



Química

para Engenharias

Notas de Aula / Prof. Diego J. Raposo

EXERCÍCIOS

QUÍMICA A CIÉNCIA CENTRAL
BROWN ET AL 13^ª EDIÇÃO

- CAP. 1, SEC. 1.5: 1.37, 1.39, 1.41 \Rightarrow INCERTEZA NAS MEDIDAS
- CAP. 2, SEC. 1.6: 1.45, 1.51, 1.56 \Rightarrow ANÁLISE DIMENSIONAL
-
- "

ESTRUTURA DA MATERIA

A MATERIA É COMPOSTA POR ÁTOMOS

- FILOSOFOS GREGOS (500-300 a.C)
 - ANAXÁGORA, LEUCIPO, DEMÓCRICO
 - A MATERIA É FEITA DE ÁTOMOS
 - ÁTOMOS SÃO ENTIDADES INVISÍVEIS (MINÚSCULAS) E INDESTRUTÍVEIS (INDIVISÍVEIS = ÓTOMOS)
 - PROPRIEDADES DA MATERIA ADVÉM DAS PROPRIEDADES DOS ÁTOMOS



ARISTÓTELES

- MATERIA É COMPOSTA POR ELEMENTOS NATURAIS
- ÁGUA, TERRA, AR, FOGO, ÉTER
- MELHOR ACEITA QUE O ATOMISMO POR EXPLICAR A SENSIBILIDADE HUMANA
- VISÃO PREDOMINANTE PELOS SÉCULOS SEGUINTES

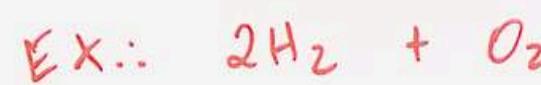
LEIS PONDERAIS (SÉC. XVIII À XIX)

- * LEI DE LA VOISIER (CONSERVAÇÃO DA MASSA)
 - A MASSA TOTAL DE UM SISTEMA FECHADO ONDE OCORRE UMA REACAO QUÍMICA PERMANE CONSTANTE, ANTES, DURANTE E DEPOIS DA REAÇÃO

$$m_T = \text{CONSTANTE}$$

"*OMNIA MUTANDUR NIHIL INTERIT*" [NA NATUREZA NADA SE CRIA, NADA SE PERDE, TUDO SE TRANSFORMA]

ANTOINE LAURENT LAVOISIER



$$m(\text{H}_2) \quad m(\text{O}_2)$$

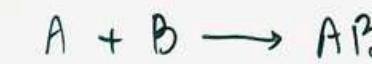


$$m(\text{H}_2\text{O})$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = m(\text{H}_2) + m(\text{O}_2)$$

* LEI DE Proust (Lei das proporções definidas)

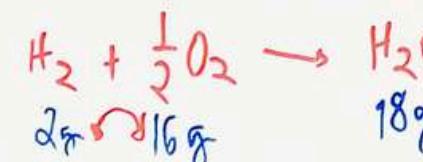
- A razão entre a massa de dois elementos que fazem parte de um composto químico é sempre a mesma



$$4g \leftarrow 32g$$

$$36g$$

$$\frac{m_O}{m_H} = \frac{32}{4} = \frac{16 \cdot 2}{2 \cdot 2} = \frac{16}{2} = 8$$



$$2g \leftarrow 16g$$

$$18g$$

$$\boxed{\frac{m_A}{m_B} = \text{CONSTANTE}}$$

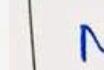
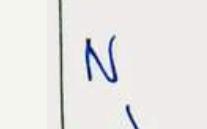
* MODELO DE DALTON (1808)

JOHN DALTON POSTULOU QUE
(VOLTANDO AO MODELO GREGO)

- 1) A MATERIA É FEITA DE PEQUENOS ÁTOMOS INDESTRUTÍVEIS
- 2) ÁTOMOS DE UM ELEMENTO NÃO PODERÃO SE TORNAR ÁTOMOS DE OUTROS ELEMENTOS
- 3) ÁTOMOS DE UM MESMO ELEMENTO SÃO DÉNTICOS EM MASSA E OUTRAS PROPRIEDADES, DISTINTAS DAS DOS OUTROS ELEMENTOS
- 4) COMPOSTOS SÃO UMA COMBINAÇÃO EM RAZÃO ESPECÍFICA DOS ÁTOMOS DISTINTOS

- Ele conseguiu, com os postulados:

- DEDUZIR AS LEIS PONDERAIS ANTERIORES
- PROPOR UMA NOVA LEI PONDERAL



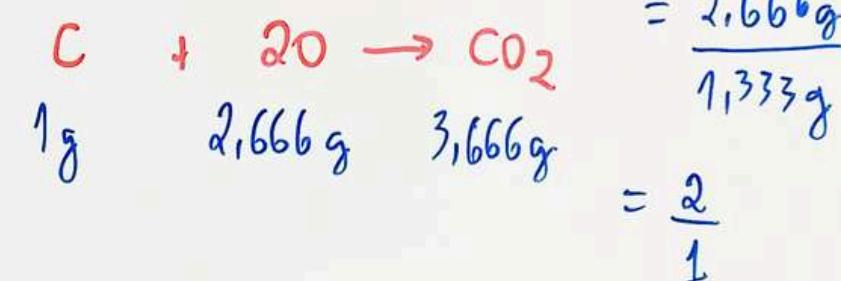
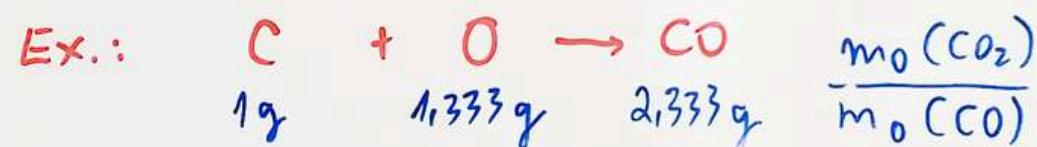
;

* LEI DAS PROPORÇÕES MÚLTIPLAS

- SE DOIS ELEMENTOS FORMAM DIFERENTES COMPOSTOS, A RAZÃO ENTRE AS MASSAS DE UM DESSES ELEMENTOS NOS DIFERENTES COMPOSTOS PARA UMA MASSA FIXA DE OUTRO ELEMENTO É UMA RAZÃO ENTRE NÚMEROS INTEIROS PEQUENOS

$$\frac{m_B(AB_x)}{m_B(AB_y)} = \frac{x}{y}$$

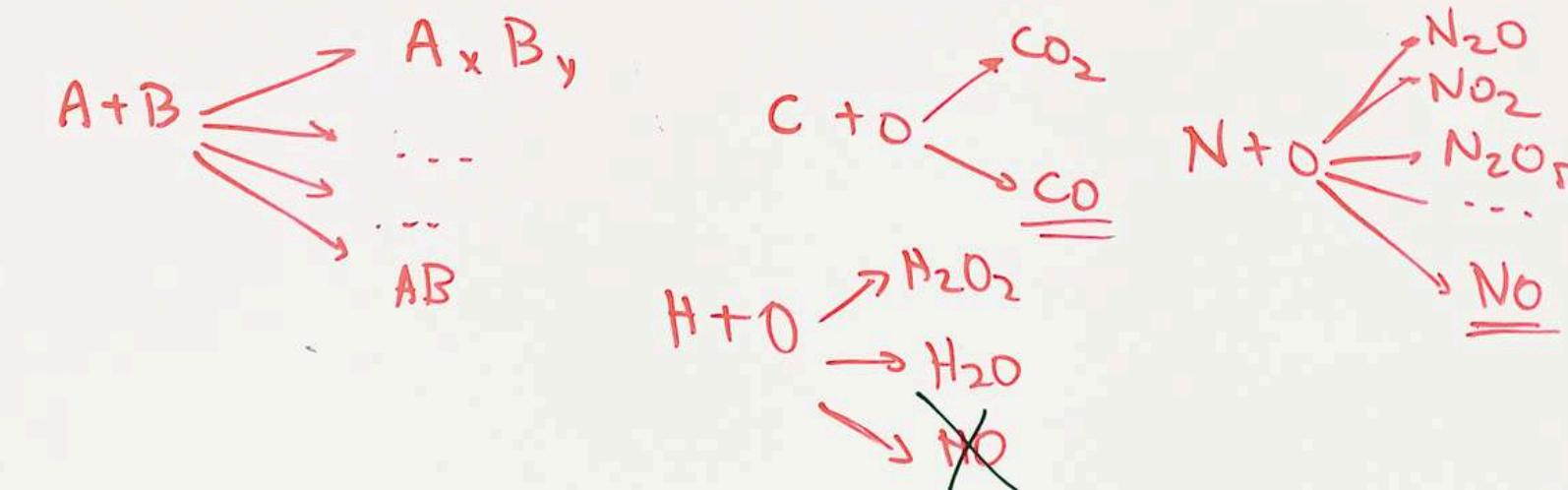
$$\frac{m_B(A_xB_y)}{m_B(A_xB_z)} = \frac{y}{z}$$



* A TEORIA DA HIPÓTESE ATÔMICA GANHOU FORÇA COM A ANÁLISE DE DALTON, COM O USO DA HIPÓTESE NA DESCRIÇÃO DE GASES (TEORIA CINÉTICA DOS GASES) E DO MOVIMENTO BROWNIANO.

- PARA OBTER A MASSA DOS ÁTOMOS DOS ELEMENTOS, DALTON PRECISOU ASSUMIR OUTRO POSTULADO, A "REGRA DA MÁXIMA SIMPLICIDADE", NA QUAL ELE ASSUMIA QUE QUANDO PARES DE ELEMENTOS FORMAVAM MAIS DE UM COMPOSTO, SEMPRE HAVIA UM QUE CONTERIA APENAS UM ÁTOMO DE CADA ELEMENTO.

$$6,0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$



- EMBORA TENHA SIDO BEM SUCESSIDO AO ESTUDAR CO E O CO₂, OU NO E TODOS OS SEUS COMPOSIÇÕES BINÁRIOS, ELE ACREDITAVA QUE A FÓRMULA DA ÁGUA ERA HO, E PERSISTIU NO ERRO.

$$\frac{RT}{P} = \frac{n}{V} = \text{CONSTANTE}$$

QUE INVABILIZOU A MEDIDA PRECISA DA MASSA DOS ÁTOMOS POR ALGUNS ANOS. ATÉ QUE STANISLAO CANNIZZARO (1858) TROUxe A

TOMA A HIPÓTESE DE AMEDEO AVOGADRO (1811), QUE INDICAVA QUE DOIS VOLUMES IGUAIS DE DOIS GASES QUALQUER CONTEM O MESMO NÚMERO DE MOLECULAS, DESDE QUE A PRESSÃO E A TEMPERATURA SEJAM AS MESMAS. POR MEDIDAS RE-

LATIVAS DOS VOLUMES DE H₂, O₂ E VAPOR DE ÁGUA, ELE DETERMINOU QUE A FÓRMULA CORRETA DA ÁGUA SERIA H₂O. APÓS O CONGRESSO DE KARLSRUSHE, NO QUAL CANNIZZARO DISSESSOU, O CONSENSO NA FORMA DE MEDIR, RELATAR E CALCULAR MASSAS ATÔMICAS E MOLECULARES FOI ATINGIDO.

ESTRUTURA DO ÁTOMO

O ÁTOMO É FORMADO POR PARTÍCULAS SUBATÔMICAS

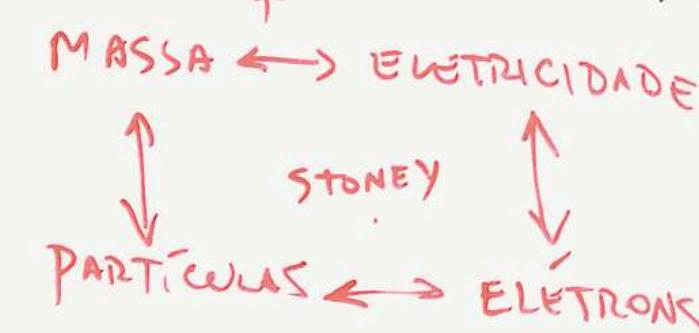
* A ELETRICIDADE E O MODELO DE THOMSON

- A ELETRICIDADE PODE SER COMPOSTA POR PARTÍCULAS

- MICHAEL FARADAY (1833): ELETRICIDADE E MASSA DEPOSITADA EM ELETRODOS ESTÃO DIRETAMENTE RELACIONADAS (LEIS DE FARADAY).

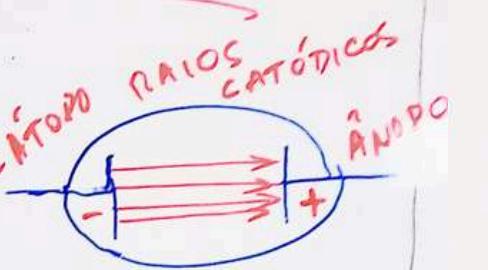
- G.J. STONEY (1874): SE MASSA É COMPOSTA POR PARTÍCULAS, ENTÃO A ELETRICIDADE TAMBÉM DEVE SER. ENTÃO CUNHOU O TERMO "ELÉTRON" PARA PARTÍCULAS DE

ELETRICIDADE



* EXPERIMENTOS INICIAIS COM ELETRICIDADE ATRAVÉS DE GASES

- WILLIAM WATSON: GASES SÃO BONS CONDUTORES EM CÂMARAS DE BAIXA PRESSÃO COM ELETRODOS NOS EXTREMOS. CADA GÁS EMITE UMA RADIACAO PRÓPRIA;



- JULIUS PLÜCKER: DIMINUIR MAIS A PRESSÃO AUMENTA A LUMINOSIDADE, QUE VEM DA LUMINESCÊNCIA DO VIDRO EM RESPOSTA A CONDUÇÕES DE ELETRICIDADE



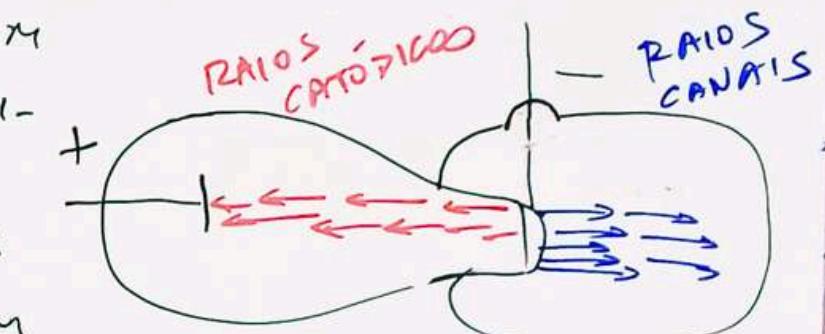
- WILLIAM CROOKES (1879): LUMINESCÊNCIA SE DEVE A UM BOMBARDEIO DO LADO DO ELETRODO POSITIVO (o ANODO) POR UMA RADIAÇÃO QUE VINHA DO ELETRODO NEGATIVO (o CÁTODO). INCLUSIVE



COM ANTEPARO

SE UM OBJETO FOSSE USADO COMO ANTEPARO, UMA "SOMBRA" PODERIA SER VISTA NO VIDRO IRRADIADO. A ESSA RADIACAO ELE DEU O NOME DE RAIOS CATÓDICOS.

- EUGENE GOLDSTEIN (1886): MUDOU UM POCO O EXPERIMENTO, USANDO UM CÁTODO PERFORADO COM DUAS CÂMARAS, UMA COM O CÁTODO E A OUTRA SEM ELE. ENQUANTO OS RAIOS CATÓDICOS ATRAVESSAVAM A CÂMARA ENTRE O CÁTODO E O ÂNODO, RAIOS NO SENTIDO OPOSTO ATRAVESSAVAM A OUTRA CÂMARA. ESSES RAIOS, CHAMADOS DE RAIOS CANAIS, LEVAM A CORAÇÕES DIFERENTE NA CÂMARA PARA GASES DISTINTOS.



EXPERIMENTO DE GOLDSTEIN

- WILHELM WIEN: VERIFICOU QUE OS RAIOS CANAIS SOFRIM DEFLEXÃO COM CAMPOS ELÉTRICOS E MAGNÉTICOS, E QUE O DESVIO É COMPATÍVEL COM UM FEIXE DE PARCULAS POSITIVAMENTE CARREGADAS.

* EXPERIMENTOS DE THOMSON

- J. J. THOMSON (1897): continuou

EXPERIMENTOS DE CROOKES PARA
CARACTERIZAR RAIOS CATÓDICOS.

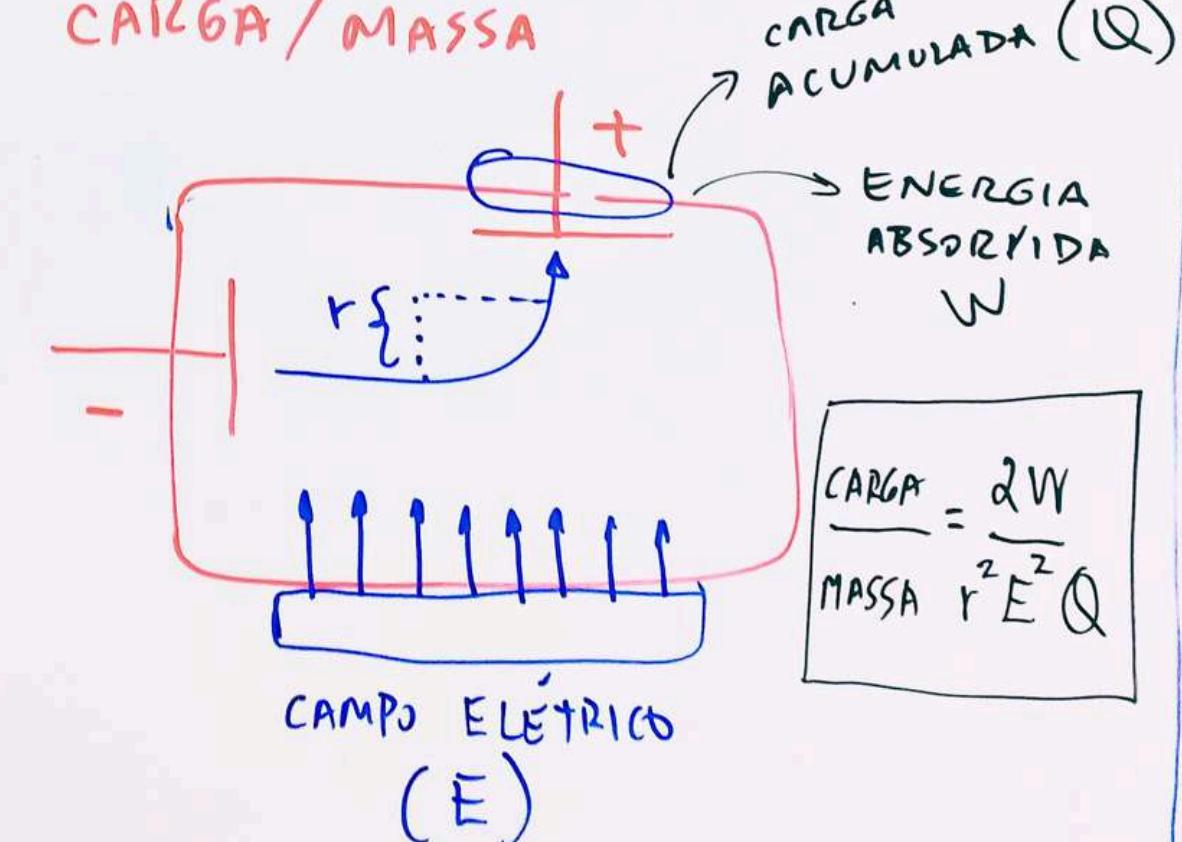
→ RAIOS CATÓDICOS SÃO COMPOSTOS
POR PARTÍCULAS NEGATIVAS, QUE FA-
ZEM PARTE DE TODOS OS ÁTOMOS.

VERIFICOU ISSO POIS:

- 1) QUANDO INCIDEM EM ELETRÔMERO
APONTAM CARGA NEGATIVA
- 2) SE DESVIAM FRENTE A UM CAMPO
ELÉTRICO, REPELIDOS POR ELETRODO CAR-
REGADO NEGATIVAMENTE
- 3) O DESVIO FRENTE A CAMPO ELÉTRICO ERA
O MESMO PARA DIFERENTES GASES

→ RAIOS CATÓDICOS SÃO PARTÍCULAS
FUNDAMENTAIS, E NÃO ÍONS NEGATI-
VAMENTE CARREGADOS

1) EXPERIMENTO MODIFICADO
DA AMPOLA DE RAIOS CATÓ-
DICOS, OBSTENDO A RELAÇÃO
CARGA / MASSA



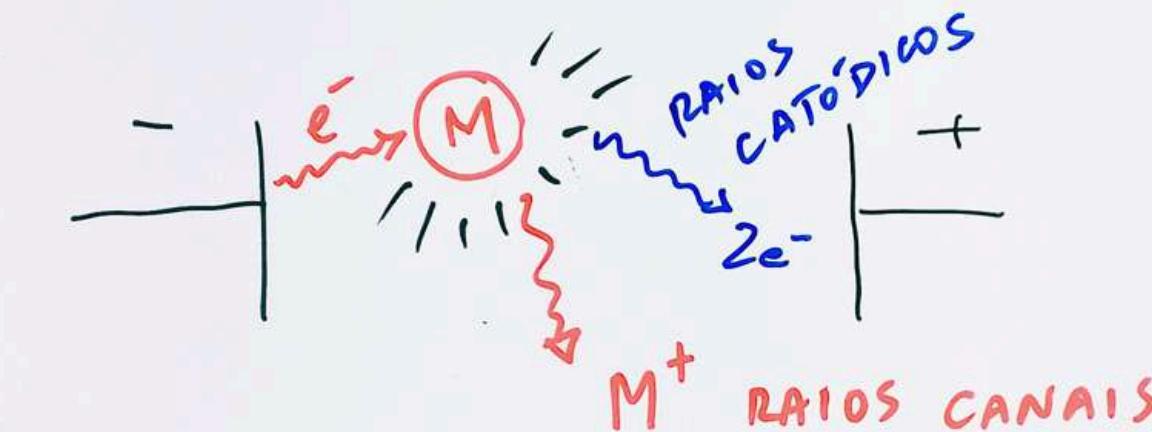
ESSA RELAÇÃO ERA DE APPROXIMADAMENTE $1 \cdot 10^{11} \text{ C kg}^{-1}$, MUITO MAIOR QUE O VALOR MEDIDO PARA QUALQUER IÓN. POR EXEMPLO, CARGA/MASSA PARA O H^+ É $1 \cdot 10^8 \text{ C kg}^{-1}$

2) O MESMO VALOR FOI ENCONTRADO PARA GASES DIFERENTES, E USANDO DUAS CONFIGURAÇÕES EXPERIMENTAIS DIFERENTES

3) DETERMINOU CARGA/MASSA PARA RAIOS GERADOS POR OBJETOS AQUECIDOS (TERMOELÉTRICOS) E SUBMETIDOS A LUZ (EFEITO FOTOELETRICO)

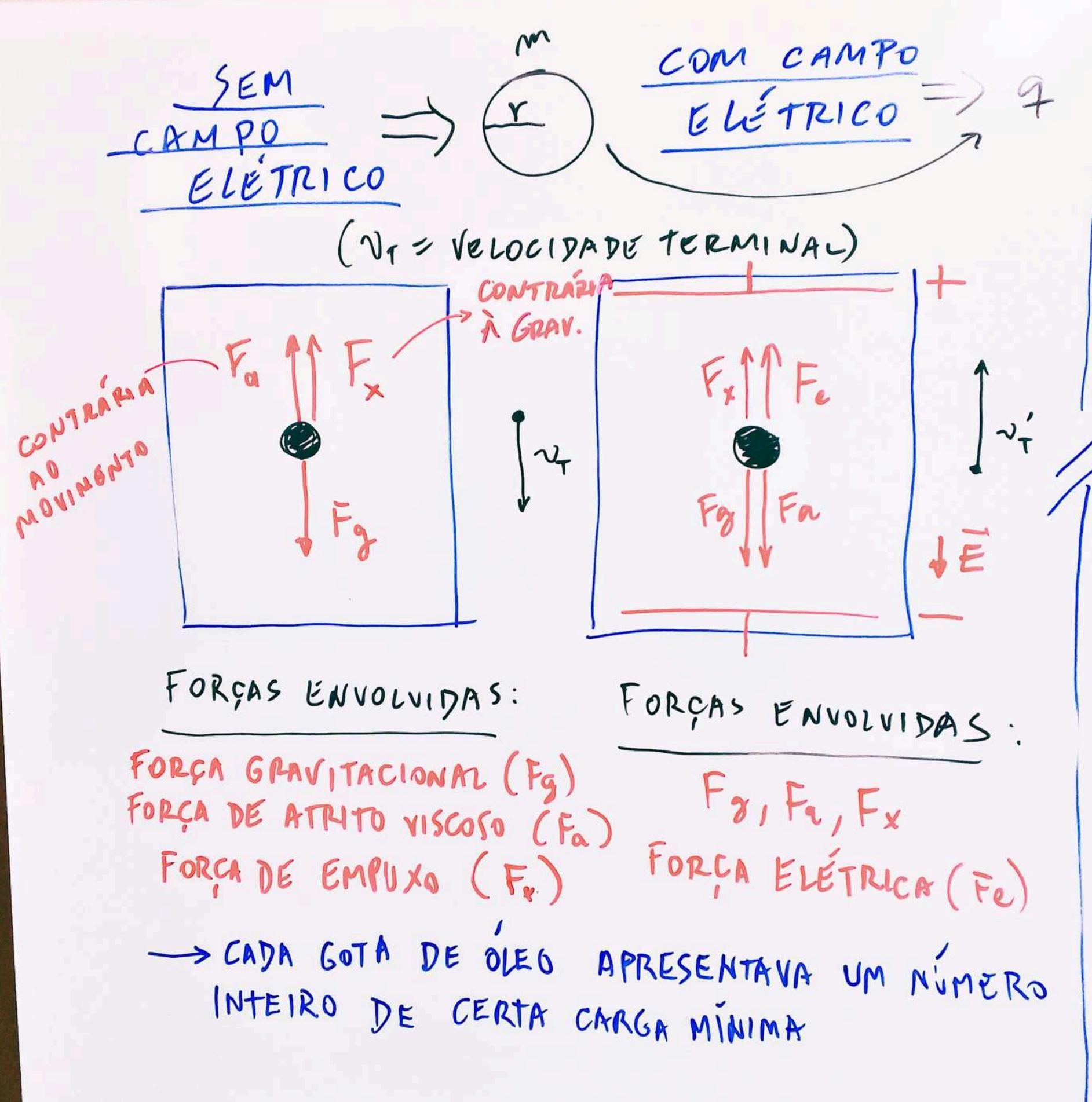
→ OS RAIOS CANAIS SÃO COMPOSTOS DE PARTÍCULAS (JÁ SABIDAS POSITIVAS) COM MASSA MUITO MAIOR, E DISTINTAS PARA DIFERENTES GASES.

- 1) VERIFICOU QUE CARGA/MASSA É MUITO MENOR QUE NOS RAIOS CATÓDICOS: A MASSA É MUITO MAIOR
- 2) O SEU VALOR VARIAVA DE ACORDO COM A NATUREZA DO GÁS



* EXPERIMENTO DE MILLIKAN

- R. A. MILLIKAN (1909): CONSTRUIU UMA CÂMARA ONDE PODERIA ACOMPANHAR A VELOCIDADE TERMINAL DA QUEDA DE PEQUENAS GOTAS ESFÉRICAS DE ÓLEO



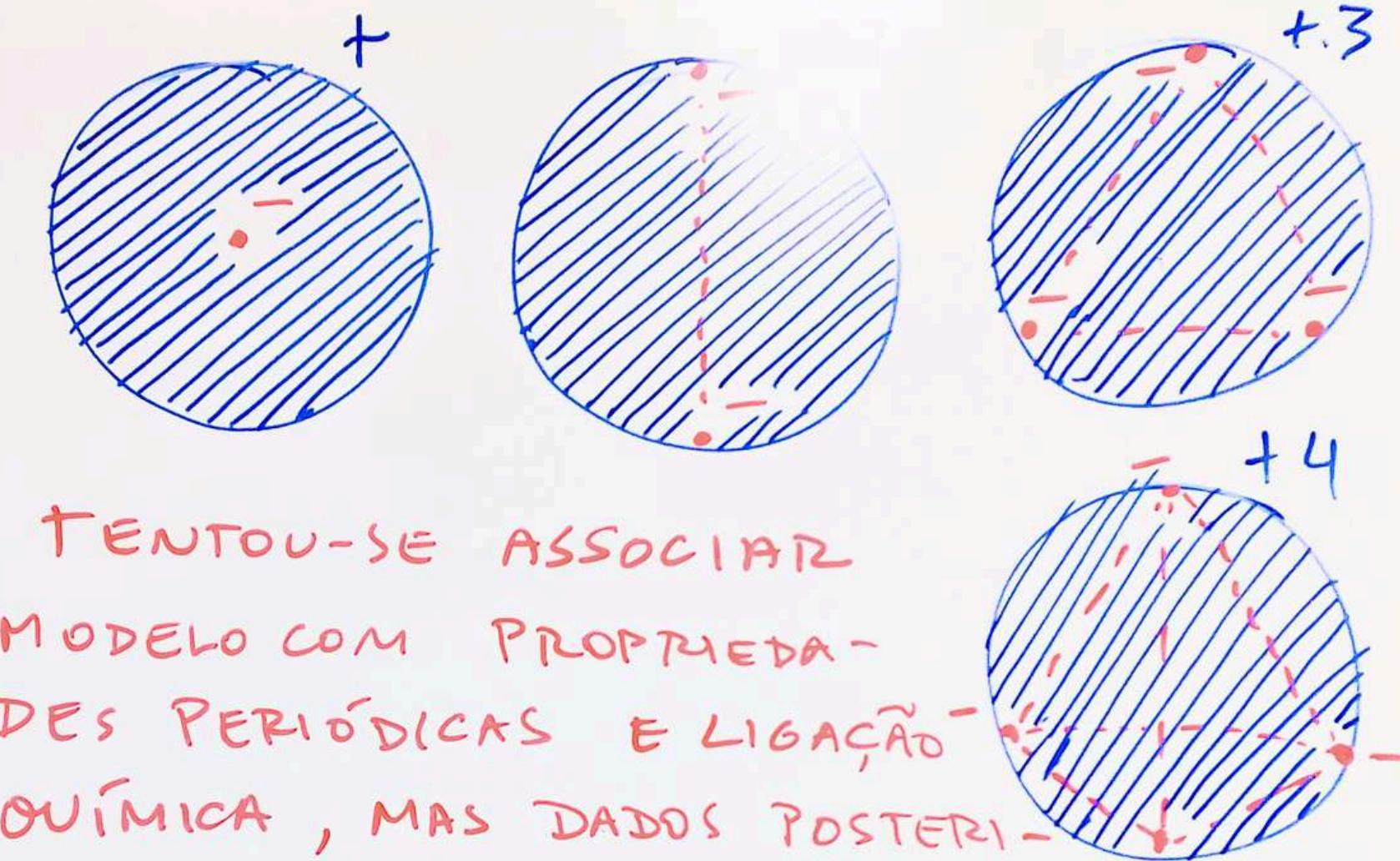
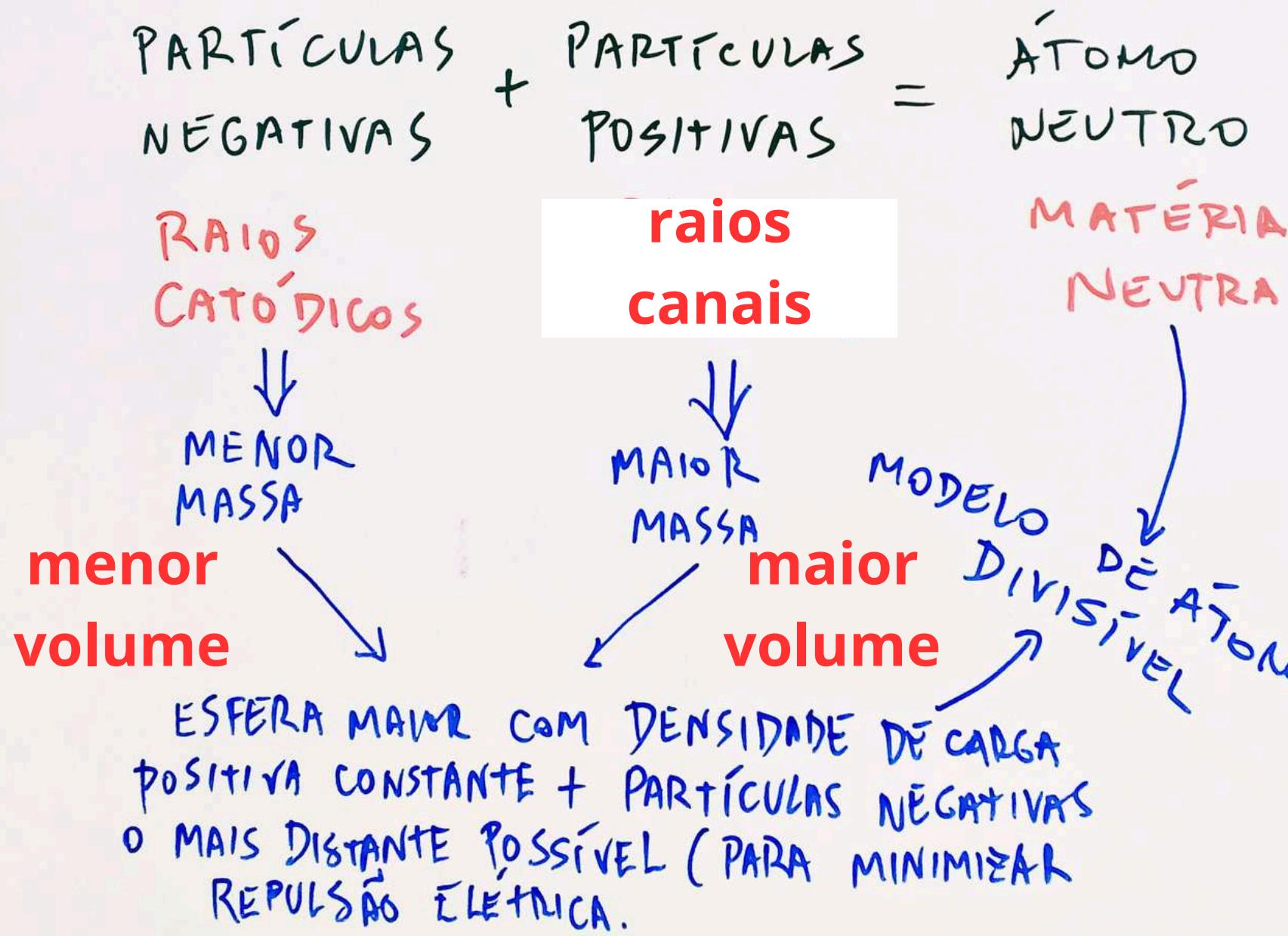
MEDINDO A CARGA DE DIFERENTES GOTAS, ELE OBTEVE A MENOR CARGA, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, QUE HOJE SABEMOS SER A CARGA FUNDAMENTAL, A CARGA DO ELÉTRON. TODAS AS CARGAS SÃO MÚLTIPLOS DELA.

→ A MASSA DA PARTÍCULA COM MENOR CARGA É $9,1 \cdot 10^{-28} \text{ g}$

ASSUMINDO QUE OS RAIOS CATÓDICOS ANALISADOS POR THOMSON ERAVAM COMPOSTOS PELAS MESMAS PARTÍCULAS FUNDAMENTAIS OBSERVADAS NAS GOTAS DE ÓLEO, MILLIKAN USOU A RELAÇÃO CARGA/MASSA DE THOMSON EM COMBINAÇÃO COM SUA ESTIMATIVA DE CARGA PARA OBTER A MASSA DO ELÉTRON.

* MODELO DE THOMSON-KELVIN

- WILLIAM THOMSON (LORD KELVIN)
E J. J. THOMSON: PROPUSERAM MO-
 DELO ATÔMICO PARA EXPLICAR RAIOS
 CATÓDICOS E RAIOS CANAIS.



TENTOU-SE ASSOCIAR MODELO COM PROPRIEDADES PERIÓDICAS E LIGAÇÃO QUÍMICA, MAS DADOS POSTERIORES REFUTARAM A VALIDADE DO MODELO

- RADIOATIVIDADE E O MODELO DE RUTHERFORD

* RADIOATIVIDADE

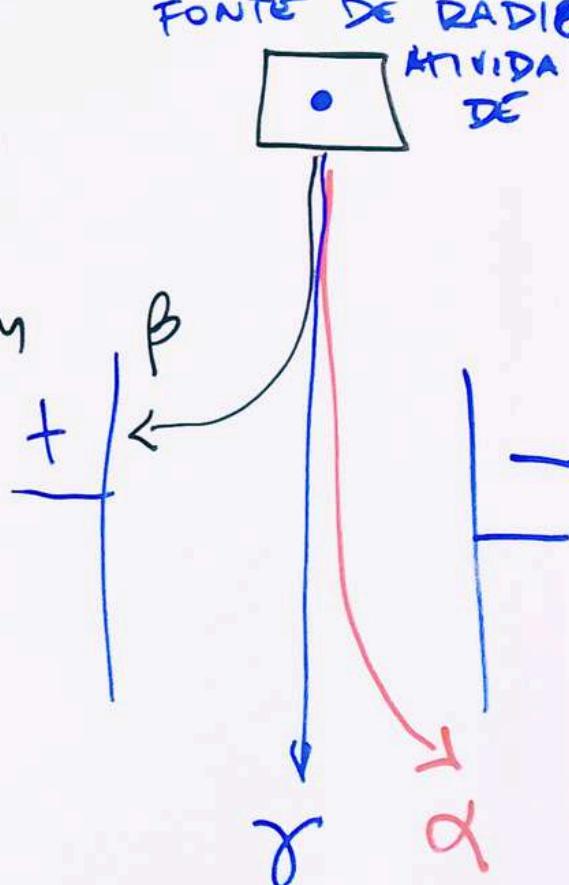
- HENRI ANTOINE BECQUEREL (1896): EMISSÃO ESPONTÂNEA DE RADIACÃO DESCONHECIDA POR SAIS DE URÂNIO

*Aluno de
Becquerel*

- PIERRE E MARIE CURIE (1898):
NÃO SÓ URÂNIO E SEUS SAIS, MAS
OUTROS ELEMENTOS (COMO O RÁDIO
E O POLÔNIO) TAMBÉM EMITIAM
RADIACÃO PRÓPRIA. MARIE DEU AO
FENÔMENO O NOME DE RADIOATIVIDADE.

*Aluno de
S.J. Thomson*

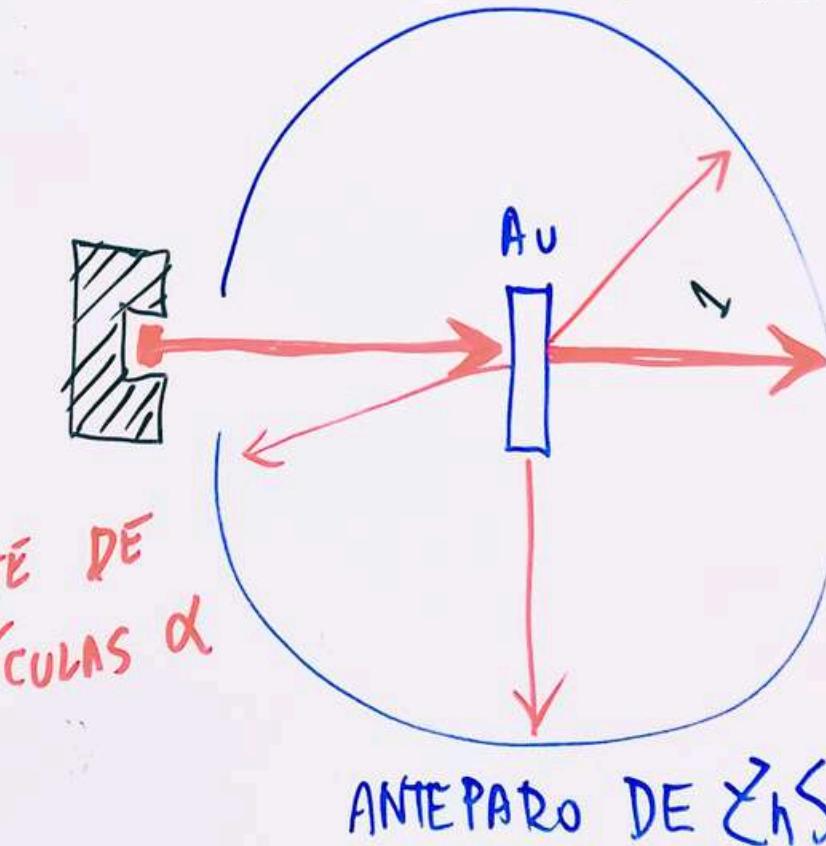
- ERNEST RUTHERFORD: ESTUDOU RADIAÇÕES EMITIDAS PELO TÓMO, URÂNIO
E RÁDIO. DETECTOU
TRÊS TIPOS DE RADIAÇÃO
DISTINTAS, BATIZANDO-AS
DE α , β E γ . ELE TAMBÉM
VERIFICOU QUE OS RAIOS
CANAIS DO HIDROGÉNIO
POSSUÍAM A MÉNOR MASSA
DETECTADA, A ESSES RAIOS
ELE DESIGNOU O NOME DE
PROTONS.



* EXPÉRIMENTO DE GEIGER E MARSDEN

*Aluno de
Rutherford*

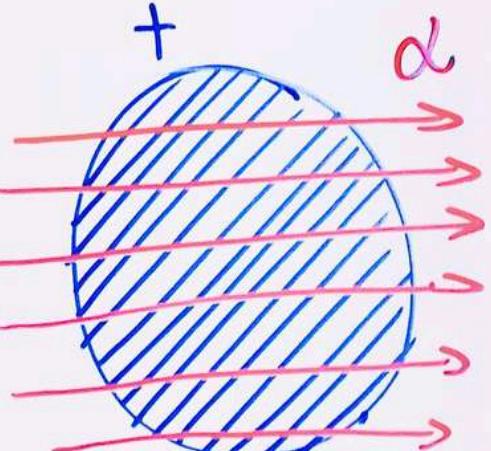
- HANS GEIGER E ERNEST MARSDEN (1909): FONTES DE PARTÍCULAS α COM FEIXE ORIENTADO A UMA FINA FOLHA DE OURO, E A TRAJETÓRIA FINAL DAS PARTÍCULAS FOI ACOMPANHADA POR LUMINESCÊNCIA DE ZnS AO REDOR DA FOLHA



*Esquema
simplificado
do experi-
mento de
Geiger e
Marsden*

- ELES OBSERVARAM QUE:

1. A MAIOR PARTE DAS PARTÍCULAS ATRAVESSOU A FOLHA DE OURO SEM SINAS DE ALTERAÇÕES EM SUA TRAJÉTORIA;
 2. UM NÚMERO MUITO PEQUENO DE PARTÍCULAS (1 EM CADA 20000) SOFREU UM DESVIO ACENTUADO NA TRAJÉTORIA, INCLUSIVE TENDO SUA TRAJÉTORIA REVERTIDA (ÂNGULO DE DESVIO DE 180°).
- RUTHERFORD CONCLUIU QUE TAIS RESULTADOS ERAM INCOMPATÍVEIS COM O MODELO DE KELVIN-THOMSON. ESSE MODELO PREVIA QUE AS PARTÍCULAS α DEVIAM SEGUIR UMA TRAJÉTORIA ÚNICA ATRAVÉS DA FOLHA, JÁ QUE OS ÁTOMOS TERIAM DENSIDADE UNIFORME DE CARGA POSITIVA. A OCASIONAL DEFLEXÃO, PORÉM, INDICAVA UMA DISTRIBUIÇÃO DE CARGA BEM MAIS DESIGUAL.



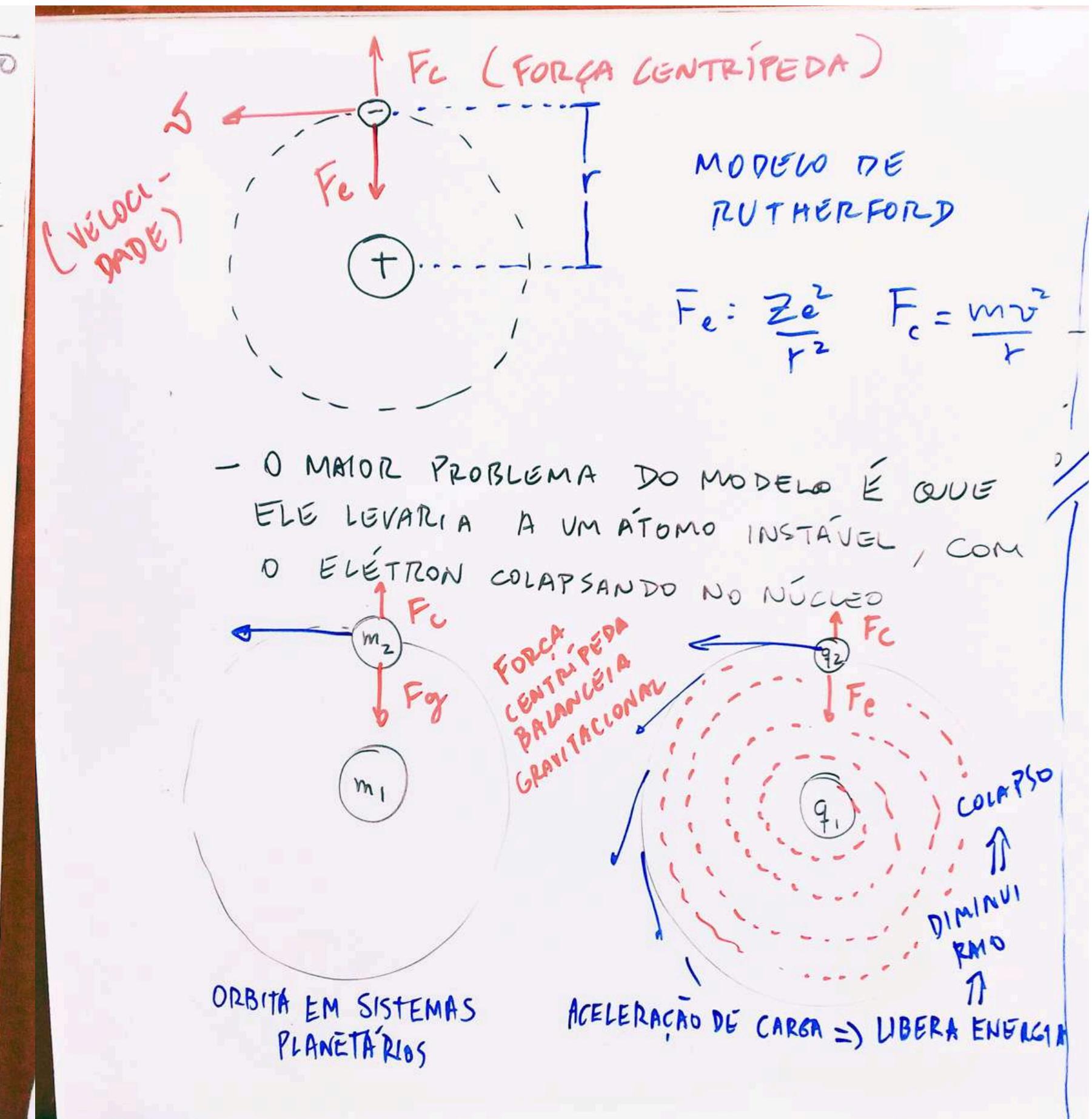
PREVISÃO SEGUNDO MODELO
DE KELVIN-THOMSON

* MODELO ATÔMICO DE RUTHERFORD

- VISANDO EXPLICAR OS RESULTADOS OBSERVADOS POR GEIGER E MARSDEN, RUTHERFORD PROPOSSUM MODELO ATÔMICO PRÓPRIO. PELA EVIDÊNCIA ELE DEDUZIU QUE MAIOR PARTE DO VOLUME DO ÁTOMO É ESPAÇO PRATICAMENTE VAZIO, OCUPADO APENAS PELOS ELÉTRONS, INCAPAZES DE DESVIAR A TRAJÉTORIA DAS PARTÍCULAS α . A CARGA ATÔMICA POSITIVA, PORTANTO, DEVIA ESTAR CONCENTRADA EM UM PEQUENO VOLUME, TÃO PEQUENO QUANTO INFREQUENTES FORAM OS DESVIOS DAS PARTÍCULAS QUE COLIDIARAM COM AS FOLHAS DE OURO. NESSE CASO, SABENDO QUE AS PARTÍCULAS α ERAM POSITIVAS E RELATIVAMENTE PESADAS (COM MASSA 4 VEZES SUPERIOR A DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO) TENDO ALTA ENERGIA CINÉTICA, OBSERVOU-SE UMA

DEFLEXÃO SÓ OCORRERIA POR REPULSÃO ELETROSTÁTICA, E QUE A PARTE POSITIVA DO ÁTOMO NÃO SÓ OCUPARIA UM PEQUENO VOLUME, MAS CONCENTRARIA QUASE TODA A MASSA. ELE ENTÃO:

- ESTIMOU A CARGA DA PARTE POSITIVA DO INTERIOR DO ÁTOMO DE OURO (100 ± 20 , DENTRO DO ESPERADO, 79);
- ESTIMOU O TAMANHO APPROXIMADO OCUPADO POR ESSA CARGA ($\sim 10^{-12} \text{ cm}$);
- PROPOS UM MODELO PLANETÁRIO DO ÁTOMO COM A CARGA POSITIVA, O NÚCLEO, NO CENTRO, COM OS ELÉTRONS CIRCULANDO EM TRAJETÓRIAS DEFINIDAS COMO EM PLANETAS EM TORNO DO SOL, PARTE QUE ELE CHAMOU DE ELETROSFERA.



EXERCÍCIOS

QUÍMICA A CIÊNCIA CENTRAL
BROWN ET AL 13^ª EDIÇÃO

CAP. 1, SEC. 1.5: 1.37, 1.39, 1.41 \Rightarrow INCERTOZA NAS MEDIDAS

CAP. 2, SEC. 1.6: 1.45, 1.51, 1.56 \Rightarrow ANÁLISE DIMENSIONAL

VISÃO MODERNA DA ESTRUTURA ATÔMICA

- PARA ENCONTRAR OS FENÔMENOS QUÍMICOS, A DIVISÃO DO ÁTOMO EM 3 PARTÍCULAS SUBATÔMICAS É O SUFICIENTE. DUAS PROPRIEDADES SÃO IGUALMENTE IMPORTANTES: MASSA E CARGA.

PARTÍCULA	SÍMBOLO	CARGA/e	MASSA/m
ELÉTRON	e^-	-1	0,00055
PRÓTON	p	+1	1,00728
NÊUTRON	n	0	1,00862

$1e = 1,602 \cdot 10^{-19} C$
 $1m = 1u_{\text{ma}} = 1,66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
 $m_n, m_p \gg m_e$

$$m(e) = 5,5 \cdot 10^{-11} \text{ N} \cdot \left(\frac{1,66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{1 \text{ N}} \right)$$

$$= 9,13297 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\frac{1,66054 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{1 \text{ u}} = 1$$

- NO CENTRO DE UM ÁTOMO HÁ UM NÚCLEO, CONTENDO PRÓTONS (QUE CONFEREM CARGA POSITIVA) E NÊUTRONS. ONDE SE TODA A MASSA DO ÁTOMO ESTÁ NO NÚCLEO (99,9%). O NÚMERO DE PRÓTONS DE UM ÁTOMO É CHAMADO DE NÚMERO ATÔMICO, Z . UM ELEMENTO QUÍMICO É UMA SUBSTÂNCIA QUE POSSUI APENAS ÁTOMOS COM O MESMO NÚMERO ATÔMICO, E ESSES ELEMENTOS ESTÃO LISTADOS NA TABELA PERIÓDICA. CADA ELEMENTO POSSUI UM NOME E UM SÍMBOLO, ASSOCIADOS AO SEU NÚMERO ATÔMICO.

$$X \leftrightarrow Z$$

- ÁTOMOS COM O MESMO Z MAS COM MASSAS DIFERENTES SÃO CHAMADOS DE ISÓTOPOS, QUE POSSUEM NÚMERO DE NÊUTRONS, B , DIFERENTES. DESTA FORMA, ISÓTOPOS SÃO DISTINGUIDOS PELO NÚMERO DE MASSA, A , A SOMA DO NÚMERO DE PRÓTONS COM O DE NÊUTRONS:

$$A = Z + B$$

ELEMENTO QUÍMICO: Z_X ou X

Ex.: ${}^6_{12}C$, C , ${}^{11}_{11}Na$, Na

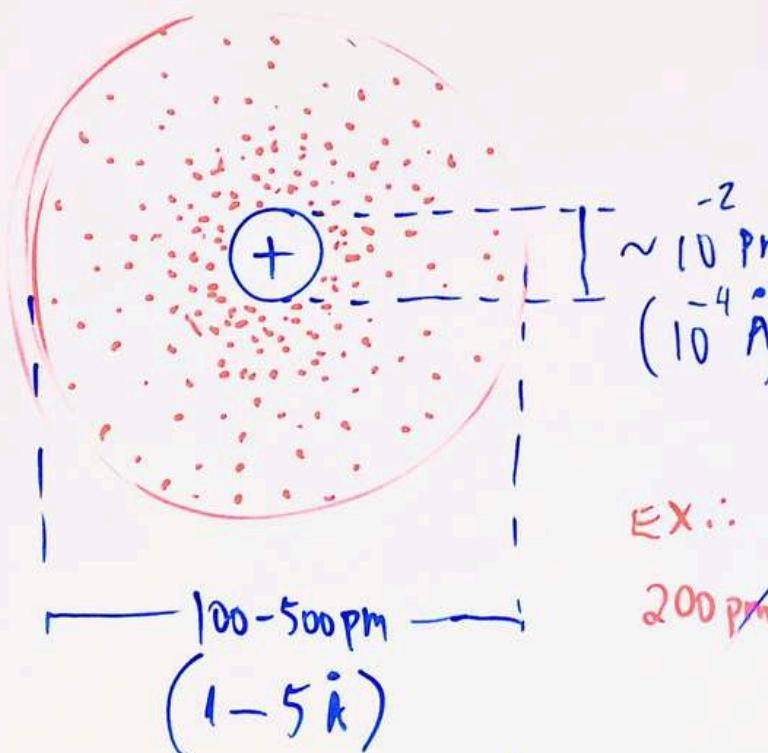
ELEMENTO QUÍMICO: A_ZX ou AX

EX.: $^{12}_{6}\text{C}$, $^{23}_{11}\text{Na}$

$$A - Z \leftarrow$$

$$A - Z = 12 - 11 = 1$$

• ALÉM DOS PRÓTONS E NEUTRONS, ÁTOMOS POSSUEM ELÉTRONS. ELES OCUPAM A MAIOR PARTE DO VOLUME DO ÁTOMO (99,99%), MAS POUCO AFETAM SUA MASSA. ELES TRAFEGAM NA ELETROSFERA.



EX.: $d(\text{Cl}) = 200\text{pm}$

$$200\text{pm} \cdot \frac{1\text{\AA}}{100\text{pm}} = 2\text{\AA}$$

• A RELAÇÃO ENTRE O NÚMERO DE ELÉTRONS DE UM ÁTOMO, L, E, O NÚMERO DE PRÓTONS, Z, DETERMINA A CARGA TOTAL DO ÁTOMO.

$Z \Rightarrow$ ÁTOMO NEUTRO (TODOS NA TABELA PERIÓDICA)

$L \neq Z \Rightarrow$ ÁTOMO CARREGADO (ION)

$\begin{cases} L > Z & \text{ÁTOMO NEGATIVO (ÂNION)} \\ L < Z & \text{ÁTOMO POSITIVO (CÁTION)} \end{cases}$

$Q = Z - L$

QUALQUER ÁTOMO: $^{A}_{Z}\text{X}^Q$ ou $^{A}_{Z}\text{X}^{+}$

EX.: $^{23}_{11}\text{Na}^+$ $Q = Z - L \Rightarrow L = Z - Q$

$Q \left\{ \begin{array}{l} +, 2+, 3+, 4+, \dots \\ -, 1-, 2-, 3-, 4-, \dots \end{array} \right.$

$\left[\begin{array}{l} \text{EXERCÍCIOS } 2.19, \\ 2.22, 2.23, 2.26, \\ 2.29, 2.34, 2.36 \end{array} \right]$

$= 11 - 1 =$

$= 10 \text{ elétrons}$

• A MASSA DO ISÓTOPO DE UM ELEMENTO É OBTIDA CONSIDERANDO A MASSA DO ^{12}C IGUAL A 12 u, EXATAMENTE. A MASSA DO ELEMENTO É OBTIDA PELA MÉDIA PONDERADA DAS MASSAS DOS ISÓTOPOS ESTÁVEIS, TENDO COMO PESO AS ABUNDÂNCIAS RELATIVAS DOS ISÓTOPOS DOS ELEMENTOS.

$m(E) = \sum_I R(I)m(I)$

$= R(I_1)m(I_1) + R(I_2)m(I_2) + \dots$

EX.: $^{10}_5\text{B}$ $m(^{10}\text{B}) = 10,01\text{u}$

$R(^{10}\text{B}) = 20\%$

$^{11}_5\text{B}$ $m(^{11}\text{B}) = 11,01\text{u}$

$R(^{11}\text{B}) = 80\%$

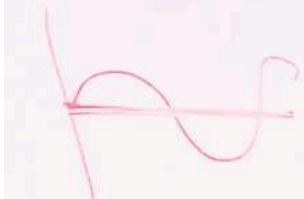
$m(\text{B}) = R(^{10}\text{B})m(^{10}\text{B}) + R(^{11}\text{B})m(^{11}\text{B}) = 10,81\text{u}$

$0,20 \cdot 10,01\text{u} + 0,80 \cdot 11,01\text{u}$

RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA

* ONDAS EM GERAL

- ONDAS SÃO PERTURBAÇÕES DE UMA GRANDEZA FÍSICA NO ESPAÇO E PERIÓDICA NO TEMPO. NO CASO UNIDIMENSIONAL, PODEMOS USAR UMA FUNÇÃO $y(x, t)$ PARA DESCREvê-LA.



EX.: CORDA BALANÇANDO (ONDA UNIDIMENSIONAL)

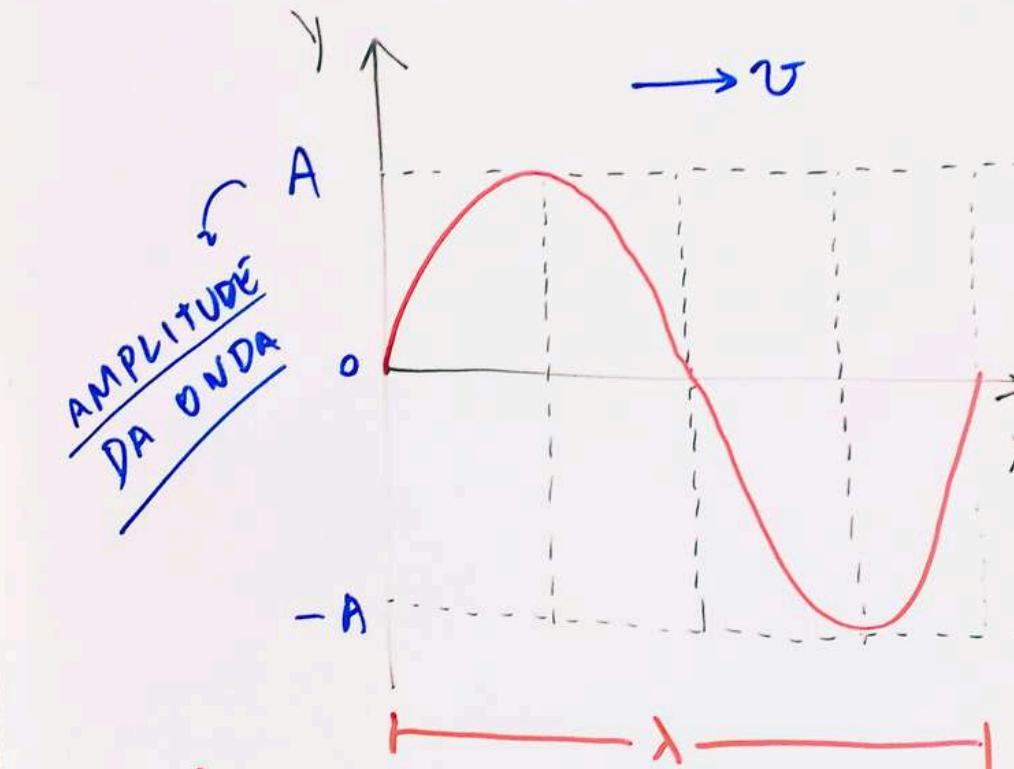
ONDA DO MAR (ONDA 2DIMENSIONAL)

ONDAS SONORAS (ONDA 3DIMENSIONAL)

- ESTÃO ASSOCIADAS A PROPAGAÇÃO DE ENERGIA EM UM MEIO (OU NO ESPAÇO) A UMA VELOCIDADE FINITA, v .

- SÃO MATEMATICAMENTE REPRESENTADAS POR FUNÇÕES TRIGONOMÉTRICAS, COMO SENOS E COSENOS.

- SÃO MATEMATICAMENTE REPRESENTADAS POR FUNÇÕES TRIGONOMÉTRICAS, COMO SENOS E COSENOS



$\Rightarrow \lambda$: COMPRIMENTO DA ONDA: PARÂMETRO QUE REPRESENTA OSCILAÇÃO NO ESPAÇO

$\Rightarrow T$: PERÍODO DA ONDA PARÂMETRO QUE REPRESENTA OSCILAÇÃO NO TEMPO

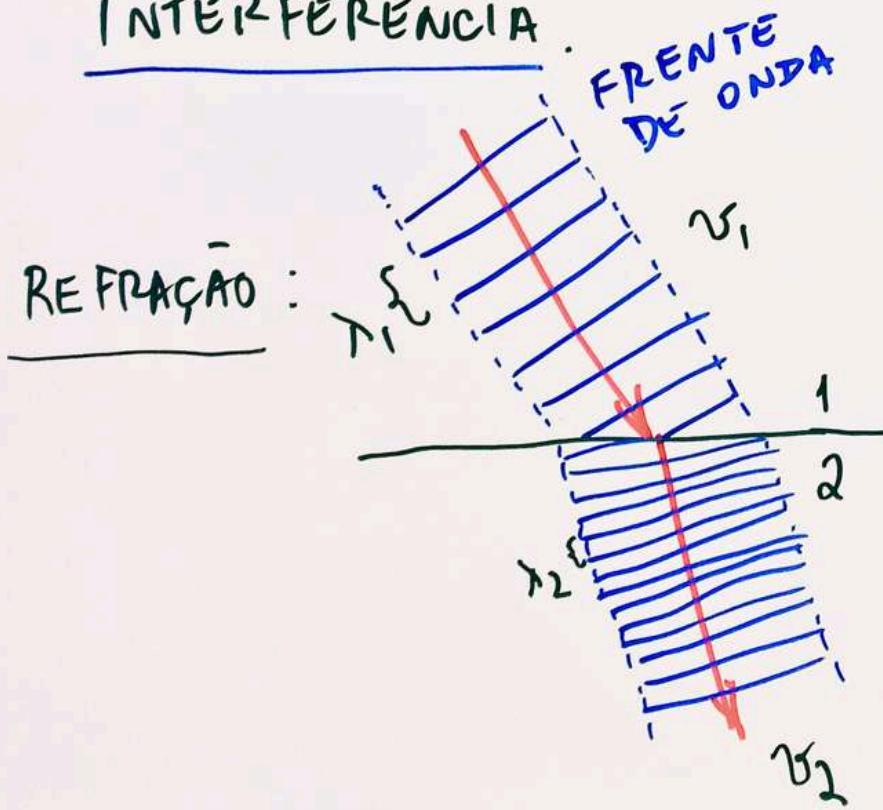


- SE TÉ DADO E SEGUNDOS, PODE-SE DEFINIR A FREQUÊNCIA ν , O NÚMERO DE OSCILAÇÕES POR SEGUNDO ($s^{-1} = \text{HERTZ} = Hz$)
- COMO VELOCIDADE É DESLOCAMENTO DIVIDIDO PELA VARIACÃO NO TEMPO, $\lambda \in \nu$ ESTÃO RELACIONADOS À VELOCIDADE DA ONDA

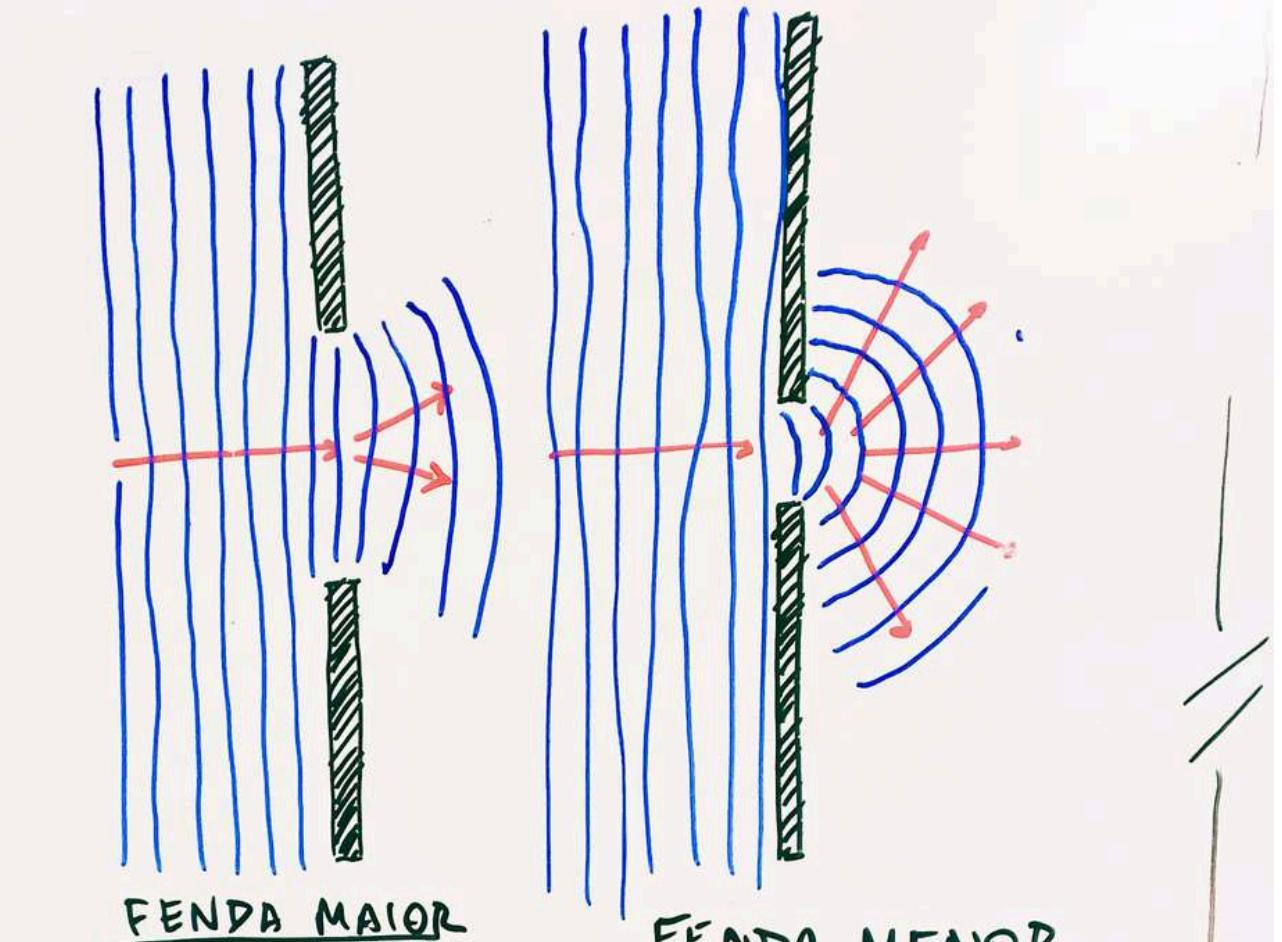
$$\nu = \frac{1}{T}$$

$$\lambda \nu = c$$

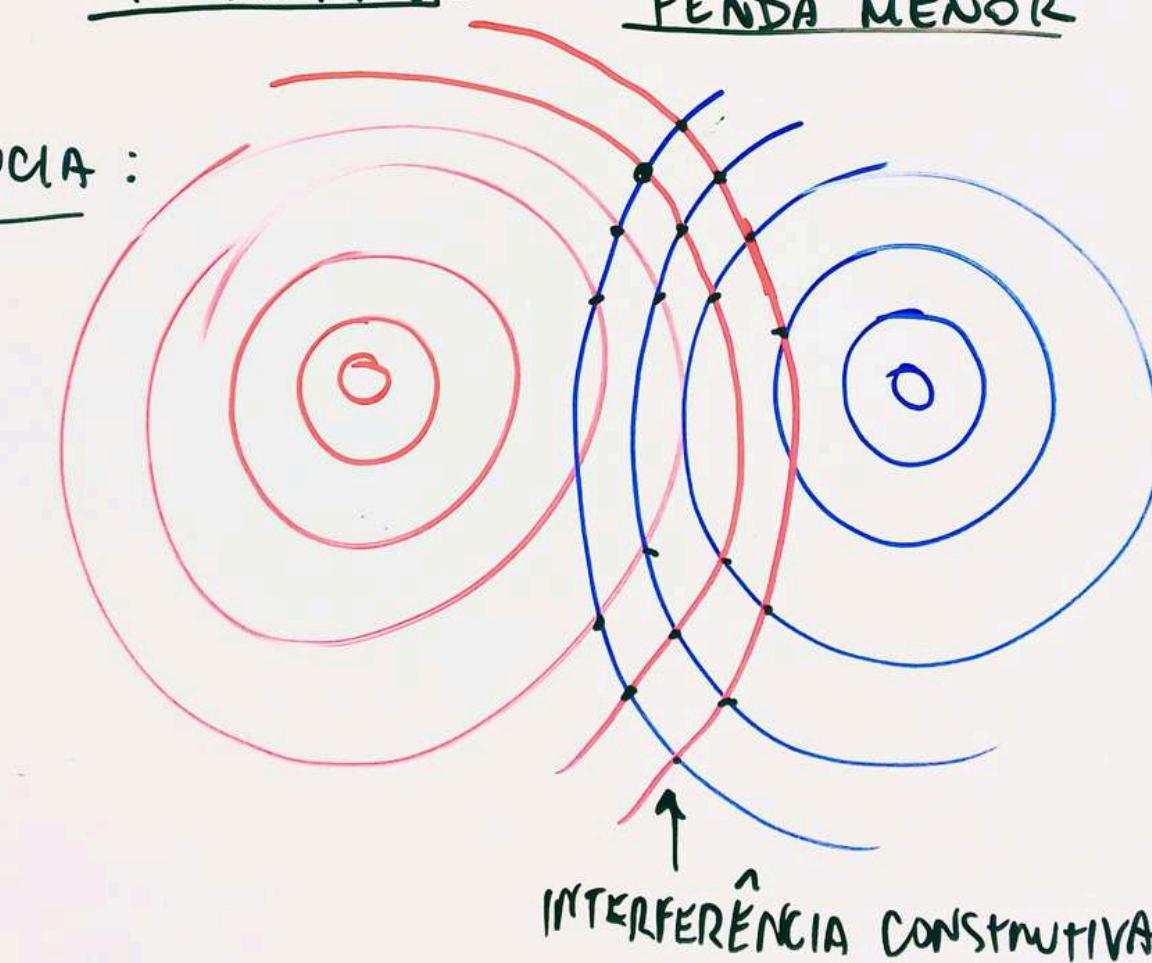
- ALGUNS FENÔMENOS SÃO CARACTERÍSTICOS DE ONDAS, COMO REFRAÇÃO, DIFRAÇÃO E INTERFERÊNCIA.



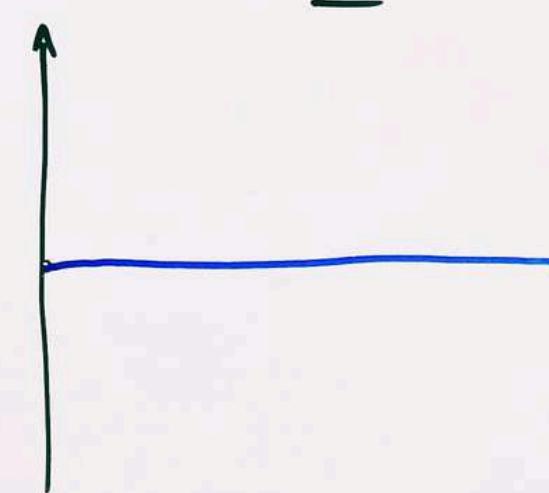
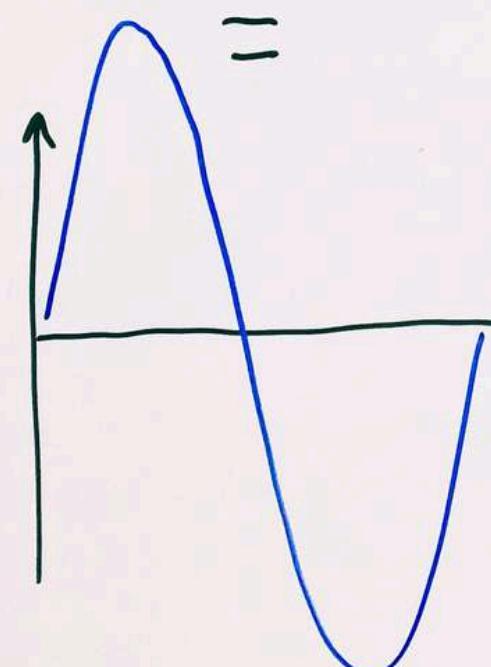
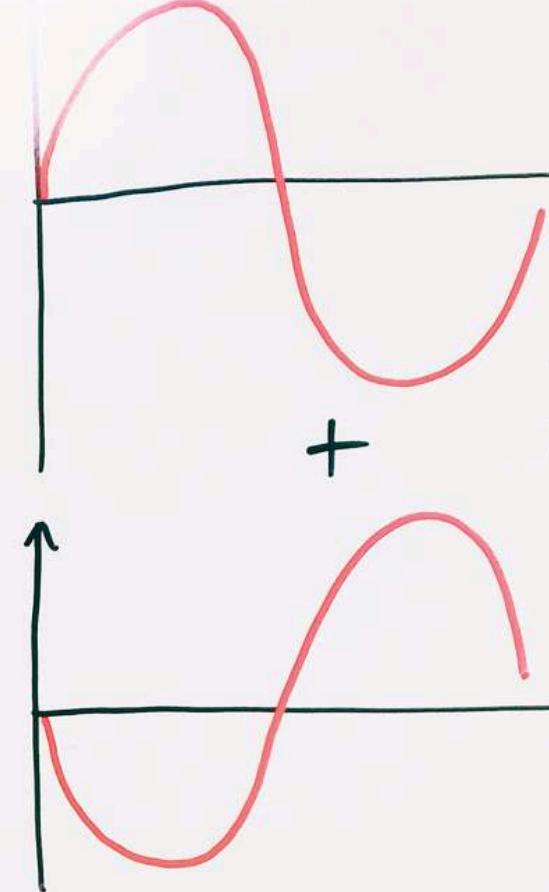
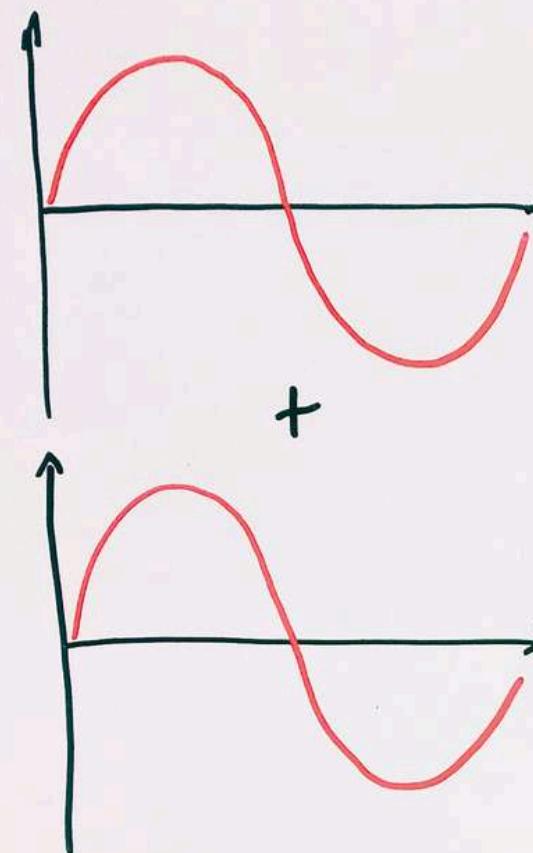
DIFRAÇÃO:



INTERFERÊNCIA:



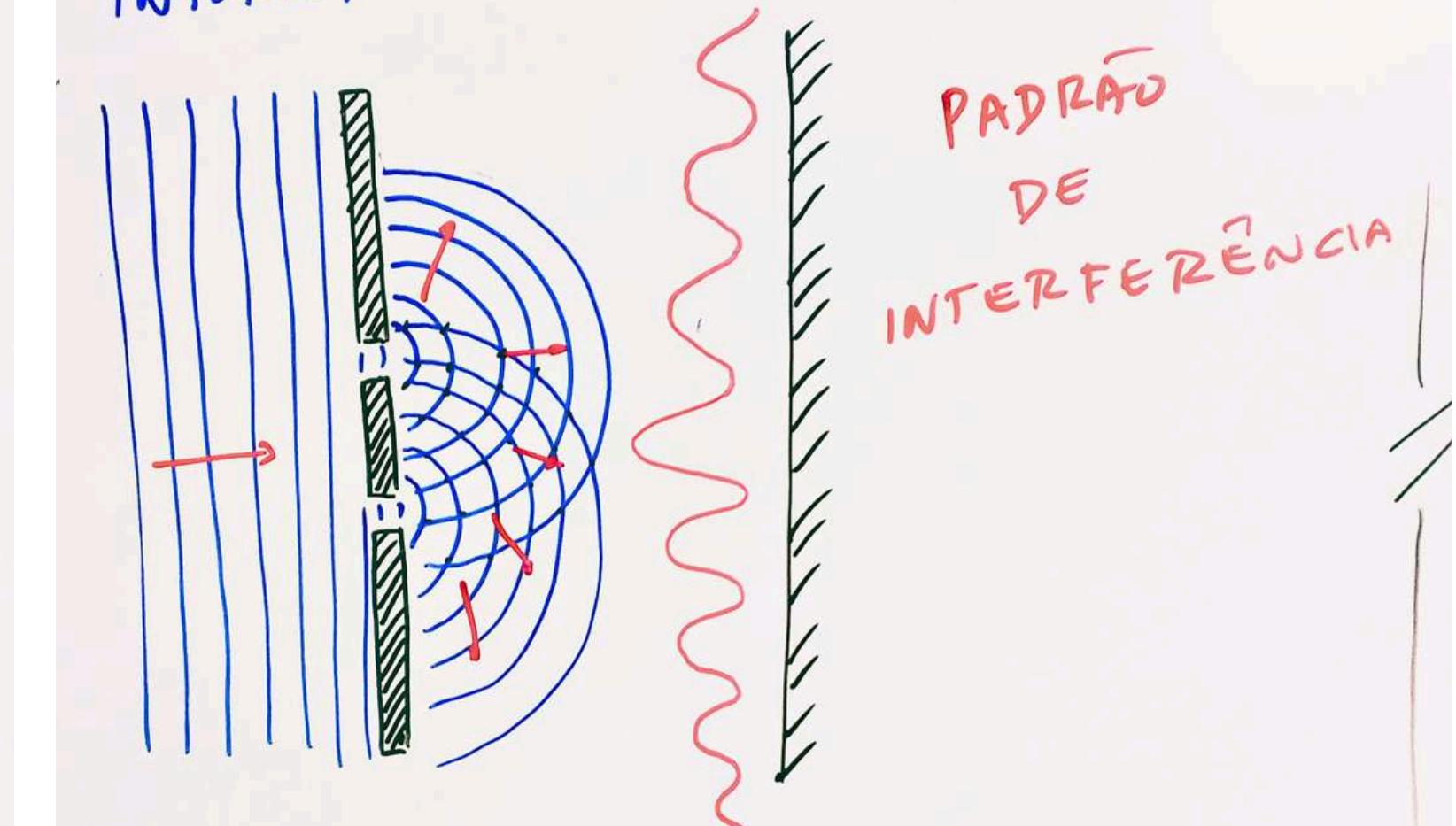
EM UMA LINHA:



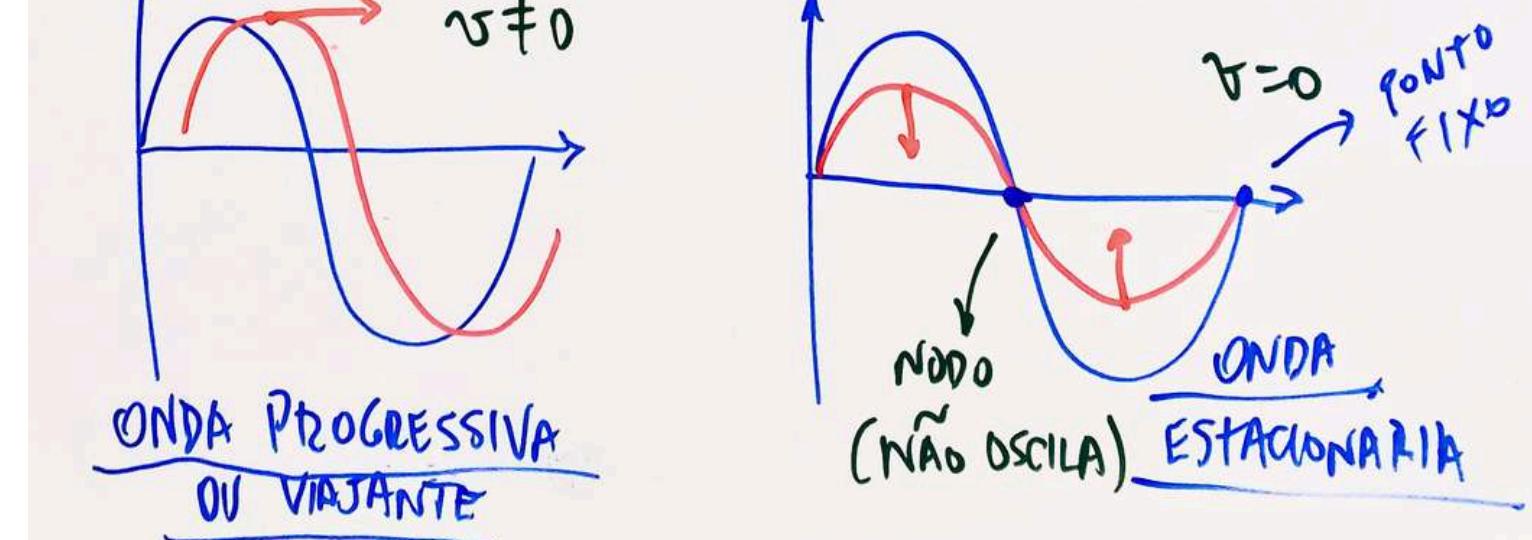
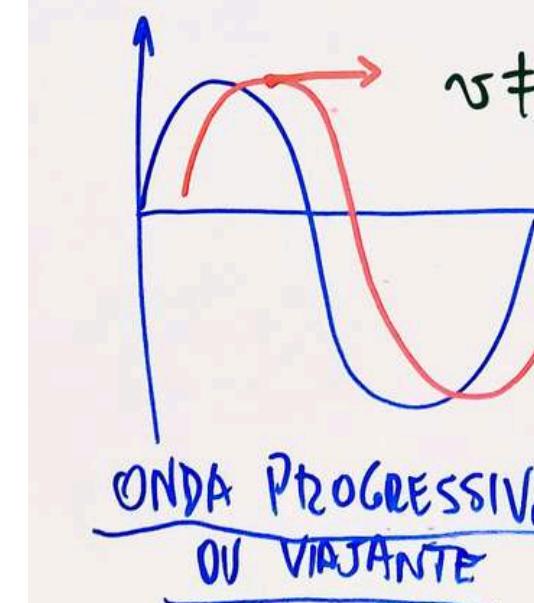
INTERFERÊNCIA
CONSTRUTIVA

INTERFERÊNCIA
DESTRUTIVA

INTERFERÊNCIA + DIFRAÇÃO:



- ONDAS PODEM SER PROGRESSIVAS (SE DESLOCAM EM UMA VELOCIDADE v) OU ESTACIONÁRIAS, QUE ESTÃO CONFINADAS EM UMA REGIÃO

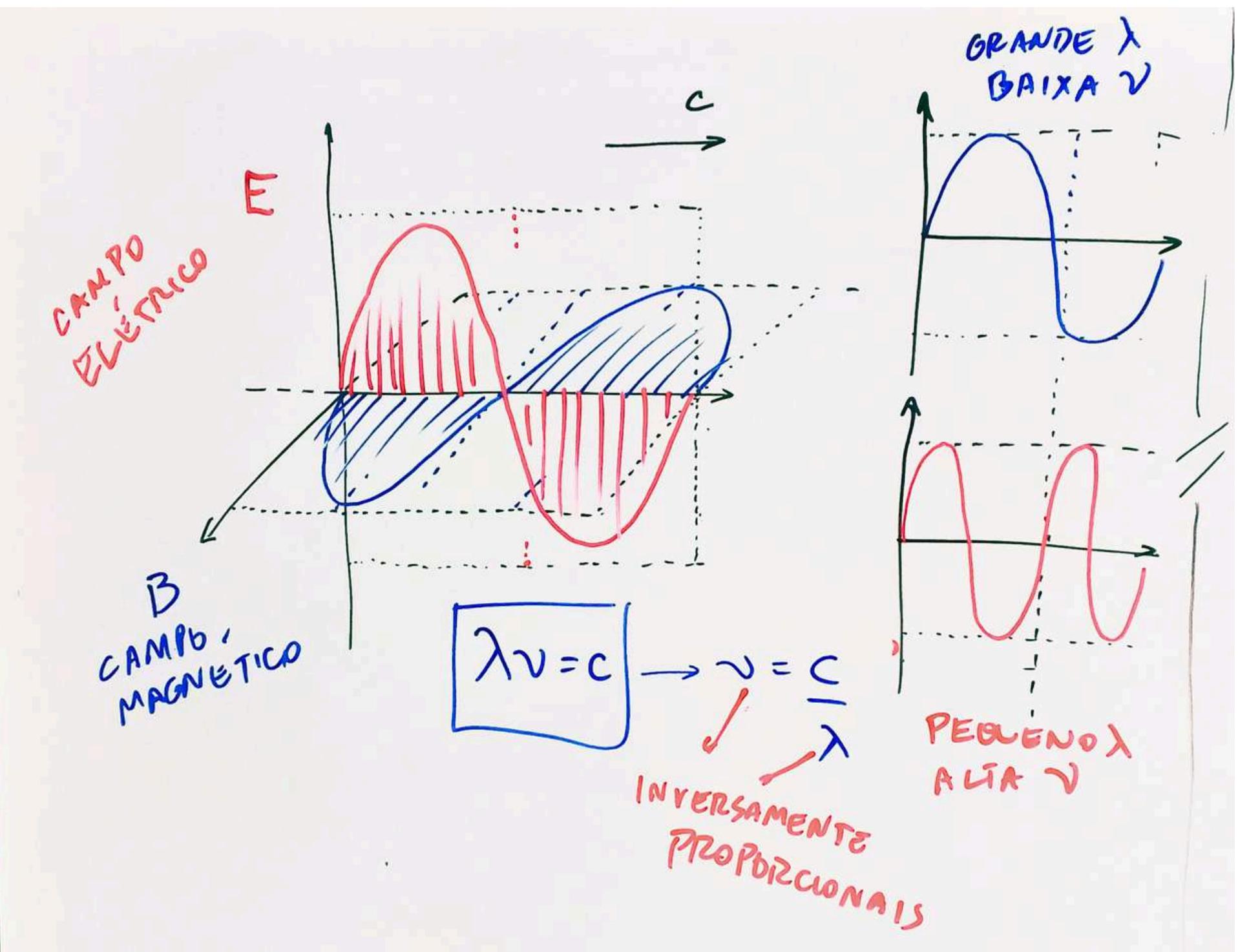


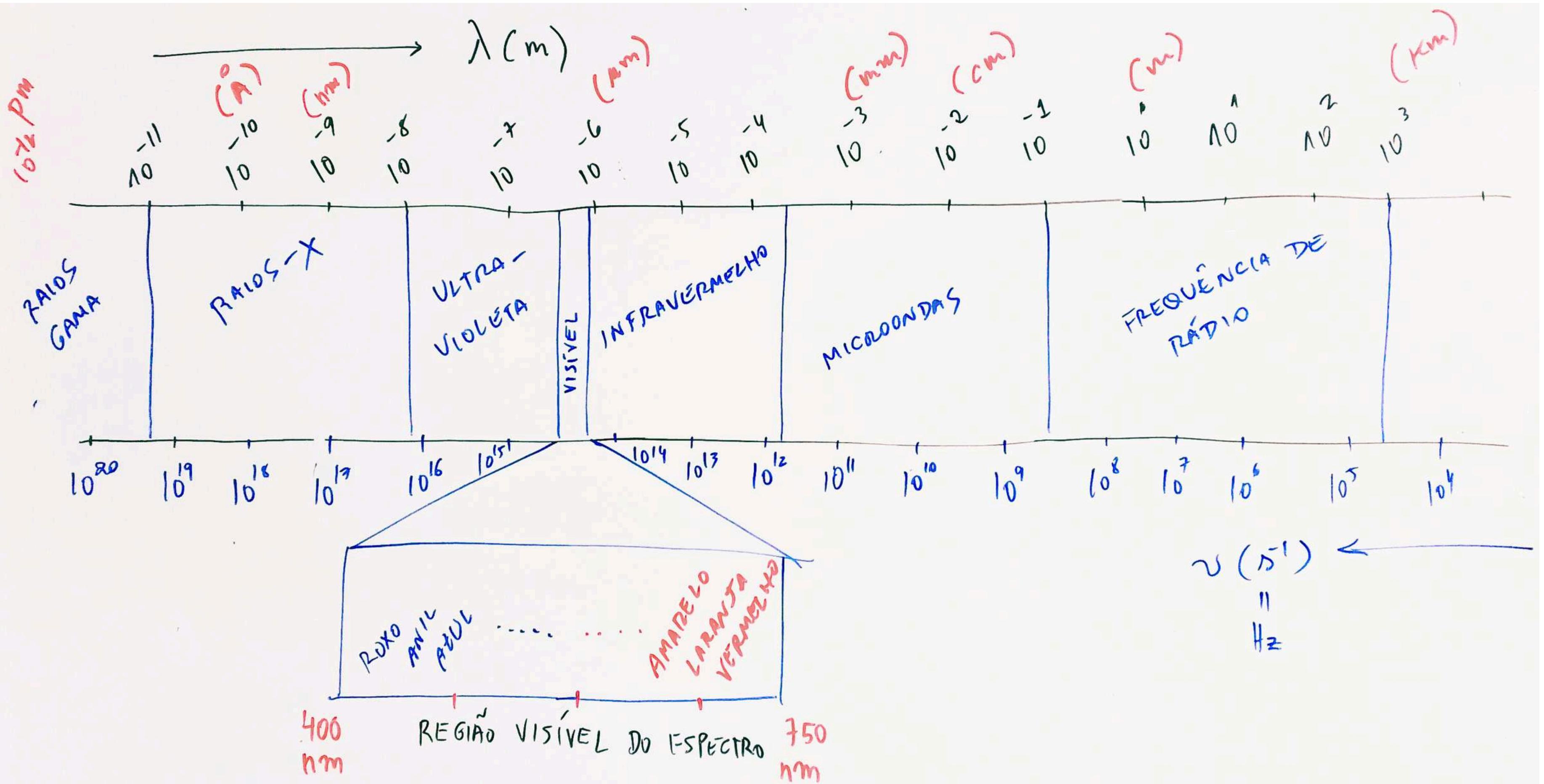
ONDA
ESTACIONARIA

- ONDAS ESTACIONÁRIAS → O RESULTADO DA INTERFERÊNCIA DE ONDA EM SENTIDOS OPOSTOS (EX.: CORDA DE VIOLÃO)

* LUZ

- JAMES CLERK MAXWELL, EM 1861-1862, MOSTROU QUE A LUZ, EM SUAS DIFERENTES FORMAS, TAMBÉM SÃO ONDAS. NESTE CASO ONDAS ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS PERPENDICULARES QUE SE PROPAGAM NO VÁCUO COM A VELOCIDADE DA LUZ, c , PREVIAMENTE CONHECIDA.
- ESSA RADIACÃO ELETROMAGNÉTICA PODE SE APRESENTAR COM DIFERENTES FREQUÊNCIAS (OU, ANALOGAMENTE, COMPRIMENTOS DE ONDA), FORMANDO O ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO





EXERCÍCIOS (ONDAS): 6.14, 6.16, 6.17,
6.19, 6.20, 6.21, 6.81

PRIMÓRDIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

* FALHAS DA MECÂNICA E DO ELETROMAGNETISMO CLÁSSICOS

- APESAR DO ELEVADO PODER EXPLICATIVO, ESSAS TEORIAS NÃO TIVERAM SUCESSO AO DESCREVER CERTOS FENÔMENOS DESCOBERTOS ENTRE OS SÉCULOS XIX E XX.

Foi necessária a introdução do conceito de QUANTIZAÇÃO (DISCRETIZAÇÃO) DE GRANDEZAS FÍSICAS, COMO A ENERGIA.

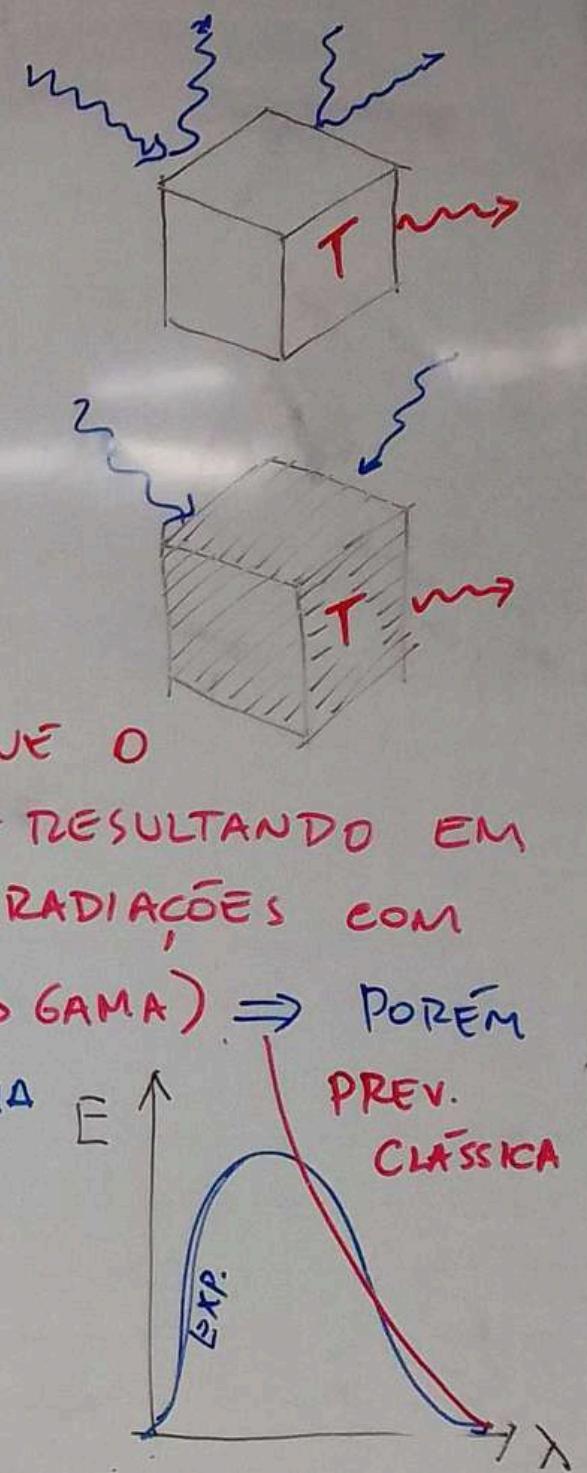
RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO

- CORPOS LIBERAM RADIAÇÃO ELÉTROMAGNÉTICA EM FUNÇÃO DE REFLEXÃO E TRANSMISSÃO DE LUZ, E PELA EMISSÃO DEVIDA A VIBRAÇÕES EM SUA ESTRUTURA, PROPORCIONAL À TEMPERATURA.

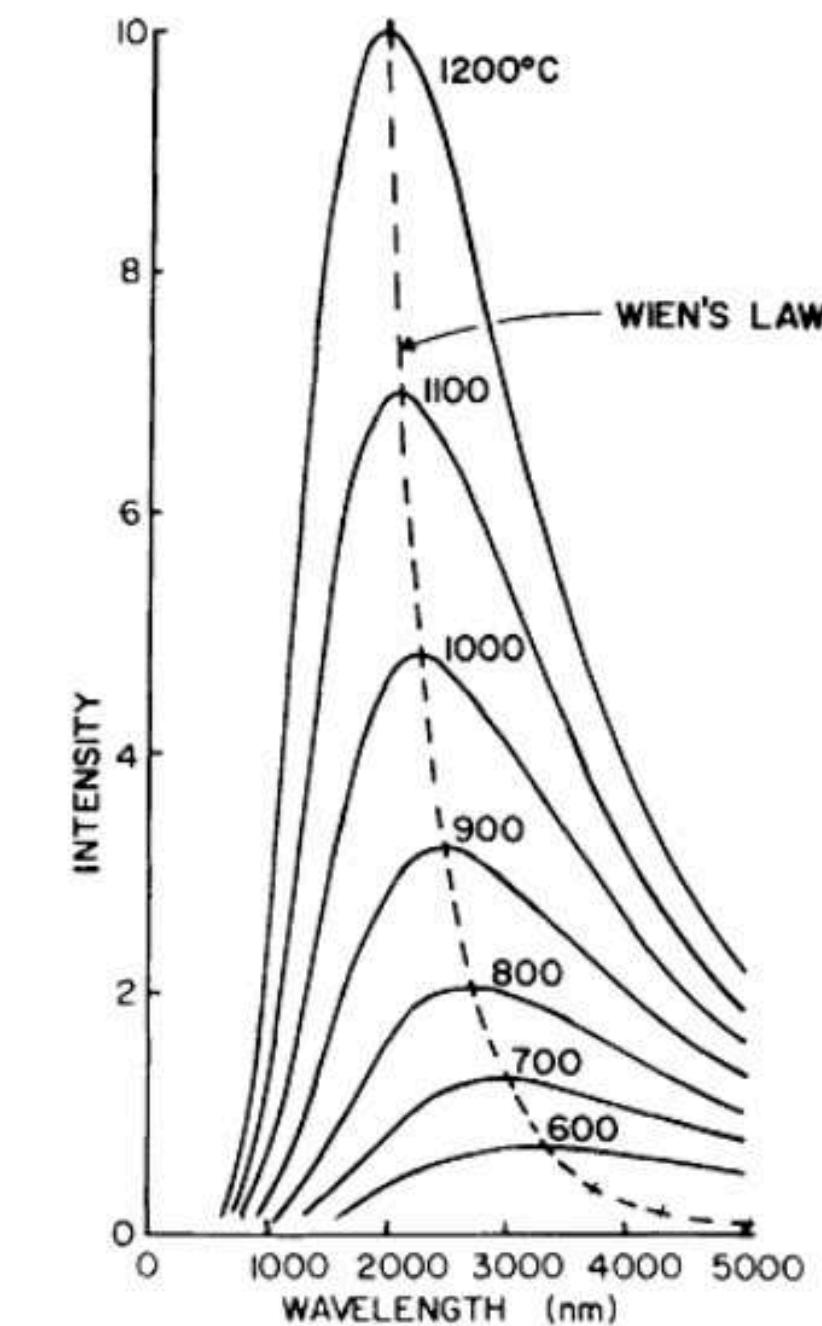
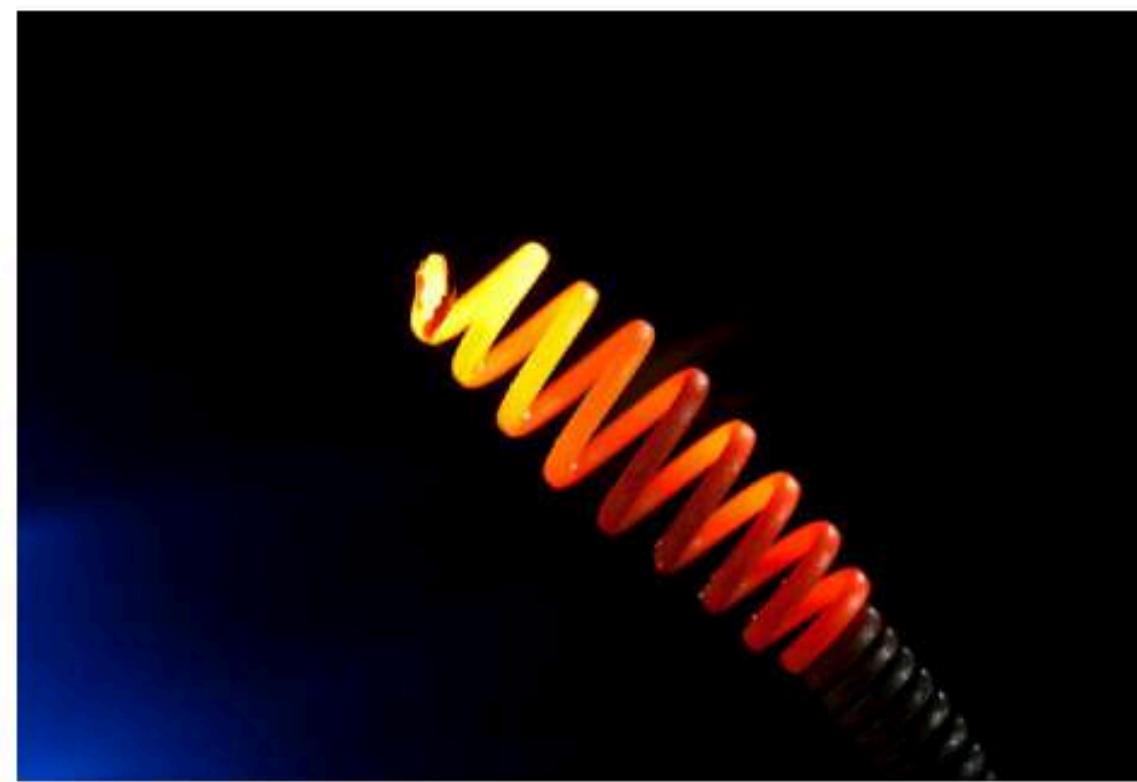
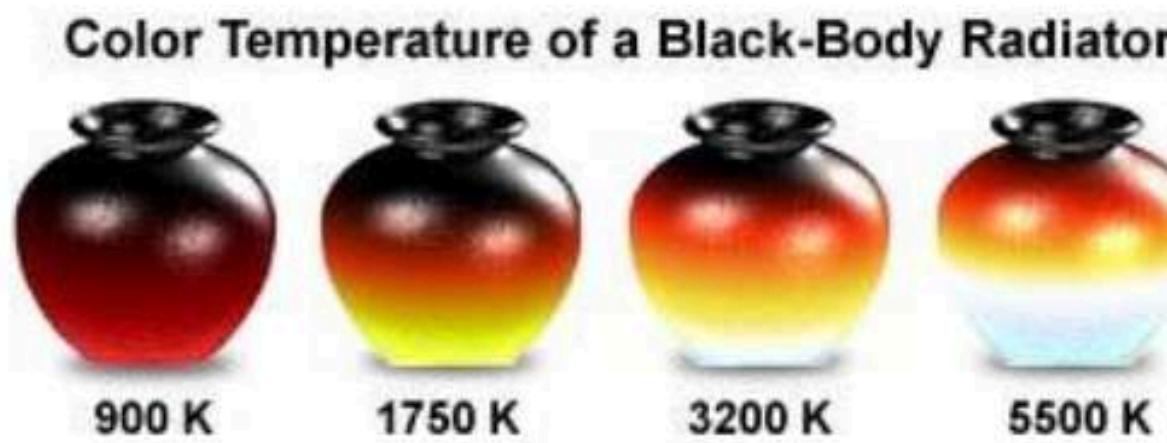
- A RADIAÇÃO EMITIDA POR UM CORPO NEGRO SE DEVE UNICAMENTE À TEMPERATURA.

- QUANDO AQUECIDO, O CORPO NEGRO PASSA A EMITIR INFRAVERMELHO E, COM O AUMENTO DE T , VERMELHO, AMARELO, ATÉ FICAR BRANCO E LEVEMENTE AZULADO.

- NA TEORIA CLÁSSICA, SE PREVIA QUE O AQUECIMENTO MAIOR CONTINUARIA RESULTANDO EM OSCILAÇÕES MAIS INTENSAS, E EM RADIACÕES COM MAIOR FREQUÊNCIA (RAIOS-X E RAIOS GAMA) \Rightarrow PORÉM ISSO NÃO OCORRE: A QUANTIDADE DE ENERGIA RELATIVA A EMISSÃO DESSAS RADIACÕES COM BAIXO λ É MUITO PEQUENA, TÃO MAIS λ É MENOR

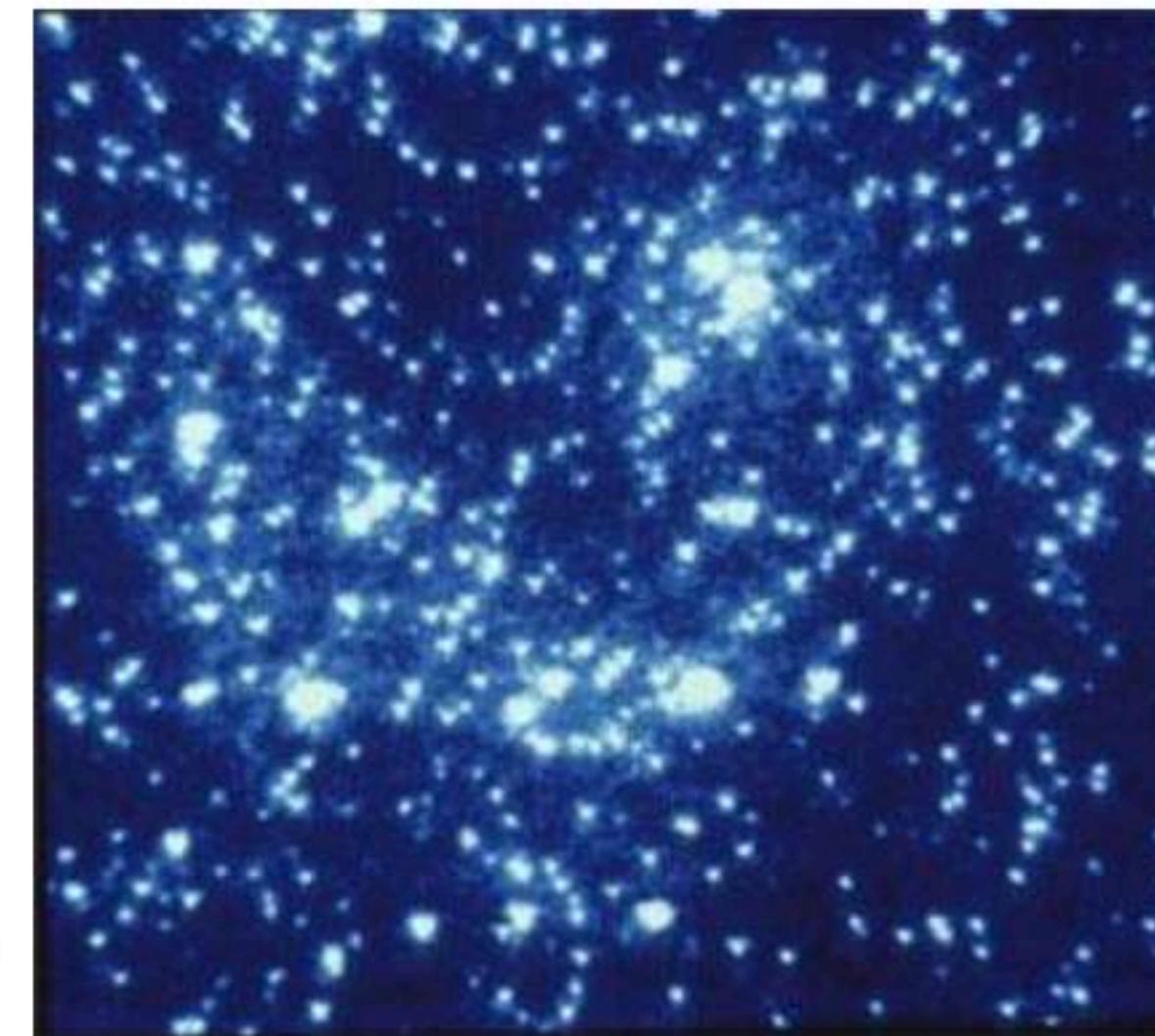
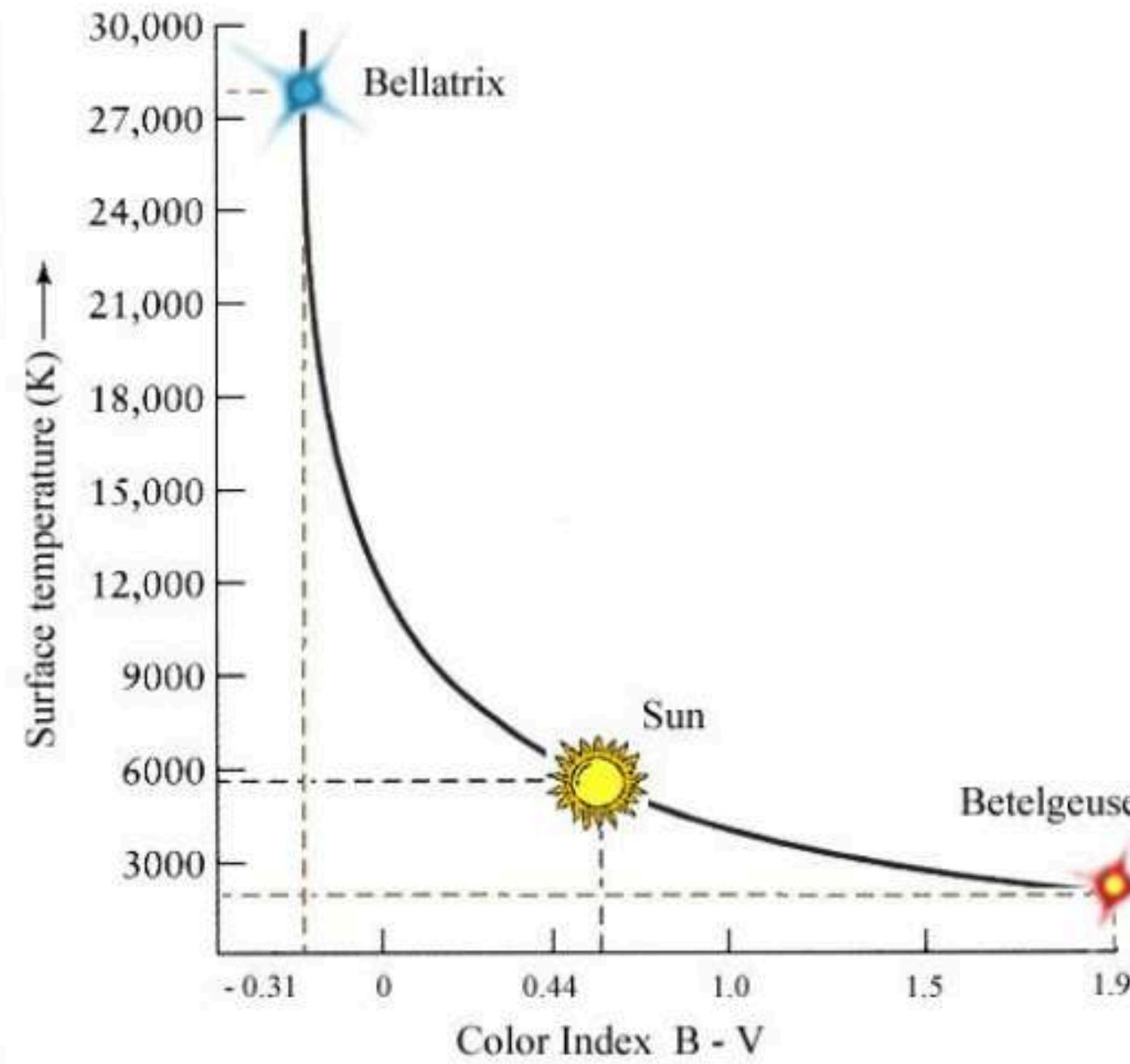


Radiação do corpo negro



Nassau, K.; The Fifteen Causes of Color: The Physics and Chemistry of Color; *COLOR Research and Application*, 12 (1), 4 (1987);

Cor das estrelas



- MAX PLANCK SUBERIU UMA SOLUÇÃO EFETIVA PARA O PROBLEMA: AS ENERGIAS DOS OSCILADORES, PROPORCIONAIS A FREQUÊNCIA DE OSCILAÇÃO, DEVEM SER MÚLTIPLOS INTEIROS DE UMA ENERGIA MÍNIMA.

$$E = nE_0 = nh\nu_0$$

$n = 1, 2, 3 \dots$

ENERGIA DO OSCILADOR → *CONSTANTE DE PLANCK* ($6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$) → *FREQUÊNCIA DO OSCILADOR*

- O AUMENTO DA TEMPERATURA É INSUFICIENTE PARA FORNECER ENERGIA PARA OSCILAÇÕES DE TÃO ELEVADA FREQUÊNCIA. CONSEQUENTEMENTE, A ENERGIA INRADIADA NESTA REGIÃO DO ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO CAI.

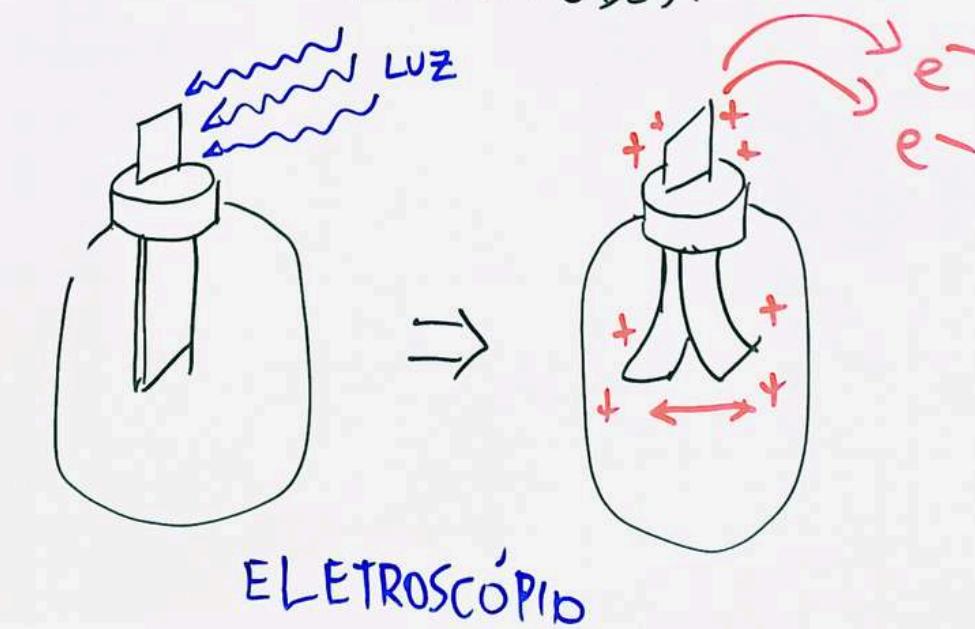
QUESTÕES (ONDAS): 6.14, 6.16, 6.17, 6.19, 6.20, 6.21, 6.81

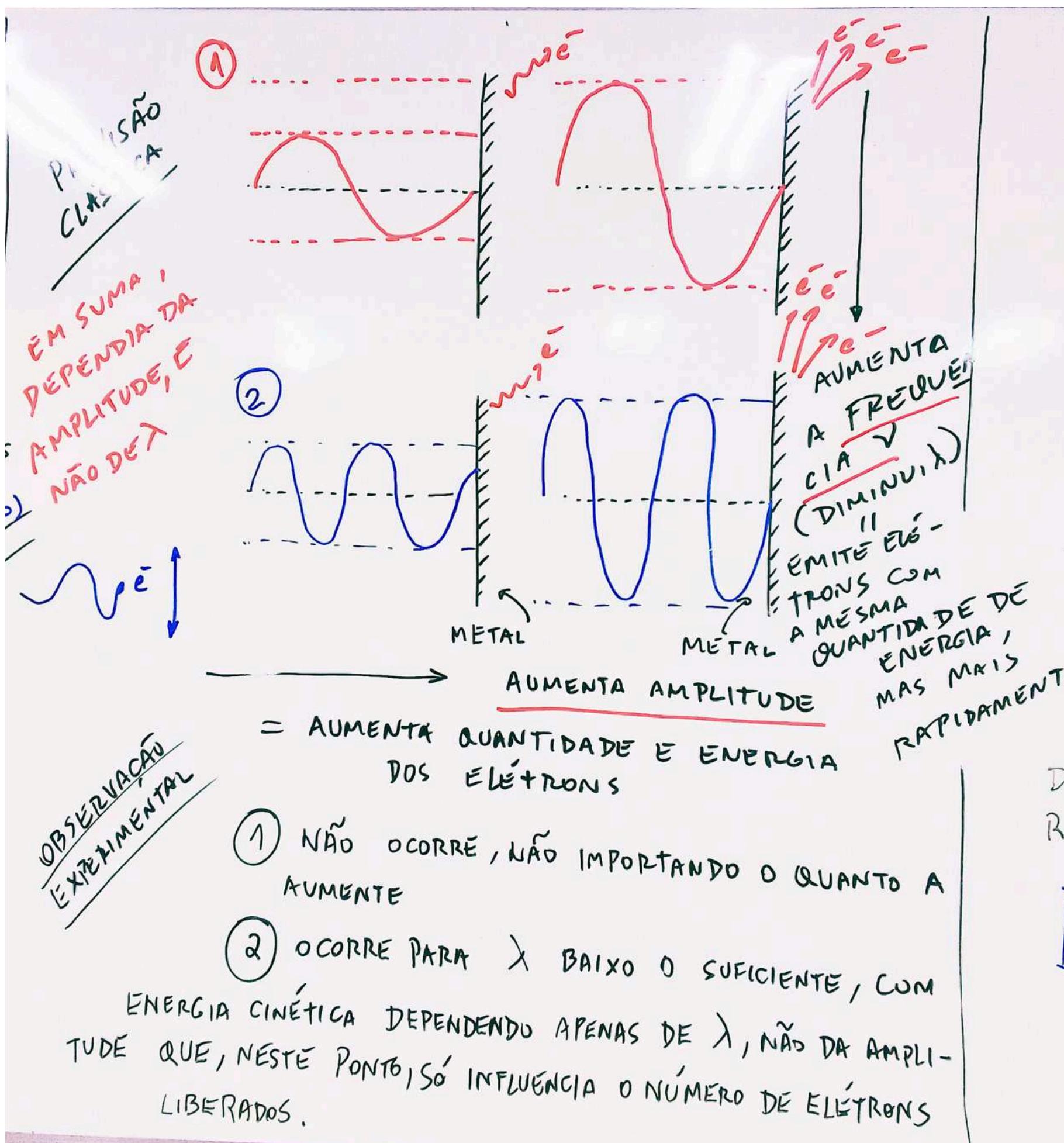
QUESTÕES: 6.24, 6.25, 6.26, 6.30, 6.31, 6.33
(CORPO NEGRO, EFEITO FOTOELÉTRICO...)

⇒ PRIMÓRDIOS... RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO...
(SLIDES) ↑

• EFEITO FOTOELÉTRICO

- A INCIDÊNCIA DA LUZ PODE REMOVER ELÉTRONS DA SUPERFÍCIE DE UM METAL (EFEITO FOTOELÉTRICO)
- PELA TEORIA CLÁSSICA, QUALQUER METAL PODERIA TER SEUS ELÉTRONS REMOVIDOS SE A LUZ, DE COMPRIMENTO DE ONDA λ , TIVER ELEVADA INTENSIDADE (AMPLITUDE).





- OU SEJA, A EMISSÃO DEPENDE DE λ ,
E APENAS AIXO DE CERTO λ_0 (OU,
SIMILARMENTE, ACIMA DE CERTO v_0)
ELÉTRONS SÃO EJETADOS. QUANTO MAIOR
A INTENSIDADE DA LUZ, MAIS ELÉTRONS
SÃO REMOVIDOS. QUANTO MAIOR A FRE-
QUÊNCIA, MAIS ENERGIA CINÉTICA ELES
POSSUEM.
- EINSTEIN EXPLICOU O FENÔMENO AS-
SUMINDO QUE A RADIACÃO ELETROMAG-
NÉTICA E COMPOSTA POR PARTÍCULAS COM
ENERGIA QUANTIZADA (DISCRETA), ASSIM
COMO PLANCK. ANALOGAMENTE, A ENERGIA
DO FÓTON É PROPORCIONAL À FREQUÊNCIA DA
RADIACÃO:

$$E = h\nu$$

LOGO RADIAÇÃO COM MAIOR FREQUÊNCIA POSSUI MAIS ENERGIA

- A ENERGIA MÍNIMA PARA RETIRAR O ELÉTRON DO

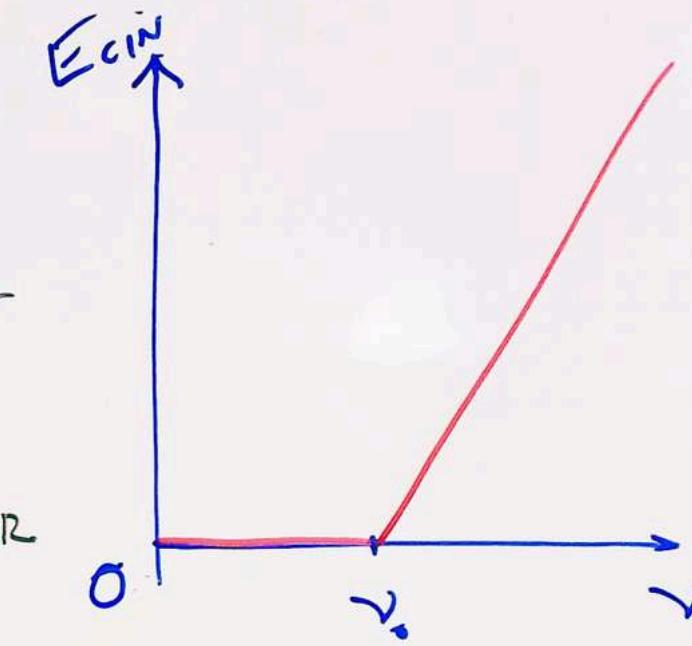
MÉTAL, CHAMADA DE FUNÇÃO TIRABALHO ϕ (QUE DEPENDE DE CADA METAL), ESTÁ ASSOCIADA À FREQUÊNCIA MÍNIMA QUE OS FÓTONS DEVEM POSSUIR PARA REMOVER OS ELÉTRONS:

$$\phi = E_0 = h\nu_0$$

- A ENERGIA CINÉTICA MÁXIMA DO ELÉTRON DEPENDE DA ENERGIA QUE SOBRA APÓS A USADA PARA REMOVÉ-LO:

$$E_{cin}(\text{máx.}) = h\nu - h\nu_0 = h\nu - \phi$$

- QUANTO MAIOR A INTENSIDADE, MAIS FÓTONS SÉ SUR FREQUÊNCIA É MAIOR QUE ν_0 , ENTÃO MAIS ELÉTRONS SÃO EJETADOS.

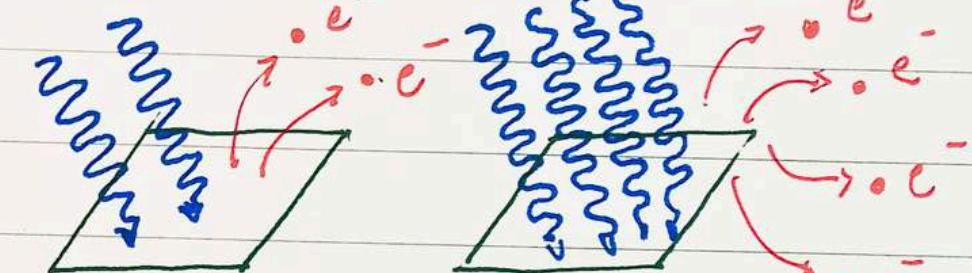


QUANTO MAIOR
ESSA ENERGIA,
MAIS "DIFÍCIL" REMOVER
O ELÉTRON DO METAL

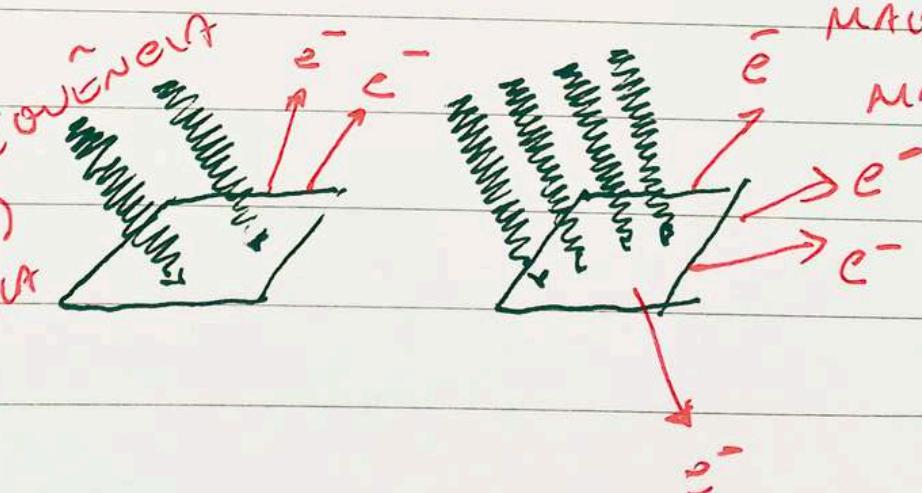
MAIOR FREQUÊNCIA =
MAIOR ENERGIA CINÉTICA



FREQUÊNCIA (ENERGIA) INSUFICIENTE
NADA



MAIOR INTENSIDADE,
MAIS ELÉTRONS



spiral

MAIOR FREQUÊNCIA ($\nu > \nu_0$)
= MAIS PARTIDOS
CINÉTICA ENERGIA

LINHAS VISUCAIS E O MODELO DE BOHR

SPECTRO DO ÁTOMO

- O MODELO ATÔMICO DE RUTHERFORD, QUE É UM MODELO CLÁSSICO, FAZIA UM PREDIÇÃO A ESTABILIDADE DO ÁTOMO
- ADICIONALMENTE, EU PREDIZE QUE O ÁTOMO EMITIRIA RADIAÇÃO EM FREQUÊNCIA CADA VEZ MAIOR (MAIS ENERGÉTICA), COBRINDO TODO O SPECTRO ELETROMAGNÉTICO, DE FORMA CONTÍNUA.
- NA VERDADE, O SPECTRO DE ABSORÇÃO DOS ÁTOMOS APRESENTA LINHAS ESCURAS CARACTERÍSTICAS DO ELEMENTO (ASSIM SE DESCOBRIU HÉLIO NO SOL), ENQUANTO OS OUTROS COMPRIMENTOS DE ONDA PERMANECEM O MATEMÁTICO SEM ALTERAÇÃO. EU SUSA, O ÁTOMO SÓ ABSORVE FREQUÊNCIAS ESPECÍFICAS DE LUZ.
- NESSES, POR OUTRO LADO, A EMISSÃO DE LUZ A PARTIR DOS ÁTOMOS EM CONDIÇÕES PROPÍCIAS (AMPOLAS DE CROOKES, COM DA CHAMA NA PRESENÇA DE ÍONS METÁLICOS) OCORRE NESTES EXATOS COMPRIMENTOS DE ONDA. UMA EMISSÃO AUMENTA PRATICAMENTE OS FOGOS DE ANTIFÍCIO, E A COR OBSERVADA DEPENDE DAS LINHAS DE EMISSÃO DO ÁTOMO DE CADA ELEMENTO.



ESPECTRO ELETRÔMAGNETICO
NA REGIÃO DO VISÍVEL
(CONTÍNUO, DISCRETO, INTENSO)

SPECTRO DE ABSORÇÃO DO H NA REGIÃO DO VISÍVEL
(DISCRETO, OBSCURUM)

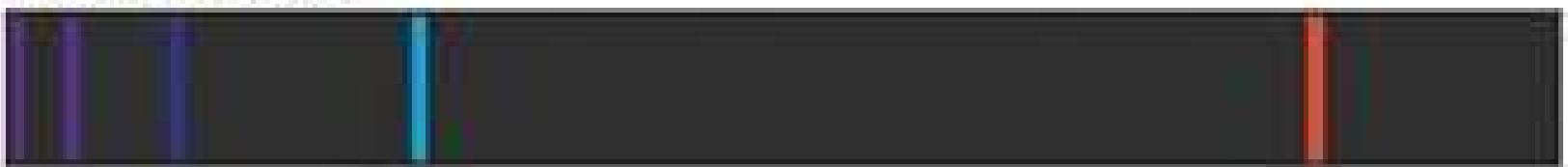
SPECTRO DE EMISSÃO DO H NA REGIÃO DO VISÍVEL
(DISCRETO, OBSCURUM)

spiral

Continuous

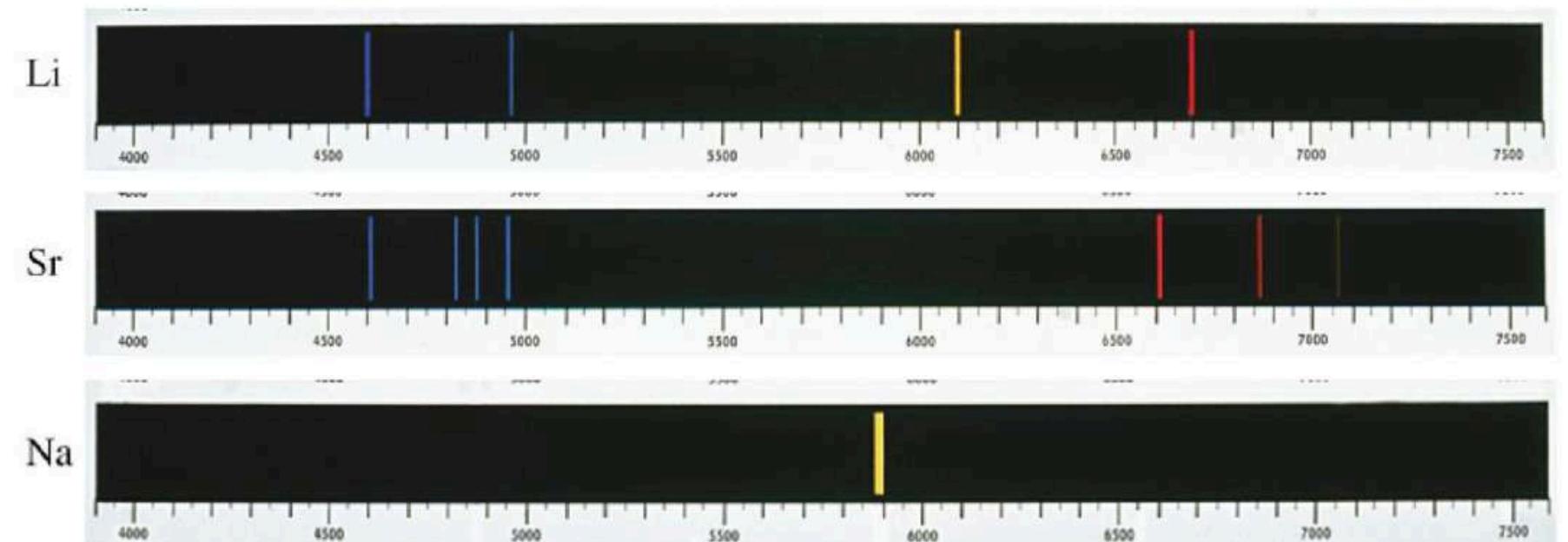
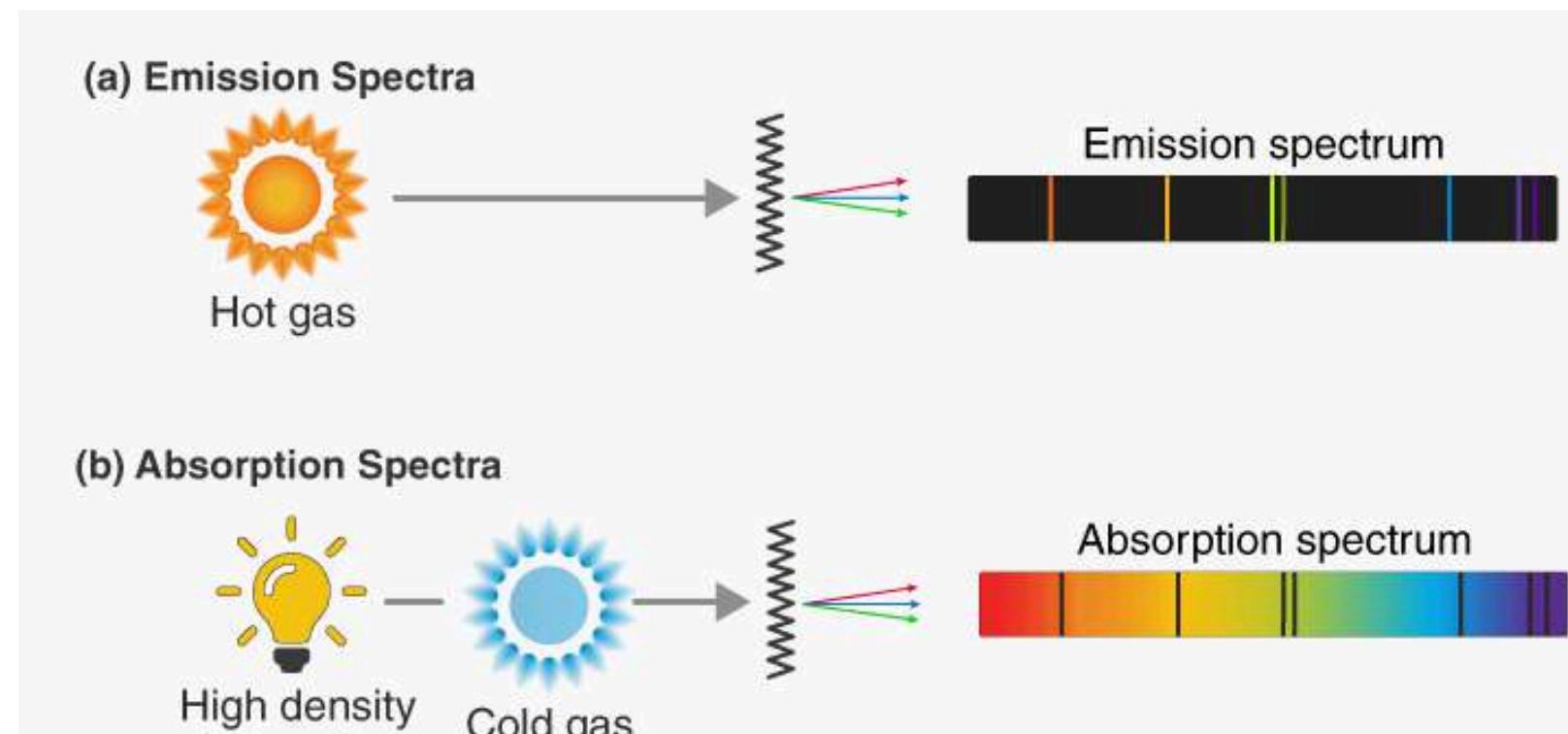
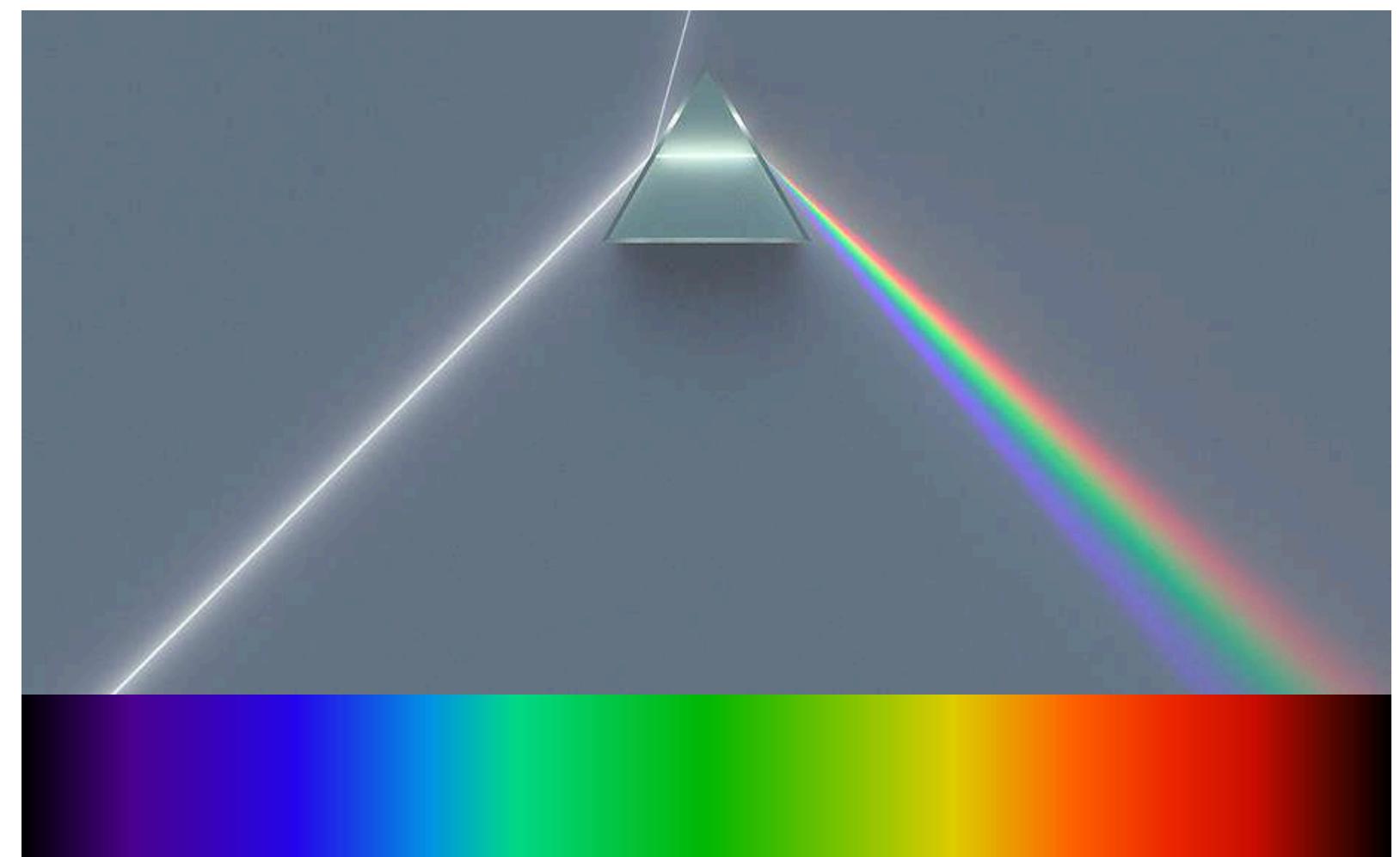
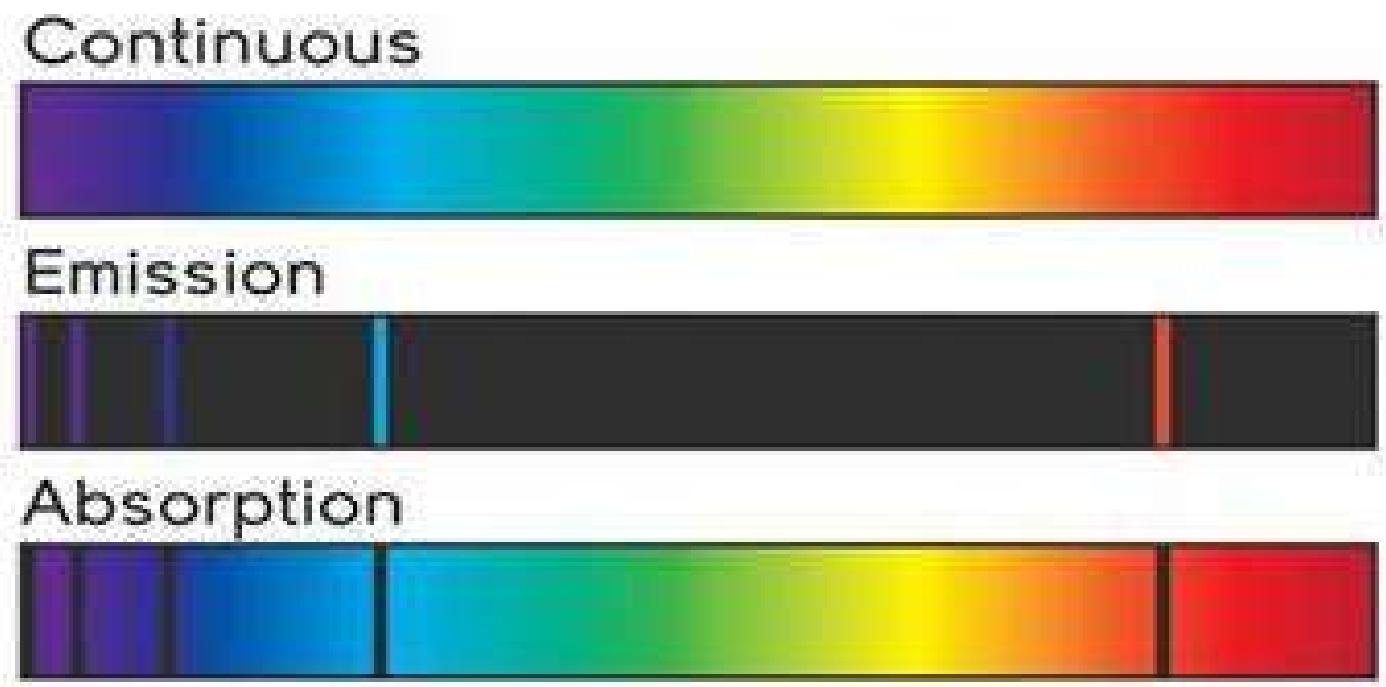


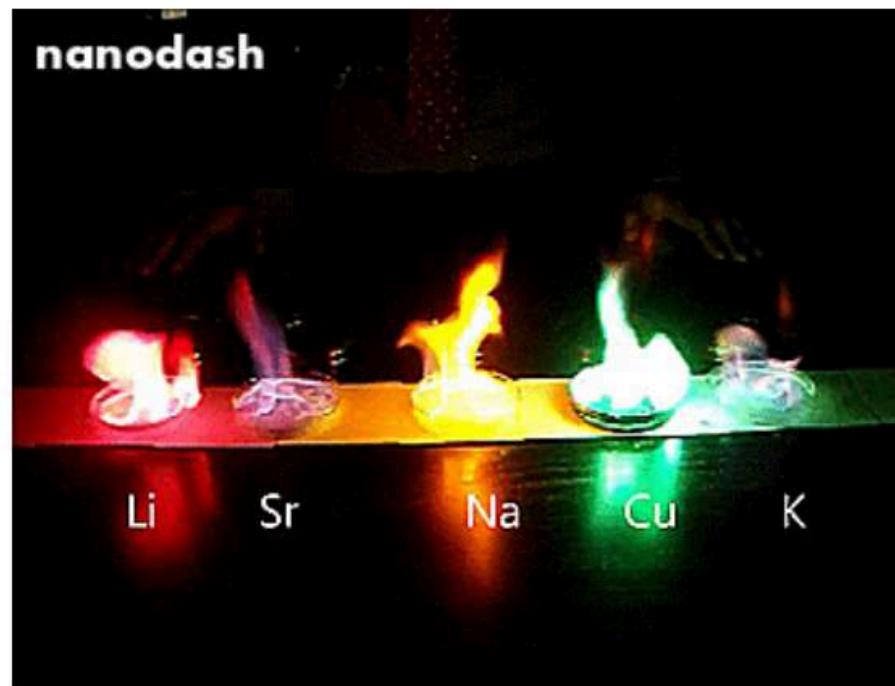
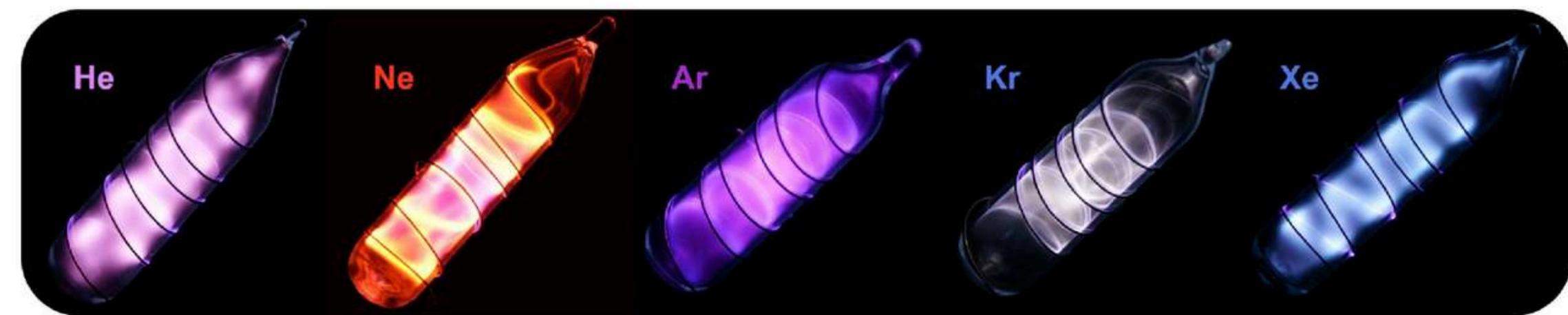
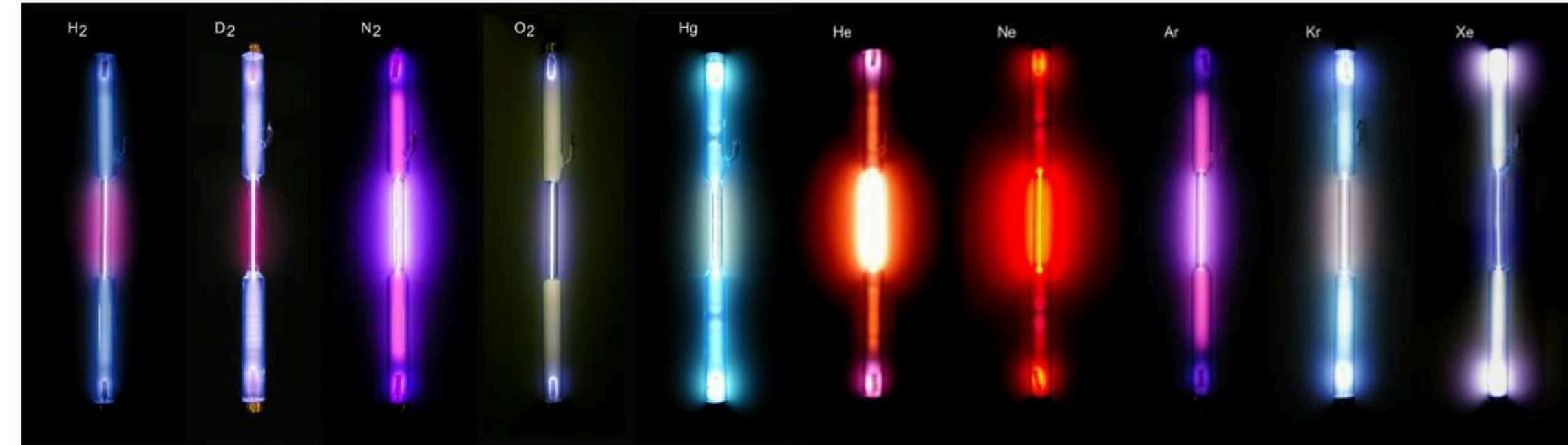
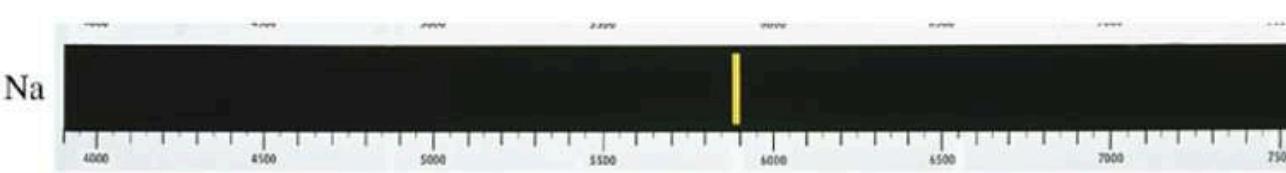
Emission



Absorption





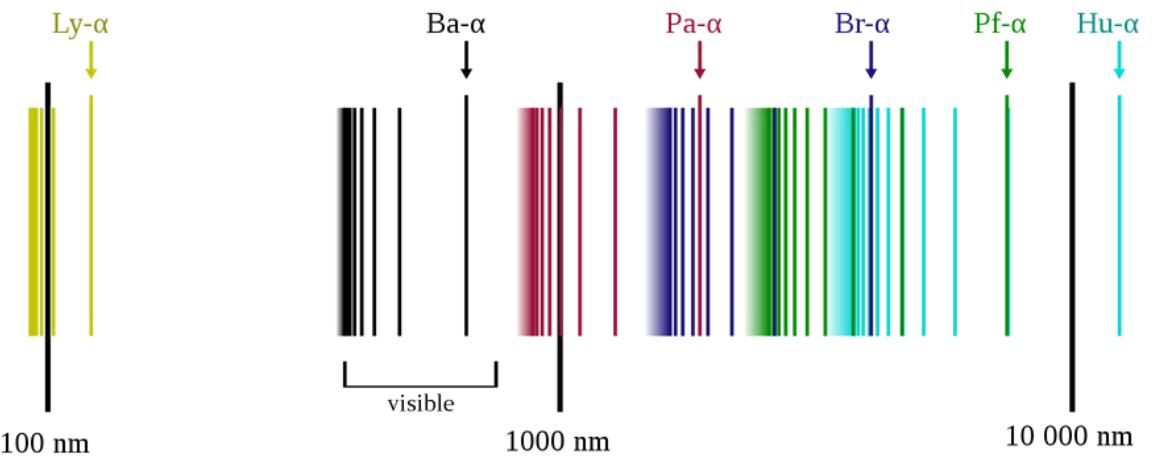


- PESQUISADORES INICIARAM, NO FIM DO SÉC. XIX, UMA BUSCA POR LEVACÕES EMPIRÍCAS PARA OS ESPECTROS DE LUMSSAS DAS VÁRIAS EMISSÕES. ENTRE ELES ESTAVA JOHANN BALMER, QUE FOI BEM SUCESSIVO EM DEMONSTRAR QUE AS LUMSSAS DE LUMSSAS DO HIDROGÊNIO SEGUAM A SEGUINTE RELAÇÃO:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

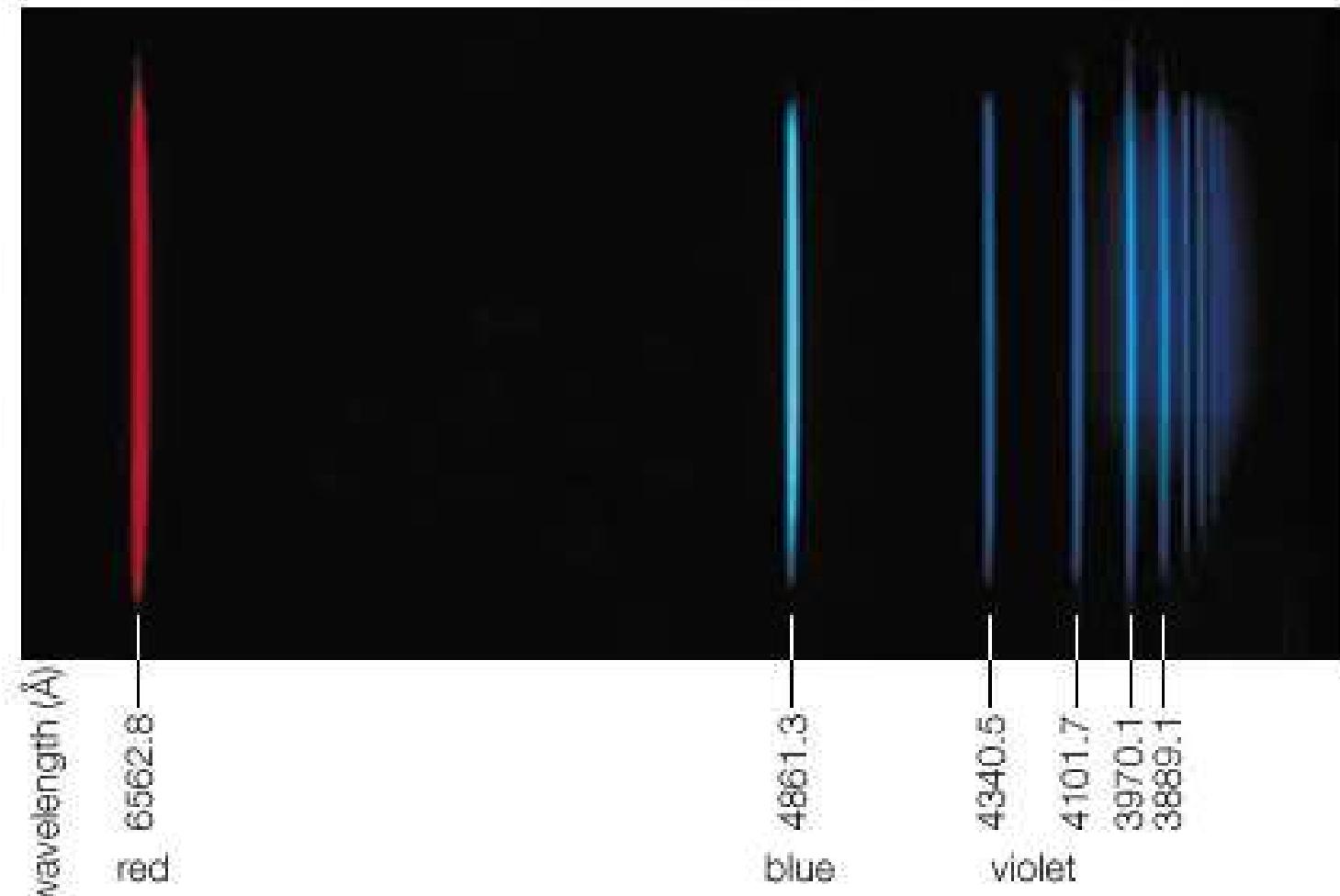
$1097.10^{-7} \text{ m}^{-1}$

- Sendo λ o comprimento de onda da radiação emitida, R_H chamada constante de RYDBERG (também bem sucedido na proposta de levacões para ospectros de vários íons) e n é um número intíro tal que $n > 2$. Outras lumssas do atomo de hidrogênio, em outras faixas do espectro eletromagnético, também foram descobertas por pesquisadores de maneira independente, todas seguindo uma levacão similar, mas dada em função de n_1 e n_2 , com ambos os números intíros, com n_1 sendo tal que é um valor característico da série (região do espetro ^{em} que o hidrogênio emite) e $n_2 > n_1$, uma sugestão de intíros que especifica as lumssas da série.



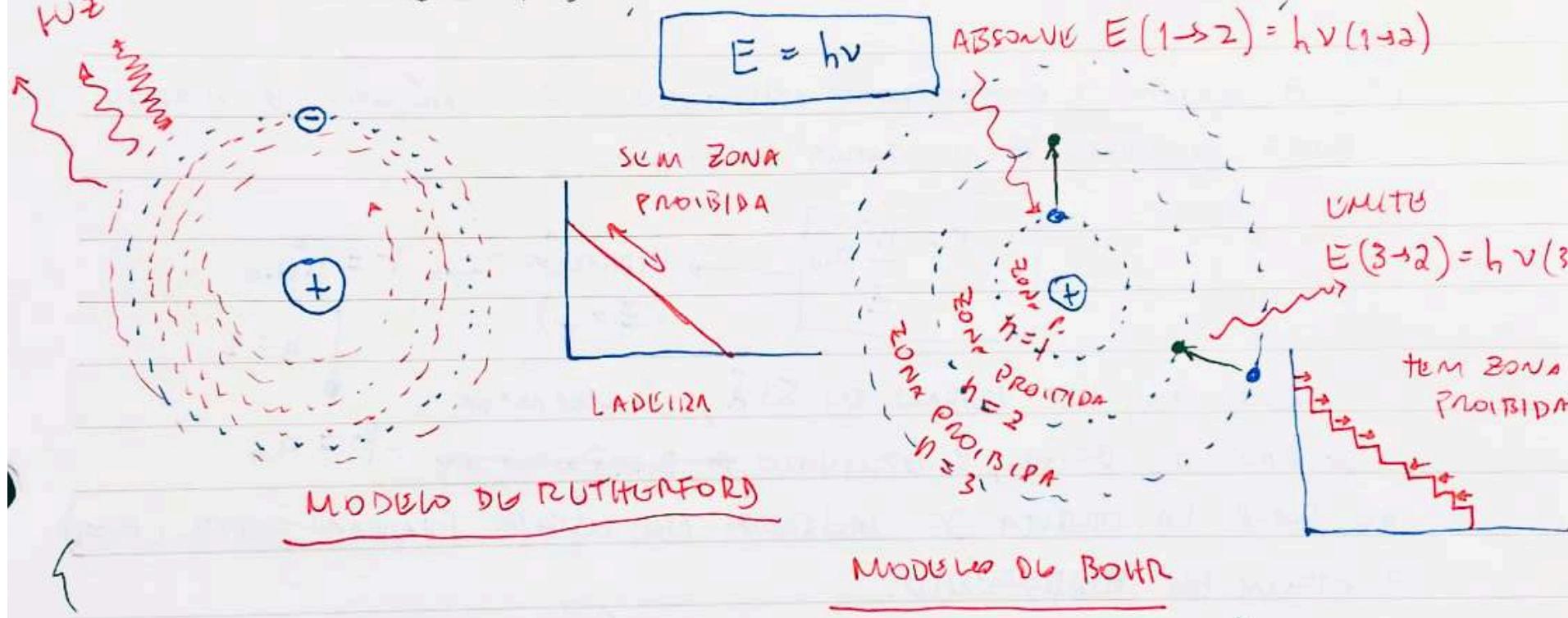
SÉRIE	n_1	n_2	REGIÃO	COMPRIMENTO DE ONDA, λ (Å)
LYMAN	1	2, 3, 4, 5, ...	ULTRAVIOLETA	920 - 1200
BALMER	2	3, 4, 5, 6, ...	VISÍVEL	4000 - 6500
PASCHEN	3	4, 5, 6, 7, ...	INFRAVERMELHO	9500 - 18750
BRACKETT	4	5, 6, 7	INFRAVERMELHO	17450 - 40500
PFUND	5	6, 7	INFRAVERMELHO	37860 - 75000

- NÃO SE SABIA A ORIGEM DO SUCESSO DESSAS E OUTRAS LEVACÕES NA REPRESENTAÇÃO DO ESPECTRO DE LUMSSAS. DE ITÓRICOS, INCLUSIVO DO HIDROGÊNIO.



PROPOSTA DE BOHR

- NIELS BOHR, INSPIRADO PELA TEORIA DO MAX PLANCK PARA EXPLICAR A RADIACAO DO CORPO NEGRO, PROPOS QUE O PROBLEMA DO MODELO DE RUTHERFORD PODERIA SER RESOLVIDO SE A ENERGIA DO ELETRON QUE CIRCUITA AO REDOR DO NUCLEO PODER ASSUMIR APENAS CERTOS VALORES DISCRETOS. COMO CONSEQUENCIA, O ELETRON TRAJEGARIA APENAS EM CERTAS ORBITAS ESTACIONARIAS, COM DISTANCIAS DO NUCLEO E ENERGIA SABIDAS FUNCOES DE UM NIVEL INTEGRAL, $r = r(n) \ L^E = E(n)$, E SO MIGRARIA DE UMA PARA A OUTRA SE RECEBESSE OU EMITISSE FOTONS COM ENERGIA IDENTICA A DIFERENCA DE ENERGIA ENTRE A ORBITA FINAL E INICIAL. A FREQUENCIA DESSA RADIACAO ELECTROMAGNETICA SUGERIU A EQUACAO DE PLANCK:



- BOHR GRAVOU SUA TEORIA COM BASE EM TRÊS POSTULADOS:
- ① O ELETRON É CAPAZ DE CIRCULAR O NÚCLEO EM ALGUMAS ÓRBITAS SEM PERDER ENERGIA. ESSAS SÃO CHAMADAS DE ÓRBITAS ESTACIONÁRIAS E ESTÃO ASSOCIADAS A CERTAS DISTÂNCIAS DISCRETAS DO NÚCLEO. O ELETRON NÃO PODE TRANSITAR ENTRADAS ÓRBITAS;
- ② A CADA ÓRBITA PERTENCIDA ESTÁ ASSOCIADA UMA ENERGIA PRINCIPAL, n , UM NÚMERO INTEIRO MAIOR OU IGUAL A 1: $E = E(n)$

- ③ ELETRONS PODEM GANHAR OU PERDER ENERGIA MIGRANDO DE UMA ÓRBITA PARA A OUTRA EM "SALTOS", ABSORVENDO OU EMITINDO RADIACAO ELECTROMAGNETICA, COM UMA CONSTANTE DE ENERGIA DETERMINADA PELA DIFERENCA DE ENERGIA ENTRE OS NIVEIS SUGERIDO A EQUACAO DE PLANCK. OU SEJA, A DIFERENCA ENTRE DOIS NIVEIS COM ENERGIAS i E j TEM QUE:

$$\Delta E = E_j - E_i = h\nu \quad (E_j > E_i)$$

A vertical energy level diagram. The bottom level is labeled E_i . The top level is labeled E_j . An upward arrow between them is labeled $h\nu$. A downward arrow between them is labeled $-h\nu$. To the right of the levels, the text "ABSORVE UNITE" and "EMITE hν" is written above the arrows.

PELOS POSTULADOS APLICADOS A ATOMOS COM CARGA NUCLEAR, Ze E APENAS UM SUB-

PELOS POSTULADOS APLICADOS A ÁTOMOS
COM CARGA NUCLEAR Ze E APONAS UM ELECTRÔNICO, ABSORVE ENERGIA

ΔE

COM CARGA NUCLEAR Ze E APONAS UM ELECTRÔNICO, ABSORVE ENERGIA

CHAMADOS DE ÁTOMOS HIDROGÓNIOS (COMO O H, He⁺, Li²⁺, ...),
QUE PODE PROVOCAR O ÁTOMO A ESTAR NA QUINTA:

① A DISTÂNCIA ENTRE O NÚCLEO E O ELECTRÔNICO É MAIOR

PARA MAIORES n E CARGA DO NÚCLEO, Ze :

$$r = \frac{h^2}{Za_0} \rightarrow \text{HIDROGÓNIO} \rightarrow r = h^2 a_0$$

$(Z=1)$

$h=1$

ONDE a_0 , EM Torno do 53\AA , É O RAIO DA ÓRBITA DO ELECTRÔNICO NO ESTADO FUNDAMENTAL ($n=1$) DO ÁTOMO DE HIDROGÓNIO.

HISTÓRICAMENTE, ASSOCIAMOS CADA NÍVEL A UMA CHAMADA NOMEADA DE ACORDO COM LETRAS MAIÚSCULAS

n	CAMADA/NÍVEL
1	K
2	L
3	M
4	N
...	...

② A ENERGIA EM CADA ORBITAL É MÁS NEGATIVA, TÃO MAIS NEGATIVA QUANTO MAIOR É A CARGA NUCLEAR OU MAIS INTENSA (PRÓXIMA DO NÚCLEO, COM MAIOR n) A CARGA:

$$E(n) = -\frac{Ze^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2} \rightarrow \text{HIDROGÓNIO } (Z=1) \rightarrow E(n) = -\frac{e^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$\int n=L$

③ A ABSORÇÃO DA ENERGIA DE UM FÓTON COM FREQUÊNCIA ν PERMITE O ELECTRÔNICO DE UM NÍVEL COM ENERGIA MENOR (NO SENSEDO DE MAIS NEGATIVA) PARA UM MAIOR. PARA UM "SALTO" DE UM NÍVEL i PARA UM f ($n_f > n_i$):

$$\Delta E = E_f - E_i = \frac{Ze^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n_f^2} - \left(-\frac{Ze^2}{2a_0} \cdot \frac{1}{n_i^2} \right) = \frac{Ze^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

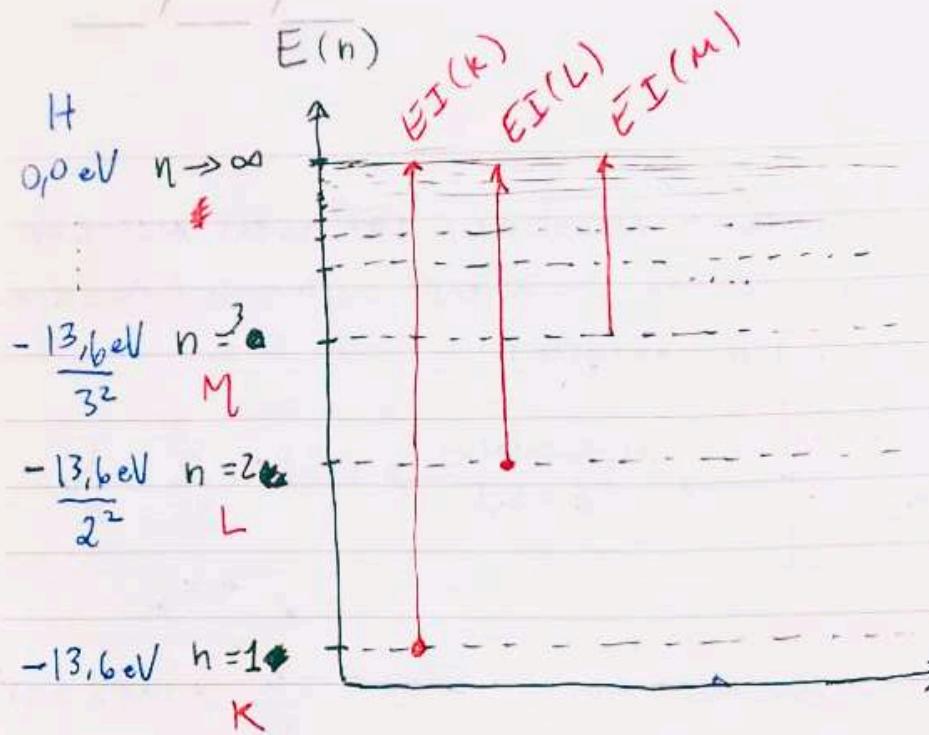
PARA UM ÁTOMO DE HIDROGÓNIO:

$$\Delta E = +13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

A TRANSIÇÃO DE UM ELECTRÓN DO NÍVEL FUNDAMENTAL DES-
TE ATÔMICO PARA n_f TORNANDO-SE INFINITO CORRESPONDE
A REMOÇÃO DE UM ELECTRÓN DA CAMADA K DO ATÔMICO DE
HIDROGÉNIO: SE $n_f \rightarrow \infty$, $E(\infty) \propto -1/\infty^2 \rightarrow 0$ (NAS
HÍDRAS DE ENERGIA QUE JUSTIFICAM A UNIÃO ENTRE O
NÚCLEO). PORTANTO, O FORMULISMO DE BOHR PODEMOS CALCULAR A ENERGIA DE IONIZAÇÃO PARA O ELECTRÓN EM
DIFERENTES CAMADAS, INCLUINDO HIDROGÉNIO:

$$\text{ENERGIA DE IONIZAÇÃO} = 13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = \frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

DO ELECTRÓN NA
CAMADA n COM
 n
(NO HIDROGÉNIO) \uparrow EI



UNERGIAS PARA
TRANSIÇÕES DE ELECTRÓN
DE DIFERENTES CAMADAS
DO ATÔMICO DE HIDROGÉNIO

OUTRA APLICAÇÃO RELEVANTE DAS LEIS DE BOHR É DIVULGADA
EMISSÃO DE RÓTONS, COM ENERGIA PROPORCIONAL A V E ATRELADA
AOS NÍVEIS QUANTICOS n_i E n_f ($n_i \rightarrow$ INICIAL \rightarrow FINAL,
 ~~$n_f < n_i$~~ $n_f > n_i$ \rightarrow DESLIGAR $n_f > n_i$ \rightarrow $n_2 > n_1$)

$$\Delta E = h\nu = \frac{Ze^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

COMO V E λ ESTÃO RELACIONADOS,
BOHR FOI CAPAZ DE:

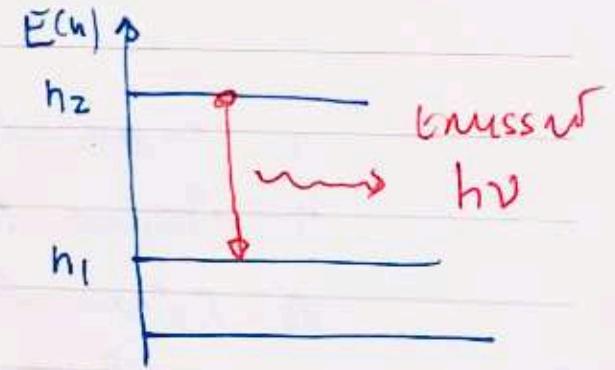
- a) OBTER UMA EXPRESSÃO PARA O COMPROMISSO DO ONDE
DE ENERGIAS DE ATÔMOS HIDROGÊNÓIDES, SUBSTITUÍDO DO
ATÔMICO DE HIDROGÊNIO E SUAS VÍRGENES SÉRIEIS

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{Ze^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{Ze^2}{2hc a_0} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Podendo assim

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{e^2}{2hc a_0} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

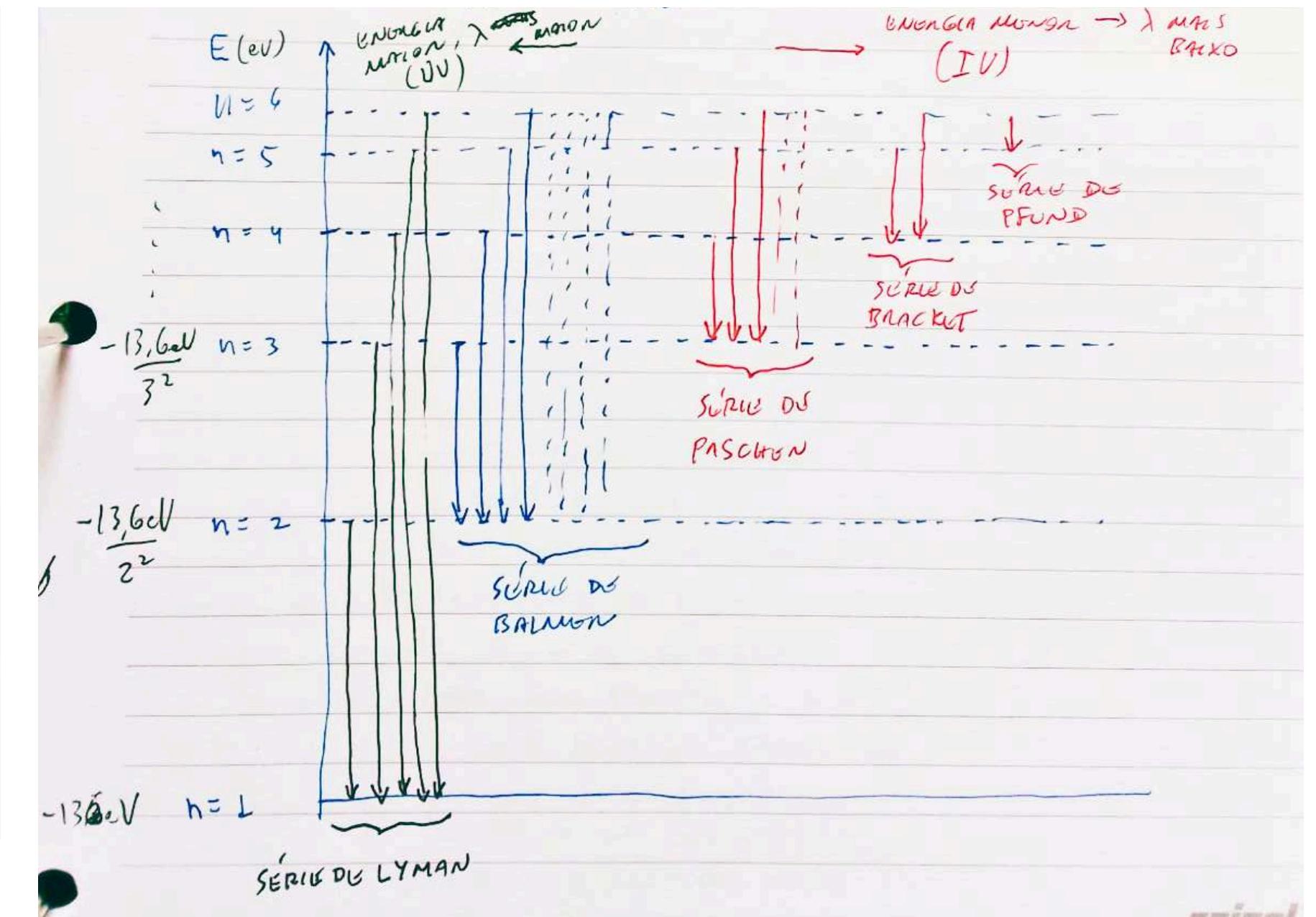
HIDROGÊNIO
 $Z = 1$

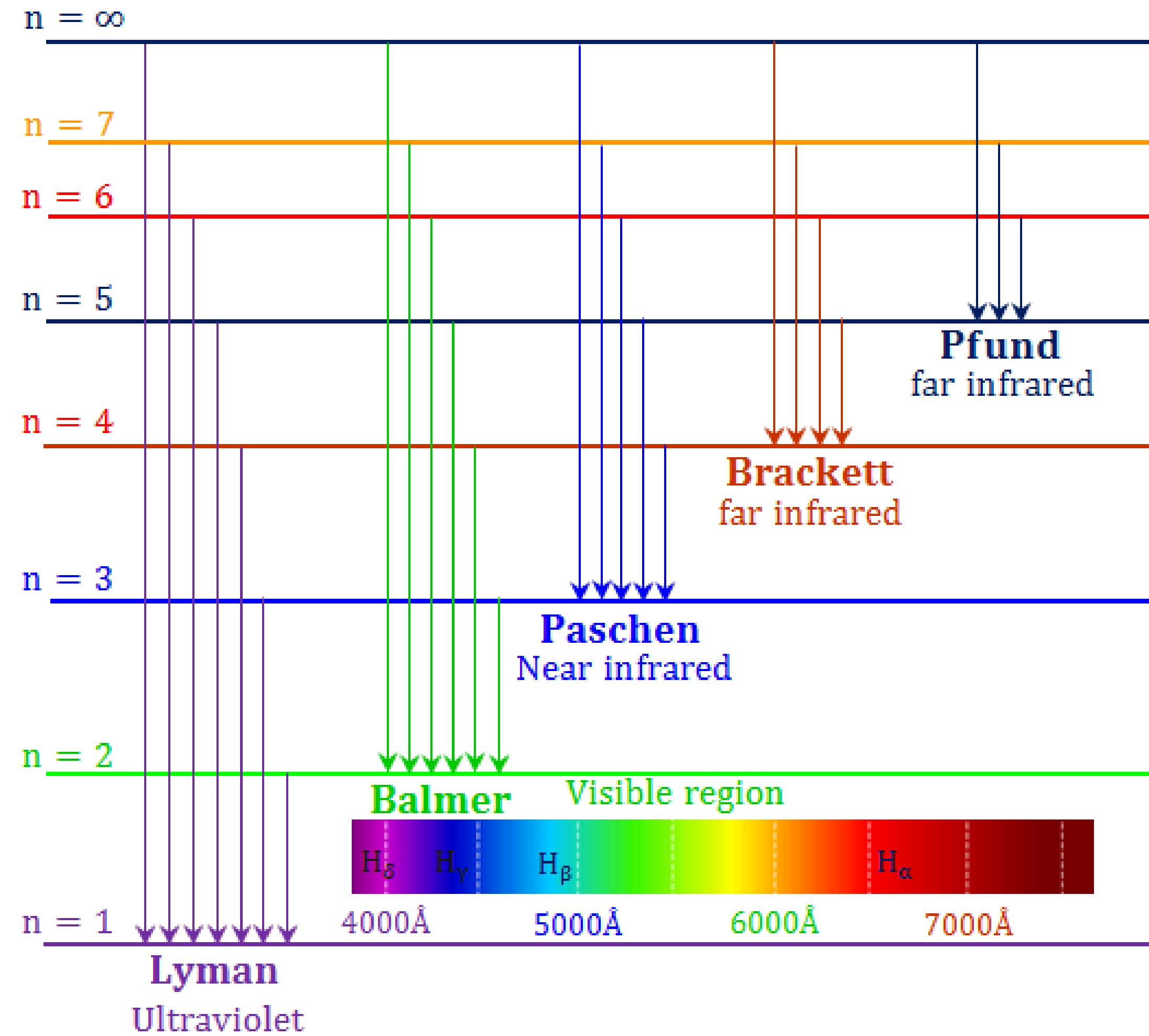


De modo que podemos estimar com sucesso a constante de RYDBERG A PARTIR DE constantes fundamentais (para comparação com a teoria de BOHR):

$$R_H = \frac{e^2}{2 \hbar c a_0}$$

b) Pode finalmente explicar a origem das linhas de emissão dos átomos com 1 elétron (como o hidrogênio): elas se devem a transições energéticas dos elétrons (hoje chamadas de transições eletromagnéticas) de um nível com nelson menor (n_{menor}) para um de menor energia. Com isso, podemos explicar todas as séries do hidrogênio em termos de transições para um nível característico de cada série.





Exercícios (Bohr): 6.36, 6.37, 6.41, 6.43, 6.46, 6.83

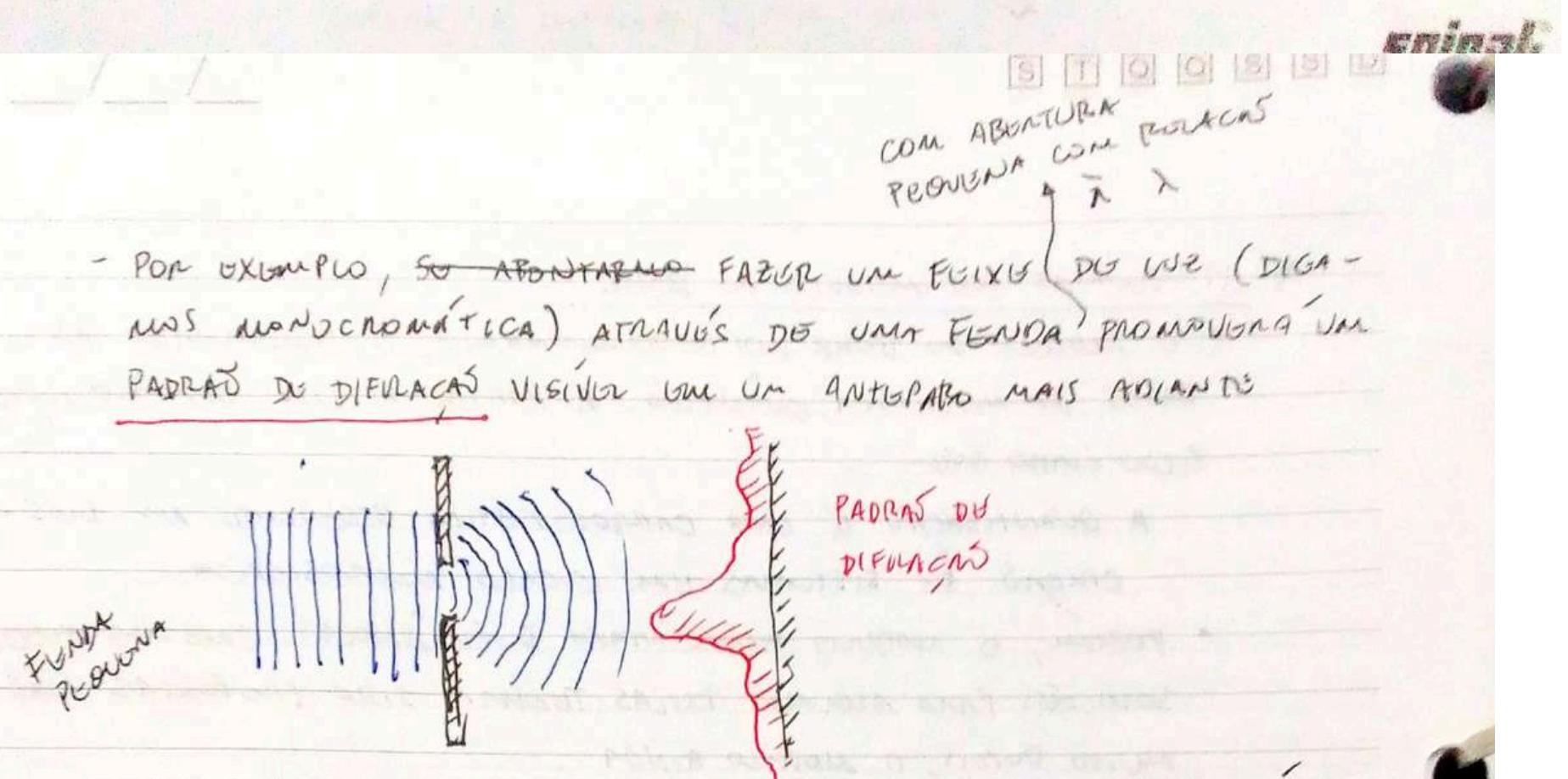
* PROBLEMAS NO MÓDULO DE BOHR

- O MÓDULO DE BOHR FOI REVOLUÇÃO RÍO, E SEDIMENTOU AS BASES DA MECÂNICA QUÂNTICA. A PARTIR DE SUA CONTRIBUIÇÃO, FICOU CLARO QUE:
A QUANTIZAÇÃO É UMA CARACTERÍSTICA ESSENCIAL NA DESCRIÇÃO DE SISTEMAS EM ESCALA MACROSCÓPICA
- PORÉM, O MÓDULO APRESENTAVA DIFÍCULDADES. EMBORA ALGUMAS SOLUÇÕES PARA ALGUMAS DIFÍCULDADES TENHAM SIDO PROPOSTAS NÃO MUITO DEPOIS, O MÓDULO AINDA:
 - ERA LIMITADO A DESCRIÇÃO DE ÁTOMOS HIDROGÊNÓIDES (ISTO É, COM UM ELECTRÓN), FALHANDO NA PREVISÃO DE, POR EXEMPLO, OS POCOS DE ENERGIA DOS ÁTOMOS POLIELECTRÔNICOS (COM MAIS DE UM ELECTRÓN).
 - ERA INCAPAZ DE EXPLICAR OS PATRIMOS DE INTENSIDADES ASSOCIADOS ÀS TRANSIÇÕES LUMINOSAS DOS ÁTOMOS, ISTO É, A INTENSIDADES DAS LINHAS NOS ESPECTROS DE EMISSÃO.
 - NEGLIGENCIAVA COMpletamente OUTRA CARACTERÍSTICA RELATIVA A SISTEMAS A NÍVEL MACROSCÓPICO: A DUALIDADE DA ONDA-PARTÍCULA.

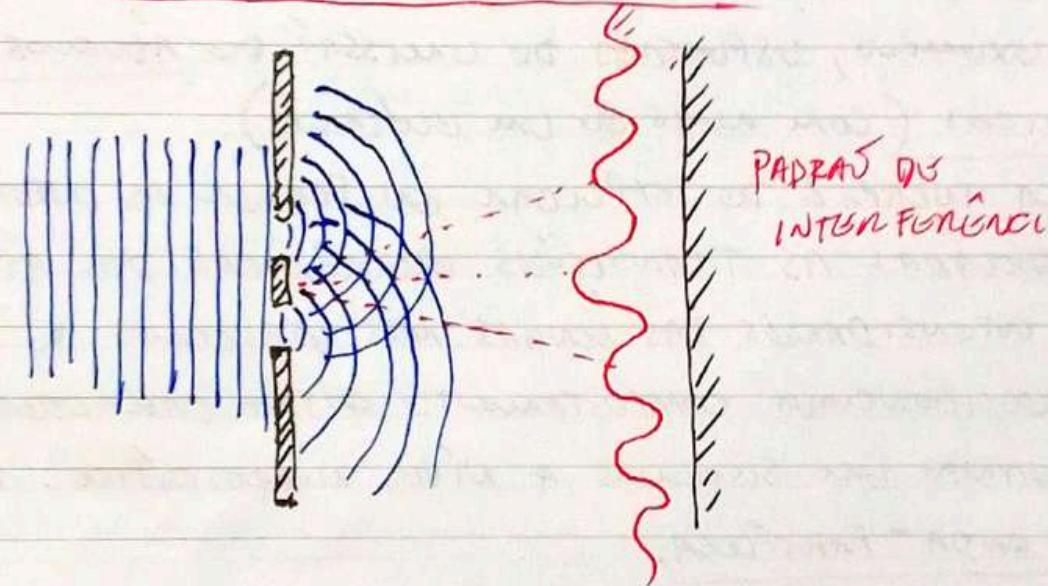
* DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA

- DESDE NEWTON E HUYGENS OS FÍSICOS DISCUDEM SOBRE A REAL NATURALEZA DA LUZ, SE A RADIAÇÃO ELECTROMAGNÉTICA ERA COMPOSTA POR ONDAS OU PARTÍCULAS. DE FATO, APÓS AS DESCRIÇÕES DE MAXWELL A TEORIA DE PLANCK FOI SEGUIR QUE DIVIDIU A PRIMEIRA HIPÓTESE. A LUZ, DE FATO, APRESENTA CARACTERÍSTICAS INERENTES A ONDAS, COMO:

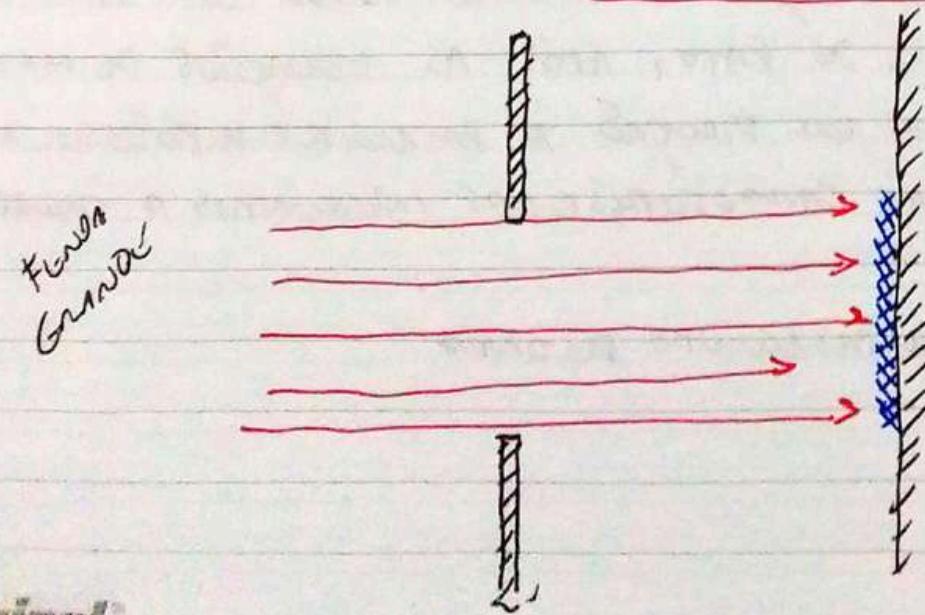
- FRANGIMENTO E COMPROMINTO DE ONDAS
- DIFRAÇÃO
- INTENSIVIDADE



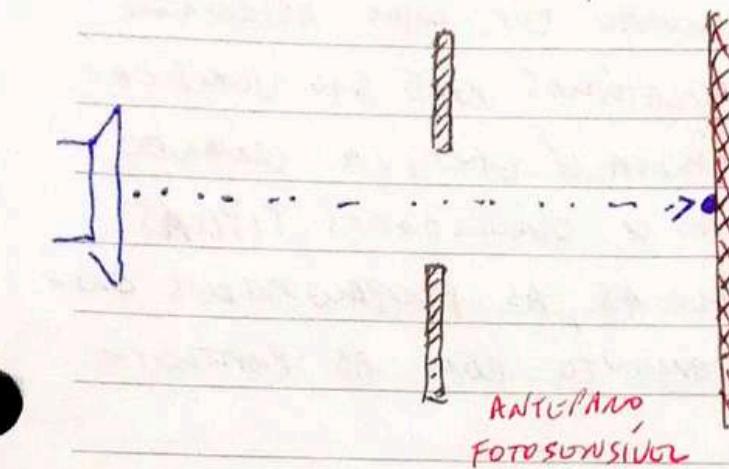
- ADICIONALMENTE, SE USARMOS DUAS FUNDAS SU VENCERÁMOS
- UM CLARO PADRÃO DE INTERFERÊNCIA:



- PORÉM, ALGUMAS CARACTERÍSTICAS DA WZ VAO DO ENCONTRAR A ~~HESSE~~. ESSA ULIS. SE A FUNDA FOR GRANDE, O FEIXE DA WZ SIMPLISPONTA SUGIRÁ AO ANTEPARA SEM DIFRAÇÃO OU INTERFERÊNCIA VISÍVEL, como partículas falam



- É POSSÍVEL, ATURALMENTE, DIMINUIR A INTENSIDADE DA WZ AO USAR ALGUMAS 1 FÓTON PODER CARREGAR. SE O ANTEPARA FOR SENSÍVEL A WZ, ELAS MARCARÁ COM UM PONTO PARA CADA FÓTON



- UMA VEZ QUE A WZ INTERAGIU DESSA FORMA COM O ANTEPARA, A ENERGIA SE CONVIRTEU, E NÃO HA COMPORTAMENTO DIFRAÇÃO VISÍVEL

- VSCS EXPERIMENTOS ILUSTRAM O CAPÍTULO CORPUSCULAR DA WZ, SOBRETUDO SUA LOCALIDADE. A WZ, COMO OUTRAS PARTÍCULAS, TAMBÉM APRESENTAM TODAS CARACTERÍSTICAS (+ DEPENDENTES DO EXPERIMENTO):

- LOCALIDADE (POSIÇÃO E MOMENTO DEFINIDOS), MUITA
- SUGIRÃO AS LEIS DE NEWTON (DIFERENÇA DAS ONDAS, OUVE BRILHOREM AS PROPRIADES DA ONDA, COMO A DE MAXWELL)
- HOJE EM DIAS QUALQUER TIPO FOTOSENSÍVEL, INDEPENDENTE DA TOPO SUPERFÍCIE DE COMPUTADORES, TVs, GTC (ISTO É, BASEADAS EM PONTOS PROPRIOS PONTOS DA WZ, PIXELS) REPRESENTO ESSO EFEITO — ESSA CARACTERÍSTICA. Além disso, como vimos, O EFEITO FOTOGRÁFICO (e outros, como o EFEITO COMPTON) SÃO MUITO DESCRITOS ASSUMINDO QUE A WZ É FORMADA POR PARTÍCULAS

LUELLA
AO RETRIBUIR

- ISSO CÁRATER DUAL DA LUZ FOI MUITAMENTE EXPRESO POR LOUIS DE BROGLIE, QUE MOSTROU A RELAÇÃO ENTRE O MOMENTO DE UM FÓTON E SEU COMPRIMENTO DE ONDA.⁽¹⁹²⁵⁾ MAS UMA Vez, A CONSTANTE DE PLANCK, \hbar , SURGIU COMO UMA CONSTANTE DO PROPORCIONALDADO:

$$\text{EINSTEIN: } E=mc^2 \rightarrow mc^2 = hf \rightarrow \lambda = \frac{h}{mc}$$

MASSA · VELOCIDADE
P = MOMENTO

$$\text{PLANCK: } E=hf = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{E}$$

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

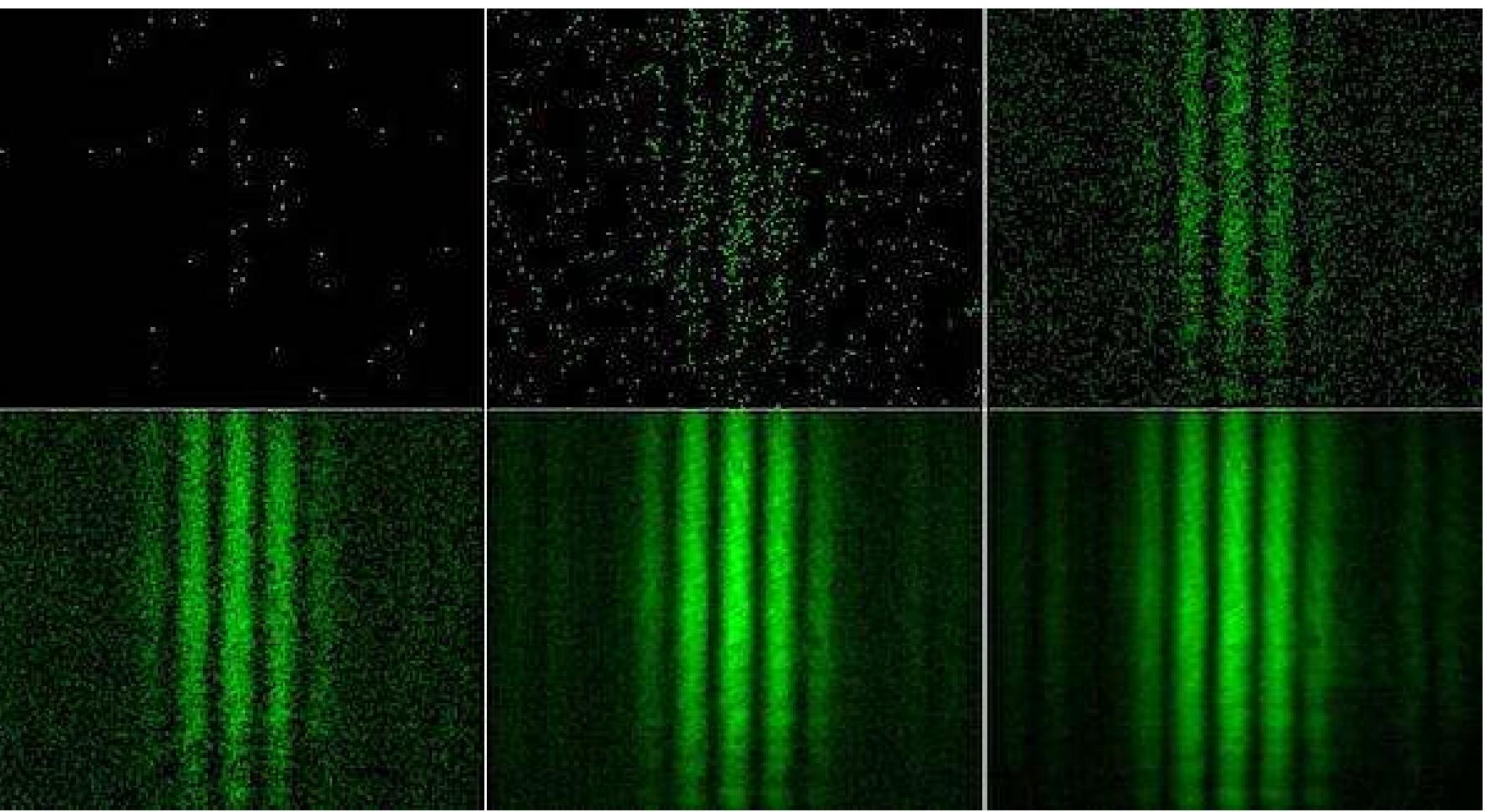
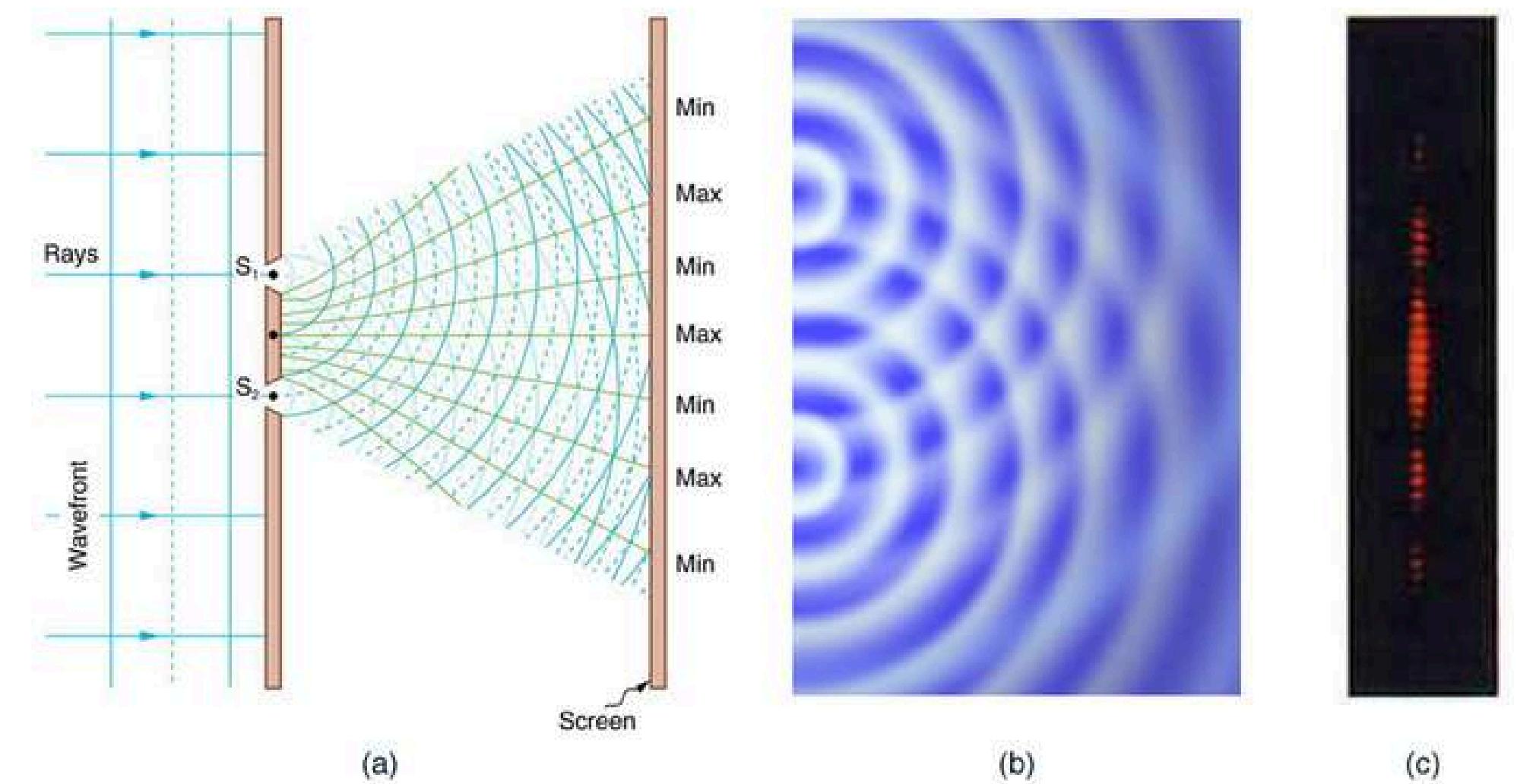
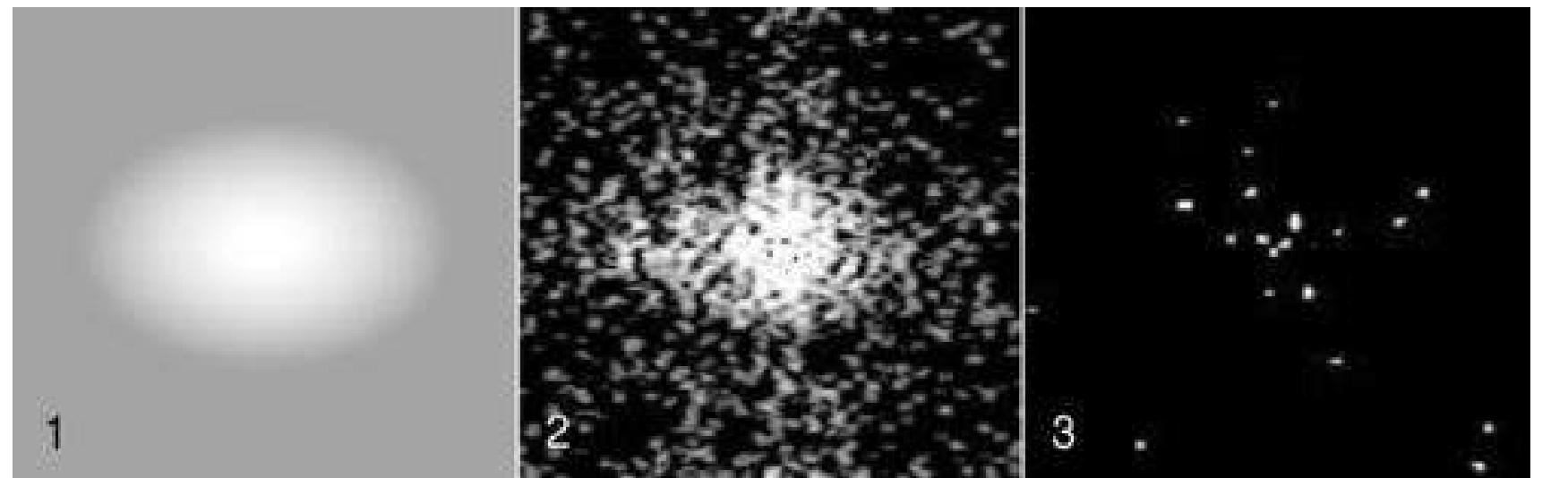
X (NOTA SEU COMO O FÓTON NÃO TÉM MASSA, O CONTEÚDO SOMA USAR $E=pc$, TAMBÉM DEDUZIDA POR WILSON)

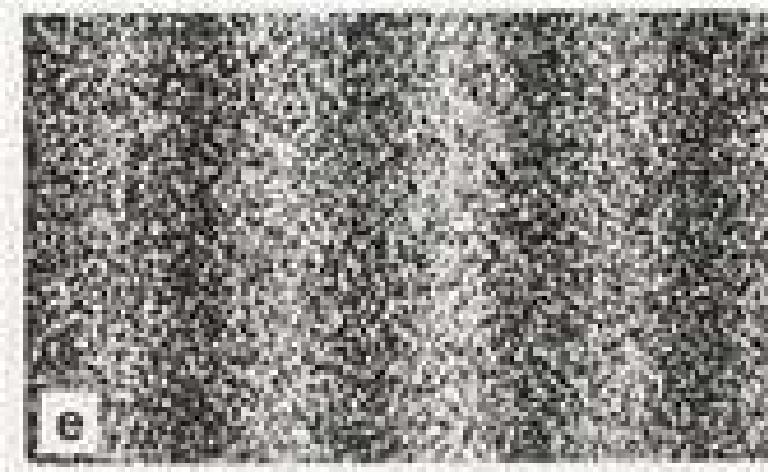
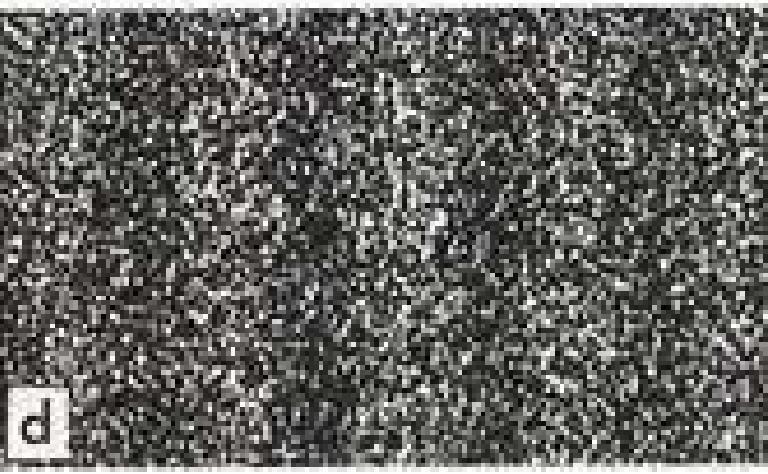
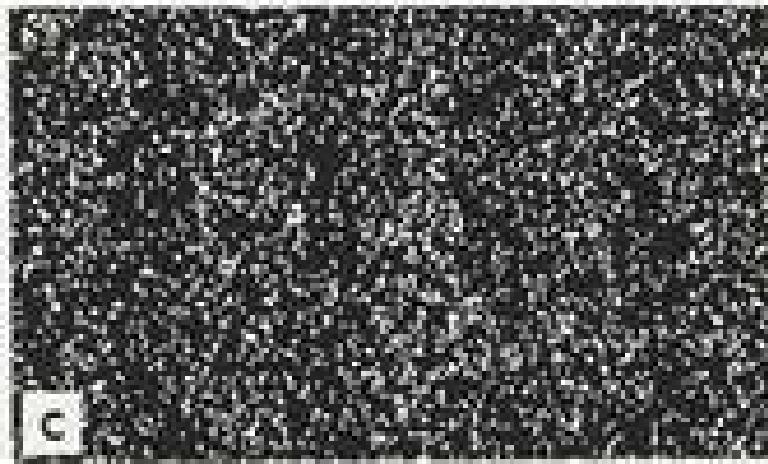
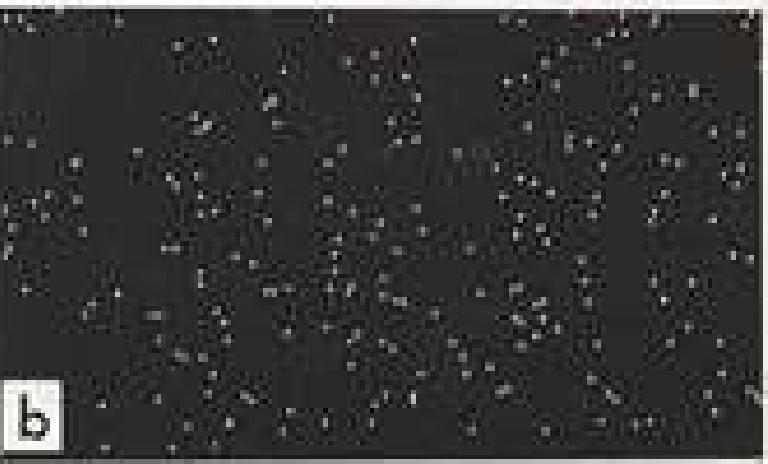
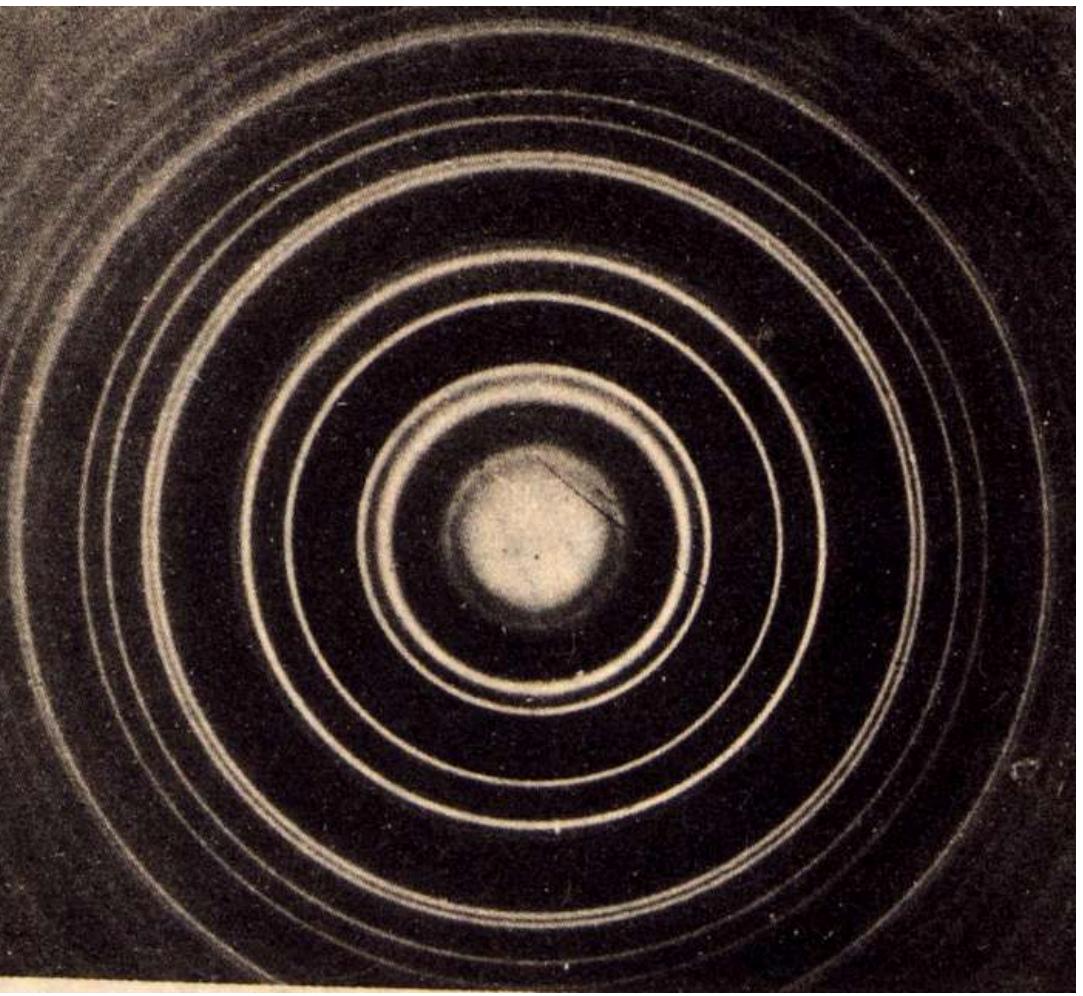
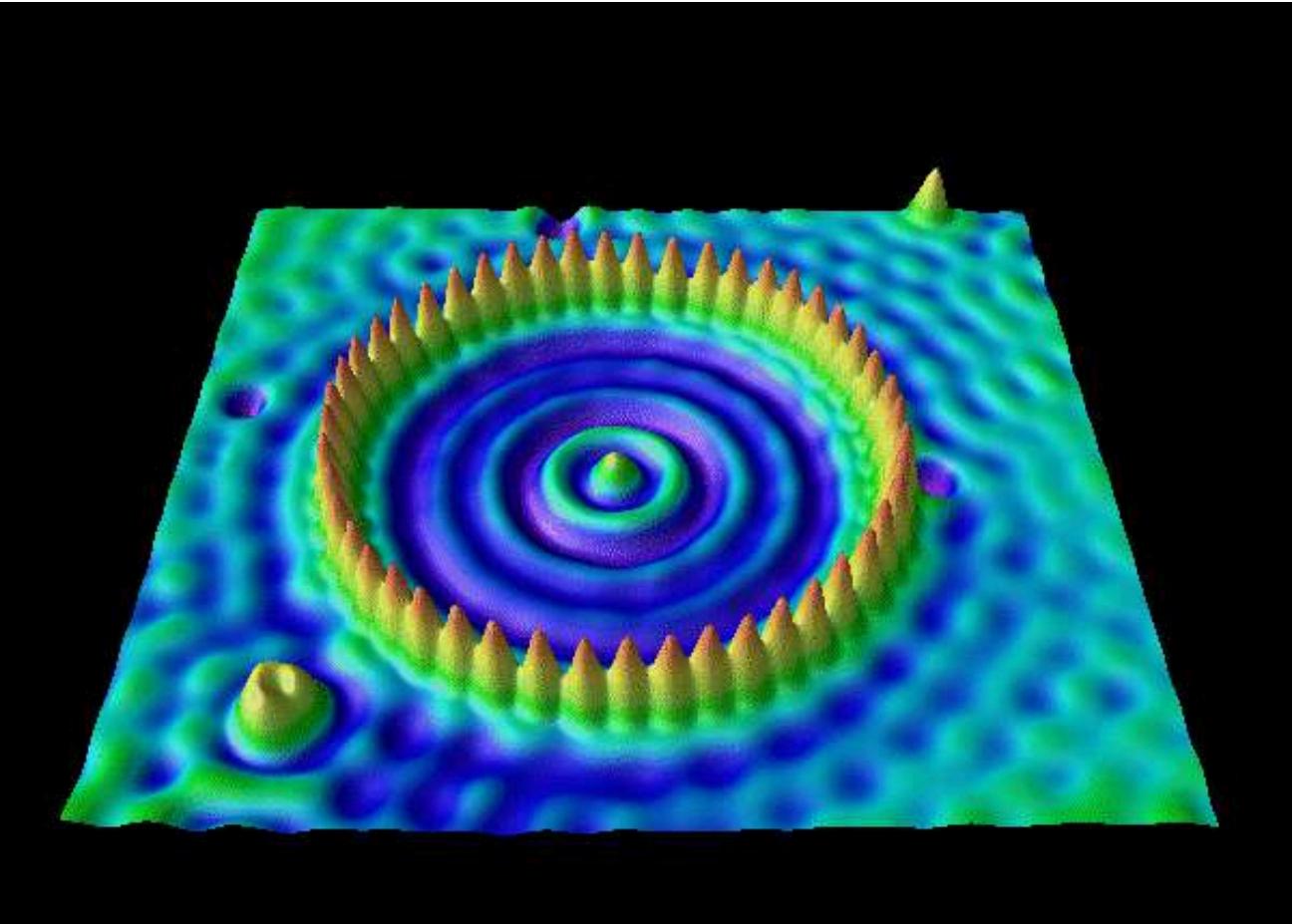
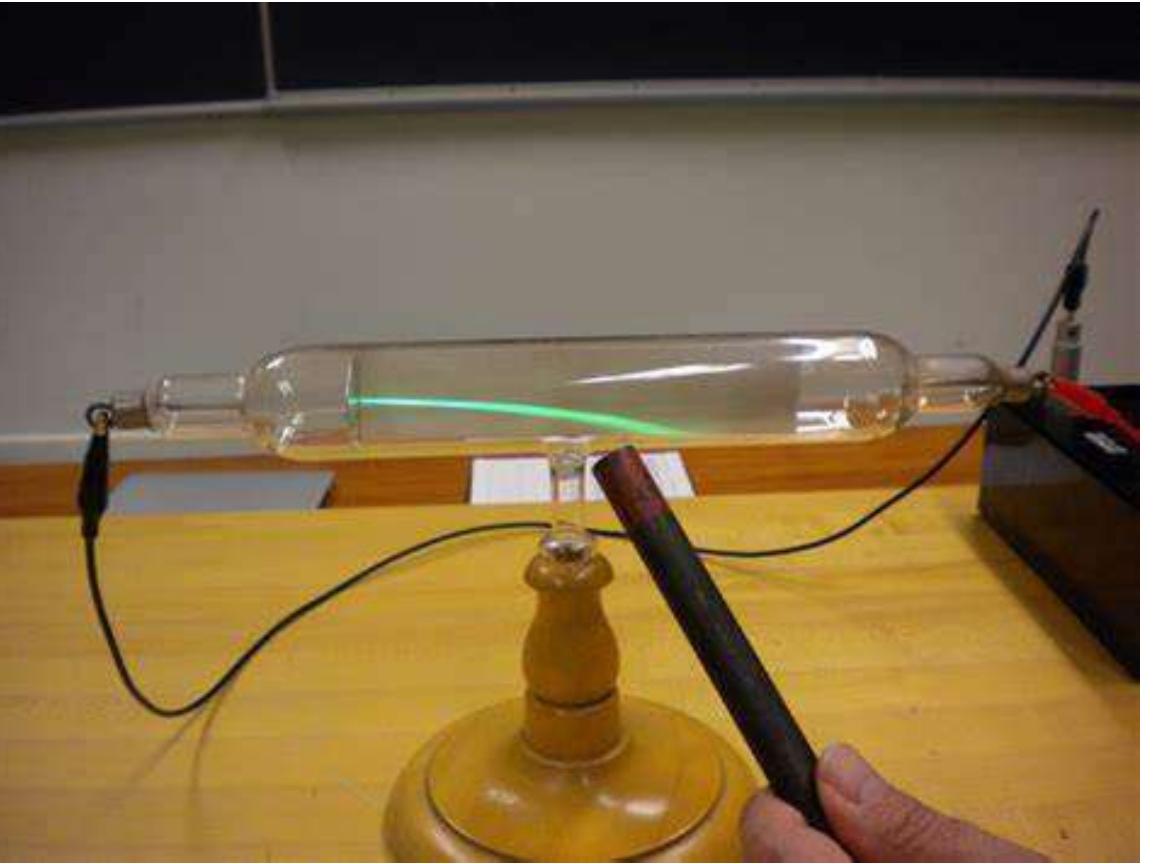
spiral

- TONEL, POR EXEMPLO, O NEUTRÔN. DESDE OS EXPERIMENTOS DE RAYOS CATÓDICOS, SABIA-SE QUE O NEUTRÔN PODIA SER ADERIDADO MUITO DESENTRALMENTE COMO UMA PARCÍCULA, CUJA MASSA E CARGA FORAM MEDIDOS. Sendo UMA PARCÍCULA MACROSCÓPICA, ESPERAVA-SE QUE TAMBÉM EXIBISSE PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS. DE FATO, COMPROVANDO A AFIRMAÇÃO DE BROGLIE, DAVISSON ⁽¹⁹²⁷⁾ E GORDON DEMONSTRARAM QUE O NEUTRÔN APRESENTA DIFRAÇÃO AO ATRAVASSAR REDES CRISTALINAS, FENÔMENO CARACTERÍSTICO DE ONDAS. ISSO OCORRE PORQUE, COMO VIMOS NO CASO DA LUZ, FUNDAS DE COMPRIMENTO DA ONDA DO λ ASSOCIADO AO NEUTRÔN PERMITIU QUE NEUTRÔNS DIFRAZESSEM INTENSIVAMENTE COMO ONDAS.

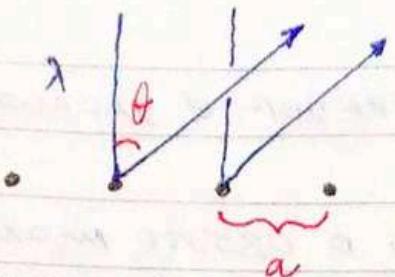
- MAIS RECENTEMENTE, PODEMOS APRENDER NEUTRÔNS COM "CURLS QUÂNTICOS", ENGANHANDO-OS DE ÁTOMOS EM UMA SUPERFÍCIE E IDENTIFICANDO AS PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS DO NEUTRÔN COM MUITA CLARIZA.
- HOJE É COMUM USAR DIFRAÇÃO DE FÓTONS (RAIOS X) PARA DETERMINAR A ESTRUTURA DE SÓLIDOS E LÍQUIDOS
- PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS FORAM IDENTIFICADAS EM ÁTOMOS E ATÉ NANOPARTÍCULAS.

- DE BROGLIE FOI MUITO ALÉM. QUE PROPOS QUE ISSA RELAÇÃO QUÍMICA PARA CORPOS DE UMA MANGAIA GERAL - PARA CORPOS MACROSCÓPICOS PODE TAMBÉM SER H (QUASE COMO SE TIVESSESSO A ZERO) QUE O COMPRIMENTO DA ONDA ASSOCIADO É MÍNIMO, E AS PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS NÃO SÃO VERIFICADAS. NESTE LIMITE A MECÂNICA CLÁSSICA É EFETIVA. QUANDO VEDAMOS COM PARCÍCULAS DE TAMAÑO E VELOCIDADES TÍPICAS DE ÁTOMOS E PARCÍCULAS SUBATÔMICAS, AS PROPRIEDADES ONDULATÓRIAS DA MATEMÁTICA SURGEM JUNTAMENTE COM AS PARCÍCULAS.



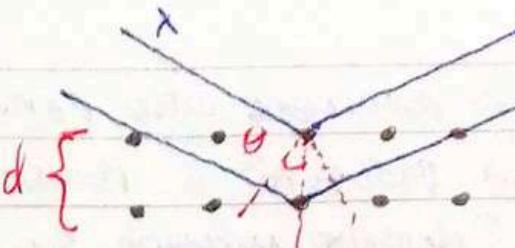


DIFRAÇÃO DE ELETRÔNE



$$\text{LEI DA BRAGG: } n\lambda = \text{arco}$$

DIFRAÇÃO DE RAIOS-X



$$\text{LEI DA BRAGG: } n\lambda = 2ds \text{sen}\theta$$

INSEGURANÇA
INDETERMINÂNCIA

* PRINCÍPIO DA INCERTEZA DE HEISENBERG

- ONDAS E PARTÍCULAS APRESENTAM ALGUMAS CARACTERÍSTICAS QUASE OPOSTAS.
- PARTÍCULAS: LOCALIDADE E MOMENTO DEFINIDO
- ONDAS: NÃO-LOCALIDADE E MOMENTO INDEFINIDO
- EM UMA DIMENSÃO, POR EXEMPLO, ENQUANTO AS POSIÇÕES E MOMENTO X E P_x DE UMA PARTÍCULAS PODEM SÉR CLARAMENTE DEFINIDOS, PARA ONDAS TEMOS APENAS UMA REGIÃO INCERTA ΔX E UM MOMENTO COM INCERTEZA ΔP_x . COMO X E P_x ESTÃO RELACIONADOS, A INCERTEZA EM UM (DEVIDO A DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA, POR EXEMPLO) ESTÁ ASSOCIADA A DO OUTRO.
- ERNEST HEISENBERG DESCOBRIU QUE A QUANTIZAÇÃO É A DUALIDADE IMPõEM RESTRIÇÕES PARA essa RELAÇÃO $\Delta X \leftrightarrow \Delta P_x$. Ele DEMONSTROU QUE ELAS SÃO INVERSAMENTE PROPORCIONAIS E OBEDECEM A INSEGURANÇA:

$$\boxed{\Delta X \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{4\pi}}$$

Prod.

SE $\Delta X \uparrow$, $\Delta P_x \downarrow$ cte

SE $\Delta X \downarrow$, $\Delta P_x \uparrow$ cte

• ISLA INDICA QUE:

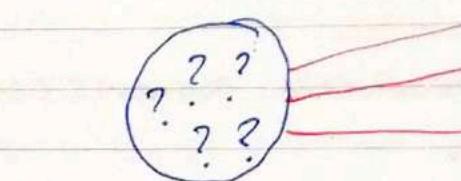
SE $\Delta X \downarrow$, $\Delta P_x \uparrow$ cte

- AUMENTAR A INCERTEZA NA POSIÇÃO OCASionalmente REDUZ NA PRECISÃO DA VELOCIDADE (MOMENTO), E VICE-VERSA;
- É POSSÍVEL REDUZIR A INCERTEZA NAS DUAS ATÉ O MÍNIMO DE $\hbar/2\pi$.

• UMA ANALOGIA útil PARA COMPREENDER O PRINCÍPIO DA INCERTEZA é PENSAR

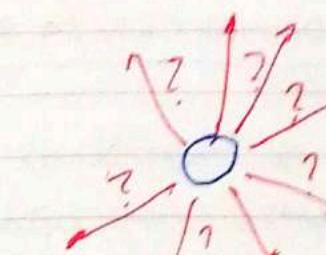
"QUANTO MELHOR SE SABE ONDE O OBJETO MICROSCÓPICO ESTÁ, MENOS SE SABE DE ONDE VEM O PAIS ONDE IRÁ!"

• Por Józéss ASSOCIA



ΔX ALTO

ΔP_x BAIXO



ΔX BAIXO

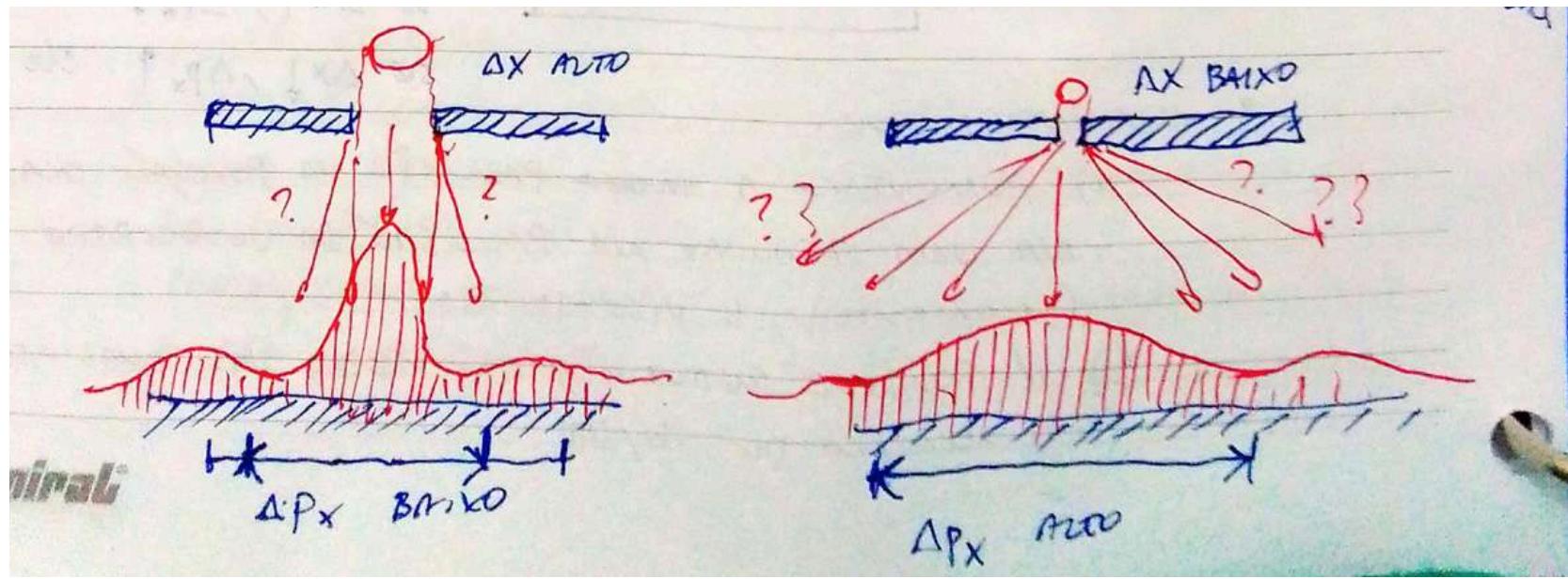
ΔP_x ALTO

(ESTA ÁREA
NÃO SE COBERTA,
MAS SE RECORTA
NA MÍNIMA)

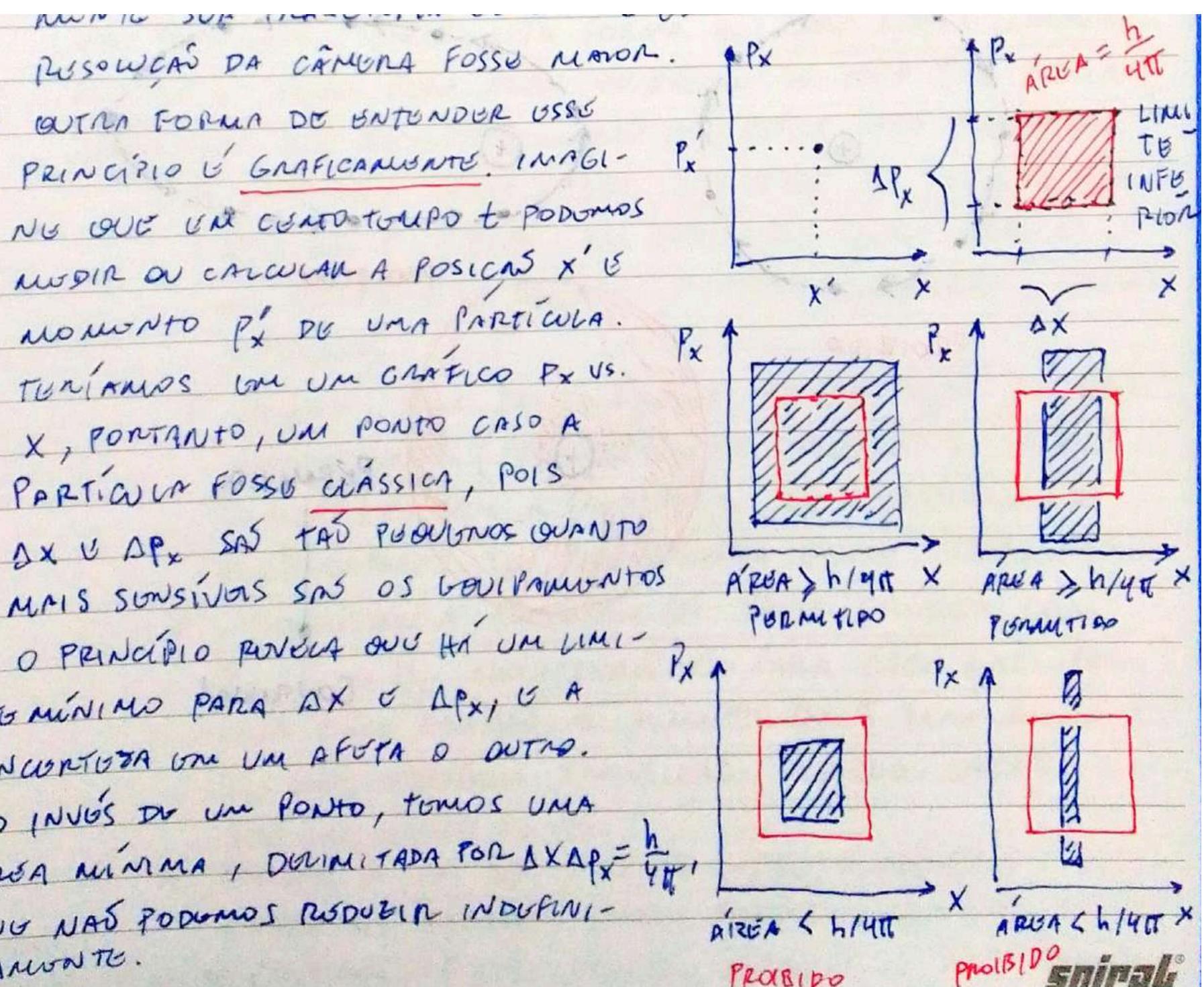
• UM EXPERIMENTO QUE ILUSTRA BEM essa IMAGEM é A PASSAGEM DE UM FEIXE DE FÓTONS ATTRAÍS DE UMA FONDA DE TAMANHO VARIÁVEL.

• QUANTO MENOR A FONDA, MAIOR A INCERTEZA NA POSIÇÃO DOS FÓTONS QUE A ATTRAÍSSAM, MAS A REGIÃO DO ANTERIOR ONDE TERMINAM É BEM DEFINIDA, E INDICA CLARAMENTE DE ONDE OS FÓTONS VIERAM.

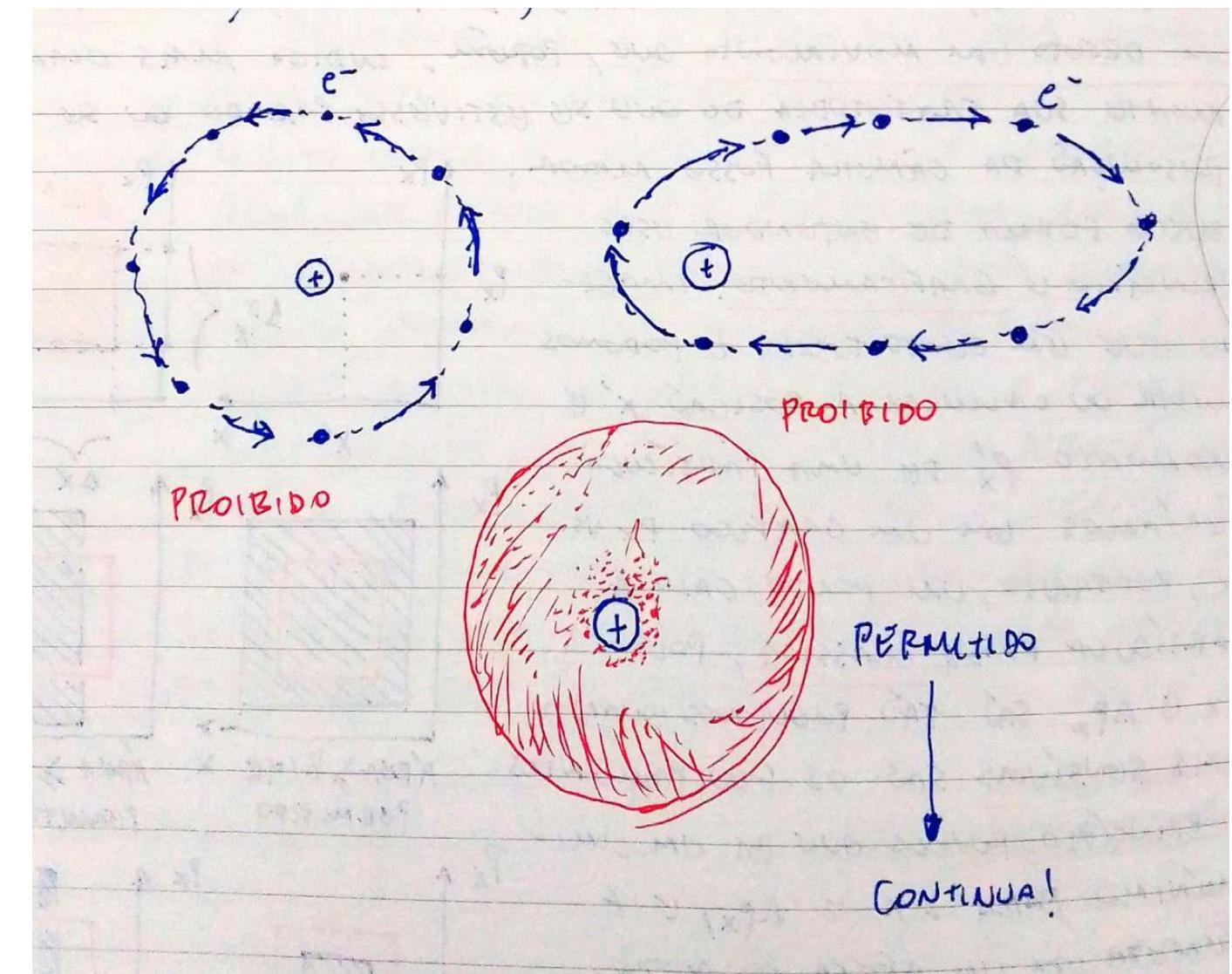
• QUANTO MELHOR A FONDA MELHOR A PRECISÃO NA LOCALIZAÇÃO DOS FÓTONS, MAS A DIREÇÃO QUE SEGUIMOS SE TORNA MUITO INSEGURA E INCERTA. O RESULTADO é UM AUMENTO DE DISPERSAO DA WI NO RETRATO, O QUE GERA UM COMPORTAMENTO MUITO DIFERENTE DO QUE OCORRERIA COM UM FEIXE DE PARTICULAS.

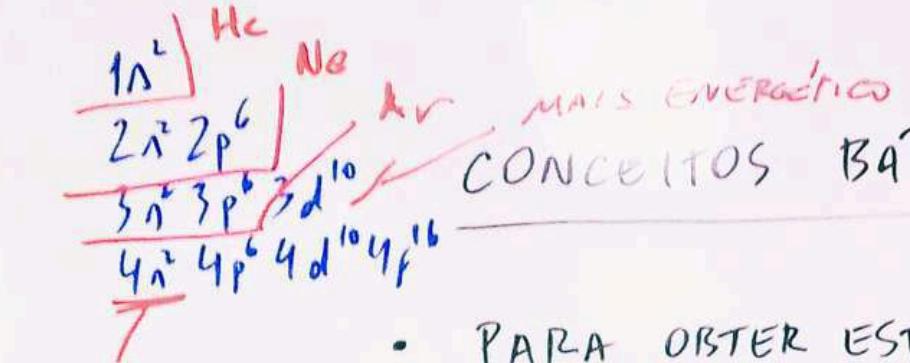


- MUITAS VEZES TAL INCERTEZA VÉ EXPLICADA COMO O PESO DO "EFETO DO OBSERVADOR" EM MEDIDAS TÃO DELICADAS DENTRO AS EM NÍVEL MACROSCÓPICO. SE USAMOS FÓTONS PARA INTERAGIR COM UMA PARCÍCULA VÉ DETERMINAR SUA POSIÇÃO, POR EXEMPLO, PODERÍAMOS AUMENTAR A RESOLUÇÃO ESPACIAL DESSA LOCALIZAÇÃO REDUZINDO O COMPRIMENTO DA ÓNDA, λ : MUNDOS INCRÍVEIS NA POSIÇÃO, Δx ALTO. POR OUTRO LADO, AO FAZER ISSO USAMOS FÓTONS COM MAIOR ENERGIA (LUMÍBRE $E = h\nu = hc/\lambda$), UMAS INFUGANTES QUES SÃO NA TRAJETÓRIA DA PARCÍCULA, TORNANDO MAIS INCERTO SEU PERCURSO ("DE ONDE VEMO VÉ PARA ONDE VAI"). ESSA MENOR CONFIANÇA NO ALIMENTO TORNA A ENERGIA VÉ O COMPRIMENTO DE ONDA ASSOCIADO A PRÓPRIA PARCÍCULA INCERTOS.



- NOSSA PRECISÃO PODE SER MAIOR QUE Δx OU UM Δp_x , MAS UM DELES NOS PODE SER REDUZIDO A ZERO, POIS O PRODUTO (ÁREA DO RETÂNGULO) NAS PODE SER MENOR QUE $\hbar/4\pi$.
- NATURALMENTE OS SISTEMAS COM INCERTA MAIOR, OU SEJA, ASSOCIADOS A UMA ÁREA TAL QUE $\Delta x \Delta p_x > \hbar/4\pi$, SÃO PERMITIDOS.
- ISSO É A RAZÃO PARA QUEM O MÓDULO DO BOHR E OUTROS BASEADOS EM TRAJETÓRIAS DEFINIDAS DO ELECTRÔNICO NO ATÔMO (COM O DE WILSON - SOMMERFELD) NAS CORRESPONDAM AO COMPROMISSO PELA DÉSSES SISTEMAS: NAS É POSSÍVEL CONHESCO POSIÇÕES E MOMENTO DESTA PARCÍCULA (EM NENHUM TEMPO ESPACIAL, MUITO MENOS AO LONGO DO TEMPO) COM RESOLUÇÃO (PRECISÃO) INFINITA.





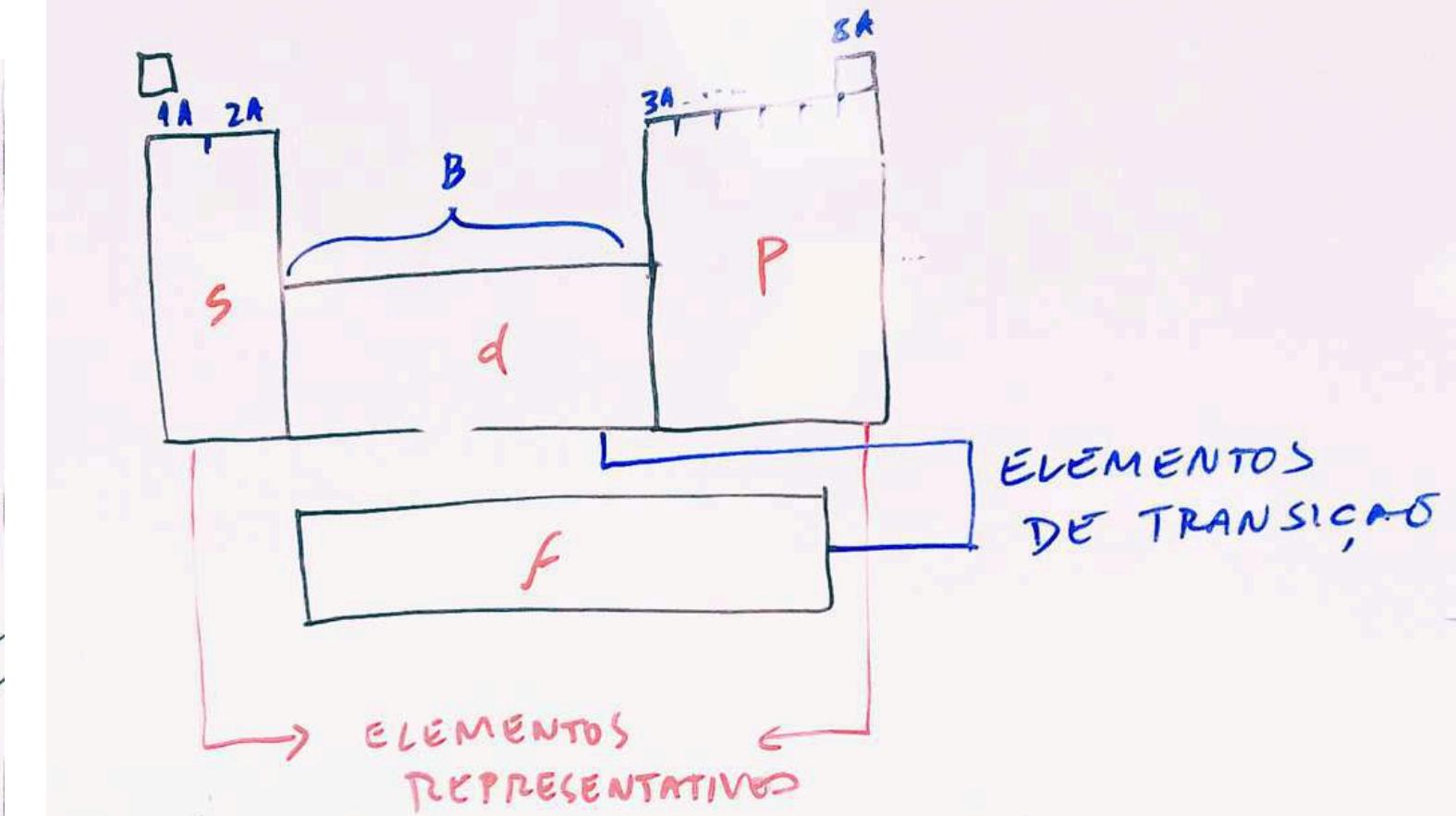
MAIS EXTERNO
 SUFICIENTES P/ ESTUDAR OS 3 TIPOS DE LIGAÇÃO

FOCAREMOS NESTES CASOS

$2e^-$ K
 $8e^-$ L, M, N...
 CAMADA FECHADA (CARPO) CONP. ELETRON. DE GÁS NOBRE

- PARA OBTER ESTABILIDADE (CONFIGURAÇÃO DE GÁS NOBRE) ÁTOMOS FORMAM LIGAÇÕES QUÍMICAS
- ELAS OCORREM ATRAVÉS DA CAMADA DE VALÊNCIA, OU SEJA, COM ELÉTRONS QUE NÃO PERTENCEM AO CARPO, PRIMEIRAMENTE COM OS ELÉTRON EM SUBNÍVEIS MAIS EXTERNOS.
- NOS PRIMEIROS PERÍODOS O SUBNÍVEL MAIS ENERGÉTICO TAMBÉM É O MAIS EXTERNO (ELEMENTOS REPRESENTATIVOS)
- NOS PERÍODOS MAiores O SUBNÍVEL MAIS EXTERNO INTERAGE PARA FORMAR LIGAÇÃO PRIMEIRO E, DEPENDENDO DA SITUAÇÃO, O SUBNÍVEL MAIS ENERGÉTICO TAMBÉM PARTICIPA (ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO)

CONCEITOS BÁSICOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

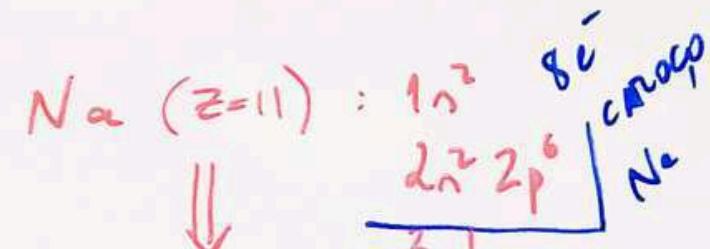


- REPRESENTAÇÃO DE ELÉTRONS (CAMADA DE VALÊNCIA)
ELÉTRONS COMO PONTOS (LEWIS)

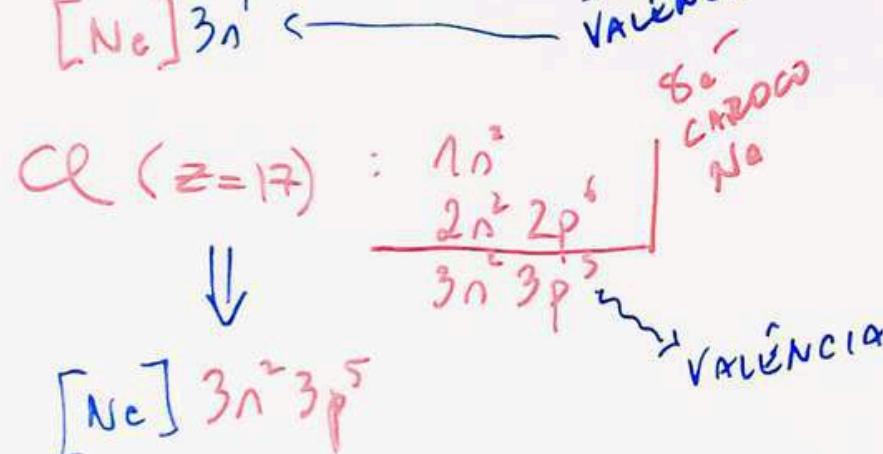
SÍMBOLO + NÚMERO DE ELÉTRONS
 \downarrow \downarrow
 X + :

Máximo de 8 e⁻ / 2 e⁻, por lado, lado na, minima

ETAPAS: 1) CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA OU OLHAR TABELA



1A	2A
Li	
Na	



7A
Cl

7 ELETRONS NA C.V.

X: X: X: X: X: X: X:

2) NÚMERO DE ELETRONS NA C.V.



3) FAZER ESTRUTURA: $\text{Na} \quad \text{Cl}$

REGRAS DO OCTETO: ÁTOMOS TENDEM A GANHAR

PERDER ELETRONS PARA ADQUIRIR CONFIGURAÇÃO

DE GÁS NOBRE

REGRAS NÃO É ABSOLUTA (EX.: REGRAS DO DUETO NA CAMADA K)

LIGAÇÃO IÔNICA

ÁTOMOS QUE TÊM FACILIDADE EM PERDER e⁻

+

ÁTOMOS QUE TÊM FACILIDADE EM ACEITAR e⁻

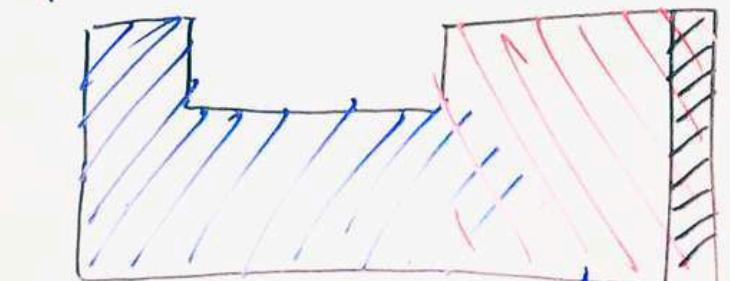
↓

SUBSTÂNCIAS IÔNICAS
(CARACTERIZADAS POR
LIGAÇÃO IÔNICA)

METAIS + AMETALS = LIGAÇÃO IÔNICA

METAIS

AMETALS

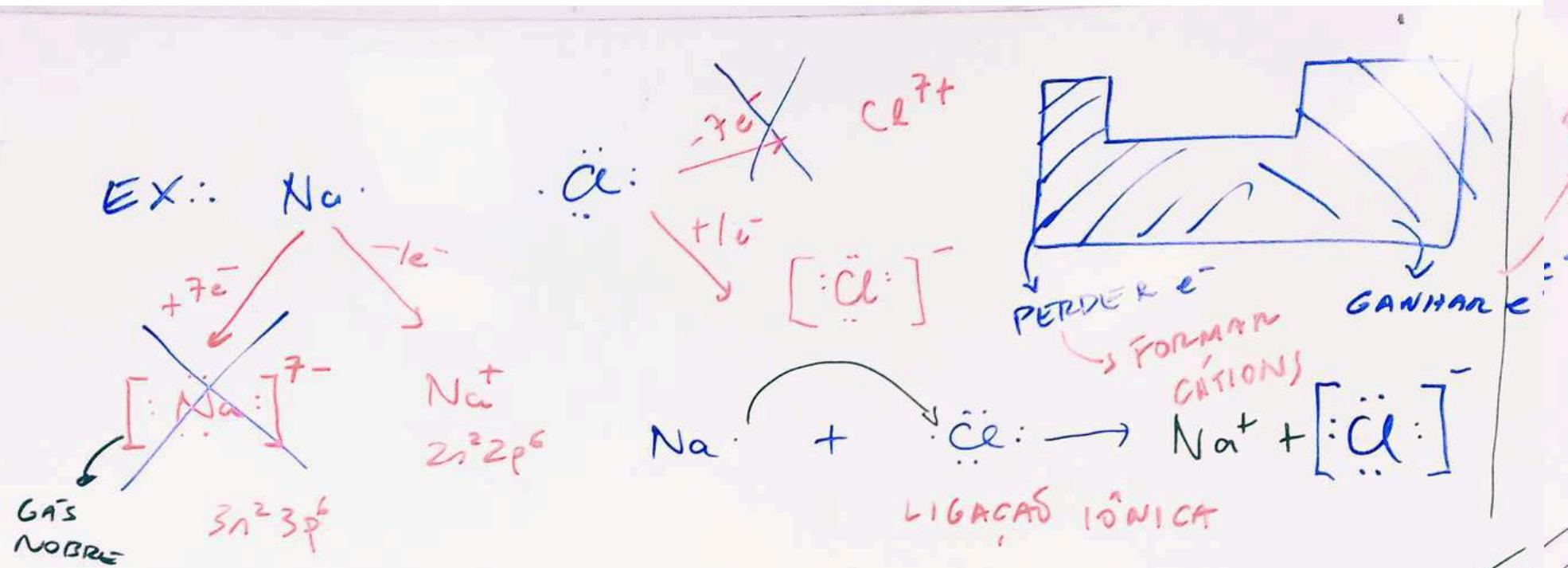


ESTABILIDADE
(NÃO TENDE
A RECEBER e⁻
OU DODA
ELETRONS)

ENERGIA
DE IONIZAÇÃO
BAIXA

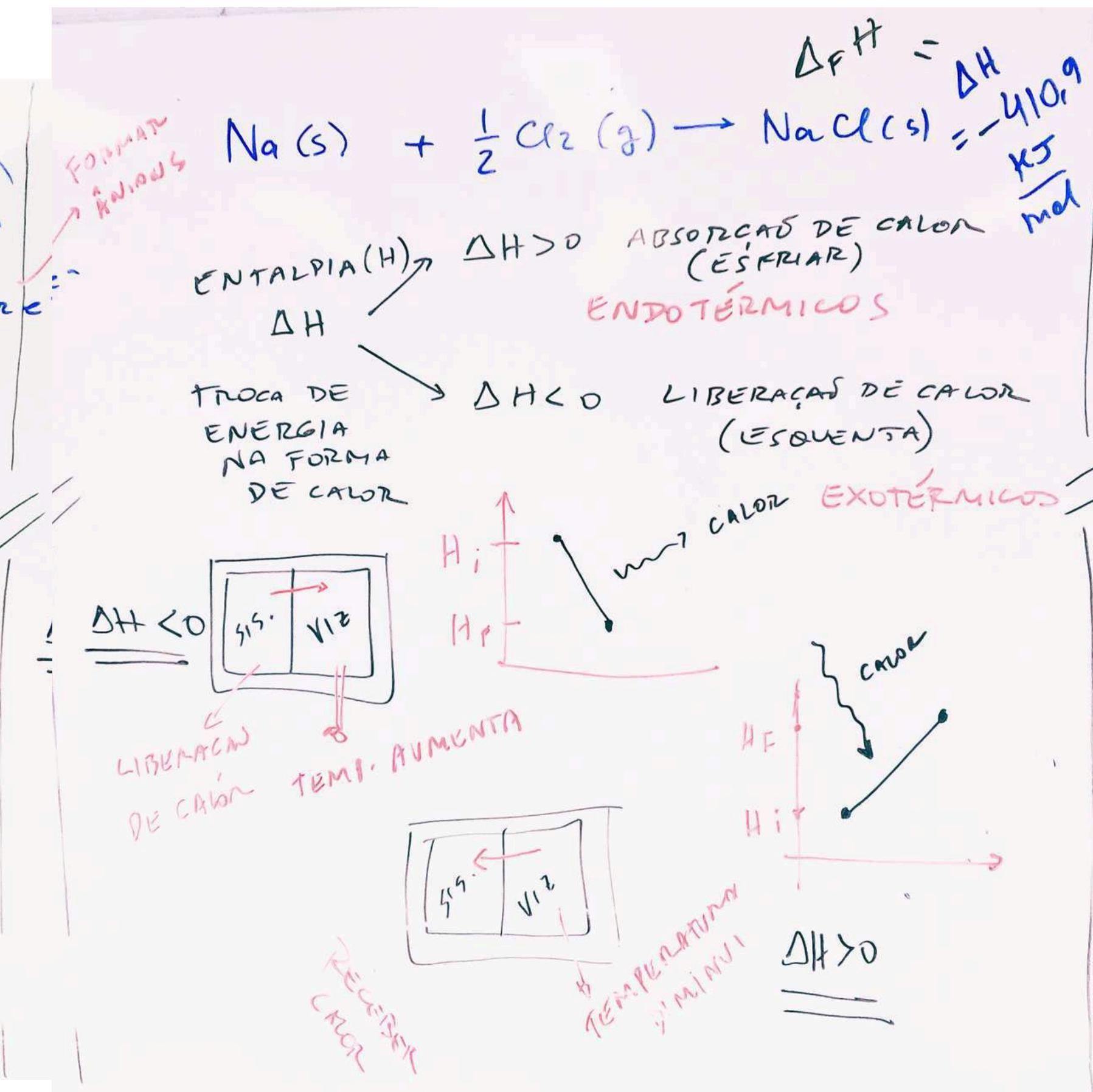
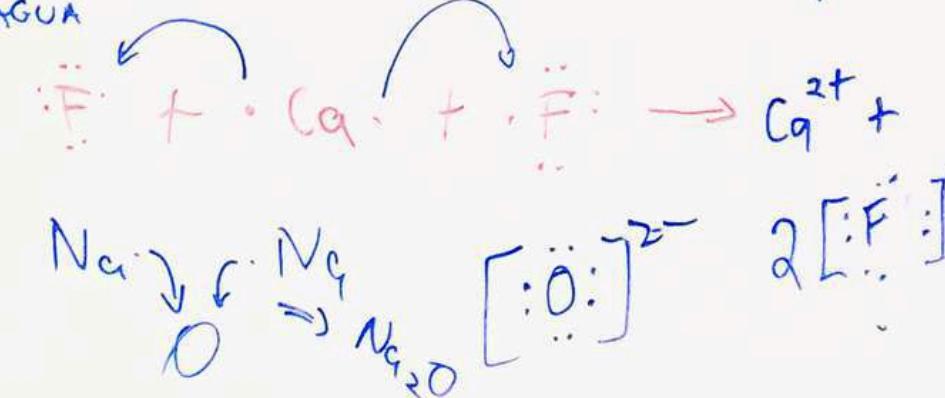
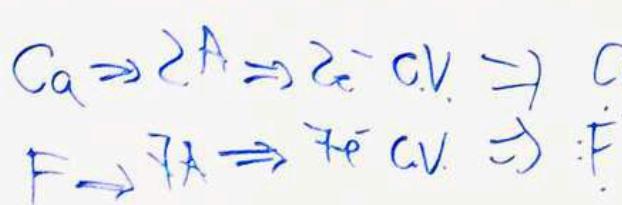
ALTA AFINIDADE
ELÉTRÔNICA
(MUITO NEGATIVA)

$$\Delta_f H^\circ = \Delta H^\circ = -4109 \text{ kJ/mol}$$

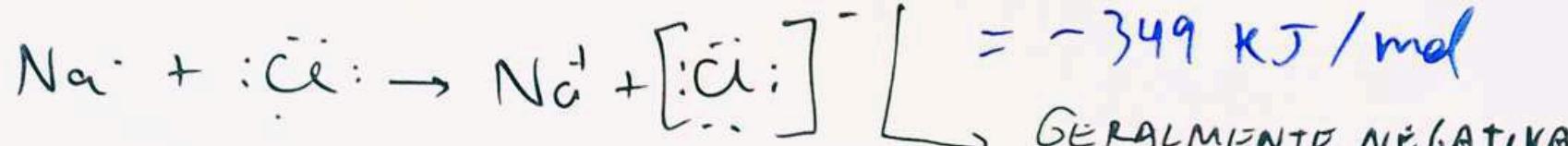


- COMPOSTOS IÔNICOS TÊM PROPRIEDADES EM COMUM:

- QUEBRADIGOS
- FACILMENTE CLIVADOS
- ELEVADO PONTO DE FUSÃO
- CRYSTALINIDADE
- SOLUBILIDADE EM ÁGUA



ENTALPIA DE FORMAÇÃO DE COMPOSTOS IÓNICOS É MUITO NEGATIVA.



$$\Delta H = (496 - 349) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 147 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

IONIZAÇÃO DE ÁTOMOS PARA FORMAR ÍONS EM UM COMPOSTO IÓNICO É ENDOTÉRMICA (REQUER ENERGIA)

$$\Delta H > 0$$

$$\Delta H$$

ENERGIA DE IONIZAÇÃO

$$= 496 \text{ kJ/mol}$$

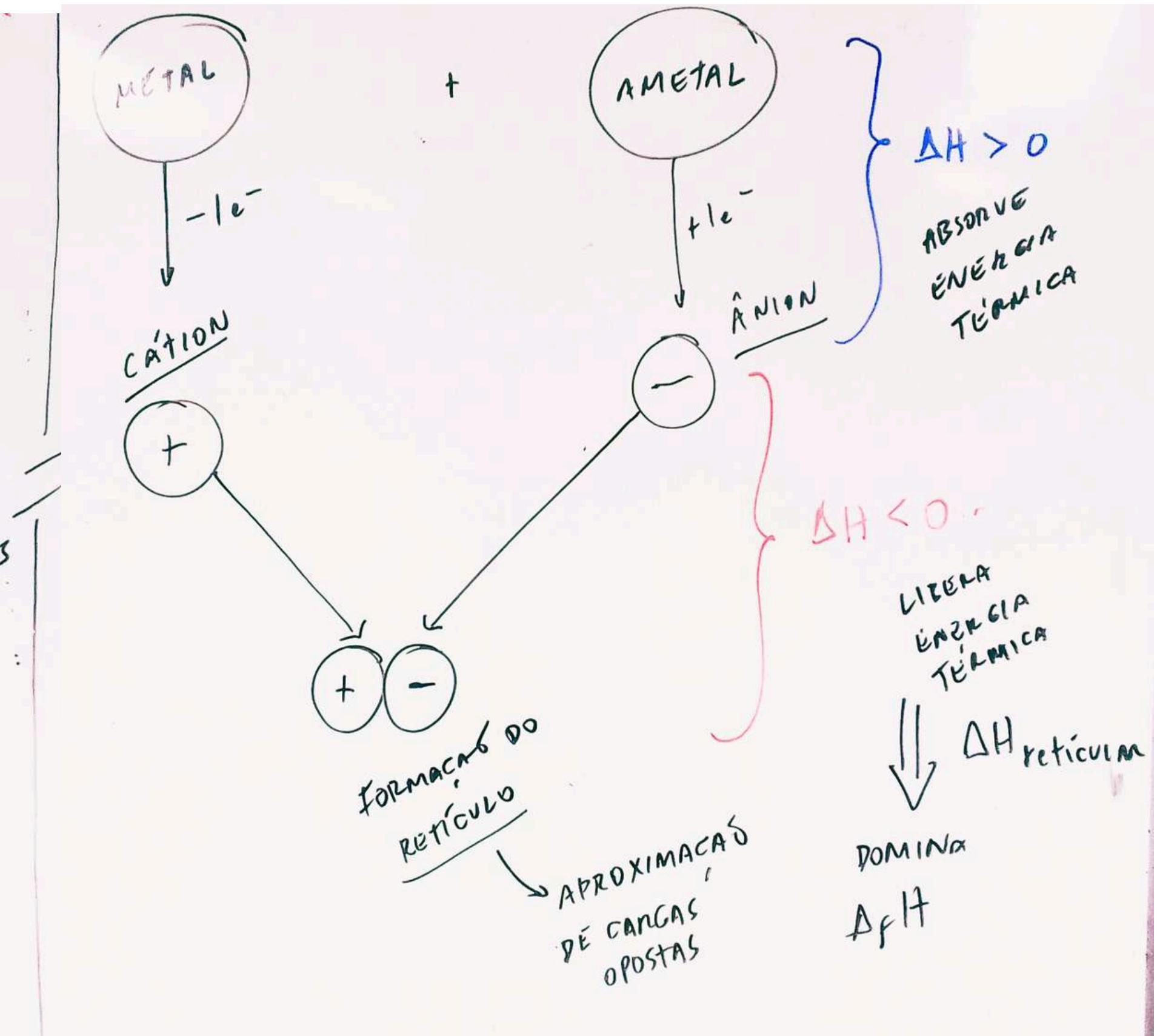
SÃO POSITIVAS ($\Delta H > 0$)
(METÁLICAS)

AFINIDADE ELÉTRONICA

$$= -349 \text{ kJ/mol}$$

GERALMENTE NEGATIVAS
(AMETÁLICAS)

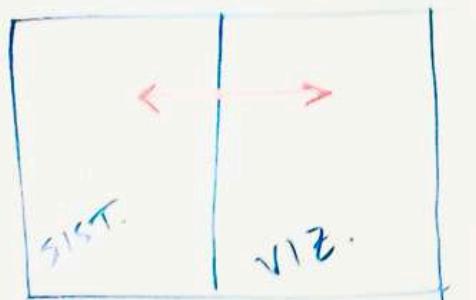
$$(\Delta H < 0)$$



ENERGÉTICA DA FORMAÇÃO DE LIGAÇÕES IÔNICAS

SISTEMA + VIZINHANÇA

onde observamos processos físicos e químicos

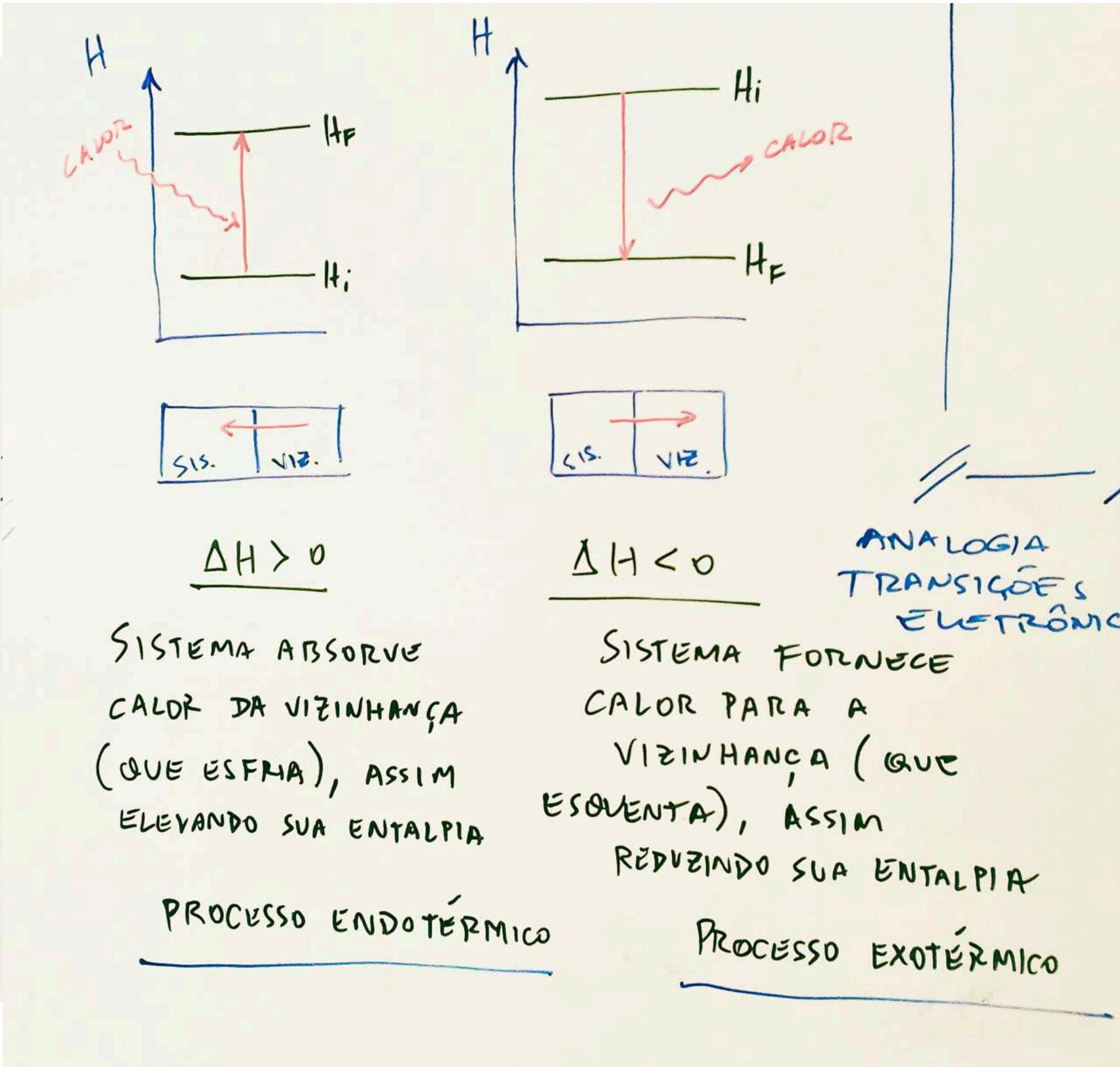


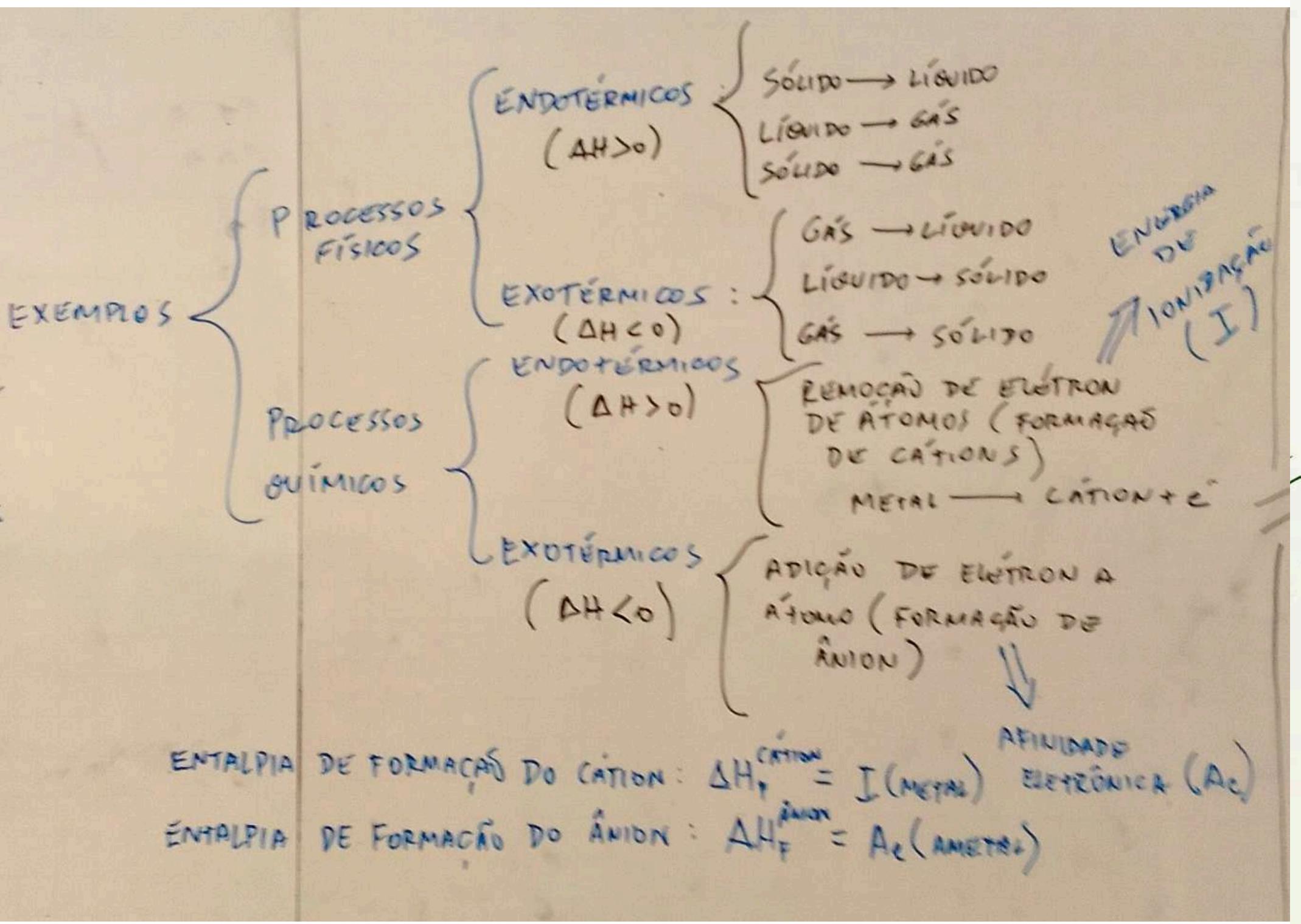
TROCA DE ENERGIA

- ENTALPIA: associada à transferência de energia térmica pela troca de calor (à pressão constante)

$$\Delta H = H_F - H_i = \text{CALOR TROCADO ENTRE SISTEMA E VIZINHANÇA}$$

↑ ENTALPIA DO ESTADO FINAL ↓ ENTALPIA DO ESTADO INICIAL

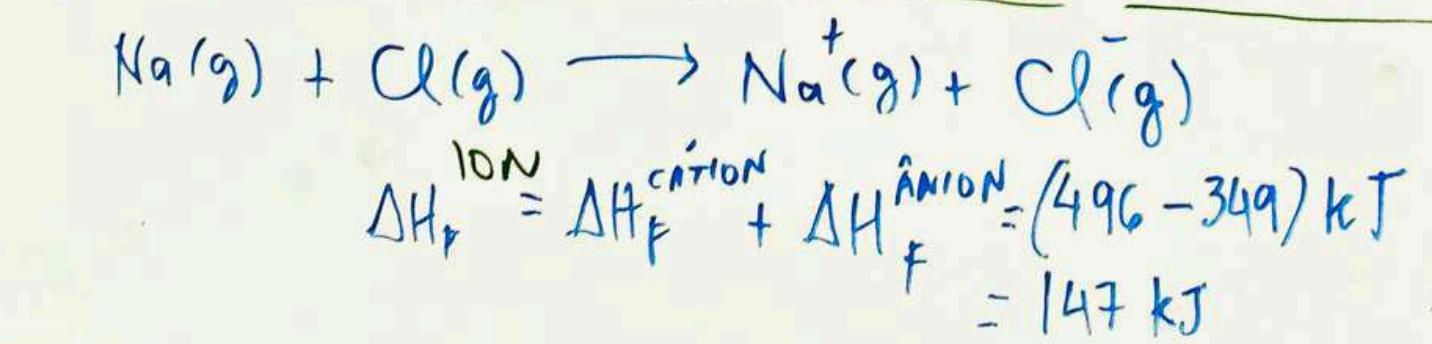
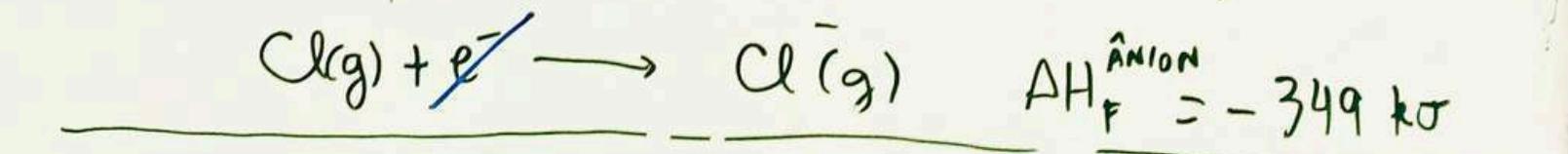
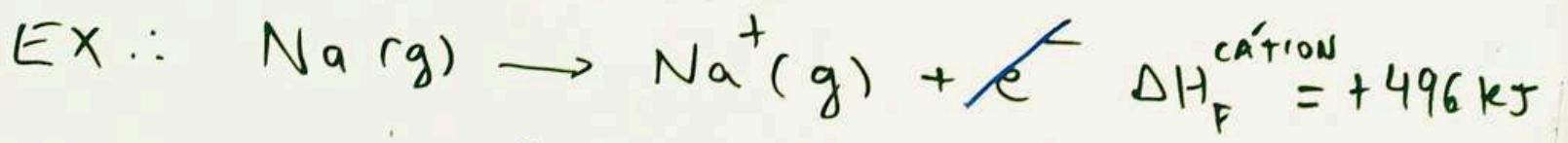




- FORMAÇÃO DÉSAMS A PARTIR DOS ELEMENTOS ESTÁVEIS NUMA CERTA TEMPERATURA (25°C , POR EXEMPLO) SÃO MUITO EXOTÉRMICAS ($\Delta H_F^{\text{SAL}} << 0$)

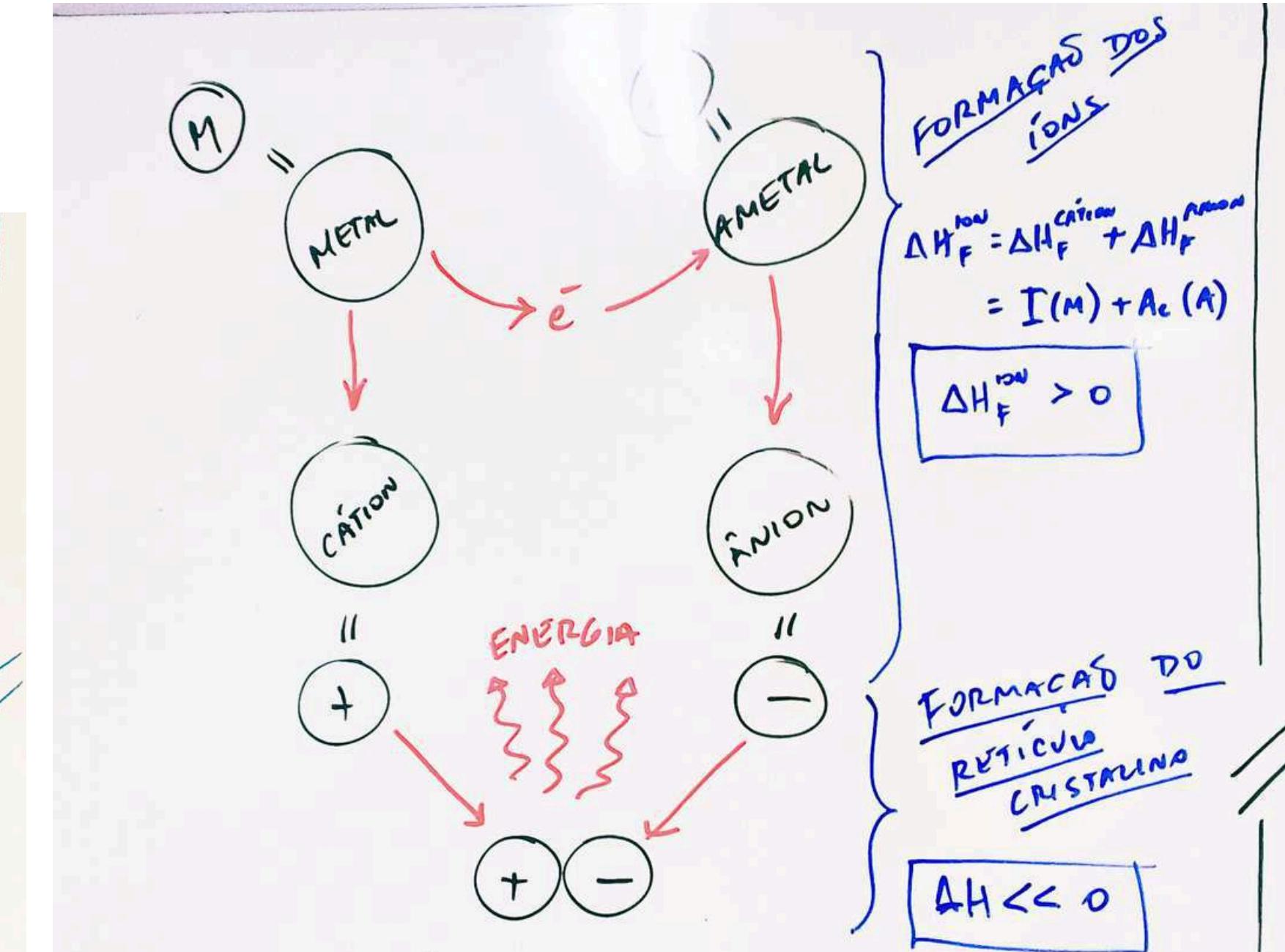


- POREM, A REMOÇÃO DE ELÉTRONS DO METAL É ADIÇÃO DESTE EM UM AMETAL E, NO TOTAL, UM PROCESSO ENDOTÉRMICO ($\Delta H_F^{\text{ION}} = \Delta H_F^{\text{CATION}} + \Delta H_F^{\text{ÂNION}} > 0$)



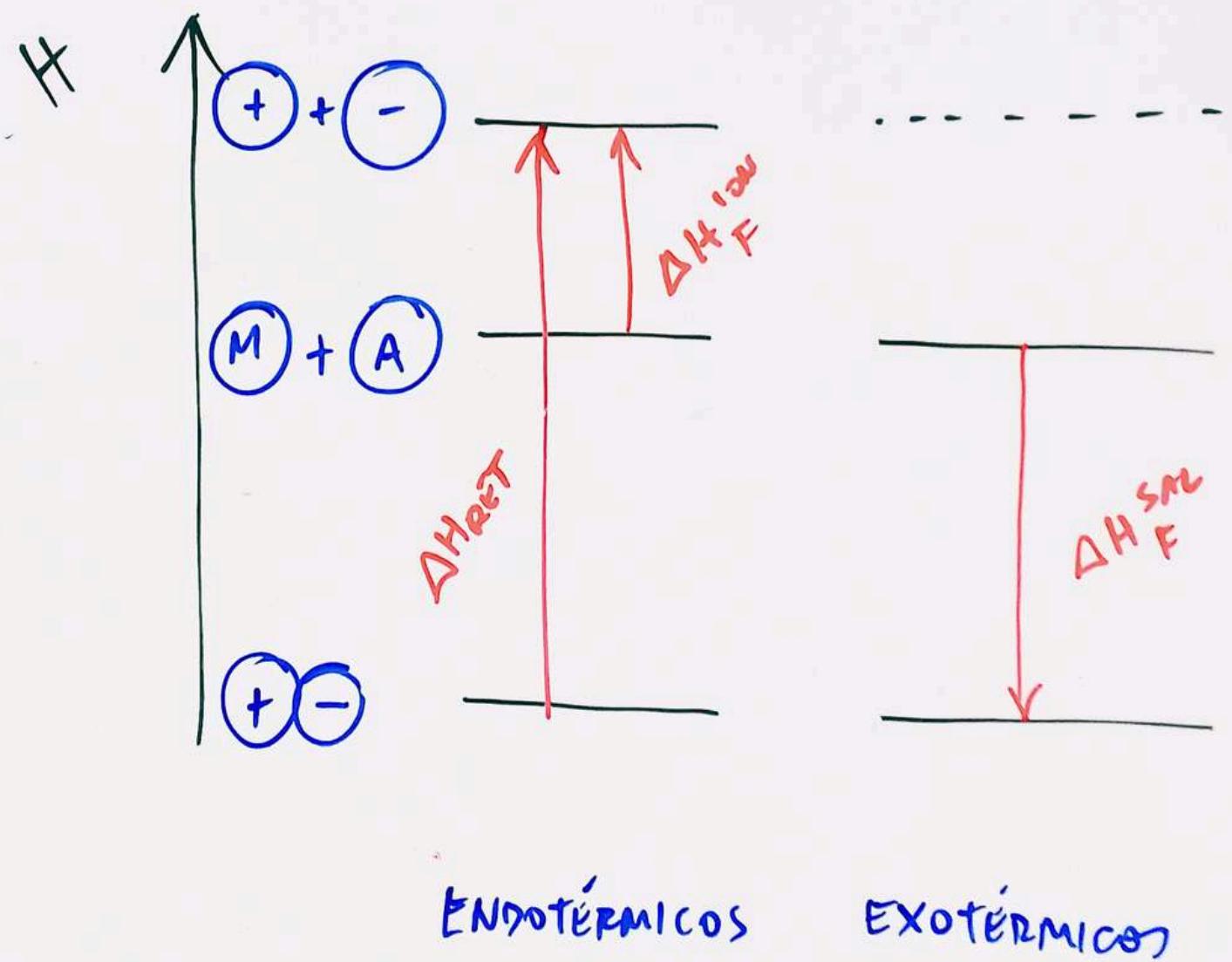
ENERGÉTICA DA FORMAÇÃO DE LIGAÇÕES IÓNICAS

- NORMALMENTE A I DO METAL É MAIS POSITIVA DO QUE A A_e DO AMETAL É NEGATIVA, NO TOTAL SENDO POSITIVA.
- QUAL A EXPLICAÇÃO? O QUE JUSTIFICA TAMANHA LIBERAÇÃO DE ENERGIA, SENDO QUE A FORMAÇÃO DOS ÍONS REQUER ABSORÇÃO DE ENERGIA
- A RESPOSTA É QUE, APÓS A FORMAÇÃO DOS ÍONS, ESTES INTERAJEM ATRATIVAMENTE (INTERAÇÃO ELETROSTÁTICA, FORÇAS DE COULOMB), LIBERANDO MUITA ENERGIA NO PROCESSO (UMA VEZ QUE ESTE É FÁVEL). A ESTE PROCESSO DAMOS O NOME DE FORMAÇÃO DO RETÍCULO CRISTALINO, ASSOCIADO A UM $\Delta H_{\text{RET}}^{\text{ION}}$ BASTANTE NEGATIVO.



- COMO ΔH É MUITO MAIS NEGATIVO DO QUE ΔH_F^{ion} É POSITIVO, O PROCESSO DE FORMAÇÃO DO SAL LIBERA (E NÃO ABSORVE) ENERGIA, LOGO $\Delta H_F^{\text{sm}} \ll 0$.
- SE A FORMAÇÃO DO RETÍCULO LIBERA ENERGIA, O PROCESSO CONTRÁRIO (SEPARAÇÃO DOS ÍONS) DEVE CONSUMIR MUITA ENERGIA AO ACONTECER. OU SEJA, DESFAZER O RETÍCULO É UM PROCESSO EXTREMAMENTE ENDOTÉRMICO. A ENTALPIA ASSOCIADA

ESSE PROCESSO É CHAMADA DE ENTALPIA DE REDE, OU ENTALPIA RETICULAR, QUE É O NEGATIVO DA ENTALPIA DE FORMAÇÃO DO RETÍCULO. ELA É POSITIVA E QUANTO MAIOR O SEU VALOR, MAIS FORTE AS INTERAÇÕES ENTRE OS ÍONS NO SÓLIDO IÔNICO.



- ORIGEM DA ENERGIA RETICULAR
 - A ATRAÇÃO ENTRE OS ÍONS EM UM SÓLIDO IÔNICO ESTÁ RELACIONADA À ENERGIA ELETROSTÁTICA ENTRE ELAS: CARGAS OPOSTAS SE ATRAEM. A FORÇA DESSA INTERAÇÃO ENTRE DOIS PONTOS COM CARGAS Q_1 E Q_2 A UMA DISTÂNCIA d É DADA PELO POTENCIAL ELÉTRICO E_{el} :
- $8,9 \times 10^9 \text{ J m/C}^2$
- $$E_{el} = \frac{k Q_1 Q_2}{d}$$
- DISTÂNCIA
- ANALISAREMOS APENAS O VALOR NUMÉRICO DE E_{el} , ISTO É, APENAS SUA MAGNITUDE OU VALOR ABSOLUTO, IGNORANDO O SINAL. OBSERVA-SE QUE O MÓDULO DA INTERAÇÃO ENTRE AS CARGAS É TAL QUE:
 - * QUANTO MAIOR A CARGA, MAIS FORTE A INTERAÇÃO
 - * QUANTO MAIOR A DISTÂNCIA, Mais FRACA A INTERAÇÃO.

- A INTERAÇÃO ENTRE UM PAR DE ÍONS DE UM SÓLIDO PODE SER ESTUDADA ATRAVÉS DESSA EQUAÇÃO, DESDE QUE:

$$* Q_1 \in Q_2 = Q_+ \in Q_- \text{ (CARGAS DOS ÍONS)}$$

$$* d = r_+ + r_- \text{ (SOMA DO RAIO DOS ÍONS)}$$

- PORTANTO: $E_{el} \text{ (DOIS ÍONS EM SÓLIDO)} = \frac{k(Q_+Q_-)}{r_+ + r_-}$

- VERIFICA-SE QUE A ENTALPIA RETICULAR É PROPORCIONAL AO MÓDULO DE E_{el} , $|E_{el}|$, DE MODO QUE:

$$\Delta H_{ret} = A \cdot |E_{el}| = \frac{A k |Q_+Q_-|}{r_+ + r_-}$$

ONDE, A É UMA CONSTANTE QUE DEPENDE DO ARRANJO GEOMÉTRICO NO CRISTAL. VAMOS ASSUMIR QUE SUA INFLUÊNCIA É PEQUENA RELATIVA A DO POTENCIAL ELETROSTÁTICO, DE MODO A COMPREENDER OS VALORES VARIAVEIS DAS ENTALPIAS RETICULARES EM TÉRMINOS DE CARGAS E DISTÂNCIAS APENAS



Na^+

Cl^-

Cada íon Na^+ é circundado por seis íons Cl^- .

Cada íon Cl^- é circundado por seis íons Na^+ .

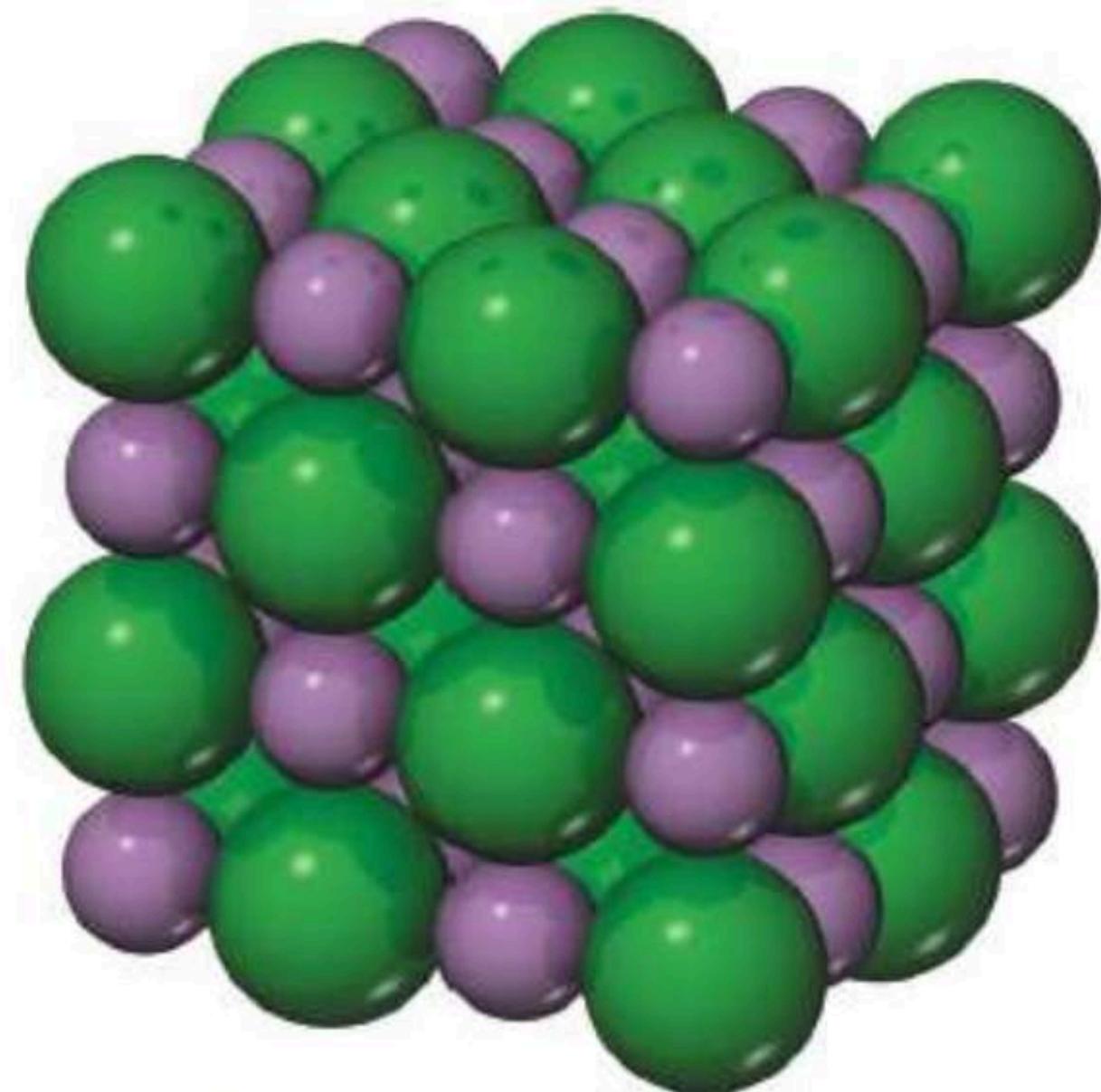
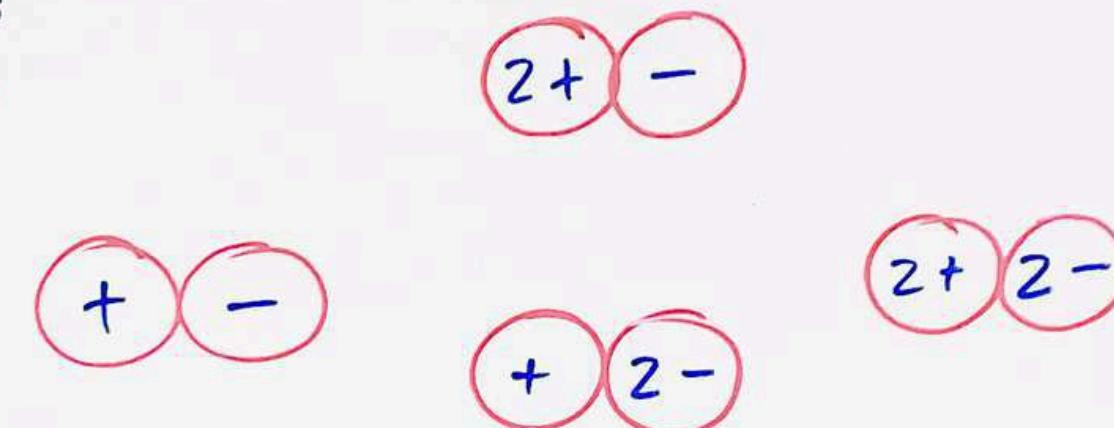


Figura 8.3 Estrutura cristalina do cloreto de sódio.

TO, QUANTO MAIOR AS CARGAS DOS IONS, MAIOR A FORÇA COM QUE ELES SE LIGAM E, CONSEQUENTEMENTE, A ENERGIA DO RETÍCULO, POIS MAIS ENERGIA É NECESSÁRIA PARA SEPARAR CÁTIONS E ANIONS:

SE RAIOS SÃO CONSTANTES



CARGAS CRESCENTES

ENERGIA DO RETÍCULO CRESCENTE

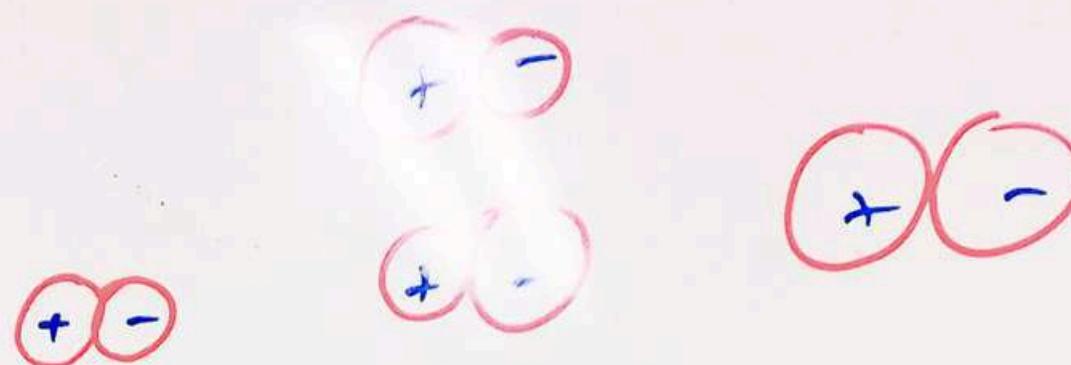
(MAIS ENERGIA É NECESSÁRIA PARA SEPARAR OS ÍONS)

VER TABELA DO LIVRO

• POR OUTRO LADO, QUANTO MAIOR O RAIO DOS ÍONS (r_+ E/OU r_-), MENOR A FORÇA ELSTROSTÁTICA E A ENERGIA DE REDE.

Composto	Energia reticular (kJ/mol)	Composto	Energia reticular (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl ₂	2.326
LiCl	834	SrCl ₂	2.127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3.795
NaCl	788	CaO	3.414
NaBr	732	SrO	3.217
Nal	682		
KF	808	ScN	7.547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

SÍ CARGAS
CONSTANTES



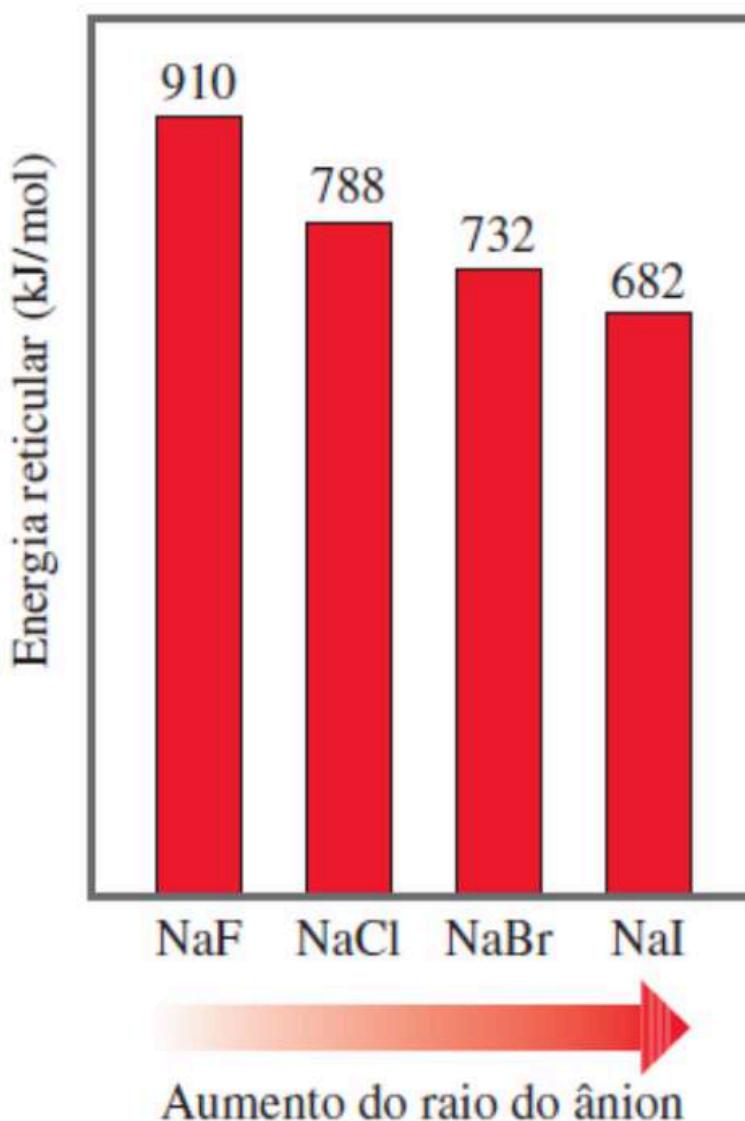
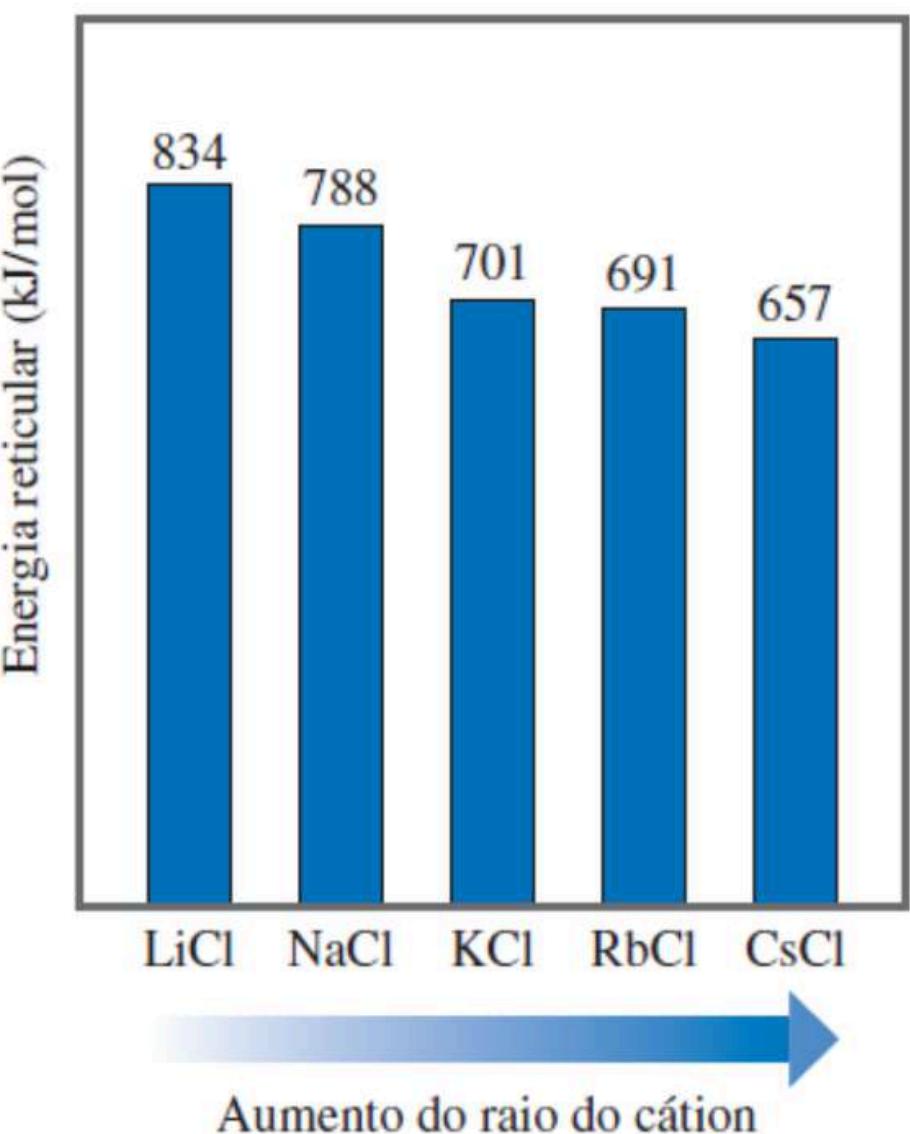
RAIOS CRESCENTES

ENERGIA DE REDE DECRESCENTE
(MENOS ENERGIA É NECESSÁRIA
PARA SEPARAR OS IÔNIS)

VER TABELA E GRÁFICO DO LIVRO

• CÁLCULO DA ENERGIA RETICULAR:

- ΔH_{ret} NÃO PODE SER OBTIDO DIRETAMENTE EM UM EXPERIMENTO. NO ENTANTO, ELE PODE SER CALCULADO DE MANEIRA INDIRETA, USANDO A LEI DE HESS E OUTRAS MEDIDAS, SEGUNDO O CICLO DE HABER-BORN.

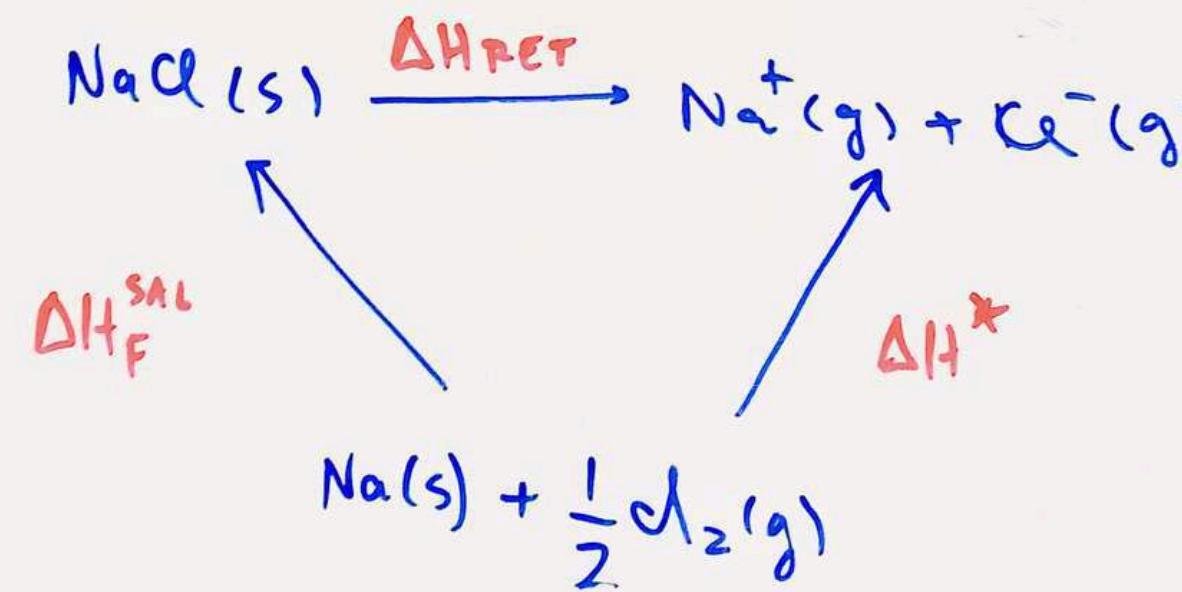


\Rightarrow CICLO DE PERR-BORN

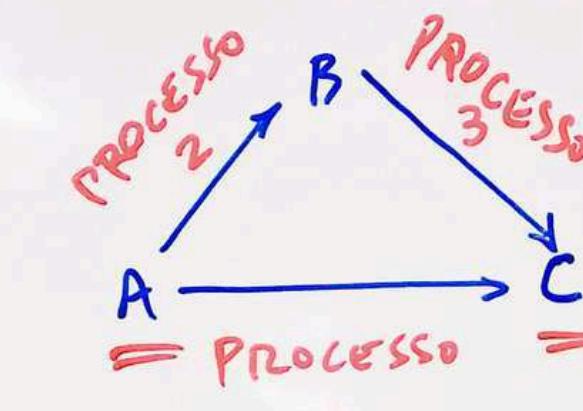
- DESSEJAMOS ΔH_{RET} , REFERENTE AO PROCESSO:



- CONSIDERANDO QUE TEMOS ACESSO ÀS ENERGIAS ENVOLVIDAS NOS PROCESSOS DE IONIZAÇÃO (QUE ENVOLVEM OS REAGENTES) E FORMAÇÃO DO SAL (QUE ENVOLVEM O PRODUTO):



- DEVIDO A PRINCÍPIOS DA TERMODINÂMICA:



$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

(LEI DE HESS)

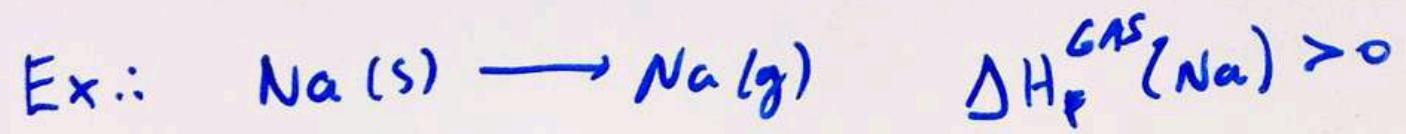
- NO NOSSO CASO:

$$\Delta H^* = \Delta H_F^{\text{SAL}} + \Delta H_{\text{RET}} \quad \text{OU:}$$

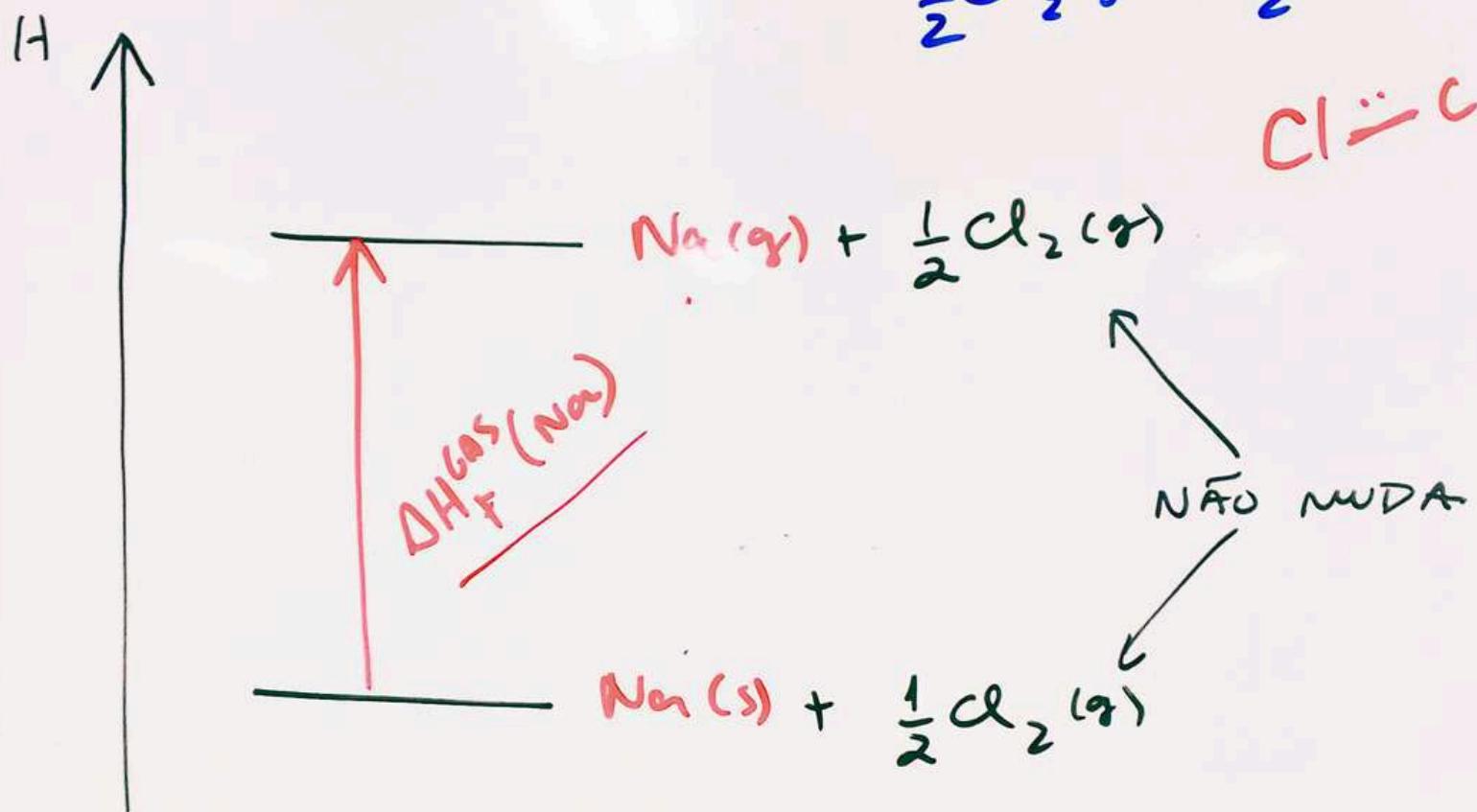
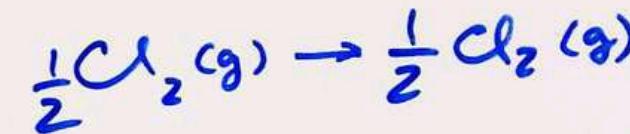
$$\boxed{\Delta H_{\text{RET}} = \Delta H^* - \Delta H_F^{\text{SAL}}}$$

- A ENTALPIA ΔH^* ENVOLVE:

- 1) TRANSFORMAÇÃO DOS ELEMENTOS (METAL E/OU AMÉTAL) PARA A FASE GASOSA (SE NECESSÁRIO). TAL PROCESSO, COMO VIMOS, É ENDOTÉRMICO: $\Delta H_F^{\text{GAS}} > 0$

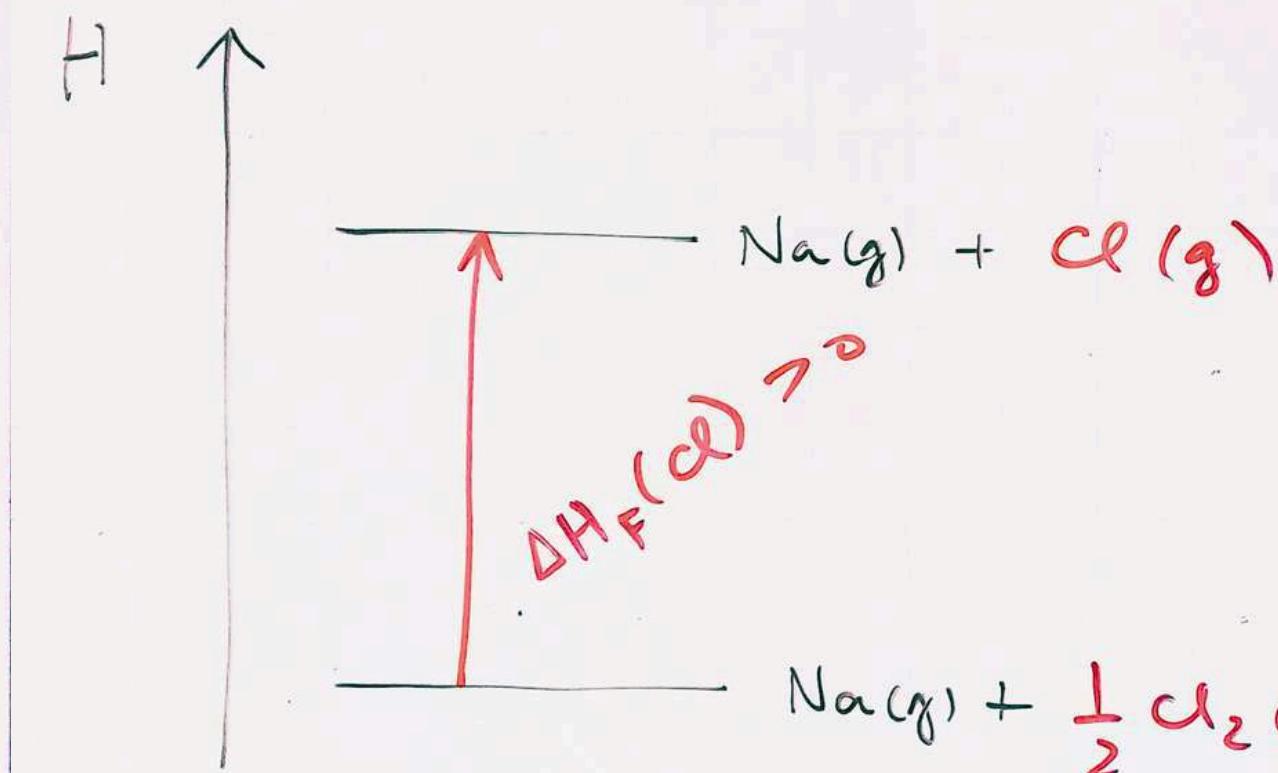


CLORO JÁ É NA FASE GASOSA À 25°C

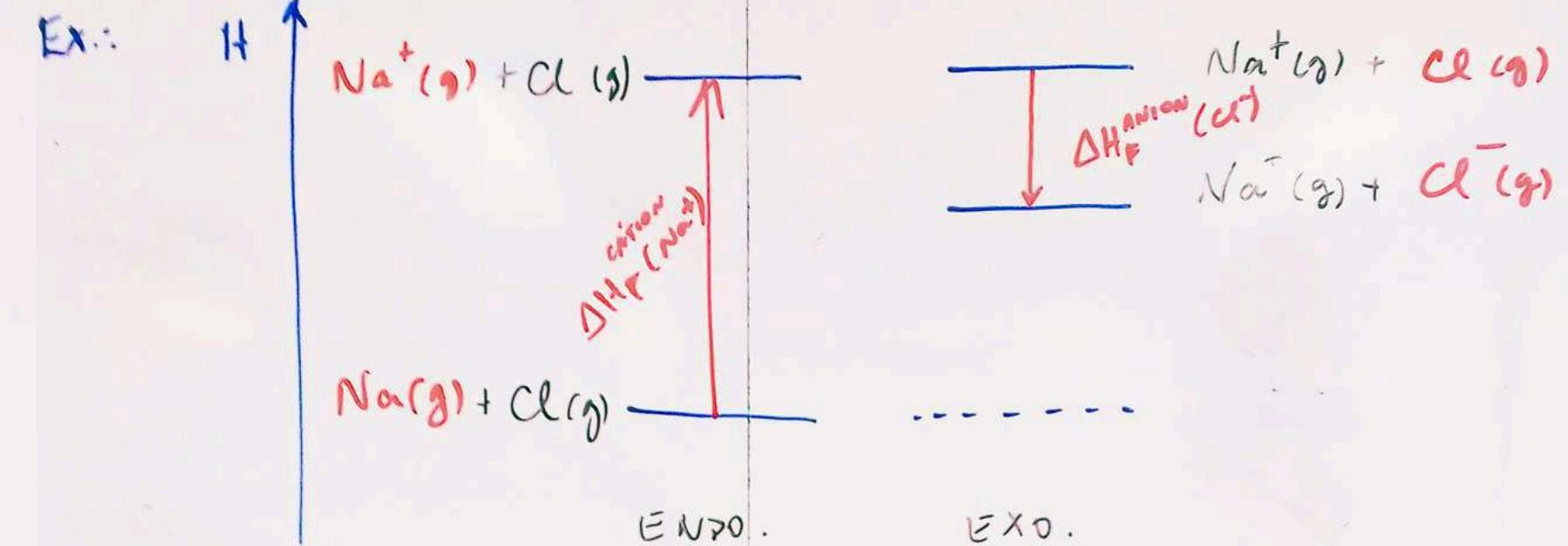
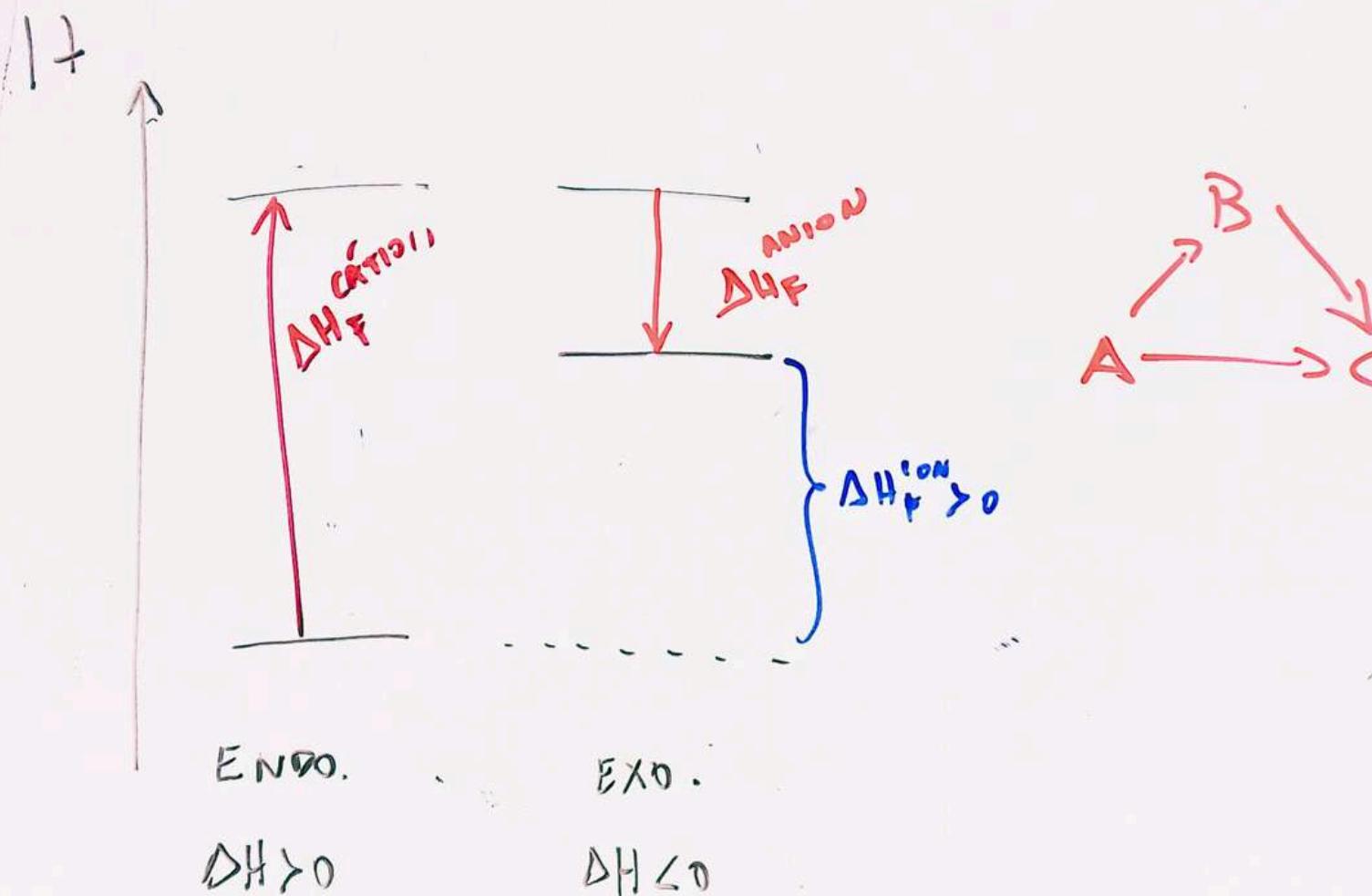
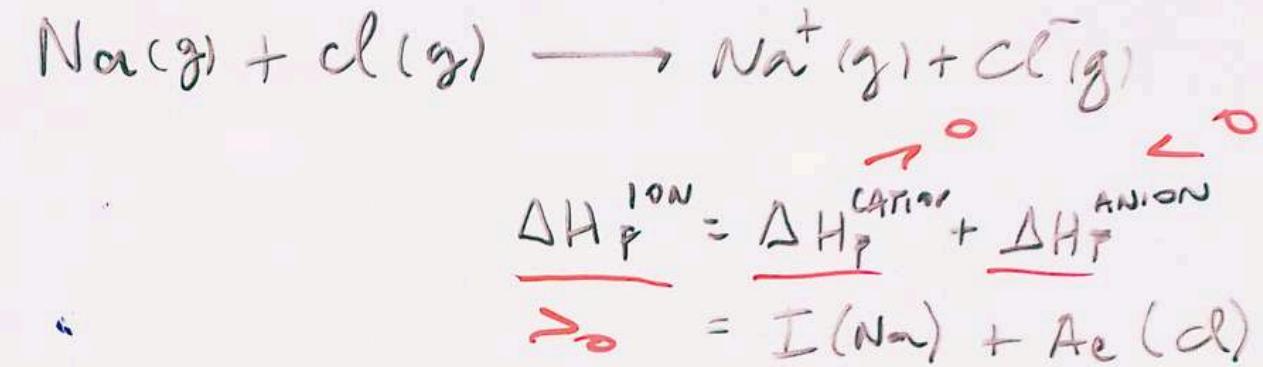
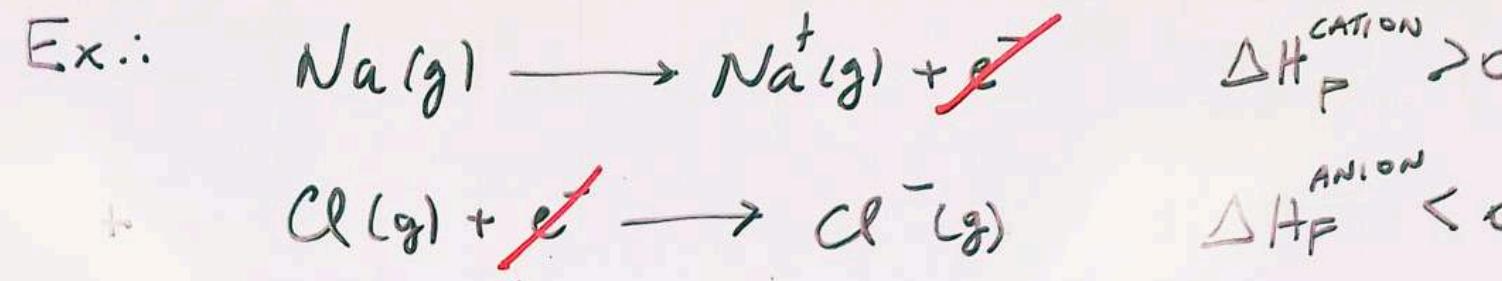


2) FORMAÇÃO DOS ÁTOMOS (EM FASE GASOSA) A PARTIR DE QUALQUER SUBSTÂNCIA MOLECULAR (SE HOUVER). A ATOMIZAÇÃO ENVOLVE SEPARAR ÁTOMOS LIGADOS VIA LIGAÇÃO QUÍMICA, POR ISSO É UM PROCESSO NECESSARIAMENTE ENDOTÉRMICO, $\Delta H_F(\alpha) > 0$

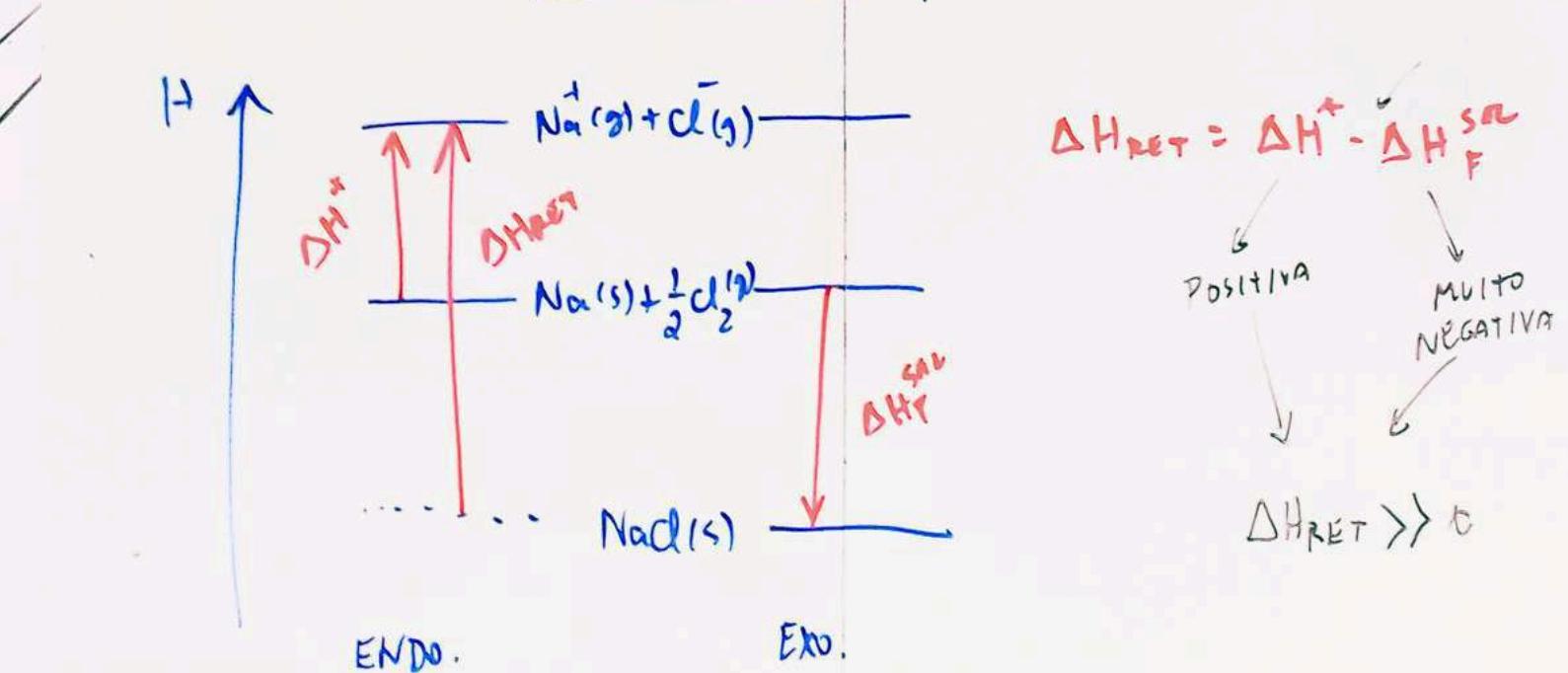
SÓDIO JÁ É ÁTOMO NA FASE GASOSA:



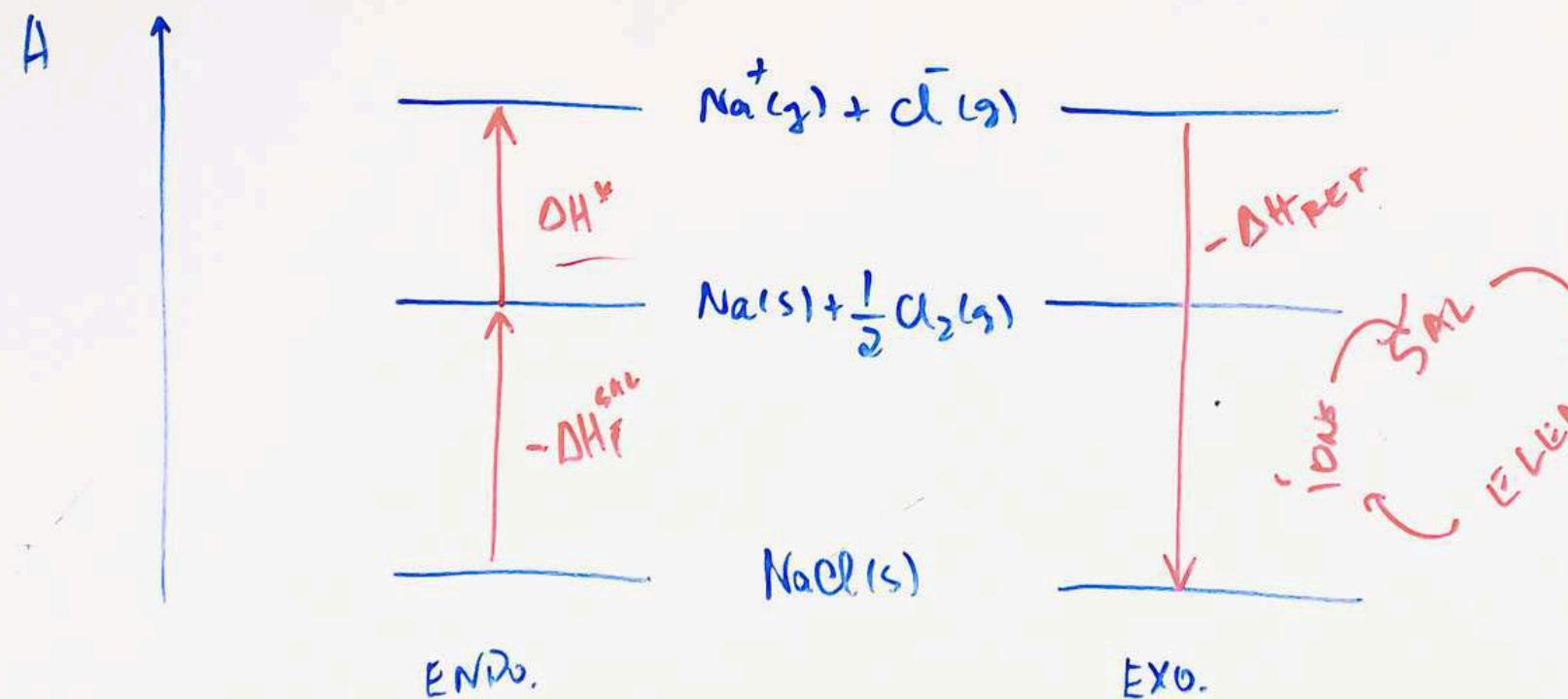
3) FORMAÇÃO DOS ÍONS, A PARTIR DOS ÁTOMOS EM FASE GASOSA, UM PROCESSO ENDOTÉRMICO PARA OS CATIONES E EXOTÉRMICO PARA OS ANIONES MAS, NO TOTAL, ENDOTÉRMICO: $\Delta H_F^{\text{ION}} > 0$



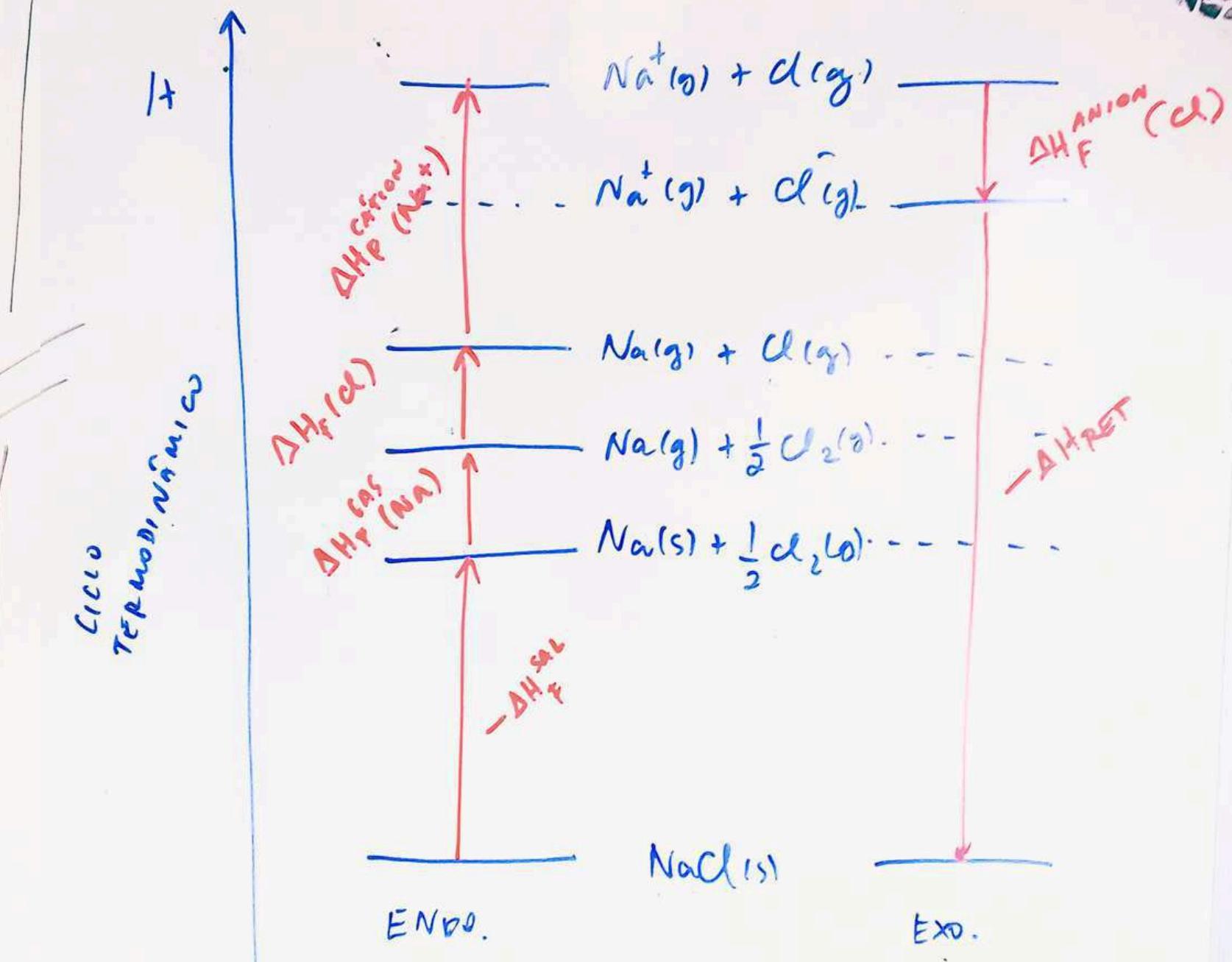
- SABEMOS, PORTANTO, QUE OS PROCESSOS ENVOLVIDOS EM ΔH^\ddagger SÃO, NO TOTAL, ENDOTÉRMICOS, LOGO



• É COMUM, NA REPRESENTAÇÃO DE CICLOS DE HABER-BORN, USAR AS ENTALPIAS DOS PROCESSOS OPOSTOS ÀS SEPARAÇÃO DOS ÍONS DO SAL E FORMAÇÃO DO SAL, SUBSTITUINDO ΔH_{RET} POR $-\Delta H_{\text{RET}}$ (ENTALPIA DE JUNÇÃO DOS ÍONS EM FASE GASOSA PARA FORMAR O SÓLIDO IÔNICO) E ΔH_F^{Sal} POR $-\Delta H_F^{\text{Sal}}$ (TRANSFORMAÇÃO DO SAL EM SEUS ELEMENTOS MAIS ESTÁVEIS). É CLARO QUE, COM A MUDANÇA DOS ESTADOS INICIAIS E FINAIS, $-\Delta H_{\text{RET}}$ É EXOTÉRMICA E $-\Delta H_F^{\text{Sal}}$ É ENDOTÉRMICA:



• O CICLO COMPLETO É, PORTANTO



SOMA DAS ENTALPIAS EM CICLO É ZERO, LOGO
 $\Delta H_{\text{RET}} = \Delta H_F^{\text{gas}}(\text{Na}) + \Delta H_F(\text{Cl}_2) + \Delta H_F^{\text{anion}}(\text{Cl}) - \Delta H_F^{\text{Sal}}$

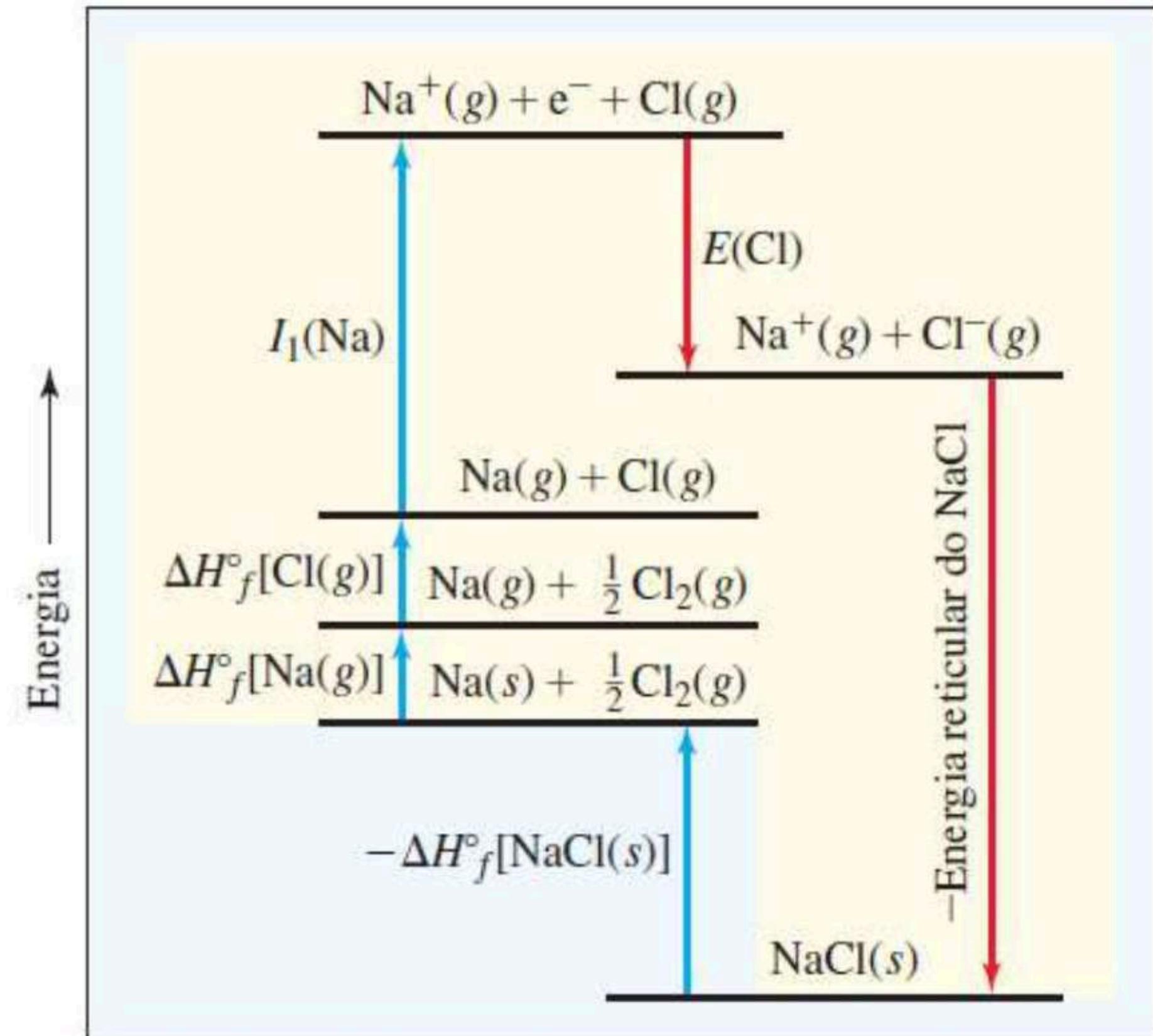
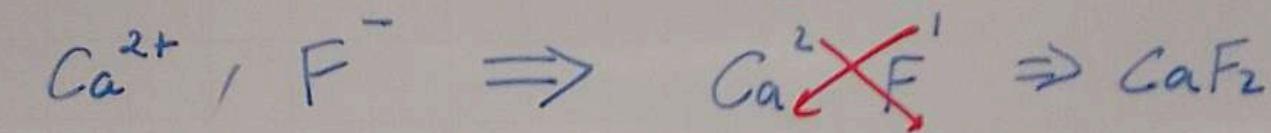
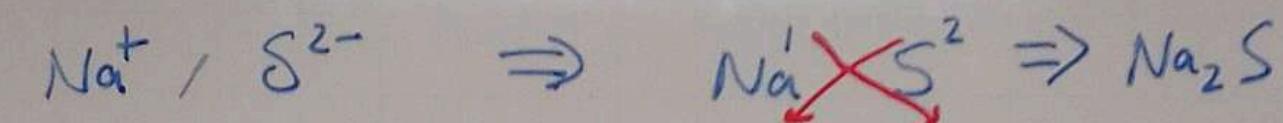
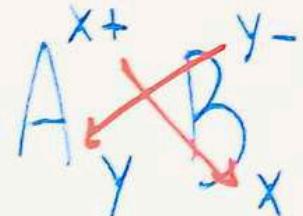


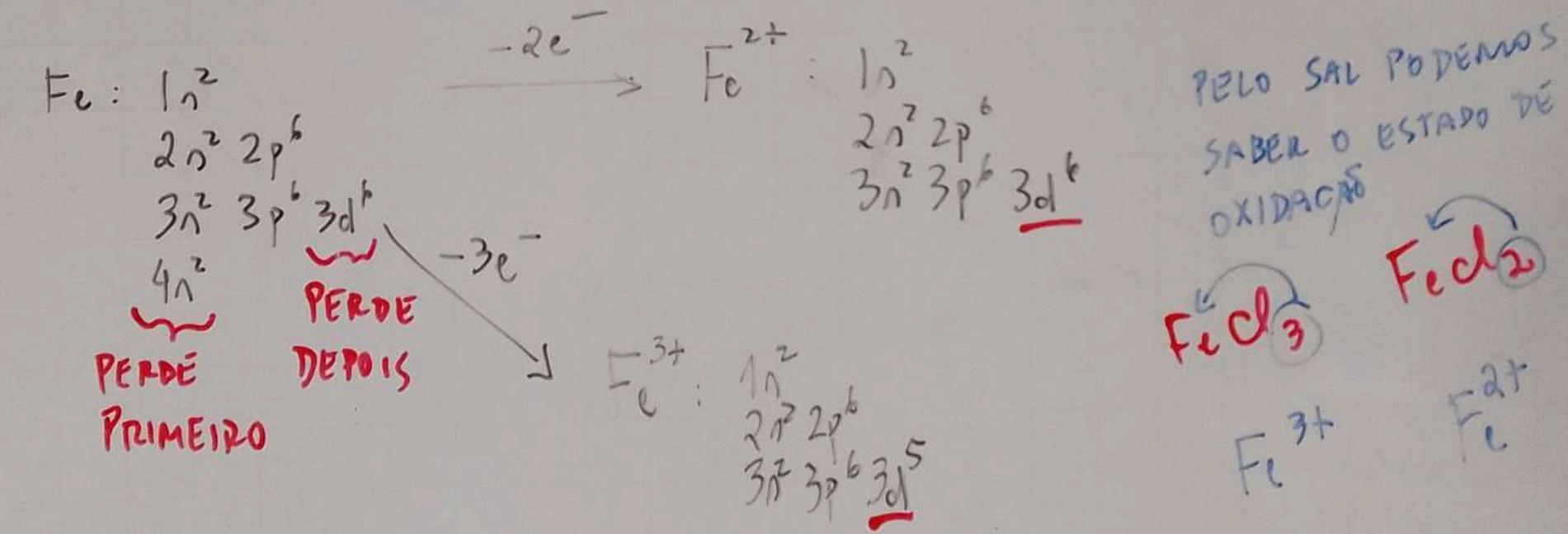
Figura 8.5 O ciclo de Born–Haber para a formação do NaCl. Essa representação da lei de Hess mostra as relações energéticas na formação do sólido iônico a partir de seus elementos.

FORMAÇÃO DE SAIS

	GRUPO	CARGA
METÁLIS	1A	+1
	2A	+2
	3A	+3
AMETAIS	5A	-3
	6A	-2
	7A	-1



- OBSERVAR QUE METAIS DE TRANSIÇÃO POSSUEM MÚLTIPLOS ESTADOS DE OXIDAÇÃO, PERDENDO PRIMEIROS ELETRONS DOS ORBITAIS ns ($n=4$ ou 5 , NÍVEL MAIS EXTERNO NO 3º E 4º PERÍODO) E DEPOIS OS ELETRONS DOS ORBITAIS $(n-1)d$ ($3d$ ou $4d$, POR EXEMPLO)



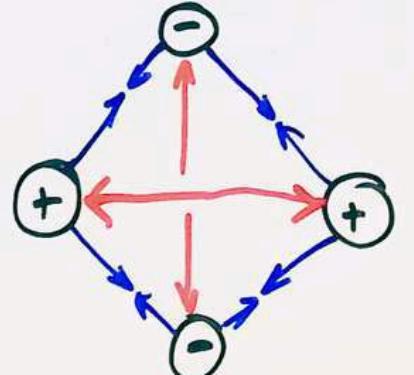
1A																	7A	8A
H^+																H^-		
2A																		
Li^+																G		
Na^+	Mg^{2+}	Metais de transição														A		
K^+	Ca^{2+}	Sc^{3+}	Ti^{4+}	V^{5+} V^{4+}	Cr^{3+}	Mn^{2+} Mn^{4+}	Fe^{2+} Fe^{3+}	Co^{2+} Co^{3+}	Ni^{2+}	Cu^+ Cu^{2+}	Zn^{2+}	Al^{3+}	P^{3-}	N^{3-}	O^{2-}	F^-	S	
Rb^+	Sr^{2+}								Pd^{2+}	Ag^+	Cd^{2+}		Sn^{2+} Sn^{4+}	Sb^{3+} Sb^{5+}	Te^{2-}	Br^-	N	
Cs^+	Ba^{2+}								Pt^{2+}	Au^+ Au^{3+}	Hg_2^{2+} Hg^{2+}		Pb^{2+} Pb^{4+}	Bi^{3+} Bi^{5+}			O	
																B		
																R		
																E		
																S		

Figura 7.15 Estados de oxidação representativos dos elementos. Observe que o hidrogênio apresenta números de oxidação positivo e negativo, sendo 1 e -1 .

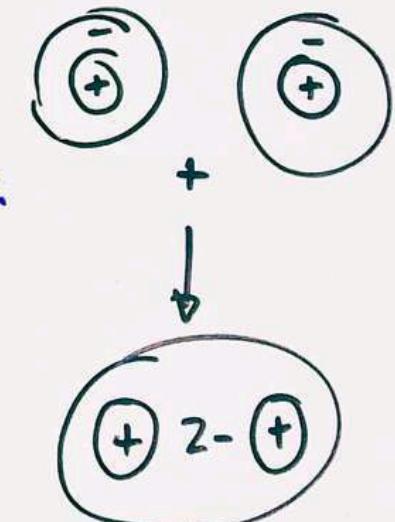
LIGAÇÃO COVALENT

- MUITAS SUBSTÂNCIAS NÃO POSSUEM CARACTERÍSTICAS DE SAIS IÔNICOS;
- LEWIS PROPOSS QUE ÁTO_{NOS} TAMBÉM PODEM ADQUIRIR CONFIGURAÇÃO DE GÁS NOBRE COMPARTILHANDO UM OU MAIS PARES DE ELÉTRONS
- UMA MOLÉCULA (SUBSTÂNCIA FORMADA POR TAIS LIGAÇÕES DE COMPARTILHAMENTO) É ESTÁVEL PORQUE FORÇAS ATRATIVAS NÚCLEO-ELÉTRONS SUPERAM AS REPULSIVAS (NÚCLEO-NÚCLEO E ELÉTRON-ELÉTRON)

Ex.:



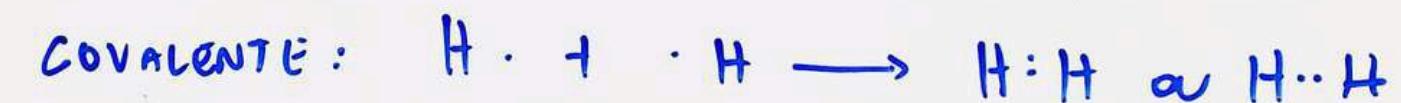
PENSIDADE ELÉTRÔNICA
(PROBABILIDADE DE ENCONTRAR e^-) MAIOR



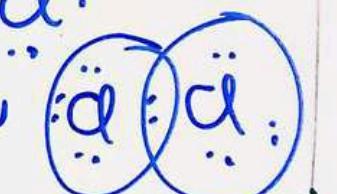
- ESSE COMPARTILHAMENTO É CHAMADO DE LIGAÇÃO COVALENTE

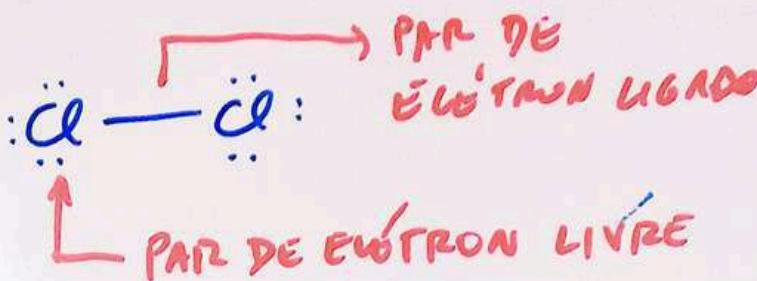
* ESTRUTURAS DE LEWIS P/ LIGAÇÃO COVALENTE

- PODEMOS REPRESENTAR LIGAÇÕES COVALENTES EM MOLECULAS DE DUAS FORMAS. UMA DELAS "ELÉTRONS COMO PONTOS", É A MESMA USADA PARA LIGAÇÕES IÔNICAS COM O PAR DE ELÉTRONS COMPARTILHADO ENTRE OS ÁTO_{NOS}:



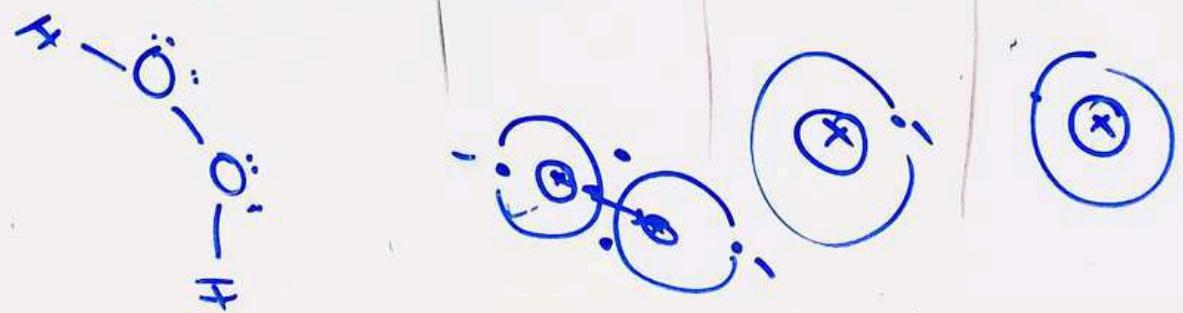
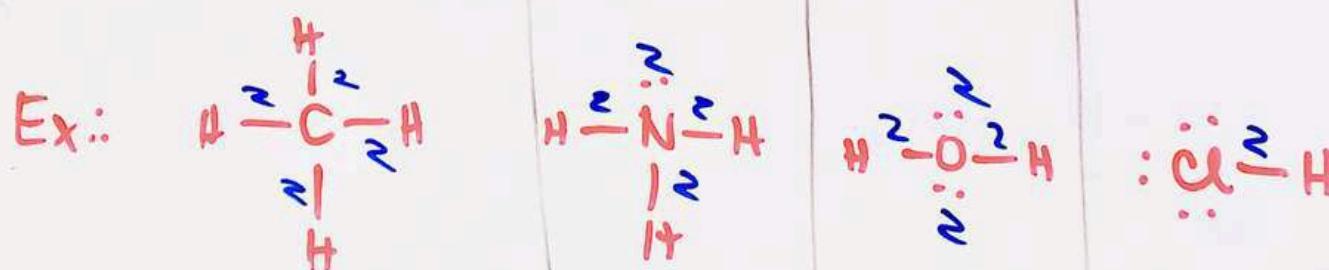
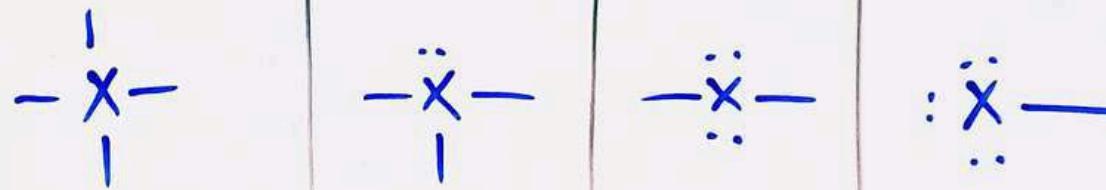
- OUTRA FORMA DE INDICAR ESSAS ESTRUTURAS É PELA NOTAÇÃO DE "ELÉTRONS LIVRES" (ISTO É, NÃO-LIGADOS) COMO PONTOS. NELA, CADA PAR DE ELÉTRONS NA LIGAÇÃO É REPRESENTADO POR UMA LINHA CONECTANDO OS ÁTO_{NOS} QUE SE LIGAM:





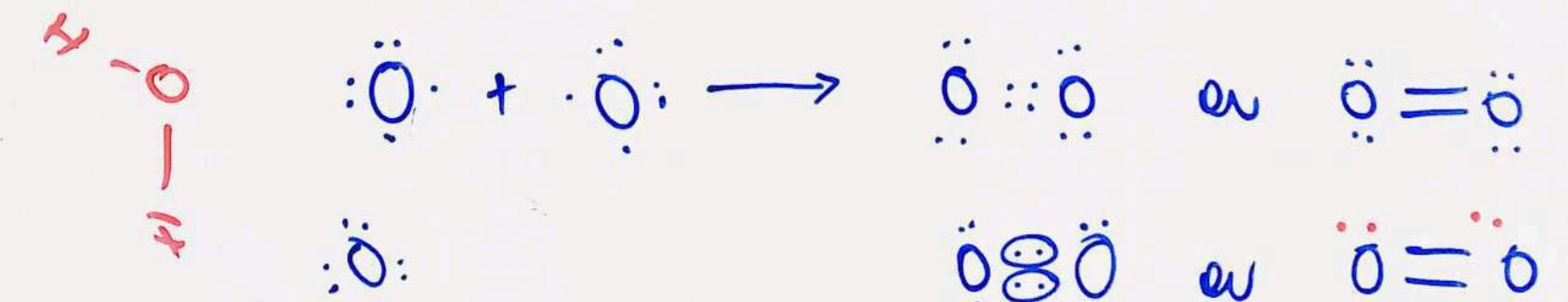
- COMO O NÚMERO DE LIGAÇÕES SIMPLES QUE CADA ÁMETAL PODE FAZER PARA COMPLETAR O OCTETO DEPENDE DO NÚMERO DE ELÉTRONS DE VALENCIA, PODE-SE ESPERAR QUE CADA FAMÍLIA DE ÁTOMOS TENHAM NÚMEROS DE LIGAÇÕES E ELÉTRONS LIVRES EQUIVALENTES.

4 A	5 A	6 A	7 A
-----	-----	-----	-----

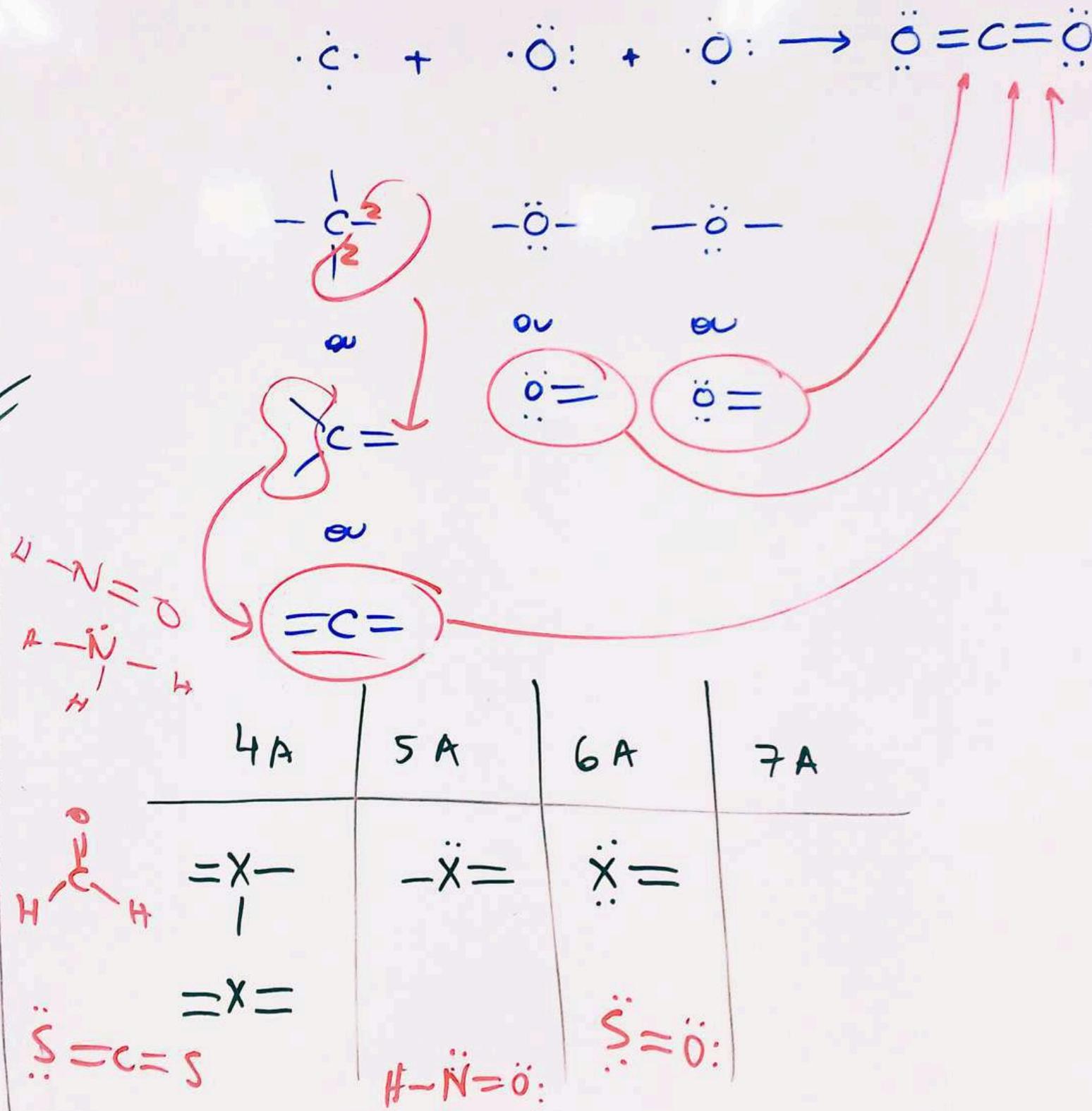


* LIGAÇÕES MÚLTIPLOAS

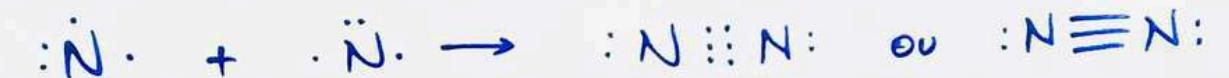
- NESSES CASOS OS ÁTOMOS COMPLETAM O OCTETO COMPARTILHANDO MAIS DE UM PAR DE ELÉTRONS. CADA LIGAÇÃO DESSAS É REPRESENTADA POR UM PAR DE PONTOS ("ELÉTRONS COMO PONTOS") OU UMA LINHA ("ELÉTRONS LIVRES COMO PONTOS")
- LIGAÇÃO DUPLA: SE ÁTOMOS COMPARTILHAM 4 ELÉTRONS TEMOS DOIS PARES, DUAS LINHAS NA REPRESENTAÇÃO:



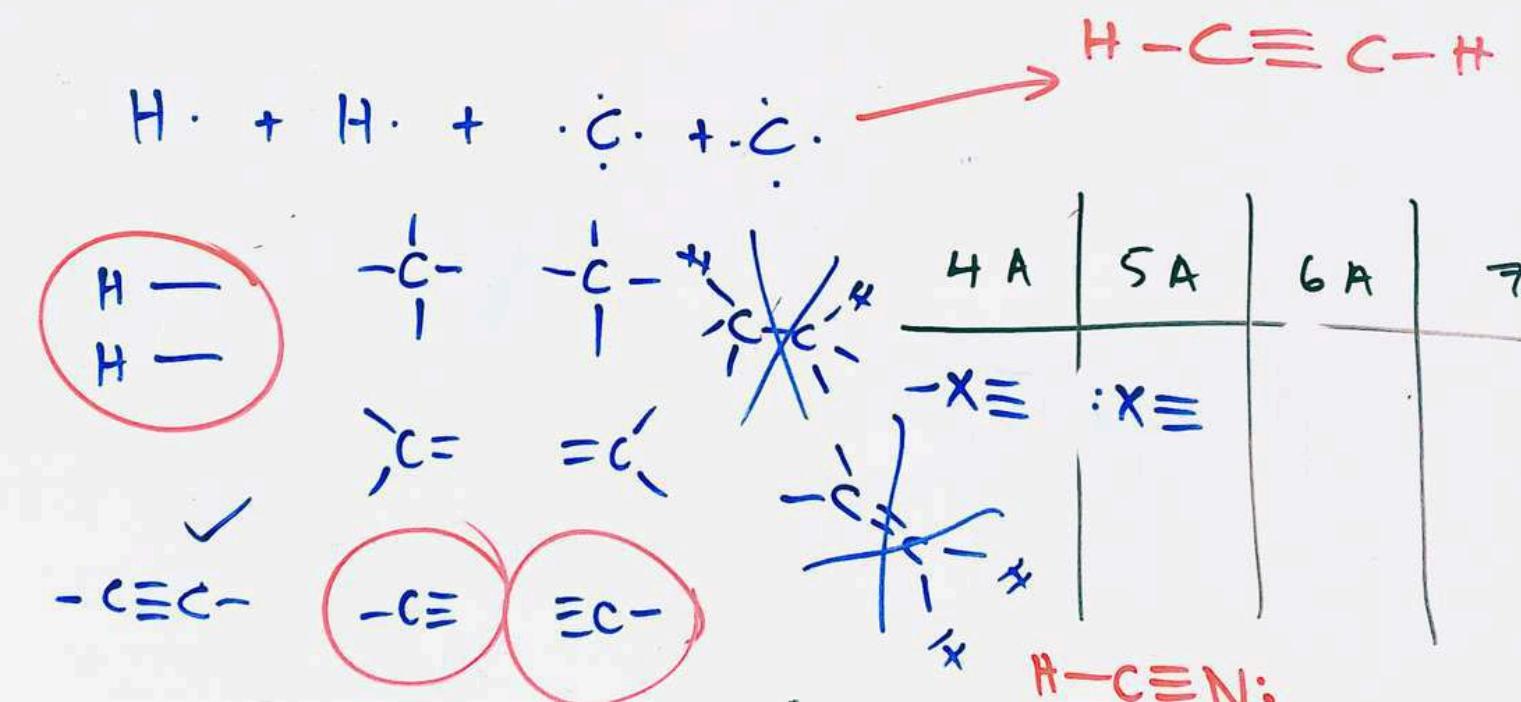
• ENTRE ÁTOMOS DIFERENTES:



* LIGAÇÃO TRIPLA: DOIS ÁTOMOS COMPARTILHAM 6 ELÉTRONS, OU TRÊS PARES, PARA COMPLETAR O OCTETO $:\text{N} \times \text{N}:$

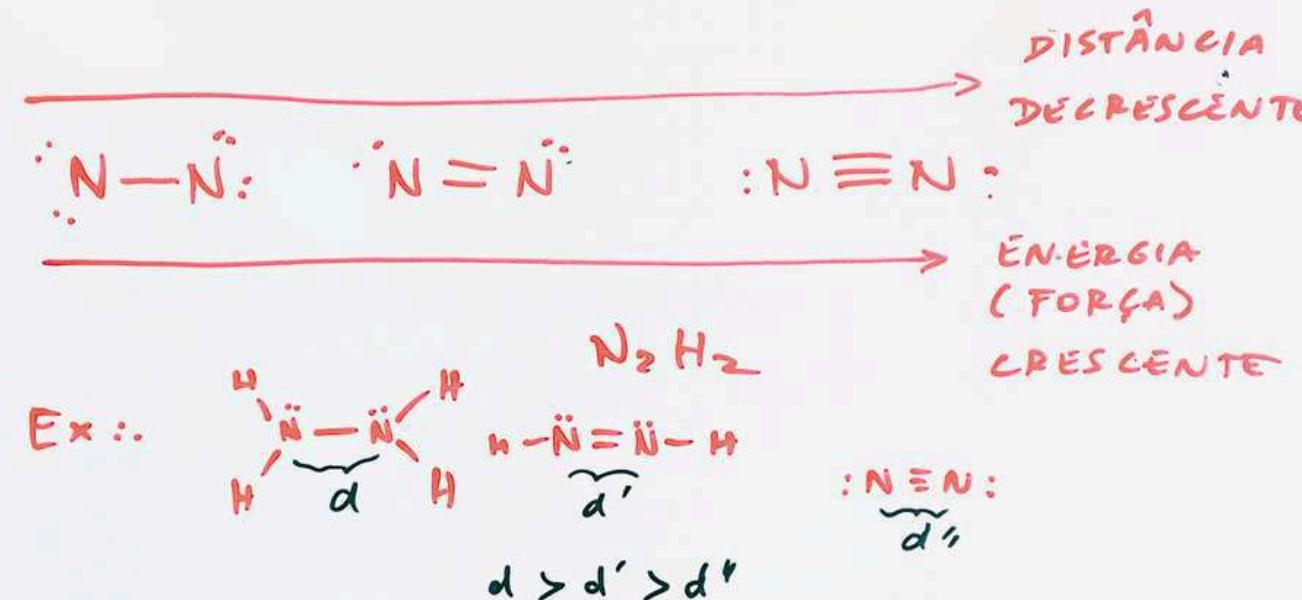


• ENTRE ÁTOMOS DIFERENTES:



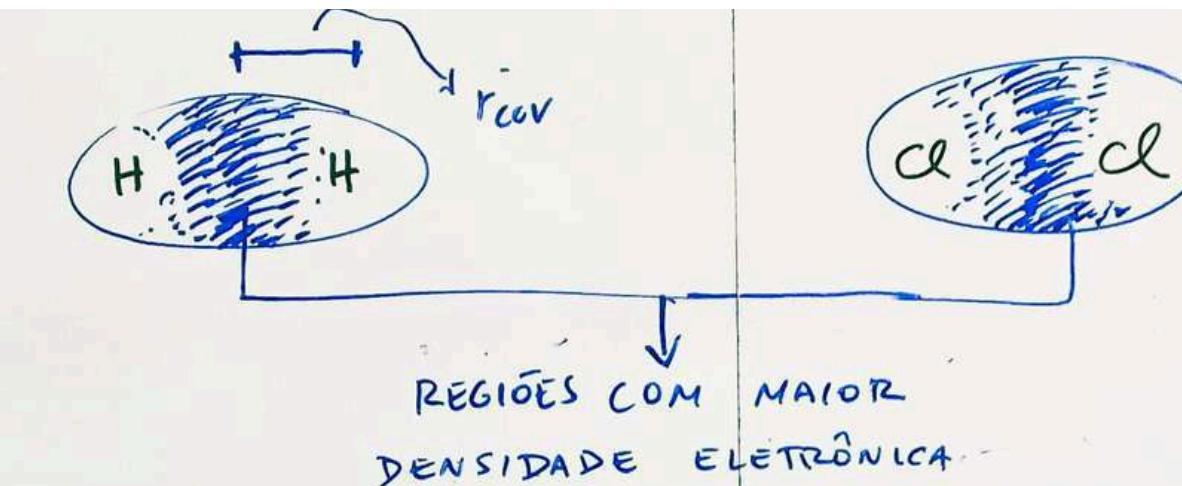
• QUANTO MAIOR O NÚMERO DE LIGAÇÕES ENTRE OS ÁTOMOS, MAIS ENERGIA É NECESSÁRIA PARA SEPARA-LOS, PORQUE MAIOR É A FORÇA DA LIGAÇÃO

- QUANTO MAIOR O NÚMERO DE LIGAÇÕES ENTRE OS ÁTOMOS, MENOR É A DISTÂNCIA ENTRE OS ÁTOMOS LIGADOS;



* POLARIDADE E ELETRONEGATIVIDADE

- ÁTOMOS POSSUEM TENDÊNCIAS PRÓPRIAS DE ATRAIR ELÉTRONS EM UMA LIGAÇÃO QUÍMICA;
- ESSA TENDÊNCIA RELATIVA INDICARÁ O TIPO DE LIGAÇÃO FORMADA;
- EM MOLECULAS FORMADAS POR DOIS ÁTOMOS DE UM MESMO ELEMENTO ESSA TENDÊNCIA É EQUIVALENTE. ENTÃO A DENSIDADE ELÉTRÔNICA (REGIÃO COM MAIOR PROBABILIDADE DE ENCONTRAR O ELÉTRON) FICA EXATAMENTE NO MEIO DOS ÁTOMOS.

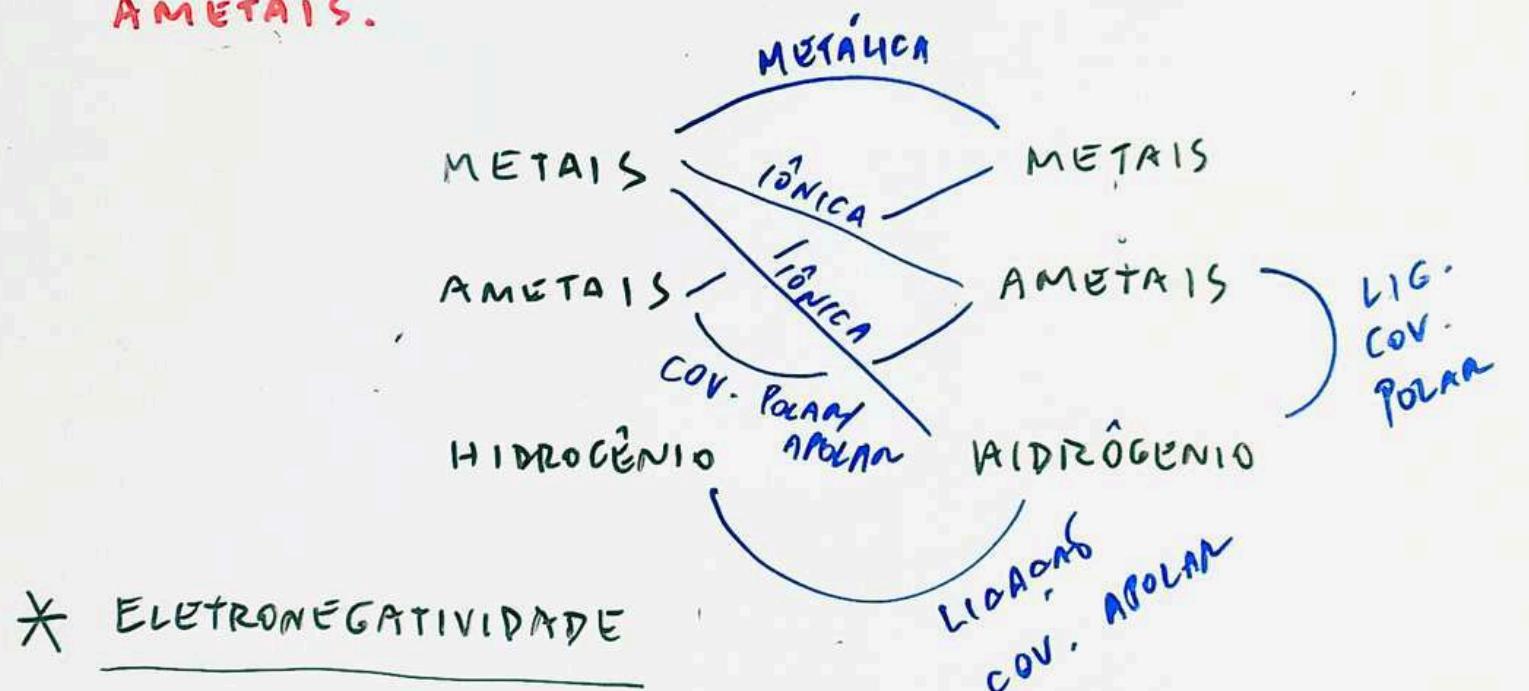


- DIZEMOS QUE ESSA LIGAÇÃO É CHAMADA DE COVALENTE APO-LAR, POIS NÃO HÁ DIPOLOS ELÉTRICOS DISTINGUINDO A CARGA DE UM ÁTOMO DA DE OUTRO. OCORRE ENTRE AMETALIS DE UM MESMO ELEMENTO, E ENTRE ÁTOMOS DE HIDROGÉNIO (H_2).
- SE, POR OUTRO LADO, UM DOS ÁTOMOS TEM UMA TENDÊNCIA MAIOR DE ATRAIR ELÉTRONS, A NUVEM ELÉTRÔNICA ESTARÁ MAIS DESLOCALIZADA EM SUA DIREÇÃO, ASSIM COMO A CHANCE DE ENCONTRAR O ELÉTRON. DIZEMOS QUE ESSA LIGAÇÃO É COVALENTE POLAR, PORQUE UM DIPOLO ELÉTRICO PERMANENTE É FORMADO NA LIGAÇÃO. É COMUM ENTRE AMETALIS DISTINTOS E O HIDROGÉNIO.



ALEXANDROS
MICHELE

- SE A DIFERENÇA ENTRE A CAPACIDADE RELATIVA DE ATRAIR ELÉTRONS ENTRE OS ÁTOMOS É MUITO GRANDE, HAVERÁ A TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS PARA ESTE, O QUE OCORRE NUMA LIGAÇÃO IÔNICA. COMO VIMOS, ELA OCORRE SOBRETUDO ENTRE METAIS E AMETAIS.



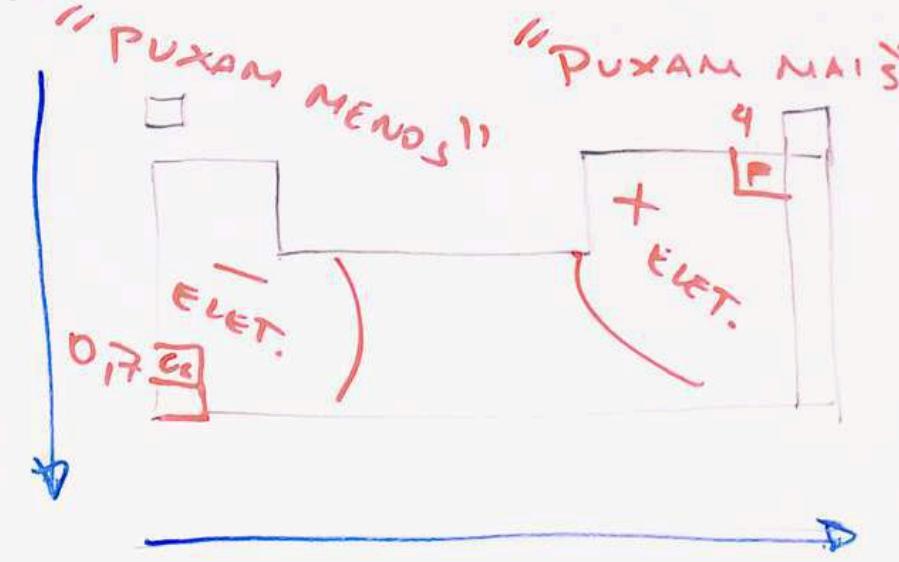
- VIMOS QUE A TENDÊNCIA DE UM ÁTOMO ATRAIR ELÉTRONS, ISOLADAMENTE OU AO INTERAGIR COM OUTRO ÁTOMO, AJUDA A DIFERENCIAR E PREVER QUE TIPO DE LIGAÇÃO SERÁ FORMADA, QUE É UMA INFORMAÇÃO IMPORTANTE NO ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS DAS SUBSTÂNCIAS.

- É POSSÍVEL ESTIMAR ESSA TENDÊNCIA POR MEIO DE UMA QUANTIDADE CHAMADA ELETRONEGATIVIDADE. EXISTEM DEFINIÇÕES DISTINTAS PARA CALCULÁ-LA
- ELETRONEGATIVIDADE DE MILLIKAN: ÁTOMOS QUE ATRAEM MELHOR OS ELÉTRONS POSSUEM UMA ENERGIA DE IONIZAÇÃO ALTA (DIFICILMENTE PERDEM ELÉTRONS QUE JÁ TEM) E UMA AFINIDADE DE ELETRÔNICA ALTA (LIBERAM MUITA ENERGIA QUANDO RECEBEM ELÉTRONS NOVOS). A DEFINIÇÃO DE ELETRONEGATIVIDADE χ_m É:

$$\chi_m(\text{átomo}) = \frac{I(\text{átomo}) + A_e(\text{átomo})}{2}$$

(χ_p)

- ELETRONEGATIVIDADE DE PAULING: A MAIS CONHECIDA É USADA ESCALA DE ELETRONEGATIVIDADE, OBTIDA A PARTIR DE DADOS TERMOQUÍMICOS (ENERGIAS NECESSÁRIAS PARA ROMPER LIGAÇÕES ENTRE ÁTOMOS. ESSA ELETRONEGATIVIDADE SE COMPORTA COMO UMA TENDÊNCIA PERIÓDICA: ELA AUMENTA QUANDO Z AUMENTA EM UM PERÍODO E DIMINUI QUANDO Z AUMENTA EM UM GRUPO (VER TABELA DO LIVRO):



(PORQUE Z IF MAIS EXTERNO AUMENTA)

- ÁTOMOS Mais eletronegativos TÊM CARGA NUCLEAR EFETIVA MAIOR E RAIOS MENORES, POIS ISSO MAXIMIZA A INTERAÇÃO DOS ELÉTRONS DE VALÊNCIA COM O NÚCLEO;
- A ELETRONEGATIVIDADE DE PAULING VARIA DE 0,7 (CS) A 4,0 (F), MAS MEMORIZAR TAL VALORES NÃO É IMPORTANTE. SABER, EM UM GRUPO DE ÁTOMOS, QUais SÃO Mais eletro-negativos, POR OUTRO LADO, É RELEVANTE NA PREVISÃO DO TIPO DE CADA LIGAÇÃO E A POLARIDADE DA LIGAÇÃO DA MOLÉCULA. ISSO PODE SER INFERIDO PELA INSPEÇÃO DA TABELA PERIÓDICA.
- * ELETRONEGATIVIDADE E TIPOS DE LIGAÇÃO
 - CONSIDERE DOIS ÁTOMOS LIGADOS ENTRE SI. PELA DIFERENÇA DE ELETRONEGATIVIDADE ENTRE ELES PODÉMOS INFERRIR SE A LIGAÇÃO TEM MAIS CARÁTER COVALENTE (LEVANDO À MOLÉCULAS) OU IÔNICO (FORMANDO SUBSTÂNCIAS SÓLIDAS IÔNICAS)

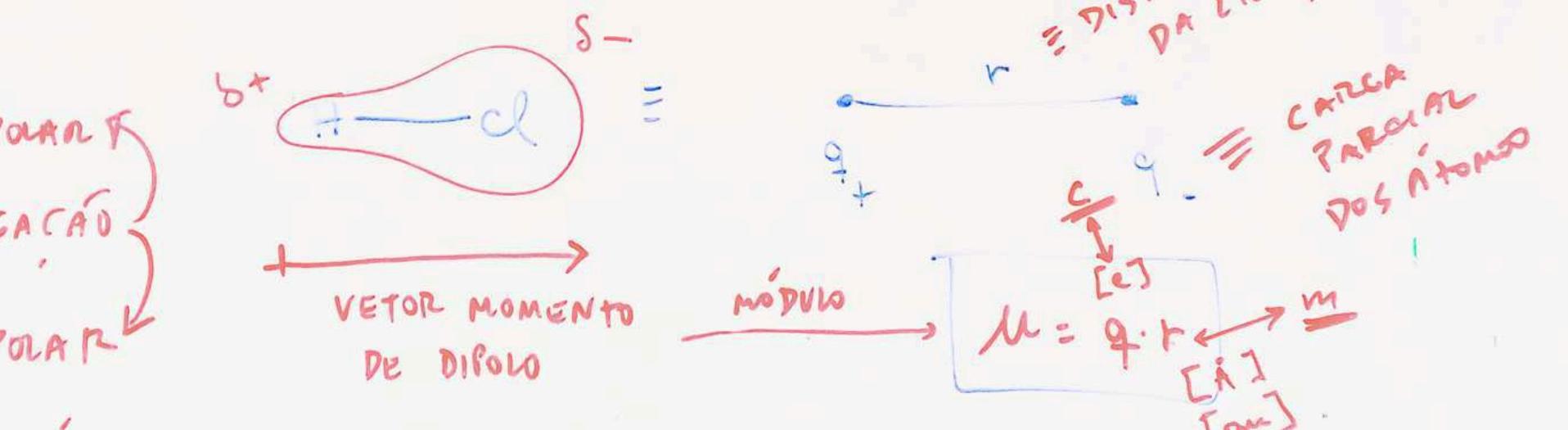
ΔV_p	0	$> 0 - 25$	> 2
LIGAÇÃO	COVALENTE APOLAR	COVALENTE POLAR	IONICA
EXEMPLO	$F - F$	$H - F$	$Li^+ F^-$
CARGAS	SEM CARGAS PERMANENTES	CARGAS PARCIAIS	CARGAS TOTais
TIPO DE SUBSTÂNCIA	MOLÉCULA	MOLÉCULA	COMPÓSTO IONICO

• TAL MÉTODO NÃO FUNCIONA TÃO BEM QUANDO METALS COM DIFERENTES ESTADOS DE OXIDAÇÃO FORMAM COMPOSTOS. EM GERAL, QUANTO MAIOR O ESTADO DE OXIDAÇÃO DO METAL (SOBRETUDO ACIMA DE +4) MAIS SIGNIFICATIVO O GRAU DE COVALENCIA



* MOMENTO DE DIPOLO

• LIGAÇÃO COVALENTE POLAR PODE SER TRADUZIDA COMO UM DIPOLO ELÉTRICO, EM QUE AS CARGAS q_+ E q_- ESTÃO SEPARADAS POR UMA DISTÂNCIA r . EM MOLECULAS DIATÔMICAS, COMO A ÚNICA LIGAÇÃO É POLAR, A MOLECULA É DITA POLAR. MOLECULAS POLARES INTERAGEM FORTEMENTE ENTRE SI E COM IONS, LEVANDO A VÁRIAS PROPRIEDADES RELEVANTES.



• GERALMENTE É EXPRESSO EM DEBYE (D):

$$1D = 3,34 \cdot 10^{-30} C \cdot m$$

CONSIDERAR LiF: $\mu = 6,28 \text{ D}$
 $r = 1,53 \text{ \AA}$
 $q = ?$

$$\mu = q \cdot r \Rightarrow q = \frac{\mu}{r} = \frac{6,28 \text{ D}}{1,53 \text{ \AA}} \cdot \left(\frac{3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}}{1 \text{ D}} \right) \cdot \frac{1e}{10^{-10} \text{ m}} \cdot \frac{1e}{1,60 \cdot 10^{-19} \text{ C}}$$

$$q = \frac{6,28 \cdot 3,34}{1,53 \cdot 1,60} \cdot \frac{10^{-30}}{10^{-29}} e = 9857 e$$

TODA LIGAÇÃO
IÔNICA TEM PARCELA

COVALENTE

(100% IÔNICA
NÃO EXISTE)

O=O

F-F

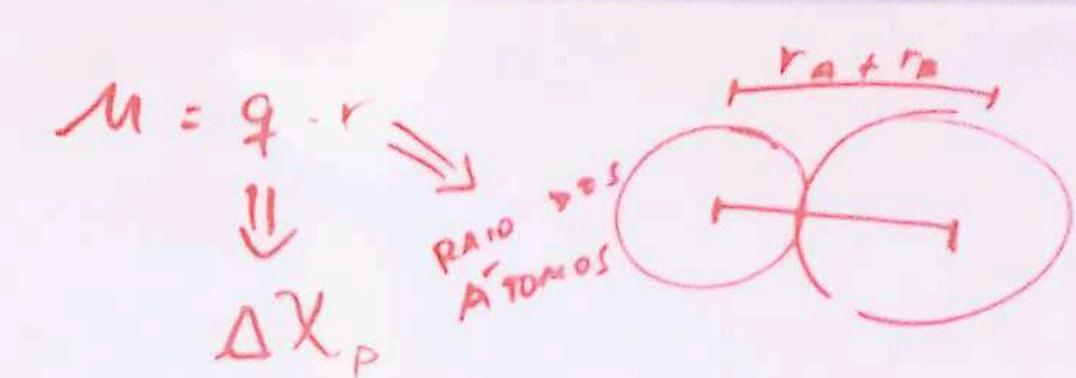
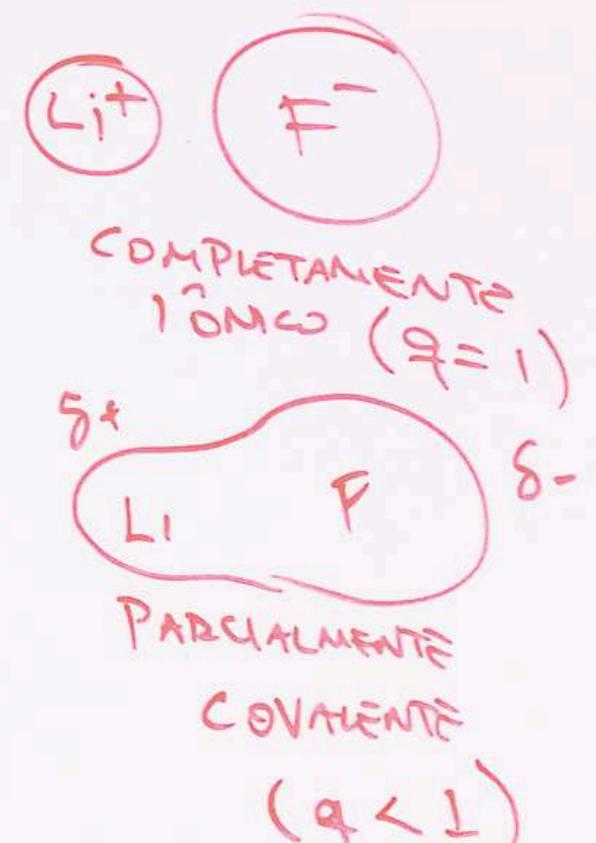
I-I

100% COVALENTE

H-H

SIM

C-C



$\Delta \chi_p$ ALTA $\Rightarrow q \uparrow$

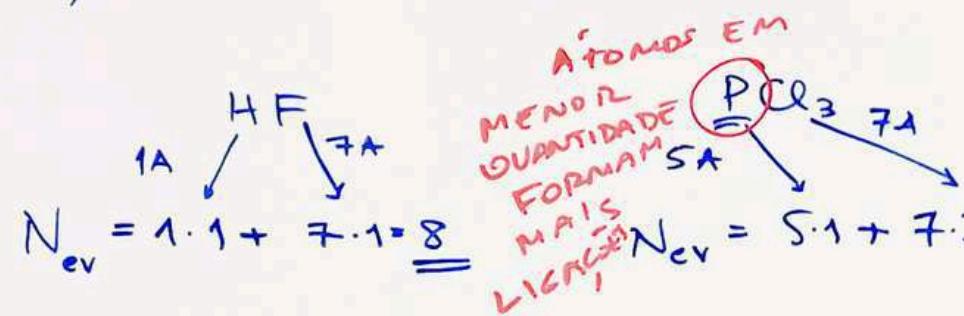
	$r/\text{\AA}$	$\Delta \chi_p$	μ/D
$\delta^+_{\text{H}} - \delta^-_{\text{F}}$	0,92	1,9	1,82
$\delta^+_{\text{H}} - \delta^-_{\text{Cl}}$	1,27	0,9	1,08
$\delta^+_{\text{H}} - \delta^-_{\text{Br}}$	1,41	0,7	0,82
$\delta^+_{\text{H}} - \delta^-_{\text{I}}$	1,61	0,4	0,44
	$r \uparrow$	$\Delta \chi_p \downarrow$	$\mu \downarrow$
			$q \downarrow$

Turma PM

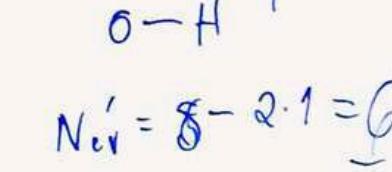
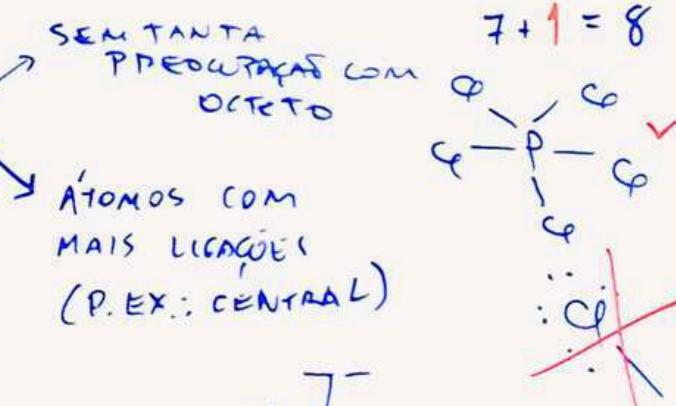
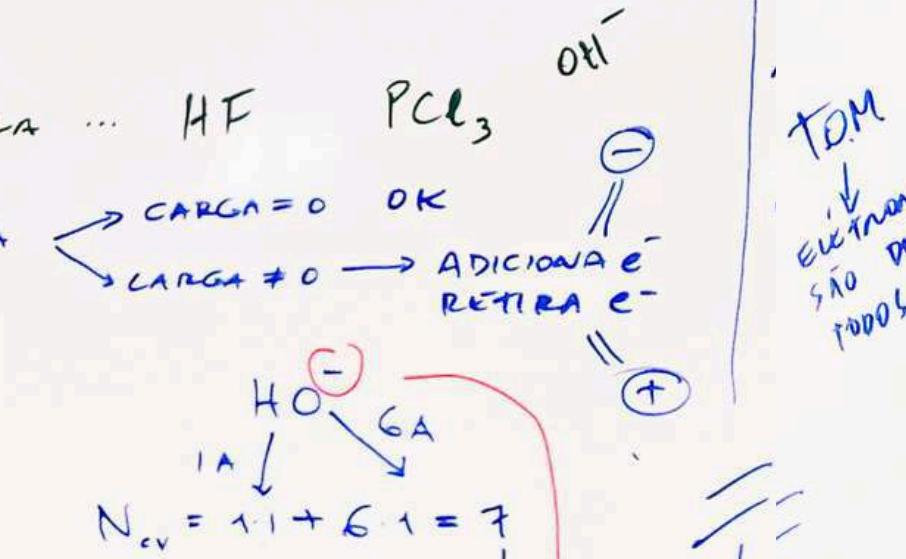
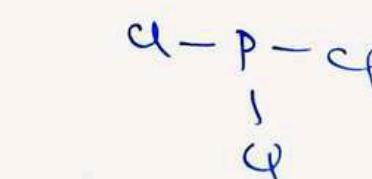
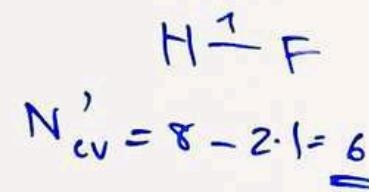
ESTRUTURAS DE LEWIS

DETERMINE ESTRUTURA(S) DE LEWIS DA MOLÉCULA ... HF PCl₃ O⁻

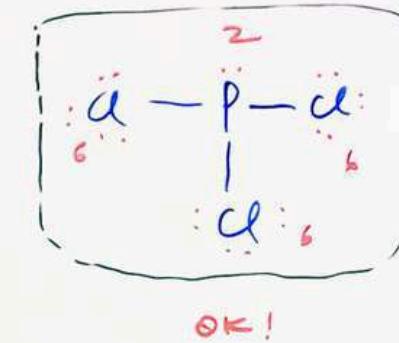
1) CALCULE O NÚMERO DE e.V. DA MOLÉCULA



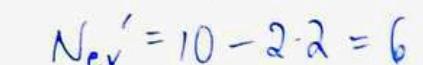
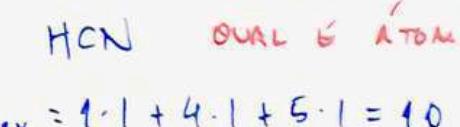
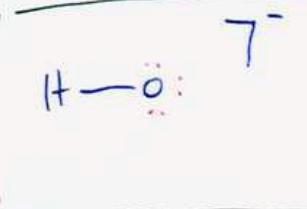
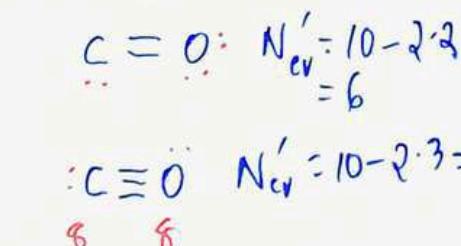
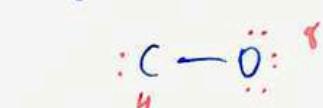
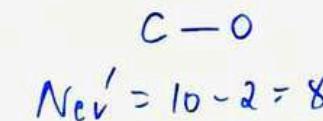
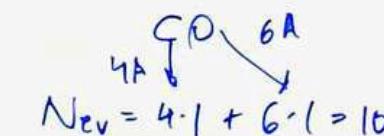
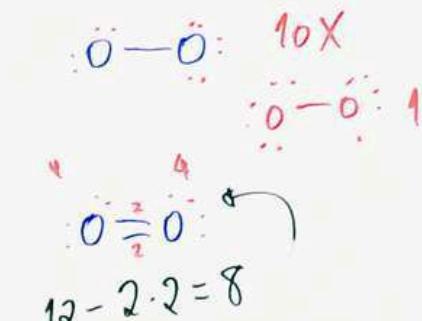
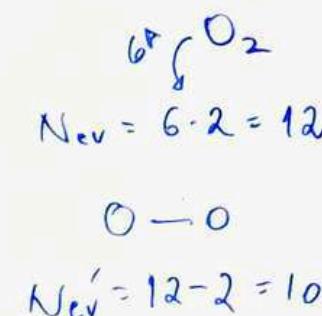
2) CONECTAR ÁTOMOS COM LIGAÇÕES SIMPLES



3) USAR ELETRONS RESTANTES PARA PREENCHER OCTETOS



4) SE FALTAR ELETRONS PARA COMPLETAR OCTETO: FAZER DUPLAS E TRIPLAS



ESTRUTURAS DE LEWIS

USANDO TRÍPLA: $H-C\equiv N:$ e $H-N\equiv C:$

5) SE MAIS DE UMA ESTRUTURA É POSSÍVEL, CALCULE CARGAS FORMAIS

CARGA FORMAL ATÔMO = N.º DE ELÉTRONS DE VALENÇA - $\frac{1}{2}$ (N.º DE ELÉTRONS LIGADOS) - (N.º DE ELÉTRONS LIVRES)

CARGA QUE ATÔMO TERIA SE LIGAÇÃO FOSSÉ ROMPIDA EQUIVALENTEMENTE

$H-\ddot{C}i:$ $CF = 7 - \frac{1}{2} \cdot 2 - 6 = 0$

$H-\overset{\overset{0}{H}}{C}\equiv\overset{\overset{0}{N}}{i}:$ $CF = 1 - \frac{1}{2} \cdot 2 - 0 = 0$

$CF = 4 - \frac{1}{2} \cdot 8 - 0 = 0$

$CF = 5 - \frac{1}{2} \cdot 6 - 2 = 0$

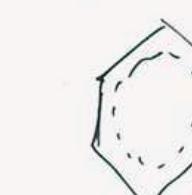
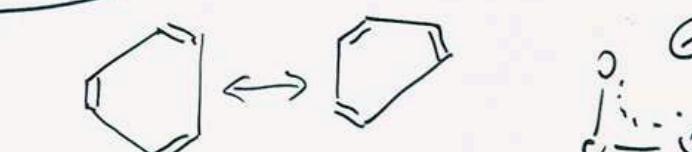
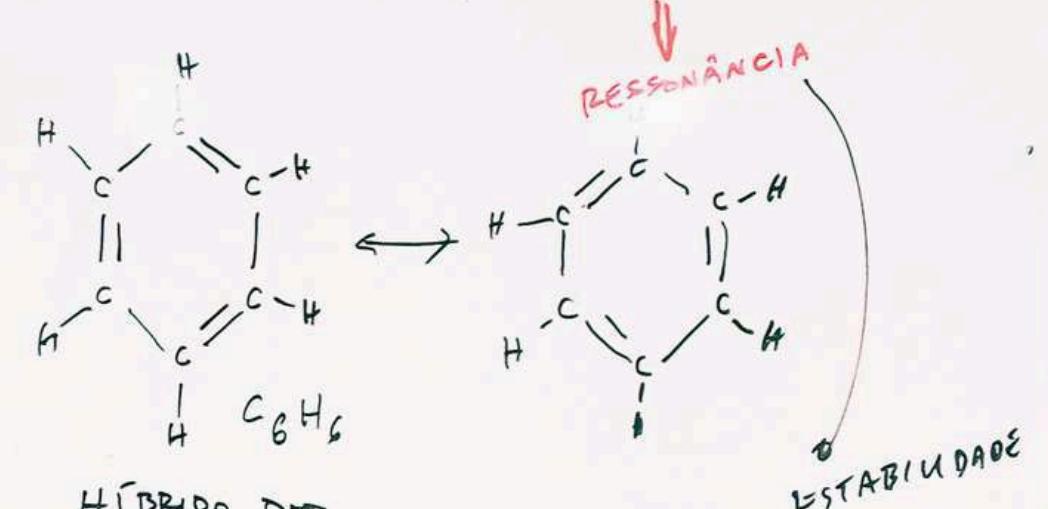
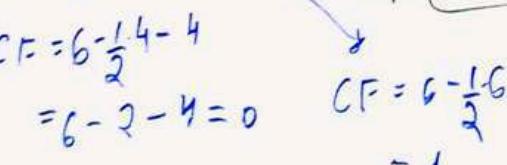
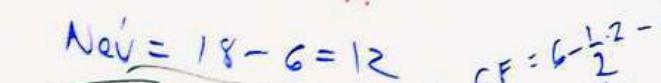
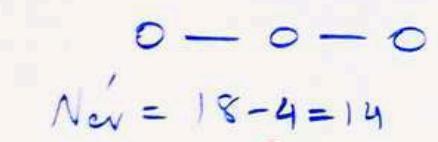
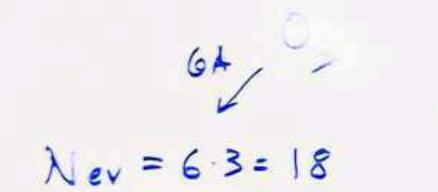
$H-\overset{\overset{+1}{N}}{i}\equiv\overset{\overset{-1}{C}}{i}:$ $CF = 4 - \frac{1}{2} \cdot 6 - 1 = 1$

$CF = 5 - \frac{1}{2} \cdot 8 - 0 = 1$

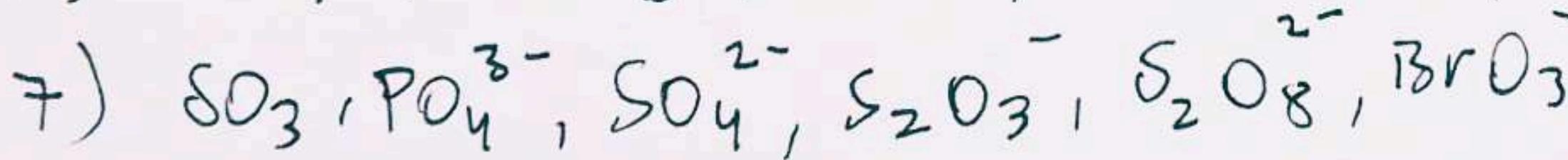
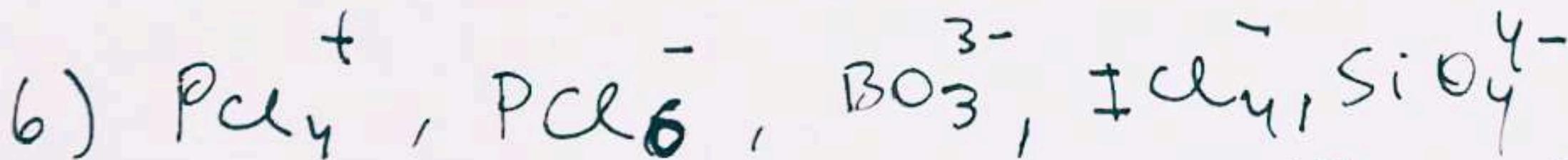
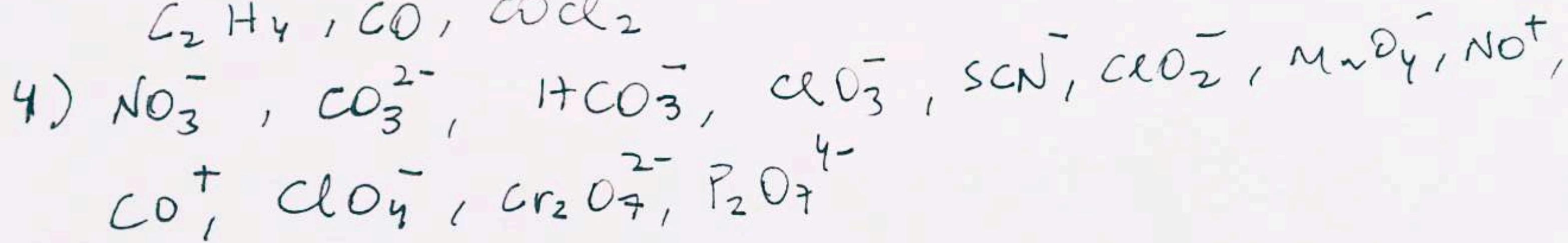
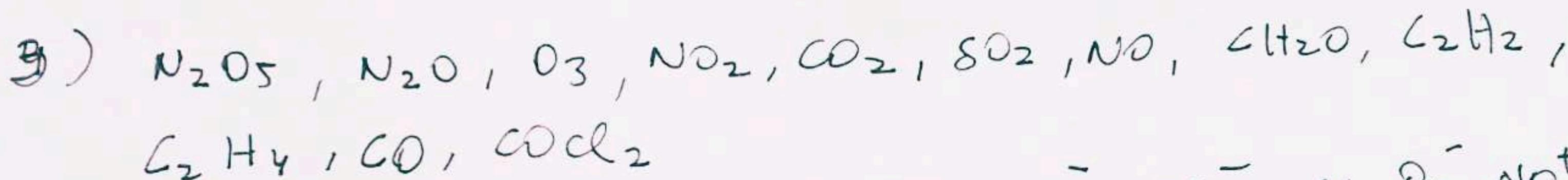
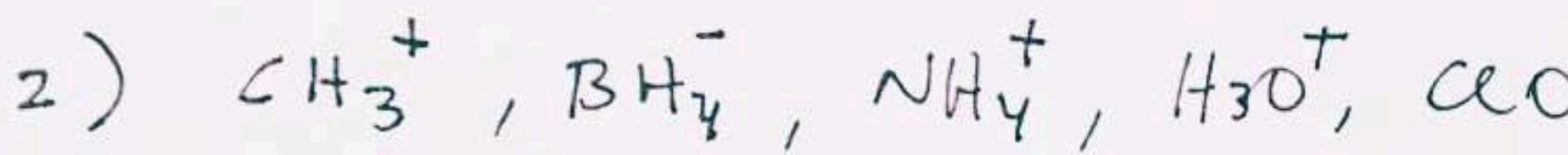
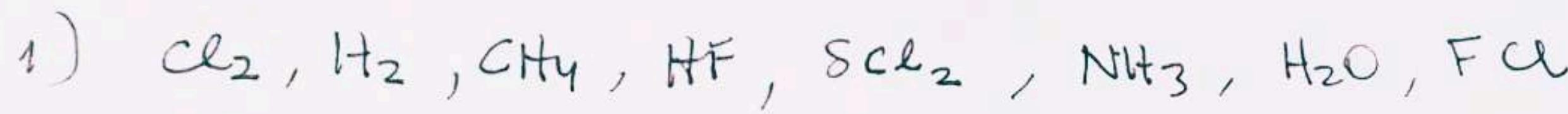
$H-\ddot{C}i$

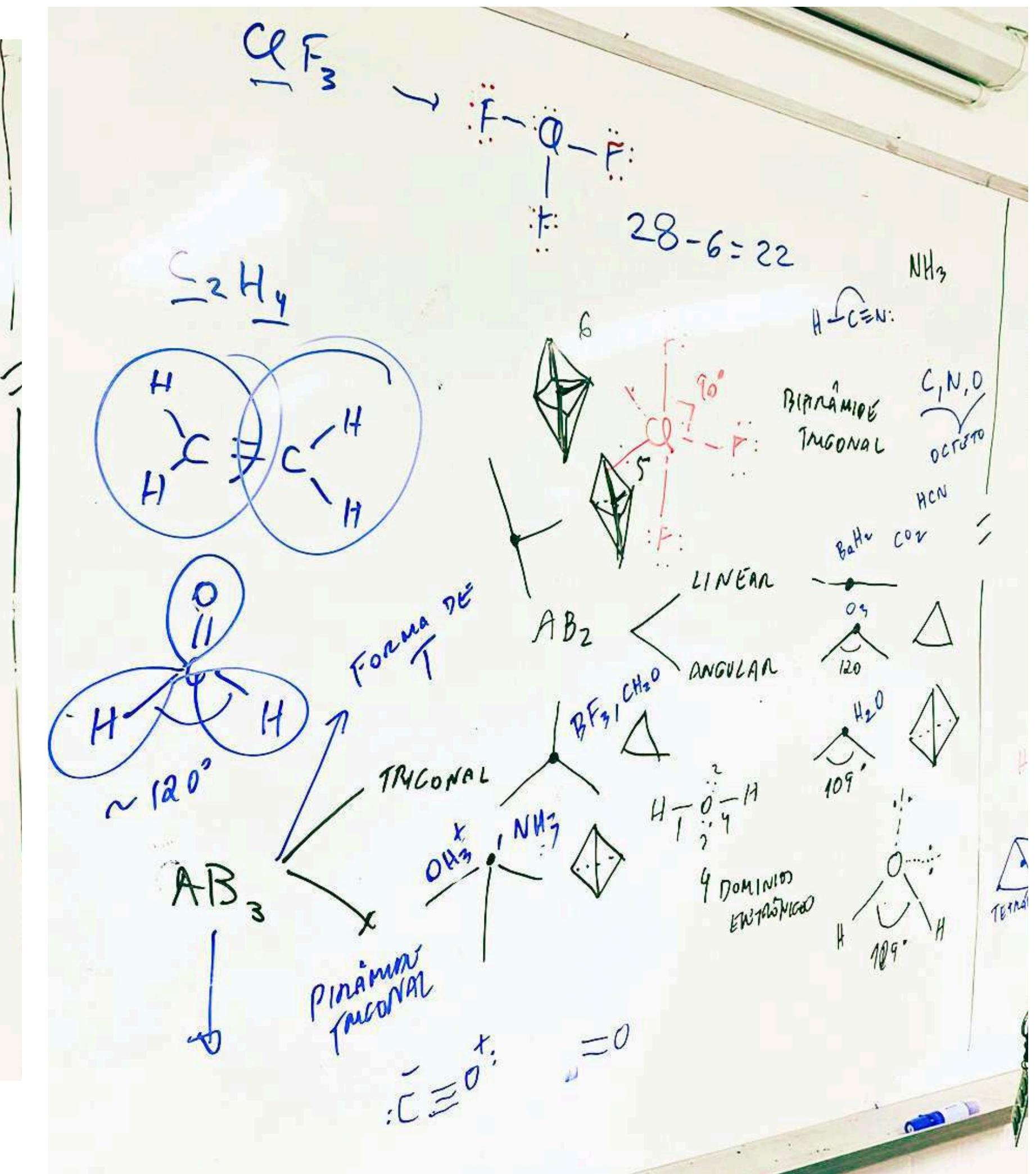
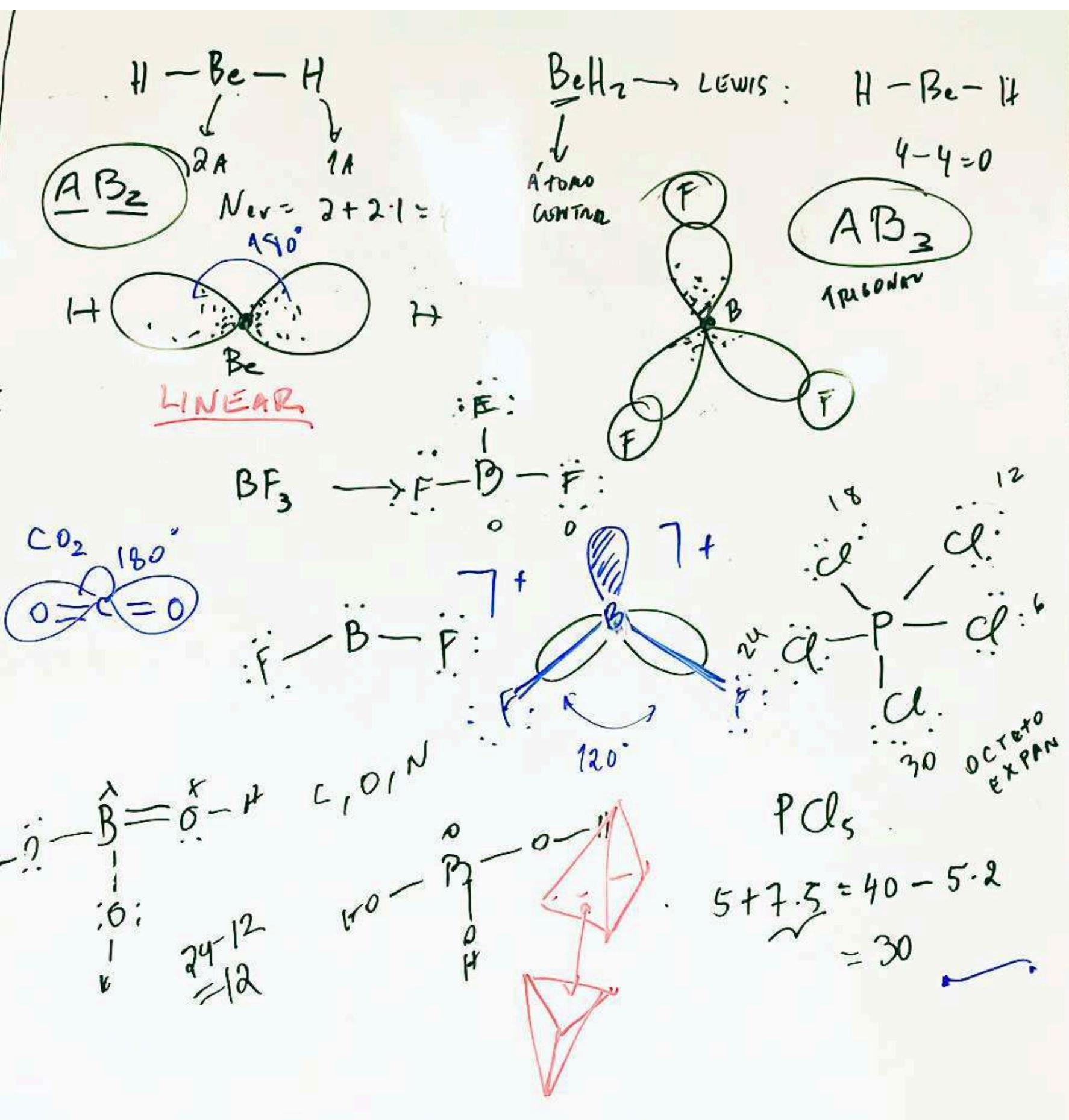
ESCOLHER
ESTRUTURA
COM MEMÓRIA
SEPARADA
DE CARGAS

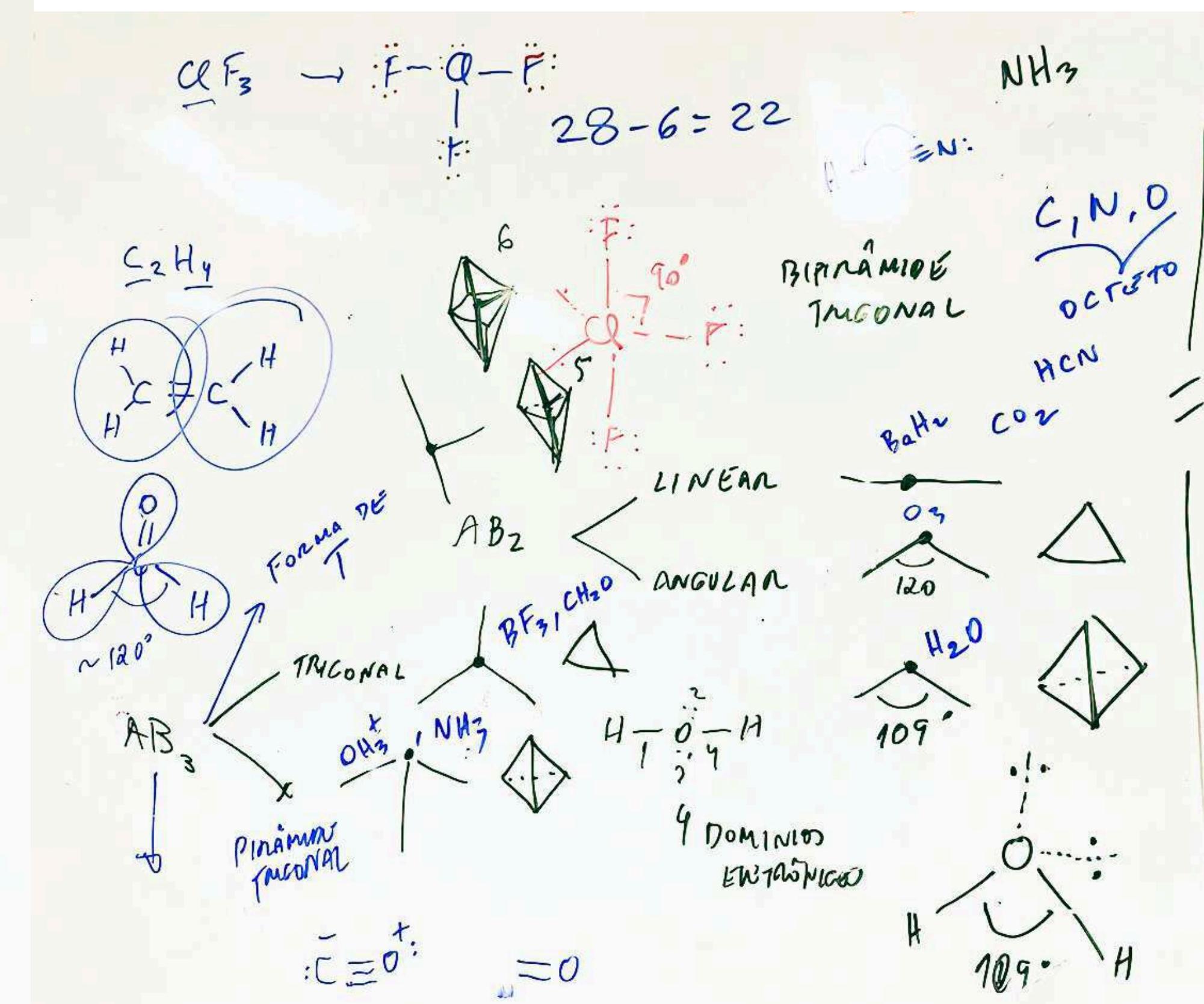
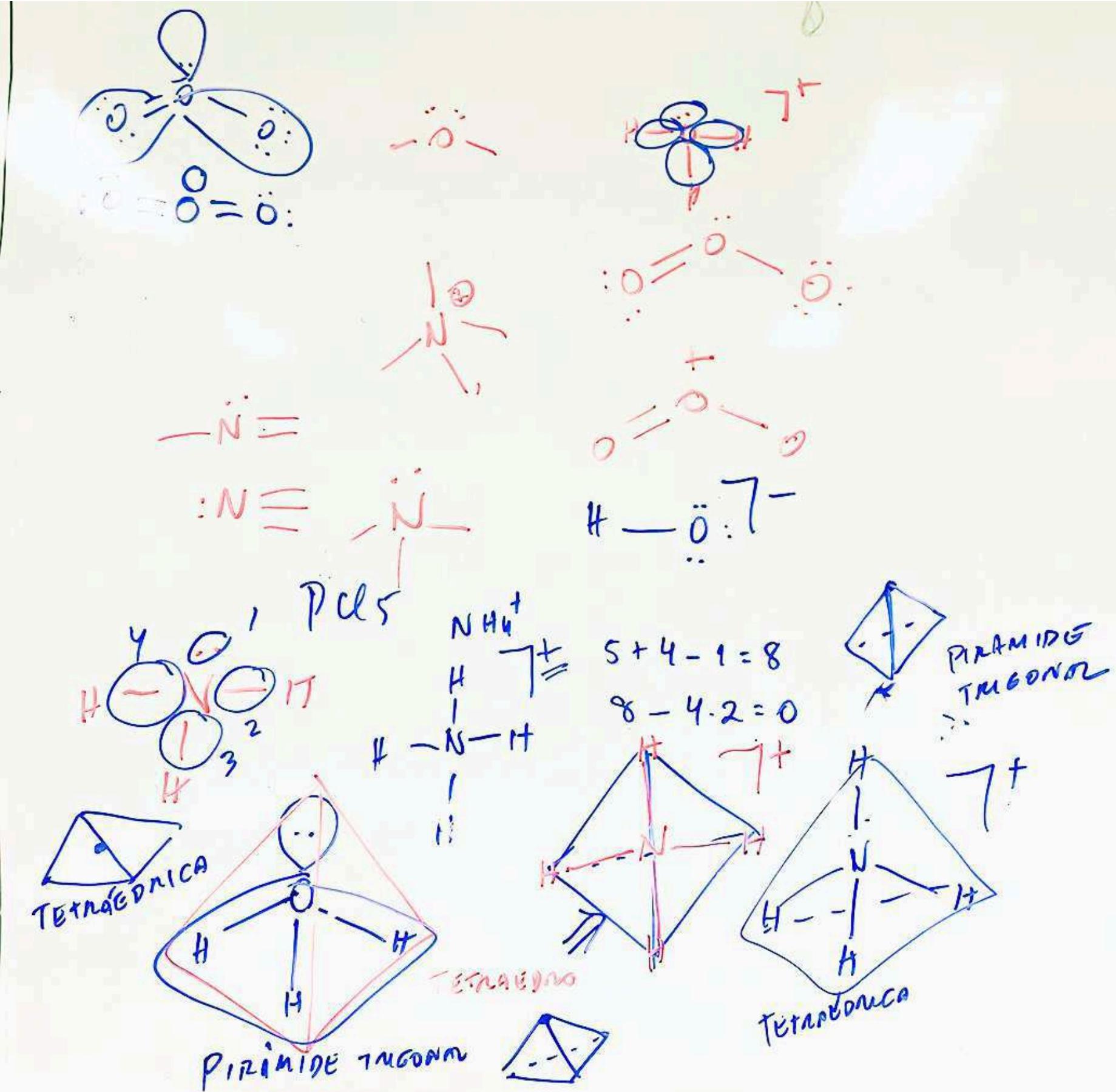
6) QUANDO MAIS DE UMA E. P. JRA POSSUI O MESMO NÚMERO DE ÁTOMOS COM MESMA CARCA FORMAL, TODAS SÃO VÁLIDAS



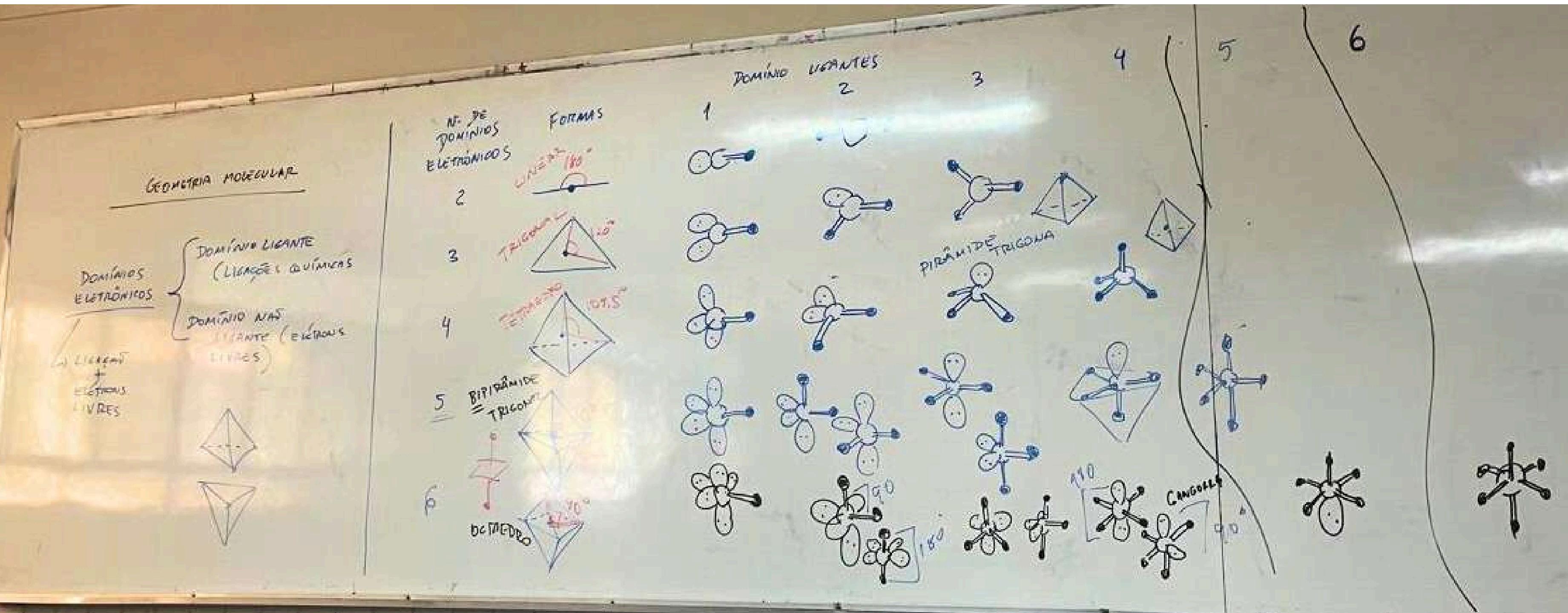
FAGA AS OSTRUKTUREN DG UNDIS DAS MOWALTS * SUGER

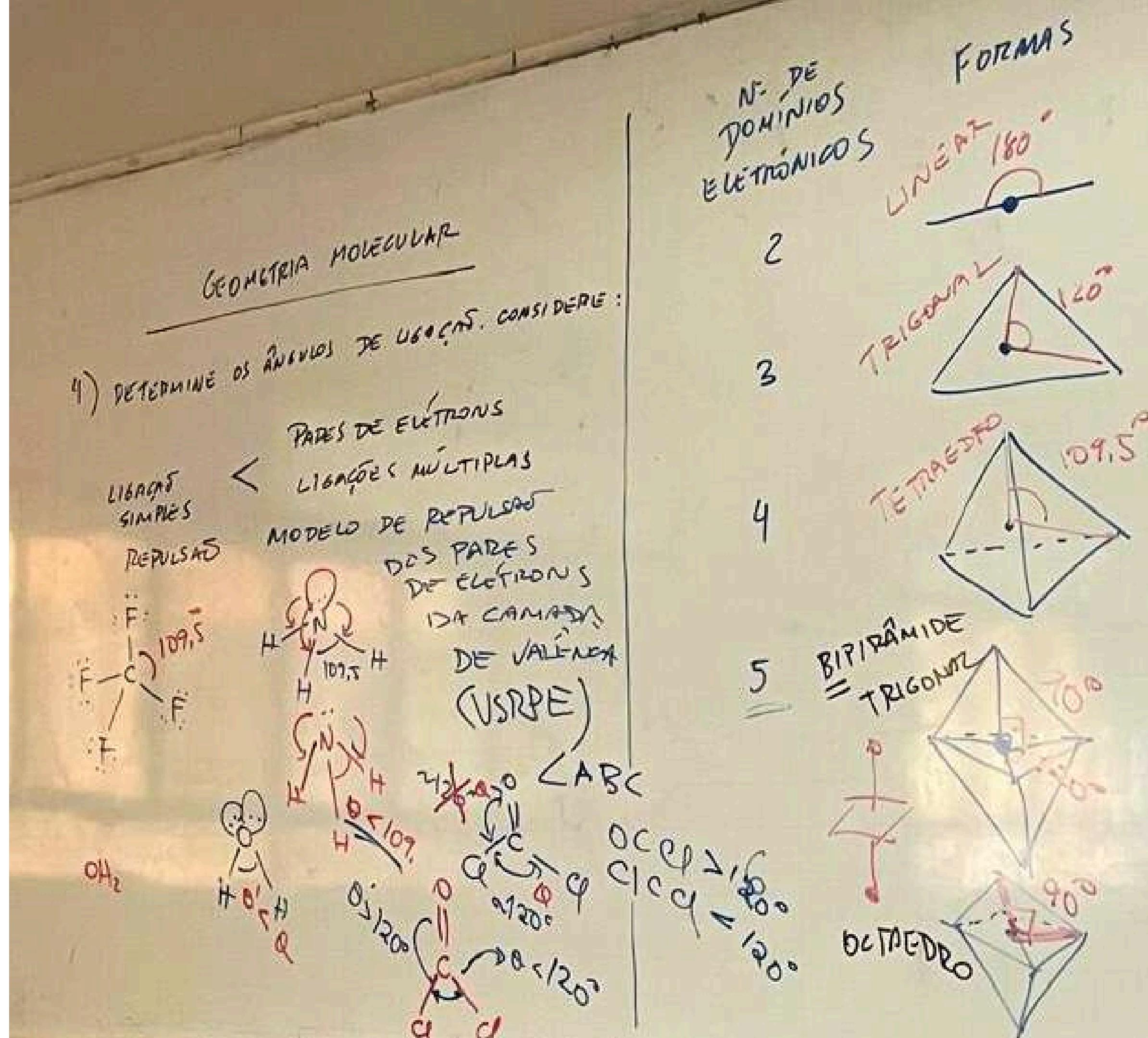




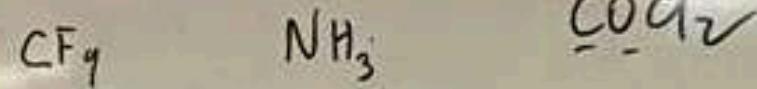


Turma MT

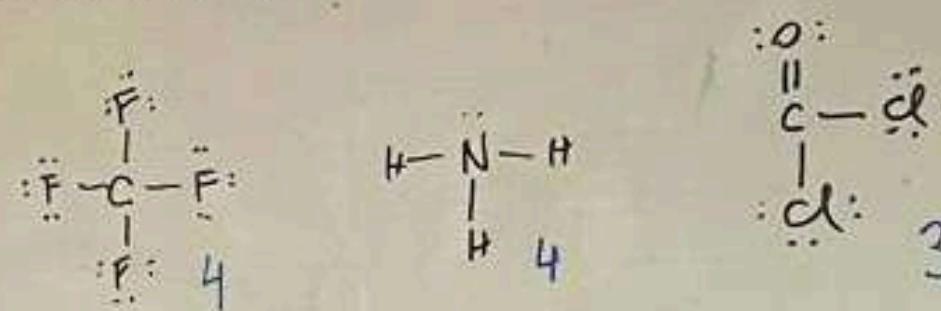




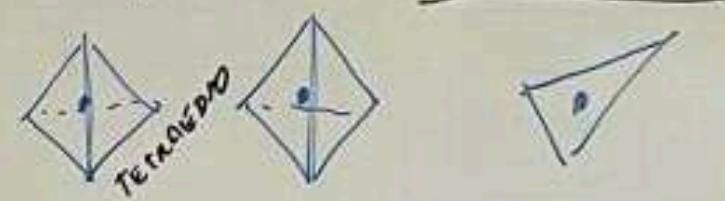
DETERMINANDO GEOMETRIA MOLÉCULAR



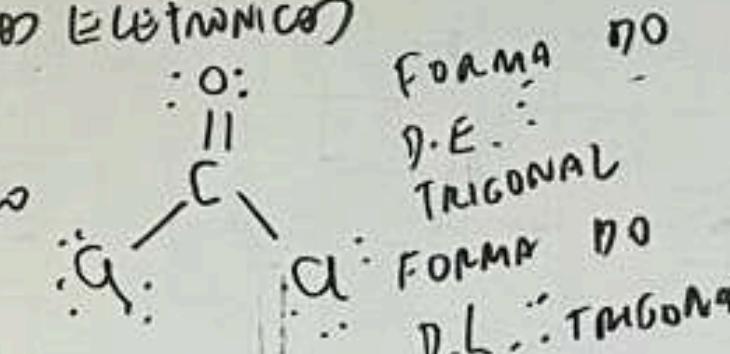
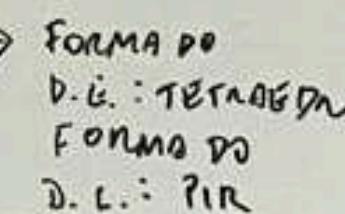
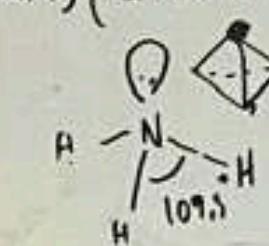
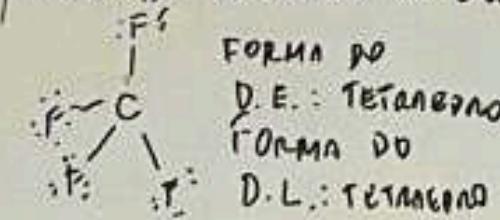
1) ESTRUTURAS DE UNIS



2) QUANTOS DOMÍNIOS ESTRÔNICOS



3) COLOCAR OS PARES DE GUIMBÔNS (L. OU N.L.) NO DOMÍNIO ELETÔNICO

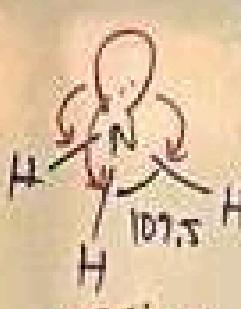


GEOMÉTRIA MOLECULAR

DETERMINATION OF ANNUAL USE OF C.M.S. CONSIDERED:

LIGAGAS
SIMPLIS
REPULS

< LIGAÇÕES MULTIPLAS
 MODELO DE REPULSAO
 DAS PARÉS
 DE ELÉTRONS
 DA CAMAÇA
 DE VALENTE
 (VRPE)



DE
 ÉLECTRONS
 D'A CARBON
 DE VALENCE
 (VRPE)

$\sqrt{P^H} \gamma_{k,0} \angle A B$

19/10/2018

卷之三

17.20°C

H_2O_2 (1) $\rightarrow \text{H}_2\text{O}$

-120-

a d

N. PÉ
DOMÍNIO
EUSTRÔNICO

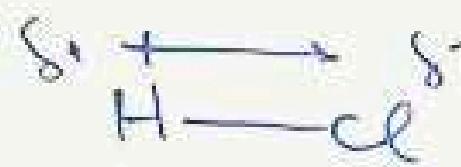
2

2

4

5
817
=

5) OBTERNA O MOMENTO DE DIPOLO DA molécula



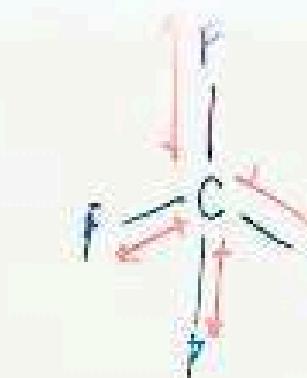
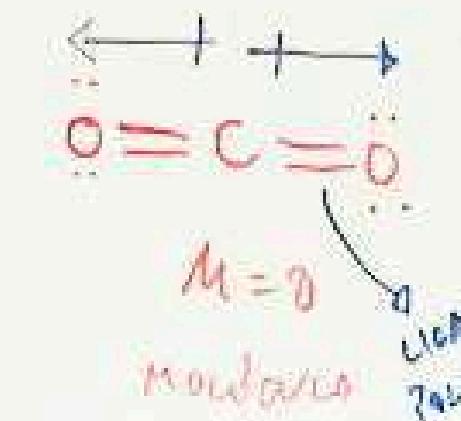
MOMENTO
DE DIPOLO
EM LARGO

MOMENTO DE
DIPOLO DA
molécula

DISTRIBUIÇÃO
DE ELECTRÔNICA
ENTRE OS ATÔMOS /

DEPENDE DE DIF.
E AX.

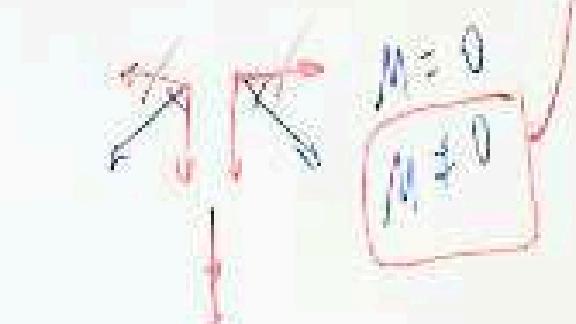
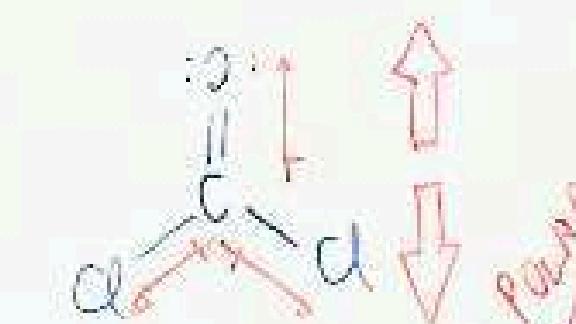
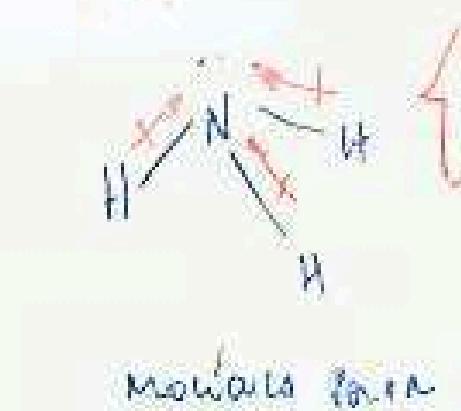
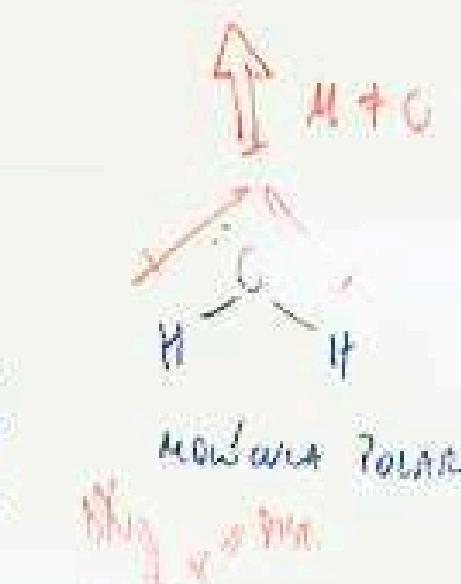
+
GROMETRICO
MOMENTO



$\mu = 0$
molécula
neutra



$\mu = 0$



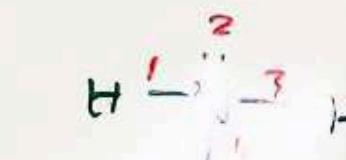
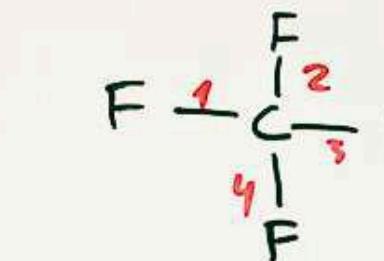
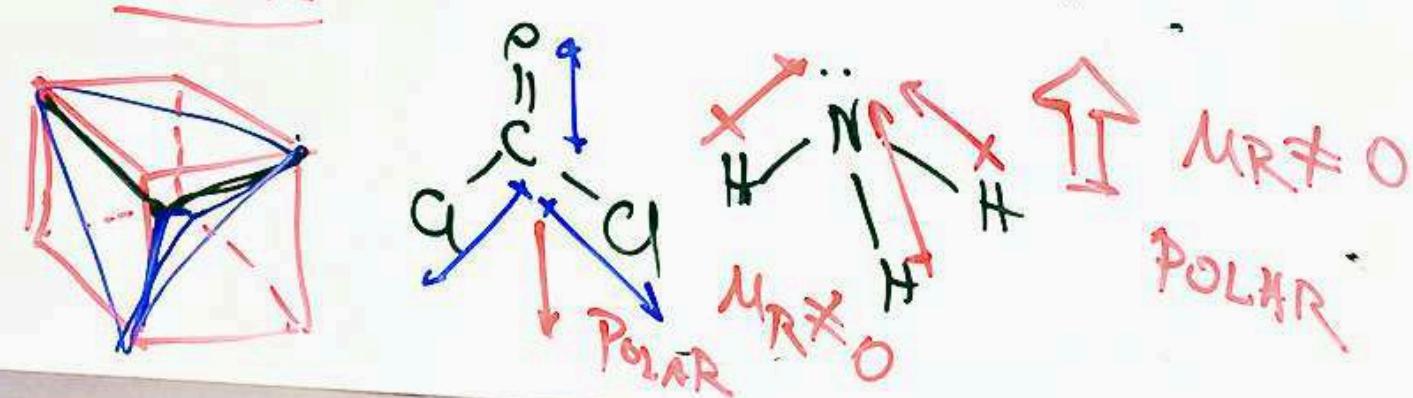
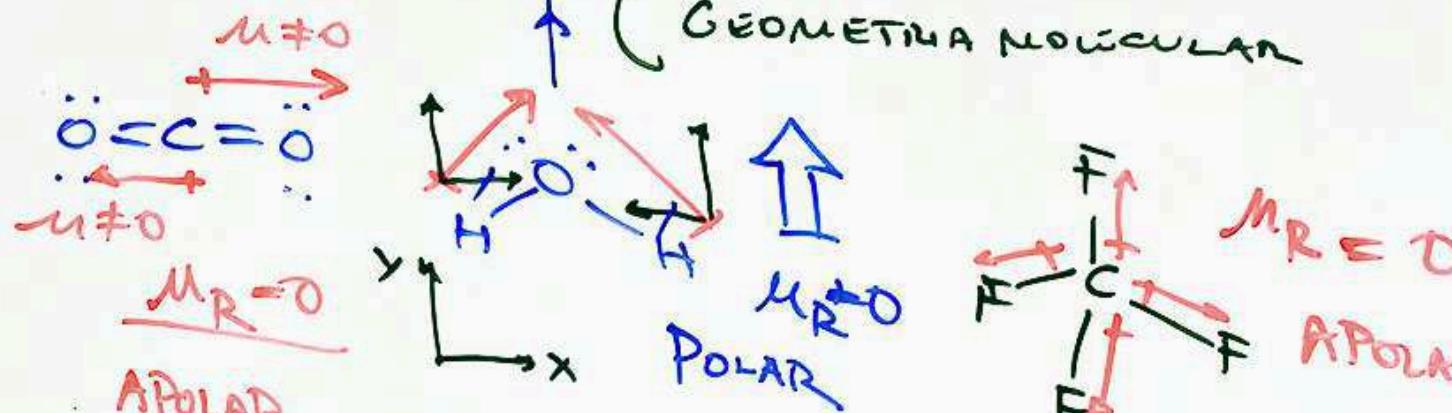
Turma PM

GEOMETRIA MOLECULAR

5) DETERMINE O MESTO DE DIPOLO (μ) DA

FUI ONTEM
NO CLUBE
BRASIL
I SO COMIH — Cl: $\Delta\chi$
PIZZA HUT
TEMPERADA
POLAR

DIPOLO DA MOLÉCULA $\left\{ \begin{array}{l} \text{DIFERENÇA DE} \\ \text{ELETRONEGATIVIDADE} \\ \text{ENTRE OS ÁTOMOS} \\ \text{DIPOLO DAS LIGAÇÕES} \end{array} \right.$

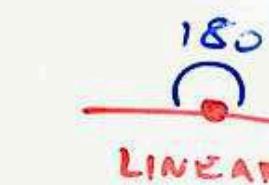


D.E.: 4
D.L.: 1
D.M.: 3

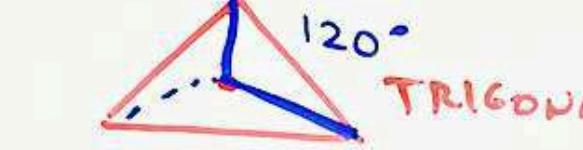
QUANTOS D.E.: 4
QUANTOS D.L.: 0
QUANTOS D.M.: 4

Nº D.E.

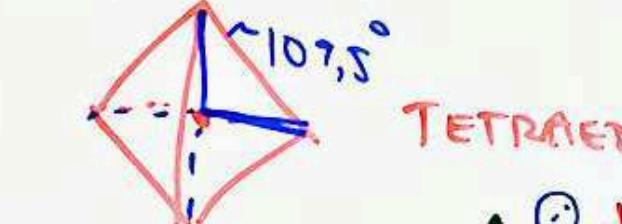
2



3



4

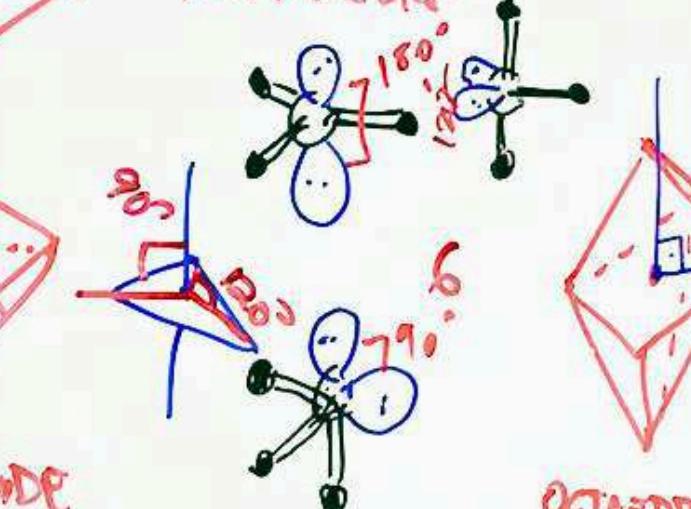


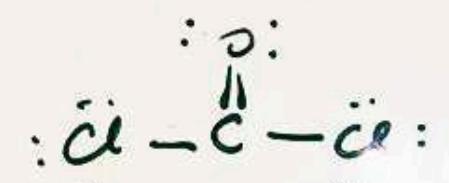
PIRAMIDE TRIGONAL

5



6

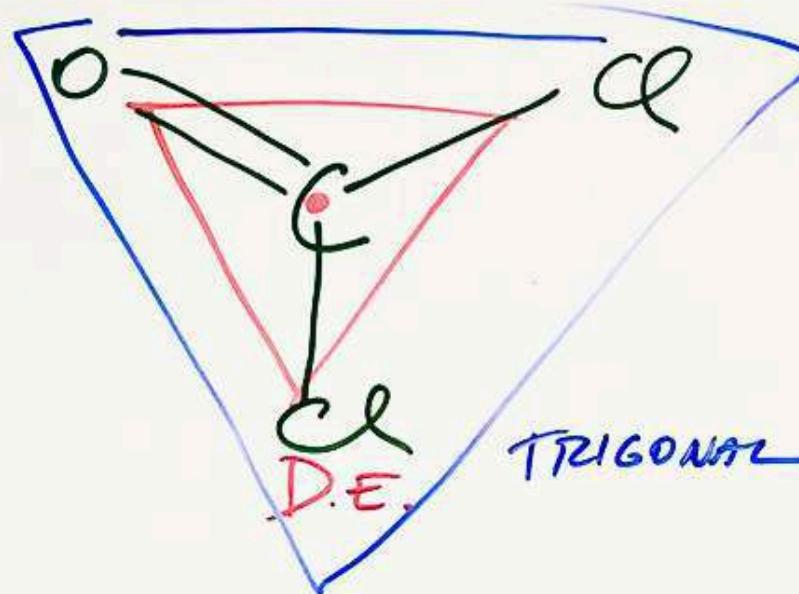




D.E.: 3

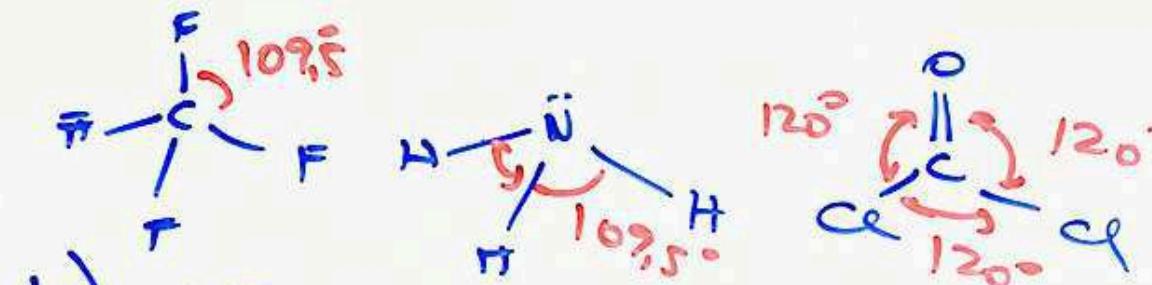
D.L.: 0

D.M.: 3

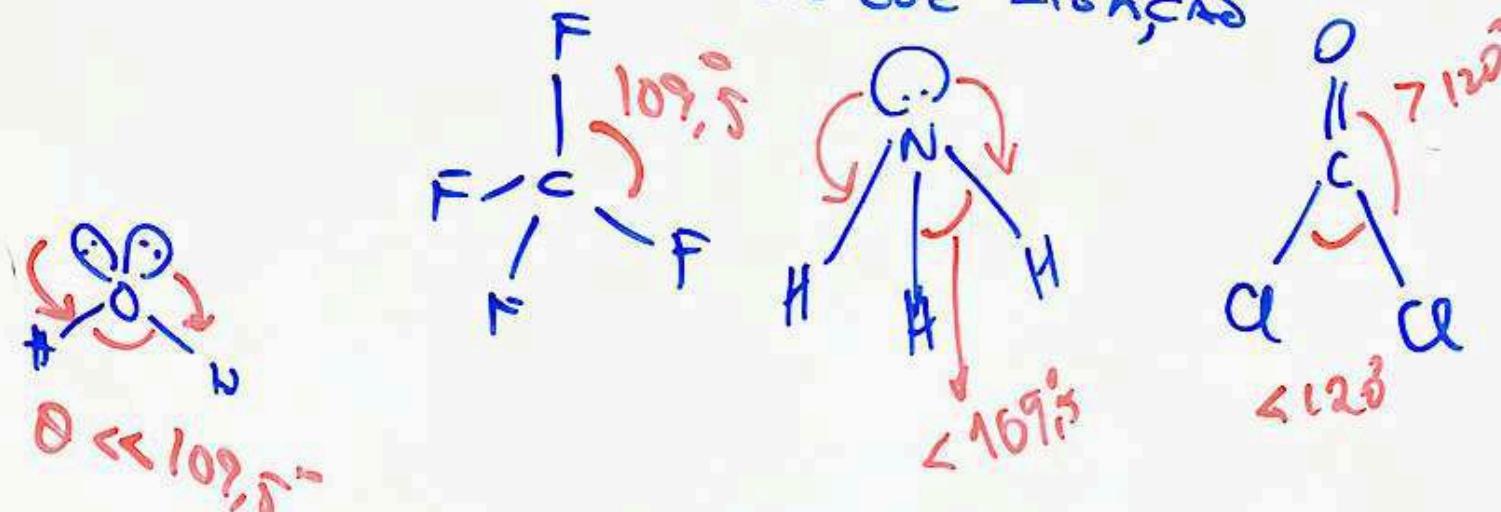


4) CALCULE OS ÂNGUOS DE LIGAÇÃO

a) FORMA DO DOMÍNIO ELÉTRÔNICO



b) REPULSA DE PARES MAIOR QUE DE LIGAÇÕES



GEOMETRIA MOLECULAR

5) DETERMINE O MOMENTO DE DIPOLO (μ) DA MOLÉCULA

FUI ONTEM
NO CLUBE
BRASIL

I SO COMI H — Cl: $\Delta\chi$
PIZZA HUT
TEMPERADA
POLAR

$\mu \neq 0$

DIPOLO DA LIGAÇÃO

DIFERENÇA DE ELETRONEGATIVIDADE

ENTRE OS ÁTOMOS DAS LIGAÇÕES

DIPOLO DA MOLÉCULA

$\mu \neq 0$

$\mu_R = 0$

APOLAR

$\mu_R \neq 0$

POLAR

$\mu_{RX} = 0$

POLAR

$\mu \neq 0$

$\mu_R = 0$

APOLAR

$\mu_{RX} \neq 0$

POLAR

$\mu \neq 0$

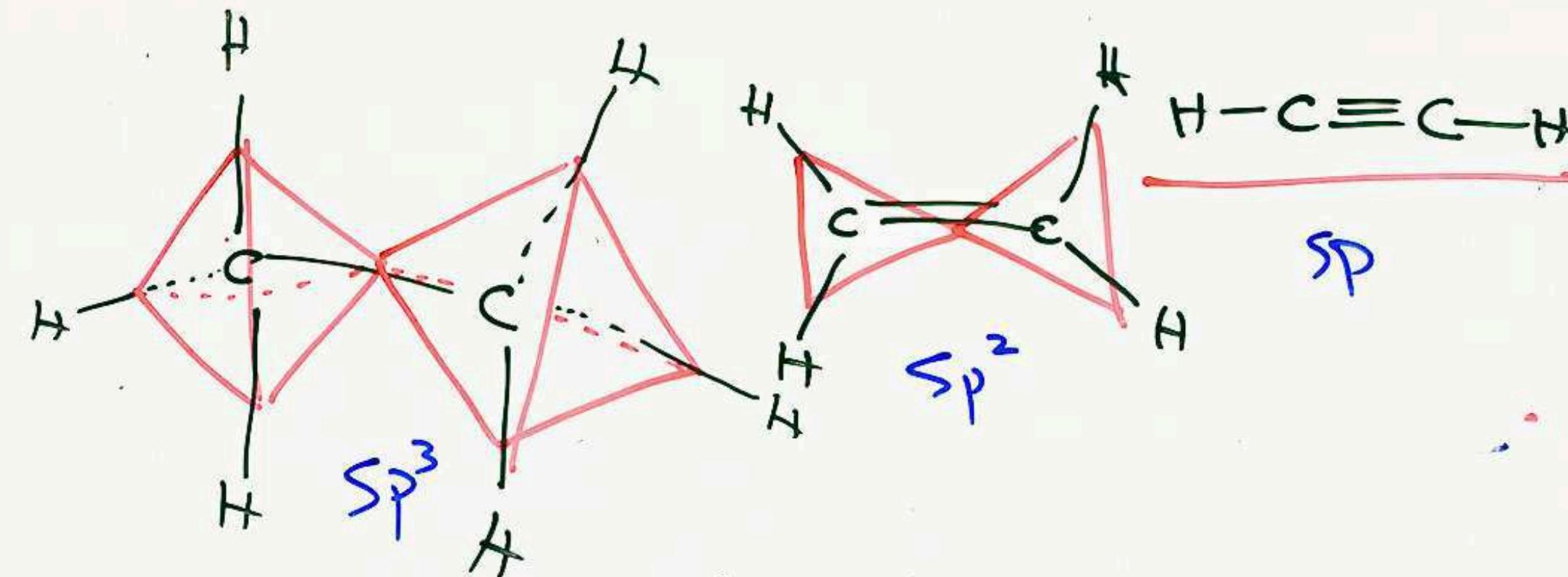
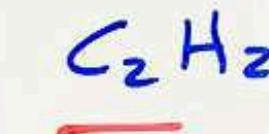
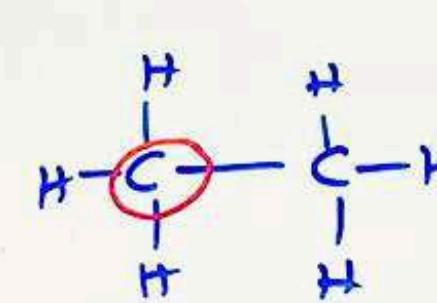
$\mu_R = 0$

APOLAR

$\mu_{RX} \neq 0$

POLAR

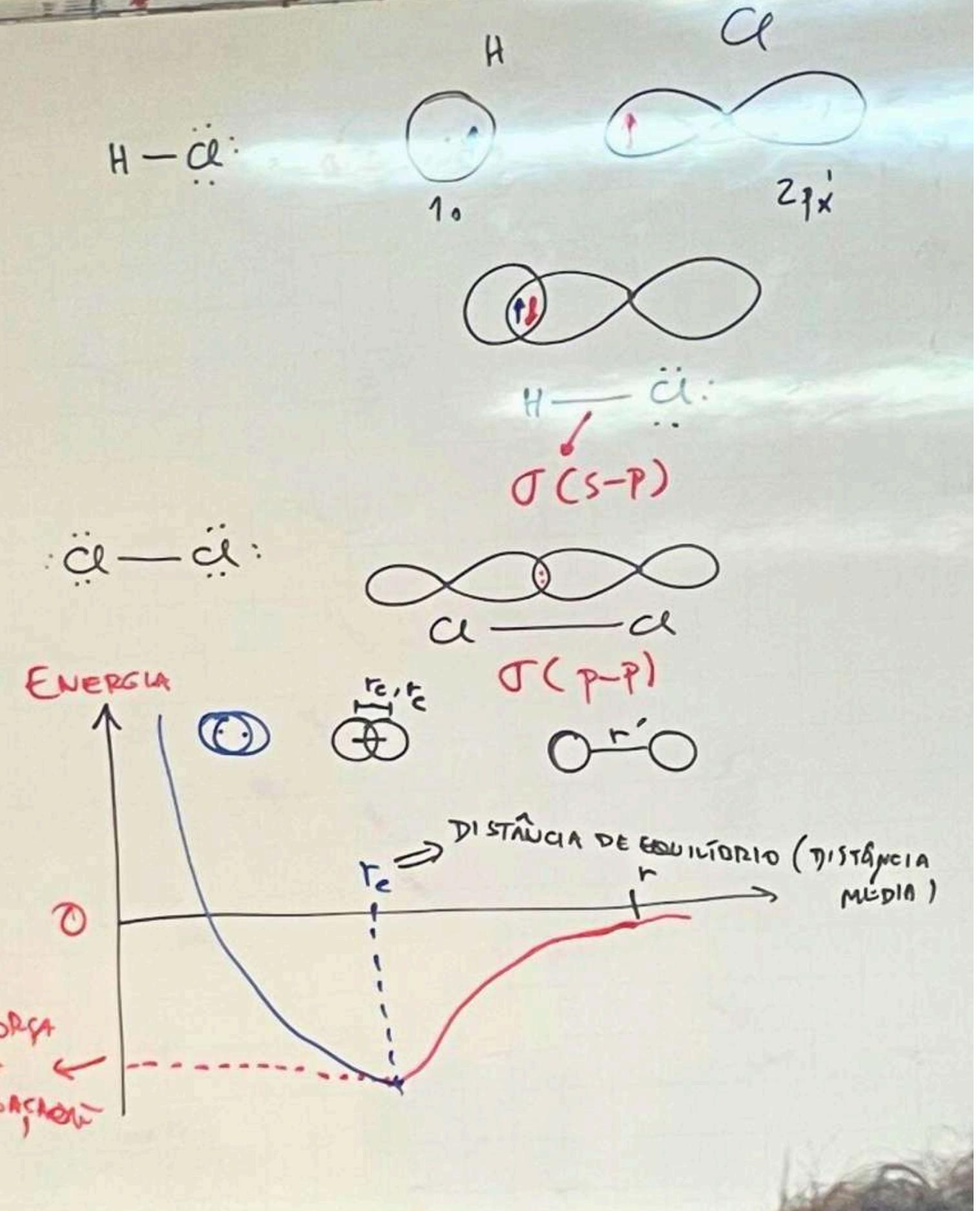
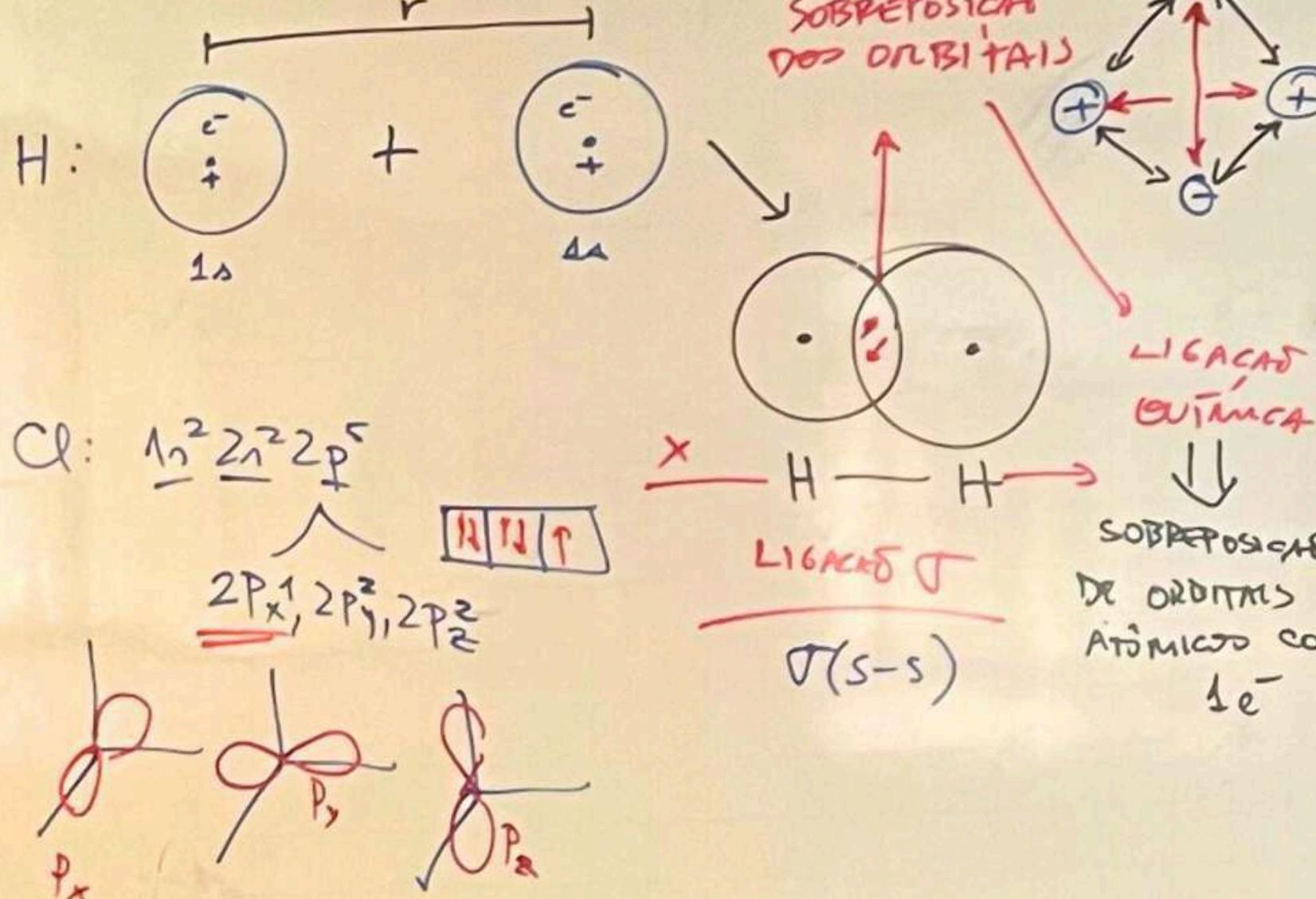
6) MAIS DE UM CENTRAL



Turma MT

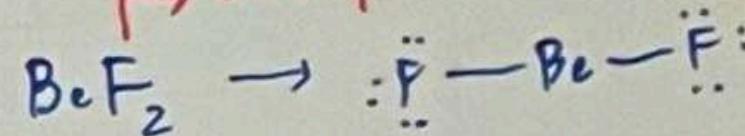
* PAPEL DOS ORBITAIS NA GEOMETRIA MOLECULAR

VSEPR, TEORIA DE LIGAÇÃO DA VALENCIA (TL)

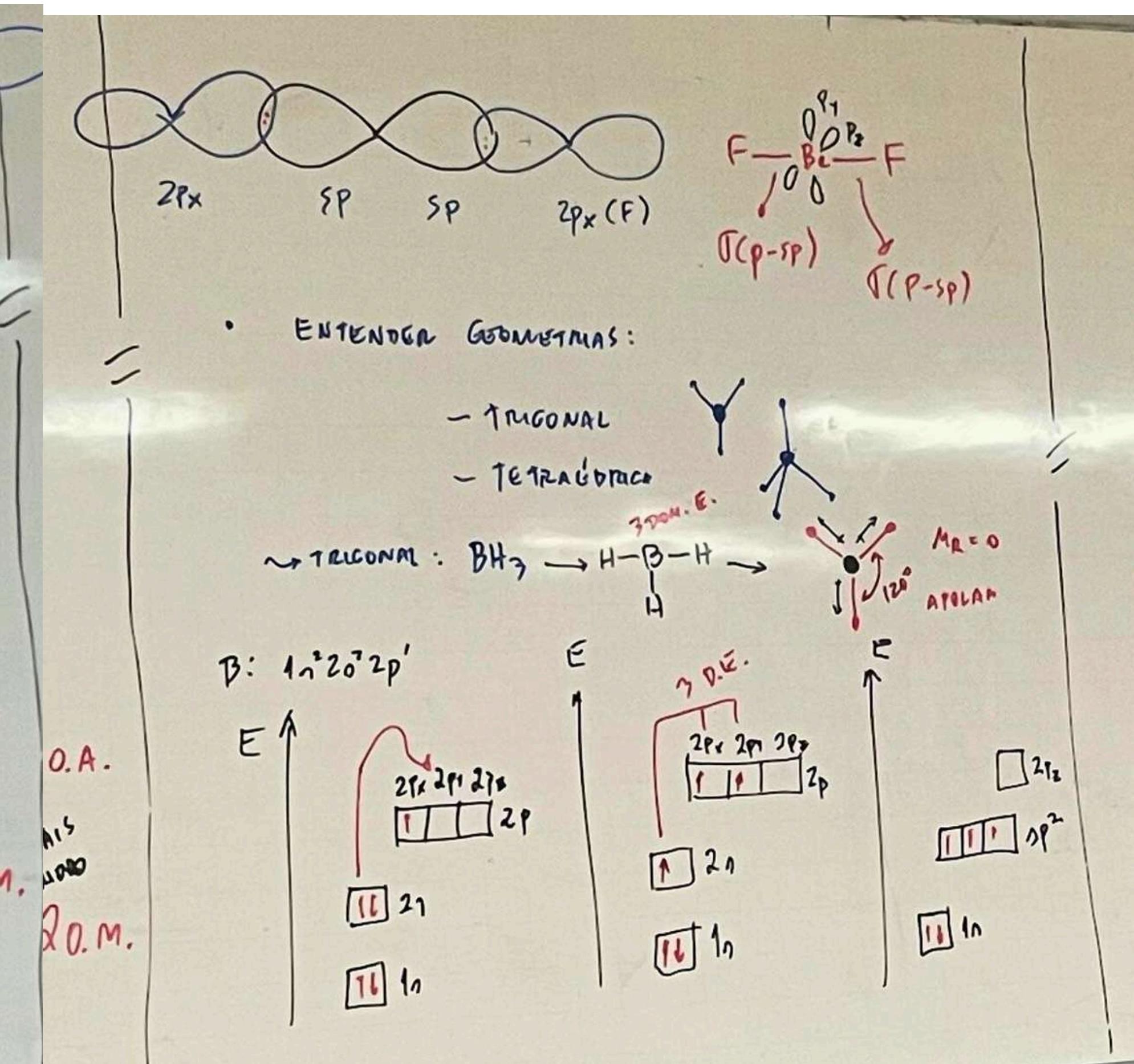
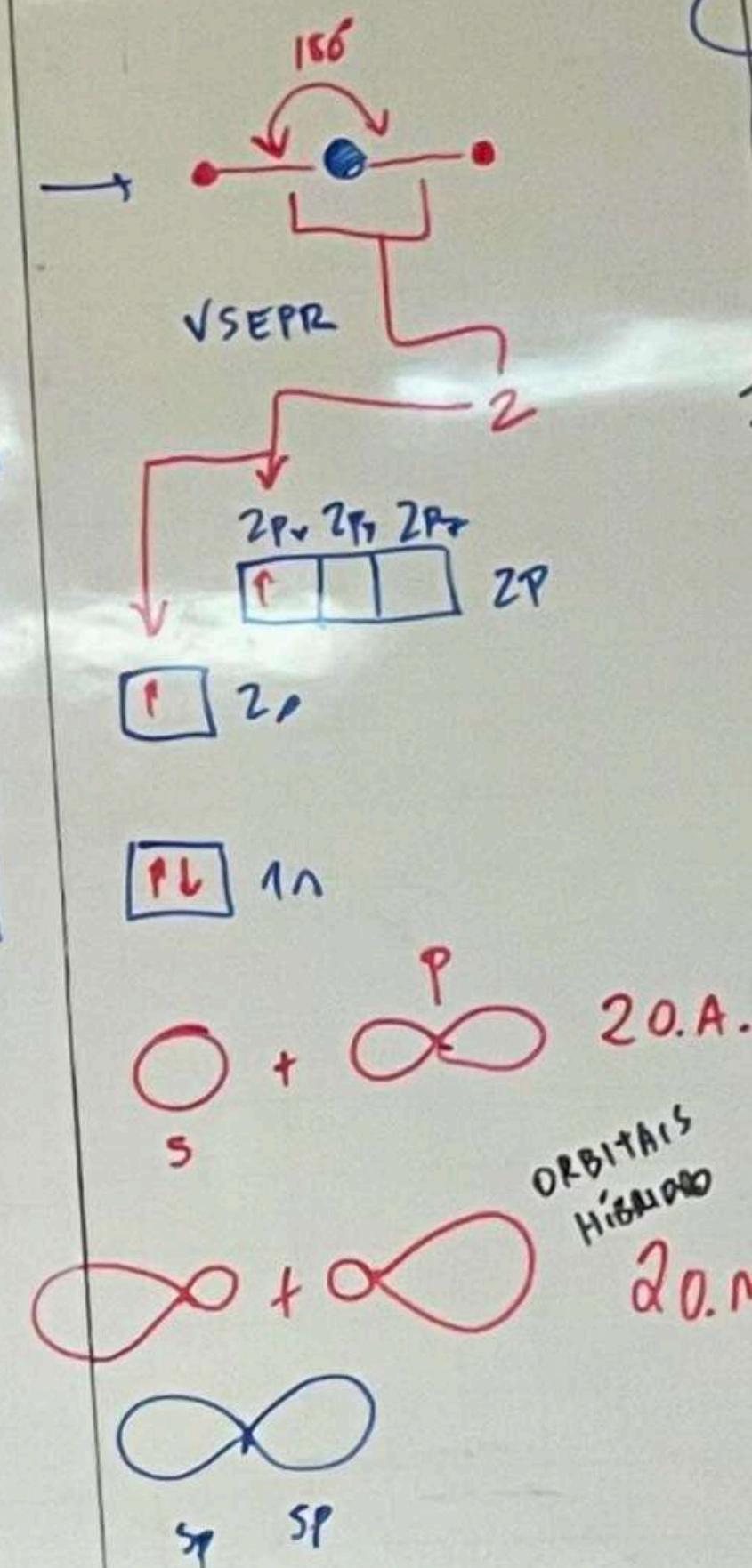
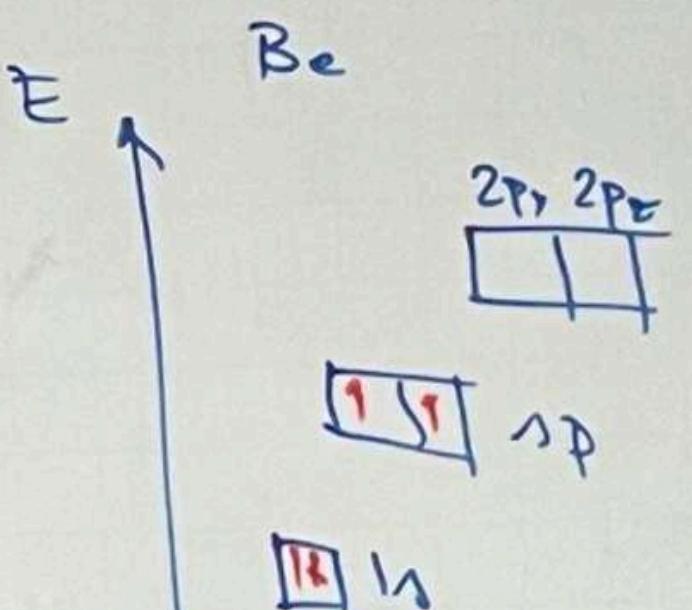
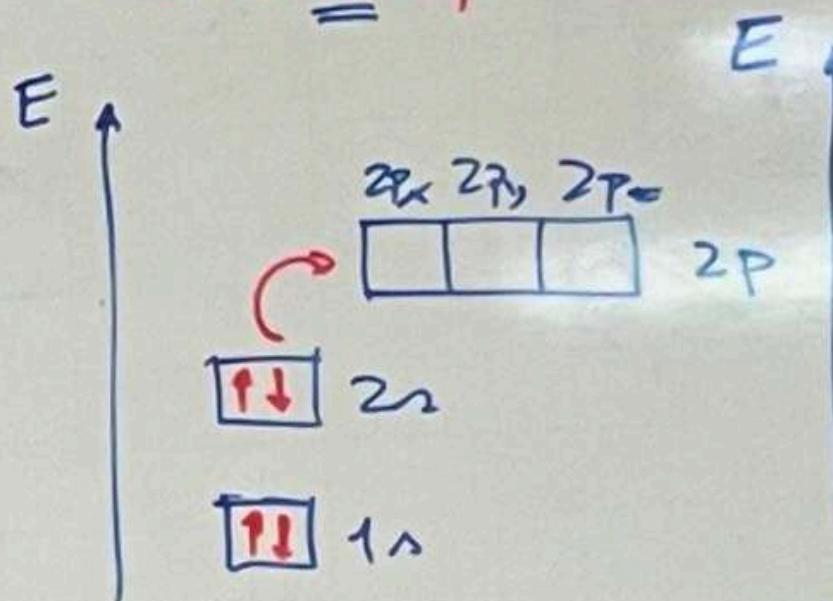


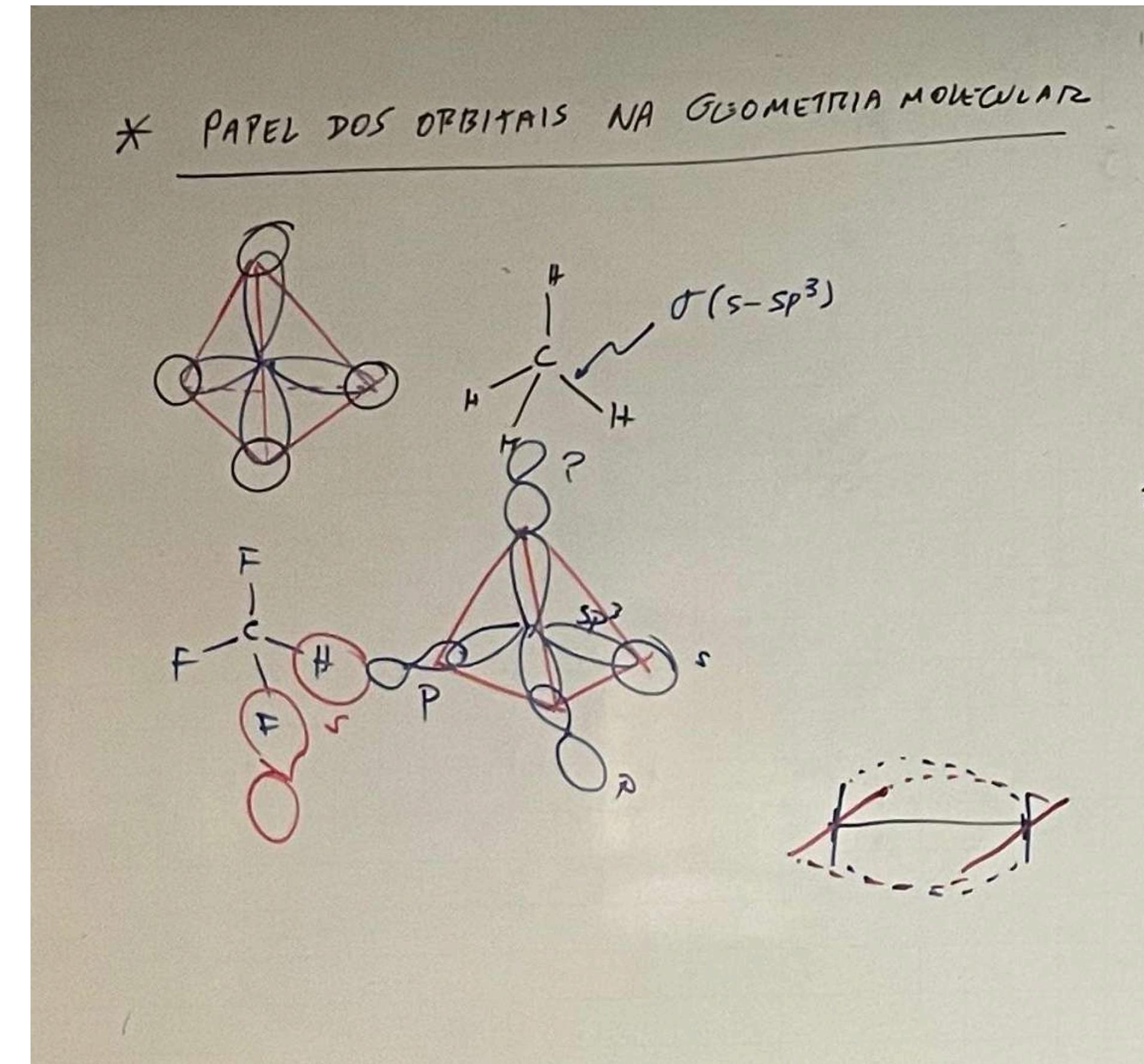
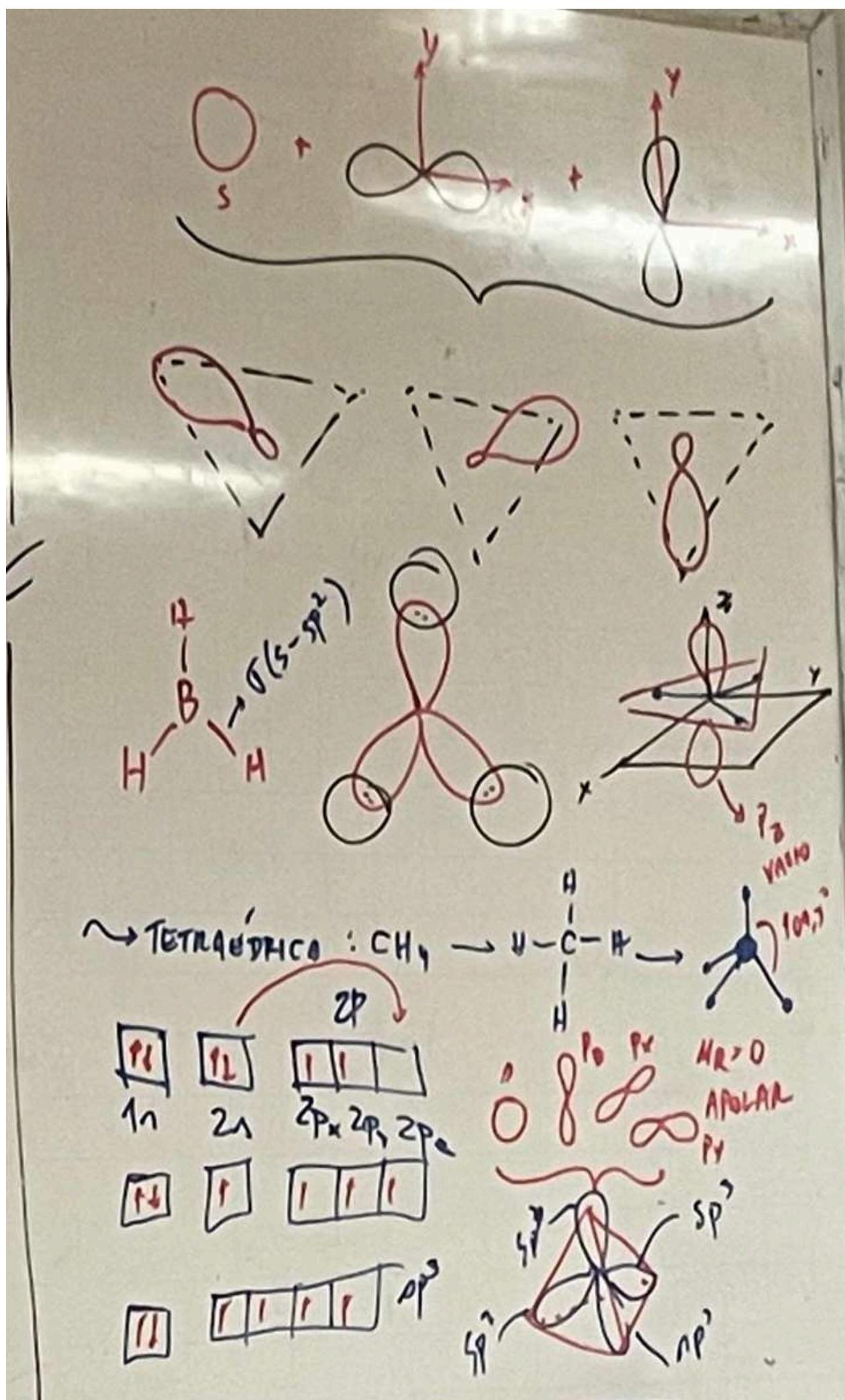
* ORBITAIS HÍBRIDOS

→ $1s^2 2p^2$

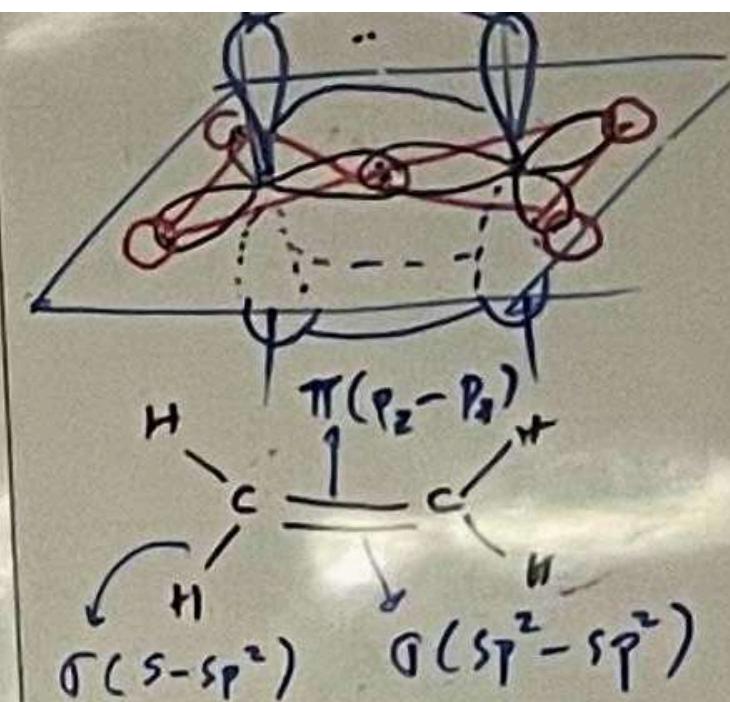
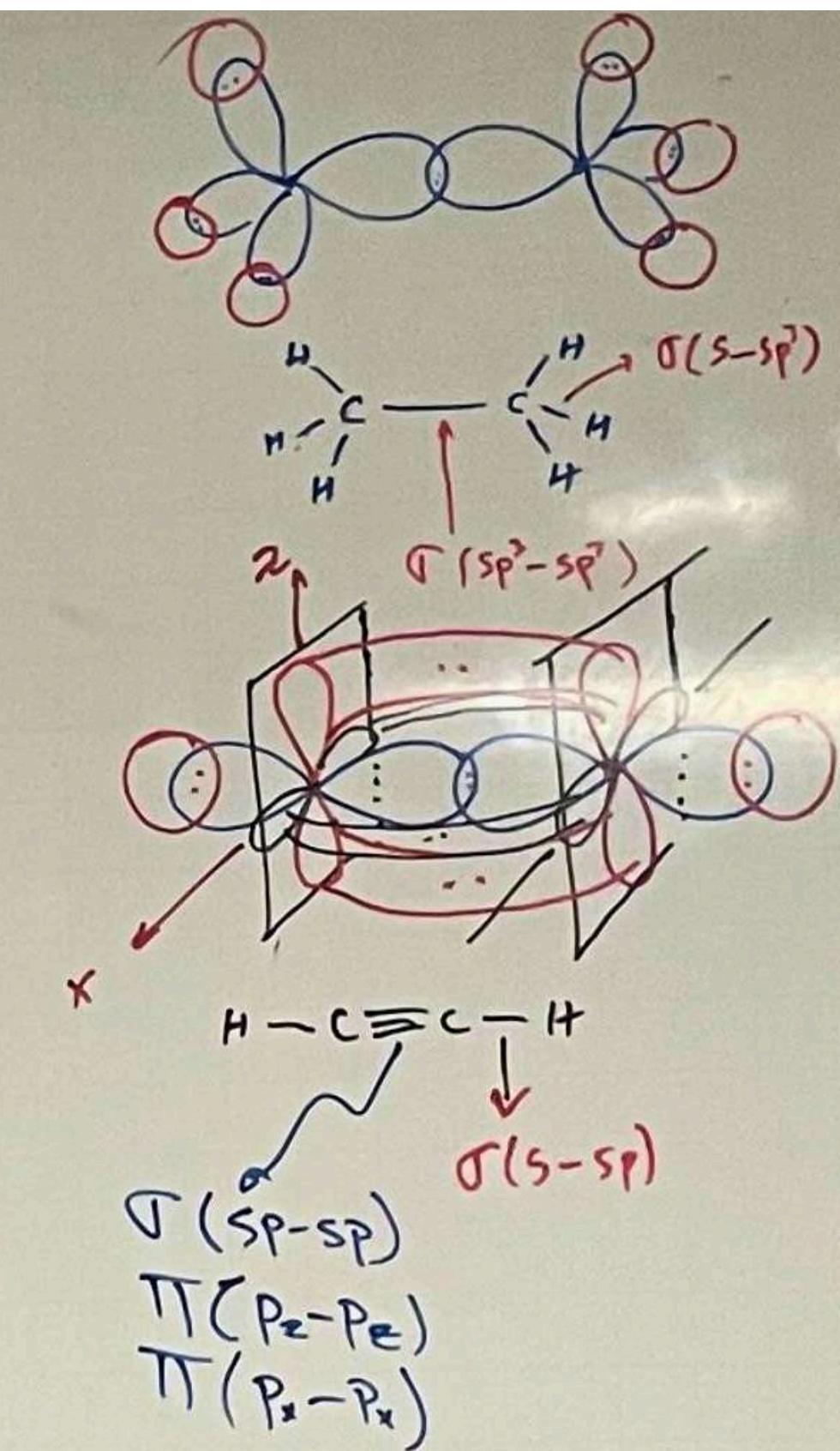
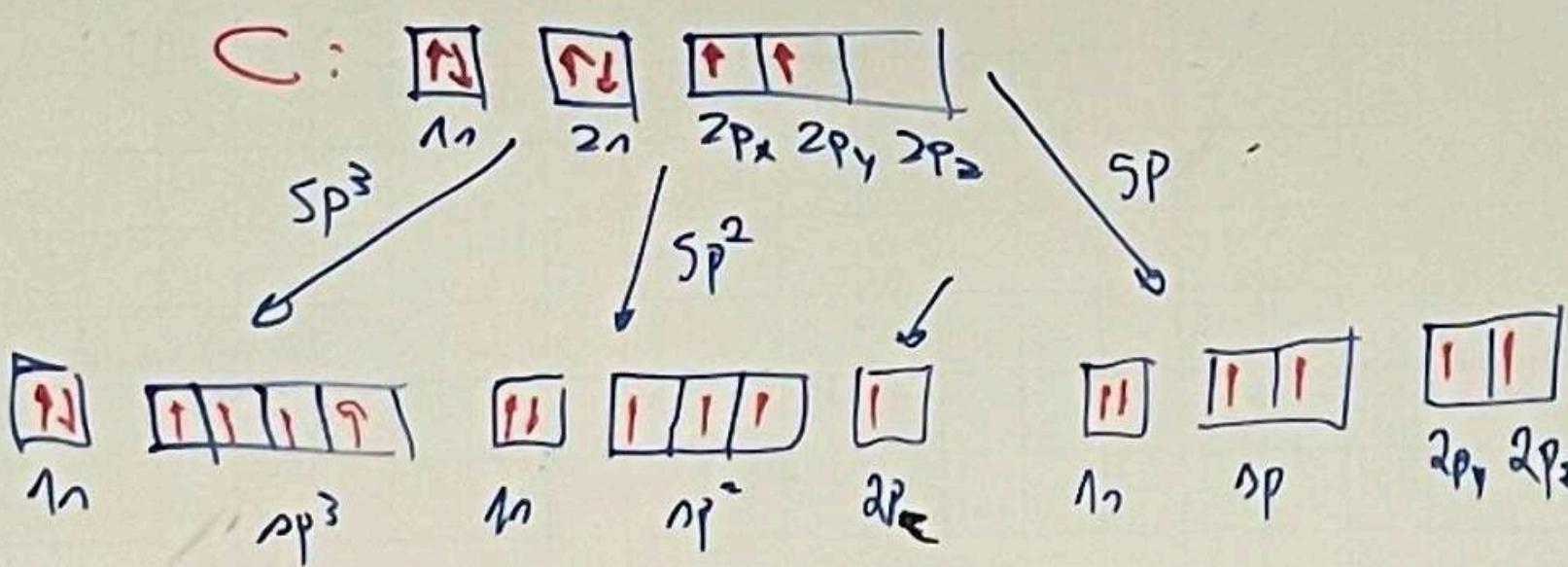
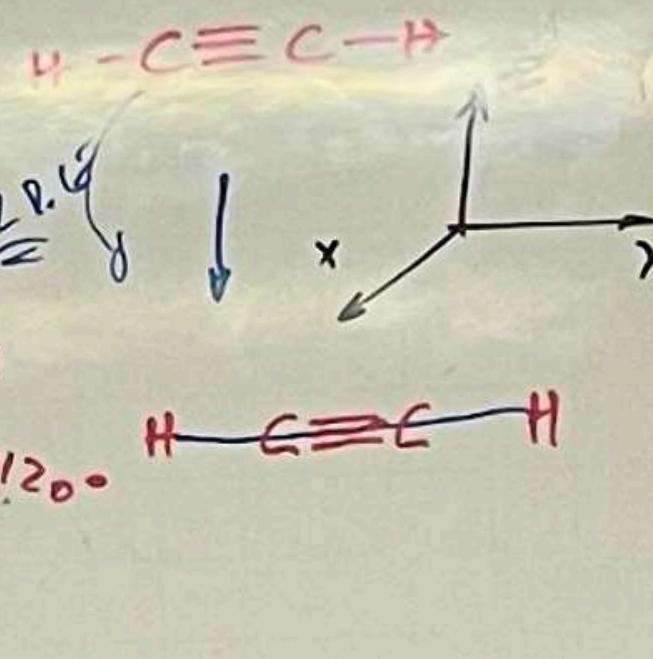
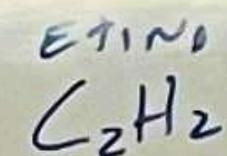
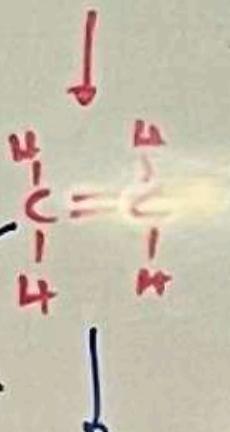
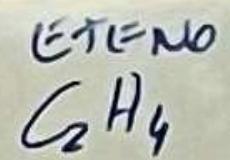
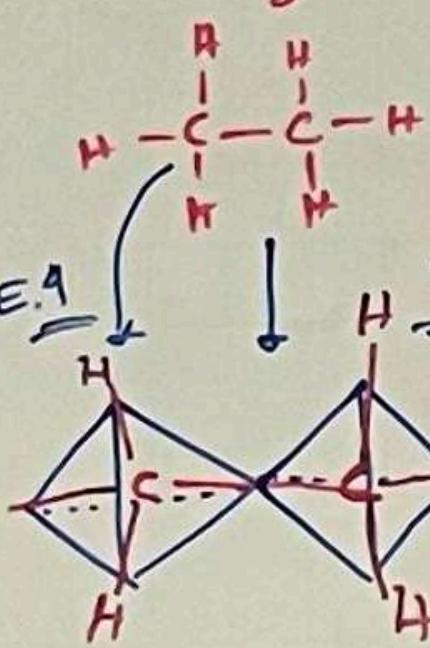
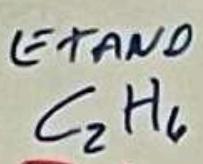


LEWIS
L, $1s^2 2s^2 2p^0$

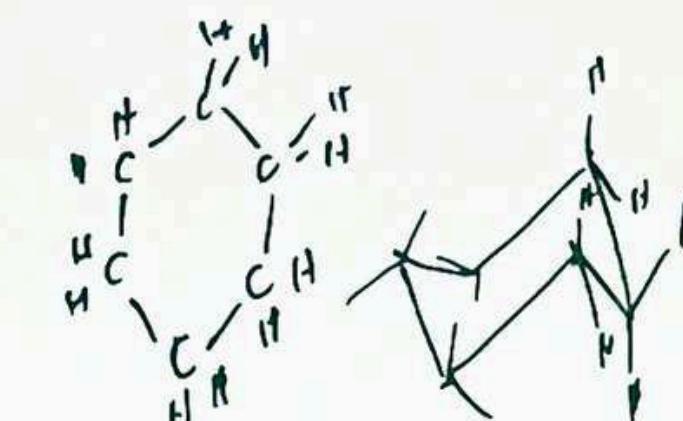
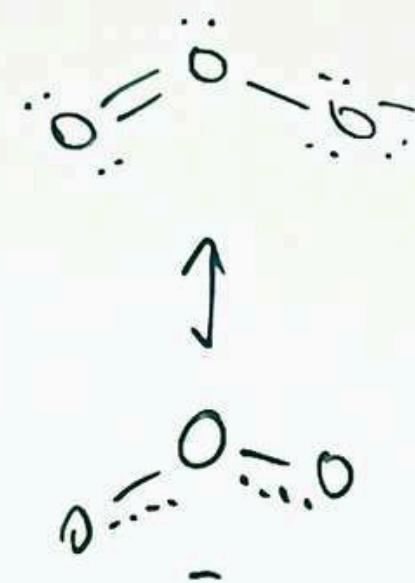
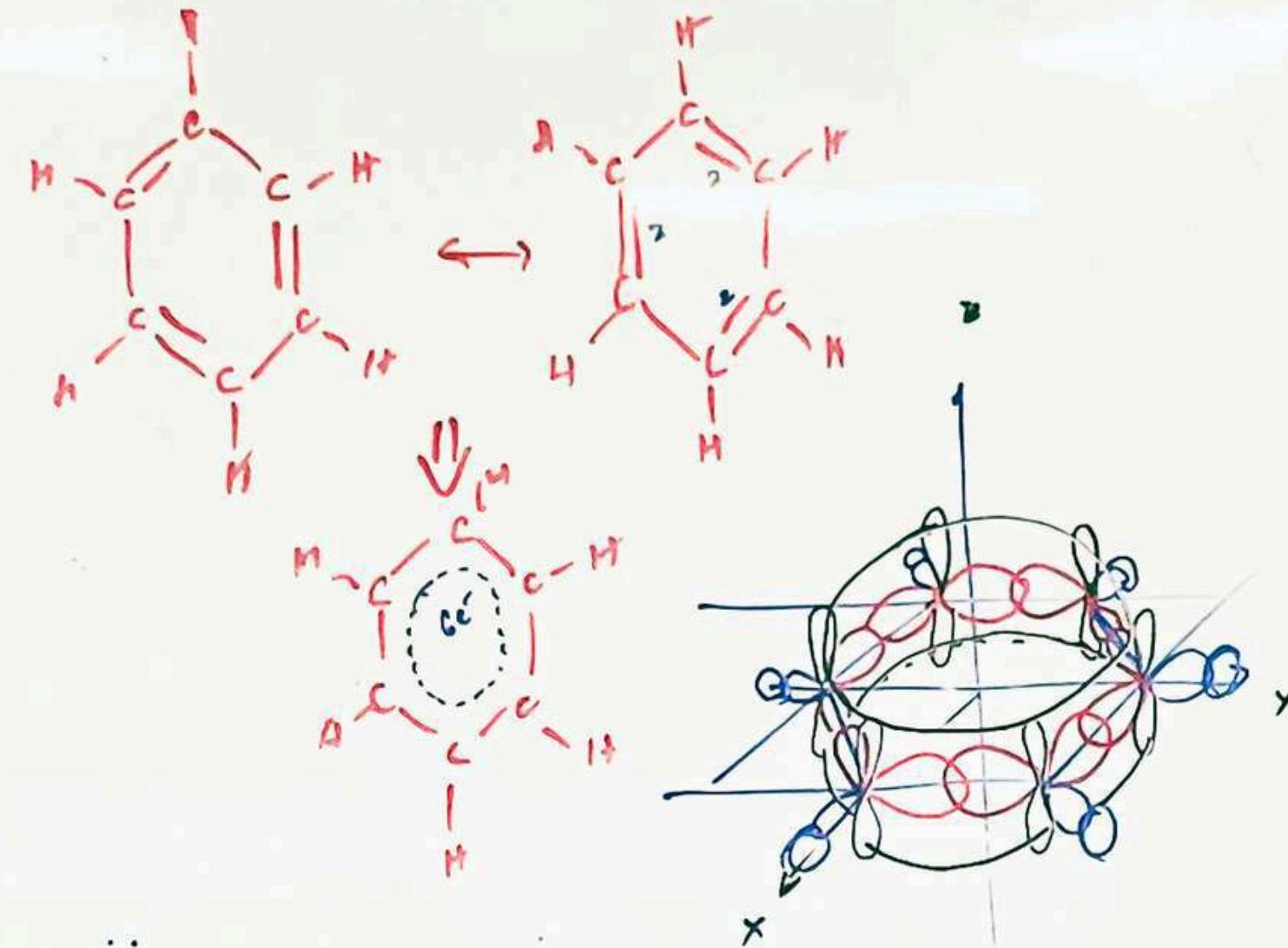




* LIGAÇÕES MÚLTIPLOAS



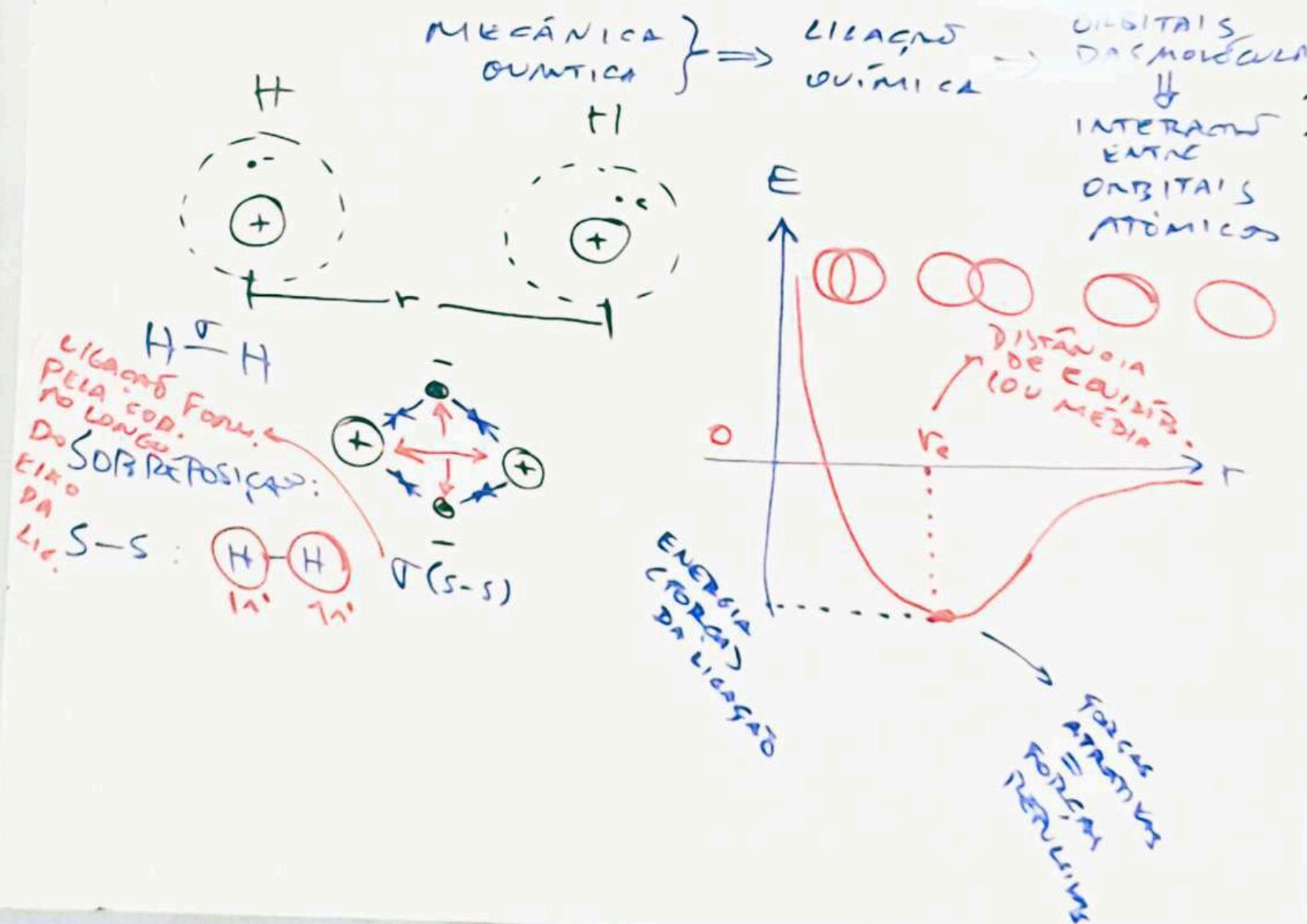
* RESSONÂNCIA \Rightarrow DESLOCAÇÃO DE e^- EM LIGAÇÕES π



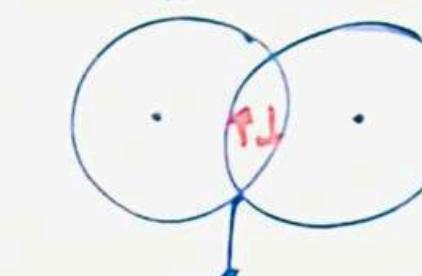
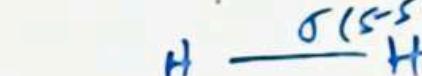
Turma PM

* RELAÇÕES ENTRE LIGAÇÕES QUÍMICAS, GEOMETRIA E ORBITAIS

- O QUE SÃO LIGAÇÕES QUÍMICAS e como se formam
- TEORIA DE LIGAÇÕES DA VALENCIA (TLV)

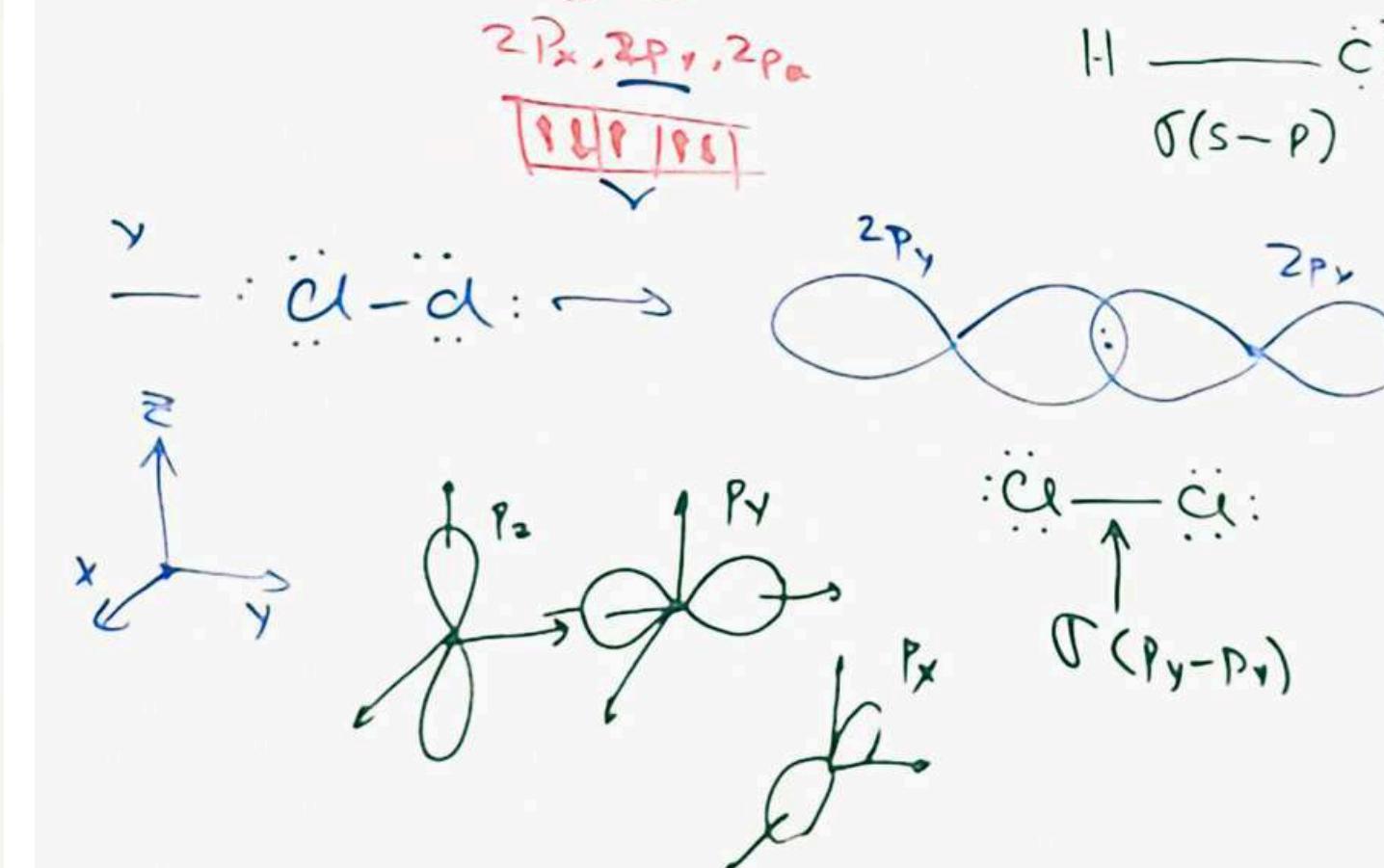
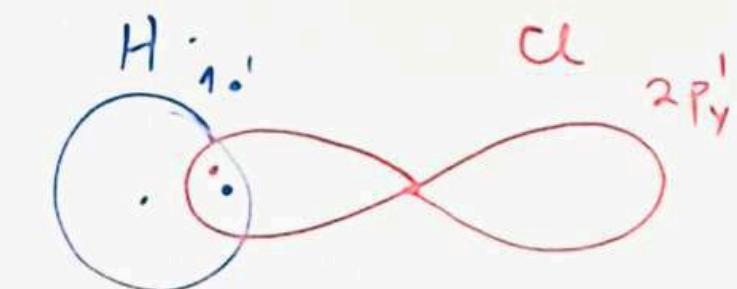


LIGAÇÃO OCORRE ENTRE ORBITAIS COM UM ELÉTRON

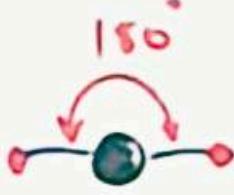


ORBITAL MOLÉCULAR \rightarrow SÓ CABE e^- COM SPINS OPOSTOS

COMBINAR ORBITAIS DE $1e^-$ LIGAÇÕES



• HIBRIDIZAÇÃO

- BeH_2 → H-Be-H → 

 FORM. MOL. LEWIS VSEPR

\downarrow

$\text{Be} : 1s^2 2s^2$ $\text{Be} :$

↑↓

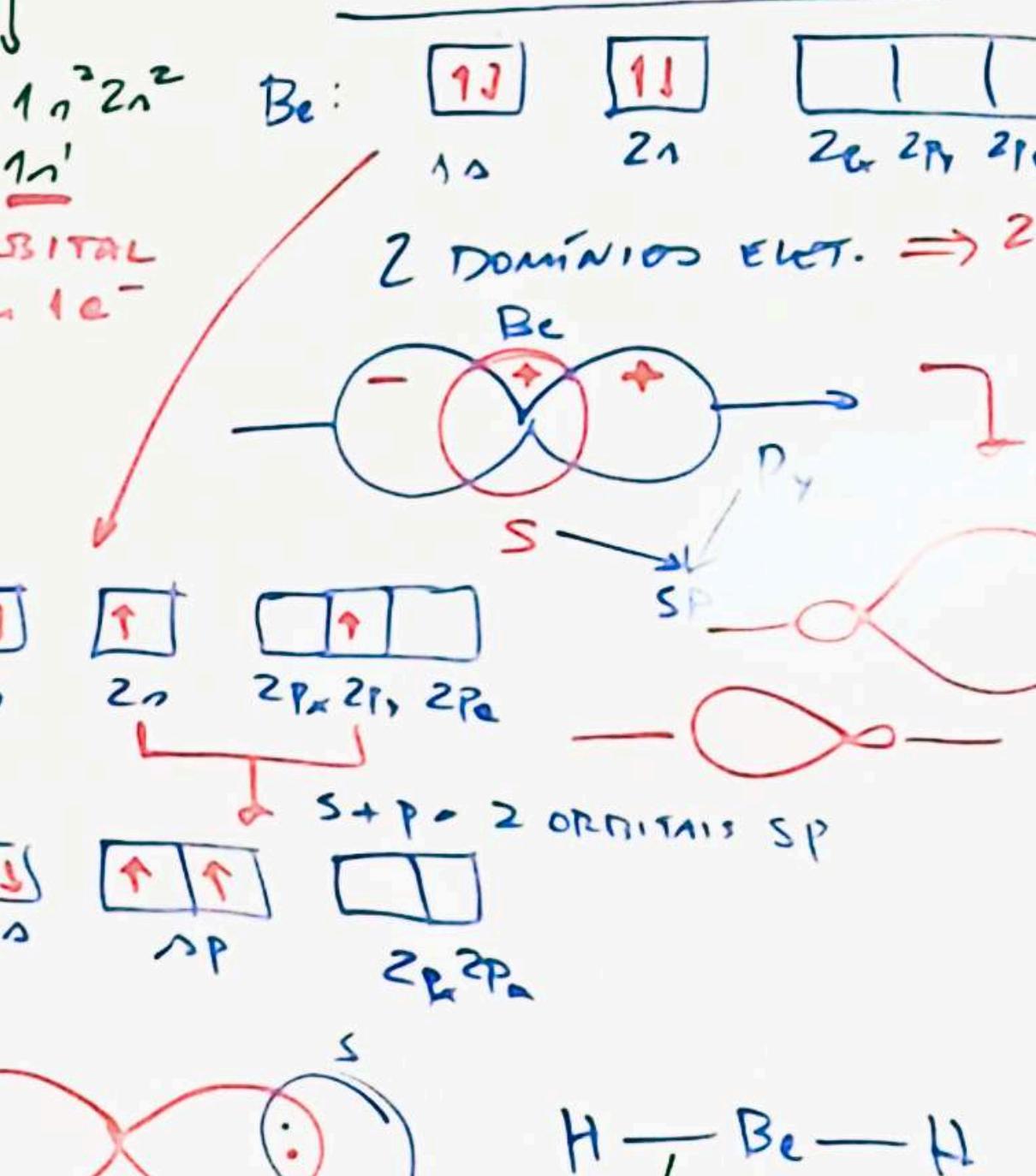
↑↓

1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
----	----	-----------------	-----------------	-----------------

 $\text{H} : 1s^1$

ORBITAL con 1 e⁻

2 Dominios ELET. \Rightarrow 2 ORB DE 1



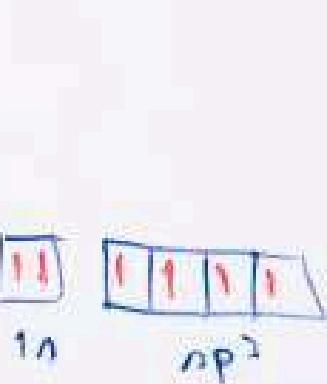
$\Sigma (s-s_p)$

* LIGAÇÕES MULTIPLAS

ETANO
 C_2H_6



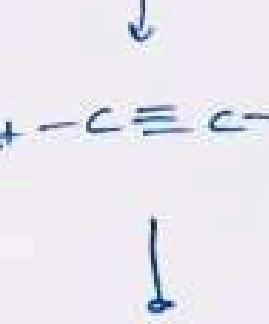
4 D.E. \Rightarrow 4 ORBITAIS
NISSEIROS



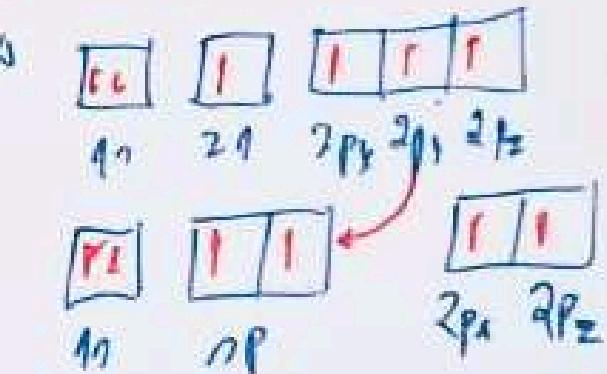
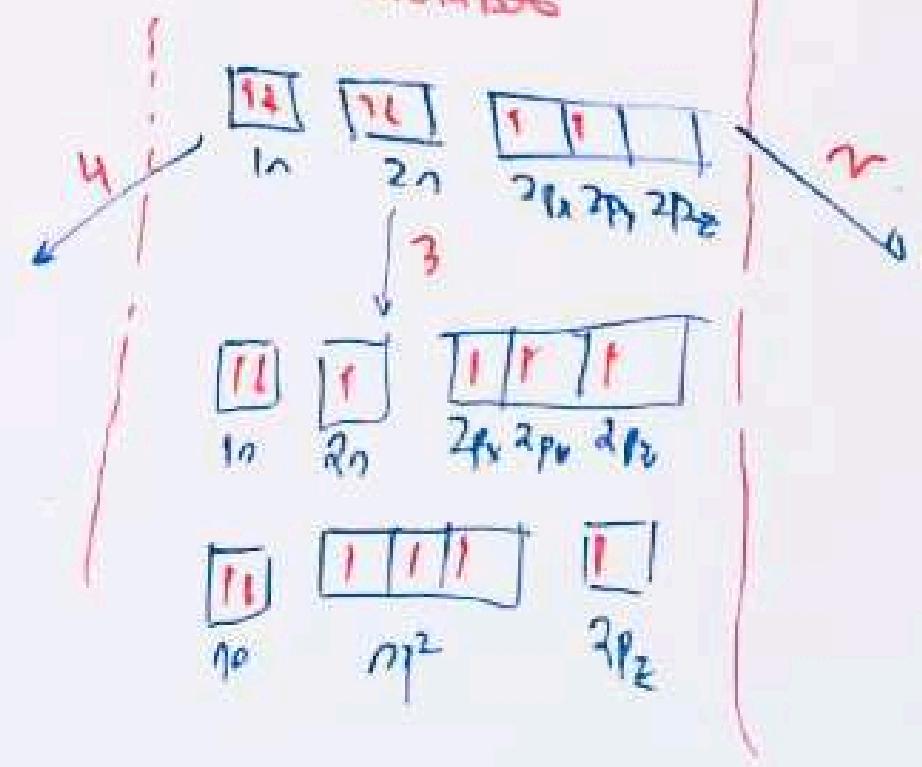
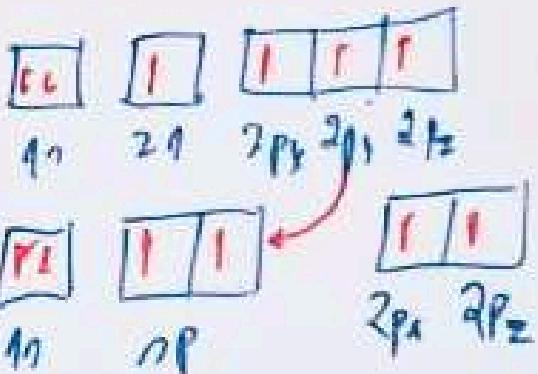
ETENO
 C_2H_4

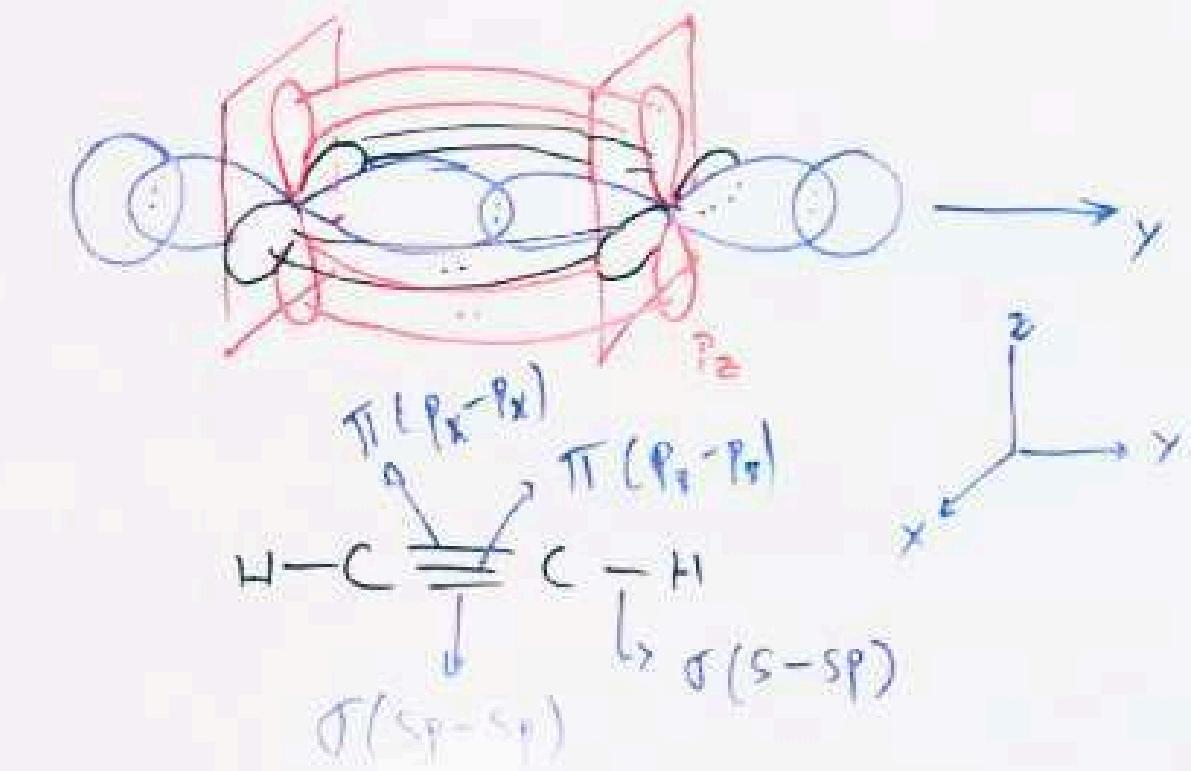
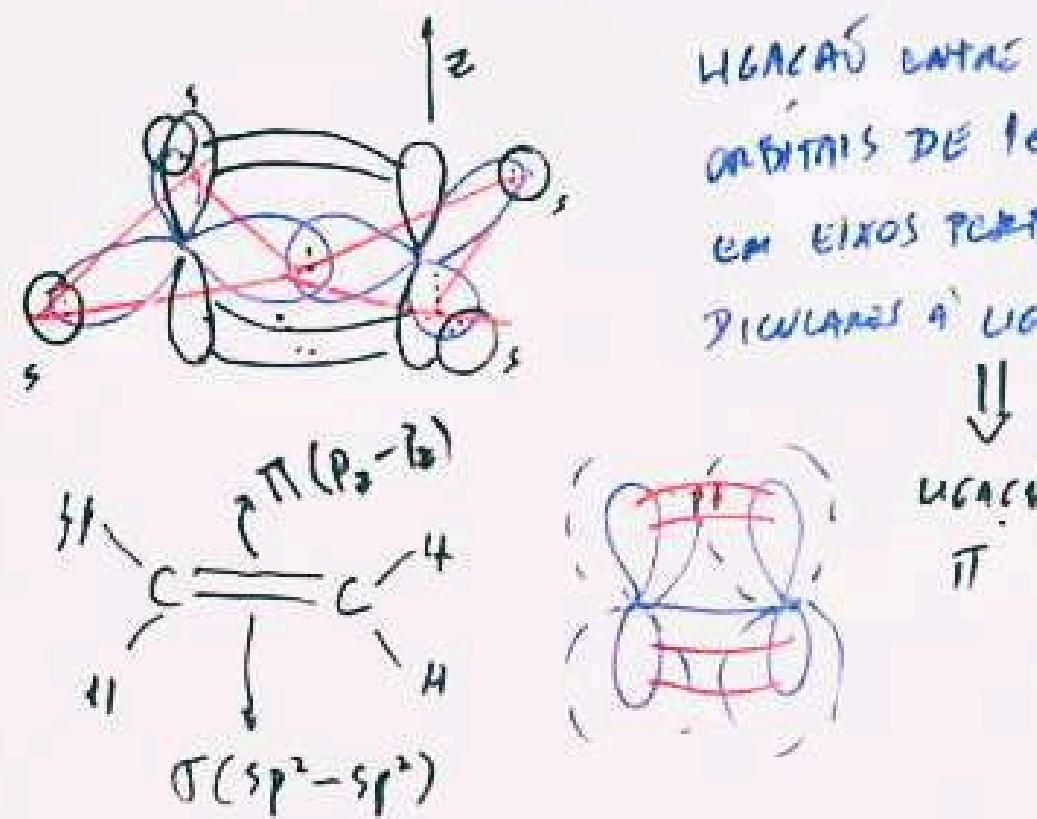
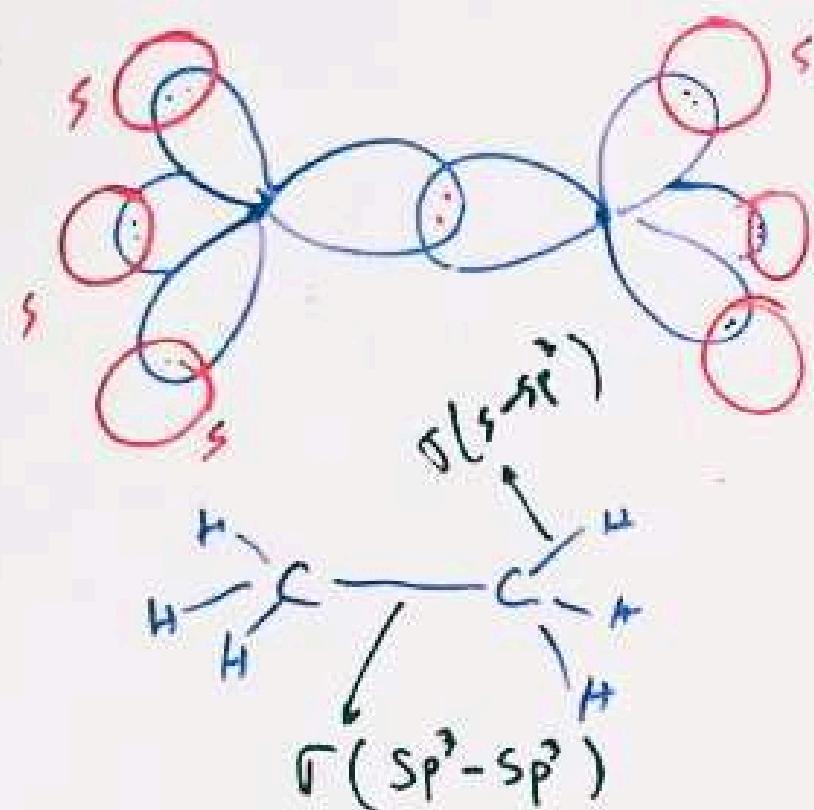


ETINO
 C_2H_2

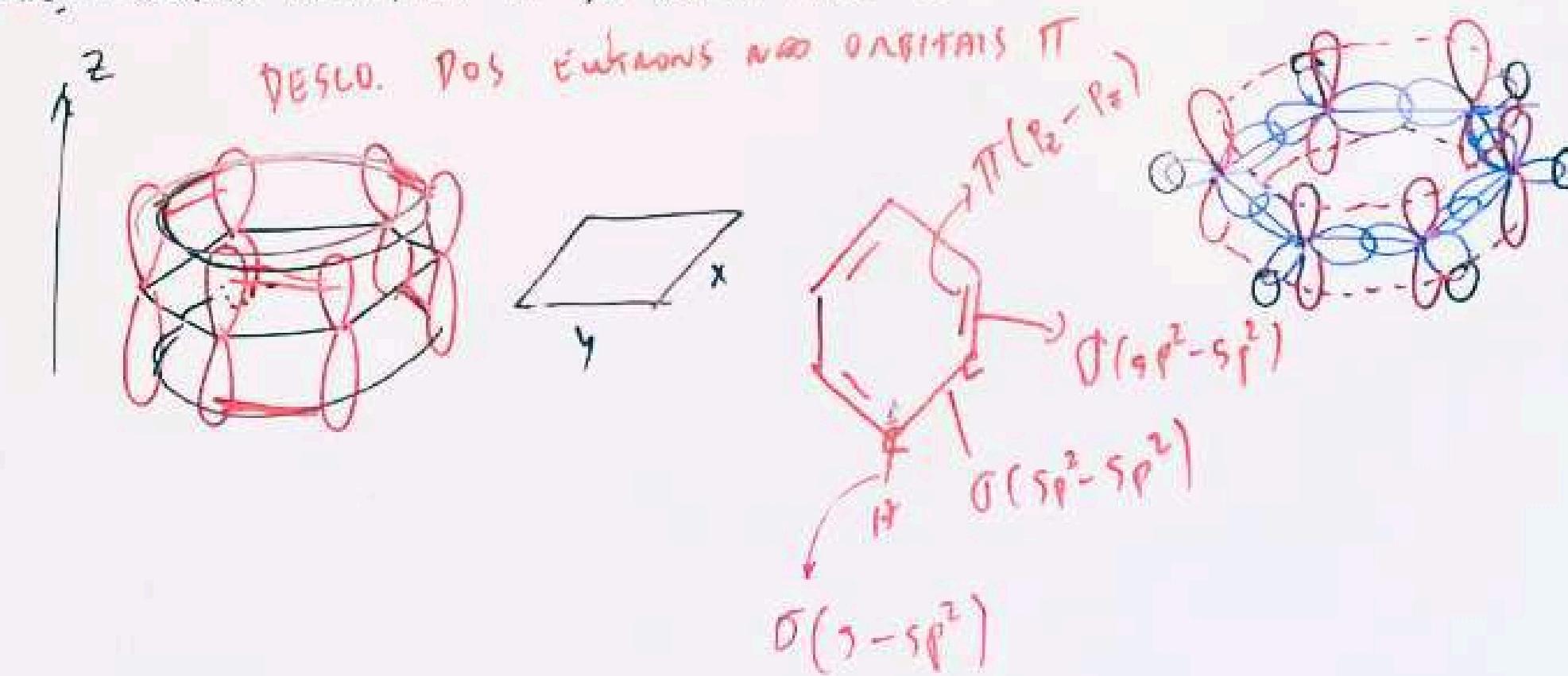
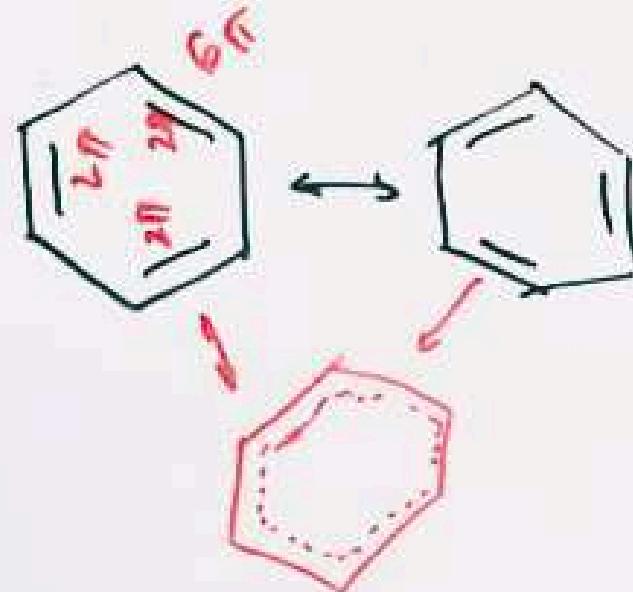


2 D.E. \Rightarrow 2 ORBITAIS



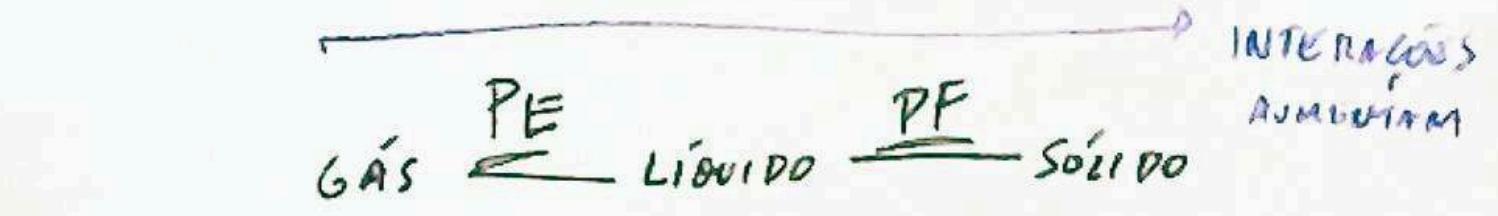
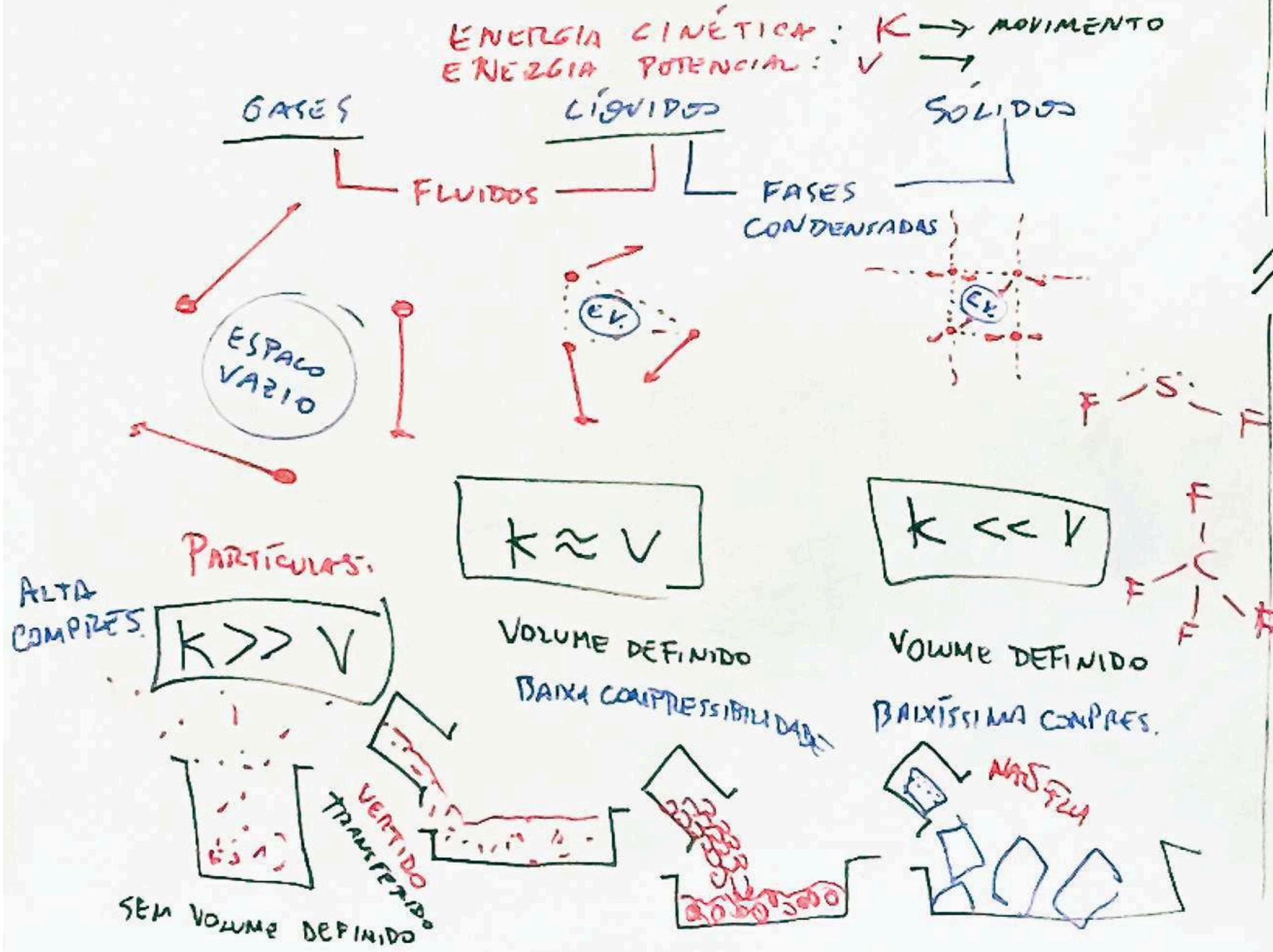


* RESSONÂNCIA : INTERAÇÕES ENTRE ORBITAIS π DE VÁRIOS ÁTOMOS



* INTERAÇÕES INTERMOLECULARES

• PROPRIEDADES DE LÍQUIDOS E SÓLIDOS



AUMENTA TEMPERATURA

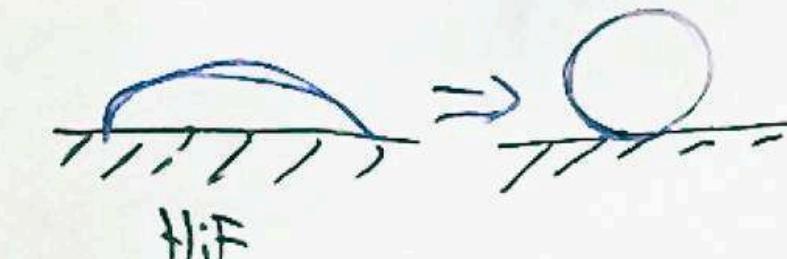
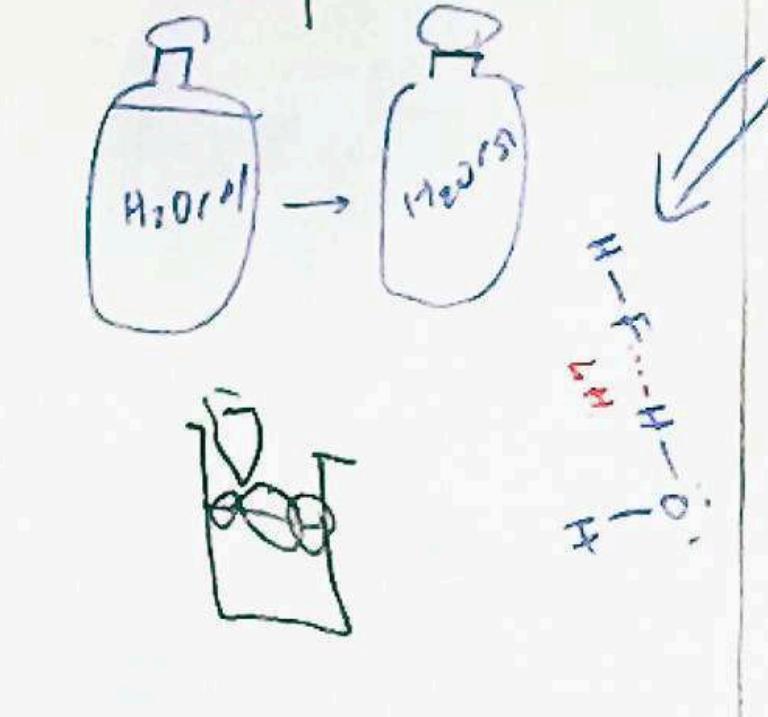
AUMENTA ENERGIA CINÉTICA

$$K = f(T, P \text{ CTE})$$

AUMENTA PRESSÃO

AUMENTA V

INTERAÇÕES MAIS FORTEIS: $PF, PE \uparrow$

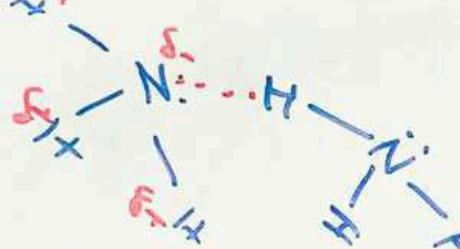
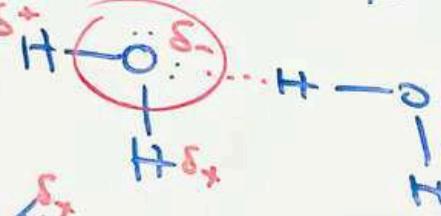


• TIPOS DE INTERAÇÕES

ION-ION
-DIP. PER.
-DIP. IND.

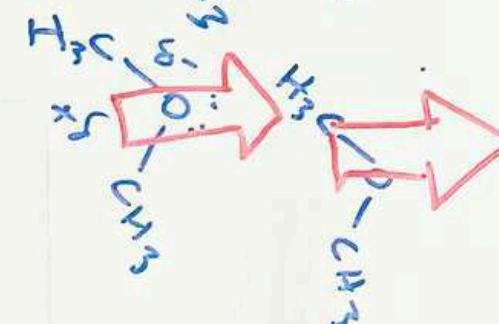
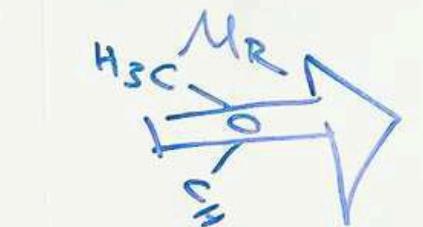
**LIGAÇÕES DE
HIDROXÍLIO**

$$\delta_+ \dots \delta_-$$



$X - H \dots E$

TERÇAS DIPOLO MANENTE - DIP. PERM



POLARES >
APOLARES
→ TUMÉ
FORÇAS DE DISPERSAO
(DE LONDÔN)
POLARIZABILIDADE
MAIOR COM
MAIS ELETRO

The diagram shows two helium atoms represented by circles. The top atom has two lone pairs of electrons (two pairs of dots) and is labeled "He :". The bottom atom has one lone pair of electrons (one pair of dots) and is also labeled "He :". A blue arrow points from the top atom towards the bottom atom. To the right of the bottom atom, the text "DIPOLO INSTANTÁNEO" is written.

EN MUY POCOS ATOMOS FUNCIONA COMO ATRACCION (PODE SER DISTORCIONADA)

A diagram illustrating molecular structures. On the left, a molecule is shown with a central oxygen atom (O) bonded to two hydrogen atoms (H). The bond length is labeled d_1 . On the right, a molecule is shown with two bromine atoms (Br) bonded together. The bond length is labeled d_2 . Below the first molecule, the text $d_2 > d_1$ is written, indicating that the bond length between two bromine atoms is greater than the bond length between a bromine atom and an oxygen atom.

$\text{H}-\overset{\text{P}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\overset{\text{F}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\text{H}$ PE

$$\text{H}-\overset{\text{P}}{\underset{\text{C}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{C}}{\text{C}}}-\overset{\text{P}}{\underset{\text{C}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{C}}{\text{C}}}-\text{H} \quad \text{PE}$$

1



A skeletal structure of a four-carbon chain with a methyl group branch on the second carbon.

$$\text{H} \quad \text{C} \quad \text{O} \quad \text{POLAR}$$

\diagdown \diagup

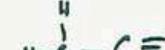
$$\text{F} \quad \text{C} \quad \text{O-H}$$

ANALISIS
DE POLARIDAD

Dipolo de la molécula de agua: H_2O

Parte negativa: O^-
Parte positiva: H^+

Dipolo: 1.64 D

			
M 44 M.M.A.	46 M.M.A.	49 M.M.A.	49 M.M.A.
μ 0.1D	1.3D	2.7D	3.7D
PE 231 K	248 K	291 K	355 K

