Henrique E. Toma

1 Coleção de **Química Conceitual**

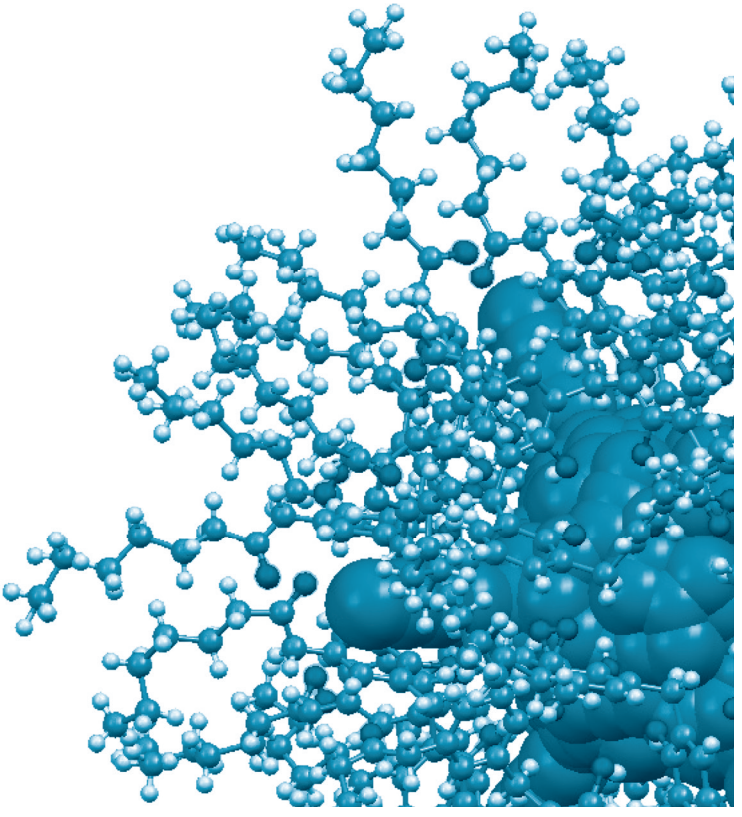
Estrutura Atômica, Ligações e Estereoquímica

Blucher

COLEÇÃO de QUÍMICA CONCEITUAL

volume um

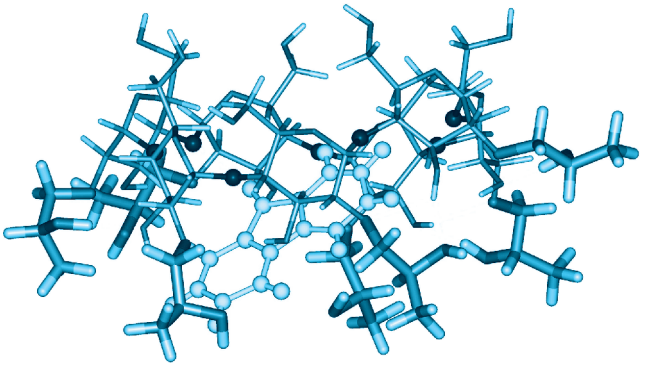
ESTRUTURA ATÔMICA, LIGAÇÕES E ESTEREOQUÍMICA



Blucher

HENRIQUE E. TOMA

ESTRUTURA ATÔMICA, LIGAÇÕES E ESTEREOQUÍMICA



Coleção de Química Conceitual – volume um
Estrutura atômica, ligações e estereoquímica
© 2013 Henrique Eisi Toma
Editora Edgard Blücher Ltda.

Blucher

Rua Pedroso Alvarenga, 1245, 4º andar
04531-012 - São Paulo - SP - Brasil
Tel 55 11 3078-5366
contato@blucher.com.br
www.blucher.com.br

Segundo Novo Acordo Ortográfico, conforme 5. ed. do
Vocabulário Ortográfico da Língua Portuguesa,
Academia Brasileira de Letras, março de 2009.

É proibida a reprodução total ou parcial por quaisquer
meios, sem autorização escrita da Editora

Todos os direitos reservados a Editora Edgard Blücher Ltda.

FICHA CATALOGRÁFICA

Toma, Henrique Eisi
Estrutura atômica, ligações e estereoquímica
/ Henrique Eisi Toma. – São Paulo: Blucher, 2013.
Coleção de Química conceitual, v. 1).

ISBN 978-85-212-0729-0

1. Química 2. Química nuclear
2. Estereoquímica I. Título II. Série

12.0443 CDD 540

Índice para catálogo sistemático:
1. Química

À minha família,

Cris, Henry e Gustavo, e

às várias gerações de alunos que têm
mantido acesa esta chama.

PREFÁCIO

Neste conjunto de textos que compõem a coleção **Química Conceitual**, nossa maior preocupação foi apresentar um conteúdo moderno, representativo do mundo da Química, sem fronteiras. O público-alvo são os químicos e não químicos e, por isso, o ponto de partida não pressupõe qualquer pré-requisito cognitivo. Na série, rompemos, com as divisões clássicas de Química Inorgânica, Orgânica e Físico-química, e procuramos abrir espaço para tópicos que não podem deixar de ser ensinados na atualidade, como a questão dos materiais, da energia, da nanotecnologia, dos aspectos ambientais e da sustentabilidade. Aspectos básicos da Química Orgânica tradicional foram enquadrados de forma harmoniosa na Química dos Elementos e Compostos, para que o leitor perceba as particularidades e semelhanças de forma global, na Tabela Periódica.

Com o avanço e uso extensivo dos recursos computacionais na Química, a ferramenta teórica já não pode mais ser ignorada. Apesar de a Química teórica ser baseada na mecânica quântica, devemos aceitar o desafio de tentar torná-la acessível pedagogicamente, em vez de simplesmente expurgá-la, em razão de sua complexidade. Certamente, muito terá de ser feito nessa área, para que o ensino

de Química entre em sintonia com a modernidade e possa usufruir dos seus benefícios.

Alguns dos sistemas abordados no texto podem, inicialmente, parecer demasiadamente complexos. As estruturas de polímeros, medicamentos e materiais ultrapassam nossa capacidade de memorização e, de fato, este não foi o nosso objetivo. A presença dessas estruturas no texto contribuirá para que o leitor aprenda a analisar o fato complexo pelas suas partes simples, e perceba a identidade química dos materiais constituintes que estão ao redor.

CONTEÚDO

1 INTRODUÇÃO, 11
A Questão das Unidades e da Nomenclatura, 15

2 MATÉRIA E ENERGIA, 19
Luz, 23
O Elétron, 39
O Próton, 42
O Nêutron, 42
O Átomo Nuclear, 43
A existência do núcleo, 44
Número Atômico, 45
Massa Atômica e Isótopos, 45
Visão Microscópica do Átomo, 47

3 A NATUREZA QUÂNTICA DA MATÉRIA, 51
A Mecânica Quântica, 55
O Spin Eletrônico e o Princípio de Pauli, 63

4 CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS, 71
Propriedades Periódicas, 76

5 ESTRUTURA MOLECULAR E LIGAÇÃO QUÍMICA, 81
Eletronegatividade, Polaridade, Distâncias e Energias de Ligação, 84
Abordagem Quântica da Ligação Química, 88
Ligações Químicas em Moléculas Poliatômicas, 96
Ligações Múltiplas, 97

6 SIMETRIA MOLECULAR, 103
Grupo de Ponto, 106

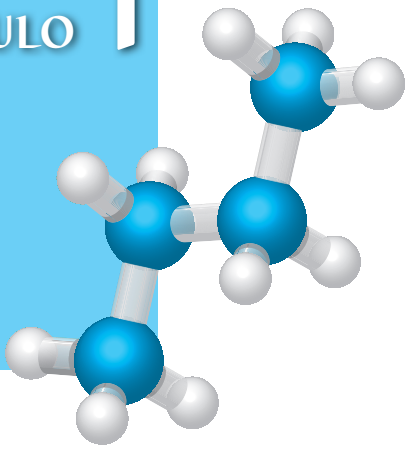
7 ESTEREOQUÍMICA E TEORIAS DE REPULSÃO INTERELETRÔNICA, 111
Teoria dos Quartetos Duplos de Linnett, 111

A expansão do octeto, 115
Teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência (TRPEV), 116
Teoria do Campo Ligante – Estereoquímica de Compostos de Coordenação, 121
Estereoisomeria, 126
Isomeria Geométrica, 126
Isomeria Óptica, 128
Isomeria Conformacional, 130

8 CONVERSA COM O LEITOR, 133
Questões provocativas, 135

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO



Para compreender melhor o mundo, é indispensável conhecer a *composição* dos corpos e as *leis* que regem as transformações da matéria. Em outras palavras, é preciso falar de Química, que, como ciência, trata da composição, estrutura e propriedades das *substâncias* e, principalmente, dos processos que modificam sua natureza, permitindo a criação de novas substâncias.

Na Química, as teorias existentes passaram, de uma forma ou outra, pelo caminho da

1. observação;
2. experimentação;
3. proposição de modelo; e
4. verificação de sua capacidade de previsão.

Atualmente, com o avanço dos recursos computacionais, os modelos são cada vez mais elaborados, e as teorias, aperfeiçoadas, têm maior capacidade de previsão. Em algumas áreas, como na Química Teórica, os modelos frequentemente antecipam os fatos, porém, mesmo assim, sempre dependerão de experimentos e medidas para a sua con-

Figura 1.1
Heinrich Rheinboldt nasceu em Karlsruhe (Alemanha), em 1891, sendo neto do ilustre químico Heinrich Caro, considerado um ícone no período da criação da indústria química moderna. Rheinboldt foi professor na Universidade de Bonn, mudando-se para o Brasil em 1934, para implantar o Departamento de Química na USP. Cientista, historiador e educador, juntamente com Heinrich Hauptmann promoveu a nucleação da pesquisa moderna em Química no Brasil, formando várias gerações de cientistas de grande expressão. Morreu em 1955.

validação. Com raras exceções, ainda podemos confiar no lema: *na ciência, enquanto a teoria guia, a experiência decide!*

Na busca pela explicação dos fatos, podemos fazer uso do raciocínio dedutivo, partindo do todo para buscar as partes, ou do raciocínio indutivo, seguindo um caminho inverso. Mas não é só de raciocínio que é feita a Química. Segundo Heinrich Rheinboldt (Figura 1.1), um importante cientista que renovou o cenário da Química no Brasil na metade do século passado, a base da Química está na intuição; isto é, na capacidade de sentir quimicamente e "pensar por fenômenos". Dizia o grande Mestre: mais do que Ciência, a Química tem muito de "ofício e arte".

A criatividade é outro ponto muito importante na Química, pois é o elo que faz da Química, um misto de arte e ciência. Como definir criatividade sem falar em intuição ou percepção? De fato, além de ser o ponto em comum entre a arte e a ciência, a criatividade também é o diferencial que caracteriza os grandes cientistas. Muitas vezes, a ideia básica que gerou a teoria, teve origem na simples imaginação. Kekulé (Figura 1.2), por exemplo, concebeu a estrutura cíclica do benzeno, em 1865, durante um cochilo, enquanto trabalhava em seu livro de Química. No sonho, apareciam átomos enfileirados como serpentes agitadas. Uma das serpentes parecia abocanhar sua própria cauda, formando um anel, lembrando a imagem do ouroboros da alquimia (sím-

Figura 1.2
Friedrich August Kekulé nasceu em Darmstadt (1829); foi professor da Universidade de Gent, e considerado um dos fundadores da Química Orgânica. Em 1858, postulou que o carbono é tetravalente, e propôs uma estrutura cíclica para o benzeno, inspirado na figura de ouroboros com que havia sonhado. Deixou uma frase famosa: *Vamos aprender a sonhar, talvez assim encontremos a verdade...* Morreu em 1896.

bolo da eternidade). O arranjo de átomos, formando um anel, era a ideia que Kekulé estava buscando para explicar a estrutura do benzeno.

Outras vezes, desvendar o segredo oculto nos fatos é fortuito, ou, pelo menos, quase. A criatividade aliada à sorte pode ser o segredo de grandes descobertas, como acreditam muitos cientistas bem-sucedidos. Esse fato é conhecido como *serendipity*. Afinal, a sorte existe mesmo para todos, ou favorece apenas àqueles que nela acreditam?

O cientista, utilizando os conhecimentos acumulados, é capaz de produzir novos fatos, e, dessa forma, desvendar fenômenos, formular e modificar teorias. Nesse sentido, a criatividade exige observação, conhecimento e imaginação. Para o químico, a síntese ou descoberta de uma nova substância representa um momento de glória. A realização experimentada na criação de um novo produto, após percorrer trajetórias desconhecidas ou inesperadas, não é diferente daquela sentida pelo artista, diante de sua obra, ou do compositor, ao completar sua sinfonia. Entretanto, como cientista, o químico, terá de comprovar a sua descoberta, descrevendo todas as etapas utilizadas, de modo a permitir sua reprodução. Além disso, terá de provar a composição ou estrutura do composto, tarefa muito facilitada atualmente, graças à existência de métodos instrumentais cada vez mais sofisticados e possantes.

À medida que o mundo evolui, cresce a necessidade por novos compostos e métodos mais adequados de síntese, análise e processamento de materiais. Além da redução de custos, a indústria tem perseguido o aumento da qualidade e a minimização dos efeitos sobre o meio ambiente. Hoje, o número de trabalhos científicos vem crescendo verticalmente em uma escala de centenas de milhões. Desde 1900, a produção do primeiro milhão de trabalhos catalogados no *Chemical Abstracts* levou 31 anos. O segundo milhão levou 18 anos. Na atualidade, isso já é possível em menos de um ano. Dada a nossa capacidade limitada, diante da expansão vertiginosa do número de compostos e de trabalhos científicos, parece uma atitude insensata querer estudar Química! Felizmente, mesmo com tudo isso, nossa capacidade de trabalhar com a ciência não foi comprometida. De fato, as leis fundamentais continuam válidas, pelo menos no seu devido contexto. Entretanto, novas leis poderão aparecer. Por meio delas poderemos continuar raciocinando e aprendendo a criar novos modelos capazes de lidar com novas descobertas. Parafraseando Rheinboldt, para sobreviver à avalanche de informações a que sempre estaremos sujeitos, *teremos de aprender a pensar quimicamente!*

A Química tem sido um componente importante da tecnologia moderna, em todas as áreas; contudo não devemos esquecer que, do descobrimento científico até as aplicações práticas, existe um longo caminho a ser percorrido. Por exemplo, o processo fotográfico foi concebido em 1782 e só foi colocado em prática em 1838, após 56 anos de incubação. A reprodução xerográfica de imagens foi descoberta em 1935, porém viabilizada apenas em 1950. Os primeiros antibióticos foram descobertos em 1910, mas só se tornaram úteis em 1940.

Muitas vezes, a percepção da aplicabilidade de um invento está diretamente relacionada com a época e as necessidades do momento. O composto conhecido como *cis*platina já havia sido descrito havia mais de um século, contudo somente em 1964 foi verificada sua atividade anticancerígena, permitindo sua utilização na quimioterapia, a partir de 1972. Sendo assim, muitos dos compostos químicos considerados de interesse acadêmico na atualidade, poderão ser estratégicos no futuro, em função do próprio

desenvolvimento científico-tecnológico. É nesse sentido que a Química, como ciência, tem de ser cultivada, em benefício dos interesses tecnológicos e da humanidade.

A Questão das Unidades e da Nomenclatura

Na Química, o uso das grandezas experimentais e da nomenclatura é regulamentado pela IUPAC (acrônimo, em inglês, de *International Union of Pure and Applied Chemistry*). A IUPAC é uma organização internacional que, entre outras responsabilidades, vem cuidando da uniformização da linguagem química, gerando diretrizes a serem adaptadas em diversos idiomas pelos diferentes países. Na realidade, a questão da linguagem científica é um problema muito complexo e dinâmico, com muitas peculiaridades provenientes das raízes culturais e da tradição. Por isso, algumas formas tradicionais ou populares de lidar com essa questão ainda continuam em uso, coexistindo com as recomendações oficiais, até que acabem predominando com o tempo.

Atualmente, o sistema internacionalmente aceito para expressar as unidades das medidas é conhecido como SI (Sistema Internacional), e é baseado no sistema métrico, tendo como base as unidades mostradas na Tabela 1.1. Contudo, nos países de língua inglesa, unidades como polegadas e libras ainda continuam sendo usadas, principalmente fora do ambiente científico.

Tabela 1.1 — Unidades físicas adotadas no Sistema Internacional (SI)

Grandeza	Símbolo	Nome	Unidade
Massa	kg	quilograma	kg
Comprimento	m	metro	m
Tempo	t	segundo	s
Temperatura	T	Kelvin	K
Quantidade de substância	n	mol	mol
Corrente elétrica	i	Ampere	A

A temperatura é normalmente expressa em graus Celsius, °C, com uma escala graduada ou centígrada, com base nos pontos de fusão e de ebulição da água em condições normais. Entretanto, na linguagem científica é conveniente o uso da temperatura expressa em uma escala absoluta, conhecida como Kelvin (K), desaparecendo a notação de grau. A conversão pode ser feita diretamente, considerando que a temperatura absoluta da fusão da água (gelo) é igual a 273,15 K. Assim,

$$T\ (K) = T\ (°C) + 273{,}15;\ \text{ou}$$

$$T/K = T/°C + 273{,}15$$

A representação das unidades separadas por (/), como na expressão anterior, vem sendo cada vez mais adotada internacionalmente, principalmente nas revistas científicas.

As grandezas podem ser precedidas por multiplicativos como apresentado na Tabela 1.2.

A quantificação das grandezas físicas deve ser feita por meio do sistema SI, como nos exemplos da Tabela 1.3.

Tabela 1.2 — Prefixos usados nos multiplicativos

Multiplicativo	10^{-15}	10^{-12}	10^{-9}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	10^{3}	10^{6}	10^{9}	10^{12}
Nome	femto	pico	nano	micro	mili	centi	deci	quilo	mega	giga	tera
Abreviação	f	p	n	μ	m	c	d	k	M	G	T

Tabela 1.3 — Algumas grandezas físicas no sistema SI

Especificação	**Unidade Física**	**Símbolo**	**Sistema SI**
Força	newton	N	kg m s^{-2}
Energia e Trabalho	joule	J	kg m^2 s^2 ou N m
Pressão	pascal	Pa	N m^{-2}
Carga elétrica	coulomb	C	A s
Potencial elétrico	volt	V	kg m^2 s^{-3} A^{-1} ou J C^{-1}
Frequência	hertz	Hz	s^{-1}

A pressão é uma grandeza física que tem sido expressa em várias unidades além do pascal (Pa), adotado no sistema SI. A forma mais usual continua sendo a atmosfera (atm) que corresponde a $1{,}01325 \times 10^5$ Pa, ou 1,01325 bar. Uma atmosfera de pressão equivale a uma coluna de 760,0 mm de Hg, ou 10,33 m de H_2O. Também é frequente encontrar a pressão expressa em psi (*pound per square inch*), sendo 1 psi = 0,07 bar.

Outra unidade muito importante que expressa a quantidade de uma substância é o **mol**[1], que equivale a $6{,}022 \times 10^{23}$ unidades de partículas (átomos ou moléculas), número este conhecido como constante de Avogadro. Por exemplo, um mol de H_2O expresso em gramas é igual a 18,01 g e representa sua massa molar. É nela que estão contidas $6{,}022 \times 10^{23}$ moléculas de água. Da mesma forma, 36,02 g de água equivalem a 2 mol de H_2O.

A energia pode ser expressa em diversas unidades. Embora a forma recomendada seja o joule, frequentemente é expressa em unidades espectroscópicas, elétricas ou correlatas. A conversão pode ser feita de acordo com a Tabela 1.4.

Tabela 1.4 — Conversão de unidades de energia

	hartree	**eV**	**cm^{-1}**	**kcal mol^{-1}**	**kJ mol^{-1}**
hartree	1	27,2107	219.474,63	627,503	2.625,5
eV	0,0367502	1	8.065,73	23.060,9	96.486,9
cm^{-1}	$4.556{,}33 \times 10^{-6}$	$1{,}23981 \times 10^{-4}$	1	0,00285911	0,0119627
kcal mol^{-1}	0,00159362	0,0433634	349,757	1	4,18400
kJ mol^{-1}	0,00038088	0,01036410	83,593	0,239001	1

1 O uso do mol como unidade dispensa a designação de plural, tornando inadequadas expressões como "número de moles", da mesma forma como não se diz número de dúzias ou número de quilos.