UNIVERSIDADE ZAMBEZE

FACULDADE DE ENGENHARIA AMBIENTAL E DE RECURSOS NATURAIS

AULA TEÓRICA I

Cadeira: Química Inorgânica

Tema I: Estrutura atómica e lei periódica

1.INTRODUÇÃO

Desde o início da civilização até hoje, a humanidade pode observar que a natureza é formada por materiais muito diferentes entre si, como por exemplo o solo em que pisamos, que pode ser de: terra vermelha, terra preta, areia, pedras, O mesmo ocorre com os animais existem: aves, mamíferos, peixes de formas, tamanhos e constituições muito diferentes entre si. Todos esses materiais que nos rodeiam (a terra, as pedras, a água e os seres vivos) constituem o que chamamos matéria.

Definição*: Matéria é tudo que tem massa e ocupa lugar no espaço (isto é, tem volume).*

Massa e volume são então propriedades gerais da matéria. A matéria pode se apresentar no estado sólido (por exemplo, as pedras), líquido (por exemplo, a água) ou gasoso (por exemplo, o ar que respiramos).

1.1 Nascimento da química

Observando a queima de um pedaço de carvão, tem-se a impressão de que ele desaparece. Essa impressão, porém, está errada a matéria escapa nas chamas, durante a combustão.

Quando uma esponja de aço se enferruja, sua massa aumenta. Será que houve “criação” de matéria?

Não. Ocorre que o oxigênio do ar reage com o ferro da esponja, durante o enferrujamento, produzindo aumento na massa total da esponja de aço.

A lei de Lavoisier

No final do século XVIII, o cientista Antoine Lavoisier realizou uma série de experiências em recipientes fechados (para que não entrasse nem escapasse nada do sistema em estudo) e, efetuando pesagens com balanças mais precisas do que as dos cientistas anteriores, concluiu:

No interior de um recipiente fechado, a massa total não varia, quaisquer que sejam as transformações que venham a ocorrer.

Tal afirmativa é uma lei da Natureza, descoberta por Lavoisier e que, por esse motivo, ficou conhecida como lei de Lavoisier (ou lei da conservação da massa, ou lei da conservação da matéria).

A lei de Proust

Quase na mesma época de Lavoisier, Joseph Louis Proust, efetuando também uma grande série de pesagens em inúmeras experiências, chegou à seguinte conclusão:

Uma determinada substância composta é formada por substâncias mais simples, unidas sempre na mesma proporção em massa.

Por exemplo, observa-se que o gás carbônico é sempre formado por carbono e oxigênio, e verifica-se também que:

1ª experiência: 3 g de carbono (C) se unem a 8 g de oxigênio (O_2), produzindo 11 g de gás carbônico (CO_2)

2ª experiência: 6 g de carbono (C) se unem a 16 g de oxigênio (O_2), produzindo 22 g de gás carbônico (CO_2)

Na 1ª experiência, a proporção entre as massas é de 3: 8: 11. Na 2a experiência, é de 6: 16: 22. Nesta última, os números mudaram, mas obedecendo à relação: 6 é o dobro de 3; 16 é o dobro de 8; e 22 é o dobro de 11. Enfim, os números mudaram, mas a proporção é a mesma, como se diz em Matemática.

Para explicar os factos experimentais observados nas duas leis ponderais vistas anteriormente, o cientista inglês John Dalton imaginou a seguinte hipótese:

Todo e qualquer tipo de matéria é formado por partículas indivisíveis, chamadas átomos.

2. A EVOLUÇÃO DOS MODELOS ATÓMICOS

A noção de átomo tem os seus primórdios no filósofo grego **Demócrito** que, no séc. IV AC, e contra as ideias dominantes de **Aristóteles**, considerava a matéria composta de partículas indivisíveis, os átomos.

Só em 1808 um cientista inglês, **Dalton**, formulou uma definição precisa acerca dos átomos. As suas hipóteses foram as seguintes:

- Os elementos são constituídos por partículas extremamente pequenas, chamados átomos. Todos os átomos de um dado elemento são idênticos, têm o mesmo tamanho, massa e propriedades químicas. Os átomos de um elemento são diferentes dos átomos de outro elemento qualquer;

- Os compostos são constituídos por átomos de mais do que um elemento. Em qualquer composto a razão entre o número de átomos de qualquer dos elementos é um número inteiro, ou uma fracção simples;

- Uma reacção química envolve apenas separação, combinação ou rearranjo dos átomos. Não resulta na sua criação ou destruição. Dalton imaginava o átomo como uma unidade indivisível, mas na realidade este possui uma estrutura interna de partículas subatómicas: electrões, protões e neutrões.

A descoberta do electrão deve-se à invenção do tubo de raios catódicos
(figura 1.1.)

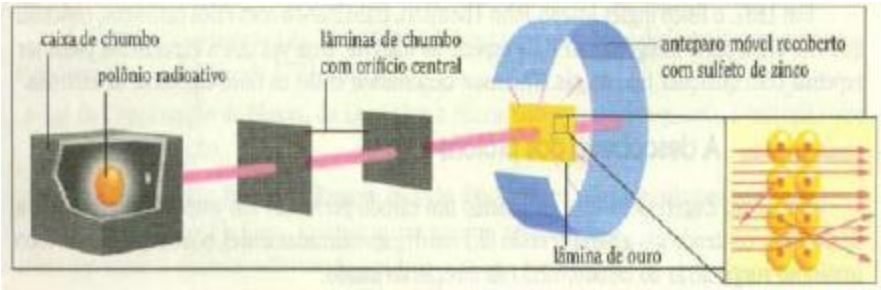


Figura 1.1

Partículas emitidas pelo cátodo são dirigidas para o ânodo. Um orifício permite que estas partículas o atravessem, originando o raio catódico. Este raio vai posteriormente atingir uma placa fluorescente. Colocando um campo eléctrico no caminho do raio catódico, este é atraído pelo prato possuindo carga positiva e repelido pelo prato possuindo carga negativa, o que indica tratarem-se de partículas carregadas negativamente: os electrões.

Os átomos, contendo electrões, são contudo electricamente neutros, pelo que cada átomo deveria conter igual número de cargas positivas e de cargas negativas.

Segundo **Thomson**, o átomo seria como um “bolo de passas”, ou seja os electrões “embebidos” numa esfera uniforme e positiva.

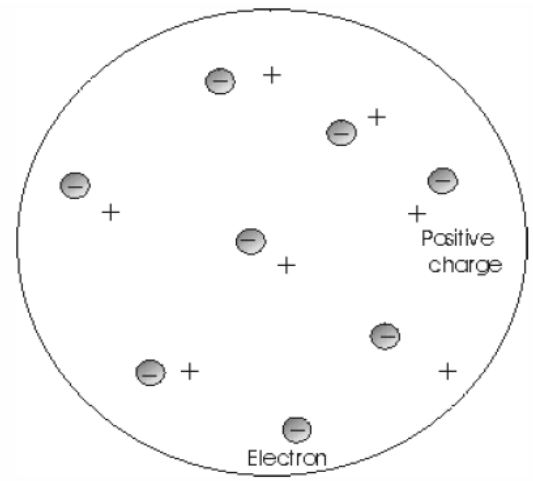
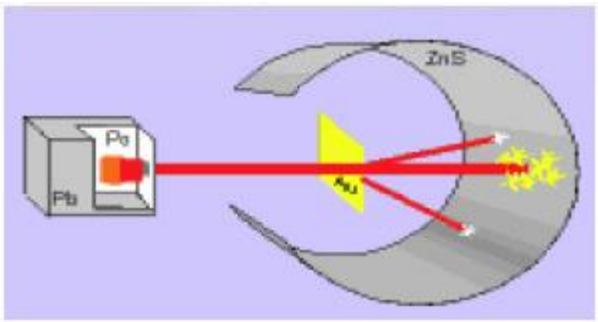


Figura 1.2

O modelo atômico de Thomson explicava satisfatoriamente os seguintes fenômenos:

- Eletrização por atrito, entendendo-se que o atrito separava cargas elétricas (parte das positivas em um corpo e igual parte das negativas em outro, como no caso do bastão atritado com tecido);
- Corrente elétrica, vista como um fluxo de eletrões;
- Formação de íons negativos ou positivos, conforme tivessem, respectivamente excesso ou falta de eletrões;
- Descargas elétricas em gases, quando os eletrões são arrancados de seus átomos (como na ampola de Crookes).

Em 1910, **Rutherford** decide usar partículas α (emitidas por átomos radioactivos) para provar a estrutura do átomo. Para isso bombardeou finas películas de ouro com estas partículas α, sendo os resultados surpreendentes: a maioria das partículas atravessava a película, algumas mudavam de direcção, e outras (poucas) voltavam para trás.



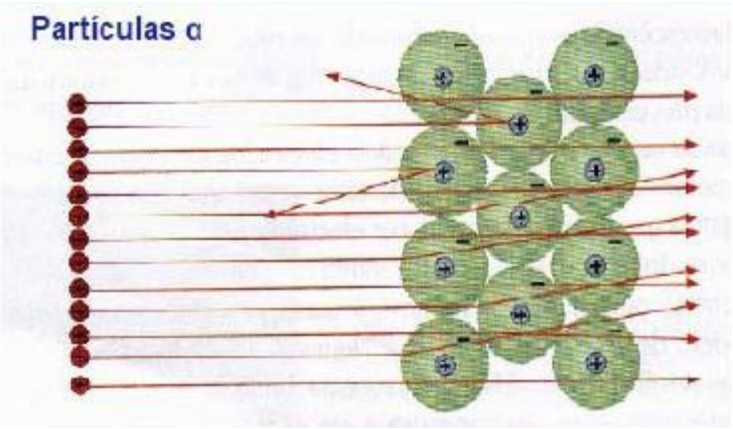


Figura 1.3

Rutherford propôs assim, que as cargas positivas estavam concentradas num núcleo, na parte central do átomo.

As cargas positivas no núcleo são chamadas de protões. Cada um tem uma massa de 1.67252×10^{-24} g, ou seja cerca de 1840 vezes a massa de um electrão. O átomo é cerca de 10000 vezes maior do que o seu respectivo núcleo.

Rutherford imaginou que ao redor do núcleo estavam girando os eletrões. Sendo negativos, os eletrões iriam contrabalançar a carga positiva do núcleo e garantir a neutralidade elétrica do átomo. Sendo muito pequenos e estando muito afastados entre si, os eletrões não iriam interferir na trajetória das partículas α.

Em resumo, o átomo seria semelhante ao sistema solar: o núcleo representaria o Sol; e os elétrons seriam os planetas, girando em órbitas circulares e formando a chamada eletrosfera.

Apesar do sucesso de Rutherford, na tentativa de explicar a estrutura do átomo, continuavam muitos aspectos por esclarecer. Por exemplo, sabia-se que o hidrogénio continha um protão e o hélio 2 protões, mas a relação de massas não era de 2:1 mas sim de 4:1 (despreza-se a massa dos electrões que é muito pequena comparada com a dos protões).

Isto só foi resolvido com a descoberta do neutrão por **Chadwick**, em 1932. Chadwick bombardeou uma película de berílio com partículas a, e o metal emitia uma radiação altamente energética, constituída por partículas neutras, e com uma massa ligeiramente superior à do protão: o neutrão.

Com esta descoberta, a constituição do átomo ficou definitivamente estabelecida: os átomos são constituídos por núcleos muito pequenos e muito densos, cercados por "nuvens" de electrões a relativamente grandes distâncias do núcleo. Todos os núcleos contêm protões. Núcleos de todos os átomos, excepto o hidrogénio, contêm também neutrões.

Na tabela seguinte resumem-se os dados relativos à massa e carga destas três partículas subatómicas:

Partícula	Massa (g)	Carga (C)	unidade de carga
electrão	9.1095×10^{-28}	-1.6022×10^{-19}	- 1
protão	1.67252×10^{-24}	1.6022×10^{-19}	+ 1
neutrão	1.67495×10^{-24}	0	0

3. A IDENTIFICAÇÃO DOS ÁTOMOS

Todos os átomos podem ser identificados pelo número de protões, electrões e de neutrões que os constituem.

3.1 O número atómico (Z) é o número de protões no núcleo de cada átomo de um elemento. Num átomo neutro, o número de protões é igual ao número de electrões, pelo que o número atómico indica também o número de electrões no átomo.

Só o hidrogénio tem 1 protão, só o hélio tem 2 protões, só o lítio tem 3 protões, etc. Facilmente se conclui que o número atómico nos indica imediatamente de que elemento se trata.

3.2 O número de massa (A) é o número total de neutrões e protões presentes no núcleo de um átomo. Daqui pode concluir-se que o número de neutrões é dado por A - Z.

A forma de representar o nuclido de um átomo é ${}^{A}_{Z}X$. Exemplos são o ${}^{7}_{3}Li$, ${}^{23}_{11}Na$, etc.

3.3. Elemento químico é o conjunto de átomos com o mesmo número atômico (Z).

O número atômico é muito importante, pois identifica o elemento químico (o que foi proposto em 1914, por Moseley). Assim, quando falamos no elemento químico sódio, estamos falando dos átomos com número atômico 11.

3.4 Iões

Um átomo, em seu estado normal, é eletricamente neutro, ou seja, o número de eletrões na electrosfera é igual ao número de protões do núcleo, e em consequência suas cargas se anulam.
Um átomo pode, porém, ganhar ou perder electrões da electrosfera, sem sofrer alterações em seu núcleo, resultando daí partículas denominadas Iões.
Quando um átomo ganha electrões, ele se torna um íon negativo, também chamado anião. Por exemplo: o átomo normal de cloro tem 17 protões, 18 neutrões e 17 electrões. Ele pode ganhar 1 electrão e transformar-se em anião cloreto (Cl^-), que terá 17 protões, 18 neutrões e 18 electrões.
Quando um átomo perde electrões, ele se torna um ião positivo, também chamado catião. Por exemplo: o átomo de sódio (Na) tem 11 protões, 12 neutrões e 11 electrões. Ele pode perder 1 elétron, tornando-se um catião sódio (Na^+) com 11 protão, 12 neutrões e 10 electrões.

3.1 Isótopos, isóbaros e isótonos

Examinando o número atômico (*Z)*, o número de neutrões (*N)* e o número de massa (*A)* de diferentes átomos, podemos encontrar conjuntos de átomos com um ou outro número igual. A partir daí surgiram alguns novos conceitos que agora passamos a definir:

Isótopos são átomos com mesmo número de protões (*Z*) e diferente número de massa (*A*). Um exemplo de isótopos são os dois isótopos do urânio:

$$^{235}_{92}U \quad e \quad ^{238}_{92}U$$

Outro exemplo são os três isótopos do hidrogénio: o hidrogénio, o deutério e o trítio:

$$^{1}_{1}H, ^{2}_{1}H, ^{3}_{1}H.$$

As propriedades químicas de um elemento são determinadas sobretudo pelo número de protões e electrões no átomo. Neutrões não entram em reacções químicas, em condições normais, logo isótopos de um mesmo elemento têm propriedades químicas semelhantes.

Isóbaros são átomos de diferentes números de protões (elementos diferentes), mas que possuem o mesmo número de massa (*A*).
Conclui-se que os isóbaros são átomos de elementos químicos diferentes, mas que possuem a mesma massa, porque um maior número de protões é compensado por um menor número de neutrões e vice-versa. Exemplos:
Os isóbaros têm propriedades físicas e químicas diferentes.

Isótonos são átomos de diferentes números de protões (elementos diferentes), diferentes Números de massa, porém com mesmo número de neutrões (*N).*

4. NATUREZA ONDULATÓRIA DA LUZ

Muito do entendimento actual sobre a estrutura electrónica dos átomos veio da análise da luz emitida ou absorvida pelas substâncias. Para entender a base para o modelo actual de estrutura electrónica, consequentemente, devemos primeiro compreender mais sobre a luz. A luz que podemos ver com nossos olhos, *luz visível*, é um tipo de radiação electromagnética. Como a radiação electromagnética transporta energia pelo espaço, ela é também conhecida como *energia radiante*. Existem vários tipos de radiação electromagnética além da luz visível. Essas diferentes formas – como ondas de rádio que "transportam" musica, a radiação infravermelho (calor) de lareiras incandescentes e os raios X usados por um dentista – podem *parecer* muito diferentes umas das outras, porem elas compartilham certas características fundamentais.

Todos os tipos de radiações electromagnéticas movem-se no vácuo a uma velocidade de 3,00 x 10^8 m/s, a *velocidade* da luz. Alem disso, todas tem características ondulatórias semelhantes às das ondas que se movem na água. As ondas de água são o resultado da energia transferida para água, talvez pela queda de uma pedra ou o movimento de um barco em sua superfície. Essa energia é expressa como movimentos da água para cima e para baixo.

Uma secção transversal de onda de água (figura 1.4) mostra como que ela é periódica: o padrão de picos e depressões repetem-se a intervalos regulares. A distância entre picos (ou depressões) é chamada ***comprimento de onda***. O número de comprimento de onda completo, ou *ciclos*, que passam por determinado ponto a cada segundo, é a ***frequência*** da onda. Podemos medir a frequência da onda contando o número de vezes por segundo que uma rolha oscilando em sua superfície se move por um ciclo completo de movimentos para cima e para baixo.

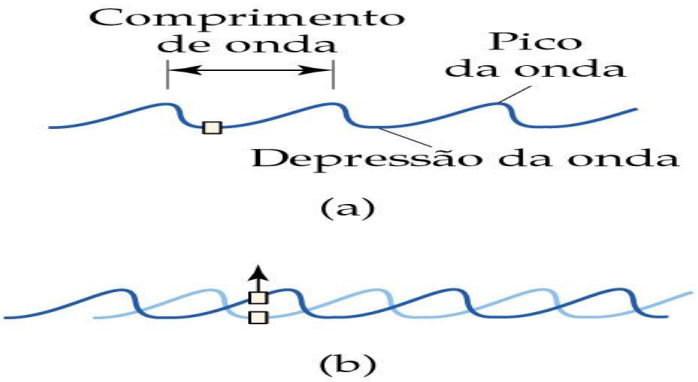


Figura 1.4

As características ondulatórias de uma radiação electromagnética devem-se a oscilações periódicas de intensidades de forças electrónicas e magnéticas associadas com a radiação. Podemos apontar a frequência e o comprimento de onda para essas ondas electromagnéticas, como ilustrado na figura 1.5. como a radiação electromagnética se move à velocidade da luz, o comprimento de onda e a frequência estão relacionados. Se o comprimento de onda é longo, existirão menos ciclos da onda passando por um ponto por segundo; logo, a frequência será baixa. De maneira inversa, para uma onda que tem frequência alta, a distância entre os picos da onda deverá ser menor (comprimento de onda curto). Essa relação inversa entre a frequência e o comprimento de onda de uma radiação electromagnética pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\upsilon\lambda = c \qquad (1.1)$$

Onde υ (ni) é a frequência, λ (lambda) é o comprimento de onda e c é a velocidade da luz.

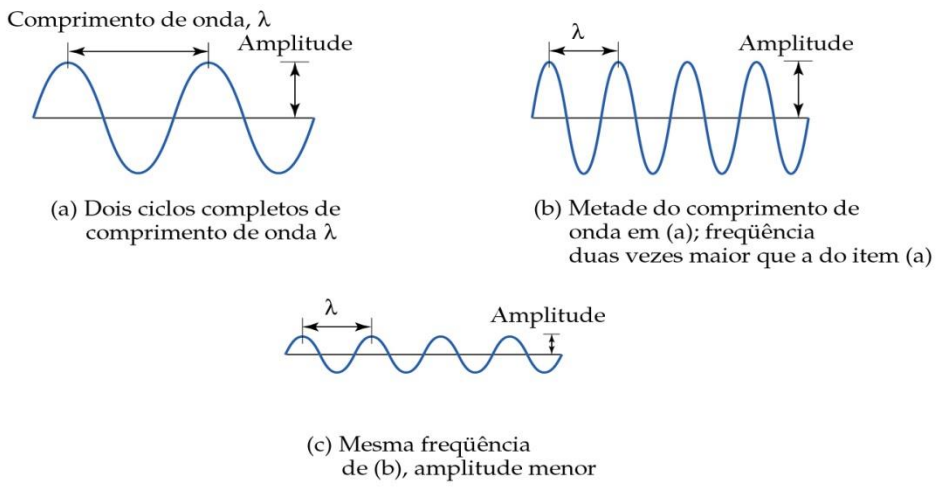


Figura 1.5

A figura 1.6 mostra os vários tipos de radiação electromagnética distribuídos em ordem crescente de comprimento de onda, um mostrador chamado *espectro electromagnético*. Note que os comprimentos de onda dos raios gama são parecidos com os diâmetros dos núcleos atómicos, enquanto os de ondas de rádio podem ser mais longos do que um campo de futebol. Note também que a luz visível, que compreende os comprimentos de onda de aproximadamente 400 a 700 nm, é uma porção extremamente pequena do espectro electromagnético.

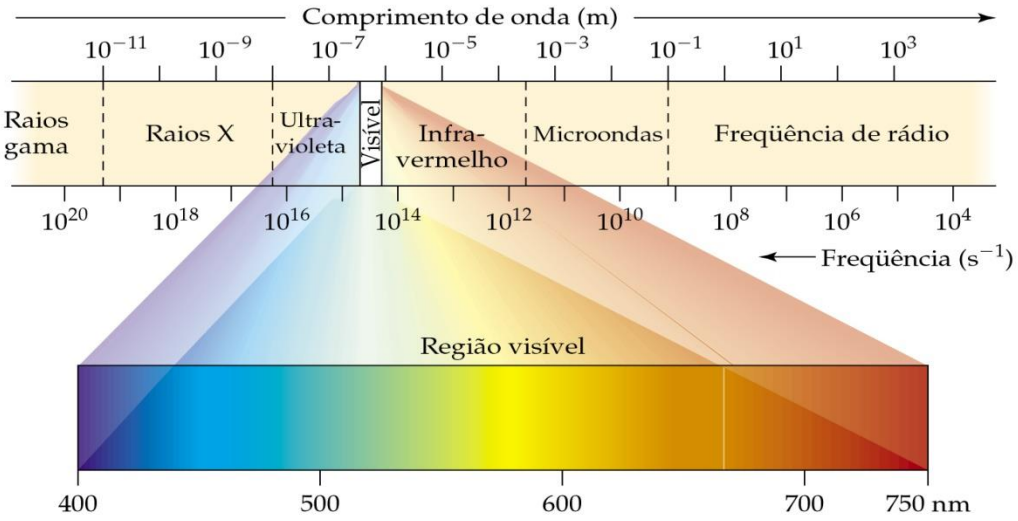


Figura 1.6

Podemos ver a luz visível por causa das reacções químicas que ela provoca em nossos olhos. A unidade de comprimento normalmente escolhida para expressar o comprimento de onda depende do tipo de radiação, como mostrado na tabela seguir.

A frequência é expressa em ciclos por segundo, uma unidade também chamada *hertz* (Hz). Como se entende que ciclos estão envolvidos, as unidades de frequência são geralmente dadas como 'por segundo', indicado por s^{-1} ou /s.

TABELA 6.1 Unidades de comprimentos de onda comuns para radiações eletromagnéticas

Unidade	Símbolo	Comprimento (m)	Tipo de radiação
Angström	Å	10^{-10}	Raios X
Nanômetro	nm	10^{-9}	Ultravioleta, visível
Mícron	μm	10^{-6}	Infravermelho
Milímetro	mm	10^{-3}	Infravermelho
Centímetro	cm	10^{-2}	Microondas
Metro	m	1	TV, rádio

5. ENERGIA QUANTIZADA E FOTÕES

Apesar de o modelo ondulatório da luz explicar muitos aspectos de seu comportamento, existem vários fenómenos que ele não pode explicar. Três desses são especialmente pertinentes para o entendimento de como a radiação electromagnética e os átomos interagem. Esses três fenómenos são (1) a emissão de luz por objectos quentes (chamada *radiação de corpo preto* porque os objectos estudados parecem pretos antes do aquecimento), (2) a emissão de electrões a partir de uma superfície metálica onde a luz incide (*o efeito fotoeléctrico*) e (3) a emissão de luz a partir de átomos de gás excitados electronicamente (*espectros de emissão*).

Objectos quentes e quantização da energia

Quando os sólidos são aquecidos, eles emitem radiação, como visto na incandescência vermelha das trempes de um fogão eléctrico e a luz branca brilhante de lâmpadas de tungsténio. A distribuição do comprimento de onda de uma radiação depende da temperatura, um objecto 'quente branco'. No final do século XIX alguns físicos estudavam esse fenómeno, tentando entender a relação entre a temperatura e a intensidade e os comprimentos de onda da radiação emitida. As leis predominantes da física não podiam explicar essas observações.

Em 1900, um físico alemão chamado Max Planck (1858 - 1947) resolveu o problema fazendo uma suposição audaciosa: ele propôs que a energia podia ser liberada (ou absorvida) por átomos apenas em 'pedaços' distintos de tamanhos mínimos. Planck deu o nome **quantum** (significando 'quantidade fixa') para a menor quantidade de energia que podia ser emitida ou absorvida como radiação electromagnética. Ele considerou que a energia, E, de um único quantum é igual à constante multiplicada pela frequência.

$$E = h\upsilon$$

A constante h, conhecida como **constante de Planck**, tem valor de 6,63 x 10^{-34} joule segundos (J s). De acordo com a teoria de Planck, a energia é sempre emitida ou absorvida pela matéria em múltiplos inteiros de $h\upsilon$, $2\ h\upsilon$, $3\ h\upsilon$ e assim por diante. Se a quantidade de energia emitida por um átomo for $3\ h\upsilon$, por exemplo, dizemos que foram emitidos três quanta de energia (quanta é o plural de quantum). Alem disso, dizemos que as energias permitidas são quantizadas, isto é, seus valores são restritos a determinadas quantidades.

A proposta revolucionaria de Planck sobre a energia ser quantizada foi comprovada e ele ganhou o premio Nobel de Física em 1918 por seu trabalho sobre teoria quântica.

Se a noção de energias quantizadas lhe parece estranha, pode ser útil fazer uma comparação entre uma rampa e uma escada. À medida que você sobe a rampa, sua energia potencial aumenta uniformemente, de maneira contínua. Quando você sobe uma escada, você pode pisar apenas em degraus individuais, não entre eles, de modo que sua energia potencial está restrita a determinados valores e, portanto, é quantizada.

Se a teoria quântica de Planck está correcta, por que seus efeitos não são mais óbvios no nosso dia-a-dia? Por que as variações de energia parecem ser continuas em vez de quantizadas? Observe que a constante de Planck é um número extremamente pequeno. Portanto, um quantum de energia, hv, será uma quantidade extremamente pequena. As regras de Planck com respeito à obtencao ou perda de energia são sempre as mesmas se estiveremos preocupados com objectos na escala de tamanho de nossas experiencias cotidianas ou com objectos microscópicos. Para objectos macroscópicos como os seres humanos, a obtenção ou a perda de energia de um único quantum de energia passa completamente despercebido. Entretanto, quando lidamos com matéria em nível atómico, o impacto das energias quantizadas é muito mais significativo.

O efeito fotoeléctrico e fotões

Poucos anos após Planck apresentar sua teoria, os cientistas começaram a ver sua probabilidade para um grande número de observações experimentais. Rapidamente se tornou aparente que a teoria de Planck tinha ela as sementes de uma revolução no modo como o mundo físico era visto. Em 1905, Albert Einstein (1879 - 1955) usou a teoria quântica de Planck para explicar o **efeito fotoeléctrico**, ilustrado na figura 1.7. os experimentos tinham mostrado que a luz incidindo em uma superfície metálica limpa leva-a emitir electrões. Para cada metal existe uma frequência mínima de luz abaixo da qual nenhum electrão é emitido. Por exemplo, a luz com frequência de 4,60 x 10^{14} s^{-1} ou maior faz com que o césio metálico emita electrões, mas a luz de frequências mais baixas não tem efeito.

Para explicar o efeito fotoeléctrico, Einstein supôs que a energia radiante atingindo a superfície metálica é um fluxo de pacotes minúsculos de energia. Cada pacote de energia, chamado fotão, comporta-se como uma partícula minúscula. Ampliando a teoria quântica de Planck, Einstein deduziu que cada fotão deveria ter uma energia proporcional à frequência da luz: $E = hv$. Portanto, a própria energia radiante é quantizada.

Energia do fotão = $E = hv$ (1.2)

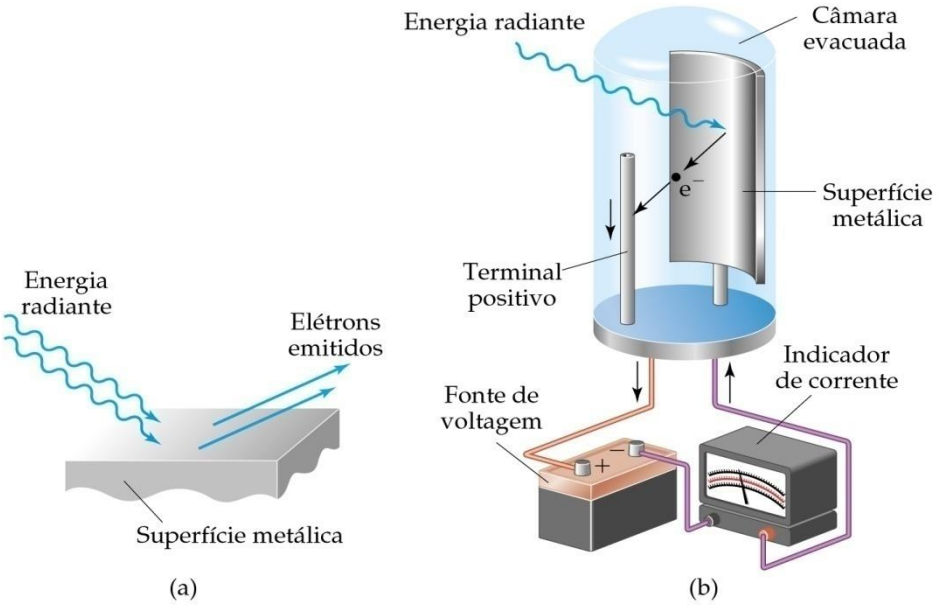


Figura 1.7

Quando um fotão atinge o metal, ele pode literalmente desaparecer. Quando isso acontece, sua energia pode ser transferida para um electrão no metal. É necessária uma determinada quantidade de energia para que o electrão vença as forcas atractivas que o prendem ao metal. Se os fotões da radiação tem menos energia do que o limiar de energia, os electrões não adquirem energia suficiente para sair da superfície do metal, mesmo que o feixe de luz seja intenso. Se os fotões têm energia suficiente, os electrões são emitidos. Se os fotões têm mais do que a energia mínima necessária para liberar os electrões, o excesso aparece como energia cinética dos electrões emitidos.

Para entender melhor o que é um fotão, imagine que você tem uma fonte de luz que produz radiação com um único comprimento de onda. Suponha também que você pode ligar e desligar a luz cada vez mais rapidamente de modo a fornecer manifestações repentinas e continuas de energia. A teoria de fotões de Einstein nos diz que eventualmente você atingiria a menor manifestação repentina de energia, dada por $E = hv$. A menor manifestacao de energia consiste em um único fotão de luz.

A ideia de que a energia da luz depende de sua frequência ajuda-nos a entender os diversos efeitos que os diferentes tipos de radiação electromagnética causam à matéria. Por exemplo, altas frequências (comprimento de onda curto) de raio X (figura 1.6) fazem com que os fotões desse tipo tenham alta energia, suficiente para causar danos aos tecidos e ate mesmo câncer. Portanto, normalmente são colocados avisos perto de equipamentos de raio X advertindo-nos da radiação de alta energia.

Apesar de a teoria de luz de Einstein explicar o efeito fotoeléctrico e muitas outras observações, ela apresentou uma situação embaraçosa. A luz é uma onda ou ela compõe-se de partículas? O facto é que ela possui propriedades de ambos. Comporta-se macroscopicamente como uma onda, mas consiste em conjunto de fotões. Quando examinamos o fenómeno em nível atómico, observamos suas propriedades de partículas. É como se passássemos da descrição de uma praia inteira para começar a examinar os graus de areia dos quais a praia é constituída.

i. ESPECTROS DE LINHAS E O MODELO DE BOHR

Os trabalhos de Planck e Einstein abriram caminho para a compreensão de como os electrões são distribuídos nos átomos. Em 1913 o físico dinamarquês Niels Bohr propôs uma explicação teórica dos espectros de linhas, outro fenómeno que intrigava os cientistas no século XIX.

Espectros de linhas

Uma fonte específica de energia radiante pode emitirem comprimento de onda único, como na luz de um laser. A radiação composta por um único comprimento de onda é chamada *monocromática*. Entretanto, a maioria das radiações comuns, incluindo lâmpadas incandescentes e estrelas, produz radiação contendo muitos comprimentos de onda diferentes. Quando a radiação de fontes como essas é separada em seus diferentes comprimentos de onda componentes, um **espectro** é produzido. A figura 1.8 mostra como um prisma dispersa a luz de uma lâmpada incandescente. O espectro produzido constitui-se de uma faixa contínua de cores: o violeta funde-se ao azul; o azul, ao verde, e assim por diante, sem nenhum ponto branco. Esse arco-íris contendo luz de todos os comprimentos de onda, é chamado **espectro contínuo.** O exemplo mais comum de um espectro contínuo é o arco-íris produzido pela dispersão da luz do sol através dos pingos de chuva ou neblina.

A figura 1.8 mostra como um prisma dispersa a luz de uma lâmpada incandescente. O espectro produzido constitui-se de uma faixa contínua de cores: o violeta funde-se ao azul; o azul, ao verde, e assim por diante, sem nenhum ponto branco. Esse arco-íris contendo luz de todos os comprimentos de onda, é chamado **espectro contínuo.** O exemplo mais comum de um espectro contínuo é o arco-íris produzido pela dispersão da luz do sol através dos pingos de chuva ou neblina.

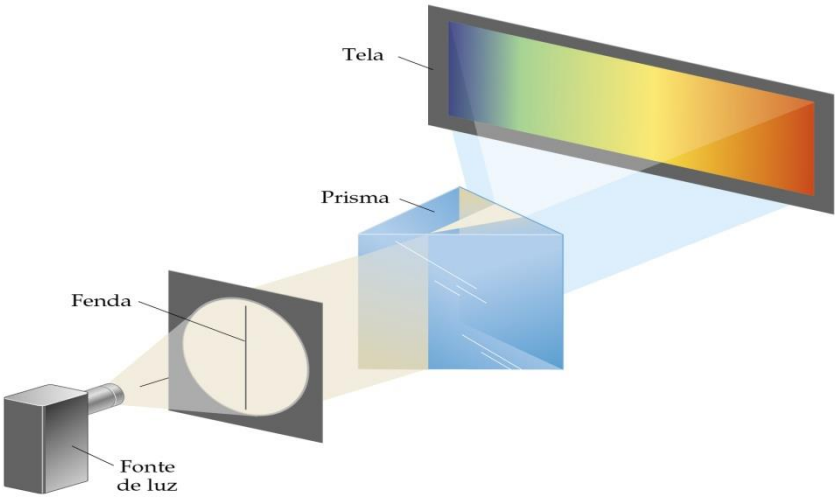


Figura 1.8

Nem todas as fontes de radiação produzem um espectro contínuo. Quando diferentes gases são colocados sob pressão em um tubo e uma alta voltagem é aplicada, os gases emitem diferentes cores de luz. A luz emitida pelo gás neónio é a familiar incandescência vermelhado-alarajanda de muitos letreiros luminosos, enquanto o vapor de sódio emite a luz características de algumas luzes de ruas modernas. Quando a luz vinda de tais tubos

passa através de um prisma, apenas linhas de poucos comprimentos de onda estão presentes nos espectros resultantes, como mostrado na figura 1.9. as linhas coloridas são separadas por regiões pretas, que correspondem a comprimentos de onda ausentes na luz. Um espectro contendo apenas radiações de comprimentos de onda específicos é chamado **espectro de linhas**.

Quando os cientistas detectaram pela primeira vez o espectro de linhas do hidrogénio na metade do século XIX, ficaram fascinados pela sua simplicidade. Em 1885 um professor suíço chamado Johann Balmer observou que os comprimentos de onda das quatro linhas de hidrogénio mostrado na figura 1.9 encaixa de maneira intrigante em uma fórmula simples. Descobriu-se que as linhas adicionais ocorriam nas regiões do ultravioleta e do infravermelho.

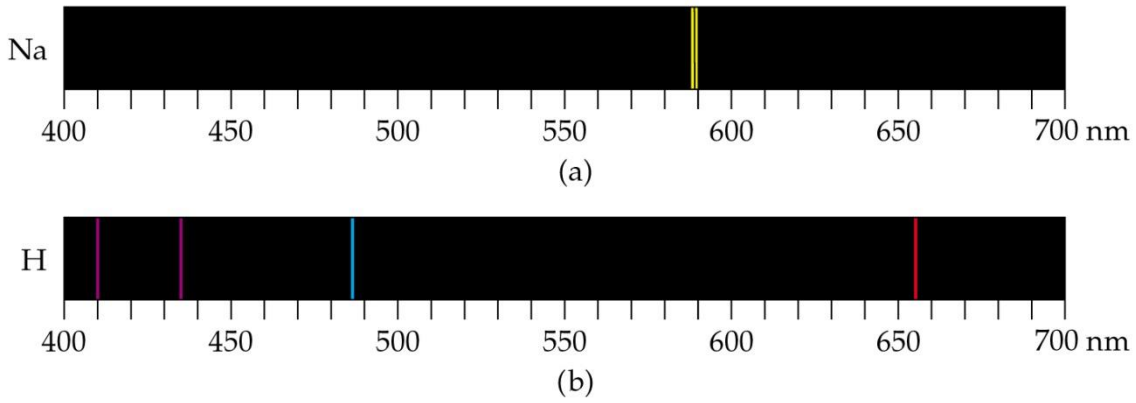


Figura 1.9

Rapidamente a equação de Balmer foi estendida para uma equação mais geral, chamada *equação de Rydberg*, que permitiu calcular os comprimentos de onda de todas as linhas espectrais do hidrogénio:

$$\frac{1}{\lambda} = (R_H)\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (1.3)$$

Nessa formula, λ é o comprimento de onda de uma linha espectral, R_H é a *constante de Rydberg* (1.096776 x 10^7 m^{-1}) e n_1 e n_2 são números inteiros positivos, sendo n_2 é maior que n_1.

O modelo de Bohr

Depois que Rutherford descobriu a natureza nuclear do átomo, os cientistas pensavam no átomo como um 'sistema solar microscópico' no qual os electrões descreviam uma orbita ao redor do núcleo. Para explicar o espectro de linhas do hidrogénio, Bohr começou supondo que os electrões moviam-se em orbitas circulares ao redor do núcleo. Entretanto, de acordo com a física clássica, uma partícula carregada (como um electrão) que se move em uma trajectória circular perderia energia continuamente pela emissão de radiação electromagnética. À medida que o electrão perde energia, ele deve mover-se em forma de espiral em direcção ao núcleo. Bohr abordou esse problema quase da mesma forma que Planck tinha abordado o problema da natureza da radiação emitida por objectos quentes: Assumindo que as leis predominantes da física eram inadequadas para descrever todos os

aspectos dos átomos. Alem disso, ele adoptou a ideia de Planck de que as energias eram quantizadas.

Bohr baseou seu modelo em três postulados:

1. Somente orbitas de certos raios, correspondendo a certas energias definidas, são permitidas para os electrões em um átomo.
2. Um electrão em certa orbita permitida tem certa energia específica e está em um estado de energia 'permitido'. Um electrão em estado de energia permitido não irradiará energia e, portanto, não se moverá em forma de espiral em direcção ao núcleo.
3. A energia só é emitida ou absorvida por um electrão quando ele muda de um estado de energia permitido para outro. Essa energia é emitida ou absorvida como fotão, $E = hv$.

Os estados de energia do átomo de hidrogénio

Começando com seus três postulados e usando as equações clássicas de movimento e para interacção entre cargas eléctricas, Bohr calculou as energias correspondentes a cada orbita permitida. Essas energias encaixavam-se na seguinte fórmula:

$$E = (-2{,}18 \times 10^{-18}\text{J})\left(\frac{1}{n^2}\right) \tag{1.4}$$

O número inteiro *n*, que pode assumir valores de 1 a infinito, é chamado *número quântico*. Cada orbita corresponde a um valor diferente de *n* e o raio da orbita aumenta à medida que *n* aumenta. Dessa forma, a primeira orbita permitida (a orbita mais próxima ao núcleo) tem $n = 1$, a próxima orbita permitida (a segunda mais próxima do núcleo) tem $n = 2$, e assim por diante.

As energias do electrão de um átomo de hidrogénio dadas pela equação 1.4 são negativas para todos os valores de *n*. Quanto mais baixa (mais negativa) for a energia, mais estável será o átomo. A energia é mais baixa (mais negativa) para $n = 1$. À medida que *n* aumenta, a energia torna-se sucessivamente menos negativa e aumenta. Podemos comparar essa situação a uma escada na qual os degraus são numerados da base para cima. Quanto mais alto uma pessoa subir (maior o valor de *n*), maior a energia. O estado de energia mais baixa ($n = 1$, analogamente ao degrau da base) é chamado **estado fundamental** do átomo. Quando o electrão está em uma orbita de energia mais alta (menos negativa) – $n = 2$ ou mais alta – diz-se que o átomo está em **estado excitado**. A figura 1.10 mostra a energia do electrão em um átomo de hidrogénio para vários valores de *n*.

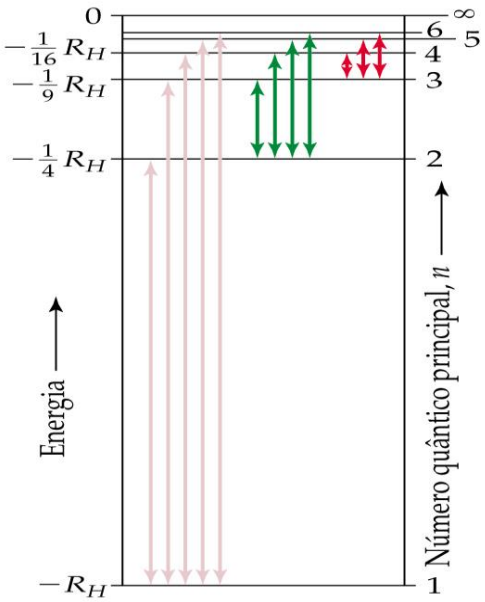


Figura 1.10

O que acontece ao raio da orbita e à energia na medida em que *n* se torna infinitamente grande? O raio aumenta com n^2. Prontamente atingimos um ponto no qual o electrão está completamente separado do seu núcleo. Quando $n = \infty$, a energia é zero.

$$E = (-2{,}18 \times 10^{-18}\text{J})\left(\frac{1}{n^2}\right) = 0$$

Portanto, o estado no qual o electrão é removido do núcleo é o estado de referência, ou energia zero, do átomo de hidrogénio. Esse estado de energia zero é mais alto em energia que os estados com energias negativas.

No seu terceiro postulado, Bohr supôs que o electrão poderia 'pular' de um estado de energia permitido para outro, absorvendo ou emitindo fotões cuja energia radiante corresponda exactamente à diferença entre os dois estados. Um electrão deve absorver energia para que ele mude para um estado de mais alta energia (um estado com um valor mais alto de *n*). De maneira contrária, a energia radiante é emitida quando o electrão pula para um estado de energia mais baixa (um estado com menor valor de *n*). Assim, se o electrão pula de um estado inicial, com energia E_i para um estado final, com energia E_f, a variação de energia é dada pela seguinte relação:

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{fotão} = h\upsilon \qquad (1.5)$$

Portanto, o modelo de Bohr para o átomo de hidrogénio afirma que apenas frequências específicas de luz que satisfazem a equação 1.5 podem ser absorvidas ou emitidas pelo átomo.

Substituindo a expressão de energia da equação 1.4 na equação 1.5 e recalculando $\upsilon = c/\lambda$, temos:

$$\Delta E = h\upsilon = \frac{hc}{\lambda} = (-2{,}18 \times 10^{-18}\text{J})\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \qquad (1.6)$$

Nessa equação, n_i e n_f são os números quânticos principais dos estados iniciais e final do átomo, respectivamente. Se n_f é menor que n_i, o electrão move-se para mais perto do núcleo e ΔE é um número negativo, indicando que o átomo libera energia.

Limitações do modelo de Bohr

Enquanto o modelo de Bohr oferece uma explicação para o espectro de linhas do átomo de hidrogénio, ele não pode explicar o espectro de outros átomos, a não ser de uma maneira muito incipiente. Alem disso, existe um problema em descrever um electrão meramente como uma partícula circulando ao redor do núcleo.

O modelo de Bohr é apenas um importante passo em direcção ao desenvolvimento de um modelo mais abrangente. O mais importante sobre a teoria de Bohr é que ela apresenta duas ideias principais que também são incorporadas por nosso modelo actual: (1) os electrões existem apenas em níveis de energia distintos, que são descritos pelos números quânticos. (2) a energia está envolvida na movimentação de um electrão de um nível para outro. Alem disso, parte do vocabulário associado com o novo modelo remonta ao modelo de Bohr. Por exemplo, ainda usamos a ideia de estados fundamentais e excitados para descrever as estruturas electrónicas dos átomos.

1.1.4. COMPORTAMENTO ONDULATÓRIO DA MATÉRIA

Nos anos posteriores ao desenvolvimento do modelo de Bohr para o átomo de hidrogénio, a natureza dual da energia radiante tornou-se um conceito familiar. Dependendo das circunstâncias experimentais, a radiação parece ter um carácter ondulatório ou de partícula (fotão). Louis De Broglie (1892 - 1987), quando trabalhava em sua tese de doutoramento em física na Sorbonne, em Paris, corajosamente ampliou essa ideia. Se a energia radiante pudesse se comportar, sob condições apropriadas, como um feixe de partículas, a matéria, sob condições apropriadas, poderia possivelmente mostrar propriedades de uma onda? Suponha que o electrão girando em orbitas ao redor de um de um átomo de hidrogénio fosse visto como uma onda, com um comprimento de onda característico. De Broglie sugeriu que o electrão, em seu movimento ao redor do núcleo, tinha associado a ele um comprimento de onda particular. Ele propôs que o comprimento de onda característico do electrão ou qualquer outra partícula depende de sua massa, m, e de sua velocidade, v.

$$\lambda = \frac{h}{mv} \tag{1.7}$$

(h é a constante de Planck). A grandeza mv para qualquer objecto é chamada seu **momento**. De Broglie usou o termo **ondas de matéria** para descrever as características ondulatórias das partículas materiais.

Como a hipótese de De Broglie é aplicável a toda matéria, qualquer objecto de massa m e velocidade v daria origem a uma onda de matéria característica. Entretanto, a equação 1.7 indica que o comprimento de onda associado a um objecto de tamanho comum, como uma bola de golfe, é tão minúsculo que estará fora da faixa de qualquer observação possível. Esse não é o caso de um electrão porque sua massa é muito pequena.

Poucos anos após De Broglie publicar sua teoria, as propriedades ondulatórias do electrão foram demonstradas experimentalmente. Os electrões eram difractados pelos cristais, do mesmo modo que os raios X sofriam difracção. Assim, um fluxo de electrões em movimento exibe os mesmos tipos de comprimento ondulatório que a radiação electromagnética.

A técnica de difracção de electrões tem se desenvolvido enormemente. No microscópico electrónico as características ondulatórias do electrão são usadas para obter fotos de objectos minúsculos. Esse microscópico é uma importante ferramenta para estudar os fenómenos superficiais com ampliações muito grandes.

O princípio da incerteza

A descoberta das propriedades ondulatórias da matéria levantou algumas questões novas e interessantes sobre a física clássica. Considere, por exemplo, uma bola descendo uma rampa. Usando a física clássica, podemos calcular sua posição, direcção de movimento e velocidade a qualquer momento, com grande exactidão. Podemos fazer o mesmo para um electrão que exibe propriedades ondulatórias? Uma onda estende-se no espaço e sua localização não é definida de maneira precisa. Dessa forma, podemos antecipar que é impossível determinar exactamente onde um electrão está localizado em um tempo determinado.

O físico alemão Werner Heisenberg concluiu que a natureza dual da matéria coloca uma limitação fundamental em como podemos determinar precisamente a posição e o momento de qualquer objecto. A limitação torna-se importante apenas quando trabalhamos com matéria em nível subatômico (isto é, com massas tão pequenas quanto a de um electrão). O princípio de Heisenberg é chamado de **princípio da incerteza**. Quando aplicado aos electrões em um átomo, esse princípio afirma que é inerentemente impossível para nós saber de maneira simultânea tanto o exacto momento do electrão quanto sua posição especifica no espaço.

Heisenberg relacionou matematicamente a incerteza da posição (Δx) e o momento exactos (Δmv) para uma quantidade envolvendo a constante de Planck:

$$\Delta x \cdot \Delta mv \geq \frac{h}{4\pi} \tag{1.8}$$

1.1.5. MECÂNICA QUÂNTICA E OS ORBITAIS ATÓMICOS

Em 1926 o físico Austríaco Erwin Schrödinger (1887 - 1961) propôs uma equação, conhecida actualmente como equação de Schrödinger, que incorpora tanto o comportamento ondulatório como *mecânica quântica ou mecânica ondulatória*. A aplicação da equação de Schrödinger requer cálculos avançados, e não nos preocuparemos com os detalhes de sua abordagem. Entretanto, consideraremos qualitativamente os resultados que esse cientista obteve, porque eles nos fornecem uma maneira nova e poderosa de ver a estrutura electrónica. Vamos começar examinando a estrutura electrónica do átomo mais simples, o hidrogénio.

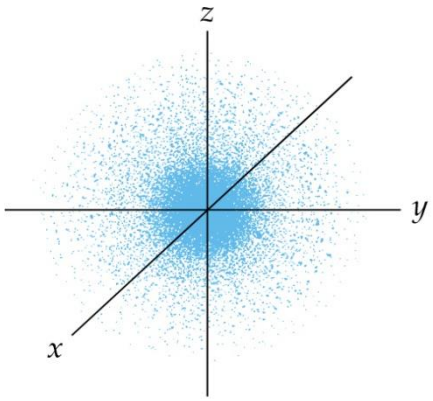
A resolução da equação de Schrödinger leva a uma serie de funções matemáticas chamadas **funções de onda** que descrevem a questão ondulatória do electrão. Essas funções são geralmente representadas pelo símbolo ψ (a letra grega minúscula psi).

Apesar de a função de onda em si não ter um significado físico directo, o quadrado da função de onda, ψ^2, fornece informações importantes sobre a localização de um electrão quando ele está em estado de energia permitido.

Para o átomo de hidrogénio, as energias permitidas são as mesmas previstas pelo modelo de Bohr. Contudo, o modelo de Bohr supõe que o electrão está em orbita circular com alguns raios específicos ao redor do núcleo. No modelo da mecânica quântica, a localização do electrão não pode ser descrita de maneira tão simples. De acordo com o princípio da incerteza, quando determinamos o momento do electrão com grande precisão, o conhecimento simultâneo de sua localização é muito incerto. Não podemos especificar a localização exacta de um electrão individual ao redor do núcleo. Mais propriamente, devemos nos contentar com uma espécie de conhecimento estatístico. No modelo da mecânica quântica, por essa razão falamos da *probabilidade* de o electrão ser encontrado em certa região do espaço em determinado instante. Resulta que o quadrado da função de onda, ψ^2, em um ponto determinado do espaço representa a probabilidade de o electrão ser encontrado nessa posição. Por essa razão, ψ^2 é chamado **densidade de probabilidade.**
Uma maneira de representar a probabilidade de encontrar o electrão em várias regiões de um átomo é mostrada na figura 1.11. Nessa figura a densidade de pontos representa a probabilidade de encontrar o electrão. As regiões com densidade alta de pontos correspondem a valores relativamente altos para ψ^2. A **densidade electrónica** é outra maneira de expressar a probabilidade: as regiões onde existe alta probabilidade de encontrar o electrão são regiões de alta densidade electrónica.

Orbitais e números quânticos

A solução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogénio produz um conjunto de funções de onda e energias correspondentes. Essas funções de onda são chamadas **orbitais**. Cada orbital descreve uma distribuição específica de densidade electrónica no espaço, como determinado pela probabilidade de densidade. Cada orbital, consequentemente, tem energia e forma características. Por exemplo, o orbital de mais baixa energia no átomo de hidrogénio tem energia de $-2{,}18 \times 10^{-18}$ J e o formato ilustrado na figura 1.11. Observe que um *orbital* (modelo da mecânica quântica) não é o mesmo que *orbita* (modelo de Bohr). O modelo da mecânica quântica não se refere a orbitas porque o movimento do electrão em um átomo não pode ser medido ou localizado com precisão (principio da incerteza de Heisenberg).



O modelo de Bohr introduziu um único número quântico, *n*, para descrever certa orbita. O modelo da mecânica quântica usa três números quânticos, *n*, *l* e m_l, para descrever um orbital. Consideremos quais informações podemos obter a partir de cada um desses e como eles estão relacionados entre si.

1. O *número quântico principal*, *n*, pode ter valores positivos e inteiros de 1, 2, 3, e assim por diante. À medida que *n* aumenta, o orbital torna-se maior, e o electrão passa mais tempo distante do núcleo. Um aumento em *n* significa também que o electrão tem energia alta e, por isso, está menos fortemente preso ao núcleo. Para o átomo de hidrogénio, $E_n = -(2{,}18 \times 10^{-18}\text{J})(1/n^2)$, como também previsto pelo modelo de Bohr.

2. O segundo número quântico – o *número quântico azimuthal*, *l* – pode ter valores inteiros de 0 a n – 1 para cada valor de *n*. Esse número quântico define o formato do orbital. O valor de *l* para determinado orbital é normalmente assinalado pelas letras *s*, *p*, *d* e *f*, correspondendo aos valores de *l* de 0, 1, 2 e 3, respectivamente, como resumido aqui.

Valores de *l*	0	1	2	3
Letra usada	s	p	d	f

3. *Numero quântico magnético, pode ter valores inteiros entre l e –l*, inclusive zero. Esse número quântico descreve a orientação do orbital no espaço.

O conjunto de orbitais com o mesmo valor de *n* é chamado **nível electrónico**. Por exemplo, todos os orbitais que tem n = 3 chamados terceiro nível. Alem disso, o conjunto de orbitais que tem os mesmos valores de *n* e *l* é chamado **subnível.** Cada subnível é designado por um número (o valor de *n*) e uma letra (s, p, d ou f, correspondendo ao valor de *l*). Por exemplo, os orbitais que tem n = 3 e *l* = 2 são chamados orbitais 3d e estão no subnível 3d.

TABELA 6.2 Relação entre os valores de *n*, *l* e m_l até *n* = 4

n	Valores possíveis de *l*	Designação do subnível	Valores possíveis de m_l	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível
1	0	1*s*	0	1	1
2	0	2*s*	0	1	
	1	2*p*	1, 0, –1	3	4
3	0	3*s*	0	1	
	1	3*p*	1, 0, –1	3	
	2	3*d*	2, 1, 0, –1, –2	5	9
4	0	4*s*	0	1	
	1	4*p*	1, 0, –1	3	
	2	4*d*	2, 1, 0, –1, –2	5	
	3	4*f*	3, 2, 1, 0, –1, –2, –3	7	16

A tabela acima resume os possíveis valores dos números quânticos *l* e m_l para os valores de *n* até *n = 4*. As restrições aos possíveis valores dos números quânticos dão origem às seguintes observações mais importantes:

1. O nível com o número quântico principal *n* consistirá em exactamente *n* subníveis. Cada subnível corresponde a um valor permitido diferente de *l* de 1 a *n – 1*. Portanto, o primeiro nível (*n = 1*) consiste em apenas um subnível, o 1s (*l = 0*); o

segundo nível ($n = 2$) consiste em dois subníveis, o 2s ($l = 0$) e o 2p ($l = 1$); o terceiro nível consiste em três subníveis, 3s, 3p e 3d, e assim por diante.

2. Cada subnível consiste em um número específico de orbitais. Cada orbital corresponde a diferentes valores permitidos de m_l. Para determinado valor de l, existem $2l + 1$ valores permitidos de m_l, variando de $-l$ a $+l$. Portanto, cada subnível s ($l = 1$) consiste em três orbitais; cada subnível d ($l = 2$) consiste em cinco orbitais, e assim por diante.

3. O número total de orbitais em um subnível é n^2, onde n é o número quântico principal do nível. O número de orbital resultantes para os subnível – 1, 4, 9,16 – está relacionado com um padrão observado na tabela periódica: vemos que o número de elementos uma de suas linhas – 2, 8, 18 e 32 – é igual a duas vezes esses números.

A figura 1.12 mostra as energias relativas dos orbitais do átomo de hidrogénio até $n = 3$. Cada quadrícula representa um orbital; os orbitais de mesmo subnível, como os do 2p, estão agrupados juntos. Quando o electrão está em um orbital de energia mais baixa (o orbital 1s), diz-se que o átomo de hidrogénio está no seu *estado fundamental*. Quando o electrão está em qualquer outro orbital, o átomo está em *estado excitado*. A temperaturas ordinárias praticamente todos os átomos de hidrogénio estão em seus estados fundamentais. O electrão pode ser excitado para um orbital de mais alta energia pela absorção de um fotão de energia apropriada.

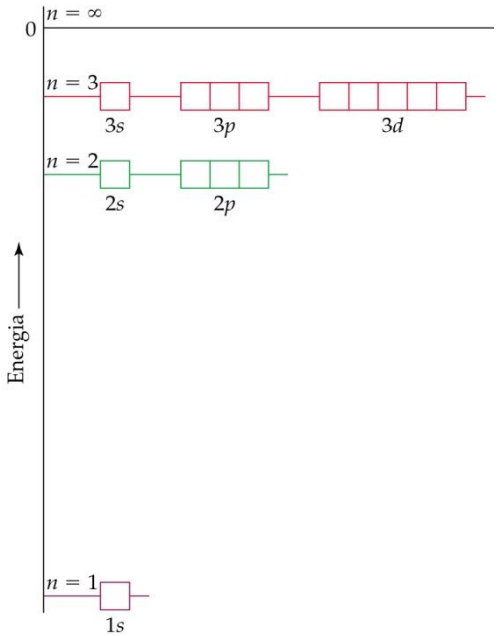


Figura 1.12

1.1.6. REPRESENTAÇÕES DE ORBITAIS

Orbitais s

O orbital de mais baixa energia, o 1s, é esférico, como mostrado na figura 1.11. As figuras desse tipo, mostrando a densidade electrónica, é um dos vários modos usados para auxílio

na visualização dos orbitais. Essa figura indica que a probabilidade de encontrar o electrão diminui à medida que nos afastamos do núcleo em qualquer direcção específica. Quando a função de probabilidade, ψ^2, para o orbital 1s é colocada em um gráfico como função da distância a partir do núcleo, *r*, ela aproxima-se de zero rapidamente, como mostrado na figura 1.13 (a). Esse efeito indica que o electrão, puxado em direcção ao núcleo por forças electrostáticas, é improvável de ser encontrado longe do núcleo.

Se consideramos analogamente os orbitais 2s e 3s do hidrogénio, descobriremos que eles são também esfericamente simétricos. Na realidade, *todos* os orbitais *s* são esfericamente simétricos. A maneira pela qual a função de probabilidade, ψ^2, varia com *r* para os orbitais 2s e 3s é mostrada na figura 1.13 (b) e (c). Observe que para o orbital 2s, ψ^2 vai para zero e depois aumenta de novo em valor antes de finalmente se aproximar de zero a um maior valor de *r*. As regiões intermediárias onde ψ^2 é zero são chamadas **nós.** O número de nós aumenta com a elevação do valor do número quântico principal, *n*. o orbital 3s possui dois nós, como ilustrado na figura 1.13 (c). Observe também que à medida que *n* aumenta, é cada vez mais provável que o electrão seja encontrado distante do núcleo. Isto é, o tamanho do orbital aumenta com o aumento de *n*.

Um método muito utilizado para representar orbitais é mostrar uma superfície limite que inclui alguma porção substancial, digamos 90%, da densidade electrónica total para o orbital. Para os orbitais s, essas representações de contorno são simplesmente esferas. As representações de superfície limite ou de contorno dos orbitais 1s, 2s e 3s estão mostrados na figura 1.14. elas tem o mesmo formato, mas diferem no tamanho. Apesar de os detalhes de como a densidade electrónica vária dentro da superfície se perderem nessas representações, essa não é uma desvantagem séria. Para a maioria das abordagens qualitativas, as mais importantes características dos orbitais são os tamanhos relativos e os formatos. Essas características são adequadamente mostradas pelas representações de superfície limite.

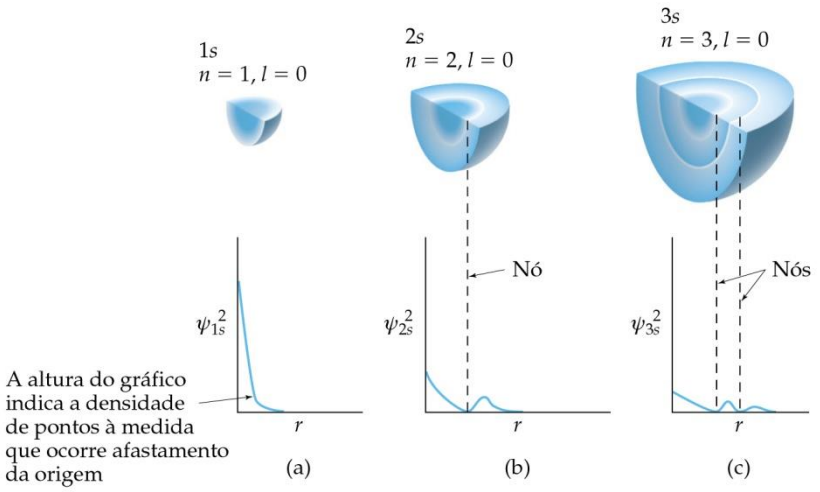


Figura 1.13

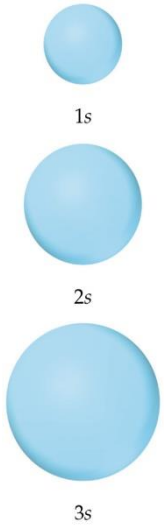


figura 1.14

Orbital *p*

A distribuição da densidade electrónica para um orbital 2p é mostrado na figura 1.15 (a). Como podemos ver a partir dessa figura, a densidade electrónica não está distribuída de forma esférica como em um orbital s. em vez disso, a densidade electrónica está concentrada em duas regiões em ambos os lados do núcleo, separadas por um nó no

núcleo. Dizemos que esse orbital na forma de halteres tem dois *lóbulos*. É útil lembrar que não estamos fazendo afirmações de como o electrão está se movendo dentro do orbital; a figura 1.15 (a) retrata a distribuição *média* da densidade electrónica em um orbital 2p.

Cada nível começando com $n = 2$ tem três orbitais; portanto, existem três orbitais 2p, três orbitais 3p, e assim por diante. Os orbitais de determinado valor de n (isto é, de determinado subnível) tem o mesmo tamanho e forma, mas diferem entre eles na orientação espacial. Geralmente representamos os orbitais *p* desenhando o formato e a orientação de suas funções de onda, como mostrado na figura 1.15 (b). É conveniente rotulá-los como

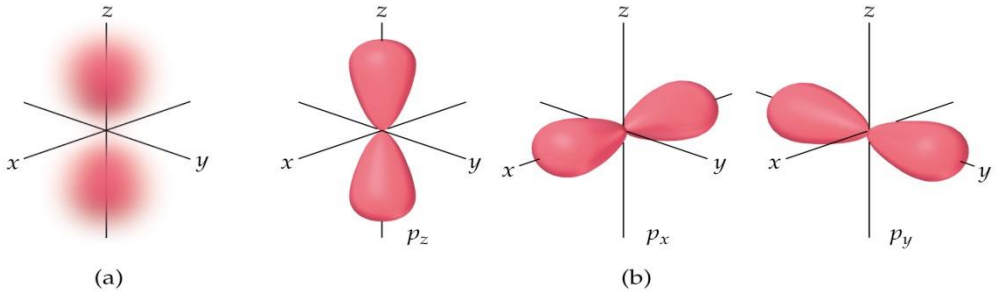


Figura 1.15

orbitais p_x, p_y, p_z. Os índices inferiores de letras indicam o eixo ao longo do qual o orbital está orientado. Do mesmo modo que os orbitais s, os orbitais p aumentam de tamanho quando passamos de 2p para 3p, deste para 4p, e assim por diante.

Orbitais *d* e *f*

Quando n é igual ou maior que 3, encontramos os orbitais *d* (para o qual $l = 2$). Existem cinco orbitais 3d, cinco orbitais 4d, etc. Os diferentes orbitais d em determinado nível tem diferentes formatos e orientações no espaço, como mostrado na figura 1.16. quatro das superfícies limite dos orbitais *d* tem formato de 'trevo de quatro folhas' e cada uma se encontra principalmente em um plano. Os d_{xy}, d_{xz} e d_{yz} situam-se nos planos xy, xz e yz, respectivamente, como os lóbulos orientados entre os eixos. Os lóbulos do orbital $d_{x^2-y^2}$ tambem se situam no pano xy, mas os lóbulos localizam-se ao longo dos eixos x e y. O orbital d_{z^2} tem aspecto muito diferente dos outros quatro: dois lóbulos ao longo do eixo *z* e uma 'rosquinha' no plano xy. Mesmo que o orbital d_{z^2} pareça diferente, ele tem a mesma energia que os outros quatro orbitais *d*. As representações na figura 1.16 são normalmente utilizadas independentemente do número quântico principal.

Quando n é maior ou igual a 4, existem sete orbitais *f* equivalentes (para os quais $l = 3$). As formas dos orbitais *f* são ainda mais complicadas do que as dos orbitais *d*.

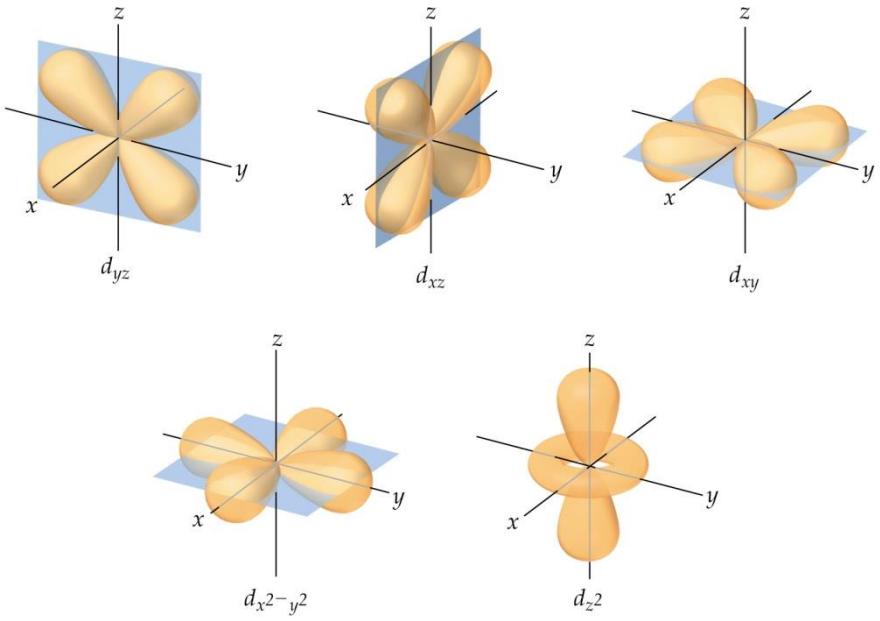


Figura 1.16

1.1.7. ÁTOMOS POLIELECTRÓNICOS

Orbitais e suas energias

O modelo da mecânica quântica não seria muito útil se não pudéssemos estender aos outros átomos o que aprendemos sobre hidrogénio. Felizmente, os orbitais atómicos em um átomo polielectrónico são semelhantes aos do átomo de hidrogénio. Podemos continuar, pois, designando os orbitais como 1s, $2p_x$ etc. esses orbitais tem a mesma forma geral que os orbitais correspondentes do hidrogénio.

Apesar de as formas dos orbitais dos átomos polielectrónicos serem as mesmas daqueles para o hidrogénio, a presença de mais de um electrão muda bastante as energias dos orbitais. No hidrogénio a energia de um orbital depende apenas do seu número quântico principal, *n*; os subníveis 3s, 3p e 3d, por exemplo, tem todos a mesma energia. Em um átomo polielectrónico, entretanto, a repulsão electrão – electrão faz com que os diferentes subníveis estejam em diferentes níveis de energia, como ilustrado na figura 1.17. por exemplo, o subnível 2s é mais baixo em energia que o subnível 2p. para entender o porque disso, temos de considerar as forças entre os electrões e como estas são afectadas pelas formas dos orbitais.

A ideia importante é esta: em um átomo polielectrónico, para certo valor de *n*, a energia de um orbital aumenta com o aumento do valor de *l*. observe, por exemplo, que os orbitais com n = 3 aumentam sua energia na ordem s < p < d. a figura 1.17 é um diagrama de níveis de energia qualitativo; as energias exactas e suas diferenças de espaçamento diferem de um átomo para outro. Observe que todos os orbitais de determinado subnível (como os orbitais 3d) ainda tem a mesma energia da mesma forma que no átomo de hidrogénio. Dizemos que os orbitais com a mesma energia são **degenerados**.

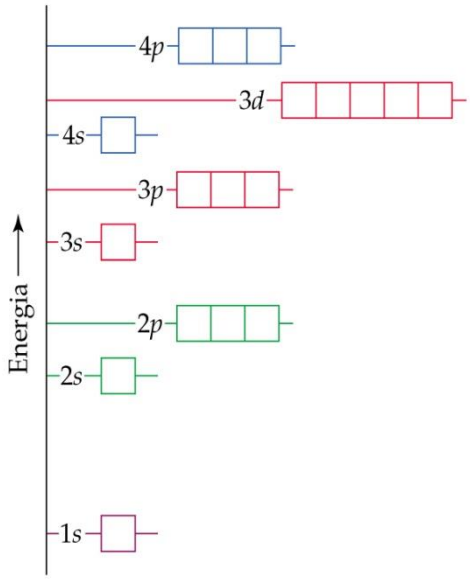


Figura 1.17

Spin electrónico e o princípio da exclusão de Pauli

Acabamos de ver que podemos usar orbitais semelhantes aos do hidrogénio para descrever átomos polielectrónicos. Entretanto, o que determina os orbitais nos quais os electrões se situam? Isto é, como os electrões de um átomo polielectrónico preenchem os orbitais disponíveis? Para responder a essa perguntar, devemos considerar uma propriedade adicional do electrão.

Quando os cientistas estudaram os espectros de linhas de átomos polielectrónicos mais detalhadamente, eles observaram uma característica muito intrigante: eram as linhas que originalmente eram tidas como únicas, na realidade pares pouco espaçados. Isso significativa, essencialmente, que havia duas vezes mais níveis de energia do que se 'supunha'. Em 1925, os físicos holandeses George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit propuseram uma solução para esse dilema. Eles postularam que os electrões tinham uma propriedade intrínseca, chamada spin electrónico. O electrão aparentemente comportava-se como se fosse uma esfera minúscula rodando em torno de seu próprio eixo.

A essa altura provavelmente não é surpresa para você aprender que o spin electrónico é quantizado. Essa observação levou à atribuição de um novo número quântico para o electrão, alem dos n, l e m_l . Esse novo número quântico, o **número quântico magnético de spin**, é simbolizado por m_s (o índice inferior s significa *spin*). Apenas dois valores possíveis são permitidos para m_s, $+1/2$ ou -1/2, que foi primeiro interpretado como indicador dos dois sentidos opostos nos quais o electrão pode girar. Uma carga giratória produz um campo magnético. Os dois sentidos opostos de rotação produzem campos magnéticos directamente opostos, como mostrado na figura 1.18. Esses dois campos magnéticos opostos levam à separação das linhas espectrais em pares muito próximos.

O spin electrónico é crucial para o entendimento das estruturas electrónicas dos átomos. Em 1925, o físico austríaco Wolfgang Pauli (1900 - 1958) descobriu o princípio que governa a distribuição dos electrões em átomos polielectrónicos. O **princípio da exclusão de Pauli** afirma que *dois electrões em um átomo não podem ter o conjunto de quatro números quânticos n, l, m_l e m_s iguais.* Para um dado orbital (1s, $2p_z$ etc), os valores de n,

l e m são fixos. Se quisermos colocar mais de um electrão em um orbital *e* satisfazer o princípio da exclusão de Pauli, nossa única escolha é assinalar diferentes valores de m_s para os electrões. Como existem apenas dois desses valores, concluímos que *um orbital pode receber o máximo de dois electrões, e eles devem ter spins opostos*. Essa restrição permite-nos relacionar os electrões em um átomo, dando seus números quânticos e definindo a região no espaço onde cada electrão é mais provável de ser encontrado. Ela fornece também o segredo para um dos grandes problemas da química – entender a estrutura dos elementos da tabela periódica.

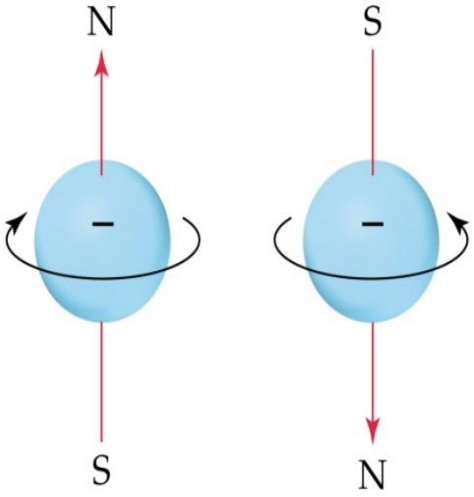


Figura 1.18

1.1.8. CONFIGURAÇÕES ELECTRÓNICAS

Munidos do conhecimento das energias relativas dos orbitais e do princípio da exclusão de Pauli, estamos agora em uma posição para abordar a distribuição dos electrões nos átomos. A maneira na qual os electrões são distribuídos entre os vários orbitais de um átomo é chamada **configuração electrónica**. A mais estável configuração electrónica, ou estado fundamental, de um átomo é aquela na qual os electrões estão nos estados mais baixos possíveis de energia. Se não existissem restrições nos possíveis valores para os números quânticos dos electrões, todos os electrões se aglomerariam no orbital 1s porque é o mais baixo em energia (figura 1.17). Entretanto, o princípio da exclusão de Pauli nos diz que pode haver no máximo dois electrões em um único orbital. Assim, *os orbitais são preenchidos em ordem crescente de energia, com não mais que dois electrões por orbital.* Por exemplo, considere o átomo de lítio, que tem três electrões. (lembre-se de que o numero de electrões em um átomo neutro é igual ao seu numero atómico). O orbital 1s pode acomodar dois electrões. O terceiro electrão vai para o próximo orbital de mais baixa energia, o 2s.

Podemos resumir qualquer configuração electrónica escrevendo o símbolo para cada subnível ocupado e adicionando um índice superior para *indicar* o número de electrões em cada subnível. Por exemplo, para o lítio escrevemos $1s^2 2s^1$ (lê-se '1s dois, 2s um'). Podemos também mostrar a distribuição dos electrões como

Li | 1↿⇂ | 1 |

1s 2s

Nesse tipo de representação, que chamaremos *configuração de quadrículas*, cada orbital é representado por uma quadrícula é cada electrão, por uma meia-seta. Uma meia-seta apontando para cima (↑) representa um electrão com número quântico magnetico de spin positivo ($m_s = +1/2$) e a meia-seta apontando para baixo (↓) representa um electrão com número quântico magnético de spin negativo ($m_s = -1/2$). Essa representação por figuras do spin do electrão é bastante conveniente. De facto, químicos e físicos geralmente se referem aos electrões como 'spin para cima' e 'spin para baixo' em vez de especificar o valor de m_s.

Dizemos que os electrões que possuem spin contrários são *emparelhados* quando estão em um mesmo orbital (↑↓). Um *electrão desemparelhado* não está acompanhado por um companheiro de spin contrário. No átomo de lítio os dois electrões no orbital 1s estão emparelhados, e o electrão no orbital 2s está desemparelhado.

Regra de Hund

Considere agora como as configurações electrónicas dos elementos variam à medida que passamos de um elemento para outro ao longo da tabela periódica. O hidrogénio tem um electrão, que ocupa o orbital 1s em seu estado fundamental.

H [↑] :$1s^1$

1s

Aqui, a escolha de um electrão de spin +1/2 é arbitrária; poderíamos igualmente mostrar o estado fundamental com um electrão de spin -1/2 no orbital 1s. entretanto, é habitual mostrar os electrões desemparelhados com seus spins para cima.

O próximo elemento, o hélio, tem dois electrões. Uma vez que dois electrões com spins contrários podem ocupar um orbital, ambos os electrões do hélio estão em um orbital 1s.

He [↑↓] :$1s^2$

1s

Os dois electrões presentes no hélio completam o primeiro nível. Essa distribuição representa uma configuração muito estável, como é evidenciado pela inactividade química do hélio.

Observando na tabela periódica, o lítio começa um novo período da tabela periódica. Ele é o primeiro membro dos metais alcalinos (grupo 1A). O elemento posterior ao lítio é o berílio; sua configuração electrónica é $1s^2 2s^2$. O boro, numero atómico 5, tem configuração electrónica $1s^2 2s^2 2p^1$. O quinto electrão deve ser colocado em um orbital 2p porque o orbital 2s está preenchido. Como todos os três orbitais 2p estão com energias iguais, não importa qual orbital 2p é ocupado.

Com o próximo elemento, o carbono, deparamos com uma situação nova. Sabemos que o sexto electrão tem de ir para um orbital 2p. entretanto, esse novo electrão vai para o orbital 2p, que já tem um electrão, ou para um dos outros? Essa pergunta é respondida pela **regra de Hund**, que afirma que para *orbitais degenerados, a menor energia será*

obtida quando o número de electrões com o mesmo spin for maximizado. Isso significa que os electrões ocuparão individualmente os orbitais ate a máxima extensão possível, com o mesmo numero quântico magnético de spin. Diz-se que os electrões distribuídos dessa forma tem *spins paralelos*. Portanto, para um átomo de carbono atingir sua energia mais baixa, os dois electrões 2p terão o mesmo spin. Para que isso aconteça, os electrões devem estar em orbitais 2p diferentes. Assim, um átomo de carbono em seu estado fundamental tem dois electrões desemparelhados. Da mesma forma, para o nitrogénio em seu estado fundamental, a regra de Hund requer que os três electrões 2p ocupem individualmente cada um dos três orbitais 2p. essa é a única maneira com a qual todos os três electrões terão o mesmo spin. Para o oxigénio e o flúor, colocamos quatro e cinco electrões, respectivamente, nos orbitais 2p. para conseguir isso, emparelharemos os electrões nos orbitais 2p.

A regra de Hund é baseada em parte no facto de que os electrões se repelem. Ocupando orbitais diferentes, os electrões permanecem tão afastados quanto possível um do outro, assim minimizando as repulsões electrão – electrão.

Configurações electrónicas condensadas

O preenchimento do subnível 2p está completo no neónio, que tem configuração estável com oito electrões (*um octeto*) em nível mais externo. O próximo elemento, o sódio, o número atómico 11, marca o início de um novo período da tabela periódica. O sódio tem um único electrão 3s além da configuração estável do neónio. Podemos abreviar a configuração electrónica do sódio como a seguir:

$$Na: [Ne]3s^1$$

O símbolo [Ne] representa a configuração electrónica dos dez electrões do neónio, $1s^2 2s^2 2p^6$. Escrever a configuração electrónica dessa maneira ajuda a focalizar a atenção nos electrões mais externos do átomo. Eles são os principais responsáveis pelo comportamento químico de um elemento.

Ao escrever a *configuração electrónica condensada* de um elemento, a configuração electrónica do gás nobre de menor número atómico mais próximo é representada por seu símbolo químico entre colchetes. Por exemplo, podemos escrever a configuração electrónica do lítio como:

$$Li: [He]2s^1$$

Referimo-nos aos electrões representados pelo símbolo de um gás nobre como o cerne de gás nobre de um átomo. Mais habitualmente, esses níveis mais internos são chamados meramente **electrões internos**. Os electrões listados depois do cerne de gás nobre são chamados electrões mais externos, ou **electrões de valência**.

Comparando a configuração electrónica do lítio com a do sódio, podemos estimar por que esses dois elementos são tão quimicamente similares: eles tem o mesmo tipo de configuração electrónica mais externa. De facto, todos os membros do grupo dos metais alcalinos (1A) tem um único electrão *s* além da configuração do gás nobre.

Metais de transição

O elemento gás nobre argónio marca o final do período iniciado pelo sódio. A configuração do argónio é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. O próximo elemento após o argónio na tabela periódica é o potássio (K), numero atómico 19. Em todas as suas propriedades químicas, o potássio é claramente um membro do grupo dos metais alcanicos. Os factos experimentais sobre as propriedades do potássio não deixam dúvidas de que o electrão mais externo desse elemento ocupa um orbital *s*. Mas isso significa que o electrão de mais alta energia não foi para um orbital *3d*, como esperaríamos que fosse. Aqui a ordem dos níveis de energia é tal que o orbital 4s é mais baixo em energias do que o 3d. naturalmente, a configuração condensada do potássio é:

$$K: [Ar]4s^1$$

Após o preenchimento completo do orbital 4s (isso ocorre no átomo de cálcio), o próximo conjunto de orbitais equivalentes a serem preenchidos é o 3d. Começando com o escândio e estendendo ate o zinco, os electrões são adicionados aos cincos orbitais 3d até que eles estejam completamente preenchidos. O quarto período da tabela periódica tem dez elementos a mais do que os dois anteriores. Esses dez elementos são conhecidos como **elementos de transição**, ou **metais de transição**. Observe a posição deles na tabela periódica.

De acordo com a regra de Hund, os electrões são adicionados individualmente aos orbitais 3d ate que os cinco orbitais tenham um electrão cada. Os electrões adicionais são colocados nos orbitais 3d com spins emparelhados ate que o nível esteja completamente preenchido. As representações de configurações electrónicas condensadas e configurações de quadrículas correspondente de dois elementos de transição como seguem;

	4s	3d				
Mn: $[Ar]4s^2 3d^5$ ou [Ar]	↿⇂	↿	↿	↿	↿	↿
Zn: $[Ar]4s^2 3d^{10}$ ou [Ar]	↿⇂	↿⇂	↿⇂	↿⇂	↿⇂	↿⇂

Após a serie de transição 3d estar completa, os orbitais 4p começam a ser ocupados ate que o octeto dos electrões externos ($4s^2 4p^6$) seja atingido no criptónio (Kr), numero atómico 36, outro gás nobre. Observe que o período é em todos os aspectos semelhante ao anterior, excepto quanto ao valor de *n*, que é maior em 1.

Lantanídeos e actinídeos

O sexto período da tabela periódica começa de maneira similar ao anterior: um electrão no orbital 6s do césio (Cs) e dois electrões no orbital 6s do bário (Ba). Observe, entretanto, que a tabela periódica tem uma quebra, e o conjunto subsequente de elementos (elementos 57-70) é colocado abaixo da parte principal da tabela. É o local em que começamos a encontrar um novo conjunto de orbitais, os *4f*.

Existem sete orbitais degenerados *4f*, correspondendo aos sete valores permitidos de m_l, variando de 3 a -3. Assim, são necessários 14 electrões para preencher completamente os orbitais *4f*. Os 14 elementos *4f* são conhecidos como **lantanídeos** (ou terras raras). Os lantanídeos são colocados abaixo dos outros elementos para evitar que seja feita uma

tabela injustificavelmente extensa. As propriedades dos lantanídeos são todas bastante similares e eles são encontrados juntos na natureza. Por muitos anos era virtualmente impossível separá-los.

Em virtude de as energias dos orbitais *4f* e *5d* serem muito próximas, as configurações electrónicas de alguns lantanídeos envolvem electrões *5d*. Por exemplo, o elemento lantano (La), cério (Ce) e praseodímio (Pr) tem as seguintes configurações:

La: $[Kr]6s^2 5d^1$ Ce: $[Kr]6s^2 5d^1 4f^1$ Pr: $[Kr]6s^2 4f^3$

La, que tem um único electrão *5d*, é algumas vezes colocado abaixo do ítrio (Y) como o primeiro membro da terceira serie dos elementos de transição, e Ce, como o primeiro membro dos lantanídeos. Distribuídos dessa forma, existem aparentemente menos excepções ao preenchimento regular dos lantanídeos. Distribuídos dessa forma, existem aparentemente menos excepções ao preenchimento regular dos orbitais *4f* entre os membros posteriores da serie.

Depois da serie dos lantanídeos, a terceira serie dos elementos de transição é completada pelo preenchimento dos orbitais *5d*, seguido pelo preenchimento dos orbitais 6p. Isso nos trás ao radónio (Rn), o mais pesado dos gases nobres conhecidos. O último período da tabela periódica começa com o preenchimento do orbital 7s. Os **actinídeos**, dos quais o urânio (U, elemento 92) e o plutónio (Pu, elemento 94) são os mais conhecidos, são então constituídos pelo preenchimento dos orbitais *5f*. Os actinídeos são radioactivos, e a maioria deles não é encontrada na natureza.

1.1.9. CONFIGURAÇÕES ELECTRÓNICAS E A TABELA PERIÓDICA

O levantamento um tanto breve das configurações electrónicas dos elementos nos levou ate a tabela periódica. Vimos que as configurações electrónicas dos elementos estão relacionados com a respectiva localização na tabela periódica. A tabela periódica é estruturada de forma que os elementos com o padrão de configurações electrónicas de níveis mais externos (valência) estejam distribuídos em colunas. A partir da tabela periódica vemos que todos os elementos da 2A tem configurações mais externa ns^2, enquanto os elementos da 3A tem configurações ns^2np^1.

Anteriormente, na tabela 6.2, dissemos que o número total de orbitais em cada nível era igual a n^2: 1, 4, 9 ou 16. Como cada orbital pode comportar dois electrões, cada nível pode acomodar ate $2n^2$ electrões: 2, 8, 18 ou 32. A estrutura da tabela periódica reflecte essa estrutura de orbital. O primeiro período pode comportar dois elementos, o segundo e terceiro períodos tem oito elementos, o quarto e quinto, 18 e o sexto período tem 32 elementos (incluindo os lantanídeos). Alguns dos números se repetem porque atingimos o final de um período da tabela periódica antes de preencher completamente um nível. Por exemplo, o terceiro período tem oito elementos, o que corresponde a preencher os orbitais 3s e 3p. os orbitais restantes do terceiro nível, os 3d, não começam a ser preenchidos ate o quarto período da tabela periódica (e depois do orbital 4s estar preenchido). Da mesma forma, os orbitais 4d não começam a ser preenchidos ate o quinto período da tabela, e os *4f* não começam a ser preenchidos ate o sexto período.

Todas essas observações são evidentes na estrutura da tabela periódica. Por essa razão, enfatizamos que *a tabela periódica é seu guia para a ordem na qual os orbitais são preenchidos*. Você pode facilmente escrever a configuração electrónica de um elemento com base em sua localização na tabela periódica. O padrão está resumido na figura 1.19. observe que os elementos podem ser agrupados pelos *tipos* de orbital dentro dos quais os electrões são colocados. À esquerda estão *duas* colunas de elementos. Esses elementos, conhecidos como metais alcalinos (grupo 1A) e metais alcalinos terrosos (grupo 2A), são aqueles nos quais os orbitais *s* do nível mais externo são preenchidos. À direita está um bloco de seis colunas. Esses são os elementos nos quais os orbitais *p* mais externos são preenchidos. Os blocos *s* e *p* da tabela periódica contem os **elementos representativos** (ou **grupo principal**). No meio da tabela está um bloco de dez colunas que contem os metais de transição. Esses são os elementos nos quais os orbitais *d* são preenchidos. Abaixo da parte principal da tabela estão dois períodos contendo 14 colunas. Esses elementos são normalmente chamados **metais do bloco *f*** porque são aqueles nos quais os orbitais *f* são preenchidos. Lembre-se de que os números 2, 6, 10 e 14 são exactamente o número de electrões que podem preencher os subníveis *s, p, d e f*, respectivamente. Lembre-se também de que o subnível 1s é o primeiro subníveis, o *2p* é o primeiro subnível *p*, o *3d* é o primeiro subnível *d* e o *4f*, o primeiro subnível *f*.

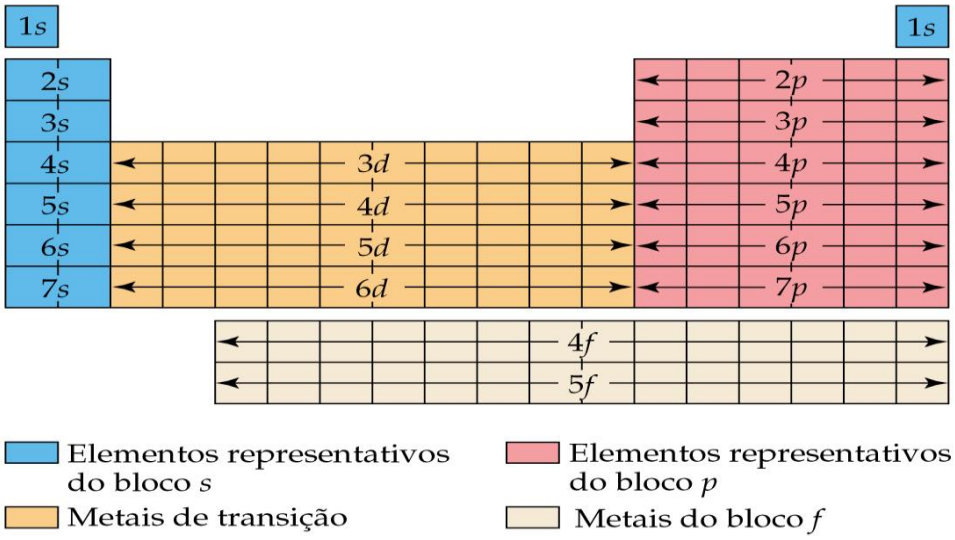


Figura 1.19

A figura 1.20 fornece a configuração electrónica do estado fundamental do nível mais externo dos elementos. É possível usar essa figura para conferir suas respostas à medida que você pratica escrevendo as configurações electrónicas. Escrevemos essas configurações com os orbitais em ordem crescente de número quântico principal.

Configurações electrónicas anómalas

Se você fizer uma inspecção cuidadosa na figura 1.20, verá que as configurações electrónicas de determinados elementos parecem violar as regras que acabamos de abordar. Por exemplo, a configuração do crómio é $[Ar]3d^5 4s^2$ em vez de $[Ar]3d^4 4s^2$, como esperaríamos. Analogamente, a configuração do cobre é $[Ar]3d^{10} 4s^1$ em vez de $[Ar]3d^9 4s^2$. Esse comportamento anómalo é basicamente uma consequência da

proximidade entre as energias dos orbitais 3d e 4s. Ela ocorre frequentemente quando existem electrões suficientes para fazer com que orbitais degenerados tornem-se parcialmente preenchidos (como no cromo) ou totalmente preenchidos (como no cobre). Existem poucos casos similares entre os metais de transição mais pesados (aqueles com orbitais 4d ou 5d parcialmente preenchidos) e entre os metais do bloco *f*. Apesar de esses pequenos desvios da expectativa serem interessantes, eles não tem grande relevância química.

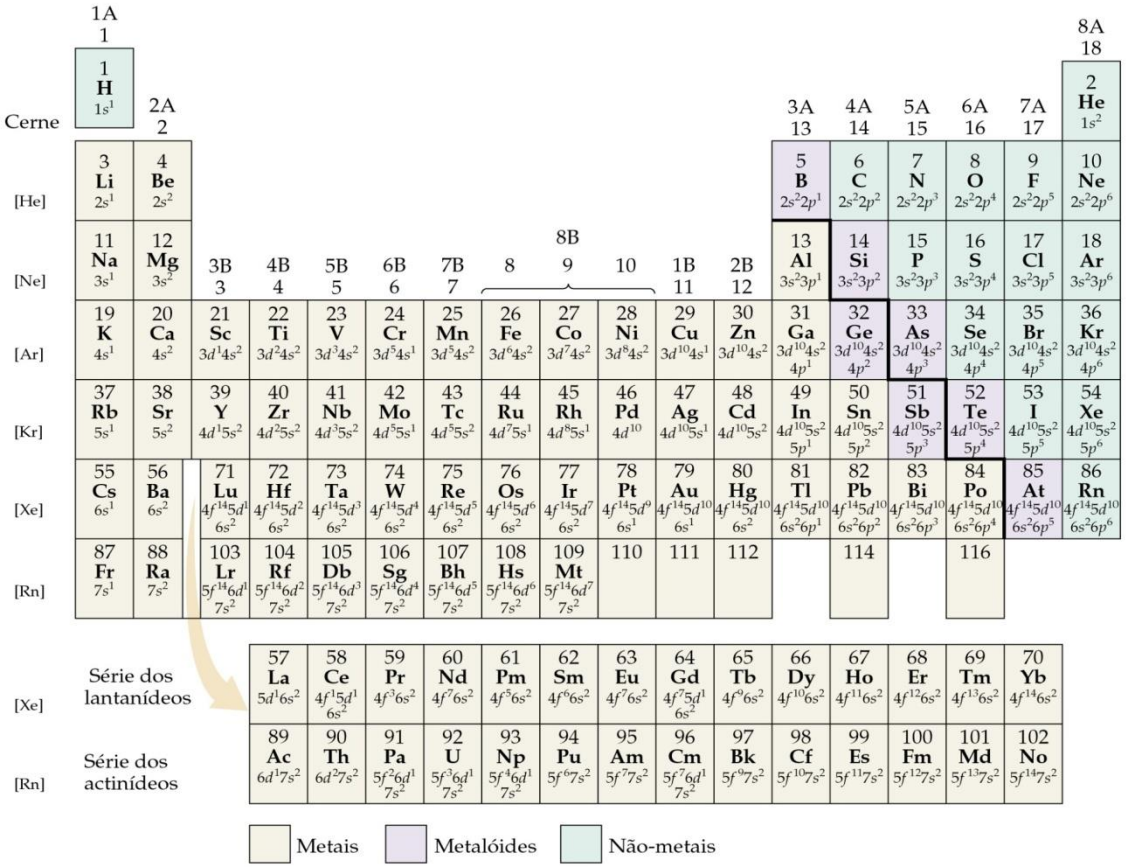


Figura 1.20

1.1.0. O DESENVOLVIMENTO DA TABELA PERIÓDICA

A descoberta de novos elementos químicos tem sido um processo de avanços desde os tempos da Antiguidade. Determinados elementos, como o ouro, aparecem na natureza na forma elementar e foram descobertos milhares de anos atrás. Em contraste, alguns elementos são radioactivos e intrinsecamente instáveis.

A maioria dos elementos, apesar de estáveis, está vastamente dispersa na natureza e está incorporada em grande número de compostos. Por séculos os cientistas não tinham conhecimento de sua existência. No inicio do século XIX, os avanços na química fizeram com que ficasse mais fácil isolá-los a partir de seus compostos. Como resultado, o numero de elementos conhecidos mais que dobrou, de 31 em 1800 para 63 por volta de 1865.

À medida que o número de elementos conhecidos aumenta, os cientistas começam a investigar as possibilidades de classificá-las de maneira útil. Em 1869 Dmitri Mendeleev, na Rússia, e Lothar Meyer, na Alemanha, publicaram esquemas de classificação

praticamente idênticos. Os dois cientistas observaram que as similaridades das propriedades físicas e químicas tornam a se repetir periodicamente quando os elementos são distribuídos em ordem crescente de massa atómica. Os cientistas daquela época não tinham conhecimento dos números atómicos. As massas atómicas, entretanto, geralmente cresciam como aumento do número atómico, logo tanto Mendeleev quanto Meyer casualmente distribuíram os elementos em ordem apropriada. As tabelas dos elementos desenvolvidas por Mendeleev e Meyer foram as precursoras da tabela periódica moderna.

Apesar de Mendeleev e Meyer terem chegado basicamente à mesma conclusão sobre a periodicidade das propriedades dos elementos, a Mendeleev são dados os créditos por desenvolver suas ideias mais eficazmente e estimular mais trabalhos novos na química. Sua insistência em listar os elementos com características similares nas mesmas famílias forçou-o a deixar vários espaços em branco na tabela. Por exemplo, tanto o gálio (Ga) quanto o germânio (Ge) eram desconhecidos naquela época. Mendeleev corajosamente previu sua existência e suas propriedades, referindo-se a eles como eka-aluminio e eka-silicio, termos criados por ele mesmo para indicar abaixo de quais elementos eles aparecem na tabela periódica. Quando esses elementos foram descobertos, soube-se que suas propriedades eram muito parecidas com as previstas por Mendeleev.

Em 1913, dois anos após Rutherford propor o modelo atómico do átomo, um físico inglês chamado Henry Moseley (1887 - 1915) desenvolveu o conceito de números atómicos. Moseley determinou as frequências de raios X emitidas à medida que diferentes elementos eram bombardeados com electrões de alta energia. Ele descobriu que cada elemento produz raios X de frequência única; alem disso, ele descobriu que a frequência geralmente aumenta quando a massa atómica aumenta. Ele distribui as frequências de raios X em ordem atribuindo um número inteiro exclusivo para cada elemento, chamada *número atómico*. Moseley identificou correctamente o numero atómico o numero de protão no núcleo do átomo e o numero de electrão no átomo.

O conceito de número atómico esclareceu alguns problemas nas versões anteriores da tabela periódica, que eram baseadas na massa atómica. Por exemplo, a massa atómica do Ar (numero atómico 18) é maior que a do potássio (numero atómico 19). Entretanto, quando os elementos são arranjados em ordem crescente de número atómico, em vez de ordem crescente de massa atómica, Ar e K aparecem em seus lugares correctos na tabela. Os estudos de Moseley tornaram possível também identificar os ‘buracos’ na tabela periódica, que levaram à descoberta de novos elementos.

1.1.1. CARGA NUCLEAR EFECTIVA

Para entender as propriedades dos átomos, devemos estar familiarizados não apenas com as configurações electrónicas, mas também com a intensidade da força de atracção entre o núcleo e os electrões mais externos. A lei de Coulomb de atracção indica que a força da atracção entre as duas cargas eléctricas depende da magnitude das cargas e da distância entre elas. Portanto, a força de atracção entre um electrão e o núcleo depende da magnitude da carga nuclear líquida agindo no electrão e da distância média entre o núcleo e o electrão. A força de atracção aumenta na mesma proporção que a carga nuclear, e diminui à medida que o electrão se afasta do núcleo.

Em um átomo polielectrónico, cada electrão é simultaneamente atraído pelo núcleo e repelido pelos outros electrões. Em geral, existem tantas repulsões electrão – electrão que não podemos analisar exactamente a situação. Entretanto, podemos estimar a energia de

cada electrão considerando como ele interage com o ambiente *médio* criado pelo núcleo e os outros electrões no átomo. Essa abordagem permite-nos tratar cada electrão individualmente como se ele estivesse se movendo no campo eléctrico criado pelo núcleo e pela densidade electrónica vizinha dos outros electrões. Esse campo eléctrico é equivalente ao campo gerado por uma carga localizada no núcleo, chamada **carga nuclear efectiva**. A carga nuclear efectiva, Z_{ef}, agindo em um electrão é igual ao numero de protões no núcleo, Z, menos o numero médio de electrões, S, que está entre o núcleo e o electrão em questão:

$$Z_{ef} = Z - S$$

Como S representa uma media, não é necessário que ele seja um número inteiro.

Muitas das propriedades dos átomos são determinadas pela carga nuclear efectiva sofrida por seus electrões mais externos, ou de valência. Qualquer densidade electrónica entre o núcleo e um electrão mais externo diminui a carga nuclear efectiva agindo em um electrão mais externo. Diz-se que a densidade electrónica relativa aos electrões mais internos *blinda* ou *protege* os electrões mais externos da carga total do núcleo. Uma vez que os electrões mais internos estão localizados basicamente entre o núcleo e os electrões mais externos, eles são mais eficientes em blindar os electrões mais externos. Por outro lado, os electrões de mesmo nível dificilmente blindam uns aos outros da carga do núcleo. Como resultado, *a carga nuclear efectiva sofrida pelos electrões mais externos é determinada basicamente pela diferença entre a carga do núcleo e a carga dos electrões internos.*

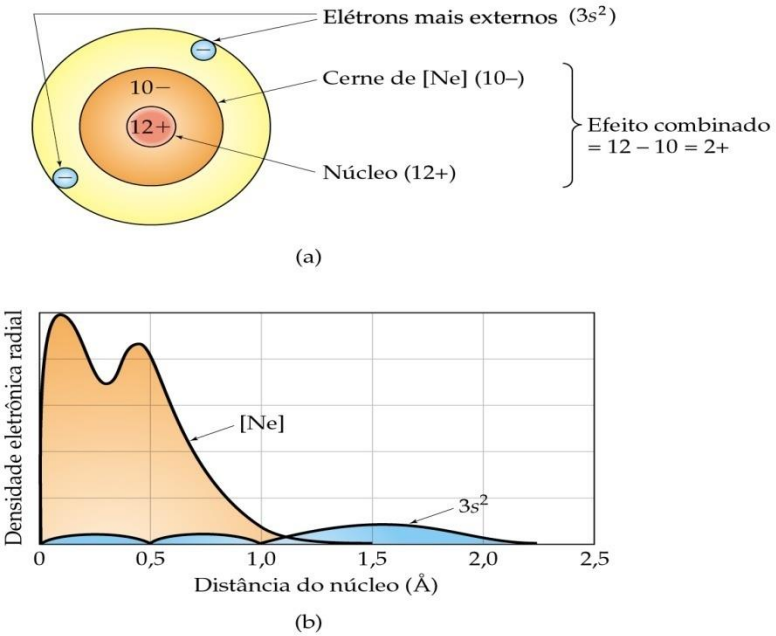


Figura 1.21

Podemos estimar aproximadamente a carga nuclear efectiva usando a carga nuclear e o número de electrões internos. O magnésio (numero atómico 12), por exemplo, tem configuração electrónica $[Ne]3s^2$. A carga nuclear do átomo é 12+, e a camada mais interna de Ne consiste em dez electrões. Grosso modo, esperaríamos que cada electrão mais externo sofresse uma carga nuclear efectiva de aproximadamente 12 – 10 = 2+,

como mostrado de modo simplificado na figura 1.21(a). Entretanto, esse cálculo subestima a carga nuclear efectiva porque os electrões mais externos de um átomo tem muitas probabilidades de estar no cerne, como mostrado na figura 1.21(b). De facto, cálculos mais detalhados indicam que a carga nuclear efectiva agindo nos electrões mais externos do Mg é na realidade 3,3+.

A carga nuclear efectiva sofrida pelos electrões mais externos aumenta quando passamos de elemento para elemento por um período da tabela. Apesar de o número de electrões internos permanecer o mesmo à medida que nos movemos no período, a carga nuclear real aumenta. Os electrões de nível mais externo adicionados para contrabalançar o aumento da carga nuclear blindam uns aos outros com muita pouca eficiência. Logo, a carga nuclear efectiva aumenta progressivamente. Por exemplo, os electrões mais internos $1s^2$ do lítio ($1s^22s^1$) blindam os electrões mais externos 2s do núcleo carregado 3+ com eficiência satisfatória. Consequentemente, os electrões mais externos sofrem carga nuclear efectiva de aproximadamente 3 – 2 = 1+. Para o berílio ($1s^22s^2$), a carga nuclear efectiva sofrida pelos electrões 2s mais externos é maior; nesse caso, os electrões mais externos blindam apenas parcialmente o outro. Dessa forma, a carga nuclear efectiva sofrida por cada electrão 2s é em torno de 4 – 2 = 2+.

Descendo em uma família, a carga nuclear efectiva sofrida pelos electrões dos níveis mais externos varia muito menos do que varia ao longo do período. Por exemplo, esperaríamos que a carga nuclear efectiva para os electrões mais externos no lítio e no sódio fosse aproximadamente a mesma, em torno de 3 – 2 = 1+ para o lítio e 11 – 10 = 1+ para o sódio. Entretanto, na realidade, a carga nuclear efectiva aumenta ligeiramente à medida que descemos na família, porque cernes de electrões maiores são mais eficientes em blindar da carga nuclear os electrões mais externos. Nem por isso a pequena variação na carga nuclear efectiva ocorrida ao se descer na família é menos relevante que o aumento ocorrido ao longo do período.

1.1.2. TAMANHOS DE ÁTOMOS E IÕES

Uma das propriedades mais importantes de um átomo ou ião é o tamanho. Geralmente pensamos em átomos e iões como objectos esféricos e duros. Entretanto, de acordo com o modelo da mecânica quântica, os átomos e os iões não tem limites pontuais definidos nos quais a distribuição electrónica torna-se zero. As bordas dos átomos e iões são, portanto, bastante ‘vagas’. Não obstante, podemos definir seus respectivos tamanhos de várias maneiras com base nas distâncias entre os átomos em várias situações.

Imagine um conjunto de átomos de argónio na fase gasosa. Quando os átomos colidem uns com os outros durante os movimentos, eles ricocheteiam, separando-se – como bolas de bilhar. Isso acontece porque as nuvens electrónicas dos átomos que estão colidindo não podem penetrar uma nas outras ate certa quantidade significativa. As distâncias mais próximas separando os núcleos durante tais colisões determinam o raio *aparente* dos átomos de argónio. Podemos chamar esses raios de *raios não-ligantes* de um átomo.

Quando dois átomos estão quimicamente ligados, como na molécula de Cl_2, existe uma interacção atractiva entre eles, que os leva a uma ligação química. Essa interacção atractiva coloca os dois átomos mais próximo do que eles estariam em uma colisão não-ligante. Podemos definir um raio atómico com base na distância que separa os núcleos dos átomos quando eles estão quimicamente ligados. Essa distancia, chamada **raio ligante**, é menor que o raio não-ligante, como ilustrado na figura 1.22. Os modelos de

preenchimento de espaço, usam o raio não-ligante (também chamado *raio de Van der Waals*) para determinar o tamanho dos átomos. Os raios atómicos ligantes (também chamados *raios covalentes*) são usados para determinar as distâncias entre seus centros.

Os cientistas tem desenvolvido uma variedade de métodos para medir as distâncias separando núcleos em moléculas. A partir de observações dessas distâncias em muitas moléculas, a cada elemento pode ser atribuído um raio covalente. Por exemplo, na molécula de I_2, observou-se que a distância separando os núcleos de iodo é 2,66 Å. Com base nisso, podemos definir o raio covalente do iodo como 1,33 Å. Similarmente, a distância separando dois núcleos de carbono adjacentes no diamante, que é uma rede sólida tridimensional, é 1,54 Å; assim, ao raio covalente do carbono é atribuído o valor de 0,77 Å. Os raios de outros elementos podem ser definidos de maneira similar (figura 1.23). (Para o hélio e o neónio, os raios ligantes devem ser estimados porque não existem combinações químicas conhecidas.)

Os raios atómicos permitem-nos estimar os comprimentos de ligação entre diferentes elementos em moléculas. Por exemplo, o comprimento da ligação Cl – Cl no Cl_2 é 1,99 Å, logo se atribui um raio de 0,99 Å para o Cl. No composto CCl_4, o comprimento da ligação C – Cl é 1,77 Å, muito próximo da soma (0,77 + 0,99 Å) dos raios atómicos para C e Cl.

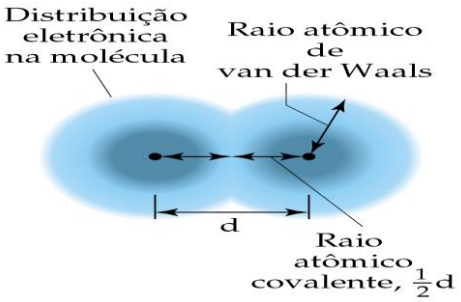


Figura 1.22

Tendências periódicas nos raios atómicos

Se examinarmos o 'mapa de ajuda' de raios atómicos na figura 1.23, observaremos duas tendências interessantes nos dados:

1. Em cada coluna (grupo) o número atómico tende a crescer à medida que descemos. Essa tendência resulta basicamente do aumento do numero quântico principal (*n*) dos electrões mais externos. Conforme descemos em um grupo, os electrões mais externos passam mais tempo afastados do núcleo, fazendo com que o átomo aumente de tamanho.

2. Em cada período o raio atómico tende a diminuir quando vamos da esquerda para direita. O principal factor influenciando essa tendência é o aumento na carga nuclear efectiva (Z_{ef}) à medida que nos movemos ao longo do período. O aumento da carga nuclear efectiva atrai continuamente os electrões, inclusive os mais externos, para perto do núcleo, fazendo com que o raio diminua.

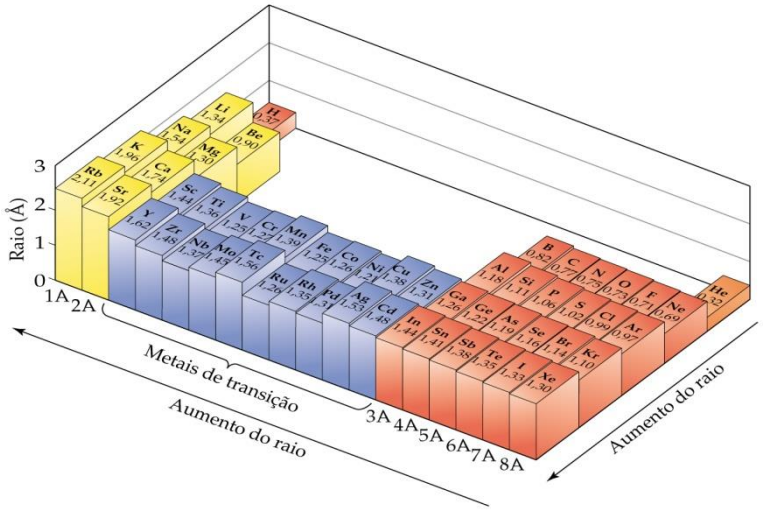


Figura 1.23

Tendências nos tamanhos dos iões

Os tamanhos dos iões são baseados nas distancias um do outro em compostos iónicos. Como o tamanho de um átomo, o tamanho de um ião depende de sua carga nuclear, do numero de electrões que ele possui e dos orbitais nos quais os electrões de nível mais externo localizam-se. A formação de um catião desocupa os orbitais mais extensos em relação ao espaço e também diminui as repulsões totais electrão – electrão. Como consequência, *os catiões são menores que os átomos que lhes dão origem*, como ilustrado na figura 1.24. O oposto é verdade para iões negativos (aniões). Quando electrões são adicionados a um átomo neutro para formar um anião, o aumento das repulsões electrão – electrão faz com que os electrões se espalhem mais no espaço. Assim, *os aniões são maiores que os átomos que lhes dão origem.*

Para iões de mesma carga, o tamanho aumenta à medida que descemos um grupo na tabela periódica. Essa tendência é também vista na figura 1.24. À medida que o número quântico principal do orbital mais externo ocupado de um ião aumenta, o tamanho dele próprio aumenta.

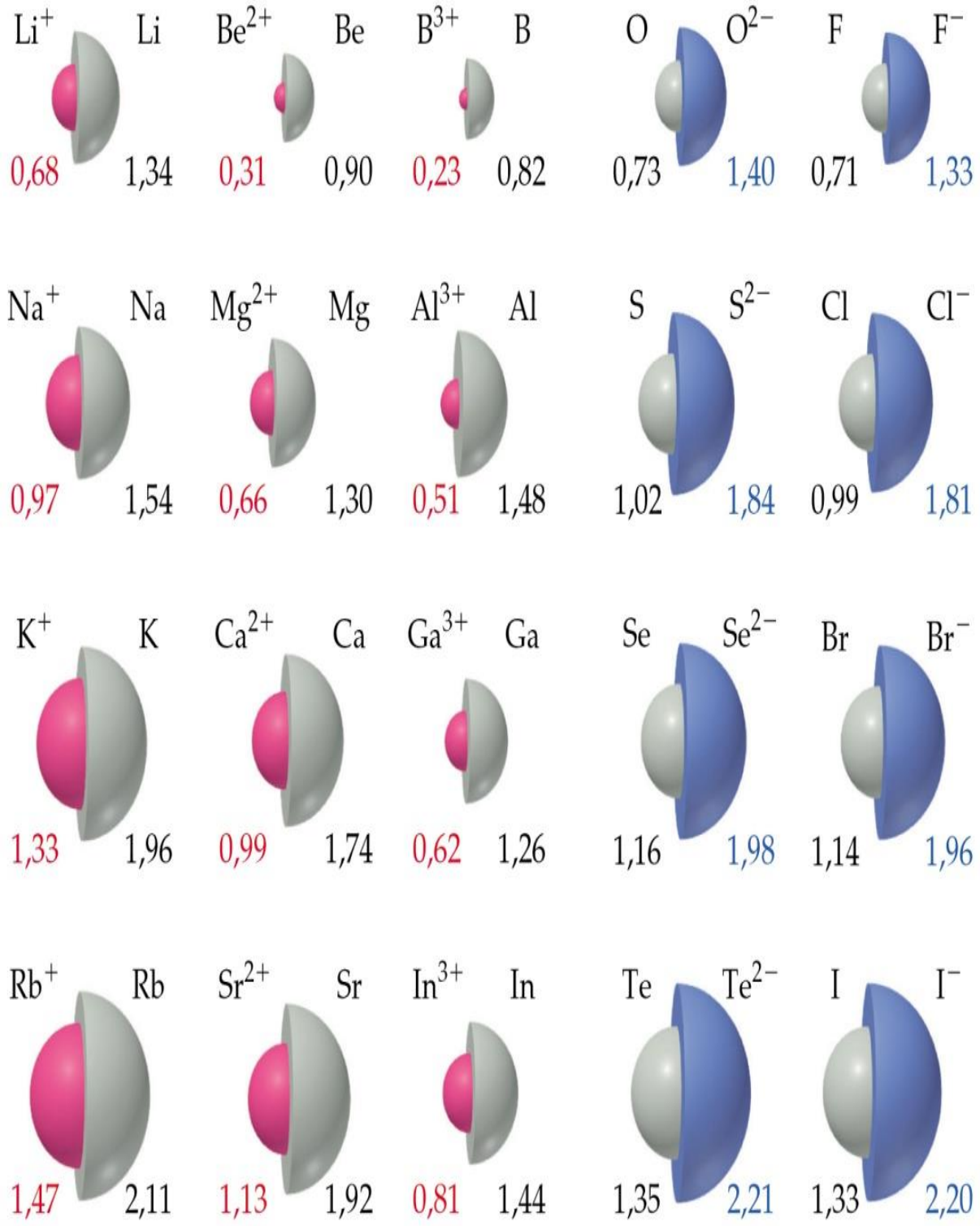


Figura 1.24

O efeito da variação da carga nuclear nos raios iónicos é visto na variação dos raios em uma **serie isoelectrónica** de iões. O termo *isoelectrónico* significa que os iões possuem o mesmo número de electrões. Por exemplo, cada ião na serie O^{2-}, F^{-}, Na^{+}, Mg^{2+} e Al^{3+} tem dez electrões. A carga nuclear nessa serie aumenta continuamente na ordem listada (lembre-se de que a carga no núcleo de um átomo ou ião monoatómico é dada pelo numero atómico do elemento). Uma vez que o número de electrões permanece constante,

o raio do ião diminui com o aumento da carga nuclear, à medida que os electrões estão mais fortemente presos ao núcleo:

Aumentando a carga nuclear ⟶

O^{2-}	F^{-}	Na^{+}	Mg^{2+}	Al^{3+}
1,40 Å	1,33 Å	0,97 Å	0,66 Å	0,51 Å

Diminuindo o raio iónico ⟶

Observe as posições desses elementos na tabela periódica e também seus números atómicos. Os aniões não-metalicos antecedem o gás nobre Ne na tabela. Os catiões metálicos estão logo após o Ne. O oxigénio, o maior ião nessa serie isoelectrónica, tem o menor número atómico, 8. O alumínio, o menor desses iões, tem o maior número atómico, 13.

1.1.3. ENERGIAS DE IONIZAÇÃO

A facilidade com que os electrões podem ser removidos de um átomo é um indicador importante do comportamento químico dele. A **energia de ionização** de um átomo ou ião é a mínima necessária para remover um electrão de um átomo ou ião gasoso isolado em seu estado fundamental. A *primeira energia de ionização*, I_1, é a energia necessária para remover o primeiro electrão de um átomo neutro. Por exemplo, a primeira energia de ionização para o átomo de sódio é a energia necessária para o seguinte processo:

$$Na_{(g)} \longrightarrow Na^{+}_{(g)} + e^{-}$$

A *segunda energia de ionização*, I_2, é a energia necessária para remover o segundo electrão, e assim por diante, para remoções de electrões adicionais. Portanto, I_2, para o átomo de sódio, é a energia associada com o seguinte processo:

$$Na_{(g)} \longrightarrow Na^{2+}_{(g)} + e^{-}$$

Quanto maior a energia de ionização, mais difícil a remoção de um electrão.

Variações nas energias de ionização sucessivas

As energias de ionização para os elementos do sódio até o argónio estão relacionados na tabela abaixo. Observe que elas aumentam de magnitude à medida que os electrões são removidos: $I_1 < I_2 < I_3$ etc. essa tendência ocorre porque, com cada remoção sucessiva, um electrão é afastado de um ião cada vez mais positivo, necessitando, por isso, de cada vez mais energia.

A segunda característica importante da tabela abaixo é o aumento brusco na energia de ionização, que ocorre quando um electrão do nível mais interno é removido. Por exemplo, considere o silício, cuja configuração electrónica é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ ou [Ne] $3s^2 3p^2$.

TABELA 7.2 Valores das energias de ionização sucessivas, *I*, para os elementos do sódio até o argônio (kJ/mol)

Elemento	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	496	4.560			elétrons dos níveis mais internos		
Mg	738	1.450	7.730				
Al	578	1.820	2.750	11.600			
Si	786	1.580	3.230	4.360	16.100		
P	1.012	1.900	2.910	4.960	6.270	22.200	
S	1.000	2.250	3.360	4.560	7.010	8.500	27.100
Cl	1.251	2.300	3.820	5.160	6.540	9.460	11.000
Ar	1.521	2.670	3.930	5.770	7.240	8.780	12.000

As energias de ionização aumentam continuamente de 786 para 4.360 kj/ mol para a perda de quatro electrões nos subníveis. A remoção do quinto electrão, que vem do subnível 2p, requer uma quantidade muito maior de energia: 16.100 kj/ mol. O grande aumento da energia ocorre porque os electrões 2p do nível mais interno estão muito mais próximo do núcleo e sofrem carga nuclear efectiva maior que os electrões 3s e 3p do nível de valência.

Cada elemento exibe um aumento maior na energia de ionização quando os electrões são removidos de seu cerne de gás nobre. Essa observação ampara a ideia de que apenas os electrões mais externos, aqueles além do cerne de gás nobre, estão envolvidos no compartilhamento e transferência de electrões que dão origem às ligações e reacções químicas. Os electrões mais internos estão ligados muito fortemente ao núcleo para serem perdidos pelo átomo ou ate compartilhados com outro átomo.

Tendências periódicas nas primeiras energias de ionização

Temos visto que a energia de ionização para certo elemento aumenta à medida que removemos electrões sucessivamente. Quais as tendências que observamos nas energias de ionização conforme passamos de um elemento para outro na tabela periódica? A figura 1.25 mostra um gráfico de I_1 *versus* número atómico para os primeiros 54 elementos. As importantes tendências são como se seguem:

1. Em cada período, I_1 geralmente aumenta com o aumento do número atómico. Os metais alcalinos tem a menor energia de ionização em cada período e os gases nobres, as maiores. Existem pequenas irregularidades nessa tendência que abordaremos em breve.

2. Em cada grupo a energia de ionização geralmente diminui com o aumento do número atómico. Por exemplo, as energias de ionização dos gases nobres seguem a seguinte ordem He > Ne > Ar > Kr > Xe.

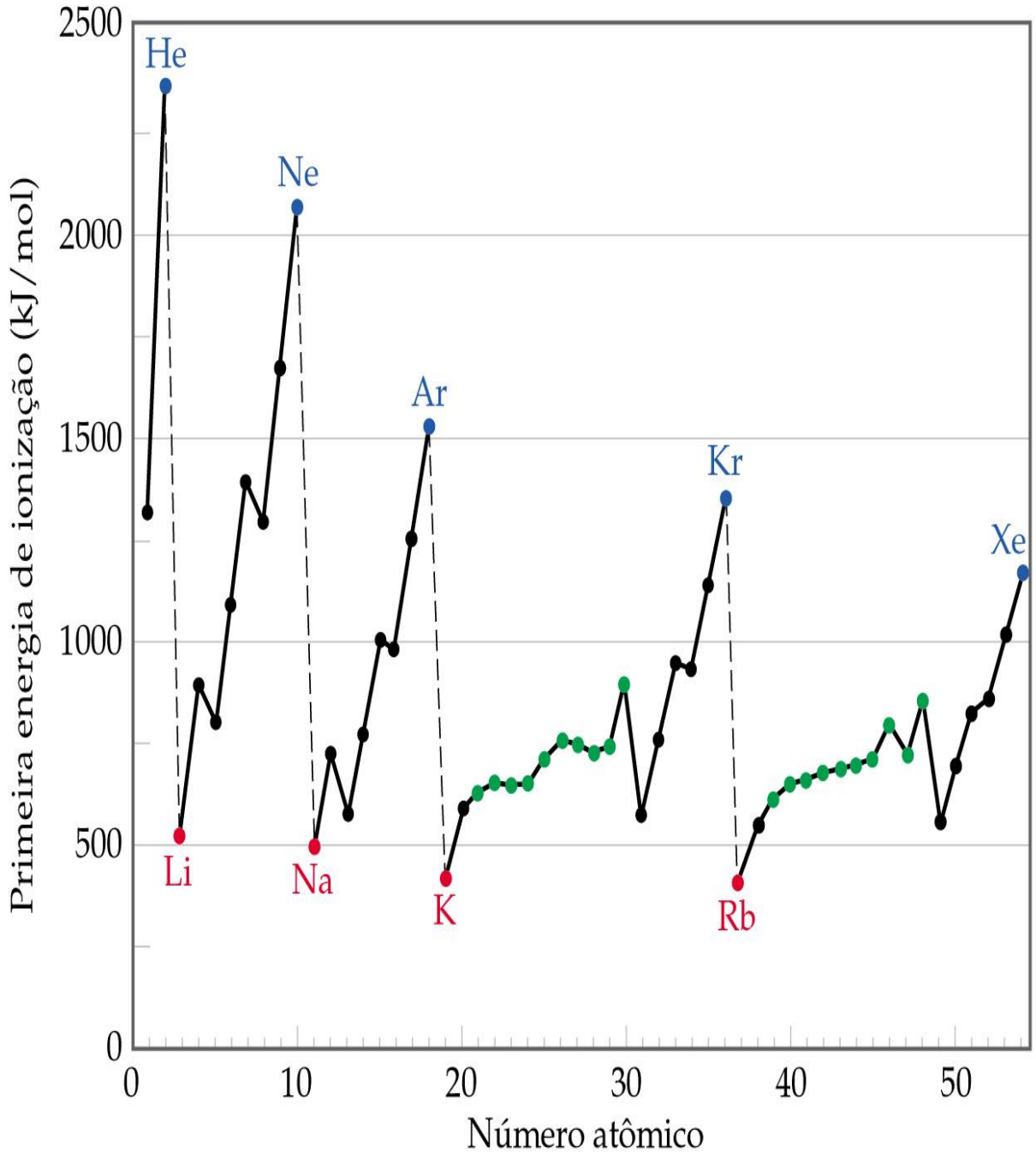


Figura 1.25

3. Os elementos representativos apresentam uma maior faixa de valores de I_1 que os elementos metálicos de transição. Em geral, as energias de ionização dos elementos de transição aumentam vagarosamente na medida em que vamos da esquerda para a direita em um período. Os metais do bloco *f*, os quais não estão mostrados na figura 1.25, também apresentam apenas uma pequena variação nos valores de I_1.

Informações adicionais sobre as tendências periódicas nas primeiras energias de ionização dos elementos representativos são ilustrados na figura 1.26.

Normalmente, os menores átomos tem energias de ionização maiores. Os factores que influenciam o tamanho atómico também influenciam as energias de ionização. A energia necessária para remover um electrão de um nível mais externo depende tanto da carga nuclear efectiva quanto da distância média do electrão ao núcleo. À medida que essa atracção aumenta, torna-se mais difícil remover o electrão e, assim, a energia de ionização aumenta.

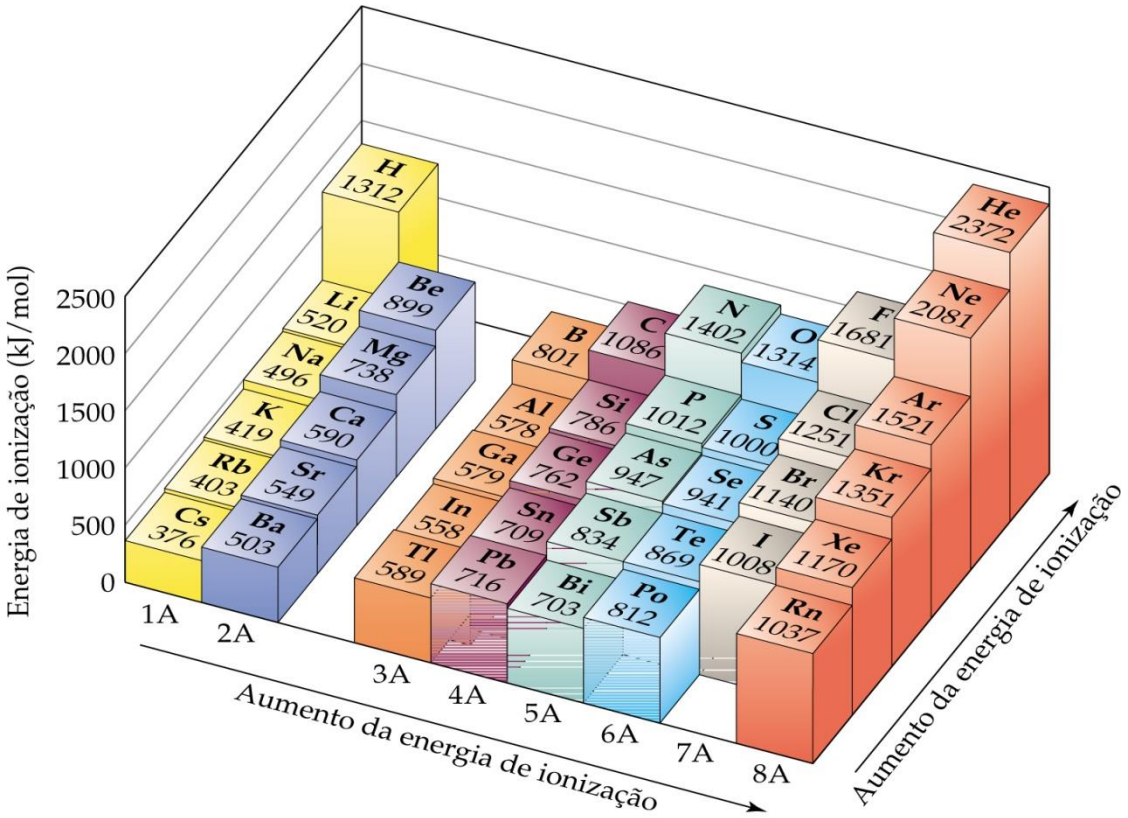


Figura 1.26

Conforme nos movemos por um período, existe tanto aumento na carga nuclear efectiva quanta diminuição no raio atómico, fazendo com que a energia de ionização aumente. Entretanto, à proporção que descemos em uma coluna, o raio atómico aumenta, enquanto a carga nuclear efectiva varia pouco. Portanto, a atracção entre o núcleo e os electrões diminui, provocando diminuição na energia de ionização.

As irregularidades dentro de um dado período são um pouco sutis, mas são explicadas facilmente. Por exemplo, a diminuição na energia de ionização do berílio ([He]$2s^2$) ao boro ([He] $2s^2 2p^1$) ocorre porque os electrões no orbital preenchido 2s são mais eficientes em blindar os electrões no subnível 2p do que são em se blindarem. Essa é essencialmente a mesma razão pela qual os orbitais 2p de átomos polielectrónicos apresentam energia mais alta que o 2s. A diminuição na energia de ionização quando passamos do nitrogénio ([He]$2s^2 2p^3$) para o oxigénio ([He]$2s^2 2p^4$) é relativa à repulsão dos electrões emparelhados na configuração p^4. (lembre-se de que, de acordo com a regra de Hund, cada electrão na configuração p^3 localiza-se em diferentes orbitais p).

Configurações electrónicas de iões

Quando electrões são removidos de um átomo para formar um catião, eles são sempre removidos primeiro do orbital com o maior número quântico principal disponível, *n*. Por exemplo, quando um electrão é removido de um átomo de lítio ($1s^2 2s^1$), é o electrão $2s^1$ que é removido:

$$Li\ (1s^2 2s^1) \Rightarrow Li^+\ (1s^2)$$

Da mesma forma, quando dois electrões são removidos do Fe ($[Ar]3d^6 4s^2$), eles são os electrões $4s^2$:

$$Fe\ ([Ar]3d^6 4s^2) \Rightarrow Fe^{2+}\ ([Ar]3d^6)$$

Se um electrão adicional é removido, formando Fe^{3+}, ele virá de um orbital 3d porque todos os orbitais com n = 4 estão vazios:

$$Fe^{2+}\ ([Ar]3d^6) \Rightarrow Fe^{3+}\ ([Ar]3d^5)$$

Pode parecer estranho que os electrões 4s sejam removidos antes dos electrões 3d na formação de catiões de metais de transição. Afinal, quando escrevemos as configurações electrónicas, os electrões 4s são adicionais antes dos electrões 3d. entretanto, ao escrever as configurações electrónicas para os átomos, estamos utilizando um processo imaginário no qual passamos pela tabela periódica de um elemento para outro. Ao fazer isso, não estamos apenas adicionando um electrão, mas também um protão ao núcleo, para que a identidade do elemento mude. Na ionização não revertemos esse processo porque os electrões, mas não os protões, são removidos.

Quando os electrões são adicionados a um átomo para formar um anião, eles são adicionados a um orbital vazio ou parcialmente preenchido com os mais baixos valores de *n* disponíveis. Por exemplo, quando um electrão é adicionado a um átomo de flúor para formar um ião F^-, o electrão entra em uma vaga remanescente no subnível 2p.

$$F\ (1s^2 2s^2 2p^5) \Rightarrow F^-\ (1s^2 2s^2 2p^6)$$

1.1.4. AFINIDADES ELECTRÓNICAS

A energia de ionização mede a energia associada com a remoção de electrões de um átomo para formar iões carregados positivamente. Por exemplo, a primeira energia de ionização do $Cl_{(g)}$, 1.251 kj/ mol, é a variação de energia associada com o seguinte processo:

Energia de ionização: $Cl_{(g)} \longrightarrow Cl^+_{(g)} + e^-$ ΔE = 1.251 kj/ mol

O valor positivo da energia de ionização significa que a energia deve ser fornecida ao átomo para que o electrão seja removido.

Alem disso, muitos átomos podem ganhar electrões para formar iões carregados negativamente. A variação de energia que ocorre quando um electrão é adicionado a um

átomo gasoso chama-se **afinidade electrónica** porque ela mede a atracção, ou *afinidade*, de um átomo pelo electrão adicionado. Para muitos átomos, a energia é liberada quando um electrão é adicionado. Por exemplo, a adição de um electrão ao átomo de cloro é acompanhada por uma variação de energia de -349 kj/ mol, o sinal negativo indicando que a energia é liberada durante o processo. Consequentemente, dizemos que a afinidade electrónica do Cl é -349 kj/ mol:

Afinidade electrónica: $Cl_{(g)} + e^- \longrightarrow Cl^-_{(g)}$ ΔE = -349 kj/ mol

$[Ne]3s^2 3p^6$ $[Ne]3s^2 3p^6 4s^1$

É importante entender as diferenças entre energia de ionização e afinidade electrónica: a energia de ionização mede a facilidade com que um átomo *perde* um electrão, enquanto a afinidade electrónica mede a facilidade com que um átomo *ganha* um electrão.

Quanto maior a atracção entre determinado átomo e um electrão adicionado, mais negativa será a afinidade electrónica do átomo. Para alguns elementos, como os gases nobres, a afinidade electrónica tem valor positivo, significando que o anião tem energia mais alta do que os átomos e electrões separados:

$$Ar_{(g)} + e^- \longrightarrow Ar^-_{(g)} \qquad \Delta E > 0$$

$[Ne]3s^2 3p^6$ $[Ne]3s^2 3p^6 4s^1$

Como $\Delta E > 0$, o ião Ar^- é instável e não se forma.

A figura 1.27 mostra as afinidades electrónicas para os elementos representativos dos primeiros cinco períodos da tabela periódica. A afinidade electrónica, geralmente, torna-se cada vez mais negativa à proporção que caminhamos em direcção aos halogéneos. Os halogéneos, que tem um electrão a menos para preencher completamente o subnível *p*, apresentam as afinidades electrónicas mais negativas. Ao ganhar um electrão, um átomo de halogéneo forma um ião negativo estável que tem a configuração de um gás nobre.

Entretanto, a adição de um electrão a um gás nobre necessitaria que esse electrão fosse colocado em um subnível de mais alta energia. Ocupar um subnível de mais alta energia é energeticamente muito desfavorável; assim, a afinidade electrónica é altamente positiva. As afinidades electrónicas do Be e do Mg são positivas pela mesma razão; o electrão adicionado estaria localizado em um subnível *p* anteriormente vazio que é de mais alta energia.

As afinidades electrónicas dos elementos do grupo 5A (N, P, As, Sb) são também interessantes. Uma vez que esses elementos tem subníveis *p* preenchidos pela metade, o electrão adicionado deve entrar em um orbital que já está ocupado, resultando em repulsões electrão – electrão maiores. Como resultado, esses elementos tem afinidades electrónicas que são ou positivas (N) ou menos negativas que as de seus vizinhos à esquerda (P, As, Sb).

As afinidades electrónicas não variam muito à medida que descemos um grupo. Por exemplo, considere as afinidades electrónicas dos halogéneos (figura 1.27). para o F, o electrão adicionado entra em um orbital 2p, para o cloro em um orbital 3p, para o Br em um orbital 4p, e assim por diante. Conforme passamos do F para o I, dessa forma

reduzindo as repulsões electrão – electrão. Uma atracção electrão – núcleo é, portanto, contrabalançada por menos repulsões electrão – electrão.

H −73							He >0
Li −60	Be >0	B −27	C −122	N >0	O −141	F −328	Ne >0
Na −53	Mg >0	Al −43	Si −134	P −72	S −200	Cl −349	Ar >0
K −48	Ca −2	Ga −30	Ge −119	As −78	Se −195	Br −325	Kr >0
Rb −47	Sr −5	In −30	Sn −107	Sb −103	Te −190	I −295	Xe >0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A

Figura 1.27

1.1.5. METAIS, NÃO-METAIS E METALÓIDES

Os conceitos de raios atómicos, energias de ionização e afinidade eletrónicas são propriedades de átomos individuais. Com excepção dos gases nobres, entretanto, nenhum dos elementos existe na natureza como átomo individual. Para se obter um entendimento mais amplo das propriedades dos elementos, devemos também examinar as tendências periódicas que envolvem conjuntos grandes de átomos.

Os elementos podem ser agrupados de modo mais amplo nas categorias de metais, não-metais e metalóides. Essa classificação é mostrada na figura 1.28. aproximadamente três quartos dos elementos são metais, situados na parte esquerda e no meio da tabela. Os não-metais estão localizados no canto direito superior, e os metalóides entre os metais e os não-metais. O hidrogénio, localizado no canto esquerdo superior, é um não-metal. Essa é a razão pela qual o hidrogénio é colocado à parte dos elementos do grupo 1A.

Quanto mais um elemento exibe as propriedades físicas e químicas de metais, maior seu **carácter metálico**. Similarmente, podemos falar de *carácter não-metalico* de um elemento. Como indicado na figura 1.28, o carácter metálico geralmente aumenta à proporção que descemos em uma coluna da tabela periódica e diminui à medida que vamos da esquerda para direita em um período.

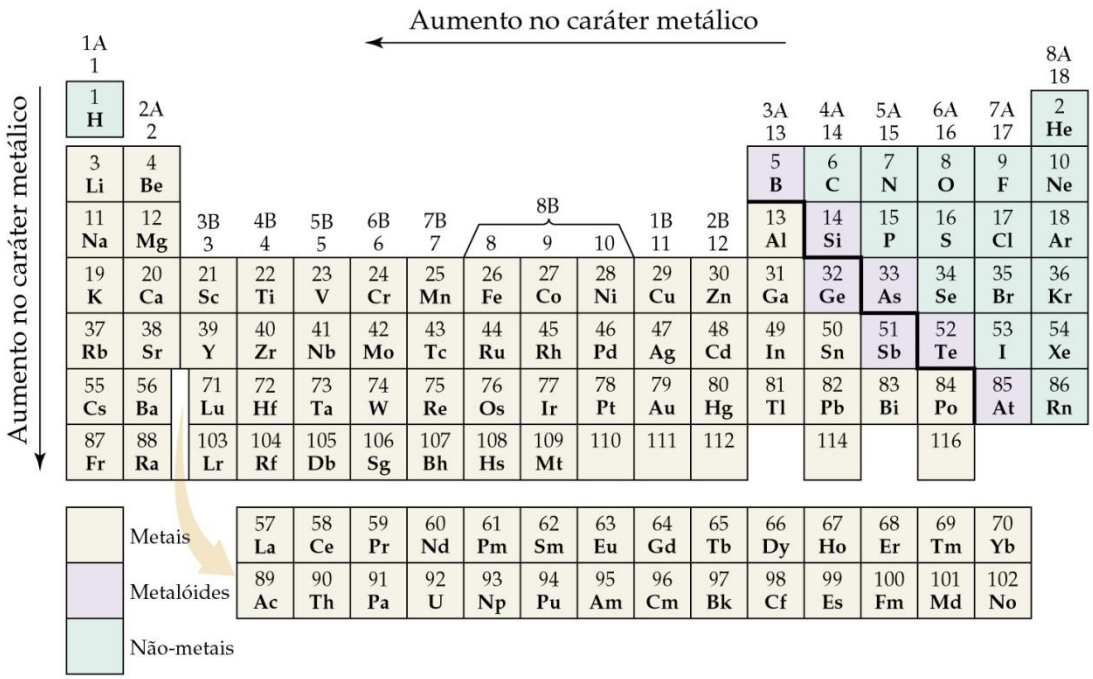


Figura 1.28

Metais

Muitos elementos metálicos exibem um lustro brilhoso característico de metais. Os metais conduzem calor e electricidade. São maleáveis (podem ser transformados em folhas finas) e dúcteis (podem ser transformados em fios). Todos são sólidos à temperatura ambiente com excepção do mercúrio (ponto de fusão = -39 °C), que é um líquido. Dois deles fundem-se a temperaturas um pouco acima da temperatura ambiente: césio a 28,4 °C e gálio a 29,8 °C. No outro extremo, muitos metais fundem a temperaturas muito mais altas. Por exemplo, o cromo funde a 1.900 °C.

Os *metais tendem a ter baixas energias de ionização e, portanto, tendem a formar iões positivos com relativa facilidade.* Como resultado, os metais são oxidados (perdem electrões) quando sofrem reacções químicas. A relativa facilidade de oxidação dos metais comuns foi discutida anteriormente. Como observamos na ocasião, muitos metais são oxidados por uma variedade de substancia comuns, incluindo O_2 e ácidos.

A figura 1.29 mostra as cargas de alguns iões comuns. As cargas dos metais alcalinos são sempre 1+ e as dos metais alcalinos terrosos, sempre 2+ em seus compostos. Para cada um desses grupos, os electrões *s* mais externos são facilmente perdidos, gerando uma configuração electrónica de gás nobre. As cargas dos iões de metais de transição não seguem um padrão óbvio. Muitos iões de metais de transição tem cargas 2+, mas 1+ e 3+ são também encontradas. Um dos aspectos característicos dos metais de transição é que eles podem formar mais de um ião positivo. Por exemplo, o ferro pode ser 2+ em alguns compostos e 3+ em outros.

Os compostos de metais e não-metais tendem a ser substâncias iónicas. Por exemplo, muitos óxidos metálicos e haletos metálicos são sólidos iónicos. Para ilustrar, a reacção entre o níquel metálico e o oxigénio produz óxido de níquel, um sólido iónico contendo iões Ni^{2+} e O^{2-}:

$$2Ni_{(s)} + O_{2\,(g)} \longrightarrow 2NiO_{(s)}$$

Os óxidos são particularmente importantes devido à grande abundância de oxigénio em nosso ambiente.

Muitos óxidos metálicos são básicos. Os que se dissolvem em agua reagem para formar hidróxidos, como nos seguintes exemplos:

Oxido metálico + agua ⟶ hidróxido metálico

$$Na_2O_{(s)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow 2NaOH_{(aq)}$$

$$CaO_{(s)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow Ca(OH)_{2(aq)}$$

A basicidade dos óxidos metálicos deve-se ao ião oxido, que reage com água de acordo com as seguintes reacções iónicas simplificadas:

$$O^{2-}_{(aq)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow 2OH^-_{(aq)}$$

Os óxidos metálicos demonstraram também suas basicidades reagindo com ácidos para formar sais e agua.

Oxido metálico + acido ⟶ sal + agua

$$NiO_{(s)} + 2HCl_{(aq)} \longrightarrow NiCl_{2(aq)} + H_2O$$

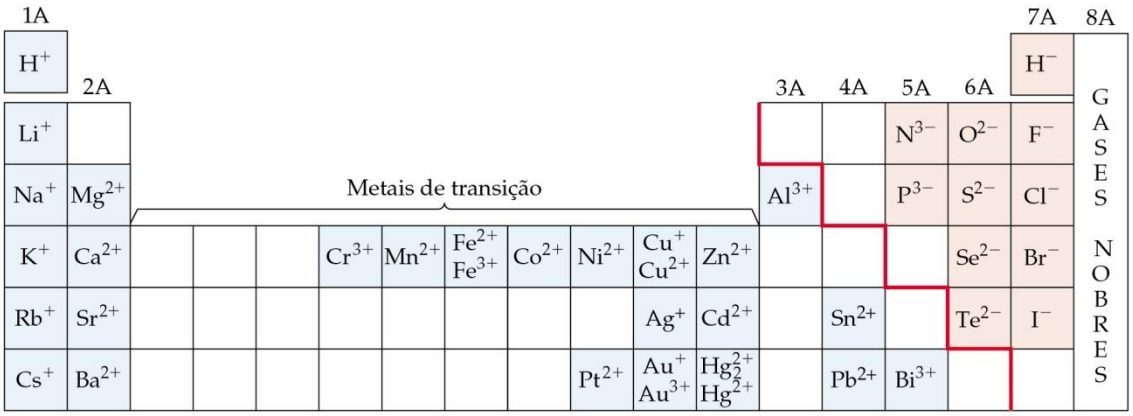


Figura 1.29

Não-metais

Os não-metais variam muito na aparência. Eles não são brilhantes e, geralmente, são pobres condutores de calor e electricidade. O ponto de fusão é frequentemente mais baixo que o dos metais (apesar de o diamante, uma forma do carbono, fundir-se a 3.570 °C). Sete não-metais existem sob condições ordinárias como moléculas diatómicas. Cinco deles são gases (H_2, N_2, O_2, F_2 e Cl_2), um é um liquido (Br_2) e um é um sólido volátil (I_2). Os outros não-metais são sólidos que podem ser duros como o diamante ou maleáveis como o enxofre.

Por causa de suas afinidades electrónicas, os não-metais tendem a ganhar electrões quando reagem com metais. Por exemplo, a reacção do alumínio com o bromo produz

brometo de alumínio, um composto iónico contendo o ião alumínio, Al^{3+}, e o ião brometo, Br^-:

$$2Al_{(s)} + 3Br_{2(l)} \longrightarrow 2AlBr_{3(s)}$$

Normalmente um não-metal ganhara electrões suficientes para preencher completamente seu subnível *p* mais externo, fornecendo a configuração electrónica de um gás nobre. Por exemplo, o átomo de bromo ganha um electrão para preencher seu subnível 4p:

$$Br\ ([Ar]4s^2 3d^{10} 4p^5) \Rightarrow Br^-\ ([Ar]4s^2 3d^{10} 4p^6)$$

Os *compostos constituídos unicamente de não-metais são substancias moleculares.* Por exemplo, óxidos, haletos e hidretos de não-metais são substancias moleculares que tendem a ser gases, líquidos ou sólidos de baixo ponto de fusão à temperatura ambiente.

Muitos óxidos não-metalicos são ácidos; os que se dissolvem em agua reagem para formar ácidos, como nos seguintes exemplos:

Óxidos não-metalicos + água ⟶ ácido

$$CO_{2(g)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow H_2CO_{3(aq)}$$

$$P_4O_{10(s)} + 6H_2O_{(l)} \longrightarrow 4H_3PO_{4(aq)}$$

A reacção de dióxido de carbono com água responde pela acidez da água carbonatada e, ate certo ponto, da água da chuva. Como o enxofre está no óleo e no carvão, a combustão desses combustíveis comuns produz dióxido e trióxido de enxofre. Essas substâncias dissolvem-se em água para produzir *chuva ácida*, um dos maiores problemas da poluição em muitas partes do mundo. Como os ácidos, muitos óxidos não-metalicos dissolvem-se em soluções básicas para formar sais:

Óxidos não-metalicos + base ⟶ sal + água

$$CO_{2(g)} + 2NaOH_{(aq)} \longrightarrow Na_2CO_{3(aq)} + H_2O_{(l)}$$

Metalóides

Os metalóides tem propriedades intermediárias entre as dos metais e as dos não-metais. Eles podem ter *algumas* propriedades metálicas características, mas faltam outras. Por exemplo, o silício *parece* um metal, mas é quebradiço em vez de maleável e pior condutor de calor e electricidade que os metais são. Vários dos metalóides, mais claramente o *silício*, são semicondutores eléctricos e são os principais elementos usados na fabricação de circuitos integrados e chips de computador.

1.1.6. TENDÊNCIAS DE GRUPO PARA OS METAIS ACTIVOS

Grupo 1A: os metais alcalinos

Os metais alcalinos são sólidos metálicos maleáveis. Todos tem propriedades metálicas características, como brilho metálico prateado e altas condutividades térmicas e eléctricas. O nome *alcalino* deriva de uma palavra árabe que significa ‘cinzas’. Muitos

compostos de sódio e potássio, dois metais alcalinos, foram isolados de cinzas de madeira por químicos antigos.

O sódio e o potássio estão entre os mais abundantes elementos na crosta terrestre, na água do mar e nos sistemas biológicos. Todos nós temos iões sódio no organismo. Entretanto, se ingerimos muito sódio, ele aumenta a pressão sanguínea. O potássio também é predominante no organismo; uma pessoa de 140 libras de massa contem aproximadamente 130 g de potássio, como ião K^+ nos fluidos intracelulares. As plantas necessitam de potássio para crescer e se desenvolver.

Os elementos tem baixas densidades e baixos pontos de fusão. Essas propriedades variam de maneira razoavelmente regular com o aumento do número atómico. Para cada período da tabela periódica, os metais alcalinos tem menor valor de I_1, que reflecte a relativa facilidade com a qual seus electrões *s* mais externos podem ser removidos. Como resultado, os metais alcalinos são todos muito reactivos, perdendo rapidamente um electrão para formar iões com carga 1+.

Os metais alcalinos existem na natureza apenas como compostos. Os metais combinam-se directamente com muitos não-metais. Por exemplo, eles reagem com o hidrogénio para formar hidretos e com o enxofre para formar sulfetos:

$$2M_{(s)} + H_{2(g)} \longrightarrow 2MH_{(s)}$$

$$2M_{(s)} + S_{(s)} \longrightarrow M_2S_{(s)}$$

(O símbolo M nas equações anteriores representa qualquer dos metais alcalinos). Nos hidretos de metais alcalinos (LiH, NaH etc.), o hidrogénio está presente, H^+, formado quando um átomo de hidrogénio perde seu electrão.

Os metais alcalinos reagem violentamente com água, produzindo gás hidrogénio e soluções de hidróxidos de metais alcalinos:

$$2M_{(s)} + 2H_2O_{(l)} \longrightarrow 2MOH_{(aq)} + H_{2(g)}$$

Essas reacções são muito exotérmicas. Em muitos casos geram calor suficiente para incendiar o H_2, produzindo fogo ou explosão. Essa reacção é muito mais violenta para os membros mais pesados do grupo, estando de acordo com as menores capacidades em manter o único electrão de valência.

As reacções entre os metais alcalinos e o oxigénio são complexas. O oxigénio normalmente reage com metais para formar óxidos metálicos, que contem o ião O^{2-}. De facto, o lítio reage dessa maneira para formar o oxido de lítio, Li_2O:

$$4Li_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow 2Li_2O_{(s)}$$

Todos os outros metais alcalinos, entretanto, reagem com o oxigénio para formar peróxidos metálicos, que contem ião O_2^{2-}. Por exemplo, o sódio forma peróxido de sódio, Na_2O_2:

$$2Na_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow Na_2O_{2(s)}$$

Surpreendentemente, o potássio, o rubídio e o césio formam também compostos MO_2 que contem O_2^-, chamados iões superóxidos. Por exemplo, o potássio forma o superóxido de potássio, KO_2:

$$K_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow KO_{2(S)}$$

Apesar de os iões dos metais alcalinos serem incolores, eles emitem cores características quando colocados em uma chama (figura 1.30). Os iões dos metais alcalinos são reduzidos a átomos metálicos gasosos na região central da chama. A alta temperatura da chama excita electronicamente o electrão de valência. O átomo emite energia na forma de luz visível quando retorna ao seu estado fundamental. O sódio produz uma chama amarela por causa da emissão a 589 nm. Esse comprimento de onda é produzido quando o electrão de valência excitado volta do subnível 3p para o subnível de mais baixa energia, 3s. a emissão amarela característica do sódio é a base para as lâmpadas de vapor de sódio.

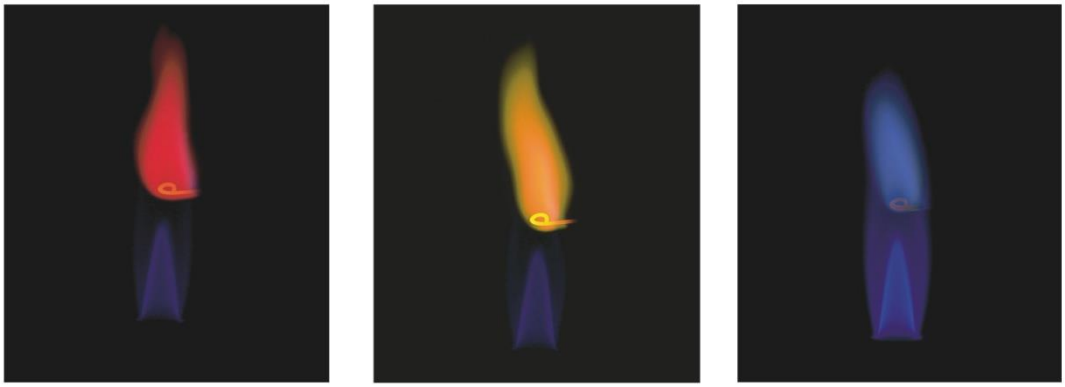


Figura 1.30

Grupo 2A: os metais alcalinos terrosos

Como os metais alcalinos, os elementos do grupo 2A são todos sólidos com propriedades metálicas típicas, algumas das quais estão relacionadas na tabela abaixo. Comparados com os metais alcalinos, os metais alcalinos terrosos são mais duros e mais densos, fundindo-se a temperaturas mais altas.

As primeiras energias de ionização dos metais alcalinos terrosos são baixas, mas não tão baixas como as dos metais alcalinos. Consequentemente, os metais alcalinos terrosos são menos reactivos que seus vizinhos, os metais alcalinos. A facilidade com que os elementos perdem electrões diminui à medida que vamos da esquerda para direita na tabela periódica e aumenta quando descemos um grupo. Portanto, o berílio e o magnésio, os membros mais leves do grupo, são os menos reactivos.

A tendência ao aumento da reactividade em um grupo é mostrada pelo comportamento dos elementos mediante agua. O berílio não reage com agua ou vapor de agua, mesmo quando muito aquecidos. O magnésio não reage com agua liquida, mas reage com vapor para formar oxido de magnésio e hidrogénio:

$$Mg_{(s)} + H_2O_{(g)} \longrightarrow MgO_{(s)} + H_{2(g)}$$

TABELA 7.5 Algumas propriedades dos metais alcalinos terrosos

Elemento	Configuração eletrônica	Ponto de fusão (°C)	Densidade (g/cm³)	Raio atômico (Å)	I_1 (kJ/mol)
Berílio	$[He]2s^2$	1.287	1,85	0,90	899
Magnésio	$[Ne]3s^2$	650	1,74	1,30	738
Cálcio	$[Ar]4s^2$	842	1,54	1,74	590
Estrôncio	$[Kr]5s^2$	777	2.63	1,92	549
Bário	$[Xe]6s^2$	727	3,51	2,15	503

O cálcio e os elementos abaixo dele reagem rapidamente com água à temperatura ambiente (apesar de mais lentamente que os metais alcalinos adjacentes a eles na tabela periódica):

$$Ca_{(s)} + 2H_2O_{(l)} \longrightarrow Ca(OH)_{2(aq)} + H_{2(g)}$$

As duas reacções anteriores ilustram o padrão dominante na reactividade dos metais alcalinos terrosos – a tendência de perder seus dois electrões *s* mais externos e formar iões 2+. Por exemplo, o magnésio reage com o cloro à temperatura ambiente para formar $MgCl_2$ e se queima com um brilho ofuscante no ar para produzir MgO:

$$Mg_{(s)} + Cl_{2(g)} \longrightarrow MgCl_{2(s)}$$

$$2Mg_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow 2MgO_{(s)}$$

Na presença de O_2, o magnésio metálico é protegido dos produtos químicos por uma camada superficial fina de MgO insolúvel na água. Assim, ainda que esteja alto na serie de actividade, o Mg pode ser incorporado em ligas estruturais leves usadas, por exemplo, em rodas de automóveis. Os metais alcalinos terrosos mais pesados (Ca, Sr e Ba) são ainda mais reactivos que o magnésio diante de não-metais.

Os iões dos metais alcalinos terrosos mais pesados fornecem cores características quando fortemente aquecidos em uma chama. A chama colorida produzida pelo cálcio é cor de tijolo; a do estrôncio; carmesim, e a do bário, verde. Os sais de estrôncio produzem a cor vermelho-brilhante em fogos-de-artifício e os sais de bário produzem a cor verde.

Tanto o magnésio quanto o cálcio são essenciais aos organismos vivos. O cálcio é importante principalmente para o crescimento e a manutenção de ossos e dentes. Nos humanos, 99% do cálcio é encontrado no sistema esquelético.

1.1.7. TENDÊNCIAS DO GRUPO PARA ALGUNS NÃO-METAIS

Hidrogénio

O hidrogénio, o primeiro elemento da tabela periódica, tem configuração electrónica $1s^1$ e é, geralmente, colocado acima dos metais alcalinos. Entretanto, ele não pertence verdadeiramente a nenhum grupo em particular. Diferentemente dos metais alcalinos, o hidrogénio é um não-metal encontrado na natureza como gás diatómico incolor, $H_{2(g)}$, sob muitas condições. Todavia, o hidrogénio pode ser metálico a pressões extremamente altas. Acredita-se, por exemplo, que os interiores dos planetas Júpiter e Saturno consistam em um cerne rochoso rodeado por uma camada grossa de hidrogénio metálico. O hidrogénio metálico é, por sua vez, rodeado por uma camada de hidrogénio molecular com o hidrogénio gasoso aparecendo acima dele junto à superfície.

Devido à ausência completa de blindagem nuclear do seu único electrão, a energia de ionização do hidrogénio, 1.312 kj/ mol, é marcadamente mais alta que as dos metais alcalinos. Na realidade, é comparável ao valores de I_1 de outros não-metais, como o oxigénio e o cloro. Como resultado, o hidrogénio tem menor tendência a perder electrões que os metais alcalinos. Enquanto os metais alcalinos facilmente perdem seus electrões com não-metais, formando compostos moleculares. As reacções entre hidrogénio e não-metais podem ser bastante exotérmicas, como evidenciando pela reacção de combustão entre o hidrogénio e o oxigénio para formar água:

$$2H_{2(g)} + O_{2(g)} \longrightarrow 2H_2O_{(l)} \qquad \Delta H° = -571{,}7 \text{ kJ}$$

Vimos também que o hidrogénio reage com metais activos para formar hidretos metálicos sólidos, que contem o ião hidreto, H^-. O facto de o hidrogénio poder ganhar um electrão ilustra ainda mais o facto de ele não ser um membro verdadeiro da família dos metais alcalinos. Na verdade, isso sugere uma pequena semelhança entre o hidrogénio e os halogéneos.

Apesar da tendência di hidrogénio em formar ligações covalentes e da sua habilidade em ganhar electrões, o hidrogénio pode perder, e de facto perde, electrão para formar um catião. Na verdade, a química em solução do hidrogénio é dominada pelo ião $H^+_{(aq)}$.

Grupo 6A: o grupo do oxigénio

À proporção que descemos no grupo 6A, existe uma mudança de metálico para não-metalico. O oxigénio, o enxofre e o selénio são não-metais típicos. O telúrio tem algumas propriedades metálicas e é classificado como metalóide. O polónio, radioactivo e bastante raro, é um metal. O oxigénio é um gás incolor à temperatura ambiente; todos os outros são sólidos. Algumas propriedades físicas dos elementos do grupo 6A são dadas na tabela abaixo.

O oxigénio é encontrado em duas formas moleculares, O_2 e O_3. A forma O_2 é mais comum. As pessoas geralmente se referem a O_2 como 'oxigénio', apesar de o nome *dioxigénio* ser mais representativo. A forma O_3 é chamada **ozónio**. As duas formas do oxigénio são exemplos de *alotropos*. Os alotropos são diferentes formas do mesmo elemento no mesmo estado. (Nesse caso, as duas formas são gases). Aproximadamente 21% do ar seco compõe-se de moléculas de O_2. O ozónio, que é tóxico e tem cheiro pungente, está presente em quantidades muito pequenas na parte mais alta da atmosfera

e no ar poluído. É também formado a partir do O_2 em descargas eléctricas, como relâmpagos:

$$3O_{2(g)} \longrightarrow 2O_{3(g)} \qquad \Delta H° = 284{,}6 \text{ Kj}$$

Essa reacção é endotérmica, de forma que O_3 é menos estável que O_2.
O oxigénio apresenta grande tendência em atrair electrões de outros elementos (para *oxida-los*). O oxigénio nas combinações com os metais está quase sempre presente como o ião oxido, O^{2-}. Esse ião tem configuração de gás nobre e é particularmente estável. A formação de óxidos não-metalicos é também muito frequentemente exotérmica e, portanto, energeticamente favorável.

Na nossa abordagem sobre os metais alcalinos observamos dois aniões menos comuns do oxigénio, a saber, os iões peróxidos (O_2^{2-}) e o superóxido (O_2^{-}). Os compostos desses iões normalmente reagem com eles mesmos para produzir um oxido e O_2. Por exemplo, peróxido de hidrogénio aquoso, H_2O_2, decompõe-se lentamente em agua e O_2 à temperatura ambiente:

$$2H_2O_{2(aq)} \longrightarrow 2H_2O_{(l)} + O_{2(g)} \qquad \Delta H° = -\ 196{,}1 \text{ kJ}$$

TABELA 7.6 Algumas propriedades dos elementos do grupo 6A

Elemento	Configuração eletrônica	Ponto de fusão (°C)	Densidade	Raio atômico (Å)	I_1 (kJ/mol)
Oxigênio	[He] $2s^2 2p^4$	–218	1,43 g/L	0,73	1.314
Enxofre	[Ne]$3s^2 3p^4$	115	1,96 g/cm^3	1,02	1.000
Selênio	[Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^4$	221	4,82 g/cm^3	1,16	941
Telúrio	[Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^4$	450	6,24 g/cm^3	1,35	869
Polônio	[Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 5p^4$	254	9,2 g/cm^3	1,9	812

Por essa razão as garrafas de peróxidos de hidrogénio são fechadas com tampas que facilitam a liberação do $O_{2(g)}$ produzido, antes que a pressão interna torne-se muito alta.
Depois do oxigénio, o elemento mais importante do grupo 6A é o enxofre. O enxofre também existe em várias formas alotrópicas; a mais comum e mais estável delas é o sólido amarelo com fórmula molecular S_8. Essa molécula constitui-se de um anel de oito membros de átomos de enxofre. Ainda que o enxofre sólido seja formado por anéis S_8, geralmente escrevemos apenas S(s) nas equações químicas para simplificar os coeficientes.

De forma análoga ao oxigénio, o enxofre tem tendência em ganhar electrões de outros elementos para formar sulfetos, os quais contem o ião S^{2-}. Na realidade, a maior parte do enxofre na natureza é encontrada na forma de sulfetos metálicos. Uma vez que o enxofre está abaixo do oxigénio na tabela periódica, a tendência para formar aniões sulfeto não é tão grande quanto a tendência do oxigénio em formar iões óxido. Como resultado, a química do enxofre é mais complexa que a do oxigénio. Na realidade, o enxofre e seus compostos (incluindo os do carvão e do oxigénio) podem ser queimados em presença de oxigénio. O produto principal é o dióxido de enxofre, um poluente importante.

$$S_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow SO_{2(g)}$$

Grupo 7A: os halogéneos

Os elementos do grupo 7A são conhecidos como **halogéneos**, da palavra grega *halos* e *gennao*, que significa 'formadores de sal'. Algumas das propriedades desses elementos são dadas na tabela abaixo. O astato, extremamente raro e radioactivo, foi omitido, porque muitas de suas propriedades ainda não são conhecidas.

Ao contrário dos elementos do grupo 6A, todos os halogéneos são tipicamente não-metais. Seus pontos de fusão e ebulição aumentam com o aumento do número atómico. O flúor e o cloro são gases à temperatura ambiente, o bromo é um liquido e o iodo, um sólido. Cada elemento consiste em moléculas diatómicas: F_2, Cl_2, Br_2 e I_2. O flúor é um gás amarelo pálido; o cloro é um gás verde-amarelo; o bromo é um liquido marrom-avermelhado e forma rapidamente um vapor também marrom-avermelhado; e o iodo sólido é preto-acinzentado e forma rapidamente um vapor violeta.

Os halogéneos tem afinidades electrónicas altamente negativas. Portanto, não é surpreendente que a química dos halogéneos seja dominada pela tendência em ganhar electrões de outros elementos para formar iões haletos, X^-. (Em muitas equações o X é usado para indicar qualquer um dos halogéneos). O flúor e o cloro são mais reactivos que o bromo e o iodo. Na realidade, o flúor remove electrões de quase todas as substancias com as quais entra em contacto, incluindo a agua, geralmente fazendo-se de maneira muito exotérmica, como nos exemplos:

$$2H_2O_{(l)} + 2F_{2(g)} \longrightarrow 4HF_{(aq)} + O_{2(g)} \qquad \Delta H° = -758{,}9 \text{ kJ}$$

$$SiO_{2(s)} + 2F_{2(g)} \longrightarrow SiF_{4(g)} + O_{2(g)} \qquad \Delta H° = -704{,}0 \text{ kJ}$$

TABELA 7.7 Algumas propriedades dos halogênios

Elemento	Configuração eletrônica	Ponto de fusão (°C)	Densidade	Raio atômico (Å)	I_1 (kJ/mol)
Flúor	$[He]2s^2 2p^5$	–220	1,69 g/L	0,71	1.681
Cloro	$[Ne]3s^2 3p^5$	–102	3,21 g/L	0,99	1.251
Bromo	$[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$	–7,3	3,12 g/cm^3	1,14	1.140
Iodo	$[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^5$	114	4,93 g/cm^3	1,33	1.008

Como resultado, o gás flúor é difícil e perigoso de se usar no laboratório, necessitando de aparelhos especiais.

Dos halogéneos, o cloro é o mais usado industrialmente. Em 2001 sua produção total foi de 12,3 bilhões de quilogramas, tornando-se o oitavo produto químico mais produzido nos Estados Unidos. Ao contrário do flúor, o cloro reage lentamente com água para formar soluções aquosas relativamente estáveis de HCl e HOCl (acido hipocloroso):

$$Cl_{2(g)} + H_2O_{(l)} \longrightarrow HCl_{(aq)} + HOCl_{(aq)}$$

O cloro é normalmente adicionado à agua potável e a piscina, onde o $HOCl_{(aq)}$ formado serve como desinfectante.

Os halogéneos reagem directamente com a maioria dos metais para formar haletos iónicos. Os halogéneos reagem também com o hidrogénio para formar haletos de hidrogénio gasosos:

$$H_{2(g)} + X_2 \longrightarrow 2HX_{(g)}$$

Esses compostos são todos muito solúveis em água e dissolvem-se para formar os ácidos halídricos. $HCl_{(aq)}$, $HBr_{(aq)}$ e $HI_{(aq)}$ são ácidos fortes, enquanto o $HF_{(aq)}$ é um acido fraco.

Grupo 8A: os gases nobres

Os elementos do grupo 8A, conhecidos como **gases nobres**, são todos não-metais, gases à temperatura ambiente. Eles são todos *monoatómicos* (isto é, consistem de átomos únicos em vez de moléculas). Algumas propriedades físicas dos gases nobres estão relacionadas na tabela abaixo. A alta radioactividade do Rn tem inibido o estudo de sua química.

Os gases nobres têm os subníveis *s* e *p* completamente preenchidos. Todos os elementos do grupo 8A tem energias de ionização muito grandes e vemos o decréscimo previsto conforme descemos no grupo. Uma vez que os gases nobres possuem configurações electrónicas tão estáveis, eles são excepcionalmente não-reactivos. Na realidade, ate o inicio dos anos 60 os elementos eram chamados *gases inertes* porque se pensava que eles eram incapazes de formar compostos químicos. Em 1962 Neil Bartlett, na Universidade de British Columbia, inferiu que a energia de ionização do Xe seria baixa o suficiente para permiti-lo formar compostos. Para que isso acontecesse, o Xe teria de reagir com uma substancia com habilidade extremamente alta para remover electrões de outras substâncias, como o flúor. Bartlett sintetizou o primeiro composto de gás nobre combinando o Xe com o composto contendo flúor, PtF_6. O xenónio reage também directamente com $F_{2(g)}$ para formar os compostos moleculares XeF_2, XeF_4 e XeF_6. O criptónio tem valor de I_1 mais alto que o xenónio, sendo, portanto, menos reactivo. Na realidade, apenas um único composto estável de criptónio é conhecido, KrF_2. Em 2000, cientistas finlandeses anunciaram a obtenção da molécula HarF, estável apenas a baixas temperaturas.

TABELA 7.8 Algumas propriedades dos gases nobres

Elemento	Configuração eletrônica	Ponto de ebulição (K)	Densidade (g/L)	Raio atômico* (Å)	I_1 (kJ/mol)
Hélio	$1s^2$	4,2	0,18	0,32	2.372
Neônio	$[He]2s^2p^6$	27,1	0,90	0,69	2.081
Argônio	$[Ne]3s^23p^6$	87,3	1,78	0,97	1.521
Criptônio	$[Ar]3d^{10}4s^24p^6$	120	3,75	1,10	1.351
Xenônio	$[Kr]4d^{10}5s^25p^6$	165	5,90	1,30	1.170
Radônio	$[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$	211	9,73	—	1.037

* Apenas os gases nobres mais pesados formam compostos químicos. Assim, os raios atômicos para os gases nobres têm valores estimados.