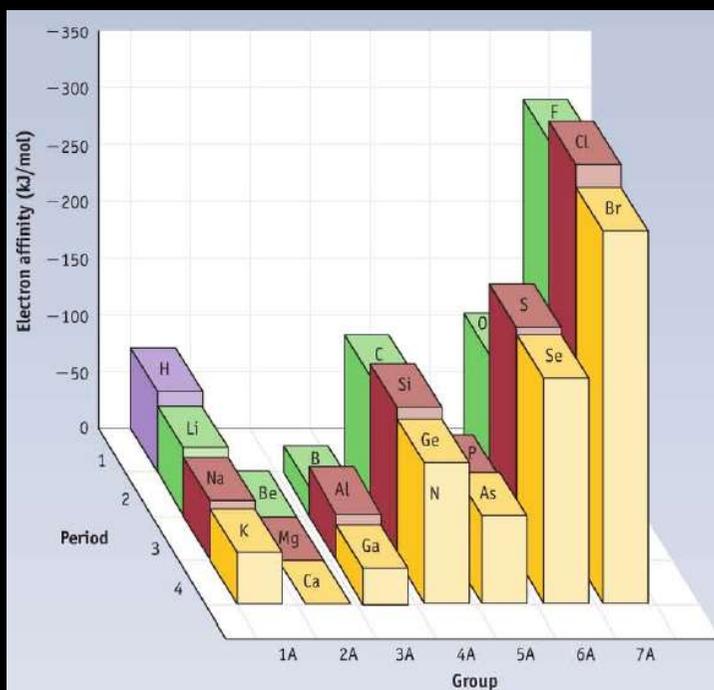
Electronegatividade



Raio atômico

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A
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

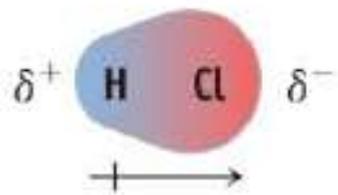


Afinidade eletrônica

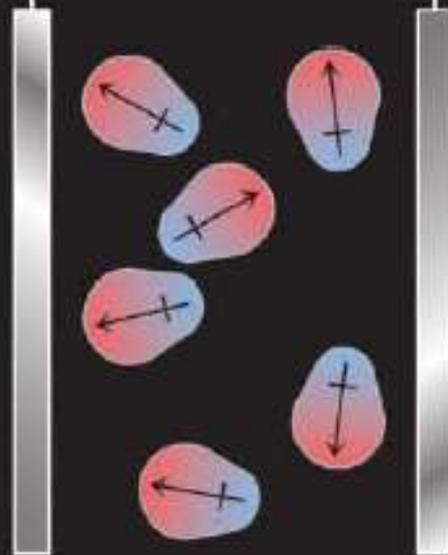
Polaridade

Questão: BF_3 é uma molécula polar?

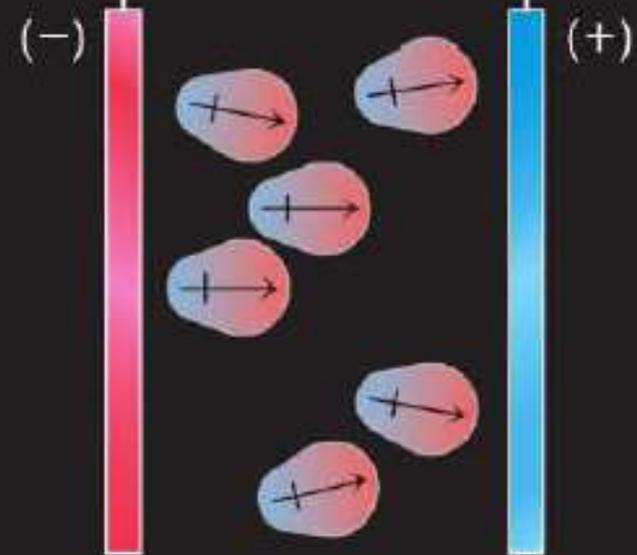
Momento dipolar



Electric Field OFF



Electric Field ON



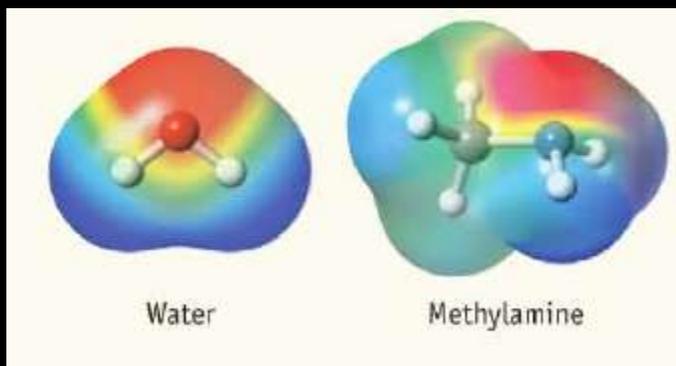
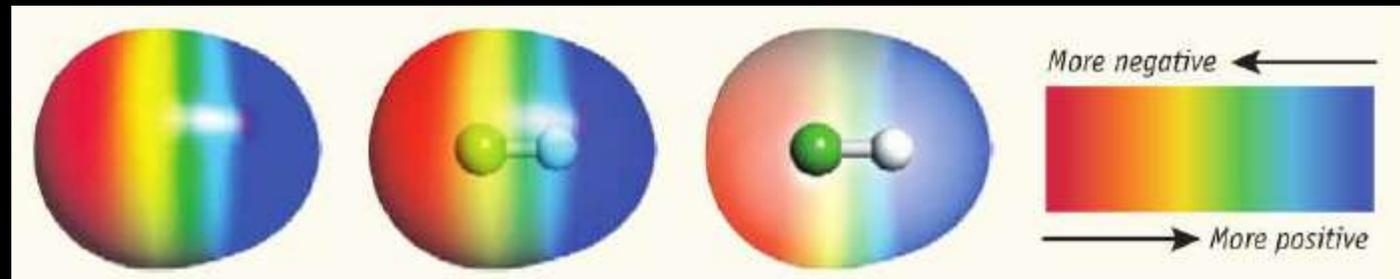
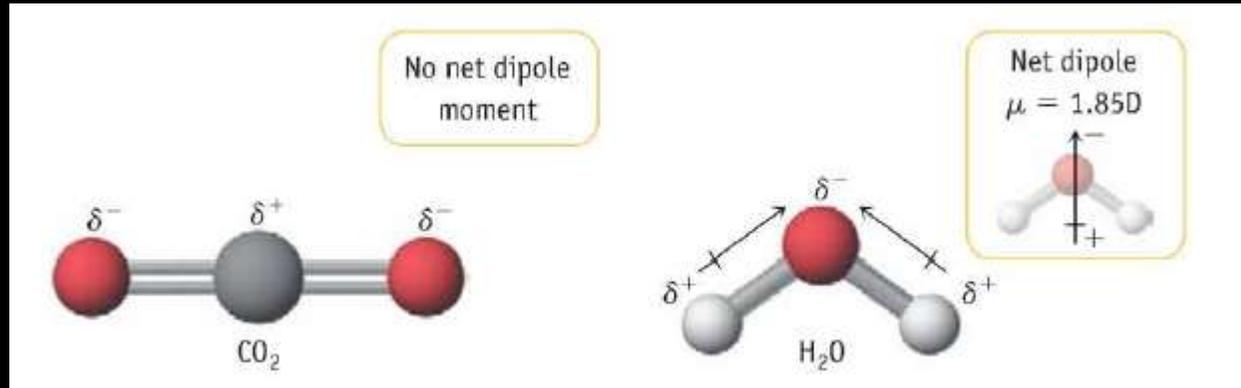
$$\mu = q \times d$$

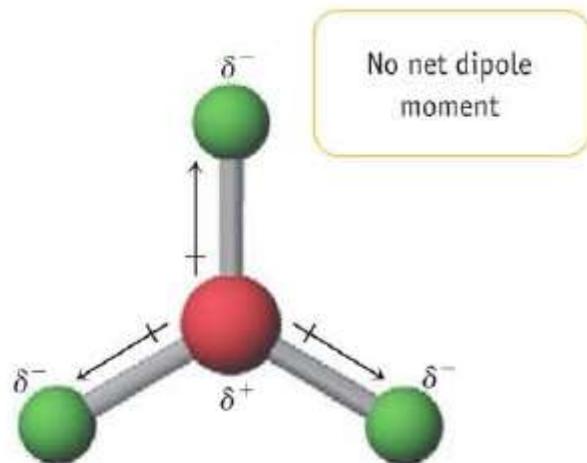
Momento dipolar

TABLE 8.7 Dipole Moments of Selected Molecules

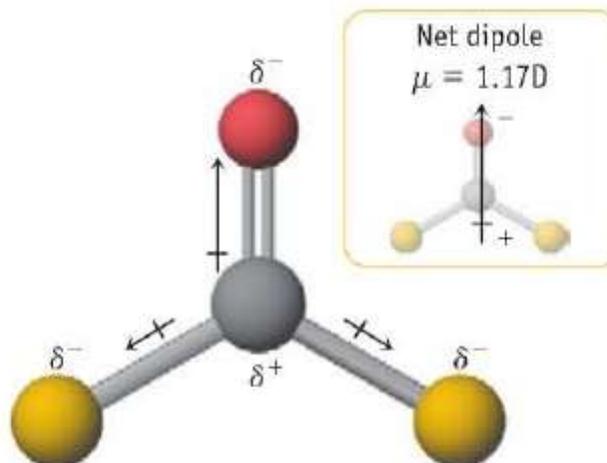
Molecule (AX)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AX ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	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

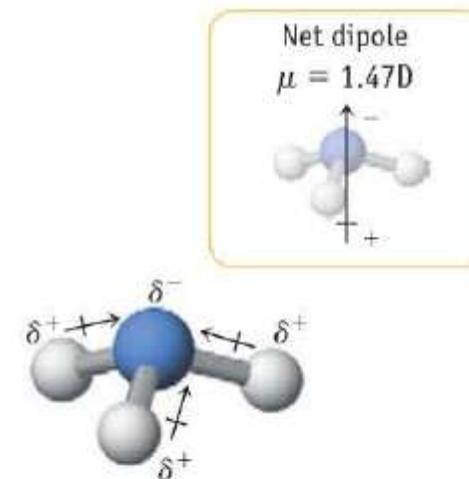




BF_3



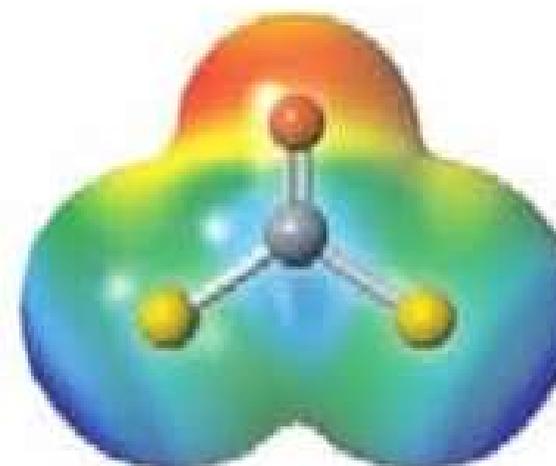
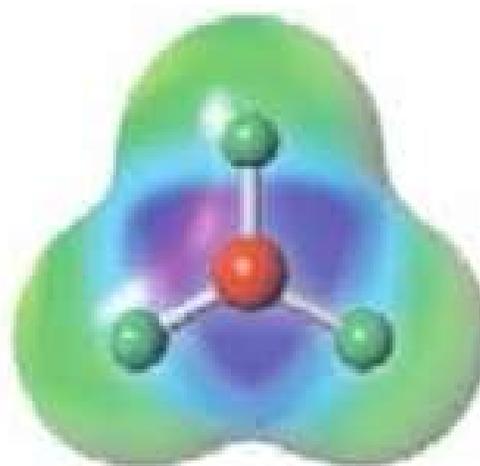
Cl_2CO



NH_3

Active Figure 8.14 Polar and nonpolar molecules of the type AX_3 . In BF_3 , the negative charge on the F atoms is distributed symmetrically, so the molecular dipole is zero. In contrast, in Cl_2CO and NH_3 , the negative charge in the molecules is shifted to one side and the positive charge to the other side.

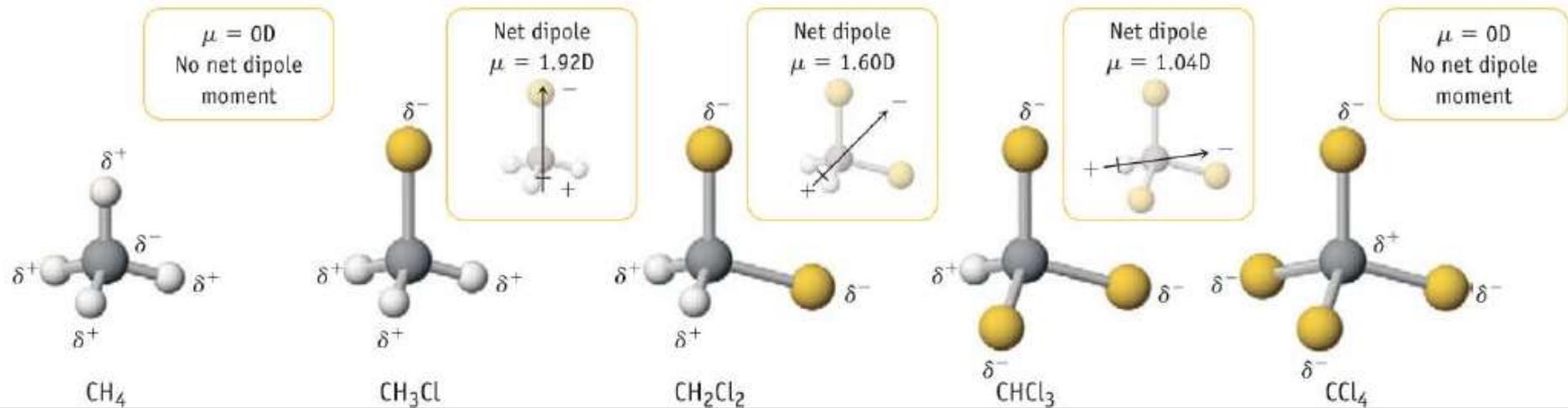
Molecule	Calculated Partial Charges	Calculated dipole
BF_3	B = 0.44, F = -0.15	0
Cl_2CO	O = -0.21, C = 0.23, Cl = -0.01	1.25
NH_3	N = -0.40, H = 0.13	1.58



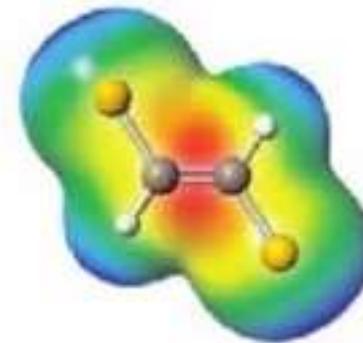
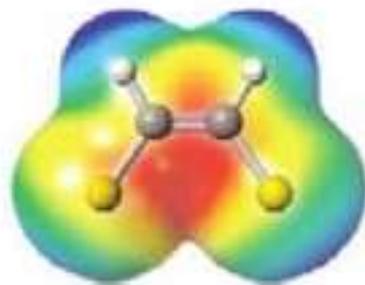
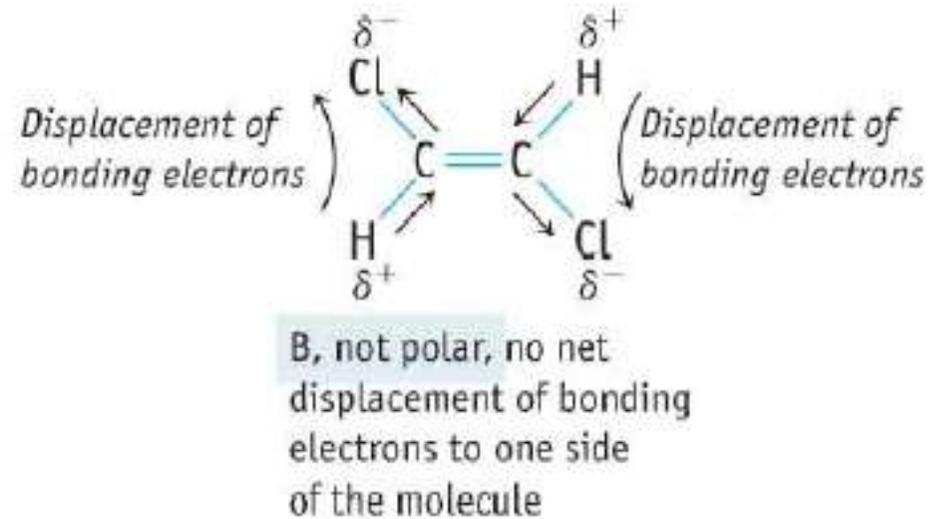
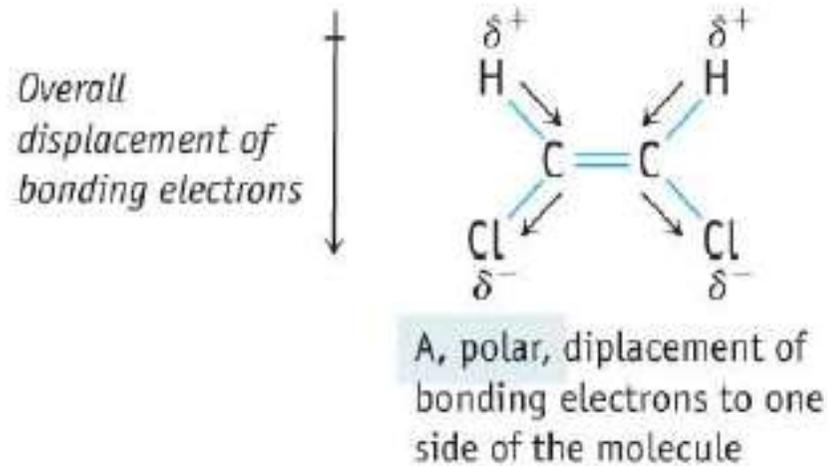
Polaridade

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

Polaridade



Polaridade



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

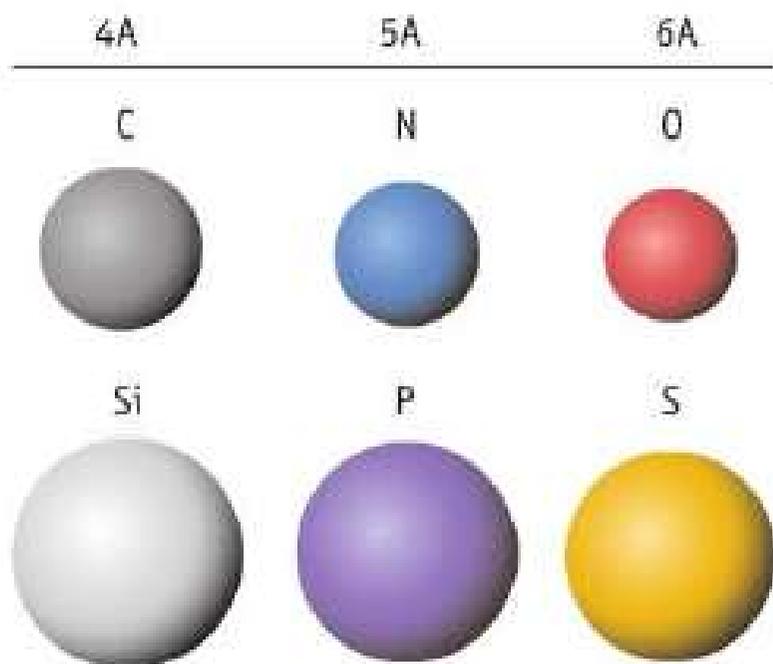
C=C 134 C≡C 121

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.

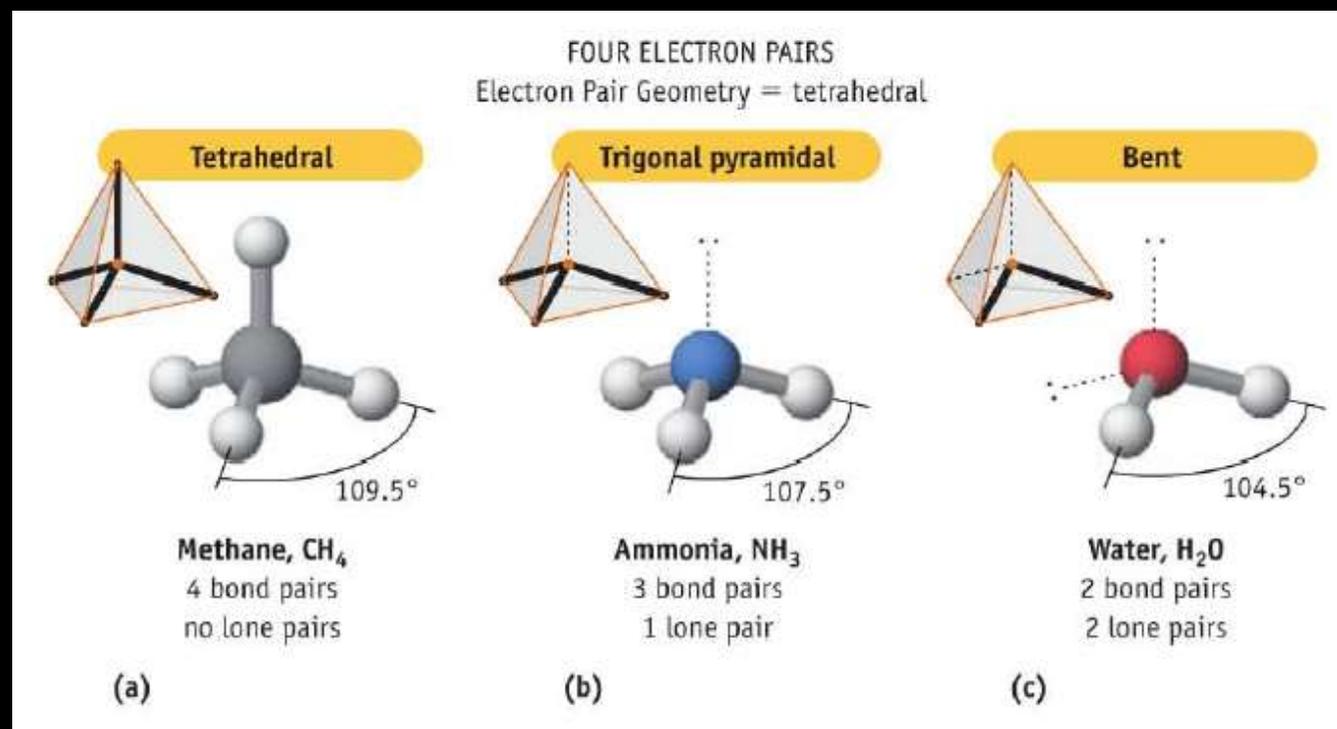
C—H	N—H	O—H
110	98	94 pm
Si—H	P—H	S—H
145	138	132 pm

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

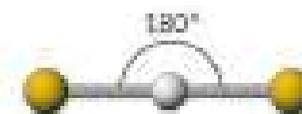
Geometry

Example

Two electron pairs
 sp

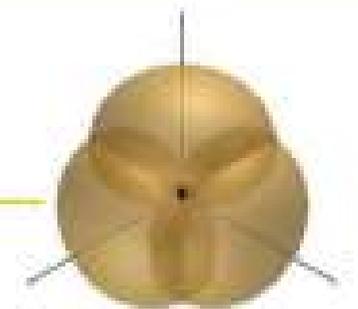


Linear



BeCl_2

Three electron pairs
 sp^2

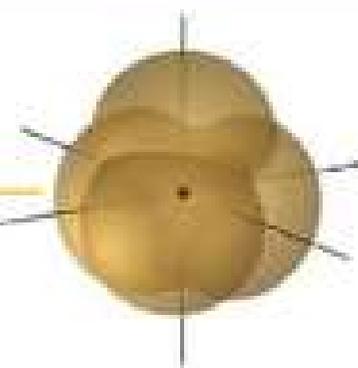


Trigonal-planar



BF_3

Four electron pairs
 sp^3

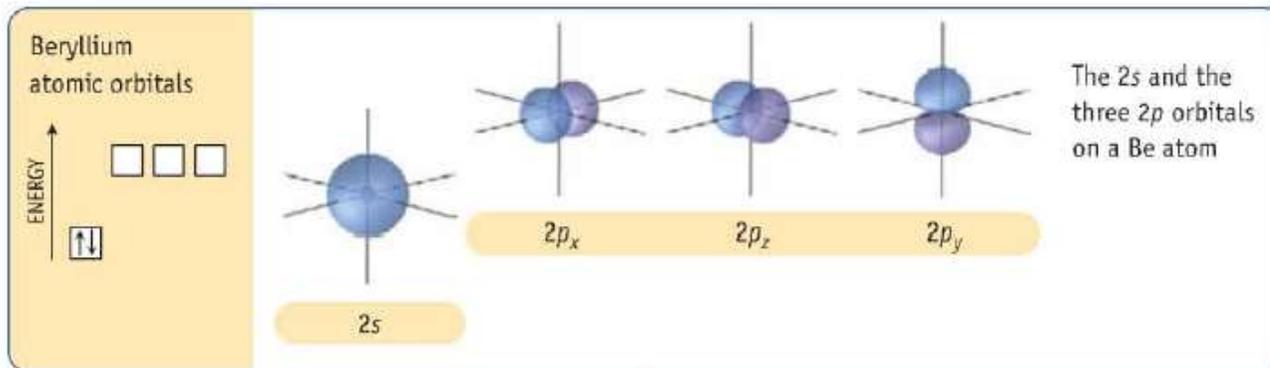


Tetrahedral

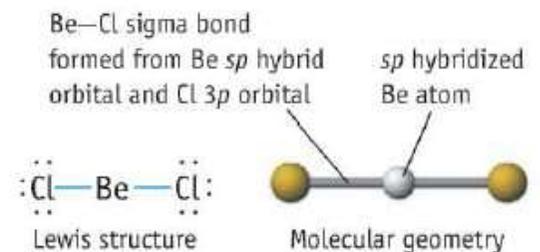
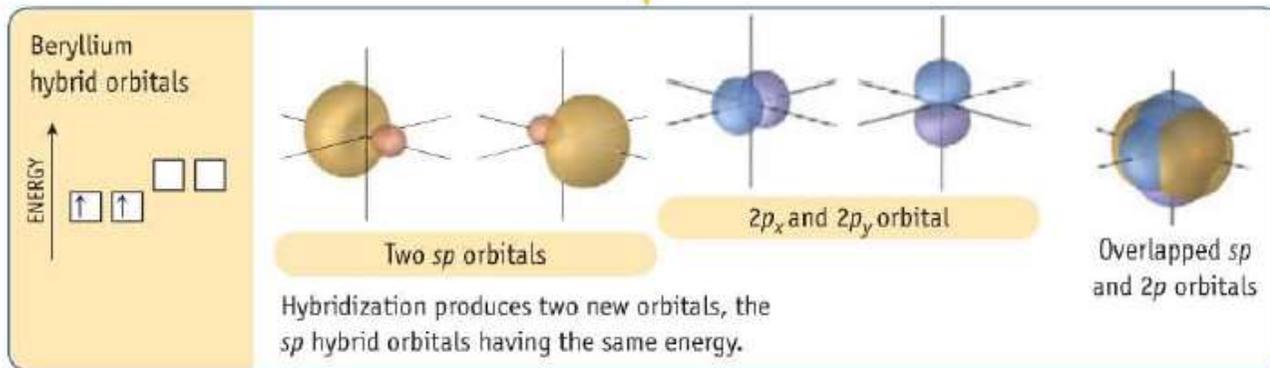


CH_4

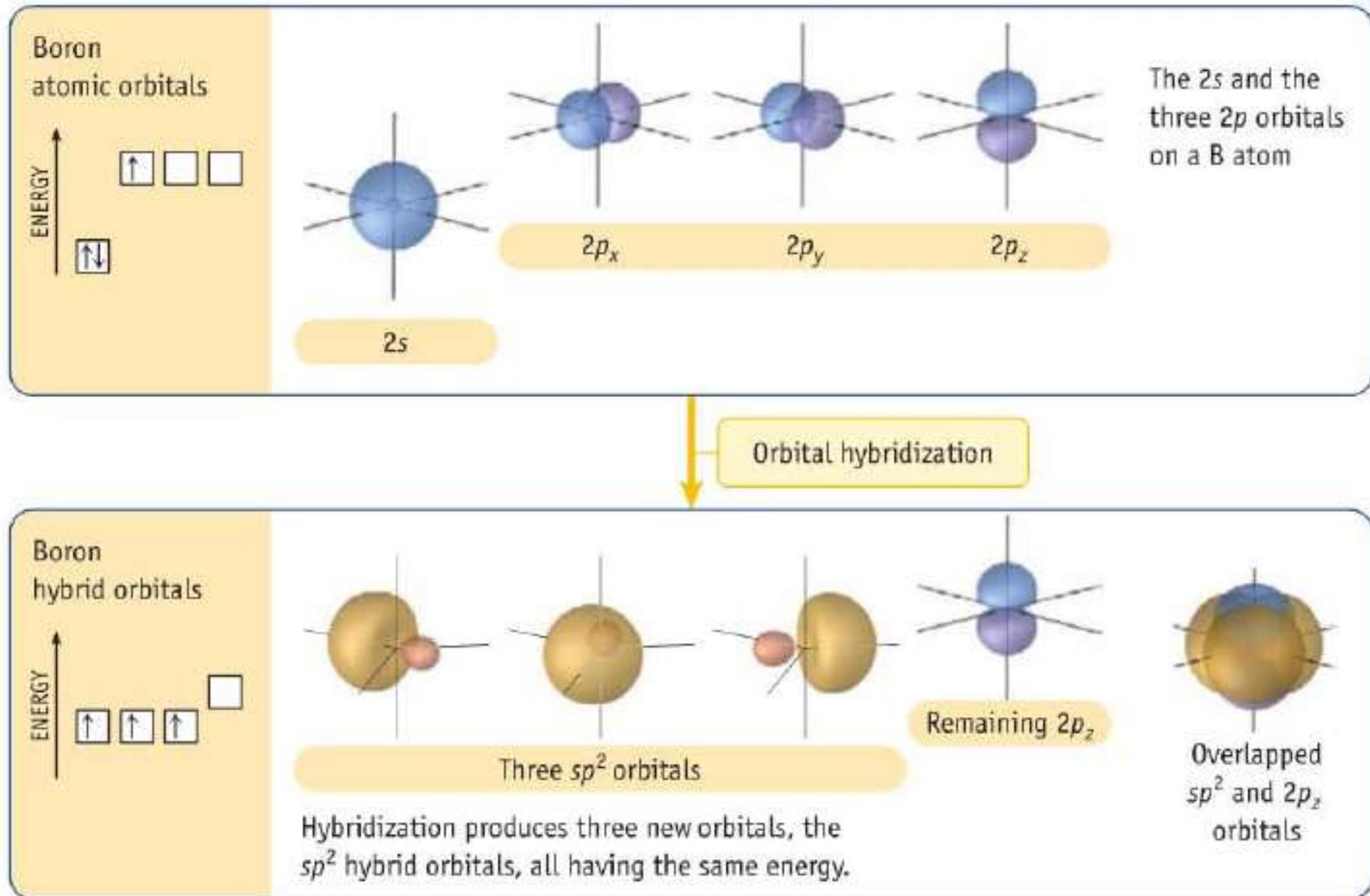
Hibridação Sp



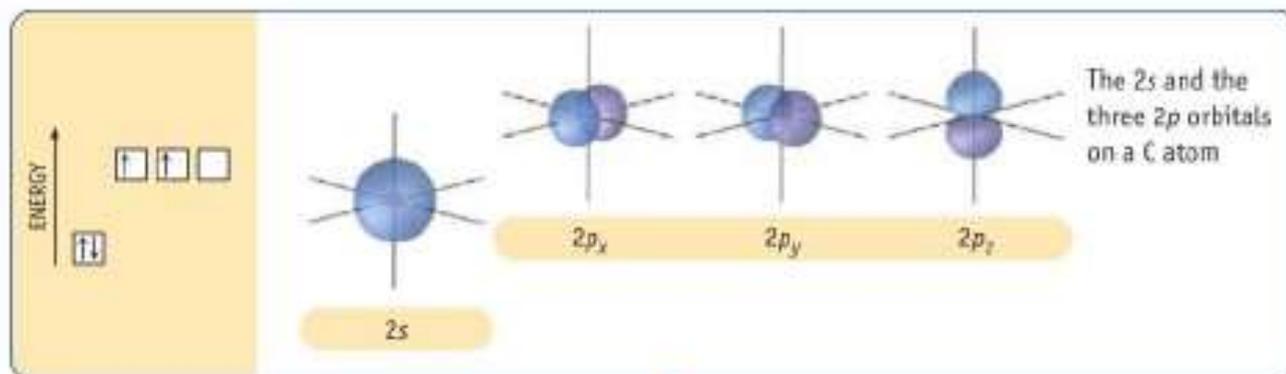
Orbital hybridization



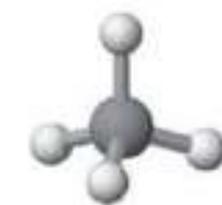
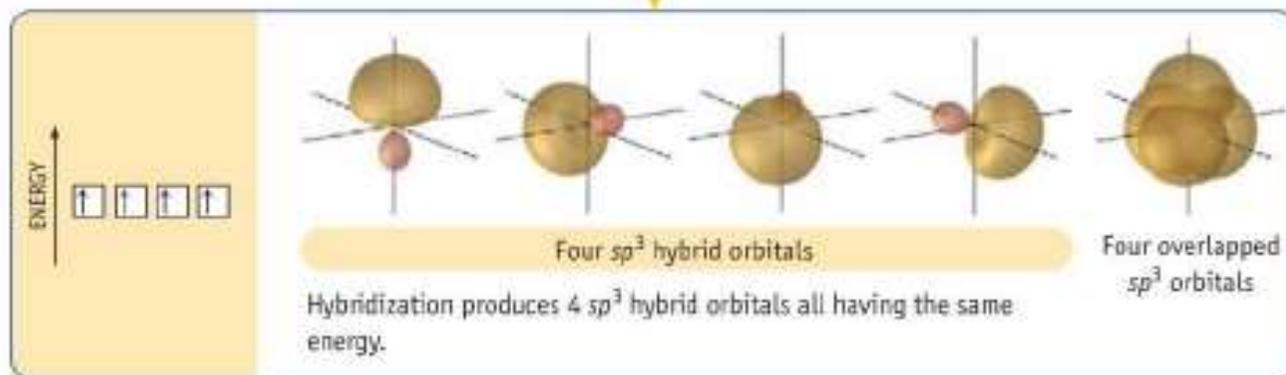
Hibridação sp^2



Hibridação sp^3



Orbital hybridization



Molecular model, CH_4

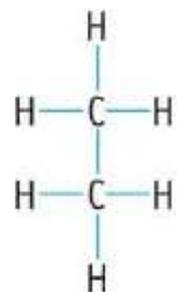


Orbital representation

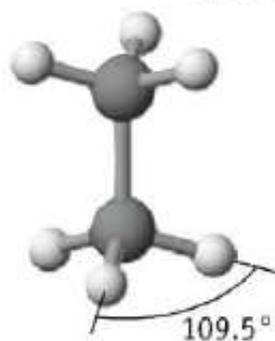
Pausa!!!!

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

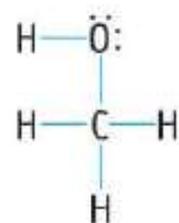
C—H bond is formed from overlap of C atom sp^3 hybrid orbital and H 1s orbital.



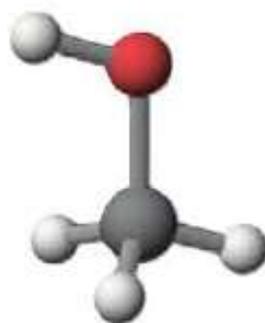
Orbital representation

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

sp^3 hybridized carbon atom.



Lewis structure



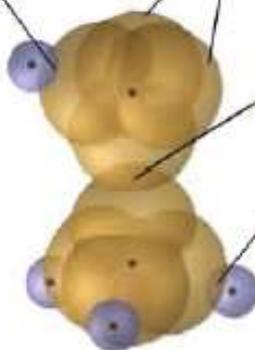
Molecular model

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.

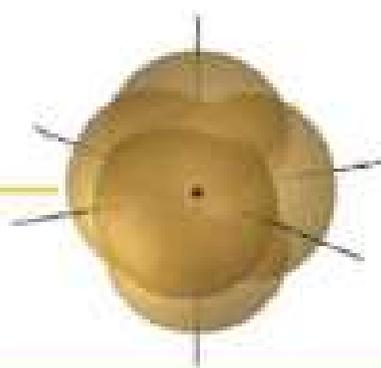
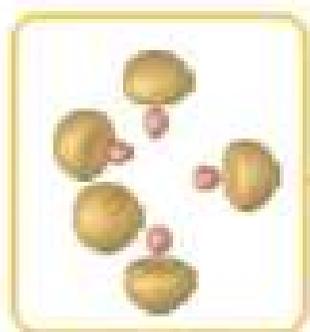
C—H bond formed from C atom sp^3 hybrid orbital and H 1s orbital.



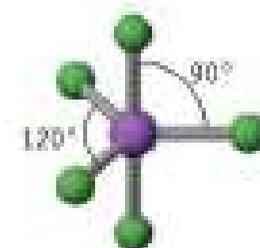
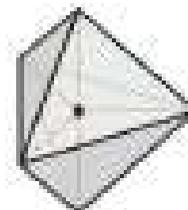
Orbital representation

Questão: Então e no caso do PF_5 e SF_6 ?

Five electron pairs
 sp^3d

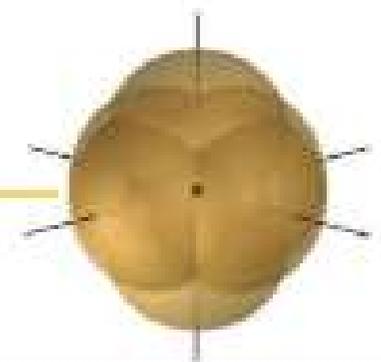


Trigonal-bipyramidal

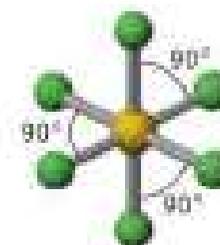
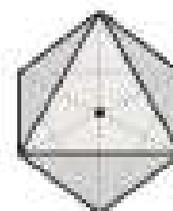


PF_5

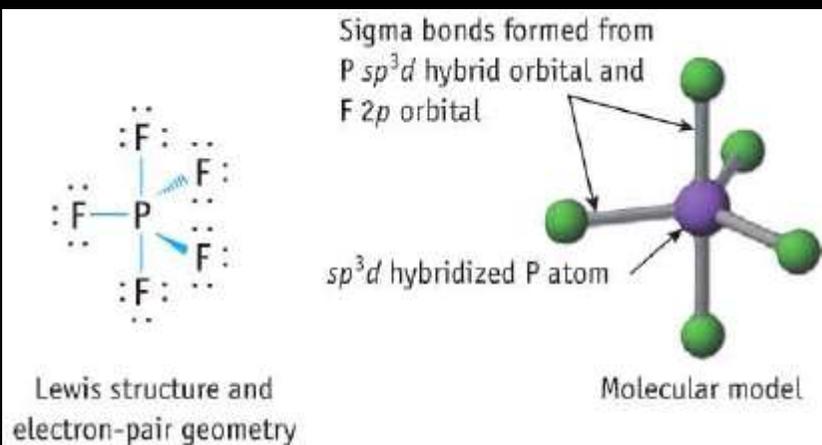
Six electron pairs
 sp^3d^2



Octahedral

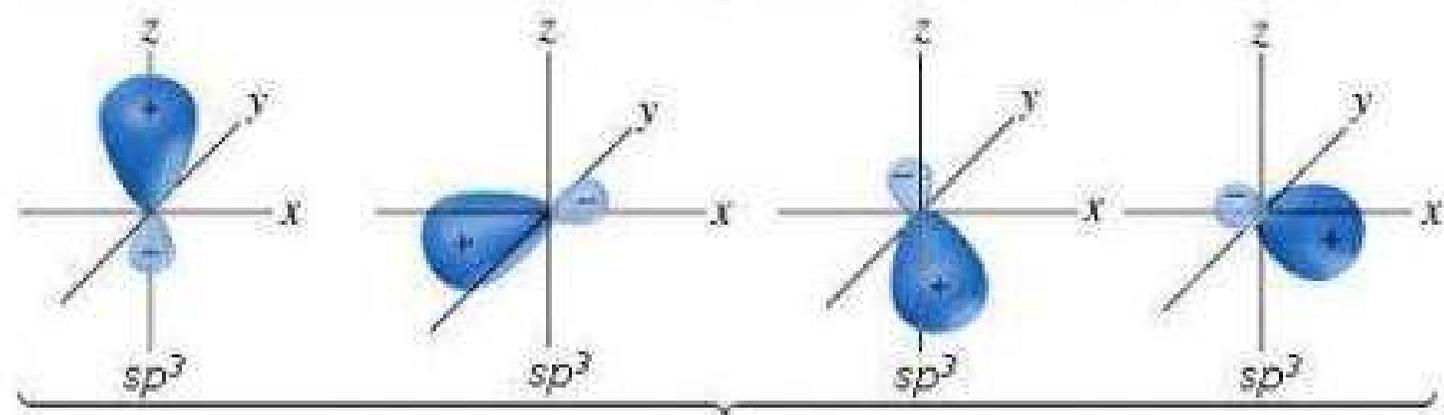
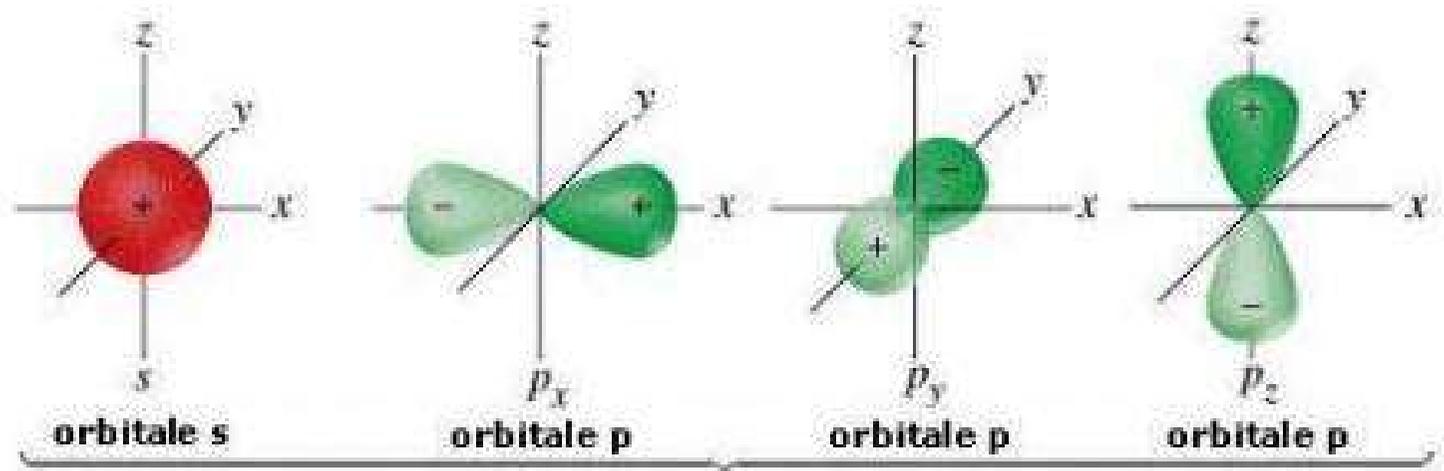


SF_6



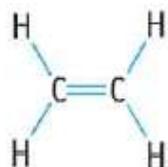
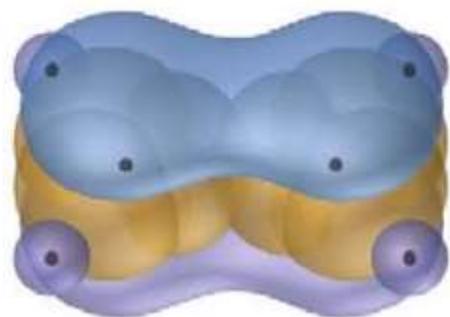
Questão: Então e se a ligação for múltipla?

ORBITAIS HIBRIDAS

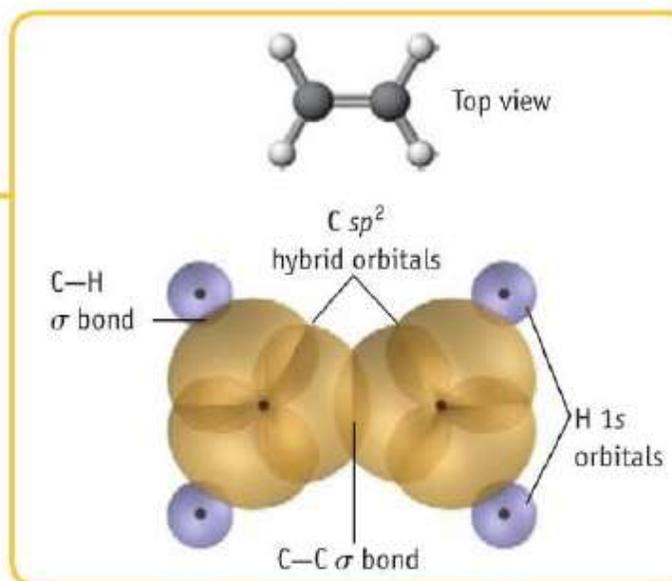


4 orbitali sp^3

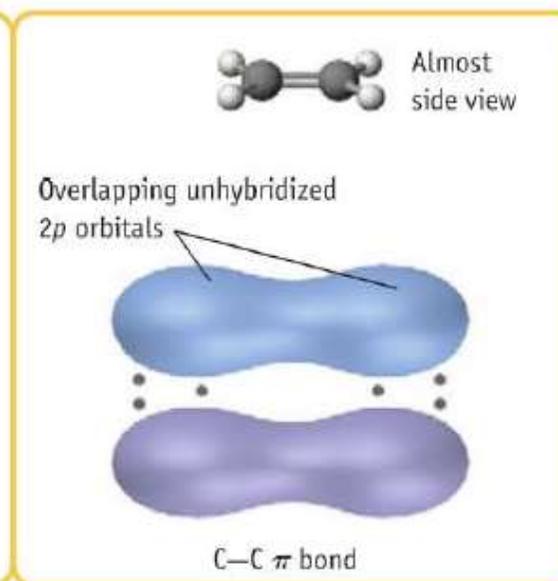




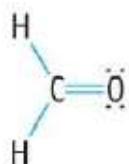
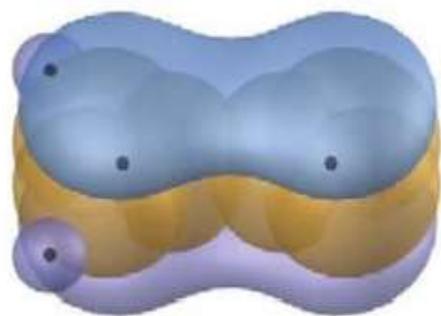
(a) Lewis structure and bonding of ethylene, C_2H_4 .



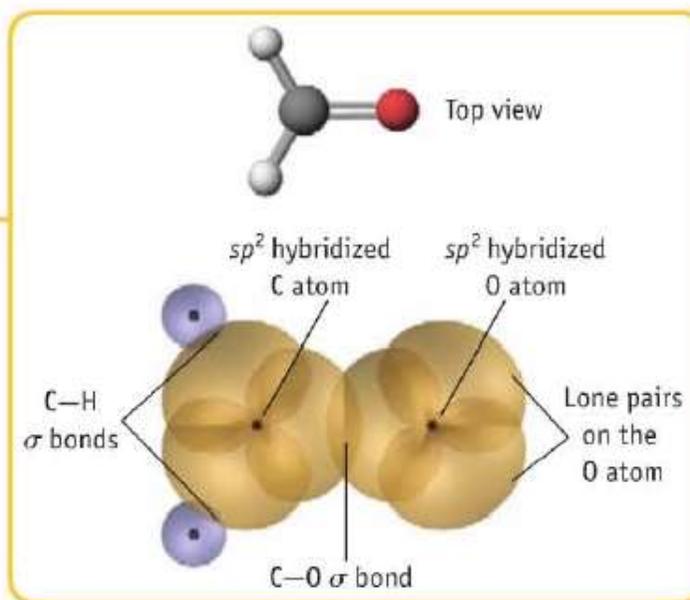
(b) The C-H σ bonds are formed by overlap of C atom sp^2 hybrid orbitals with H atom 1s orbitals. The σ bond between C atoms arises from overlap of sp^2 orbitals.



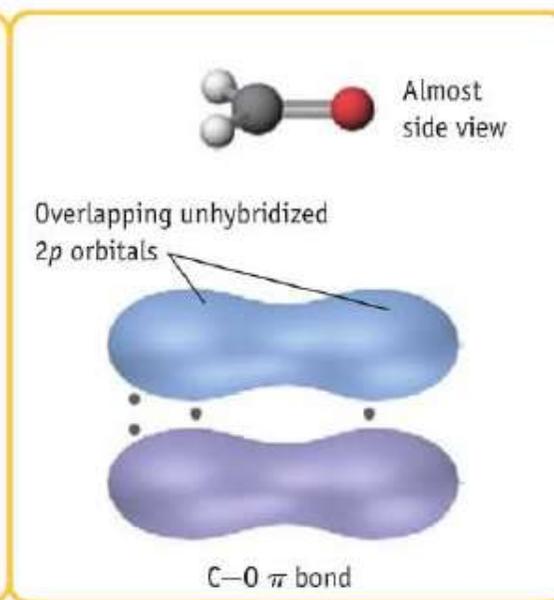
(c) The carbon-carbon π bond is formed by overlap of an unhybridized 2p orbital on each atom. Note the lack of electron density along the C-C bond axis from this bond.



(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.

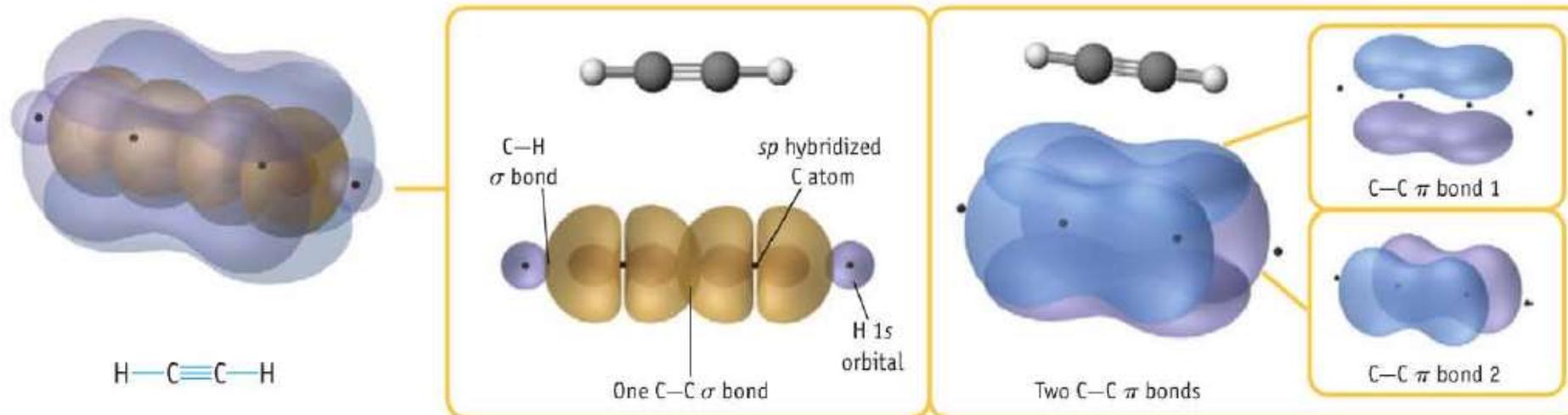
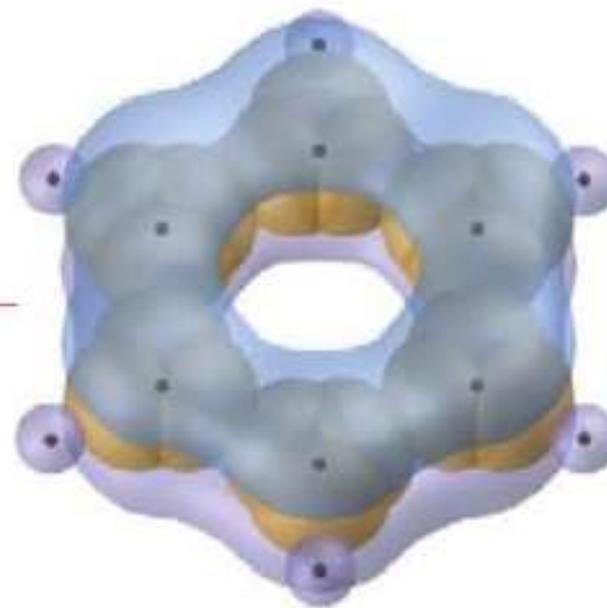
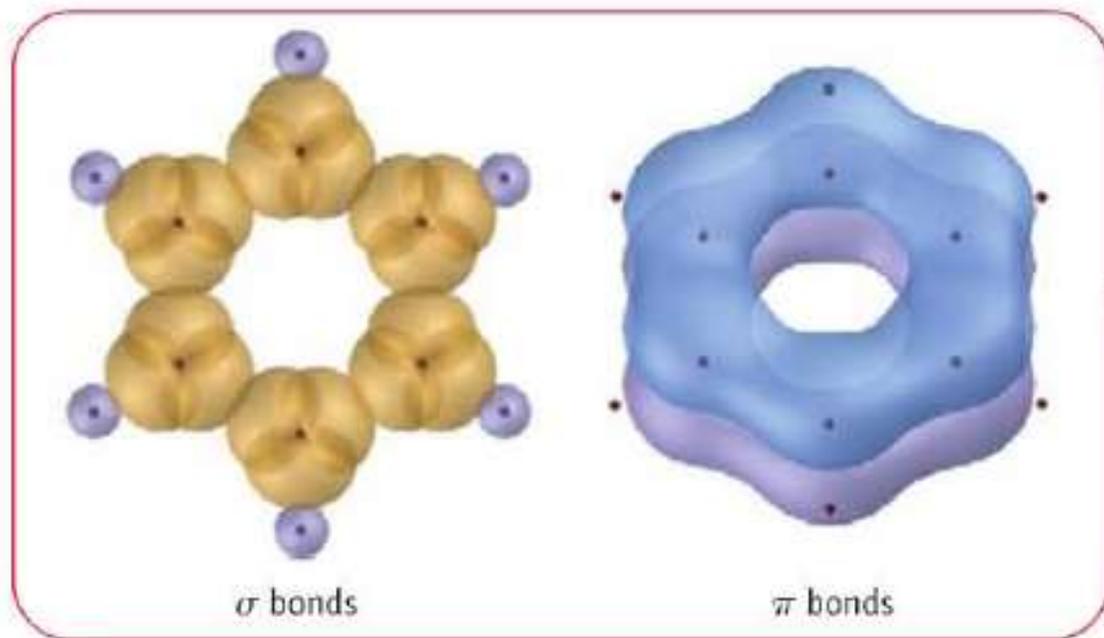
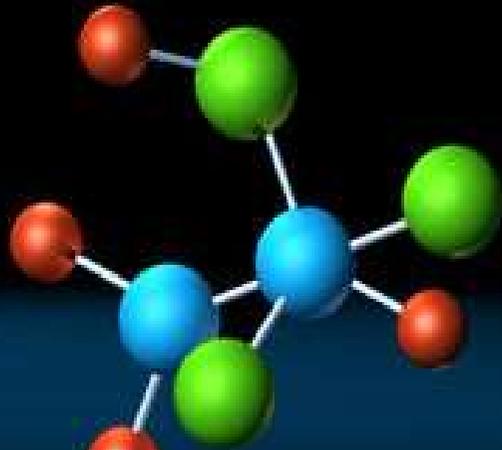


FIGURE 9.12 Bonding in acetylene.



Model of bonding in benzene

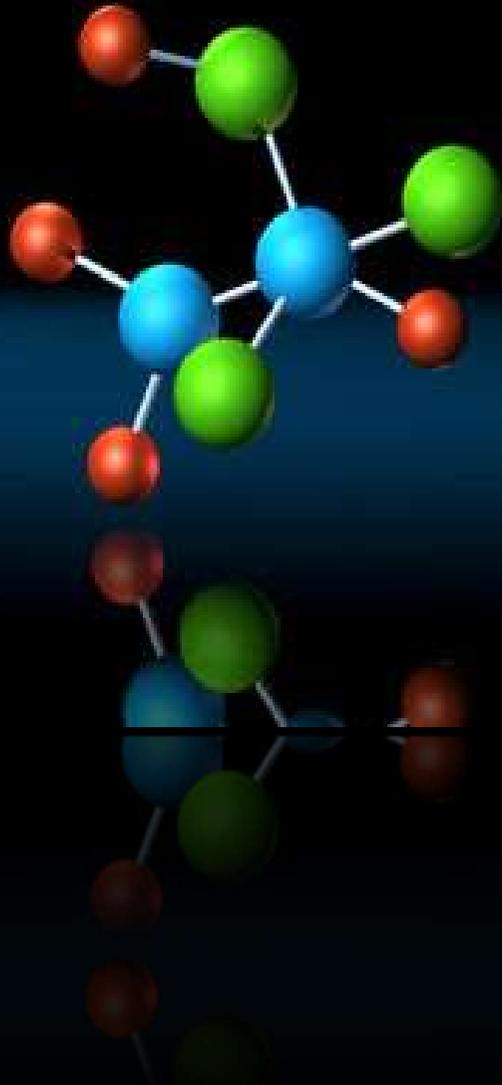
σ and π bonding in benzene



Exercicios

Aula 7

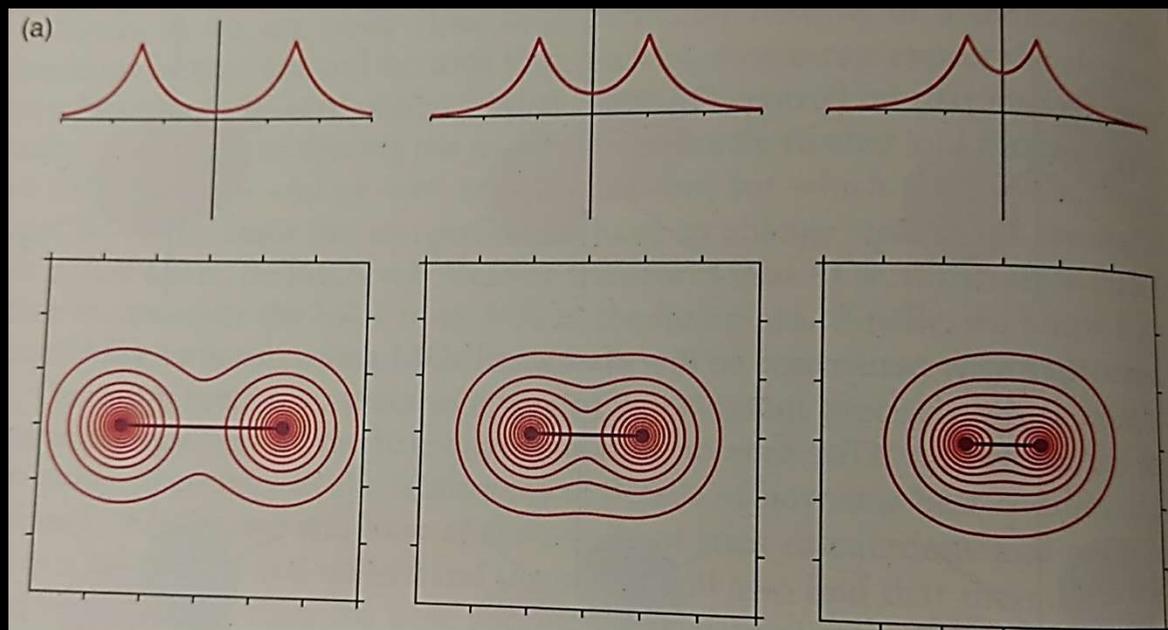
1. Desenhe a estrutura de Lewis para o fluoreto de carbonila COF_2 . Qual a geometria devido aos seus pares de elétrons e qual a geometria molecular em torno do átomo central? Qual é a hibridização do átomo de carbono? Quais orbitais se sobrepõem para formar as ligações σ e π entre carbono e oxigênio?
 2. Desenhe a estrutura de Lewis para a 1,1-dimetilhidrazina $(\text{CH}_3)_2\text{NNH}_2$. Qual é a hibridização do átomo de carbono? Quais são as orbitais que se sobrepõem para formar a ligação entre dois átomos de nitrogênio?
 3. Desenhe a estrutura de Lewis para hidroxilamina H_2NOH . Qual é a hibridização do átomo de nitrogênio e do oxigênio nessa molécula? Quais as orbitais se sobrepõem para formar a ligação entre nitrogênio?
 4. Especifique a geometria devida aos pares de elétrons e a geometria molecular para cada átomo sublinhado na seguinte lista. Descreva o conjunto de orbitais híbridos utilizados pelo átomo sublinhado em cada molécula ou ion?
 5. Desenhe as estruturas de Lewis do ácido HPO_2F_2 e de seu anion PO_2F_2^- . Qual é a geometria molecular e a hibridação do átomo de fosforo em cada espécie
- Qual é a hibridização do átomo de carbono no fósforo Cl_2CO . Dê uma descrição completa das ligações σ e π nessa molécula.
6. Qual é a geometria devida aos pares de elétrons e qual é a geometria molecular em torno do átomo central S no cloreto de tionila SOCl_2 ? Qual é a hibridização do enxofre nesse composto?
 7. Qual é a geometria devida aos pares de elétrons e qual é a geometria molecular em torno do átomo central S no cloreto de tionila SOCl_2 ? Qual é a hibridização do enxofre nesse composto?



***Estrutura molecular e
ligações de orbitais e
orbitais híbridas***

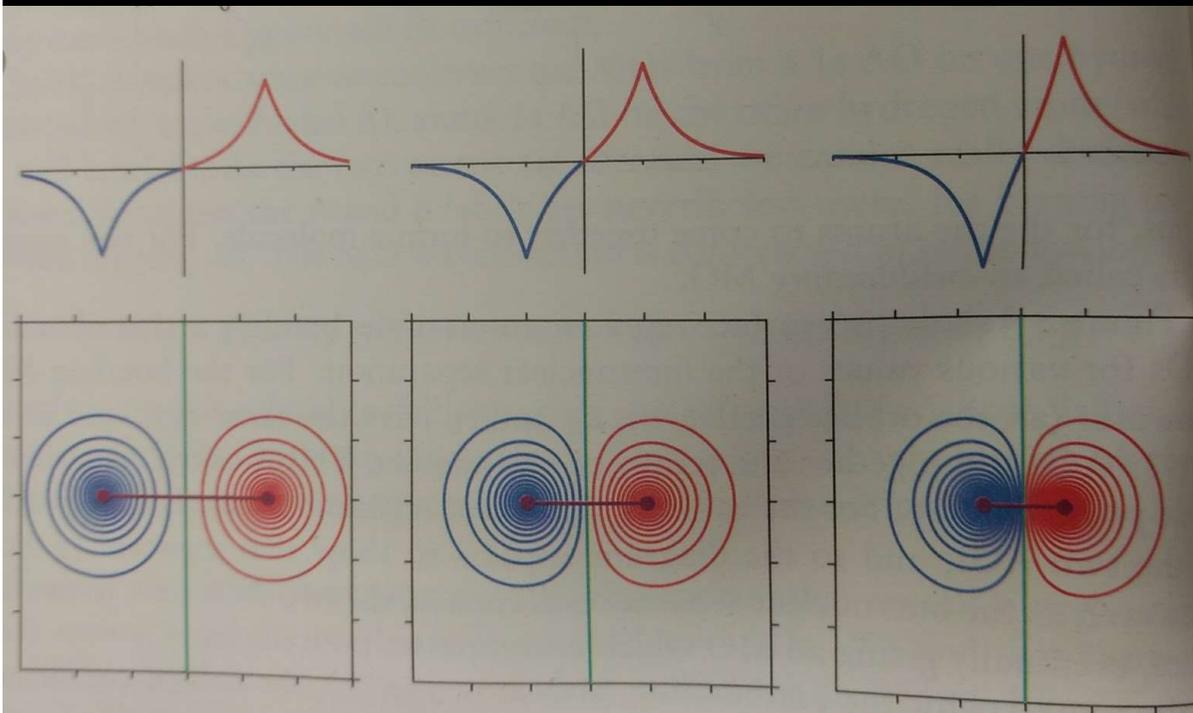
Aula 8

Teoria das orbitais moleculares (TOM)



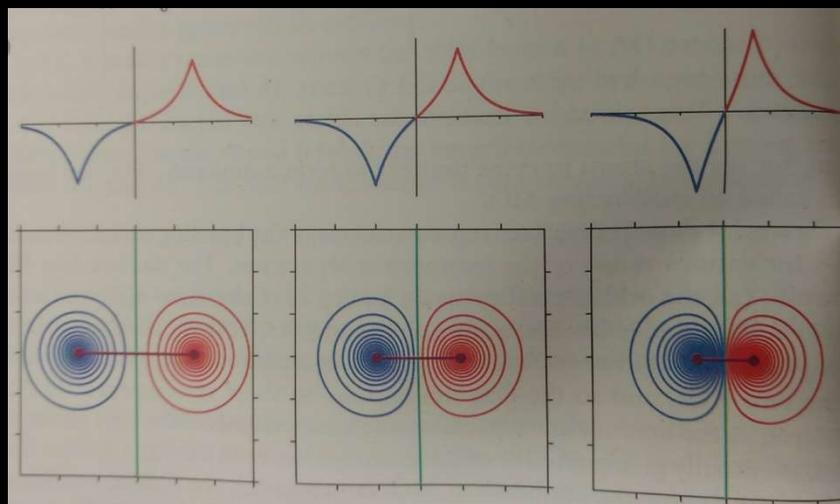
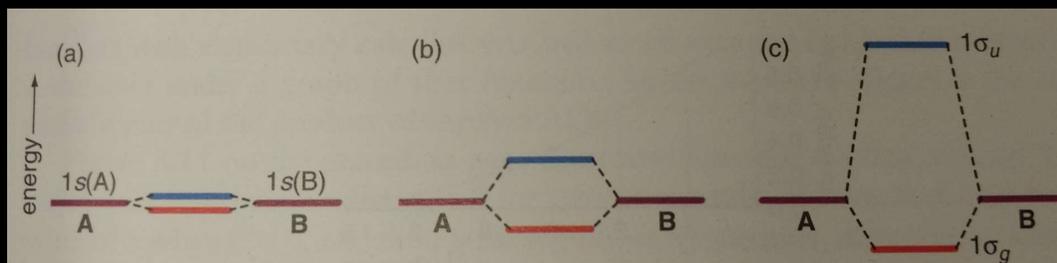
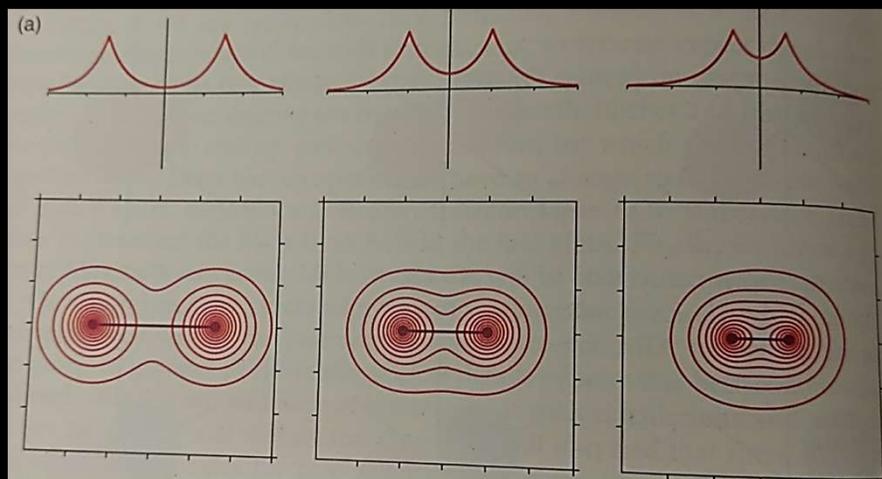
- Formação de um orbital molecular (OM) a partir de dois orbitais atômicos (OA)
- Neste caso o orbital molecular formado denomina-se de orbital ligante.
- E a sua energia é inferior à dos dois orbitais moleculares que lhe deram origem.
- A densidade eletrônica desta orbital situa-se na região mais interna do orbital

Teoria das orbitais moleculares (TOM)



- Formação de um orbital molecular (OM) a partir de dois orbitais atômicos (OA)
- Neste caso o orbital denomina-se de anti-ligante
- Esta orbital é mais energética que a orbital ligante
- A sua energia é maior que a dos orbitais moleculares que lhe dão origem.
- Quando este orbital é ocupado por elétrons a energia de ligação diminui enfraquecendo deste modo a ligação química.
- A densidade eletrônica desta orbital situa-se na região mais externa do orbital

Teoria das orbitais moleculares (TOM)

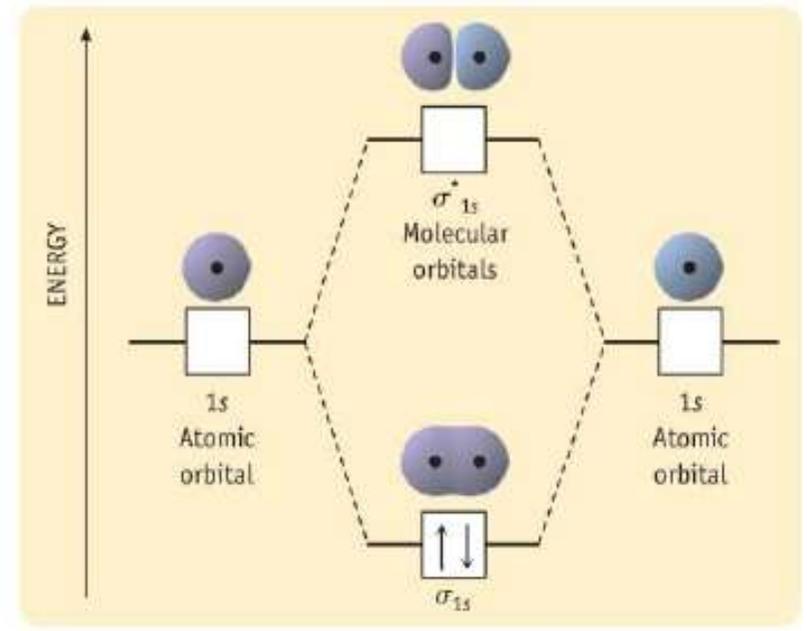
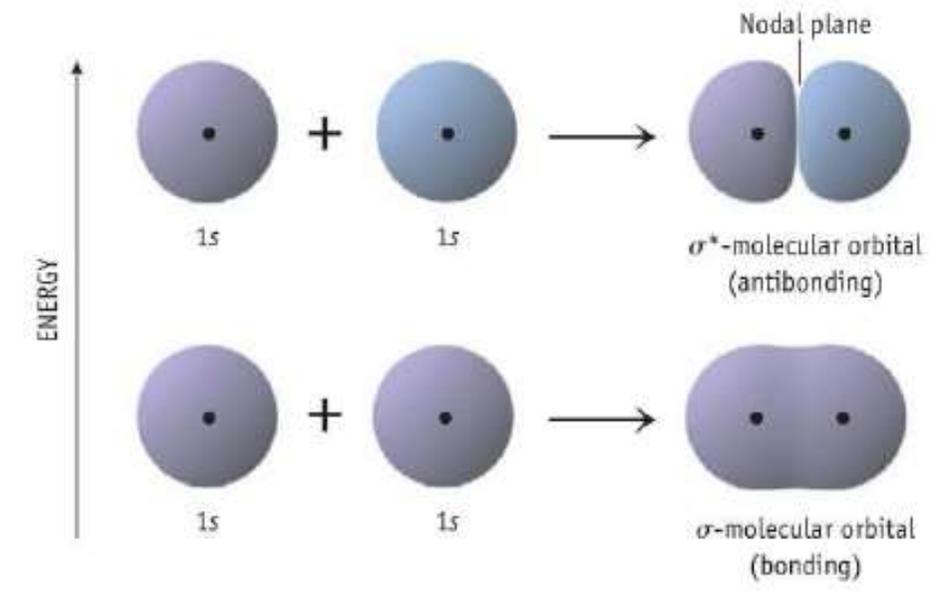


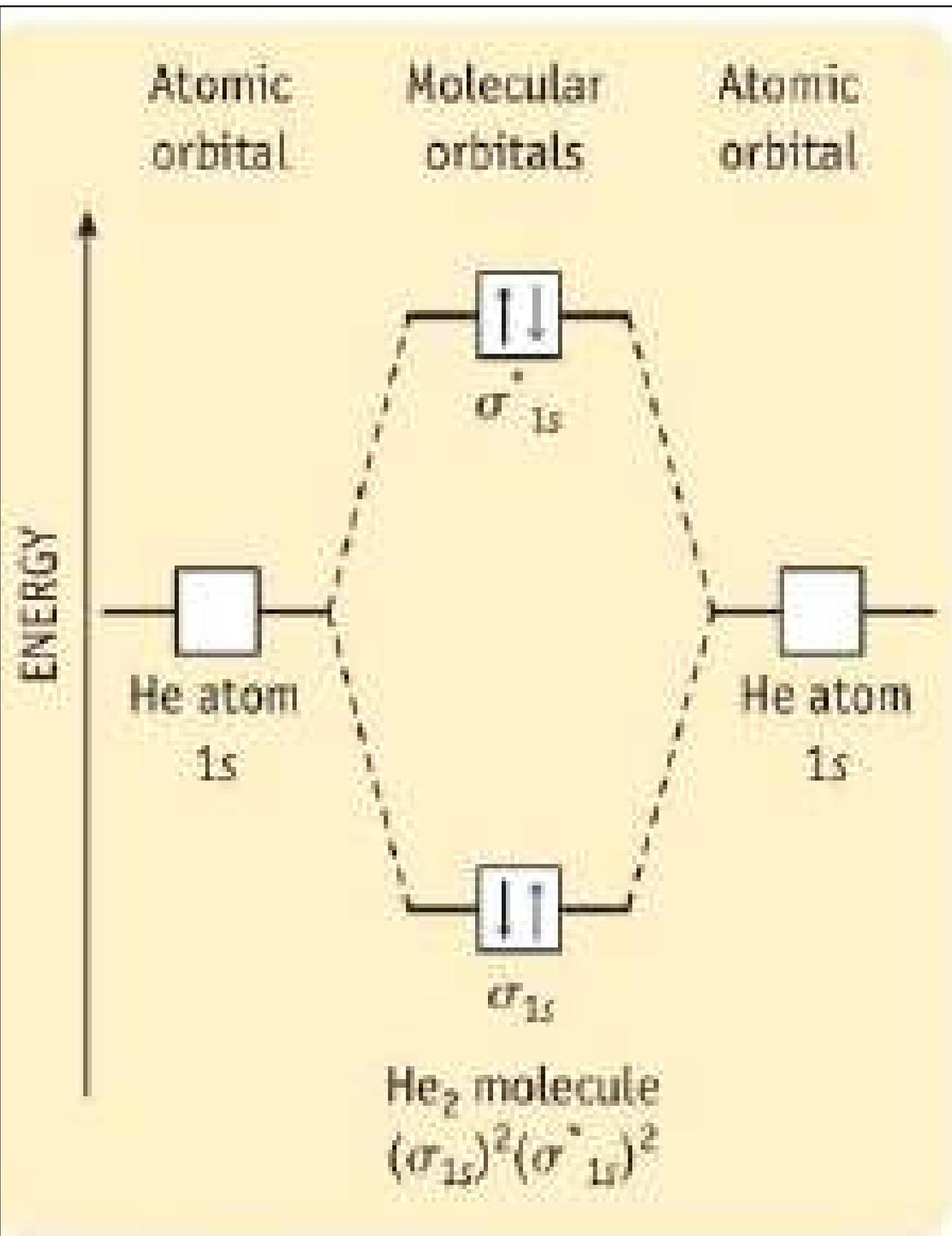
- Formação de um orbital molecular (OM) a partir de dois orbitais atômicos (OA)
- A energia na Orbital anti-ligante aumenta à medida que os dois átomos se aproximam

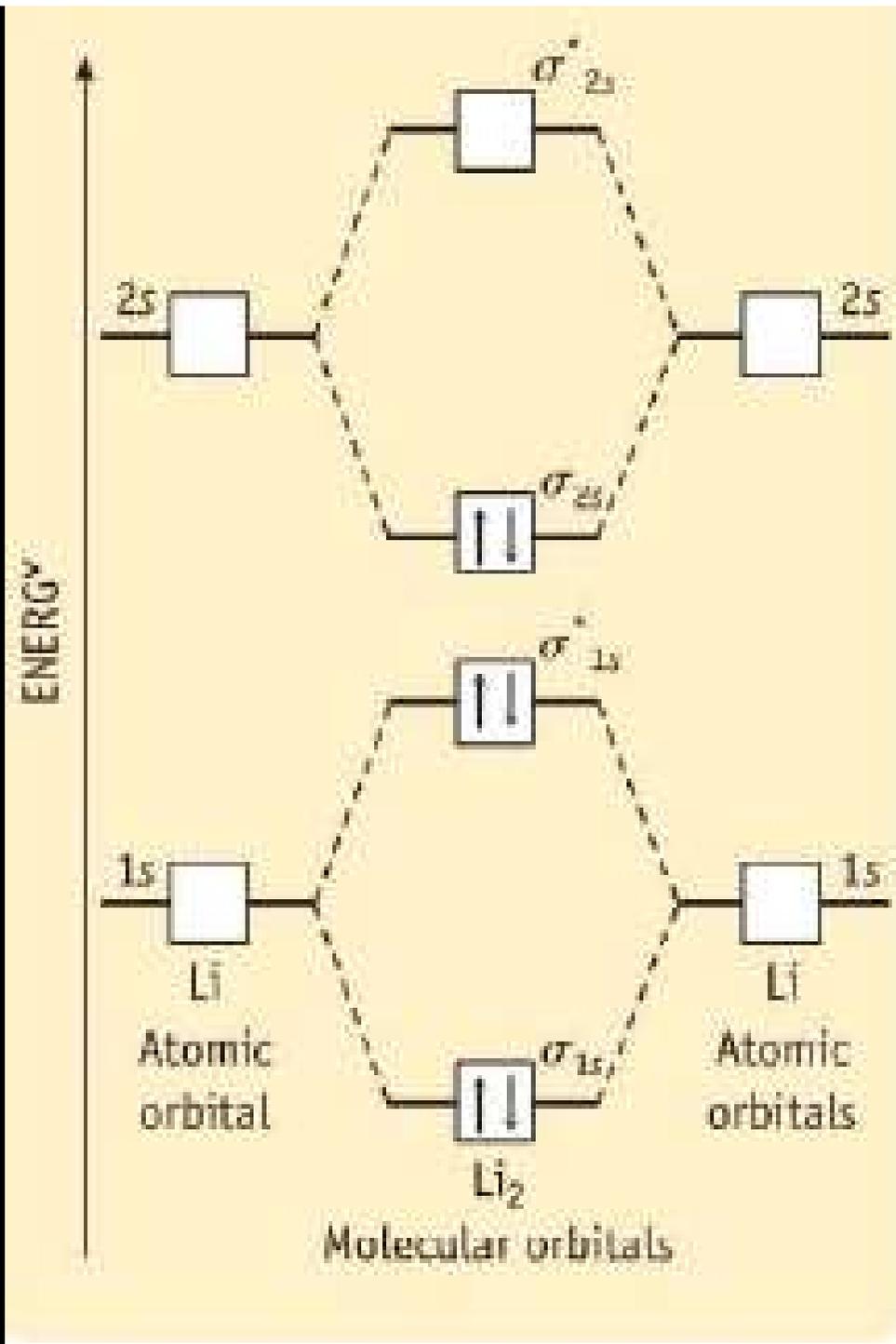
Teoria das orbitais moleculares (TOM)

resumo

- 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.

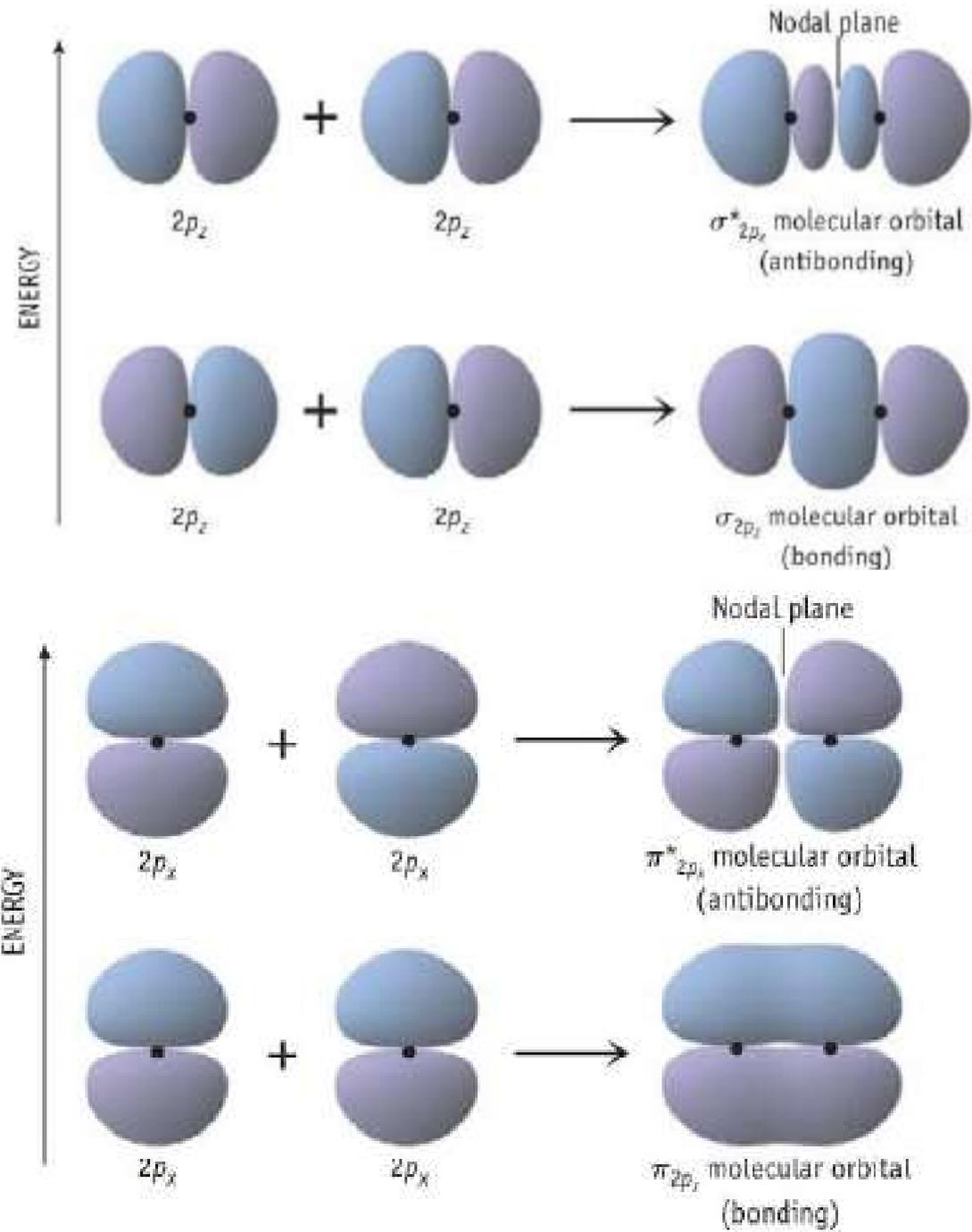


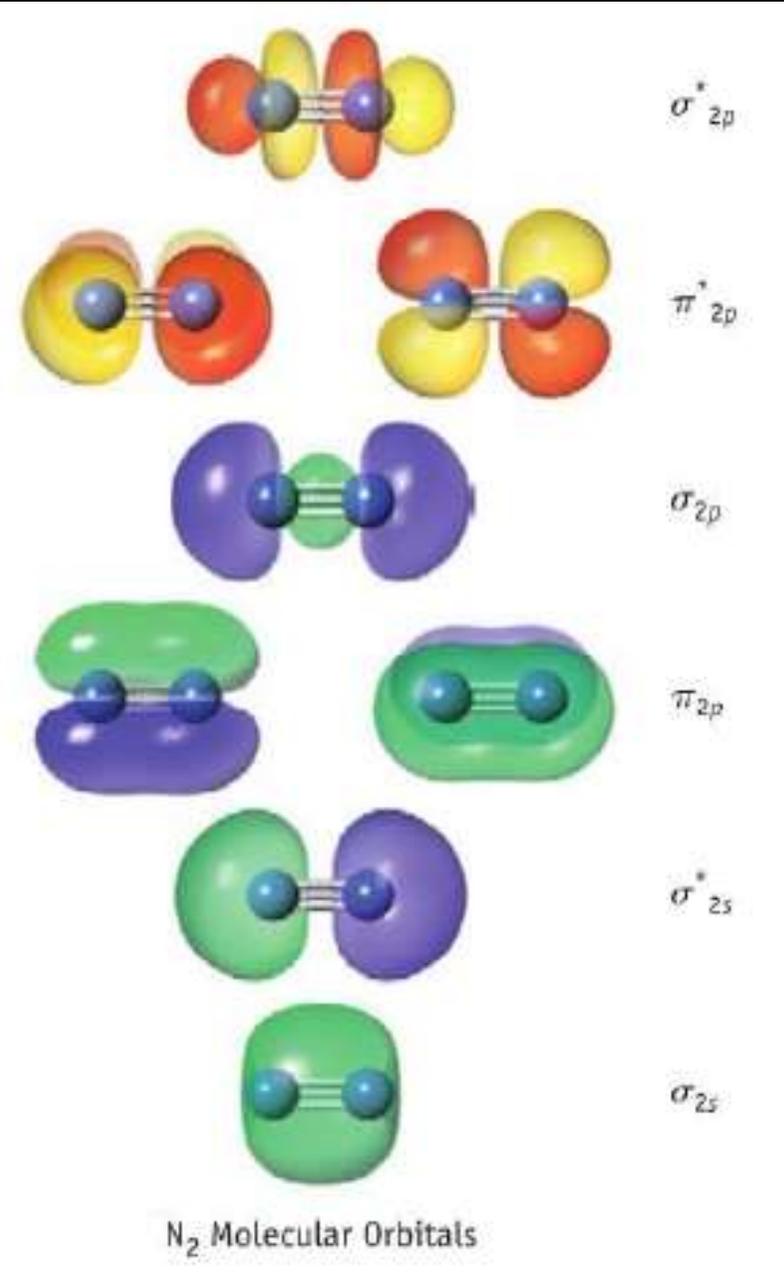
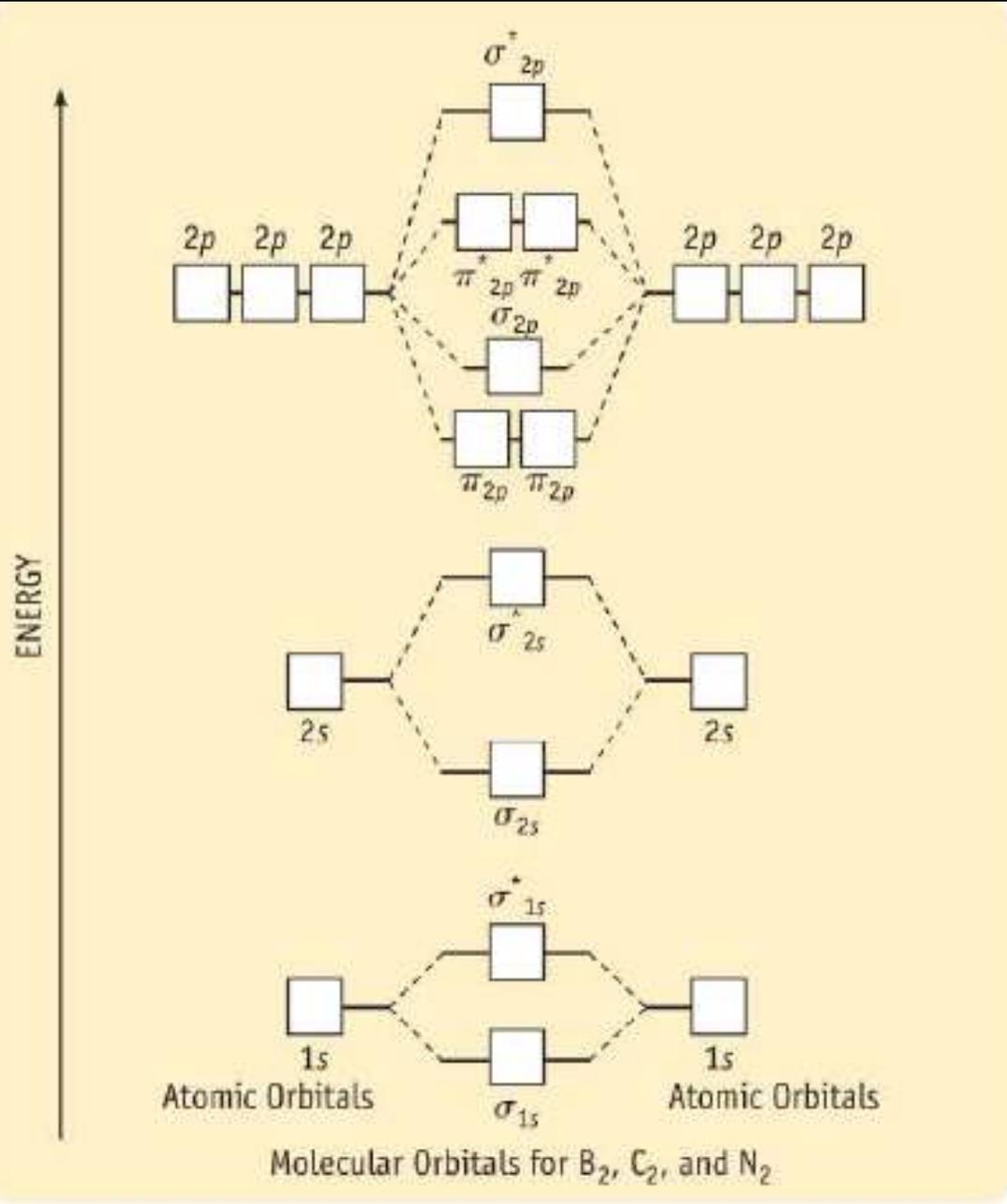




Ligação química

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





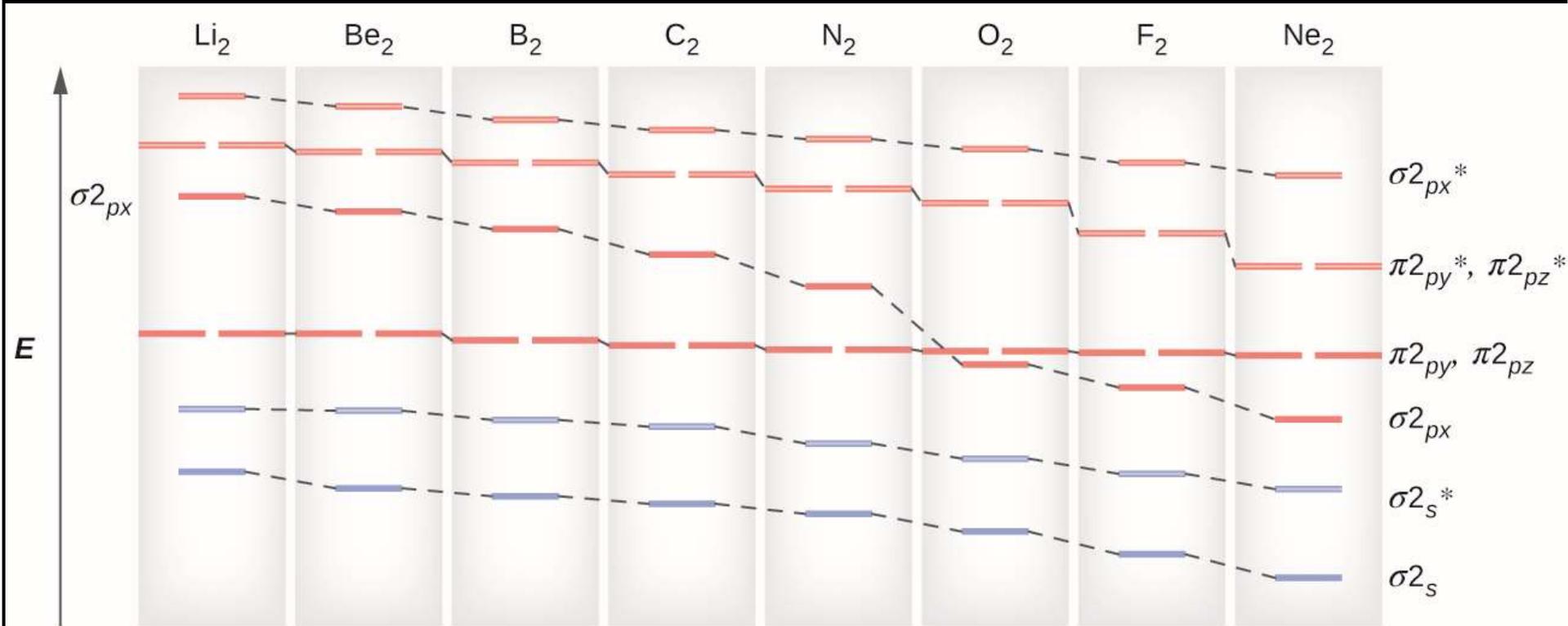


TABLE 9.1 Molecular Orbital Occupations and Physical Data for Homonuclear Diatomic Molecules of Second-Period Elements

	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



8. O íon molecular hidrogénio, H_2^+ , pode ser detectado espectroscopicamente. Escreva a configuração electrónica em termos de orbitais moleculares. Qual é a ordem de ligação do íon? A ligação hidrogênio-hidrogênio é mais forte ou mais fraca do H_2^+ em comparação com H_2 .

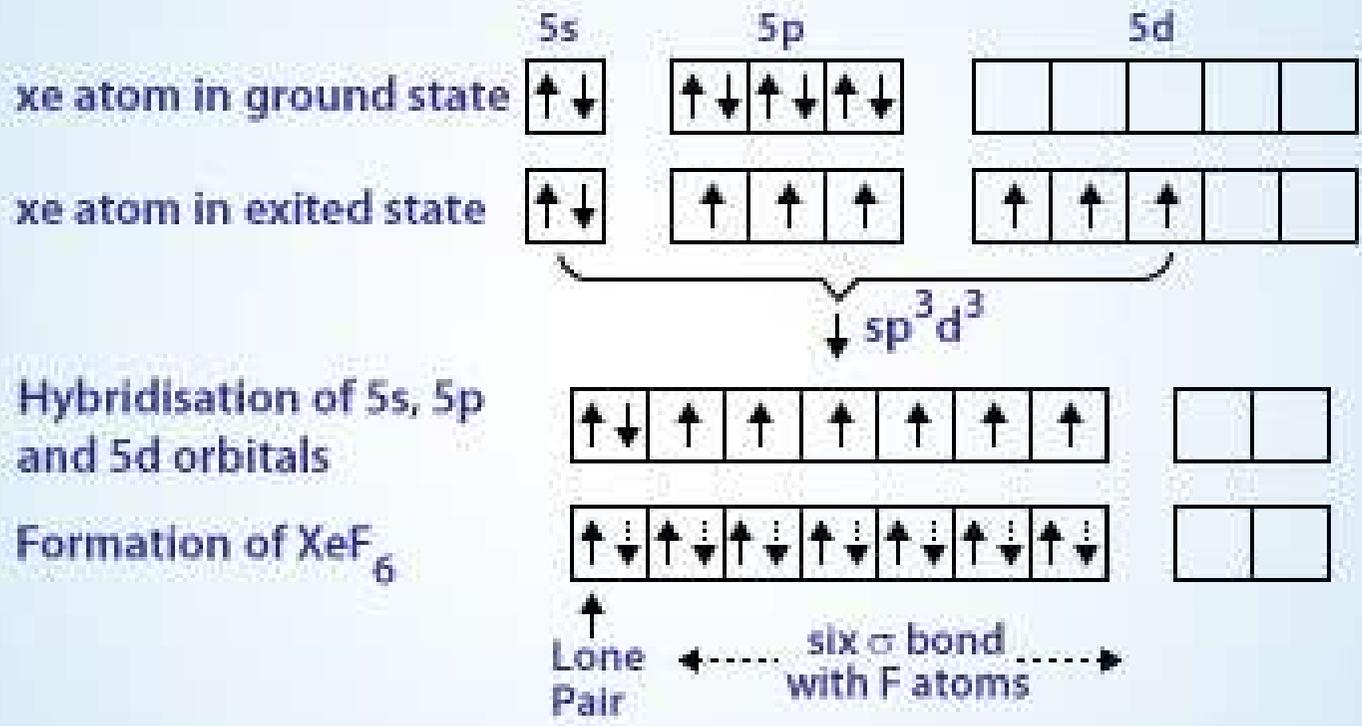
9. O carbeto de cálcio, CaC_2 contém o íon acetileno C_2^{2-} . Desenhe o diagrama de níveis de energia dos orbitais moleculares para esse íon. Quantas ligações σ e π o íon possui? Qual é a ordem da ligação carbono-carbono? Como é que a ordem foi alterada por adicionar electrons ao C_2 para formar C_2^{2-} ? O íon C_2^{2-} é paramagnético?

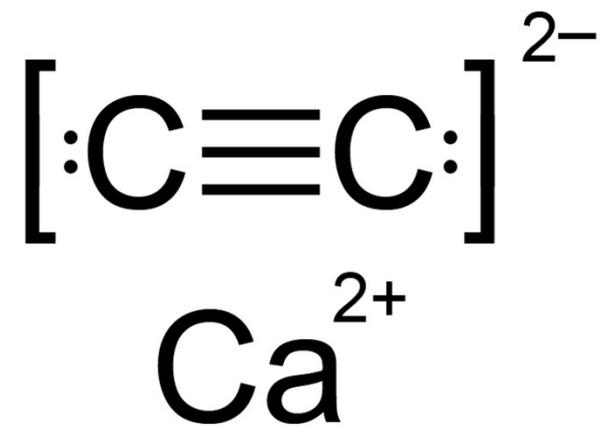
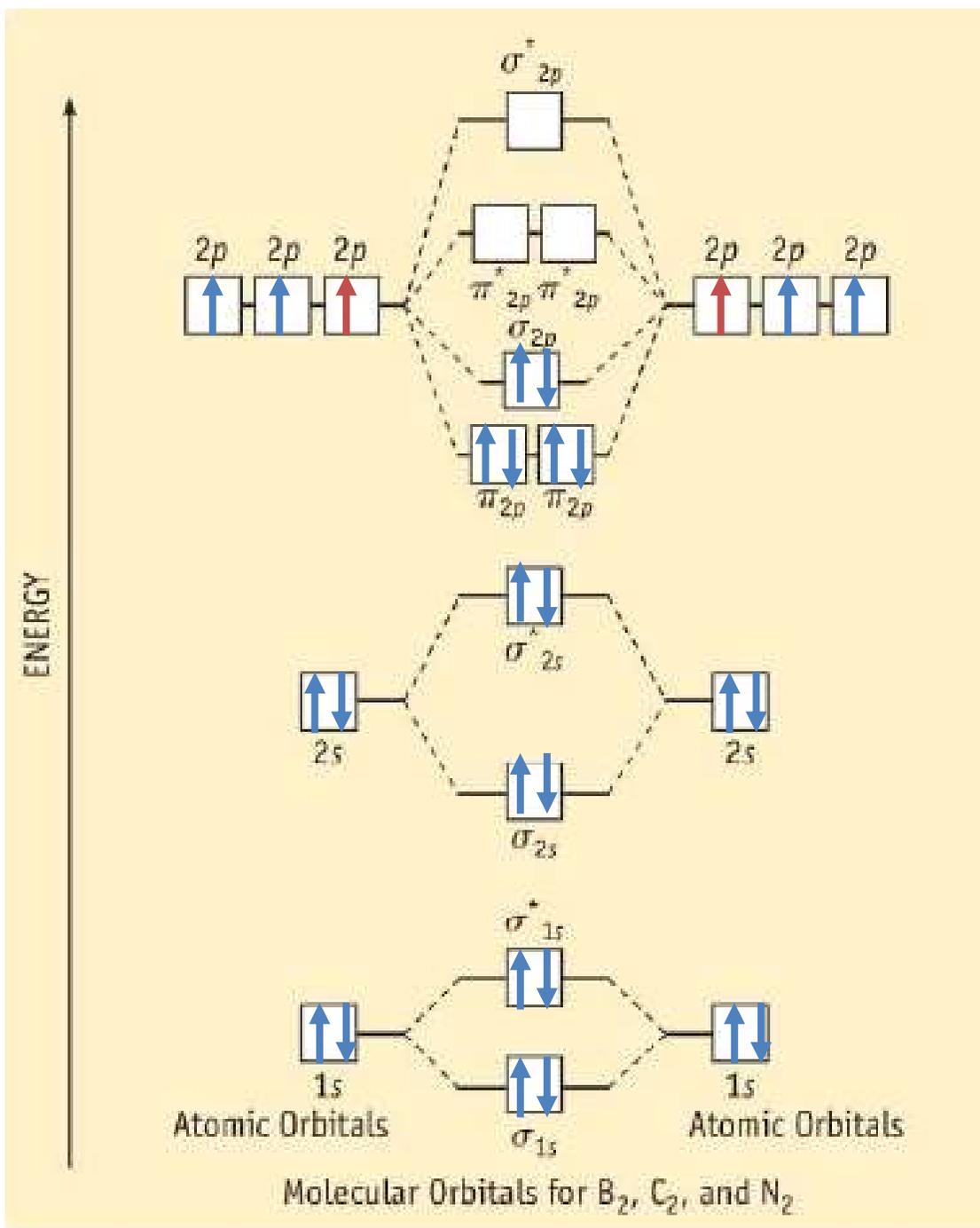
10. Quando o sódio e o oxigênio reagem, um dos produtos obtidos é o peróxido de sódio Na_2O_2 . O anion é o íon peróxido O_2^{2-} . Escreva a configuração electrónica para esse íon em termos de orbitais moleculares e, então, compare-a com a configuração electrónica da molécula de O_2 com relação aos seguintes critérios:

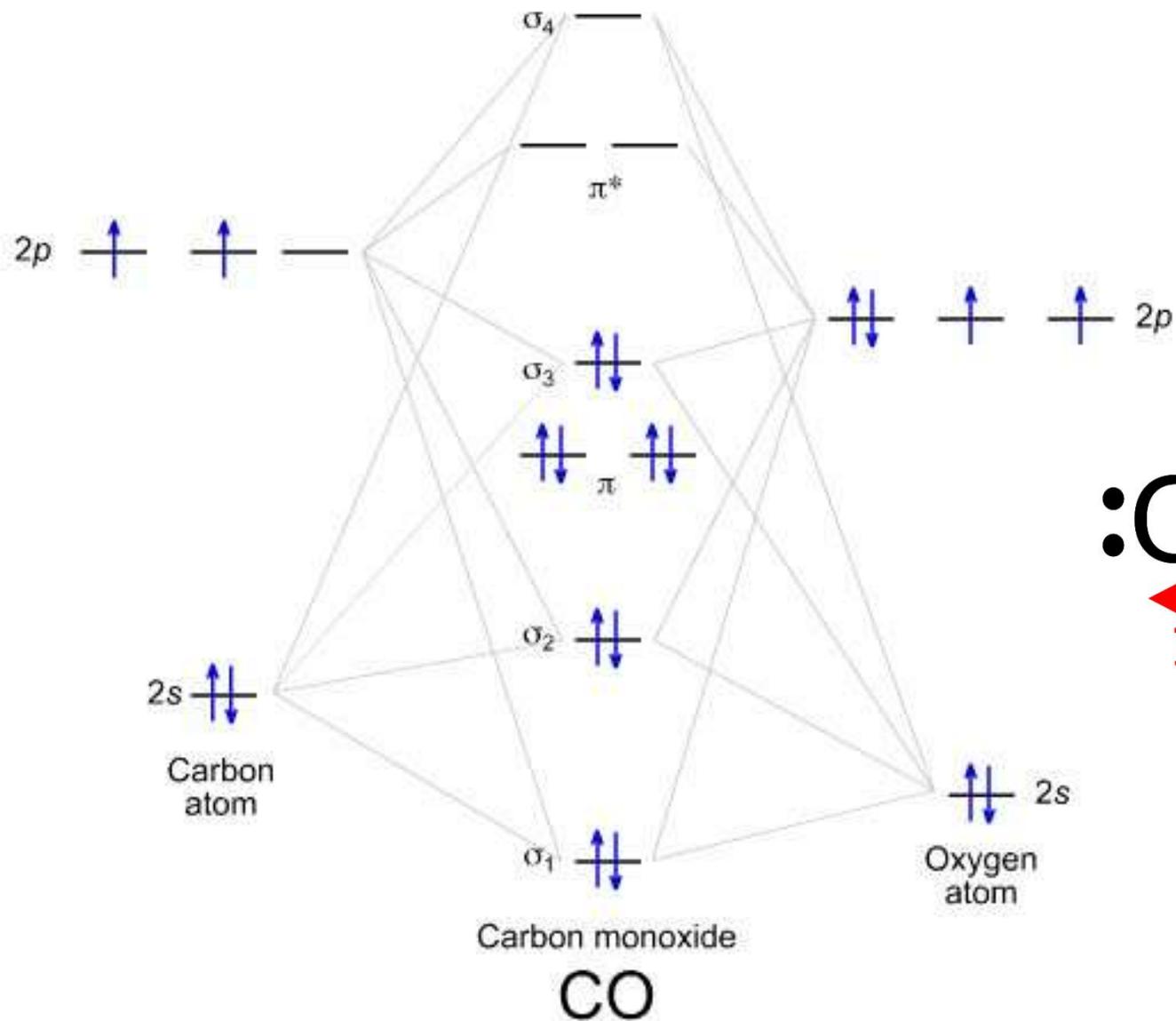
- a) Caracter magnético
- b) Número de electrons
- c) Ordem de ligação
- d) Comprimento de ligação oxigênio-oxigênio.

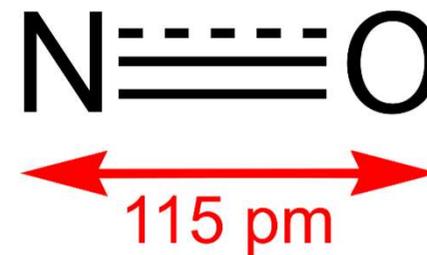
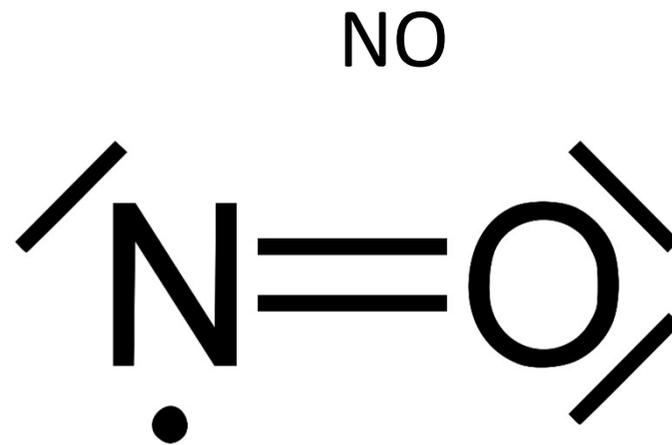
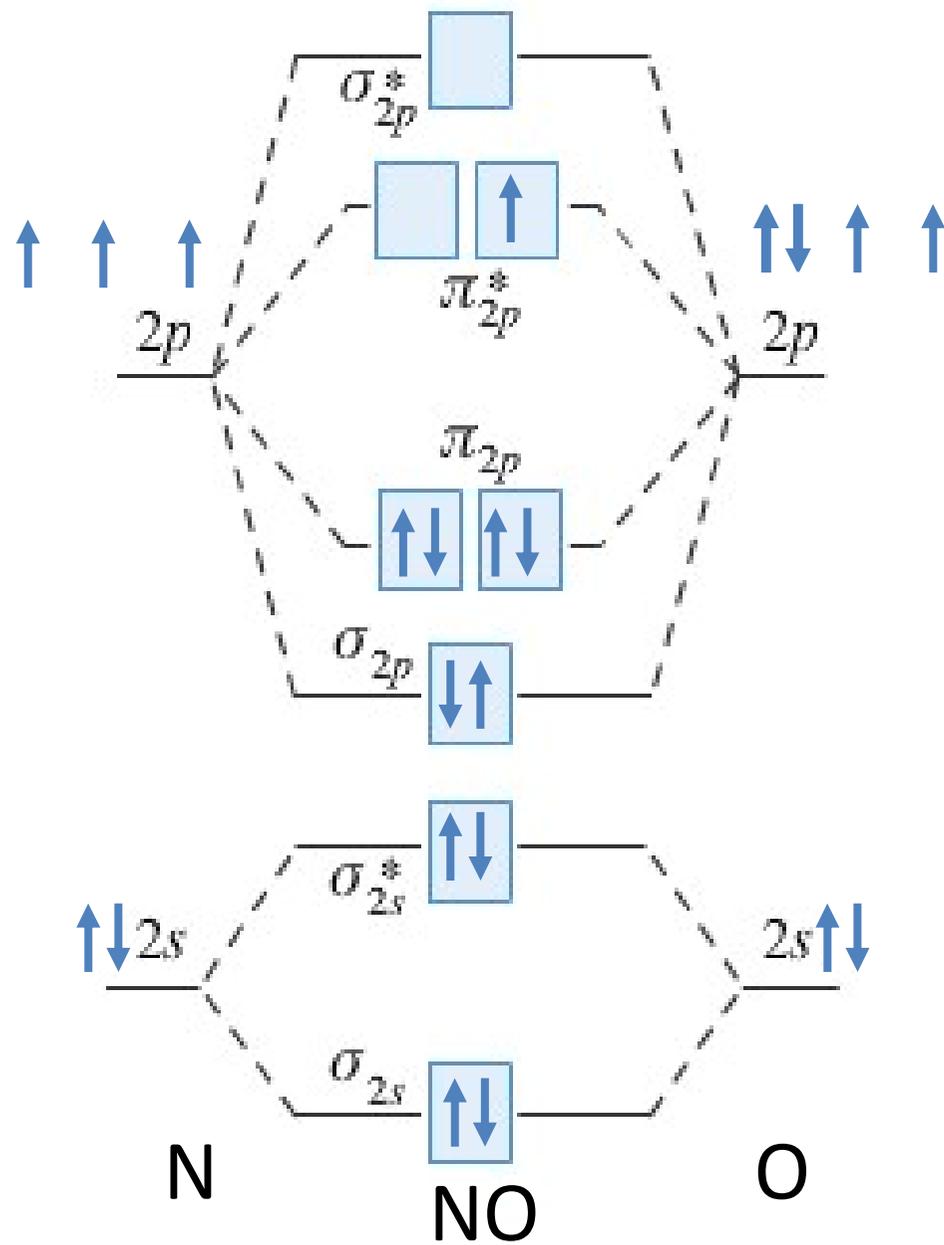
11. Com base na teoria das orbitais moleculares qual das seguintes moléculas possui a ligação mais curta e qual possui a ligação mais longa: Li_2 , B_2 , C_2 , N_2 , O_2 ?

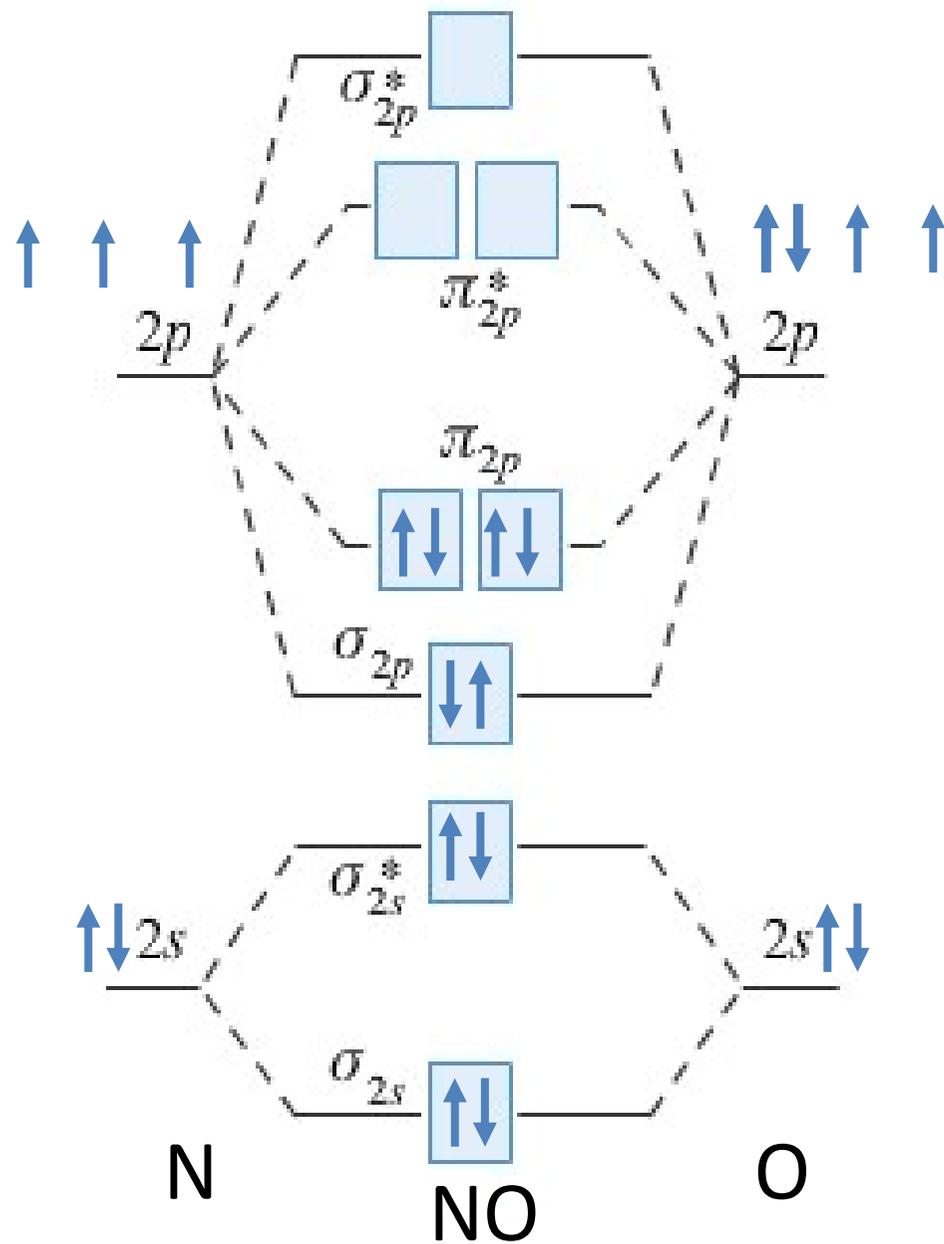
Hibridização do Xe



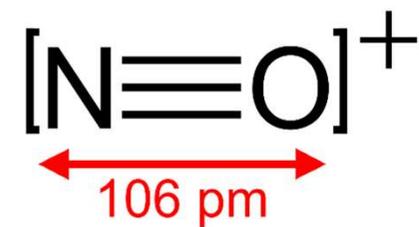
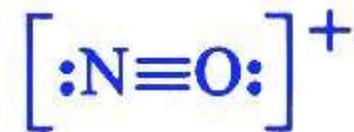


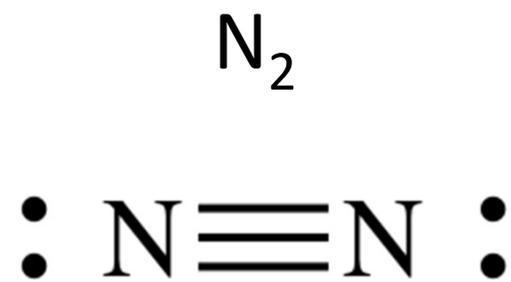
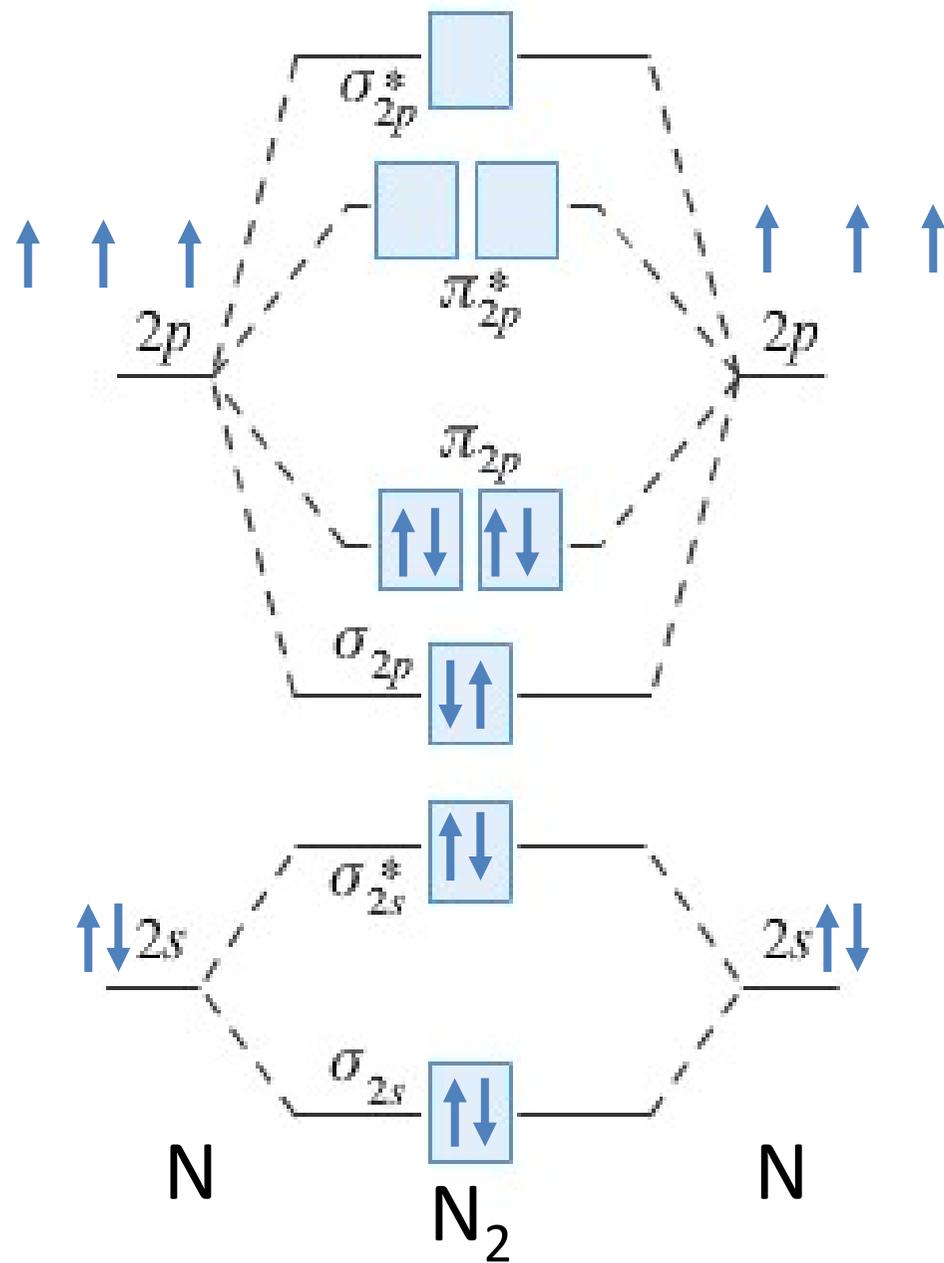






NO^+

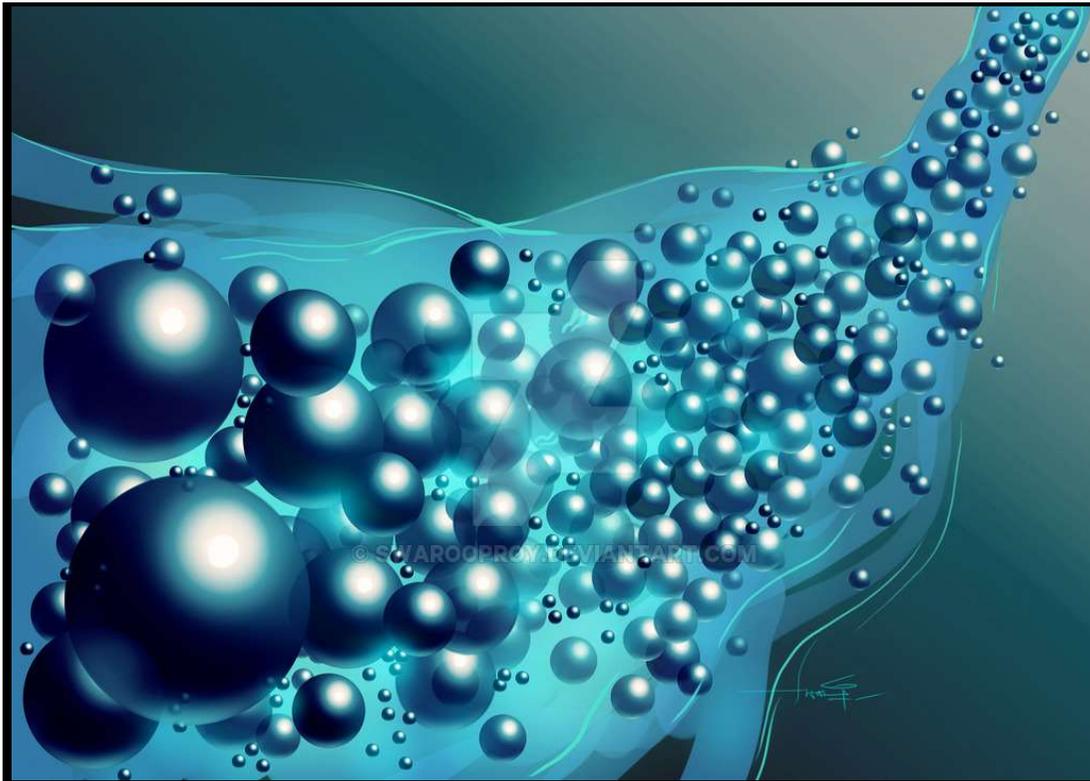




:N ≡ N: **3 bonds**

•N ≡ O **2.5 bonds**

•O = O• **2 bonds**



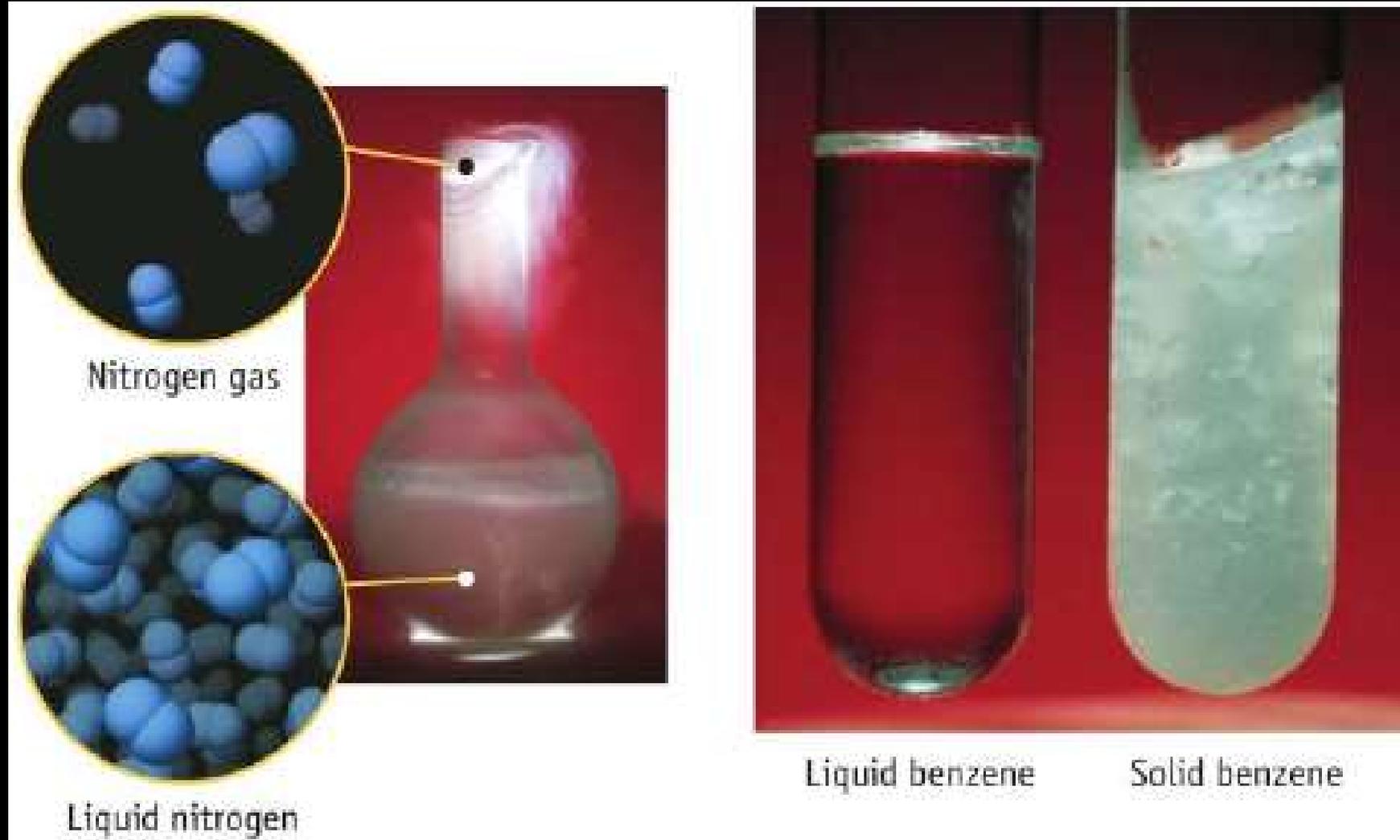
Forças intermoleculares

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

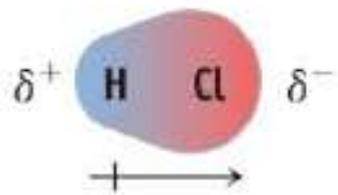
Forças intermoleculares



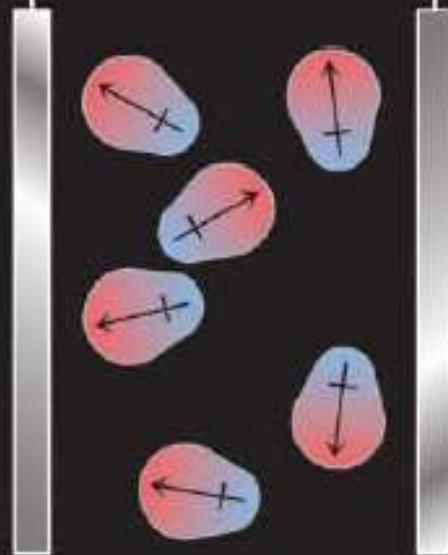
Forças intermoleculares

- 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

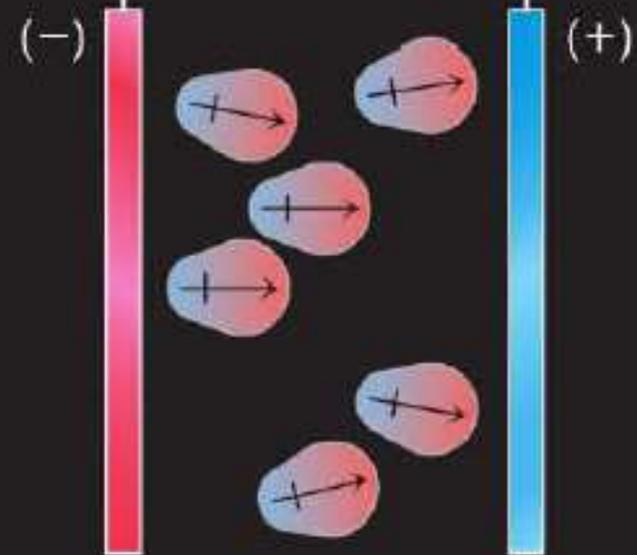
Momento dipolar



Electric Field OFF



Electric Field ON



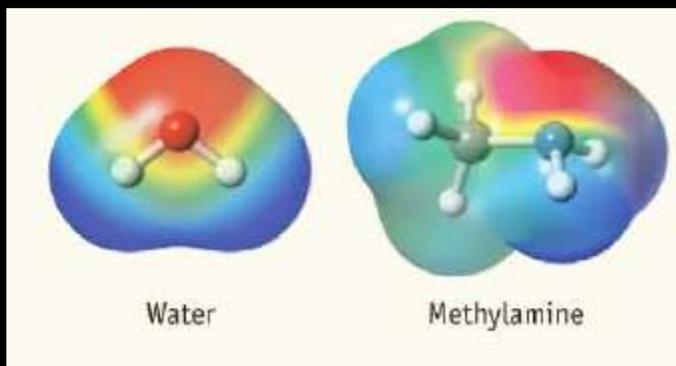
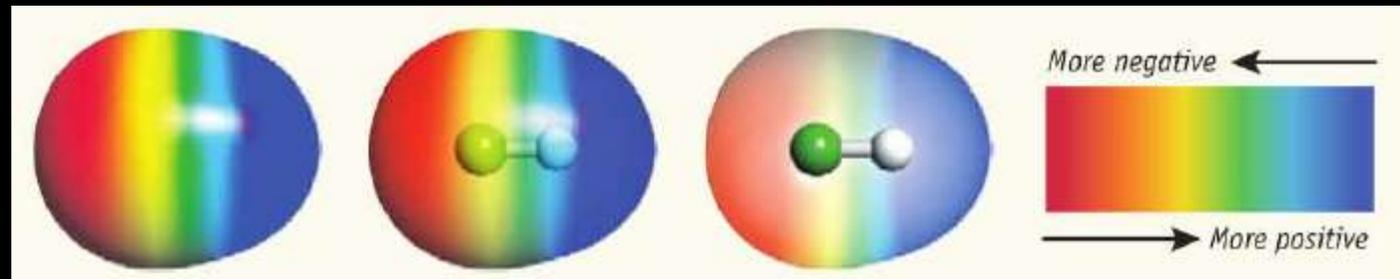
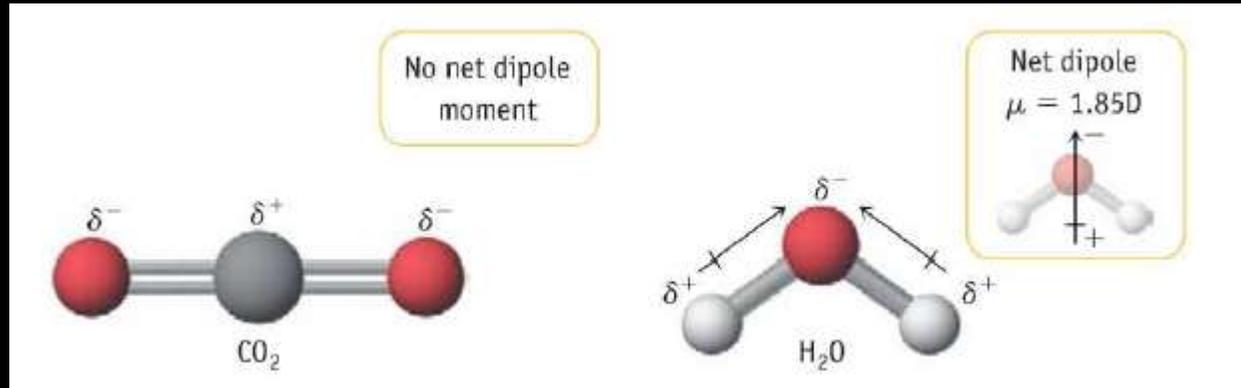
$$\mu = q \times d$$

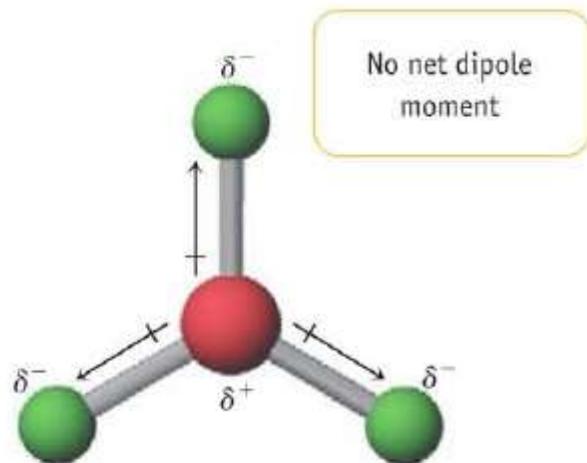
Momento dipolar

TABLE 8.7 Dipole Moments of Selected Molecules

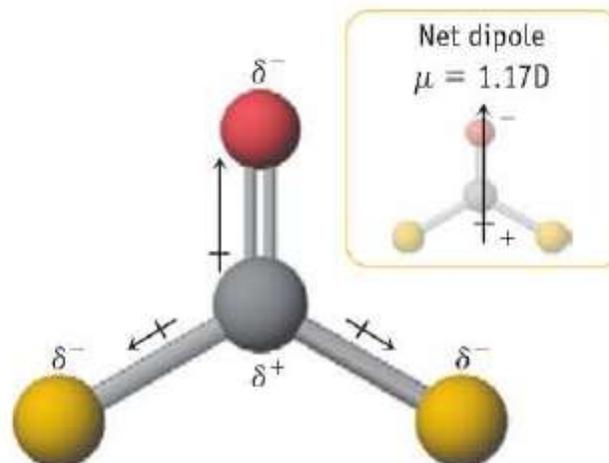
Molecule (AX)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₂)	Moment (μ , D)	Geometry
HF	1.78	linear	H ₂ O	1.85	bent
HCl	1.07	linear	H ₂ S	0.95	bent
HBr	0.79	linear	SO ₂	1.62	bent
HI	0.38	linear	CO ₂	0	linear
H ₂	0	linear			
Molecule (AX ₃)	Moment (μ , D)	Geometry	Molecule (AX ₄)	Moment (μ , D)	Geometry
NH ₃	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

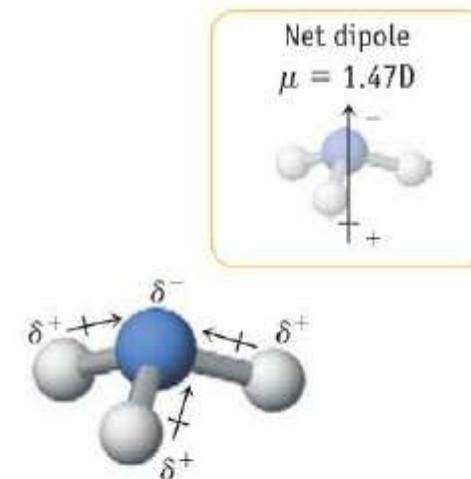




BF₃



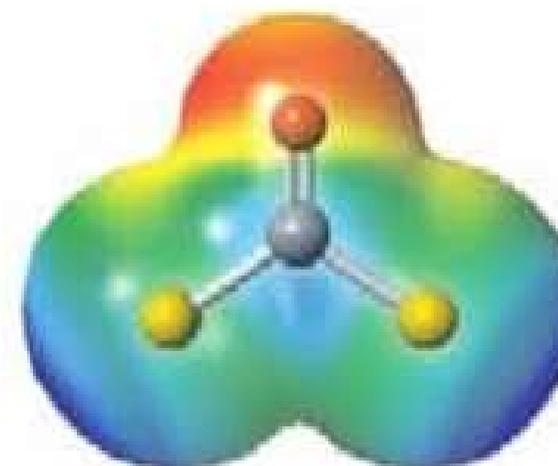
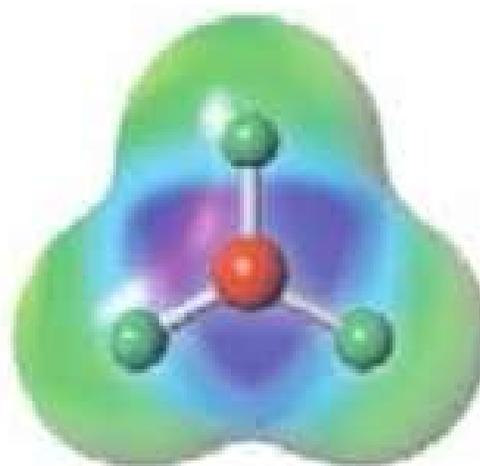
Cl₂CO



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.

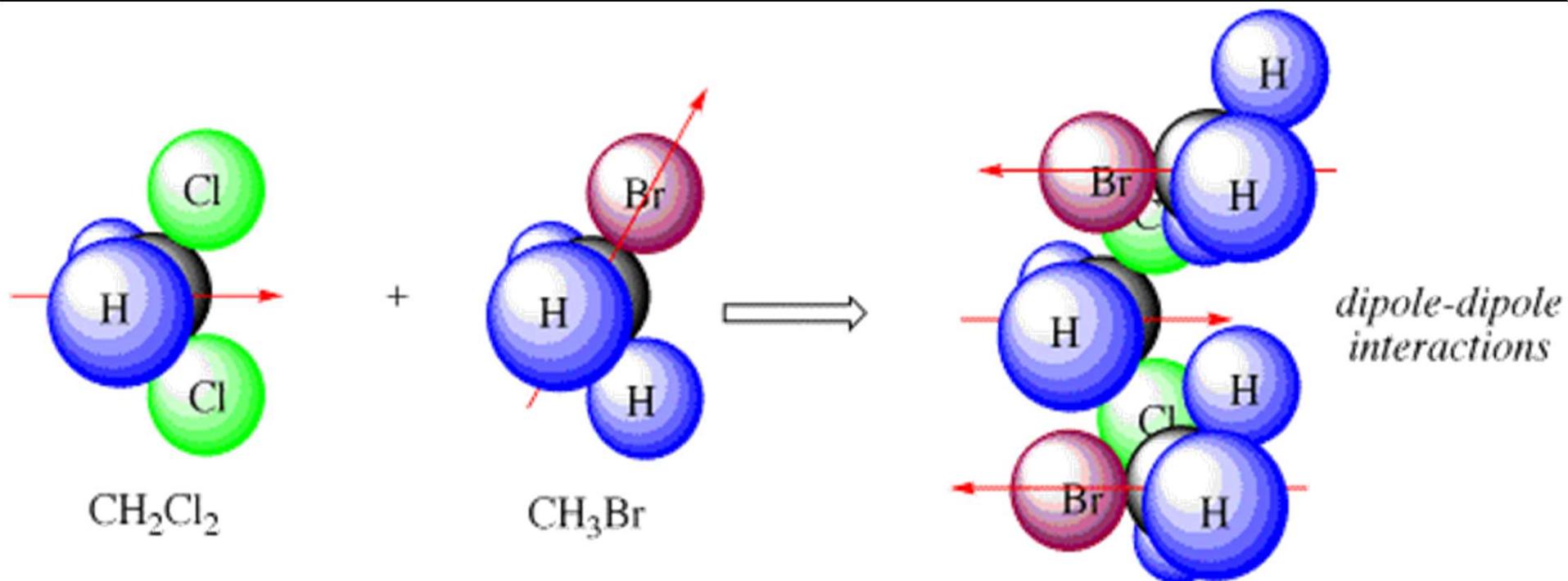
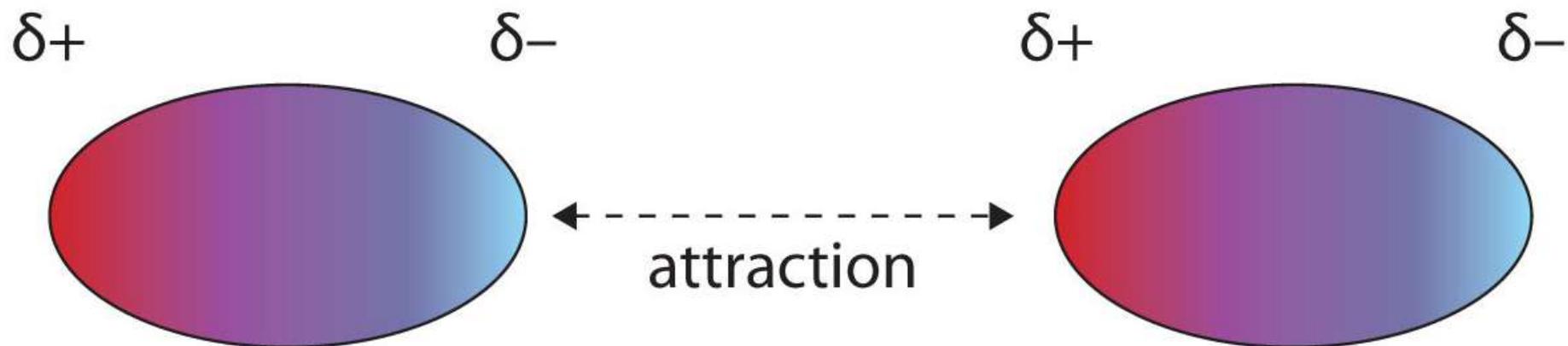
Molecule	Calculated Partial Charges	Calculated dipole
BF ₃	B = 0.44, F = -0.15	0
Cl ₂ CO	O = -0.21, C = 0.23, Cl = -0.01	1.25
NH ₃	N = -0.40, H = 0.13	1.58



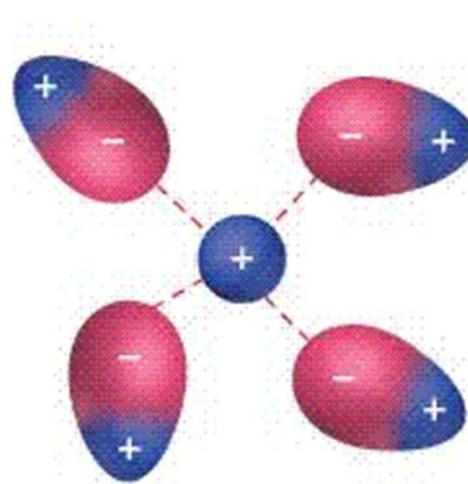
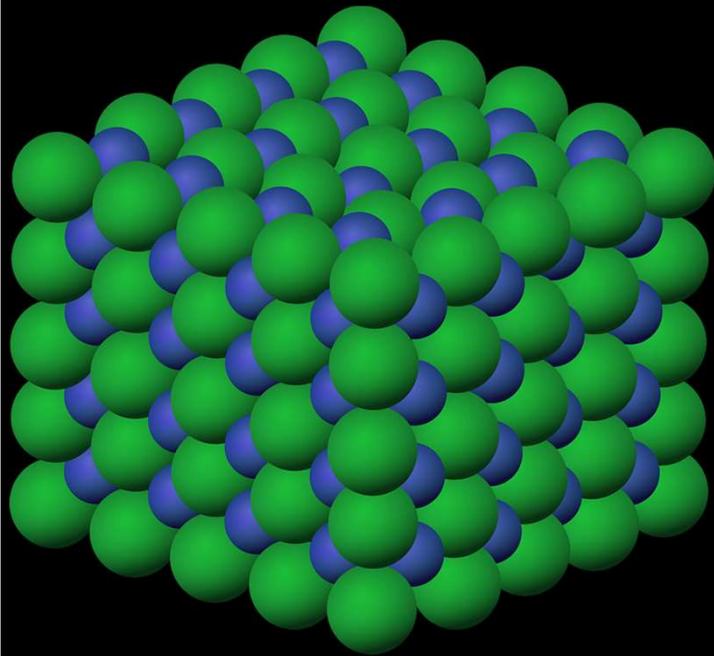
Forças intermoleculares

- 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

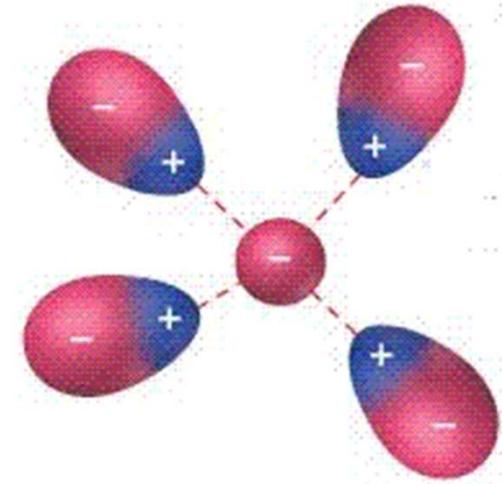
Dipolo-Dipolo



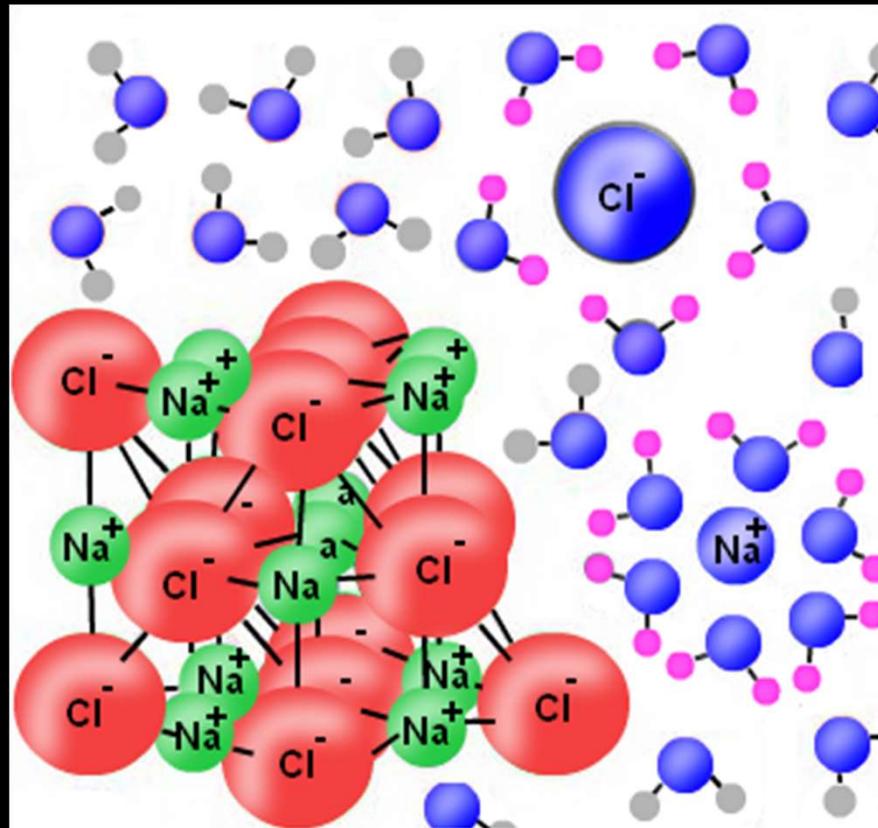
Ion-Dipole



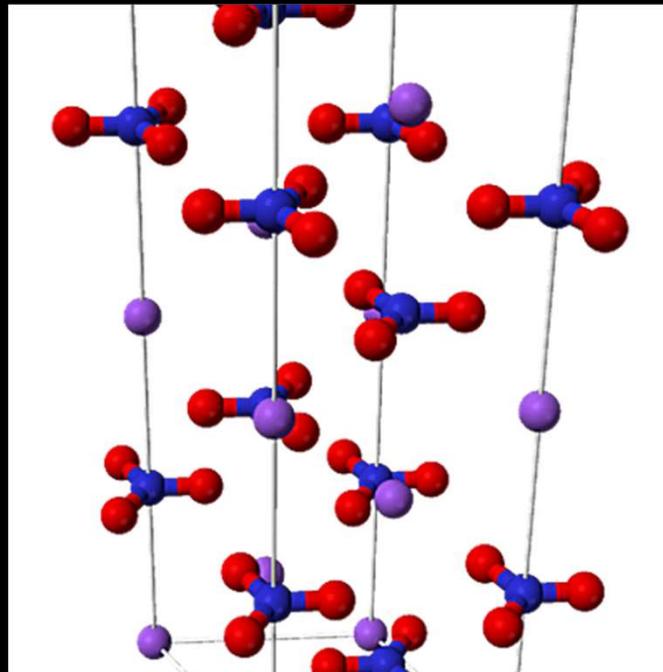
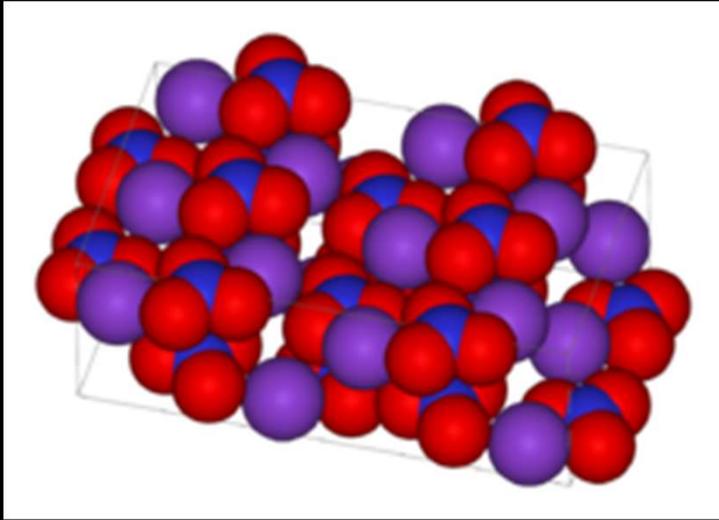
Cation-dipole attractions



Anion-dipole attractions



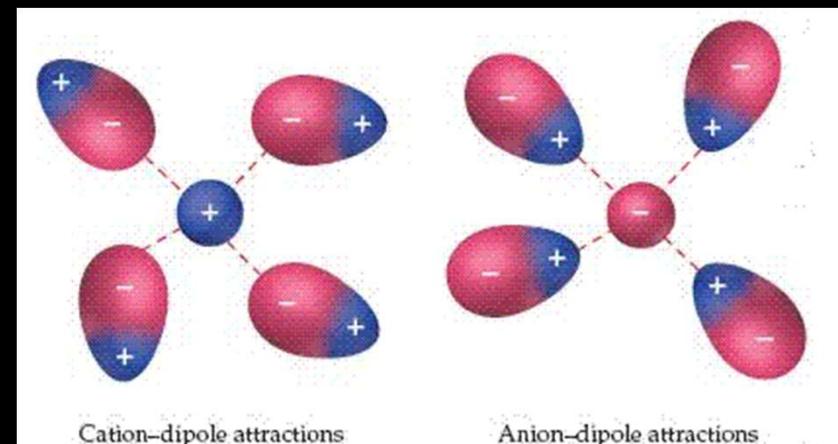
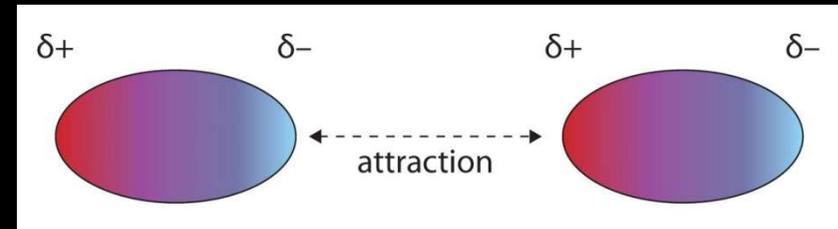
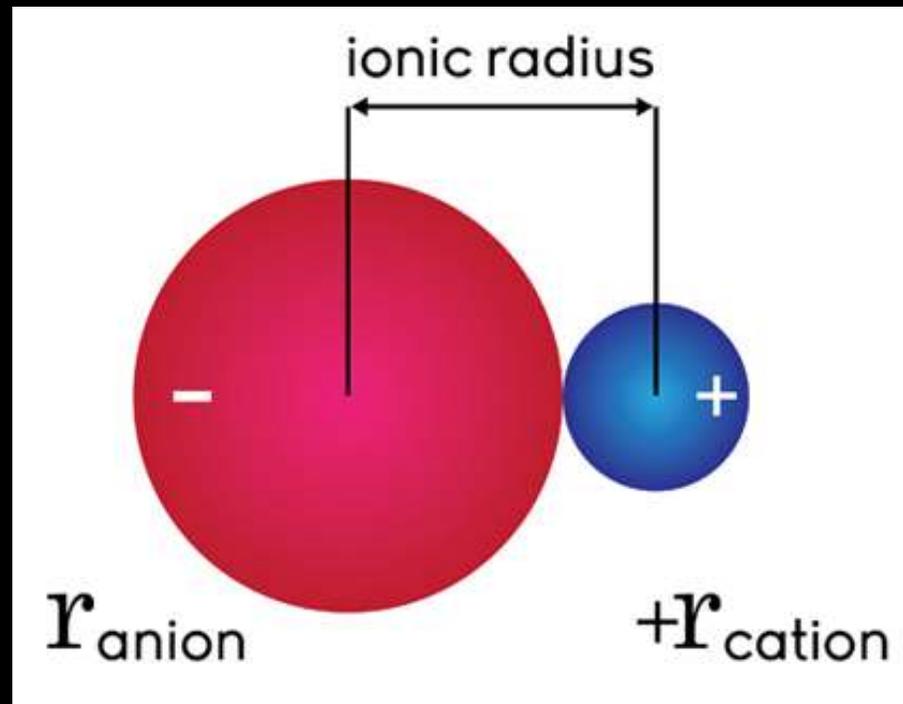
Ion-Dipolo



KNO₃

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

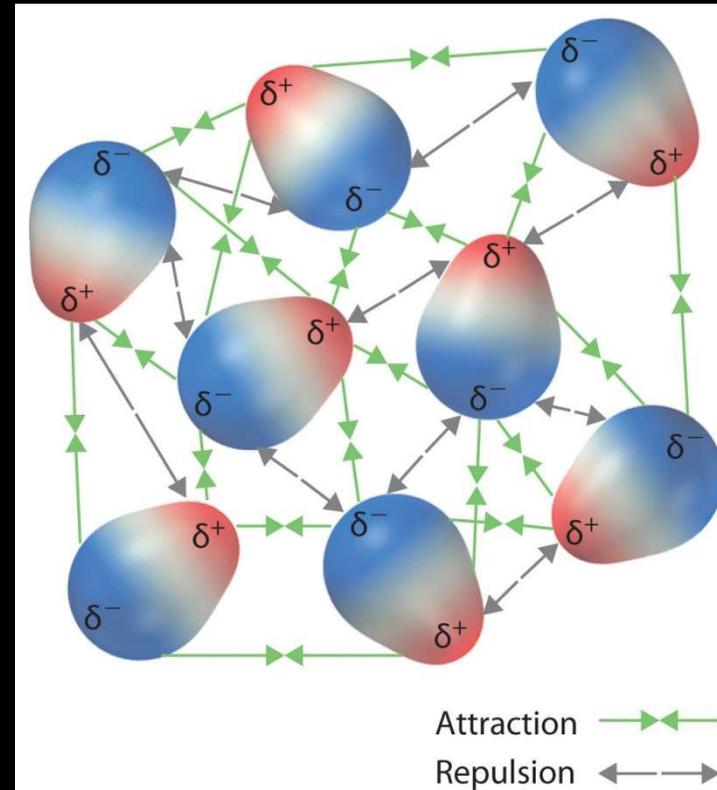
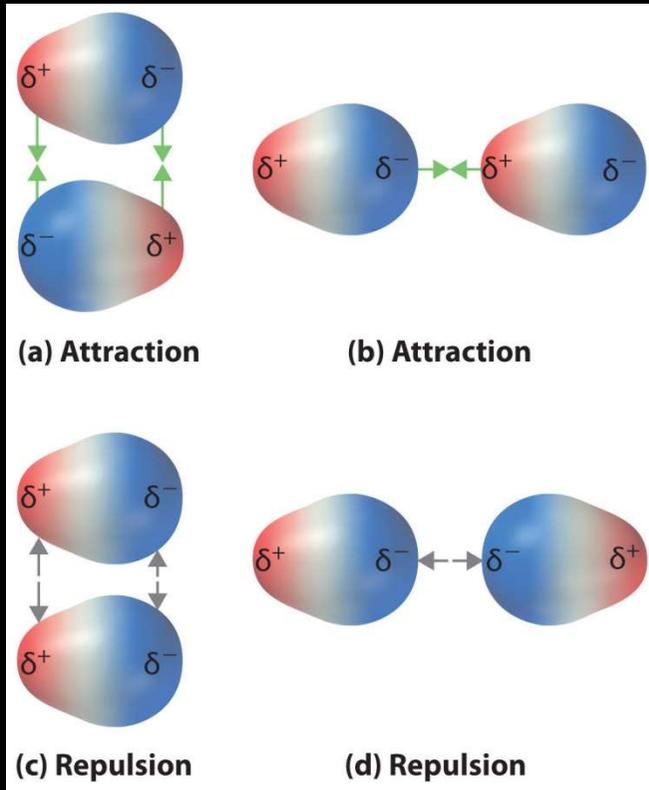
Quais as interações mais fortes?



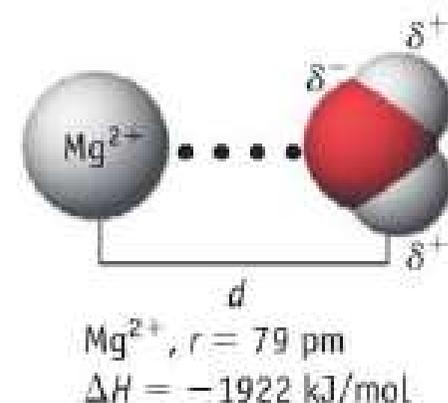
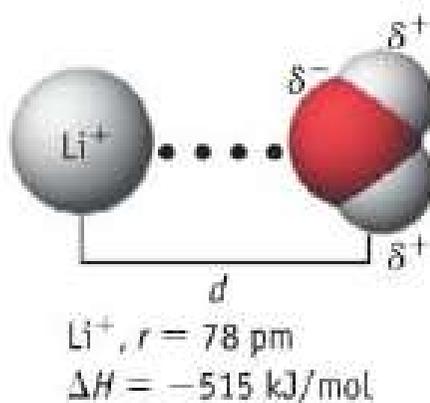
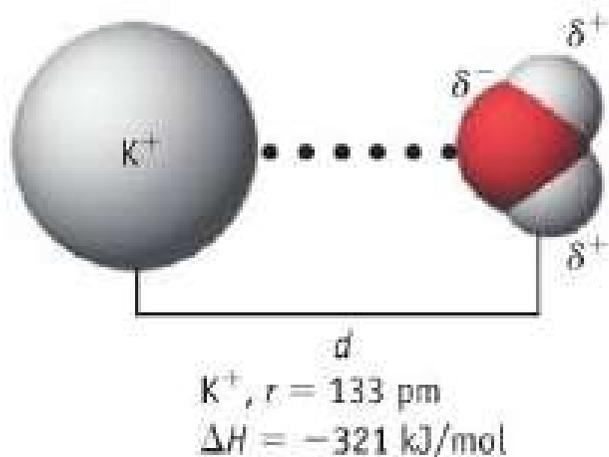
$$E_p = \frac{|\mu_1 \mu_2|}{r^2}$$

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

Quais as interações mais fortes?



Quais as interações mais fortes?



Increasing force of attraction; more exothermic enthalpy of hydration

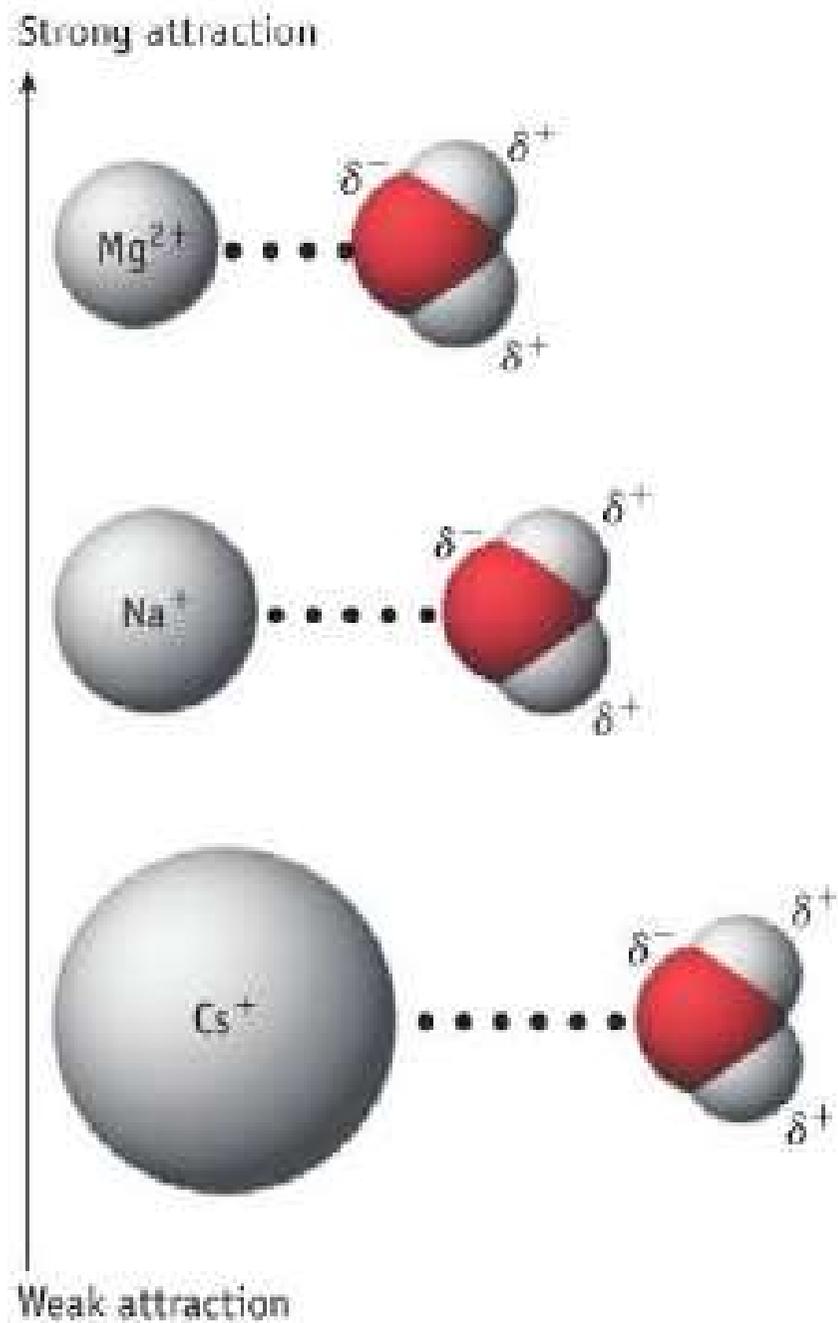
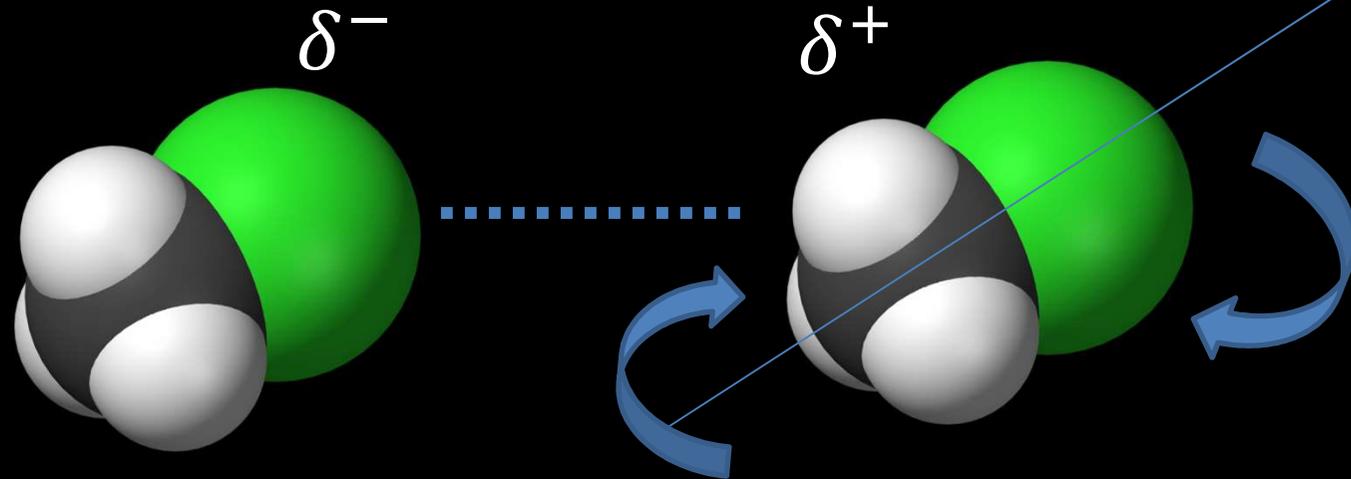
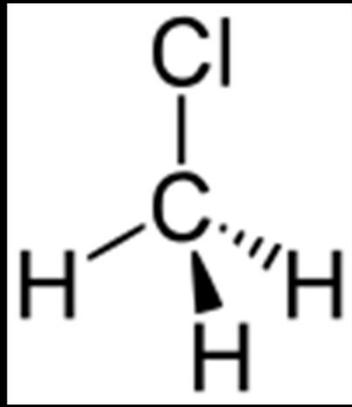


TABLE 12.1 Radii and Enthalpies of Hydration of Alkali Metal Ions

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

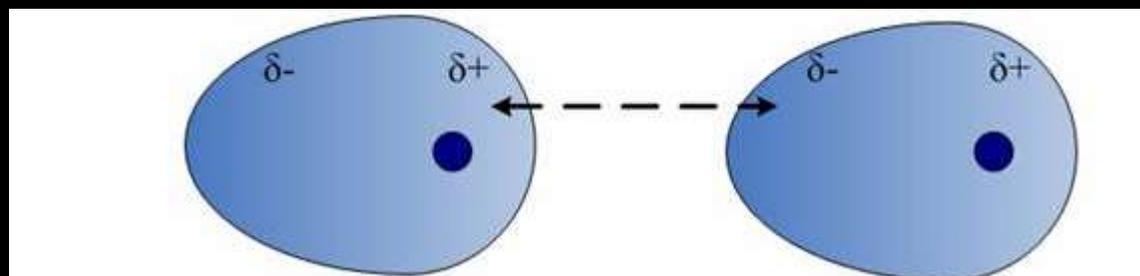
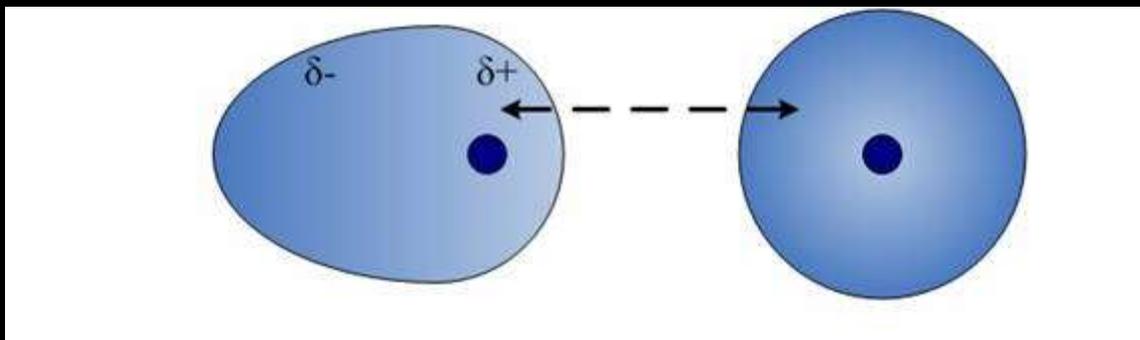
Questão: dipolos em fase gasosa existem? Serão mais intensos ou mais fracos?

Como são os dipolos na fase gasosa?

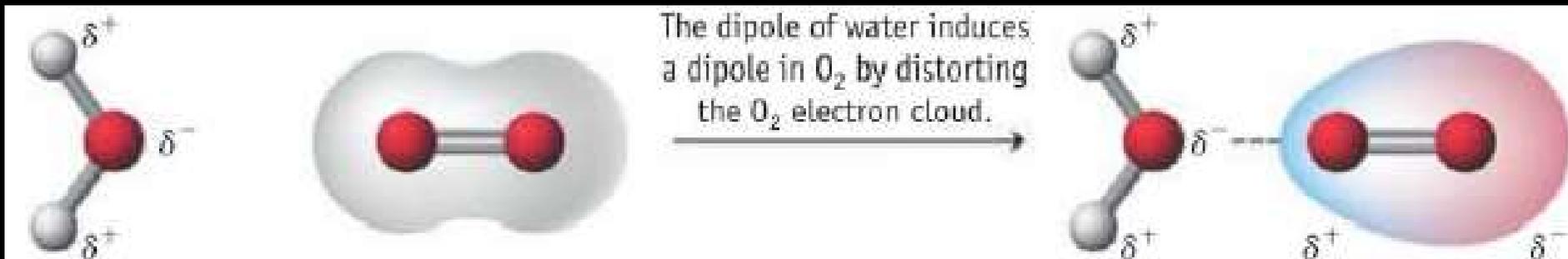


$$E_p = \frac{|\mu_1 \mu_2|}{r^6}$$

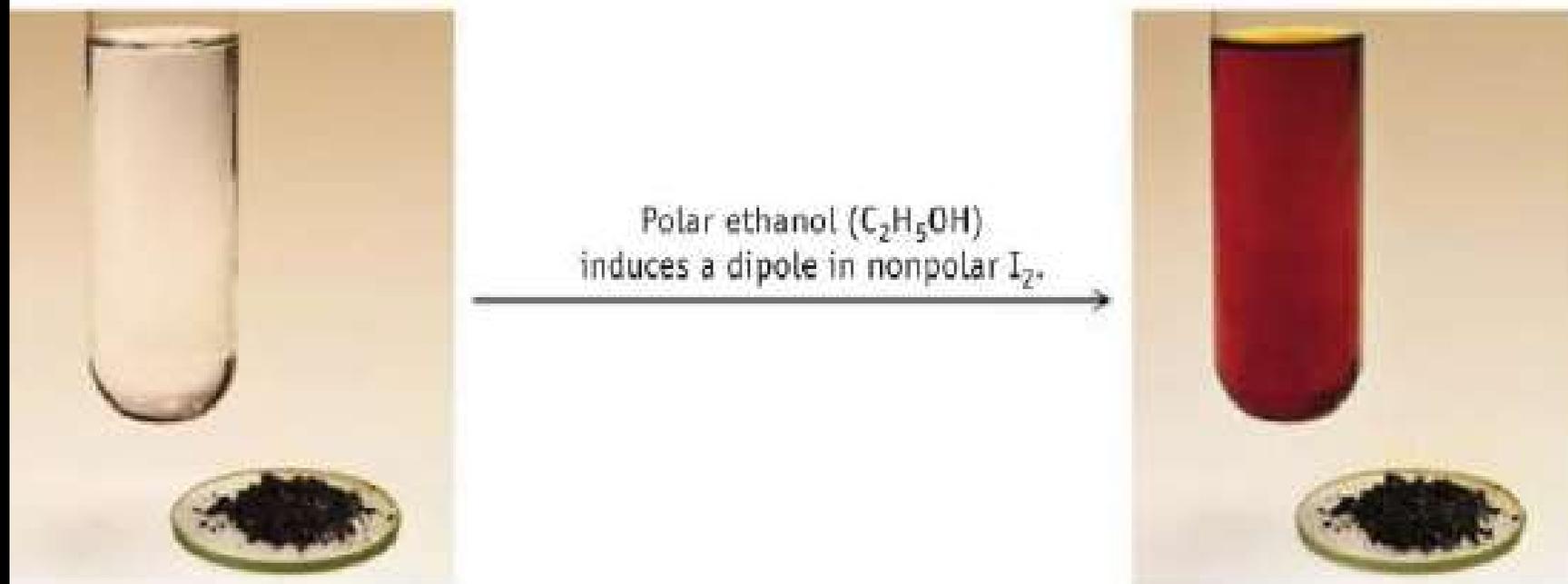
dipolo -dipolo induzido



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

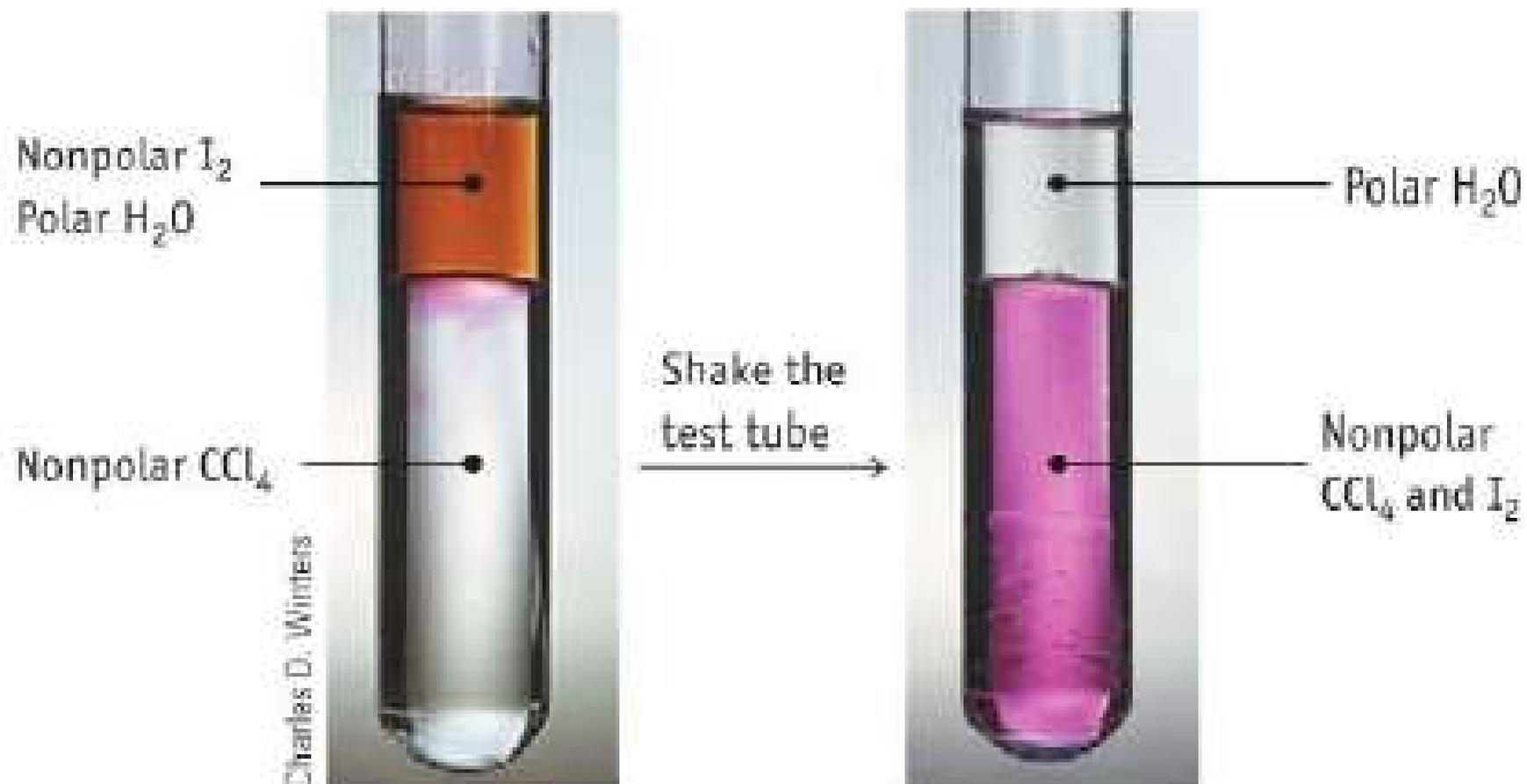
* Data taken from J. Dean: *Lange's Handbook of Chemistry*, 14th Ed., pp. 5.3–5.8, New York, McGraw-Hill, 1992.

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

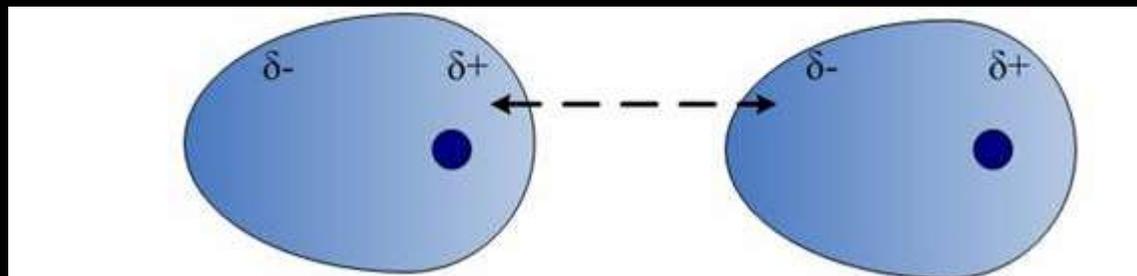
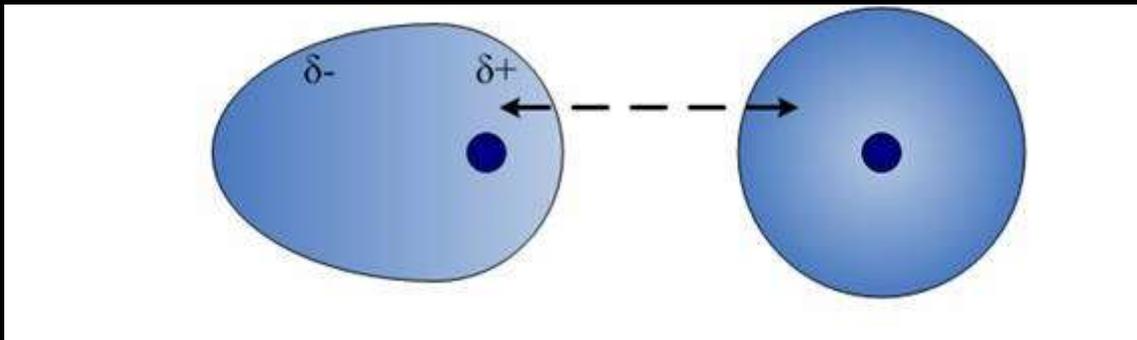
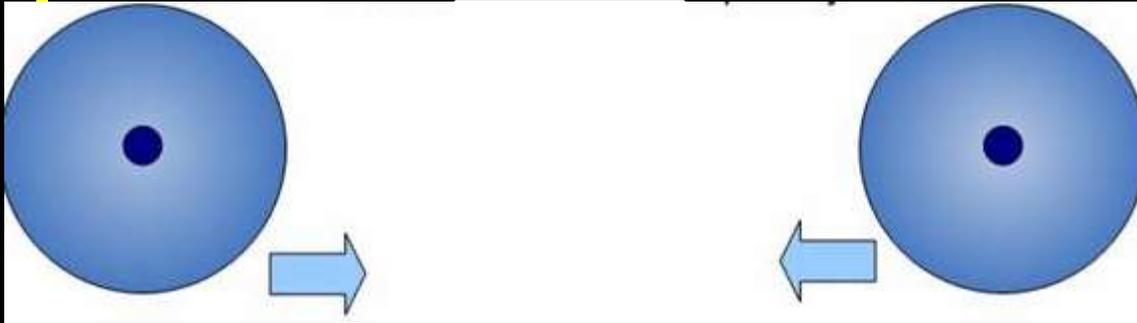
TABLE 12.4 Enthalpies of Vaporization and Boiling Points of Some Nonpolar Substances

	$\Delta_{\text{vap}}H^\circ$ (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 ou de dispersão



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

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

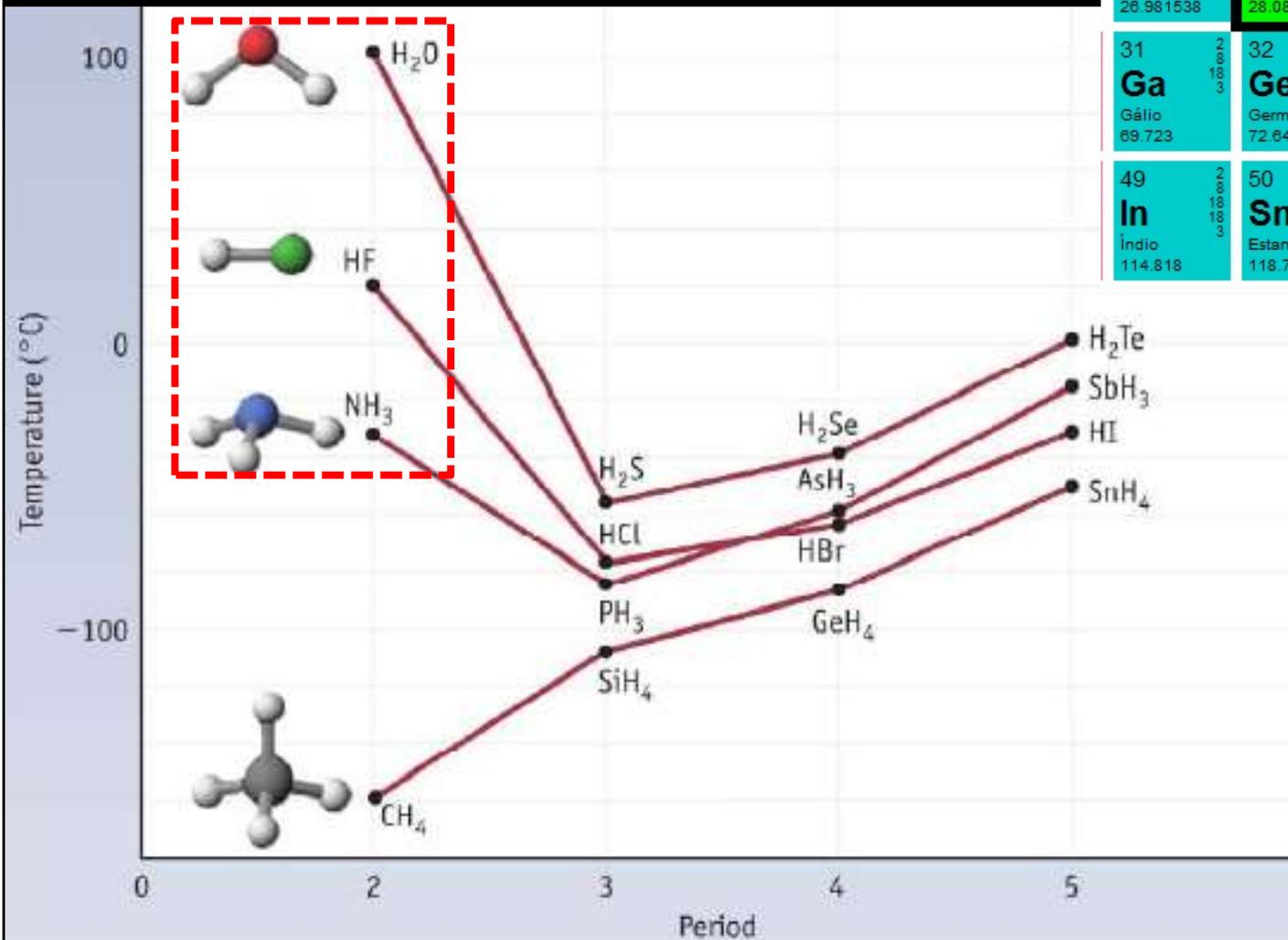
Porquê?

Ponto de ebulição

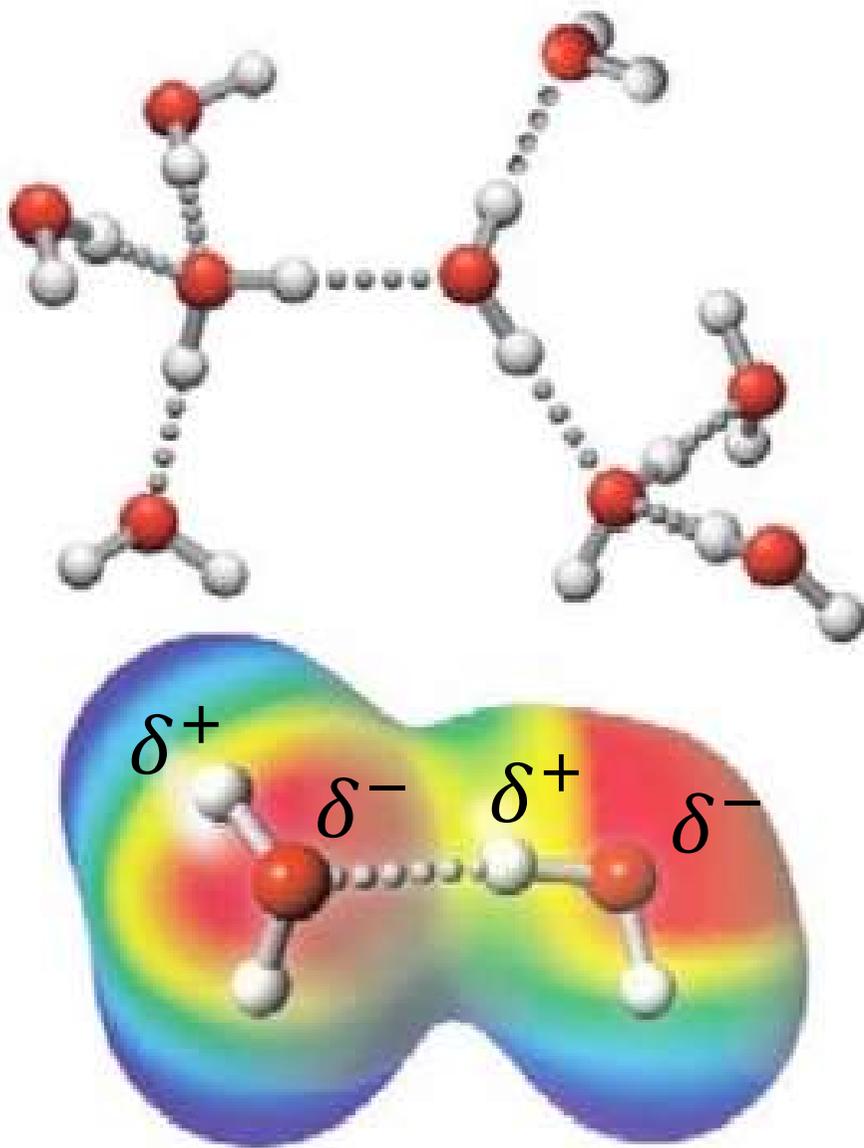


Ponto de ebulição

13	14	15	16	17
IIIA	IVA	VA	VIA	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 contêm oxigênio fazem ligações de hidrogênio?

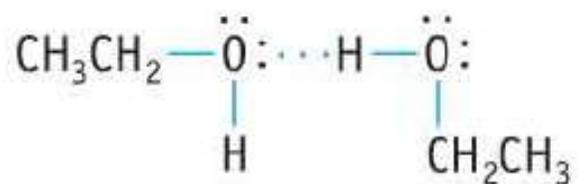
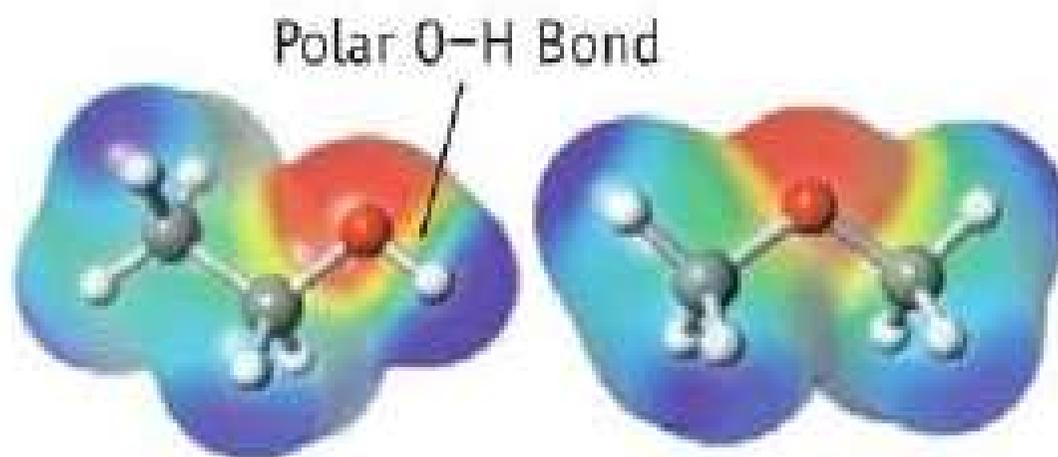
Porquê?



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



Dimethyl ether, CH_3OCH_3



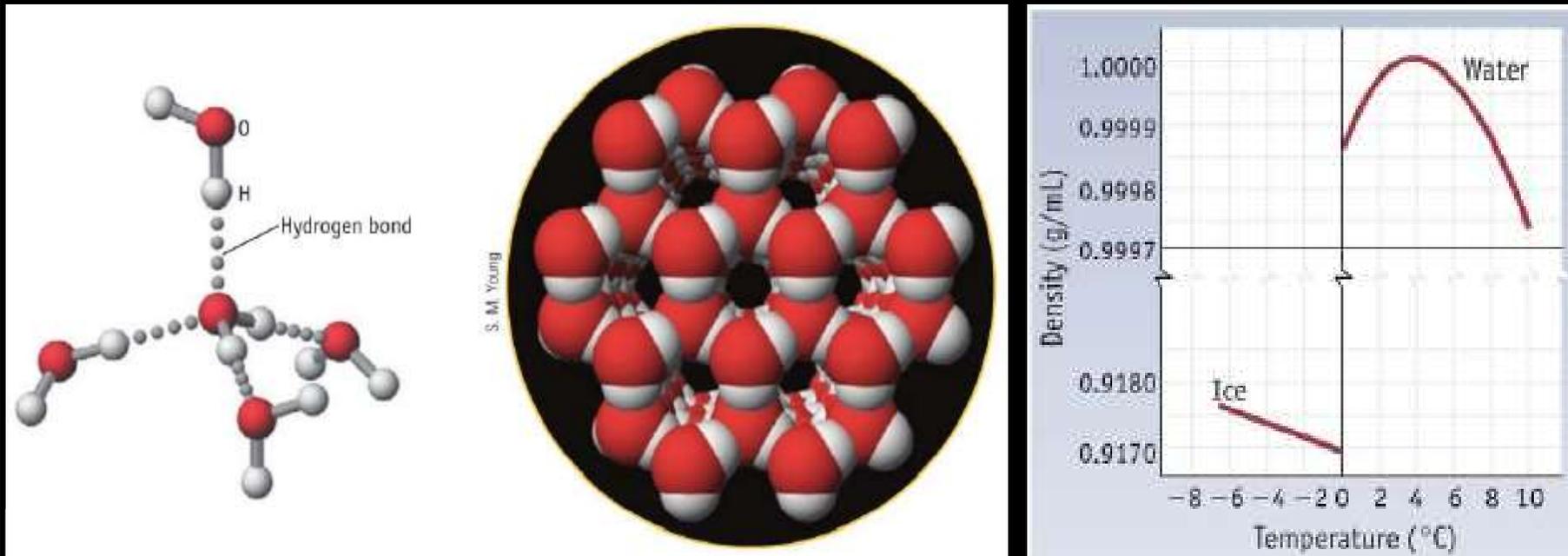
hydrogen bonding in ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

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

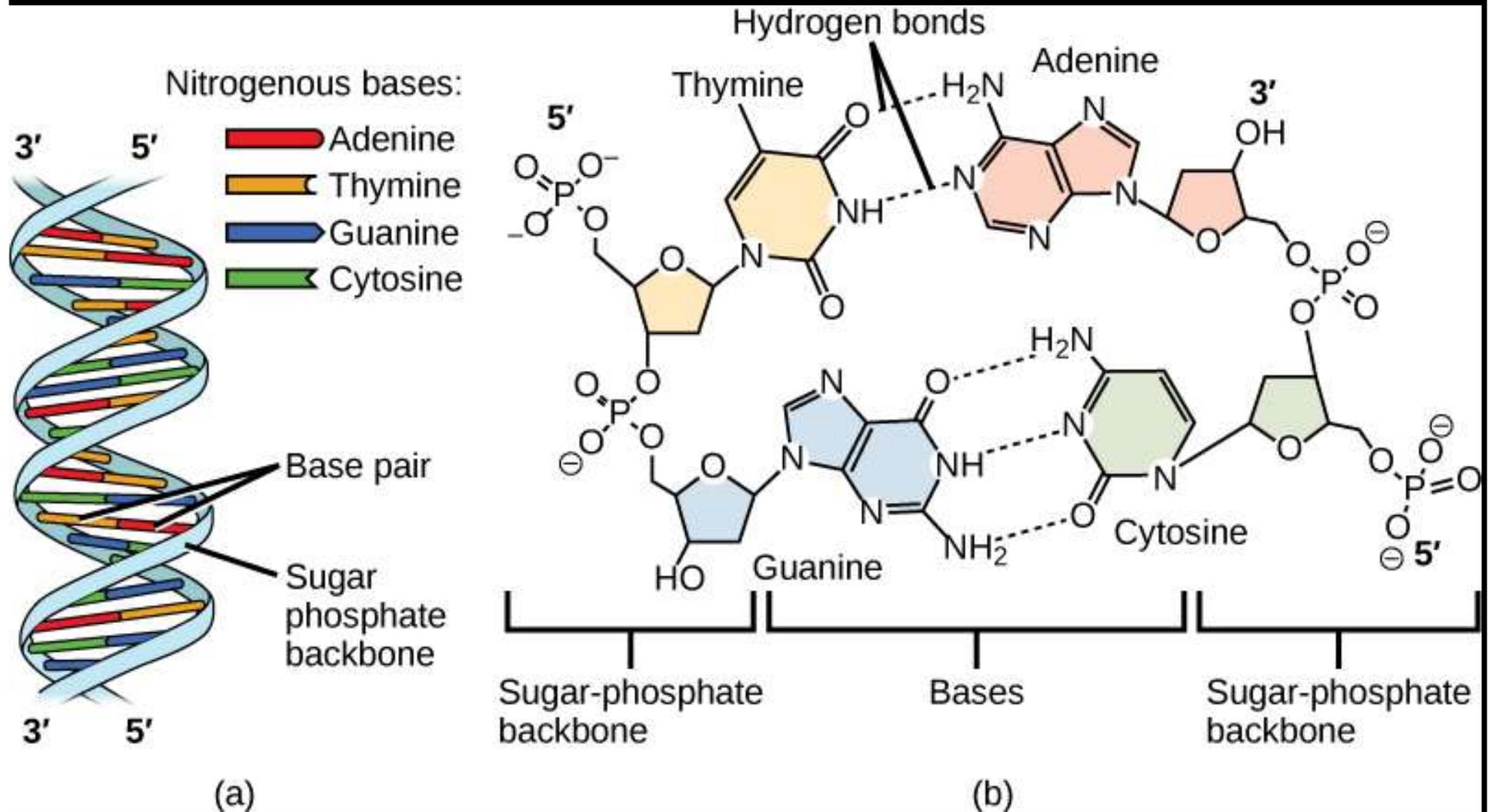
Capacidade calorífica da água



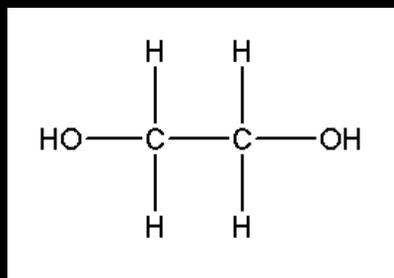
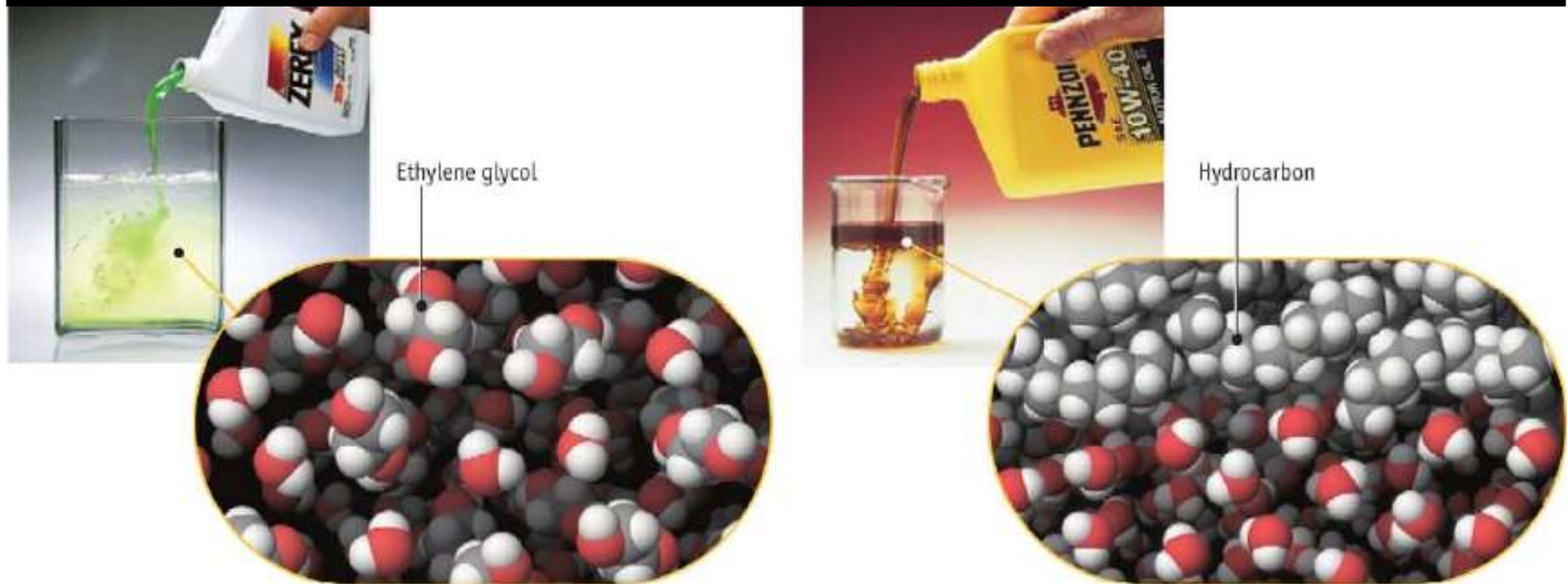
Heat Capacities of a Few Substances	
Substance	Heat Capacity $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
Diamond	6.1
Argon gas	20.8
Aluminium	24.2
Water (ice)	38.1
Water (liquid)	75.3
Water (steam)	37.5
Ammonia (NH_3)	80.1

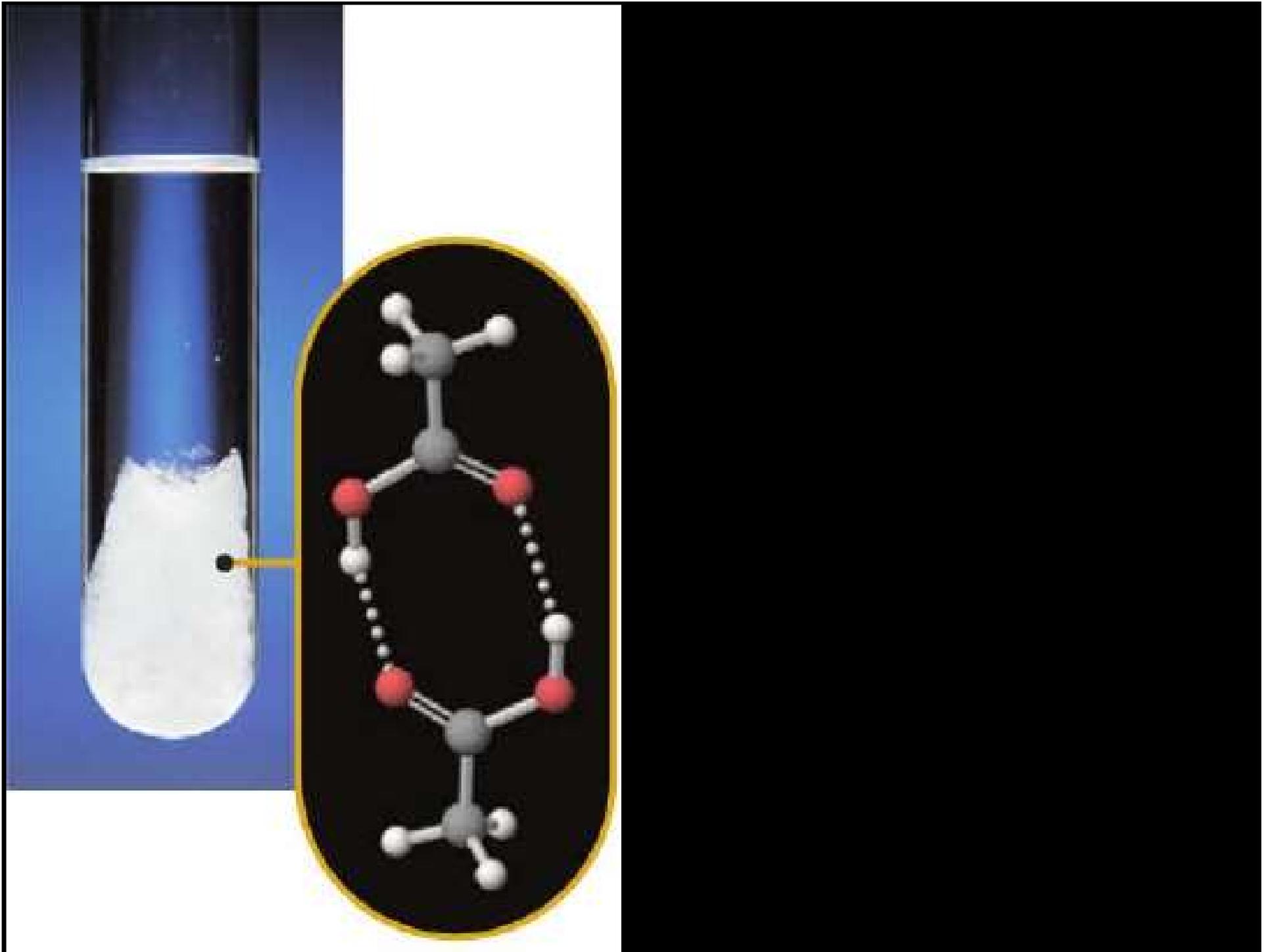
Capacidade Calorífica – Estabelece uma relação entre a quantidade de calor fornecida a um corpo e a variação de temperatura verificada por este.

Pontes de hidrogénio na Biologia

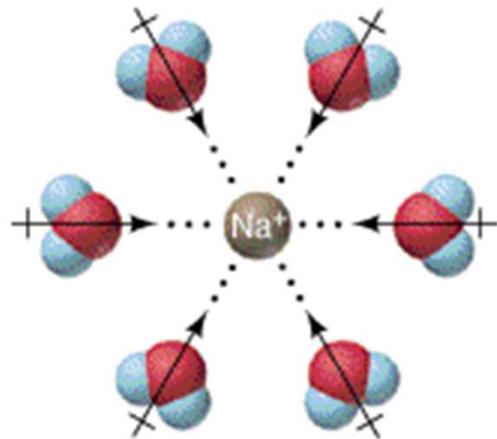


Ligações de hidrogénio

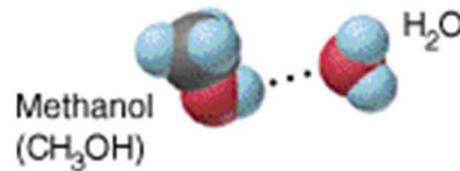




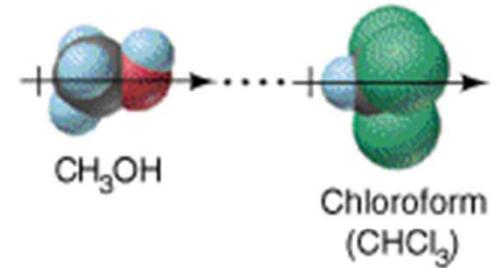
Forças intermoleculares resumo



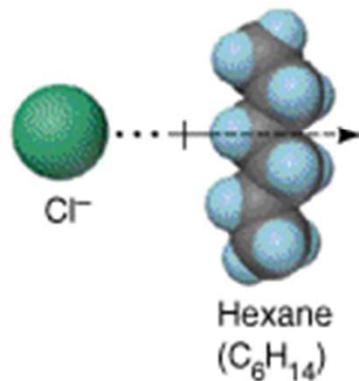
Ion-dipole



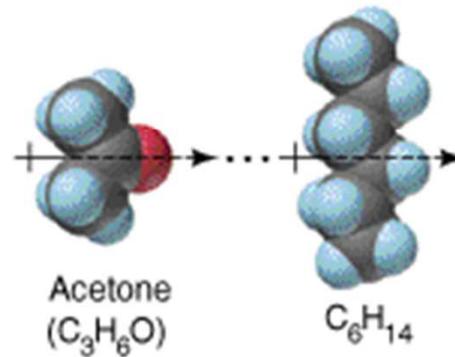
H bond



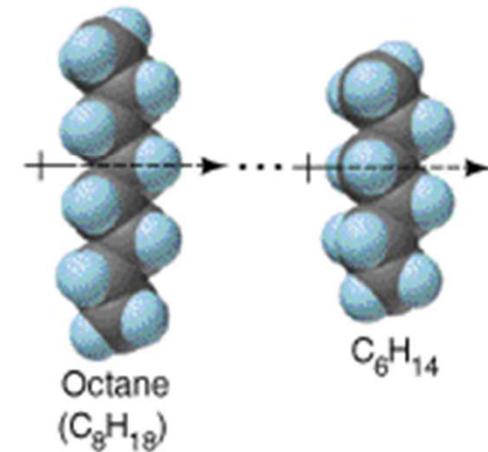
Dipole-dipole



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 $\text{X}-\text{H}$ bond (where $\text{X} = \text{F}, \text{N}, \text{O}$) 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	$\text{I}_2 \dots \text{I}_2$



Gases

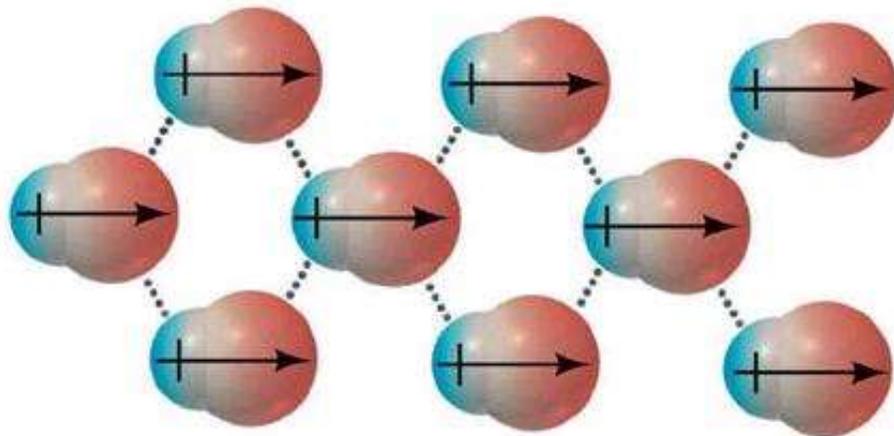
Aula 10



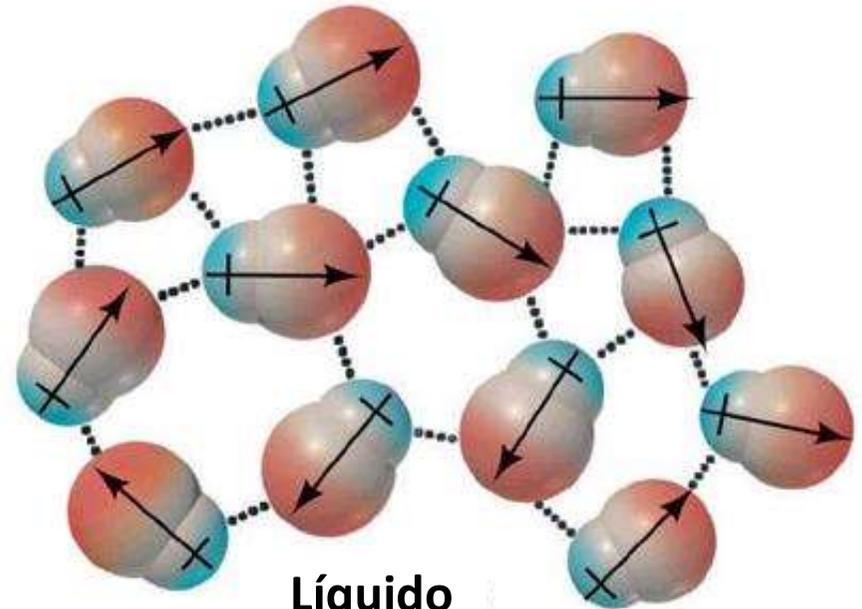
Questão: Porquê que um gás é um gás?

Porquê?

Forças Intermoleculares



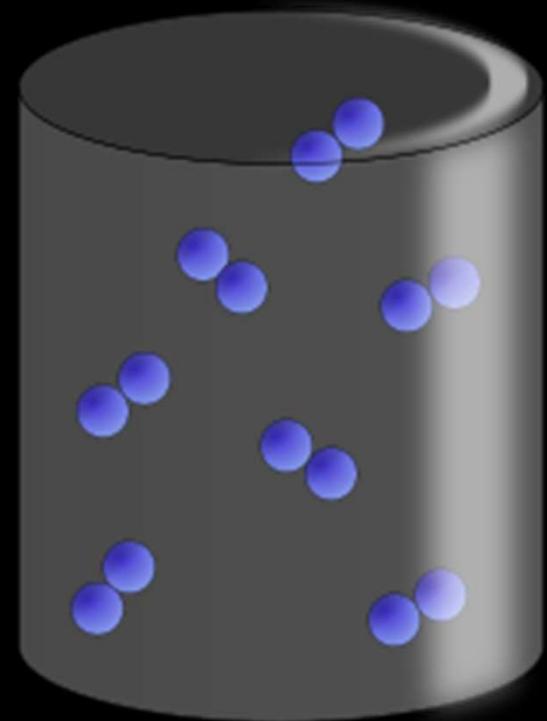
Sólido



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

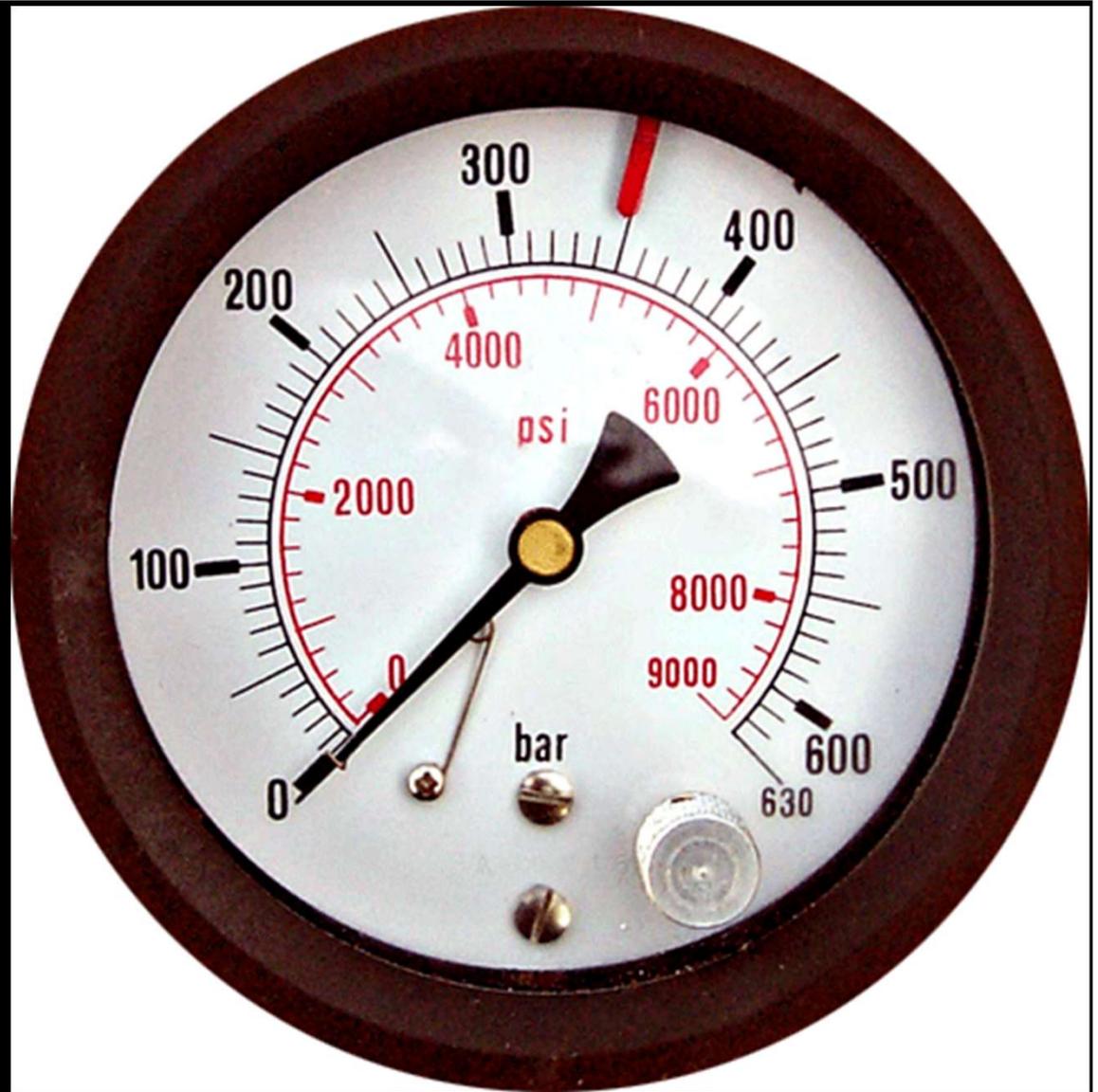
Termicamente expansíveis

Baixa densidade

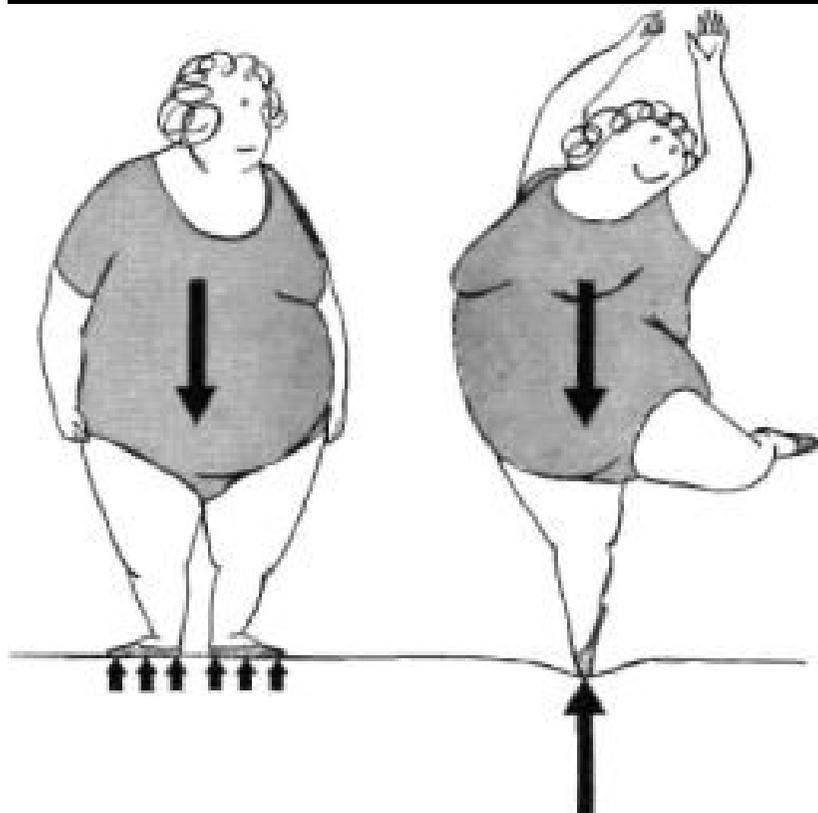
Baixas viscosidades

Infinitamente miscíveis uns nos outros

Pressão

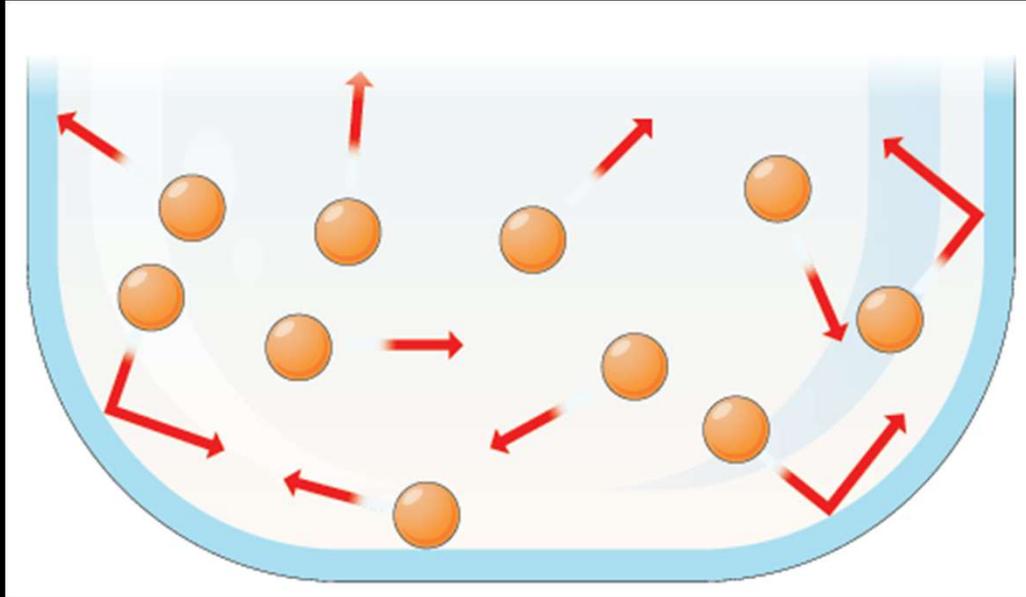


O que é a pressão?



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

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)



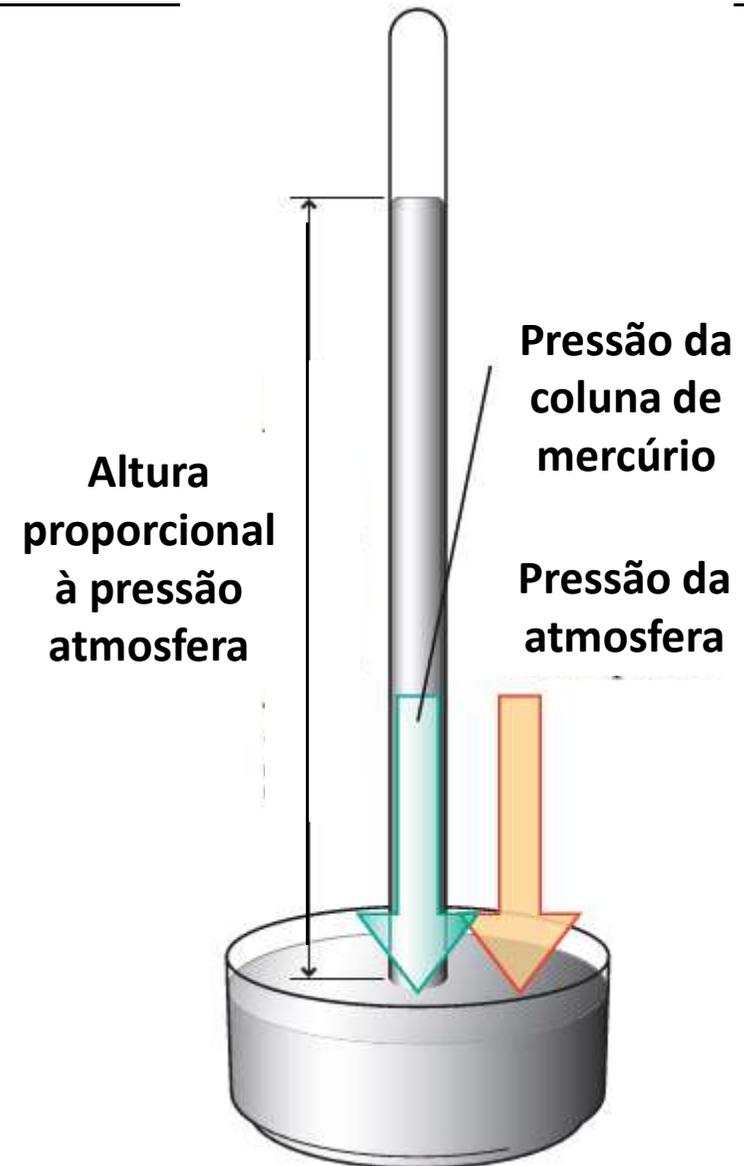
Blaise Pascal - (1623 - 1662 físico, matemático, filósofo moralista e teólogo francês.

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

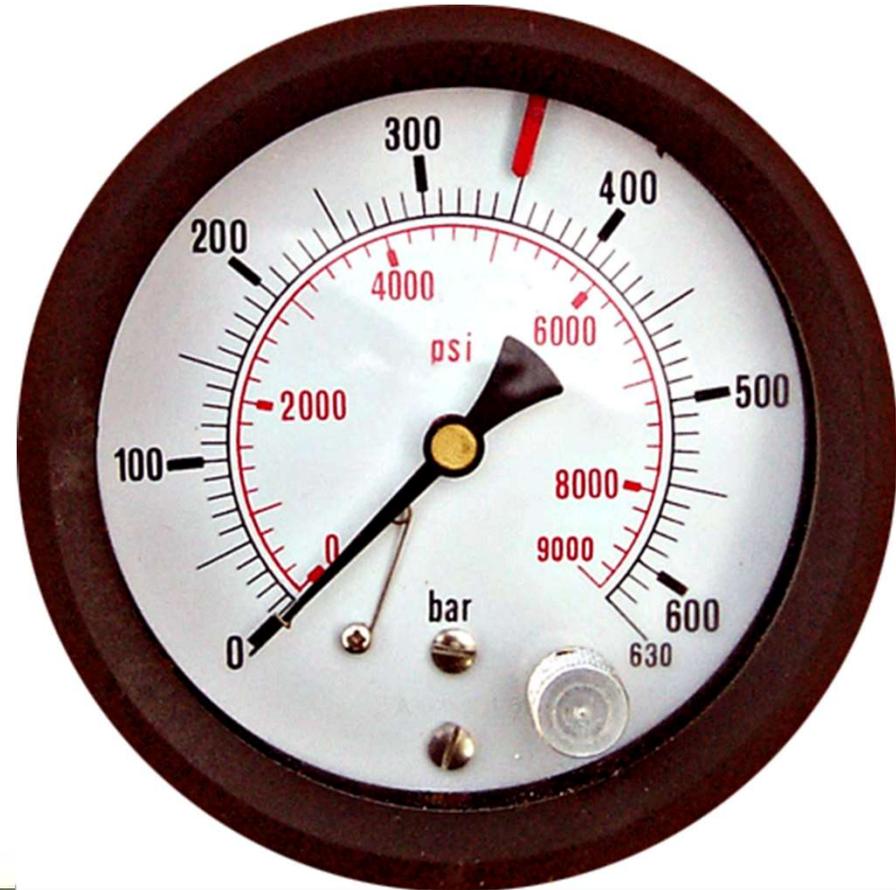
$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa} = 100 \text{ kPa}$$

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

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

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

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



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

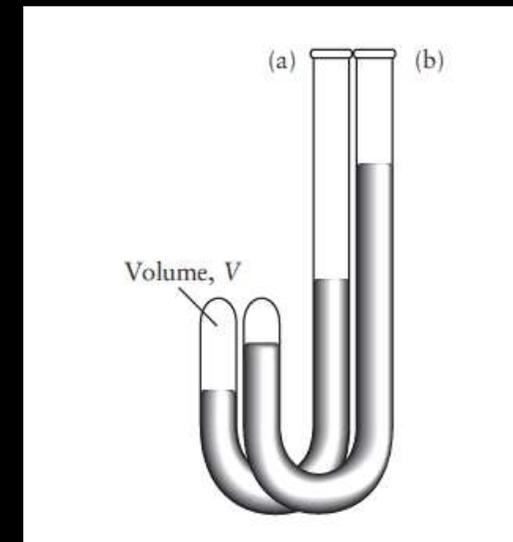
Concluindo

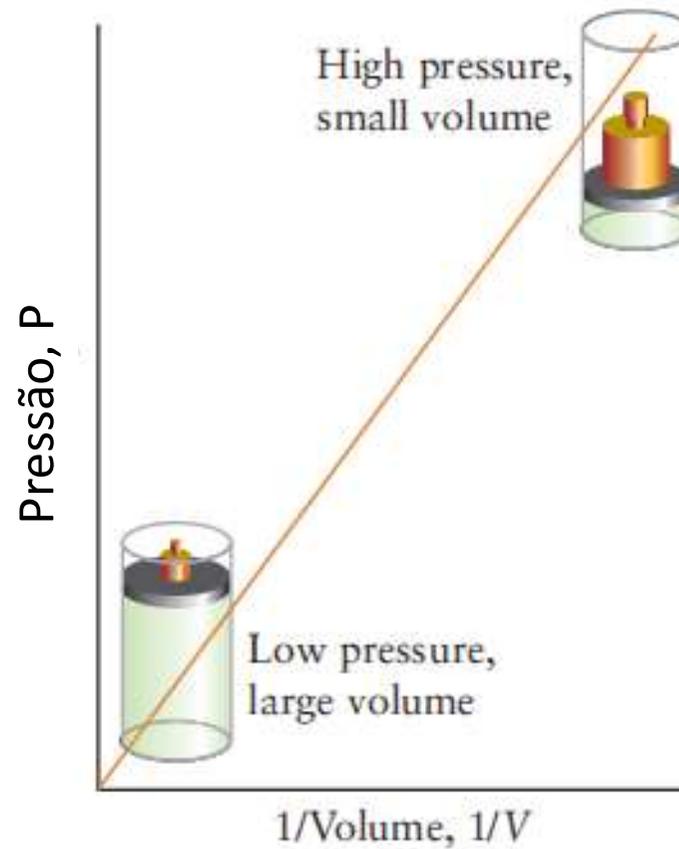
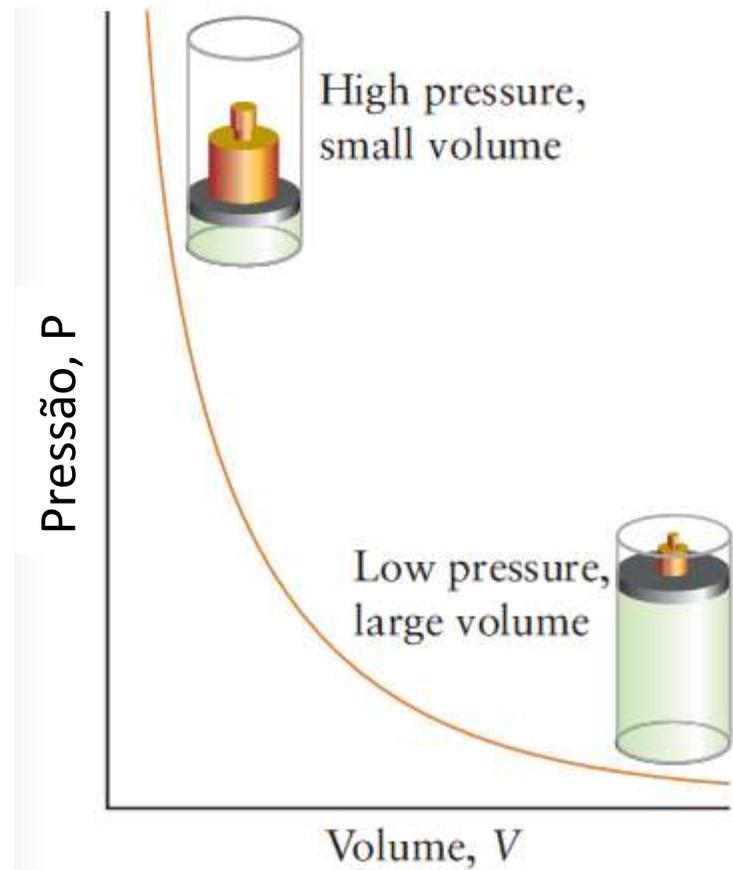
que o volume variava na razão e inversa da pressão

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



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

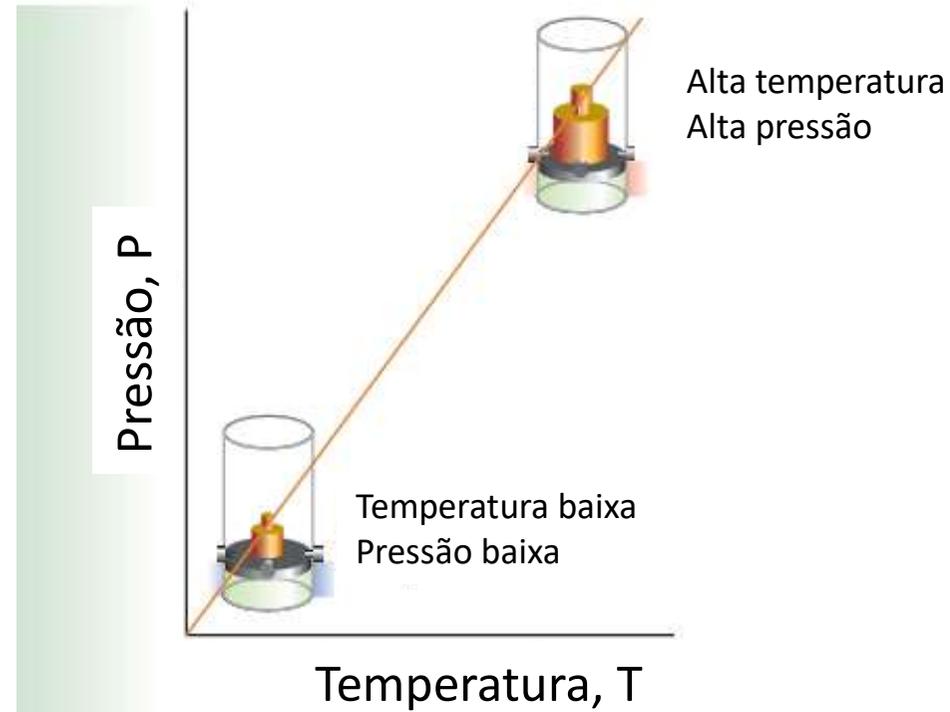
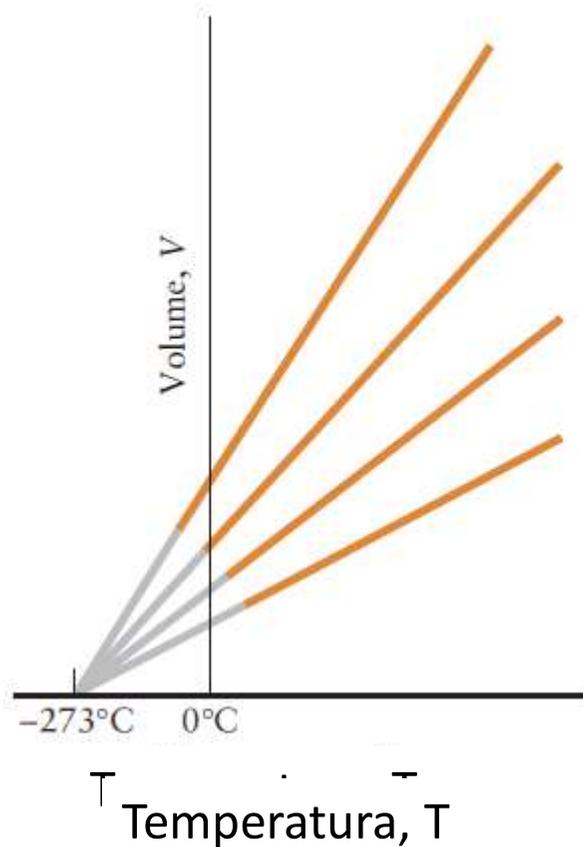


Joseph Louis Gay-Lussac (1778 -1850)
físico e químico francês



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 273 K 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

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

$$8.205\ 74 \times 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{atm}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$8.314\ 47 \times 10^{-2} \text{ L}\cdot\text{bar}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

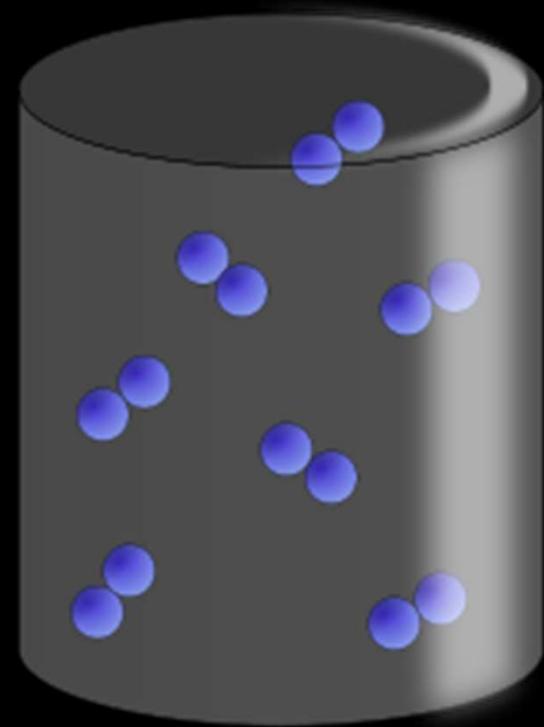
$$8.314\ 47 \text{ L}\cdot\text{kPa}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$8.314\ 47 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$62.364 \text{ L}\cdot\text{Torr}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Porque é que os gases são perfeitos?...

Ausência de Forças intermoleculares



Densidade de Um Gás

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

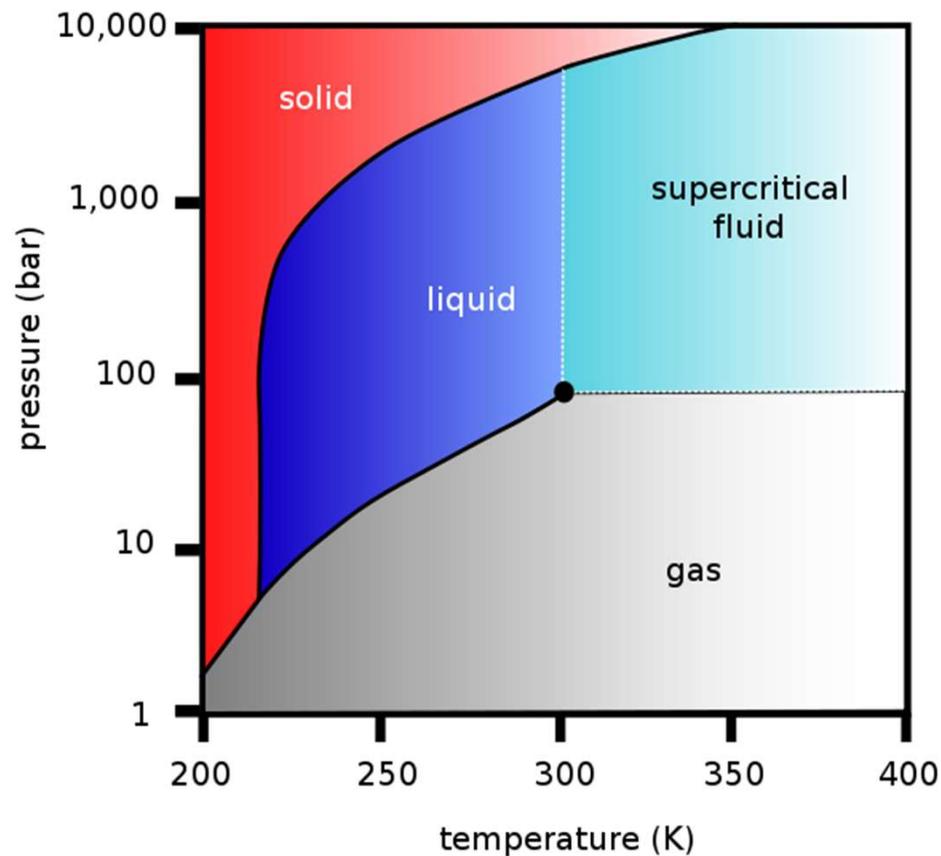
O que é que esta equação nos diz ?

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

“Que *diminui* com a temperatura”

Gases possuem uma baixa densidade...

Densidade de Um Gás



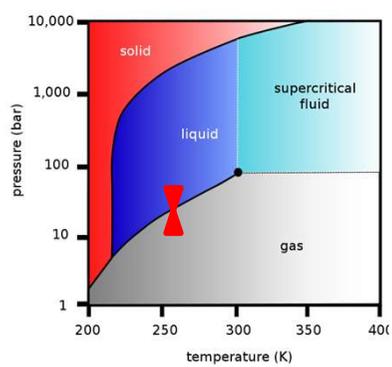
Fluido supercrítico:

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

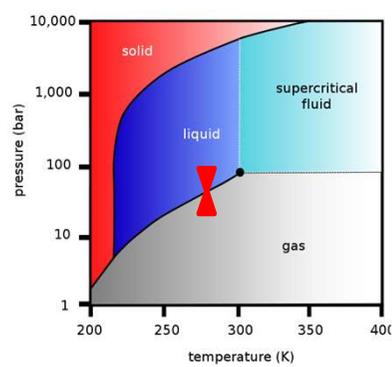
Ponto crítico:

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

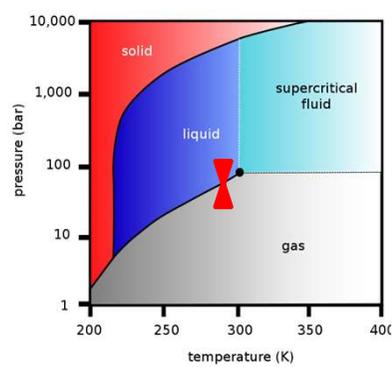
Densidade de Um Gás



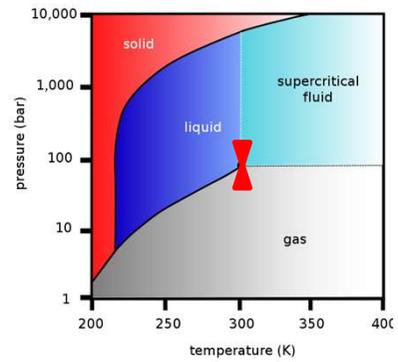
Pressão de vapor
CO₂ 298 K 60 bar



Aumentando T



Aumentando T

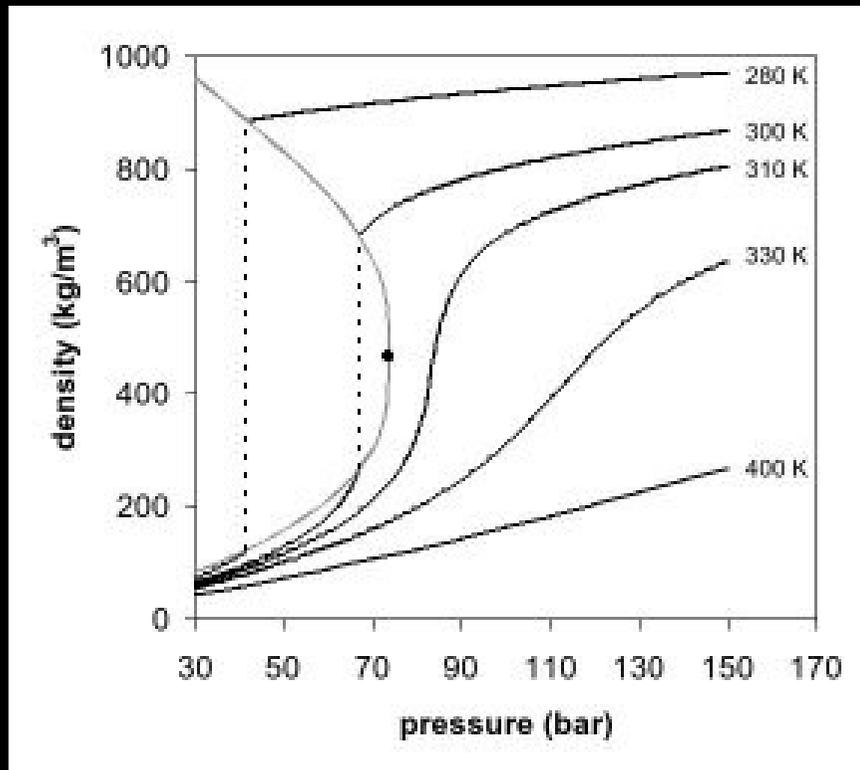


O Menisco desaparece
PONTO CRITICO

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

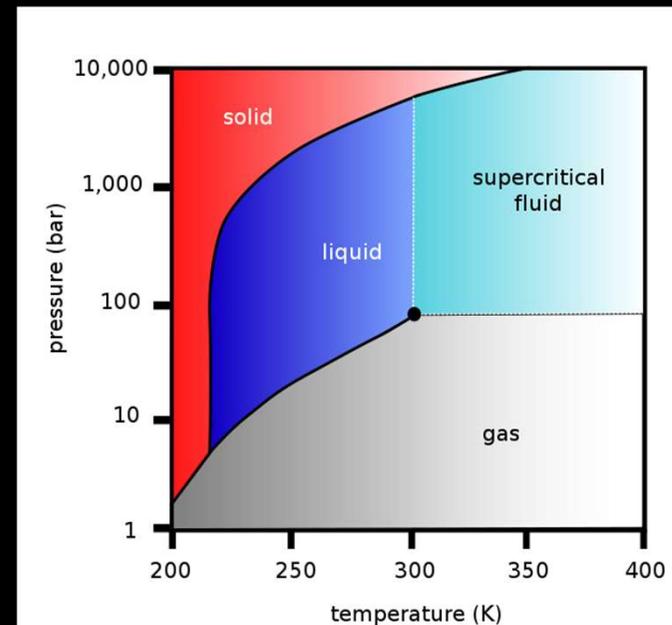
Solvent	Molecular weight	Critical temperature	Critical pressure	Critical density
	g/mol	K °C	MPa (atm)	g/cm ³
<u>Carbon dioxide</u> (CO ₂)	44.01	304.1 (31,1)	7.38 (72.8)	0.469
<u>Water</u> (H ₂ O) (acc. IAPWS)	18.015	647.096 (374.1)	22.064 (217.755)	0.322
<u>Methane</u> (CH ₄)	16.04	190.4 (-82,6)	4.60 (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

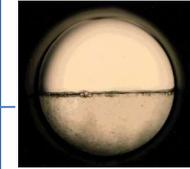


DENSIDADE !!!

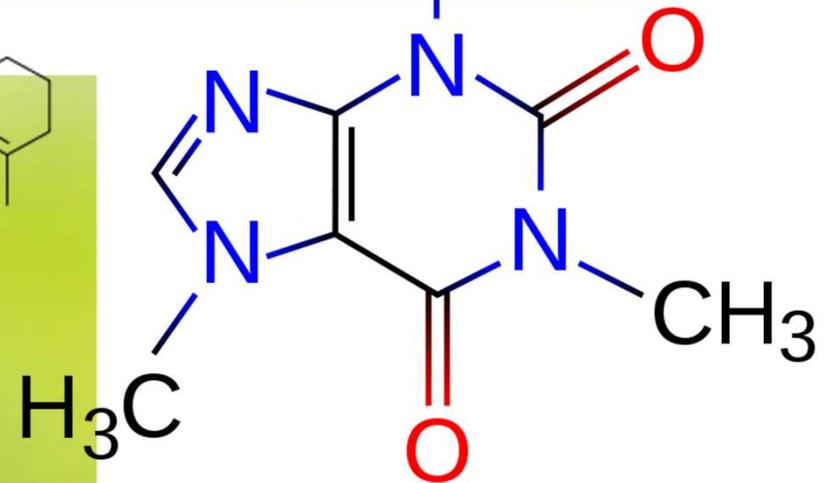
Com pequenas alterações na densidade do CO₂ podemos alterar a solubilidade dos compostos em CO₂



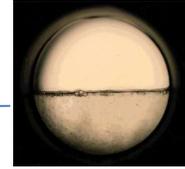
Extracção Supercritica



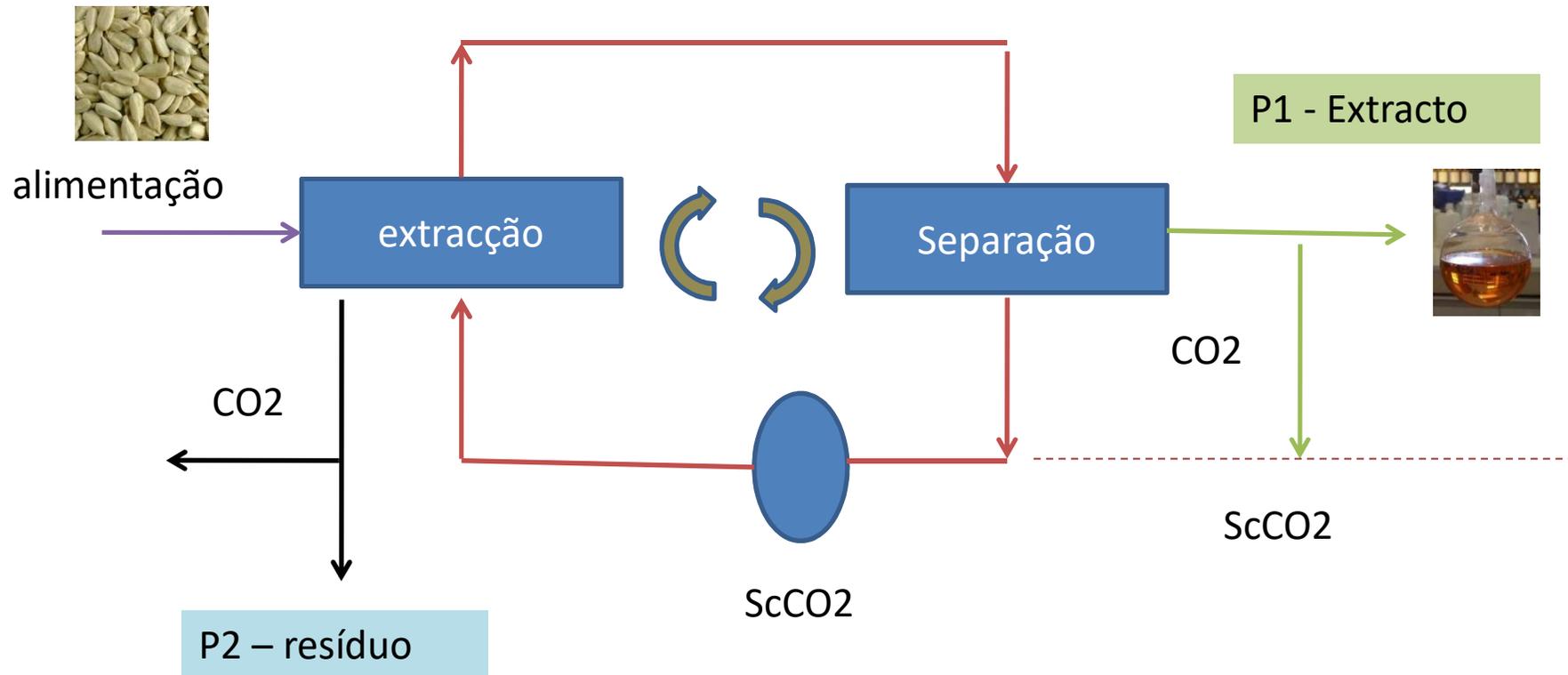
• *Sistema de extração de produtos naturais*



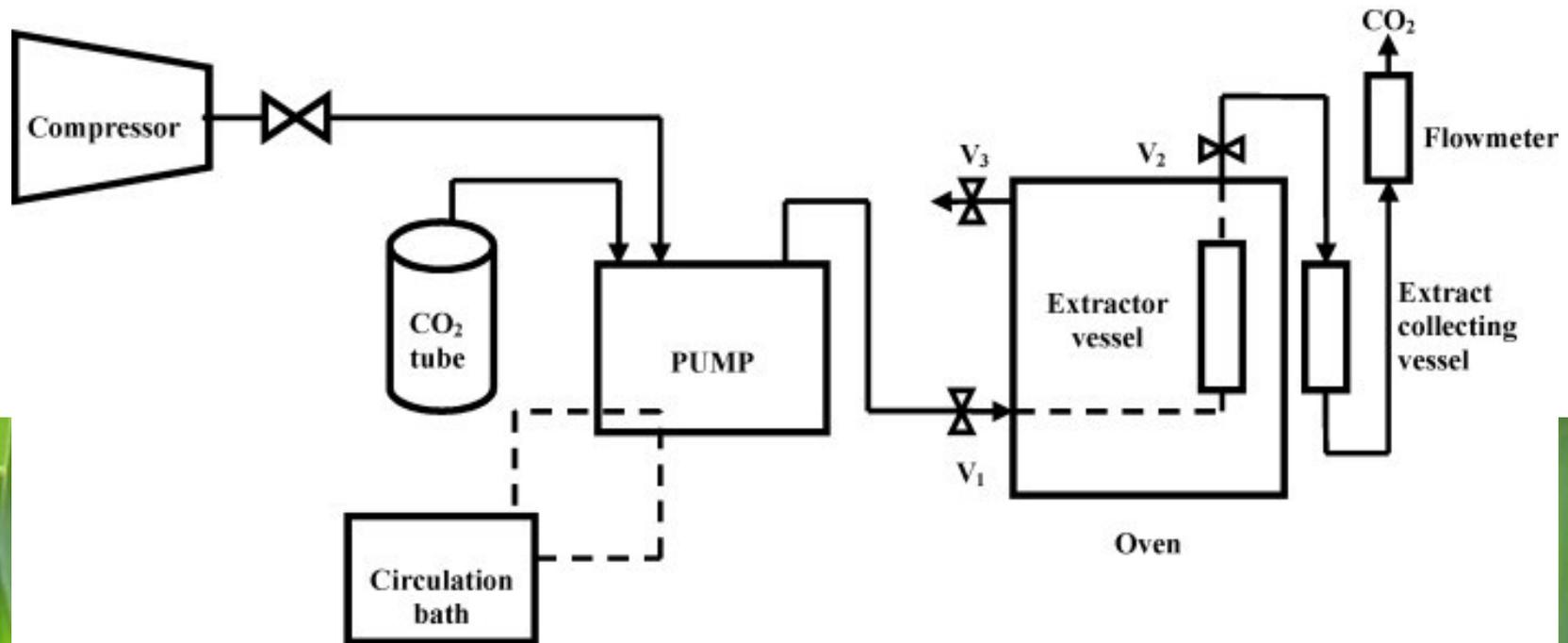
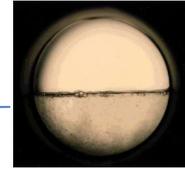
Extracção Supercritica



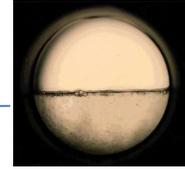
•Sistema de extração de sólidos



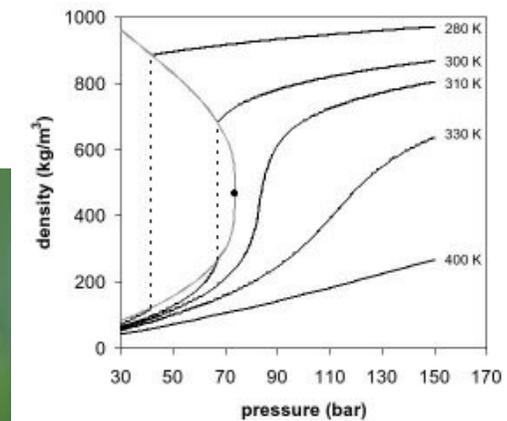
Extracção Supercritica



Extracção Supercritica

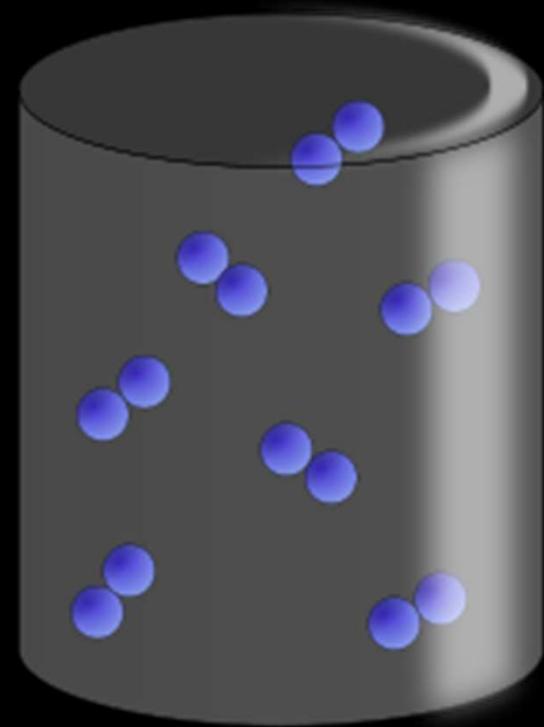


•Parâmetros que influenciam o processo de extracção de sólidos



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...

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 oxigênio num recipiente e obteve uma pressão de 0,6 atm.

em outro recipiente colocou uma certa nitrogênio 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 átomos

Misturas de gases

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

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

$$PV = nRT$$

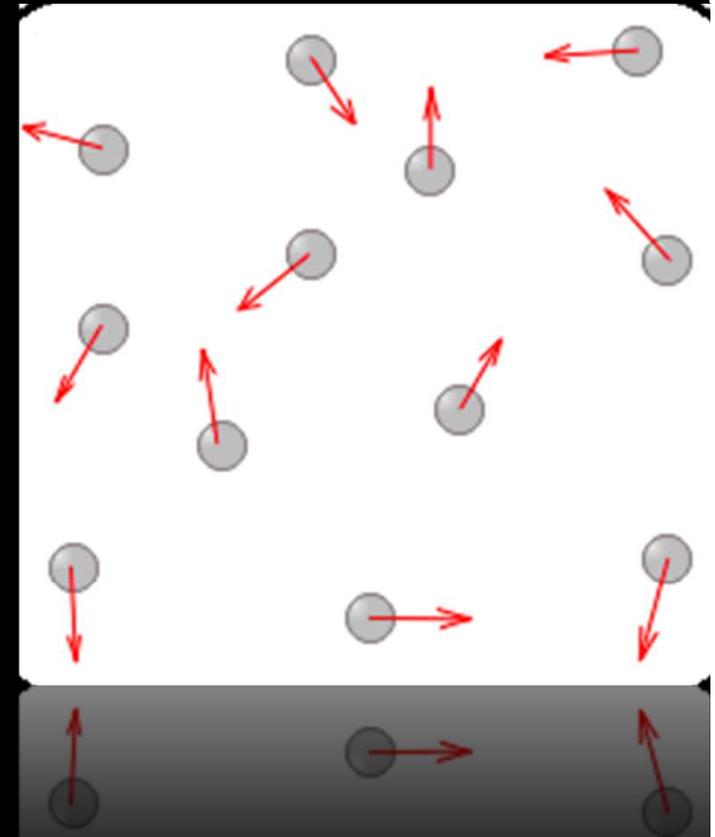
$$P_a = \frac{n_a RT}{V} = x_a \frac{nRT}{V} = x_a P$$

$$P_a = x_a P$$



Movimento molecular

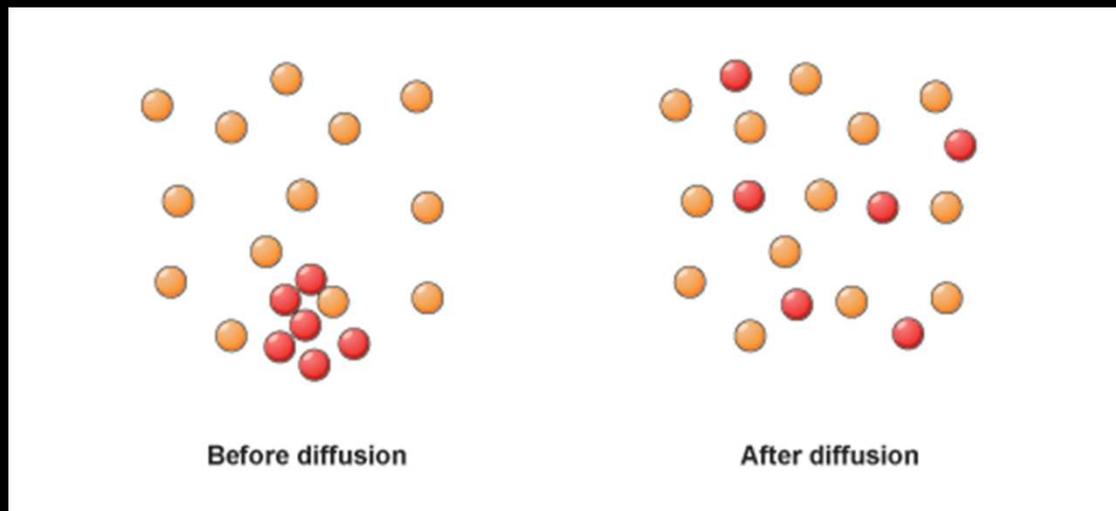
- Não há interacção das moléculas excepto durante a colisão
- Neste caso as moléculas viajam com uma **velocidade média** que aumenta com a **temperatura**
- Compreender como é que essa **velocidade** está correlacionada com o aumento de **temperatura** e peso molecular



Movimento molecular

Existem dois fenómenos que vamos ter compreender.

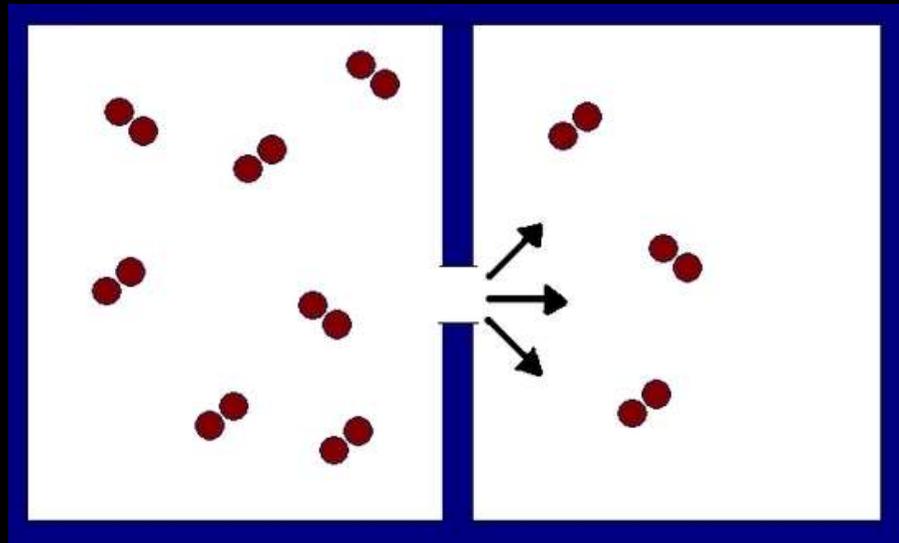
Difusão



Em que a difusão explica a dispersão dos perfumes

Movimento molecular

Efusão



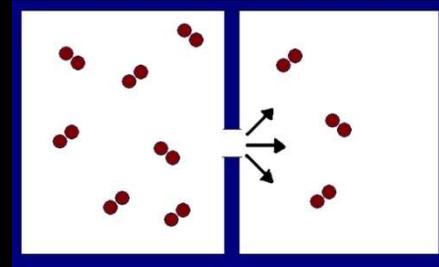
Alta pressão

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”

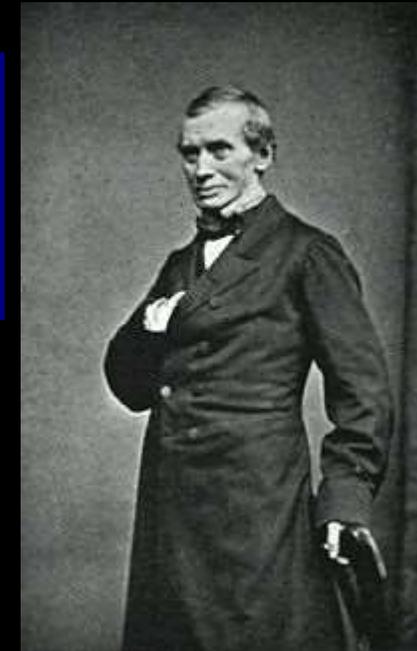


$$\text{velocidade de efusão} \propto \frac{1}{\sqrt{\text{massa molecular}}}$$

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

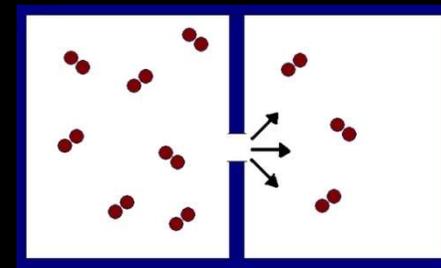
A velocidade de efusão é proporcional à velocidade média das partículas e consequente será inversamente proporcional a sua massa molecular

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



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:

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

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 ?

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

Como a taxa de efusão é proporcional à 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 à 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?

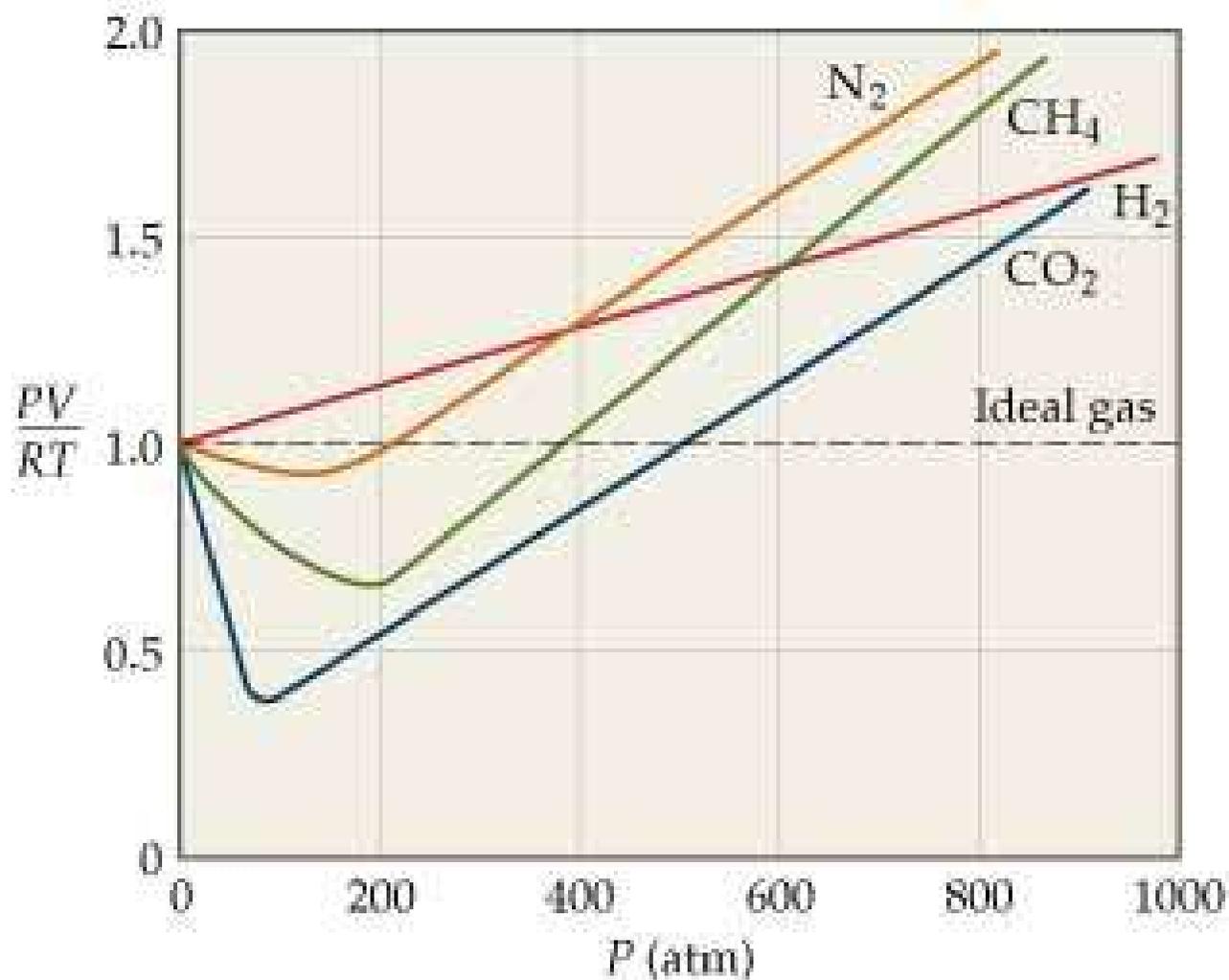
Estamos a falar de *gases reais*.

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

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

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

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

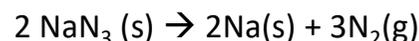
Gás real

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	$p = \frac{RT}{V_m} \left\{ 1 + \frac{B(T)}{V_m} + \frac{C(T)}{V_m^2} + \dots \right\}$				

1. Um dos cilindros o motor de um automóvel tem um volume de 400 cm^3 . O motor recebe o ar a uma pressão de 1 atm e a uma temperatura de 15°C e o comprime até um volume de $50,0 \text{ cm}^3$ a 77°C qual é a pressão. Qual é a pressão final do gás no cilindro?
2. Um balão para voos de grande distância contém $1,2 \times 10^7 \text{ L}$ hélio. Se a pressão for 737 mmHg a 25°C qual a massa de hélio que o balão conterá?
3. Um novo hidreto de boro B_xH_y foi isolado. Para encontrar a sua massa molar, você mede a pressão do gás em um volume conhecido a uma temperatura conhecida. Os seguintes dados foram coletados: Massa do gás – 12,5 mg; pressão do gás – 24,8 mmHg; temperatura - 25°C ; volume do frasco – 125 mL. Qual a fórmula molecular calculada?

4. A azida de sódio é o composto explosivo utilizado nos airbags automotivos e decompõe-se de acordo com a seguinte equação



Qual a massa de azida de sódio para fornecer nitrogênio suficiente para inflar um airbag de 75 L a uma pressão de 1,3 atm a 25°C .

5. Uma mistura de halotano e oxigênio ($\text{C}_2\text{HBrClF}_3 + \text{O}_2$) pode ser usada como anestésico. Um tanque contendo essa mistura tem as seguintes pressões parciais:

$$P_{(\text{halotano})} = 170 \text{ mmHg} \text{ e } P_{(\text{O}_2)} = 0,570 \text{ mmHg}$$

- a) Qual é a proporção do número de moles de haloetano para o número de moles de O_2
- b) Se o tanque contém 160 g de O_2 qual é a massa de $\text{C}_2\text{HBrClF}_3$ presente. $M(\text{C}_2\text{HBrClF}_3) = 197,38 \text{ g/mol}$

6. Um gás cuja a massa molar você deseja saber, efunde por uma abertura a uma velocidade de um terço da velocidade do hélio. Qual o volume molar do gás desconhecido?

7. Há 5 membros na família dos compostos de enxofre e flúor com a fórmula geral de S_xF_y . Um desses compostos tem 25,23% de S. se você colocar 0,0955 g do composto em um frasco de 89 mL a 45°C , a pressão do gás será de 83,8 mm Hg. Qual a fórmula molecular do S_xF_y ?

8. Considere um tanque de 5,00 L contendo 325 g de água a uma temperatura de 275 °C.

- a. Calcule a pressão no tanque usando a lei do gás ideal e a equação de van der Waals.
- b. Que termo de correção tem mais impacto sobre a pressão deste sistema?



Reacções químicas

Aula 11

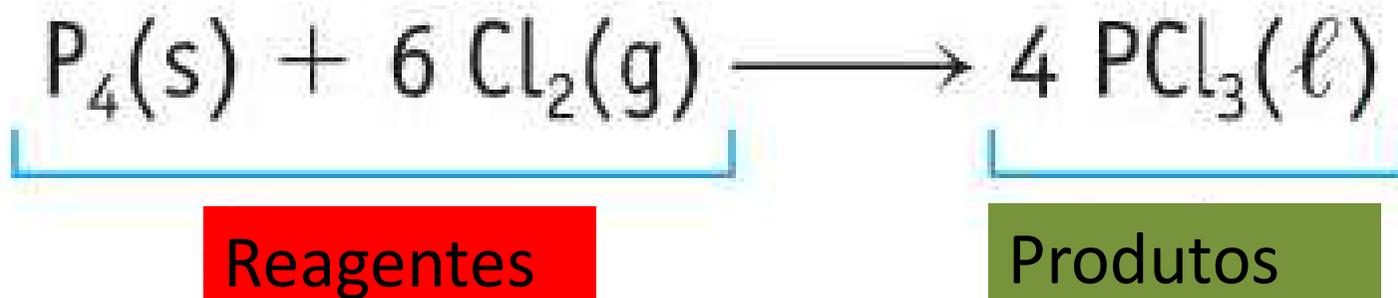
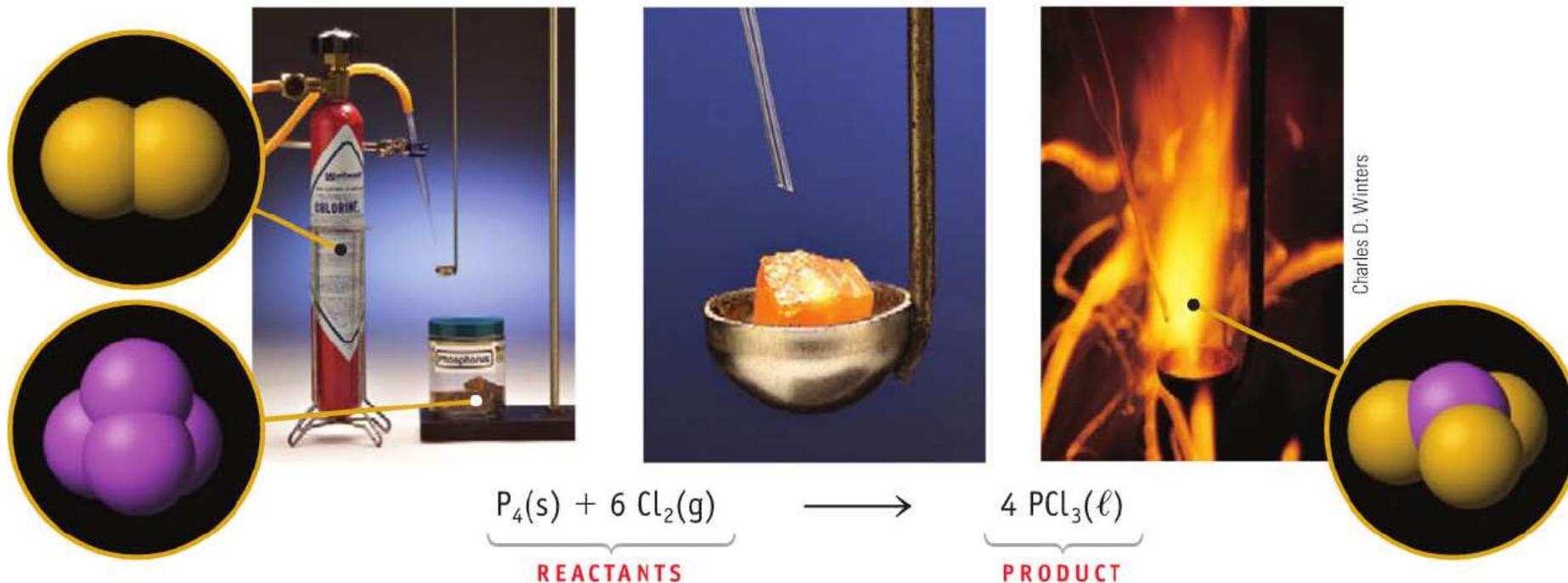
Lei da conservação de massa



Na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma.

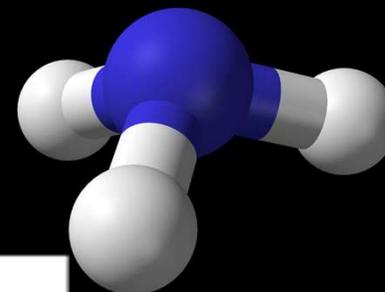
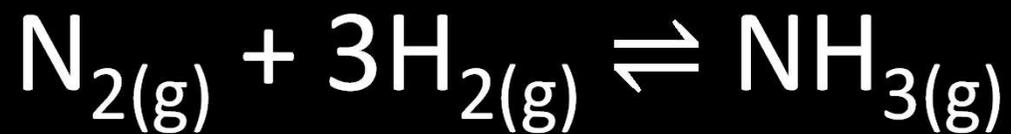
(Antoine Lavoisier)

Reações Químicas

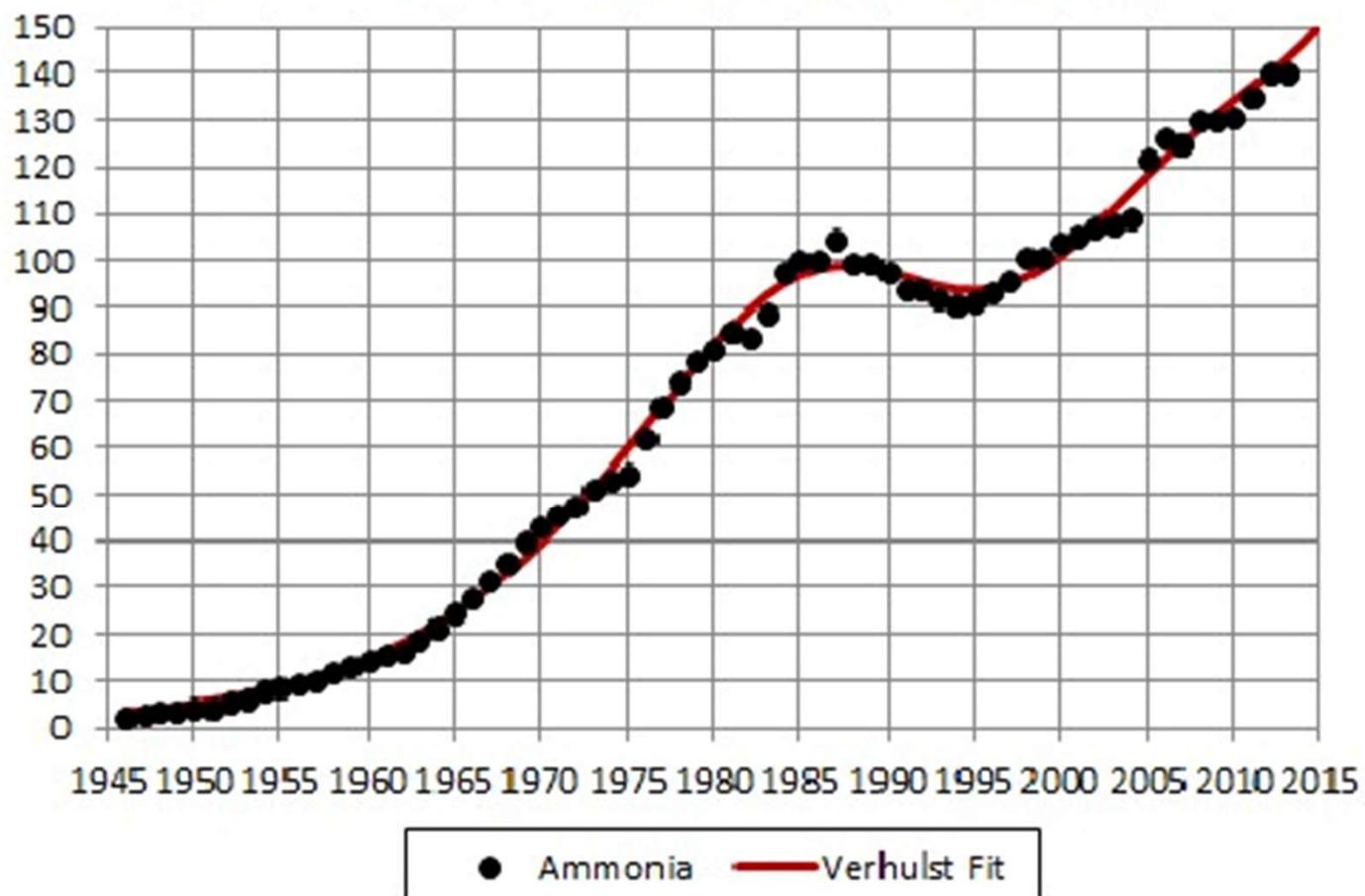


Lei da conservação da matéria: Antoine Lavoisier

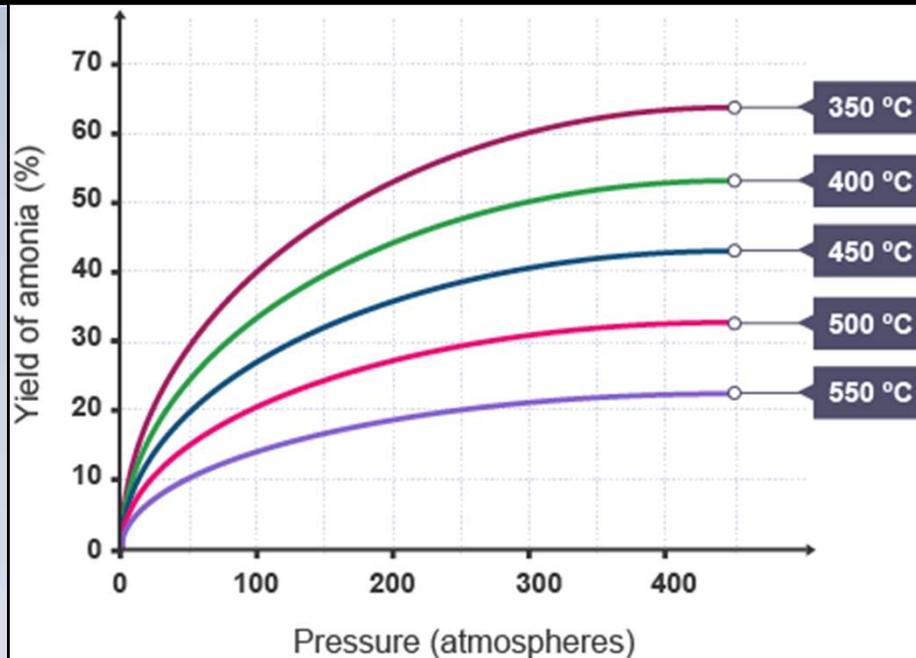
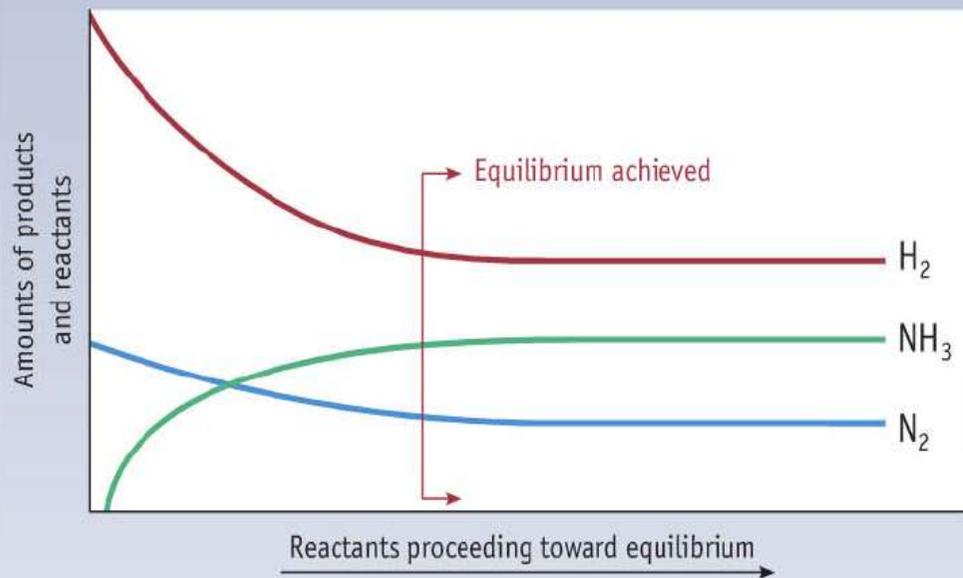
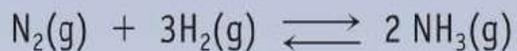
Síntese de amónia



World Ammonia Production (10⁶ tonnes)



Introdução ao Equilíbrio Químico

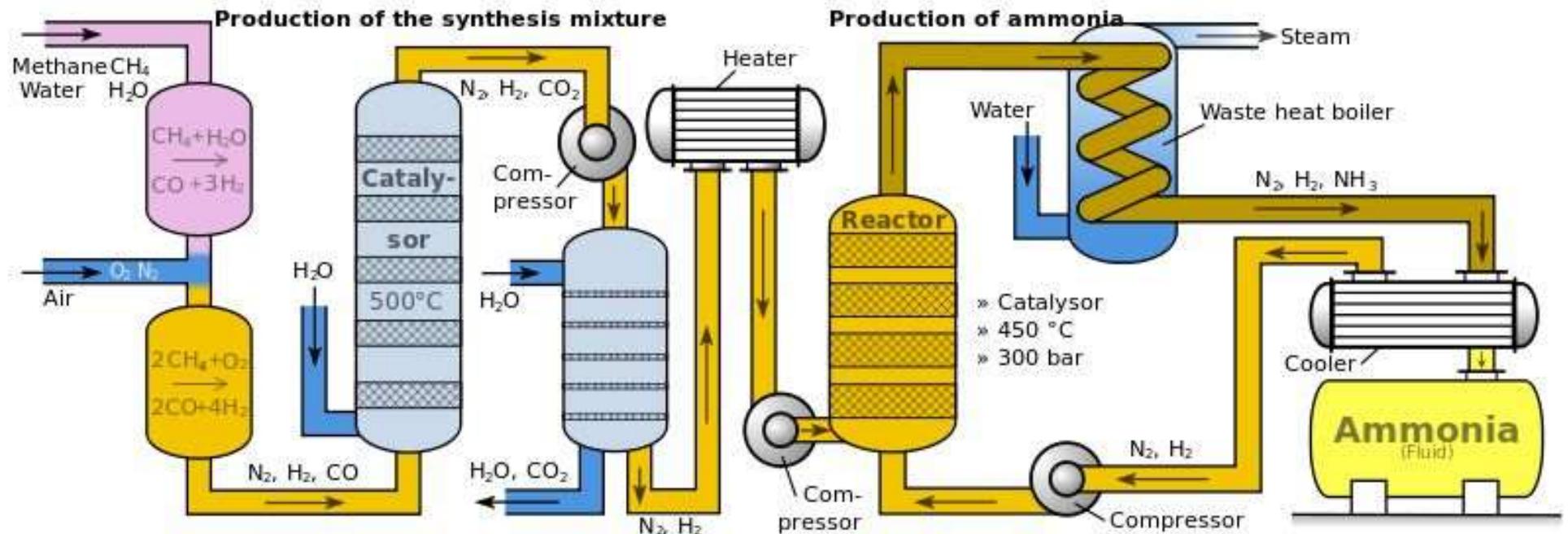


$K_p(T)$ for $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3$

T(°C)	K_p
300	4.34×10^{-3}
400	1.64×10^{-4}
450	4.51×10^{-5}
500	1.45×10^{-5}
550	5.38×10^{-6}
600	2.25×10^{-6}

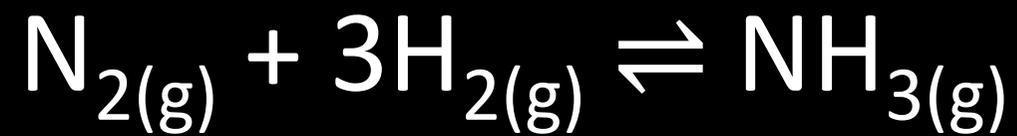
$$K_p = \frac{p\text{NH}_3^2}{p\text{H}_2^3 p\text{N}_2}$$

Processo de Haber -Bosch





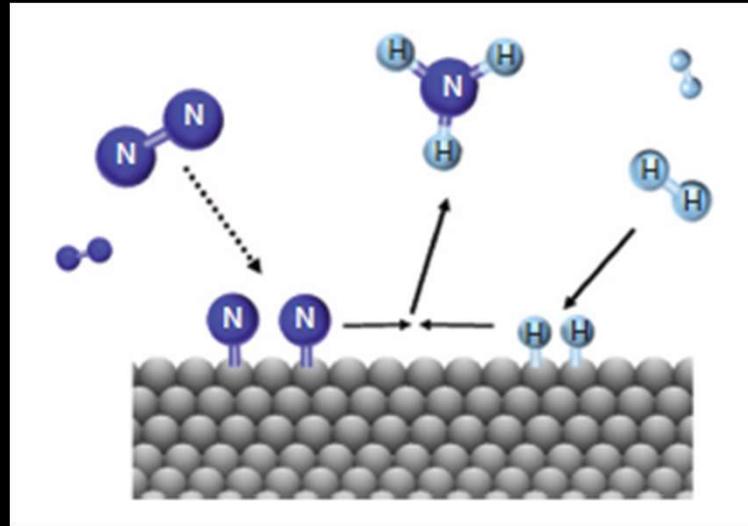
Processo de Haber -Bosch



Catálise



*Assistente do
Bosch— Alwin
Mittasch*



Complexo Ferro-ruténio

*Assistente do
Bosch— Alwin
Mittasch*

Óxido de ferro

*Ósmio Catalisador
Haber*





Fritz Haber, 1868 - 1934



Prémio nobel - 1918

“Síntese da amónia a partir dos seus consituíntes

Haber's "Darkside"

Segunda batalha Ypres (Bélgica)
(1915) – 67.000 mortos devido ao Cl_2



Clara Immerwahr (1870-1915)
1ª mulher doutorada em
química pela universidade de
Breslau (Wroclaw, Polónia)

BASF

The Chemical Company

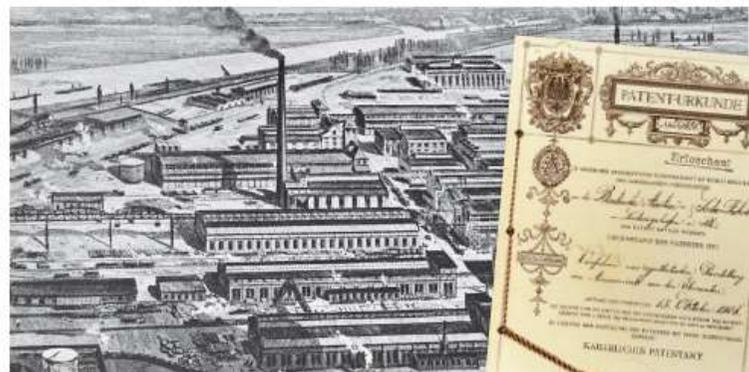
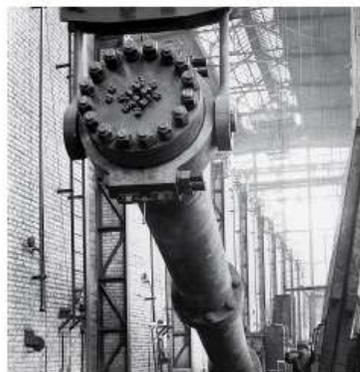
Badische Anilin und Soda-Fabrik

1910

2014 ≈ \$100 billions

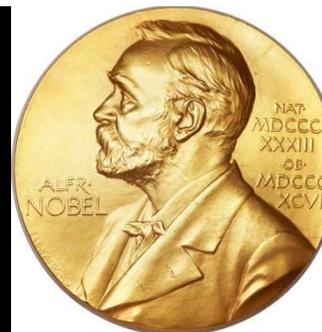


Carl Bosch, 1874 - 1940

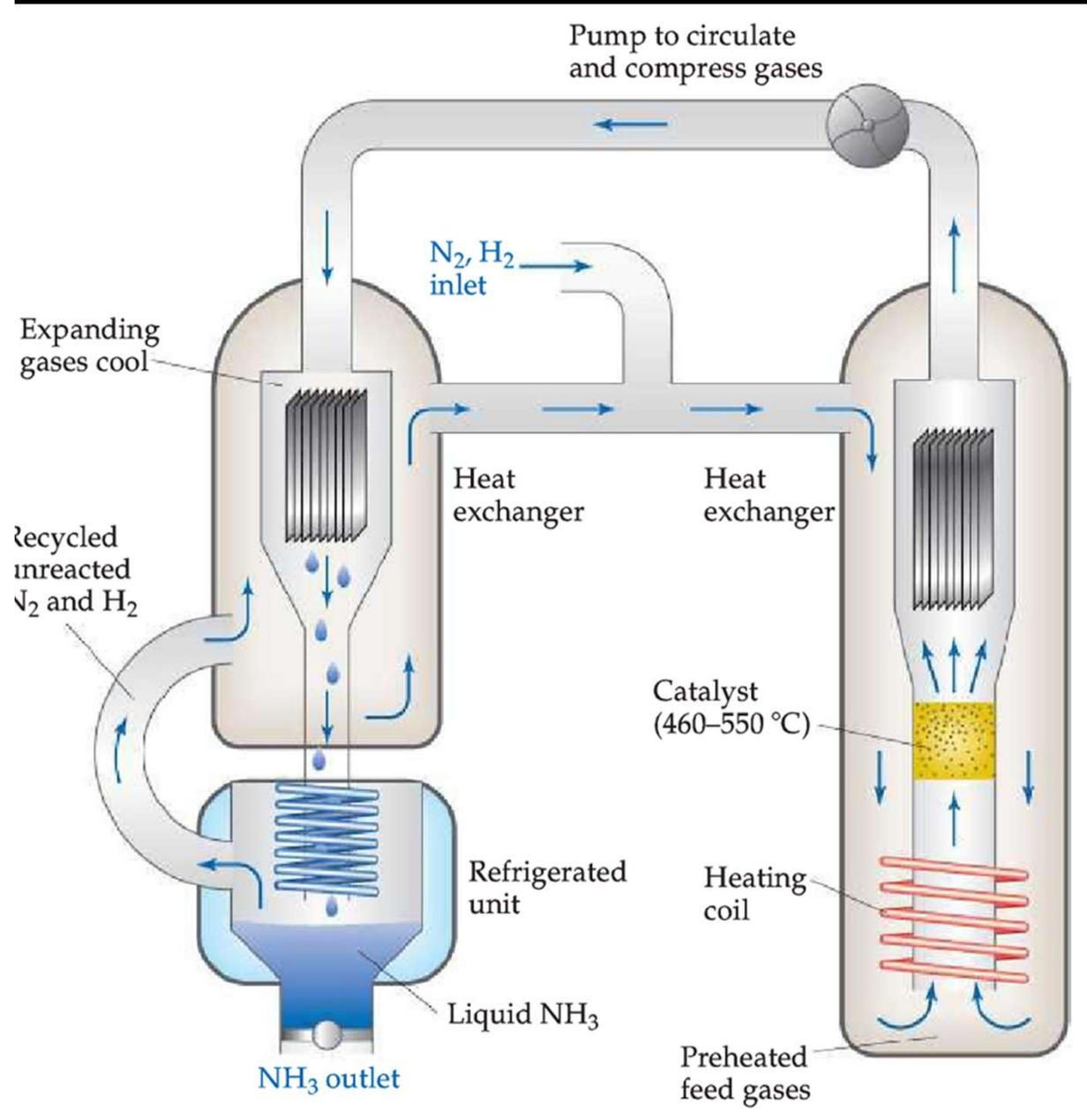


Left to right: Bosch's original reactor; BASF's Oppau works ca 1913; the 1908 patent for Haber's process (Pictures courtesy of BASF)

Nobel prize - 1931



Invenção e desenvolvimento de métodos de alta pressão.





Science around us

Fertilizer out of thin air

Equilíbrio Químico

a Reactants: Solutions of CaCl_2 (left) and NaHCO_3 (right). Na^+ and Cl^- are spectator ions (page 129; not shown)

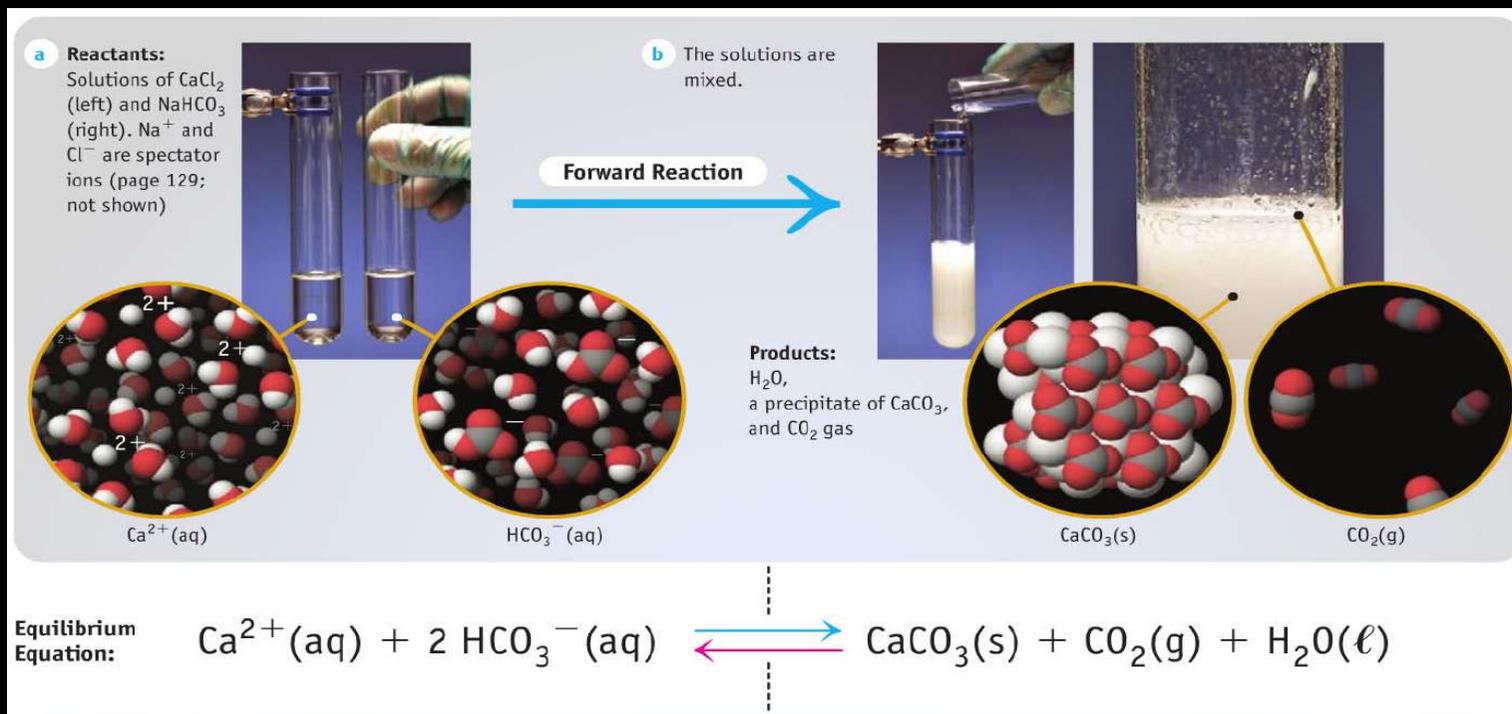
b The solutions are mixed.

Forward Reaction

Products: H_2O , a precipitate of CaCO_3 , and CO_2 gas

$\text{Ca}^{2+}(\text{aq})$ $\text{HCO}_3^-(\text{aq})$ $\text{CaCO}_3(\text{s})$ $\text{CO}_2(\text{g})$

Equilibrium Equation: $\text{Ca}^{2+}(\text{aq}) + 2 \text{HCO}_3^-(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{CaCO}_3(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\ell)$



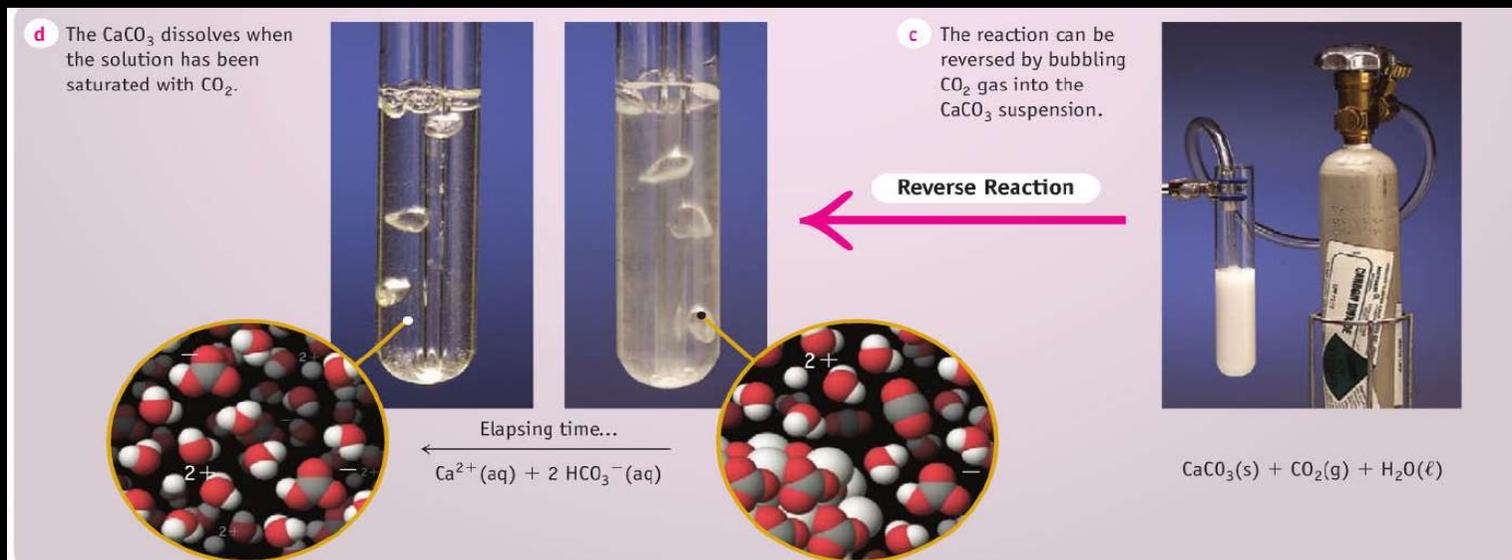
d The CaCO_3 dissolves when the solution has been saturated with CO_2 .

c The reaction can be reversed by bubbling CO_2 gas into the CaCO_3 suspension.

Reverse Reaction

Elapsing time... $\text{Ca}^{2+}(\text{aq}) + 2 \text{HCO}_3^-(\text{aq})$

$\text{CaCO}_3(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\ell)$

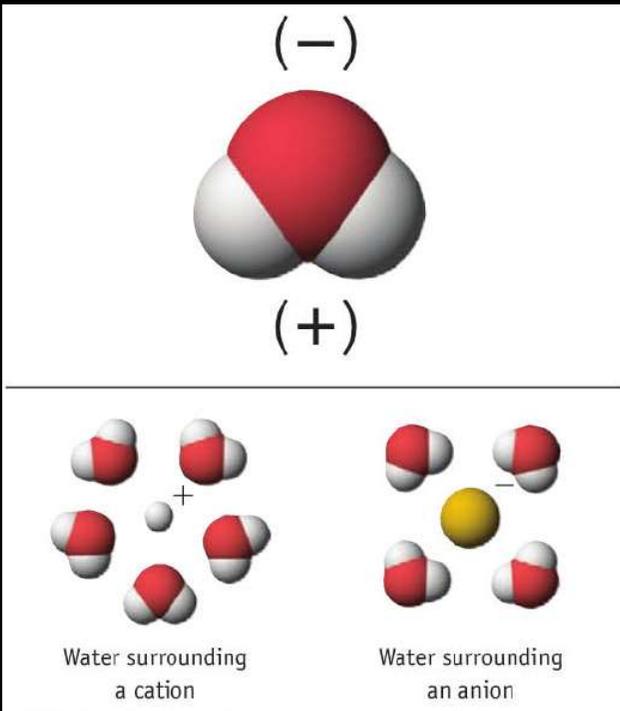


Reações em meio aquoso

- Precipitação
- Ácido-Base
- Formação de gás
- Óxido redução



Íons em solução



Element	Dissolved Species	Sea Water	<i>Valonia</i> [†]	Red Blood Cells	Blood Plasma
Chlorine	Cl ⁻	550	50	50	100
Sodium	Na ⁺	460	80	11	160
Magnesium	Mg ²⁺	52	50	2.5	2
Calcium	Ca ²⁺	10	1.5	10 ⁻⁴	2
Potassium	K ⁺	10	400	92	10
Carbon	HCO ₃ ⁻ , CO ₃ ²⁻	30	<10	<10	30
Phosphorus	H ₂ PO ₄ ⁻ , HPO ₄ ²⁻	<1	5	3	<3

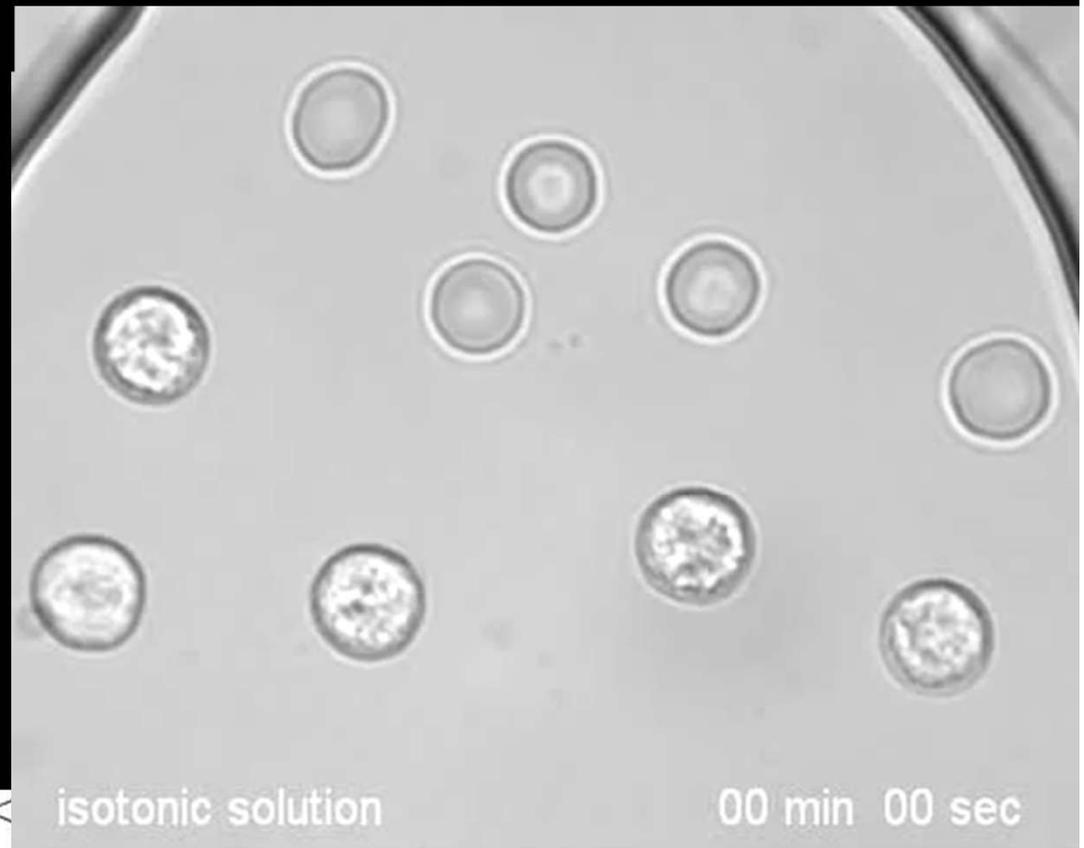
Íons em solução

Dissolution of NaCl in Water

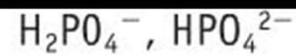


Water surrounding a cation

Water surrounding an anion



Phosphorus



isotonic solution

00 min 00 sec

Íons em solução - Eletrólitos

Forte

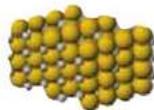
Fraco

Não-eletrólito

Strong Electrolyte



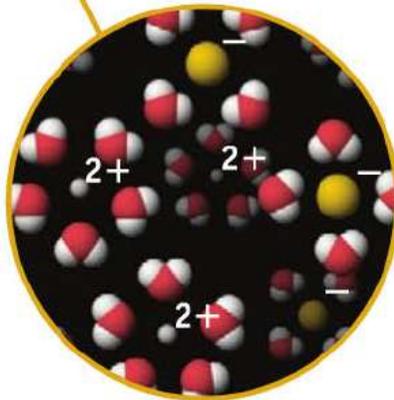
A **strong electrolyte** conducts electricity. CuCl_2 is completely dissociated into Cu^{2+} and Cl^- ions.



CuCl_2

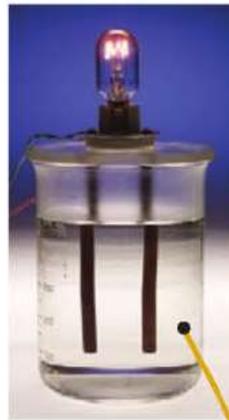
Cu^{2+}

Cl^-



CuCl_2

Weak Electrolyte



A **weak electrolyte** conducts electricity poorly because only a few ions are present in solution.

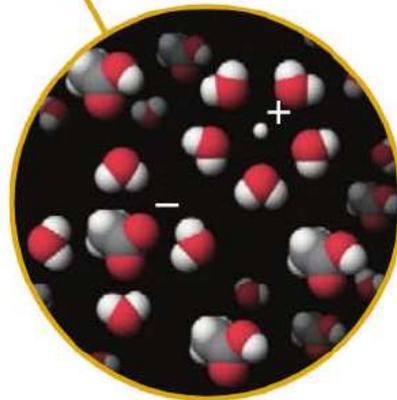


Acetic acid



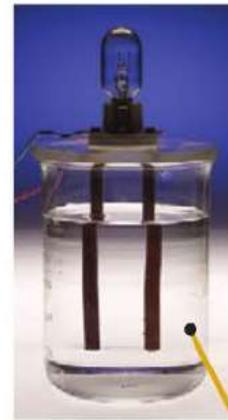
Acetate ion

H^+



Ácido acético

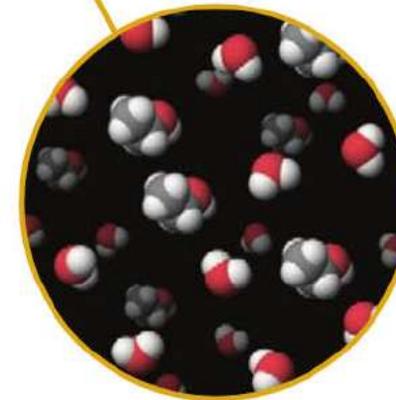
Nonelectrolyte



A **nonelectrolyte** does not conduct electricity because no ions are present in solution.



Ethanol



Etanol

Íons em solução - Solubilidade

SOLUBLE COMPOUNDS

Almost all salts of Na^+ , K^+ , NH_4^+

Salts of nitrate, NO_3^-
chlorate, ClO_3^-
perchlorate, ClO_4^-
acetate, CH_3CO_2^-

Almost all salts of Cl^- , Br^- , I^-

Salts containing F^-

Salts of sulfate, SO_4^{2-}

SILVER COMPOUNDS



AgNO_3

AgCl

AgOH

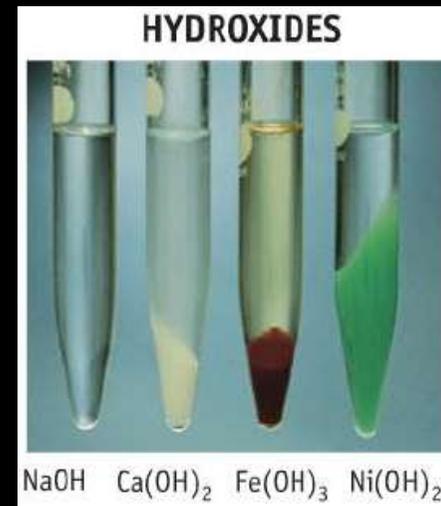
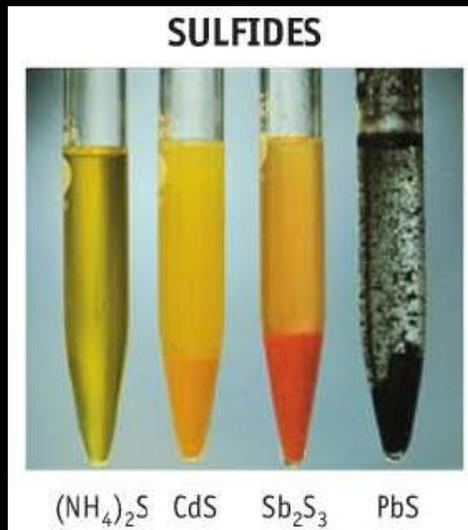
EXCEPTIONS

Halides of Ag^+ , Hg_2^{2+} , Pb^{2+}

Fluorides of Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+}

Sulfates of Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+}

Íons em solução - Solubilidade



INSOLUBLE COMPOUNDS

Most salts of carbonate, CO_3^{2-}
phosphate, PO_4^{3-}
oxalate, $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$
chromate, CrO_4^{2-}
sulfide, S^{2-}

Most metal hydroxides and oxides

EXCEPTIONS

Salts of NH_4^+ and the alkali metal cations

Alkali metal hydroxides and $\text{Ba}(\text{OH})_2$

Precipitação



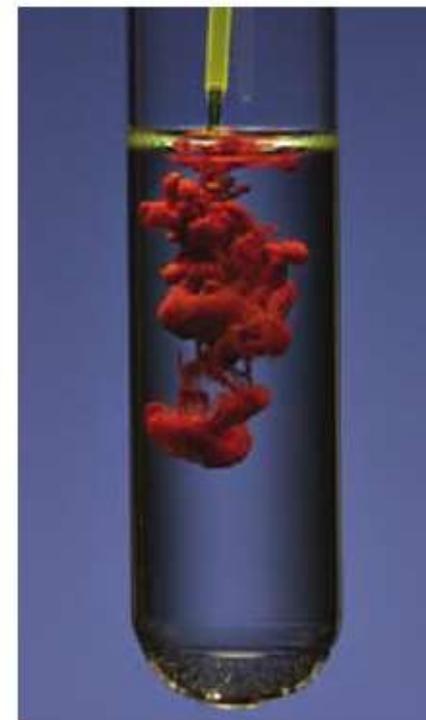
(a) $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ and K_2CrO_4 produce yellow, insoluble PbCrO_4 and soluble KNO_3 .



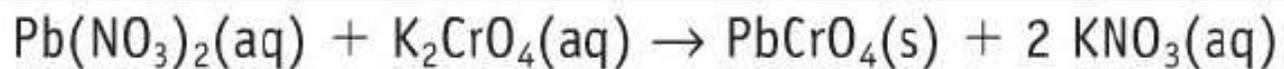
(b) $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ and $(\text{NH}_4)_2\text{S}$ produce black, insoluble PbS and soluble NH_4NO_3 .



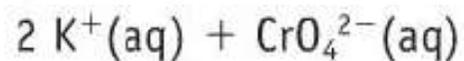
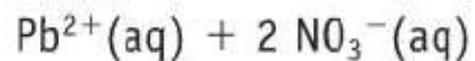
(c) FeCl_3 and NaOH produce red, insoluble $\text{Fe}(\text{OH})_3$ and soluble NaCl .



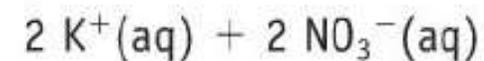
(d) AgNO_3 and K_2CrO_4 produce red, insoluble Ag_2CrO_4 and soluble KNO_3 .



Reactants

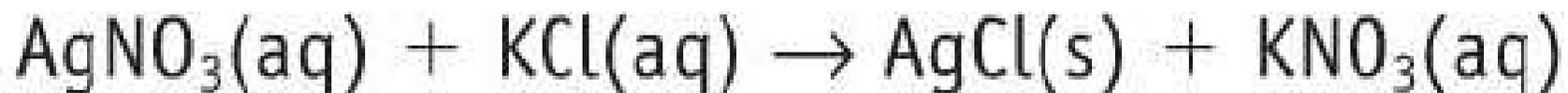


Products

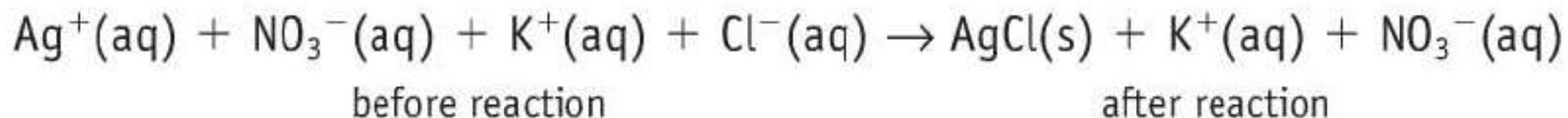


Equação iônica

I. Equação iônica balanceada



II. Equação iônica completa



Obs: Íons espectadores

II. Equação iônica líquida





***Princípios de
reatividade e
equilíbrios
químicos***

Aula 12

Equilíbrio químico

Photos: Charles D. Winters



Solution of cobalt(II) chloride in dilute hydrochloric acid.



Solution in an ice bath.



Solution in a boiling water bath.

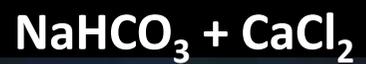


Solution after adding excess hydrochloric acid.



Solution after adding excess water.

Equilíbrio químico



Excesso Gelo seco –
 CO_2 sólido



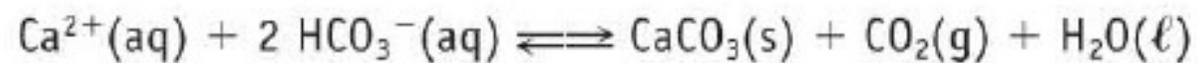
(a)



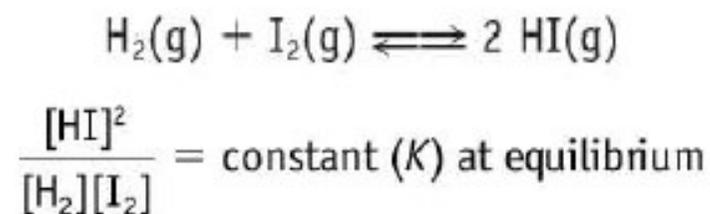
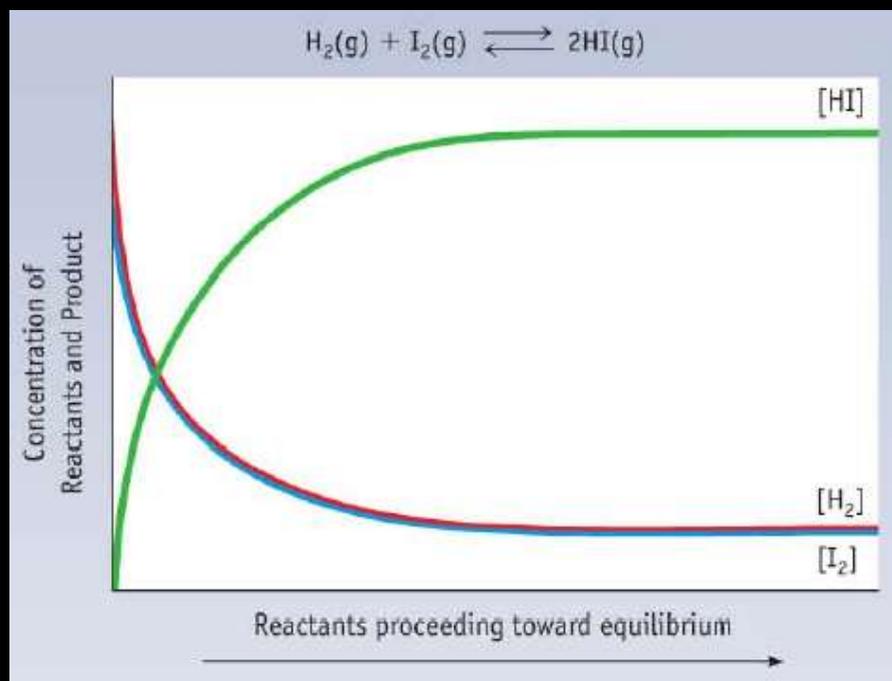
(b)



(c)



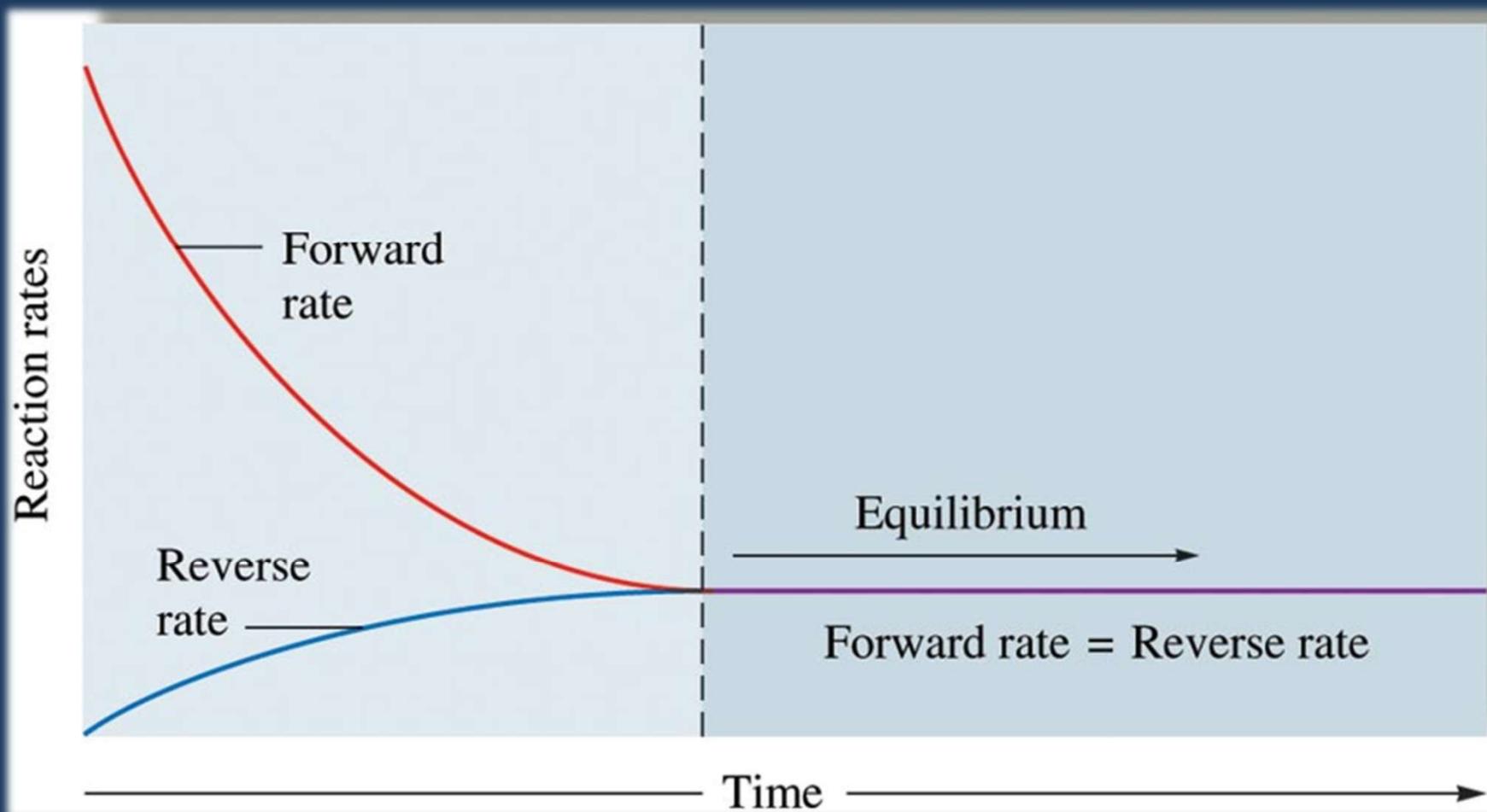
Constante de equilibrio químico



$$\frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = \frac{(0.0276)^2}{(0.0037)(0.0037)} = 56$$

Equation	$\text{H}_2(\text{g})$	+	$\text{I}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$2 \text{HI}(\text{g})$
$I = \text{Initial concentration (M)}$	0.0175		0.0175		0
$C = \text{Change in concentration as reaction proceeds to equilibrium}$	-0.0138		-0.0138		+0.0276
$E = \text{Equilibrium concentration (M)}$	0.0037		0.0037		0.0276

Constante de equilibrio químico



Constante de equilíbrio químico



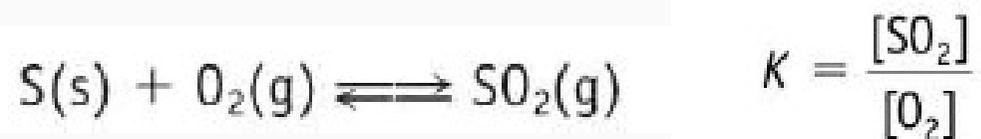
$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Constante para uma dada temperatura

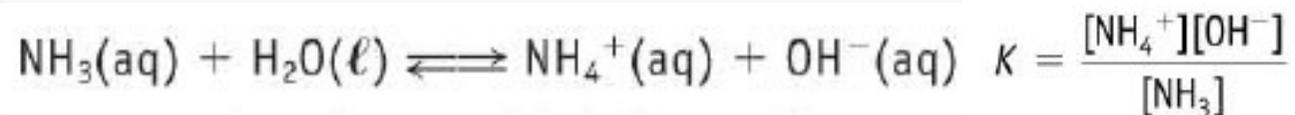
Constante de equilíbrio químico



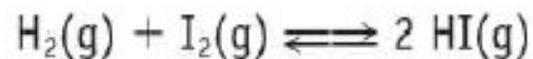
Sólidos no equilíbrio



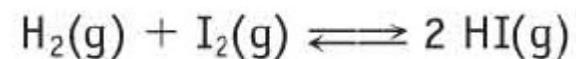
Água no equilíbrio



Equilíbrio em fase gasosa

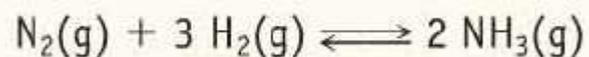


$$\frac{[\text{HI}]^2}{[\text{H}_2][\text{I}_2]} = \text{constant } (K) \text{ at equilibrium}$$



$$K_p = \frac{P_{\text{HI}}^2}{P_{\text{H}_2} P_{\text{I}_2}}$$

Relação K_p com K_c



$$K_p = \frac{(P_{\text{NH}_3})^2}{(P_{\text{N}_2})(P_{\text{H}_2})^3}$$

$$K_p = \frac{\{[\text{NH}_3](RT)\}^2}{\{[\text{N}_2](RT)\}\{[\text{H}_2](RT)\}^3} = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2][\text{H}_2]^3} \times \frac{1}{(RT)^2} = \frac{K_c}{(RT)^2}$$

$$K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$$

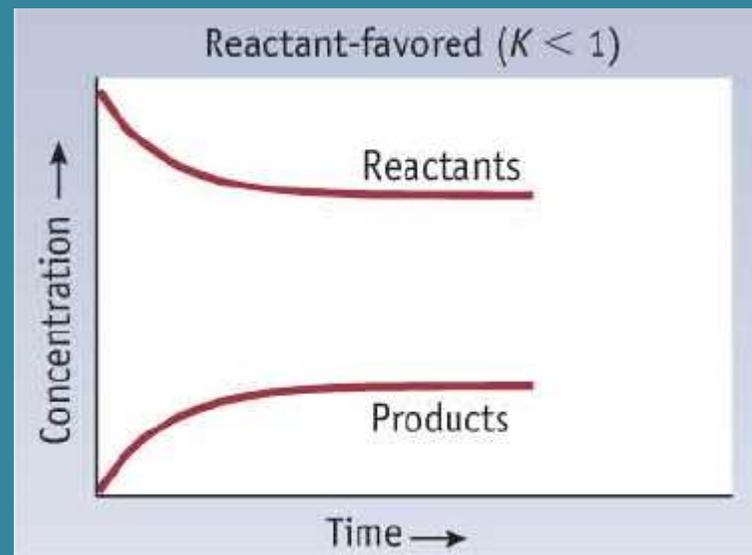
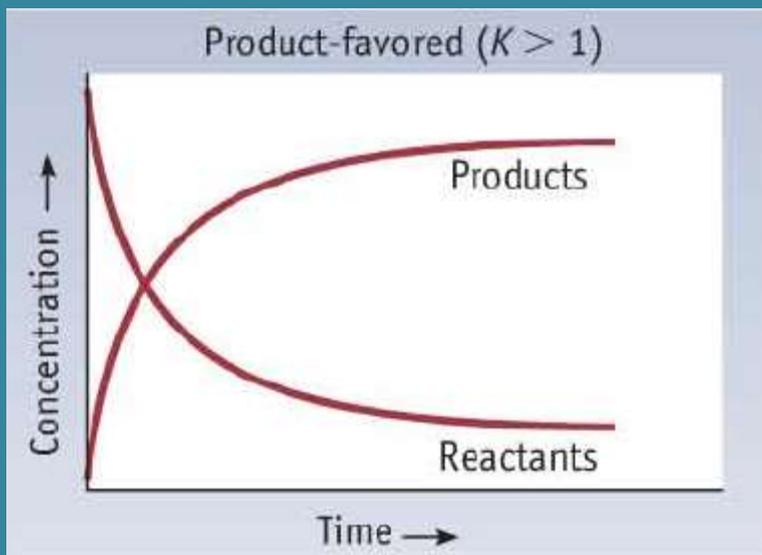
Δn = mol de produtos – moles de reagentes

Magnitude da constante de equilíbrio

TABLE 16.1 Selected Equilibrium Constant Values

Reaction	Equilibrium Constant, K (at 25 °C)	Product- or Reactant-Favored
<i>Combination Reaction of Nonmetals</i>		
$S(s) + O_2(g) \rightleftharpoons SO_2(g)$	4.2×10^{52}	$K > 1$; product-favored
$2 H_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2 H_2O(g)$	3.2×10^{81}	$K > 1$; product-favored
$N_2(g) + 3 H_2(g) \rightleftharpoons 2 NH_3(g)$	3.5×10^8	$K > 1$; product-favored
$N_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2 NO(g)$	1.7×10^{-3} (at 2300 K)	$K < 1$; reactant-favored
<i>Ionization of Weak Acids and Bases</i>		
$HCO_2H(aq) + H_2O(\ell) \rightleftharpoons HCO_2^-(aq) + H_3O^+(aq)$ formic acid	1.8×10^{-4}	$K < 1$; reactant-favored
$CH_3CO_2H(aq) + H_2O(\ell) \rightleftharpoons CH_3CO_2^-(aq) + H_3O^+(aq)$ acetic acid	1.8×10^{-5}	$K < 1$; reactant-favored
$H_2CO_3(aq) + H_2O(\ell) \rightleftharpoons HCO_3^-(aq) + H_3O^+(aq)$ carbonic acid	4.2×10^{-7}	$K < 1$; reactant-favored
$NH_3(aq) + H_2O(\ell) \rightleftharpoons NH_4^+(aq) + OH^-(aq)$ ammonia	1.8×10^{-5}	$K < 1$; reactant-favored
<i>Dissolution of "Insoluble" Solids</i>		
$CaCO_3(s) \rightleftharpoons Ca^{2+}(aq) + CO_3^{2-}(aq)$	3.8×10^{-9}	$K < 1$; reactant-favored
$AgCl(s) \rightleftharpoons Ag^+(aq) + Cl^-(aq)$	1.8×10^{-10}	$K < 1$; reactant-favored

Magnitude da constante de equilíbrio



Magnitude da constante de equilíbrio

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Relative
Magnitude

Direction of Reaction

$$Q < K$$

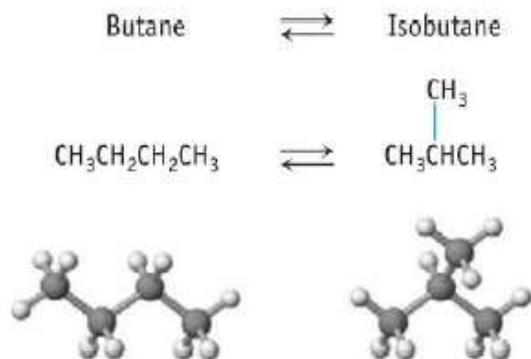
Reactants \rightarrow Products

$$Q = K$$

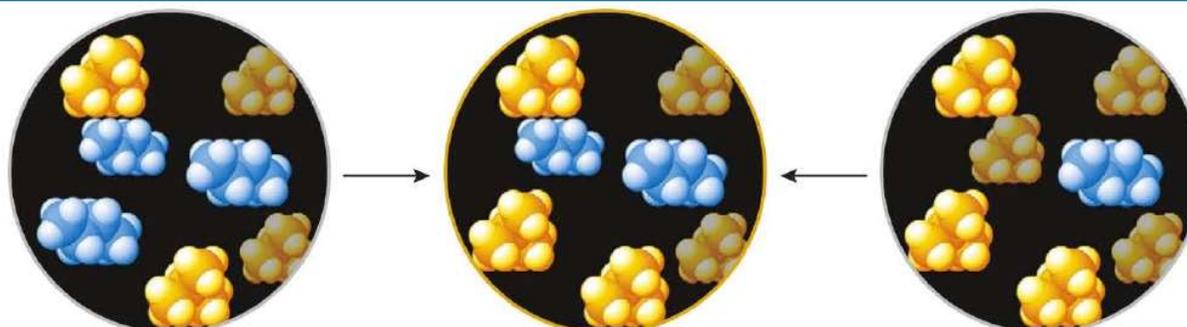
Reaction at equilibrium

$$Q > K$$

Reactants \leftarrow Products



$$K_c = \frac{[\text{isobutane}]}{[\text{butane}]} = 2.50 \text{ at } 298 \text{ K}$$

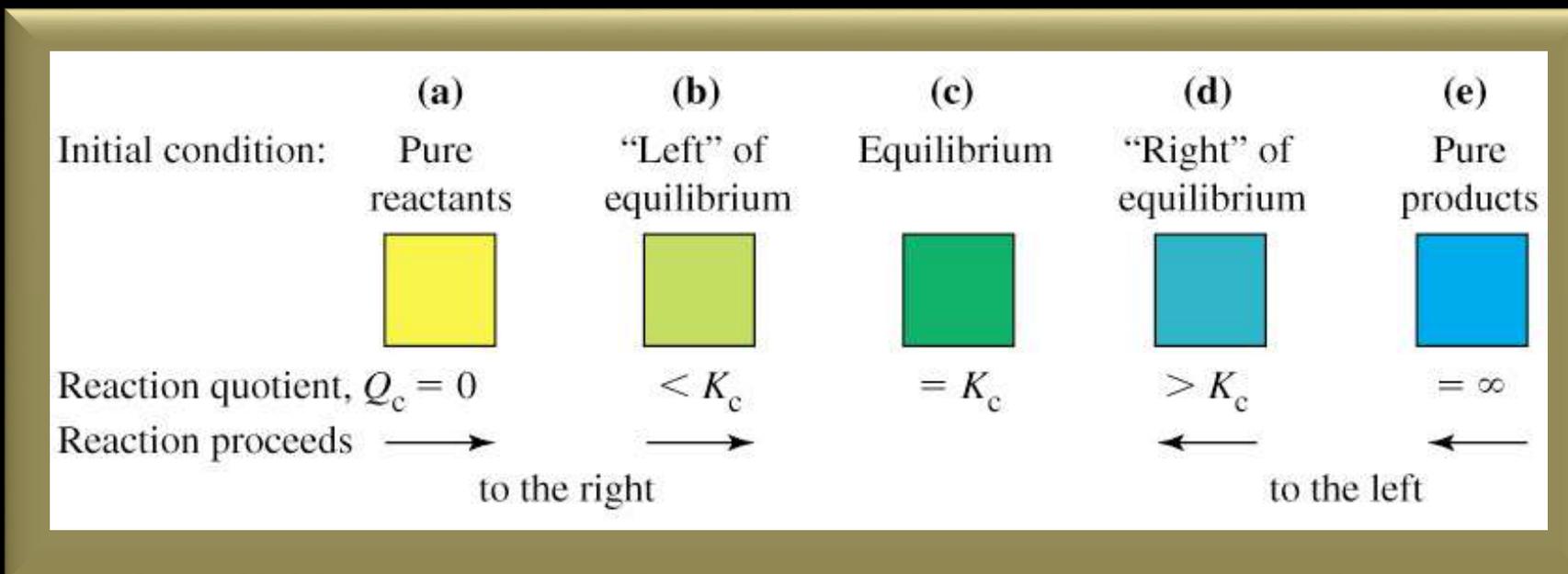


(a) Not at equilibrium. $Q < K$.

(b) At equilibrium. $Q = K$.

(c) Not at equilibrium. $Q > K$.

Magnitude da constante de equilíbrio



$Q = K$; Sistema em equilíbrio. Não ocorrerá deslocamento.

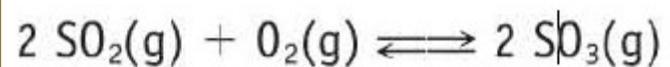
$Q < K$; Sistema se desloca para a direita.

- Consumo de reagentes e formação de produtos, até atingir o equilíbrio.

$Q > K$; Sistema se desloca para a esquerda.

- Consumo de produto e formação de reagente, até atingir o equilíbrio.

Determinação das concentrações no equilíbrio



Equation	$2 \text{SO}_2(\text{g})$	+	$\text{O}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$2 \text{SO}_3(\text{g})$
<i>Initial (M)</i>	1.00		1.00		0
<i>Change (M)</i>	-0.925		-0.925/2		+0.925
<i>Equilibrium (M)</i>	$1.00 - 0.925 = 0.075$		$1.00 - 0.925/2 = 0.54$		0.925

Exemplo 1



Considerando a concentração iniciais de $\text{PCl}_5 = 1,6 \text{ M}$. Determine as concentrações de produtos e reagentes no equilíbrio. $K_c = 1,20$

Reaction	$\text{PCl}_5(\text{g})$	\rightleftharpoons	$\text{PCl}_3(\text{g})$	+	$\text{Cl}_2(\text{g})$
Initial (M)	1.60		0		0
Change (M)	-x		+x		+x
Equilibrium (M)	$1.60 - x$		x		x

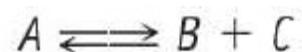
$$K = 1.20 = \frac{[\text{PCl}_3][\text{Cl}_2]}{[\text{PCl}_5]} = \frac{(x)(x)}{1.60 - x}$$

$$x^2 + 1.20x - 1.92 = 0$$

$$[\text{PCl}_5] = 1.60 - 0.91 = 0.69 \text{ M}$$

$$[\text{PCl}_3] = [\text{Cl}_2] = 0.91 \text{ M}$$

Magnitude da constante de equilíbrio



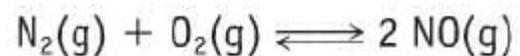
$$K = \frac{[B][C]}{[A]} = \frac{(x)(x)}{[A]_0 - x}$$

$$K = \frac{[B][C]}{[A]} \approx \frac{(x)(x)}{[A]_0}$$

Podemos desprezar x quando $K < 1$

$$100 \times K < [A]_0$$

Exemplo 2



Considerando as concentrações iniciais de $\text{N}_2 = 0,8 \text{ M}$ e $\text{O}_2 = 0,2 \text{ M}$. Determine as concentrações de produtos e reagentes no equilíbrio. $K_c = 1 \times 10^{-5}$

Equation	$\text{N}_2(\text{g})$	+	$\text{O}_2(\text{g})$	\rightleftharpoons	$2 \text{NO}(\text{g})$
Initial (M)	0.80		0.20		0
Change (M)	-x		-x		+2x
Equilibrium (M)	$0.80 - x$		$0.20 - x$		2x

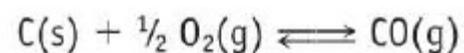
$$K = 1.0 \times 10^{-5} = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} = \frac{[2x]^2}{(0.80 - x)(0.20 - x)}$$

$$K = \underline{1.0 \times 10^{-5}} = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} = \frac{(2x)^2}{(0.80)(0.20)}$$

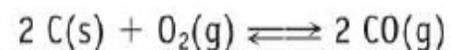
$$\begin{aligned} X &= 6,3 \times 10^{-5} \\ [\text{N}_2] &\approx 0,80 \text{ M} \\ [\text{O}_2] &\approx 0,20 \text{ M} \\ [\text{NO}] &= 6,3 \times 10^{-4} \text{ M} \end{aligned}$$

Balanceamento e constante de equilíbrio

As equações químicas podem ser balanceadas utilizando diferentes coeficientes estequiométricos.



$$K_1 = \frac{[\text{CO}]}{[\text{O}_2]^{1/2}} = 4.6 \times 10^{23} \text{ at } 25 \text{ }^\circ\text{C}$$

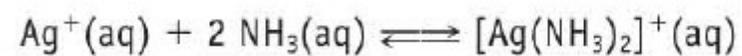
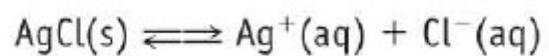


$$K_2 = \frac{[\text{CO}]^2}{[\text{O}_2]} = 2.1 \times 10^{47} \text{ at } 25 \text{ }^\circ\text{C}$$

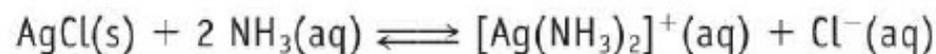
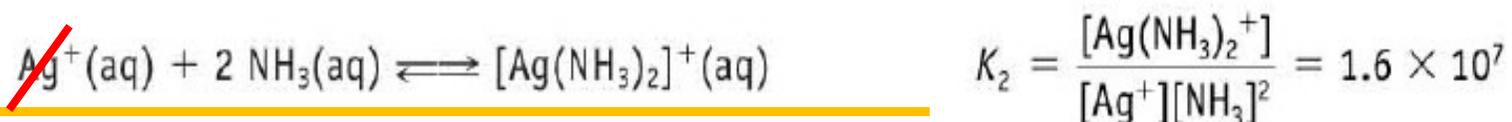
$$K_2 = \frac{[\text{CO}]^2}{[\text{O}_2]} = \left\{ \frac{[\text{CO}]}{[\text{O}_2]^{1/2}} \right\}^2 = K_1^2$$

Quando os coeficientes de uma equação balanceada são multiplicados por algum dado fator a constante de equilíbrio para a nova equação K_{nova} é igual à constante de equilíbrio anterior K_{anterior} elevada à potência do factor de multiplicação.

Somando reações químicas – equilíbrio químico de reações consecutivas



Somando reações químicas

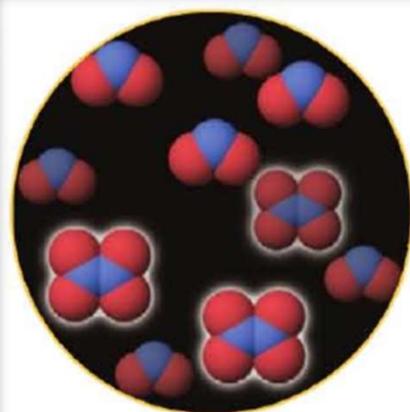


$$K_{\text{net}} = K_1 \times K_2 = \cancel{[\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]} \times \frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+]}{\cancel{[\text{Ag}^+][\text{NH}_3]^2}} = \frac{[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2^+][\text{Cl}^-]}{[\text{NH}_3]^2}$$

$$K_{\text{net}} = K_1 \times K_2 = 2.9 \times 10^{-3}$$

Efeito da temperatura no equilíbrio

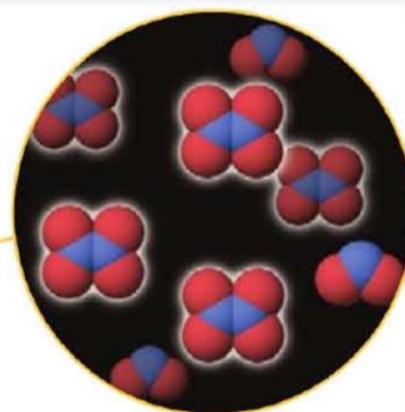
Perturbação	Mudança conforme a mistura volta ao equilíbrio	Efeito no equilíbrio	Efeito em K
Aumento da temperatura	Energia seja consumida pelo sistema	Varição endotérmica	Varição
Queda da temperatura	Energia seja gerada pelo sistema	Varição exotérmica	Varição



Temperatura alta



Maria G. Clarke



Temperatura baixa



Gás castanho

Gás amarelo

$$K = \frac{[\text{N}_2\text{O}_4]}{[\text{NO}_2]^2} = 170 \text{ at } 298 \text{ K}$$

Equilibrium Constant, K	Temperature (K)
1300	273
170	298

Efeito adição de um componente no equilíbrio

Gases		
Diminuição do volume - aumento de pressão	Sistema tende a diminuir a pressão	A composição varia para reduzir o número total de moléculas de gás
Aumento do volume - diminuição de pressão	Sistema tende a aumentar a pressão	A composição varia para aumentar o número total de moléculas de gás



Gás castanho

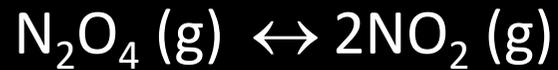
Gás amarelo



Decréscimo no volume

O novo equilíbrio favorece o produto

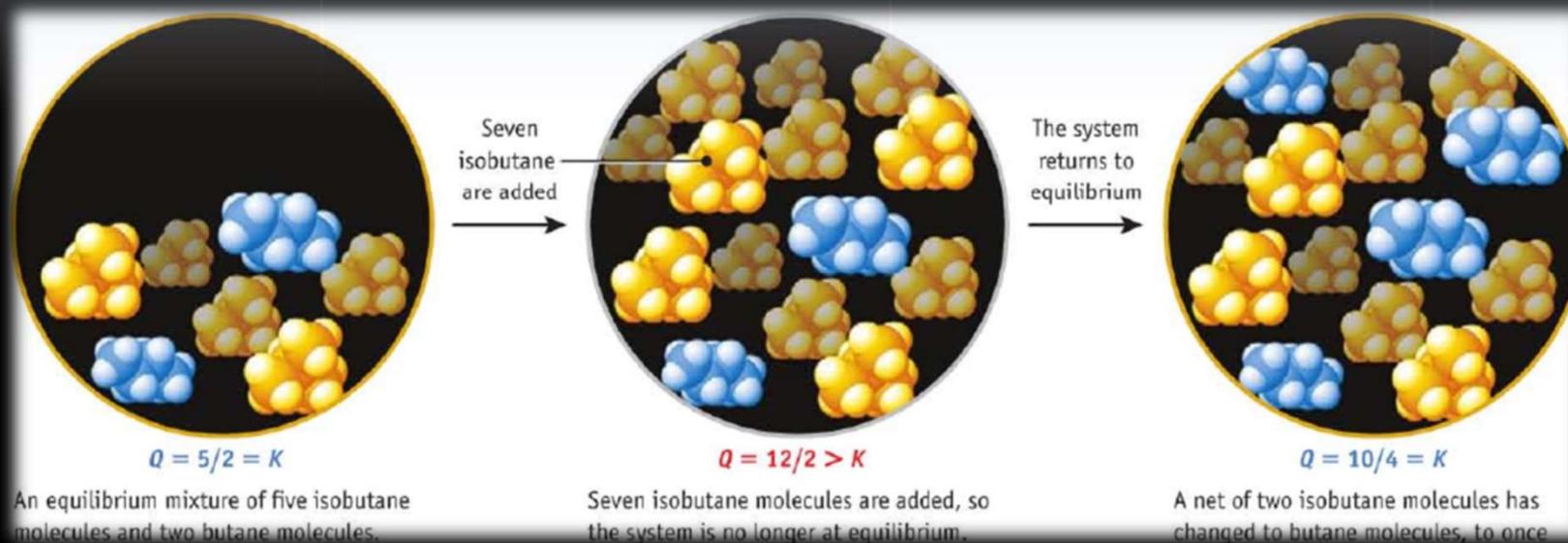
1. A reacção de equilíbrio é dada pela seguinte equação:



A pressão total em um frasco contendo os gases NO_2 e N_2O_4 a $25\text{ }^\circ\text{C}$ é de $1,5\text{ atm}$. Sabendo que o K_p a essa temperatura é de $0,148$ determine qual a pressão de NO_2 no equilíbrio?

Efeito adição de um componente no equilíbrio

Adição de reagente	Parte do reagente gerado é consumido	Aumento da concentração do produto	Nenhuma variação
Adição de produto	Parte do produto adicionado é consumido	Aumento da concentração do reagente	Nenhuma variação
Adição reagente	Parte do reagente adicionado é consumido	Aumento da concentração do produto	Nenhuma variação



2. O K_p para a formação de fosgênio (COCl_2 é de $6,5 \times 10^{11}$ a 25°C)



Qual é o valor de K_p para a dissociação do fosgênio



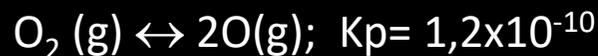
3. O Tetracloreto de Carbono pode ser produzido pela seguinte reação:



Suponha que 0,12 mols de CS_2 e 0,36 mol Cl_2 sejam colocadas em um frasco de 10 L. Após o equilíbrio ter sido atingido, a mistura contém 0,090 mol de CCl_4 . Calcule K_c ?

4. A constante de equilíbrio para a reação de isomerização butano \leftrightarrow isobutano é de 2,5 a 25°C . Se 1,75 mol de butano e 1,25 mol de isobutano são misturados, o sistema está em equilíbrio?

5. A 1800 K o oxigênio se dissocia muito levemente em seu átomos.



Se você colocar 0,050 mol de O_2 em um recipiente de 10 L e aquecê-lo até 1800, quantos átomos de O estarão presentes no frasco.

9. Ácido bórico e glicerina formam um complexo



Com uma constante de equilíbrio de 0,90. Se a contracção de ácido bórico é de 0,10 M, quanta glicerina deve ser adicionada, por litro, para que 60% do ácido bórico esteja na forma de complexo?

8. Uma amostra de gás N_2O_4 é colocada em um frasco a uma pressão de 1 atm. Quando o equilíbrio é atingido 20% do N_2O_4 foi convertido em gás N_2 .

Calcule o K_p

Se a pressão original de N_2O_4 for 0,1 atm qual é a percentagem de dissociação do gás? O resultado está de acordo com o princípio de Le Chatelier?

9. Uma reacção importante na formação de smog é:



Se as concentrações iniciais forem $[\text{O}_3]=1 \times 10^{-6} \text{M}$, $[\text{NO}] = 1 \times 10^{-5} \text{M}$, $[\text{NO}_2]=2,5 \times 10^{-4} \text{M}$ e $[\text{O}]=8,2 \times 10^{-3} \text{M}$ o sistema estará em equilíbrio? Se não estiver em equilíbrio para onde é que a reacção irá prosseguir? O resultado está de acordo com o princípio de Le Chatelier. O que acontece se aumentar a temperatura?

10. A hemoglobina (Hb) pode formar complexos com o O_2 e com o CO.



Em temperatura corporal K é aproximadamente igual a 200. No entanto se a razão $[\text{HbCO}/\text{HbO}_2]$ chegar perto de 1 a morte é provável. Que pressão parcial de CO no ar tende a ser fatal? Suponha uma pressão parcial de O_2 na de 0,20 atm.

Reacções Ácido-Base



Aula 13

Ácido-Base - Classificação

Lewis

Ácido: receptor de par de e^-
Base: doador de par de e^-

Bronsted-Lowry

Ácido: doador de H^+
Base: receptor de H^+

Arrhenius

Ácido: doador de H^+
Base: doador de OH^-

Arrhenius



Arrhenius

Ácido: doador de H^+

Base: doador de OH^-

Arrhenius

Ácido: doador de H^+

Base: doador de OH^-

Ácidos Arrhenius

- Fornecem H^+ em soluções aquosas.

- **Ácidos fortes:**



- **Ácidos fracos:**



Arrhenius

Ácido: doador de H⁺

Base: doador de OH⁻

Base Arrhenius

- **Fornece OH⁻** em solução aquosa.

- **Base forte:**



- **Base fraca:**



Ácido-Base - Arrhenius

Strong Acids (Strong Electrolytes)

HCl (aq)	Hydrochloric acid
HBr (aq)	Hydrobromic acid
HI (aq)	Hydroiodic acid
HNO ₃	Nitric acid
HClO ₄	Perchloric acid
H ₂ SO ₄	Sulfuric acid

Soluble Strong Bases

LiOH	Lithium hydroxide
NaOH	Sodium hydroxide
KOH	Potassium hydroxide
Ba(OH) ₂	Barium hydroxide

Weak Acids (Weak Electrolytes) *

H ₃ PO ₄	Phosphoric acid
H ₂ CO ₃	Carbonic acid
CH ₃ CO ₂ H	Acetic acid
H ₂ C ₂ O ₄	Oxalic acid
H ₂ C ₄ H ₄ O ₆	Tartaric acid
H ₃ C ₆ H ₅ O ₇	Citric acid
HC ₉ H ₈ O ₄	Aspirin

Weak Base (Weak Electrolyte)

NH ₃	Ammonia
-----------------	---------

Arrhenius

Ácido: doador de H⁺
Base: doador de OH⁻

Bronsted-Lowry
Ácido: doador de H⁺
Base: receptor de H⁺

Brønsted-Lowry



Ácido-Base – Amônia

Ammonia, a weak base, < 100% ionized. Equilibrium favors reactants.



ammonia, base
weak electrolyte
< 100% ionized



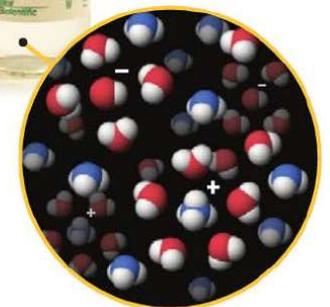
water



ammonium
ion



hydroxide ion



Ácido-Base – Bronsted-Lowry

Ácido forte

Hydrogen chloride, a strong acid. 100% ionized. Equilibrium strongly favors products.



hydrochloric acid
strong electrolyte
= 100% ionized



water



hydronium ion



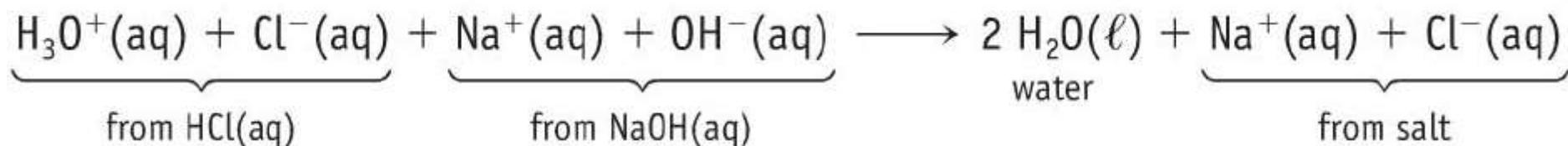
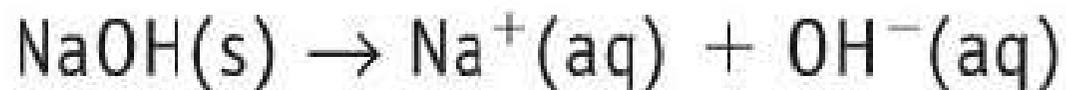
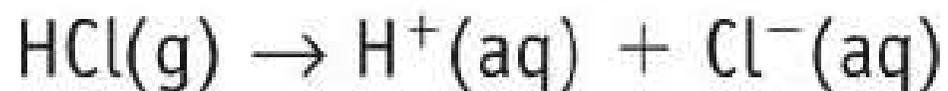
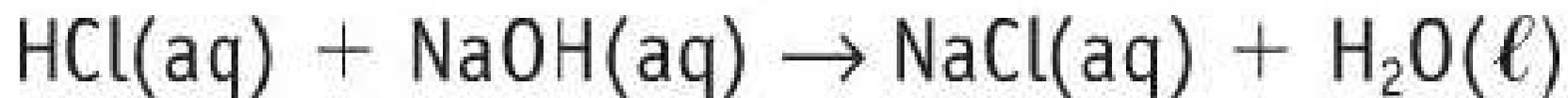
chloride ion

Ácido fraco

Acetic acid, a weak acid, << 100% ionized. Equilibrium favors reactants.



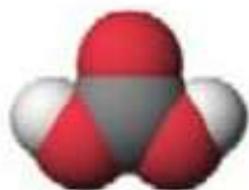
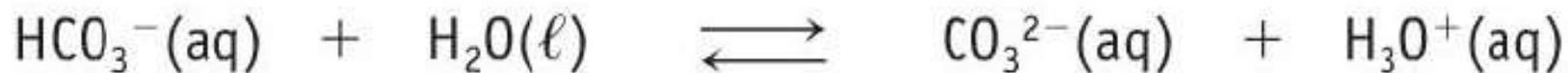
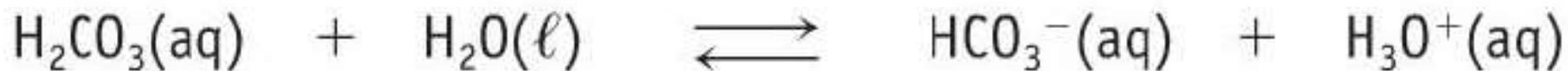
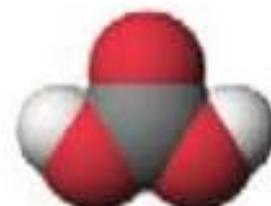
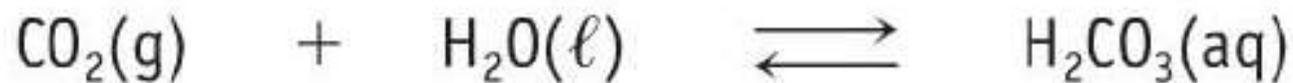
Ácido-Base - Neutralização



Equação iônica líquida



Ácido-Base - Óxidos



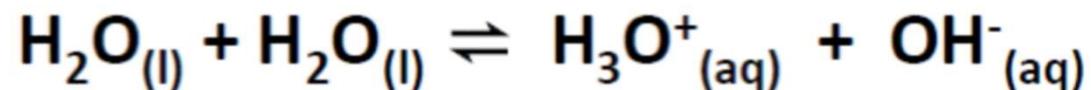


***Equilíbrio
ácido-base***

Aula 13



Auto-ionização da água:



No equilíbrio:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 1.0 \times 10^{-7} \text{ mol L}^{-1}$$

$$[\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-7} \text{ mol L}^{-1}$$

$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]^2}$$

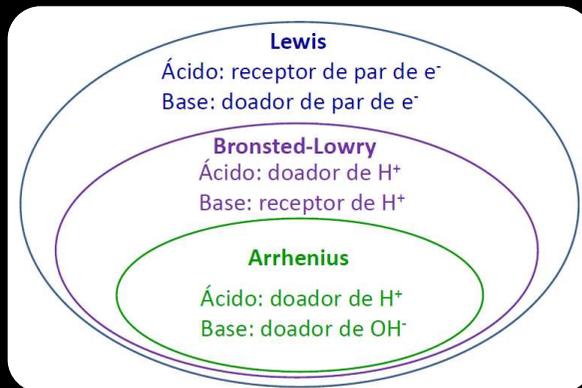


$$K_w = [\text{H}_3\text{O}^+].[\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = 7$$

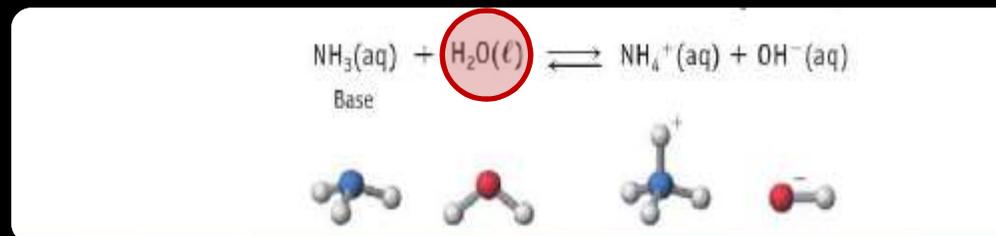
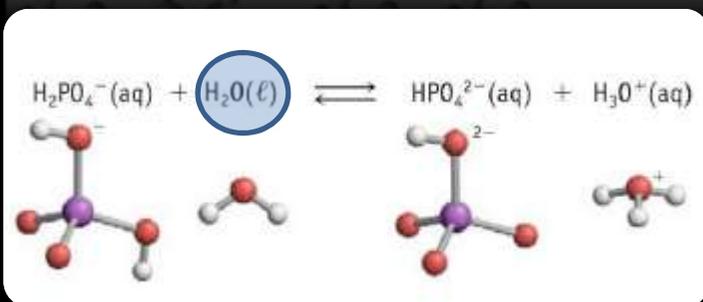
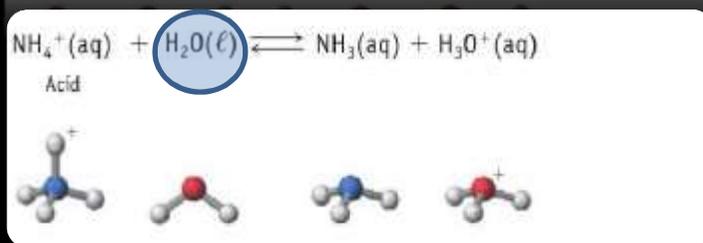
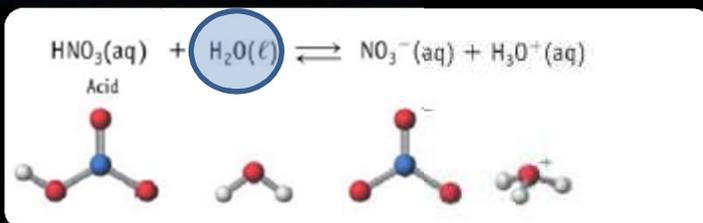
$$\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-] = 7$$

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14$$

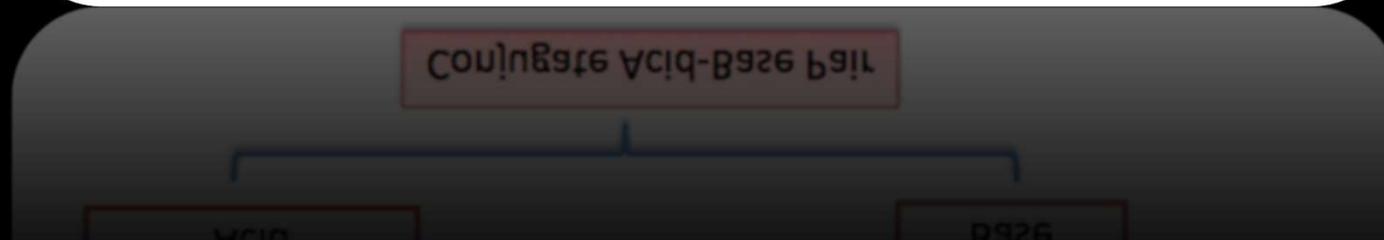
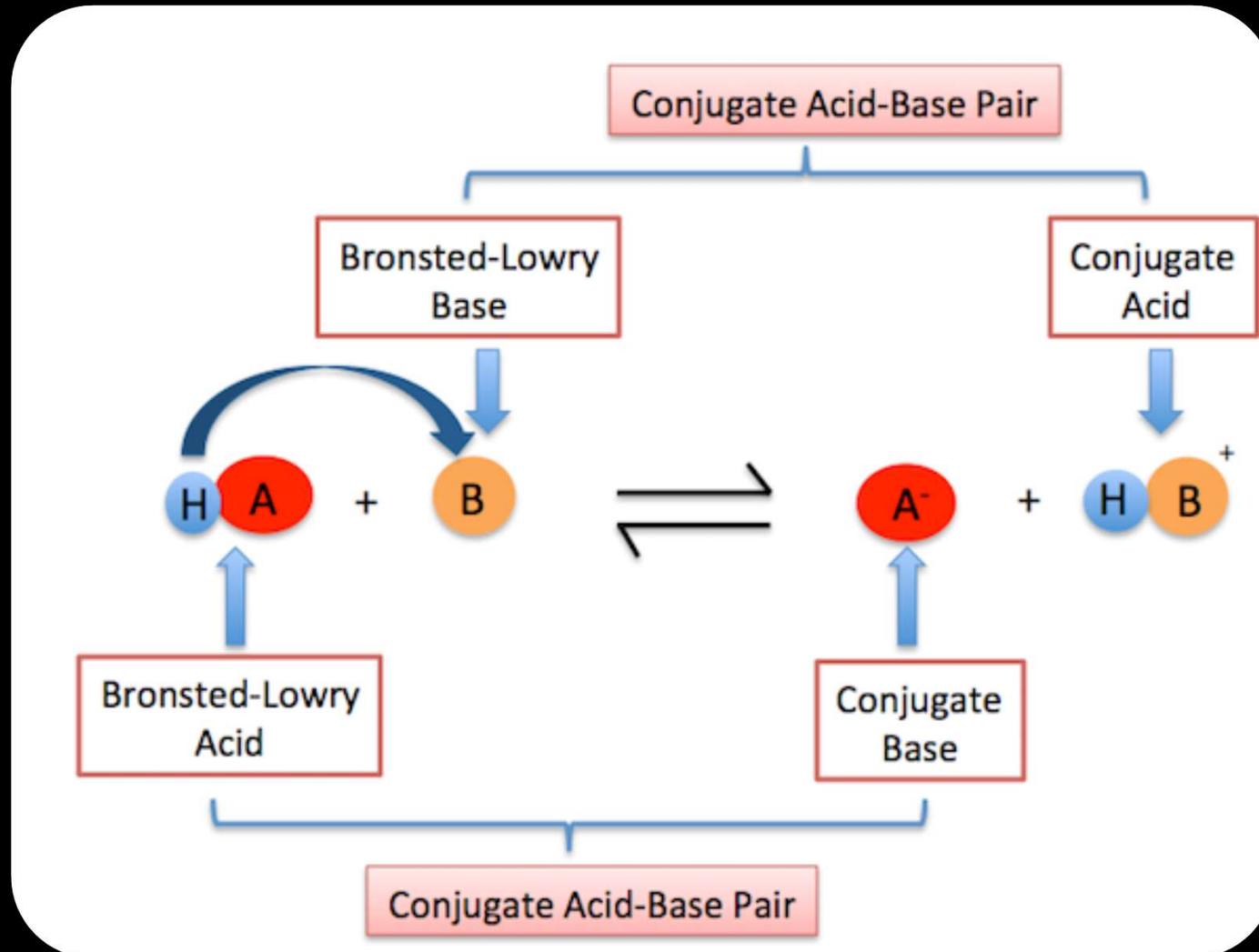


Bronsted-lowry

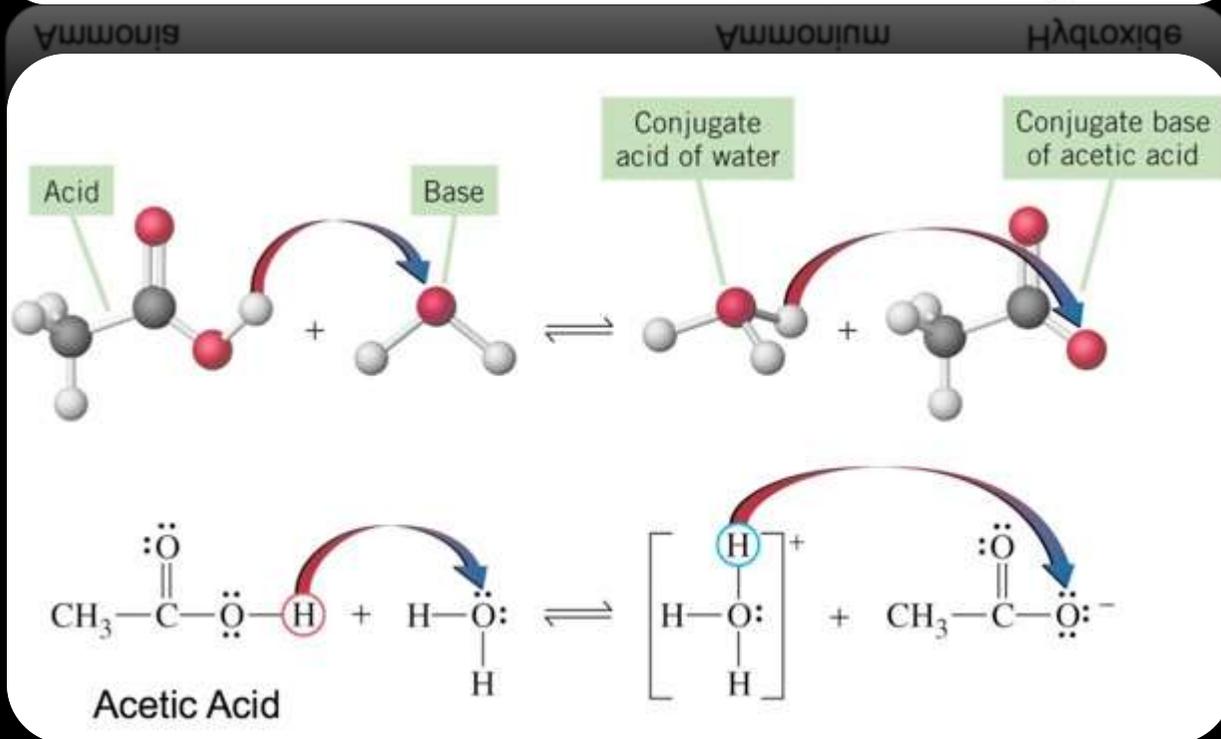
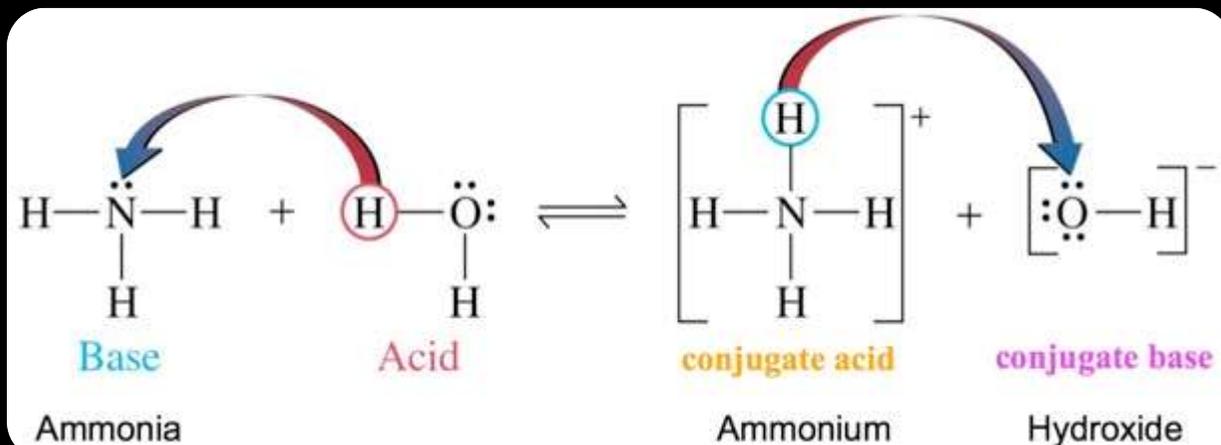
A água tem um caracter afiprótico – funciona como ácido base ou base.



Par conjugado ácido-base



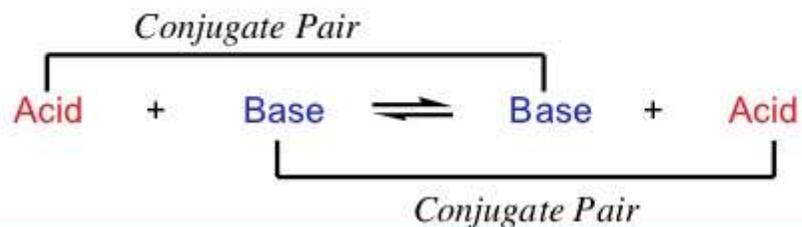
Par conjugado ácido-base



Par conjugado ácido-base

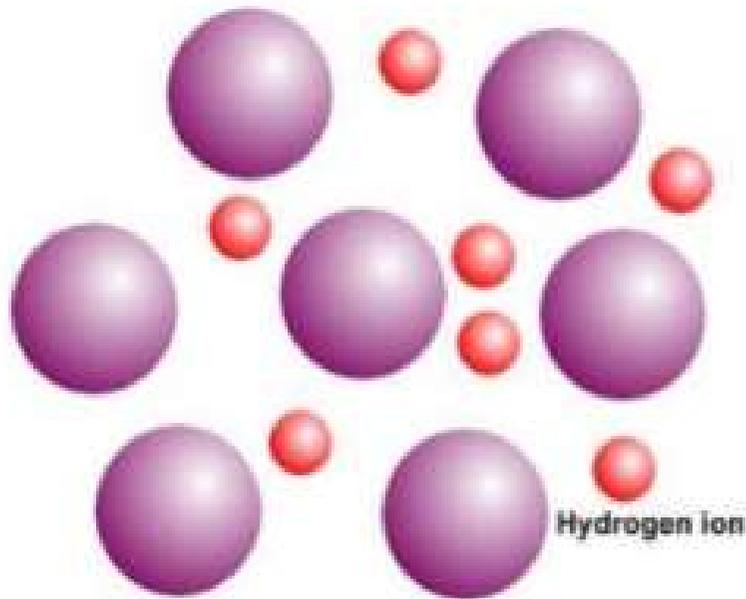
Copyright ©The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Table 18.4 The Conjugate Pairs in Some Acid-Base Reactions

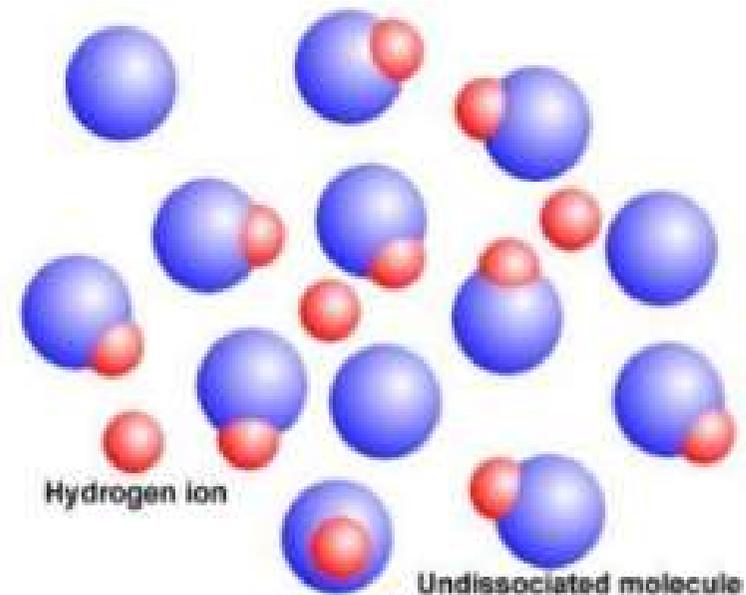


Reaction 1	HF	+	H ₂ O	⇌	F ⁻	+	H ₃ O ⁺
Reaction 2	HCOOH	+	CN ⁻	⇌	HCOO ⁻	+	HCN
Reaction 3	NH ₄ ⁺	+	CO ₃ ²⁻	⇌	NH ₃	+	HCO ₃ ⁻
Reaction 4	H ₂ PO ₄ ⁻	+	OH ⁻	⇌	HPO ₄ ²⁻	+	H ₂ O
Reaction 5	H ₂ SO ₄	+	N ₂ H ₅ ⁺	⇌	HSO ₄ ⁻	+	N ₂ H ₆ ²⁺
Reaction 6	HPO ₄ ²⁻	+	SO ₃ ²⁻	⇌	PO ₄ ³⁻	+	HSO ₃ ⁻
Reaction 7	HBO ₃ ⁻	+	SO ₃ ²⁻	⇌	BO ₃ ⁻	+	H ₂ O ³⁻
Reaction 8	H ₂ SO ₄	+	I ⁻	⇌	HSO ₄ ⁻	+	HI
Reaction 9	H ₂ BO ₃	+	OH ⁻	⇌	HBO ₃ ⁻	+	H ₂ O

Força relativa de um ácido



Ácido forte dissocia-se completamente



Ácido fracos dissociam-se moderadamente

When in aqueous solution, strong acids are assumed to dissociate completely.

The majority of molecules remain undissociated. Weak acids dissociate only slightly in aqueous solution.

Força relativa de um ácido



$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{X}^-]}{[\text{HX}][\text{H}_2\text{O}]}$$



$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{X}^-]}{[\text{HX}]}$$

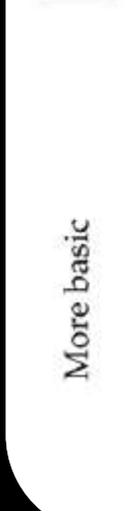
Ácido forte: $K_a \gg \gg 1$

Ácido fraco: $K_a \ll \ll 1$

	ACID		BASE	
Strong	HCl	→	H ⁺ + Cl ⁻	Negligible
	H ₂ SO ₄	→	H ⁺ + HSO ₄ ⁻	
	HNO ₃	→	H ⁺ + NO ₃ ⁻	
	H ₃ O ⁺	→	H ⁺ + H ₂ O	
Medium	HSO ₄ ⁻	⇌	H ⁺ + SO ₄ ²⁻	Very Weak
	H ₂ SO ₃	⇌	H ⁺ + HSO ₃ ⁻	
	H ₃ PO ₄	⇌	H ⁺ + H ₂ PO ₄ ⁻	
	HF	⇌	H ⁺ + F ⁻	
Weak	CH ₃ COOH	⇌	H ⁺ + CH ₃ COO ⁻	Weak
	H ₂ CO ₃	⇌	H ⁺ + HCO ₃ ⁻	
	H ₂ S	⇌	H ⁺ + HS ⁻	
	HSO ₃ ⁻	⇌	H ⁺ + SO ₃ ²⁻	
	H ₂ PO ₄ ⁻	⇌	H ⁺ + HPO ₄ ²⁻	
	NH ₄ ⁺	⇌	H ⁺ + NH ₃	
Very Weak	HCO ₃ ⁻	⇌	H ⁺ + CO ₃ ²⁻	Medium
	HPO ₄ ²⁻	⇌	H ⁺ + PO ₄ ³⁻	
	H ₂ O	⇌	H ⁺ + OH ⁻	
Negligible	HS ⁻	←	H ⁺ + S ²⁻	Strong
	OH ⁻	←	H ⁺ + O ²⁻	

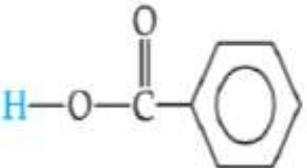
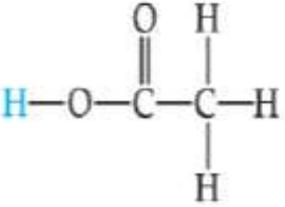
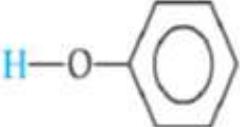
	ACID		BASE	
Very Weak	H ₂ SO ₃	⇌	H ⁺ + HSO ₃ ⁻	Strong
	H ₂ O	⇌	H ⁺ + OH ⁻	
Medium	HCO ₃ ⁻	⇌	H ⁺ + CO ₃ ²⁻	Negligible
	HPO ₄ ²⁻	⇌	H ⁺ + PO ₄ ³⁻	
Weak	CH ₃ COOH	⇌	H ⁺ + CH ₃ COO ⁻	Very Weak
	H ₂ CO ₃	⇌	H ⁺ + HCO ₃ ⁻	
Strong	HSO ₄ ⁻	⇌	H ⁺ + SO ₄ ²⁻	Negligible
	H ₂ SO ₄	→	H ⁺ + HSO ₄ ⁻	
	HNO ₃	→	H ⁺ + NO ₃ ⁻	
	HCl	→	H ⁺ + Cl ⁻	

Força relativa de um ácido

	$[H^+]$ (M)	pH	pOH	$[OH^-]$ (M)
	1 (1×10^{-0})	0.0	14.0	1×10^{-14}
Gastric juice	1×10^{-1}	1.0	13.0	1×10^{-13}
Lemon juice	1×10^{-2}	2.0	12.0	1×10^{-12}
Cola, vinegar	1×10^{-3}	3.0	11.0	1×10^{-11}
Wine	1×10^{-4}	4.0	10.0	1×10^{-10}
Tomatoes	1×10^{-4}	4.0	10.0	1×10^{-10}
Banana	1×10^{-5}	5.0	9.0	1×10^{-9}
Black coffee	1×10^{-5}	5.0	9.0	1×10^{-9}
Rain	1×10^{-6}	6.0	8.0	1×10^{-8}
Saliva	1×10^{-6}	6.0	8.0	1×10^{-8}
Milk	1×10^{-7}	7.0	7.0	1×10^{-7}
Human blood, tears	1×10^{-7}	7.0	7.0	1×10^{-7}
Egg white, seawater	1×10^{-8}	8.0	6.0	1×10^{-6}
Baking soda	1×10^{-8}	8.0	6.0	1×10^{-6}
Borax	1×10^{-9}	9.0	5.0	1×10^{-5}
Milk of magnesia	1×10^{-10}	10.0	4.0	1×10^{-4}
Lime water	1×10^{-11}	11.0	3.0	1×10^{-3}
Household ammonia	1×10^{-12}	12.0	2.0	1×10^{-2}
Household bleach	1×10^{-12}	12.0	2.0	1×10^{-2}
NaOH, 0.1 M	1×10^{-13}	13.0	1.0	1×10^{-1}
	1×10^{-14}	14.0	0.0	1 (1×10^{-0})

Força relativa de um ácido

Acid	Structural Formula*	Conjugate Base	Equilibrium Reaction	K_a
Hydrofluoric (HF)	$\text{H}-\text{F}$	F^-	$\text{HF}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{F}^-(aq)$	6.8×10^{-4}
Nitrous (HNO_2)	$\text{H}-\text{O}-\text{N}=\text{O}$	NO_2^-	$\text{HNO}_2(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{NO}_2^-(aq)$	4.5×10^{-4}
Benzoic ($\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$)		$\text{C}_6\text{H}_5\text{COO}^-$	$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{C}_6\text{H}_5\text{COO}^-(aq)$	6.3×10^{-5}
Acetic (CH_3COOH)		CH_3COO^-	$\text{CH}_3\text{COOH}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{CH}_3\text{COO}^-(aq)$	1.8×10^{-5}
Hypochlorous (HClO)	$\text{H}-\text{O}-\text{Cl}$	ClO^-	$\text{HClO}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{ClO}^-(aq)$	3.0×10^{-8}
Hydrocyanic (HCN)	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$	CN^-	$\text{HCN}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{CN}^-(aq)$	4.9×10^{-10}
Phenol (HOC_6H_5)		$\text{C}_6\text{H}_5\text{O}^-$	$\text{HOC}_6\text{H}_5(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{C}_6\text{H}_5\text{O}^-(aq)$	1.3×10^{-10}

Benzoic (HOC_6H_5)		$\text{C}_6\text{H}_5\text{O}^-$	$\text{HOC}_6\text{H}_5(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{C}_6\text{H}_5\text{O}^-(aq)$	1.3×10^{-10}
Hydrocyanic (HCN)	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$	CN^-	$\text{HCN}(aq) + \text{H}_2\text{O}(l) \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+(aq) + \text{CN}^-(aq)$	4.9×10^{-10}

Queimaduras com HF



Degrada sistema nervoso
Irritação nos olhos, pele, nariz, broquite,
edema pulmonar
Reage com Ca^{2+} e Mg^{2+}

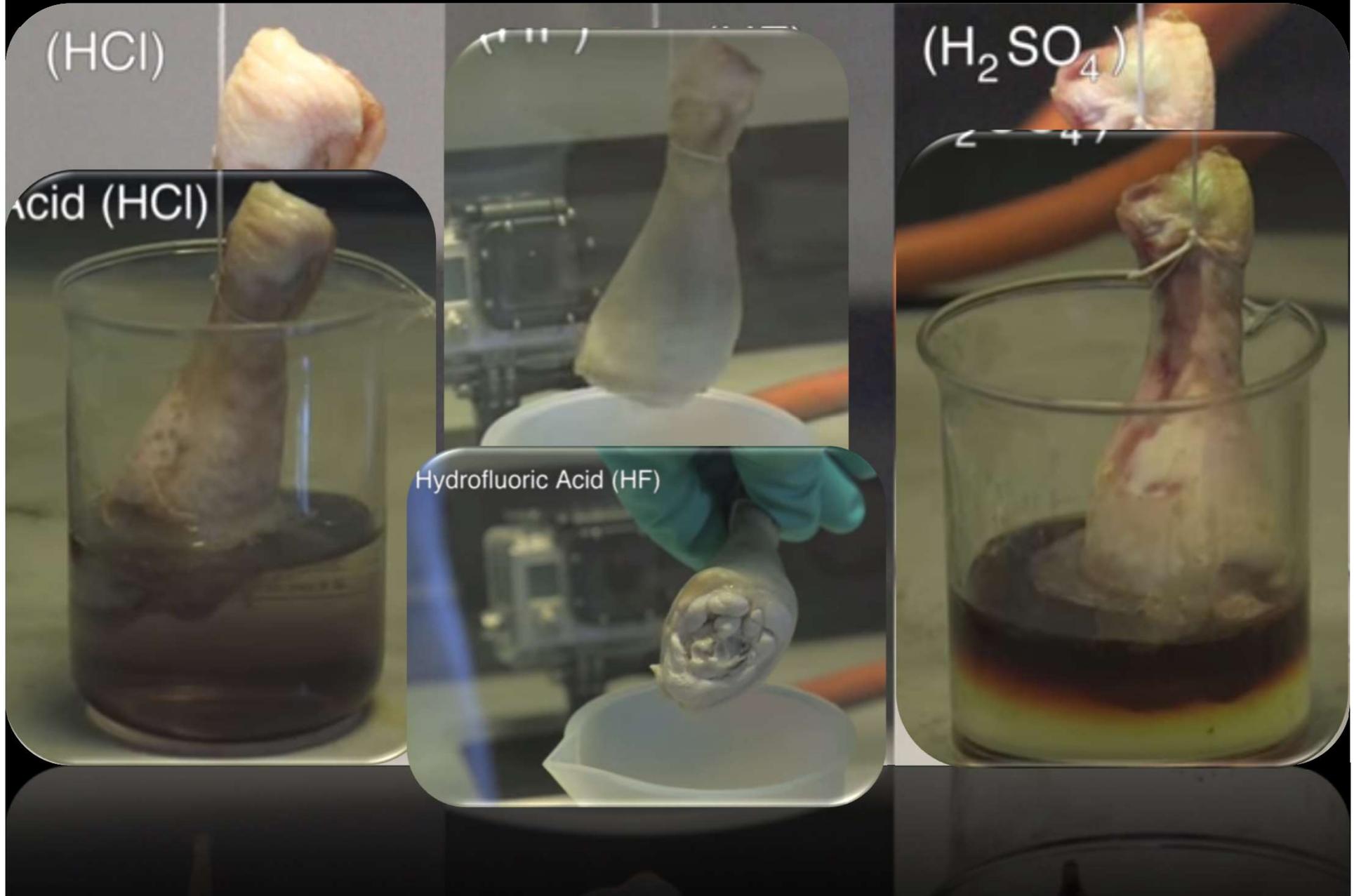
Dissolve carne humana?

(HCl)

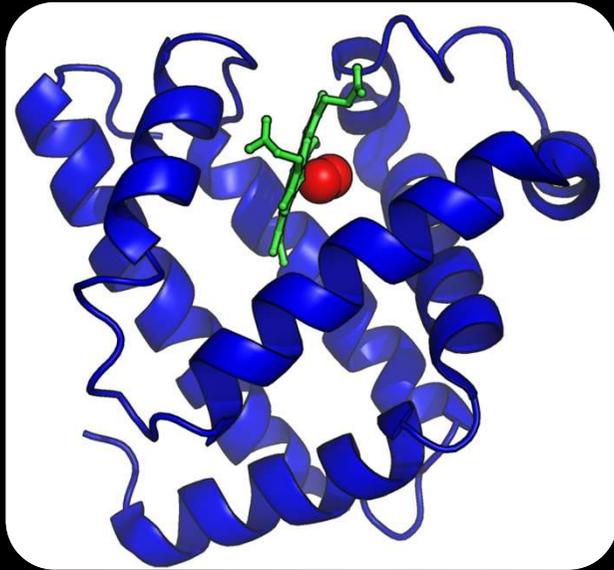
Acid (HCl)

(H₂SO₄)

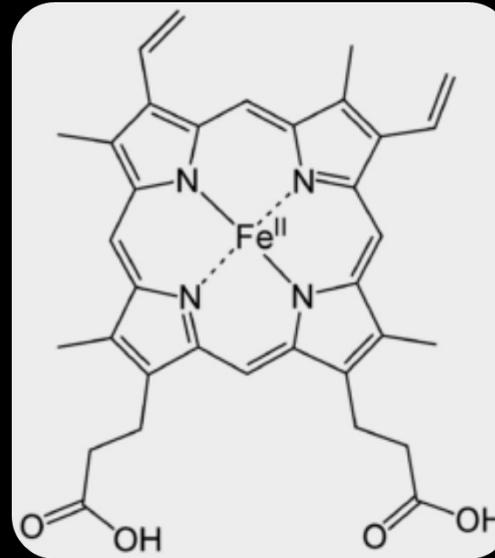
Hydrofluoric Acid (HF)



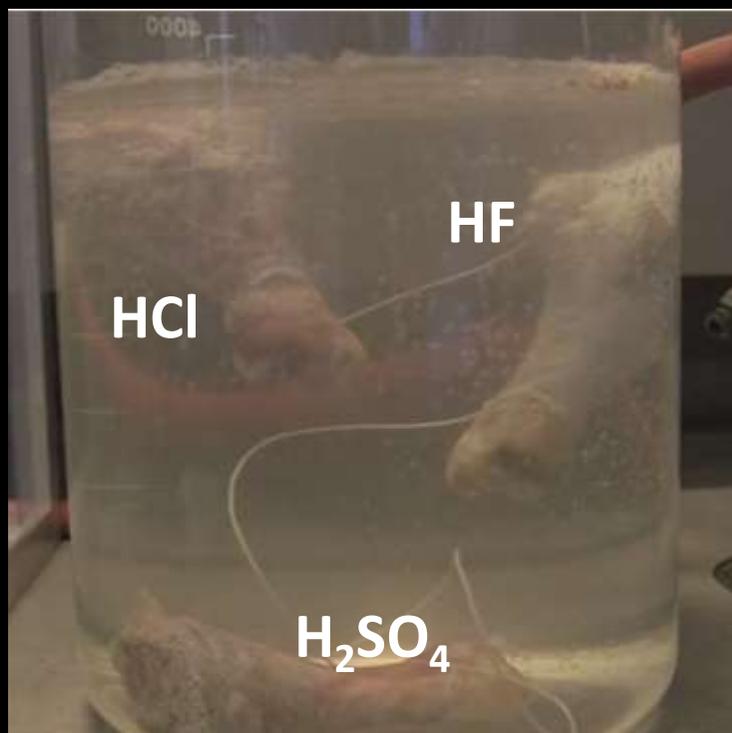
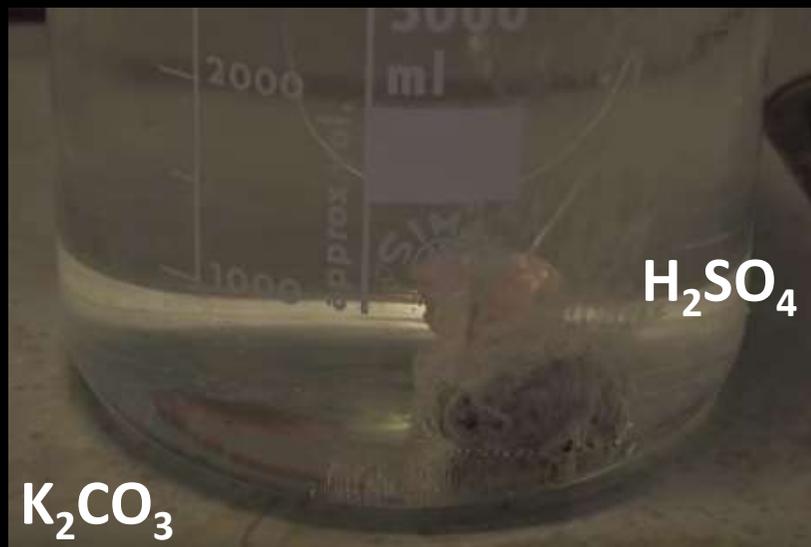
Dissolve carne humana?



Myoglobin



Group Heme



Porquê?

Depois do exemplo anterior vamos calcular porcentagem de ionização de ionização do HF para 0,1 M e 0,01 M

	$\text{HF}(aq)$	\rightleftharpoons	$\text{H}^+(aq)$	+	$\text{F}^-(aq)$
Initial	0.10 M		0		0
Change	-x M		+x M		+x M
Equilibrium	(0.10 - x) M		x M		x M

$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{F}^-]}{[\text{HF}]} = \frac{(x)(x)}{0.10 - x} = 6.8 \times 10^{-4}$$

$$x^2 = (0.10 - x)(6.8 \times 10^{-4})$$

$$x = 8.2 \times 10^{-3} \text{ M}$$

$$\begin{aligned}x^2 &= (0.10 - x)(6.8 \times 10^{-4}) \\&= 6.8 \times 10^{-5} - (6.8 \times 10^{-4})x \\x^2 + (6.8 \times 10^{-4})x - 6.8 \times 10^{-5} &= 0\end{aligned}$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\begin{aligned}x &= \frac{-6.8 \times 10^{-4} \pm \sqrt{(6.8 \times 10^{-4})^2 + 4(6.8 \times 10^{-5})}}{2} \\&= \frac{-6.8 \times 10^{-4} \pm 1.6 \times 10^{-2}}{2}\end{aligned}$$

$$x = [\text{H}^+] = [\text{F}^-] = 7.9 \times 10^{-3} \text{ M}$$

$$\text{Percent ionization of HF} = \frac{\text{concentration ionized}}{\text{original concentration}} \times 100\%$$

$$= \frac{7.9 \times 10^{-3} \text{ M}}{0.10 \text{ M}} \times 100\% = 7.9\%$$

$$\frac{x^2}{0.010 - x} = 6.8 \times 10^{-4}$$

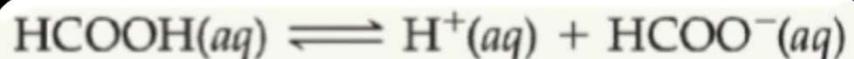
$$x = [\text{H}^+] = [\text{F}^-] = 2.3 \times 10^{-3} \text{ M}$$

$$\frac{0.0023 \text{ M}}{0.010 \text{ M}} \times 100\% = 23\%$$

$$\text{Percent ionization of HF} = \frac{\text{concentration ionized}}{\text{original concentration}} \times 100\%$$

$$= \frac{7.9 \times 10^{-3} \text{ M}}{0.10 \text{ M}} \times 100\% = 7.9\%$$

O vosso colega Walter Branco preparou uma solução 0,10 M de ácido fórmico (HCOOH) e mediu o seu pH a (2,38 , 25°C. Calcule o K_a para o ácido a essa temperatura bem como a sua percentagem de ionização



$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{HCOO}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$

$$\text{pH} = -\log[\text{H}^+] = 2.38$$

$$\log[\text{H}^+] = -2.38$$

$$[\text{H}^+] = 10^{-2.38} = 4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$$

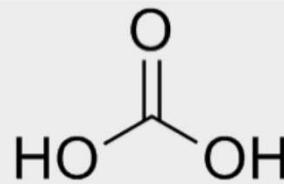
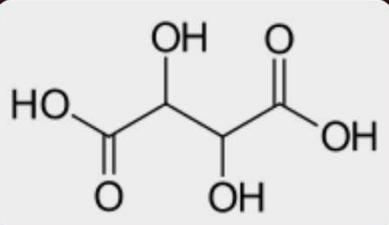
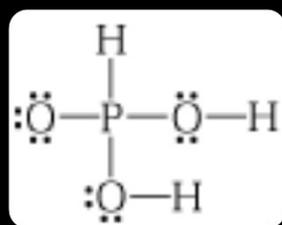
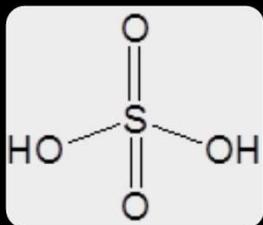
	HCOOH(aq)	\rightleftharpoons	H ⁺ (aq)	+	HCOO ⁻ (aq)
Initial	0.10 M		0		0
Change	$-4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$		$+4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$		$+4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$
Equilibrium	$(0.10 - 4.2 \times 10^{-3}) \text{ M}$		$4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$		$4.2 \times 10^{-3} \text{ M}$

$$(0.10 - 4.2 \times 10^{-3}) \text{ M} \approx 0.10 \text{ M}$$

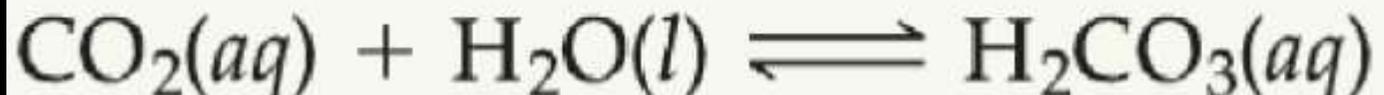
$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{HCOO}^-]}{[\text{HCOOH}]}$$

$$K_a = \frac{(4.2 \times 10^{-3})(4.2 \times 10^{-3})}{0.10} = 1.8 \times 10^{-4}$$

Ácidos dipróticos



EXEMPLO: A solubilidade do CO₂ em água pura a 25°C e 0,1 atm é 0,0037. Calcule qual o pH de uma solução de 0,0037 H₂CO₃



	H ₂ CO ₃ (aq)	H ⁺ (aq)	+ HCO ₃ ⁻ (aq)
Initial	0.0037 M	0	0
Change	-x M	+x M	+x M
Equilibrium	(0.0037 - x) M	x M	x M

$$K_{a1} = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]} = \frac{(x)(x)}{0.0037 - x} = 4.3 \times 10^{-7}$$

$$x = 4.0 \times 10^{-5} \text{ M}$$

$$0.0037 - x \approx 0.0037$$

$$\text{pH} = -\log[\text{H}^+] = -\log(4.0 \times 10^{-5}) = 4.40$$

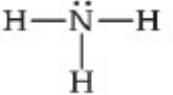
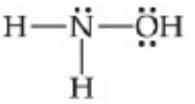
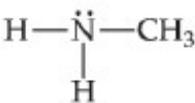
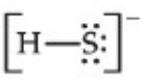
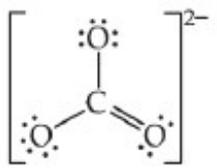
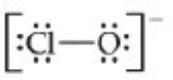


Initial	$4.0 \times 10^{-5} M$	$4.0 \times 10^{-5} M$	0
Change	$-y M$	$+y M$	$+y M$
Equilibrium	$(4.0 \times 10^{-5} - y) M$	$(4.0 \times 10^{-5} + y) M$	$y M$

$$K_{a2} = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} = \frac{(4.0 \times 10^{-5})(y)}{4.0 \times 10^{-5}} = 5.6 \times 10^{-11}$$

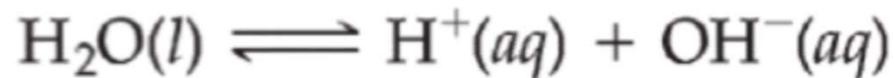
$$y = 5.6 \times 10^{-11} M = [\text{CO}_3^{2-}]$$

Bases fracas

Base	Lewis Structure	Conjugate Acid	Equilibrium Reaction	K_b
Ammonia (NH ₃)		NH ₄ ⁺	NH ₃ + H ₂ O ⇌ NH ₄ ⁺ + OH ⁻	1.8 × 10 ⁻⁵
Pyridine (C ₅ H ₅ N)		C ₅ H ₅ NH ⁺	C ₅ H ₅ N + H ₂ O ⇌ C ₅ H ₅ NH ⁺ + OH ⁻	1.7 × 10 ⁻⁹
Hydroxylamine (H ₂ NOH)		H ₃ NOH ⁺	H ₂ NOH + H ₂ O ⇌ H ₃ NOH ⁺ + OH ⁻	1.1 × 10 ⁻⁸
Methylamine (NH ₂ CH ₃)		NH ₃ CH ₃ ⁺	NH ₂ CH ₃ + H ₂ O ⇌ NH ₃ CH ₃ ⁺ + OH ⁻	4.4 × 10 ⁻⁴
Hydrosulfide ion (HS ⁻)		H ₂ S	HS ⁻ + H ₂ O ⇌ H ₂ S + OH ⁻	1.8 × 10 ⁻⁷
Carbonate ion (CO ₃ ²⁻)		HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻ + H ₂ O ⇌ HCO ₃ ⁻ + OH ⁻	1.8 × 10 ⁻⁴
Hypochlorite ion (ClO ⁻)		HClO	ClO ⁻ + H ₂ O ⇌ HClO + OH ⁻	3.3 × 10 ⁻⁷

$$K_b = \frac{[\text{BH}^+][\text{OH}^-]}{[\text{B}]}$$

K_b, K_a e K_w



$$K_a = \frac{[\text{NH}_3][\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]}$$

$$K_b = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]}$$

$$\begin{aligned} K_a \times K_b &= \left(\frac{[\text{NH}_3][\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]} \right) \left(\frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} \right) \\ &= [\text{H}^+][\text{OH}^-] = K_w \end{aligned}$$

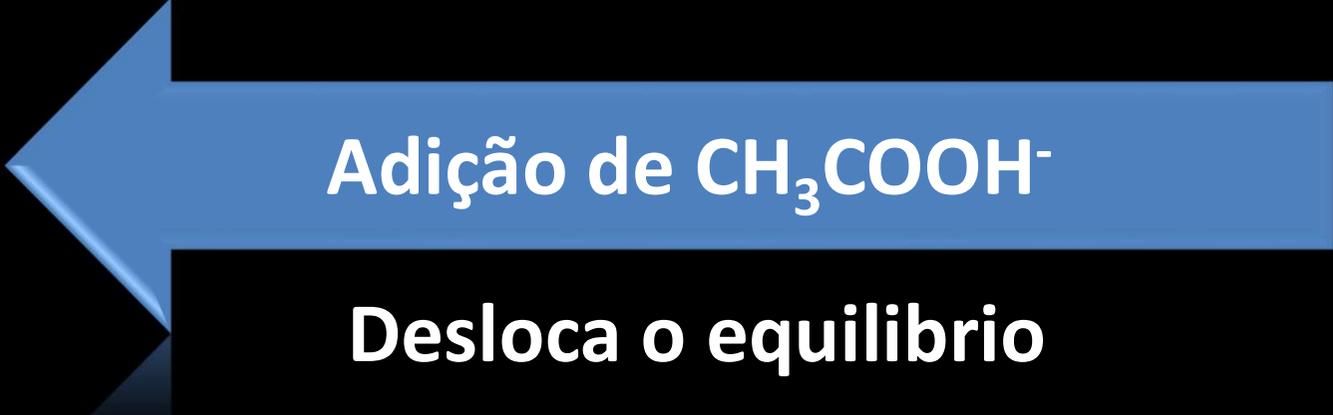
$$K_a \times K_b = K_w$$

$$\text{p}K_a + \text{p}K_b = \text{p}K_w = 14.00 \quad \text{at } 25^\circ\text{C}$$

Exemplo

1) Determine se as soluções aquosas de cada um dos sais será **ácida**, neutra ou **básica**: (a) $\text{Ba}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ (b) NH_4Cl (c) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Br}$ (d) KNO_3 (e) $\text{Al}(\text{ClO}_4)_3$

Efeito do íon comum



Adição de CH_3COOH

Desloca o equilíbrio

EXEMPLO: qual o pH de uma solução feita pela adição de 0,30 mols de ácido acético e 0,30 moles de acetato de sódio. Considere volume igual a 1L;



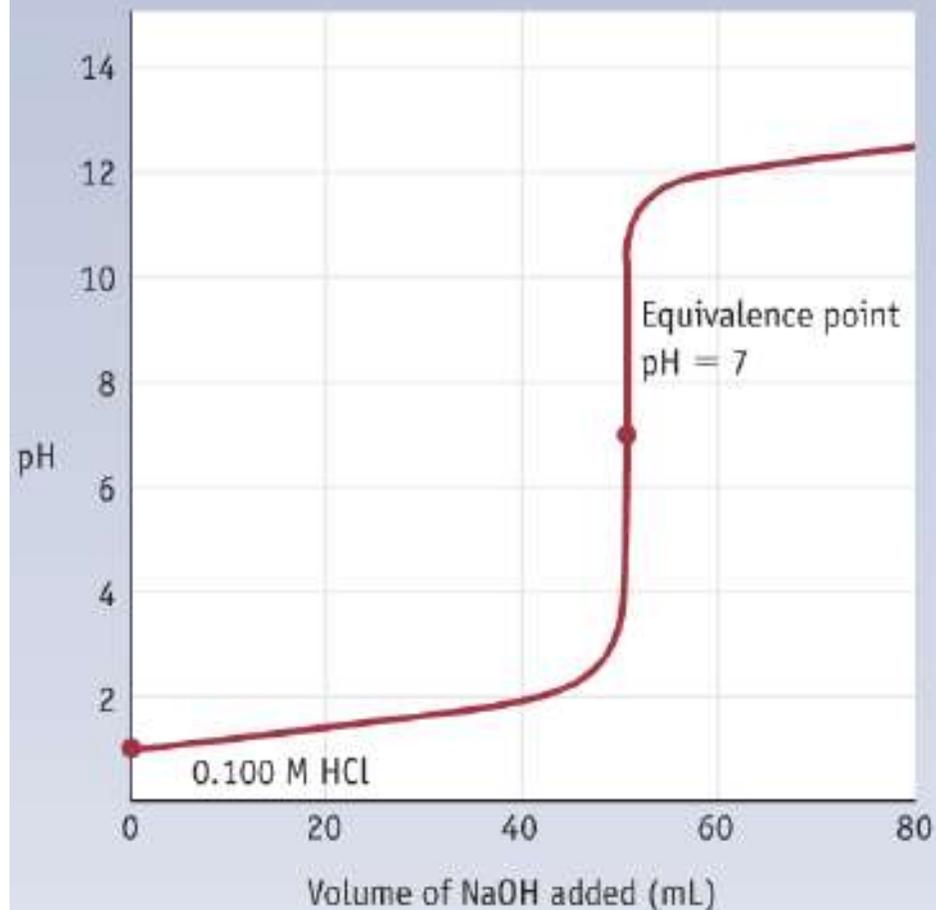
	$\text{CH}_3\text{COOH}(aq)$	\rightleftharpoons	$\text{H}^+(aq)$	+	$\text{CH}_3\text{COO}^-(aq)$
Initial	0.30 M		0		0.30 M
Change	$-x$ M		$+x$ M		$+x$ M
Equilibrium	$(0.30 - x)$ M		x M		$(0.30 + x)$ M

$$K_a = 1.8 \times 10^{-5} = \frac{[\text{H}^+][\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{x(0.30 + x)}{0.30 - x} = \frac{x(0.30)}{0.30}$$

$$x = 1.8 \times 10^{-5} \text{ M} = [\text{H}^+]$$

$$\text{pH} = -\log(1.8 \times 10^{-5}) = 4.74$$

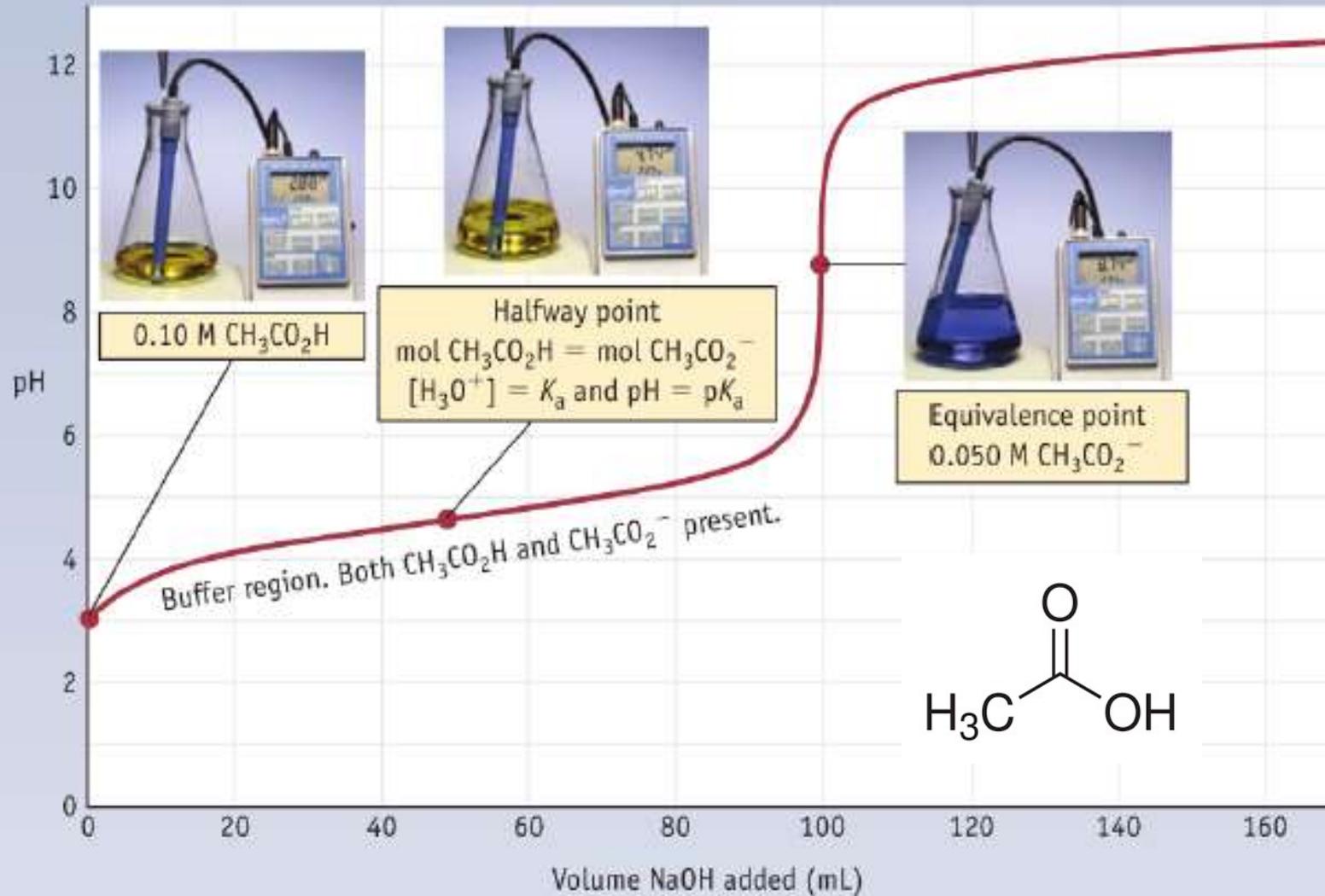
Titulação ácido forte - base forte



50.0 mL of 0.100 M HCl titrated
with 0.100 M NaOH

<u>Volume of base added</u>	<u>pH</u>
0.0	1.00
10.0	1.18
20.0	1.37
40.0	1.95
45.0	2.28
48.0	2.69
49.0	3.00
50.0	7.00
51.0	11.00
55.0	11.68
60.0	11.96
80.0	12.36
100.0	12.52
very large amount	13.00 (maximum)

Titulação ácido fraco- base forte



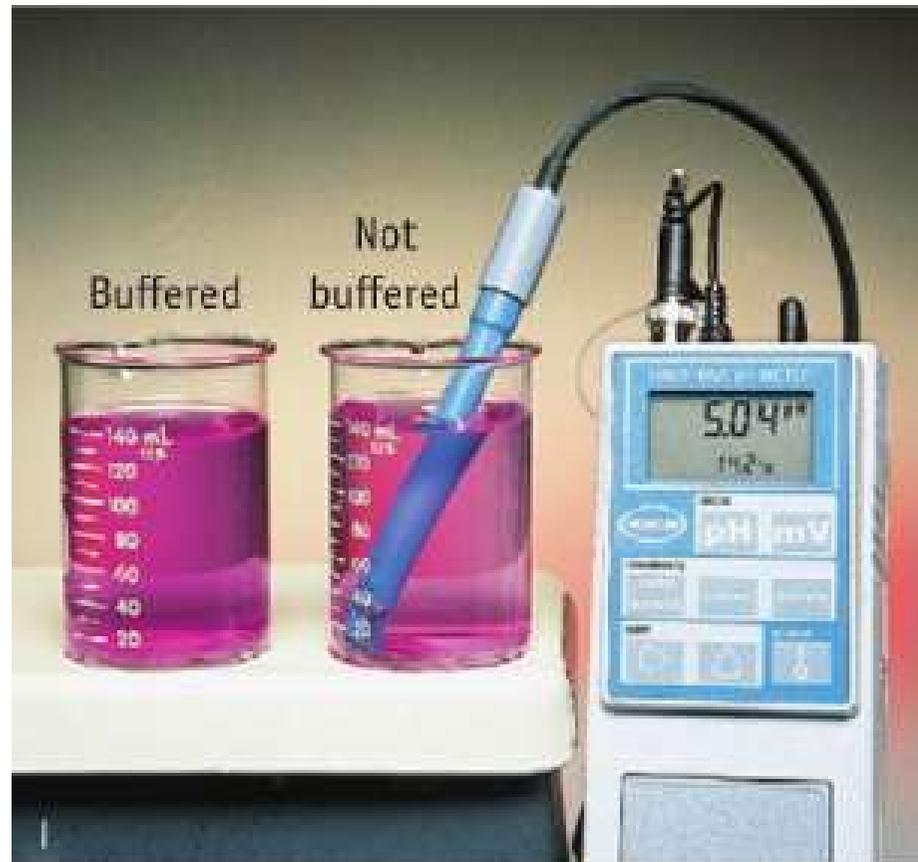
Tampão: é uma solução]ao que resiste a mudanças no pH pois possui espécies químicas acídicas e básicas capazes de consumir OH^- e H^+ . No entanto as suas espécies ácidas e básicas não se neutralizam pois resultam de pares conjugado ácido-base

TABLE 18.1 Some Commonly Used Buffer Systems

Weak Acid	Conjugate Base	Acid K_a ($\text{p}K_a$)	Useful pH Range
Phthalic acid, $\text{C}_6\text{H}_4(\text{CO}_2\text{H})_2$	Hydrogen phthalate ion, $\text{C}_6\text{H}_4(\text{CO}_2\text{H})(\text{CO}_2)^-$	1.3×10^{-3} (2.89)	1.9–3.9
Acetic acid, $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$	Acetate ion, CH_3CO_2^-	1.8×10^{-5} (4.74)	3.7–5.8
Dihydrogen phosphate ion, H_2PO_4^-	Hydrogen phosphate ion, HPO_4^{2-}	6.2×10^{-8} (7.21)	6.2–8.2
Hydrogen phosphate ion, HPO_4^{2-}	Phosphate ion, PO_4^{3-}	3.6×10^{-13} (12.44)	11.3–13.3

Tampão

Before



After adding 0.10 M HCl



Tampão



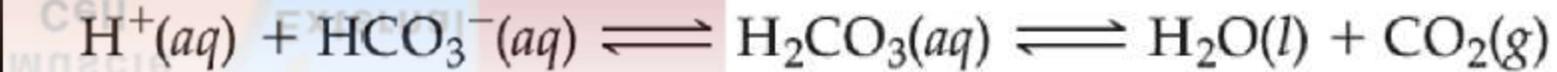
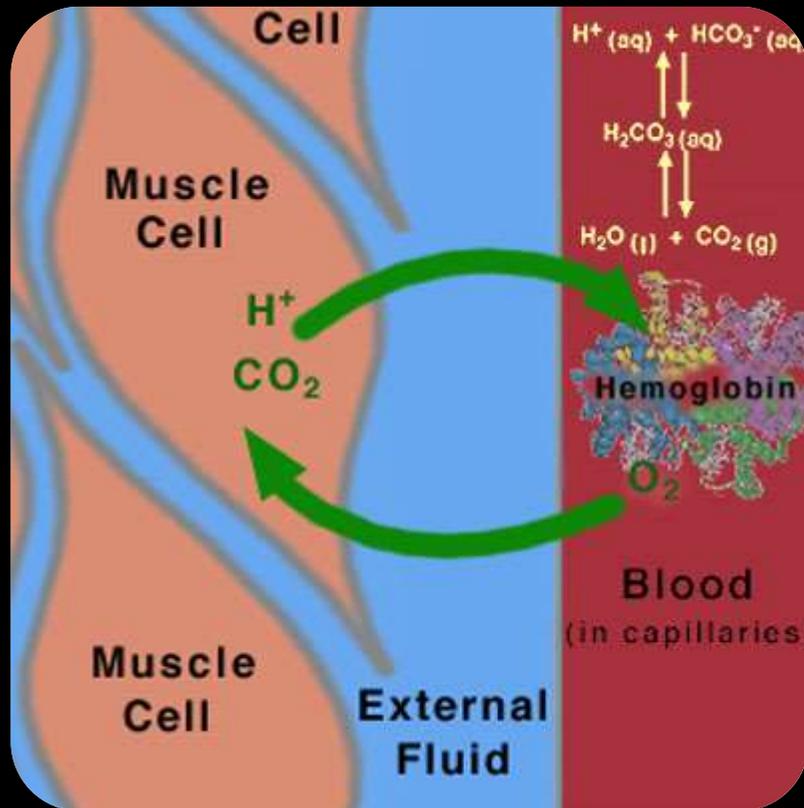
$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{X}^-]}{[\text{HX}]} \quad \rightarrow \quad [\text{H}^+] = K_a \frac{[\text{HX}]}{[\text{X}^-]}$$

$$-\log[\text{H}^+] = -\log\left(K_a \frac{[\text{HX}]}{[\text{X}^-]}\right) = -\log K_a - \log \frac{[\text{HX}]}{[\text{X}^-]}$$

$$\text{pH} = \text{p}K_a + \log \frac{[\text{base}]}{[\text{acid}]}$$

**Equação de
Henderson-Hasselbalch**

Tampão no sangue



$$[\text{HCO}_3^-] = 2,4 \times 10^{-2} \text{ M}$$

$$[\text{H}_2\text{CO}_3] = 1,2 \times 10^{-3} \text{ M}$$



Exemplo

Qual é o pH de um tampão que é 0,12 M em ácido láctico ($\text{HC}_3\text{H}_5\text{O}_3$) e 0,10 M em lactato de sódio ($\text{NaC}_3\text{H}_5\text{O}_3$)? (K_a ác. láctico = $1,4 \times 10^{-4}$)



Initial	0.12 M	0	0.10 M
Change	$-x$ M	$+x$ M	$+x$ M
Equilibrium	$(0.12 - x)$ M	x M	$(0.10 + x)$ M

$$K_a = 1.4 \times 10^{-4} = \frac{[\text{H}^+][\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3^-]}{[\text{HC}_3\text{H}_5\text{O}_3]} = \frac{x(0.10 + x)}{(0.12 - x)} = \frac{x(0.10)}{0.12}$$

$$x = 1.7 \times 10^{-4} \text{ M} \quad \rightarrow \quad \text{pH} = -\log(1.7 \times 10^{-4}) = 3.77$$

$$\begin{aligned} \text{pH} &= \text{p}K_a + \log\left(\frac{[\text{base}]}{[\text{acid}]}\right) = 3.85 + \log\left(\frac{0.10}{0.12}\right) \\ &= 3.85 + (-0.08) = 3.77 \end{aligned}$$

Exemplo

Quantos mols de NH_4Cl devem ser adicionados a 2,0 L de 0,10 M de NH_3 para formar um tampão cujo pH é 9,00? ($K_b \text{ NH}_3 = 1,8 \times 10^{-5}$)

Exemplo

Um tampão é feito adicionando 0,300 mols CH_3COOH e 0,300 mols de CH_3COONa à água suficiente para preparar 1,0 L de solução. O pH do tampão é 4,74. **(a)** Calcule o pH desta solução após a adição de 0,020 mols de NaOH . **(b)** Para comparação, calcule o pH que resultaria se 0,020 mols de NaOH fossem adicionados à 1,0 L de água pura



Buffer before addition	0.300 mol	0	—	0.300 mol
Addition	—	0.020 mol		—
Buffer after addition	0.280 mol	0	—	0.320 mol

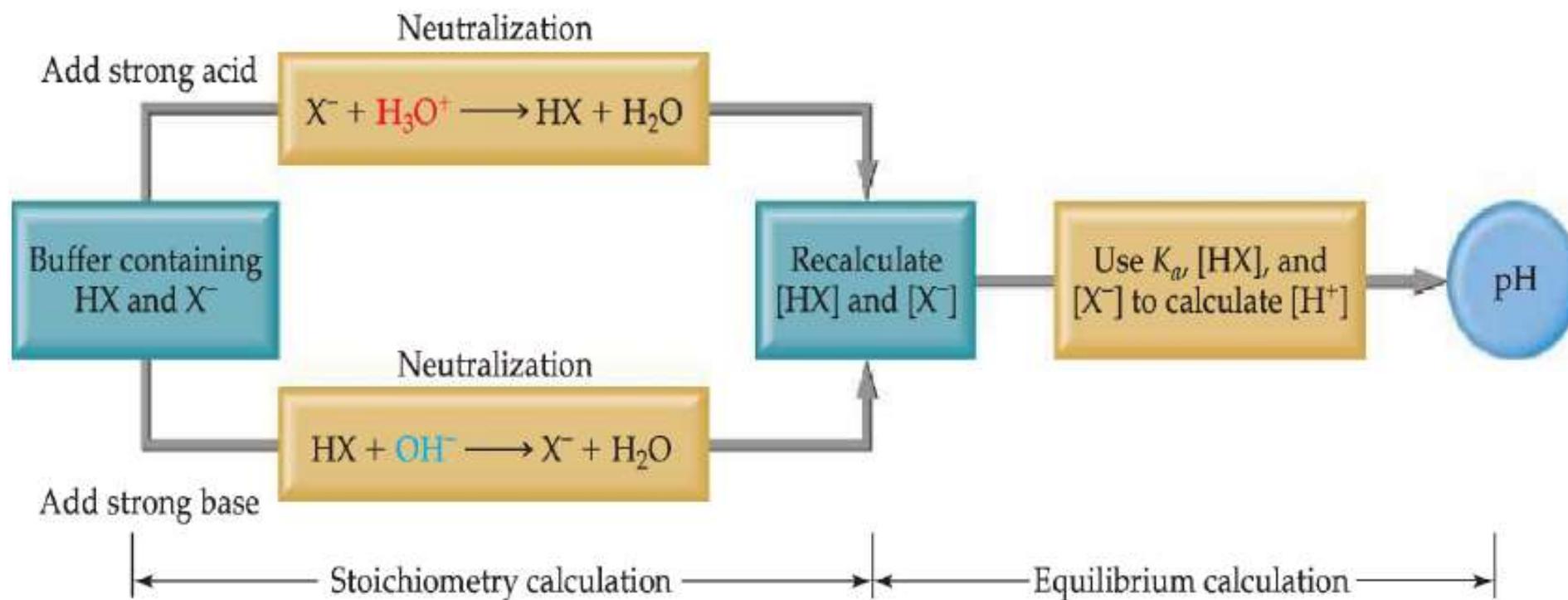


$$\text{(a)} \quad \text{pH} = 4.74 + \log \frac{0.320 \text{ mol}/1.00 \text{ L}}{0.280 \text{ mol}/1.00 \text{ L}} = 4.80$$

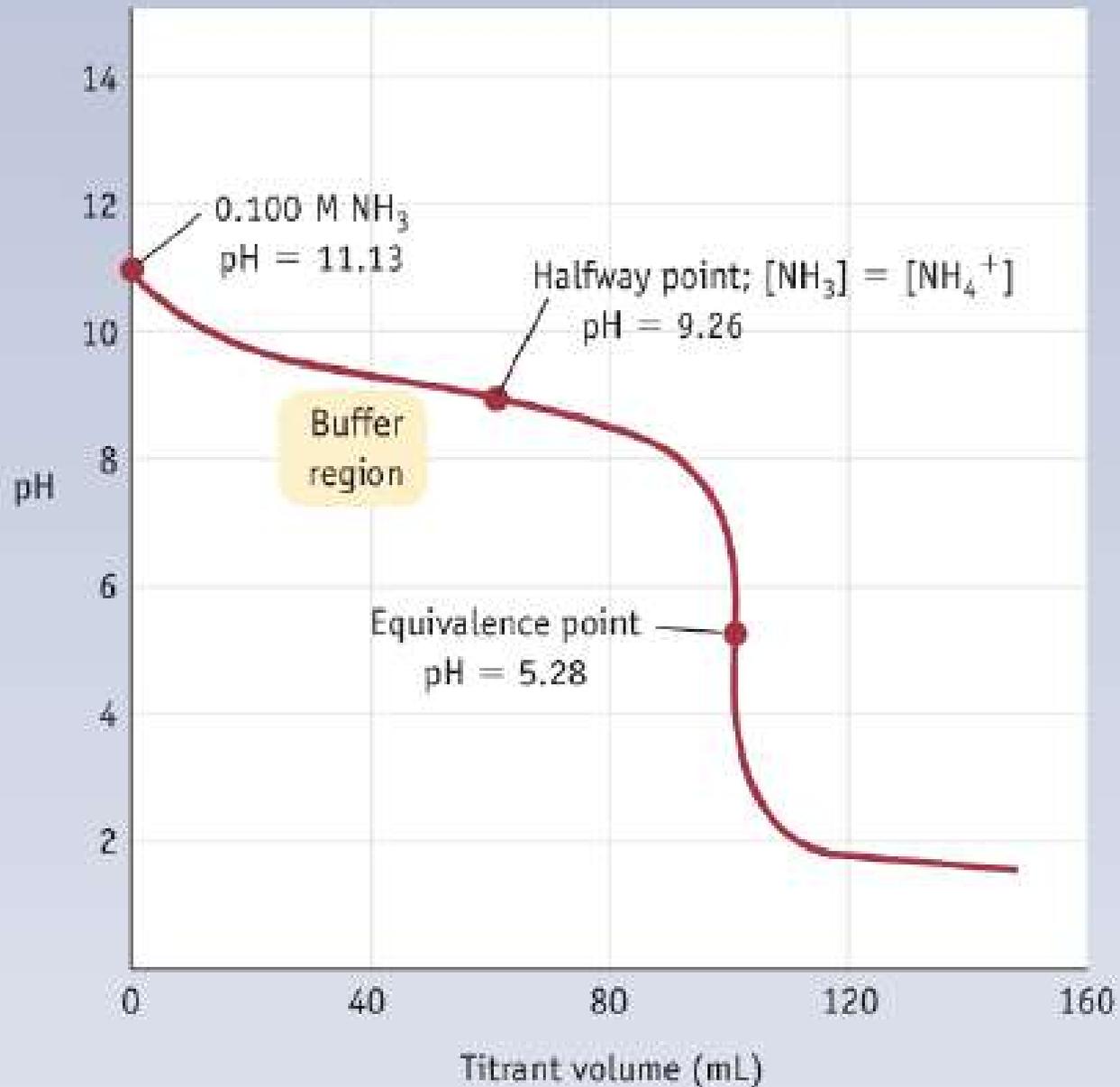
$$\text{(b)} \quad \text{pH} = 14 - (-\log 0.020) = 12.30$$

Capacidade tamponante e faixa de pH

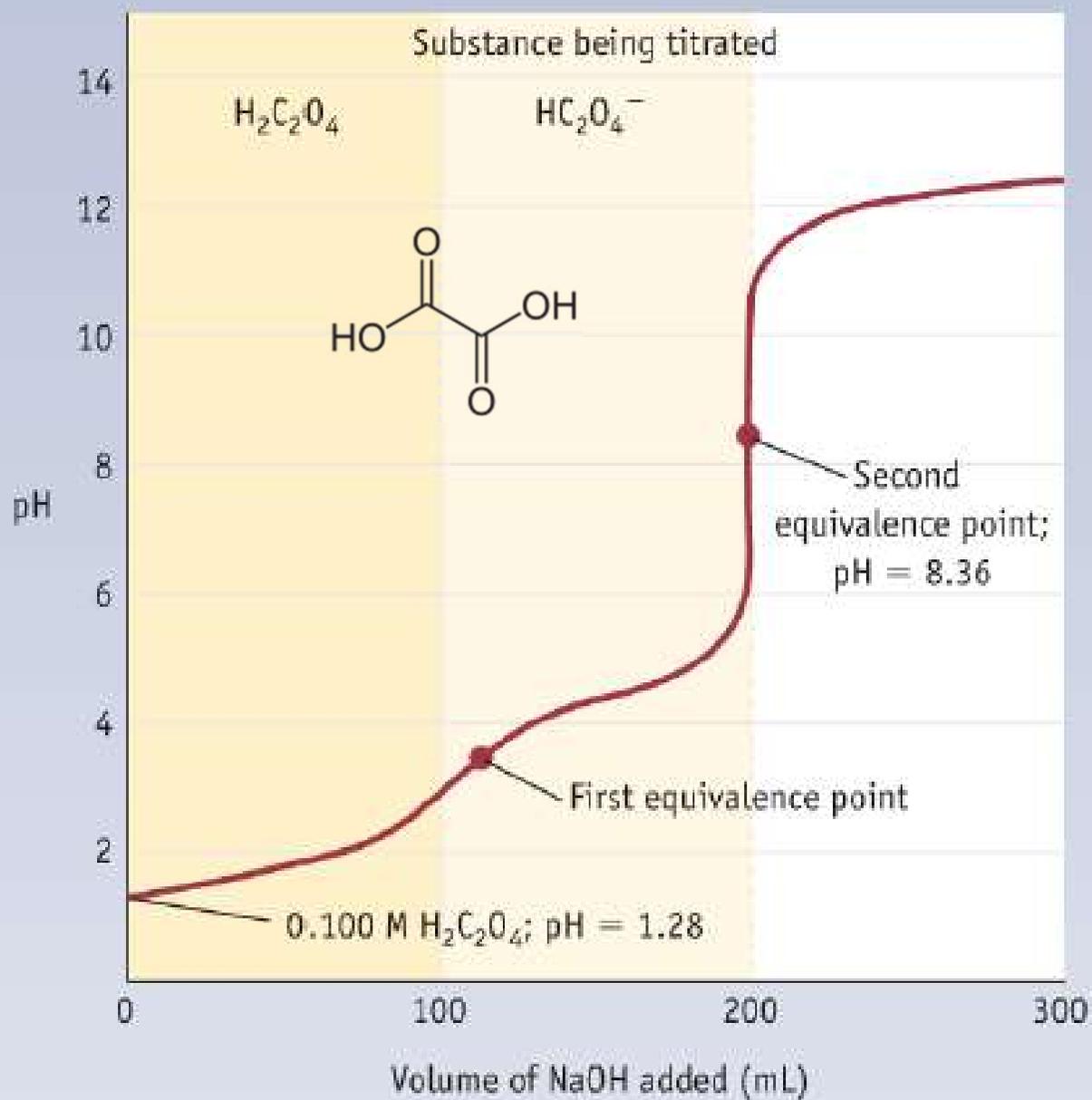
Capacidade Tamponante e Faixa de pH



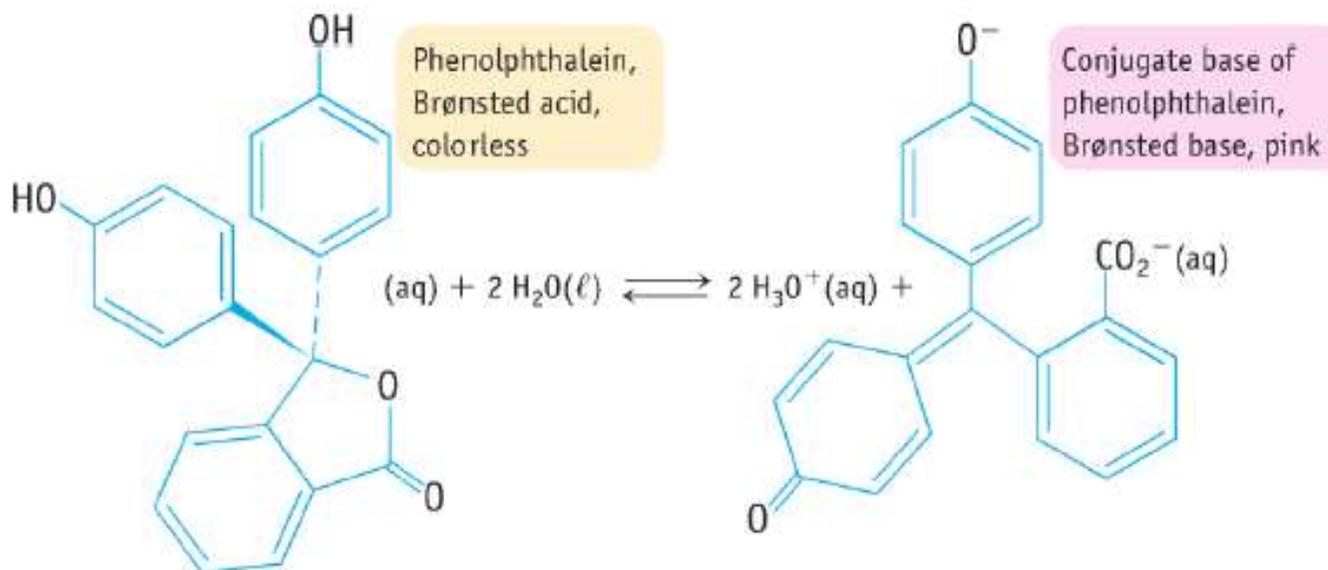
Titulação base fraca ácido forte



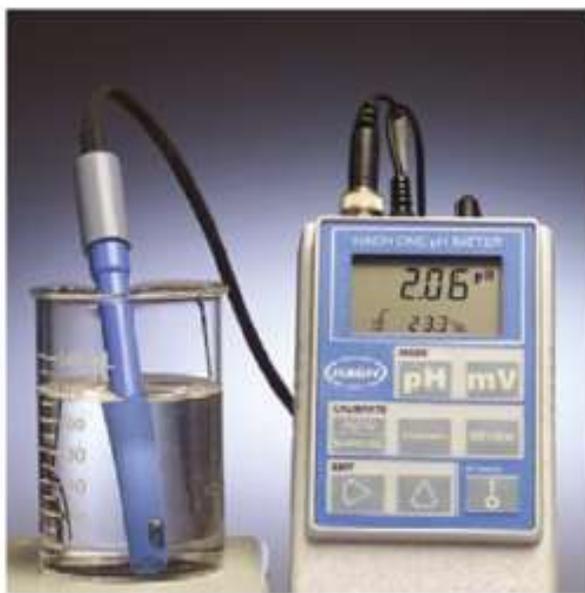
Ácidos dipróticos



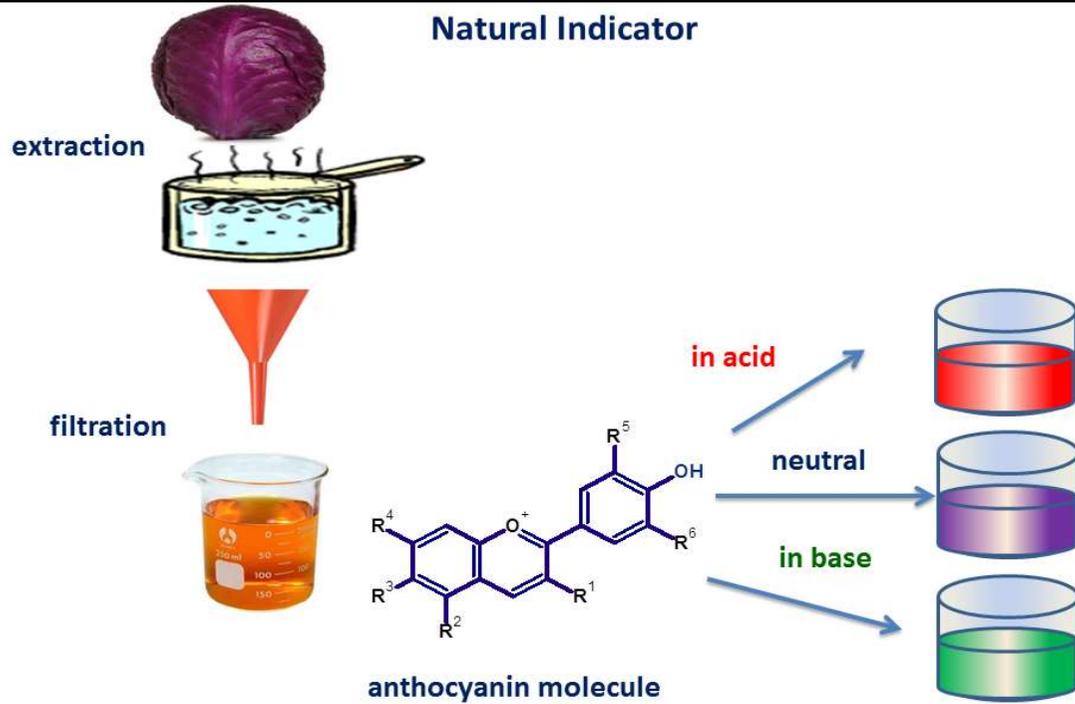
Ácidos indicadores



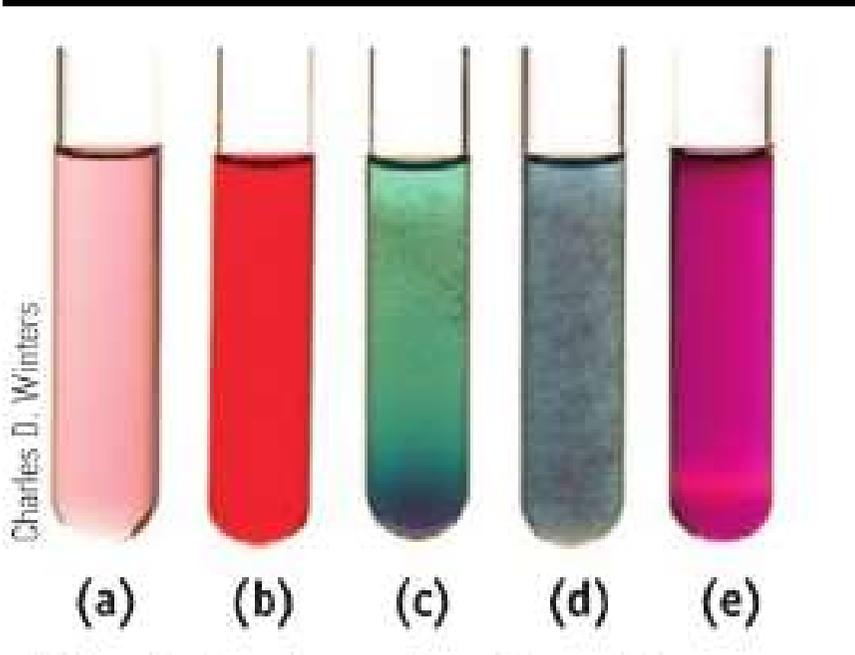
Photos: Charles D. Winters



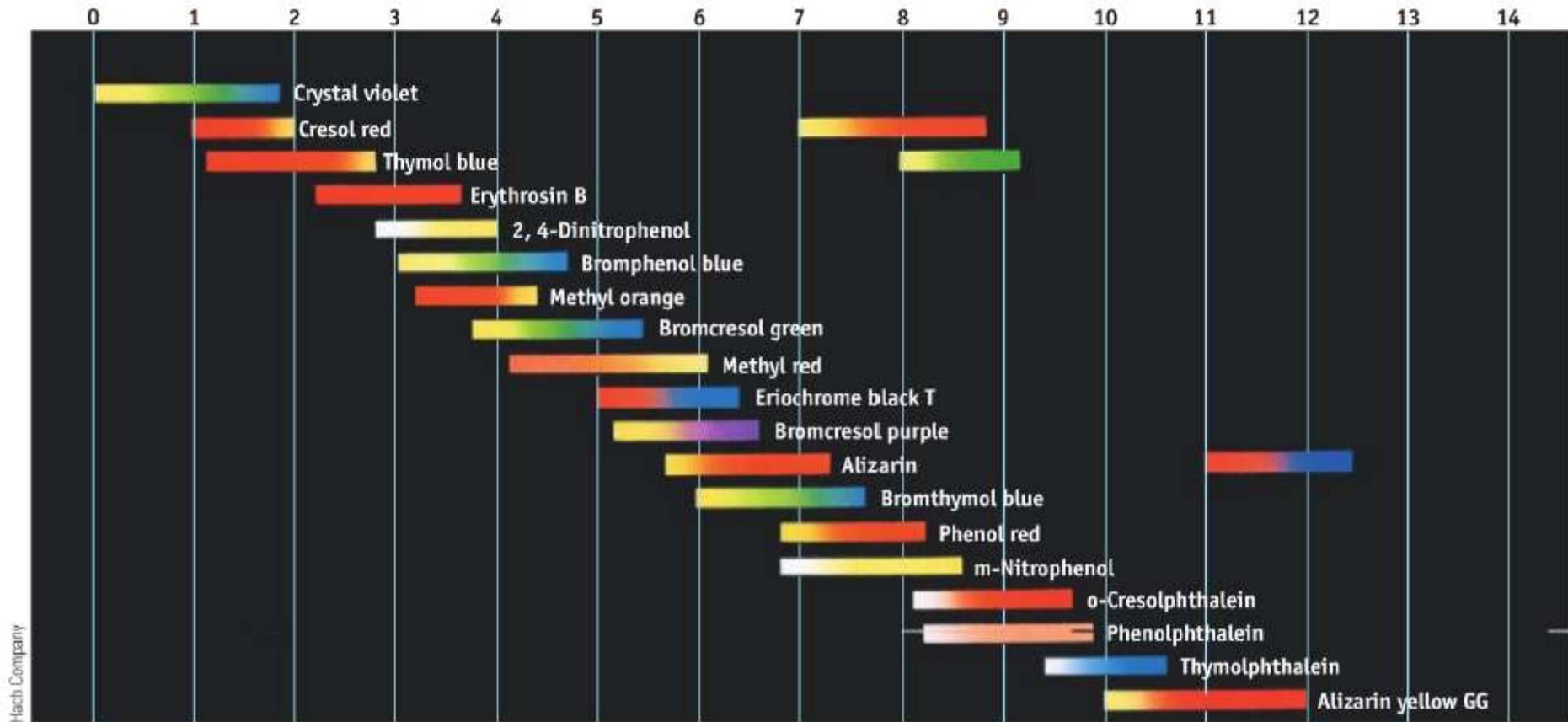
Natural Indicator



Indicadores ácido-base



Indicadores ácido-base

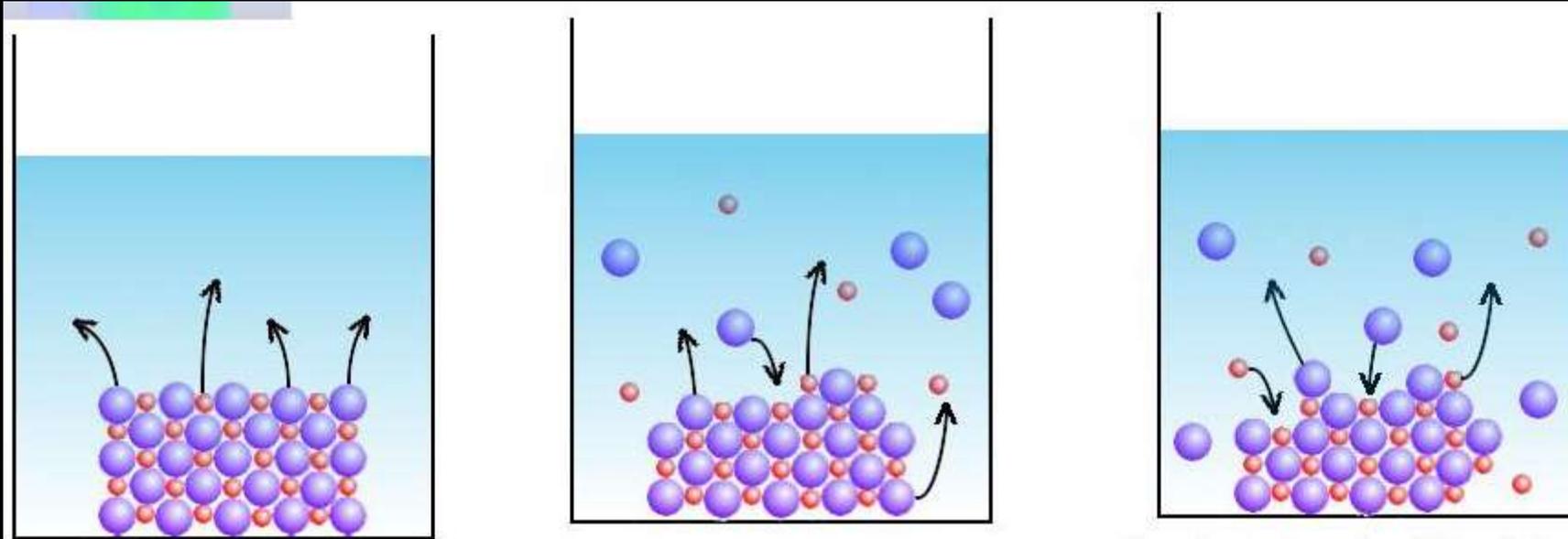




***solubilidade
e de
complexação***

Aula 14

Equilíbrio de solubilidade



$$K_{sp} = [M^{z+}]^y [X^{y-}]^z$$

Produto de solubiliade

Solubilidade molar dos ions

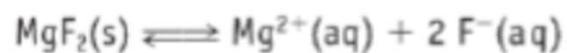
Equilibrio de solubilidad

TABLE 18.2 Some Common Insoluble Compounds and Their K_{sp} Values*

Formula	Name	K_{sp} (25 °C)	Common Names/Uses
CaCO ₃	Calcium carbonate	3.4×10^{-9}	Calcite, iceland spar
MnCO ₃	Manganese(II) carbonate	2.3×10^{-11}	Rhodochrosite (forms rose-colored crystals)
FeCO ₃	Iron(II) carbonate	3.1×10^{-11}	Siderite
CaF ₂	Calcium fluoride	5.3×10^{-11}	Fluorite (source of HF and other inorganic fluorides)
AgCl	Silver chloride	1.8×10^{-10}	Chlorargyrite
AgBr	Silver bromide	5.4×10^{-13}	Used in photographic film
CaSO ₄	Calcium sulfate	4.9×10^{-5}	The hydrated form is commonly called gypsum
BaSO ₄	Barium sulfate	1.1×10^{-10}	Barite (used in "drilling mud" and as a component of paints)
SrSO ₄	Strontium sulfate	3.4×10^{-7}	Celestite
Ca(OH) ₂	Calcium hydroxide	5.5×10^{-5}	Slaked lime

* The values in this table were taken from *Lange's Handbook of Chemistry*, 15th edition, McGraw-Hill Publishers, New York, NY (1999). Additional K_{sp} values are given in Appendix J.

Exemplo: Determine as concentrações em equilíbrio do MgF_2 sabendo que o $K_{sp} = 5,2 \times 10^{-11}$



$$K_{sp} = [\text{Mg}^{2+}][\text{F}^{-}]^2 = 5.2 \times 10^{-11}$$

and then set up an ICE table.

Equation	$\text{MgF}_2(\text{s})$	\rightleftharpoons	$\text{Mg}^{2+}(\text{aq})$	+	$2 \text{F}^{-}(\text{aq})$
Initial (M)			0		0
Change (M)			+x		+2x
Equilibrium (M)			x		2x

$$K_{sp} = [\text{Mg}^{2+}][\text{F}^{-}]^2 = (x)(2x)^2 = 4x^3$$

$$x = \sqrt[3]{\frac{K_{sp}}{4}} = \sqrt[3]{\frac{5.2 \times 10^{-11}}{4}} = 2.4 \times 10^{-4}$$

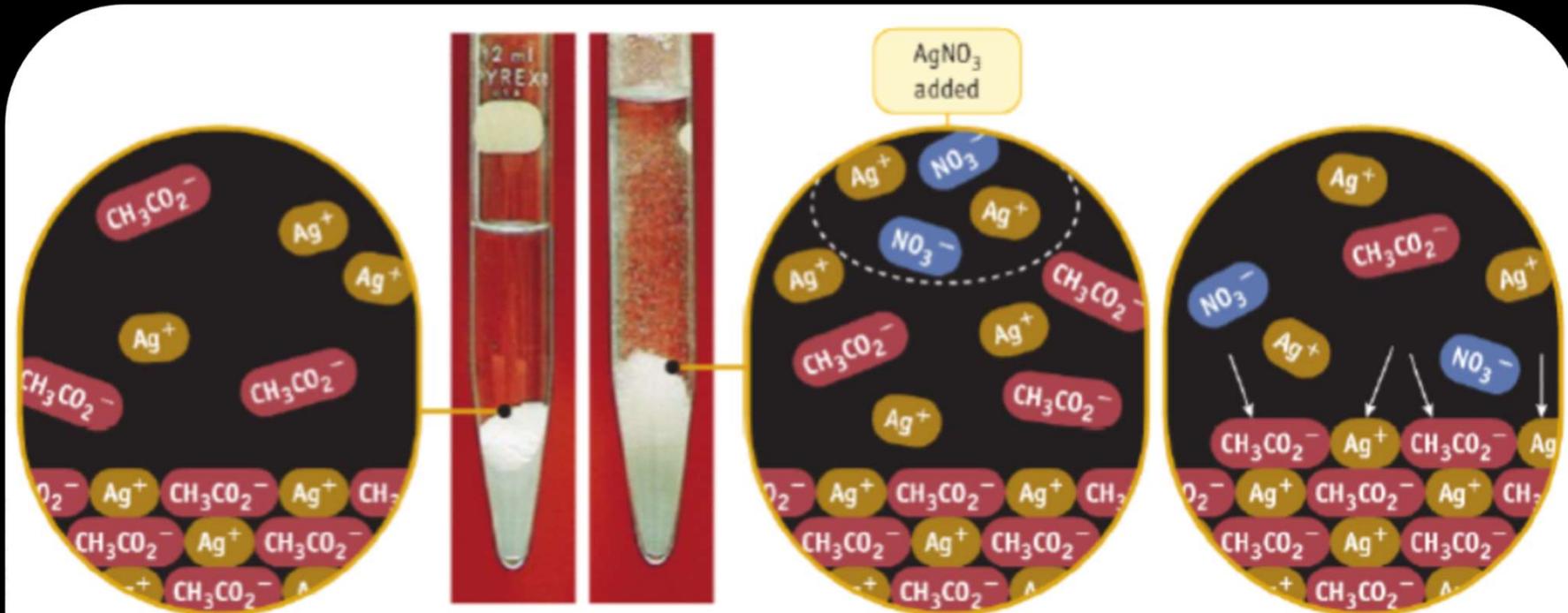


FIGURE 18.13 The common ion effect. The tube at the left contains a saturated solution of silver acetate, AgCH_3CO_2 . When 1.0 M AgNO_3 is added to the tube (right), more solid silver acetate forms.

Exemplo: o que acontece ao equilíbrio quando a uma solução saturada de AgCl se adiciona 0,55 moles de NaCl. Determine as concentrações em equilíbrio em mol/L e g/L. $K_{sp} = 1,8 \times 10^{-10}$

Equation	AgCl(s)	\rightleftharpoons	Ag ⁺ (aq)	+	Cl ⁻ (aq)
Initial (M)			0		0.55
Change (M)			+x		+x
Equilibrium (M)			x		0.55 + x

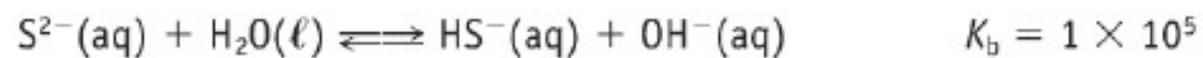
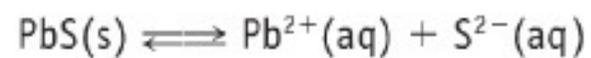
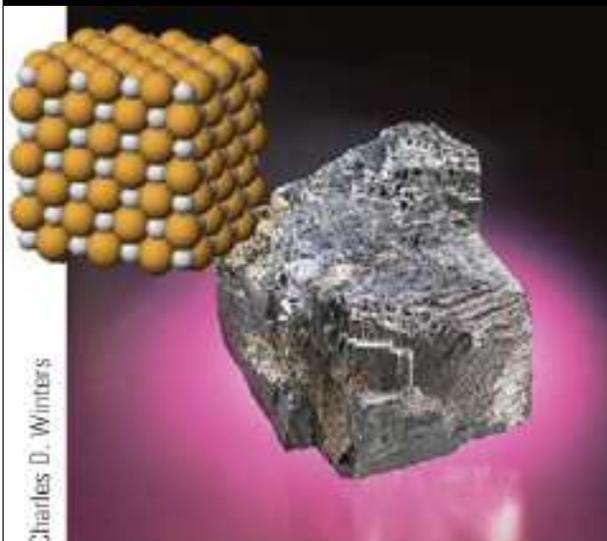
$$K_{sp} = 1.8 \times 10^{-10} = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-] = (x)(0.55 + x)$$

$$x^2 + 0.55x - K_{sp} = 0$$

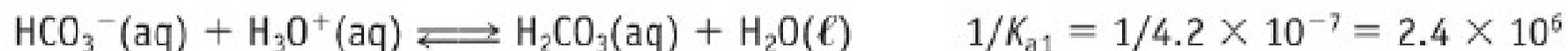
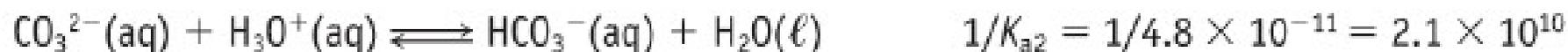
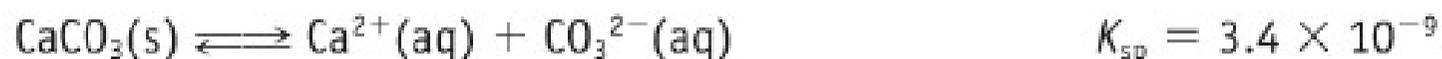
$$x = [\text{Ag}^+] = 3.3 \times 10^{-10} \text{ M}$$

$$(3.3 \times 10^{-10} \text{ mol/L})(143 \text{ g/mol}) = 4.7 \times 10^{-8} \text{ g/L}$$

Efeito da água no equilíbrio de solubilidade

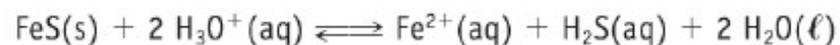


Efeito da água no equilíbrio de solubilidade



$$K_{\text{net}} = (K_{\text{sp}})(1/K_{\text{a}2})(1/K_{\text{a}1}) = 1.7 \times 10^8$$

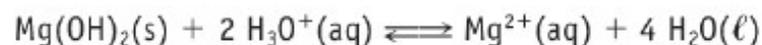
Efeito do ácido no equilíbrio de solubilidade



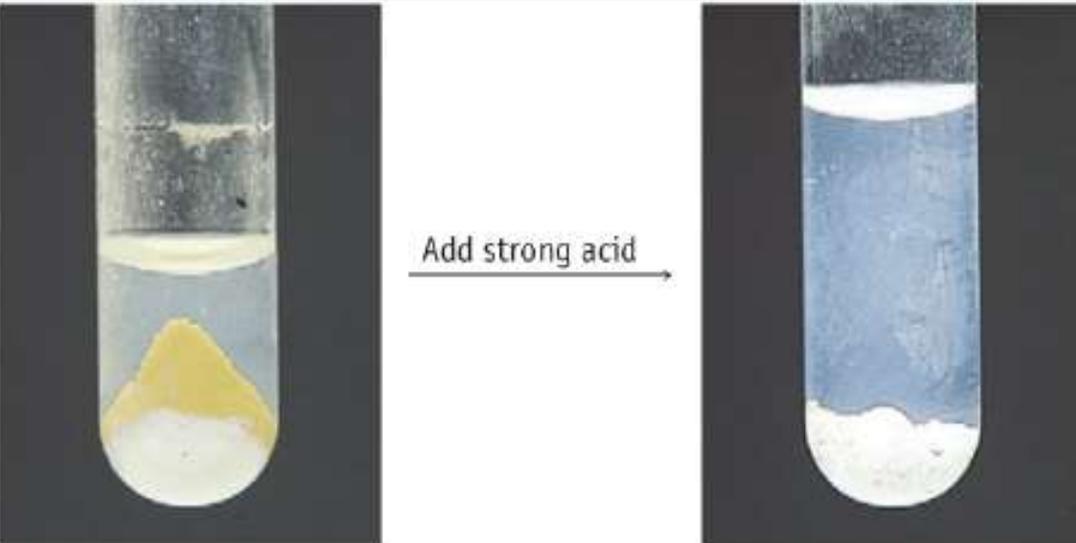
as are metal phosphates (Figure 18.15),



and metal hydroxides.

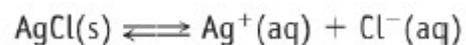


Photos: Charles D. Winters



Precipitate of
 AgCl and Ag_3PO_4

Precipitate of
 AgCl

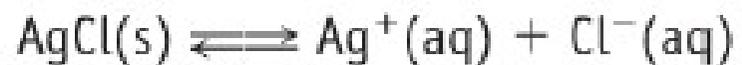


$$K_{sp} = 1.8 \times 10^{-10}$$



$$K \ll 1$$

Ks e Q



$$K_{sp} = 1.8 \times 10^{-10}$$

$$Q = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]$$

Q = Ksp → solução saturada

Q < Ksp → solução não saturada

Q > Ksp → solução saturada

Exemplo: A concentração do ion bário em solução é de 0,01 .

- Qual a concentração de sulfato necessaria para que o sulfato de bario comece a precipitar.
- Quando a concentração de sulfato for de 0,015 M qual será a concentração de bário que restará em solução.



$$K_{sp} = [\text{Ba}^{2+}][\text{SO}_4^{2-}] = 1.1 \times 10^{-10}$$

$$[\text{SO}_4^{2-}] = \frac{K_{sp}}{[\text{Ba}^{2+}]} = \frac{1.1 \times 10^{-10}}{0.010} = 1.1 \times 10^{-8} \text{ M}$$

$$[\text{Ba}^{2+}] = \frac{K_{sp}}{[\text{SO}_4^{2-}]} = \frac{1.1 \times 10^{-10}}{0.015} = 7.3 \times 10^{-9} \text{ M}$$

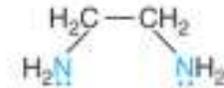
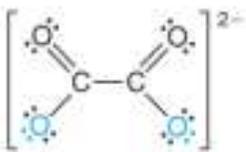
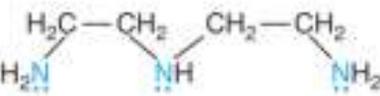
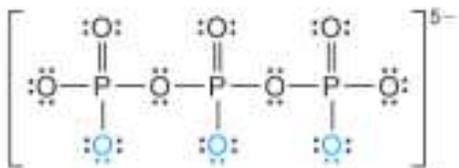
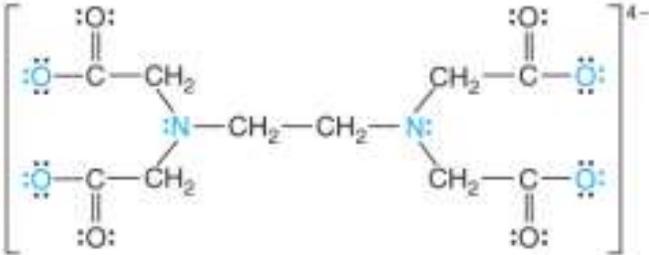
- O que é um Complexo?
- O que há de especial acerca de um complexo (tipo de ligação?)
- Quantas ligações poderão ser efectuadas?
- Como é que os ligantes se ligam ao ion metálico?
- Exemplo $\text{Fe}[(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$
- Número de coordenação

Número de coordenação

Elemento	nº coordenação	Exemplos
Fe	6	$\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$, $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$
Co	4, 6	CoCl_2^{2-} , $\text{Co}(\text{NH}_3)_6^{3+}$, $\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$
Ni	4, 6	$\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$, $\text{Ni}(\text{NH}_3)_6^{2+}$
Cu	4, 6	CuCl_2^{2-} , $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$
Zn	4	$\text{Zn}(\text{CN})_4^{2-}$
Pt	4, 6	PtCl_4^{2-} , PtCl_6^{2-}
B	3, 4	BO_3^{3-} , BF_4^-
C	3, 4	CO_3^{2-} , CH_4 , CF_4
N	3, 4	NO_3^- , NH_4^+
Si	4, 6	SiO_4^{2-} , SiF_6^{2-}
S	4, 6	SO_4^{2-} , SF_6
Cl	1, 2, 3, 4	ClO^- , ClO_2^- , ClO_3^- , ClO_4^-
As	3, 4	AsO_3^{3-} , AsO_4^{3-}
Sb	6	$\text{Sb}(\text{OH})_6^-$, SbCl_6^-
I	3, 4, 6	IO_3^- , IO_4^- , IO_6^{5-}

Tipos de ligantes

Table 22.5 Some Common Ligands in Coordination Compounds

Ligand Type	Examples
Monodentate	$\text{H}_2\ddot{\text{O}}:$ water $:\text{NH}_3$ ammonia $:\ddot{\text{F}}:^-$ fluoride ion $:\ddot{\text{Cl}}:^-$ chloride ion $[:\text{C}\equiv\text{N}:]^-$ cyanide ion $[:\ddot{\text{S}}=\text{C}=\ddot{\text{N}}:]^-$ thiocyanate ion $[:\ddot{\text{O}}-\text{H}]^-$ hydroxide ion $[:\ddot{\text{O}}-\text{N}=\ddot{\text{O}}:]^-$ nitrite ion
Bidentate	 ethylenediamine (en)  oxalate ion
Polydentate	 diethylenetriamine  triphosphate ion  ethylenediaminetetraacetate ion (EDTA^{4-})

Configuração electrónica de metais de transição

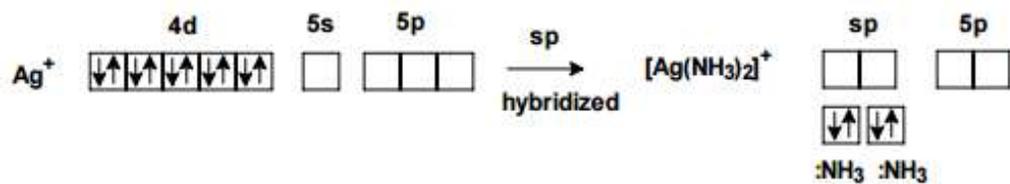
Element	Partial Orbital Diagram			Unpaired Electrons
	4s	3d	4p	
Sc	↑↓	↑		1
Ti	↑↓	↑ ↑		2
V	↑↓	↑ ↑ ↑		3
Cr	↑	↑ ↑ ↑ ↑ ↑		6
Mn	↑↓	↑ ↑ ↑ ↑ ↑		5
Fe	↑↓	↑↓ ↑ ↑ ↑ ↑		4
Co	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑ ↑ ↑		3
Ni	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑		2
Cu	↑	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓		1
Zn	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓		0

Estabilidade do complexo

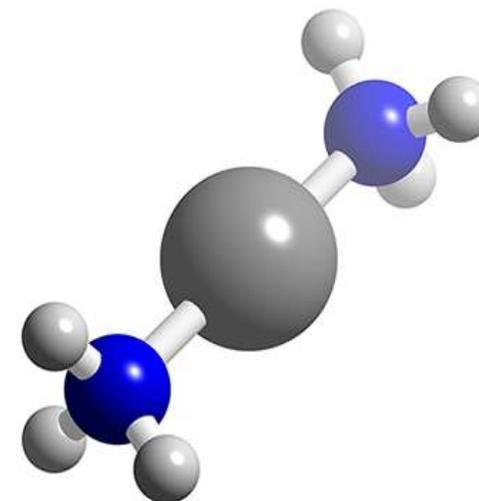
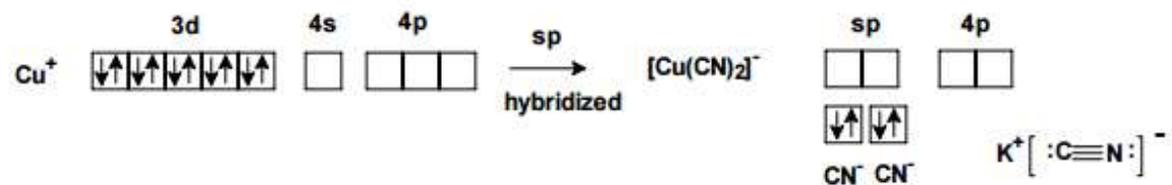
Lewis Acid		Lewis Base		Complex	Dissociation Constants
Cr^{+3}	+	$6\text{H}_2\text{O}$	→	$[\text{Cr}(\text{OH}_2)_6]^{+3}$	--
Co^{+3}	+	6NH_3	→	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{+3}$	2.2×10^{-34}
Ni^{+2}	+	4CN^-	→	$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{-2}$	1.0×10^{-31}
Fe	+	5CO	→	$[\text{Fe}(\text{CO})_5]$	--
Ag^+	+	2NH_3	→	$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	6.3×10^{-8}

Coordenação de 2 ligandos

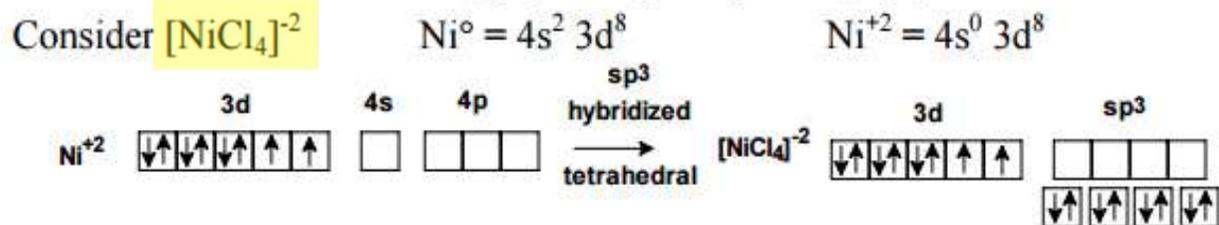
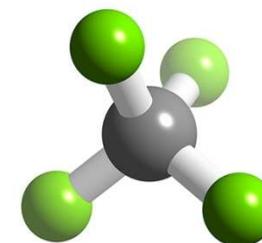
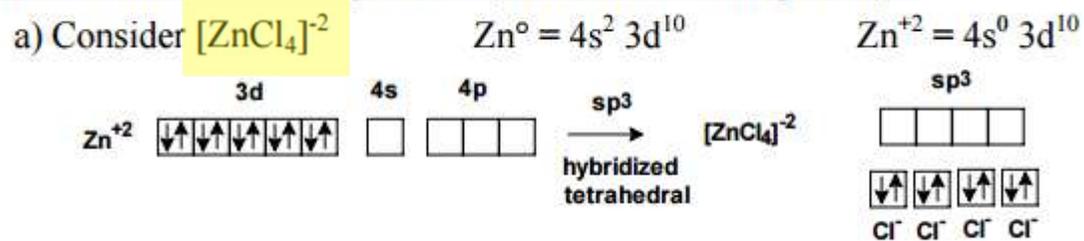
a) Consider $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ $\text{Ag}^0 = 5s^1 4d^{10}$ $\text{Ag}^+ = 5s^0 4d^{10}$



b) Consider $[\text{Cu}(\text{CN})_2]^-$ $\text{Cu}^0 = 4s^1 3d^{10}$ $\text{Cu}^+ = 4s^0 3d^{10}$

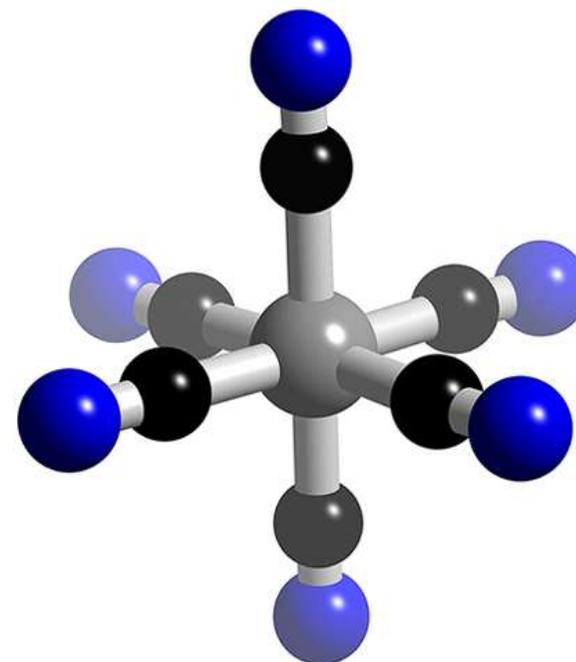
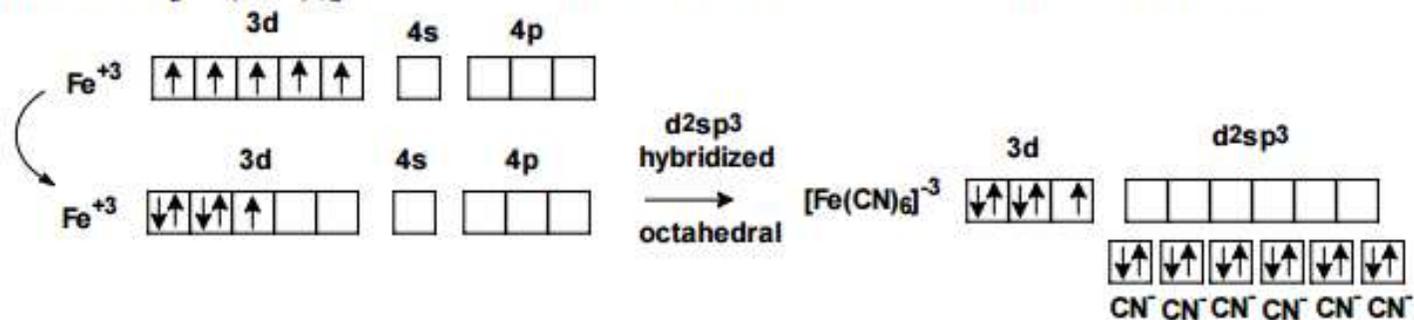
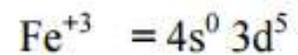
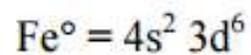


Coordenação de 4 ligandos



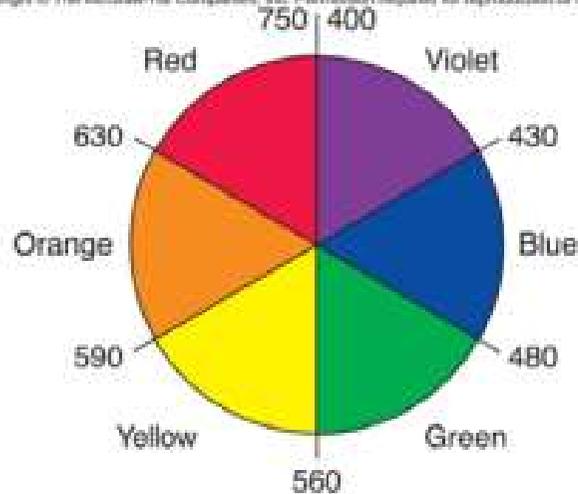
Coordenação de 6 ligandos

Consider $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{-3}$



Cor do complexo

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

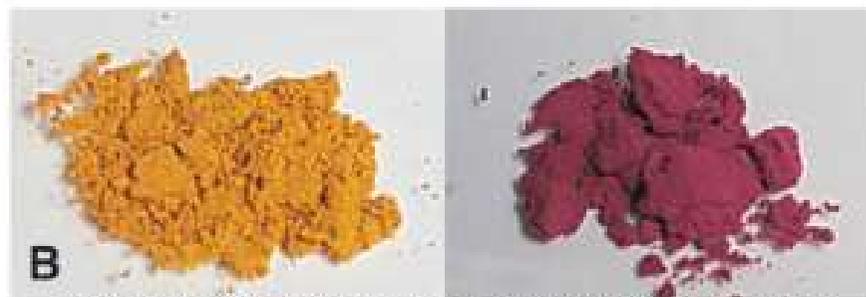


Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Table 22.8 Relation Between Absorbed and Observed Colors

Absorbed Color	λ (nm)	Observed Color	λ (nm)
Violet	400	Green-yellow	560
Blue	450	Yellow	600
Blue-green	490	Red	620
Yellow-green	570	Violet	410
Yellow	580	Dark blue	430
Orange	600	Blue	450
Red	650	Green	520

- Se um objecto absorve todos os λ é preto
- Se um objecto reflete tudo é branco
- Se um objecto **absorve tudo excepto verde**, a cor verde refletida (transmitida) é interpretada pelo cérebro com verde.
- Se o objecto **só absorve vermelho** (complementar do verde) a mistura reflectida (transmitida) é interpretada pelo **cérebro com verde**



©The McGraw-Hill Companies, Inc./Stephen Frisch, Photographer

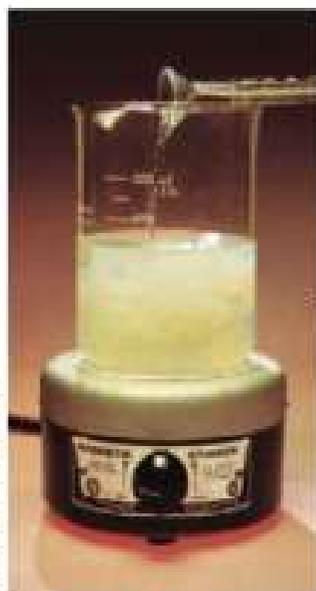


Equilíbrio químico nos complexos

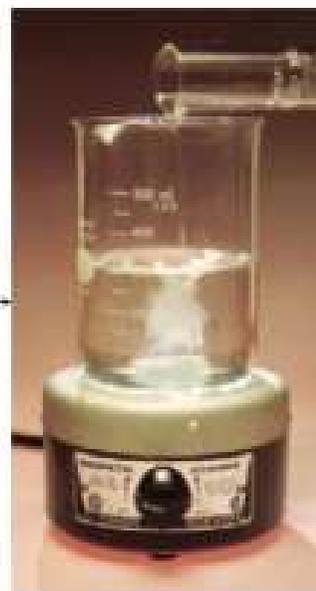


Equilíbrio químico nos complexos

Photos: Charles D. Wilcox



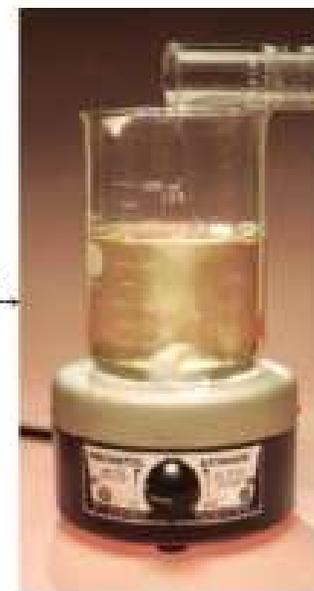
$\text{NH}_3(\text{aq})$



$\text{NaBr}(\text{aq})$



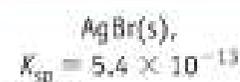
$\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3(\text{aq})$



(a) AgCl precipitates on adding NaCl(aq) to AgNO₃(aq) (see Figure 3.7).



(b) The precipitate of AgCl dissolves on adding aqueous NH₃ to give water-soluble $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$.



(c) The silver-ammonia complex ion is changed to insoluble AgBr on adding NaBr(aq).



(d) Solid AgBr is dissolved on adding Na₂S₂O₃(aq). The product is the water-soluble complex ion $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$.