

CQ132 – Fundamentos de Química Inorgânica I

Química Inorgânica?

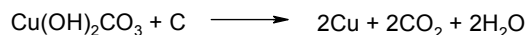
- Origem: Transformação dos materiais – minerais.
- Estudos de compostos inorgânicos em todas as fases, envolvendo síntese, estrutura, termodinâmica, reatividade, espectroscopia, propriedades de ligação, etc.

TABELA PERIÓDICA E SEUS ELEMENTOS

() = ESTIMATIVA

Compostos Inorgânicos

- Minerais
- Metalurgia



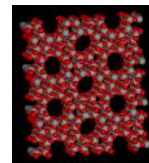
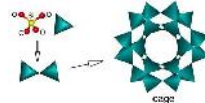
Compostos Inorgânicos

- Minerais:
- Magnetita (Fe_3O_4)



Compostos Inorgânicos

- Zeólitas



Compostos Inorgânicos

- Silício

Compostos Inorgânicos

- Compostos de carbono

Compostos Inorgânicos

- TiO_2

Solar cells

Compostos Inorgânicos

- Compostos não metálicos
- NO_x

Compostos Inorgânicos

- Compostos não metálicos
- H_2SO_4
- Prod. Mundial = 200 milhões ton./ano

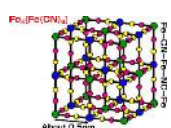
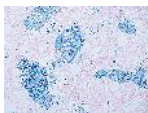
Compostos Inorgânicos

- Compostos de coordenação

$[Co(NH_3)_4Cl_2]$

Compostos Inorgânicos

- Compostos de coordenação
- Azul da Prússia
- Marcadores, janelas electrocrômicas
- Sensores, sequestrador, etc.

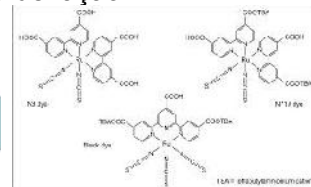


Compostos Inorgânicos

- Compostos de coordenação

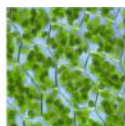
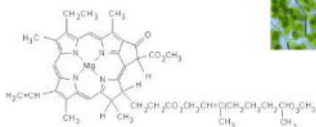


Solar cells



Compostos Inorgânicos

- Compostos de coordenação
- Biomoléculas



Compostos Inorgânicos

- Compostos de coordenação
- Biomoléculas

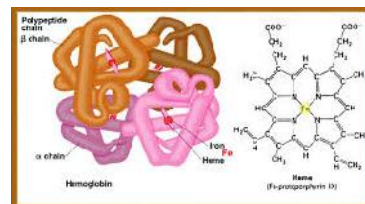


TABELA PERIÓDICA E SEUS ELEMENTOS

1	1																2
H	He																
3	4										5	6	7	8	9	10	
Li	Be										B	C	N	O	F	Ne	
11	12										13	14	15	16	17	18	
Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl	Ar	
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uub	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh
119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136
119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136
() = ESTIMATIVA	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
	Rf	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		
	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq	Uuh	Uuq

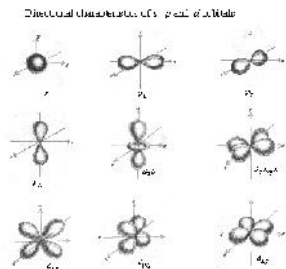
Estrutura eletrônica do átomo

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi$$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta, \phi)$$

R = função radial; $\Theta\Phi$ = função angular

As funções orbitais $\psi(\theta, \phi)$



Funções radiais dos orbitais R

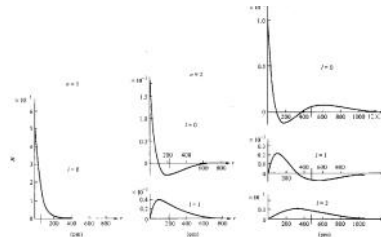
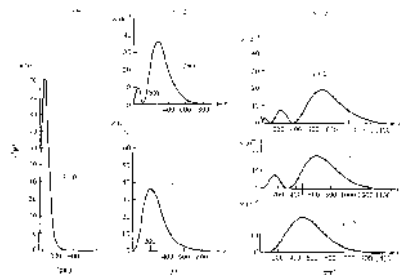


Fig. 2.1 Radial part of the hydrogen eigenfunctions for $n = 1, 2, 3$. [From Herzberg, G. Atomic Spectra and Atomic Structure, Dover: New York, 1944. Reproduced with permission.]

Funções probabilidade radial $(Rr)^2$



- Born: ψ^2 fornece informação de se encontrar a partícula

Átomos polieletrônicos

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{r_{ij}} \right) \Psi$$

Aproximação orbital

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n \frac{Z_{ef} e^2}{r_i} \right) \Psi$$

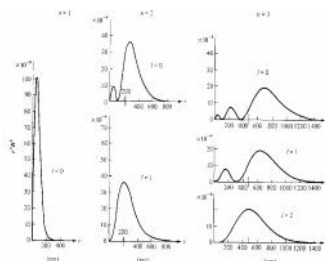
Supõe que a carga elétrica ao redor do núcleo é esférica e homogênea. Cada e^- "sente" um campo próprio (Z_{ef})

As funções utilizadas são monoelétrônicas

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_n) = \psi(r_1) \psi(r_2) \psi(r_3) \dots \psi(r_n)$$

Blindagem e carga nuclear efetiva

- $Z_{ef} = Z - \sigma$
- Regra geral:
- Blindagem σ : $s > p > d$
- Mais blindados: $d > p > s$



Regras de Slater para cálculo simples de Z_{ef}

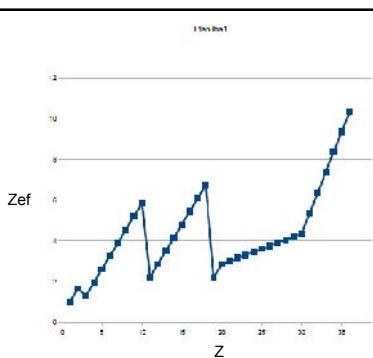
- Escreva a configuração eletrônica agrupando: $(1s)(2s, 2p)(3s, 3p)(3d)(4s, 4p)(4d)(4f)$, etc.
- Para calcular σ de um e^- ns ou np:
- e^- a direita de (ns, np) não contribuem na σ
- e^- s e p de mesmo n contribuem com $0,35\sigma$
- e^- de n-1 contribuem com $0,85\sigma$
- e^- n-i ($i \geq 2$) contribuem com $1,00\sigma$
- Se e^- d ou f, qq e^- a esquerda contribuem com $1,00\sigma$

Considerações sobre as regras de Slater

- As contribuições dos elétrons s e p são equivalentes.
- Os elétrons 4s são blindados por elétrons 3d.
- Os elétrons 3d não são blindados por elétrons 4s.

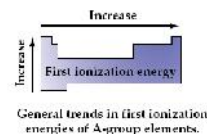
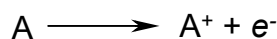
Utilização da regra de Slater

- Calcule Z_{ef} do e⁻ de valência de H a Mg.



Energia de ionização

- energia necessária para remover um e⁻ de um átomo isolado na fase gasosa



General trends in first ionization energies of A-group elements.

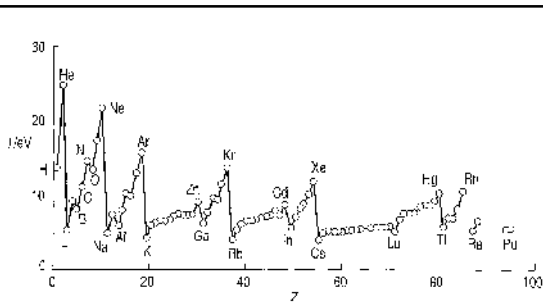


Figura 1.22 Variação da primeira energia de ionização ao longo da tabela periódica.

Raio atômico

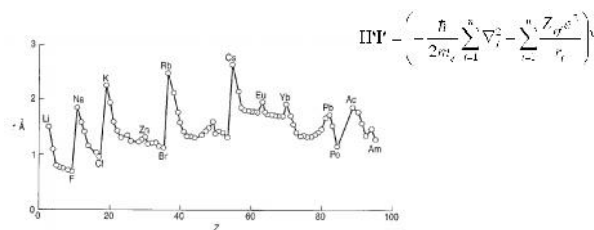


Figura 1.21 Variação do raio atômico ao longo da tabela periódica. Observe uma contração dos raios após os lanatídeos no período 6. Para os elementos metálicos foram usados os raios metálicos e para os elementos não-metálicos foram usados os raios covalentes.

Eletronegatividade (χ)

- **Pauling:** Capacidade de um átomo em atrair elétrons numa ligação química

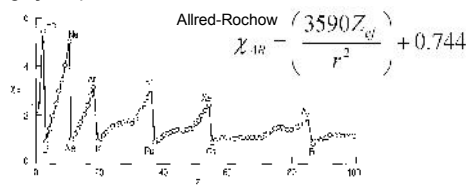


Figura 1.75 - Função de eletronegatividade de Pauling em função do número atômico.