

# RESUMO TEÓRICO

## INTRODUÇÃO AO ESTUDOS DA QUÍMICA

1. Introdução ao estudo da Química
2. Conceitos Fundamentais
3. Substância Pura, Mistura e Alotropia
4. Mudança de Estado Físico
5. Densidade x Massa Específica
6. Separação de Misturas

## MATÉRIA E ENERGIA

**Matéria:** Tudo que possui massa e ocupa lugar no espaço.

**Energia:** É a capacidade de realizar trabalho. A energia é o ente capaz de transformar a matéria.

**Matéria e energia** não podem ser destruídas, podem somente ser transformadas. Matéria e energia são interconvertíveis.

Obs:

**Corpo:** porção limitada de matéria.

**Objeto:** porção limitada de matéria que possui uma utilização definida.

## ESTADOS FÍSICOS DA MATÉRIA

A matéria pode se apresentar em cinco estados físicos: sólido, líquido, gasoso, plasma e condensado de Bose-Einstein. Três deles são estados comuns da matéria.

**Sólido:** forma rígida da matéria.

**Líquido:** forma fluida da matéria que tem superfície bem definida e que toma a forma do recipiente que a contém.

**Gás:** forma fluida da matéria que ocupa todo o recipiente que a contém.

Obs:

**Vapor** é utilizado para indicar a forma gasosa de uma substância que normalmente é sólida ou líquida.

Existem dois tipos de sólidos: Cristalinos (estrutura organizada) Ex: NaCl e amorfos (estrutura desorganizada) Ex: vidro.

## MUDANÇAS DE ESTADOS FÍSICOS

A matéria pode passar de um estado físico para outro mediante absorção (endo) ou liberação (exo) de energia.

S -> L (endo) - Fusão

L -> G (endo) - Vaporização

G -> L(exo) - Condensação

L -> S (exo) - Solidificação

S -> G(endo) - Sublimação

G ->S(exo) - Ressublimação

Obs:

- I. De acordo com a velocidade da mudança de estado físico a vaporização pode ser classificada como: evaporação (lento), ebulição (rápido), calefação (instantâneo).
- II. A passagem do gasoso para o líquido com aumento de pressão é denominada liquefação.
- III. Com um resfriamento lento sem agitação, um líquido puro isento de partículas pode ser resfriado a baixo do seu ponto de congelamento sem que ocorra solidificação (líquido super resfriado). Esse sistema é instável.
- IV. Os principais exemplos de sublimação são: naftalina, iodo, gelo seco e cânfora.

As mudanças de estado físico de uma substância podem ser representadas em gráficos. Existem quatro tipos diferentes de gráficos.

**Substância pura:** Possui PF e PE constantes. Não ocorre variação de temperatura durante a mudança de estado físico. Ex: água destilada

**Mistura comum:** Durante a mudança de estado físico a temperatura sofre variação. O PF e o PE não são constantes. Ex: água+ NaCl

**Mistura eutética:** Possui somente o PF constante. Ex: Sn (62%) + Pb (38%)

**Mistura azeotrópica:** Possui somente o PE constante. Ex: água (4%) + álcool (96%)

Obs:

- I. Substância é uma forma simples e pura da matéria. Uma substância possui aspecto uniforme e um conjunto de propriedades constantes. Uma substância pode ser simples (Ex: H<sub>2</sub>) ou composta (Ex: H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>).
- II. O PF e o PE dependem da pressão externa.
- III. O PE é diretamente proporcional à pressão externa (todas as substâncias).
- IV. O PF da água é inversamente proporcional à pressão externa.
- V. Durante a mudança de estado físico de uma substância a temperatura não se altera por que a energia fornecida é utilizada para aumentar a energia potencial das partículas e não a energia cinética.

## PROPRIEDADES DA MATÉRIA

As propriedades da matéria podem ser divididas em três grupos:

- I. **Propriedades gerais:** São comuns a todo e qualquer tipo de matéria. Ex: Impenetrabilidade, compressibilidade, divisibilidade, massa, extensão, inércia, indestrutibilidade etc.
- II. **Propriedades específicas:** São particulares a cada substância. As específicas se dividem em:
  - **Organolépticas:** são aquelas perceptíveis aos nossos sentidos. Ex: cor, odor, brilho, sabor, grau de compactação, som.
  - **Físicas:** são aquelas passíveis de serem medidas. Ex: ponto de fusão (PF), ponto de ebulição (PE), densidade, solubilidade, calor específico etc.
  - **Químicas:** referem-se à habilidade de uma substância de transforma-se em outra substância.
- III. **Propriedades funcionais:** são apresentadas por grupos de substância. Ex: acidez, basicidade etc.

## MISTURAS

Mistura é a reunião de duas ou mais substâncias. Existem dois tipos de misturas:

**Homogêneas:** apresentam uma única fase. Toda mistura homogênea é uma solução. Ex:

Líquida: água+álcool, NaCl (aq), água + gás.

Sólida: ouro 18, latão, bronze etc.

Gasosa: Ar atmosférico.

**Heterogêneas:** apresentam duas ou mais fases. Ex: NaCl (aq) + areia + óleo (3 fases e 4 componentes)

Obs:

- I. Toda mistura gasosa é homogênea.
- II. Uma mistura homogênea possui uma fase até em nível microscópico.
- III. Algumas misturas parecem homogêneas a olho nu, mas são heterogêneas em nível microscópico. Ex: leite, sangue, gelatina. Esse tipo de mistura é denominado de colóide.
- IV. O granito é uma mistura heterogênea de três componentes (quartzo, feldspato e mica) e três fases.
- V. Sistema = parte do universo sob observação.
- VI. Um sistema homogêneo pode ser uma mistura homogênea (Ex: água + álcool) ou uma substância pura (Ex: água destilada).
- VII. Um sistema heterogêneo pode ser uma mistura heterogênea (Ex: água + óleo) ou uma substância pura em vários estados físicos (Ex: água +gelo).

### DENSIDADE OU MASSA ESPECÍFICA

A densidade é uma propriedade que caracteriza as substâncias puras, sendo definida como a massa da unidade de volume de uma substância.

$$d = m/v$$

As unidades usuais são g/cm<sup>3</sup> (ou g/mL). Ex:

d água (4 °C) = 1 g/ mL

d mercúrio (20°C) =13,55 g / mL

Obs:

- I. A densidade depende da temperatura.
- II. Densidade e volume são inversamente proporcionais.
- III. A densidade também pode ser calculada para uma mistura.
- IV. Geralmente d gás < d líquido < d sólido.
- V. A água possui um comportamento anômalo em relação à densidade. A densidade da água líquida é maior que a da água sólida (0,92g/mL).

### FENÔMENOS

Fenômeno é qualquer alteração que ocorre em um sistema. Um fenômeno pode ser físico ou químico.

**Físico:** não altera a matéria

**Químico:** altera a matéria.

Obs:

- I. Fenômeno químico é sinônimo de reação química.
- II. Os fenômenos podem ser reversíveis ou irreversíveis.

### ALOTROPIA

Fenômeno de ocorrência de substâncias simples diferentes formadas pelo mesmo elemento químico. Os principais exemplos de alotropia são dos elementos: oxigênio, fósforo, enxofre e carbono.

Oxigênio: O<sub>2</sub> (gás oxigênio) e O<sub>3</sub> (gás ozônio)

Fósforo: P<sub>4</sub> (branco) e P<sub>n</sub> (vermelho)

Enxofre: S<sub>8</sub> (rômbico) e S<sub>8</sub> (monoclínico)

Carbono: C<sub>n</sub> (grafite), C<sub>n</sub> (diamante) e C<sub>60</sub> (Buckminsterfullerene)

OBS:

- I. Os alótropos possuem propriedades físicas e químicas (aspectos energéticos e cinéticos) diferentes.
- II. O C<sub>60</sub> é conhecido informalmente como “futeboleno” ou “buckball”. O C<sub>60</sub> pertence à classe dos fulerenos. O buckball possui estrutura esférica formada por 20 hexágonos e 12 pentágonos.
- III. A hibridização do carbono na grafite e no buckball é sp<sup>2</sup> e no diamante sp<sup>3</sup>.
- IV. Quando o índice de atomicidade dos alótropos é igual o que muda é o arranjo cristalino.
- V. A grafite possui estrutura bidimensional, diamante e buckball tridimensional.
- VI. Grafite e buckball são macios, condutores e possuem aromaticidade (resonância).
- VII. Atualmente o homem conhece outras formas alotrópicas não cristalinas (amorfos) do carbono. Ex: Nanotubos de carbono.

## SEPARAÇÃO DE MISTURAS

**Análise imediata:** conjunto de métodos físicos e mecânicos utilizados para separar os componentes de uma mistura.

### MISTURAS HETEROGÊNEAS

#### 1) Catação (S+S)

Ex: reciclagem de lixo; feijão + pedra

#### 2) Peneiração ou tamisação (S+L; S+S)

Ex: areia+brita ; suco de laranja + sementes

#### 3) Separação magnética (S+S)

Ex: limalha de ferro + areia ; reciclagem de lixo

#### 4) Ventilação (S+S)

Utiliza uma corrente de ar para separar sólidos com densidades diferentes. A corrente de ar arrasta o sólido menos denso separando-o do mais denso.

Ex: café +folhas ; arroz + casca

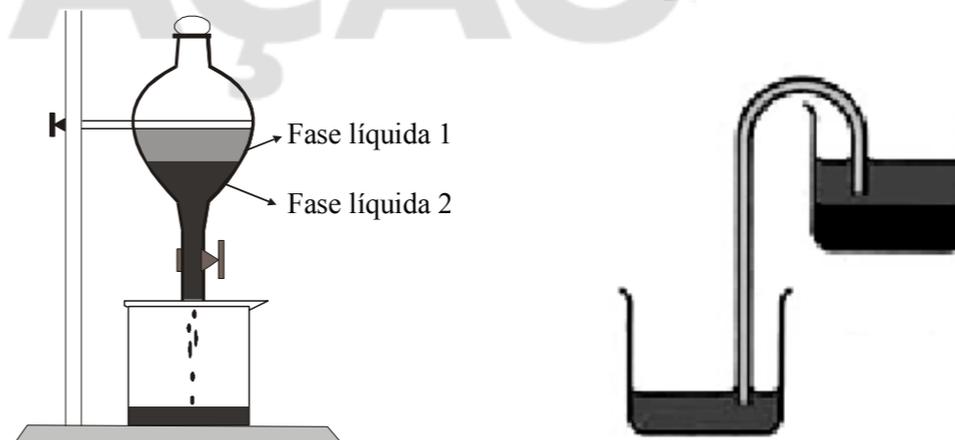
#### 5) Levigação (S+S)

Utiliza uma corrente de água para separar mistura de sólidos com densidades diferentes. A corrente de água arrasta o sólido menos denso separando-o do mais denso.

Ex: ouro +areia

#### 6) Decantação (S+L; S+G; L+L)

Ex: água +óleo ;água+barro ;ar + poeira

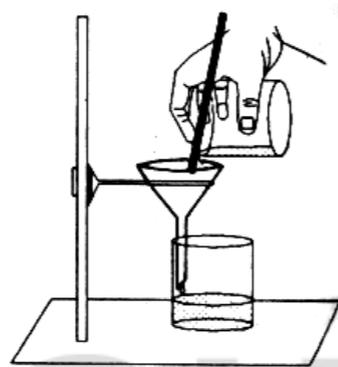


- A separação de líquidos é realizada em um funil de separação(decantação ou bromo).
- Na ausência de um funil pode ser feita uma sifonação.A decantação de sólidos pode ser acelerada utilizando uma centrífuga(centrifugação).

- A decantação pode ser acelerada por floculação, que é uma aglutinação e subsequente precipitação de partículas finamente divididas e dispersas num líquido. Um composto químico comumente utilizado como agente aglutinante é o  $\text{Al}(\text{OH})_3$ .

### 7) Filtração (S+L; S+G)

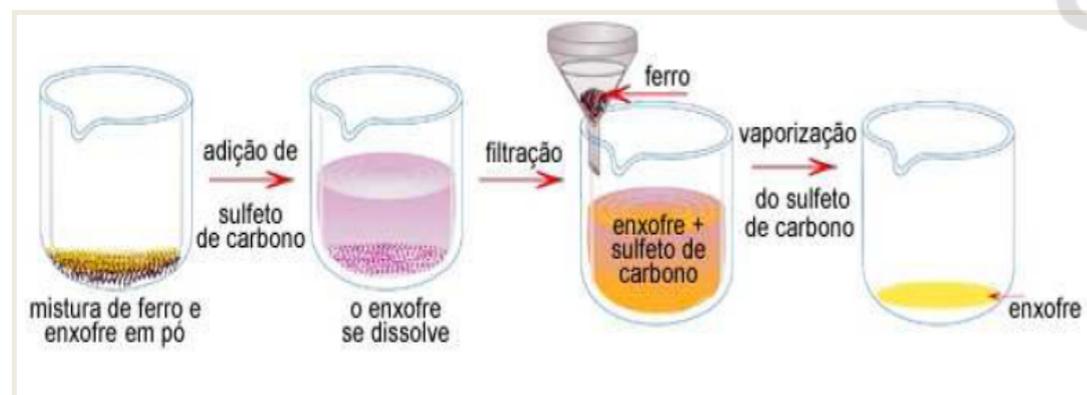
Ex: água + areia ; preparação de café ; ar + poeira (aspirador de pó, filtro de ar)



- Existe dois tipos de filtração : comum e a vácuo.

### 8) Dissolução fracionada (S+S; L+L)

Ex: areia + sal ; álcool + gasolina



- O princípio do método é usar um solvente que dissolva somente uma parte dos componentes da mistura.
- A dissolução fracionada pode ser utilizada pra extrair componentes de misturas sólidas ou líquidas.

Ex: água quente extraíndo componentes do pó de café ou de um saquinho de chá ; extração do álcool da gasolina utilizando água.

Obs:

- A dissolução fracionada (extração) é um processo de dissolução seletiva de substâncias que é empregado na preparação de café, chá e na extração de aromas e corantes vegetais.

### 9) Flutuação ou sedimentação fracionada (S+S)

Método baseado na diferença de densidade dos componentes da mistura.

Ex: serragem + areia ; reciclagem de plásticos

### 10) Flotação

Nesse método de separação a mistura é submetida a uma forte corrente de ar, que provoca a formação de uma espuma que reúne uma parte da mistura na superfície. A flotação é muito utilizada na separação de minérios pulverizados da respectiva ganga (impurezas) e no tratamento de esgoto. Normalmente, a flotação é facilitada pela adição de uma substância denominada agente de flotação, que é escolhida previamente, dependendo da mistura cujos componentes devem ser separados.



## • Tratamento de esgoto

O tratamento de esgoto domiciliar possui 4 níveis básicos: nível preliminar, tratamento primário, tratamento secundário e tratamento terciário ou pós-tratamento.

- **Nível preliminar:** são utilizadas grades, peneiras ou caixas de areia para reter os resíduos maiores.
- **Tratamento primário:** são sedimentados (decantação) os sólidos em suspensão que vão se acumulando no fundo do decantador formando o lodo primário que depois é retirado para dar continuidade ao processo.
- **Tratamento secundário ou aeróbico:** os microorganismos aeróbios irão se alimentar da matéria orgânica convertendo-a em gás carbônico e água.
- **Tratamento terciário:** também chamado de fase de pós-tratamento, são removidos os poluentes específicos como os micronutrientes (nitrogênio, fósforo) e patogênicos (bactérias, fungos). Isso quando se deseja que o efluente tenha qualidade superior, ou quando o tratamento não atingiu a qualidade desejada.

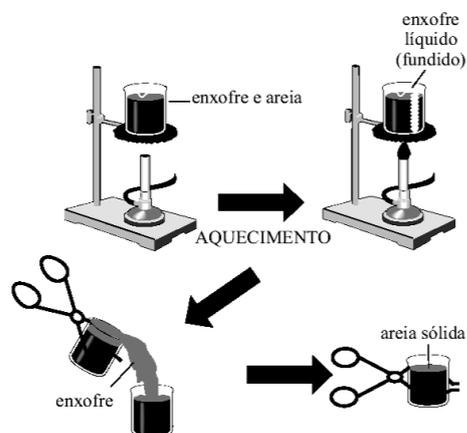
## 11) Sublimação (S+S)

Ex: areia+iodo ; areia +naftalina

Um dos componentes da mistura deve ter a capacidade de sublimar quando aquecido.

## 12) Fusão fracionada (S+S)

Ex: areia+enxofre



## 13) Cristalização fracionada (S+S)

Método baseado na diferença do coeficiente de solubilidade dos componentes da mistura. A mistura é dissolvida em um solvente adequado que posteriormente é evaporado ou resfriado. O componente menos solúvel cristaliza-se antes dos outros, separando-se da mistura.

Ex: açúcar +sal

## MISTURAS HOMOGÊNEAS

### 1) Evaporação (S+L)

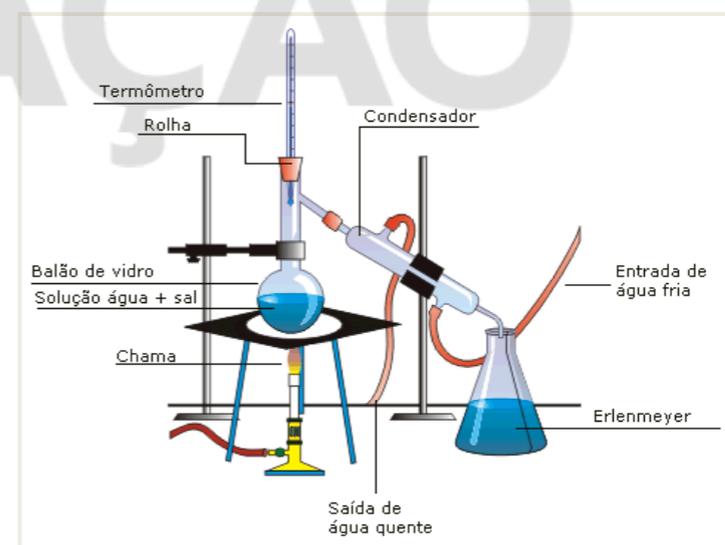
Ex: água + NaCl(aq) ; extração de sal do mar

Obs:

A evaporação só recupera o sólido.

### 2) Destilação simples (S+L)

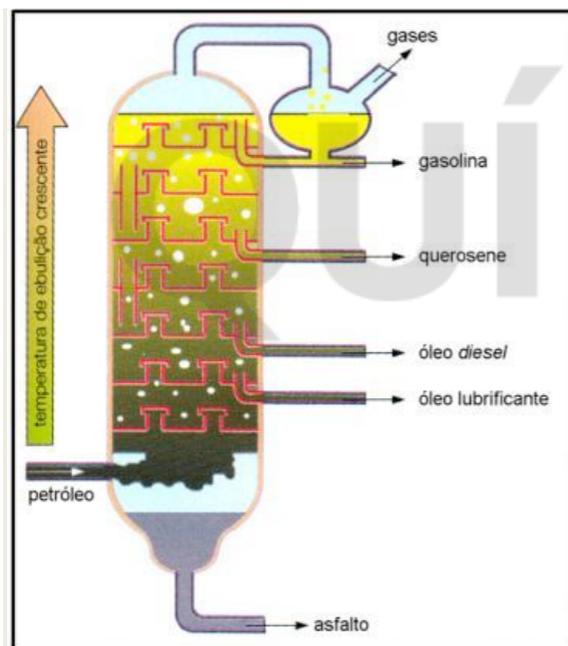
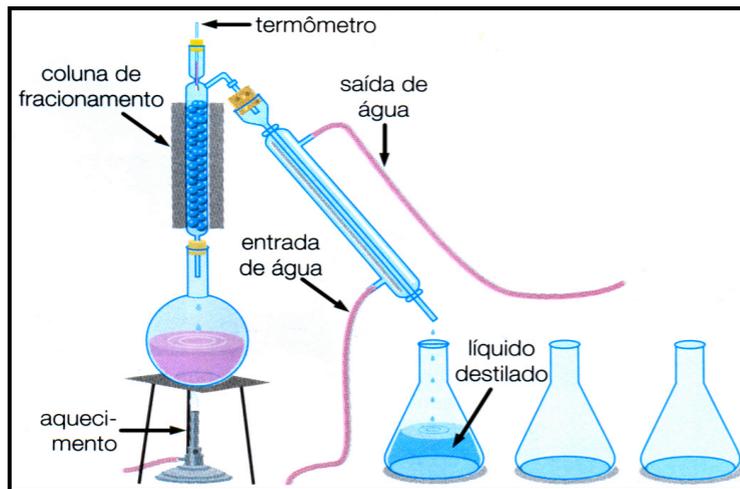
O processo de destilação é baseado na diferença do PE dos componentes da mistura. Quanto maior a diferença entre os PE mais fácil é a separação.



Ex: água + NaCl(aq)

### 3) Destilação fracionada (L+L)

Ex: água + acetona; destilação do petróleo



- A diferença entre a aparelhagem de uma destilação simples e uma fracionada é a presença obrigatória de um termômetro e uma coluna de destilação ou fracionamento.
- A destilação fracionada não separa misturas azeotrópicas e misturas de enantiômeros.

#### 4) Liquefação fracionada(G+G)

A mistura gasosa primeiro é liquefeita por diminuição de temperatura e aumento de pressão seguida de uma destilação fracionada em uma coluna de fracionamento.

Ex: Separação dos componentes do ar

PE  $O_2 = -183^\circ C$  // PE  $N_2 = -195^\circ C$

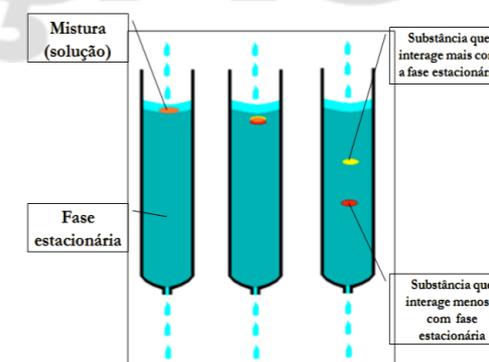
#### 5) Adsorção

Consiste no aproveitamento da capacidade que algumas substâncias (como carvão ativo ou ativado) têm de reter, na sua superfície, substâncias gasosas. Ex: máscaras contra gases venenosos.

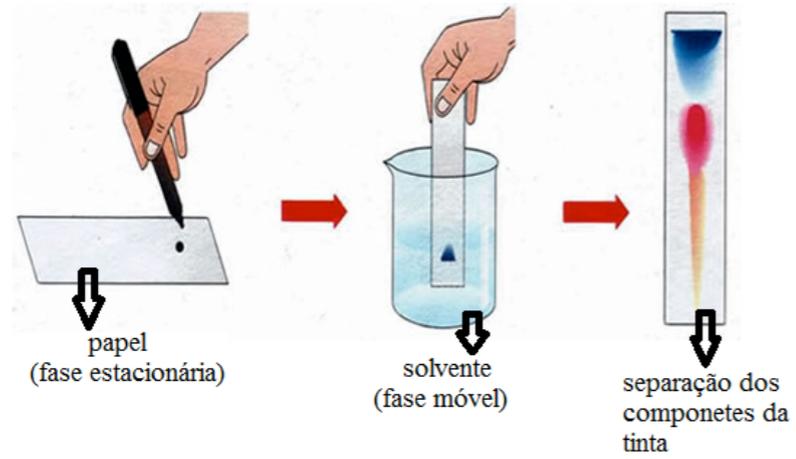
#### 6) Cromatografia

Cromatografia é um método de separação de misturas e identificação de seus componentes. A cromatografia separa os componentes de uma mistura com base nas diferentes capacidades das substâncias de aderirem às superfícies de sólidos como papel ou sílica. O procedimento consiste em passar uma solução (fase móvel) através de uma fase estacionária, onde se efetua o procedimento de separação com base nas diferentes interações intermoleculares. A cromatografia pode ser feita em colunas, tiras de papel ou em placas de vidro recobertas com a fase estacionária.

##### I. Cromatografia de coluna



## II. Cromatografia de papel



QUÍMICA  
*em* AÇÃO

# RESUMO TEÓRICO

## O ÁTOMO

1. Leis Ponderais
2. Leis Ponderais - Exercícios
3. Modelo de Dalton
4. Modelo de Thomson
5. Modelo de Rutherford
6. Partículas Fundamentais

## Reações químicas

Reação química é toda transformação que modifica a natureza da matéria (fenômeno químico).

### Reagentes → Produtos

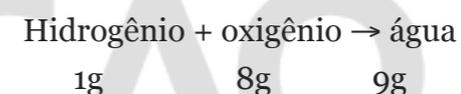
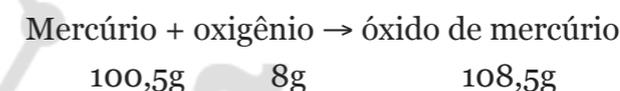
## Leis ponderais

São leis que relacionam as massas dos participantes de uma reação. Essas leis surgiram no final do século XVIII, começo do século XIX.

### Lei da conservação das massas ou lei de Lavoisier (1774)

“A massa total dos reagentes que reage é igual à massa total dos produtos formados”

Exemplos:



Obs.:

- Lavoisier é considerado o fundador da química moderna.
- No começo do século XX Albert Einstein demonstrou matematicamente que matéria pode se transformar em energia e vice versa. Portanto, durante as reações químicas que ocorrem com liberação ou absorção de calor ocorre variação de massa. No entanto a variação de massa nas reações químicas é extremamente pequena podendo ser desprezada.
- A lei de Lavoisier não pode ser utilizada em reações nucleares.

### Lei de Proust ou lei das proporções constantes ou definidas (1797)

“Toda substância possui uma proporção constante, em massa, na sua composição, e a proporção na qual reagem e se formam é constante”. ou

“A proporção entre as massas dos reagentes ou entre as massas dos produtos é constante”

Hidrogênio + oxigênio → água

hidrogênio	oxigênio	água
2g	16g	18g
10g	80g	90g
8g	X	Y

$$\frac{\text{massaO}}{\text{massaH}} = \frac{16}{2} = \frac{80}{10} = \frac{X}{8}$$

$$\frac{\text{massaH}_2\text{O}}{\text{massaH}} = \frac{18}{2} = \frac{90}{10} = \frac{Y}{8}$$

Consequências da lei de Proust:

- Fórmula percentual.
- Cálculo estequiométrico(regra de três).

### Lei das proporções múltiplas ou lei de Dalton

“Quando dois elementos formam duas ou mais substâncias compostas diferentes, se a massa de um deles permanecer fixa a do outro irá variar numa proporção de números inteiros e pequenos”.

Nitrogênio + oxigênio → óxidos de nitrogênio

nitrogênio	oxigênio	óxido
14g	8g	22g
14g	16g	30g
14g	24g	38g
14g	32g	46g

Proporção das massas de oxigênio que reagiram:

$$8:16:24:32 \Rightarrow 1:2:3:4$$

### ESTRUTURA ATÔMICA

A idéia de átomo surgiu com os filósofos gregos Leucipo e Demócrito (478a.C). A idéia foi rejeitada devido à teoria dos 4 elementos de Aristóteles.

### Modelo atômico de J. Dalton (1803)

Baseado nas “Leis Ponderais”, Dalton propôs que o átomo seria uma esfera maciça e indivisível. O modelo de Dalton foi abandonado por não explicar a natureza elétrica da matéria.

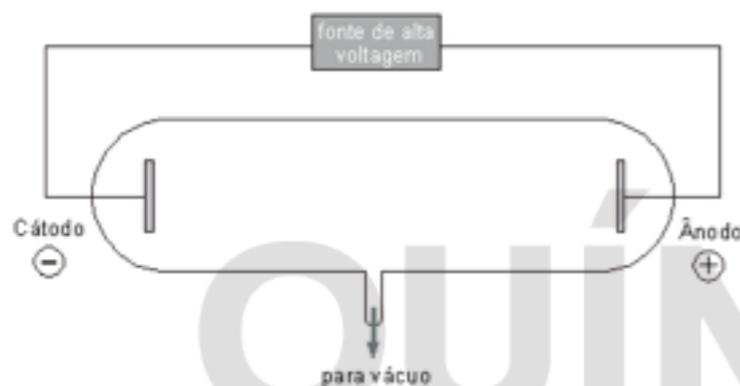


### • Teoria Atômica de Dalton

1. Toda matéria é constituída por átomos. Os átomos não podem ser criados ou destruídos.
2. Os átomos de um mesmo elemento são idênticos.
3. Os átomos se combinam em proporções fixas para formarem compostos.
4. Uma reação química é apenas um rearranjo de átomos.

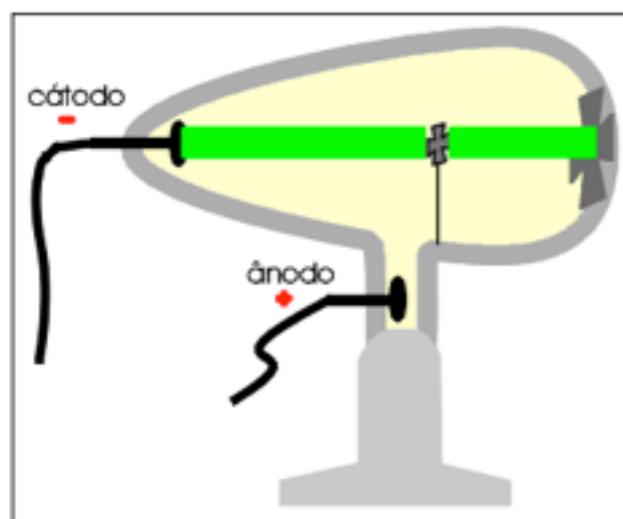
## Tubos de raios catódicos

Experimento descoberto por Geissler e Crookes em 1856, que consiste em aplicar descargas elétricas em um gás à baixa pressão contido em um tubo de vidro. Os raios catódicos são formados por partículas que possuem as seguintes características: propagação retilínea, massa e carga elétrica negativa. Em 1886, Eugen Goldstein descobriu raios com carga positiva dentro dos tubos de raios catódicos. Esses novos raios foram denominados raios canais ou anódicos.

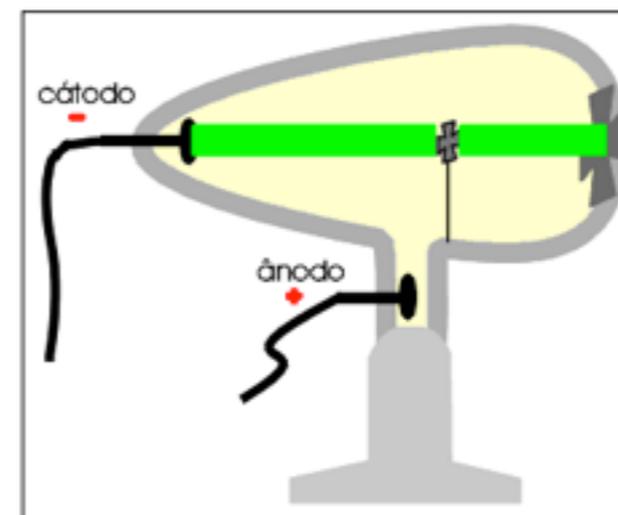


## Propriedades dos raios catódicos

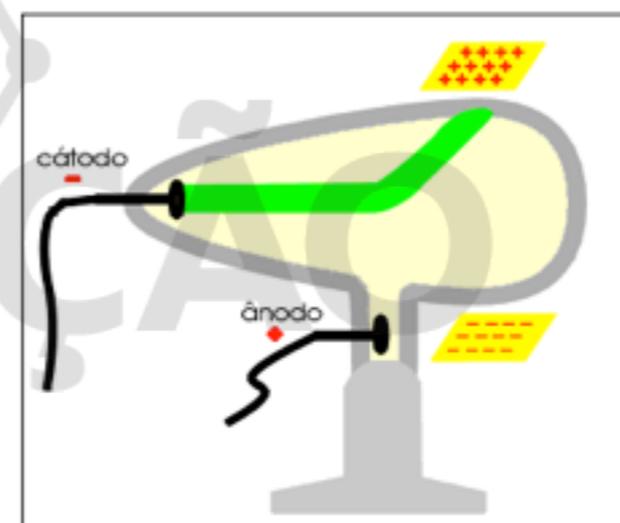
Os raios catódicos, quando incidem sobre um anteparo, produzem uma sombra na parede oposta do tubo, permitindo concluir que se **propagam em linha reta**.



Os raios catódicos, quando incidem sobre um anteparo, produzem uma sombra na parede oposta do tubo, permitindo concluir que se **propagam em linha reta**.



Os raios catódicos são desviados por um campo de carga elétrica positiva, permitindo concluir que são dotados de **carga elétrica negativa**.

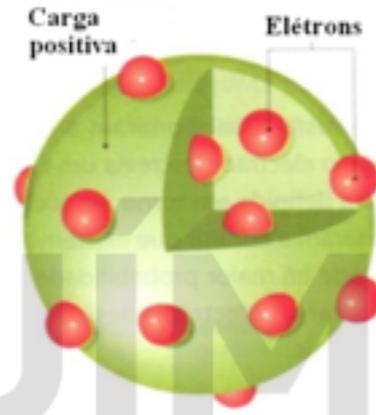
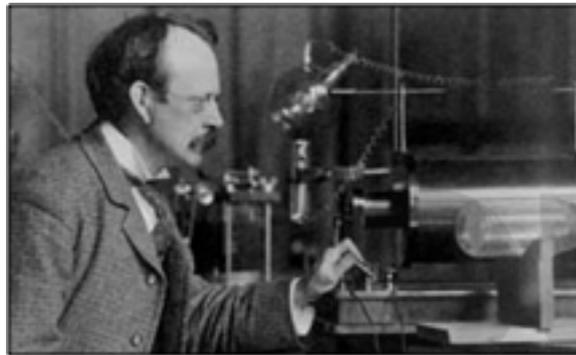


## Raios canais

Em 1886, Eugen Goldstein descobriu raios com carga positiva dentro dos tubos de raios catódicos. Esses novos raios foram denominados raios canais ou anódicos. Quando o gás residual dentro do tubo é o hidrogênio, a massa das partículas dos raios canais é a menor, sendo de aproximadamente 1836 vezes maior que a massa do elétron, e a carga dessas partículas é igual à do elétron, com sinal contrário.

## Modelo de Sir J. J. Thomson (1897)

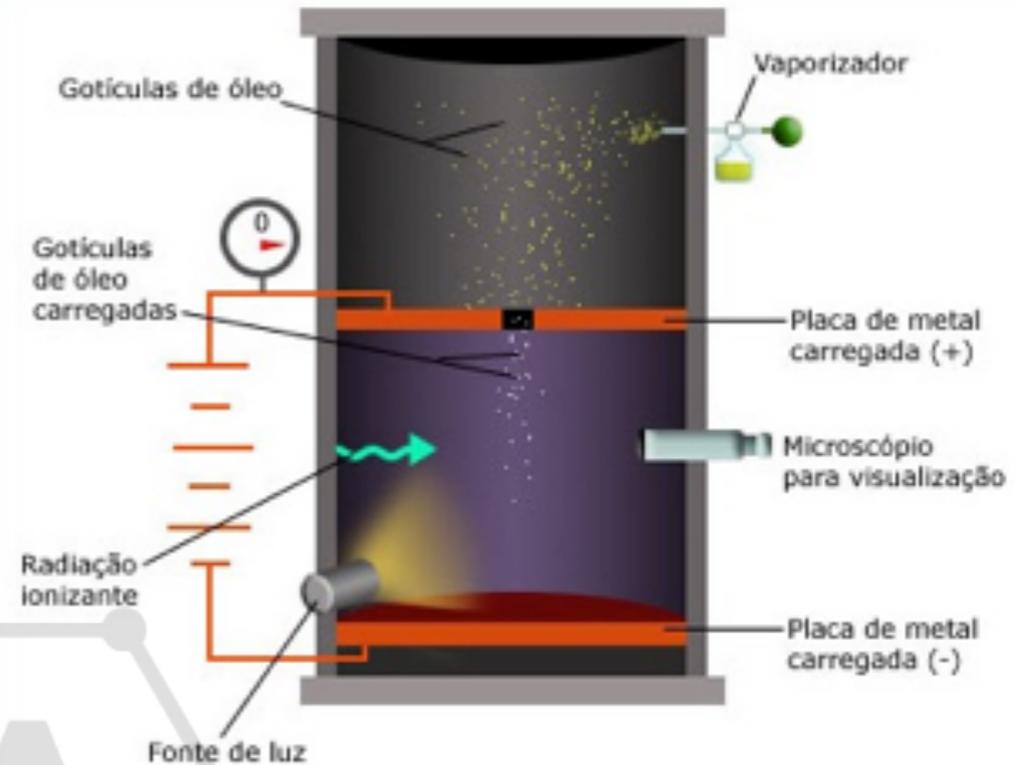
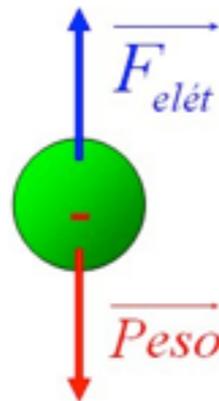
Thomson mediu a razão carga/massa da partícula do raio catódico. Essa partícula foi denominada elétron. A razão carga/massa dos raios catódicos (elétrons) não depende do gás contido no tubo ou da natureza dos metais dos eletrodos. Com a descoberta do elétron e dos raios canais, Thomson propôs um átomo formado por uma esfera preenchida por um fluido positivo com elétrons incrustados em sua estrutura.



### Determinação da carga do elétron

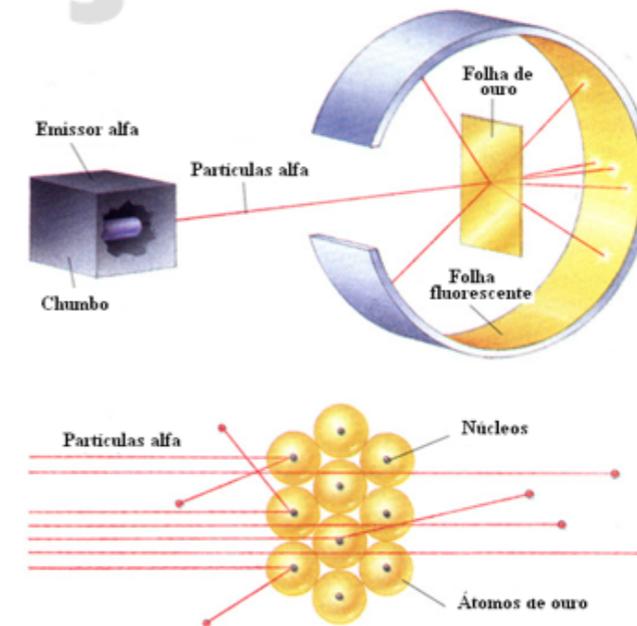
Em 1909 Millikan determinou a carga do elétron utilizando gotas de óleo carregadas eletricamente em equilíbrio em um campo elétrico.

- **Carga elétron:**  $-1,6 \cdot 10^{-19}C$
- **Massa elétron:**  $9,1 \cdot 10^{-31}Kg$



## Modelo atômico de Ernest Rutherford (1913)

Através do estudo do espalhamento de partículas alfa em uma fina folha de ouro ( $0,0001cm$ ), Rutherford propôs um novo modelo atômico. O átomo de Rutherford é formado por duas regiões distintas.



- **Núcleo:** extremamente pequeno e denso contendo os prótons.
- **Eletrosfera:** extremamente grande em relação ao diâmetro do núcleo, constituída principalmente por espaços vazios com elétrons girando em órbitas circulares em torno do núcleo.

Obs:

- Em 1919, Rutherford identifica a partícula responsável pela carga positiva do átomo, o próton, e levanta a hipótese de que no interior do núcleo deveria haver uma outra partícula, eletricamente neutra, mas com massa semelhante à do próton.

### Descoberta do Nêutron (1932)

James Chadwick descobriu o nêutron bombardeando o núcleo de átomos de Berílio com partículas alfa.



### Conceitos fundamentais

**Número atômico (Z):** indica o número de prótons de um átomo ( ${}^z\text{X}$ ).

Ex:  ${}^1\text{H}$ ,  ${}^8\text{O}$ ,  ${}^{20}\text{Ca}$

**Número de massa (A):** indica soma do número de prótons e nêutrons de um átomo. ( ${}^A\text{X}$ )

$$A = Z + N$$

Ex:  ${}_{92}\text{U}^{235}$  Prótons = 92 // Elétrons = 92 // Nêutrons =  $235 - 92 = 143$

**Íon:** átomo em desequilíbrio elétrico.

- $\text{Ca}^{+2}$ (cátion) = perdeu 2 elétrons
- $\text{Cl}^{-1}$ (ânion) = ganhou 1 elétron

**Isótopos:** átomos com mesmo Z e diferente A. Ex:  ${}^1_1\text{H}$ ,  ${}^2_1\text{H}$ ,  ${}^3_1\text{H}$ .

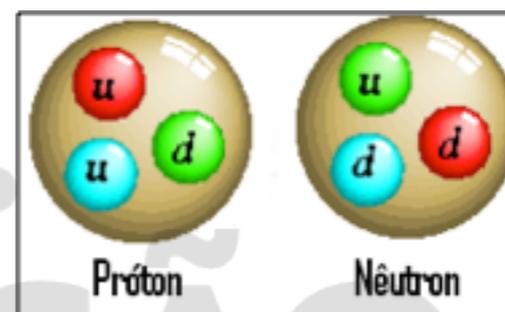
**Isóbaros:** átomos com mesmo A e diferente Z. Ex:  ${}^{14}_6\text{C}$ ,  ${}^{14}_7\text{N}$ .

**Isótonos:** átomos com mesmo número de nêutrons e diferentes Z e A.

Ex:  ${}^4_2\text{He}$ ,  ${}^3_1\text{H}$ .

### Aprofundamento

Os prótons e nêutrons são formados por outras partículas, denominadas quarks. Atualmente só existem dois tipos de quarks na matéria:



- Quark up (u)  $\rightarrow +2/3$
- Quark down (d)  $\rightarrow -1/3$
- Próton = u+u+d
- Nêutron = d+d+u

### Modelo padrão

A teoria do “MODELO PADRÃO” considera a existência de 12 partículas, que combinadas dão origem a todas as outras. Essas partículas são denominadas de “partículas elementares”: elétron, múon, tau, neutrino do elétron, neutrino do tau, neutrino do múon, quark up, quark down, quark charm, quark top, quark botton, quark strange.

# RESUMO TEÓRICO

## MODELOS ATÔMICOS QUÂNTICOS

1. Modelo de Bohr
2. Modelo Atômico Atual
3. Distribuição Eletrônica
4. Números Quânticos

### I. Nascimento da física quântica (moderna)

#### • Max Planck - Teoria dos quanta (1900)

Os átomos não podem absorver ou emitir energia eletromagnética de forma contínua. A energia só pode ser emitida ou absorvida em "blocos" ou "pacotes". Cada bloco unitário de energia denomina-se quantum.

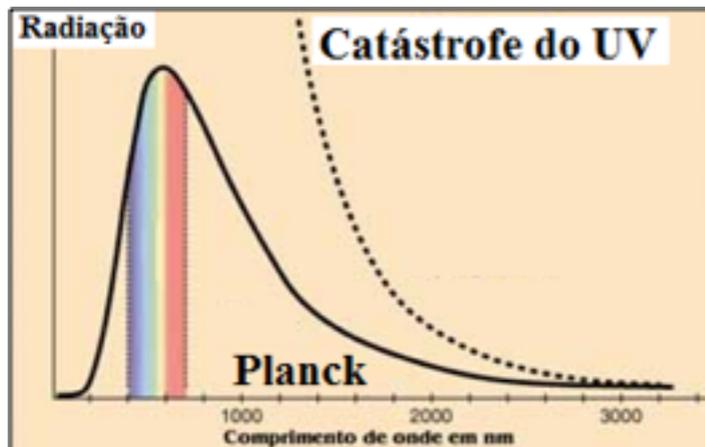
"A absorção e a emissão de energia eletromagnética pela matéria são quantizadas"

$$\text{Energia (quantum)} = h \cdot f$$

$h$  (constante de Planck) =  $6,62 \cdot 10^{-34} \text{J/Hz}$  //  $f$  = frequência

Obs:

- Quantum é a quantidade mínima de energia que o átomo pode absorver ou emitir.
- Os valores permitidos de energia devem ser múltiplos de um quantum.
- Quantização significa restrição de valores.
- Planck formulou a hipótese do quantum estudando a intensidade da radiação emitida por um corpo negro (objeto quente). De acordo com a física clássica qualquer objeto quente poderia emitir radiação UV, entretanto, isso não era observado experimentalmente. Esse problema ficou conhecido como catástrofe do UV.



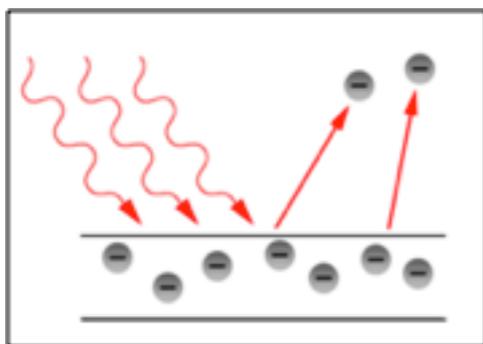
• **Albert Einstein - Teoria do fóton (1905)**

Para explicar o efeito fotoelétrico estudado em física, Einstein propôs que a radiação eletromagnética (luz) consistia de partículas chamadas fótons.

$$\text{Energia (fóton)} = h \cdot f$$

Obs:

- Efeito fotoelétrico = ejeção de elétrons de um metal quando sua superfície é exposta à luz com uma frequência acima de uma frequência limiar que é característica de cada metal. A energia cinética dos elétrons ejetados varia linearmente com a frequência da luz incidente.



- Fóton nome dado as partículas que constituem as ondas eletromagnéticas (luz).

- O fóton é indivisível.
- Quanto maior a frequência, maior é a energia do fóton e menor é o comprimento de onda ( $\lambda$ ) da radiação eletromagnética.

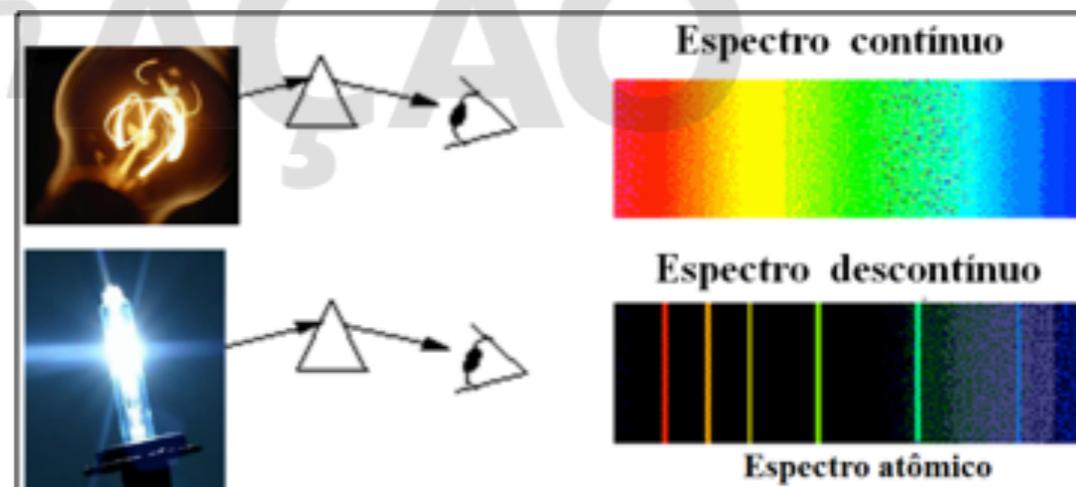
Resumindo:

**Quantum:** quantidade mínima de energia que um átomo pode absorver ou emitir. Corresponde a energia de um fóton.

**Fóton:** partícula que constitui a luz.

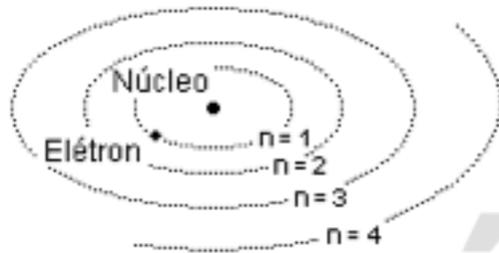
**II. Modelo atômico de Niels Bohr (modelo do átomo de hidrogênio)**

Em 1913 Bohr propôs um modelo atômico para o átomo de hidrogênio baseado em postulados. O modelo de Bohr foi baseado no estudo do espectro atômico do átomo de hidrogênio (espectro descontínuo). Bohr foi o primeiro a considerar conceitos da física moderna (energia quantizada e fóton) para explicar a estrutura do átomo.



Bohr concluiu que o fato do espectro do hidrogênio ser constituído por raias, indicava que os átomos desse elemento podiam emitir somente algumas frequências, portanto, só certas mudanças de energia eram possíveis dentro do átomo. Suas hipóteses podem ser resumidas pelos seguintes postulados:

1. O elétron gira ao redor do núcleo em órbitas (níveis de energia) circulares e estacionárias (energia constante).



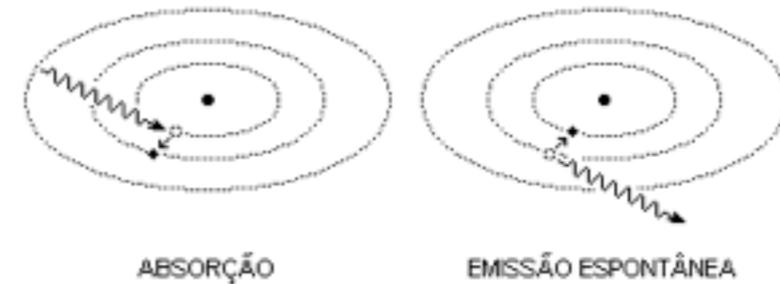
2. Cada órbita possui um valor determinado de energia.

$$\text{Energia (órbita)} = E = -A \frac{1}{n^2}$$

A = constante

n = nível de energia (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7...).

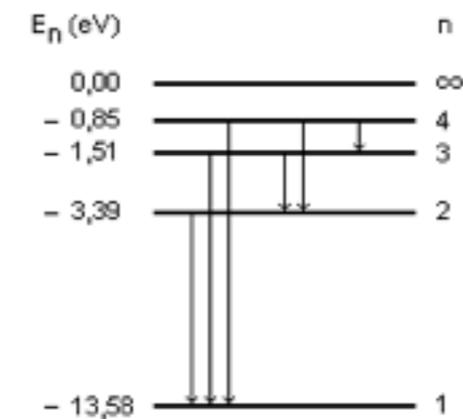
3. O elétron pode passar de uma órbita para outra, mediante absorção ou emissão de energia. A energia emitida ou absorvida é igual à diferença de energia entre os níveis envolvidos na transição (salto quântico ou eletrônico).



De acordo com Bohr, cada linha ou raia do espectro atômico correspondia a uma transição eletrônica espectral. No entanto, o modelo de Bohr só foi capaz de explicar, de modo satisfatório, o espectro do hidrogênio e dos íons hidrogenóides (possuem apenas um elétron). Por isso, seu modelo ficou conhecido como o modelo do átomo de hidrogênio.

Obs:

- A letra n que aparece na equação de Bohr é denominada número quântico principal, podendo variar de 1 a  $\infty$ .
- A energia é sempre emitida na forma de luz (fóton).
- Quando se afasta do núcleo a energia dos níveis (órbitas) aumenta e a diferença de energia entre os níveis diminui.

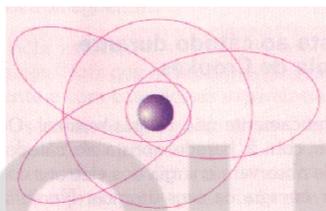


- O salto quântico explica a emissão de luz nos fogos de artifícios, lâmpadas fluorescentes, lasers, aparelhos de raios-X, substâncias fosforescentes e fluorescentes.
- O modelo de Bohr não é o modelo atômico atual.

### III. Modelo de Sommerfeld (1916)

Cada nível de energia do átomo possui uma órbita circular e (n-1) órbitas elípticas.

Ex: Nível 4 (n=4) → 1 órbita circular e 3 órbitas elípticas



Sommerfeld concluiu que cada nível energia n está dividido em n subníveis. Os subníveis são designados pelas letras : s,p,d e f.

Número quântico secundário ou azimutal	s	p	d	f
1	0	1	2	3

### IV. Modelo atômico atual

Entre 1924 e 1926 apareceram novas propostas sobre a estrutura eletrônica dos átomos, que vieram substituir o esquema de órbitas proposto por Bohr e Sommerfeld. As contribuições mais importantes que ocorreram até chegarmos ao modelo atual do átomo foram:

#### 1. Caráter dual da matéria -Louis De Broglie (1924)

“Todo corpo em movimento está associado a um comportamento ondulatório”

$$\lambda_{\text{partícula}} = h / m.v$$

$\lambda$  = comprimento de onda da partícula

h = constante de Planck

m = massa

v = velocidade da partícula

Devido ao caráter dual da matéria as propriedades ondulatórias do elétron devem ser consideradas no estudo da estrutura do átomo. Os elétrons se comportam não só como partículas, mas também como ondas.

#### 2. Princípio da incerteza-W. Heisenberg (1926).

“É impossível determinar, de modo exato e simultâneo, a energia de uma partícula e a sua posição”

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$\Delta x$  = erro na posição

$\Delta p$  = erro na energia

O princípio da incerteza acabou com o conceito de órbita e criou o conceito de orbital.

**Órbita:** trajetória definida em torno de um corpo

**Orbital:** região de maior probabilidade de se encontrar o elétron



### 3. Equação de onda Erwin Schrödinger (1926)

Criou uma equação matemática (equação de onda) que permite calcular a probabilidade de se encontrar o elétron numa dada região do espaço. Por isso, Schrödinger é conhecido como o criador da mecânica ondulatória.

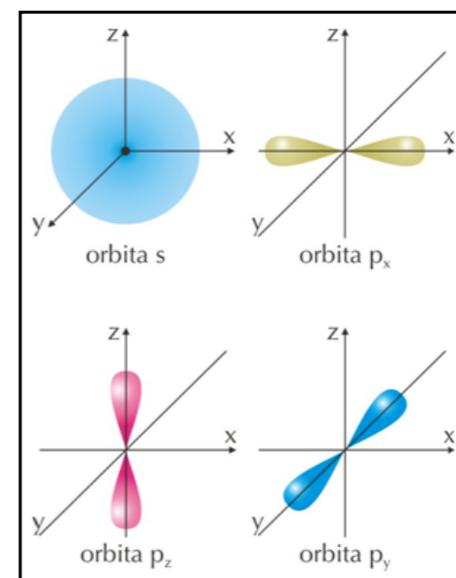


$$-\hbar^2/2m \nabla^2 \psi + V\psi = E \psi$$

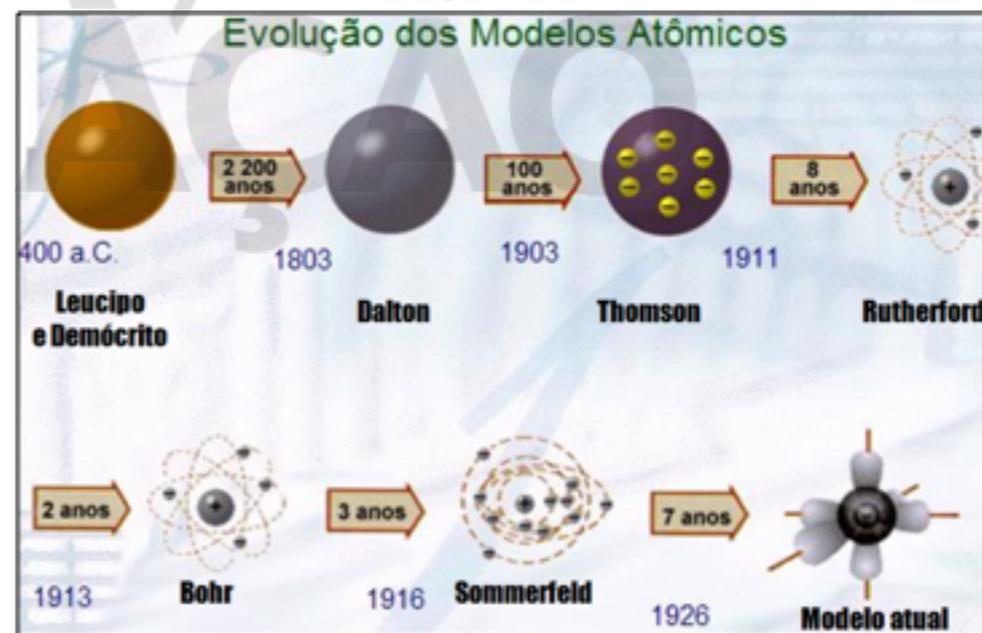
Na mecânica quântica de Schrödinger, como é conhecida hoje, aparece um ente matemático chamado função de onda  $\psi(\psi)$ , cuja interpretação não era clara. O alemão Max Born indicou que a função de onda elevada ao quadrado ( $\psi^2$ ) nos dá a probabilidade de que o elétron se encontre em alguma das diversas regiões do espaço. Dessa forma nasceu a interpretação probabilística da mecânica quântica.

Em resumo, no modelo atômico atual, podemos conhecer somente probabilidade de que o elétron se encontre em uma determinada região do espaço. A dualidade dos elétrons e o princípio da incerteza só

nos permitem conhecer com um certo grau de precisão a sua posição e velocidade, impedindo-nos de falar sobre a “trajetória” dos elétrons. Por isso, o novo modelo fala em orbitais.



### Resumo



### V. Distribuição eletrônica

#### 1. Camadas Eletrônicas ou Níveis de Energia

A eletrosfera está dividida em 7 níveis de energia designadas por K, L, M, N, O, P, Q ou pelos números:  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ . O número de camada é chamado número quântico principal ( $n$ ).

*Número máximo de elétrons em cada nível de energia(x):*

- **Teórico:** Equação de Rydberg:  $x = 2n^2$

K	L	M	N	O	P	Q
2	8	18	32	50	72	98

- **Experimental:**

O elemento de número atômico 112 apresenta o seguinte número de elétrons nas camadas energéticas:

K	L	M	N	O	P	Q
2	8	18	32	32	18	2

## 2. Subcamadas ou Subníveis de Energia

Uma camada de número quântico  $n$  será subdividida em  $n$  subníveis:

s, p, d, f, g, h, i...

Nos átomos dos elementos conhecidos, os subníveis teóricos g, h, i... estão vazios.

*Número máximo de elétrons em cada subnível:*

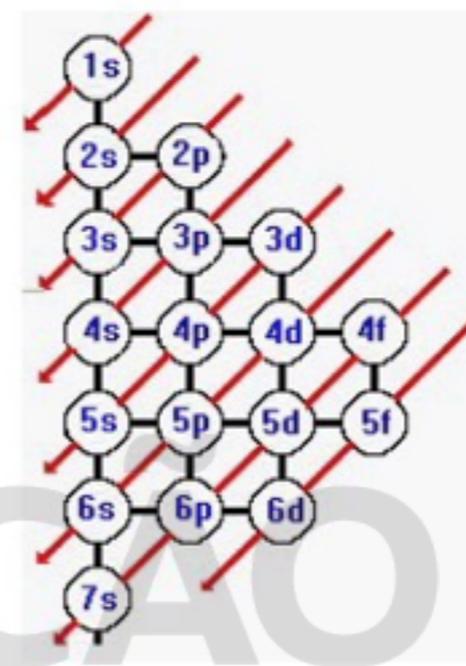
s	p	d	f
2	8	10	14

## 3. Distribuição dos elétrons nos subníveis (Configuração eletrônica).

Os subníveis são preenchidos em ordem crescente de energia (ordem energética). Linus Pauling descobriu que a energia dos subníveis aumenta na ordem:

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

É nessa ordem que os subníveis são preenchidos. Para obter essa ordem basta seguir as diagonais no Diagrama abaixo:



Seqüência de preenchimento de orbitais

Deve-se observar a ordem energética dos subníveis de energia, que infelizmente não é igual à ordem geométrica. Isso porque subníveis de níveis superiores podem ter menor energia total do que subníveis inferiores. A energia de um subnível é proporcional à soma  $(n + l)$  de seus respectivos números quânticos principal ( $n$ ) e secundário ( $l$ ). O número quântico azimutal ou secundário, representado pela letra  $l$ , especifica a subcamada e, assim, a forma do orbital. Pode assumir os valores 0, 1, 2 e 3, correspondentes às subcamadas s, p, d, f.

**Camada de Valência (CV)** é o último nível eletrônico de um átomo,

normalmente os elétrons pertencentes à camada de valência, são os que participam de alguma ligação química. A CV sempre possui o maior valor de n no átomo.

Exemplo: Arsênio (As):  $Z = 33$

- Ordem energética (ordem de preenchimento):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^3$
- Ordem geométrica (ordem de camada):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$

Camadas Energéticas:  $K = 2; L = 8; M = 18; N = 5$

A camada de valência do As é a camada N, pois é o último nível que contém elétrons.

#### 4. Distribuição Eletrônica em Íons

Átomo neutro:  $n^\circ$  de prótons =  $n^\circ$  de elétrons

Íon:  $n^\circ$  de prótons (p)  $\neq$   $n^\circ$  de elétrons

Íon positivo (cátion):  $n^\circ$  de p >  $n^\circ$  de elétrons

Íon negativo (ânion):  $n^\circ$  de p <  $n^\circ$  de elétrons

##### 4.1. Distribuição Eletrônica em Cátion

Primeiro distribuir os elétrons do átomo correspondente e depois retirar os elétrons da CV. Quando existir mais de um subnível na CV, os elétrons devem ser retirados primeiramente dos subníveis de maior energia. Exemplo:

Ferro (Fe)  $Z = 26 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$  (estado fundamental = neutro)

$Fe^{2+} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$  (estado iônico)

$Fe^{3+} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$  (estado iônico)

##### 4.2. Distribuição Eletrônica em Ânion

Somar os elétrons recebidos aos do átomo correspondente e depois distribuir. Os elétrons são adicionados no subnível incompleto de maior energia. Exemplo:

Oxigênio (O)  $Z = 8 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^4$  (estado fundamental = neutro)

$O^{2-} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$

#### Números quânticos

##### 1) Número quântico principal (n)

- Localiza o nível de energia do elétron.
- Nos átomos identificados atualmente, o número quântico principal varia de 1 a 7.

Nível de energia	K	L	M	N	O	P	Q
n	1	2	3	4	5	6	7

##### 2) Número quântico secundário ou azimutal (l)

- Localiza o subnível de energia do elétron.
- Determina a forma do orbital

subnível	s	p	d	f
1	0	1	2	3

Exemplo:

Em qual subnível está localizado um elétron que possui  $n=4$  e  $l=3$  ?

Resposta: 4f

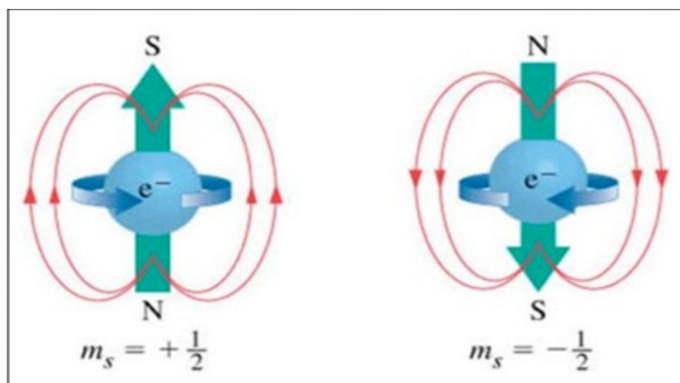
### 3) Número quântico magnético (m ou ml)

- Localiza o orbital do elétron.
- Determina a orientação do orbital no espaço.
- Em cada subnível a variação de m é de  $-l$  a  $+l$ .

Subnível	Nº é	Nº de orbitais	Nº quântico Magnético (m)
s	2	1	0
p	6	3	-1 0 +1
d	10	5	-2 -1 0 +1 +2
f	14	7	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3

### 4) Spin (s ou ms)

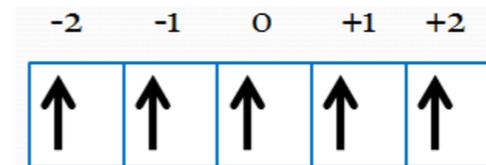
- Define a quantidade de movimento angular intrínseca do elétron.
- Rotação anti-horário =  $\uparrow$  =  $+1/2$
- Rotação anti-horário =  $\downarrow$  =  $-1/2$



### 5) Regra de Hund ou princípio da máxima multiplicidade

Em um dado subnível, os elétrons tendem a ocupar orbitais diferentes e a manter spins desemparelhados.

Ex: Preenchimento da subcamada d:



### 6) Princípio da exclusão de Pauli

Em um dado átomo, dois elétrons não podem ter os quatro números quânticos iguais.



# RESUMO TEÓRICO

## QUANTIDADES E MEDIDAS

1. Leis Volumétricas
2. Hipóteses de Avogadro
3. Massa Atômica e Massa do Elemento Químico
4. Massa Molecular
5. Mol e Massa Molar

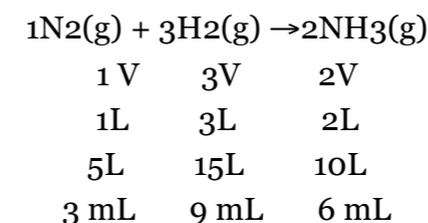
### Leis volumétricas

Relaciona os volumes dos participantes gasosos de uma reação. As leis volumétricas foram determinadas por Gay-Lussac.

#### Lei das proporções volumétricas

“Nas mesmas condições de temperatura e pressão, os volumes dos gases que participam de uma reação têm entre si uma proporção de números inteiros e pequenos”.

Exemplo:



#### Proporção entre os volumes 1:3:2

Os coeficientes estequiométricos das substâncias gasosas representam a proporção volumétrica entre os reagentes e produtos na reação.

#### Hipóteses de Avogadro

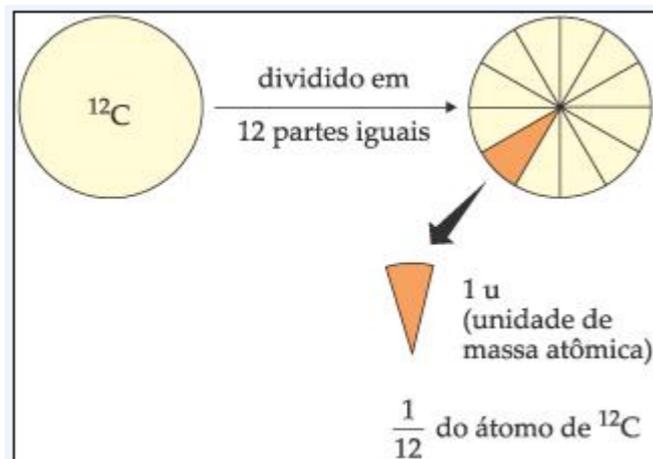
A relação existente entre os volumes de combinação e as fórmulas corretas dos produtos formados foi estabelecida pelo italiano Amadeo Avogadro. As duas hipóteses podem ser enunciadas assim:

“Dois gases que ocupam o mesmo volume, nas mesmas condições de temperatura e pressão, contêm o mesmo número de moléculas”.

“Certos elementos apresentam moléculas diatômicas, pois dois de seus átomos formam agregados estáveis”.

## Medida da massa de um átomo

Para medir a massa dos átomos os químicos adotaram como padrão de medida a massa da 12ª parte do carbono 12 ( $^{12}\text{C}$ ). Esse padrão é denominado de unidade de massa atômica (u).



$$1\text{u} = 1,66 \cdot 10^{-24}\text{g}$$

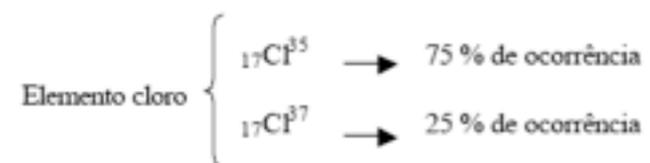
## Massa atômica de um átomo (MA)

A massa de um átomo (massa atômica) indica quantas vezes o átomo é mais pesado que 1/12 do carbono 12 (1u). Por exemplo, se a massa atômica do alumínio é 27u, significa que 1 átomo de alumínio é 27 vezes mais pesado que uma unidade de massa atômica (1u).

$$1 \text{ átomo de Al} = 27 \text{ u}$$

## Massa atômica de um elemento (MA)

A maioria dos elementos se apresentam na natureza na forma de dois ou mais isótopos. O valor da massa atômica de cada elemento na tabela periódica é a média ponderada das massas atômicas dos seus isótopos. Veja o exemplo do elemento cloro:



$$\text{M.A.} = \frac{35 \cdot 75 + 37 \cdot 25}{100} = 35,50 \text{ u}$$

## Massa molecular (MM)

A massa molecular indica quantas vezes a molécula é mais pesada que 1/12 do carbono 12 (1u).

$$\text{MM H}_2\text{O} = 2 \text{ H} + 1 \text{ O} = 2 \cdot 1\text{u} + 1 \cdot 16\text{u} = 18\text{u}$$

Significa que 1 molécula de água é 18 vezes mais pesada que uma unidade de massa atômica (1u).

$$\text{MM C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} = 12 \text{ C} + 22 \text{ H} + 11 \text{ O}$$

$$\text{MM C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} = 12 \cdot 12\text{u} + 22 \cdot 1\text{u} + 11 \cdot 16\text{u}$$

$$\text{MM C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} = 144 \text{ u} + 22\text{u} + 176\text{u}$$

$$\text{MM C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} = 342 \text{ u}$$

$$\text{MM Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 3 \text{ Ca} + 2 \text{ P} + 8 \text{ O}$$

$$\text{MM Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 3 \cdot 40\text{u} + 2 \cdot 31\text{u} + 8 \cdot 16\text{u}$$

$$\text{MM Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 120\text{u} + 62\text{u} + 128\text{u}$$

$$\text{MM Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 310\text{u}$$

## Mol

Mol é a quantidade de matéria que contém tantas entidades elementares quantos são os átomos contidos em 0,012 Kg (12g) de carbono 12.

$$12\text{g } ^{12}\text{C} \rightarrow 6,02 \cdot 10^{23} \text{ átomos} \rightarrow 1 \text{ mol}$$

$$\text{Número de Avogadro} = 6,02 \cdot 10^{23}$$

O Mol é a “dúzia” do químico. Da mesma forma que uma dúzia sempre possui 12 unidades, um mol sempre possui  $6,02 \cdot 10^{23}$  unidades.

- 1 mol de átomos =  $6,02 \cdot 10^{23}$  átomos
- 1 mol de moléculas =  $6,02 \cdot 10^{23}$  moléculas
- 1 mol de elétrons =  $6,02 \cdot 10^{23}$  elétrons
- 1 mol de canetas =  $6,02 \cdot 10^{23}$  canetas

## Massa molar (M)

A massa molar de um elemento é a massa em gramas de  $6,02 \cdot 10^{23}$  átomos desse elemento, sendo numericamente igual a sua massa atômica. Por exemplo, a massa atômica do sódio é 23u, portanto a sua massa molar é 23g/mol.

- MA oxigênio (O) = 16u ; M oxigênio = 16g/mol
- MA mercúrio (Hg) = 201 u ; M mercúrio = 201g/mol
- MA enxofre (S) = 32u ; M enxofre = 32g/mol

A massa molar de uma substância é a massa em gramas de  $6,02 \cdot 10^{23}$  moléculas dessa substância, sendo numericamente igual a sua massa molecular. Por exemplo, a massa molecular da água é 18u, portanto a sua massa molar é 18 g/mol.

- MM (CO<sub>2</sub>) = 44u ; M(CO<sub>2</sub>) = 44g/mol
- MM (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) = 98u ; M (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) = 98g/mol

### Quantidade de matéria (número de mol)

O número de mol de uma determinada massa de um elemento ou substância pode ser determinado pela seguinte equação:

$$n = m/M$$

n = número de mol

m = massa

M = massa molar

QUÍMICA  
em AÇÃO

# RESUMO TEÓRICO

## TABELA PERIÓDICA

1. A Tabela Periódica
2. Propriedades Periódicas (1/3)
3. Propriedades Periódicas (2/3)
4. Propriedades Periódicas (3/3)

### Histórico

1869- Dimitri Mendeleev ordenou os elementos conhecidos em ordem crescente de massa atômica. A tabela de Mendeleev possuía 8 colunas verticais e 12 de colunas horizontais. Dimitri é considerado o “ Pai da tabela periódica”

1913- Henry Moseley ordenou os elementos em ordem crescente de número atômico. Esse novo conceito de ordenação deu origem a tabela periódica atual ou moderna.

### Organização da tabela atual

A tabela atual possui 18 colunas verticais (famílias ou grupos) e 7 colunas horizontais (períodos).

Obs:

- Os elementos de um mesmo grupo(família ) possuem o mesmo número de elétrons na camada de valência(CV).
- Os elementos de um mesmo período possuem o mesmo número de níveis de energia(camadas).

### Elementos representativos (Famílias A)

Possuem o subnível mais energético (SME) s ou p.

1 ou 1A= metais alcalinos → CV = 1 elétron

2 ou 2A = metais alcalinos terrosos → CV = 2 elétrons

13 ou 3A =família do boro → CV= 3 elétrons

14 ou 4A = família do carbono → CV= 4 elétrons

15 ou 5A = família do nitrogênio → CV= 5 elétrons

16 ou 6A = calcogênios → CV= 6 elétrons

17 ou 7A = halogênios → CV= 7 elétrons

18 ou 8A = gases nobres → CV= 8 elétrons

Obs:

- O He possui 2 elétrons na CV.
- Grupo(família) = nº de e- na CV

## Elementos de transição externa (Famílias B)

Possuem o subnível mais energético(SME) d.Geralmente possuem 2 elétrons na CV.

3 ou 3B  
4 ou 4B  
5 ou 5B  
6 ou 6B  
7 ou 7 B  
8 ou 8B  
9 ou 8B  
10 ou 8B  
11 ou 1B  
12 ou 2B

Obs:

- Cu , Cr , Au , Mo , Ag possuem 1 elétron na CV.
- Grupo (família) = no de e- da CV + no de e- do SME

## Elementos de transição interna

Possuem o subnível mais energético 4f (lantanídeos;5o período) ou 5f (actinídeos; 6o período). Esses elementos pertencem ao grupo 3 ou 3B da tabela.

## Divisão com base nas propriedades físicas e químicas

### Metais

- Bons condutores de calor e eletricidade
- Possuem brilho
- Alta maleabilidade e ductibilidade
- Geralmente possuem elevados PF , PE e densidade.
- São sólidos nas CNTP. Exceção Hg (líquido)
- Reagem com ácidos.
- Formam óxidos básicos.
- Formam cátions
- Formam haletos iônicos.

## Ametais ou não metais

- Maus condutores de calor e eletricidade
- Não possuem brilho
- Baixa maleabilidade e ductibilidade
- Geralmente possuem baixos PF , PE e densidade.
- Podem se apresentar nos três estados físicos.
- Não reagem com ácidos.
- Formam óxidos ácidos.
- Formam ânions.
- Formam haletos covalentes.

## Semimetais ou metalóides

Os semimetais possuem propriedades intermediária.

**B Si Ge As Sb Te Po**

Obs:

- Os principais semimetais são o silício e o germânio que são semicondutores utilizados na industria da informática.
- O carbono na forma de grafite é condutor de corrente elétrica.
- Carbono grafite e carbono diamante possuem alto ponto de fusão.
- O boro e o silício são sólidos brilhantes com alto ponto de fusão.
- O Iodo sólido possui cor preta e apresenta um ligeiro brilho metálico, quando sublima forma um vapor violeta.
- O hidrogênio é um ametal e possui a propriedade de se combinar com metais , ametais e semimetais .É um gás extremamente inflamável.

## Elementos artificiais

O urânio é o elemento artificial de maior número atômico( Z= 92). Os elementos artificiais são denominados de transurânicos e cisurânicos.

Transurânicos =  $Z \geq 93$

Cisurânicos =  $Z < 92$

Obs:

- Existem somente dois elementos cisurânicos: Tc e Pm

## Elementos radioativos

Todo elemento com  $Z \geq 84$  é radioativo

Obs:

- Existem isótopos radioativos com  $Z$  menor que 84.

## Estado físico (substância simples)

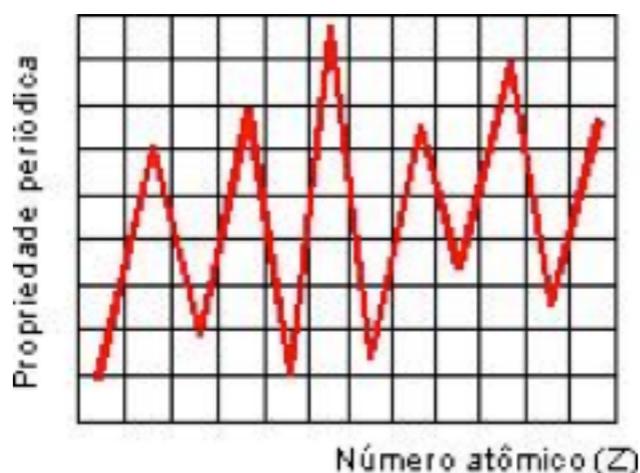
**Gasosas:**  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$  (amarelo claro),  $Cl_2$  (amarelo esverdeado) e gases nobres.

**Líquidas:**  $Br_2$  (líquido castanho avermelhado) e  $Hg$ .

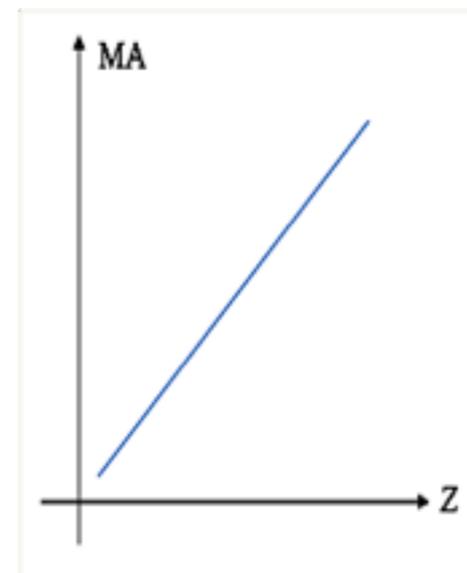
**Sólidas:** as demais.

## Propriedades periódicas

A lei periódica estabelece que os elementos sejam ordenados em ordem crescente de  $Z$ , podendo se observar a repetição periódica das suas propriedades. Propriedades periódicas são aquelas que se repetem de período em período. Por exemplo, os dias da semana possuem uma repetição periódica a cada sete dias. A maneira mais simples de se descobrir se uma propriedade é periódica ou não, é através de um gráfico da propriedade versus o número atômico. A característica do gráfico de uma propriedade periódica é apresentada pelos máximos e mínimos em intervalos regulares. As propriedades periódicas são: raio atômico, potencial ou energia de ionização, eletroafinidade ou afinidade eletrônica, eletronegatividade, eletropositividade, densidade, volume atômico, ponto de fusão e ebulição. A variação das propriedades periódicas na tabela é representada por setas que sempre indicam o sentido de aumento da propriedade.



## Propriedades aperiódicas



## Propriedades periódicas

São aquelas que apresentam variação periódica na tabela, crescendo e decrescendo, à medida que o  $Z$  aumenta.

### 1) Raio atômico

O raio atômico corresponde ao tamanho do átomo. Em uma família o raio cresce de cima para baixo e em um período da direita para esquerda.

Obs.:

- Quando um átomo perde elétrons (forma cátion), a repulsão da nuvem eletrônica diminui, diminuindo o seu tamanho. Inclusive pode ocorrer perda do último nível de energia, e quanto menor a quantidade de níveis, menor o raio.
- Quando um átomo ganha elétrons (forma ânion), aumenta a repulsão da nuvem eletrônica, aumentando o seu tamanho.
- Íons isoeletrônicos são os que apresentam igual número de elétrons e, portanto, o número de níveis é o mesmo. Assim, quanto maior for o número atômico, maior será a atração do núcleo pela eletrosfera e menor será o raio.

### Carga nuclear efetiva ( $Z^*$ )

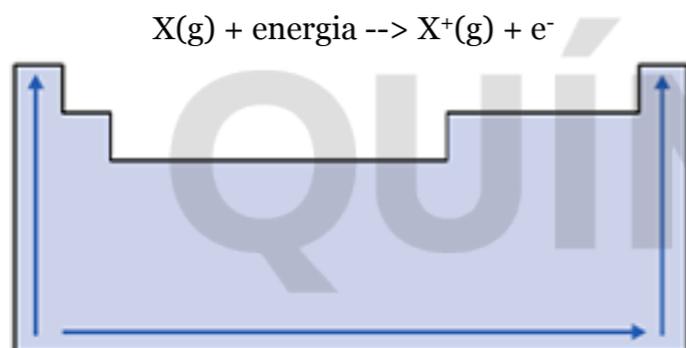
$Z^*$  = É a carga nuclear líquida que atua sobre o último nível, após considerado o efeito blindagem ocasionado pelos elétrons dos níveis internos.

$$Z^* = Z - (\text{no e- internos})$$

**Blindagem:** Os elétrons dos níveis internos diminuem a atração do núcleo sobre os elétrons do último nível.

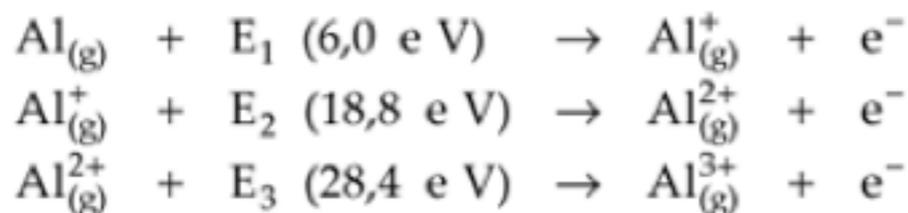
## 2) Potencial de ionização ou energia de ionização (PI)

É a energia mínima necessária para retirar um elétron de um átomo (ou íon) isolado no estado gasoso. Em uma família o potencial de ionização cresce de baixo para cima, e em um período da esquerda para direita.

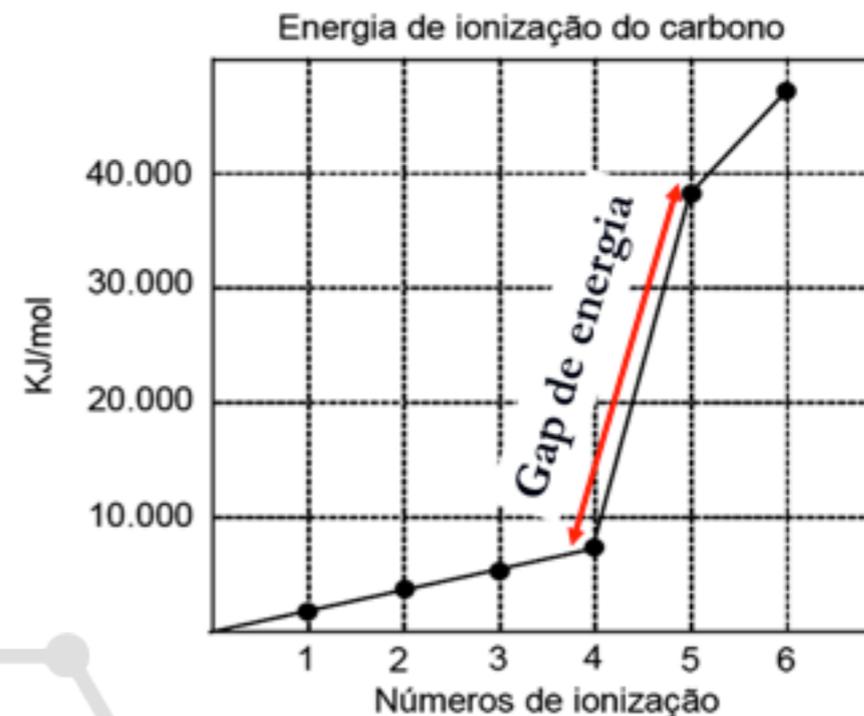


Obs.:

- O PI é sempre um processo endotérmico (absorve energia).
- Quando um átomo perde elétron o seu raio diminui, aumentando a força de atração sobre os elétrons restantes, dificultando a retirada do próximo elétron (aumenta o PI).

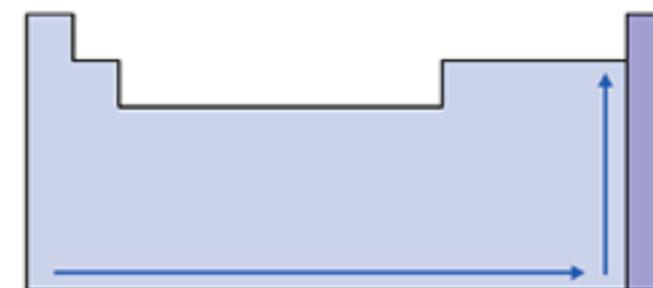
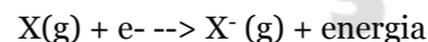


- O gap de energia (salto) indica que ocorreu mudança de nível de energia (camada).



## 3) Eletroafinidade ou afinidade eletrônica

É a quantidade de energia mínima liberada ou absorvida quando um átomo neutro, isolado no estado gasoso, recebe um elétron. Geralmente é um processo exotérmico (libera energia). Em uma família a eletroafinidade cresce de baixo para cima, e em um período da esquerda para direita.



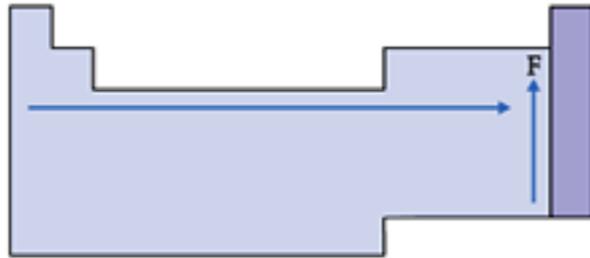
Obs.:

- Os gases nobres possuem os menores valores de afinidade eletrônica da tabela. Eles não apresentam tendência de receber elétrons por que já são estáveis.
- Quanto mais negativa (exotérmica) for a afinidade eletrônica, maior será a atração do átomo por um elétron.

- Uma afinidade eletrônica positiva (endotérmica) indica que o íon negativo tem energia mais elevada que o átomo separado do elétron.

#### 4) Eletronegatividade

É a capacidade que um átomo possui de atrair elétrons em uma ligação.

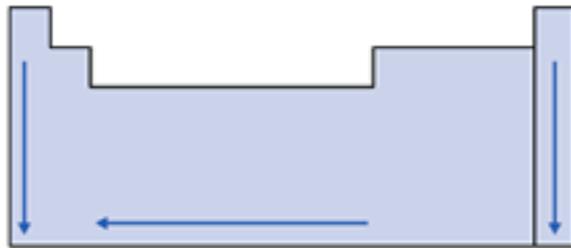


Obs.:

- Os gases nobres possuem os menores valores de eletronegatividade da tabela.

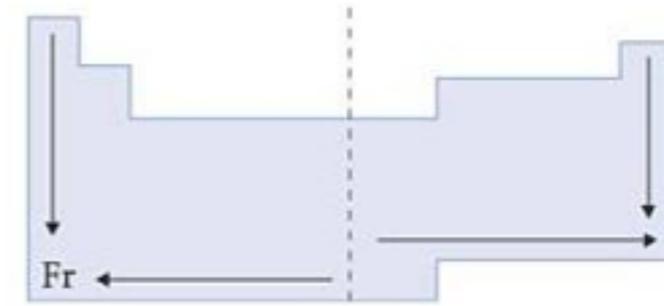
#### 5) Eletropositividade ou caráter metálico

É a capacidade que um átomo possui de formar cátions (perder elétrons). Possui a mesma variação na tabela que o raio atômico.

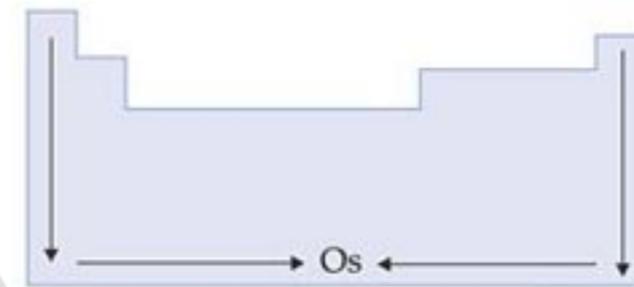


#### 6) Volume atômico

É o volume ocupado por 1 mol de átomos ( $6,0 \cdot 10^{23}$  átomos) do elemento no estado sólido.



#### 7) Densidade



#### 8) Ponto de fusão e ebulição



# RESUMO TEÓRICO

## LIGAÇÕES QUÍMICAS

1. Ligação Iônica
2. Os Compostos Iônicos
3. Ligação Covalente
4. Fórmulas Estruturais
5. Propriedade dos Compostos Covalentes
6. Orbitais Moleculares
7. Geometria Molecular
8. Polaridade das Ligações e das Moléculas
9. Forças Intermoleculares ou Forças de Van de Walls
10. Hibridização
11. Ligação Metálica
12. NOX - Número de Oxidação
13. Balanceamento por Tentativa
14. Balanceamento por Oxirredução
15. Balanceamento por Oxired - Casos Especiais

## Ligações químicas

### Por que os átomos se ligam?

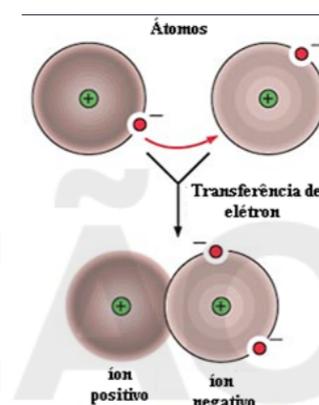
Os átomos se ligam para adquirir **estabilidade**. A grande maioria dos átomos adquire estabilidade quando apresentam **oito elétrons** na camada mais externa. Essa teoria foi proposta por **G.N.Lewis** em 1916. A teoria do octeto foi baseada no estudo dos gases nobres.

*“Os átomos tendem a ceder, receber ou compartilhar elétrons, até que tenham 8 elétrons na camada de valência (ou 2 no caso da camada K).”*

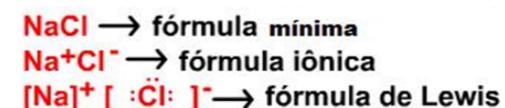
**“Existem muitas exceções a regra do octeto”**

### Ligação iônica ou eletrovalente

A ligação iônica resulta da transferência de elétrons da camada de valência de um átomo para a camada de valência de outro átomo. Os compostos iônicos geralmente são formados pela combinação de **metais (perdem elétrons)** com **ametais ou semimetais (ganham elétrons)**.



O processo de formação de um composto iônico é exotérmico. Os compostos iônicos não possuem moléculas.



Os cátions e ânions se agrupam formando um **retículo cristalino**. O retículo é a unidade de repetição do cristal iônico.



Toda ligação iônica forma um sistema eletricamente neutro. O número total de elétrons cedidos é igual ao número total de elétrons recebidos.

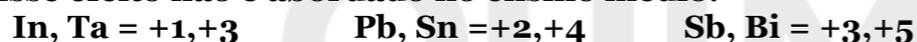


### Nox Lig. iônica (grupos)

- 1(1A) = +1
- 2(2A) = +2
- 13(3A) = +3, +1
- 14(4A) = +4, -4, +2
- 15(5A) = -3, +5, +3
- 16(6A) = -2
- 17(7A) = -1
- H = +1

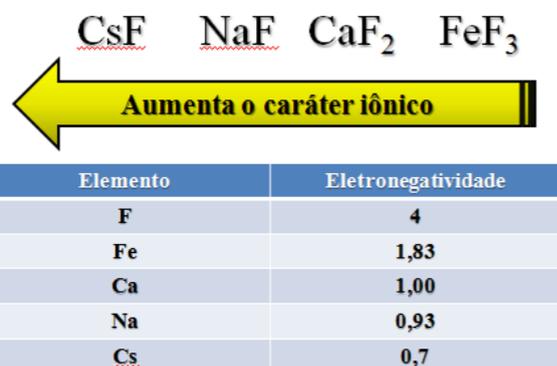
Obs:

Os nox +1 no grupo 13, +2 no grupo 14 e +3 no grupo 15 podem ser explicados pelo efeito do par inerte que é a tendência de formar íons duas unidades mais baixas em carga que o esperado pelo número do grupo; isto é mais pronunciado nos elementos pesados no bloco p da tabela. Esse efeito não é abordado no ensino médio.



### Caráter iônico

Quanto maior a diferença de eletronegatividade entre os átomos ligados, maior é o caráter iônico do composto. Quando a diferença de eletronegatividade entre os átomos é maior que 1,7 a **tendência** é de se ter um composto iônico.



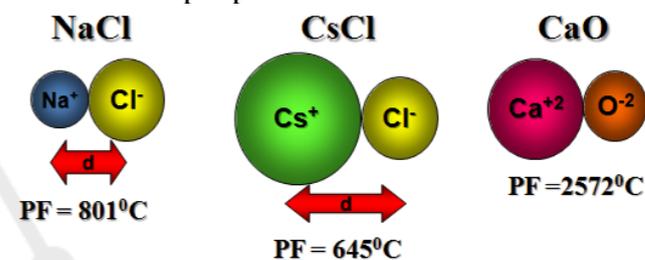
### Propriedades dos compostos iônicos

- Todo composto iônico é sólido nas CNTP.
- São duros e quebradiços.
- Possuem altos pontos de fusão e ebulição.
- São isolantes elétricos no estado sólido e condutores nos estados líquido e gasoso.

- Soluções de compostos iônicos conduzem corrente elétrica (soluções eletrolíticas).

### Observações

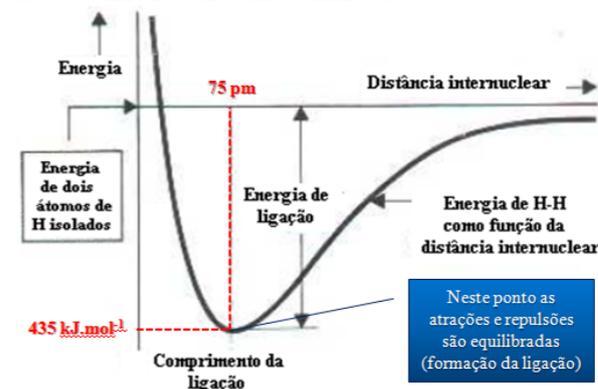
- Os metais de transição formam compostos iônicos que não obedecem obrigatoriamente à regra do octeto. Ex: FeCl<sub>3</sub>.
- Os compostos iônicos de hidrogênio são denominados hidretos.
- Compostos iônicos importantes:
- NaCl = sal de cozinha
- CaO = óxido de cálcio (cal virgem ou viva)
- Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = óxido de alumínio (principal componente do minério bauxita)
- Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = óxido de ferro III (principal componente do minério hematita)
- O PF/PE dos compostos iônicos é diretamente proporcional a carga dos íons e inversamente proporcional aos seus raios.



- Existem compostos formados por metais e ametais que não são iônicos. Ex: BeCl<sub>2</sub>, AlCl<sub>3</sub>.
- Existem compostos iônicos que não possuem metal. Ex (NH<sub>4</sub>)<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, H<sub>3</sub>C-NH<sub>3</sub><sup>+</sup>Cl<sup>-</sup>

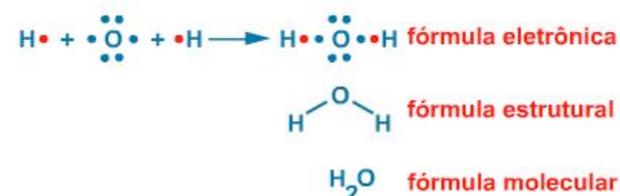
### Ligação covalente ou molecular

Uma ligação covalente resulta do compartilhamento de um par de elétrons entre os átomos. A força da ligação resulta da atração entre os **elétrons compartilhados** e os **núcleos positivos** dos átomos que participam da ligação. Quando as forças de repulsão estão em equilíbrio com as forças de atração, ocorre a formação da ligação covalente. O gráfico a seguir é o diagrama de energia para a formação da molécula de H<sub>2</sub>(g). Esse diagrama pode ser generalizado para todas as moléculas diatômicas.



O compartilhamento ocorre pela **superposição de orbitais (overlap)** formando orbitais moleculares. Orbital molecular é a região onde a probabilidade de encontrar o par de elétron compartilhado entre os dois átomos é máxima. Um composto covalente normalmente é formado por **ametais e semimetais**. A **superposição frontal dos orbitais forma uma ligação sigma e a superposição lateral dos orbitais forma uma ligação pi**. A ligação covalente pode ser formada de duas formas diferentes:

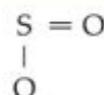
➤ **Ligação covalente comum ou normal**



➤ **Ligação covalente dativa ou coordenada**



**Observação** – Convencionou-se representar a ligação dativa por uma seta orientada do átomo que “cede” o par de e<sup>-</sup> para o átomo que o “recebe”; porém, modernamente, o uso da seta indicando a ligação dativa tende a ser substituído por um traço de covalente normal.



**Obs:**

Do ponto de vista da mecânica quântica a ligação covalente equivale a um aumento da probabilidade de se encontrar os elétrons na região entre os dois núcleos.

**Regras para construção de fórmulas estruturais**

- Some os elétrons de valência de todos os átomos
- Coloque uma ligação para cada ligante
- Complete o octeto dos ligantes
- Coloque os elétrons restantes no átomo central

- Se o átomo central não alcançou o octeto, procure completá-lo com ligações múltiplas

**Propriedades dos compostos moleculares**

Ao contrário dos compostos iônicos os compostos moleculares não possuem propriedades muito regulares.

- Em condições ambientes podem ser encontrados nos **três estados físicos**.
- Geralmente possuem **baixos PF/PE**. Exceções: grafite, diamante e sílica
- São isolantes elétricos. Exceção: grafite, fulerenos, nanotubos e grafeno.
- Alguns compostos moleculares conduzem corrente elétrica em solução: **ácidos e NH<sub>3</sub>**
- Podem possuir dois **tipos de retículos: cristalino molecular** formado por moléculas discretas e **cristalino covalente** onde todos os átomos estão unidos por ligações covalentes formando uma **macromolécula** (diamante, grafite e sílica).

**Exceções a regra do octeto**

- 1) Expansão do octeto (hipervalência)** = estabilização com mais de 8 elétrons na camada de valência.  
Ex: SF<sub>6</sub>, PCl<sub>5</sub>, XeF<sub>4</sub>, SF<sub>4</sub>
- 2) Hipovalência** = estabilização com menos de 8 elétrons na camada de valência.  
Ex: BeCl<sub>2</sub>, BeH<sub>2</sub>, BeF<sub>2</sub>, AlCl<sub>3</sub>, BF<sub>3</sub>, BH<sub>3</sub>, BCl<sub>3</sub>.
- 3) Moléculas com número ímpar de elétron** = o átomo central se estabiliza com 7 elétrons na camada de valência ficando com um elétron desemparelhado (radical). Esse tipo de molécula é **paramagnética**. Com número par de elétron **diamagnética**.  
Ex: NO, NO<sub>2</sub>, ClO<sub>2</sub>.

**Geometria molecular**

Cada molécula possui um arranjo definido de átomos no espaço. Esse arranjo é determinado pela repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (TRPECV) dos átomos da molécula. A geometria molecular depende do número de ligantes e do número de pares eletrônicos no átomo central. Podemos determinar a geometria de uma molécula determinando o seu grupo AXE.

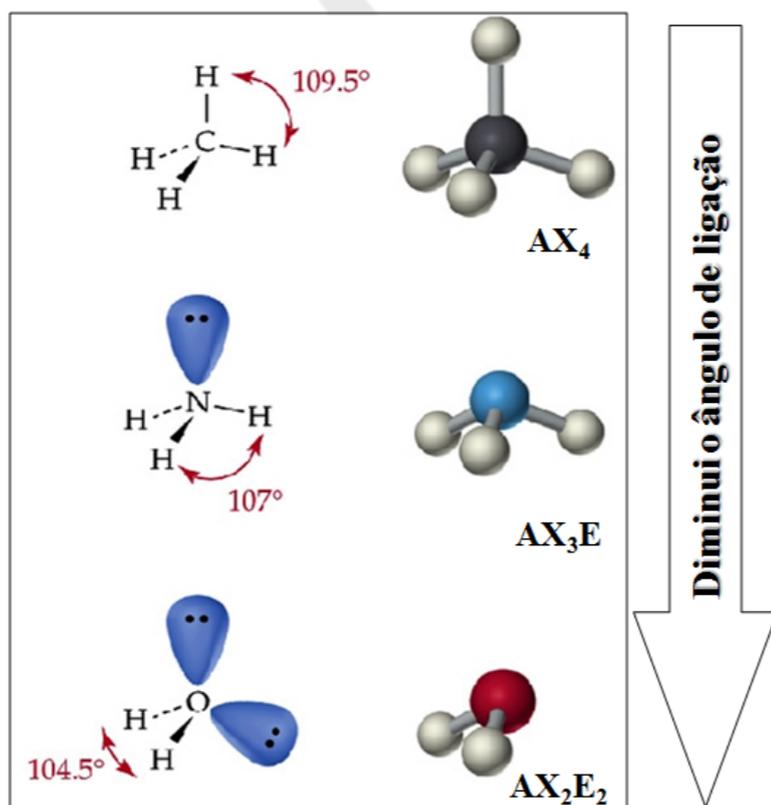
- Legenda:
- **A = átomo central**
- **X = ligante**
- **E = par eletrônico no átomo central**



### Grupos e geometria molecular

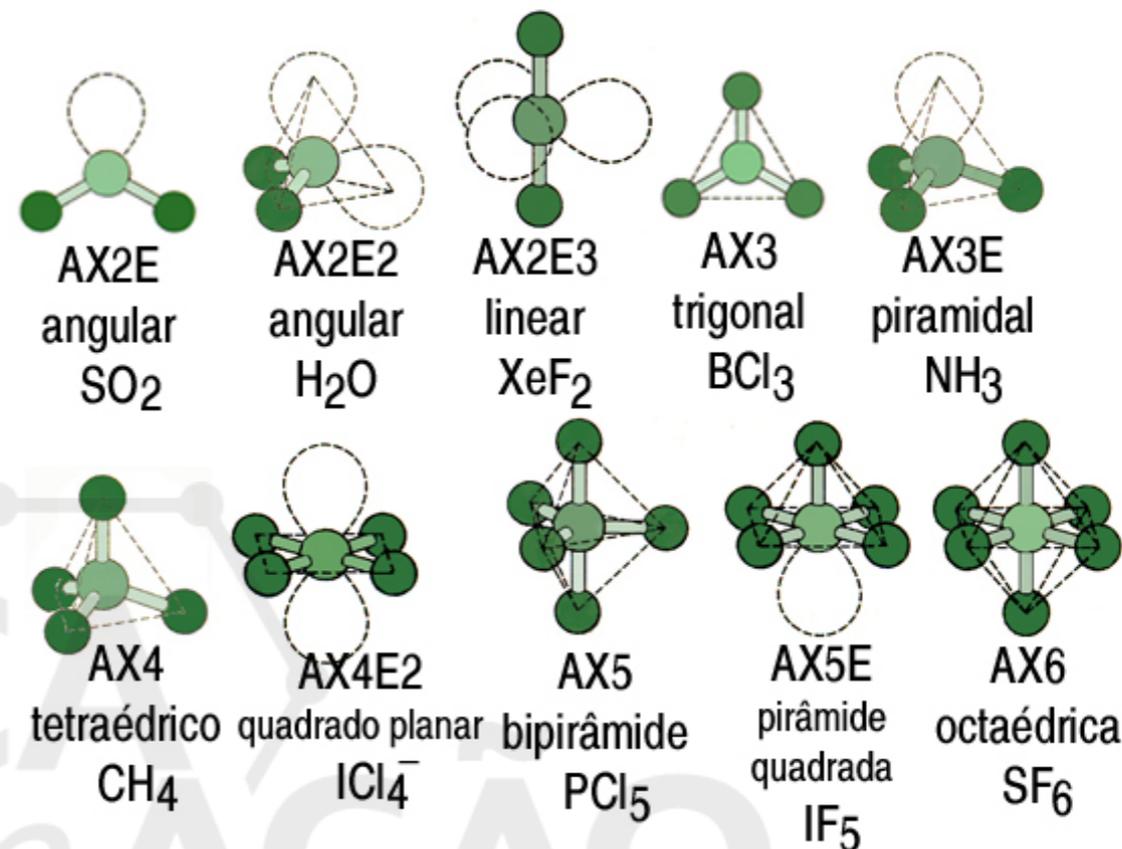
- $\text{A}_2$  = linear
- $\text{AX}_2$  = linear
- $\text{AX}_2\text{E}$  = angular
- $\text{AX}_3$  = trigonal plana
- $\text{AX}_4$  = tetraédrica
- $\text{AX}_3\text{E}$  = piramidal
- $\text{AX}_2\text{E}_2$  = angular
- $\text{AX}_5$  = bipirâmide trigonal
- $\text{AX}_4\text{E}$  = tetraedro distorcido ou gangorra
- $\text{AX}_3\text{E}_2$  = forma de T
- $\text{AX}_2\text{E}_3$  = linear
- $\text{AX}_6$  = octaédrica
- $\text{AX}_5\text{E}$  = pirâmide de base quadrada
- $\text{AX}_4\text{E}_2$  = quadrado planar

### Relação entre ângulo de ligação e os pares de elétrons livres



## Geometria Molecular

### Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons de Valência



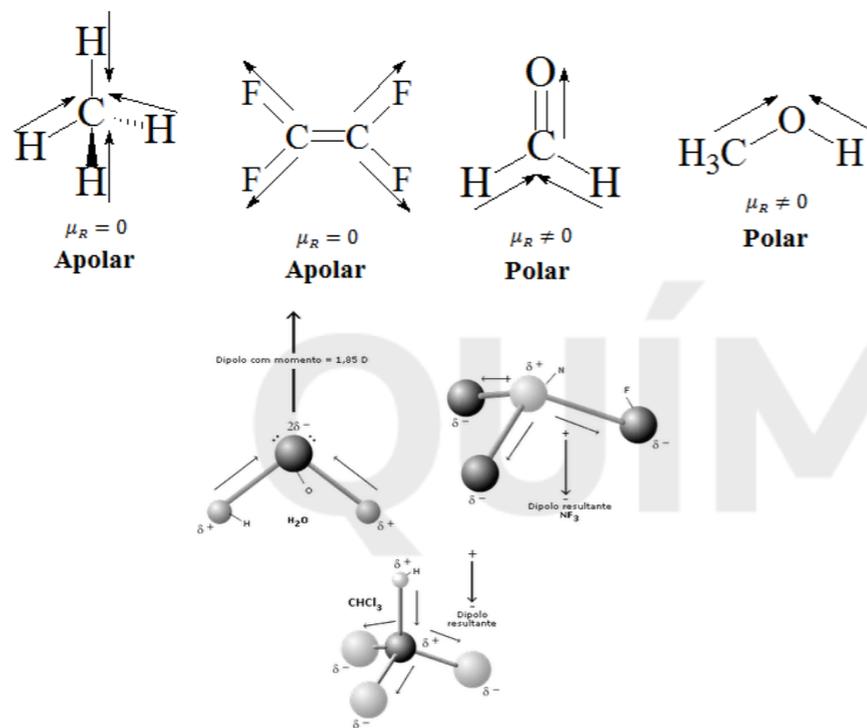
### Polaridade de ligações

- Em função da diferença de eletronegatividade dos átomos que estão unidos por uma ligação covalente, podemos classificá-las em polares ou apolares. Nas ligações covalentes apolares não há diferença de eletronegatividade entre os átomos ligados, portanto, os elétrons das ligações são igualmente compartilhados entre os átomos, resultando em uma distribuição homogênea de densidade eletrônica.
- Entretanto, em ligações covalentes que envolvem átomos diferentes, ocorre uma distribuição desigual de densidade eletrônica na ligação, devido à diferença de eletronegatividade existente entre os átomos que estão unidos. O átomo da ligação que possui maior eletronegatividade adquire uma maior densidade eletrônica, desenvolvendo, portanto, uma carga parcial negativa ( $\delta^-$ ). Já o átomo com menor eletronegatividade, adquire uma carga parcial positiva ( $\delta^+$ ) em função da sua menor densidade eletrônica. Diz-se, nesse caso que a ligação é polar.

- A polaridade da ligação é representada por um vetor denominado momento de dipolo ( $\mu$ ), direcionado da extremidade positiva para a negativa.

### Polaridade de moléculas

A polaridade de uma molécula é determinada pela soma dos momentos de dipolo de todas as ligações. Por se tratar de uma operação vetorial, a geometria da molécula deve ser respeitada no somatório dos momentos de dipolo. Quando o somatório dos momentos de dipolo for igual a zero a molécula é apolar e quando o somatório for diferente de zero polar. Observe os exemplos abaixo:



### Propriedades físicas

“Propriedades físicas” é uma expressão de significado muito amplo: engloba todas as propriedades das substâncias relacionadas a fenômenos físicos. Não teria nenhum sentido tentar estudar todas as propriedades físicas de uma vez; apenas para enumerá-las todas já seriam consumidas um espaço enorme. Em geral estabelecemos objetivos de natureza prática para delimitar nossos estudos: as propriedades físicas que nos interessam neste momento são aquelas que utilizamos corriqueiramente nos trabalhos comuns de laboratório, como ponto de fusão, ponto de ebulição e solubilidade. Estas propriedades estão fortemente associadas com as forças que mantêm as moléculas unidas umas com as outras, chamadas forças intermoleculares.

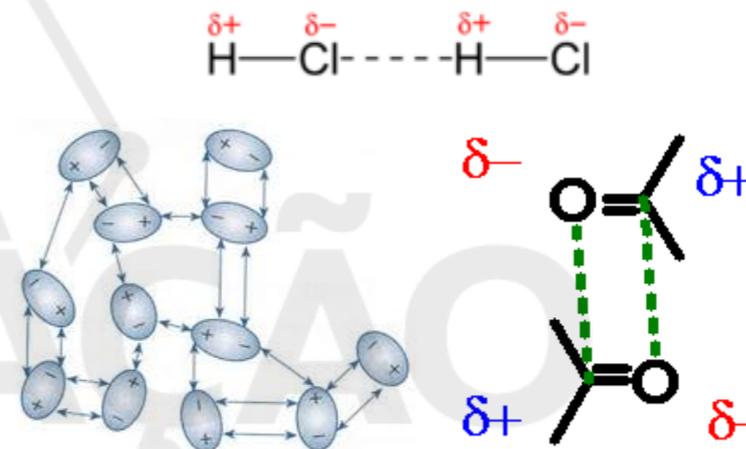
### Forças intermoleculares ou forças de Van der Waals

A ligação que prende os átomos dentro de uma molécula é a ligação covalente. As forças de atração entre as moléculas são de natureza elétrica. Vamos, agora, analisar as forças que existem entre as moléculas. Essas forças podem ser divididas em três tipos: dipolo-dipolo (dipolo permanente), ligação (ponte) de hidrogênio e forças de London (dipolo induzido).

### Dipolo-dipolo ou dipolo permanente (DD)

Se as moléculas de uma substância contêm um dipolo permanente (devido à polaridade de uma ou mais de suas ligações covalentes), então podemos facilmente ver como essas moléculas se atraem umas às outras: o lado positivo do dipolo de uma molécula atrai o lado negativo do dipolo da outra molécula. Esta força existe, portanto, entre moléculas polares ( $\mu_r \neq 0$ ).

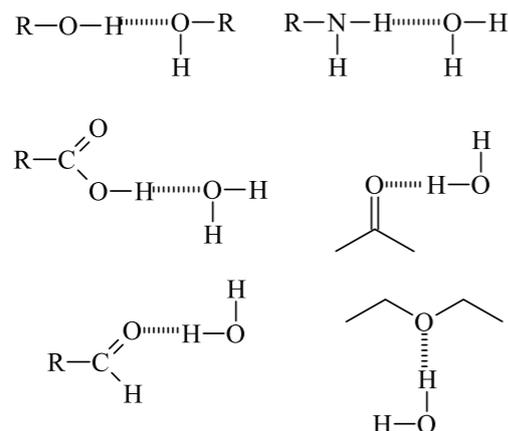
Exemplos:



### Ligações de hidrogênio (LH)

O átomo de hidrogênio tem propriedades especiais por ser um átomo muito pequeno, sem elétrons no interior: por dentro da camada de valência há apenas o núcleo do átomo, o próton. Uma das propriedades que só o átomo de hidrogênio apresenta é a capacidade de exercer uma força de atração intermolecular chamada ligação de hidrogênio. A ligação de hidrogênio só pode ocorrer quando o hidrogênio estiver ligado a um átomo pequeno e muito eletronegativo: apenas F, O, N satisfazem as condições necessárias. Quando o hidrogênio está ligado a um átomo muito eletronegativo, a densidade eletrônica em torno do próton fica bem baixa; esta parte da molécula é então fortemente atraída pelos pares de elétrons dos átomos de F, O, N de outra molécula, estabelecendo a ligação de hidrogênio.

Exemplos:



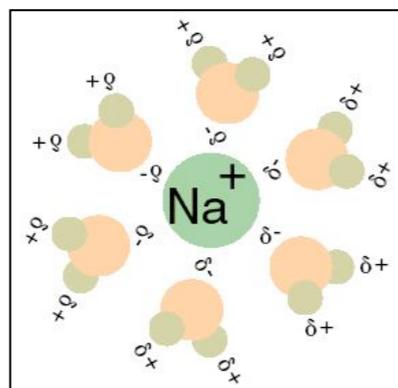
As ligações de hidrogênio apresentam um importante papel tanto nas propriedades especiais da água como em moléculas de extrema importância para os seres vivos: elas determinam a forma das proteínas, e constituem a força que une as hélices do DNA.

Obs:

- A ligação de hidrogênio é um dipolo-dipolo muito forte, devido à grande diferença de eletronegatividade entre o H e os átomos F, O e N.
- A molécula de água pode formar no máximo **quatro ligações de hidrogênio**.
- No estado líquido o número máximo de LH formadas é 3,4 e no estado sólido quatro. A formação de uma estrutura hexagonal no cristal de gelo, explica o **comportamento anômalo** da água. As moléculas ficam mais distantes umas das outras,  **aumentando o volume e diminuindo a densidade**.

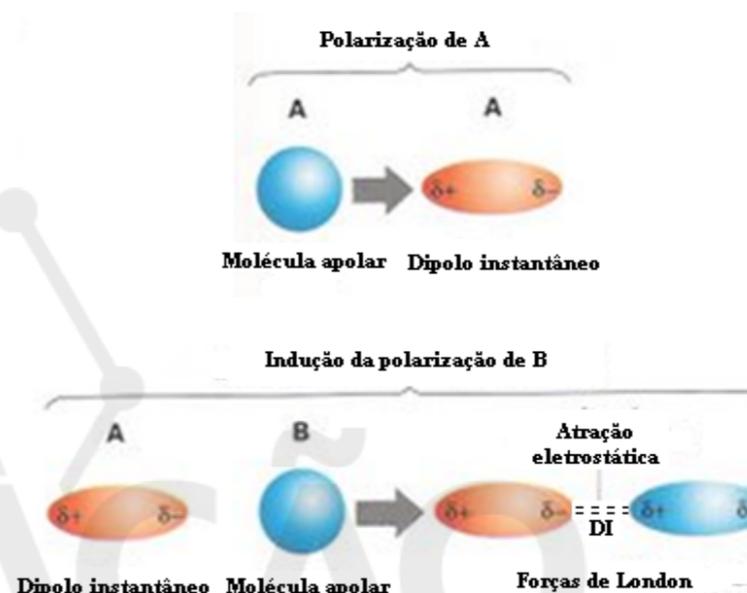
### Íon-Dipolo:

Ocorrem entre íons (cátions e ânions) e moléculas polares. Está interação é característica de **íons dissolvidos em solventes polares** (Ex: água).



### Forças de London ou dipolo induzido

Ocorrem quando as moléculas não contêm dipolos (são apolares), como é que elas podem se atrair? Pense numa molécula como uma entidade não estática, mas contendo elétrons em constante movimento; é razoável pensar que num determinado momento a distribuição nessa molécula pode não ser perfeitamente simétrica, e apareçam então pequenos dipolos instantâneos neste momento. Esses dipolos desaparecerão em muito pouco tempo, podendo levar a uma molécula neutra ou a outros dipolos, inclusive contrários; mas no curto espaço de tempo em que eles existem, eles podem induzir a formação de dipolos contrários na molécula vizinha, levando as duas a se atraírem mutuamente. Exemplo:



Obs:

- As forças de London surgem da atração entre dipolos elétricos **instantâneos (induzidos)** em moléculas vizinhas e age entre todos os tipos de moléculas; sua força aumenta com o número de elétrons em uma molécula.

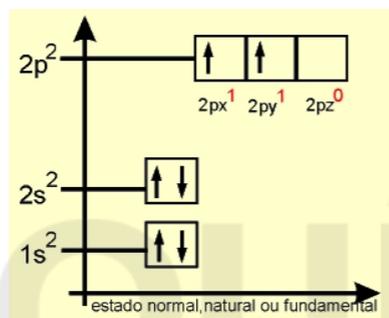
Tipo de ligação	Energia (kJ/mol)
Ligação de hidrogênio	10-40
Dipolo-dipolo	0,1-10
Forças de London	0,1-2,0
Ligação covalente	> 100

## Revisão de orbitais

- Orbital é a região de maior probabilidade de se encontrar o elétron.
- Cada orbital possui um formato espacial definido.
- Existem 4 tipos principais de orbitais: s, p, d e f.
- As hibridizações do carbono utilizam somente os orbitais s e p.

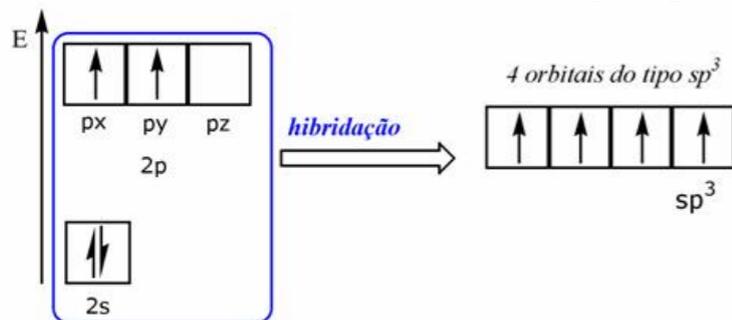
## Hibridização

- O número de elétrons desemparelhados (orbitais incompletos) indica a quantidade de ligações covalentes que podem ser efetuadas.
- No estado fundamental, o carbono possui somente 2 elétrons desemparelhados, podendo portanto, fazer somente duas ligações.

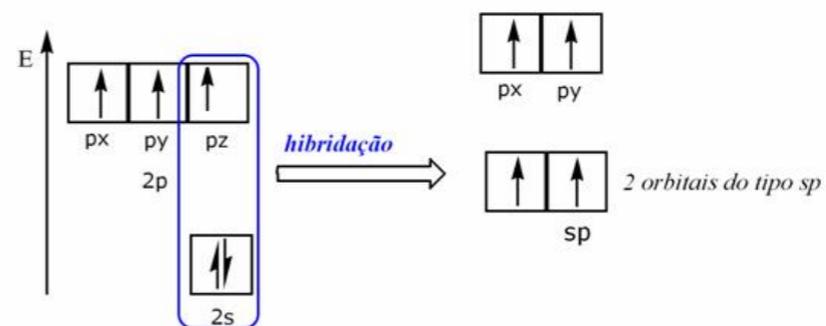


- A hibridização é um fenômeno que permite ao átomo realizar um número maior de ligações, aumentando assim a sua estabilidade.
- Hibridização consiste na  fusão  de orbitais atômicos incompletos, que se transformam originando novos orbitais, em  igual número . Esses novos orbitais são denominados de  orbitais híbridos .
- Existem três hibridizações para o átomo de carbono.

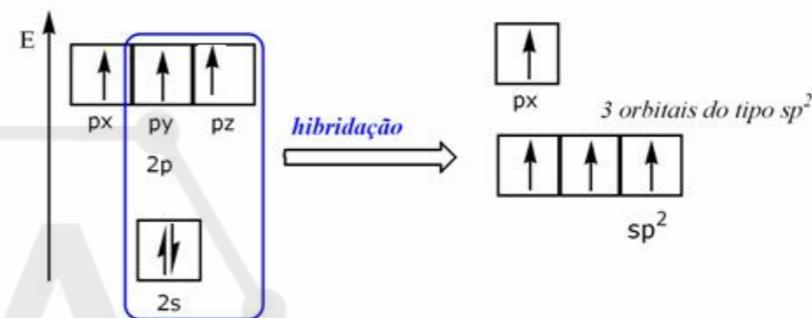
## Hibridização sp³



## Hibridização sp²



## Hibridização sp



- Outros átomos também podem sofrer hibridização. Ex: O, N, S, Be, P, B etc

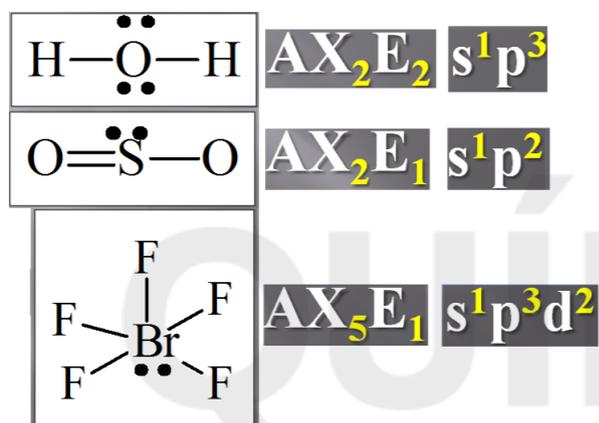
Tipo de carbono	Hibridização	Geometria	Ângulo de ligação
Saturado	sp³	Tetraédrica	109,47°
1 dupla	sp²	Trigonal plana	120°
1 tripla ou 2 duplas	sp	Linear	180°

- A hibridização determina a geometria da molécula.
- Os orbitais p que não participam da hibridização são denominados de “p puro”.
- A superposição  lateral  de orbitais “p puro” formam as ligações  pi .
- As ligações  sigmas  são formadas por superposições  frontais  de orbitais: s, p ou híbridos.

## Relação entre geometria molecular e a hibridização do átomo central

Geometria	Hibridização
$AX_2$	$sp$
$AX_3, AX_2E$	$sp^2$
$AX_4, AX_3E, AX_2E_2$	$sp^3$
$AX_5, AX_4E, AX_3E_2, AX_2E_3$	$sp^3d$
$AX_6, AX_5E, AX_4E_2$	$sp^3d^2$

Exemplos:



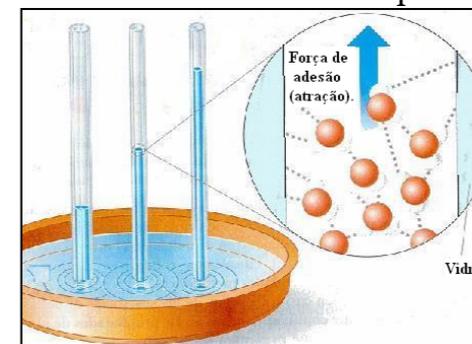
### Tensão superficial

Tensão superficial é um efeito que ocorre na camada superficial de um líquido, que leva a sua superfície a se comportar como uma membrana elástica. As moléculas situadas no interior de um líquido são atraídas em todas as direções pelas moléculas vizinhas e, por isso, a resultante das forças que atuam sobre cada molécula é praticamente nula. As moléculas da superfície do líquido, entretanto, sofrem apenas atração lateral e inferior. Essa desigualdade de atrações na superfície provoca a contração do líquido, dando-nos a impressão de existir uma fina película na sua superfície.

- A tensão superficial é responsável pelo fato de alguns objetos e insetos flutuarem sobre os líquidos.
- A adição de tensoativos (surfactantes) como detergente ou sabão diminui a tensão superficial do líquido.
- A tensão superficial também é responsável pelo formato esférico das gotas dos líquidos. A forma esférica corresponde à melhor relação área – volume, minimizando o número de moléculas na superfície.

## Capilaridade

A ação capilar dos líquidos ( elevação de líquidos em tubos estreitos) também está relacionada com a tensão superficial. Quanto maior a tensão superficial e a estreiteza do tubo, mais alta será a escalada do líquido.



- Toalhas de papel enxugam água por ação capilar dentro dos canais estreitos entre as fibras de papel. A ação capilar também está relacionada com o transporte de líquidos nos vegetais.
- A altura da coluna de líquido dentro do tubo pode ser utilizada para determinar a tensão superficial ( $\gamma$ ) do líquido.

$\gamma$  = tensão superficial ( $N \cdot m^{-1}$ ).

$g$  = aceleração da gravidade ( $m \cdot s^{-2}$ )

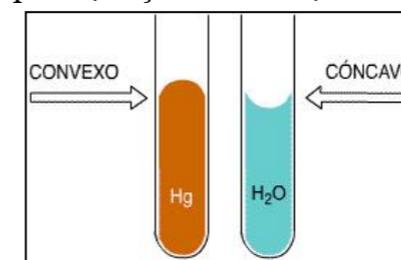
$r$  = raio do tubo ( $m$ )

$d$  = densidade do líquido ( $kg \cdot m^{-3}$ )

### Menisco

O menisco de um líquido é a superfície curvada que se forma em um tubo estreito.

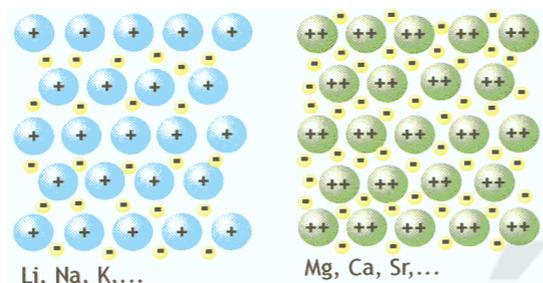
- O menisco pode ser côncavo ou convexo. O menisco côncavo é formado quando a força de atração entre o líquido e a superfície do material (força de adesão) é mais forte que as forças de atração existentes entre as partículas que constituem o líquido (força de coesão).



## Ligação metálica

### Teoria do “mar de elétrons” ou “nuvem eletrônica”

Uma das características dos metais é a facilidade de perder elétrons devido ao baixo potencial de ionização dessa classe de elementos. Como os átomos de um metal se ligam uns aos outros? A combinação de metais não segue o raciocínio da regra do octeto. Em um pedaço de metal, os átomos liberam os seus elétrons de valência, que ficam livres para percorrer toda a estrutura. O resultado é um arranjo ordenados de íons positivos mergulhados em uma nuvem eletrônica. A nuvem eletrônica formada pertence a todo o cristal metálico.



### “Representação do mar de elétrons ou nuvem eletrônica”

A força da ligação metálica resulta da atração entre a nuvem de elétrons deslocalizados (livres) e os núcleos positivos. As principais características da ligação metálica são:

- A ligação metálica não é direcionada. O movimento dos elétrons livres é desordenado.
- Não ocorre ligação metálica no estado gasoso. Os átomos do metal precisam estar muito próximos para ocorrer a formação da nuvem eletrônica e no estado gasoso a distância entre os átomos é muito grande.
- O modelo do “mar de elétrons” não explica totalmente todas as propriedades dos metais.
- A teoria mais moderna sobre ligação metálica é a “teoria das bandas eletrônicas”.

### Propriedades dos metais

- São sólidos nas CNTP (exceção Hg).
- Geralmente possuem altos PF/PE. Isso indica que a força de atração entre os átomos é muito forte.
- Brilho.
- Maleáveis (facilidade de forma lâminas) e dúcteis (facilidade formar fios).



“papel alumínio”



“ fio de cobre”

- Bons condutores de eletricidade e calor.
- O brilho, a maleabilidade e a ductibilidade em um metal são explicados pela mobilidade dos elétrons de valência.
- A condutividade elétrica de um metal diminui com o aumento da temperatura.
- No estado sólido, os átomos dos metais se agrupam de forma geometricamente ordenada, dando origem às células ou reticulados cristalinos.

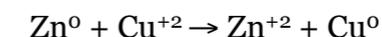
### Ligas metálicas

Ligas são materiais metálicos que são misturas de dois ou mais metais ou metais com ametais. As ligas tendem a ser duras e ter menor condutividade elétrica que o metal puro. As principais ligas do cotidiano são:

- **Latão** = Cu + Zn
- **Bronze** = Cu + Sn
- **Aço** = Fe + C
- **Aço inoxidável** = Fe + C + Ni + Cr
- **Ouro 18** = Au + Cu + Ag
- **Amalgamas** = ligas que contêm mercúrio. Ex: **amalgama dentário** de Ag + Hg.
- **Liga leve** = Al + Mg

### Reações de óxido-redução (redox)

São reações químicas em que o estado de oxidação (nox) de uma ou mais substâncias se altera. O nox é um número positivo ou negativo que se atribui segundo certas regras, a um elemento numa molécula ou íon.

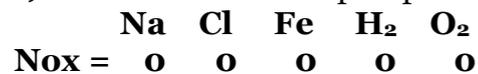


- O Zn<sup>0</sup> perdeu elétrons ⇒ **sofreu oxidação; aumenta o nox.**
- O Cu<sup>+2</sup> perdeu elétrons ⇒ **sofreu redução; diminui o nox.**

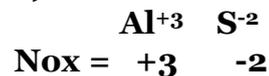
A espécie química que sofre **redução** é denominada de agente **oxidante** e a que sofre **redução** de **agente redutor**.

## Regras para determinação do nox

1) Toda substância simples possui nox igual à zero:



2) O nox de um íon monoatômico é igual a sua carga.



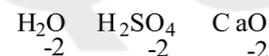
3) Alguns elementos possuem nox fixo:

- Metais alcalinos (grupo 1) = +1
- Metais alcalinos terrosos (grupo dois) = +2
- Al, Bi = +3
- Zn, Cd = +2
- Ag = +1
- F = -1

4) O nox do H geralmente é +1, quando combinado com metais -1.



5) O nox do oxigênio geralmente é -2.



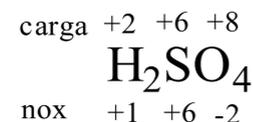
Exceções:

- Peróxidos  $\Rightarrow -1 \Rightarrow$  Ex:  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CaO}_2$ ,  $\text{K}_2\text{O}_2$
- Superóxidos  $\Rightarrow -1/2 \Rightarrow$  Ex:  $\text{KO}_2$ ,  $\text{CsO}_2$

6) Halogênios a direita da fórmula possuem nox -1.



7) A soma do nox de todos os átomos deve ser igual à carga do composto.



## Balanceamento de equações redox

O balanceamento de equações redox baseia-se num princípio fundamental:

## O nº de elétrons cedidos = O nº de elétrons recebidos

A igualdade na quantidade dos elétrons na redução e na oxidação é à base do balanceamento de reações pelo método de óxido-redução.

## Regras para o balanceamento

1º) Determinar, na equação química, qual espécie se oxida e qual se reduz.

2º) Escolher os produtos ou reagentes para iniciar o balanceamento.

3º) Encontrar os  $\Delta_{\text{oxid}}$  e  $\Delta_{\text{red}}$ .

$\Delta_{\text{oxid}}$  = número de elétrons perdidos x atomicidade do elemento

$\Delta_{\text{red}}$  = número de elétrons recebidos x atomicidade do elemento

As atomicidades são definidas no membro de partida (reagentes ou produtos).

4º) Se possível, os  $\Delta_{\text{oxid}}$  e  $\Delta_{\text{red}}$  podem ser simplificados. Exemplificando...

$$\Delta_{\text{oxid}} = 4 \quad \Delta_{\text{red}} = 2$$

Simplificando ...

$$\Delta_{\text{oxid}} = 2 \quad \Delta_{\text{red}} = 1$$

5º) Para igualar os elétrons nos processos de oxidação e redução:

O  $\Delta_{\text{oxid}}$  se torna o coeficiente da substância que contém o átomo que se reduz.

O  $\Delta_{\text{red}}$  se torna o coeficiente da substância que contém o átomo que se oxida.

6º) Os coeficientes das demais substâncias são determinados por tentativas, baseando-se na conservação dos átomos.

## Exemplo



O Br se oxida, pois tem nox = -1 no primeiro membro e nox = 0 no segundo. Esta oxidação envolve 1 elétron e como sua atomicidade no NaBr é igual a 1, temos:

$$\Delta_{\text{oxid}} = 1 \times 1 = 1$$

O Mn se reduz, pois tem nox = +4 no primeiro membro e nox = +2 no segundo. Esta redução envolve 2 elétrons e como sua atomicidade no  $\text{MnO}_2$  é igual a 1, temos:

$$\Delta_{\text{red}} = 2 \times 1 = 2$$

Invertendo os coeficientes obtidos :



Os demais coeficientes são obtidos por tentativas.



Os coeficientes iguais a 1 foram colocados somente por questões de evidência, uma vez que os mesmos são dispensáveis.

## RESUMO TEÓRICO

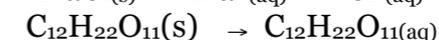
## FUNÇÕES INORGÂNICAS

1. Introdução: Conceitos Gerais
2. Ácidos: Definição e Classificação
3. Ácidos: Força Ácida
4. Ácidos: Nomenclatura (1/2)
5. Ácidos: Nomenclatura (2/2)
6. Fórmulas Estruturais e Ácidos Meta, Piro e Orto
7. Bases
8. Sais: Definição e Nomenclatura
9. Sais: Classificação (1/2)
10. Sais: Classificação (2/2)
11. Óxidos
12. Teorias Modernas de Ácidos e Bases

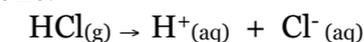
Dissociação e ionização

Estudando a condutividade elétrica de soluções, Arrhenius estabeleceu a teoria da dissociação iônica.

**Dissociação** = separação de íons ou partículas



**Ionização** = formação de íons.



**Solução eletrolítica** = solução que conduz corrente elétrica (contém íons, solução iônica).

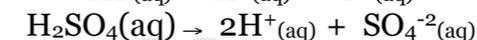
**Solução não eletrolítica** = não conduz corrente elétrica (não contém íons, solução molecular).

**Obs:**

- A condutividade elétrica é proporcional a concentração de íons.

Ácidos de Arrhenius

**Ácidos** = substâncias que em solução aquosa sofrem ionização, liberando como cátions somente  $\text{H}^{+}$ .

Classificação de ácidos

## ➤ Quanto à presença de oxigênio

*Oxiácidos* = HClO

*Hidrácidos* = HBr

## ➤ Quanto ao número de hidrogênios ionizáveis

*Monoácido* = HI

*Diácido* = H<sub>2</sub>S

*Triácido* = H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>

*Tetrácido* = H<sub>4</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>

**Obs:**

- Exceções H<sub>3</sub>PO<sub>3</sub>(diácido), H<sub>3</sub>PO<sub>2</sub>(monoácido)

## ➤ Quanto ao número de elementos

*Binários* = HF

*Ternários* = HBrO

*Quaternários* = HCNO

➤ **Quanto a volatilidade**

Ácidos voláteis ( PE < 100°C ) = hidrácidos ,HNO<sub>3</sub> , HClO<sub>3</sub> etc.

Ácidos fixos ( PE > 100°C ) = H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, HBO<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>C<sub>2</sub>O<sub>4</sub> etc.

**Obs:** Para ácidos fixos de um mesmo elemento, quanto maior o número de oxigênios maior é o PE.

Obs:

➤ **Quanto à força ácida**

A força de um ácido é medida pelo seu grau de ionização(α)

(α) = n° moléculas ionizadas / n° moléculas dissolvidas

α > 50 % = fortes    5% < α < 50% = moderados    α < 5% = fracos

**Obs:**

Para oxiácidos a força pode ser medida pela diferença entre os átomos de oxigênio e hidrogênio.

$$(n^{\circ} \text{oxigênios}) - (n^{\circ} \text{hidrogênios ionizáveis}) = X$$

X = 3 ou 2 fortes

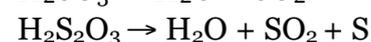
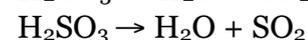
X = 1 moderados

X = 0 fracos

**Obs:**

- H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> é um ácido fraco.
- Os s ácidos orgânicos em geral são mais fracos que os inorgânicos.

➤ **Ácidos instáveis**



**Nomenclatura**

**1)Hidrácidos**

Ácido **nome do elemento + ídrico**

**HCl = Ácido clorídrico**

**HF = Ácido fluorídrico**

**HBr = Ácido bromídrico**

**HCN = Ácido cianídrico**

**H<sub>2</sub>S = Ácido sulfídrico**

**2)Oxiácidos**

Em oxiácidos a nomenclatura depende do **nox do elemento central(X)**.

Terminação	Nox do elemento central
hipo-oso	+1 e +2
oso	+3 e +4
ico	+5 e +6
Per-ico	+7



X= elemento central

Nos oxiácidos o nox do **oxigênio** é **-2** e do **hidrogênio** é **+1**.

•HClO =ácido **hipocloroso** (nox Cl= +1)

•HNO<sub>2</sub> = ácido **nitroso** (nox N= +3)

•H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> = ácido **sulfúrico** (nox S= +6)

•HClO<sub>4</sub> = ácido **perclórico** (nox Cl= +7)

**Exceções:**

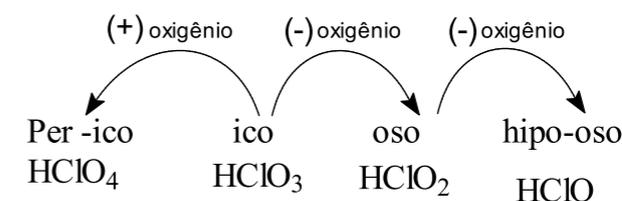
Os ácidos dos grupos **14(4A)** e **13(3A)** possuem nox **+4** e **+3** com terminação **ico**.

**H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> = ácido carbônico**

**H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> = ácido bórico**

**Nox de oxiácidos nos grupos da tabela**

Grupo	Per-ico	ico	oso	Hipo-oso
17(7A)	+7	+5	+3	+1
16(6A)	—	+6	+4	—
15(5A)	—	+5	+3	+1
14(4A)	—	+4	—	—
13(3A)	—	+3	—	—



## Principais ácidos “ico” de referência

Grupo 17 = HClO<sub>3</sub>

Grupo 16 = H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

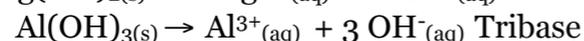
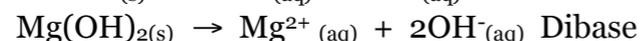
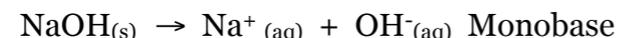
Grupo 15 = HNO<sub>3</sub>, H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>

Grupo 14 = H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>

Grupo 17 = H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub>, HAlO<sub>2</sub>

## BASES (ARRHENIUS)

São substâncias que se dissociam em água liberando como único ânion o íon hidróxido(OH<sup>-</sup>).



As bases possuem sabor adstringente, que “amarra” a boca. O termo **alcalino** significa **básico**.

### **Obs:**

- As bases geralmente são compostos iônicos.
- Fórmula geral = M(OH)<sub>x</sub>, M= cátion metálico ou NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, X = Nox do metal

## Nomenclatura

### Bases de metais de nox fixo

Regra = Hidróxido de nome do elemento

NaOH = Hidróxido de sódio

Zn(OH)<sub>2</sub> = Hidróxido de zinco

AgOH = Hidróxido de prata

### **Obs:**

- Metais de nox fixo : metais alcalinos (+1), alcalinos terrosos(+2), Al e Bi (+3), Cd e Zn(+2), Ag (+1)

### Bases de metais de nox variável

Regra = Hidróxido de nome do elemento valência (numeral romano)

Fe(OH)<sub>3</sub> = Hidróxido de ferro III ou hidróxido férrico( nox maior )

Fe(OH)<sub>2</sub> = Hidróxido de ferro II ou hidróxido ferroso( nox menor )

### **Obs:**

- Metais de nox variável mais comuns: Cu e Hg ( +1, +2 ), Fe ( +2, +3 ), Pb e Sn ( +2, +4 ), Au ( +1, +3 ).

## Classificação das bases

### **01) Quanto à força**

Fortes = Grupo 1 e 2 (alcalinos e alcalinos terrosos)

Fracas = As demais

### **Obs:**

- O hidróxido de berílio(Be(OH)<sub>2</sub>) é fraco e anfotérico.
- Quanto menor o nox do metal mais forte é a base.

### **02) Quanto à solubilidade em água**

**Solúveis** = Grupo 1(1A) e NH<sub>4</sub>OH

**Parcialmente solúveis** = Grupo 2 (2A)

**Insolúveis** = As demais

### **Obs:**

- As bases de Be e Mg são insolúveis.
- O NH<sub>4</sub>OH( hidróxido de amônio ) não existe na forma de substância pura. Uma solução de hidróxido de amônio é na verdade uma solução de amônia (NH<sub>3</sub>) em água.
- A solução de hidróxido de amônio é conhecida comercialmente como amoníaco.

### **Indicadores ácido -base**

Indicador ácido -base é uma substância que muda de cor em certa faixa de pH, denominada zona de viragem.

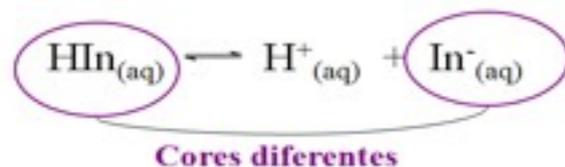
Indicador	Zona de viragem(pH)	Abaixo da zona de viragem	Acima da zona de viragem
Fenolftaleína	8,2 -10	incolor	rosa
Azul de bromotimol	6,6 -7,6	amarelo	azul

### **Papel de tornassol**

Vermelho = meio ácido

Azul = meio básico

- Indicadores ácido-base são ácidos fracos em que a espécie **ionizada** possui cor diferente da **não ionizada**.



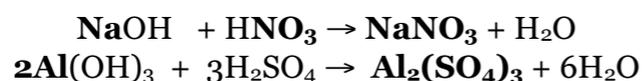
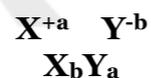
A mudança de cor é causada pelo **deslocamento do equilíbrio**.

### Sais

Toda substância (geralmente iônica) que em meio aquoso, se dissocia liberando pelo menos um cátion diferente de  $\text{H}^+$  e um ânion diferente de  $\text{OH}^-$ .



Os sais são produtos da reação de neutralização entre um ácido e uma base. Um sal é formado por um cátion proveniente da base e por um ânion proveniente do ácido.



### Nomenclatura dos sais

A nomenclatura dos sais é obtida a partir do ânion derivado do ácido que originou o sal na reação de neutralização.

Sufixo do ácido	ídrico	ico	oso
Sufixo do ânion	eto	ato	ito

Nomenclatura do sal  $\rightarrow$  *nome do ânion de nome do cátion*

Cátion	Ânion	Fórmula	Nome do sal
$\text{K}^+$	$\text{PO}_4^{-3}$	$\text{K}_3\text{PO}_4$	Fosfato de potássio
$\text{Na}^+$	$\text{NO}_3^-$	$\text{NaNO}_3$	Nitrato de sódio
$\text{Ca}^{+2}$	$\text{CO}_3^{-2}$	$\text{CaCO}_3$	Carbonato de cálcio
$\text{Al}^{+3}$	$\text{SO}_4^{-2}$	$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$	Sulfato de alumínio

Para cátions que possuem nox variável deve-se informar o nox em algarismos romanos no final do nome do sal.

$\text{Fe}(\text{SO}_4)_3$  = sulfato de ferro III ou sulfato férrico (**nox maior**)

$\text{FeSO}_4$  = sulfato de ferro II ou sulfato ferroso (**nox menor**)

### Classificação dos sais

**1) Sais normais:** são produtos da neutralização total de um ácido e uma base. Não possuem  $\text{H}^+$  ionizável e também não apresentam  $\text{OH}^-$ .



**2) Hidrogenossais:** são produtos da neutralização parcial de um ácido. Possuem  $\text{H}^+$  ionizável.

$\text{NaHCO}_3$  = Hidrogenocarbonato de sódio (bicarbonato de sódio)

$\text{KH}_2\text{PO}_4$  = Diidrogenofosfato de potássio

**3) Hidroxissais:** são produtos da neutralização parcial de uma base. Possuem  $\text{OH}^-$ .

$\text{Ca}(\text{OH})\text{Cl}$  = hidroxidreto de cálcio

$\text{Al}(\text{OH})_2\text{NO}_3$  = dihidroxinitrato de alumínio

**4) Sais hidratados:** apresentam moléculas de água em proporção definida na sua estrutura.

$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  = sulfato de cobre II pentaidratado

$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$  = sulfato de sódio decaidratado

$\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  = cloreto de bário diidratado

Obs:

- Eflorescência = perda de água de um sal hidratado.

- Deliquescência = fixação de água por um sal resultando em uma pasta ou solução.

**5) Sais duplos ou mistos:** são formados pela reação entre dois ácidos e uma base ou vice-versa.



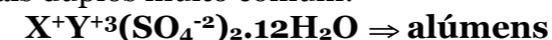
$\text{KAl}(\text{SO}_4)_2$  sulfato de potássio e alumínio

$\text{CaBrCl}$  cloreto brometo de cálcio

$\text{K}_2\text{NaPO}_4$  fosfato de dipotássio e sódio

$\text{FeCl}_2\text{NO}_3$  dicloreto nitrato de ferro III

Existe um grupo de sais duplos muito comum:



$\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  sulfato de potássio e alumínio dodecaidratado (pedra úme).

## 6) Sais complexos

Complexo é uma espécie química que possui um átomo metálico central, ligado a moléculas ou íons circundantes.

$\text{Na}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  ferricianeio de sódio

$\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  ferrocianeo de sódio

$\text{Ag}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}$  cloreto de diamim prata

## Óxidos

São compostos **binários oxigenados**, nos quais o **oxigênio** é o elemento mais eletronegativo. Ex:



Os compostos  **$\text{OF}_2$**  e  **$\text{O}_2\text{F}_2$**  não são óxidos, pois o flúor é mais eletronegativo que o oxigênio.

## Nomenclatura

**Óxidos iônicos** = geralmente são formados pela combinação de um **cátion metálico** com o **íon óxido ( $\text{O}^{2-}$ )**.

**Óxido de .....**

$\text{CaO}$  = óxido de cálcio (cal viva)

$\text{Na}_2\text{O}$  = óxido de sódio

$\text{Al}_2\text{O}_3$  = óxido de alumínio (bauxita)

$\text{ZnO}$  = óxido de zinco

Para metais de nox variável acrescenta-se ao final do nome, em algarismos romanos, o número da carga do íon. Outra maneira é acrescentar o sufixo **oso** ao íon de menor carga, e **ico** ao íon de maior carga.

$\text{Fe}_2\text{O}_3$  = **óxido de ferro III ou férrico (hematita)**

$\text{FeO}$  = **óxido de ferro II ou ferroso**

**Óxidos moleculares (covalentes)** = geralmente são formados por **ametais ou semimetais** combinados com o **oxigênio** de **nox -2**.

$\text{CO}$  = monóxido de carbono

$\text{CO}_2$  = dióxido de carbono (efeito estufa)

$\text{SO}_3$  = trióxido de enxofre (chuva ácida)

$\text{N}_2\text{O}_4$  = tetróxido de dinitrogênio

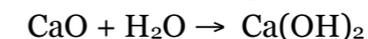
$\text{P}_2\text{O}_5$  = pentóxido de difósforo

$\text{Cl}_2\text{O}_7$  = heptóxido de dicloro

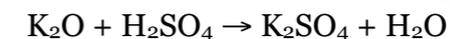
## Classificação

**Óxidos básicos** = são óxidos iônicos que geralmente apresentam o metal com carga **+1 e +2**. Os principais óxidos básicos são os dos **metais alcalinos**.

*Óxido básico +  $\text{H}_2\text{O}$  → Base*

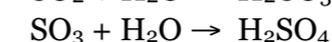


*Óxido básico + ácido → sal +  $\text{H}_2\text{O}$*

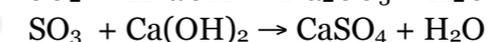
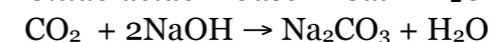


**Óxidos ácidos ou anidridos** = geralmente são óxidos moleculares formados por ametais.

*Óxido ácido +  $\text{H}_2\text{O}$  → ácido*



*Óxido ácido + base → sal +  $\text{H}_2\text{O}$*

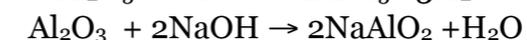
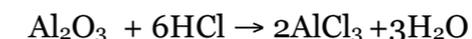


**Óxidos anfóteros** = são formados por metais ou semimetais que apresentam comportamento de óxido ácido e de óxido básico.

*Óxido anfótero + ácido → sal +  $\text{H}_2\text{O}$*

*Óxido anfótero + base → sal +  $\text{H}_2\text{O}$*

**Os principais óxidos anfóteros são :  $\text{ZnO}$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .**



**Óxidos neutros** = são óxidos moleculares que não reagem com ácido, base ou água. Os mais importantes são:

$\text{NO}$  = monóxido de nitrogênio (óxido nítrico)

$\text{N}_2\text{O}$  = monóxido de dinitrogênio (óxido nitroso, gás hilariante)

$\text{CO}$  = monóxido de carbono (poluente tóxico)

**Óxidos duplos ou mistos** = se comportam como se fossem formados por dois outros óxidos do mesmo elemento. Os principais são :

$\text{Fe}_3\text{O}_4 = \text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3$  (magnetita imã natural)

$\text{Pb}_3\text{O}_4 = 2\text{PbO} + \text{PbO}_2$  (fabricação de zarcão)

## Problemas ambientais

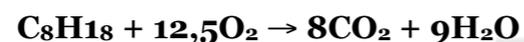
### Efeito estufa

O acúmulo de gases na atmosfera faz com que diminua o retorno da **radiação infravermelha** ao espaço. O principal gás do efeito estufa é o **dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>)**. As principais causas são:

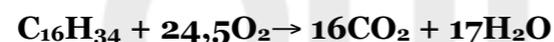
- Destruição das áreas verdes
- Queimadas
- Industrialização
- Queima de combustíveis de carbono

A principal fonte de dióxido de carbono é a frota mundial de veículos.

#### Combustão da gasolina



#### Combustão do diesel



Uma das novas preocupações do homem em relação ao efeito estufa é a liberação do gás metano (CH<sub>4</sub>), que consegue absorver cerca de vinte vezes mais radiação infravermelha que o dióxido de carbono. As principais fontes de liberação do metano são:

- A decomposição do lixo (aterros)
- Rebanho mundial de bovinos

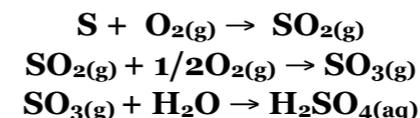
#### Conseqüências

- Derretimento das calotas polares
- Aumento do nível médio dos oceanos
- Mudanças climáticas
- Aumento da acidez de lagos e oceanos

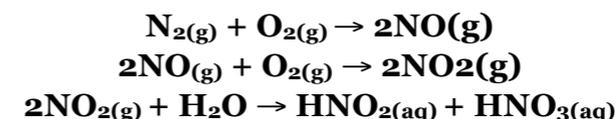
### Chuva ácida

A chuva ácida é causada pela presença de óxidos ácidos na atmosfera. A principal fonte de emissão dessa classe de substâncias é a queima de combustíveis derivados do petróleo. Os principais óxidos são:

#### •Óxidos de enxofre



#### •Óxidos de nitrogênio



A diminuição do pH da chuva é causada pelos ácidos H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> e HNO<sub>3</sub>. Toda chuva na verdade é levemente ácida devido à presença do dióxido de carbono na atmosfera.



Tecnicamente, chama-se de chuva ácida a qualquer chuva com pH < 5,6. Já foram registradas chuvas com pH = 2. Existem fenômenos naturais que podem causar chuva ácida. Os principais são as emissões de vulcões e processos biológicos que ocorrem no solo, pântanos e oceanos.

#### Conseqüências

- Aumento da acidez de rios, lagos e oceanos.
- Aumento da acidez do solo
- Morte de peixes e plantas
- Corrosão de estruturas metálicas e concreto
- Corrosão de monumentos de mármore

# RESUMO TEÓRICO

## REAÇÕES INORGÂNICAS

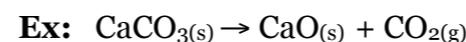
1. Classificação das Reações Inorgânicas
2. Reações de Deslocamento ou Simples Troca
3. Reações de Dupla Troca

### Reações inorgânicas

As reações inorgânicas são classificadas como: síntese, decomposição, simples troca e dupla troca. As reações inorgânicas geralmente são mais rápidas que as reações orgânicas.

#### Reação de síntese ou adição

Em uma reação de síntese dois ou mais reagentes formam um único produto.



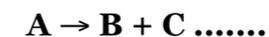
A síntese pode ser classificada em **total** ou **parcial**.

*Síntese total* = substâncias simples como reagentes

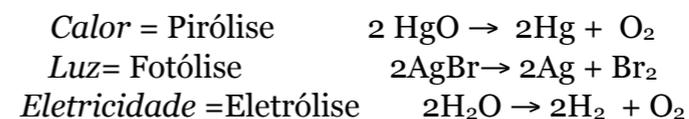
*Síntese parcial* = substância compostas como reagentes

#### Reação de decomposição ou análise

Em uma reação de decomposição um reagente forma dois ou mais produtos.



A decomposição geralmente é causada por um agente físico.



#### Reação de deslocamento ou simples troca



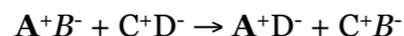
Para ocorrer à reação A deve ser mais reativo que B e C

#### *Reatividade dos metais*



**Reatividade dos ametais**  
**F O Cl Br I S**  
 ←←← Aumenta a reatividade ←←←

**Reação de dupla troca ou dupla substituição**



Para ocorrer uma reação de dupla-troca pelo menos uma das seguintes condições deve ser obedecida:

- \***Formação de um produto insolúvel.**
- \***Formação de um produto volátil.**
- \***Formação de um produto menos ionizado.**

**Formação de um produto insolúvel**

Ânions	solúveis	insolúveis
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , H <sub>3</sub> COO <sup>-</sup> , ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	Todos	_____
Cl <sup>-</sup> , Br <sup>-</sup> , I <sup>-</sup>	Os demais	Ag <sup>+</sup> , Pb <sup>+2</sup> , Hg <sub>2</sub> <sup>+2</sup>
SO <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	Os demais	Ca <sup>+2</sup> , Ba <sup>+2</sup> , Sr <sup>+2</sup> , Pb <sup>+2</sup>
S <sup>-2</sup>	Grupo 1 e 2, NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Os demais
CO <sub>3</sub> <sup>-2</sup> , PO <sub>4</sub> <sup>-3</sup> , CrO <sub>4</sub> <sup>-2</sup> , C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> <sup>-2</sup>	Grupo 1, NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Os demais
Hidróxidos e óxidos	Grupo 1 e 2, NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Be

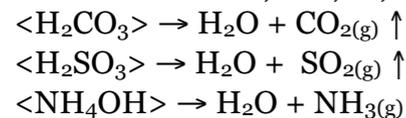
Obs:

- Ca(OH)<sub>2</sub> e Sr(OH)<sub>2</sub> levemente solúveis; Mg(OH)<sub>2</sub> é muito pouco solúvel.
- Ag<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> é levemente solúvel.

**Formação de um produto volátil**

Os principais produtos voláteis são:

Hidrácidos = HCl, HBr, HI, HCN, H<sub>2</sub>S, HF



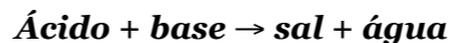
Obs:

- H<sub>2</sub>S possui cheiro de ovo podre.
- NH<sub>3</sub> possui cheiro forte(urina).
- Carbonatos e bicarbonatos** liberam CO<sub>2(g)</sub> quando reagem com ácidos.



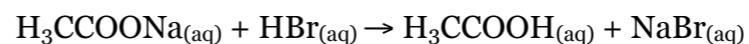
**Formação de um produto menos ionizado**

1) Reação de neutralização



Água ⇒ produto pouco ionizado

2) Formação de um ácido ou base mais fracos.



HBr ⇒ Ácido forte

H<sub>3</sub>CCOOH ⇒ Ácido fraco

# RESUMO TEÓRICO

## GASES

1. Introdução ao Estudos dos Gases
2. Transformações Gasosas
3. Teoria Cinética dos Gases Perfeitos e PVNRT
4. Volume Molar
5. Misturas Gasosas

### Propriedades gerais do Gases

- Os gases expandem-se uniformemente. Podendo encher qualquer recipiente.
- Difundem-se rapidamente um no outro.
- Exercem pressão sobre as paredes do recipiente onde estão contidos. A pressão aumenta com a temperatura se o gás está em um recipiente rígido.
- À pressão constante, o volume aumenta com a temperatura.
- Podem ser comprimidos. Abaixo de uma certa temperatura chamada de “crítica” acabam sendo liquefeitos pela pressão.
- A densidade é baixa comparada com as dos sólidos e líquidos.

### Teoria cinética dos gases

A **teoria Cinética dos gases** foi sintetizada com o intuito de explicar as propriedades e o comportamento interno dos gases. A compreensão dessa teoria é fundamental para o entendimento da pressão que os gases exercem em outros corpos e em muito mais estudos sobre os gases.

A teoria Cinética dos gases diz que:

- O volume das partículas do gás é sempre desprezível.
- A pressão que um gás exerce é o resultado das colisões das partículas do gás com as paredes do recipiente que o contém. As partículas não perdem energia nas colisões ( choques elásticos).
- A temperatura absoluta do gás é diretamente proporcional à energia cinética média de suas moléculas.  
$$E_{\text{cinética média}} = K.T$$
- Não existem forças de atração ou repulsão entre as partículas de um gás ideal. As forças intermoleculares são desprezíveis.

O comportamento de um gás real se aproxima ao de um gás ideal quando a pressão diminui e a temperatura aumenta. Quanto mais fracas são as forças intermoleculares do gás real, mais o gás se aproxima do comportamento de um gás ideal.

### Variáveis de estado

O estado de um gás depende de seu volume, temperatura e pressão que são conhecidos como variáveis de estado.

### Pressão

- A unidade de medida no SI é o Pa.
- Ao nível do mar:  
$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ Torr} = 1 \text{ Bar} = 100 \text{ Kpa}$$
- A pressão de um gás atualmente é medida em um manômetro.

## Volume

- A unidade de medida no SI é o m<sup>3</sup>.

$$1 \text{ m}^3 = 1000\text{L} = 1000\text{dm}^3$$

$$1 \text{ mL} = 1 \text{ cm}^3$$

## Temperatura

- A unidade de medida no SI é o K.

$$T(\text{K}) = T(^{\circ}\text{C}) + 273$$

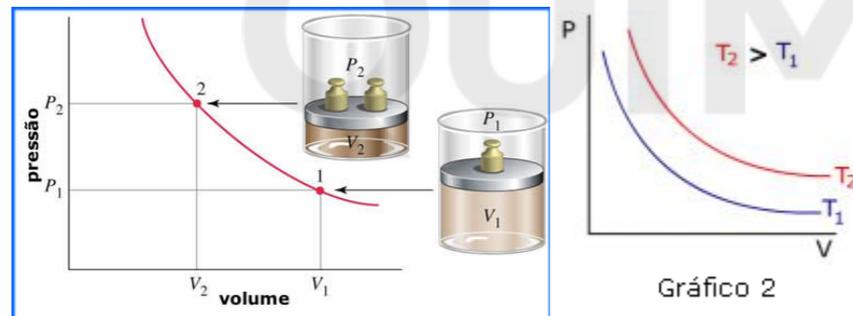
- Todos os cálculos em gases utilizam Kelvin.

### Transformações gasosas

Um gás sofre uma transformação gasosa quando pelo menos uma das suas variáveis de estado sofre variação.

### Transformação isotérmica (Lei de Boyle)

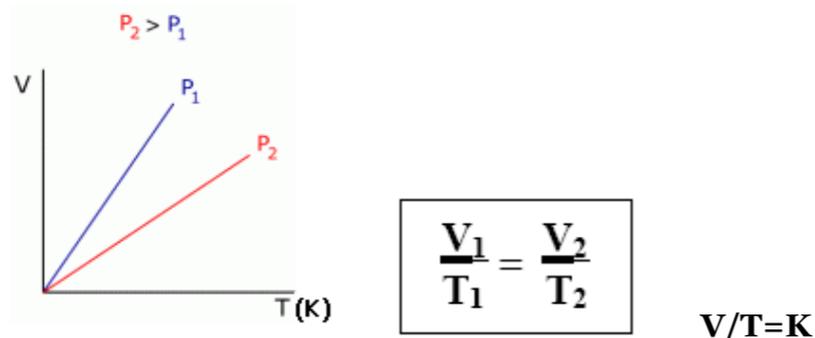
À mesma temperatura, o volume ocupado por certa massa de um gás é inversamente proporcional à pressão por ele exercida.



$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2 \quad P \cdot V = K$$

### Transformação isobárica (Lei de Charles/Gay Lussac)

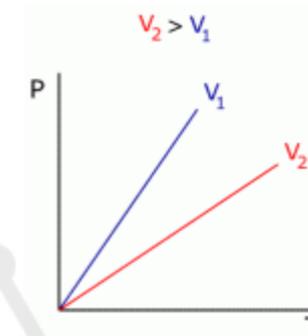
À mesma pressão, o volume de certa massa de um gás varia linearmente com a temperatura.



Obs: A relação entre o volume e a temperatura de um gás a pressão constante foi primeiramente observada por Charles e comprovada posteriormente por Gay Lussac.

### Transformação isocórica (Lei de Gay Lussac)

Mantendo-se constante o volume de certa massa de um gás, a pressão exercida é diretamente proporcional à temperatura absoluta.



$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

$$P/T = K$$

### Transformações de estado em um sistema aberto

Em um sistema aberto P, V e R são constantes. Portanto:

$$n_1 \cdot T_1 = n_2 \cdot T_2$$

### Equação geral dos gases

A equação geral dos gases é utilizada quando ocorre a variação das três variáveis de estado (P, T e V).

$$\frac{P_1 \cdot V_1}{T_1} = \frac{P_2 \cdot V_2}{T_2}$$

### Equação de Clayperon

A equação de Clayperon relaciona as variáveis de estado (P, T e V) com a quantidade de matéria (número de mol) do gás.

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T$$

P = pressão

V = volume

n = número de mol = massa/massa molar = m/M

T = temperatura

Pressão	volume	R
atm	L	0,082
mmHg	L	62,3
Pa	m <sup>3</sup>	8,314

### Transformações de estado em um sistema aberto

Em um sistema aberto P, V e R são constantes. Portanto:

$$n_1 \cdot T_1 = n_2 \cdot T_2$$

#### Volume molar

É o volume ocupado por um mol de qualquer gás, a uma determinada pressão e temperatura. Nas condições normais de temperatura e pressão (CNTP) o volume molar de qualquer gás é igual a **22,4L**.

#### Lei de Avogadro

Volume iguais, de quaisquer gases, nas mesmas condições de pressão e temperatura, apresentam a mesma quantidade de substância em mol ou moléculas.

#### Densidade dos gases

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \rightarrow P \cdot V = m/M \cdot R \cdot T \rightarrow m/V = P \cdot M / R \cdot T \rightarrow d = P \cdot M / R \cdot T$$

#### Mistura de gases

**A atmosfera é uma grande mistura gasosa.** A baixas altitudes, na troposfera, os gases mais pesados são os mais abundantes: nitrogênio, oxigênio, gás carbônico, argônio e água, entre outros. Na medida em que se aumenta a altitude, o ar - além de ficar mais rarefeito - também passa a ser formado de gases mais leves, como o oxigênio atômico, o hélio, o hidrogênio, e outros. A composição da atmosfera foi exaustivamente estudada por **John Dalton**, em 1800. Seus estudos, entretanto, serviram para outro propósito: Dalton compreendeu como se comportavam misturas de gases, e fez uma observação importante: "**cada gás é um vácuo para o outro gás**", isto é, os gases, numa mistura, se comportam independentemente, como se estivessem sozinhos naquele recipiente.

#### **Composição do ar atmosférico seco ao nível do mar**

Este fato ficou conhecido como a **Lei de Dalton das misturas de gases**. De acordo com seu postulado, **a pressão total de uma mistura gasosa simplesmente é a soma das pressões parciais de cada um dos gases**. Então:

$$p(\text{total}) = p(\text{A}) + p(\text{B}) + \dots p(\text{N})$$

**Por exemplo:** assumindo que o ar atmosférico tenha **79% de mols de nitrogênio**, 20% de mols de oxigênio e 1% de mols de argônio, temos a seguinte relação em pressões:

$$p(\text{total}) = 1,00 \text{ atm} = p(\text{N}_2) + p(\text{O}_2) + p(\text{Ar})$$

De acordo com Dalton, **a pressão parcial pode ser obtida pela fração molar (X) do gás na mistura**. Então,

$$p(\text{N}_2) = X(\text{N}_2) \cdot p(\text{total}) = 0,79 \times 1,00 \text{ atm} = 0,79 \text{ atm}$$

Da mesma forma, encontramos que **p(O<sub>2</sub>) = 0,20 atm** e **p(Ar) = 0,01 atm**. Isto significa que a pressão exercida pelo gás oxigênio na atmosfera é de cerca de 0,2 atm.

#### Resumo:

- Pressão total do sistema corresponde à soma das pressões parciais de cada gás da mistura.
- $P(\text{gás}) = X_{\text{gás}} \cdot P_{\text{total}}$
- $\% \text{volume gás} / 100 = X_{\text{gás}}$

#### Efusão e difusão gasosa

**Efusão** = escapamento de um gás, através de um pequeno orifício, para o vácuo.  
**Difusão** = espalhamento de uma substância gasosa através de um espaço ou de uma outra substância.

#### Lei da difusão gasosa (Lei de Graham)

O químico Graham estudou a velocidade de difusão de diferentes gases, chegando à conclusão de que os mais rápidos são os menos densos. Os resultados são descritos pela equação a baixo:

$$\frac{V_1}{V_2} = \sqrt{d_1/d_2} \quad \text{ou} \quad \frac{V_1}{V_2} = \sqrt{M_1/M_2}$$

# RESUMO TEÓRICO

## DETERMINAÇÃO DE FÓRMULAS

1. Fórmula Mínima
2. Fórmula Centesimal
3. Fórmula Molecular

Fórmula é a representação gráfica da composição de uma substância. Vários tipos de fórmulas são utilizadas. As teorias que explicam a formação das ligações químicas permitem prever a fórmula molecular, estrutural e eletrônica de uma substância molecular e a fórmula empírica de uma substância iônica. Estudaremos de que maneira é possível, através da análise de dados experimentais, determinar a fórmula molecular de uma substância e outros tipos de fórmulas como a centesimal e a mínima.

### Fórmula ou composição centesimal

**Fórmula centesimal (ou percentual)** indica a porcentagem, em massa, de cada elemento que constitui uma substância.

A fórmula centesimal, em outras palavras, nos indica a massa (em gramas) de cada elemento presente em 100 gramas de substância.

A determinação experimental da fórmula centesimal de uma substância é feita através de reações de síntese ou de decomposição.

**Reação de síntese** é aquela na qual uma substância é formada a partir de seus elementos.

#### Exemplo 1

Síntese da água:  $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \Rightarrow H_2O$ ;

síntese de dióxido de enxofre:  $S + O_2 \Rightarrow SO_2$ .

**Reação de decomposição** é aquela onde uma substância composta origina substâncias mais simples.

#### Exemplo 2

decomposição da água oxigenada:  $H_2O_2 \Rightarrow H_2O + \frac{1}{2} O_2$ ;

decomposição da amônia:  $2NH_3 \Rightarrow N_2 + 3H_2$ .

Para exemplificar como a fórmula centesimal pode ser calculada tomemos como exemplo a água.

Uma das propriedades da água é ser decomposta em seus elementos constituintes através da passagem de corrente elétrica. Experimentalmente verifica-se que 900 gramas de água, ao serem decompostas, originam 100 gramas de gás hidrogênio e 800 gramas de gás oxigênio. Utilizando a lei de Proust, podemos calcular as massas de hidrogênio e oxigênio formadas pela decomposição de 100 gramas de água:

água => hidrogênio + oxigênio

900 g    100 g    800 g

100 g    x    y

Matematicamente temos:

Repetindo esse procedimento para o oxigênio temos:  $y = 88,9$  g

Cálculos mostram que cada 100 gramas de água é formada por 11,1 gramas de hidrogênio e 88,9 gramas de oxigênio. A fórmula centesimal da água é: H – 11,1% O – 88,9%

### Exemplo 3

A fórmula centesimal de uma substância também pode ser calculada teoricamente. Para isso é necessário conhecer a massa molecular da substância. Para o caso do ácido sulfúrico,  $H_2SO_4$ , temos:

ELEMENTO	MASSA ATÔMICA	CONTRIBUIÇÃO DO ELEMENTO PARA MM	COMPOSIÇÃO CENTESIMAL (%)
H	1	2	x
O	16	64	y
S	32	32	z

Massa molecular =  $2 + 64 + 32 = 98$

Utilizando a lei de Proust e realizando as proporções:

para o hidrogênio  $x = 2 \times 100/98 = 2,0\%$

para o oxigênio  $y = 64 \times 100/98 = 65,3\%$

para o enxofre  $z = 32 \times 100/98 = 32,7\%$

Portanto, a fórmula centesimal do ácido sulfúrico é:

H – 2,0%; S – 65,3%; O – 32,7%

### Fórmula mínima ou empírica

**Fórmula mínima (ou empírica)** indica a proporção, expressa pelos números inteiros, entre os átomos presentes num agregado atômico, ou íons num agregado iônico.

Conhecendo-se quanto de cada elemento está presente numa determinada amostra de substância, é possível calcular sua fórmula mínima.

Cálculo da Fórmula Mínima

①  $\frac{\text{MASSA OU PORCENTAGEM dos elementos Químicos}}{\text{MASSA MOLAR}} = \text{RESULTADO 1}$

②  $\frac{\text{RESULTADO 1}}{\text{menor número}} = \text{RESULTADO 2}$

③ Se o RESULTADO 2, NÃO FOR UM NÚMERO MENOR E INTEIRO, multiplique esse número 2, 3, 5 ou você errou!!!

Assim, sabendo-se que 560 gramas de buteno são formadas por 480 gramas de carbono e 80 gramas de hidrogênio, o cálculo da fórmula mínima deve ser assim realizado:

Ex1.: USANDO MASSA

$C = \frac{480}{12} = 40$  ← menor deles

$H = \frac{80}{1} = 80$  — RESULTADO 1: Não são menores... apenas índices

Resultado 1 - DIVIDE TODOS PELO MENOR.

$C = \frac{40}{40} = 1$

$H = \frac{80}{40} = 2$

Fórmula Mínima  $C_1H_2$

Ex2:

$Na = \frac{43,4}{23} = 1,88$

Conhecendo-se a fórmula molecular de uma substância, sua fórmula mínima é determinada através de "simplificação matemática" dos índices dos elementos na fórmula molecular. Em muitos casos as fórmulas mínima e molecular são as mesmas substância

substância	Fórmula molecular	fórmula mínima
água oxigenada	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	HO
benzeno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	CH
eteno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub>
propeno	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	CH <sub>2</sub>
buteno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	CH <sub>2</sub>
ácido nítrico	HNO <sub>3</sub>	HNO <sub>3</sub>

Observe que substâncias diferentes, como o eteno, propeno e buteno, podem apresentar a mesma fórmula mínima. Isto não acontece com a fórmula molecular, que é característica de cada substância.

A fórmula mínima de uma substância geralmente é expressa da seguinte maneira: (fórmula mínima)<sub>n</sub> onde n, é um número inteiro. Para a água oxigenada temos (HO)<sub>n</sub> onde n = 2 e para a glicose (CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> onde n = 6.

Exemplo

Calcular a fórmula mínima de um composto que apresenta 43,4% de sódio, 11,3% de carbono e 45,3% de oxigênio. Dados: massas atômicas: Na = 23; C = 12; O = 16

$C = \frac{11,3}{12} = 0,94$

$O = \frac{45,3}{16} = 2,82$

Divide todos pelo menor:

$Na = \frac{1,88}{0,94} = 2$

$C = \frac{0,94}{0,94} = 1$

$O = \frac{2,82}{0,94} = 3$

MEIORES E INTEIROS

$Na_2CO_3$

OBS: No esquema explicado, acontece frequentemente o seguinte: dividindo-se todos os valores pelo menor deles (coluna 3), nem sempre chegamos a um resultado com todos os números inteiros. Por exemplo, num outro problema, poderíamos ter a proporção 2 : 1,5 : 3; no entanto, multiplicando esse valores por 2, teremos 4 : 3 : 6.

Generalizando, diremos que, às vezes, no final do problema somos obrigados a efetuar uma "tentativa", multiplicando todos os valores por 2, ou por 3, etc. (sempre um número inteiro pequeno), a fim de que os resultados finais tornem-se inteiros.

### Fórmula molecular

**Fórmula molecular** indica os elementos e a quantidade de átomos de cada elemento presente numa molécula da substância. Um dos caminhos para determinar a fórmula molecular é calcular inicialmente a fórmula mínima e depois multiplicá-la por n. O valor de n, por sua vez, é calculado a partir da massa molecular da substância, uma vez que a relação anterior indica que:

massa molecular = (massa da fórmula mínima) x n, de onde resulta:

$$n = \text{massa molecular} / \text{massa da fórmula mínima}$$

Nos problemas, a massa molecular em geral é dada. Para gases ou vapores, a massa molecular (M) pode também ser calculada pela expressão  $PV = nRT/M$ . Por sua vez, a massa da fórmula mínima é obtida somando-se as massas atômicas dos átomos formadores da fórmula mínima.

- Cálculo da fórmula molecular através da fórmula mínima

Uma substância de massa molecular 180, encerra 40,00% de carbono, 6,72% de hidrogênio e 53,28% de oxigênio. Pede-se sua fórmula molecular. Dados: massas atômicas: H = 1; C = 12; O = 16.

$$C = \frac{40}{12} = 3,33 \div 3,33 = 1$$

$$H = \frac{6,72}{1} = 6,72 \div 3,33 = 2$$

$$O = \frac{53,28}{16} = 3,33 \div 3,33 = 1$$

↓  
DIVIDE TODAS  
PELO MENOR

$$N = \frac{\text{massa molecular}}{\text{massa da fórmula mínima}} = \frac{180}{30} = 6$$

$$\text{Massa Fórmula mínima} = C_1H_2O_1 = 12 + 2 + 16 = 30$$

$$6 \times C_1H_2O = C_6H_{12}O_6$$

- Cálculo a partir da fórmula centesimal:

Vamos utilizar o ácido ascórbico de massa molecular igual a 180, que possui fórmula centesimal C40,92% H4,58% O 54,50%.

$$C_{40,92\%} H_{4,58\%} O_{54,50\%}$$

$$C_x H_y O_z = 12x + 12y$$

$$C_{40,92\%} H_{4,58\%} O_{54,50\%}$$

$$C_x H_y O_z = 12 \cdot x + 1 \cdot y + 16 \cdot z = \frac{180}{\text{g/mol}}$$

Em 100g de Ácido — 40,92g de C  
Em 180g " " — 12 · x de C

$$x \cong 6$$

Em 100g de Ácido — 4,58g de H  
Em 180g " " — 1 · y de H

$$y \cong 8$$

Em 100g de Ácido — 54,50g de O  
Em 180g " " — 16 · z

$$z \cong 6$$

$$\therefore \boxed{C_6H_8O_6}$$

## RESUMO TEÓRICO

## ESTEQUIOMETRIA

1. Introdução (1/2)
2. Introdução (2/2)
3. Caso Geral: Massa
4. Caso Geral: Massa e Volume
5. Caso Geral: Volume
6. Caso Geral: Massa e Mol
7. Caso Geral: Massa e Quantidade
8. Caso Específico: Rendimento (1/2)
9. Caso Específico: Rendimento (2/2)
10. Caso Específico: Excesso
11. Caso Específico: Impurezas (1/2)
12. Caso Específico: Impurezas (2/2)
13. Caso Específico: Reações Sucessivas
14. Caso Específico: Reações com o Ar

**Gás Nobre, estequiometria se aprende resolvendo exercícios. Ele condensa tudo que aprendemos até agora. Recomendo que vcs assistam os exercícios resolvidos, eles sim, vão te ajudar a entender passo a passo todos casos. Dito isso, nesse resumo, quero destacar apenas os passos necessários para iniciar um cálculo estequiométrico:**

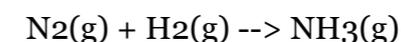
1) Cálculo Estequiométrico:

O cálculo estequiométrico estabelece relação de massa, número de moléculas, volume e quantidade de matéria (mol) entre reagentes e produtos.

Passos:

- 1 - Montar a equação química;
- 2 - Balancear os coeficientes da equação;
- 3 - Verificar quais substâncias participam da relação em questão;

Exemplo: O gás amônia pode ser obtido pela reação entre o hidrogênio e o nitrogênio conforme a reação abaixo:



Qual a massa de  $\text{NH}_3(\text{g})$  que pode ser produzidos a partir de 8g de  $\text{H}_2(\text{g})$ ?

- 1 passo) Escrever a equação química, nesse caso o exercício já a forneceu.
- 2 passo) Balancear os coeficientes da equação.

Balanceando temos:



3 passo) As substâncias em questão são o  $\text{NH}_3$  e o  $\text{H}_2$ , portanto basta que consideremos os seus coeficientes. Após montar e balancear as equações, restará apenas o cálculo propriamente dito.

**Os coeficientes estequiométricos são a proporção que as substâncias reagem e formam**, portanto, 3 mol de gás hidrogênio formarão 2 mol de gás amônia. Assim sendo, convertendo mol para grama, pois o exercício quer a resposta em massa, teremos:



Resolvendo teremos que:  $x = 45.33\text{g}$ . Portanto, 45,33g de gás amônia são produzidos a partir de 8g de gás hidrogênio.

# RESUMO TEÓRICO

## SOLUÇÕES

1. Classificação das Soluções
2. Coeficiente de Solubilidade
3. Concentração Comum, densidade e título
4. Molaridade, Fração Molar e Molalidade
5. Diluição e Misturas de Soluções
6. Titulação

### Soluções

Soluções são misturas de duas ou mais substâncias que apresentam aspecto uniforme (homogêneo). Uma solução é formada pela adição de um ou mais solutos ao solvente.

*Soluto = disperso de uma solução*

*Solvente = dispersante de uma solução*

### Classificação

#### **1) Quanto ao estado físico**

Existem soluções sólidas, líquidas e gasosas. Ex:

Sólida = ouro 18

Líquida = água + álcool

Gasosa = ar atmosférico

#### **2) Quanto à natureza do soluto**

Moleculares

Iônicas

#### **3) Quanto à condução elétrica**

Soluções eletrolíticas = conduzem corrente elétrica. Possuem íons livres dissolvidos.

Soluções não eletrolíticas = não conduzem corrente elétrica. Possuem moléculas neutras dissolvidas.

### Notação das soluções

Convenção:

**Índice 1 = soluto**

**Índice 2 = solvente**

**Sem índice = solução**

Dessa forma:

$m_1$  = massa do soluto

$n_2$  = quantidade de matéria do solvente

$V$  = volume da solução

$M_1$  = massa molar do soluto

### Solubilidade e curvas de solubilidade

**Coefficiente de solubilidade (CS):** é a quantidade máxima de soluto que se dissolve a uma determinada temperatura e pressão numa quantidade prefixada de solvente.

Ex.: (CS)NaCl (20°C) → 36g/100g H<sub>2</sub>O

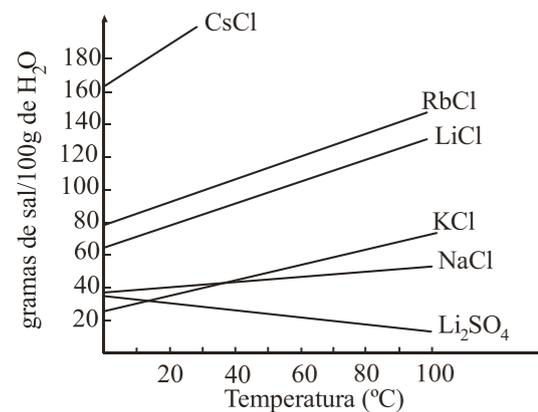
Com base na solubilidade do soluto existem três tipos de soluções:

**Solução insaturada** = quantidade de soluto menor que o CS.

**Solução saturada** = quantidade de soluto igual ao CS.

**Solução supersaturada** = quantidade de soluto maior que o CS.

A solubilidade de uma substância pode ser representada em um gráfico de solubilidade versus temperatura.



**Obs.:**

- Solução saturada não é sinônimo de solução concentrada.

- Uma solução supersaturada é instável. A tendência desse tipo de solução é se transformar em uma solução saturada com corpo de fundo.
- Uma solução saturada pode ter ou não corpo de fundo.
- Dissolução endotérmica = a solubilidade aumenta com a temperatura
- Dissolução exotérmica = a solubilidade diminui com a temperatura.

### Solubilidade de gases em líquidos

“A solubilidade de um gás em um líquido é inversamente proporcional à temperatura (T)”

“A solubilidade de um gás em um líquido é diretamente proporcional à pressão (P)”

$$S_{\text{gás}} = K \cdot P$$

### Concentração comum (C)

É a relação entre a massa do soluto e o volume da solução. As unidades mais comuns são : g/L; g/mL ;g/cm<sup>3</sup>.

$$C = \frac{m_1}{V}$$

### Densidade da solução(d)

É a relação entre a massa e o volume da solução.

$$d = m / V$$

### Título porcentagem em massa (τ)

É a relação entre a massa do soluto ou do solvente e a massa da solução.

$$\tau = m_1/m \text{ ou } \tau = m_2/m$$

O título multiplicado por 100% indica a porcentagem em massa do soluto presente na solução.

## Partes por milhão (ppm) e partes por bilhão (ppb)

$$\text{ppm} = m_1 \cdot 10^6 / m$$

ppm = indica a massa do soluto em 10<sup>6</sup>g de solução.

Ex: 5 ppm significa 5 g de soluto em 10<sup>6</sup> g de solução.

ppb = indica a massa do soluto em 10<sup>9</sup>g de solução

\* ppm e ppb são utilizados para indicar concentrações extremamente pequenas.

## Concentração em mol/L ou concentração molar ou concentração em quantidade de matéria ou molaridade(M)

É a relação entre a quantidade de matéria do soluto (n<sub>1</sub>) e o volume em litros da solução.

$$M = n_1/V \text{ ou } M = m_1/M \cdot V \text{ (mol/L)}$$

Apesar de o termo molaridade não ser mais recomendado pela IUPAC, é muito comum ainda a sua utilização.

## Concentração molar de íons

A concentração molar dos íons é proporcional aos coeficientes estequiométricos da equação.



## Fração molar ou fração em mol (X)

É a relação entre as quantidades de matéria em número de mol dos componentes de uma solução.

$$X_1 = n_1 / n_1 + n_2 \quad X_2 = n_2 / n_1 + n_2$$

Obs:

- n<sub>1</sub> + n<sub>2</sub> deve ser sempre igual a 1.
- X.100% indica a porcentagem em mol do componente na solução.

## Relação entre as concentrações

$$C = d \cdot \tau \quad M = \tau \cdot d / MM$$

Obs:

- Nas relações a densidade deve estar expressa em g/L.

## Diluição de Soluções

Diluir uma solução, significa diminuir a sua concentração. O procedimento mais simples, geralmente aplicado, para diluir uma solução, é a adição de solvente à solução. Na diluição de soluções a massa de soluto, inicial e final, é a mesma, somente o volume é maior, logo, a concentração da solução será menor. Como a massa de soluto permanece inalterada durante a diluição, pode-se escrever:

$$C_1 \cdot V_1 = C_2 \cdot V_2$$

iniciais      finais

Aplicando um raciocínio semelhante para a molaridade, obtém-se a expressão:

$$M_1 \cdot V_1 = M_2 \cdot V_2$$

Através das expressões obtidas para a diluição de soluções, pode-se observar que a concentração de uma solução é inversamente proporcional ao volume.

## Mistura de soluções com o mesmo solvente e o mesmo soluto

Na mistura de soluções a massa total do soluto e o volume da solução final, é igual à soma das massas dos solutos e dos volumes das soluções que foram misturadas. A determinação da concentração final da mistura pode ser feita pela seguinte equação matemática:

$$C_1 \cdot V_1 + C_2 \cdot V_2 = C_{\text{final}} \cdot V_{\text{final}}$$

Aplicando um raciocínio semelhante para a molaridade, obtém-se a expressão:

$$M_1 \cdot V_1 + M_2 \cdot V_2 = M_{\text{final}} \cdot V_{\text{final}}$$

### Mistura de soluções com o mesmo solvente e solutos diferentes

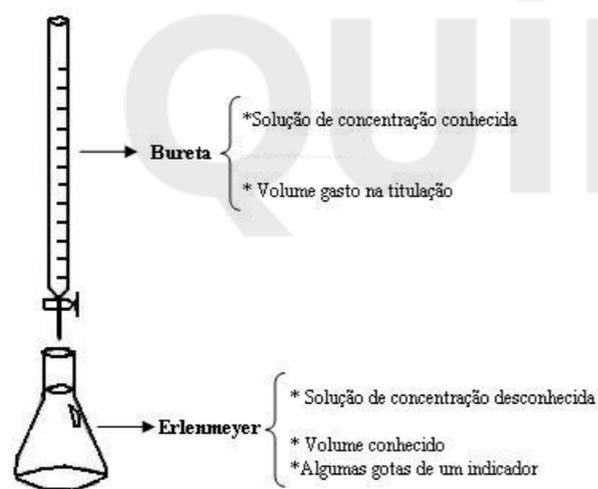
Quando são misturadas duas ou mais soluções sem que haja reação entre elas, os solutos das mesmas sofrem apenas diluição.

### Mistura de Soluções de solutos diferentes com reação entre eles

A mistura de soluções de substâncias que reagem entre si deve ser analisada como reação química. O cálculo das concentrações das substâncias que não reagiram e as substâncias que se formaram é feito de forma semelhante aos cálculos estequiométricos.

### Titulação

Operação de laboratório utilizada para determinar a concentração desconhecida de uma solução (solução problema) usando uma reação química com uma solução de concentração conhecida (solução padrão).



#### **Procedimento:**

Enche-se uma bureta com a solução de concentração-padrão;

Colocam-se num erlenmeyer determinado volume da solução problema e um indicador que possa evidenciar o final da reação entre os solutos das duas soluções;

Goteja-se lentamente a solução da bureta sobre a solução problema;

Quando o indicador mudar de cor, o que indica o final da reação (ponto de equivalência), lê-se o volume gasto da solução padrão.

### Tipos de Titulação

#### **ácido-base (acidimetria-alkalimetria):**

Se uma solução de ácido é titulada com uma solução alcalina (ou seja na acidimetria) as hidroxilas da solução alcalina combinam-se com os hidrogênios ionizáveis do ácido, aumentando o pH da solução; em determinado pH o ponto de equivalência é atingido e a reação terminada. O mesmo raciocínio se aplica as soluções alcalinas tituladas por ácidos (isto é, a alkalimetria).

#### **oxidação-redução (redox):**

Baseiam-se nos processos em que há transferência de elétrons (isto é, nas reações de oxirredução). Os agentes oxidantes ou redutores apresentam diferentes atividades químicas. Oxidantes fortes têm pronunciada tendência para ganhar elétrons, que são capazes de remover de grande número de redutores. O mesmo acontece na perda de elétrons em relação aos redutores. Sendo a intensidade da ação oxidante ou redutora de um sistema determinada pelo seu potencial de oxidação.

#### **precipitação:**

Uma reação com formação de precipitado pode ser utilizada para titulação, desde que processe com velocidade adequada, que seja quantitativa e que haja um modo de determinar o momento em que o ponto de equivalência foi alcançado. Na prática essas condições limitam seriamente o número de reações de precipitação utilizáveis. Muitas reações de precipitação precisam de tempo relativamente longo para serem consideradas quantitativas.

O tipo de titulação mais comum é a titulação **ácido base**. Nesse tipo de titulação ocorre a seguinte reação:



No ponto de equivalência pode-se usar o seguinte raciocínio:

$$M_{\text{ácido}}/X = M_{\text{base}}/Y$$

**ou**

$$n_{\text{ácido}} \cdot V_{\text{ácido}}/X = n_{\text{base}} \cdot V_{\text{base}}/Y$$

# RESUMO TEÓRICO

## PROPRIEDADES COLIGATIVAS

1. Pressão Máxima de Vapor
2. Diagrama de Fases
3. Tonoscopia, Ebulioscopia e Crioscopia

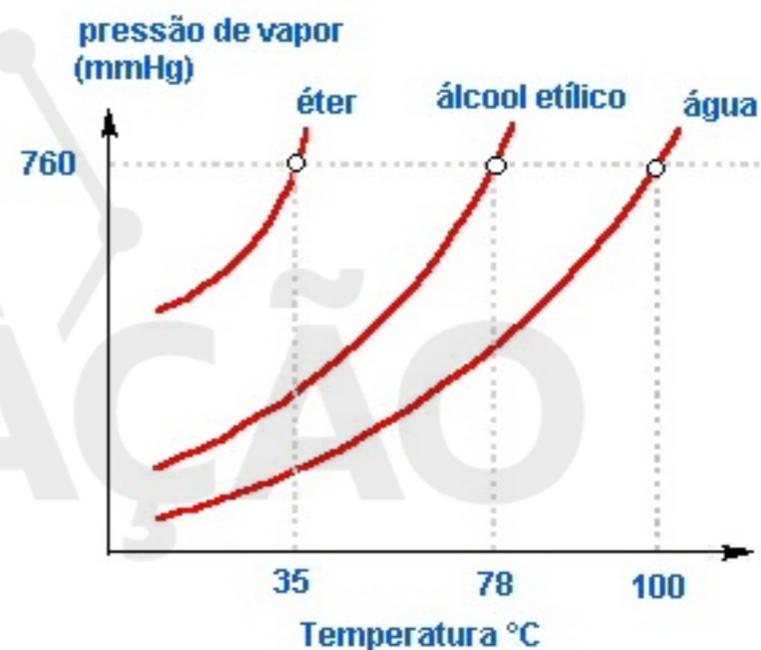
**Propriedades coligativas** são as propriedades das soluções que dependem do número de partículas dispersas e independem da natureza das partículas do soluto.

### Pressão Máxima de Vapor (PMV)

PMV é a pressão exercida pelo vapor quando está em equilíbrio dinâmico com o líquido correspondente.

A PMV depende da temperatura e da natureza do líquido. Observa-se experimentalmente que, numa mesma temperatura, cada líquido apresenta sua pressão de vapor, pois esta está relacionada com a volatilidade do líquido.

Vejamos alguns exemplos no gráfico abaixo:



Analisando o gráfico podemos perceber que em uma temperatura fixa, por exemplo a 35°C, temos que a água possui uma **menor** PMV, isso por quê a água é capaz de fazer **ligações de hidrogênio**, essa interação intermolecular bem intensa, já o **éter** é uma molécula levemente polar e por isso possui interações moleculares menos intensas que a da água, e assim evapora mais que a água, em uma mesma temperatura e exerce uma maior PMV.

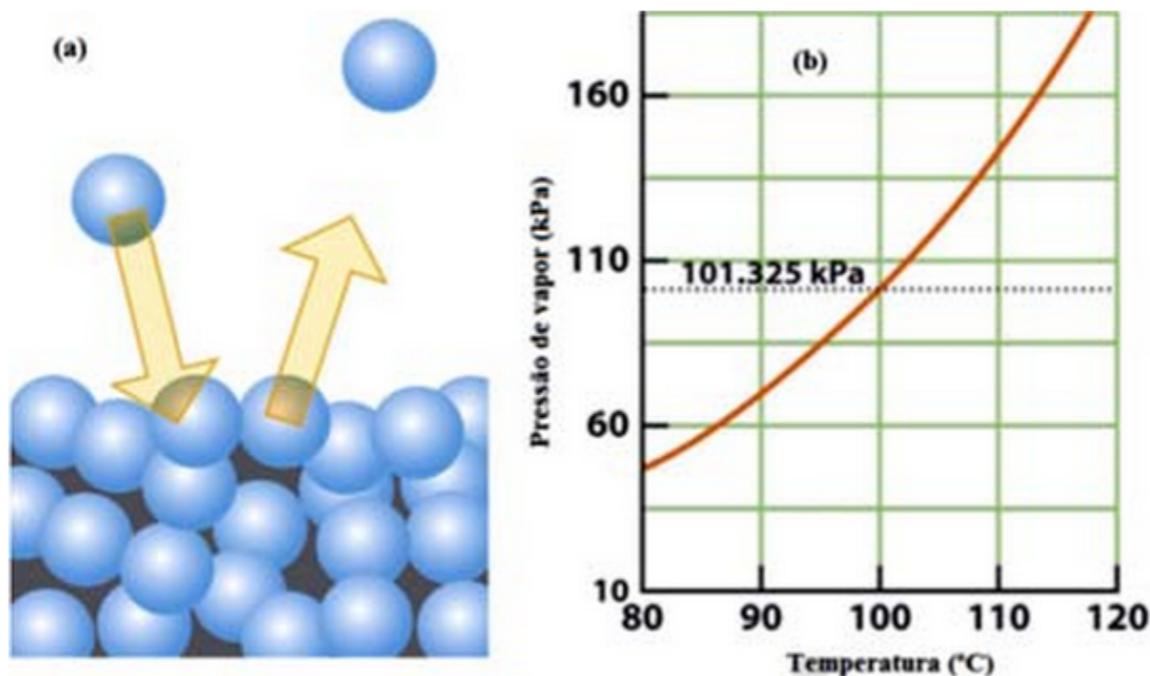


Figura 1 - (a) o equilíbrio na superfície do líquido (ilustra a passagem das espécies entre as fases líquido e vapor); (b) gráfico da pressão de vapor da água pura (note que a pressão de vapor correspondente à temperatura de 100°C equivale a 1 atm). Fonte: Kotz, Treichel Jr., Química geral 1 e reações químicas, 2005.

**Ponto de ebulição** é a temperatura na qual a PMV iguala a pressão atmosférica. Quanto maior a PMV na temperatura ambiente, menor o P.E. amos então estudar cada um dos efeitos coligativos.

Para simplificar um pouco a discussão, levaremos em conta apenas soluções contendo solutos não voláteis, podendo inclusive tratar-se de espécies iônicas ou moleculares. Em virtude dos efeitos coligativos dependerem do número de partículas presentes, e não da natureza dessas partículas (um mol de íons exerce o mesmo efeito que um mol de moléculas), o efeito será proporcional ao número de íons originados por fórmula do composto iônico (para solutos iônicos).

Em síntese, faz-se necessário que o leitor considere a seguinte situação:

a) Compostos moleculares, quando em solução, apresentaram o número de partículas dispersas, iguais à quantidade molar dos compostos dissolvidos, ou seja:

Soluto	Concentração, mol.L <sup>-1</sup>	Cada molécula corresponde a	Total de partículas dispersas
	1	a	
Glicose	0,01	1 partícula	$1 \times 0,01 \times 6,02 \times 10^{23}$
Glicose	0,1	1 partícula	$1 \times 0,1 \times 6,02 \times 10^{23}$
Etilenoglicol	0,01	1 partícula	$1 \times 0,01 \times 6,02 \times 10^{23}$
Etilenoglicol	0,1	1 partícula	$1 \times 0,1 \times 6,02 \times 10^{23}$

Onde:  $6,02 \times 10^{23}$  = número de Avogadro

b) Compostos iônicos, quando em solução, apresentaram o número de partículas dispersas, iguais à quantidade molar dos íons dissolvidos, ou seja:

Soluto	Concentração, mol.L <sup>-1</sup>	Cada molécula corresponde a	Total de partículas dispersas
NaCl	0,01	2 íons ( $\text{Na}^+_{(sol)} + \text{Cl}^-_{(sol)}$ )	$2 \times 0,01 \times 6,02 \times 10^{23}$
NaCl	0,1	2 íons ( $\text{Na}^+_{(sol)} + \text{Cl}^-_{(sol)}$ )	$2 \times 0,1 \times 6,02 \times 10^{23}$
MgCl <sub>2</sub>	0,01	3 íons ( $\text{Mg}^{2+}_{(sol)} + 2 \text{Cl}^-_{(sol)}$ )	$3 \times 0,01 \times 6,02 \times 10^{23}$
MgCl <sub>2</sub>	0,1	3 íons ( $\text{Mg}^{2+}_{(sol)} + 2 \text{Cl}^-_{(sol)}$ )	$3 \times 0,1 \times 6,02 \times 10^{23}$

Onde:  $6,02 \times 10^{23}$  = número de Avogadro

Repare que uma solução de NaCl contém o dobro de partículas dispersas em solução, quando comparada com uma solução de glicose (na mesma concentração).

Mas, enfim, quais são os efeitos provocados em um sistema com estas características?

## Efeitos coligativos

Para cada propriedade considerada, teremos um efeito observado:

### a) Efeito tonoscópico - PMV:

O efeito consiste na diminuição da pressão de vapor do solvente quando se adiciona um soluto não volátil:

Podemos afirmar que o soluto dificulta a evaporação do solvente. Em síntese, com a adição de partículas de soluto (íons ou moléculas) intensificam-se as forças atrativas moleculares e, conseqüentemente, a pressão de vapor do solvente diminui.

### b) Efeito ebulioscópico - Ponto de Ebulição:

É o aumento da temperatura de ebulição do solvente, quando se adiciona um soluto não volátil.

Do mesmo modo, o efeito é explicado pelo aumento da intensidade das forças interativas e pela presença das partículas do soluto. Quanto maior o número de partículas de soluto, maior o número interações soluto-solvente e, conseqüentemente, menor a tendência de escape das moléculas de solvente para o estado gasoso.

### c) Efeito crioscópico - Ponto de Fusão:

O efeito crioscópico consiste na diminuição da temperatura de congelamento ou fusão do solvente quando se adiciona um soluto não volátil.

Exemplos de aplicação deste efeito podem ser observados na fabricação de sorvete e na adição de etilenoglicol em radiadores de automóveis, para evitar seu congelamento (em regiões onde as temperaturas estão abaixo de  $0^{\circ}\text{C}$ ). Nas regiões polares, a água não congela por causa da presença de elevada quantidade de sais dissolvidos, principalmente NaCl.

### d) Efeito osmoscópico - Pressão osmótica:

Por fim, o efeito osmótico, que consiste na variação da pressão osmótica entre duas soluções separadas entre si por uma membrana semipermeável (m.s.p.) ou de uma solução com o solvente puro.

Em resumo, a pressão osmótica é aquela pressão exercida pelo solvente contra a m.s.p. para que ocorra a osmose. Uma membrana semipermeável deve permitir apenas a passagem de solvente (ex.: citoplasma, papel celofane,...). A passagem de

solvente através da membrana ocorre até que as soluções tornem-se isotônicas, isto é, exerçam a mesma pressão osmótica.

Deparamos com exemplos deste efeito todos os dias. Quando adicionamos açúcar à salada de frutas, verificamos o aumento no volume do caldo. Da mesma forma, o charque é preparado pela adição de sal sobre a carne, o que provoca a sua desidratação.

QUÍMICA  
em AÇÃO

## RESUMO TEÓRICO

## TERMOQUÍMICA

1. Conceitos Gerais
2. Entalpia de uma Reação
3. Calor ou Entalpia de Formação
4. Calor ou Entalpia de Combustão
5. Calor ou Entalpia de Ligação
6. Lei de Hess
7. Entropia e Energia de Gibbs

Termoquímica

A termoquímica estuda a variação do calor de um sistema devido à ocorrência de uma reação química. Toda reação química absorve ou gera calor, ou seja, há sempre uma troca de energia.

Tipos de processos

**1) Processo endotérmico:** Absorve energia, o *calor* é representado como *reagente*.



processo físico endotérmico



processo químico endotérmico

**1) Processo exotérmico:** Libera energia, o *calor* é representado como *produto*.



processo físico exotérmico



processo químico exotérmico

**Obs:**

A unidade de energia no SI é o Joule (J).

1cal = 4,18J.

1 cal é a quantidade de energia necessária para elevar 1°C à temperatura de 1g de água.

Entalpia(H)

É a soma da energia interna com o produto da pressão pelo volume do sistema.

$$\mathbf{H = E + PV}$$

*E* = energia interna (conteúdo total de energia de um sistema)

*P* = pressão

*V* = volume

Quando um sistema libera ou absorve calor ocorre uma variação de entalpia.

$$\Delta H = \Delta E + \Delta PV$$

Em reações químicas que ocorrem à pressão constante, que é a situação normal do laboratório  $\Delta PV = 0$ .

$$\Delta H = \Delta E$$

Portanto, a variação de entalpia ( $\Delta H$ ) é a medida da quantidade de calor liberada ou absorvida pela reação, a pressão constante. De maneira simplificada podemos dizer que entalpia é sinônimo de energia.

**Obs:**

- O valor de H não pode ser calculado, na prática o que pode ser medido é o  $\Delta H$  de um processo.
- A variação de entalpia pode ser medida em calorímetros.

**A variação de entalpia ( $\Delta H$ ) é a medida da quantidade de calor liberado ou absorvido em uma transformação física ou química, a pressão constante.**

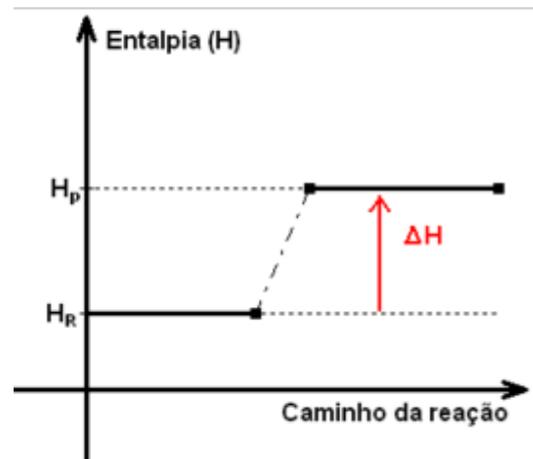
### Reações endotérmicas



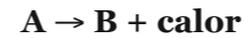
$$H_{\text{produto}} > H_{\text{reagentes}}$$

$$\Delta H = H_{\text{produtos}} - H_{\text{reagentes}}$$

$$\Delta H > 0 \text{ (positivo)}$$



### Reações exotérmicas



$$H_{\text{produto}} < H_{\text{reagentes}}$$

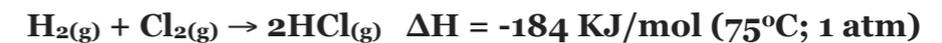
$$\Delta H = H_{\text{produtos}} - H_{\text{reagentes}}$$

$$\Delta H < 0 \text{ (negativo)}$$



### Equações termoquímicas

A variação de entalpia ( $\Delta H$ ) de um processo depende da temperatura, da pressão, do estado físico, do número de mol e da variedade alotrópica das substâncias envolvidas. Uma equação termoquímica mostra todos os fatores que podem influir no valor do  $\Delta H$ . Ex:



Por isso foi criado um referencial para calcular o  $\Delta H$  denominado estado padrão.

**Estado padrão  $\Rightarrow$  estado mais estável de um a substância, a 25°C e a 1 atm.**

Por convenção toda substância simples, no estado padrão, tem entalpia igual à zero.

## Casos particulares das entalpias (ou calores) das reações

**Entalpia de formação:** é o calor liberado ou absorvido na formação de 1 mol de uma substância a partir de substâncias simples, no estado padrão. Vamos considerar a água como sendo esta substância:



A entalpia de formação da água (H<sub>2</sub>O) é -68,3 Kcal/mol, este valor corresponde à obtenção de 1 mol de H<sub>2</sub>O (l) através dos elementos no estado padrão. Com base nas entalpias de formação das substâncias que participam da reação podemos calcular o  $\Delta H$  de uma reação com a equação abaixo:

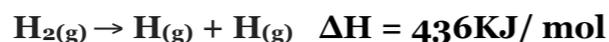
$$\Delta H_{\text{reação}} = [\sum \Delta H_f^\circ \text{ produtos}] - [\sum \Delta H_f^\circ \text{ reagentes}]$$

**Entalpia de combustão:** é a energia liberada na combustão completa de 1 mol de uma substância no estado padrão. A combustão libera calor, ela ocorre entre um combustível e um comburente, o combustível pode ser qualquer substância, o principal comburente é o oxigênio.



O valor - 212,8 Kcal/mol é referente à combustão de 1 mol de metano CH<sub>4</sub>(g) em condições ambientes de 25°C e pressão de 1 atm.

**Entalpia de ligação:** é a energia absorvida na quebra de 1 mol de ligações, no estado gasoso, a 25°C e 1 atm.

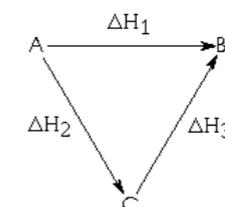


Os valores das energias de ligação dos participantes da reação também podem ser usados para calcular o  $\Delta H$  da reação.

$$\Delta H_{\text{reação}} = [\sum \Delta H_{\text{ligações rompidas}}] - [\sum \Delta H_{\text{ligações formadas}}]$$

## Lei de Hess

A variação de entalpia de uma reação pode ser obtida por meio da soma algébrica das variações de entalpia de cada etapa em que a reação possa ser formalmente dividida. A lei de Hess é uma confirmação do princípio da conservação da energia. Ela permite trabalhar com as equações termoquímicas como se fossem equações matemáticas: podemos multiplicar ou dividir uma equação termoquímica por um número ou adicionar ou subtrair uma série de equações conhecidas para obter uma não conhecida.

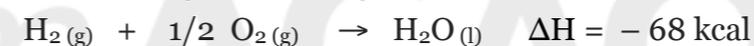


$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

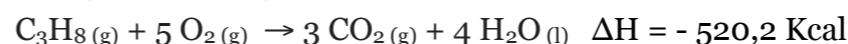
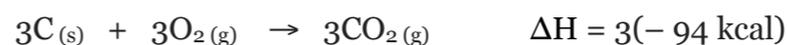
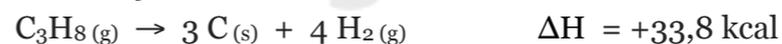
Exemplo: Calcule o  $\Delta H$  da reação:



Dadas as equações abaixo:



**Resolução:**



## Espontaneidade das reações

### Entropia(S)

A entropia é uma grandeza relacionada ao grau de desordem de um sistema. Quanto maior o grau de desordem maior a entropia. Ex:

$$S_{\text{sólido}} < S_{\text{líquido}} < S_{\text{gás}}$$

A variação de entropia é dada por:

$$\Delta S = S_{\text{final}} - S_{\text{inicial}}$$

$\Delta S > 0$  = entropia aumenta (aumenta a desordem)

$\Delta S < 0$  = entropia diminui (diminui desordem)

### **Energia livre de Gibbs (G)**

É a energia de que o processo dispõe para realizar trabalho útil à temperatura e pressão constante.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$\Delta G$  = variação da energia livre

$\Delta H$  = variação da entalpia

$\Delta S$  = variação da entropia

T = temperatura (K)

$\Delta G > 0 \Rightarrow$  reação não espontânea

$\Delta G < 0 \Rightarrow$  reação espontânea

$\Delta G = 0 \Rightarrow$  equilíbrio

#### **Obs:**

Quando  $\Delta G = 0$ , podemos utilizar a seguinte equação:  $T = \Delta H / \Delta S$

QUÍMICA  
em AÇÃO

## RESUMO TEÓRICO

## CINÉTICA QUÍMICA

1. Introdução
2. Velocidade Média das Reações
3. Fatores Que Alteram a Velocidade das Reações
4. Lei da Velocidade das Reações

Cinética química

A cinética química estuda a velocidade das reações químicas e os fatores que podem modificá-la. Existem reações químicas de velocidade: lenta, moderada, rápida e instantânea. A cinética química não pode prever se uma reação é **espontânea ou não**. Por exemplo, a transformação de grafite em diamante é uma reação extremamente lenta já a queima de fogos de artifícios é uma reação extremamente rápida. As reações orgânicas e iônicas de oxirredução geralmente são mais lentas que as inorgânicas. A velocidade de uma reação pode ser determinada por métodos físicos ou químicos. Os **físicos são mais vantajosos**.

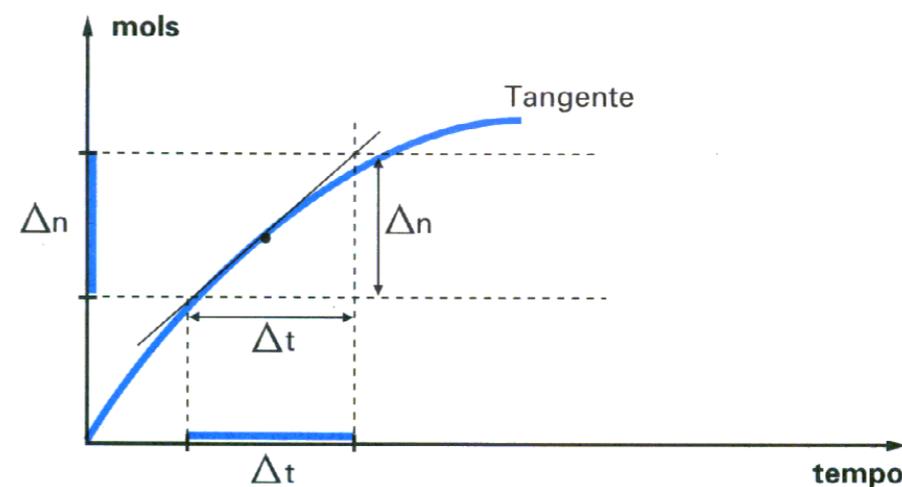
Velocidade média de consumo ou formação de um participante

A velocidade de formação de um produto ou de consumo de um reagente é a relação entre a variação de sua quantidade, dada em mol, mol/L, massa ou volume, e o tempo, dado em segundos, minutos, horas em que ele ocorre.

$$V_{\text{média}} = \Delta \text{quantidade} / \Delta T$$

**Obs:**

- Para a maior parte das reações, a velocidade decresce à medida que a reação progride.
- A velocidade instantânea é obtida traçando-se uma tangente no gráfico de concentração versus tempo. A inclinação desta tangente é chamada velocidade instantânea da reação.



## Velocidade média única da reação

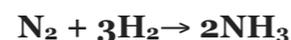
Para se obter o valor da velocidade média da reação, devemos dividir os valores das velocidades médias dos participantes da reação pelos respectivos coeficientes estequiométricos.



$$V_{\text{reação}} = -\Delta[A] / a\Delta T = -\Delta[B] / b\Delta T = \Delta[C] / c\Delta T = \Delta[D] / d\Delta T$$

$$V_{\text{reação}} = V_{\text{consumo}} A / \Delta T = V_{\text{consumo}} B / \Delta T = V_{\text{formação}} C / \Delta T = V_{\text{formação}} D / \Delta T$$

**Exemplo:**



$$V_{\text{reação}} = \frac{VN_2}{\Delta T} = \frac{VH_2}{3\Delta T} = \frac{VNH_3}{2\Delta T}$$

## Condições para que ocorra reação

- Os reagentes devem entrar em contato.
- Deve existir afinidade química entre os reagentes.
- As partículas dos reagentes devem colidir entre si.
- As colisões devem ocorrer com uma orientação favorável e com uma quantidade mínima de energia (energia de ativação).

Em uma reação podem ocorrer até 1.000.000 colisões por segundo. Existem dois tipos de colisão:

**Colisão efetiva ou eficaz** = forma produtos

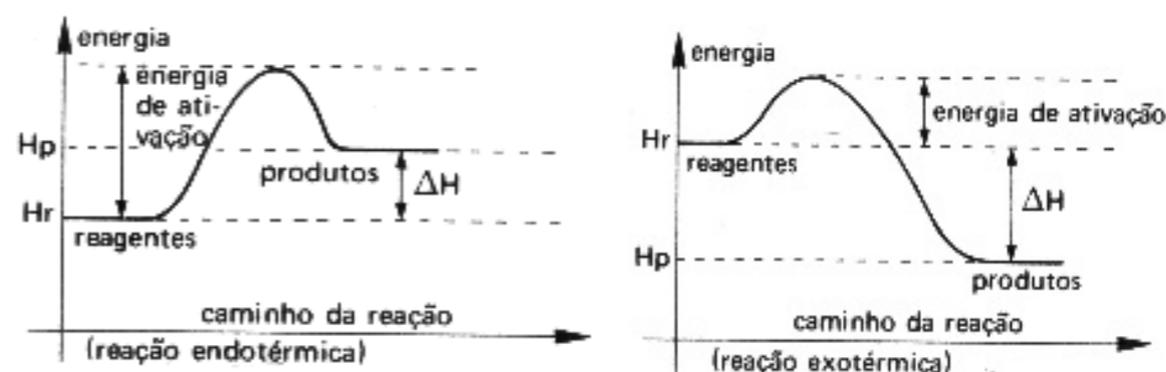
**Colisão não efetiva** = não forma produtos.

Quanto maior for o número de colisões efetivas, maior é a velocidade da reação.

## Energia de ativação (E<sub>a</sub>)

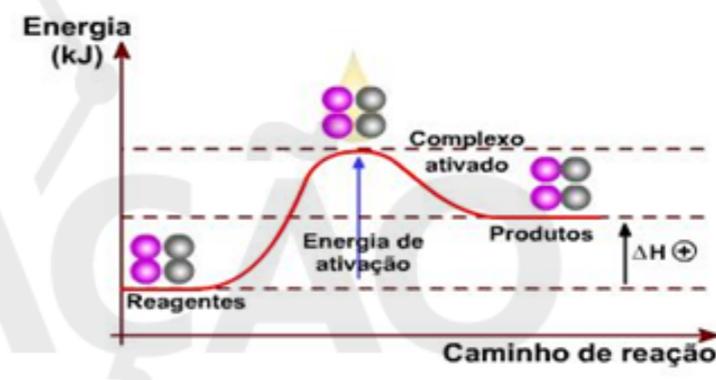
Mínimo de energia necessário, sem o qual a reação não acontece. Por exemplo, para um palito de fósforo entrar em combustão é preciso um mínimo de energia

que pode ser fornecido através de atrito. Quanto maior a energia de ativação, menor é a velocidade da reação.



## Complexo ativado

Entre a transformação dos reagentes em produtos, existe uma espécie química intermediária altamente instável denominada de complexo ativado. O complexo ativado não pode ser isolado.



## Fatores que influenciam a velocidade das reações

### **1) Temperatura**

Quanto maior a temperatura dos reagentes, maior é a rapidez da reação. Quanto maior a temperatura, maior é o número de colisões entre as partículas dos reagentes. Um exemplo simples do cotidiano, da ação da temperatura na rapidez das reações é a utilização de refrigeradores ou freezers para diminuir a velocidade das reações de decomposição dos alimentos.

### **2) Superfície de contato**

Quanto maior a superfície de contato dos reagentes, maior a rapidez das reações. Nota-se que a mesma massa de um antiácido reage mais rapidamente quando se encontra em forma de **pó** que quando na forma de **comprimido**.

### 3) Pressão

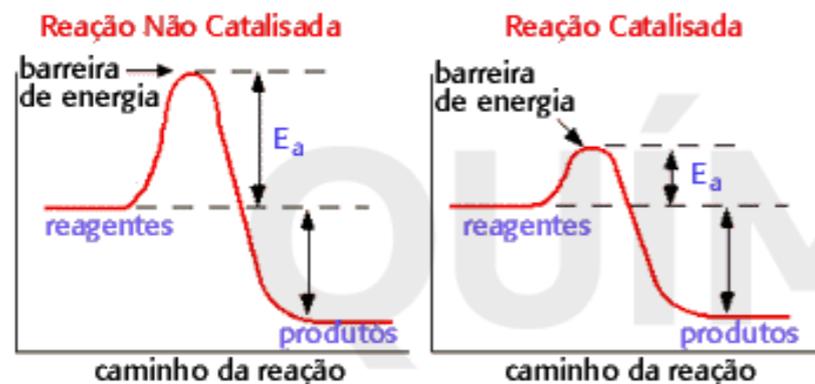
Quanto maior a pressão dos reagentes, maior a rapidez da reação. (**somente para reagentes gasosos**).

### 4) Concentração dos reagentes

Quanto maior a concentração dos reagentes, maior é o número de **colisões efetivas**, maior a rapidez da reação. Por exemplo, ao soprar sobre um carvão em brasa ele pega fogo, pois aumentamos a quantidade de oxigênio.

### 5) Catalisador

**Catalisador** é uma **substância** química que **umenta** a velocidade de uma reação **sem ser consumida** no processo. O catalisador **diminui** a energia de ativação da reação.



### Tipos de catálise

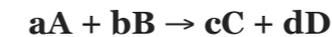
- **Catálise homogênea** = reagentes e o catalisador formam um **sistema monofásico**.
- **Catálise heterogênea** = Reagentes e o catalisador formam um **sistema** com mais de uma fase.
- **Autocatálise** = um dos produtos formados na reação atua como catalisador.
- **Catálise enzimática** = O catalisador da reação é uma enzima.

### Conceitos importantes

- **Promotor ou ativador:** substância que acentua o efeito do catalisador. Sozinha essa substância não tem efeito catalítico.
- **Veneno ou anticatalisador:** = substância que diminui ou mesmo anula a ação do catalisador.
- **Inibidor:** = diminui a velocidade da reação. É consumido no processo.

### Lei cinética da velocidade das reações

A lei cinética (lei da ação das massas) estabelecida por Guldberg e Waage, relaciona a velocidade de uma reação química com as concentrações em quantidade de matéria dos reagentes.



A velocidade de uma reação é proporcional às concentrações molares dos reagentes, elevadas a expoentes determinados experimentalmente. A lei da velocidade é uma lei empírica. Os expoentes são denominados de **ordem** e a soma dos expoentes fornece a ordem **global da reação**.

$$V = K[A]^x[B]^y$$

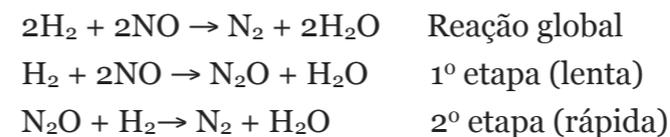
Obs:

- K é uma constante característica da reação e varia com a temperatura.
- A velocidade de uma reação de ordem zero é independente da concentração dos reagentes e permanece constante até que todo o reagente tenha sido consumido, quando ela cai abruptamente para zero.

**Reação elementar**  $\Rightarrow$  Ocorre em uma única etapa. Em uma reação elementar os coeficientes estequiométricos dos reagentes são iguais aos expoentes da lei cinética.



**Reação não elementar**  $\Rightarrow$  Ocorre em mais de uma etapa. A etapa lenta e que determina a lei cinética da reação.



**Lei cinética**  $\Rightarrow V = K[H_2][NO]^2$

Obs:

- **Molecularidade** é o número de moléculas de reagentes que participam de cada etapa da reação.

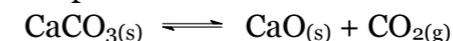
## RESUMO TEÓRICO

## EQUILÍBRIOS MOLECULARES

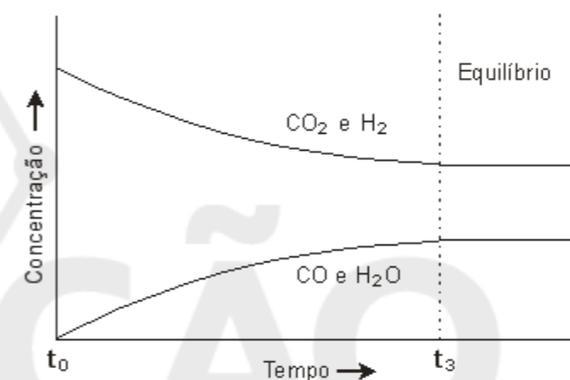
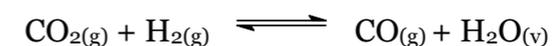
1. Introdução
2. Constante de Equilíbrio Kc
3. Kc - Resolução de Exercícios
4. Kp, Qc e Grau de Equilíbrio
5. Deslocamento de Equilíbrio (1/2)
6. Deslocamento de Equilíbrio (2/2)

Equilíbrio químico**1) Reação reversível**

É toda reação que pode ocorrer nos dois sentidos. Uma reação reversível é representada por uma seta dupla.



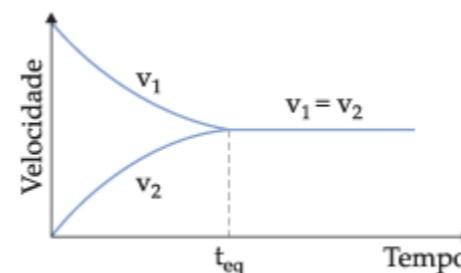
Toda reação **reversível** que ocorre em um sistema **fechado** a **uma dada temperatura**, tende para uma particular situação denominada equilíbrio químico. No equilíbrio químico a velocidade da reação direta é igual a da reação inversa ( $V_1=V_2$ ). Quando um sistema atinge o equilíbrio químico a concentração de reagentes e produtos permanecem constantes. O gráfico abaixo representa a variação de produtos e reagentes em função do tempo de reação.



No instante  $t_3$  o sistema atingiu o equilíbrio e as curvas se transformam em patamares. A curva cuja concentração diminui sempre representa os reagentes e a que aumenta os produtos.

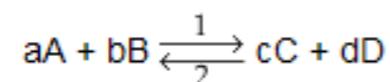
Obs.:

- Quando o sistema atinge o equilíbrio não significa que a reação parou, a reação continua ocorrendo com velocidades iguais nos dois sentidos.
- No equilíbrio as propriedades **macroscópicas** não se alteram.
- Geralmente a variação de  $V_1$  e  $V_2$  é a seguinte:



## Constante de equilíbrio em termo das concentrações molares (K<sub>c</sub>)

Considerando uma reação reversível qualquer:



Aplicando a lei de Goldberg Waage (lei cinética):

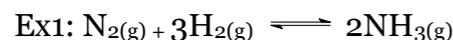
$$K_1 \cdot [A]^a \cdot [B]^b = K_2 \cdot [C]^c \cdot [D]^d$$

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

$$K_c = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

Portanto:

$$K_c = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$



$$K_c = [NH_3]^2 / [N_2] [H_2]^3$$



$$K_c = [PCl_5]^2 / [Cl_2]^5 [P]^2$$

Obs:

- K<sub>c</sub> depende somente da temperatura.
- K<sub>c</sub> não possui unidade.

$$\ln K = \Delta G^\circ / RT$$

$$\ln K = \frac{J \cdot mol^{-1}}{(J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}) \cdot (K)}$$

- Portanto K<sub>c</sub> é um número adimensional (puro).
- Para reações **endotérmicas** o valor numérico de K<sub>c</sub> **aumenta** com a temperatura e para reações **exotérmicas** **diminui** com a temperatura.

- Substâncias **sólidas** e **líquidas que são o solvente da reação** não participam do K<sub>c</sub>.



$$K_c = [CO_2]$$



$$K_c = [C_6H_{12}O_6][C_6H_{12}O_6] / [C_{12}H_{22}O_{11}]$$

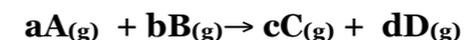
Operações matemáticas importantes:



- K<sub>c</sub> muito maior que 1 ⇒ No equilíbrio, os produtos são mais abundantes que os reagentes.
- K<sub>c</sub> muito menor que 1 ⇒ No equilíbrio, os reagentes são mais abundantes que os produtos.

## Constante de equilíbrio em função das pressões parciais (K<sub>p</sub>)

Em um equilíbrio que participam substâncias gasosas, pode-se usar uma constante que, em vez de ser expressa em termos de concentração, utiliza as pressões parciais dos gases.



$$K_p = \frac{(pC)^c (pD)^d}{(pA)^a (pB)^b}$$

Obs:

- Na expressão de K<sub>p</sub> só devem ser representados os componentes gasosos.
- K<sub>p</sub> só depende da temperatura.

## Relação entre K<sub>c</sub> e K<sub>p</sub>

$$K_p = K_c \cdot (RT)^{\Delta n}$$

Obs:

- $\Delta n$  = variação do número de mol de substâncias gasosa na reação.  $\Delta n = n$  gás dos produtos -  $n$  gás dos reagentes.
- Quando  $\Delta n = 0 \Rightarrow K_p = K_c$

### Deslocamento de equilíbrio químico

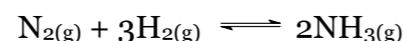
Um estado de equilíbrio químico é mantido enquanto não se alterem as condições do sistema. Quando se modifica alguma condição, como por exemplo, a pressão, a temperatura ou a concentração de alguma das espécies em equilíbrio, este se desloca em certa direção (para os reagentes ou para os produtos) até atingir um novo estado de equilíbrio.

### Princípio de Le Châtelier

“Quando uma reação em equilíbrio sofre uma alteração de condições, as proporções dos reagentes e dos produtos se ajustam de maneira a minimizar o efeito da alteração”.

### Alteração da concentração

Quando se aumenta a concentração de qualquer participante, o equilíbrio se desloca no sentido de consumi-lo. Quando se diminui a concentração de qualquer participante, o equilíbrio se desloca no sentido de recolocá-lo.



- Se há aumento dos reagentes  $[\text{N}_2]$   $[\text{H}_2]$ , o equilíbrio se desloca para a direita.
- Se há aumento do produto  $[\text{NH}_3]$ , o equilíbrio se desloca para a esquerda.

Resumo:

- Quando aumenta a concentração de um reagente, o sistema tenderá a formar produtos.
- Quando aumenta a concentração de um produto, o sistema tenderá a formar reagentes.
- Quando diminui a concentração de um reagente, o sistema tenderá a formar reagentes.
- Quando diminui a concentração de um produto, o sistema tenderá a formar produtos.

Obs:

- A adição ou retirada de um participante sólido da reação não desloca o equilíbrio, porque a concentração de um sólido é constante e não depende da sua quantidade.

### Alteração da temperatura

Se no sistema onde acontece uma reação eleva-se a temperatura, a reação se deslocará para o lado que absorva calor (**sentido endotérmico -  $\Delta H > 0$** ). Por outro lado, se a temperatura diminui, a reação se deslocará para o lado que desprenda calor (**sentido exotérmico -  $\Delta H < 0$** ).

**Reação endotérmica:** absorve calor, são favorecidas a altas temperaturas.

**Reação exotérmica:** libera calor, são favorecidas a baixas temperaturas.

Resumo:

- Em um equilíbrio químico, o aumento da temperatura desloca o equilíbrio para o sentido endotérmico e a diminuição da temperatura desloca o equilíbrio para o sentido exotérmico.

### Alteração da pressão

O **aumento da pressão** desloca o equilíbrio para o lado com o **menor número de mols de gás (menor volume)**. Por outro lado, se a **pressão diminui** a reação se deslocará para o lado com **maior número de mols de gás** (maior volume).

Resumo:

- Em um equilíbrio gasoso, o aumento da pressão causa deslocamento do equilíbrio para o sentido de menor volume e vice-versa.

Obs:

- A adição de um gás inerte, ou seja, um gás que não reage a um sistema em equilíbrio causa um aumento da pressão total do sistema, mas como não há variação da concentração nem das pressões parciais de cada gás componente do equilíbrio, a adição do gás inerte não desloca o equilíbrio. Ex: adição de gases nobres.
- Quando o volume dos reagentes é igual ao volume dos produtos o equilíbrio não sofre deslocamento por variação de pressão.

### 4) **Efeito do Catalisador**

O catalisador não desloca equilíbrio, apenas faz com que o equilíbrio seja alcançado mais rápido.

## RESUMO TEÓRICO

## EQUILÍBRIO IÔNICO

1.  $K_a$ ,  $K_b$  e  $K_i$
2.  $pK_a$ ,  $pK_b$  e  $\alpha$
3.  $pH$ ,  $pOH$  e  $K_w$
4. Hidrólise Salina / Íons
5.  $K_{ps}$ : Produto de Solubilidade
6. Efeito do Íon Comum e  $Q_{ps}$

**Equilíbrio iônico**

É aquele que quando estabelecido se verifica a presença de íons. Existem três casos principais de equilíbrio iônico:

Equilíbrios químicos envolvendo ácidos e bases.

Equilíbrios químicos envolvendo substâncias iônicas pouco solúveis.

**Constante de ionização de ácidos ( $K_a$  ou  $K_i$ )**

Ácidos de acordo com Arrhenius são substâncias que em solução aquosa ionizam e libera o íon  $H^+$  como um único cátion. Considerando um ácido genérico HA, podemos escrever o seguinte equilíbrio.



Como a água é o solvente da reação a sua concentração praticamente não se altera. Portanto, por comodidade, escrevemos apenas:



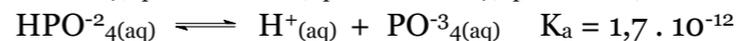
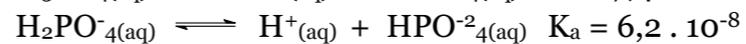
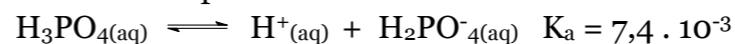
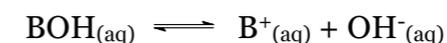
$$K_a = [H^+] \cdot [A^-] / [HA]$$



$$K_a = [H^+] \cdot [CN^-] / [HCN]$$

Obs:

- $K_a$  depende somente da temperatura.
- Quanto maior o  $K_a$ , mais forte é o ácido
- $pK_a = -\log K_a$
- Quanto menor o  $pK_a$ , mais forte é o ácido.
- Poliacidos possuem mais de um  $K_a$ .

**Constante de ionização de bases ( $K_b$  ou  $K_i$ )**

$$K_b = [B^+] \cdot [OH^-] / [BOH]$$



$$K_b = \frac{[\text{NH}_4^+] \cdot [\text{OH}^-]}{[\text{NH}_4\text{OH}]}$$

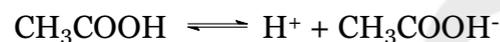
Obs:

- Quanto maior o  $K_b$ , mais forte é a base.
- $\text{p}K_a = -\log K_b$
- Quanto menor o  $\text{p}K_b$ , mais forte é a base.
- $K_b$  depende somente da temperatura.

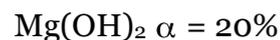
### Grau de Ionização ( $\alpha$ )

É a grandeza que indica a porcentagem do ácido que sofreu ionização na solução. Quanto maior o  $\alpha$ , mais forte é o ácido ou a base.

$\alpha$  = número de moléculas ionizadas / número de moléculas inicial



De cada 100 moléculas de ácido, apenas 5 sofrem a ionização acima.



De cada 100 moléculas de base, apenas 20 sofrem a dissociação acima.

Obs:

- Tanto  $\alpha$  como  $K_i$  aumentam com a temperatura.

### Lei da diluição de Ostwald

O químico russo-germânico *Friedrich Wilhelm Ostwald* (1853-1932), no final do século XIX, deduziu uma equação matemática que relacionava a constante de ionização, o nível de concentração em mol/L e o grau de ionização para monoácidos e monobases.



	AB	$\rightleftharpoons$	A <sup>+</sup>	+ B <sup>-</sup>
Inicial	$\mathcal{M}$		—	—
Reage	$\mathcal{M} \cdot \alpha$		—	—
Forma	—		$\mathcal{M} \cdot \alpha$	$\mathcal{M} \cdot \alpha$
No equilíbrio	$\mathcal{M} - \mathcal{M} \cdot \alpha$		$\mathcal{M} \cdot \alpha$	$\mathcal{M} \cdot \alpha$

$$K_i = \frac{[\text{A}^+] \cdot [\text{B}^-]}{[\text{AB}]} \therefore K_i = \frac{(\mathcal{M} \cdot \alpha) \cdot (\mathcal{M} \cdot \alpha)}{\mathcal{M} - \mathcal{M} \cdot \alpha} \therefore$$

$$K_i = \frac{\mathcal{M}^2 \cdot \alpha^2}{\mathcal{M} \cdot (1 - \alpha)} \therefore \boxed{K_i = \frac{\mathcal{M} \cdot \alpha^2}{1 - \alpha}}$$

Para eletrólito fraco ( $\alpha < 5\%$ )  $\rightarrow (1 - \alpha) = 1$ . Portanto:

$$K_a = M \cdot \alpha^2 \quad \text{ou} \quad K_b = M \cdot \alpha^2$$

Obs:

- O **grau de ionização** de um eletrólito **aumenta**, tendendo para 100%, à medida que a solução se **dilui**.
- Monoácido  $\Rightarrow [\text{H}^+] = M_{\text{ácido}} \cdot \alpha$
- Monobase  $\Rightarrow [\text{OH}^-] = M_{\text{base}} \cdot \alpha$

### Equilíbrio iônico da água

Na água pura existe o seguinte equilíbrio:



Esse equilíbrio representa a auto-ionização da água, que ocorre em escala extremamente pequena. Por simplificação escrevemos:



A sua expressão da constante de equilíbrio:

$$K_c = \frac{[H^+] \cdot [OH^-]}{[H_2O]} \text{ em que } [H_2O] = \text{constante}$$

$$K_c \cdot [H_2O] = [H^+] [OH^-] \text{ (produto iônico da água)}$$

O produto  $K_c \cdot [H_2O]$  é denominado de  $K_w$ .

Obs:

- $K_w$  depende da temperatura. A  $25^\circ\text{C}$   $K_w = 10^{-14}$
- Portanto a  $25^\circ\text{C}$  o produto  $[H^+] \cdot [OH^-]$  é sempre igual a  $10^{-14}$ . Se conhecermos a  $[H^+]$  de uma solução, podemos determinar a concentração  $[OH^-]$ .

Ex: Se a  $[H^+]$  for igual a  $10^{-5}$  a de  $[OH^-]$  deve ser  $10^{-9}$ .

Na água pura ( $25^\circ\text{C}$ )  $\Rightarrow [H^+] = [OH^-] = 10^{-7} \text{ mol/L}$

### Acidez e basicidade nas soluções

A variação da concentração de  $H^+$  e  $OH^-$  determina se o meio é ácido, básico ou neutro.

$[H^+] > [OH^-] \Rightarrow$  meio ácido  $\Rightarrow [H^+] > 10^{-7} \text{ mol/L}$

$[H^+] < [OH^-] \Rightarrow$  meio básico  $\Rightarrow [H^+] < 10^{-7} \text{ mol/L}$

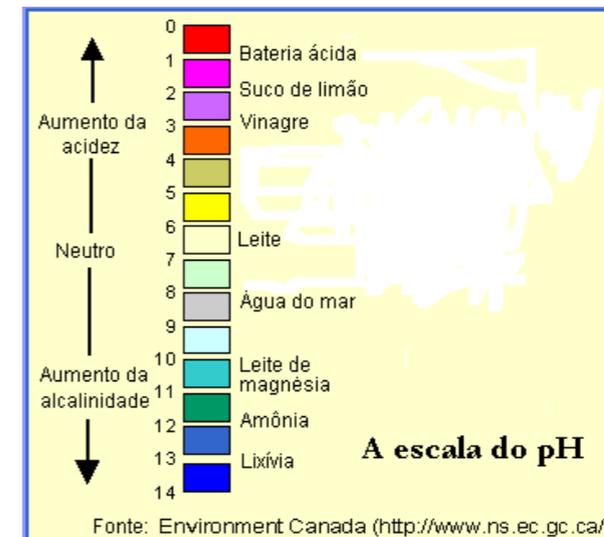
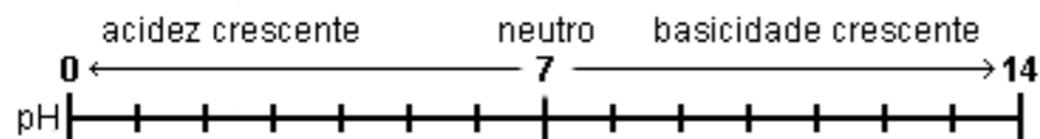
$[H^+] = [OH^-] \Rightarrow$  meio neutro  $\Rightarrow [H^+] = 10^{-7} \text{ mol/L}$

### Escala de pH e pOH

A escala de pH foi criada em 1901 por Sørensen para facilitar a medida da acidez de um meio.

$$\text{pH} = -\log[H^+] \text{ e } \text{pOH} = -\log[OH^-]$$

A escala de pH normalmente varia de 0 a 14.



A escala de pOH também varia de 0 a 14.

- $\text{pOH} > 7 \Rightarrow$  meio ácido
- $\text{pOH} < 7 \Rightarrow$  meio básico

Em soluções a  $25^\circ\text{C}$ , temos:

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14$$

### Solução tampão

Mistura que tem capacidade de evitar variações bruscas de pH quando recebe a adição de pequenas quantidades de ácido ou base. Soluções tampão se preparam pela mistura de um ácido fraco, ou de uma base fraca, com um sal do ácido ou da base.

**Tampão ácido** = ácido fraco e um sal desse ácido

Ex:  $\text{HCN} + \text{NaCN}$

**Tampão básico** = base fraca e um sal dessa base

Ex:  $\text{NH}_4\text{OH} + \text{NH}_4\text{Cl}$

### Cálculo do pH de um tampão

O pH de um tampão é calculado utilizando-se a equação de **Henderson-Hasselbach**.

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log\left[\frac{\text{ânion do sal}}{\text{ácido}}\right] \text{ Tampão ácido}$$

$$pOH = pK_b + \log[\text{ânion do sal}] / [\text{base}] \quad \text{Tampão básico}$$

Obs:

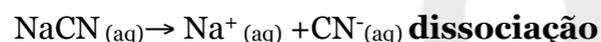
- O tampão só funciona quando a razão entre [ânion do sal] / [ácido] estiver entre 0,1 e 10.
- No corpo humano existem dois importantes tampões: tampão  $[H_2CO_3] / [HCO_3^-]$  e tampão  $[H_2PO_4^-] / [HPO_4^{2-}]$ .
- Os ânions que ainda tem prótons ionizáveis, como o  $HCO_3^-$ , são anfóteros: podem agir como ácidos ou como bases.

### Hidrólise salina

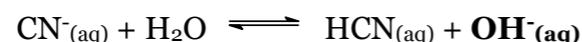
É o processo em que o(s) íon(s) proveniente de um sal reage(m) com a água. A adição de um sal a água pode resultar em uma solução ácida, básica ou neutra. O caráter ácido-base de um sal depende do ácido e da base que deram origem a ele.

#### 1) Sal derivado de ácido fraco e base forte (sal de caráter básico)

NaCN → derivado do NaOH (base forte) e HCN (ácido fraco)



O íon derivado do “fraco” e quem sofre hidrólise.

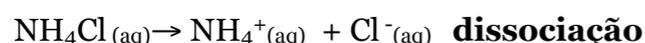


$$K_h = [HCN][OH^-] / [CN^-]$$

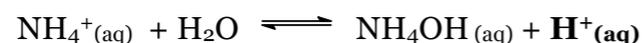
A liberação de  $OH^-$  é responsável pelo caráter básico da solução ( $pH > 7$ ).

#### 2) Sal derivado de ácido forte e base fraca (sal de caráter ácido)

$NH_4Cl$  → derivado do HCl (ácido forte) e  $NH_4OH$  (base fraca)



O íon derivado do “fraco” e quem sofre hidrólise.



$$K_h = [NH_4OH][H^+] / [NH_4^+]$$

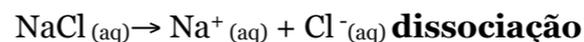
A liberação de  $H^+$  é responsável pelo caráter ácido da solução ( $pH < 7$ ).

Obs:

- Quando o **cátion** hidrolisa ocorre a liberação de  $H^+_{(aq)}$  deixando o meio ácido e quando o ânion hidrolisa ocorre a liberação de  $OH^-_{(aq)}$  deixando o meio básico.

#### 3) Sal derivado de ácido forte e base forte (sal de caráter neutro)

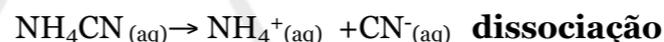
NaCl → derivado do HCl (ácido forte) e NaOH (base forte)



Íons derivados de ácidos e bases fortes não sofrem hidrólise, portanto, o pH não se altera.

#### 4) Sal derivado de ácido fraco e base fraco

$NH_4CN$  → derivado do  $NH_4OH$  (base fraca) e HCN (ácido fraco)



Nesse caso ocorrerá a hidrólise dos dois íons. O pH é determinado pelo  $K_a$  do ácido e pelo  $K_b$  base.

$K_a > K_b =$  **sal de caráter ácido**

$K_a < K_b =$  **sal de caráter básico**

$K_a = K_b =$  **sal de caráter neutro**

#### Relação entre $K_a$ , $K_b$ , $K_w$ e $K_h$

Sal derivado de **ácido fraco** e base forte =  $K_h = K_w / K_a$

Sal derivado de ácido forte e **base fraca** =  $K_h = K_w / K_b$

Sal derivado de **ácido fraco** e **base fraca** =  $K_h = K_w / K_a \cdot K_b$

#### Produto de Solubilidade ( $K_{ps}$ )

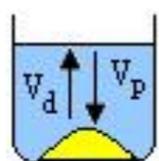
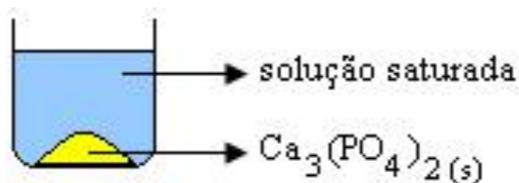
Nos sais pouco solúveis (solubilidade menor que 0,01 mol/L) o produto da concentração molar dos íons é uma constante denominada de produto de solubilidade. O  $K_{ps}$  é determinado quando um sólido não dissolvido está em equilíbrio com seus íons em solução. Nesse momento a velocidade de dissolução ( $V_d$ ) é igual à velocidade de precipitação ( $V_p$ ).



A concentração em quantidade de matéria de um sólido é constante, e por isso não aparece na constante de equilíbrio. Portanto:

$$K_{ps} = [A^{+m}]^n [B^{-n}]^m$$

Exemplo:



$$K_{ps} = [Ca^{+2}]^3 [PO_4^{-3}]^2$$

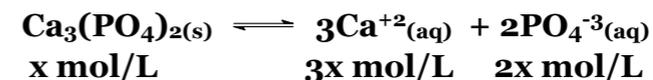
Obs:

- $K_{ps}$  depende da temperatura.
- $K_{ps}$  só é determinado para substâncias pouco solúveis.
- Para substâncias com o **mesmo número de íons por fórmula**, quanto maior o  $K_{ps}$ , maior é a solubilidade.
- Se a dissociação iônica for endotérmica, e se aumentarmos a temperatura, este aumento acarretará em um aumento de solubilidade, portanto, o valor do  $K_{ps}$  aumentará. Se a dissolução for exotérmica acontecerá o contrário do citado anteriormente.

Nome	Fórmula	Produto de Solubilidade ( $K_{ps}$ )
Sulfato de Cálcio	$CaSO_4$	$9 \times 10^{-6}$
Hidróxido de Cálcio	$Ca(OH)_2$	$4 \times 10^{-6}$
Ortofosfato de Cálcio	$Ca_3(PO_4)_2$	$2 \times 10^{-29}$
Sulfato de Bário	$BaSO_4$	$1 \times 10^{-10}$
Hidróxido de Alumínio	$Al(OH)_3$	$1 \times 10^{-33}$
Sulfeto de Cádmio	$CdS$	$8 \times 10^{-27}$

### Relação entre $K_{ps}$ e solubilidade em mol/L

Exemplos:

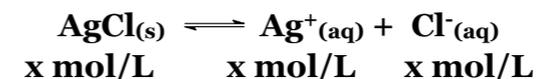


$$K_{ps} = [Ca^{+2}]^3 [PO_4^{-3}]^2$$

$$K_{ps} = [3x]^3 [2x]^2$$

$$K_{ps} = 27x^3 \cdot 4x^2$$

$$K_{ps} = 108x^5$$



$$K_{ps} = [Ag^{+}][Cl^{-}]$$

$$K_{ps} = [x][x]$$

$$K_{ps} = x^2$$

### Previsão de precipitação

Para ocorrer precipitação em uma solução, o produto da concentração em mol/L dos íons deve resultar em um valor maior que o  $K_{ps}$ . Em resumo, para a equação genérica abaixo:



- $[A^{+}][C^{-}] < K_{ps} \Rightarrow$  solução não saturada;
- $[A^{+}][C^{-}] = K_{ps} \Rightarrow$  solução saturada;
- $[A^{+}][C^{-}] > K_{ps} \Rightarrow$  ocorre precipitação até atingir a situação de solução saturada com corpo de fundo.

### Efeito do íon comum é solubilidade

Para se diminuir a solubilidade de um composto deve-se adicionar um dos seus íons a solução. Ao se aumentar a concentração de um dos íons que formam o precipitado, a concentração do outro deve diminuir, para que o  $K_{ps}$  permaneça constante, a uma dada temperatura. Este efeito reduz a solubilidade do composto.

Resumindo:

“O efeito do íon comum é a redução da solubilidade de um composto pouco solúvel, pela adição de um composto solúvel que tenha um íon comum a ele”

Por exemplo, ao se adicionar  $HCl_{(aq)}$  a uma solução saturada de  $AgCl_{(aq)}$ , ocorre a precipitação de  $AgCl_{(s)}$  devido ao aumento da concentração de  $Cl^{-}_{(aq)}$  que é um íon comum nas duas substâncias.

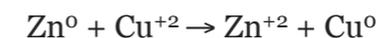
## RESUMO TEÓRICO

## ELETROQUÍMICA

1. Introdução
2. Funcionamento de uma Pilha
3. Potencial de uma Pilha
4. Metal de Sacrifício
5. Eletrólise

EletroquímicaReações de óxido-redução (redox)

São reações químicas em que o estado de oxidação (nox) de uma ou mais substâncias se altera. O nox é um número positivo ou negativo que se atribui segundo certas regras, a um elemento numa molécula ou íon.

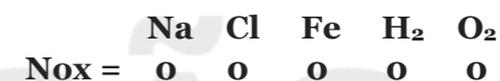


- O  $\text{Zn}^0$  perdeu elétrons  $\Rightarrow$  **sofreu oxidação; aumenta o nox.**
- O  $\text{Cu}^{+2}$  ganhou elétrons  $\Rightarrow$  **sofreu redução; diminui o nox.**

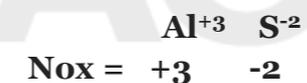
A espécie química que sofre **redução** é denominada de agente **oxidante** e a que sofre **oxidação** de **agente redutor**.

**Regras para determinação do nox**

1) Toda substância simples possui nox igual à zero.



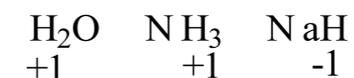
2) O nox de um íon monoatômico é igual a sua carga.



3) Alguns elementos possuem nox fixo:

- Metais alcalinos (grupo 1) = +1
- Metais alcalinos terrosos (grupo dois) = +2
- Al, Bi = +3
- Zn, Cd = +2
- Ag = +1
- F = -1

4) O nox do H geralmente é +1, quando combinado com metais -1.



5) O nox do oxigênio geralmente é -2.



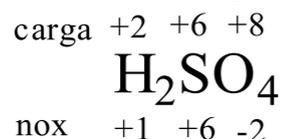
Exceções:

- Peróxidos  $\Rightarrow -1 \Rightarrow$  Ex:  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CaO}_2$ ,  $\text{K}_2\text{O}_2$
- Superóxidos  $\Rightarrow -1/2 \Rightarrow$  Ex:  $\text{KO}_2$ ,  $\text{CsO}_2$

6) Halogênios a direita da fórmula possuem nox -1.



7) A soma do nox de todos os átomos deve ser igual à carga do composto.



### Balanceamento de equações redox

O balanceamento de equações redox baseia-se num princípio fundamental:

$$\text{n}^\circ \text{ de elétrons cedidos} = \text{n}^\circ \text{ de elétrons recebidos}$$

A igualdade na quantidade dos elétrons na redução e na oxidação é à base do balanceamento de reações pelo método de óxido-redução.

#### **Regras para o balanceamento**

1º) Determinar, na equação química, qual espécie se oxida e qual se reduz.

2º) Escolher os produtos ou reagentes para iniciar o balanceamento.

3º) Encontrar os  $\Delta_{\text{oxid}}$  e  $\Delta_{\text{red}}$ .

$\Delta_{\text{oxid}}$  = número de elétrons perdidos x atomicidade do elemento

$\Delta_{\text{red}}$  = número de elétrons recebidos x atomicidade do elemento

As atomicidades são definidas no membro de partida (reagentes ou produtos).

4º) Se possível, os  $\Delta_{\text{oxid}}$  e  $\Delta_{\text{red}}$  podem ser simplificados. Exemplificando...

$$\Delta_{\text{oxid}} = 4 \quad \Delta_{\text{red}} = 2$$

Simplificando ...

$$\Delta_{\text{oxid}} = 2 \quad \Delta_{\text{red}} = 1$$

5º) Para igualar os elétrons nos processos de oxidação e redução:

O  $\Delta_{\text{oxid}}$  se torna o coeficiente da substância que contém o átomo que se reduz.

O  $\Delta_{\text{red}}$  se torna o coeficiente da substância que contém o átomo que se oxida.

6º) Os coeficientes das demais substâncias são determinados por tentativas, baseando-se na conservação dos átomos.

#### Exemplo



O Br se oxida, pois tem nox = -1 no primeiro membro e nox = 0 no segundo. Esta oxidação envolve 1 elétron e como sua atomicidade no NaBr é igual a 1, temos:  
 $\Delta_{\text{oxid}} = 1 \times 1 = 1$

O Mn se reduz, pois tem nox = +4 no primeiro membro e nox = +2 no segundo. Esta redução envolve 2 elétrons e como sua atomicidade no  $\text{MnO}_2$  é igual a 1, temos:

$$\Delta_{\text{red}} = 2 \times 1 = 2$$

Invertendo os coeficientes obtidos :



Os demais coeficientes são obtidos por tentativas.



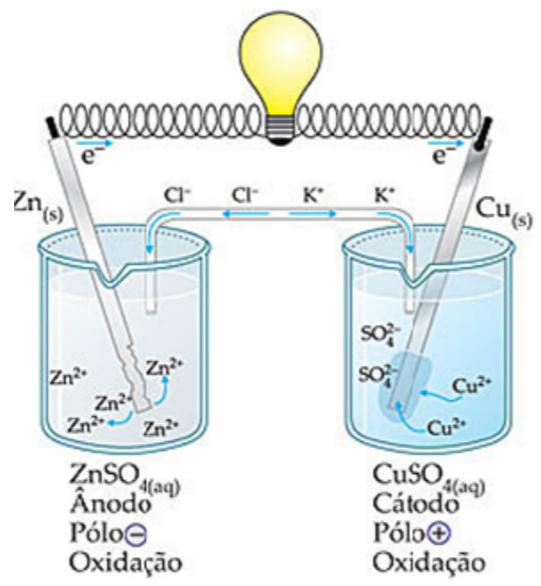
Os coeficientes iguais a 1 foram colocados somente por questões de evidência, uma vez que os mesmos são dispensáveis.

#### Pilhas

A eletroquímica estuda a transformação de energia química em energia elétrica e vice-versa. Nas pilhas e baterias ocorre uma reação de **óxido-redução espontânea** que produz corrente elétrica. Esse processo químico foi descoberto em 1800 por Alessandro Volta e aperfeiçoado em 1836 por Daniell.

#### Pilha de Daniell

A pilha de Daniell é dividida em duas semicelas. Cada semicela é constituída por um eletrodo metálico imerso em uma solução aquosa iônica. Os dois eletrodos estão conectados por um fio condutor, e as duas semicelas unidas por uma ponte salina. Esse é o esquema clássico de uma pilha. O esquema abaixo representa uma pilha de Daniell que utiliza Zn e Cu como metais nos eletrodos.



### Eletrodos

#### Cátodo

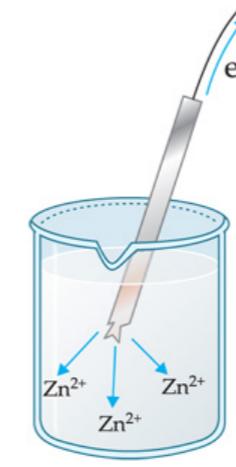
Ocorre redução.

- Polo positivo.
- Espessamento da lâmina do metal (deposição).
- Semi reação  $\Rightarrow \text{Cu}^{+2}(\text{aq}) + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Cu}(\text{s})$



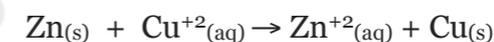
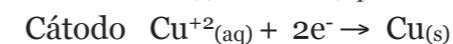
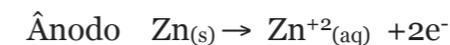
#### Ânodo

- Ocorre oxidação.
- Polo negativo.
- Corrosão da lâmina do metal.
- Semi reação  $\Rightarrow \text{Zn}(\text{s}) \rightarrow \text{Zn}^{+2}(\text{aq}) + 2\text{e}^-$



### Reação global da pilha

A reação global da pilha é obtida somando as semireações de redução e oxidação dos eletrodos.



Obs:

- Em uma pilha os elétrons migram do ânodo para o cátodo.
- A finalidade da ponte salina é manter as duas semicelas eletricamente neutras através da migração de íons. A ponte salina pode ser substituída por uma placa de porcelana porosa.
- As pilhas podem ser denominadas de células voltaicas ou células galvânicas.

### Representação convencional pela IUPAC

**Ânodo/Solução do ânodo//Solução do cátodo/Cátodo**

**Exemplo:** Pilha de Daniell  $\Rightarrow \text{Zn}/\text{Zn}^{2+}//\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}$

### Fem de pilhas

O que faz os elétrons migrarem do ânodo para o cátodo?

Os elétrons passam do ânodo para o cátodo em virtude da diferença de energia potencial (elétrica). No ânodo, a energia potencial é mais elevada do que no cátodo e os elétrons passa espontaneamente do ânodo para o cátodo. A diferença de poten-

cial entre dois eletrodos é medida em volts (V). A diferença de potencial proporciona a força motriz que impele os elétrons através do circuito externo. Essa diferença de potencial é a força eletromotriz, ou simplesmente fem. Como a diferença de potencial na pilha  $E_{\text{pilha}}$  é medida em volts, é comum falar de voltagem da pilha. A fem de uma pilha depende das reações anódicas e catódicas, das concentrações dos reagentes e dos produtos, e da temperatura.

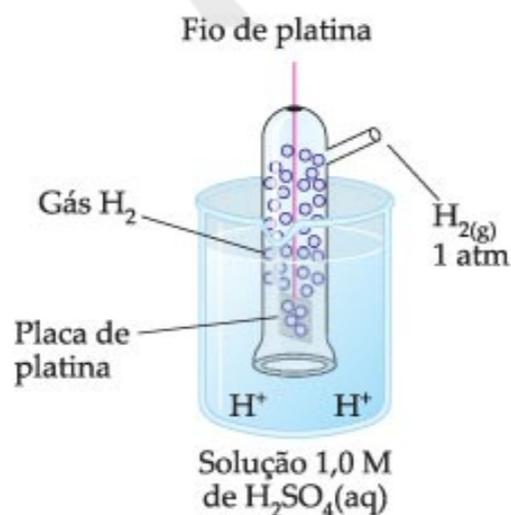
### Potenciais padrão ( $E^{\circ}_{\text{oxi}}$ e $E^{\circ}_{\text{red}}$ )

- Potencial de redução  $\Rightarrow E^{\circ}_{\text{red}}$
- Potencial de oxidação  $\Rightarrow E^{\circ}_{\text{oxi}}$

“Em uma pilha, a espécie química que apresenta maior  $E^{\circ}_{\text{red}}$  sofre redução e, a outra espécie, de maior  $E^{\circ}_{\text{oxi}}$ , sofre oxidação”.

### Medição dos potenciais

Para se determinar os  $E^{\circ}_{\text{red}}$  e os  $E^{\circ}_{\text{oxi}}$  das inúmeras espécies químicas foi necessário adotar um padrão de comparação. Foi escolhido como padrão o eletrodo de hidrogênio, que consiste em um fio de platina no interior de um tubo de vidro, preenchido com gás hidrogênio à pressão de 1 atm, imerso em uma solução 1 mol/L de  $H^+$ .



### Convenção adotada pela IUPAC:

$$E^{\circ}_{\text{red}}(H^+, H_2) = 0$$

$$E^{\circ}_{\text{oxi}}(H_2, H^+) = 0$$

Montando-se pilhas com todas as espécies químicas com o eletrodo padrão de hidrogênio, estaremos medindo seus  $E^{\circ}$  e poderemos então organizar uma tabela com seus potenciais-padrão de eletrodo.

Potencial de redução ( $E^{\circ}_{\text{red}}$ )	Estado reduzido	Estado oxidado	Potencial de oxidação ( $E^{\circ}_{\text{oxi}}$ )
-3,04	Li	$Li^+ + e^-$	+3,04
-2,92	K	$K^+ + e^-$	+2,92
-2,90	Ba	$Ba^{2+} + 2e^-$	+2,90
-2,89	Sr	$Sr^{2+} + 2e^-$	+2,89
-2,87	Ca	$Ca^{2+} + 2e^-$	+2,87
-2,71	Na	$Na^+ + e^-$	+2,71
-2,37	Mg	$Mg^{2+} + 2e^-$	+2,37
-1,66	Al	$Al^{3+} + 3e^-$	+1,66
-1,18	Mn	$Mn^{2+} + 2e^-$	+1,18
-0,83	$H_2 + 2(OH)^-$	$2 H_2O + 2e^-$	+0,83
-0,76	Zn	$Zn^{2+} + 2e^-$	+0,76
-0,74	Cr	$Cr^{3+} + 3e^-$	+0,74
-0,48	$S^{2-}$	$S + 2e^-$	+0,48
-0,44	Fe	$Fe^{2+} + 2e^-$	+0,44
-0,28	Co	$Co^{2+} + 2e^-$	+0,28

### Cálculo da voltagem da pilha (ddp ou fem)

ddp = força eletromotriz = fem

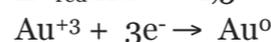
$$\Delta E^{\circ} = E^{\circ}_{\text{red maior}} - E^{\circ}_{\text{oxi maior}} \text{ OU}$$

$$\Delta E^{\circ} = E^{\circ}_{\text{red maior}} - E^{\circ}_{\text{red menor}} \text{ OU}$$

$$\Delta E^{\circ} = E^{\circ}_{\text{oxi maior}} - E^{\circ}_{\text{red menor}}$$

Exemplo: Cálculo da fem da pilha  $Zn^0/Zn^{+2} // Au^{+3}/Au^0$

$$E^{\circ}_{\text{red}} Au^{+3} = 1,5 \text{ V}$$



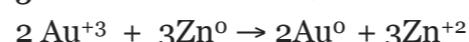
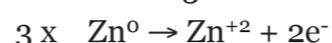
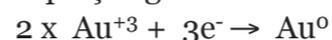
$$E^{\circ}_{\text{red}} Zn^{+2} = -0,76 \text{ V}$$



$$\Delta E^{\circ} = E^{\circ}_{\text{red maior}} - E^{\circ}_{\text{red menor}}$$

$$\Delta E^{\circ} = 1,5 - (-0,76) = 0,74 \text{ V}$$

Equação global



Obs:

- Os valores de  $E^{\circ}$  não dependem dos coeficientes estequiométricos das equações de semi-reação utilizadas.

## Espontaneidade das reações de oxi-redução

O que determina se uma reação de óxido-redução é espontânea ou não é a fem( $\Delta E^\circ$ ) e do processo:

- $\Delta E^\circ > 0 \Rightarrow$  reação espontânea.
- $\Delta E^\circ < 0 \Rightarrow$  reação não espontânea.

Um exemplo de reação de óxido-redução espontânea é a corrosão do ferro em contato com o oxigênio do ar e água.



## Eletrólise

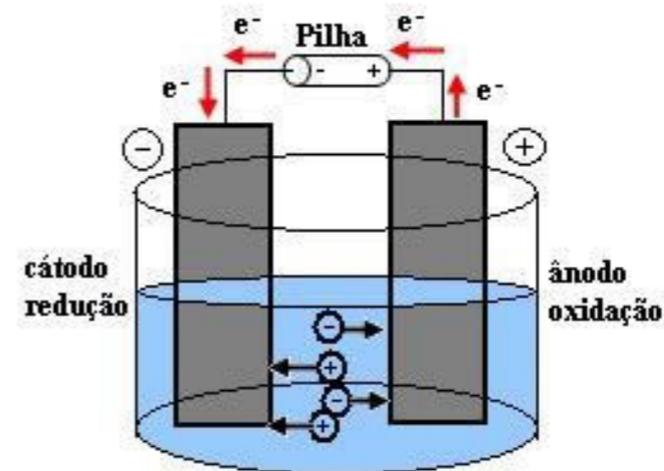
É a transformação química de íons por meio da passagem de corrente elétrica. A eletrólise é um processo não espontâneo. Existem dois tipos de eletrólise:

- **Ígnea**
- **Aquosa**

### Mecanismo da eletrólise

Na eletrólise um gerador (pilha ou bateria) está ligado aos eletrodos. O eletrodo ligado ao pólo positivo do gerador é o ânodo e o eletrodo ligado ao pólo negativo é o cátodo.

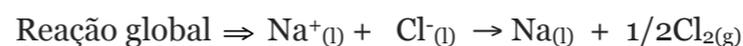
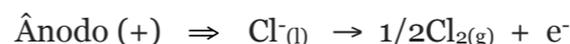
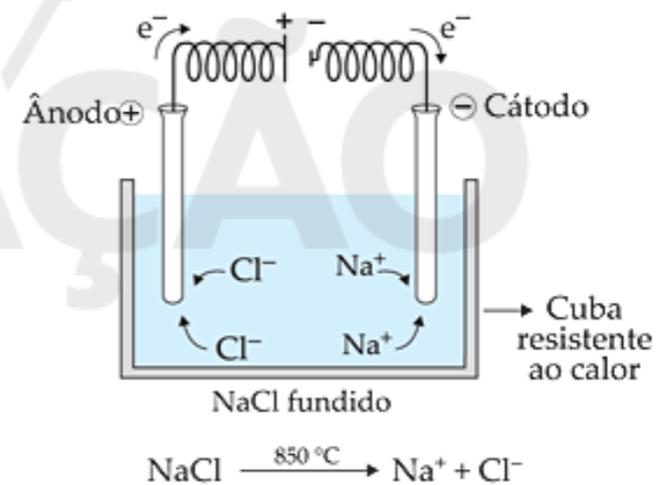
- **Eletrodo negativo**  $\Rightarrow$  recebe elétrons  $\Rightarrow$  ocorre redução  $\Rightarrow$  **cátodo**
- **Eletrodo positivo**  $\Rightarrow$  perde elétrons  $\Rightarrow$  ocorre oxidação  $\Rightarrow$  **ânodo**
- **O cátion sempre vai para o cátodo.**
- **O ânion sempre vai para o ânodo.**



## Eletrólise ígnea

A eletrólise ígnea é realizada a altas temperaturas com o eletrólito fundido.

Exemplo: Eletrólise do NaCl fundido



A eletrólise é um processo útil na obtenção de várias substâncias químicas.

Por exemplo:

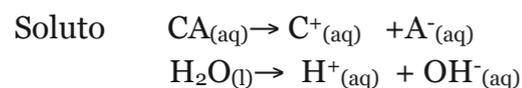
**Sódio:** eletrólise ígnea de NaCl (cloreto de sódio) fundido em um processo que ocorre a cerca de 800°C.

**Alumínio:** eletrólise ígnea de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(bauxita).

**Cloro (Cl<sub>2</sub>):** eletrólise ígnea de NaCl. O cloro é muito utilizado na produção de compostos orgânicos clorados e alvejantes, e também para o tratamento de água para consumo e de piscinas.

### Eletrólise aquosa

Eletrólise em solução aquosa é aquela que ocorre quando os íons estão livres na água, devido aos fenômenos de dissociação iônica ou ionização. Na eletrólise aquosa existem íons provenientes do soluto e íons provenientes da água.

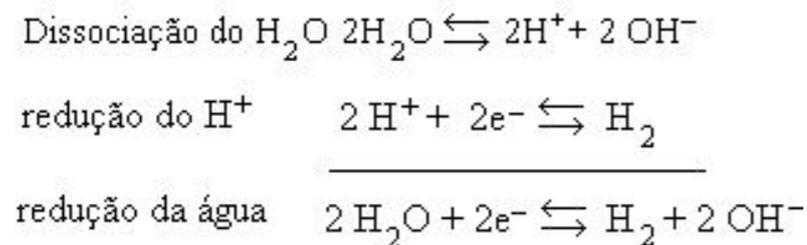


Somente um dos cátions e somente um dos ânions sofre descarga. Numa eletrólise aquosa, temos as seguintes possibilidades:

Cátodo	Ânodo
Redução do cátion do soluto	Oxidação do ânion do soluto
ou	ou
Redução da água	Oxidação da água

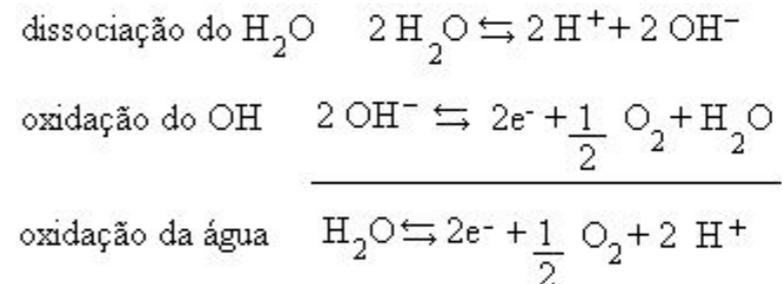
### Redução da água (cátodo)

A redução da água pode ser explicada com a utilização do seguinte mecanismo:

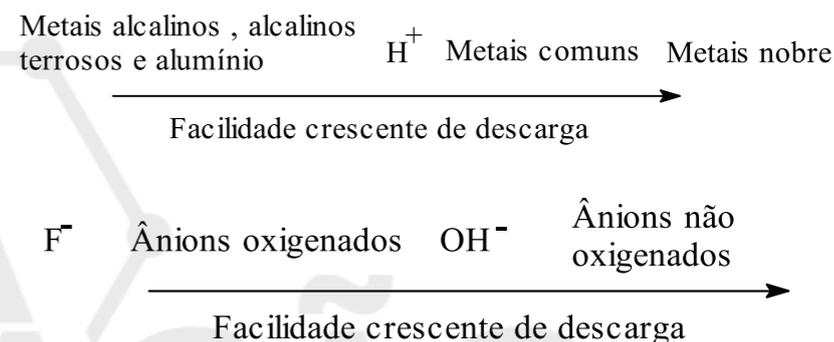


### Oxidação da água (ânodo)

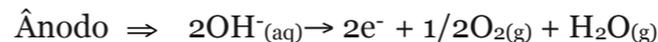
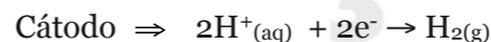
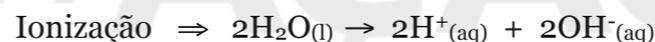
A oxidação da água pode ser explicada com a utilização do seguinte mecanismo:



Para saber qual cátion reduz e qual ânion oxida, devemos consultar a fila abaixo:

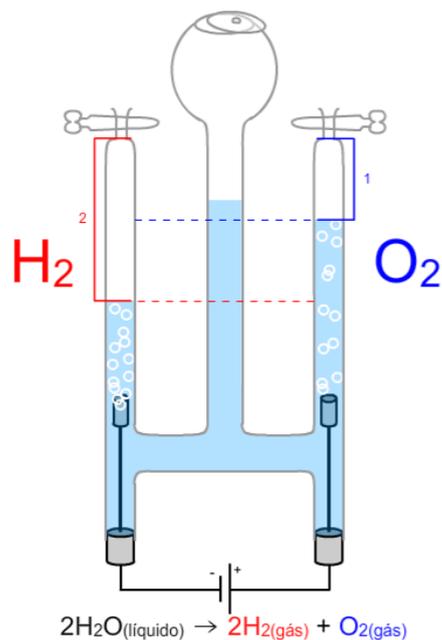


### 1º Exemplo: Eletrólise da água.

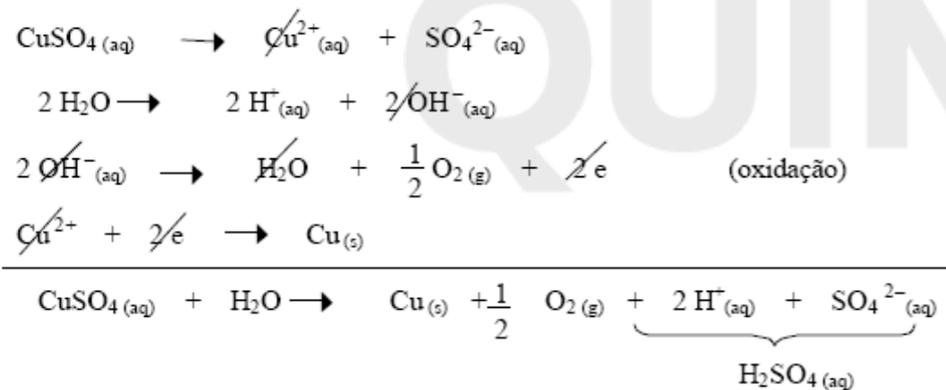


### **Obs:**

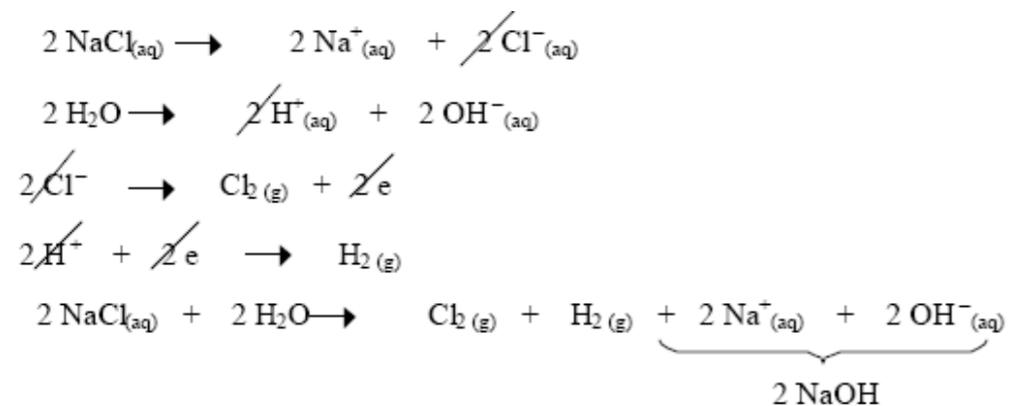
- Na eletrólise da água o volume de hidrogênio liberado corresponde ao dobro do volume de oxigênio.



### 2º Exemplo: Eletrólise aquosa de uma solução de $\text{CuSO}_4(\text{aq})$



### 3º Exemplo: Eletrólise aquosa de uma solução de $\text{NaCl}(\text{aq})$



#### **Obs:**

- Na eletrólise de soluções aquosas de **oxiácidos** ou de **bases fortes** quem sofre a eletrólise é a água.

#### **Eletrólise ou galvanização**

A galvanização consiste em se revestir um objeto metálico com um outro metal. O objeto que será recoberto é o cátodo e o metal que vai revestir é o ânodo. A galvanoplastia tem uma série de aplicações:

- Prateação
- Douração
- Produção de folhas-de-Flandres
- Cromação

QUÍMICA  
em AÇÃO

# RESUMO TEÓRICO

## RADIOATIVIDADE

1. Introdução
2. Características das Radiações
3. Meia Vida
4. Datação com  $C^{14}$

## Radioatividade

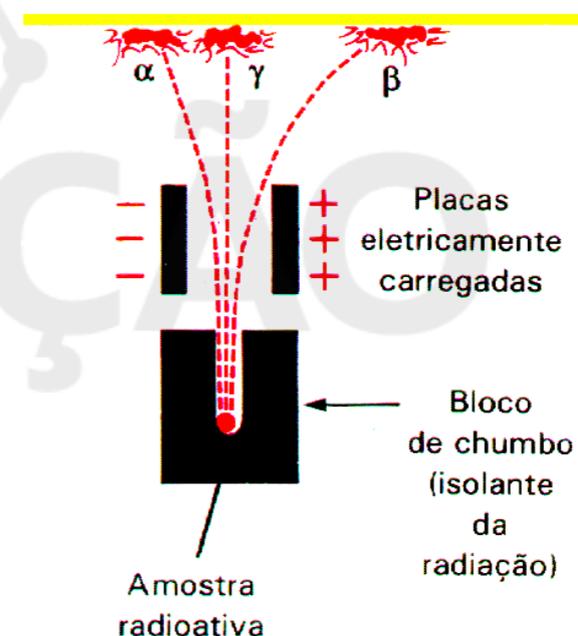
### Descoberta da radioatividade - Histórico

1895-Trabalhando com um tubo de raios catódicos o alemão Roentgen descobriu inesperadamente os raios X.

1896 – Henry Becquerel percebeu que um sal de urânio,  $K_2(UO_2)(SO_4)_2$ , conseguia revelar filmes fotográficos recobertos com papel ou por uma fina lâmina de metal. Imaginou então que o sal emitia alguma radiação desconhecida. O fenômeno foi denominado de radioatividade.

1897 – Marie Curie demonstrou que a intensidade da radiação é proporcional à quantidade de urânio na amostra e concluiu que a radioatividade era de natureza atômica e não molecular.

1897 – Rutherford analisando o desvio das radiações em um campo eletromagnético, descobriu que algumas tinham sua trajetória desviada em direção à placa negativa (raios  $\alpha$ ) e outras em direção a placa positiva (raios  $\beta$ ).



1898 – O casal Curie descobriu um novo elemento químico – o polônio, 400 vezes mais radioativo do que o urânio.

1899 - O casal Curie descobriu um novo elemento químico – o rádio, 900 vezes mais radioativo do que o urânio.

1900 – O físico Paul Villard, repetindo a experiência de Rutherford, percebeu a existência de outros raios que não eram afetados pelo campo eletromagnético (raios  $\gamma$ ).

## O que é radioatividade?

A radioatividade é um processo natural decorrente da liberação de energia de um **núcleo atômico** cuja relação entre o **número de prótons e de nêutrons** resulta em uma configuração **instável**; o processo modifica a relação prótons/nêutrons do núcleo e leva a configurações **estáveis (não radioativas)**. O ambiente no qual vivemos é naturalmente radioativo. Por exemplo, respiramos Carbono 14, que é radioativo, e é formado a partir da interação das radiações cósmicas com a atmosfera; comemos bananas que apresentam em sua composição Potássio 40, com núcleo instável, emissor de raios gama, entre outros. Vivendo em um ambiente radioativo, os seres humanos, e todos os demais seres vivos, são naturalmente radioativos. O problema está na quantidade de radiação à qual estes seres venham a ser expostos: acima de certo nível a exposição às radiações provoca, no corpo humano, e nos demais seres vivos, algumas reações adversas:

- A geração de radicais livres, provocando oxidação nas moléculas biológicas (DNA, etc.);
- Alterações no material genético, impedindo as células de se reproduzirem;
- Alterações no material genético, levando à transformação celular que, eventualmente, e em função de uma série de fatores que incluem características próprias e a predisposição do indivíduo irradiado, pode degenerar em câncer.

Mas níveis baixos de radiação são absorvidos sem maiores conseqüências pelas células do corpo humano, que possuem mecanismos de defesa e de recuperação.

## Tipos de radiação

### 1) Radiação alfa

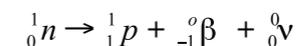
- É formada por partículas constituídas por 2 prótons e 2 nêutrons.
- Possuem carga igual a +2.
- Número de massa 4.
- Baixo poder de penetração.
- Simbologia  $\Rightarrow {}^4_2\alpha$

### 2) Radiação beta

- Constituída por elétrons de alta energia.
- Possuem carga igual a -1.
- Número de massa 0.
- Moderado poder de penetração.
- Simbologia  $\Rightarrow {}^0_{-1}\beta$

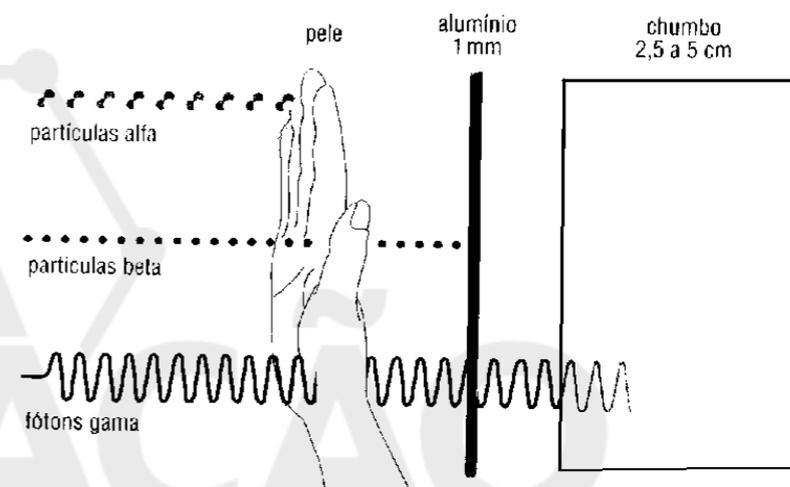
Obs:

- Na emissão de uma partícula beta, um nêutron presente no núcleo se decompõe e dá origem a um próton, a um elétron e a um neutrino (partícula com carga zero e massa, aproximadamente zero).



### 3) Radiação gama

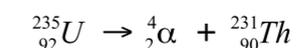
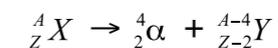
- Constituída por ondas eletromagnéticas
- Possuem carga igual a 0.
- Número de massa 0.
- Elevado poder de penetração.
- Simbologia  $\Rightarrow {}^0_0\gamma$



## Leis da radioatividade

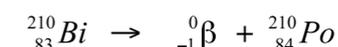
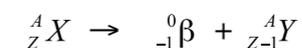
### 1) Emissão de partícula alfa

Quando um núcleo emite uma partícula alfa, seu número atômico diminui duas unidades e seu número de massa diminui quatro unidades.



### 2) Emissão de partícula beta

Quando um núcleo o emite uma partícula beta, seu número atômico aumenta uma unidade e seu número de massa não se altera.

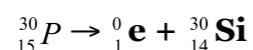


### 3) Emissão gama

A radiação gama não é constituída por partícula, e sim por ondas eletromagnéticas de altíssimas frequências. A emissão de radiação gama sozinha não altera o número atômico e o número de massa de um átomo. Nas emissões de radiação alfa e beta sempre ocorre também à emissão de radiação gama.

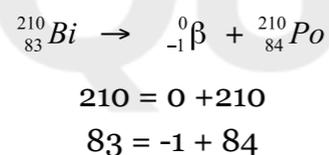
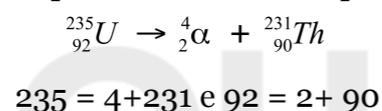
### 4) Emissão de pósitron

O pósitron é uma partícula de massa igual a do elétron mas com carga positiva. Na emissão de um pósitron o número de massa permanece o mesmo e o número atômico diminui uma unidade.



#### Obs:

- Nas equações nucleares sempre existe um balanço dos números de massas e das cargas elétricas nucleares. O somatório dos números de massas e das cargas elétricas nucleares antes e depois da emissão sempre deve ser igual. Ex:



### Cinética das desintegrações radioativas

#### Meia-vida ou período de semidesintegração (p ou $t_{1/2}$ )

Tempo necessário para que a atividade da amostra de um isótopo radioativo diminua à pela metade do seu valor inicial, ou seja, para que uma amostra radioativa se reduza à metade. O tempo de meia-vida é uma característica particular de cada elemento.

Isótopo	Meia-vida
${}^{238}\text{U}$	$4,5 \cdot 10^9$ anos
${}^{14}\text{C}$	5370 anos
${}^{99}\text{Tc}$	6 horas
${}^{13}\text{O}$	$8,7 \cdot 10^{-3}$ segundos

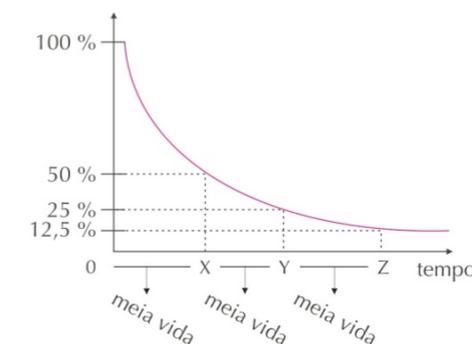
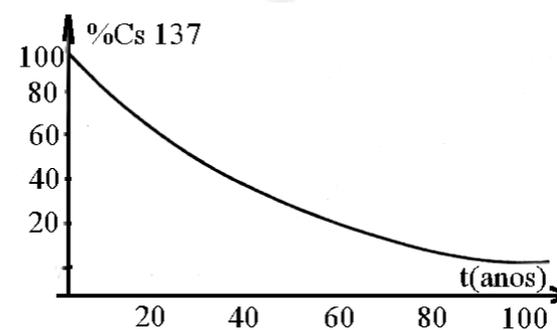
Importante característica das meias-vidas dos decaimentos nucleares é a independência diante de condições externas como temperatura, pressão, ou combinações químicas. A meia-vida de um elemento é invariável. O conceito de meia-vida pode ser aplicado à massa, número de mol, número de átomos e porcentagem de um radioisótopo. Vamos considerar como exemplo 4 amostras diferentes de  ${}^{137}\text{Cs}$  que possui meia-vida de 30 anos:

Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4	Tempo (anos)
400 g	20 mol	160 átomos	100 %	0
200 g	10 mol	80 átomos	50 %	30
100 g	5 mol	40 átomos	25 %	60
50 g	2,5 mol	20 átomos	12,5 %	90

O decaimento radioativo obedece às regras de um caso particular de sequência numérica da matemática denominada progressão geométrica (P.G).



O decaimento radioativo pode ser representado em um gráfico denominado de curva de decaimento.



A relação matemática que permite relacionar a quantidade inicial ( $Q_i$ ) à quantidade final ( $Q_f$ ) de um decaimento radioativo com a meia-vida ( $P$ ) e o tempo de desintegração ( $T$ ) é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{Q_i}{Q_f} = 2^x \quad T = x \cdot P, \quad \text{onde, } X = \text{número de meias-vidas}$$

Obs:

- O decaimento radioativo é um processo cinético de primeira ordem.
- Existe uma relação entre a meia-vida de um elemento (P) e a sua constante radioativa (K).

$$P = \frac{0,693}{K}$$

### Vida média (v<sub>m</sub>)

A vida média indica o tempo que os átomos de determinado isótopo radioativo levam em média para se desintegrarem.

$$V_m = \frac{1}{K}$$

K = constante radioativa (particular de cada elemento)

Portanto:

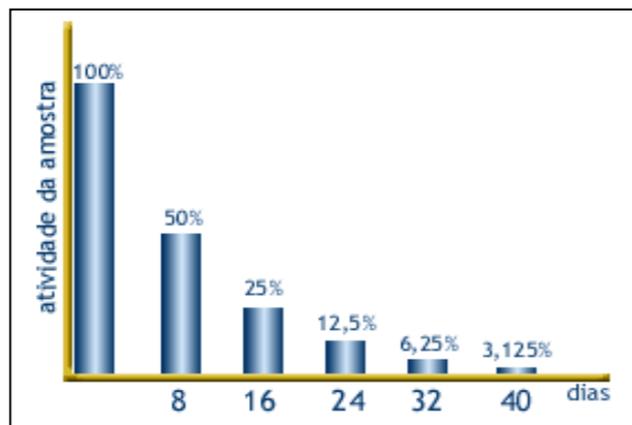
$$V_m = \frac{P}{0,693}$$

### Velocidade de desintegração

A velocidade de desintegração (V) de uma dada amostra de isótopos radioativos é proporcional ao número de núcleos radioativos da amostra (N):

$$V = K \cdot N$$

A velocidade de desintegração também pode ser denominada de **atividade da amostra**.



A atividade pode ser interpretada como o número de desintegrações radioativas que ocorrem em uma determinada unidade de tempo. As unidades mais utilizadas são o **bequerel** e o **curie**.

Unidade	Desintegrações /segundo
bequerel (Bq)	1
curie (Ci)	$3,7 \cdot 10^{10}$

A constante de decaimento (K) possui um valor definido para cada isótopo radioativo.

Isótopo	K (ano <sup>-1</sup> )
<sup>226</sup> Ra	$1/2 \cdot 10^{10}$
<sup>232</sup> Th	1/2300

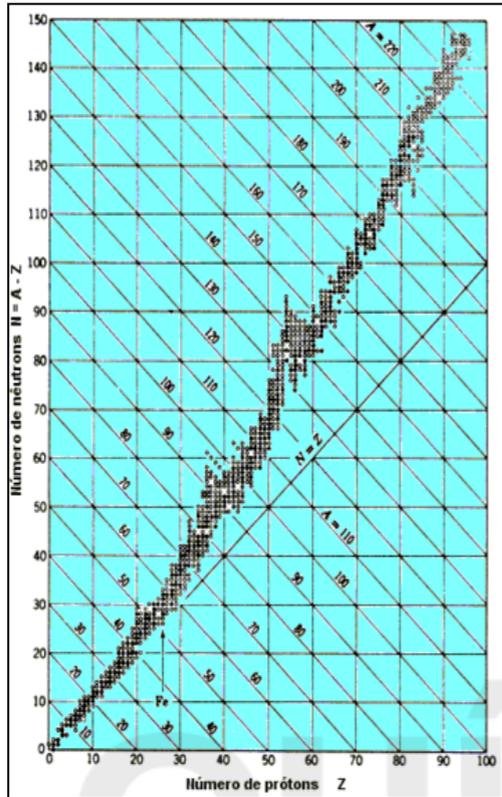
### Qual a interpretação correta do valor da constante radioativa?

Quando dizemos que a constante radioativa do <sup>226</sup>Ra é  $1/2 \cdot 10^{10} \text{ ano}^{-1}$ , significa que a probabilidade máxima e que em  $2 \cdot 10^{10}$  anos somente um átomo se desintegrará. Quanto maior o valor de K, mais radioativo é o radioisótopo. A meia vida possui uma relação matemática com a constante radioativa:

$$P = \frac{0,693}{K}$$

### Faixa de estabilidade (FE)

A faixa sombreada do gráfico mostra a região (nêutrons/prótons) onde são encontrados os núcleos estáveis. Essa faixa termina no elemento <sup>83</sup>Bi. Todos os núcleos com mais de 84 prótons são radioativos.



- Núcleos com razão entre nêutrons e prótons muito grande (acima da FE) = emissão beta
- Núcleos com razão entre nêutrons e prótons pequena (abaixo da FE) = emissão de pósitron ou captura de elétrons.
- Núcleos com número atômico 84 ou maior (núcleos pesados) = emissão alfa.

**Obs: Essas regras não são rígidas.**

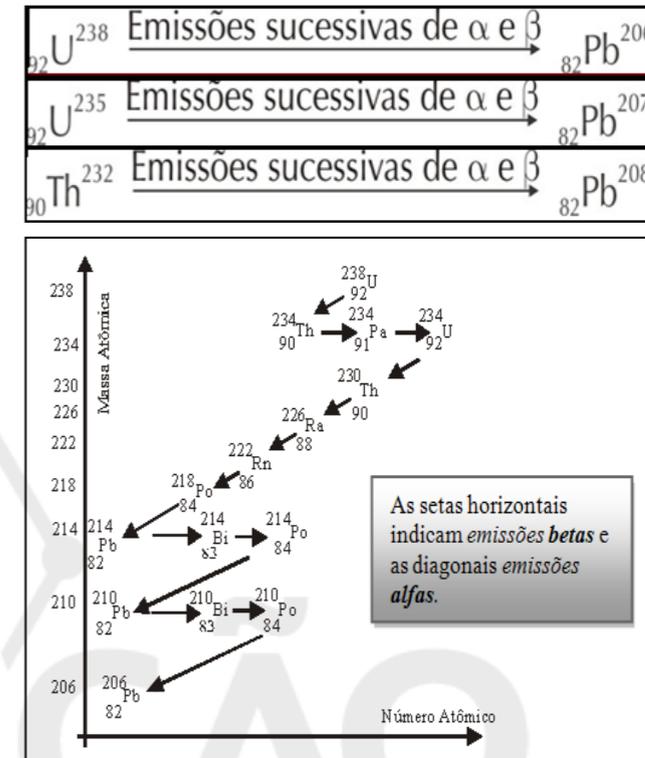
### Curiosidades

Os núcleos com 2, 8, 20, 28, 50 ou 82 prótons, ou com 2, 8, 20, 28, 50, 82 ou 126 nêutrons são, em geral, mais estáveis (números mágicos). Os núcleos com números pares de prótons e de nêutrons são, em geral, mais estáveis.

Isótopos estáveis	Prótons	Nêutrons
157	Par	Par
53	Par	Ímpar
50	Ímpar	Par
5	Ímpar	Ímpar

### Séries radioativas (famílias radioativas)

É uma sequência de compostos que se origina através de sucessivas emissões alfa e beta tendo como composto final um isótopo estável do elemento chumbo (Pb). Existem três séries radioativas naturais:



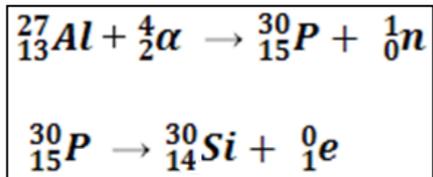
As transmutações artificiais podem ser obtidas por bombardeamento de núcleos estáveis com partículas  $\alpha$  e nêutrons ou pela colisão entre átomos. Essas metodologias permitiram a obtenção de centenas de novos radioisótopos.

A primeira transmutação artificial produzindo oxigênio a partir do bombardeamento de nitrogênio com partículas alfa foi realizada em 1919 por Rutherford.



### Radioatividade artificial

Irene Curie, filha de Marie Curie, e seu marido Frederic Joliot, bombardearam o  ${}^{27}\text{Al}$  com partículas  $\alpha$  e produziram  ${}^{30}\text{P}$  e um nêutron. O fósforo-30 foi o primeiro radioisótopo artificial produzido pelo homem. Essa reação nuclear é representada por:



Atualmente as transmutações artificiais geralmente são realizadas em reatores nucleares ou aceleradores de partículas. Nesses aparelhos as partículas são aceleradas mediante campos elétricos e magnéticos e são colocadas em rota de colisão com gigantesca energia.

O maior acelerador de partículas da atualidade é o LHC, com um túnel de 27 km de circunferência situado a 100 m abaixo da superfície. O LHC é a maior e mais sofisticada máquina construída na história da civilização.

### **Produção de energia**

Projeções indicam que até 2050 o consumo de energia terá um aumento de 160%. Uma das possíveis opções para solucionar esse problema de produção de energia é a utilização da energia nuclear. Existem dois processos de produção de energia através de reações nucleares: fissão nuclear e fusão nuclear.

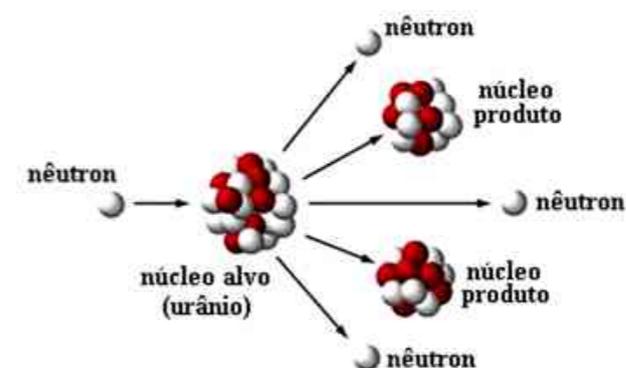
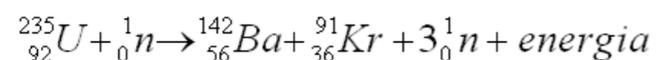
### **Fissão nuclear**

Fissão nuclear é um processo de divisão de um núcleo atômico, em geral de grande massa, em dois núcleos menores, liberando uma grande quantidade de energia.

A fissão é ocasionada pelo bombardeio do núcleo com partículas.

Durante a fissão ocorre uma diminuição considerada de massa que justifica a grande quantidade de energia liberada. Essa transformação de massa em energia foi prevista e equacionada por Albert Einstein em 1905.

Uma das fissões mais importantes é a do  ${}^{235}\text{U}$ .



A fissão de 1g de urânio-235 libera uma quantidade de energia equivalente a aproximadamente 30.000 Kg de TNT, um dos explosivos mais poderosos que o homem conhece.

O número médio de nêutrons liberados por cada átomo de  ${}^{235}\text{U}$  que sofre fissão é de 2,4. Esses nêutrons liberados podem provocar a fissão de outros átomos, liberando mais nêutrons e mais energia.

Se a reação não for controlada ocorrerá a liberação de uma enorme quantidade de energia em um pequeno intervalo de tempo gerando uma violenta explosão.

Para ocorrer a reação em cadeia é necessária uma massa mínima de urânio-235 denominada de massa crítica. Para o urânio esse valor mínimo é de aproximadamente 1Kg

### **Bomba atômica**

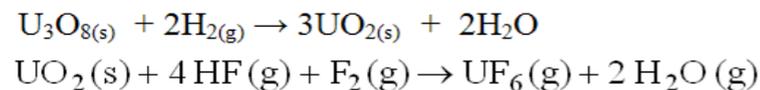
Em 1941 o presidente Roosevelt criou um audacioso projeto denominado de “Projeto Manhattan”, que envolveu grande parte dos EUA na construção da bomba atômica.

Uma das etapas mais difíceis da produção da bomba atômica foi a do enriquecimento do urânio. O urânio natural possui 0,7%  ${}^{235}\text{U}$  e 99,3%  ${}^{238}\text{U}$  que não sofre fissão.

Em uma bomba atômica o teor de urânio-235 deve ser de aproximadamente 90%

## Enriquecimento de urânio

Atualmente o **enriquecimento do urânio** é feito por processos baseados na diferença das **velocidades de efusão (passagem dos gases através de pequenos orifícios)** dos gases  $^{235}\text{UF}_6$  e  $^{238}\text{UF}_6$ .



$$\frac{V_a}{V_b} = \sqrt{\frac{M_b}{M_a}}$$

**Lei de Graham**

## Testes nucleares

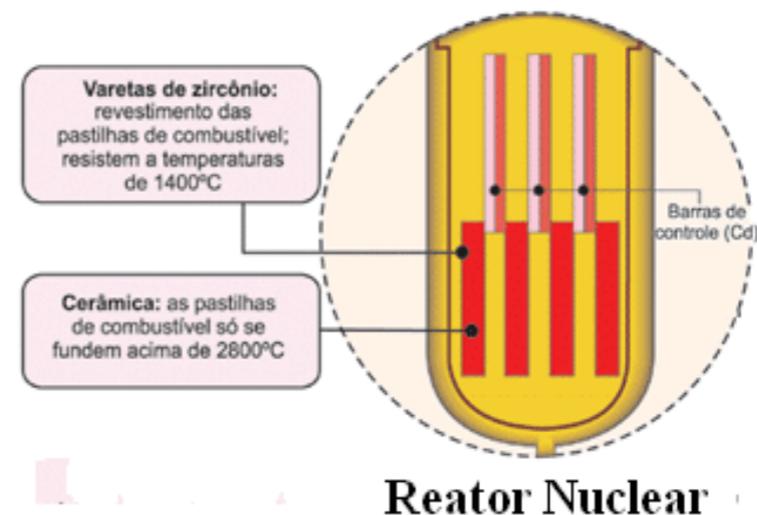
Linus Pauling ganhou o prêmio Nobel da Paz, em 1962, por suas objeções declaradas aos testes nucleares. Em 1963 vários países assinaram o Tratado de Interdição Parcial de Ensaio Nucleares, comprometendo-se a não testarem armas nucleares na atmosfera, debaixo de água, ou no espaço exterior. O tratado permitia testes subterrâneos.

Em 1996 foi assinado o Tratado de Interdição Completa de Ensaio Nucleares.

## Reatores nucleares

É um dispositivo em que a fissão nuclear ocorre de forma controlada e o calor liberado no processo é utilizado para produzir energia elétrica. O combustível do reator nuclear pode ser urânio enriquecido (3% de  $^{235}\text{U}$ ) ou plutônio.

A fissão é controlada no núcleo do reator por um agente moderador que contém um material, geralmente grafite ou água pesada, que diminui a velocidade dos nêutrons e barras de controle geralmente feitas de cádmio que absorvem o excesso de nêutrons.



## Lixo nuclear

Um dos grandes problemas das usinas nucleares é o gerenciamento do descarte de resíduos nucleares.

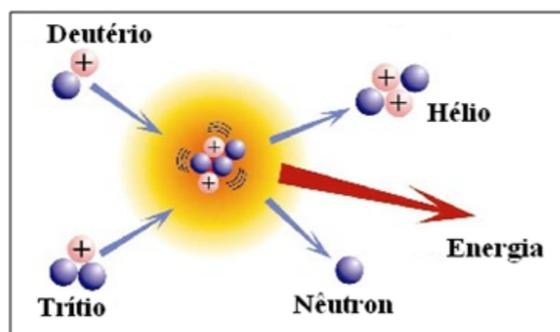
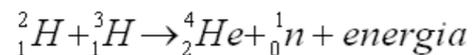
Esses resíduos são os produtos da fissão do combustível do reator. O maior problema é que muitos dos radioisótopos formados durante a fissão possuem tempos de meia-vida longos.

Estudos indicam que seriam necessárias cerca de 20 meias-vidas para se atingir um nível seguro de exposição organismos vivos.

## Fusão nuclear

Fusão nuclear é a união de dois núcleos atômicos leves para formar outro mais pesado, liberando uma grande quantidade de energia.

Para ocorrer a fusão os núcleos devem possuir uma enorme quantidade de energia para superarem a repulsão que existe entre eles. A fusão dos isótopos do hidrogênio é a mais importante.



A temperatura mínima para essa reação ocorrer está na ordem de 40.000.000 K, por isso, essa reação é denominada de termonuclear.

A quantidade de energia liberada na fusão é maior que na fissão e geralmente não ocorre à formação de produtos radioativos.

**A fusão só é utilizada, por enquanto, na construção de armas nucleares como a bomba H.**

Os maiores problemas para o aproveitamento da fusão nuclear na produção de energia são: a temperatura necessária para iniciar a fusão e a construção de um reator capaz de confinar o meio reacional.

Os protótipos existentes atualmente de reatores de fusão, pretendem conter o meio reacional da fusão utilizado potentes **campos magnéticos**. Esse projeto foi desenvolvido por cientistas Russos e ficou conhecido como **tokamak**.

Atualmente existe um grande consórcio internacional que reúne a Rússia, EUA, União Européia, China, Japão e Coréia do Sul que pretende construir um multibilionário reator de fusão nuclear estilo tokamak no sul da França. O projeto é conhecido pela sigla **ITER(Reator Termonuclear Experimental Internacional)**.

### Medicina

Radioisótopo	Utilização
${}^{131}\text{I}$	Tratamento de câncer e mapeamento da tireóide
${}^{99}\text{Tc}$	Mapeamento do cérebro, pulmões, ossos e fígado
${}^{137}\text{Cs}$ e ${}^{60}\text{Co}$	Radioterapia
${}^{197}\text{Hg}$	Tratamento de tumores cerebrais
${}^{24}\text{Na}$	Medição do volume sanguíneo
${}^{15}\text{O}$	Tomografia

### Química

Em química os radioisótopos são utilizados como **traçadores**, substâncias que podem ser monitoradas durante um processo devido à emissão de radiação. Os traçadores são utilizados na elucidação dos mecanismos das reações químicas.

Um importante exemplo dessa utilização foi a descoberta das etapas da fotossíntese realizado pelo cientista **Melvin Calvin**. O pesquisador utilizou  $\text{CO}_2$  marcado com carbono 14 (emissor  $\beta$ ) para investigar o mecanismo da fotossíntese.

### Aplicações na indústria

As emissões radioativas são utilizadas para visualizar imperfeições internas em estrutura de tubos, molas, motores, aviões e navios etc. Consiste em um processo semelhante ao de uma radiografia de raios-X, esse processo também permite medir a espessura de placas metálicas. Outra aplicação industrial é a utilização de radioisótopos na localização de vazamentos em tubulações de água.

### Agricultura

Na agricultura uma das utilizações da radioatividade é a utilização de radioisótopos para acompanhar a absorção de fertilizantes nos vegetais.

A radioatividade também pode ser utilizada para matar os microorganismos presentes no alimento, aumentando dessa forma a sua durabilidade (alimentos irradiados).

### Efeitos biológicos da radiação

As radiações mais perigosas para os sistemas biológicos são as ionizantes.

Os **raios alfa, beta, gama, X e UV** são exemplos de radiações ionizantes.

As radiações ionizantes removem elétrons das moléculas de água e formam íons  $\text{H}_2\text{O}^+$  muito reativos.



Os tecidos mais suscetíveis à radiação são os que se reproduzem rapidamente, como a **medula óssea, os tecidos hematogênicos e os nodos linfáticos**.

Externamente a radiação mais perigosa é a **gama**. Internamente os raios alfa são especialmente perigosos, pois são altamente ionizantes e desencadeiam lesões biológicas bastante graves.

A escala mais utilizada para medição de danos biológicos é o **Sievert**.

Todo ano absorvemos, em média, **0,0024 Sievert** de radiações ionizantes provenientes de fontes naturais.

### **Acidentes nucleares**

#### ***O acidente de Three-Mile Island***

Em 28 de março de **1979** uma falha no sistema de refrigeração do reator causou a fusão de suas partes internas causando a liberação de radioatividade para atmosfera. Não houve nenhuma morte.

#### ***O acidente de Chernobyl(1986)***

O superaquecimento de um dos reatores da usina causado por uma série de procedimentos inadequados de segurança e erros humanos produziu duas explosões que projetaram pedaços do reator para fora provocando uma chuva de detritos radioativos e desencadeando um incêndio que levou dez dias para ser controlado.

**58 pessoas morreram** imediatamente após o acidente e que cerca de **quatro mil pessoas adquiriram câncer** de tireóide em decorrência do acidente.

Segundo previsões baseadas em estudos epidemiológicos, no futuro cerca de **10 mil pessoas** poderão morrer em virtude de diversos tipos de tumor causados pela exposição à radiação de Chernobyl.

#### ***O acidente de Goiânia***

Em 13 de setembro de 1987 foi encontrado em Goiânia um aparelho de radioterapia abandonado que continha uma fonte de cloreto de césio ( $^{137}\text{CsCl}$ ) do Instituto Goiano de Radioterapia. O césio 137 é um beta emissor que se transforma em bário 137 que é um gama emissor.

#### ***O acidente de Tokaimura***

O acidente aconteceu em 30 de setembro de 1999 em uma instalação de purificação do Urânio no Japão. Três funcionários da usina colocaram num tanque de

ácido alguns quilos (sete vezes mais do que o permitido) de mineral radioativo. Com isso iniciou-se uma reação nuclear em cadeia que matou dois trabalhadores e causou a evacuação de centenas de moradores das proximidades.

#### ***O acidente de Fukushima no Japão***

Após ter parte de seu território devastado por um terremoto seguido de tsunami, a usina japonesa de Fukushima teve o seu sistema de resfriamento avariado e os técnicos japoneses adotaram medidas alternativas, como a injeção de água do mar nos reatores. Mesmo assim, três explosões aconteceram.

# RESUMO TEÓRICO

## INTRODUÇÃO À QUÍMICA ORGÂNICA

1. Histórico da Química Orgânica
2. O Carbono e suas Classificação
3. Representação das Cadeias Carbônicas
4. Classificação das Cadeias Carbônicas
5. Compostos Aromáticos e Ressonância
6. A Hibridização do Carbono
7. Nomenclatura (1/3): Cadeias Normais
8. Nomenclatura (2/3): Os Radicais
9. Nomenclatura (3/3): Cadeias Ramificadas
10. Principais Funções dos Hidrocarbonetos
11. O Petróleo

## Histórico da Química Orgânica

### Introdução

- > Todos os ramos da química são de extrema importância, no entanto, nenhum deles está tão relacionado com o nosso cotidiano ou mesmo com nossas vidas como a química orgânica.
- > Podemos dizer que hoje vivemos a “Era da Química Orgânica”.
- > Sem as moléculas orgânicas não existiria vida em nosso planeta. As moléculas orgânicas são o “**coração da vida**”

### Histórico

- > Sec XVIII Carl Schelle isolou uma série de compostos de organismos vivos.

Leite → ácido láctico  
Limão → ácido cítrico  
Urina → uréia  
Gordura → glicerina

- > 1777 - Bergman propôs a primeira divisão da química.

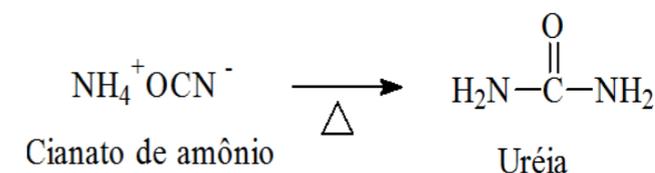
**Química inorgânica** → Reino mineral

**Química orgânica** → Seres vivos

- > **Lavoisier** descobre que os compostos orgânicos possuem o elemento carbono. 1807- Berzelius criou a “**teoria da força vital**”

**“Um composto orgânico não pode ser sintetizado em um laboratório”**

- > 1828 - Wölher derrubou a teoria do “Vitalismo” sintetizando a uréia a partir do **cianato de amônio**, um composto inorgânico.



- > 1858- Kekulé define que química orgânica é a parte da química que estuda os compostos de carbono.
- > Atualmente a química orgânica é a parte da química que estuda quase todos os compostos de carbono.
- > Existem compostos que possuem carbono, mas são inorgânicos. Esses compostos são denominados compostos de transição. Ex: HCN, CO, CO<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>.

## O Carbono e suas Classificações

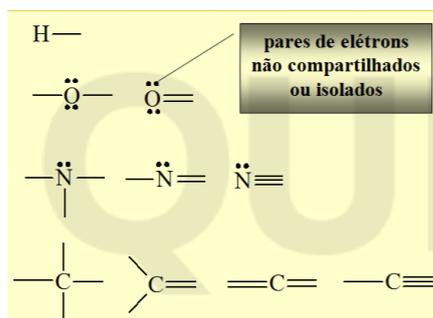
### Elementos organógenos

Os elementos que compõem os compostos orgânicos são denominados elementos **organógenos**. Na constituição dos compostos orgânicos além do carbono e hidrogênio alguns outros elementos aparecem com muita frequência como oxigênio, nitrogênio, enxofre, halogênios e mesmo alguns metais. Os principais elementos **organógenos** são:



- Tendência de ligação:

H = monovalente  
O = bivalente  
N = trivalente  
C = tetravalente



### Propriedades dos compostos orgânicos

- Elevado número de compostos.
- Predominância da ligação covalente (compostos moleculares).
- Apresentam geralmente baixa estabilidade diante de agentes energéticos, como temperatura, pressão, ácidos concentrados etc.
- A grande maioria é combustível, ou seja, sofre combustão (inflamáveis).
- A grande maioria é insolúvel em água, ou seja, são predominantemente apolares.
- Maus condutores de eletricidade e calor.
- Reagem, na maioria dos casos, mais lentamente que os inorgânicos com formação de subprodutos e requerem geralmente o uso de catalisadores.
- PF/PE baixos comparados aos inorgânicos iônicos.

### Teoria estrutural de Kekulé (postulados)

- O carbono é tetravalente

#### Observação:

Os carbonos que possuem somente ligações simples são denominados **saturados** e os de duplas e triplas **insaturados**.

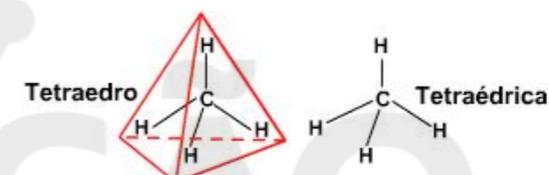
- As quatro ligações (valências) do carbono são iguais e coplanares.
- O carbono é capaz de formar cadeias.

#### Obs:

Vant'Hoff e Le Bel propuseram uma estrutura tetraédrica para o carbono (1874). Dessa forma pode-se explicar porque só existia um composto com a fórmula  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ . O trabalho de Vant'Hoff sobre o arranjo espacial dos átomos de carbono, foi extremamente criticado por Kolbe, um dos maiores químicos da época.

### Geometria dos carbonos

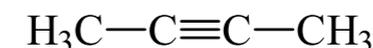
- Carbono saturado (ligações simples) geometria tetraédrica. Ângulo de ligação  $109^\circ 47'$ .



- Carbono de dupla ligação geometria trigonal plana. Ângulo de ligação  $120^\circ$ .



- Carbono de tripla ou de duas duplas ligações geometria linear. Ângulo de ligação  $180^\circ$ .



### Classificação de carbonos

A classificação de carbonos se refere ao **número de carbonos** a que cada **carbono está ligado**.

- Carbono primário = ligado a um carbono
- Carbono secundário = ligado a dois carbonos

- Carbono terciário = ligado a três carbonos
- Carbono quaternário = ligado a quatro carbonos

### Obs:

- A classificação de carbonos só se aplica a **carbonos saturados (IUPAC)**.
- O átomo de carbono que não está ligado a nenhum carbono é denominado **núclero**, para efeito de classificação, como **primário**.

### Nomenclatura das ligações

Toda ligação covalente simples é denominada de **sigma ( $\sigma$ )**, independente de quais sejam os átomos que estão estabelecendo a ligação. Nas ligações múltiplas uma das ligações sempre é sigma e as demais são denominadas de **pi ( $\pi$ )**, independente de quais sejam os átomos ligados.

	Quatro ligações sigmas
	Três ligações sigmas e uma ligação pi
	Duas ligações sigmas e duas ligações pi

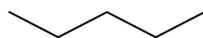
### Classificação das Cadeias Carbônicas

- Cadeias fechadas homogêneas podem ser classificadas como **homocíclicas** e fechadas heterogêneas de **heterocíclicas**.
- Cadeias fechadas ramificadas podem ser classificadas como **mistas**.

As cadeias carbônicas podem ser classificadas segundo vários critérios:

#### 1) Quanto ao fechamento da cadeia

- **Aberta ou acíclica ou alifática** ⇒ a cadeia não sofre nenhum fechamento.

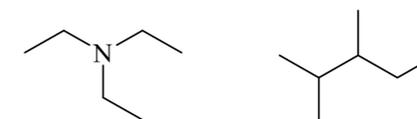


- **Fechada ou cíclica ou cicloalifática ou alicíclicas** ⇒ a um fechamento na cadeia formando um ciclo.



#### 2) Quanto à disposição dos átomos

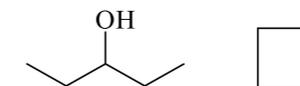
- **Ramificada** ⇒ é aquela que apresenta no mínimo três extremidades de carbono.



Em uma cadeia ramificada, pelo menos uma das seguintes condições deve existir:

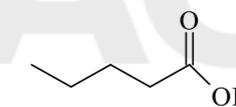
- 1) Presença de **carbono terciário** ou **quaternário**.
- 2) Possuir mais de duas extremidades de carbono.

- **Normal ou reta ou linear** ⇒ é aquela que apresenta somente duas extremidades de carbono.

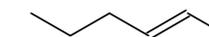


#### 3) Quanto aos tipos de ligação

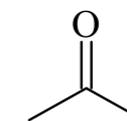
- **Saturada** ⇒ apresenta somente ligações simples entre os átomos de carbono.



- **Insaturada** ⇒ apresenta ligações duplas ou triplas entre os átomos de carbono.



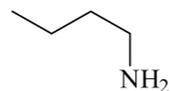
Nota: Um composto pode ser insaturado e possuir cadeia saturada



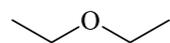
cadeia saturada  
composto insaturado

#### 4) Quanto à natureza dos átomos

- **Homogênea** ⇒ não possui nenhum átomo diferente de carbono **entre** carbonos (heteroátomo).



• **Heterogênea** ⇒ possui pelo menos um átomo diferente de carbono **entre** carbonos (heteroátomo).

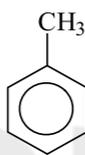


### Cadeias aromáticas

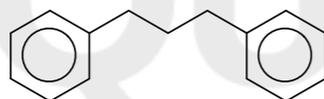
São aquelas que apresentam em sua estrutura pelo menos um núcleo benzênico.

#### 1) Quanto ao número de núcleos

• **Mononuclear** ⇒ contêm um único anel benzênico.



• **Polinuclear** ⇒ contêm vários anéis benzênicos.



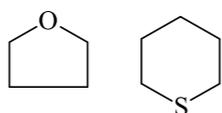
isolados



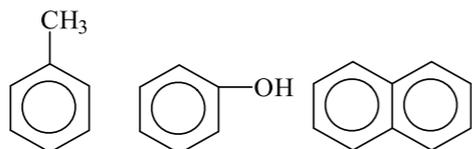
condensados

### Classificação de compostos orgânicos

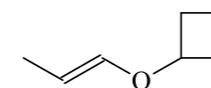
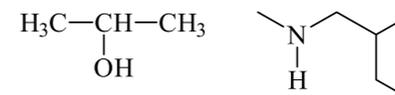
1) **Heterocíclicos** ⇒ apresentam cadeia carbônica heterocíclica.



2) **Aromáticos** ⇒ apresentam núcleo benzênico.



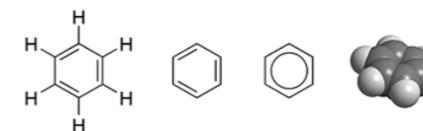
3) **Alifáticos** ⇒ são os demais.



### Compostos Aromáticos

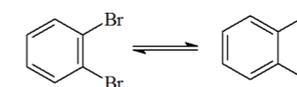
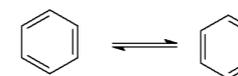
#### Compostos aromáticos

São compostos que possuem núcleo benzênico ou obedecem a regra de Hückel. O benzeno é o principal representante da classe dos aromáticos.



#### Histórico do benzeno

- Descoberto por Michael Faraday em 1825.
- Sua fórmula molecular ( $C_6H_6$ ) foi estabelecida nove anos depois.
- Sua fórmula estrutural só foi estabelecida em 1865 por Kekulé, segundo o que sabe, após um sonho.
- Kekulé usou uma simbologia dos alquimistas o ouroboros, para representar o seu sonho.
- Kekulé propôs uma estrutura cíclica com duplas alternadas em que cada átomo de hidrogênio estava ligado a um átomo de carbono. Entretanto, surgiu um problema com a proposta de Kekulé. Ela permitia dois desenhos diferentes para o benzeno e para o 1,2 - dibromobenzeno, para resolver o problema, Kekulé propôs que as duas formas do benzeno e de seus derivados, coexistiam em um equilíbrio químico muito rápido, que impedia o isolamento dos compostos separados.



- A teoria estrutural de Kekulé também não explicava as características atípicas do benzeno e de seus derivados de sofrerem reações de substituição em vez de adição e de serem mais estáveis do que as estruturas de Kekulé sugeriam.

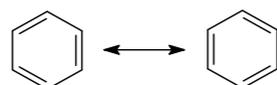
## Teoria estrutural moderna

- O benzeno é um hexágono regular.
- Se o benzeno tivesse ligações duplas e simples alternadas ele não poderia ser representado por um hexágono regular por que uma ligação simples não tem o mesmo comprimento que uma ligação dupla.

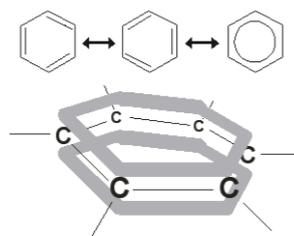
Ligação	Ordem	Comprimento (pm)
C-C	1	154
C=C	2	134
C≡C	3	121

## Estruturas canônicas

- A estrutura real do benzeno é explicada pela teoria da ressonância proposta pela mecânica quântica na década de 1920.
- O benzeno possui duas estruturas canônicas.



- No benzeno, verifica-se que todas as ligações têm o mesmo comprimento (**1,4Å**) indicando, portanto, que nenhuma das duas estruturas canônicas é a estrutura real. As ligações do benzeno possuem comprimentos intermediários entre a simples (**1,54Å**) e a dupla (**1,34Å**) devido à ressonância dos elétrons pi.
- De acordo com a teoria da ressonância sempre que duas ou mais estruturas de Lewis podem ser escritas para uma molécula que diferem apenas na posição de seus elétrons, **nenhuma das estruturas** deverá estar em completa concordância com as propriedades físicas e químicas dos compostos.
- A estrutura real é um híbrido de ressonância das estruturas canônicas.



O círculo representa o movimento contínuo e deslocalizado dos elétrons pi dos átomos de carbono.

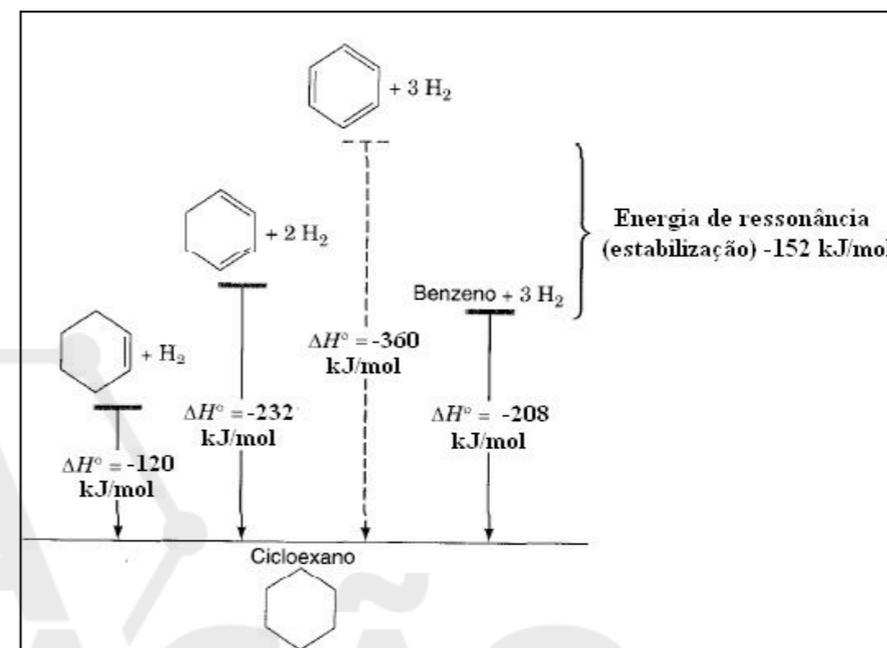
## Ressonância

**“É uma mistura de estruturas com o mesmo arranjo de átomos, mas com arranjo de elétrons diferente. Isto diminui a energia da molécula e aumenta a sua estabilidade”.**

## Energia de ressonância

As principais características dos compostos aromáticos são:

- 1) Tendência de sofrer reação de substituição em vez de adição mesmo se for altamente insaturado.
- 2) Possuir estabilidade maior que a esperada (energia de ressonância).

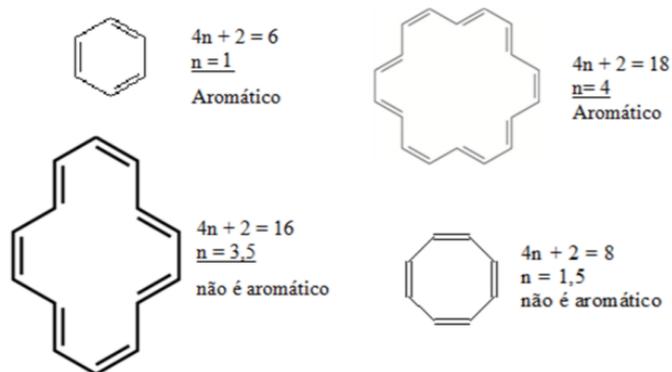


## Regra de Hückel

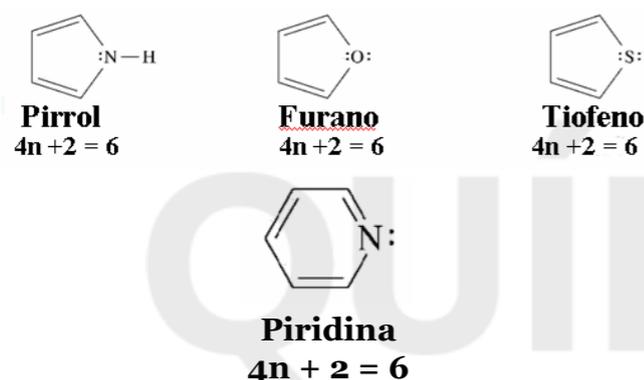
- Atualmente os conceitos de composto aromático e aromaticidade se tornaram mais amplos.
- Hoje o homem conhece compostos aromáticos que não possuem núcleo benzênico.
- Em 1931, o físico Erich Hückel criou uma equação matemática tendo como base a mecânica quântica, que permite avaliar se um composto é aromático ou não. A equação de Hückel é aplicada apenas a compostos monocíclicos planos.

$$4n + 2 = n^{\circ} \text{ de elétrons } \pi$$

- Quando  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ , o sistema será aromático, caso contrário não o será. Observe a aplicação da equação de Hückel nos compostos a seguir:



- Os principais exemplos de compostos aromáticos que não possuem o núcleo benzênico são os seguintes heterocíclicos:



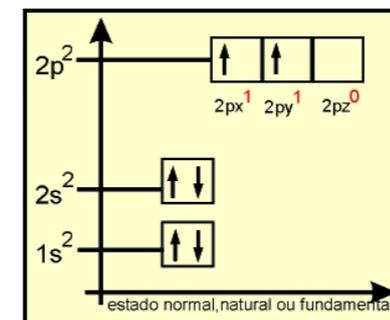
## Hibridização

### Revisão de orbitais

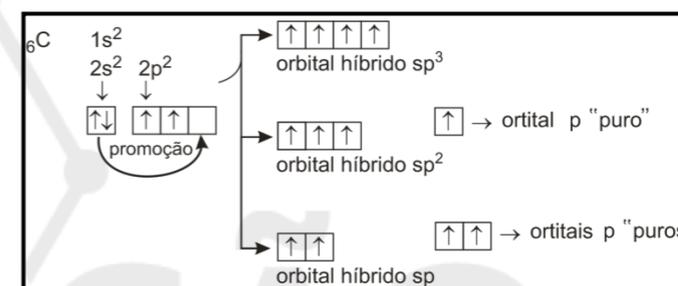
- Orbital é a região de maior probabilidade de se encontrar o elétron.
- Cada orbital possui um **formato espacial** definido.
- Existem 4 tipos principais de orbitais: **s, p, d e f**.
- As hibridizações do carbono utilizam somente os orbitais **s e p**.

### Hibridização

- O número de elétrons desemparelhados (**orbitais incompletos**) indica a quantidade de ligações covalentes que podem ser efetuadas.
- No estado fundamental, o carbono possui somente **2 elétrons** desemparelhados, podendo portanto, fazer **somente duas ligações**.



- A hibridização é um fenômeno que permite ao átomo realizar um número maior de ligações, aumentando assim a sua estabilidade.
- Hibridização consiste na  **fusão**  de orbitais atômicos incompletos, que se transformam originando novos orbitais, em **igual número**. Esses novos orbitais são denominados de **orbitais híbridos**.
- Existem três hibridizações para o átomo de carbono.



- Outros átomos também podem sofrer hibridização. Ex: O, N, S, Be, P, B etc

Tipo de carbono	Hibridização	Geometria	Ângulo de ligação
Saturado	$sp^3$	Tetraédrica	$109,47^\circ$
1 dupla	$sp^2$	Trigonal plana	$120^\circ$
1 tripla ou 2 duplas	$sp$	Linear	$180^\circ$

- A hibridização determina a geometria da molécula.
- Os orbitais p que não participam da hibridização são denominados de "**p puro**".
- A superposição **lateral** de orbitais "**p puro**" formam as ligações **pi**.
- As ligações **sigmas** são formadas por superposições **frontais** de orbitais: s, p ou híbridos.

## Nomenclatura

### Nomenclatura de compostos orgânicos

Devido ao grande número de compostos orgânicos foi necessário criar uma normalização dos nomes. Em 1892 em Genebra foi criado o primeiro sistema internacional de nomenclatura da química orgânica, que foi se aperfeiçoando até se transformar nas “**Regras da IUPAC de 1957**”. As regras da IUPAC são constantemente revisadas e atualizadas.

#### Princípios básicos

- Cada composto orgânico deve ter um nome diferente.
- A partir do nome deve ser possível desenhar a fórmula estrutural do composto.
- O nome de um composto orgânico é dividido em três partes: **prefixo+ infixo+sufixo**.

**Prefixo** = indica o número de átomos de carbono na cadeia principal.

Nº de carbonos	Prefixo	Nº de carbonos	Prefixo
1	Met	7	Hept
2	Et	8	Oct
3	Prop	9	Non
4	But	10	Dec
5	Pent	11	Undec
6	Hex	12	Dodec

**Infixo** = indica o tipo de ligação entre os carbonos.

Ligações simples = **an**

Ligações duplas = **en**

Ligações triplas = **in**

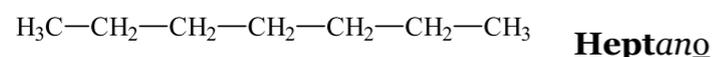
**Sufixo** = indica a função ou grupo de compostos que a substância pertence.

### Hidrocarbonetos

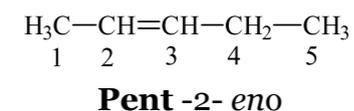
São compostos formados apenas por carbono e hidrogênio.

Fórmula geral  $\Rightarrow C_xH_y$

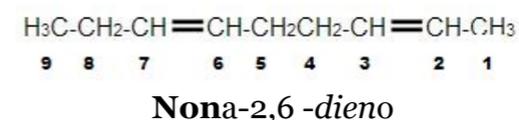
#### Nomenclatura de hidrocarbonetos de cadeia normal



É necessário indicar no nome a **localização da insaturação** quando houver mais de uma posição possível para ela. Essa indicação é feita numerando-se os carbonos a partir da **extremidade** mais próxima da insaturação e escrevendo-se na **frente do infixo** o menor dos dois números que recaem sobre os carbonos da insaturação.

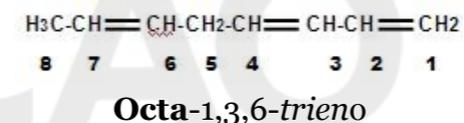


Obs.: Existe uma nomenclatura **antiga** que não é mais recomendada pela IUPAC: 2-Penteno

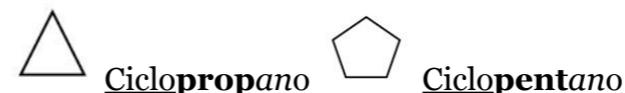


Quando for necessário utilizar os prefixos de quantidade **di, tri, tetra, penta** para o **infixo**, deve-se usar a vogal “a” após o **sufixo**. Quando os prefixos de quantidade são usados para o **sufixo** usa-se a vogal “o” depois do **infixo**.

Ex: Propano-1,2,3-triol



Os nomes dos hidrocarbonetos monocíclicos são formados acrescentando-se o prefixo ciclo ao nome do hidrocarboneto de origem.



#### Obs.:

\*Quando não existir número entre as palavras elas devem ser escritas juntas.

\*Ao se juntar as palavras, a letra “h” é suprimida.

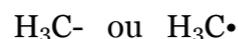


Hidrocarbonetos cíclicos de cadeia normal com uma insaturação não são numerados.

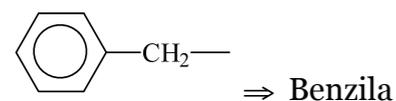
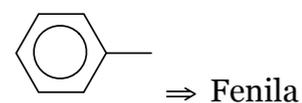
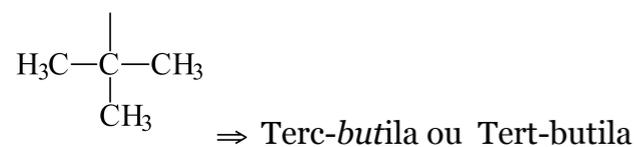
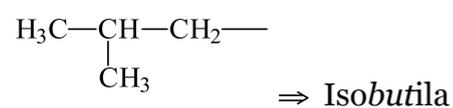
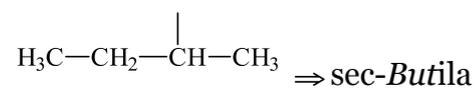
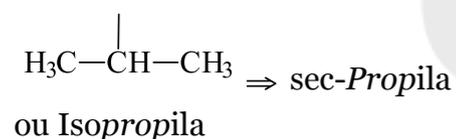
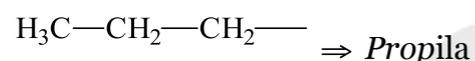
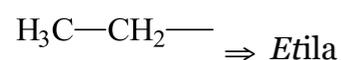
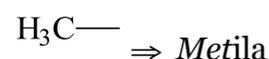


### Radicais

Radical é um átomo ou grupo de átomos que possui elétron desemparelhado (valência livre). Um radical é formado quando uma ligação covalente sofre homólise (cisão homolítica). O elétron desemparelhado pode ser representado por um ponto ou um traço (valência livre).



Nomenclatura de radicais  $\Rightarrow$  **prefixo + ila**



Na nomenclatura das ramificações substitui-se o sufixo **ila** dos radicais por **il**.

### Hidrocarbonetos com uma ramificação

Para dar nome a um hidrocarboneto com uma ramificação, proceda da seguinte maneira:

1º) Localize a cadeia principal.

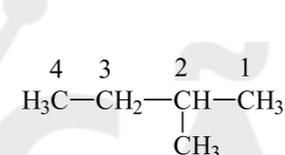
2º) Numere os carbonos da cadeia principal. Para decidir por qual extremidade deve começar a numeração, baseie-se nos seguintes critérios:

- Se a cadeia for **insaturada**, comece pela extremidade mais **próxima da insaturação**. Se houver mais de uma insaturação, comece pela extremidade que permita dar às insaturações os **menores números** possíveis.
- Se a cadeia for **saturada**, comece pela extremidade mais **próxima da ramificação**.

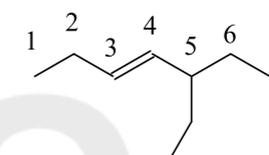
3º) Escreva o número de localização da ramificação e, a seguir, separando com hífen, o nome do grupo orgânico que corresponde à ramificação. Por exemplo, se houver um grupo  $\text{CH}_3$  como ramificação no segundo carbono da cadeia principal, deve-se escrever 2-metil.

4º) Finalmente, escreva o nome do hidrocarboneto correspondente à cadeia principal junto com o nome do último grupo.

Exemplos:



**2-metilbutano**



**5-etilept-3-eno**

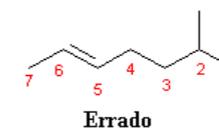
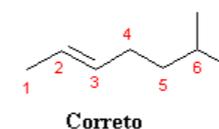
### Hidrocarbonetos com mais de uma ramificação

Para dar nome a um hidrocarboneto com mais de uma ramificação, o procedimento é muito parecido com o descrito anteriormente, com apenas algumas variações.

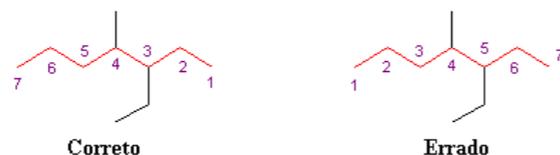
1º) Localize a cadeia principal.

2º) Numere os carbonos da cadeia principal. Para decidir por qual extremidade deve começar a numeração, baseie-se nos seguintes critérios:

- Se a cadeia for **insaturada**, comece pela extremidade mais **próxima da insaturação**. Se houver mais de uma insaturação, comece pela extremidade que permita dar às insaturações os **menores números** possíveis.



- Se a cadeia for saturada, comece pela extremidade que permita dar às **ramificações os menores números** possíveis.



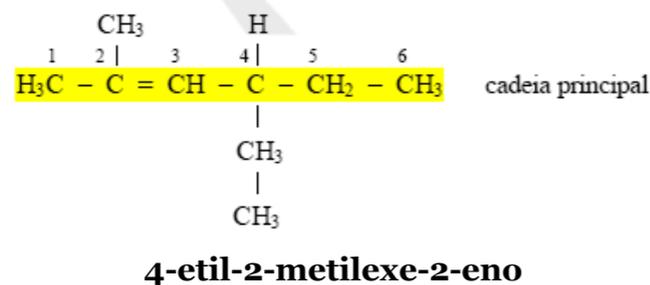
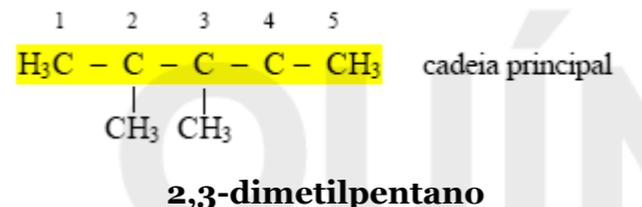
Ambos os procedimentos de numeração correspondem à regra dos **menores números**, ou seja, atribuem-se os menores números às **insaturações** ou, na ausência delas, às **ramificações**.

3º) Escreva o nome e o número de localização das ramificações seguindo a **ordem alfabética**.

**Hífen:** entre número e palavra.

**Vírgula:** entre número e número e também entre palavra e palavra.

Exemplos:



### Funções dos hidrocarbonetos

O grupo dos hidrocarbonetos é dividido em várias funções orgânicas:

**Alcanos** ⇒ Hidrocarbonetos nos quais todas as ligações carbono-carbono são ligações simples. Os alcanos são conhecidos como parafinas.



Ex:



Principais alcanos:

**Metano (CH<sub>4</sub>)** ⇒ utilizado como combustível em termoelétricas e automóveis. Conhecido como gás do lixo, gás natural, gás do pântano e GNV.

**Propano (H<sub>3</sub>C-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>) e Butano (H<sub>3</sub>C-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>)** ⇒ utilizados como gás de cozinha e conhecido pela sigla GLP.

**Alcenos** ⇒ Hidrocarbonetos que contêm uma ligação dupla carbono-carbono. Os alcenos são conhecidos como olefinas.

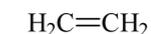


Ex:



Principal alceno:

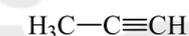
**Eteno** ⇒ utilizado na produção de álcool combustível, plástico e como agente de amadurecimento de frutas. Conhecido como **etileno**.



**Alcinos** ⇒ Hidrocarbonetos que contêm uma ligação tripla carbono-carbono.



Ex:



Principal alcino:

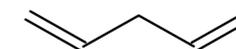
**Etino** ⇒ utilizado com gás de maçarico e na produção de borrachas. Conhecido como acetileno.



**Alcadienos** ⇒ Hidrocarbonetos que contêm duas ligações duplas carbono-carbono.

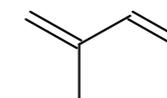


Ex:



Principal alcadieno:

**2-metilbuta-1,3-dieno** ⇒ utilizado na produção de borracha sintética. Conhecido como isopreno.



**Ciclanos** ⇒ Hidrocarbonetos cíclicos nos quais todas as ligações carbono-carbono são ligações simples.

Fórmula geral ⇒  $C_nH_{2n}$

Ex:



Principais ciclanos:

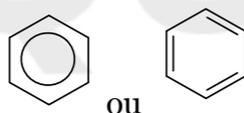
**Cicloexano** ⇒ utilizado na fabricação de solventes e náilon.

**Ciclopropano** ⇒ utilizado como anestésico.

**Aromáticos** ⇒ Hidrocarbonetos que possuem um ou mais anéis benzênicos em sua molécula.

Principais aromáticos:

**Benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)** ⇒ Usado na produção de álcool anidro (como azeótropo), produção de detergentes, solventes e produção de várias substâncias químicas, tais como anilina e fenol. Já foi usado como combustível automotivo, na Europa, misturado à gasolina.



**Tolueno** ⇒ amplamente utilizado como solvente ou diluente para um grande número de resinas.



**Naftaleno** ⇒ utilizado na fabricação de bolinhas de naftalina.

## Principais Funções dos Hidrocarbonetos

### Introdução

Uma função química consiste em um conjunto de compostos que possuem **propriedades químicas semelhantes**. Os hidrocarbonetos possuem propriedades químicas variáveis, o que permite dividi-los em várias funções químicas.

Hidrocarboneto não é uma função química

## Alcanos

Hidrocarbonetos nos quais todas as ligações carbono-carbono são **ligações simples**. Os alcanos são conhecidos como parafinas e são amplamente encontrados na natureza. As principais fontes de alcanos são o gás natural e o petróleo.

Fórmula geral ⇒  $C_nH_{2n+2}$

Ex:



### Principais alcanos:

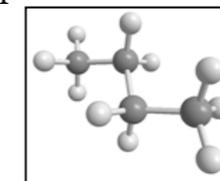
**Metano (CH<sub>4</sub>)** ⇒ É o principal constituinte do gás natural e também é produto da decomposição anaeróbica (fermentação) de biomassa. Esse processo de decomposição ocorre em larga escala em terrenos alagados e aterros sanitários produzindo uma mistura gasosa denominada **biogás**, cujo principal constituinte é o metano. Sua principal utilização é como combustível em termoelétricas e automóveis. Conhecido como gás do lixo, gás do pântano e GNV. Quando puro o metano é um gás incolor, inodoro, não tóxico e menos denso que o ar.



Vantagens do GNV:

- Não possui enxofre, portanto, sua queima não favorece a formação de chuva ácida.
- Praticamente não emite monóxido de carbono (CO), gás altamente tóxico.
- Não apresenta impurezas e resíduos aumentando a vida útil do motor.
- Economia de gastos com combustível, mais barato que a gasolina e o álcool.

**Propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) e Butano (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>)** ⇒ Utilizados como gás de cozinha. Essa mistura é conhecida pela sigla GLP (gás liquefeito do petróleo). Obtido pela destilação fracionada do petróleo.



“Butano”

## Alcenos ou alquenos

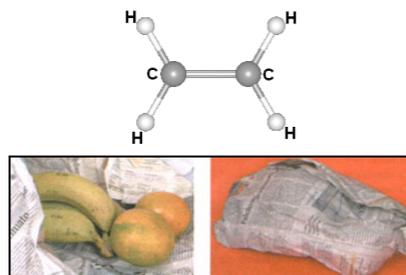
Hidrocarbonetos que contêm uma **ligação dupla carbono-carbono**. Os alcenos são conhecidos como olefinas. Podem ser encontrados em organismos animais e vegetais, apresentando muitas vezes importantes funções biológicas. Fórmula geral  $\Rightarrow C_nH_{2n}$

Ex:



**Principal alceno:**

**Eteno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)**  $\Rightarrow$  Utilizado na produção de álcool combustível, plástico e como agente de amadurecimento de frutas. Conhecido como etileno.

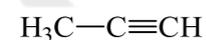


### Alcinos ou alquinos

Hidrocarbonetos que contêm uma **ligação tripla (tríplice) carbono-carbono**.

Fórmula geral  $\Rightarrow C_nH_{2n-2}$

Ex:



**Principal alcino:**

**Etino (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>)**  $\Rightarrow$  Utilizado com gás de maçarico e na produção de borrachas sintéticas. Conhecido como acetileno. Os maçaricos de oxigênio e acetileno ou oxi-acetileno produzem uma chama, cuja temperatura pode chegar a 3000°C.



A maneira mais fácil de obter etino é através da reação entre carbeto de cálcio e água.

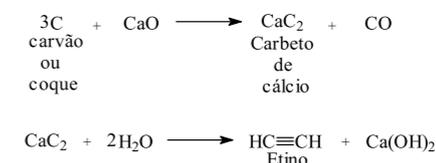


“Carbeto ou carbureto de cálcio”

### Síntese do etino

**1º etapa** síntese do carbeto de cálcio a partir de carvão

**2º etapa** reação do carbeto de cálcio com água (hidrólise) liberando o gás etino



### Alcadienos

Hidrocarbonetos que contêm **duas ligações duplas carbono-carbono**. Compostos que possuem mais de uma ligação dupla também podem ser classificados como **alquenos**.

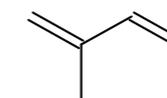
Fórmula geral  $\Rightarrow C_nH_{2n-2}$

Ex:



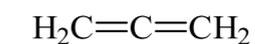
**Principal alcadieno:**

**2-Metilbuta-1,3-dieno (C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>)**  $\Rightarrow$  Utilizado na produção de borracha sintética. Conhecido como **isopreno**.



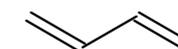
Os alcadienos podem ser classificados em:

**Acumulados ou alênicos**  $\Rightarrow$  duas duplas no mesmo carbono.

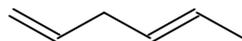


Propadieno ou aleno

**Conjugados**  $\Rightarrow$  duas duplas alternadas.

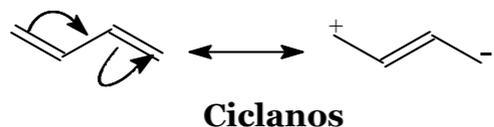


**Isolados** ⇒ duas duplas separadas por duas ou mais ligações simples.



Os dienos conjugados possuem maior estabilidade devido à deslocalização dos elétrons  $\pi$  das ligações duplas (**ressonância**).

**Exemplo:**



Hidrocarbonetos cíclicos nos quais todas as ligações carbono-carbono são ligações simples.

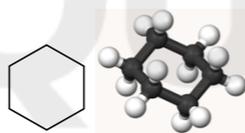
Fórmula geral ⇒  $C_nH_{2n}$

Ex:

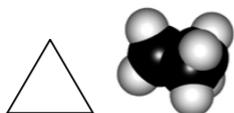


**Principais ciclanos:**

**Cicloexano**( $C_6H_{12}$ ) ⇒ Utilizado na fabricação de solventes e náilon.



**Ciclopropano**( $C_3H_6$ ) ⇒ Utilizado como anestésico.

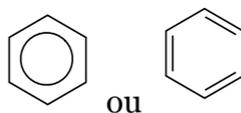


### Aromáticos

Hidrocarbonetos que possuem um ou mais anéis benzênicos em sua molécula. As principais fontes de aromáticos são o carvão de hulha e o petróleo.

**Principais aromáticos:**

**Benzeno** ( $C_6H_6$ ) ⇒ É um líquido incolor, de odor agradável bastante volátil. Usado na produção de álcool anidro (como azeótropo), detergentes, inseticidas, como solvente e na produção de várias substâncias químicas como, por exemplo, a anilina. Seus vapores são altamente tóxicos e podem causar leucemia.



**Cuidado!!! Veneno!!!**



Embora muito utilizado na síntese orgânica e frequentemente usado como solvente, o benzeno é muito tóxico. Seus maiores danos são no SNC e no tecido ósseo. A exposição crônica ao benzeno causa anemia e leucemia. Vários relatos de operários de indústrias químicas que contraíram leucemia existem na literatura médica. Uma concentração de apenas 1 ppm na atmosfera já representa um alto fator de risco. Por isso, muitas vezes os químicos optam pelo tolueno, como solvente; vários produtos que tinham benzeno passaram a utilizar o tolueno. Embora também cause danos no SNC, não provoca anemia ou leucemia. Os "cheiradores de cola" buscam justamente os efeitos no SNC do tolueno quando utilizam a cola. Esta é uma atividade extremamente prejudicial...

**Tolueno**( $C_7H_8$ ) ⇒ Também é um líquido incolor, de odor agradável bastante volátil. Amplamente utilizado como solvente ou diluente para um grande número de resinas como, por exemplo, cola de sapateiro. O tolueno também é utilizado na fabricação de TNT, um explosivo extremamente poderoso. Os seus vapores causam um tipo de excitação alcoólica que pode resultar em coma ou morte.



**Naftaleno**( $C_{10}H_8$ ) ⇒ É um sólido branco, com cheiro característico, que sofre sublimação. Utilizado na fabricação de bolinhas de naftalina e como matéria prima na produção de corantes e solventes.



## Petróleo

### Petróleo

O petróleo é constituído por uma mistura extremamente complexa de milhares de compostos orgânicos, dentre os quais predominam os **hidrocarbonetos**.



A palavra petróleo vem do latim *petra*, "pedra", e

### Origem do petróleo

O petróleo foi formado pela decomposição de animais e vegetais principalmente marinhos, que sofreram inúmeras decomposições químicas pela ação de calor, pressão e bactérias em ausência de oxigênio.

### Exploração do petróleo

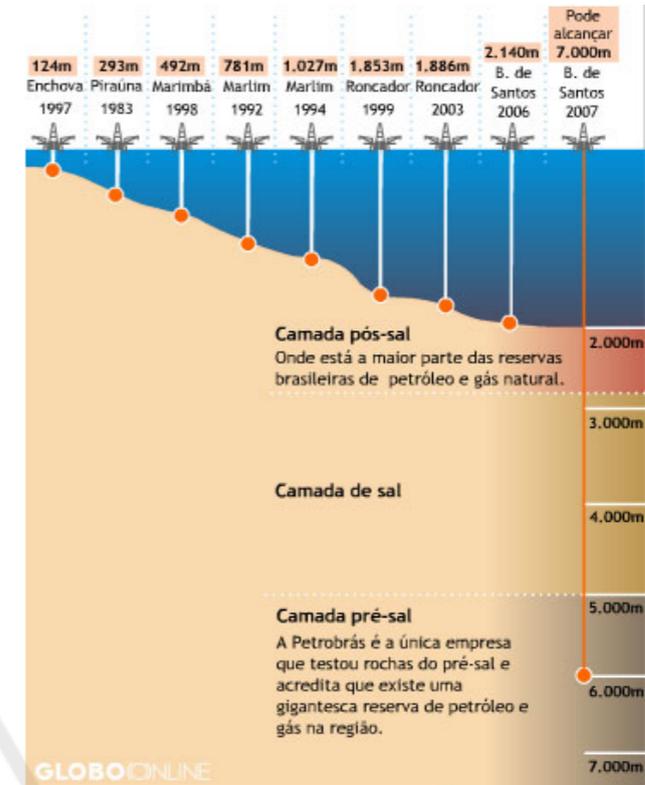
Atualmente a prospecção de petróleo utiliza aviões, navios e satélites que possuem equipamentos que conseguem fazer uma verdadeira "**radiografia**" do subsolo.

### Extração

A extração do petróleo pode ser feita no continente (solo) ou no mar. No mar a extração é feita na chamada "**plataforma continental**".



A Petrobrás, atualmente, é uma das companhias que detêm a tecnologia mais avançada para esse tipo de extração.



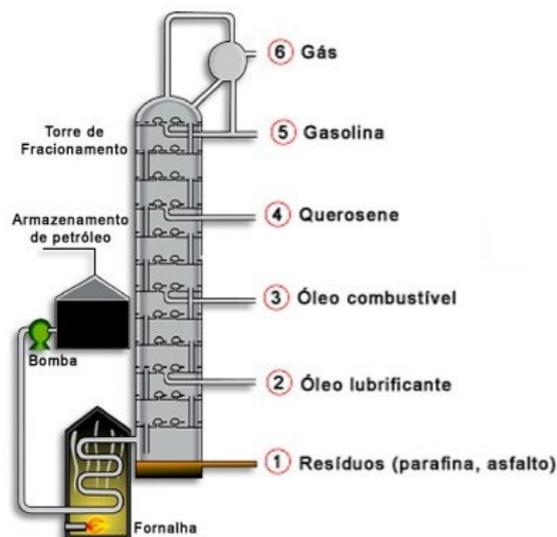
### Transporte

O transporte é feito por **oleodutos** ou em **superpetroleiros**.



### Refino

Nas refinarias o petróleo é separado em seus constituintes por **destilação fracionada**. Esse processo se baseia na **diferença de volatilidade** entre os diversos componentes do petróleo.



### Gasolina

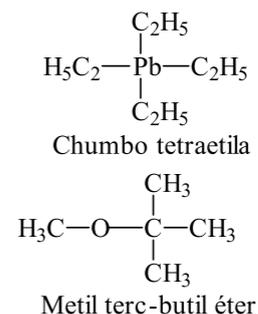
A gasolina é uma mistura de vários hidrocarbonetos (5 a 10 carbonos). Para medir a qualidade da gasolina, utiliza-se o chamado **índice de octanagem**.

Octanagem = mede a resistência da mistura **gasolina + ar** à detonação espontânea quando submetida a compressão.

O índice de octano foi adotado em 1927, quando se observou que o composto 2,2,4-trimetilpentano (isooctano) detonava apenas a altas compressões e era um combustível de qualidade superior a qualquer gasolina conhecida. Foi atribuído a esse composto o índice 100 e ao heptano, que é particularmente suscetível de detonar, foi atribuído o índice 0. Uma gasolina de **80 octanas se comporta** como uma mistura de **80% de isooctano e 20% de heptano**. Os automóveis de hoje requerem gasolina com índice de octano de no mínimo 86. As gasolinas comuns e aditivadas possuem octanagem 86 a Premium 94 e a de aviação 120.

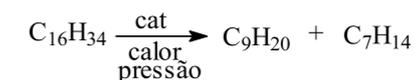
### Antidetonantes

Os antidetonantes são substâncias que aumentam a octanagem da gasolina. Um muito conhecido é o **tetraetilchumbo** ou **chumbo tetraetila** que foi muito utilizado como **antidetonante na gasolina** até a década de 90. Devido a sua toxicidade e ao fato de que ele inutilizava os catalisadores em pouco tempo, ficou evidente a incompatibilidade deste aditivo com a nova política ambiental que vem se desenvolvendo em todo o mundo. Assim, esforços da Petrobrás resultaram na eliminação do chumbo tetraetila da gasolina em 1989; sendo o Brasil o primeiro país do mundo a eliminar completamente esse tóxico aditivo de sua matriz de combustíveis. O aditivo usado como substituto do chumbo tetraetila passou a ser o **etanol** e em outros países como os EUA o **éter terc-butil metílico (MTBE)**.



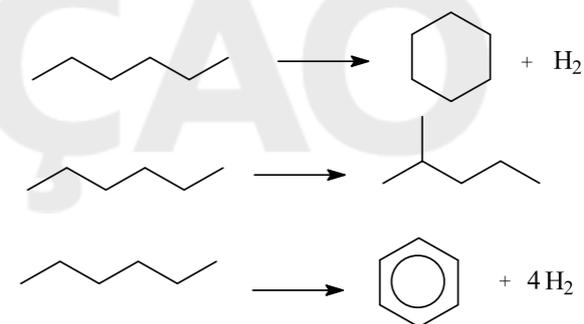
### Cracking ( ou craqueamento ou pirólise )

Transformação de frações pesadas (moléculas grandes) do petróleo em frações mais leves (moléculas menores) por aquecimento e catalisadores. O cracking aumenta a quantidade de gasolina e produz matéria prima para outras indústrias.



### Reforming

Transforma hidrocarbonetos de cadeia normal em hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e aromáticos, contendo o mesmo número de carbonos. Esse processo é muito importante para melhorar a qualidade da gasolina.



### Gás natural

É uma mistura gasosa em que predomina o metano. Sua ocorrência pode ou não estar associada à do petróleo. Utilizado como combustível em veículos e em termelétricas.

### Xisto betuminoso

É uma rocha impregnada de material oleoso (5% a 10%) semelhante ao petróleo. O Brasil possui umas das maiores reservas mundiais de xisto.

## Carvão mineral

Material rico em carbono , formado principalmente da decomposição de organismos vegetais , não – marinhos , com grande quantidade de celulose.



*Turfa , 60% de carbono*  
*Linhito , 70% de carbono*  
*Hulha , 80% de carbono*  
*Antracito , 98% de carbono*

## Destilação seca da hulha

**Fração gasosa** =  $H_2$  ,  $CH_4$  ,  $CO$  (combustível , gás de iluminação)

**Fração líquida** = Águas amoniacais (rico em amônia) ; Alcatrão da hulha (rico em aromáticos)

**Fração sólida** = coque (rico em carbono)

## Histórico

Há inúmeras teorias sobre o surgimento do petróleo, porém, a mais aceita é que ele surgiu através de restos orgânicos de animais e vegetais depositados no fundo de lagos e mares sofrendo transformações químicas ao longo de milhares de anos. Substância inflamável possui estado físico oleoso e com densidade menor do que a água. Sua composição química é a combinação de moléculas de carbono e hidrogênio (hidrocarbonetos). Além de gerar a gasolina, que serve de combustível para grande parte dos automóveis que circulam no mundo, vários produtos são derivados do petróleo como, por exemplo, a parafina, gás natural, GLP, produtos asfálticos, nafta petroquímica, querosene, solventes, óleos combustíveis, óleos lubrificantes, óleo diesel e combustível de aviação. O primeiro poço de petróleo foi descoberto nos Estados Unidos – Pensilvânia – no ano de 1859. Ele foi encontrado em uma região de pequena profundidade (21m). Ao contrário das escavações de hoje, que ultrapassam os 6.000 metros. O maior produtor e consumidor mundial são os Estados Unidos; por esta razão, necessitam importar cada vez mais. Os países que possuem maior número de poços de petróleo estão localizados no Oriente Médio, e, por sua vez, são os maiores exportadores mundiais. Os Estados Unidos da América, Rússia, Irã, Arábia Saudita, Venezuela, Kuwait, Líbia, Iraque, Nigéria e Canadá, são considerados um dos maiores produtores mundiais. No Brasil, a primeira sondagem foi realizada em São Paulo, entre 1892-1896, por Eugênio Ferreira de Camargo, quando ele fez a primeira perfuração na profundidade de 488 metros; contudo, o poço jorrou somente água sulfurosa. Foi somente no ano de 1939 que foi descoberto o óleo de Lobato na Bahia. A Petrobrás foi criada, em 1954, com o objetivo de monopolizar a exploração do petróleo no Brasil. A partir daí muitos poços

foram perfurados. Atualmente, a Petrobrás está entre as maiores empresas petrolíferas do mundo.

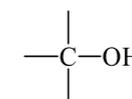
## RESUMO TEÓRICO

## FUNÇÕES OXIGENADAS

1. Álcool, Enol e Fenol
2. Aldeído, Cetona e Éter
3. Ácidos Carboxílico, Éster, Sal de Ácidos Carboxílicos, Anidridos

Álcoois

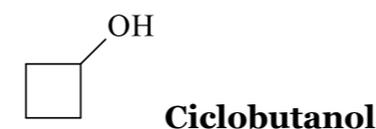
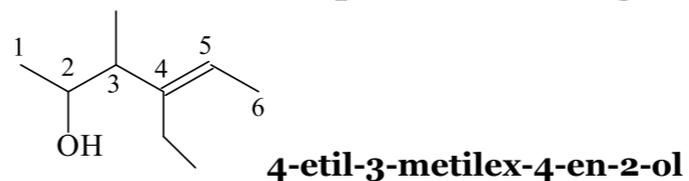
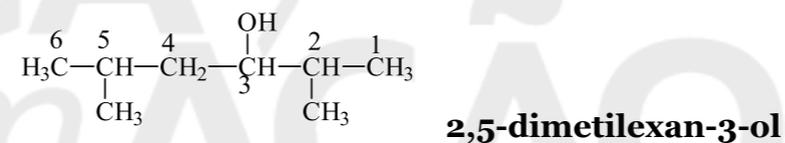
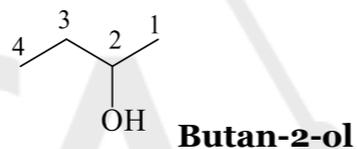
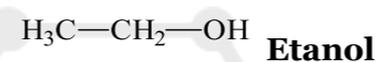
São compostos que apresentam o grupo hidroxila ligado diretamente a um carbonos  $sp^3$ (saturado).

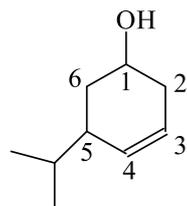


Grupo funcional

Nomenclatura IUPAC (substitutiva)

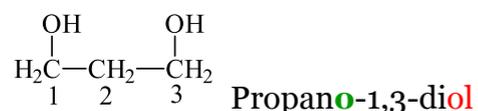
Prefixo + infixo + ol





**5-isopropilcicloex-3-en-1-ol**

Quando existir mais de um grupo funcional, devemos utilizar os prefixos de quantidade antes do sufixo e acrescentar a vogal “o” depois do infixo.



### Classificação de álcoois

Os álcoois podem ser classificados de acordo com dois critérios:

• **Quanto ao número de hidroxilas:** Monoálcool (monol), diálcool (diol), triálcool (trio) etc.

• **Quanto ao carbono que está ligado o grupo OH:**

Álcool primário ⇒ hidroxila ligada a carbono primário

Álcool secundário ⇒ hidroxila ligada a carbono secundário

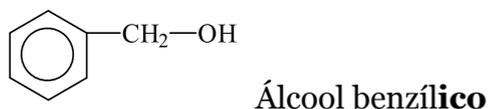
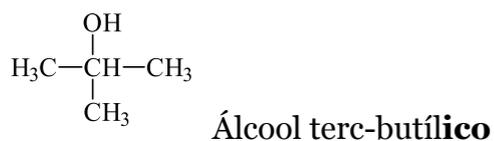
Álcool terciário ⇒ hidroxila ligada a carbono terciário

### Nomenclatura usual (radicofuncional)

Álcool + nome do grupo orgânico + ico

CH<sub>3</sub> – OH Álcool metílico

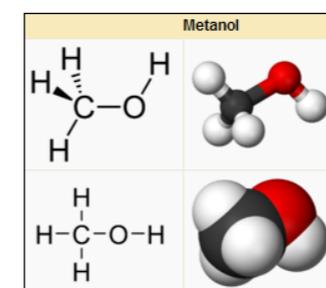
CH<sub>3</sub> – CH<sub>2</sub> – OH Álcool etílico



## Alcoóis importantes

### *Metanol*

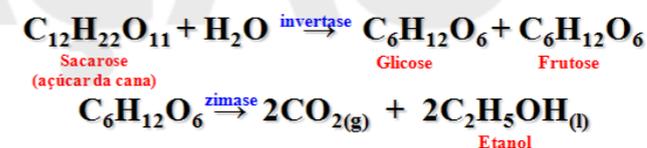
O metanol é utilizado como matéria prima de síntese de substâncias orgânicas, solvente e combustível de aviões a jato e carros de alta potência. Os carros de fórmula Indy utilizam o metanol como combustível. A chama produzida na queima do metanol é de cor azul muito clara **praticamente invisível** quando está sob forte luminosidade. O metanol é o mais tóxico dos alcoóis, podendo causar cegueira e até mesmo a morte. O metanol é conhecido como álcool da madeira.



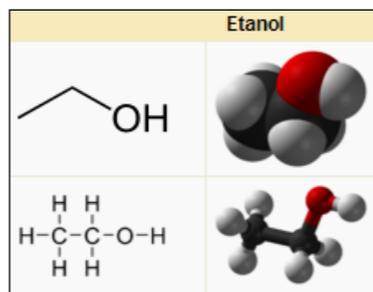
### *Etanol*

O etanol é o mais importante dos álcoois, pois ele é um dos combustíveis que tem maior probabilidade de substituir o petróleo nas próximas décadas. É obtido através da **fermentação de açúcares**, como os presentes na cana-de-açúcar, milho, cevada, malte, ou pela hidratação do **etileno**.

#### ➤ Fermentação



O processo é catalisado pelas enzimas invertase e zimase que são produzidas por microorganismo presentes no mosto de fermentação. Cada tonelada de cana produz aproximadamente 70 litros de etanol. Além de ser misturado à gasolina (geralmente para baratear o preço), ele também é o álcool que está presente nas bebidas alcoólicas, como cerveja, vodka, cachaça etc. Seu ponto de fusão é de -114°C, o que faz com que seja utilizado também como fluido para termômetros de temperaturas muito baixas (o mercúrio não serviria já que seu PF é de -40°C). Para se obter um etanol 100% puro é preciso retirar a água do álcool hidratado com **óxido de cálcio** (cal virgem) ou destila-se o álcool hidratado com benzeno.



**OBSERVAÇÃO :** % V/V ou graus Gay – Lussac (°GL)

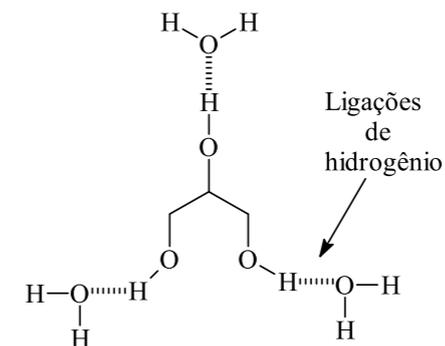
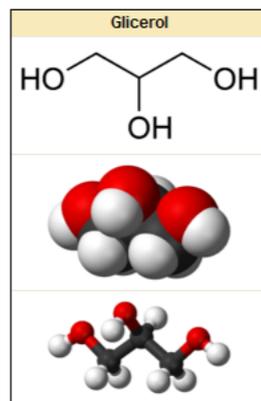
**Ex<sub>1</sub>:** Álcool 96 °GL ou 96% V/V → Indica em cada 100 mL, 96 mL de álcool. O álcool aqui funciona como **solvente** e água **soluto**.

**Ex<sub>2</sub>:** Cerveja 5,0 °GL ou 5% V/V → cada 100mL de cerveja temos 5 mL de etanol.



### **Propano-1,2,3-triol (glicerol ou glicerina)**

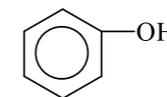
O glicerol é utilizado na fabricação de sabonetes, cosméticos, hidratantes, tintas, explosivos e em confeitaria.



As moléculas de glicerol possuem uma grande afinidade pela água, devido as ligações de hidrogênio que são formadas entre elas. Essa capacidade de reter a água explica o grande uso do glicerol na preparação de cosméticos e alimentos.

### **Fenóis**

São compostos que apresentam grupo hidroxila ligado ao anel aromático.



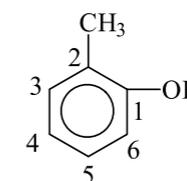
### **Nomenclatura oficial (substitutiva)**

Na nomenclatura substitutiva o sufixo “o” do hidrocarboneto aromático correspondente é substituído pelo sufixo “ol” ou a hidroxila é citada como um grupo substituinte do anel denominado **hidroxi**.



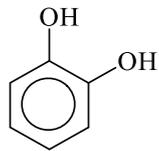
### **Fenol ou Hidroxibenzeno ou Benzenol (Fenol comum)**

O **Fenol comum** é utilizado na síntese de **Baquelite**, uma resina plástica muito usada para a fabricação de cabos de painéis.

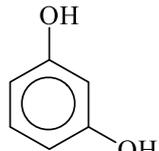


### **1-hidroxi-2-metilbenzeno**

**2-metilfenol  
o-metilfenol  
o-cresol**



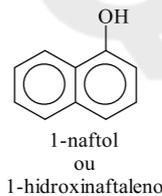
Benzeno-1,2-diol ou **o-diidroxibenzeno** ou **catecol** (aceito pela IUPAC)



Benzeno-1,3-diol ou **m-diidroxibenzeno** ou **resorcinol** (aceito pela IUPAC)

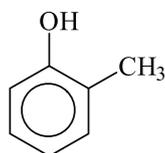


Benzeno-1,4-diol ou **p-diidroxibenzeno** ou **hidroquinona** (aceito pela IUPAC)



**Obs:**

- Os fenóis são muito usados na produção de anti-sépticos bucais, hospitalares e caseiros.
- A creolina é uma mistura de cresóis.

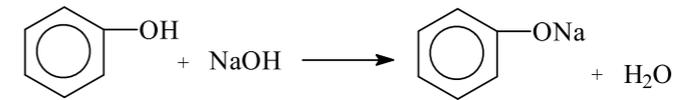
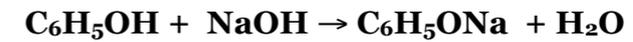


o-cresol



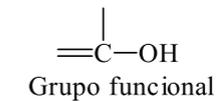
**Muito importante!**

Os fenóis possuem caráter ácido fraco e são neutralizados por bases fortes formando sal e água.



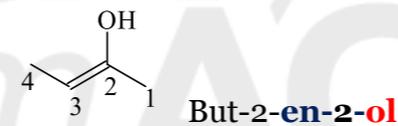
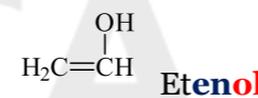
**Enóis 1**

São compostos que apresentam o grupo hidroxila ligado diretamente a um carbono  $\text{sp}^2$  (dupla ligação).



**Nomenclatura IUPAC 2**

A nomenclatura substitutiva dos enóis segue a mesma regra dos álcoois.



Os enóis normalmente são compostos muito instáveis. Essa função será estudada posteriormente, no capítulo de isomeria plana.

**Éteres**

São compostos que contêm um átomo de oxigênio a dois átomos de carbono.

Fórmula geral:

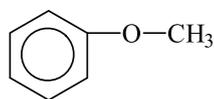
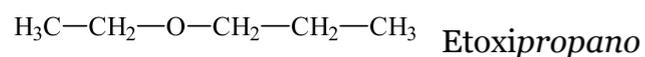
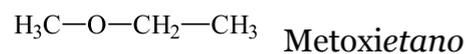
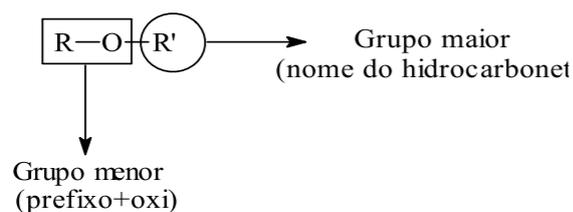


**Nomenclatura IUPAC**

**Grupo menor + oxí + grupo maior**

Grupo menor  $\Rightarrow$  prefixo do número de carbonos + oxí

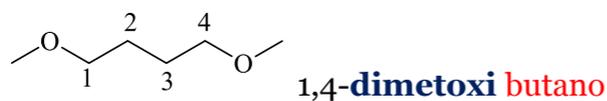
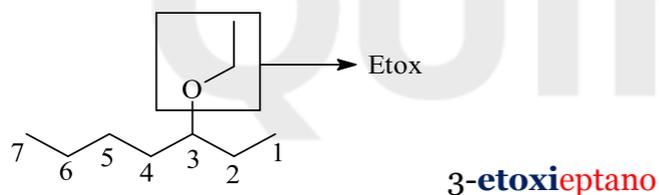
Grupo maior  $\Rightarrow$  nome do hidrocarboneto do grupo maior



Metoxibenzeno

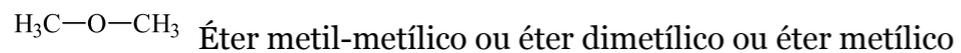
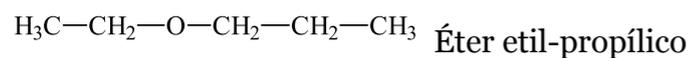
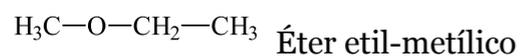
Em éteres de cadeias longas e assimétricas, o grupo com menor número de carbonos é citado como um grupo substituinte da cadeia principal junto com o oxigênio.

Exemplos:

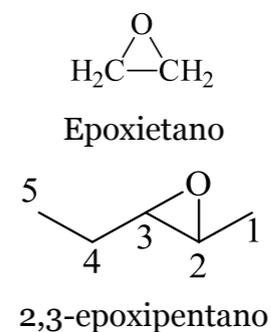


### Nomenclatura usual(radicofuncional)

A nomenclatura usual contém a palavra éter seguida pelos nomes dos dois grupos, em ordem alfabética, e finalizando com a terminação **ílico**.



Em éteres cíclicos a IUPAC recomenda a utilização do prefixo “epoxi”, precedido dos números de localização dos carbonos que estão ligados ao átomo de oxigênio.



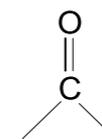
### Éter importante

O éter mais comum no cotidiano é o **etoxietano** ou **éter etílico** ou **éter comum**. É uma substância que já foi muito utilizada como anestésico. Atualmente o éter comum é muito usado como solvente, tanto em laboratório como nas indústrias. Sua comercialização também é controlada pelo **Departamento de Entorpecentes da Polícia Federal**, por ser um dos solventes orgânicos que pode ser usado no refino da cocaína.



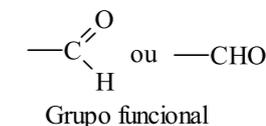
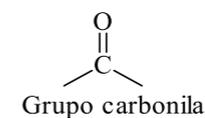
### Compostos carbonilados

As substâncias carboniladas tem grupos R ou Ar ligadas ao grupo carbonila.



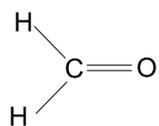
### ALDEÍDOS

São compostos que apresentam o grupo carbonila e pelo menos um átomo de hidrogênio ligado ao mesmo carbono. O grupo  $-\text{CHO}$  é denominado formil.



Na nomenclatura substitutiva o sufixo “o” do hidrocarboneto correspondente é substituído pelo sufixo “al”. A numeração da cadeia sempre deve ser feita a partir do grupo formil (grupo funcional).

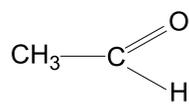
Prefixo + sufixo + al



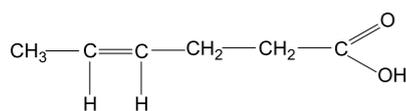
Metanal

A mistura de **metanal** e **água** recebe o nome de formol ou formalina. O metanal é amplamente utilizado como solvente e na fabricação de plástico. O metanal é extremamente tóxico.

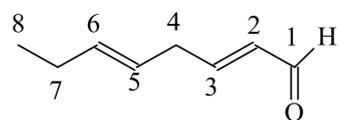
O **aldeído acético** ou **acetaldeído** é a substância química responsável pela “**ressaca**”.



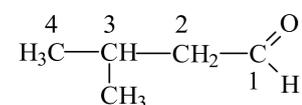
Etanal



Hex - 4 - enal

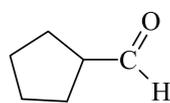


Octa-2,5-dienal

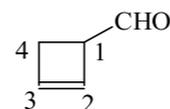


3-metilbutanal

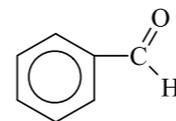
Para aldeídos de cadeia cíclica é recomendado pela IUPAC:  
Ciclohidrocarboneto + **carbaldeído**



Ciclopentanocarbaldeído



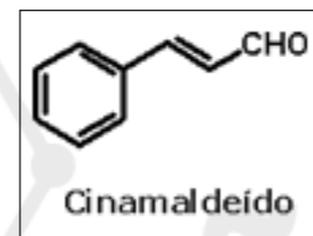
Ciclobut-2-eno-1-carbaldeído



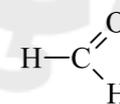
Benzenocarbaldeído ou Benzaldeído (aceitos pela IUPAC)

### Importante

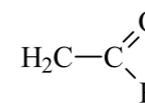
O odor dos aldeídos que têm baixo peso molecular é irritante, porém, à medida que o número de carbonos aumenta, torna-se mais agradável. Os aldeídos de maior peso molecular são muito utilizados na indústria de cosméticos na fabricação de perfumes sintéticos. Por exemplo, o benzaldeído é utilizado como essência de amêndoas e o cinamaldeído de canela.



Alguns aldeídos possuem uma nomenclatura limitada em função da complexidade, mas algumas vezes utilizada (usual ou trivial).



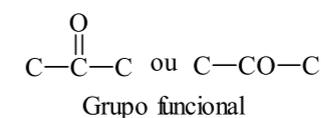
Aldeído fórmico ou formaldeído



Aldeído acético ou acetaldeído

### Cetonas

São compostos que apresentam o grupo carbonila entre carbonos .

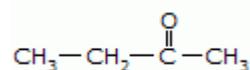


## Nomenclatura IUPAC(substitutiva)

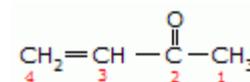
Na nomenclatura substitutiva o sufixo “o” do hidrocarboneto correspondente é substituído pelo sufixo “ona”, precedido do número que indica a posição da carbonila. A numeração da cadeia sempre deve ser feita de modo que a carbonila receba o menor número possível.

Prefixo + sufixo + ona

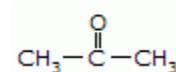
Exemplos:



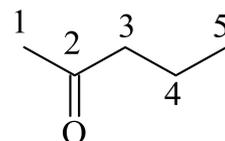
Butanona (oficial)



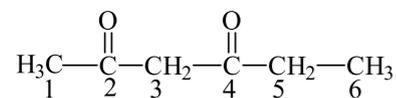
But-3-en-2-ona



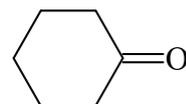
Propanona



Pentan-2-ona



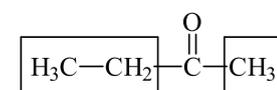
Hexano-2,4-diona



Cicloexanona

## Nomenclatura usual(radicofuncional)

Na nomenclatura usual, os grupos ligados a carbonila são citados em ordem alfabética com a terminação “il”, seguidos pela palavra cetona.



Etil metil cetona

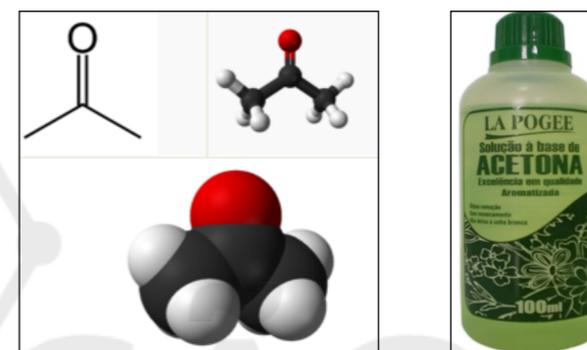


Dimetil cetona

## Cetona importante

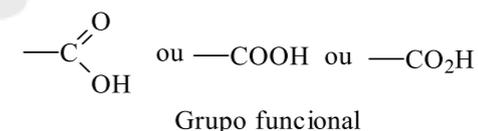
### Propanona

A propanona é a cetona mais importante. É mais conhecida como **acetona**, e é utilizada na extração de óleos vegetais, na produção de medicamentos, removedor de tintas e esmaltes e como solvente. Seu cheiro é bastante forte e desagradável, sendo um líquido inflamável, volátil e incolor. Sua comercialização é controlada pelo **Departamento de Entorpecentes da Polícia Federal** por ser utilizada pelo tráfico para transformar a pasta base de coca em cocaína.

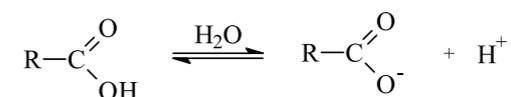


## Ácidos carboxílicos

São compostos que apresentam o grupo funcional carboxila



Essa classe funcional recebe a denominação de ácidos devido ao hidrogênio da hidroxila, que pode ser ionizado em meio aquoso ou neutralizado por bases. Portanto, os ácidos carboxílicos apresentam o mesmo comportamento dos ácidos inorgânicos.

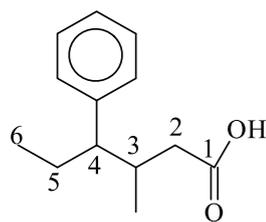


## Nomenclatura IUPAC(substitutiva)

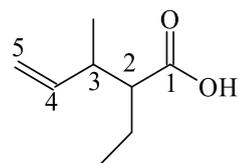
Na nomenclatura substitutiva o sufixo “o” do hidrocarboneto correspondente é substituído pelo sufixo “óico”. A numeração da cadeia sempre deve ser feita a partir da carboxila.

### Ácido prefixo + infixo+óico

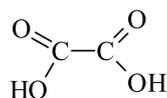
Exemplos:



Ácido 4-fenil-3metilexanóico



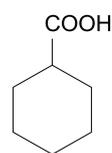
Ácido 2-etil-3-metilpent-4-enóico



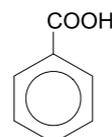
Ácido etanodióico (ácido oxálico)

Para ácidos carboxílicos de cadeia cíclica é recomendado pela IUPAC: Ciclohidrocarboneto + **carboxílico**

Exemplos:

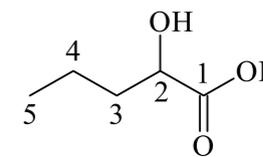
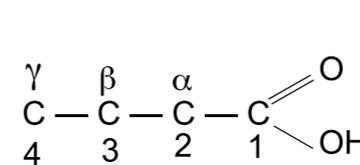


Ácido ciclohexanocarboxílico



Ácido Benzeno carboxílico (ácido benzóico)

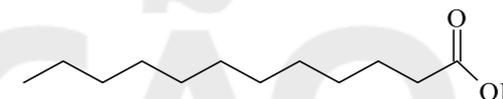
Outra forma de enumerar os carbonos é utilizando letras gregas (**alfa, beta, gama**), contando a partir do carbono vizinho ao carbono da carboxila.



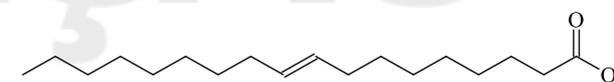
A nomenclatura **trivial(usual)** é bastante diversificada, levando em conta o lugar onde são encontrados esses compostos, sendo impossível criar uma regra para ela. Abaixo uma tabela dos nomes usuais, de acordo com o número de carbonos:

- 1 carbono = ácido fórmico (ácido metanóico) (encontrado na formiga)**
- 2 carbonos = ácido acético (ácido etanóico) (componente do vinagre)**
- 3 carbonos = ácido propiônico (características de gordura)**
- 4 carbonos = ácido butírico (ácido butanóico) (manteiga rançosa)**
- 5 carbonos = ácido valérico (ácido pentanóico) (extraído da planta Valeriana)**
- 6 carbonos = ácido capróico (ácido hexanóico) (encontrado em caprinos)**

Quando ácidos **monocarboxílicos** possuem mais de 10 carbonos, cadeia aberta, normal com número par de carbonos são conhecidos como **ácidos graxos**.



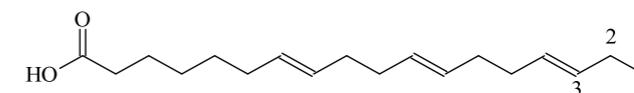
Ácido dodecanóico(láurico)



Ácido octadec-9-enóico

### Ácidos omega-3

Esses ácidos possuem como característica uma dupla ligação no carbono 3 da cadeia (linear), enumerando-se a partir da extremidade oposta da carboxila, como mostra o desenho a seguir:

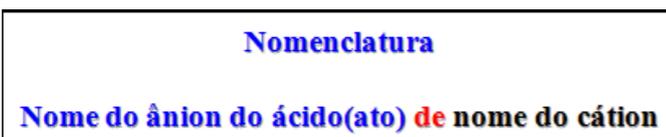


## Derivados de ácidos carboxílicos pela substituição do hidrogênio ionizável

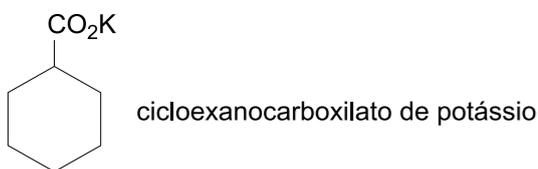
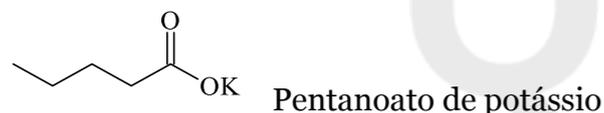
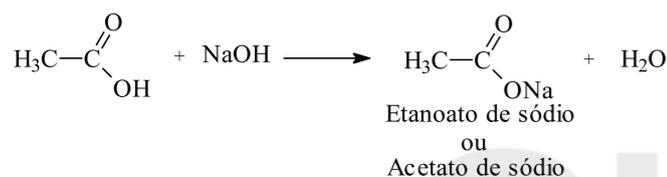
a) **Por metal** ⇒ sais de ácidos carboxílicos ou sais orgânicos (RCOOME).



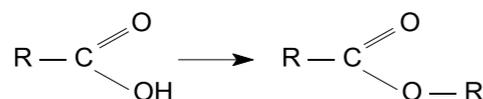
### NOMENCLATURA:



Exemplos:



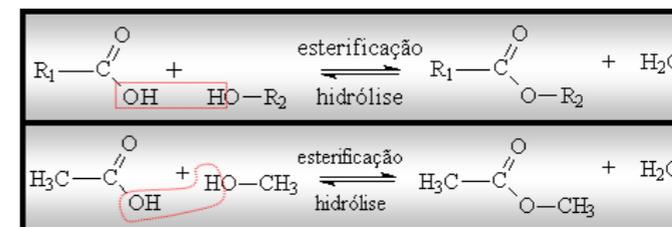
b) **Por um grupo alquila (R) ou arila (Ar)** ⇒ ésteres (RCOOR).



Obtenções mais comum:

### Esterificação

O método mais utilizado para se obter um éster é reagir um ácido carboxílico com um álcool. A reação é catalisada por meio ácido. Esse processo é conhecido como esterificação de Fischer.



A reação de esterificação e de hidrólise são **catalisadas por meio ácido**.

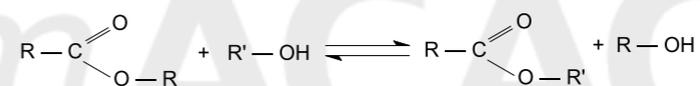
### Reação de haleto de acila e álcool

Outro processo também muito utilizado na obtenção de ésteres que possui a vantagem de não estabelecer equilíbrio químico, consiste na reação de um **haleto de acila** com um **álcool**. Esse processo não atinge equilíbrio químico permitindo assim, um maior rendimento da reação.



### Transesterificação (Alcoólise)

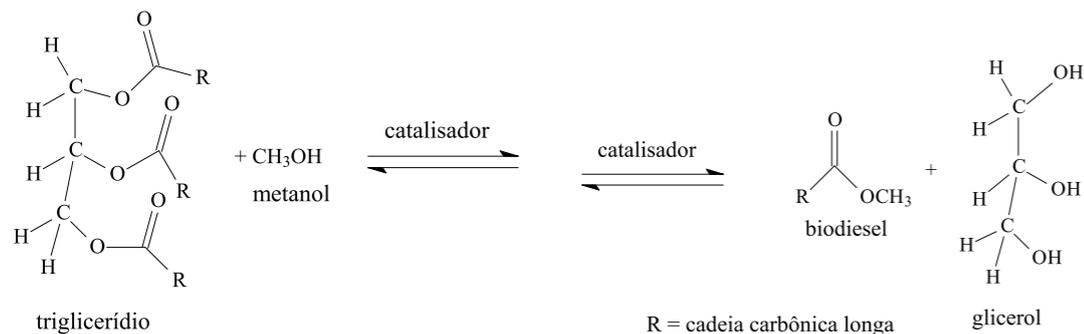
Na transesterificação um **éster** e um **álcool** reagem formando um outro **éster** e um outro **álcool**.



Essa reação é utilizada na obtenção de **Biodiesel**.



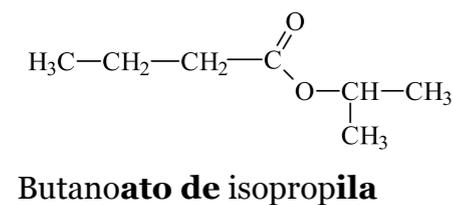
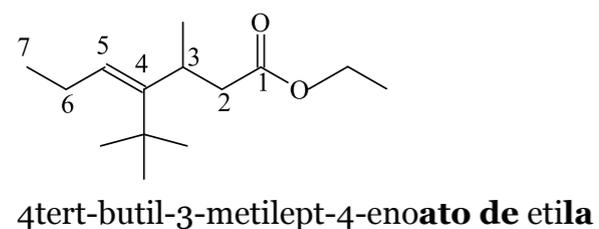
O éster utilizado na transesterificação de obtenção do biodiesel é um **glicerí-dio (lipídio)**, derivado de óleos vegetais ou gordura animal e o álcool pode ser o **metanol** ou **etanol**. Portanto o biodiesel é um éster metílico ou etílico de um ácido graxo.



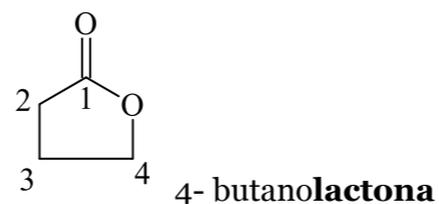
Existem dezenas de espécies vegetais no Brasil que podem ser utilizadas na produção de biodiesel, tais como mamona, dendê (palma), girassol, babaçu, amendoim, pinhão manso e soja, dentre outras.

**NOMENCLATURA:** Semelhante aos sais trocando-se o nome do cátion pelo nome do grupo ligado ao oxigênio com terminação **ila**.

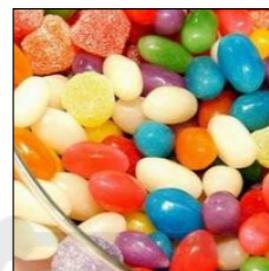
**Exemplos:**



Ésteres cíclicos são denominados de **lactonas**.



Uma das utilizações industrial mais importante dos ésteres é a de **flavorizantes**.

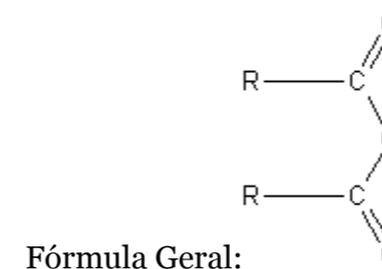


Os flavorizantes são substâncias artificiais que são adicionadas aos alimentos com a função de proporcionar **aroma** e **sabor**.

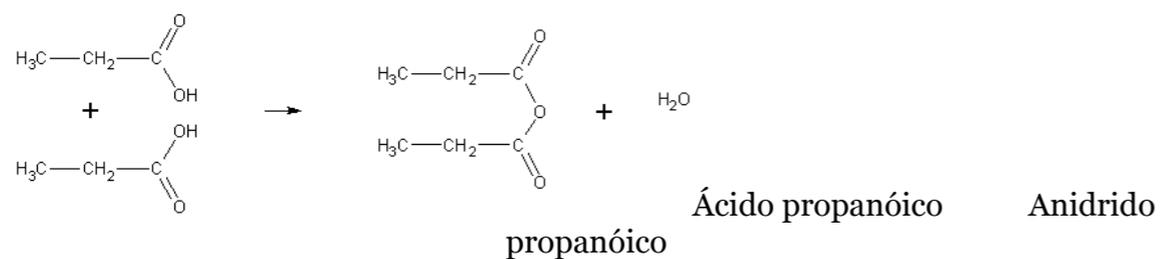
Flavorizante	Éster
Abacaxi	Butanoato de etila
Laranja	Acetato de octila
Maçã verde	Acetato de etila
Kiwi	Benzoato de metila

**Anidridos**

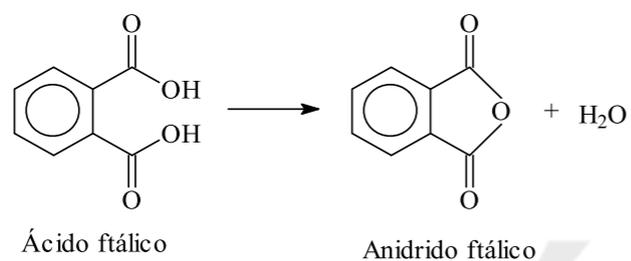
São compostos orgânicos obtidos pela desidratação **intermolecular** ou **intramolecular** de ácidos carboxílicos.



### Desidratação intermolecular

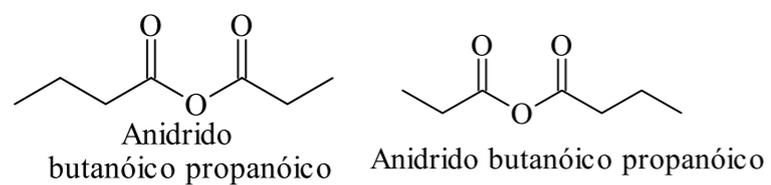


### Desidratação intramolecular



### Nomenclatura IUPAC(substitutiva)

A nomenclatura é composta pela palavra anidrido seguido do nome dos ácidos de origem em ordem alfabética. Quando o anidrido possuir cadeias iguais, não se deve repetir o nome do ácido.



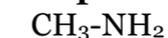
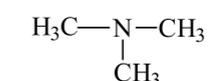
## RESUMO TEÓRICO

## FUNÇÃO NITROGENADAS

1. Aminas
2. Amidas
3. Nitrilas, Isonitrilas, Nitrocompostos

Aminas

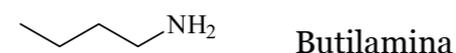
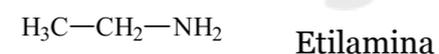
As **aminas** são compostos orgânicos derivados da **amônia** (NH<sub>3</sub>), onde os hidrogênios são substituídos por grupos orgânicos. Elas são classificadas em primárias quando há apenas um grupo orgânico ligado ao nitrogênio; secundárias se forem dois grupos; e terciárias se forem três grupos.

**Amina primária:****Amina secundária:****Amina terciária:**

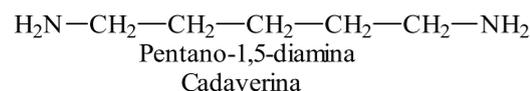
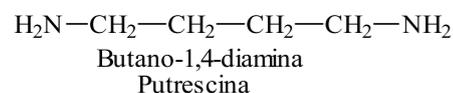
As aminas possuem **caráter básico**, sendo então chamadas de **bases orgânicas**. Elas estão presentes em animais em decomposição, como a **putrescina** e a **cadaverina**. São responsáveis pelo mau cheiro desses corpos. Também são fundamentais para a vida, pois formam os **aminoácidos**.

Nomenclatura IUPAC

A nomenclatura das aminas primárias é feita utilizando o sufixo "**amina**" depois do nome do grupo ligado ao nitrogênio. Em aminas primárias complexas, pode-se considerar o grupo NH<sub>2</sub> como sendo uma ramificação, indicando-o pelo prefixo "**amino**".



Também pode ser utilizado o nome do hidrocarboneto, ao invés do radical:



Em aminas secundárias e terciárias o grupo maior ligado ao nitrogênio é citado como grupo principal junto com o sufixo amina. Os outros grupos são citados em ordem alfabética precedidos da letra N. Quando os grupos são iguais pode se usar os prefixos de quantidade :di e tri.



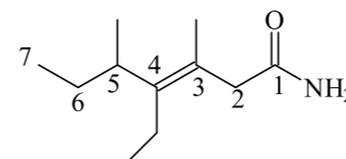
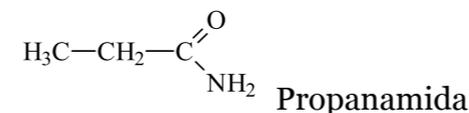
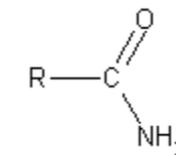
Obs:

- A fenilamina(anilina) é utilizada na fabricação de corantes.
- A trimetilamina é o principal componente do forte cheiro do peixe podre.
- Alcalóides são aminas cíclicas que apresentam anéis heterocíclicos contendo nitrogênio.Ex: Nicotina, cocaína, morfina etc.
- As aminas podem se comportar como bases de **Brönsted(receber  $\text{H}^+$ )** ou de **Lewis(doar par de elétron)**.
- A ordem crescente de basicidade das aminas é:

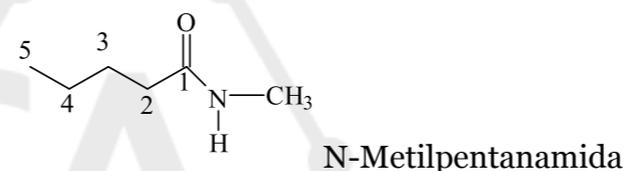
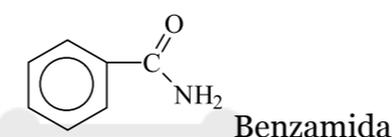
**aromáticas < terciárias < primárias < secundárias**

### Amidas

Amidas: são compostos orgânicos obtidos normalmente da reação de um ácido carboxílico e uma amina. Em sua nomenclatura, substitui-se a terminação **óico** do ácido carboxílico por **amida**. São usados na preparação de medicamentos.  
Fórmula Geral :

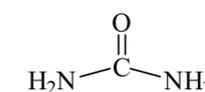


4-Etil-3,5-dimetilept-3-enamida



Obs:

- Uma amida muito importante é a **uréia**. Sólido branco, cristalino, solúvel em água que constitui um dos produtos finais do metabolismo dos animais, sendo eliminada pela urina. A uréia é largamente usada como adubo, na alimentação do gado, produção de hidratantes, como estabilizador de explosivos e na produção de resinas. Vários derivados da uréia são importantes na medicina.

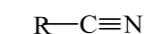


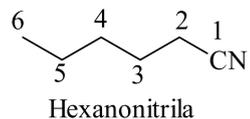
Uréia

### Nitrilas

Nitrilas: são compostos orgânicos obtidos do ácido cianídrico pela substituição do hidrogênio por um radical derivado de hidrocarboneto. Em sua nomenclatura, usa-se o nome do hidrocarboneto correspondente seguido do sufixo **nitrila**.

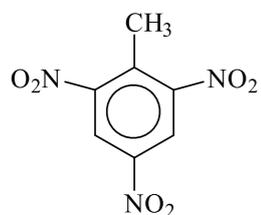
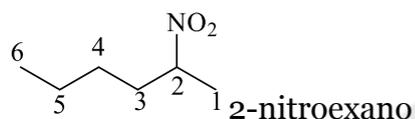
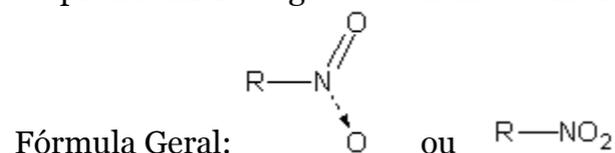
Fórmula Geral:





### Nitrocomposto

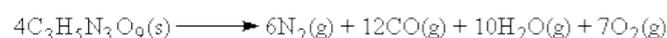
Nitro composto: são compostos orgânicos derivados do ácido nítrico pela substituição da hidroxila por um radical alquila ou arila. Em sua nomenclatura, usa-se o prefixo **nitro** seguido do nome do hidrocarboneto correspondente.



2,4,6 trinitrotolueno (T.N.T)

Obs:

A **nitroglicerina** é uma substância líquida, incolor e oleosa, mas também altamente instável e explosiva. Basta um simples toque para que ocorra uma detonação espontânea. Como a molécula contém átomos de oxigênio, hidrogênio e carbono, **quando ela explode libera novas moléculas** (como  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2$  e  $CO_2$ ), **mais estáveis**, e com uma grande energia cinética (há uma conversão entre a energia de ligação para energia cinética!). Esta substância também foi utilizada como vaso-dilatador, nos ataques cardíacos e anginas.



reação de decomposição da nitroglicerina sólida.

A nitroglicerina tem, entretanto, uma grande desvantagem: é muito, mas muito mesmo, instável. É praticamente impossível manusear ou transportar a substância. **Muitas pessoas perderam a vida tentando**, até o problema ter sido resolvido pelo **químico suéco Alfred Nobel**. Nobel estivera trabalhando em Stockholm, por vários anos, com a nitroglicerina, que era preparada pela mistura de glicerol e os ácidos sulfúrico e nítrico. Foram **vários os acidentes explosivos**

no laboratório, incluindo um em que seu irmão, **Emil Nobel e outras pessoas morreram**. As autoridades de Stockholm proibiram, então, experimentos com nitroglicerina nos limites da cidade. Nobel mudou o seu laboratório para Lake Malaren e, em 1864, encontrou a solução. Nobel experimentou misturar nitroglicerina com vários aditivos, numa tentativa de torná-la estável. Ele logo descobriu que a mistura da nitroglicerina com um certo tipo de argila, chamado **kieselguhr**, era muito eficaz: tornava o líquido instável em uma pasta sólida estável e maleável. No ano seguinte, em 1867, ele patenteou a mistura com o nome "**Dynamite**". Atualmente, a dinamite é feita com nitroglicerina, nitrato de amônio e nitrato de sódio (2 outros explosivos), polpa de madeira e um pouco de carbonato de cálcio para neutralizar os excessos de ácidos que podem estar presentes. Os propósito da dinamite era, segundo Nobel, **auxiliar na construção civil**. Mas na primeira guerra mundial, foi logo adotada como uma arma extremamente mortal. Logo após o fim da guerra, um jornal publicou, erroneamente, o obituário de Alfred Nobel, sem este ter realmente morrido. Nobel percebeu que seria lembrado como **o homem que criou o explosivo** e causou tantas mortes. Para limpar sua consciência e seu nome, criou um instituto, que anualmente distribui **prêmios** para trabalhos relevantes em medicina, ciência e paz.

## RESUMO TEÓRICO

## FUNÇÕES HALOGENADAS E SULFURADAS

## 1. Haletos Orgânicos, Compostos Grignard, Ác. Sulfônicos e Tiocompostos

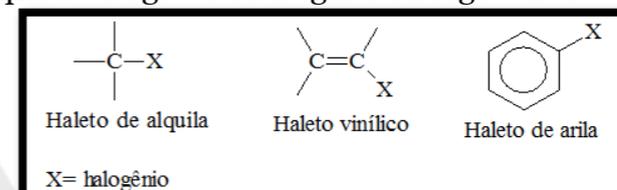
## Compostos organoalogenados

Os compostos organoalogenados são formados por substâncias derivadas de compostos orgânicos que possuem halogênios em suas estruturas (F, Cl, Br, I). As principais funções químicas dessa classe de compostos são:

- Haletos orgânicos
- Haletos de acila
- Compostos de Grignard

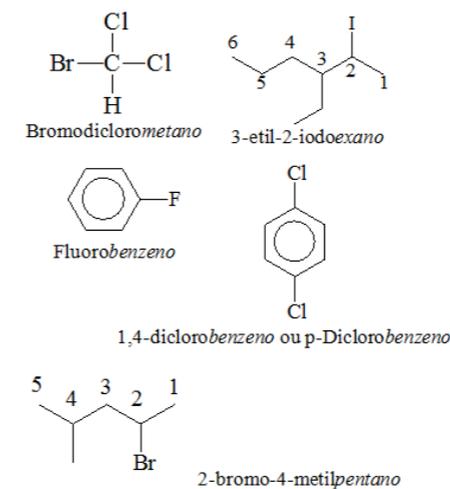
## Haletos orgânicos

São compostos orgânicos derivados dos **hidrocarbonetos** pela substituição de hidrogênios por halogênios. Os haletos podem ser classificados em relação ao grupo orgânico a que o halogênio está ligado da seguinte forma:

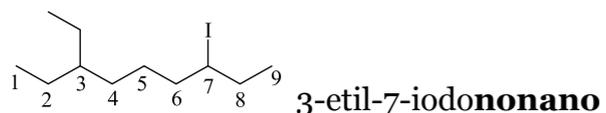
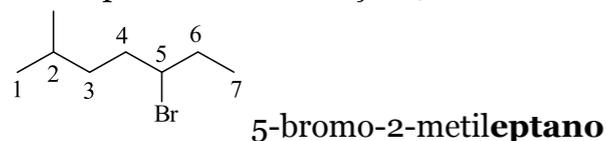


## Nomenclatura IUPAC (substitutiva)

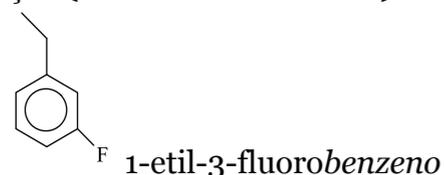
Na nomenclatura substitutiva o halogênio é citado com um substituinte da cadeia principal pelos prefixos *fluoro*, *cloro*, *bromo* e *iodo*.



Nos haletos orgânicos os halogênios não possuem prioridade na numeração da cadeia principal, a numeração deve começar a partir da extremidade mais próxima da primeira ramificação (**menores números**). Observe o exemplo a seguir:



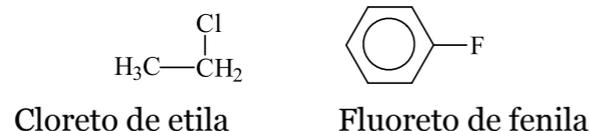
A numeração começa pela extremidade mais próxima da primeira ramificação (**menores números**).



No caso acima o *etil* possui **prioridade alfabética** em relação ao *flúor*.

### Nomenclatura usual (radicofuncional)

Na nomenclatura usual os halogênios são citados pelos prefixos fluoreto, cloreto, brometo e iodeto seguidos da preposição *de* mais o nome do grupo orgânico com a terminação "**ila**".



### Haletos importantes

#### **Clorofórmio (CHCl<sub>3</sub>)**

Possui ação anestésica, mas atualmente a sua principal aplicação é como solvente. A sua utilização como anestésico foi abandonada devida a sua toxicidade. Alguns haletos são utilizados de forma inadequada como entorpecentes, um exemplo é o lança-perfume que é uma droga manufaturada com solventes químicos a base de **cloreto de etila**. A versão caseira chamado de "**loló**" é feita com uma combinação de éter, **clorofórmio**, álcool de cereais e/ou acetona e essência perfumada.

#### **Cloreto de vinila ou Cloroetano**

Matéria prima para fabricação do polímero **PVC** que é utilizado na produção de condutos de água e fios elétricos, mangueiras, embalagens plásticas etc. Os discos de vinil são feitos de PVC.

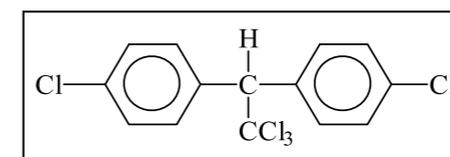
#### **Freons**

São haletos gasosos constituídos por carbono, cloro e flúor (CCl<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CCl<sub>3</sub>F etc) utilizados como gases refrigeradores e propelentes em aerossóis. Os freons destroem a **camada de ozônio**, o que levou a criação de vários acordos internacionais (tratado de Montreal) a determinar a redução progressiva de sua produção.

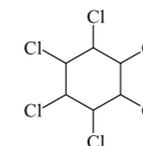
#### **Inseticidas (organoclorados)**

O DDT foi o primeiro inseticida químico moderno para controle de pragas de insetos. Foi usado durante a segunda guerra mundial para controlar as epidemias de tifo e malária salvando milhões de vidas combatendo os vetores dessas doenças. Porém o DDT possui efeito bioacumulativo no ecossistema. Um exemplo desse efeito aconteceu em **Bornéu** em 1960 durante uma campanha da OMS de combate a malária. O DDT eliminou os mosquitos e uma espécie de vespa que se alimentava de uma lagarta que habitava os telhados de sapé das casas. Sem as vespas as lagartas se multiplicaram e destruíram os telhados. Os mosquitos mortos foram consumidos por lagartixas que adoeceram e se tornaram presas fáceis para os gatos que também morreram, provocando a multiplicação dos ratos que destruíram as plantações e espalharam a peste bubônica. Essa conexão entre as espécies mostra a importância do princípio da bioacumulação em cadeias alimentares.

Em 1962, o livro de **Rachel Carson, Silent Spring**, trouxe um alerta sobre os riscos de inseticidas como o DDT para o meio ambiente. Atualmente a sua produção foi proibida em muitos países. Os químicos logo descobriram que outras moléculas organocloradas também atuavam como neurotoxinas em insetos, um exemplo é o BHC.



**DDT (dicloro-difenil-tricloroetano)**

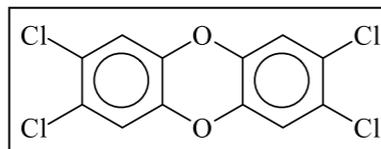


1,2,3,4,5,6-hexaclorociclohexano

**(BHC)**

Outro problema relacionado com os inseticidas é a liberação de dioxinas durante o processo de fabricação desses produtos. As dioxinas são produtos indesejados de muitos processos industriais que envolvem **reações com cloro**, tais como

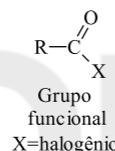
preparação de pesticidas, indústria polimérica, indústria têxtil, branqueamento de papéis, entre outros, além de ser produzido na incineração do lixo químico, hospitalar e PVC. O composto abaixo é o principal representante dessa classe:



De acordo com o professor de bioquímica da universidade de Harvard, **Matthew Meselson**, as dioxinas estão entre as moléculas pequenas mais tóxicas e cancerígenas que o homem conhece.

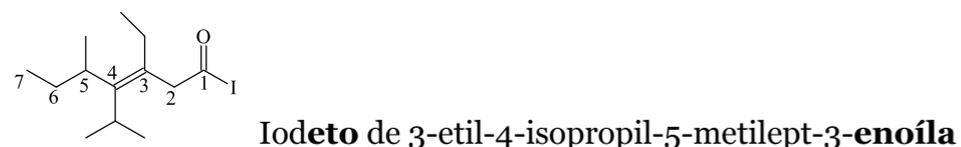
### Haleto de acila ou haleto de ácidos

São compostos derivados dos ácidos carboxílicos pela substituição da hidroxila por um átomo de halogênio. O grupo R-C=O ligado ao halogênio é denominado acila.



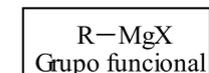
### Nomenclatura IUPAC

A nomenclatura IUPAC utiliza o nome do halogênio com a terminação “**eto**” e o nome do grupo acila ligado ao halogênio com a terminação “**oíla**”.

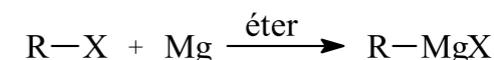


### Compostos de Grignard

Os compostos de Grignard são organometálicos. Compostos orgânicos que possuem um ou mais átomos de metal ligados diretamente ao carbono. Nos compostos de Grignard o metal ligado ao carbono é o magnésio.



Os compostos de Grignard são obtidos reagindo-se um **haleto de alquila** com magnésio em pó utilizando-se éter anidro como solvente.



### Nomenclatura IUPAC

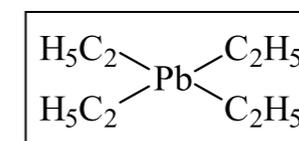
A nomenclatura IUPAC segue o esquema abaixo:

Nome do haleto de **grupo orgânico (il)** + magnésio



Os haleto de organomagnésio foram descobertos pelo químico francês **Victor Grignard** em 1900 que recebeu o prêmio Nobel por essa descoberta em 1912.

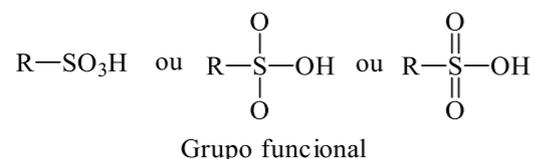
Atualmente os químicos conhecem centenas de organometálicos de diversos metais diferentes. Os mais comuns são de : Li, Sn, Hg, Pb e Zn. Um organometálico muito conhecido é o **tetraetilchumbo** ou **chumbo tetraetila** que foi muito utilizado como **antidetonaante na gasolina** até a década de 90. Devido a sua toxicidade e ao fato de que ele inutilizava os catalisadores em pouco tempo, ficou evidente a incompatibilidade deste aditivo com a nova política ambiental que vem se desenvolvendo em todo o mundo. Assim, esforços da Petrobrás resultaram na eliminação do chumbo tetraetila da gasolina em 1989; sendo o Brasil o primeiro país do mundo a eliminar completamente esse tóxico aditivo de sua matriz de combustíveis. O aditivo usado como substituto do chumbo tetraetila passou a ser o **etanol** e em outros países como os EUA o **éter terc-butil metílico (MTBE)**.



## Funções sulfuradas

### Ácidos sulfônicos

Os ácidos sulfônicos são compostos que possuem o seguinte grupo funcional:

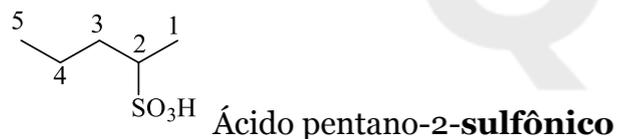


São monoácidos fortes derivados do ácido sulfúrico que possuem a seguinte equação de ionização:

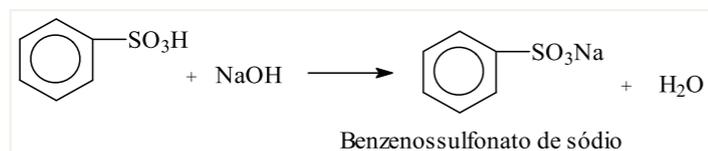


### Nomenclatura IUPAC

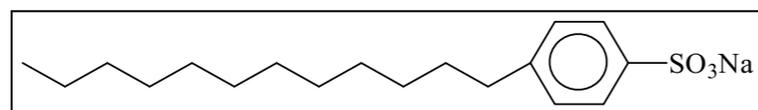
A nomenclatura substitutiva utiliza o nome do hidrocarboneto de origem seguido do prefixo “sulfônico”.



Esses compostos possuem caráter ácido devido ao hidrogênio ligado ao oxigênio do grupo funcional. Podendo, portanto, serem neutralizados por uma base dando origem a um sal.



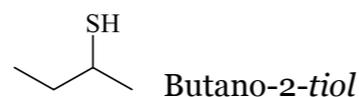
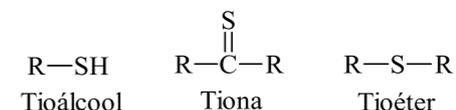
Muitos detergentes são sais derivados dos ácidos sulfônicos. O mais comum no cotidiano é o representado abaixo:



“p-dodecilbenzenossulfonato de sódio”

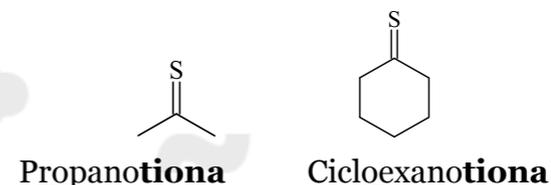
## Tiocompostos

São compostos orgânicos que possuem um átomo de enxofre substituindo um átomo de oxigênio. Os principais tiocompostos são: **tioálcoois ou mercaptanas, tionas e tioéteres ou sulfetos**.

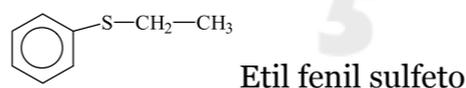


Os tioálcoois voláteis possuem cheiro repugnante, perceptível mesmo em quantidades mínimas. Devido a essa característica as mercaptanas mais simples são adicionadas ao gás de cozinha (inodoro) para prevenir vazamentos. O forte cheiro da cebola e do alho também é devido a tioálcoois.

A nomenclatura substitutiva das tionas substitui o sufixo “ona” das cetonas por “tiona”.



A nomenclatura mais recomendada para os sulfetos é a radicofuncional, nesse sistema os grupos ligados ao enxofre são citados em ordem alfabética com terminação “il”, seguidos pela palavra sulfeto.



A arma química gás mostarda ou iperita é um tioéter halogenado. Esse gás foi usado em combate pela primeira vez em setembro de 1917 pelos alemães. Além de causar intoxicação, esse gás provoca o surgimento de dolorosas bolhas na pele. Foi estimado que os alemães usaram cerca de 68 000 toneladas de gás contra os soldados aliados, mais que o exército francês e britânico juntos. Estima-se que cerca de 100 000 soldados morreram em resultado de ataques com gás durante a primeira guerra mundial.

# RESUMO TEÓRICO

## PROPRIEDADES FÍSICAS DOS CO

1. Polaridade, Forças Intermolecular, PF e PE.
2. Solubilidade

### Forças intermoleculares ou forças de Van der Waals

São as forças de atração que existem entre as moléculas. A ligação que prende os átomos dentro de uma molécula é a ligação covalente. As forças de atração entre as moléculas são de natureza elétrica

#### Tipos de forças intermoleculares

##### Moléculas polares

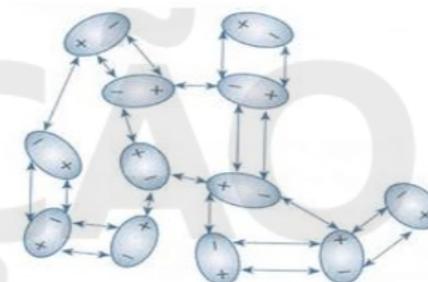
- > Dipolo-dipolo ou dipolo permanente
- > Ligações de hidrogênio
- > Íon-dipolo

##### Moléculas apolares

- > Forças de London ou dipolo induzido

1) **Força entre dipolos permanentes:** Se a molécula da substância contém um dipolo permanente (devido à polaridade de uma ou mais de suas ligações covalente), então podemos facilmente ver como essas moléculas se atraem umas às outras: o lado positivo do dipolo de uma molécula atrai o lado negativo do dipolo da outra molécula. Esta força existe, portanto, entre moléculas polares ( $\mu_{\text{total}} \neq 0$ ).

Exemplo:



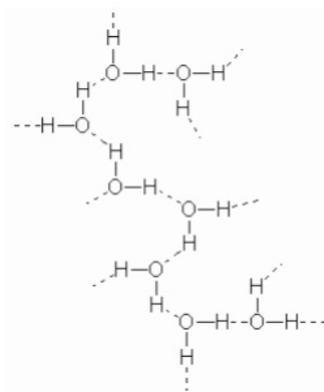
**Obs:**

- Quanto maior a diferença de eletronegatividade na ligação, maiores são as cargas parciais e maior é a força de atração.
- As interações dipolo-dipolo caem rapidamente com a distância, especialmente nas fases líquidas e gasosas.

2) **Ligações de Hidrogênio ou Pontes de Hidrogênio:** O átomo de hidrogênio tem propriedades especiais por ser um átomo muito pequeno, sem elétrons no interior: por dentro da camada de valência há apenas o núcleo do átomo, o próton. Uma das propriedades que só o átomo de hidrogênio apresenta é a capacidade de exercer uma força de atração intermolecular chamada ligação de hidrogênio, ou **ponte de hidrogênio**. A ligação de hidrogênio só pode ocorrer quando o hidrogênio estiver ligado a um átomo pequeno e muito eletronegativo: apenas **F, O, N** satisfaz as condições necessárias. Quando o hidrogênio está ligado a um átomo muito eletronegativo, a densidade eletrônica em torno do próton fica bem baixa; esta parte da molécula é então fortemente atraída pelos pares de elétrons do F, O, N de ou-

tra molécula, estabelecendo a ligação de hidrogênio.

Exemplo:



As ligações de hidrogênio representam importante papel tanto nas propriedades especiais da água como em moléculas de extrema importância para os seres vivos: elas determinam a forma das proteínas, e constituem a força que une as hélices do DNA.

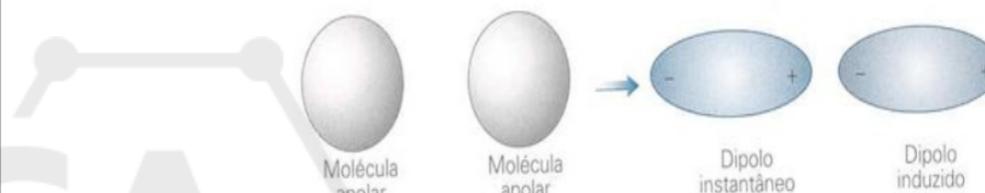
- A ligação de hidrogênio é um dipolo-dipolo muito forte, devido a grande diferença de eletronegatividade entre o H e os átomos F, O e N.
- A molécula de água pode formar no máximo 4 ligações de hidrogênio.
- No estado líquido o número máximo de LH formadas é 3,4 e no estado sólido 4.
- A formação de uma estrutura hexagonal no cristal de gelo, explica o comportamento anômalo da água. As moléculas ficam mais distantes umas das outras, aumentando o volume e diminuindo a densidade.

### Principais compostos que formam ligações de hidrogênio entre as suas moléculas

- > HF
- > NH<sub>3</sub>
- > Álcoois
- > Fenóis
- > Ácidos carboxílicos
- > Aminas primárias e secundárias
- > Amidas

**3) Íon-dipolo :** Ocorrem entre íons (cátions e ânions) e moléculas polares. Esta interação é característica de **íons dissolvidos em solventes polares** (Ex: água + NaCl).

4) **Forças de London ou dipolo induzido:** E quando as moléculas não contêm dipolos (**são apolares**), como é que elas podem se atrair? Pense numa molécula como uma entidade não estática, mas contendo elétrons em constante movimento; é razoável pensar que num determinado momento a distribuição nessa molécula pode não ser perfeitamente simétrica, e apareçam então pequenos dipolos instantâneos neste momento. Esses dipolos desaparecerão em muito pouco tempo, podendo levar a uma molécula neutra ou a outros dipolos, inclusive contrários; mas no curto espaço de tempo em que eles existem, eles podem induzir a formação de dipolos contrários na molécula vizinha, levando as duas a se atraírem mutuamente. Exemplo:



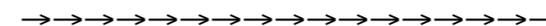
**Obs:**

- As forças de London surgem da atração entre dipolos elétricos **instantâneos (induzidos)** em moléculas vizinhas e age entre todos os tipos de moléculas; sua força aumenta com o número de elétrons em uma molécula.

### Polaridade e temperatura de ebulição dos compostos orgânicos

Quanto maior for a intensidade das forças intermoleculares, maior será a temperatura de ebulição.

**Forças de London (dipolo induzido) < Dipolo-dipolo < Ligações de hidrogênio**



**Ordem crescente de força de atração (intensidade)**

Composto	Força intermolecular	PE (°C)
Butano	London	0
Propanona	Dipolo-dipolo	56
Propan-1-ol	Ligações de hidrogênio	97

Para moléculas com o mesmo tipo de interação, quanto maior for o tamanho da molécula, maior será sua temperatura de ebulição.

Para moléculas com o mesmo tipo de interação e de mesma fórmula molecular (isômeros), quanto maior o número de ramificações menor será a temperatura de

ebulição. À medida que aumenta a quantidade de ramificações, a estrutura torna-se mais compacta, ou seja, sua superfície diminui, conseqüentemente, diminui sua temperatura de ebulição.

Composto	Pentano C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	2-Metilbutano C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	2,2-Dimetilpropano C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>
PE (°C)	36	28	9,5

### **Solubilidade em água**

Substâncias apolares tendem a se dissolver em solventes apolares e substâncias polares tendem a se dissolver em solventes polares.

***“Semelhante dissolve semelhante”***

Obs:

• Compostos orgânicos polares com cadeia carbônica pequena são solúveis em água. A medida que a cadeia carbônica aumenta a solubilidade diminui.

Álcool	Metanol	Etanol	Propan-1-ol	Butan-1-ol	Penta-1-ol
Solubilidade em água (g/100g de H <sub>2</sub> O a 25°C)	infinita	infinita	infinita	8,3	2,4

QUÍMICA  
em AÇÃO

## RESUMO TEÓRICO

## ISOMERIA

1. Isomeria Plana (1/2)
2. Isomeria Plana (2/2)
3. Análise Conformacional
4. Isomeria Geométrica Cis/Trans
5. Isomeria Geométrica E/Z
6. Isomeria Óptica: Enantiômeros
7. Isomeria Óptica: Diasterisômeros
8. ZN - Nomenclatura R e S

Isomeria

Isomeria vem do grego e significa "**mesma composição**" (iso = mesma(s); meros = partes). A isomeria é um fenômeno muito comum em química orgânica e explica o fato de cerca de 90% de todos os compostos atualmente conhecidos no planeta Terra sejam orgânicos. Uma mesma fórmula molecular pode representar diversos compostos diferentes. Observe os exemplos a seguir:

$C_3H_8 \rightarrow$  não possui isômeros

$C_4H_{10} \rightarrow$  2 isômeros

$C_5H_{12} \rightarrow$  3 isômeros

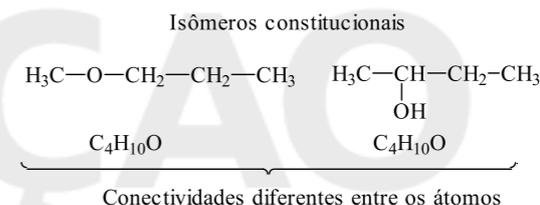
$C_{10}H_{22} \rightarrow$  75 isômeros

$C_{20}H_{42} \rightarrow$  366 319 isômeros

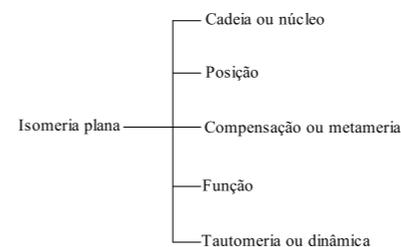
**Isomeria é o fenômeno de dois ou mais compostos apresentarem a mesma fórmula molecular (F.M.) e fórmulas estruturais diferentes. Os compostos com estas características são chamados de isômeros.**

**Isomeria Plana ou constitucional**

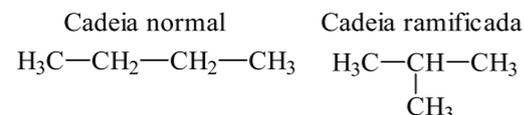
Na isomeria plana os isômeros possuem fórmulas estruturais planas diferentes, ou seja, possuem conectividade diferentes entre os átomos. Os isômeros planos são denominados **isômeros constitucionais**. A figura a seguir mostra um par de isômeros planos:



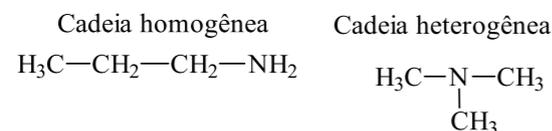
Os isômeros planos possuem propriedades físicas diferentes e podem apresentar propriedades químicas semelhantes ou extremamente diferentes em alguns casos. A isomeria plana se divide em cinco casos:



**1) Isomeria de Cadeia(núcleo)** = São isômeros pertencentes a uma mesma função química com cadeias carbônicas diferentes.

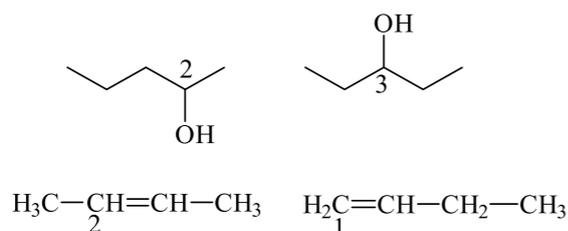


Fórmula molecular  $\text{C}_4\text{H}_{10}$



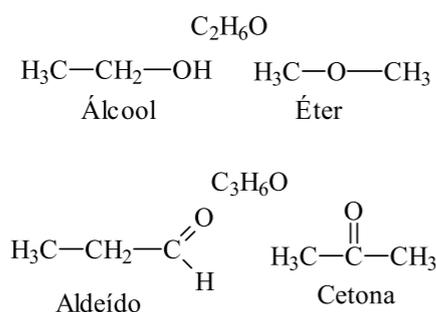
Fórmula molecular  $\text{C}_3\text{H}_9\text{N}$

**2) Isomeria de Posição**= São isômeros de mesma função química, de mesma cadeia carbônica e que diferem pela posição de um grupo funcional, ramificação ou insaturação.



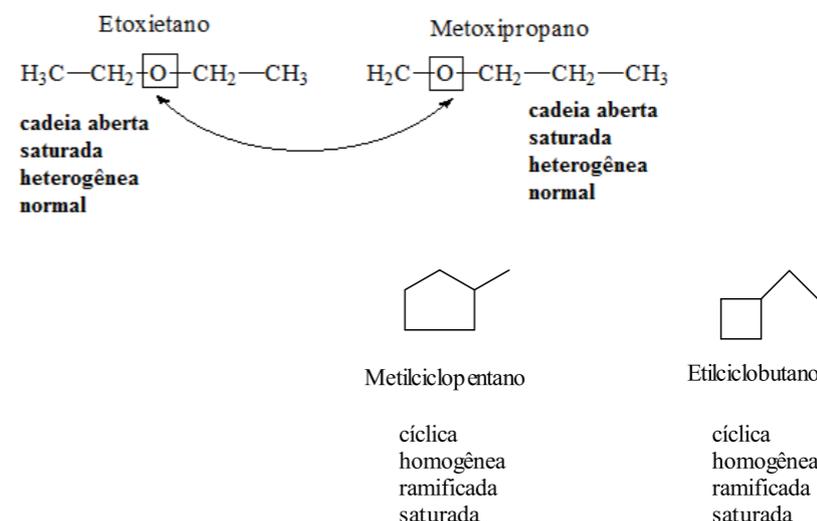
**3) Isomeria de Função**= Os isômeros de função pertencem a funções químicas diferentes. Os casos principais de isomeria funcional são:

- álcool e éter
- cetona e aldeído
- álcool aromático, fenol e éter aromático
- ácido e éster
- Nitrila e isonitrila



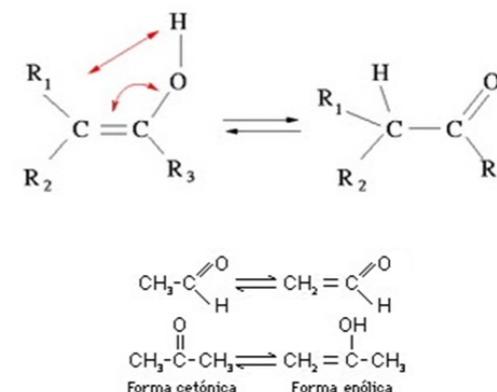
**4) Isomeria de Compensação ou Metameria**= São isômeros de mesma função química com cadeias carbônicas diferentes com a mesma classificação. Normalmente, as cadeias se diferenciam quanto à posição de um heteroátomo que está en-

tre carbonos. Os isômeros possuem prefixos diferentes heterogêneas, que diferem pela localização do heteroátomo nas cadeias.

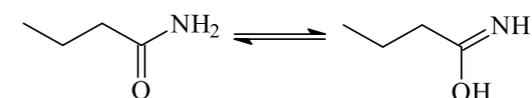


**5) Tautomeria ou Isomeria Dinâmica**= A tautomeria é um caso particular de isomeria funcional. Os isômeros pertencem a funções químicas diferentes, com a característica de um deles ser mais estável que o outro. No entanto, os isômeros não podem existir um sem o outro, eles **coexistem** no estado líquido ou em solução, mediante **equilíbrio químico (dinâmico)**. Um isômero se transforma no outro pela transposição intramolecular simultânea de um átomo de hidrogênio e uma ligação pi.

Exemplos:



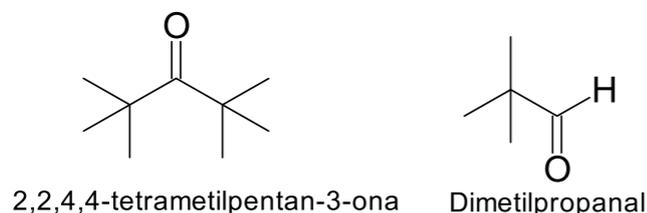
Existem outros casos de tautomeria como, por exemplo, o equilíbrio amida e iminoálcool.



Sempre que os isômeros coexistirem em equilíbrio a denominação da isomeria é tautomeria.

### Observação:

- Se o aldeído ou a cetona não possuírem pelo menos um hidrogênio ligado ao carbono vizinho a carbonila, não ocorrerá a formação do equilíbrio aldo ou ceto enólico. A cetona e o aldeído representados a seguir, não possuem enóis correspondentes por que não apresentam esse tipo de hidrogênio, por isso, podem existir na forma pura.



### Propriedades físico-químicas

- Isômero de cadeia, posição e compensação** => Propriedades químicas semelhantes e físicas diferentes.
- Isômeros funcionais e tautômeros** => Propriedades químicas e físicas diferentes.

#### Isomeria espacial

Os isômeros que apresentam isomeria espacial são denominados **estereoisômeros**. Os estereoisômeros são isômeros que possuem as mesmas conectividades (ligações), mas diferem pelo arranjo dos átomos no espaço.

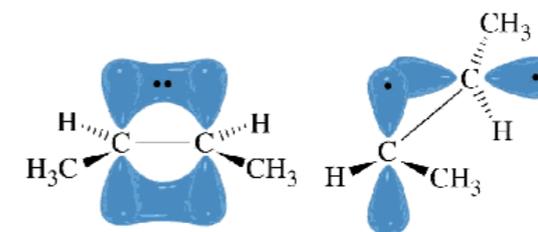
**Isomeria plana** = conectividade diferente entre os átomos (isômeros constitucionais).

**Isomeria espacial** = conectividade igual entre os átomos (estereoisômeros).

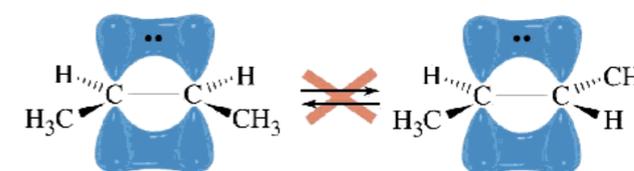
A isomeria espacial se divide em dois casos: **geométrica e óptica**.

#### Isomeria geométrica

A isomeria geométrica é causada quando não existe livre rotação da rotação entre dois átomos de carbono. O impedimento da rotação pode ser causado por uma **ligação dupla** ou pelo fato da cadeia se **fechada**. Uma ligação  $\pi$  é formada pela superposição (overlap) **lateral de orbitais "p"**, portanto, a rotação da ligação acaba com essa superposição resultando na **quebra da ligação**.

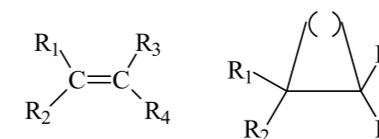


A energia necessária para efetuar a rotação em uma ligação sigma **C-C** é de **10 a 20 kJ/mol**, já em uma ligação dupla **C=C** esse valor é de aproximadamente **260 kJ/mol**. Esse alto valor de energia não está disponível para uma molécula à temperatura ambiente permitindo assim a existência de estereoisômeros.



#### "Estereoisômeros"

Nas cadeias fechadas a rotação é impedida pelo fato dos carbonos formarem um anel o que impede a rotação total em torno dos seus eixos sem que haja rompimento do anel. No entanto isso não significa que toda cadeia com uma dupla ou anel apresente isomeria geométrica. Essa particularidade só pode ocorrer se as seguintes condições forem obedecidas:

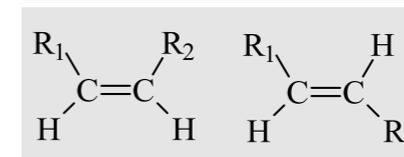


$$R_1 \neq R_2 \text{ e } R_3 \neq R_4$$

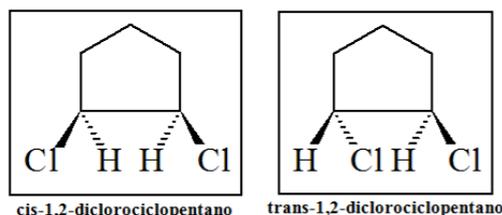
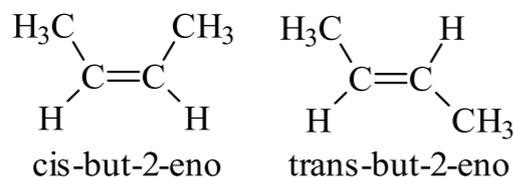
Para diferenciar os isômeros geométricos existem dois sistemas de nomenclatura: **cis/trans e E/Z**.

#### Sistema cis/trans de nomenclatura

Esse é um sistema antigo de nomenclatura da IUPAC que deve ser utilizado apenas em alcenos (alquenos) dissustituídos.



**Isômero cis** = átomos de hidrogênio de um *mesmo lado*.  
**Isômero trans** = átomos de hidrogênio em *lados opostos*.



O isômero **trans** é **mais estável** que o **cis**. A maior instabilidade do isômero cis é justificada pela aglomeração dos dois grupos maiores do mesmo lado da molécula causando uma tensão de repulsão entre eles.

**Estereoisômeros que não são imagens espaciais uns dos outros são chamados diastereômeros ou diastereoisômeros.**

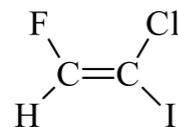
Em alcenos trissubstituídos e tetrassubstituídos esse sistema pode se tornar ambíguo, não sendo, portanto recomendado.

#### Sistema E/Z de nomenclatura

As denominações **E** e **Z** podem ser utilizadas em qualquer estereoisômero, por isso, é o sistema recomendado atualmente pela **IUPAC** pra diferenciar isômeros geométricos. Nesse sistema os grupos ligados a cada carbono da dupla ou do anel são colocados em ordem de prioridade.

**A prioridade é determinada pelo número atômico do átomo que está ligado diretamente a dupla ou anel.**

Considere o exemplo apresentado abaixo:

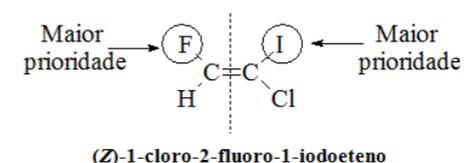


Por ser tratar de um alceno trissubstituído o sistema cis/trans não pode ser utilizado. A ordem de prioridade dos grupos ligados a dupla é a seguinte:

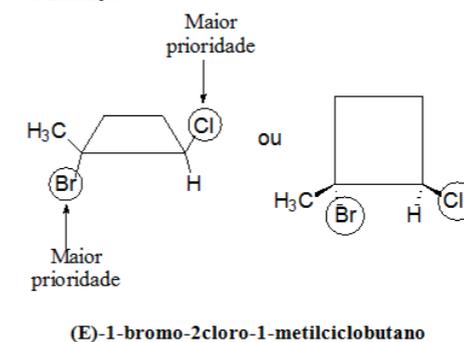


Se os grupos de maior prioridade estiverem em lados opostos o isômero será designado pela letra **E** (do alemão *Entgegen*, 'opostos') e se estiverem do mesmo lado **Z** (do alemão *Zusammen*, 'juntos').

1º Exemplo:

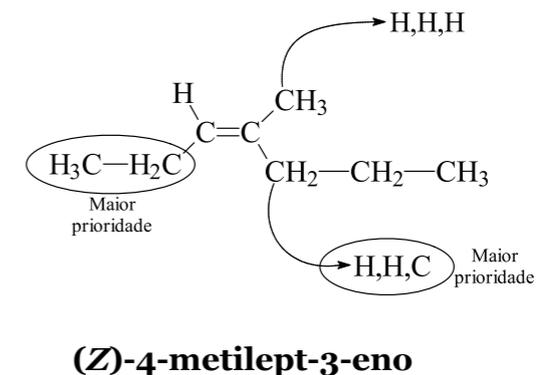


2º Exemplo:



Quando os átomos ligados aos carbonos da ligação dupla ou ao anel forem iguais, o desempate de prioridade é feito comparando-se as prioridades dos elementos ligados a cada um desses átomos.

Quando os átomos ligados aos carbonos da ligação dupla ou ao anel forem iguais, o desempate de prioridade é feito comparando-se as prioridades dos elementos ligados a cada um desses átomos. Observe o seguinte exemplo:



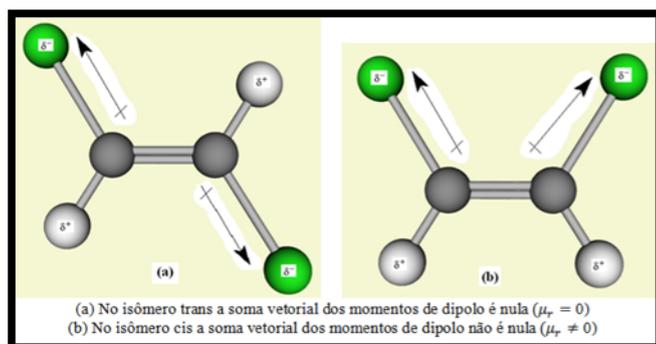
**Cuidado !!!!**

**Todo isômero cis é Z, mas nem todo isômero Z é cis.**  
**Todo isômero trans é E, mas nem todo isômero E é trans.**

## Propriedades físicas dos isômeros geométricos

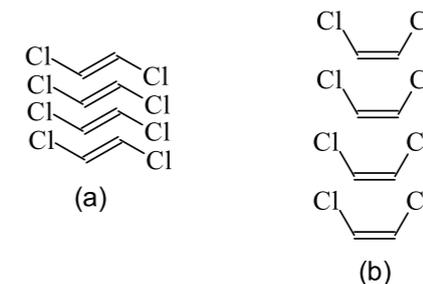
Os isômeros geométricos possuem propriedades físicas diferentes. Observe no quadro abaixo a comparação entre dois estereoisômeros geométricos:

Propriedade	cis-1,2-dicloroeteno	trans-1,2-dicloroeteno
Ponto de fusão	-80,5°C	-50°C
Ponto de ebulição	60,3°C	47,5°C
Densidade	1,28g/cm <sup>3</sup>	1,26g/cm <sup>3</sup>



As temperaturas diferentes do ponto de ebulição é uma consequência da diferença de polaridade dos isômeros. O **isômero cis** é **polar** por possuir um vetor resultante de momento de dipolo ( $\mu$ ) **diferente de zero** e o **isômero trans** é **apolar** por possuir resultante **igual a zero**. Portanto, as forças intermoleculares nos isômeros trans e cis são, respectivamente, forças de London ou dipolo induzido e dipolo-dipolo ou dipolo permanente.

Esse mesmo raciocínio não é válido para o ponto de fusão, já que o isômero trans possui maior ponto de fusão que o cis. As temperaturas de fusão dependem do empacotamento das moléculas no estado sólido (empacotamento molecular). Compostos que possuem moléculas que se agrupam de forma mais compacta no estado sólido, possuem maiores pontos de fusão. Lembre-se que, as forças intermoleculares aumentam com a diminuição da distância. Os isômeros trans possuem moléculas que podem se agrupar compactamente devido ao formato em “ziguezague” da molécula, já os isômeros cis, possuem um arranjo menos compacto devido ao formato em “U” da molécula que dificulta a aproximação. Portanto, a maior proximidade das moléculas trans no estado sólido, resulta em uma maior força de atração intermolecular entre elas, aumentando o ponto de fusão.



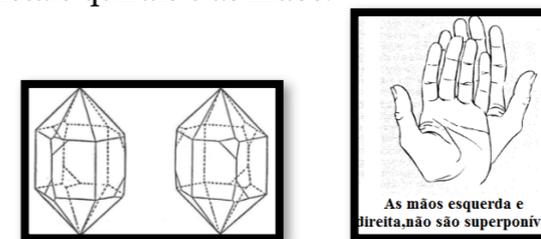
(a) O isômero trans possui empacotamento molecular mais compacto, ou seja, moléculas mais próximas.

(a) O isômero cis possui empacotamento molecular menos compacto, ou seja, moléculas mais distantes.

As propriedades químicas dos isômeros geométricos são diferentes, principalmente em sistemas biológicos.

## Isomeria Óptica

A isomeria óptica é um caso particular da isomeria espacial que só ocorre em **moléculas quirais**. O termo quiral se refere a ausência de simetria (**assimétrico**). Um objeto quiral não é idêntico a sua imagem especular, a imagem e o objeto não são superponíveis. Existem vários exemplos de objetos e de organismos quirais em nosso cotidiano e na natureza. Dois exemplos comuns de serem citados são: cristais quirais e as mãos.

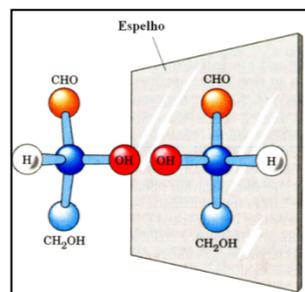


O termo quiral vem da palavra grega **cheir**, que significa ‘mão’.

### Curiosidade!

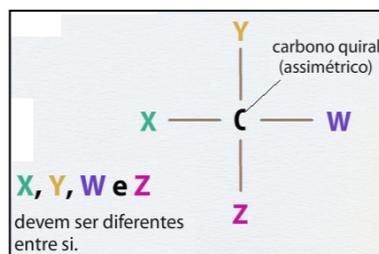
Diz uma lenda chinesa que no início dos tempos foram criados seres com as duas quiralidades. Conviviam sem problemas, até que, por razões desconhecidas, desencadeou-se uma enorme briga entre os de quiralidades diferentes. Deus, então, resolveu separá-los em dois mundos, sem que um pudesse entrar em contato com o outro.

A ausência de quiralidade também se manifesta em nível molecular. Uma molécula quiral não é idêntica a sua imagem no espelho. As moléculas quirais não possuem plano de simetria.



“Moléculas diferentes”

Para ocorrer a quiralidade em uma molécula ela deve ter um ou mais **carbonos assimétricos** ou possuir **assimetria molecular** devido a algum fator estrutural.



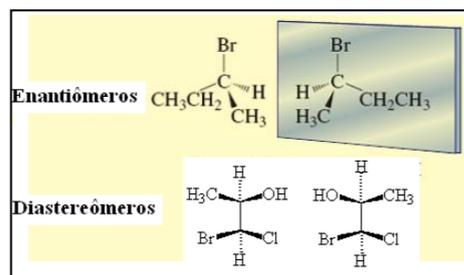
O carbono assimétrico também pode ser denominado **quiral, estereocentro ou estereogênio**.

### Isômeros ópticos

Existem duas classes de isômeros ópticos:

**Enantiômeros** = estereoisômeros que são imagens espaciais um do outro, que não se superpõem.

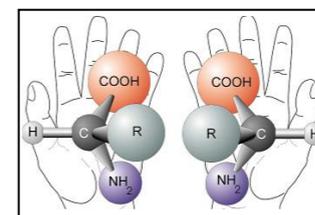
**Diastereômeros** = estereoisômeros que não são imagens espaciais um do outro e que não se superpõem.



O termo enantiômeros às vezes é substituído por antípodas ópticos ou enantiomorfos e diastereômeros por diastereoisômeros.

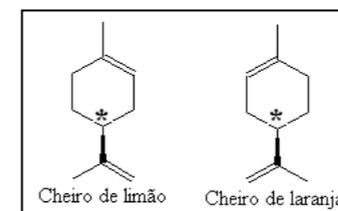
### Enantiômeros

Somente moléculas quirais podem apresentar enantiômeros.



Os enantiômeros possuem propriedades físicas como pontos de ebulição, pontos de fusão, densidade, solubilidade e índice de refração iguais. Por isso, uma mistura de enantiômeros é muito difícil de ser separada. A separação de um par de enantiômeros é denominada resolução e a primeira da história foi realizada por Louis Pasteur em 1848. Pasteur isolou os enantiômeros do **sal tartarato de sódio e amônio** por **catação**.

Apesar de muito parecidos os enantiômeros podem apresentar várias propriedades, como cheiro, sabor, propriedades biológicas e químicas, completamente diferentes.



\*Carbono assimétrico

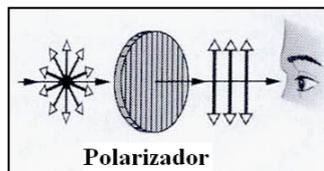
Os enantiômeros só exibem comportamento diferente quando interagem com outras **moléculas quirais** ou com a **luz polarizada** um fenômeno eletromagnético que será estudado no próximo tópico.

### Luz Polarizada

A luz natural é uma onda eletromagnética que possui infinitos planos de vibração, e a luz polarizada possui um único plano de vibração.



A luz pode ser polarizada por várias substâncias, tanto naturais quanto sintéticas, que são denominadas **polarizadores**.



Uma das principais características de uma molécula quiral é a capacidade de desviar o plano de propagação da luz polarizada. Substâncias com essa característica são opticamente ativas.

**Substâncias Opticamente Ativas (SOA)** = São as substâncias que desviam o plano de propagação da luz polarizada (quirais). Possuem carbono assimétrico ou assimetria molecular.

**Substâncias Opticamente Inativas (SOI)** = São as que não desviam o plano de propagação de luz polarizada (aquirais).

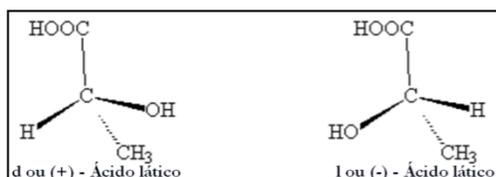
Os enantiômeros desviam o plano da luz polarizada com o mesmo desvio angular, mas em sentidos opostos. O isômero que produz o desvio para a **direita** é denominado **dextrógiro (d ou +)**, enquanto o outro, que provoca o desvio para a **esquerda**, é denominado **levógiro (l ou -)**.

**Obs:**

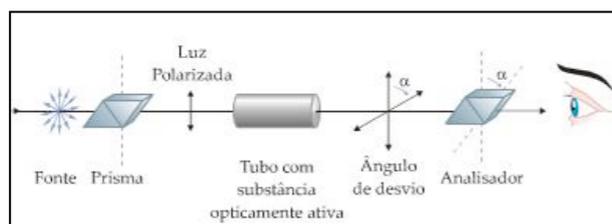
- O uso da letra **d** em vez de **(+)** e de **l** em vez de **(-)** deve ser abandonado de acordo com a **IUPAC**.

**Jean-Batiste Biot** foi o primeiro a verificar que algumas substâncias orgânicas podiam desviar o plano da luz polarizada (1815).

O uso da letra **d** em vez de **(+)** e de **l** em vez de **(-)** deve ser abandonado de acordo com a **IUPAC**.



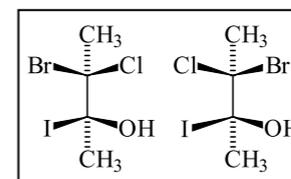
Para se verificar o desvio do plano da luz polarizada deve-se utilizar um aparelho denominado **polarímetro**.



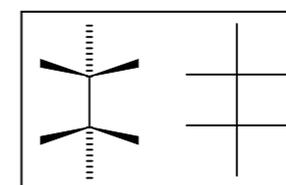
A mistura equimolar de um par de enantiômeros (50% dextrógiro + 50% levógiro) é denominada de **mistura racêmica** ou **racemato**. Uma mistura racêmica é **opticamente inativa** por **compensação externa**.

### Diastereômeros

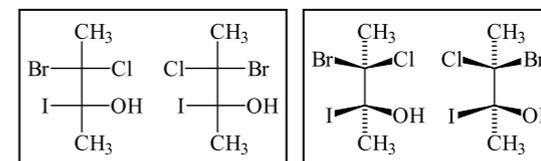
Os diastereômeros possuem propriedades físicas e químicas diferentes, portanto podem ser facilmente separados por métodos físicos tradicionais.



Para facilitar a representação dos isômeros ópticos é comum a utilização das projeções de **Fischer**. Nas projeções de **Fischer** linhas verticais representam ligações que são projetadas para trás do plano do papel e linhas horizontais representam ligações que são projetadas para fora do papel.



“Projeção de Fischer”



### Cálculo do número de isômeros ópticos e racêmicos

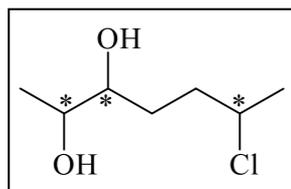
O cálculo do número de isômeros ópticos e racêmicos pode ser feito utilizando-se as seguintes equações:

**n** = Número de carbonos assimétricos  
 = Número de isômeros opticamente ativos (IOA)  
 = Número de racêmicos e número de pares de enantiômeros

O número de pares de diastereômeros pode ser calculado utilizando-se análise combinatória.

= Número de pares de diastereômeros

Exemplo:



**\*Carbonos assimétricos**

$$n = 3$$

$$2^3 = 8 \text{ (IOA)}$$

$$2^{3-1} = 4 \text{ racêmicos}$$

$$\text{Pares de enantiômeros} = 4$$

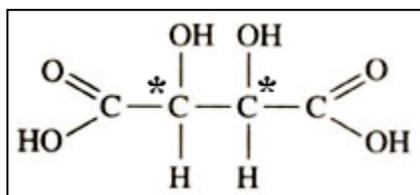
$$\text{Pares de diastereômeros} = C_{2^3, 2} - 2^{3-1} = C_{8, 2} - 4$$

### Substâncias com carbonos assimétricos com ligantes iguais

Quando um composto possui carbonos assimétricos com ligantes iguais, as relações matemáticas citadas no tópico anterior não podem ser aplicadas. Nesse caso o composto irá apresentar um estereoisômero **inativo** denominado **meso**. O isômero meso é um caso particular no qual a molécula possui carbonos assimétricos e plano de simetria (aquiral).

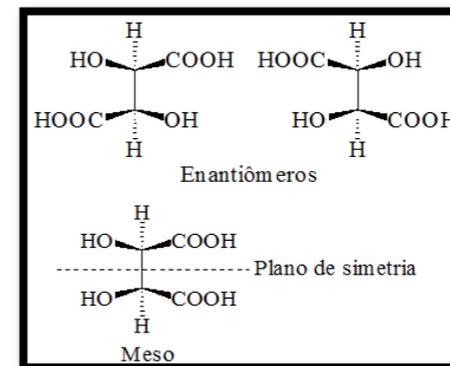
**Composto meso** = composto opticamente inativo cuja molécula é aquiral mesmo quando contém átomos tetraédricos ligados a quatro grupos diferentes (carbonos assimétricos).

O **ácido tartárico** é o principal exemplo de composto orgânico que possui isômero meso.



Ácido tartárico

Em compostos como o ácido tartárico com dois carbonos quirais com ligantes iguais, o número máximo de estereoisômeros é três: um par de enantiômeros e um composto meso.



Como só temos um par de enantiômeros só é possível a existência de uma mistura racêmica.

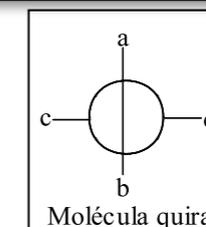
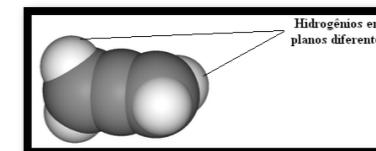
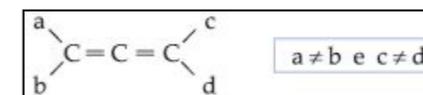
**“O composto meso é inativo por compensação interna”**

Esse tipo de inatividade óptica é denominada compensação interna. A existência de isômero meso só é possível se o composto possui um número par de carbonos assimétricos. A tabela a seguir representa algumas propriedades dos isômeros do ácido tartárico:

Acido tartárico	Rotação específica	Ponto de fusão(°C)
Dextrógiro	+13°	172
Levógiro	-13°	172
Meso	0	140

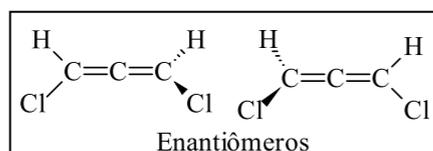
### Isomeria óptica sem carbono assimétrico (assimetria molecular)

O aleno ( $C_3H_4$ ) é o mais simples dos alcadienos. Alguns derivados do aleno apresentam isomeria óptica por não apresentarem plano de simetria molecular. Isso ocorre quando a seguinte condição é obedecida:



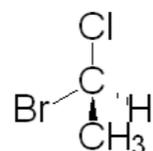
Nessa situação teremos duas moléculas espacialmente diferentes, podendo formar um par de enantiômeros (d e l) e uma mistura racêmica.

**Exemplo:** O composto **1,3-dicloropropadieno** possui dois isômeros opticamente ativos.

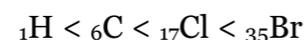


### Sistema R e S

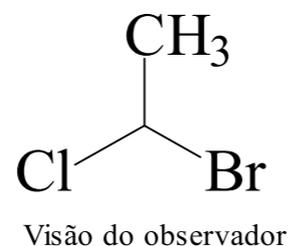
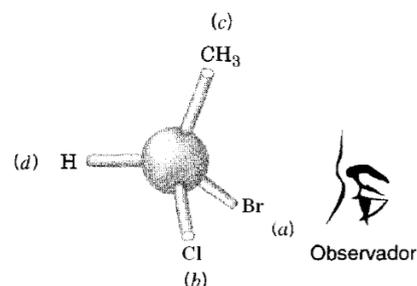
Vamos utilizar o sistema R/S para nomear o composto apresentado a seguir:



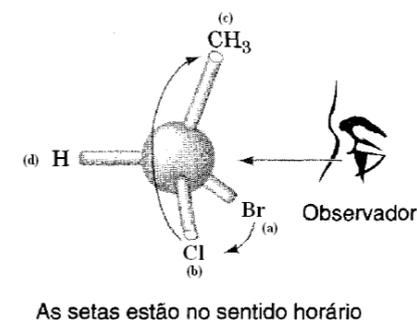
- O primeiro passo é determinar a prioridade dos átomos ligados diretamente ao carbono assimétrico. Com base no número atômico de cada elemento temos a seguinte ordem de prioridade:



- Agora, giramos a fórmula estrutural, de modo que o grupo de menor prioridade, nesse caso o hidrogênio, fique na parte de trás da molécula em relação ao observador.



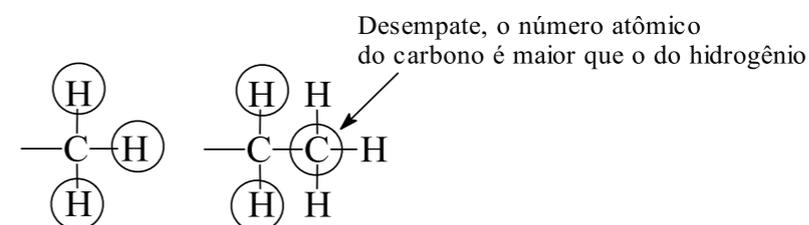
- Agora imaginamos um giro de “a” para “c” seguindo a ordem decrescente de prioridade. Se a direção do giro estiver no sentido horário, o enantiômero é denominado de (R). Se a direção do giro estiver no sentido anti- horário, o enantiômero é denominado de (S).



Com base nisso, o enantiômero que foi escolhido como exemplo é o (R)-1-bromo-1-cloroetano.

### Observação:

- Quando existir empate do número atômico dos átomos ligados diretamente ao carbono assimétrico, então o próximo conjunto de átomos presentes nos grupos não-designados é examinado. A prioridade é atribuída ao primeiro ponto de diferença. Por exemplo, no desempate de um grupo metil e um grupo etil o ponto de diferença é o próximo carbono.



# MODULO 7

## REAÇÕES ORGÂNICAS

1. Principais Reações Orgânicas
2. Classificação das Reações Orgânicas
3. Tipos de Cisão e de Reagentes
4. Efeitos Eletrônicos, Acidez e Basicidade
5. Reação de Adição: Hidrogenação
6. Adição de Halogênios
7. Adição de Haletos de Hidrogênio ou Hidretos
8. Adição de Água
9. Adição em Alcinos
10. Adição em Ciclanos
11. Reações de Substituição em Alcanos
12. Substituição Eletrofílica em Aromáticos
13. Substituição em Haletos (SN1 e SN2)
14. Mecanismo SN1 e SN2 (Substituição Nucleofílica)
15. Reação de Eliminação
16. Desidratação de Álcoois
17. NOX e Reação de Combustão
18. Oxidação em Alcenos: Enérgica e Branda
19. Ozinólise
20. Oxidação e Redução em Álcoois

## RESUMO TEÓRICO

## REAÇÕES ORGÂNICAS

1. Principais Reações Orgânicas
2. Classificação das Reações Orgânicas
3. Tipos de Cisão e de Reagentes
4. Efeitos Eletrônicos, Acidez e Basicidade
5. Reação de Adição: Hidrogenação
6. Adição de Halogênios
7. Adição de Haletos de Hidrogênio ou Hidretos
8. Adição de Água
9. Adição em Alcinos
10. Adição em Ciclanos
11. Reações de Substituição em Alcanos
12. Substituição Eletrofílica em Aromáticos
13. Substituição em Haletos (SN1 e SN2)
14. Mecanismo SN1 e SN2 (Substituição Nucleofílica)
15. Reação de Eliminação
16. Desidratação de Álcoois
17. NOX e Reação de Combustão
18. Oxidação em Alcenos: Enérgica e Branda
19. Ozinólise
20. Oxidação e Redução em Álcoois

Reações orgânicas**1) Introdução**

As reações na química orgânica geralmente são mais lentas e difíceis do que na química inorgânica. As reações moleculares são mais lentas por que envolvem a quebra e formação de ligações. Por isso, os compostos orgânicos reagem, na maioria dos casos, lentamente com formação de subprodutos e requerem, geralmente, alguma ajuda externa como o uso de catalisadores, altas temperaturas ou pressões elevadas.

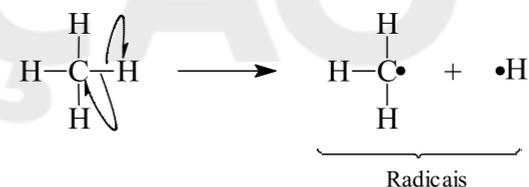
**2) Mecanismo de reação**

É a descrição dos eventos que ocorrem a nível molecular, quando os reagentes se transformam nos produtos. O mecanismo é descrito utilizando-se uma simbologia de setas.

**3) Ruptura ou cisão das ligações****a) Cisão homolítica ou homólise.**

Uma molécula pode romper-se de modo que os elétrons da ligação sejam repartidos de modo igual para os radicais resultantes.

**Exemplos:**

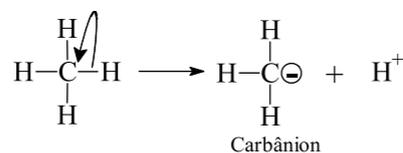
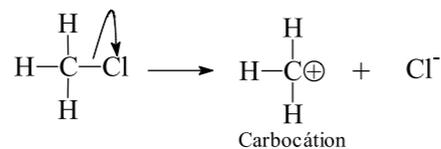


Os produtos das cisões homolíticas são denominados **radicais livres**. A cisão homolítica ocorre normalmente por aquecimento ou por irradiação de luz ou por ambas. A cisão homolítica é facilitada pela utilização de solventes apolares.

**b) Cisão heterolítica ou heterólise.**

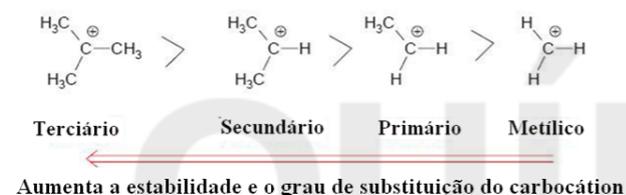
O par de elétrons da ligação onde se efetua a ruptura pode ficar apenas com um dos grupos.

**Exemplos:**



Nas rupturas heterolíticas surgem **cátions e ânions**. Esse tipo de ruptura é facilitada pela utilização de solventes polares que possam solvatar (separar) os íons e normalmente requer uma assistência externa, que pode ser um catalisador.

Obs:

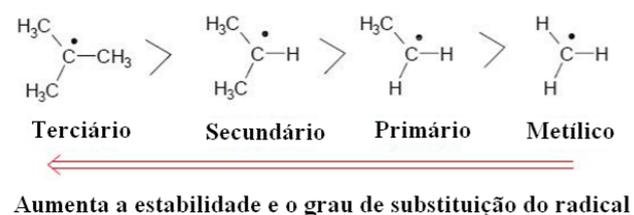


Essa ordem de estabilidade é explicada pelo efeito indutivo positivo provocado pelos grupos de carbono ligados ao carbono positivo.

#### 4) Tipos de reagentes

**Radicais (X• ou X-)** = átomo ou grupo de átomos que possui elétron desemparelhado (valência livre).

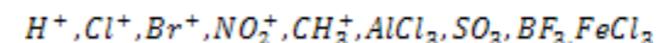
Obs:



O padrão na ordem de estabilidade dos radicais e a justificativa dessa ordem é a mesma dos carbocátions.

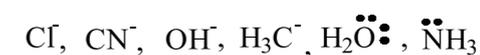
**Eletrófilos (E<sup>+</sup>)** = são substâncias com deficiência de elétrons que nas reações buscam elétrons. Normalmente são cátions ou compostos neutros que possuem moléculas com um átomo central que pode receber elétrons como Fe, Al, B e S.

Exemplos:



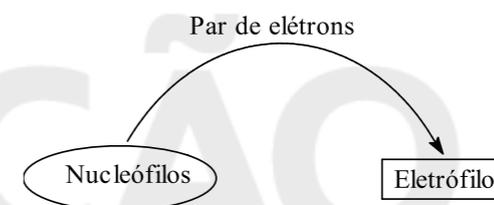
**Nucleófilos (Nu:<sup>-</sup>)** = são substâncias que nas reações buscam centros positivos. Normalmente são ânions ou compostos neutros que possuem moléculas com um átomo central que possui elétrons não compartilhados ou não ligantes.

Exemplos:



Obs:

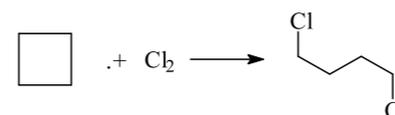
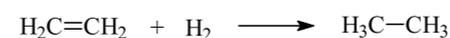
Os eletrófilos são **ácidos de Lewis** e são **agentes oxidantes**.  
Os nucleófilos são **bases de Lewis** e são **agentes redutores**.



#### 5) Classificação das reações orgânicas

##### Reações de adição

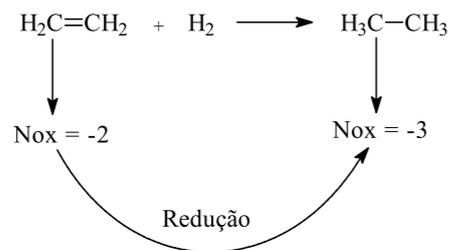
São reações em que duas ou mais moléculas se combinam para formar um único produto. Ocorrem geralmente com compostos de cadeia insaturada ou cíclica. Exemplos:



##### Reações de eliminação

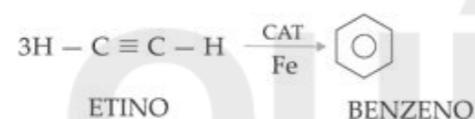
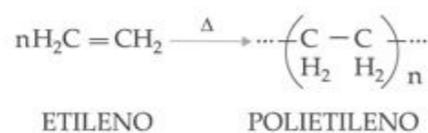
São reações que ocorrem com retirada de dois ou mais átomos sem que os mesmos sejam substituídos por outros. Ocorrem com a formação de uma insatu-





## Polimerização

É aquela em que ocorre reunião de moléculas iguais, com formação de moléculas maiores. Neste tipo de reação, os reagentes são chamados monômeros e os produtos, polímeros.



## Resumo

Reações Orgânicas {  
 Reação de substituição  
 Reação de adição  
 Reação de eliminação  
 Reação de oxirredução →  
 → (Oxidação e redução)  
 Reação de polimerização

Tipos de Reagentes {  
 Eletrófilo ⇒ H<sup>+</sup>; NH<sub>4</sub><sup>+</sup>  
 Nucleófilo ⇒ Cl<sup>-</sup>; H<sub>2</sub>O  
 Radicais livres ⇒ H<sub>3</sub>C-;  
 H<sub>3</sub>C-C-  
 H<sub>2</sub>

Tipos de Ruptura (cisão) {  
 Homolítica  
 Heterolítica

### - Ácido de Brønsted-Lowry

Toda espécie química capaz de ceder H<sup>+</sup>.

### - Base de Brønsted-Lowry

Toda espécie química capaz de receber H<sup>+</sup>.

### - Ácido de Lewis

Toda espécie química capaz de receber par de elétrons.

### - Base de Lewis

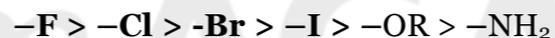
Toda espécie química capaz de ceder par de elétrons através de uma ligação dativa.

## Efeitos eletrônicos

### 1) Efeito indutivo

É a atração ou repulsão de elétrons em uma ligação sigma (simples).

**Efeito indutivo negativo (I<sup>-</sup>)** ⇒ atração de elétrons em uma ligação sigma. Diminui a densidade eletrônica da cadeia. Os principais átomos e grupos que promovem esse efeito nas moléculas orgânicas são, em ordem decrescente de intensidade:



Os principais grupos que promovem efeito indutivo negativo são os grupos halogênios.

**Efeito indutivo positivo (I<sup>+</sup>)** ⇒ repulsão de elétrons em uma ligação sigma.

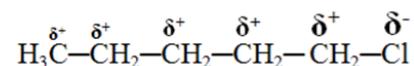
Aumenta a densidade eletrônica da cadeia. Os principais átomos e grupos que promovem esse efeito nas moléculas orgânicas são, em ordem decrescente de intensidade:



Os principais grupos que promovem efeito indutivo positivo são os grupos alquilas. Muitas teorias já foram criadas para explicar esse efeito, mas nenhuma delas se mostrou plenamente satisfatória.

**Obs:**

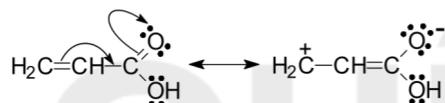
• A intensidade dos efeitos indutivos diminui ao longo da cadeia, à medida que aumenta a distância do átomo que o provoca.



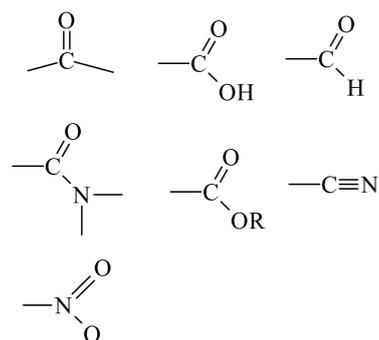
## 2) Efeito mesômero ou ressonante

É a atração ou repulsão de elétrons em ligações  $\pi$  (pi). É característico de compostos insaturados. Envolve elétrons de ligação pi alternadas ou vizinhas de um par de elétrons isolado. Está relacionado à ressonância.

**Efeito mesômero negativo ( $M^-$ )**  $\Rightarrow$  atração de elétrons em uma ligação pi. Diminui a densidade eletrônica da cadeia.

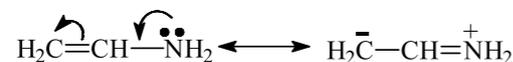


Principais grupos:

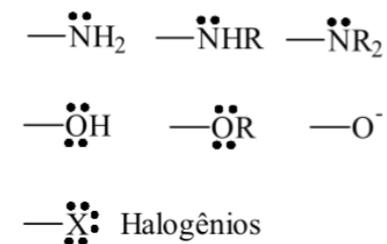


São grupos insaturados, nos quais existem átomos mais eletronegativos do que o carbono.

**Efeito mesômero positivo ( $M^+$ )**  $\Rightarrow$  repulsão de elétrons em uma ligação pi. Aumenta a densidade eletrônica da cadeia.



Principais grupos:



São grupos com ligações simples (saturados), nos quais existem átomos com pares de elétrons livres.

Obs:

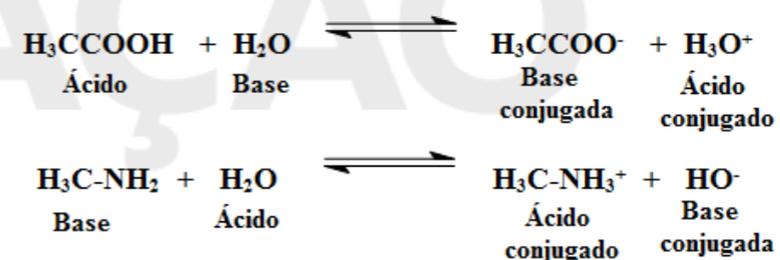
• Os efeitos eletrônicos negativos são denominados **elétron-atraente** e os positivos **elétron-repelente**.

## Caráter ácido-base de compostos orgânicos

Ácidos e bases de Brønsted-Lowry

Ácido  $\Rightarrow$  substância que pode doar um próton ( $\text{H}^+$ ).

Base  $\Rightarrow$  substância que pode receber um próton ( $\text{H}^+$ ).

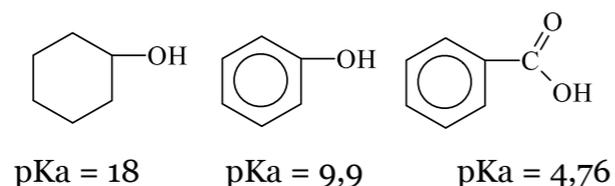


- Quanto mais forte o ácido, mais fraca é a base conjugada.
- Quanto mais forte a base, mais fraco é o ácido conjugado.

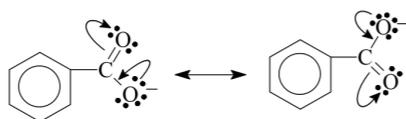
Um fator que aumenta a força ácida de um composto é a **deslocalização da carga negativa** da base conjugada.

$K_a$	$10^{-18}$	$10^{-16}$	$10^{-10}$	$10^{-5}$
composto	álcool	água	fenol	Ácido carboxílico

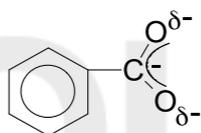
Quanto maior o  $K_a$  mais forte é o ácido e menor é o  $pK_a$ .



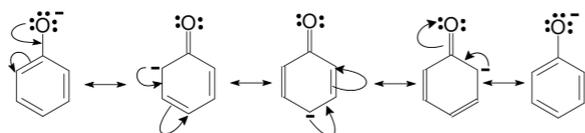
Deslocalização da carga negativa no ânion benzoato:



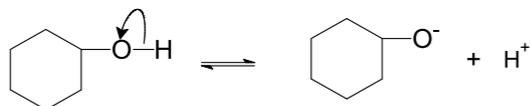
Portanto, a carga negativa não está localizada em nenhum dos átomos de oxigênio, estando na verdade distribuída de forma igual para os dois. Podemos representar o híbrido de ressonância de um ânion carboxilato da seguinte maneira:



Deslocalização da carga negativa no ânion fenóxido:



Essa deslocalização da carga negativa estabiliza a base conjugada e justifica o caráter ácido fraco característico dos fenóis. Entretanto, as estruturas de ressonância do ânion fenóxido não são equivalentes, como as do ânion carboxilato. De acordo com a teoria de ressonância, moléculas ou íons que são estabilizados por ressonância, são mais estáveis quando as estruturas de ressonância são equivalentes. Essa diferença nas estruturas de ressonância é que justifica a grande diferença de acidez existente entre os fenóis e os ácidos carboxílicos. Por último, vamos analisar a base conjugada do álcool que é denominada de alcóxido. A equação de ionização é a seguinte:



No ânion alcóxido de um álcool não existe deslocalização da carga negativa da base conjugada e o grupo alquil ligado ao oxigênio promove efeito indutivo positivo, que aumenta ainda mais a carga negativa do oxigênio diminuindo a estabilidade da base conjugada. Por isso, os alcoóis possuem um caráter ácido menor que o da água.

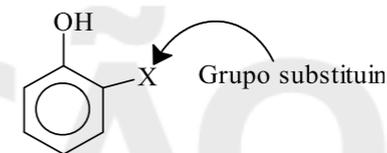
**Obs:**

- Ácidos carboxílicos podem ser neutralizados por bases fortes, moderadas, fracas e sais de caráter básico como o  $\text{NaHCO}_3$ .
- Fenóis são neutralizados somente por bases fortes e álcoois não reagem com bases ou sais de caráter básico.

### Relação entre efeitos eletrônicos e acidez e basicidade

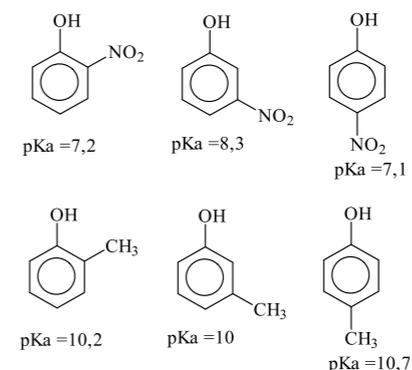
#### 1) Fenóis

A presença de grupos no anel aromático do fenol pode aumentar ou diminuir a acidez do fenol.



X ⇒ Efeito eletrônico **positivo** ⇒ **diminui a acidez** ⇒ principalmente em **orto e para**.

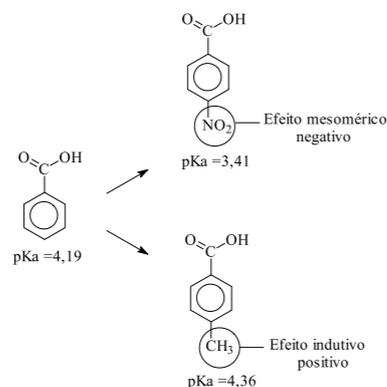
X ⇒ Efeito eletrônico **negativo** ⇒ **aumenta a acidez** ⇒ principalmente em **orto e para**



**Obs:**

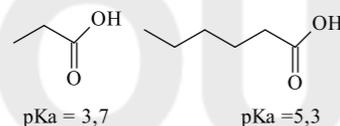
- Os halogênios são exceções, pois podem fazer **efeito indutivo negativo e mesômero positivo**.

- Os halogênios aumentam a acidez do fenol.
- As conclusões sobre o efeito do substituinte do anel aromático sobre a acidez do fenol, também podem ser estendidas para o ácido benzóico ou benzenocarboxílico. Observe:

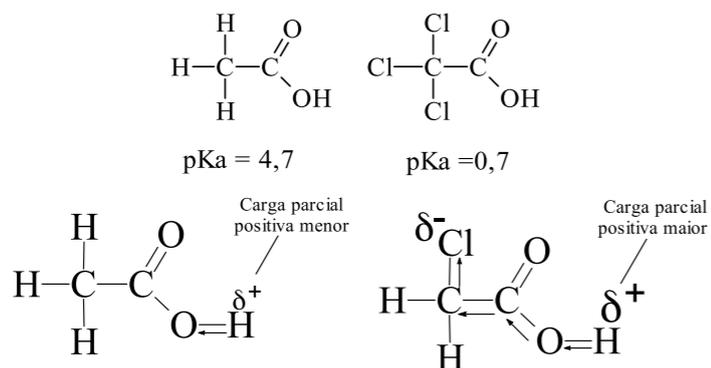


## 2) Ácidos carboxílicos

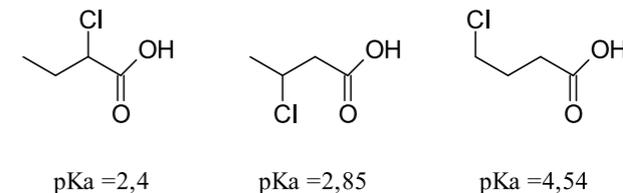
- Quanto maior a cadeia de carbonos (**R**), menor é a acidez.



- O efeito indutivo negativo do cloro (elétron-atraente) torna o próton da hidroxila mais positivo e aumenta a polarização da ligação O—H, facilitando a cisão heterolítica da ligação que libera o íon H<sup>+</sup>. Quanto maior o número de grupos atratores de elétrons na cadeia lateral maior será a acidez.



- Como os efeitos indutivos se enfraquecem à medida que aumenta a distância do átomo ou grupo que o provoca, o efeito de fortalecimento da acidez diminui quando a distância entre o grupo atrator de elétrons e a carboxila aumenta. Observe a sequência de compostos abaixo e seus respectivos pka:



## 3) Aminas

Ordem decrescente de basicidade:

*Aminas secundárias > Aminas primárias > Aminas terciárias > NH<sub>3</sub> > Aminas aromáticas*

Quanto maior o K<sub>b</sub> mais forte é a base e menor é o pK<sub>b</sub>.

**Dimetilamina** K<sub>b</sub> = 5,2.10<sup>-4</sup>

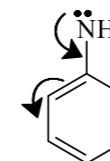
**Metilamina** K<sub>b</sub> = 4,4.10<sup>-4</sup>

**Trimetilamina** K<sub>b</sub> = 0,62.10<sup>-4</sup>

**Amônia** K<sub>b</sub> = 1,8.10<sup>-5</sup>

**Fenilamina** K<sub>b</sub> = 3,8.10<sup>-10</sup>

As aminas secundárias possuem dois grupos alquila doadores de elétrons (efeito indutivo positivo), sendo, portanto, mais básicas que as aminas primárias. Considerando-se apenas o efeito indutivo dos grupos alquila, era de se esperar que as aminas terciárias fossem mais básicas. Entretanto a presença de três grupos alquila em torno do nitrogênio dificulta a aproximação do cátion H<sup>+</sup> (**impedimento espacial ou estérico**). Já as aminas aromáticas são menos básicas que amônia por que o par de elétrons não ligante do nitrogênio pode deslocalizar-se sobre o anel aromático, tornando-se dessa forma menos disponível para se ligar ao H<sup>+</sup>.

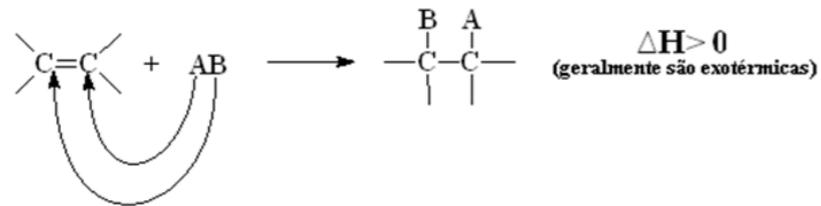


## Reações de adição em alcenos e alcinos

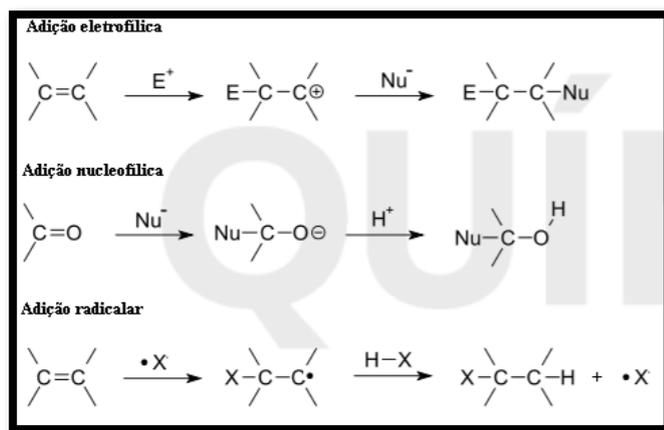
Os alcenos sofrem principalmente reações de adição. Estes hidrocarbonetos caracterizam-se por possuírem uma dupla ligação entre carbonos, constituída de uma ligação sigma, mais forte, e uma ligação pi, mais fraca. É de se esperar, portanto, que as reações consistam na ruptura da ligação mais fraca. Tal previsão é confirmada experimentalmente: a química dos alcenos é basicamente a ruptura da

ligação pi, mais fraca, e a formação de duas ligações sigmas, mais fortes, na mesma molécula.

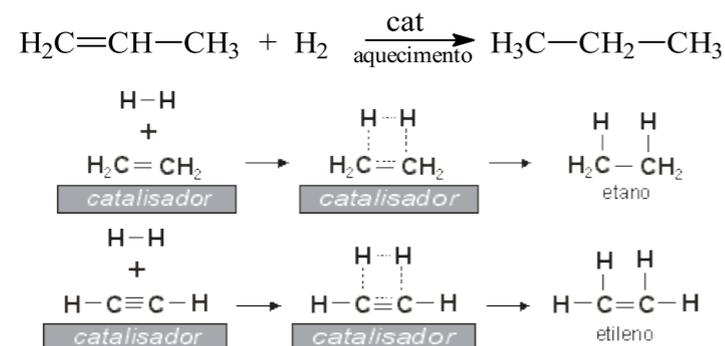
Ligação	Energia de ligação (kJ.mol <sup>-1</sup> )
π	≈ 260
σ	≈ 350



Existem três tipos de adição, que se diferenciam pelo tipo de reagente que ataca o alceno. O reagente pode ser um eletrófilo, nucleófilo ou radical. O esquema geral de cada uma delas está representado a seguir:

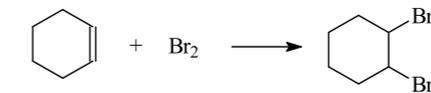
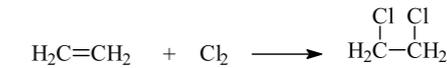


**1) Hidrogenação Catalítica:** é a reação de adição que ocorre entre alcenos e H<sub>2</sub> na presença de Ni como catalisador. Ex:

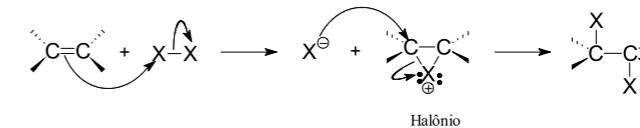


Os reagentes são adsorvidos na sua superfície, rompendo as ligações pi e enfraquecendo as ligações sigmas das moléculas de hidrogênio, o que facilita a reação. O paládio, a platina e o níquel são os principais catalisadores da hidrogenação.

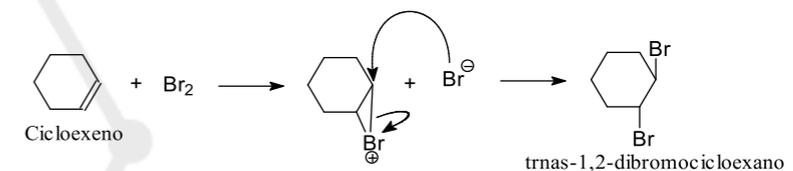
**2) Halogenação em Alcenos:** é a reação de adição que ocorre entre alcenos e haletos formando di-haletos. Ex:



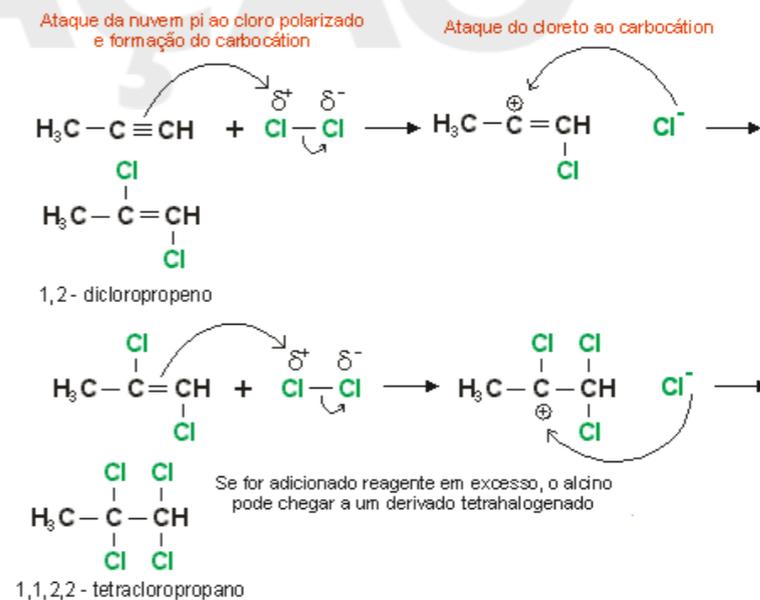
**Mecanismo geral:**



Exemplo:

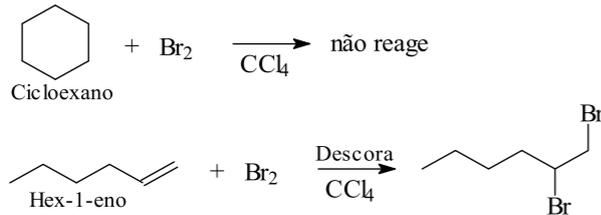


Os alcinos reagem com os halogênios formando di-haletos. Caso exista halogênio em excesso, poderemos obter um derivado tetrahalogenado. Veja o exemplo:

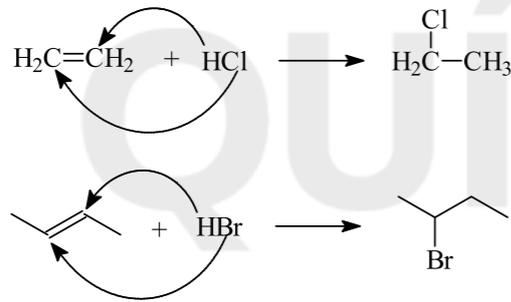


## Teste de identificação de insaturações entre carbonos

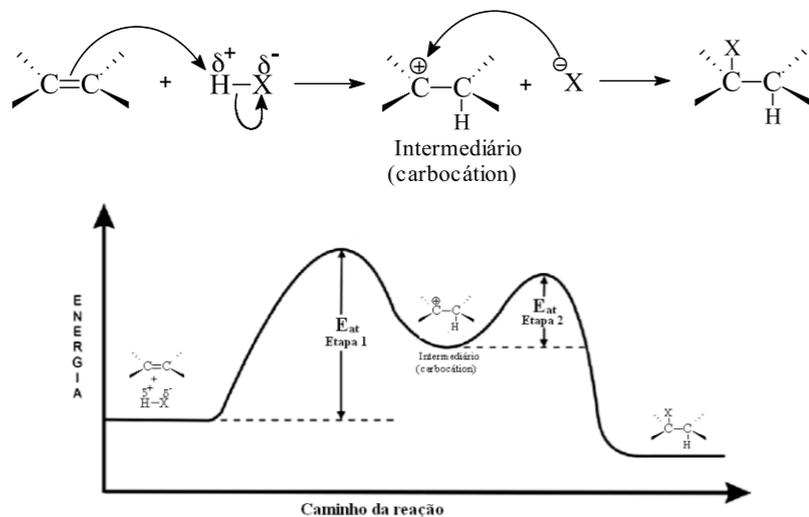
Ao se adicionar uma solução de bromo a uma amostra de um composto desconhecido de fórmula geral  $C_nH_{2n}$ , podemos observar duas situações. A solução pode descolorir ficando transparente ou a solução de bromo pode não descolorir. O descolorimento indica a presença de insaturações entre carbonos que consomem o bromo provocando o descolorimento.



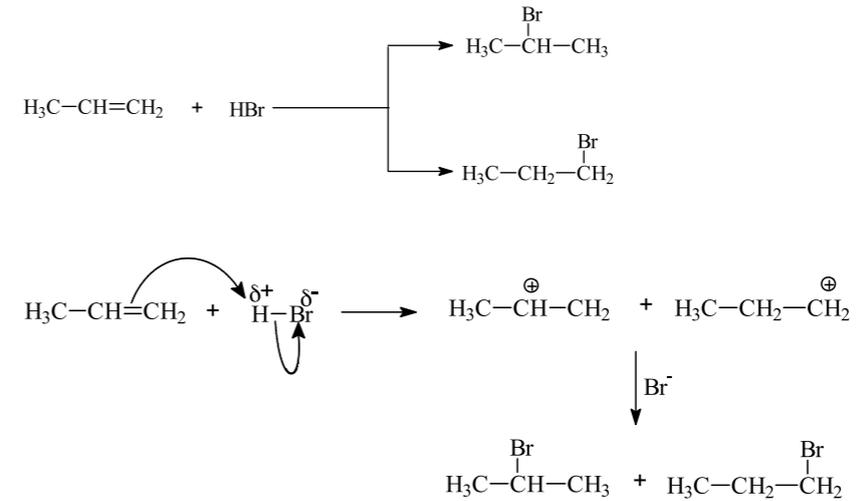
**3) Halogenidretos em Alcenos:** é a reação de adição que ocorre entre alcenos e halogenidretos (HCl, HBr, HI, HF) formando haletos de alquila. Exemplo:



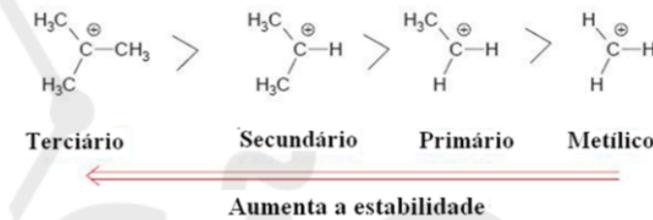
**Mecanismo geral:**



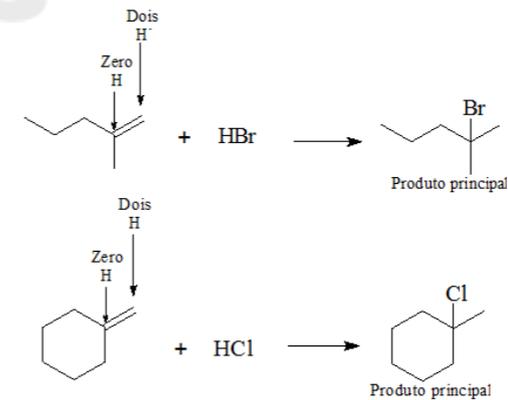
Alcenos com mais de dois carbonos poderiam dar origem a mais de um produto.



No entanto, um deles se forma em maior quantidade em relação ao outro. A orientação da adição nos alcenos depende da estabilidade do carbocátion.

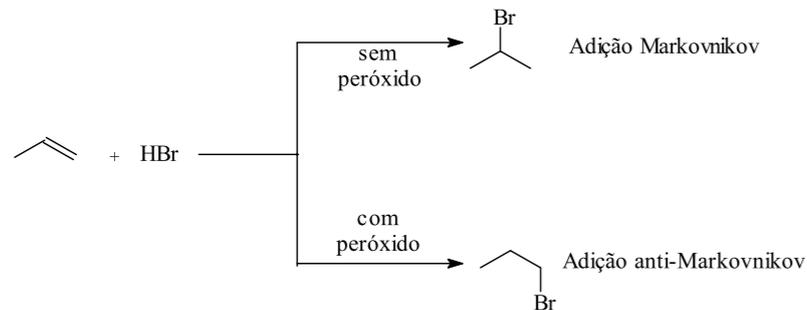


Após diversas observações experimentais o químico russo Markovnikov concluiu, que o H<sup>+</sup> é adicionado preferencialmente ao carbono mais hidrogenado da insaturação e, conseqüentemente, o halogênio é adicionado ao menos hidrogenado.

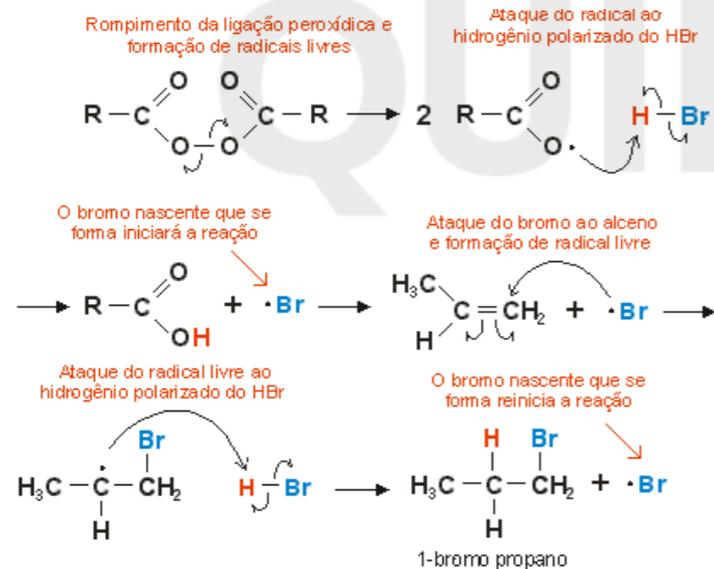


Quando reagidos com HX, os alcinos produzem haletos e, se existir excesso de HX poderemos obter **di-haletos geminados**.

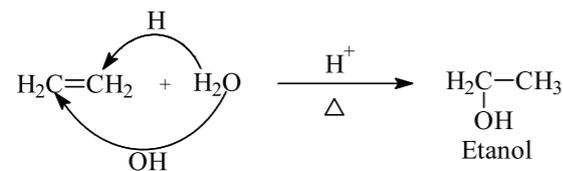
**4) Reação de Kharasch :** a orientação da adição de HBr, em especial, depende exclusivamente da presença ou ausência de peróxidos. Se a reação for feita em ausência de peróxidos orgânicos, a orientação da adição segue a regra de Markovnikov. Caso seja feita em presença de peróxidos, a orientação da adição se dá exatamente de modo oposto, ou seja, o H se liga ao carbono menos hidrogenado da insaturação.



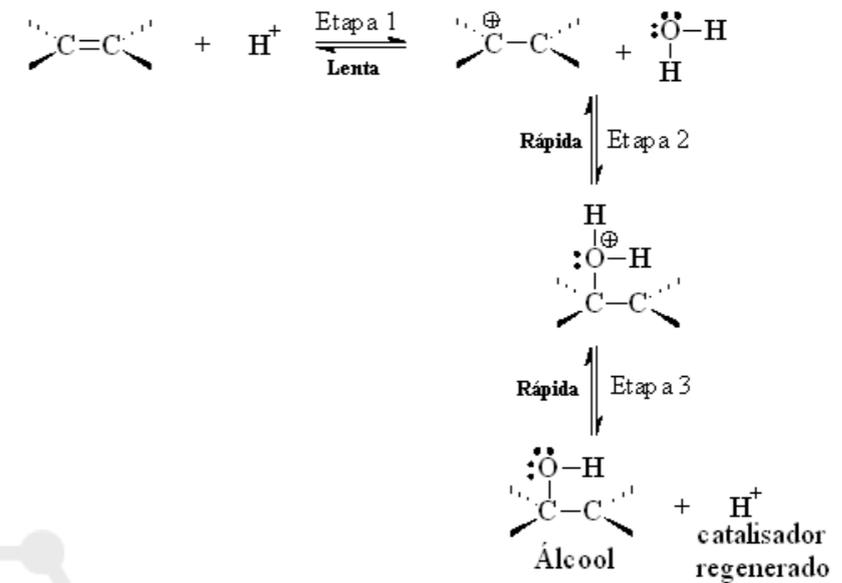
O peróxido utilizado, frequentemente derivado de perácidos (RCO<sub>3</sub>H), inicia a reação formando radicais livres, e não há formação do carbocátion. Veja:



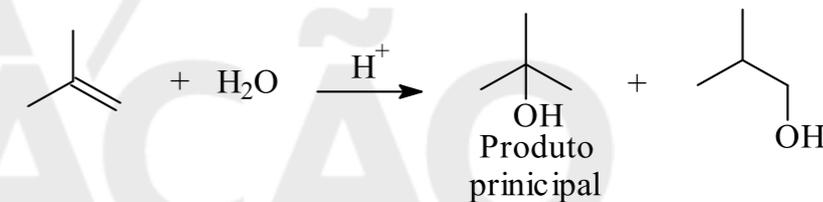
**5) Hidratação de Alcenos:** é a reação de adição que ocorre entre alcenos e H<sub>2</sub>O na presença de catalisador em meio ácido formando álcoois. Exemplo:



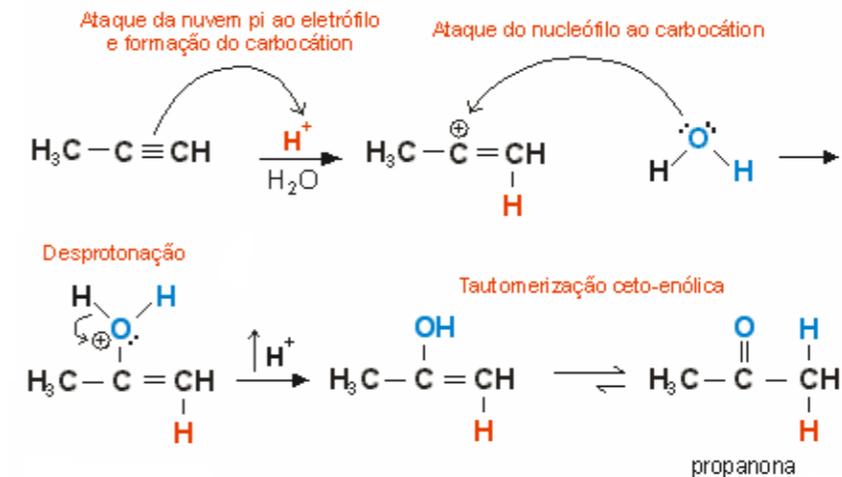
**Mecanismo geral**



A adição de água a alcenos assimétricos também obedece à regra de Markovnikov, já que o mecanismo de reação também é eletrofílico.

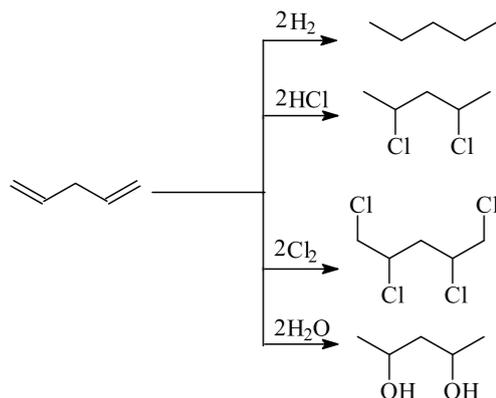


O mecanismo da adição de água nos alcinos ocorre de maneira análoga à hidratação dos alcenos, porém, o produto - um enol - tautomeriza-se na forma cetônica ou aldeídica, dependendo da estrutura da cadeia carbônica. Veja o exemplo da hidratação do acetileno:

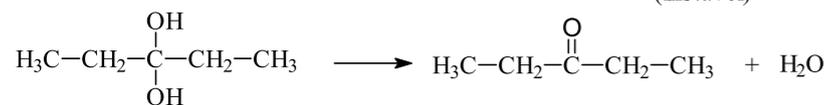
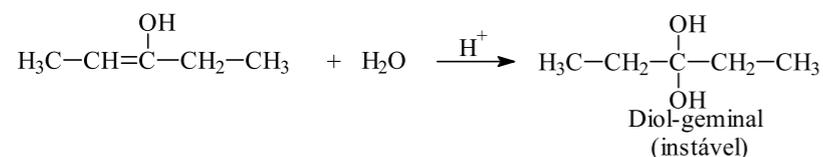
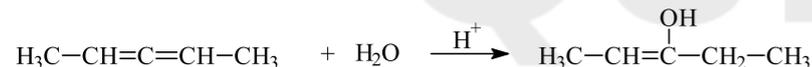


Na adição de água ao etino ocorre a formação de etanal (aldeído), nos demais alcinos devido a regra de Markovnikov ocorre a formação de cetonas.

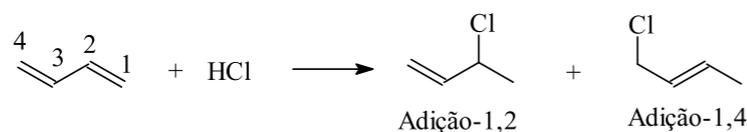
**6) Adição em alcadienos:** os alcadienos isolados, que possuem duplas separadas por pelo menos um carbono  $sp^3$ , possuem reações de adição análogas as dos alcenos podendo, no entanto, ocorrerem em dobro devido à presença das duas ligações  $\pi$ . Veja:



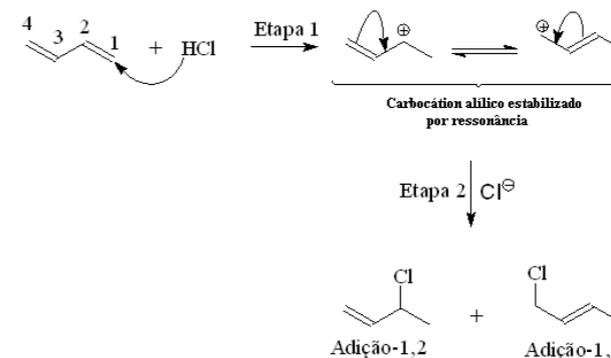
Os alcadienos acumulados, que possuem as duas duplas no mesmo carbono, só apresentam comportamento diferente na adição de água, que leva formação de cetonas no lugar de álcoois.



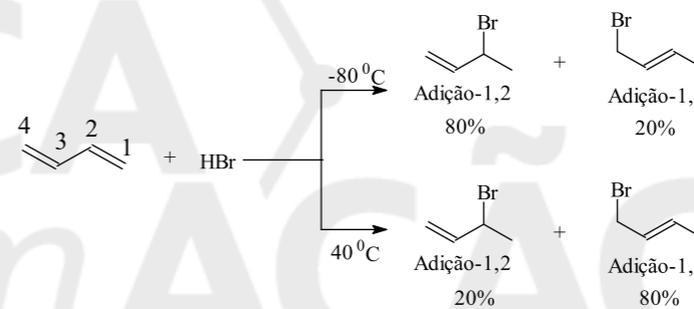
Já os dienos conjugados, apresentam um comportamento especial nas reações eletrofílicas devido ao fenômeno da ressonância existente em ligações duplas alternadas ou conjugadas. Por exemplo, na reação de adição de HCl ao buta-1,3-dieno são formados dois produtos.



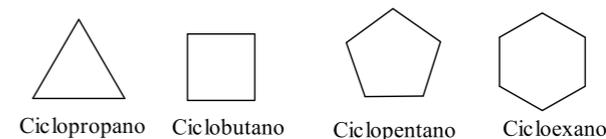
**Mecanismo geral:**



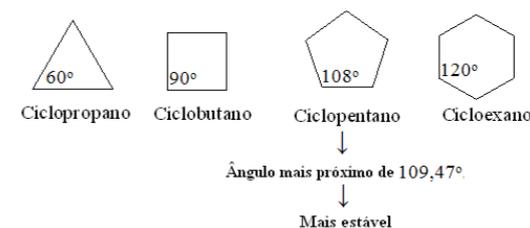
Devido as diferentes energias de ativação dos dois caminhos, podemos favorecer um ou outro produto pelo controle da temperatura reacional. As temperaturas mais baixas permitem as moléculas a ultrapassar preferencialmente a barreira mais baixa (controle cinético) e temperaturas mais altas preferencialmente a barreira mais alta (controle termodinâmico).



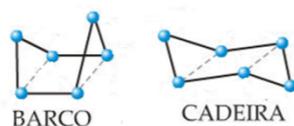
**7) Adição em ciclano:** os ciclano mais importantes nesse tipo de reação são:



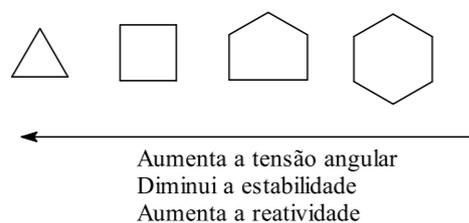
Apesar de pertencerem à mesma função química, esses ciclano não apresentam a mesma estabilidade relativa devido ao ângulo de suas ligações internas.



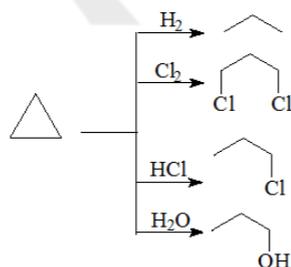
## Conformações do cicloexano



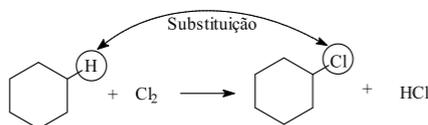
A diferença de estabilidade dos anéis devido às tensões angulares, também afeta a reatividade e a tendência de reação desses compostos. A relação entre a tensão e a estabilidade é a seguinte:



Devido à grande tensão os anéis de três e quatro carbonos se comportam como alcenos e apresentam tendência de sofrer adições. Esses anéis se abrem com facilidade, pois, a ligação sigma carbono-carbono se comporta como uma ligação  $\pi$  de um alceno e abrindo o anel a tensão angular deixa de existir, observe:

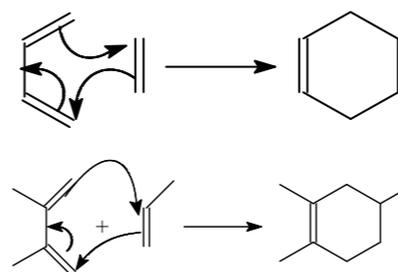


Já os ciclanos de cinco e, principalmente, o de seis carbonos resistem mais a quebra do anel e preferem sofrer substituições ao invés de adições. Veja:



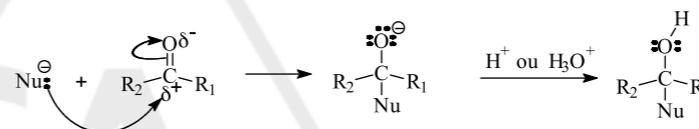
**8) Diels-Alder:** Essa reação foi descoberta por Diels e Alder em 1928. Por estes trabalhos eles ganharam o Prêmio Nobel de 1950. Esta reação é uma cicloadição que ocorre entre um dieno conjugado e um composto contendo uma ligação dupla chamado dienófilo. O produto sempre contém um novo anel de seis membros com uma ligação dupla.

Exemplos:

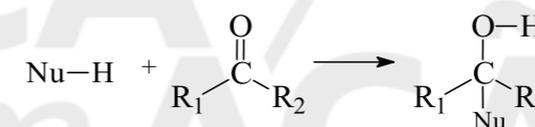


**9) Adição a carbonila de aldeídos e cetonas:** a polarização existente na ligação C=O confere ao carbono uma carga parcial positiva, o que o torna um carbono eletrofílico. Por isso, grupos nucleofílicos podem se adicionar à carbonila de aldeídos e cetonas.

**Mecanismo geral:**

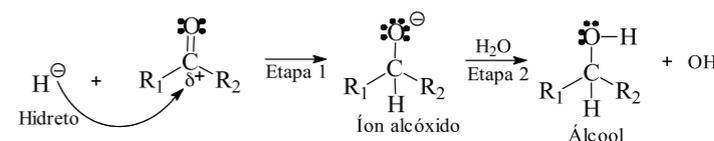


Simplificadamente:

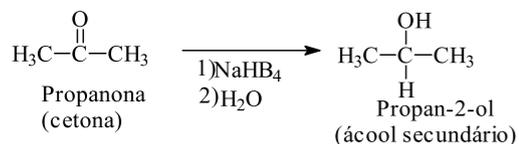
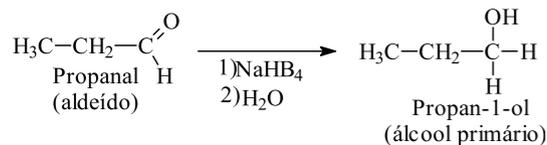


**Adição de íon hidreto**

Essa adição nucleofílica também é, na verdade, uma reação de “redução” da carbonila, por isso, alguns autores podem tratar desse assunto no capítulo de reações de oxidação e redução. Os reagentes mais recomendados para esse tipo de transformação são o boridreto de sódio ( $\text{NaBH}_4$ ) e o hidreto de lítio e alumínio ( $\text{LiAlH}_4$ ), ambos possuem a capacidade de transferir um íon hidreto para a carbonila, que é a etapa chave dessa reação. O mecanismo geral é o seguinte:

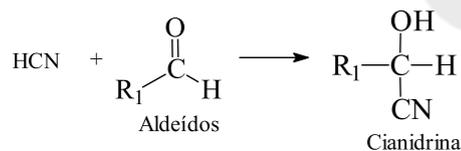
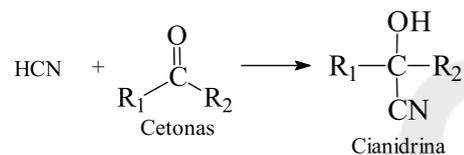


De forma simplificada, basta adicionar um hidrogênio ao carbono e ao oxigênio da carbonila. Veja:



### Adição de cianeto de hidrogênio-HCN

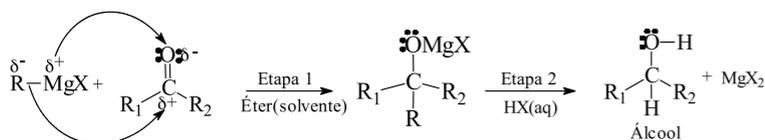
A adição de HCN a uma carbonila de um aldeído ou de uma cetona, fornece como produto uma cianidrina. As cianidrinas são intermediários úteis em sínteses orgânicas.



### Adição de compostos de Grignard- R-MgX

As reações mais importantes dos compostos de Grignard são as adições a compostos carbonílicos, como aldeídos e cetonas.

#### Mecanismo geral:

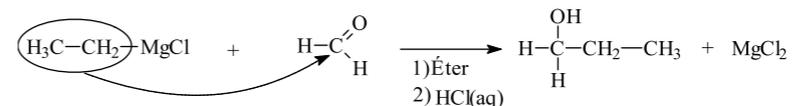


O grupo R<sup>-</sup>, forte nucleófilo, forma uma ligação com o átomo de carbono

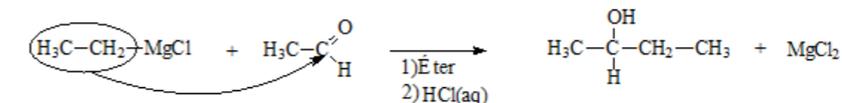
A adição de HX aquoso leva formação do álcool e do MgX<sub>2</sub>

As regras são as seguintes:

Reagentes de Grignard reagem com *metanal (aldeído fórmico)* formando **álcoois primários**.



Reagentes de Grignard reagem com os *demais aldeídos* formando **álcoois secundários**.



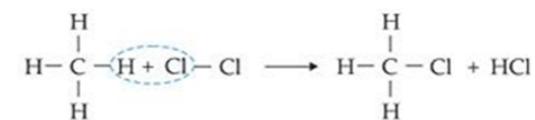
Reagentes de Grignard reagem com *cetonas* formando **álcoois terciários**

### Substituição em alcanos

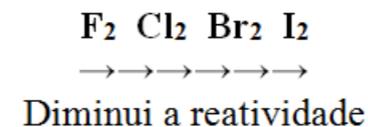
Os alcanos são pouco reativos, devido ao caráter **apolar** desses compostos. Os alcanos só reagem em condições energéticas (calor, luz UV) e com reagentes energéticos (radicais). Existem três reações de substituição em alcanos para o ensino médio, a halogenação, a nitração e a sulfonação, sendo que, a mais importante para os exames de vestibular é a halogenação.

#### Halogenação

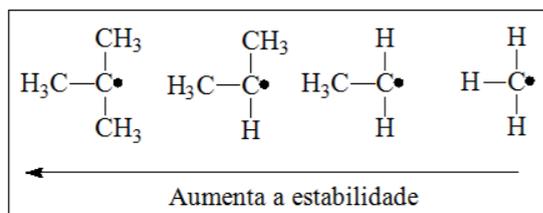
Essa reação ocorre com as substâncias simples dos halogênios: **F<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>**. A substituição pode ocorrer com um ou mais hidrogênios do alcano dependendo das condições reacionais.



Os halogênios possuem reatividade diferente. A relação entre eles é a seguinte:







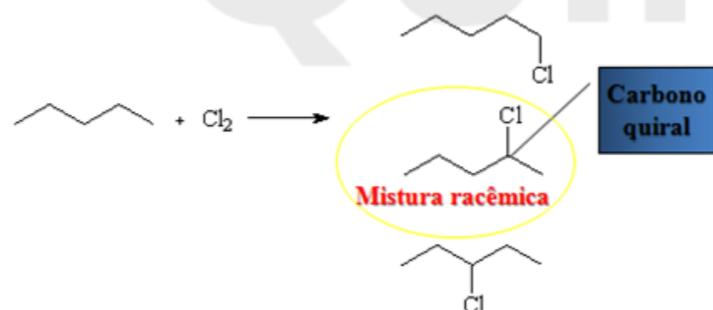
A energia de ativação da segunda etapa é que determina a reatividade do halogênio e a lei cinética da reação. Lembre-se, quanto menor for a energia de ativação, maior é a velocidade da reação. Analise a tabela a seguir:

Halogênio	$E_a$ (KJ/mol)
F <sub>2</sub>	5
Cl <sub>2</sub>	16
Br <sub>2</sub>	78
I <sub>2</sub>	140

Diminui a reatividade

### Observação:

Quando moléculas aquirais reagem para produzir um composto com um único carbono quiral, o produto será obtido na forma racêmica.

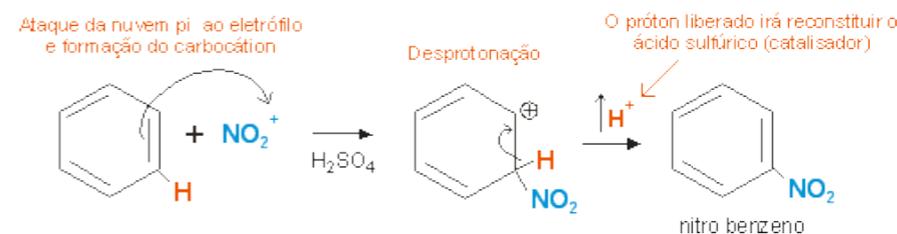
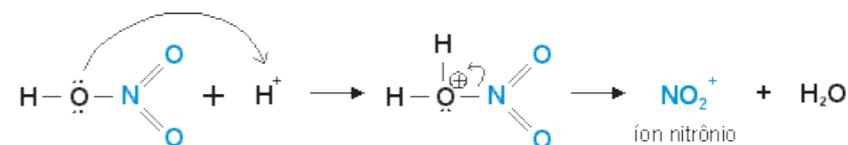


## Reações de substituição eletrofílica em aromáticos

Os compostos aromáticos são muito estáveis devido à ressonância do benzeno, por isso as reações de substituição dos hidrogênios são mais prováveis que reações de adição.

### 1- Nitração

O benzeno pode reagir com ácido nítrico, em presença de ácido sulfúrico que, sendo um ácido mais forte que o HNO<sub>3</sub>, faz com que este se comporte como base de Lewis, recebendo um próton do H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Trata-se de um equilíbrio ácido-base.

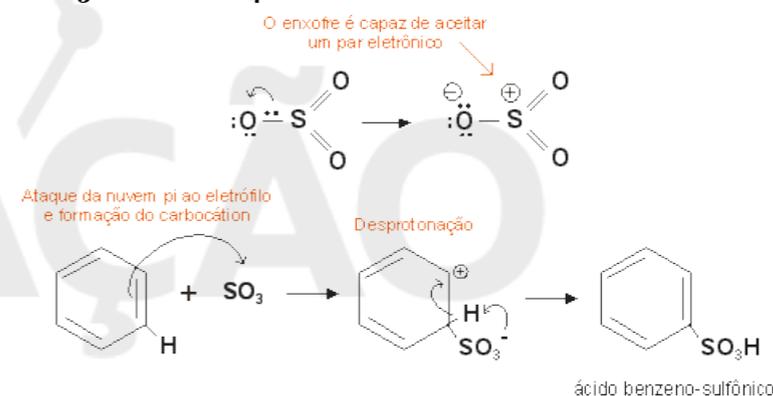
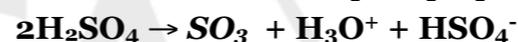


### Resumo:



### 2- Sulfonação

O benzeno pode ser sulfonado com ácido sulfúrico fumegante - uma solução de SO<sub>3</sub> em H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> - em que o próprio SO<sub>3</sub> será o eletrófilo:



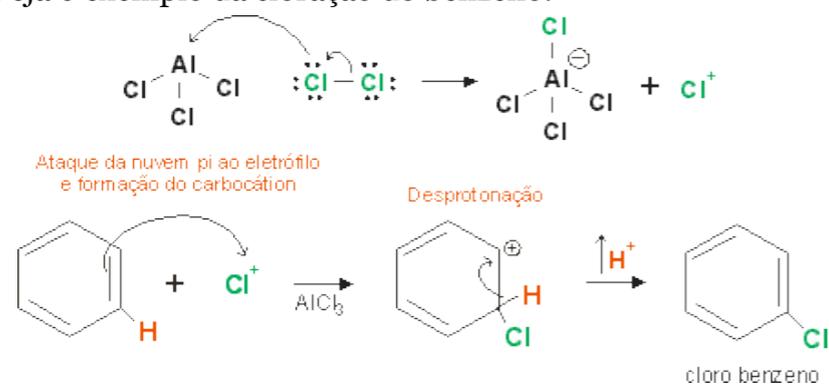
### Resumo:



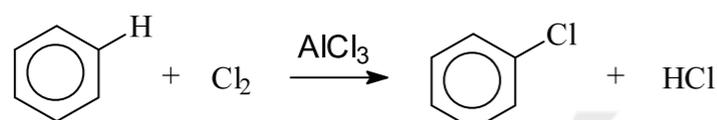
### 3- Halogenação

O benzeno e outros compostos aromáticos podem ser halogenados, em presença de AlCl<sub>3</sub> ou FeCl<sub>3</sub> (ácidos de Lewis). À primeira vista, acharíamos que a reação se iniciasse como na halogenação de um alceno ou de um cicloalcano: devido à alta reatividade da ligação pi, esta atacaria o halogênio simplesmente pela existência das cargas formais na molécula desse halogênio (dipolos induzidos). No entanto, como já vimos, os anéis aromáticos, por serem estruturas ressonantes, possuem menor reatividade que alcenos e ciclenos. Por isso é necessário "potencial-

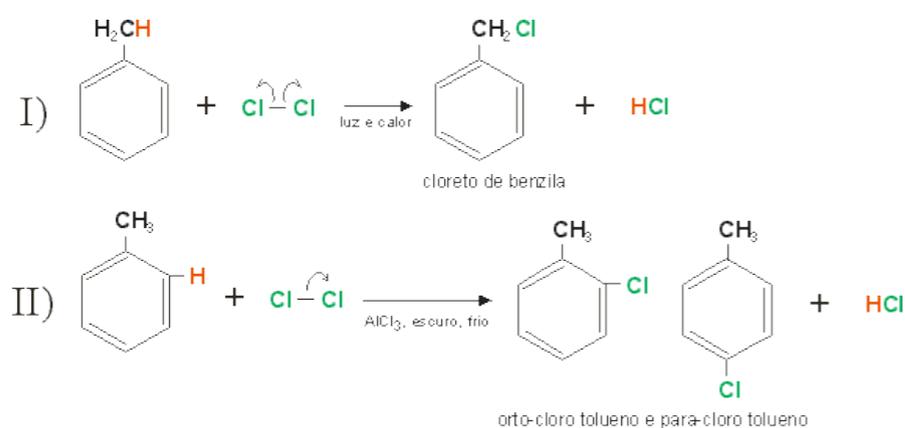
izar" essa carga formal do halogênio. Para isso, usa-se, por exemplo, o  $\text{AlCl}_3$ , que é um ácido de Lewis, e age recebendo um par de elétrons de um dos átomos do halogênio. Veja o exemplo da cloração do benzeno:



**Resumo:**



Quando halogenamos um anel aromático que possui um radical alquila (cadeia lateral), pode-se conseguir dois produtos diferentes, dependendo das condições em que a reação é realizada. Por exemplo, na cloração do tolueno, se a reação for efetuada em presença de um ácido de Lewis, no escuro e a frio, a substituição ocorrerá no anel. No entanto, se a reação for efetuada em temperaturas elevadas e em presença de luz, a substituição ocorrerá na cadeia lateral. O mecanismo nesse caso não é iônico, mas via radicais livres. Veja os exemplos abaixo:

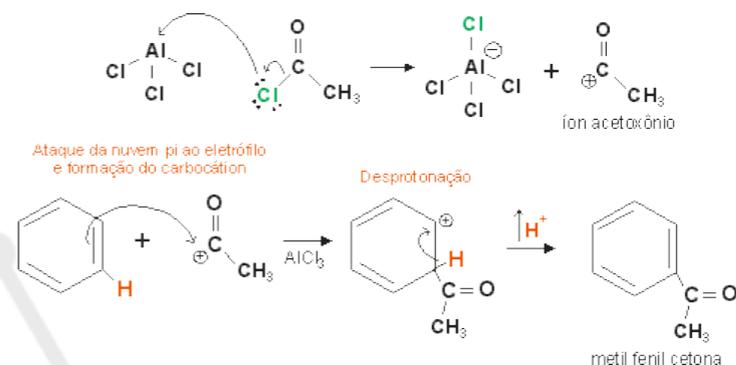


A reação I se inicia com a ruptura homolítica do halogênio. Logo, é uma reação via radicais livres, semelhante àquelas que ocorrem com os alcanos. Daí a preferência pela cadeia lateral (grupo alquila). Na prática, é necessário manter a luz, pois podem ocorrer associações entre os átomos de cloro, regenerando o  $\text{Cl}_2$ . A

reação II ocorre na presença de ácido de Lewis, que quebra heteroliticamente o halogênio, ou seja, formam-se íons. A reação é iônica e a orientação da entrada do eletrófilo será dada pelo grupo que estiver presente no anel.

#### 4- Acilação de Friedel-Crafts

Reagindo-se haletos de ácido com benzeno, em presença de  $\text{AlCl}_3$  ou  $\text{FeCl}_3$  (ácidos de Lewis), obtém-se cetonas. O eletrófilo é o íon acetoxônio. Veja o exemplo abaixo:

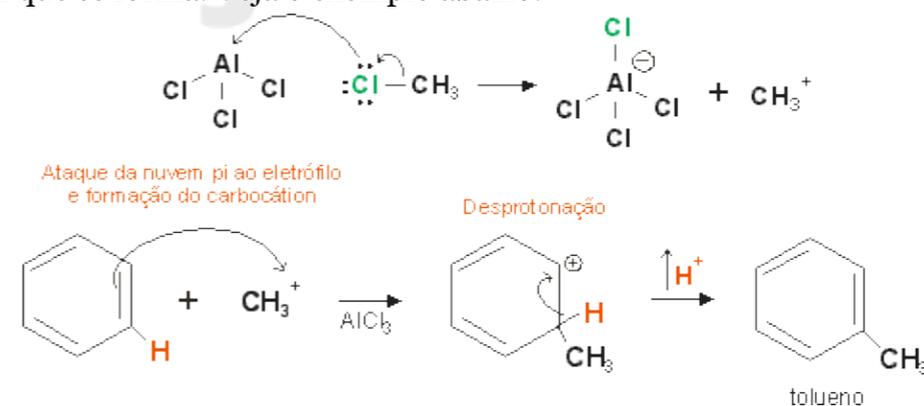


**Resumo:**

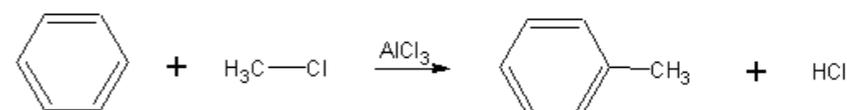


#### 5- Alquilação de Friedel-Crafts

Reagindo-se haletos de alquila com benzeno, em presença de  $\text{AlCl}_3$  ou  $\text{FeCl}_3$  (ácidos de Lewis), obtém-se outro hidrocarboneto aromático. O eletrófilo é o carbocátion que se forma. Veja o exemplo abaixo:



**Resumo:**



## Orientação da segunda substituição no benzeno

O benzeno pode sofrer mais de uma substituição. A primeira substituição ocorre normalmente, com a entrada do eletrófilo no lugar de qualquer um dos hidrogênios do anel, já que são equivalentes. No entanto, uma segunda substituição dependerá do radical já existente, que então irá orientar a entrada do próximo grupo no anel. Um segundo radical pode entrar em duas posições: meta ou orto/para, dependendo da natureza do radical existente no anel. A explicação para esse fato está relacionada com o maior ou menor número de estruturas de ressonância possíveis para determinada posição. Lembre-se de que, quanto maior o número de estruturas ressonantes, mais estável é a estrutura.

### Grupos ativadores – orto para dirigentes

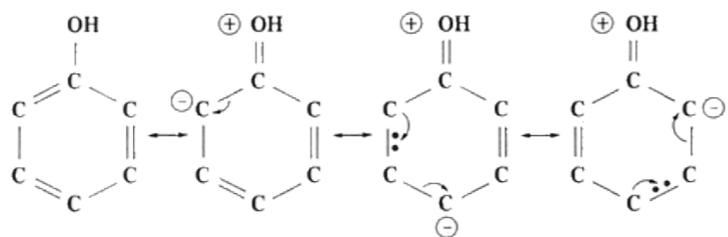
Empurram elétrons para o anel. Pode-se dividir os grupos ativadores em três subgrupos, de acordo com a reatividade que eles dão ao anel:

Fortemente ativadores:  $\text{NH}_2$ ,  $\text{NHR}$ ,  $\text{NR}_2$ ,  $\text{OH}$

Moderadamente ativadores:  $\text{OR}$ ,  $\text{NHCOR}$

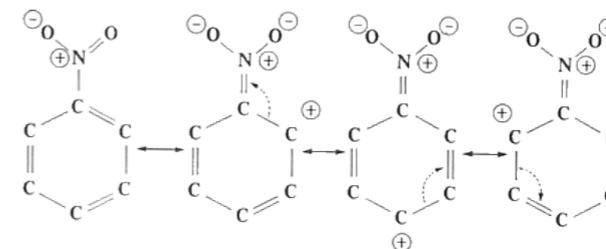
Fracamente ativadores: grupo fenilo, grupos alquilas e halogênios (os halogênios são desativantes fracos)

Esses grupos geralmente apresentam somente ligações simples. Veja no exemplo abaixo, as possíveis estruturas de ressonância para o hidróxi-benzeno (fenol):



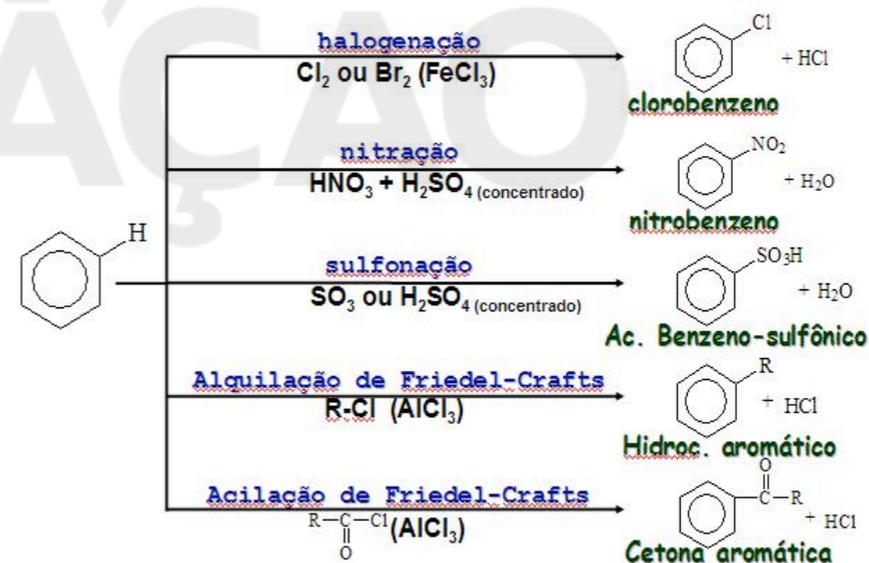
O núcleo benzeno é susceptível a ataques eletrofílicos, portanto, quanto maior a densidade eletrônica no átomo, mais facilmente ele será atacado pelo eletrófilo. Os carbonos que apresentam maior densidade eletrônica estão nas posições orto e para. Logo, a entrada de um eletrófilo se dará facilmente nestas posições. Ora, se o primeiro radical ( $\text{OH}$ ) aumenta a densidade eletrônica do anel, ele é um grupo ativador, e, portanto, aumenta a reatividade do composto.

**Grupos desativadores – meta dirigentes** = Atraem para si elétrons do anel. Ex:  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NH}_3^+$ ,  $\text{NR}_3^+$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{COOH}$ ,  $\text{COOR}$ ,  $\text{CHO}$ ,  $\text{COR}$ ,  $\text{CN}$ , etc. Estes grupos geralmente apresentam ligações duplas, triplas ou coordenadas. Os grupos desativadores orientam a segunda substituição preferencialmente na posição meta. Veja abaixo as possíveis estruturas de ressonância para o nitro-benzeno:



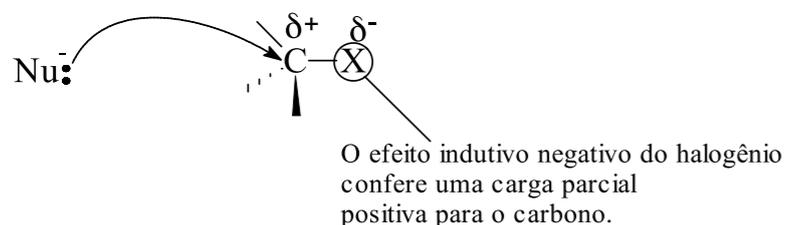
Veja que as posições orto e para possuem baixa densidade eletrônica, pois ficam constantemente destituídos de elétrons. Logo, o composto sofrerá facilmente ataques eletrofílicos na posição meta. Ora, se o primeiro radical ( $\text{NO}_2$ ) diminui a densidade eletrônica do anel, ele é um grupo desativador, e diminui a reatividade do composto.

### **Resumão :**

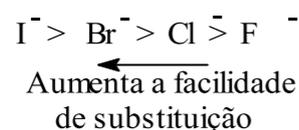


### Substituição em haletos

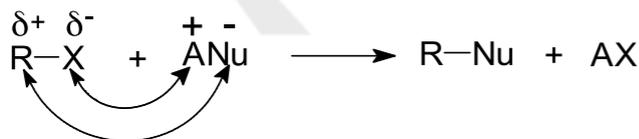
Os reagentes que promovem substituição em haletos orgânicos são os nucleófilos, devido ao efeito indutivo negativo causado pelos átomos de halogênio.



As reações de substituição em haleto de alquila são substituições nucleofílicas. O grupo que abandona o haleto de alquila é denominado grupo retirante.

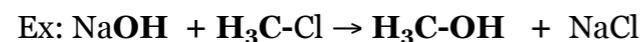


Através de uma substituição nucleofílica de um haleto de alquila podem-se gerar várias funções. Todas as substituições nucleofílicas seguem o seguinte esquema geral:

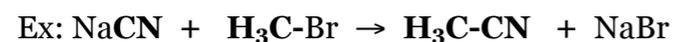


### Principais reações

1) Base forte + haleto → **álcool** + sal

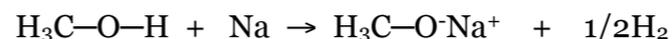


2) Sal de cianeto + haleto → **nitrila** + sal

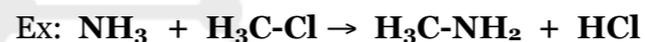


3) Alcóxido de sódio + haleto → **éter** + sal

O alcóxido de sódio é um sal de álcool, obtido pelo deslocamento do hidrogênio da hidroxila. O deslocamento é obtido utilizando-se metais muito reativos como sódio ou potássio.



4) Amônia + haleto → **amina primária** + hidrácido



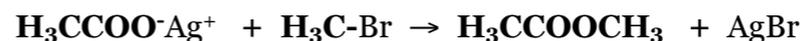
5) Composto de Grignard + haleto → **hidrocarboneto** + sal



6) Alquineto de sódio + haleto → **alcino** + sal



7) Carboxilato de prata + haleto → **éster** + sal de prata



### Mecanismos das substituições nucleofílicas

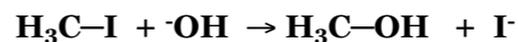
As substituições nucleofílicas podem ocorrer por dois mecanismos:

\* $\text{S}_\text{N}2$  (substituição nucleofílica bimolecular)

\* $\text{S}_\text{N}1$  (substituição nucleofílica unimolecular)

#### $\text{S}_\text{N}2$ (substituição nucleofílica bimolecular)

A substituição  $\text{S}_\text{N}2$  ocorre em uma única etapa:





Esse tipo de mecanismo só ocorre em **haletos primários, secundários e metílicos**.

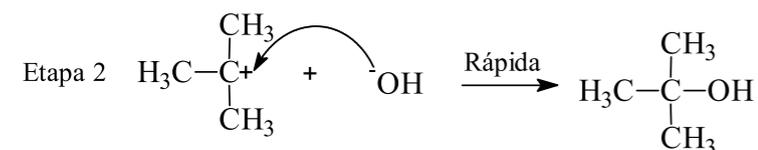
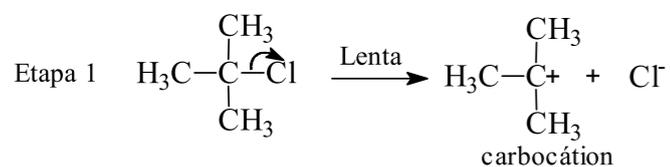
**Haleto de metila > haleto primário > haleto secundário (aumenta a velocidade da reação)**

Nesse tipo de mecanismo a velocidade da reação é proporcional a concentração do nucleófilo e do haleto

$$V = K [\text{haleto}] [\text{nucleófilo}]$$

### \*Sn<sub>1</sub> (substituição nucleofílica unimolecular)

A substituição **Sn<sub>1</sub>** ocorre em duas etapas:



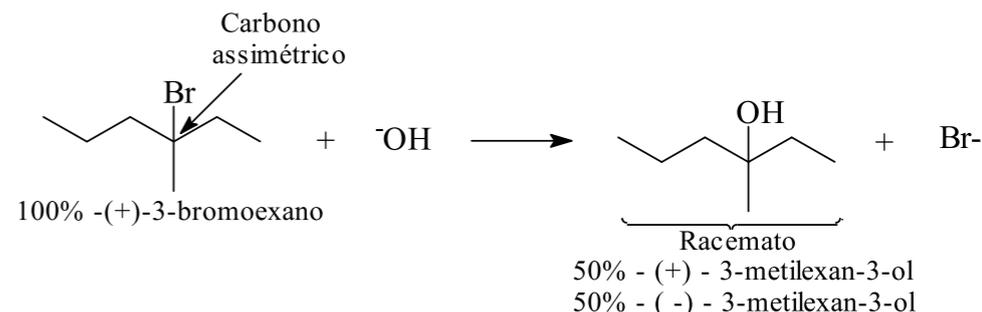
Esse tipo de mecanismo só ocorre em haletos terciários. Nesse mecanismo a velocidade da reação é proporcional somente a concentração do haleto de alquila.

$$V = K [\text{haleto}]$$

## A estereoquímica da substituição nucleofílica

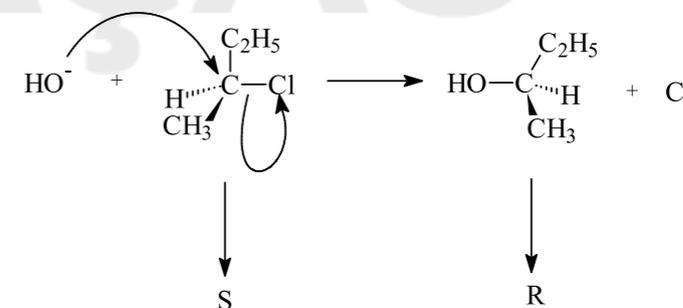
### Mecanismo Sn<sub>1</sub>

Se o átomo de carbono ligado ao grupo abandonador (halogênio) for **asimétrico (quiral)**, forma-se como produto da reação uma **mistura racêmica**.

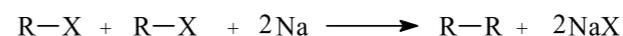


### Mecanismo Sn<sub>2</sub>

Quando o átomo de carbono ligado ao halogênio for **secundário é quiral**, ocorre a chamada **inversão de Walden** que inverte a configuração do carbono quiral de **R** para **S** ou **vice-versa**. Se o reagente de partida for um composto quiral e na forma pura, o produto também será quiral, mas com a configuração oposta. Por exemplo: a reação entre o **íon hidróxido (OH<sup>-</sup>)** e o **(S)-2-clorobutano** produz o composto **(R)-butan-2-ol**.



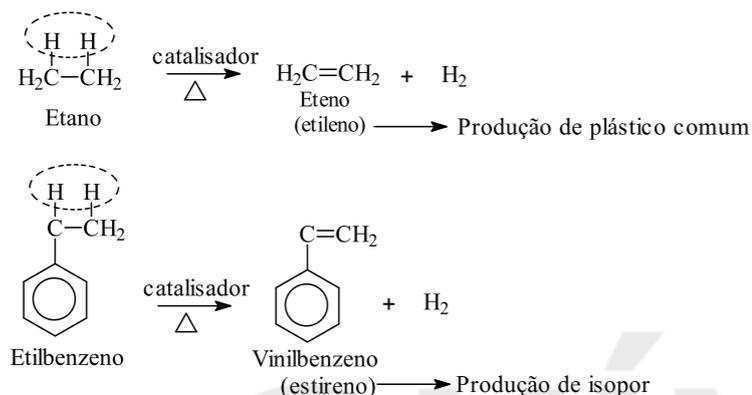
### Síntese de Wurtz



## Reações de eliminação

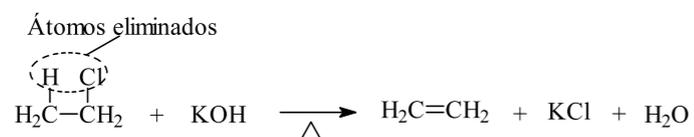
### 1) Desidrogenação

Reação química que envolve a eliminação de hidrogênio (H<sub>2</sub>). Os hidrogênios são eliminados de átomos de carbono vizinhos com o auxílio de catalisadores e aquecimento.

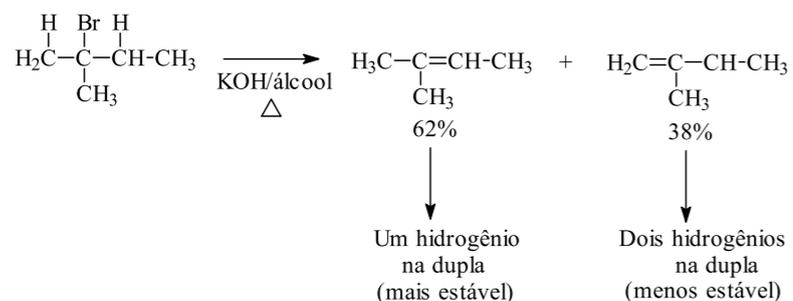


### 2) Haletos de alquila (desidralogenação)

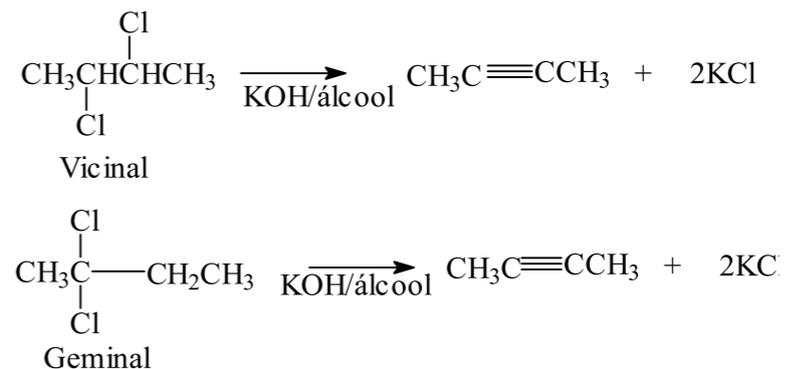
Os haletos de alquila originam alcenos quando são tratados com soluções **alcoólicas de bases fortes**.



A desidralogenação geralmente produz como produto principal o alceno mais substituído, ou seja, o que possui o menor número de hidrogênios na dupla (**regra de Zaitsev**).



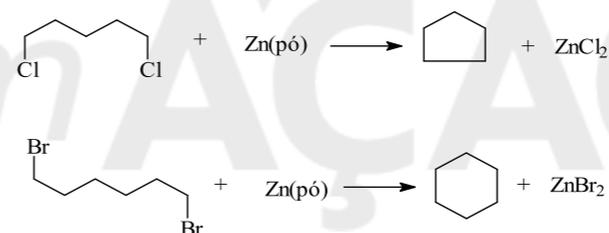
A desidralogenação de di-haletos vicinais ou geminais produz alcinos.



O tratamento de di-haletos vicinais com Zn em pó produz alcenos.



Os di-haletos que possuem os halogênios distantes um do outro na molécula, formam ciclos quando são tratados com zinco em pó. Devido à tensão angular os ciclos mais facilmente formados são os de cinco e seis carbonos.



### Mecanismos de eliminação em haletos de alquila

A eliminação em haletos pode ocorrer por dois mecanismos diferentes: E<sub>1</sub> ou E<sub>2</sub>.

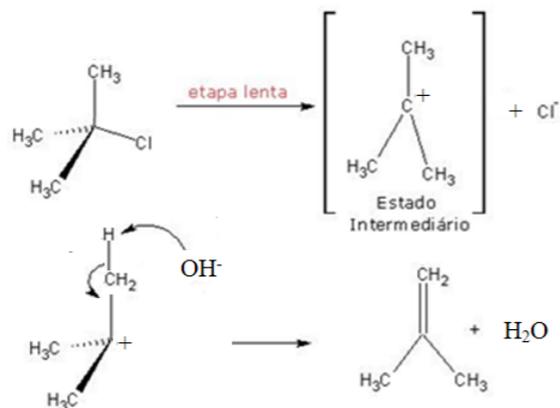
#### Mecanismo unimolecular – E<sub>1</sub>

Possui duas etapas principais

Ocorre preferencialmente em haletos terciários

Na etapa lenta ocorre a cisão heterolítica da ligação carbono halogênio formando um carbocátion

A lei cinética é determinada exclusivamente pela concentração do haleto:  $V = k \cdot [\text{haleto}]^1$



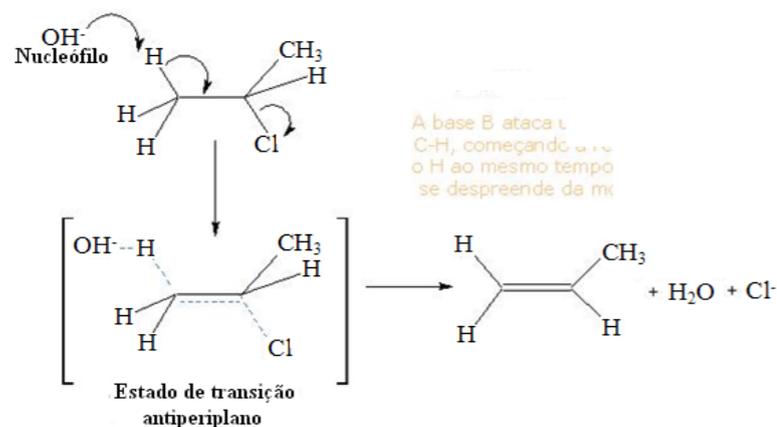
### Mecanismo bimolecular – E2

Possui uma única etapa

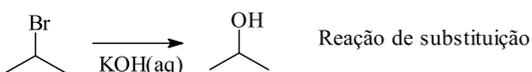
Ocorre preferencialmente em haletos secundários, primários

No estado de transição o nucleófilo e o halogênio estão no mesmo plano, mas, em lados opostos da molécula (antiperiplano)

A lei cinética é determinada pela concentração do haleto e do nucleófilo (base forte):  $V = k \cdot [\text{haleto}]^1 \cdot [\text{nucleófilo}]^1$



### Obs:Cuidado!!

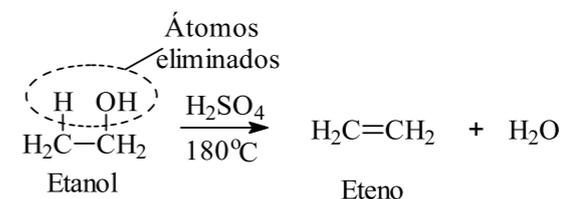


### 3) Desidratação de álcoois

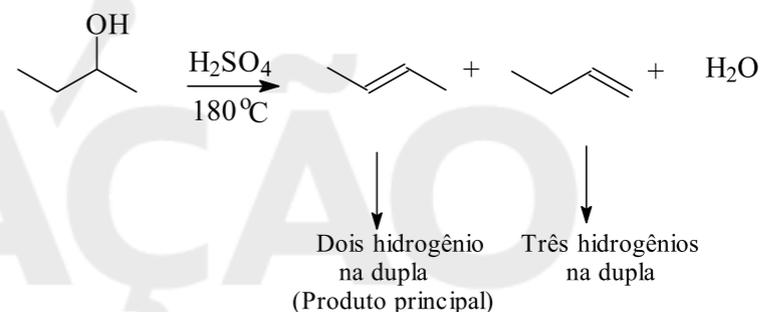
A reação de desidratação de um álcool pode ser *intermolecular* ou *intramolecular*.

#### Desidratação intramolecular de álcoois

Na desidratação intramolecular ocorre à liberação de uma molécula de água é a formação de um alceno.

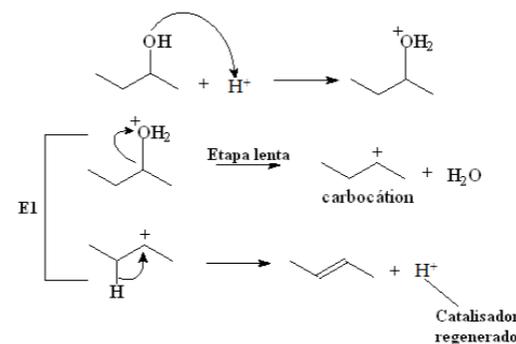


“O produto principal da desidratação intramolecular de um álcool segue a regra de Zaitsev”

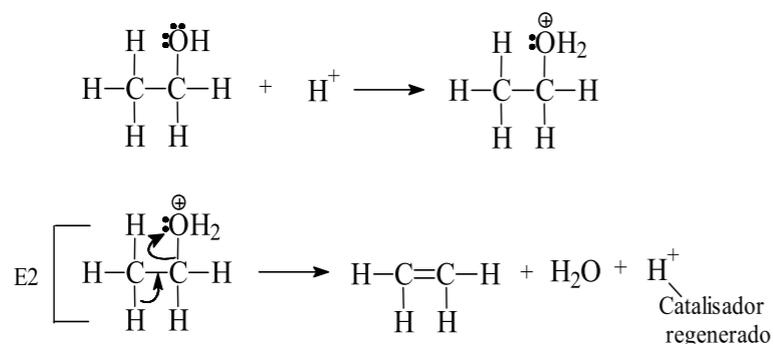


#### Mecanismo da desidratação intramolecular

A desidratação intramolecular de álcoois secundários e terciários é uma reação de eliminação unimolecular (E1).



Os álcoois primários sofrem desidratação intramolecular por eliminação bimolecular (E2), pois, não é viável a formação de um carbocátion primário como intermediário da reação.



Obs:

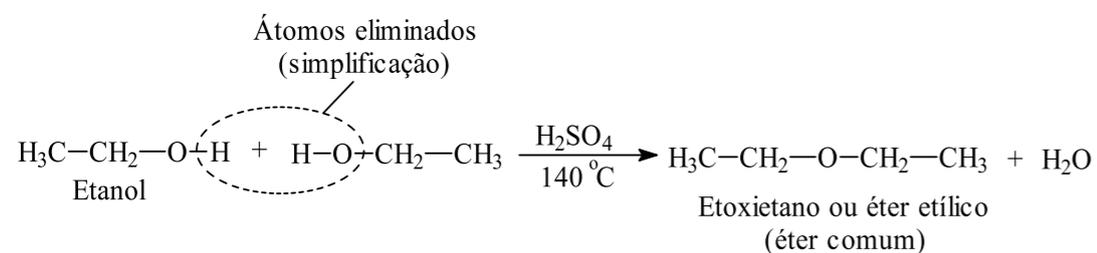
- A facilidade de sofrer **desidratação intramolecular** dos álcoois varia de acordo com a sua classificação.

**álcool terciário > álcool secundário > álcool primário**

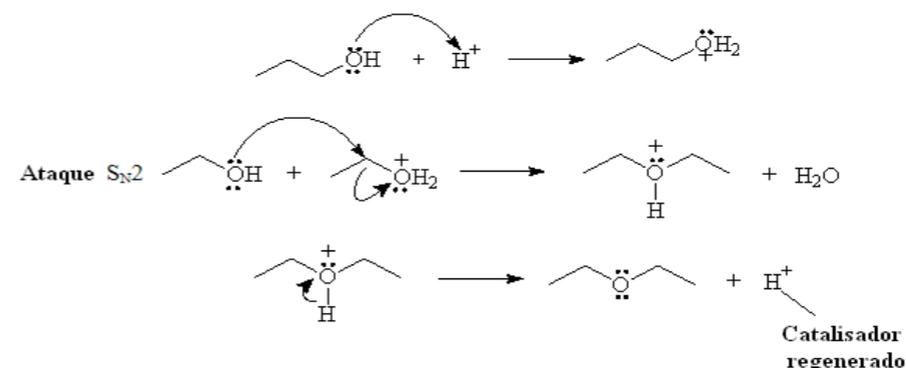
O que justifica essa ordem é a estabilidade do carbocátion formado na segunda etapa do mecanismo. O carbocátion terciário é o mais estável portanto o álcool terciário é o que sofre desidratação mais facilmente.

### Desidratação intermolecular de álcoois

Na desidratação intramolecular ocorre à liberação de uma molécula de água entre duas moléculas do álcool originando um éter. Esse tipo de desidratação utiliza meio ácido como catalisador da reação.

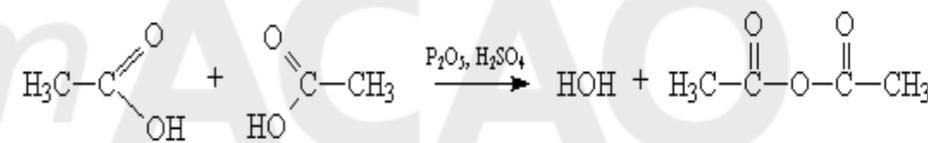


### Mecanismo da desidratação intermolecular



O fator que determina qual será o tipo de desidratação que o álcool irá sofrer é a **temperatura**. Em baixa temperatura é favorecida a **desidratação intermolecular** cujo mecanismo não envolve a formação de **carbocátion**. Temperatura alta favorece a **desidratação intramolecular**. A alta temperatura nessa desidratação é necessária pra fornecer energia suficiente para a formação do carbocátion.

### 4) Desidratação de ácidos carboxílicos:



### Reações de oxidação

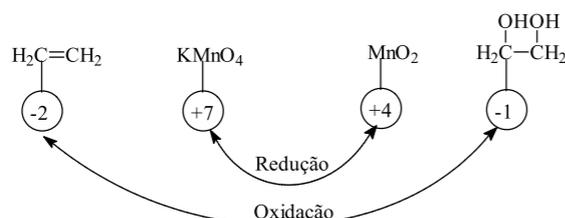
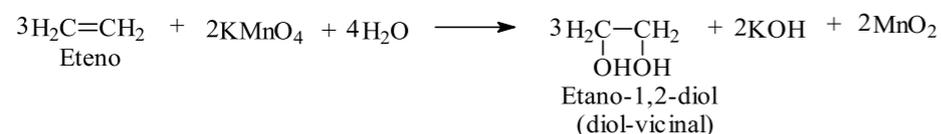
#### Oxidação de alcenos

Os alcenos podem ser oxidados com permanganato de potássio em solução aquosa de duas maneiras: **brandamente ou energicamente**. As reações de oxidação e redução geralmente **não apresentam** um mecanismo **bem explicado**. Por isso, não devemos nos preocupar muito com os detalhes destes processos.

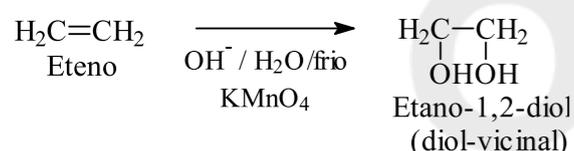
#### Oxidação branda (reação de Baeyer)

O permanganato em meio neutro ou levemente alcalino é oxidante brando, pois não chega a romper a dupla ligação, mas reage introduzindo oxigênios na cadeia. O

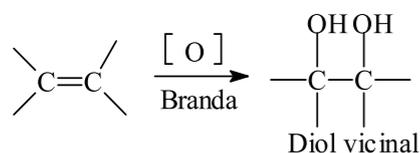
permanganato de potássio forma uma solução de coloração violeta intensa. Quando o manganês é reduzido ocorre a precipitação de um óxido marrom escuro ( $\text{MnO}_2$ ). O resultado da oxidação branda de um alceno com  $\text{KMnO}_4$  é um **diálcool vicinal (glicol)**. Como exemplo, vejamos a oxidação do eteno:



Portanto, a reação representada anteriormente pode ser representada simplificada por:



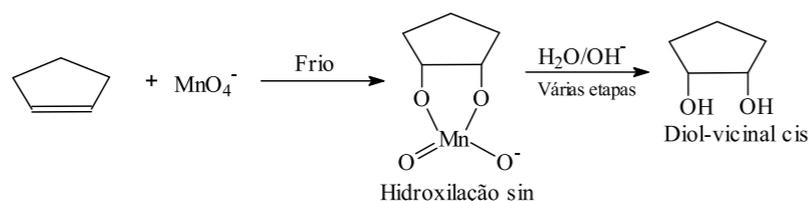
Generalizando:



### Observação:

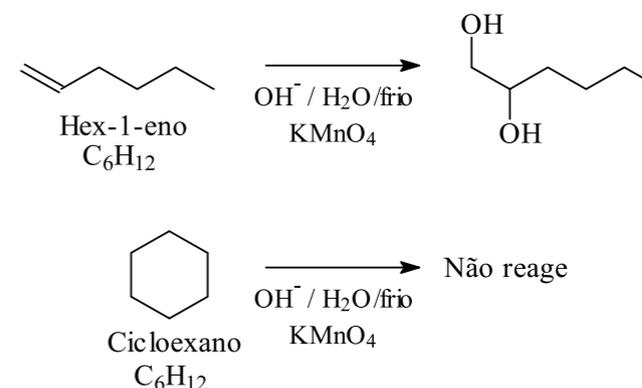
A oxidação é representada pelo símbolo [O] que representa o oxigênio atômico ou nascente que é liberado pelo agente oxidante no meio reacional.

A oxidação branda em **ciclenos** sempre dá origem a dióis cis. As hidroxilas são adicionadas no mesmo lado (face) da dupla ligação (adição sin).



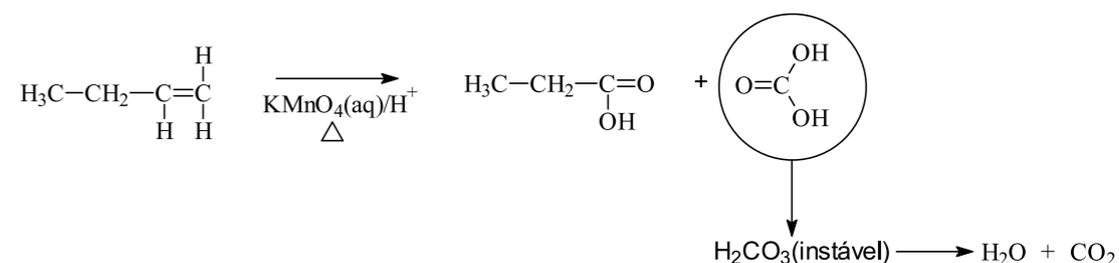
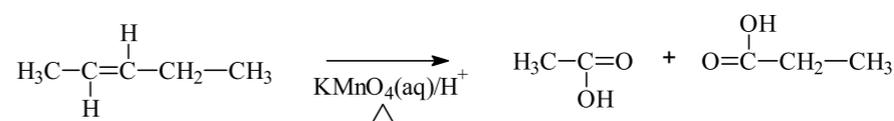
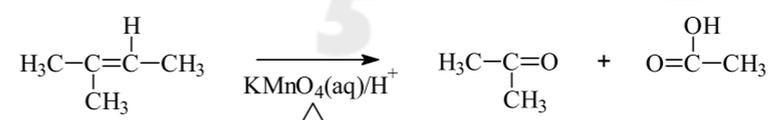
### Teste de Baeyer

Utilizando-se o teste de Baeyer podemos diferenciar facilmente isômeros constitucionais como, por exemplo, o hex-1-eno (descora a cor violeta) do ciclohexano (não descora).



### Oxidação energética ou clivagem oxidativa

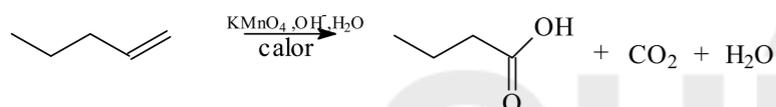
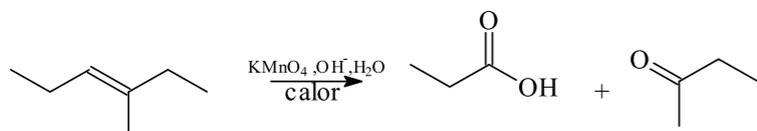
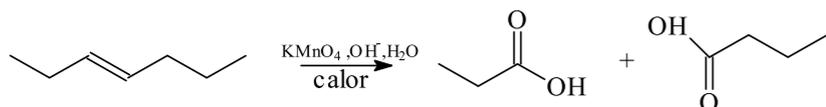
Em meio ácido o permanganato é oxidante bastante energético e leva à ruptura da dupla ligação, quebrando o alceno em moléculas menores. Os produtos formados na reação dependem do tipo de carbono da dupla ligação. Carbonos com **dois hidrogênios** originam  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ; carbonos com **um hidrogênio**, ácidos carboxílicos, e carbonos **sem hidrogênios**, cetonas. Vejamos o primeiro exemplo - a oxidação do but-2-eno:



### Generalizando:

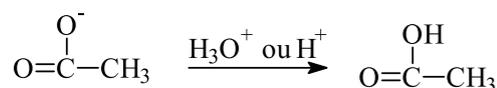
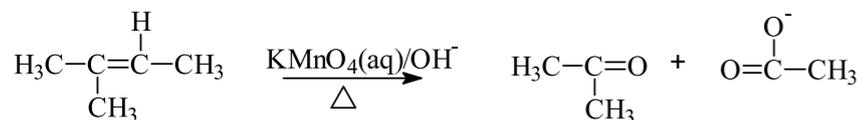
- **Carbono insaturado com dois hidrogênios** →  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$
- **Carbono insaturado com um hidrogênio** → **ácido carboxílico**
- **Carbono insaturado com nenhum hidrogênio** → **cetona**

### Exemplos



### Observação:

A formação dos ácidos carboxílicos na oxidação enérgica ocorre em duas etapas. A oxidação enérgica primeiro produz sais de ácidos carboxílicos que, posteriormente, são convertidos em ácidos carboxílicos pela acidificação do meio.

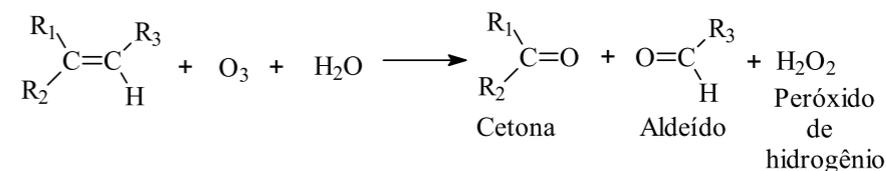
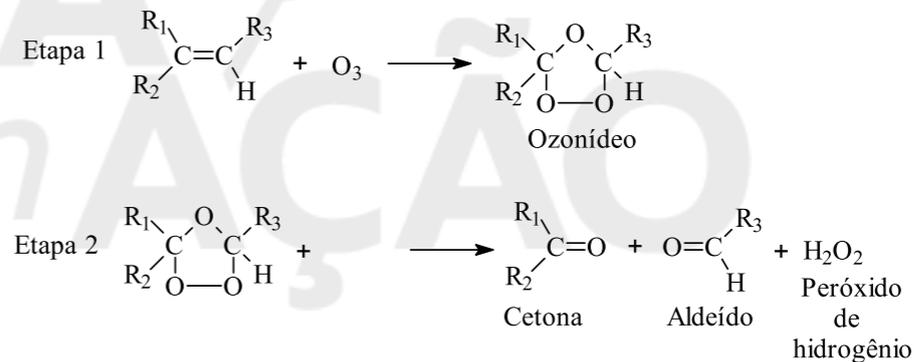
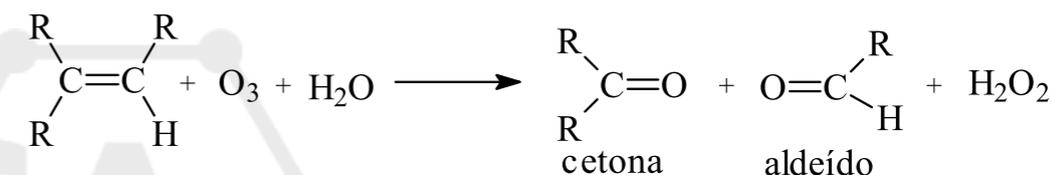


No entanto, é comum a representação simplificada da reação mostrando somente o ácido carboxílico que é o produto final da reação.

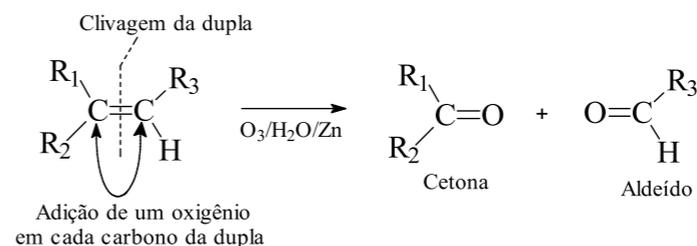
### Ozonólise

Os alcenos, reagindo com o ozônio em meio aquoso, produzem **aldeídos e/ou cetonas**. Trata-se de uma reação que destrói completamente a dupla ligação,

quebrando a molécula do alceno em moléculas menores. O ozônio é um oxidante bastante enérgico e entra em reação de adição com o alceno, formando o **ozonídeo** ou **ozoneto**, um produto intermediário instável, que se decompõe nos produtos finais, por hidrólise. Na prática o ozônio é borbulhado numa solução do alceno em um solvente inerte, como o tetracloreto de carbono. Por evaporação do solvente, obtém-se o **ozonídeo**, que tem a forma de um óleo viscoso. Por ser muito instável e explosivo esse intermediário, normalmente não é isolado, mas sim reduzido diretamente por tratamento com um agente redutor. A função desse agente redutor, geralmente a **limalha de zinco**, consiste em impedir a formação do peróxido de hidrogênio, que pode oxidar o aldeído formado. O zinco captura um oxigênio, formando o óxido de zinco (ZnO). Veja o exemplo da ozonólise do metil propeno:



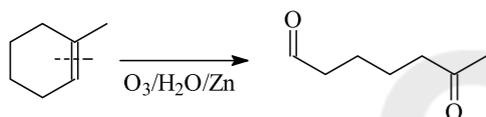
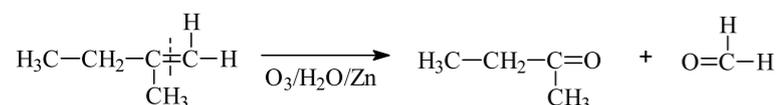
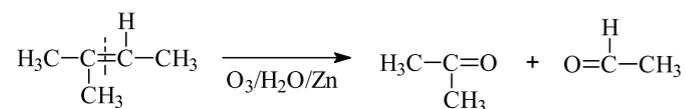
### Simplificadamente:



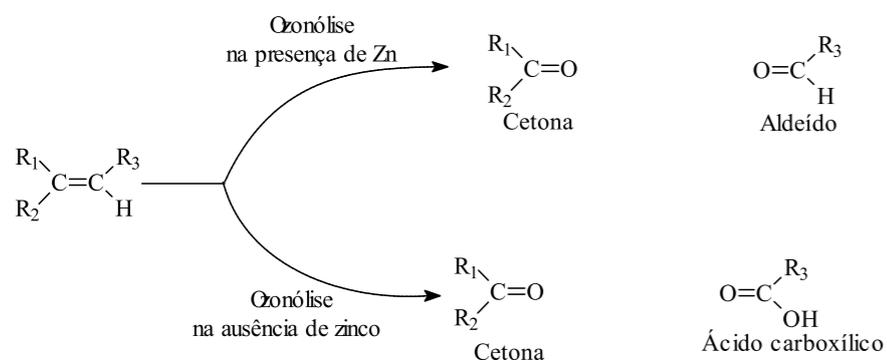
### Generalizando:

- **Carbono insaturado com dois hidrogênios → aldeído**
- **Carbono insaturado com um hidrogênio → aldeído**
- **Carbono insaturado com nenhum hidrogênio → cetona**

### Exemplos



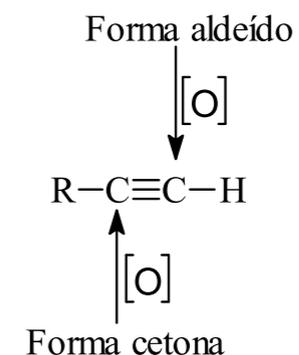
O esquema a seguir resume a ozonólise:



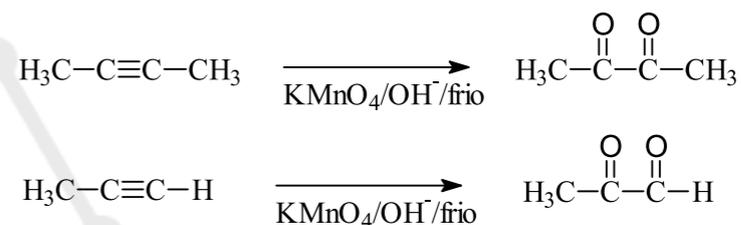
### Oxidações dos alcinos

As triplas ligações dos alcinos também podem ser oxidadas pelo permanganato de potássio ( $\text{KMnO}_4$ ) ou pelo ozônio ( $\text{O}_3$ ). No entanto, a maioria dos exames de vestibulares preferem abordar em suas questões as oxidações de alcenos ao invés de alcinos.

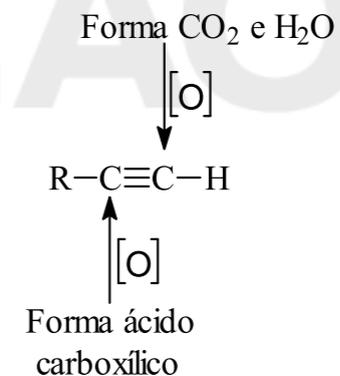
### Oxidação branda



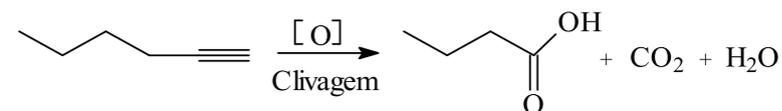
### Exemplos:



### Clivagem oxidativa



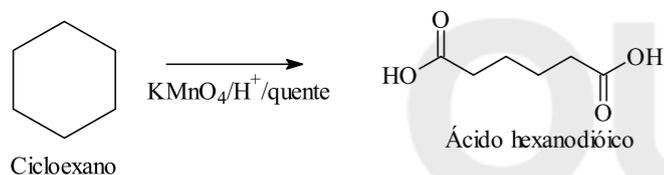
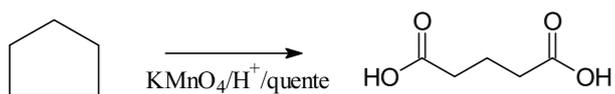
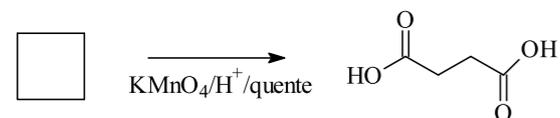
### Exemplos:



## Oxidação de ciclanos

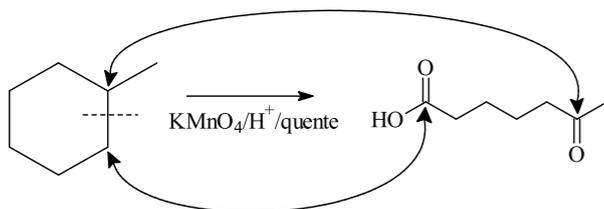
Os ciclanos oxidam quando são tratados com  $\text{KMnO}_4$  concentrado a quente em meio ácido, ou seja, oxidação enérgica. A oxidação rompe uma ligação sigma do anel formando um produto de cadeia aberta. Nos ciclanos de cadeias normais as ligações sigmas são equivalentes, não importando, assim, qual ligação sigma será rompida. Os produtos formados são diácidos carboxílicos.

### Exemplos:



Nos ciclanos ramificados a ligação sigma se rompe em torno do carbono que suporta a ramificação. Isso ocorre por que os intermediários reacionais formados por carbonos terciários são mais estáveis, devido ao efeito indutivo positivo dos grupos alquilas. Esses carbonos são convertidos para cetonas durante a oxidação.

### Exemplos:



### Generalizando

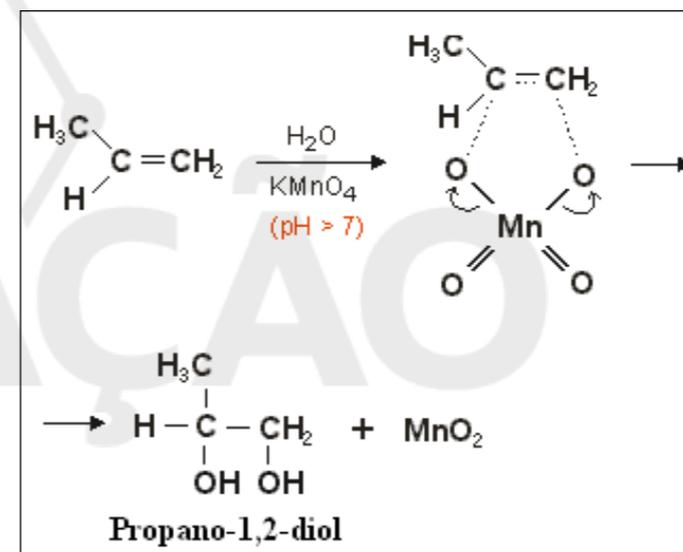
- **Carbono com dois hidrogênios**  $\rightarrow$  **ácido carboxílico**
- **Carbono com um hidrogênio**  $\rightarrow$  **cetona**

## Oxidação de alcenos

Os alcenos podem ser oxidados com permanganato de potássio em solução aquosa de duas maneiras: **brandamente ou energicamente**. As reações de oxidação e redução geralmente **não apresentam** um mecanismo **bem explicado**. Por isso não devemos nos preocupar muito com os detalhes destes processos.

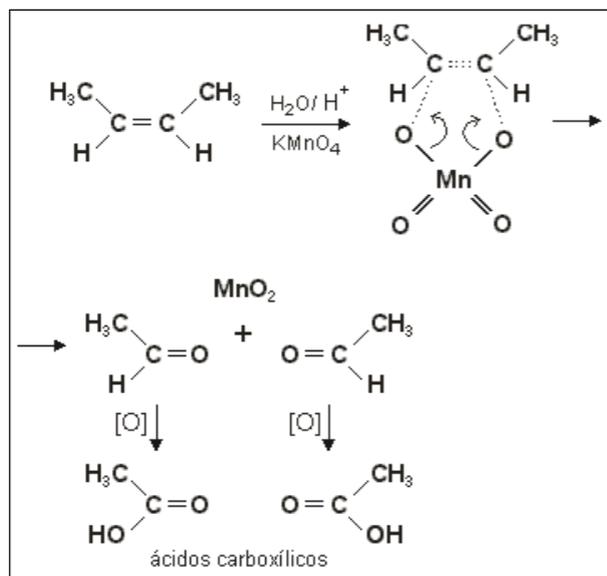
### Oxidação branda (reação de Baeyer)

O permanganato em meio neutro ou levemente alcalino é oxidante brando, pois não chega a romper a dupla ligação, mas reage introduzindo oxigênios na cadeia. O permanganato de potássio forma uma solução de coloração violeta intensa. Quando o manganês é reduzido ocorre a precipitação de um óxido marrom escuro ( $\text{MnO}_2$ ). O resultado da oxidação branda de um alceno com  $\text{KMnO}_4$  é um **diálcool vicinal (glicol)**. Como exemplo, vejamos a oxidação do propeno:



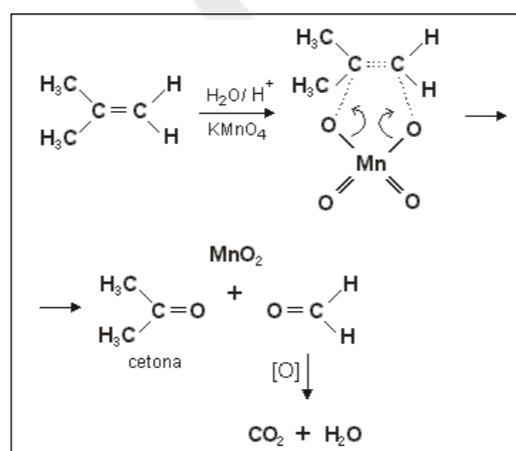
### Oxidação enérgica ou clivagem oxidativa

Em meio ácido o permanganato é oxidante bastante enérgico e leva à ruptura da dupla ligação, quebrando o alceno em moléculas menores. Os produtos formados na reação dependem do tipo de carbono da dupla ligação. Carbonos com **dois hidrogênios** originam  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ; carbonos com **um hidrogênio**, ácidos carboxílicos, e carbonos **sem hidrogênios**, cetonas. Vejamos o primeiro exemplo - a oxidação do but-2-eno:



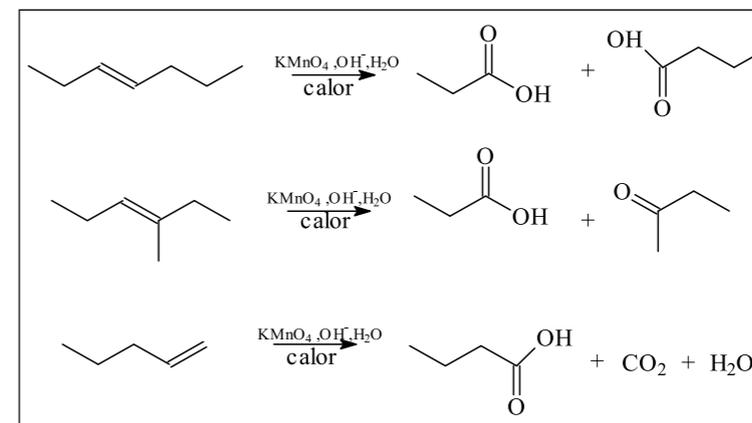
Perceba que os carbonos da dupla na molécula inicial possuíam dois hidrogênios cada um; daí a formação de **ácidos carboxílicos**.

O segundo exemplo é a oxidação do metilpropeno. Um dos carbonos da dupla não possui hidrogênios e o outro possui dois hidrogênios, formando-se respectivamente uma **cetona e CO<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>O**:



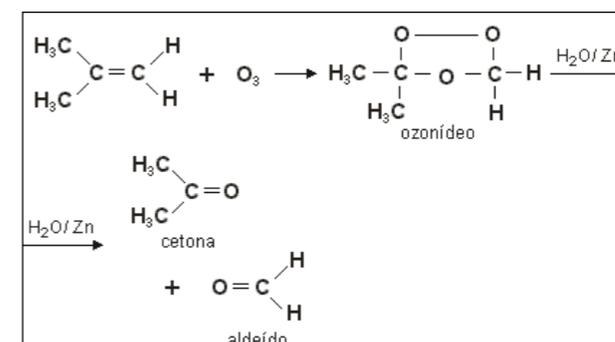
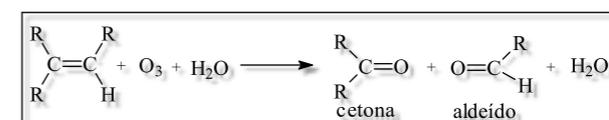
Generalizando:

- **Carbono insaturado com dois hidrogênios** → CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O
- **Carbono insaturado com um hidrogênio** → ácido carboxílico
- **Carbono insaturado com nenhum hidrogênio** → cetona



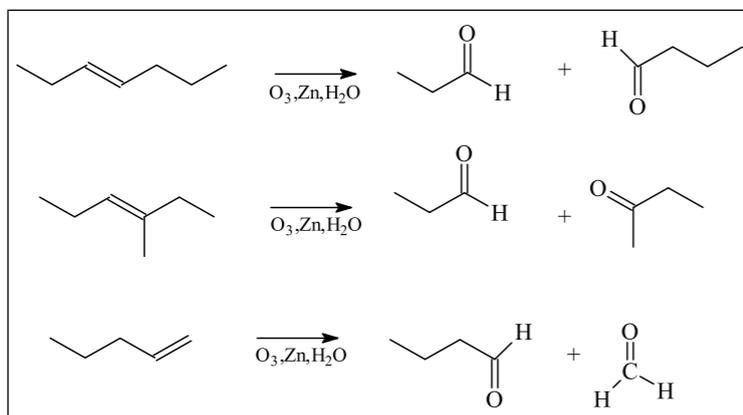
### Ozonólise

Os alcenos, reagindo com o ozônio em meio aquoso, produzem **aldeídos e/ou cetonas**. Trata-se de uma reação que destrói completamente a dupla ligação, quebrando a molécula do alceno em moléculas menores. O ozônio é um oxidante bastante energético e entra em reação de adição com o alceno, formando o **ozonídeo ou ozoneto**, um produto intermediário instável, que se decompõe nos produtos finais, por hidrólise. Na prática o ozônio é borbulhado numa solução do alceno em um solvente inerte, como o tetracloreto de carbono. Por evaporação do solvente, obtém-se o **ozonídeo**, que tem a forma de um óleo viscoso. Por ser muito instável e explosivo esse intermediário normalmente não é isolado, mas sim reduzido diretamente por tratamento com um agente redutor. A função desse agente redutor, geralmente a **limalha de zinco**, consiste em impedir a formação do peróxido de hidrogênio, que pode oxidar o aldeído formado. O zinco captura um oxigênio, formando o óxido de zinco (ZnO). Veja o exemplo da ozonólise do metilpropeno:



Generalizando:

- **Carbono insaturado com dois hidrogênios** → **aldeído**
- **Carbono insaturado com um hidrogênio** → **aldeído**
- **Carbono insaturado com nenhum hidrogênio** → **cetona**



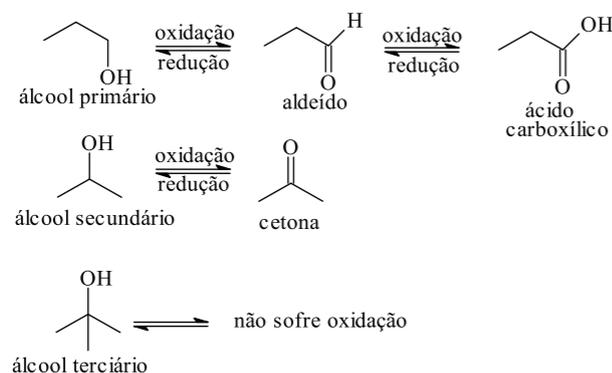
Obs: O tratamento de **alcinos** com permanganato de potássio ou com ozônio em meio básico leva à clivagem na ligação tripla carbono-carbono. **Os produtos são ácidos carboxílicos ou CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O.**

- **Carbono insaturado com um hidrogênio** → **CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O**
- **Carbono insaturado com nenhum hidrogênio** → **ácido carboxílico**

### Oxidação de álcoois

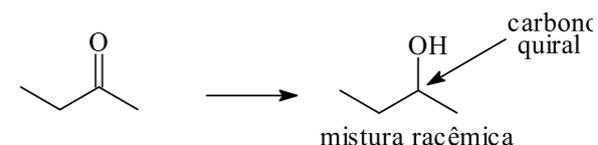
Os álcoois podem ser oxidados na presença de um agente oxidante. Em laboratório os agentes oxidantes mais utilizados são o KMnO<sub>4</sub> ou K<sub>2</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (concentrados em meio ácido a quente), ou mesmo o oxigênio, com o auxílio de um catalisador adequado. O produto da oxidação depende da classificação do álcool.

Esquema geral:



Obs:

- Os agentes redutores mais usados são: Ni/H<sub>2</sub>; NaBH<sub>4</sub> (boroidreto de sódio); LiAlH<sub>4</sub> (hidreto de lítio e alumínio).
- **A redução de uma cetona** formando um álcool com **carbono quiral** (assimétrico) produz sempre uma mistura racêmica.

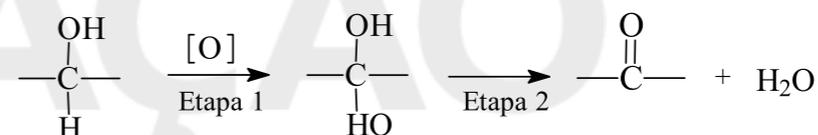


### Mecanismo da oxidação

De modo simplificado podemos prever os produtos da oxidação seguindo o seguinte raciocínio:

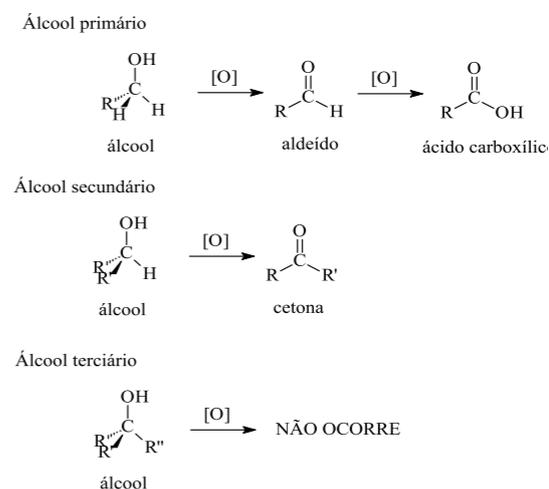
**Etapa 1** => O agente oxidante converte um dos hidrogênios do carbono da hidroxila em outra hidroxila, formando um diol-geminal.

**Etapa 2** => Dióis-geminais são muito instáveis, por isso, a busca de estabilidade faz com que o diol-geminal perca uma molécula de água produzindo uma carbonila.



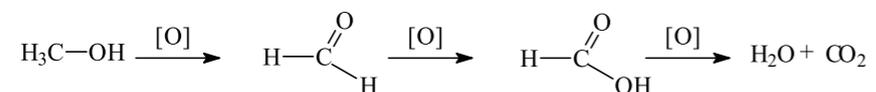
Obs:

O número de hidrogênios no carbono da hidroxila e que determina quantas oxidações podem ocorrer.



Esse não é o real mecanismo das reações de oxidação de álcoois, o mecanismo correto possui muitas etapas complicadas que não precisamos detalhar em um ensino médio.

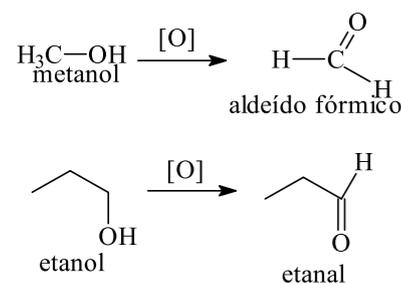
O metanol por possuir três hidrogênios ligados ao carbono da hidroxila pode sofrer três oxidações consecutivas.



## Oxidações importantes

### 1) Oxidação de álcoois no corpo

A oxidação de álcoois em nosso organismo ocorre no fígado na presença de enzimas. A oxidação do metanol forma metanal (aldeído fórmico) extremamente tóxico que pode causar a morte ou cegueira. Já o etanol, álcool das bebidas alcoólicas, produz etanal (aldeído acético) quando sofre oxidação. O etanal é o responsável pelos sintomas da “ressaca”.



### 2) Oxidação de etanol em um bafômetro

O teste do bafômetro é baseado na oxidação do etanol com dicromato de potássio em meio ácido. A mudança de cor que ocorre durante a reação indica a presença de **etanol no ar expirado**.



$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  = alaranjado

$\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$  = verde

### 3) Vinho virando vinagre

Na presença de oxigênio os microrganismos presentes no vinho transformam o **etanol** em **ácido acético (etanóico)**. Nas bebidas destiladas não ocorre essa reação devido à ausência de microrganismos.