

ÍNDICE

PREFÁCIO i

INTRODUÇÃO iii

BIBLIOGRAFIA vi

ESTRUTURA ATÓMICA E PROPRIEDADES PERIÓDICAS ESTRUTURA ATÓMICA E MODELOS ATÓMICOS

Natureza eléctrica dos átomos

Electrólise

Condução de electricidade através de gases rarefeitos

Raios anódicos

Efeito termoiónico

Efeito fotoeléctrico

Raios X e Radioactividade

Raios X

Radioactividade

A carga do electrão

Modelos atómicos

Modelo atómico de Thomson

Modelo atómico de Rutherford

Modelo atómico de Bohr

Modelo atómico de Bohr-Sommerfeld

Mecânica ondulatória e estrutura atómica

Dualidade onda-corpúsculo

Hipótese de De Broglie

Princípio da incerteza de Heisenberg

Equação de Schrödinger

Significado da função de onda ?

Função radial $R(r)$

Função angular $Y(\theta, \phi)$

Simetria das orbitais

Energia das orbitais atómicas

Átomos polieletrónicos

Preenchimento das orbitais – configuração electrónica

II

II.1

II.2

II.3

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA E PROPRIEDADES PERIÓDICAS DOS ELEMENTOS)

Classificação periódica dos elementos

Os nomes dos elementos

Classificação periódica e configuração electrónica

Propriedades periódicas dos elementos

Raios atómicos

Energia de ionização

Electroafinidade (EA); Energia de captura electrónica (ECE)

Electronegatividade (electronegatividade de Mulliken)

Outras propriedades periódicas

LIGAÇÃO QUÍMICA EM MOLÉCULAS

INTRODUÇÃO

GEOMETRIA MOLECULAR – TEORIA DA REPULSÃO DOS

PARES ELECTRÓNICOS DA CAMADA DE VALÊNCIA (TRPECV)

BeH₂

H₂O

CH₄

CCl₄

BH₃

BF₃

NH₃

CO₂

Etino, C₂H₂

Eteno, C₂H₄

Peróxido de hidrogénio, H₂O₂

TEORIA DO ENLACE DE VALÊNCIA

Moléculas diatómicas homonucleares

Li₂

“He₂”

N₂

O₂

F₂

Raios covalentes – I

Moléculas diatómicas heteronucleares

HF, fluoreto de hidrogénio

Electronegatividade de Pauling

Electronegatividade de Allred e Rochow

NO, monóxido de azoto

CO, monóxido de carbono

Moléculas poliatómicas

CH₄, metano – I

Hibridação

CH₄, metano

C₂H₄, etileno (eteno)

C₂H₂, acetileno (etino)

Ligações múltiplas e isomeria geométrica

Energética da hibridação

Propriedades direccionais das orbitais híbridas

Electronegatividade de orbital

Electronegatividade de grupo

Molécula de água, H₂O

Polaridade da molécula de H₂O

Molécula de NH₃

Molécula de BeCl₂

Moléculas “BH₃”, B₂H₆

“BH₃”

B₂H₆

Moléculas BX₃, X = F, Cl, Br, I

Raios covalentes-II

Benzeno, C₆H₆

Radical alilo, C₃H₅

Compostos “hipervalentes”

a) Compostos de elementos do grupo 15 0

b) Compostos de elementos do grupo 16

c) Compostos de elementos do grupo 17

d) Compostos de elementos do grupo 18

TEORIA DAS ORBITAIS MOLECULARES

Introdução

Moléculas diatômicas homonucleares

Espécies do primeiro período da tabela periódica

Moléculas diatômicas homonucleares construídas a partir de átomos do 2.º período da tabela periódica

Li₂

Be₂

B₂

C₂

N₂

O₂

F₂

Ne₂

Moléculas diatômicas heteronucleares

Espécies AH

Molécula de HF

Molécula de CO

Moléculas poliatômicas do tipo AH_n

Regras para a construção das CLOA(AP) a partir do Método dos Planos Nodais

“Moléculas” cíclicas

3 átomos (incluindo H₃ⁿ, n = +1, 0, -1)

4 átomos

5 átomos

6 átomos

Moléculas AH₂

Molécula linear, por exemplo BeH₂

Molécula angular, por exemplo H₂O

Diagrama de Walsh para moléculas AH₂

Moléculas AH₃

Moléculas planas, por exemplo BH₃

Moléculas piramidais, por exemplo NH₃

Diagrama de Walsh para moléculas AH₃

Moléculas AH₄

Moléculas quadrangulares planas

Moléculas tetraédricas, por exemplo CH₄

Diagrama de Walsh para moléculas AH₄

Moléculas AH₅

AH₅a partir de AH₃+ H₂(diagrama simplificado)

AH₅a partir de A + H₅

AH₅a partir de AH₃+ H₂(diagrama não simplificado)

Moléculas AH₆

H₆a partir de H₄+ H₂

AH₆a partir de A + H₆

AH₆ a partir de AH₄+ H₂

Moléculas poliatômicas do tipo AX_n

Molécula linear, CO₂

Moléculas AX₃

Espécies triangulares planas, por exemplo BF₃ e CO₃²⁻

Moléculas policêntricas

Molécula de etano, C₂H₆

III

III.1

III.2

IV

IV.1

Molécula de eteno (ou etileno), C₂H₄

Molécula de etino (ou acetileno), C₂H₂

Diborano, B₂H₆

Aplicação do Método dos Planos Nodais à descrição de ligações ¹
em moléculas orgânicas: alilo e polienos

1. Radical alilo, C₃H₅

2. Butadieno, C₄H₆

3. Ciclobutadieno, C₄H₄

4. Ião ciclopentadienilo, C₅H₅

5. Benzeno, C₆H₆ FORÇAS INTERMOLECULARES

INTERACÇÕES DE VAN DER WAALS

Interacções de Keesom

Interacções de Debye

Interacções de London

Raio de van der Waals

Importância das ligações de van der Waals

LIGAÇÕES DE HIDROGÉNIO

Efeito das ligações de hidrogénio sobre algumas propriedades físicas e químicas das substâncias

i) Pontos de fusão e de ebulição

ii) Solubilidade

iii) Constantes de acidez, K_a

iv) Outras propriedades

Estrutura cristalina dos compostos com ligações de hidrogénio

Importância prática das ligações de hidrogénio

Considerações finais

LIGAÇÃO QUÍMICA EM SÓLIDOS

LIGAÇÃO EM CRISTAIS IÓNICOS – LIGAÇÃO IÓNICA

Estruturas cristalinas mais importantes

i) Estruturas dos compostos do tipo AB

ii) Estruturas dos compostos do tipo AB₂

Energética da formação dos compostos iónicos

Ciclo de Born-Haber

Raios iónicos

Variações nos raios iónicos

Influência dos raios iónicos sobre o tipo de estrutura

IV.2

IV.3

Raios iónicos a partir de mapas de densidade electrónica

Propriedades físicas e químicas dos compostos iónicos

Pontos de fusão e de ebulição

ii) Dureza

iii) Indeformabilidade e fragilidade

iv) Solubilidade

v) Condutividade eléctrica

LIGAÇÃO QUÍMICA EM CRISTAIS METÁLICOS – LIGAÇÃO METÁLICA

Propriedades gerais dos metais

Estruturas dos metais puros

Cavidades intersticiais

Cavidades tetraédricas

Cavidades octaédricas

Estruturas compactas de aniões com cavidades intersticiais preenchidas por catiões – estruturas iónicas

Estrutura cristalina e configuração electrónica

Raios metálicos

Estrutura cristalina e propriedades mecânicas

Energias de coesão nos metais

Energia de coesão e propriedades físicas dos metais

Teorias da ligação química

Teoria clássica do electrão livre

Teoria quântica do gás electrónico

Teoria das bandas

Teoria do Enlace de Valência

Ligas metálicas — alguns conceitos básicos

Misturas metálicas

Soluções sólidas

Soluções sólidas de substituição

Soluções sólidas intersticiais

Compostos intermetálicos

LIGAÇÃO QUÍMICA EM CRISTAIS COVALENTES

Descrição da ligação química pela Teoria do Enlace de Valência (TEV)

Diamante

Grafite

Aplicação da Teoria das Bandas à descrição das propriedades eléctricas

nos cristais covalentes – Isolantes e semicondutores

Semicondutores intrínsecos

Semicondutores intrínsecos formados por compostos binários do tipo AnB_{8-n}

Crítica à teoria do campo cristalino

Teoria das Orbitais Moleculares

Complexos octaédricos – só ligações ?

Complexos octaédricos – ligações ¹

Ligação metal-carbonilo, $M-CO$

Ligação metal-etileno

Ligação metal-dihidrogénio

Complexos ML_4 tetraédricos – só ligações ?

Ligações ¹em complexos tetraédricos

Complexos ML_4 quadrangulares planos – só ligações ?

Ligações ¹em complexos ML_4 quadrangulares planos

i) Ligações ¹no plano xy

ii) Ligações ¹nos planos xz e yz

Compostos organometálicos 0

Dibenzencrómio(0)

Diciclopentadienilferro(II)

Diciclobutadienoníquel(0)

Ligação platina-etileno no sal de Zeise

APÊNDICE A – Nome, símbolo, número atómico e massa atómica dos elementos

APÊNDICE B – Grandezas, unidades e factores de conversão

APÊNDICE C – A radiação electromagnética

APÊNDICE D – Partícula numa caixa

APÊNDICE E – Método de Hartree-Fock ou Método do Campo Autocoerente

APÊNDICE F – Efeito de Hall

APÊNDICE G – Introdução à simetria molecular

APÊNDICE H – Ciclos termodinâmicos comparados da formação de CH_2 e CH_4

APÊNDICE I – Valores de electronegatividade segundo Pauling e Allred e Rochow

APÊNDICE J – Energias de ligação e distâncias internucleares em algumas moléculas diatómicas

APÊNDICE K – Propriedades magnéticas das substâncias

APÊNDICE L – Estados Atómicos e Símbolos de Termos

APÊNDICE M – Modelo da Sobreposição Angular (MSA)

APÊNDICE N – Fullerenos e Nanotubos

Índice de Assuntos

Índice de Compostos, Moléculas e Iões Moleculares

Índice Onomático de Cientistas Referidos

IV.4

V

V.1

V.2

V.3

Semicondutores extrínsecos

Semicondutores extrínsecos do tipo N

Semicondutores extrínsecos do tipo P

SUPERCONDUTIVIDADE

Aspectos estruturais das cerâmicas supercondutoras

Interpretação do mecanismo da supercondução

Aplicações dos supercondutores

LIGAÇÃO QUÍMICA EM COMPOSTOS

DE COORDENAÇÃO

INTRODUÇÃO

DEFINIÇÕES E CONCEITOS BÁSICOS

Regras de nomenclatura

Números de coordenação e geometrias

Número de coordenação 2

Número de coordenação 3

Número de coordenação 4

Número de coordenação 5

Número de coordenação 6

Número de coordenação 7

Número de coordenação 8

Número de coordenação 9

Isomerismo nos compostos de coordenação

i) Isómeros conformacionais

ii) Isómeros geométricos

iii) Isómeros ópticos

iv) Isómeros de ionização

v) Isómeros de coordenação

vi) Isómeros de ligação

TEORIAS DA LIGAÇÃO QUÍMICA

Teoria do Enlace de Valência

Complexos octaédricos

Complexos com número de coordenação 4

Teoria do Campo Cristalino

Interpretação das propriedades magnéticas

Interpretação dos espectros electrónicos

Efeito de Jahn-Teller

Propriedades termodinâmicas e outras propriedades relacionadas

Raios iónicos

Entalpias de hidratação

Energias reticulares