

# INPP

INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISA DO PANTANAL

Pesquisador Adjunto-  
Especialidade: Química  
De Produtos Naturais-  
Fitoquímica

EDITAL Nº 1 - MCTI/INPP, DE 21 DE OUTUBRO DE 2024

CÓD: SL-0950T-24  
7908433266204

# Conhecimentos Específicos

## Pesquisador Adjunto - Especialidade: Química De Produtos Naturais - Fitoquímica

|  |     |
|--|-----|
| 1. Química geral; substâncias químicas e propriedades periódicas dos elementos; ligações químicas e estruturas moleculares; reações químicas e estequiometria .....  | 7   |
| 2. Biossíntese, distribuição taxonômica e aplicações das principais classes de metabólitos especiais: ácidos graxos e policetídeos; terpenoides; substâncias fenólicas; alcaloides e derivados nitrogenados .....                  | 44  |
| 3. Preparação, propriedades, e principais reações de álcoois, cetonas, ésteres, amidas, aminas, ácidos carboxílicos, alcenos; alcinos e aromáticos; mecanismos de reações orgânicas .....  | 51  |
| 4. Ácidos e bases e equilíbrio químico.....  | 86  |
| 5. Cromatografia: em papel, em camada delgada e em coluna; gasosa (cg); gasosa com detector de massa (cg/em); líquida de alta eficiência (clae); líquida e gasosa de alta eficiência com detector de massas (clae/em e cg/em)..... | 100 |
| 6. Espectroscopia uv-vis e iv; espectrometria de massas (em) baixa e alta resolução .....  | 106 |
| 7. Ressonância magnética nuclear <sup>1</sup> h e <sup>13</sup> c, <sup>1</sup> d, <sup>2</sup> d .....  | 121 |
| 8. Métodos estatísticos ou matemáticos como pca (principal component analysis), pcr (principal component regression), pls (partial least squares), parafac (parallel factor analysis), npls (n-way partial least squares) .....    | 125 |

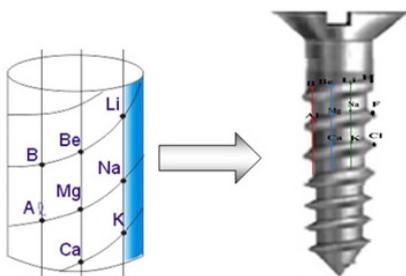
# CONHECIMENTOS ESPECIFICOS

QUÍMICA GERAL; SUBSTÂNCIAS QUÍMICAS E PROPRIEDADES PERIÓDICAS DOS ELEMENTOS; LIGAÇÕES QUÍMICAS E ESTRUTURAS MOLECULARES; REAÇÕES QUÍMICAS E ESTEQUIOMETRIA

## SUBSTÂNCIAS QUÍMICAS E PROPRIEDADES PERIÓDICAS DOS ELEMENTOS

Um dos esforços mais antigos, no sentido de se encontrar uma relação no comportamento dos elementos com propriedades similares, foi o método de separar os elementos em grupos de três denominados tríades. Nessas tríades, a massa atômica de um elemento era aproximadamente a média aritmética dos pesos atômicos dos outros dois. Isto foi proposto pelo químico alemão J.W. Dobereiner, em 1829.

No ano de 1862, Alexandre-Émile Béguyer de Chancourtois ordenou os valores de massas atômicas ao longo de linhas espirais traçadas nas paredes de um cilindro, dando origem ao parafuso telúrico, em que os elementos que apresentavam propriedades similares estavam reunidos numa linha vertical.



Em 1866, John A. R. Newlands desenvolveu um rearranjo dos elementos químicos denominado **Lei das Oitavas**. Essa forma de classificação consistia em colocar os elementos agrupados de sete em sete, em ordem crescente de massa atômica.

A partir dessa classificação Newlands observou que o primeiro elemento tinha propriedades semelhantes ao oitavo, e assim por diante. Diante disso, ele chamou esta descoberta de Lei das Oitavas uma vez que as características se repetiam de sete em sete, como as notas musicais.

Pesquisador Adjunto- Especialidade: Química De Produtos Naturais - Fitoquímica

| Dó | Ré | Mi | Fá | Sol | Lá | Si |
|----|----|----|----|-----|----|----|
| H  | Li | Be | B  | C   | N  | O  |
| F  | Na | Mg | Al | Si  | P  | S  |
| Cl | K  | Ca | Cr | Ti  |    |    |

Em meados de 1869, Lothar Meyer e Dimitri Ivanovich Mendeleev, independentemente, criaram tabelas periódicas dos elementos (semelhantes às usadas atualmente) onde os elementos eram colocados em ordem crescente de massas atômicas. Essas tabelas foram criadas quando tinham conhecimento de apenas 63 elementos químicos.<sup>1</sup>

Mendeleev ordenou os elementos em linhas horizontais, chamadas de **períodos**, e em linhas verticais, de **grupos**, contendo elementos com propriedades similares. Veja a seguir a tabela de Mendeleev.

| Período | GRUPO |    |     |     |     |    |     |          |
|---------|-------|----|-----|-----|-----|----|-----|----------|
|         | I     | II | III | IV  | V   | VI | VII | VIII     |
| 1       | H     |    |     |     |     |    |     |          |
| 2       | Li    | Be | B   | C   | N   | O  | F   |          |
| 3       | Na    | Mg | Al  | Si  | P   | S  | Cl  |          |
| 4       | K     | Ca | Ea* | Ti  | V   | Cr | Mn  | Fe Co Ni |
|         |       | Cu | Zn  | Eb* | Ec* | As | Se  | Br       |
| 5       | Rb    | Sr | Y   | Zr  | Nb  | Mo | Ed* | Ru Rh Pd |
|         |       | Ag | Cd  | In  | Sn  | Sb | Te  | I        |

Nesta tabela é possível observar que existe espaços vazios e asteriscos. Estes espaços representam elementos não conhecidos e os asteriscos os elementos que foram previstos por Mendeleev.

Esta classificação proposta por Mendeleev foi utilizada até 1913, quando Mosely verificou que as propriedades dos elementos eram dadas pela sua carga nuclear (número atômico-Z). Sabendo-se que em um átomo o número de prótons é igual ao número de elétrons, ao fazermos suas distribuições eletrônicas, verificamos que a semelhança de suas propriedades químicas está relacionada com o número de elétrons de sua camada de valência, ou seja, pertencem à mesma família.

Com base nessa constatação, foi proposta a tabela periódica atual, na qual os elementos químicos:

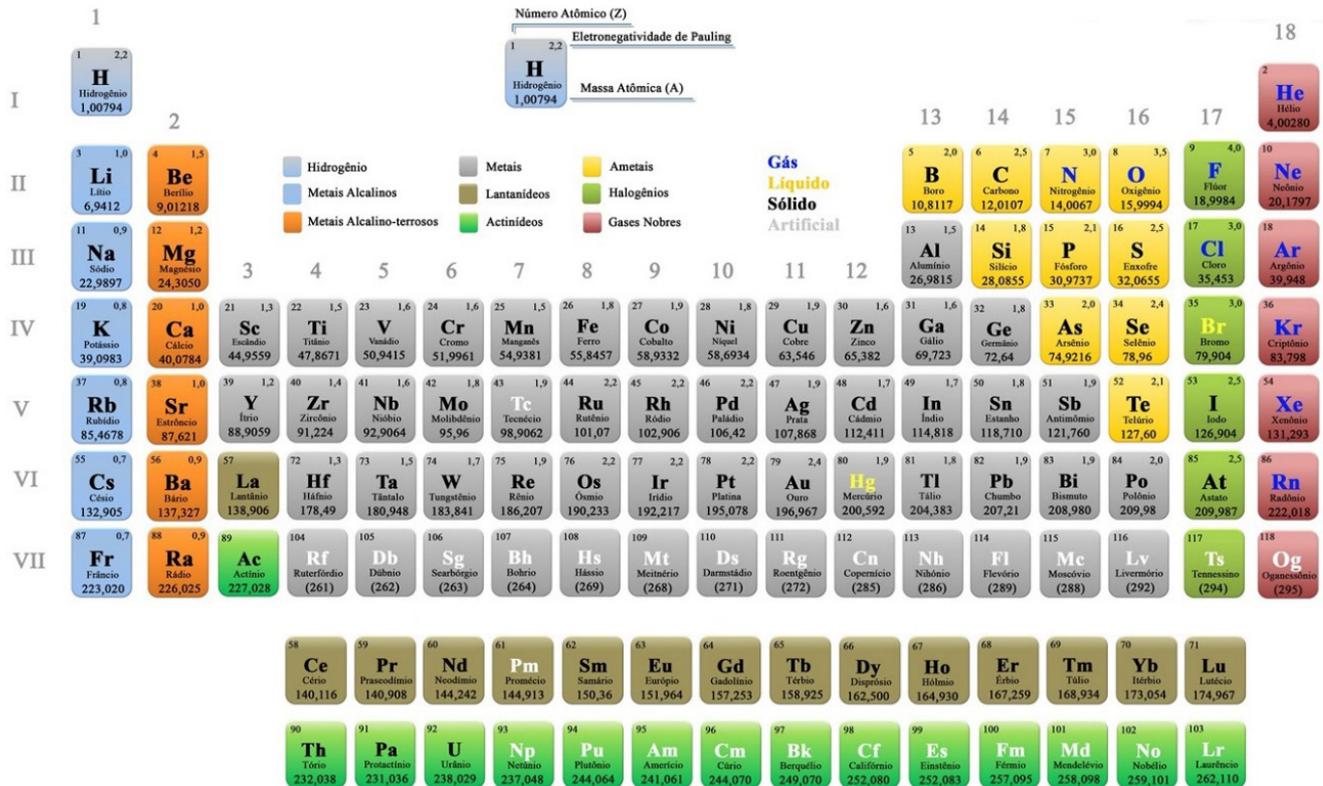
- Estão dispostos em ordem crescente de número atômico (Z);
- Originam os períodos na horizontal (em linhas);

<sup>1</sup> Usberco, J.; Salvador, E. 2002. Química. Editora Saraiva.

## CONHECIMENTOS ESPECÍFICOS

- Originam as famílias ou os grupos na vertical (em colunas).

**Tabela periódica atual:** Os elementos são agrupados em ordem crescente de seu número atômico (Z), observando-se a repetição periódica de muitas de suas propriedades.



Fonte: [www.omundodaquimica.com.br](http://www.omundodaquimica.com.br)

### Distribuição Eletrônica<sup>2</sup>

Bohr propôs que existiam 7 camadas nomeadas K, L, M, N, O, P e Q, e os subníveis propostos pelos estudos subsequentes foram nomeados de s, p, d e f, onde cada camada e cada subnível tem um limite de quantos elétrons eles “abrigam”. A tabela a seguir mostra o número de elétrons que cada camada pode ter assim como os subníveis presentes nela.

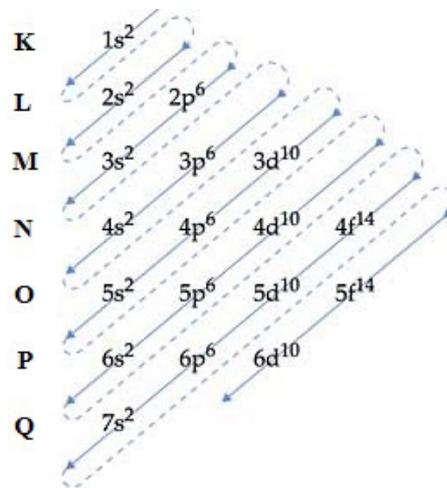
| Camada | Nível | Subnível | Número de elétrons |
|--------|-------|----------|--------------------|
| K      | 1     | s        | 2                  |
| L      | 2     | s p      | 8                  |
| M      | 3     | s p d    | 18                 |
| N      | 4     | s p d f  | 32                 |
| O      | 5     | s p d f  | 32                 |
| P      | 6     | s p d    | 18                 |
| Q      | 7     | s p      | 8                  |

### Distribuição dos Elétrons

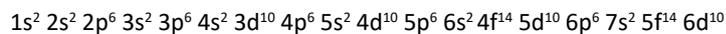
Os estudos seguintes vieram a mostrar como os elétrons deveriam ser distribuídos dentro dos subníveis de cada camada, onde o químico Linus Carl Pauling criou um método prático que nos dá a ordem crescente de energia dos subníveis.

O Diagrama de Pauling mostra a sequência de ocupação dos elétrons onde, na eletrosfera, os elétrons vão ocupando as posições de menor energia. Assim ele conseguiu mostrar de maneira facilitada essa ordem de posicionamento. Essa sequência que é feita através do diagrama de Pauling é chamada de *Distribuição Eletrônica* ou *Configuração Eletrônica*.

*2 Sardella, A.; Química – São Paulo, 2003. Editora Ática.*



Seguindo esse diagrama a ordem crescente de energia para a distribuição dos elétrons é:



Para realizar essa distribuição, algumas regras devem ser seguidas:

- O número de elétrons a ser distribuído deve ser correspondente ao do átomo, estando ele no estado fundamental ou em forma de íon;
- A última camada não deve ultrapassar 8 elétrons;
- A penúltima camada não deve ultrapassar 18 elétrons;
- A última camada que contém elétrons é chamada de camada de valência.

Na tabela seguinte vemos alguns exemplos de distribuição eletrônica:

| Elemento                  | Número de elétrons | Distribuição Eletrônica   |
|---------------------------|--------------------|---|
| He (Hélio)                | 2                  | $1s^2$<br>K = 2   |
| Cl (Cloro)                | 17                 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$<br>K = 2, L = 8, M = 7   |
| Zr (Zircônio)             | 40                 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^2$<br>K = 2, L = 8, M = 18, N = 10, O = 2                                   |
| Pt (Platina)              | 78                 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^1 4f^{14} 5d^9$<br>K = 2, L = 8, M = 18, N = 32, O = 17, P = 1 |
| Pt <sup>2+</sup> (Cátion) | 76                 | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^1 4f^{14} 5d^7$<br>K = 2, L = 8, M = 18, N = 32, O = 17, P = 1 |

### Números Quânticos<sup>3</sup>

O **Princípio da Incerteza** de Werner Heisenberg (1901-1976), criado em 1926, estabeleceu que não é possível calcular a posição e a velocidade de um elétron em um mesmo instante, ou seja, quanto maior for a precisão da determinação da medida da posição do elétron, menor será a precisão da medida de sua velocidade e vice-versa.

Por isso, os cientistas passaram a adotar o conceito de “orbital”, que se refere à região no espaço ao redor do núcleo do átomo onde é maior a probabilidade de se encontrar determinado elétron. No modelo de orbitais, o elétron tem característica dual, isto é, como onda-partícula que se desloca no espaço, mas que está dentro de uma região (orbital) ao redor do núcleo, como uma nuvem eletrônica.

Esse movimento do elétron passou a ser descrito por Erwin Schrödinger por meio de uma equação matemática que associava a natureza corpuscular do elétron, ou seja, sua natureza como partícula, sua energia, carga e massa.

<sup>3</sup> <https://manualdaquimica.uol.com.br/quimica-geral/numeros-quanticos.htm>

Durante o processo algébrico da solução da equação de Schrödinger, surgiram naturalmente códigos matemáticos relacionados com a energia do elétron, que são denominados de números quânticos. Existem quatro números quânticos:

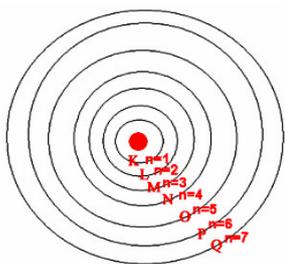
- número quântico principal ( $n$ ),
- número quântico secundário ou azimutal ( $l$ ),
- número quântico magnético ( $m$  ou  $m_l$ ) e
- número quântico spin ( $s$  ou  $m_s$ ).

O conjunto de números quânticos nunca se repete para dois elétrons em um átomo. Portanto, esse conjunto de números quânticos serve para identificar cada elétron na eletrosfera de um átomo. Então, vejamos como determinar cada um:

**Número quântico principal ( $n$ ):** Refere-se ao nível de energia do elétron. Segundo o modelo atômico de Rutherford-Bohr, os elétrons movimentam-se ao redor do núcleo em órbitas circulares com quantidades de energia bem definidas e características, sendo, portanto, chamadas de níveis de energia ou camadas eletrônicas.

Para os elementos conhecidos até o momento, a quantidade máxima de níveis de energia são sete, sendo representados pelas letras K, L, M, N, O, P e Q, indo da camada mais próxima ao núcleo para a mais distante. Essas camadas correspondem respectivamente aos números 1, 2, 3, 4, 5, 6 e 7.

Assim, os valores de  $n$  variam de 1 a 7, de acordo com o nível de energia do elétron. Quanto maior o número quântico principal, maior é a energia do elétron.



| Nível de Energia | Número Quântico Principal |
|------------------|---------------------------|
| K                | $n = 1$                   |
| L                | $n = 2$                   |
| M                | $n = 3$                   |
| N                | $n = 4$                   |
| O                | $n = 5$                   |
| P                | $n = 6$                   |
| Q                | $n = 7$                   |

Relação entre o nível de energia e o número quântico principal

**Número quântico secundário ou azimutal ( $l$ ):** Refere-se ao subnível de energia do elétron. Os elétrons distribuem-se nas camadas eletrônicas de acordo com subníveis de energia, que são identificados pelas letras s, p, d, f, que aumentam de energia nessa ordem. Cada nível comporta uma quantidade máxima de elétrons distribuídos nos subníveis de energia.

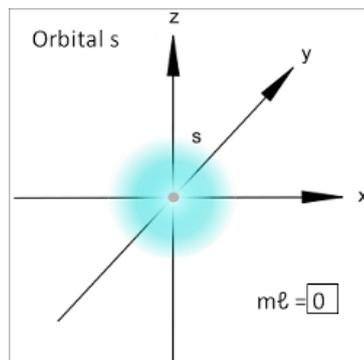
Para os elementos até então conhecidos, temos apenas quatro tipos de subníveis:

| Subnível de Energia | Número Quântico Secundário |
|---------------------|----------------------------|
| s                   | $l = 0$                    |
| p                   | $l = 1$                    |
| d                   | $l = 2$                    |
| f                   | $l = 3$                    |

Tabela da relação entre o subnível de energia e o número quântico secundário

Isso significa que, para um número quântico principal  $n$ , o número quântico secundário será  $l = n - 1$ .

**Número quântico magnético ( $m$  ou  $m_l$ ):** Refere-se à orientação dos orbitais no espaço. O orbital do tipo s possui forma esférica e, portanto, só há uma orientação possível para ele. Desse modo, só haverá um valor possível para o número quântico magnético, que será igual a 0:



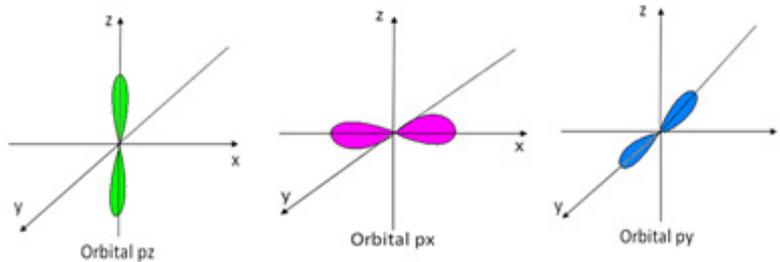
Representação do orbital s

Veja que o orbital é representado por um quadrado.

Em relação ao subnível do tipo p, conforme a figura abaixo indica, existem três orientações espaciais possíveis, porque ele apresenta-se na forma de um duplo ovoide. Então, para o subnível p, há três números magnéticos possíveis, -1, 0, +1, que são representados por três quadradinhos:

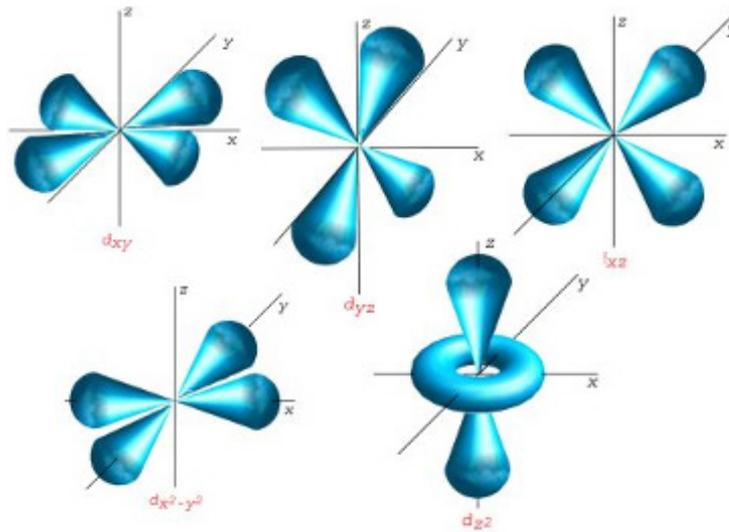
Orbitais p

$$m_l = -1 \quad 0 \quad +1$$



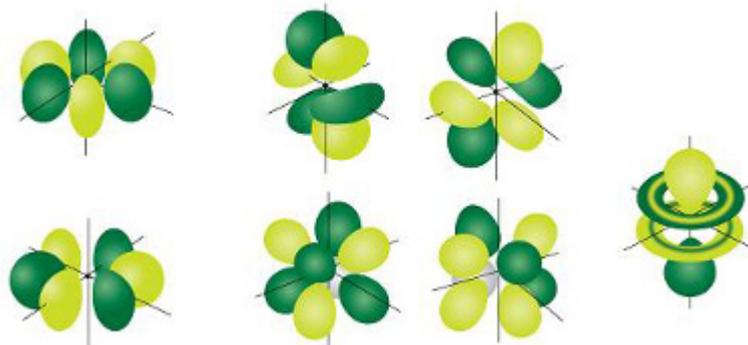
Representação dos orbitais p

Já o subnível d possui cinco orientações espaciais possíveis, sendo que o número magnético pode apresentar os seguintes valores: -2, -1, 0, +1, +2:



Representação dos orbitais d

Por fim, o subnível f possui sete orientações espaciais possíveis, sendo que o número magnético pode apresentar os seguintes valores: -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3:



Representação dos orbitais f\*

Desse modo, temos as seguintes possibilidades:

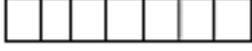
| Tipo de Subnível | Valores de $\ell$ | Quantidade de orbitais | Valores para o número quântico magnético | Representação gráfica dos orbitais  |
|------------------|-------------------|------------------------|--|---|
| <b>s</b>         | 0                 | 1                      | 0  |  |
| <b>p</b>         | 1                 | 3                      | -1, 0, +1                                |  |
| <b>d</b>         | 2                 | 5                      | -2, -1, 0, +1, +2                        |  |
| <b>f</b>         | 3                 | 7                      | -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3                |  |

Tabela da relação entre orbitais e o número quântico magnético

Esses orbitais costumam ser representados de acordo com um diagrama energético, como o mostrado a seguir, em que cada “escada” corresponde ao nível e cada “degrau” corresponde ao subnível.

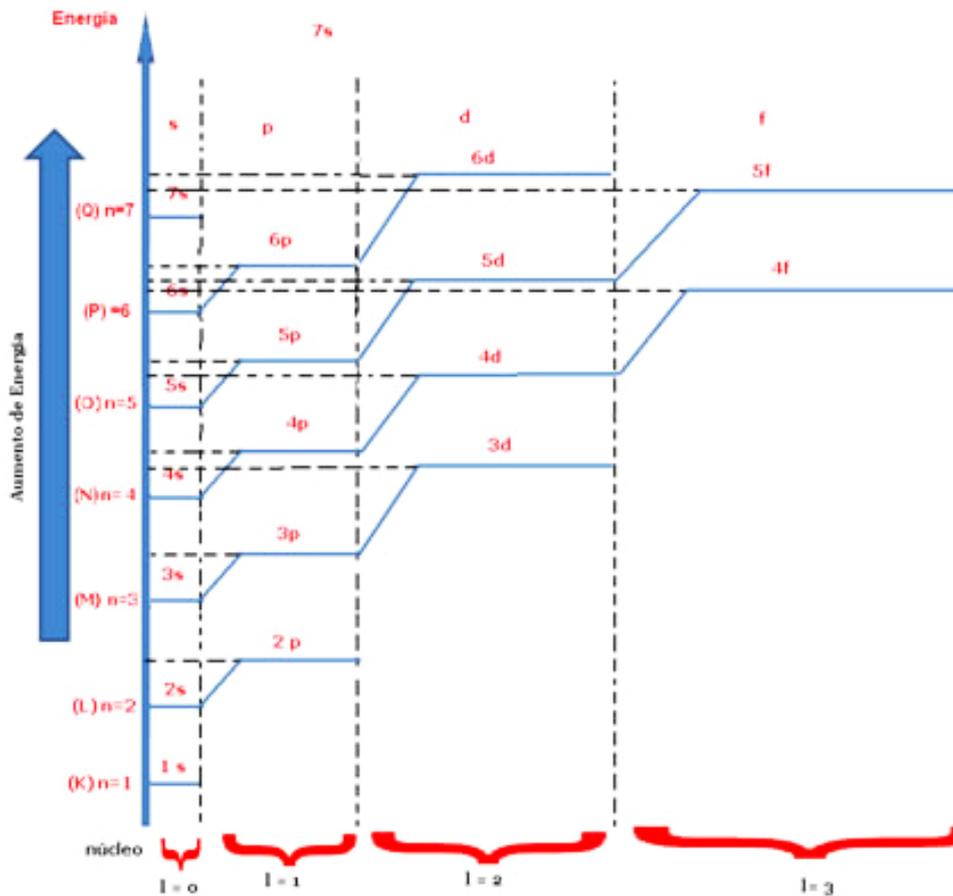


Diagrama energético indicando o número quântico magnético