

Química

Conceitos importantes

Prof. Diego J. Raposo (djrs@poli.br)
UPE – Poli
2025.1

Matéria

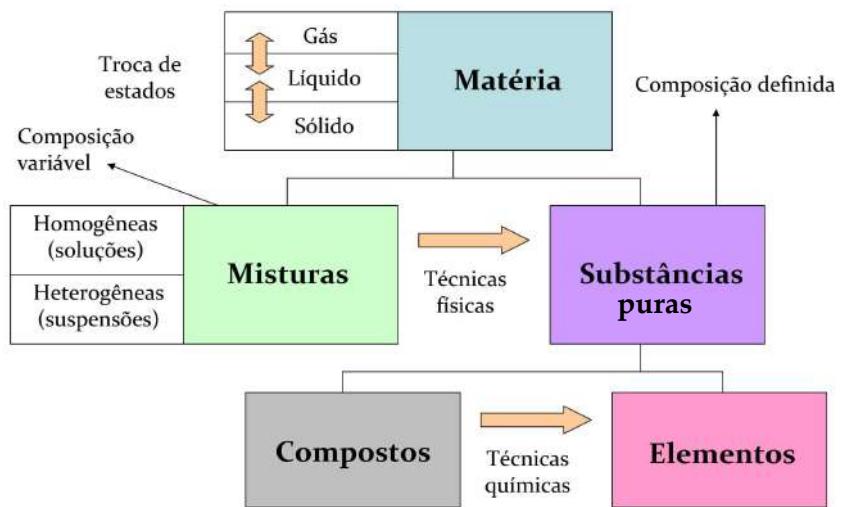
- **Matéria:**
 - Possui **massa**;
 - Ocupa **volume**;
 - **Ex.:** partículas subatômicas (próton, elétron), átomos e moléculas
- **Energia:**
 - Capacidade de **gerar trabalho** pela atuação de uma força;
 - **Ex.:** radiação eletromagnética (luz), calor (energia térmica)
- **Fase:**
 - Também chamada de **estado de agregação**;
 - Estado da matéria com propriedades físicas definidas.
 - Estados mais importantes na química: **sólido, líquido e gás**.
 - **Ex.:** gelo, óleo, leite, nitrogênio gasoso, ...



Substâncias

• Substâncias (ou espécies) químicas:

- Matéria com tipos de **átomos** (e proporção relativa entre eles) **constante** e independente da quantidade (massa);
- Podem ser:
 - **Puras:** apenas uma substância química
 - **Simples** (apenas um tipo de átomo) --> **Elementos**
 - **Compostas** (mais de um tipo de átomo)
 - **Misturas:** mais de uma substância química
 - **Homogêneas:** substâncias em uma mesma fase
 - **Heterogêneas:** mais de uma fase.



Transformações

- **Processos físicos:**

- **Mudança no estado** (temperatura, fase, etc.) do sistema. Não há produção de substâncias novas.
- **Ex.:** Mudança de fase, condução de calor, passagem de corrente elétrica, expansão/compressão de gás, etc.



- **Processos químicos:**

- **Mudança na composição** (quais substâncias e em qual quantidade) do sistema; Novas substâncias são produzidas. Veremos que isso é possível através da formação/quebra das chamadas ligações químicas;
- **Ex.:** Formação de ferrugem, torra de café, combustão em vela, fotossíntese, etc.



Bons estudos!

Matéria e energia

- A interação entre matéria e diferentes tipos de energia é tipicamente estudada em ramos separados (mesmo que interligados) da ciência.
- A interação entre energia cinética e potencial com a matéria é assunto da física clássica.
- Com energia elétrica é assunto do eletromagnetismo e da eletroquímica (quando reações ocorrem).
- Quando a energia é térmica, temos a termodinâmica ('termo' pelo tipo da energia e 'dinâmica' no sentido de fluxo de energia térmica entre materiais).
- Entre outros.

Química

Grandezas: Números

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

Grandezas físicas

- De acordo com o Sistema Internacional (SI), grandezas são compostas por: **número** e **unidade**. Ex.: 200 kg, 300 mL, 25 °C, etc.
- Números, por sua vez, podem ser exatos ou inxertos:
 - Exatos:** possuem **precisão infinita**. Ex.: Números naturais, como em $1 + 1 = 2$, que significa $1,00\dots + 1,00\dots = 2,00\dots$, com infinitos zeros à direita da vírgula (casas decimais);
 - Inxertos:** têm **precisão finita**, possuindo erro em alguma casa decimal, e nas casas decimais à direita dela. Ex.: medida do peso em balança digital. Como a menor medida possível nesse dispositivo é 0,1 kg nosso conhecimento desse valor vai até a terceira casa decimal (**casa do erro**). Ou seja, 70 kg na balança equivale a 70,0 kg. Não faz sentido escrever 70,000 kg ou 70,24 kg, por exemplo.



Números inexatos

- Nesses números é importante identificar duas coisas:
 - A casa do erro:** casa mais à direita do algarismo, inclusive se for zero. Ex.: 1,01; 0,020; 100, etc;
 - O número de algarismos significativos (a.s.):** quantidade de algarismos a direita de zeros à esquerda. Ou ainda à esquerda da casa do erro. Ex:

67,3	500	0,075	15.0702	0,9401	1500,0	0,3	Zeros à direita ✓
3 a.s.	3 a.s.	2 a.s.	6 a.s.	4 a.s.	5 a.s.	1 a.s.	Zeros no meio ✓

Zeros à esquerda ✗

- Notação científica:** simplificar notação de números muito grandes ou muito pequenos/indicar claramente algarismos significativos. Números são arranjados em potências de 10 de forma que:

Casa da unidade → **2,014 ...** • 10^x { 0, 1, 2, ...
casas decimais -1, -2, -3, ... } $10^0 = 1$ $10^{-1} = 1/10^1 = 0,1$
Ponto central: multiplicação Potência de 10 $10^1 = 10$ $10^{-2} = 1/10^2 = 0,01$
 $10^2 = 100$ $10^{-3} = 1/10^3 = 0,001$

Notação científica

- Para escrever um número em notação científica deve-se deslocar a vírgula até que apenas um algarismo esteja à esquerda dela. Lembrando que*:

- Se deslocamos a vírgula **x vezes para a direita**, a notação deve conter 10^x ;
- Se deslocarmos a vírgula **x vezes para a esquerda**, a notação deve conter 10^{-x} .

- Exemplos:

1 à esquerda	23,45702 → $2,345702 \cdot 10^1$
67,3 → 6,73 → $6,73 \cdot 10^1$	0,02931 → $2,931 \cdot 10^{-2}$
2 à esquerda	500 → 50,0 → $5,00 \cdot 10^2$
500,210 → $1,500210 \cdot 10^3$	1500,210 → $1,500210 \cdot 10^3$
2 à direita	0,075 → 7,5 → $7,5 \cdot 10^{-2}$
1,40 → $1,40 \cdot 10^0$	Porque todo número multiplicado por 1 é ele mesmo. Como $10^0 = 1$, ele se mantém inalterado
0,0010100 → $1,010100 \cdot 10^{-3}$	

*Essas regras se baseiam no fato de que, para conservar o valor do número, o deslocamento da vírgula multiplicando ou dividindo por potências de 10 da notação científica. Ex.: 200 precisa que a vírgula seja deslocada para a esquerda duas vezes, o que ocorre pela divisão de 200 por 100. Para manter o número igual, portanto, devemos também Multiplicá-lo 100. Assim: $200 = 200/(100/100) = (200/100)*100 = 2,00*10^2 = 2,00*10^2$.

Exercícios

1) Qual dos seguintes números tem o mesmo número de algarismos significativos que $1,00310$?

- a) $1 \cdot 10^6$
- b) 199,791
- c) 8,66
- d) 5,119
- e) 100

Exercícios

2) O número com maior número de zeros significativos é _____.

- a) 0,00002510
- b) 0,02500001
- c) 250000001
- d) $2,501 \cdot 10^{-7}$
- e) 2,5100000

Arredondamento

- Em certos casos é interessante reduzir o número de algarismos significativos de um número (como veremos). Isso é feito por meio do **arredondamento**, onde o número mais a direita é removido, e isso é repetido quantas vezes forem necessárias de modo a chegar ao número de algarismos final.
- Considere o número 0,5324, por exemplo. Suponha que desejamos reduzir os a.s. a 1 apenas.

I) Identifique quantos e quais são os algarismos significativos: 0,5324 (são 4 a.s.);

II) Identifique a casa do erro: 0,5324 (4.^a casa decimal);

III) Omita o número da casa do erro, reduzindo agora para 3 a.s.: 0,532;

IV) A nova casa do erro (número mais a direita) deve ser alterada ou não, a depender do valor do número apagado. **Se for 6, 7, 8 ou 9, adiciona-se 1 à nova casa do erro:** 0,75;

V) Repita o processo até o número de a.s. desejado: 0,532 (3 a.s.) \rightarrow 0,53 (2 a.s.) \rightarrow 0,5 (1.a.s.)

Arredondamento

- Considerando agora o número 0,748. Suponha que desejamos reduzir os a.s. a 1 apenas.
- I) Identifique quantos e quais são os algarismos significativos: 0,748 (são 3 a.s.);
- II) Identifique a casa do erro: 0,748 (3.^a casa decimal);
- III) Omita o número da casa do erro, reduzindo agora para 3 a.s.: 0,74;
- IV) A nova casa do erro (número mais a direita) deve ser alterada ou não, a depender do valor do número apagado. **Se for 6, 7, 8 ou 9, adiciona-se 1 à nova casa do erro:** 0,75;
- V) Repita o processo até o número de a.s. desejado: 0,748 (3 a.s.) \rightarrow 0,75 (2 a.s.) \rightarrow ? (1.a.s.);
- VI) Caso o número a ser apagado seja 5, deve-se a) manter o número a esquerda dele **inalterado se par** e b) **adicionar 1** a esse número caso seja **ímpar**. Como 7 é ímpar, adiciona-se 1: 0,75 (2 a.s.) \rightarrow 0,8 (1.a.s.)

Exercícios

3) Arredonde o número 0,007222 para 3 a.s.

- a) 0,007
- b) 0,00722
- c) 0,0072
- d) 0,00723
- e) 0,007225

Exercícios

4) Arredonde o número 3456,5 para dois a.s.

- a) 3400,0
- b) 3400
- c) 3000
- d) 3500
- e) 3000,0

Operações com números inexatos

- Frequentemente combinamos vários números inexatos, e o número de casas decimais (ou de algarismos significativos) da resposta dependerá da precisão dos números incluídos no cálculo. Sabendo disso, arredonda-se para obter o número final.
- **Soma/subtração:** número de casas decimais da resposta é igual ao da parcela com menos casas decimais. **Ex.:** $12,01 + 15 + 0,07 + 0,001 = 27,081$. Como o número com menos casas decimais é o 15 (zero), então arredonda-se até a primeira casa da unidade: $27,081$ (3 casas) $\rightarrow 27,08$ (2 casas) $\rightarrow 27,1$ (1 casa) $\rightarrow 27$ (0 casas);
- **Multiplicação/divisão:** número de algarismos significativos é igual ao do fator com menos algarismos significativos. **Ex.:** $6,221 \cdot 5,2 = 32,3492$. Dado que o número com menos algarismos significativos é o 5,2 (2 a.s.), arredonda-se até a primeira casa da unidade: $32,3492$ (6 a.s.) $\rightarrow 32,349$ (5 a.s.) $\rightarrow 32,35$ (4 a.s.) $\rightarrow 32,4$ (3 a.s.) $\rightarrow 32$ (2 a.s.).

Exercícios

5) O resultado correto (indicando o número apropriado de algarismos significativos) da seguinte adição é _____.

$$12 + 1,2 + 0,12 + 0,012$$

- a) 13
- b) 13,3
- c) 13,33
- d) 13,332
- e) nenhuma das anteriores

Exercícios

6) A resposta correta (relatada com o número apropriado de algarismos significativos) para a seguinte operação é _____.
 $6,3 \times 3,25 = \text{_____}$.

- a) 20
- b) 20,475
- c) 20,48
- d) 20,5
- e) 21

Exercícios

7) O resultado correto (indicando o número apropriado de algarismos significativos) do seguinte cálculo da massa molecular para H_2SO_4 é $4 \cdot 15,9994 + 32,066 + 2 \cdot 1,0079$

- a) 98,08
- b) 98,079
- c) 98,074
- d) 98,838
- e) 98,84

Bons estudos!

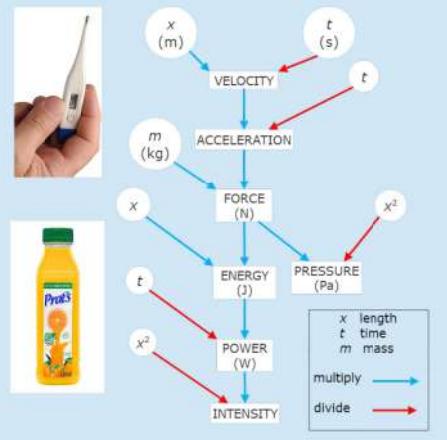
Química

Grandezas: Unidades

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

Outras unidades

- Todas as outras unidades usadas podem ser convertidas às unidades fundamentais, ou são elas mesmas combinações dessas unidades;
- Outras **unidades ainda aceitas** pelo SI são minutos (min), horas (h), dias (d), graus Celsius ($^{\circ}\text{C}$), litro (L), etc;
- Unidades como m/s , para velocidade, ou A s (chamada de Coulomb, unidade de carga), são **unidades derivadas**. Outras frequentemente usadas na Química, como angströms ou u ('uma', unidades atômicas), serão abordada posteriormente.



Unidades do SI

- As unidades de grandezas físicas são padronizadas pelo Sistema Internacional (SI), e as **unidades fundamentais** são:



Kilograma (kg):
unidade de massa



Metro (m):
unidade de comprimento



Kelvin (K):
unidade de temperatura



Segundos (s):
unidade de tempo



Mol (mol):
quantidade de substância



Candela (cd):
unidade de intensidade luminosa



Ampère (A):
unidade de corrente elétrica

Outras unidades e prefixos

- É comum usar **prefixos** para diminuir o tamanho da representação numérica da grandeza se escrita em notação científica.
- Por exemplo: $0,00000008 \text{ m} \rightarrow 8 \cdot 10^{-9} \text{ m}$, por exemplo. Tal notação pode ser ainda mais reduzida se substituirmos 10^x por uma letra, tal como 'k' em 'kg' (quilo) representa ' 10^3 g '. Ou seja, ao invés de mencionar 1000 kg (1000 quilogramas), podemos mencionar 1 kg (1 quilograma);
- O prefixo para 10^{-9} é 'n'(nano), logo 8 nm ('8 nanômetros') é uma forma simplificada de $8 \cdot 10^{-9} \text{ m}$. Os prefixos segundo o SI são apresentados ao lado.

Fator	Prefixo	Símbolo	Fator	Prefixo	Símbolo
10^{-1}	deci	d	10^1	deca	da
10^{-2}	centi	c	10^2	hecto	h
10^{-3}	milli	m	10^3	quilo	k
10^{-6}	micro	μ	10^6	mega	M
10^{-9}	nano	n	10^9	giga	G
10^{-12}	pico	p	10^{12}	tera	T
10^{-15}	femto	f	10^{15}	petra	P
10^{-18}	atto	a	10^{18}	exa	E
10^{-21}	zepto	z	10^{21}	zeta	Z
10^{-24}	yocto	y	10^{24}	yotta	Y

Conversão de unidades

- Algo muito relevante sobre unidades, fundamental para cálculos em química, é a [análise dimensional](#), ou conversão de unidades.
- Ela é feita para [converter uma unidade de uma grandeza em outra unidade](#), por exemplo, metros e centímetros. Digamos que se deseja converter 15 m em centímetros:

$$15 \text{ m} \longrightarrow ? \text{ cm}$$

- Para isso, multiplicamos o número na unidade inicial (m) por um [fator de conversão](#). Neste caso, ele expressa a relação entre metro e centímetro:

$$1 \text{ m} = 10^2 \text{ cm}$$

- Essa equação pode ser rearranjada de duas formas:

$$\frac{1 \text{ m}}{10^2 \text{ cm}} = 1 \quad \text{ou} \quad \frac{10^2 \text{ cm}}{1 \text{ m}} = 1$$

Conversão de unidades

- Podemos usar uma ou outra para converter centímetros em metros ou vice-versa. Desejamos saber quantos metros (unidade inicial) há em 15 cm (unidade final). Para tanto, multiplicamos 15 cm por um dos dois fatores (que, como vimos, equivalem a 1): aquele que permite cancelar a unidade inicial, mantendo a final.

$$15 \cancel{\text{cm}} \cdot \left(\frac{1 \text{ m}}{10^2 \cancel{\text{cm}}} \right) = 15 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

- Assim, de uma maneira geral:

$$\text{grandeza}[\text{unidade final}] = \text{grandeza}[\text{unidade inicial}] \cdot \text{fator} \left[\frac{\text{unidade final}}{\text{unidade inicial}} \right]$$

- Por exemplo, se desejamos converter 0,5 m em centímetros, usamos o fator de modo que as unidades iniciais se cancelem novamente:

$$0,5 \cancel{\text{m}} \cdot \left(\frac{10^2 \text{ cm}}{1 \cancel{\text{m}}} \right) = 50 \text{ cm}$$

Conversão de unidades

- Podemos encadear várias conversões em uma mesma linha, apenas tomando cuidado de seguir a regra.
- Por exemplo, desejamos saber quantos quilômetros por hora é a velocidade da luz, sabendo que $3 \cdot 10^8$ m/s é o valor aproximado dessa velocidade. Reconhecendo as relações de conversão $1 \text{ km} = 1 \cdot 10^3 \text{ m}$ e $1 \text{ h} = 3600 \text{ s}$, e fazendo duas multiplicações por 1:

$$3 \cdot 10^8 \cancel{\frac{\text{m}}{\text{s}}} \cdot \left(\frac{1 \text{ km}}{10^3 \cancel{\text{m}}} \right) \cdot \left(\frac{3600 \cancel{\text{s}}}{1 \text{ h}} \right) = 10,8 \cdot 10^8 \frac{\text{km}}{\text{h}} = 1,08 \cdot 10^9 \frac{\text{km}}{\text{h}} \cong 1 \cdot 10^9 \frac{\text{km}}{\text{h}}$$

- Conversões também podem ser feitas com potências das relações de conversão, pois como equivalem a 1, seu cubo, por exemplo, também equivale a 1: $1^3 = 1$.
- Desta forma podemos converter 1 L em m^3 se considerarmos que $1 = 1 \text{ dm}^3$ e que $1 \text{ m} = 10 \text{ dm}$:

$$1 \cancel{\text{L}} \cdot \left(\frac{1 \cancel{\text{dm}}^3}{1 \cancel{\text{L}}} \right) \cdot \left(\frac{1 \text{ m}}{10 \cancel{\text{dm}}} \right)^3 = 10^{-3} \text{ m}^3$$

Exercícios

- 1)** Determine a Um conjunto comum de unidades em inglês para expressar velocidade é milhas/hora. A unidade do SI para velocidade é _____.

a) km/h

b) km/s

c) m/h

d) m/s

e) cm/s.

Exercícios

2) $45 \text{ m/s} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ km/h}$

- a) 2,7
- b) 0,045
- c) $1,6 \cdot 10^2$
- d) $2,7 \cdot 10^3$
- e) $1,6 \cdot 10^5$

Exercícios

3) Um lado de um cubo mede 1,55 m. O volume desse cubo é $\underline{\hspace{2cm}} \text{ cm}^3$.

- a) $2,40 \cdot 10^4$
- b) $3,72 \cdot 10^6$
- c) 2,40
- d) 3,72
- e) 155

Bons estudos!

Química

Teoria atômica: histórico

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

Gregos

- A primeira teoria da matéria conhecida que mais se assemelha a que temos atualmente foi desenvolvida por filósofos gregos entre 500 e 300 anos antes da era comum;
- Anaxágonas, Demócrito e Leucipo acreditavam que toda matéria era composta de partículas indivisíveis chamadas de átomos, e que as propriedades da matéria advinham das propriedades desses átomos.

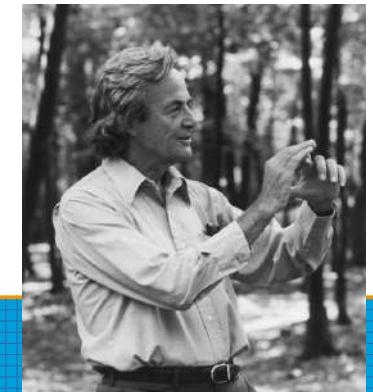
Nada existe senão átomos e vazio; tudo mais é opinião.

Demócrito de Abdera



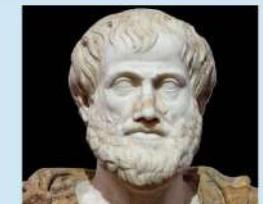
Se tivéssemos que nomear a suposição mais poderosa de todas, que leva alguém a tentar entender a vida continuamente, seria a de que todas as coisas são feitas de átomos, e que tudo o que os seres vivos fazem pode ser entendido em termos dos movimentos e oscilações dos átomos.

Richard P. Feynman



Gregos

- A teoria foi parcialmente esquecida devido ao grande sucesso da descrição de Aristóteles na idade antiga e média. Nela, a matéria seria uma composição de 5 elementos: **água, ar, terra, fogo e éter**;
- Tal teoria apelava para os sentidos humanos, tornando-se muito influente na Europa e Oriente médio, e foi bastante influente na medicina, por exemplo;
- Ambas as teorias **carenceiam de respaldo experimental**. Apenas com a descrição de Dalton podemos dizer que elaborou-se uma teoria com base em resultados experimentais.



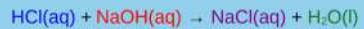
Leis de Lavoisier

- No século XVII algumas tendências foram observadas em experimentos repetidos. A primeira dessas leis ponderais foi chamada de Lei de Lavoisier, ou lei da conservação da massa. Ela foi enunciada considerando que qualquer reação química que ocorre em um sistema fechado (isto é, de onde os reagentes e produtos não podem sair) a massa total é constante.



$$\text{Massa de } 4 \text{ g} + 32 \text{ g} = 36 \text{ g}$$

Massa dos reagentes (hidrogênio + oxigênio) é igual à massa do produto (água)



$$\text{Massa de } 36,5 \text{ g} + 40 \text{ g} = 58,5 \text{ g} + 18 \text{ g}$$

Massa total dos reagentes (ácido + base) é igual à massa total dos produtos (sal + água)

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

Antoine Laurent Lavoisier



Lei de Proust

- A segunda lei ponderal é chamada de Lei de Proust, ou lei das proporções definidas;
- Ela resultou da verificação de que ao se variar a quantidade de reagentes para obter certa quantidade de produto, a relação entre a massa dos reagentes se mantinha constante;
- Ex.:** Sempre, em qualquer amostra de H_2O , a razão (massa de H_2)/(massa de O_2) = $2/16 = 1:8$;
- Ex.:** No óxido de cálcio (CaO), a razão (massa de cálcio)/(massa de oxigênio) = $40/16 = 5:2$.



Postulados de Dalton

- Dalton se inspirou na teoria atômica da antiguidade para elaborar quatro postulados sobre a natureza da matéria em função da existência de átomos. Esses postulados são:

1. Todos os átomos são **indestrutíveis**;

2. Um átomo **não pode se transformar** em outro átomo;

3. Átomos de um mesmo elemento são **iguais** entre si (possuem as mesmas propriedades), e diferentes de átomos de elementos diferentes;

4. Compostos são combinações de **números inteiros** de átomos de elementos diferentes.



Lei de Dalton

- Com esses enunciados, Dalton pôde:
 - explicar as **leis ponderais anteriores**;
 - propor uma **nova lei ponderal**, a Lei de Dalton ou lei das proporções múltiplas.
- Esta, por sua vez, mostrava que se dois tipos de átomos podem formar mais de um tipo de composto, ao se manter a quantidade de um dos átomos constantes, a **razão entre as massas dos compostos produzidos devem a razão entre números inteiros pequenos**;
- Ex.:** A mistura de **1 g de carbono (C) + 1,3 g de oxigênio (O)** produz 2,3 g de monóxido de carbono (CO). Se misturarmos a mesma massa de carbono a **2,6 g de oxigênio**, serão produzidos 3,6 g de dióxido de carbono (CO_2). A proporção da massa de oxigênio no CO e no CO_2 é $1,3/2,6 = 1:2$;
- Ex.:** Para uma massa fixa de nitrogênio, a razão das massas de oxigênio em NO e NO_2 é $1:2$.

Exercícios

1) Associar elementos à composição da matéria foi tema comum a alguns filósofos da Grécia Antiga. Uns acreditavam que a água estava na base de tudo; outros que o ar ou mesmo o fogo descreviam o universo. Um deles, no entanto, acreditava que todos esses e outros elementos descreviam a matéria e as sensações que temos ao interagir com eles:

- a)** Aurélio;
- b)** Demócrito;
- c)** Dalton;
- d)** Anaxágonas;
- e)** Aristóteles.

Exercícios

2) Hoje sabemos que a massa não se conserva em certos processos; na verdade massa pode se converter em energia e vice-versa no universo microscópico. Essa observação é contrária a lei ponderal de qual cientista?

- a)** Lavoisier;
- b)** Proust;
- c)** Dalton;
- d)** Thomson;
- e)** Torricelli.

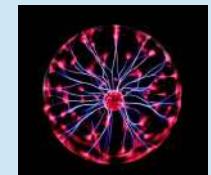
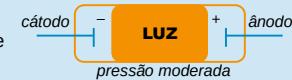
Exercícios

3) Qual a única hipótese que é compatível com os postulados de Dalton:

- a)** Todos os átomos são iguais;
- b)** Não é possível converter um átomo em outro;
- c)** Todo elemento é composto de mais de um tipo de átomo;
- d)** O átomo é formado por partículas menores;
- e)** Alguns átomos são divisíveis, enquanto outros, não.

Eletricidade e gases

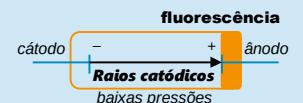
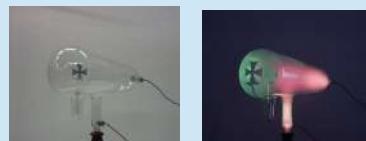
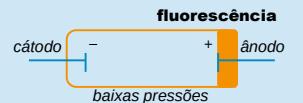
- Um pouco antes da confirmação da hipótese atômica, alguns experimentos que levariam a conclusão de que **átomos são**, de fato, **divisíveis**, foram realizados. Eles levariam ao quadro mais relevante para a química da composição de um átomo em termos de partículas subatômicas;
- **Gases permitem a condução de eletricidade** quando confinados em uma ampola de vidro na qual dois eletrodos, conectados a uma fonte de energia, são colocados em seu interior, em posições opostas. O que se observa nessas condições é uma **incandescência característica de cada gás**;
- Esse tipo de experimento levou os cientistas a questionarem, entre muitas coisas (inclusive a razão das cores serem diferentes, a ser abordado depois), **como o gás, teoricamente neutro, pode permitir a passagem de corrente elétrica**.



Raios catódicos

[ver vídeo](#)

- Descobriu-se que quando a **pressão do gás é reduzida**, a luz diminui e apenas uma fluorescência do vidro, no lado do eletrodo positivo, é observada.
- William Crookes (1879) demonstrou que a luminescência das paredes de vidro se deve a um bombardeio do lado do eletrodo positivo (o ânodo) por uma radiação que vinha do eletrodo negativo (o cátodo).
- Inclusive se um objeto era usado como anteparo, uma **sombra de seu contorno**, que não brilhava, poderia ser vista no vidro irradiado.
- Isso demonstrou que a radiação seguia em linha reta, e Crookes a batizou de **raios catódicos**.



Experimentos de Thomson

[ver vídeo](#)

- Thomson fez vários experimentos com raios catódicos, descobrindo que eles são:

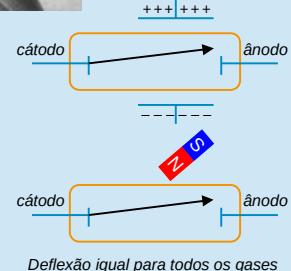


1) compostos de partículas carregadas negativamente (defletem com campo elétrico e magnético) e;

2) são observados em todos os gases, possuindo as mesmas características (massa e carga, pelo grau de deflexão do feixe) → faz parte de todos os átomos.

Visto que os raios catódicos transportam uma quantidade de eletricidade negativa, são desviados por uma força electrostática como se fossem negativamente carregados, e sofrem a ação de uma força, exatamente, como se fosse um corpo carregado negativamente, movendo-se ao longo do caminho seguido pelos raios, não vejo como fugir a explicação de que elas são cargas de eletricidade negativa transportadas por partículas de matéria.

J.J. Thomson



Raios canais

[ver vídeo](#)

- Eugene Goldstein (1886) modificou um pouco o experimento, usando um cátodo perfurado com **duas câmaras**, uma com o ânodo e a outra sem ele;
- Enquanto que raios catódicos atravessavam a câmara entre o cátodo e o ânodo, **raios no sentido oposto** atravessavam outra câmara. Esses raios, que levavam a uma coloração da câmara que dependia do gás, foram chamados de **raios canais**;
- Wilhelm Wien verificou que os raios canais sofriam deflexão com campos elétricos e magnéticos, e que o desvio é compatível com um feixe de **partículas positivamente carregadas**.



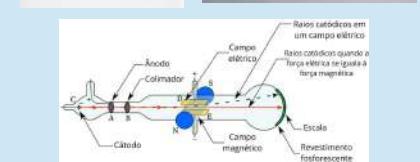
Experimentos de Thomson

[ver vídeo](#)

- Variando os campos possibilitou a Thompson determinar uma razão **carga/massa** do elétron como $e/m_e = 1 \cdot 10^{11} \text{ C kg}^{-1}$, a mesma para qualquer gás que usasse, indicando que o elétron é um componente fundamental de todos os átomos.



- Thomson também estudou os **raios canais**, verificando que são partículas positivas cuja relação carga/massa, além de muito menor do que a do elétron (indicando que sua **massa era muito maior**), era diferente para diferentes gases. Para se ter uma ideia, o gás que levava a raios catódicos com maior valor dessa razão era o raio canal do gás hidrogênio, de $1 \cdot 10^8 \text{ C kg}^{-1}$;



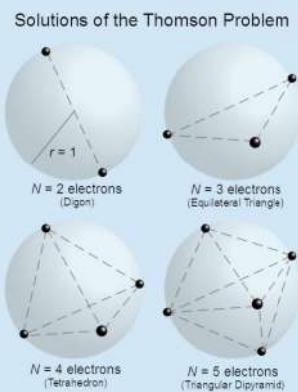
- Rutherford viria a chamar essa partícula de **próton**.



Deflexão diferente para gases distintos

Modelo de Kelvin-Thomson

- Baseado no fato de que a parte positiva dos átomos possuía relação carga/massa muito menor do que as partículas negativas, assumindo-se uma densidade de carga constante, a massa das partículas positivas devia ser muito maior que a das negativas;
- Thomson e Kelvin assumiram que isso implicava um maior volume das partículas com maior massa, e para dispor essas duas parcelas em um átomo neutro eles propuseram um modelo de **átomo divisível** em que quase todo o volume do átomo era carregado positivamente, de maneira uniforme, e os elétrons, em quantidade que neutralizaria a carga do átomo, ocuparia um volume muito menor, sendo quase cargas pontuais;
- Os elétrons ficavam localizados na esfera de modo a **minimizar sua repulsão eletrostática**. O arranjo dessas cargas na esfera é chamado de problema de "Thomson".



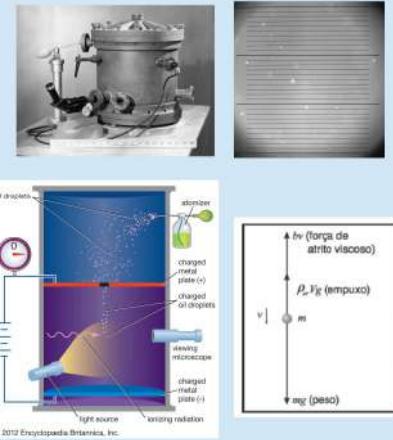
Exercícios

4) Qual pesquisador determinou que raios catódicos são partículas que trafegam em linha reta do cátodo ao ânodo de uma tubo de descarga?

- Goldstein;
- Thomson;
- Wien;
- Crookes;
- Millikan.

Experimento de Millikan

- Millikan propôs uma maneira engenhosa de **determinar a carga do elétron**: ele imaginou que gotículas de óleo pequenas poderiam perder elétrons ao serem atingidas por radiação (raios X, mas na próximo tópico).
- Essas gotas, ao caírem em queda livre, adquirem uma **velocidade constante** que pode ser medida e está associada a massa e o raio das gotas. Como algumas delas estão carregadas eletricamente (por mais ou menos elétrons), se um campo elétrico, paralelo ao campo gravitacional, é aplicado, é possível reduzir essa velocidade e medir uma **nova velocidade terminal**, esta agora alterada pelo **número de cargas negativas adicionais**.
- Fazendo essas medidas com várias gotas, Millikan determinou que todas são **múltiplos de um valor apenas**: $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C. Com essa estimativa ele pode também obter, aplicando a relação carga/massa determinada por Thomson anteriormente, a massa do elétron: $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ g.



Exercícios

5) Das observações abaixo, qual a incorreta?

- Elétrons são cargas negativas com massa relativamente pequena;
- Átomos são neutros porque contêm cargas negativas e positivas;
- Thomson determinou que raios canais são partículas positivas;
- Os experimentos de Crookes comprovaram o caráter particular dos raios catódicos;
- Com os experimentos de Millikan foi possível estimar a carga e a massa do elétron.

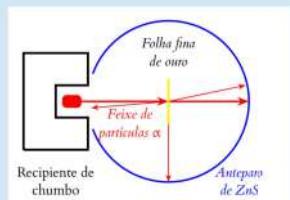
Exercícios

6) Sobre raios canais e raios catódicos, qual alternativa está correta:

- a) Raios canais são positivos e raios catódicos negativos;
- b) A massa dos raios canais é muito menor que a massa dos raios catódicos;
- c) Raios canais e raios catódicos possuem a mesma massa;
- d) Raios canais defletem na mesma intensidade na presença de um ímã;
- e) Raios catódicos defletem mais ou menos na presença de um campo elétrico a depender do gás.

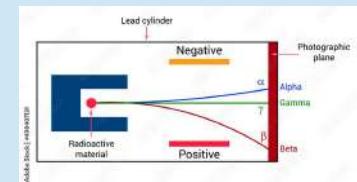
Experimentos de Geiger-Marsden

- Para entender melhor a estrutura do átomo, Geiger e Marsden realizaram um experimento em que uma **folha de ouro fina** seria bombardeada por **partículas alfa** de átomos de tório (radioativo). Ao redor da folha um anteparo de ZnS, que se ilumina ao ser atingido por partículas alfa, indicaria a trajetória das partículas depois de incididas na folha.
- O comportamento esperado **segundo o modelo de Thomson-Kelvin** era de que, considerando a densidade positiva constante dos átomos, **as partículas atravessariam o átomos de ouro de maneira mais ou menos uniforme**, pois a massa da carga positiva seria distribuída uniformemente.
- Porém, **o experimento indicou que** apesar da grande maioria das partículas exibirem esse comportamento, **uma fração pequena de partículas alfa foi rebatida e seguiram uma trajetória quase oposta**. Isso indicou que a maior parte do volume do átomo possui uma massa muito pequena, de modo que as partículas alfa não tiveram sua trajetória alterada na maioria dos casos.
- Por outro lado, a parte positiva ocupa um volume pequeno, mas uma massa elevada ao ponto de rebater as partículas alfa que se chocavam com tal fração do átomo.



Radioatividade

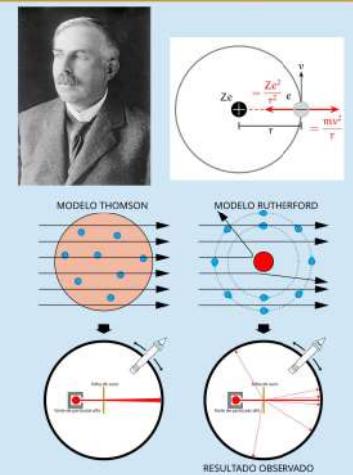
- Desde Becquerel sabia-se que algumas substâncias, como sais de urânio, polônio e rádio, emitiam um tipo de radiação espontaneamente. Esse fenômeno, chamado de **radioatividade**, e foi caracterizar três dessas radiações ionizantes (capazes de remover elétrons de átomos): **partículas α, β e γ**.
- Partículas alfa, ele determinou, **possuem grande massa relativa e carga positiva**; partículas beta, por outro lado, são negativas e muito mais leves; partículas gama, diferente das duas, é neutra e não possui massa determinável (mais tarde se observaria que é um tipo de luz muito energética).



Modelo de Rutherford

Isso era quase tão incrível como se alguém tivesse disparado uma bala de 15 polegadas em um tecido de papel e ela voltasse, acertando o autor do disparo.
E. Rutherford

- Rutherford, que supervisionava o experimento, frente a essas observações, indicou que haviam falhas no modelo de Kelvin-Thomson, e propôs o modelo de átomo divisível similar a um **modelo planetário**: a **região densa positivamente carregada**, que ele chamou de **núcleo**, fica no centro do átomo, e o restante, correspondente a quase todo o volume do átomo, orbitariam **elétrons em trajetórias circulares** numa região chamada de **eletrosfera**.
- No caso planetas orbitando em torno de uma estrela, a atração gravitacional é compensada pela força centrípeta repulsiva. No caso do átomo a atração coulombica (elétrons negativos por núcleos positivos) é contrabalanceada pela força centrípeta do movimento circular.



Bons estudos!

Apêndices

Referências das figuras

- <https://physics.nyu.edu/~phylab/Demos/updatedEquipment/E&M/crookesTubes.html>
- <https://www.crtsite.com/page7-2.html>

Filósofos

Heráclito acreditava que o fogo era o elemento primordial, do qual todas as coisas haviam surgido. Tales, como o leitor recordará, achava que todas as coisas eram feitas de água; Anaxímenes considerava o ar como o elemento primitivo; Heráclito preferia o fogo. Por fim, em pédocles sugeriu um compromisso diplomático, permitindo quatro elementos: terra, ar, fogo e água. A química dos antigos parou neste ponto. Nenhum novo progresso se verificou na ciência até

O tratado *Dos Céus* expõe uma teoria simples e agradável. As coisas que estão em baixo da Lua estão sujeitas à geração e decadência; da Lua para cima, tudo é ingerido e indestrutível. A Terra, que é esférica, está no centro do universo. Na esfera sublunar, todas as coisas são compostas de quatro elementos: terra, água, ar e fogo; mas há um quinto elemento, de que se compõem os corpos celestes. O movimento natural dos elementos terrestres é retílineo, mas o do quinto elemento é circular. Os céus são perfeitamente esféricos, e as regiões superiores são mais divinas do que as inferiores. As estrelas e os planetas não são compostos de fogo, mas do quinto elemento; seu movimento é devido ao das esferas a que estão ligados. (Tudo isto aparece, em forma poética, no *Paraíso de Dante*).

Fonte: Bertrand Russell, *História da filosofia ocidental*

Provando leis ponderais

Também chamado de modelo da bola de bilhar, o modelo de Dalton assume que átomos não possuem estrutura interna (o que veremos não ser verdade). Porém, suas hipóteses eram bastante satisfatórias na explicação das leis observadas:

- *Sobre Lei de Lavoisier:* se átomos não podem ser destruídos (postulado 1) nem convertidos em átomos de outros elementos (postulado 2), e possuem uma massa fixa característica, uma reação química, onde átomos simplesmente se realocam entre compostos, não pode mudar a massa de um sistema fechado;
- *Sobre Lei de Proust:* um composto é uma combinação em quantidades específicas de diferentes átomos (postulado 4), e como cada um possui uma massa particular (postulado 3), a massa de cada elemento constitui uma fração fixa da massa total.

Provando leis ponderais

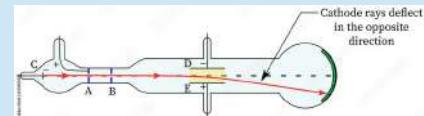
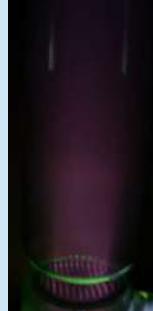
Dalton também previu a seguinte lei:

- **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 do outro elemento é uma razão entre números inteiros pequenos.

Que foi prevista com base nos postulados:

- *Sobre Lei das Proporções Múltiplas:* átomos de um elemento possuem a mesma massa (postulado 3) e são indivisíveis (postulado 1). As massas de um elemento B que se combinam com uma massa fixa de um elemento A fornecem uma razão de números inteiros pequenos porque números distintos de átomos de B se combinam com cada átomo A em diferentes compostos.

Figuras adicionais



Fonte: <https://www.crtsite.com/page7-2.html>

Figuras adicionais



Fonte: <https://physics.nyu.edu/~physlab/Demos/updatedEquipment/E&M/crookesTubes.html>

Pressão, Goldstein e Thomson

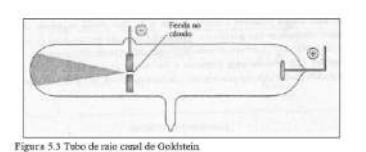
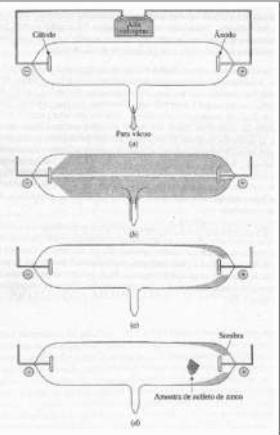


Figura 5.3 Tubo de raios catódicos de Goldstein

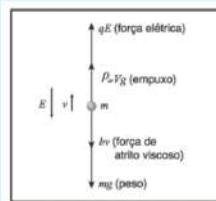
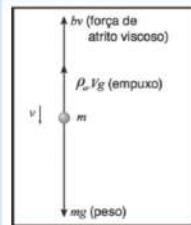


Figura 5.2 Deflagração dos raios catódicos por campos aplicados. (a) Carga elétrica. (b) Carga iônica.

Figura 5.1 Um tubo Crookes. O cátodo é o eletrodo carregado negativamente por uma fonte de alta voltagem, e o ânodo, o eletrodo carregado positivamente. (a) Antes de ser evacuado. (b) A pressões intermediárias. (c) Abaixas pressões. (d) A baixas pressões.

Fonte: Russell, Química Geral Vol. 1

Millikan



Em suma, os experimentos de Millikan levaram não apenas à constatação da existência de uma carga elementar na natureza – a carga do elétron –, mas permitiram também a primeira determinação precisa de seu valor, que, combinado com o resultado da eletrólise de Faraday, leva a uma determinação também precisa do número de Avogadro. Esses fatos levaram-no a afirmar que

[A carga elétrica] tem cada vez mais sido vista, não somente como a mais fundamental das constantes físicas ou químicas, mas também como aquela da mais suprema importância na solução de problemas numéricos da Física moderna.

Fonte: Caruso et al., Física Moderna - Origens Clássicas e Fundamentos Quânticos

TEORIA ATÓMICA: VISÃO MODERNA

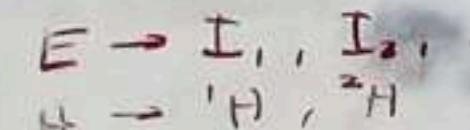
H	$^1_1 H$	$^2_1 H$	$^3_1 H$	$^4_2 Be$
MASSA ATÔMICA DO ELEMENTO	1,0079 m			
ABUNDÂNCIA RELATIVA DO ISÓTOPO L		R(%)		
MASSA (m)	1,0078	99,985		

$^1_1 H$	$^2_1 H$	$^3_1 H$
1,0136	0,015	

$$m(H) = \frac{99,985\% \cdot 1,0078 + 0,015\% \cdot 2,0136}{8} = (99,985 + 0,015)\%$$

? $H, H, ^3H?$

INSTÁVEIS
ISÓTOPOS ESTÁVEIS \rightarrow MASSA MÉDIA



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

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

ABUNDÂNCIA RELATIVA DO ISÓTOPO L 100

$$\begin{cases} ^1H \\ ^2H \end{cases} \quad \begin{cases} R(\%) \\ 1,0136 \end{cases}$$

$$m(H) = 0,99985 \cdot 1,0078 m + 0,015 \cdot 2,0136 m$$

$$= 1,0079 m$$

BORO	$^{10}_5 B$	10,01 m	20%
	$^{11}_5 B$	11,01 m	80%

$$m(B) = 10,81 m$$

ELETROSFERA

ELÉTRONS \rightarrow CARGA DO ÁTOMO (Q)

QUASE TODO O VOLUME DO ÁTOMO
QUASE NENHUMA MASSA DO ÁTOMO

$$\text{NÚMERO DE CARGA } (Q) = \frac{\text{Nº DE PRÓTONS}}{\text{Nº DE ELÉTRONS } (L)} -$$

$$Q = Z - L$$

NOTAÇÕES DO ÁTOMO:

$$L = Z - Q$$

$$\text{Ex.: } {}^{12}_6 C \quad Q=0$$

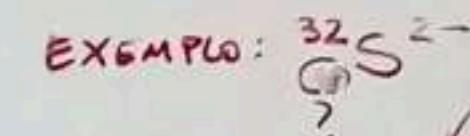
$$\begin{aligned} & \text{Nº PRÓTONS: } 6 \\ & \text{Nº NÉUTRONS: } 12 - 6 = 6 \\ & \text{Nº DE ELÉTRONS: } L = Z - Q = 6 \end{aligned}$$

ELEMENTOS DA TABELA

SE $Q \neq 0$: ÁTOMO = ÍON

$\begin{array}{l} A \\ Z \\ X^Q \end{array}$ $\left\{ \begin{array}{l} Q=0 \text{ ÁTOMO NEUTRO } Z=L \\ Q>0 \text{ ÁTOMO POSITIVO } Z>L \text{ CÁTION} \\ Q<0 \text{ ÁTOMO NEGATIVO } Z<L \text{ ANION} \end{array} \right.$

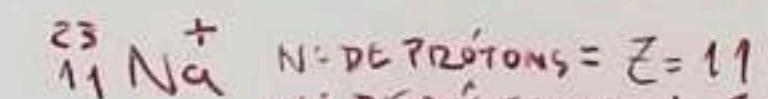
$Q \neq 0$ $\left\{ \begin{array}{l} +1, +2, +3, +4, \dots \\ -1, -2, -3, -4, \dots \end{array} \right.$



$$\text{Nº DE PRÓTONS} = Z = 16$$

$$\text{Nº DE NÉUTRONS} = A - Z = 32 - 16 = 16$$

$$\text{Nº DE ELÉTRONS} = Z - Q = 16 - (-2) = 18$$

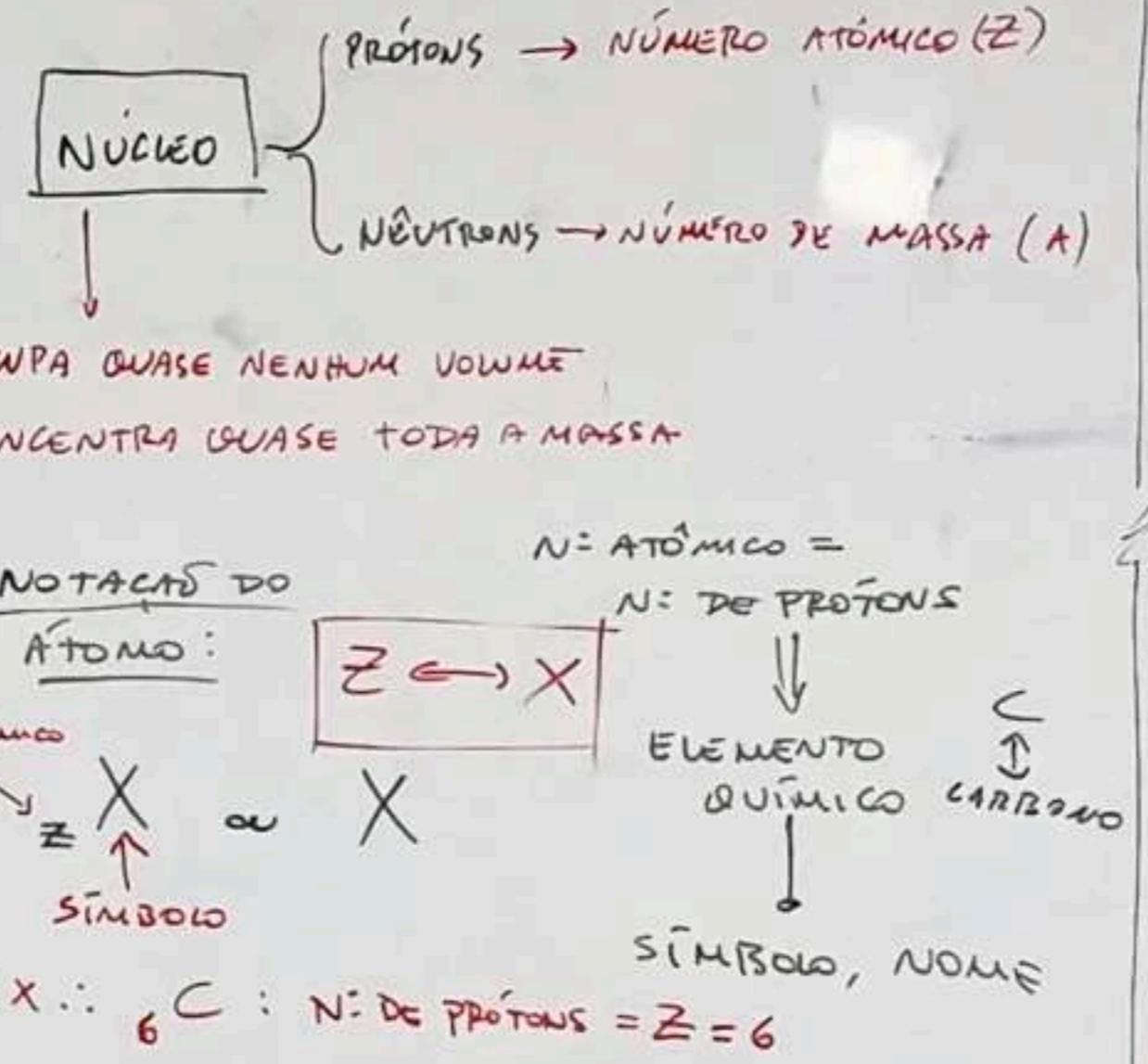
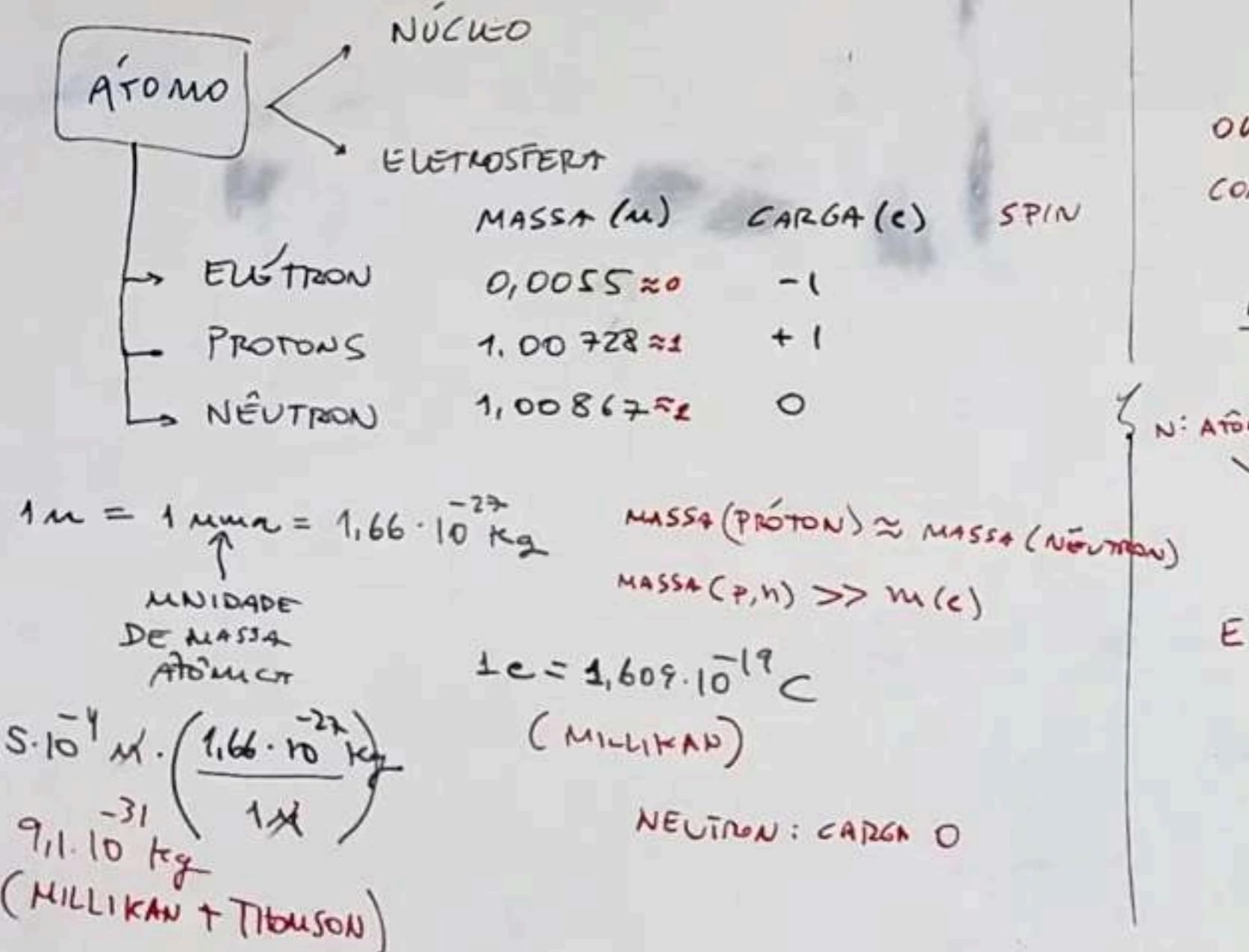


$$\text{Nº DE PRÓTONS} = Z = 11$$

$$\text{Nº DE NÉUTRONS} = A - Z = 23 - 11 = 12 \text{ (B)}$$

$$\text{Nº DE ELÉTRONS} = Z - Q = 11 - (+1) = 10$$

TEORIA ATÔMICA: VISÃO MODERNA



NÚMERO DE MASSA (A) = N: DE PRÓTONS + N: DE NÊUTRONS (B)

$A = Z + B$

NOTAÇÃO DO ÁTOMO:

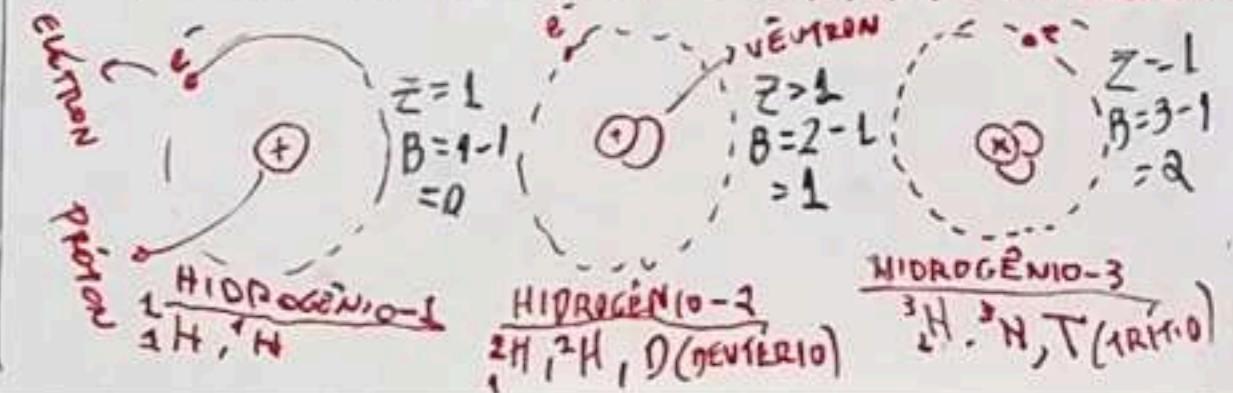
${}^A_Z X$ ou ${}^{A'}_{Z'} X'$

$B = A - Z$

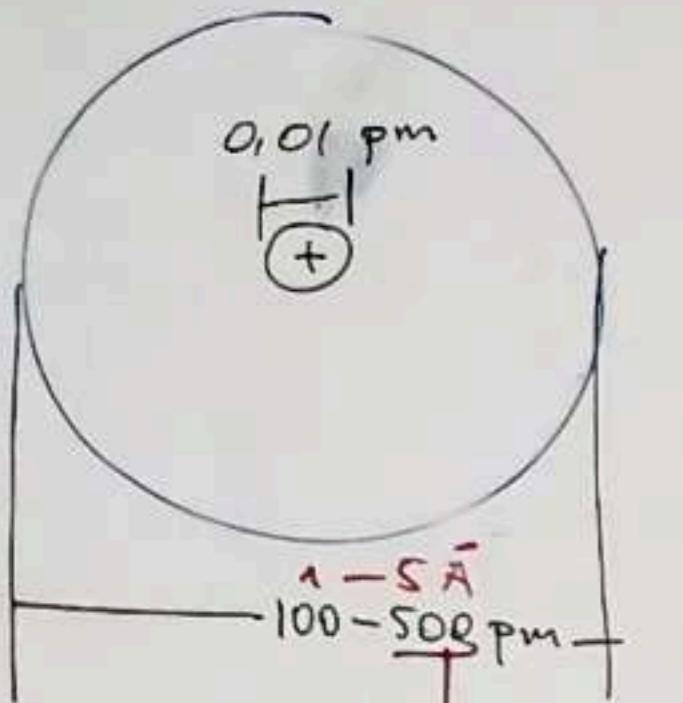
EX.: ${}^{12}_6 C$: N: PRÓTONS = $Z = 6$
 N: NÊUTRONS = $A - Z = 12 - 6 = 6$

${}^{23}_{11} Na$: N: DE PRÓTONS = $Z = 11$
 N: NÊUTRONS = $A - Z = 23 - 11 = 12$

ATÔMOS DE UM MESMO ELEMENTO (MESMO Z) PODEM POSSUIR B DISTINTOS → ISÓTOPOS DE UM ELEMENTO



ELETROSFERA { ELETRONS



$$\frac{1 \text{ pm}}{1 \text{ \AA}} = 10^{-12} \text{ pm}$$

$$\frac{1 \text{ pm}}{1 \text{ \AA}} = 10^{-12+10} = 10^{-2}$$

$$1 \text{ pm} = 10^{-2} \text{ \AA}$$

$$100 \text{ pm} = 1 \text{ \AA}$$

$$500 \text{ pm} \cdot \frac{1 \text{ \AA}}{100 \text{ pm}} = 5 \text{ \AA}$$

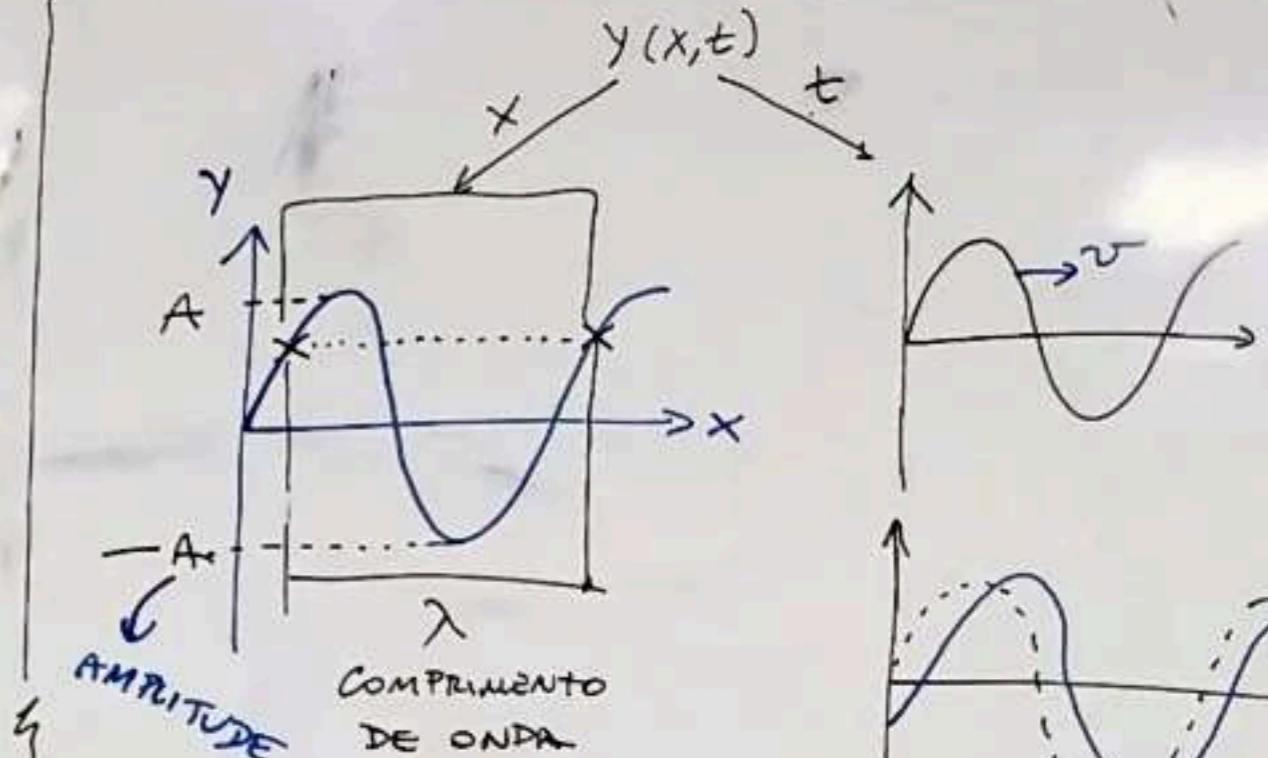
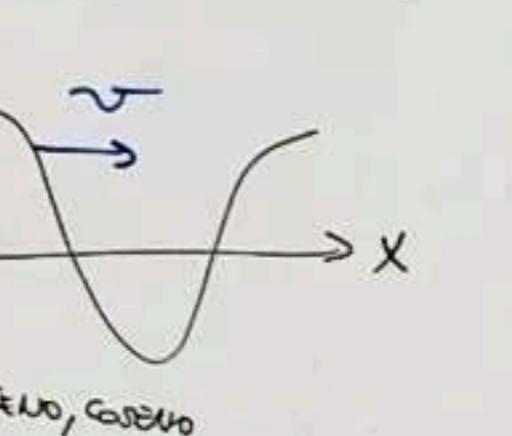
ÁTONO \leftrightarrow LUZ \rightarrow ONDA

ONDAS

- OSCILAÇÕES EM ALGUMA PROPRIEDADE REGULAR NO $\frac{\text{TEMPO}}{t}$ E NO $\frac{\text{ESPAÇO}}{x}$

$y(x, t)$: EQUAÇÕES / FUNÇÕES DE ONDA

EX.: CORDA, ONDA DO MAR, SOM
1D 2D 3D



ONDA PROGRESSIVA:
(ONDA QUE SE PROPAGA COM VELOCIDADE v)

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\lambda}{T}$$

$$v = \lambda f$$

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

$$f = \text{Hz}$$

T: PERÍODO DA ONDA
SE TEMPO EM S

RADIAGENS ELETROMAGNÉTICA

- WZ É ONDA

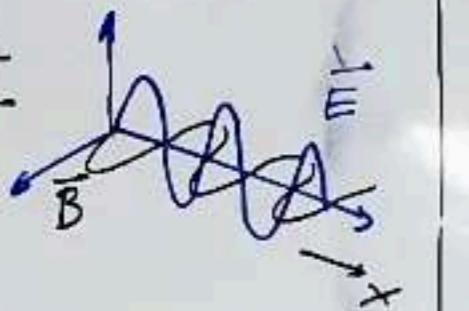
- SE PROPAGA NO VÁCUO

- COM VELOCIDADE CONSTANTE C.

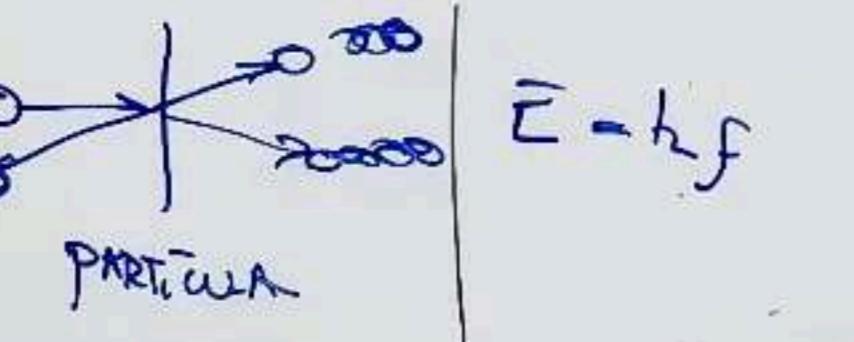
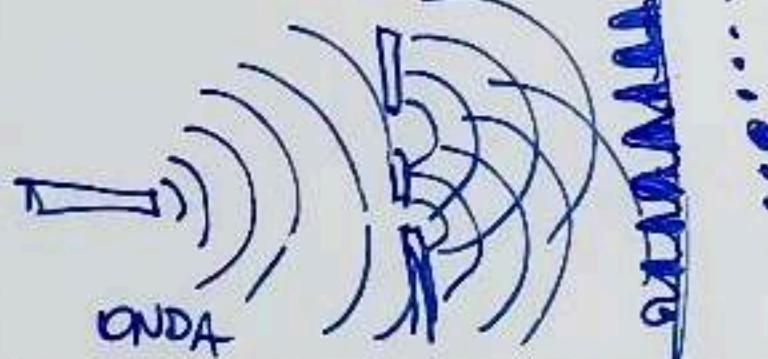
$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$\text{\AA} =$
ANGSTRON

$$c = \lambda f$$

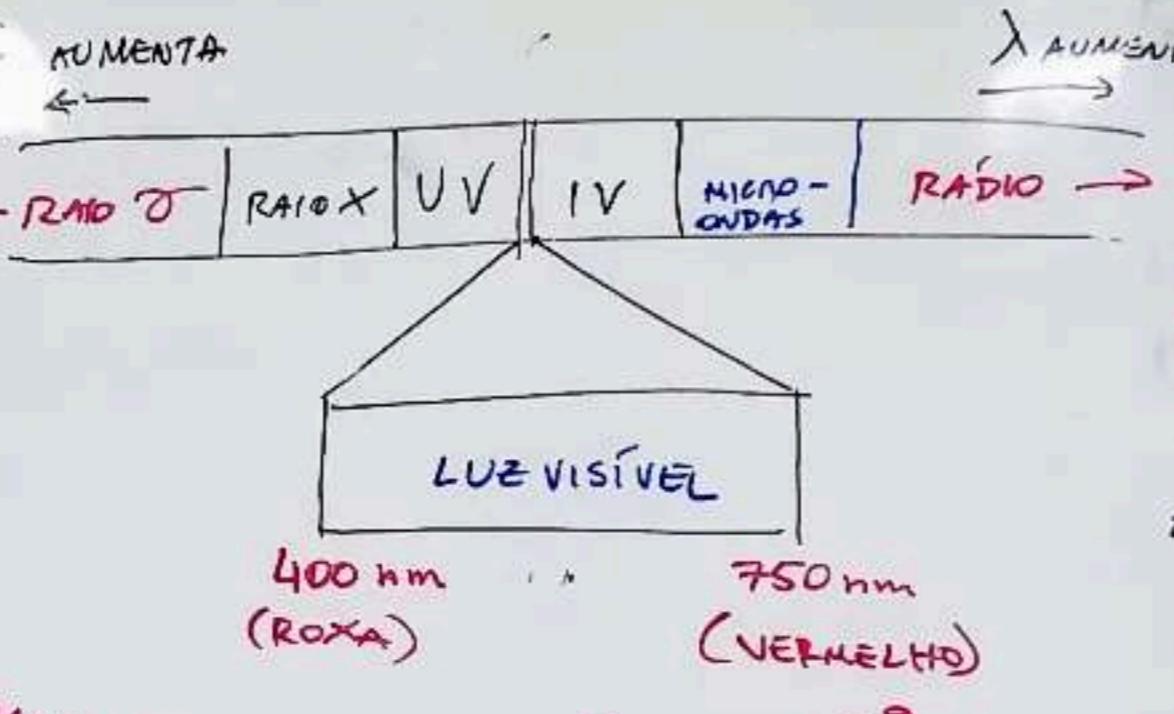


DOIS TIPOS
APENAS UM λ → MONOCROMÁTICA
MAIS DE UM λ → POLICROMÁTICA



$$\vec{E} = h f$$

- ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO $c = \lambda f$



1) CALCULE A FREQUÊNCIA DA LUZ VERMELHA.

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{750 \text{ nm} \cdot \frac{1 \text{ m}}{10^9 \text{ nm}}} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{750 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = \frac{3 \cdot 10^{17} \text{ Hz}}{750}$$

2) CALCULE O COMPRIMENTO DE ONDA DA LUZ
COM 10^{16} Hz , EM \AA

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{10^{16} \text{ Hz}} \cdot \frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 3 \cdot 10^{20} \text{ \AA}$$

$$0,004 \cdot 10^{17} \text{ Hz}$$

$$4$$

$$4 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

3) QUAL LASER POSSUI O MAIOR COMPRIMENTO DE ONDA,
O VERDE OU O VERMELHO? QUAL POSSUI MAIOR
FREQUÊNCIA?

VERMELHO
VERDE

MAIOR

MAIOR f

PRIMÓRDIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

FÍSICA CLÁSSICA
NEWTON \Rightarrow MECÂNICA
MAXWELL \Rightarrow ELETROMAG.
INCAPAZES DE EXPLICAR CERTOS FENÔMENOS NO FINAL DO SÉC. XIX ENTRE ELES:

- ~ RADIÇÃO DO CORPO NEGRO
- ~ EFEITO FOTOELÉTRICO
- ~ LINHAS ESPECTRAIS

* RADIÇÃO DE CORPO NEGRO

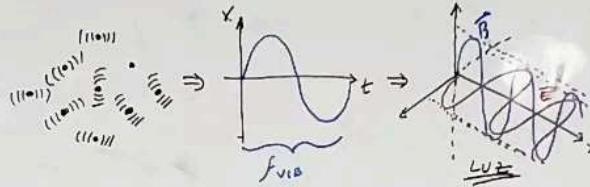
CORPOS AQUECIDOS EMITEM LUZ.

- FERRO AQUECIDO
- FUMO EM VELAS
- ESTRELAS

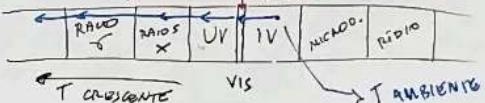
CORPO NEGRO: MODELO USADO PARA ENTENDER FENOM.

- NÃO REFLETE OU TRANSMITE LUZ
- NEGRO QUANDO FRIO, MAS EMITE LUZ QUANDO QUENTE
- BOM MODELO PARA CORPOS EM ALTA TEMPERATURA
- ~ EMISSÃO SE DÁ PELA VIBRAÇÃO DE PARCÍCULAS: PARTE DA ENERGIA SE TORNAM LUZ

SISTEMA DE PARCÍCULAS
ONDE A ENERGIA TOTAL É A SOMA DAS ENERGIAS DAS PARCÍCULAS



EM TEORIA: MAIOR $T \rightarrow$ MAIOR $f_{VIB} \rightarrow$ LUZ COM MAIOR FREQUÊNCIA



NA PRÁTICA: MESMO COM T CRESCENTE, LUZ EMITIDA TEM FREQUÊNCIA MÁXIMA NO UV

MAX PLANCK (1900) CONSEGUIU EXPLICAR ISSO ASSUMINDO:

① HIPÓTESE QUÂNTICA:

- ENERGIA DAS VIBRAÇÕES NÃO É CONTÍNUA E SIM DISCRETA
- A ENERGIA TOTAL É A SOMA DE UM NÚMERO INTEIRO (n) DE PACOTES ("QUANTUM") DE ENERGIA. SERIA ENTÃO UM MÚLTIPLO DE UMA ENERGIA MÍNIMA E_0

$$E_{VIB} = E_r \rightarrow n \cdot E_0 \quad E_0 = h f_{VIB}$$

② RELAÇÃO COM A FREQUÊNCIA:

A ENERGIA MÍNIMA É PROPORCIONAL A FREQUÊNCIA DA VIBRAÇÃO DOS ÁTOMOS

$$E_0 = h f_{VIB} \quad \text{CONST. DE PLANCK: } 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

COM ESSAS OBSERVAÇÕES PLANCK MOSTROU:

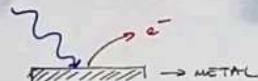
- OSCILADORES (CORPOS QUE VIBRAM) TROCAM ENERGIA
- MESMO QUE NO CONJUNTO MUITOS TENTAM ALTA ENERGIA, ELES RAPIDAMENTE TRANSFEREM PARA OS OUTROS
- NO EQUILÍBRIO POUcos POSSUEM POUCO OU MUITA ENERGIA (FREQUÊNCIA): A MAIORIA FICA PRÓXIMO A UMA MÉDIA
- ESES SÃO OS QUE GERAM A LUZ OBSERVADA



PRIMÓDIOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

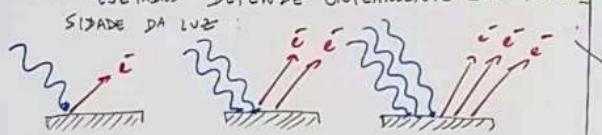
EFEITO FOTOELÉTRICO

EM CERTAS CONDIÇÕES É POSSÍVEL GERAR CORRENTE ELÉTRICA AO INCIDIR LUZ SOBRE UM METAL

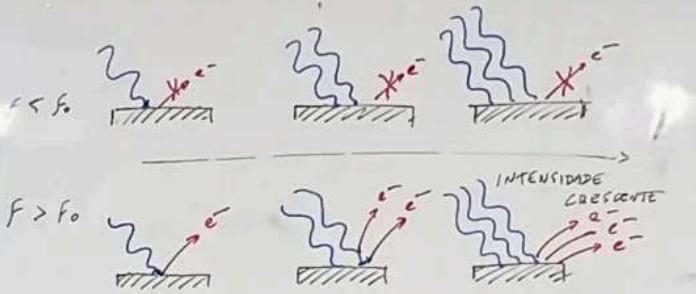


SEGUNDO A FÍSICA CLÁSSICA:

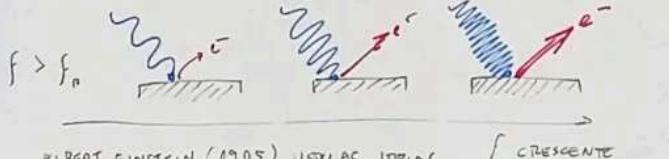
EM TEORIA: QUANTIDADE DE ENERGIA DOS ELÉTRONS EJETADOS DEPENDE UNICAMENTE DA INTENSIDADE DA LUZ



NA PRÁTICA: REMOÇÃO DE ELÉTRON DEPENDE DA FREQUÊNCIA f , E NÃO DA INTENSIDADE. LUZ ABAAIXO DE FREQUÊNCIA MÍNIMA f_0 NÃO REMOVE ELÉTRON. ACIMA DESSE MÍNIMA, AUMENTAR A INTENSIDADE AUMENTA O NÚMERO DE ELÉTRONS LIBERADOS



OBSERVOU-SE TAMBÉM QUE CASO $f > f_0$, QUANTO MAIOR A FREQUÊNCIA MAIOR A ENERGIA CINÉTICA DOS ELÉTRONS



PILBERT EINSTEIN (1905) USOU AS IDEIAS DE PLANCK PARA EXPLICAR TAL FENÔMENO

① HIPÓTESE QUÂNTICA:

- A ENERGIA DA RADIACAO ELETROMAGNETICA É DISCRETA
- A ENERGIA TOTAL É IGUAL A SOMA DE UM NÚMERO INTEIRO DE PACOTES
- A ENERGIA DA LUZ É MÚLTIPLO DE UMA ENERGIA MÍNIMA

$$E_{LUZ} = hE_0$$

- EINSTEIN SUGERIU QUE UM QUANTUM DE ENERGIA LUMINOSA É A ENERGIA DE UMA PARCÍCULA QUE ELE NOMEOU PÓTON

$$E_0 = E_{PÓTON}$$

② RELAÇÃO COM A FREQUÊNCIA:

- A ENERGIA DO PÓTON, EM ANÁLOGIA A PROPOSTA DE PLANCK, É PROPORCIONAL A SUA FREQUÊNCIA

$$E_{PÓTON} = h f_{PÓTON}$$

COM TAL OBSERVAÇÃO ELE DEPUXOU:

- ELÉTRONS SÃO ARRANCADOS APENAS SE O PÓTON POSSUI FREQUÊNCIA MAIOR QUE UMA MÍNIMA. MAIOR INTENSIDADE AUMENTA O NÚMERO DE PÓTONS, MAS AINDA COM ENERGIA MENOR DO QUE A REQUERIDA.

- CHAMOU A ENERGIA PARA RETIRAR O ELÉTRON DE UM METAL DE FUNÇÃO TRABALHO: Φ

$$\Phi = h f_0$$

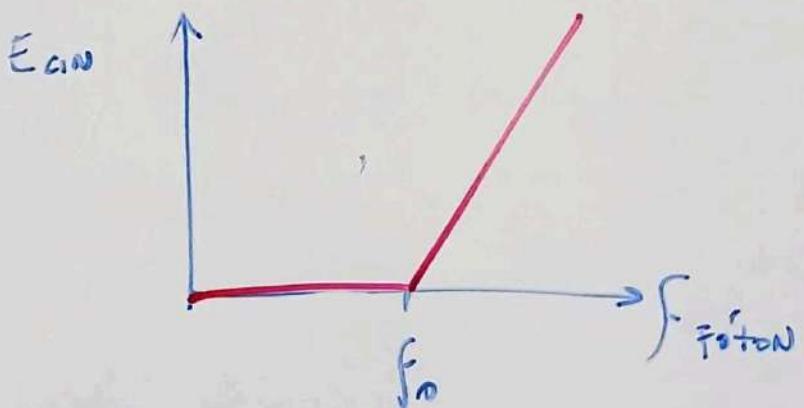
- SE $f > f_0$, QUANTO MAIOR A INTENSIDADE MAIS ELÉTRONS SÃO REMOVIDOS

PRIMÓRDIOS II MECÂNICA QUÂNTICA

- A ENERGIA QUE SOBRA QUANDO $f_{\text{fóton}} > f_0$ ($E_{\text{fóton}} > \phi$) É CONVERTIDA EM ENERGIA CINÉTICA (VELOCIDADE) DO ELÉTRON:

$$E_{\text{CIN}} = E_{\text{fóton}} - \phi = h f_{\text{fóton}} - h f_0$$

- SE $f_{\text{fóton}} < f_0$, E_{CIN} É ZERO, E CASO f AUMENTE A ENERGIA CINÉTICA CRESCE LINEARMENTE COM A FREQUÊNCIA:



1) CALCULE A FREQUÊNCIA (Hz) DO FÓTON DE UV (360 nm)

$$\lambda = 360 \text{ nm}$$

$$c = \lambda f \Rightarrow f = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{360 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = \frac{3 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}}{(360)^{-1}} = 8,3 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

2) LUZ LARANJA POSSUI $\lambda = 641 \text{ nm}$. QUAL A ENERGIA DE UM FÓTON DESSA LUZ? SE UM PULSO DE LASER EMITE $1,3 \cdot 10^{-2} \text{ J}$ DE ENERGIA POR PULSO, QUANTOS FÓTONS SÃO EMITIDOS?

$$\boxed{E = hf} = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}}{641 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = \frac{6,63 \cdot 3 \cdot 10^{-34+9} \text{ J}}{641 \cdot 10^{14} \text{ Hz}} = 0,0083 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\boxed{c = \lambda f} \quad f = c/\lambda = 0,0083 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

3) SÃO NECESSÁRIOS 250 KJ PARA EJECTAR E DE UMA CERTA SUPERFÍCIE METÁLICA. QUAL O MAIOR COMPRIMENTO DE ONDA DE LUZ (EM nm) QUE PODE SER USADO PARA EJECTAR E DA SUPERFÍCIE DESSE METAL VIA EFEITO FOTOCÉTRICO?

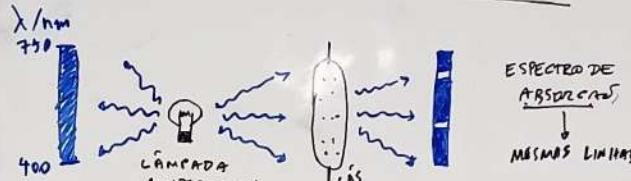
$$E = 250 \text{ kJ} = hf \leq \frac{hc}{\lambda} \quad c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

$$\lambda = \frac{hc}{E}$$

$$c = \lambda f \quad E = hf = h \cdot \left(\frac{c}{\lambda} \right) \geq \frac{hc}{\lambda}$$

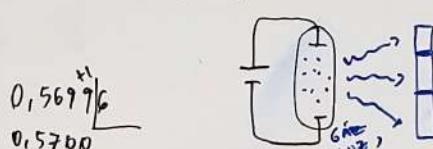
$$\therefore f = \frac{c}{\lambda} \quad \boxed{f = \frac{c}{\lambda}}$$

* LINHAS ESPECTRAIS E MODELO DE BOHR

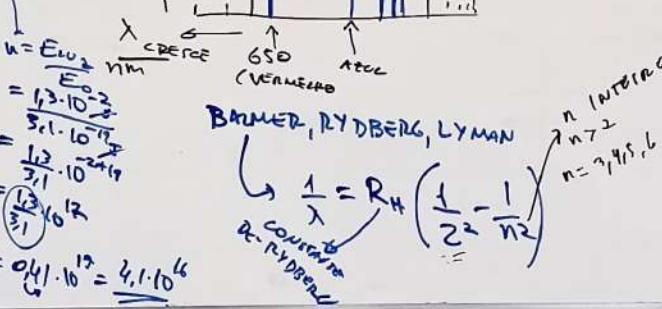


ESPECTRO DE ABSORÇÃO
↓
MESMAS LINHAS

ESPECTRO DE EMISSÃO



• ESPECTRO DE EMISSÃO DO Ar₂



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

$$\text{LYMAN: } \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$n = 1$ INTEIRO

$n > 1$

$n = 2, 3, 4, \dots$

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

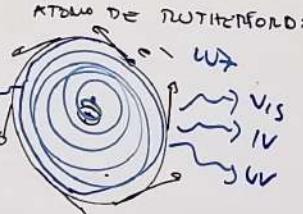
$$\text{LYMAN: } n_1 = 1 \\ n_2 = 2, 3, 4, \dots$$

$n_1 = 1$ INTEIRO

$n_2 = 2, 3, 4, \dots$

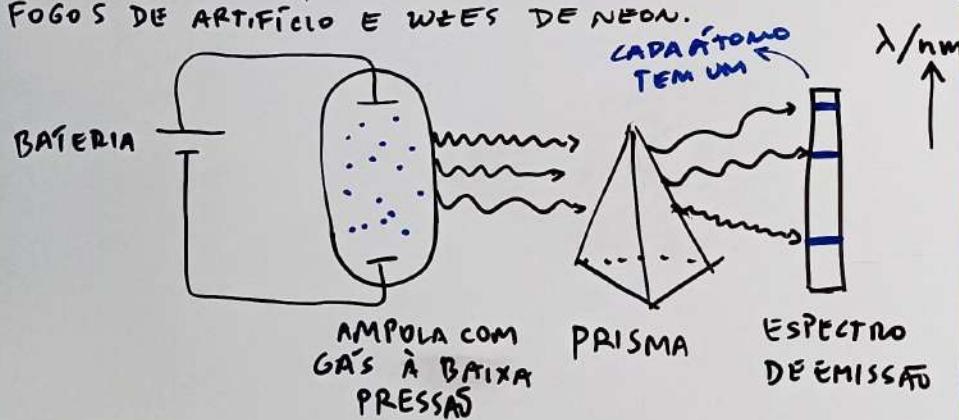
$$\text{BALMER: } n_1 = 2 \\ n_2 = 3, 4, 5, \dots$$

$$\text{RYDBERG: } n_1 = 3 \\ n_2 = 4, 5, 6, \dots$$



LINHAS ESPECTRAIS

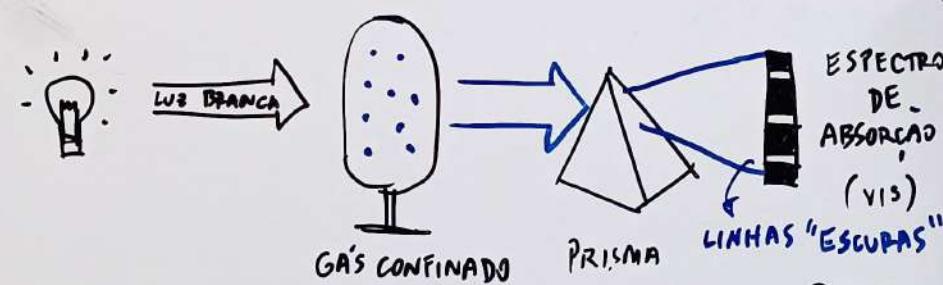
- GASES CONFINADOS EMITEM LUZ CARACTERÍSTICA QUANDO SUBMETIDOS A UMA CORRENTE ELÉTRICA.
- SE LUZ EMITIDA É DECOMPOSTA NOS COMPRIMENTOS DE ONDA QUE A FORMAM (POR MEIO DE UM PRISMA, POR EXEMPLO) GERA-SE UM ESPECTRO DE EMISSÃO PRÓPRIO DO GÁS. ESSE PRINCÍPIO ESTÁ POR TRÁS DA ILUMINAÇÃO PÚBLICA (LAMPADAS DE SÓDIO), FOGOS DE ARTIFÍCIO E LÂMPADAS DE NEON.



- EM UM EXPERIMENTO DIFERENTE, INCIDE-SE LUZ BRANCA NO MESMO GÁS CONFINADO. TAL LUZ APRESENTA TODOS OS DIFERENTES COMPRIMENTOS DE ONDA NA FAIXA DO VISÍVEL. SE USARMOS UM PRISMA, VEREMOS QUE TODAS AS CORES DO ARCO-ÍRIS SE REVELAM NO ESPECTRO DE EMISSÃO, UM CONTÍNUO DE LUZ DE DIFERENTES ENERGIAS, DE 400 nm A 750 nm.



- SE ESSA LUZ ATRAVESSA O GÁS E DEPOIS TEM SEUS COMPRIMENTOS DE ONDA SEPARADOS, VERIFICA-SE QUE AO INVÉS DO CONTÍNUO DE LUZ ESPERADO EXISTEM ALGUNS COMPRIMENTOS DE ONDA SEM COR. AS MARCAS ESCURAS NO LUGAR MOSTRAM QUE OS FÓTONS DESSES COMPRIMENTOS DE ONDA FORAM ABSORVIDOS PELO GÁS. NÃO POR COINCIDÊNCIA OBSERVA-SE QUE ESSAS LINHAS NO ESPECTRO DE ABSORÇÃO SÃO AS MESMAS ENCONTRADAS NO ESPECTRO DE EMISSÃO. ISSO OCORRE PORQUE O MESMO FENÔMENO PERMEIA OS DOIS.



- ESPECTROS DE ABSORÇÃO FORAM USADOS PARA DETERMINAR A PRESENÇA DE HÉLIO NO SOL, E DE OUTROS ELEMENTOS EM ESTRELAS E PLANETAS.

* ESPECTRO DE EMISSÃO DO HIDROGÉNIO

O ESPECTRO DE EMISSÃO DO HIDROGÉNIO DESEMPENHOU UM PAPEL IMPORTANTE NA EVOLUÇÃO DO NOSSO ENTENDIMENTO DO ÁTOMO, POIS FOI NELE QUE UM MAIOR EFSFORO FOI EMPREENDIDO PARA EXPLICAR A RELAÇÃO MATEMÁTICA QUE GERAVA SEU ESPECTRO DE EMISSÃO. SUA EMISSÃO OCORRE NÃO SÓ NO VISÍVEL (VIS), MAS TAMBÉM EM FAIXAS DO ULTRAVIOLETA (UV) E DO INFRAREMELHO (IR). NOTADAMENTE, JOHANN BALMER ANALISOU AS LINHAS DO HIDROGÉNIO NA REGIÃO VISÍVEL DO ESPECTRO, QUE POSSUI UMA EM 650 nm (VERMELHO), OUTRA EM 480 nm (AZUL) E VÁRIAS OUTRAS ABALHO DE 430 nm (VISITAS). ELE NOTOU QUE PODERIA PREVER CADA COMPRIMENTO DE ONDA OBSERVADO A PARTIR DA SEGUINTE EQUAÇÃO:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

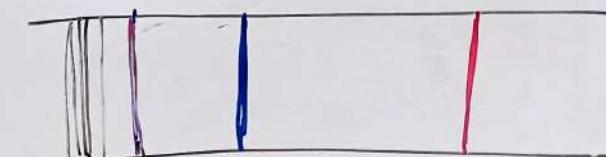
$n = 3, 4, 5, \dots$

\rightarrow CONSTANTE DE RYBERG: $1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

SÉRIE DE BALMER

LINHAS DO ESPECTRO DE EMISSÃO DO H

$\longrightarrow \lambda / \text{nm}$



$$\frac{1}{\lambda_3} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_2} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right)$$

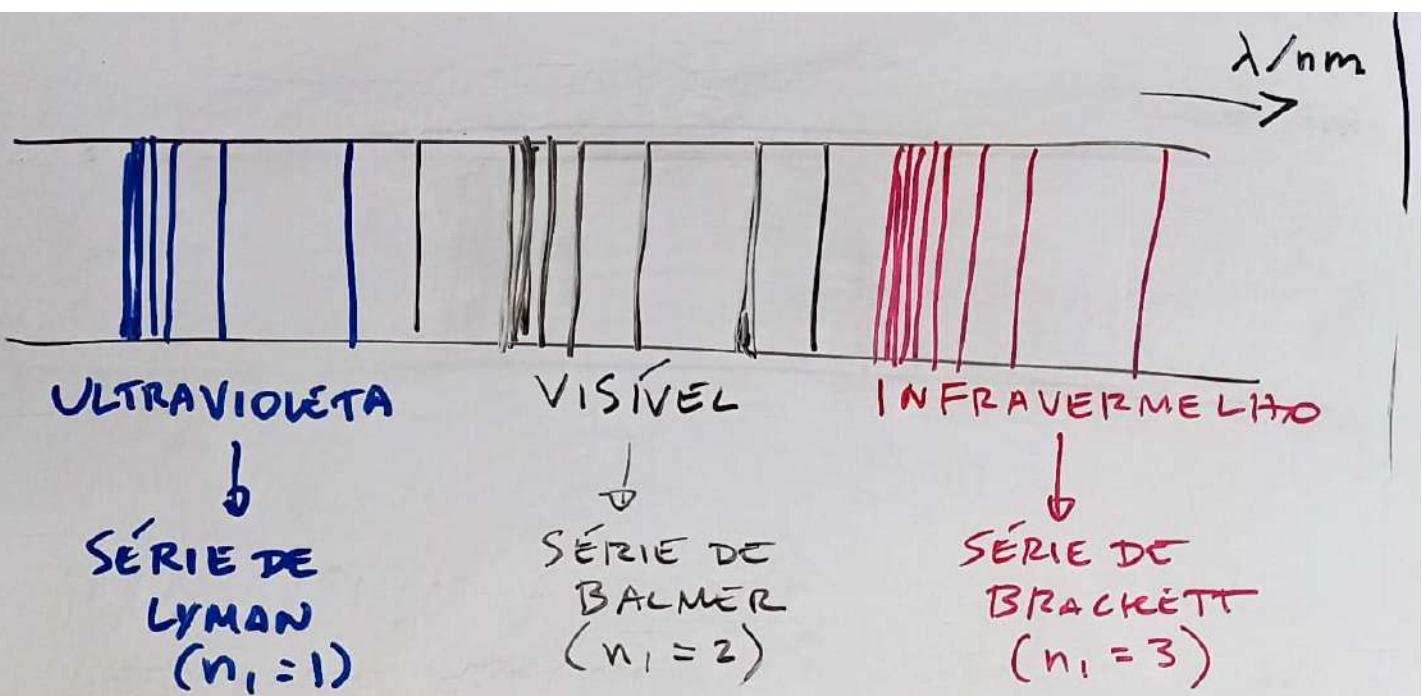
$$\frac{1}{\lambda_1} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R_H \left(\frac{3^2 - 2^2}{3^2 \cdot 2^2} \right) = R_H \left(\frac{9-4}{9 \cdot 4} \right) = \frac{5 R_H}{36}$$

$$\lambda_1 = \frac{36}{5 R_H} = \frac{36}{5 \cdot 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}} \cdot \left(\frac{10 \text{ nm}}{1 \text{ m}} \right) = 656 \text{ nm}$$

POSTERIORMENTE NOTOU-SE QUE A EQ. DE BALMER PODERIA SER APLICADA À SÉRIES EM OUTRAS REGIÕES DO ESPECTRO DE EMISSÃO DO HIDROGÉNIO: BASTAVA MUDAR O FATOR 2 NA PRIMEIRA FRACAO, E CONTAR OS NOVOS VALORES DE m (ANÁLOGO AO n) A PARTIR DESTE. POR EXEMPLO, NA SÉRIE DE LYMAN, DE EMISSÃO NO UV SUBSTITUI-SE TAL FATOR POR 1, E CONSIDERA-SE m=2, 3, ... (m INTEIRO MAIOR QUE 1):

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$m = 2, 3, 4, \dots$



- DE UMA MANEIRA GERAL:

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

n_1, n_2 INTEIROS
 $n_2 > n_1$

LYMAN: $n_1 = 1, n_2 = 2, 3, 4, \dots$

BALMER: $n_1 = 2, n_2 = 3, 4, 5, \dots$

BRACKETT: $n_1 = 3, n_2 = 4, 5, 6, \dots$

- APESAR DE UM FEITO NOTÁVEL, A QUESTÃO DO PORQUÊ ESSES PADRÓES MATEMÁTICOS ERAM VERIFICADOS NESTE CASO ESPECÍFICO DO HIDROGÊNIO, E TAMBÉM EM OUTROS, AINDA ESPERARIA ATÉ A CONTRIBUIÇÃO DE NIELS BOHR.

PUTHERFORD → LIGA ENTRE OS 2
INSERIBILIDADE ATÔMICA

CALCULE O COMPRIMENTO DE ONDA DA PRIMEIRA LINHA DO ESPECTRO DE EMISSÃO DO HIDROGÉNIO ($n=2$) NO VISÍVEL.

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = R_H \left(\frac{4-1}{4} \right) = \frac{3R_H}{4}$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

BALMER

$n = 1, 2, 3, \dots$

MODELO DE BOHR

$$\lambda = \frac{4}{3} R_H \cdot 10^2$$

$$= \frac{4}{3} \cdot 1,097 \cdot 10^{-3} \text{ m} = 1,097 \cdot 10^{-2} \text{ nm} = 1097 \text{ nm}$$

PARA EXPLICAR A ESTABILIDADE DO ÁTOMO COM UMA CARGA NEGATIVA AO REDOR DE UMA POSITIVA, NIELS BOHR SE INSPIROU NAS DESCOPERTAS ANTERIORES (PLANCK E EINSTEIN):

① HIPÓTESE QUÂNTICA:

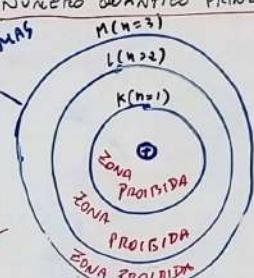
O MOMENTO ANGULAR DO ELÉTRON SÓ PODE ASSUMIR VALORES DISCRETOS, MÚLTIPLOS DE $\frac{\hbar}{2\pi}$

$$L = m\sigma r = n\hbar \rightarrow \text{NÃO SABIA PORQUE FUNCIONAVA!}$$

$$\hookrightarrow n = 1, 2, 3, \dots$$

- ISSO IMPLICA QUE:

- EXISTEM ÓRBITAS ESTACIONÁRIAS ONDE O ELÉTRON PODE TRAFEGAR SEM PERDER ENERGIA
- OUTRAS ÓRBITAS SÃO PROIBIDAS (INACESSÍVEIS), O QUE EVITA O COLAPSO DAS CARGAS (E DO ÁTOMO)
- CADA ÓRBITA PASSOU A SER CHAMADA DE CAMADA (K, L, M, \dots) DE ACORDO COM O VALOR DE n , O NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL



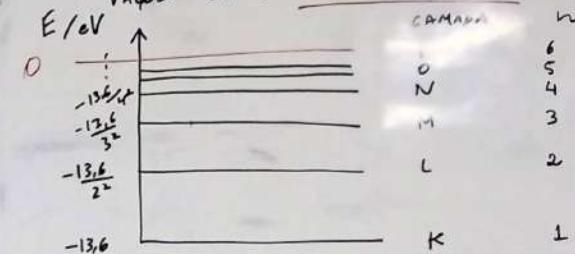
TANTO A ENERGIA QUANTO A DISTÂNCIA SÃO AGORA FUNÇÕES DE n E CARACTERÍSTICAS DAS CAMADAS. A ENERGIA, POR EXEMPLO:

$$E(n) = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ (ÁTOMO DE H)

$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

- PORTANTO QUANDO MAIOR O n , MENOS NEGATIVA É A ENERGIA E MENOR O SEU MÓDULO. PODEMOS REPRESENTAR ESSAS OBSERVAÇÕES EM UM DIAGRAMA DE ENERGIA:



QUAL A ENERGIA DO ELÉTRON NA CAMADA M DO ÁTOMO DE H SEGUNDO O MODELO DE BOHR?

$$E(3) = -\frac{13,6 \text{ eV}}{3^2} = -1,51 \text{ eV}$$

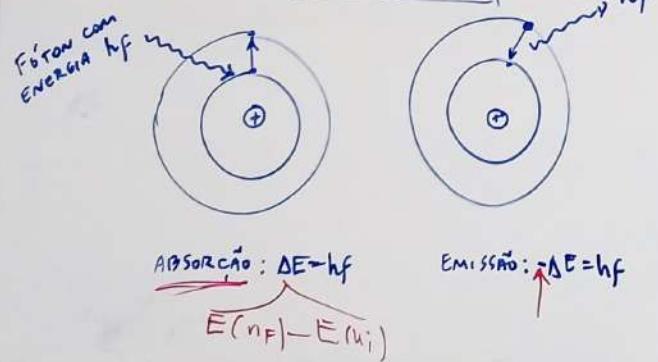
$n = 3$

② RELAÇÃO COM A FREQUÊNCIA

- UM ELÉTRON PODE MIGRAR DE UMA ÓRBITA PARA A OUTRA, O QUE CHAMAMOS DE TRANSIÇÃO ELETRÔNICA. PARA QUE ISSO ACONTEÇA UM FÓTON COM ENERGIA IGUAL À DIFERENÇA DAS ENERGIAS DOS ORBITAIS.

$\Delta E = E(n_f) - E(n_i)$ (COM $n_f > n_i$) DEVE SER ABSORVIDO OU PERDIDO. ASSIM, PARA UM FÓTON DE FREQUÊNCIA f

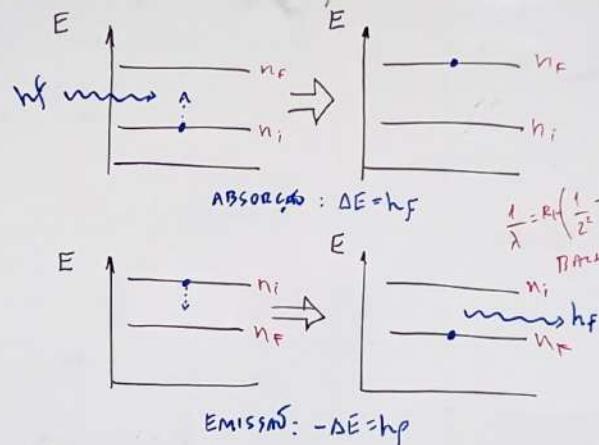
$$\Delta E = hf = \frac{hc}{\lambda}$$



$$hf \left\{ \begin{array}{l} \Delta E, \text{ ABSORÇÃO} \\ -\Delta E, \text{ EMISSÃO} \end{array} \right.$$

PARA GARANTIR
QUE $f (E)$ SEJA
POSITIVA

- PODEMOS REPRESENTAR ESSAS TRANSIÇÕES EM UM DIAGRAMA DE NÍVEIS DE ENERGIA



- USANDO essa RELAÇÃO ENTRE ΔE E FREQUÊNCIA, PODE PREDIZER A EQ. PAS LINHAS ESPECTRAIS DO H, E INTERPRETAR n_i E n_f COMO OS NÚMEROS QUÂNTICOS PRIN-

CIPAIS DAS CAMADAS INICIAL E FINAL NA ABSORÇÃO/EMISSÃO.
ELA TAMBÉM PODE REVERSA

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

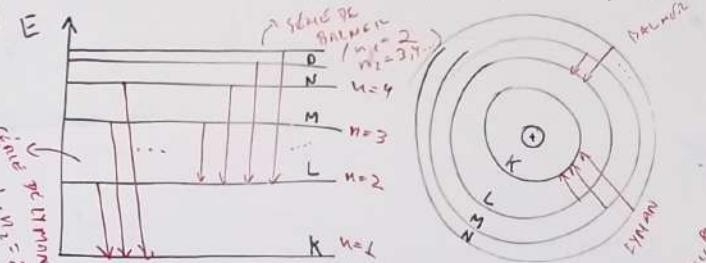
$$n_i = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_f > n_i$$

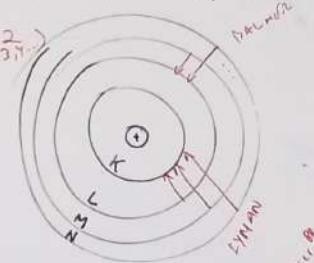
$$-13,6 \text{ eV} - \left(\frac{-13,6 \text{ eV}}{n_f^2} \right) = 13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = \frac{hc}{\lambda}$$

ESPECTROS DE
EMISSÃO

- A SÉRIE DE BALMER, POR EXEMPLO, ENVOLVE TRANSIÇÕES DA
CAMADA M ($n=3$), N ($n=4$), O ($n=5$), ..., A UMA MESMA
CAMADA FINAL: A L ($n=2$). A SÉRIE DE LYMAN CORRESPONDE
ÀS TRANSIÇÕES L \rightarrow K ($2 \rightarrow 1$), M \rightarrow K ($3 \rightarrow 1$), ETC.



DETERMINAR OS DOIS PRIMEIROS COMPRIMENTOS DE Onda DA SÉRIE DE BRACKETT ($n_i=3$), EM A



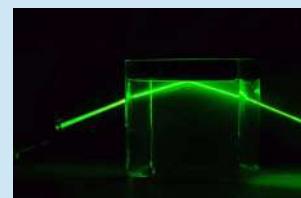
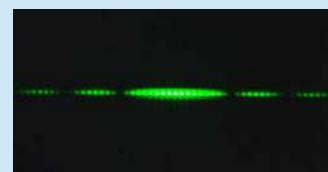
Química

Mecânica Quântica Moderna

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

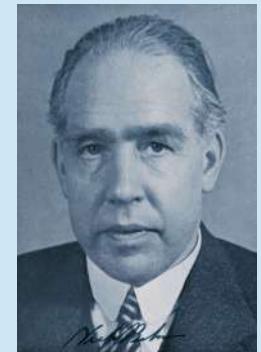
Dualidade onda-partícula

- Tais limitações se devem, em parte, a outra propriedade muito importante no domínio de partículas tão pequenas: a [dualidade onda-partícula](#);
- Ondas e partículas apresentam propriedades muito diferentes:
 - Onda:** posição, momento e massa indefinidos.
 - Partículas:** Posição, momento e massa definidos.
- A luz exibe propriedades de onda e de partícula:
 - Propriedades de onda: interferência, difração;
 - Propriedades de partícula: efeito Tyndall, refração (posição, trajetória), efeito fotoelétrico, luminescência (momento mínimo)



Reflexões sobre o modelo de Bohr

- Inovações trazidas pelo modelo de Bohr:
 - Explicação e cálculo de espectros de absorção/emissão de átomos com um elétron, chamados de hidrogenóides;
 - Uso bem sucedido da hipótese quântica na descrição da estrutura dos átomos.
- Limitações do modelo de Bohr
 - Não é aplicável para átomos com mais de um elétron;
 - Não descreve substâncias com mais de um átomo;
 - Não explica a diferença de intensidade entre as linhas, entre outros.



Eq. de Le Broglie

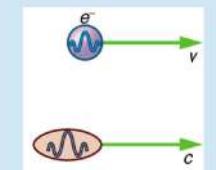
- Usando a Eq. de Planck ($E = hf$) e a de Einstein ($E=pc$), que relaciona a energia e o momento da luz, Le Broglie uniu em uma só equação a característica corpuscular (momento) e ondulatória (comprimento de onda) da luz:

$$\lambda = h/p$$

- Le Broglie foi além e [propôs que a relação era válida para qualquer corpo](#) com massa m e velocidade v , possuindo propriedades de partícula e de onda simultaneamente:

$$\lambda = h/p = h/mv$$

- A confirmação da [Eq. de Le Broglie](#) veio a partir de dois experimentos:
 - Efeito Compton:* fôtons têm momento
 - Difração de elétrons:* eles exibem propriedades ondulatórias também



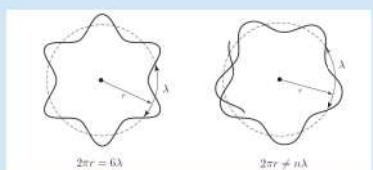
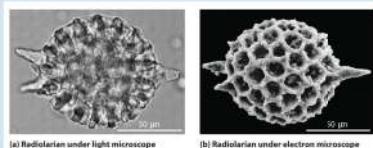
Exemplos

- 1) Calcule o comprimento de onda de um hambúrguer de 500 g a 1 m/s. R.: $1,33 \cdot 10^{-23} \text{ \AA}$.

Corpos na nossa escala tamanho e massa têm comprimento de onda muito pequeno para que propriedades ondulatórias sejam verificadas na prática. Então o comportamento simultâneo onda-partícula é algo inerente ao domínio microscópico;

- Ex.: Calcule o comprimento de onda do elétron a $9,47 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$.
R.: $0,77 \text{ \AA}$.

Confirmação adicional a abordagem foi a explicação bem sucedida de Le Broglie para a razão da condição de quantização de Bohr funcionar.

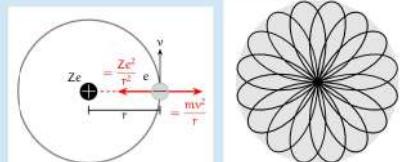


Princípio da Incerteza de Heisenberg

- Heisenberg descobriu que não só o erro na posição e momento de objetos pequenos estão relacionadas, como que **existe um mínimo que impede que um ou outro seja nulo ou menor que certo valor:**

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/4\pi$$

- Logo é verdade que Δx e Δp_x nunca podem ser iguais a zero.
- Essa descoberta mostrou que é **impossível descrever um modelo do átomo com trajetórias e velocidades definidas do elétron**, como o modelo de Bohr, que está fundamentalmente errado.
- Ex.: O princípio da incerteza no momento da bola (0,40 kg) lançada por um jogador de futebol a 40 m/s é $1 \cdot 10^{-6}$ do seu momento. Qual é a incerteza na posição?



Princípio da Incerteza de Heisenberg

- Posição e momento definidos é algo característico de partículas;
- Uma partícula pode ter valores de x e p_x tão exatos quanto se quiser, assim os erros Δx e Δp_x podem tender a zero com medidas mais e mais precisas;
- Ondas, por outro lado, não possuem localidade (são deslocalizadas) e não possuem momento definido.
- Mas no mundo microscópico objetos possuem propriedade de onda e partícula, então **como conciliar o definido com o indefinido?**
- A resposta é uma **definição limitada de x e p_x** .
- Analogia:** como numa foto desfocada, a direção é certa quando a posição é incerta, e a certeza na posição impede-nos de conhecer a futura direção.

Cuidado: precisão alta equivale a erros (ou incertezas) baixos, e vice-versa



Precisão na posição grande = Δx pequeno
(sabe onde está)

Precisão no momento baixa = Δp_x alto
(não sabe onde vai)



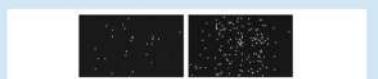
Precisão na posição pequena = Δx grande
(não sabe onde está)

Precisão no momento grande = Δp_x pequeno
(sabe onde vai)

Interpretação de Born

- Se partícula-onda, qual a função de onda Ψ ? É onda de quê?
- Ψ é um objeto matemático sem significado físico intríseco. Porém, $|\Psi|^2$ é a **probabilidade de encontrar o elétron** em certa região do espaço. Essa é a interpretação de Born.
- Não podemos determinar precisamente se uma moeda lançada dará cara ou coroa. Mas, por meio de medidas coletivas, podemos ver **padrões de probabilidade e fazer previsões**.
- Portanto, calcular $|\Psi|^2$ é uma maneira de fazer previsões. Em certo sentido, Ψ não é uma onda comum, que se propaga em um meio, mas um objeto matemático que permite obter probabilidades.

Experimentos de dupla fenda



1 fôton por vez

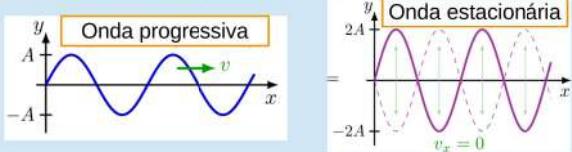


1 elétron por vez

Equação de Schrodinger

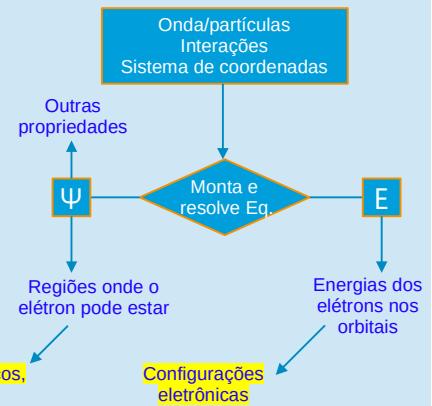
- Se Ψ é tão importante, como calculá-lo? Schrödinger sugeriu o uso de duas equações de onda:

- a) Uma para determinar a função de **ondas progressivas**, sendo dependente do espaço e do tempo, $\Psi(x,t)$ (ondas tais como a da luz);
- b) Outra para determinar a função em **ondas estacionárias**, que depende apenas do espaço, $\Psi(x)$ (ondas de matéria confinada, como uma partícula em uma caixa);



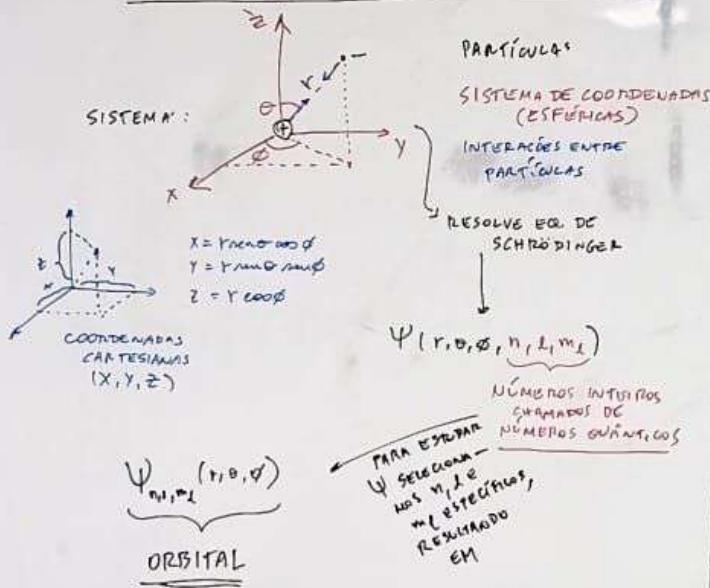
Eq. de Schrödinger

- A segunda equação é a adequada para descrever orbitais e energias em um átomo, por isso vamos focar nela. Para usá-la emprega-se o esquema ao lado.
- Ele permitiu que os cientistas previssem, ao longo dos anos:
 - A Eq. de Le Broglie
 - O princípio da Incerteza de Heisenberg
 - Resultados de experimentos com fendas
 - Energias e outras propriedades de átomos hidrogenóides
 - Energias e outras propriedades de átomos polieletônicos
 - Energias e outras propriedades de moléculas
 - E muito mais!



Bons estudos!

EQ. DE SCHRODINGER PARA O ÁTOMO DE H



* NÚMEROS QUÂNTICOS

n NÚMERO QUÂNTICO FUNDAMENTAL

ENERGIA DO ELECTRÓN NO ORBITAL, TANANHO DO ORBITAL

CAMADA (NÍVEL)

K L M ...

CADA C. POSSUI

$n = 1, 2, 3, \dots$
ENERGIA, DISTÂNCIA DO NÚCLEO

- n^2 ORBITAIS

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

- ATÉ $2n^2$ E⁻

NÚMERO QUÂNTICO DO MOMENTO ANGULAR

FORMA DO ORBITAL

SUBCAMADA (SUBNÍVEL)

S P D F ...
 $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$
ENERGIA EM UM MESMO NÍVEL

CADA SUBCAMADA POSSUI:
- $2l+1$ ORBITAIS
- ATÉ $2(2l+1)$ E⁻

m_l NÚMERO QUÂNTICO MAGNÉTICO

ORIENTAÇÃO ESPECIAL DO ORBITAL

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \pm l$
(SÍMBOLOS VARIAM)

CAMADA	n	l	SUBNÍVEL
K	1	0	S.
L	2	0, 1	S, P.
M	3	0, 1, 2	S, P, D.
N	4	0, 1, 2, 3	S, P, D, F
O	5	0, 1, 2, 3, 4	S, P, D, F, G
:	:		
			n SUBNÍVEIS

ORBITAL	n	l	m_l	Z: [2L+2]	
				SUBNÍVEL	ORBITAIS
	1	0	0	S	1
	2	1	0, ±1	P	3
	3	2	0, ±1, ±2	D	5
	4	3	0, ±1, ±2, ±3	F	7
	5				
	6				
	7				
	8				
	9				
	10				
	11				
	12				
	13				
	14				
	15				
	16				
	17				
	18				
	19				
	20				
	21				
	22				
	23				
	24				
	25				
	26				
	27				
	28				
	29				
	30				
	31				
	32				
	33				
	34				
	35				
	36				
	37				
	38				
	39				
	40				
	41				
	42				
	43				
	44				
	45				
	46				
	47				
	48				
	49				
	50				
	51				
	52				
	53				
	54				
	55				
	56				
	57				
	58				
	59				
	60				
	61				
	62				
	63				
	64				
	65				
	66				
	67				
	68				
	69				
	70				
	71				
	72				
	73				
	74				
	75				
	76				
	77				
	78				
	79				
	80				
	81				
	82				
	83				
	84				
	85				
	86				
	87				
	88				
	89				
	90				
	91				
	92				
	93				
	94				
	95				
	96				
	97				
	98				
	99				
	100				

ORBITAIS

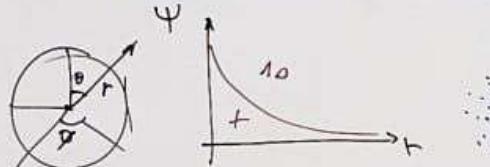
FORMA = $\ell \Rightarrow 0, 1, 2, 3, \dots$
 s, p, d, f

→ ORBITAIS S

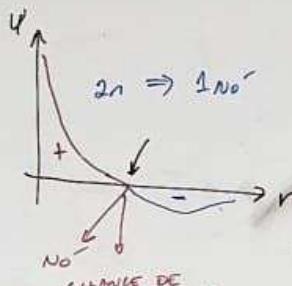
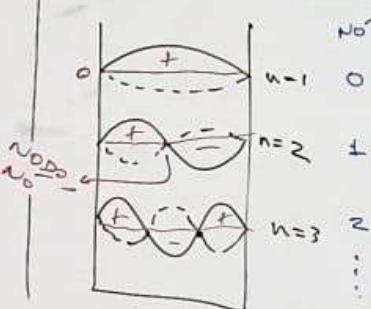
$$\Psi(r, \theta, \phi) \xrightarrow{\ell=0} \Psi(r)$$



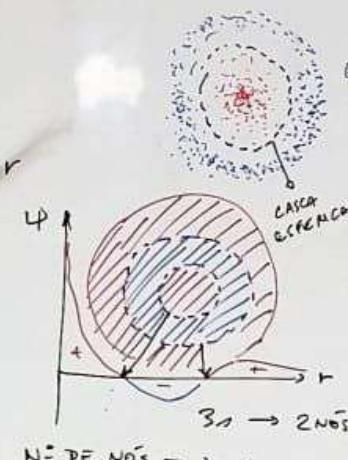
$$1s \quad 2s \quad 3s$$



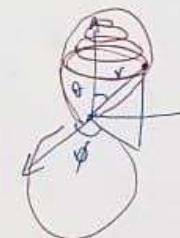
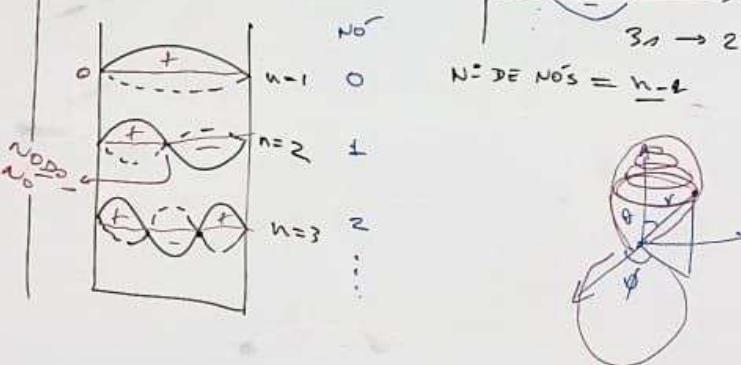
TAMANHO / ENERGIA



CHANCE DE ENCONTRAR E ZERO
É ZERO



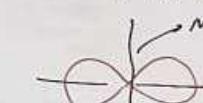
N. DE NOS = n-1



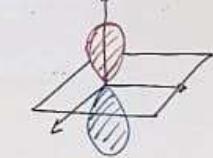
CASO ESPECÍFICO

→ ORBITAIS P

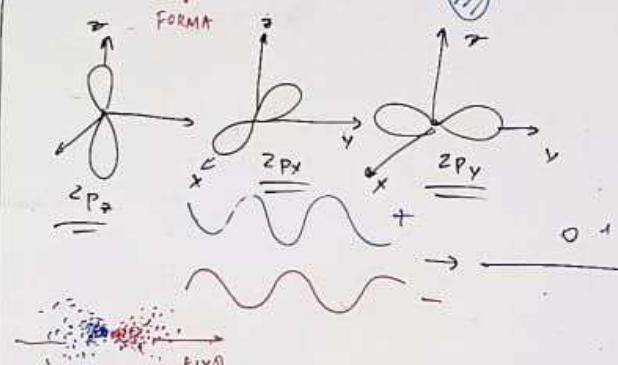
$$\Psi(r, \theta, \phi) \xrightarrow{\ell=1} \Psi(r, \theta, \phi)$$



FORMA



2p_y



2p_x

2p_y

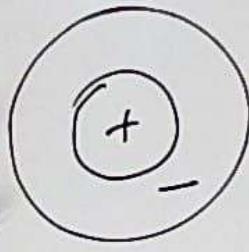
0°

EIXO

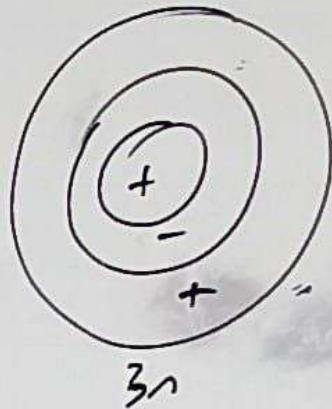
ORBITAIS



1s

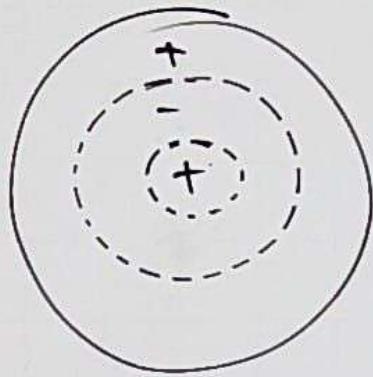


2s

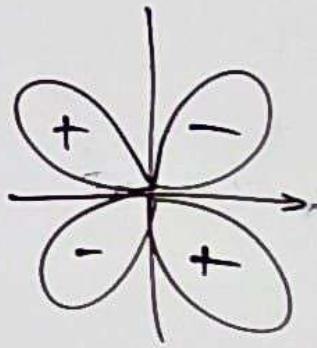
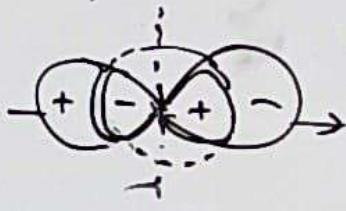


3s

SE ELECTRÓN NÃO ESTÁ LÁ, COMO VAI INTERAGIR
COM OS NÓS \rightarrow ENERGIA



3p



3d

\rightarrow ENERGIA AUMENTA

NÓS

- QUANTOS VALORES POSSÍVEIS EXISTEM PARA
 $l \in m_l$ QUANDO (A) $n=3$ E (B) $n=5$

$n =$ DE ORBITAS	CAMADA	$1, 2, 3, \dots$ n	$0, 1, 2, \dots, n-1$ l	$0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ m_l
1^2	K	1	0	0
4	L	2	$0, \pm 1$	$0, \pm 1$
9	M	3	$0, 1, 2$	$0, \pm 1, \pm 2$
16	N	4	$0, 1, 2, 3$	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$
<u>25</u>	O	5	$0, 1, 2, 3, 4$	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$

$\xrightarrow{\quad}$ $\xrightarrow{\quad}$ $\xrightarrow{\quad}$

$\begin{matrix} \square \\ l=0 \end{matrix}$ $\begin{matrix} \square \\ l=1 \end{matrix}$ $\begin{matrix} \square \\ l=2 \end{matrix}$

$3s$ $3p$ $3d$

$-2 -1 0 +1 +2$

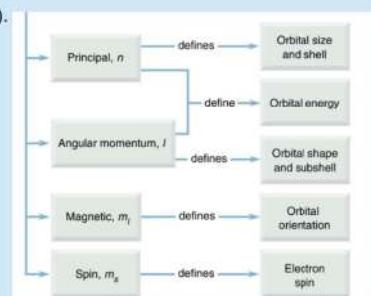
Química

Configurações eletrônicas

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

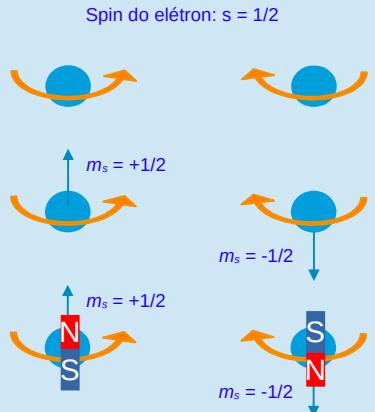
Spin do elétron

- Esse número quântico, mais os três abordados anteriormente, permitem obter a configuração eletrônica de um átomo no seu estado fundamental (arranjo dos elétrons nos orbitais que leva a menor energia do átomo).
- A função de onda que inclui os três números quânticos e o do spin é chamada de spin-orbital:
- Relembrando, os números quânticos são:
 - Número quântico principal (n);
 - Número quântico do momento angular (l);
 - Número quântico magnético (m_l);
 - Número quântico do spin (m_s).



Spin do elétron

- O elétron, assim como outras partículas, possui uma propriedade chamada spin, s , associada (classicamente) ao sentido de um rodopio.
- O momento angular do elétron devido ao spin só pode assumir certos valores discretos. A componente do momento angular ao longo do eixo perpendicular ao plano da rotação (m_s) é o quarto número quântico, podendo assumir, no caso do elétron, dois valores: $+1/2$ (designado por \uparrow) ou $-1/2$ (designado por \downarrow).
- O momento angular do spin, como deve-se ao rodopio de cargas, também gera um campo magnético.



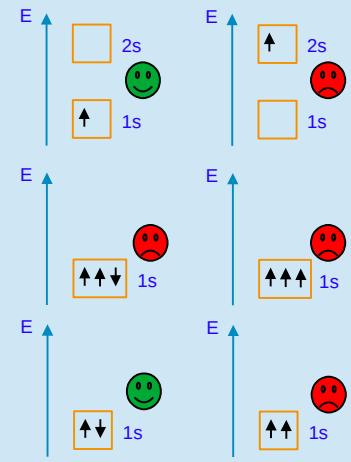
Exercício

- 1) Determine se cada um dos seguintes conjuntos de números quânticos para o átomo de hidrogênio são válidos. Se um conjunto não for válido, indique qual dos números quânticos cujo valor é inválido, e porque.

- a) $n = 4, l = 1, m_l = 2, m_s = -1/2;$
- b) $n = 4, l = 3, m_l = -3, m_s = +1/2;$
- c) $n = 3, l = 2, m_l = -1, m_s = +1/2;$
- d) $n = 5, l = 0, m_l = 0, m_s = 0;$
- e) $n = 2, l = 2, m_l = 1, m_s = +1/2;$

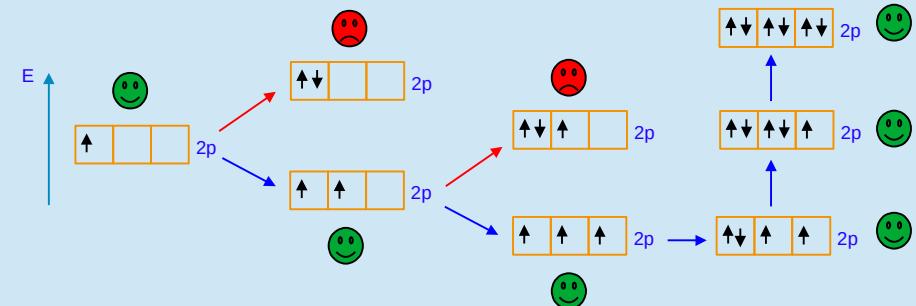
Regras para dispor elétrons em orbitais

- O arranjo dos elétrons no átomo é o que dá várias das propriedades físicas e químicas de átomos e moléculas que observamos;
- Para determinar tal arranjo mais provável, chamado de configuração eletrônica, são observadas quatro regras:
- 1) Regra do Aufbau:** Elétrons devem ocupar primeiro os subníveis com menor energia (estabilidade), e quando seus orbitais estiverem preenchidos, ocupam o próximo na ordem de energia;
- 2) Princípio de exclusão de Pauli:** a) dois elétrons não podem possuir os mesmos 4 números quânticos ou b) orbitais podem ser ocupado por, no máximo, 2 elétrons, e com spins opostos (par emparelhado). Emparelhados: Desemparelhados:



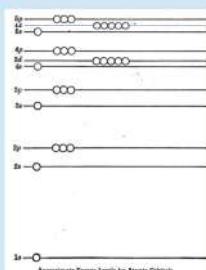
Regras para dispor elétrons em orbitais

- 3) Regra de Hund:** elétrons, para evitar a repulsão ao ocuparem um mesmo orbital, primeiro ocupam orbitais diferentes caso esses possuam mesma energia (degenerados) ou diferença pequena de energia (veremos tal exemplo em hibridização);



Regras para dispor elétrons em orbitais

- 4) Regra de Bohr (diagrama de Pauling):**
 - a) orbitais com $n + l$ menor possuem menor energia (são ocupados primeiro) e b) entre aqueles com mesmo $n + l$, os com menor n são os com menor energia.



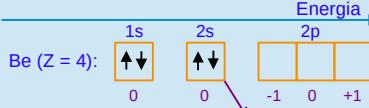
	Camada				Máximo de elétrons em camadas
	<i>n</i>	0	1	2	3
K	1	1	1s		2
L	2	2	2s	2p	8
M	3	3	3s	3p	18
N	4	4	4s	4p	32
O	5	5	5s	5p	50
P	6	6	6s	6p	62
Q	7	7	7s	7p	88

Máximo de elétrons em subcamadas 2 6 10 14

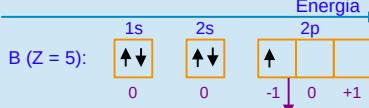
Configurações de alguns elementos

H ($Z = 1$):	1s	2s	2p	Energia	Usa regra do Aufbau e regra de Bohr	Configuração eletrônica: $1s^1$
				0 0 -1 0 +1	Números quânticos desse elétron: $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = +1/2$	
He ($Z = 2$):	1s	2s	2p	Energia	Usa regra do Aufbau e regra de Bohr e princípio de exclusão de Pauli	Configuração eletrônica: $1s^2$
				0 0 -1 0 +1	Números quânticos do último elétron: $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = -1/2$	Nível completo: conf. estável gás nobre
Li ($Z = 3$):	1s	2s	2p	Energia	Usa regra do Aufbau e regra de Bohr e princípio de exclusão de Pauli	Configuração eletrônica: $1s^2 2s^1$ ou $[He] 2s^1$
				0 0 -1 0 +1	Números quânticos do último elétron: $n = 2$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = +1/2$	Essa notação é mais econômica, e evidencia elétrons do caroço: fortemente ligados ao núcleo

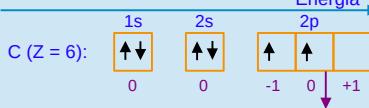
Configurações de alguns elementos



Números quânticos do último elétron: $n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = -1/2$



Números quânticos do último elétron: $n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = +1/2$



Números quânticos do último elétron: $n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = +1/2$

Usa regra do Aufbau e regra de Bohr e princípio de exclusão de Pauli

Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2$ ou $[\text{He}] 2s^2$

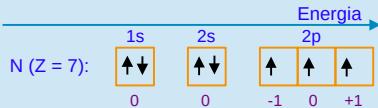
Usa regra do Aufbau e regra de Bohr e princípio de exclusão de Pauli

Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^1$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^1$

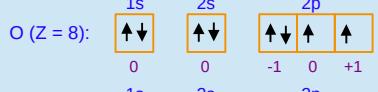
Usa regra do Aufbau e regra de Bohr, princípio de exclusão de Pauli e regra de Hund

Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^2$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^2$

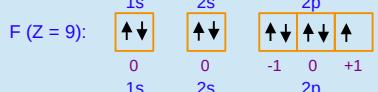
Configurações de alguns elementos



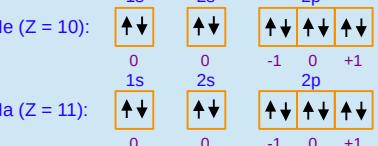
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^3$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^3$



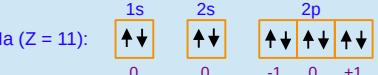
Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^4$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^4$



Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^5$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^5$



Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^6$ ou $[\text{He}] 2s^2 2p^6$



Configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ou $[\text{Ne}] 3s^1$

Nível completo:
conf. estável
gás nobre

2) Diferencie o princípio de exclusão de Pauli da regra de Hund;

3) Escreva as configurações eletrônicas condensadas dos átomos a seguir e indique quantos elétrons desemparelhados cada um possui:

a) Mg;

b) Ge;

c) V.

4) O que está errado com as seguintes configurações eletrônicas para os átomos em seus estados fundamentais?

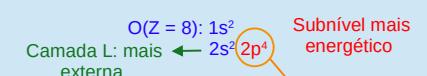
a) $1s^2 2s^2 3s^1$

b) $[\text{Ne}] 2s^2 2p^3$

c) $[\text{Ne}] 3s^2 3d^5$

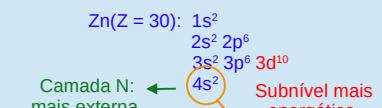
Tipos de camadas/subníveis

- Subníveis são divididos em:
 - Subnível mais energético:** último a ser ocupado;
 - Subnível mais externo:** com maior valor de n .
- Em elementos com poucos elétrons, é comum o subnível mais externo ser também o mais energético. Porém, isso passa a mudar em elementos com Z maior que 20;
- A camada mais externa é aquela que possui o subnível mais externo (ou seja, a com maior valor de n).



Subnível mais energético

Subnível mais externo



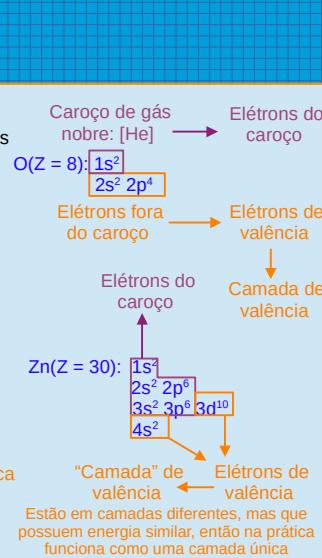
Subnível mais energético

Subnível mais externo

Elétrons nos átomos

- É interessante dividir os elétrons nas configurações eletrônicas dos átomos em dois tipos:

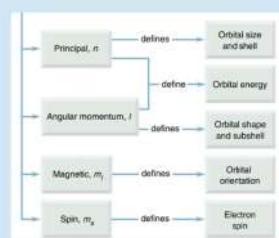
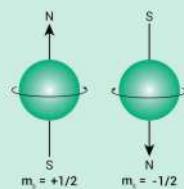
- Elétrons do caroço:** mais fortemente ligados ao núcleo. São identificados quando:
 - fazem parte de uma configuração de gás nobre no átomo ou, analogamente,
 - quando uma camada é fechada: 2 elétrons na camada K, 8 elétrons nas restantes. Nas camadas K, L e M correspondem à uma camada fechada (totalmente preenchida);
- Elétrons de valência:** menos ligados ao núcleo, são todos os elétrons que não fazem parte do caroço. Se fazem parte de uma única camada, esta é chamada de camada de valência. São os principais responsáveis pelas propriedades físicas e químicas dos átomos.



Bons estudos!

Spin do elétron

- Após os sucessos do método proposto por Schrödinger, descobriu-se que 3 números quânticos são insuficientes para descrever o elétron no átomo;
- Isso porque o elétron possui uma propriedade chamada spin;
- Esse spin resulta em um momento angular, m_s , que pode ser um de dois valores: $+1/2$ ou $-1/2$.
- A função de onda que inclui os três números quânticos é chamada de spin-orbital;
- Relembrando, os números quânticos são:
 - Número quântico principal (n);
 - Número quântico do momento angular (l);
 - Número quântico magnético (m);
 - Número quântico do spin (m_s).



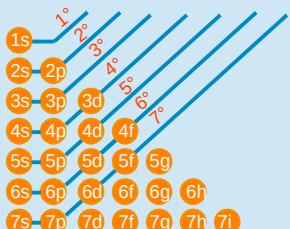
Química

Tabela Periódica

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

Períodos (linhas)

- Indicam **n de camada mais externa**. Quando fecham 2 elétrons na camada K, ou 8 elétrons nas outras camadas, passa para a linha seguinte.



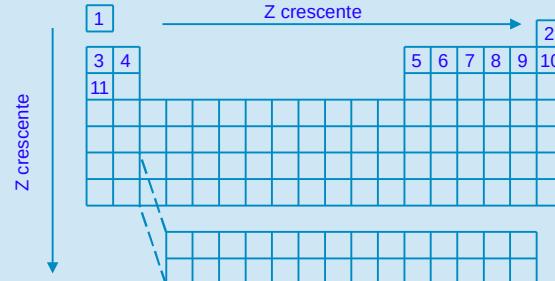
Período	1º	2º	3º	4º	5º	6º	7º
	1s	2s 2p	3s 3p	4s 3d 4p	5s 4d 5p	6s 4f 5d 6p	7s 5f 6d 7p

Note que assim que são completados 8 elétrons na camada mais externa, passa-se para outra linha

Camada mais externa	n
K	1
L	2
M	3
N	4
O	5
P	6
Q	7

Introdução

- A tabela periódica sistematiza **padrões** de propriedades físicas e químicas dos seus 118 elementos;
- Muito desses padrões remetem diretamente às **configurações eletrônicas** dos mesmos.
- Ordenamento: átomos de cada elemento são ordenados em **ordem crescente de Z**, da esquerda para a direita:



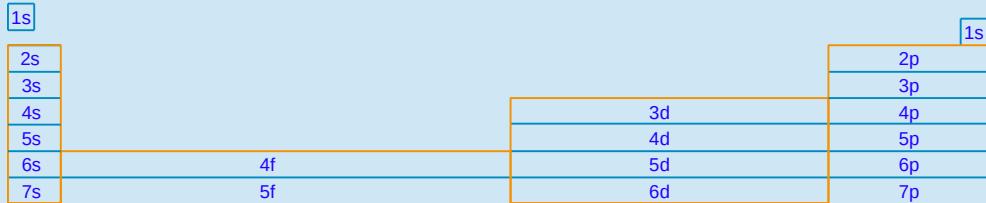
Blocos

- Indicam qual é o **subnível mais energético**.
- Se separamos os orbitais com mesmo l (ou seja, s, p, d e f) e separamos em colunas iguais:

1s			
2s	2p		
3s	3p		
4s	3d	4p	
5s	4d	5p	
6s	4f	5d	6p
7s	5f	6d	7p

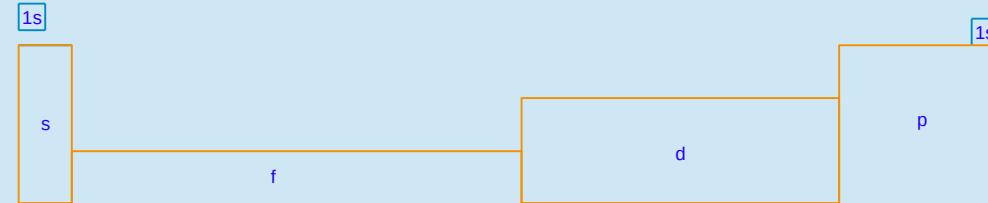
Blocos

- Indicam qual é o subnível mais energético.
- Se separamos os orbitais com mesmo l (ou seja, s, p, d e f) e separamos em colunas iguais:



Blocos

- Indicam qual é o subnível mais energético (logo seu valor de l).
- Se separamos os orbitais com mesmo l (ou seja, s, p, d e f) e separamos em colunas iguais:



Embora o H e o He possam ser colocados no bloco s (acima do Li e do Be respectivamente), suas propriedades os mantém fora desses blocos. O hidrogênio é separado por possuir propriedades de diferentes grupos, e o hélio é um gás nobre. Eles são anômalos porque ambos tem seus elétrons na camada que possui menos elétrons que as outras, abaixo dos 8 necessários para a estabilidade: a camada K

Blocos

- Essa forma da tabela reflete a sequência de preenchimento dos orbitais segundo a regra de Bohr:

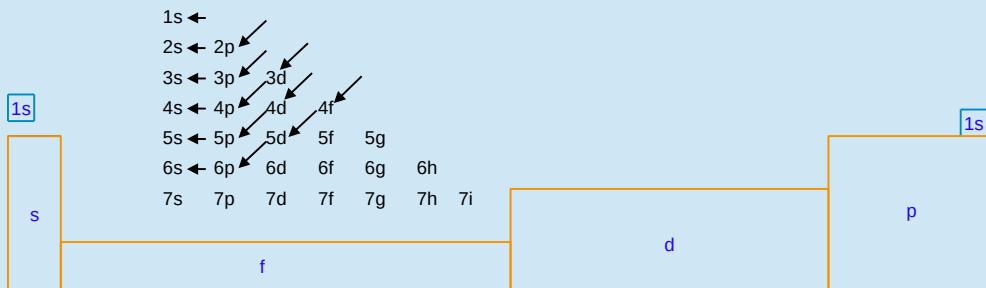
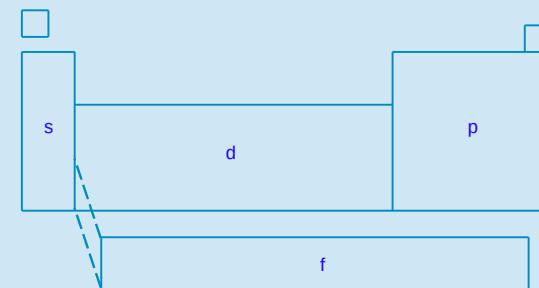


Tabela na ordem do preenchimento dos blocos

Blocos

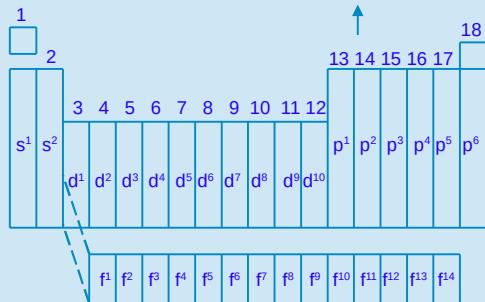
- A forma condensada é a mais popular: o bloco f é removido para baixo da tabela.



Colunas

- As colunas/grupos refletem quantos elétrons há no **subnível mais energético**;
- Como elementos de uma coluna possuem propriedades físicas e químicas similares, são tipicamente chamadas de famílias;
- As colunas são numeradas de 1 a 18.
- Metais possuem propriedades similares, mesmo em colunas diferentes. São eles os metais de transição externa (bloco d) e interna (bloco f).

Corresponde ao nº de elétrons que não estão no caroço (ou seja, de valência)

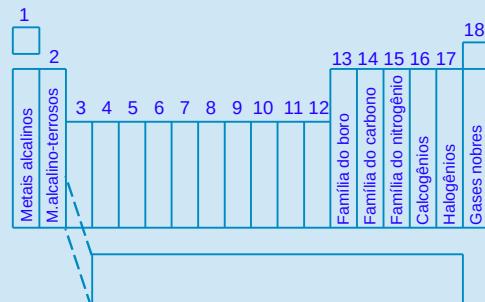


Note que no bloco p: número de elétrons no subnível mais energético = nº do grupo – 12 (devido ao preenchimento dos orbitais s e d previamente realizado: 2 + 10)

Note que no bloco d: número de elétrons no subnível mais energético = nº do grupo – 2 (devido ao preenchimento do orbital s previamente realizado)

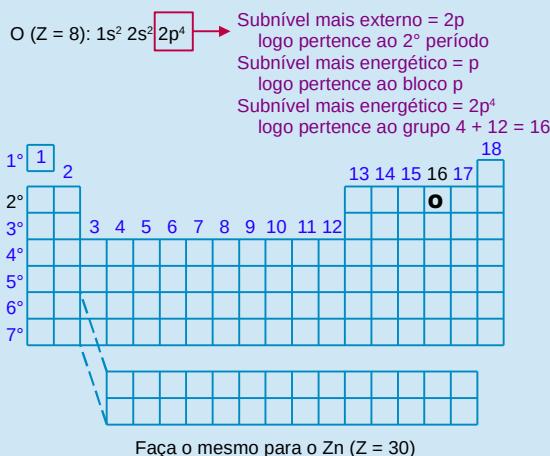
Colunas

- Algumas famílias têm nomes especiais, como os metais alcalinos ou os halogênios;
- Embora elementos de uma mesma coluna compartilhem muitas propriedades químicas, eles ainda são diferentes, pois as interações dos elétrons mais externos (que são em mesmo número numa família) mudam com o aumento de Z (de cima para baixo).
- Por isso o Cl é gás, o Br é líquido e o I é sólido em condições ambientais, por exemplo. Mas ambos formam sais com o Na da mesma forma: NaCl, NaBr e NaI.



Posição de elemento na tabela

- A partir da configuração eletrônica de um átomo podemos determinar sua posição (linha e coluna) na tabela periódica. Basta avaliar os subníveis mais energético e mais externo.
- O contrário também é possível: dada a posição na tabela, a configuração eletrônica pode ser determinada.
- Algumas exceções a regra de Bohr existem em elementos dos blocos d e f. Mas não vamos lidar com esses casos e focar mais nos blocos s e p.



Exercícios

1) Recorrendo a tabela periódica como guia, escreva a configuração condensada e determine o número de elétrons desemparelhados para o estado fundamental de:

a) Br;

b) Ga;

c) Bi.

2) Localize os elementos na tabela periódica:

a) elementos com configuração eletrônica na camada de valência $ns^2 np^5$;

b) elementos com três elétrons np desemparelhados;

c) um elemento cujos elétrons de valência são $4s^2 4p^1$;

d) elementos do bloco d.

Bons estudos!

Química

Propriedades Periódicas

Prof. Diego J. Raposo

UPE – Poli

2025.1

Elétrons de valência

- Como vimos, há dois tipos de elétrons:
 - Elétrons do caroço (configuração de gás nobre);
 - Elétrons de valência (todos os outros).
- A força de atração entre elétrons de valência e o núcleo determina muitas das propriedades dos elementos, inclusive o grau e o tipo de reatividade;
- Sendo uma força eletrostática, ela depende de dois fatores:
 - Da **distância** média dos elétrons de valência ao núcleo;
 - Da **carga** que efetivamente os elétrons de valência sentem ao interagir com o núcleo.
- Através desses dois fatores também podemos entender e fazer previsões com os padrões evidenciados pela tabela periódica: as chamadas propriedades periódicas.



$Fe(z=26)$

+ ENERG. CARGA NUCLEAR EFETIVA

- UM ÁTOMOS COM 1 ELETRÔN A ENERGIA SOU DEPENDE DE n E Z , O NÚMERO DE PROTONS (CARGAS POSITIVAS) NO NÚCLEO:

$$E = -\frac{13,6 \text{ eV} \cdot Z^2}{n^2}$$

EM ÁTOMOS COM MAIS DE UM ELETRÔN A PRESENÇA DE ELETRÔNS MAIS PRÓXIMOS DO NÚCLEO BLINDA-O DOS MAIS DISTANTES ASSIM, ESSES ELETRÔNS "SENTEM" UMA CARGA Z_{ef} EFETIVA MENOR QUE Z :

Fe^{3+}

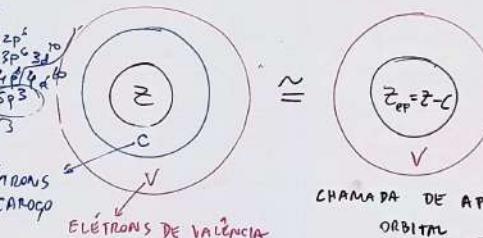
$$E = -\frac{13,6 \text{ eV} \cdot Z_{\text{ef}}^2}{n^2}$$

IMA

- ESSA BLINDAGEM SE DEVE A PENETRAÇÃO DE SUA NÍVEL EM UM MESMO NÍVEL, E A ELETRÔNS EM ORBITAS COM MENOR ENERGIA IRÁS A DO ELETRÔN NO ORBITAL MAIS DISTANTE

- ELETRÔNS DO CAROJO BLINDAM FORTEMENTE O NÚCLEO. DOS ELETRÔNS DE VALENCIA. EM CERTO NÍVEL DE APROXIMAÇÃO PODERMOS DIZER QUE A CARGA NUCLEAR É SUBTRAÍDA DA CARGA DOS ELETRÔNS DO CAROJO PARA OS ELETRÔNS DE VALENCIA? OU SEJA,

EQUIVALE A UM ÁTOMO HIDRÓGENOIDE COM CARGA NUCLEAR ZERO AO INVÉS DE Z :



$Sb(z=51)$

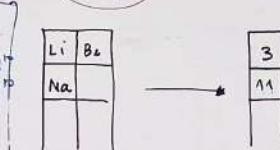
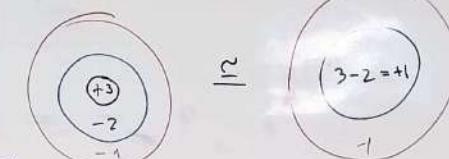
$$Z_{\text{ef}} \approx Z - C$$

CHAMADA DE APROXIMAÇÕES ORBITAL

\sim

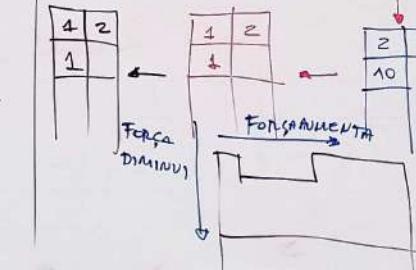
He

Ex.: $Li(z=3)$: $\frac{1n^2}{2n^1} V$



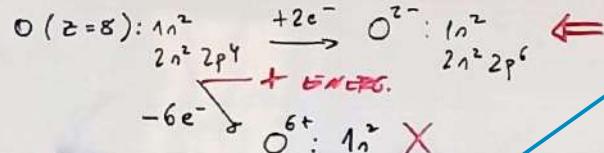
$Li(z=3): 1n^2 2n^1$
 $Be(z=4): 1n^2 2n^2$
 $Mg(z=12): 1n^2 2n^2 3n^2$

$Z_{\text{ef}} \text{ AUMENTA}$
 $n \text{ EXT} \sim \text{CONSTANTE}$



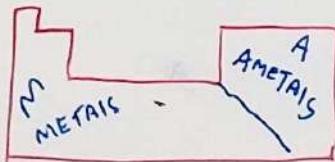
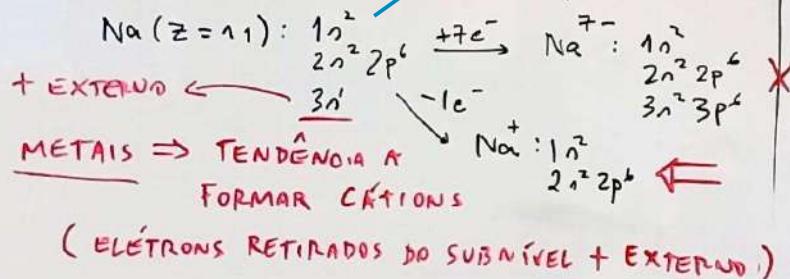
$Z_{\text{ep}} \approx C_x$

~ CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE ÍONS



AMETAIS \Rightarrow TENDÊNCIA A FORMAR ÂNIONS

(ELETRÔNS ACRESCENTADOS NO SUBNÍVEL + ENERGÉTICO)



Usar exemplo do Fe

TABLE 1.4 Characteristics of Metals and Nonmetals

Metals

Physical properties

good conductors of electricity

malleable

ductile

lustrous

typically: solid; high melting point;
good conductors of heat

Chemical properties

react with acids

form basic oxides (which react with acids)

form cations

form ionic halides

Nonmetals

poor conductors of electricity

not malleable

not ductile

not lustrous

typically: solid, liquid, or gas; low melting point; poor conductors of heat

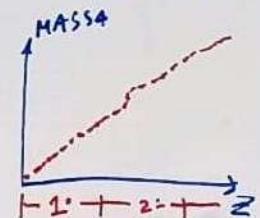
do not react with acids

form acidic oxides (which react with bases)

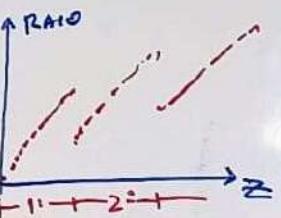
form anions

form covalent halides

* PROPRIEDADES PERIÓDICAS



NÃO PERIÓDICA
(INDEPENDE DO PÉRÍODO)



PERIÓDICA
(DEPENDE DO PÉRÍODO)

- RAIO ATÔMICO: OBTIDO A PARTIR DA DISTÂNCIA ENTRE NÚCLEOS, A DEPENDER DO TIPO DE LIGAÇÃO ENTRE OS ÁTOMOS

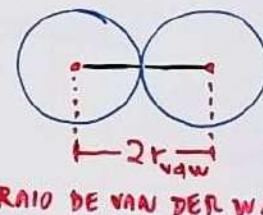
— ÁTOMOS NEUTROS

~ NÃO LIGADOS

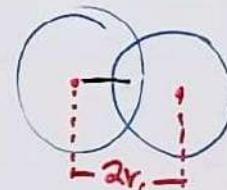
GASES
NÓBRES

~ LIGADOS

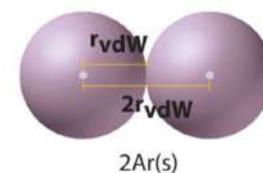
AMETALIS



RAIO DE VAN DER WAALS



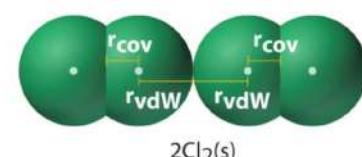
RAIO COVALENTE



$2r_{vdW}$



$2r_{cov}$

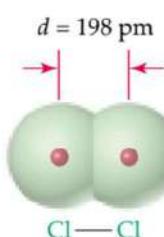


$2r_{cov}$

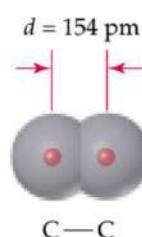
(c) van der Waals radius, r_{vdW}

(a) Covalent radius, r_{cov}

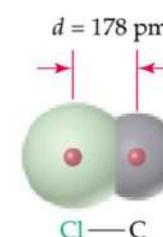
(d) Covalent vs. vDW radii



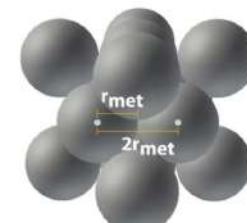
$$\frac{d}{2} = 99 \text{ pm}$$



$$\frac{d}{2} = 77 \text{ pm}$$



$$(99 \text{ pm} + 77 \text{ pm} = 176 \text{ pm}) \\ \text{predicted}$$



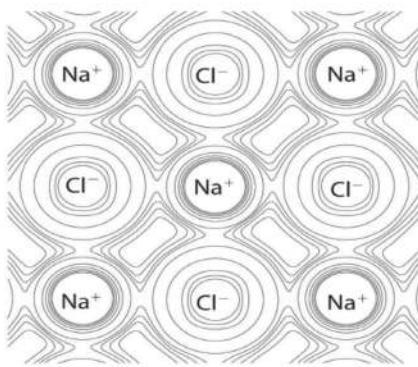
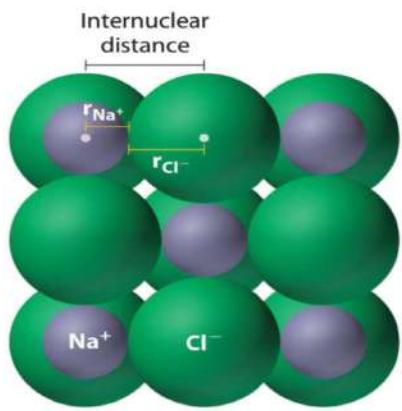
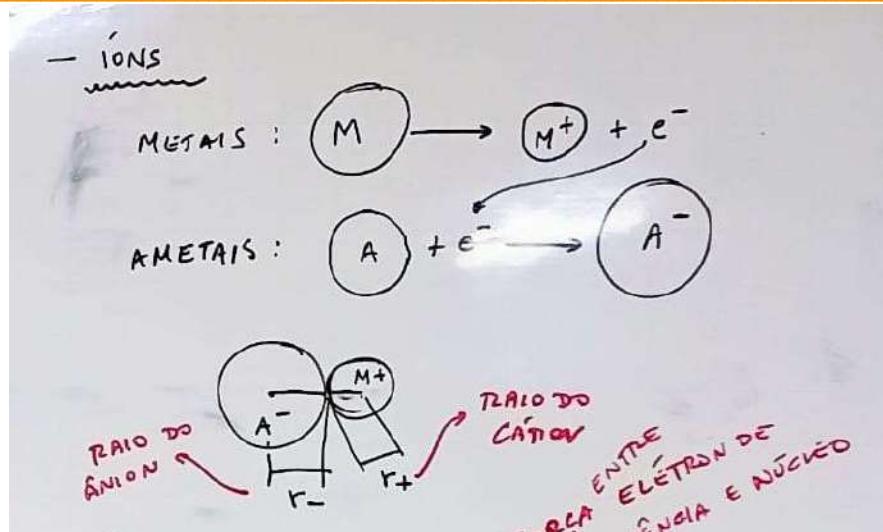
(b) Metallic radius, r_{met}

$$\frac{d}{2} = 99 \text{ pm}$$

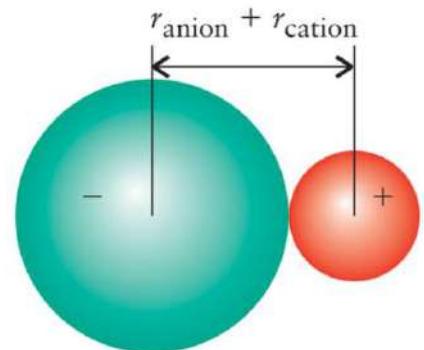
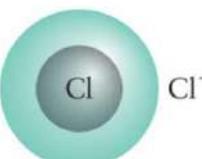
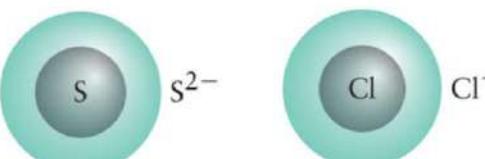
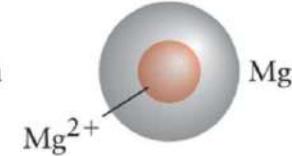
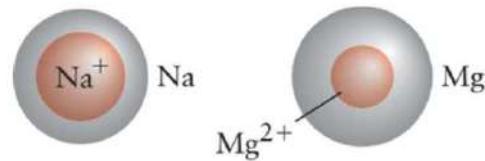
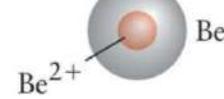
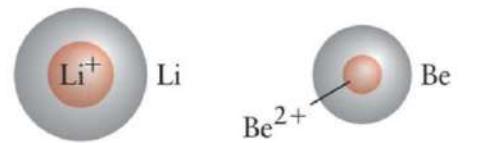
$$\frac{d}{2} = 77 \text{ pm}$$

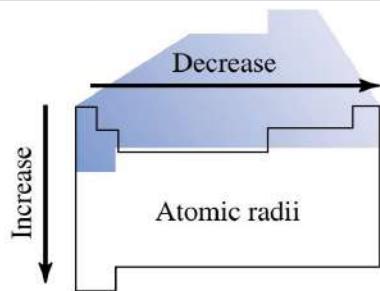
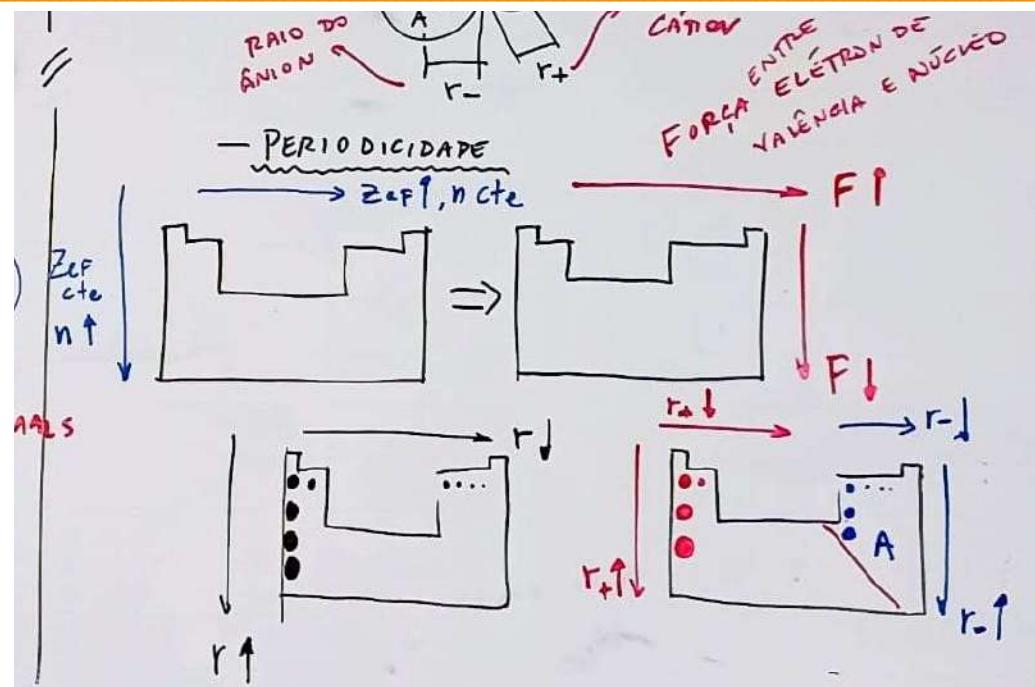
$$99 \text{ pm} + 77 \text{ pm} = 176 \text{ pm}$$

$$\text{predicted}$$



(a) The internuclear distance is apportioned between adjacent cations and anions in the ionic structure, as shown



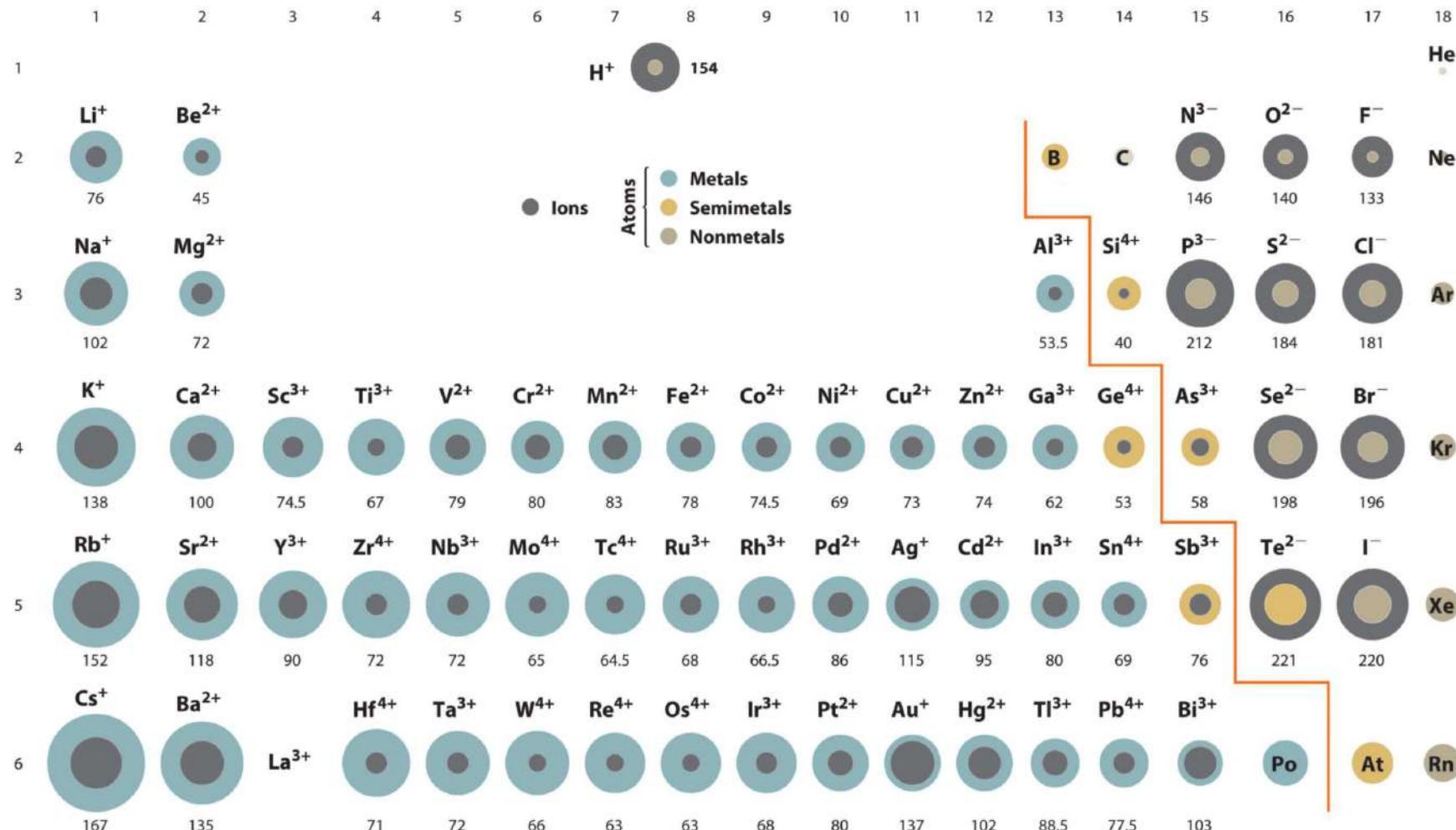


General trends in atomic radii of A group elements with position in the periodic table.

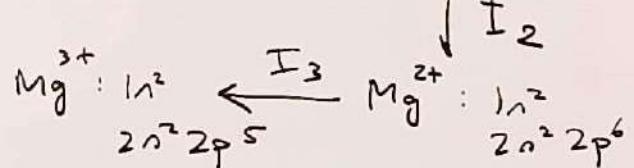
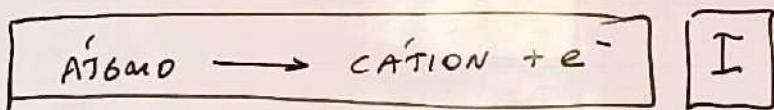
1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
Li 152	Be 113	B 88	C 77	N 75	O 66	F 58	Ne
Na 154	Mg 160	Al 143	Si 117	P 110	S 104	Cl 99	Ar
K 227	Ca 197	Ga 122	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114	Kr
Rb 248	Sr 215	In 163	Sn 141	Sb 141	Te 137	I 133	Xe
Cs 265	Ba 217	Tl 170	Pb 175	Bi 155	Po 167	At	Rn

1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
Li^+ 76	Be^{2+} 45	B^{3+} 23	C	N^{3-} 171	O^{2-} 140	F^- 133	Ne
Na^+ 102	Mg^{2+} 72	Al^{3+} 54	Si	P^{3-} 212	S^{2-} 184	Cl^- 181	Ar
K^+ 138	Ca^{2+} 100	Ga^{3+} 62	Ge	As^{3-} 222	Se^{2-} 198	Br^- 196	Kr
Rb^+ 152	Sr^{2+} 118	In^{3+} 80	Sn	Sb^{3-} 221	Te^{2-} 220	I^- 220	Xe
Cs^+ 167	Ba^{2+} 135	Pb^{3+} 89	Pb	Bi	Po	At	Rn

Figure 7.9 Ionic Radii (in Picometers) of the Most Common Oxidation States of the *s*-, *p*-, and *d*-Block Elements

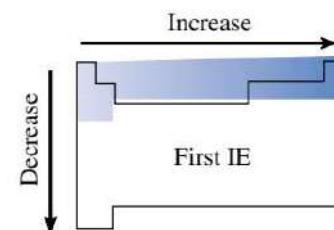
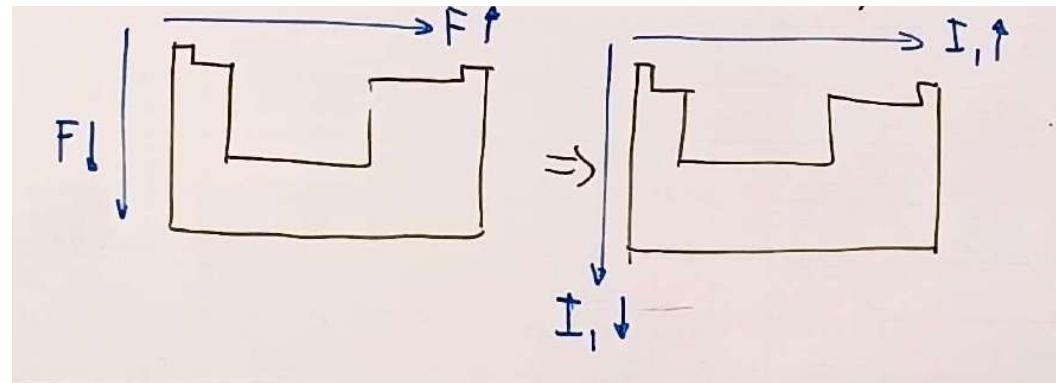


- ENERGIA DE IONIZAÇÃO
 - ENERGIA P/ RETIRAR e^- DO ÁTOMO NA FASE GÁSOST



$$I_3 > I_2 > I$$

\downarrow
ELETRONS DO CAROÇO



General trends in first ionization energies of A group elements with position in the periodic table.
Exceptions occur at Groups IIIA and VIA.

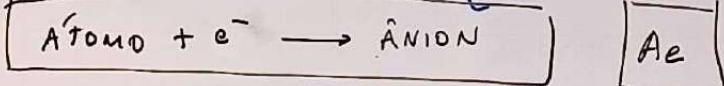
É preciso MAIS ENERGIA P/ RETIRAR e^-
DE AMETALIS QUE DE METAIS: METAIS = I_1 BAIXO
AMETALIS = I_1 ALTO

TABLE 6-1 *First Ionization Energies (kJ/mol of atoms) of Some Elements*

H 1312																			He 2372	
Li 520	Be 899														B 801	C 1086	N 1402	O 1314	F 1681	Ne 2081
Na 496	Mg 738														Al 578	Si 786	P 1012	S 1000	Cl 1251	Ar 1521
K 419	Ca 599	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 652	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 757	Cu 745	Zn 906	Ga 579	Ge 762	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1351			
Rb 403	Sr 550	Y 617	Zr 661	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 558	Sn 709	Sb 834	Te 869	I 1008	Xe 1170			
Cs 377	Ba 503	La 538	Hf 681	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 589	Pb 715	Bi 703	Po 812	At 890	Rn 1037			

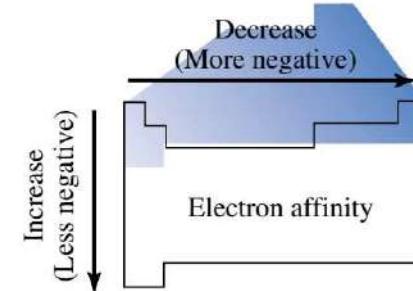
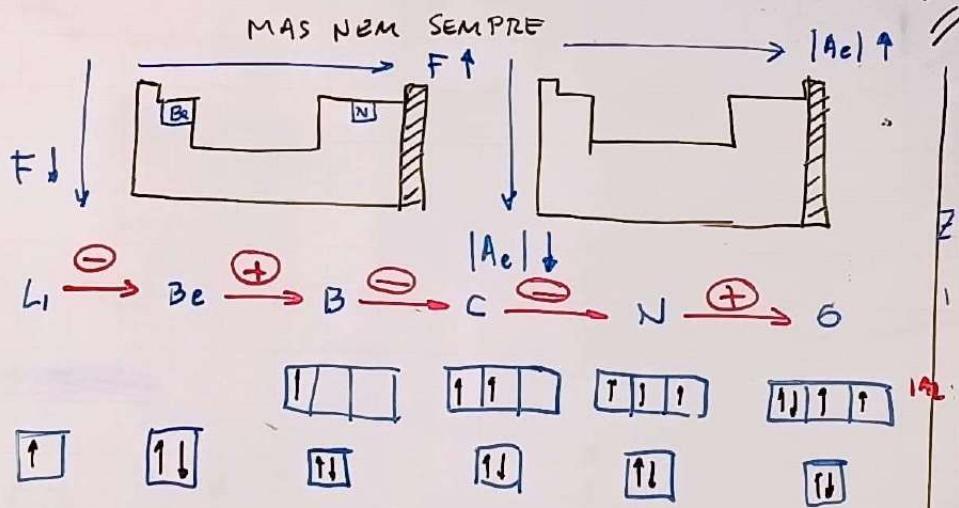
É preciso mais energia p/ retirar e^-
de ametais que de metais: METAIS = I, BAIXO
AMETAIS = I, ALTO

- AFINIDADE ELETRÔNICA
 - ENERGIA ASSOCIADA À ADIÇÃO DE $1e^-$ A UM ATÔMOS



- NORMALMENTE $A_e < 0$ (PROCESSO ESPONTÂNEO)

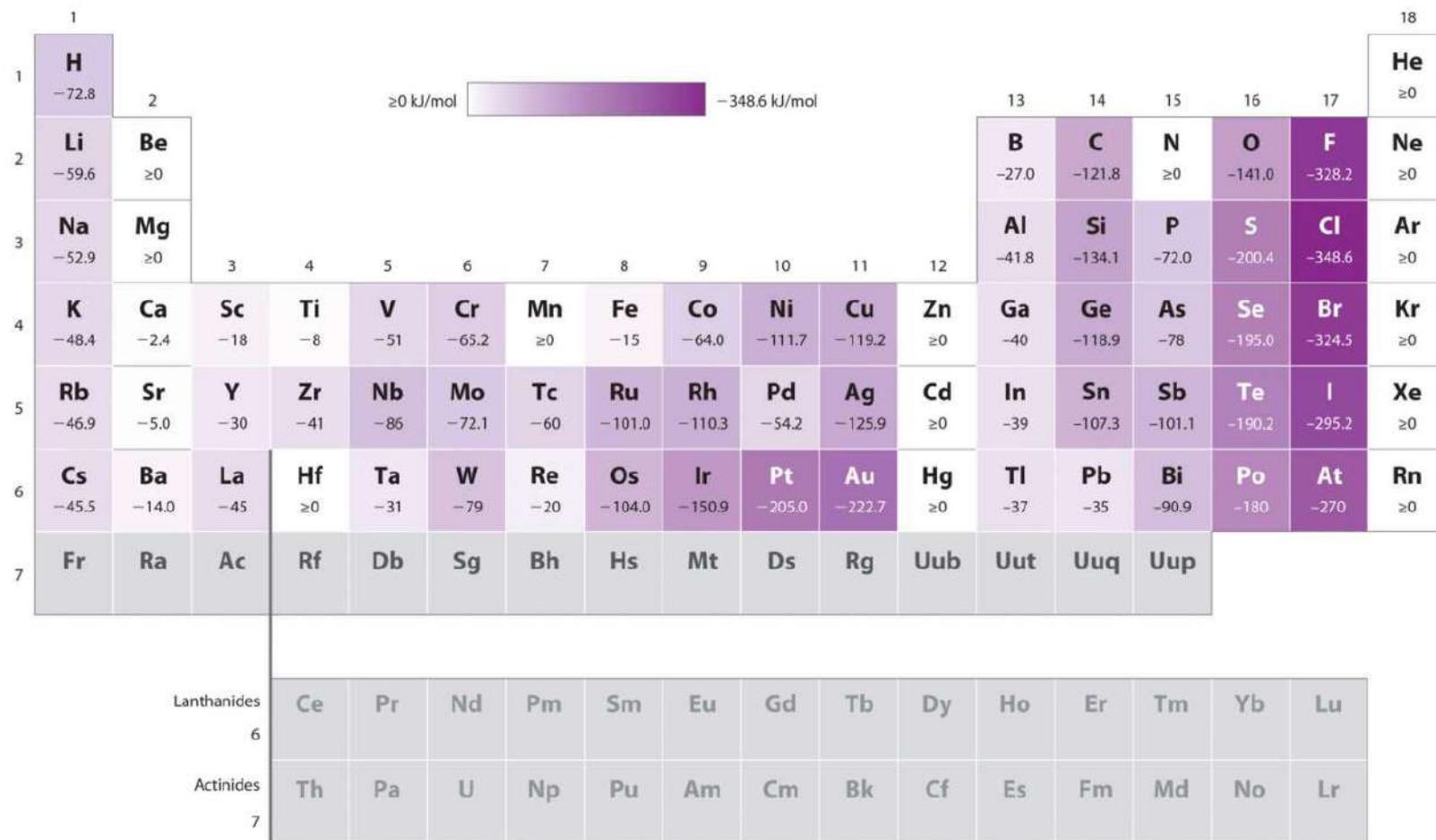
MAS NEM SEMPRE



General trends in electron affinities of A group elements with position in the periodic table. There are many exceptions.

1	H -73								He 0
2	Li -60	Be (-0)		B -29	C -122	N 0	O -141	F -328	Ne 0
3	Na -53	Mg (-0)		Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar 0
4	K -48	Ca (-0)		Ag -125	Ga -29	Ge -119	As -78	Se -195	Br -324
5	Rb -47	Sr (-0)		Au -282	In -29	Sn -107	Sb -101	Te -190	I -295
6	Cs -45	Ba (-0)			Tl -19	Pb -35	Bi -91		Xe 0

Figure 7.13 Electron Affinities (in kJ/mol) of the s-, p-, and d-Block Elements



Bons estudos!

Química

Ligações iônicas

Prof. Diego J. Raposo

UPE – Poli

2025.1

PRESENCIAIS	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
10h30 - 12h10				Yasmin		
12h10 - 13h50	João Victor			João Victor		
16h20 - 18h00					Yasmin	
ONLINE	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
20h00 - 21h00	Yasmin	Yasmin	João Victor		João Victor	

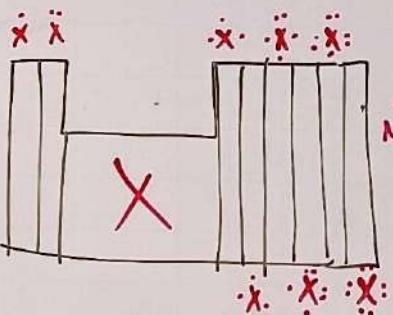


Link grupo da monitoria no zap

CONCEITOS BÁSICOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

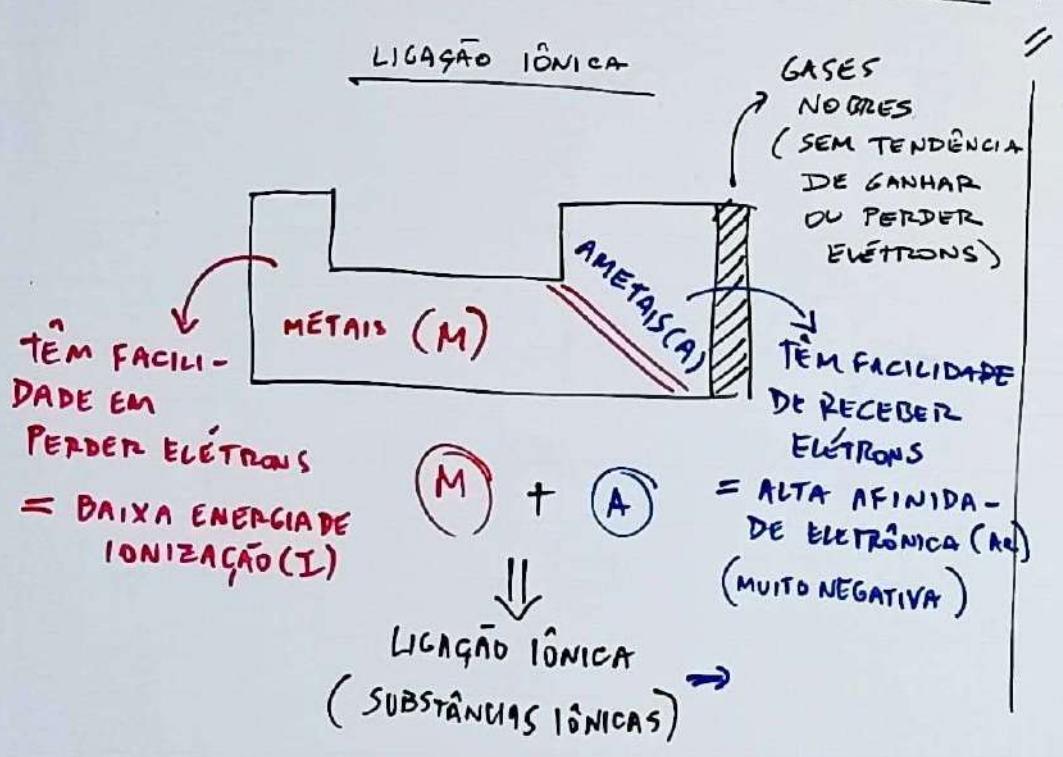
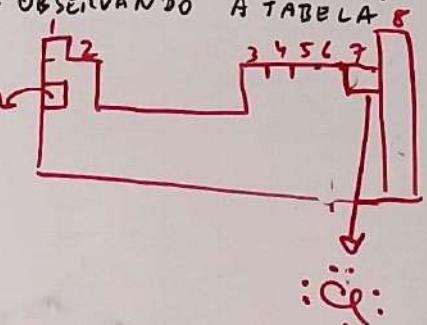
- ATÔMOS SE LIGAM PARA OBTER CONFIGURAÇÕES DE GÁS NOBRE \rightarrow Be^- NA CAMADA + EXTERNA
- VEREMOS LIGAÇÕES QUÍMICAS ENTRE METAIS DO BLOCO S E AMETALIS DO BLOCO P
- NOTAÇÃO DE LEWIS: $:X:$ → ELETRONS DE VALENCIA
 $:..X:$ → SÍMBOLO
- $:X:$: $X:$

NÚMERO DE ELETRONS DE VALENCIA



FABRIZANDO CONFIG. ELETRÔNICAS
Na: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ Ne $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ Cl: $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^2$ $3p^5$ Nc

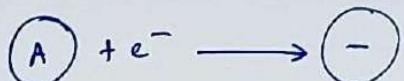
OBSERVANDO A TABELA



(M)



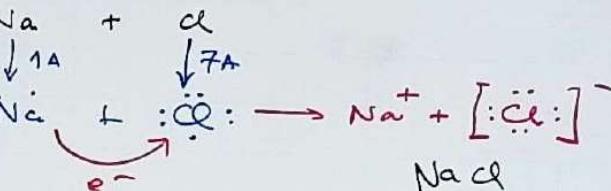
(A)



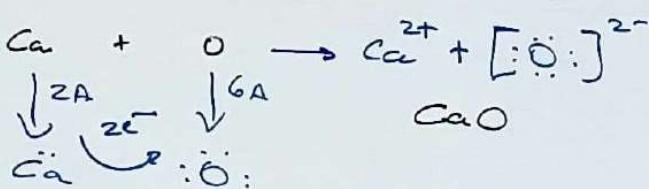
USANDO LEWIS

EX.: $Z = 11$
 $\begin{array}{c} 1s^2 \\ 2s^2 2p^6 \\ 3s^1 \end{array}$
 VALÊNCIA

1s 2s	3s 4s 3d 5s 2p
Na	Cl



EX..



EX..

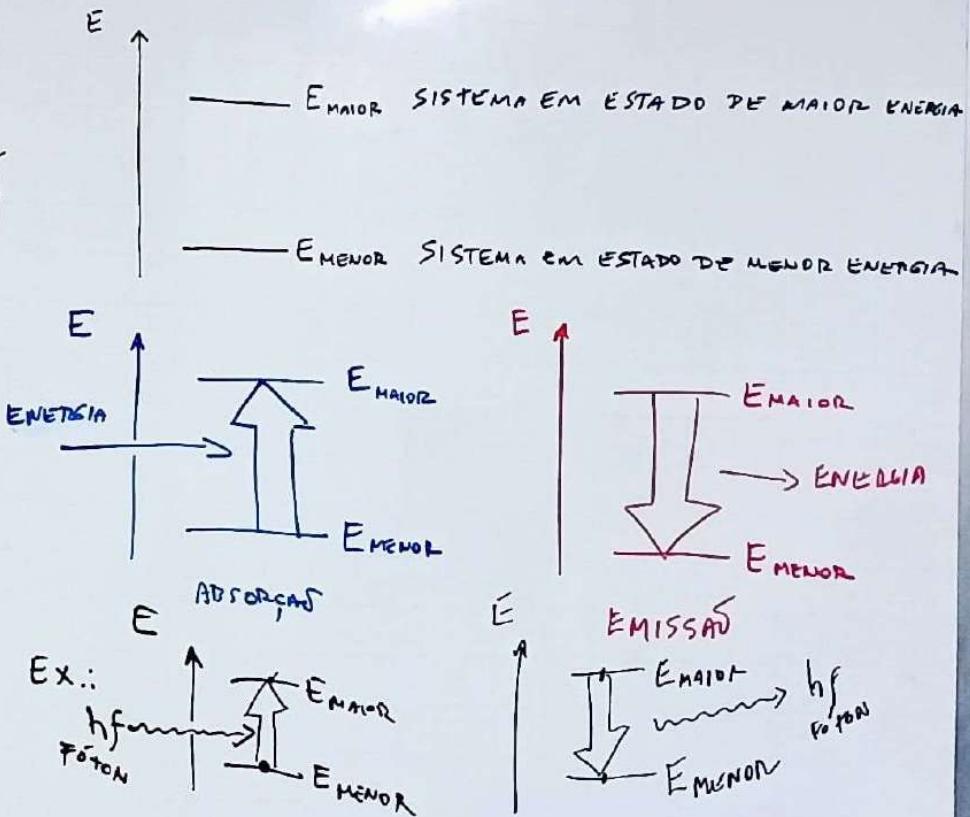


Ex.

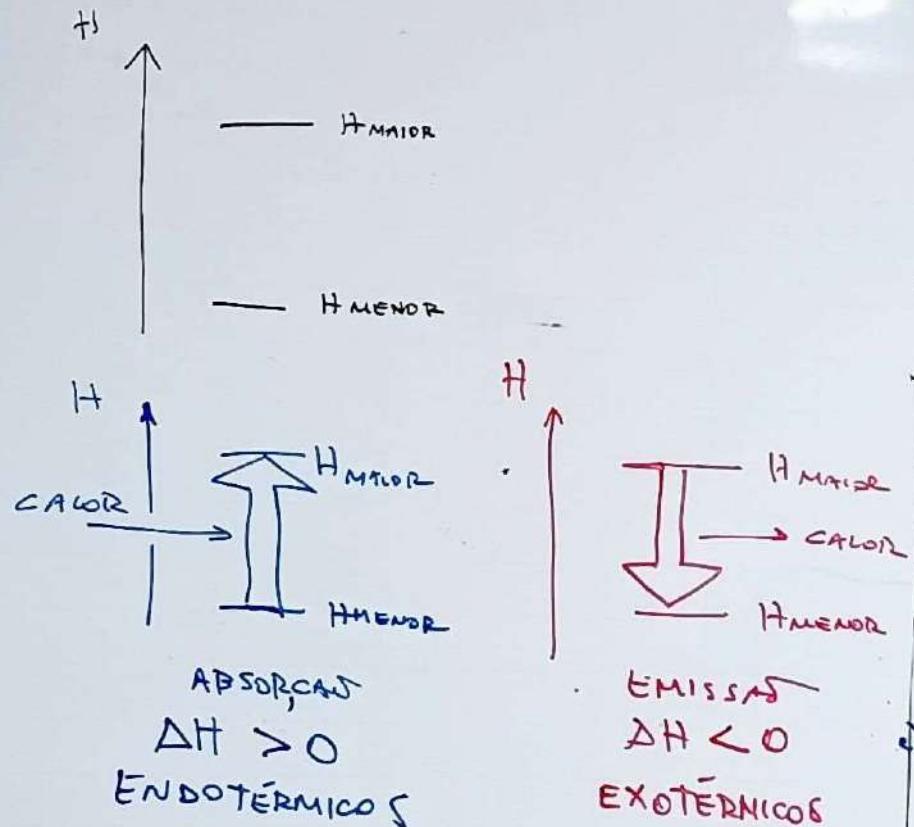


ENERGIAS NA FORMAÇÃO DE COMPOSTOS IÔNICOS

- ALTERAÇÕES NA ENERGIA DE UM SISTEMA:

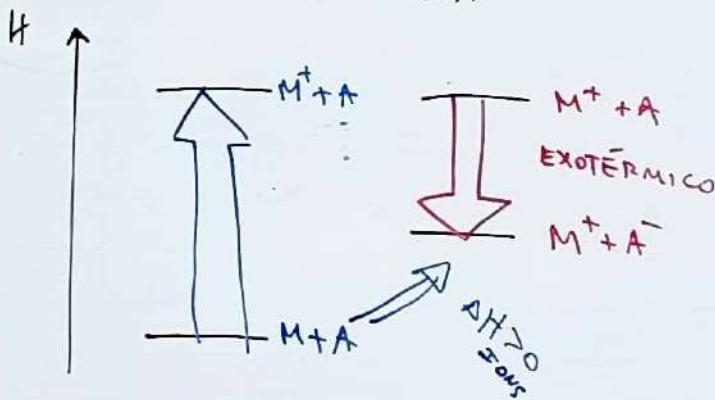
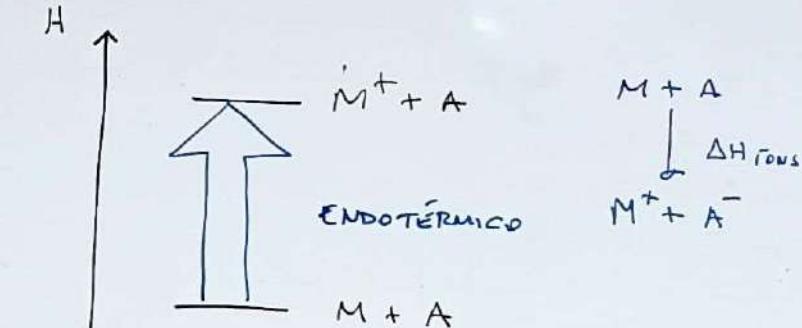


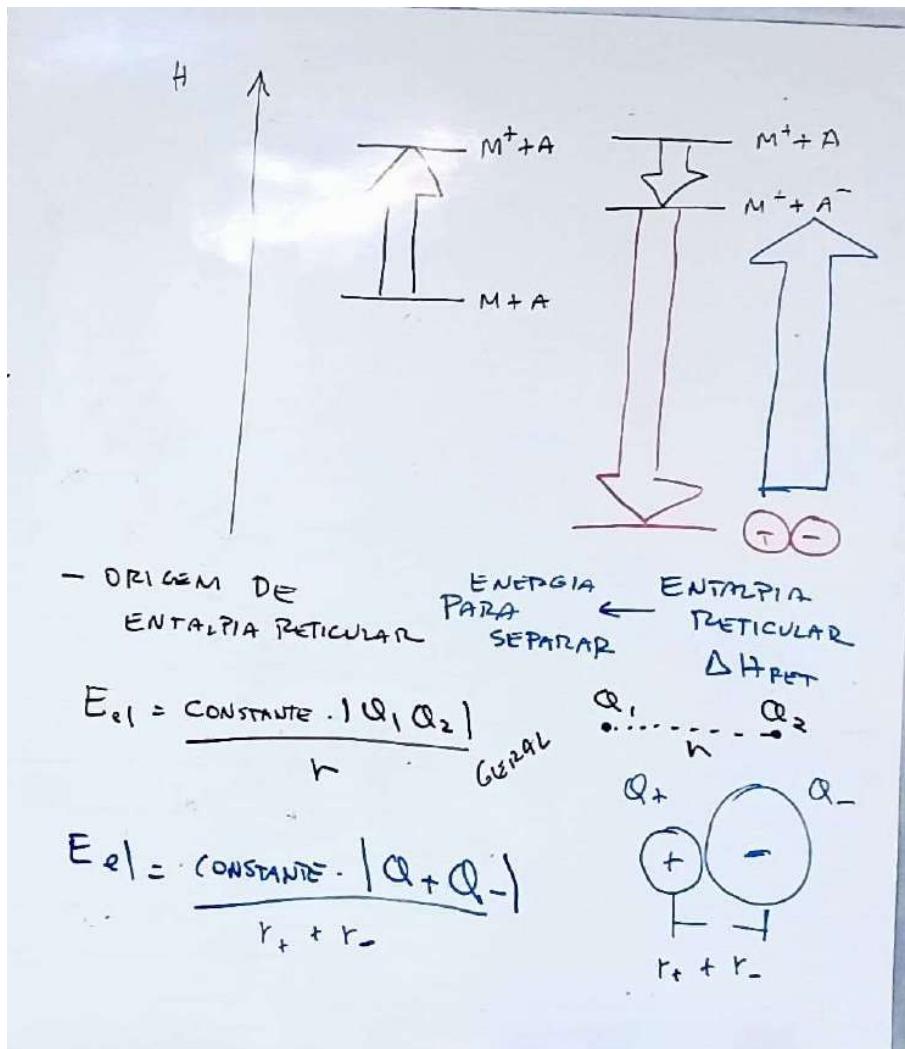
VARIACÕES DA ENERGIA NA FORMA DE CALOR :
ENTALPIA



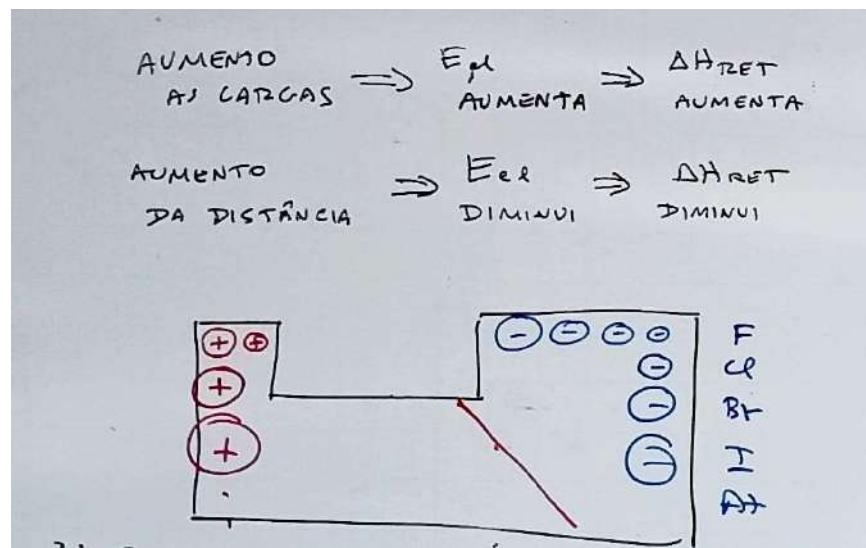
ETAPAS NA FORMAÇÃO DA LIGAÇÃO IÔNICA

1) FORMAÇÃO DOS ÍONS





- Existem duas definições para “energia reticular”:
- A energia para separar os íons (Brown):
 $MA(s) \rightarrow M^+(g) + A^-(g)$ entalpia positiva
 - A energia associada à formação do sal a partir dos íons (outros livros):
 $M^+(g) + A^-(g) \rightarrow MA(s)$ entalpia negativa
 - Vamos seguir o livro.



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	MgO	3.795
NaF	910	CaO	3.414
NaCl	788	SrO	3.217
NaBr	732		
Nal	682		
KF	808	ScN	7.547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

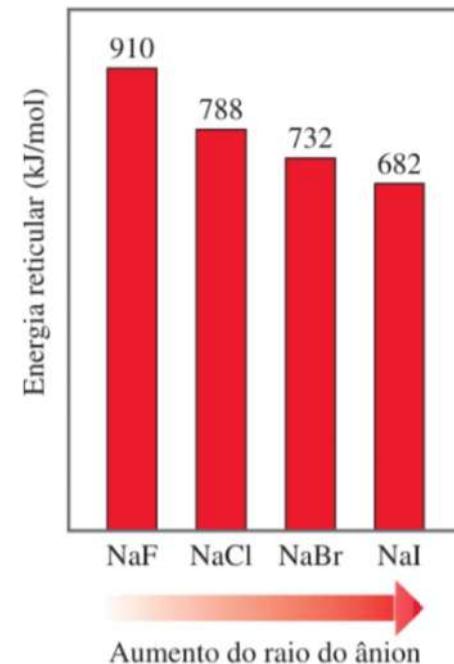
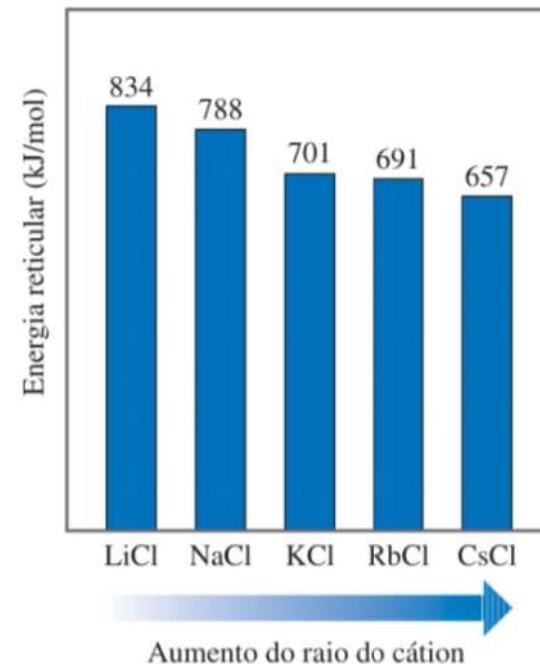
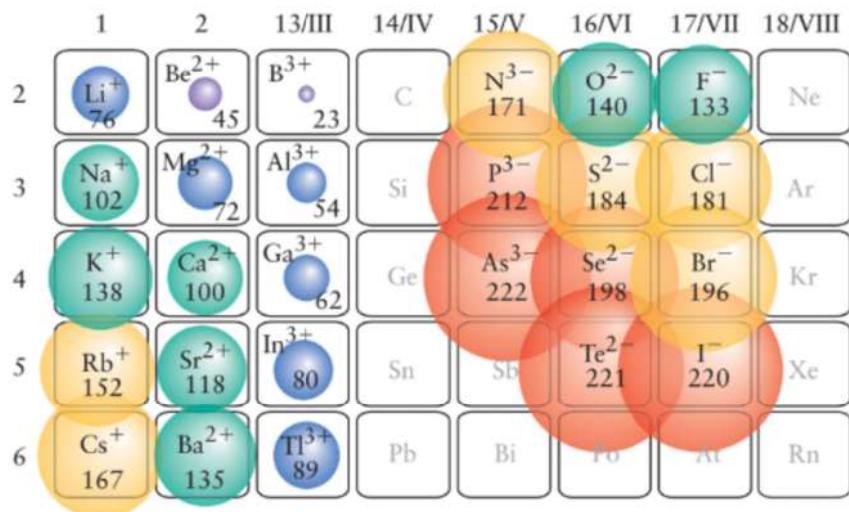
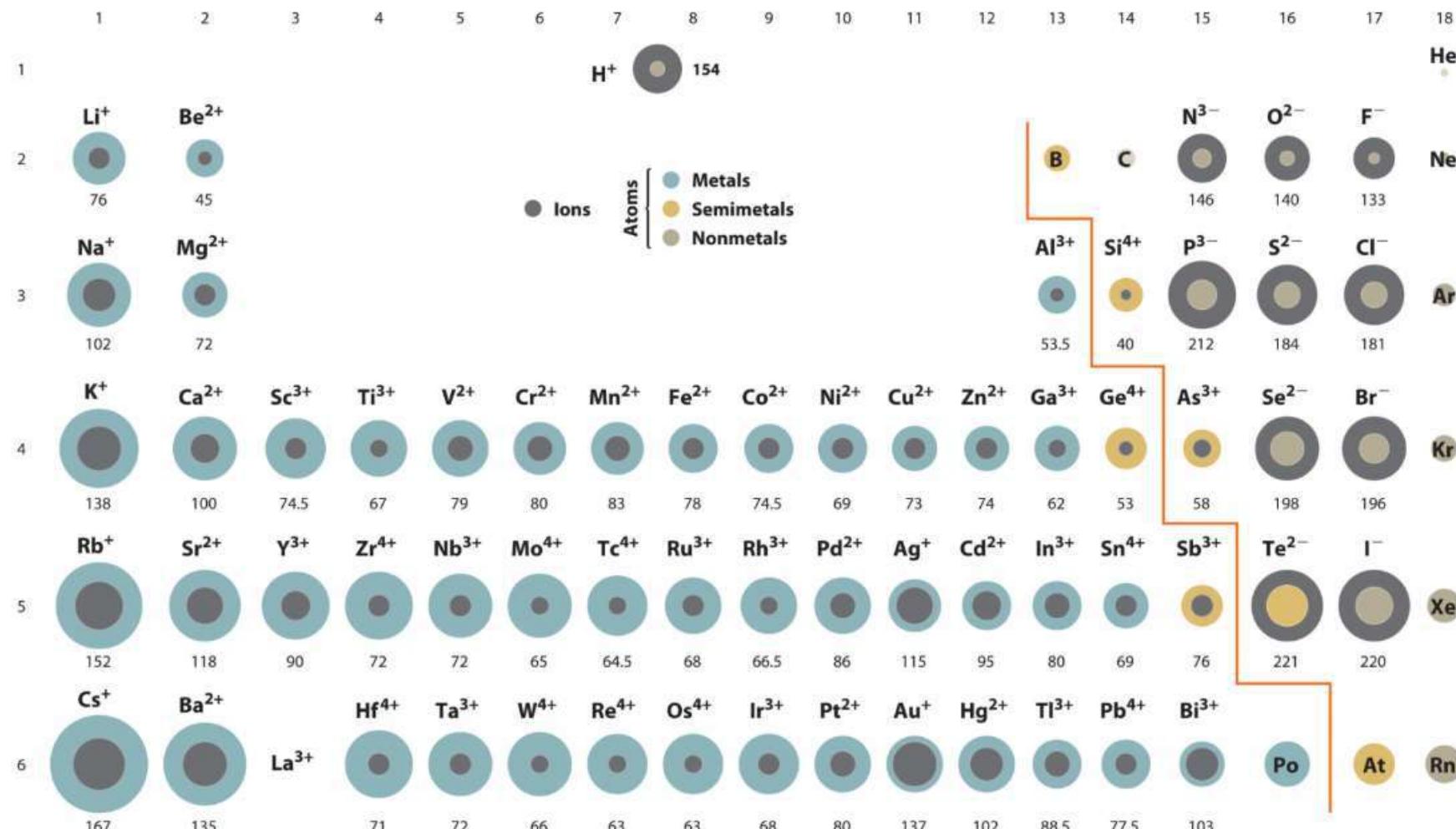


Figure 7.9 Ionic Radii (in Picometers) of the Most Common Oxidation States of the *s*-, *p*-, and *d*-Block Elements



ORDEN DE SAIS A SEGUIR EM ORDEM CRESCENTE

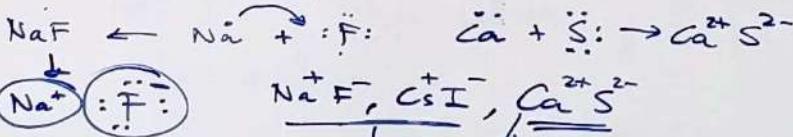
DE ENERGIA ROTICULAR: NaF, CsI, CaS

(1) (2) (3)

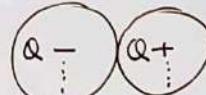
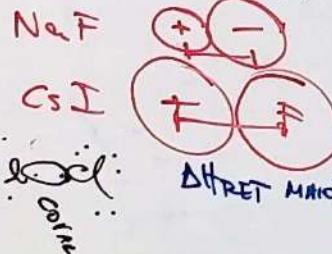
$$E_{el} = \frac{k}{r_+ + r_-}$$

CONSTANTE

E_{el} ALTA FORÇA ELEVADA
 ΔH_{RET} ALTA L.I.
PF AUTO.



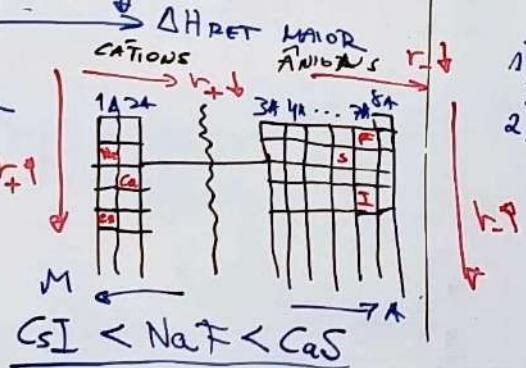
CARGAS MAIORES
 $E_{el} \rightarrow \Delta H_{RET}$ MENOR



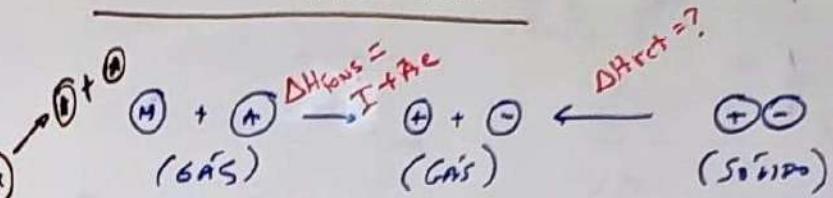
$$q_1 \dots q_2 \quad E \propto \frac{q_1 q_2}{r}$$



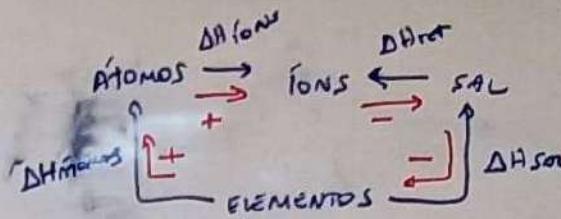
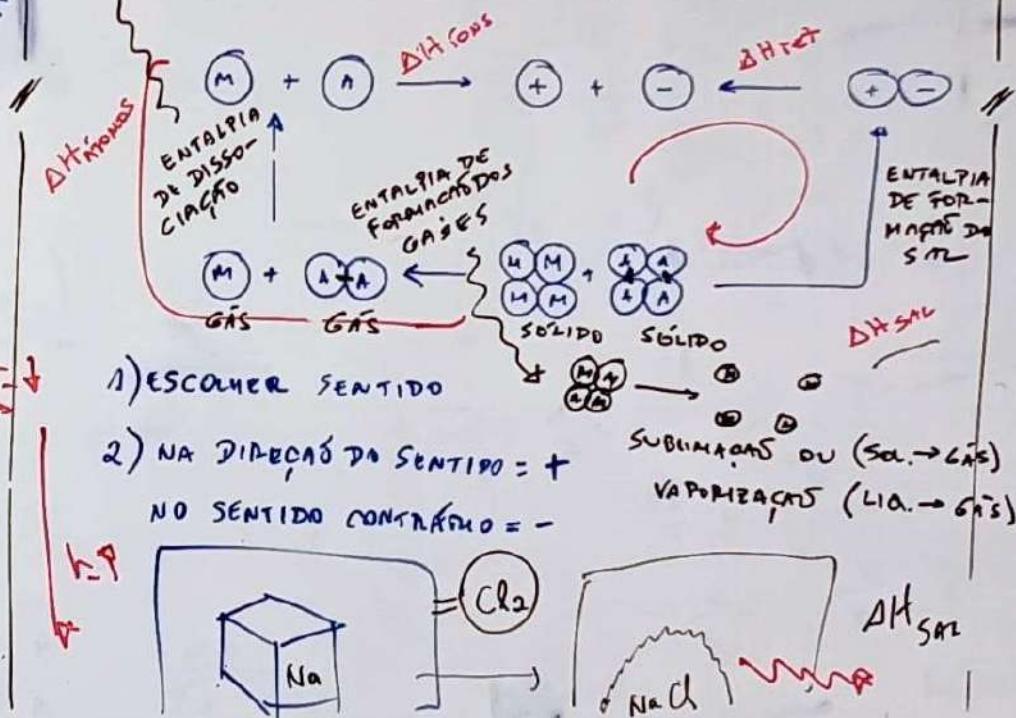
Attrações



CICLO DE HABER - BORN



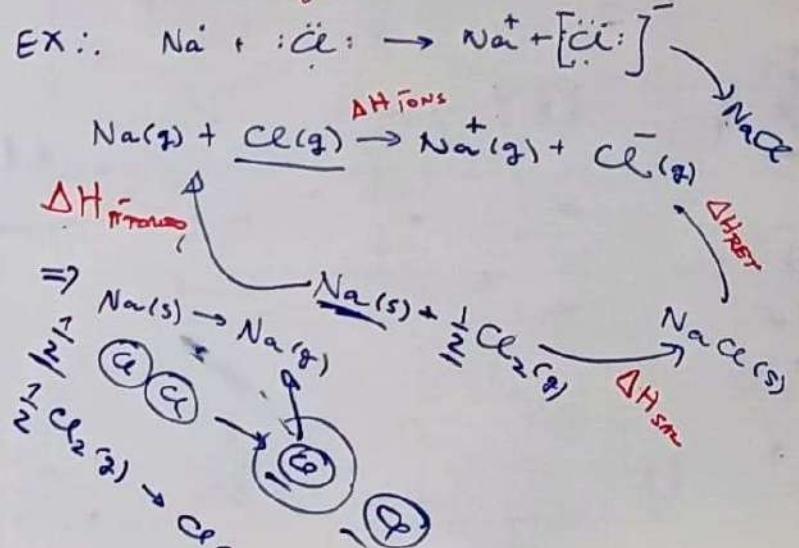
FAZER CICLO TERMODINÂMICO PARA DETERMINAR ΔH_{ret}
A PARTIR DE DADOS EXPERIMENTAIS

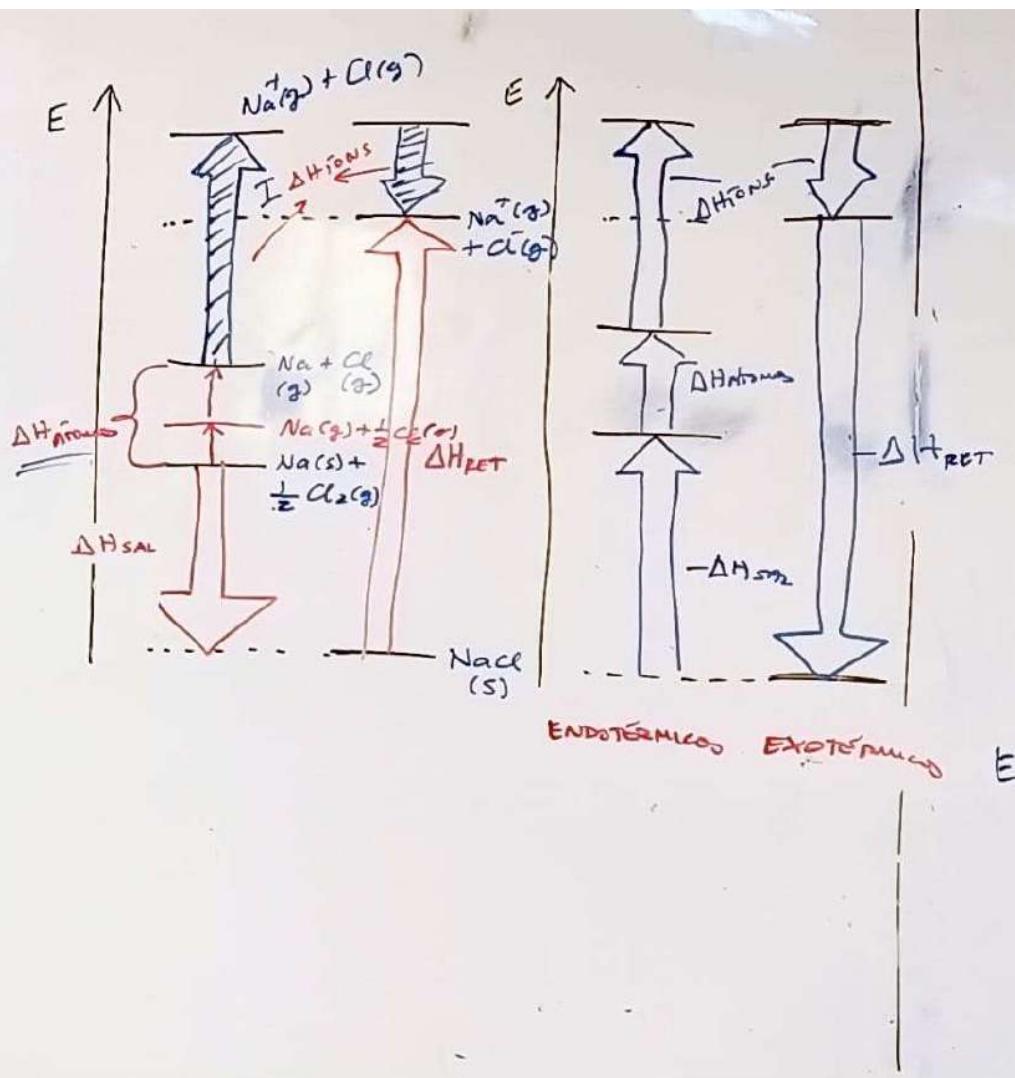


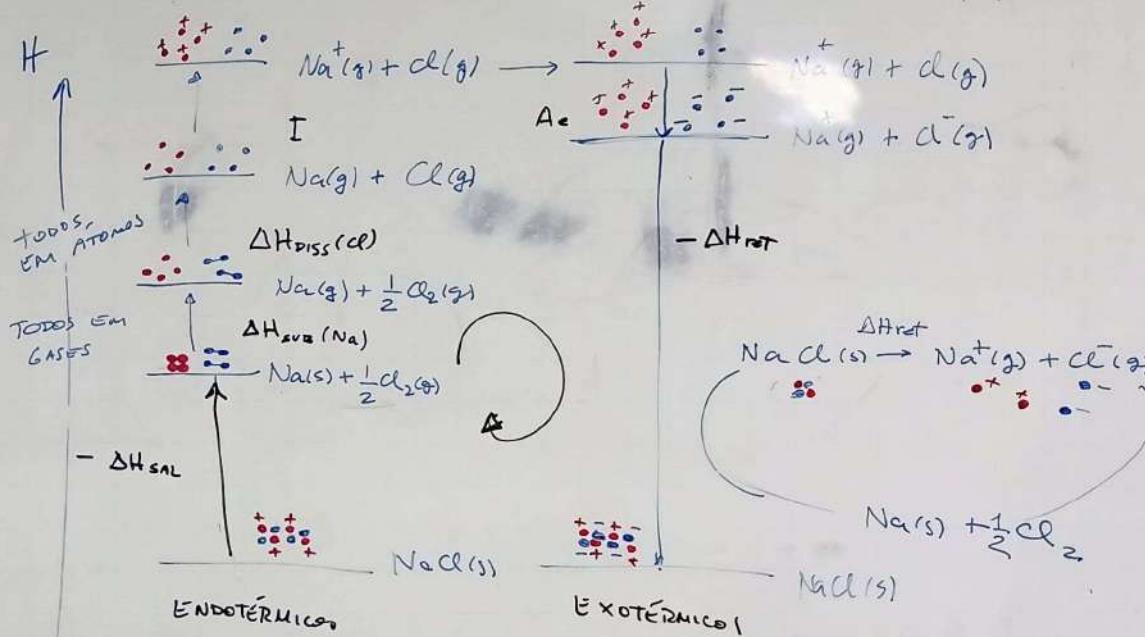
$$-\Delta H_{\text{ret}} = \Delta H_{\text{sol}} + \Delta H_{\text{ions}} + \Delta H_{\text{lattice}} = 0$$

$$\Delta H_{\text{ret}} = \Delta H_{\text{atoms}} + \Delta H_{\text{lattice}} - \Delta H_{\text{sol}}$$

TORNAR GÁS I + Ae
QUEBRAR LIGAÇÃO

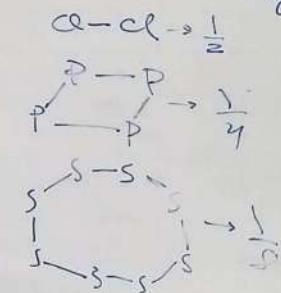
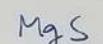
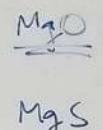
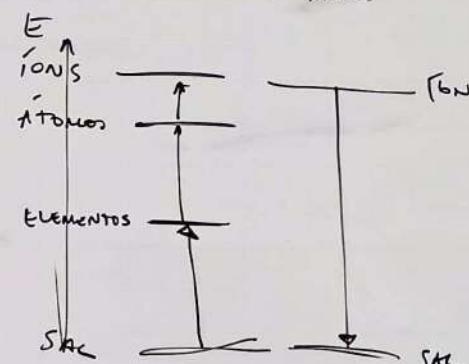






$$-\Delta H_{\text{SAL}} + \Delta H_{\text{sub}} + \Delta H_{\text{diss}} + I + Ae - \overbrace{\Delta H_{\text{ret}}}^{\text{DESEJO}} = 0$$

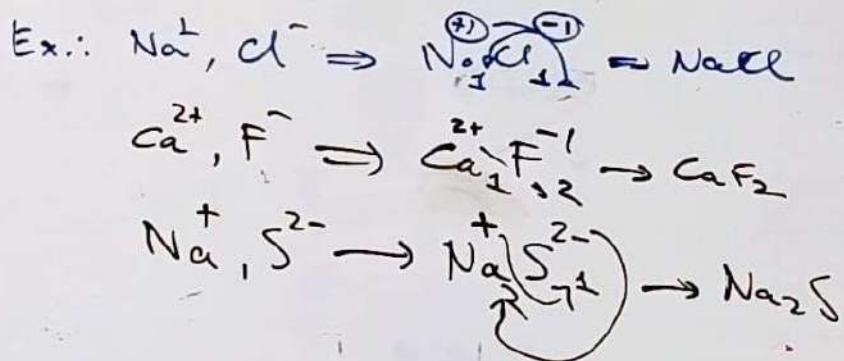
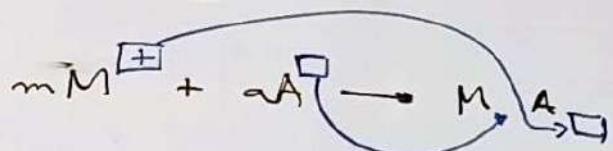
$$\Delta H_{\text{ret}} = \underbrace{\Delta H_{\text{sub}}(\text{Na}) + \Delta H_{\text{diss}}(\text{Cl}_2)}_{\Delta H_{\text{ATOMOS}}} + I + Ae - \underbrace{\Delta H_{\text{SAL}}}_{\Delta H_{\text{IONS}}}$$



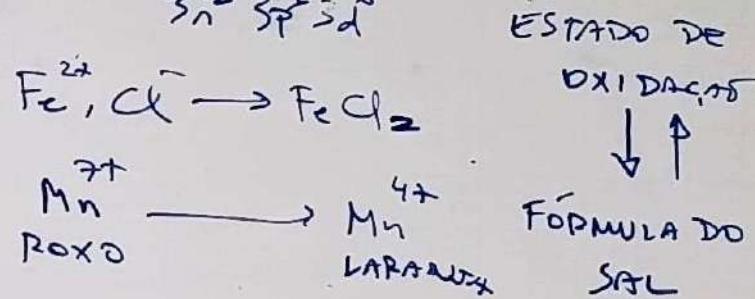
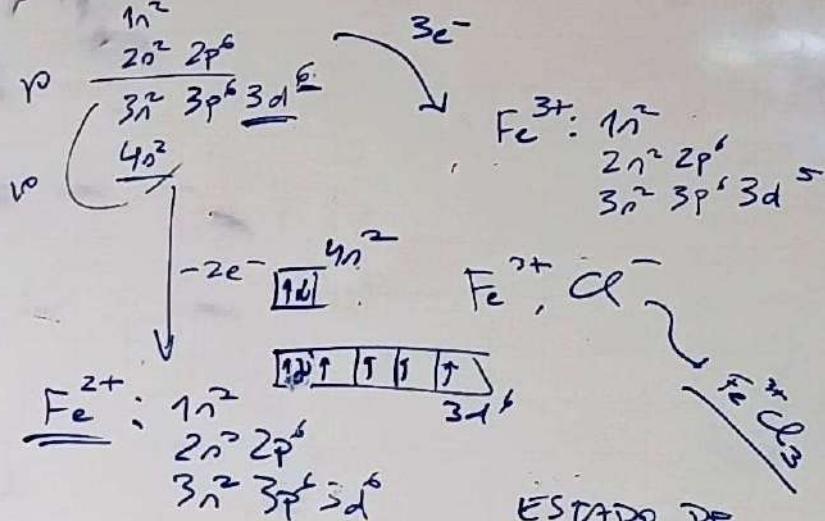
FÓRMULA DOS SAIS

	GRUPO	CARGA
METÁLICOS ↓ CATIONES	1A →	+1
	2A →	+2
	3A →	+3

	CARGAS
AMETÁLICOS ↓ ÂNIONES	5A → -3
	6A → -2
	7A → -1



Fe ($Z = 26$):



Bons estudos!

Ligações covalentes

Prof. Diego J. Raposo

UPE – Poli

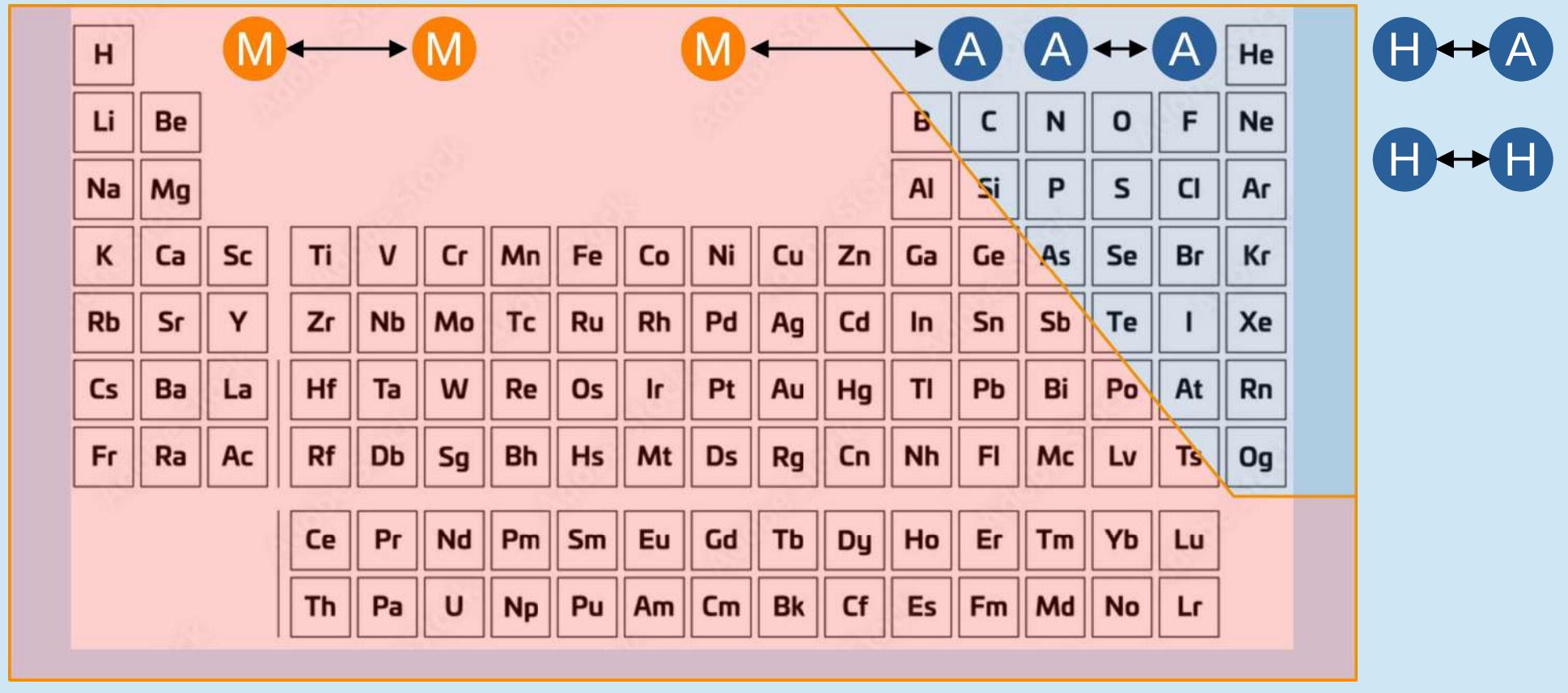
2025.1

Tipos de ligações

Ligaçāo metálica

Ligaçāo iônica

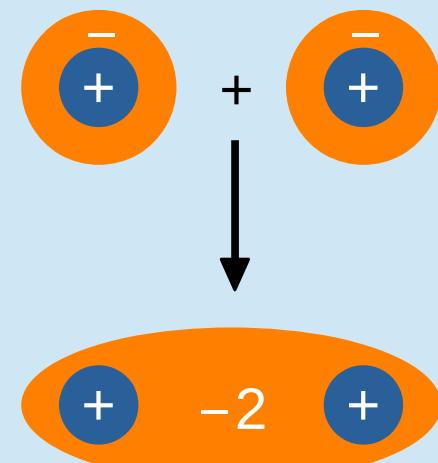
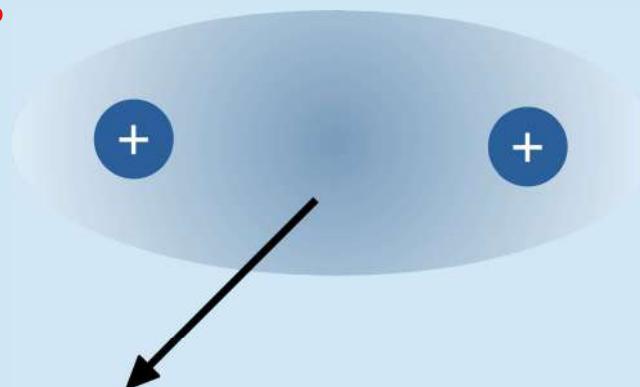
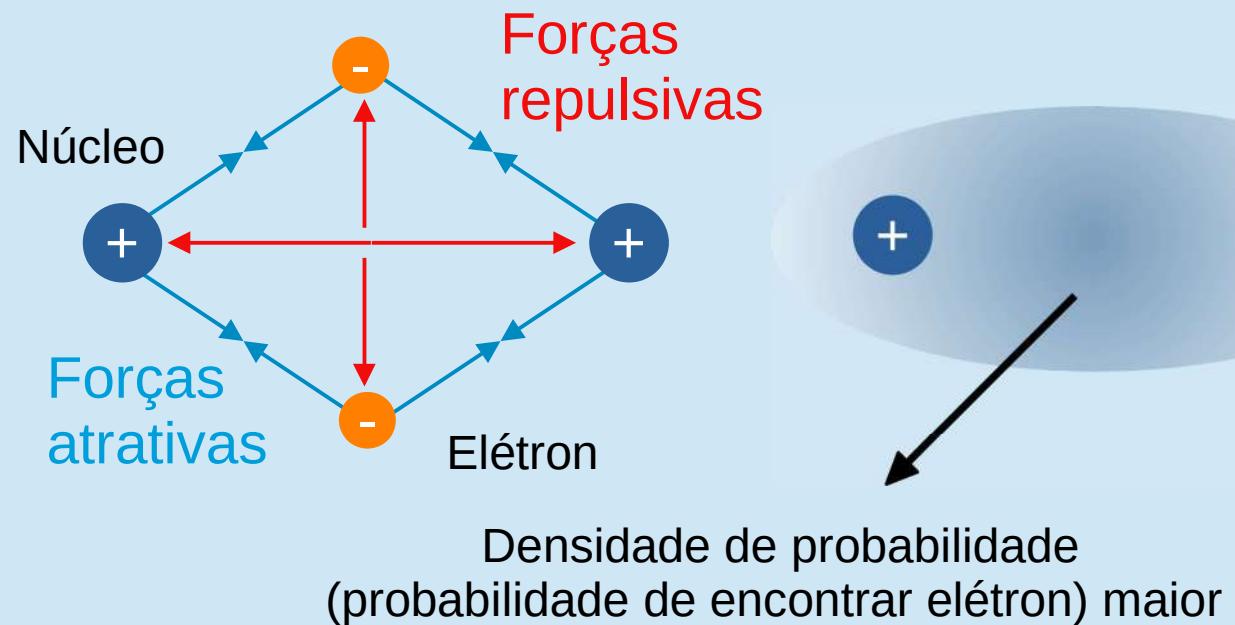
Ligaçāo covalente



O que são e porque se formam

- Muitas substâncias não possuem propriedades características de compostos iônicos;
- Lewis também propôs que átomos podem adquirir configuração de gás nobre **compartilhando um ou mais pares de elétrons**;
- Tal ligação é justificada (isto é, possível e estável) porque **forças atrativas** núcleo-elétrons **superam as repulsivas** (núcleo-núcleo e elétron-elétron):

O que são e porque se formam



O que são e porque se formam

- Átomos que compartilham elétrons formam **moléculas**, e as ligações são chamadas de ligações covalentes.
- **Substâncias covalentes** são formadas por um ou mais tipos de átomos ligados covalentemente. Geralmente:

Substâncias iônicas

Pontos de fusão e ebulação altos
Líquidos conduzem eletricidade
Sólidos duros e quebradiços
Formam soluções condutoras



Substâncias covalentes

Pontos de fusão e ebulação baixos
Líquidos não conduzem eletricidade
Sólidos mais macios e flexíveis
Formam soluções não condutoras



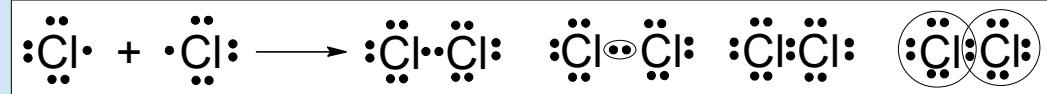
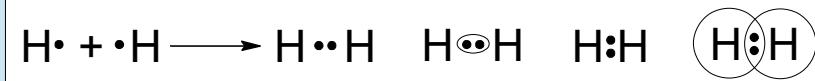
Estruturas de Lewis

- A notação de Lewis pode ser aplicada para substâncias covalentes de duas formas:
 - a) Elétrons como pontos: similar à usada na representação de ligações iônicas, com a diferença de que agora os elétrons compartilhados são identificados entre átomos, sendo destacados ou não.

Ligações iônicas

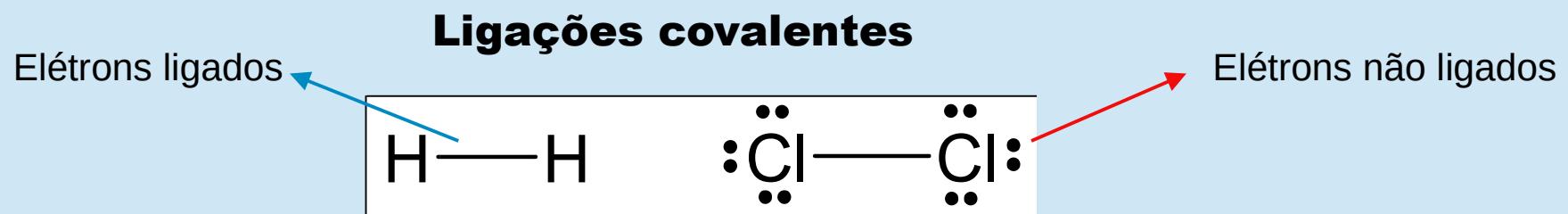


Ligações covalentes



Estruturas de Lewis

b) Elétrons livres (isto é, não ligados) como pontos: cada par de elétrons na ligação é representado como uma linha conectando os átomos que se ligam. Elétrons livres continuam sendo representados por pontos.



Ligações simples

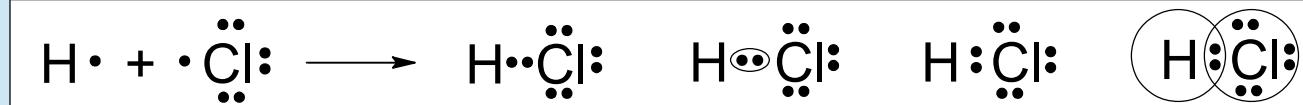
- Como o número de ligações simples que cada ametal pode fazer para completar o octeto depende do número de elétrons de valência, espera-se que cada família de átomos tenham números de ligações e de elétrons livres iguais.

Ligaçāo simples

Com apenas um tipo de átomo (elemento)



Com mais de um tipo de átomo (composto)



Ligações simples

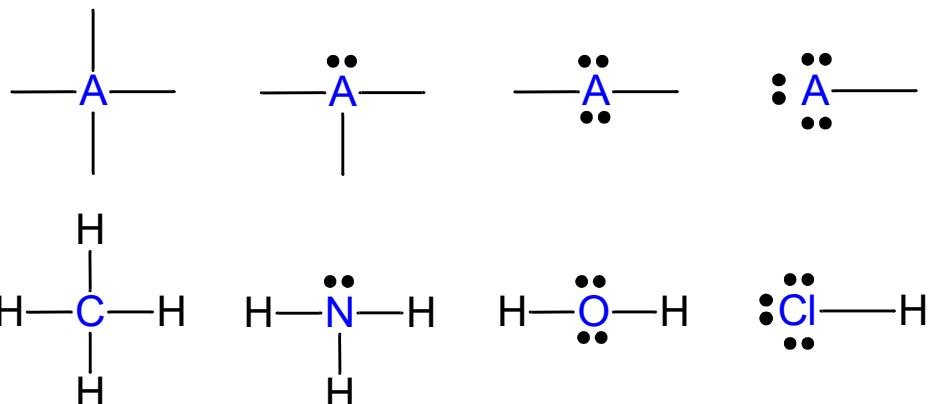
**Com apenas um tipo de átomo
(elemento)**



**Com mais de um tipo de átomo
(composto)**



4A 5A 6A 7A



Ligações múltiplas

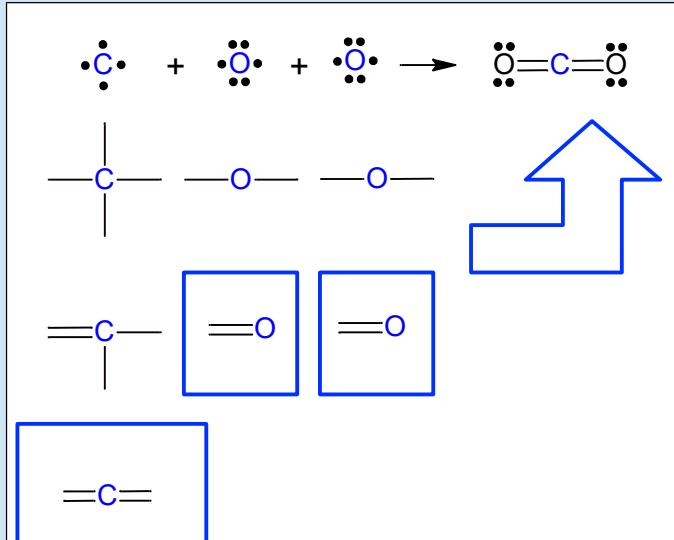
- **Ligações simples** são formadas entre átomos que compartilham apenas um par de elétrons.
- Em **ligações múltiplas** os átomos completam o octeto compartilhando mais de um par de elétrons. Cada ligação dessas é representada por um par de pontos (elétrons como pontos) ou uma linha (elétrons livres como pontos).
- **Ligação dupla:** se átomos compartilham 4 elétrons temos dois pares, ou duas linhas, na representação;
- **Ligações triplas:** quando átomos compartilham 6 elétrons (três pares, três linhas).

Ligações duplas

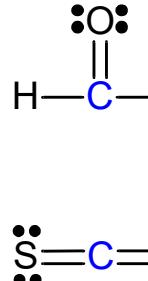
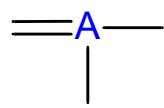
**Com apenas um tipo de átomo
(elemento)**



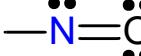
**Com mais de um tipo de átomo
(composto)**



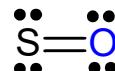
4A



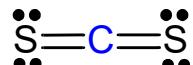
5A



6A



7A

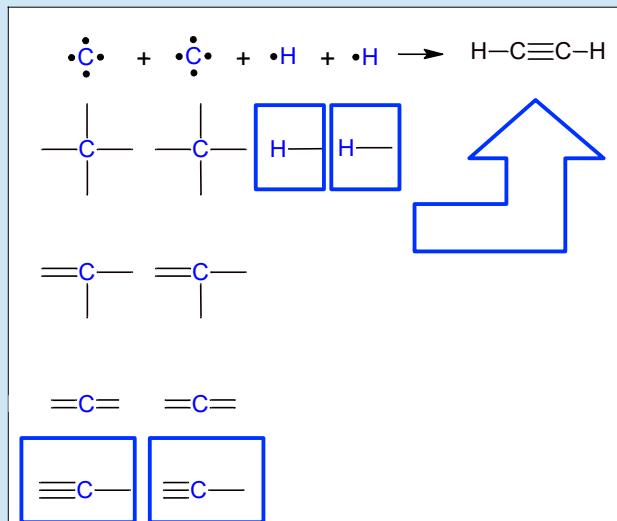


Ligações triplas

Com apenas um tipo de átomo (elemento)



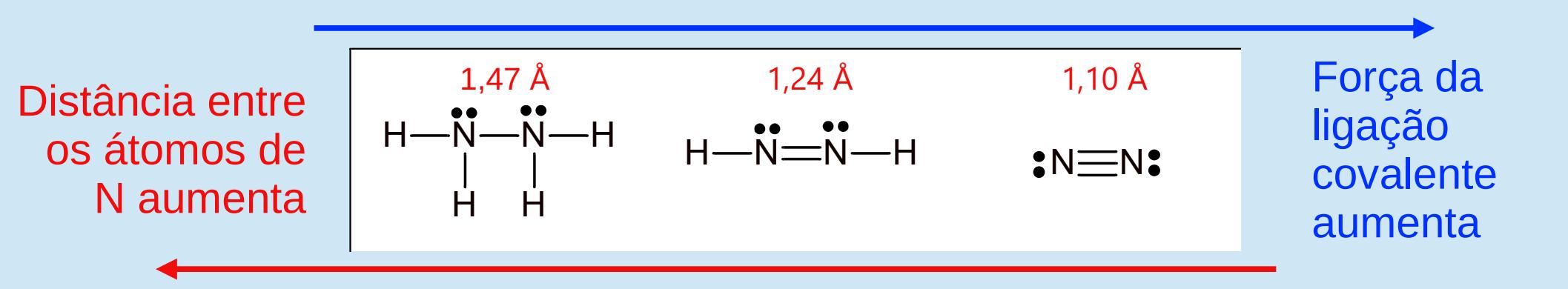
Com mais de um tipo de átomo (composto)



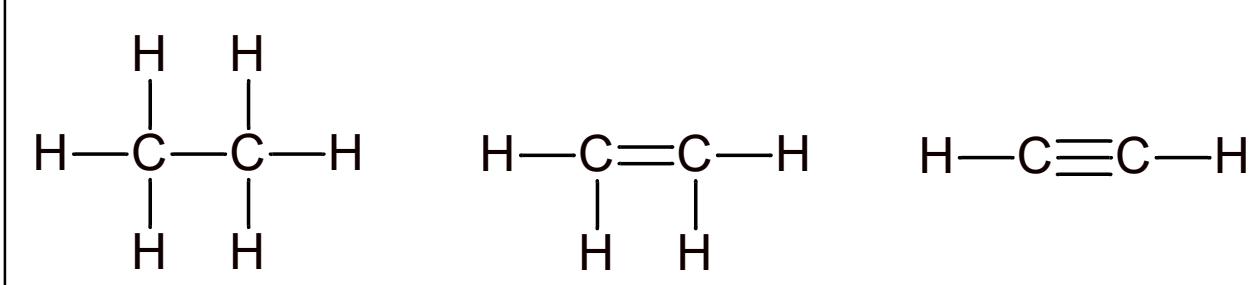
4A	5A	6A	7A
$\equiv \text{A} -$	$\equiv \text{A} :$		
$:\text{N} \equiv \text{C} - \text{H}$			

Força da ligação e distâncias

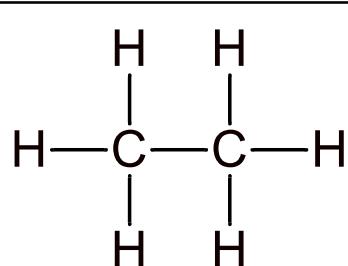
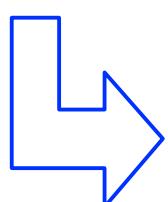
- Quanto mais elétrons compartilhados entre dois átomos:
 - a) Maior a **força** da ligação covalente (mais energia é necessária para rompê-la);
 - b) Menor é a **distância** entre átomos.



**Que molécula possui menor distância entre os átomos de carbono? C_2H_6 , C_2H_4 ou C_2H_2 .
Mostre as estruturas de Lewis de cada uma.**



Distância entre
os átomos de
C aumenta



No C_2H_6 : 1,54 Å
No C_2H_4 : 1,34 Å
No C_2H_2 : 1,20 Å

Obrigado e boa sorte!

Polaridade e eletronegatividade

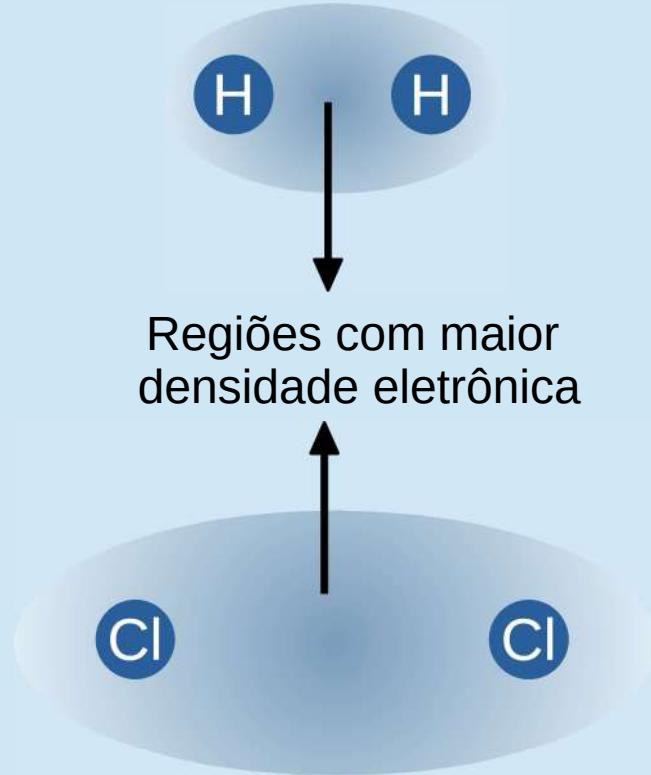
Prof. Diego J. Raposo

UPE – Poli

2025.1

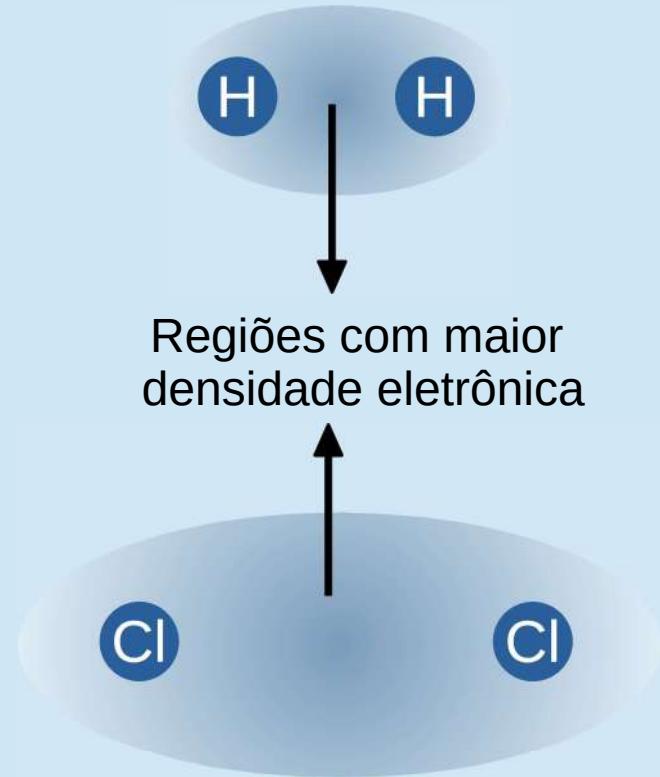
Polaridade de ligação química

- Átomos possuem tendências próprias de atrair elétrons em ligação química;
- Isso caracteriza o tipo de ligação que será formada;
- Em moléculas formadas por **dois átomos de um mesmo elemento** a tendência de cada átomo é igual. Logo a densidade eletrônica (região com maior probabilidade de encontrar o elétron) se encontra exatamente no meio dos átomos.



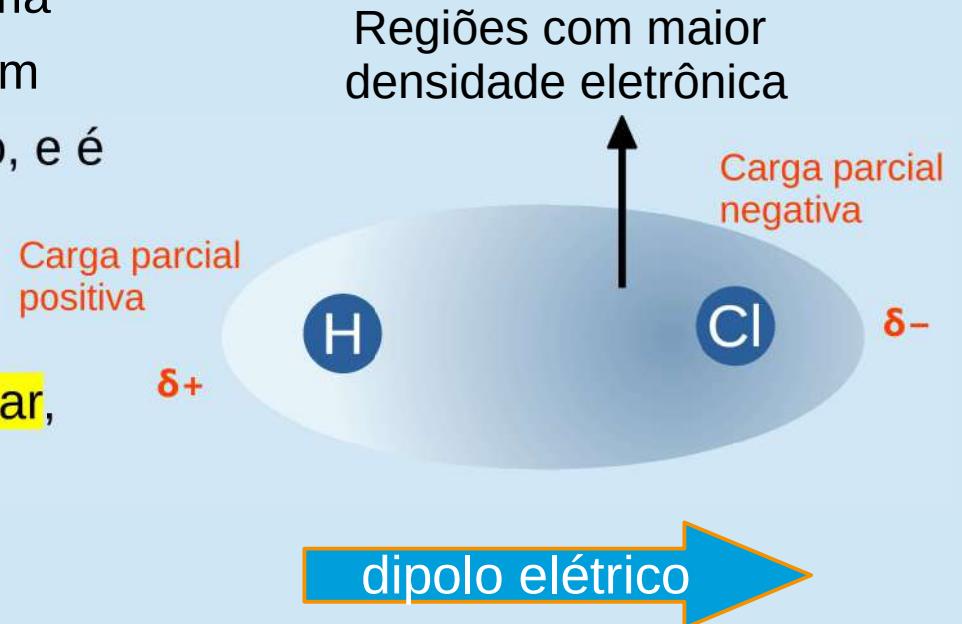
Polaridade de ligação química

- Esse tipo de ligação é chamada de **covalente apolar**, pois não há dipolos elétricos, nem preferência da nuvem eletrônica por um dos átomos (cargas ao redor dos átomo são equivalentes);
- Ela ocorre entre **átomos de um mesmo elemento**, e entre átomos de hidrogênio (H_2).



Polaridade de ligação química

- Se, por outro lado, um dos átomos tem uma tendência maior de atrair elétrons, a nuvem estará mais deslocalizada em sua direção, e é mais provável encontrar o elétron mais próximo dele;
- Essa ligação é chamada de **covalente polar**, porque um dipolo elétrico permanente é formado na ligação;
- É comum entre **ametais de diferentes tipos entre si ou ligados ao átomo de hidrogênio.**



Polaridade de ligação química

- Se a diferença entre a capacidade relativa de atrair elétrons entre os átomos é muito grande, haverá a transferência de elétrons para o com maior capacidade, ocorrendo uma ligação iônica. Como vimos, ela ocorre sobretudo entre metais e ametais.



Covalente apolar
(ametais iguais)



Covalente polar
(ametais diferentes)



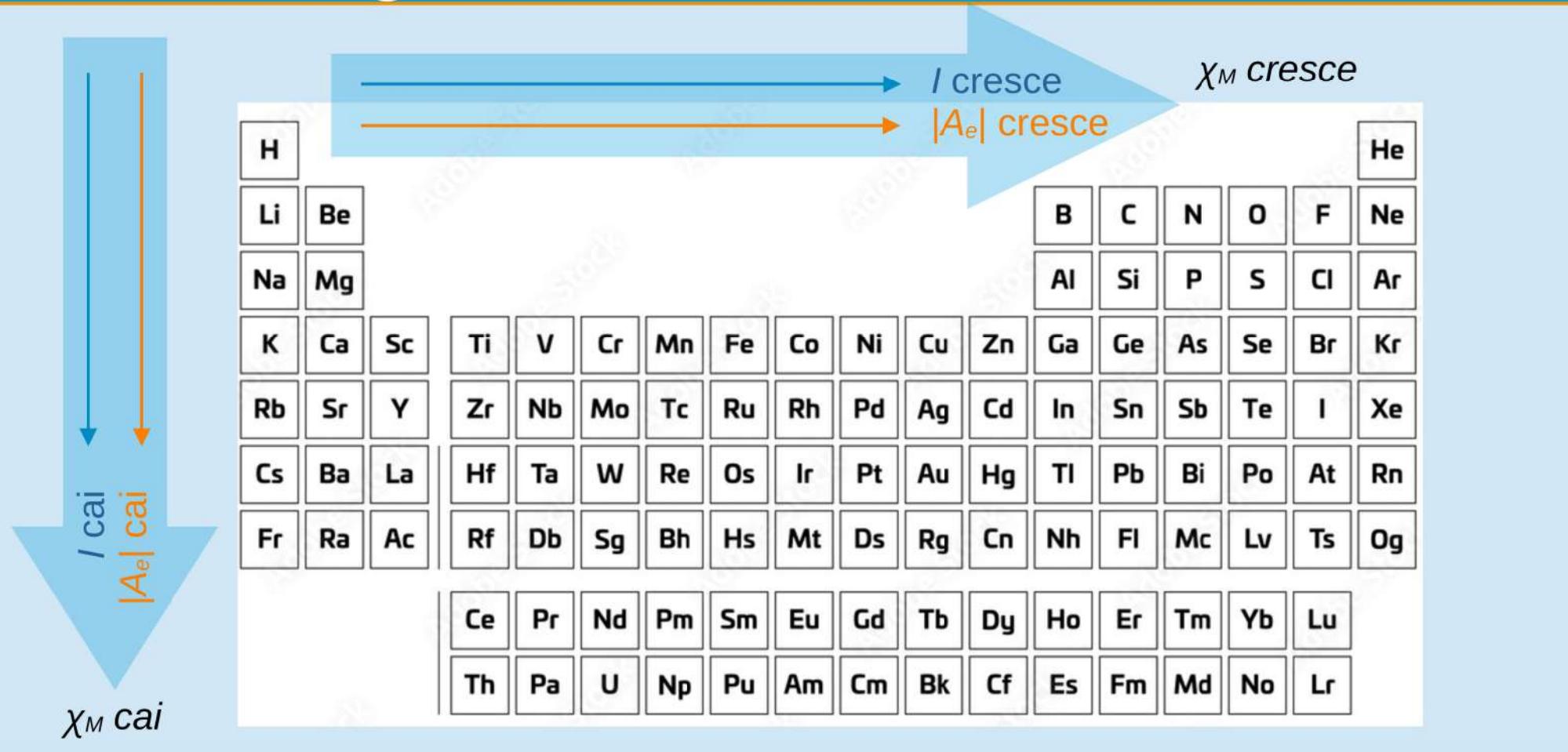
Iônica
(ametal + metal)

Eletronegatividade de Millikan

- A tendência de um átomo atrair elétrons é chamada de eletronegatividade, uma quantidade que ajuda a prever o tipo de ligação que é formada entre dois ou mais átomos. Ela também auxilia o estudo de propriedades físicas e químicas das substâncias.
- É possível estimar a eletronegatividade de diferentes formas. Uma delas, chamada de **eletronegatividade de Millikan**, combina a energia de ionização e a afinidade eletrônica de um átomo para estimar sua eletronegatividade:

$$\chi_M = \frac{I + A_e}{2}$$

Eletronegatividade de Millikan



Eletronegatividade de Pauling

- Ou seja, átomos que possuem uma energia de ionização elevada (dificilmente perdem os elétrons que possuem) e uma afinidade eletrônica também alta (liberam muita energia quando recebem elétrons, pois diminuem bastante em energia ao incorporá-los) são muito eletronegativos.
- A mais usada medida de eletronegatividade é, no entanto, devida a Linus Pauling. A **eletronegatividade de Pauling** (χ_P) é calculada 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).

Eletronegatividade de Pauling

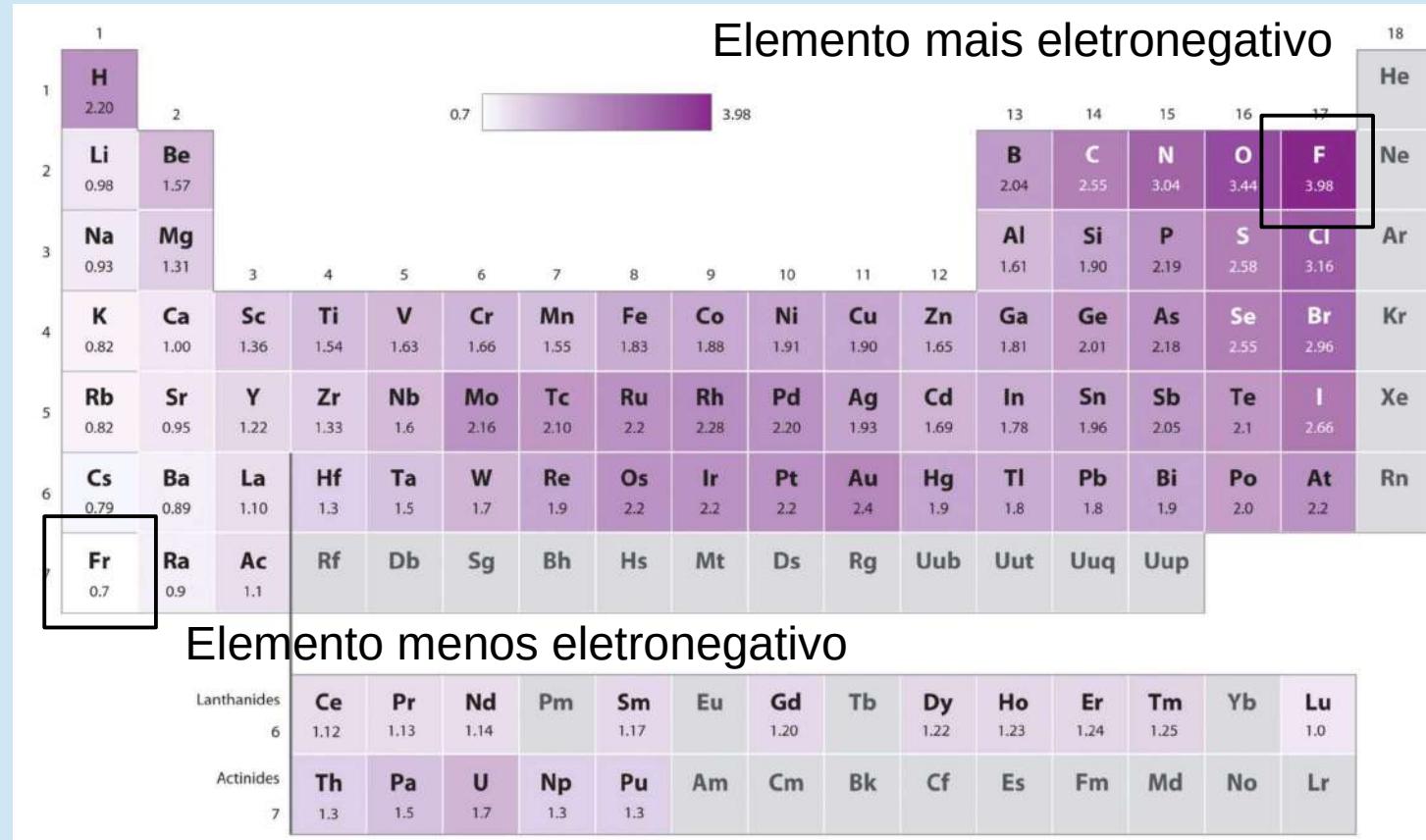
Porque n aumenta
(distância
núcleo-
elétrons)



Porque
força
núcleo-
elétrons
diminui



χ diminui



χ aumenta

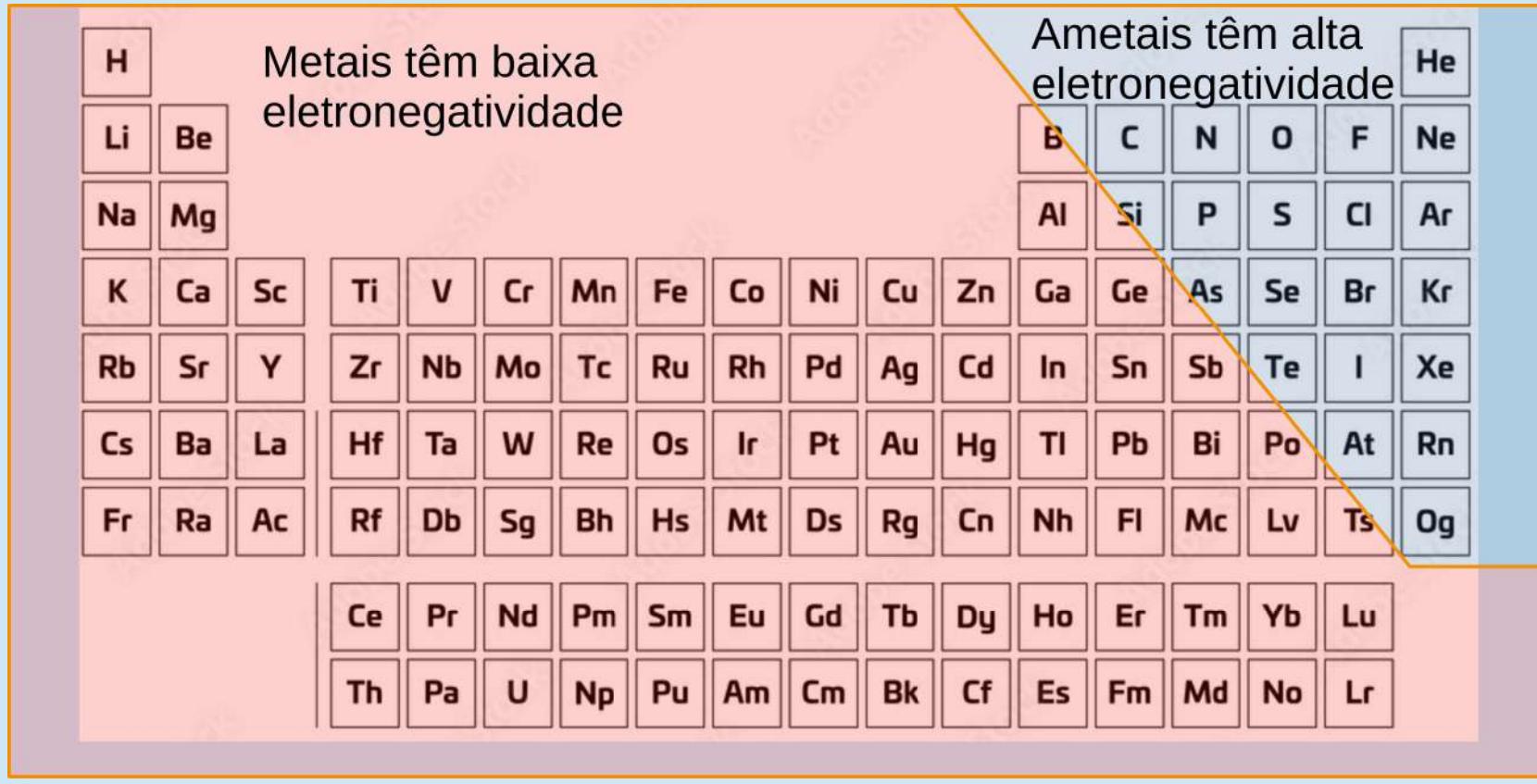


Porque força
núcleo-elétrons
aumenta



Porque Z_{ef}
aumenta

Eletronegatividade



Eletronegatividade

- Os átomos mais eletronegativos têm **carga nuclear efetiva maior e raios menores**, pois isso maximiza a interação dos elétrons de valência (inclusive os que estão na ligação covalente) com o núcleo;
- A eletronegatividade de Pauling varia de 0,7 (Fr) a 4,0 (F), mas memorizar tais valores não é importante. Por outro lado, saber quais os átomos são mais eletronegativos em um grupo é bastante relevante na determinação do tipo de cada ligação e na polaridade da ligação e da molécula. Essa **comparação relativa** pode ser feita via inspeção da **tabela periódica**.

Eletronegatividade e tipos de ligação

- Podemos inferir se a ligação tender a ser covalente (isto é, temos uma molécula) ou iônica (formando substâncias sólidas iônicas);

Método 1: identificando os elementos na tabela, e se são metais (M), ametais (A) e hidrogênio (H).

H + H → Ligação covalente apolar

H + A → Ligação covalente polar

A + A → Ligação covalente apolar

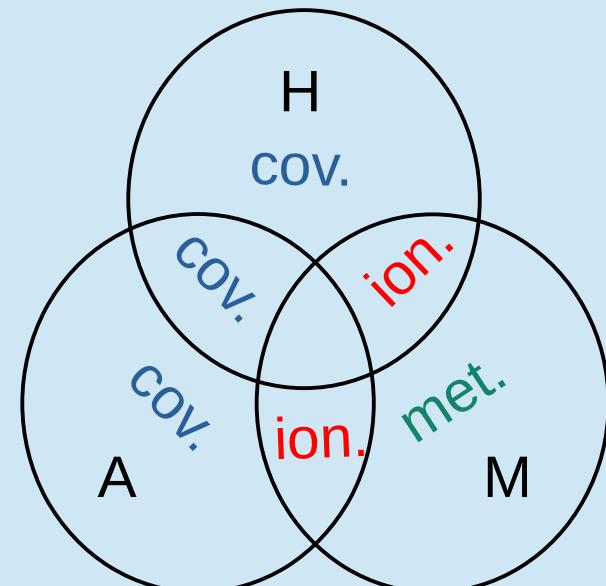
A + A' → Ligação covalente polar

M + M → Ligação metálica

M + M' → Ligação metálica

M + H → Ligação iônica

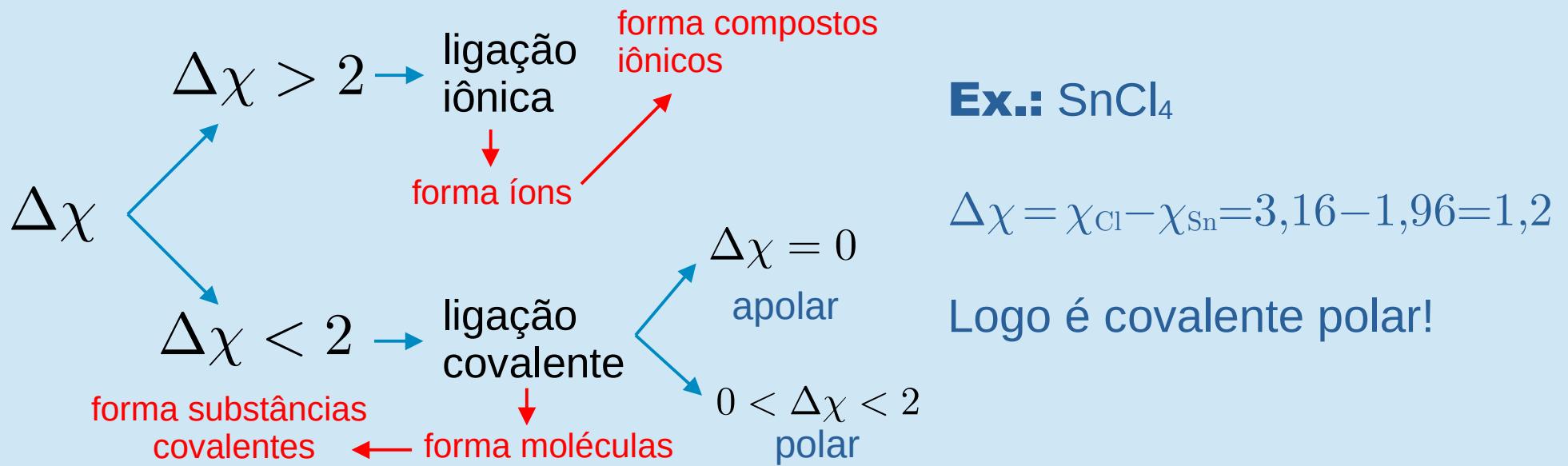
M + A → Ligação iônica



Tal abordagem, porém, tem várias exceções. Ex.: SnCl₄ é covalente embora seja M + A

Eletronegatividade e tipos de ligação

- **Método 2:** Cálculo de $\Delta\chi = \chi_A - \chi_B$ para o par de átomos AB, onde χ_A é a eletronegatividade do átomo mais eletronegativo e χ_B é a eletronegatividade do átomo menos eletronegativo. Portanto:

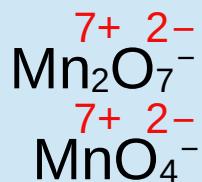


Eletronegatividade e tipos de ligação

- O método 2, no entanto, não funciona tão bem quando metais 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 covalência;
- Quanto maior o estado de oxidação mais difícil retirar o elétron do metal, então a tendência é que haja um compartilhamento (ligação covalente) ao invés da transferência para o ametal (ligação iônica).



Ligação iônica



Ligação covalente

Eletronegatividade e tipos de ligação

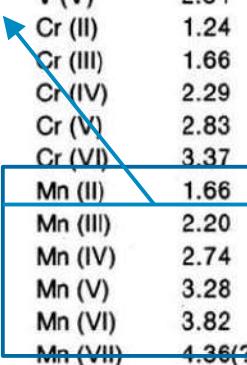
1A									7A	8A				
H ⁺								H ⁻						
Li ⁺														
Na ⁺	Mg ²⁺													
Metais de transição														
K ⁺	Ca ²⁺	Sc ³⁺	Ti ⁴⁺	V ⁵⁺ V ⁴⁺	Cr ³⁺	Mn ²⁺ Mn ⁴⁺	Fe ²⁺ Fe ³⁺	Co ²⁺ Co ³⁺	Ni ²⁺	Cu ⁺ Cu ²⁺	Zn ²⁺			
Rb ⁺	Sr ²⁺						Pd ²⁺	Ag ⁺	Cd ²⁺		Sn ²⁺ Sn ⁴⁺	Sb ³⁺ Sb ⁵⁺	Te ²⁻	I ⁻
Cs ⁺	Ba ²⁺						Pt ²⁺	Au ⁺ Au ³⁺	Hg ²⁺ Hg ²⁺		Pb ²⁺ Pb ⁴⁺	Bi ³⁺ Bi ⁵⁺		

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

Table 1. Electronegativities and Change with Unit Charge

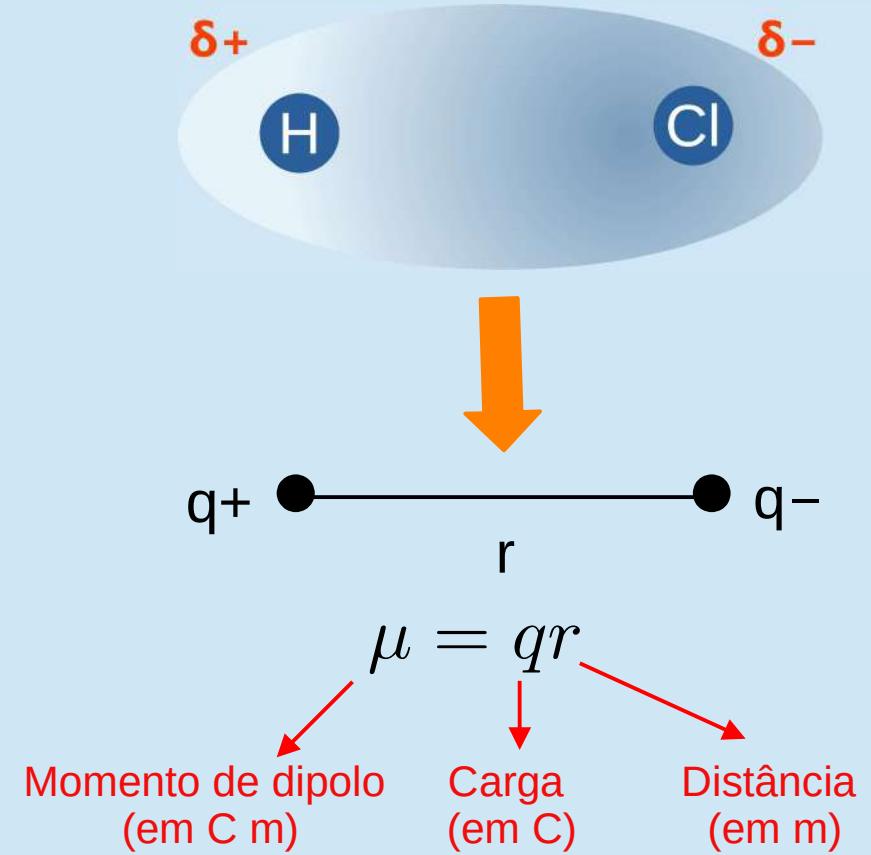
	S	ΔS_i		S	ΔS_i		S	ΔS_i		S	ΔS_i
H	2.592	2.528	Ti (II)	0.64	1.256	Ni (IV)	3.27	2.839	Mo (IV)	1.40	1.858
Li	0.886	1.468	Ti (III)	1.09	1.639	Ni (V)	3.81	3.065	Mo (V)	1.73	2.065
Be (I)	1.56	1.961	Ti (IV)	1.50	1.923	Cu (II)	1.98	2.209	Mo (VI)	2.20	2.329
Be (II)	1.810	2.112	V (II)	0.69	1.304	Zn	2.223	2.341	Ag (I)	1.826	2.122
B (I)	1.53	1.961	V (III)	1.39	1.851	Ga (I)	0.86	1.456	Cd	1.978	2.208
B (II)	2.19	2.323	V (IV)	1.89	2.158	Ga (III)	2.419	2.442	In (I)	0.71	1.323
B (III)	2.275	2.368	V (V)	2.51	2.487	Ge (IV)	2.618	2.540	In (III)	2.138	2.296
C	2.746	2.602	Cr (II)	1.24	1.748	As	2.816	2.635	Sn (II)	1.49	1.916
N	3.104	2.806	Cr (III)	1.66	2.023	Se	3.014	2.726	Sn (IV)	2.298	2.380
O	3.654	3.001	Cr (IV)	2.29	2.376	Br	3.219	2.817	Sb	2.458	2.461
F	4.000	3.140	Cr (V)	2.83	2.641	Rb	0.312	0.866	Te	2.618	2.540
Na	0.835	1.435	Cr (VI)	3.37	2.882	Sr	0.721	1.333	I	2.778	2.617
Mg	1.318	1.802	Mn (II)	1.66	2.023	Y (II)	0.40	0.993	Cs	0.220	0.736
Al (I)	0.84	1.439	Mn (III)	2.20	2.329	Y (III)	0.65	1.260	Ba	0.683	1.298
Al (II)	1.63	2.004	Mn (IV)	2.74	2.599	Zr (II)	0.52	1.132	W (II)	0.73	1.341
Al (III)	1.714	2.055	Mn (V)	3.28	2.843	Zr (III)	0.79	1.395	W (III)	0.98	1.910
Si (III)	1.99	2.215	Mn (VI)	3.82	3.069	Zr (IV)	0.90	1.489	W (IV)	1.23	1.741
Si (IV)	2.138	2.296	Mn (VII)	4.36(?)	3.278	Nb (II)	0.77	1.378	W (V)	1.48	1.910
P	2.515	2.490	Fe (II)	1.64	2.011	Nb (III)	1.02	1.586	W (VI)	1.67	2.029
S	2.957	2.790	Fe (III)	2.20	2.329	Nb (IV)	1.25	1.755	Hg	2.195	2.326
Cl	3.475	2.927	Co (II)	1.96	2.198	Nb (V)	1.42	1.871	Tl (I)	0.99	1.562
K	0.445	1.047	Co (III)	2.56	2.512	Mo (II)	0.90	1.489	Tl (III)	2.246	2.353
Ca	0.946	1.527	Co (IV)	3.10	2.764	Mo (III)	1.15	1.684	Pb (II)	1.92	2.175
Sc (II)	0.64	1.256	Ni (II)	1.94	2.187				Pb (IV)	2.291	2.376
Sc (III)	1.02	1.586	Ni (III)	2.73	2.594				Bi	2.342	2.403

iônica



Momento de dipolo

- A ligação covalente polar pode ser tratada aproximadamente como um dipolo elétrico, em que as cargas $q+$ e $q-$ estão separadas por uma distância r . Em moléculas diatômicas, como a única ligação é polar, a molécula é dita polar. Moléculas polares interagem fortemente entre si e com íons, levando a várias propriedades relevantes;
- O momento de dipolo permite quantificar a polaridade de uma ligação.



Momento de dipolo

- Usamos essa equação para determinar o momento de dipolo de uma molécula, mas as unidades são tipicamente:
- Ao invés de C m usa-se Debye (D): $1 \text{ D} = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
- Ao invés de C usa-se unidades da carga do elétron: $1 \text{ e} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- Ao invés de m usa-se Å: $1 \text{ m} = 10^{-10} \text{ Å}$

$$\mu = qr$$

Momento de dipolo (em D) Carga (em e) Distância (em m)

A carga é tão maior quanto a diferença de eletronegatividade entre os átomos

A distância entre eles é tão maior quanto os raios dos átomos

Momento de dipolo

- Ex.: Considere a molécula LiF, cujo momento de dipolo é 6,28 D e o comprimento de ligação é 1,53 Å. Determine a carga dos átomos.

$$\mu = q \cdot r \Rightarrow q = \frac{\mu}{r} = \frac{6,28 \text{ D}}{1,53 \text{ \AA}} \left(\frac{3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}}{1 \text{ D}} \right) \left(\frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} \right) \left(\frac{1 \text{ e}}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \right) = 0,857 \text{ e}$$

- Se a ligação fosse completamente iônica (como esperado já que Li é um metal e F é um ametal, e a diferença de eletronegatividade entre eles é maior do que 2 (3,98 – 0,98 = 3,00) a carga seria 1. Mas ela é menor porque há certa parcela de compartilhamento entre os átomos. Ou seja, a ligação não é 100% iônica. Na verdade, nenhuma ligação tem tal característica: **haverá sempre um grau de covalência na ligação**. Por outro lado, ligações 100% covalentes existem: as ligações entre átomos de um mesmo elemento (como no H₂ ou no Cl₂).

Momento de dipolo

- Se carga e distância seguem tendências opostas, em geral a separação de **carga influencia mais** o momento de dipolo que a distância:

Tabela 8.3 Comprimentos de ligação, diferenças de eletronegatividade e momentos de dipolo dos halogenetos de hidrogênio.

Composto	Comprimento da ligação (Å)	Diferença de eletronegatividade	Momento de dipolo (D)
HF	0,92	1,9	1,82
HCl	1,27	0,9	1,08
HBr	1,41	0,7	0,82
HI	1,61	0,4	0,44

r cresce

q decresce

μ decresce

Calcule as cargas parciais dos átomos na molécula de BrCl, considerando que o momento de dipolo é 0,57 D e os raios atómicos do Br e do Cl são 1,20 Å e 1,02 Å.

Dados:

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

$$1 \text{ e} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$1 \text{ \AA} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Calcule as cargas parciais dos átomos na molécula de BrCl, considerando que o momento de dipolo é 0,57 D e os raios atómicos do Br e do Cl são 1,20 Å e 1,02 Å.

Distância aproximada: $(1,20 + 1,02) \text{ \AA} = 2,22 \text{ \AA}$ Na verdade deve ser menor que isso
(sobreposição dos orbitais)

$$\mu = q \cdot r \Rightarrow q = \frac{\mu}{r} = \frac{0,57 \text{ D}}{2,22 \text{ \AA}} \left(\frac{3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}}{1 \text{ D}} \right) \left(\frac{1 \text{ \AA}}{10^{-10} \text{ m}} \right) \left(\frac{1 \text{ e}}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \right)$$

$$q = \frac{\mu}{r} = \frac{0,57 \cdot 3,34}{2,22 \cdot 1,602} \cdot 10^{-30+10+19} \text{ e} = 0,054 \text{ e}$$

A carga é próxima de zero, como esperado, já que a diferença de eletronegatividade entre cloro e bromo é pequena (0,1), e a molécula é muito pouco polar.

Obrigado e boa sorte!

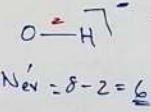
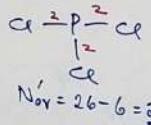
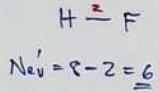
ESTRUTURAS DE LEWIS

COVAMENTE

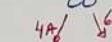
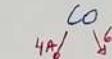
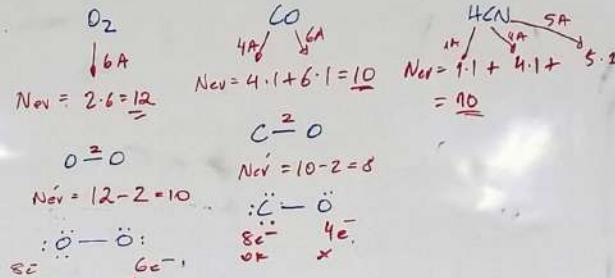
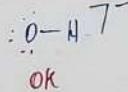
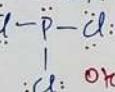


- 1) CONTAR N.º DE ELÉTRONS DE VALENCIA DA MOLECULA
- HF : $1\text{A} + 7\text{A} = 8$ $\text{Ne}^{\prime} = 8 - 2 = 6$
- PCl_3 : $5\text{A} + 3 \times 7\text{A} = 26$ $\text{Ne}^{\prime} = 26 - 6 = 20$
- OH^- : $6\text{A} + 1\text{A} = 7$ $\text{Ne}^{\prime} = 7 + 1 = 8$
- NEGATIVA (ÂNION): ADICIONAR e^-
POSITIVA (CÂTON): RETIRAR e^-

- 2) CONECTAR ÁTOMOS POR LIGAÇÕES SIMPLES, E CONTAR OS ELÉTRONS DE VALENCIA QUE SOBRAM
ÁTOMO EM PLENA QUANTIDADE \rightarrow CENTRAL

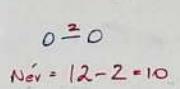


- 3) DISTRIBUIR ELÉTRONS RESTANTES PARA PREENCHER A VALENCIA DOS ÁTOMOS. SE BEM SUSCETÍVEL, FAZ AIQUI:



$\text{Ne}^{\prime} = 4 \cdot 1 + 6 \cdot 1 = 10$

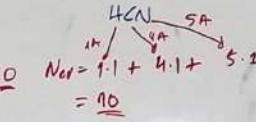
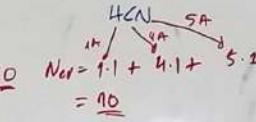
$= 10$



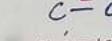
$\text{Ne}^{\prime} = 12 - 2 = 10$



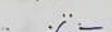
$\text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 1 \cdot 1 + 4 \cdot 1 + 5 \cdot 2 = 10$

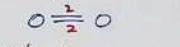


$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 2 = 8$

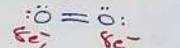


$\text{OK} \quad \text{X}$

- 4) FAZ LIGAÇÕES DUPLAS, DEPOIS TRIPLAS.



$\text{Ne}^{\prime} = 12 - 4 = 8$



$\text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 4 = 6$



$\text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 6 = 4$



$\text{OK} \quad \text{OK}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 4 = 6$



$\text{OK} \quad \text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 6 = 4$



$\text{OK} \quad \text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 8 = 2$



$\text{OK} \quad \text{OK}$



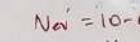
$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 4 = 6$



$\text{OK} \quad \text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 6 = 4$



$\text{OK} \quad \text{OK} \quad \text{X}$



$\text{Ne}^{\prime} = 10 - 8 = 2$



$\text{OK} \quad \text{OK}$

- ① VALENCIA
- ② SIMPLES
- ③ OCTETOS
- ④ MULTIPLAS

CARCA FORMAL: CARGA DO ÁTOMO APÓS TODAS AS LIGAÇÕES COVAMENTES TEREM SIDO ROMPIDAS, I. E., PARA CADA ÁTOMO

$\text{H} \not\equiv \text{F}:$ $\rightarrow \text{H}^+ + \text{F}^- \rightarrow$ SE TIVER MESMO N.º DE ELÉTRONS DE VALENCIA, CARCA FORMAL É 0

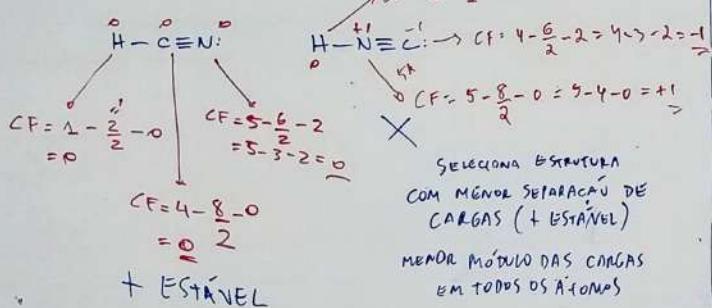
ESTRUTURAS DE LEWIS

5) SE MAIS DE UMA ESTRUTURA É POSSÍVEL, CALCULE E COMPARE AS CARGAS FORMAIS DOS ÁTOMOS

$$\text{CARGA FORMAL} = \frac{\text{N. DE e}^- \text{ DE VALENCIA} - \text{N. DE e}^- \text{ LIGADOS} - \text{N. DE e}^- \text{ LIVRES}}{(\text{DO ÁTOMO})}$$

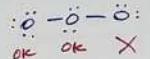
$$CF = V - \frac{B}{2} - L$$

$$\begin{array}{l} H-F: \\ \quad \text{CF} = 7 - \frac{2}{2} - 6 \\ \quad = 7 - 1 - 6 = 0 \\ \text{CF} = \frac{1-2-0}{2} = 0 \end{array}$$

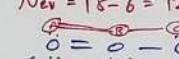


$$\begin{array}{l} O_3 \\ \downarrow \\ N_{\text{liv}} = 6 \cdot 3 = 18 \\ O \equiv O \equiv O \end{array}$$

$$N_{\text{liv}} = 18 - 4 = 14$$



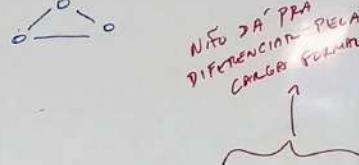
$$\begin{array}{l} O \equiv O \equiv O \\ N_{\text{liv}} = 18 - 6 = 12 \\ O = O \equiv O \end{array}$$



$$\begin{array}{l} CF = 6 - \frac{4}{2} - 4 \\ = 6 - 2 - 4 \\ = 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} CF = 6 - \frac{2}{2} - 6 \\ = 6 - 1 - 6 \\ = -1 \end{array}$$

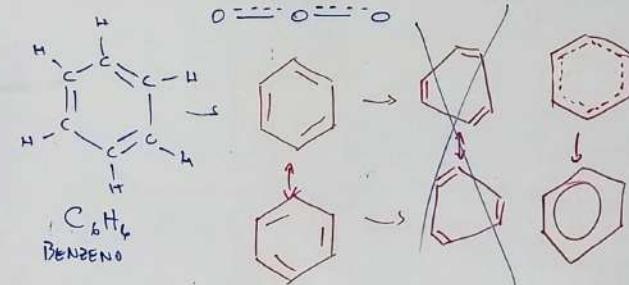
$$\begin{array}{l} CF = 6 - \frac{6}{2} - 2 \\ = 6 - 3 - 2 \\ = +1 \end{array}$$



$\ddot{O}=\ddot{O}-\ddot{O} \leftrightarrow \ddot{O}-\ddot{O}=\ddot{O}$ (igualmente estáveis)

AMBOS SÃO HÍBRIDOS DE RESSONÂNCIA DO O_3

RESSONÂNCIA: CONVERSAS DE UM HÍBRIDO DE RESSONÂNCIA (ESTRUTURA DE LEWIS VÁLIDA) PARA OUTRO IGUALMENTE ESTÁVEL.



QUANTO MAIS HÍBRIDOS MAIS ESTÁVEL

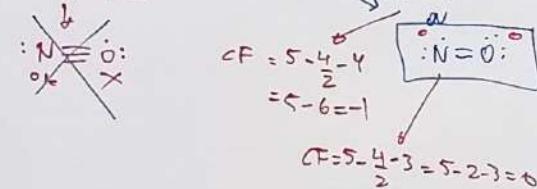
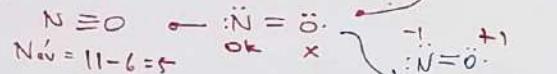
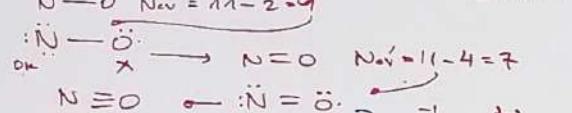
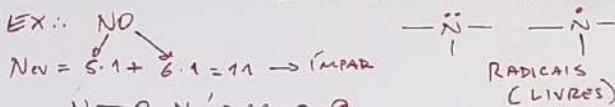
- ① VALENCIA
- ② SIMPLES
- ③ OCTETOS
- ④ MULTIPLAS
- ⑤ CF
- ⑥ RESSONÂNCIA

EXCEÇÕES ÀS REGRAS DE LEWIS

1) NÚMERO IMPAR DE ELETRÔNS DE VALENCIA

2, 8 e⁻ de valência → Ncv deve ser par
se Ncv ímpar → A) vai ter átomo com octeto incompleto

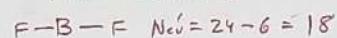
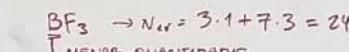
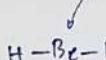
B) eletróns desemparelhados



2) ÁTOMOS HIPOVARENTES (OCTETO INCOMPLETO)

ÁTOMOS COM MENOS DE 8e⁻ NA CV

Be, B



SE ÁTOMO FAZ LIGAÇÕES
PE ACORDO COM TADEU!

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

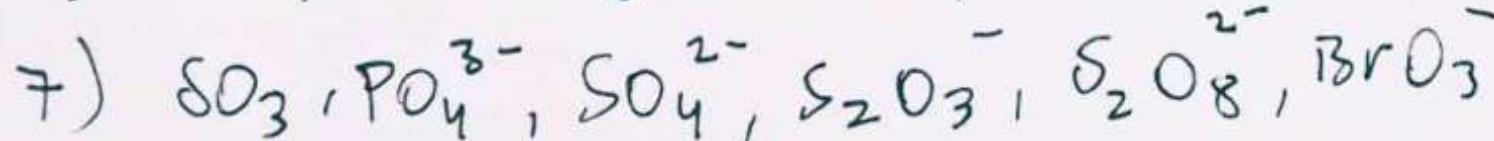
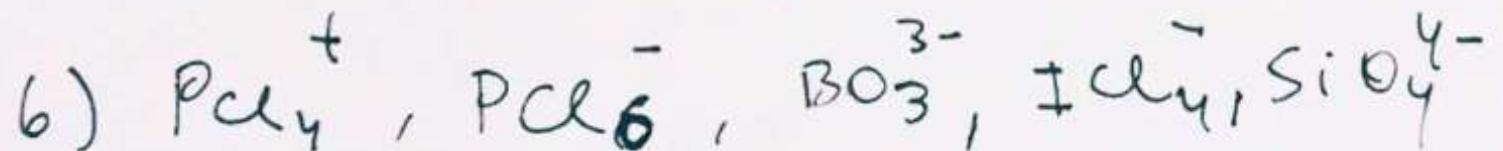
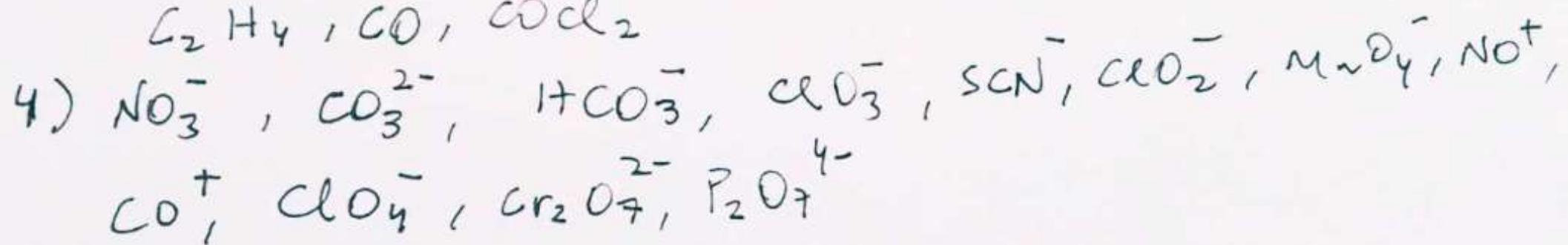
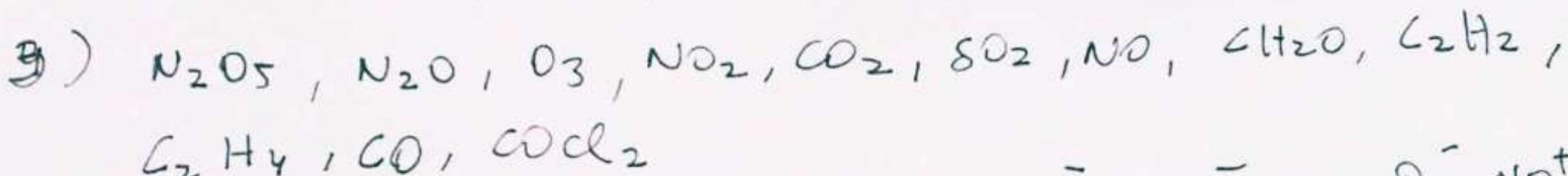
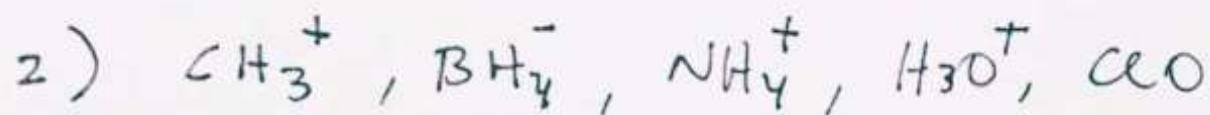
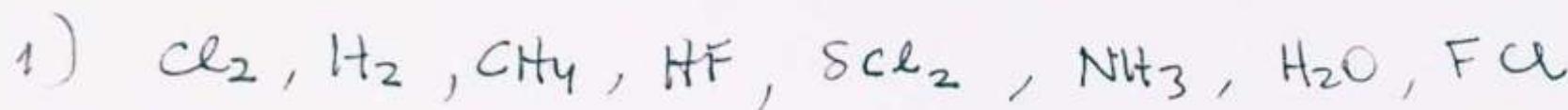
CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3 = 0 3-6 = 0

CF = 0 3-3

Faça as estruturas de Lewis das moléculas a seguir



GEOMETRIA MOLECULAR

LEWIS: CONECTIVIDADE (QUEM ESTÁ LIGADO COM QUEM)

POLARIDADE DAS LIGAÇÕES

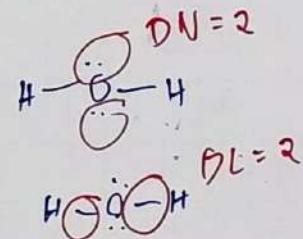
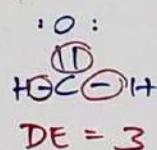
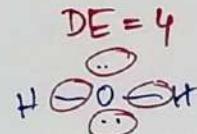
SIMPLÉS, MÚLTIPLAS, ELÉTRONS LIVRES

VSEPR: FORMA, POLARIDADE DA MOLECULA

MODELO DE REPULSA DOS ELÉTRONS DA CAMADA DE VALENCIA

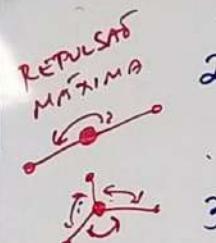
DOMÍNIOS ELÉTRÔNICOS (DE)

CONCENTRAÇÃO DE ELÉTRONS EM UMA DIREÇÃO



$$\boxed{\text{DE} = \text{DL} + \text{DN}}$$

DE



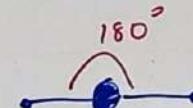
3

4

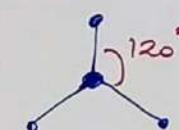
5

6

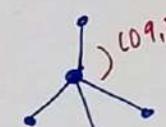
FORMA



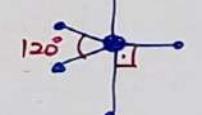
LINEAR



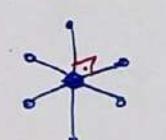
TRIÂNGULO
TRIGONAL PLANA



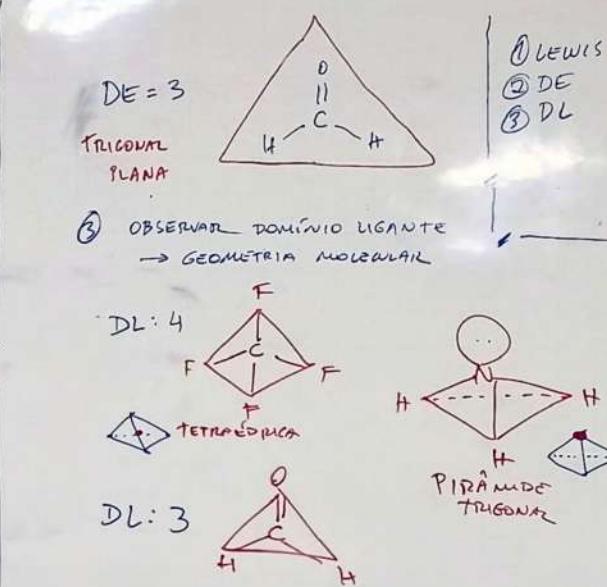
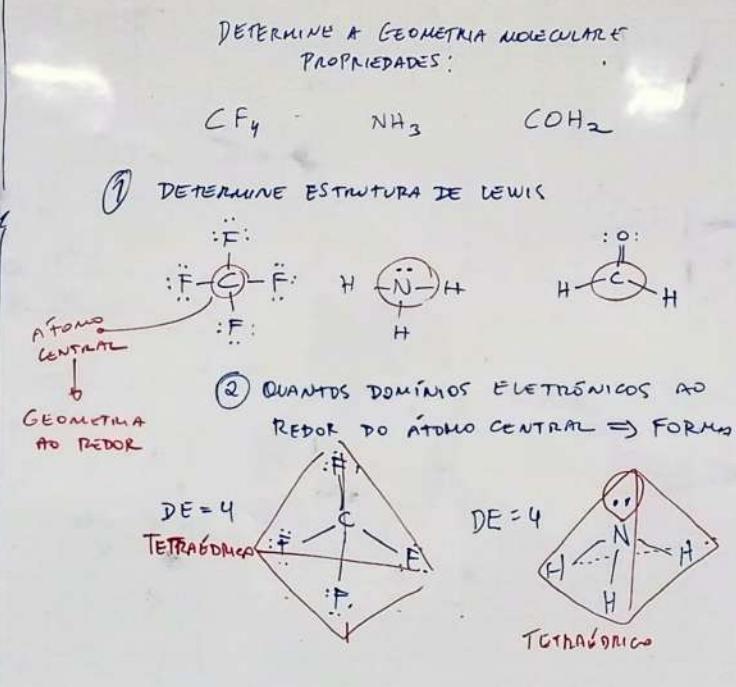
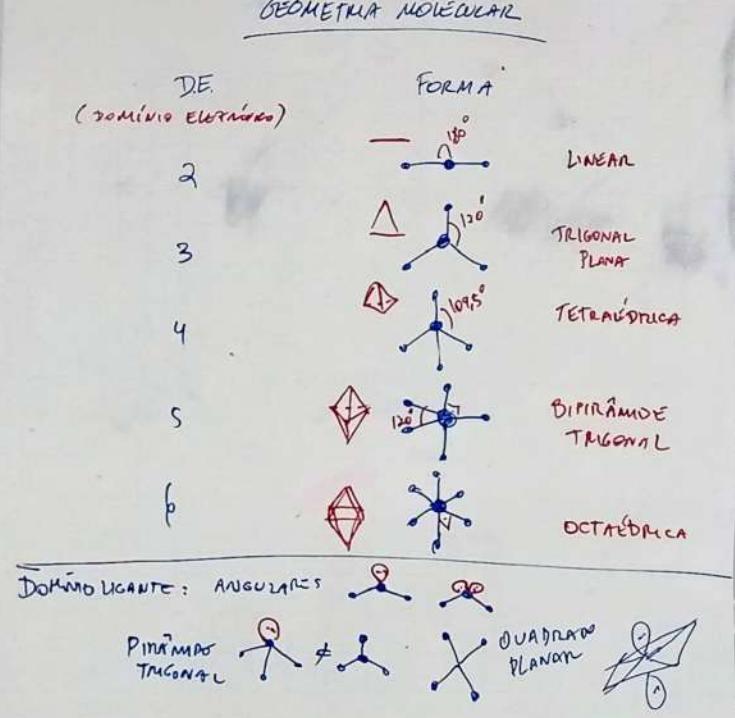
TETRAEDRICA



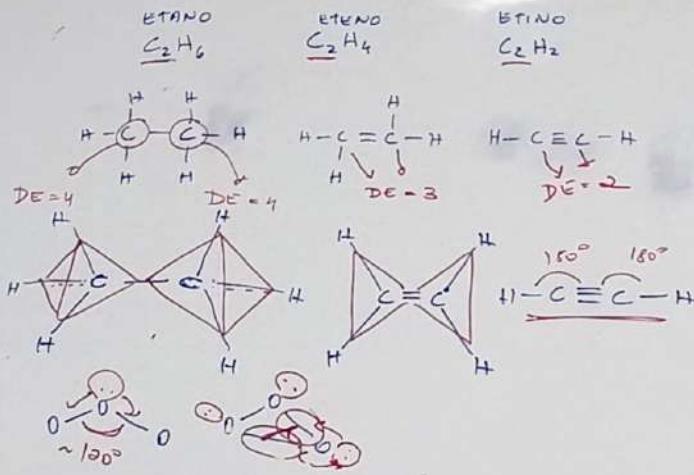
BIPIRÂMIDE TRIGONAL



OCTAEDRICA



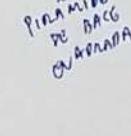
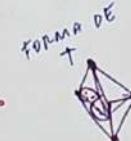
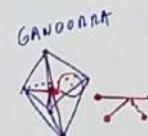
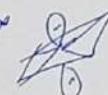
⑥ MAIS DE 1 ÁTOMO CENTRAL



Dominio LIGANTE: ANGULARES

Piramidal
TRIANGULAR

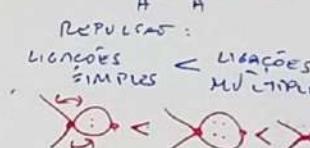
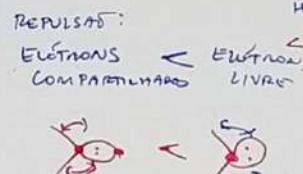
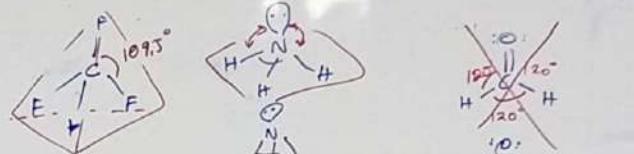
QUADRADO
PLANAR



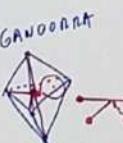
DURS@POLI-DR

⑦ ANGULOS: DEFORMAÇÃO

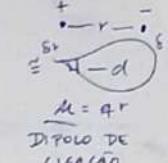
PAR DE ELE. LIVRES
MULTIPLES, LIGAÇÕES



FORMA: TETRAEDRICA (DE)
GEOMETRIA: Tet., Piram. T., Ang.



⑧ DIPOLOS MOLECULARES/RESULTANTES



DIPOLO
MOLÉCULA: (Mr)
SEMIA VETORIAL
DOS DIPOLOS DA
LIGAÇÃO

$$\mu = qr$$

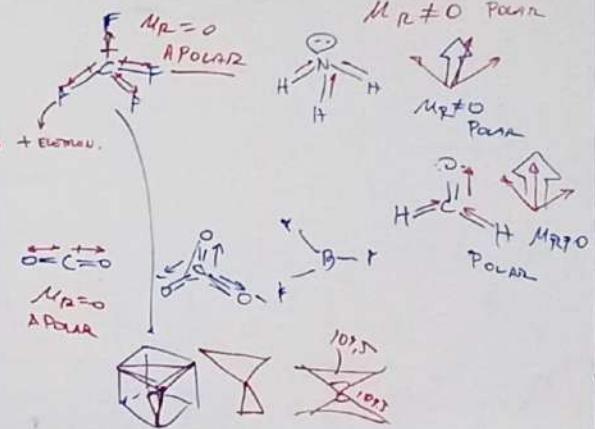
DIPOLO DE
LIGAÇÃO

⑨ LEWIS
⑩ DE
⑪ DL
⑫ ANGULAS
⑬ DIPOLARIS
⑭ MAIS DE 1 CÓM
TODOS

$\text{Mr} = 0$ APOLAR

$\text{Mr} \neq 0$ POLAR

$\text{Mr} \neq 0$ Polar

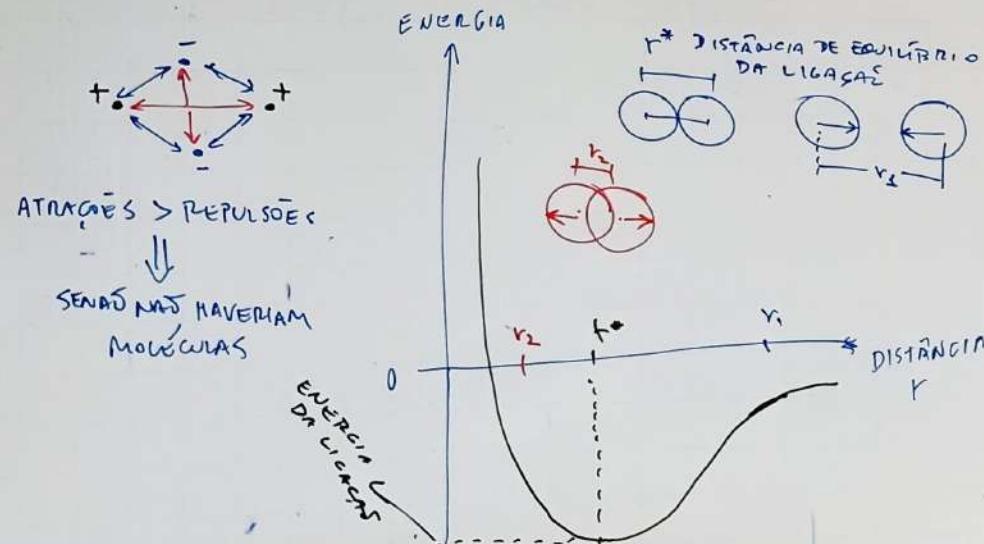


HIBRIDIZAÇÃO

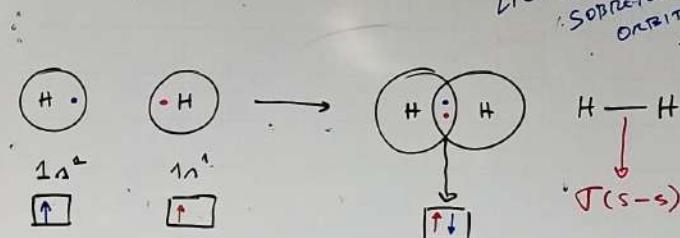
VSEPR → GEOMETRIAS ← ORBITAIS

POIS SÓ HÁ, NO MÁXIMO, 2 LIGAÇÕES DUPLAS

HIBRIDIZAÇÕES: EXPLICAR LIGAÇÕES QUÍMICA E GEOMETRIA A PARTIR DA COMBINAÇÕES DE ORBITAIS DOS ÁTOMOS

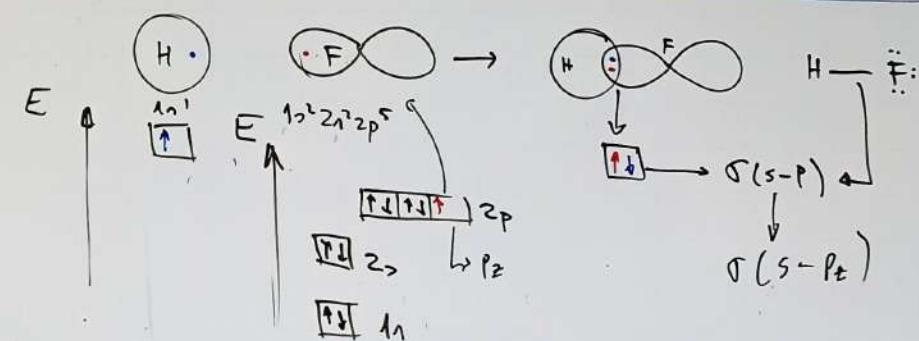


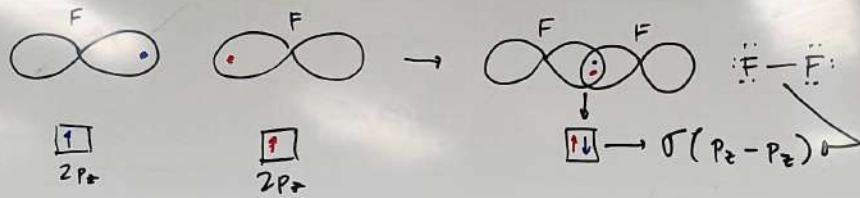
* LIGAÇÕES SIMPLES



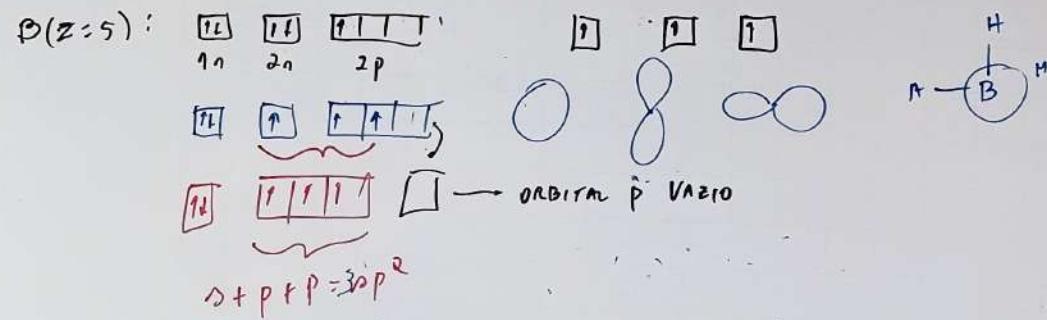
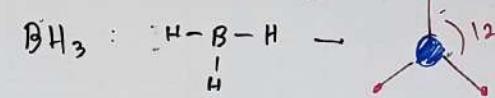
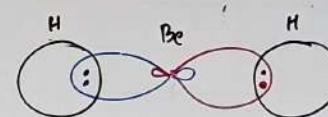
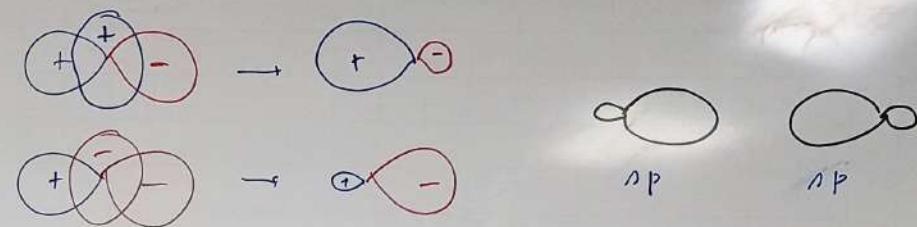
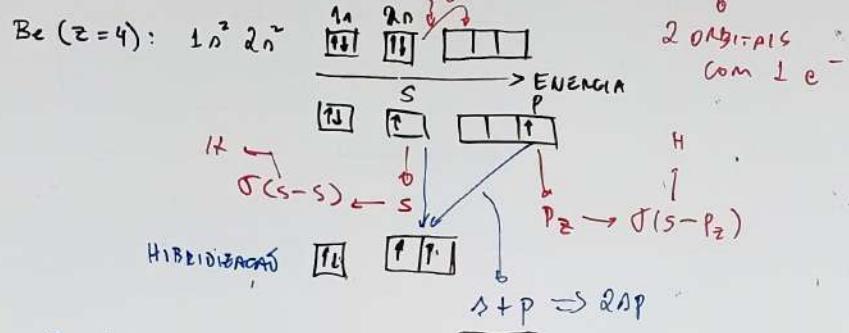
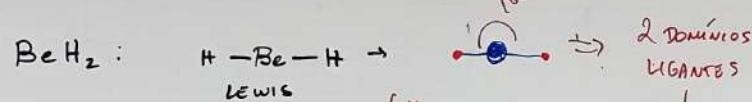
LIGAÇÕES QUÍMICA É
SOPREPOSIÇÃO DE
ORBITAIS ATÔMICOS
DE 1s

LIGAÇÃO SIGMA (σ): FORMADA DA Sobreposição
DOS ORBITAIS AO LONGO DO EIXO DA LIGAÇÃO

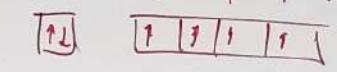
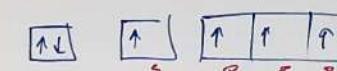
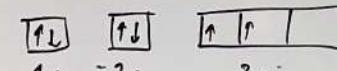
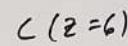
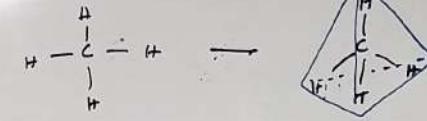
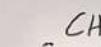
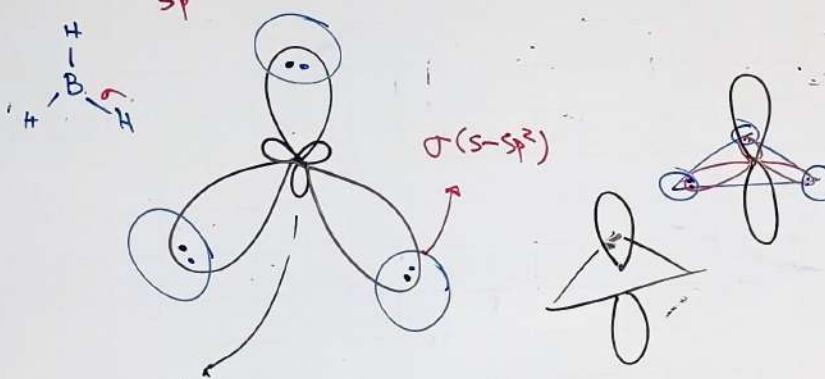
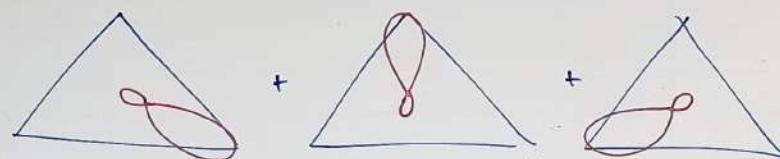
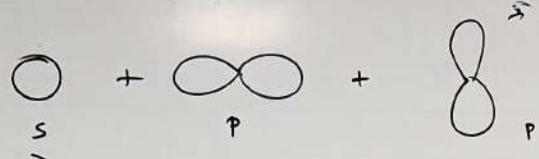




- MAIS ÁTOMOS = MAIS LIGAÇÕES

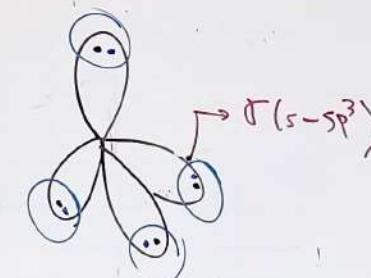
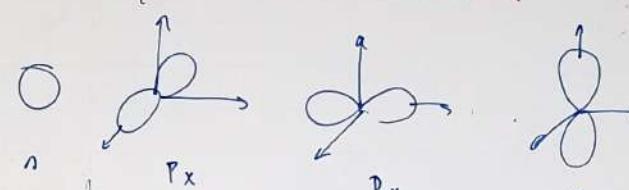


HIBRIDIZAÇÃO



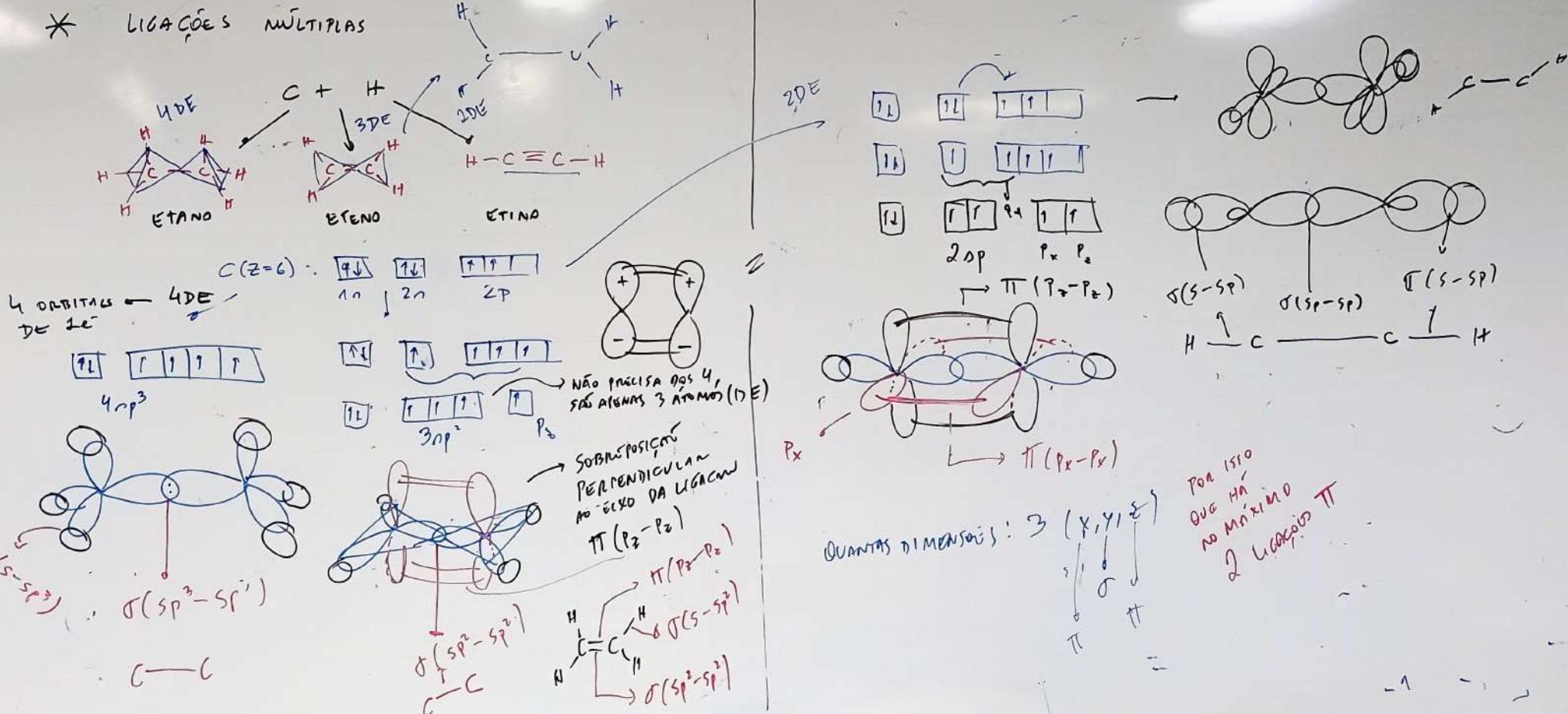
A PENAS 2 ORBITAIS
DISPONÍVEIS

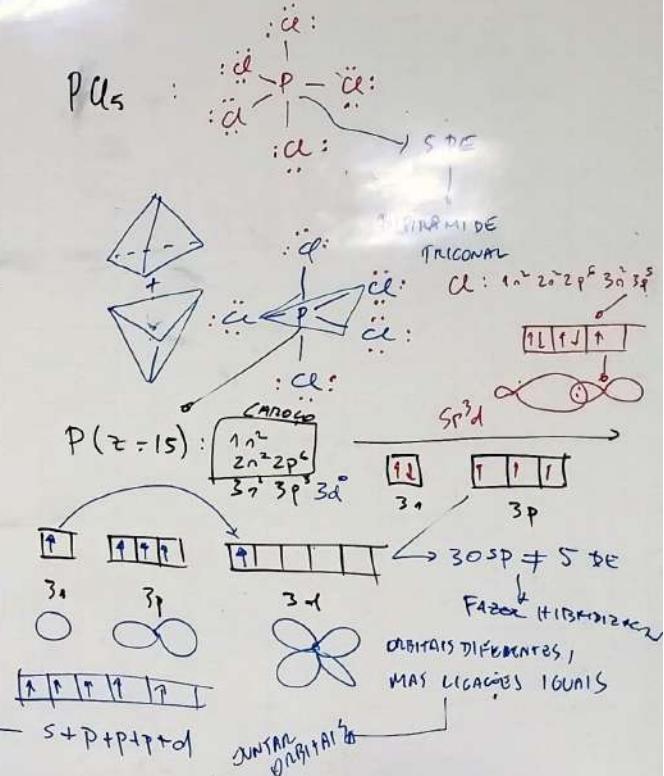
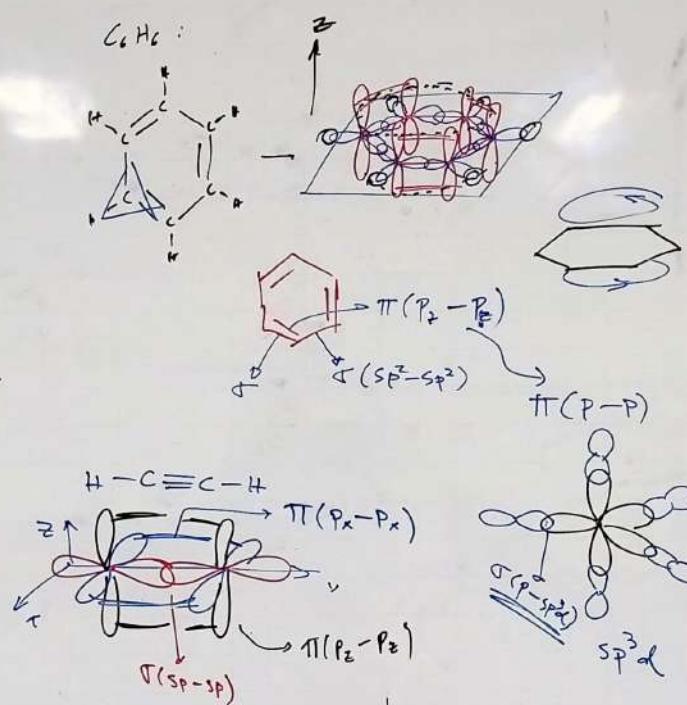
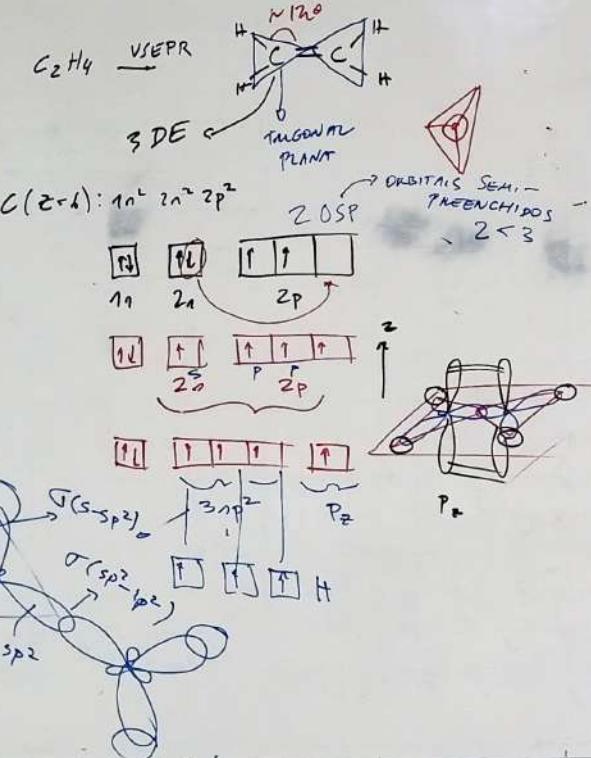
$$s + p + p + p = 4sp^3$$

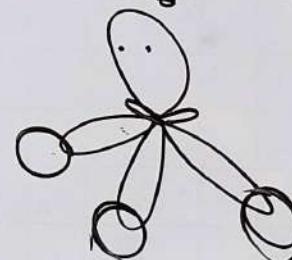
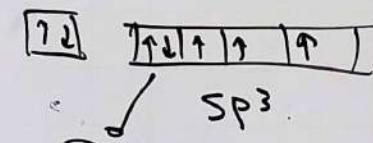
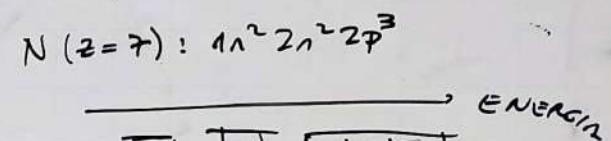
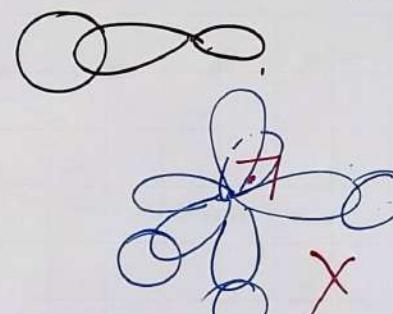
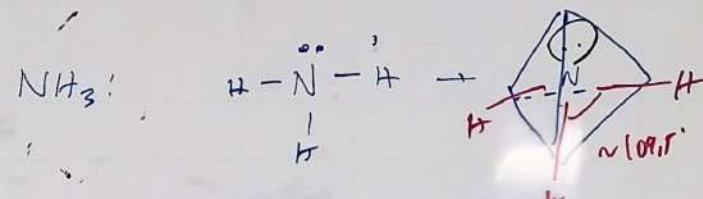
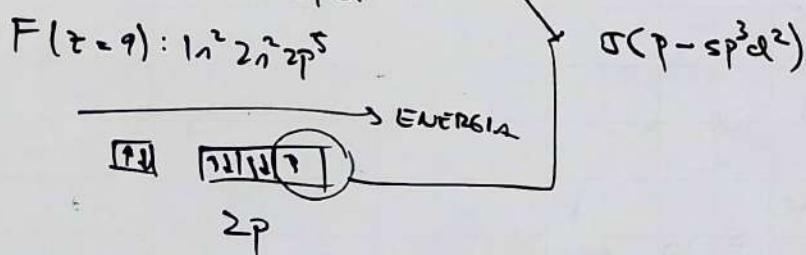
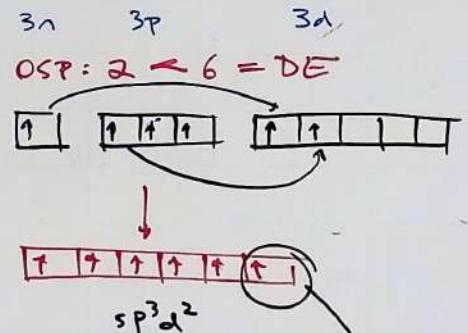
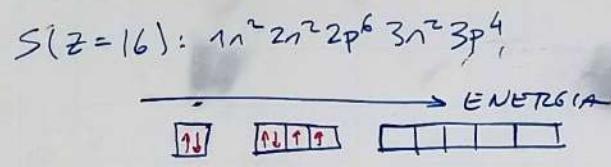
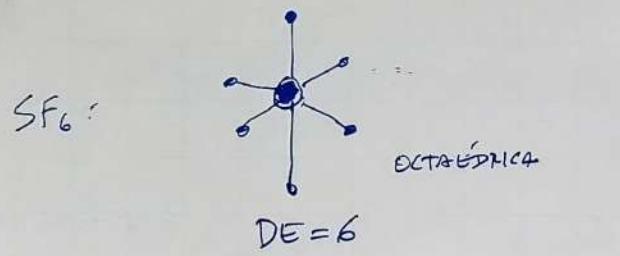


IMPORTANTÉ NÃO
É DESENHAR, É
SABER COMBINAR O
NÚMERO E TIPO CERTO
DE ORBITAIS PARA FORMAR
O NÚMERO DE LIGAÇÕES
DESEJADA

* LIGAÇÕES MÚLTIPLAS





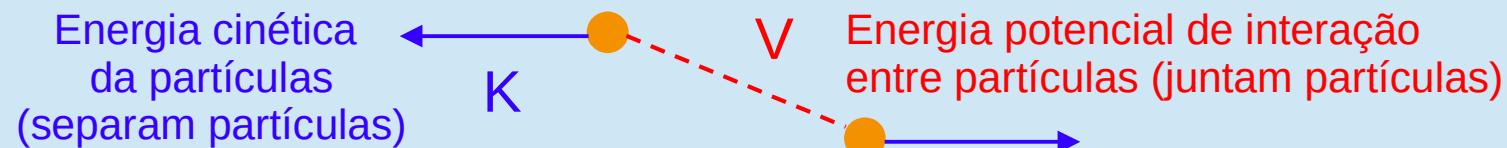


Interações intermoleculares

Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.1

Fases

- **Ligações químicas** são fortes interações entre átomos visando preencher as **camadas de valência**;
- Uma vez preenchidas, os átomos podem interagir de maneira mais fraca, formando agregados que chamamos de **fases**. As interações são chamadas de **interações intermoleculares**;
- As fases mais relevantes são a **gasosa**, a **líquida** e a **sólida**;
- As características das substâncias nessas fases são determinadas pelas **energias cinética** (**K**) e **potencial** (**V**) de todas as partículas entre si;



Fases

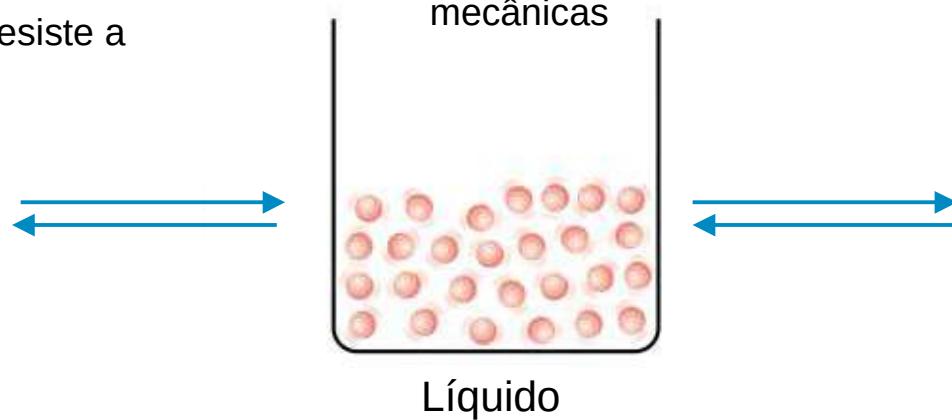
Interações não limitam movimento das partículas
es spontaneamente ocupam volume disponível

Interações limitam muito o movimento das partículas.
ocupam um volume definido, com forma própria que resiste a deformações

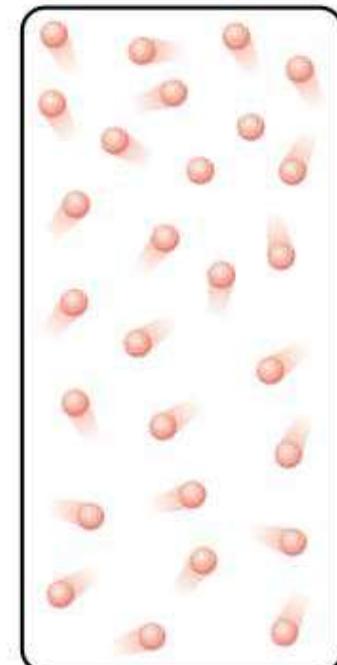


Sólido

Interações limitam movimento das partículas
Ocupam um volume definido, mas flui para adaptar-se a forma do espaço e à forças mecânicas



Líquido



Gás

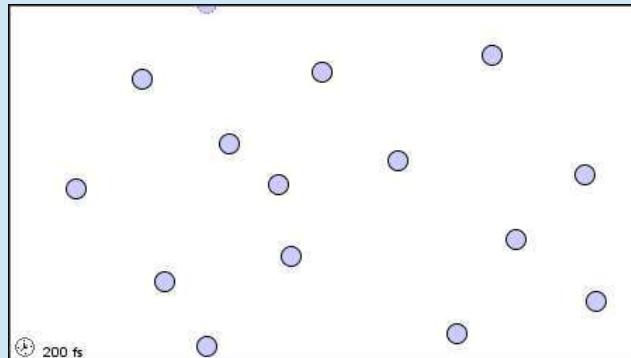
$$K \ll V$$

$$K \approx V$$

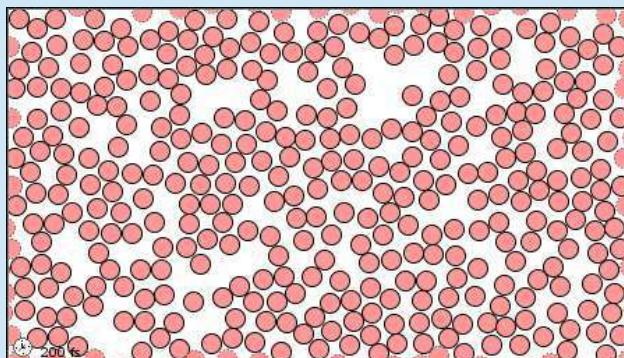
$$K \gg V$$

Espaços vazios

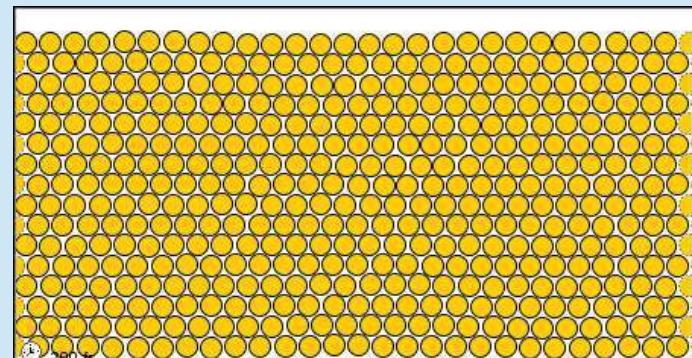
Gases



Líquidos



Sólidos



$$K \gg V$$

Muito espaço vazio:
Alta compressibilidade
Baixa densidade

$$K \approx V$$

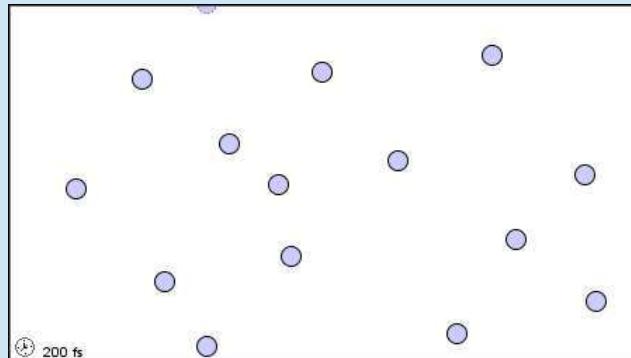
Pouco espaço vazio:
Baixa compressibilidade
Densidade alta

$$K \ll V$$

Sem espaço vazio:
Incompressíveis
Densidade alta

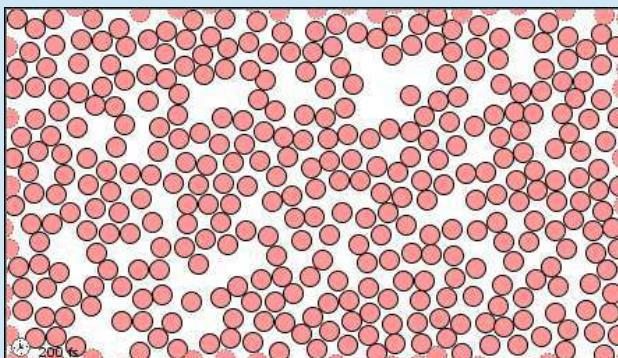
Espaço

Gases



$$\kappa \gg v$$

Líquidos



$$\kappa \approx v$$

3. The next molecule can move into the opening leaving a new opening behind it.

2. An opening is left.

1. Gravity has caused this molecule to fall out of the flask.

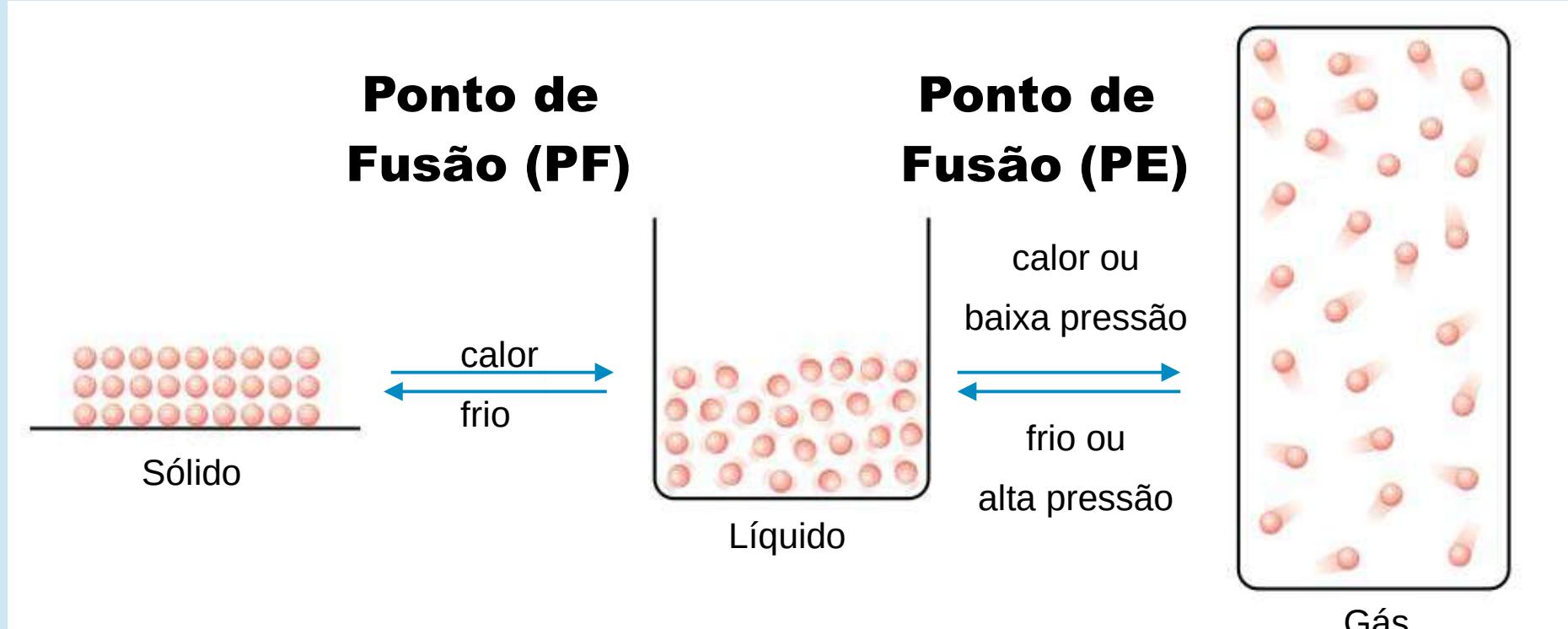


Fluidez diminui,
Viscosidade aumenta

V constante, varia K

- A quantidade de **energia cinética** das partículas está relacionada a **temperatura** da substância: quanto maior T, maior o valor de K para cada partícula;
- O fator de interação, ou **energia potencial**, depende da **natureza da substância** (quais átomos e com quais outros estão ligados). Se temos apenas uma substância, então podemos assumir que V é constante.
- Quando a temperatura é tal que $K \ll V$, ela estará na fase sólida. Com o aquecimento K aumentará, até o **ponto de fusão** ser atingido (**PF**), e se formará um líquido a partir do sólido. Neste caso as partículas possuem tanto K e V comparáveis. Caso aumentemos T ainda mais, o líquido vaporizá no **ponto de ebulação (PE)**, formando um gás. Dessa vez as partículas tem energia cinética grande o suficiente para não interagirem significativamente, $K \ll V$.

V constante, varia K



Aumenta T
Aumenta K

V constante, varia K

- Como V é fixo, podemos usar a mudança de fase como uma referência para o quanto forte as interações entre partículas de uma substância são. Caso sejam muito elevadas, maiores serão as temperaturas de fusão e ebulação (mais energia cinética precisa ser fornecida para $K \gg V$);
- Em uma temperatura fixa, o estado físico reflete a força relativa de interação entre as substâncias (isto é, K é aproximadamente constante, V varia).

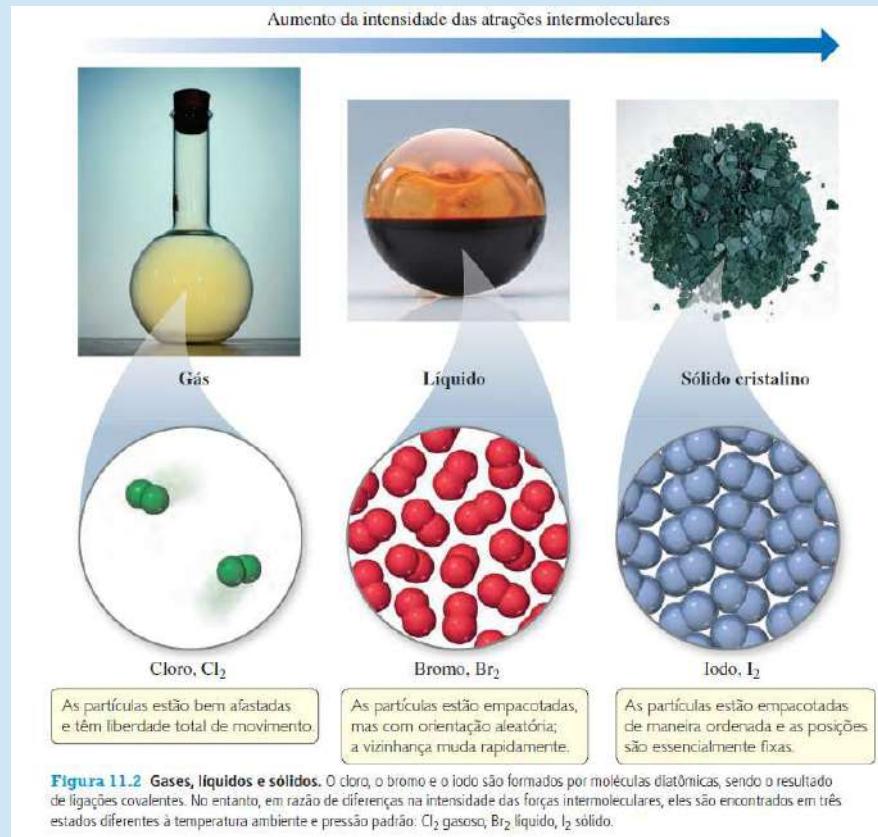


Figura 11.2 Gases, líquidos e sólidos. O cloro, o bromo e o iodo são formados por moléculas diatônicas, sendo o resultado de ligações covalentes. No entanto, em razão de diferenças na intensidade das forças intermoleculares, eles são encontrados em três estados diferentes à temperatura ambiente e pressão padrão: Cl₂ gaseoso, Br₂ líquido, I₂ sólido.

Comparando PF(ou PE)

- Mas se duas substâncias possuem o mesmo tipo de fase (por exemplo, duas são líquidas), como saber qual possui interações moleculares mais fortes? Pelos pontos de fusão ou de ebulição: quanto maior PF ou PE maior a força.

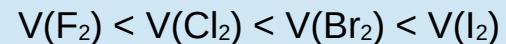


Halogênio	PF (K)	PE (K)
F_2	53,5	85,0
Cl_2	172,2	238,6
Br_2	265,9	331,9
I_2	386,7	457,5

Como:

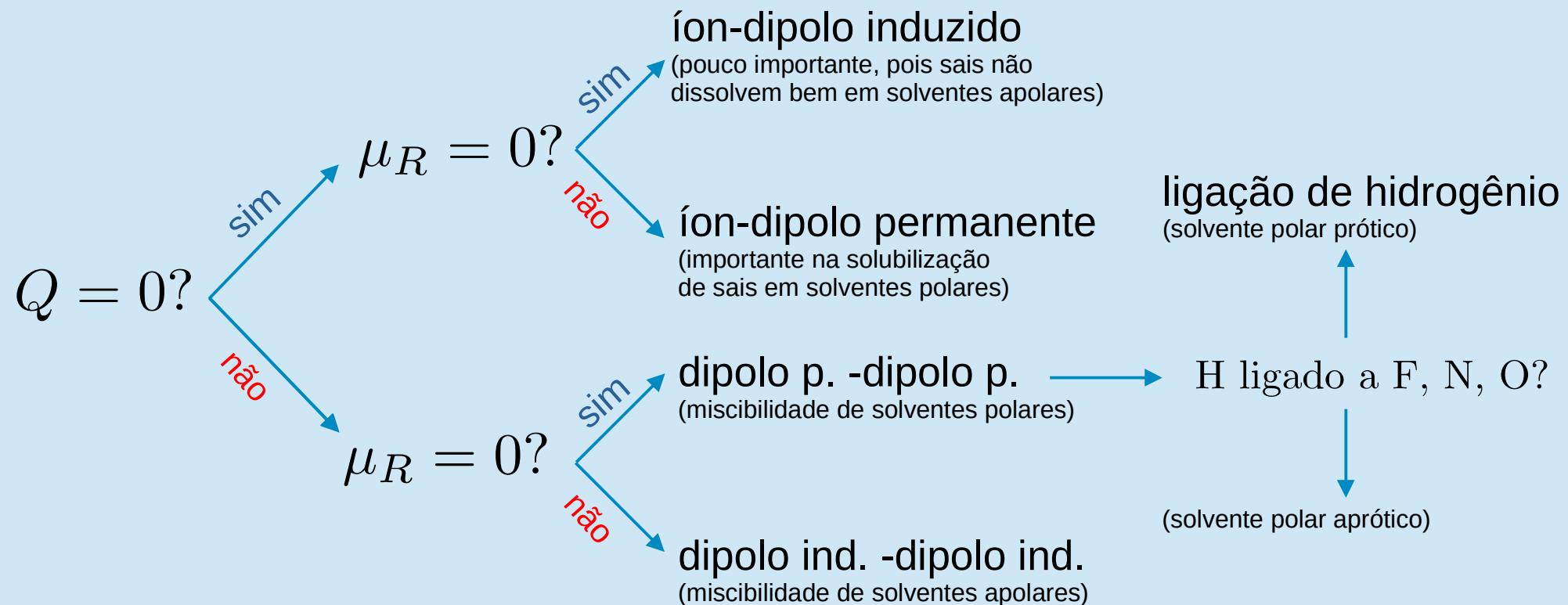


Então força relativa das interações é tal que:



Mas por que?

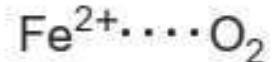
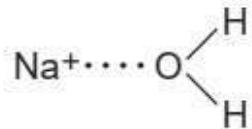
Esquema básico



Quando $Q \neq 0$

- **Ion-ion:**

- Potencial de coulomb (ligação iônica);
- Energia entre 400 e 4000 kJ mol⁻¹.

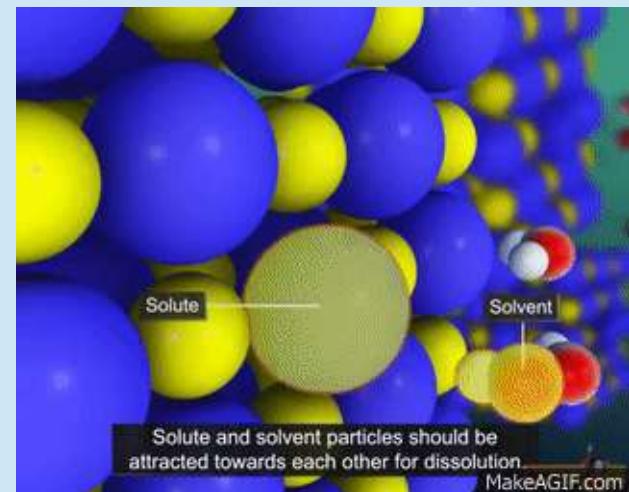


- **Ion-dipolo permanente:**

- Entre íons e moléculas polares;
- Responsável pela solvatação de sais em solventes polares;
- Energia entre 40 e 600 kJ mol⁻¹;

- **Ion-dipolo induzido:**

- Entre dipolos induzidos e íons;
- Energia entre 3 e 15 kJ mol⁻¹;



Ion-íon vs. Ion-dipolo permanente:
solubilidade do sal

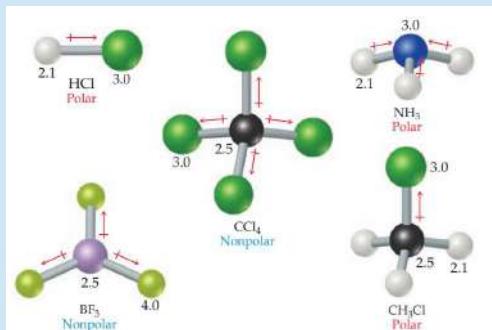
Quando $Q = 0$

- **Forças de van der Waals:**

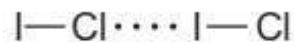
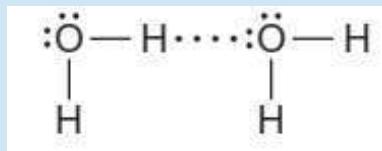
- Dipolo-dipolo (forças de Debye); → Entre moléculas polares
- Dipolo-dipolo induzido (forças de Keesom); → Entre moléculas polares e apolares
- Dipolo induzido-dipolo induzido (forças de dispersão de London); → Entre moléculas apolares

- **Interações específicas:**

- Ligação de hidrogênio.



Polaridade das moléculas



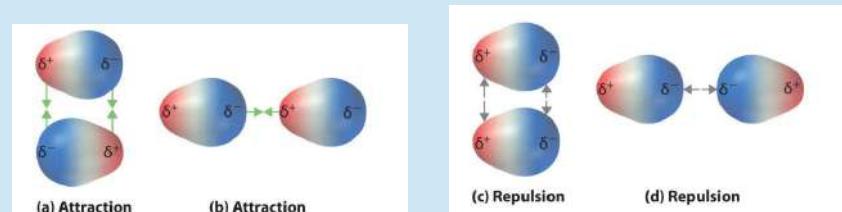
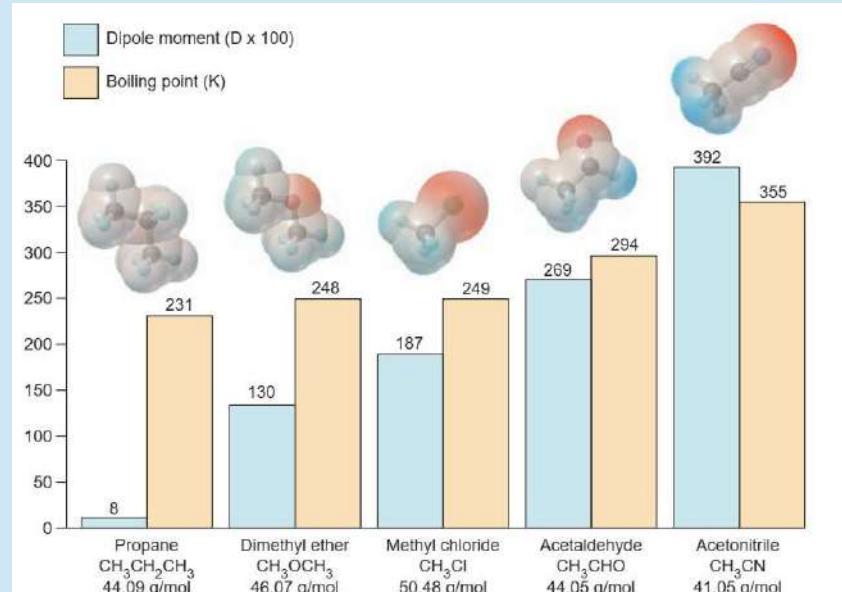
Moléculas polares: $\mu_R \neq 0$

Moléculas apolares: $\mu_R = 0$



Interações dipolo-dipolo

- Também chamadas de interações dipolo permanente-dipolo permanente, ocorre entre moléculas polares, sejam de um mesmo tipo (substâncias puras) ou de tipos diferentes (misturas);
- Líquidos puros: quanto maior o **dipolo**, maior esse tipo de interação, e maior os PF e PE comparando diferentes substâncias.
- Misturas: misturas de substâncias polares são frequentemente homogêneas (uma fase), porque *igual dissolve igual*: **substâncias que interagem pelo mesmo tipo de força tendem a se misturarem melhor**;
- Varia de 5 a 25 kJ/mol.



O que é dipolo induzido?

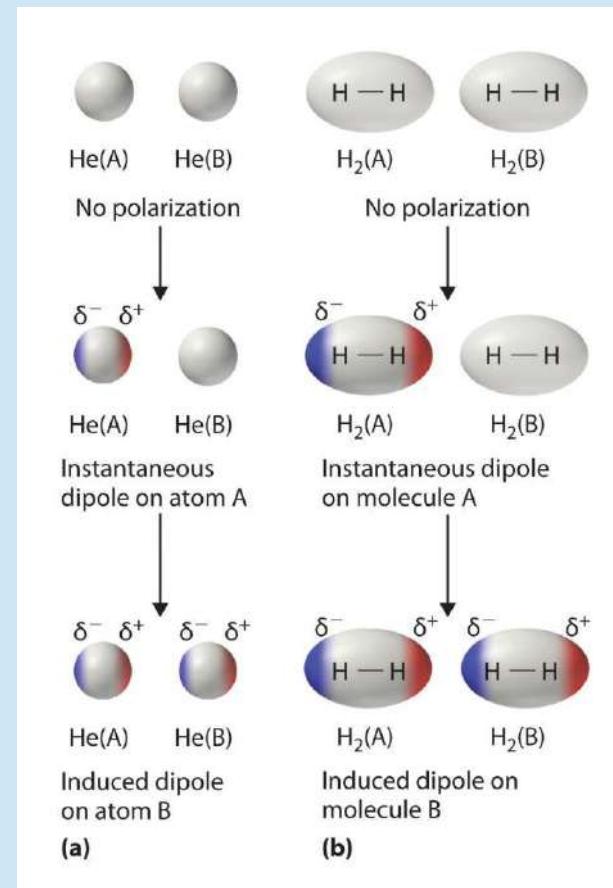
- Todo átomo ou molécula possui uma **nuvem eletrônica** que, como é composta de cargas elétricas, é suscetível a ser **distorcida** pela ação de um **campo elétrico**;



- Quanto **mais elétrons** maior a distorção, maior o momento de dipolo instantâneo criado. Quanto **maior a área superficial** da molécula, maior o dipolo instantâneo, pois mais expostos estão os elétrons ao campo elétrico gerado.
- O campo é gerado por **partículas carregadas** e por outros **dipolos** (instantâneos ou não).

Dipolo induzido-dipolo induzido

- Forças de dispersão de London envolvem a interação entre dipolos instantâneos em moléculas apolares;
- Moléculas apolares interagem apenas através dessa interação, pois basta haver uma nuvem eletrônica para que a formação do dipolo instantâneo seja possível;
- Moléculas polares também podem interagir dessa forma, mas as interações dipolo-dipolo permanente são normalmente mais fortes nesses casos.

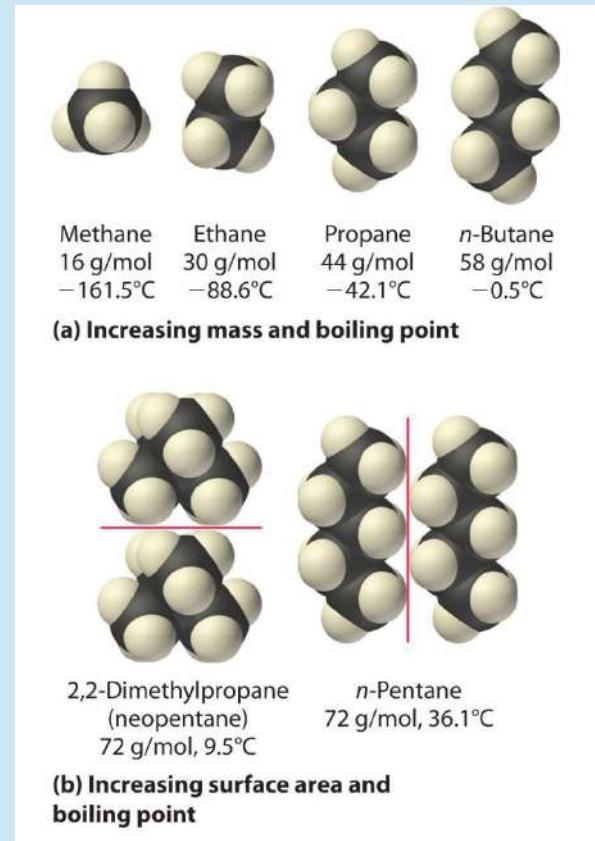


Dipolo induzido-dipolo induzido

- É a força responsável pelos padrões nos pontos de ebulação de gases nobres e halogênios, por exemplo;
- É afetado pelo **número de elétrons** e pela **área superficial** das moléculas;
- É proporcional a polarizabilidade do átomo ou molécula;
- O processo de indução do dipolo instantâneo é chamado de **polarização**: uma molécula com dipolo induz a formação do dipolo em outra;
- Energia entre 0,05 a 40 kJ/mol

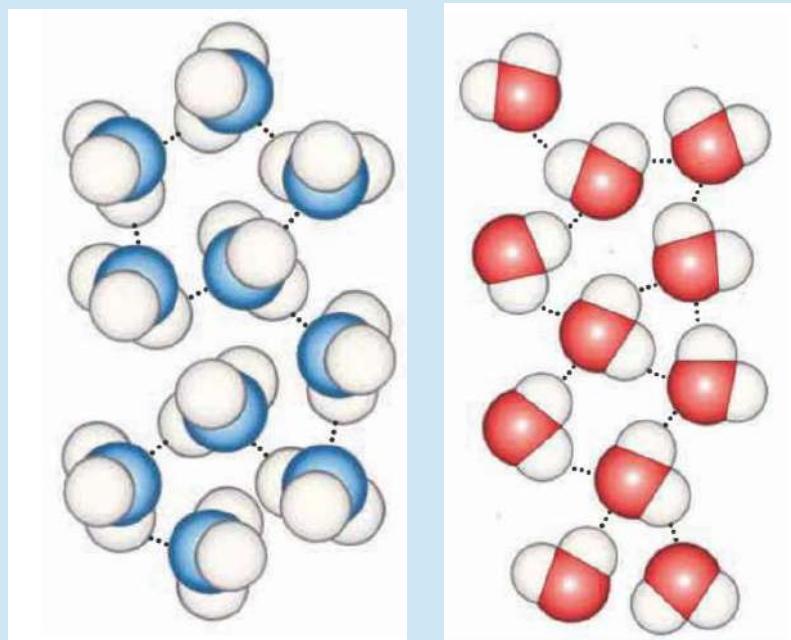
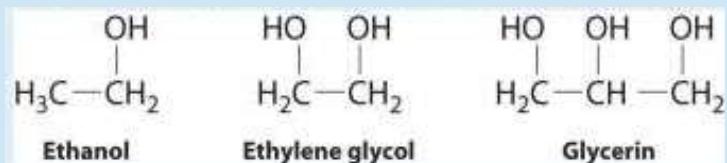
7A (17)	8A (18)
Substance Model Molar mass Boiling point (K)	He 4.003 4.22
F ₂ 38.00 85.0	Ne 20.18 27.1
Cl ₂ 70.91 239	Ar 39.95 87.3
Br ₂ 159.8 333	Kr 83.80 120
I ₂ 253.8 458	Xe 131.3 165

↓
Increasing strength of dispersion forces



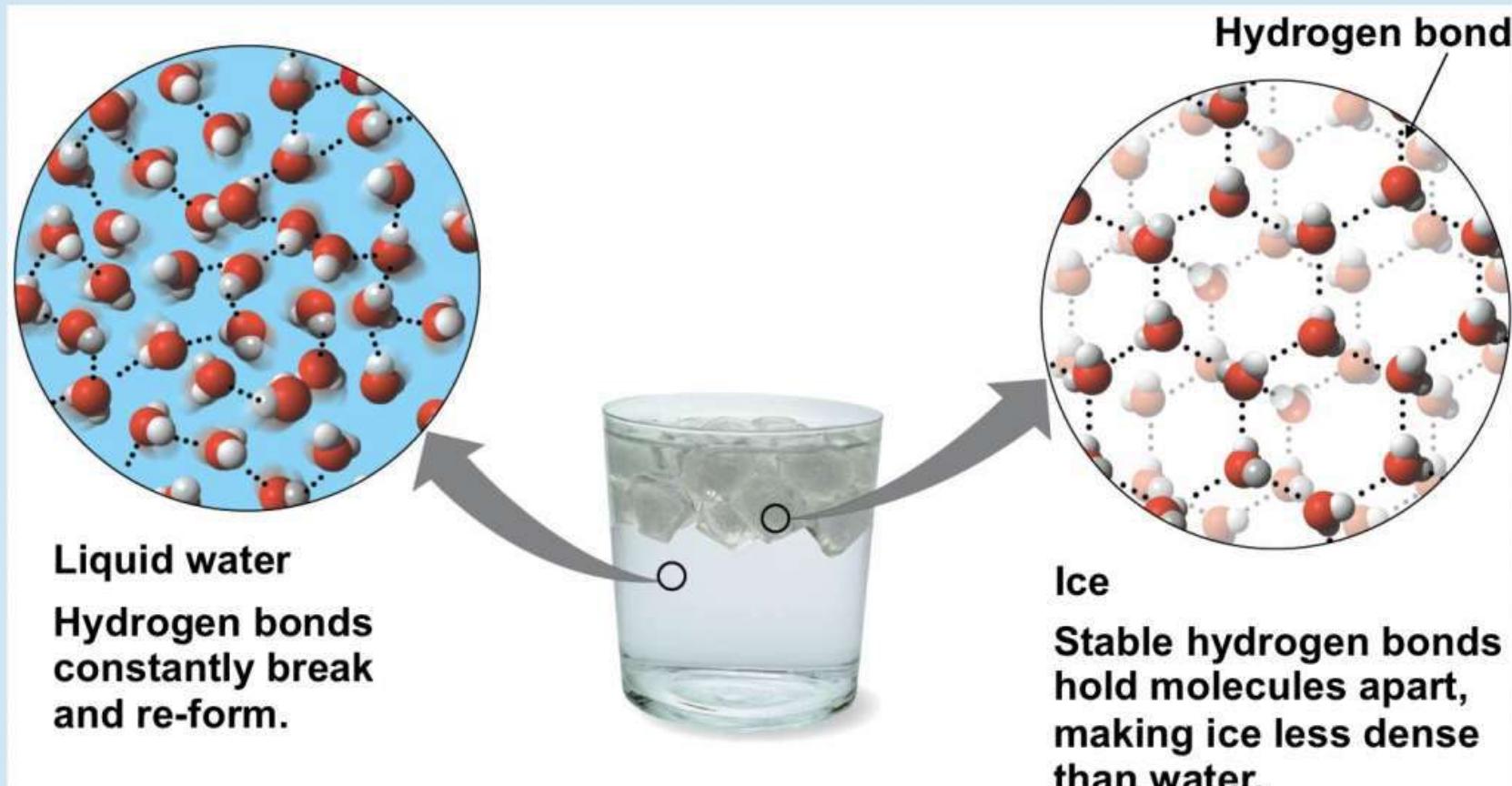
Ligaçāo de hidrogēnio

- Ligação covalente formada entre moléculas com hidrogênio ligados a um dos três átomos muito pequenos e eletronegativos (F, N ou O) e o átomo eletronegativo de outra molécula (pode ser F, N, O ou outro);
- **Particularmente forte**, ela possui uma direcionalidade, dependendo não só da distância entre as moléculas (como as outras interações) mas da orientação relativa entre elas;
- Tipicamente fica entre 10 e 40 kJ/mol



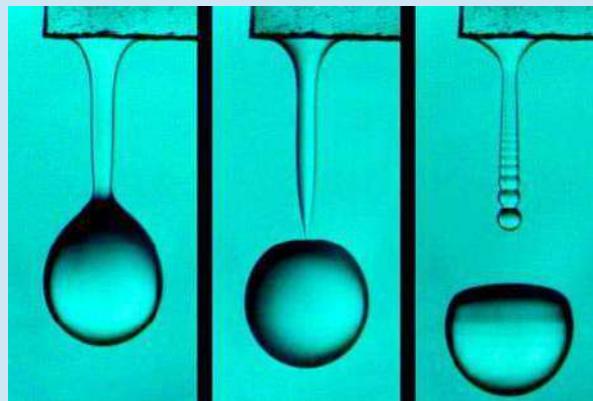
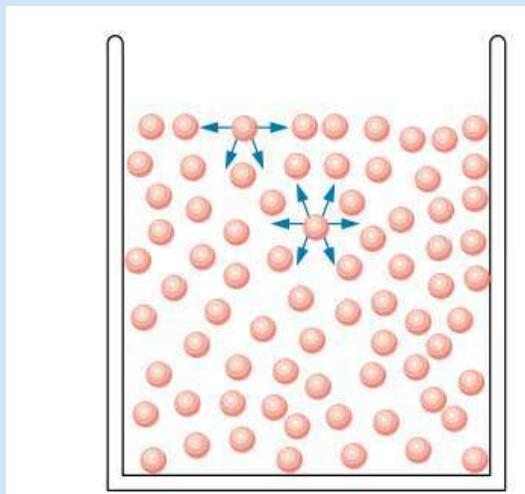
Quanto mais ligações de hidrogênio, maior interação (e PF e PE)

Água



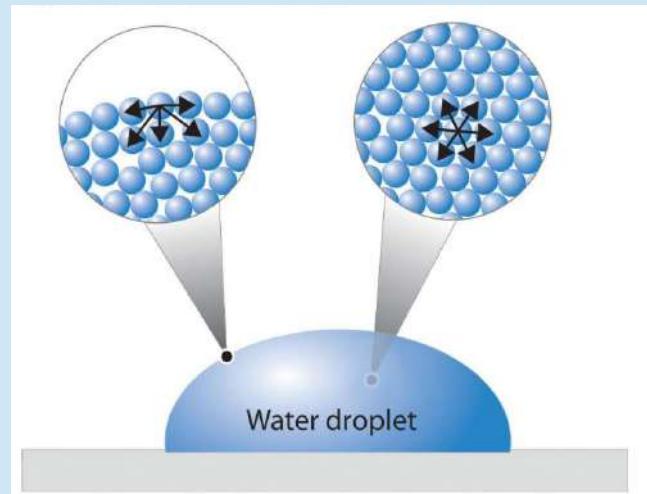
Tensão superficial

- Força necessária para criar uma **área na superfície** de um líquido: quanto mais forte a interação, maior a tensão;
- Na ausência de interações favoráveis na interface, **líquidos minimizam a área superficial**, pois assim um menor número de moléculas estarão desestabilizadas por estarem na superfície.



Tensão superficial

- Caso haja uma superfície, ela atrairá o líquido (que maximizará sua área), ou o repelirá (levando a minimização da área por formação da esfera).
- **Superfícies hidrofóbicas:** repelem a água;
- **Superfícies hidrofílicas:** atraem a água.

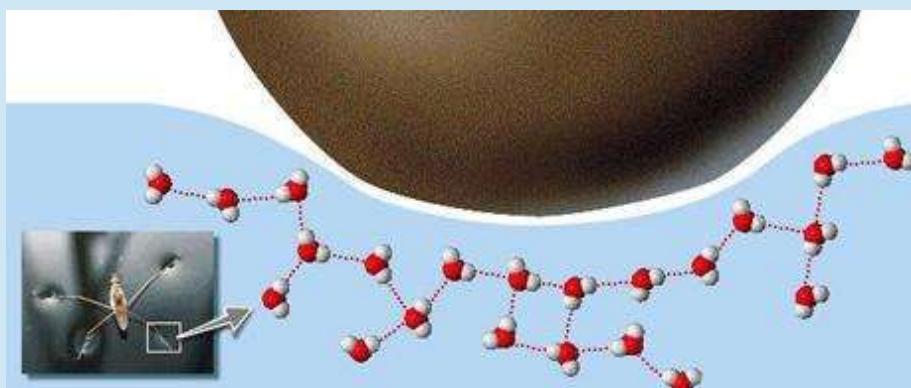


Tensão superficial

- Ligações fortes na superfície

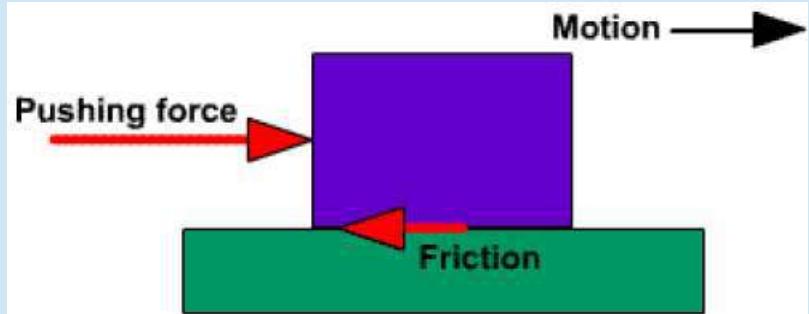
Table 12.3 Surface Tension and Forces Between Particles

Substance	Formula	Surface Tension (J/m ²) at 20°C	Major Force(s)
Diethyl ether	CH ₃ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	1.7 × 10 ⁻²	Dipole-dipole; dispersion
Ethanol	CH ₃ CH ₂ OH	2.3 × 10 ⁻²	H bonding
Butanol	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	2.5 × 10 ⁻²	H bonding; dispersion
Water	H ₂ O	7.3 × 10 ⁻²	H bonding
Mercury	Hg	48 × 10 ⁻²	Metallic bonding



Viscosidade

- Viscosidade: resistência do fluido a fluir;
- Fricção entre líquidos;
- Gases também possuem viscosidade, mas muito menor.



Water		Air
Viscosity, μ ($\text{Pa s} \times 10^5$)	Kinematic viscosity, ν ($\text{m}^2/\text{s} \times 10^6$)	Viscosity, μ ($\text{Pa s} \times 10^5$)
179.2	1.792	1.724
130.7	1.307	1.773
100.2	1.004	1.822
79.7	0.801	1.869
65.3	0.658	1.915

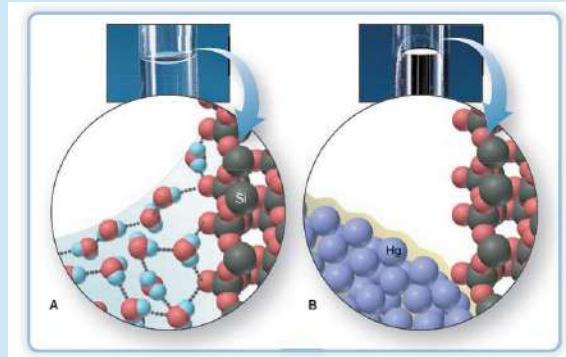


FIGURE 11.20 ▲
Comparison of the viscosities of two liquids

Similar steel balls were dropped simultaneously into two graduated cylinders, the right one containing water and the left one glycerol. A steel ball takes considerably longer to fall through a column of glycerol than through a similar column of water, because glycerol has a greater viscosity than water.

Ação capilar (capilaridade)

- Maximização ou minimização do contato com uma superfície;
- Há uma competição entre as **forças de adesão** (que “molham” o sólido com o líquido) e as **forças de coesão** (o quanto firmemente as partículas do líquido estão unidas entre si).
-



Atenção

- Ligações químicas (forças de ligação) são diferentes de interações intermoleculares (forças intermoleculares). As primeiras são causadas pela busca de estabilidade eletrônica dos átomos (regra do octeto), e as segundas pela interação eletrostática entre partículas parcialmente ou totalmente carregadas, salvo algumas exceções específicas. As primeiras são muito mais fortes do que as segundas.

Força que une as partículas	Substância	Ponto de fusão (K)	Ponto de ebulação (K)
Ligações químicas			
Ligações iônicas	Fluoreto de lítio (LiF)	1.118	1.949
Ligações metálicas	Berílio (Be)	1.560	2.742
Ligações covalentes	Diamante (C)	3.800	4.300
Forças intermoleculares			
Força de dispersão	Nitrogênio (N ₂)	63	77
Força dipolo-dipolo	Cloreto de hidrogênio (HCl)	158	188
Ligação de hidrogênio	Fluoreto de hidrogênio (HF)	190	293

Table 12.2 Comparison of Bonding and Nonbonding (Intermolecular) Forces				
Force	Model	Basis of Attraction	Energy (kJ/mol)	Example
Bonding				
Ionic		Cation–anion	400–4000	NaCl
Covalent		Nuclei–shared e ⁻ pair	150–1100	H–H
Metallic		Cations–delocalized electrons	75–1000	Fe
Nonbonding (Intermolecular)				
Ion-dipole		Ion charge–dipole charge	40–600	Na ⁺ ⋯⋯O [−] H ⁺ ⋯⋯O [−]
H bond		Polar bond to H–dipole charge (high EN of N, O, F)	10–40	:O [−] ⋯⋯H⋯⋯O [−] H ⁺ ⋯⋯O [−]
Dipole-dipole		Dipole charges	5–25	I–Cl⋯⋯I–Cl
Ion-induced dipole		Ion charge–polarizable e ⁻ cloud	3–15	Fe ²⁺ ⋯⋯O ₂
Dipole-induced dipole		Dipole charge–polarizable e ⁻ cloud	2–10	H–Cl⋯⋯Cl–Cl
Dispersion (London)		Polarizable e ⁻ clouds	0.05–40	F–F⋯⋯F–F

Atenção

- Moléculas diferentes podem interagir por mais de um tipo de interação molecular! Embora seja importante determinar qual delas é a mais forte (se houver uma que se destaque).
Mas todas interagem via dipolo induzido-dipolo induzido (pois possuem elétrons), algumas por dipolo-dipolo induzido (caso uma tenha dipolo não nulo) e outras por dipolo-dipolo (caso todas tenham dipolo não nulo).

Quais tipos de interação permitem que acetona seja solúvel em água e que CCl_4 seja insolúvel em água.

Quais tipos de interação permitem que acetona seja solúvel em água e que CCl₄ seja insolúvel em água.

Quais as propriedades das moléculas envolvidas?

Todas são neutras (interações com íons não são possíveis)

Algumas são polares (acetona e água) e uma é apolar (CCl₄)

Em geral moléculas polares se misturam bem devido a interação dipolo-dipolo.

Ela é responsável pela solubilidade da água em acetona.

Já o tetracloreto de carbono não possui momento de dipolo resultante.

Portanto ele não pode interagir tão facilmente com a molécula da água.

Isso torna a água insolúvel no CCl₄.

Obrigado e boa sorte!

Sólidos e materiais modernos

Prof. Diego J. Raposo

UPE – Poli

2025.1

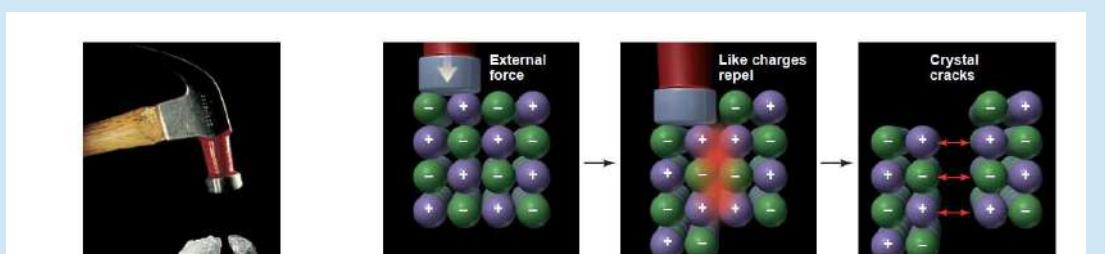
Introdução

- Materiais sólidos são onipresentes no nosso dia a dia;
- Suas **propriedades** (mecânicas, magnéticas, elétricas, ópticas, térmicas) estão vinculadas à **estrutura** do sólido, e esta ao tipo de **ligação química** e interação intermolecular que ocorre entre os átomos do material;
- Para cada tipo de ligação temos um material diferente.



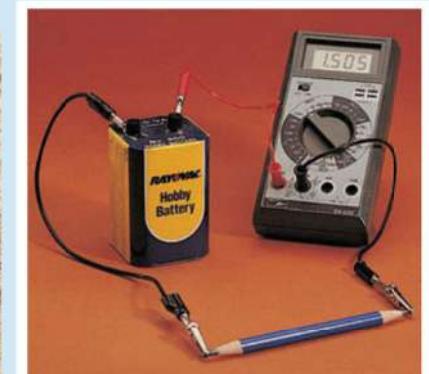
Tipos de sólidos

- **Ligações iônicas:** formam sólidos iônicos;
- **Exemplos:** sais de diferentes tipos (NaCl , CaO), incluindo **cerâmicas**, etc;
- **Natureza:** atração eletrostática entre íons;
- **Propriedades:** mal condutores, quebradiços, formam soluções condutoras quando dissolvem em água;



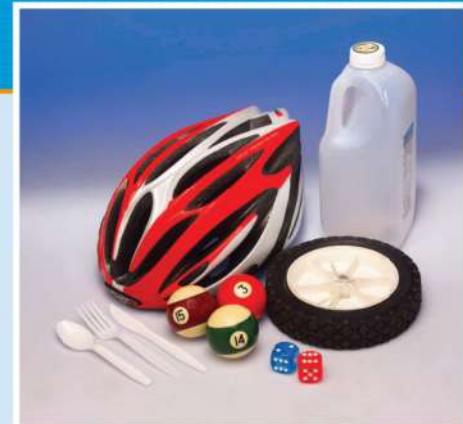
Tipos de sólidos

- **Ligações covalentes:** formam sólidos de rede covalente;
- **Exemplos:** semi-metais como grafite e Si, **semi-condutores** e **materiais vítreos** (como SiO_2);
- **Natureza:** completam camadas de valência por compartilhamento de elétrons (ligação localizada);
- **Propriedades:** muito duros, semi-condutores;



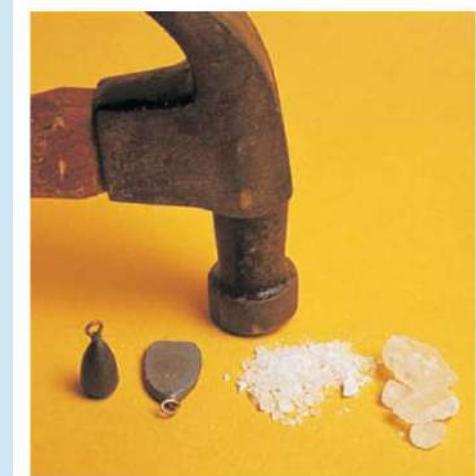
Tipos de sólidos

- **Interações intermoleculares:** formam sólidos de van der Waals (átomos não ligados: gases nobres) ou sólidos moleculares (moléculas);
- **Exemplos:** polímeros em geral (PVC, borracha, fibras, madeira, etc), pois são moléculas com cadeias longas (se fossem pequenas seriam líquidos ou gases);
- **Natureza:** atração/repulsão entre nuvens eletrônicas de camadas de valência já completas;
- **Propriedades:** macio ou duros, com pontos de fusão baixos em relação a outros sólidos, a depender do número de átomos por molécula; isolantes elétricos e térmicos;

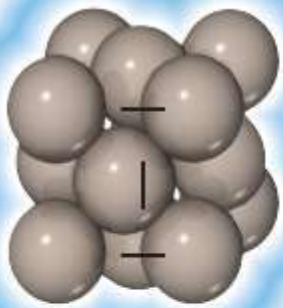


Tipos de sólidos

- **Ligaçāo metálica:** sólidos metálicos;
- Exemplos: metais;
- Natureza: elétrons de valência compartilhados por toda a rede;
- Propriedades: bons condutores térmicos e elétricos, com brilho e fortes, mas não quebradiços;

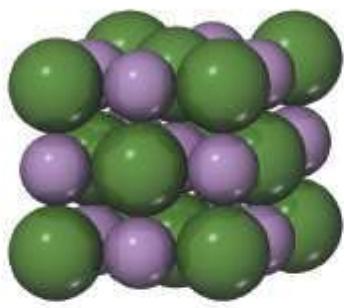


Tipos de sólidos



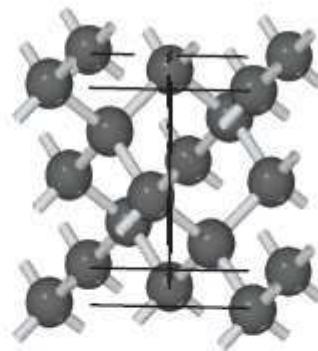
Sólidos metálicos

Extensas redes de átomos unidos por ligações metálicas (Cu, Fe)



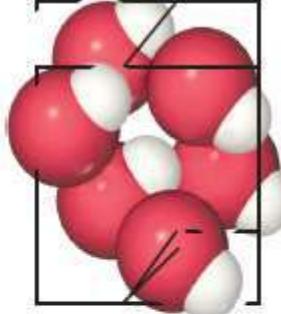
Sólidos iônicos

Extensas redes de íons unidos por interações íon–íon (NaCl, MgO)



Sólidos de rede covalente

Extensas redes de átomos unidos por ligações covalentes (C, Si)

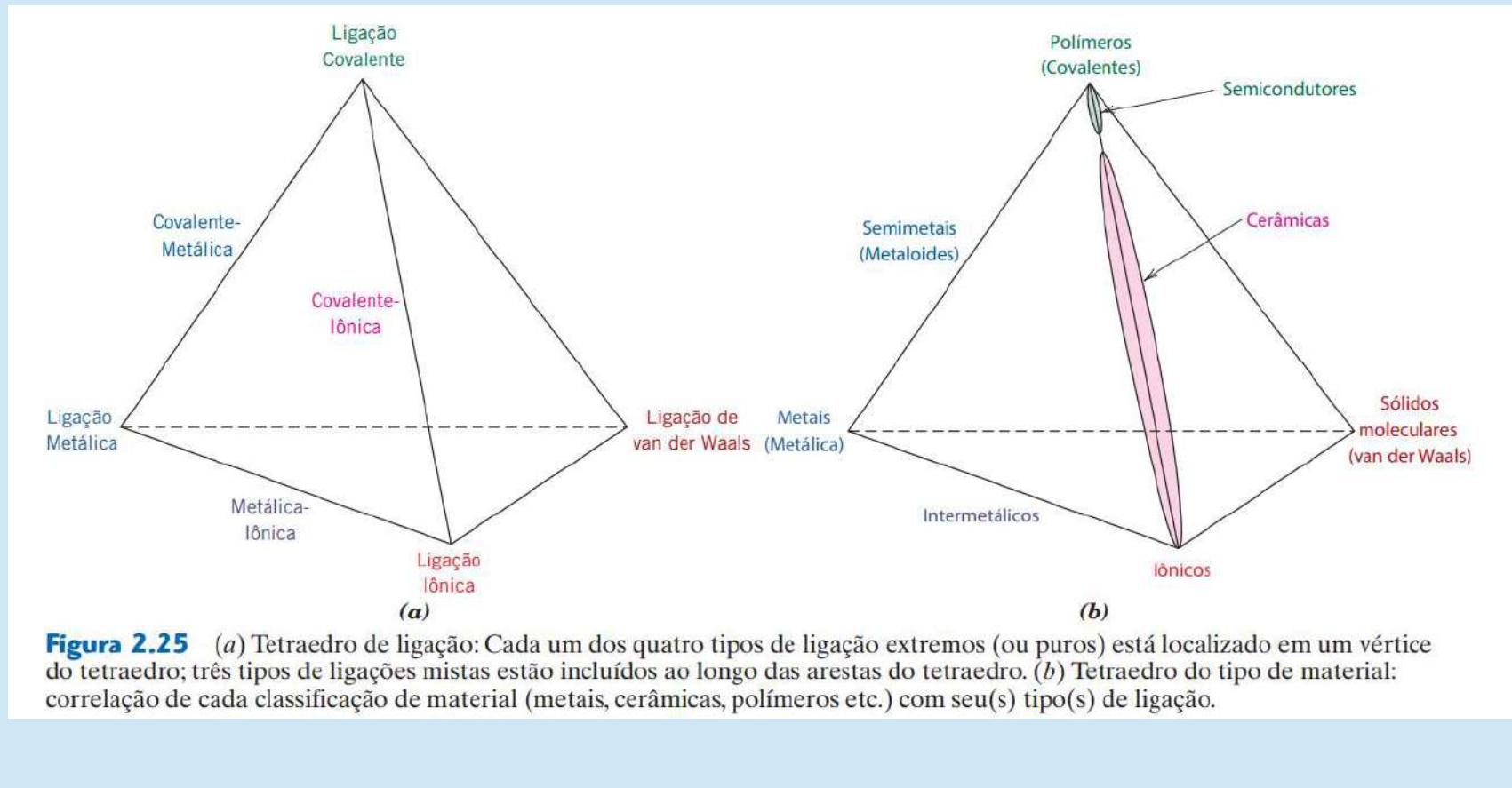


Sólidos moleculares

Moléculas discretas unidas por forças intermoleculares (HBr, H₂O)

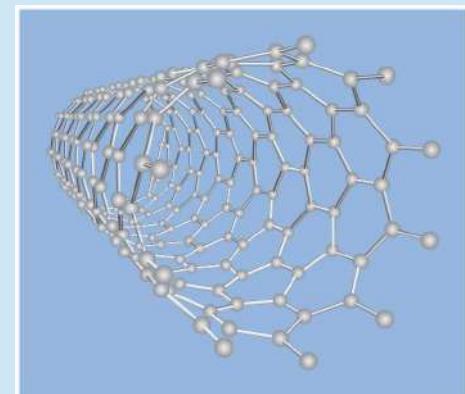
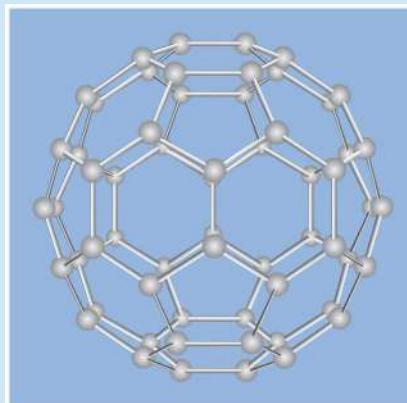
Figura 12.1 Classificação e exemplos de sólidos de acordo com o tipo de ligação predominante.

Tetraedro de ligação e materiais



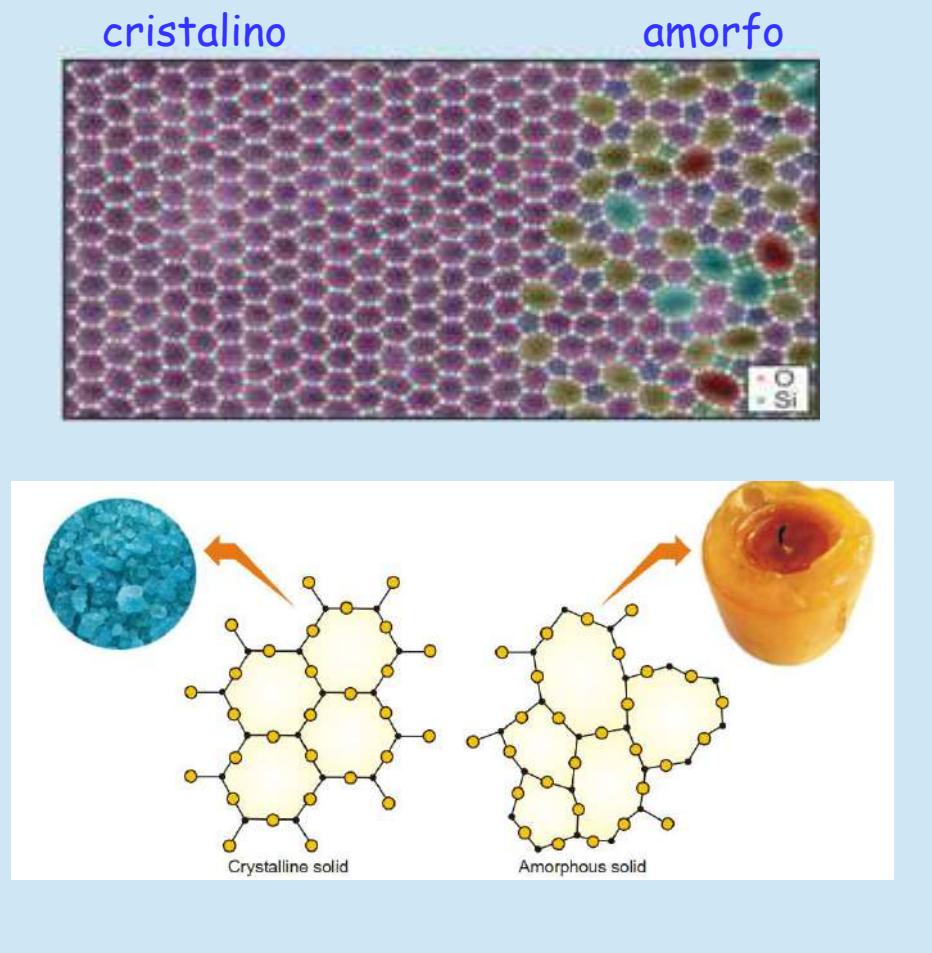
Nanomateriais

- Podem ser compostos de diferentes tipos de ligações, e feitos de diferentes tipos de materiais (metais, semicondutores, cerâmicas, polímeros);
- O que compartilham não é sua química, mas dimensão: entre 1 e 100 nm;
- Nanocarbonos (cerâmicas avançadas);
- Nanopartículas metálicas;

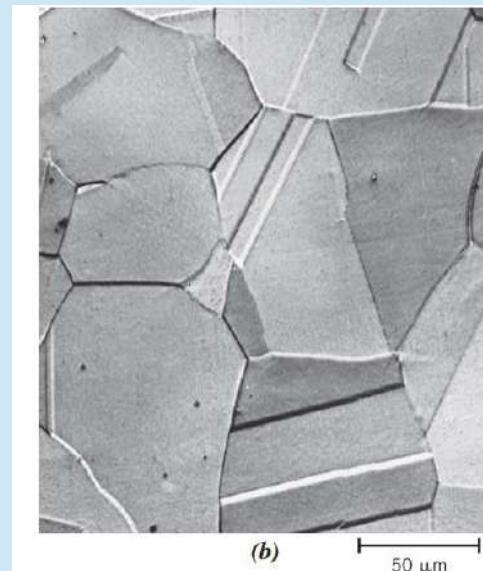
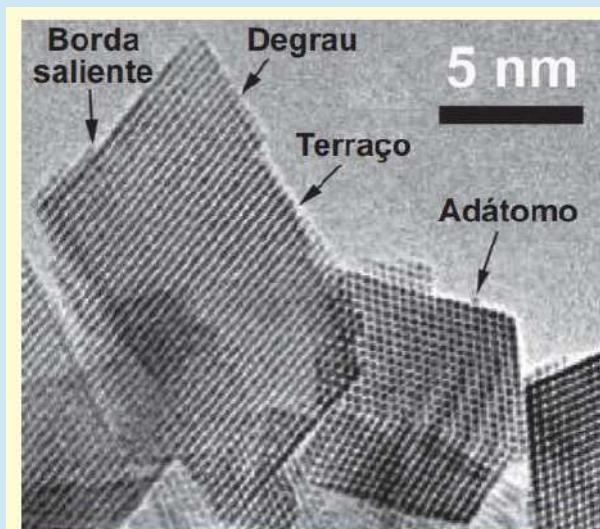


Cristalino vs. amorfo

- A estrutura do sólido é composta por um arranjo repetitivo de átomos por uma longa distância, que pode ser:
 - Regular: **sólidos cristalinos** (com faces e ângulos definidos); são *anisotrópicos*: propriedades dependem da direção;
 - Irregular: **sólidos amorfos** ou não cristalinos (estrutura similar à dos líquidos, mas com menor mobilidade); são *isotrópicos*: propriedades independem da direção;
- Metais, cerâmicas e semi-condutores são cristalinos; polímeros podem ser cristalinos ou amorfos, e materiais vítreos são amorfos.

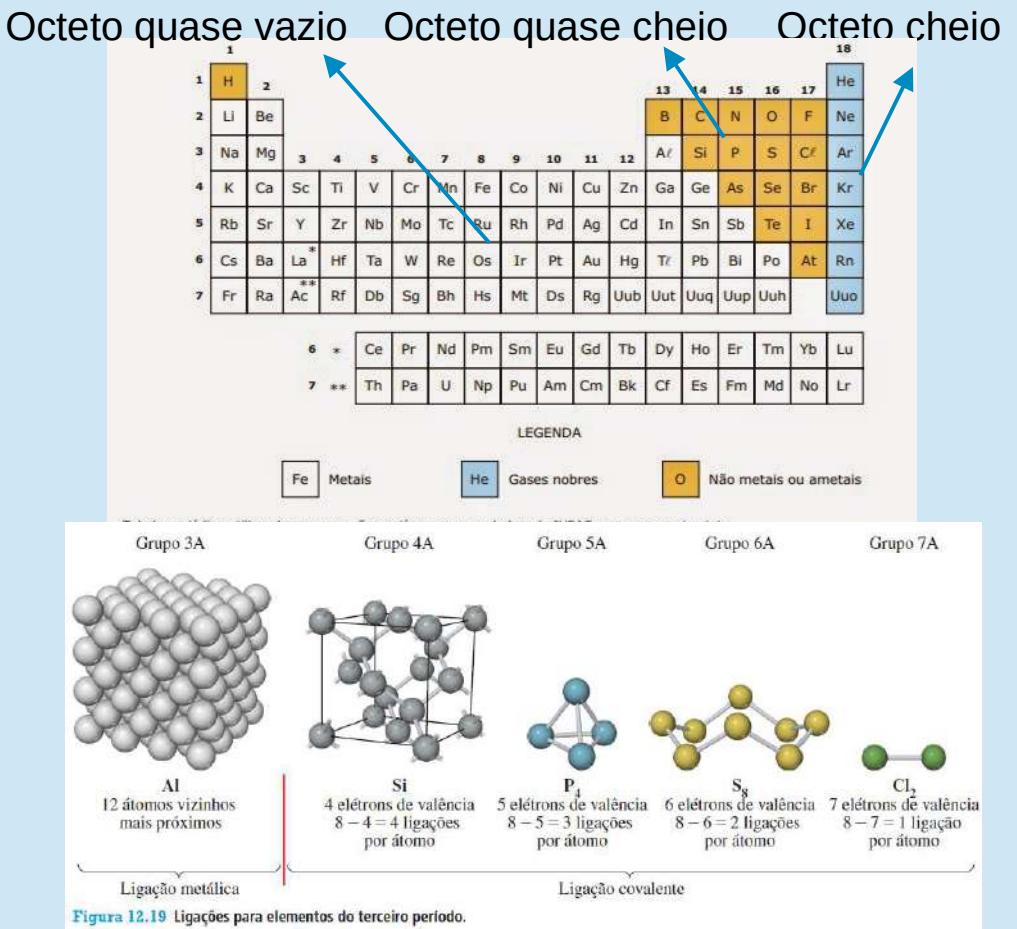


Cristalino vs. amorfo



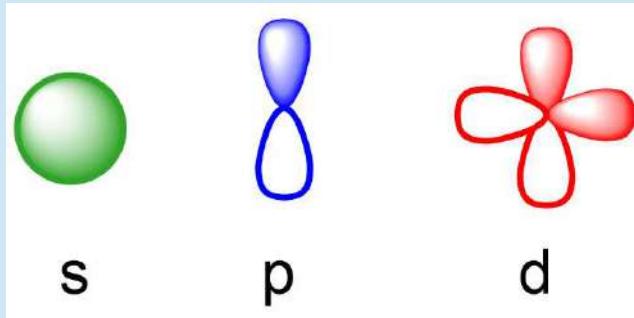
Ligaçāo metálica

- **Gases nobres:** não formam ligações (só interações);
- **Ametais:** fecham o octeto com algumas ligações localizadas entre átomos (ligação direcional);
- **Metais:** elétrons insuficientes para preencher octetos com ligações entre alguns poucos átomos, por isso **elétrons são compartilhados entre todos** (ligação deslocalizada);
- Isso explica porque o caráter metálico aumenta da direita para a esquerda na tabela periódica.



Ligação metálica

- O caráter metálico aumenta de cima para baixo na tabela periódica;
 - Isso ocorre porque ligações covalentes em caráter direcional, mas em metais orbitais s, p e d possuem energias próximas (tão mais próximas quanto mais abaixo), tornando as interações com outros átomos quase independentes da direção no espaço.



Modelo do mar de elétrons

- Rede de cátions rodeados por elétrons livres;
- Todos os cátions são atraídos por todos os elétrons;
- Explica:
 - **Maleabilidade** (todos estão muito ligados);
 - **Condutividade elétrica**: diferença de potencial elétrico em diferentes pontos (carga transportada pelos elétrons);
 - **Condutividade térmica**: diferença de temperatura (energia cinética transportada pelos elétrons);
- Não explica:
 - **Pontos de fusão** (e outras propriedades). Prevê que quanto mais elétrons de valência mais forte a ligação metálica, e maiores seriam os pontos de fusão dos metais. Na verdade os com maiores PF são os que estão no meio da tabela;

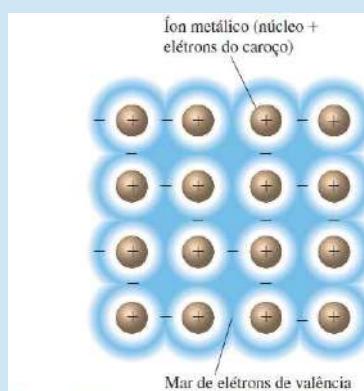
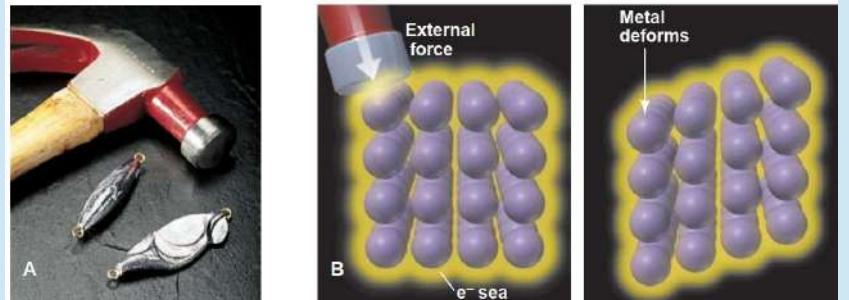


Figura 12.20 Modelo do mar de elétrons para a ligação metálica.
Os elétrons de valéncia deslocalizados formam um mar de elétrons livres, que circunda e liga um grande conjunto de íons metálicos.

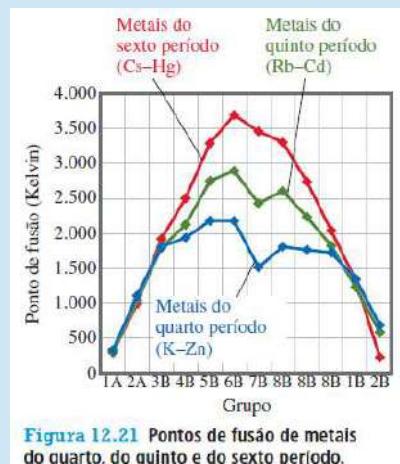
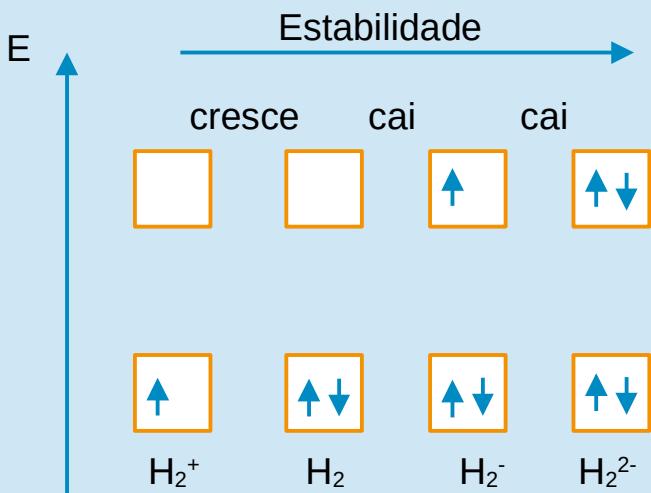
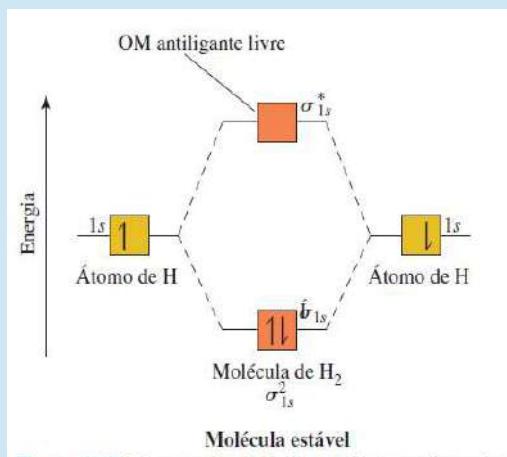
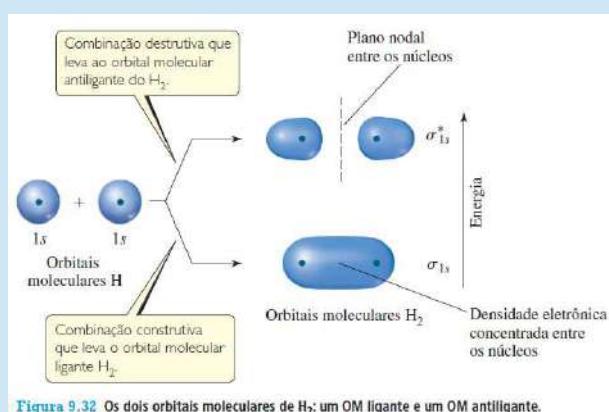


Figura 12.21 Pontos de fusão de metais do quarto, do quinto e do sexto período.

Orbitais moleculares (O.M.)

- Orbitais atômicos formam um mesmo número de orbitais da molécula, que são ocupados pelos elétrons dos átomos;
 - Orbitais ligantes: interferência construtiva (fases iguais); quanto mais elétrons nesses orbitais mais forte a ligação, estabiliza a molécula;
 - Orbitais antiligantes: interferência destrutiva (fases opostas); quanto mais elétrons nesses orbitais mais a molécula é desestabilizada.



Modelo de O.M. para metais

- Combinando vários átomos de metais, geram-se inúmeros níveis de energia, formando um contínuo que chamamos de bandas;
- A combinação de orbitais s leva a formação da banda s, com no máximo $2N$ elétrons, sendo N o número de átomos ligados;
- A banda p possui até $6N$ elétrons, e assim por diante;
- Em metais as bandas s, p, d, se sobrepõem, formando as bandas sp, por exemplo;
- Metade das energias (as menores) correspondem à orbitais ligantes, e é chamada de banda de valência; já a metade superior é chamada de banda de condução;
- Metais conduzem porque elétrons podem sair da banda de condução para a de valência com pouca energia (elétrica ou térmica);

fazer desenho

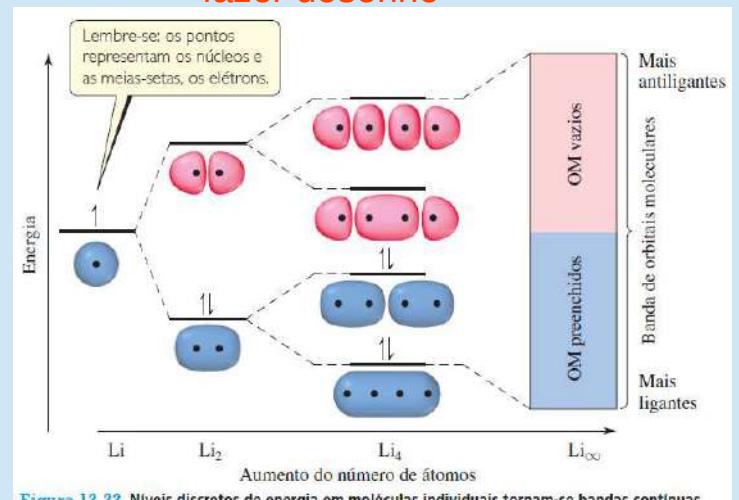
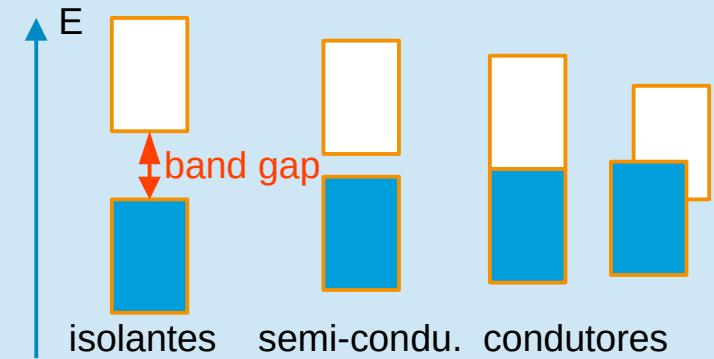


Figura 12.22 Níveis discretos de energia em moléculas individuais tornam-se bandas contínuas de energia em um sólido. Orbitais ocupados estão em azul, e orbitais vazios, em rosa.



Modelo de O.M. para metais

- O preenchimento das bandas seguem um perfil similar ao preenchimento de tanques de água;
- Eles vão ocupando as energias mais baixas primeiro, subindo até ocuparem parcialmente ou totalmente as bandas s, p e d. Quando metade das bandas, como a banda sp, é preenchida, há o máximo de estabilidade da ligação, e os maiores pontos de fusão;
- A medida em que mais elétrons são adicionados, mais orbitais antiligantes são ocupados, e as ligações apresentam interferência destrutiva significativa, a ligação metálica então enfraquecendo;⁷
- Esse modelo permite entender as propriedades dos metais que o modelo do mar de elétrons explica, mas também às que ele não explica.

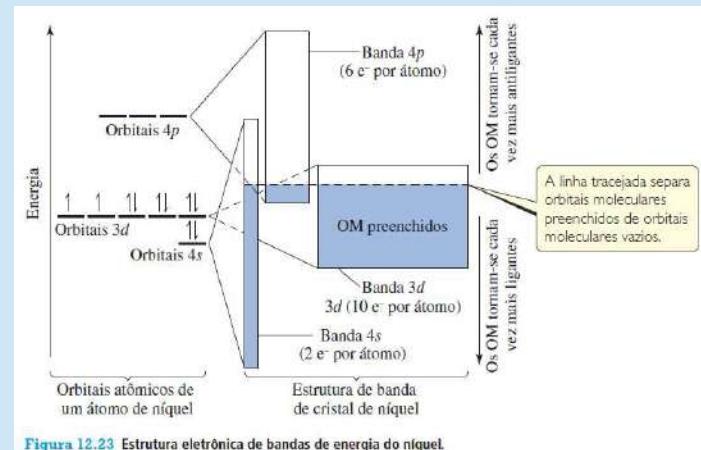
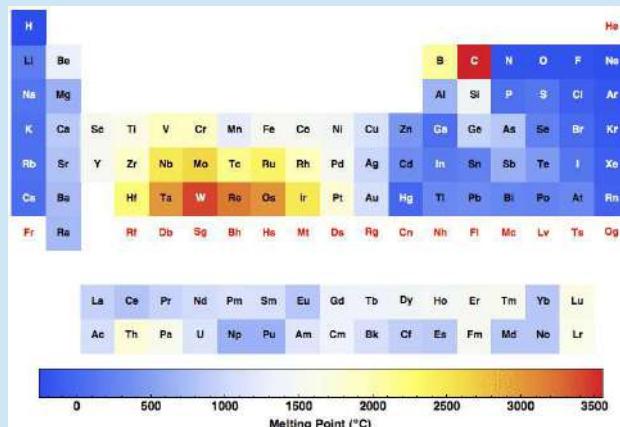
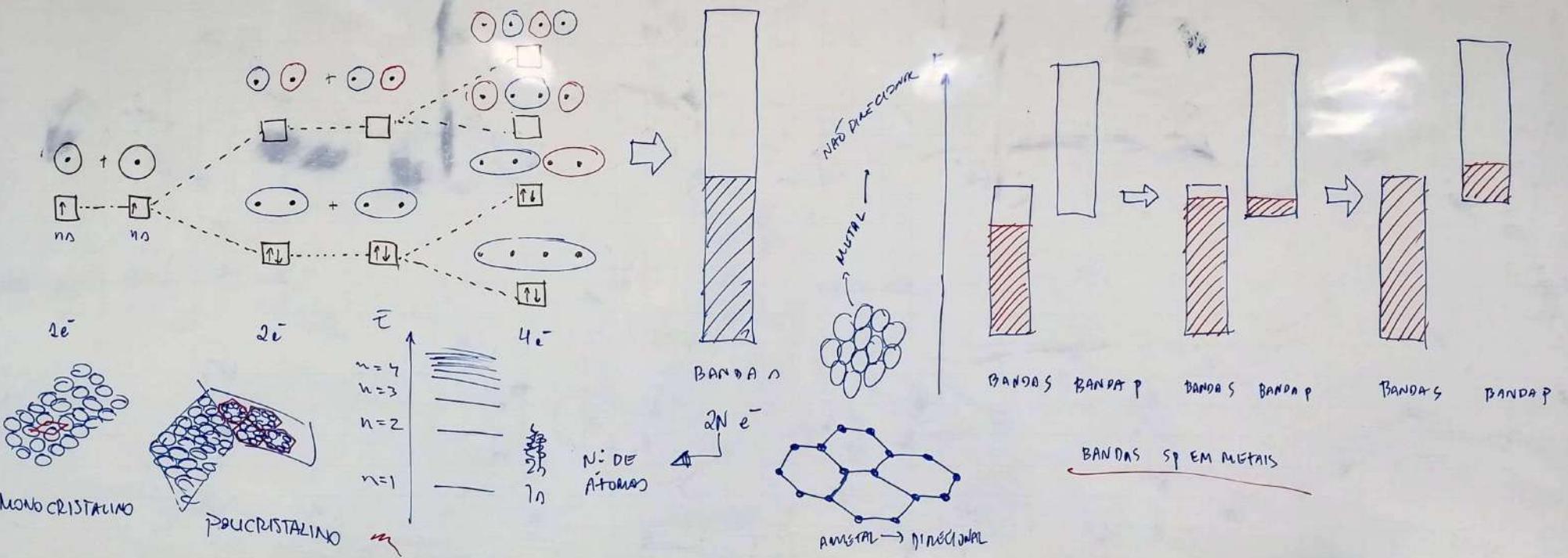


Figura 12.23 Estrutura eletrônica de bandas de energia do níquel.





Obrigado e boa sorte!

CAP.
U.1 - U.4

* REAÇÕES QUÍMICAS

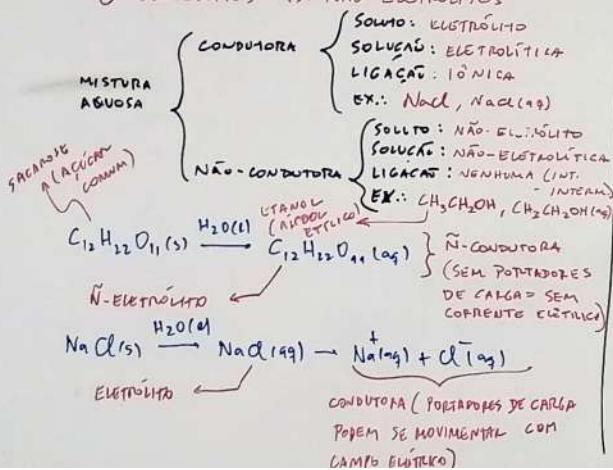
- PROPRIEDADES GERAIS DAS SOLUÇÕES AQUOSAS

SOLUÇÃO: MISTURA HOMOGENEIA (1 FASE)
DE DUAS OU MAIS SUBSTÂNCIAS

SOLVENTE: SUBSTÂNCIA EM MAIOR QUANTIDADE

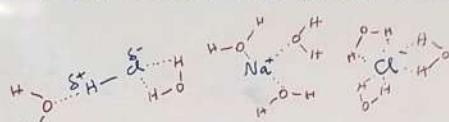
SOLUTO(s): SUBSTÂNCIA(S) EM MENOR QUANTIDADE

① ELETROLÍTOS VS. NÃO-ELETROLÍTOS

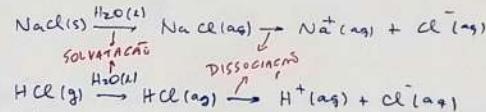


② SOLVATAGÃO / DISSOLUÇÃO:

- SOLVENTE ENVOLVE (RODEIA) MOLECULAS OU IONS

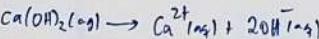
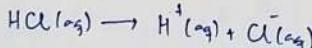
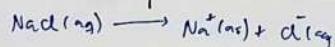


- OCORRE QUANDO SOLVENTE ROMPE INTERAÇÕES INTERMOLECULARES (MOLECULAS) OU LIGAÇÕES IÔNICAS (SÓLIDOS IÔNICOS) DE UM SÓLIDO, LÍQUIDO OU GÁS



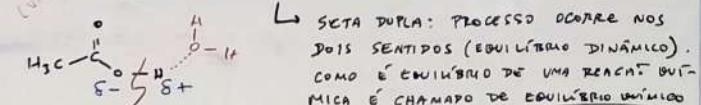
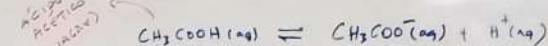
③ ELETROLÍTOS FORTES / FRACOS

- **FORTES**: QUANDO DISSOLVIDOS, ESTÃO QUASE SOU TOTALMENTE COMO IONS. EX.: NaCl , Ca(OH)_2 , HCl



SETA EM UMA DIREÇÃO:
PROCESSO SÓ OCORRÉ EM UM SENTIDO (IRREVERSÍVEL)

- **FRACOS**: QUANDO DISSOLVIDOS ESTÃO QUASE NÃO-DISSOCIADOS (MOLECULAS NEUTRAS). A MAIORIA DOS IONS VOLTA A MOLECULAS, E POCAS SE FORMAM

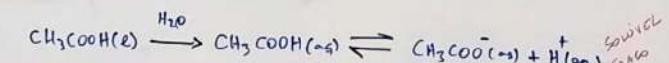
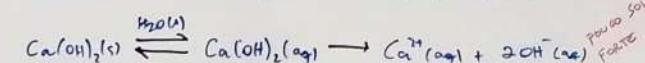
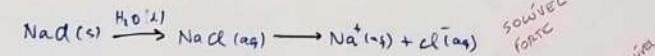


SETA DUPLA: PROCESSO OCORRE NOS DOIS SENTIDOS (EQUILÍBRIO DINÂMICO).

COMO É EQUILÍBRIO DE UMA REACAO BIM

MICA É CHAMADO DE EQUILÍBRIO UNIÚMICO

• NÃO CONFUNDIR SOLUBILIDADE COM FORÇA DO ELETROLÍTICO



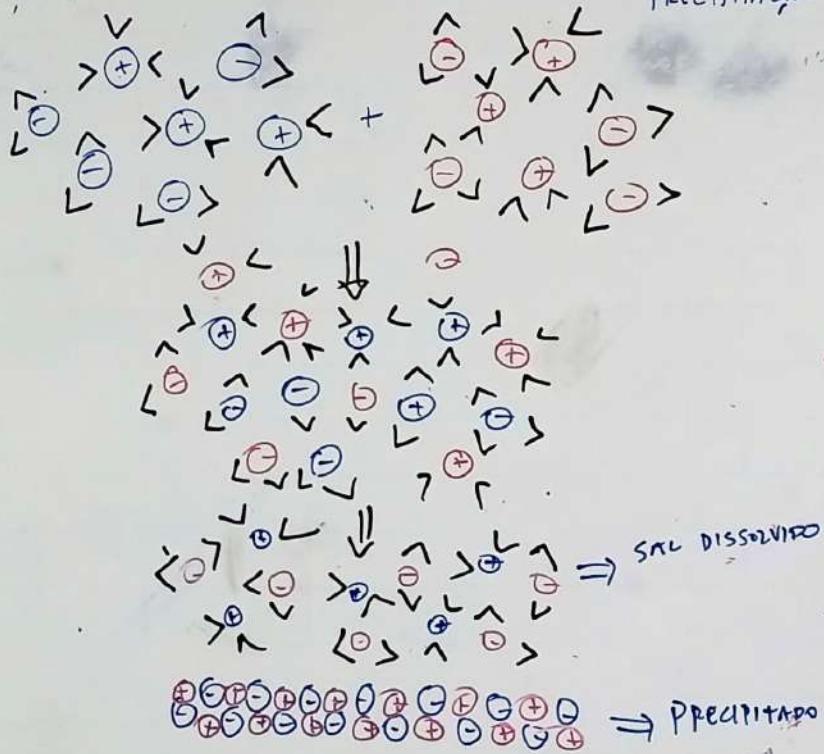
LOGO SOLÜVEL \rightarrow FORTALE NÃO É NECESSARIAMENTE VÉRDA DE

NOTE QUE $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ NEM ELETROLÍTICO, TANTO A ANÁLISE ELETROLÍTICO FOMA VS. FORTALE NÃO TEM SENTIDO.

CAP.
U.1-U.4

* REAÇÕES DE PRECIPITAÇÃO

- REAÇÕES QUÍMICAS ONDE IONS EM SOLUÇÃO SE UNEM PARA FORMAR UM SÓLIDO INSOLÚVEL CHAMADO PRECIPITADO. TAL FORMAÇÃO É CHAMADA DE PRECIPITAÇÃO.



- REGRAS DE SOLUBILIDADE: DEPENDEM DO CÁTION E DO ANION

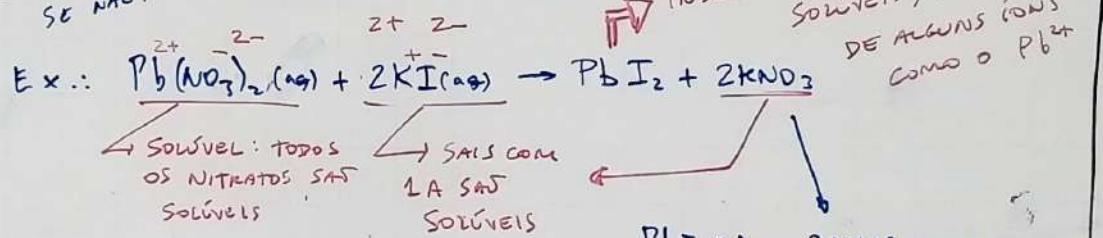
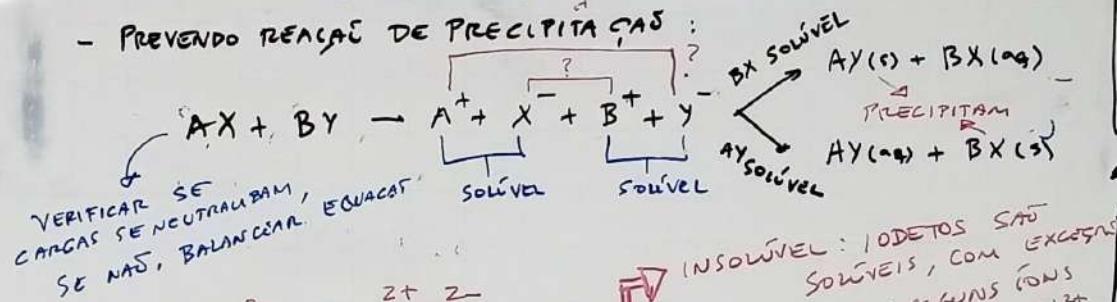
Ex.: CÁTION + $\text{NO}_3^- \rightarrow$ SOLÚVEL

VER TABELA DO LIVRO

1A OU NH_4^+ + ANION \rightarrow SOLÚVEL

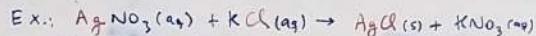
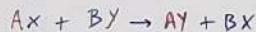
CÁTION + $\text{CO}_3^{2-} \rightarrow$ INSOLÚVEL, EXCETO 1A OU NH_4^+

- PREVENDO REAÇÕES DE PRECIPITAÇÃO:



- A REAÇÃO DE PRECIPITAÇÃO É UM EXEMPLO DE REAÇÃO DE TROCA (METÁFSE), POIS OS IONS TROCAM DE PARES.

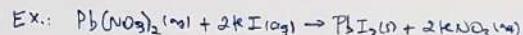
-ESSAS REAÇÕES SEGUIM O PÉRFL:



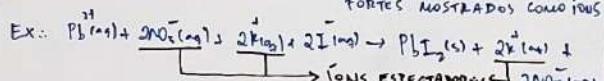
- REAÇÕES DE NEUTRALIZAÇÃO (ÁCIDO + BASE) TAMBÉM SEGUEM ESSE PÉRFL.

EQUAÇÕES IÔNICAS E IONS ESPECTADORES

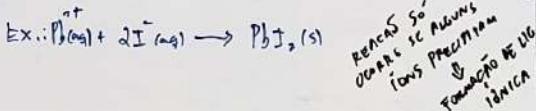
- EQUAÇÃO MOLECULAR: CARÁTER IÔNICO NÃO É EVIDENCIADO



- EQUAÇÃO IÔNICA COMPLETA: TODOS OS ELETROLÍTOS FORTESS MOSTRADOS COMO IONS



- EQUAÇÃO IÔNICA SIMPLIFICADA: REMOÇÃO DE IONS ESPECTADORES

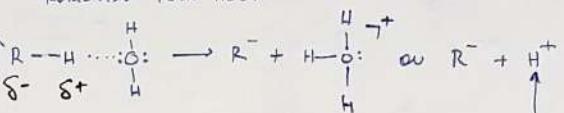


* ÁCIDOS, BASES E REAÇÕES DE NEUTRALIZAÇÃO

- ÁCIDOS E BASES SÃO ELETROLÍTOS COMUNS QUE PROMOVEM O AUMENTO NA QUANTIDADE DE IONS H^+ OU OH^- EM SOLUÇÃO AQUOSA, RESPECTIVAMENTE.

ÁCIDOS

- MOLEÚLAS QUE POSSUEM UM HIDROGÊNIO QUE PODE SER REMOVIDO PELA ÁGUA



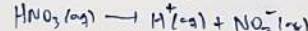
ION HIDRÓNIO \longrightarrow FORMA SIMPLIFICADA

- COMO O H^+ É SÓ UM PRÓTON, ÁCIDOS SÃO DOADORES DE PRÓTONS. Ex.: VINAGRE (ÁCIDO ACÉTICO)

SUCO DE LIMÃO (ÁCIDO CÍTRICO)

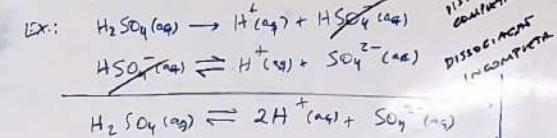
- PODEM SER CLASIFICADOS DE ACORDO COM O NÚMERO DE PRÓTONS PRODUZIDO:

a) MONOPRÓTICO ($\pm \text{H}^+$)



* 2 GRAMAS

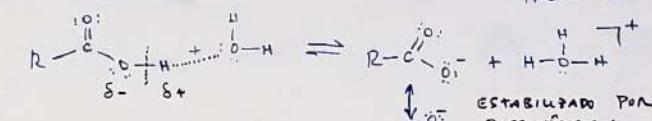
B) DIPROTÓTICOS (2H^+):



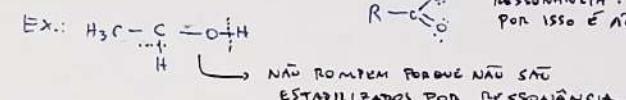
DISSOCIAÇÃO
COMPLETA

DISSOCIAÇÃO
INCOMPLETA

- O ÁCIDO ACÉTICO É UM ÁCIDO CARBOYLICO: IONS H^+ , SO_4^{2-} E HSO_4^- PRESENTES



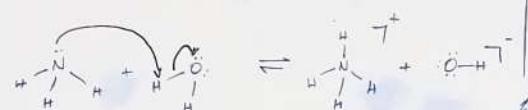
ESTABILIZADO POR
PESSONÂNCIA;
POR ISSO É ÁCIDO



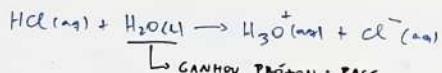
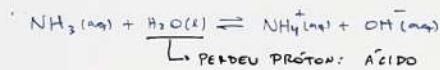
NÃO ROMPEM PORQUE NÃO SÃO ESTABILIZADOS POR PESSONÂNCIA

BASES

- SUBSTÂNCIAS QUE REAGEM (RECEBEM) IONS H^+ . OU ELAS LIBERAM OH^- QUANDO DISSOLVIDAS OU AUMENTAM SUA QUANTIDADE INDIRETAMENTE AO CONSUMIR H^+ .



- NOTE QUE A ÁGUA PODE SE COMPORTAR COMO ÁCIDO OU BASE:



ÁCIDOS E BASES FORTES E FRACOS

- ELETROLÍTOS FORTES \rightarrow ÁCIDOS/BASES FORTES

- ELETROLÍTOS FRACOS \rightarrow ÁCIDOS/BASES FRACOS

FORÇA \neq REATIVIDADE (EXETO QUANDO REATIVO DADO DEPENDE DE H^+ APENAS)

EXEMPLOS:

- ÁCIDOS FORTES: HCl , HBr , HI , HClO_3 , HClO_4 , HNO_3 , H_2SO_4

- ÁCIDOS FRACOS: OUTROS (EM GERAL)

- BASES FORTES: HIDRÓXIDOS DE CÁTIONS DO GRUPO IA (Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+) E DE CÁTIONS PESADOS DO GRUPO IIA (Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+}).

- BASES FRACAS: NH_3 E OUTRAS

SOBRE RELAÇÃO ENTRE O COMPOSTO SETE IÔNICO/MOLECULAR:

IÔNICO \rightarrow BASES FORTES
OUTROS (EX: Na^+) (ELETROLÍTOS FORTES)

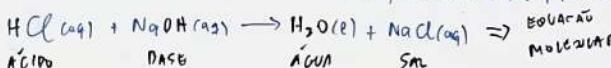
MOLECULAR \rightarrow ÁCIDOS/BASES FRACOS (ELETROLÍTOS FRACOS)
 \downarrow ÁCIDOS FORTES (ELETROLÍTOS FORTES)
OUTROS (NÃO-ELETROLÍTICOS)

REACÕES DE NEUTRALIZAÇÃO DE SALS

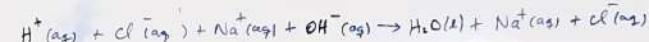
- ÁCIDOS E BASES DIFEREM $\left\{ \begin{array}{l} \text{SABOR} \\ \text{CORES DE INDICADORES} \\ \text{PROPRIEDADES ÚNICAS EM GERAL} \end{array} \right.$

- REAÇÃO DE NEUTRALIZAÇÃO: ÁCIDO + BASE \longrightarrow PRODUTOS

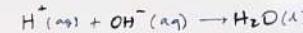
- QUANDO É ÁCIDO + HIDRÓXIDO METÁlico, PRODUTO É SAL + ÁGUA



EQUAÇÃO IÔNICA COMPLETA:



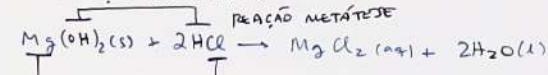
EQUAÇÃO IÔNICA SIMPLIFICADA:



(CARACTERÍSTICA PRINCIPAL DAS REAÇÕES DE NEUTRALIZAÇÃO)

Ex.: REAÇÃO DE NEUTRALIZAÇÃO DO ÁCIDO CLORÍDICO COM O HIDRÓXIDO DE MAGNÉSIO SÓLIDO

EQUAÇÃO MOLECULAR:

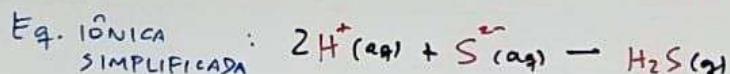
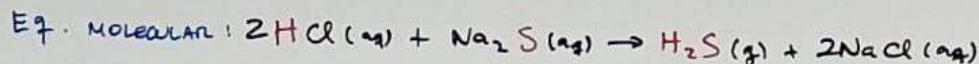


EQUAÇÃO IÔNICA SIMPLIFICADA

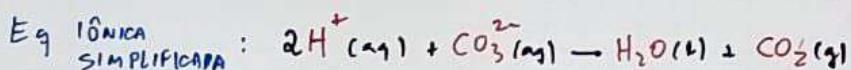
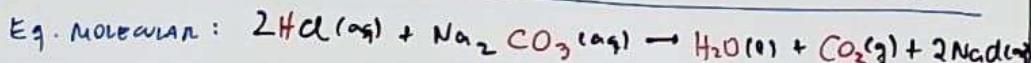
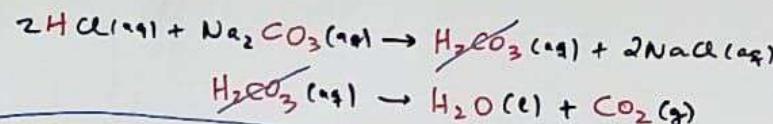


• REAÇÕES DE NEUTRALIZAÇÃO COM FORMAÇÃO DE SAIS

- OUTRAS BASES ALÉM DO OH^- : S^{2-} , CO_3^{2-} , HCO_3^-
 SULFETO CARBONATO BICARBONATO
- FORMAÇÃO DE H_2S :



- FORMAÇÃO DE CO_2



- FAÇA AS REAÇÕES PARA O $\text{NaHCO}_3(\text{aq})$ ATUANDO COMO BASE

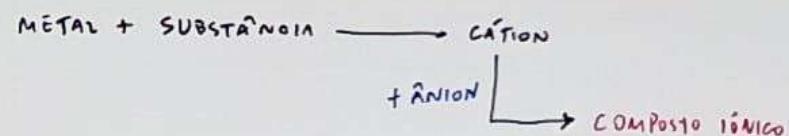
* REAÇÕES DE OXIDAÇÃO-REDUÇÃO (OXIRREDUÇÃO, REDOX)

- PRECIPITAÇÃO: $\text{A}^+ \rightarrow \text{A}^{2+} \text{ e } \text{B}^- \rightarrow \text{B}^{2-}$
- ÁCIDO-BASE: $\text{A}(\text{H}) \rightarrow \text{H}(\text{B})$
- OXIRREDUÇÃO: $\text{O}(\text{R}) \rightarrow \text{O}(\text{R}')$

- VAMOS NOS CONCENTRAR EM CASOS ONDE UM REAGENTE É UM METAL (NA FORMA ELEMENTAR)

- UM EXEMPLO COMUM DESSE CASO:

CORTESIA: METAL PERDE ELÉTRONS PARA OUTRA SUBSTÂNCIA, E FORMA CÁTIONES QUE SE COMBINAM COM ANÍONS GERANDO COMPOSTOS IÔNICOS



- Ex.: $\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{CuCO}_3, \text{Cu(OH)}_2$
 $\text{Fe} \rightarrow \text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe(OH)}_3, \text{Fe}_2\text{O}_3$
 $\text{Ag} \rightarrow \text{Ag}^+ \rightarrow \text{Ag}_2\text{S}$

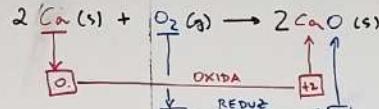
- OXIDAÇÃO: SUBSTÂNCIA PERDE E FICA COM CARGA MAIOR (MAIS POSITIVA/MENOS NEGATIVA)



Redução: SUBSTÂNCIA GANHA e⁻ E FICA COM CARGA MENOR (MENOS POSITIVA / MAIS NEGATIVA)



- SE HÁ UMA SUBSTÂNCIA QUE PERDE (OXIDA) HÁ OUTRA QUE GANHA. LOGO OXIDAÇÕES DE UMA SUBSTÂNCIA ↔ REDUÇÃO DE OUTRA



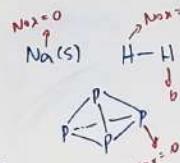
NÚMERO DE OXIDAÇÃO (Nox)

- SERVE PARA GERENCIAMENTO DO N.º DE ELÉTRONS QUE SAEM DA SUBSTÂNCIA QUE OXIDA PARA A QUE REDUZ

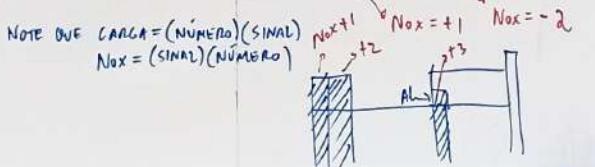
- DETERMINADA POR DIVISÃO HIPOTÉTICA DOS ELÉTRONS ENTRE ÁTOPOS (+ CARGA FIRMAL)

REGRAS:

① ÁTOMO NA FORMA ELEMENTAR: Nox = 0



② ION MONOATÔMICO: Nox = CARGA



③ NÃO METAIS: EM GERAL Nox < 0, MAS NEM SEMPRE

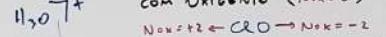
(A) Nox(O) = -2 EM COMPOSTOS IÔNICOS E MOLECULARES

EXCEÇÃO: PEROXÍDOS COMO O $\text{O}_2^{\cdot-} \Rightarrow \text{Nox(O)} = -1$

(B) Nox(H) = $\begin{cases} +1, & \text{QUANDO LIGADO A NÃO-METAIS} \\ \text{Nox} = +1 - H = \text{Cl} \\ -1, & \text{QUANDO LIGADO A METAIS} \\ \text{NaH} \rightarrow \text{Nox} = -1 \end{cases}$

(C) Nox(F) = -1

Nox(Cl, Br, I) = -1, EXCEÇÃO: QUANDO COMBINADOS COM OXIGÉNIO ($\text{Nox} > 0$)



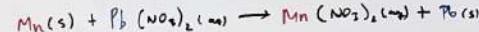
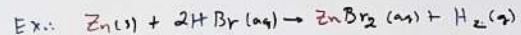
④ SOMA DO Nox = CARGA DO COMPOSTO
ÚTIL PARA OBTER NOx DE ÁTOMO QUANDO SABEMOS DOS OUTROS

$$\begin{aligned} \text{ClO} &\rightarrow \text{CARGA DA MOLÉCULA} \\ &\text{H}_3\text{O}^{\cdot+} \rightarrow \text{Nox(O)} = -2 \\ &\text{Nox(H)} = +1 \\ &3\text{Nox(H)} + \text{Nox(O)} = \\ &3 \cdot (+1) + 1 \cdot (-2) = +1 \end{aligned}$$

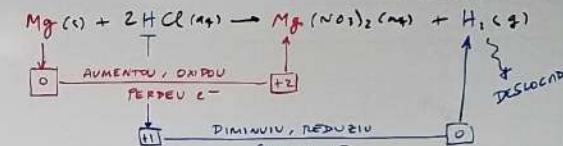
$$\text{Nox(Cl)} + \text{Nox(O)} = 0 \text{ anula-se}$$

$$\text{Nox(Cl)} = -\text{Nox(O)} = -(-2) = +2$$

OXIDAÇÃO DE ÁCIDOS POR ÁCIDOS E SAIS



- REAÇÕES DE DESLOCAMENTO: ION É SUBSTITUIDO (DESLOCADO) EM FUNÇÃO DE UM ELEMENTO

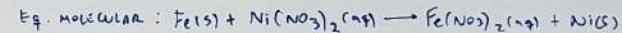


- QUANDO NÃO OXIDOU NEM REDUZIU: ION ESPECTADOR. A EQUAÇÃO IÔNICA SIMPLIFICADA É, TANTO: TANTO:

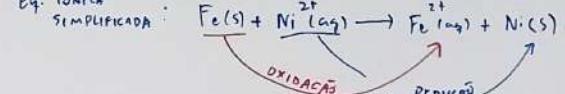


- METAIS TAMBÉM PODEM SER OXIDADOS POR SOLUÇÕES AQUOSAS DE SAIS

EX.:

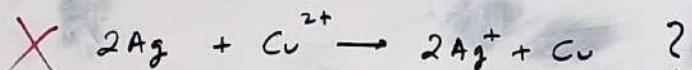
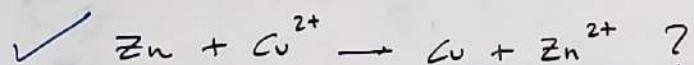


Eq. iônica

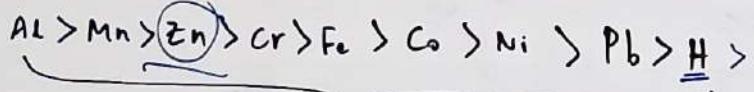
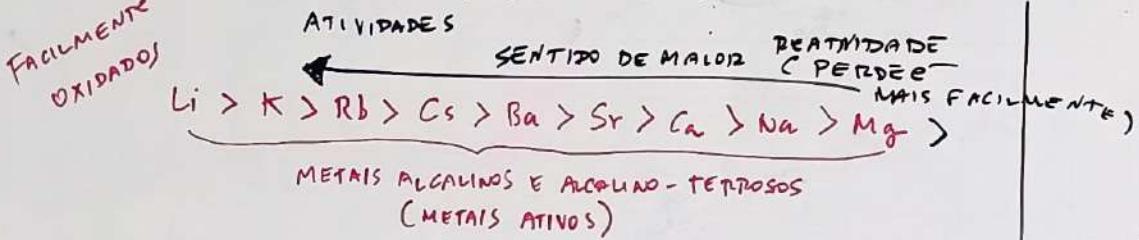


SÉRIE DE ATIVIDADES

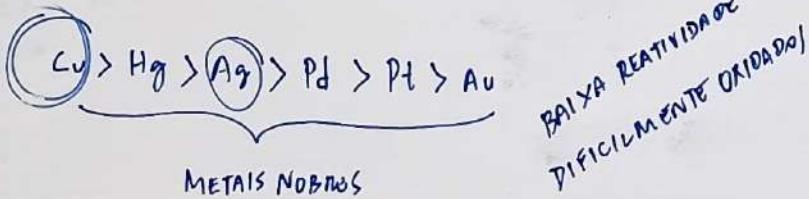
- PREVER SE METAL SERÁ OXIDADO POR ÁCIDO OU SAL.



- TABELA COM FACILIDADE DE OXIDAÇÕES: SÉRIE DE ATIVIDADES

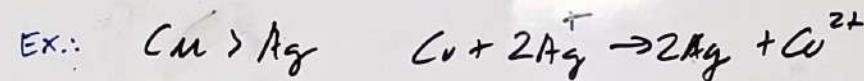


METAIS COMUNS



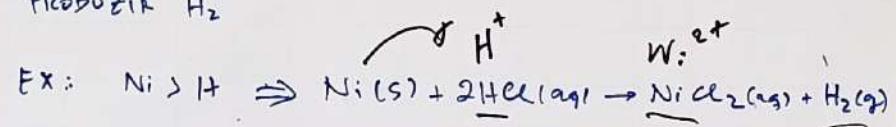
METAIS + SAIS/IÓNS

- QUALQUER METAL DA LISTA PODE SER OXIDADO PELOS IÓNS (SAIS) DOS ELEMENTOS MAIS ABAIXO DA LISTA



METAIS + ÁCIDOS

- METAIS ACIMA DO H^+ REACEM COM ÁCIDO PARA PRODUZIR H_2



- METAIS ABAIXO NÃO SÃO OXIDADOS PELO H^+ , E NÃO PRODUZEM H_2