

Avaliação 2 – Sobre sistemas moleculares, poliatômicos, propriedades periódicas e materiais sólidos

1) Defina energia de ionização (I) e afinidade eletrônica (A) e comente qualitativamente sobre a influência da carga nuclear efetiva (Z_{eff}) em ambas propriedades dos elementos químicos. Como é medido o potencial de ionização de um elemento?

A energia de ionização é dada pela energia, que pode ser medido em V (volt), eV (eletrovolt) e kJmol^{-1} (quilo joule por mol), necessária para tirar um elétron da camada de valência.

A afinidade eletrônica é a tendência que um átomo tem de aceitar um elétron.

A influência é que quanto maior a carga nuclear efetiva, maior é a afinidade eletrônica e maior é a energia de ionização.

Para medir a energia de ionização, vaporiza-se o elemento e aplica-se um potencial. Quando o elemento é ionizado, observa-se uma oscilação na corrente elétrica. Isso acontece ao atingir a energia de ionização suficiente para se retirar um elétron do átomo.

2) Descreva as principais características e propriedades de metais, metaloides e não metais. Comente sobre as relações entre I , A , Z_{eff} e as propriedades dos mesmos.

Metais possuem um lustro brilhoso característico, conduzem eletricidade e calor, são maleáveis (podem ser transformados em folhas finas) e dúcteis (podem ser transformados em fios). Geralmente são sólidos em temperatura ambiente, a exceção é o mercúrio (cujo ponto de fusão é -39°C), que é um líquido. Há dois metais que fundem-se a uma temperatura um pouco acima da ambiente, o cézio a $28,4^{\circ}\text{C}$ e o gálio a $29,8^{\circ}\text{C}$. Tendem a formar cátions em soluções aquosas.

Metaloides possuem propriedades intermediárias entre a dos metais e as dos não-metais.

Não-metais variam muito em aparência, não são brilhantes e, geralmente, não são bons condutores de calor e eletricidade. O ponto fusão geralmente é baixo, (apesar de o diamante fundir-se a 3750°C). Há sete não-metais que existem naturalmente, sendo cinco deles gases (H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Cl_2), um líquido (Br_2) e um sólido volátil (I_2). Tendem a formar ânions em soluções aquosas.

Com relação a energia de ionização, os metais tendem a ter baixas energias de ionização e com isso tendem facilmente a formar íons positivos. Por isso, perdem elétrons quando sofrem alguma reação química. Em consequência disso, os não-metais possuem altas energias de ionização, ou seja, tendem a "segurar" os elétrons.

Com relação a carga nuclear efetiva, os metais, devido ao seu maior raio atômico, possuem uma menor carga nuclear efetiva que os não-metais, ou seja, a tendência de "segurar" um elétron é menor nos metais do que nos não-metais.

Com relação a afinidade eletrônica, os metais possuem menor afinidade eletrônica, ou seja, a tendência de ganhar elétrons é menor do que nos não-metais.

3) Defina eletronegatividade (uma propriedade de átomos em sistemas moleculares). Usando uma tabela de eletronegatividade de Pauling, organize, em ordem decrescente, os elementos segundo sua tendência de atrair elétrons em uma ligação química.

A eletronegatividade é a habilidade de um átomo de atrair elétrons para si em certa molécula. A eletronegatividade de um átomo em uma molécula está relacionada a sua energia de ionização e a sua afinidade eletrônica.

Em ordem decrescente, do elemento com a maior eletronegatividade para o elemento com a menor eletronegatividade: F, O, Cl, N, Kr, Br, I, Xe, S, C, Se, Au, W, Pb, Rh, Pt, H, Pd, Ir, Ru, Os, At, P, As, Mo, Te, Sb, B, Bi, Ge, Hg, Po, Sn, Ag, Ni, Si, Cu, Tc, Re, Co, Fe, Ga, In, Cd, Cr, Zn, V, Tl, Al, Nb, Be, Mn, Ti, Ta, Pa, U, Sc, Np, Zr, Mg, Hf, Th, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Pu, Lu, Tm, Er, Ho, Y, Dy, Gd, Sm, Nd, Pr, Ce, La, Ac, Ca, Li, Sr, Na, Ra, Ba, K, Rb e Cs. Os elementos He, Ne, Ar, Pm, Eu, Tb, Yb, Rn e Fr são gases nobres, sendo estes estáveis.

4) Quais são os principais tipos de ligações químicas (em sistemas poliatômicos) e suas principais características microscópicas e macroscópicas? Construa representações químicas, desenhos, para cada tipo de sistema (metálico, iônico e covalente/molecular).

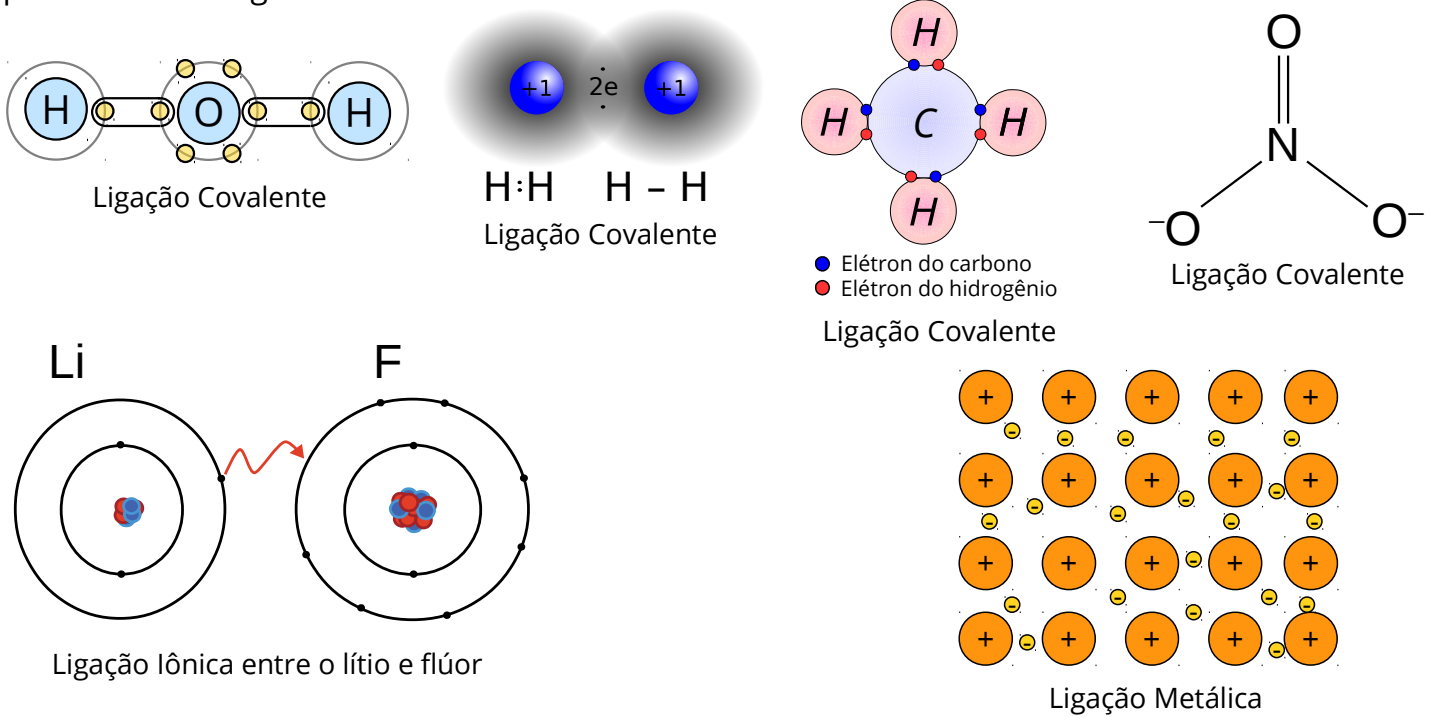
Existem três tipos gerais de ligações químicas:

Ligação iônica refere-se às forças eletrostáticas que existem entre íons de cargas de sinais contrários. Os íons devem ser formados pela transferência de um ou mais elétrons de um átomo para outro. As ligações iônicas, geralmente, são resultado da interação de metais com não-metais. Em nível microscópico, um cátion atrai vários ânions e um ânion atrai vários cátions, formando assim aglomerados com formas geométricas bem definidas. Macroscopicamente, são sólidos em condições normais de temperatura (25°C) e pressão (1 atm). Possuem pontos de fusão e de ebulição elevados. Em solução aquosa (dissolvida em água) ou em líquidos, eles conduzem corrente elétrica, pois seus íons com cargas positivas e negativas ficam com liberdade de movimento e fecham o circuito elétrico, permitindo que a corrente continue fluindo. Seu melhor solvente é a água, pois, assim como ela, estes compostos são polares. No entanto, apesar de serem polares nem todos os compostos iônicos se dissolvem na água.

Ligação covalente resulta do compartilhamento de elétrons entre dois átomos. Ocorre, geralmente, nas interações entre não-metais. Microscopicamente, pelo fato de apresentarem baixa atração entre suas moléculas, a energia necessária para separá-las e fazê-las mudar de estado de agregação é pequena, por isso seus pontos de ebulição e de fusão são inferiores aos das substâncias iônicas. Esse fato também varia proporcionalmente com a massa molar e as forças de intermoleculares dos compostos, ou seja, com o aumento da massa molar e da intensidade das forças intermoleculares, os pontos de fusão e de ebulição aumentam e vice-versa. Macroscopicamente, são sólidos quebradiços. Na sua forma pura, a maioria das substâncias covalentes não conduz corrente elétrica, isto é, comporta-se como isolante.

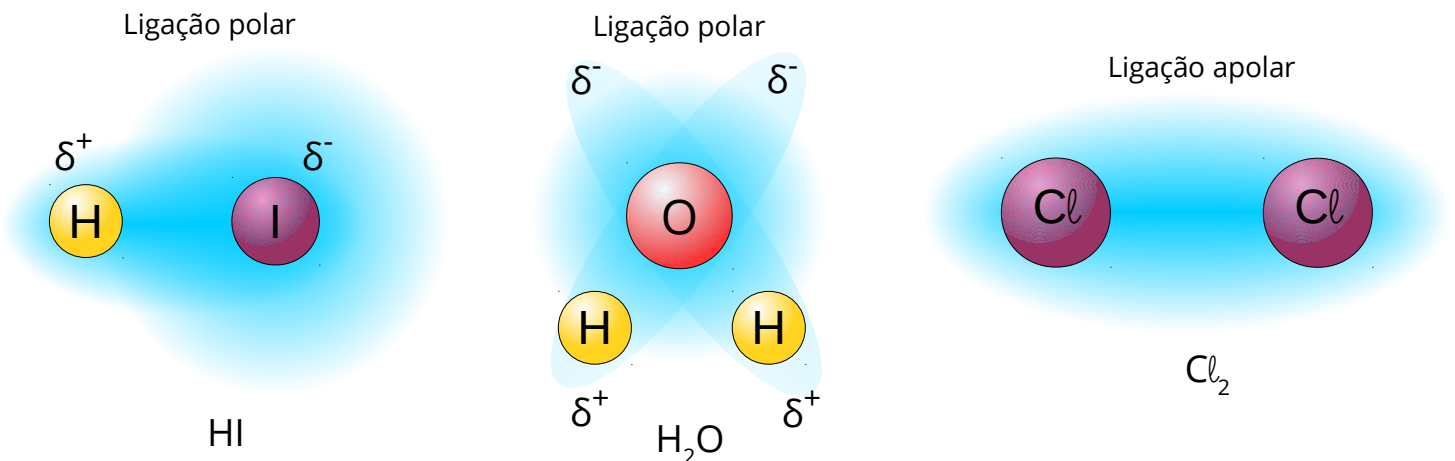
Ligação metálica são encontradas em metais. Nesses metais, cada átomo está ligado a vários átomos vizinhos. Os elétrons ligantes estão relativamente livres para mover-se pela estrutura

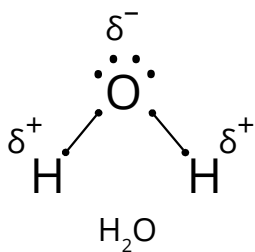
tridimensional do metal. As ligações metálicas dão origem a tais propriedades metálicas como alta condutividade elétrica e brilho. Além disso, em geral, possuem alto ponto de ebulição. Macroscopicamente, os metais são densos, em virtude das estruturas compactas dos retículos cristalinos. Os fios metálicos são muito resistentes às forças que se aplicam sobre eles ao serem puxados ou alongados.



5) Dê exemplos de moléculas polares e apolares usando estruturas de Lewis e indicando, quando houver, as porções negativas e positivas de cada molécula, bem como os relativos vetores de dipolo elétrico de suas ligações.

O conceito de polaridade de ligação ajuda a descrever o compartilhamento de elétrons entre os átomos. Uma ligação covalente apolar é aquela na qual os elétrons estão igualmente compartilhados entre dois átomos. Em uma ligação covalente polar, um dos átomos exerce maior atração pelos elétrons ligantes que o outro. Se a diferença na habilidade relativa em atrair elétrons é grande o suficiente, uma ligação iônica é formada.

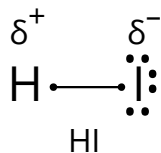




Ligação polar

Diferença de eletronegatividade:

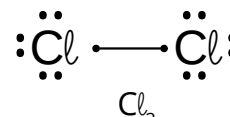
$$\mu = 3,5 (\text{O}) - 2,1 (\text{H}) = 1,4$$



Ligação polar

Diferença de eletronegatividade:

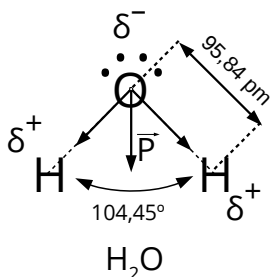
$$\mu = 2,5 (\text{I}) - 2,1 (\text{H}) = 0,4$$



Ligação apolar

Diferença de eletronegatividade:

$$\mu = 3,0 (\text{Cl}_2) - 3,0 (\text{Cl}_2) = 0$$



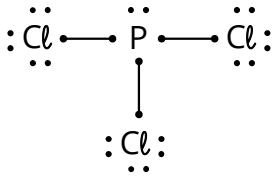
Representação do H_2O com o vetor de dipolo elétrico.

6) Represente os símbolos de Lewis de elementos metais alcalinos, metais alcalinos terrosos, elementos representativos e gases nobres.

Elementos Representativos			
Metais alcalinos:	Metais alcalinos terrosos:		Gases nobres:
Li ·	· Be ·	· B · · C · · N · : O · : F ·	He :
Na ·	· Mg ·	· Al · · Si · · P · : S · : Cl ·	: Ne :
K ·	· Ca ·	· Ga · · Ge · · As · : Se · : Br ·	: Ar :
Rb ·	· Sr ·	· In · · Sn · · Sb · : Te · : I ·	: Kr :
Cs ·	· Ba ·	· Ti · · Pb · · Bi · : Po · : At ·	: Xe :
Fr ·	· Ra ·	· Nh · · Fl · · Mc · : Lv · : Ts ·	: Rn :
			: Og :

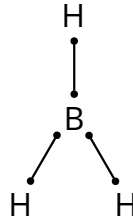
7.0) Construa as estruturas de Lewis para os seguintes sistemas moleculares, neutros e iônicos: PCl_3 , BH_3 , PCl_5 , CH_2Cl_2 , HCN , NO^+ , C_2H_4 , BrO_3^- , ClO_2^- , PO_4^{3-} , NH_4^+ , HSO_4^- .

PCl_3 – Tricloreto de fósforo



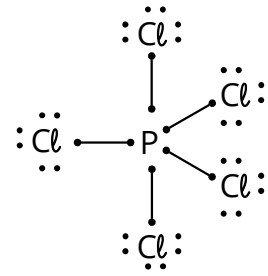
Estrutura de Lewis do Tricloreto de Fósforo

BH_3 – Borano



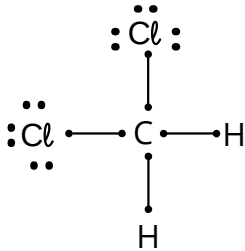
Estrutura de Lewis do Borano

PCl_5 – Pentacloreto de fósforo



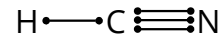
Estrutura de Lewis do Pentacloreto de Fósforo

CH_2Cl_2 – Diclorometano



Estrutura de Lewis do Diclorometano

HCN – Cianeto de hidrogênio



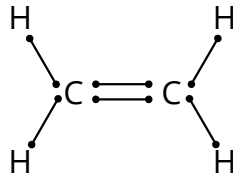
Estrutura de Lewis do Cianeto de Hidrogênio

NO^+ – Nitrosônio



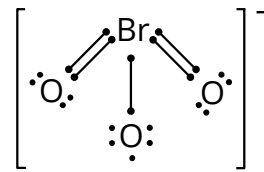
Estrutura de Lewis do Nitrosônio

C_2H_4 – Etileno



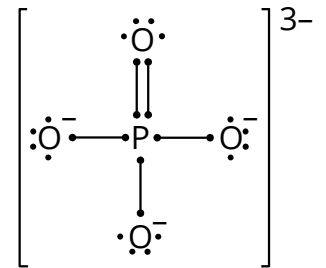
Estrutura de Lewis do Etileno

BrO_3^- – Bromato



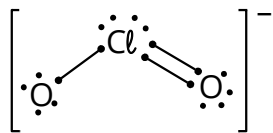
Estrutura de Lewis do Bromato

PO_4^{3-} – Fosfato



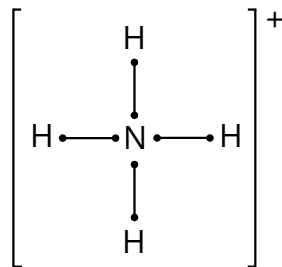
Estrutura de Lewis do Fosfato

ClO_2^- – Dióxido de cloro



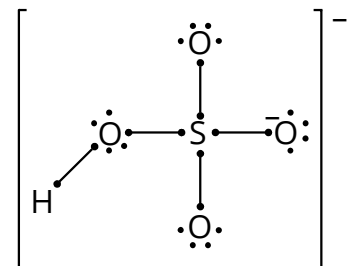
Estrutura de Lewis do Dióxido de Cloro

NH_4^+ – Amônio



Estrutura de Lewis do Amônio

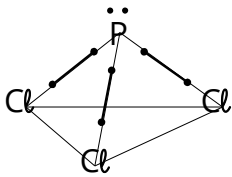
HSO_4^- – Bissulfato de hidrogênio



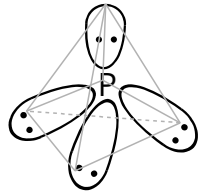
Estrutura de Lewis do Bissulfato de Hidrogênio

7.1) Represente a geometria dos domínios eletrônicos (pares eletrônicos ao redor do átomo central) e nomeie a geometria molecular (envolvendo apenas átomos, excluindo pares de elétrons livres) de cada composto.

PCl_3 – Tricloreto de fósforo

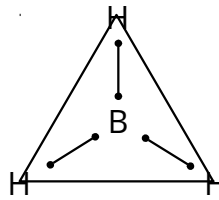


Geometria molecular:
Trigonal piramidal

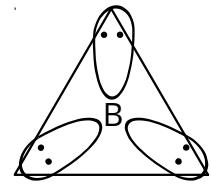


Geometria dos domínios eletrônicos:
tetraédrico

BH_3 – Borano

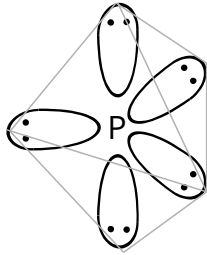


Geometria molecular:
Trigonal plano



Geometria dos domínios eletrônicos:
Trigonal plano

PCl_5 – Pentacloreto de fósforo



Geometria molecular: piramidal
Geometria dos domínios eletrônicos: bipiramidal

HCN – Cianeto de hidrogênio



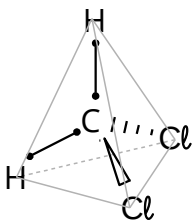
Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: linear

NO^+ – Nitrosônio

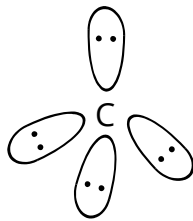


Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: linear

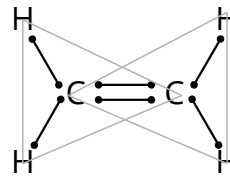
CH_2Cl_2 – Diclorometano



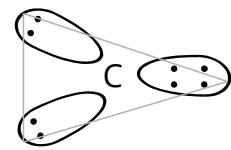
Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: tetraédrico



C_2H_4 – Etileno

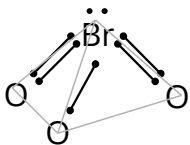


Geometria molecular: planar

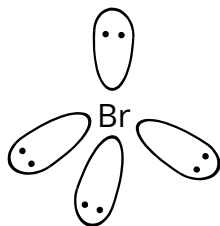


Geometria dos domínios eletrônicos: trigonal plano

BrO_3^- – Bromato

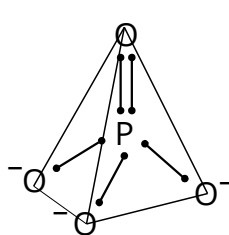


Geometria molecular:
trigonal piramidal

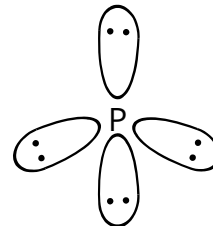


Geometria dos domínios eletrônicos: tetraédrico

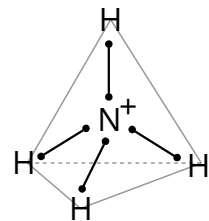
PO_4^{3-} – Fosfato



Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: tetraédrico

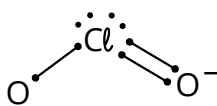


NH_4^+ – Amônio

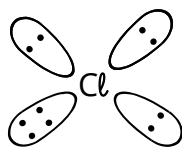


Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: tetraédrico

ClO_2^- – Dióxido de cloro

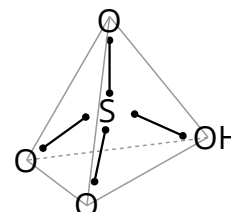


Geometria molecular: angular



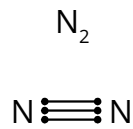
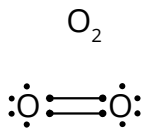
Geometria dos domínios eletrônicos: tetraédrico

HSO_4^- – Bissulfato de hidrogênio



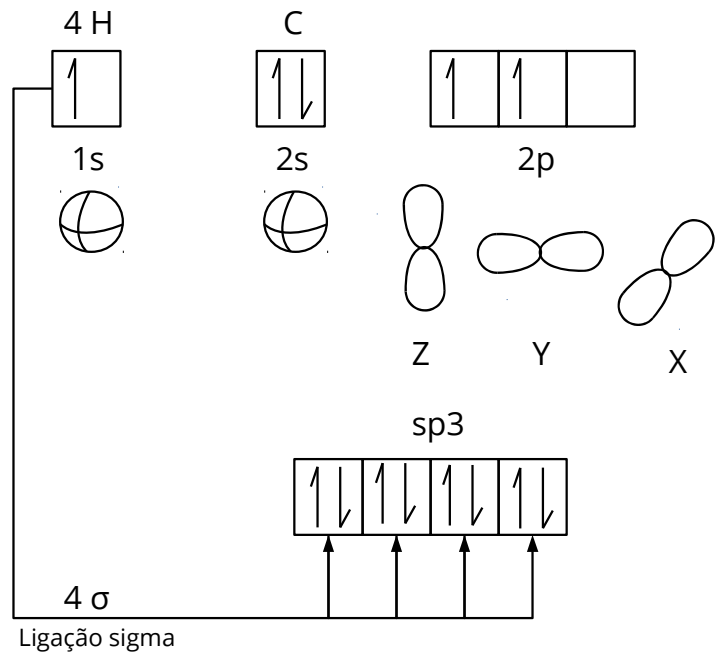
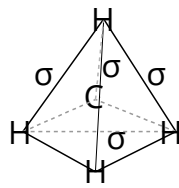
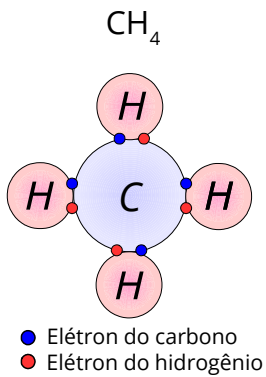
Geometria molecular e dos domínios eletrônicos: tetraédrico

8) Construa estruturas de Lewis para N_2 e O_2 e tente explicar a razão da estabilidade eletrônica das estruturas propostas.

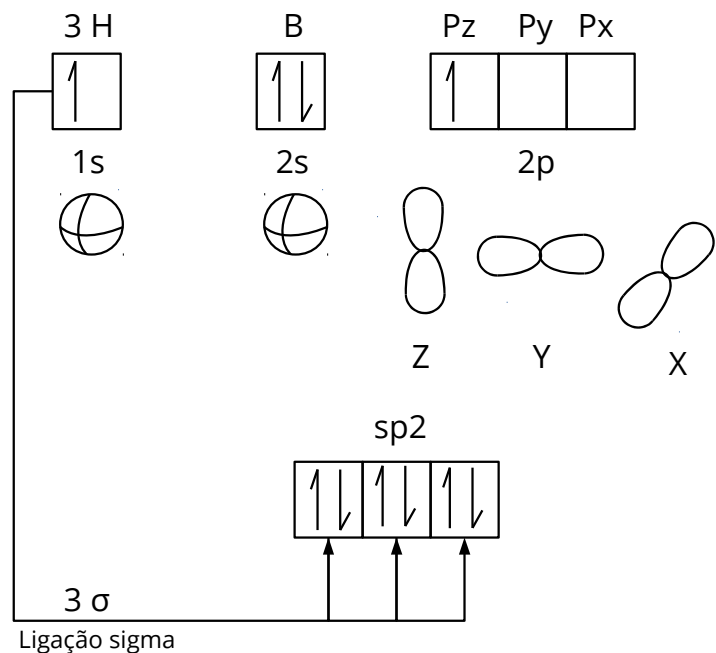
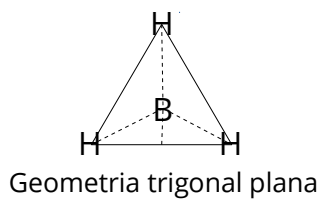
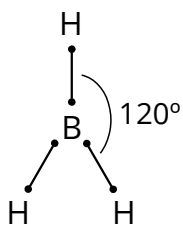


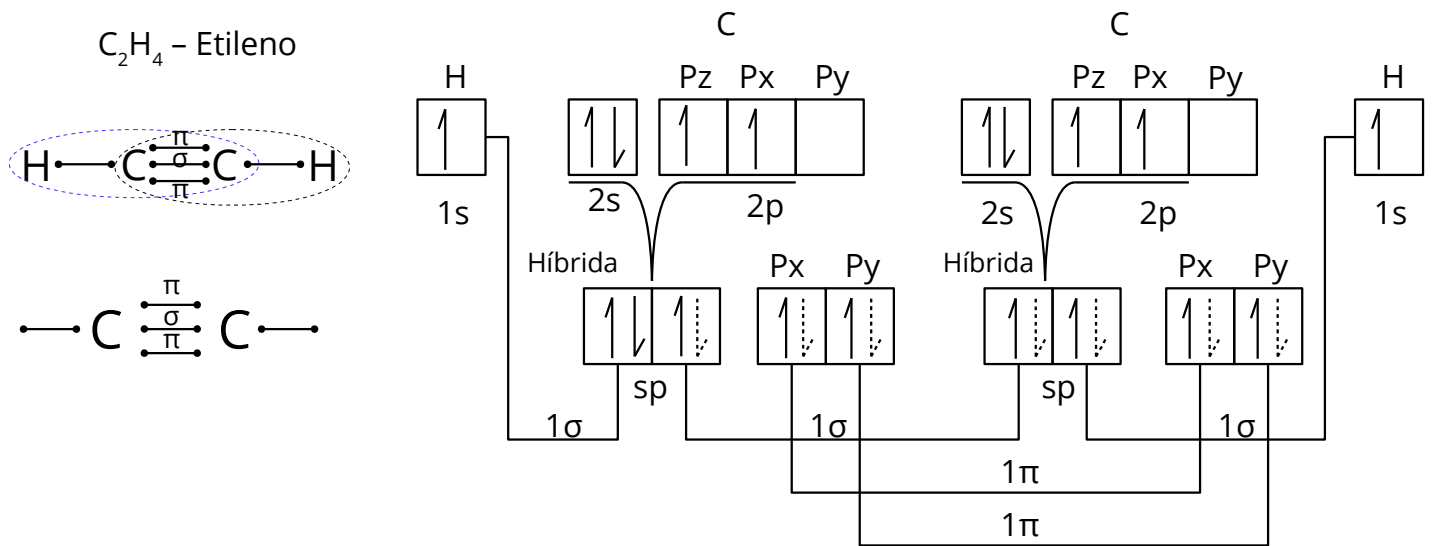
A estabilidade eletrônica dessas moléculas dá-se pela regra do octeto, ou seja, com oito elétrons no último nível energético.

9) Use os exemplos moleculares C_2H_2 , BH_3 e CH_4 e suas respectivas estruturas de Lewis para definir a formação de orbitais moleculares híbridos dos tipos sp , sp^2 , sp^3 respectivamente, destacando a formação de ligações do tipo σ e π .



BH_3 - Borano





sp (linear), sp^2 (trigonal plano), sp^3 (tetraédrico)

10) De acordo com os encontros do fim do semestre, comente sobre a definição e estrutura/propriedades de materiais sólidos (cristalinos metálicos e iônicos e sólidos amorfos). Apresente o conceito de cela unitária em sistemas cristalinos bem como propriedades (ângulos e dimensões) das sete redes cristalinas. Apresente os sistemas de empacotamento compacto hexagonal (exemplificando com a estrutura do grafite) e cúbico (ex. Silício e diamante). Por último, em função de uma melhor compreensão das propriedades de condução elétrica dos materiais sólidos, comente sobre a teoria das bandas usando os diagramas de orbitais simplificados por esta teoria para materiais isolantes, condutores e semicondutores.

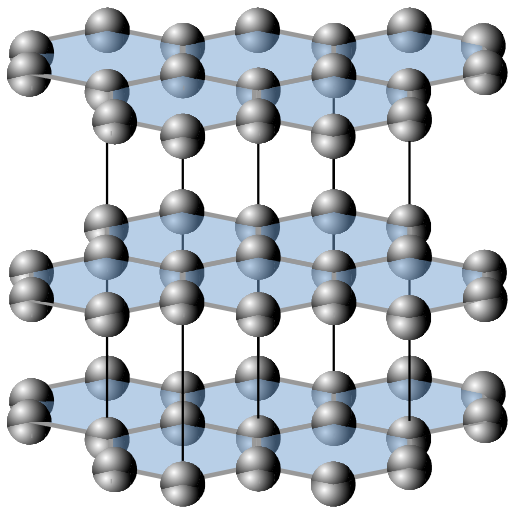
Os sólidos podem ser cristalinos ou amorfos (não-cristalinos). Em um sólido cristalino os átomos, íons ou moléculas estão ordenados em arranjos bem definidos. Esses sólidos geralmente têm superfícies planas ou faces que fazem ângulos definidos entre si. As pilhas regulares de partículas que produzem essas faces também fazem com que os sólidos tenham formas altamente regulares. O quartzo e o diamante são sólidos cristalinos.

Cela unitária é a menor parte do cristal que contém as suas características, e que repetido tridimensionalmente forma um mineral.

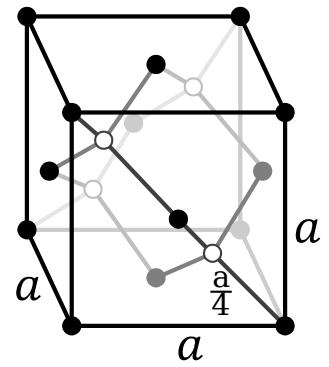
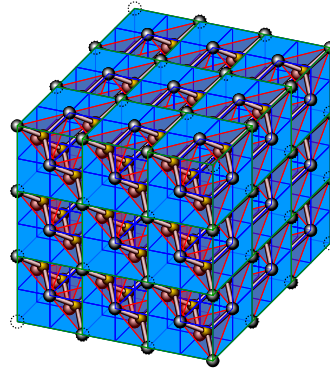
Há sete tipos de redes cristalinas:

Sistemas	Eixos	Ângulos axiais
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$ graus.
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$ graus.
Ortorrômbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$ graus.
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = 90$ graus, $\beta \neq 90$ graus, $\gamma = 90$ graus.
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq 90$ graus, $\beta \neq 90$ graus, $\gamma \neq 90$ graus.
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90$ graus, $\gamma = 120$ graus.
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$ ou $\alpha' = \beta' = 90$ graus, $\gamma' = 120$ graus.

Estrutura de empacotamento do grafite



Estrutura de empacotamento do diamante



A teoria das bandas de energia explica a condução elétrica em sólidos. Um sólido pode ser pensado como formado por átomos isolados. Cada átomo no sólido apresenta um número expressivo de níveis discretos de energia que podem ser ocupados pelos elétrons atômicos. Normalmente, os elétrons ocupam os estados de mais baixas energias. É possível ocorrer excitação destes estados eletrônicos para níveis mais altos em energia. Usualmente, somente os elétrons que ocupam originalmente os estados mais altos em energia no átomo, os chamados elétrons de valência, é que participam destes processos de excitação.

Se não há interação entre os átomos, os níveis de energia são idênticos àqueles dos átomos isolados. Se houver interações presentes, cada nível previamente existente no sistema será duplicado na medida em que as interações entre os átomos produzem desdobramentos de níveis. Se mais átomos forem adicionados ao sistema, haverá um maior número de desdobramentos de níveis. Por existir 10^{23} átomos em um sólido, cada nível de energia de partícula única sofrerá desdobramentos em um número enorme de partes. Ademais, como os valores dos níveis de energia permanecem praticamente idênticos, o efeito de junção de um grande número de átomos é o de formar bandas de energia, de níveis de energia praticamente contínuos, separados por lacunas onde não existem elétrons.

O modo como os elétrons ocupam as bandas disponíveis de energia é governado pelo Princípio de Exclusão de Pauli. As bandas são preenchidas com elétrons de maneira similar ao que ocorre quando níveis de elétrons são ocupados em átomos de muitos elétrons.

Por exemplo, o Na tem seus níveis de energia ocupados até o nível 3s que tem um elétron. A configuração eletrônica é: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$. Como o nível 3s pode acomodar 2 elétrons, então há espaço para um elétron neste nível. De maneira semelhante, as bandas em sólidos podem ser totalmente preenchidas, parcialmente preenchidas e vazias. A banda com mais alto nível de energia ocupada pelos elétrons de valência e a banda não ocupada são determinadas pelas propriedades de condução do sólido cristalino. Se a banda contendo os elétrons de valência for totalmente preenchida nos referimos a ela como banda de valência e a banda seguinte como banda de condução. Se a banda que contém os elétrons de valência não for totalmente preenchida, ela será chamada de banda de condução. Um bom condutor tem uma banda de condução que é aproximadamente meio preenchida, pois, neste caso, é muito mais fácil fazer com que um elétron ascenda a um nível mais alto de energia, de modo que estes elétrons possam adquirir energia devido à presença de um campo elétrico e participar da condução

elétrica. Um material isolante, por outro lado, tem uma banda de valência cheia e o espaço entre a banda de valência e a de condução é largo. Como resultado os elétrons não podem adquirir energia facilmente de um campo elétrico e portanto participarem da condução elétrica.

