

# Classificação de Elementos Químicos Usando Análise de Componentes Principais e Propriedades Periódicas e Aperiódicas

Wellington da Silva Lyra<sup>1</sup> (IC)\*, Germano Véras<sup>2</sup> (PG), Wallace Duarte Fragoso<sup>1</sup> (PQ), Edvan Cirino da Silva<sup>1</sup> (PQ) e Mário César Ugulino de Araújo<sup>1</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Depto. de Química / CCEN / UFPB / Campus I – João Pessoa – PB, Fone/fax: 0XX83-3216.7438

<sup>2</sup>Depto. de Química / CCT / UEPB / Campus I – Campina Grande – PB

\*e-mail: [spectru@gmail.com.br](mailto:spectru@gmail.com.br).

Palavras Chave: Elementos químicos, propriedades, reconhecimento de padrões

## Introdução

É uma prática natural das pessoas buscar a formação de classes ou grupos (de objetos, classes sociais, associações, etc) em função de interesses ou características comuns. Em se tratando de elementos químicos, a busca por agrupamentos com base em determinadas propriedades atômicas resultou no que se conhece hoje como a Tabela Periódica. Como consequência, tornou-se possível sistematizar, por exemplo, o conhecimento relativo às propriedades químicas e físicas dos elementos.

Os elementos são usualmente classificados em metais, semimetais, não-metais e gases nobres. Recentemente, a SBQ<sup>[1]</sup> sugeriu a supressão da classe dos semimetais e a inclusão de alguns de seus elementos na classe dos metais e outros dos não-metais.

Neste trabalho, realizou-se um estudo empregando dados de propriedades periódicas e aperiódicas e a técnica de reconhecimento de padrões denominada de análise de componentes principais (Principal Component Analysis-PCA)<sup>[2]</sup> para verificar a consistência dessa modificação. Com isto, buscou-se implementar a classificação indicando a classe (metal ou não-metal) onde se enquadram os elementos comumente classificados como semimetais. Além disso, buscou-se verificar, entre as propriedades consideradas no estudo, as que efetivamente respondem pela classificação.

O estudo abrangeu apenas os elementos que vão do H até o U, excluindo-se o Tc, Fr, Pm e At.

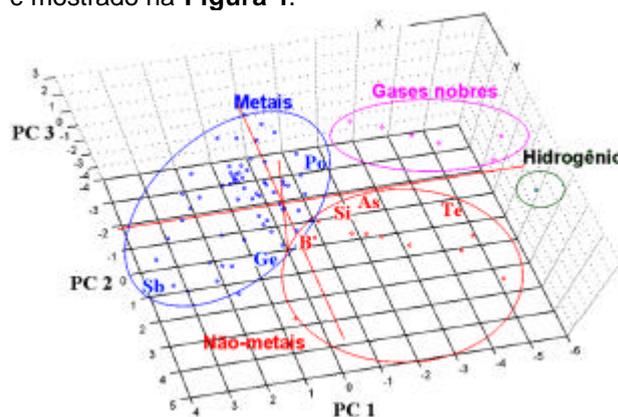
Os dados das propriedades utilizados foram: **PERIÓDICAS:** número atômico (Z), densidade (D), ponto de fusão (PF), ponto de ebulição (PE), raio atômico (RA), eletronegatividade (X), energia de ionização (EI), afinidade eletrônica (AE);

**APERIÓDICAS:** massa atômica (A), calor específico (c), condutividade térmica (CT), capacidade calorífica (Cp) e entropia padrão (S°).

## Resultados e Discussão

O tratamento dos dados foi realizado usando o "Unscrambler® 9.1" e o autoescalamento foi pré-

tratamento mais adequado. O gráfico obtido na PCA é mostrado na **Figura 1**.



**Figura 1.** Gráfico escores obtidos na PCA.

Observa-se na **Fig. 1a** formação de quatro classes distintas de elementos químicos. As propriedades responsáveis pela separação dos grupos com maiores pesos na PC1 foram: E.I. e S° com valores negativos e PF, PE e D com valores positivos. Em relação a PC2: RA e Cp têm pesos com valores negativos e AE, X e CT com valores positivos. O contraste de sinais resulta das influências antagônicas das variáveis. É também notável na **Fig. 1** o agrupamento dos elementos considerados semimetais com outras classes, ou seja, os elementos Ge, Sb e Po se juntam à classe dos metais, enquanto B, Si, As e Te à dos não-metais.

## Conclusões

Os resultados da PCA sugerem que o conceito de semimetal não deve ser usado, uma vez que não se observou a formação desse grupo no gráfico dos escores e seus elementos distribuem-se naturalmente nas classes dos metais e não-metais.

É válido enfatizar que o hidrogênio é um elemento singular merecendo ser estudado separadamente dos demais.

## Agradecimentos

CNPq, CAPES

<sup>1</sup><http://www.geocities.com/area51/hollow/9495/tabelape.htm>, acessado em 02/02/2006.

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

<sup>2</sup>Beebe, K. R., Pell, R. J.; Seasholtz, M. B., *Chemometrics - A Practical Guide*, Wiley, N.York, 1998.