

Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

Bases da Teoria Atômica II

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>

Átomos

O átomo é a **partícula** que representa um determinado **elemento químico**.

O desenvolvimento da **Química** como **ciência** deu-se ao acatar e desenvolver esse conceito e no trabalho de definir as propriedades físicas e químicas dos mesmos.

Nas **culturas grega** e **hindu** (há mais de 2500 anos) pregava-se que o **Universo** era formado de **quatro elementos fundamentais**: Fogo, ar, terra e água.

Átomos

A **menor unidade** de uma **substância** (do grego a-tomo = indivisível).

O conceito vem dos **gregos** (mas na **Índia**, o conceito já existia também) e foi fortemente defendido por **Newton**, **Claus**, **Maxwell** e **Boltzman**.

Mas no final do século XIX estava desacreditado.

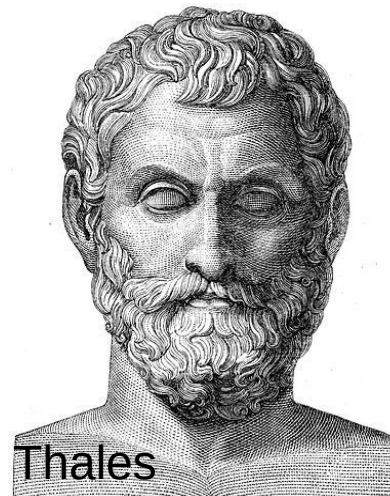
Atomismo antes de 1808

Inicialmente, conceitos atômicos estavam baseados em **considerações filosóficas** e **não** em **observações experimentais**.

600 a.C. - **Kanada** (Índia)

Considerava que a **matéria** era composta de **quatro** tipos de **átomos**, **terra**, **fogo**, **ar** e **água**. Átomos poderiam **reagir** com a ajuda de **forças invisíveis** (adrsta) e formar **moléculas** biatômicas e triatômicas.

Na **Grécia**, o conceito dos **quatro elementos** se origina de diferentes **filósofos**, os mais famosos são **Thales** de Mileto (630-550 a.c.) e **Empedocles** (483-430 a.c.).



Thales



Empedocles

Atomismo antes de 1808

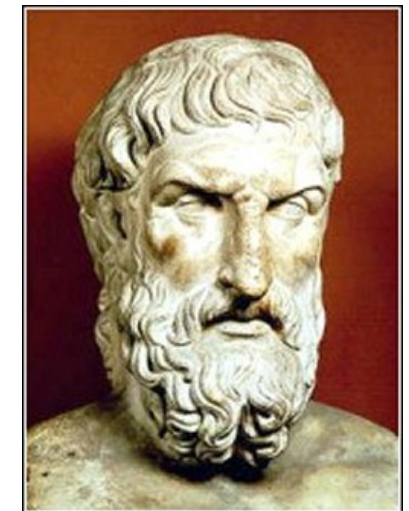
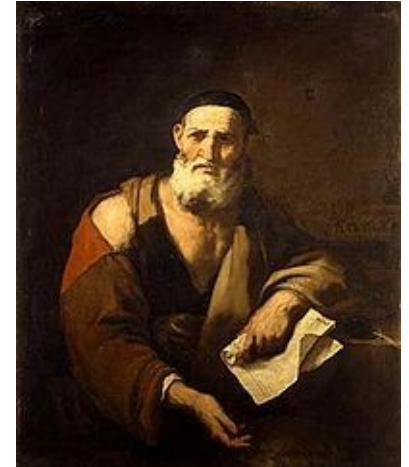
450 a.C. - **Leucípo** de Miletos e seu pupilo, **Demócrito** de Abdera:

A **matéria** pode se dividir em **partículas** cada vez menores até atingir uma **partícula fundamental**, minúscula e indivisível.

Demócrito é considerado o **pai** do **atomismo grego**.

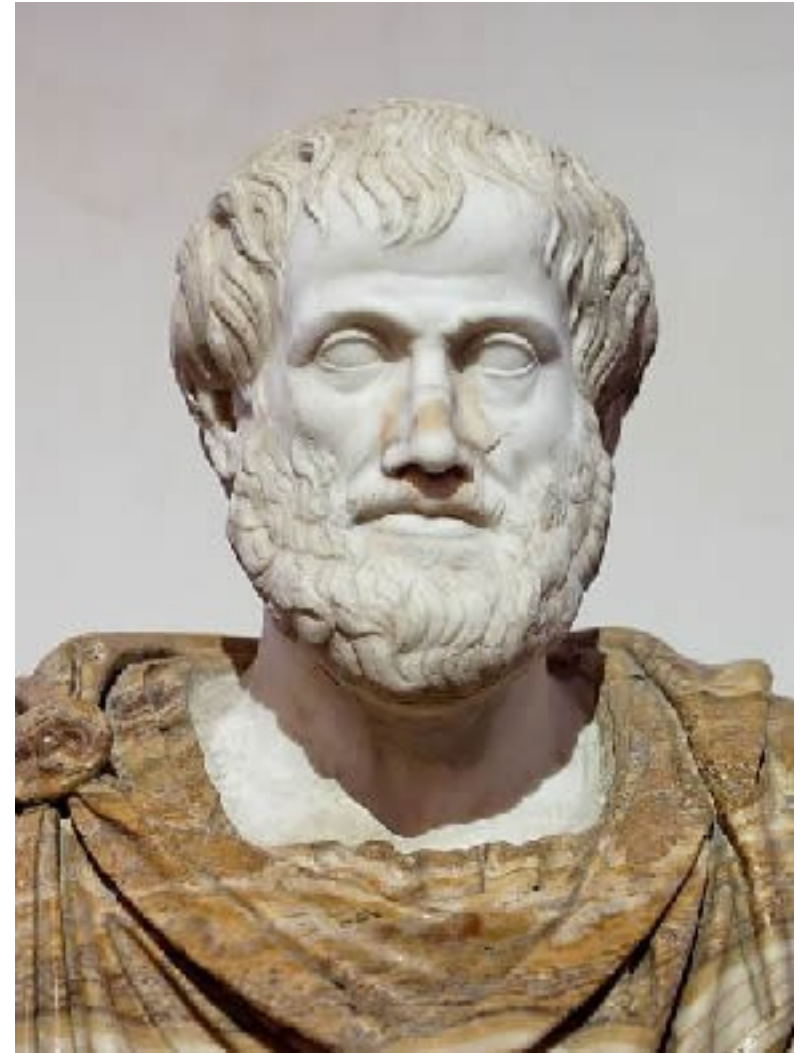
Epícuro de Samos (342-271 a.c.):

Para Epícuro os **átomos** eram **indivisíveis**, invisíveis e **indestrutíveis**, e eram **diferentes** em **tamanho**, **forma** e **peso**. Acreditava também no **vazio**, uma vez que os átomos não poderiam se mover sem o vazio.



Atomismo antes de 1808

350 a.C. - **Aristóteles**:
A **descontinuidade** da **matéria**:
os **quatro elementos**
fundamentais
(a água, o fogo, o ar e a terra).
Apesar de errado, o conceito
aristotélico de matéria,
juntamente com toda a sua
filosofia, foi **aceito** oficialmente
durante mais de **2000 anos**.
Nesse período, apenas alguns
alquimistas aceitavam a
existência de elementos
básicos.



Atomismo antes de 1808

- A **alquímia** nasce no **Egito** onde **sacerdotes** iniciam o **estudo de operações alquímicas** (dissolução, sublimação, etc.).
- **Escritos gregos** salvos, da desintegração do império Romano, na Síria e Pérsia. Tradução para o Árabe. No El andaluz tradução do árabe do livro das composições alquímicas em 1144.
- Os alquímicos árabes adicionam mercúrio e enxofre aos quatro elementos. O grande alquímico **Paracelsus** considera também o sal como elemento (1493-1541).
- Quase nenhuma referência aos átomos foi feita pelos alquímicos em seus escritos.



Atomismo antes de 1808

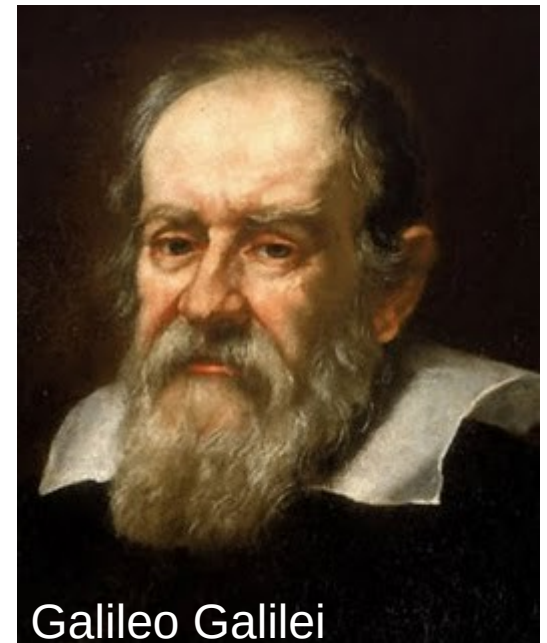
- No começo do séc. XV de **Rerum Natura** é redescoberto e os conceitos de **átomo** e **vazio** de **Épicuro** são reintroduzidos no mundo Ocidental e se espalham pela Europa.

- Para **Giordano Bruno** (1548-1600) **átomos** tinham **aspectos físicos** e **metafísicos**: átomos são as **substâncias últimas** do mundo e das suas **combinações** deriva o **mundo material** (inclusive os quatro elementos aristotélicos).

- **Galileo Galilei** (1564-1642), também perseguido pela Igreja, foi um atomista.



Giordano Bruno



Galileo Galilei

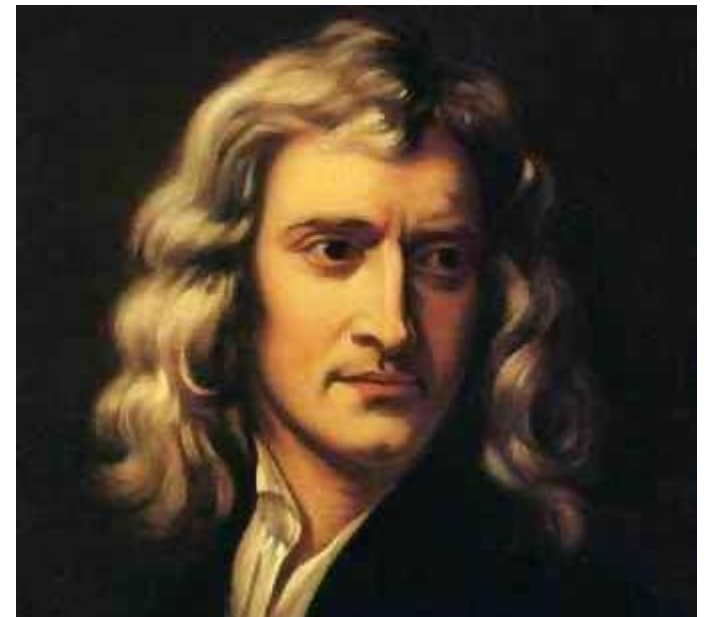
Atomismo antes de 1808

- Sir **Francis Bacon** (1561-1626),
Pierre Gassendi (1592-1655) e
René Descartes (1595-1650)



não acreditavam no **vazio**
- movimento criado por **Deus**.

- Sir **Isaac Newton** (1642-1727),
físico e **alquimista**, estava de
acordo com o **atomismo epicurista**,
inclusive a ideia do **vazio**.



Atomismo antes de 1808

1661 - **Robert Boyle**

Autor do livro *Sceptical chemist*, no qual defendeu o atomismo e deu o primeiro conceito de elemento com base experimental.

1775 - **Antoine-Laurent Lavoisier**

- Descoberta do **Oxigênio**

- Lei de **Conservação** da **massa**:

“Na natureza nada se cria, nada se perde.

Tudo se transforma”

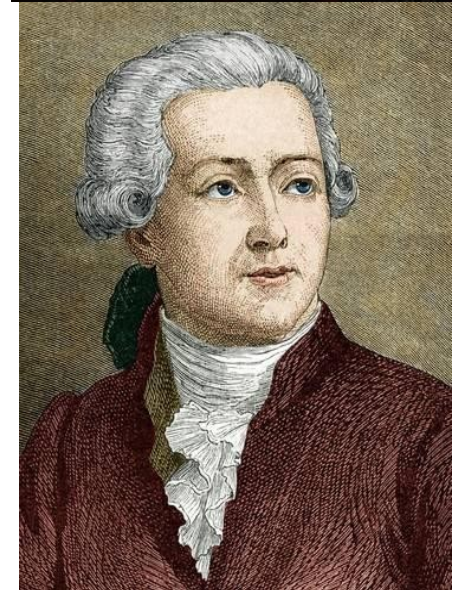
Exemplo: Magnésio + Oxigênio → Óxido de Magnésio

2,4 g + 1,6 g → 4g

Posteriormente, a partir de 1750, diversos **gases**

começaram a ser **isolados** e **identificados**

(CO₂, H₂, N₂, ...).



Antoine-Laurent Lavoisier

Tabela das **substâncias simples** (1789) no “Traité élémentaire de Chimie, présenté dans un ordre nouveau et d’après les découvertes modernes”

Lavoisier **não** considera os quatro **elementos aristotélicos** (terra, água, fogo e ar), **nem** os três princípios de **Paracelsus** (mercúrio, enxofre e sal). Apesar de considerar o calórico, Lavoisier pontua que os **elementos** são **compostos** de **átomos** apesar de nada se saber sobre eles. Início da **Química** como **Ciência** moderna.

	Noms nouveaux.	Noms anciens correspondans.	
<i>Substances simples qui appartiennent aux trois règnes, & qu'on peut regarder comme les éléments des corps.</i>	Lumière.....	Lumière.	
	Calorique.....	Chaleur.	
		Principe de la chaleur.	
		Fluide igné.	
	Oxygène.....	Feu.	
		Matière du feu & de la chaleur.	
		Air déphlogistiqué.	
		Air empiréal.	
		Air vital.	
	Azote.....	Base de l'air vital.	
Gaz phlogistiqué.			
Mofète.			
Hydrogène.....	Base de la mofète.		
	Gaz inflammable.		
	Base du gaz inflammable.		
<i>Substances simples non métalliques & oxidables & acidifiables.</i>	Soufre.....	Soufre.	
	Phosphore.....	Phosphore.	
	Carbone.....	Charbon pur.	
	Radical muriatique.	Inconnu.	
	Radical fluorique...	Inconnu.	
	Radical boracique..	Inconnu.	
	Antimoine.....	Antimoine.	
	Argent.....	Argent.	
	Arsenic.....	Arsenic.	
	Bismuth.....	Bismuth.	
	Cobalt.....	Cobalt.	
	Cuivre.....	Cuivre.	
	Etain.....	Etain.	
	<i>Substances simples métalliques oxidables & acidifiables.</i>	Fer.....	Fer.
		Manganèse.....	Manganèse.
Mercure.....		Mercure.	
Molybdène.....		Molybdène.	
Nickel.....		Nickel.	
Or.....		Or.	
Platine.....		Platine.	
Plomb.....		Plomb.	
Tungstène.....		Tungstène.	
Zinc.....		Zinc.	
<i>Substances simples salifiables terreuses.</i>	Chaux.....	Terre calcaire, chaux.	
	Magnésie.....	Magnésie, base du sel d'epsom.	
	Baryte.....	Barote, terre pesante.	
	Alumine.....	Argile, terre de l'alun, base de l'alun.	
Silice.....	Terre siliceuse, terre vitrifiable.		

Cronologia

Joseph Louis Proust (1754-1826)

Lei de Proust ou

Lei das **proporções constantes** (1799):

"Uma **substância pura**, qualquer que seja sua origem é **sempre** formada pela **mesma composição de massa**"

ou " A **proporção** das **massas** que reagem é sempre **constante**."

Exemplo: Experiência Carbono + Oxigênio -> Gás Carbônico
Se utilizarmos 3 g de carbono, a quantidade necessária de oxigênio será 8 g, ou seja, a proporção entre carbono e oxigênio deve ser a mesma: 3:8.



John Dalton: Teoria Atômica

1803/08(?) - John Dalton

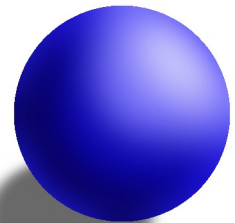
Primeiro modelo atômico com base experimental.

“Modelo da bola de bilhar”



O átomo é uma partícula maciça e indivisível.

Uma molécula é um grupo de átomos ligados uns aos outros.



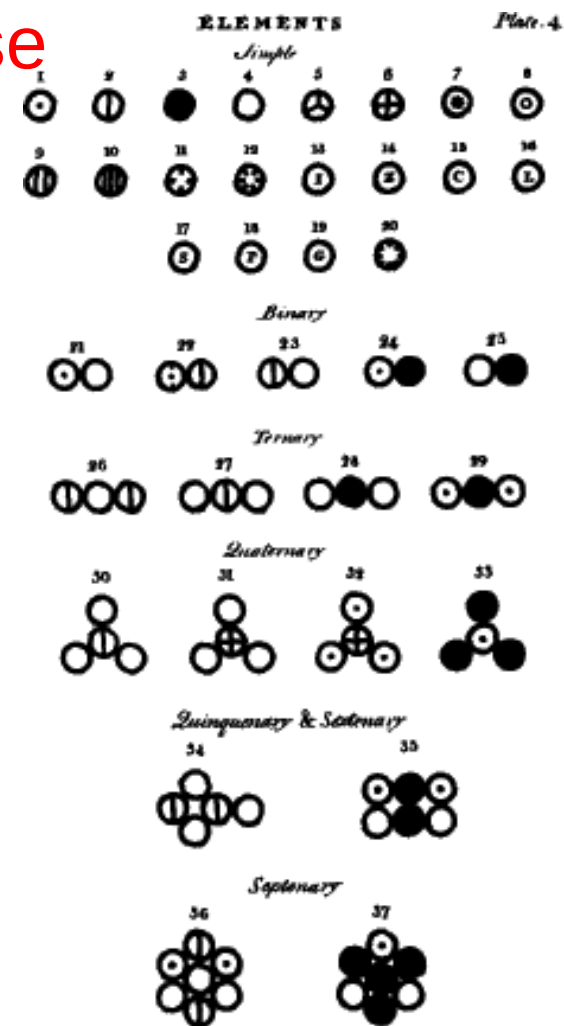
John Dalton: Teoria Atômica



1803 John Dalton estabelece uma base científica para a hipótese atomística com sua lei da composição constante:

“Dois elementos (A e B) que formam uma série de componentes

combinam-se numa razão de pequenos números inteiros.”



Lei de Dalton ou das proporções múltiplas (1804)

"As **diferentes massas** de um **elemento**, que reagem com a **massa fixa** de **outro elemento** para formar **compostos distintos**, em cada caso, estão, numa relação de **números inteiros** e geralmente **simples**, entre si". "Quando dois elementos se combinam para formar compostos mantendo-se constante a massa de um deles, as massas do outro variam segundo números inteiros e pequenos."

Exemplo: O nitrogênio se combina com o oxigênio, formando diferentes óxidos:

Verifica-se que, permanecendo constante a massa do nitrogênio, as massas do oxigênio, entre si, numa relação simples de números inteiros e pequenos, ou seja, 1:2:3:4:5.

Óxidos	Nitrogênio	Oxigênio
N_2O	28 g	16 g
N_2O_2	28 g	32 g
N_2O_3	28 g	48 g
N_2O_4	28 g	64 g
N_2O_5	28 g	80 g

A primeira Teoria atômica (~1808)

- Todo elemento químico é composto por átomos.
- Todos os átomos de um mesmo elemento apresentam as mesmas propriedades.
- Átomos de diferentes elementos químicos apresentam propriedades químicas diferentes.
- Durante uma reação química, nenhum átomo de determinado elemento desaparece ou se transforma em átomo de outro elemento (explica a Lei de Lavoisier).

A primeira Teoria atômica (~1808)

- Lei da **composição constante**: **Compostos** são formados pela **combinação** de **átomos** de dois ou mais **elementos**. Em um **determinado composto**, os **números relativos** de **átomos** de um certo tipo são definidos **constantes**. De um modo geral, esses **números relativos** podem ser expresso como **números inteiros** ou **frações simples** (explica a Lei de Proust).
- Quando dois elementos se unem para formar uma terceira substância, presume-se que apenas um átomo de um elemento se combine com um átomo do outro elemento.

O modelo vingou até 1897.

Jöns Jakob Berzelius: Massas Atômicas

Determinou os pesos atômicos de cerca de **43 elementos**, entre os quais o cálcio, o bário, o estrôncio, o silício, o titânio e o zircônio. Também descobriu os elementos, selênio, tório e césio.

Seu trabalho forneceu os **fundamentos experimentais** para a determinação das **massas relativas** dos átomos, fundamentando as leis ponderais da química.

Na determinação das massas atômicas, Berzelius tomou o oxigênio como base de referência (peso 100) e determinou a massa atômica dos demais elementos em relação áquele. Os resultados foram publicados em 1818 numa tabela de massas atômicas de 42 elementos.

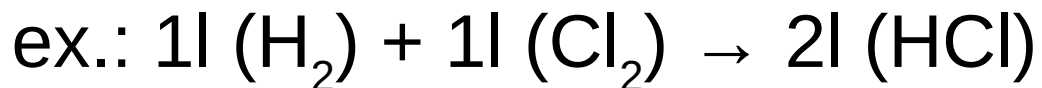


Jöns Jakob Berzelius
(1779-1848)

Lei Volumétrica das Reações Químicas

Gay-Lussac em 1808 descobriu a lei das **combinações volumétricas**.

Lei de Gay-Lussac: Os **volumes** de **gases** que participam de uma **reação química**, medidos nas **mesmas condições** de **pressão** e **temperatura**, guardam entre si uma **relação constante** que pode ser expressa através de **números inteiros**.



Louis Joseph Gay-Lussac
(1778-1850)

Hipótese de Avogadro

- Na tentativa de explicar a **lei volumétrica** de Gay-Lussac, Amadeo Avogadro propôs que amostras de **gases** diferentes, ocupando o **mesmo volume** e submetidas às **mesmas** condições de **pressão** e **temperatura**, são formadas pelo **mesmo número** de **átomos** ou **moléculas**.

Ou seja: a **relação** entre os **volumes** dos **gases** que **reagem** e que são formados numa **reação** é a **mesma** relação entre o **número** de **moléculas** participantes.



Amadeo Avogadro
(1776-1856)

Hipótese de Avogadro

exemplo:

hidrogênio + oxigênio → Vapor d'água



Amedeo Avogadro
(1776-1856)

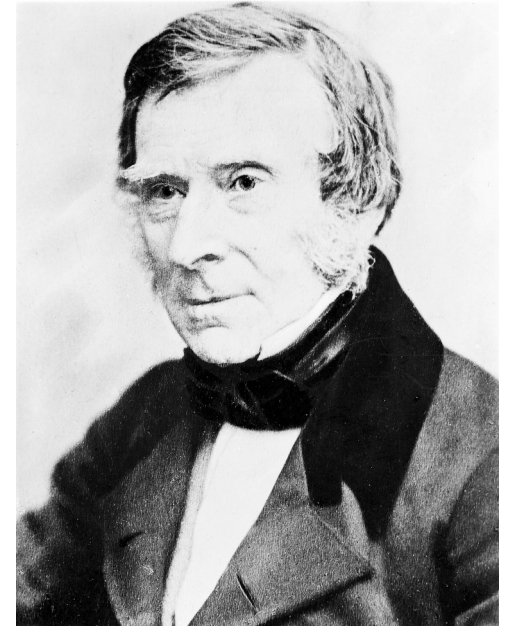
	hidrogênio	oxigênio	vapor d'água
Dados experimentais	2 vol.	1 vol.	2 vol.
Hipótese de Avogadro	2 x moléculas	1 x moléculas	2 x moléculas
Dividido por x	2 moléculas	1 molécula	2 moléculas

Atomismo Físico x Atomismo Químico

O **atomismo químico** foi relativamente considerado sem controvérsia como uma **construção hipotética** baseada em **premissas estequiométricas** e apenas existia divergência entre os valores das massas.

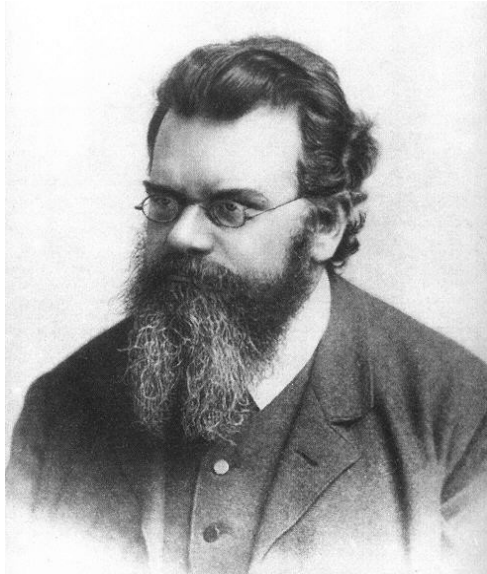
Mas o **atomismo físico** era **controverso**, e se tentou impugnar sua validade como **evidência da realidade física**.

“A Química está fora dos trilhos, os químicos estão desobedecendo a premissa fundamental de Lavoisier em sua revolução química: a Química tem que se basear em fatos, em evidências experimentais e não em especulações”.



Benjamin Collins Brodie
(1817-1880)

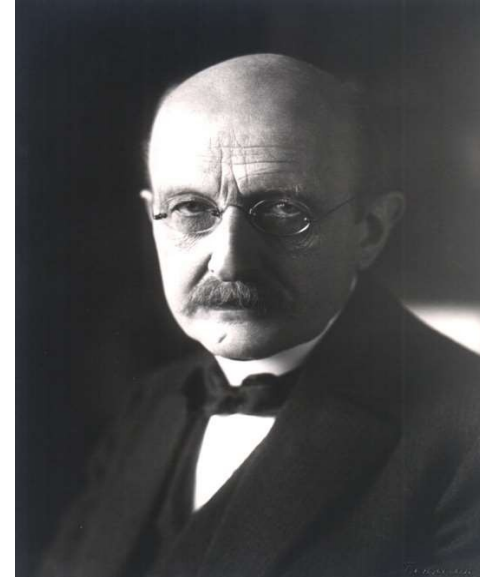
Defensores do Atomismo



Ludwig Boltzmann (1844-1906)



Walter Nernst (1864-1941)



Max Planck (1858-1947)



J. Wislicenus
Johannes Wislicenus (1835-1902)



Viktor Meyer
Viktor Meyer (1848-1897)

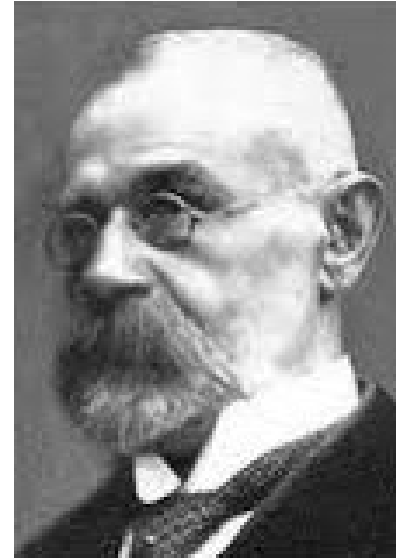
Detratores do Atomismo



Wilhelm Ostwald(1853-1932)



Georg Helm (1851-1923)



Frantisek Wald (1858-1947)

Capitateados por Ostwald postulavam a prevalência da energia frente à matéria, ou de outra forma, das leis da termodinâmica como forma de explicar os fenômenos químicos.

Argumentavam que as transformações eram apenas mudanças de energias e as diferenças entre elementos e entre outras substâncias era devido a estados energéticos diferentes.

Detratores do Atomismo

Apesar da controvérsia boa parte da comunidade **química**, principalmente ligada com a química orgânica, continuou trabalhando com a **teoria atômico-molecular**. Afinal, a teoria energética não ofereceu qualquer explicação satisfatória para a lei periódica, valência, teoria estrutural em química orgânica, ou para os pesos atômicos.

Entretanto, Ostwald persistiu, dando uma defesa convincente de sua teoria energética na London Chemical Society em 1904. Lá, ele argumentou que as leis estequiométricas eram todas dedutíveis da termodinâmica, portanto, uma hipótese atômica era desnecessária.

Congresso de Karlsruhe (1860)

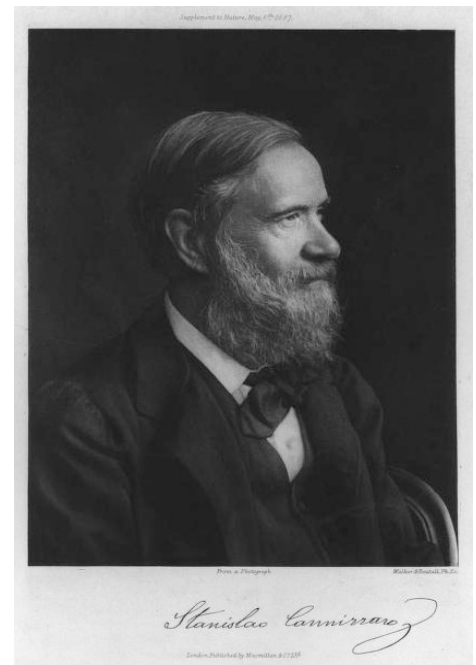
$C_2H_2O_2$	empirische Formel.
$C_2H_2O_2 + HO$	dualistische Formel.
$C_2H_2O_2 = H$	Wasserstofftheorie.
$C_2H_2 + O_2$	Kertheorie.
$C_2H_2O_2 + HO_2$	Longchamp's Ansicht.
$C_2H_2 + H_2O_2$	Graham's Ansicht.
$C_2H_2O_2 + HO$	Radicaltheorie.
$C_2H_2 + O_2 + HO$	Radicaltheorie.
$C_2H_2O_2 \left\{ \begin{matrix} O_2 \\ H \end{matrix} \right.$	Gerhardt's Typentheorie.
$C_2H_2O_2 \left\{ \begin{matrix} O_2 \\ H \end{matrix} \right.$	Typentheorie(Schischkoff)etc.
$C_2O_2 + C_2H_2 + HO$	Berzelius' Paarungstheorie.
$H O . (C_2H_2)C_2 . O_2$	Kolbe's Ansicht.
$H O . (C_2H_2)C_2 . O . O_2$	ditto
$C_2(C_2H_2O_2) \left\{ \begin{matrix} O_2 \\ H \end{matrix} \right.$	Wurtz.
$C_2H_2(C_2O_2) \left\{ \begin{matrix} O_2 \\ H \end{matrix} \right.$	Mendius.
$C_2H_2 \cdot \frac{HO}{HO} C_2O_2$	Geuther.
$C_2 \left\{ \begin{matrix} C_2H_2 \\ O \\ O \end{matrix} \right\} O + HO$	Kochleder.
$(C_2 \frac{H_2}{CO} + CO_2) + BO$	Person.
$C_2 \left\{ \begin{matrix} C_2 \\ H \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} O_2 \\ H \end{matrix} \right.$	Buff.

Karlsruher Kongress 1860:
 congresso organizado por
Friedrich August Kekulé von Stradonitz,
Carl Weltzien e Charles Adolphe Wurtz.

primeiro encontro inter-
 nacional da química

- Várias **teorias** de
estrutura e confusão
 nos valores das
massas atômicas.

- **Normalização** das
estruturas e uso da
hipótese de Avogadro



Stanislao Cannizzaro
 (1826-1910)

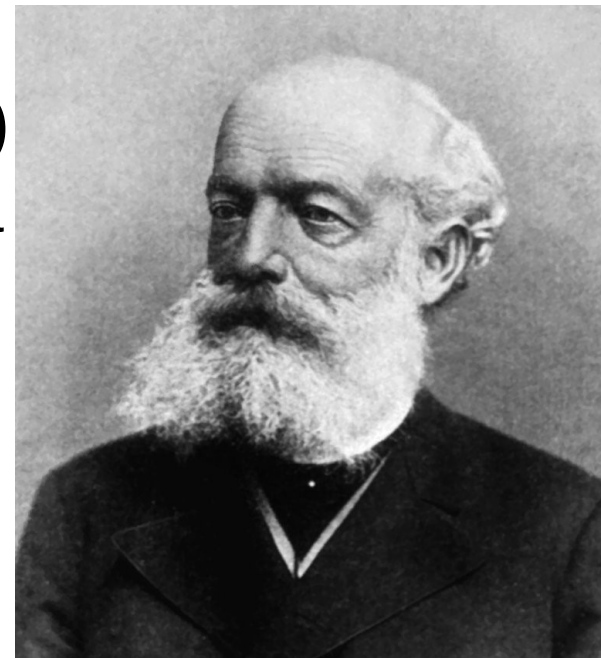
Estrutura Física x Estrutura Química

1858: dois artigos (Kekulé escreveu o primeiro e Couper escreveu o segundo) lançam as bases da **teoria estrutural da química orgânica**.

- Ideias centrais:

- 1) a ideia do **carbono tetravalente**
- 2) o conceito de **catenação**, ou seja, **átomos de carbono** podem formar **cadeias**

- Além disso, ambos os artigos, pela primeira vez, continham a ideia de que as **propriedades dos compostos** dependia das **propriedades e arranjos** de seus **átomos**.



August Kekulé (1829-1896)

Estrutura Física x Estrutura Química

Butlerow (1828-1886) faz um **refinamento** da teoria da estrutura química (1859-1870).

- Kekulé, Couper e Butlerow enfatizam que as **estruturas** que escreviam **não** tinham **significado físico**, mas apenas uma possível **representação** das **afinidades químicas**.

- De certa forma, a distinção entre estrutura física e química foi uma forma de amenizar a forte crítica que havia na época em relação às novas ideias estruturais e assim tornavam estes conceitos mais palatáveis para uma audiência maior de químicos.



A handwritten signature in cursive script, likely reading 'A. M. Butlerov'.

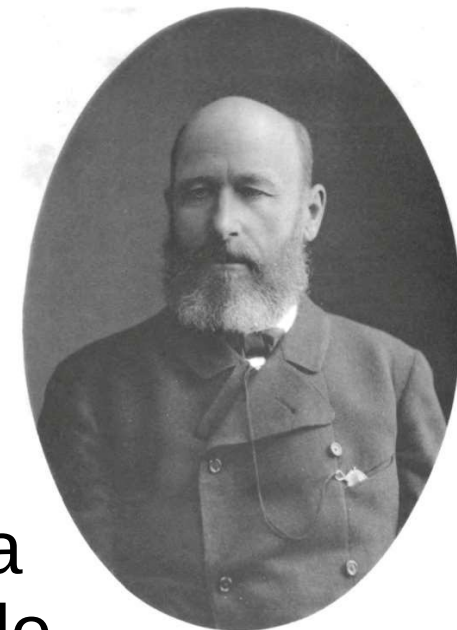
Aleksandr Mikhailovich
Butlerow (1828-1886)

Estrutura Física x Estrutura Química

Butlerow (1828-1886) publica seu primeiro artigo sobre a teoria estrutural em 1861 no jornal *Zeitschrift für Chemie* editado por Emil Erlenmeyer (1825-1909).

- “A bem conhecida regra de que as propriedades de uma molécula depende da sua natureza, da quantidade e do arranjo de seus constituintes elementares pode ser alterado para:

A **natureza química** de uma **molécula** depende da **natureza e quantidade** de seus **constituintes elementares** e de sua **estrutura química**”



A handwritten signature in cursive script, likely reading 'A. M. Butlerov'.

Aleksandr Mikhailovich
Butlerow (1828-1886)

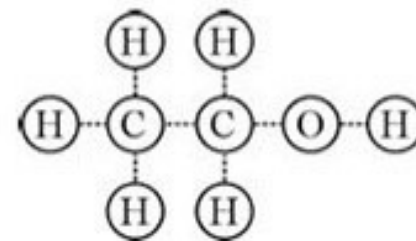
Estrutura Física x Estrutura Química



Alexander Crum
Brown (1838-1922)

Alexander Crum Brown (1838-1922) publicou seu primeiro artigo sobre a teoria estrutural em 1861 no jornal *Zeitschrift für Chemie* editado por Emil Erlenmeyer (1825-1909).

Investigou a **estrutura** de **moléculas**.

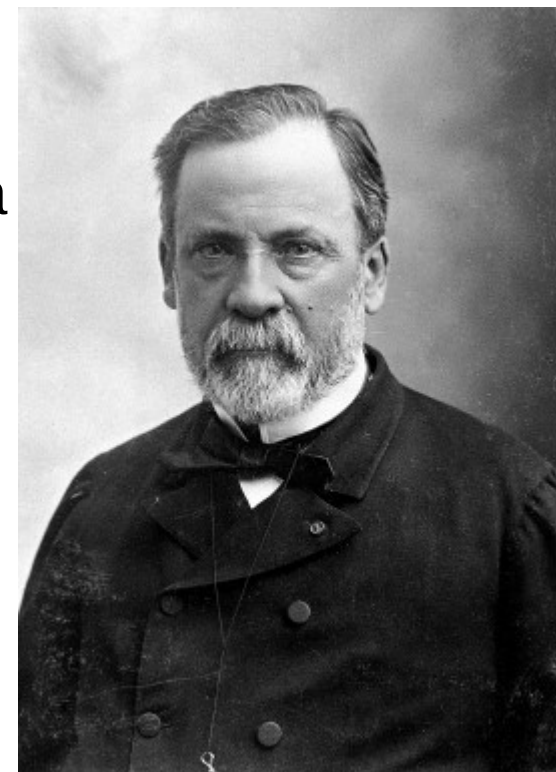
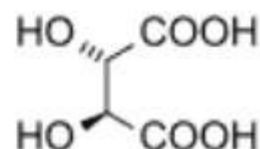
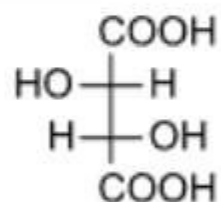
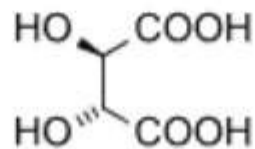
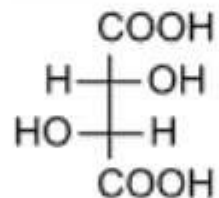
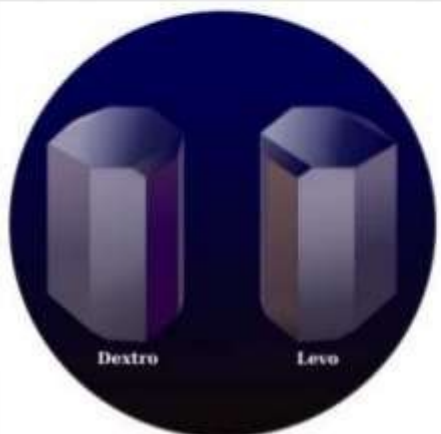


molécula de etanol (C_2H_6O
ou CH_3CH_2OH ou C_2H_5OH)
desenhada por Crum Brown

Estrutura Física se transforma em Estrutura Química

O **movimento** que levou para um **significado físico** das **representações estruturais** foi dado por **Pasteur**. Pasteur em 1860 sugere que uma **mesma substância** com **rotações opostas** estão relacionadas como um objeto e sua imagem no **espelho**.

- Pasteur made a proposal that since the crystals of tartaric acid were mirror images of each other, their molecules were also mirror images of each other

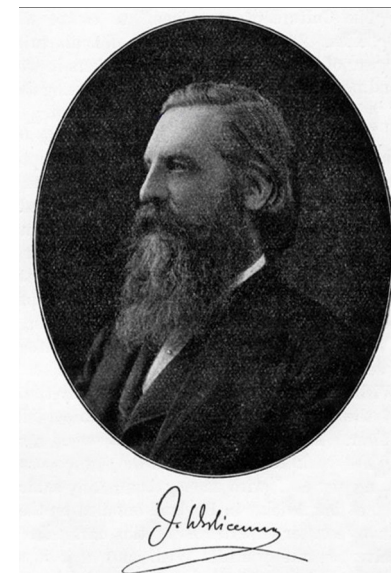


Louis Pasteur
(1822-1895)

Estrutura Física se transforma em Estrutura Química

Wislicenus sugere que as diferenças entre **estereoisômeros** é devido ao **arranjo tridimensional** dos **átomos**.

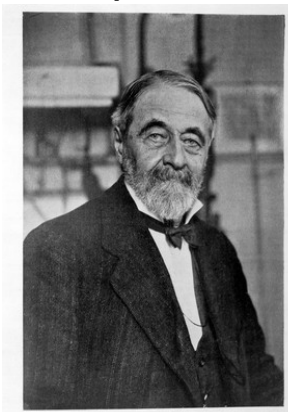
O conceito de carbono tetraédrico foi introduzido em 1862, mas apenas em 1874 os químicos **van't Hoff** (1852-1911) e **Le Bel** (1847-1930) concluíram que as **estruturas químicas** tinham **significado físico**, ou em outras palavras as duas tinham o **mesmo significado**.



Johannes Wislicenus
(1835-1902)



Jacobus Henricus van't
Hoff (1852-1911)



Joseph Achille Le³Bel
(1847-1930)

Estrutura Física = Estrutura Química

É notável que, no espaço de menos de **duas décadas**, a **teoria estrutural** da **química orgânica** mudou muito, no **início** considerava que a estrutura química era **separada** e distinta da **estrutura física** da molécula, e representava apenas as "afinidades" dos átomos dentro da molécula, até o ponto onde essas **mesmas fórmulas** passaram a ser vistas como **representações** das **localizações físicas** reais dos **átomos** na **molécula**. O que foi deixado **sem explicação** no final do século XIX, foi uma descrição exata do que as "**afinidades químicas**" dos **átomos** que compõem as **moléculas** eram. A **resposta** para este problema teria que aguardar o novo século, e o desenvolvimento de **teorias modernas** do **átomo** e da **ligação química**.

O Mol

Definição atual: *Bureau International des Poids et Mesures* (BIPM) 1967 (definição) → 1969 (confirmado) → 1971 (adotado):

1. The **mole** is the **amount of substance** of a system which contains **as many elementary entities** as there are **atoms** in **0.012 kg of carbon-12**, its symbol is “**mol**”.

2. When the mole is used, the elementary entities must be specified and may be **atoms, molecules, ions, electrons, other particles**, or specified groups of such particles.

It follows that the **molar mass** of carbon-12 is exactly 12 g per mole

$$M(^{12}\text{C}) = 12 \text{ g/mol}$$

N_A ou L : **constante de Avogadro** (sem dimensão, melhor mol^{-1})

N : **número** de entidades (partículas) da amostra,

n : **quantidade** de substância (unidade: mol) $\Rightarrow n = N/N_A$

O Mol

Definição atual: 1 mol de objetos contém um **determinado número** de objetos igual ao **número** de **átomos** que existe em precisamente **12 g** de **carbono-12** (ou ^{12}C).

Determinando a constante de Avogadro

A massa de um átomo de carbono-12 foi determinada por espectroscopia de massa como sendo $1.99265 \cdot 10^{-23}$ g

$$\Rightarrow N_A = 12 \text{ g} / 1.9926 \cdot 10^{-23} \text{ g} = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1},$$

ou seja 1 mol de objetos = $6.0221 \cdot 10^{23}$ objetos

Exemplos: Suponha que uma amostra de vitamina C contém $1.29 \cdot 10^{24}$ átomos de hidrogênio (além de outros tipos de átomos). Qual é a quantidade química (em mol) de átomos de hidrogênio na amostra?

$$n = N/N_A = 1.29 \cdot 10^{24} / 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 2.14 \text{ moles de H}$$

A Massa Molar

A **massa molar** $M(X)$ de uma substância X é a **massa** por **mol** de seus **átomos** ou **moléculas**. A unidade de massa molar é gramas ou kilogramas por mol (kg mol^{-1}).

A **massa molar** dos **elementos** é dada na **tabela periódica**.

Para um montante n de uma substância X com massa M vale:

$$M(X) = M/n$$

Exemplo: A massa de uma moeda de cobre é 3.20 g. Suponha que ela foi feita com cobre puro.

(a) Quantos mols de átomos de Cu deveria conter a moeda, dada a massa molar de Cu de 63.54 g/mol.

(b) Quantos átomos N de Cu estão presentes?

$$(a) n = M/M(\text{Cu}) = 3.20 \text{ g} / 63.54 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 0.0504 \text{ mol de Cu}$$

$$(b) N = n \cdot N_A = 0.0504 \text{ mol} \cdot 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \\ = 3.03 \cdot 10^{22} \text{ átomos de Cu}$$

Massa Atômica

A **unidade de massa atômica** é definida convencionando que a **massa atômica** do isótopo do **carbono-12** é **exatamente 12 u.m.a.**

1 u.m.a = 1 u = 1 Da (Dalton) = 1/12 da massa de um átomo de carbono-12, isto é, $1.99265 \cdot 10^{-23} \text{ g} / 12 = 1.660540 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Devido a esta definição, a **massa molar** de **uma substância X em gramas** é igual à **massa atômica/molecular** m_x da substância **em Dalton**:

$$M(X)[\text{g}] = m_x[\text{u}]$$

combinando com $M(X) = M/n$ obtemos: $N = M/m_x$

As **massas** do **próton** e do **néutron** m_p e m_n , são quase iguais e muito próximas de **um Dalton** ($m_p = 1.007276 \text{ u}$, $m_n = 1.008671 \text{ u}$), tal que a **massa** de **um átomo** é, em boa aproximação, o seu número de núcleons ou **número de massa**, A , em **Daltons**.

Massa Atômica

Figura 19.1 Massas atômicas e abundâncias de alguns elementos

Elemento	Isótopos	Massa	Abundância (%)	Abundância (100 : minoritário) ^a	Peso atômico ou químico
C	¹² C	12,000 00	98,903		12,011
	¹³ C	13,003 35	1,103	1,15	
H	¹ H	1,007 825	99,985		1,007 94
	² H	2,0140	0,015	0,015	
O	¹⁶ O	15,994 915	99,76		15,9994
	¹⁷ O	16,999 131	0,04	0,04	
	¹⁸ O	17,999 160	0,20	0,20	
N	¹⁴ N	14,003 074	99,63		14,006 74
	¹⁵ N	15,000 108	0,37	0,37	
F	¹⁹ F	18,998 403	100		18,998 403
Cl	³⁵ Cl	34,968 852	75,77		35,4527
	³⁷ Cl	36,965 903	24,23	31,98	
Br	⁷⁹ Br	78,918 336	50,69		79,904
	⁸¹ Br	80,916 289	49,31	97,28	

Massa Atômica x Massa do Átomo

A **massa atômica** de um **elemento químico** é dada pela **média ponderada** das **massas atômicas** de seus **isótopos**, onde a **porcentagem** com que cada aparece na **natureza** é o **peso**.

exemplo: cloro possui dois isótopos de pesos atômicos 35 u e 37 u, com porcentagens, respectivamente, iguais a 75 % e 25 %.

$$m_{\text{Cl}} = 0.75 \cdot 35 \text{ u} + 0.25 \cdot 37 \text{ u} = 35.5 \text{ u}$$

Massa Molecular

De uma maneira prática, calculamos a **massa molecular somando todas as massas atômicas** dos **átomos** que **formam** a molécula.

exemplo:

CO₂ consiste de 1 átomo de C (normalmente C-12)
e 2 átomos de oxigênio (O-16)

$$m_{\text{CO}_2} = m_{\text{C}} + 2 \cdot m_{\text{O}} = 12 \text{ u} + 2 \cdot 16 \text{ u} = 44 \text{ u}$$

O Estado Gasoso da Matéria

Os **gases** possuem a propriedade de ocupar **todo** o **volume** disponível no recipiente onde eles se encontram. Havendo uma **diminuição** do **volume** do recipiente o gás se **comprime**, e havendo um **aumento** de volume o gás se **expande**.

- Outra característica de um gás é sua **baixa densidade** comparado com **líquidos** ou **sólidos** nas **mesmas** condições de **temperatura** e **pressão**.

- De certa forma, o estado gasoso é o estado “mais simples” da matéria, já que as **moléculas** estão tão separadas que **não interagem** umas com as outras (ou apenas por choques elásticos).

Princípio de Avogadro: Relação Quantidade-Volume

O **volume molar**, V_m , de uma substância (qualquer uma, não só o gás) é o **volume** ocupado por **um mol** de **moléculas**. Ou seja: $V_m = V/n$

Na tabela abaixo, temos algumas medidas de V_m de **gases** na **mesma pressão** e **mesma temperatura**. Os **valores** são **muito próximos**.

Ideal gas	22.41
Argon	22.09
Carbon dioxide	22.26
Nitrogen	22.40
Oxygen	22.40
Hydrogen	22.43

Princípio de Avogadro

Esses resultados sugerem:

- Essa expressão nos diz que quando o **número de mols** aumenta por um fator 2 (sobre T e P constantes) o **volume** ocupado pelo gás **também** dobra.
- Está em acordo com nossa **visão molecular** do gás: para a pressão ficar constante quando há um aumento no número de moléculas, o volume do recipiente deve aumentar.

Resumo das Grandezas e Relações entre elas

N : **número** de entidades (partículas) da amostra [sem dimensão],

n : **quantidade** de substância [mol]

N_A ou $L = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$: **constante de Avogadro**

m_x : **massa atômica/molecular** da substância X [kg ou u]

M : **massa** da amostra [kg]

$M(X)$: **massa molar** da substância X [kg/mol]

V : volume da amostra [m^3]

V_m : **volume molar** da substância [m^3/mol]

ρ : **densidade** da substância [kg/m^3]

$$n = N/N_A$$

$$M(X) = M/n$$

$$M(X)[\text{g}] = m_x[\text{u}]$$

$$V_m = V/n$$

$$\rho = M/V = M(X)n / V_m n = M(X) / V_m$$

Movimento Browniano

- Robert Brown observou o movimento de grãos de pólen, sobre um líquido.
- O movimento era aleatório (movimento Browniano)
- <https://www.youtube.com/watch?v=R5t-oA796to>
- *“The agitation does not originate either in the particles themselves or in any cause external to the liquid, but must be attributed to internal movements, characteristic of the fluid state,”* movements which the grains follow more faithfully the smaller they are. We are thus brought face to face with an essential property of what is called a fluid in equilibrium; its apparent repose is merely an illusion due to the imperfection of our senses and corresponds in reality to a permanent condition of uncoordinated agitation.”

Movimento Browniano

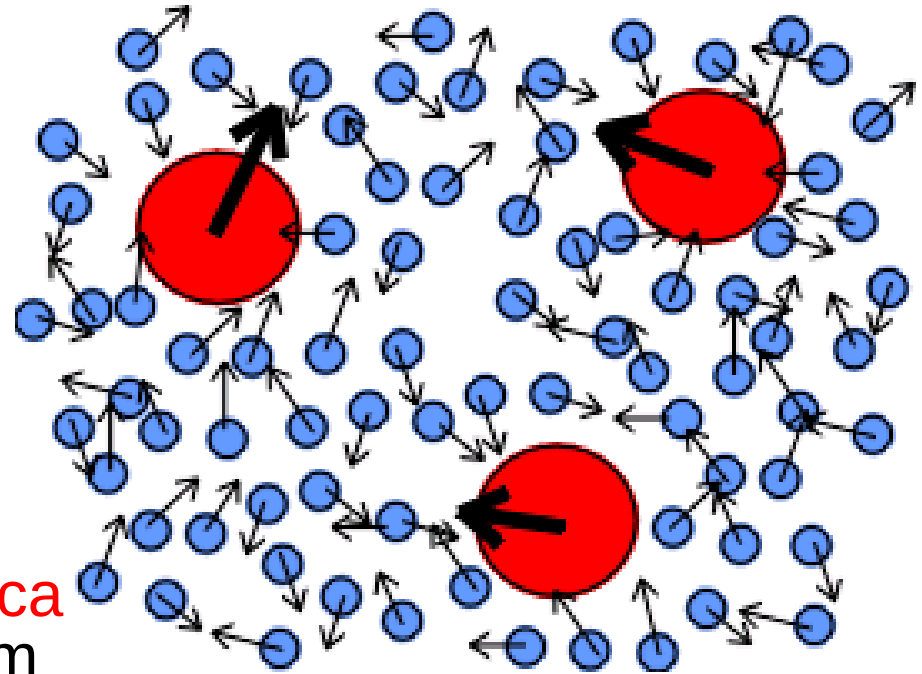
- O cientista que explicou corretamente esse movimento, propondo que o **líquido** fosse constituído de **moléculas**, foi Albert EINSTEIN em 1905
- Baseado na fórmula pra **energia térmica** de uma **partícula** num **gás** ou **líquido**, $E = \frac{3}{2} \cdot k_B T = \frac{1}{2} \cdot m v^2$, Einstein provou que o movimento browniano devia ser **mais intenso** para **partículas menores**, e estudou também os diversos outros fatores que nele intervêm, como, por exemplo, a viscosidade do líquido.



$$v_{\text{rms}} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

Movimento Browniano

Usando a **teoria cinética dos gases** (=> próxima aula), Einstein calculou o **deslocamento quadrático médio** $\langle x^2 \rangle$ de um grão de pólen no **tempo** t , onde η = viscosidade do líquido, r = raio da partícula, $N_0 = N_A$.



1909 Jean Perrin verifica experimentalmente com grande precisão a fórmula de Einstein, e consegue **medir o número de moléculas** presentes em dada **massa de água**.

$$\langle x^2 \rangle = \frac{RT}{N_0} \frac{t}{3\pi\eta r}$$

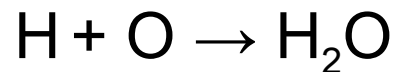
=> Moléculas e Átomos Existem!!!

Alguns Exemplos (se der tempo)

Equações Químicas

hidrogênio + oxigênio → água

1° passo: representação de átomos e moléculas envolvidos na reação



INCORRETO:

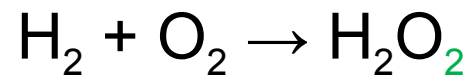
as substâncias hidrogênio e oxigênio não são formadas por átomos isolados, e sim por moléculas diatômicas

Alguns Exemplos (se der tempo)

Equações Químicas

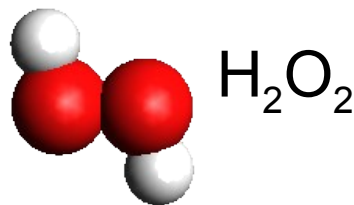
hidrogênio + oxigênio → água

1º passo: representação de átomos e moléculas envolvidos na reação



INCORRETO:

H₂O₂ representa a substância peróxido de hidrogênio, e não água

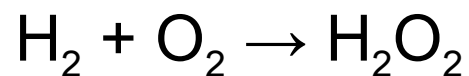


Alguns Exemplos (se der tempo)

Equações Químicas

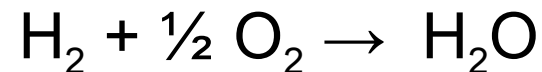
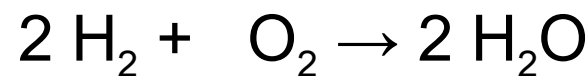
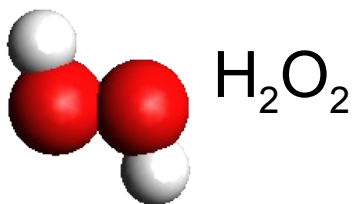
hidrogênio + oxigênio → água

2º passo: balanceamento da equação (encontrar a proporção entre os componentes, de modo que nenhum átomo seja criado nem destruído durante a reação química)

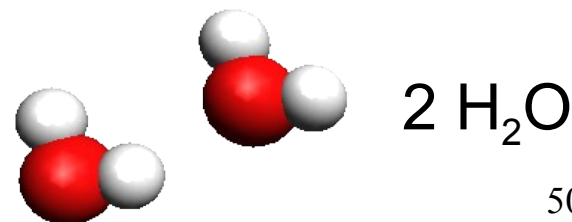


INCORRETO:

H₂O₂ representa a substância peróxido de hidrogênio, e não água



CORRETOS



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanceamento de Equações Químicas



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanceamento de Equações Químicas



Começar pelos elementos que figuram, em ambos lados da reação, em apenas uma substância. Começamos C_3H_8 e tratamos o átomo de C.



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanceamento de Equações Químicas



Começar pelos elementos que figuram, em ambos lados da reação, em apenas uma substância. Começamos C_3H_8 e tratamos o átomo de C.



Mais átomos de H do lado esquerdo



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanceamento de Equações Químicas



Começar pelos elementos que figuram, em ambos lados da reação, em apenas uma substância. Começamos C_3H_8 e tratamos o átomo de C.



Mais átomos de H do lado esquerdo

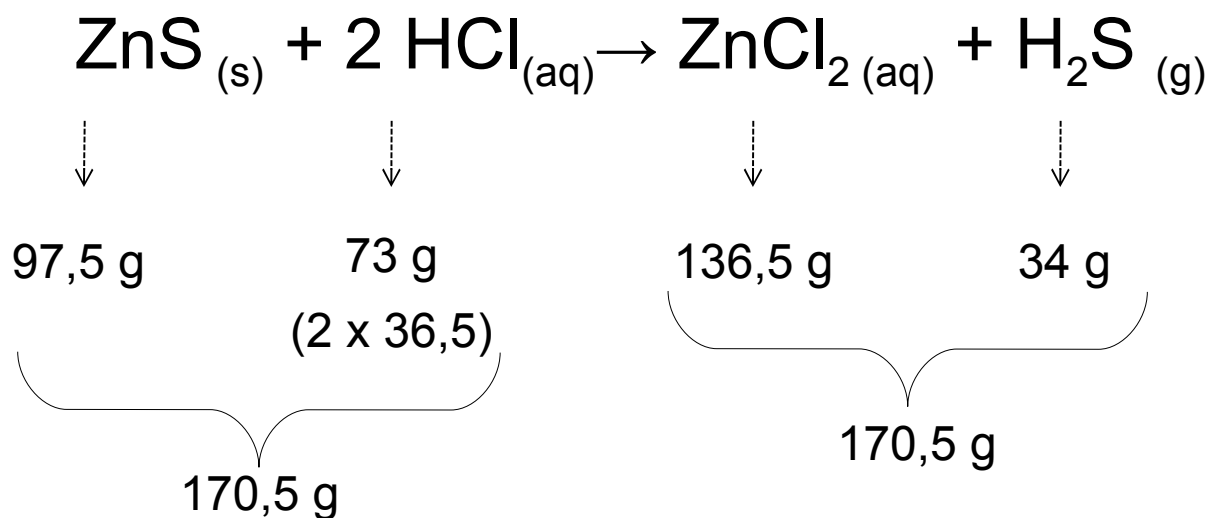


Mais átomos de O do lado direito



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanço de massa



Massas Molares
ZnS = 97,5 g.mol ⁻¹
HCl = 36,5 g.mol ⁻¹
ZnCl ₂ = 136,5 g.mol ⁻¹
H ₂ S = 34 g.mol ⁻¹

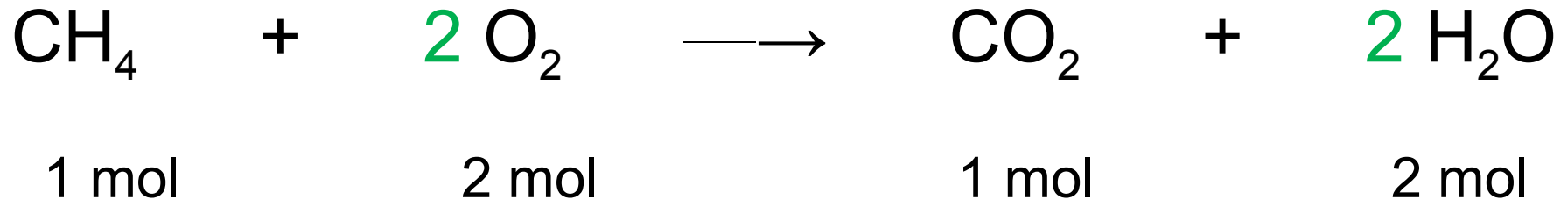
Esta é a **PROPORÇÃO em MASSA** desta reação. Assim, o dobro da massa de ZnS (195,0 g) reagiria com o dobro da massa de HCl (146,0 g), formando o dobro de massa de cada produto.

O mesmo raciocínio vale para a *proporção em quantidade de matéria* dos reagentes desta reação.

Alguns Exemplos (se der tempo)

Estequiometria

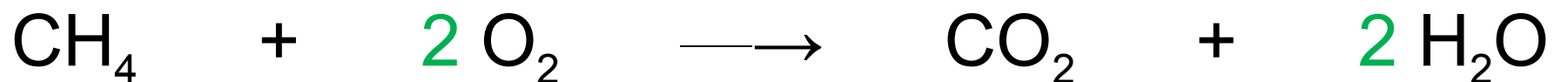
Relações de massa entre os componentes de uma reação química:



Alguns Exemplos (se der tempo)

Estequiometria

Relações de massa entre os componentes de uma reação química:



1 mol

2 mol

1 mol

2 mol



16 g

$2 \times 32 \text{ g}$

44 g

$2 \times 18 \text{ g}$

massa dos reagentes: 80 g

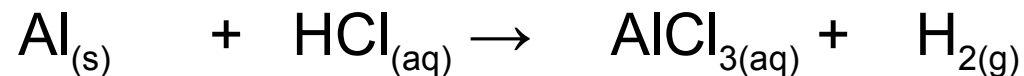
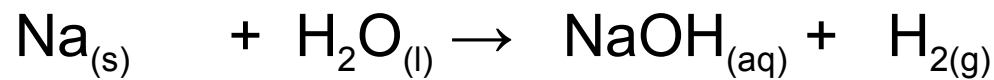
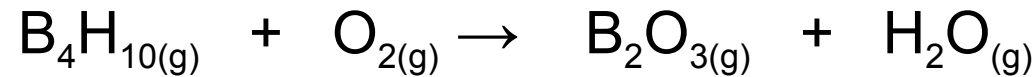
massa dos produtos: 80 g



CONSERVAÇÃO DE MASSA

Alguns Exemplos (se der tempo)

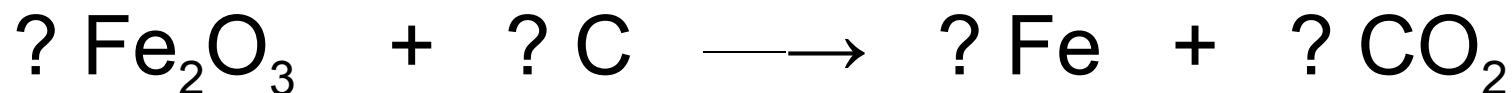
Balanceamento de Equações Químicas



Alguns Exemplos (se der tempo)

Balanço de Massa

1) Qual a massa de ferro metálico que pode ser obtida de 1 t de minério?

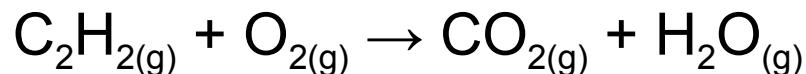


Massas molares: Fe (56 g/mol), C (12 g/mol), O (16 g/mol)

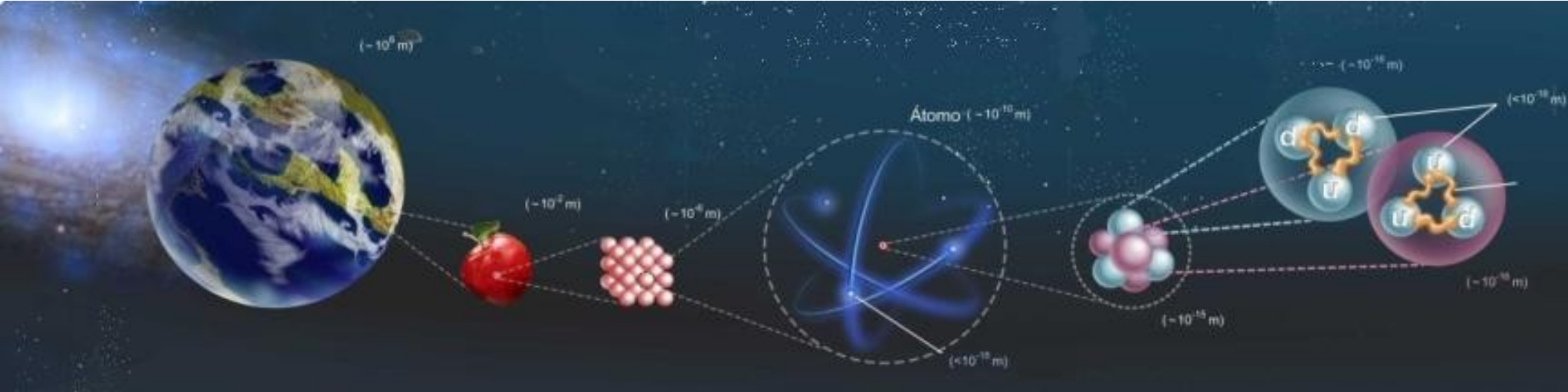
2) Considere a equação: $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$.

Calcule a massa de CO_2 que seria produzida a partir de 12.0 g de CO.

3) As chamas de oxiacetileno são usadas para soldas, atingindo temperaturas próximas a 2000°C . Estas temperaturas são devidas à combustão do acetileno, C_2H_2 , com oxigênio:



Partindo de 125 g de ambos, qual é o reagente limitante?



Universidade Federal do ABC

Estrutura da Matéria

FIM pra hoje

<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Estrutura.html>