

Resumo de Química

Leis ponderais

Lavoisier – **lei da conservação da massa**: “Em um sistema fechado, a massa total das substâncias antes da transformação é igual à massa total das substâncias após a transformação”.

Proust – **lei das proporções definidas**: “Independentemente da substância pura, ela é sempre formada pelos mesmos componentes químicos e na mesma proporção em massa”.

Dalton – **lei das proporções múltiplas**: “Quando dois elementos químicos formam vários compostos, fixando-se a massa de um dos elementos, as massas do outro variam numa proporção de números inteiros e, em geral, pequenos”.

Modelos atômicos

Modelo de Dalton:

- Modelo da “bola de bilhar”;
- **Átomos indestrutíveis e indivisíveis**;
- **Todos os átomos de um mesmo elemento são idênticos**;
- **Átomos de elementos diferentes possuem diferentes massas e propriedades**;
- Átomos elementos distintos se combinam sempre na mesma proporção para formar determinado composto químico;
- Átomos não são criados nem destruídos durante reações, mas são rearranjados;
- **Átomos de um determinado elemento não pode se converter em átomos de outro elemento**.

Modelo de Thomson:

- Modelo do “pudim de passas”;
- Experiência com raios catódicos;
- Descoberta do elétron (o átomo passa a ser divisível);
- **Núcleo composto por carga positiva distribuída uniformemente com elétrons incrustados**;
- Descoberta da relação carga/massa do elétron.

Modelo de Rutherford:

- Modelo “planetário”;
- Experimento de bombardeamento de uma folha de ouro com partículas alfa;
- Descoberta do próton;
- O átomo é composto por um grande vazio;
- O núcleo pequeno e denso composto por prótons e partículas desprovidas de carga;
- Elétrons orbitando o núcleo em órbitas **circulares** de diâmetros muito maiores do que o núcleo (eletrosfera);

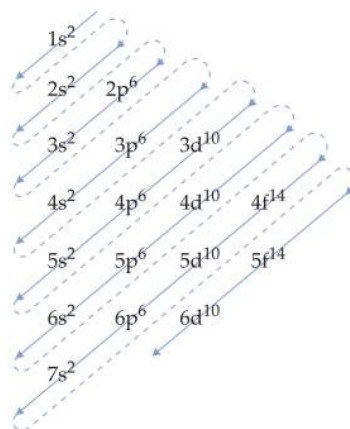
Modelo de Rutherford-Böhr

- As órbitas são **circulares** e possuem níveis de energia em ordem crescente;
- Os níveis são quantizados;
- Um elétron só passa para o próximo nível quando absorve um determinado *quantum* de energia (salto quântico);
- Quando passa para um nível superior atinge um estado instável (estado excitado);
- Quando retorna ao estado de origem libera um *quantum* de energia na forma de fóton;
- A energia do fóton é inversamente proporcional ao comprimento de onda da radiação (ou diretamente à frequência);
- A diferença de energia entre 2 níveis consecutivos diminui quanto mais distantes do núcleo os níveis estiverem;
- A espectroscopia de um átomo está relacionada à radiação emitida pelos elétrons quando transitam entre os níveis.

Modelo atual (de Broglie, Heisenberg e Schrödinger):

- Modelo quântico do átomo;
- Princípio da incerteza – é impossível determinar com precisão a posição de um átomo e sua velocidade;
- Princípio da dualidade partícula-onda – elétrons se comportam como partícula (possuem massa) e como onda (emitem radiação);
- Orbitais são regiões probabilísticas no espaço nas quais elétrons podem estar;
- Princípio da exclusão de Pauli: cada elétron de um átomo possui uma combinação única de 4 números quânticos.
- **Número quântico principal (n)**: está associado ao nível de energia do elétron e define o “**tamanho**” orbital (1, 2, 3, 4, 5, 6 e 7);
- **Número quântico secundário (ℓ)**: está associado ao subnível de energia e define o “**formato**” do orbital podendo ser s, p, d e f (0, 1, 2 e 3);

➤ Diagrama de Pauling:



- **Número quântico magnético (m)**: está associado às posições possíveis do elétron em relação ao núcleo e define a “**localização espacial**” do orbital:

- s: 0 (2 elétrons no máximo)
- p: -1, 0, 1 (6 elétrons no máximo);
- f: -2, -1, 0, 1, 2 (10 elétrons no máximo);
- d: -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 (14 elétrons no máximo).

- Diagrama de orbitais:

Subnível	Representações
s	□
p	□ □ □
d	□ □ □ □ □
f	□ □ □ □ □ □ □

- **Número quântico de spin (s)**: está associado ao sentido do campo magnético gerado pelo movimento do elétron (-1/2 e 1/2).

- Há no máximo dois elétrons por orbital;
- Regra de Hund (princípio da máxima multiplicidade): cada orbital de um mesmo subnível recebe um elétron com o mesmo *spin*, para que depois cada um desses orbitais serem preenchidos com elétrons de *spins* opostos.

- Exemplo: $_{26}\text{Fe}$

4s²	↑↓				
3d⁶	↑↓	↑	↑	↑	↑

Tabela periódica

Tabela periódica atual

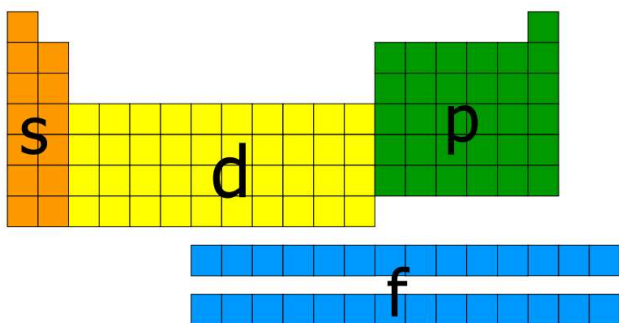
- Linhas (1-7): séries ou períodos;
- Colunas (1-18): grupos ou famílias;
- Organização dos elementos em linhas em função do número atômico crescente.

Propriedades físicas

- Metais: brilho característico, bons condutores de calor, geralmente sólidos, elevada condutividade elétrica, são dúcteis e maleáveis;
- Ametais: o contrário dos metais;
- Semimetais: características intermediárias;
- Gases nobres: altamente estáveis, possuem octeto completo (com exceção do hélio), pouco reativos.

Localização e configuração eletrônica

- Sempre fazer a distribuição eletrônica e colocar em ordem geométrica;
- Sempre o **nível de valência** equivale ao **período** correspondente;
- Subnível mais energético **s** (subgrupo A): o número de elétrons na camada de valência corresponde ao número arábico ou romano da coluna;
- Subnível mais energético **p** (subgrupo A): o número de elétrons na camada de valência corresponde à unidade do número arábico ou ao número romano da coluna correspondente;
- Ex: **6** elétrons na camada de valência correspondem à família **16** ou **VIA**.
- Subnível mais energético **d** (subgrupo B): soma-se o número de elétrons no subnível d com os da camada valência, esse número corresponderá ao número da coluna.
- O conjunto de todos os subgrupos A é chamado de elementos representativos, enquanto o conjunto dos subgrupos B é chamado de elementos ou metais de transição.



Classificação das famílias

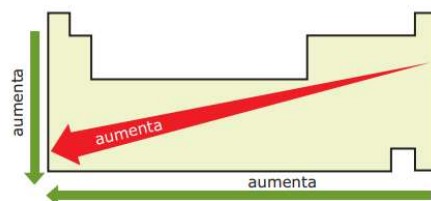
- 1 – metais alcalinos;
- 2 – metais alcalinoterrosos;
- 3 a 12 – metais de transição (dentro do qual estão contemplados os metais de transição interna: lantanídeos e actnídeos);
- 13 – família do boro;
- 14 – família do carbono;
- 15 – família do nitrogênio;
- 16 – calcogênios;
- 17 – halogênios;
- 18 – gases nobres.

Propriedades periódicas

- **Raio atômico**: “tamanho” do átomo.
- Aumenta com o número de níveis nas famílias, e diminui com o número atômico nos períodos (em função da maior interação eletrostática exercida pelo maior número de prótons);

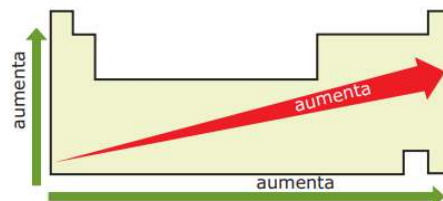
- Nas espécies isoeletrônicas será menor quanto maior for o número atômico;
- Para um mesmo elemento químico:

$$r_{\text{ânion}} > r_{\text{átomo neutro}} > r_{\text{cátion}}$$



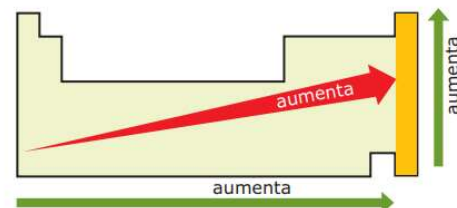
- **Energia (potencial) de ionização**: energia armazenada pelo átomo para ceder um elétron.

- Varia de maneira inversa ao raio atômico, pois quanto menor o raio, maior a energia necessária para retirar um elétron.



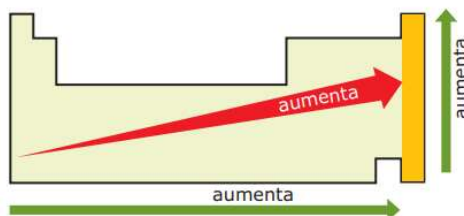
- **Afinidade eletrônica** (eletroafinidade): energia liberada pelo átomo para incorporar um elétron.

- Varia de maneira inversa ao raio atômico, pois quanto menor o raio, maior deve ser trabalho realizado pelo átomo para superar a força eletrostática para incorporar o elétron;
- Gases nobres possuem afinidade eletrônica pouco significativa.

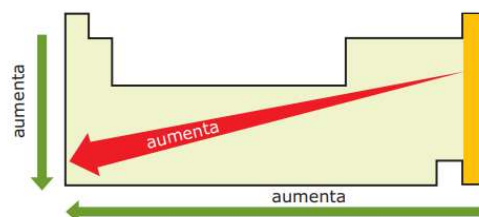


- **Eletronegatividade**: tendência relativa de um átomo a receber elétron.

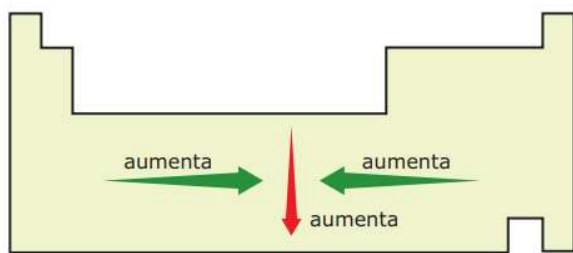
- De maneira geral, não metais, por estarem próximos ao octeto na camada de valência, possuem maior tendência do que metais;
- Segue a tendência da afinidade eletrônica e da energia de ionização, ou seja, é inversamente proporcional ao raio.
- Gases nobres por serem estáveis, possuem eletronegatividade pouco significativa.



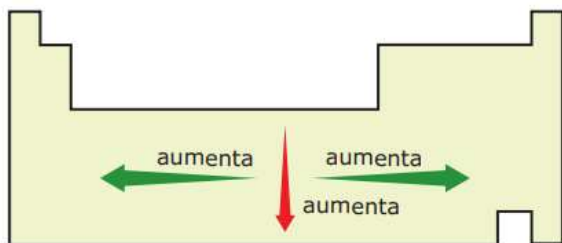
- **Eletropositividade** (caráter metálico): tendência inversa à da eletronegatividade.



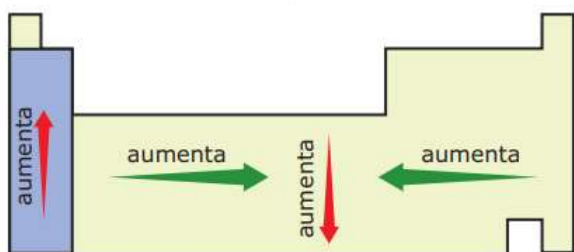
- **Densidade** (massa específica): relação entre massa e volume.



- **Volume atômico**: volume ocupado por 1 mol de átomos.



- **Pontos de fusão e ebulição**

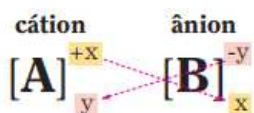


Ligações químicas

- União entre átomos resultante da interação eletrostática entre eles;
- Resulta em um abaixamento da energia em comparação com os átomos infinitamente separados;
- **Comprimento da ligação**: distância média de equilíbrio entre os núcleos. Em geral, quanto menor essa distância, maior a intensidade da ligação;
- **Regra do octeto**: tendência à dos átomos de alcançar a estabilidade com 8 elétrons na camada de valência, assumindo a configuração de um gás nobre (alguns elementos alcançam a estabilidade com 2);
- **Valência do átomo**: número de elétrons a serem recebidos ou cedidos (permanentemente ou por compartilhamento) para adquirirem estabilidade.
- Podem ser **iônicas**, **covalentes** ou **metálicas**.

Ligação iônica

- Ligação que ocorre com cessão de elétrons de um átomo para outro, quando os átomos participantes são:
 - Metal-ametal;
 - Metal-hidrogênio.
- A significativa diferença de eletronegatividade faz com que a um átomo incorpore um elétron do outro, formando íons, que se mantêm unidos pela interação eletrostática entre as cargas iônicas;
- A proporção entre os átomos da ligação será dada segundo a regra da “inversão das cargas”:



- A intensidade da ligação é proporcional às cargas dos íons e inversamente proporcional aos raios atômicos;

- Formam aglomerados de íons denominados arranjos ou estrutura cristalina;
- A estrutura cristalina resultante das ligações iônicas possuem como características:
 - São sólidos, duros e quebradiços em condições ambiente;
 - Apresentam elevados PF e PE;
 - Não conduzem eletricidade no estado sólido;
 - São bons condutores quando fundidos ou em solução aquosa.
- A energia liberada para a formação da ligação a partir da energia dos íons no estado gasoso, infinitamente separados, é denominada **entalpia de rede** ou **entalpia reticular**. Quanto maior, mais intensa a ligação iônica.

Ligação covalente

- Ligação que ocorre pelo compartilhamento de elétrons entre dois átomos. Se dá entre:
 - Ametal-ametal;
 - Ametal-hidrogênio;
 - Hidrogênio-hidrogênio.
- A pouca diferença entre as eletronegatividades dos átomos fará com que o elétron pertença simultaneamente aos orbitais dos dois átomos (interpenetração ou *overlap* de orbitais).
- O compartilhamento será realizado de modo que os átomos atinjam o número de elétrons que lhes conferem estabilidade (em regra, segundo a teoria do octeto);
- A energia liberada após o estabelecimento da ligação a partir dos átomos infinitamente separados é denominada **energia ou entalpia de ligação**;
- **Comprimento da ligação** é distância média de equilíbrio entre os dois átomos após a ligação ser estabelecida;
- Quanto menor o comprimento da ligação, maior a entalpia de ligação;
- Quanto menor os raios atômicos dos átomos envolvidos, menor o comprimento da ligação (e maior a entalpia de ligação);
- As ligações podem ser classificadas quanto:
 - À **ordem**: podendo ser **simples**, **dupla** ou **tripla**, dependendo do número de pares de elétrons compartilhados.
 - Ao **tipo**: sendo σ (s-s; s-p ou p-p), se a interpenetração de orbitais for longitudinal; ou π (p-p), se lateral (segundo a teoria da hibridização, há ainda outros tipos de ligação σ como s-sp; s-sp²; s-sp³; p-sp; sp-sp; etc.).
 - À **origem** do par eletrônico: **normais**, se houver compartilhamento mútuo, **dativas**, se unilateral;
 - A intensidade das ligações triplas > duplas > simples;
 - O tipo de ligação será, de acordo com a ordem:
 - Simples: **1 σ** ;
 - Dupla: **1 σ** e **1 π** ;
 - Tripla: **1 σ** e **2 π** .
 - Segundo a teoria da ligação de valência (TLV), as ligações se dão entre por sobreposição (*overlap*) de orbitais que possuam elétrons desemparelhados e de *spins* opostos;
 - A teoria da hibridização explica que átomos que não possuem elétrons desemparelhados (carbono, boro, berílio, ...) sofrem hibridização entre orbitais de valência antes da ligação, dando origem a orbitais híbridos, nos quais os elétrons se apresentam desemparelhados.

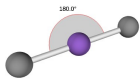
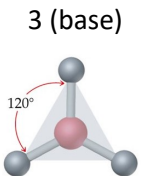

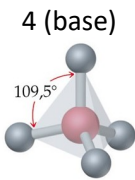
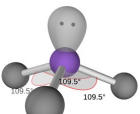
Ligação metálica

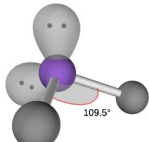
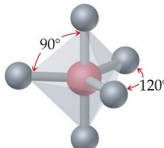
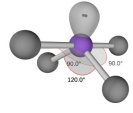
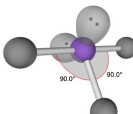
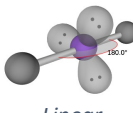
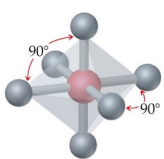
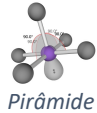
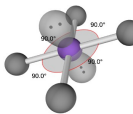
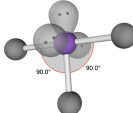
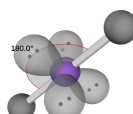
- Ligação que ocorre entre metais.
- Segundo a teoria do “mar de elétrons”, a baixa eletronegatividade dos metais faz com que os elétrons dos átomos metálicos tenham um caráter itinerante (elétrons livres), dando origem a uma rede cristalina que mantém unidos os cátions originados desses átomos;
- São características dos retículos cristalinos originados pelas ligações metálicas:
 - São geralmente sólidos em CNTP;
 - Brilho metálico;
 - Densidade alta;

- Altos PF e PE;
- Bons condutores elétricos e de calor;
- Resistência à tração;
- Maleabilidade;
- Ductibilidade.

Geometria molecular

- Justificada pela teoria da máxima repulsão dos pares eletrônicos de valência (RPEV);
 - A geometria será dada de maneira que a repulsão entre as nuvens eletrônicas no espaço seja máxima;
 - São consideradas nuvens eletrônicas (cada item é considerado apenas como 1 nuvem, e quando ligante, independe do tipo da ligação):
 - Pares eletrônicos não ligantes (1 nuvem cada par);
 - Ligações covalentes simples;
 - Ligações covalentes duplas;
 - Ligações covalentes triplas.
- Para determinar a geometria base, seguem-se os seguintes passos:
- 1) Representar a molécula segundo a fórmula de Lewis;
 - 2) Determinar o número de nuvens eletrônicas ao redor do átomo central;
 - 3) Determinar a geometria base com base no número de nuvens eletrônicas;
 - 4) Excluir os elementos não ligantes da geometria, sem alterar a estrutura restante;
 - 5) Determinar a geometria molecular com base na estrutura obtida no passo anterior.

Nº de nuvens eletrônicas	Nº de átomos ligados ao central	Geometria
2	2 (base)	 <i>Linear</i>
3	3 (base)	 <i>Trigonal plana</i>
	2	 <i>Angular</i>
4	4 (base)	 <i>Tetraédrica</i>
	3	 <i>Piramidal</i>

	2	 <i>Angular</i>
5	5 (base)	 <i>Bipirâmide trigonal</i>
	4	 <i>Gangorra</i>
	3	 <i>Forma de T</i>
	2	 <i>Linear</i>
6	6 (base)	 <i>Octaédrica</i>
	5	 <i>Pirâmide quadrada</i>
	4	 <i>Quadrada plana</i>
	3	 <i>Forma de T</i>
	2	 <i>Linear</i>

Polaridade das ligações e molecular

Polaridade das ligações

- Natureza eletrostática de uma ligação devido à diferença de eletronegatividade entre os átomos;

- É caracterizada por um vetor momento dipolar orientado do átomo menos para o mais eletronegativo ($\vec{\mu}$);
- Fila de eletronegatividade decrescente: F, O, N, Cl, Br, I, S, C, P, H;
- Ligações iônicas são sempre polares e sua polaridade é mais acentuada do que nas covalentes;
- Ligações covalentes: serão apolares quando os elementos participantes da ligação forem idênticos (por possuírem a mesma eletronegatividade), caso contrário, serão polares.

Polaridade molecular

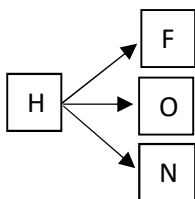
- Uma molécula será polar se a soma dos vetores momento dipolar das ligações for nula ($\vec{\mu}_R = 0$).
- Isso ocorre quando:
 - Em moléculas diatômicas, se os elementos forem idênticos;
 - O número de **átomos idênticos** ligados ao átomo central for igual ao número de nuvens eletrônicas ao redor do átomo central;
 - A geometria molecular for linear e todos os elementos ligados ao átomo central forem idênticos;
 - A geometria molecular for quadrada plana e todos os elementos ligados ao átomo central forem idênticos.

Interações intermoleculares

- Interações eletrostáticas que ocorrem entre moléculas;
- Quanto mais intensas são, mais estável tende a ser o estado de agregação de uma substância formada por essas moléculas (maior o ponto de ebulição e menor a volatilidade);
- São “rompidas” quando há mudanças de **estado físico** em substâncias.

Forças de Van de Waals

- Dipolo-dipolo (dipolo permanente–dipolo permanente ou dipolo permanente): interação eletrostática devido à polaridade “permanente” das moléculas (dipolos permanentes).
- Ocorre entre moléculas polares.
- Pontes de hidrogênio: tipo de interação dipolo-dipolo mais intensa devido à diferença de eletronegatividade entre o átomo de **hidrogênio** e **flúor, oxigênio** ou **cloro**;
- Ocorre entre moléculas que possuam pelo menos uma das ligações atômicas abaixo:

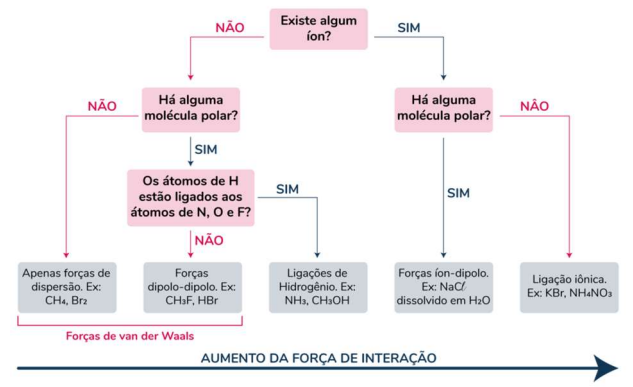


- A diferença de eletronegatividade acentuada entre esses elementos faz com que o único próton do hidrogênio fique desprotegido, acentuando a diferença da distribuição de cargas na molécula.
- Dipolo induzido (dipolo instantâneo-dipolo induzido, dispersões de London, força fraca de Van der Waals): interação eletrostática devido à indução de polos em moléculas provenientes dos dipolos instantâneos nas moléculas apolares.
- Ocorre entre moléculas apolares.

Interação íon-dipolo

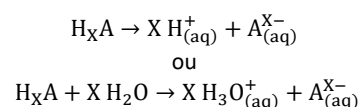
- Interação entre íons e moléculas polares;
- São observadas em soluções iônicas ou ionizáveis em solventes moleculares;
- Os íons provenientes de uma ligação iônica (interatômica) atrai as moléculas apolares;
- Quando um sal é dissolvido em um solvente (dissolução), as moléculas do solvente circundam os íons que compõem o sal

(solvatação), diluindo-o no solvente (se o solvente é a água, esse processo é chamado de hidratação).

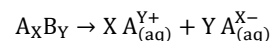


Funções inorgânicas

- São consideradas funções inorgânicas:
 - Ácidos;
 - Bases;
 - Sais;
 - Óxidos.
- Teoria de Arrhenius: substâncias podem ser classificadas como eletrólitos ou não eletrólitos, conforme seu comportamento quando dissolvidas em água.
 - Eletrólitos: conduzem corrente, pois formam íons ao serem dissolvidos em água (solução eletrolítica);
 - Não eletrólitos: a taxa de condução de corrente é desprezível, pois sua estrutura permanece praticamente inalterada ao serem dissolvidos em água.
 - Uma solução só será eletrolítica se a substância sofrer ionização ou dissociação iônica.
- Ionização: processo químico que ocorre quando substâncias **moleculares** (aquelas que formam ligações covalentes) são **dissolvidas em água** formando íons.
 - O dipolo elétrico permanente do composto molecular atrai as moléculas de água (que é polar), promovendo a separação do composto molecular, formando íon hidroxônio (H^+ ou H_3O^+) e ânion:



- Dissociação iônica: processo químico que ocorre quando substâncias **iônicas** (aqueles que formam ligações iônicas) são **dissolvidas em água** ou **fundidas**.
 - O processo é semelhante ao ocorrido na ionização, com a diferença que não há formação de íons, apenas sua separação (eles já existiam antes de serem dissolvidos, apenas são separados por solvatação).



- Grau de ionização ou dissociação (α):

$$\alpha = \frac{n^\circ \text{ de moléculas ionizadas ou dissociadas}}{n^\circ \text{ de moléculas dissolvidas}}$$

- Fortes: $\alpha\% > 50\%$;
- Moderados (semifortes): $5\% < \alpha\% < 50\%$;
- Fracos: $\alpha\% < 5\%$.
- Quanto mais forte, maior a condutibilidade do eletrólito.

Ácidos

- Substâncias moleculares que em solução aquosa sofrem ionização, dando origem a um ânion e a um íon hidroxônio (H^+ ou H_3O^+).

- Classificação quanto ao número de hidrogênios ionizáveis: monoácidos (1H^+), diácidos (2H^+), triácidos (3H^+), tetrácidos (4H^+);
- Classificação quanto ao grau de ionização:
 - Hidrácidos (sem oxigênio): sendo fortes o HCl , HBr , HI ; moderado o HCl ; e fracos os demais;
 - Oxiácidos (contêm oxigênio): segundo a regra geral:

$\text{n}^\circ \text{ de oxigênios} - \text{n}^\circ \text{ de hidrogênios ionizáveis}$
--

0 – fraco; 1 – moderado; 2 – forte; 3 muito forte

OBS: o H_3PO_4 possui 2 hidrogênios ionizáveis e o H_2CO_3 é considerado fraco, pois mais se decompõe do que ioniza quando em solução aquosa.

- Classificação quanto à volatilidade: sendo fixos apenas H_2SO_4 e o H_3PO_2 , os demais são voláteis.