

Química Geral para Ciências Biológicas (QGB)

1

Aula 1

⇒ Organização:

- Aulas no quadro (slides apenas se necessário)

- 3 provas ~ P1: $\frac{07}{06/04}$ P2: $\frac{12}{11/05}$ P3: $\frac{07}{06/07}$

Sub: $\frac{14}{13/07}$

MF: $\frac{P1 + P2 + P3}{3}$

- Módulos:

1. Ligações químicas 2. Funções inorgânicas

3. Química de soluções 4. Equilíbrio químico

5. Ácidos, bases e pKa

- Bibliografia: KOTZ, J. C.; TREICHEL, P. M. Química geral e Reações Químicas (vols. 1 e 2)

- Arquivo em pdf no SIGAA com todas as informações

- Presença não será cobrada

⇒ Estudo de Química: Por que estudar química em um curso de biologia?

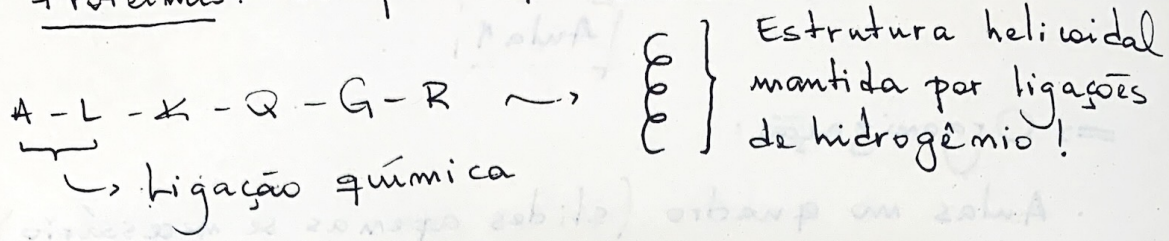
[a.] Linguagens das ciências naturais

Matemática → Física → Química → Biologia

[b.] Processos e sistemas biológicos são químicos!

2

EX.: Proteínas: Compostas por aminoácidos



EX.: Enzimas: Catalisam reações em meio biológico

↳ Extremamente sensíveis a pH e T

• Como se mantém o pH em uma faixa ótima?

↳ Soluções - tampão!

Módulo 1. Ligações químicas (Kotz: vol. 1, cap. 8)

1.1) Tipos de ligação química ~> elétrons!

Iônica

Interação eletrostática entre cátions e ânions

Na⁺ Cl⁻

NaCl
(Cloreto de Sódio)

Covalente

Compartilhamento de elétrons entre átomos

H · · H

H · · H
(H₂, ou hidrogênio molecular)

Metálica

Átomos de elementos formando um "mar de elétrons"

Na

Brilho, condução elétrica e térmica

↳ Para a biologia, a ligação covalente é a mais prevalente e importante, pois descreve os compostos orgânicos

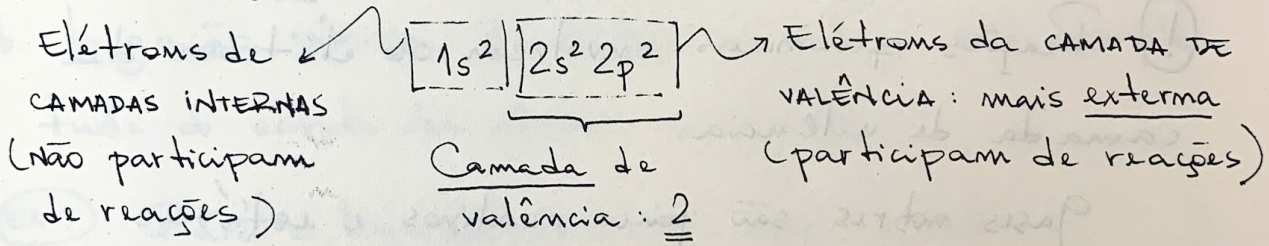
→ Como uma ligação covalente é estabelecida ③
e como podemos fazer suas representações?

↳ Estruturas e fórmulas
de Lewis!

1.2 Fórmulas de Lewis → Gilbert N. Lewis
(1875 - 1946) Indicado
ao Nobel 41 vezes!
Maneiras simples de repre-
sentar átomos e moléculas

→ Elétrons: camada de valência e camadas intermas

EX: Configuração eletrônica do carbono:



Exercício: Para cada elemento, mostre a configuração eletrônica total e a camada de valência

a) Mg b) O c) Ca d) As

a) Mg: 3º período e família II
} Camada 3 2e de valência

↳ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$: Distribuição total
[Ne]

= [Ne] $3s^2$; gás nobre com menos e mais próximo + Camada de valência (3)

④

→ Representação de Lewis para o átomo:

a. Escrever a sigla / símbolo do elemento;

b. Colocar um ponto para cada elétron de valência em um dos lados até completar 4;

c. Caso tenha mais que 4 elétrons de valência, formar pares até completar 8.

↳ Octeto de elétrons
(Configuração de gás nobre)

Ⓛ Reações químicas envolvem os elétrons da camada de valência.

Gases nobres são pouco reativos e estáveis

Exceto o He, todos os gases nobres têm 8 elétrons de valência.

⇒ Átomos tendem a perder, ganhar ou compartilhar elétrons até atingirem uma configuração eletrônica de gás nobre (Regra do Octeto)

→ Pela Regra do Octeto, podemos descrever melhor o conceito de valência e as ligações iônicas e covalentes.

a. Valência: Número de ligações químicas que um elemento químico tipicamente faz. (5)

EX.: Hidrogênio (H): 1s¹
 gás nobre mais próximo: He (1s²) Δe = 1

ligações necessárias (valência): (1)

Monovalente

H,
Halogênios

Bivalente

Família XVI
(O, S, ...)

Trivalente

Família XVIII
e XIX
(B, N, Al, ...)

Tetravalente

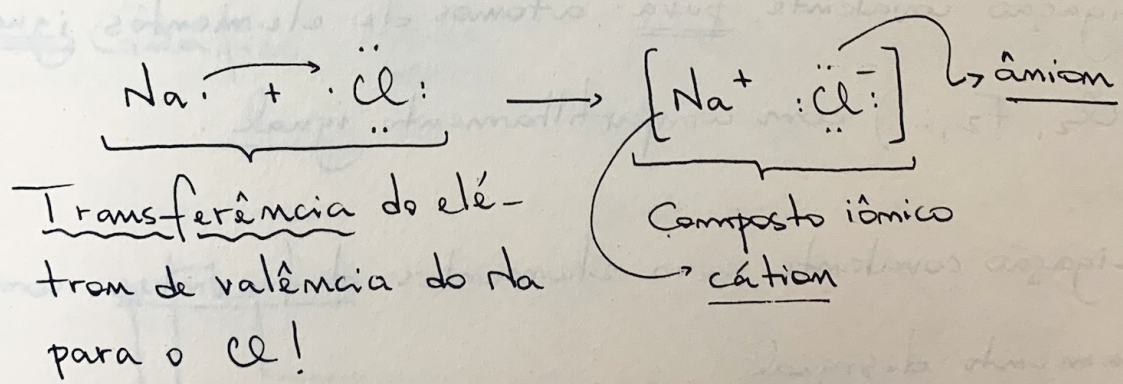
Família XIV
(C, Si, ...)

b. ligação iônica: transferência de e até completude do octeto dos átomos envolvidos

EX.: Para a ligação entre o Na e o Cl:

Na: [Ne] 3s¹

Cl: [Ne] 3s² 3p⁵

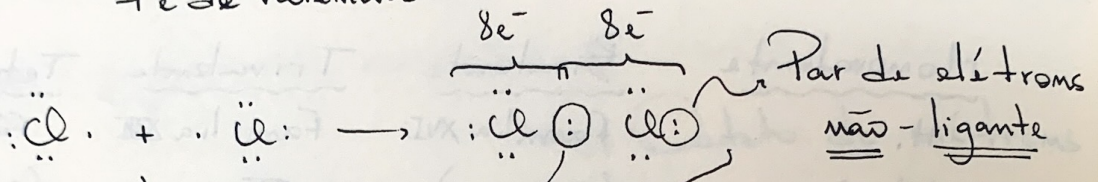
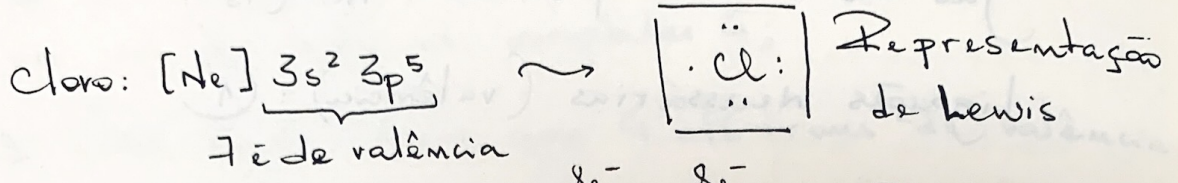


Na⁺: [Ne] (gás nobre)

Cl⁻: [Ne] 3s² 3p⁶ = [Ar] (gás nobre!)

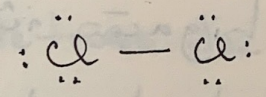
6 c. ligação covalente: compartilhamento de elétrons até completude dos octetos

EX.: Para a formação do composto Cl₂:



Ligação covalente!
 (Completude do octeto só é atingida com o compartilhamento)
 Par de elétrons ligante

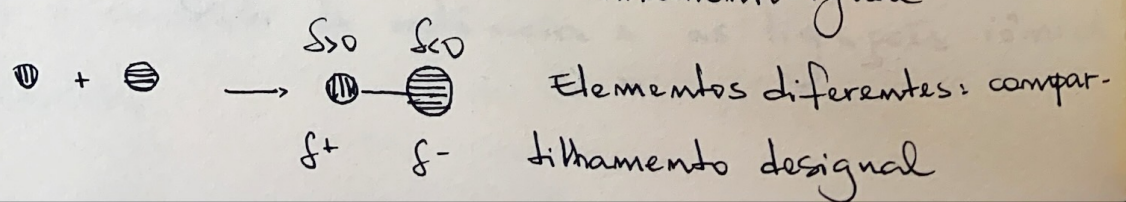
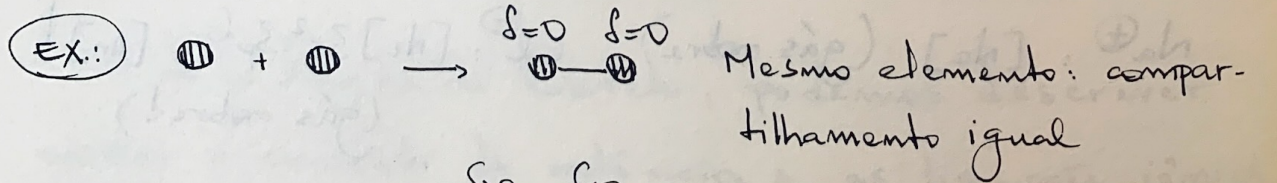
Mesma coisa de escrever:



1.3 | Eletronegatividade (χ) e momento dipolo (μ)

\rightarrow ligação covalente pura: átomos de elementos iguais ($\text{H}_2, \text{Cl}_2, \text{F}_2, \dots$) com compartilhamento igual.

\rightarrow Ligação covalente com elementos diferentes: compartilhamento desigual.



Carga parcial (δ): Medida de "deslocamento" ⁽⁷⁾ de densidade eletrônica em uma ligação covalente

→ Cargas parciais positivas ($\delta > 0, \delta^+$) indicam pouca densidade eletrônica no átomo;

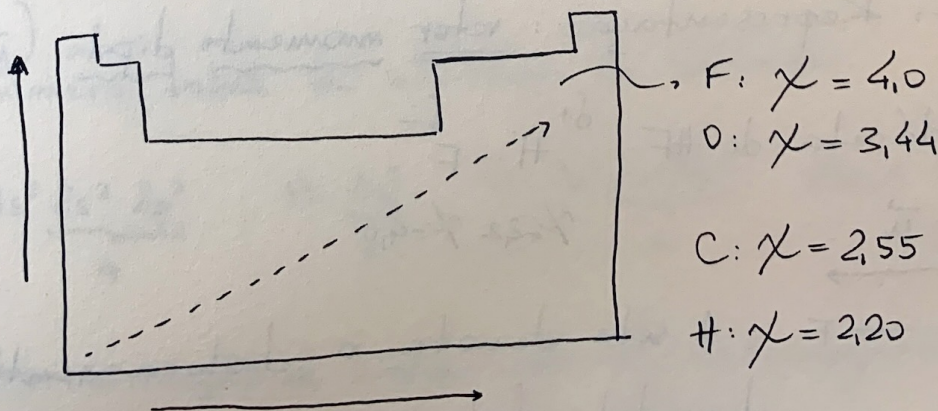
Cargas parciais negativas ($\delta < 0, \delta^-$) indicam alta densidade eletrônica no átomo.

→ Como saber, para um par de átomos A-B, qual terá δ^+ e qual terá δ^- ?

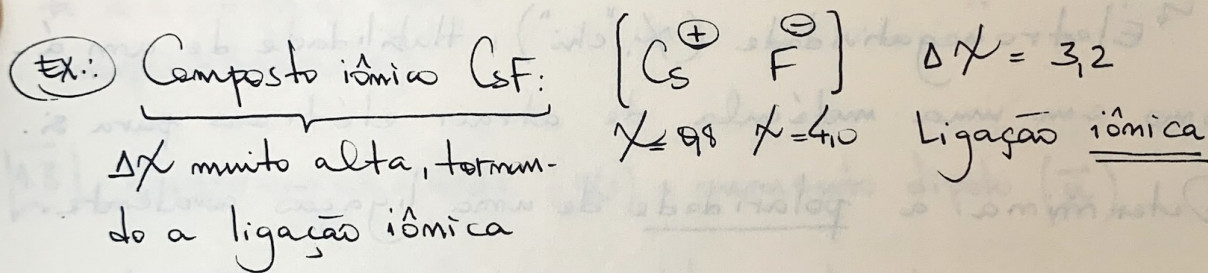
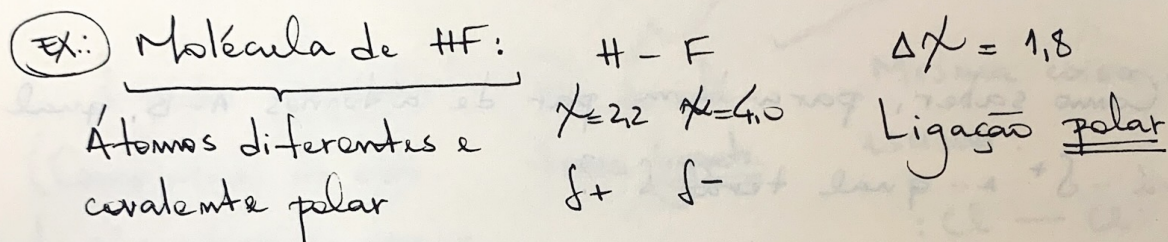
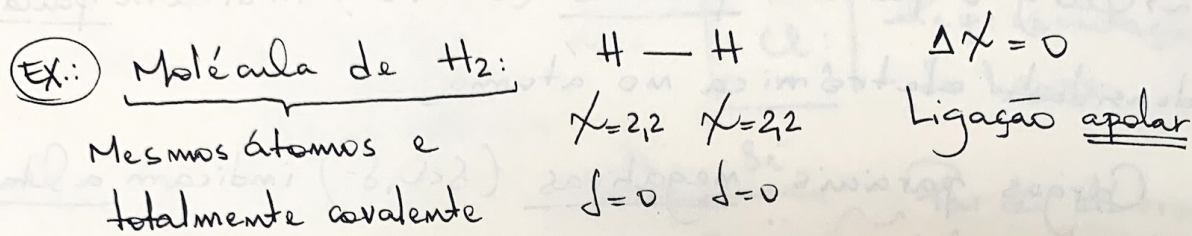
↳ Eletronegatividade (χ , "chi"): Habilidade de um átomo em uma molécula de atrair elétrons para si.

Determina a polaridade de uma ligação covalente.

⇒ Gráfico: Slide Tendência: aumenta da esquerda para direita e de baixo para cima na tabela

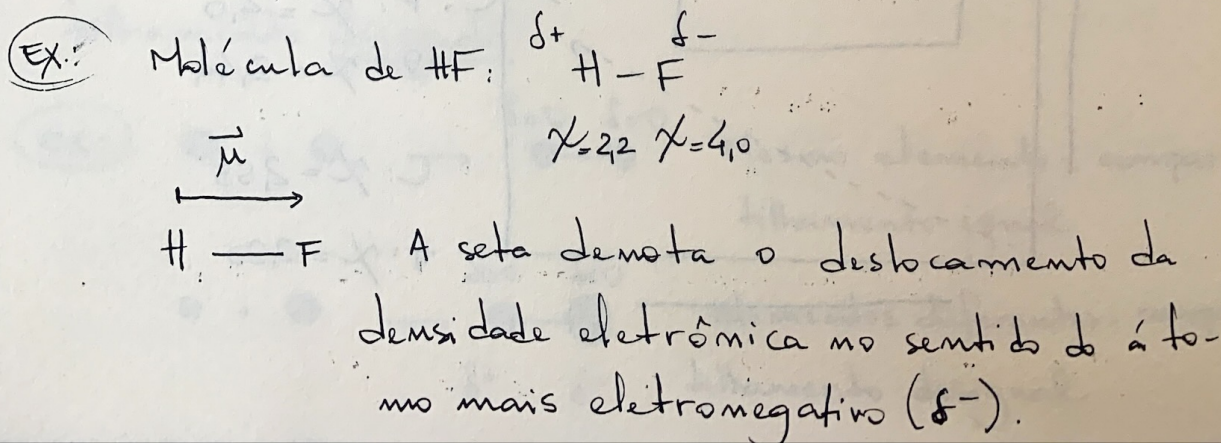


8) Polaridade de uma ligação: diferença entre a eletronegatividade dos átomos ($\Delta\chi$). Quanto maior $\Delta\chi$, mais polar será a ligação.



→ Ligações covalentes polares possuem concentração de cargas de sinais opostos

↳ Representação: vetor momento dipolo ($\vec{\mu}$)



1.4) Estruturas de Lewis de moléculas e íons poliatômicos

Exemplos: F_2 , CH_2O , $SOCl_2$, PO_4^{3-} ~ íon molecular!

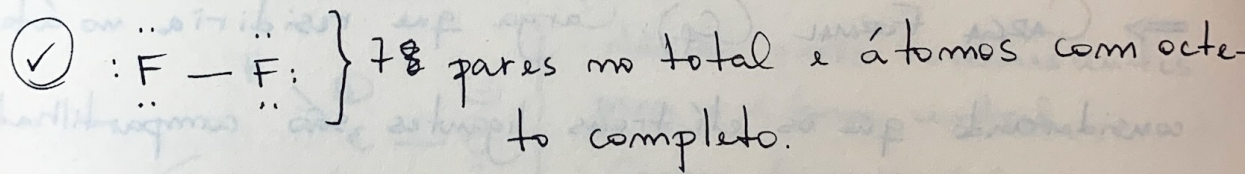
EX.: Para a molécula de F_2 :

1. Calcular o número total de e^- de valência:

F: $[He] \underbrace{2s^2 2p^5}_{7 e^- \text{ de valência}}$ $\rightarrow \sum e_{vi} = 7 \times 2 = \underline{14 e^-}$ (7 pares)

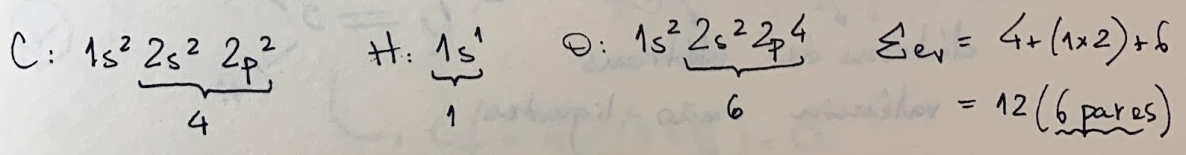
2. Determinar o átomo central: não se aplica

3. Colocar 1 par de elétrons entre os átomos ligados (LIGANTES) e pares NÃO-LIGANTES nos átomos periféricos até a completude do octeto.

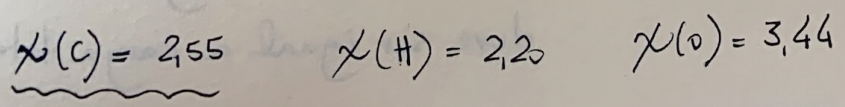


EX.: Para a molécula de CH_2O :

1. Número total de elétrons de valência:



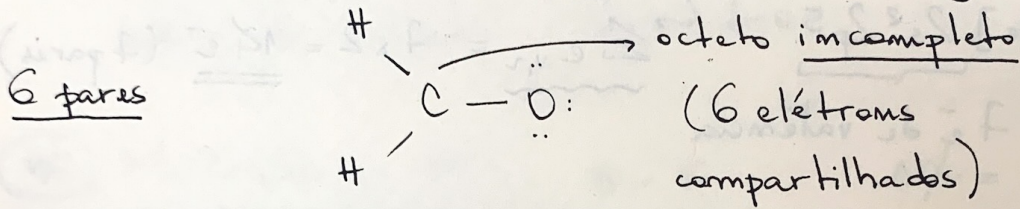
2. Determinação do átomo central: eletronegatividade!



10) \rightarrow Costuma ser o átomo de valência > 1 e com menor eletronegatividade.

Arranjo em torno do átomo central costuma ser simétrico!

3) Pares de elétrons ligantes e não-ligantes:



4) Se não houver pares restantes e o átomo central tiver o octeto incompleto, verificar a existência de ligações múltiplas (carga formal).

\Rightarrow CARGA FORMAL (C_f): Carga que residiria no átomo considerando que os elétrons ligantes são compartilhados igualmente entre os átomos da ligação.

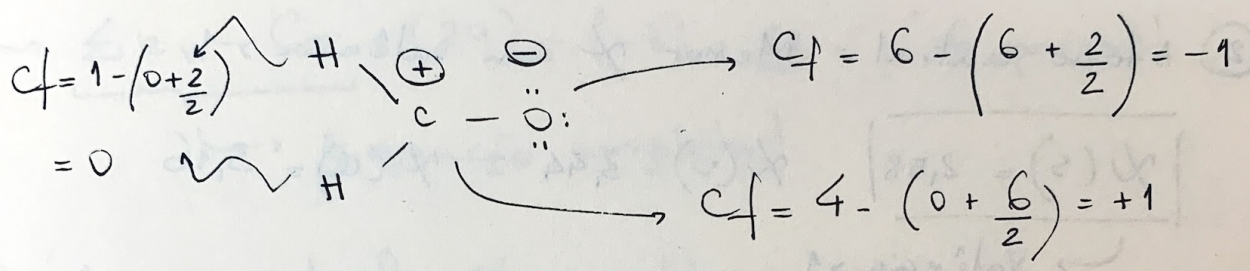
$$C_f = e_v - \left(e_{nl} + \frac{e_l}{2} \right)$$

elétrons de valência elétrons não-ligantes elétrons ligantes

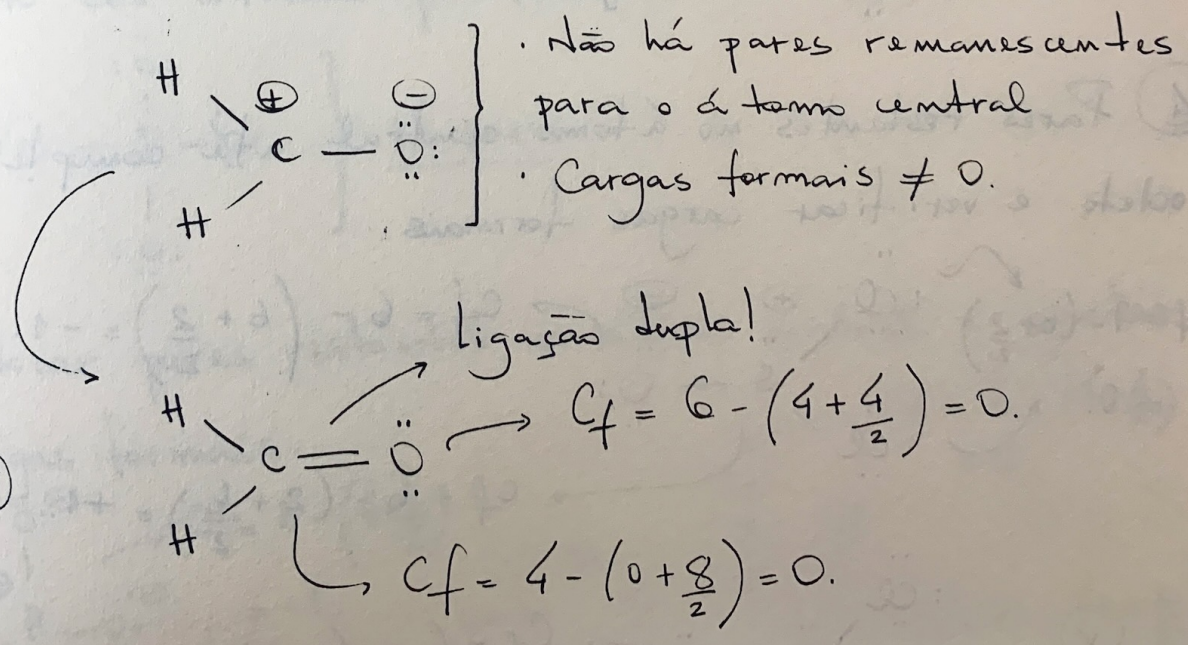
Carga Total $\leftarrow C_T = \sum C_f \rightarrow$ A soma das cargas formais deve ser igual a carga total

OBS.: As cargas formais dos átomos devem ser o mais próximo de zero possível. Além disso, átomos eletronegativos tendem a ter carga formal negativa e eletropositivos, positiva.

Retomando a etapa 4:

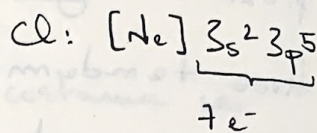
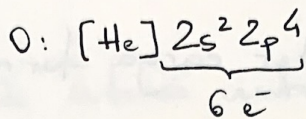
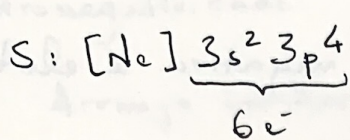


4. (Enunciado total): Após a distribuição dos pares nos átomos periféricos até completar o octeto, distribuir o restante no átomo central. Após isso, checar as cargas formais e ajustar a estrutura.



12) EX.: Para a molécula de SOCl_2 :

1) Soma dos elétrons de valência:



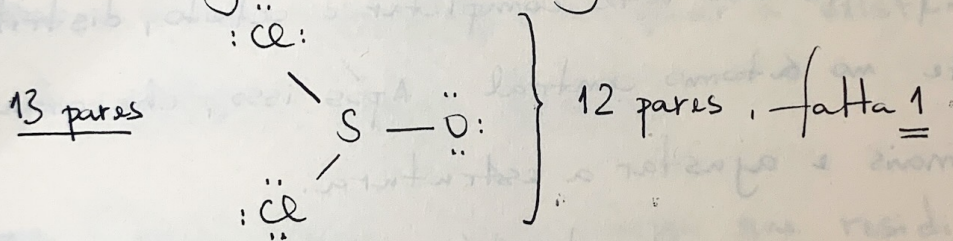
$$\Sigma_{ev} = 6 + 6 + (7 \times 2) = 26e^- \quad (\underline{13 \text{ pares}})$$

2) Átomo central: Memor χ com valência > 1

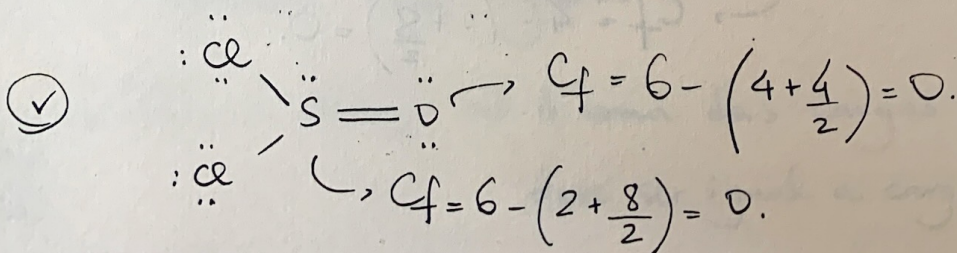
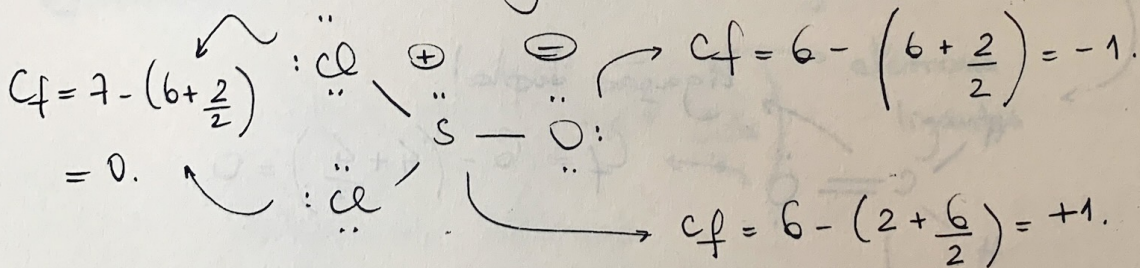
$$\left| \chi(\text{S}) = 2,58 \right| \quad \chi(\text{O}) = 3,44 \quad \chi(\text{Cl}) = 3,16$$

\hookrightarrow Valência > 1

3) Pares ligantes e não-ligantes até octeto:

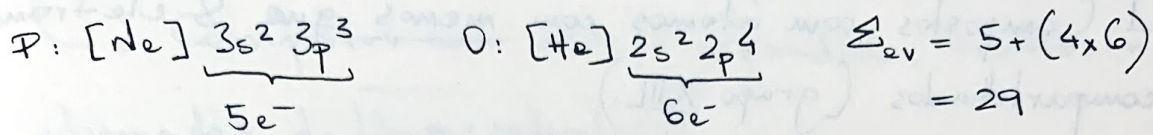


4) Pares restantes no átomo central até completar o octeto e verificar cargas formais:



Ex.: Para a molécula amiônica PO_4^{3-} ($C_T = -3$) (15)

1. Somatório dos elétrons de valência $\underline{\underline{E}}$ $\underline{\underline{\Delta A}}$
CARGA TOTAL!

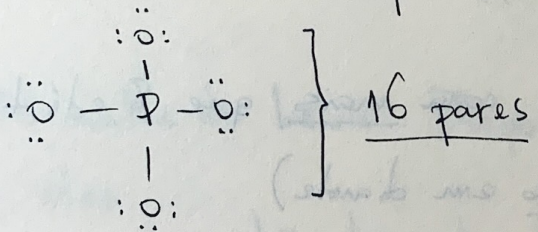


$\rightarrow \underbrace{\Sigma_{ev} - C_T}_{\text{Equação completa!}} = (29) - (-3) = \underline{\underline{32}} e^-$ (16 pares)

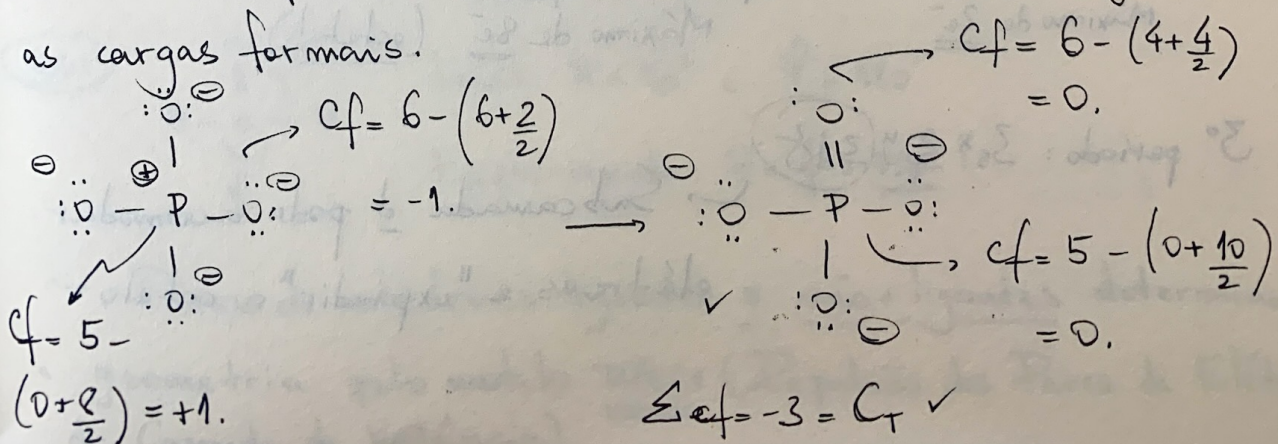
2. Átomo central: X e valência > 1

$\boxed{X(P) = 2,19}$ $X(O) = 3,44$

3. Pares ligantes e não-ligantes até completar o octeto dos átomos periféricos



4. Colocar pares restantes no átomo central e ajustar as cargas formais.

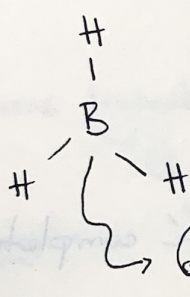
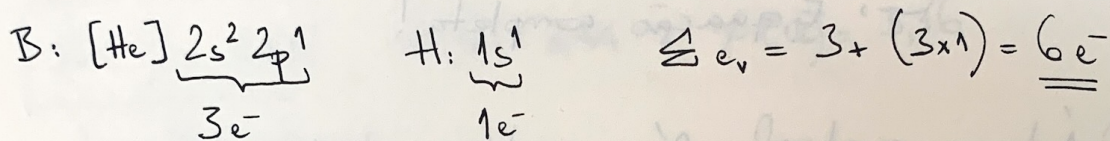


14 | 1.5 | Exceções da regra do octeto

→ 3 principais exceções:

1 | Compostos com átomos com menos que 8 elétrons compartilhados (grupo XIII)
↳ B, Al, Ga, In

EX.: Composto BH₃:



- Não há elétrons remanescentes
- Não há como fazer ligações duplas
- Cargas formais iguais a zero!

↳ 6 e⁻ compartilhados
(octeto incompleto)

2 | Compostos com átomos com mais que 8 elétrons compartilhados (3º período em diante)

1º período: $\underbrace{1s^x}$
Máximo de 2e⁻

2º período: $\underbrace{2s^x 2p^y}$
Máximo de 8e⁻ (octeto!)

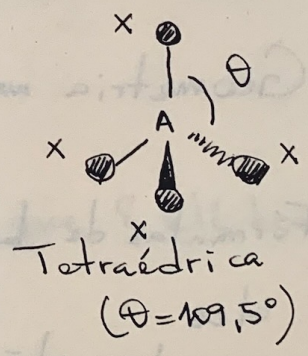
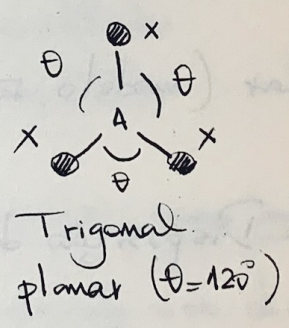
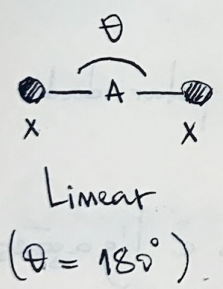
3º período: $3s^x 3p^y$ (3d^z)

↳ Subcamada d pode acomodar elétrons e "expandir" o octeto

16) \rightarrow As geometrias moleculares tendem a diminuir a repulsão entre pares de elétrons, especialmente os não-ligantes!

1) Moléculas com o átomo central (A) SEM pares de elétrons não-ligantes: mimimização da repulsão entre os pares de elétrons ligantes.

<u>Notação</u>	<u>Pares ligantes</u>	<u>Pares não-ligantes</u>	<u>θ/°</u>	<u>Geometria</u>
AX_2	2	0	180	Linear
AX_3	3	0	120	Trigonal planar
AX_4	4	0	109,5°	Tetraédrica

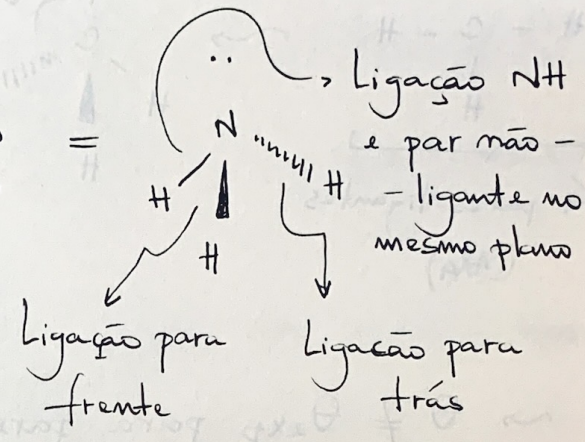
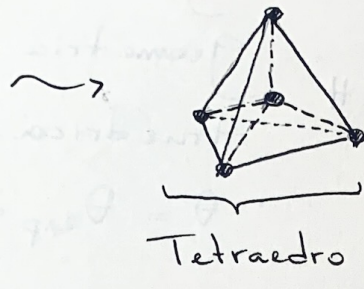
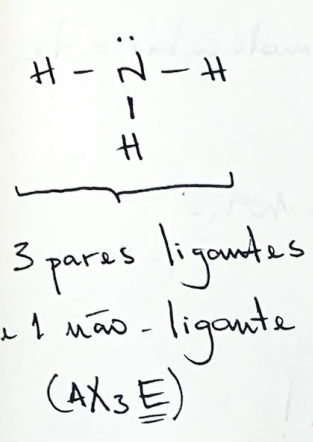


: CUNHA CHEIA (ligação para frente)

: CUNHA HACHURADA (ligação para trás)

2) Átomo central (A) com pares de elétrons não-ligantes: GEOMETRIA ELETRÔNICA e MOLECULAR.

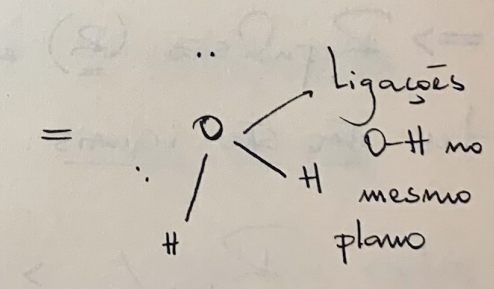
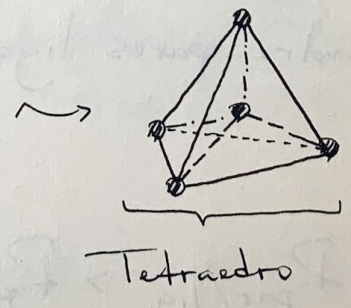
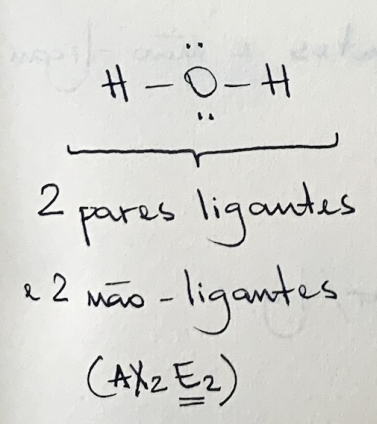
EX.: Para a molécula NH_3 (amônia) $\rightarrow \Sigma e_v = 8$



\Rightarrow Geometria eletrônica: todos os pares de elétrons (ligantes e não-ligantes) \rightarrow Tetraédrica

\Rightarrow Geometria molecular: apenas os pares de elétrons ligantes \rightarrow Piramidal

EX.: Para a molécula H_2O (água) $\rightarrow \Sigma e_v = 8e^-$

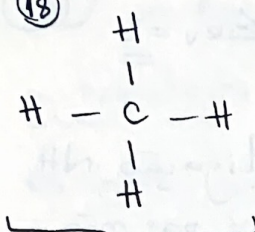


Geometria eletrônica: Tetraédrica

Geometria molecular: Angular

EX.: Para a molécula CH_4 (metano) $\rightarrow \Sigma e_v = 8e^-$

18



4 pares ligantes
(AX₄)

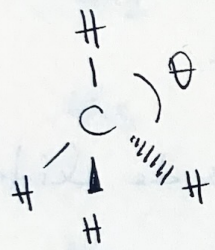


Geometria eletrônica =
Geometria molecular = tetraédrica

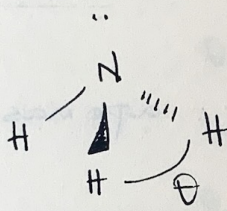
$\theta = \theta_{\text{exp}} = 109,5^\circ$

$\theta \neq \theta_{\text{exp}}$ para pares não - ligantes!

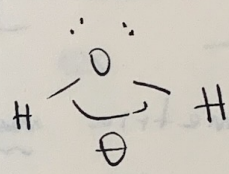
Comparando CH₄, NH₃ e H₂O:



$\theta_{\text{exp}} = 109,5^\circ$



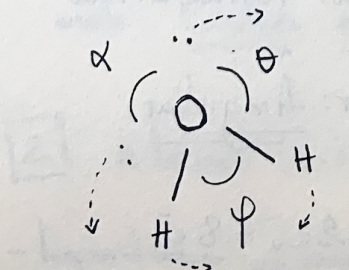
$\theta_{\text{exp}} = 107,5^\circ!$



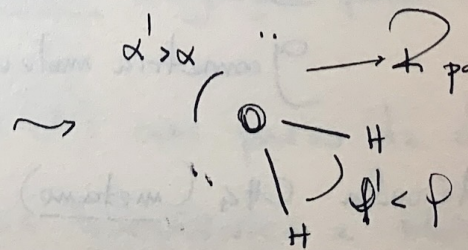
$\theta_{\text{exp}} = 104,5^\circ!$

\Rightarrow Repulsão (R) entre pares ligantes e não-ligantes NÃO SÃO IGUAIS:

$R_{\text{par/par}} > R_{\text{par/lig.}} > R_{\text{lig./lig.}}$

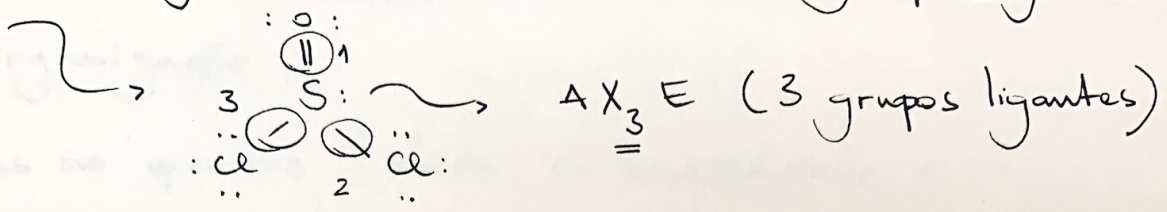


Ideal: $\alpha = \theta = \phi$



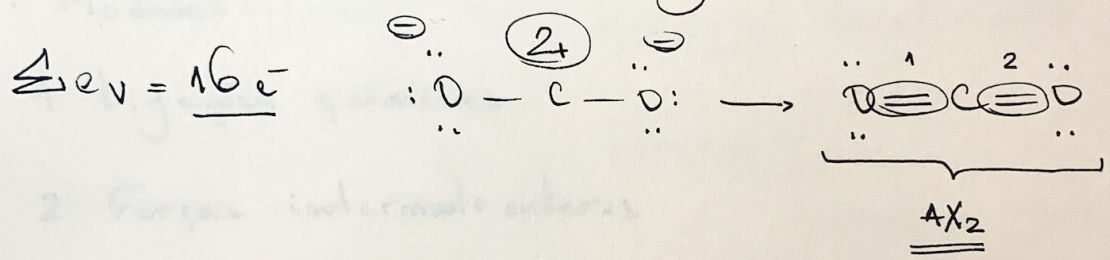
$R_{\text{par/par}}$ afasta os pares e aproxima os hidrogênios

→ Para moléculas com ligações múltiplas (duplas e triplas): ligações contam como um grupo ligante

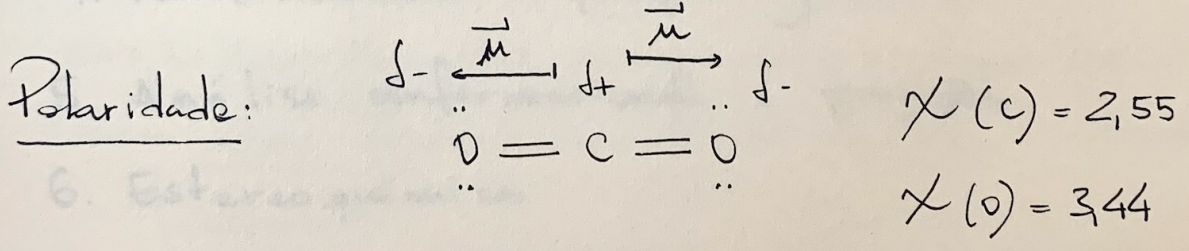


→ Polaridade de moléculas: SOMA dos vetores momento dipolo ($\vec{\mu}$) das ligações

EX.: Para a molécula de gás carbônico (CO₂)



AX₂: Geometria molecular = geometria eletrônica = Linear ($\theta = 180^\circ$)



$$\vec{\mu}_r = \Sigma \vec{\mu} = \overleftrightarrow{\quad} = 0. \therefore \text{Molécula } \underline{\text{apolar}}.$$

→ Quando $\vec{\mu}_r = \Sigma \vec{\mu} \neq 0$: Molécula polAR.