

Ciências Biológicas

Química Geral e Orgânica

Alexandre Cabral Craveiro



Geografia



História



Educação Física



Química



Ciências Biológicas



Artes Plásticas



Computação



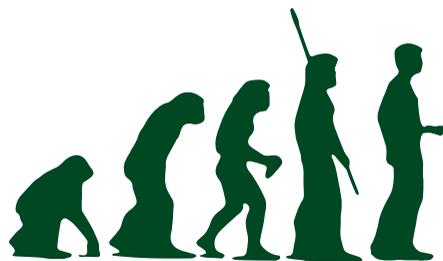
Física



Matemática



Pedagogia



Ciências Biológicas

Química Geral e Orgânica

Alexandre Cabral Craveiro

2ª edição
Fortaleza - Ceará



2015



Geografia



História



Educação
Física



Química



Ciências
Biológicas



Artes
Plásticas



Computação



Física



Matemática



Pedagogia

Copyright © 2015. Todos os direitos reservados desta edição à UAB/UECE. Nenhuma parte deste material poderá ser reproduzida, transmitida e gravada, por qualquer meio eletrônico, por fotocópia e outros, sem a prévia autorização, por escrito, dos autores.

Editora Filiada à



Presidenta da República

Dilma Vana Rousseff

Ministro da Educação

Renato Janine Ribeiro

Presidente da CAPES

Carlos Afonso Nobre

Diretor de Educação a Distância da CAPES

Jean Marc Georges Mutzig

Governador do Estado do Ceará

Camilo Sobreira de Santana

Reitor da Universidade Estadual do Ceará

José Jackson Coelho Sampaio

Vice-Reitor

Hidelbrando dos Santos Soares

Pró-Reitora de Graduação

Marcília Chagas Barreto

Coordenador da SATE e UAB/UECE

Francisco Fábio Castelo Branco

Coordenadora Adjunta UAB/UECE

Eloísa Maia Vidal

Diretora do CCS/UECE

Glaúcia Posso Lima

Coordenadora da Licenciatura em Ciências Biológicas

Germana Costa Paixão

Coordenadora de Tutoria e Docência em Ciências Biológicas

Roselita Maria de Souza Mendes

Editor da UECE

Erasmus Miessa Ruiz

Coordenadora Editorial

Rocylânia Isidoro de Oliveira

Projeto Gráfico e Capa

Roberto Santos

Diagramador

Marcus Lafaiete da Silva Melo

Conselho Editorial

Antônio Luciano Pontes

Eduardo Diatary Bezerra de Menezes

Emanuel Ângelo da Rocha Fragoso

Francisco Horácio da Silva Frota

Francisco José Camelo Parente

Gisafran Nazareno Mota Jucá

José Ferreira Nunes

Liduína Farias Almeida da Costa

Lucili Grangeiro Cortez

Luiz Cruz Lima

Manfredo Ramos

Marcelo Gurgel Carlos da Silva

Marcony Silva Cunha

Maria do Socorro Ferreira Osterne

Maria Salete Bessa Jorge

Silvia Maria Nóbrega-Therrien

Conselho Consultivo

Antônio Torres Montenegro (UFPE)

Eliane P. Zamith Brito (FGV)

Homero Santiago (USP)

Ieda Maria Alves (USP)

Manuel Domingos Neto (UFF)

Maria do Socorro Silva Aragão (UFC)

Maria Lírida Callou de Araújo e Mendonça (UNIFOR)

Pierre Salama (Universidade de Paris VIII)

Romeu Gomes (FIOCRUZ)

Túlio Batista Franco (UFF)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Sistema de Bibliotecas

Biblioteca Central Prof. Antônio Martins Filho

Thelma Marylanda – CRB-3 / 923

Bibliotecária

C898q Craveiro, Alexandre Cabral.

Química geral e orgânica / Alexandre Cabral Craveiro.

2. ed. – Fortaleza : EdUECE, 2015.

117 p. : il. ; (Ciências Biológicas)

ISBN: 978-85-7826-360-7

1. Química geral. 2. Química Orgânica I. Craveiro, Alexandre Cabral. II. Título.

CDD 5400.092

Editora da Universidade Estadual do Ceará – EdUECE

Av. Dr. Silas Munguba, 1700 – Campus do Itaperi – Reitoria – Fortaleza – Ceará

CEP: 60714-903 – Fone: (85) 3101-9893

Internet: www.uece.br – E-mail: eduece@uece.br

Secretaria de Apoio às Tecnologias Educacionais

Fone: (85) 3101-9962

Sumário

Apresentação	7
Capítulo 1 – Química: Ciência central	9
1. Por que estudar Química?	11
1.1. A Importância dessa ciência na vida cotidiana	11
2. O que é Química?	12
2.1. Um pouco de história!	13
2.2. As quatro principais eras da Química	14
3. Química e Tecnologia	16
3.1 Qual é a diferença entre ciência e tecnologia?	19
3.2 Mas o que é ciência?	19
4. Os métodos da ciência	20
4.1. O que é Método?	20
Capítulo 2 – Estrutura atômica	29
1. Os primeiros modelos atômicos	31
1.1. O modelo de Dalton	32
1.2. O modelo atômico de Thomson	35
1.3. Modelo atômico de Rutherford	37
1.4. Modelo atômico de Bohr	40
2. A teoria Quântica	43
2.1. O Modelo Atômico de Sommerfeld	44
3. O Modelo Atômico Atual	45
3.1. Os números quânticos	46
3.2. Distribuição Eletrônica	47
3.3. O Diagrama de Linus Pauling	49
4. Alguns conceitos básicos	53
4.1 Dimensões do átomo e do núcleo	54
Capítulo 3 – Classificação Periódica	59
1. A história da tabela periódica	61
1.1. O parafuso telúrico de Chancourtois	62
1.2. As últimas modificações na tabela	65
2. A Classificação Periódica Moderna	66
2.1. A Lei Periódica	66
2.2. Os Períodos da Tabela	67
2.3. A Série dos Lantanídeos	67
3. Colunas, Grupos ou Famílias da Tabela Periódica	72
3.1. Os Principais Grupos da Tabela	73
4. Classificação dos elementos segundo suas propriedades	82
4.1. Metais	83
4.2. Ametais ou Não Metais	83
4.3. Semi-metais	83
4.4. Gases Nobres	84
4.5. Hidrogênio	84

5. Propriedades Periódicas e Aperiódicas	84
5.1. Variação das Propriedades de acordo com a posição na Tabela Periódica.....	84
5.2. Variação do Tamanho Atômico dentro dos Grupos	85
5.3. Variação do tamanho Atômico dentro dos Períodos	85
5.4. Densidade Absoluta	86
5.5. Pontos de Fusão e de Ebulição	86
5.6. Potencial de Ionização ou Energia de Ionização	86
5.7. Afinidade Eletrônica ou Eletroafinidade	87
5.8. Eletronegatividade e Eletropositividade	88
5.9. Tamanho do Átomo	88
Capítulo 4 – Ligações Químicas	93
1. Por que se forma uma ligação química?	96
1.1. A Teoria do Octeto	96
1.2. As Representações de Lewis	97
1.3. Os tipos de ligações químicas	98
2. Propriedades físicas das substâncias iônicas.....	102
2.1 Estrutura Iônica.....	103
2.2. Ligações iônicas x ligações covalentes	103
2.3. Ligação Covalente	104
2.4. Resumo das principais características das ligações e substâncias covalentes	110
2.5. As Pontes de Hidrogênio.....	111
2.6. A Ligação Metálica	112
3. Geometria Molecular	114
3.1. Teoria da repulsão dos pares eletrônicos	114
Capítulo 5 – Funções inorgânicas	119
1. Funções Inorgânicas.....	121
2. Teoria da dissociação iônica de Arrhenius-1884	122
2.1. Ácidos	122
2.2. Bases.....	127
2.3. Sais.....	130
2.5. Hidretos	136
Capítulo 6 – Introdução ao estudo da Química Orgânica	141
1. Os Compostos Orgânicos	143
1.1. O Carbono.....	144
2. Características gerais dos Compostos Orgânicos	151
2.1. Representação dos compostos orgânicos.....	152
2.2. A classificação das cadeias carbônicas.....	152
Capítulo 7 – Funções orgânicas	159
1. Funções Orgânicas	161
1.1. Regras de nomenclatura	161
1.2. Nomenclatura dos compostos orgânicos.....	161
1.3. Classificação e nomenclatura dos radicais.....	163
2. Hidrocarbonetos	164
2.1. Nomeando alcanos de cadeia aberta	165
2.2. Nomeando Alcenos ou Olefinas de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada	165

2.3. Nomeando Alcinos ou alquinos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada	166
2.4. Nomeando Alcadienos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada	166
2.5. Nomeando ciclanos ou cicloalcanos ou ciclo-parafinas	167
2.6. Nomeando ciclenos ou ciclo-alquenos ou ciclo-olefinas	167
2.7. Nomeando hidrocarbonetos aromáticos	168
3. Álcool (R-OH) (OH ligado a carbono saturado)	169
4. Éter (R-O-R' ou Ar-O-Ar ou Ar-O-Ar)	170
5. Fenol (Ar-OH)	170
6. Aldeído (H-COH ou R-COH ou Ar-COH)	171
7. Cetona (R-CO-R' ou R-CO-Ar ou Ar-CO-Ar)	172
8. Ácido carboxílico (H-COOH ou R-COOH ou Ar-COOH)	173
9. Éster (H-COO-R ou R-COO-R ou Ar-COO-R ou Ar-COO-Ar)	174
10. Amina (R-NH ₂ ou R-NH-R' ou R-NR'-R'')	174
11. Amida (H-CONH ₂ ou R-CONH ₂ ou Ar-CONH ₂ ; ou	175
12. Nitrila (R-CN ou Ar-CN)	176
13. Nitrocompostos (R-NO ₂ ou Ar-NO ₂)	177
14. Anidridos	177
Capítulo 8 – Isomerias	181
1. Isomerias	183
1.1. Isomeria plana	184
1.2. Isomeria de posição	184
1.3. Isomeria de cadeia ou núcleo	185
1.4. Isomeria de função	186
1.5. Metameria ou isomeria de compensação	186
1.6. Tautomeria	187
1.7. Isomeria Espacial	187
1.8. Isomeria Geométrica (ou Cis-Trans)	188
1.9. Porque ocorre a isomeria Geométrica?	189
1.10. Isomeria Geométrica em Compostos de Cadeia Cíclica	191
1.11. Isomeria Ótica	191
2. Substâncias opticamente ativas e a luz polarizada	192
3. Assimetria Molecular	193
3.1. A assimetria molecular em compostos com carbono assimétrico	195
3.2. Compostos com 2 ou mais carbonos assimétricos	196
Sobre os autores	200

Apresentação

Com uma abordagem conceitual acerca dos princípios fundamentais da Química, o livro de Química Geral e Orgânica traz um breve relato histórico sobre ciências, com suas descobertas, métodos e importância. Após esse trecho introdutório, o livro mergulha nas questões próprias da Química, apresentando temas como estrutura orgânica, classificação periódica, ligações químicas, funções inorgânicas e orgânicas e isomerias.

O livro está subdividido em oito capítulos, conforme descrição a seguir. O Capítulo 1 apresenta um registro sobre algumas questões que justificam o ensino da Química na educação básica e ensino superior, conceituando-a e aproximando-a do contexto social, justificando a relevância desta disciplina para o mundo moderno. Discute ainda a apresentação da relação que existe entre Química e evolução tecnológica, sendo o conhecimento científico e seus métodos o caminho que impulsiona o crescimento da área.

O capítulo 2 é dedicado ao estudo da estrutura orgânica, seus principais modelos e os eventos científicos que contribuíram para o seu desenvolvimento. Segue no Capítulo 3 trabalhando classificação periódica, identificando os elementos químicos e seus agrupamentos. No Capítulo 4 aborda-se as ligações químicas, reconhecendo e descrevendo seus diversos tipos.

O Capítulo 5 tem como objetivo o reconhecimento das funções inorgânicas e a classificação dos ácidos, bases, sais e óxidos para, então, no Capítulo 6, chegarmos ao estudo mais específico da Química Orgânica, apresentando seus conceitos básicos, descrevendo as principais propriedades do Carbono, bem como procurando compreender o processo de hibridização do carbono e o encadeamento dos compostos orgânicos. No Capítulo 7 é apresentado um estudo sobre as funções orgânicas, cujo objetivo é reconhecer as suas funções e nomear corretamente seus compostos, entendendo as principais características dos compostos orgânicos.

Por fim, o Capítulo 8 é dedicado ao estudo das isomerias, apresentando o seu conceito, classificação e sua compreensão na geometria, ótica e assimetria molecular.

Esperamos que os conhecimentos químicos apresentados neste livro sejam de grande valia para o seu percurso acadêmico e com isso seja bem-sucedido nas disciplinas vindouras.

O autor

Capítulo

1

Química: Ciência central

Objetivos

- Conhecer um pouco da história da Química.
- Destacar algumas Descobertas importantes e alguns dos principais cientistas.
- Definir a Química e sua importância para a vida.
- Apresentar alguns conceitos fundamentais sobre ciência, metodologia e métodos científicos.

1. Por que estudar Química?

A Química está presente em todos os lugares e em todas as coisas que podemos ver ou tocar. Tudo em nosso planeta é formado por partículas, substâncias e elementos químicos. A indústria Química, por exemplo, trabalha utilizando os conhecimentos e procedimentos para a elaboração de novos produtos, alimentos e materiais de usos diversos. A Química está, portanto, intrinsecamente ligada ao desenvolvimento da humanidade, já que se relaciona diretamente com todas as transformações de materiais e com o desenvolvimento das teorias correspondentes.

A Química, enquanto Ciência, estuda os diferentes tipos de substâncias e a forma como interagem entre si. Da mesma forma que ocorrem com os fenômenos físicos, podemos identificar muitos fenômenos químicos em nosso dia-a-dia. Ao cozinhar alimentos, ao produzir plásticos ou medicamentos, ao utilizar produtos de limpeza ou cosméticos, estamos usufruindo de descobertas realizadas ao longo da história, pelos químicos. Se você parar para pensar no funcionamento do seu corpo, descobrirá que todas as funções orgânicas acontecem em virtude de reações químicas poderosas, que podem ser observadas indiretamente nos nossos movimentos, emoções e atitudes diárias.

1.1. A Importância dessa ciência na vida cotidiana

Os fenômenos e transformações que a Química estuda estão bastante presentes em nosso dia-a-dia. Um exemplo é quando o despertador toca e acordamos assustados, o que ocorre? Acordamos, abrimos os olhos e desligamos o despertador. Mas, de onde surge a energia para que isso ocorra? Para que todas as nossas atividades se realizem, é necessária a ingestão de alimentos, pois é através das substâncias presentes nos mesmos, por meio de reações

químicas catalisadas por enzimas específicas, que ocorrerá a liberação de energia, a qual irá possibilitar a realização de movimentos, a formação dos pensamentos e a decisão por determinadas atitudes por parte de uma pessoa. Outro exemplo que podemos citar é o computador. Mas, onde a Química está? Bem, ela está presente nos chips do computador, no plástico e no vidro do monitor, no metal dos circuitos e gabinetes da CPU.

Mas espere um pouco, e quando não estamos fazendo nenhuma atividade, simplesmente sentados, de olhos fechados, sem pensar em nada, as reações continuam ocorrendo em nosso corpo?

Como dito anteriormente, até mesmo nessa situação, seu organismo estará trabalhando, transformando açúcares e/ou gorduras em energia, pois sem alguns ATP's você não consegue nem mesmo ficar vivo. Além disso, o processo da respiração, que é necessário a qualquer pessoa para se manter viva, envolve diretamente a Química. O ar inspirado é na verdade, uma mistura de gases, oxigênio, gás carbônico e nitrogênio.

Logo, podemos concluir facilmente que a Química está em quase tudo que se imagina e que ela não é um objeto ou produto, mas sim, uma ciência que estuda transformações e fenômenos do nosso dia-a-dia, bem como, aqueles que ainda não sabemos existir!

Para Refletir

Observe a sua volta e cite um exemplo de algo que não esteja relacionado à Química. Justifique sua resposta.

A Química como ciência tem grande responsabilidade sobre o mundo. Defenda ou conteste essa afirmação.

Escolha 5 produtos utilizados por você, como por exemplo: sabonete, óleo de cozinha, perfume, talher e papel. Pesquise e liste as empresas que produzem esses artigos e identifique a composição química dos mesmos.

Você acha necessária a contratação de profissionais da área de Química para a fabricação desses produtos? Por quê?

2. O que é Química?

A Química é uma ciência natural que estuda a matéria e suas transformações. As principais áreas de estudo são: Química geral, orgânica, inorgânica, físico-química e bioquímica.

Poderíamos definir classicamente a Química como sendo a Ciência que trata das substâncias da natureza, dos elementos que a constituem, de suas características, propriedades combinatórias, processos de obtenção,

suas aplicações e sua identificação. Estuda a maneira que os elementos se ligam e reagem entre si, bem como, a energia desprendida ou absorvida durante estas transformações.

Uma vez que consideramos como matéria tudo que compõe o universo, tudo aquilo que vemos ou usamos faz parte do campo de estudos da Química. O corpo humano, por exemplo, é um fantástico palco onde ocorrem milhões de reações químicas simultâneas. Desta forma, podemos concluir que a Química está tão envolvida com todos os aspectos do nosso contato com o mundo material que faz sentido pensarmos na Química como sendo uma ciência central, parte de nossa cultura, tendo influência em todos os aspectos de nossas vidas.

Reflexão: Você já parou para pensar que, em última instância, tudo que existe é Química ou Física?

2.1. Um pouco de história!

Desde os primórdios da história a humanidade vem acumulando conhecimentos em Química. Na Idade dos Metais, por exemplo, o homem pré-histórico utilizou conhecimentos básicos para poder produzir metais. Sem o conhecimento de determinados minérios e suas características principais, isso se tornaria impossível. Já os egípcios, utilizaram conhecimentos de destilação e fermentação, para produzir algumas bebidas como a cerveja.

O filósofo grego Aristóteles acreditava que as substâncias eram formadas por quatro elementos: terra, vento, água e fogo. Paralelamente, outra teoria, o atomismo, postulava que a matéria era formada por átomos¹, partículas indivisíveis que se podiam considerar a unidade mínima da matéria. Esta teoria, proposta pelo filósofo grego Demócrito de Abdera não foi popular na cultura ocidental dado o peso das obras de Aristóteles na Europa. No entanto, tinha seguidores (entre eles Lucrécio) e a idéia ficou presente até o princípio da Idade Moderna.

Os árabes, no século VIII, muito colaboraram para o desenvolvimento da Química através da chamada alquimia². Eles buscavam produzir a pedra filosofal e obter o elixir da vida, e através destes estudos, descobriram a propriedade de diversas substâncias. Somente alguns séculos depois, já na época do Renascimento (séculos XV e XVI), é que a Química irá atingir um grande avanço. Diversos cientistas, ansiosos em descobrir o funcionamento da natureza, vão embarcar em profundas experiências científicas, desenvolvendo diversos conhecimentos químicos.

A história da Química está intrinsecamente ligada ao desenvolvimento da sociedade humana, já que engloba todas as transformações de matérias

¹O átomo é a menor partícula que ainda caracteriza um elemento químico. Ele apresenta um núcleo com carga positiva que apresenta quase toda sua massa (mais que 99,9%) e n elétrons determinando o seu tamanho.

²A Alquimia é uma tradição antiga que combina elementos de química, física, astrologia, arte, metalurgia, medicina, misticismo e religião. Existem três objetivos principais na sua prática. Um dos principais objetivos desta prática era a obtenção do Elixir da Longa Vida.

³Lei de Boyle diz que: “Sob temperatura constante (condições isotermas), o produto da pressão e do volume de uma massa gasosa é constante, sendo, portanto, inversamente proporcionais. Qualquer aumento de pressão produz uma diminuição de volume e qualquer aumento de volume produz uma diminuição de pressão.”

⁴Segundo a teoria do flogístico, os corpos combustíveis teriam como constituinte ativo um elemento chamado flogístico, que no momento da combustão abandonaria o corpo, alterando suas características.

e as teorias correspondentes. Considera-se que os princípios básicos da Química são reconhecidos pela primeira vez na obra do cientista britânico Robert Boyle³: *The Sceptical Chymist* (1661). A Química, como conhecemos hoje, começa a ser estudada um século mais tarde, com os trabalhos do francês Antoine Lavoisier e as suas importantes descobertas em relação ao oxigênio, à famosa lei da conservação da massa e à refutação da teoria do flogístico⁴ como teoria da combustão.

2.2. As quatro principais eras da Química

De forma resumida, a história da Química costuma ser dividida em quatro eras ou fases principais:

a) Fase ou Era I - Magia negra, dos tempos pré-históricos ao início da Era Cristã

Pouco conhecimento químico foi conseguido nesta era, pois o misticismo e a superstição prevaleceram sobre o conhecimento científico. As pessoas acreditavam que os processos eram controlados pelos espíritos que utilizavam a magia em seu favor.

Apesar desses fatores, alguns elementos tais como o ferro, ouro e cobre foram reconhecidos. Durante este tempo, os filósofos gregos especularam sobre a composição da matéria. Eles acreditavam que a terra, ar, fogo e água eram os elementos básicos que compunham toda a matéria.

No final dessa era, descobriu-se que o ferro poderia ser conseguido a partir de uma rocha marrom escura, e o bronze poderia ser obtido combinando-se cobre e latão. Isso os levou a imaginar que se uma substância amarela pudesse ser combinada com uma mais dura, poderia obter-se ouro. A crença que o ouro poderia ser obtido a partir de outras substâncias iniciou uma nova era conhecida como Alquimia.

b) Fase ou Era 2 – Alquimia, do início da Era Cristã à metade do século XVII

Essa foi uma longa era em que os alquimistas acreditavam que metais podiam ser convertidos em ouro por alquimia utilizando o que eles chamavam de “pedra filosofal”. Apesar dessa pedra nunca ter sido encontrada, muitas descobertas de novos elementos e compostos ocorreram durante esse longo período.

O último químico influente nesta era foi Robert Boyle que rejeitou as teorias científicas vigentes e iniciou uma listagem de elementos que ainda hoje é

reconhecida. Ele também formulou uma Lei relacionando o volume e pressão dos gases (a Lei de Boyle). Em 1661, ele fundou uma sociedade científica que mais tarde tornaria-se conhecida como a Sociedade Real da Inglaterra.

c) Fase ou Era 3 - Química Tradicional, da metade do século XVII ao meio do século XIX

Nesta fase, os cientistas já estavam usando "métodos modernos" de descobertas testando teorias com experimentos. Uma das grandes controvérsias durante este período foi o mistério da combustão. O primeiro químico que provou que o oxigênio é essencial à combustão foi Joseph Priestly. Ambos o oxigênio e o hidrogênio foram descobertos durante este período. Foi o químico francês Antoine Laurent Lavoisier quem formulou a teoria atualmente aceita sobre a combustão. Esta era marcou um período aonde os cientistas usaram o "método moderno" de testar teorias com experimentos. Isso originou uma nova era, conhecida como Química Moderna, também conhecida como Química atômica.

d) Fase ou Era 4 - Química Moderna, Da metade do século XIX até hoje

Foi nesta Era que a Química realmente floresceu. As teses de Lavoisier deram aos químicos a primeira compreensão sólida sobre a natureza das reações químicas. O trabalho de Lavoisier levou um professor inglês chamado John Dalton a formular a teoria atômica. Neste mesmo período, um químico italiano chamado Avogadro formulou uma teoria que ficou conhecida como a *Lei de Avogadro*⁵, relacionada às moléculas e suas relações com temperatura e pressão.

Lá pela metade do século XIX, já haviam sido identificados aproximadamente 60 elementos químicos. Foi então que Dmitri Mendeleev publicou a sua primeira tabela periódica. Esse trabalho estabeleceu a fundação da Química teórica. Em 1896, Henri Becquerel e os Curies descobriram o fenômeno chamado de *radioatividade*⁶, o que estabeleceu o início do desenvolvimento da Química nuclear. Em 1919, Ernest Rutherford estipulou as bases para a interpretação da estrutura atômica. Pouco depois, outro químico, Niels Bohr, finalizou a teoria atômica. Estes e outros avanços criaram muitos ramos distintos na Química, que incluem, entre outros ramos: bioquímica, Química nuclear, Engenharia Química e Química orgânica.

Antes de prosseguir, faça o seguinte questionamento:

Qual a minha atitude em relação à Química?

Antes de iniciar o estudo da Química e sua relação com a natureza e os fenômenos físicos, químicos e biológicos do nosso planeta, é muito importante que nós façamos uma reflexão para descobirmos se há algum precon-

⁵Lei de Avogadro diz que: "Gases que ocupam o mesmo volume, nas mesmas condições de temperatura e pressão, contêm o mesmo número de moléculas. Isto quer dizer que à mesma pressão e temperatura, o volume que um gás ocupa é proporcional à quantidade de moléculas desse gás existentes em um recipiente".

⁶A radioatividade é um fenômeno pelo qual algumas substâncias são capazes de emitir radiações, as quais têm a propriedade de impressionar placas fotográficas, ionizar gases, produzir fluorescência, atravessar corpos opacos à luz ordinária, etc. As radiações emitidas pelas substâncias radioativas são principalmente partículas alfa, partículas beta e raios gama.

ceito e qual a visão de cada um sobre Química, ciência e tecnologia. Muitos imaginam as ciências básicas como um bicho de sete cabeças, e conseqüentemente tem uma atitude de simplesmente não tentar compreender seus conceitos básicos, gerando um “bloqueio” no aprendizado e entendimento. A Química precisa, antes de tudo, ser desmistificada. Estudar Química pode ser algo divertido e muito interessante! Pense nisso.

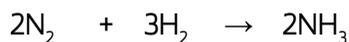
3. Química e Tecnologia

⁷A Revolução Industrial consistiu em um conjunto de mudanças tecnológicas com profundo impacto no processo produtivo em nível econômico e social. Iniciada na Inglaterra em meados do século XVIII expandiu-se pelo mundo a partir do século XIX.

Nos últimos 150 anos, o conhecimento científico tem experimentado um enorme crescimento, dinâmico e cumulativo, tendo sido utilizado extensivamente pela população do chamado mundo desenvolvido. Desde a chamada revolução industrial⁷ da Inglaterra, a tecnologia⁸ tem fornecido os meios para a produção mais rápida de bens de consumo. Essa evolução tecnológica tem causado um efeito curioso de dependência da população em relação à tecnologia. Entretanto, da mesma forma que estão cada vez mais dependentes, as pessoas estão se questionando cada vez mais sobre o quê a tecnologia pode trazer de bom para o futuro da humanidade, muito embora elas sejam as mesmas que requerem, cada vez mais, avanços da mesma tecnologia que questionam. Tomemos como exemplo problemas ambientais como a poluição atmosférica e o efeito estufa, tiveram sua origem no momento em que combustíveis fósseis, como o carvão e o petróleo, começaram a ser utilizados à 200 anos atrás. Um outro exemplo marcante do impacto tecnológico sobre a sociedade é o desenvolvimento das técnicas de produção de amônia. Vejamos porque?

⁸Tecnologia química: é um conjunto de conhecimentos que permite a promoção e o domínio dos fenômenos que obedecem as Leis Naturais, as que regem a transformação da matéria, para benefício do homem.

No final do século XIX, a sociedade inglesa industrializada começou a sofrer um processo de migração do campo para a cidade e os cientistas previram que haveria um surto de fome generalizada, se não fossem desenvolvidos métodos para aumentar a produção agrícola. Os cientistas acharam que o suprimento de comida seria dependente do suprimento de fertilizantes à base de nitrogênio, que eram obtidos exclusivamente das minas de guano (esterco de aves) do Peru e do salitre (nitrato de sódio) do Chile. A Inglaterra industrial, naquela época, já importava a maioria da comida que consumia. O curioso é que enquanto a Inglaterra estava interessada no nitrogênio para fertilizantes, a Alemanha estava interessada no nitrogênio para explosivos, pois os alemães temiam que a marinha inglesa tivesse o potencial de bloquear os navios alemães do acesso vital aos compostos nitrogenados só encontráveis na América do Sul. O exército alemão, então, financiou a indústria daquele país, e em 1911 a primeira planta industrial de produção de amônia a partir do nitrogênio do ar estava em operação. A produção de amônia pode ser ilustrada através do seguinte esquema reacional:



Hoje, o processo de produção de amônia (Figura 1) conhecido como processo de Haber-Bosch é utilizado para produzir 40.000 toneladas de amônia por dia só nos Estados Unidos.

A Química está, sem dúvida alguma, na base do desenvolvimento econômico e tecnológico de qualquer nação. De setores como siderurgia à indústria da informática, das artes à construção civil, da agricultura à indústria aeroespacial, não há área ou setor da economia que não utilize em seus processos ou produtos algum insumo de origem química. Com alto grau de desenvolvimento científico e tecnológico, a indústria Química transforma elementos presentes na natureza em produtos úteis ao homem. Substâncias são modificadas e recombinadas, através de avançados processos, para gerar matérias-primas que serão empregadas na formulação de medicamentos, na geração de energia, na produção de alimentos, na purificação da água, na fabricação de bens como automóveis e computadores, na construção de moradias e na produção de uma infinidade de itens, como roupas, utensílios domésticos e artigos de higiene que estão no dia-a-dia da vida moderna. Essa aplicação direta da Química no desenvolvimento de produtos com aplicações na melhoria de vida da população é o que chamamos de tecnologia.

Por exemplo, a Química está presente em praticamente todos os medicamentos modernos. Sem ela, os cientistas não poderiam criar novas moléculas, que curam doenças e fortalecem a saúde humana. Como você acha que acontece a ação de um medicamento no combate de determinada doença?

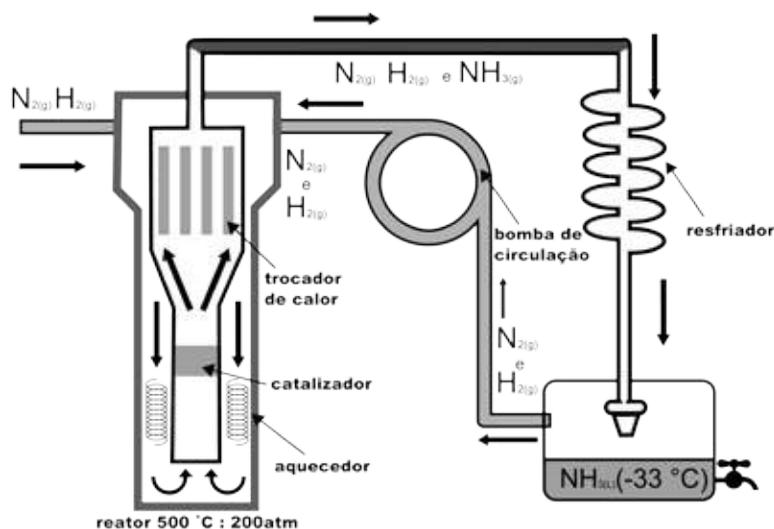


Figura 1 - esquema do processo de Heber-Bosch

Só para deixá-lo mais surpreso gostaríamos novamente chamar a atenção para o fato de que a aplicação da Química vai muito além dos medicamentos. Ela proporciona à espécie humana de outros cuidados que prolongam e protegem a vida. Fornecedor de uma quantidade fantástica de produtos básicos para outras indústrias, o setor químico também desenvolveu matérias-primas específicas para a medicina. Válvulas cardíacas, próteses anatômicas, seringas descartáveis, luvas cirúrgicas, recipientes para soro, tubos flexíveis e atóxicos e embalagens para coleta e armazenamento de sangue são apenas alguns dos exemplos dos produtos de origem química que revolucionaram a medicina. Os médicos, hospitais, clínicas, laboratórios, enfermarias e unidades de terapia intensiva têm na Química uma parceira indispensável. Os modernos equipamentos utilizados em cirurgias ou diagnósticos foram fabricados com matérias-primas químicas. Avançados desinfetantes combatem o risco de infecções. Reagentes aceleram o resultado de exames laboratoriais. Na medicina, mais do que em qualquer outra atividade, fica patente que Química é vida.

Um dos principais ramos industriais da Química é o segmento petroquímico. A partir do eteno, derivado do petróleo ou diretamente do gás natural, a petroquímica dá origem a uma série de matérias-primas que permite ao homem fabricar novos materiais, substituindo com vantagens a madeira, peles de animais e outros produtos naturais. O plástico, as resinas e as fibras sintéticas são alguns desses produtos. Nas empresas transformadoras, as resinas darão origem a autopeças, componentes para computadores e para as indústrias aeroespacial e eletroeletrônica, entre outros. Os produtos das centrais petroquímicas também são utilizados para fabricação de matérias-primas para a produção dos fios e fibras de poliéster, de náilon, acrílicos e do elastano. As fibras sintéticas, em associação ou não com fibras naturais como o algodão e a lã, são transformadas em artigos têxteis e em produtos utilizados por diferentes indústrias. E, a cada dia, surgem novas aplicações para as fibras sintéticas e para as resinas termoplásticas. Resultado: maior produção, menores preços e maior facilidade de acesso da população aos bens de consumo, é a Química gerando mais qualidade de vida!

Imagine um mundo diferente! Feito de veículos totalmente recicláveis, produtos que, ao entrar em contato com o solo, são degradados e se transformam em substâncias que ajudam a recuperar a fertilidade da terra. Plantações de vegetais que produzem plásticos. Combustíveis de alto rendimento energético e não-poluentes. Medicamentos ainda mais eficazes. Recuperação de áreas devastadas por séculos de exploração. Sonhos? Não para a Química, uma ciência⁹ que constantemente amplia as fronteiras do conhecimento. Voltada para o futuro, a indústria química investe grande parte do seu faturamento em pesquisa e desenvolvimento. Foi a indústria química que, com as fibras

⁹Ciência é o processo pelo qual o homem se relaciona com os fenômenos universais que se sujeitam à regra científica fundamental.

sintéticas, permitiu ao setor têxtil ampliar a produção e baratear os preços das roupas. Com os plásticos, foram criadas embalagens que conservam alimentos e remédios por longos períodos, tubos resistentes à corrosão e peças e componentes utilizados pelas mais diferentes indústrias. Da mesma forma, será a indústria química que facilitará ao homem desenvolver processos e materiais que lhe permitirão assegurar alimento, moradia e conforto às novas gerações. Muito do futuro do homem e do planeta está sendo desenhado pela Química e felizmente hoje, muitas discussões a cerca de questões sociais, econômicas e ambientais, aliadas ao desenvolvimento natural do conhecimento científico e tecnológico, têm proporcionado o surgimento de uma nova era, onde a Química continuará cumprindo seu papel transformador do mundo em que vivemos, porém de maneira mais responsável.

3.1 Qual é a diferença entre ciência e tecnologia?

Uma forma de entender melhor essa diferença é separar o conhecimento científico em ciência básica, ciência aplicada e tecnologia.

A ciência básica procura a compreensão das coisas sem nenhum objetivo prático eminente, ou imediato. Um exemplo de pesquisa básica é a tentativa de se determinar a composição química de um composto, da forma como os seus átomos constituintes estão interligados, qual a forma da molécula, etc.

A ciência aplicada tem objetivos pré-determinados, de curto prazo, buscando a solução para um determinado problema. Por exemplo, depois que a ação antibacteriana da penicilina foi descoberta, foi feita pesquisa aplicada para a determinação da efetividade da penicilina sobre diferentes tipos de infecções bacterianas.

Tecnologia pode ser definida como o conjunto complexo de técnicas, artes e ofícios capazes de modificar/transformar o ambiente natural, social e humano (cognitivo), em novas realidades construídas artificialmente. Em outras palavras, é a forma que temos de empregar o conhecimento científico para obter resultados e aplicações práticas. Formas de produzir, por exemplo, novos medicamentos, melhores plásticos, carros mais velozes, armas nucleares, ração de frangos para a produção de ovos com menos colesterol, etc, são exemplos de tecnologia.

3.2 Mas o que é ciência?

Não é fácil definir ciência, e são inúmeros os tratados que abordam sobre esse tema. Talvez a melhor definição seja a derivada da palavra latina *scientia*, que significa "conhecimento". É uma atividade humana envolvida na acumulação de conhecimento sobre tudo que nos cerca. É a esfera da atividade

¹⁰“Fatos são os dados do mundo. Teorias são estruturas de idéias que explicam e interpretam os fatos.” - Stephen Jay Gould

humana responsável por investigar o mundo ao nosso redor. A ciência envolve compreensão, correlação, e a habilidade de explicar determinados fatos¹⁰ estabelecidos, geralmente em termos de uma causa física para a ocorrência de um fato observado.

O estudo da matéria e suas transformações, que consiste na introdução de conceitos básicos de matéria, substância, corpo, objeto, molécula, átomo, íon, anti-matéria, energia e seus tipos. O estudo dos estados físicos da matéria, as mudanças de estado e os tipos de fenômenos que podem ocorrer com a matéria permitiram caracterizar as transformações que ocorrem com a matéria (fenômenos) e as conseqüências dessas transformações (tipos de fenômenos).

A **ciência** é o estudo dessas transformações e tipos que caracterizam o fenômeno. Cada um dos tipos de transformações caracteriza um ramo da ciência, assim:

- Fenômenos biológicos serão estudados e desenvolvidos pela Biologia.
- Fenômenos físicos serão estudados e desenvolvidos pela Física.
- Fenômenos químicos serão estudados e desenvolvidos pela Química.

4. Os métodos da ciência

Apesar de existir relatos históricos de descobertas científicas que ocorreram por acidente ou como resultados de idéias brilhantes, a maior parte do conhecimento científico é resultado de investigações ou pesquisas cuidadosamente planejadas, conduzidas por cientistas treinados e capacitados, que utilizam técnicas conhecidas como “método científico”.

4.1 O que é Método?

Método, entre outras coisas, significa caminho para chegar a um fim ou pelo qual se atinge um objetivo.

Uma das definições clássicas de método diz tratar-se de um conjunto de etapas ordenadamente dispostas a serem executadas com finalidade de investigar fenômenos naturais ou sistemas físicos (produtos ou processos) para a obtenção de conhecimentos.

Na ciência existe a necessidade de utilizar-se uma ferramenta para a aquisição e construção do conhecimento, que se denomina: método científico.

O método científico é um conjunto de regras básicas para desenvolver uma experiência a fim de produzir um novo conhecimento, bem como corrigir e integrar conhecimentos pré-existentes. A maioria das disciplinas científicas consiste em juntar evidências observáveis, empíricas, baseadas apenas na experi-

ência) e mensuráveis e as analisar com o uso da lógica. Para muitos autores, o método científico nada mais é do que a lógica aplicada à ciência.

O objetivo do método é produzir um conhecimento teórico prático aplicável, que possa ser utilizado diretamente para previsão, explicação e controle de fenômenos, produtos e processos.

Metodologia científica são os procedimentos lógicos de abordar a resolução de problemas que se prestam à investigação. É o caminho trilhado pelo cientista quando em busca de "verdades" científicas.

A metodologia científica pode ser definida como um método lógico para resolver problemas científicos e que pode incluir a seguintes etapas:

1. Observação, ou resultados obtidos por experimentos;
2. Raciocínio indutivo para interpretar e classificar os fatos de acordo com uma afirmação generalizada, ou lei;
3. Formulação da hipótese, ou especulação sobre como explicar os fatos ou observações realizadas;
4. Raciocínio dedutivo, para testar a hipótese com experimentos cuidadosamente preparados;
5. Elaboração de teorias, ou de modelos para a explicação das leis.

Para compreender melhor observe a figura abaixo atentamente!

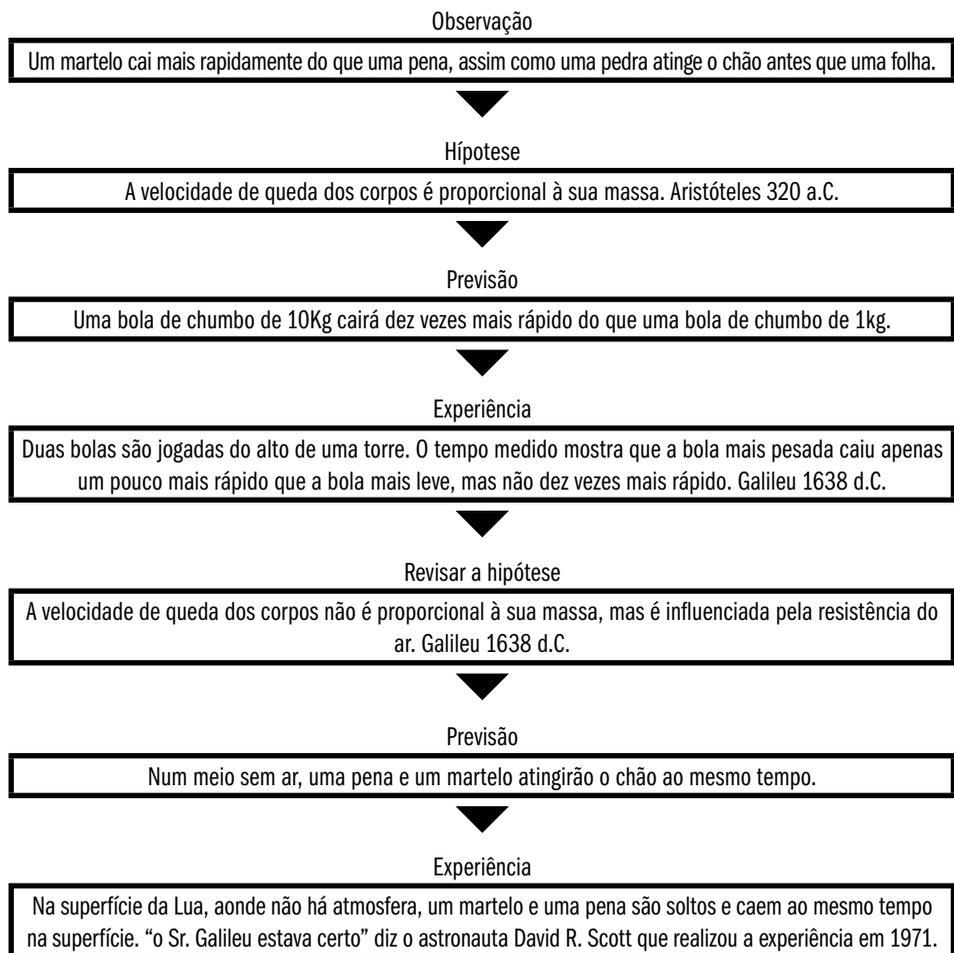


Figura 2 - Metodologia Científica Esquematizado.

Os químicos, como os outros cientistas, esforçam-se por explicar grande número de observações, relacionando-as sob a forma de princípios gerais ou generalizações. Toda pesquisa científica básica é dedicada à descoberta desses princípios. As generalizações que descrevem o comportamento da natureza são chamadas de "leis ou princípios".

A ciência nos obriga a fazer duas perguntas importantes: "o que é?" e "por quê?". Quando um cientista observa um acontecimento ou situação na natureza, ao qual se dá o nome de fenômeno, procura a resposta a essas perguntas realizando investigações sistemáticas, disciplinadas e persistentes.

Normalmente, considera-se que existem quatro fases distintas na aplicação dos métodos científicos: Observação - generalização - teorização e verificação. Entretanto, a criatividade, imaginação e atitude mental do cientista é geralmente mais importante do que a seqüência destes procedimentos. Observe o quadro na próxima página:



a) Observação

A observação é considerada uma etapa do método científico de pesquisa e estudo. Ela consiste basicamente em perceber, ver e não interpretar. Ou seja, a observação é relatada como foi visualizada, sem que as idéias interpretativas dos observadores sejam tomadas. Em ciência, só pode se hipotetizar a situação apresentada após uma descrição minuciosa do ambiente e dos objetos de estudo. Um dos critérios da observação científica é a capacidade do observador de não interferir no ambiente ou nos processos Observados.

O cientista deve acumular o maior número possível de dados fidedignos sobre um fenômeno observado, sendo o seu interesse inicial concentrado sobre o que realmente ocorre. Estes dados podem originar-se de observações diretas, de uma pesquisa na literatura científica em busca de informações anteriormente relatadas e de experiências bem planejadas e habilmente realizadas.

Para os químicos a observação é mais produtiva quando se controla as condições que a afeta. Assim, a Observação geralmente é feita no laboratório, onde as condições podem ser controladas ao critério do Observador.

Os principais tipos de observação:

- **Observação assistemática:** não existe planejamento nem controle previamente elaborados;
- **Observação sistemática:** tem planejamento, realiza-se em condições controladas para corresponder aos propósitos pré-estabelecidos;
- **Observação individual:** realizada por apenas um pesquisador;
- **Observação em equipe:** é realizada por um grupo de pesquisadores.

b) Experiência

Outra etapa muito importante do método científico caracterizada por uma seqüência de observações realizadas sob condições controladas. A experimentação proporciona a base sobre a qual se constrói a ciência moderna. Provoca-se o mesmo fenômeno várias vezes, registrando-se todas as possíveis variações e valores relacionados a ele. Nessa fase são feitas cuidadosas medições.

As experiências não necessariamente envolvem as bancadas de um laboratório ou tubos de ensaio. No entanto, elas precisam ser bem planejadas e montadas de forma a testar uma hipótese específica e precisam ser controladas. Controlar uma experiência significa controlar todas as variáveis, de modo que apenas uma esteja aberta a estudo. Monitorar é registrar os dados observados.

Controlar uma experiência também significa montá-la de forma que haja um grupo de controle e um grupo experimental. O grupo de controle permite que o responsável pela experiência estabeleça um parâmetro de compara-

ção, com números que ele possa confiar e que não resultem das mudanças geradas pela experiência.

Você seria capaz de montar um experimento controlado? Exemplifique.

c) Generalização

Nesta etapa, o cientista organiza os dados obtidos e procura analisar e fazer correlações entre eles. O volume de análise necessário para chegar a uma conclusão pode variar amplamente. As relações encontradas podem permitir-lhe formular uma ampla generalização descrevendo o que acontece. Depois da análise dos dados do experimento, elabora-se uma Lei Científica, que é uma generalização que relaciona os dados que foram estudados. É importante notar que a Lei Científica não é a explicação do por que daquilo, mas apenas uma descrição do fenômeno.

Durante uma experiência, os cientistas reúnem dados quantitativos e qualitativos. Em meio a essas informações, podem ter indícios que irão ajudar a manter ou a rejeitar uma hipótese. Como a experiência de Pasteur dependia de observações qualitativas sobre a aparência do caldo, a análise era bem simples. Ocasionalmente, é preciso usar ferramentas analíticas sofisticadas para analisar os dados. De qualquer forma, o objetivo final é provar ou negar uma hipótese e, ao fazê-lo, responder à pergunta original.

d) Criação de Hipóteses

A hipótese é considerada uma proposição que se aceita de forma provisória como princípio do qual se pode deduzir pelas regras da lógica um mecanismo da experiência a explicar. Também pode ser entendida como uma suposição ou pergunta, que orienta uma investigação por antecipar as características prováveis do objeto investigado e que torna-se válida pela confirmação através de deduções lógicas dessas características ou pela descoberta de novos caminhos de investigação.

No processo de criação de hipóteses, imagina-se explicações para o fenômeno e sua lei. A procura da explicação leva, muitas vezes à criação de um modelo. A hipótese ou modelo mais simples e elegante é escolhido como provável explicação para o fenômeno estudado.

Quando um cientista entendeu o que ocorre, ele está pronto para passar a tarefa mais estimulante de determinar "por que" o fenômeno ocorre – a formação da teoria. Nesse momento, uma imaginação criadora é muito importante para formar e aperfeiçoar uma explicação plausível, construindo um modelo simples, físico ou mental, que relacionará o comportamento observado com fenômenos familiares e bem compreendidos.

Para o cientista, a hipótese, tem dois objetivos principais: explicar um fato e prever outros acontecimentos dele decorrentes. A hipótese deverá ser testada em experiências laboratoriais controladas. Se, após muitas dessas experiências, os resultados obtidos pelos pesquisadores não contrariarem a hipótese, então ela será aceita como uma lei e integrada à uma teoria e/ou sistema teórico.

e) Verificação ou teste das hipóteses

Uma vez aperfeiçoada uma teoria aparentemente satisfatória, ela deve ser verificada repetidamente até estabelecer-se uma validade. Os cientistas verificam continuamente os dados de observação e experiências e as previsões baseadas em princípios conhecidos, submetendo-se a novas e engenhosas experiências. Só se conserva uma teoria enquanto ela é útil, podendo ser abandonada ou modificada pelos resultados de novas experiências.

A hipótese escolhida deve resistir e experiências comprobatórias e explicar novas observações e fenômenos. O modelo relacionado a esta hipótese deve ser capaz de fazer previsões sobre fenômenos que ainda vão ocorrer. Se a hipótese estiver errada, dependendo do grau de erro, ela deve ser melhorada, parcialmente corrigida ou abandonada ou substituída por outra hipótese.

Uma teoria que resiste a verificação científica é bem valiosa para os cientistas porque estimula imaginação e serve como base para a previsão de comportamentos até então não investigados. Este é o ponto chave do método científico e o incentivo real para o desenvolvimento da ciência.

Os princípios da Química são estudados com maior eficiência e mais facilmente compreendidos quando as leis e a prova experimental que compõe um conjunto de conhecimentos correlatos são reunidos sob a forma de uma teoria geral relativa ao comportamento da matéria. Dessa forma, os químicos usam o termo "teoria" num sentido geral. Alguns exemplos de teorias químicas que poderemos estudar são : "teoria cinética", "teoria atômica", "teoria da ionização", etc.

Síntese do Capítulo



Conhecemos um pouco da história da Química e suas principais eras, com destaque para algumas descobertas importantes e alguns dos principais cientistas. Definiu-se também o que é Química, sua importância para a vida e para o mundo e a relação existente entre química e tecnologia, mostrando alguns inventos e aplicações importantes que estão presentes em nosso cotidiano.

Por fim, conhecemos alguns conceitos fundamentais sobre ciência, metodologia e métodos científicos, descrevendo e explicando suas principais etapas.

Atividades de avaliação



1. Henri Poincaré disse: "Um punhado de fatos não é mais ciência do que um punhado de tijolos é uma casa".

O que ele quis dizer com isso?

2. Se a Ciência está em constante evolução, as "verdades" são apenas temporárias? Pode existir uma verdade temporária? Justifique sua resposta:

3. Leia os itens abaixo:

- O calor dilata o ferro;
- O calor dilata o cobre;
- O calor dilata o bronze;
- O ferro, o cobre e o bronze são metais.
- Logo, o calor dilata os metais.

A conclusão apresentada acima é exemplo de que método?

4. Pesquise sobre os assuntos abaixo e encontre a idéia fundamental de cada um dos métodos:

- Observacional;
- Comparativo;
- Experimental.

5. Conceitue:

- a) Ciência, método e método Científico.
- b) O que caracteriza o método indutivo.
- c) O que caracteriza o método dedutivo.

Leituras, filmes e sites



Leituras

SAGAN, Carl – O mundo assombrado pelos demônios. Companhia das Letras Sem sombra de dúvida, o livro mais central desta bibliografia. Numa síntese tremendamente acurada e agradável, Carl Sagan (considerado por muitos como o maior divulgador de ciência de todos os tempos) faz uma exposição do método científico e da maneira como ele é sistematicamente ignorado pela maior parte da população. Isso tem contribuído para produzir pessoas desinformadas e sem capacidade crítica, o que para Sagan constitui grande perigo para a sociedade como um todo. A forma apaixonante e lúcida com que ele descreve e faz a defesa da ciência tornaram seu último livro uma referência para cursos de metodologia e divulgação científica.

MARCONI, Marina de Andrade e LAKATOS Eva Maria - Metodologia Científica - Atlas – 3ª edição. Tradicional livro que sistematiza a teorização sobre metodologia da ciência. Bastante completo, aborda múltiplos aspectos do assunto.

DAWKINS, Richard. Desvendando o arco-íris: ciência, ilusão e encantamento - Companhia das Letras. Um livro que vai na mesma linha que o de Carl Sagan, embora não seja tão completo e coeso quanto aquele. Dawkins é um dos maiores defensores da ciência e do método científico na atualidade, e faz essa defesa com uma linguagem extremamente sedutora e convincente

STRATHERN, Paul. O sonho de Mendeleiev: a verdadeira história da Química - J. Zahar. Paul Strathern mostra todos os passos dos cientistas em busca dos elementos químicos, desde os físicos gregos, passando pela Química medieval, até chegar à fissão do átomo. A medida que apresenta as descobertas no campo da Química, traça uma biografia de cada um de seus agentes: Hermes Trimegisto, Paracelso, Avicena, Giordano Bruno, Galileu, Dmitri Mendeleiev e Antoine Lavoisier, entre outros.

FARIAS, Robson Fernandes de. Para gostar de ler a história da Química. Para gostar de ler a história da Química constitui-se em livro sobre a história e desenvolvimento da ciência Química, procurando, contudo, fugir aos moldes dos textos tradicionais, se apresentado numa espécie de livro de crônicas. Não se utiliza aqui uma narrativa que obedeça a qualquer

ordem cronológica, começando pela protoquímica e os alquimistas, como normalmente se verifica. O texto sob forma de crônica apresenta as vantagens inerentes a este tipo de construção literária, a saber, leveza e coloquialidade de linguagem, tornando o texto mais atraente para o leitor. A presente obra, contém elementos para enriquecer seus conhecimentos e ampliar sua visão crítica sobre esta ciência.

Sites

- <http://www.woodrow.org/teachers/ci/1992/> - Biografia dos maiores Químicos
- <http://www.exatas.com/quimica/historia.html> - História da Química

Referências



CHASSOT, A. **A ciência através dos tempos**. São Paulo: Editora Moderna, 1994.

GOLDFARB, A. M. **Da alquimia a Química moderna**: um estudo do pensamento mágico vitalista ao mecanicismo. São Paulo, Editora Landy, 2001.

ALVES, R. **Filosofia da ciência**: introdução ao jogo e suas regras. São Paulo, Edições Loyola, 2003.

STRATHERN, P. **O Sonho de Mendeleev** – a verdadeira História da Química. Cidade:, Editora J. Zahar, 2002.

COUTEOUR, P. L., BURRESON, J., - **Os botões de Napoleão**. Cidade:, Editora J. Zahar, 2006.

Capítulo

2

Estrutura atômica

Objetivos

- Descrever os modelos atômicos de Dalton, J. J. Thomson, E. Rutherford, Bohr e o modelo do átomo da mecânica quântica.
- Conhecer os eventos científicos que contribuíram para o desenvolvimento dos modelos atômicos.
- Detalhar a constituição moderna da matéria.
- Definir os princípios que deram origem ao modelo atual do átomo.
- Identificar as propriedades dos números quânticos.
- Escrever a configuração eletrônica dos elementos.

1. Os primeiros modelos atômicos

Alguns filósofos da Grécia antiga já admitiam que toda e qualquer matéria seria formada por minúsculas partículas indivisíveis, constituintes fundamentais da matéria, que foram denominadas átomos, que em grego, significa indivisível.

Tradicionalmente, Leucipo é considerado o mestre de Demócrito e, talvez, o verdadeiro criador do atomismo (segundo a tese de Aristóteles). Leucipo viveu por volta de 450 a. C. e dizia que a matéria podia ser dividida em partículas cada vez menores, até chegar-se a um limite.

Por volta de 400 anos a.C. filósofo grego Demócrito sugeriu que a matéria não era contínua, isto é, ela era feita de minúsculas partículas indivisíveis. Essas partículas foram chamadas de átomos. Demócrito postulou que todas as variedades de matéria resultam da combinação de átomos de quatro elementos: terra, ar, fogo e água.

Demócrito baseou seu modelo principalmente na intuição e na lógica. No entanto, o modelo foi rejeitado por um dos maiores lógicos de todos os tempos, o filósofo Aristóteles. Este reviveu e fortaleceu o modelo de matéria contínua, ou seja, a matéria como “um inteiro”. Os argumentos de Aristóteles permaneceram até a Renascença. Entretanto, todo modelo não deve ser somente lógico, mas também deve ser consistente com a experiência, e no século XVII, algumas experiências demonstraram que o comportamento das substâncias era inconsistente com a idéia de matéria contínua e o modelo de Aristóteles desmoronou. No entanto, foi somente no século XIX que o cientista inglês John Dalton, com base em inúmeras experiências, conseguiu provar cientificamente a idéia de átomo. Surgiu então a teoria atômica clássica da matéria.

1.1. O modelo de Dalton

Químico e físico inglês, considerado o fundador da teoria atômica moderna, John Dalton nasceu em Eaglesfield, Cumberland, em 1766, e faleceu em Manchester, em 27 de julho de 1844. Dalton dedicou a vida ao ensino e à pesquisa. Com apenas 11 anos, substituiu seu professor John Fletcher, na Quaker's School de Eaglesfield. Observador atento, seu nome entrou para a história da ciência tanto por suas teorias químicas quanto pela descoberta e descrição de uma anomalia da visão das cores: o daltonismo. Dalton percebeu ainda jovem, sua cegueira para algumas cores.

Dalton apresentou sua teoria atômica numa série de conferências que proferiu na Royal Institution de Londres. Em 1807, com o seu consentimento, Thomas Thomson incluiu um sumário da teoria atômica na terceira edição de sua obra *System of chemistry* (Sistema de Química). Dalton, no ano seguinte, no primeiro volume do seu *New system of chemical philosophy* (Novo sistema de filosofia Química), apresentou as bases de sua nova teoria.

Dalton afirmava que o átomo era a partícula elementar, a menor partícula que constituía a matéria e eram esferas de diferentes tipos (tipo 1, 2, 3, ...) em relação a quantidades de átomos conhecidos. De acordo com sua teoria, a matéria era constituída de diminutas partículas amontoadas (figura 2). Sua estrutura atômica representava o átomo como uma “bola” maciça e, por esse motivo, o seu modelo atômico, ficou então conhecido como “bola de bilhar”. Segundo esse modelo, quando olhamos, por exemplo, para um grão de ferro ou de areia, devemos imaginá-los como sendo formado por um aglomerado de um número enorme de átomos.

Apesar de bastante simples, esse modelo proposto por Dalton deu um grande salto na elaboração de um modelo atômico, pois foi o mesmo que instigou a busca por algumas respostas e proposições de futuros modelos. Embora baseada em alguns princípios inexatos, a teoria atômica de Dalton, por sua extraordinária concepção, revolucionou a Química moderna.

O modelo de Dalton estava baseado nas seguintes hipóteses:

1. Tudo que existe na natureza é formado por diminutas partículas denominadas átomos;
2. Os átomos são entidades indivisíveis, intransformáveis e indestrutíveis;
3. Existe um número limitado e pequeno de elementos químicos diferentes na natureza;
4. Reunindo átomos iguais ou diferentes, em diferentes proporções, poderia formar todas as matérias do universo, até então conhecidas.

a) A Lei das Proporções Múltiplas

Partindo das investigações iniciais sobre a composição de diferentes óxidos de nitrogênio, Dalton estabeleceu a chamada Lei das Proporções Múltiplas, também conhecida como Lei de Dalton.

A Lei de Dalton das proporções múltiplas diz que: quando dois elementos formam diferentes compostos, a proporção da massa dos elementos em um composto está relacionada à proporção da massa do outro através de um número inteiro pequeno.

A Lei de Dalton pode ser enunciada da seguinte forma: se a massa “m” de uma substância química “X” pode combinar-se com as massas m_1 , m_2 , m_3 , etc. de uma substância “K”, dando origem a compostos distintos, as massas da substância “K” estarão associadas entre si numa relação de números inteiros e simples.

Em outras palavras, se uma massa fixa de um elemento se combina com massas diferentes de um segundo elemento, para formar compostos diferentes, estas massas (diferentes) estão relacionadas entre si numa relação de números inteiros pequenos.

Por exemplo, o nitrogênio se combina com o oxigênio, formando diferentes óxidos:

Óxidos	Nitrogênio	Oxigênio
N_2O	28 g	16 g
N_2O_2	28 g	32 g
N_2O_3	28 g	48 g
N_2O_4	28 g	64 g
N_2O_5	28 g	80 g

Observe que, permanecendo constante a massa do nitrogênio, as massas do oxigênio, entre si, numa relação simples de números inteiros e pequenos, ou seja, 1 : 2 : 3 : 4 : 5.

Exemplo:

Para duas razões conhecidas, temos:



Na primeira reação ocorre a formação do monóxido de carbono, cuja proporção de carbono por oxigênio é uma razão de números inteiros de resultado igual a 1. Na segunda reação, temos a formação do dióxido de carbono (CO_2), cuja relação carbono por oxigênio é uma razão de números inteiros 1/2.

Conclusão: Os átomos unem-se como unidades, isto é, um átomo de carbono não se pode combinar com frações ou partes de um átomo de oxigênio.

A teoria atômica de Dalton pode ser condensada nos seguintes princípios:

- Os átomos são partículas reais, descontínuas e indivisíveis de matéria, e permanecem inalterados durante as reações químicas;
- Os átomos de um mesmo elemento são iguais e de peso invariável;
- Os átomos de elementos diferentes são diferentes entre si; na formação dos compostos, os átomos entram em proporções numéricas fixas 1 : 1, 1 : 2, 1 : 3, 2 : 3, 2 : 5 etc. (Lei das Proporções Múltiplas);
- O peso do composto é igual à soma dos pesos dos átomos dos elementos que o constituem.

b) O que postulava a Lei de Dalton?

Os principais postulados da Teoria Atômica de Dalton são:

- A matéria é formada por partículas extremamente pequenas denominadas átomos;
- Átomos que apresentam mesmas propriedades (tamanho, massa e forma) constituem um elemento químico e são idênticos;
- Átomos de elementos diferentes possuem propriedades diferentes;
- Os átomos podem se unir entre si formando “átomos compostos”;
- Uma reação química nada mais é do que a união e separação de átomos, que não são alterados;
- Os compostos são formados quando átomos de diferentes elementos se combinam.

c) Faraday e a natureza elétrica da matéria

Os elétrons (partículas subatômicas com carga elétrica negativa) foram descobertos por cientistas que estavam mais envolvidos com estudos no campo da eletricidade do que em Química. Entretanto, sabe-se hoje que realmente existe uma estreita relação entre matéria e eletricidade.

Os primeiros indícios importantes relativos à natureza elétrica dos átomos foram obtidos em 1834, como resultado das experiências sobre eletrólise do físico químico inglês Michel Faraday. Ao examinar os trabalhos sobre os fenômenos eletroquímicos, Faraday realizou uma série de experiências e demonstrou que uma transformação química pode ser realizada pela passagem de eletricidade através de soluções aquosas de compostos químicos. Esses experimentos culminaram com o estabelecimento das leis da eletrólise. A pri-

meira delas diz que “a massa de substância decomposta pela eletrólise é proporcional à quantidade de eletricidade que atravessa o eletrólito” e a segunda, que “as massas de diferentes substâncias liberadas pela mesma quantidade de eletricidade são proporcionais aos respectivos equivalentes-grama”. Denominou-se “faraday” a quantidade de eletricidade necessária para libertar um equivalente-grama de qualquer substância.

d) Os primeiros experimentos

A natureza elétrica da matéria foi esclarecida de forma brilhante com as informações de W. Crookes obtidas ao realizar seus experimentos com tubos de descarga de gás, que ficaram conhecidos como tubos de Crookes.

As investigações realizadas indicaram que as partículas “catódicas” estavam presentes em toda a matéria, uma vez que, sempre tem as mesmas propriedades, independente do material do cátodo. Em 1874, G. J. Stoney sugeriu o nome de elétron para a partícula elétrica fundamental.

e) Os Raios Catódicos

Apresentam carga negativa, são partículas sólidas e se deslocam em linha reta. Segundo Thomson, os raios catódicos são constituídos por elétrons provenientes do cátodo (pólo negativo), sendo acelerados por um campo elétrico dos pólos e dos átomos do gás colocado em um tubo (ampola de Crookes).

1.2. O modelo atômico de Thomson

A idéia do átomo indivisível de Dalton reinou por mais de 90 anos (1804 a 1897). Entretanto, toda descoberta científica resulta da conjunção de uma série de eventos sucessivos que permitem finalmente o estabelecimento da mesma. Desta forma, no início do século XX, o cientista inglês Joseph J. Thomson, baseado em experiências realizadas com gases e que mostraram que a matéria era formada por cargas elétricas positivas e negativas, modificou o modelo atômico de Dalton. Segundo Thomson, o átomo seria uma esfera maciça e positiva com as cargas negativas distribuídas, ao acaso, na esfera. A quantidade de cargas positivas e negativas seriam iguais e dessa forma o átomo seria eletricamente neutro. O modelo proposto por Thomson ficou conhecido como “pudim com passas”.

O cientista demonstrou que os raios catódicos ao se chocarem com o eletrodo de um eletrômetro, este acusa uma carga negativa. Demonstrou também que tais raios são repelidos pelo eletrodo negativo, sendo desviados sob a ação de um campo elétrico. Thomson concluiu que, se os raios catódicos

comportam-se de forma semelhante a um corpo carregado negativamente, eles são cargas de eletricidade negativa transportadas por partículas de matéria e que, tais partículas são encontradas em todos os átomos.

O experimento de Thomson pode ser resumido da seguinte forma: num tubo de raios catódicos como aquele mostrado na Figura 3 acima o cientista realizou experiências para a caracterização quantitativa dos “raios catódicos”. Como mostrado na Figura 3, um feixe de partículas carregadas é emitido pelo cátodo, as partículas são atraídas pelo ânodo que possui um orifício para permitir a passagem de um feixe dessas partículas.

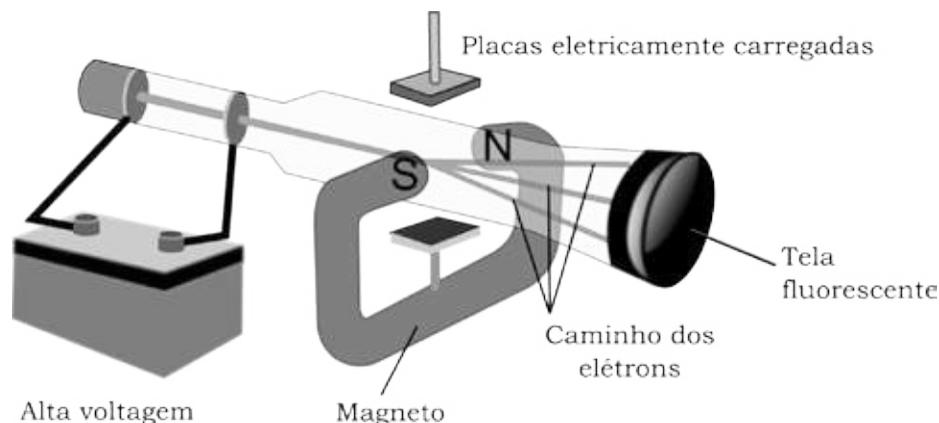


Figura 3 - Experiência com tubos de raios catódicos

Essas partículas continuam seu percurso até colidir com um anteparo de sulfeto de zinco. Quando placas eletricamente carregadas são colocadas por cima e por baixo do feixe, este é desviado conforme a placa (-) repele e a placa (+) o atrai. A magnitude do desvio é proporcional à voltagem das placas. Em outra experiência de Thomson foi comprovado que bobinas magnéticas geram trajetória curva no feixe de partículas.

a) O modelo “pudim com passas” de Thomson

A partir dos resultados dos experimentos, Thomson formulou então a teoria segundo a qual a matéria, independente de suas propriedades, contém partículas de massa muito menores que o átomo do hidrogênio. Inicialmente denominou-as de corpúsculos, depois ficaram conhecidas como elétrons.

Através de suas experiências, Thomson concluiu que a matéria era formada por um modelo atômico diferente do modelo atômico de Dalton: uma esfera de carga positiva continha corpúsculos (elétrons) de carga negativa distribuídos uniformemente à semelhança de um pudim de passas.

O “modelo atômico do pudim com passas” (Figura 4), substituiu então ao “modelo da bola de bilhar”, mas não eliminou totalmente as deduções de Dalton, apenas foram acrescentadas mais informações. Grande parte das teorias de Thomsom estão em sua obra *Condução de Eletricidade Através dos Gases*.

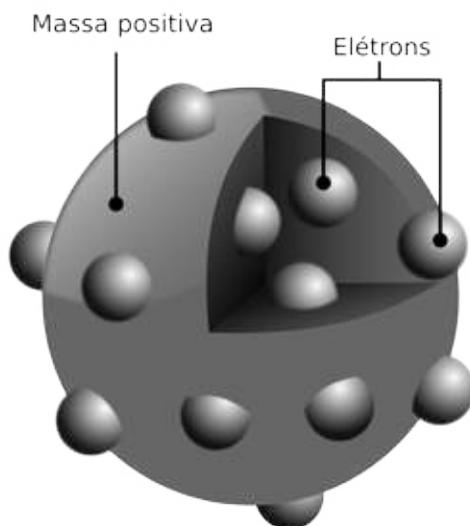


Figura 4 - Modelo atômico de Thomson

1.3. Modelo atômico de Rutherford

Apesar de ser um físico, recebeu o Prêmio Nobel da Química em 1908 pelas suas investigações sobre a desintegração dos elementos e a química das substâncias radioativas.

Ernest Rutherford, aplicando os fenômenos radiativos no estudo da estrutura atômica, descobriu que o átomo não seria uma “esfera maciça” e percebeu que a carga positiva de um átomo está concentrada na parte central, num minúsculo e denso núcleo, introduzindo o conceito de núcleo atômico e uma região externa chamada eletrosfera. Neste núcleo estariam as partículas positivas (os prótons) e na eletrosfera as partículas negativas (os elétrons). A liderança e o trabalho de Rutherford inspiraram duas gerações de cientistas. Baseado na concepção de Rutherford, o físico dinamarquês Niels Bohr idealizaria mais tarde um novo modelo atômico.

a) O Experimento de Rutherford

Para chegar a essas conclusões Rutherford e seus colaboradores bombardearam lâminas de ouro com partículas alfa (2 prótons e 2 nêutrons) utilizando a aparelhagem esquematizada ao lado (Figura 5).

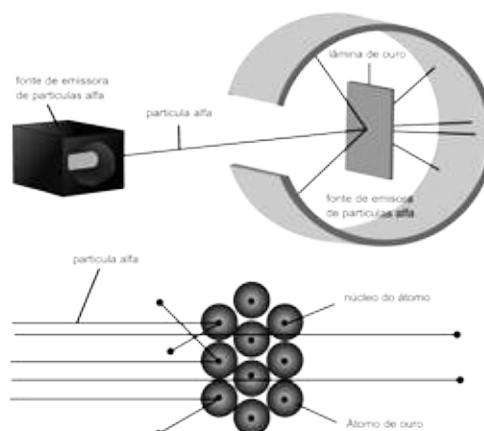


Figura 5 - Experimento de Rutherford

Em seus experimentos, Rutherford observou que a grande maioria das partículas alfa atravessava normalmente a lâmina de ouro que apresentava aproximadamente 10-5 cm de espessura. Algumas partículas sofriam pequenos desvios e outras, em número muito pequeno, batiam na lâmina e voltavam. O caminho seguido pelas partículas a podia ser detectado devido às cintilações que elas provocavam no anteparo de sulfeto de zinco.

Comparando o número de partículas lançadas com o número de partículas a que sofriam desvios, Rutherford calculou que o raio do átomo deveria ser 10.000 a 100.000 vezes maior do que o raio do núcleo, ou seja, o átomo seria formado por espaços vazios. Por esses espaços vazios a grande maioria das partículas a atravessava a lâmina de ouro.

Os desvios sofridos pelas partículas a eram devidos às repulsões elétricas entre o núcleo (positivo) e as partículas a, também positivas, que a ele se dirigiam. O modelo de Rutherford (Figura 6) ficou conhecido como “modelo planetário”.

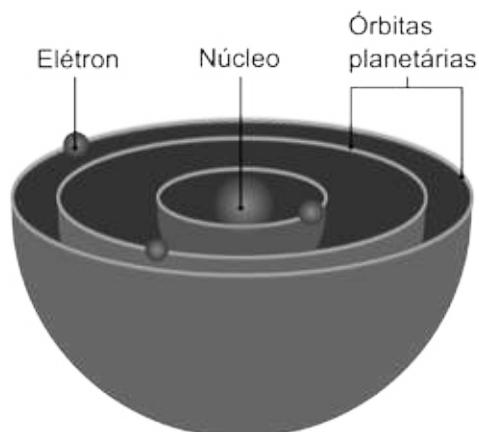


Figura 6 - Modelo atômico de Rutherford

Mas, mesmo em 1911, já se apresentavam sérias dificuldades quanto ao conceito de Rutherford. A teoria da eletricidade e do magnetismo era muito clara sobre como se comportariam as partículas carregadas negativamente se estivessem girando em órbita ao redor de um núcleo com carga positiva. Uma vez que as partículas que possuem cargas opostas se atraem, os elétrons perderiam energia gradualmente e percorreriam uma espiral para o interior.

b) O “dilema” do átomo de Rutherford

Apesar do sucesso momentâneo do modelo planetário, o átomo de Rutherford possuía um sério problema: um átomo contendo um núcleo pequeno de carga positiva com elétrons orbitando ao seu redor é instável, pois:

- Se os elétrons (que têm carga negativa) estivessem parados, eles seriam atraídos pelo núcleo (positivo) rapidamente, “caindo” no núcleo e entrando em colapso, impossibilitando a existência do universo;
- Se os elétrons descrevessem uma trajetória circular ao redor do núcleo, segundo a física clássica (eletromagnetismo), a direção de movimento dos elétrons precisaria ser mudada constantemente e para isso emitiria energia radiante continuamente; perdendo energia, os elétrons cairiam lentamente no núcleo, também entrando em colapso.

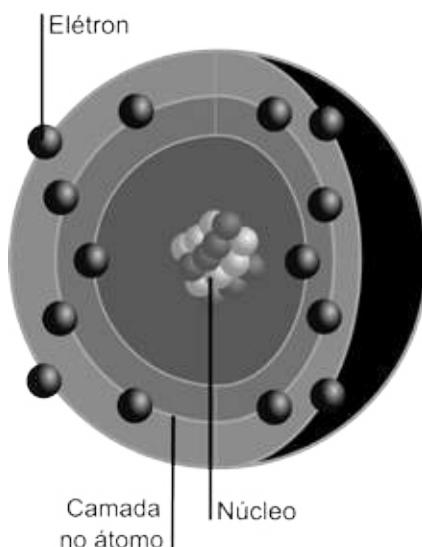


Figura 7 - Modelo de Rutherford

Conclusão: os fenômenos que envolvem elétrons não poderiam ser explicados em termos da mecânica clássica. Diante disso, Niels Bohr tentou resolver o paradoxo existente utilizando a teoria quântica da energia, desenvolvida por Max Planck.

c) As Partículas Elementares

A experiência de Rutherford mostrou que no núcleo atômico¹¹ além do próton deveria existir uma outra partícula. Esta nova partícula foi descoberta em 1932. Nesse ano, o cientista inglês James Chadwick descobriu uma nova espécie de partícula que era produzida como consequência do bombardeamento de berílio com partículas alfa. Esta partícula tem sua massa quase exatamente igual à do próton, mas não tem carga elétrica, e por esta razão foi chamada nêutron.

¹¹As partículas presentes no núcleo atômico apresentam a mesma massa e que essa é praticamente 2.000 vezes maior do que a massa do elétron. A massa de um átomo está praticamente concentrada numa região extremamente pequena do átomo: o núcleo atômico.

Com prótons e nêutrons tornou-se possível “fabricar” ou montar qualquer núcleo. O núcleo de sódio, por exemplo, necessitaria 11 prótons para dar a carga elétrica correta e 12 nêutrons para dar a massa correspondente a 23. A partícula alfa (utilizada nos experimentos de Rutherford) teria 2 prótons e 2 nêutrons, isto é, uma carga positiva de 2 unidades e uma massa de 4 unidades. Todas as investigações realizadas desde 1932 confirmaram que os núcleos contêm somente prótons e nêutrons.

Desta forma, prótons, elétrons e nêutrons são as principais partículas presentes num átomo. Elas são chamadas partículas elementares ou subatômicas e suas principais características estão listadas em um quadro na próxima página:

Partícula	Massa (grama)	Massa relativa	Carga elétrica (Coulomb)	Carga relativa
Próton (p+)	1,7.10-24	1	+1,6.10-19	+1
Nêutron (n0)	1,7.10-24	1	0	0
Elétron (e-)	9,1.10-28	1/1840	-1,6.10-19	-1

A quantidade de prótons e elétrons presentes num átomo é a mesma, o que faz com que ele seja eletricamente neutro.

1.4. Modelo atômico de Bohr

Com apenas 28 anos de idade, Bohr era um físico famoso com uma brilhante carreira. De 1914 a 1916 foi professor de Física Teórica na Universidade de Victoria, em Manchester. Mais tarde, voltou para Copenhagem, onde foi nomeado diretor do Instituto de Física Teórica em 1920. Em 1922, a sua contribuição foi internacionalmente reconhecida quando recebeu o Premio Nobel da Física. Os trabalhos de Bohr contribuíram de forma decisiva para a compreensão da estrutura atômica e da física quântica. Em 1913, Bohr, realizando estudos com espectros de emissão o átomo de hidrogênio, conseguiu formular um modelo atômico inédito, modificando o modelo de Rutherford (Figura 7). O cientista concluiu que o elétron presente no átomo não emitia radiações enquanto permanecesse na mesma órbita, emitindo-as apenas quando se desloca de um nível ou órbita de maior energia (órbita mais distante do núcleo, onde a energia

cinética do elétron tende a diminuir enquanto que sua energia potencial tende a aumentar) para outro de menor energia (órbita menos distante, onde sua energia cinética tende a aumentar e sua energia potencial tende a diminuir).

O desenvolvimento da teoria quântica permitiu-lhe formular essa concepção de forma mais precisa e definida: as órbitas não se localizariam a qualquer distâncias do núcleo. Ao contrário, apenas algumas órbitas seriam possíveis, com cada uma delas correspondendo a um nível bem definido de energia do elétron. A transição de uma órbita para a outra seria feita por saltos pois, ao absorver energia, o elétron conseguiria saltar para uma órbita mais externa (conceito quantum) e, ao emití-la, passaria para outra mais interna (conceito fóton). Cada uma dessas emissões aparece no espectro como uma linha luminosa bem localizada.

Desta forma, a teoria de Bohr, que foi sucessivamente melhorada e enriquecida, representou um passo decisivo no conhecimento do átomo e permitiu a elaboração da mecânica quântica partindo de uma sólida base experimental. A publicação da teoria sobre a constituição do átomo teve uma enorme repercussão no mundo científico. No mesmo ano, Bohr escreveu o livro "The Theory of Spectra and Atomic Constitution", cuja segunda edição foi publicada em 1924.

a) O espectro de luz e as descobertas de Bohr

No início do século XX já se sabia que a luz solar podia ser decomposta em diversas cores, fazendo com que a luz passe através de um prisma. No caso da decomposição da luz solar obtém-se um espectro chamado espectro contínuo, que é formado por ondas eletromagnéticas visíveis e invisíveis (radiação ultravioleta e infravermelho). Na parte visível não ocorre distinção definida entre uma cor e outra, mas uma gradual passagem de uma para outra. O arco-íris é um exemplo clássico de espectro contínuo onde a luz solar é decomposta pelas gotas de água presentes na atmosfera. Como a cada onda eletromagnética está associada certa quantidade de energia, a decomposição da luz branca produz ondas eletromagnéticas com toda e qualquer quantidade de energia (Figura 8).

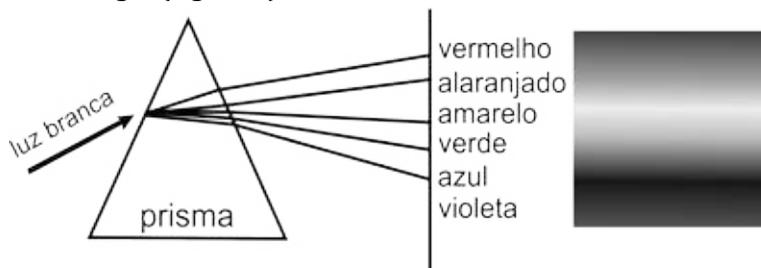
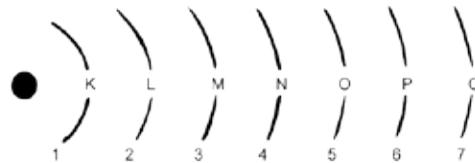


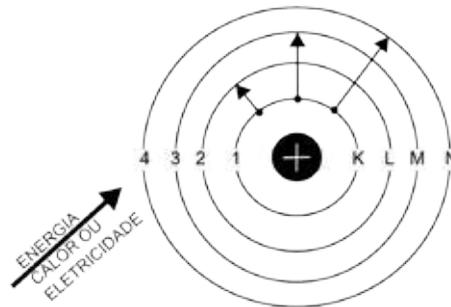
Figura 8 - Espectro de luz

No entanto, se a luz que atravessar o prisma for de uma substância como hidrogênio, sódio, neônio etc. será obtido um espectro descontínuo. Este é caracterizado por apresentar linhas coloridas separadas. Em outras palavras, somente alguns tipos de radiações luminosas são emitidas, isto é, somente radiações com valores determinados de energia são emitidas. Observando esse fato é que Bohr elaborou um novo modelo com os seguintes postulados:

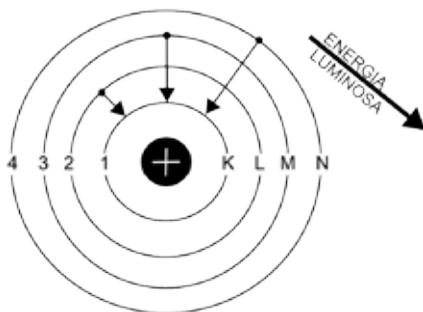
- Na região denominada eletrosfera os elétrons não se encontram em qualquer posição aleatória. Eles giram ao redor do núcleo em órbitas fixas e com energia bem definida. As órbitas são chamadas camadas eletrônicas, representadas pelas letras K, L, M, N, O, P e Q a partir do núcleo, ou níveis de energia representados pelos números 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7;



- Os elétrons ao se deslocarem numa mesma camada eletrônica não absorvem nem emitem energia;
- Os elétrons de um átomo tendem a ocupar as camadas eletrônicas mais próximas do núcleo, isto é, as que apresentam menor quantidade de energia (mais estáveis);



- Um átomo está no estado fundamental quando seus elétrons ocupam as camadas menos energéticas;
- Quando um átomo recebe energia (térmica ou elétrica), o elétron pode saltar para uma camada mais externa (mais energética). Nessas condições o átomo se torna instável. Dizemos que o átomo se encontra num estado excitado;



- Os elétrons de um átomo excitado tendem a voltar para as camadas de origem. Quando isso ocorre, ele devolve, sob a forma de onda eletromagnética, a energia que foi recebida na forma de calor ou eletricidade.

Esses postulados permitem explicar a existência dos espectros de emissão descontínuos: como o elétron só pode ocupar determinadas órbitas, as transições eletrônicas (ida e volta do elétron) ocorrem em número específico, o que produz somente alguns tipos de radiação eletromagnética e não todas como no espectro contínuo.

Modelo atômico de Bohr foi elaborado para o átomo de hidrogênio, mas aplica-se com boa aproximação a todos os outros átomos.

b) As limitações do modelo de Bohr

- O modelo pode explicar de forma adequada apenas o espectro de linhas do átomo de hidrogênio;
- Os elétrons não são completamente descritos como partículas pequenas.

2. A teoria Quântica

De acordo com Max Planck (1900), quando uma partícula passa de uma situação de maior para outra de menor energia ou vice-versa, a energia é perdida ou recebida em “pacotes” que recebe o nome de quanta (quantum é o singular de quanta).

O quantum é o pacote fundamental de energia e é indivisível. Cada tipo de energia tem o seu quantum.

A Teoria Quântica permitiu a identificação dos elétrons de um determinado átomo, surgindo assim os “números quânticos”.

2.1. O Modelo Atômico de Sommerfeld

Ao estudar o átomo, Sommerfeld concluiu que os elétrons de um mesmo nível, ocupam órbitas de trajetórias diferentes (circulares e elípticas) a que denominou de subníveis, que podem ser de quatro tipos: s, p, d, f. Os subníveis receberam essa nomenclatura (s, p, d, f) a partir dos nomes técnicos da espectrografia – Sharp, Principal, Difuse e Fundamental.

A principal contribuição de Sommerfeld para a evolução do modelo atômico foi a inclusão no modelo de Niels Bohr, dos orbitais elípticos e da relatividade restrita, obtendo assim o modelo conhecido como Bohr-Sommerfeld que dividia os níveis em subníveis (regiões menores) e que eliminava a decadência do elétron que ocorria no modelo anterior (modelo de Bohr). O modelo acrescentou mais dois números quânticos (azimutal e o magnético) além de estabelecer que os orbitais não tinham que se estabelecer num mesmo plano (Figura 9).

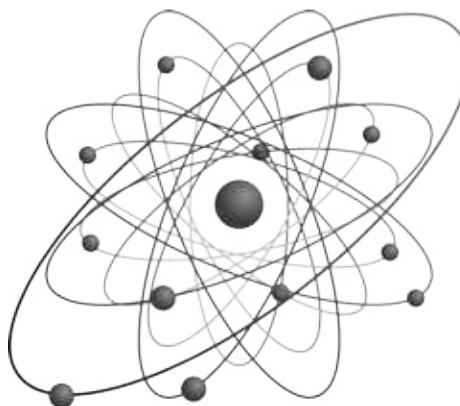


Figura 9 - Modelo atômico de Sommerfeld

Agora vamos fazer uma analogia: imagine um vagalume em um quarto escuro. Esse vagalume move-se ao acaso pelo quarto e de tempo em tempo acende e apaga a sua cauda. Em um papel é feita a marcação da posição do vagalume. Quando a cauda acende sabe-se onde o vagalume estava, mas não onde está agora. O papel ficaria cheio de registros das posições anteriores do vagalume, mas não da atual.

Em outras palavras, é impossível determinar a órbita (trajetória) de um elétron em um átomo. Pode-se determinar a probabilidade relativa de encontrar o elétron numa certa região ao redor do núcleo.

a) Surge então o modelo orbital

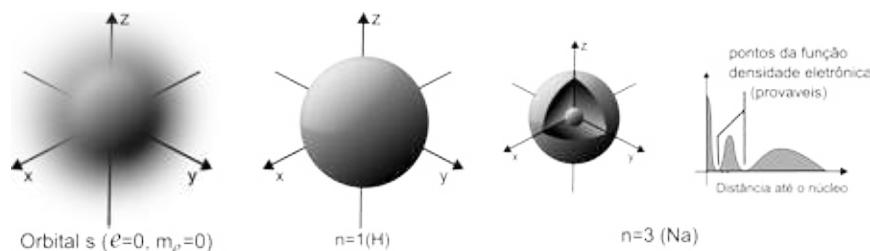
Em 1926, Erwin Shrödinger formulou uma teoria chamada de “Teoria da Mecânica Ondulatória” que criou o conceito de “orbital”.

Orbital é definido como a região do espaço ao redor do núcleo onde existe a máxima probabilidade de se encontrar o elétron.

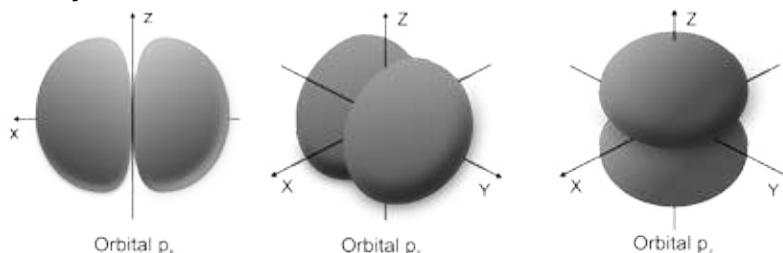
b) As Formas dos orbitais

O orbital s tem simetria esférica ao redor do núcleo. Na figura seguinte, são mostradas duas alternativas de representar a nuvem eletrônica de um orbital s:

- Na primeira, a probabilidade de encontrar o elétron (representada pela densidade de pontos) diminui à medida que nos afastamos do núcleo.
- Na segunda, se apresenta o volume esférico no qual o elétron passa a maior parte do tempo.
- Pela simplicidade, a segunda forma é mais utilizada.



A forma geométrica dos orbitais p é a de duas esferas achatadas até o ponto de contato (o núcleo atômico) e orientadas segundo os eixos de coordenadas. Em função dos valores que pode assumir o terceiro número quântico m (-1, 0 e +1), obtêm-se três orbitais p simétricos, orientados segundo os eixos x, z e y.



3. O Modelo Atômico Atual

O modelo atômico atual é um modelo matemático-probabilístico que está baseado em dois princípios fundamentais.

- **O Princípio da Incerteza de Heisenber.** afirma que é impossível determinar com precisão a posição e a velocidade de um elétron num mesmo instante.
- **O Princípio da Dualidade da matéria de Louis de Broglie:** postula que o elétron apresenta característica DUAL, ou seja, comporta-se como matéria e energia sendo, portanto, considerado uma partícula-onda.

¹²Orbital é a região onde é mais provável encontrar um elétron -
Teoria dos Quarks

O Princípio da Incerteza deixa clara a impossibilidade de determinar a exata trajetória do elétron a partir da energia e da velocidade. Por este motivo, buscou-se, então, trabalhar com a provável região onde é possível encontrá-lo. Erwin Schrödinger baseado nestes dois princípios criou o conceito de **orbital**¹².

A teoria mais moderna afirma que existem apenas 12 partículas elementares: seis chamadas léptons (o elétron faz parte deste grupo) e outras seis chamadas quarks.

Dois tipos de quarks, o up (para cima) e o down (para baixo), formam os prótons e os nêutrons.

O quark up tem carga $+2/3$ enquanto o down tem carga $-1/3$. O próton é um agregado de dois up e um down enquanto o nêutron é constituído por um up e dois down.

Dois outros quarks foram batizados de charm (charme) e strange (estranho). O charm tem carga $+2/3$ enquanto o strange tem carga $-1/3$. Existem nos raios cósmicos.

Em 1997, foi descoberto o quinto quark, o bottom, enquanto o sexto e último quark, o top, foi identificado em 1995. O top tem carga $-2/3$ e o bottom, $-1/3$.

O top é o mais pesado dos quarks (200 vezes mais pesado que um próton) e não está presente nem em fenômenos normais da natureza nem em raios cósmicos, devido à alta energia exigida para sua formação. O top deve ter sido produzido no início do universo e depois pode ter desaparecido.

3.1. Os números quânticos

Dirac calculou estas regiões de probabilidade denominadas orbitais e determinou os quatro números quânticos relacionados a elas, que foram nomeados: principal, secundário, magnético e de spin.

Os quatro números quânticos, que resumiremos a seguir, formam um conjunto de números que nos permitem designar cada elétron de um átomo.

a) Número quântico principal (N): corresponde ao nível energético do modelo de Rutherford-Bohr. Os níveis diferenciam-se por seu conteúdo de energia, crescente de 1 a 7. Este número quântico localiza o elétron em seu nível de energia e assume valores que vão de 1 até o infinito, mas para os átomos conhecidos atualmente com, no máximo, 7 camadas teremos uma variação de 1 até 7.

nº quântico principal	1	2	3	4	5	6	7
nível correspondente	K	L	M	N	O	P	Q
nº máximo de elétrons	2	8	18	32	32	18	2

b) Número quântico secundário ou azimutal (L): corresponde às variações de energia (subníveis) existentes em cada nível. localiza o elétron no seu

subnível de energia e dá o formato do orbital. Pode assumir valores que vão desde ZERO até $n - 1$. Para átomos conhecidos:

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

Cada valor de nível “l” indica a presença de um subnível. Os subníveis são representados pelas letras minúsculas s, p, d, f, g, h, i, etc...

Observação: a simbologia correta para o n° quântico secundário é uma letra “L” minúscula (l)

n° quântico secundário	0	1	2	3
subnível correspondente	s	p	d	f
n° máximo de elétrons	2	6	10	14

c) Número quântico magnético (M OU M_l): Identifica cada orbital dentro de um subnível. Localiza o elétron no orbital¹³ e dá a orientação espacial dos orbitais. O número quântico magnético pode assumir valores que vão desde $-l$ até $+l$, passando pelo zero.

$$M = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

Sendo $l = n^{\circ}$ quântico secundário

Se $l = 0$, então $M = 0$

$l = 1$, então $M = -1, 0, +1$

Se $l = 2$, então $M = -2, -1, 0, +1, +2$

Valores de l	subnível	valores de M	n° orbitais/ orientações
0	s	0	1
1	p	-1, 0, +1	3
2	d	-2, -1, 0, +1, +2	5
3	f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7

d) Número quântico de spin (S): O número quântico de spin indica a orientação do elétron ao redor do seu próprio eixo. Como existem apenas dois sentidos possíveis, este número quântico assume apenas os valores $-1/2$ e $+1/2$, indicando a probabilidade do 50% do elétron estar girando em um sentido ou no outro.

Por convenção, também, utiliza-se spin $-1/2$ para o primeiro elétron do orbital.

¹³A expressão “rotação” utilizada, dá uma idéia do elétron apenas como partícula, só que ele tem comportamento dual de partícula-onda. Na falta de um termo mais apropriado vamos utilizar esta expressão, mas sem esquecer que o elétron não é apenas partícula.

3.2. Distribuição Eletrônica

Conforme dito, os elétrons estão distribuídos em camadas ao redor do núcleo. Para fazer a distribuição eletrônica dos elétrons nas camadas, admite-se a existência de 7 camadas eletrônicas, designados pelas letras maiúsculas: K, L, M, N, O, P e Q. À medida que as camadas se afastam do núcleo, aumenta a energia dos elétrons nelas localizados.

As camadas da eletrosfera de um átomo representam os níveis de energia da eletrosfera. Desta forma, as camadas K, L, M, N, O, P e Q constituem os 1º, 2º, 3º, 4º, 5º, 6º e 7º níveis de energia, respectivamente.

Por meio de métodos experimentais, os químicos determinaram o número máximo de elétrons que cabe em cada camada ou nível de energia.

Nível de energia	Camada	Número máximo de elétrons
1º	K	2
2º	L	8
3º	M	18
4º	N	32
5º	O	32
6º	P	18
7º	Q	2 (alguns autores admitem até 8)

Em cada camada ou nível de energia, os elétrons se distribuem em subcamadas ou subníveis de energia, representados pelas letras s, p, d, f, em ordem crescente de energia.

O número máximo de elétrons que cabe em cada subcamada, ou subnível de energia, também foi determinado experimentalmente:

energia crescente ----->

Subnível	s	p	d	f
Número máximo de elétrons	2	6	10	14

O número de subníveis que constituem cada nível de energia depende do número máximo de elétrons que cabe em cada nível. Assim, como no 1º nível cabem no máximo 2 elétrons, esse nível apresenta apenas um subnível s, no qual cabem os 2 elétrons. O subnível s do 1º nível de energia é representado por 1s.

Como no 2º nível cabem no máximo 8 elétrons, o 2º nível é constituído de um subnível s, no qual cabem no máximo 2 elétrons, e um subnível p, no qual cabem no máximo 6 elétrons. Desse modo, o 2º nível é formado de dois subníveis, representados por 2s e 2p, e assim por diante.

A tabela abaixo mostra uma visão geral que resume os níveis, camadas, número máximo de elétrons e subníveis conhecidos mais utilizados.

Nível	Camada	Nº máximo de elétrons	Subníveis conhecidos
1º	K	2	1s
2º	L	8	2s e 2p
3º	M	18	3s, 3p e 3d
4º	N	32	4s, 4p, 4d e 4f
5º	O	32	5s, 5p, 5d e 5f
6º	P	18	6s, 6p e 6d
7º	Q	2 (alguns autores admitem até 8)	7s *7p

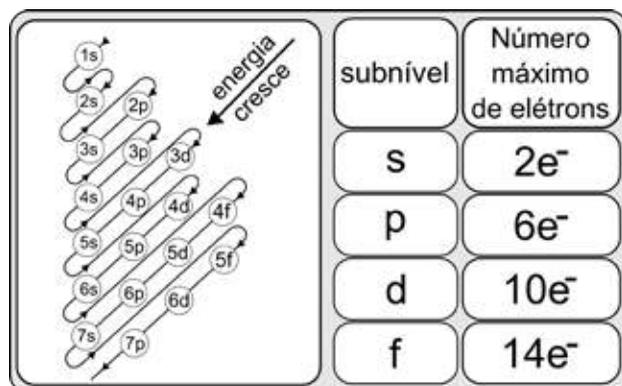
Para se proceder a distribuição eletrônica de um elemento químico é necessário conhecer seu número atômico (Z) que corresponde ao número de prótons no seu núcleo. Desta forma, se o elemento estiver eletricamente neutro, conclui-se que o número de elétrons é igual ao número de prótons. Caso o elemento químico tiver cargas positivas, significa que o número de elétrons deste átomo será o número Z menos o número de cargas, por outro lado, se a carga elétrica do elemento for negativa, então o número de elétrons que ele possui será o número Z mais a sua(s) carga(s).

3.3. O Diagrama de Linus Pauling

Para solucionar problema de construir uma teoria consistente que explicasse como os elétrons se distribuíam ao redor dos átomos, o cientista americano Linus C. Pauling apresentou a teoria que até o momento é a mais aceita para realização da distribuição eletrônica em qualquer átomo.

O diagrama de Pauling é um dispositivo prático que permite colocar todos os subníveis de energia conhecidos em ordem crescente de energia. Utiliza o processo das diagonais representado a seguir, de forma que a ordem crescente de energia dos subníveis é a ordem crescente das diagonais.

No processo de preenchimento a distribuição dos elétrons é feita segundo o nível de energia de cada subnível, numa seqüência crescente em que ocupa-se primeiro os subníveis de menor energia e, por último, os de maior.



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

----->
 ordem crescente de energia

4.4 Regras Básicas de preenchimento

Para fazer a configuração eletrônica de um átomo qualquer, basta seguir as regras básicas indicadas abaixo:

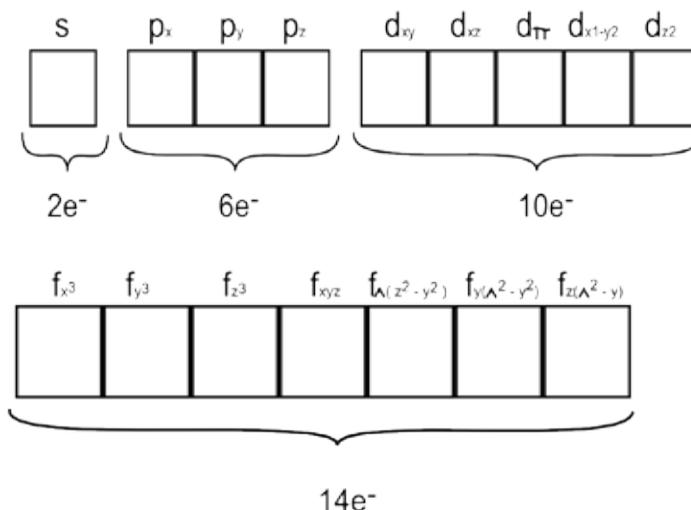
- Construir o diagrama de Pauling conforme o modelo acima.
- Verificar quantos elétrons o átomo contém.

- Preencher o diagrama a partir do subnível de menor energia (de cima para baixo seguindo as setas).
- Nunca ultrapassar o nível Máximo de elétrons de um subnível.

Observações importantes

- O Subnível mais energético é sempre o último do átomo em questão, na ordem crescente de energia.
- A Camada de Valência é a última camada eletrônica de um átomo.
- O Elétron mais energético ou de diferenciação é o último elétron distribuído.
- Os Elétrons de Valência (ou mais afastados) são os elétrons que se encontram na camada de Valência.

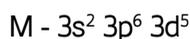
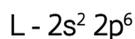
Sempre existirá, para cada nível: 1 orbital s, 3 orbitais p e 5 orbitais d e 7 orbitais f. Como cada um destes podem comportar até 2 elétrons pode-se esperar que o número de elétrons que estes orbitais podem acomodar é 2, 6, 10 e 14 respectivamente, conforme a figura abaixo:



Alguns exemplos ilustrativos de distribuição eletrônica:

1. Distribuir os elétrons do átomo normal de manganês ($Z = 25$) em ordem de camada.

Solução: Se $Z = 25$ isto significa que no átomo normal de manganês há 25 elétrons. Aplicando o diagrama de Pauling, teremos:



O - 5s 5p 5d 5f

P - 6s 6p 6d

Q - 7s 7p

Resposta: K=2; L=8; M=13; N=2

2. Distribuir os elétrons do átomo normal de xenônio ($Z = 54$) em ordem de camada.

Solução:

K - $1s^2$

L - $2s^2 2p^6$

M - $3s^2 3p^6 3d^{10}$

N - $4s^2 4p^6 4d^{10} 4f$

O - $5s^2 5p^6 5d 5f$

P - 6s 6p 6d

Q - 7s 7p

Resposta: K = 2; L = 8; M = 18; N = 18; O = 8

Há alguns elementos químicos cuja distribuição eletrônica não “bate” com o diagrama de Pauling

b) O Formato dos Orbitais

subnível s	1 orbital s - uma única orientação
subnível p	3 orbitais p - 3 orientações: p_x, p_y, p_z
subnível d	5 orbitais d - 5 orientações: $d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2-y^2}$ e d_z^2
subnível f	7 orbitais f - 7 orientações

Importante lembrar que os átomos terão um determinado conjunto de orbitais atômicos independentemente de possuir elétrons ou não, em outras palavras, um orbital atômico não deixa de existir só porque ele está vazio.

Quando tratamos de orbitais do mesmo tipo, por exemplo, orbitais p, podemos dizer que estes são totalmente equivalentes, no que se refere a energia, não havendo qualquer distinção entre eles, exceto por sua orientação espacial, ou seja, em que posição no espaço ele se encontra, neste exemplo existem três orientações distintas, a vertical, a horizontal e a perpendicular ao plano formado pelos dois anteriores.

Normalmente não são representados os orbitais g, h e i, visto que não existe nenhum elemento químico conhecido que tenha um número de elé-

trons suficientes para preenchê-los. Podemos então citar, neste momento, como se executa a distribuição eletrônica de um determinado átomo.

Para se proceder a distribuição eletrônica de um elemento químico é necessário conhecer seu número atômico (Z) que corresponde ao número de prótons no seu núcleo. Desta forma, se o elemento estiver eletricamente neutro, conclui-se que o número de elétrons é igual ao número de prótons. Caso o elemento químico tiver cargas positivas, significa que o número de elétrons deste átomo será o número Z menos o número de cargas, por outro lado, se a carga elétrica do elemento for negativa, então o número de elétrons que ele possui será o número Z mais a sua(s) carga(s).

Para se fazer uma distribuição eletrônica é importante lembrar que os elétrons de uma espécie química não podem ficar espalhados aleatoriamente, em qualquer lugar em torno do núcleo. Os elétrons só podem ficar nas regiões que forem efetivamente definidas pelos orbitais. Assim, como cada átomo apresenta um certo número de orbitais atômicos, deve haver uma seqüência definida de preenchimento destes orbitais pelos elétrons do elemento. Essa ordem obedece uma ordem crescente de energia, ou seja, os orbitais que tiverem uma energia menor, deverão ser preenchidos primeiro. A ordem de preenchimento dos orbitais é definida segundo um diagrama conhecido por diagrama de Linus Pauling, mostrado abaixo:

c) Princípio da exclusão de Wolfgang Pauli

Em um mesmo átomo, não existem dois elétrons com quatro números quânticos iguais.

Como consequência desse princípio, dois elétrons de um mesmo orbital têm spins opostos.

Um orbital semi-cheio contém um elétron desemparelhado; um orbital cheio contém dois elétrons emparelhados (de spins opostos).

d) Regra de Hund

Ao ser preenchido um subnível, cada orbital desse subnível recebe inicialmente apenas um elétron; somente depois de o último orbital desse subnível ter recebido seu primeiro elétron começa o preenchimento de cada orbital semi-cheio com o segundo elétron.

Elétron de maior energia ou elétron de diferenciação é o último elétron distribuído no preenchimento da eletrosfera, de acordo com as regras estudadas. É importante salientar que os números quânticos são, na verdade, uma aproximação para as complexas equações propostas por Schrödinger.

4. Alguns conceitos básicos

Próton: partícula nuclear com carga positiva igual, em grandeza, à do elétron. Junto com o nêutron, está presente em todos os núcleos atômicos (exceto o do hidrogênio, que não tem nêutron). A massa de um próton é de $1,6726 \times 10^{-27}$ kg, ou seja, 1.836 vezes a do elétron. O número atômico de um elemento indica o número de prótons em seu núcleo e determina de que elemento se trata. O antipróton é sua antipartícula. É estável no vácuo e não se desintegra espontaneamente.

- **Nêutron:** uma das partículas fundamentais que compõem a matéria. Sua massa é de $1,675 \times 10^{-27}$ kg, aproximadamente 0,125% maior que a do próton. Não tem carga elétrica. É uma partícula constituinte de todos os núcleos, exceto o do hidrogênio comum. Os nêutrons livres, que formam parte de um núcleo, são produzidos em reações nucleares. Quando é expulso do núcleo, o nêutron é instável, e se desintegra para dar lugar a um próton, um elétron e um neutrino. O uso de feixes de nêutrons é uma ferramenta importante em campos tão diversos quando a paleontologia, a arqueologia e a história da arte.
- **Elétron:** tipo de partícula elementar que, junto com os prótons e os nêutrons, forma os átomos e as moléculas. Intervém em uma grande variedade de fenômenos. Os elétrons têm uma massa em repouso de $9,109 \times 10^{-31}$ kg e uma carga elétrica negativa de $1,602 \times 10^{-19}$ coulombs. Sua partícula de antimatéria correspondente é o pósitron.
- **Número atômico (Z):** chama-se o número atômico de um elemento o número de prótons no seu núcleo. Para um átomo neutro, este é também o número de elétrons que o átomo possui. O número atômico geralmente é representado pela letra Z.
- **Número da massa (A):** denomina-se o número de massa de um elemento a soma do número de prótons com o número de nêutrons existentes, isto é, o número total de partículas que constituem o núcleo. Representa-se geralmente pela letra A. Assim, sendo N o número de nêutrons de um núcleo, temos que: $A = N + Z$

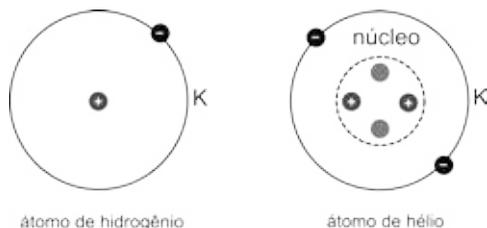
Exemplos

1 – O átomo de hidrogênio tem o núcleo constituído por um único próton. E tem somente um elétron, na única órbita, K.

Depois de ler o texto anterior, responda às seguintes questões.

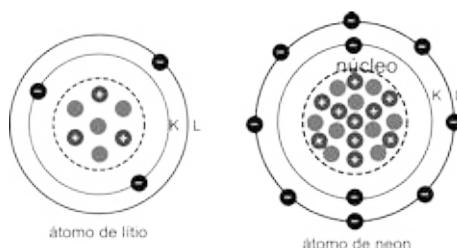
- a. Quais as diferenças entre os modelos atômicos de Rutherford e Bohr?
- b. Podemos dizer que o modelo atômico que hoje conhecemos expressa o que realmente acontece na estrutura da matéria?
- c. A palavra “átomo” significa “o que não pode ser dividido”.

Comente o significado desses termos nos dias atuais: Elétron, Núcleo e Órbita



2 – O átomo de hélio tem o núcleo constituído por dois prótons e dois nêutrons. E tem dois elétrons, na única órbita, K.

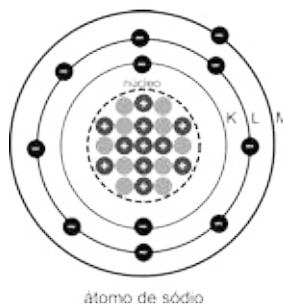
3 – O átomo de lítio tem o núcleo constituído por três prótons e quatro nêutrons. Tem três elétrons: dois na órbita K, um na L.



4 – O átomo de neon tem o núcleo constituído por dez prótons e nove nêutrons. Tem dez elétrons: dois na órbita K, e oito na L.

5 – O átomo de sódio tem o núcleo constituído por onze prótons e dez nêutrons. Tem onze elétrons: dois na órbita K, oito na L, um na M.

6 – O átomo de urânio, o maior que existe na natureza, tem o núcleo formado por 92 prótons e 146 nêutrons. Tem 92 elétrons, dispostos do seguinte modo: 2 na órbita K, 8 na L, 18 na M, 32 na N, 18 na O, 12 na P, 2 na Q.



4.1 Dimensões do átomo e do núcleo

O volume ocupado por um átomo é o de uma esfera de raio da ordem de 10^{-8}cm ($10^{-10}\text{m} = 1 \text{ . Angström}$). O volume ocupado pelo núcleo é o de uma esfera de raio da ordem de 10^{-12}cm . Portanto, o raio do átomo é cerca de 10.000 vezes maior que o do núcleo.

O volume do núcleo é então muito pequeno. Os prótons e nêutrons que o constituem estão muito próximos, atraindo-se com forças muito grandes, formando um conjunto compacto. Quando se consegue romper esse conjunto, liberta-se grande quantidade de energia. É a energia atômica.

Síntese do Capítulo



Neste capítulo conhecemos a história dos primeiros modelos atômicos com destaque para a Teoria de Dalton, considerado o fundador da Teoria atômica moderna. Em seguida são descritos os experimentos de Faraday e os modelos atômicos de Thomson, Rutheford e Bohr, descrevendo os experimentos, evoluções e limitações de cada um dos modelos. Depois a introdução da Teoria quântica junto com o modelo de Sommerfeld. Descreve-se então os principais tipos de orbitais e o modelo atômico atual, incluindo o detalhamento dos números quânticos. Por fim a distribuição eletrônica nos átomos utilizando o diagrama de Linus Pauling, a regra de Hund e o princípio da exclusão de Pauli.

Atividades de avaliação



- Um átomo neutro, no estado fundamental, apresenta a seguinte distribuição eletrônica em níveis de energia: $K = 2$, $L = 8$, $M = 8$, $N = 2$. Sobre este átomo, é incorreto afirmar-se que:
 - apresenta 20 prótons em seu núcleo.
 - é de um elemento que se encontra no quarto período da classificação periódica.
 - é de um metal alcalino terroso.
 - tende a formar íons com carga positiva $2+$.
 - ao perder 2 elétrons adquire a distribuição eletrônica igual à do gás nobre criptônio.
- Átomos de determinados elementos formam ânions quando:
 - perdem prótons da eletrosfera.
 - têm prótons e nêutrons no núcleo.
 - perdem elétrons do núcleo.
 - estão eletricamente neutros.
 - recebem elétrons na eletrosfera.

3. Átomos neutros de dois elementos diferentes possuem o mesmo número de massa. Portanto, contém o mesmo número de:
- a) prótons + elétrons. d) nêutrons.
 - b) prótons + nêutrons. e) elétrons.
 - c) prótons.
4. Um determinado átomo possui 3 prótons, 4 nêutrons e 3 elétrons. Com relação a este átomo podemos afirmar que:
- a) seu número atômico é 7.
 - b) seu número de massa é 3.
 - c) a massa atômica é praticamente a soma das massas de 3 prótons e 4 neutrons.
 - d) existem 10 partículas no núcleo desse átomo.
 - e) o núcleo do átomo tem carga zero.
5. Um átomo genérico "A" possui número de massa 52 e 24 prótons. O número de elétrons e o de nêutrons do átomo "A", respectivamente é:
- a) 24 e 52
 - b) 24 e 28
 - c) 28 e 28
 - d) 28 e 24
 - e) 52 e 24
6. O experimento do desvio das partículas alfa foi conduzido por:
- a) Thomson
 - b) Maxwell
 - c) Crookes
 - d) Rutherford
7. A partícula mais simples da matéria que participa de reações químicas e que não pode ser reduzida a nada mais simples é:
- a) o núcleo.
 - b) o elemento.
 - c) a molécula.
 - d) o átomo.
8. As três fundamentais partículas do átomo são:
- a) Positron, Neutrino e Gamma Rays
 - b) Mesons, Quarks e Anti-neutrino
 - c) Próton, Nêutron e Elétron
 - d) Núcleo, Anti-quarks e Elétrons
9. A Teoria Atômica foi formulada por:
- a) Thomson
 - b) Rutherford
 - c) Avogadro
 - d) Dalton

10. Como resultado do experimento do desvio das partículas alfa de Rutherford, foi concluído que:
- a) o centro do átomo é vazio.
 - b) o centro do átomo tem carga negativa.
 - c) a massa atômica está distribuída por todo o átomo.
 - d) a maior parte do átomo é vazia.

Leituras, filmes e sites



Assista ao vídeo sobre os modelos atômicos nos links:

<http://www.youtube.com/watch?v=jmmxJDDTD7s&feature=related>

http://www.youtube.com/watch?v=l6jYKOp_jkw

Referências



www.mundodoquimico.hpg.ig.com.br

www.conhecimentosgerais.com.br

LEE, J. D. **Química inorgânica: um novo texto conciso**. 3. ed. São Paulo: E. Blucher, 1980.

MAHAN, Bruce M.; MYERS, Rollie J. **“Química: um curso universitário”**. 4 ed, São Paulo: Edgard Blücher Ltda, 1995.

SANTOS FILHO, Pedro F. **“Estrutura atômica & ligação Química”**. Campinas: UNICAMP, 1999.

PERUZZO, Tito Miragaia; CANTO, Eduardo Leite do. **“Química: na abordagem do cotidiano”**. Volume único, 1 ed., São Paulo: Moderna, 1996.

Capítulo

3

Classificação Periódica

Objetivos

- Entender, classificar e ordenar os elementos na tabela periódica.
- Identificar e relacionar as propriedades periódicas dos elementos.
- Reconhecer e identificar os principais grupos e elementos da tabela.

1. A história da tabela periódica

Com crescente descoberta de elementos químicos e suas propriedades, surgiu a evidente necessidade de organizá-los segundo suas características. Até 1800 aproximadamente 30 elementos eram conhecidos; atualmente a Tabela Periódica consta de 109 elementos. A classificação dos elementos químicos permite estudarmos os elementos químicos e as substâncias nas quais fazem parte.

A denominada **classificação periódica**¹⁴ dos elementos químicos, como o nome sugere, é feita em períodos, ou seja, em seqüências de acordo com suas propriedades. Essas seqüências, ou períodos, são dispostos na ordem crescente dos números atômicos dos elementos químicos. É importante destacar que são os números atômicos que determinam as propriedades químicas dos elementos. O número atômico de um elemento, que determina o número de prótons, é igual ao seu número de elétrons e são os elétrons que participam das ligações químicas para formar as substâncias e, portanto, responsáveis pelas propriedades físicas e químicas dos elementos.

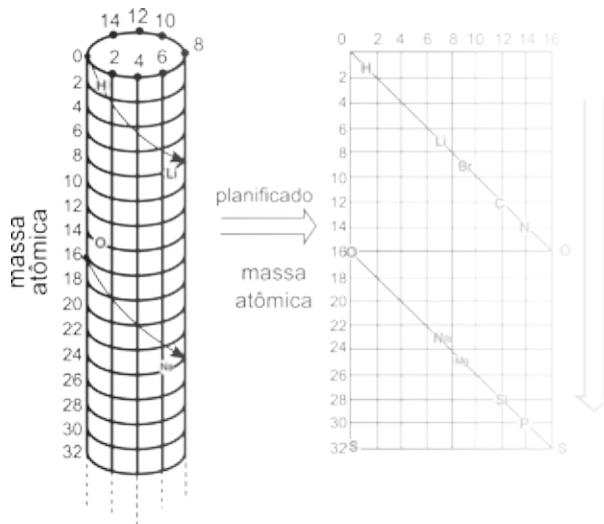
A primeira tentativa de obter uma classificação dos elementos com propriedades ou comportamento químico semelhante foi feita pelo professor de Química Johann Wolfgang Dobereiner com as suas famosas tríades. Em 1829, o professor percebeu que o recém-descoberto elemento bromo tinha propriedades que pareciam situar-se a meio caminho entre as do cloro e as do iodo. Além disso, observou que a massa atômica do elemento central era a média aritmética das massas atômicas dos outros elementos. Desta forma, ele procurou estabelecer vários grupos de três elementos com propriedades químicas semelhantes.

Dobereiner continuou a estudar a lista dos elementos conhecidos, registrados com suas propriedades e pesos atômicos, e acabou descobrindo outros dois grupos de elementos com o mesmo padrão. O estrôncio situava-se a meio caminho (em peso atômico, cor, propriedades e reatividade) entre o cálcio e o bário; e o selênio podia ser igualmente situado entre o enxofre e o

¹⁴A “Lei Periódica dos Elementos Químicos” é uma classificação dos elementos químicos de acordo com seus números atômicos e conseqüentemente por suas propriedades físicas e químicas.

telúrio. Döbereiner nomeou esses grupos de tríades, e deu início a uma ampla investigação dos elementos em busca de outros exemplos, mas não conseguiu encontrar mais.

Para os conhecimentos da época, a classificação era interessante, mas logo se verificou que, na maioria dos elementos, a massa atômica do elemento central não era a média aritmética dos outros dois. A chamada “lei das tríades” de Döbereiner parecia aplicar-se a apenas nove dos 54 elementos conhecidos e foi rejeitada por seus contemporâneos como mera coincidência.



Posteriormente, na década de 1860, as massas atômicas foram determinadas de maneira mais exata. Em 1862, o geólogo francês ALEXANDRE CHANCOURTOIS dispôs os elementos conhecidos na ordem crescente de suas massas atômicas em uma superfície cilíndrica chamada parafuso telúrico. Os elementos colocados na mesma vertical apresentavam propriedades químicas semelhantes. O problema era que além de complicado, o “parafuso” revelou-se válido somente até o cálcio.

1.1. O parafuso telúrico de Chancourtois

Na elaboração do seu “parafuso”, Chancourtois dispôs os elementos químicos em ordem crescente de suas massas atômicas numa linha espiral em volta de um cilindro. Tal disposição exótica ficou conhecida como parafuso telúrico de Chancourtois. Ao redor do cilindro foram feitas divisões, e os elementos com propriedades semelhantes apareciam uns sobre os outros em voltas consecutivas da espiral. Chancourtois estava sugerindo que as propriedades dos elementos estavam relacionadas ao número que o elemento ocupava na seqüência. As regularidades que ele encontrou não funcionavam para todos os elementos conhecidos e a idéia não foi bem aceita e nem recebeu atenção.

Chancourtois foi prejudicado pelo fato de muitas das massas atômicas terem sido calculadas erradas, na sua época.

Em 1863, John A. R. Newlands¹⁵ propôs uma nova classificação para os elementos químicos. Ele ordenou os elementos químicos com propriedades semelhantes, em 11 grupos, nos quais, os elementos semelhantes possuíam massas com uma relação de multiplicidade 8. Esta proposta ficou conhecida como a “Lei das Oitavas”, que buscava a ordenação dos elementos químicos seguindo o exemplo da música.

Newlands, ao tentar ordenar os elementos na ordem crescente das massas atômicas fez uma curiosa comparação. Como existem sete notas musicais (dó, ré, mi, fá, sol, lá, si) e a oitava nota é sempre uma repetição da nota de onde se partiu, ele tentou fazer o mesmo com os elementos químicos conhecidos com o oitavo elemento tendo as mesmas propriedades do primeiro.

Muitos cientistas discordaram da idéia de Newlands, até mesmo, criticando-o. Por tentar buscar essa relação entre Química e Música, sofreu o desprezo dos membros da Sociedade de Química de Londres, citando que Newlands poderia ter classificado os elementos, segundo a ordem alfabética. Embora criticada, esta classificação foi uma tentativa meritória de ordenação dos elementos químicos, que já mostrava certa periodicidade. Ou seja, as propriedades dos elementos se repetem após certo período.

O seu trabalho só foi reconhecido cerca de duas décadas mais tarde, por ser um precursor das idéias de Mendeleiev.

Poucos anos depois, o trabalho conjunto de dois cientistas L. Meyer e D. Mendeleev trouxe uma melhor visualização da periodicidade dos elementos químicos.

Em 1860, Meyer participou de um congresso na Alemanha onde muitos cientistas discutiam sobre pesos atômicos e pesos equivalentes dos elementos, e tentou mostrar uma relação entre os pesos atômicos e as propriedades dos elementos químicos.

Em sua pesquisa, Meyer procurou calcular o volume atômico dos 63 elementos descobertos até então. Em 1870 conseguiu fazer uma tabela e mostrar a relação de periodicidade entre volume e massa atômica, traçando um gráfico destas propriedades.

Na mesma época (1869), Dmitri Ivanovitch Mendeleev descobriu que as propriedades dos elementos decorriam de suas massas atômicas e ordenou os elementos em colunas, segundo as massas atômicas crescentes, observando que os elementos quimicamente semelhantes ficavam numa mesma horizontal. Posteriormente, reuniu esses elementos de propriedades parecidas em colunas, denominadas grupos.

¹⁵O mérito de Newlands

O grande mérito de Newlands foi introduzir a idéia da periodicidade das propriedades dos elementos em função das massas atômicas.

A partir deste estudo, Mendeleev montou uma tabela tão consistente com os resultados experimentais que chegou a defender que os elementos que não se encaixavam em sua tabela tiveram suas massas atômicas calculadas erradamente.

Com base em suas observações, Mendeleev enunciou, então, a lei periódica, segundo a qual, dispondo-se os elementos na ordem crescente de massas atômicas, suas propriedades variam de modo definido e retornam ao mesmo valor em pontos fixos das séries. O Químico tinha tanta confiança na validade da lei que, quando a ordem dos elementos parecia ser interrompida, ele deixava espaços em branco, lacunas que corresponderiam a elementos que deveriam ainda ser descobertos. Mendeleev chegou a prever as propriedades destes elementos, acertando em quase todas.

	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	H							
2	Li	Be	B	C	N	O	F	
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	
4	K	Ca	-	Ti	V	Cr	Mn	Fe, Ni, Co
5	Cu	Zn	-	-	As	Se	Br	Ru, Pb, Rh
6	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	-	
7	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
8	Cs	Ba			-	-	-	
9								
10					Ta			
11	Au	Hg	Tl	Pb	Bi			
12			Th					

A tabela periódica de Mendeleev

Na “tabela de Mendeleev”, os elementos foram distribuídos em oito colunas verticais, chamados grupos homólogos e em doze faixas horizontais denominadas séries heterólogas. Os elementos foram agrupados em ordem crescente de suas massas atômicas. Os grupos foram numerados de I a VIII e cada grupo dividido em dois subgrupos.

Na época, eram conhecidos, somente cerca de 60 elementos. Os gases nobres e as terras raras (com exceção do cério) eram desconhecidos. Mendeleev deixou na sua tabela lacunas, reservadas para os elementos que viriam a ser descobertos.

Depois do silício, por exemplo, Mendeleev suspeitou que deveria existir um outro elemento que ele denominou eka-silício e cujas propriedades previu. Esse elemento foi descoberto em 1886 pelo alemão Clemens Winkler, que o chamou de germânio. As propriedades do germânio são espantosamente

próximas das previstas por Mendeleev. Além do germânio, outros elementos cuja existência foi prevista por Mendeleev foram descobertos posteriormente como o escândio (Sc), o gálio (Ga) e o polônio (Po).

Outro mérito seu foi admitir que as massas atômicas de alguns elementos estavam errados. Mendeleev percebeu que em alguns locais da tabela seria melhor fazer pequenas inversões na ordem dos elementos como, por exemplo, no caso do telúrio e do iodo. Em 1871, ele publicou uma versão aprimorada de seu trabalho.

Nem mesmo a posterior descoberta de uma família completa de novos elementos, os gases nobres, desfigurou a classificação de Mendeleev. Os gases nobres ficaram perfeitamente acomodados pela simples adição de uma coluna vertical. Embora lançada na mesma época e sendo semelhante à de Mendeleev, a classificação de L. Meyer tem hoje apenas significado histórico. O que é perfeitamente explicável pelo fato de ser a tabela do químico russo mais completa, mais simples e, principalmente, muito mais audaciosa para a época. É bom lembrar que naquela época, o átomo era considerado indivisível. Portanto, noções hoje em dia consideradas primárias, como eletrosfera e número atômico, eram simplesmente desconhecidas.

Em 1913, o inglês Henry Moseley fez importantes descobertas trabalhando com uma complexa técnica envolvendo raios X. Ele descobriu uma característica numérica dos átomos de cada elemento que ficou conhecida como número atômico e que posteriormente foi associada ao número de prótons.

1.2. As últimas modificações na tabela

A última mudança significativa na tabela periódica resultou do trabalho de Glenn Seaborg, na década de 50. Depois da descoberta do plutônio em 1940, Seaborg descobriu todos os elementos chamados de transurânicos (do número atômico 94 até 102). O estudioso reconfigurou então a tabela periódica colocando a série dos actínidos abaixo da série dos lantanídeos. Em 1951, Seaborg recebeu o Prêmio Nobel em Química, pelo seu trabalho. O elemento 106 da tabela periódica é chamado seabórgio, em sua homenagem. O sistema de numeração dos grupos da tabela periódica, usados atualmente, é recomendado pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC). A numeração é feita em algarismos arábicos de 1 a 18, começando a numeração da esquerda para a direita, sendo o grupo 1, o dos metais alcalinos e o 18, o dos gases nobres.

Os elementos não estão dispostos na tabela periódica atual por ordem crescente de massa atômica, mas sim por ordem crescente de número atômico. Hoje se sabe que quando os elementos químicos são organizados em

ordem crescente de número atômico, ocorre uma periodicidade nas suas propriedades, ou seja, ocorre uma repetição regular de elementos com propriedades semelhantes. Essa regularidade da natureza é conhecida como Lei Periódica dos Elementos.

1																	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	**Ac	Rf	Ha	106	107	108	109	110	111	112						
*Lantanídeos		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
**Actinídeos		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
Radionuclídeos		H	C	K	Co	Sr	Sr	Cs	Pb	Po	Rn	Ra	Ra	Th	Th	U	U

A tabela periódica dos elementos

2. A Classificação Periódica Moderna

Além de ser mais completa que a Tabela de Mendeleev, a Classificação Periódica Moderna apresenta os elementos químicos dispostos em ordem crescente de números atômicos.

2.1. A Lei Periódica

"As propriedades físicas e químicas dos elementos são funções periódicas de seus números atômicos". Na tabela periódica, os elementos estão arranjados horizontalmente, em seqüência numérica, de acordo com seus números atômicos, resultando em sete linhas horizontais (ou períodos). Cada período, à exceção do primeiro, começa com um metal e termina com um gás nobre. Os períodos diferem em comprimento, variando de 2 elementos, no mais curto, a 32 elementos no mais longo. As linhas verticais são formadas por elementos que possuem estruturas similares da camada externa. Estas colunas são denominadas grupos. Em alguns deles, os elementos estão relacionados tão intimamente em suas propriedades, que são denominados de famílias. O grupo 2, por exemplo, representa a família dos metais alcalinos terrosos.

2.2. Os Períodos da Tabela

Para iniciar o estudo da tabela periódica atual, vamos começar analisando as principais divisões que são utilizadas para agrupar elementos com propriedades semelhantes na tabela. A Tabela Periódica atual é formada por 109 elementos distribuídos em sete linhas horizontais, cada uma sendo chamada de período. Os períodos são contados de cima para baixo na tabela. O 1º período corresponde à camada K; o 2º período corresponde à camada L; e assim sucessivamente. Os elementos pertencentes ao mesmo período possuem o mesmo número de camadas de elétrons. O número de elementos em cada período é variável:

- Primeiro Período: o mais curto – 2 elementos (H, He).
- Segundo Período: curto – 8 elementos (Números atômicos – 3 a 10).
- Terceiro Período: curto – 8 elementos (Números atômicos – 11 a 18).
- Quarto Período: longo – 18 elementos (Números atômicos – 19 a 36).
- Quinto Período: longo – 18 elementos (Números atômicos – 37 a 54).
- Sexto Período: muito longo – 32 elementos (Números atômicos – 55 a 86).
- Sétimo Período: incompleto – (Números atômicos – 87 em diante).

o 1º período	é muito curto	tem 2 elementos	H e He
o 2º período	é curto	tem 8 elementos	do Li ao Ar
o 3º período	é curto	tem 8 elementos	do Na ao Ar
o 4º período	é longo	tem 18 elementos	do K ao Kr
o 5º período	é longo	tem 18 elementos	do Rb ao Xe
o 6º período	é super longo	tem 32 elementos	do Cs ao Rn
o 7º período	é incompleto	tem 23 elementos(?)	do Fr ao ...

Resumo dos períodos da tabela periódica

2.3. A Série dos Lantanídeos

No final do século XVIII, descobriu-se na Suécia uma série de minerais, que compreendiam elementos químicos de características semelhantes, porém peculiares e que foi denominada de terras-raras. Embora chamados terras-raras, os lantanídeos, na verdade, não são escassos na natureza. Para ilustrar essa “abundância”, calcula-se que a crosta terrestre seja formada por 0,02% de lantanídeos e 0,00002% de prata, que tem, portanto, ocorrência mil vezes menor que os lantanídeos. A estrutura atômica desses elementos foi explicada somente após a descoberta do conceito de orbitais.

Os lantanídeos começaram a ser isolados a partir do século XIX, notadamente a partir de 1839, quando o cientista C. G. Mosander isolou pela

primeira vez o cério e o lantânio, e posteriormente o ítrio, o térbio e o érbio. Outros 11 elementos foram isolados até o início do século XX. Entretanto, somente em 1945 o promécio foi detectado e isolado a partir de produtos de fissão do urânio-235, por cientistas americanos.

Lantanídeos, lantânios ou terras-raras são sinônimos dos elementos químicos pertencentes a família que compreende o escândio (Sc), de número atômico 21; o ítrio (Y) de número atômico 39, e a série de 15 elementos que se inicia no lantânio (La), de números atômicos entre 57 e 71. Todos eles têm dois elétrons na camada mais externa, numa configuração $6s^2$. São classificados juntos porque nesta série de elementos o aumento de um próton no núcleo corresponde a um aumento de elétrons no sub-nível 4f e por isso constituem o bloco f da Tabela Periódica, juntamente com os Actinídeos.

Z	Nome	Símbolo	Configuração
57	Lantânio	La	[Xe] $5d^1 6s^2$
58	Cério	Ce	[Xe] $4f^1 5d^1 6s^2$
59	Praseodímio	Pr	[Xe] $4f^3 6s^2$
60	Neodímio	Nd	[Xe] $4f^4 6s^2$
61	Promécio	Pm	[Xe] $4f^5 6s^2$
62	Samário	Sm	[Xe] $4f^6 6s^2$
63	Európio	Eu	[Xe] $4f^7 6s^2$
64	Gadolínio	Gd	[Xe] $4f^7 5d^1 6s^2$
65	Térbio	Tb	[Xe] $4f^9 6s^2$
66	Disprósio	Dy	[Xe] $4f^{10} 6s^2$
67	Hólmio	Ho	[Xe] $4f^{11} 6s^2$
68	Érbio	Er	[Xe] $4f^{12} 6s^2$
69	Túlio	Tm	[Xe] $4f^{13} 6s^2$
70	Ytérbio	Yb	[Xe] $4f^{14} 6s^2$
71	Lutécio	Lu	[Xe] $4f^{14} 5d^1 6s^2$

Lantanídeos e suas configurações eletrônicas

O fato das propriedades físicas e químicas dos elementos dessa série serem semelhantes às do lantânio justifica o nome lantanídeos com que são designados. Integram ainda essa família: cério (Ce), praseodímio (Pr), neodímio (Nd), promécio (Pm), samário (Sm), európio (Eu), gadolínio (Gd), térbio (Tb), disprósio (Dy), hólmio (Ho), érbio (Er), túlio (Tm), itérbio (Yb) e lutécio (Lu).

Os lantanídeos apresentam propriedades químicas semelhantes, no entanto, elas não variam de maneira periódica. Esse foi um problema para a inserção deles na Tabela Periódica.

a) Propriedades e aplicações

Os lantanídeos, quando purificados, são brilhantes e apresentam coloração prateada. Suas propriedades físicas e químicas variam significativamente quando apresentam impurezas ou quando combinam com outros elementos, principalmente no que se refere aos seus pontos de fusão e ebulição.

O lantanídeo que apresenta aplicação mais difundida é o cério, utilizado na preparação de ligas pirofóricas para isqueiros, dispositivos de iluminação a gás e na fabricação de vidros especiais que absorvem as radiações térmica e ultravioleta. Entre os outros elementos, o gadolínio forma um óxido que é usado como substância fluorescente nos tubos de televisão a cores. O óxido de térbio também é usado nos tubos de televisores em cores, para dar fluorescência verde.

2.4. A Série dos Actinídeos

Os actinídeos são os representantes de um grupo de elementos que formam parte do sétimo período da tabela periódica e que compõe a série de elementos químicos de estrutura semelhante à do actínio. Estes elementos, junto com os lantanídeos, são chamados de metais de transição interna. Recebem essa denominação porque suas propriedades são geralmente intermediárias entre os elementos metálicos dos blocos s e os elementos não metálicos dos blocos p. O nome desse grupo é proveniente do elemento químico actínio.

O grupo é constituído por um total de 15 elementos (desde o número atômico 89 até o 103), sendo quatro naturais (actínio, tório, protoactínio e urânio), mais onze elementos denominados transurânicos (netúnio, plutônio, amerício, cúrio, berquélio, califórnio, einstéinio, férmio, mendelévio, nobélio e laurêncio), obtidos por meio de processos radioativos.

Estes elementos apresentam características muito semelhantes entre si. Os de maior número atômico não são encontrados na natureza e apresentam tempos de meia-vida curtos; todos os seus isótopos são radioativos.

Na tabela periódica, estes elementos estão situados abaixo dos demais, junto com os lantanídeos, formando uma “tabela extra”, mais compacta. Algumas tabelas periódicas situam estes elementos entre os blocos s e blocos d, formando uma tabela mais alongada.

Algumas substâncias cujos átomos pertencem ao grupo dos actinídeos são essenciais a processo de obtenção de energia atômica. O combustível que se utiliza nas centrais nucleares como produto da fissão é basicamente constituído de urânio 235 e plutônio 239.

a) Estado natural e propriedades dos Actínídeos

Somente alguns representantes desse grupo (urânio, tório, actínio e o proto-actínio) são encontrados na natureza. Os demais actínídeos não se encontram em estado natural, devido a sua grande instabilidade.

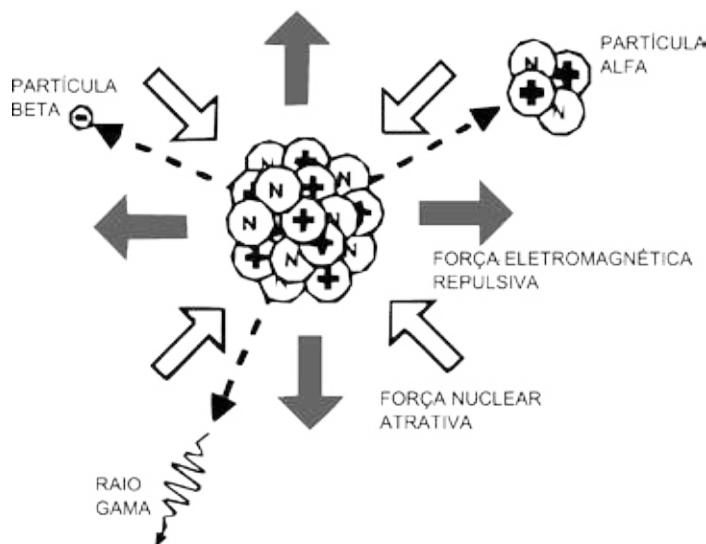
Já sabemos que as características químicas de um elemento se definem pelo número de elétrons da órbita mais externa (camada de valência) e é exatamente nesse ponto que reside a peculiaridade dos actínídeos. Na sequência da série, os novos elétrons se integram a órbitas profundas, mantendo a mais externa invariável. Desse fenômeno nasce a grande afinidade entre as propriedades químicas observadas na série. O mesmo ocorre no grupo dos lantanídeos, ou terras raras, que é outro conjunto de elementos estreitamente vinculados aos actínídeos, devido a suas similaridades e à configuração semelhante de camada externa dos elétrons.

Os actínídeos possuem sete camadas ou órbitas. As cargas negativas que aumentam de quantidade à medida que cresce o número atômico integram-se à quinta órbita. Os lantanídeos, por sua vez, possuem seis camadas e os novos elétrons se localizam na quarta órbita. Essa relação é importante para os pesquisadores, porque permite atribuir aos actínídeos propriedades descobertas pelo estudo dos lantanídeos, mais estáveis e mais frequentemente encontrados em estado livre.

A principal diferença entre os dois grupos de elementos está em seu número de oxidação, que determina a quantidade de elétrons que cada um deles pode aceitar ou ceder ao combinar-se com outros elementos. Quase todos os lantanídeos têm número de oxidação +3, o que significa que podem aceitar três elétrons. Os actínídeos têm número de oxidação variável entre +3 e +7. Como possuem mais orbitais, os elétrons adquiridos se situam na quinta delas, enquanto que nos lantanídeos os novos elétrons se localizam na quarta órbita. Esse fenômeno determina comportamentos químicos diferentes, pois, os elétrons que permanecem mais distantes do núcleo sofrem uma atração menor por parte das cargas nucleares, fazendo com que os actínídeos participem de reações químicas com maior facilidade que os lantanídeos.

b) A Radioatividade dos actínídeos

Todos os actínídeos são elementos radioativos, ou seja, emitem radiações de modo espontâneo e se desintegram para formar elementos mais estáveis, de menor peso e com números atômicos menores. Em termos gerais, todos os elementos de número atômico maior que 83 (número do bismuto) são radioativos.



Existem três tipos principais de radiações¹⁶: os raios beta, que consistem em elétrons; os raios alfa, que são pares de prótons e nêutros unidos em um núcleo de hélio e os raios gama, de natureza ondulária eletromagnética (ver figura abaixo). Quanto mais instável um elemento, mais freqüente será sua emissão de radiação, portanto, mais rápida sua desintegração.

Chama-se “meia-vida” o tempo necessário para a carga radioativa do elemento se reduza à metade. Seu valor varia de milhares de anos a poucos segundos.

A desintegração radioativa é o fenômeno responsável pelo fato de que a maior parte dos actinídeos não seja encontrada em estado natural. O urânio e o tório existem na natureza porque são produtos mais estáveis (originados da desintegração de elementos transurânicos), além de terem meias-vidas relativamente longas. A enorme quantidade de calor gerada pelo processo de desintegração é o fundamento pela qual se apóia o aproveitamento da energia nuclear para inúmeras aplicações.

c) Actinídeos e energia nuclear

Os isótopos são elementos que apresentam o mesmo número de elétrons e prótons, mas números diferentes de nêutrons em relação à configuração original do átomo. Os isótopos dos actinídeos apresentam uma acentuada tendência a captar nêutrons e adquirir assim uma configuração estável. Quando submetidos à ação de partículas energéticas, os núcleos dos isótopos de urânio ou plutônio, por exemplo, se desintegram e liberam grande quantidade de energia. No processo se desprendem outros nêutrons, que vão atingir o núcleo de novos átomos, os quais por sua vez se desintegram. Esse é o prin-

¹⁶**Radiação** é a propagação da energia por meio de partículas ou ondas. Todos os corpos emitem radiação, basta estarem a uma determinada temperatura.

cipio da reação em cadeia, fundamento dos reatores nucleares e da bomba atômica (figura abaixo – Fissão Nuclear).

O núcleo de um elemento químico pesado (urânio, plutônio ou tório) bombardeado por um nêutron divide-se em duas partes maiores e alguns nêutrons, sofrendo uma cisão denominada FISSÃO e a soma das massas resultantes tem massa inferior à soma das massas do núcleo bombardeado e do nêutron.

Além dos elementos actínio, tório, urânio e plutônio, que possuem uma importância essencial no campo da energia nuclear, é importante ressaltar as diversas aplicações dos elementos transurânicos. O isótopo 241 do amerício, por exemplo, no qual predomina a radiação gama, é usado em diferentes sistemas de medição industrial e no diagnóstico radiológico dos distúrbios da tireóide. Outro elemento transurânico de variada aplicação, em função de sua radioatividade específica, é o isótopo 252 do califórnio. Esse elemento é uma notável fonte de nêutrons para a tecnologia nuclear e se aplica também à prospecção de minerais e à localização de lençóis de petróleo. É também utilizado na exploração mineira de ouro e prata.

Propriedades físicas e químicas dos actinídeos:					
Nome	Símbolo atômico	Número mais estável	Isótopo	Valência	Configuração eletrônica:
Actínio	Ac	98	227	3	(Rn)6d ¹ 7s ⁵
Tório	Th	90	232	4	(Rn)6d ² 7s ²
Protactínio	Pa	91	231	4, 5	(Rn)5f ² 6d ¹ 7s ²
Urânio	U	92	238	3, 4, 5, 6	(Rn)5f ³ 6d ¹ 7s ²
Netúnio	Np	93	237	3, 4, 5, 6	(Rn)5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
Plutônio	Pu	94	244	2, 3, 4, 5, 6	(Rn)5f ⁶ 6s ²
Amerício	Am	95	243	2, 3, 4, 5, 6	(Rn)5f ⁷ 7s ²
Cúrio	Cm	96	247	3, 4	(Rn)5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
Berquélio	Bk	97	247	3, 4	(Rn)5f ⁹ 6d ¹ 7s ² ou (Rn)5f ⁹ 7s ²
Califórnio	Cf	98	251	3	(Rn)5f ¹⁰ 7s ²
Einstéinio	Es	99	254	2, 3	(Rn)5f ¹¹ 7s ²
Férmio	Fm	100	257	2, 3	(Rn)5f ¹² 7s ²
Mendelévio	Md	101	101	2, 3	(Rn)5f ¹³ 7s ²
Nobélio	No	102	102	2, 3	(Rn)5f ¹⁴ 7s ²
Laurêncio	Lw	103	256	3	(Rn)5f ¹⁴ 7s ²

3. Colunas, Grupos ou Famílias da Tabela Periódica

As dezoito linhas verticais que aparecem na tabela são denominadas colunas, grupos ou famílias de elementos. Devemos destacar que algumas famílias têm nomes especiais, listados na tabela ao lado:

Número da coluna	Elementos	Nome da família
1	Li,Na,K,Rb,Cs,Fr	Metais alcalinos
2	Be,Mg,Ca,Sr,Ba,Ra	Metais alcalinos-terrosos
16	O,S,Se,Te,Po	Calcogênios
17	F,Cl,Br,I,At	Halogênios
18	He,Ne,Ar,Kr,Xe,Rn	Gases nobres

3.1. Os Principais Grupos da Tabela

a) Grupo 1 – Hidrogênio e Metais alcalinos, formado pelos elementos Hidrogênio, lítio, sódio, potássio, rubídio, céσιο e frâncio.

Os elementos desse grupo são caracterizados pela configuração eletrônica da camada de valência, ns^1 e ocorrem como íons com carga positiva +1. Com exceção do hidrogênio, todos são metais e não são encontrados livres na natureza. O único elétron existente na camada de valência desses elementos está relativamente afastado do núcleo, e protegido pela camada interna preenchida. Por esse motivo, o elétron pode ser removido com facilidade. Por outro lado, os elétrons internos estão próximos ao núcleo, mais firmemente ligados, sendo muito difícil removê-los.

Os integrantes desse grupo são chamados de metais alcalinos, porque reagem facilmente com a água, formando hidróxidos, conhecidos como substâncias básicas ou álcalis. Estes metais também reagem facilmente com o oxigênio produzindo óxidos. O hidrogênio, que é o mais simples de todos os elementos químicos é constituído apenas por duas partículas subatômicas: um próton e um elétron. Apesar de possuir a mesma configuração eletrônica da camada de valência dos demais elementos que formam grupo 1, o hidrogênio é classificado como não-metal. No estado elementar é encontrado como moléculas diatômicas (H_2).

Principais Características

Os elementos pertencentes a esse grupo são metais leves, de baixa densidade, coloridos e moles. A moleza desses metais deve-se a fraqueza das ligações e das suas baixas energias de coesão (força que mantém os átomos unidos no estado sólido). Essa característica explica-se pelo fato da ligação efetuada entre os átomos de um metal alcalino ser do tipo covalente sigma s-s, onde há pequena interpenetração de orbitais, sendo, desta forma pouco eficiente ou fraca. Os átomos do grupo se tornam maiores do Lítio para o Frâncio (de cima para baixo), conseqüentemente as ligações se tornam mais fracas, as energias de coesão diminuem e os metais se tornam mais moles.

A primeira energia de ionização dos metais alcalinos é muito baixa (são os valores mais baixos da tabela), ou seja, é fácil retirar o elétron de valência de um átomo alcalino neutro. Logo, os elementos desse grupo são bastantes reativos, ávidos por formar uma ligação (na busca de estabilidade), bons agentes redutores, oxidando bem mais facilmente que os demais elementos da tabela. O tamanho dos íons aumenta do Li^+ para o Fr^+ , pois o número de camadas eletrônicas aumenta neste sentido uma vez que elementos maiores em termos de raio atômico perdem seus elétrons de valência com mais facilidade, reagindo de forma brusca e espontânea. Porém, a carga nuclear efetiva é a mesma para todos os elementos do grupo.

A eletropositividade destes elementos tende a crescer, no grupo, de cima para baixo se visto do ponto de vista termodinâmico (liberação de energia). Os valores das eletronegatividades dos metais alcalinos são muito pequenos. De fato são os menores valores encontrados na tabela. Assim, quando esses elementos se combinam com outros elementos para formarem compostos, é provável uma grande diferença de eletronegatividades dos átomos envolvidos, com a formação de ligações iônicas.

Tamanho, densidade e pontos de fusão e ebulição.

Como os átomos dos metais alcalinos são grandes, tendem a apresentar densidades muito baixas, sendo inferiores ou pouco maiores que a densidade da água. Os valores geralmente baixos de energia de coesão justificam os baixos valores para os pontos de fusão e ebulição dos elementos do grupo. Do Lítio para o Césio ocorre um decréscimo nas energias de coesão; logo, os valores de pontos de fusão e ebulição acompanham esse decréscimo.

A cor dos compostos e o teste da chama

A cor característica de cada elemento forma-se quando a energia absorvida ou emitida nas transições eletrônicas corresponde aos comprimentos de onda correspondentes da região da luz visível. Os metais do grupo IA apresentam configuração eletrônica estável, semelhante a dos gases nobres, no qual todos os elétrons estão emparelhados. Desta forma, a promoção de um elétron desses compostos requer uma grande quantidade de energia para promover o desemparelhamento dos elétrons, romper o nível energético preenchido e para levar o elétron para um nível mais alto de energia. Assim, Qualquer transição que porventura ocorra será de elevada energia e aparecerá na região do ultravioleta e não da luz visível, e será, portanto, invisível ao olho humano. Os compostos de metais do grupo IA são brancos.

Os elétrons podem ser excitados a um nível energético mais elevado, por exemplo, no teste da chama: Nesse teste, uma amostra de um sal do me-

tal é mergulhado em HCl concentrado, e aquecido sobre um fio de platina ou de níquel-cromo na chama de um bico de Bunsen. O calor da chama excita um elétron externo a um nível energético mais alto. Quando o elétron retorna ao seu nível energético original, a energia absorvida é liberada em determinado comprimento de onda. Para os metais alcalinos essa energia aparece como luz visível, provocando a cor característica da chama.

Solubilidade e Hidratação

Todos os sais simples dos metais alcalinos se dissolvem em água, liberando íons e formando soluções que são fortes eletrólitos.

• O Hidrogênio

O hidrogênio, com um único elétron, está situado normalmente na tabela periódica no mesmo grupo dos metais alcalinos (ainda que às vezes apareça separado destes em outra posição). Porém, a energia necessária para arrancar o elétron do hidrogênio é muito mais elevada do que a qualquer alcalino. Como nos halogênios o hidrogênio necessita receber um único elétron para completar o seu nível mais externo. Na sua forma elementar é encontrado como uma molécula diatômica, H_2 . Pode formar sais denominados hidretos (MH) com os alcalinos, de forma que o metal cede um elétron ao hidrogênio, como se o hidrogênio fosse um halogênio. Devido à peculiaridade do hidrogênio, prefere-se não classificá-lo em nenhuma série química.

O Hidrogênio foi o responsável pela tragédia com o dirigível Hindenburg?

A história sempre relatou que o Hindenburg foi destruído pela explosão de seu reservatório de hidrogênio e esse fato tornou-se conhecido mundialmente desta forma. Entretanto, alguns estudiosos observaram que a filmagem do desastre exibia efeitos que contradiziam a explicação clássica para o acidente.

Logo depois do desastre, imediatamente presumiu-se que o hidrogênio no dirigível de alguma forma se incendiara, realizando as previsões de muitos que avisavam que hidrogênio era muito perigoso para ser usado em transporte público.

As investigações conduzidas pelos governos norte-americano e alemão concluíram que um vazamento de hidrogênio fora a causa. Relatórios oficiais afirmaram que uma mistura de ar e hidrogênio se acumulara sob a cobertura do dirigível, e inflamou-se com uma faísca causada pela tempestade.

Coube ao pesquisador da NASA Addison Bain descobrir a verdade, mais de 60 anos depois do desastre:

Como é 14 vezes menos denso que o ar, ao queimar o hidrogênio tenderia a subir!! Entretanto, ficou claro pelas imagens que desde o início o fogo se dirigiu para baixo. Além disso, sabe-se que o dirigível estava recoberto com uma substância altamente combustível. A cobertura externa era composta de óxido de ferro coberto com cinco camadas adicionais de acetato de celulose, aplicado para endurecer a cobertura e proteger a estrutura da umidade. Os cientistas da NASA reconheceram imediatamente a mistura: era praticamente idêntica a combustível de foguete.

O dirigível não explodiu – queimou!

Conclusão: O incêndio foi causado pela natureza extremamente inflamável do material de cobertura e desencadeado por descargas de natureza eletrostática!

b) Grupo 2 – Metais alcalinos terrosos

Os elementos do grupo 2 (berílio, magnésio, cálcio, estrôncio, bário e rádio) são caracterizados pela configuração eletrônica da camada de valência ns^2 , ou seja, possuem dois elétrons na camada de valência. Embora menores do que os componentes do grupo IA, pois a carga adicional no núcleo atrai mais fortemente os elétrons, os elementos do grupo IIA são grandes e formam compostos no estado de oxidação +2, como por exemplo, o óxido de cálcio – CaO . O termo "terrosos" vem da época dos alquimistas que chamavam de "terrosos" as substâncias que não se fundiam e não sofriam transformações sob ação do calor. Os elementos desse grupo são metais que apresentam uma alta reatividade e ocorrem sob a forma de compostos, como cátions com carga +2.

Como os átomos são menores que os do grupo IA, os elétrons são ligados mais firmemente ao núcleo, conseqüentemente a energia necessária para remover o primeiro elétron (primeira energia de ionização) é maior que no grupo IA. A segunda energia de ionização, em relação à primeira, é quase o dobro do seu valor, porque com um elétron a menos, a carga efetiva do núcleo aumenta. No entanto, o fato de se formarem compostos iônicos mostra que a energia liberada quando se forma o retículo cristalino compensa a energia gasta para produzir os íons M^{2+} .

Raios atômicos e pontos de fusão e ebulição

O raio atômico desses elementos aumenta de cima para baixo no grupo e os pontos de fusão e ebulição diminuem. O aumento do número atômico é diretamente proporcional ao tamanho dos átomos (maior raio) e a carga nuclear efetiva é a mesma para todos os elementos do grupo (no estado neutro).

Os metais alcalino-terrosos possuem coloração branco prateada. Como esses elementos possuem dois elétrons de valência que podem participar das ligações (o que leva a uma ligação mais eficaz), conseqüentemente possuem uma maior dureza do metal e uma maior energia de coesão. Adicionalmente, o menor tamanho dos átomos gera uma ligação mais curta, e, por isso, mais forte. Mas apesar disso, os metais do grupo IIA ainda são relativamente moles. Como possuem maior massa atômica e são menores, apresentam densidades maiores do que os elementos do grupo IA. A energia de coesão dos átomos dos metais alcalino-terrosos é maior que a dos metais do grupo IA, fazendo com que os valores dos pontos de fusão e ebulição sejam maiores do que os destes últimos.

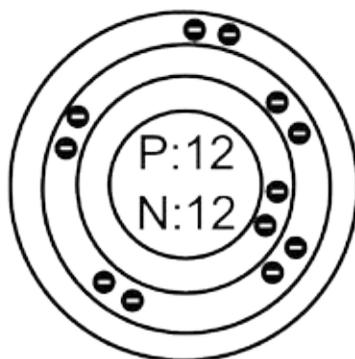
Aplicações

Os metais alcalinos terrosos são elementos reativos e assim como os metais alcalinos, são de grande importância para diversos setores de nossa vida. Compostos dos metais do grupo 2 (Mg e Ca) são conhecidos e utilizados desde a antiguidade. Um exemplo é o gipso ($\text{CaSO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$), que foi utilizado na construção da grande pirâmide de Gizé. Já o magnésio foi muito utilizado na forma de mineral macio, denominado talco, que era também chamado de pedra de Magnésia.

3.7 Alguns Elementos importantes desse grupo

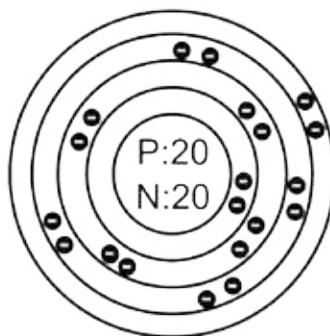
• Magnésio

Embora não seja encontrado em sua forma elementar, o Magnésio é considerado o oitavo elemento mais abundante da crosta terrestre, sendo um metal facilmente inflamável quando cortado em tiras ou bastões. Quando exposto à atmosfera, é rapidamente coberto por uma camada de óxido de magnésio, (MgO). O magnésio é um elemento muito importante para plantas e animais. Faz parte da molécula de clorofila. A dose diária requerida para um adulto é de cerca de 0,3g/dia.



Principais Usos:

- Flashes de máquinas fotográficas;
- Em ligas metálicas leves utilizadas em aviação e em automóveis;
- Na preparação de reagentes importantes;
- Em pirotecnia e bombas incendiárias;
- Como agente redutor na produção de urânio;
- Em diversos medicamentos.
- **Cálcio**



O óxido de cálcio (cal) já era utilizado antes de Cristo pelos romanos! Outros compostos como o sulfato e o carbonato de cálcio já eram conhecidos na antiguidade. Entretanto, o elemento só foi isolado e identificado no século XIX em 1808. O cálcio é um metal, e é o quinto elemento em abundância na crosta terrestre. É um constituinte essencial das folhas, dos ossos, dentes e das conchas de crustáceos. Esse metal tem uma coloração prateada e é relativamente duro. Forma um óxido branco na presença do oxigênio do ar, que, quando dissolvido em água, torna a solução básica. Não ocorre livremente na natureza, e é encontrado principalmente em minerais e tecidos animais.

Principais Aplicações

- Utilizado como agente redutor na obtenção de vários metais, como Tório, Urânio, Zircônio, e outros;
- Utilizado na preparação de ligas metálicas com alumínio, cobre e berílio;
- Na produção de hidróxido de cálcio.
- É um dos ingredientes da composição do cimento;
- É um nutriente essencial para os humanos;
- **Rádio**

O elemento rádio foi descoberto pelo casal Curie (Marie e Pierre), em 1898, em minérios de urânio (uranita). O seu nome vem da palavra em Latim "radius", que significa "raio". Este elemento, quando puro, é um metal brilhante

e branco, mas escurece rapidamente quando exposto ao ar. O rádio é luminescente, e emite raios alfa, beta e gama. É muito tóxico ao organismo, provocando câncer e outras doenças. O rádio é mais de 1 milhão de vezes mais radioativo do que o urânio.

Principais Aplicações

- Na fabricação de tintas luminosas
- Em fontes de nêutron
- Na medicina nos procedimentos de radioterapia de combate ao câncer

Para refletir

1. Pesquise sobre as propriedades e características de cada elemento descrito acima. Descubra como foram descobertos.
2. Identifique locais onde podem ser encontrados esses elementos no planeta Terra.
3. Verifique a ocorrência destes elementos no Brasil e, em caso positivo, especifique a região ou o Estado onde são encontrados.
4. Indique como tais elementos podem ser aplicados na área de saúde, na indústria farmacêutica e a sua importância como elementos radioativos.

c) Grupos 3 a 12 – Os Elementos de Transição

Os chamados elementos de transição formam o grande bloco dos elementos da parte central da tabela periódica. O bloco pode ser considerado uma ponte entre os elementos do bloco s (grupos 1 e 2) e os elementos do bloco p (grupos 13 à 18). Os elementos de transição receberam esta denominação de Mendeleev, que observou que as propriedades destes elementos eram intermediárias às dos elementos classificados como pertencentes ao bloco s e ao bloco p. Os elementos de transição possuem características próprias que os diferenciam de qualquer outro conjunto de grupos de elementos da Tabela Periódica.

Os elementos pertencentes a esses grupos são também chamados de metais de transição e todos possuem alta condutividade térmica e elétrica. Os elementos de transição possuem orbitais de valência 3d, 4d e 5d (são também chamados de elementos do bloco d), além dos denominados lantanídeos e actinídeos, que possuem orbitais de valência 4f e 5f (também chamados elementos do bloco f). Os lantanídeos e os actinídeos são denominados elementos de transição interna.

Além dos citados, existem os transférmicos, que são os elementos conhecidos a partir do 101 até o 114, devido ao fêrmio (elemento de número atômico 100). Os transférmicos tiveram seus nomes revisados em fevereiro de 1997, pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC). Esses elementos não ocorrem na natureza, foram produzidos artificialmente, em laboratórios, usando reações nucleares controladas.

¹⁷Seguindo a receita de Fermi, os cientistas alemães Lise Meitner e Otto Hahn produziram acidentalmente uma fissão nuclear em 1939, descoberta que levou à criação do reator nuclear e da bomba atômica.

A produção de átomos superpesados tornou-se possível após uma previsão teórica do físico italiano Enrico Fermi¹⁷, em 1934. Ele concluiu que seria possível fazer elementos com mais prótons que o urânio ao bombardear núcleos com nêutrons, causando o chamado decaimento beta: um nêutron do núcleo se transforma em um próton e emite um elétron.

O primeiro elemento transurânico, o netúnio, foi produzido na Califórnia em 1940. A proposta de Fermi permitiu a criação de mais sete elementos, mas falhou na produção do elemento acima do Férmio (batizado em sua homenagem). A partir daí os cientistas começaram a usar aceleradores de partículas para jogar núcleos contra núcleos, e em 1955 os americanos criaram o mendelévio, elemento 101. Os elementos superpesados estão sendo considerados um problema para a atual estrutura da tabela periódica, por apresentarem propriedades diferentes dos seus vizinhos de grupo.

Os elementos de transição mais conhecidos

Alguns destes elementos, como o ferro e o cobre são conhecidos e utilizados desde a antiguidade. O ferro era trabalhado a milhares de anos, antes mesmo do surgimento da metalurgia. O cobre é um outro elemento trabalhado desde a antiguidade, que era moldado a marteladas. Após o surgimento da metalurgia, o derretimento do cobre foi realizado, surgindo a Idade do Bronze, quando se construía muitos objetos a partir liga de cobre e estanho.

Além do cobre e do ferro que são bastante conhecidos e utilizados há muito tempo, tem também o ouro e a prata, que desde o início da sua utilização são ambicionados e têm diversas aplicações voltadas para a área financeira, eletrônica e de ornamentação.

Alguns Metais Muito Importantes

- **Ferro**

O ferro é o metal mais utilizado no mundo. Ele é utilizado para produzir objetos como: cadeiras, mesas, esponja de aço, carroceria e rodas de automóveis, pontes, edifícios, painéis, pregos, parafusos, ferramentas em geral, entre tantos outros. Todos os objetos citados ou são construídos de ferro, ou possuem ferro em sua composição. Além disso, o ferro é essencial ao organismo animal, a sua ausência pode provocar anemia.

- **Cromo**

O cromo é bastante utilizado na produção de ligas de aço-cromo (aço inoxidável), cobertura de outros metais por depósito (galvanoplastia). O Cr_2O_3 é utilizado como pigmento de coloração verde e como catalisador. O dicromato de potássio $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ é um forte agente oxidante, tóxico, mas muito utilizado em reações químicas e em explosivos.

- **Ouro**

O ouro já foi muito utilizado em cunhagem de moedas, agora, ele é padrão monetário em alguns países. O ouro, além possuir aplicação financeira, é empregado em jóias, em recobrimento de contato elétrico de alguns processadores de computador, em odontologia e em recobrimento de outros metais.

- **Prata**

A prata metálica possui grande aplicação na joalheria. No entanto, é na indústria fotográfica que a prata é mais empregada, na forma de AgBr. Além da prata na forma de AgNO₃ ser utilizada na medicina, para combater problemas de pele, gastrites e diarreias. A prata é também utilizada para produção de talheres, em pequena escala.

- **Níquel**

O níquel é utilizado em processo chamado de niquelação (recobrimento de uma superfície com níquel), em ligas metálicas como: o aço inoxidável, (constituído de 65% de Ni, 32% de Cu e 3% de outros), ligas Ni-Cu (usada em aparelho para desalinizar a água do mar). Além disso, ele é utilizado como catalisador na fabricação de margarinas e em baterias recarregáveis de telefones celulares e Ni-MH.

d) Grupo 13 – A Família do Boro (boro, alumínio, gálio, índio e tálio)

O grupo 13 é o primeiro grupo do chamado bloco p da tabela. Seus membros possuem a configuração da camada de valência, $ns^2 np^1$, portanto, espera-se um número de oxidação +3 para seus elementos. Com exceção do boro, que é um metalóide, todos os elementos do grupo são metais.

O alumínio é o representante mais conhecido desse grupo.

e) Grupo 14 – Família do carbono (carbono, silício, germânio, estanho e chumbo)

Os elementos do grupo 14 são caracterizados pela configuração da camada de valência $ns^2 np^2$. O primeiro elemento, o carbono, é o mais importante elemento para os seres vivos, seguido pelo silício, que é um dos elementos fundamentais para a tecnologia moderna. O carbono é o único elemento da tabela periódica que forma mais de 1.000.000 de compostos e tem seu próprio ramo da Química, a chamada Química orgânica. O carbono é distintamente um não metal, silício e germânio são metalóides e estanho e chumbo são metais.

O carbono é o representante mais conhecido desse grupo.

f) Grupo 15 – Família do Nitrogênio (nitrogênio, fósforo, arsênio, antimônio e bismuto)

Os elementos desse grupo são caracterizados pela configuração eletrônica $ns^2 np^3$ da sua camada de valência. Esta configuração dá aos elementos, uma variação no número de oxidação de -3 à +5. O nitrogênio e o fósforo são não-metais, o arsênio é um metalóide e o antimônio e o bismuto são metais.

g) Grupo 16 – Família do Oxigênio (oxigênio, enxofre, selênio, telúrio e polônio)

Os integrantes desse grupo são caracterizados pela configuração eletrônica $ns^2 np^4$ da sua camada de valência, e são todos não-metais. Formam compostos com metais e com hidrogênio quando o número de oxidação é -2. Os números de oxidação +2, +4 e +6 ocorrem quando os elementos do grupo formam compostos com outros elementos do seu próprio grupo, ou com os elementos do grupo 17, os halogênios.

h) Grupo 17 - Halogêneos (Flúor, cloro, bromo, iodo e astato).

São caracterizados pela configuração eletrônica $ns^2 np^5$ da sua camada de valência. Seus elementos são chamados de halogênios. Mostra uma regularidade nas propriedades físicas, na eletronegatividade, e nos raios atômicos e iônicos. O flúor possui algumas propriedades anômalas, tais como: a sua força como agente oxidante e a baixa solubilidade da maioria dos fluoretos.

i) Grupo 18 – Gases Nobres (Hélio, neônio, argônio, criptônio, xenônio e radônio).

Os elementos desse grupo possuem configuração eletrônica $ns^2 np^6$ da sua camada mais externa. Têm a camada externa totalmente preenchida de elétrons. Isso os torna elementos quimicamente inertes. Estes elementos são encontrados na natureza como gases monoatômicos, não reativos. Entretanto, o primeiro composto do gás nobre, foi produzido a partir de uma mistura de xenônio com flúor, em temperatura elevada. O radônio (Rn) é um gás radioativo.

4. Classificação dos elementos segundo suas propriedades

Os 115 elementos da tabela periódica estão divididos em cinco categorias principais, levando-se em conta suas propriedades gerais, comportamento químico e características físicas.

4.1. Metais

Dos 115 elementos químicos conhecidos, 87 são metais.

A principal característica dos metais é a eletropositividade, de onde vem o termo caráter metálico. Os metais possuem forte tendência a doar elétrons e, portanto a formar cátions. Fisicamente, os metais são:

- a) bons condutores de calor;
- b) bons condutores de eletricidade;
- c) maleáveis, ou seja, podem ser transformados em lâminas. (Para se ter uma idéia, 1 grama de ouro, o metal mais maleável que existe, pode ser transformado em uma lâmina de área 1 m^2);
- d) dúcteis, ou seja, podem ser transformados em fios. (1 grama de ouro, o metal mais dúctil, pode ser transformado em um fio de 2 quilômetros);
- e) portadores de brilho metálico característico;
- f) coloridos, entre acinzentado e prateado, com exceção do ouro e do cobre, cujo colorido é dourado com nuances amareladas ou avermelhadas, respectivamente;
- g) sólidos a 25°C a 1 atm, com exceção do mercúrio, que é líquido nessas condições.

4.2. Ametais ou Não Metais

São 11 os elementos que compõem essa categoria. A principal característica dos não metais é a eletronegatividade. Ou seja, possuem grande tendência a atrair elétrons e portanto a formar ânions.

Fisicamente, os ametais se apresentam de maneira inversa aos metais, salvo algumas exceções. De um modo geral:

- a) não são bons condutores de calor;
- b) não são bons condutores de eletricidade;
- c) devido aos itens anteriores, podem ser usados como isolantes;
- d) não possuem brilho como os metais.

4.3. Semi-metais

Grupo formado por sete elementos que apresentam características intermediárias entre os metais e os ametais.

4.4. Gases Nobres

Essa família é composta por seis elementos cuja característica principal é a inércia química. São muito estáveis na forma de átomo e não possuem nenhuma tendência a formar íons espontaneamente.

4.5. Hidrogênio

O hidrogênio é um elemento atípico, diferente de todos os outros da tabela. É o menor dos átomos. Tem um comportamento único e será sempre considerado e estudado à parte.

5. Propriedades Periódicas e Aperiódicas

Ao longo da história observou-se que diversas propriedades dos elementos químicos variam forma periódica com o aumento de seus números atômicos (portanto, ao longo dos períodos da Tabela Periódica), atingindo valores máximos e mínimos em colunas bem definidas da classificação periódica, sendo então chamadas de propriedades periódicas. Como exemplos, podemos citar a densidade, o volume atômico, as temperaturas de fusão e de ebulição, dentre outras.

Este aspecto costuma ser resumido de forma simples pela Lei da Periodicidade, que diz: Muitas propriedades físicas e químicas dos elementos são funções periódicas de seus números atômicos.

Entretanto, existem algumas propriedades cujos valores só aumentam ou só diminuem com o número atômico e que são chamadas propriedades aperiódicas.

Dentre elas, podemos destacar:

- A massa atômica, que aumenta com o aumento do número atômico;
- O calor específico do elemento no estado sólido, que diminui com o aumento do número atômico. No entanto, as propriedades periódicas são mais comuns e importantes, de maneira que só iremos estudar, com maiores detalhes, as propriedades periódicas.

5.1. Variação das Propriedades de acordo com a posição na Tabela Periódica

Tamanho dos Átomos

O tamanho dos átomos depende principalmente de dois fatores:

- Da Carga Nuclear (número de prótons), que tende a puxar os elétrons para perto do núcleo.

- Do Efeito de Proteção (blindagem) dos Elétrons Internos, que tende a evitar que os elétrons externos se aproximem do núcleo.
- São dois fatores que atuam, produzindo efeitos opostos, e o problema está em determinar qual dos dois é mais forte.
- Átomo Li > Cátion Li⁺ ⇒ Z = 3
- 3p 3p
- 3e 2e
- O átomo de lítio tem maior raio, pois apresenta mais elétrons atraídos pela mesma carga nuclear.
- Partículas isoeletrônicas (mesmo número de elétrons).

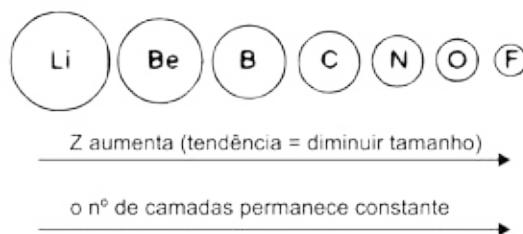
F	>	Ne ⁰	>	Na ⁺
Z=9		Z=10		Z=11
9p		10p		11p
10e		10e		10e

Como as partículas têm o mesmo número de elétrons, quando maior o número de prótons menor o tamanho.

5.2. Variação do Tamanho Atômico dentro dos Grupos

Dentro de uma família, o efeito dos níveis eletrônicos intermediários (tendendo a aumentar o raio) prepondera sobre o efeito de maior carga nuclear (tendendo a diminuir o raio). Desta forma, à medida que aumenta o número atômico ao longo da família, os átomos aumentam de tamanho.

5.3. Variação do tamanho Atômico dentro dos Períodos



Em cada período, da esquerda para a direita (de 1 a 18), o tamanho dos átomos diminui, pois há um aumento de carga nuclear, enquanto o número quântico principal permanece constante, isto é, o número de camadas eletrônicas é o mesmo.

5.4. Densidade Absoluta

Chama-se DENSIDADE ABSOLUTA (d) ou massa específica de um elemento o quociente entre sua massa (m) e seu volume (v). Portanto:

$$d = \frac{m}{V}$$

A variação da densidade absoluta, no estado sólido, é também uma propriedade periódica dos elementos químicos.

Os elementos mais densos situam-se no centro e na parte inferior da tabela.

Exemplo:

ósmio ($d = 22,5\text{g/cm}^3$) e irídio ($d = 22,65\text{g/cm}^3$)

5.5. Pontos de Fusão e de Ebulição

As temperaturas nas quais os elementos entram em fusão ou em ebulição são, também, funções periódicas de seus números atômicos.

É interessante notar que os elementos de menores pontos de fusão e de ebulição são aqueles que podem se apresentar no estado líquido, ou até mesmo gasoso, em condições ambientes. Com exceção do hidrogênio, esses elementos estão situados à direita e na parte superior da tabela.

5.6. Potencial de Ionização ou Energia de Ionização

Primeiro potencial de ionização de um átomo é a energia necessária (absorvida) para retirar o elétron de ligação mais fraca (e, portanto, do mais alto nível energético) de um átomo no estado gasoso isolado.

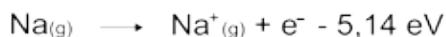
A energia necessária para arrancar um segundo elétron é o segundo potencial de ionização. E, assim, define-se o terceiro, quarto, etc. potencial de ionização.

Exemplo: A energia necessária para arrancar o primeiro elétron de um átomo de sódio isolado é 5,14 e V. A energia necessária para arrancar o segundo elétron do íon Na^+ isolado é 47,3 e V.

Nota: eV= elétron volt= $1,6 \times 10^{-19}$ joule.

O primeiro potencial de ionização é mais baixo que o segundo potencial de ionização, pois neste último devemos remover um elétron de um íon carregado positivamente (sendo necessário um maior dispêndio de energia,

pois é necessário vencer a atração eletrostática entre o elétron negativo e o íon positivo). O processo pode ser equacionado conforme o exemplo abaixo:



A indicação do estado gasoso (g) é coerente com a condição de estarem reagentes e produtos isolados.

a) Variação do Primeiro Potencial de Ionização na Tabela

Em um período, com algumas exceções, o potencial de ionização aumenta da esquerda para a direita. Isso acontece, porque, nesse sentido, aumenta a carga nuclear e diminui o tamanho dos átomos. Quanto mais perto está o elétron do seu núcleo, mais difícil é afastá-lo.

Exemplo: Segundo período:

Li	Be	B	C	N	O	F	F
5,4 eV	9,3 eV	11,3 eV	11,3 eV	14,5 eV	13,6 eV	17,4 eV	21,6 eV

É importante lembrar que os elementos de potencial de ionização elevado estão à direita da tabela, e os de baixo potencial estão à esquerda.

Dentro de um grupo, o potencial de ionização diminui de cima para baixo, pois, nesse sentido, o tamanho dos átomos aumenta bastante. No átomo de lítio, o elétron que vai ser retirado está bem próximo do núcleo e, portanto, mais firmemente ligado do que o elétron do cézio, que está muito mais distante do núcleo.

Li	Na	K	Rb	Cs
5,4 eV	5,1 eV	4,3 eV	4,2 eV	3,9 eV

5.7. Afinidade Eletrônica ou Eletroafinidade

É considerado eletroafinidade, a energia liberada, quando um elétron é adicionado a um átomo neutro isolado. Assim, quando se adiciona um elétron a um átomo neutro de cloro, formando o íon negativo cloreto, libera 3,75 e V, que é a afinidade eletrônica do cloro.



Em um grupo, com algumas exceções, a afinidade eletrônica diminui de cima para baixo, pois, nesse sentido, o tamanho do átomo aumenta. Estando mais distante do núcleo, o elétron adicionado não estará tão firmemente ligado.

5.8. Eletronegatividade e Eletropositividade

Eletronegatividade é a propriedade que mede a tendência que o átomo tem para receber elétron. Quanto maior, maior a tendência de receber elétrons.

Eletropositividade é a propriedade que mede a tendência que o átomo tem para ceder elétron. É o contrário da eletronegatividade. Assim, o flúor é o elemento menos eletropositivo e o céscio e o frâncio, os mais eletropositivos.

Dizemos que quanto maior a eletropositividade, maior o caráter metálico do elemento. Quanto mais eletronegativo, maior o caráter não-metálico.

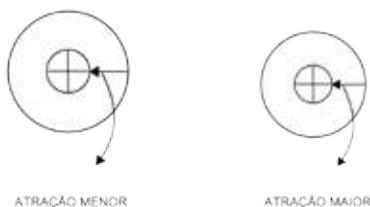
Vários fatores influem na eletronegatividade:

a) Número de Elétrons na Última Camada

Os elementos com mais de quatro elétrons na camada de valência tendem a receber elétron (alta eletronegatividade). Os elementos com menos de quatro elétrons tendem a ceder elétron (baixa eletronegatividade e, portanto, alta eletropositividade).

5.9. Tamanho do Átomo

Átomos pequenos tendem a apresentar eletronegatividades maiores que os átomos grandes.



Portanto, em um grupo, o tamanho do átomo aumenta bastante para baixo e, conseqüentemente, a eletronegatividade decresce para baixo. Assim, no grupo 17 a eletronegatividade diminui do flúor para o iodo.

Carga Nuclear do Átomo

Para os átomos com tamanho aproximadamente igual, a eletronegatividade depende da carga nuclear. Quanto maior esta, maior a atração sobre o elétron e, portanto, maior a eletronegatividade.

O nitrogênio é mais eletronegativo que o carbono.

Portanto, em um período, da esquerda para a direita, o tamanho não varia muito e a carga nuclear aumenta, deste modo, nesse sentido, aumenta a eletronegatividade. O grupo dos gases nobres (18) está excluído nessa variação.

Baseando-se em medidas experimentais, o cientista Pauling criou uma escala de eletronegatividade, que representamos a seguir, num esquema simplificado da Tabela Periódica:

<div style="background-color: #004a33; color: white; padding: 5px; display: inline-block; border-radius: 5px;">H 2,1</div>							
1	2	--	13	14	15	16	17
Li 1,0	Be 1,5	--	B 2,0	C 2,5	N 3,1	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	--	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,4	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	--	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8	Sr 1,0	--	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,7	Ba 0,9	--	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2
Fr 0,7	Ra 0,9						

Síntese do Capítulo



Iniciamos esse capítulo com a história da tabela periódica, destacando os principais fatos e eventos ao longo da trajetória até o modelo atual. Em seguida abordamos a classificação periódica moderna destacando os principais períodos, as séries especiais dos lantanídeos e actinídeos e por fim os grupos ou famílias da tabela periódica, relatando os elementos constituintes e as principais características de cada um. No final da unidade é abordado com detalhes as propriedades periódicas e aperiódicas dos elementos.

Atividades de avaliação



1. O que é a Lei Periódica dos Elementos Químicos? Defina.
2. Qual a importância de Mendeliev para a classificação periódica dos elementos?
3. Quais são os principais períodos da tabela? Como os elementos estão agrupados?
4. Quando um material é considerado radioativo? Por quê? Quais as suas características?
5. Em fogos de artifício, as diferentes colorações são obtidas quando se adicionam sais de diferentes metais às misturas explosivas. Assim, para que se obtenha a cor azul é utilizado o cobre, enquanto que para a cor vermelha utiliza-se o estrôncio. A emissão de luz com cor característica para cada elemento deve-se
 - a) aos elétrons destes íons metálicos, que absorvem energia e saltam para níveis mais externos e, ao retomarem para os níveis internos, emitem radiações com coloração característica.
 - b) às propriedades radioativas destes átomos metálicos.
 - c) aos átomos desses metais que são capazes de decompor a luz natural em um espectro contínuo de luz visível.
 - d) à alta densidade e eletropositividade dos átomos metálicos.
 - e) aos valores de energia de ionização dos átomos metálicos.
6. Assinale a alternativa que indica corretamente a ordem crescente dos raios atômicos.
 - a) Cs < Rb < K < Na < Li
 - b) Cs < Li < Rb < Na < K
 - c) K < Rb < Na < Cs < Li
 - d) Li < Cs < Na < Rb < K
 - e) Li < Na < K < Rb < Cs
7. Na tabela periódica, pertencem a um mesmo grupo os elementos que:
 - a) possuem a mesma densidade
 - b) diferem entre si de 4 unidades de número atômico.
 - c) têm o mesmo número de camadas eletrônicas.
 - d) têm o mesmo número de elétrons no último nível.
 - e) têm as mesmas propriedades físicas e químicas.

8. A alternativa que apresenta os elementos em ordem crescente de seus potenciais de ionização é:
- a) hélio, carbono, berílio, sódio. d) flúor, potássio, carbono, berílio.
b) neônio, flúor, oxigênio, lítio. e) potássio, sódio, nitrogênio, neônio.
c) sódio, neônio, carbono, lítio.
9. Os elementos químicos que apresentam um, dois ou três elétrons na camada mais externa, têm geralmente brilho específico, são bons condutores de calor e eletricidade e são classificados como:
- a) metais d) calcogênios
b) semi-metais e) representativos
c) não-metais
10. Pelo exame dos elementos representativos da classificação periódica, conclui-se que em geral a energia necessária para a remoção do primeiro elétron de um átomo no estado gasoso aumenta em função:
- a) do aumento do número de camadas do átomo.
b) da diminuição do número atômico em cada período.
c) do aumento do raio atômico em cada grupo.
d) da diminuição do número atômico em cada grupo.
e) do aumento de volume atômico em cada período.
11. O elemento químico mais eletronegativo do quarto período na classificação periódica dos elementos está localizado no grupo () e é representado pelo símbolo (). A alternativa que completa corretamente a sentença acima é:
- a) 1; K d) 17; Br
b) 4; Zr e) 18; Kr
c) 14; C
12. Com relação à classificação periódica dos elementos, é correto afirmar que:
- a) elementos de mesmo período possuem diferentes níveis de energia.
b) os metais alcalinos possuem maiores valores de potenciais de ionização.
c) a eletropositividade dos metais alcalinos terrosos aumenta com o aumento do número atômico.
d) os halogênios apresentam baixos valores de eletronegatividade.
e) os calcogênios são todos classificados como não metais

Referências



MEDEIROS, M. A. Texto retirado na íntegra do software QuipTabela 4.01; cidade: 2004.

LEE, J. D. **Química Inorganica: Um novo texto conciso**. 3 Ed. São Paulo: Ed. Blucher, 1980.

BRADY J. E. e HUMISTON G. E. **Química geral** vol. 1, 2 ed. : Ed. LTC, 1986.

Capítulo

4

Ligações Químicas

Objetivos

- Saber como e porque se forma uma ligação química.
- Reconhecer e descrever os tipos de ligações químicas.
- Entender a teoria de Lewis e a regra do Octeto.
- Entender o conceito de geometria molecular e as interações intermoleculares.

Introdução

As ligações químicas são uniões estabelecidas entre átomos para formar moléculas, que constituem a estrutura básica de uma substância ou composto. Na Natureza existem aproximadamente uma centena de elementos químicos diferentes. Os átomos destes elementos químicos ao se unirem, por meio de ligações químicas, formam a grande diversidade de substâncias químicas que existem em nosso planeta. A energia armazenada por essas ligações, somada à da rede molecular do conjunto, determina a estabilidade dos compostos formados.

O estudo das ligações químicas constitui-se em tema essencial na Química pela compreensão que proporciona em relação às substâncias orgânicas e inorgânicas. As teorias relacionadas às ligações químicas permitem explicar e antecipar propriedades dessas substâncias, bem como processos físicos e químicos de transformação em que podem estar envolvidas. Uma reação química rompe as ligações existentes entre os átomos das substâncias iniciais, ou reagentes, para dar origem a produtos finais da reação, por meio da formação de novas ligações.

Os conceitos relacionados com as ligações químicas são muito importantes dentro do estudo de Química. Podemos, inclusive, afirmar que a compreensão dos diferentes modelos de ligação química é fundamental para a aprendizagem de outros conteúdos químicos.

A compreensão deste assunto é dificultada pela maneira como, geralmente, é trabalhado este conteúdo. As diferentes ligações são apresentadas, não como modelos que servem para explicar o comportamento das substâncias, e sim como um conteúdo isolado.

Algumas questões surgem:

- Como é que a ligação é estabelecida? Será vantajosa?
- Quais as partículas do átomo que participam nessa ligação?

- O que mantém a ligação, uma vez estabelecida?
- Como é representada a ligação?

1. Por que se forma uma ligação química?

A ligação química irá se formar se houver uma queda na energia total do sistema favorecendo a formação do novo composto, ou seja, há uma queda na variação da energia livre de Gibbs¹⁸ dos produtos em relação aos reagentes. Em outras palavras, uma ligação química, entre dois átomos acontece quando a força de união entre eles é suficiente para originar um agregado estável, que pode se manter como uma nova espécie molecular independente.

As ligações químicas são, portanto, a solução para uma configuração eletrônica estável.

A entropia¹⁹ está relacionada com o número de configurações (ou arranjos) de mesma energia que um dado sistema pode assumir. A interpretação molecular da entropia sugere que, em uma situação puramente geométrica, quanto maior o número de configurações, maior a entropia.

Apenas os chamados gases nobres ou inertes e os metais em estado gasoso apresentam estrutura interna estável, caracterizada por átomos isolados. As demais substâncias químicas puras se constituem de mais de um átomo do mesmo elemento químico (substâncias simples, como o oxigênio, de fórmula molecular O_2) ou de átomos de elementos químicos diferentes (substâncias compostas, como a água, de fórmula molecular H_2O , com dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio). A quantidade de ligações que o átomo de um elemento pode efetuar simultaneamente expressa sua capacidade de se combinar, também chamada valência. Cada elemento apresenta, normalmente, um número fixo e limitado de valências.

A energia necessária para arrancar um elétron de um átomo desempenha papel fundamental na formação das ligações químicas. Nos metais alcalinos, por exemplo, essa energia é mínima. Esse aspecto explica porque os elementos desse grupo apresentam grande reatividade, ou seja, unem-se facilmente a outros elementos. Já os gases nobres, em que essa energia é muito alta, apresentam grande dificuldade para formar combinações, motivo por que são chamados gases inertes.

1.1. A Teoria do Octeto

De acordo com a teoria do octeto²⁰, enunciada pelo cientista americano Gilbert Newton Lewis, os átomos ao se combinarem tendem a assumir a estrutura eletrônica do gás nobre que lhe é mais próximo na tabela periódica. As liga-

¹⁸**Energia Livre de Gibbs** representa a variação total de entropia que acompanha uma reação química, efetuada lentamente e à temperatura e pressão constante. O engenheiro químico William Gibbs chegou à conclusão de que o conceito de energia disponível G em um sistema termodinâmico pode ser matematicamente obtido através da subtração da energia perdida $T \Delta S$ da variação da energia total do sistema H .

¹⁹Entropia é uma grandeza termodinâmica geralmente associada ao grau de desordem. Ela mede a parte da energia que não pode ser transformada em trabalho.

²⁰**Regra do octeto** é uma regra química simples, segundo a qual os átomos tendem a combinar-se de modo a ter, cada um, oito elétrons na sua camada de valência, ficando com a mesma configuração eletrônica de um gás nobre.

ções químicas representam um caminho para obter uma situação energética final favorável, de maior estabilidade.

Um grande número de elementos adquire estabilidade eletrônica quando seus átomos apresentam oito elétrons na sua camada mais externa. Existem algumas exceções para essa teoria como o Hidrogênio (H) e o Hélio (He), que se estabilizam com dois elétrons na última camada. Ainda temos o caso do carbono que é um elemento tetravalente (pode realizar quatro ligações); além dele todos os átomos que pertencem a família de número 14 da tabela periódica são tetravalentes e sendo assim encontram-se no eixo central dessa regra (Octeto), nesses casos os átomos tendem a fazer 4 ligações sigmas (ligações simples) entre diferentes átomos.

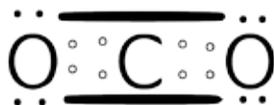


Figura: As ligações químicas no dióxido de carbono - o átomo central (carbono) está rodeado por 8 elétrons, de acordo com a regra do octeto, formando uma molécula estável.

1.2. As Representações de Lewis

Baseada na distribuição eletrônica da camada de valência de cada átomo, a Notação de Lewis é uma forma de representar ligações químicas de maneira bem detalhada. Foi proposta no início do século passado pelo físico e químico norte-americano Gilbert Newton Lewis.

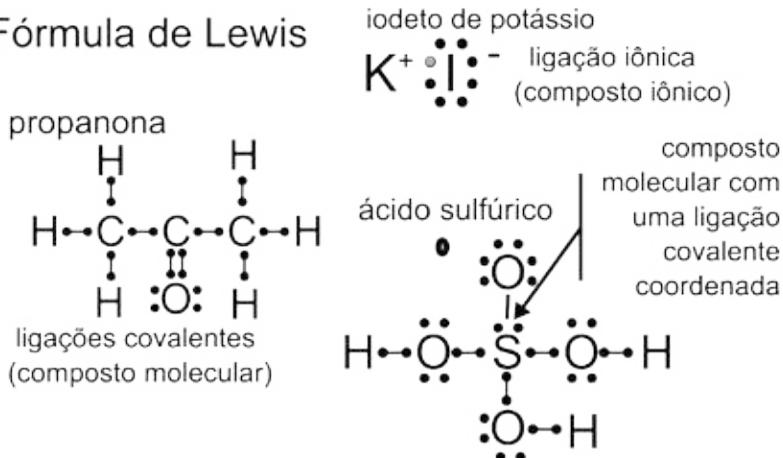
Esta notação consiste numa representação esquemática da camada de valência de cada átomo. Na chamada estrutura de Lewis, representa-se o símbolo do elemento rodeado pelos elétrons de valência (representados por pontos num átomo e por cruces no outro). A representação de lewis baseia-se na teoria de que certos átomos podem alcançar a estabilidade por compartilha de elétrons ficando com uma estrutura estável, igual à de um gás nobre, ou seja, com oito elétrons na última camada. Esta representação permite prever a formação de ligações químicas entre os átomos.

No caso mais simples da molécula de hidrogénio, os dois elétrons, provenientes um de cada átomo, deixam de ser propriedade exclusiva de cada elemento e passam a ser compartilhados igualmente pelos núcleos dos dois átomos. É como se cada átomo de hidrogénio tivesse dois elétrons em comum com o outro.



Cada ponto isolado representa um elétron desemparelhado que está apto a fazer uma ligação química. Cada par de elétrons é considerado não-ligante e só em certas condições pode fazer ligações químicas.

Fórmula de Lewis



Observe na figura abaixo que todos os átomos de gases nobres possuem oito elétrons na camada de valência, exceto o Hélio que apresenta apenas dois. Essas distribuições dos gases nobres representam camadas eletrônicas completas. Cada átomo dos grupos anteriores necessita de elétrons para atingir a configuração eletrônica de valência de um gás nobre e o faz por meio de ligações com outros elementos.

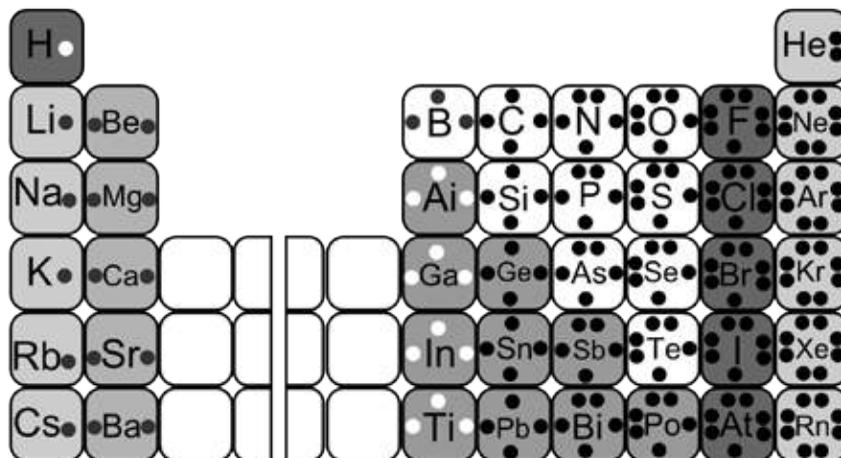


Tabela periódica com a representação dos elétrons de valência dos principais grupos.

1.3. Os tipos de ligações químicas

Os átomos podem adquirir uma configuração eletrônica estável de três maneiras: perdendo, recebendo ou compartilhando elétrons. Os elementos que

participam da formação de moléculas através de ligações químicas podem ser de três tipos principais:

- Elementos eletropositivos, cujos átomos perdem um ou mais elétrons com relativa facilidade;
- Elementos eletronegativos, que tendem a receber elétrons;
- Elementos com reduzida tendência em perder ou receber elétrons.
- Dependendo do caráter eletropositivo ou eletronegativo dos átomos envolvidos, três tipos de ligações químicas podem ser formadas:
 - Ligações iônicas
 - Ligações covalentes
 - Ligações metálicas

a) Ligação iônica

Ligação iônica é um tipo de ligação que ocorre através da permuta, ou seja, doação e recepção de elétrons entre os átomos participantes. Está baseada na atração eletrostática entre dois íons carregados com cargas opostas. Esse modelo procura explicar as ligações que ocorrem entre elementos muito eletronegativos (geralmente ametais e hidrogênio) e elementos eletropositivos (metais). Esse tipo de ligação pressupõe os metais doam elétrons, tornando-se íons positivos (cátions) e os ametais e o hidrogênio recebem elétrons, tornando-se íons negativos (ânions).

Os Metais apresentam-se normalmente na forma de cátions pela perda de elétrons, o que se dá na tendência de procurar a estrutura eletrônica estável de seu gás nobre mais próximo. Essa tendência em perder elétrons, mais acentuada entre os metais, denomina-se Eletropositividade. Os ametais, por sua vez, apresentam-se na forma de ânions que receberam elétrons, resultando também na configuração eletrônica estável do gás nobre mais próximo. Essa tendência em receber elétrons, mais acentuada entre os ametais, denomina-se Eletro-negatividade.

Em condições normais, a ligação iônica é formada entre elementos químicos que estão em lados opostos da tabela periódica. Em outras palavras, o átomo mais eletronegativo atrai os elétrons da ligação com tanta intensidade que eles passam a compor (fazer parte de) sua camada de valência, formando um íon negativo. O átomo mais eletropositivo apresenta uma energia de ionização²¹ tão baixa que cede um ou mais de seus elétrons para o outro átomo formando um íon positivo. Os compostos que são formados segundo este modelo de ligação, são denominados compostos iônicos.

²¹Energia de ionização:

Quando um elétron é excitado passa de um nível mais interno, de menor energia, para um nível mais externo, de maior energia. Este salto quântico requer uma determinada quantidade de energia. Do mesmo modo, para separar um elétron do seu átomo também é necessário o uso de um conteúdo de energia. Esta quantidade de energia necessária para retirar definitivamente um elétron de seu átomo isolado, no estado gasoso e no fundamental, formando um íon gasoso positivo é denominado energia de ionização.

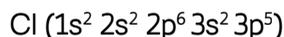
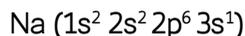
A ligação iônica ocorre somente se a variação da energia total da reação é favorável, quando os átomos ligados (produto) tem energia mais baixa que os átomos livres (reagentes). Quanto maior a variação da energia total, mais forte se torna a ligação.

Estudos revelaram que não existe ligação iônica 100% ou pura. Todas ligações iônicas tem um grau de ligação covalente ou ligação metálica. Quanto maior a diferença na eletronegatividade entre dois átomos mais iônica se torna a ligação. Compostos iônicos conduzem eletricidade quando fundidos ou em solução. Eles geralmente tem um alto ponto de fusão e tendem a ser solúveis em água.

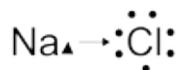
b) Energia Reticular

Quando se ligam átomos com comportamentos eletrônicos opostos, a transferência de elétrons dá origem a átomos eletricamente carregados, denominados íons: os cátions são átomos que ao ceder elétrons adquiriram carga positiva; e os ânions, átomos que receberam elétrons e adquiriram carga negativa. A ligação iônica assim verificada, característica dos sais alcalinos e alcalino-terrosos, se sustenta principalmente nas forças de atração eletrostática, embora seja também importante a energia geral do sistema resultante da combinação que se forma, chamada energia de rede, ou reticular.

A ligação entre o sódio (Na) e o cloro (Cl) para formar o nosso conhecido “sal de cozinha” é um exemplo clássico de ligação iônica. Observe a distribuição dos elétrons em camadas para os dois elementos:



No caso do cloreto de sódio, o cloro tem necessidade de adicionar um elétron à sua última camada, completando a quantidade de oito elétrons e obter assim uma estabilidade. Por outro lado, ao sódio interessa perder o elétron de sua camada M, assim a anterior passará a ser a camada de valência, já possuindo a quantidade suficiente de elétrons para ficar energeticamente estável. Na representação da ligação, utilizam-se somente os elétrons da última camada de cada átomo. A seta indica o sentido de quem cede e quem recebe o elétron. Cada elétron cedido deve ser simbolizado por uma seta. A representação resultante (abaixo) é conhecida por fórmula eletrônica ou de Lewis.

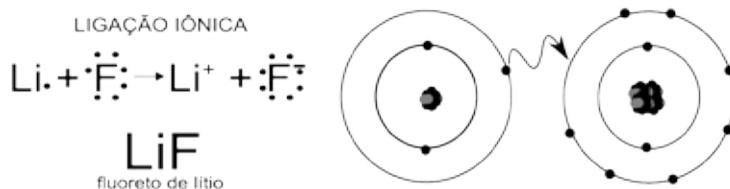


É importante ressaltar que antes da ligação, o sódio possuía 11 prótons e 11 elétrons. Após a ligação, a quantidade de prótons não se altera e a de elé-

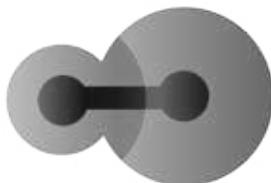
trons reduz-se e passa a ser 10. O cloro, por sua vez, possuía 17 prótons e 17 elétrons, após a ligação formada tem sua quantidade de elétrons aumentada de uma unidade. Com isso, o sódio se torna um íon de carga 1+ e o cloro 1-. A força que mantém os dois átomos unidos é de atração elétrica, que é uma ligação muito forte. Como foram utilizados um átomo de cada tipo, a fórmula do composto será representada como NaCl.

Outro exemplo ilustrativo é a união do lítio (Li) com o flúor (F) para formar o fluoreto de lítio. Aqui vemos também a ligação de um elemento do grupo IA da tabela periódica (eletropositivo) com um elemento do grupo 7A (eletro-negativo). O Lítio possui um elétron em sua camada de valência, mantido com dificuldade porque sua energia de ionização é baixa. Já o Flúor possui 7 elétrons em sua camada de valência, ávido por um elétrons para completar sua última camada. Quando o Lítio encontra o átomo de Flúor, este último atrai fortemente o elétron do Lítio para si, por ser muito mais eletronegativo.

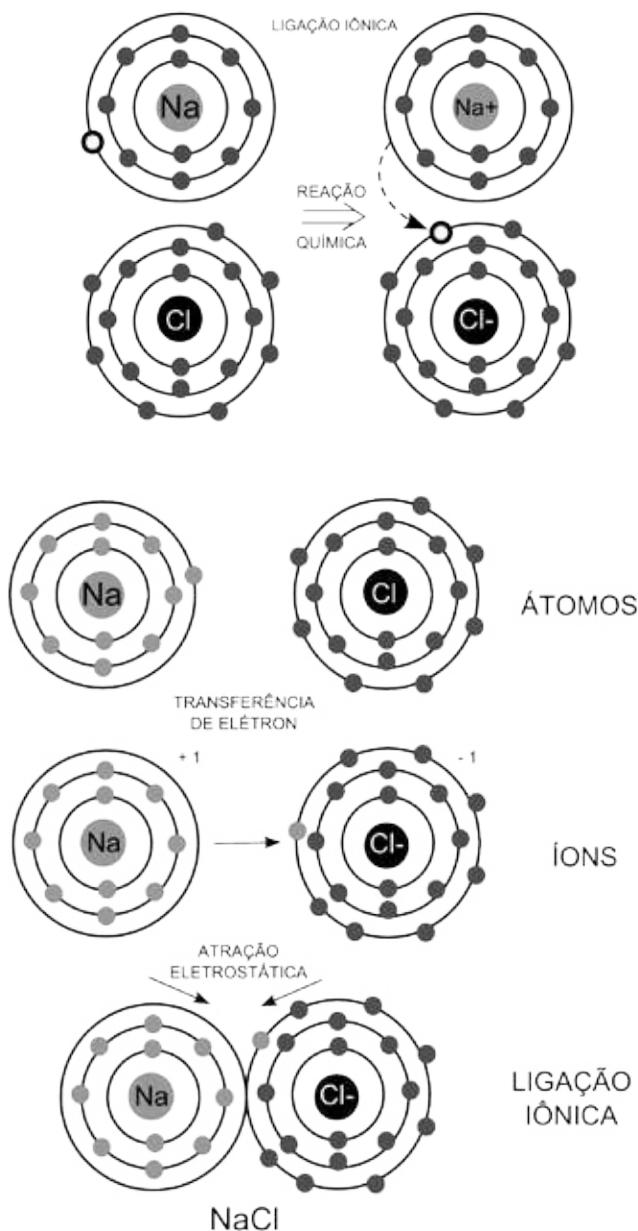
Após a transferência do elétron do lítio para o fluor, formam-se dois íons, que adquirem a configuração de gás nobre. Desta forma, o átomo de Flúor torna-se um íon negativo e o átomo de Lítio torna-se um íon positivo. A energia de ligação proveniente da atração eletrostática dos dois íons de cargas opostas tem valor negativo suficiente para que a ligação se torne estável.



Representação do fluoreto de lítio e esquema da formação da ligação iônica.



Representação em 3D da ligação Li-F – Fluoreto de lítio.



2. Propriedades físicas das substâncias iônicas

As substâncias iônicas são sólidas a temperatura ambiente, e possuem elevados pontos de fusão. No estado sólido, essas substâncias não conduzem eletricidade; entretanto, se estiverem fundidas ou dissolvidas em água revelam-se bons condutores elétricos. Uma parcela significativa dessas substâncias é solúvel em água; no entanto, essa característica encontra numerosas exceções. As substâncias iônicas apresentam baixa tenacidade, não são dúcteis nem maleáveis, apresentam aspecto cristalino e permitem a passagem de luz.

Principais propriedades físicas das substâncias iônicas:

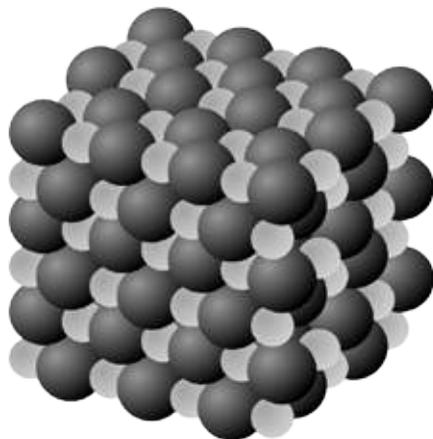
- Altos pontos de fusão e ebulição;
- Condutividade elétrica quando fundidos ou dissolvidos em água;
- Solubilidade em água (a maioria);
- Apresentam aspecto cristalino;
- São sólidos e possuem brilho (a maioria).

Exemplos de compostos iônicos:

- Cloreto de sódio - NaCl;
- Sulfeto de cálcio - CaS;
- Óxido de potássio - K_2O ;
- Fluoreto de lítio - LiF;
- Carbonato de cálcio - $CaCO_3$.

2.1 Estrutura Iônica

Os compostos iônicos no estado sólido formam uma estrutura iônica contínua em um cristal iônico. A forma mais simples de cristal iônico é um sistema cúbico simples (figura abaixo). Nessa forma todos os átomos estão posicionados nas extremidades de um cubo. Quando todos os íons tem aproximadamente o mesmo tamanho, eles podem formar uma estrutura diferente chamada cúbica de face-centrada.

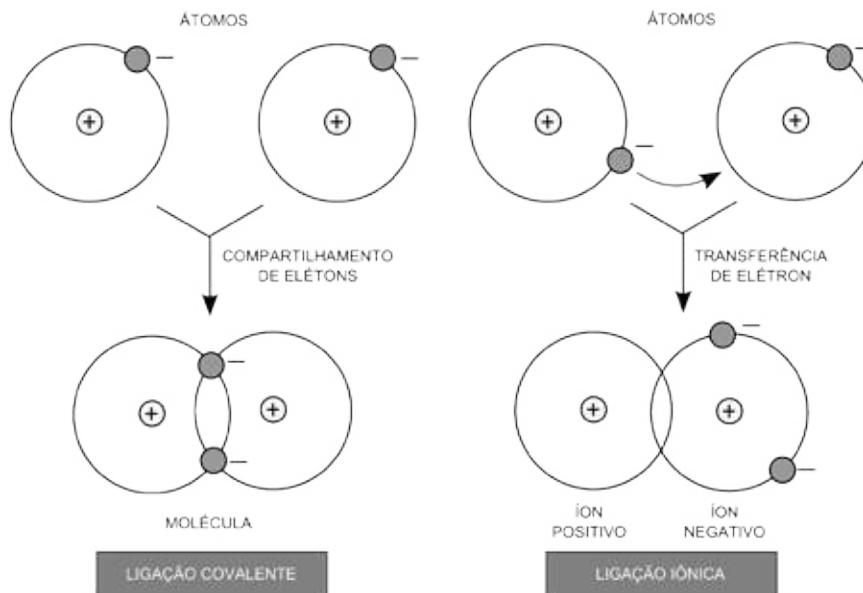


Representação da forma mais simples de um cristal iônico.

2.2. Ligações iônicas x ligações covalentes

Enquanto que em uma ligação iônica, os átomos estão ligados pela atração de íons com cargas opostas, em uma ligação covalente, os átomos estão ligados por compartilhamento de elétrons entre os elementos envolvidos. Na ligação covalente, a geometria molecular de cada átomo é determinada pelas regras

da Teoria da Repulsão Eletrônica do Par de Valência, enquanto que, em materiais iônicos, a geometria segue as regras do empacotamento máximo.



Desenho esquemático enfatizando a formação e a diferença entre as ligações iônica e covalente.

2.3. Ligação Covalente

A principal característica da ligação covalente é o compartilhamento de um ou mais pares de elétrons entre átomos, causando uma atração mútua entre eles, que mantêm a molécula resultante unida. Átomos tendem a compartilhar elétrons de modo que suas camadas eletrônicas externas sejam preenchidas e eles adquiram, desta forma, uma distribuição eletrônica mais estável. A força dessas ligações é maior que a das interações intermoleculares e comparável à da ligação iônica.

As ligações covalentes normalmente ocorrem entre átomos com eletro-negatividades próximas e elevadas (geralmente entre dois não-metals), dos quais remover completamente um elétron requer muita energia. Esse tipo de ligação ocorre entre átomos de natureza semelhante, é a mais comum nos compostos orgânicos. Também formam ligação covalente as moléculas diatômicas de grande estabilidade do oxigênio, nitrogênio, hidrogênio, flúor e cloro.

a) Um modelo para a ligação covalente

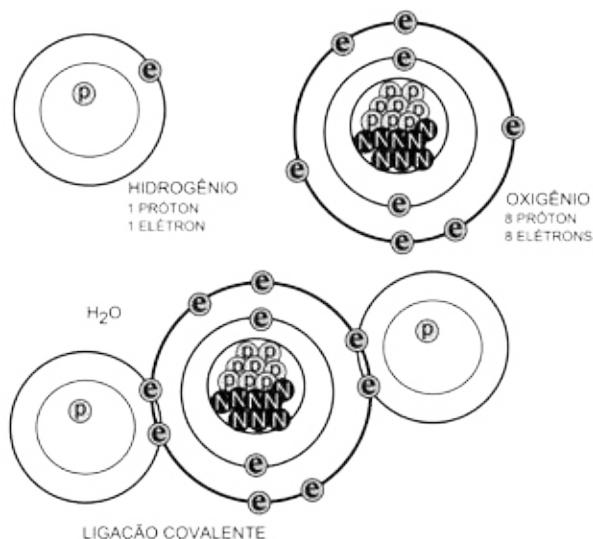
Com o objetivo de entender a forma como se dá a ligação entre ametais, Lewis (conforme relatado no início do módulo) propôs um modelo segundo o qual os átomos que se ligam formariam pares eletrônicos compartilhados pelos átomos ligantes. Os pares eletrônicos seriam formados por elétrons de valência dos átomos que constituem as moléculas, sendo comuns aos dois ametais ligantes. O modelo proposto foi denominado ligação covalente, e os compostos assim formados são chamados covalentes ou moleculares.

Frequentemente observa-se que o número de pares de elétrons compartilhados obedece a regra do octeto o que permite supor que dentro desse modelo de ligação, há também uma tendência dos elementos em alcançar a configuração eletrônica do gás nobre de número atômico mais próximo.

Fórmula molecular	Fórmula eletrônica	Fórmula estrutural
H ₂	H ∞ H	H — H
HCl	H ∞ Cl	H — Cl
Cl ₂	Cl ∞ Cl	Cl — Cl
O ₂	O ∞ O	O = O
H ₂ O	H ∞ O ∞ H	H — O — H
N ₂	N ∞ N	N ≡ N
NH ₃	$\begin{array}{c} \text{H} \infty \text{N} \infty \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} - \text{N} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

Alguns exemplos mostrando a fórmula molecular, eletrônica e estrutural de compostos.

Na formação de uma molécula de água, por exemplo, através da ligação covalente de dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio, podemos observar claramente o compartilhamento do elétron dos dois hidrogênios com os elétrons do oxigênio (figura abaixo).



Desenho esquemático do compartilhamento de elétrons dos dois hidrogênios com os elétrons do oxigênio na molécula da água.

A ligação covalente é normalmente mais forte que outros tipos de ligações. Ao contrário das ligações iônicas nas quais os íons são mantidos unidos por atração elétrica não direcional, as ligações covalentes são altamente direcionais. Como resultado, moléculas covalentemente ligadas tendem a formar-se em um número relativamente pequeno de formas características, exibindo alguns ângulos de ligação bem específicos.

Em alguns casos, o par de elétrons que participa diretamente da ligação pode ficar mais próximo do átomo que exerça sobre ele maior força de atração (mais eletronegativo). Essa ligação, chamada covalente polar, forma um pequeno dipolo elétrico, embora a molécula, no conjunto, seja neutra. A água e o ácido fluorídrico são exemplos clássicos de compostos desse tipo de ligação. As substâncias polares que contêm hidrogênio podem apresentar ocasionalmente em sua estrutura molecular as chamadas pontes de hidrogênio.

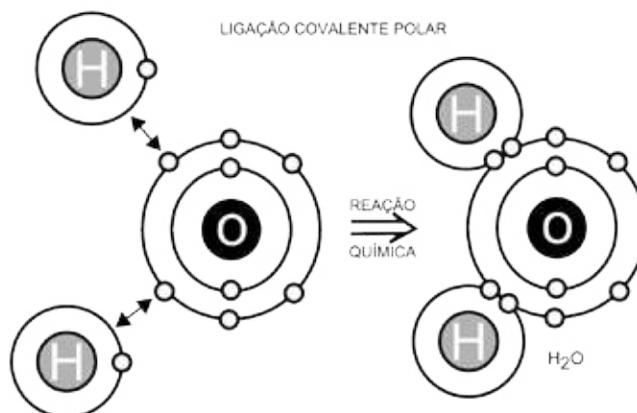
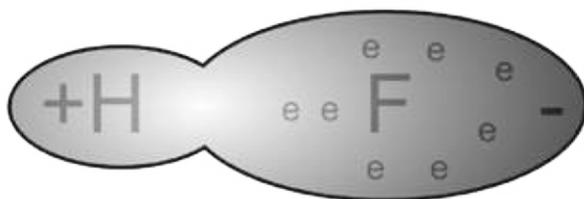


Ilustração da ligação covalente polar

Exemplo 1: Ácido Fluorídrico

O átomo de Flúor tem configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^5$ e o átomo de hidrogênio $1s^1$.

Quando os dois átomos se aproximam, eles compartilham seus elétrons de valência desemparelhados, atingindo a configuração do Neônio ($1s^2 2s^2 2p^6$) e do Hélio ($1s^2$), respectivamente. Como os dois átomos apresentam uma elevada diferença de eletronegatividade, a ligação formada é considerada covalente e polar. O flúor sendo mais eletronegativo que o hidrogênio, atrai os elétrons da ligação para si, formando um dipolo permanente (figura abaixo).



Representação do ácido fluorídrico mostrando o dipolo formado

Exemplo 2: Cl_2

O átomo de Cloro necessita apenas de um elétron na camada de valência par atingir a configuração eletrônica do gás nobre mais próximo (Argônio) e possui a seguinte configuração eletrônica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. Ao compartilhar um elétron com o átomo de cloro vizinho, a configuração do argônio é obtida, e conseqüentemente a estabilidade.

Neste caso, como os dois átomos apresentam as mesmas configurações eletrônicas e os mesmos valores de eletronegatividade, não há tendência em haver concentração de elétrons sobre nenhum dos dois átomos e, portanto, a ligação é covalente apolar.

b) Ordem de ligação

Ordem de ligação é um termo científico criado para descrever o número de pares eletrônicos compartilhados entre os átomos que formam a ligação covalente. O tipo mais comum de ligação covalente é a simples, em que ocorre o compartilhamento de um único par eletrônico entre dois átomos individuais. Aquelas em que mais de um par é compartilhado são chamadas ligações covalentes múltiplas. O compartilhamento de dois pares é denominado de ligação dupla, e o de três, ligação tripla. Um exemplo de ligação dupla ocorre na molécula de dióxido de carbono entre os oxigênios e o carbono, e um exemplo de ligação tripla ocorre no cianeto de hidrogênio entre o carbono e o nitrogênio.

c) Ligação dupla

Exemplo: O₂

O oxigênio tem configuração eletrônica $1s^2 2s^2 2p^4$ e necessita de dois elétrons para atingir a configuração eletrônica do gás nobre mais próximo, o Neônio.

Como ele apresenta dois elétrons desemparelhados, cada oxigênio pode fazer até duas ligações químicas. Ao fazer essas duas ligações, o oxigênio atinge a configuração do gás Neônio. A diferença de eletronegatividade entre os dois átomos é zero e, assim, a ligação é covalente apolar.

d) Ligação tripla

Exemplo: HCN

No caso do ácido cianídrico, o átomo que mais pode fazer ligações (o Carbono) e que é mais eletropositivo que o nitrogênio será o átomo central. Esta ocorrência é baseada no fato de que, por ser mais eletropositivo, o carbono tem mais facilidade de compartilhar os seus elétrons com os átomos periféricos. O hidrogênio necessita de apenas mais um elétron para atingir a configuração do gás nobre Hélio. O carbono necessita de mais 4 elétrons ($2s^2 2p^2$) e o nitrogênio necessita de mais 3 elétrons ($2s^2 2p^3$) para atingir a configuração do gás nobre Neônio ($2s^2 2p^6$).

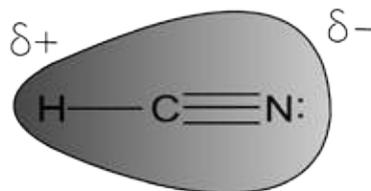
Ao fazer uma ligação simples com o hidrogênio e outra com o nitrogênio, o átomo de carbono fica com configuração $2s^2 2p^4$ e pode ainda fazer mais duas ligações simples com o nitrogênio. O nitrogênio tem a capacidade de fazer exatamente mais duas ligações simples.



Ao fazer uma ligação tripla com o nitrogênio, o carbono atingiu a configuração do neônio e conseguiu a estabilidade. O nitrogênio também.

A diferença de eletronegatividade entre o hidrogênio e o carbono é de 0,35 e a ligação é covalente polar, a diferença de eletronegatividade entre o carbono e o nitrogênio é de 0,49 e a ligação é covalente polar.

Como a molécula é linear e a eletronegatividade dos átomos aumenta no sentido HCN, a molécula é polar e tem seus elétrons concentrados na direção do nitrogênio.

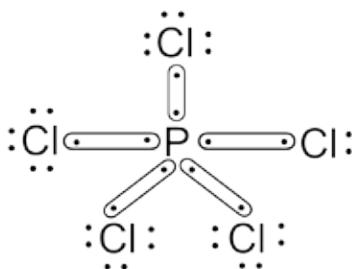


O HCN apresenta ligações polares e a molécula também é polar.

Ligações quádruplas, embora raras, também existem. Tanto o carbono quanto o silício podem teoricamente formá-las; entretanto, as moléculas formadas são extremamente instáveis. Ligações quádruplas estáveis são observadas, normalmente entre dois metais de transição em compostos organometálicos. Ligações de ordem 5 e 6 também foram observadas em metais de transição na fase gasosa e são ainda mais raras.

Exemplo: Ligação de 5^o ordem - pentacloreto de Fósforo – PCl_5

a) PCl_5 – Pentacloreto de fósforo

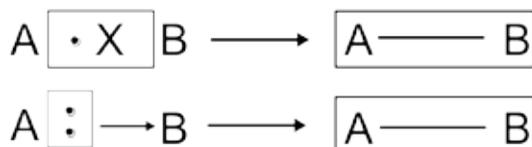


e) Ligação Coordenada

A ligação coordenada é um tipo especial de ligação covalente, caracterizada pelo compartilhamento de elétrons e que ocorre quando um átomo fornece os dois elétrons da ligação. É um tipo de ligação, muito semelhante à covalente, pois há o compartilhamento de elétrons. Entretanto, nesse caso específico um dos átomos cede ao outro o par de elétrons que ele necessita.

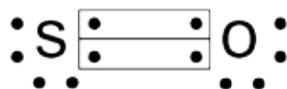
Podemos concluir que: Na ligação covalente, a ligação forma-se com um elétron de cada átomo. Na coordenada, um dos átomos cede o par de elétrons.

Exemplo comparativo que ilustra a diferença entre as ligações:

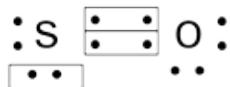


Exemplo: SO₂

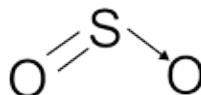
Enxofre (S) átomo central



Ocorrerá, nesta etapa, ligações coordenadas, onde os átomos se ligam ao átomo central.



ou ainda:



Na ligação covalente normal a diferença de eletronegatividade deve sempre ser menor que 1,7, se essa diferença for maior a ligação é iônica.

2.4. Resumo das principais características das ligações e substâncias covalentes

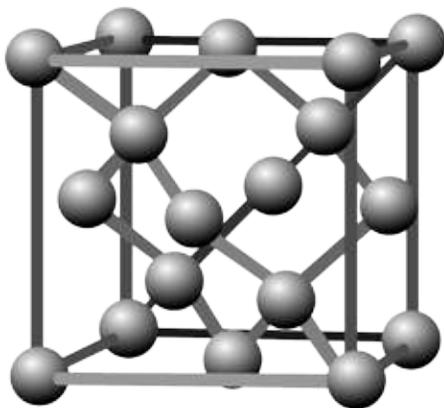
Nas ligações covalentes, todos os átomos envolvidos precisam receber elétrons para atingir a estabilidade ou completar sua camada de valência. Neste caso ocorrerá com os não-metais e hidrogênio, pois um necessita do outro para atingir sua estabilidade, sendo que o hidrogênio não irá perder seu elétron apenas compartilhar com um elemento do grupo dos não metais.

As substâncias “covalentes” são, de forma geral, líquidas ou gasosas. Entretanto, não são bons condutoras de eletricidade como as soluções iônicas.

As substâncias covalentes são sólidos que apresentam altos pontos de fusão e ebulição. As suas macromoléculas apresentam diferenciação formando um grande conjunto de átomos, por exemplo: grafite e diamante.

2.5. As Pontes de Hidrogênio

Também conhecidas como ligações de hidrogênio, as pontes de hidrogênio são importantes interações que ocorrem entre o átomo de hidrogênio e dois ou mais átomos próximos, de forma que o hidrogênio atua como "elo" entre os átomos com os quais interagem. São as interações intermoleculares mais intensas, tanto sob o ponto de vista energético quanto sob o ponto de vista de distâncias interatômicas.

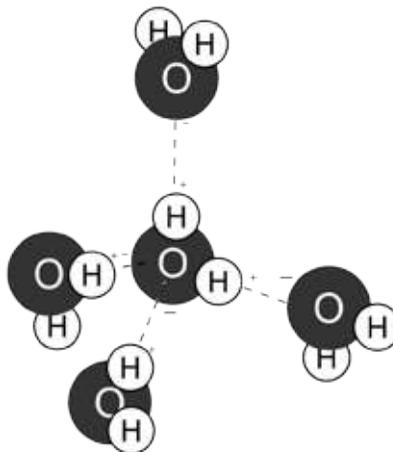


Estrutura cristalina do diamante

Nas moléculas formadas por átomos de hidrogênio unidos a elementos com forte afinidade por elétrons, os átomos de hidrogênio são atraídos simultaneamente por vários outros átomos e formam as chamadas pontes de hidrogênio. Esse tipo de ligação explica a estrutura e o comportamento de vários hidretos (combinações de hidrogênio com átomos de alta afinidade eletrônica), como o flúor (hidreto de flúor), o oxigênio (na molécula de água) e o nitrogênio (amônia). Devido a essa associação, tais hidretos possuem pontos de fusão e de ebulição mais altos do que o esperado. A ligação por ponte de hidrogênio também pode explicar por que o gelo flutua na água: sua densidade é menor porque as pontes de hidrogênio formam espaços vazios na estrutura reticular do gelo que não existem no líquido.

A ligação no hidrogênio é um dos casos especiais da tabela periódica pois na ligação covalente ou na iônica o hidrogênio fica instável apenas com dois elétrons na sua camada de valência. O átomo de hidrogênio, em vez de se unir a um só átomo de oxigênio, pode se unir simultaneamente a dois átomos de oxigênio, formando uma ligação entre eles. Essa ligação especial é chamada ponte de hidrogênio e se forma sobretudo com os elementos muito eletronegativos (F; O; N), pois gera uma separação de cargas que favorece o fenômeno. Entretanto esta ligação, do tipo eletrostático, não é muito firme,

sendo preferível representá-la em pontilhado ou em tracejado nas fórmulas. Existem dois tipos de ponte de hidrogênio: a intramolecular e a intermolecular. A ligação intramolecular se faz na mesma molécula e a intermolecular se faz entre duas moléculas.



Pontes de hidrogênio na água

No caso da água, a interação do hidrogênio com átomos de oxigênio das moléculas vizinhas explica todas as características e propriedades físicas particulares da água, que resultam de sua estrutura molecular. Essas ligações criam uma cadeia que pode se rearranjar muitas vezes, permitindo que a água líquida flua em toda parte. Os átomos de hidrogênio e oxigênio podem interagir com muitos tipos de moléculas diferentes, razão pela qual a água é considerada o solvente universal. Essa ligação dá uma notável característica à água: a tensão superficial.

As ligações de hidrogênio também existem dentro de uma mesma molécula, como nas proteínas e RNA. Em ambos os casos elas são importantes na manutenção da estrutura da macromolécula. Além disso, sua baixa energia (1 a 10 kJ/mol) permite o rompimento da ligação com o aumento da temperatura, daí os eventos de desnaturação das proteínas e do RNA, além da dissociação da dupla fita de DNA.

2.6. A Ligação Metálica

Os metais se caracterizam por possuir poucos elétrons na camada exterior do átomo. Enquanto certos corpos apresentam os elétrons bem presos aos átomos, em outros, algumas dessas partículas permanecem com certa liberdade de se movimentarem no cristal. Por esse motivo, esses elétrons formam uma "nuvem eletrônica", que ocupa faixas limitadas no interior do metal, as

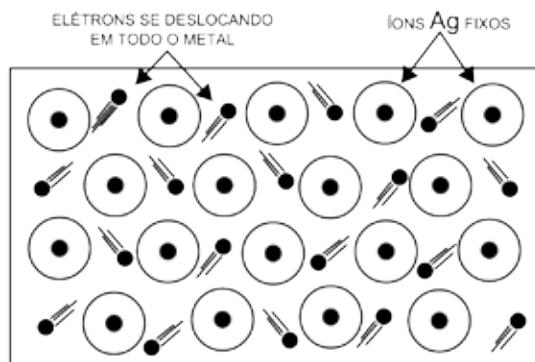
chamadas zonas de Brillain, e podem passar facilmente de uma para outra, o que justifica a relativa liberdade de que desfrutam dentro da rede. O sólido metálico seria assim formado pelos núcleos dos átomos mergulhados nessa nuvem eletrônica, que pertence ao conjunto, compondo um retículo cristalino.

Esse fato justifica a alta condutibilidade observada nos metais. Nesses compostos muitos dos elétrons se movimentam livremente no cristal, de forma desordenada, isto é, em todas as direções. Por ser caótico, esse movimento não resulta em qualquer deslocamento de carga de um lado a outro do cristal.

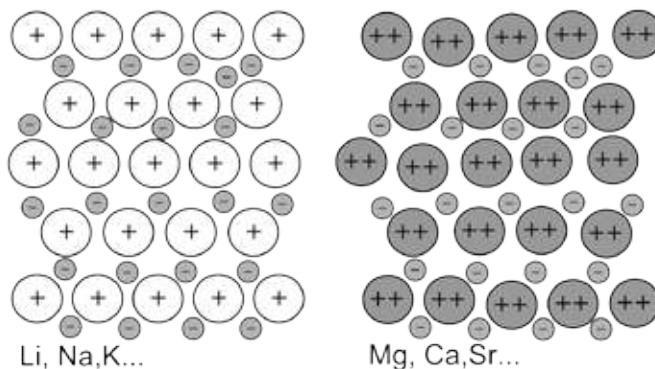
Os átomos de um metal têm grande tendência a perder elétrons da última camada e transformar-se em cátions. Esses elétrons, entretanto, são simultaneamente atraídos por outros íons, que então o perdem novamente e assim por diante. Por isso, apesar de predominarem íons positivos e elétrons livres, diz-se que os átomos de um metal são eletricamente neutros.

Os átomos mantêm-se unidos no interior da rede não só por implicações geométricas, mas também por apresentarem um tipo peculiar de ligação química, denominada ligação metálica. A união dos átomos que ocupam os "nós" de uma rede cristalina dá-se por meio dos elétrons de valência que compartilham (os situados em camadas eletrônicas não são completamente cheias). A disposição resultante é a de uma malha formada por íons positivos e uma nuvem eletrônica.

Na malha formada, um átomo metálico que perde elétrons se transforma em um cátion, o qual pode recapturar elétrons, voltando à forma de átomo neutro, que, por sua vez, novamente perderá elétrons. Assim, o retículo cristalino de um metal seria constituído de um conjunto de cátions e átomos neutros imersos em uma nuvem ou mar de elétrons móveis, denominados elétrons deslocalizados, que se movimentam livremente entre os íons.



Esquema do modelo do mar de elétrons para prata metálica



Representações de retículos cristalinos de um metais

Este modelo permite explicar satisfatoriamente as propriedades dos metais, considerando-se a grande mobilidade dos elétrons de valência:

Alta Condutividade: Quando é aplicada uma diferença de potencial (bateria) ocorre uma ordenação no movimento dos elétrons livres, originando um fluxo de elétrons com movimento orientado denominado corrente elétrica.

Altos Pontos de Fusão e Pontos de Ebulição: explicados pela grande estabilidade do retículo cristalino, bem como pelo fato de estarem os metais na forma iônica (cátions imersos em um mar de elétrons).

Condutividade: pode ser explicada considerando-se que quando é fornecido calor ao metal isto provoca um aumento na vibração dos íons positivos que transferem esta energia aos elétrons em movimento, transmitindo, assim, a energia para todo retículo.

A maleabilidade e ductibilidade: é explicada considerando-se que os íons do retículo cristalino, quando aquecidos e submetidos a pressões, podem deslocar-se uns sobre os outros (rolar), sem se separarem e tomando novas posições no arranjo cristalino.

3. Geometria Molecular

Geometria molecular é o estudo de como os átomos estão distribuídos espacialmente em uma molécula. Esta pode assumir várias formas geométricas, dependendo dos átomos que a compõem. As principais classificações são linear, angular, trigonal plana, piramidal e tetraédrica.

3.1. Teoria da repulsão dos pares eletrônicos

A teoria da repulsão eletrônica²² está baseada no conceito de que pares eletrônicos da camada de valência de um átomo central, se comportam como nuvens eletrônicas que se repelem (mesmo que estejam participando de liga-

²²A Teoria de Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência (TRPEV) se baseia em um simples argumento de que os grupos de elétrons se repelem uns com os outros e a forma adotada pela molécula será aquela em que a repulsão dos grupos eletrônicos seja mínima.

ções ou não), ficando com a maior distância angular possível uns dos outros. Uma nuvem eletrônica pode ser representada por uma ligação simples, dupla, tripla ou mesmo por um par de elétrons livres, ou seja que não estejam fazendo parte de uma ligação química. Essa teoria funciona bem para moléculas do tipo AB_x, em que A é o átomo central e B é chamado elemento ligante. De acordo com esse conceito, os pares de elétrons da camada de valência do átomo central (A) se repelem, produzindo o formato da molécula ou íon.

Desta forma, se houver 2 nuvens eletrônicas ao redor de um átomo central, a maior distância angular que elas podem assumir é 180 graus. No caso de três nuvens, 120 graus etc., sendo muito importante Observar se a ligação é covalente ou iônica.

Os Tipos de geometria molecular são:

- **Linear:** Acontece em toda molécula biatômica (que possui dois átomos) ou em toda molécula em que o átomo central possui no máximo duas nuvens eletrônicas em sua camada de valência. Exemplos: Ácido clorídrico (HCl) e gás carbônico (CO₂).
- **Trigonal plana ou triangular:** Acontece somente quando o átomo central tem três nuvens eletrônicas em sua camada de valência. Formam ligações químicas, formando um ângulo de 120 graus entre os átomos ligados ao átomo central. Observação: caso 2 das nuvens eletrônicas for de ligações químicas e uma de elétrons não ligantes a geometria é angular, como descrita a cima. O ângulo é de 120°.
- **Angular:** Ocorre quando o átomo central tem três ou quatro nuvens eletrônicas em sua camada de valência. No caso de três, duas devem estar fazendo ligações químicas e uma não, formando um ângulo de 120 graus entre os átomos ligantes. Quando há quatro nuvens, duas devem fazer ligações químicas e duas não, formando um ângulo de 104° 34' (104,45°) entre os átomos.
- **Tetraédrica:** Acontece quando há quatro nuvens eletrônicas na camada de valência do átomo central e todas fazem ligações químicas. O átomo central assume o centro de um tetraedro regular. Ângulo de 109° 28'.
- **Piramidal:** Acontece quando há quatro nuvens eletrônicas na camada de valência do átomo central, sendo que três fazem ligações químicas e uma não. Os três átomos ligados ao átomo central não ficam no mesmo plano. O ângulo é de 107°. O exemplo mais citado é o amoníaco, NH₃.
- **Bipiramidal:** Acontece quando existem cinco nuvens eletrônicas na camada de valência do átomo central, todas fazendo ligação química. O átomo central assume o centro de uma bipirâmide trigonal, sólido formado pela

união de dois tetraedros por uma face comum. Como exemplo cita-se a molécula PCl_5 . Os ângulos entre as ligações são 120 graus e 90 graus.

- **Octaédrica:** Acontece quando há seis nuvens eletrônicas na camada de valência do átomo central e todas fazem ligações químicas formando ângulos de 90 graus e 180 graus.

Síntese do Capítulo



No início desse capítulo estudamos a definição de ligação química e como a mesma se forma abordando os conceitos de energia livre de Gibbs e a Teoria do octeto. Em seguida estudamos as representações de Lewis. Na seqüência apresentamos de forma detalhada os tipos de ligações químicas destacando as ligações iônicas, covalentes e as pontes de hidrogênio com suas principais características e propriedades. Finalmente foi apresentado o conceito de geometria molecular incluindo a teoria da repulsão dos pares eletrônicos e os tipos de geometria molecular.

Atividades de avaliação



1. Quais são os principais tipos de ligação? Qual a principal característica de cada?
2. Descreva de forma resumida a teoria do octeto.
3. Quando uma ligação química entre átomos diz-se covalente? Defina e exemplifique.
4. Em termos energéticos, a ligação covalente é vantajosa? Por quê? Qual a principal característica desse tipo de ligação?
5. Sabemos que as partículas que participam na ligação são os elétrons, mas não a totalidade deles. Quais participam? Por quê?
6. O que caracteriza uma ligação simples? Como ela ocorre?
7. O que caracteriza uma ligação dupla? Como ela ocorre?
8. Qual a diferença entre uma ligação simples e uma dupla?
9. Qual o principal objetivo de uma ligação química?
10. Explique resumidamente a teoria da repulsão dos pares eletrônicos.
11. O momento dipolar é a medida quantitativa da polaridade de uma ligação. Em moléculas apolares, a resultante dos momentos dipolares referentes a

Capítulo

5

Funções inorgânicas

Objetivos

- Reconhecer as principais funções inorgânicas.
- Explicar e utilizar o conceito de Arrhenius.
- Classificar e nomear os ácidos, bases, sais e óxidos.

1. Funções Inorgânicas

Funções químicas representam grupos de substâncias que apresentam propriedades químicas em comum, também chamadas de propriedades funcionais.

O que confere as propriedades às substâncias participantes de uma mesma função é sua capacidade de reagir. Substâncias que reagem da mesma forma, quando colocadas em uma mesma situação, geralmente, pertencem à mesma função. Por exemplo, todas as bases reagem com ácidos resultando em sais.

Conhecendo-se a classificação de uma substância química como pertencente a uma função, é possível prever seu comportamento e, dessa forma, utilizá-la com segurança. A forma adequada de trabalhar com um material é uma informação útil quer seja em laboratório ou na atividade cotidiana.

A palavra ácido, por exemplo, refere-se a substâncias de grande utilidade, como líquido de bateria de automóvel, tempero de saladas, limpadores de superfícies etc. Para trabalhar com ácidos é importante ter noções de suas propriedades, como a possibilidade de conduzir corrente elétrica, o sabor azedo ou, ainda, seu efeito corrosivo.

Bases, como a soda cáustica e a barrilha, são utilizadas nas formulações de sabões, detergentes, removedores, desentupidores de encanamentos etc. Mais uma vez constatamos que seu uso prende-se às suas propriedades, como a possibilidade de reação com gorduras e seu poder de corrosão. Conhecendo essas propriedades, podemos tomar precauções na sua utilização: luvas, óculos de segurança e máscara, por exemplo.

Sabonetes e xampus são substâncias essenciais para nossa higiene pessoal e são constantemente aperfeiçoados para proteger a pele, cabelos e olhos: apenas os produtos anunciados como tendo pH neutro merecem nossa confiança. Novamente é uma propriedade química que vai facilitar nossas decisões e atitudes.

As principais funções inorgânicas são:

- ácidos;
- bases;
- sais;
- óxidos.

Mas antes de estudarmos cada uma das funções inorgânicas vamos analisar alguns conceitos necessários para entendermos as definições de algumas funções.

2. Teoria da dissociação iônica de Arrhenius-1884

Os conceitos de ácidos e bases²³ propostos por Arrhenius se baseiam no comportamento das substâncias quando em contato com a água (somente com a água). Do estudo das ligações químicas, podemos recapitular que a água apresenta ligações covalentes entre seus átomos, constituindo moléculas angulares, altamente polares e cujas forças intermoleculares são exercidas por pontes de hidrogênio.

2.1. Ácidos

Conceito: De acordo com o conceito de Arrhenius, considera-se ácido toda a substância que, dissolvida em água, se ioniza, fornecendo como cátions somente íons de hidrogênio (H⁺).



O íon H⁺ liga-se a molécula de água formando o íon H₃O⁺ (ÍON HIDRÔNIO).



a) Classificação dos Ácidos

a) Quanto ao número de elementos químicos:

- **Binário:** formado por dois elementos químicos diferentes:
Exemplo: Ácido clorídrico (HCl)
- **Ternário:** formado por três elementos químicos diferentes.
Exemplo: Ácido cianídrico (HCN)

²³**Ácido x Base:** Uma glândula situada no abdômen da formiga produz um ácido bastante corrosivo, que é o ácido fórmico. Contra picada de formiga, pode-se usar uma solução de água e sabão, já que o sabão, uma base, neutraliza o ácido fórmico que é injetado na picada.

- **Quartenário:** formado por quatro elementos químicos diferentes.

Exemplo: Ácido ciânico (HCNO)

b) Quanto ao número de hidrogênios ionizáveis:

- **Monoácido:** HCl, HI, H_3PO_4
- **Diácido:** H_2SO_4 , H_2S , H_3PO_3
- **Triácido:** H_3PO_4 , H_3BO_3
- **Tetrácido:** $H_4P_2O_7$

c) Quanto à presença (ou ausência) de oxigênio:

- **Oxiácidos:** H_2SO_4 , HNO_3
- **Hidrácidos:** HCl, H_2S

d) Quanto ao grau de ionização:

O grau de ionização corresponde ao grau de equilíbrio, aqui chamado grau de ionização, pois se refere à ionização de um ácido.

b) Característica ácida

A **característica ácida**²⁴ de um composto resulta da presença de cátions H^+ (ou H_3O^+) em solução aquosa e não de hidrogênios que porventura permaneçam não-ionizados. Assim, por exemplo, quando ocorre uma reação entre um ácido e um metal, são os cátions H^+ livres que reagem e não as moléculas de ácido “não ionizadas”. Neste caso, se utilizarmos um ácido puro ao invés de sua solução aquosa esta reação não ocorre justamente devido a ausência destes cátions. Em consequência, é possível transportar ácido sulfúrico puro em recipientes metálicos sem risco de uma corrosão rápida do recipiente.

²⁴Característica ácida: característica ácida de um composto resulta da presença de cátions H^+ (ou H_3O^+) em solução aquosa. Assim, por exemplo, quando da reação entre um ácido e um metal, são os cátions H^+ livres que reagem e não as moléculas de ácido não ionizadas.

c) Grau de ionização e força de ácidos

Quando ocorre a dissolução de uma determinada quantidade de moléculas de um ácido em água, nem todas elas, num dado instante, se encontram necessariamente ionizadas. Por exemplo, para uma certa quantidade de moléculas de ácido clorídrico adicionadas em água, de cada 100 delas, 92 apresentam-se ionizadas em cada instante, enquanto que 8 apresentam-se como moléculas não ionizadas. A proporção de moléculas ionizadas em relação ao total adicionado é denominada grau de ionização e varia de um ácido para outro. Neste caso, o ácido clorídrico apresenta um grau de ionização de 92% ($\alpha = 92\%$). O ácido fluorídrico, em condições semelhantes, apresenta grau de 8%. Isto significa que, de cada 100 moléculas adicionadas em água apenas 8 apresentam-se ionizadas, originando cátion H^+ (ou H_3O^+); as demais apresentam-se como moléculas não ionizadas.

- $\alpha > 50\%$: ácido forte
- $5\% < \alpha < 50\%$: ácido médio
- $\alpha < 5\%$: ácido fraco

d) Alguns ácidos importantes:+

- **HCl - Cloreto de hidrogênio**

Este ácido é produzido pela reação (queima) de Cloro e Hidrogênio, formando o gás denominado Cloreto de Hidrogênio, que depois é absorvido em água para formar o ácido clorídrico.

O ácido apresenta-se como um líquido fumegante claro e ligeiramente amarelado, com odor pungente e irritante. Sua forma comercial contém cerca de 33% de Cloreto de Hidrogênio em peso. É um produto tóxico e corrosivo.

O HCl é utilizado principalmente para limpeza e tratamento de metais ferrosos, processamento de minérios, acidificação de poços de petróleo e regeneração de resinas de troca iônica, na construção civil, na neutralização de efluentes, na fabricação de produtos para a indústria de alimentos e farmacêutica, entre muitos outros usos.

- **H₂SO₄ - Sulfato de hidrogênio**

O ácido sulfúrico é produzido por uma via conhecida como processo de contato a partir de enxofre, oxigênio e água. Primeiro, o enxofre é queimado ao ar, produzindo dióxido de enxofre, que por sua vez, em uma segunda etapa é oxidado a trióxido de enxofre com o uso de oxigênio e na presença de um catalisador de pentóxido de vanádio. Finalmente, o trióxido de enxofre é lavado com água ou uma solução de ácido sulfúrico, com a formação de uma solução de ácido sulfúrico 98-99%.

O ácido sulfúrico²⁵ é um ácido muito forte e extremamente corrosivo. Esta substância tem alto poder desidratante, ou seja, com forte capacidade de retirar água. Portanto ele carboniza os hidrocarbonetos como os açúcares, o amido, a celulose, o papel, tecidos de algodão, a madeira etc. Pois a reação de desidratação libera grande quantidade de calor.

Uma característica bastante peculiar deste ácido está relacionado ao seu comportamento dependente da concentração. Quando diluído (abaixo de concentrações molares de 90%), a solução assume caráter de ácido forte e não apresenta poder desidratante. Por outro lado, quando é concentrado (acima de 90%), deixa de ter caráter ácido e acentua-se o seu poder desidratante.

O ácido sulfúrico é o produto mais utilizado na indústria química. Pois é utilizado em enormes quantidades em quase todos os processos industriais, como na indústria petroquímica, na fabricação de papel, de corantes, bate-

²⁵Reação com a água: reação de hidratação do ácido sulfúrico é altamente exotérmica. Se a água for vertida sobre o ácido sulfúrico concentrado, poderá ferver e espirrar de forma perigosa. Sempre deve-se adicionar o ácido sobre a água e não o contrário.

rias de automóveis, de ácidos, de sais minerais e de inseticidas, assim como em explosivos, em metalurgia, como catalisador em inúmeras indústrias de produtos orgânicos. O maior consumo de ácido sulfúrico é na fabricação de fertilizantes. [Hipertexto](#)

• HNO₃ - Ácido Nítrico

O ácido nítrico puro é um líquido viscoso, incolor e inodoro. Sua coloração pode tornar-se amarelada devido a presença de impurezas. O ácido nítrico fumegante é a forma concentrada contendo óxidos de nitrogênio e que tem essa denominação porque libera fumaças (fumos) vermelhos ou amareladas, quando exposto ao ar, mesmo à temperatura ambiente. Na forma concentrada tingem a pele humana de amarelo ao contato, devido a uma reação com a cisteína presente na queratina da pele.

O ácido nítrico pode ser preparado em diversas concentrações, para fins particulares. A forma concentrada, normalmente usado em laboratórios e aplicações industriais, é uma solução aquosa de ponto de ebulição constante, contendo 68% de ácido nítrico.

A forma diluída pode ter qualquer concentração abaixo de 68%, porém o termo é normalmente empregado para designar uma solução de aproximadamente 10% de ácido nítrico, preparado por diluição de uma parte de ácido nítrico concentrado normal com 5 (cinco) partes de água. Ácido nítrico diluído tem um efeito muito corrosivo sobre metais, especialmente o alumínio.

O ácido nítrico, em várias concentrações, é utilizado para fabricação de corante, explosivos, ésteres orgânicos, fibras sintéticas, nitrificação de composto alifáticos e aromáticos, galvanoplastia, seda artificial, nitroglicerina, nitrocelulose, ácido pícrico, ácido benzóico, nylon, etc.

O ácido nítrico reage com os metais alcalinos, óxidos básicos e carbonatos, formando sais, como o nitrato de amônio. Devido à sua natureza oxidante, o ácido nítrico geralmente não doa prótons (não libera hidrogênio) na reação com metais. Por essa razão, pode-se esperar forte corrosão, que deve ser evitada pelo uso apropriado de metais ou ligas resistentes à corrosão.

e) Nomes dos ácidos

Algumas regras básicas para dar nome aos ácidos

a) Para os ácidos não oxigenados – Fórmula geral - H_nX_m

H_nX_m = ácido + X + ídrico

Exemplos:

HF = ácido fluorídrico.

HCN = ácido cianídrico.

b) Para os ácidos oxigenados (H_nO_m)

1º caso:

Mesmo número de elementos, porém

possuindo número de oxidação (Nox) diferente:

ácido hipo + E + oso

ácido + E + ico

ácido + E + oso

ácido per + E + ico

Nox crescente em relação a E.

E = radical do nome do elemento.

f) Classificação dos ácidos

- Quanto a presença de oxigênio:

1- Hidrácidos – não possuem oxigênio.

Ex: HI, HCN, $H_4[Fe(CN)_6]$

2- Oxiácidos – possuem oxigênio

Ex: HNO_2 , H_3PO_4 , $H_4P_2O_7$

- Quanto a volatilidade:

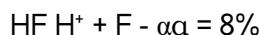
Voláteis – apresentam grande tendência a evaporação.

Ex: HNO_2 , HNO_3

g) Grau de ionização e força dos ácidos

Quando ocorre a dissolução de uma determinada quantidade de moléculas de um ácido em água, nem todas elas, num dado instante, se encontram necessariamente ionizadas. Por exemplo, para uma certa quantidade de moléculas de ácido clorídrico adicionadas em água, de cada 100 delas, 92 apresentam-se ionizadas em cada instante, enquanto que 8 apresentam-se como moléculas não ionizadas. A proporção de moléculas ionizadas em relação ao total adicionado é denominada grau de ionização e varia de ácido para ácido. Neste caso, ácido clorídrico apresenta um grau de ionização de 92% ($\alpha = 92\%$). O ácido fluorídrico, em condições semelhantes, apresenta $\alpha = 8\%$. Isto significa que, de cada 100 moléculas adicionadas em água apenas 8 apresentam-se ionizadas, originando cátion H^+ (ou H_3O^+); as demais apresentam-se como moléculas não ionizadas.

Exemplos:



Levando em conta que o caráter ácido decorre da presença de cátions H^+ (ou H_3O^+) livres em solução, ao adicionar-se quantidades iguais de moléculas de ácido clorídrico e fluorídrico à água, a presença de H^+ (ou H_3O^+) no ácido clorídrico será bem maior que no fluorídrico. Em outras palavras, pode-se dizer que o ácido clorídrico é mais forte que o fluorídrico. Um ácido é considerado forte quando mais da metade de suas moléculas apresenta-se ionizada em água; ou seja quando seu grau de ionização $> 50\%$; quando estiver entre 5% e 50% é considerado médio e, abaixo deste valor é fraco.

É possível identificar-se a força de um ácido através de sua fórmula. Para hidrácidos, isto é, ácidos sem oxigênio na fórmula.

- **Ácidos fortes:** HCl, HBr e HI (elementos centrais dos halogênios)
- **Ácido médio:** HF (primeiro halogênio)
- **Ácidos fracos:** demais hidrácidos

Para oxiácidos, a força pode ser estimada com base na diferença entre o número de oxigênios e hidrogênios na molécula. Assim:

$$(n^\circ\text{O} - n^\circ\text{H}) \begin{cases} = 0 & \text{ácido fraco} \\ = 1 & \text{ácido médio} \\ > 1 & \text{ácido forte} \end{cases}$$

2.2. Bases

Conceito: De acordo com Arrhenius, base ou hidróxido é toda substância que, dissolvida em água, se dissocia fornecendo como ânion exclusivamente íons OH^- (hidróxido).



A fórmula geral das bases é $\text{M}(\text{OH})_x$ onde M é um metal e x é a valência (carga elétrica) do íon formado por M.

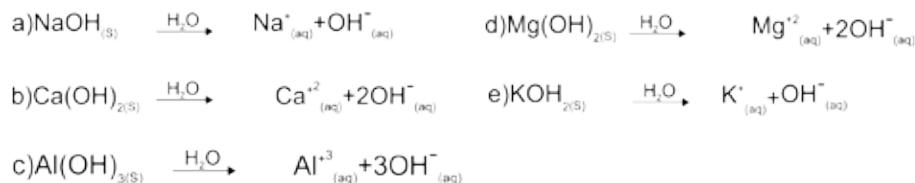


a) A influência das ligações presentes na determinação do tipo de substância

As bases são compostos que apresentam ligações iônicas entre o cátion metálico e o ânion hidroxila (OH^-) e ligações covalentes entre o oxigênio e hidrogênio na hidroxila. Predominam, neste caso, as propriedades de substâncias iônicas nestes compostos. Desta forma, as bases apresentam-se em condições normais ou padrão como sólidos constituídos de cátions e ânions. As bases mais tipicamente iônicas são as dos metais alcalinos e alcalino-terrosos (respectivamente, grupos 1 e 2).

b) Equação de dissociação

As equações normalmente utilizadas para representar o processo de dissociação das bases são apresentadas abaixo. A água é representada sobre a flecha. Fica implícito nesta representação que o processo de dissociação decorre da interação entre os íons e as moléculas da água. Da mesma forma, fica implícito que os íons apresentam-se continuamente cercados por moléculas de água.



c) Classificação das Bases

a) De acordo com o número de hidroxilas

- **monobases:** NaOH ; NH_4OH ; KOH
- **dibases:** Ca(OH)_2 ; Mg(OH)_2 ; Ba(OH)_2
- **tribases:** Al(OH)_3 ; Fe(OH)_3
- **tetrabases:** Pb(OH)_4 ; Sn(OH)_4

b) Quanto ao grau de dissociação iônica.

- **Fortes:** são as bases essencialmente iônicas, cujo grau de dissociação pode chegar a praticamente 100%. Nesse grupo incluem-se os hidróxidos de metais alcalinos e metais alcalinos terrosos.
- **Fracos:** são as bases essencialmente moleculares, cujo grau de dissociação é, em geral, inferior a 5%. Nesse grupo estão incluídos o hidróxido de amônio (NH_4OH) e os hidróxidos dos demais metais.

c) Quanto à solubilidade em água.

- **Totalmente solúveis:** os hidróxidos dos metais alcalinos e o hidróxido de amônio.
- **Parcialmente solúveis:** os hidróxidos dos metais alcalinos terrosos.
- **Praticamente insolúveis:** todos os demais hidróxidos.

Importante: O hidróxido de amônio é uma base especial, pois não tem metal na sua estrutura. A amônia reage com água formando hidróxido de amônio.

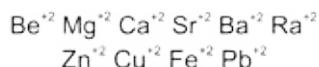


Principais Cátions

carga + 1



carga + 2



carga + 3



d) A Nomenclatura das bases

- **Nomenclatura Oficial:** Coloca-se palavra hidróxido seguida da preposição de e do nome do elemento. Se o elemento puder apresentar mais de uma valência, esta deverá ser indicada com algarismos romanos.

HIDRÓXIDO de _____ (Valência) nome do elemento

Exemplos:

NaOH hidróxido de sódio

Fe(OH)₂ hidróxido de ferro II

Fe(OH)₃ hidróxido de ferro III

- **Nomenclatura com terminações ICO e OSO:** Utiliza-se para indicar, para cátions que podem ter mais de uma valência, a maior e a menor valência, respectivamente:

Exemplos:

Fe(OH)₂ hidróxido ferroso

Fe(OH)₃ hidróxido férrico

Cu(OH) hidróxido cuproso

Cu(OH)₂ hidróxido cúprico

2.3. Sais

Conceito: São compostos iônicos que possuem, pelo menos, um cátion diferente do H^+ e um ânion diferente do O_2^- ou OH_1^- .

a) Tipo de substância com base nas ligações presentes

Os sais são substâncias predominantemente iônicas. Alguns sais apresentam simultaneamente ligações iônicas e covalentes (por exemplo, sais com ânions oxigenados); nestes casos, predominam também as características iônicas em termos de propriedades. Sendo iônicos, os sais são, a temperatura ambiente, sólidos constituídos de cátions e ânions alternando-se ordenadamente no espaço.

b) Equação de Dissociação

A equação normalmente utilizada para representar o processo de dissociação iônica de sais é apresentada abaixo. A água é representada sobre a flecha. Fica implícito nesta representação que o processo de dissociação decorre da interação entre os íons e as moléculas polares da água. Da mesma forma, fica implícito que os íons apresentam-se continuamente cercados por moléculas de água.

Exemplos de equações de dissociação



c) Classificação dos Sais

a) Quanto à presença (ou ausência) de Oxigênio

- **Oxissais:** $CaSO_4$; $CaCO_3$
- **Halóides:** $NaCl$; $CaCl_2$

b) Quanto ao Número de Elementos

- **Binários:** $NaCl$; KBr ; $CaCl_2$
- **Ternários:** $CaSO_4$; $Al_2(SO_4)_3$
- **Quaternários:** $NaCNS$; $Na_4Fe(CN)_6$

c) Quanto à Presença (ou ausência) de Água

- **Hidratados:** $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$
- **Anidros:** KCl ; NaCl ; CaSO_4

d) Quanto à Natureza

- **Normais:** NaBr ; CaCO_3
- **Hidrogenossais:** NaHCO_3 ; CaHPO_4
- **Hidroxissais:** Ca(OH)Br
- **Duplos ou mistos:** NaKSO_4 ; CaClBr

e) Quanto à Solubilidade

- **Solúveis:** quando sofrem grande dissociação em água: NaCl
- **Insolúveis:** quando sofrem pouquíssima dissociação iônica em água (na prática são pouco solúveis)

2.4. Óxidos

Conceito: Óxido é todo composto binário, no qual o oxigênio é o elemento mais eletronegativo. São conhecidos óxidos de todos os elementos, com exceção do flúor.

OF_2 não é óxido. É o fluoreto de oxigênio.

Fórmula geral dos óxidos:



Exemplos: CO_2 , H_2O , Mn_2O_7 , etc.

- **Nomenclatura Oficial:** Nomeia-se o composto da seguinte forma: (óxido) de (nome do elemento) (valência em algarismos romanos)

Exemplos:

FeO Óxido de Ferro II

Fe_2O_3 Óxido de ferro III

NaO Óxido de sódio

MgO Óxido de magnésio

Al_2O_3 Óxido de alumínio

CaO Óxido de cálcio (cal virgem)

- **Nomenclatura com terminações OSO e ICO:** Utilizam-se os sufixos oso e ico, respectivamente, para os elementos de menor e maior valência.

Exemplos:

FeO Óxido ferroso

Fe_2O_3 Óxido férrico (hematita)

Cu_2O Óxido cuproso

CuO Óxido cúprico

• Nomenclatura com

prefixos -

Regra Geral

Para Óxidos do tipo ExO_y



Os prefixos mono, di, tri, etc., indicam os valores de x e y na fórmula geral do óxido. O prefixo mono, antes do nome de E, é comumente omitido.

Exemplos:

SO_3 trióxido de enxofre

N_2O_3 trióxido de dinitrogênio

Fe_3O_4 tetróxido de triferro

P_2O_5 pentóxido de difósforo

CO monóxido de carbono

CO_2 dióxido de carbono (gás carbônico)

N_2O monóxido de dinitrogênio (gás hilariante)

MnO_2 bióxido de manganês

a) Classificação dos Óxidos

Quanto ao comportamento nas reações, os óxidos são classificados como:

- a) Básicos
- b) Ácidos
- c) Neutros
- d) Anfóteros
- e) Duplos ou Salinos ou Mistos
- f) Superiores

- Peróxidos
- Superóxidos

b) Óxidos Básicos

Existem alguns óxidos que possuem características peculiares, quando colocados em solução aquosa originam bases e quando em contato com ácidos, resultam na formação de sais e água. Esse caráter alcalino manifestado nestas duas situações levou a classificá-los como óxidos básicos. A análise destes compostos indica que são normalmente óxidos de metais com carga baixa (+1, +2, +3).

Exemplos: CaO, Na₂O, MgO

Óxido Básico + H₂O = Base

Óxido Básico + Ácido = Sal + H₂O

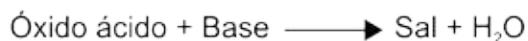
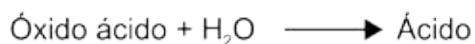
Óxido Básico + Óxido Ácido = Sal



c) Óxidos Ácidos (ou anidridos)

Alguns óxidos, quando adicionados em água originam ácidos como produtos. Quando estes mesmos óxidos são colocados em contato com bases, resultam a formação de sais e água. O caráter ácido apresentado em ambos os processos levou a caracterizá-los como óxidos ácidos. A análise destes compostos indica que são normalmente óxidos de ametais ou metais com carga elevada (+5, +6, +7).

Exemplos: SO₃, NO₂, C₂O₇, P₂O₅, CO₂, CrO₃



d) Óxidos Neutros

Existem três óxidos que não seguem a tendência geral dos óxidos de reagir com água e com ácidos ou bases, são eles: CO, NO e N₂O. Por este motivo, são classificados à parte como óxidos neutros. Por outro lado, isso não significa que não possam reagir com outras substâncias. Assim, por exemplo, o monóxido de carbono (CO) pode sofrer combustão, convertendo-se em dióxido de carbono.

Óxido neutro + H_2O \longrightarrow não ocorre reação

Óxido neutro + Ácido \longrightarrow não ocorre reação

Óxido neutro + Base \longrightarrow não ocorre reação

e) Óxidos Anfóteros

Existe um grupo de óxidos que podem tanto reagir com ácidos como com bases, resultando a formação de sais nos dois casos: esses compostos são conhecidos como óxidos anfóteros. Entretanto, quando colocados em água, sempre uma das características irá predominar e, neste caso, ou se forma um ácido ou uma base na água. Os óxidos anfóteros mais conhecidos são o Al_2O_3 e o ZnO . São também anfóteros os óxidos do estanho (Sn), de chumbo (Pb), de arsênio (As) e de antimônio (Sb).

Óxido anfótero + Ácido \longrightarrow Sal + H_2O

Óxido anfótero + Base \longrightarrow Sal + H_2O

Óxido anfótero + H_2O \longrightarrow poderá formar ou ácido ou base, dependendo do caráter predominante

Exemplos: Al_2O_3 ; ZnO ; Sb_2O_3 ; Cr_2O_3 ; MnO_2

$Al_2O_3 + 2NaOH \longrightarrow 2NaAlO_2 + H_2O$

$Al_2O_3 + 6HNO_3 \longrightarrow 2Al(NO_3)_3 + 3H_2O$

$Al_2O_3 + 3H_2O \longrightarrow 2Al(OH)_3$

f) Óxidos Duplos, Mistos ou Salinos

Estes óxidos comportam-se como se fossem misturas em proporções fixas de dois óxidos de um mesmo metal. São facilmente identificados pela proporção de sua fórmula: E_3O_4 . Assim, por exemplo, o Fe_3O_4 pode ser considerado como uma mistura dos dois óxidos de ferro: FeO e Fe_2O_3 . O mesmo pode ocorrer com o Pb_3O_4 , apenas com outra proporção na mistura de seus dois óxidos.

g) Peróxidos

Este grupo de óxidos, em princípio, apresenta caráter alcalino. O que os distingue dos óxidos básicos e a maior proporção de oxigênio na fórmula quando

comparado com o óxido básico correspondente. Por exemplo, Na_2O é um óxido básico; Na_2O_2 seria o peróxido correspondente. Este grupo inclui apenas metais alcalinos e alcalino-terrosos. Os peróxidos são constituídos pelo ânion O_2^{2-} . Neste ânion, dois átomos de oxigênio estão ligados entre si por uma ligação covalente. Por isso, cada oxigênio pode ganhar apenas 1 elétron, apresentando carga -1 , o que caracteriza uma situação não usual. Esta ligação é relativamente instável o que torna relativamente fácil a decomposição de peróxidos com liberação do gás oxigênio (O_2).

As reações dos peróxidos são semelhantes as dos óxidos básicos; entretanto, o átomo de oxigênio que apresentam combina-se com moléculas de água e origina moléculas de peróxido de hidrogênio em suas reações. Isto os diferencia quimicamente dos óxidos básicos.



h) Superóxidos

Também denominados polióxidos, representam uma variedade dos peróxidos e são identificados pelo ânion $\text{O}_2^{-1/2}$.



Reagem com os ácidos diluídos produzindo sal, água oxigenada e gás oxigênio.



Reagem com a água formando hidróxido, água oxigenada e gás oxigênio.



i) Óxidos Iônicos

São óxidos iônicos aqueles em que predomina a ligação iônica entre o oxigênio e o elemento, isto é, em que a diferença de eletronegatividade entre os elementos é igual ou superior a 1,7.



Os óxidos iônicos são sólidos de elevado ponto de fusão, reagem fortemente com água e com ácidos.

j) Óxidos Moleculares

São aqueles em que predomina a ligação covalente entre o oxigênio e o elemento, isto é, a diferença entre as eletronegatividades dos componentes é diferente de zero e menor que 1,7.

Exemplo: CO_2 , Cl_2O_3 , N_2O_3 , H_2O_2

Os óxidos moleculares de baixo peso molecular são gasosos, os de peso molecular médio são líquidos e os de peso molecular elevado são sólidos.

2.5. Hidretos

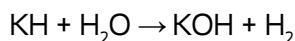
Os hidretos são compostos inorgânicos hidrogenados binários, que apresentam o hidrogênio como o elemento mais eletronegativo, ou seja, como anion de estado de oxidação -1 (H^{-1}).

Exemplos:

NaH – Hidreto de sódio

CaH_2 - Hidreto de cálcio

Estes compostos reagem facilmente na presença de água.



a) Os tipos de hidretos

Os hidretos podem ser iônicos ou moleculares. Os iônicos resultam da combinação de hidrogênio com elementos metálicos (sódio, cálcio, ferro, ouro etc.), e se caracterizam pela acentuada tendência a ceder elétrons. Os hidretos moleculares são produtos da combinação do hidrogênio com elementos não-metálicos (oxigênio, nitrogênio, enxofre, halogênios), dotados de alta eletronegatividade, ou poder de captar elétrons.

b) Nomenclatura dos hidretos

- Para nomear um hidreto metálico usa-se a palavra hidreto seguida do nome do metal que participa da formação do composto.

Exemplos: hidreto de sódio (NaH), hidreto de cálcio (CaH_2).

- Quando o metal tem vários números de oxidação possíveis, expressa-se o número de oxidação para cada situação.

Exemplos: hidreto de ferro II (FeH_2), ou ferroso, e hidreto de ferro III (FeH_3), ou férrico.

Os critérios utilizados para a nomenclatura dos hidretos não-metálicos coincidem com os anteriores, com a ressalva de que seus números são negativos e únicos: hidreto de cloro, hidreto de enxofre etc.

Muitos hidretos são conhecidos por denominações generalizadas mas não sistemáticas. É o caso da água (hidreto de oxigênio), do amoníaco (hidreto de nitrogênio), dos silanos (hidreto de silício) e dos boranos (hidretos de boro).

c) Classificação

De uma forma geral, os hidretos podem ser classificados em 3 diferentes tipos conforme a natureza de ligação e estrutura:

- Hidretos iônicos
- Hidretos covalentes
- Hidretos de metais de transição (hidretos intersistiais)

Basicamente, a classificação é definida pela eletronegatividade do elemento que está ligado ao hidrogênio. Os metais eletropositivos, os alcalinos e os alcalinos terrosos, formam hidretos iônicos enquanto que os elementos eletronegativos formam hidretos covalentes.

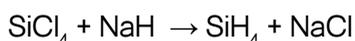
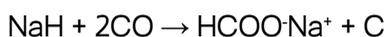
d) Hidretos iônicos

Os hidretos iônicos são os hidretos formados pelos elementos da família 1A e 2A, alcalinos e alcalinos terrosos. O hidrogênio comporta-se como um halogênio e recebe um elétron do metal formando um íon hidreto (H^-) que possui a configuração eletrônica do hélio ou o orbital s completo. Os hidretos são chamados de compostos binários quando formados de 2 elementos incluindo o hidrogênio, a sua fórmula química é MH ou MH_2 . Os hidretos de gálio, de índio, de tálio e de lantanídeos também são iônicos. A estrutura é cristalina.

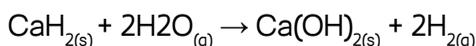
As evidências do carácter iônico são basicamente:

- Os hidretos iônicos quando fundidos conduzem corrente elétrica, por exemplo o hidreto de lítio P.F. = 691°C ; os demais hidretos decompõem antes de alcançar o ponto de fusão.
- Submetidos a uma eletrólise, desprendem gás hidrogênio no ânodo.
- As propriedades destes compostos são:

Agentes redutores



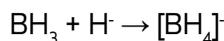
Reativos em meio aquoso



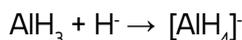
e) Hidretos covalentes

Os hidretos covalentes são os hidretos formados pelos elementos do bloco p (boro, alumínio e do grupo 4-7) e berílio.

Os metais fracamente eletropositivos do grupo III da tabela periódica geralmente formam hidretos covalentes. O hidreto de boro mais simples é o diborano, B_2H_6 , e o hidreto de alumínio é um polímero $(AlH_3)_n$. Observa-se que o B_2H_6 e o AlH_3 são aceptores de elétrons pois os átomos de B e Al possuem orbitais disponíveis:



borano \rightarrow boroidrito



alano \rightarrow aluminoidrito

f) Hidretos de metais de transição

Nestes compostos, as moléculas de hidrogênio dissociam e os átomos de hidrogênios entram nos buracos do retículo cristalino do metal, sítios intersticiais. Os hidretos intersticiais geralmente não são estequiométricos, ao contrário dos hidretos iônicos e covalentes. Os átomos de hidrogênio, que estão dentro do retículo, podem migrar internamente, reagindo com impurezas ou alterando as propriedades do material. Estes compostos são condutores.

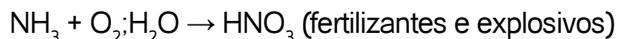
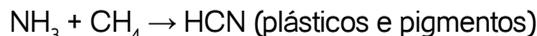
Exemplos:

Raney nickel (hidrogênio superficial)

PdH_x (hidrogênio intersticial)

Aplicações

- Amônia:



- Borohidretos (BH_4^- e derivados) e os hidretos de alumínio ("alananos"; AlH_4^- e derivados) são agentes redutores utilizados em sínteses orgânica que convertem grupos carbonilas em álcoois.
- Hidreto de lítio - empregado na fabricação de acumuladores de lítio.
- Hidretos de metais de transição de platina são usados em catálise heterogênea, como halogenação de olefinas.

Síntese do Capítulo

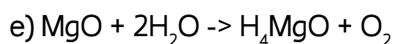
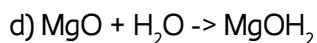
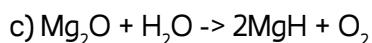
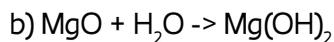
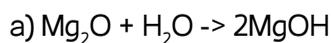


Iniciamos esse capítulo com uma introdução sobre o conceito de função química. Em seguida apresentamos o conceito de Arrhenius e a Teoria da dissociação iônica. Na seqüência estudamos detalhadamente os ácidos com suas propriedades, classificação, características, nomenclatura e exemplos. A mesma abordagem foi feita para as bases, sais óxidos e hidretos.

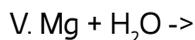
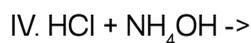
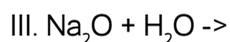
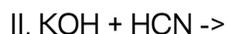
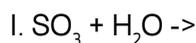
Atividades de avaliação



1. O leite de magnésia pode ser preparado pela reação entre óxido de magnésio e água, sendo corretamente representada pela equação:



2. Nas reações inorgânicas



apresentam produtos cujas respectivas soluções aquosas são ácidas:

a) somente I e IV.

b) somente II, III e IV.

c) somente III, IV e V.

d) somente I, II, III e V.

e) somente I, II, IV e V.

Capítulo

6

Introdução ao estudo da Química Orgânica

Objetivos

- Saber os conceitos básicos de Química Orgânica.
- Reconhecer e descrever as principais propriedades do carbono.
- Entender o processo de hibridização do carbono.
- Reconhecer e Classificar o encadeamento dos compostos orgânicos.

1. Os Compostos Orgânicos

Todos os compostos orgânicos são constituídos pelo elemento carbono. A grande maioria é constituída também pelo hidrogênio. Com bastante frequência, verifica-se a presença de oxigênio, nitrogênio e halogênios.

Os compostos orgânicos estão presentes em todos os seres vivos. Em nosso organismo, por exemplo, há mais de 60% em massa de compostos orgânicos, que se encontram em algumas membranas celulares lipoprotéicas (lipídeos + proteínas) e no DNA, responsável pela transmissão de caracteres hereditários. Além dos compostos orgânicos naturais, presentes em todos os alimentos que ingerimos, o ser humano conseguiu sintetizar um número muito grande de novos compostos orgânicos, que foram e são responsáveis por modificações dos nossos hábitos de vida, e dos quais acabamos nos tornando dependentes. Ex.: madeira, plásticos, adoçantes, analgésicos, etc.

Considerando-se a característica predominantemente não metálica destes elementos, é fácil constatar que os compostos orgânicos são essencialmente **substâncias moleculares**²⁶. Como substâncias moleculares, podem apresentar-se à temperatura ambiente nos três estados físicos da matéria: sólido, líquido e gasoso.

Essa diversidade pode ser compreendida pela influência que a dimensão das moléculas, a polaridade e a geometria exercem na intensidade das forças moleculares atrativas (forças de Van der Waals e pontes de hidrogênio) que se estabelecem entre moléculas de uma **determinada substância**²⁷. Mesmo quando sólidas à temperatura ambiente, seus pontos de fusão e de ebulição são inferiores aos dos metais e das substâncias iônicas. Além disso, de forma geral, os compostos orgânicos são termicamente menos estáveis que os compostos inorgânicos o que faz com que normalmente sofram decomposição térmica. Alguns compostos orgânicos, inclusive, não podem apresentar-se no estado de vapor, pois sofrem decomposição térmica antes de entrarem em ebulição.

²⁶Tetravalência: Significa que o carbono pode compartilhar quatro elétrons com outros átomos, de modo a completar o octeto, e assim se estabilizar.

²⁷Alotropia (do grego *allos*, outro, e *tropos*, maneira) é o nome dado ao fenômeno em que um mesmo elemento químico pode originar substâncias simples diferentes. As substâncias simples distintas são conhecidas como alótropos.

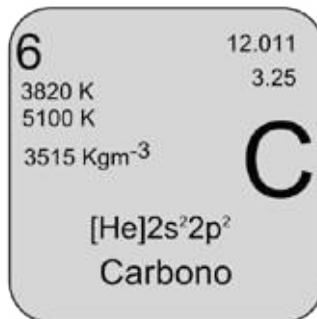
A solubilidade dos compostos orgânicos em água depende da presença de grupos polares nas moléculas; por outro lado, são freqüentemente solúveis em solventes apolares tais como o tetracloreto de carbono e o benzeno.

1.1. O Carbono

Como elemento do grupo 14 da tabela, o carbono apresenta 4 elétrons na sua camada de valência²⁸ e uma tendência a compartilhar seus 4 elétrons, constituindo-se todos eles como pares ligantes. Desta forma, a configuração dos seus átomos cria uma condição favorável para que o carbono seja tetravalente.

O carbono pode ser encontrado na natureza em diversas formas diferentes denominadas alotrópicas, carbono amorfo e cristalino em forma de grafite ou diamante.

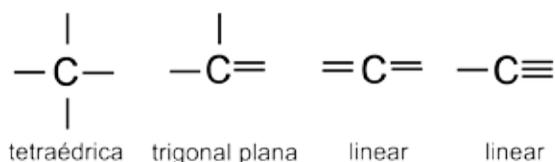
²⁸**Valência** é a capacidade que um átomo de um elemento tem de se combinar com outros átomos, capacidade essa que é medida pelo número de elétrons que um átomo pode dar, receber, ou compartilhar de forma a constituir uma ligação química.



Este elemento é considerado o pilar básico da Química orgânica. É tão importante, que alguns chamam a Química orgânica de Química do carbono. São conhecidos cerca de 10 milhões de compostos de carbono, e, este elemento forma parte de todos os seres vivos.

Devido sua posição central na tabela periódica o carbono não é nem fortemente eletronegativo (que atrai elétrons) nem fortemente eletropositivo (que repele elétrons). Portanto, forma ligações com outros átomos por compartilhamento de pares de elétrons ao invés de ligações por doação ou ganho de elétrons. Essas ligações formadas pelo carbono são denominadas de Ligação Covalente ou Ligação Molecular.

Dependendo do composto, as quatro valências do carbono podem apresentar-se tal como esquematizado a seguir.



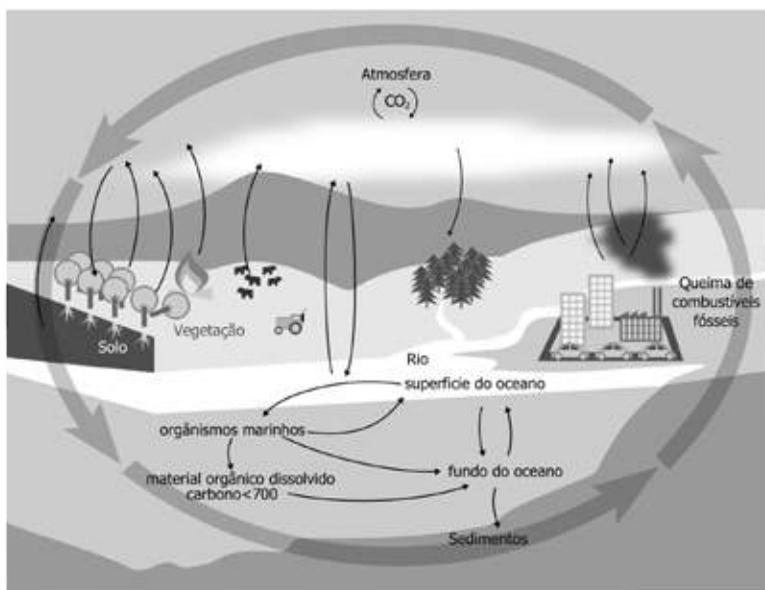
Representação das formas de valência do carbono

Principais Características

- O carbono possui quatro elétrons de valência ($2s^2 2p^2$)
- É classificado como um composto tetravalente.
- Pode formar ligações simples, duplas e triplas.
- Pode apresentar orbitais híbridos do tipo sp , sp^2 e sp^3

a) O ciclo do carbono

O chamado ciclo do carbono consiste, de uma forma simplificada, na transferência do carbono presente na natureza, através das várias reservas naturais existentes, sob a forma de dióxido de carbono (CO_2).



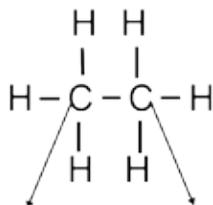
O dióxido de carbono é liberado através do processo de respiração dos animais. Outras formas de produção de dióxido de carbono são as queimadas e a decomposição de material orgânico no solo. Os processos envolvendo fotossíntese nas plantas e árvores funcionam de forma inversa. Na presença da luz, elas retiram o dióxido de carbono do ar, usam o carbono para crescer e retornam o oxigênio para atmosfera. Durante a noite, na transpiração, este processo inverte, e a planta libera CO_2 excedente do processo de fotossíntese.

Os reservatórios de CO_2 na terra e nos oceanos são maiores que o total contido na atmosfera. Pequenas mudanças nestes reservatórios podem causar grandes efeitos na concentração atmosférica. O carbono emitido para atmosfera não é destruído, mas sim redistribuído entre diversos reservatórios, ao contrário de outros gases causadores do efeito estufa, que normalmente são destruídos por ações químicas na atmosfera.

b) Os tipos de carbono

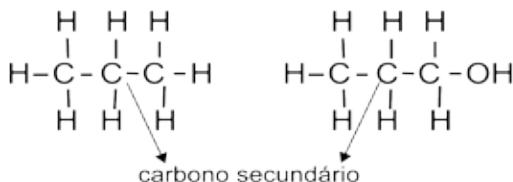
Os átomos de carbono que fazem parte de uma cadeia podem ser classificados em função do número de átomos de carbono ligados diretamente ao átomo que se deseja classificar. Numa cadeia carbônica pode-se ler, então, carbonos primários, secundários, terciários e quaternários, pois o carbono é tetravalente.

a) **Carbono primário** – considera-se primário quando o carbono se encontra ligado diretamente, no máximo a outro átomo de carbono.



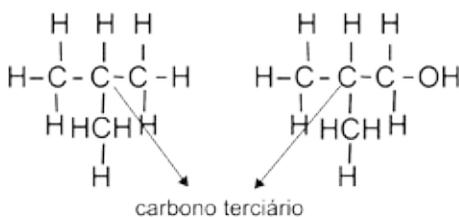
carbonos primários

b) **Carbono secundário** – considera-se secundário quando um determinado carbono se encontra ligado diretamente a dois outros átomos de carbono.



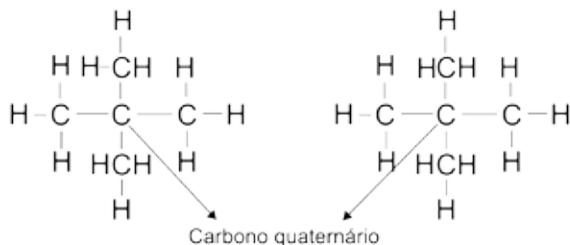
carbono secundário

c) **Carbono terciário** – considera-se terciário quando um determinado carbono se encontra ligado diretamente a três outros átomos de carbono.



carbono terciário

d) **Carbono quaternário** – considera-se quaternário quando um determinado carbono se encontra ligado diretamente a quatro átomos de carbono.



Carbono quaternário

c) Hibridização ou Hibridação do Carbono

O termo hibridização ou hibridação refere-se a “mistura” de orbitais atômicos pertencentes a um mesmo átomo, originando novos orbitais iguais entre si, mas diferentes dos orbitais originais, para a formação de ligações químicas.

Os novos orbitais formados, denominados orbitais híbridos são diferentes tanto na geometria quanto no conteúdo energético.

O número dos orbitais híbridos obtidos ou formados será sempre o mesmo dos orbitais existentes antes de serem misturados.

Os tipos de hibridização

A Hibridização sp^3

Principais Características:

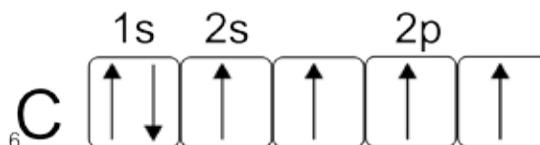
- Essa hibridização é consequência da mistura de 3 orbitais p “puros” com um orbital s “puro”, formando 4 novos orbitais “híbridos” denominados sp^3 .
- A geometria desses 4 orbitais sp^3 formados é tetraédrica (os 4 orbitais partem do centro do tetraedro e dirigem-se, cada um, para um dos vértices do tetraedro).
- O ângulo entre os orbitais sp^3 será de aproximadamente 109°
- Acontece no Carbono que se liga através de 4 ligações simples (o Carbono é tetravalente).

O Carbono possui em seu estado fundamental a configuração $1s^2; 2s^2; 2p_x^1; 2p_y^1; 2p_z^0$. Lembrando que um orbital é considerado como semipreenchido quando possui apenas um elétron e totalmente preenchido quando apresenta dois e que também apenas orbitais semipreenchidos participam de ligações covalentes, poderíamos concluir de forma equivocada que o carbono é capaz de realizar apenas duas ligações. Entretanto, o carbono é capaz de formar quatro ligações e por isso é denominado tetravalente. Essa versatilidade do carbono só é possível devido ao salto quântico, onde um elétron do orbital 2s preenchido “salta” para o orbital vazio 2p. Com esse salto eletrônico, o carbono passa a apresentar a configuração: $1s^2; 2s^1; 2p_x^1; 2p_y^1; 2p_z^1$.

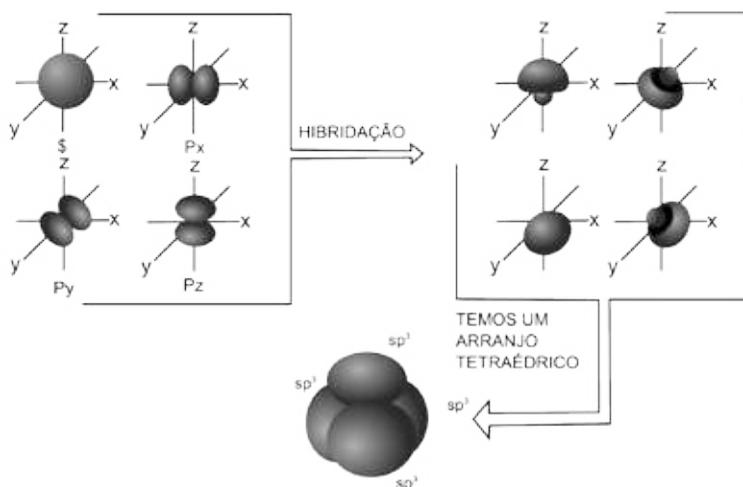
A segunda etapa do processo é a fusão de orbitais.

Observe agora o diagrama abaixo e veja que agora ele possui 4 orbitais semi-preenchidos, podendo realizar 4 ligações covalentes.

Distribuição eletrônica do carbono após o salto quântico do elétron do orbital 2s para o orbital 2p.



Orbitais s e p possuem tamanhos e formas diferentes, portanto, uma ligação estabelecida por um orbital s será conseqüentemente diferente da estabelecida por um orbital p. Desta forma, em um composto do tipo CX_4 , 3 ligações deveriam ser idênticas (as formadas pelos 3 orbitais p do carbono) e uma diferente das demais (a formada pelo orbital s), mas, em compostos como CCl_4 e CH_4 , observa-se que as 4 ligações são idênticas e apresentam propriedades intermediárias entre as esperadas pelos orbitais p e as esperadas pelos orbitais s, por isso os orbitais no átomo de carbono após o salto quântico são denominados híbridos, por apresentarem propriedades intermediárias entre orbitais s e orbitais p. Como os orbitais híbridos no carbono são formados por 1 orbital s e três orbitais p, sua hibridização é classificada como sp^3 .



Representação esquemática do processo de hibridização sp^3 dos orbitais do carbono.

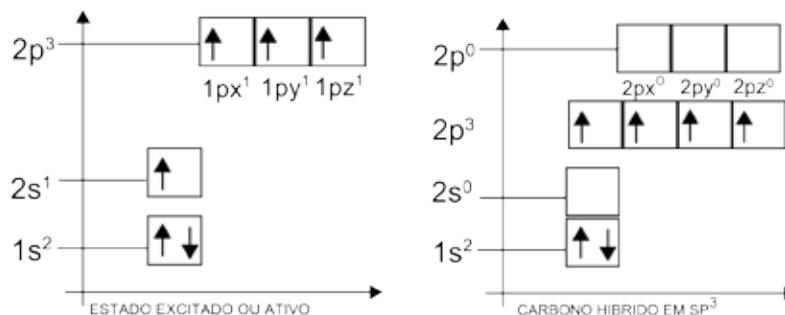
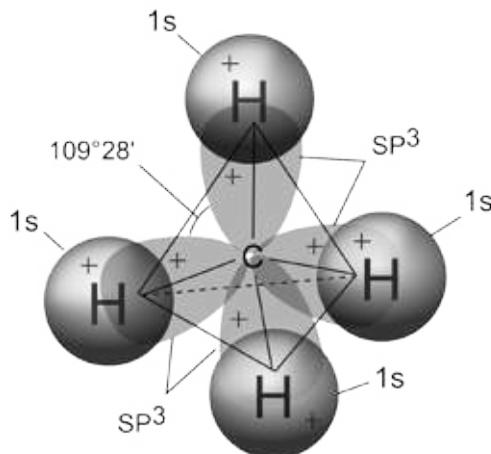


Ilustração esquemática da hibridização sp^3 mostrando os níveis energéticos

Exemplo de hibridação sp^3 – O Metano CH_4

No metano (CH_4), os quatro orbitais híbridos sp^3 do Carbono se ligam com os orbitais s de quatro átomos de H, formando quatro ligações sigma C-H.



Representação da estrutura tetraédrica do metano

A Hibridização sp^2

Principais Características

- É formada pela mistura de um orbital s com dois orbitais p (pertencentes a um mesmo átomo), resultando em 3 novos orbitais denominados híbridos sp^2 ;
- Os três orbitais híbridos sp^2 situam-se num mesmo plano formando ângulos de 120° entre si (geometria plana triangular);
- Acontece com um carbono que possua uma dupla ligação;
- Num carbono do tipo sp^2 existirá um orbital p “puro” que será responsável pela ligação covalente do tipo π .

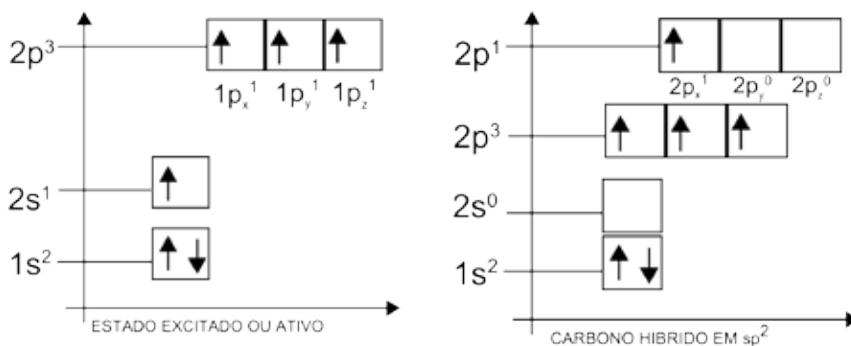
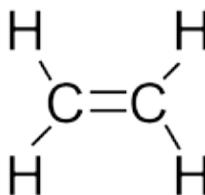


Ilustração esquemática da hibridização sp^2 mostrando os níveis energéticos

Um Exemplo de hibridização sp^2 – O Eteno

O etileno ou eteno é o hidrocarboneto mais simples da família das olefinas, constituído por dois átomos de carbono e quatro de hidrogênio (C_2H_4). Existe uma ligação dupla entre os dois carbonos. A existência de uma ligação dupla significa que o etileno é um hidrocarboneto insaturado. Pela nomenclatura IUPAC recebe a denominação de eteno.

A molécula não pode rodar em torno da ligação dupla, e os seis átomos dispõem-se no mesmo plano. O ângulo das duas ligações carbono-hidrogênio é de 117° , muito próximo dos 120° preditos pela hibridização sp^2 ideal.



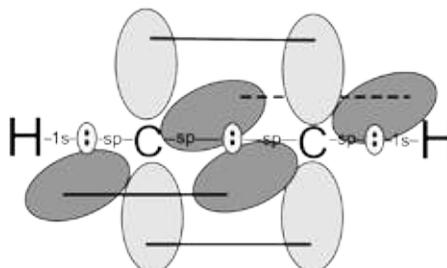
Representação estrutural da molécula de etileno.

Hibridização sp

Também conhecida como hibridização planar ou linear. Essa hibridização forma sempre um carbono "insaturado" com duas duplas ligações ou com uma ligação tripla e uma simples (duas ligações do tipo sigma e duas do tipo pi).

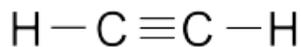
Principais Características:

- É o resultado da mistura de um orbital s com 1 orbital p, produzindo dois novos orbitais denominados híbridos sp ;
- Número de orbitais híbridos – 2 (no plano linear);
- Número de orbitais p "puros" – 2 (perpendiculares entre si);
- A geometria molecular formada será linear;
- Os orbitais híbridos sp formam um ângulo de 180° ;
- Ocorre em carbono com duas duplas ou em carbono com uma tripla ligação;
 - Numa tripla ligação teremos sempre uma ligação sigma e duas pi.



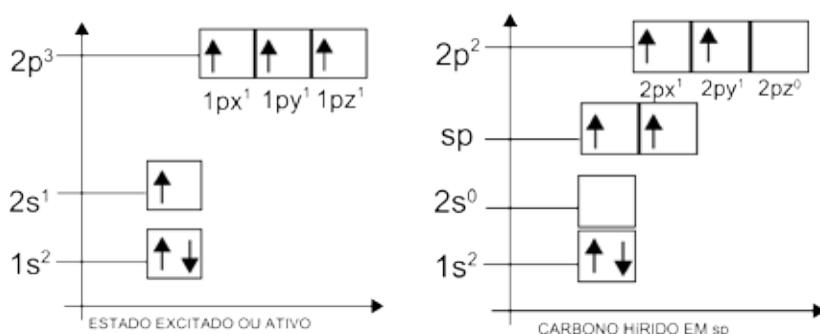
Hibridação sp C_2H_2 - Etileno (acetileno)

Um exemplo de hibridização sp: O etileno



Temos:

- Em torno dos átomos de carbono existem dois orbitais híbridos sp e dois orbitais p “puros”.
- Os dois orbitais híbridos se ligarão através de ligações sigma s-sp(H-C) e sigma sp-sp(C-C).
- Os dois orbitais p de cada carbono se ligarão produzindo duas ligações pi entre os carbonos (resultando numa tripla ligação entre os dois carbonos).



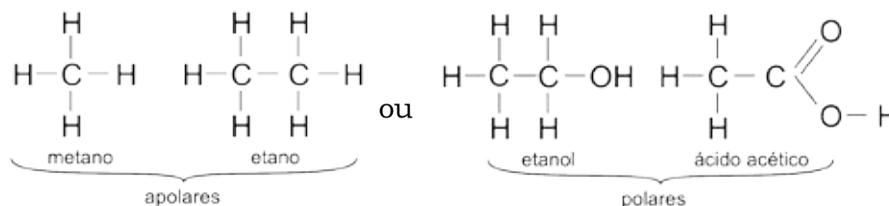
Esquemática da hibridização sp mostrando os níveis energéticos.

2. Características gerais dos Compostos Orgânicos

As ligações mais frequentes envolvendo os compostos orgânicos acontecem entre átomos de carbono e hidrogênio. Uma característica importante é que a atração exercida sobre os elétrons é praticamente a mesma entre o carbono e o hidrogênio, de forma que não ocorre deslocamento ou acúmulo de cargas elétricas na molécula formada. Desta forma, a configuração formada favorece o surgimento de compostos apolares.

Entretanto, quando temos a presença de um outro elemento químico diferente do hidrogênio na molécula de um composto orgânico, esta poderá apresentar certa polaridade. Vejamos alguns exemplos.

Exemplos de compostos orgânicos polares e apolares.

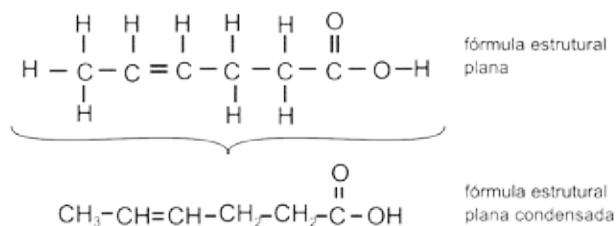


2.1. Representação dos compostos orgânicos

Em virtude da enorme quantidade de compostos orgânicos, combinados das mais diversas formas, incluindo compostos que apresentam a mesma fórmula molecular, mas diferentes fórmulas estruturais (conhecidos como isômeros), os compostos orgânicos são representados utilizando-se fórmulas estruturais.

a) Fórmula Estrutural Plana Condensada

Com o único objetivo de simplificar a representação da fórmula estrutural de compostos orgânicos é comum “condensar-se” os hidrogênios em seus respectivos carbonos, tal como está apresentado no exemplo abaixo.



Além desta simplificação, outras são aceitas e utilizadas: elas serão objeto de comentário quando do estudo das funções orgânicas e dos isômeros.

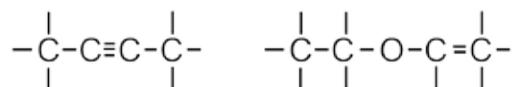
b) O Encadeamento dos Compostos Orgânicos

Os átomos de carbono possuem a capacidade de formar ligações com outros átomos de carbono se unindo em cadeias de diversos tamanhos e formas denominadas cadeias carbônicas. Essa propriedade é a principal responsável pela existência de milhões de compostos orgânicos.

2.2. A classificação das cadeias carbônicas

De acordo com a disposição dos átomos de uma cadeia carbônica, ela pode apresentar ou não extremidades livres, sendo esse o primeiro critério a ser utilizado na sua classificação. Assim, temos três grandes grupos de cadeias carbônicas:

Cadeia aberta, acíclica ou alifática – é a cadeia carbônica que apresenta pelo menos duas extremidades e nenhum ciclo ou anel.

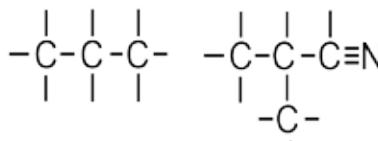


As cadeias abertas podem ser classificadas de acordo com três critérios: quanto à disposição dos átomos de carbono, quanto ao tipo de ligação

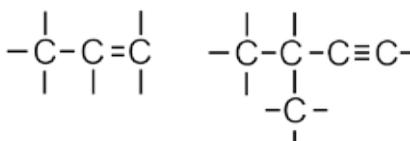
entre esses átomos e quanto à natureza dos átomos que compõem a cadeia.

Quanto à disposição dos átomos

- a) **Cadeia normal, reta ou linear:** é a cadeia aberta que apresenta somente duas extremidades, ou seja, todos os átomos que compõem a cadeia estão em uma única seqüência.

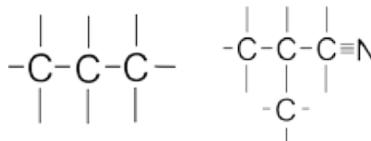


- b) **Cadeia ramificada:** é a cadeia aberta que apresenta no mínimo três extremidades; seus átomos de carbono não estão dispostos segundo uma única seqüência, isto é, apresentam ramificações.

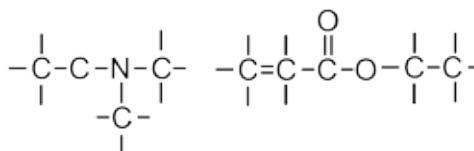


Quanto ao tipo de ligação entre os átomos de carbono

- a) **Cadeia saturada:** é aquela que apresenta somente ligações simples entre os átomos de carbono constituintes da cadeia.



- b) **Cadeia insaturada:** é aquela que apresenta uma dupla ou uma tripla ligação entre os átomos de carbono constituintes da cadeia.



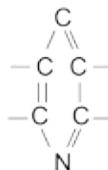
Quanto a natureza dos átomos que compõem a cadeia

- a) **Cadeia homogênea:** é constituída somente por átomos de carbono.
- b) **Cadeia heterogênea:** existe pelo menos um heteroátomo entre os átomos de carbono que constituem a cadeia, sendo que os heteroátomos mais comuns são: O, N, S e P.

Cadeia fechada ou cíclica: é a cadeia carbônica que não apresenta extremidades (pontas); os átomos se unem, originando um ou mais ciclos (anéis). As cadeias cíclicas subdividem-se em dois grupos: cadeias aromáticas e cadeias alíclicas ou não-aromáticas.



Cadeia Aromática

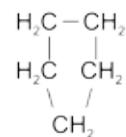


Cadeia Não-Aromática

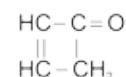
Classificações

Quanto aos tipos de ligação entre os átomos de carbono

a) **Cadeia alicíclica saturada:** é a cadeia fechada que apresenta apenas ligações simples entre os átomos de carbono.

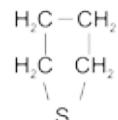


b) **Cadeia alicíclica insaturada:** é a cadeia fechada que apresenta pelo menos uma dupla ou um tripla ligação entre os átomos de carbono.

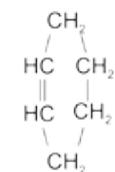


Quanto a natureza dos átomos que compõem a cadeia

a) **Cadeia alicíclica homogênea ou homocíclica:** é aquela composta apenas por átomos de carbono.

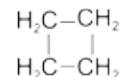


b) **Cadeia alicíclica heterogênea ou heterocíclica:** é aquela que apresenta pelo menos um heteroátomo entre os átomos de carbono que formam a cadeia.



Quanto a quantidade de anéis ou ciclos presentes na estrutura

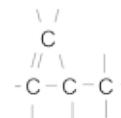
a) **Cadeia monocíclica ou mononuclear:** apresenta somente um ciclo ou anel.



b) **Cadeia policíclica ou polinuclear:** apresenta pelo menos dois ciclos ou anéis.



c) **Cadeia mista:** é cadeia carbônica que apresenta pelo menos um ciclo e uma extremidade.



Síntese do Capítulo

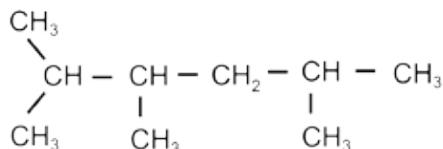


No início deste capítulo fizemos uma introdução sobre Química orgânica e descrevemos o carbono com suas principais características e propriedades. Na seqüência, apresentamos as classificações do carbono em relação à posição na molécula e a hibridização deste elemento na formação de ligações. Em seguida estudou-se a representação dos compostos orgânicos e finalmente a classificação das cadeias carbônicas.

Atividades de avaliação



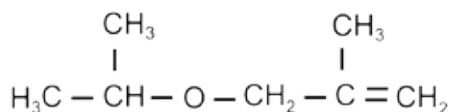
1. Observe atentamente a estrutura abaixo:



Agora, marque a opção que contém o número correto de átomos de carbono primário secundário e terciário, respectivamente:

- a) 5, 1, 3 d) 2, 3, 4
 b) 2, 4, 3 e) 5, 2, 2
 c) 3, 3, 3

2. Observe a cadeia carbônica abaixo. Marque a alternativa que contém a classificação correta:

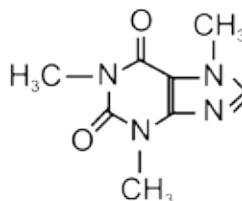


- a) aromática, ramificada, saturada e heterogênea.
 b) aromática, normal, insaturada e homogênea.
 c) alicíclica, ramificada, saturada e homogênea.
 d) alifática, ramificada, insaturada e heterogênea.
 e) alifática, normal, insaturada e homogênea.

3. A cafeína, extraída dos grãos de café ou das folhas do chá, simplesmente pelo aquecimento com água, é o estimulante mais utilizado, inclusive por atletas. Observe sua fórmula estrutural ao lado:

Com base nessa estrutura, podemos afirmar que sua fórmula molecular é:

- a) $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_2\text{N}_2$ d) $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_2\text{N}_4$
 b) $\text{C}_3\text{H}_9\text{O}_2\text{N}_4$ e) $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_2\text{N}_4$
 c) $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_4\text{N}_4$



Atividades de avaliação



Assista ao vídeo sobre a hibridização sp^3 no link:

<http://www.youtube.com/watch?v=ti-3Dae6b8s>

Veja um modelo interativo da molécula de Metano no link abaixo:

http://www.edinformatics.com/interactive_molecules/3D/methane_molecule.htm

Assista a formação do metano no link abaixo:

<http://www.yenka.com/freecontent/item.action?quick=sv#>

Assista ao vídeo sobre a hibridização sp^2 no link:

http://www.youtube.com/watch?v=WGh9_z7-dY0

Veja a animação da molécula de eteno em:

<http://www.millsian.com/flash/EthyleneAnim.shtml>

Assista ao vídeo sobre a hibridização sp^2 no link:

<http://www.youtube.com/watch?v=pwDsSwbEqz0&feature=related>

Referências



ALLINGER, **Química Orgânica**. Rio de Janeiro: Ed. Guanabara, RJ, 1985.

SOLOMONS, T. G. **Química Orgânica 6**. Rio de Janeiro: Ed. LTC, 1996, V.1.

MORRISON, R. BOYD, R. **Química orgânica**. Lisboa:Ed. Calouste Gulbenkian, 1997.

Capítulo

7

Funções orgânicas

Objetivos

- Reconhecer grupos funcionais e funções orgânicas.
- Nomear corretamente os compostos orgânicos de acordo com as regras de nomenclatura.
- Entender as características dos principais grupos de compostos orgânicos.

1. Funções Orgânicas

Na Química Orgânica também ocorre o agrupamento de compostos orgânicos com propriedades químicas semelhantes, em consequência de características estruturais comuns. Cada função orgânica²⁹ é caracterizada por um grupo funcional³⁰ específico. É essa parte da molécula que determina, efetivamente, as propriedades químicas do composto, e também algumas propriedades físicas.

1.1. Regras de nomenclatura

Para nomear os compostos orgânicos, foram criadas algumas regras básicas que obedecem a alguns princípios estabelecidos por especialistas, denominadas regras de nomenclatura.

As regras de nomenclatura oficiais para compostos orgânicos começaram a ser criadas no final do século XIX em 1892 em um congresso internacional em Genebra, após várias reuniões surgiu então a chamada nomenclatura IUPAC (União Internacional de Química Pura e Aplicada).

Essa nomenclatura obedece aos seguintes princípios:

- I. Que cada composto tenha um único nome que o distinga dos demais;
- II. Que dada a fórmula estrutural de um composto, seja possível elaborar seu nome, e vice-versa.

Observação: Apesar da IUPAC ser considerada a nomenclatura oficial, existem outros tipos de nomenclatura, por exemplo, a nomenclatura usual.

1.2. Nomenclatura dos compostos orgânicos

Basicamente, o processo de elaboração estabelece que o nome é dividido em três partes: prefixo, afixo ou infixo e sufixo. Cada parte tem um significado específico que, em conjunto, caracteriza o composto.

²⁹Função Orgânica: engloba um conjunto de substâncias com propriedades químicas semelhantes (propriedades funcionais).

³⁰Grupo funcional: é o átomo ou grupo de átomos responsável pelas propriedades químicas dos compostos pertencentes a uma determinada função química.

Prefixo: indica o número de átomos de carbono pertencentes à cadeia.

- 1C = met;
- 2C = et;
- 3C = prop;
- 4C = but;
- 5C = pent;
- 6C = hex;
- 7C = hept;
- 8C = oct;
- 9C = non;
- 10C = dec.

Afixo ou Infixo: indica o tipo de ligação entre os carbonos.

- Apenas ligações simples entre carbonos = an;
- Uma ligação dupla entre carbonos = en;
- Duas ligações duplas entre carbonos = dien;
- Três ligações duplas entre carbonos = trien;
- Uma ligação tripla entre carbonos = in;
- Duas ligações triplas entre carbonos = diin;
- Três ligações triplas entre carbonos = triin;
- Uma dupla e uma tripla entre carbonos = enin.

Sufixo: indica a função química a que pertence o composto orgânico.

- Hidrocarboneto (apenas carbonos e hidrogênios) - sufixo “o”;
- Álcool (hidroxila, -OH, ligada a carbono saturado) - sufixo “ol”;
- Aldeído – sufixo “al”;
- Cetona – sufixo “ona”;
- Ácido Carboxílico – sufixo “óico”;
- Amina – sufixo “amina”;
- Éter – sufixo “óxi”.

Quando a cadeia carbônica for alicíclica (fechada e não aromática), o nome é precedido da palavra ciclo, ligada ao prefixo. Os compostos aromáticos têm nomenclatura específica.

a) Compostos orgânicos de cadeia normal

O nome é obtido juntando-se prefixo + infixo + sufixo e, sempre que a cadeia carbônica permitir mais de uma possibilidade para localização do grupo

funcional e/ou das insaturações, será necessário numerar os carbonos para indicar a posição exata de cada característica do composto. Essa numeração deve ser feita de acordo com as seguintes regras básicas:

A numeração deve começar sempre pela extremidade da cadeia mais próxima da característica mais importante do composto. A ordem de importância é a seguinte: grupo funcional > insaturação;

A numeração deve seguir a regra dos menores números, ou seja, de forma que os carbonos recebam o menor número possível.

b) Compostos orgânicos de cadeia ramificada

Neste caso, haverá no composto uma cadeia chamada de principal e uma ou mais cadeias chamadas de secundárias. As cadeias secundárias serão entendidas como ramificações ou radicais da cadeia principal. Dessa forma, para atribuir nome a esse tipo de composto orgânico³¹ é preciso, inicialmente, determinar a cadeia principal.

As regras para determinar a cadeia principal, por ordem de importância, são as seguintes:

- 1) A cadeia que possui o grupo funcional;
- 2) A que engloba o maior número de insaturações;
- 3) A que possui a seqüência mais longa de átomos de carbono.

1.3. Classificação e nomenclatura dos radicais

Uma vez escolhida a cadeia principal, as cadeias restantes são consideradas radicais³². Os nomes dos radicais devem vir antes do nome da cadeia principal. Os radicais estão classificados em cinco grupos, porém apenas dois importam neste momento:

- **Os alquilas ou alcoílas:** possuem apenas ligações simples entre carbonos. Os principais radicais alquilas são: metil, etil, n-propil, s-propil ou sec-propil ou iso-propil, n-butil, s-butil ou sec-butil, t-butil ou terc-butil e iso butil;
- **Os alquenilas:** possuem uma ligação dupla entre carbonos.

O principal radical alquenila é o etenil ou vinil.

a) A localização dos radicais na cadeia principal

A localização deve ser informada pela numeração dos carbonos da cadeia principal. Essa numeração é semelhante às regras básicas já vista para os compostos orgânicos de cadeia normal:

³¹Caso no composto orgânico existam duas ou mais possibilidades de escolha da cadeia principal (com o mesmo número de átomos de carbono), deve-se escolher como principal a cadeia que tiver o maior número de ramificações;

Quando a cadeia é mista, deve-se considerar preferencialmente como principal a parte alicíclica ou aromática. A cadeia acíclica passa a ser entendida como uma ramificação ou um radical da cadeia principal; O nome da cadeia principal é obtido da mesma maneira que o nome dos compostos de cadeia normal.

³²Apesar da palavra radical ser muito usada ela está errada o nome correto é grupo ou grupamento: grupo metil (correto), radical metil (errado).

A numeração deve começar sempre pela extremidade da cadeia mais próxima característica mais importante do composto: grupo funcional > insaturação > radical; A numeração deve seguir a regra dos menores números.

Observações:

- A localização de cada radical é indicada pelo número do carbono da cadeia principal;
- Indicação da quantidade de radicais: Se a cadeia apresentar dois ou mais radicais iguais, deve-se usar os prefixos di, tri, tetra, penta, etc.
- Os números que indicam a localização dos radicais são escritos em ordem crescente, separados entre si por vírgulas e do nome por hífen;
- Se a cadeia carbônica apresentar dois ou mais radicais diferentes, eles devem ser indicados em ordem alfabética;
- Os prefixos que indicam a quantidade de um mesmo radical (di, tri, tetra, etc.) não são considerados quando se estabelece a ordem alfabética;
- O nome do último radical mencionado deve vir ligado sem hífen ao nome da cadeia principal, exceto nos casos em que o nome da cadeia principal começar com a letra h (hex, hept), quando deve vir precedido de hífen.

Resumo das etapas para nomear os compostos orgânicos de cadeia ramificada:

1. Determinar a cadeia principal e seu nome;
2. Numerar os carbonos da cadeia principal (regra dos menores números);
3. Identificar os radicais e suas localizações.

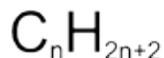
2. Hidrocarbonetos

Os Hidrocarbonetos são compostos orgânicos constituídos exclusivamente por carbono e hidrogênio. Uma das principais características desse grupo é a apolaridade ou a polaridade extremamente reduzida dos seus compostos. Os hidrocarbonetos com até quatro carbonos são gasosos a temperatura ambiente; a partir de cinco carbonos são líquidos e, quando alcançam cadeias entre 16 e 18 carbonos apresentam-se como sólidos com baixos Pontos de Fusão e de Ebulição.

Os Hidrocarbonetos estão divididos em várias classes, dentre as quais merecem destaque os alcanos (possuem somente ligações simples), alcenos ou alquenos (possuem ligação dupla), alcinos ou alquinos (possuem ligação tripla), alcadienos (possuem mais de uma ligação dupla), cicloalcanos, cicloalcenos e os hidrocarbonetos aromáticos.

Nos hidrocarbonetos o número de hidrogênios da molécula é sempre igual ao dobro do número de carbonos, acrescidos de duas unidades, ou seja,

para n carbonos, o número de hidrogênios será sempre $2n+2$. Desta maneira, a fórmula geral dos alcanos é:



Essa fórmula é utilizada para determinar a fórmula molecular de qualquer alcano, bastando, para isso, conhecer o número de carbonos ou o número de hidrogênios. A fórmula molecular de um alcano com 20 carbonos, por exemplo, pode ser obtida da seguinte maneira:

$$\begin{array}{l} \text{Fórmula geral dos alcanos} = C_nH_{2n+2} \\ n = 20 > C = 20 \\ H_{2n+2} \Rightarrow H = 2(20) + 2 \\ H = 42 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} n = 20 \\ H_{2n+2} \\ H = 42 \end{array}} \right\} C_{20}H_{42}$$

2.1. Nomeando alcanos de cadeia aberta

Junta-se o prefixo + o infixo + o sufixo conforme as regras descritas acima. Exemplos de hidrocarbonetos: metano, etano, propano, butano, pentano, hexano, heptano, octano, nonano, decano, undecano, dodecano etc.

Exemplo:

- Prefixo: Número de carbonos = 6 - hex
- Infixo: ligações = apenas simples - an
- Sufixo: função hidrocarboneto – O

Nome: Hexano

2.2. Nomeando Alcenos ou Olefinas de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada

Alcenos, alquenos, olefinas ou hidrocarbonetos etenilênicos são hidrocarbonetos de cadeia aberta (acíclicos) contendo uma única dupla ligação. Possuem fórmula geral C_nH_{2n} .

A nomenclatura é muito semelhante a utilizada para os alcanos. Troca-se a terminação ano do alcano por eno.

- 1) A cadeia principal é a mais longa que contém a dupla ligação.
- 2) A numeração da cadeia principal é sempre feita a partir da extremidade mais próxima da dupla ligação, independentemente das ramificações presentes na cadeia. No nome do alceno a posição da dupla é dada pelo número do primeiro carbono da dupla; esse número é escrito antes do nome do alceno.

3) Se houver mais de uma possibilidade para a cadeia principal adota-se a regra dos menores números.

Exemplo:

- Prefixo: Número de carbonos = 3 - PROP
- Intermediário: ligação = 1 dupla – EN
- Sufixo: função = hidrocarboneto - O

Nome: Propeno

2.3. Nomeando Alcinos ou alquinos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada

Alcinos, alquinos ou hidrocarbonetos acetilênicos são hidrocarbonetos acíclicos contendo uma única ligação tripla. Possuem fórmula geral C_nH_{2n-2} .

A nomenclatura é muito semelhante a utilizada para os alcanos. Troca-se a terminação ano do alcano por ino.

- 1) A cadeia principal é a maior cadeia que contenha a ligação tripla.
- 2) A numeração da cadeia é feita a partir da extremidade mais próxima da ligação tripla (As outras regras vistas para os alcenos também valem para os alcinos).

Exemplo:

- Prefixo: Número de carbonos = 5 - Pent
 - Intermediário: ligação = 1 tripla - in
 - Sufixo: função = hidrocarboneto – o
- Localização da insaturação - entre 2 e 3

Nome – Pent-2-ino

2.4. Nomeando Alcadienos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada

Os Alcadienos são hidrocarbonetos acíclicos (abertos) contendo duas duplas ligações. Possuem fórmula geral: C_nH_{2n-2} .

- 1) A nomenclatura oficial é feita com a terminação DIENO.
- 2) A cadeia principal é a mais longa possível e deve conter as duas duplas ligações.
- 3) A numeração da cadeia se inicia pela extremidade mais próxima das duplas ligações de forma que as duplas ligações fiquem com os menores números possíveis.
- 4) Em caso de empate na posição das duplas ligações, deve-se numerar a cadeia de forma que as ramificações fiquem com os menores números possíveis;

Exemplo:

- Prefixo: Número de carbonos = 4 - BUT
- Intermediário: ligações = 2 duplas - DIEN
- Sufixo: função = hidrocarboneto - O
- Localização da insaturação - entre 1 e 2 ; 2 e 3

Nome: Buta-1,2-Dieno

2.5. Nomeando ciclanos ou cicloalcanos ou ciclo-parafinas

Os cicloalcanos são hidrocarbonetos de cadeia cíclica (fechada) e saturada. Possuem fórmula geral C_nH_{2n} onde "n" deve ser maior ou igual a três.

Nomenclatura dos Ciclanos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada

- 1) O nome é dado adicionando-se o prefixo CICLO ao nome do alcano correspondente;
- 2) Quando a cadeia for ramificada, a numeração da cadeia se inicia a partir da ramificação mais simples e segue-se o sentido horário ou anti-horário, de maneira a se respeitar a regra dos menores números;
- 3) As ramificações devem ser citadas em ordem alfabética;

Exemplo:

- Prefixo: Número de carbonos = 4 - BUT
- Intermediário: ligação = somente simples - AN
- Sufixo: função = hidrocarboneto - O

Nome - Ciclobutano

2.6. Nomeando ciclenos ou ciclo-alquenos ou ciclo-olefinas

Os Ciclenos são hidrocarbonetos cíclicos com uma dupla ligação. A fórmula geral é C_nH_{2n-2} :

Nomenclatura dos Ciclenos de Cadeia Normal e de Cadeia Ramificada

- 1) O nome é dado adicionando-se o prefixo CICLO ao nome do alceno correspondente;
- 2) Quando a cadeia for ramificada, a numeração da cadeia se inicia a partir do carbono da ligação dupla (a dupla deve ficar entre o carbono 1 e 2) e segue-se o sentido horário ou anti-horário, de maneira a se respeitar a regra dos menores números;
- 3) As ramificações devem ser citadas em ordem alfabética;

Exemplo:

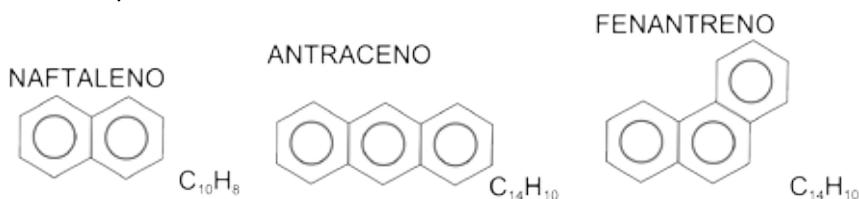
- Prefixo: Número de carbonos = 4 - BUT
- Intermediário: ligação = dupla - EN
- Sufixo: função = hidrocarboneto – O

Nome Ciclobuteno

2.7. Nomeando hidrocarbonetos aromáticos

Os hidrocarbonetos aromáticos são compostos que possuem um ou mais anéis benzênicos, que também são chamados de anéis aromáticos.

Exemplos:



O benzeno era muito usado como solvente orgânico. Porém, hoje sabe-se que ele é uma substância perigosa, mesmo em baixas concentrações e em curtos períodos de exposição. A inalação de benzeno causa náusea, podendo provocar parada respiratória e cardíaca. A exposição repetida ao benzeno pode causar o aparecimento de leucemia e outras alterações sangüíneas.

Muitos dos compostos aromáticos são comprovadamente agentes cancerígenos; entre eles, um dos mais potentes é o benzopireno. Esse composto é liberado na combustão da hulha e do tabaco, sendo encontrado no alcatrão da fumaça do cigarro. Pode ser o fator que relaciona o hábito de fumar com câncer de pulmão, de laringe e de boca.

O benzopireno é tão carcinogênico que pode provocar câncer em cobaias (ratos) pelo simples contato de uma região do corpo do animal, sem pêlo, com uma camada desse composto.

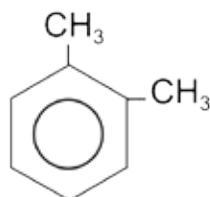
a) Nomenclatura dos Hidrocarbonetos Aromáticos

- 1) A nomenclatura oficial considera os hidrocarbonetos aromáticos como derivados do benzeno;
- 2) Quando o anel benzênico possui mais de uma ramificação, a numeração da cadeia se inicia a partir da ramificação mais simples e segue-se o sentido horário ou anti-horário, de maneira a se respeitar a regra dos menores números;
- 3) Quando o anel benzênico possuir duas ramificações, iguais ou diferentes, pode-se usar a nomenclatura orto, meta, para, ao invés de numerar o anel ben-

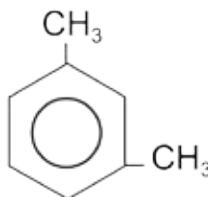
zênico. A posição 1,2 passa a ser indicada por orto ou simplesmente por "o", a posição 1,3 passa a ser indicada por meta ou simplesmente por "m" e finalmente a posição 1,4 passa a ser indicada por para ou simplesmente por "p";

4) As ramificações devem ser citadas em ordem alfabética;

Exemplos:



1,2 DIMETIL BENZENO
ORTO DIMETIL BENZENO
O.XILENO



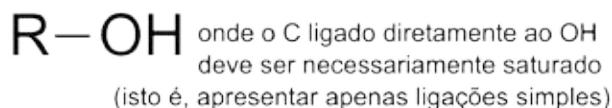
1,3 DIMETIL BENZENO
META DIMETIL BENZENO
M.XILENO



1,4 DIMETIL BENZENO
PARA DIMETIL BENZENO
P.XILENO

3. Álcool (R-OH) (OH ligado a carbono saturado)

Os álcoois são compostos orgânicos que apresentam uma ou mais hidroxilas ligadas diretamente ao carbono saturado.



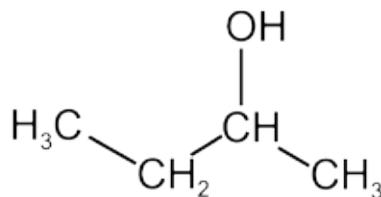
Observação: R = grupo ou grupamento orgânico; Ar = anel aromático ou anel benzênico. Oficial (IUPAC)

- 1) Troca-se a terminação do hidrocarboneto correspondente por OL;
- 2) A cadeia principal é a maior fila de átomos de carbono que contenha a hidroxila;
- 3) Quando houver mais de uma possibilidade para a posição da hidroxila, esta deve ser numerada;
- 4) A numeração da hidroxila se inicia pela extremidade mais próxima da mesma;

Observações

- Em moléculas complexas a hidroxila pode ser considerada como uma ramificação chamada: hidróxi;
- Álcoois insaturados: posição da insaturação + hidrocarboneto correspondente + posição do OH + OL
- Diálcool (terminação: DIOL); trialcool (terminação: TRIOL) etc.

Ex: 2-BUTANOL



4. Éter (R-O-R' ou Ar-O-Ar ou Ar-O-Ar)

Os éteres caracterizam-se pela presença de oxigênio como heteroátomo ligadas a átomos de carbono.



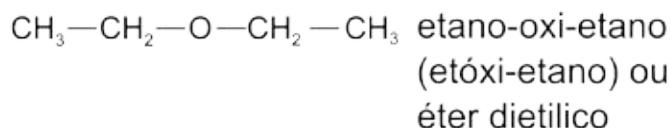
Nomenclatura Oficial (IUPAC)

(grupo menor) ÓXI + (hidrocarboneto correspondente ao grupo maior)

Nomenclatura Usual

Éter (grupo menor) - (grupo maior) + ICO

Exemplo: Éter dietílico



5. Fenol (Ar-OH)

Os fenóis caracterizam-se pela presença de uma ou mais hidroxilas presas diretamente a anel benzênico.



onde Ar representa um anel benzênico; a hidroxila deve ligar-se necessariamente a carbono de anel benzênico.

Nomenclatura Oficial (IUPAC):

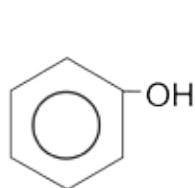
- Utiliza-se o prefixo HIDRÓXI;
- Havendo necessidade de numeração, esta se inicia pela hidroxila e segue o sentido dos menores números;

Observação: O número "1" atribuído a hidroxila pode ser omitido;

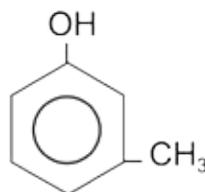
Nomenclatura Usual:

O hidróxi-benzeno é chamado de FENOL e todos os outros fenóis são considerados como seus derivados;

Exemplos:



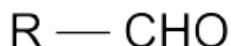
FENOL OU
HIDROXIBENZENO



1-HIDROXI-2-METIL-BENZENO
ORTO-CRESOL

6. Aldeído (H-COH ou R-COH ou Ar-COH)

Os aldeídos caracterizam-se pela presença do grupo carbonila ligado diretamente a um hidrogênio; isto é, a carbonila encontra-se necessariamente numa das extremidades. O nome deriva de álcool desidrogenado (o que corresponde a um dos processos para sua obtenção).



O metanal é o principal aldeído, sendo conhecido também por aldeído fórmico, formaldeído ou formol. Quando dissolvido em água, forma-se uma solução conhecida por formol ou formalina.

O formol tem a propriedade de desnaturar proteínas tornando-as resistentes à decomposição por bactérias. Por essa razão, ele é usado como fluido de embalsamamento, na conservação de espécies biológicas e também como antisséptico.

Durante a defumação doméstica, as carnes são submetidas à fumaça provenientes da queima da madeira, que contém aldeído fórmico, um dos responsáveis pela conservação da carne defumada.

O metanal é também utilizado, em escala industrial, como matéria-prima para produção de muitos plásticos e resinas.

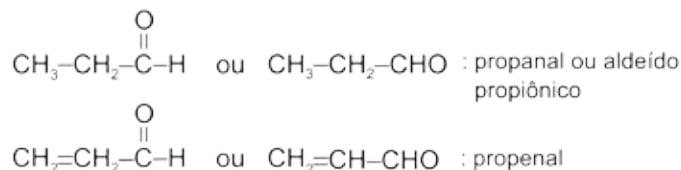
Nomenclatura Oficial (IUPAC)

- Substitui-se a terminação do hidrocarboneto correspondente por AL;
- A numeração começa pelo carbono do grupo funcional;

Nomenclatura Usual

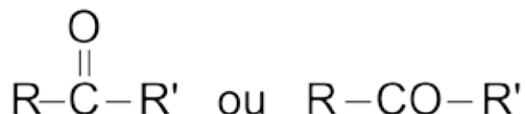
Os aldeídos possuem nomes usuais correspondentes aos nomes usuais dos ácidos carboxílicos correspondentes: metanal (aldeído fórmico ou formaldeído); etanal (aldeído acético ou acetaldeído); fenil-metanal (aldeído benzóico ou benzaldeído) etc.

Exemplos:



7. Cetona (R-CO-R' ou R-CO-Ar ou Ar-CO-Ar)

As cetonas caracterizam-se pela presença de uma carbonila, com cada uma de suas valências livres ligada a radical derivado de hidrocarboneto. Comparando-se, então, aldeídos e cetonas podemos afirmar que, quando a carbonila se apresentar em uma das extremidades da cadeia carbônica, temos um aldeído; quando se apresentar dentro da cadeia, temos uma cetona.



A propanona, também conhecida por acetona, é um líquido à temperatura ambiente que apresenta um odor agradável, e é solúvel tanto em água quanto em solventes orgânicos; por isso, é muito utilizada como solvente em laboratórios e em fábricas de tintas, vernizes e esmaltes.

Na indústria de alimentos, sua aplicação mais importante ocorre na extração de óleos e gorduras de sementes, como soja, amendoim e girassol. Sua comercialização é controlada pelo Departamento de Entorpecentes da Polícia Federal, por ser utilizada na extração da cocaína, a partir das folhas da coca.

A acetona é formada em nosso organismo pela metabolização de gorduras. Sua concentração normal é menor que 1mg/100ml de sangue.

Nomenclatura Oficial (IUPAC)

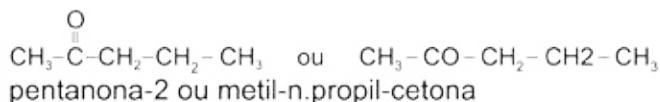
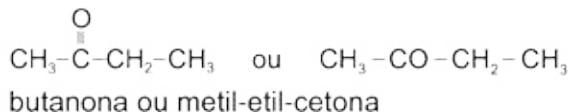
- Troca-se a terminação do hidrocarboneto correspondente por ONA;
- A numeração da cadeia se inicia pela extremidade mais próxima da carbonila (-CO-);

Observação: cetonas insaturadas: posição da insaturação + hidrocarboneto correspondente + posição da carbonila + ONA;

Nomenclatura Usual:

(grupo menor)-(grupo maior)-CETONA

Exemplos:

**8. Ácido carboxílico (H-COOH ou R-COOH ou Ar-COOH)**

Os ácidos carboxílicos caracterizam-se pela presença de uma carbonila ligada diretamente a um grupo hidroxila.



O ácido metanóico é um ácido carboxílico de cheiro irritante e bastante corrosivo, conhecido também por ácido fórmico. Historicamente, foi obtido a partir da maceração de formigas e posterior destilação. Algumas formigas contêm grandes quantidades desse ácido, que, quando injetado através da mordida, produz uma reação alérgica no tecido humano, caracterizada pela formação de edema e coceira intensa.

Uma das principais aplicações do ácido fórmico é como fixador de pigmentos e corantes em tecidos, como algodão, lã e linho.

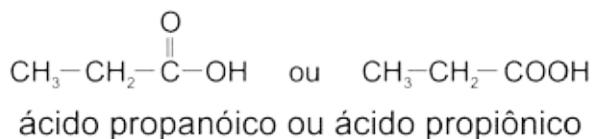
Nomenclatura Oficial (IUPAC)

- Troca-se a terminação do hidrocarboneto correspondente por ÓICO;
- ÁCIDO + hidrocarboneto correspondente + ÓICO;

Nomenclatura Usual

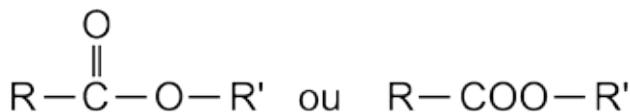
A nomenclatura usual dos ácidos carboxílicos está relacionada com a origem do ácido ou de suas propriedades: ácido metanóico (ácido fórmico); ácido etanóico (ácido acético); ácido propanóico (ácido propiônico); ácido butanóico (ácido butírico); etc.

Exemplo:



9. Éster (H-COO-R ou R-COO-R ou Ar-COO-R ou Ar-COO-Ar)

Os ésteres são derivados de ácidos carboxílicos pela substituição do hidrogênio da carboxila por radical derivado de hidrocarboneto. Os ésteres podem ser obtidos a partir da reação entre um ácido carboxílico e um álcool.



Nomenclatura Oficial (IUPAC)

Substitui-se a terminação ICO do ácido carboxílico correspondente por ATO e acrescenta-se o nome do grupamento ligado ao oxigênio;

Observação: o nome do grupamento deve terminar com ILA e não com IL.

EX.: metila, etila etc.

Nomenclatura Usual

Esta nomenclatura, a exemplo dos aldeídos, baseada na nomenclatura dos ácidos carboxílicos: metanoato = formiato; etanoato = acetato; propanoato = propionato.

Observação: Uma forma prática é acrescentar ATO ao hidrocarboneto correspondente, não sendo assim necessário, raciocinar com o ácido carboxílico correspondente;

Exemplo:



etanoato de etila ou acetato de etila

10. Amina (R-NH₂ ou R-NH-R' ou R-NR'-R'')

As aminas são compostos orgânicos que derivam da amônia pela substituição de um ou mais hidrogênios por radicais derivados de hidrocarbonetos.

Existem várias aminas que aumentam a atividade do sistema nervoso, elevam o ânimo, provocam diminuição da sensação de fadiga e reduzem o apetite, sendo por isso, usadas como estimulantes (energizadores fracos). Essas aminas são denominadas comumente de anfetaminas. O uso dessas substâncias provoca dependência, e sua comercialização é controlada. Uma amina muito comum em nosso dia a dia, que age como um estimulante bran-

do, é a cafeína presente no café, no chá, no pó de guaraná e ainda em alguns refrigerantes e antigripais.

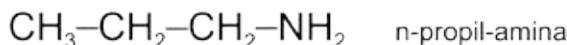
Comercialmente, uma das aminas mais importante é a anilina, cujo nome, de origem árabe (anil), significa azul. Essa substância foi obtida pela primeira vez a partir da destilação destrutiva do corante denominado índigo, que é extraído da planta anileiro. Como muitos corantes podem ser obtidos a partir da anilina, o nome dessa substância é usado como sinônimo de corante.

Nomenclatura Oficial (IUPAC)

(grupos ligados ao Nitrogênio) + AMINA;

- Os grupamentos ligados ao nitrogênio (N) devem ser colocados em ordem alfabética (a ordem crescente de complexidade não é recomendada pela IUPAC);
- Em moléculas complexas o grupamento característico das aminas pode ser considerado uma ramificação chamada de AMINO;

Exemplos:



11. Amida (H-CONH₂ ou R-CONH₂ ou Ar-CONH₂; ou H-CONH-R' ou R-CONH-R' ou Ar-CONH-R'; ou H-CONR'-R'' ou R-CONR'-R'' ou Ar-CONR'-R'')

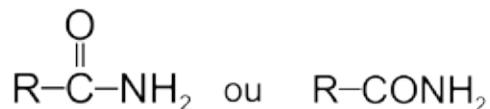
As amidas são compostos orgânicos que se caracterizam pela presença de uma carbonila ligada diretamente a um grupo amina.

Uma classe de compostos muito importantes que apresentam o grupo amida é a dos denominados genericamente barbitúricos. Esse composto foi sintetizado pela primeira vez em 1864 por Baeyer. De acordo com a lenda o termo barbitúrico vem da união do nome Bárbara (namorada de Baeyer) e da palavra uréia.

Os barbitúricos são usados como sedativos, indutores do sono, para diminuir a ansiedade e alguns distúrbios de origem psíquica. A ingestão de barbitúricos com bebidas alcoólicas potencializa em até 200 vezes a ação do barbitúrico. Seu uso habitual leva a uma tolerância do organismo, exigindo cada vez doses maiores, o que cria dependência.

Em doses elevadas, pode causar a morte, razão pela qual a comercialização de barbitúricos é controlada.

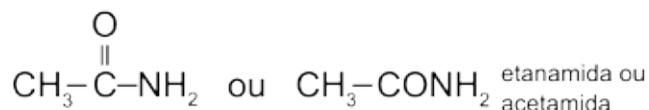
As amidas são compostos que apresentam o seguinte grupo funcional:



Nomenclatura Oficial (IUPAC)

- Troca-se a terminação ICO do ácido carboxílico correspondente por AMIDA;
- Um procedimento prático é acrescentar AMIDA ao hidrocarboneto correspondente, não sendo assim necessário raciocinar com o ácido carboxílico correspondente;

Exemplo:



12. Nitrila (R-CN ou Ar-CN)

Nomenclatura Oficial (IUPAC)

Dá-se o nome do hidrocarboneto correspondente, acrescentando-lhe a terminação NITRILA, (hidrocarboneto correspondente + NITRILA);

Nomenclatura Usual

Cianeto de (nome do grupamento ligado ao -CN);

A toxicidade do íon cianeto é conhecida há mais de dois séculos; porém, os compostos que contêm cianeto são tóxicos somente se liberarem HCN numa reação. Sem dúvida alguma, o HCN, conhecido por gás cianídrico, ácido cianídrico ou ácido prússico, é o veneno de ação mais rápida que se conhece.

O gás cianídrico, devido à sua ação rápida, foi utilizado por muito tempo como inseticida e raticida na fumigação de navios e, também, para eliminar toupeiras que infestavam algumas plantações. Ainda hoje, em alguns estados dos EUA, ele é usado nas câmaras de gás, na execução de prisioneiros condenados à morte.

O cianeto tem grande importância na síntese de vários compostos orgânicos, principalmente da acrilonitrila (cianeto de vinila), produto muito importante na manufatura de tecidos sintéticos.

Soluções de cianeto são largamente usadas nas indústrias de metalurgia e em eletrodeposição de metais (galvanoplastia). A descarga dessas soluções nos esgotos, que acabam chegando às fontes de suprimento de

água, pode provocar desastres fatais. Por isso, é necessário que esse tipo de indústria faça um tratamento rigoroso de seus dejetos, retirando deles os íons cianetos remanescentes.

13. Nitrocompostos ($R\text{-NO}_2$ ou Ar-NO_2)

Nomenclatura Oficial (IUPAC)

Usa-se o prefixo NITRO antecedendo o nome do hidrocarboneto que origina o nitrocomposto (NITRO + hidrocarboneto correspondente)

14. Anidridos

Os anidridos são compostos que apresentam o seguinte grupo funcional visualizado na figura ao lado.

O anidrido acético, por exemplo, é um reagente utilizado na produção da aspirina. Sua reação com celulose do algodão ou da polpa da madeira origina o Rayon, utilizado na produção de tecidos, filmes fotográficos e papel celofane.

Nos anidridos com cadeias carbônicas iguais, deve-se mencionar o nome do ácido correspondente, precedido da palavra ANIDRIDO;

Quando o anidrido possuir cadeias diferentes deve-se escrever primeiro o nome do menor ácido existente.

Síntese do Capítulo



Neste capítulo conhecemos algumas regras gerais de nomenclatura de compostos orgânicos e definimos o que é função orgânica e grupo funcional. Também se estudou as regras detalhadas de nomenclatura dos Hidrocarbonetos, Álcoois, Éteres, Ésteres, Fenol, Ácidos Carboxílicos e Compostos Nitrogenados.

Atividades de avaliação



- De acordo com o sistema IUPAC, a nomenclatura correta do composto abaixo é:
 - 3-fenil-3-hexanal
 - propil-n-metil fenilcarbinol
 - 4-fenil-4-etilbutanol
 - propil-fenil-etilcarbinol
 - 3-fenil-3-hexanol

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & \text{OH} & & & \\
 & & & | & & & \\
 \text{CH}_2 & - & \text{CH}_2 & - & \text{C} & - & \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \\
 | & & & & | & & \\
 \text{CH}_3 & & & & \text{C}_6\text{H}_5 & &
 \end{array}$$
- O composto 2-metil-2-butanol apresenta:
 - carbono terciário com número de oxidação zero.
 - dois carbonos primários e dois secundários.
 - a cadeia acíclica, ramificada, heterogênea e insaturada.
 - um radical alcoíla ligado a um carbono primário.
 - a hidroxila (HO) ligada ao carbono terciário, o que caracteriza um álcool terciário.
- O tetrametilbutanol é um álcool:

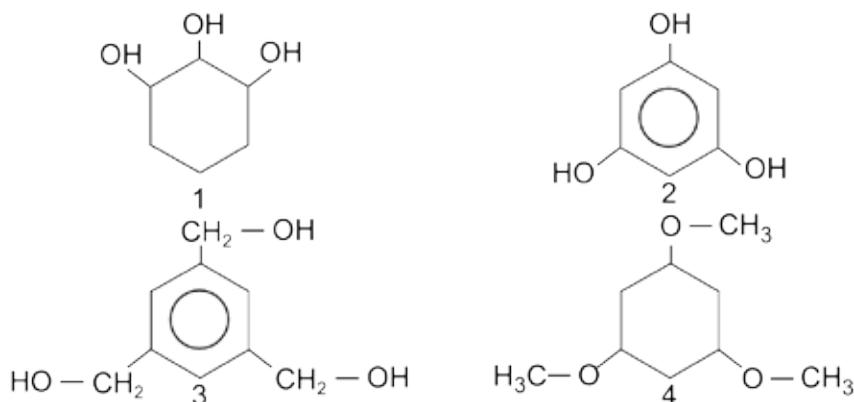
a) primário	d) quaternário
b) secundário	e) nulário
c) terciário	
- A acetona é um solvente muito utilizado em Química Orgânica. Esse solvente é um composto carbonílico com três átomos de carbono e cadeia saturada, sua fórmula molecular é:

a) $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$	d) $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_2$
b) $\text{C}_3\text{H}_7\text{O}$	e) $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$
c) $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$	
- Fazendo-se a substituição dos hidrogênios da molécula da água por 1 radical fenil e 1 radical metil, obtém-se:

a) cetona	d) éter
b) aldeído	e) ácido carboxílico
c) éster	
- A vanilina é o composto responsável pelo sabor de baunilha em diversos alimentos. Em relação à esse composto, que possui a fórmula estrutural abaixo, os grupos funcionais, ligados ao anel aromático, pertencem às funções:

- a) álcool - éter - éster.
- b) fenol - éter - cetona.
- c) fenol - éter - aldeído.
- d) fenol - éter - ácido carboxílico.
- e) fenol - éster - ácido carboxílico.

7. Algumas algas marinhas produzem polifenóis para defesa contra predadores herbívoros. Analise as fórmulas abaixo que representam diferentes substâncias químicas. A fórmula que representa um polifenol é a de número



- a) 1
- b) 2
- c) 3
- d) 4

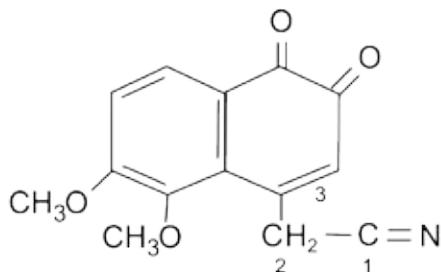
8. Na análise de uma amostra de manteiga rançosa, foram encontrados compostos com fórmulas moleculares C₃H₆O e C₄H₈O₂. Sabendo-se que esses compostos apresentam cadeias carbônicas acíclicas, normais e saturadas, é possível prever que se trata de:

- a) aldeídos, cetonas e ácidos carboxílicos.
- b) aldeídos, álcoois e ésteres.
- c) álcoois, éteres e ésteres.
- d) ácidos carboxílicos, cetonas e álcoois.
- e) ésteres, aldeídos e éteres.

9. A fórmula molecular C₂H₆O pode representar compostos pertencentes às funções:

- a) hidrocarboneto, álcool e aldeído.
- b) álcool e éter.
- c) aldeído e cetona.
- d) ácido carboxílico, aldeído e álcool.
- e) éter, cetona e éster.

10. A morfina, alcalóide do ópio, extraído da papoula, pode ser sintetizada em laboratório, tendo como um de seus precursores o composto com a seguinte estrutura:



A geometria dos carbonos com números 1, 2 e 3 é, respectivamente:

- tetraédrica, trigonal, linear.
- linear, tetraédrica, trigonal.
- tetraédrica, linear, trigonal.
- trigonal, tetraédrica, linear.
- linear, trigonal, tetraédrica.

Referências



ALLINGER, **Química Orgânica**. Ed. Guanabara, RJ, 1985.

SOLOMONS, T. G. **Química Orgânica**. 6 ed. Ltc, RJ, Vol. I, 1996.

MORRISON, R. BOYD, R. **Química Orgânica**, Ed. Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1997.

Química. disponível em: <http://www.alexquimica.com.br/quimica/orgânica/nomenclatura.htm>

8

Capítulo

Isomerías

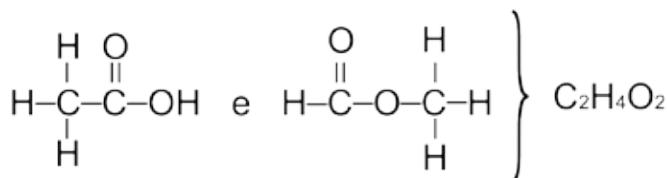
Objetivos

- Entender o conceito de isomeria.
- Identificar os tipos de isomeria.
- Fazer a classificação dos subtipos de isomeria plana ou espacial.
- Compreender os conceitos de isomeria geométrica, ótica e assimetria molecular.

1. Isomerias

Isomeria é uma palavra que vem do grego e significa "mesma composição" (iso = mesma(s); meros = partes). Esse fenômeno é caracterizado pela existência de duas ou mais substâncias diferentes que possuem fórmulas moleculares idênticas, porém fórmulas estruturais distintas. Os compostos que apresentam isomeria são denominados de **isômeros**³³.

Em outras palavras, as moléculas dos isômeros são constituídas pelos mesmos átomos, porém organizados (ou estruturados) de formas diferentes. Um exemplo clássico de isomeria envolve o ácido etanóico (conhecido como ácido acético) e o metanoato de metila que são duas substâncias diferentes e, conseqüentemente possuem propriedades distintas; mas as moléculas de ambas são constituídas de 2 átomos de carbono, 4 átomos de hidrogênio e 2 átomos de oxigênio, ambas tendo portanto fórmula molecular $C_2H_4O_2$. Entretanto, os átomos das duas substâncias estão ligados de forma diferente:



A diferença apresentada pelos isômeros é que irá determinar o tipo de isomeria a que eles pertencem. Assim, por exemplo, dois isômeros que apresentam diferentes funções são denominados isômeros de função; se forem da mesma função, mas apresentarem diferentes cadeias principais são denominados isômeros de cadeia; se forem da mesma função, apresentarem a mesma cadeia mas diferirem na posição de grupo funcional, insaturação ou ramificação são denominados isômeros de posição.

³³Isômeros: são compostos de mesma fórmula molecular e diferentes fórmulas estruturais.

A isomeria está dividida basicamente em duas classificações: plana e espacial. A isomeria plana está subdividida em isomeria de cadeia, de posição, de compensação, de função e tautomeria e a Isomeria espacial em geométrica e ótica.

- Isomeria de cadeia é aquela onde os isômeros têm cadeias ou núcleos diferentes.
- Isomeria de posição ocorre quando os isômeros têm a mesma cadeia carbônica, mas diferem pela posição de radicais ou de ligações duplas ou triplas.
- Isomeria de compensação ou metameria ocorre quando os isômeros diferem pela posição de um heteroátomo na cadeia carbônica.
- Isomeria de função ou funcional ocorre quando os isômeros pertencem a funções químicas diferentes.
- A tautomeria é o caso especial de isomeria funcional onde os dois isômeros ficam em equilíbrio químico dinâmico.

Resumindo:

Isomeria Plana	1. Isomeria de função
	2. Tautomeria
	3. Isomeria de cadeia
	4. Isomeria de posição
	5. Metameria (ou isomeria de compensação)
Isomeria Espacial	1. Isomeria geométrica
	2. Isomeria ótica

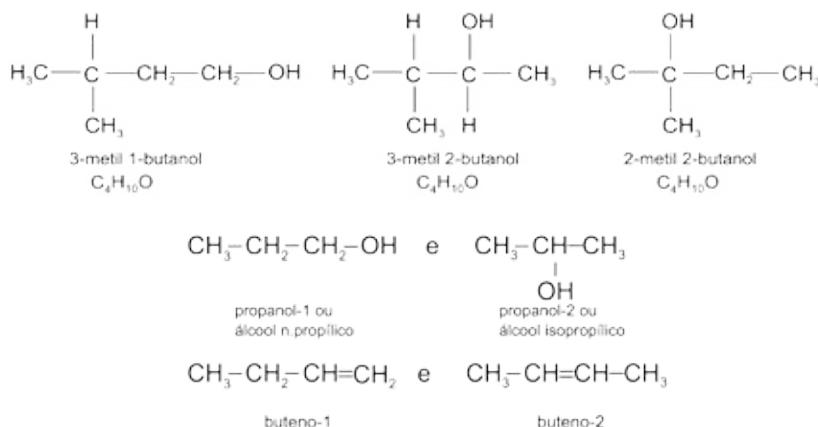
1.1. Isomeria plana

Neste tipo de isomeria, os isômeros apresentam mesma fórmula molecular, mas diferentes fórmulas planas.

Na isomeria plana, os isômeros diferem um dos outros, apenas pela fórmula estrutural plana. Essa forma de isomeria pode ser dividida em cinco tipos:

1.2. Isomeria de posição

Neste tipo de isomeria, os isômeros pertencem à mesma função química e possuem a mesma cadeia carbônica, diferenciando apenas, pela posição de uma ramificação, ou de um grupo funcional, ou uma insaturação (ligações duplas, ou triplas). Veja os exemplos:



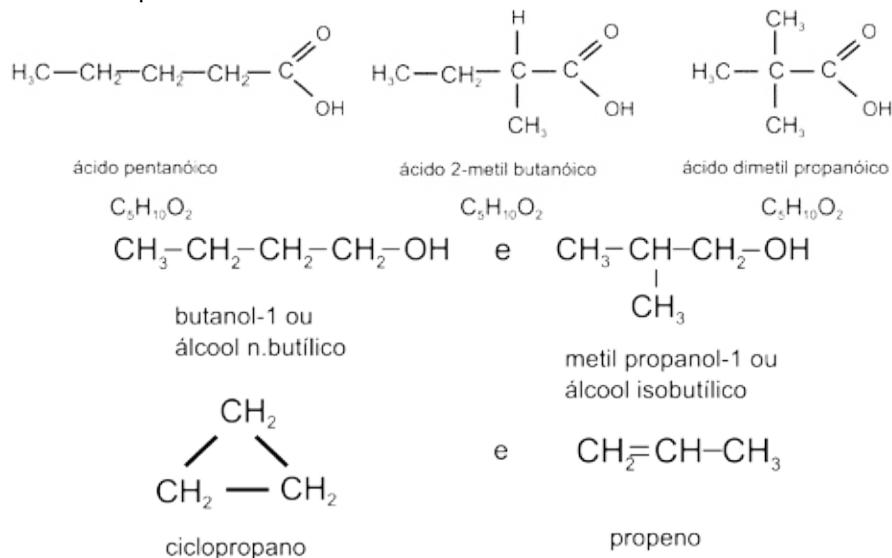
No caso do propanol, temos uma diferença na posição do grupo funcional (OH) entre os isômeros de posição. No caso do buteno, a diferença é na posição da dupla ligação.

1.3. Isomeria de cadeia ou núcleo

Os isômeros pertencem à mesma função química, mas possuem cadeias carbônicas diferentes. Há duas formas que podem caracterizar diferença na cadeia entre os isômeros:

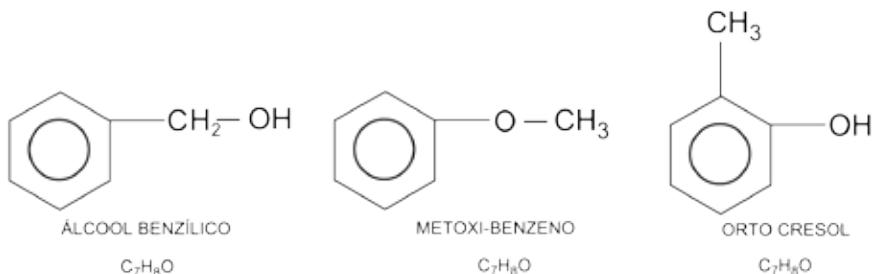
- A cadeia principal dos isômeros apresenta diferente número de carbonos;
- A cadeia de um dos isômeros é alifática e a do outro é cíclica.

Exemplos:



1.4. Isomeria de função

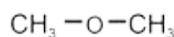
Também chamada de isomeria funcional, neste caso os isômeros diferem na função. As situações mais usualmente mencionadas neste caso referem-se à isomeria entre álcoois e éteres; aldeídos e cetonas; ácidos e ésteres.



Álcool - éter

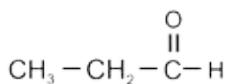


etanol ou
álcool etílico

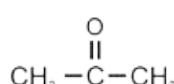


metano-oxi-metano
éter dimetílico

Aldeído - cetona

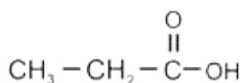


propanal ou
aldeído propiônico

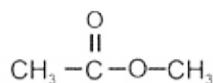


propanona ou
dimetil-cetona

Ácido carboxílico -éster



ácido propanóico ou
ácido propiônico

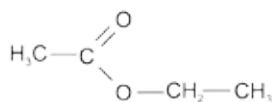


etanoato de metila ou
acetona de metila

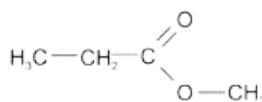
1.5. Metameria ou isomeria de compensação

Neste tipo de isomeria, os isômeros pertencem à mesma função e apresentam a mesma cadeia carbônica, mas apresentam diferença na posição do heteroátomo³⁴. A metameria pode ser considerada um caso de isomeria de posição.

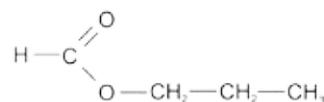
Exemplos:



acetato de etila
 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$

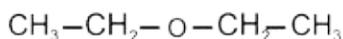


propionato de metila
 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$



formiato de propila
 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$

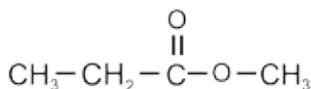
³⁴Heteroátomo: átomo dentro da cadeia carbônica diferente do carbono. São considerados heteroátomos: N, O, P, S.



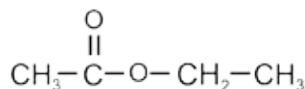
etano-oxi-etano ou
éter dietílico



metano-oxi-propano ou
éter metil n.propílico



propanoato de metila ou
propionato de metila



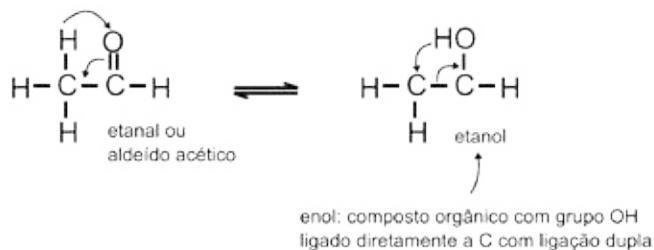
etanoato de etila ou
acetona de etila

1.6. Tautomeria

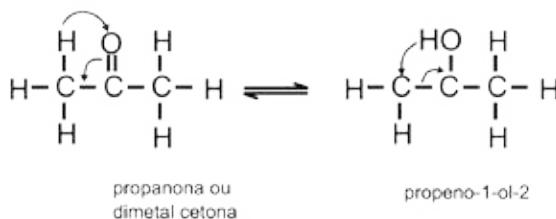
A tautomeria é considerada um caso especial de isomeria de função. Acontece quando ocorre um rearranjo de átomos ou grupo de átomos em uma molécula. Isso ocorre como em uma reação, onde um composto se transforma em outro, sendo mantido um equilíbrio. Portanto, estes compostos irão necessariamente coexistir. Ou seja, numa amostra de um destes isômeros haverá sempre a presença do outro numa determinada proporção.

Exemplos:

tautomeria aldo-enólica



tautomeria ceto-enólica



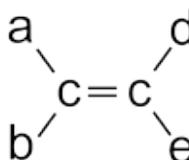
1.7. Isomeria Espacial

Os isômeros apresentam mesma fórmula molecular, mesma fórmula plana, mas diferentes fórmulas estruturais espaciais.

Divide-se em:

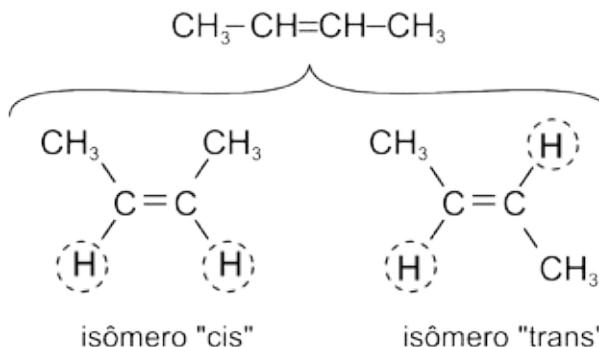
1.8. Isomeria Geométrica (ou Cis-Trans)

A ocorrência de isômeros geométricos pode ser observada em compostos que apresentam ligação dupla entre carbonos e que, além disso, cada um destes dois carbonos apresente suas duas ligações restantes necessariamente com ligantes diferentes entre si.



Para que ocorra isomeria geométrica, o ligante "a" deve ser necessariamente diferente do ligante "b" e o ligante "d" deve ser necessariamente diferente do ligante "e".

Vejamos na figura abaixo o exemplo do 2- Buteno:



Se dividirmos a molécula por um plano que passa pelos dois carbonos que constituem a ligação dupla teremos como classificar os dois isômeros:

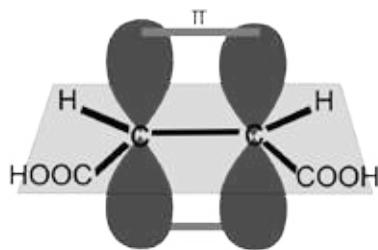
- O isômero "cis": os ligantes mais simples de cada carbono encontram-se do mesmo lado.
- O isômero "trans": os ligantes mais simples de cada carbono encontram-se em lados opostos.

Observação: Apesar da semelhança estrutural que estas duas moléculas apresentam, suas propriedades físicas diferem, em função da diferença na disposição geométrica dos seus ligantes.

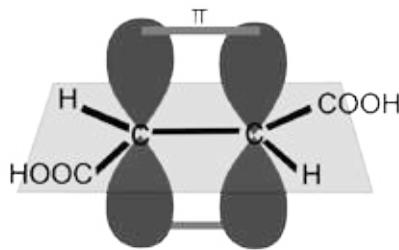
As estruturas do exemplo acima não são "sobreponíveis", pois dois carbonos que trocam duplas ligações não possuem "rotação livre", desse modo são diferentes. Esse tipo de isomeria que existe entre essas duas estruturas é chamada espacial, do tipo geométrica ou CIS-TRANS.

Outro exemplo clássico da isomeria do tipo CIS-TRANS ocorre com ácido butenodíóico que possui a fórmula estrutural a seguir (figura), que repre-

senta dois compostos: o ácido butenodióico CIS, também chamado de ácido malêico e o ácido butenodióico TRANS, conhecido como ácido fumárico.



ÁCIDO BUTENODIÓICO CIS
ÁCIDO MALEICO



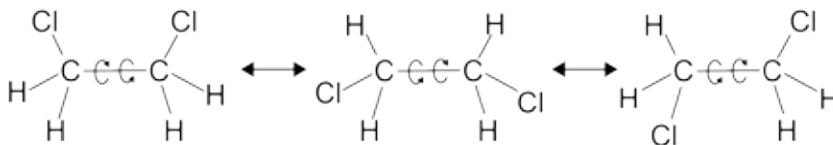
ÁCIDO BUTENODIÓICO TRANS
ÁCIDO FUMÁRICO

Fórmulas estruturais cis e trans do ácido butenodióico

O isômero cuja molécula apresenta os dois grupos carboxílicos de um mesmo lado do plano determinado pela ligação pi chama-se CIS; o isômero cuja molécula apresenta os dois grupos carboxílicos em lados opostos em relação ao plano determinado pela ligação pi chama-se TRANS.

1.9. Porque ocorre a isomeria Geométrica?

Inicialmente, vamos tomar como exemplo a molécula do 1,2 – dicloro-etano:



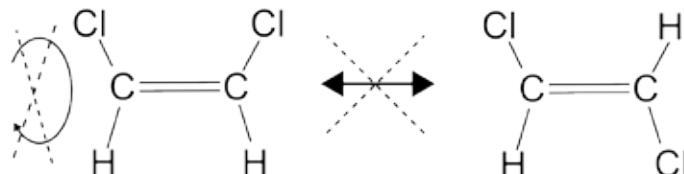
Estas três disposições relativas correspondem a uma mesma substância e as diferentes posições relativas que uma mesma molécula pode assumir são denominadas "conformações". Essas representações mostram que uma mesma molécula, ao longo do tempo, vai modificando as posições relativas de seus ligantes.

Desse modo, basta "girar" o carbono da esquerda da estrutura central (B) 120° para que ela coincida com a estrutura A; bem como "rodando" o carbono esquerdo da estrutura C 120° , ela coincide com a estrutura B, e continuando o "giro" por mais 120° , ela coincide com "A". Enfim, sempre que houver superposição das estruturas, elas estarão representando o mesmo composto.

A possibilidade de rotação entre os carbonos que estabelecem uma ligação simples entre si determina que uma dada molécula deste composto possa assumir ao longo do tempo e espontaneamente diferentes posições relativas de seus ligantes sem que para isso haja necessidade de ocorrer o rompimento de qualquer tipo de ligação. Como consequência disso, não existe a ocorrência de isômeros para o 1,2–dicloro-etano.

Agora analisaremos o 1,2-dicloro-eteno:

Observações experimentais revelam que não há livre rotação da ligação dupla entre carbonos, pois isso implicaria a quebra da ligação dupla entre os carbonos; logo não há conversão espontânea de uma forma na outra.



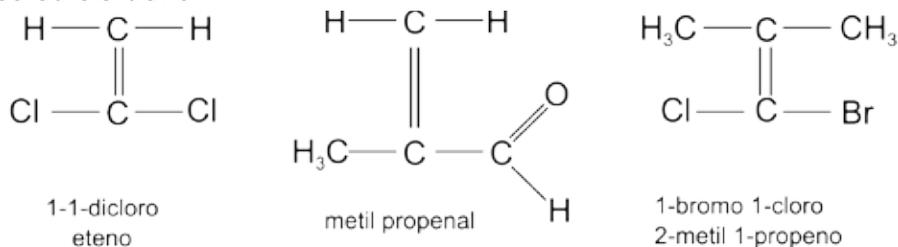
Analisando a figura acima, podemos constatar facilmente que, no caso do 1,2-dicloro eteno, existe duas possibilidades para a disposição relativa dos ligantes dos carbonos que participam da dupla ligação.

Observe!

- Na primeira estrutura, os dois átomos de cloro estão do “mesmo lado” do plano que “divide” a molécula ao meio; esta é a chamada forma CIS (cis=mesmo lado).
- Na segunda figura, os dois átomos de cloro estão de “lados opostos” do plano que “divide” a molécula ao meio; esta é a chamada forma TRANS (trans=através ou transversal).

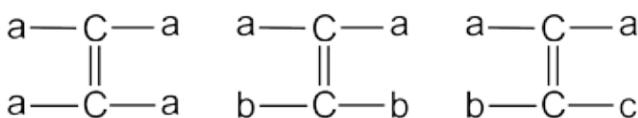
Lembre-se! Entretanto, nem todos os compostos que apresentam dupla ligação entre átomos de carbono formam isômeros geométricos. Havendo dois átomos ou grupos iguais ligados ao mesmo átomo de carbono da dupla ligação, está eliminada a possibilidade de ocorrer isomeria geométrica.

Desta forma, os compostos abaixo não têm isômeros geométricos ou cis-trans:

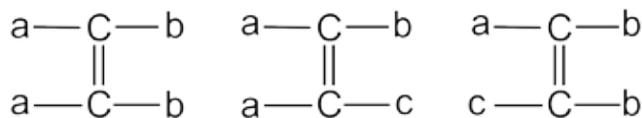


Representando por a, b, c, e d os átomos ou grupamentos ligados aos átomos de carbono da dupla ligação temos:

a) Compostos que não apresentam isômeros geométricos:

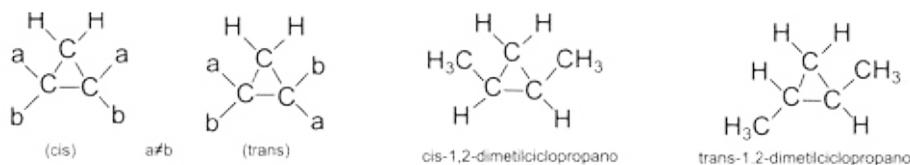


b) Compostos que apresentam isômeros geométricos:



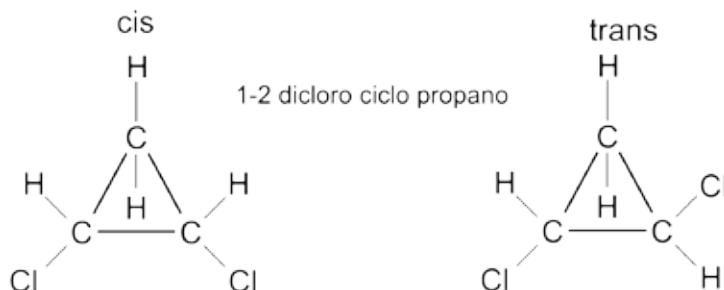
1.10. Isomeria Geométrica em Compostos de Cadeia Cíclica

Quando átomos de carbono estiverem ligados numa cadeia fechada ou cíclica estarão impedidos de sofrer uma rotação completa em torno de seus eixos sem quebrar o ciclo. Desta forma, para que haja isomeria geométrica basta que pelo menos dois carbonos do ciclo possuam ligantes diferentes entre si.



Representação estrutural das formas CIS e TRANS do 1,2- Dimetilciclopropano.

Outro exemplo clássico de isomeria geométrica em é a que ocorre com o composto 1-2-dicloro ciclopropano. Os dois átomos de cloro desse composto podem dispor-se num mesmo lado ou em lados opostos do plano determinado pelo ciclo; existem, desta forma, duas moléculas diferentes³⁵ correspondentes ao 1-2-dicloro ciclopropano que são os dois isômeros geométricos. O composto cuja molécula apresenta os dois átomos de Cl num mesmo lado do plano determinado pelo ciclo é o isômero cis; o composto cuja molécula apresenta os dois átomos de Cl em lados opostos do plano determinado pelo ciclo é o isômero trans.



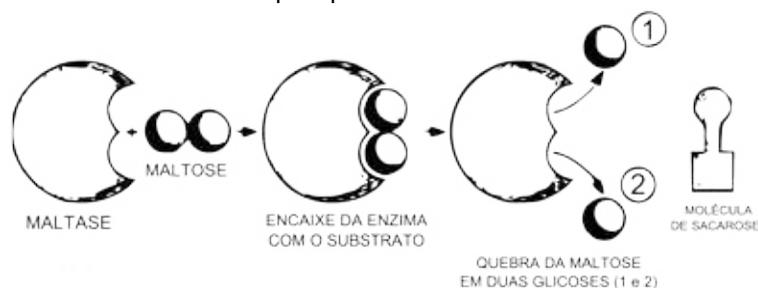
³⁵Combinação Chave-Fechadura: a grande especificidade de uma enzima é determinada pelo tamanho e forma tridimensional (espacial), formando regiões de afinidade com os reagentes (substratos). Essa complementaridade, leva o nome de combinação chave-fechadura.

1.11. Isomeria Ótica

Esse tipo de isomeria está relacionado com substâncias conhecidas como opticamente ativas, ou seja, que têm a propriedade de desviar o plano de vibração da luz polarizada.

Essas substâncias possuem as mesmas propriedades físicas (Ponto de fusão, ponto de ebulição, densidade, solubilidade, dentre outras propriedades), exceto uma: o desvio do plano da luz polarizada. Esta propriedade, denominada atividade ótica, é exclusiva de moléculas assimétricas e as substâncias que a apresentam são chamadas de opticamente ativas.

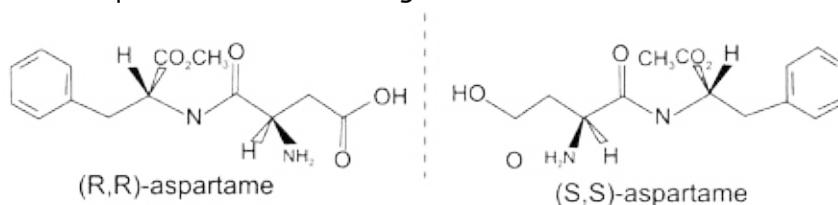
A importância fundamental que substâncias opticamente ativas assumem na constituição e no metabolismo dos seres vivos é explicitada, por exemplo, nos mecanismos de ação enzimática (do tipo chave-fechadura) mostrada na figura abaixo. Diversos outros exemplos podem ser colhidos no estudo de fármacos.



Esquema chave-fechada de enzima e substrato

É importante destacar que cada uma das moléculas de um par de enantiômeros pode exercer efeitos completamente diferentes em um organismo vivo. Um exemplo muito interessante é dado pelo aspartame, um conhecido adoçante utilizado pela indústria alimentícia em todo o mundo. Uma de suas formas enantioméricas tem sabor adocicado [a forma (S,S)-aspartame], enquanto seu enantiômero [a forma (R,R)-aspartame] tem sabor amargo (ver esquema na próxima página).

Muitos medicamentos também têm como princípio ativo apenas uma das formas enantioméricas, cuja substituição por aquela que é sua imagem especular pode levar ao desaparecimento da atividade biológica³⁶ ou mesmo trazer conseqüências danosas ao organismo.



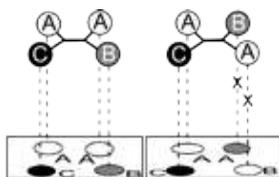
Representação estrutural do par de enantiômeros do aspartame.

2. Substâncias opticamente ativas e a luz polarizada

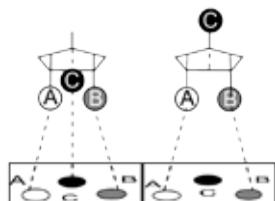
Conforme dito no início, são consideradas substâncias opticamente ativas aquelas que giram o plano da luz polarizada.

³⁶Atividade Biológica

Os estereoisômeros podem apresentar atividades biológicas diferentes: um deles pode ser muito ativo, e o outro inativo ou fracamente ativo. As ilustrações abaixo mostram como a orientação espacial de uma molécula é importante na interação com o seu receptor biológico.



Neste caso, somente o primeiro enantiômero possui a configuração correta para o receptor: quando os grupos A estão em trans a molécula não "encaixa" com o sítio receptor.



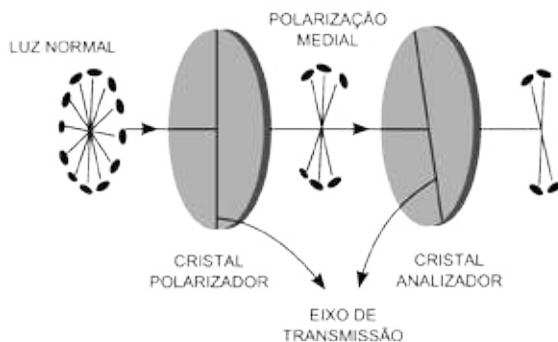
Neste caso, o grupo C do segundo enantiômero está em uma posição desfavorável à interação com o receptor.

O uso de luz polarizada para estudar substâncias opticamente ativas e enantiômeros iniciou-se com Jean Baptiste Biot e Louis Pasteur. A polarização da luz foi observada primeiramente por Malus em 1808 e por Huygens, ao estudar o comportamento atípico da luz que atravessava cristais de espató da Islândia (uma das formas cristalinas do CaCO_3). Em 1812, Jean Baptiste Biot observou que, quando luz polarizada atravessava um cristal de quartzo convenientemente cortado, seu plano de polarização era rotacionado em um ângulo proporcional à espessura do cristal.

O aparelho inventado por Biot para observar esses fenômenos, chamado de polarímetro, foi posteriormente aperfeiçoado por Ventzke, que adaptou um prisma de Nicol ao mesmo, separando o feixe de luz em dois componentes com polarizações perpendiculares entre si, aproveitando somente um dos feixes de luz. Por fim, Mitscherlich introduziu o uso de luz monocromática nas observações.

Às substâncias que giram o plano da luz polarizada³⁷ no sentido horário do polarizador³⁸ - portanto, para a direita do observador - damos o nome de dextrorrotatórias ou dextrógiras (d), atribuindo-lhes sinal (+).

As substâncias que giram o plano da luz polarizada no sentido anti-horário do polarizador - portanto, para a esquerda do observador - damos o nome de levorrotatórias ou levógiras (l), atribuindo-lhes sinal (-).



Representação da luz não polarizada e polarizada

Para que um composto orgânico seja opticamente ativo é necessário que sua molécula seja assimétrica, ou seja, sua molécula deve possuir um carbono assimétrico, que é o carbono que possui os quatro ligantes diferentes, ou seja, carbono com ligação dupla ou tripla nunca pode ser assimétrico. O carbono assimétrico ou quiral é representado por C^* .

3. Assimetria Molecular

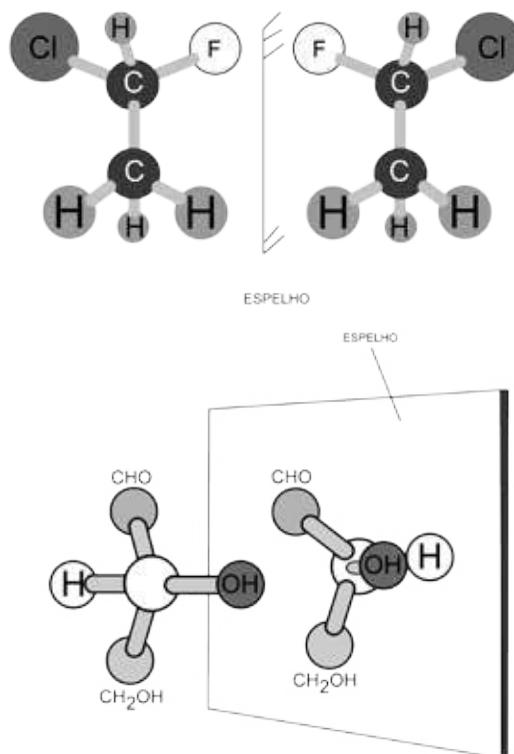
Inicialmente vamos imaginar uma determinada molécula orgânica colocada diante de um espelho e considerar a existência de uma segunda molécula

³⁷Luz Polarizada: a luz natural de emissão apresenta infinitos planos de vibração, todos perpendiculares à direção de sua propagação. Quando essas vibrações têm lugar em um único plano que contém a direção de propagação, dizemos que a luz está polarizada.

³⁸Polarizador: é um dispositivo através do qual se consegue a polarização da luz; o mais usado é o chamado prisma de nicol.

correspondente à imagem especular da primeira. A etapa seguinte consiste na sobreposição da segunda molécula sobre a primeira, tentando fazer coincidir os ligantes de ambas as moléculas. Para todas as moléculas orgânicas onde se conseguir a sobreposição coincidente das duas estruturas correspondentes ao objeto e imagem frente a um espelho, pode-se caracterizar a simetria desta molécula. Nestes casos, a molécula inicialmente considerada e a sua correspondente imagem especular são exatamente iguais, constituindo apenas uma e a mesma substância.

Por outro lado, há moléculas orgânicas onde não se consegue a sobreposição coincidente das duas estruturas correspondentes ao objeto e imagem frente a um espelho (figura abaixo). Estes casos caracterizam a assimetria molecular. Nestes casos, a molécula colocada diante do espelho não é exatamente a mesma do que a correspondente à sua imagem especular: tem-se, portanto, duas substâncias diferentes constituídas por cada uma dessas moléculas. Caracteriza-se, pois, mais um caso de isomeria espacial: A isomeria ótica.



Representação da luz assimétrica e sua imagem especular

Quando duas substâncias possuem as mesmas propriedades físicas, mas desviam o plano da luz polarizada para sentidos opostos, estas substâncias são caracterizadas como antípodos óticos, enantiômeros ou enantio-

morfos. Como os isômeros diferem em relação a uma propriedade ótica, este caso de isomeria é designado como ISOMERIA ÓTICA.

O exemplo do composto 2-metil-butanol-1 ilustra bem esse caso de isomeria. Veja a tabela a seguir com algumas das propriedades físicas dos enantiômeros desse composto.

	2-metil-butanol-1 (dextrógiro)	2-metil-butanol-1 (levógiro)
Rotação específica	+ 5,756°	-5,756°
PE(°C)	128,9	128,9
Densidade	0,8193	0,8193
Índice de refração	1,4107	1,4107

Propriedades Físicas dos enantiômeros do 2-metil-butanol-1

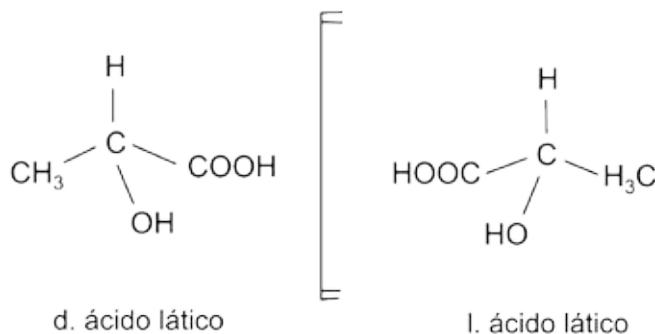
Observe que todas as propriedades físicas são idênticas, exceto a rotação específica.

Em resumo, é a ocorrência da assimetria molecular o fator que determina a existência da isomeria ótica. Dos compostos com assimetria molecular, existe um subgrupo importante que engloba a maioria dos casos de assimetria molecular: os compostos que apresentam carbonos assimétricos na molécula.

3.1. A assimetria molecular em compostos com carbono assimétrico

A presença de, pelo menos, um carbono com seus quatro ligantes diferentes entre si garante a ocorrência de assimetria molecular num composto orgânico. O carbono que possui estas características é denominado carbono assimétrico.

Exemplo: O ácido láctico



A uma dessas formas isoméricas irá corresponder o ácido láctico dextrógiro e a outra, o ácido láctico levógiro. Em princípio, não existe uma convenção para a identificação do isômero dextrógiro ou levógiro com base exclusivamente na representação de sua fórmula estrutural.

O d.ácido láctico e o l.ácido láctico constituem um par de antípodas ópticos ou de enantiômeros, onde ambos são oticamente ativos. Se, entretanto, for preparada uma mistura equimolecular da forma dextrógira e levógira, obtém-se uma mistura oticamente inativa, pois a luz polarizada, ao atravessar essa mistura irá encontrar 50% de moléculas que desviarão o seu plano para a direita e 50% para a esquerda. Esta mistura é denominada mistura racêmica ou racêmico.

3.2. Compostos com 2 ou mais carbonos assimétricos

Na medida em que aumenta o número de carbonos assimétricos numa molécula orgânica, aumenta também o número de isômeros oticamente ativos possíveis: a cada carbono assimétrico adicional, duplica o número de isômeros oticamente ativos e duplica também o número de misturas racêmicas possíveis.

Resumindo:

	Isômeros oticamente ativos	Misturas racêmicas (oticamente inativa)
1C*	2 ¹ 1 dextrógico 1 levógico	2 ⁰ mistura racêmica
2C*	2 ² 2 dextrógico 2 levógico	2 ¹ mistura racêmica

Síntese do Capítulo



Neste capítulo conhecemos o conceito geral de isomeria. Em seguida estudamos a isomeria plana e os tipos de isomeria relacionados, incluindo isomeria de posição, de cadeia, de função, metameria e tautomeria. Na segunda parte foi abordado com detalhes a isomeria espacial e seus tipos. Finalmente, estudamos a isomeria ótica e suas características.

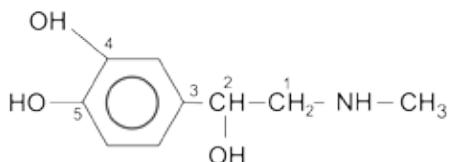
Atividades de avaliação



1. A seguir veremos uma equação de uma reação típica dos alcenos denominada adição de halogênios à ligação dupla. Essa reação forma compostos chamados dihalogenados vicinais, conforme mostrado no esquema reacional abaixo:

Em relação a essa equação, podemos afirmar que:

- o composto II apresenta dois carbonos assimétricos.
 - o nome do produto formado é 2,3-dibromo-3- metil-butano.
 - o nome do composto I é 2-metil-buteno-2.
 - o alceno pode apresentar isomeria geométrica.
 - o nome do produto formado é 2,3-dibromo-2- metil-propano.
2. Quando se diz que uma molécula apresenta atividade óptica isto significa que é necessário que a molécula.
- seja um composto orgânico.
 - desvia a luz polarizada para a direita, isto é, seja dextrógiro.
 - não apresente plano, centro ou eixo de simetria.
 - apresente carbonos assimétricos.
 - seja um racêmico, isto é, formada de uma mistura de dextrógiro e levógiro.
3. O éter metílico e o álcool etílico possuem a mesma fórmula molecular C_2H_6O . Isso significa que:
- são isômeros.
 - possuem as mesmas propriedades químicas.
 - possuem a mesma função química.
 - podem ser usados como analgésicos.
 - podem ser queimados na ausência de oxigênio, pois este já ocorre na molécula.
4. Na fórmula da adrenalina que é um hormônio e neurotransmissor, o carbono responsável pela isomeria ótica é o de número:



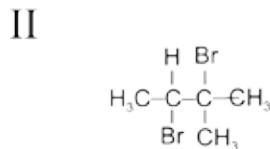
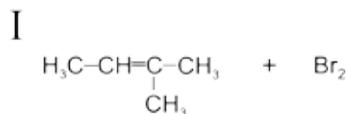
- a) 1 b) 2 c) 3 d) 4 e) 5

5. Observe a lista de compostos abaixo.

- | | |
|--------------------|--------------------|
| I. butanol | IV. butanal |
| II. metil-propanol | V. etano-oxi-etano |
| III. butanona | VI. butanóico |

Quais são isômeros?

- a) I, III e IV b) I, III e VI c) III, IV e VI d) I, II e V e) II, V e VI



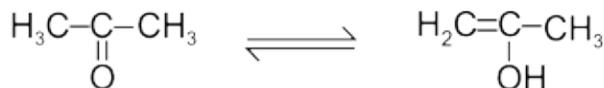
6. A existência da atividade ótica em um composto é em geral determinada pela presença de um centro de assimetria molecular. Um composto opticamente ativo é

- a) dicloro - 1,3 - ciclobutano. d) cis- dicloroeteno.
 b) metil-etil-cetona. e) dimetil - 2,2 - propanóico.
 c) cloro-2-propanol- 1.

7. Formam pares de isômeros:

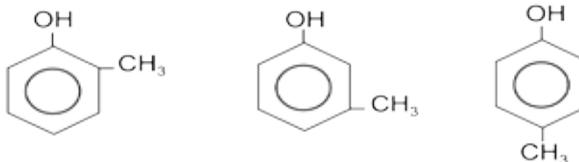
- a) o metano-oxi-etano e o propanol. d) a propanona e o propano.
 b) o propeno e o propano. e) o propanol e a propanal.
 c) o propanal e o propanóico.

8. O caso de isomeria representado pelo esquema abaixo é classificado como:



- a) metameria. d) isomeria cis-trans.
 b) isomeria de cadeia. e) tautomeria.
 c) isomeria de posição.

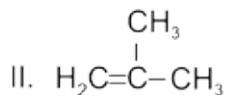
9. Os cresóis são anti-sépticos utilizados na obtenção da creolina que é formada pela mistura dos compostos a seguir.



Pode-se afirmar que esses compostos são

- a) isômeros de posição. d) tautômeros.
 b) isômeros de função. e) metâmeros.
 c) isômeros de cadeia.

10. Analise as fórmulas estruturais dos seguintes compostos orgânicos



Pode-se afirmar que entre os compostos I e II e entre os compostos I e III, respectivamente, existem isomerias de:

- a) cadeia e função.
- b) cadeia e posição.
- c) posição e função.
- d) posição e cadeia.
- e) função e posição.

Referências



BAGATIN, O., SIMPLÍCIO F.I., SANTIN, S. M., *Rotação da luz polarizada: Abordagem histórica com proposta experimental QUÍMICA NOVA NA ESCOLA N° 21*, MAIO 2005.

Barreiro, E. J. e Fraga, C. A. M. *Química Medicinal - As Bases Moleculares Da Ação Dos Fármacos* – Ed. Artmed, 2008.

MORRISON, R. e BOYD, R. *Química Orgânica. 13ª ed. Trad. M.A. da Silva.* Lisboa: Editora Calouste Gulbenkian, 1996.

ROMERO, J.R. *Fundamentos de estereoquímica dos compostos orgânicos.* Ribeirão Preto: Holos Editora, 1998.

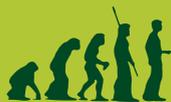
SOLOMONS, T.W.G. *Química Orgânica. 7ª ed. Trad. W. Oh Lin.* Rio de Janeiro: Editora LTC, 2001. v. 1.

Sobre os autores

Alexandre Cabral Craveiro: doutor em Química Orgânica pela Universidade Federal do Ceará (1999). Tem larga experiência na área de Química Orgânica e de Produtos Naturais, com ênfase em Síntese Orgânica e biopolímeros atuando principalmente nos seguintes temas: quitosana, quitina, biotransformações, *Saccharomyces cerevisiae*, alimentos funcionais e fitoterápicos. Autor de quatro livros científicos e um livro didático, possui dezenas de patentes de produtos e processos registradas no INPI e várias participações em bancas de Mestrado. Professor Conteudista da Universidade Aberta do Brasil.



A não ser que indicado ao contrário a obra **Química Geral e Orgânica**, disponível em: <http://educapes.capes.gov.br>, está licenciada com uma licença **Creative Commons Atribuição-Compartilha Igual 4.0 Internacional (CC BY-SA 4.0)**. Mais informações em: http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt_BR. Qualquer parte ou a totalidade do conteúdo desta publicação pode ser reproduzida ou compartilhada. Obra sem fins lucrativos e com distribuição gratuita. O conteúdo do livro publicado é de inteira responsabilidade de seus autores, não representando a posição oficial da EdUECE.



Ciências Biológicas

Fiel a sua missão de interiorizar o ensino superior no estado Ceará, a UECE, como uma instituição que participa do Sistema Universidade Aberta do Brasil, vem ampliando a oferta de cursos de graduação e pós-graduação na modalidade de educação a distância, e gerando experiências e possibilidades inovadoras com uso das novas plataformas tecnológicas decorrentes da popularização da internet, funcionamento do cinturão digital e massificação dos computadores pessoais.

Comprometida com a formação de professores em todos os níveis e a qualificação dos servidores públicos para bem servir ao Estado, os cursos da UAB/UECE atendem aos padrões de qualidade estabelecidos pelos normativos legais do Governo Federal e se articulam com as demandas de desenvolvimento das regiões do Ceará.



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ



C A P E S

