

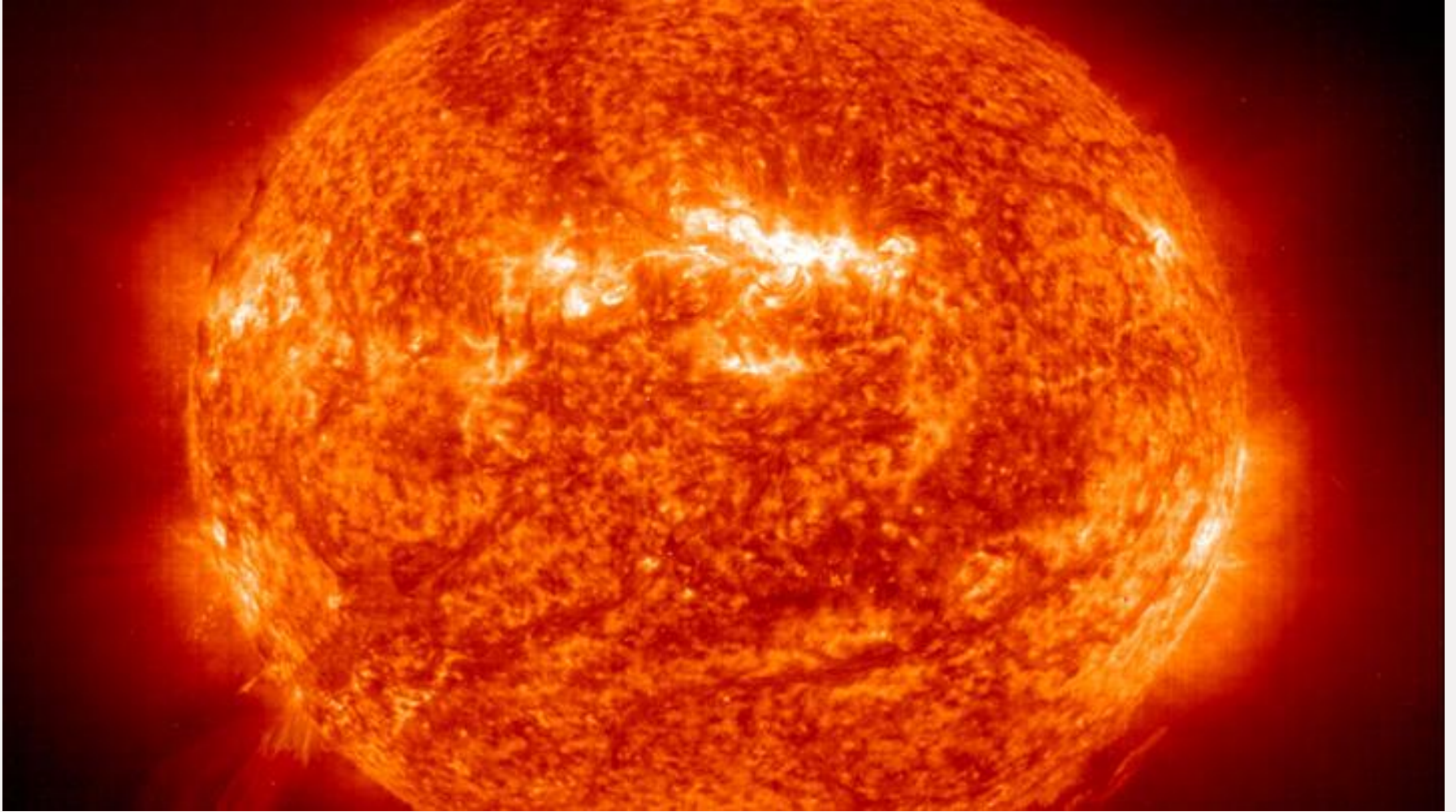
Química Geral

Prof. Dr. Márcio Marques Martins

Unidade 1 – Conceitos Básicos de Química

<http://digichem.org>

Parte 1 – Matéria e Energia



Em química, porém, uma substância é uma *forma simples e pura da matéria*.

As substâncias e a matéria, em geral, existem em diferentes formas, chamadas de estados da matéria. Os três estados da matéria mais comuns são sólido, líquido e gás:

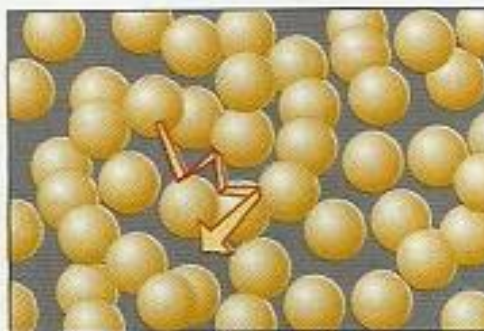
Um sólido é uma forma rígida da matéria.

Um líquido é uma forma fluida da matéria, que tem superfície bem definida e que toma a forma do recipiente que o contém.

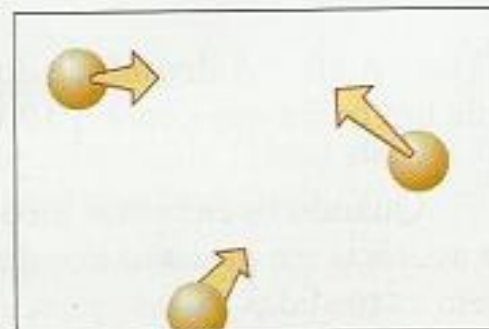
Um gás é uma forma fluida da matéria que ocupa todo o recipiente que o contém.



(a)



(b)



(c)

FIGURA A.1 Representação molecular dos três estados da matéria. Em cada caso as esferas representam partículas que podem ser átomos, moléculas ou íons. (a) Em um sólido, as partículas têm um empacotamento apertado, mas continuam a oscilar. (b) Em um líquido, as partículas têm energia suficiente para se mover umas em relação às outras. (c) Em um gás, as partículas movem-se quase completamente livres e estão em constante movimento aleatório.

A.1 Propriedades Físicas

A química está envolvida com as “propriedades” da matéria, isto é, com suas características distintivas. Uma **propriedade física** de uma substância é uma característica que podemos observar ou medir sem mudar a identidade dessa substância. A massa, por exemplo, é uma propriedade física da água; outra, é sua temperatura. As propriedades físicas incluem características, como o ponto de fusão (a temperatura na qual um sólido passa a líquido), a dureza, a cor, o estado da matéria (sólido, líquido ou gás) e a densidade. Uma **propriedade química** refere-se à capacidade de uma substância de transformar-se em outra substância. Uma propriedade química do gás hidrogênio, por exemplo, é que ele reage com oxigênio (queima) para produzir água. Uma propriedade química do metal zinco é que ele reage com ácidos para produzir o gás hidrogênio.

A.1 Propriedades Físicas

*As propriedades físicas são aquelas que não mudam a identidade de uma substância.
As propriedades químicas são aquelas que mudam a identidade de uma substância.
As propriedades extensivas dependem da massa da amostra, ao contrário das propriedades intensivas. A precisão de uma medida indica o quão próximo elas estão umas das outras, enquanto a acurácia de uma medida indica o quão próximo a média das medidas está do valor real.*

A.1 Propriedades Físicas

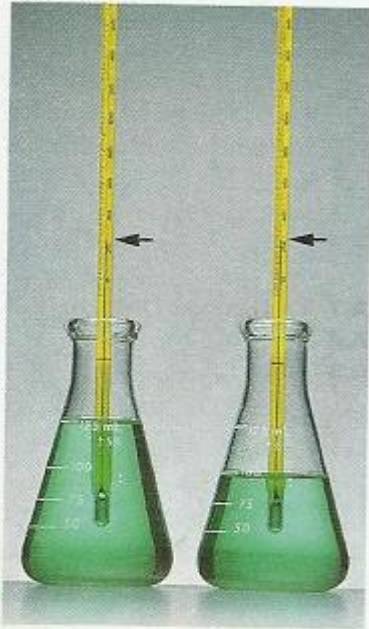


FIGURA A.2 A massa é uma propriedade extensiva, mas a temperatura é intensiva. Estas duas amostras de sulfato de ferro(II) em solução foram tiradas da mesma fonte: elas têm massas diferentes, mas a mesma temperatura.

As propriedades também são classificadas segundo sua dependência da massa da amostra. Uma **propriedade intensiva** independe da massa da amostra. A temperatura, por exemplo, é uma propriedade intensiva, porque poderíamos tomar uma amostra de qualquer tamanho de um banho uniforme de água e mediríamos a mesma temperatura (Fig. A.2). Uma **propriedade extensiva** é uma propriedade que depende da massa (“extensão”) da amostra. O volume é uma propriedade extensiva: 2 kg de água ocupam um volume duas vezes maior do que 1 kg de água.

A.1 Propriedades Físicas

EXEMPLO A.1 Amostra de exercício: Cálculo do volume de uma amostra

Qual é o volume ocupado por 5,0 g de prata sólida? A densidade está listada no Apêndice 2D.

SOLUÇÃO O rearranjo da Eq. 1 dá

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

Podemos, agora, introduzir os dados. Note que quanto menor for a densidade (d), maior será o volume ocupado por uma amostra de mesma massa. A densidade da prata, dada no Apêndice 2D, é $10,50 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$; logo, o volume ocupado por 5,0 g do sólido é

$$V = \frac{5,0 \text{ g}}{10,50 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}} = \frac{5,0}{10,50} \text{ cm}^3 = 0,48 \text{ cm}^3$$

A.1 Propriedades Físicas

TESTE A.1A A densidade do selênio é $4,79 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Qual é a massa de $6,5 \text{ cm}^3$ de selênio?

[Resposta: 31 g]

TESTE A.1B A densidade do gás hélio em 273 K e 1,00 atm é $0,17685 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$. Qual é o volume de um balão que contém 10,0 g de hélio nas mesmas condições?

A.2 Energia

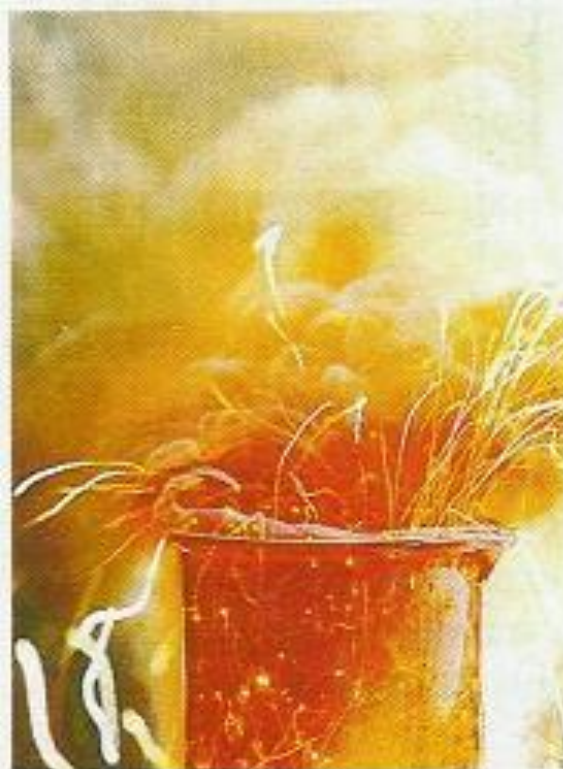


FIGURA A.3 Quando bromo é derramado em fósforo vermelho, ocorre uma reação química, na qual muita energia é liberada como calor e luz.

A.2 Energia

Quanto maior for a energia de um objeto, maior será sua capacidade de realizar trabalho.

A unidade SI de energia é o joule (J).

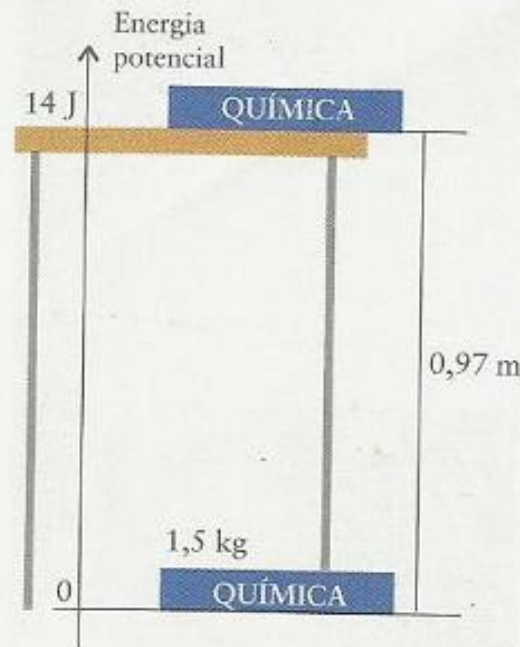
$$1 \text{ J} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$$

$$1 \text{ kJ} = 10^3 \text{ J.}$$

A.2 Energia

Existem três contribuições para a energia: a energia cinética, a energia potencial e a energia eletromagnética.

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2)^*$$



A.2 Energia

EXEMPLO A.2 Amostra de exercício: Cálculo da energia cinética

Qual é a energia necessária para acelerar uma pessoa em uma bicicleta cuja massa total é 75 kg até $8,9 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, partindo do repouso e desprezando o atrito e a resistência do ar?

SOLUÇÃO Para calcular a energia, substituímos os dados na Eq. 2:

$$\begin{aligned} E_c &= \frac{1}{2}mv^2, & E_c &= \frac{1}{2} \times (75 \text{ kg}) \times (8,9 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1})^2 \\ & & &= 3,0 \times 10^3 \underbrace{\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}}_{\text{J}} = 3,0 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Para manter essa velocidade contra o atrito e a resistência do ar é necessário consumir mais energia.

A.2 Energia

TESTE A.2A Calcule a energia cinética de uma bola cuja massa é 0,050 kg e que viaja à velocidade de $25 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

[Resposta: 16 J]

TESTE A.2B Este livro (massa 1,5 kg) caiu de uma mesa. Calcule sua energia cinética no instante exato em que ele atinge seu pé. Nesse momento, sua velocidade é de $3,0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

A.2 Energia

A energia potencial, E_p , de um objeto é sua energia em função de sua posição em um campo de força. Não existe uma fórmula única para a energia potencial de um objeto, porque ela depende da natureza das forças que agem sobre ele. Dois casos simples, entretanto, são importantes em química: a energia potencial gravitacional (para uma partícula em um campo gravitacional) e a energia potencial de Coulomb (para uma partícula carregada em um campo eletromagnético).

Um corpo de massa m que está a uma altura h acima da superfície da Terra tem energia potencial gravitacional

$$E_p = mgh \quad (3)^*$$

A.2 Energia

$$E_p = mgh \quad (3)^*$$

EXEMPLO A.3 Amostra de exercício: Cálculo da variação da energia potencial gravitacional

Uma pessoa com massa 65 kg sobe um lance de escadaria entre dois andares de um prédio que estão separados por 3,0 m. Qual é mudança de energia potencial da pessoa?

SOLUÇÃO A energia potencial da pessoa que está no andar de cima em relação à que ela teria no andar de baixo é

$$\begin{aligned} E_p &= mgh, & E_p &= (65 \text{ kg}) \times (9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}) \times (3,0 \text{ m}) \\ & & &= 1,9 \times 10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2} = 1,9 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Essa energia tem que ser fornecida por um processo químico: a digestão de alimentos

A.2 Energia

TESTE A.3A Qual é a energia potencial gravitacional deste livro (1,5 kg de massa) quando ele está sobre uma mesa de 0,82 m de altura em relação à energia potencial que teria se estivesse no chão?

[Resposta: 12 J]

TESTE A.3B Quanta energia tem de ser gasta para levar uma lata de refrigerante (massa 0,350 kg) até o topo do edifício Sears Tower na cidade de Chicago, nos Estados Unidos (altura 443 m)?

A.2 Energia

A energia devida à atração e repulsão entre cargas elétricas é de grande importância em química, que trata de elétrons, núcleos atômicos e íons, todos com carga. A **energia potencial de Coulomb** de uma partícula de carga q_1 colocada a uma distância r de outra partícula de carga q_2 é proporcional às duas cargas e ao inverso da distância entre elas:

$$E_p = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4)^*$$

ϵ_0 (epsilon zero)

permissividade no vácuo

$$8,854 \times 10^{-12} \text{ J}^{-1} \cdot \text{C}^2 \cdot \text{m}^{-1}$$

A carga de um elétron é $-e$, com $e = 1,602 \times 10^{-19}$

A.2 Energia

$$E_p = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

(4)*

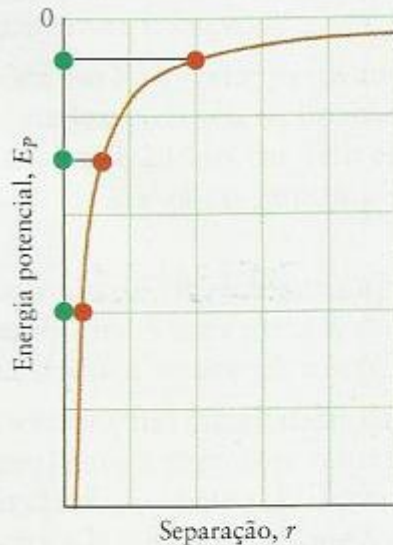


FIGURA A.6 Variação da energia potencial de duas cargas opostas (uma representada pelo círculo vermelho e, a outra, pelo círculo verde) com a distância entre elas. Observe que a energia potencial diminui quando as cargas se aproximam.

A energia potencial de Coulomb se aproxima de zero quando a distância entre as duas partículas tende a infinito.

Se as duas partículas têm a mesma carga o numerador $q_1 q_2$ é, portanto, E_p é positivo e a energia potencial *aumenta* quando elas se aproximam (r diminui)

Se as duas partículas têm cargas opostas E_p é negativo e a energia potencial *decresce* (torna-se mais negativa) quando a separação das partículas diminui (Fig. A.6).

O que chamamos de “energia eletromagnética” é a energia do campo eletromagnético, isto é, a energia transportada pelas ondas de rádio, ondas de luz e raios X. Um campo eletromagnético é gerado pela aceleração de partículas carregadas e tem dois componentes: um campo elétrico oscilante e um campo magnético oscilante (Fig. A.7). A diferença crucial é que um campo elétrico afeta as partículas carregadas quando elas estão paradas ou em movimento, enquanto que um campo magnético só afeta as partículas carregadas quando elas estão em movimento.

A.2 Energia

A energia total, E , de uma partícula é a soma de suas energias cinética e potencial:

$$\text{Energia total} = \text{energia cinética} + \text{energia potencial}, \quad \text{ou} \quad E = E_C + E_P \quad (5)^*$$

Uma característica muito importante da energia total de um objeto é que ela é constante, se não existem influências externas. A energia cinética e a energia potencial podem converter-se uma na outra, mas sua soma é constante. Resumimos essa observação ao dizer que a *energia é conservada*. As energias cinética e potencial podem se interconverter, mas a soma, para um dado objeto, é constante.

A energia cinética é resultado do movimento; a energia potencial é resultado da posição. Um campo eletromagnético transporta energia através do espaço.

A.3 Força

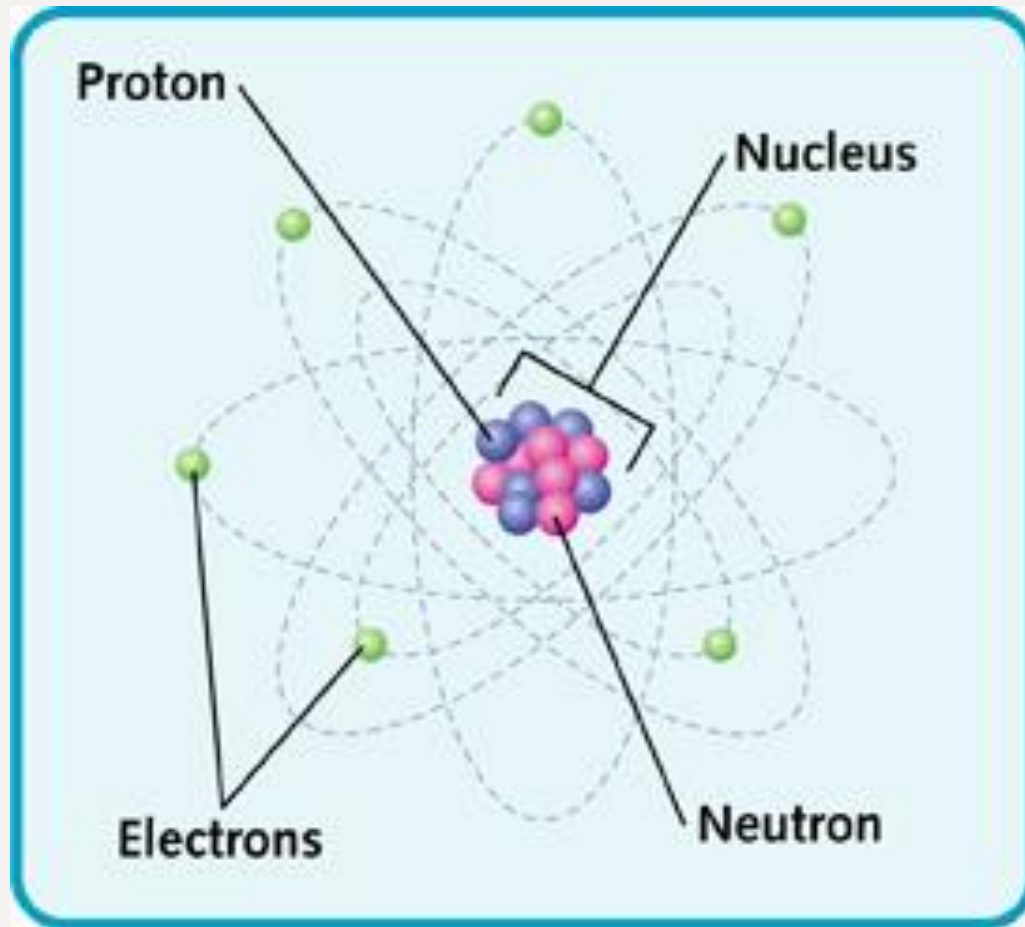
$$\text{Massa} \times \text{aceleração} = \text{força}, \quad \text{ou} \quad ma = F \quad (6)$$

A aceleração, isto é, a taxa de variação da velocidade, é proporcional à força aplicada: $ma = F$. O trabalho é o movimento contra uma força em oposição.

EXERCÍCIOS

- A.1 Classifique as seguintes propriedades como físicas ou químicas: (a) os objetos feitos de prata ficam escuros com o tempo; (b) a cor vermelha dos rubis deve-se à presença de íons crômio; (c) o ponto de ebulição do etanol é 78°C .
- A.2 Um químico investiga os pontos de ebulição e de fusão, bem como a inflamabilidade da acetona, um componente do removedor de esmalte de unhas. Quais dessas propriedades são físicas e quais são químicas?
- A.5 Diga se as seguintes propriedades são extensivas ou intensivas: (a) a temperatura na qual o gelo derrete; (b) a cor do cloreto de níquel; (c) a energia produzida na queima da gasolina; (d) o preço da gasolina.
- A.7 Quando se deixa cair uma peça de metal com massa 112,32 g em um cilindro graduado que contém 23,45 ml de água, o nível da água sobe para 29,27 ml. Qual é a densidade do metal (em gramas por centímetro cúbico)?
- A.14 Imagine que a massa de um átomo está totalmente concentrada em seu núcleo, uma esfera de raio $1,5 \times 10^{-5}$ pm. (a) Se a massa de um átomo de carbono é $2,0 \times 10^{-23}$ g, qual é a densidade do núcleo do carbono? O volume de uma esfera é $(4/3)\pi r^3$, em que r é o raio. (b) Qual seria o raio da Terra se sua matéria fosse comprimida até a densidade do núcleo do carbono? (O raio médio da Terra é $6,4 \times 10^3$ e sua densidade média é $5,5 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.)
- A.24 Um elétron em um tubo de raios catódicos experimenta uma aceleração constante de $1,2 \times 10^6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ sobre uma distância de 0,85 cm. Que força em newtons (N) teve de ser exercida sobre o elétron? A massa de um elétron é $9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.
- A.25 Calcule a energia liberada quando um elétron vai do infinito até a distância de 53 pm de um próton. (Essa é a distância mais provável entre o elétron e o núcleo de um átomo de hidrogênio.) A verdadeira energia liberada quando um elétron e um próton formam um átomo de hidrogênio é 13,6 elétron-volts (eV, $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$). Explique a diferença.
- A.26 A pressão é definida como uma força dividida pela área sobre a qual a força é exercida. Obtenha as unidades SI de pressão (verifique a resposta no Apêndice 1B).
- A.27 Mostre que o produto das unidades SI de pressão e volume é igual à unidade SI de energia.

Parte 2 – Elementos e Átomos



B

ELEMENTOS E ÁTOMOS



B

ELEMENTOS E ÁTOMOS



FIGURA B.1 Amostras de elementos comuns. Em sentido horário, a partir do bromo líquido de cor marrom avermelhada, estão o mercúrio líquido prateado e os sólidos iodo, cádmio, fósforo vermelho e cobre.

B.1 Átomos

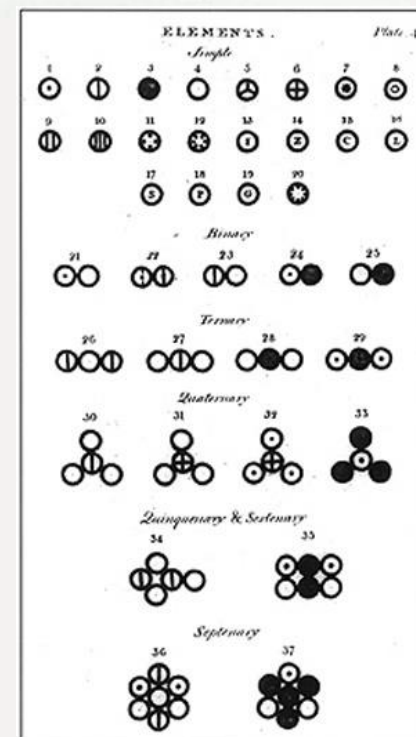
Os gregos perguntavam-se o que aconteceria se eles dividissem a matéria em peças cada vez menores. Haveria um ponto no qual teriam de parar, porque os pedaços não teriam mais as mesmas propriedades do conjunto, ou eles poderiam continuar indefinidamente? Sabemos hoje que existe um ponto em que temos de parar. Em outras palavras, a matéria é feita de partículas inimaginavelmente pequenas. A menor partícula possível de um elemento é chamada de átomo.



B.1 Átomos

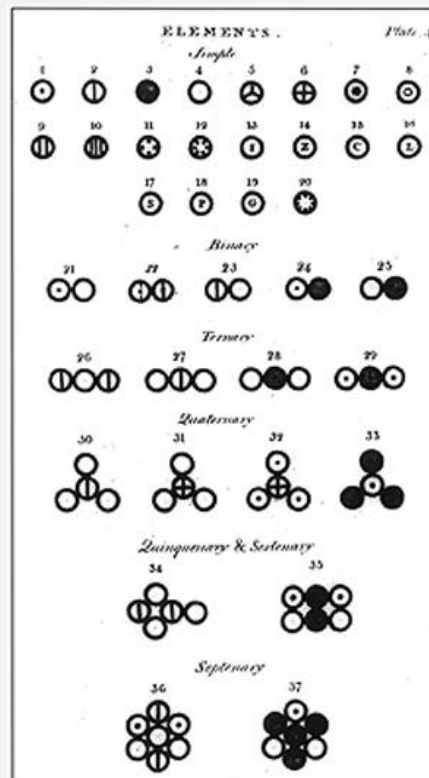
O primeiro argumento convincente em favor dos átomos foi apresentado, em 1807, pelo professor e químico inglês John Dalton (Fig. B.2). Ele mediu muitas vezes a razão entre as massas dos elementos que se combinam para formar as substâncias a que chamamos de “compostos” e verificou que as razões entre as massas mostravam uma tendência. Ele encontrou, por exemplo, 8 g de oxigênio para cada 1 g de hidrogênio em todas as amostras de água que estudou, mas que em outro composto dos dois elementos (peróxido de hidrogênio), havia 16 g de oxigênio para cada 1 g de hidrogênio. Dados desse tipo levaram Dalton a desenvolver sua *hipótese atômica*:

ELEMENTS				
	Hydrogen	1		Strontian 46
	Azote	5		Barytes 68
	Carbon	5		Iron 56
	Oxygen	7		Zinc 56
	Phosphorus	9		Copper 56
	Sulphur	13		Lead 90
	Magnesia	20		Silver 190
	Lime	24		Gold 190
	Soda	28		Platina 190
	Potash	42		Mercury 167



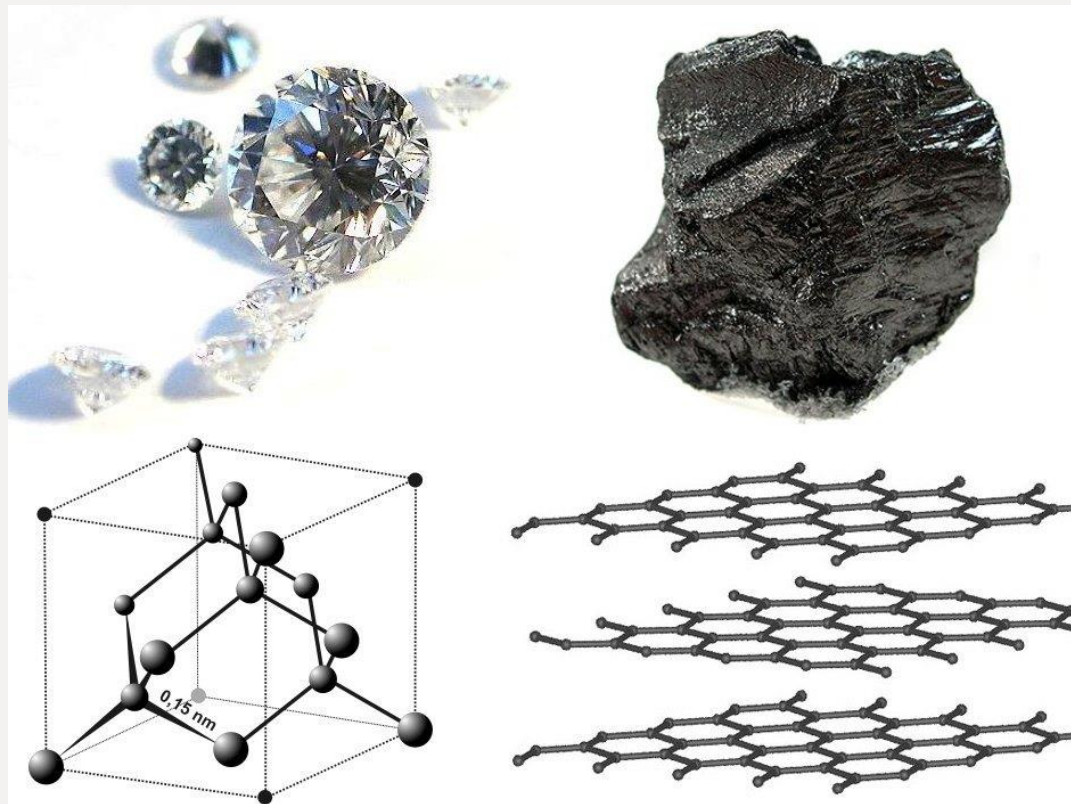
B.1 Átomos

- 1 Todos os átomos de um dado elemento são idênticos.
- 2 Os átomos de diferentes elementos têm massas diferentes.
- 3 Um composto tem uma combinação específica de átomos de mais de um elemento.
- 4 Em uma reação química, os átomos não são criados nem destruídos, porém trocam de parceiros para produzir novas substâncias.



B.1 Átomos

Toda a matéria é feita de várias combinações de formas simples da matéria, chamadas elementos químicos. Um elemento é uma substância formada por um único tipo de átomo.



B.2 Modelo Nuclear

A primeira evidência experimental da estrutura interna dos átomos foi a descoberta, em 1897, da primeira partícula subatômica, o elétron. O físico britânico J. J. Thomson (Fig. B.4) estava investigando os “raios catódicos”, isto é, os raios emitidos quando uma grande diferença de potencial (alta voltagem ou alta tensão) é aplicada entre dois eletrodos (contatos metálicos) em um tubo de vidro sob vácuo (Fig. B.5). Thomson mostrou que os raios catódicos eram feixes de partículas com cargas negativas. Elas provêm dos átomos do eletrodo que tem carga negativa, e é chamado de *catodo*. Thomson descobriu que as partículas carregadas eram sempre as mesmas, independentemente do metal usado para o catodo. Ele concluiu que eram parte constitutiva de *todos* os átomos. Essas partículas foram chamadas de *elétrons* (representados por e^-).

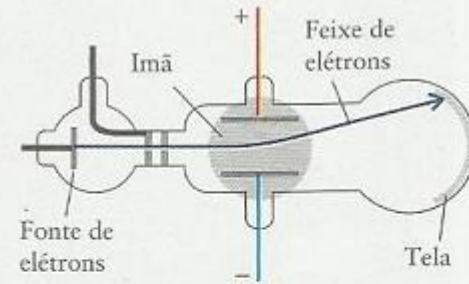
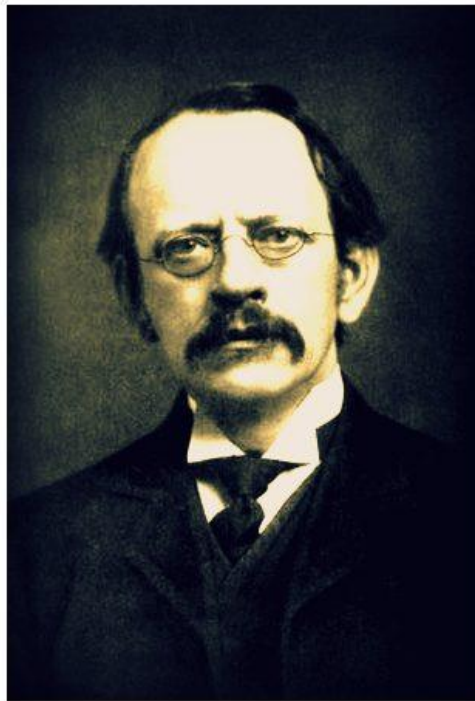


FIGURA B.5 Aparelho usado por J. J. Thomson para investigar as propriedades dos elétrons. Um campo elétrico é colocado entre duas placas e um campo magnético, aplicado perpendicularmente ao campo elétrico.

B.2 Modelo Nuclear

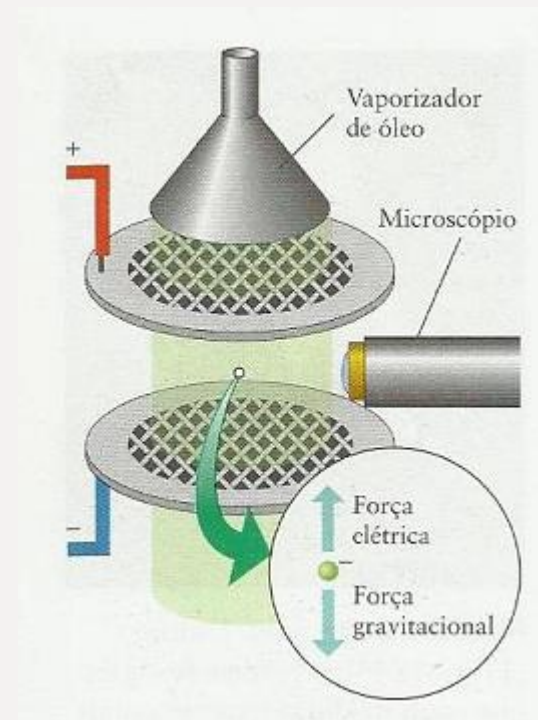
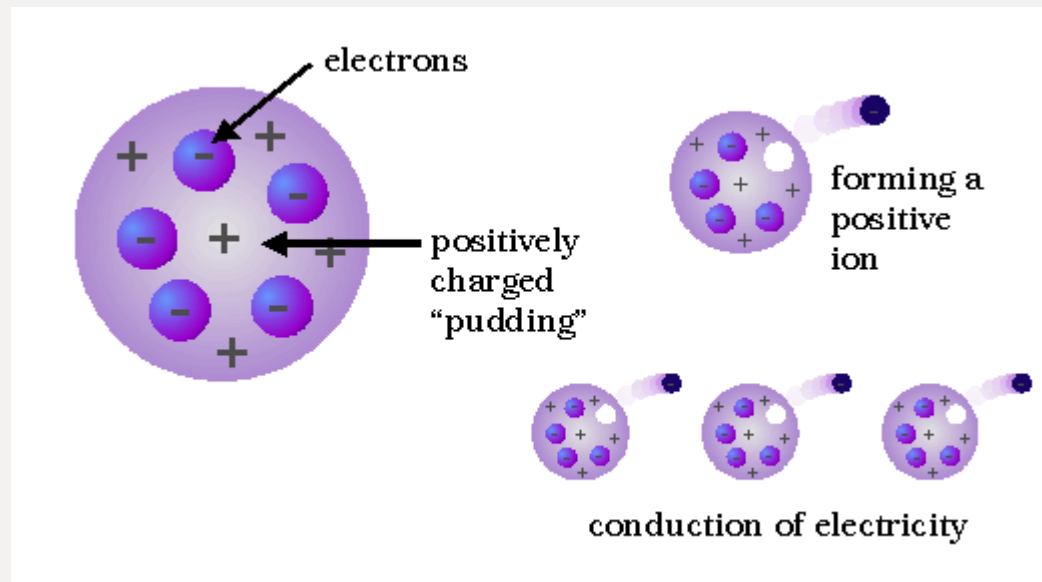


FIGURA B.6 Uma representação esquemática do experimento de Millikan da gota de óleo. O óleo é pulverizado como uma nuvem fina em uma câmara que contém um gás carregado e a velocidade de queda entre as duas placas é medida com um microscópio. As partículas com carga (íons) são geradas no gás por exposição aos raios X. A queda da gota carregada é contrariada pelo campo elétrico.

B.2 Modelo Nuclear

Esse modelo, entretanto, foi derrubado em 1908 por outra observação experimental.

Ernest Rutherford (Fig. B.7) sabia que alguns elementos, incluindo o radônio, emitiam feixes de partículas com carga positiva, que ele chamou de partículas α (partículas alfa).



FIGURA B.7 Ernest Rutherford (1871–1937), responsável por muitas descobertas sobre a estrutura do átomo e seu núcleo.

B.2 Modelo Nuclear

Ele pediu a dois de seus estudantes, Hans Geiger e Ernest Marsden, para atirarem partículas α contra um pedaço de folha de platina com alguns poucos átomos de espessura (Fig. B.8)

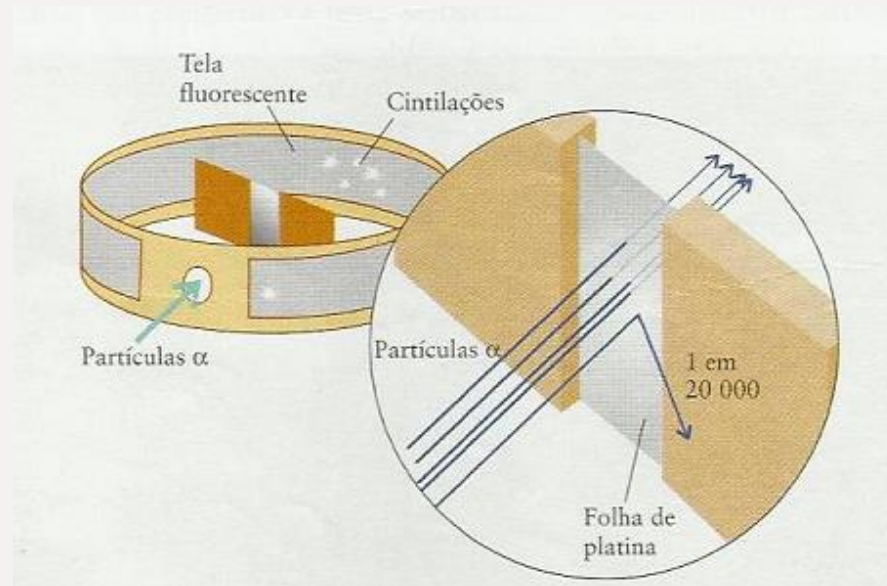
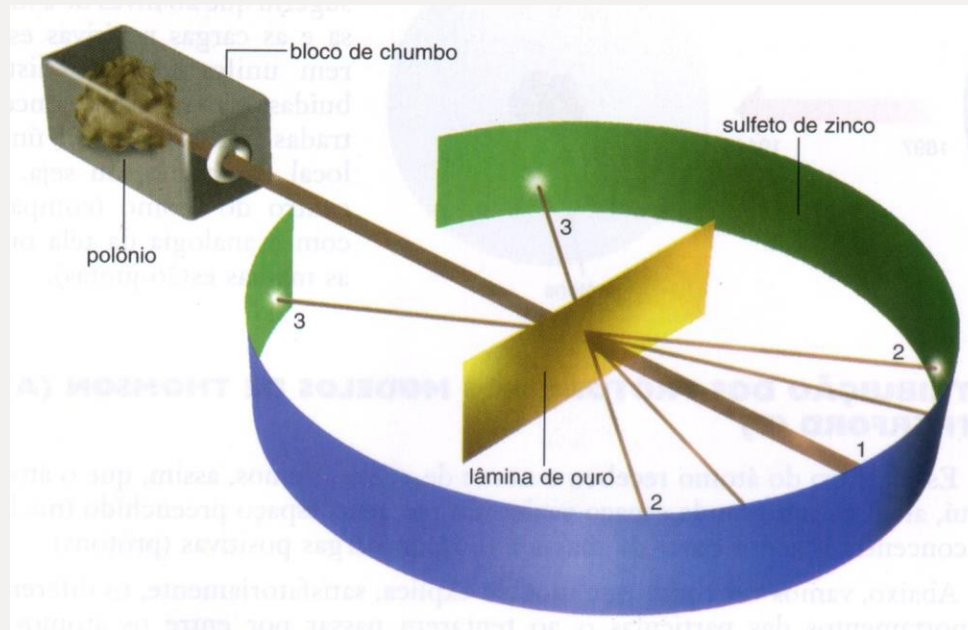


FIGURA B.8 Parte do arranjo experimental usado por Geiger e Marsden. As partículas α vinham de uma amostra do gás radioativo radônio. Elas passavam por um furo para o interior de uma câmara cilíndrica com as paredes cobertas com sulfeto de zinco. As partículas α atingiam a folha de platina montada no interior do cilindro e suas deflexões eram medidas observando-se lampejos de luz (cintilações) quando atingiam a tela de sulfeto de zinco. Uma em cada 20.000 partículas α , aproximadamente, era defletida em ângulos muito grandes. A maior parte das partículas atravessava a folha de platina sem sofrer deflexão.

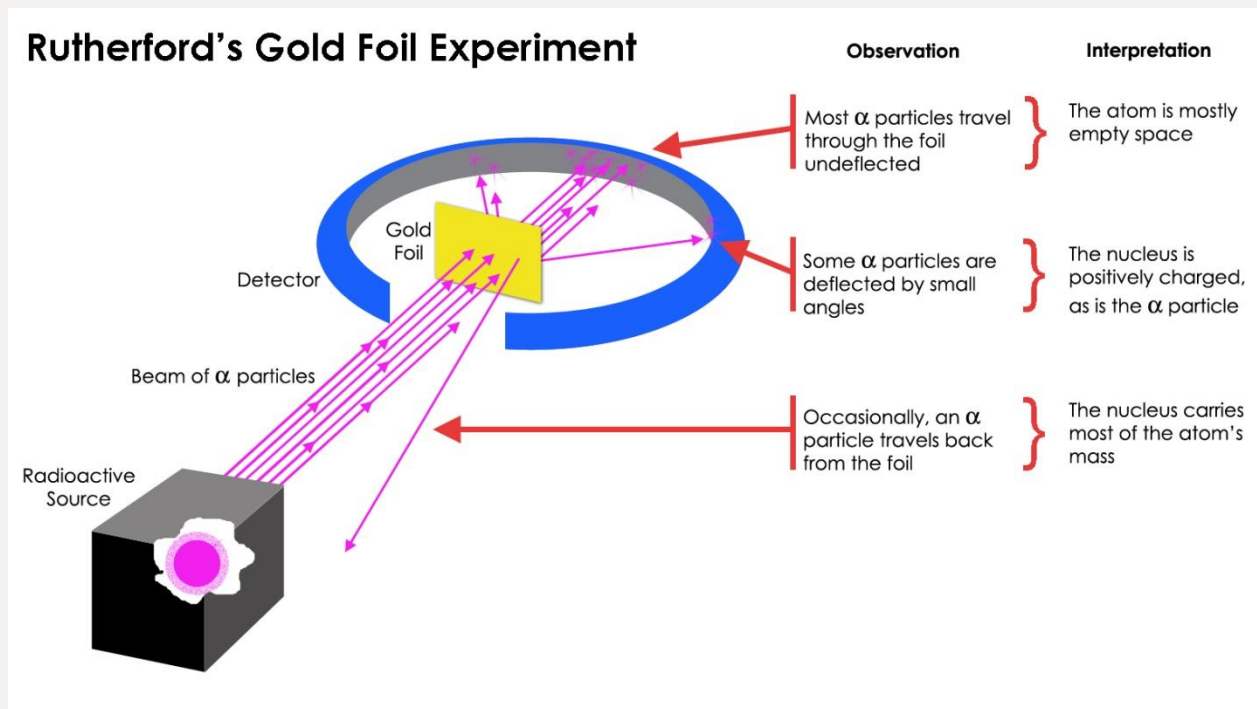
B.2 Modelo Nuclear

O que Geiger e Marsden observaram perturbou a todos. Embora quase todas as partículas α tivessem passado e sofressem muito pouca deflexão, cerca de 1 em cada 20.000 sofria uma deflexão superior a 90° , e algumas poucas partículas α retornavam à direção de partida. “Isso era quase tão incrível”, disse Rutherford, “como se alguém tivesse disparado uma bala de 15 polegadas em um tecido de papel e ela voltasse, acertando o autor do disparo”.



B.2 Modelo Nuclear

Os resultados do experimento de Geiger-Marsden sugeriam um modelo de átomo no qual existe uma densa carga positiva central circundada por um grande volume de espaço quase vazio. Rutherford chamou essa região de carga positiva de **núcleo atômico**. Seu raciocínio é que quando uma partícula α com carga positiva atingia diretamente o núcleo pesado de platina, ela era fortemente repelida pela carga positiva do núcleo, sofrendo deflexão de um ângulo grande, como uma bola de tênis que atinge uma bala de canhão parada (Fig B.9).



B.2 Modelo Nuclear

De acordo com o corrente modelo nuclear do átomo, os elétrons estão dispersos no espaço em torno do núcleo. Em comparação com o tamanho do núcleo (diâmetro de cerca de 10^{-14} m), o espaço ocupado pelos elétrons é enorme (diâmetro de cerca de 10^{-9} m; cem mil vezes maior). Se o núcleo de um átomo tivesse o tamanho de uma mosca no centro de um campo de beisebol, então o espaço ocupado pelos elétrons vizinhos deveria ser aproximadamente do tamanho do estádio de beisebol inteiro (Fig. B.10).

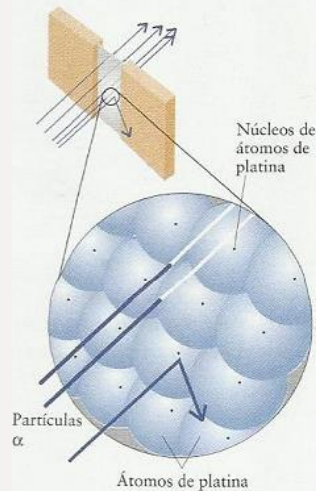


FIGURA B.9 O modelo do átomo de Rutherford explica por que quase todas as partículas α passam sem deflexão pela folha de platina, enquanto algumas poucas – as que atingem o núcleo diretamente – sofrem uma grande deflexão. A maior parte do átomo é feita de espaço vazio, com uma população rarefeita de elétrons. Os núcleos são muito menores em relação a seus átomos do que é mostrado aqui.

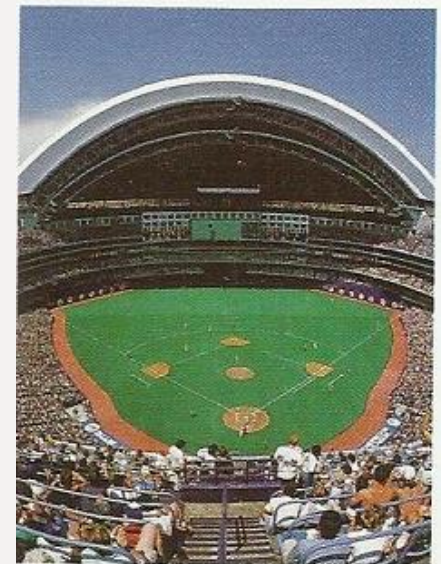
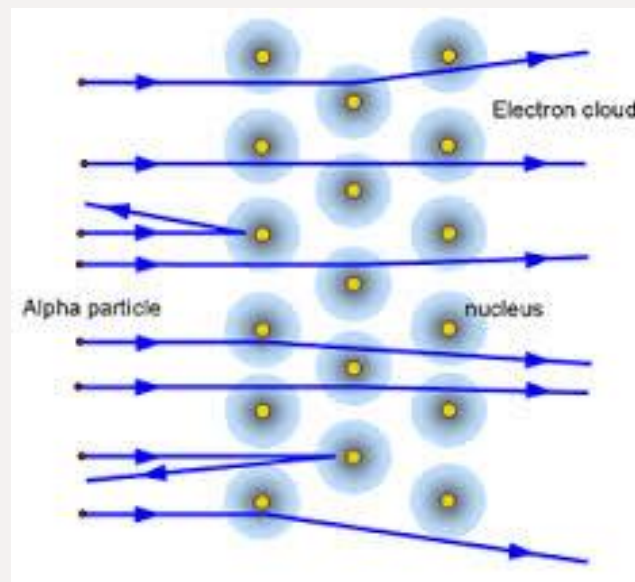
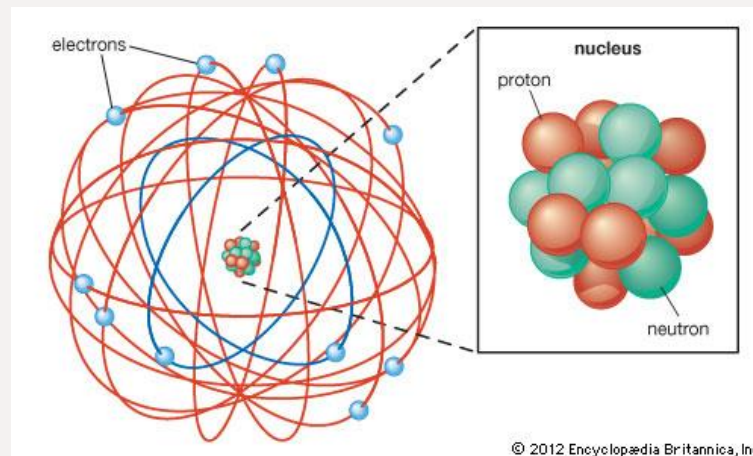


FIGURA B.10 Imagine uma mosca no centro deste estádio: seria esse o tamanho relativo do núcleo de um átomo se ele fosse ampliado até o tamanho do estádio.

B.2 Modelo Nuclear

Podemos, agora, resumir o modelo nuclear do átomo:

- 1 Os átomos são feitos de partículas subatômicas chamadas elétrons, prótons e nêutrons.
- 2 Os prótons e os nêutrons formam um corpo central, minúsculo e denso, chamado núcleo do átomo.
- 3 Os elétrons se distribuem no espaço em torno do núcleo.



B.3 Nêutrons

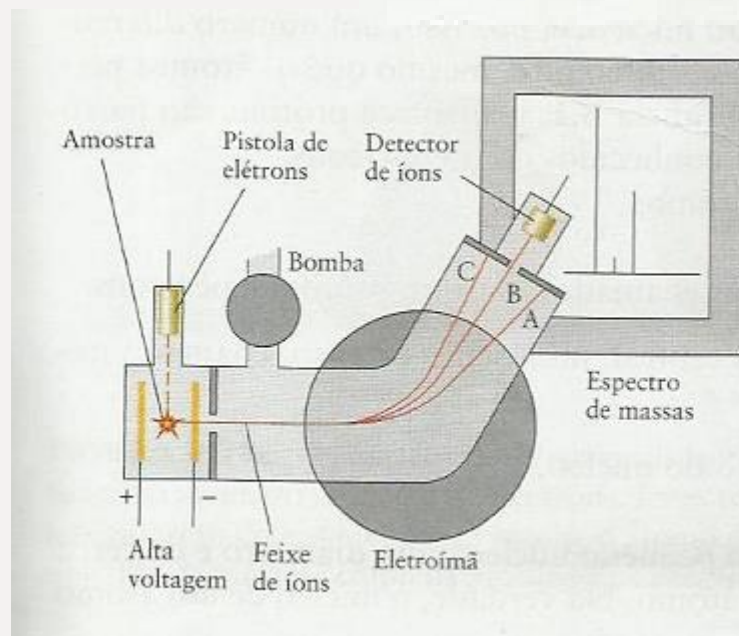


FIGURA B.11 Um espectrômetro de massas é usado para medir as massas dos átomos. À medida que muda a intensidade do campo magnético, o caminho dos íons acelerados movimenta-se de A para C. Quando o caminho está em B, o detector de íons manda um sinal para o registrador. A massa do íon é proporcional à intensidade do campo magnético necessária para mover o feixe até a posição correta.

A espectrometria de massas já foi usada para determinar a massa dos átomos de todos os elementos. Sabemos agora, por exemplo, que a massa de um átomo de hidrogênio é igual a $1,67 \times 10^{-27}$ kg e que a massa de um átomo de carbono é $1,99 \times 10^{-26}$ kg. A massa dos átomos mais pesados não ultrapassa cerca de 5×10^{-25} kg. Se soubermos a massa de cada átomo, poderemos determinar o número de átomos de uma amostra do elemento dividindo a massa da amostra pela massa de um átomo.

B.3 Nêutrons

TABELA B.1 Propriedades das Partículas Subatômicas

Partícula	Símbolo	Carga*	Massa
elétron	e^-	-1	$9,109 \times 10^{-31}$
próton	p	+1	$1,673 \times 10^{-27}$
nêutron	n	0	$1,675 \times 10^{-27}$

*As cargas são dadas como múltiplos da carga de um próton, que vale nas unidades SI $1,602 \times 10^{-19}$ C (veja o Apêndice 1B).

Os nêutrons são partículas subatômicas sem carga que têm aproximadamente a mesma massa dos prótons. Eles estão localizados no núcleo dos átomos.

B.3 Nêutrons

EXEMPLO B.1 Amostra de exercício: Cálculo do número de átomos de uma amostra.

Quantos átomos existem em uma amostra de carbono de massa 10,0 g?

SOLUÇÃO Para calcular o número de átomos de uma amostra, temos de dividir a massa da amostra pela massa de um átomo de carbono, $1,99 \times 10^{-26}$ kg:

$$\text{Número de átomos de C} = \frac{\text{massa da amostra}}{\text{massa de um átomo}} = \frac{1,00 \times 10^{-2} \text{ kg}}{1,99 \times 10^{-26} \text{ kg}} = 5,03 \times 10^{23}$$

Observe que tivemos de converter a massa da amostra para a mesma unidade (quilogramas) usada para a massa do átomo. Observe, também, que mesmo uma pequena amostra de uma substância contém um número muito grande de átomos.

TESTE B.1A A massa de um átomo de ferro é $9,29 \times 10^{-26}$ kg. Quantos átomos de ferro existem em um magneto de ferro cuja massa é 25,0 g?

[Resposta: $2,69 \times 10^{23}$]

TESTE B.1B Um garimpeiro que procurava ouro em um riacho coletou 12,3 g de peças finas de ouro conhecidas como “pó de ouro”. A massa de um átomo de ouro é $3,27 \times 10^{-25}$ kg. Quantos átomos de ouro ele coletou?

B.4 Isótopos

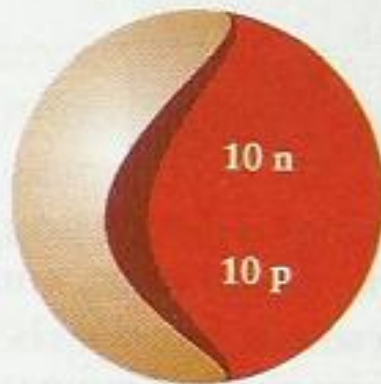
O nome *isótopo* vem das palavras gregas para “o mesmo lugar”.

B.4 Isótopos

O número total de prótons e nêutrons de um núcleo é chamado de **número de massa**, A , do átomo. Um núcleo cujo número de massa é A , é cerca de A vezes mais pesado do que um átomo de hidrogênio, cujo núcleo tem um só próton. Por isso, se sabemos que um átomo é um certo número de vezes mais pesado do que um átomo de hidrogênio, podemos deduzir o número de massa do átomo. Por exemplo, como a espectrometria de massa mostra que existem três tipos de átomos de neônio que são 20, 21 e 22 vezes mais pesados do que um átomo de hidrogênio, podemos inferir que os números de massa dos três tipos de átomos de neônio são 20, 21 e 22. Como, para cada um deles, $Z = 10$, esses átomos de neônio devem conter 10, 11 e 12 nêutrons, respectivamente (Fig. B.13).

B.4 Isótopos

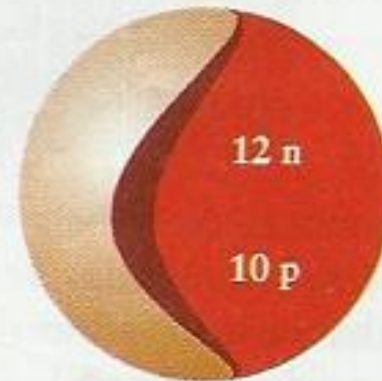
Os isótopos de um elemento têm o mesmo número atômico, mas diferentes números de massa. Seus núcleos têm o mesmo número de prótons, mas número diferente de nêutrons.



Neônio-20 ($^{20}_{10}\text{Ne}$)



Neônio-21 ($^{21}_{10}\text{Ne}$)



Neônio-22 ($^{22}_{10}\text{Ne}$)

B.4 Isótopos

Os átomos que têm o mesmo número atômico (e pertencem ao mesmo elemento) e diferentes números de massa são chamados de isótopos do elemento. Todos os isótopos de um elemento têm exatamente o mesmo número atômico; logo, eles têm o mesmo número de prótons e elétrons. Um isótopo é nomeado escrevendo-se seu número de massa após o nome do elemento, como em neônio-20, neônio-21 e neônio-22. Seu símbolo é obtido escrevendo-se o número de massa como um sobrescrito à esquerda do símbolo químico do elemento, como em ^{20}Ne , ^{21}Ne e ^{22}Ne . Ocasionalmente, coloca-se o número atômico do elemento como um subscrito à esquerda, como na Figura B.13.



B.4 Isótopos

TESTE B.2A Quantos prótons, nêutrons e elétrons existem em um (a) átomo de nitrogênio-15; (b) átomo de ferro-56?

[Resposta: (a) 7,8,7; (b) 26,30,26]

TESTE B.2B Quantos prótons, nêutrons e elétrons existem em um (a) átomo de oxigênio-16; (b) átomo de urânio-236?

B.4 Isótopos

TABELA B.2 Alguns Isótopos de Elementos Comuns

Elemento	Símbolo	Número atômico, Z	Número de massa, A	Abundância (%)
hidrogênio	^1H	1	1	99,985
deutério	^2H ou D	1	2	0,015
trítio	^3H ou T	1	3	—*
carbono-12	^{12}C	6	12	98,90
carbono-13	^{13}C	6	13	1,10
oxigênio-16	^{16}O	8	16	99,76

B.5 Organização dos Elementos

A Tabela Periódica é um arranjo dos elementos que reflete suas relações de família. Os membros do mesmo grupo tipicamente mostram a mesma tendência nas propriedades.

Diagrama da Tabela Periódica com as seguintes características:

- Períodos:** Numerados de 1 a 7 na vertical à esquerda.
- Grupos:** Numerados de 1 a 18 na horizontal no topo.
- Cor dos elementos:**
 - Metais alcalinos (Grupo 1): Azul.
 - Metais alcalino-terrosos (Grupo 2): Azul.
 - Metais de transição (Grupos 3-10): Laranja.
 - Metais pós-transição (Grupos 11-12): Amarelo.
 - Metais não metálicos (Grupos 13-16): Amarelo claro.
 - Halogênios (Grupo 17): Branco.
 - Gases nobres (Grupo 18): Branco.
 - Lantanídeos e Actinídeos: Roxo.
- Regiões específicas:**
 - Metais alcalinos:** Grupo 1.
 - Metais alcalino-terrosos:** Grupo 2.
 - Metais de transição:** Grupos 3 a 10.
 - Lantanídeos:** Série inferior, grupos 3 a 10.
 - Actinídeos:** Série inferior, grupos 3 a 10.
 - Halogênios:** Grupo 17.
 - Gases nobres:** Grupo 18.

B.5 Organização dos Elementos

Um metal conduz eletricidade, tem brilho, é maleável e dúctil.

Um não-metal não conduz eletricidade e não é maleável nem dúctil.

Este diagrama da Tabela Periódica classifica os elementos em três categorias baseadas na cor:

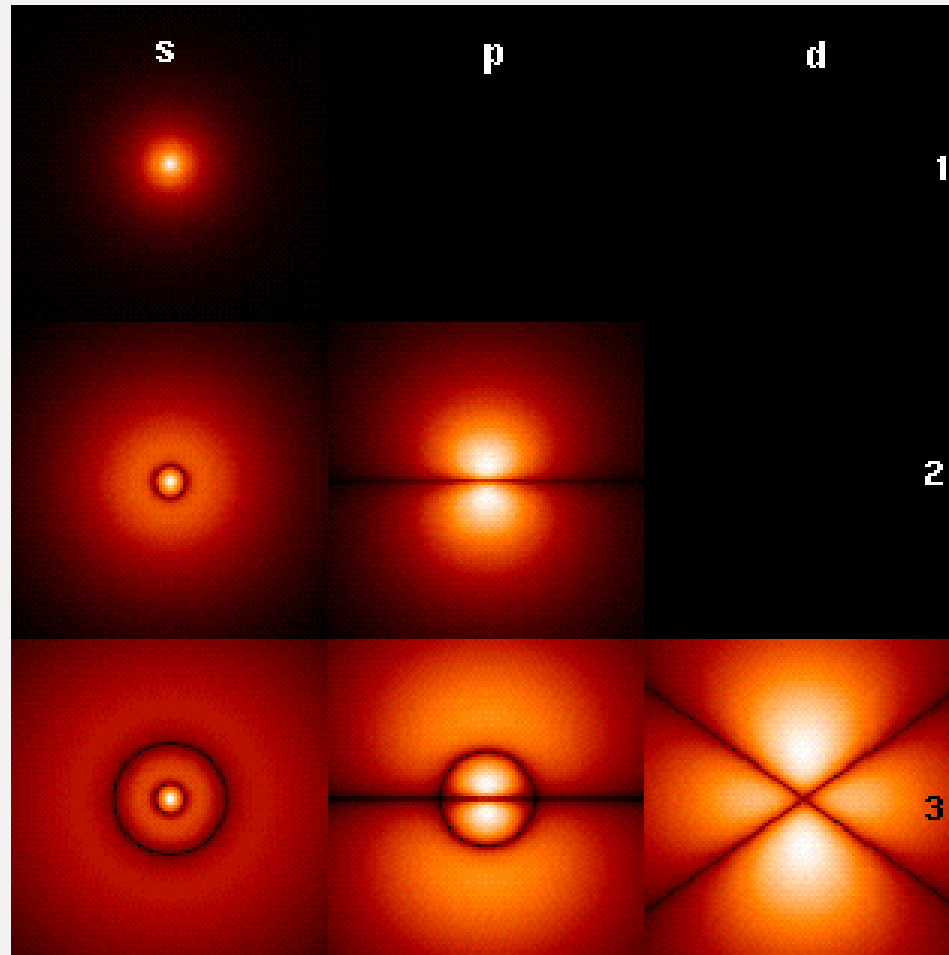
- Metais (Azul):** Ocupam a maioria da tabela, incluindo os metais alcalinos, alcalino-terrosos, a maior parte dos metais de transição e os metais pobres.
- Metalóides (Verde):** Localizados na fronteira entre os metais e os não-metais, incluem Boro (B), Silício (Si), Germânio (Ge), Arsênio (As), Antimônio (Sb) e Telúrio (Te).
- Não-metais (Laranja):** Localizados no canto superior direito da tabela, incluem Hidrogênio (H), Carbono (C), Nitrogênio (N), Oxigênio (O), Flúor (F), Neônio (Ne), Hélio (He), Lítio (Li), Berílio (Be), Boro (B), Cálcio (Ca), Escândio (Sc) até Zinco (Zn), Alumínio (Al), Silício (Si), Fósforo (P), Sulfúrio (S), Cloro (Cl), Argônio (Ar), Potássio (K), Césio (Cs), Prata (Ag), Cádmio (Cd), Mercúrio (Hg), Chumbo (Pb), Bismuto (Bi), Polônio (Po) e Rádio (Ra).



EXERCÍCIOS

- B.1 A massa de um átomo de berílio é $1,50 \times 10^{-26}$ kg. Quantos átomos de berílio existem em 0,210 g de um filme de berílio usado como janela de tubos de raios X?
- B.6 Dê o número de prótons, nêutrons e elétrons de um átomo de (a) deutério, ^2H ; (b) ^{127}I ; (c) nitrogênio-15; (d) ^{209}Bi .
- B.7 Dê o número de prótons, nêutrons e elétrons de um átomo de (a) boro-11; (b) ^{10}B ; (c) fósforo-31; (d) ^{238}U .
- B.8 Identifique o isótopo que tem átomos com (a) 104 nêutrons, 71 prótons e 71 elétrons; (b) 68 nêutrons, 50 prótons e 50 elétrons; (c) 3 nêutrons, 3 prótons e 3 elétrons.
- B.9 Identifique o isótopo que tem átomos com (a) 117 nêutrons, 77 prótons e 77 elétrons; (b) 12 nêutrons, 10 prótons e 10 elétrons; (c) 28 nêutrons, 23 prótons e 23 elétrons.
- B.10 (a) Que características têm em comum os átomos de carbono-12, carbono-13 e carbono-14? (b) Em que eles são diferentes? (Pense nos números e tipos de partículas subatômicas).
- B.11 (a) Que características têm em comum os átomos de argônio-40, potássio-40 e cálcio-40? (b) Em que eles são diferentes? (Pense nos números e tipos de partículas subatômicas).
- B.12 (a) Que características têm em comum os átomos de manganês-55, ferro-56 e níquel-58? (b) Em que eles são diferentes? (Pense nos números de cada tipo de partícula subatômica).

Parte 3 – Números quânticos e distribuição eletrônica



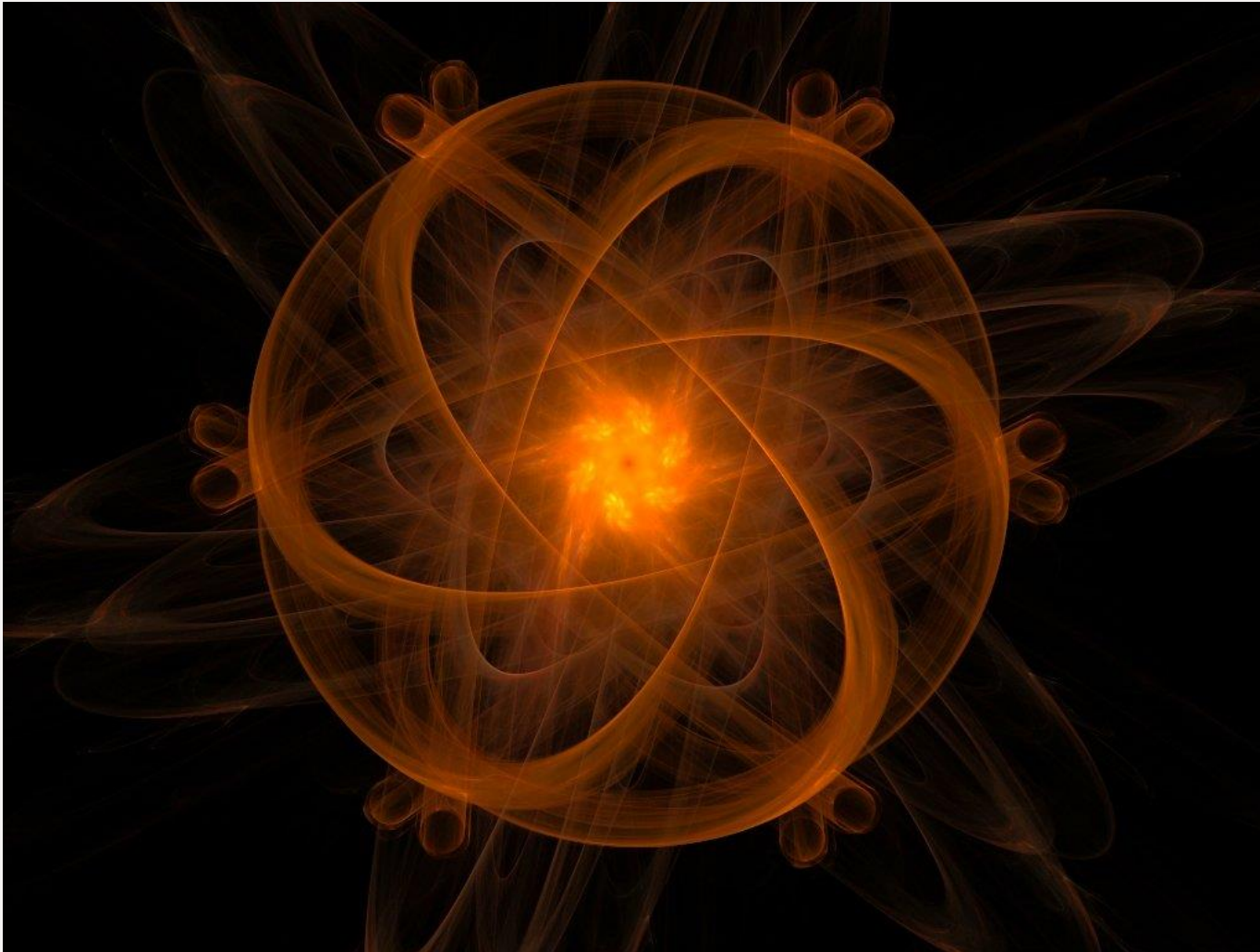
MODELOS ATÔMICOS

- 1.7 Número Quântico Principal
- 1.8 Orbitais Atômicos
- 1.9 Spin do Elétron
- 1.10 Estrutura Eletrônica do Hidrogênio

A ESTRUTURA DOS ÁTOMOS COM MUITOS ELÉTRONS

- 1.11 Energias dos Orbitais
- 1.12 Princípio da Construção
- 1.13 Estrutura Eletrônica e Tabela Periódica

MODELOS ATÔMICOS



MODELO ATÔMICO QUÂNTICO

Equação de Schrödinger



MODELO ATÔMICO QUÂNTICO

Em coordenadas cartesianas

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + U(x, y, z) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

Em coordenadas esferopolares

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} \right] + U(r) \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi)$$

MODELO ATÔMICO QUÂNTICO

A solução da Eq. de Schrödinger exige que as funções de onda sejam autofunções. Para resolver a Eq., é necessário separar em um termo radial (R) e um angular (Y):

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

- r , a distância ao centro do átomo;
- θ (teta), o ângulo relativo à parte positiva do eixo z (o “pólo norte”), que podemos relacionar à “latitude”; e
- ϕ (fi), o ângulo relativo ao eixo z , a “longitude”.

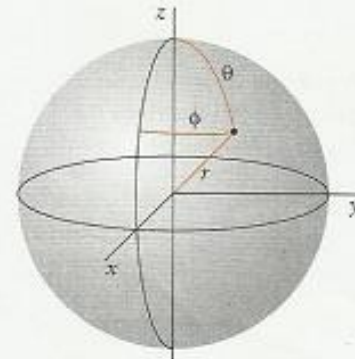


FIGURA 1.24 Coordenadas esféricas polares: r é o raio, θ é a latitude, e ϕ é o ângulo azimutal.

MODELO ATÔMICO QUÂNTICO

A função $R(r)$ é chamada de função de onda radial, e a função $Y(\theta, \phi)$ de função de onda angular. Assim, a função de onda que corresponde ao estado fundamental do átomo de hidrogênio é

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{\overbrace{2e^{-r/a_0}}^{R(r)}}{a_0^{3/2}} \times \frac{\overbrace{1}^{Y(\theta, \phi)}}{2\pi^{1/2}} = \frac{e^{-r/a_0}}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

A quantidade a_0 é chamada de raio de Bohr.

$$a_0 = 52,9 \text{ pm.}$$



Para esta função de onda, a função de onda angular Y é uma constante, $1/2\pi^{1/2}$, independentemente dos ângulos, e a função de onda radial R decai exponencialmente a 0 quando r aumenta.

MODELO ATÔMICO QUÂNTICO

cada função de onda está associada a três números quânticos, n , l e m_l .

n está relacionado ao *tamanho* e à *energia* do orbital

l , a sua *forma*

m_l , a sua *orientação* no espaço.

1.7 Número Quântico Principal

Já encontramos o número quântico principal, n , que especifica a energia do orbital (pela Eq.16). Em um átomo de hidrogênio, todos os orbitais atômicos com o mesmo valor de n têm a mesma energia e diz-se que eles pertencem à mesma camada do átomo.

$$E_n = -\frac{h\mathcal{R}}{n^2} \quad \mathcal{R} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \quad n=1,2,\dots \quad (16a)^*$$

1.7 Número Quântico Principal

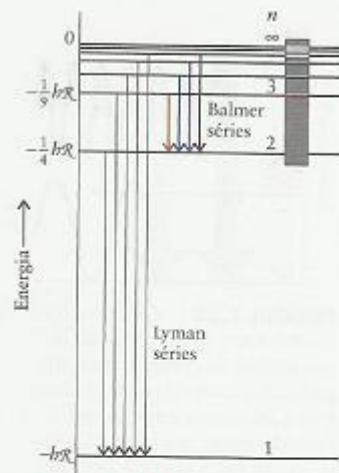


FIGURA 1.22 Níveis de energia permitidos para o átomo de hidrogênio segundo a Eq. 14. Os níveis são nomeados pelo número quântico n , que varia de 1 (para o estado mais baixo) até o infinito (para a separação total entre o próton e o elétron).

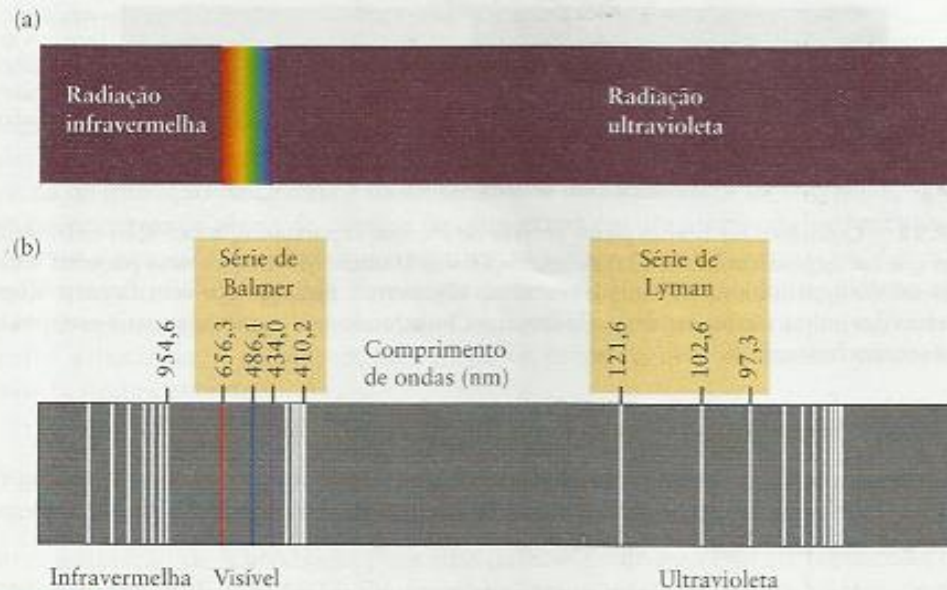
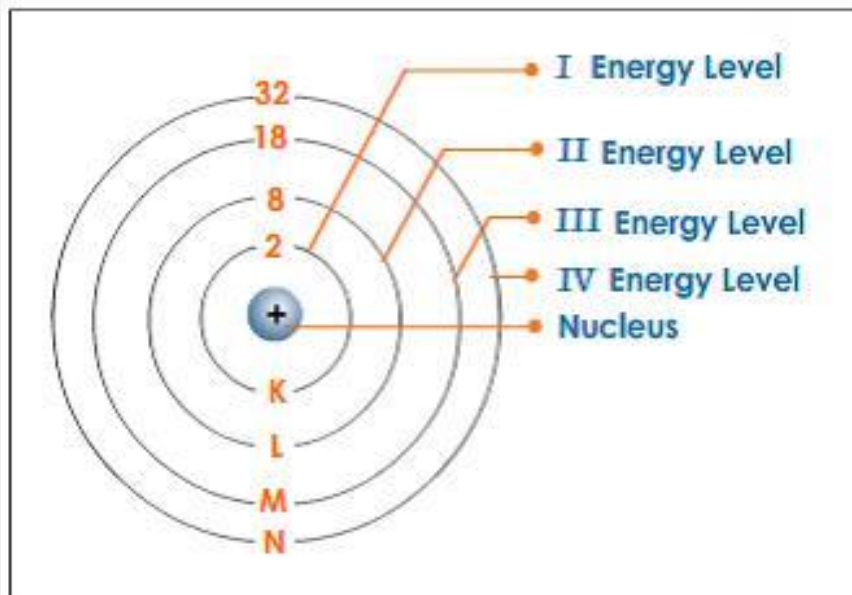


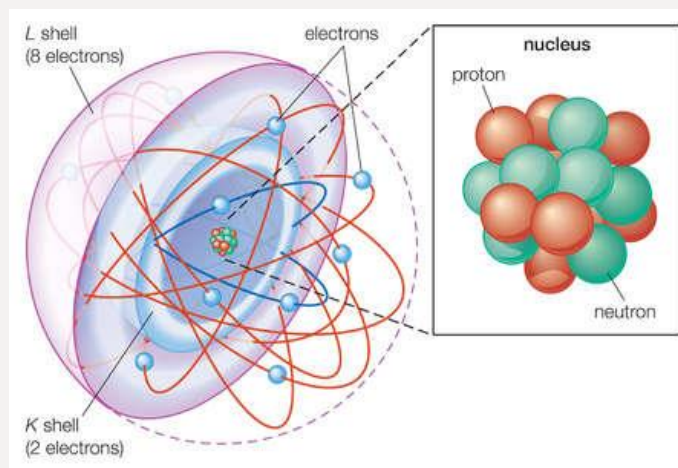
FIGURA 1.19 (a) Espectro visível. (b) Espectro completo do átomo de hidrogênio. As linhas espectrais foram distribuídas em vários grupos, chamados de séries, duas das quais são mostradas com seus nomes.

Os níveis de energia de um átomo de hidrogênio, Eq. 16, são definidos pelo número quântico principal, $n = 1, 2, \dots$, e formam uma série convergente, como mostra a Fig. 1.22.

1.7 Número Quântico Principal



Nível (n)	Camada	Nº máximo de elétrons
1	K	2
2	L	8
3	M	18
4	N	32
5	O	32
6	P	18
7	Q	8



1.8 Orbitais Atômicos

O segundo número quântico necessário para especificar um orbital é l , o número quântico do momento angular do orbital. Esse número quântico pode ter os valores

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

Assim como os valores de n podem ser usados para calcular a energia de um elétron, os valores de l permitem o cálculo de outra propriedade física. Como o nome sugere, l nos dá o momento angular do orbital do elétron, uma medida da velocidade com que o elétron circula em redor do núcleo.

$$\text{Momentoangular do orbital} = \{l(l+1)\}^{1/2} \hbar \quad (18)^*$$

$l=0$



$l=1$



$l=2$



$l=3$



1.8 Orbitais Atômicos

O terceiro número quântico necessário para especificar um orbital é m_l , o **número quântico magnético**, que distingue entre si os orbitais de uma subcamada. Este número quântico pode assumir os valores

$$m_l = l, l - 1, \dots, -l$$

Existem $2l + 1$ valores diferentes de m_l para cada valor de l e, portanto, $2l + 1$ orbitais em uma subcamada de número quântico l .

O número quântico magnético nos dá a *orientação* do movimento orbital do elétron.

Assim, por exemplo, se $m_l = +1$, então o momento angular do orbital do elétron em torno do eixo arbitrário é $+\hbar$, enquanto que se $m_l = -1$, o momento angular do orbital do elétron em torno do mesmo eixo arbitrário é $-\hbar$. Se $m_l = 0$, então o elétron não está circulando em torno do eixo arbitrário selecionado.

1.8 Orbitais Atômicos

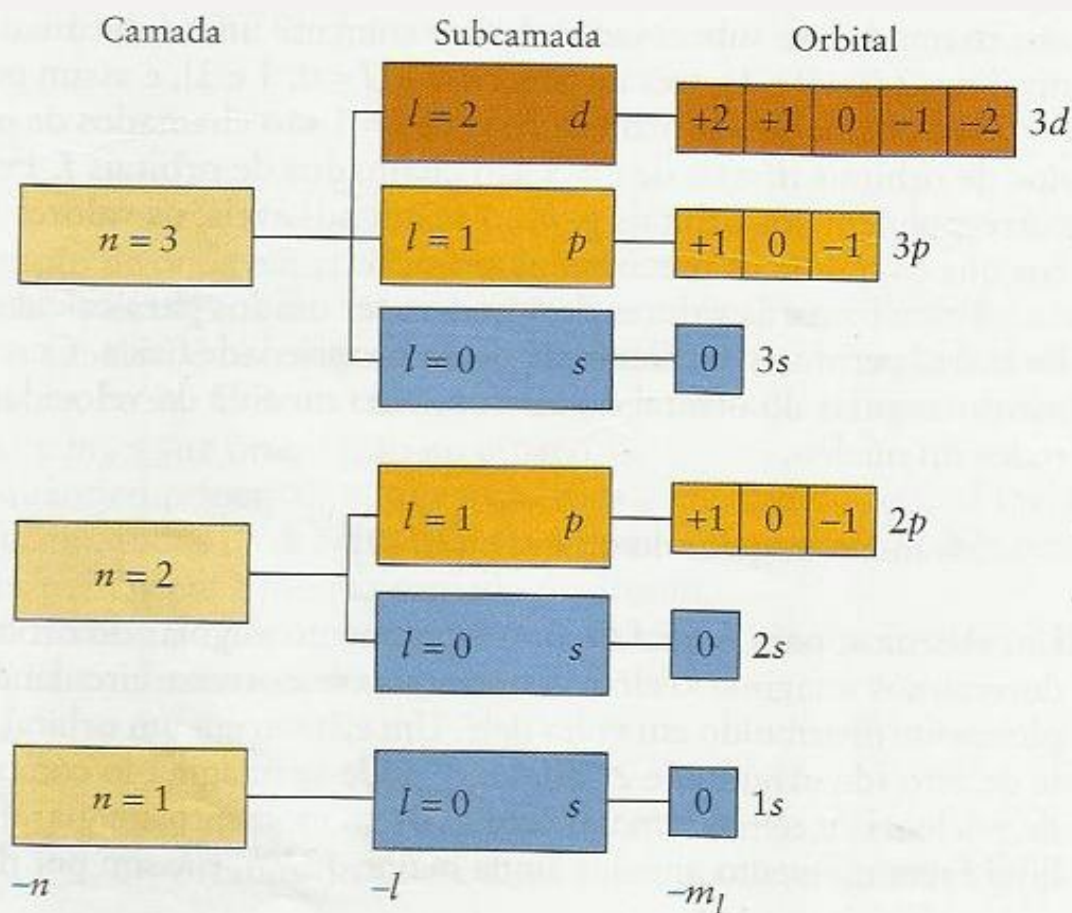


FIGURA 1.25 Sumário do arranjo das camadas, subcamadas e orbitais em um átomo e os números quânticos correspondentes. Note que o número quântico m_l é uma caracterização alternativa dos orbitais individuais: em química, é mais comum usar x , y e z , como será mostrado nas Figs. 1.31 – 1.33.

1.8 Orbitais Atômicos

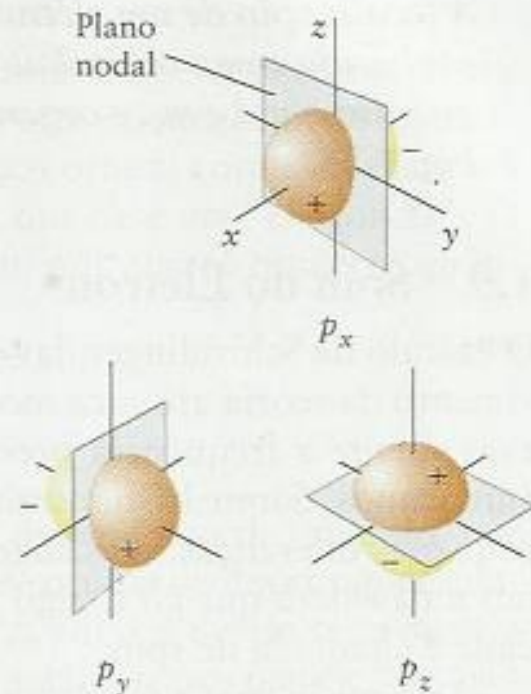


FIGURA 1.31 Existem três orbitais p de mesma energia que ficam ao longo de três eixos perpendiculares. Usaremos amarelo para indicar os orbitais p : amarelo escuro para o lobo positivo e amarelo claro para o lobo negativo.

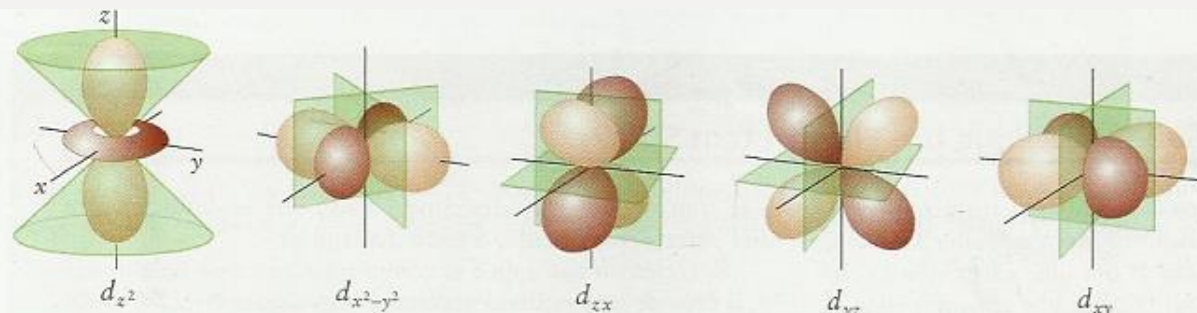


FIGURA 1.32 A superfície limite de um orbital d é mais complicada do que a dos orbitais s e p . Existem cinco orbitais d de uma dada energia. Quatro deles têm quatro lobos e o último é ligeiramente diferente. Em nenhum caso, um elétron que ocupa um orbital d será encontrado no núcleo. Usaremos a cor laranja para indicar os orbitais d : laranja escuro para os lobos positivos e laranja claro para os lobos negativos.

1.8 Orbitais Atômicos

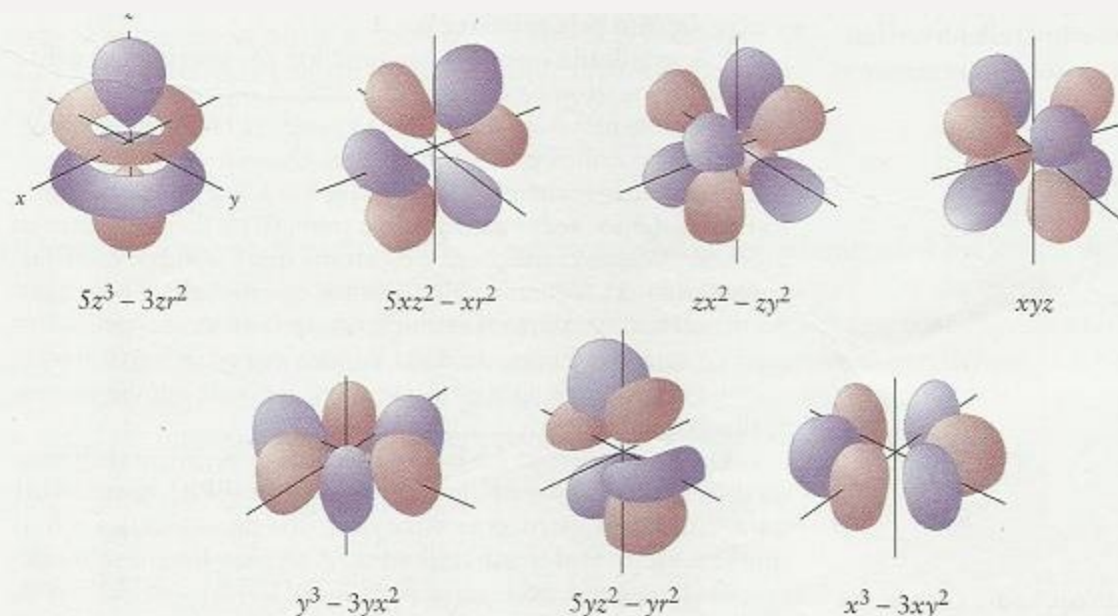


FIGURA 1.33 Os sete orbitais f de uma camada (com $n = 3$) têm aparência muito complexa. Suas formas detalhadas não serão usadas novamente neste texto. Entretanto, sua existência é importante para o entendimento da Tabela Periódica, da presença dos lantanídeos e actinídeos e das propriedades dos últimos elementos do bloco d . A cor mais escura mostra o lobo positivo e a cor mais clara, o lobo negativo.

4f	+3	+2	+1	0	-1	-2	-3
4d	+2	+1	0	-1	-2		
4p	+1	0	-1				
4s	0						16

FIGURA 1.34 Existem 16 orbitais na camada $n = 4$, cada um dos quais pode aceitar dois elétrons (veja a Seção 1.12), no total de 32 elétrons.

1.8 Orbitais Atômicos

A função de distribuição radial, P , está intimamente relacionada à função de onda $\psi = RY$ e é dada por

$$P(r) = r^2 R(r)^2$$

Para os orbitais s , essa expressão equivale a

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi(r)^2$$

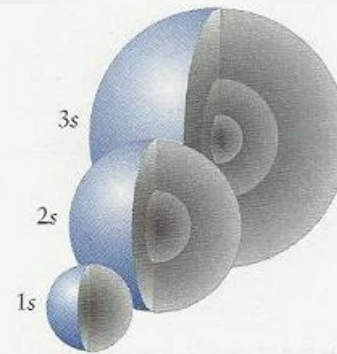


FIGURA 1.28 Os três orbitais s de energia mais baixa. A maneira mais simples de desenhar um orbital atômico é como uma superfície limite, uma superfície dentro da qual existe uma alta probabilidade (tipicamente 90%) de encontrar o elétron. Usaremos azul para os orbitais s , mas a cor é usada somente para auxiliar a identificação. O sombreamento das superfícies limite é uma indicação aproximada da densidade de elétrons em cada ponto.

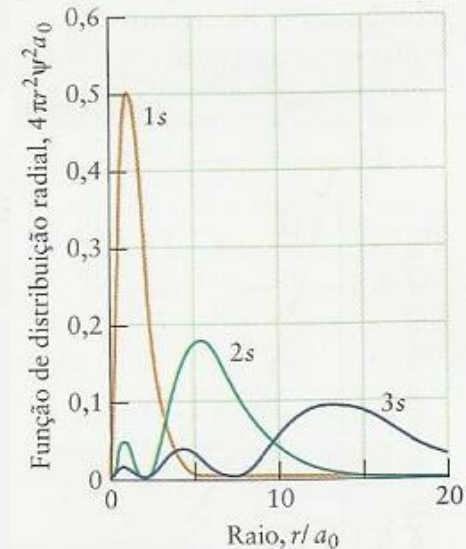
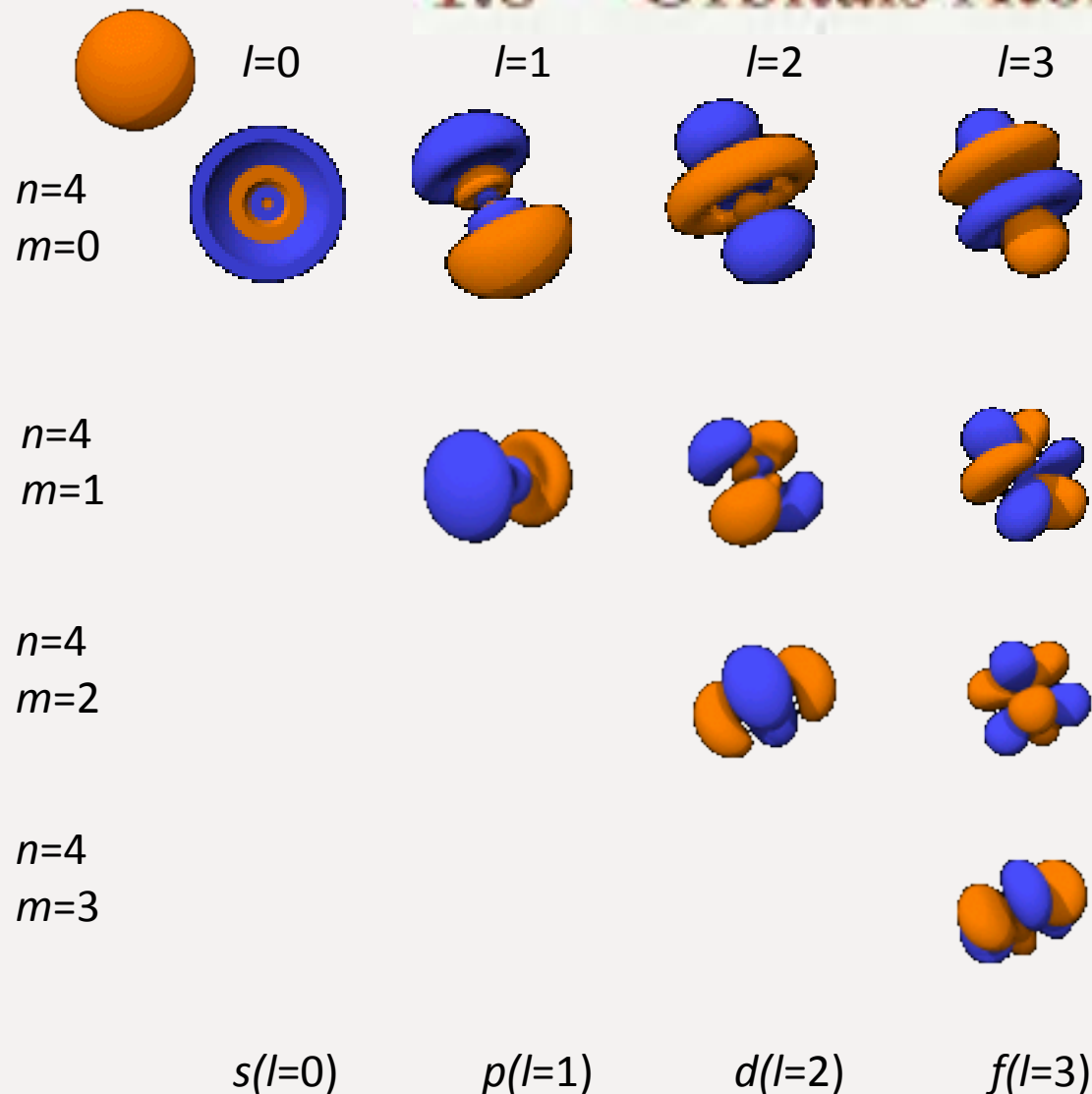


FIGURA 1.27 A função de distribuição radial mostra a densidade de probabilidade de encontrar um elétron em uma dada distância do núcleo, independentemente da direção. O gráfico mostra a função de distribuição radial dos orbitais $1s$, $2s$ e $3s$ do hidrogênio. Observe que o raio mais provável (que corresponde ao maior máximo) aumenta quando n aumenta.

1.8 Orbitais Atômicos



<http://www.orbitals.com/orb/orbtable.htm>

1.8 Orbitais Atômicos

TABELA 1.3 Números Quânticos dos Elétrons nos Átomos

Nomes	Símbolo	Valores	Especifica	Indica
principal	n	$1, 2, \dots$	camadas	tamanho
momento orbital angular*	l	$0, 1, \dots, n - 1$	subcamada $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, \dots	forma
magnético	m_l	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitais de subcamada	orientação
magnético de spin	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	estado de spin	direção do spin

* Também chamado de *número quântico azimutal*.

A localização de um elétron em um átomo é descrita por uma função de onda conhecida como orbital atômico. Os orbitais atômicos são designados pelos números quânticos n , l e m_l , e organizam-se em camadas e subcamadas, como resumido na Fig. 1.25.

1.9 Spin do Elétron

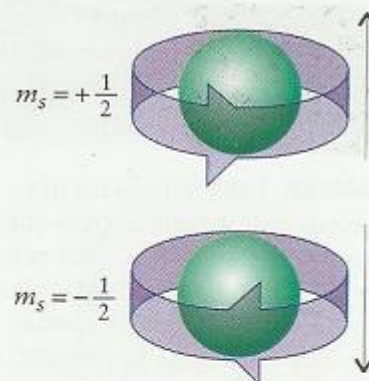


FIGURA 1.35 Os dois estados de spin de um elétron podem ser representados como rotações horária e anti-horária em torno de um eixo que passa pelo elétron. Os dois estados são identificados pelo número quântico m_s e representados pelas setas mostradas à direita.

Um elétron tem a propriedade de spin. O número quântico m_s descreve o spin, que pode ter um de dois valores.

1.10 Estrutura Eletrônica do Hidrogênio

O elétron do átomo de hidrogênio no estado fundamental é descrito por quatro números quânticos cujos valores são:

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m_l = 0 \quad m_s = +\frac{1}{2} \text{ ou } -\frac{1}{2}$$

Ambos os estados de spin são permitidos.

O estado do elétron em um átomo de hidrogênio é definido por quatro números quânticos n , l , m_l e m_s . Quando o valor de n aumenta, o tamanho do átomo aumenta.

TESTE 1.11A Em um determinado estado, os três números quânticos do elétron de um átomo de hidrogênio são $n = 4$, $l = 2$ e $m_l = -1$. Em que tipo de orbital esse elétron está localizado?

[Resposta: 4d]

TESTE 1.11B Em um determinado estado, os três números quânticos do elétron de um átomo de hidrogênio são $n = 3$, $l = 1$ e $m_l = -1$. Em que tipo de orbital esse elétron está localizado?

1.10 Estrutura Eletrônica do Hidrogênio

A ESTRUTURA DOS ÁTOMOS COM MUITOS ELÉTRONS

Os átomos com muitos elétrons são também chamados de “átomos polieletrônicos”.

Todos os átomos neutros, exceto o hidrogênio, têm mais de um elétron. Um átomo neutro de um elemento com número atômico $Z > 1$ têm Z elétrons. Esses átomos são conhecidos como **átomos com muitos elétrons**, ou átomos com mais de um elétron. Aproveitaremos, nas próximas três seções, o que já aprendemos sobre o átomo de hidrogênio para ver como a presença de mais de um elétron afeta a energia dos orbitais atômicos. As estruturas eletrônicas que resultam são a chave das propriedades periódicas dos elementos e da capacidade dos átomos em formar ligações químicas.

1.11 Energias dos Orbitais

O número de elétrons afeta as propriedades do átomo. No átomo de hidrogênio, com um elétron, não ocorre repulsão elétron-elétron. Vimos que todos os orbitais de uma determinada camada têm a mesma energia. Assim, por exemplo, o orbital $2s$ e os três orbitais $2p$ têm a mesma energia. Nos átomos com muitos elétrons, entretanto, o resultado de experimentos espectroscópicos e de cálculos mostra que as repulsões elétron-elétron fazem com que a energia dos orbitais $2p$ seja mais alta do que a de um orbital $2s$. O mesmo ocorre na camada $n = 3$, em que os três orbitais $3p$ ficam mais altos do que o orbital $3s$, e os cinco orbitais $3d$ ficam ainda mais altos (Fig. 1.36). Como podemos explicar essas diferenças de energia?

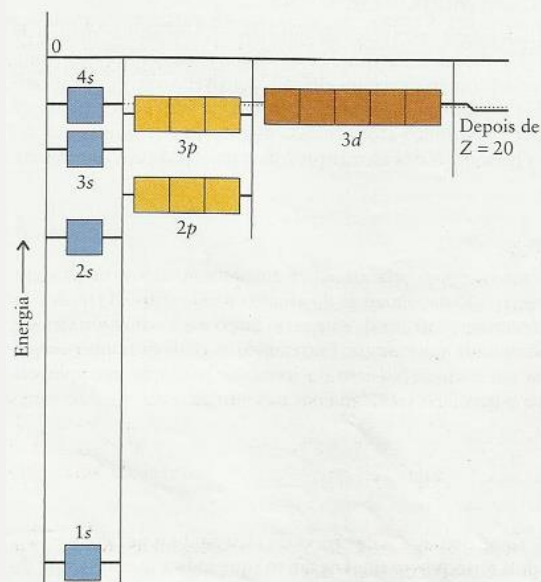


FIGURA 1.36 Energias relativas das camadas, subcamadas e orbitais de átomos de muitos elétrons. Cada uma das caixas pode ser ocupada por dois elétrons, no máximo. Note a mudança na ordem de energias dos orbitais $3d$ e $4s$ após $Z = 20$.

1.11 Energias dos Orbitais

Assim como é atraído pelo núcleo, cada elétron é repelido pelos demais elétrons. Como resultado, ele está menos fortemente ligado ao núcleo do que estaria sem a influência dos outros elétrons. Dizemos que cada elétron está **blindado** pelos demais para a atração total do núcleo. A blindagem reduz efetivamente a atração entre o núcleo e os elétrons. A **carga nuclear efetiva**, $Z_{ef}e$, experimentada pelo elétron é sempre menor do que a carga nuclear real, Ze , porque as repulsões elétron-elétron trabalham contra a atração do núcleo. Uma aproximação *grosseira* da energia de um elétron em um átomo com muitos elétrons é uma versão da Eq. 16b em que o número atômico verdadeiro é substituído pelo número atômico efetivo:

$$E_n = -\frac{Z_{ef}^2 h\mathcal{R}}{n^2} \quad (22)$$

Por causa dos efeitos da penetração e da blindagem, a ordem das energias dos orbitais em uma dada camada em um átomo com muitos elétrons é, tipicamente, $s < p < d < f$.

1.12 Princípio da Construção

Em 1925, o cientista austríaco Wolfgang Pauli descobriu uma regra geral e fundamental sobre os elétrons e orbitais, conhecida hoje como princípio da exclusão de Pauli:

- Dois elétrons, no máximo, podem ocupar um dado orbital. Quando dois elétrons ocupam um orbital, seus spins devem estar emparelhados.
- Dois elétrons em um átomo não podem ter o mesmo conjunto de quatro números quânticos.

O princípio da exclusão determina que cada orbital atômico não pode ser ocupado por mais de dois elétrons.

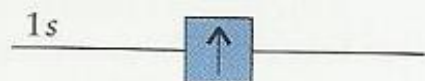
1.12 Princípio da Construção

- 1 Adicione elétrons, um após o outro, aos orbitais, na ordem da Figura 1.39, porém não coloque mais de dois elétrons em cada orbital.
- 2 Se mais de um orbital em uma subcamada estiver disponível, adicione elétrons com spins paralelos aos diferentes orbitais daquela subcamada até completá-la, antes de emparelhar dois elétrons em um dos orbitais.

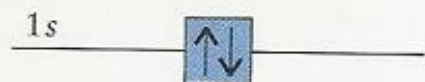
A primeira regra leva em conta o princípio da exclusão de Pauli.

A segunda regra é conhecida como regra de Hund.

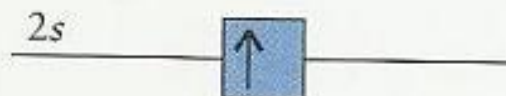
1.12 Princípio da Construção



1 H $1s^1$



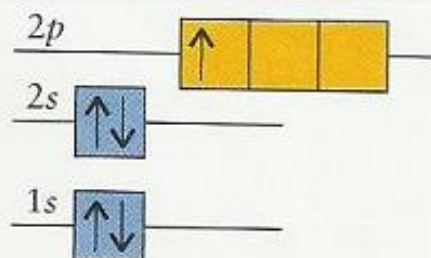
2 He $1s^2$



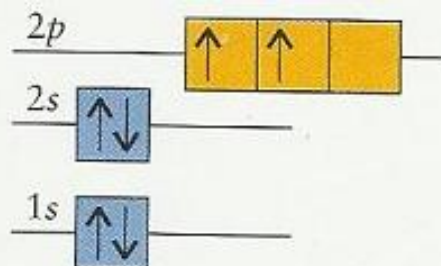
3 Li $1s^2 2s^1$, [He] $2s^1$



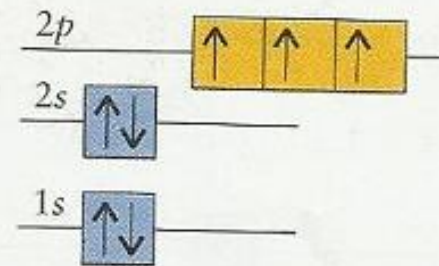
4 Be $1s^2 2s^2$, [He] $2s^2$



5 B $1s^2 2s^2 2p^1$, [He] $2s^2 2p^1$

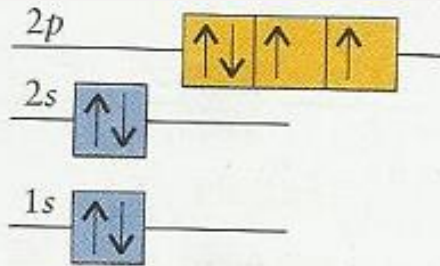


6 C $1s^2 2s^2 2p^2$, [He] $2s^2 2p^2$

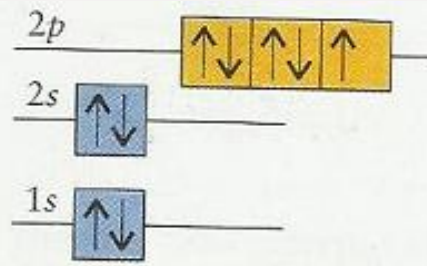


7 N $1s^2 2s^2 2p^3$, [He] $2s^2 2p^3$

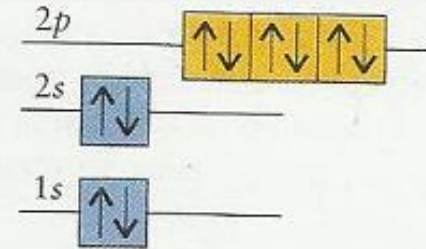
1.12 Princípio da Construção



8 O $1s^2 2s^2 2p^4$, [He] $2s^2 2p^4$



9 F $1s^2 2s^2 2p^5$, [He] $2s^2 2p^5$



10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, [He] $2s^2 2p^6$

1.12 Princípio da Construção

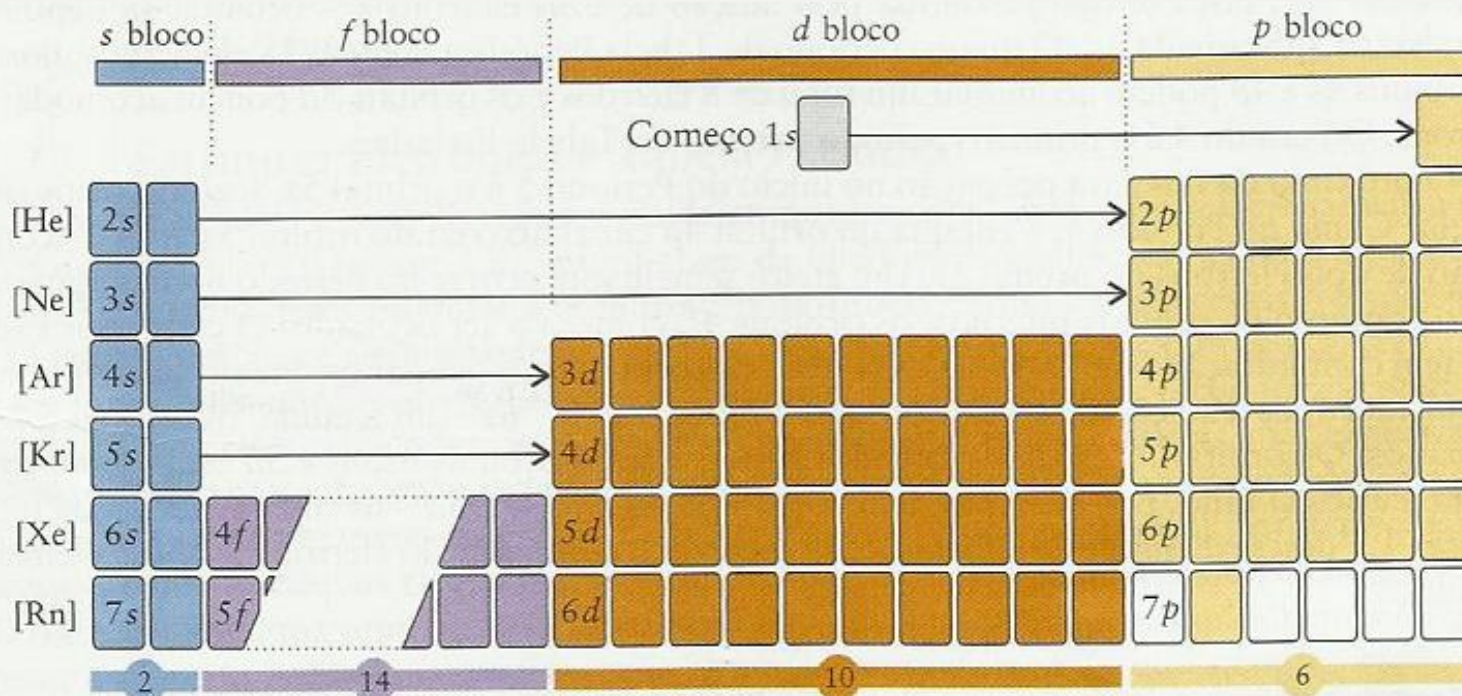


FIGURA 1.39 Ordem na qual os orbitais atômicos são ocupados de acordo com o princípio da construção. Sempre que adicionar um elétron, mova-se um lugar à direita até que todos os elétrons (Z elétrons para um elemento de número atômico Z) tenham sido acomodados. No fim de uma camada, mova-se para o começo da próxima camada, abaixo. Os nomes dos blocos da Tabela Periódica indicam a última subcamada ocupada de acordo com o princípio da construção. O número de elétrons que cada tipo de orbital pode acomodar é dado pelos números localizados no pé da tabela. As cores dos blocos combinam com as cores que estamos usando para os orbitais correspondentes.

1.12 Princípio da Construção

CAIXA DE FERRAMENTAS 1.1

COMO PREDIZER A CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE UM ÁTOMO

CONCEITOS BÁSICOS

Os elétrons ocupam orbitais de modo a reduzir ao mínimo a energia total do átomo, maximizando atrações e minimizando repulsões segundo o princípio da exclusão de Pauli e a regra de Hund.

PROCEDIMENTO

Use as seguintes regras de construção para obter a configuração do estado fundamental de um elemento de número atômico Z :

- 1 Adicione Z elétrons, um após o outro, aos orbitais na ordem mostrada nas Figs. 1.36 e 1.39. Não coloque mais de dois elétrons em um mesmo orbital (Princípio da exclusão de Pauli).
- 2 Se mais de um orbital de uma subcamada estiver disponível, adicione elétrons aos diferentes orbitais antes de completar qualquer um deles.
- 3 Escreva as letras que identificam os orbitais na ordem crescente de energia, com um sobrescrito que informa o número de elétrons daquele orbital. A configuração de uma camada fechada é representada pelo símbolo do gás nobre que tem aquela configuração, como em [He] para $1s^2$.

- 4 Ao desenhar um diagrama de caixas, mostre os elétrons em orbitais diferentes da mesma camada com spins paralelos. Elétrons que partilham um orbital têm spins emparelhados.

Este procedimento dá a configuração eletrônica do estado fundamental de um átomo. Qualquer outro arranjo corresponde a um estado excitado do átomo. Observe que podemos usar a estrutura da Tabela Periódica para prever a configuração eletrônica da maior parte dos elementos se soubermos quais orbitais estão sendo preenchidos em cada bloco da Tabela (veja a Fig. 1.39).

Um procedimento rápido para elementos com um grande número de elétrons é escrever a configuração eletrônica a partir do número do grupo, que dá o número de elétrons de valência no estado fundamental do átomo, e o número do período que dá o valor do número quântico principal da camada de valência. O caroço tem a configuração do gás nobre precedente, juntamente com quaisquer subcamadas d e f preenchidas.

O Exemplo 1.9 mostra como aplicar estas regras (principalmente o procedimento rápido).

1.12 Princípio da Construção

EXEMPLO 1.9

Amostra de exercício: Predição da configuração do estado fundamental de um átomo pesado

Prediga a configuração do estado fundamental de (a) um átomo de vanádio e (b) de um átomo de chumbo.

SOLUÇÃO (a) O vanádio está no Período 4 e, assim, tem o caroço de argônio. Dois elétrons preenchem o orbital $4s$ e, assim, os três últimos elétrons entram em dois orbitais $3d$ diferentes. A configuração eletrônica é $[\text{Ar}]3d^34s^2$. (b) O chumbo pertence ao Grupo 14/IV e ao Período 6. Por isso, ele tem 4 elétrons na camada de valência, dois no orbital $6s$ e dois em orbitais $6p$ diferentes. O átomo tem as subcamadas $5d$ e $4f$ completas e o gás nobre precedente é o xenônio. A configuração eletrônica do chumbo, portanto, é $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$.

TESTE 1.13A Escreva a configuração de um átomo de bismuto no estado fundamental.

[Resposta: $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$]

TESTE 1.13B Escreva a configuração de um átomo de arsênio no estado fundamental.

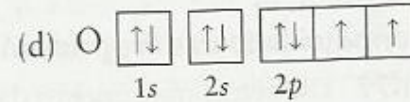
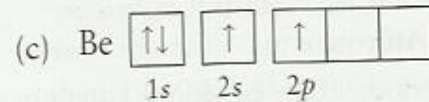
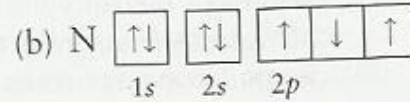
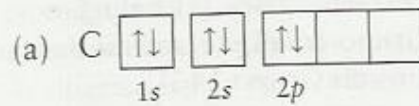
EXERCÍCIOS

- 1.41 Quantos orbitais existem em subcamadas com l igual a (a) 0, (b) 2, (c) 1, (d) 3?
- 1.42 (a) Quantas *subcamadas* existem para o número quântico principal $n = 5$? (b) Identifique as subcamadas na forma $5s$, etc.. (c) Quantos *orbitais* existem na camada com $n = 5$?
- 1.43 (a) Quantos valores do número quântico l são possíveis quando $n = 7$? (b) Quantos valores de m_l são permitidos para um elétron na subcamada $6d$? (c) Quantos valores de m_l são permitidos para um elétron em uma subcamada $3p$? (d) Quantas subcamadas existem na camada com $n = 4$?
- 1.44 (a) Quantos valores do número quântico l são possíveis quando $n = 6$? (b) Quantos valores de m_l são permitidos para um elétron na subcamada $5f$? (c) Quantos valores de m_l são permitidos para um elétron em uma subcamada $2s$? (d) Quantas subcamadas existem na camada com $n = 3$?
- 1.49 Quantos elétrons, no total, podem ocupar (a) os orbitais $4p$; (b) os orbitais $3d$; (c) o orbital $1s$; (d) os orbitais $4f$?
- 1.50 Quantos elétrons podem ocupar uma subcamada com l igual a (a) 0, (b) 1, (c) 2, (d) 3?
- 1.51 Escreva a notação da subcamada ($3d$, por exemplo) e o número de orbitais que têm os seguintes números quânticos: (a) $n = 5, l = 2$; (b) $n = 1, l = 0$; (c) $n = 6, l = 3$; (d) $n = 2, l = 1$.
- 1.52 Escreva a notação da subcamada ($3d$, por exemplo) e o número de elétrons que podem ter os seguintes números quânticos, se todos os orbitais da subcamada estão preenchidos: (a) $n = 3, l = 2$; (b) $n = 5, l = 0$; (c) $n = 7, l = 1$; (d) $n = 4, l = 3$.
- 1.53 Quantos elétrons podem ter os seguintes números quânticos em um átomo? (a) $n = 2, l = 1$; (b) $n = 4, l = 2, m_l = -2$; (c) $n = 2$; (d) $n = 3, l = 2, m_l = +1$.
- 1.54 Quantos elétrons podem ter os seguintes números quânticos em um átomo? (a) $n = 3, l = 1$; (b) $n = 5, l = 3, m_l = -1$; (c) $n = 2, l = 1, m_l = 0$; (d) $n = 7$.

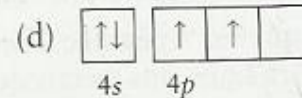
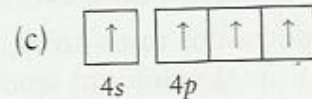
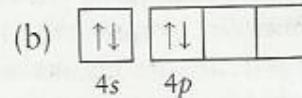
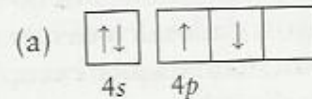
EXERCÍCIOS

Estruturas dos Átomos com muitos Elétrons

1.61 Determine se as seguintes configurações eletrônicas representam o estado fundamental ou um estado excitado do átomo em questão.



1.62 As seguintes *configurações de camada de valência* são possíveis para um átomo neutro. Que elemento e que configuração correspondem ao estado fundamental?



1.63 Dentre os conjuntos de quatro números quânticos $[n, l, m_l, m_s]$, identifique os que são proibidos para um elétron em um átomo e explique por quê: (a) $\{4, 2, -1, +1/2\}$; (b) $\{5, 0, -1, +1/2\}$; (c) $\{4, 4, -1, +1/2\}$.

EXERCÍCIOS

Estruturas dos Átomos com muitos Elétrons

- 1.64 Dentre os conjuntos de quatro números quânticos $[n, l, m_l, m_s]$, identifique os que são proibidos para um elétron em um átomo e explique por quê: (a) $\{2, 2, -1, +1/2\}$; (b) $\{6, 0, 0, +1/2\}$; (c) $\{5, 4, +5, +1/2\}$.
- 1.65 Qual é a configuração do estado fundamental esperada para cada um dos seguintes elementos: (a) prata; (b) berílio; (c) antimônio; (d) gálio; (e) tungstênio; (f) iodo?
- 1.66 Qual é a configuração do estado fundamental esperada para cada um dos seguintes elementos: (a) enxofre; (b) célio; (c) polônio; (d) paládio; (e) rênio; (f) vanádio?
- 1.67 Que elementos têm as seguintes configurações eletrônicas de estado fundamental: (a) $[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^4$; (b) $[\text{Ar}]3d^34s^2$; (c) $[\text{He}]2s^22p^2$; (d) $[\text{Rn}]7s^26d^2$?
- 1.68 Que elementos têm as seguintes configurações eletrônicas de estado fundamental: (a) $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^1$; (b) $[\text{Ne}]3s^1$; (c) $[\text{Kr}]5s^2$; (d) $[\text{Xe}]4f^76s^2$?
- 1.69 Para cada um dos seguintes átomos no estado fundamental, prediga o tipo de orbital (por exemplo, $1s, 2p, 3d, 4f$, etc.) do qual um elétron poderia ser removido para torná-lo um íon $+1$: (a) Ge; (b) Mn; (c) Ba; (d) Au.
- 1.70 Para cada um dos seguintes átomos no estado fundamental, prediga o tipo de orbital (por exemplo, $1s, 2p, 3d, 4f$, etc.) do qual um elétron poderia ser removido para torná-lo um íon $+1$: (a) Zn; (b) Cl; (c) Al; (d) Cu.
- 1.71 Prediga o número de elétrons de valência de cada um dos seguintes átomos: (a) N; (b) Ag; (c) Nb; (d) W.
- 1.72 Prediga o número de elétrons de valência de cada um dos seguintes átomos: (a) Bi; (b) Ba; (c) Mn; (d) Zn.
- 1.73 Quantos elétrons *desemparelhados* são preditos para a configuração do estado fundamental de cada um dos seguintes átomos: (a) Bi; (b) Si; (c) Ta; (d) Ni.