



Universidade Federal do ABC

# ***BCL 0307 – Transformações Químicas***

Prof. Dr. André Sarto Polo  
Bloco B – S. 1014 ou L202  
[andre.polo@ufabc.edu.br](mailto:andre.polo@ufabc.edu.br)

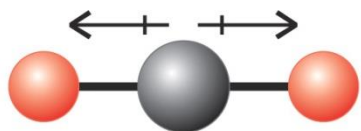
Aula 02



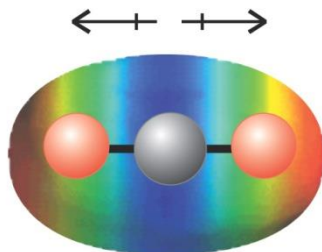


Universidade Federal do ABC

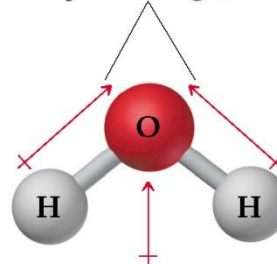
# Geometria molecular e polaridade



Carbon dioxide,  $\text{CO}_2$

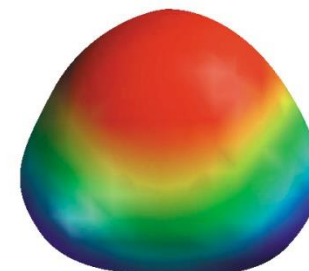


Dipolos de ligação

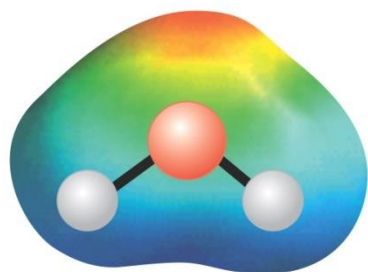


Momento de dipolo total

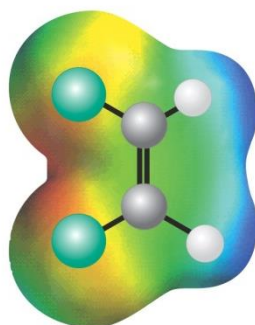
(a)



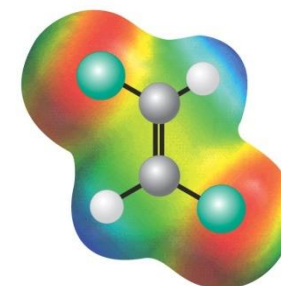
(b)



28 Water,  $\text{H}_2\text{O}$



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



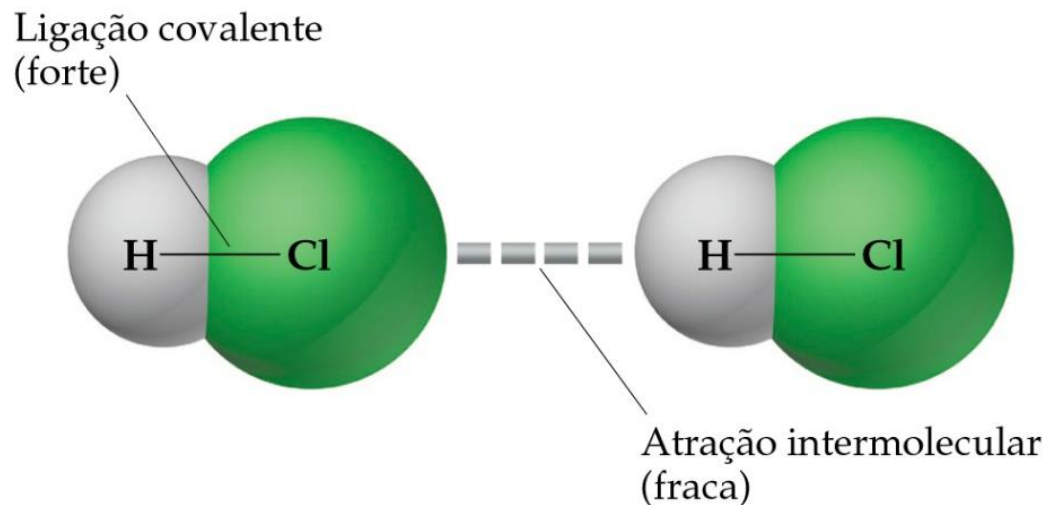
*trans*-Dichloroethene,  $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$



Universidade Federal do ABC

# Interações intermoleculares

- A ligação covalente que mantém uma molécula unida é uma força intramolecular.
- A atração entre moléculas é uma força intermolecular;
- As interações intermoleculares são muito mais fracas do que as intramoleculares (por exemplo,  $16 \text{ kJ mol}^{-1}$  versus  $431 \text{ kJ mol}^{-1}$  para o HCl).





## Transformações Químicas!!

- A **ligação** que mantém os átomos de uma molécula unidos é uma força **intramolecular**.

## Transformações Físicas!!

- A **atração entre moléculas** é uma força **intermolecular**. Quando uma substância funde ou entra em ebulição, forças **intermoleculares** são quebradas.



Universidade Federal do ABC

# Tipos de interações intermoleculares

forças de van der Waals

| Tipo de interação                          | Energia / $\text{kJ mol}^{-1}$ | Espécies que interagem           |
|--|--------------------------------|----------------------------------|
| Íon-íon                                    | 250                            | Somente íons                     |
| Íon-dipolo                                 | 15                             | Íons e moléculas polares         |
| Dipolo-dipolo                              | 2                              | Moléculas polares                |
| Ligação de Hidrogênio                      | 4 – 25                         | N, O, F; ligados a um átomo de H |
| Dispersão de London (dipolos instantâneos) | 2                              | Todos os tipos de moléculas      |

Todos são explicados por argumentos de natureza **eletrostática**.

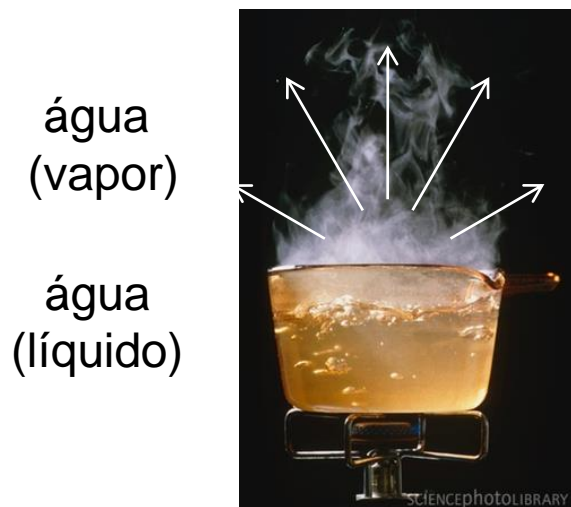




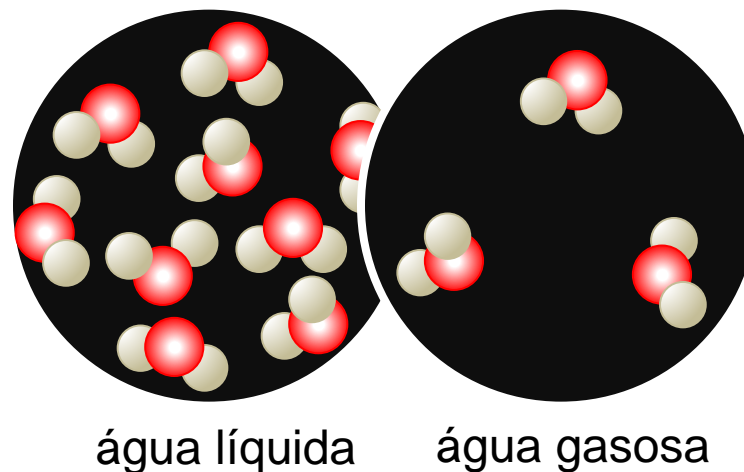
Universidade Federal do ABC

# Transformações físicas

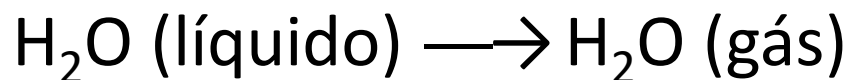
NÍVEL MACROSCÓPICO:  
(observação de mudanças)



NÍVEL SUBMICROSCÓPICO:  
(interpretação molecular)



REPRESENTAÇÃO:



Apesar de o estado físico ter mudado,  
a identidade da substância água é preservada.



Universidade Federal do ABC

# *Atuação das interações intermoleculares*

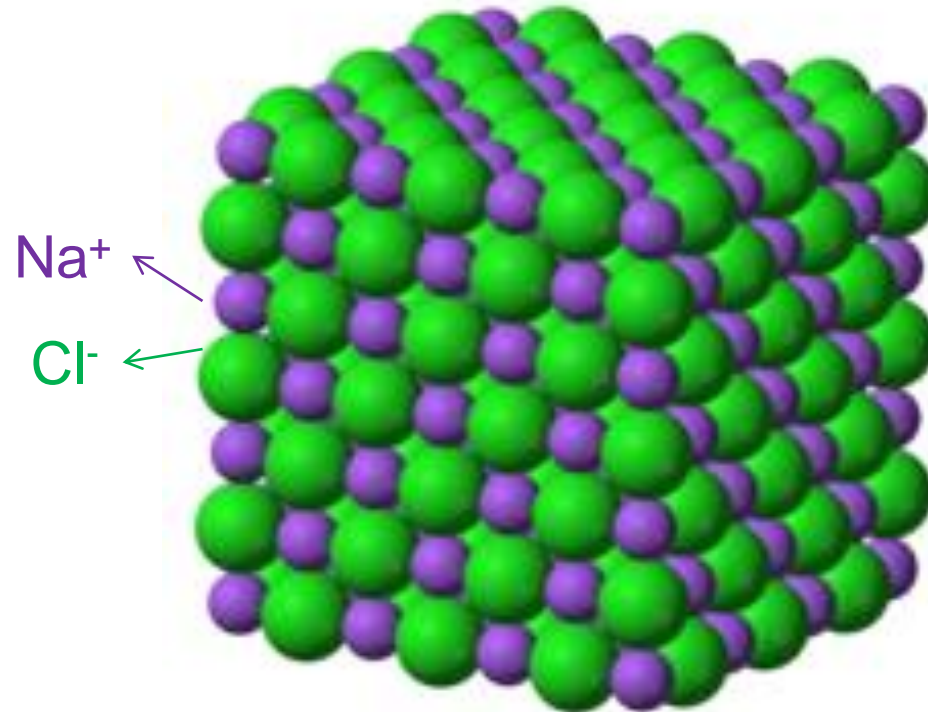
- Substâncias puras
  - Ebulição
  - Fusão
  - Viscosidade
  - Tensão superficial





Universidade Federal do ABC

# Interação íon-íon



composto iônico



Universidade Federal do ABC

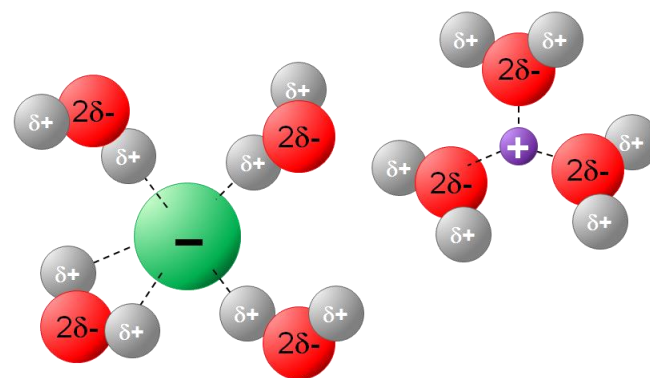
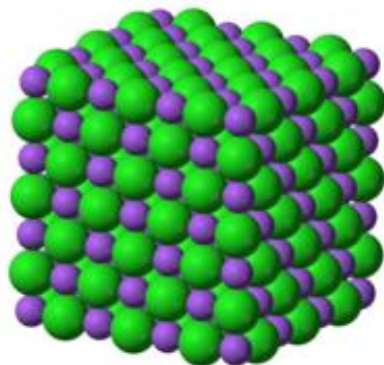
# Interação íon-dipolo

Solubilidade é determinada pelo balanço entre:

ENERGIA RETICULAR

e

ENERGIA DE HIDRATAÇÃO



interações íon-íon

interações íon-solvente



Universidade Federal do ABC

# Solubilidade de compostos iônicos

## NaCl

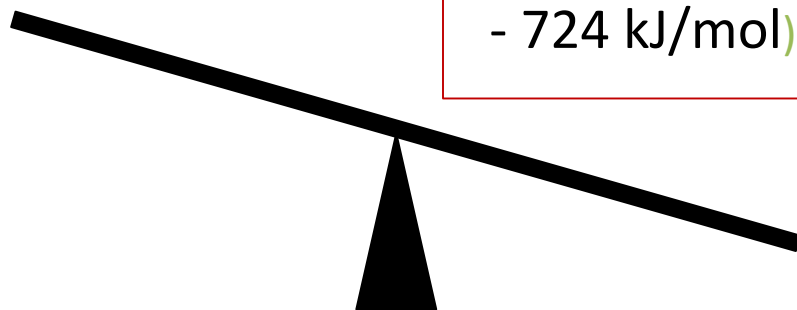
## AgCl

$E$  (reticular)

- 715 kJ/mol)

$E$  (hidratação)

- 724 kJ/mol)



MUITO SOLÚVEL

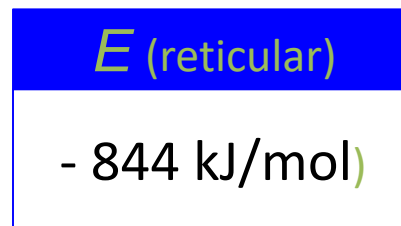
360 g NaCl / 1L H<sub>2</sub>O a 25°C

$E$  (hidratação)

- 788 kJ/mol)

$E$  (reticular)

- 844 kJ/mol)



POUCO SOLÚVEL

0,002 g AgCl / 1L H<sub>2</sub>O a 25°C



Universidade Federal do ABC

# *Solubilidade de compostos iônicos*

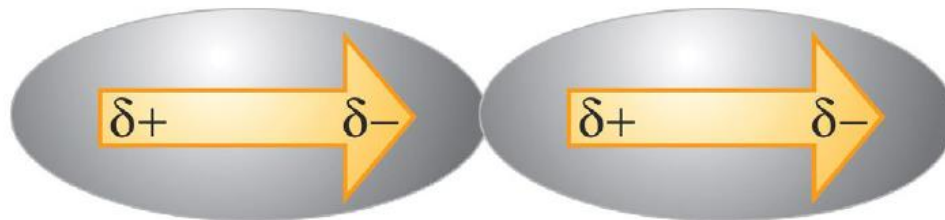
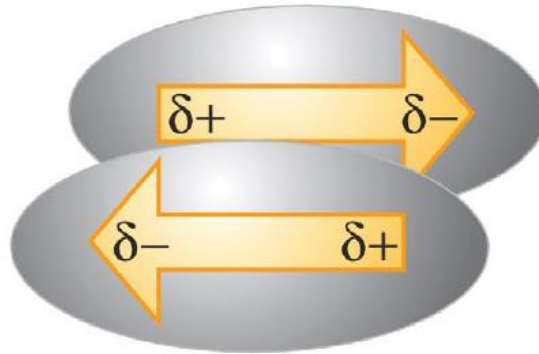
Como saber se um composto iônico é ou não solúvel em água?

- Estrutura (relação carga/raio e empacotamento dos íons no retículo).
- Dados termodinâmicos (energias tabeladas).
- Experimento (TESTANDO NA PRÁTICA NO LABORATÓRIO).



Universidade Federal do ABC

# Interações de van der Waals: dipolo-dipolo





Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio

- Tipo especial de interação dipolo-dipolo.
- Específica para moléculas contendo um átomo de H ligado a átomos de F, O ou N (três elementos mais eletronegativos da tabela periódica).
- Interação intermolecular MUITO FORTE. ( $[\text{HF}_2]^- \sim 165 \text{ kJ mol}^{-1}$ )

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

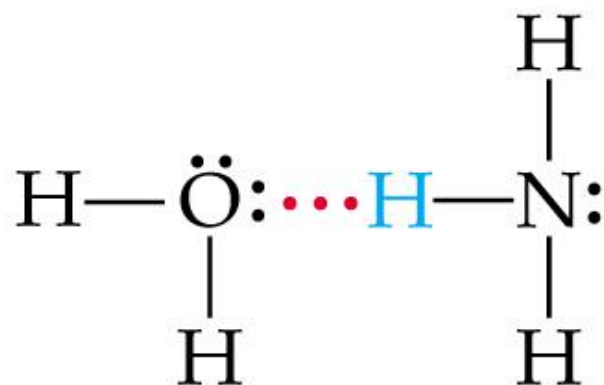
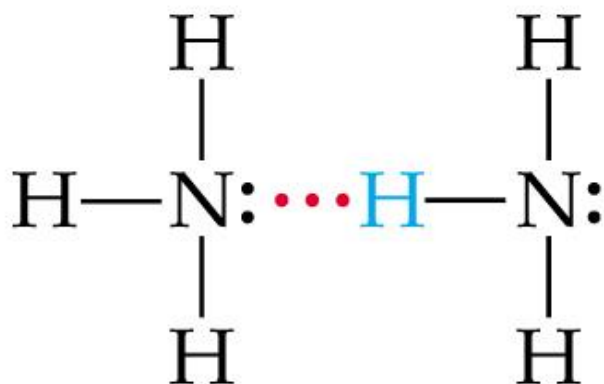
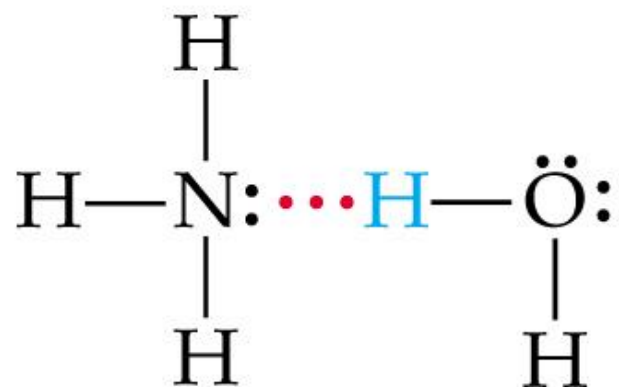
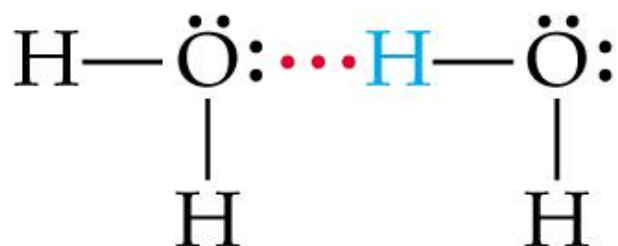
  

|           |           |           |
|-----------|-----------|-----------|
| <1.0      | 1.5 – 1.9 | 2.5 – 2.9 |
| 1.0 – 1.4 | 2.0 – 2.4 | 3.0 – 4.0 |



Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio

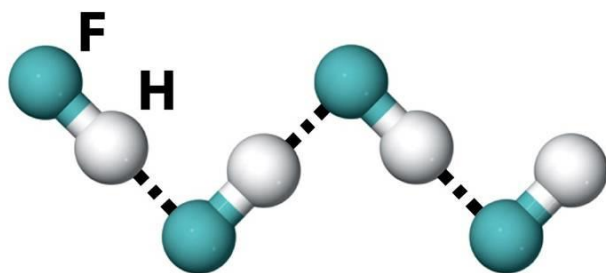




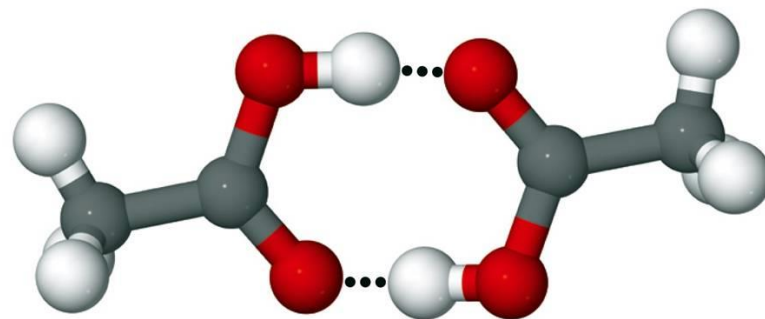


Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio



**11** Hydrogen Fluoride,  $(\text{HF})_n$



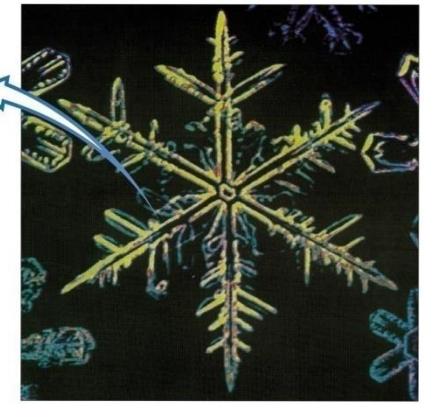
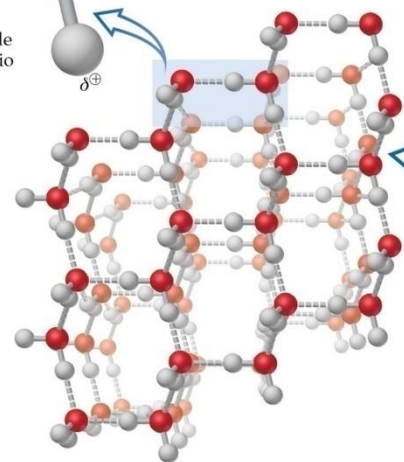
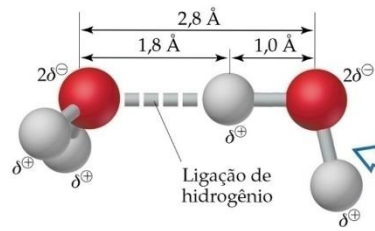
**12** Acetic acid dimer

Ocorrem em fase gasosa também!

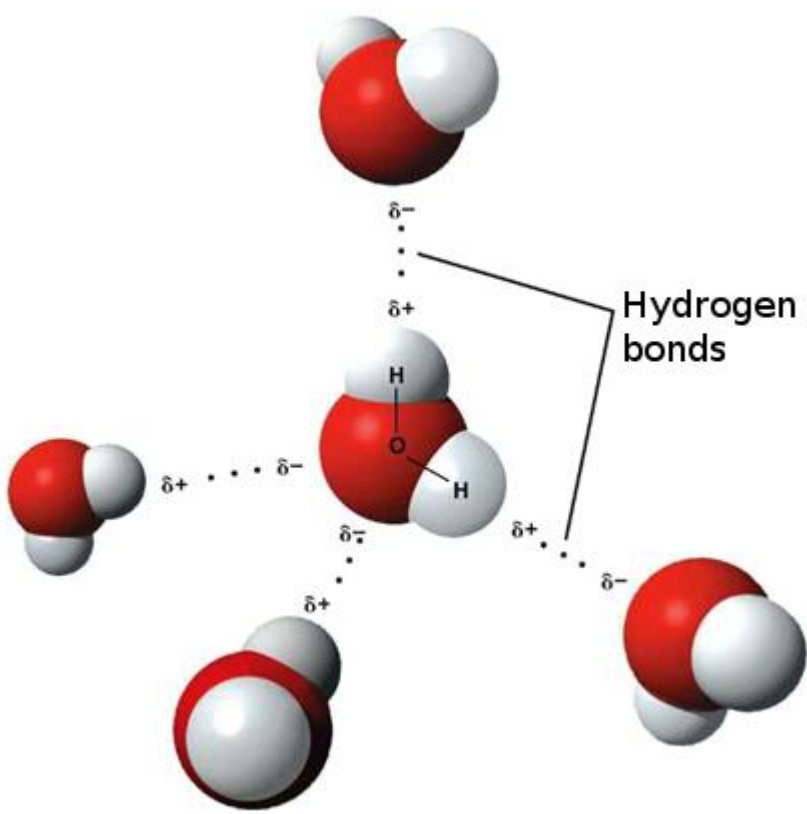


Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio



(c)



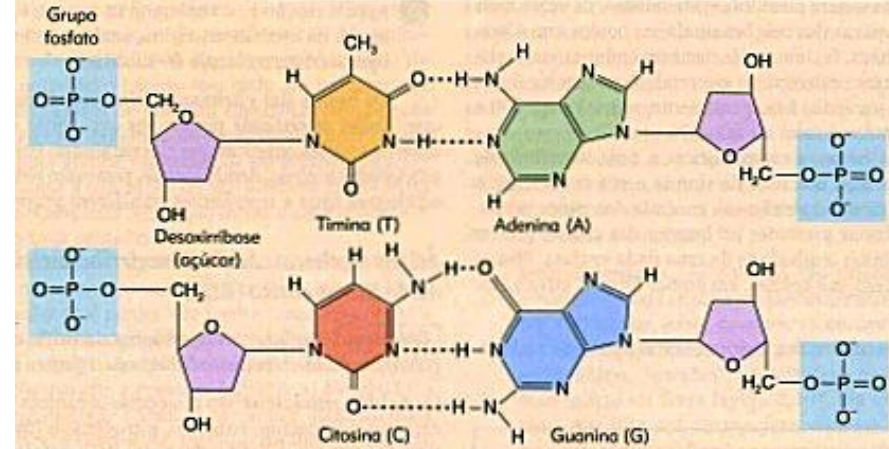
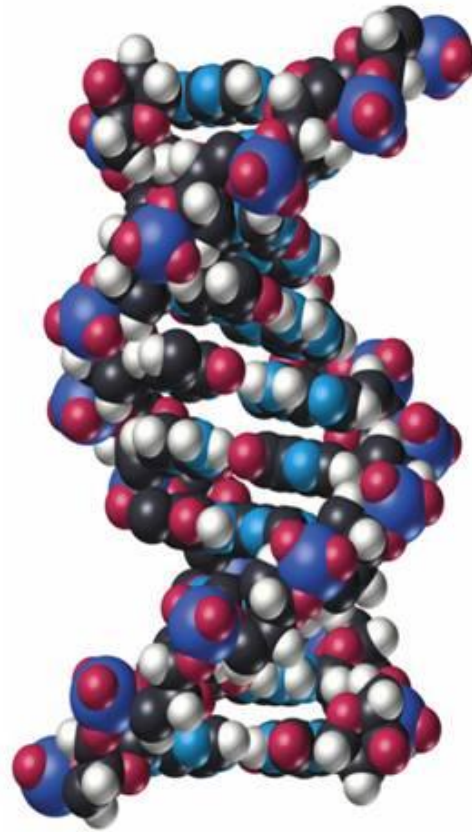
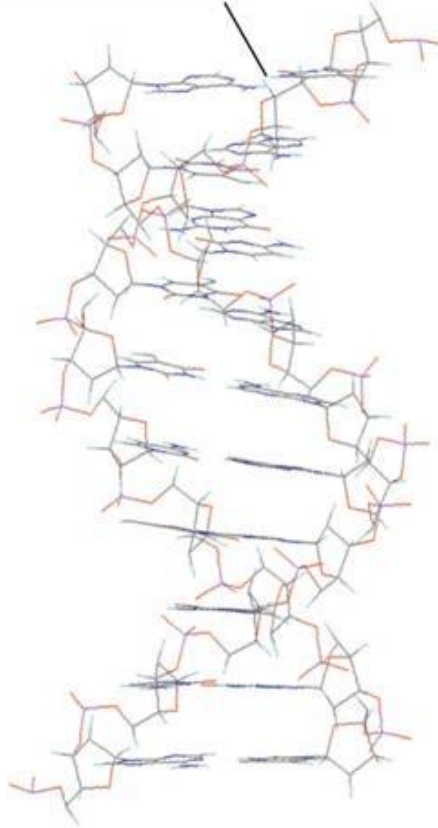
(b)



Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio

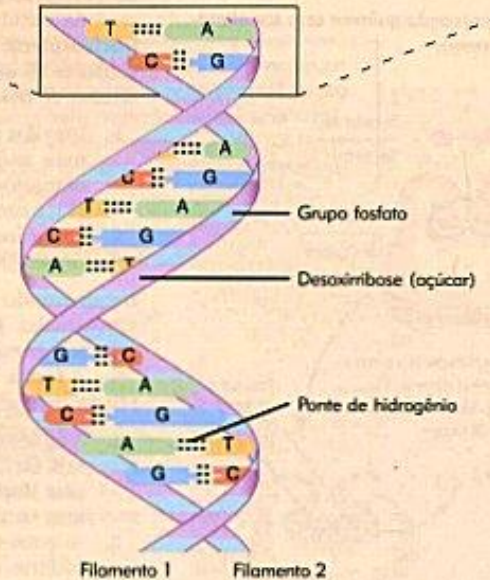
Hydrogen bond  
between chains



(a) Componentes dos nucleotídeos

Chave

- A Adenina
- G Guanina
- T Timina
- C Citosina



(b) Parte de uma molécula de DNA

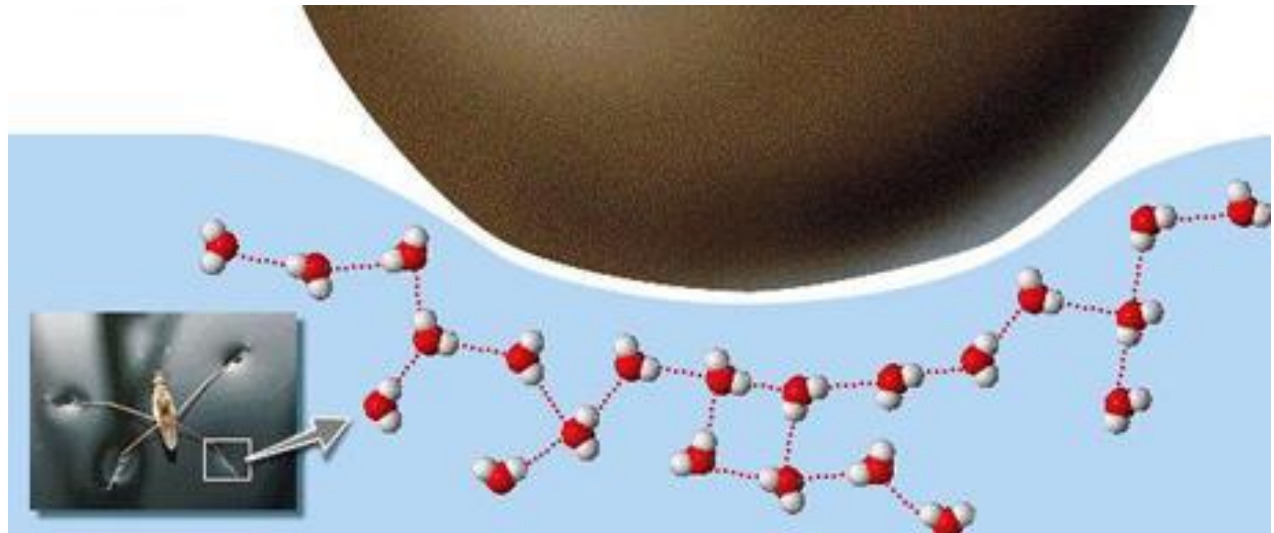




Universidade Federal do ABC

# Ligações de Hidrogênio

- Tensão superficial da água



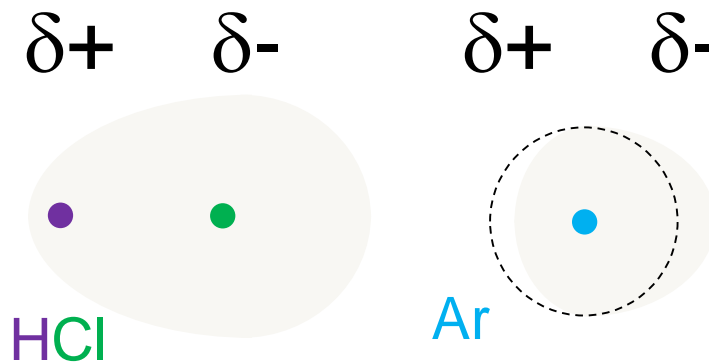
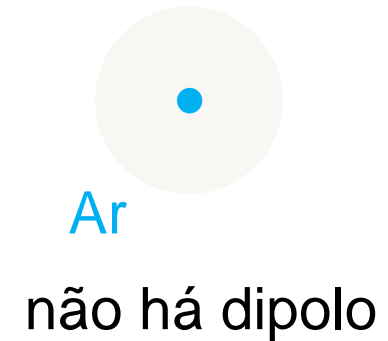
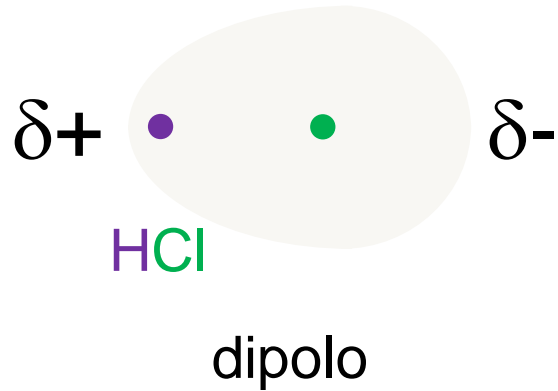
- Interações intermoleculares criam uma espécie de “pele” na superfície do líquido.



Universidade Federal do ABC

# Dispersões de London

- Dipolo-dipolo induzido



Quando se aproximam: o dipolo permanente da molécula de HCl induz a formação de dipolo num átomo de argônio próximo.



Universidade Federal do ABC

# Dispersões de London

- Dipolo induzido-dipolo induzido



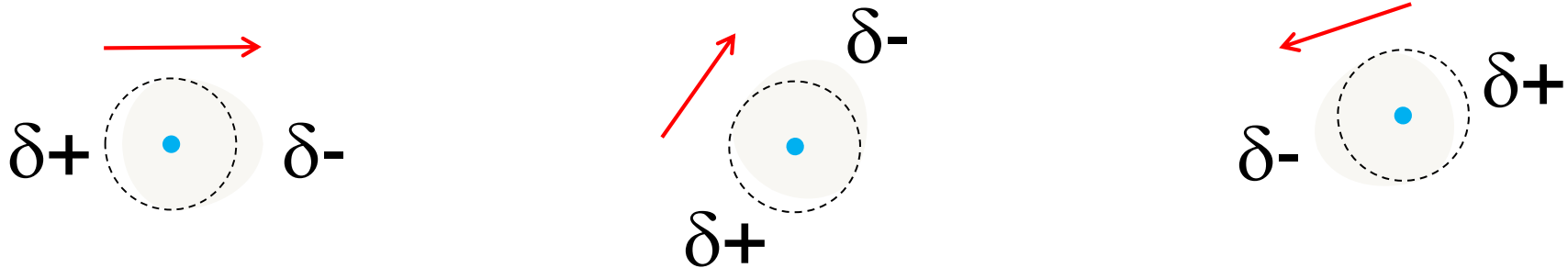


Universidade Federal do ABC

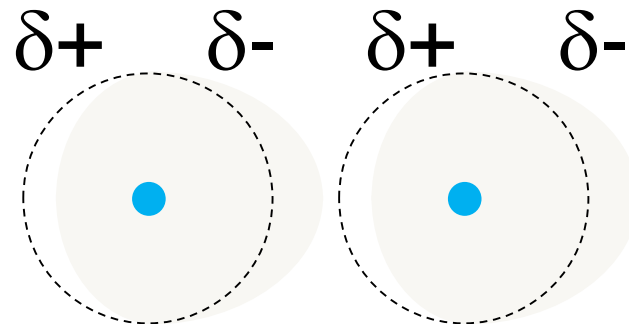
# Dispersões de London

- Dipolo instantâneo-dipolo induzido

➤ A nuvem eletrônica de átomos e moléculas pode sofrer deformações ao acaso conforme os elétrons se movimentam, gerando um dipolo instantâneo.



➤ Um dipolo instantâneo pode induzir outro dipolo instantâneo na partícula adjacente.



interação dipolo  
instantâneo –  
dipolo induzido

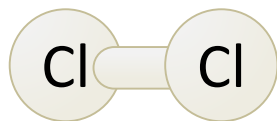




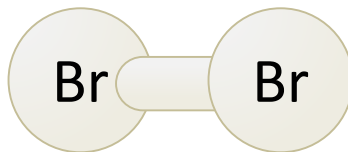
Universidade Federal do ABC

# Dispersões de London

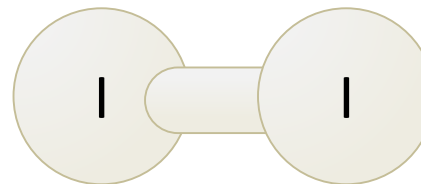
- Dipolo instantâneo-dipolo induzido



Cl (17 elétrons)



Br (35 elétrons)



I (53 elétrons)

|   |                |              |
|---|----------------|--------------|
|   | 17             | 2            |
|   |                | He           |
|   |                | helium       |
|   |                | 4.002 602(2) |
|   | 9              | 10           |
|   | F              | Ne           |
|   | fluorine       | neon         |
| 0 | 18.998 4032(5) | 20.1797(6)   |
|   | 17             | 18           |
|   | Cl             | Ar           |
|   | chlorine       | argon        |
| 0 | 35.453(2)      | 39.948(1)    |
|   | 35             | 36           |
|   | Br             | Kr           |
| 1 | bromine        | krypton      |
|   | 79.904(1)      | 83.796(2)    |

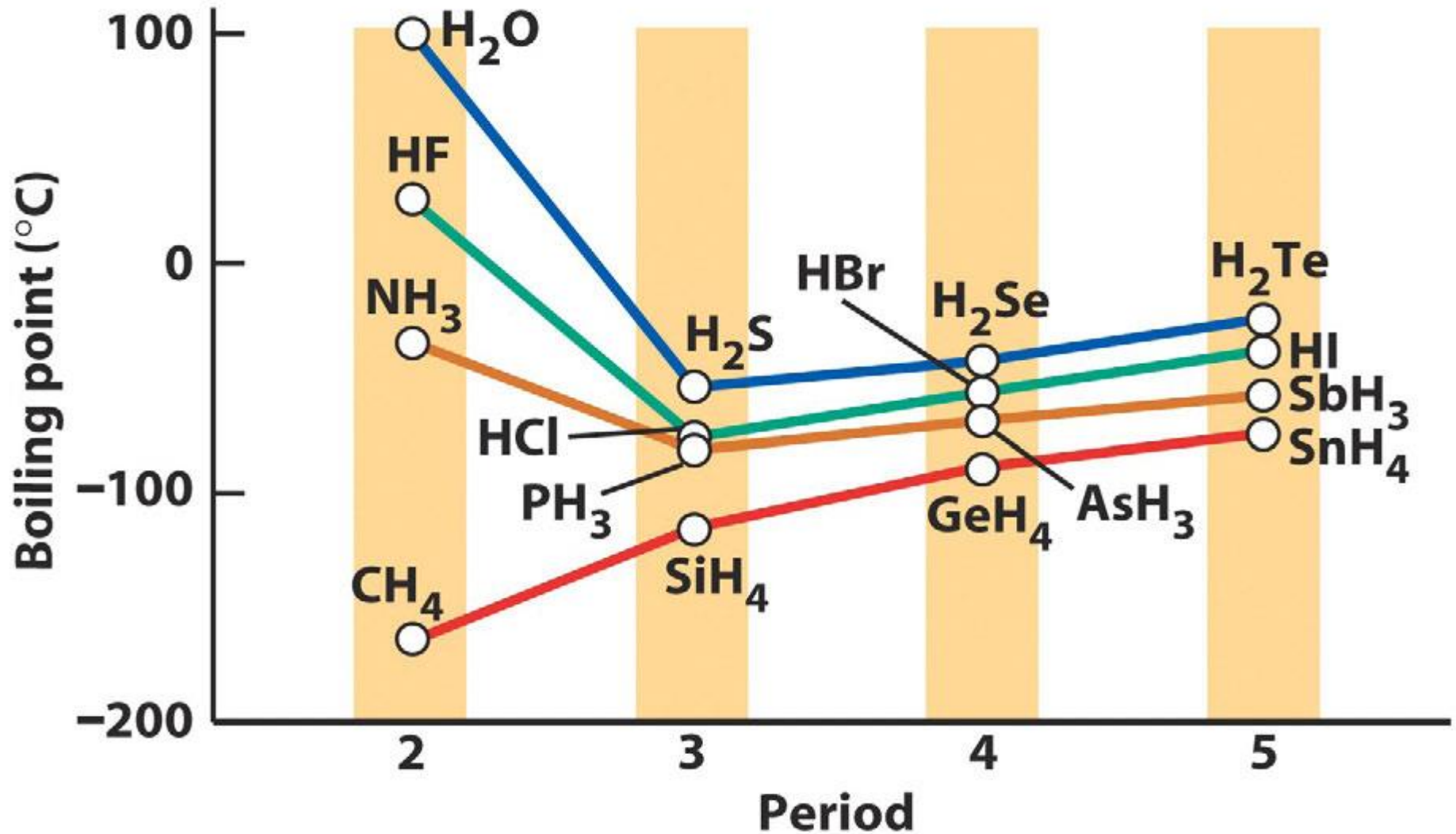
➤ Intensidade das forças de London aumenta com o aumento da polarizabilidade das moléculas.

➤ Polarizabilidade aumenta conforme o número de elétrons aumenta (nuvem eletrônica maior é mais "deformável").



Universidade Federal do ABC

# Pontos de ebulição e interações intermoleculares

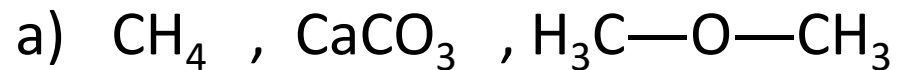




Universidade Federal do ABC

# Exercício

Colocar as substâncias abaixo em ordem crescente de ponto de ebulição e justificar a resposta:





Universidade Federal do ABC

# Atuação das interações intermoleculares

- Substâncias puras
  - Ebulição
  - Fusão
  - Viscosidade
  - Tensão superficial
- Misturas
  - Solubilidade
  - Miscibilidade



Universidade Federal do ABC

# Solubilidade

- **Solução:** mistura homogênea em nível molecular
  - água e açúcar
  - tinta de parede

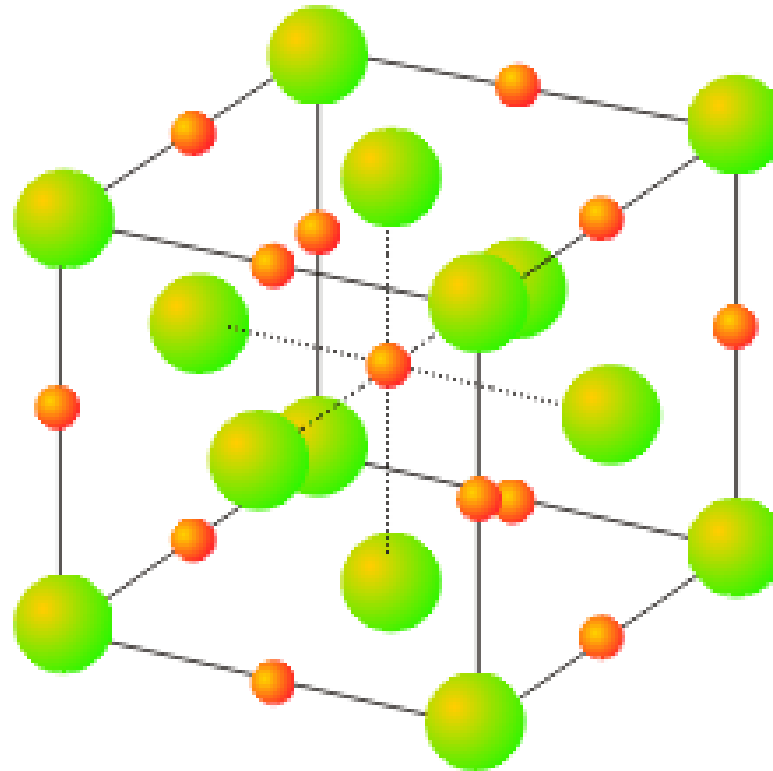


- **Solvente:** componente em maior quantidade na solução
- **Soluto:** componente em menor quantidade na solução



Universidade Federal do ABC

# Exemplo 1: Dissolução do NaCl

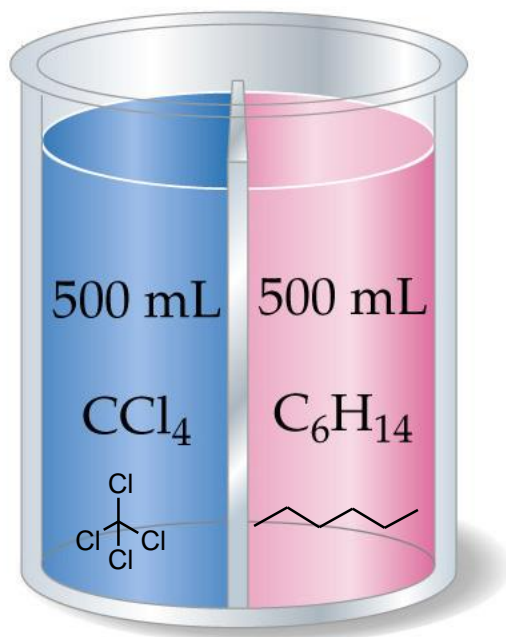


Filme ([www.prenhall.com/brown\\_br](http://www.prenhall.com/brown_br) - Cap.13)



Universidade Federal do ABC

# Exemplo 2: Mistura de $\text{CCl}_4$ e Hexano







Universidade Federal do ABC

# *Fatores que afetam a solubilidade*

- Interações intermoleculares
  - Soluto – Soluto
  - Solvente – solvente
  - Soluto – solvente



Universidade Federal do ABC

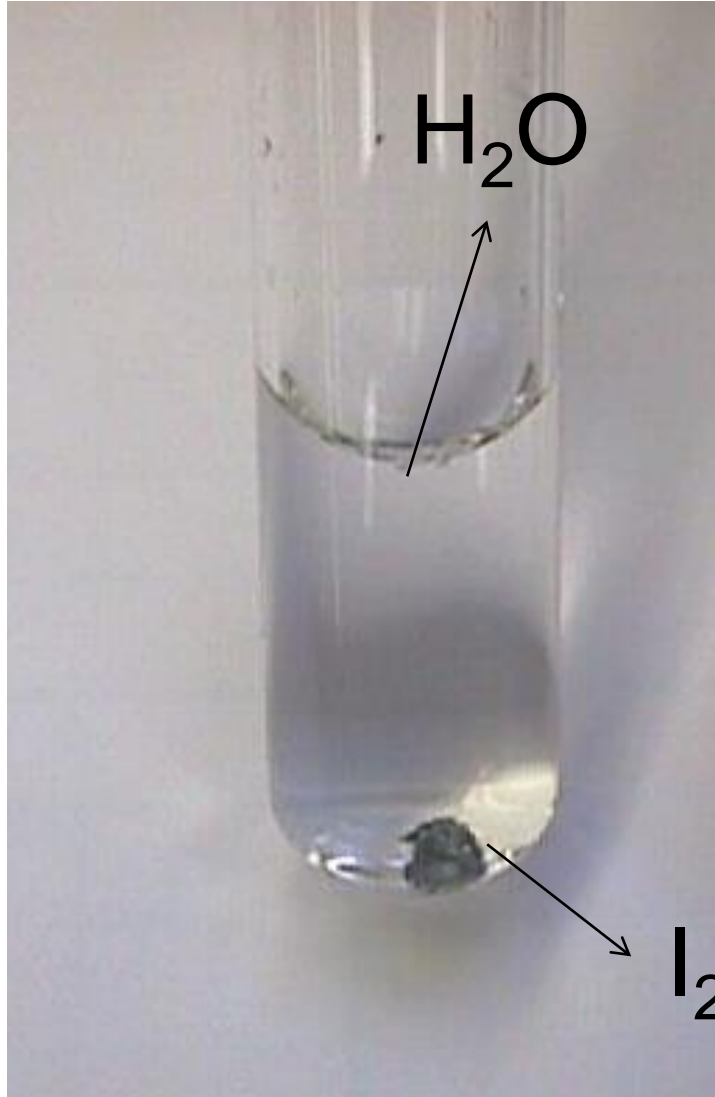
# *Solubilidade*

Semelhante dissolve semelhante



Universidade Federal do ABC

# Competição entre forças intermoleculares e solubilidade



## Interações intermoleculares:

- Solvente
  - ligações de hidrogênio
- Solute
  - dispersões de London
- Mistura
  - dipolo permanente-dipolo induzido

Iodo não é solúvel em água porque as interações água-água e iodo-iodo são mais fortes que as interações água-iodo.



Universidade Federal do ABC

# Competição entre forças intermoleculares e solubilidade



## Interações intermoleculares:

- Solvente
  - dispersões de London
- Soluto
  - dispersões de London
- Mistura
  - dispersões de London

Iodo é solúvel em  $\text{CCl}_4$  (as 3 interações acima são muito semelhantes).



Universidade Federal do ABC

# *Mais alguns exemplos*

- Solubilidade de alguns compostos em água
  - NaCl = alta
  - Etanol = alta
  - AgCl = baixa
  - CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>Cl = baixa



Universidade Federal do ABC

# *Solubilidade*

~~Semelhante dissolve semelhante~~



Universidade Federal do ABC

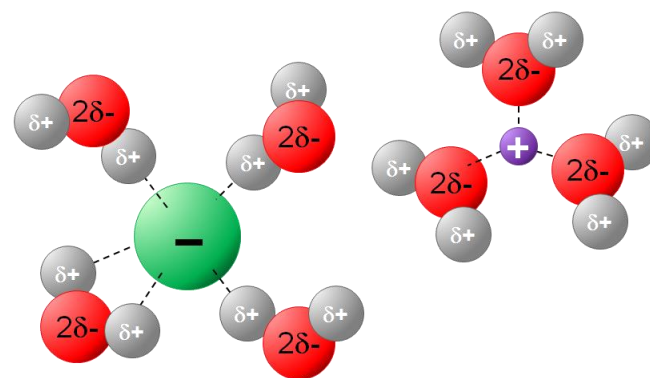
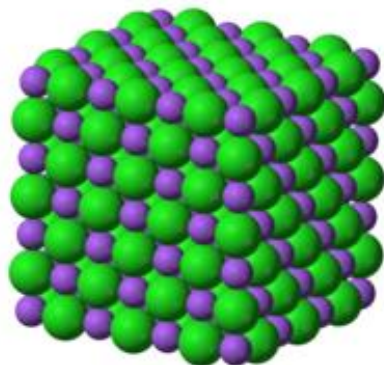
# Interação íon-dipolo

Solubilidade é determinada pelo balanço entre:

ENERGIA RETICULAR

e

ENERGIA DE HIDRATAÇÃO



interações íon-íon

interações íon-solvente





Universidade Federal do ABC

# Solubilidade de compostos iônicos

## NaCl

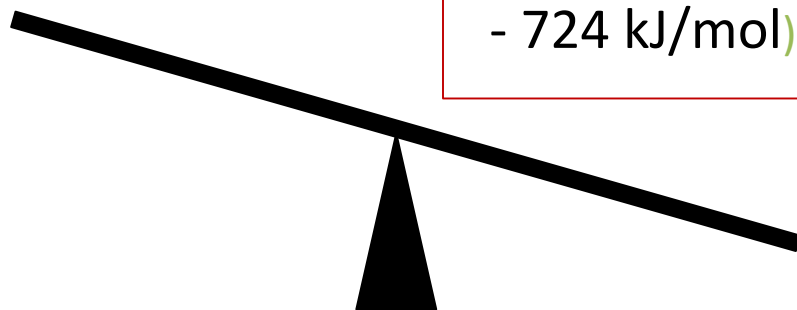
## AgCl

$E$  (reticular)

- 715 kJ/mol)

$E$  (hidratação)

- 724 kJ/mol)



MUITO SOLÚVEL

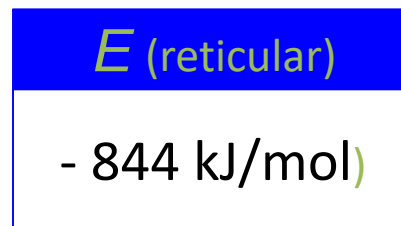
360 g NaCl / 1L H<sub>2</sub>O a 25°C

$E$  (hidratação)

- 788 kJ/mol)

$E$  (reticular)

- 844 kJ/mol)



POUCO SOLÚVEL

0,002 g AgCl / 1L H<sub>2</sub>O a 25°C



Universidade Federal do ABC

# *Solubilidade de compostos iônicos*

Como saber se um composto iônico é ou não solúvel em água?

- Estrutura (relação carga/raio e empacotamento dos íons no retículo).
- Dados termodinâmicos (energias tabeladas).
- Experimento (TESTANDO NA PRÁTICA NO LABORATÓRIO).

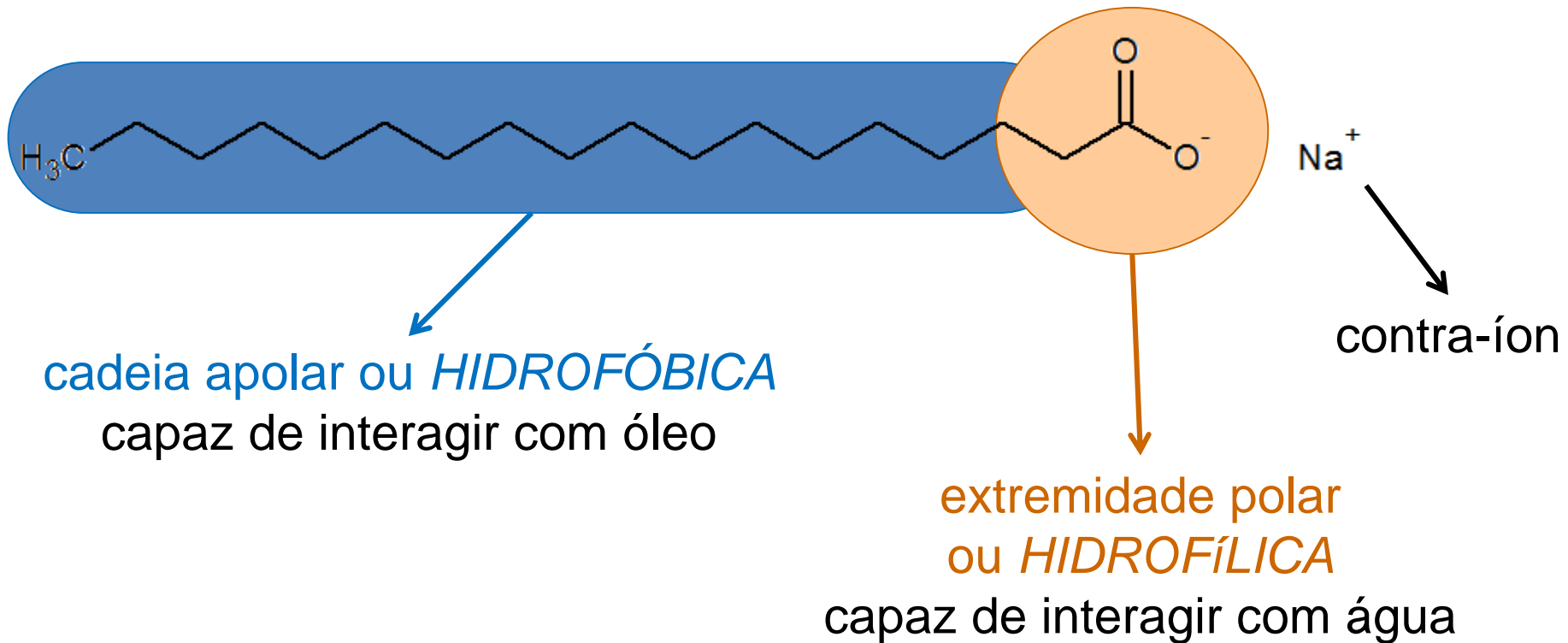


Universidade Federal do ABC

# Sabões e detergentes

Também chamados de "surfactantes" ou "tensoativos". Exemplo:

estearato de sódio



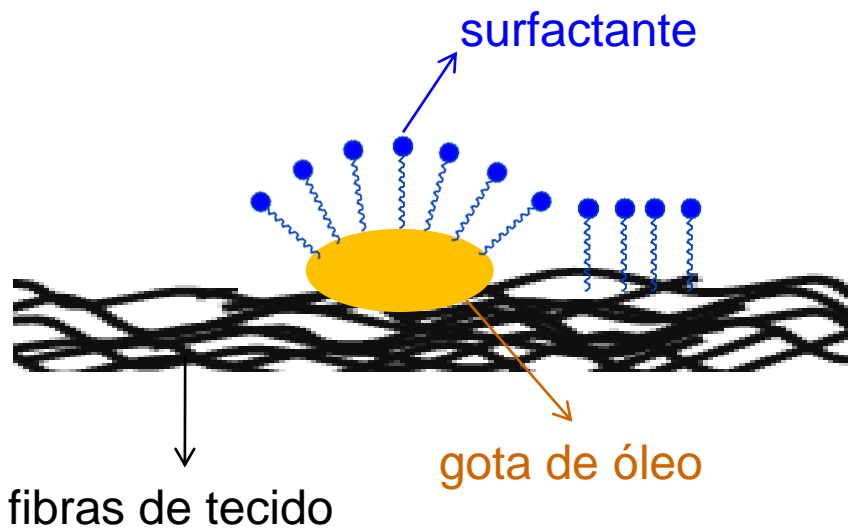
molécula como um todo é *ANFIFÍLICA*



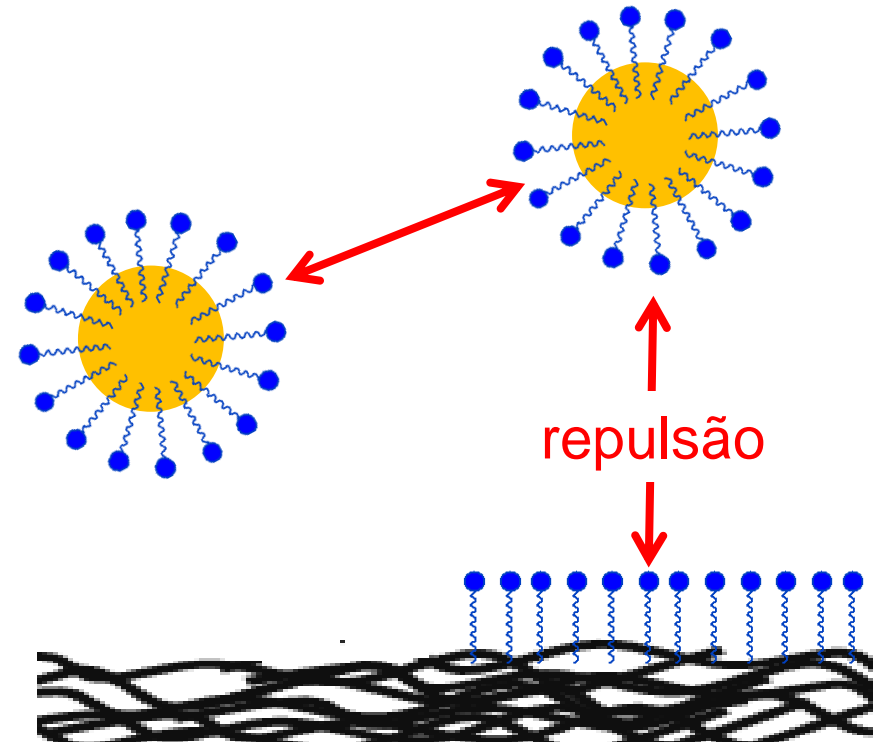
Universidade Federal do ABC

# Sabões e detergentes

## 1) ADESÃO DO SURFACTANTE:



## 2) DESLIGAMENTO E EMULSÃO:





Universidade Federal do ABC



# ***ÁCIDOS E BASES***



Universidade Federal do ABC

# ARRHENIUS

**Ácido:** espécie que ao reagir com água produz íon  $\text{H}_3\text{O}^+$  (hidroxônio).



**Base:** espécie que ao reagir com água produz íons  $\text{OH}^-$  (hidroxila).





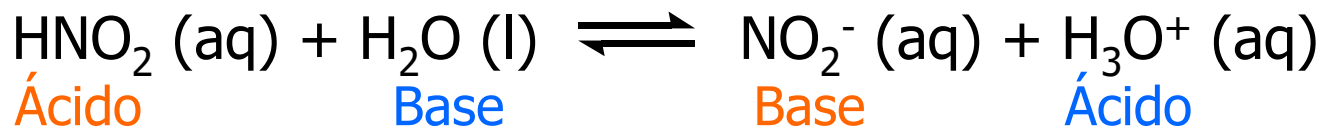
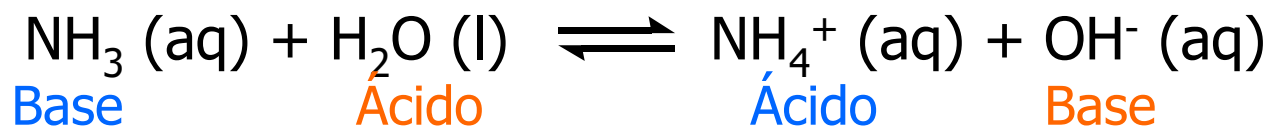


Universidade Federal do ABC

# BRÖNSTED-LOWRY (Protônica)

- **Ácido:** espécie doadora de  $H^+$ .
- **Base:** espécie receptora de  $H^+$ .

Esta teoria prevê a formação de *pares conjugados*:

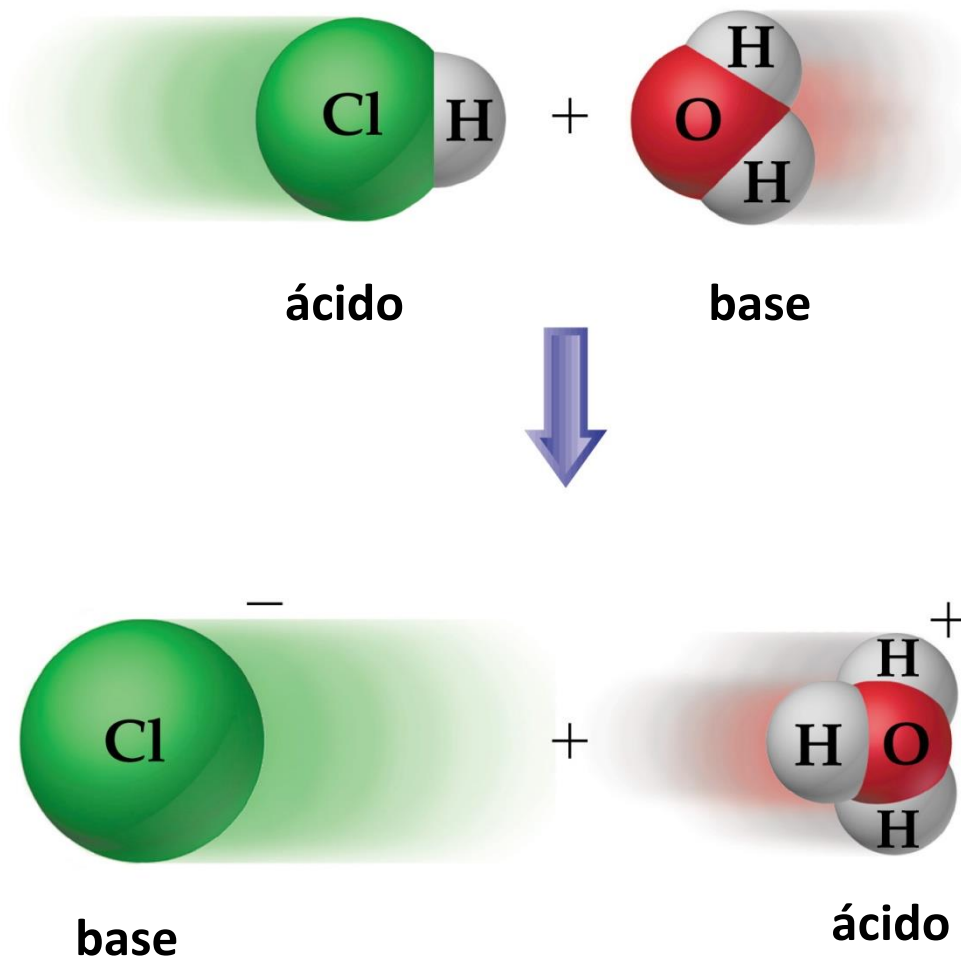


**ÁCIDOS E BASES ESTÃO RELACIONADOS ENTRE SI  
PELA PERDA OU GANHO DE  $H^+$**



Universidade Federal do ABC

# BRÖNSTED-LOWRY (Protônica)

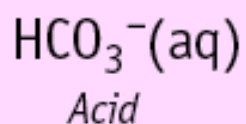




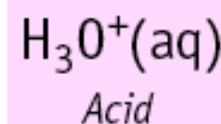
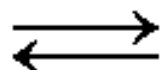
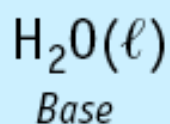
Universidade Federal do ABC

# BRÖNSTED-LOWRY (Protônica)

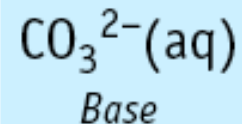
conjugate pair



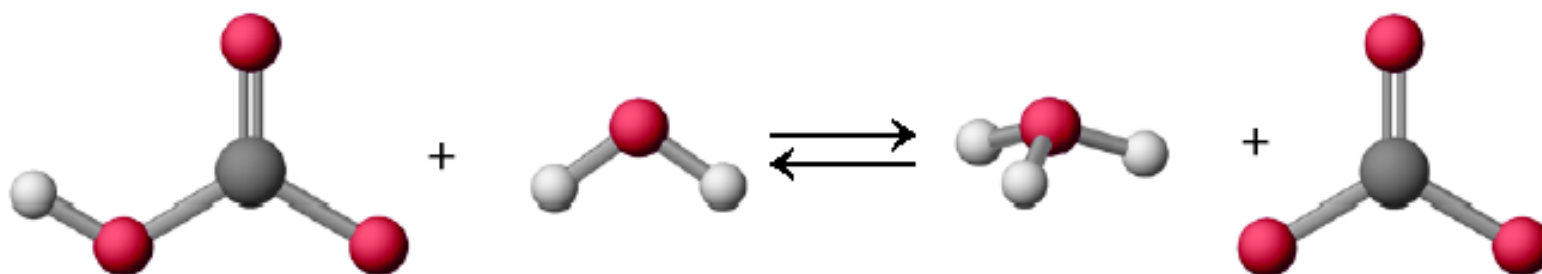
+



+



conjugate pair

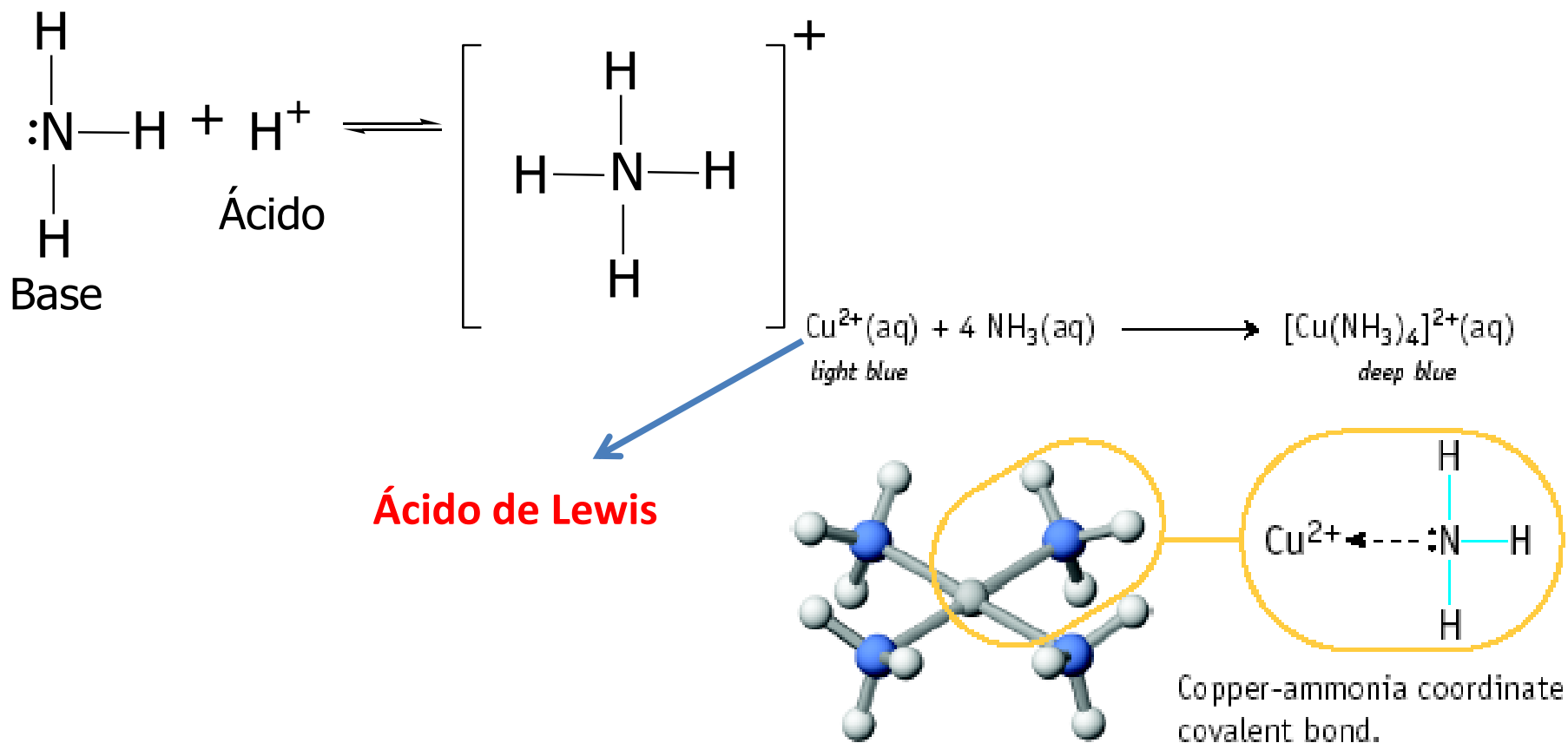




Universidade Federal do ABC

# LEWIS (Eletrônica)

- Ácido: receptor de par de elétrons.
- Base: doador de par de elétrons.





# Força Relativa

|                                   | ÁCIDO                              | BASE  |   |              |
|-----------------------------------|------------------------------------|---|---|--------------|
| 100% ionizado em H <sub>2</sub> O | <b>Forte</b>                       | HCl   | Cl <sup>-</sup>   | Desprezível  |
|                                   |                                    | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                | HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>                             |              |
|                                   |                                    | HNO <sub>3</sub>                              | NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                              |              |
|                                   | H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> (aq) | H <sub>2</sub> O                              |   |              |
| Força ácida aumenta ↑             | <b>Fraco</b>                       | HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>                 | SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                             | <b>Fraco</b> |
|                                   |                                    | H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>                | H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>               |              |
|                                   |                                    | HF  | F <sup>-</sup>  |              |
|                                   |                                    | HC <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> | C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup> |              |
|                                   |                                    | H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>                | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                             |              |
|                                   |                                    | H <sub>2</sub> S                              | HS <sup>-</sup>   |              |
|                                   |                                    | H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>   | HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                            |              |
|                                   |                                    | NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>                  | NH <sub>3</sub>   |              |
|                                   |                                    | HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>                 | CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>                             |              |
|                                   |                                    | HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>                | PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>                             |              |
|                                   | H <sub>2</sub> O                   | OH <sup>-</sup>                               |   |              |
| Desprezível                       | <b>Desprezível</b>                 | OH <sup>-</sup>                               | O <sup>2-</sup>   | <b>Forte</b> |
|                                   |                                    | H <sub>2</sub>                                | H <sup>-</sup>  |              |
|                                   |                                    | CH <sub>4</sub>                               | CH <sub>3</sub> <sup>-</sup>                              |              |
|                                   |                                    |   | 100% protonado em H <sub>2</sub> O                        |              |

Força básica aumenta ↓



Universidade Federal do ABC

# Força Relativa

**TABLE 10.6** Correlations of Molecular Structure and Acid Strength

| Acid type | Trend   |  |
|-----------|---|--|
| Binary    | 1 The more polar the H—A bond, the stronger the acid.<br><i>This effect is dominant for acids of the same period.</i>                           |  |
|           | 2 The weaker the H—A bond, the stronger the acid.<br><i>This effect is dominant for acids of the same group.</i>                                |  |
| Oxoacid   | 1 The greater the number of O atoms attached to the central atom (the greater the oxidation number of the central atom), the stronger the acid. |  |

In each diagram, the vertical orange arrow indicates the corresponding increase in acid strength.





Universidade Federal do ABC

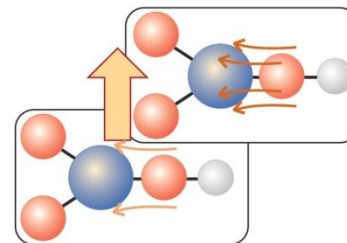
# Força Relativa

**TABLE 10.6** Correlations of Molecular Structure and Acid Strength

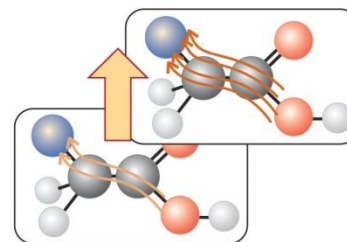
Acid type

Trend

- 2 For the same number of O atoms attached to the central atom, the greater the electronegativity of the central atom, the stronger the acid.



- Carboxylic 1 The greater the electronegativities of the groups attached to the carboxyl group, the stronger the acid.



In each diagram, the vertical orange arrow indicates the corresponding increase in acid strength.



Universidade Federal do ABC

# Precisão e algarismos significativos



0 5 10 15 20



0 2,5 5 7,5 10 12,5 15 17,5 20



0 2,5 5 7,5 10 12,5 15 17,5 20



Universidade Federal do ABC

# Algarismo significativos

- Aquilo que tem significado

- $(15,7309 \pm 0,2023) \text{ g}$

- $(234,143 \pm 0,146) \text{ mL}$

Caso faça operações matemáticas, o valor que tiver o menor número de algarismos significativos é o que limitará os algarismos significativos no resultado final.

- Exemplo:

Prepare 25 mL de uma solução 2 mol/L

Na =  $23 \text{ g mol}^{-1}$ ; Cl =  $35,5 \text{ g mol}^{-1}$





Universidade Federal do ABC

# *Próxima aula*

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