Departamento de Química
UFJF

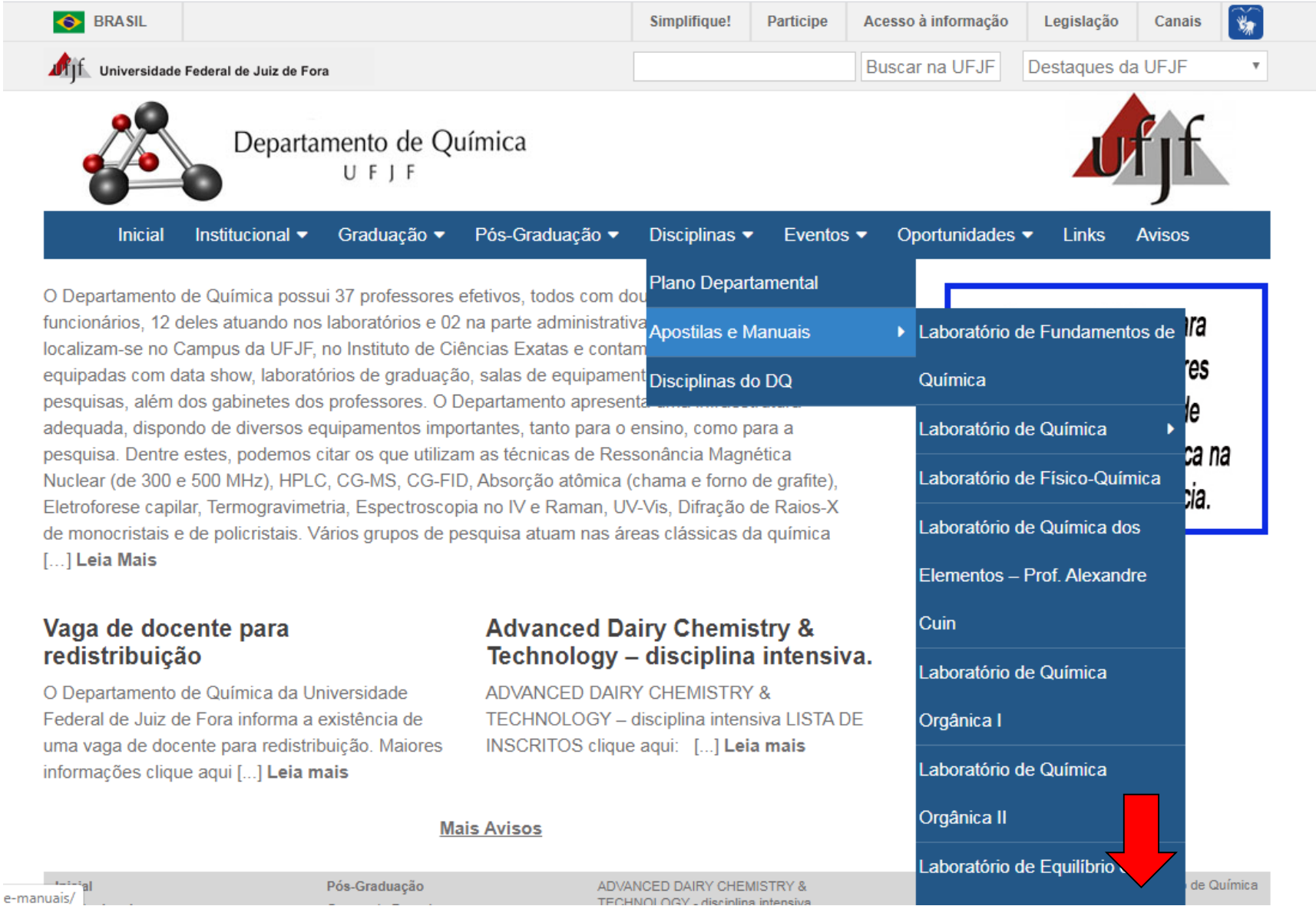
Química Fundamental

(QUI125)

Prof. Maurício A. P. Silva
mauricio.silva@ufjf.edu.br

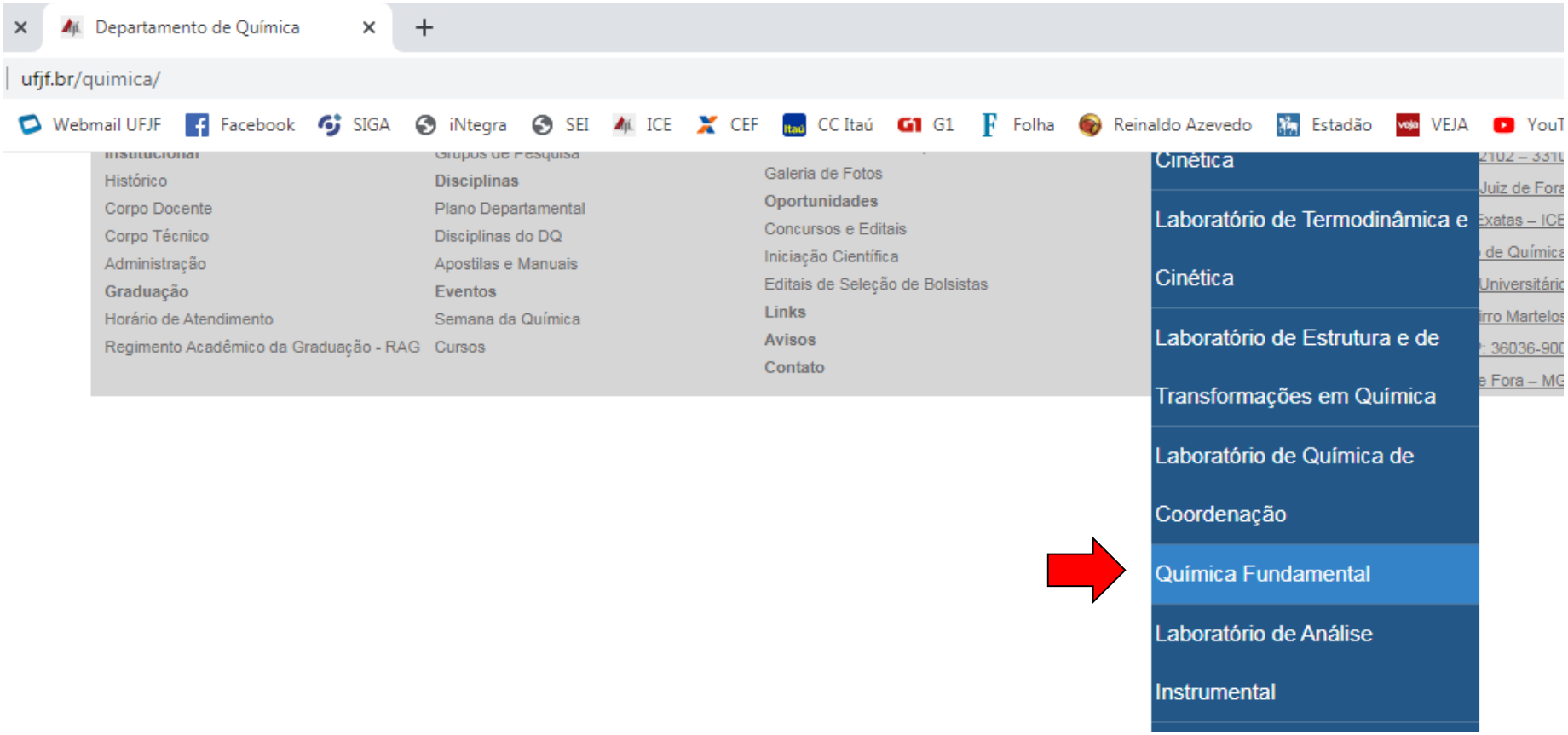
Listas de exercícios, cronograma da disciplina e demais materiais de apoio disponíveis em:

http://www.ufjf.br/quimica



Listas de exercícios, cronograma da disciplina e demais materiais de apoio disponíveis em:

http://www.ufjf.br/quimica



Listas de exercícios, cronograma da disciplina e demais materiais de apoio disponíveis em:

http://www.ufjf.br/quimica/disciplinasdep/apostilas-e-manuais/quimica-fundamental/

Planejamento da Disciplina Química Fundamental – QUI125

19/09	Estequiometria: (I) • Equações químicas • Alguns padrões de reatividade química • Massa molar • Mol	2
22/09	Estequiometria (II) • Fórmulas mínimas • Equações balanceadas • Reagentes limitantes • Cálculos de rendimentos	3
26/09	Primeiros modelos atômicos: • O átomo de Dalton • Experimentos em tubos de Crookes (raios catódicos) • Os átomos de Thomson e de Rutherford • Introdução ao modelo de Bohr	4
29/09	Estrutura eletrônica dos átomos e o modelo de Bohr: • Espectro de linhas • Modelo de Bohr Níveis de energia do átomo de hidrogênio	5

03/10	<u>Introdução à mecânica quântica (I):</u> • Quantização de energia • Efeito fotoelétrico • Comportamento ondulatório da matéria (Hipótese de De Broglie) • Princípio da Incerteza de Heisenberg	6
06/10	<u>Introdução à mecânica quântica (II):</u> • Funções de onda para o átomo de hidrogênio • Densidade de probabilidade; orbitais • Orbitais e números quânticos (átomo de hidrogênio) • Representações de orbitais (1s, 2s e 3s, 2p e 3p, 3d) •	7
10/10	<u>Introdução à mecânica quântica (III): Átomos polieletrônicos</u> • Orbitais e energias • Spin eletrônico (experimento de Stern-Gerlach) • Princípio da exclusão de Pauli e Regra de Hund	8

	• Configurações eletrônicas	
13/10	O átomo moderno: • Partículas subatômicas • Isótopos, Número atômico Massas atômicas • Abundância isotópica Propriedades periódicas dos elementos (I): • Desenvolvimento da tabela periódica • Configurações eletrônicas e a tabela periódica Carga nuclear efetiva	9
17/10	SEMANA do ICE	
20/10	SEMANA DO ICE	
24/10	Propriedades periódicas dos elementos (II): • Raios atômico, covalente e iônico • Energia de ionização Afinidade eletrônica	10
27/10	• Resolução de exercícios, esclarecimentos de dúvidas relativas ao 1°TVC	11
31/10	• **Primeiro TVC**	**12**

03/11	Conceitos básicos de ligação química: • Símbolos de Lewis • Regra do octeto • Introdução aos tipos de ligação • Energia de ligação; Energia média de ligação; Comprimento de ligação • Eletronegatividade; momento de dipolo e polaridade de ligação	13
07/11	Ligação Iônica: • Formação de ligações iônicas; Interação entre íons • Retículo cristalino e energia; Ciclo de Born-Haber • Propriedades dos compostos iônicos	14
10/11	Ligações Covalentes (I): ✓ Estruturas de Lewis ✓ Tipos de Ligações covalentes; Ligações Múltiplas; Ressonância Ligações Covalentes (II): ✓ Carga Formal ✓ Exceções da regra do octeto ✓ Correções dos modelos covalente e iônico	15
14/11	FERIADO (recesso)	
17/11	Geometria Molecular (I): • Repulsão dos Pares Eletrônicos da Camada de Valência – VSEPR	16

	✓ As cinco geometrias fundamentais para a forma molecular <u>Geometria Molecular (II):</u> • Repulsão dos Pares Eletrônicos da Camada de Valência – VSEPR ✓ Moléculas sem pares de elétrons isolados no átomo central ✓ Moléculas com pares de elétrons isolados no átomo central ✓ Efeito dos elétrons não ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação Geometria molecular e polaridade molecular	
21/11	<u>Teoria da ligação de valência (I):</u> • Orbitais híbridos (s, p)	17
24/11	<u>JOGO DO BRASIL – NÃO HAVERÁ AULA</u>	
28/11	<u>JOGO DO BRASIL – NÃO HAVERÁ AULA</u>	
01/12	<u>Teoria da ligação de valência (II):</u> • Ligações múltiplas Ligações deslocalizadas	18

05/12	Teoria dos orbitais moleculares (I): • Limitações da teoria de Lewis • Orbitais moleculares • Moléculas diatômicas homonucleares • Ordem de ligação	19
08/12	Teoria dos orbitais moleculares (I): • Configuração eletrônica das moléculas diatômicas e propriedades moleculares • Moléculas diatômicas heteronucleares	20
12/12	Resolução de exercícios, esclarecimentos de dúvidas relativas ao 2°TVC	21
15/12	• **Segundo TVC**	**22**

19/12	<u>Interações intermoleculares</u> • Origem das forças intermoleculares • Relação entre propriedades físicas e interações intermoleculares Forças íon-dipolo, dipolo-dipolo, dipolo-dipolo induzido, dispersão de London e interação de hidrogênio	23
22/12	<u>Equilíbrio Químico (I)</u> • Conceitos de equilíbrio • A constante de equilíbrio • Equilíbrio heterogênio • Cálculo das constantes de equilíbrio	24
02/01/23	<u>Equilíbrio Químico (II)</u> • Aplicações das constantes de equilíbrio: determinando o sentido de reação; cálculo das concentrações no equilíbrio • O Princípio de Le Châtelier: variação nas concentrações; variações no volume e pressão; variação na temperatura	25

05/01/23	Ácidos e Bases (I) • Teoria de Arrhenius • Teoria de Brønted-Lowry Teoria de Lewis	26
09//01/23	Ácidos e Bases (II) • Força relativa de ácidos e bases • Autoionização da água (produto iônico da água), escala de pH Ácidos e bases fortes e fracos (constantes de acidez e basicidade)	27
12/01/23	Resolução de exercícios, esclarecimentos de dúvidas relativas ao 3°TVC	28
16/01	**Terceiro TVC**	**29**
19/01	**Prova segunda chamada** (para aqueles que perderam UMA prova, matéria relativa apenas à prova perdida)	**30**
23/01	**Prova substitutiva** (matéria toda, substitui o TVC de menor nota)	

Sobre as provas (turmas presenciais e turma especial):

- As provas serão aplicadas no horário e local das aulas, podendo também ser utilizado o Anfiteatro do ICE.
- Os alunos da Turma Especial (QUI125E) receberão, via email, ou plataforma as informações a respeito de locais e horários de provas.
- Média para aprovação: 60 pontos
- *Sobre a prova de segunda chamada: -*
- *O aluno que perdeu uma prova, deve comparecer para fazer prova de segunda chamada referente ao conteúdo da prova perdida no dia agendado segundo este cronograma. Caso o aluno perca mais de uma prova ele deve presentar ao professor uma justificativa para fazer o pedido da segunda prova de segunda chamada. (seguindo o RAG.)*
- *Sobre a prova substitutiva:*

1. Todos os alunos podem fazer a prova substitutiva
2. O conteúdo da prova substitutiva contempla a matéria do semestre todo
3. A prova substitutiva irá substituir a menor nota.
4. Após a correção da prova, prevalece a maior nota.

Primeiro TVC: 31/10/22

Segundo TVC: 15/12/22

Terceiro TVC: 16/01/23

2ª chamada: 19/01/23

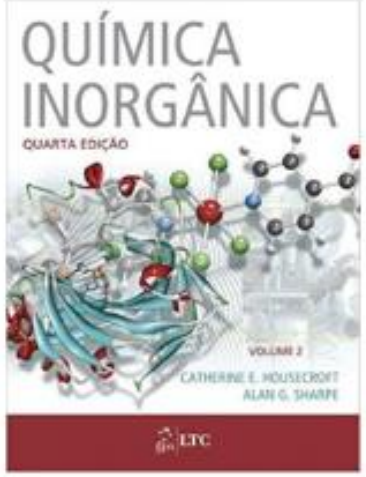
Substitutiva: 23/01/23

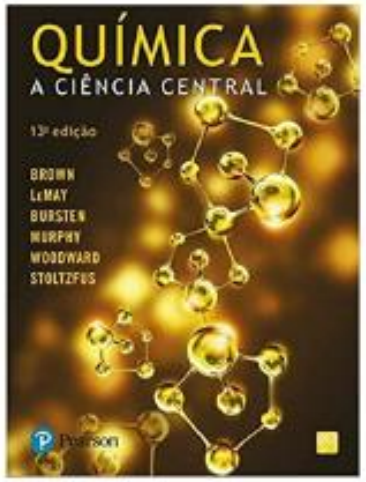
BIBLIOGRAFIA

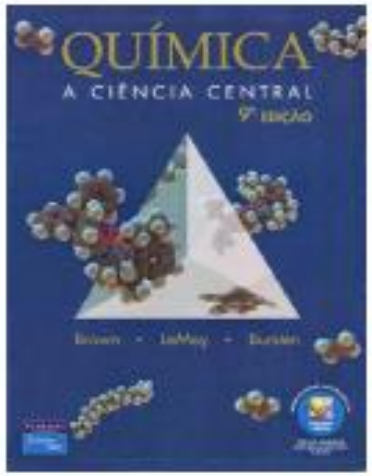
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. Química Inorgânica. 4a Edição. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2013. Volume 1. 624 págs. (ISBN 8521623274).
- Theodore L. Brown; H. Eugene Le May, Jr; Bruce E. Bursten e Julia R. Burdge, **Química – A ciência central**, Ed Pearson.

Bibliografia complementar:

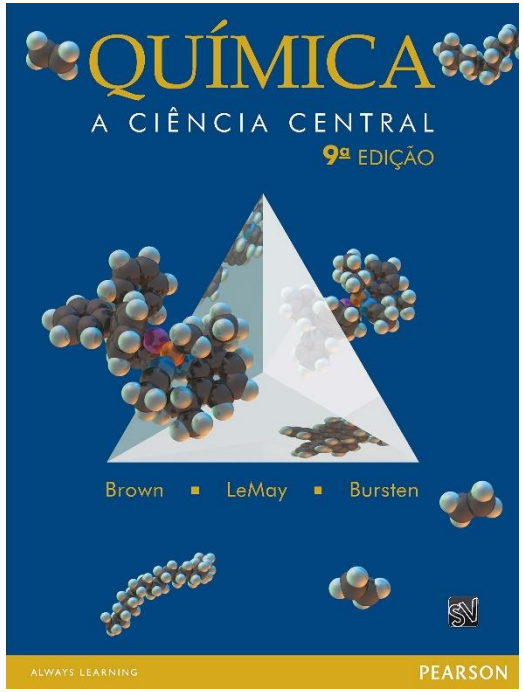
- John B. Russell, **Química Geral**, Volumes 1 e 2, Ed Pearson.
- Peter Atkins e Loretta Jones, **Princípios de Química – Questionando a vida moderna e o meio ambiente** Ed Bookman.

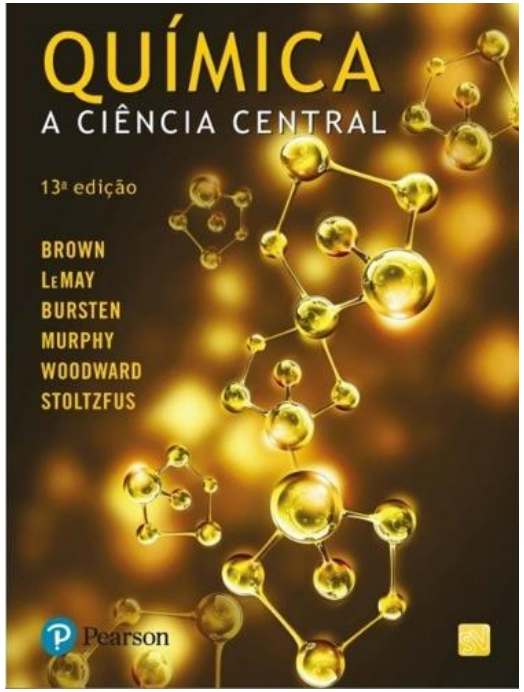






Brown, Capítulo 2
átomos, moléculas e íons





Teoria atômica da matéria

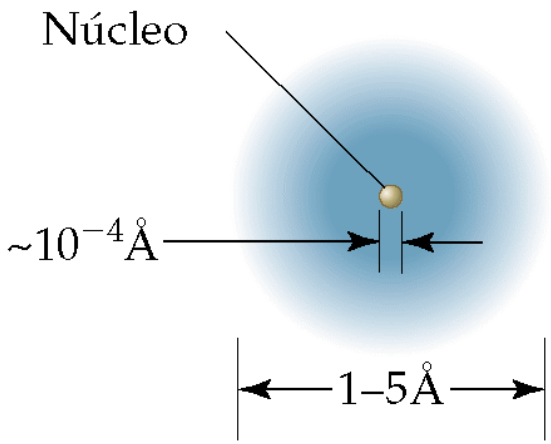
- Os gregos antigos (Leucipo de Mileto e Demócrito de Abdera, aprox. 440 A.C.) foram os primeiros a postular que a matéria é constituída de elementos indivisíveis.

- John Dalton (1803-1807):
  - Cada elemento é composto de átomos.
  - Todos os átomos de um elemento são idênticos.
  - Nas reações químicas, os átomos não são alterados.
  - Os compostos são formados quando átomos de mais de um elemento se combinam.
  - Lei de Dalton das proporções múltiplas: Quando dois elementos formam diferentes compostos, a proporção da massa dos elementos em um composto está relacionada à proporção da massa do outro através de um número inteiro pequeno.
- Mais tarde, os cientistas constataram que o átomo era constituído de entidades carregadas.

A descoberta da estrutura atômica

- O átomo consite de entidades positivas, negativas e neutras (prótons, elétrons e nêutrons).

- Os prótons e nêutrons estão localizados no núcleo do átomo, que é pequeno. A maior parte da massa do átomo se deve ao núcleo.
  - Pode haver um número variável de nêutrons para o mesmo número de prótons. Os isótopos têm o mesmo número de prótons, mas números diferentes de neutrons.



- Os elétrons estão localizados fora do núcleo. Grande parte do volume do átomo se deve aos elétrons.

A visão moderna da estrutura atômica

Isótopos, números atômicos e números de massa

- Número atômico (Z) = número de prótons no núcleo.
- Número de massa (A) = número total de núcleons no núcleo (prótons + nêutrons).
- Por convenção, para um elemento X, escreve-se ${}^{A}_{Z}X$.
- Isótopos têm o mesmo Z, porém A é diferente.
  - Ex.:

    ${}^{12}_{6}C$ (esse isótopo do carbono tem 6 prótons e 6 neutrons)

    ${}^{14}_{6}C$ (esse isótopo do carbono tem 6 prótons e 8 neutrons)
- A tabela periódica é organizada em ordem crescente de Z.

A tabela periódica

Períodos — linhas horizontais.

Grupos — colunas verticais com elementos com propriedades similares.

Elementos organizados em ordem crescente de número atômico.

Linha em forma de escada divide os metais dos não metais.

	1A 1	2A 2	3B 3	4B 4	5B 5	6B 6	7B 7	8B 8	8B 9	8B 10	1B 11	2B 12	3A 13	4A 14	5A 15	6A 16	7A 17	8A 18
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113	114 Fl	115	116 Lv	117	118

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No

- Metais
- Metaloides
- Não metais

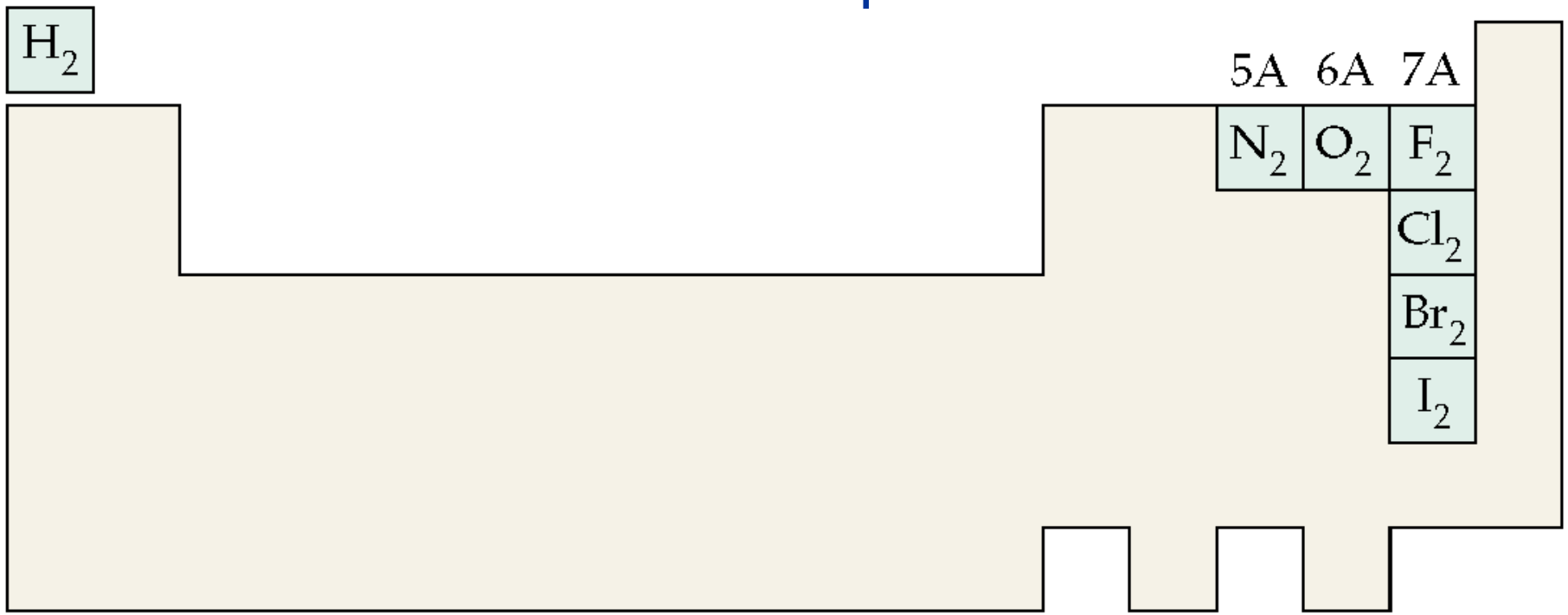
Moléculas e compostos moleculares

Moléculas e fórmulas químicas

- Moléculas são reuniões de dois ou mais átomos ligados entre si.
- Cada molécula tem uma fórmula química.
- A fórmula química indica
  - quais átomos são encontrados na molécula e
  - em qual proporção eles são encontrados.
- Compostos formados a partir de moléculas são compostos moleculares.
- As moléculas que contêm dois átomos ligados entre si são chamadas moléculas *diatômicas*.

Moléculas e compostos moleculares

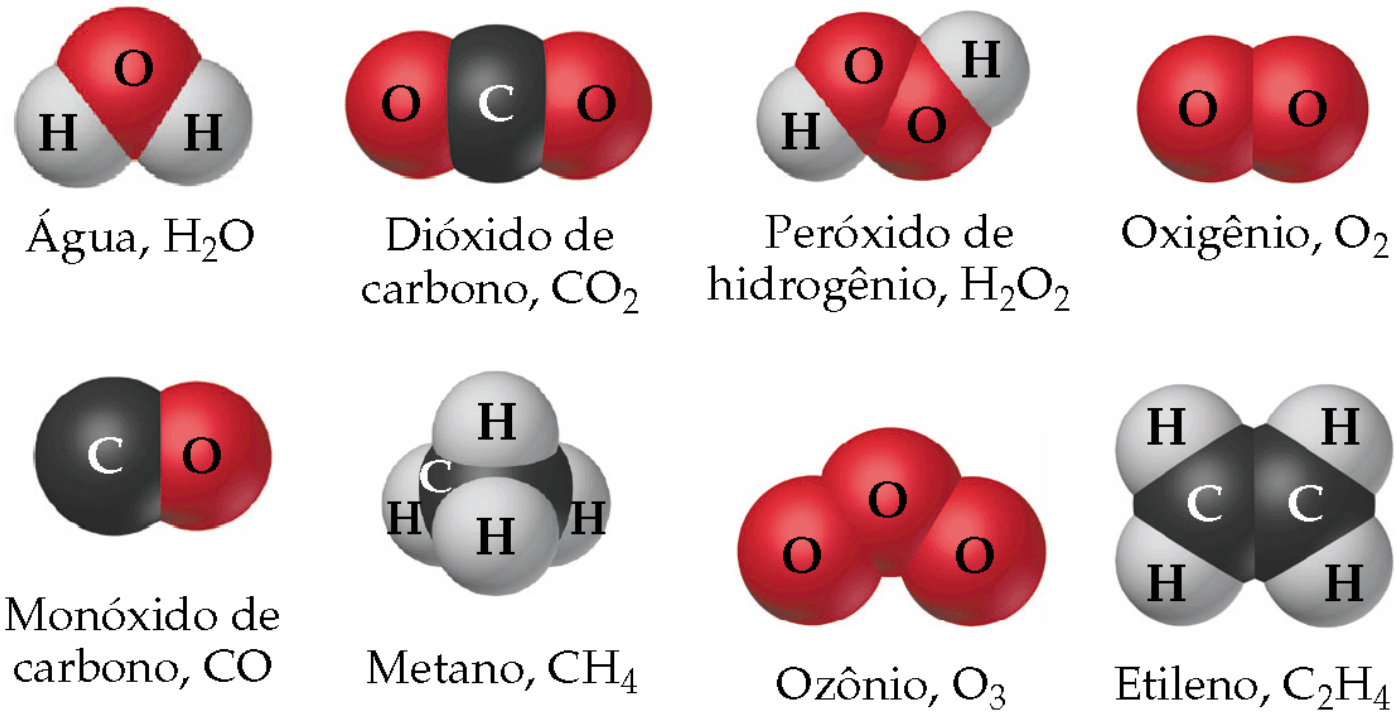
Moléculas e fórmulas químicas



Moléculas e compostos moleculares

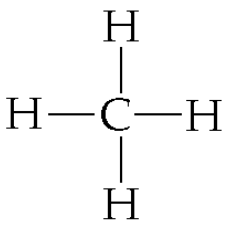
Fórmulas moleculares

- Fórmulas moleculares
  - Fornecem os números e tipos de átomos em uma molécula.
  - Exemplos: H_2O, CO_2, CO, CH_4, H_2O_2, O_2, O_3 e C_2H_4.

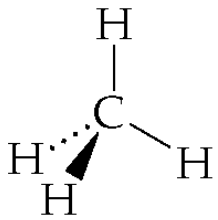


Moléculas e compostos moleculares

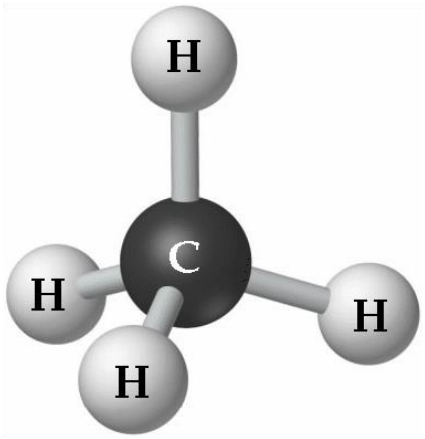
Desenhando as moléculas, ex.: CH_4



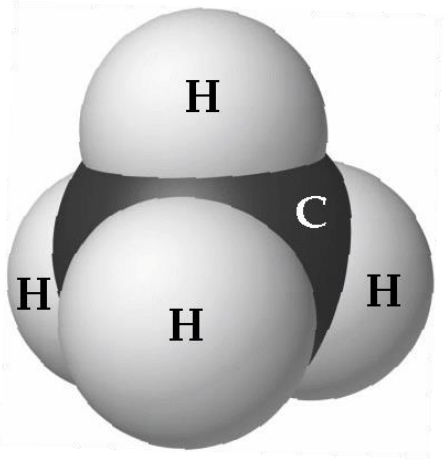
Fórmula estrutural



Desenho em perspectiva



Modelo de bola e palito



Modelo preenchimento do espaço

Íons e compostos iônicos

- Quando um átomo ou uma molécula perde elétrons, eles ficam com carga positiva.
  - Por exemplo, quando o Na perde um elétron, ele se transforma em um Na^+.
- Íons com carga positiva são chamados de *cátions*.
- Quando um átomo ou uma molécula ganha elétrons, eles ficam com carga negativa.
  - Por exemplo, quando o Cl ganha um elétron ele se transforma em Cl^-.
- Íons com carga negativa são chamados de *ânions*.
- Um átomo ou uma molécula podem ganhar ou perder mais de um elétron.

Íons e compostos iônicos

- *Em geral:*
  - ***átomos metálicos*** *tendem a perder elétrons para se transformarem em* ***cátions****;*
  - ***átomos não-metálicos*** *tendem a ganhar elétrons para formarem* ***ânions***.

Previsão das cargas iônicas

- O número de elétrons que um átomo perde está relacionado com a sua estrutura eletrônica, mas é facilmente determinado pela sua posição na tabela periódica.

Íons e compostos iônicos

Previsão das cargas iônicas

1A	2A										3A	4A	5A	6A	7A	8A
H^+															H^-	He
Li^+													N^{3-}	O^{2-}	F^-	Ne
Na^+	Mg^{2+}	Metais de transição									Al^{3+}			S^{2-}	Cl^-	Ar
K^+	Ca^{2+}													Se^{2-}	Br^-	Kr
Rb^+	Sr^{2+}													Te^{2-}	I^-	Xe
Cs^+	Ba^{2+}															Rn

Íons e compostos iônicos

Compostos iônicos

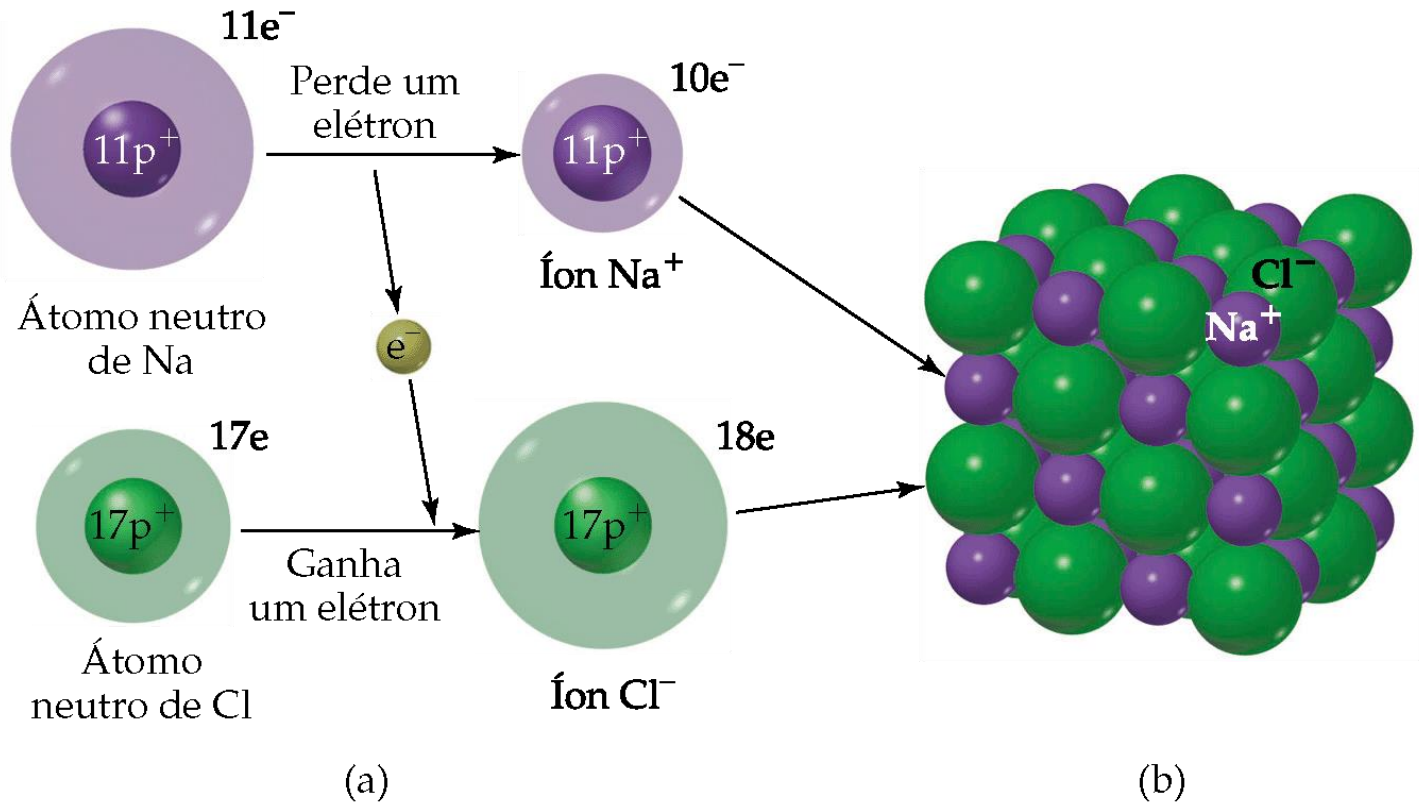
- Grande parte da química envolve a transferência de elétrons entre substâncias.

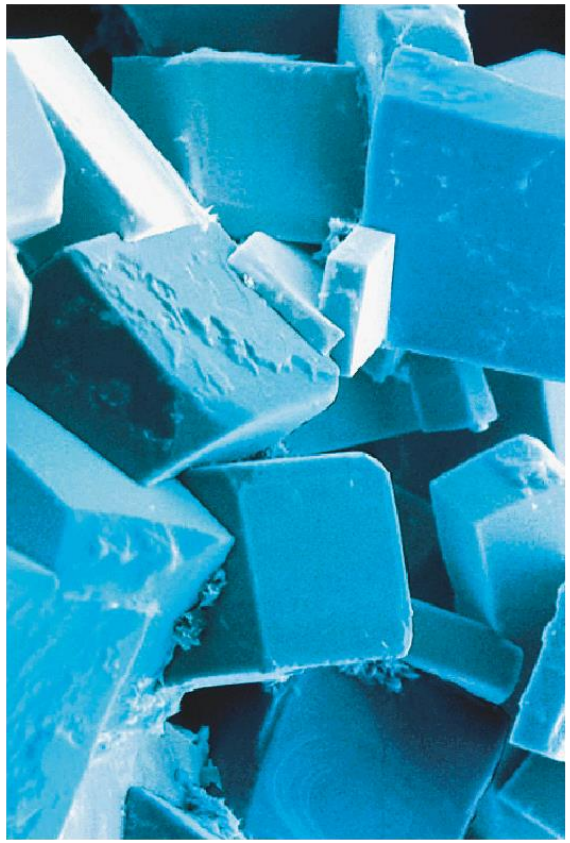
Exemplo:

  - Para formar o NaCl, o átomo de sódio neutro, Na, deve perder um elétron para se transformar em um cátion, Na^+.
  - O elétron não pode ser totalmente perdido, dessa forma ele é transferido para um átomo de cloro, Cl, que então se transforma em um ânion cloreto, Cl^-.
  - Os íons Na^+ e Cl^- ligam-se para formar o cloreto de sódio (NaCl), o principal componente do sal de cozinha.

Íons e compostos iônicos

Compostos iônicos





Íons e compostos iônicos

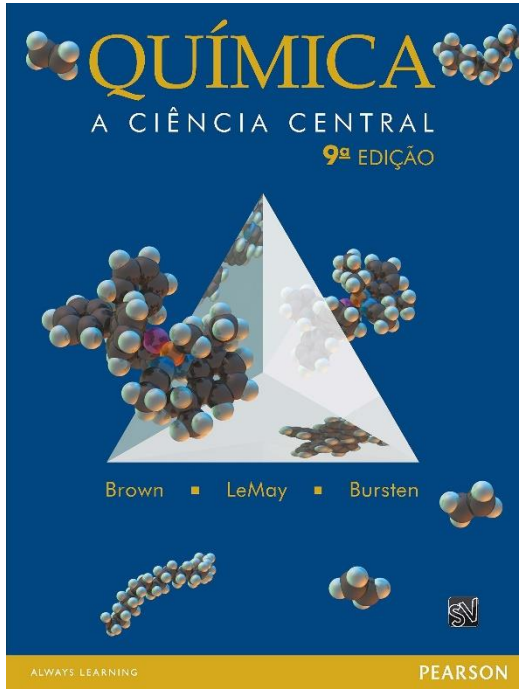
Estequiometria nos compostos iônicos

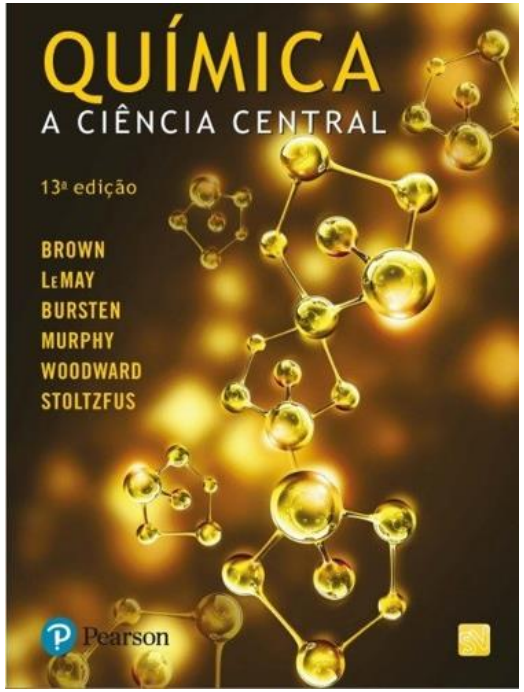
- Importante: observe que não existem moléculas de NaCl.

- Considere a formação do **Mg_3N_2:**
- O Mg perde dois elétrons para se transformar em um Mg^{2+};
- O nitrogênio ganha três elétrons para se transformar em um N^{3-}.
- Para uma substância neutra, o número de elétrons perdidos e ganhos deve ser igual.
- Isto é, 3 átomos de Mg precisam formar 3 íons Mg^{2+} (totalizando $3 \times 2+ = 6+$), e

  2 átomos de N precisam formar 2 íons N^{3-} (totalizando $2 \times 3– = 6–$).

Brown, Capítulo 3
Estequiometria: cálculos com fórmulas e equações químicas



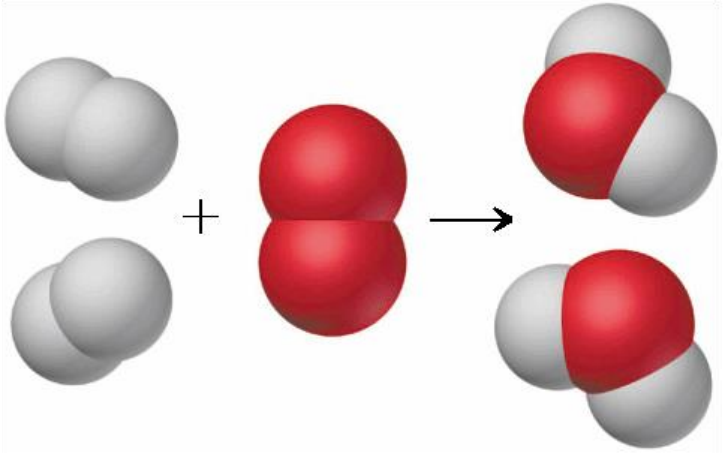


Equações químicas

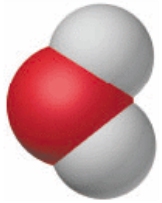
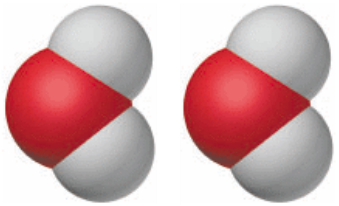
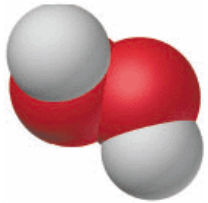
- Lavoisier (1734-1794): a massa é conservada em uma reação química.
- Equações químicas: descrições de reações químicas.
- Duas partes de uma equação: reagentes e produtos:

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$$

- Coeficientes estequiométricos: são os números na frente das fórmulas químicas; fornecem a proporção de reagentes e produtos.

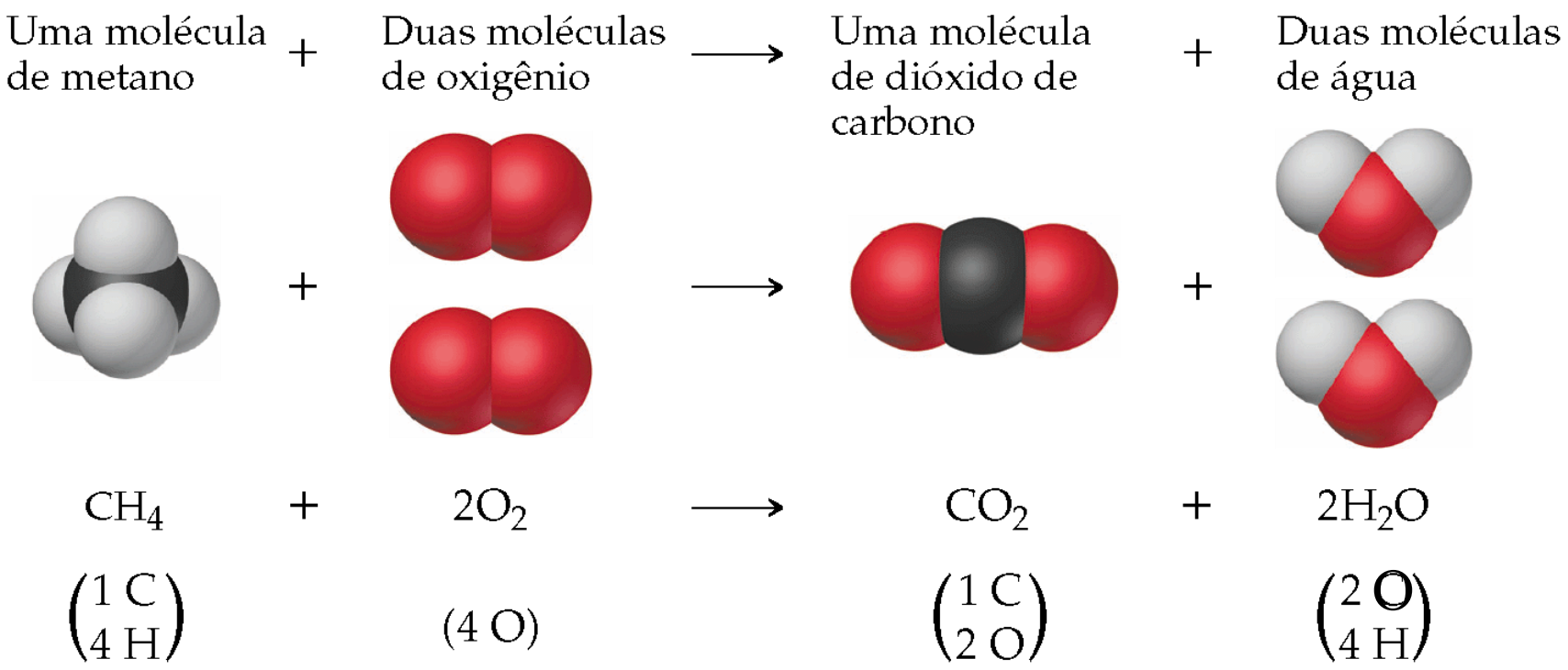


Equações químicas

Símbolo químico	Significado		Composição
H_2O	Uma molécula de água:		Dois átomos de H e um átomo de O
$2H_2O$	Duas moléculas de água:		Quatro átomos de H e dois átomos de O
H_2O_2	Uma molécula de peróxido de hidrogênio:		Dois átomos de H e dois átomos de O

Equações químicas

- Lei da conservação da massa: a matéria não pode ser perdida em nenhuma reação química.
- O número de um determinado átomo nos reagentes deve ser igual àquele nos produtos.



Massa molecular

Massa molecular

** Lembrando: 1u = 1/12 da massa do ^{12}C → um átomo de ^{12}C tem uma massa de 12 u*

- A massa molecular (MM): é a soma da massa atômica (MA) para os átomos na fórmula.

$$MM\ (H_2SO_4) = 2(MA\ do\ H) + (MA\ do\ S) + 4(MA\ do\ O)$$

$$= 2(1{,}0\ u) + (32{,}1\ u) + 4(16{,}0\ u) = 98{,}1\ u$$

- A massa molecular (MM) é a massa da fórmula molecular (dada em *u*).

$$MM\ de\ C_6H_{12}O_6 = 6(12{,}0\ u) + 12(1{,}0\ u) + 6(16{,}0\ u) = 180{,}0\ u$$

Massa molecular

Composição percentual a partir das fórmulas

O cálculo depende da massa molecular da substância, da massa atômica de cada elemento e do número de átomos de cada elemento na formula química:

$$\% \text{ do elemento} = \frac{(\text{número de átomos desse elemento})\text{x}(\text{massa atômica do elemento})}{(\text{massa molecular do composto})} \text{ x } 100$$

Ou uma simples "regra de três"

massa molecular do composto ——————— 100%

(número de átomos desse elemento)x(massa atômica do elemento) ——————— X

Massa molecular

Composição percentual a partir das fórmulas

COMO FAZER 3.6

Calcule a composição percentual de $C_{12}H_{22}O_{11}$.

Solução Vamos examinar essa questão usando as etapas de resolução de problemas dadas no quadro "Estratégias em química: Resolvendo problemas".

Análise: dada a fórmula química de um composto, $C_{12}H_{22}O_{11}$, pede-se para calcular a composição percentual, ou seja, a porcentagem em massa de seus elementos constituintes (C, H e O).

Planejamento: podemos usar a Equação 3.10, contando com uma tabela periódica para obter as massas atômicas de cada elemento constituinte. As massas atômicas são usadas inicialmente para calcular a massa molecular do composto. (A massa molecular do $C_{12}H_{22}O_{11}$, 342,0 *u*, foi calculada em "Como fazer 3.5".) Então temos de fazer três cálculos, um para cada elemento.

Resolução: usando a Equação 3.10, temos

$$\%C = \frac{(12)(12{,}0\ u)}{342{,}0\ u} \times 100\% = 42{,}1\%$$

$$\%H = \frac{(22)(1{,}0\ u)}{342{,}0\ u} \times 100\% = 6{,}4\%$$

$$\%O = \frac{(11)(16{,}0\ u)}{342{,}0\ u} \times 100\% = 51{,}5\%$$

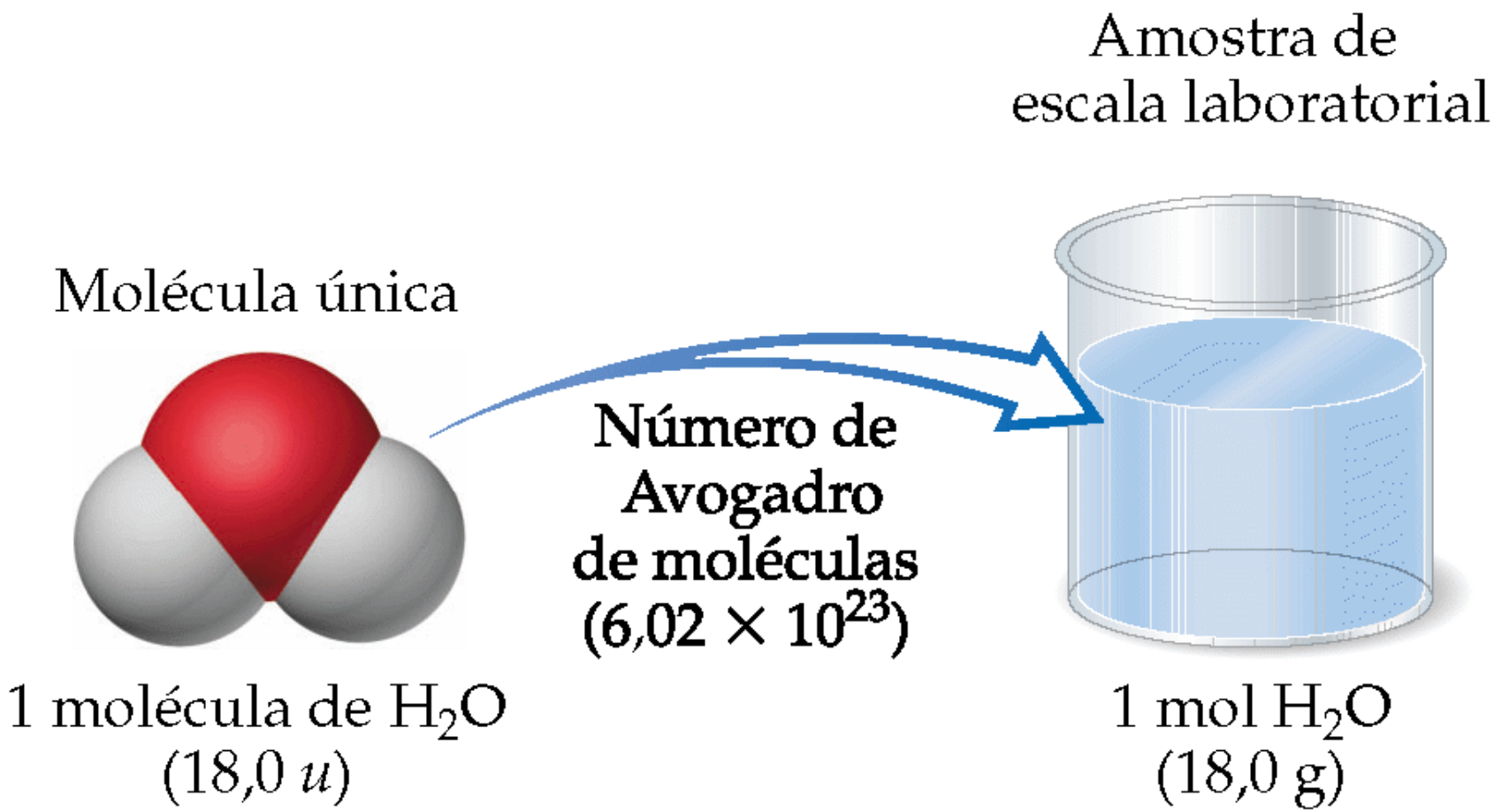
O mol

- 1 mol de algo = $6{,}02214076 \times 10^{23}$ daquele algo.
- Experimentalmente, em 12 g de átomos de ^{12}C, existem $6{,}022 \times 10^{23}$ átomos de ^{12}C (1 mol).
- O mol é a quantidade de matéria de um sistema que contém tantas entidades elementares quantos são os átomos contidos em 0,012 kg (12 g) de carbono-12.

Massa molar

- Massa molar: é a massa em gramas de 1 mol de substância (unidades g/mol, $g.mol^{-1}$).
- Massa de 1 mol de ^{12}C = 12 g.
- Massa molar do ^{12}C = 12 g/mol.
- Massa atômica do ^{12}C = 12 *u*.

O mol


Amostra de
escala laboratorial
Molécula única
Número de
Avogadro
de moléculas
($6{,}02 \times 10^{23}$)
1 molécula de H_2O
(18,0 *u*)
1 mol H_2O
(18,0 g)

O mol

Conversões entre massas, mols e número de partículas

- Massa molar de uma molécula: é a soma das massas molares dos átomos nessa molécula:

  massa molar de N_2 = 2 × (a massa molar de N).

- As massas molares para os elementos são encontradas na tabela periódica.
- As massas moleculares (em *u*) são numericamente iguais às massas molars (em *g/mol*).

TABELA 3.2 Relações molares

Nome	Fórmula	Massa molecular (*u*)	Massa molar (g/mol)	Número e tipo de partículas em um mol
Nitrogênio atômico	N	14,0	14,0	$6{,}022 \times 10^{23}$ átomos de N
Nitrogênio molecular	N_2	28,0	28,0	$6{,}022 \times 10^{23}$ moléculas de N_2 $2(6{,}022 \times 10^{23})$ átomos de N
Prata	Ag	107,9	107,9	$6{,}022 \times 10^{23}$ átomos de Ag
Íons prata	Ag^+	107,9[a]	107,9	$6{,}022 \times 10^{23}$ íons Ag^+
Cloreto de bário	$BaCl_2$	208,2	208,2	$6{,}022 \times 10^{23}$ unidades de $BaCl_2$ $6{,}022 \times 10^{23}$ íons Ba^{2+} $2(6{,}022 \times 10^{23})$ íons Cl^-

O mol

Conversões entre massas, mols e número de partículas

- COMO FAZER 3.8 (Brown)

Calcule o número de átomos de H em 0,350 mol de $C_6H_{12}O_6$.

- COMO FAZER 3.10

Calcule a quantidade de matéria de glicose em 5,380 g de $C_6H_{12}O_6$.

- COMO FAZER 3.11

Calcule a massa, em gramas, de 0,433 mol de nitrato de cálcio.

- COMO FAZER 3.12

Quantas moléculas de glicose existem em 5,230 g de $C_6H_{12}O_6$?