

Propriedades Periódicas

Química Geral Teórica

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

A tabela periódica é uma das ferramentas mais úteis para profissionais de química. Por meio dela, somos capazes de identificar rapidamente tendências e propriedades importantes sem termos informações precisas em um catálogo. A tabela periódica funciona como um excelente resumo condensado e o objetivo desta aula é relacionar a periodicidade das propriedades com o estudo da estrutura eletrônica dos átomos feito ao longo das últimas aulas. Para facilitar o acompanhamento da aula, há uma tabela periódica na última página deste documento.

1 A tabela periódica

Muitos elementos químicos apresentam similaridades entre si e, ao longo do século XIX, foram inúmeras as tentativas de organizar os elementos de forma a juntar em grupos os elementos que apresentavam propriedades similares. A forma mais bem sucedida de organizá-los teve início com a organização dos elementos sequencialmente por ordem de número atômico, em que se observou alguns padrões sendo repetidos. É importante notar que os átomos identificados com (a) têm

Z	1	2	3	4	...	9	10	11	12	...	17	18	19	20	...
Símbolo	H	He	Li	Be	...	F	Ne	Na	Mg	...	Cl	Ar	K	Ca	...
	(a)	(b)				(a)	(b)				(a)	(b)			

características importantes em comum: são gases que dificilmente formam compostos poliatômicos, existindo primariamente como gases monoatômicos. Os átomos identificados com (b) , por sua vez, são metais macios (podem ser cortados com faca doméstica) porém bastante reativos, sendo necessário guardá-los em ambiente que impeça o seu contato com o ar atmosférico ou com água. Curiosamente, o número atômico desses metais é sempre $Z_{(b)} = Z_{(a)} + 1$, indicando um padrão que se repete à medida que se aumenta o número atômico dos elementos em sequência.

Figura 1: Tabela periódica dos elementos simplificada.

Hoje em dia organizamos os elementos químicos na tabela periódica, conforme pode ser visto na Figura 1. Acima de cada coluna há um número de 1 até 18 representando o grupo. Chamamos

de grupo uma coleção de elementos com propriedades físico-químicas semelhantes. Observe que os elementos anteriormente identificado como gases inertes (He, Ne, Ar) estão no **grupo 18** e recebem o nome coletivo de **gases nobres**. Os metais macios e reativos estão no **grupo 1** e recebem o nome coletivo de **metais alcalinos**. O hidrogênio não é um metal, mas é colocado sobre esse grupo devido à sua valência, ser do tipo s^1 , como todos os elementos do grupo. Cada grupo é caracterizado por uma configuração eletrônica:

- (I) Grupo 1, também chamado de metais alcalinos, tem configuração eletrônica terminada em ns^1
- (II) Grupo 2, também chamado de **metais alcalinos terrosos**, tem configuração eletrônica terminada em ns^2
- (III) Grupo 3 é o primeiro grupo dos **elementos de transição** e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^1ns^2$.
- (IV) Grupo 4 é o segundo grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^2ns^2$.
- (V) Grupo 5 é o terceiro grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^3ns^2$.
- (VI) Grupo 6 é o quarto grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^5ns^1$. Perceba que a configuração eletrônica desses átomos é diferente do que se espera porque ter cinco orbitais $(n - 1)d$ semi-preenchidos é mais energeticamente favorável, conforme discutido em aulas passadas.
- (VII) Grupo 7 o quinto grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^5ns^2$.
- (VIII) Grupo 8 o sexto grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^6ns^2$.
- (IX) Grupo 9 o sétimo grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^7ns^2$.
- (X) Grupo 10 o oitavo grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^8ns^2$.
- (XI) Grupo 11 o nono grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^10ns^1$. Assim como os elementos do grupo 6, a configuração eletrônica é diferente do que o esperado porque ter cinco orbitais $(n - 1)d$ totalmente preenchidos é mais energeticamente favorável. É o grupo com metais nobres como o cobre (Cu), a prata (Ag) e o ouro (Au).
- (XII) Grupo 12 o décimo grupo dos elementos de transição e tem configuração eletrônica terminada em $(n - 1)d^10ns^2$.
- (XIII) Grupo 13, conhecido como grupo do boro (B), tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^1

- (XIV) Grupo 14, conhecido como grupo do carbono (C), tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^2 .
- (XV) Grupo 15, conhecido como grupo do nitrogênio (N) ou pnictogênios, tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^3 .
- (XVI) Grupo 16, conhecido como **calcogênios**, tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^4 .
- (XVII) Grupo 17, conhecido como **halogênios**, tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^5 .
- (XVIII) Grupo 18, os gases nobres, tem configuração eletrônica terminada em ns^2np^6 .

Na tabela periódica no final deste documento também é possível ver que a maior parte dos elementos são **metais** – todos os grupos de 1 ao 12 e alguns elementos nos grupos 13 a 17 –, isto é, elementos químicos caracterizados por brilho, condutividades elétrica e térmicas altas. Com exceção do mercúrio (Hg), que é líquido em temperatura ambiente, todos são sólidos. O segundo maior grupo são os **ametais**, que em condições ambiente de temperatura e pressão tendem a ser gases ou sólidos. Somente o bromo (Br) é líquido nessas condições. Os chamados **semi-metais** ou **metaloïdes** são um pequeno conjunto de sete elementos (B, Si, Ge, As, Sb, Te e Po) com propriedades intermediárias entre metais e ametais.

O número quântico principal n define a linha ou o **período** da tabela periódica em que o elemento se insere. Observe que o primeiro período somente tem dois elementos, o hidrogênio e o hélio, porque a camada de valência correspondente, 1s, somente comporta dois elétrons. À medida que n aumenta, também aumenta a disponibilidade de ocupação de mais tipos diferentes de orbitais no estado fundamental. No caso do sexto e do sétimo períodos ($n = 6$ e $n = 7$) os orbitais 4f começam a ser ocupados e definem os **elementos de transição interna**: lantanídeos (ou **terrás raras**) e actinídeos. Por isso a Figura 1 contém as duas linhas abaixo, cada uma com 14 elementos, representando esses grupos. Uma representação mais adequada (e menos condensada) envolve a adição dos elementos de transição interna logo depois do grupo 2, como na Figura 2. Neste curso, focaremos nos **elementos representativos**, isto é, os elementos dos grupos 1,2, 13, 14, 15, 16, 17 e 18. Uma observação importante: antigamente os elementos representativos e os elementos de

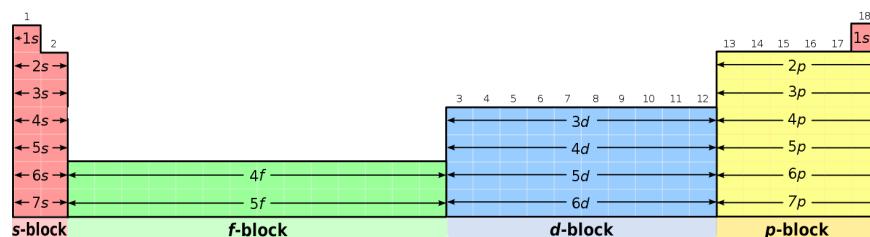


Figura 2: Tabela periódica indicando a posição dos elementos de transição interna (*f-block*).

transição eram nomeados de forma diferente. Os grupos 1,2, 13, 14, 15, 16, 17 e 18 eram chamados de famílias 1A, 2A, 3A, 4A, 5A, 6A, 7A e 8A e os grupos 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 e 12 eram chamados, respectivamente, de famílias 3B, 4B, 5B, 6B, 7B, 8B (contendo grupos 8, 9 e 10), 1B e 2B. Essa nomenclatura é antiga e não é mais recomendada, sendo usada principalmente por autores de áreas adjacentes à química.

2 Raios atômicos e raios iônicos

Sabemos que a influência da carga nuclear em elétrons de valência é diminuída em átomos multieletônicos. Isso se dá porque os elétrons das camadas mais interiores e, principalmente os elétrons em orbitais de baixo momentum angular, repelem os elétrons de valência e os fazem sentir uma carga nuclear mais atenuada. A carga nuclear efetiva influi diretamente no raio atômico da espécie em questão. Considere as cargas nucleares efetivas sentidas pelos elétrons de valência dos elementos representativos, com exceção dos gases nobres, do segundo até o quinto período: Já sabemos de

	ns^1	ns^2	ns^2np^1	ns^2np^2	ns^2np^3	ns^2np^4	ns^2np^5
$n = 2$	Li 1.28	Be 1.91	B 2.42	C 3.14	N 3.83	O 4.45	F 5.10
$n = 3$	Na 2.51	Mg 3.31	Al 4.07	Si 4.29	P 4.89	S 5.48	Cl 6.12
$n = 4$	K 3.50	Ca 4.40	Ga 6.22	Ge 6.78	As 7.45	Se 8.29	Br 9.03
$n = 5$	Rb 4.99	Sr 6.07	In 8.47	Sn 9.10	Sb 10.00	Te 10.81	I 11.61

aulas anteriores que quanto maior o n , maior a distância média entre o núcleo e o elétron no orbital. A nossa análise se torna completa ao observarmos que a carga nuclear efetiva aumenta ao longo de um período, sugerindo que os elétrons das camadas mais externas são mais atraídos em direção ao núcleo. Podemos inferir duas tendências:

1. o raio atômico aumenta com o aumento do número quântico principal, n .
2. o raio atômico diminui com o aumento da carga nuclear efetiva, Z_{efetivo} , sentido por elétrons em camadas eletrônicas mais externas.

As tendências inferidas logicamente acima são confirmadas por medições experimentais, mostrando a tendência geral de aumento do raio atômico no sentido de aumento de n e menor carga nuclear efetiva (Figura 3).

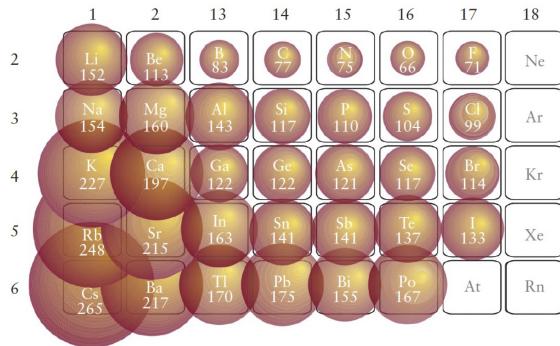


Figura 3: Raios atômicos de elementos representativos em pm. Retirada de Atkins, Jones e Laverman, *Chemical Principles: The Quest for Insight*, 7th Edition.

A maior parte dessas espécies, entretanto, se encontra na natureza em substâncias compostas, muitas vezes assumindo a forma iônica. Quando estudarmos um pouco da estruturas de sólidos, veremos que o raio iônico tem um papel muito importante na definição do empacotamento. O comprimento do raio depende, além dos fatores discutidos para a definição do raio atômico, se o íon é um cátion ou um ânion. Cátions, por terem carga positiva, têm raio iônico menor que o raio atômico da espécie neutra. Ânions, por terem carga negativa, possuem raio iônico maior que o raio atômico da espécie neutra. A explicação desse fenômeno é de natureza puramente eletrostática: em um cátion, a perda de elétrons faz o “caroço” do átomo ficar exposto; em um ânion, a adição de elétrons faz a repulsão intereletrônica aumentar a distância média entre os elétrons, o que implica em um aumento do raio. Essa lógica também é confirmada por experimentos (Figura 4). De forma geral, podemos dizer que, em um mesmo grupo, o raio iônico aumenta com n . No mesmo período, o raio iônico, seja de um cátion ou de um ânion, cresce quanto menor for a carga nuclear.

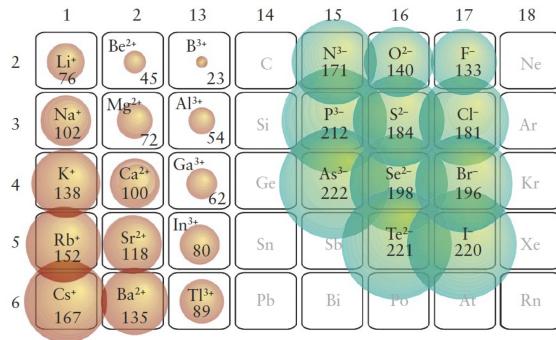


Figura 4: Raios iônicos de elementos representativos em pm. Retirada de Atkins, Jones e Laverman, *Chemical Principles: The Quest for Insight, 7th Edition*.

3 Energias de ionização, afinidades eletrônicas e eletronegatividade

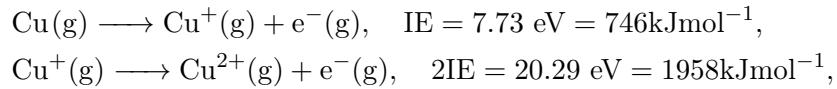
A formação de íons depende da remoção de elétrons e sua transferência para outros átomos e a estabilidade da espécie resultante do processo é avaliada por meio das **energias de ionização** ou pelas **afinidades eletrônicas**. Chamamos de energia de ionização a energia mínima requerida para remover um elétron de um átomo neutro em fase gasosa:



em que A é um átomo qualquer, (g) se refere à fase gasosa e e^- é o elétron perdido no processo de ionização. A energia de ionização é definida como a diferença de energia entre o cátion (estado final) e o átomo neutro (estado inicial):

$$\text{EI} = E(\text{A}^+) - E(\text{A}). \quad (2)$$

A energia de ionização é uma medida de quão difícil é remover um elétron. Por conta disso, podemos inferir que remover elétrons de cátions é mais difícil do que remover elétrons de espécies neutras, como podemos perceber no exemplo a seguir:



em que 2IE se refere à **segunda energia de ionização**. Elementos com alta energia de ionização dificilmente formam cátions e não são bons condutores de eletricidade. As primeiras energias de ionização dos elementos representativos podem ser vistos na Figura 5. Observe que, quanto mais

			H 1310					
2	Li 519	Be 900	B 799	C 1090	N 1400	O 1310	F 1680	Ne 2080
3	Na 494	Mg 736	Al 577	Si 786	P 1011	S 1000	Cl 1255	Ar 1520
4	K 418	Ca 590	Ga 577	Ge 784	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1350
5	Rb 402	Sr 548	In 556	Sn 707	Sb 834	Te 870	I 1008	Xe 1170
6	Cs 376	Ba 502	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 1037	Rn 1036

Figura 5: Primeira energia de ionização (EI) de elementos representativos em kJ mol^{-1} . Retirada de Atkins, Jones e Laverman, *Chemical Principles: The Quest for Insight*, 7th Edition.

próximo da configuração eletrônica de um gás nobre, maior é a EI, assim como quanto menor for o número quântico principal, n , da camada de valência. Essas tendências podem ser observadas ao longo da tabela periódica:

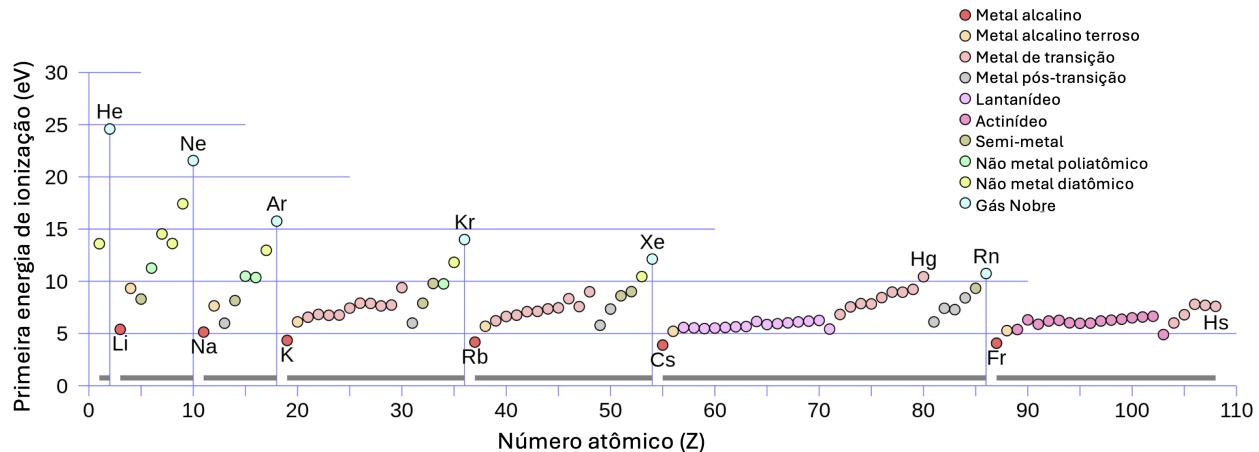


Figura 6: Primeiras energias de ionização (EI) em função do número atômico.

A afinidade eletrônica (AE), por sua vez, é definida como a energia liberada quando, em fase gasosa, átomos de um elemento recebem um elétron e se tornam uma espécie aniônica:



Por convenção, a AE é calculada como:

$$\Delta E = E(A) - E(A^-), \quad (4)$$

significando que quanto maior for o seu valor, maior a afinidade. As afinidades eletrônicas são maiores à direita na tabela periódica devido à tendência dos elementos de quererem ter a configuração

ração eletrônica de gases nobres, com a notável exceção dos mesmos. Perceba que o oxigênio e o

					H +73			
	1	2	13	14	15	16	17	18
2	Li +60	Be ≤ 0	B +27	C +122	N -7	O +141 -844	F +328	He <0
3	Na +53	Mg ≤ 0	Al +43	Si +134	P +72	S +200, -532	Cl +349	Ne <0
4	K +48	Ca +2	Ga +29	Ge +116	As +78	Se +195	Br +325	Kr <0
5	Rb +47	Sr +5	In +29	Sn +116	Sb +103	Te +190	I +295	Xe <0
6	Cs +46	Ba +14	Tl +19	Pb +35	Bi +91	Po +174	At +270	Rn <0

Figura 7: Afinidade eletrônica (AE) de elementos representativos em kJ mol^{-1} . Retirada de Atkins, Jones e Laverman, *Chemical Principles: The Quest for Insight*, 7th Edition.

enxofre possuem dois valores para a afinidade eletrônica em destaque, a primeira estabilizante e a segunda desestabilizante. Isso é explicado porque a segunda afinidade eletrônica significa adicionar um elétron a um ânion e envolve uma repulsão eletrostática. A tendência geral de comportamento da AE na tabela periódica pode ser encontrada na Figura 8.

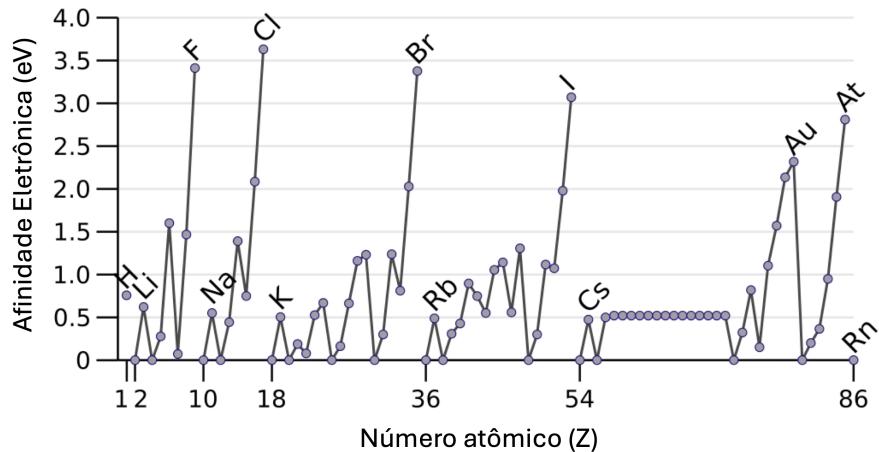


Figura 8: Afinidades eletrônicas (AE) em função do número atômico. Observe que os gases nobres estão todos com $\text{AE}=0$.

Um conceito muito utilizado em química é a **eletronegatividade**, a tendência de um átomo em atrair elétrons compartilhados (“puzar” densidade eletrônica para si) quando formada uma ligação química. Não há uma única forma de definir a eletronegatividade, mas um dos conceitos mais intuitivos é o conceito de Mulliken, que define eletronegatividade (χ) como:

$$\chi = \frac{EI + AE}{2}, \quad (5)$$

cujas unidades dependem dos valores empregados para EI e AE. Observando a Equação 5 verifica-se que quanto maior forem a EI e AE, mais eletronegativo será o átomo em questão, sugerindo que a mesma tendência observada para essas quantidades sejam replicadas para a eletronegatividade.

Linus Pauling definiu uma escala própria, mais utilizada em livros-texto, que define a eletronegatividade entre os valores de zero e quatro, calculados a partir de dados empíricos de energias de dissociação de ligações químicas (assunto de aulas futuras):

He																	
H 2.20	Li 0.98	Be 1.57															
Na 0.93	Mg 1.31																
K 0.82	Ca 1.00																
Rb 0.82	Sr 0.95																
Cs 0.79	Ba 0.89	*															
Fr *>0.79	Ra 0.9	*															
Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00		
Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60		
Lu 1.27	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2		
Lr 1.3	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og		
*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1			
*	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3			

He																	
H -13.61																	He -24.59
Li -5.39	Be -9.32																
Na -5.14	Mg -7.65																
K -4.34	Ca -6.11	Sc -6.60	Ti -7.12	V -7.32	Cr -7.46	Mn -7.84	Fe -7.91	Co -8.10	Ni -8.22	Cu -8.42	Zn -9.39	Ga -12.61	Ge -16.05	N -19.43	O -25.56	F -32.38	Ne -40.17
Rb -4.18	Sr -5.70	Y -6.70	Zr -7.31	Nb -7.22	Mo -7.24	Tc -7.21	Ru -7.13	Rh -7.28	Pd -7.44	Ag -7.58	Cd -8.99	In -11.89	Sn -14.56	Sb -16.74	Te -18.71	I -20.89	Xe -23.40
Cs -3.90	Ba -5.21	La -7.04	Hf -7.52	Ta -8.45	W -8.52	Re -8.76	Os -8.82	Ir -8.83	Pt -8.75	Au -9.22	Hg -10.44	Tl -13.14	Pb -15.12	Bi -17.52	Po -20.05	At -22.69	Rn -25.47
Fr ?	Ra ?	Ac ?															

Figura 9: Eletronegatividades dos elementos da tabela periódica definidos segundo Linus Pauling. Nela, o elemento mais eletronegativo é o flúor, F, e o mais eletropositivo é o frâncio, Fr.

Chamamos os elementos menos eletronegativos de **eletropositivos**, isto é, aqueles que têm tendência de não “puxar” para si a densidade eletrônica em uma ligação química. É interessante perceber que, já que a eletronegatividade está relacionada à afinidade eletrônica e à energia de ionização, ela deve ter alguma relação com as energias dos orbitais de valência dos átomos. Na Figura 10 podemos ver que, desconsiderando os gases nobres, os átomos cujos orbitais de valência são os mais estáveis são aqueles cujos elementos são mais eletronegativos.

He																	
H -13.61																	He -24.59
Li -5.39	Be -9.32																
Na -5.14	Mg -7.65																
K -4.34	Ca -6.11	Sc -6.60	Ti -7.12	V -7.32	Cr -7.46	Mn -7.84	Fe -7.91	Co -8.10	Ni -8.22	Cu -8.42	Zn -9.39	Ga -12.61	Ge -16.05	N -19.43	O -25.56	F -32.38	Ne -40.17
Rb -4.18	Sr -5.70	Y -6.70	Zr -7.31	Nb -7.22	Mo -7.24	Tc -7.21	Ru -7.13	Rh -7.28	Pd -7.44	Ag -7.58	Cd -8.99	In -11.89	Sn -14.56	Sb -16.74	Te -18.71	I -20.89	Xe -23.40
Cs -3.90	Ba -5.21	La -7.04	Hf -7.52	Ta -8.45	W -8.52	Re -8.76	Os -8.82	Ir -8.83	Pt -8.75	Au -9.22	Hg -10.44	Tl -13.14	Pb -15.12	Bi -17.52	Po -20.05	At -22.69	Rn -25.47
Fr ?	Ra ?	Ac ?															

Figura 10: Energias dos orbitais de valência dos átomos da tabela periódica, excluídos lantanídeos e actinídeos. Dados de espectroscopia fotoeletrônica. Adaptado de <<http://www.graylark.com/eve/orbital-energies-table.html>>

4 Cátions, ânions e números de oxidação

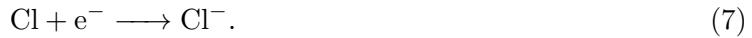
Questionamentos a respeito da estabilidade dos gases nobres, elementos de camada de valência ns^2np^6 provocou o surgimento da chamada **regra do octeto**, segundo a qual os elementos químicos procuram se estabilizar ficando com a configuração eletrônica de gases nobres. Infelizmente a regra do octeto não é uma regra universal, mas é bastante útil para compreender a química dos elementos representativos.

Perceba que a própria posição na tabela periódica já permite a identificação imediata da estrutura eletrônica. Um elemento do grupo 1, por exemplo, tem camada de valência ns^1 . Com exceção do átomo de hidrogênio, um membro honorário, a forma pela qual um átomo de um elemento do grupo 1 pode ficar com a configuração eletrônica de gás nobre se dá pela perda do elétron no orbital ns :



No caso do sódio (Equação 6) a sua configuração eletrônica passou de $1s^22s^22p^63s^1 = [\text{Ne}]3s^1$ para a configuração do neonio $1s^22s^22p^6 = [\text{Ne}]$. Como o átomo de sódio perdeu um elétron, ele se tornou uma espécie carregada, **íon**. Íons positivos são chamados de **cátions**. O processo representado pela Equação 6, a perda de elétrons, é chamada de **oxidação**.

Um elemento do grupo 17 tem camada de valência ns^2np^5 . Para ficar com camada de valência de um elemento do grupo 18, é mais fácil ganhar um elétron do que perder cinco:



Ao ganhar um elétron, o átomo de cloro na Equação 7 passou de $1s^22s^22p^63s^23p^5 = [\text{Ne}]3s^23p^5$ para $1s^22s^22p^63s^23p^6 = [\text{Ar}]$ e se tornou um íon de carga negativa, um **ânion**. O processo de ganho de elétrons é chamado de **redução**. Uma reação que envolve troca de elétrons entre duas espécies é chamada reação de redução-oxidação ou *redox*:



Na Equação 8, o sódio perde elétrons para ficar com configuração de gás nobre e o cloro ganha elétrons para ficar com configuração de gás nobre. Um conceito bastante útil em química é o conceito de **número de oxidação** (N_{ox}). Quanto maior for o N_{ox} , mais oxidada é a espécie, quanto menor, menos oxidada (ou mais reduzida). Em espécies monoatômicas, o N_{ox} tende a corresponder à carga do íon monoatômico com configuração de gás nobre. Na Equação 8, o sódio originalmente tem $N_{ox} = 0$, pois está na sua forma metálica. Da mesma forma, o cloro em moléculas de Cl_2 também tem $N_{ox} = 0$. No produto, cloreto de sódio (NaCl) o sódio perdeu um elétron e se tornou o cátion Na^+ , adquirindo $N_{ox} = +1$, e o cloro ganhou um elétron, se tornando o ânion Cl^- (cloreto), adquirindo $N_{ox} = -1$.

Os números de oxidação são propriedades que tendem a se repetir ao longo da tabela periódica. Elementos do grupo 1 tendem a se combinar quimicamente com outros elementos e ficar com $N_{ox} = +1$. Os metais alcalinos terrosos, por sua vez, tendem a ter $N_{ox} = +2$. Os elementos dos grupos 13, 14 e 15 costumam ter vários números de oxidação a depender de que outros elementos estão combinados com eles, assim como os elementos mais pesados dos grupos 16 e 17, mas como regra geral podemos determinar o N_{ox} observando as diferenças de eletronegatividade dos átomos presentes no composto. Flúor (F), oxigênio (O) e cloro (Cl), por serem elementos bastante eletronegativos, tenderão a ter

N_{ox} negativo ($N_{ox} = -1$ para F e Cl, $N_{ox} = -2$ para O; os metais alcalinos e alcalinos terrosos, por serem mais eletropositivos, sempre terão $N_{ox} = +1$ e $N_{ox} = +2$ se não estiverem em suas formas metálicas puras. A partir disso é possível inferir os números de oxidação de outros elementos.

Podemos compilar umas regras gerais para a determinação do N_{ox} :

- Preste atenção em elementos com N_{ox} fixo, como os metais alcalinos, os metais alcalinos terrosos, e os halogênios.
- O N_{ox} dos átomos em substâncias elementares será sempre zero.
- O N_{ox} dos átomos de elementos mais eletronegativos em substâncias compostas tenderá a ser negativo. O N_{ox} dos átomos de elementos mais eletropositivos em substâncias compostas tenderá a ser positivo.
- O N_{ox} de um íon monoatômico é igual a sua carga.
- A soma dos N_{ox} de todos os átomos constituintes de um composto neutro (carga zero) é sempre zero. A soma dos N_{ox} de todos os átomos constituintes de uma espécie carregada é igual a carga da espécie, seja positiva ou negativa.

Considere o permanganato de potássio (KMnO_4). Para descobrir o N_{ox} de cada átomo, primeiramente procuramos saber quais são aqueles que têm N_{ox} definido. O potássio é um metal alcalino, logo em substâncias compostas sempre terá $N_{ox} = +1$, o que nos deixa o ânion permanganato (MnO_4^-). Em regra, metais de transição podem ter vários estados de oxidação, logo podemos assumir que os átomos de oxigênio têm $N_{ox} = -2$ cada um. Como a carga do íon é -1 , então a soma dos N_{ox} deve ser igual a carga, o que permite encontrar o N_{ox} do manganês:

$$N_{ox}(\text{Mn}) + 4N_{ox}(\text{O}) = -1 \implies N_{ox}(\text{Mn}) - 8 = -1 \implies N_{ox}(\text{Mn}) = +7.$$

5 Exercícios de fixação

1. Os átomos de hidrogênio ($Z = 1$) e hélio ($Z = 2$) em seus estados fundamentais somente têm acesso ao orbital $1s$. Explique a diferença entre os raios atômicos considerando que a carga nuclear efetiva sentida pelos elétrons nesses átomos são, respectivamente, $+1.00e$ e $+1.69e$. Dica: inclua em sua explicação a razão pelo qual Z_{efetivo} do hélio ser diferente de $+2.00e$.

2. Organize em ordem decrescente de raios atômicos ou iônicos e justifique mostrando a configuração eletrônica de cada espécie.

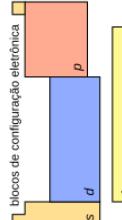
- Te, I, Po, Ba, Xe.
- Be²⁺, Cs⁺, Ca²⁺, Ba²⁺.

4. Calcule o N_{ox} de cada elemento nas seguintes espécies químicas abaixo:

- (i) CH₄
- (ii) CH₄O
- (iii) CH₂O
- (iv) CO
- (v) CO₂
- (vi) Cr₂O₇²⁻

Tabela periódica dos elementos

Hydrogénio H _{1s}	2	massa atómica ou número atómico índice mas estabeleci-	55.845	26	massa atómica ou número atómico índice mas estabeleci-	59.980	24	Bh Bohr
6.041 [50.2 0.98]	3	9.012182 [899.5 1.57]	4	1 ^a energia de ionização em kJ/mol	762.5	1.83	4.4 [44 13]	
Li Lítio 1s ² 2s ¹	2	Be Boronio 1s ² 2s ²	3	simbolo químico	Mn Manganino 1s ² 2s ² 3s ² 3p ⁶ 4s ²	717.3 [652.9 1.66]	1.1 [1.1 0.1]	
22.98976 [495.6 0.93]	11	24.3050 [33.7 1.31]	12	nome	Cr Cromo 1s ² 2s ² 3s ² 3p ⁶ 4s ¹	101.985 [91.385 0.84]	1.1 [1.1 0.1]	
3	Na Sódio [Ne] 3s ¹	19	40.078 [598.8 1.00]	20	configuração eletrônica	Ti Titânio 1s ² 2s ² 3s ² 3p ⁶ 4s ²	51.9962 [50.9415 2.23]	1.1 [1.1 0.1]
4	K Potássio [Ne] 4s ¹	38	88.90585 [800.0 1.22]	39	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	V Vanádio [Ar] 3d ³ 4s ²	659.9 [652.9 1.63]	1.1 [1.1 0.1]
85.4678 [403.0 0.82]	37	87.62 [549.5 0.95]	38	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	Zr Zirconio [Ar] 3d ⁴ 4s ²	652.1 [651.1 1.60]	1.1 [1.1 0.1]	
137.9054 [375.7 0.79]	55	137.327 [502.9 0.89]	56	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	Nb Nióbio [Ar] 3d ⁴ 4s ²	644.1 [643.1 1.60]	1.1 [1.1 0.1]	
6	Rb Rubidio [Kr] 5s ¹	103	174.96668 [178.5 1.30]	104	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	Ta Tántalo [Ar] 3d ⁵ 4s ²	782.0 [780.0 1.50]	1.1 [1.1 0.1]
Fr Francio [Kr] 7s ¹	7	87	(226) [350.0 0.90]	88	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	W Tungsténio [Ar] 3d ⁶ 4s ²	74 [70.0 1.26]	1.1 [1.1 0.1]
106 [264] <td>106</td> <td>Rb Rubidio [Kr] 5s¹</td> <td>105</td> <td>[Ar] 3d¹⁰ 4s²</td> <td>Ta Tántalo [Ar] 3d⁵ 4s²</td> <td>(266) [226.0 1.05]</td> <td>1.1 [1.1 0.1]</td>	106	Rb Rubidio [Kr] 5s ¹	105	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	Ta Tántalo [Ar] 3d ⁵ 4s ²	(266) [226.0 1.05]	1.1 [1.1 0.1]	
Sq Seaborgio [Kr] 7s ¹	106	Db Dubnio [Kr] 5f ¹	105	[Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	W Tungsténio [Ar] 3d ⁶ 4s ²	(264) [226.0 1.05]	1.1 [1.1 0.1]	



- por enquanto, os elementos 113, 115, 117 não têm nome oficial designado pela IUPAC.
- $1. \text{ kJ/mol} = 96.485 \text{ ev.}$
- todos os elementos têm implicitamente um prefixo de oxidatividade zero

Figura 11: Tabela periódica dos elementos