

# Reações Químicas

1) Ligações químicas

1) Cálculos estequiométricos

1) Reações de neutralização e precipitação

## Ligação Química

As **partículas subatômicas** são compostas por outras partículas subatômicas menores. O **átomo**, por exemplo, é composto por **elétrons, prótons e nêutrons**. Os elétrons são partículas elementares com carga elétrica negativa, os prótons são partículas com carga elétrica positiva e os nêutrons são partículas sem carga elétrica, mas com massa semelhante à dos prótons. Os elétrons giram em torno do núcleo do átomo, que é composto pelos prótons e nêutrons.

As partículas subatômicas menores que compõem prótons e nêutrons são os **quarks**, que são partículas elementares que possuem **carga elétrica fracionária** e que se combinam para formar prótons e nêutrons. Os prótons são compostos por **dois quarks up e um quark down**, enquanto os nêutrons são compostos por **dois quarks down e um quark up**.

Já os elétrons são considerados partículas elementares, ou seja, não são compostos por outras partículas subatômicas menores. No entanto, de acordo com a teoria quântica, eles podem ser descritos como ondas de probabilidade que cercam o núcleo do átomo.

## Ligação Química

O **Modelo Padrão** é uma teoria física que descreve as partículas elementares e suas interações fundamentais. É um modelo amplamente aceito pela comunidade científica e é considerado um dos pilares da física moderna.

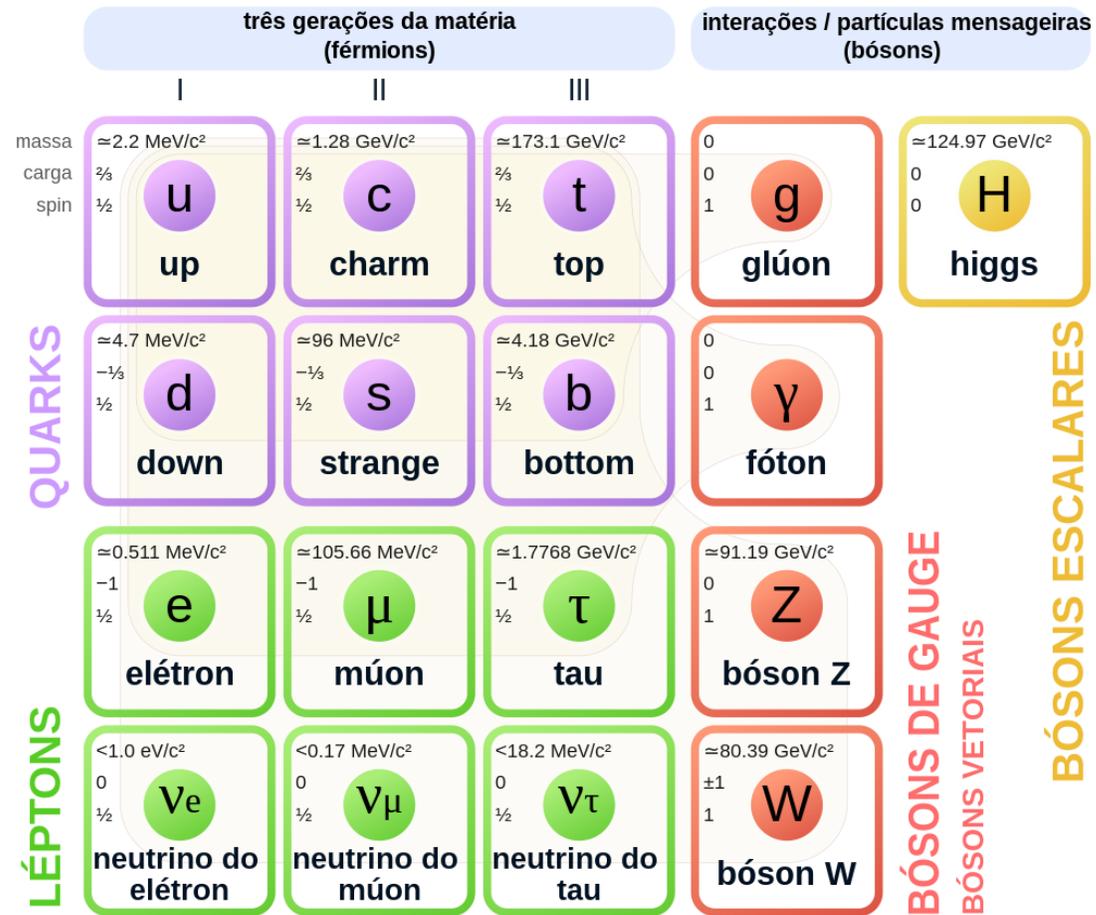
O modelo padrão descreve a matéria em termos de doze partículas elementares: **seis quarks** (up, down, charm, strange, top e bottom), **seis léptons** (elétron, múon, tau, neutrino do elétron, neutrino do múon e neutrino do tau) e seus respectivos antipartículas. Além disso, o modelo padrão postula a existência de quatro forças fundamentais: a força eletromagnética, a força fraca, a força forte e a gravidade.

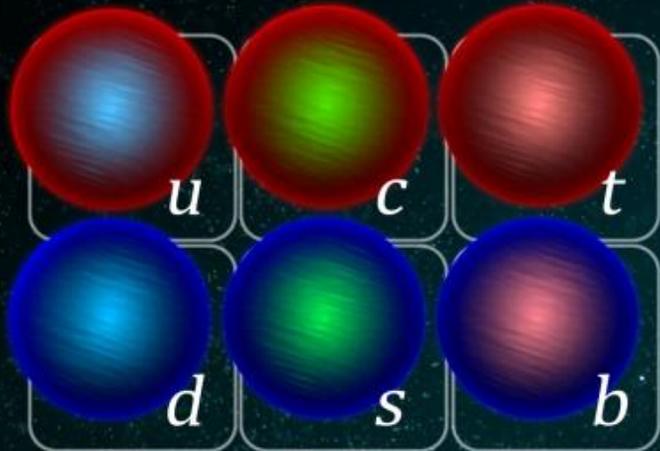
As interações entre essas partículas são mediadas pelas partículas intermediárias, como o fóton (partícula intermediária da força eletromagnética), o glúon (partícula intermediária da força forte) e os bósons W e Z (partículas intermediárias da força fraca).

O modelo padrão é uma teoria bem-sucedida em descrever a maioria dos fenômenos observados no mundo subatômico. No entanto, existem algumas limitações, como a incapacidade de explicar a gravidade e o fato de que a matéria escura e a energia escura, que constituem a maior parte do universo, não podem ser explicadas dentro do modelo padrão. Portanto, a busca por uma teoria mais completa que possa explicar esses fenômenos continua sendo um dos principais desafios da física moderna.

# Ligação Química

## Modelo Padrão das Partículas Elementares

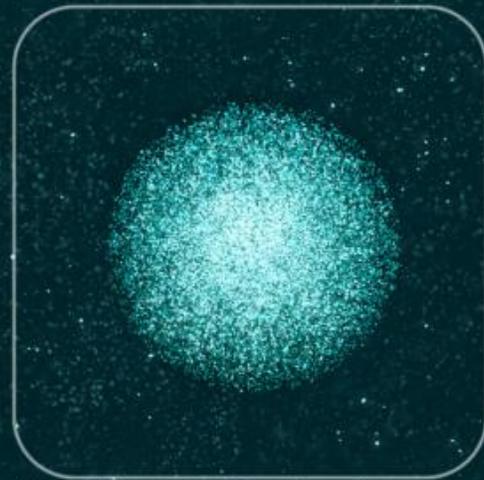




Quarks



Leptons



Higgs boson



Forces

## Ligação Química

- A ligação química pode ser definida como a interação eletromagnética que ocorre entre os elétrons de um átomo e os elétrons de outro átomo, ou entre os elétrons de um átomo e o núcleo de outro átomo. Essa interação é mediada pelas forças eletrostáticas, que agem entre as cargas elétricas dos átomos, e resulta na formação de uma estrutura molecular estável.
- Cabe destacar que, no contexto da física de partículas, o elétron é classificado como um lépton, que é uma partícula elementar de spin  $1/2$  e carga elétrica  $-1$ . Ele é considerado fundamental e não é composto por partículas menores. Na química, o elétron é um dos principais responsáveis pela formação de ligações químicas, ao ser compartilhado entre átomos para formar pares de elétrons e preencher as camadas de valência dos átomos envolvidos. A interação eletromagnética que ocorre entre esses elétrons é o que sustenta a ligação química entre os átomos, e é crucial para a estabilidade das moléculas formadas.

## Ligação Química

- A ligação química é uma interação fundamental que ocorre entre átomos e moléculas, sendo crucial para a formação de compostos químicos estáveis. Ela pode ser explicada em termos da mecânica quântica, uma vez que a formação de ligações químicas está relacionada ao compartilhamento ou transferência de elétrons entre átomos, que são descritos em termos de função de onda quântica.
- Na mecânica quântica, um átomo é descrito por sua função de onda eletrônica, que representa a probabilidade de encontrar um elétron em uma determinada posição ao redor do núcleo. Quando dois ou mais átomos se aproximam, suas funções de onda se sobrepõem, o que leva à formação de novas funções de onda, que descrevem a interação entre os elétrons dos átomos.
- A ligação química pode ser classificada em diferentes tipos, como a ligação iônica, covalente e metálica, dependendo da natureza da interação entre os átomos. Na ligação covalente, por exemplo, dois átomos compartilham um ou mais pares de elétrons, formando uma molécula estável. Já na ligação iônica, um átomo doa um ou mais elétrons para outro átomo, gerando íons que são mantidos juntos por meio da atração eletrostática.
- A mecânica quântica também permite calcular a energia envolvida na formação de ligações químicas e prever as propriedades das moléculas formadas. Esses cálculos são baseados em equações que descrevem a interação eletrostática entre os elétrons dos átomos, bem como a repulsão entre os núcleos atômicos.

## Ligação Química

A série de Pauling é uma representação das camadas eletrônicas dos átomos, em que cada camada é representada pelo número de elétrons em cada uma delas. A distribuição eletrônica de Pauling para um átomo pode ser representada da seguinte maneira:



Observe que cada número representa o número de elétrons em cada camada, começando pela camada mais interna (1s). A série continua até a camada mais externa (7p), que contém o número de elétrons correspondente ao átomo em questão.

## Ligação Química

A série de Pauling pode ser usada para prever a ligação química de dois átomos por meio da regra do octeto. A regra do octeto afirma que os átomos tendem a reagir para adquirir uma configuração eletrônica estável, na qual possuem oito elétrons em sua camada mais externa (ou dois elétrons, no caso dos átomos do grupo 1A).

Para prever a ligação química entre dois átomos, primeiro é necessário determinar a distribuição eletrônica de cada átomo utilizando a série de Pauling. Em seguida, deve-se verificar a diferença de eletronegatividade entre os átomos. A eletronegatividade é a capacidade de um átomo atrair elétrons para si em uma ligação química.

Se a diferença de eletronegatividade entre os átomos é baixa, então eles tendem a compartilhar elétrons de forma igual na ligação covalente, formando uma molécula estável. Se a diferença de eletronegatividade é alta, então um átomo tende a atrair elétrons para si de forma mais forte, formando uma ligação iônica, em que um átomo doa elétrons para outro átomo.

Por exemplo, a ligação entre dois átomos de hidrogênio (H-H) é uma ligação covalente porque a diferença de eletronegatividade é baixa e eles compartilham elétrons de forma igual. Já a ligação entre sódio (Na) e cloro (Cl) (NaCl) é uma ligação iônica porque a diferença de eletronegatividade é alta e o sódio doa um elétron para o cloro, formando um íon  $\text{Na}^+$  e um íon  $\text{Cl}^-$ .

## Importante!

A regra do octeto é uma regra empírica que se aplica a muitas moléculas e compostos, mas existem algumas exceções em que ela não se aplica. Aqui estão algumas situações em que a regra do octeto pode falhar:

1. Compostos com menos de oito elétrons: Alguns átomos, como o berílio (Be) e o boro (B), geralmente não conseguem formar uma camada completa com oito elétrons. Por isso, eles podem formar compostos com menos de oito elétrons em sua camada mais externa, como é o caso do trifluoreto de boro ( $\text{BF}_3$ ).
2. Compostos com mais de oito elétrons: Alguns elementos da terceira fila em diante, como o enxofre (S) e o fósforo (P), podem acomodar mais de oito elétrons em sua camada de valência, formando compostos com mais de oito elétrons, como o sulfato de tetrametilamônio ( $((\text{CH}_3)_4\text{N})_2\text{SO}_4$ ).
3. Radicais livres: Algumas moléculas, como o nitrogênio molecular ( $\text{N}_2$ ) e o oxigênio molecular ( $\text{O}_2$ ), podem existir como radicais livres, que são moléculas que possuem elétrons desemparelhados em sua camada mais externa.
4. Compostos com carga: Moléculas e íons com carga, como os íons hidreto ( $\text{H}^-$ ) e hidroxila ( $\text{OH}^-$ ), podem ter menos ou mais de oito elétrons em sua camada mais externa.
5. Compostos incomuns: Existem muitos compostos que não seguem a regra do octeto por razões variadas, como o íon cloreto de hipoclorito ( $\text{ClO}_2^-$ ), que possui sete elétrons na camada de valência do cloro.

Portanto, embora a regra do octeto seja útil na previsão de ligações químicas, existem exceções que devem ser levadas em consideração.

## Ligação Química

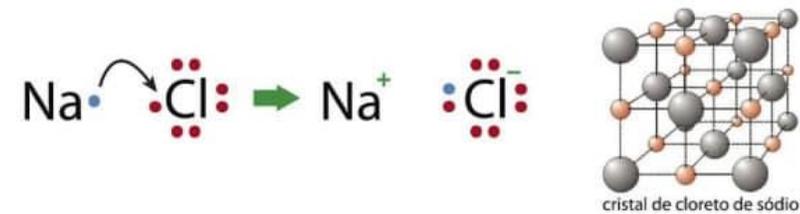
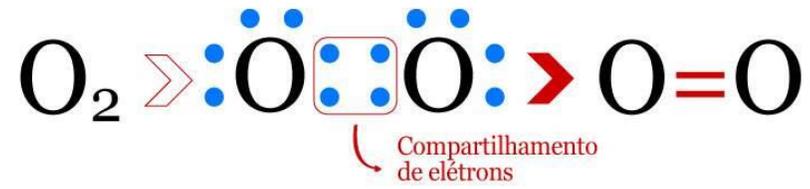
Ligações químicas: iônica, covalente e metálica.

**Ligação iônica:** ocorre quando um átomo perde ou ganha elétrons para formar íons com cargas opostas, que se atraem e se unem. Por exemplo, o cloreto de sódio (NaCl) é formado pela ligação iônica entre o íon sódio (Na<sup>+</sup>) e o íon cloreto (Cl<sup>-</sup>).

**Ligação covalente:** ocorre quando dois átomos compartilham elétrons para completar suas camadas de valência. Pode ser simples, dupla ou tripla, dependendo do número de pares de elétrons compartilhados. Por exemplo, a molécula de água (H<sub>2</sub>O) é formada por ligações covalentes entre o átomo de oxigênio (O) e os dois átomos de hidrogênio (H).

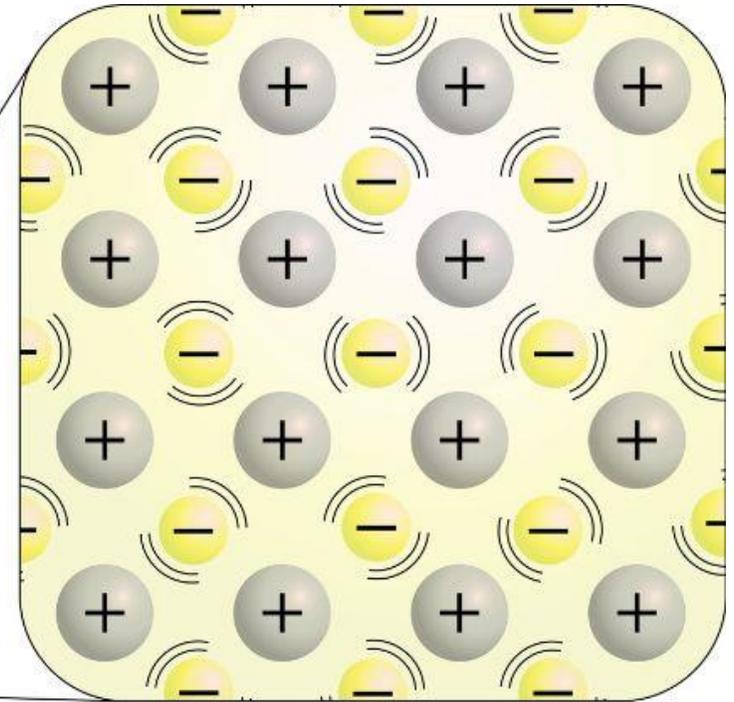
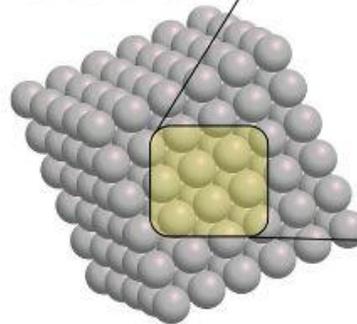
**Ligação metálica:** ocorre entre átomos de metais, que compartilham elétrons em uma nuvem eletrônica comum. Essa ligação forma uma rede tridimensional de átomos metálicos, que é responsável pelas propriedades características dos metais, como a condutividade elétrica e térmica. Por exemplo, o cobre (Cu) é um metal que forma ligações metálicas em sua estrutura cristalina.

# Ligação Química



## LIGAÇÃO METÁLICA

Estrutura metálica



Cátions metálicos no mar de elétrons

## Ligação Química

- O **grau de covalência** se refere à medida em que os átomos em uma molécula **compartilham elétrons** de maneira igual ou desigual. Isso está relacionado à **eletronegatividade** dos átomos envolvidos na ligação covalente.
- A eletronegatividade é a medida da habilidade de um átomo em atrair elétrons para si mesmo. Quando dois átomos com eletronegatividades diferentes formam uma ligação covalente, o átomo mais eletronegativo atrai os elétrons compartilhados com maior força, criando uma distribuição desigual de carga na molécula. Nesse caso, dizemos que a ligação **covalente é polar**, ou seja, tem uma carga parcial negativa em um átomo e uma carga parcial positiva no outro.
- Por outro lado, quando dois átomos com eletronegatividades semelhantes formam uma ligação covalente, os elétrons são compartilhados igualmente e não há uma carga líquida na molécula. Nesse caso, a ligação covalente é **não polar**.
- O grau de covalência pode ser expresso em termos de uma escala de polaridade, como a **escala de Pauling**.
- Quanto maior a diferença de eletronegatividade entre dois átomos, maior a polaridade da ligação covalente entre eles.
- Em resumo, o grau de covalência refere-se à **distribuição de carga** em uma molécula resultante da formação de ligações covalentes entre átomos com diferentes eletronegatividades. Uma ligação covalente pode ser polar ou não polar, dependendo da diferença de eletronegatividade entre os átomos envolvidos.

**TABLE 1: Pauling Electronegativities<sup>6</sup>**

atom	$\chi_P$	atom	$\chi_P$	atom	$\chi_P$
H	2.20	Be	1.57	Ge	2.01
Li	0.98	Mg	1.31	Sn	1.96
Na	0.93	Ca	1.00	N	3.04
K	0.82	Sr	0.95	P	2.19
Rb	0.82	B	2.04	As	2.18
F	3.98	Al	1.61	Sb	2.05
Cl	3.16	Ga	1.81	O	3.44
Br	2.96	In	1.78	S	2.58
I	2.66	C	2.55	Se	2.55
		Si	1.90	Te	2.10

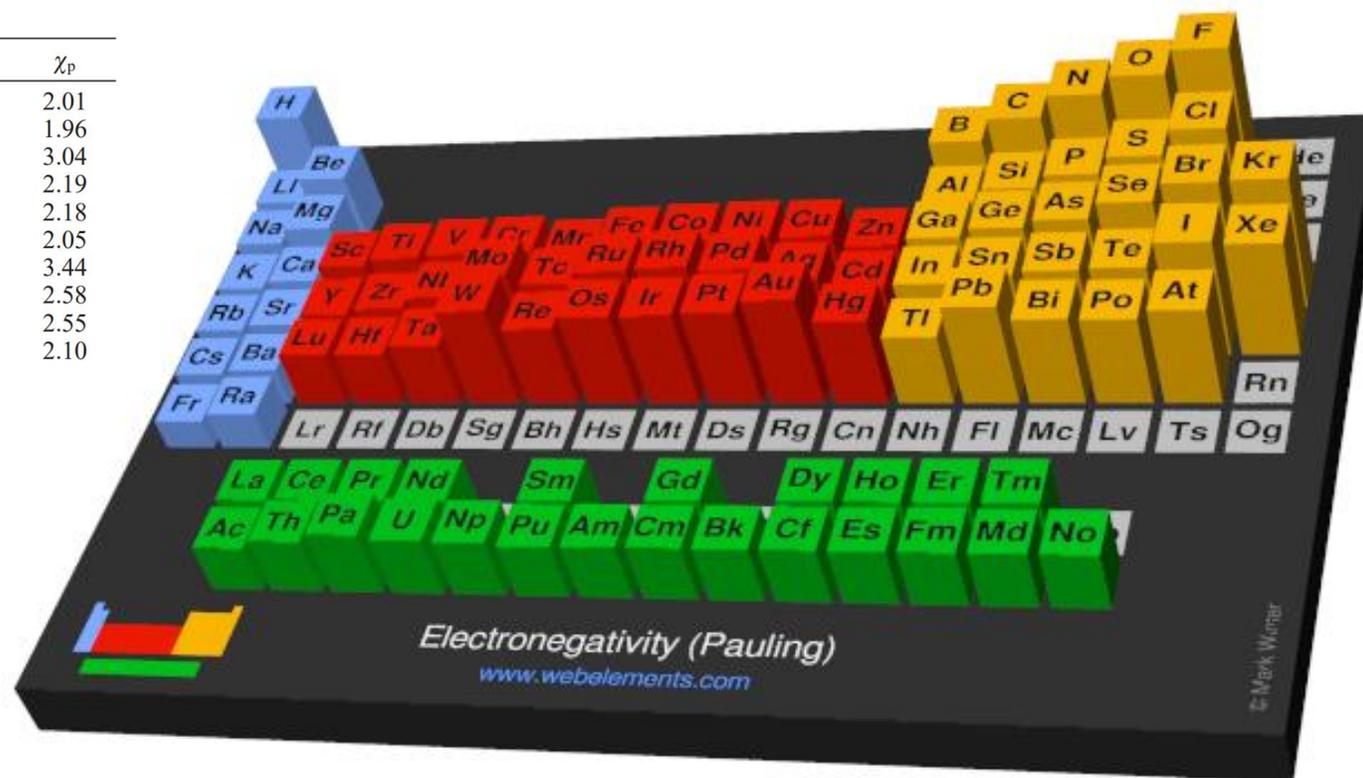
Essa escala atribui um valor de 0,0 a 4,0 para cada elemento químico, representando sua eletronegatividade.

# Ligação Química

Murphy et al.

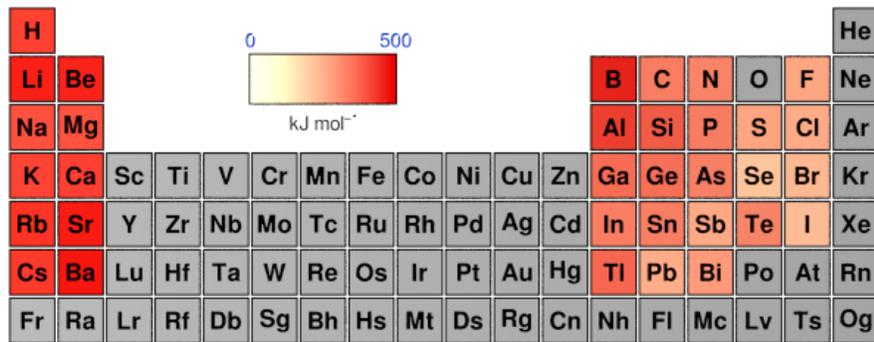
TABLE 1: Pauling Electronegativities<sup>6</sup>

atom	$\chi_p$	atom	$\chi_p$	atom	$\chi_p$
H	2.20	Be	1.57	Ge	2.01
Li	0.98	Mg	1.31	Sn	1.96
Na	0.93	Ca	1.00	N	3.04
K	0.82	Sr	0.95	P	2.19
Rb	0.82	B	2.04	As	2.18
F	3.98	Al	1.61	Sb	2.05
Cl	3.16	Ga	1.81	O	3.44
Br	2.96	In	1.78	S	2.58
I	2.66	C	2.55	Se	2.55
		Si	1.90	Te	2.10



# Ligação Química

Imagem mostrando a periodicidade dos elementos químicos para a entalpia da ligação simples no cloreto



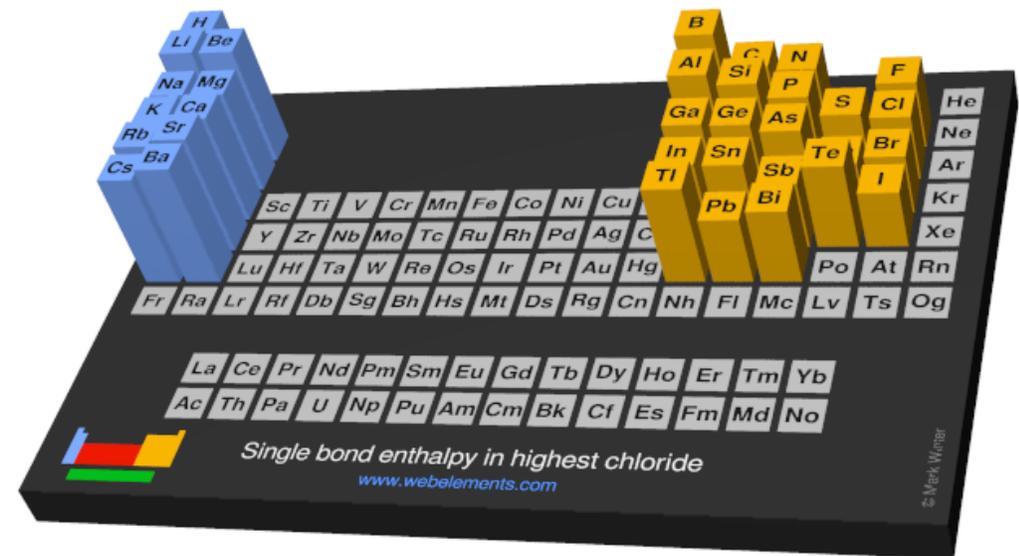
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



Single bond enthalpy in highest chloride

[www.webelements.com](http://www.webelements.com)

© Mark Winter

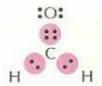
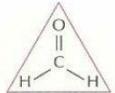
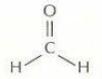
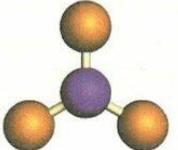
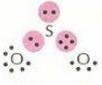
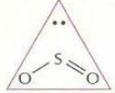
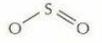
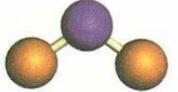
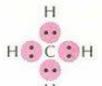
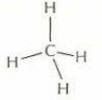
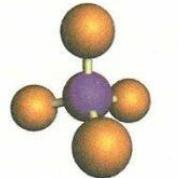
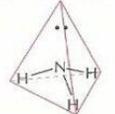
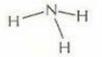
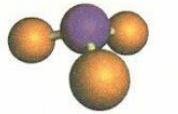
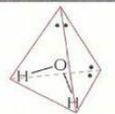
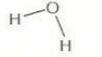
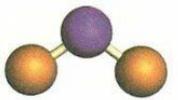


## Ligação Química: Lewis e VSEPR

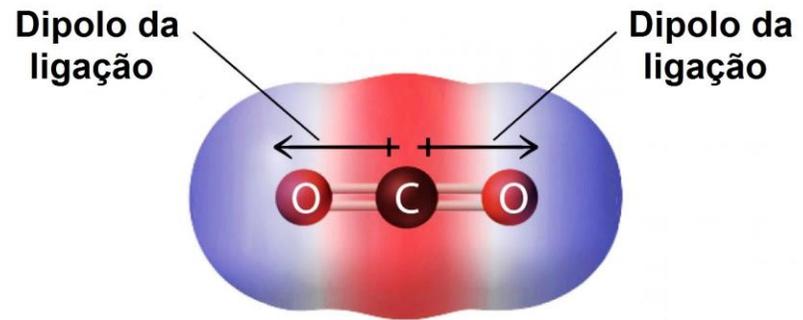
A teoria de Lewis é uma teoria química proposta pelo químico americano Gilbert N. Lewis, que descreve a ligação química em termos da transferência ou compartilhamento de elétrons entre átomos. De acordo com esta teoria, um átomo pode doar ou receber elétrons para adquirir uma configuração eletrônica estável de octeto.

A teoria VSEPR (sigla em inglês para *Valence Shell Electron Pair Repulsion*) é uma teoria que descreve a forma geométrica das moléculas, baseada na repulsão entre pares de elétrons da camada de valência do átomo central. Também, é comum chamarmos de teoria da ligação de valência (TLV).

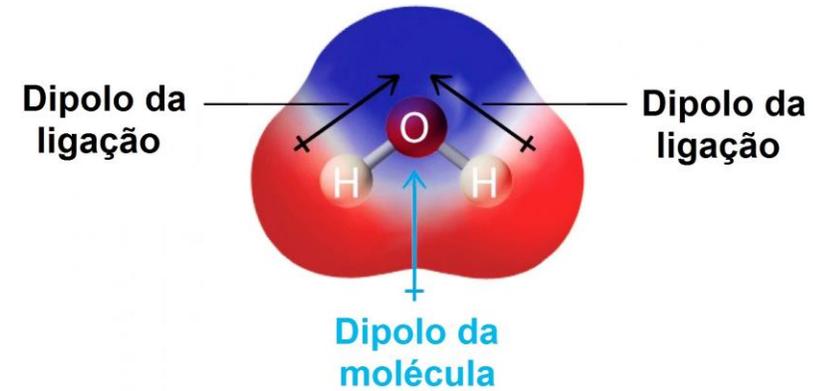
De acordo com a teoria VSEPR, os pares de elétrons na camada de valência do átomo central repulsam-se mutuamente, e essa repulsão determina a forma da molécula. Assim, a disposição dos pares de elétrons em torno do átomo central afeta a forma da molécula e suas propriedades químicas, como polaridade e reatividade. A teoria VSEPR foi amplamente usada na química para prever a geometria molecular e explicar as propriedades físicas e químicas das moléculas.

1º passo Fórmula eletrônica	2º passo Distribuição dos "pares" de elétrons	3º passo Determinação da geometria molecular	Modelo molecular
	Toda molécula biatômica é linear	H—Cl Linear	
 2 "pares"	$O=C=O$ Segmento de reta	$O=C=O$ Linear	
 3 "pares"	 Triângulo equilátero	 Trigonal plana	
 3 "pares"	 Triângulo equilátero	 Angular	
 4 "pares"	 Tetraedro	 Tetraédrica	
 4 "pares"	 Tetraedro	 Piramidal	
 4 "pares"	 Tetraedro	 Angular	

## Ligação Química: Polaridade



Dipolo resultante **nulo**



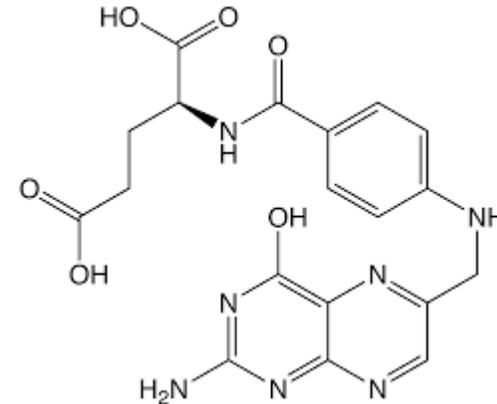
Dipolo resultante **não nulo**

## Ligação Química: Polaridade

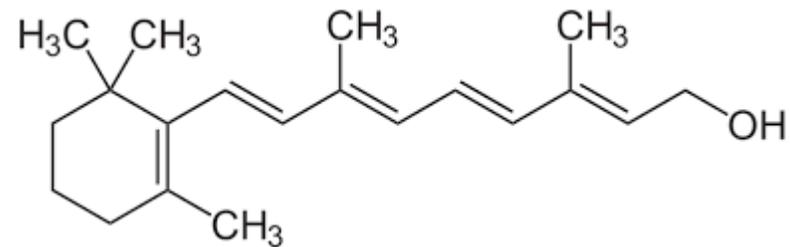
A vitamina B9, também conhecida como ácido fólico, é uma vitamina do complexo B importante para várias funções do organismo, incluindo a produção de novas células, a formação do tubo neural do feto durante a gravidez e a prevenção de anemia. A vitamina B9 é solúvel em água, o que significa que o excesso de vitamina B9 é excretado na urina.

Por outro lado, a vitamina A é uma vitamina lipossolúvel importante para a visão, crescimento e desenvolvimento, reprodução e função imunológica. Ela é encontrada em alimentos de origem animal, como fígado, leite e ovos, bem como em alimentos de origem vegetal, como cenoura, batata-doce e espinafre. A vitamina A é solúvel em gordura, o que significa que ela é armazenada no corpo.

vitamina B9



vitamina A



## Ligação Química: mecânica quântica

A **mecânica quântica** é a teoria fundamental que descreve o comportamento dos elétrons em uma ligação química. Ela utiliza a **equação de Schrödinger** para descrever a distribuição de probabilidade dos elétrons em torno dos átomos envolvidos na ligação, e como essas distribuições mudam quando os átomos se aproximam e se unem.

A ligação química é formada pela sobreposição dos orbitais atômicos dos átomos envolvidos. Essa sobreposição pode ser de dois tipos: **ligação sigma ( $\sigma$ )** ou **ligação pi ( $\pi$ )**.

Uma ligação sigma ocorre quando os **orbitais atômicos dos átomos se sobrepõem** diretamente, formando uma região de densidade eletrônica ao longo do eixo de ligação entre os átomos. Essa região é denominada de **orbital molecular sigma ( $\sigma$ )**. A ligação sigma é mais forte e mais estável do que a ligação pi.

Uma ligação pi ocorre quando os orbitais atômicos dos átomos se sobrepõem lateralmente, formando duas regiões de densidade eletrônica em lados opostos do eixo de ligação entre os átomos. Essas regiões são denominadas de **orbitais moleculares pi ( $\pi$ )**. A ligação pi é mais fraca e menos estável do que a ligação sigma.

A força e a estabilidade de uma ligação química podem ser calculadas usando a **teoria do orbital molecular (TOM)**. Nessa teoria, os orbitais atômicos dos átomos se combinam para formar os orbitais moleculares da molécula. A energia dos orbitais moleculares é calculada a partir da equação de Schrödinger e a densidade eletrônica dos orbitais moleculares é calculada como a soma das densidades eletrônicas dos orbitais atômicos dos átomos que os formam.

A interpretação da ligação química usando a mecânica quântica nos permite entender a **natureza da ligação, a polaridade e a geometria molecular, além de prever as propriedades químicas e físicas da molécula**.

# Importante!

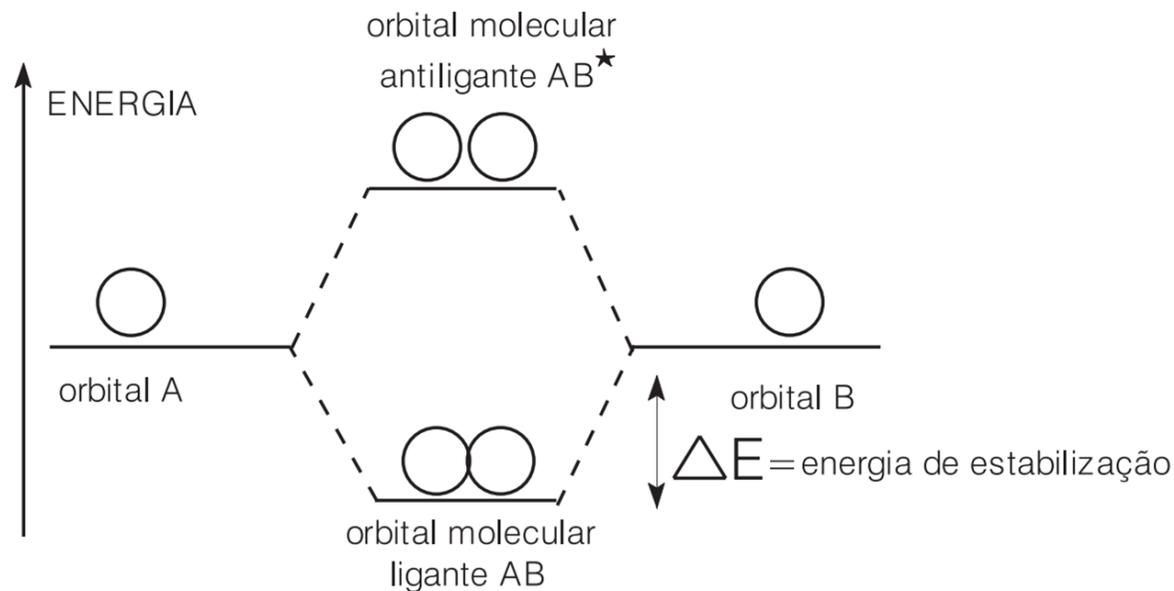
A teoria da eletronegatividade de Pauling é baseada em sua escala de eletronegatividade, que é usada para medir a atração que um átomo exerce sobre os elétrons em uma ligação química. No entanto, estudos posteriores mostraram que a escala de Pauling apresenta algumas limitações e falhas. Uma das principais limitações é que a escala de Pauling não é completamente consistente com outras propriedades químicas dos elementos, como as energias de ionização e afinidades eletrônicas. Além disso, a escala não é totalmente aditiva, o que significa que a eletronegatividade de um átomo em uma molécula não é simplesmente a soma das eletronegatividades dos átomos individuais. Isso pode levar a algumas inconsistências e imprecisões na previsão de propriedades moleculares. Outra limitação da teoria de Pauling é que ela é baseada em experimentos de moléculas diatômicas, o que significa que a escala de eletronegatividade pode não ser aplicável a moléculas mais complexas e maiores. Além disso, a escala de Pauling pode não ser capaz de prever com precisão a polaridade de ligações químicas em moléculas complexas. Em resumo, embora a teoria da eletronegatividade de Pauling tenha sido um avanço significativo na compreensão da química de ligações químicas, sua escala de eletronegatividade apresenta algumas limitações e falhas que devem ser consideradas ao avaliar a polaridade de ligações químicas em moléculas complexas. Alguns resultados mostraram que a escala de Pauling viola mais da metade das regras elementares apropriadas para escalas eletronegativas. Além disso, foi constatado que a melhor forma da equação de energia de ligação e polaridade de ligação só pode ser aplicada a uma faixa muito limitada de moléculas e que a forma utilizada por Pauling só é válida para um pequeno número de ligações com polaridades baixas. Um estudo de 2000 concluiu que a escala de eletronegatividade de Pauling apresenta algumas limitações e que existem outras equações que são mais precisas para medir a polaridade de ligações químicas em diferentes moléculas.

**Ver o artigo:** J. Phys. Chem. A 2000, 104, 5867-5871.

## Ligação Química: TOM

A teoria da ligação de valência (TLV) e a teoria das orbitais moleculares (TOM) são ambas teorias importantes na química moderna, e cada uma delas fornece uma visão valiosa sobre a natureza das ligações químicas. A TLV enfatiza a importância dos elétrons de valência dos átomos, que são aqueles localizados na camada externa, na formação de ligações químicas covalentes. Já a TOM descreve a formação de ligações químicas em termos da combinação das orbitais atômicas dos átomos envolvidos para formar orbitais moleculares que são compartilhadas entre esses átomos.

Embora a TLV tenha sido amplamente utilizada no passado e ainda seja usada hoje em dia para explicar muitos aspectos da química orgânica, a TOM é geralmente considerada a teoria mais abrangente e sofisticada das duas, e é amplamente utilizada para explicar fenômenos mais complexos, como a natureza da ligação em moléculas metálicas, bem como a natureza da química de compostos inorgânicos e moléculas com ligações fortes e múltiplas. No entanto, ambas as teorias têm suas aplicações e limitações, e é comum que os químicos usem uma combinação de ambas para entender a natureza das ligações químicas em moléculas e materiais.



## Ligação Química: TOM

A natureza da ligação química em condutores, semicondutores e isolantes está relacionada com as propriedades eletrônicas desses materiais.

Os condutores são materiais que possuem elétrons livres na camada de valência, permitindo a condução da corrente elétrica com facilidade. A ligação química predominante nos condutores é a ligação metálica, na qual os átomos do metal compartilham seus elétrons de valência de forma deslocalizada, criando uma "nuvem" eletrônica que pode mover-se livremente pelo material. Exemplos de condutores incluem metais como ouro, prata, cobre, alumínio, entre outros.

Os semicondutores são materiais que apresentam condutividade intermediária entre condutores e isolantes. A ligação química predominante nos semicondutores é a ligação covalente, na qual os átomos compartilham elétrons de valência de forma localizada. Entretanto, alguns elétrons são capazes de se deslocar por toda a rede cristalina, possibilitando a condução elétrica. Os semicondutores são amplamente utilizados em dispositivos eletrônicos como diodos, transistores e circuitos integrados. Exemplos de semicondutores incluem o silício, o germânio, o arseneto de gálio, entre outros.

Os isolantes são materiais que possuem uma grande lacuna de energia entre a camada de valência e a camada de condução, o que os torna praticamente não condutores de eletricidade. A ligação química predominante nos isolantes é a ligação covalente, na qual os átomos compartilham elétrons de valência de forma localizada. Exemplos de isolantes incluem o vidro, a cerâmica, a borracha, entre outros.

Assim, a natureza da ligação química em condutores, semicondutores e isolantes está relacionada com a presença e a mobilidade dos elétrons de valência na estrutura dos materiais. Os diferentes comportamentos elétricos desses materiais têm aplicações importantes em eletrônica e tecnologia.

## Ligação Química: TOM

A teoria de orbitais moleculares (TOM) é uma teoria que descreve a formação de orbitais moleculares (OM) a partir de orbitais atômicos (OA) dos átomos que compõem as moléculas. Essa teoria é amplamente utilizada para explicar as propriedades eletrônicas de moléculas e compostos, e também pode ser aplicada em condutores e semicondutores.

Em condutores, a TOM pode ser usada para descrever as bandas de condução e de valência do material. Os elétrons livres em condutores metálicos, por exemplo, são descritos por uma nuvem de orbitais moleculares que se estendem por toda a rede cristalina, permitindo a condução da eletricidade com facilidade.

Já em semicondutores, a TOM é usada para explicar as propriedades dos portadores de carga (elétrons e lacunas). Os semicondutores puros possuem uma lacuna de energia entre a banda de valência e a banda de condução, na qual os elétrons se movem facilmente para produzir corrente elétrica. Quando um semicondutor é dopado com impurezas, como átomos de fósforo ou boro, o número de elétrons ou lacunas é aumentado, o que influencia a condutividade do material. A TOM pode ser usada para entender como as impurezas afetam a estrutura dos orbitais moleculares e, conseqüentemente, as propriedades eletrônicas do material.

# Ligação Química: TOM

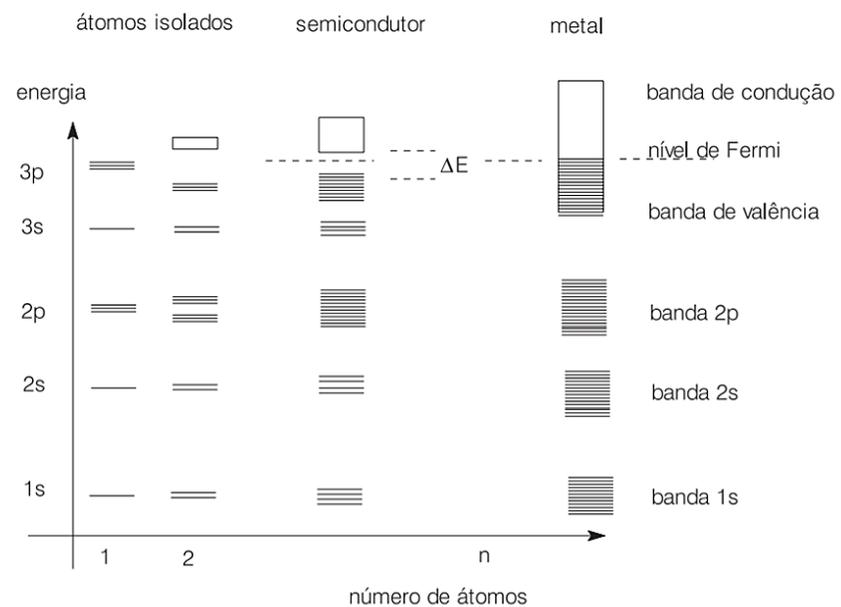
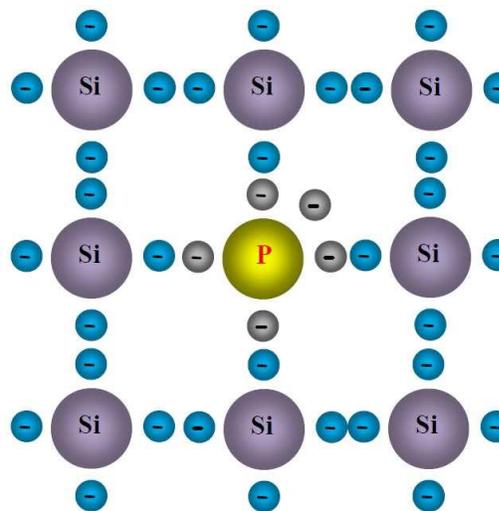


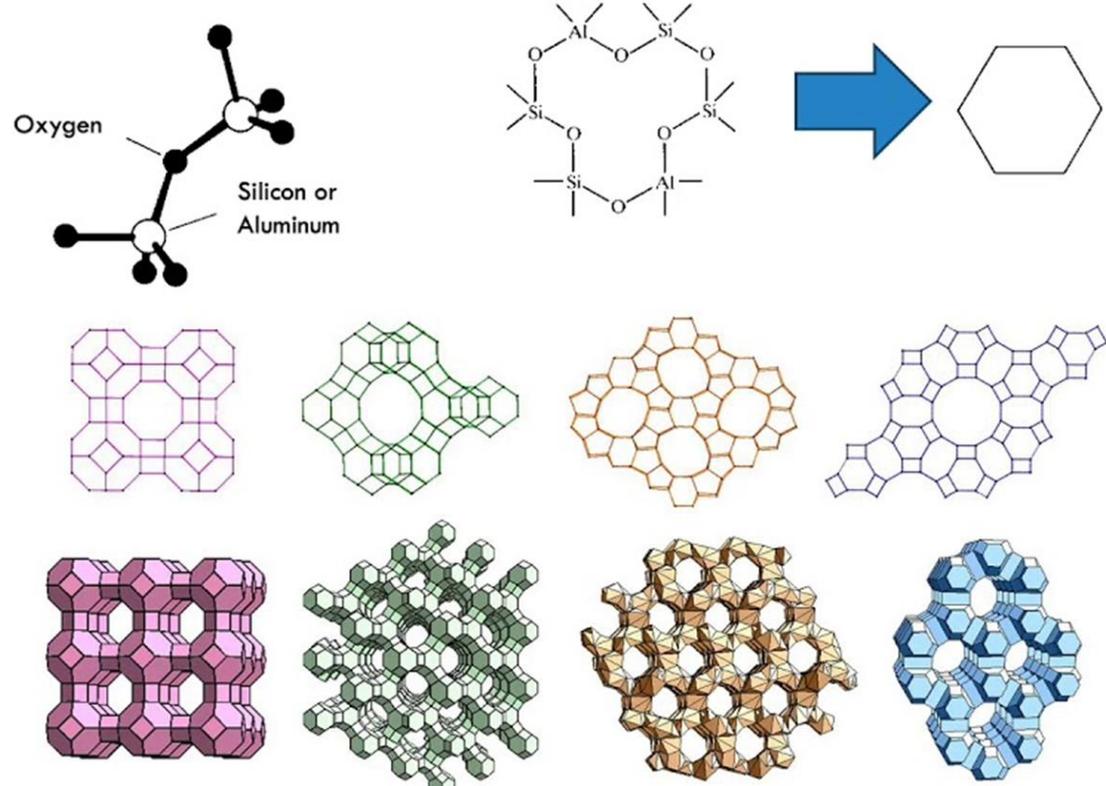
Figura 2: Extensão dos orbitais moleculares mostrando a multiplicação dos níveis com o aumento do número de átomos, até formar bandas de orbitais moleculares.



## Ligação Química: TOM

**Zeólita** é um mineral aluminossilicato microporoso que possui uma estrutura cristalina tridimensional. É caracterizada por sua alta capacidade de troca iônica e propriedades de adsorção, tornando-se útil em diversas aplicações industriais, incluindo tratamento de água, catalisadores químicos, purificação de gases, entre outros. As zeólitas também são amplamente utilizadas na indústria de petróleo e gás, onde são usadas como peneiras moleculares para separar moléculas de hidrocarbonetos com base no tamanho e na forma

## ZEÓLITAS



# Ligação Química: TOM

## Exercícios

**1. A zeólita é um material poroso composto por alumínio, silício e oxigênio. Qual tipo de ligação química é predominante na zeólita?**

Resposta: A zeólita é composta principalmente por ligações covalentes entre o alumínio e o silício, que formam uma rede tridimensional de tetraedros.

**2. Como a estrutura porosa da zeólita é formada?**

Resposta: A estrutura porosa da zeólita é formada pela disposição regular dos tetraedros de alumínio e silício, que criam canais e cavidades no material.

**3. Como as moléculas são capturadas pela zeólita?**

Resposta: As moléculas são capturadas pela zeólita através da interação de suas cargas elétricas com as cargas elétricas da superfície interna do material. Além disso, o tamanho e a forma das moléculas também afetam sua capacidade de serem capturadas pela zeólita.

**4. Qual é a aplicação mais comum das zeólitas na indústria química?**

Resposta: A aplicação mais comum das zeólitas na indústria química é no desenvolvimento de catalisador em reações químicas. As zeólitas também são usadas como adsorventes, trocadores iônicos e peneiras moleculares.

## Ligação Química

<https://www.youtube.com/watch?v=ThoD-SAczw8>

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

<https://www.youtube.com/watch?v=Ku2CzwxTqhc>

## Exercícios

1. Calcule o número de elétrons compartilhados na molécula de amônia ( $\text{NH}_3$ ).
2. Desenhe a estrutura de Lewis para o ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) e identifique todas as ligações iônicas e covalentes na molécula.
3. Identifique a ligação química presente na molécula de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ).
4. Escreva a fórmula química para a molécula de eteno ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) e identifique as ligações duplas na molécula.
5. Identifique a ligação covalente polar na molécula de cloreto de hidrogênio ( $\text{HCl}$ ).
6. Escreva a fórmula química para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ) e identifique as ligações simples na molécula.
7. Calcule a diferença de eletronegatividade entre os átomos de nitrogênio e oxigênio na molécula de óxido nítrico ( $\text{NO}$ ).
8. Identifique a ligação iônica na molécula de cloreto de sódio ( $\text{NaCl}$ ).
9. Descreva a ligação covalente presente na molécula de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ).
10. Identifique a ligação covalente não polar na molécula de oxigênio ( $\text{O}_2$ ).

## Exercícios

1. Escreva a configuração eletrônica e desenhe o diagrama de orbitais moleculares para a molécula de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ).
2. Explique como a teoria de orbitais moleculares pode ser usada para explicar a condutividade elétrica em materiais condutores.
3. Escreva a configuração eletrônica e desenhe o diagrama de orbitais moleculares para a molécula de oxigênio ( $\text{O}_2$ ).
4. Descreva como a teoria de orbitais moleculares pode ser aplicada para explicar a condutividade elétrica em materiais semicondutores.
5. Escreva a configuração eletrônica e desenhe o diagrama de orbitais moleculares para a molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ).
6. Explique como a teoria de orbitais moleculares pode ser usada para explicar a condutividade elétrica em materiais isolantes.
7. Descreva como as zeólitas são usadas como catalisadores em processos químicos.
8. Explique como a estrutura cristalina das zeólitas permite que elas sejam usadas para separação molecular.
9. Descreva a estrutura básica de uma zeólita e explique como ela é formada.
10. Explique como a teoria de orbitais moleculares pode ser aplicada para explicar as propriedades de adsorção das zeólitas.

## Reação Química

- As reações químicas são processos fundamentais que ocorrem em todo o universo, desde a síntese de moléculas orgânicas no corpo humano até as reações nucleares que alimentam as estrelas. A quebra de ligações químicas é uma etapa essencial nesses processos, permitindo a formação de novas ligações e moléculas.
- As ligações químicas são formadas pelos elétrons que orbitam o núcleo dos átomos. Esses elétrons são compartilhados ou transferidos entre os átomos, permitindo que eles se unam em moléculas ou íons. A quebra de uma ligação química ocorre quando essa ligação é rompida, resultando na separação dos átomos que a compõem.
- O processo de quebra de ligações químicas geralmente requer energia, que pode ser fornecida por uma variedade de fontes, como calor, luz ou eletricidade. Quando a energia necessária é fornecida para uma molécula, as ligações químicas podem ser rompidas e novas ligações podem ser formadas, permitindo que ocorram reações químicas.

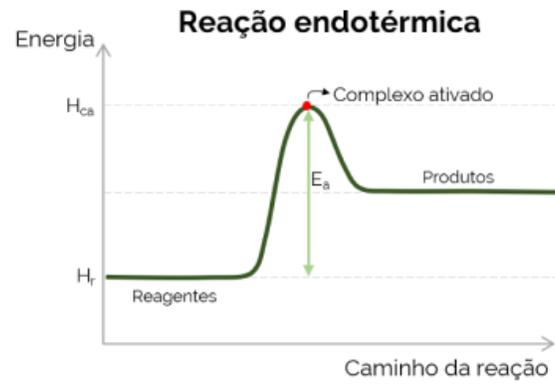
## Reação Química

- A reação química é um processo em que as ligações químicas dos reagentes são quebradas e novas ligações são formadas para gerar os produtos. Para que essa transformação ocorra, é necessário que haja uma energia mínima, chamada de **energia de ativação**, que deve ser fornecida aos reagentes para que as ligações possam ser quebradas.
- A energia de ativação é uma barreira energética que precisa ser vencida para que a reação possa ocorrer. Ela pode ser fornecida por diferentes fontes, como o calor, a luz ou a eletricidade, dependendo da natureza dos reagentes e das condições de reação.
- Uma vez que a energia de ativação é fornecida, as ligações químicas dos reagentes são quebradas e os átomos se rearranjam para formar os produtos. Essa transformação pode ser exotérmica, liberando energia para o meio ambiente, ou endotérmica, absorvendo energia do meio ambiente.
- A energia de ativação é um parâmetro importante para a cinética das reações químicas, uma vez que determina a velocidade com que a reação ocorre. Quanto maior a energia de ativação, mais lenta será a reação, e vice-versa. Por isso, os cientistas buscam entender e controlar a energia de ativação das reações químicas para otimizar os processos químicos em diferentes áreas, como a indústria química e farmacêutica.

## Reação Química

- Uma reação química pode ser **espontânea** se houver uma diminuição da **energia livre do sistema**. A energia livre é uma medida de quanto trabalho pode ser realizado pelo sistema, e sua diminuição indica uma tendência natural para que a reação ocorra.
- Existem duas principais condições que podem favorecer a espontaneidade de uma reação química: a **entropia** e a **energia de Gibbs**.
- A entropia é uma medida da “desordem ou aleatoriedade do sistema”. Se a reação química resultar em um aumento na entropia do sistema, ela tende a ser espontânea, pois a natureza tende a buscar o aumento da desordem. Por exemplo, uma reação que envolve a mistura de gases pode ser espontânea porque aumenta a desordem molecular.
- A energia de Gibbs é uma medida da energia disponível para realizar trabalho. Se a energia livre diminuir durante a reação, ela tende a ser espontânea. Por exemplo, se uma reação produzir um composto mais estável energeticamente, como a formação de um sal a partir de um ácido e uma base, a reação será espontânea.
- No entanto, é importante destacar que a espontaneidade de uma reação química não implica necessariamente em uma **velocidade** alta de reação. A velocidade de reação pode ser influenciada por outros fatores, como a energia de ativação, a concentração dos reagentes, a temperatura, entre outros.

# Reação Química



## Reação Química

- O **cálculo estequiométrico** é uma ferramenta importante para a compreensão e previsão das reações químicas. Ele se baseia na Lei de Lavoisier, que afirma que a massa total dos reagentes é igual à massa total dos produtos em uma reação química. Isso significa que a quantidade de cada reagente e produto pode ser calculada com base em sua relação estequiométrica, ou seja, na proporção molar em que eles reagem.
- O cálculo estequiométrico pode ser utilizado para determinar a quantidade de reagentes necessários para produzir uma determinada quantidade de produto, ou para determinar a quantidade de produto que pode ser produzida a partir de uma quantidade conhecida de reagente. Isso é fundamental para a otimização de processos químicos e a produção de compostos químicos em larga escala.
- Assim, as reações químicas envolvem a quebra de ligações químicas e a formação de novas ligações, e o cálculo estequiométrico é uma ferramenta fundamental para a compreensão e previsão desses processos. O entendimento das reações químicas e da estequiometria é essencial para a produção de novos materiais, medicamentos e tecnologias, bem como para o estudo da química e suas aplicações em diversas áreas do conhecimento.

## Reação Química

- Para ocorrer uma reação química, é necessário que haja um rearranjo dos átomos e elétrons das substâncias envolvidas. Em outras palavras, as ligações químicas das moléculas precisam ser quebradas e novas ligações precisam ser formadas para que ocorra a transformação de uma ou mais substâncias em outra(s) substância(s).
- Existem diversos fatores que podem influenciar a ocorrência de uma reação química, tais como a presença de energia (como calor, luz ou eletricidade), a concentração das substâncias envolvidas, a presença de catalisadores, a temperatura e a pressão.

A seguir, alguns exemplos de reações químicas:

**Combustão:** a queima de um combustível (como o etanol, por exemplo) é uma reação de combustão que libera calor e produz dióxido de carbono e água como produtos.

**Reações ácido-base:** quando um ácido é misturado com uma base, ocorre uma reação que produz sal e água. Por exemplo, a mistura de ácido clorídrico e hidróxido de sódio produz cloreto de sódio e água.

**Oxidação:** quando uma substância perde elétrons em uma reação, ocorre uma oxidação. Um exemplo comum é a oxidação do ferro, que produz ferrugem.

**Redução:** ao contrário da oxidação, a redução ocorre quando uma substância ganha elétrons em uma reação. Um exemplo é a redução do íon de prata ( $\text{Ag}^+$ ) a prata metálica ( $\text{Ag}$ ) em uma solução contendo um agente redutor.

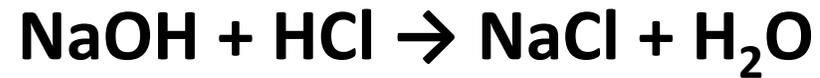
Esses são apenas alguns exemplos de reações químicas que ocorrem na natureza e em processos industriais. A compreensão dessas reações é fundamental para o desenvolvimento de novos materiais, medicamentos e tecnologias, bem como para o estudo da química e suas aplicações em diversas áreas do conhecimento.

## Cálculo Estequiométrico

- O cálculo estequiométrico é um conjunto de técnicas matemáticas utilizadas na química para determinar as quantidades de reagentes e produtos envolvidos em uma reação química, com base em sua proporção estequiométrica. Isso significa que, a partir da equação química que descreve a reação, é possível calcular a quantidade de uma substância necessária para produzir uma determinada quantidade de outra substância, ou ainda a quantidade de uma substância produzida a partir de uma quantidade conhecida de outra substância.
- O cálculo estequiométrico é importante em diversas áreas da química, como na produção de medicamentos, materiais e alimentos, pois permite otimizar os processos de síntese, reduzir custos e minimizar os resíduos gerados. Além disso, é uma ferramenta fundamental para o estudo e compreensão das reações químicas e suas aplicações práticas.
- Para realizar o cálculo estequiométrico, é necessário conhecer a proporção estequiométrica da reação, que indica a relação entre as quantidades de reagentes e produtos envolvidos na reação, expressa em moles. A partir dessa relação, pode-se utilizar a lei de Lavoisier e a lei das proporções definidas para determinar a quantidade de uma substância em relação à outra, ou ainda calcular a quantidade de reagentes necessária para produzir uma determinada quantidade de produto.
- O cálculo estequiométrico é uma importante ferramenta para a química, que permite prever e controlar as quantidades de reagentes e produtos envolvidos em uma reação química, contribuindo para a produção de materiais mais eficientes, seguros e sustentáveis.

## Cálculo Estequiométrico: Reações de Neutralização

As reações de neutralização são reações químicas **entre um ácido e uma base** que produzem um sal e água. Para calcular as quantidades dos reagentes e produtos envolvidos nessas reações, é necessário conhecer a proporção estequiométrica da reação, que é dada pela equação química balanceada. A seguir, alguns exemplos de cálculo estequiométrico para reações de neutralização:



## Cálculo Estequiométrico: Reações de Neutralização

**Exercício:** Suponha que temos 30 mL de uma solução de NaOH 0,1 mol/L e queremos neutralizá-la completamente com uma solução de HCl 0,2 mol/L. Qual o volume de HCl necessário para neutralizar completamente a solução de NaOH?

Primeiro, devemos escrever a equação química balanceada para a reação de neutralização entre NaOH e HCl:



A partir da equação química, podemos ver que a proporção estequiométrica entre NaOH e HCl é de 1:1. Isso significa que 1 mol de NaOH reage completamente com 1 mol de HCl.

A concentração da solução de NaOH é 0,1 mol/L, o que significa que a cada 1 litro de solução, temos 0,1 mol de NaOH. Como temos 30 mL de solução de NaOH, podemos calcular a quantidade de NaOH em moles:

$$0,1 \text{ mol/L} \times 0,03 \text{ L} = 0,003 \text{ mol de NaOH}$$

Para neutralizar completamente o NaOH, precisamos de 0,003 mol de HCl. A concentração da solução de HCl é 0,2 mol/L, o que significa que a cada 1 litro de solução, temos 0,2 mol de HCl. Portanto, podemos calcular o volume de HCl necessário em mL:

$$0,003 \text{ mol} / 0,2 \text{ mol/L} = 0,015 \text{ L} = 15 \text{ mL}$$

Assim, são necessários **15 mL de solução de HCl 0,2 mol/L** para neutralizar completamente 30 mL de solução de NaOH 0,1 mol/L.

## Cálculo Estequiométrico: Reações de Neutralização

Nessa reação, 20 mL de uma solução de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,1 mol/L é misturada com 50 mL de uma solução de NaOH 0,2 mol/L. Qual é a quantidade de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  produzida?



**Passo 1:** Escreva a equação química balanceada:  $\text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{NaOH} \rightarrow \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$

**Passo 2:** Calcule o número de moles de cada reagente:

$$n(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,1 \text{ mol/L} \times 0,020 \text{ L} = 0,002 \text{ mol}$$

$$n(\text{NaOH}) = 0,2 \text{ mol/L} \times 0,050 \text{ L} = 0,010 \text{ mol}$$

**Passo 3:** Identifique o reagente limitante:

$\text{H}_2\text{SO}_4$  é o reagente limitante, pois a quantidade de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  é menor do que a quantidade necessária para reagir com todo o  $\text{NaOH}$ .

**Passo 4:** Calcule a quantidade de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  produzida:

A partir da equação química balanceada, sabe-se que 1 mol de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  reage com 2 mol de  $\text{NaOH}$  para produzir 1 mol de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . Como a quantidade de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  é menor do que a quantidade necessária para reagir com todo o  $\text{NaOH}$ , a quantidade de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  produzida será determinada pela quantidade de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  utilizada:

$$n(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 0,002 \text{ mol}$$

Portanto, a quantidade de  **$\text{Na}_2\text{SO}_4$  produzida é de 0,002 mol.**

## Cálculo Estequiométrico: Reações de Precipitação

As **reações de precipitação são** um tipo de reação química em que dois reagentes em solução aquosa reagem para formar um **sólido insolúvel**, chamado de **precipitado**. Esse tipo de reação é muito comum em química analítica, já que a formação de precipitados pode ser utilizada para identificar a presença de íons específicos em uma solução.

A formação do precipitado ocorre porque a solubilidade do composto formado é limitada em uma determinada faixa de temperatura e concentração. Quando os íons dos reagentes em solução se combinam em uma proporção adequada para formar um composto insolúvel, esse composto começa a precipitar. O precipitado se forma em uma solução límpida, o que indica que não há mais íons livres em solução para reagir.

Um exemplo de reação de precipitação no cotidiano é a formação de depósitos minerais em chaleiras e panelas quando se ferve água dura, que contém altas concentrações de sais de cálcio e magnésio. Quando a água é fervida, ocorre uma reação de precipitação entre os íons de cálcio e magnésio na água e o carbonato presente na água ou na própria panela. O resultado é a formação de uma camada sólida de depósitos minerais, que podem ser difíceis de remover.

## Cálculo Estequiométrico: Reações de Precipitação

Considere a seguinte equação química balanceada para a reação de precipitação entre cloreto de sódio (NaCl) e nitrato de prata (AgNO<sub>3</sub>):



Nesta reação, o cloreto de sódio (NaCl) e o nitrato de prata (AgNO<sub>3</sub>) reagem para formar cloreto de prata (AgCl), que precipita na solução, e nitrato de sódio (NaNO<sub>3</sub>).

**Exercício:** Determine a quantidade (massa e mol) de AgCl produzida quando 25 mL de uma solução de NaCl 0,1 mol/L é misturada com 50 mL de uma solução de AgNO<sub>3</sub> 0,2 mol/L.

**Passo 1:** Calcule o número de moles de cada reagente:

$$n(\text{NaCl}) = 0,1 \text{ mol/L} \times 0,025 \text{ L} = 0,0025 \text{ mol}$$

$$n(\text{AgNO}_3) = 0,2 \text{ mol/L} \times 0,050 \text{ L} = 0,010 \text{ mol}$$

**Passo 2:** Identifique o reagente limitante: O NaCl é o reagente limitante, pois a quantidade de NaCl é menor do que a quantidade necessária para reagir com todo o AgNO<sub>3</sub>.

**Passo 3:** Calcule a quantidade de AgCl produzida: A partir da equação química balanceada, sabe-se que 1 mol de NaCl reage com 1 mol de AgNO<sub>3</sub> para produzir 1 mol de AgCl. Como a quantidade de NaCl é menor do que a quantidade necessária para reagir com todo o AgNO<sub>3</sub>, a quantidade de AgCl produzida será determinada pela quantidade de NaCl utilizada:

$$n(\text{AgCl}) = 0,0025 \text{ mol}$$

**Passo 4:** Converta a quantidade de AgCl para a massa correspondente, se necessário:

Suponha que você deseja determinar a massa de AgCl produzida. Sabendo que a massa molar do AgCl é 143,32 g/mol, podemos calcular a massa de AgCl produzida:

$$m(\text{AgCl}) = n(\text{AgCl}) \times \text{MM}(\text{AgCl}) = 0,0025 \text{ mol} \times 143,32 \text{ g/mol} = 0,358 \text{ g}$$

Portanto, a quantidade de AgCl produzida é de **0,0025 mol ou 0,358 g**.