



Universidade Federal do ABC

BCL 0307 – Transformações Químicas

Prof. Dr. André Sarto Polo
Bloco B – S. 1014 ou L202
andre.polo@ufabc.edu.br



Universidade Federal do ABC





Universidade Federal do ABC





Universidade Federal do ABC





Universidade Federal do ABC

Impacto na economia

Faturamento líquido da indústria química mundial

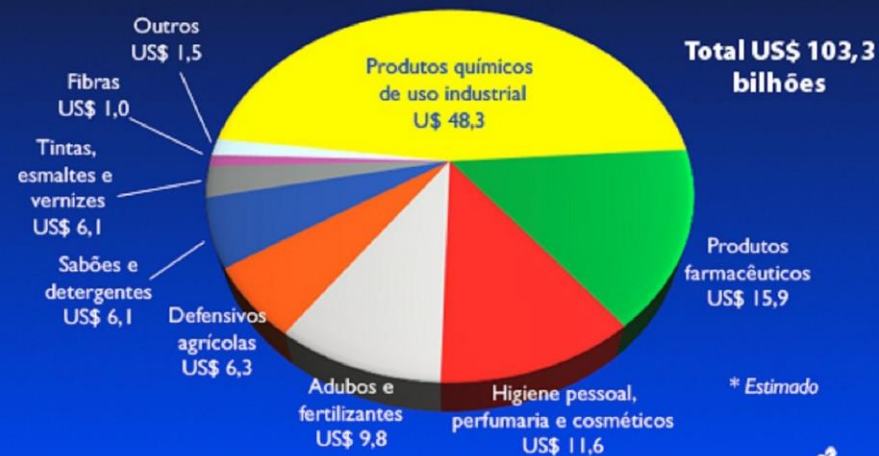
US\$ bilhões

País	Faturamento
Estados Unidos	689
China	549
Japão	298
Alemanha	263
França	159
Coréia	133
Reino Unido	123
Itália	123
Brasil	122
Índia	98
Holanda	82
Rússia	78
Espanha	75

Total mundial estimado: US\$ 3,7 trilhões

Fontes: ACC, CEFIC e Abiquim - Dados de 2008

FATURAMENTO LÍQUIDO DA INDÚSTRIA QUÍMICA BRASILEIRA - 2009*



* Estimado

ABIQUIM

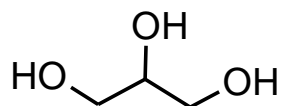
Fonte: Abiquim e associações do segmento.



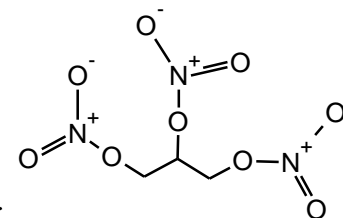
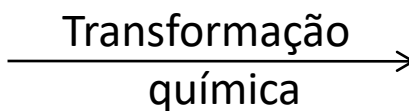


Universidade Federal do ABC

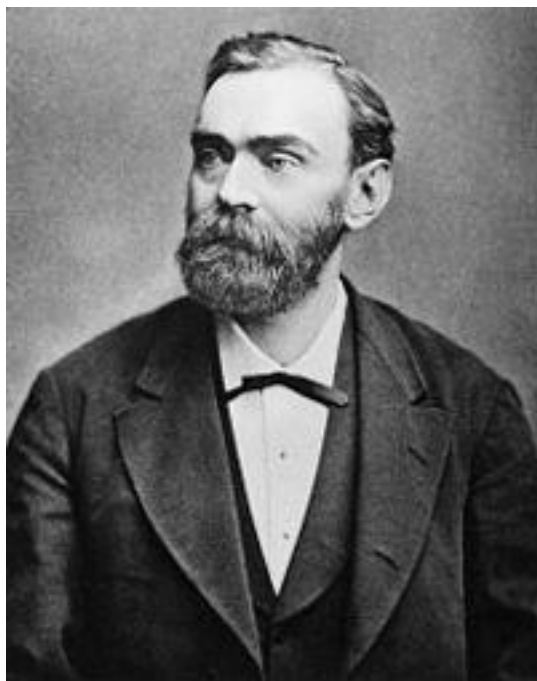
Explosivos



Glicerina



Nitroglicerina



Dinamite

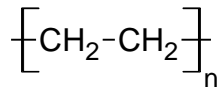
Alfred Nobel

Vasodilatador

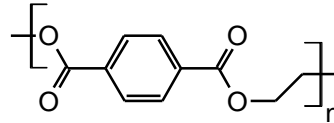


Universidade Federal do ABC

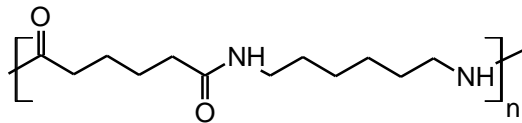
Polímeros



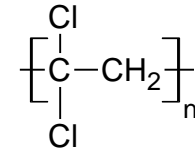
Poli(etileno) (PE)



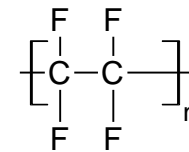
Poli(tereftalato de etileno) (PET)



Nylon 66



Poli(cloreto de vinila) (PVC)



Poli(tetrafluoretileno) (PTFE)





Universidade Federal do ABC

MARCH 2017
VOLUME 50
NUMBER 3
pubs.acs.org/accounts

ACCOUNTS

of chemical research

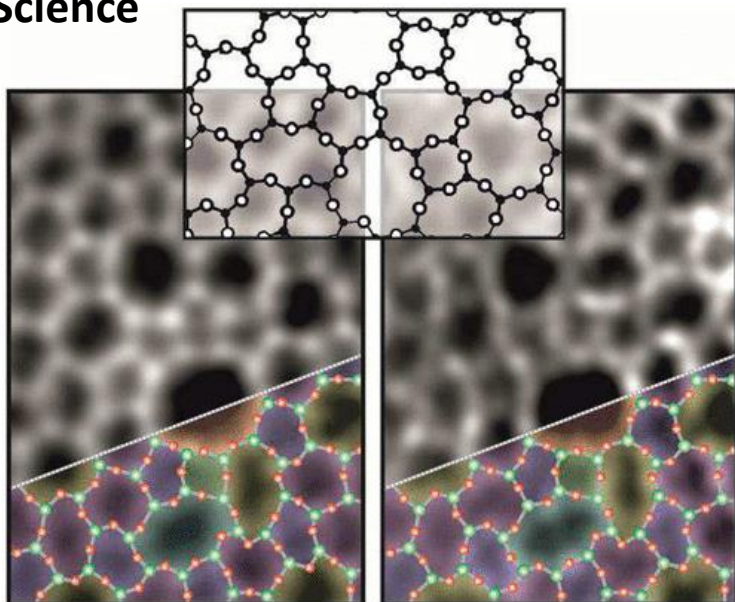
Holy Grails in Chemistry

CELEBRATING
50
YEARS

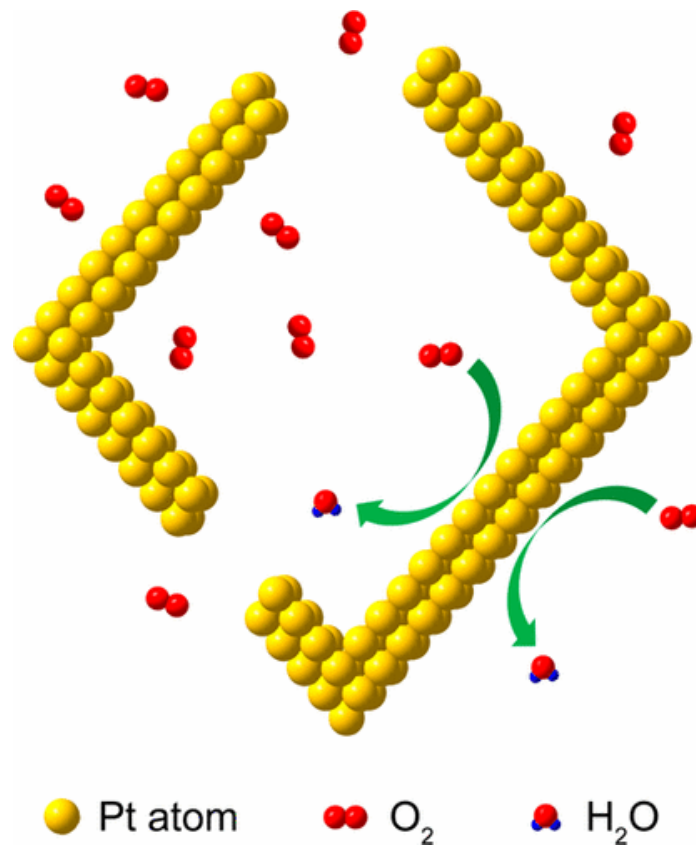


Universidade Federal do ABC

Controlling Silica in Its Crystalline and Amorphous States: A Problem in Surface Science



Toward Cost-Effective and Sustainable Use of Precious Metals in Heterogeneous Catalysts

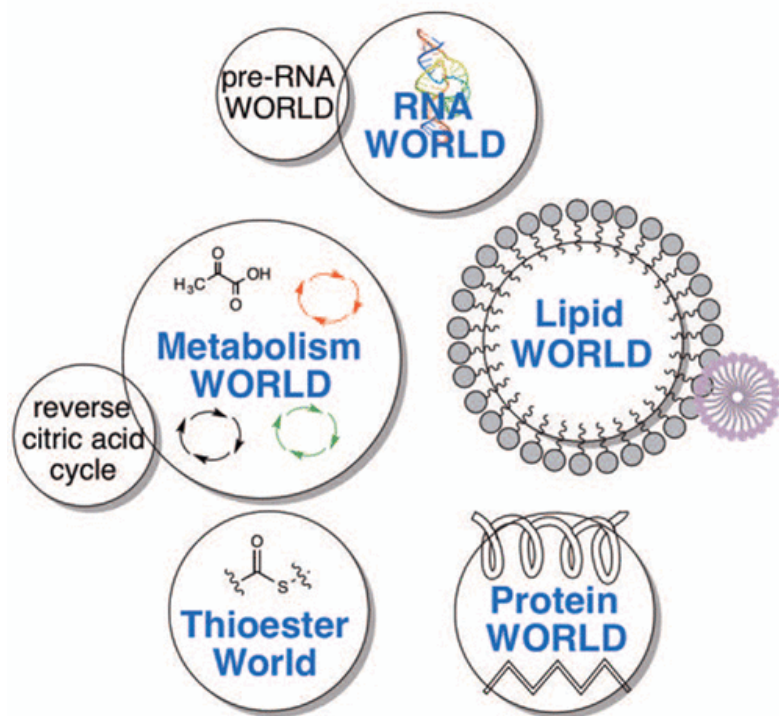




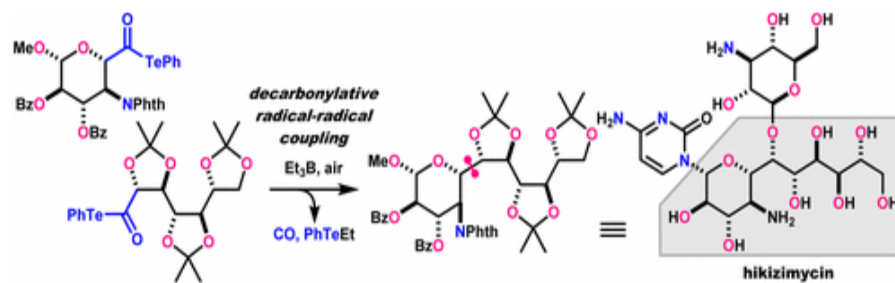
Universidade Federal do ABC

Giving Rise to Life: Transition from Prebiotic Chemistry to Protobiology

"WORLDS APART"



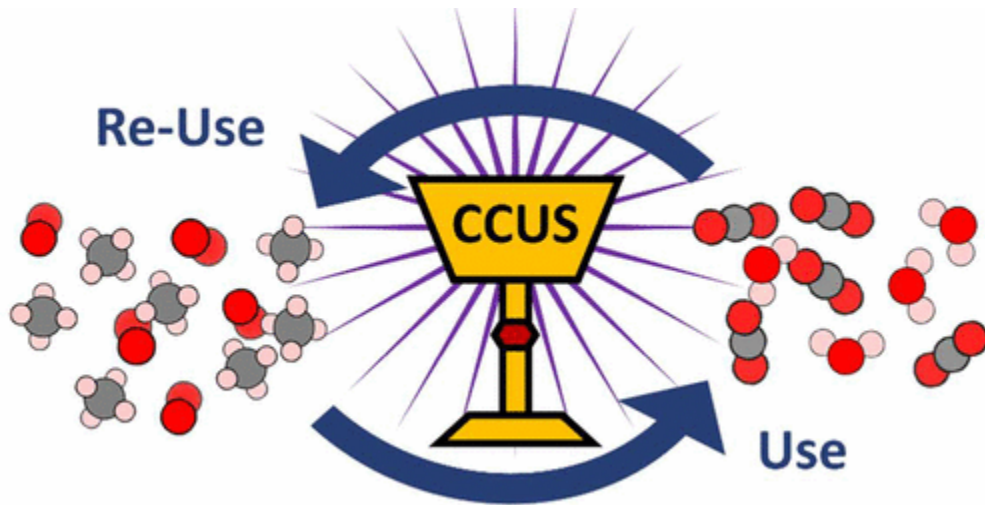
Evolution of Radical-Based Convergent Strategies for Total Syntheses of Densely Oxygenated Natural Products



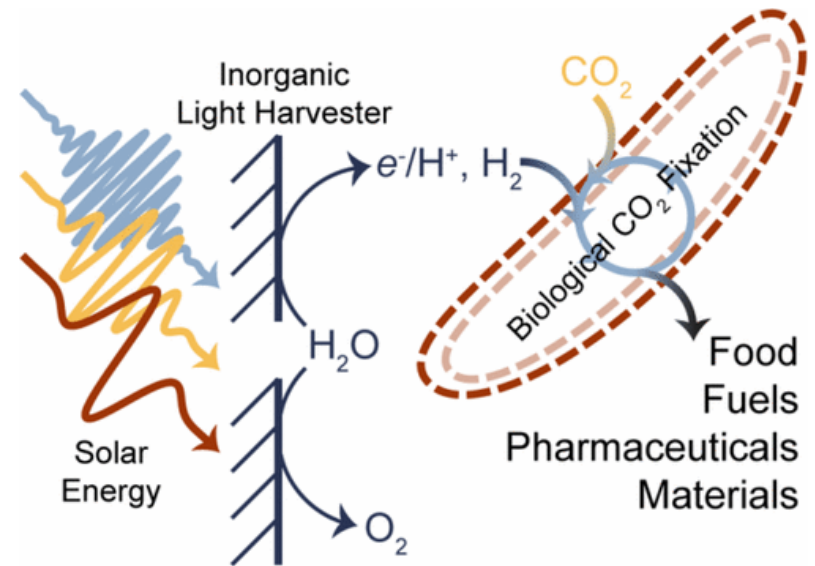


Universidade Federal do ABC

The Holy Grail: Chemistry Enabling an Economically Viable CO₂ Capture, Utilization, and Storage Strategy



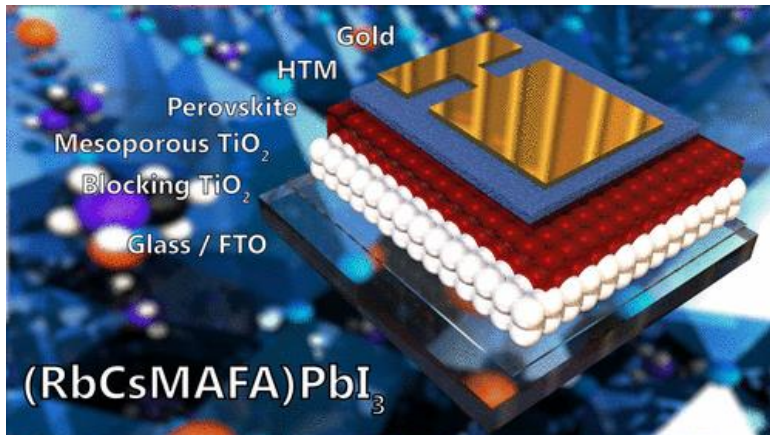
Cyborgian Material Design for Solar Fuel Production: The Emerging Photosynthetic Biohybrid Systems



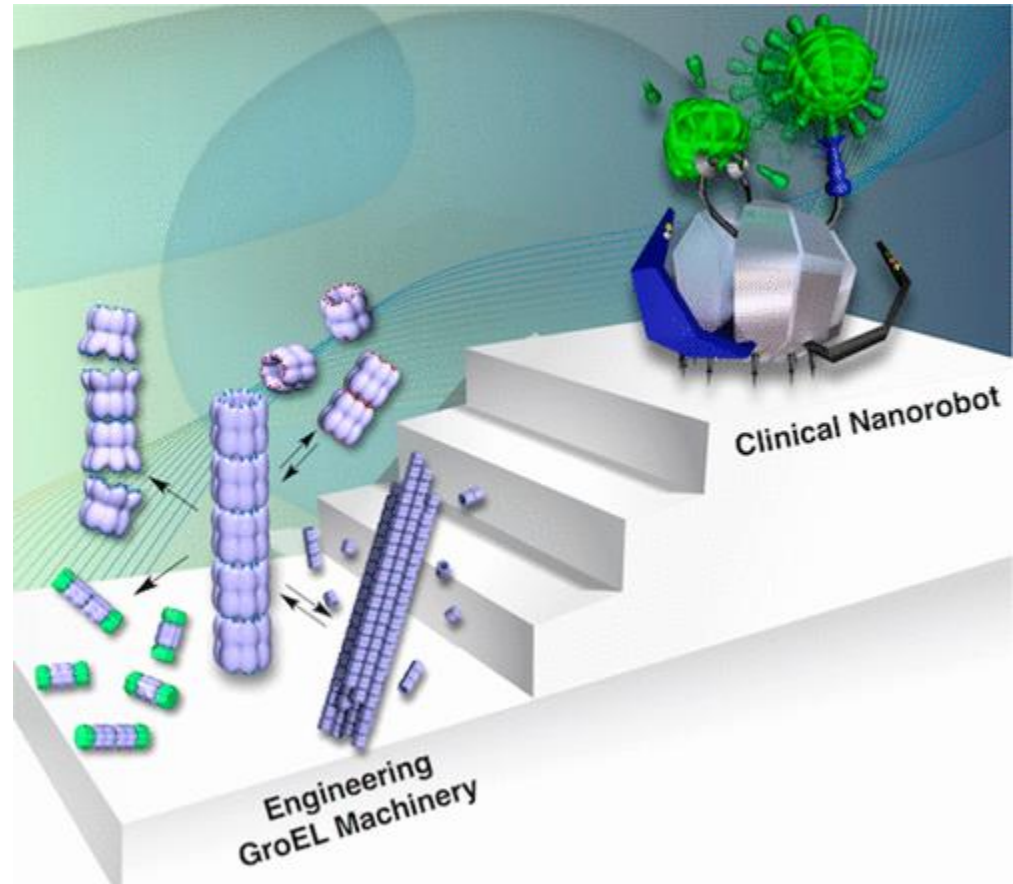


Universidade Federal do ABC

The Rise of Highly Efficient and Stable Perovskite Solar Cells



Swallowing a Surgeon: Toward Clinical Nanorobots



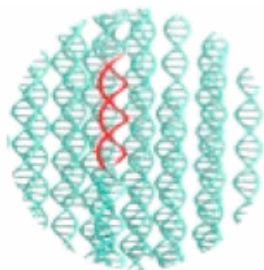


Universidade Federal do ABC

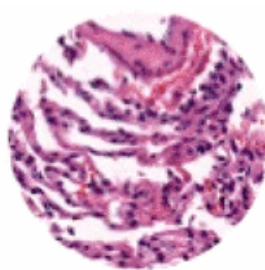
Advancing Ultrasensitive Molecular and Cellular Analysis Methods to Speed and Simplify the Diagnosis of Disease



Rapid detection of infectious pathogens

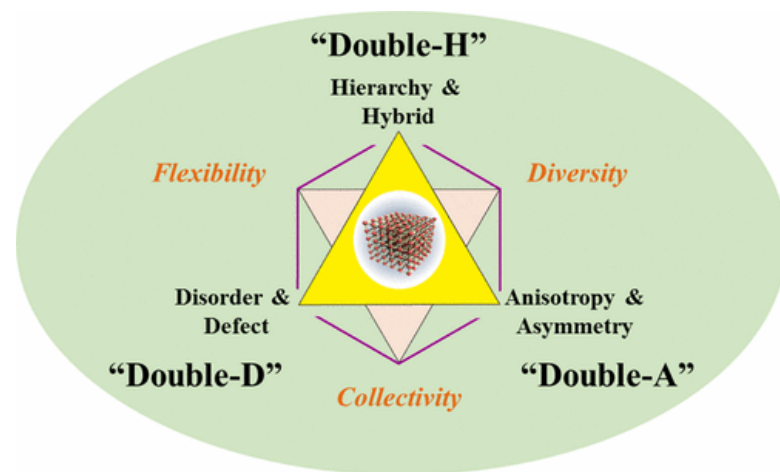


Molecular analysis for non-invasive cancer monitoring



Analysis of molecular transplant markers

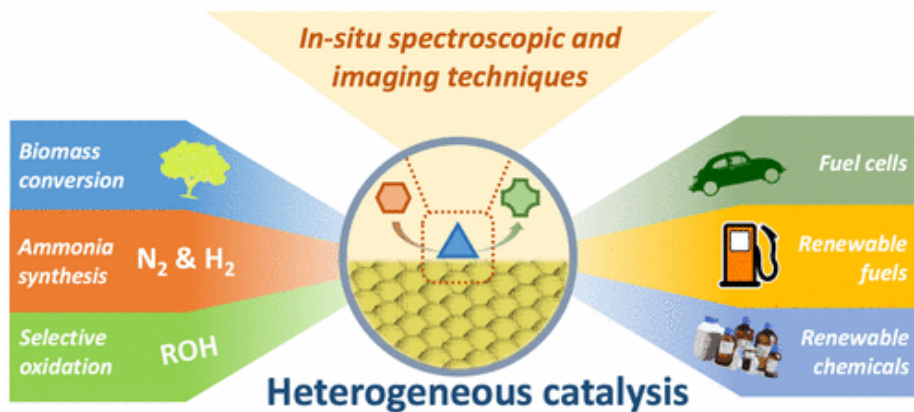
Future Porous Materials



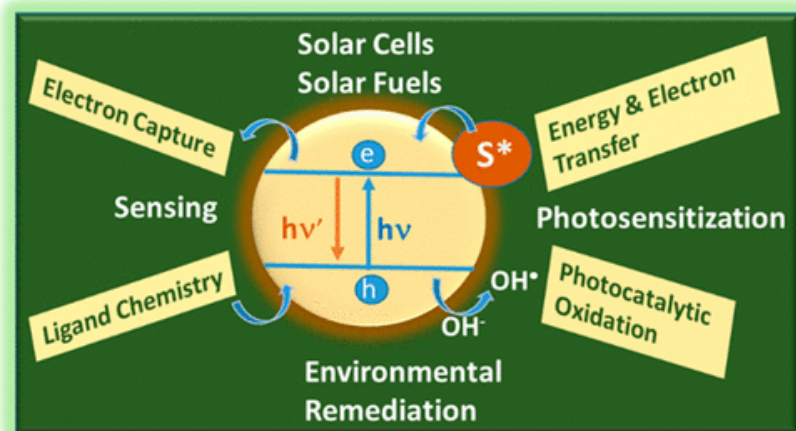


Universidade Federal do ABC

Heterogeneous Catalysis: A Central Science for a Sustainable Future



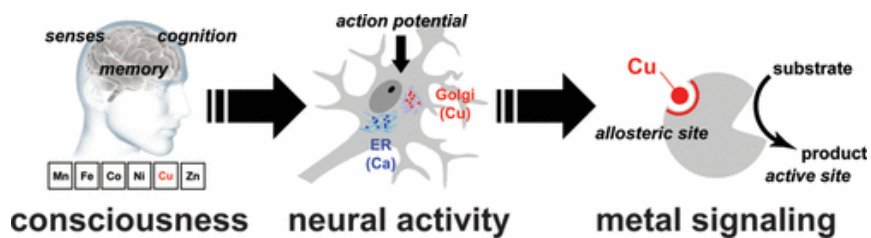
Semiconductor Surface Chemistry as Holy Grail in Photocatalysis and Photovoltaics





Universidade Federal do ABC

Bioinorganic Life and Neural Activity: Toward a Chemistry of Consciousness?



Self-Repairing Energy Materials: *Sine Qua Non* for a Sustainable Future

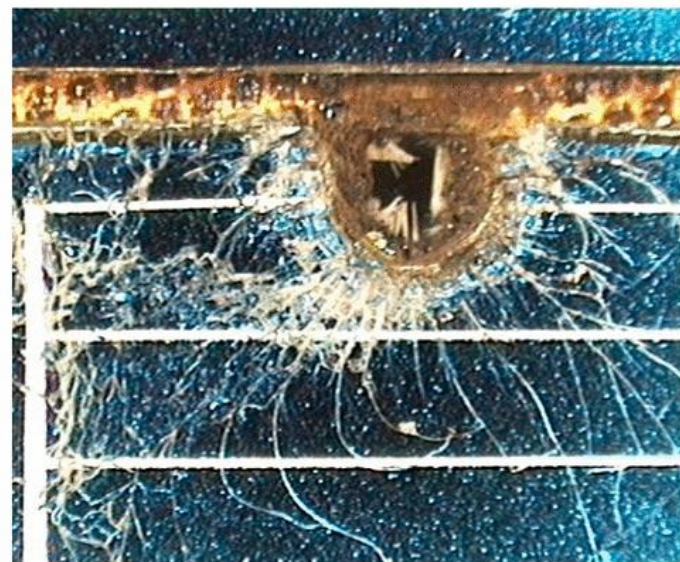
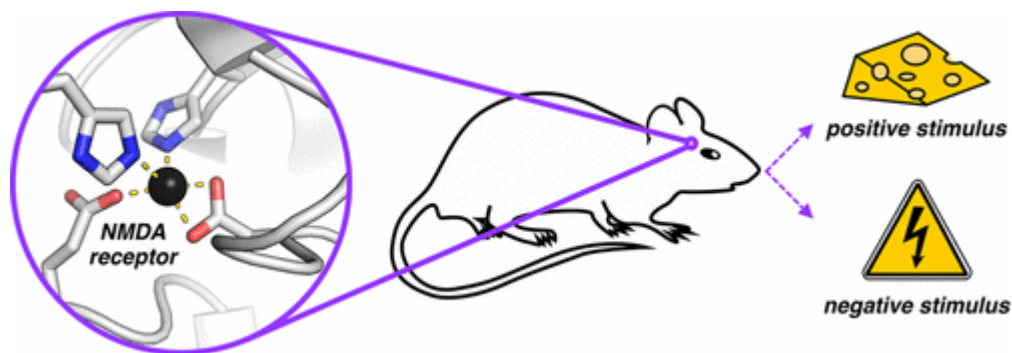


Photo: European Space Agency

Challenges and Opportunities in Brain Bioinorganic Chemistry



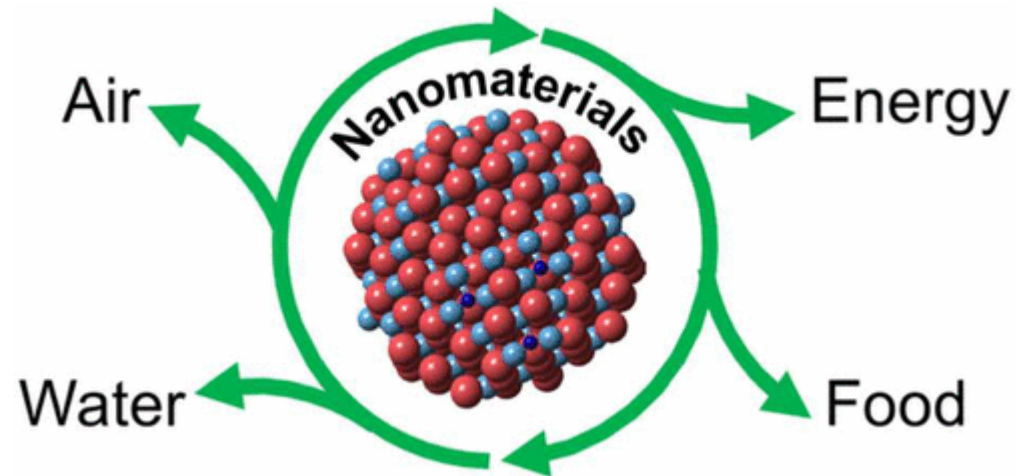


Universidade Federal do ABC

Solar Fuels and Solar Chemicals Industry



Nanomaterials and Global Sustainability





Universidade Federal do ABC





Universidade Federal do ABC

O que é uma transformação química?

A transformação química **sempre** envolve quebra e/ou formação de ligações químicas, e/ou variação de estado de oxidação.



Universidade Federal do ABC

Sobre a disciplina

- Docentes:
 - Prof. André Sarto Polo (Teoria e laboratório)
 - Profa. Luzia Novaki (Laboratório)
 - Profa. Heloisa Maltez (Laboratório)
- Aulas
 - Teoria: Quartas feiras (semana II) 08:00 – 10:00
 - Teoria: Sextas feiras (semanal) 10:00 – 12:00
 - Prática: Quintas feiras (semanal) 10:00 – 12:00
 - Atendimento extra-sala:
 - Prof. André Sarto Polo: segundas feiras 14-16 h Bloco B L202. (T e L)
 - Profa. Luzia Novaki: quintas feiras 14-15 h Bloco A **R** 607-3. (L)
 - Profa. Heloisa Maltez: quintas feiras 14-15 h Bloco A **S** 607-3. (L)

<https://sites.google.com/site/transformacoesquimicasufabc/>

<http://pesquisa.ufabc.edu.br/pologroup/>



Universidade Federal do ABC

Sobre a disciplina

- **Objetivos:**
 - Fornecer os fundamentos básicos de química para a compreensão de fenômenos envolvendo a relação entre as transformações que ocorrem no meio ambiente e as propriedades dos materiais envolvidos.
 - Correlacionar as propriedades macroscópicas dos materiais com propriedades microscópicas, permitindo ao estudante tomar consciência do papel desempenhado pela Química nas Ciências e também de sua importância na sociedade e no cotidiano.
 - Introduzir as técnicas básicas de laboratório.



Universidade Federal do ABC

Sobre a disciplina

- Ementa:
 - Definição de transformações químicas e sua relação com os seres vivos (e a diversificação das espécies), com o meio ambiente, com a indústria e com a sociedade. Ligações químicas e interações intermoleculares. Representação e classificação das transformações químicas. Entropia, entalpia, energia livre e espontaneidade das transformações. Balanço de massa e energia em transformações químicas. Cinética química, velocidade de reação, energia de ativação, catalisadores. Equilíbrio químico, equilíbrio ácido-base, soluções tampão, equilíbrios de solubilidade.



Universidade Federal do ABC

Cronograma

<i>Quartas feiras (semana II)</i>			<i>Sextas feiras (semanal)</i>	
Semana	Dia	Conteúdo	Dia	Conteúdo
1	13/fev		15/fev	Aula 01
2	20/fev	Aula 02	22/fev	Aula 03
3	27/fev		01/mar	Aula 04
4	06/mar	Feriado	08/mar	Aula 05
5	13/mar		15/mar	Aula 06
6	20/mar	Aula 07	22/mar	Prova 1
7	27/mar		29/mar	Aula 08
8	03/abr	Aula 09	05/abr	Aula 10
9	10/abr		12/abr	Aula 11
10	17/abr	Aula 12	19/abr	Feriado
11	24/abr		26/abr	Prova Lab
12	01/mai	Feriado	03/mai	Prova 2

Prova substitutiva: 13/05 – Segunda feira (10-12h)

Prova de recuperação – Data a ser definida – início do próximo quadrimestre



Aula	Conteúdo ministrado
1	Apresentação da disciplina. Definição de transformações químicas. Transformações Químicas vs. Transformações Físicas.
2	Interações intermoleculares; Reações químicas balanceamento, Cálculos estequiométricos (rendimento de reação, reagentes limitante e em excesso).
3	Reações químicas balanceamento, Cálculos estequiométricos (rendimento de reação, reagentes limitante e em excesso).
4	Introdução à termoquímica, entropia, entalpia e energia livre.
5	Lei de Hess, Combustão
6	Lei de Hess, Combustão
7	Energia livre e espontaneidade
8	Introdução à Cinética Química: Leis de Velocidade. Ordem de Reação.
9	Energia de ativação. Catalisadores homogêneos e heterogêneos.
10	Equilíbrio químico. Fatores que alteram o equilíbrio.
11	Breve introdução aos equilíbrios ácido-base.
12	Breve introdução aos equilíbrios de precipitação. Processos industriais: Solvay, Haber-Bosch e Ostwald.



Universidade Federal do ABC

Conceitos

P1	P2	A	B	C	D	F
A	A	A	A	B	C	D
B	A	A	B	B	C	D
C	A	A	B	C	D	D
D	B	B	B	C	D	F
F	C	C	C	D	D	F

LAB	TEO	A	B	C	D	F
A	A	A	A	B	C	
B	A	A	B	C	D	
C	B	B	B	C	D	
D	C	C	C	D	D	
F						



Universidade Federal do ABC

Bibliografia

- ATKINS, P., JONES, L. Princípios de Química, Questionando a vida e o meio ambiente, Bookman, Porto Alegre, 5ª Ed, 2011.
- KOTZ, J., TREICHEL, P., WEAVER, G. Química Geral e Reações Químicas, Vol. 1 e 2, Cengage Learning, São Paulo, 2010.
- BROWN, T. I., LEMAY Jr, H. E., BURSTEN, B. E., BURDGE, J. R. Química - a Ciência 59 Central, 9 ed., São Paulo: Pearson, 2005.
- James E. Brady, Joel W. Russell e John R. Holum, Química - a Matéria e Suas Transformações, 5ª ed, Volume 1 e 2, LTC Editora, Rio de Janeiro, 2012.



Universidade Federal do ABC

Representação de moléculas

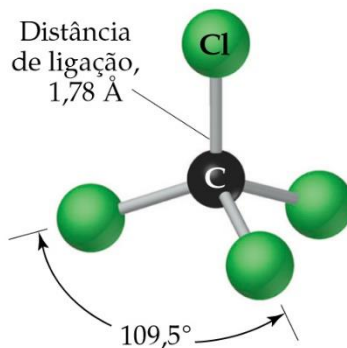


Universidade Federal do ABC

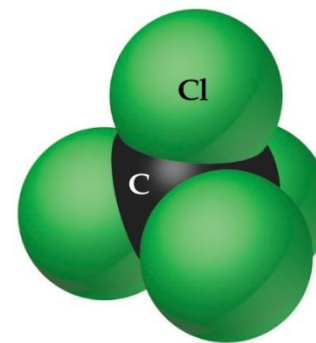
Representação tridimensional de espécies químicas



(a)



(b)



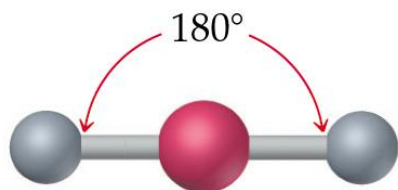
(c)

- Para prevermos a forma molecular, supomos que os elétrons de valência se repelem e, conseqüentemente, a molécula assume a geometria 3D que minimize essa repulsão.
- Denominamos este processo de teoria de **Repulsão do Par de Elétrons no Nível de Valência (RPENV)** ou **VSEPR (do inglês Valence Shell Electron Pair Repulsion)**.

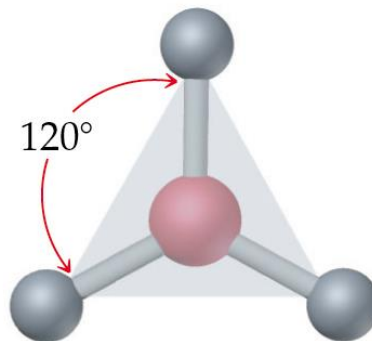


Universidade Federal do ABC

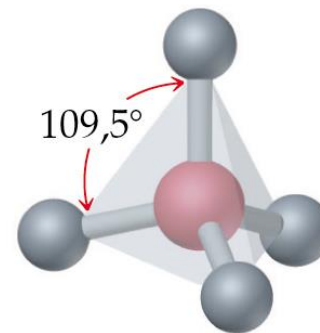
Representação tridimensional de espécies químicas



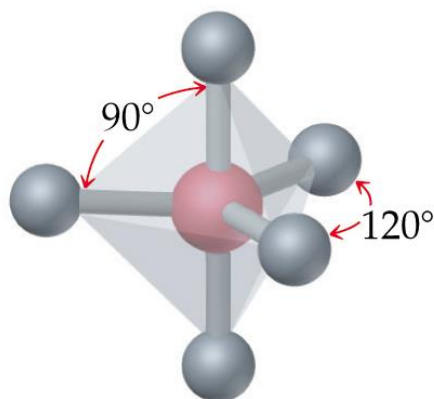
Linear



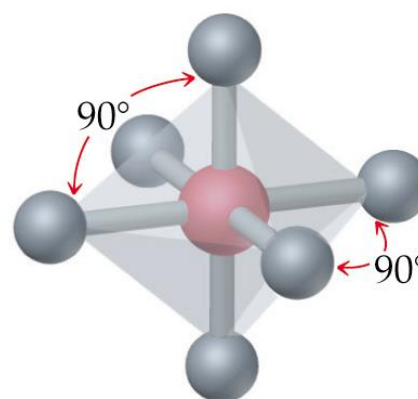
Trigonal plana



Tetraédrica



Bipiramidal trigonal



Octaédrica

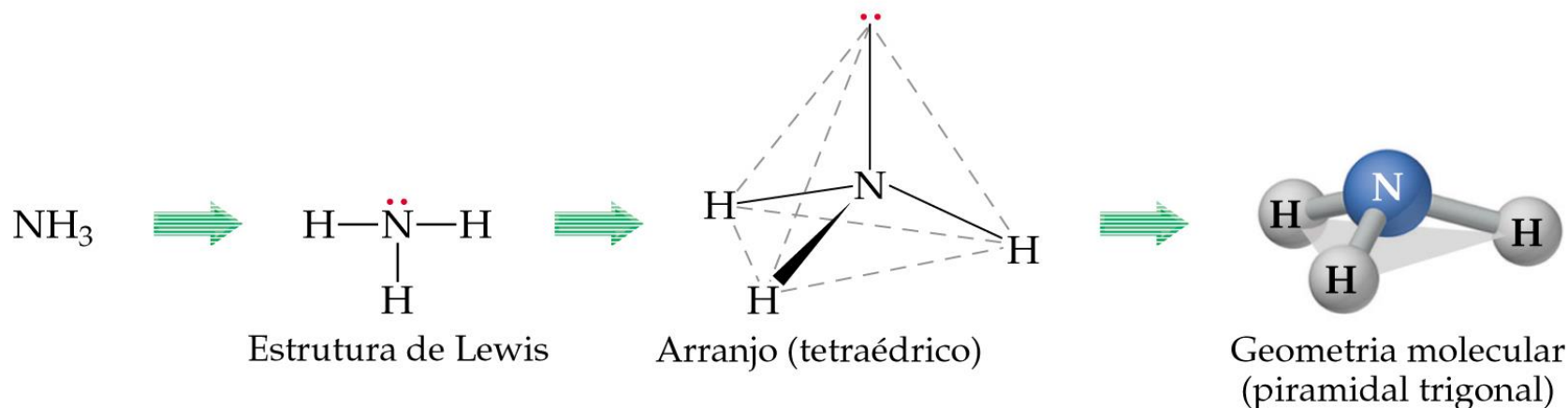


Universidade Federal do ABC

Efeito do par de elétrons isolados

isolados

Os pares de elétrons isolados do átomo central de uma molécula são regiões de densidade de elétrons elevada e devem ser considerados na identificação da forma molecular.

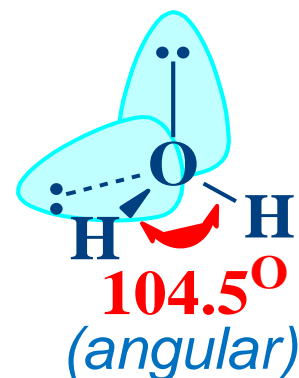
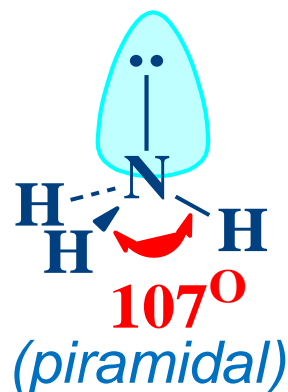
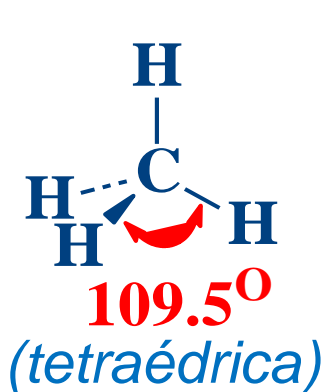




Universidade Federal do ABC

Efeito do par de elétrons isolados

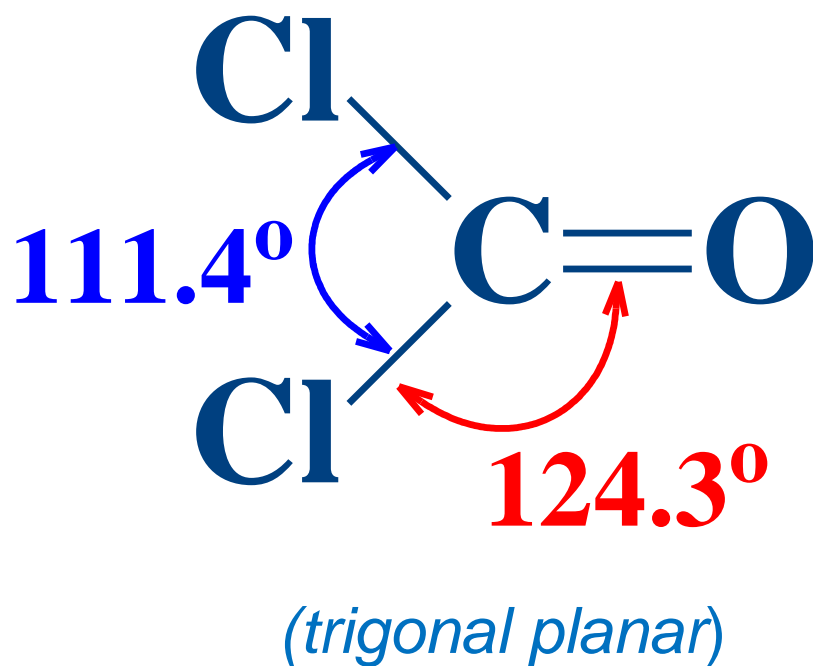
- O ângulo de ligação H-X-H diminui ao passarmos do C para o N e para o O:



- Conseqüentemente, os ângulos de ligação diminuem quando o número de pares de elétrons não-ligantes aumenta.

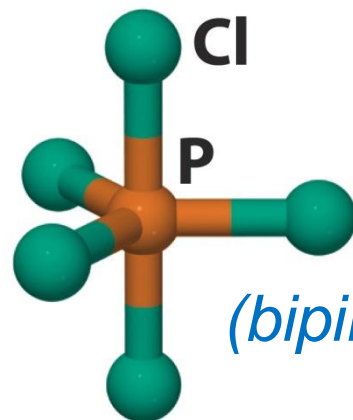
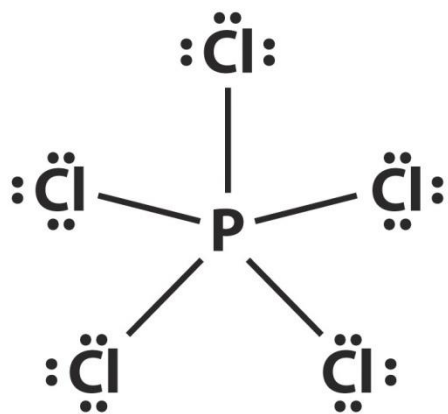


Efeito do par de elétrons isolados

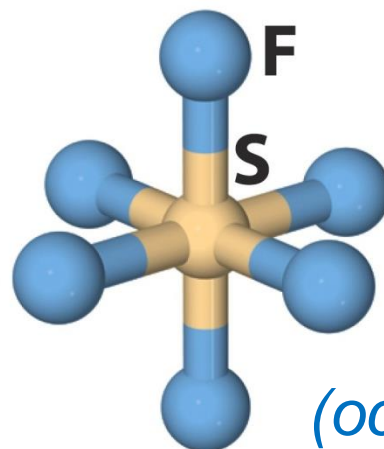
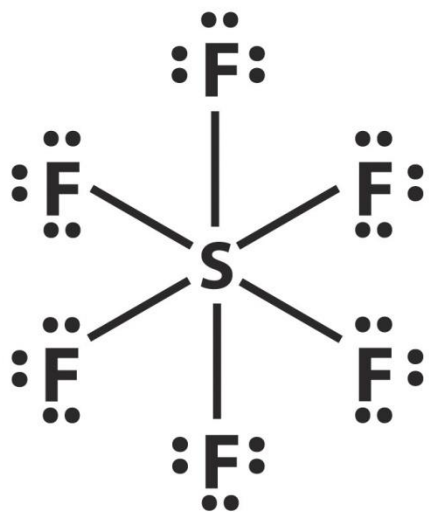




Efeito do par de elétrons isolados



(bipirâmide trigonal)

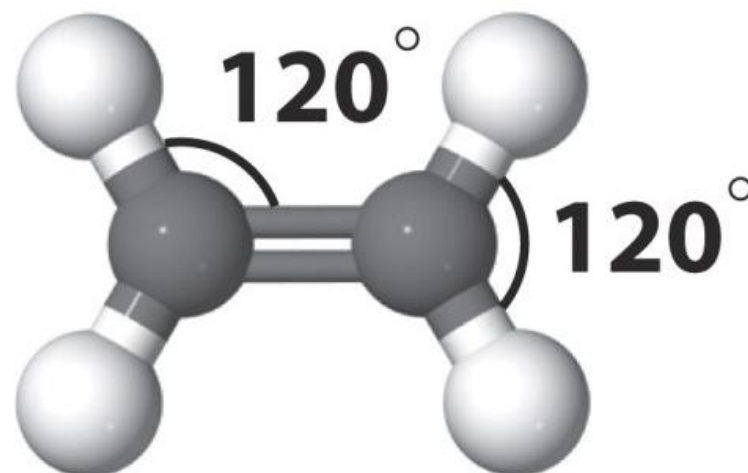
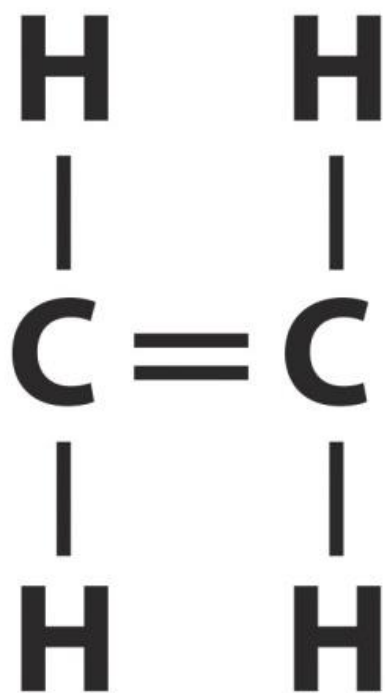


(octaédrica)



Universidade Federal do ABC

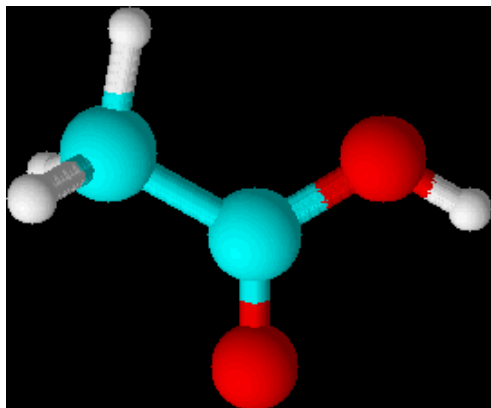
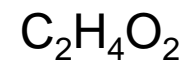
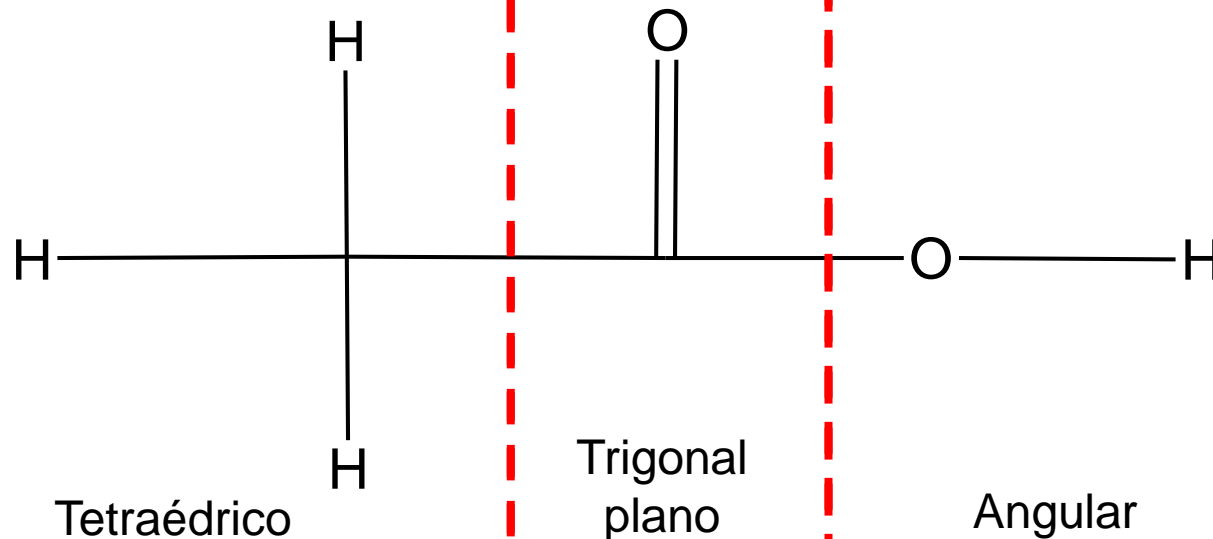
Moléculas maiores

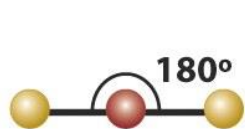




Universidade Federal do ABC

Moléculas maiores

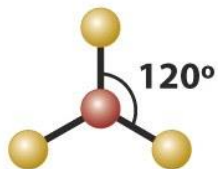




Linear



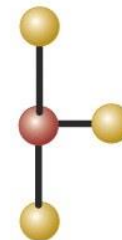
Angular



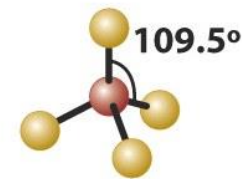
Trigonal planar



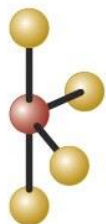
Trigonal pyramidal



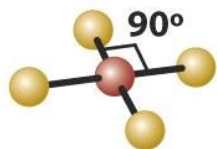
T-shaped



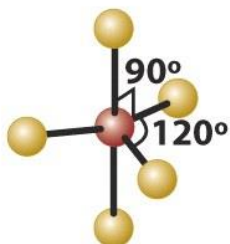
Tetrahedral



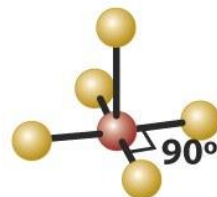
Seesaw



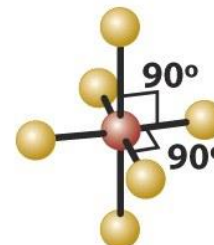
Square planar



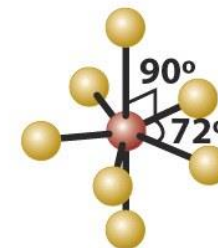
Trigonal bipyramidal



Square pyramidal



Octahedral



Pentagonal bipyramidal



Escreva as estruturas de Lewis para os seguintes compostos e indique, em cada caso, o formato espacial das moléculas:

(a) metanal ou formaldeído, H_2CO

(b) metanol, CH_3OH

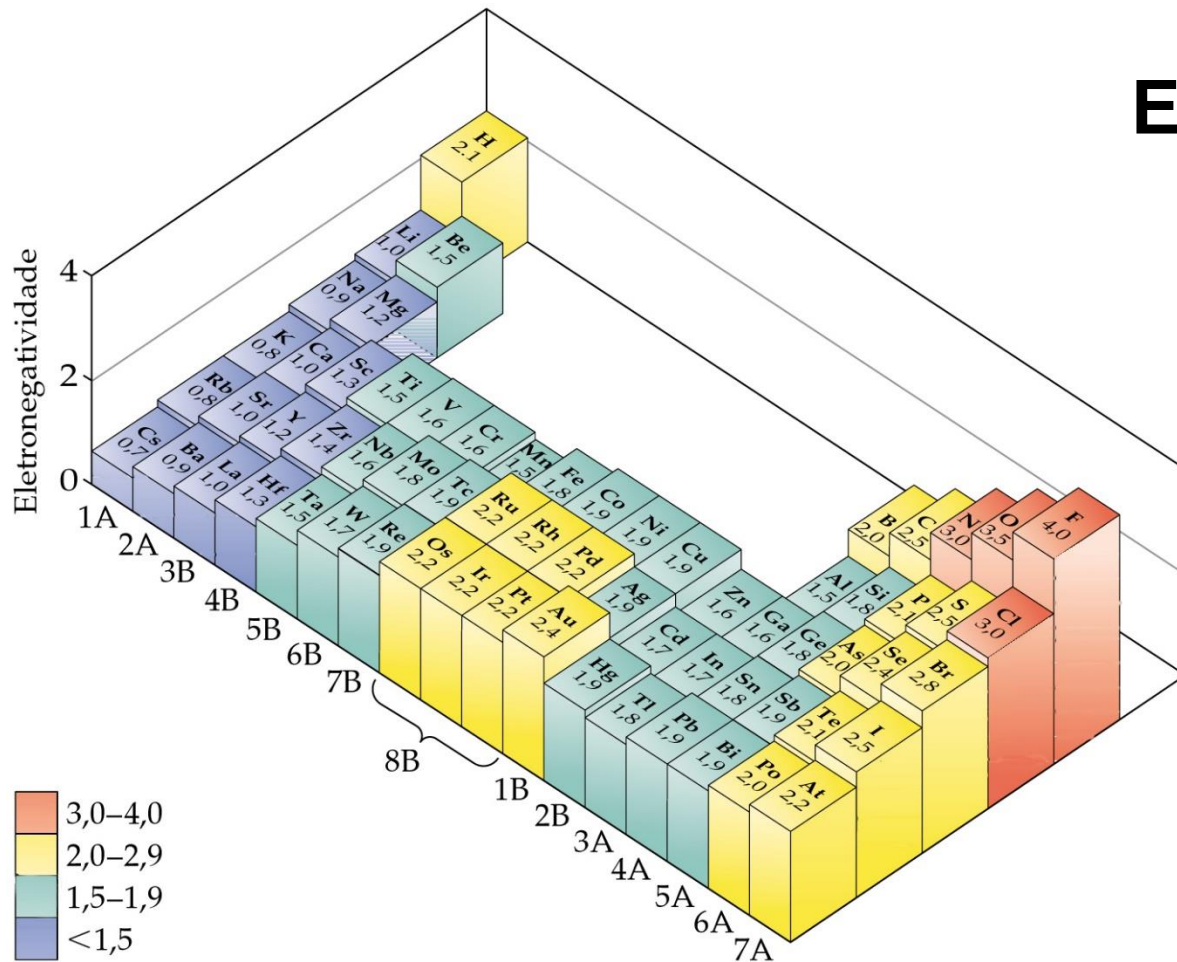


Polaridade da ligação e eletronegatividade

- **Eletronegatividade:** é a habilidade de um átomo de atrair elétrons para si *em certa molécula* .
- Pauling estabeleceu as eletronegatividades em uma escala de 0,7 (**Cs**) a **4,0 (F)**.
- A eletronegatividade aumenta:
 - ao longo de um período e
 - ao descermos em um grupo.



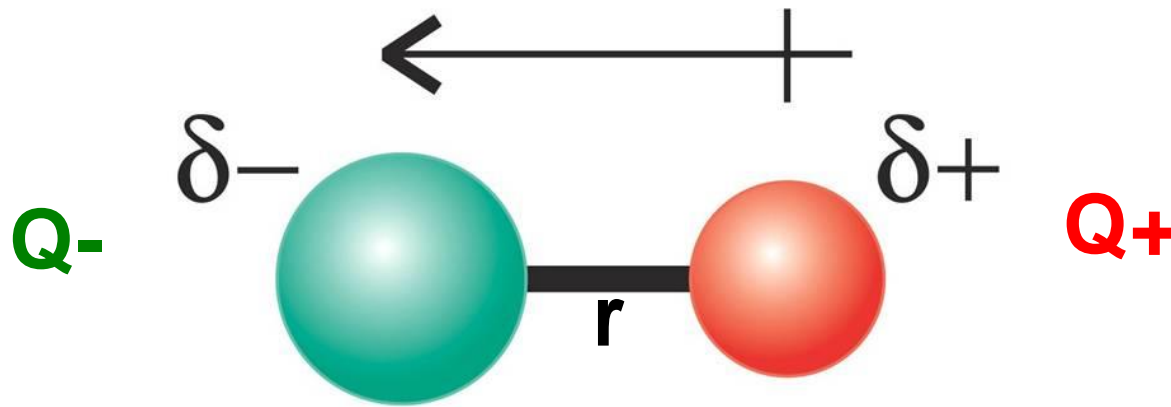
Polaridade da ligação e eletronegatividade



Eletronegatividade



Momento de dipolo



- O momento de dipolo, μ :

$$\mu = Qr$$

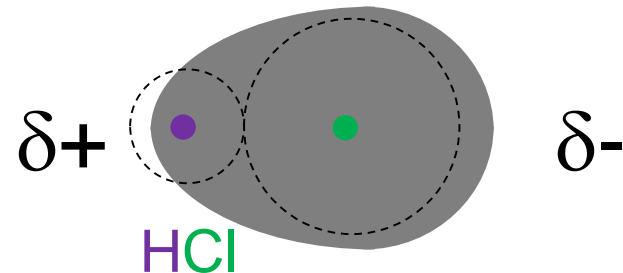
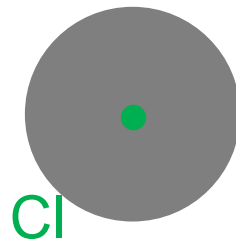
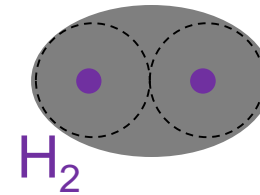
- Os momentos de dipolo são medidos em *debyes* (D).



Universidade Federal do ABC

Polaridade da ligação covalente

- Em algumas moléculas, os elétrons não estão "igualmente" distribuídos entre os dois átomos.
- "Distorção" da nuvem eletrônica: elétrons são atraídos para o lado do elemento mais eletronegativo.

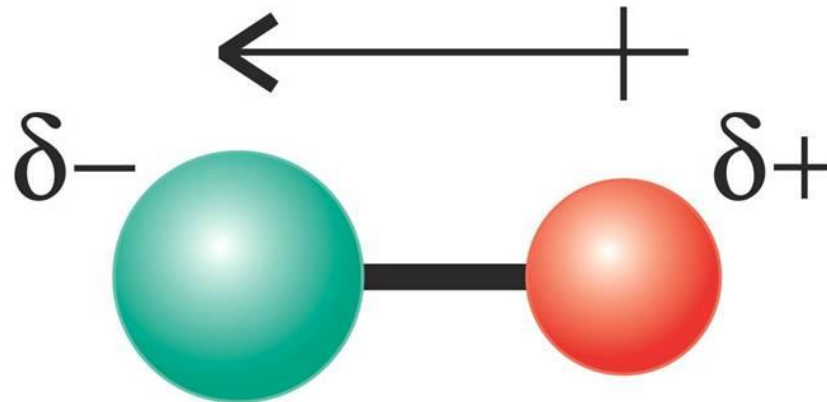


formação de
cargas parciais



Universidade Federal do ABC

Polaridade da ligação covalente



Exemplos:

H — H : apolar

Cl — Cl : apolar

H — Cl : polar

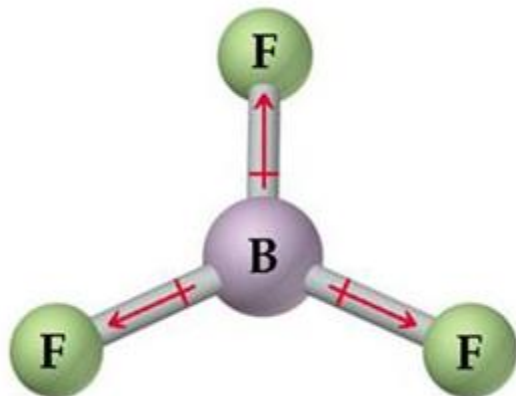
H — O : fortemente polar

H — C : fracamente polar (momento de dipolo é muito pequeno)



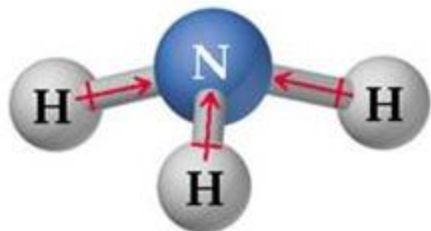
Universidade Federal do ABC

Geometria molecular e polaridade



geometria planar

- ligação B — F é polar
- vetor momento dipolar resultante = 0
- molécula é APOLAR

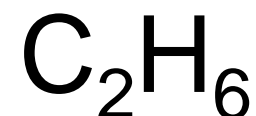


pirâmide trigonal

- ligação N — H é polar
- vetor momento dipolar resultante $\neq 0$
- molécula é POLAR



Determinar a polaridade de cada ligação e da molécula como um todo



IA	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.2	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII B			IB	II B	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5
Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2

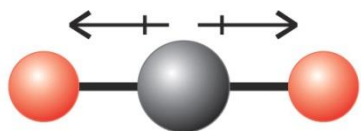
<1.0	1.5 - 1.9	2.5 - 2.9
1.0 - 1.4	2.0 - 2.4	3.0 - 4.0

escala de eletronegatividade

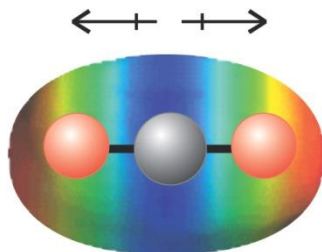


Universidade Federal do ABC

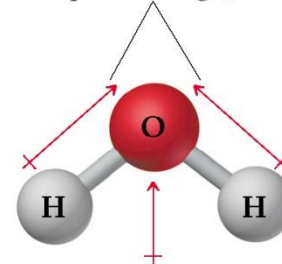
Geometria molecular e polaridade



Carbon dioxide, CO_2

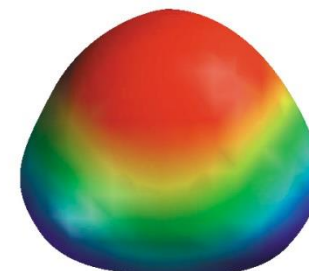


Dipolos de ligação

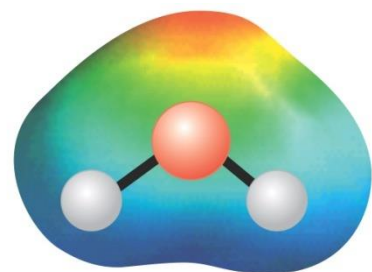


Momento de dipolo total

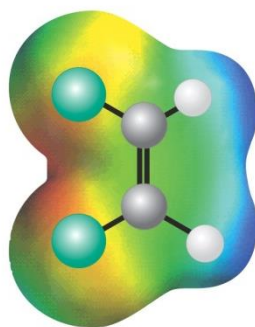
(a)



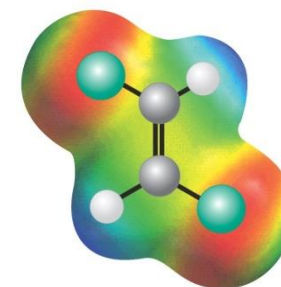
(b)



28 Water, H_2O



cis-Dichloroethene, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$



trans-Dichloroethene, $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$



Universidade Federal do ABC

Próxima aula

- Interações intermoleculares;
- Reações químicas
- Balanceamento de reações químicas
- Cálculos estequiométricos
 - rendimento de reação
 - reagentes limitante e em excesso