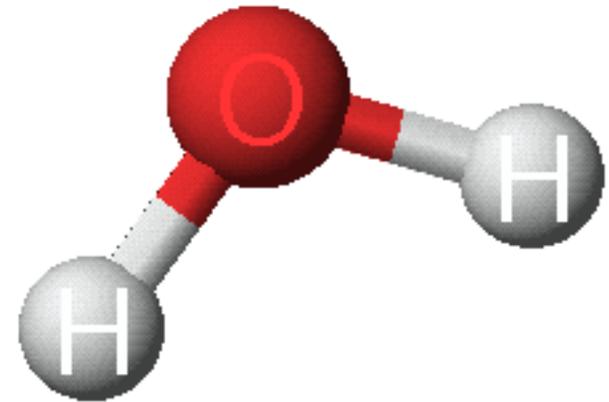
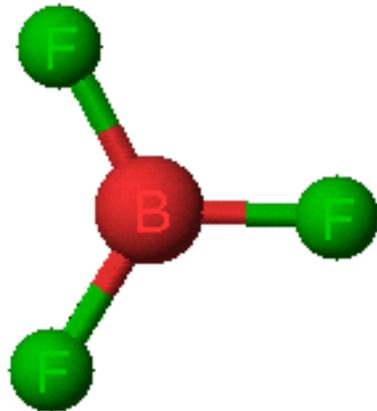
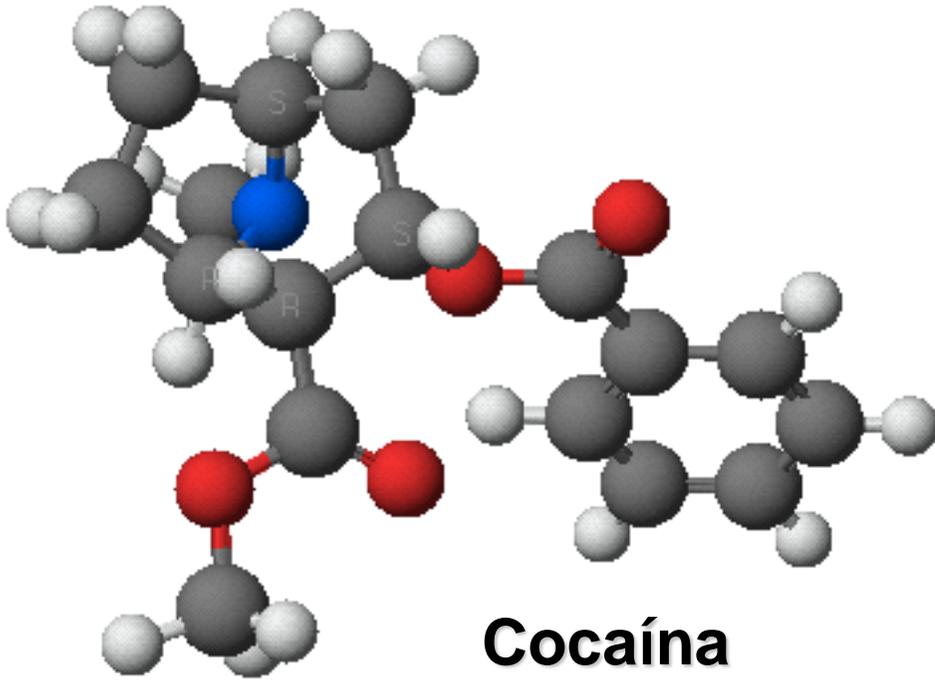


LIGAÇÃO QUÍMICA



Ligação Química

Problemas e perguntas:

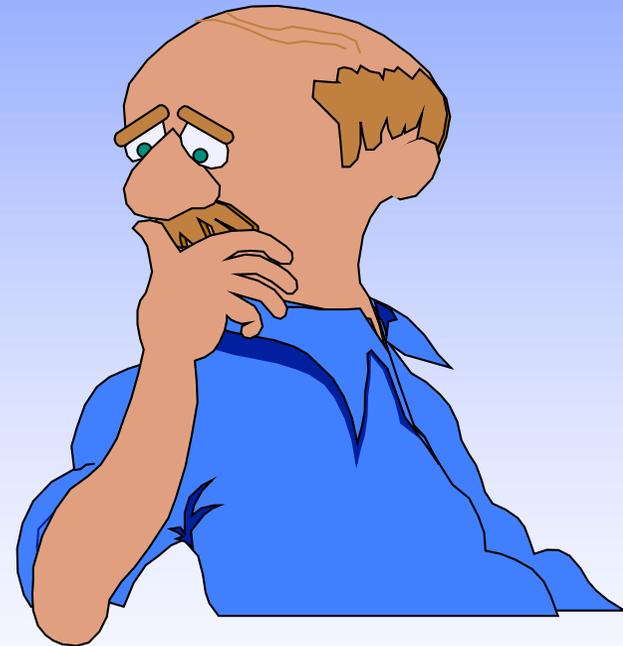
Como é uma molécula ou um íon poliatômico mantido unido?

Por que os átomos estão arranjados em ângulos distintos?

Por que as moléculas não são planas?

Podemos prever uma estrutura?

Como é a estrutura relacionada às propriedades químicas e físicas?

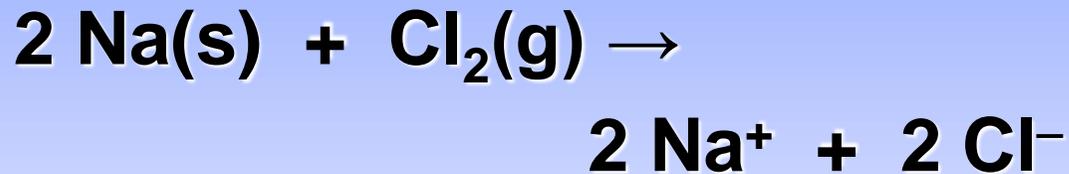


Tipos de Ligações Químicas



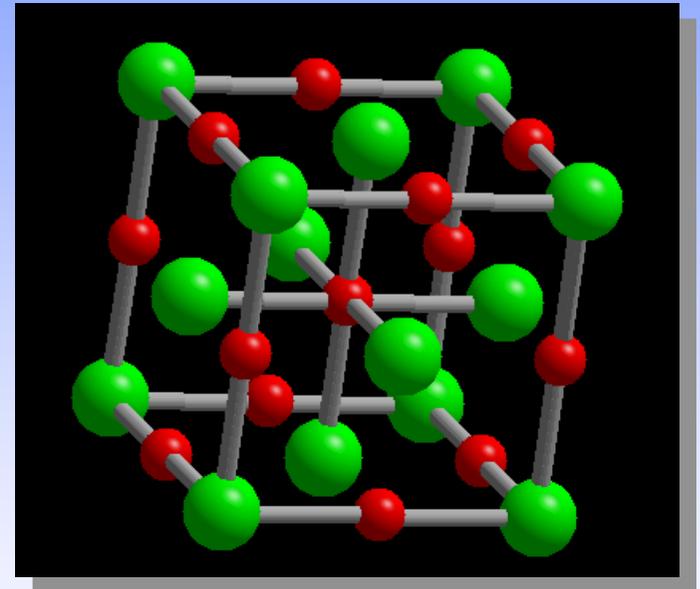
- Dois tipos extremos de conectar ou ligar os átomos:
- **Iônica**—transferência completa de 1 ou mais elétrons de um átomo a outro;
- **Covalente**—alguns elétrons de valência são compartilhados entre os átomos.
- **Maioria das ligações se situam entre esses dois extremos.**

Transferência completa de elétron de um elemento de **baixa EI (metal)** para outro com **alta afinidade por elétrons (não-metal)**



Compostos iônicos existem principalmente entre metais à esquerda da tabela periódica (Grupos 1A e 2A e metais de transição) e não- metais à direita (O e halogênios).

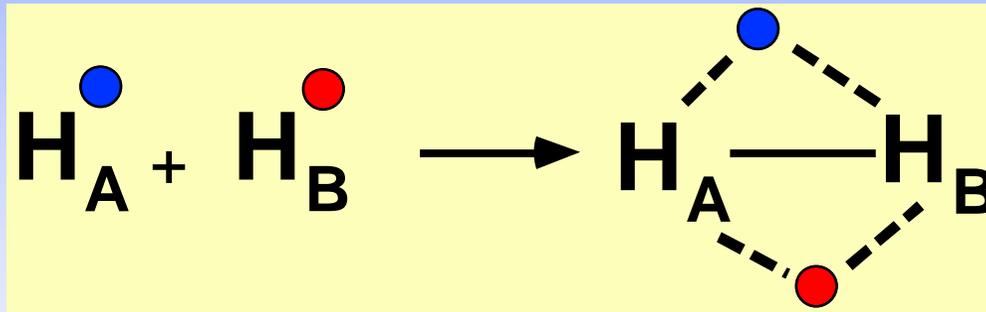
Ligações Iônicas



Ligação Covalente

Surge da atração mútua dos dois núcleos pelos mesmo elétrons.

Compartilhamento de elétrons:



A ligação é um balanço entre forças atrativas e repulsivas.

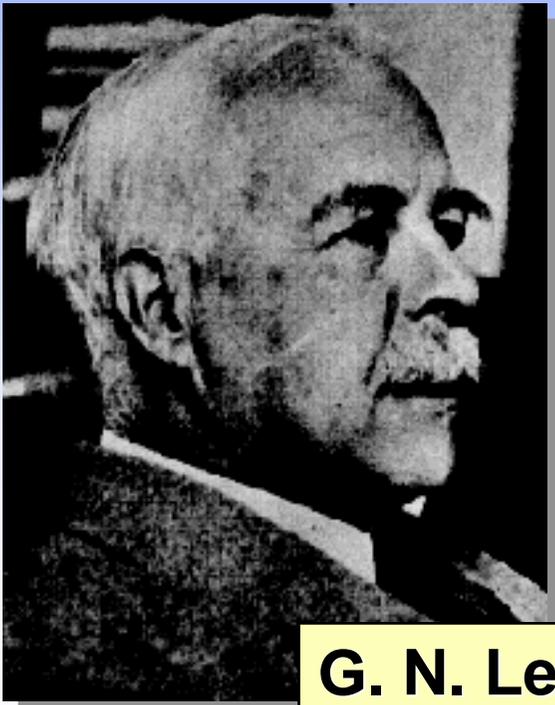
Ligação Química: Objetivos

Entender:

1. **Distribuição de elétrons de valência em moléculas e íons;**
2. **Estruturas moleculares;**
3. **Propriedades das ligações e seu efeito nas propriedades moleculares.**



Distribuição de Elétrons nas Moléculas

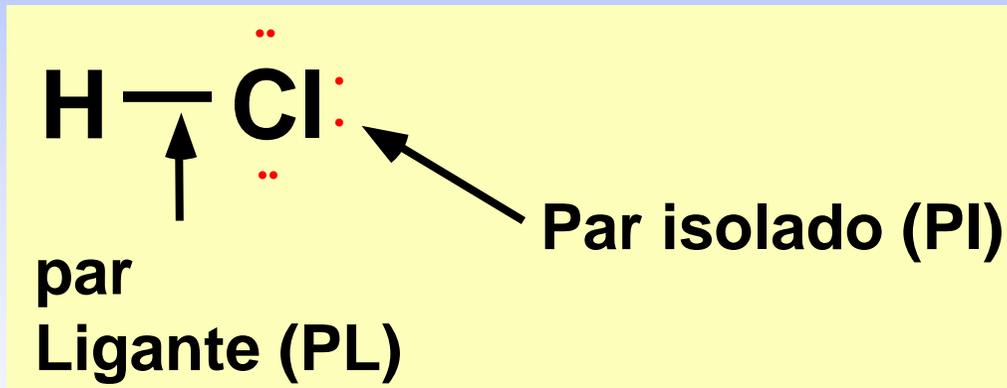


G. N. Lewis
1875 - 1946

- Representamos essa distribuição através das **estruturas de ponto de Lewis**
- Elétrons de Valência são distribuídos como **PARES LIGANTES** (elétrons compartilhados) e não-compartilhados (**PARES ISOLADOS**).

Pares Ligantes e Pares Isolados

- Elétrons de Valência vistos como **PARES LIGANTES** (elétrons compartilhados) e **PARES ISOLADOS** (elétrons isolados)

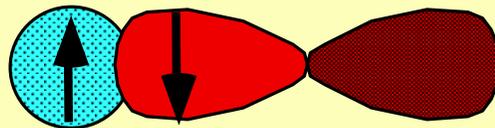
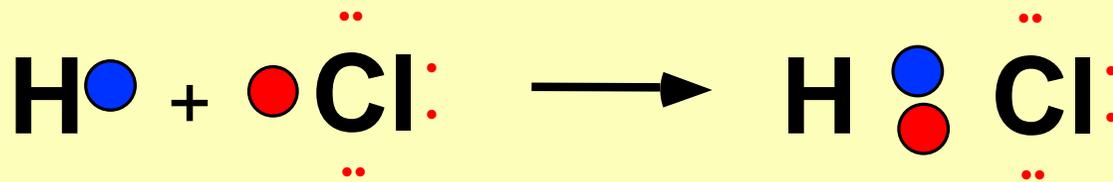


Estrutura de pontos de LEWIS.



Formação da Ligação

Resulta de um recobrimento (**OVERLAP**)
 “cabeça-a-cabeça” dos orbitais
 atômicos nos átomos vizinhos.



Recobrimento do H (1s) e Cl (2p)

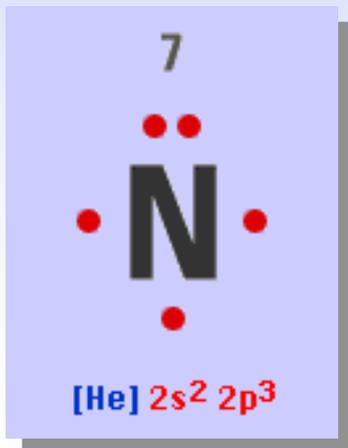
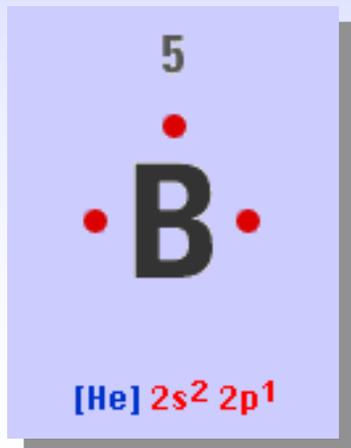
Note que cada átomo tem um único elétron desemparelhado.

Regras do Jogo

No. de elétrons de valência de um átomo do grupo principal = Número do Grupo

- Para os Grupos 1A - 4A (14), no. de elétrons de valência que **podem formar uma ligação** (elétrons ligantes) = número do grupo.

- Para os Grupos 5A (15) - 7A (17), **EL's = 8 – No. Grupo**



Regras do Jogo

No entorno de um átomo numa molécula,

$$PL's + PI's = 4 \text{ (oito elétrons)}$$

Obs. Exceto para H (e algumas vezes átomos do dos períodos 3^o e 3^o+))

Observação conhecida como a

REGRA DO OCTETO



Construindo uma estrutura de pontos

Amônia, NH_3

1. Escolha um átomo central (Nunca H);
Átomo central é o átomo com a mais baixa afinidade por elétrons;
Portanto, N é central.

2. Conte os elétrons de valência

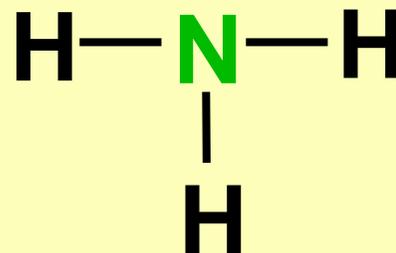
$$\text{H} = 1 \text{ e } \text{N} = 5$$

$$\text{Total} = (3 \times 1) + 5$$

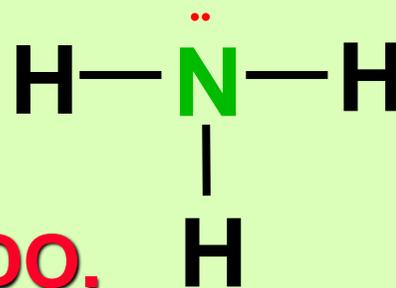
$$= 8 \text{ elétrons} / 4 \text{ pares}$$

Constuindo uma Estrutura de Pontos (Lewis)

3. Forme ligações simples entre o átomo central e cada átomo circundante.



4. Elétrons restantes formam PARES ISOLADOS completando o octeto (como exigido).



3 PARES LIGANTES e 1 PAR ISOLADO.

Note que o N contribui em 4 pares (8 elétrons), enquanto que o H contribui em 1 par.

Íon Sulfito, SO_3^{2-}

Passo 1. Átomo central = S

Passo 2. Conte os elétrons de valência
S = 6

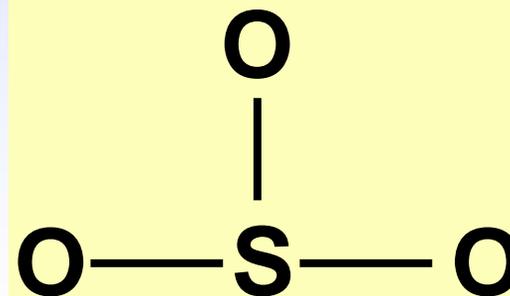
$$3 \times O = 3 \times 6 = 18$$

$$\text{Carga Negativa} = 2$$

$$\text{TOTAL} = 26 e^- \text{ or } 13 \text{ pares}$$

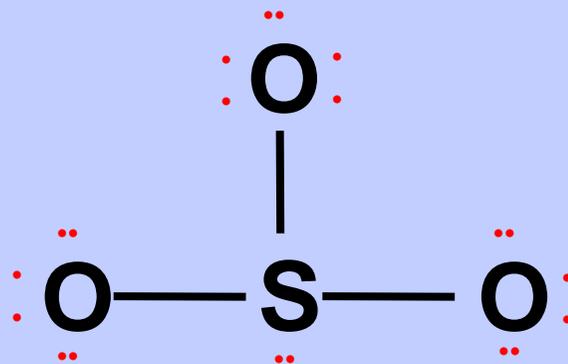
Step 3. Forme as ligações.

Sobraram 10 pares de elétrons



Íon Sulfito, SO_3^{2-}

Pares restantes tornam-se pares isolados; primeiro nos átomos externos e depois no átomo central.



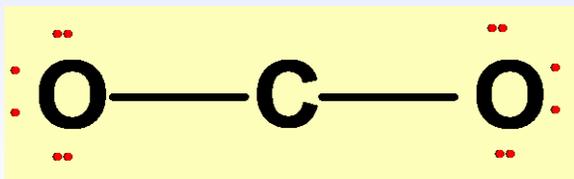
Cada átomo está circundado por um octeto de elétrons.

Dióxido de Carbono, CO_2

1. Átomo Central = **C**
2. Elétrons de Valência = $4 + 2 \times 6 = 16$ ou 8 pares
3. Forme as ligações.

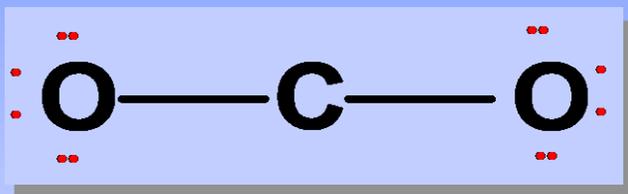


4. Localize os pares isolados nos átomos externos.

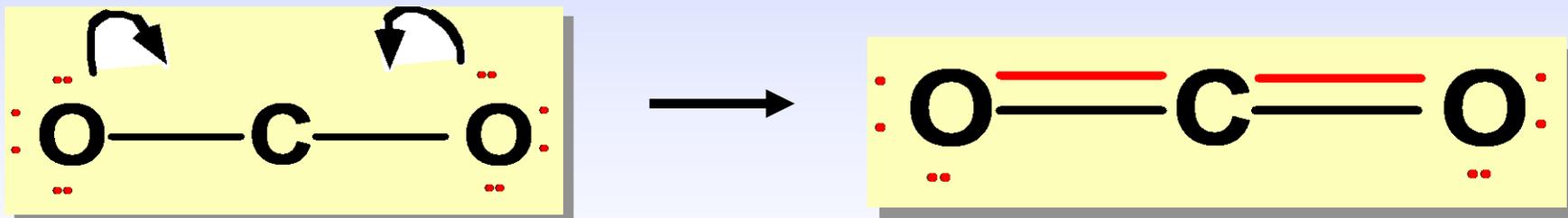


Dióxido de Carbono, CO_2

4. Localize os pares isolados nos átomos externos.

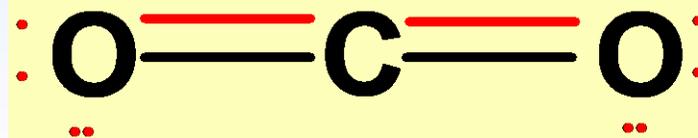
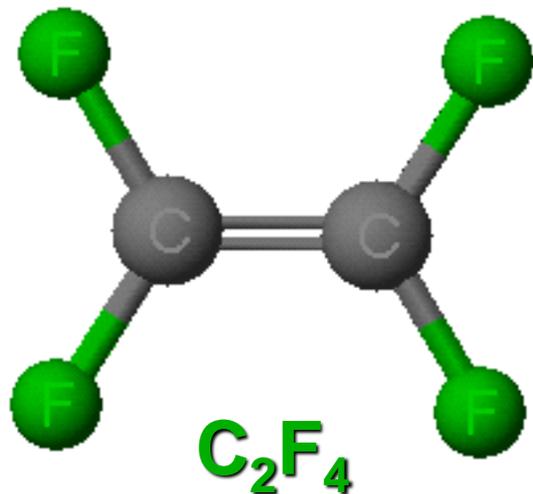
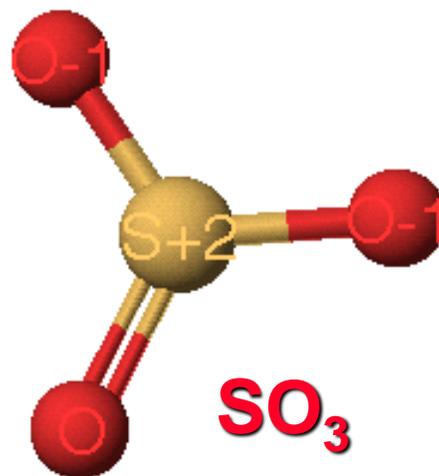
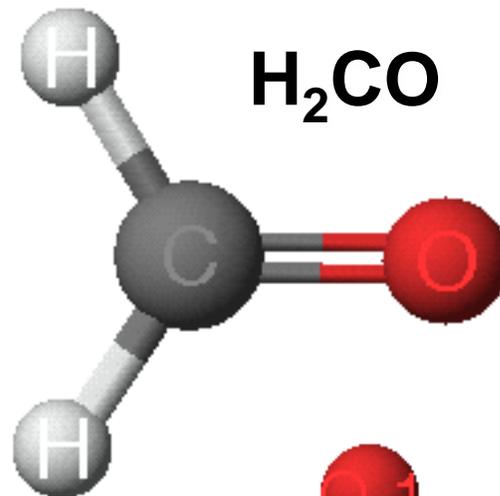


5. Para que tenhamos um octeto no C, vamos formar **LIGAÇÕES DUPLAS** entre C e O.



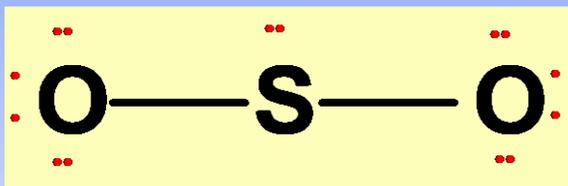
O segundo par ligante forma uma ligação **pi (π)**.

Ligações duplas e mesmo triplas são comumente observadas para C, N, P, O e S.



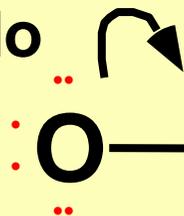
Dióxido de Enxofre, SO_2

1. Átomo Central = S
2. Elétrons de Valência = $3 \times 6 = 18$ (9 pares)

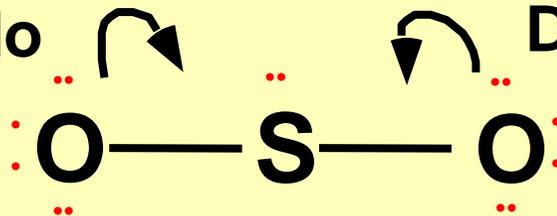


3. Forme a dupla ligação tal que o S tenha o octeto - note, entretanto, que há duas maneiras de fazer isso.

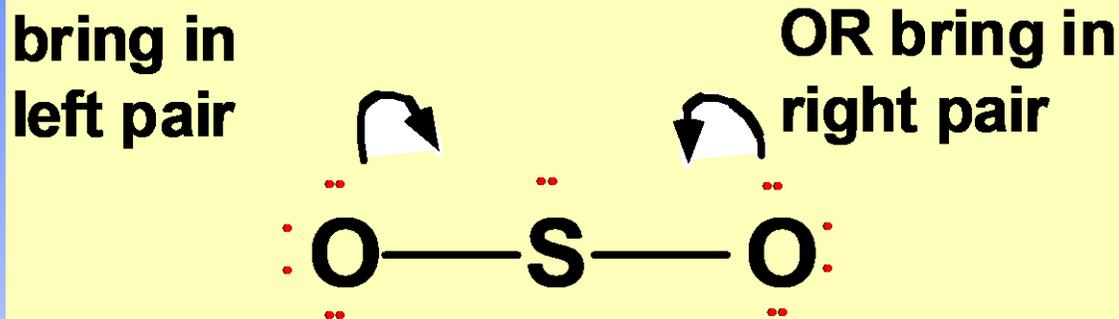
Use o par
esquerdo



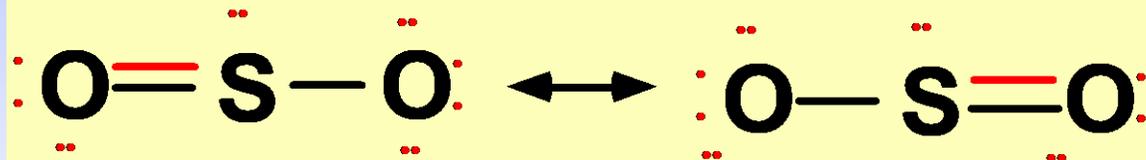
OU use o par
Da direita



Dióxido de Enxofre, SO_2



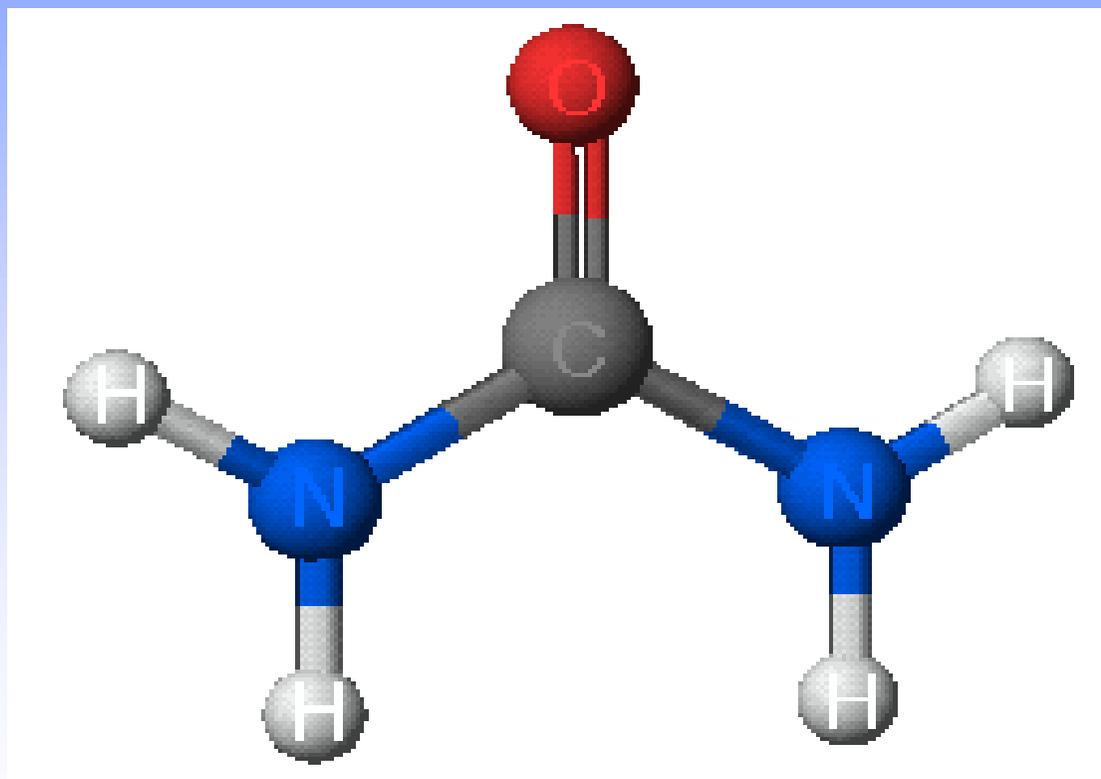
Isso leva às seguintes estruturas:



São estruturas equivalentes, conhecidas como **ESTRUTURAS DE RESSONÂNCIA**.

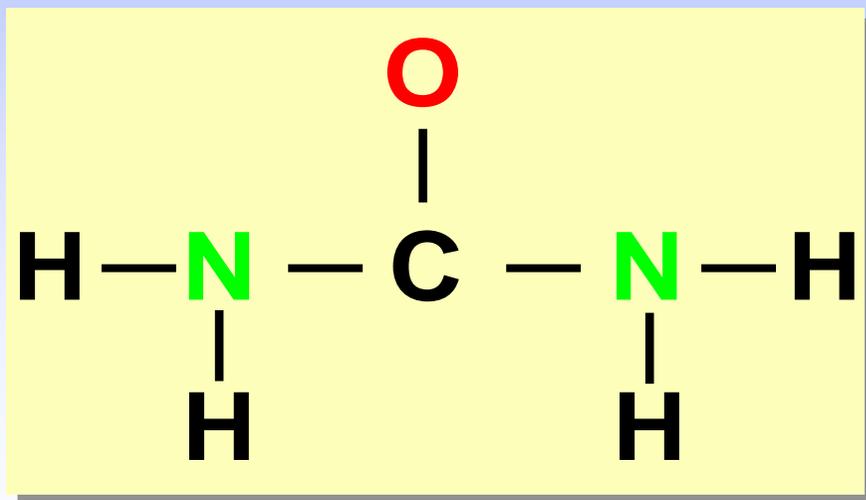
Estrutura verdadeira é um **HÍBRIDO (?) das duas**.

Ureia, $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$



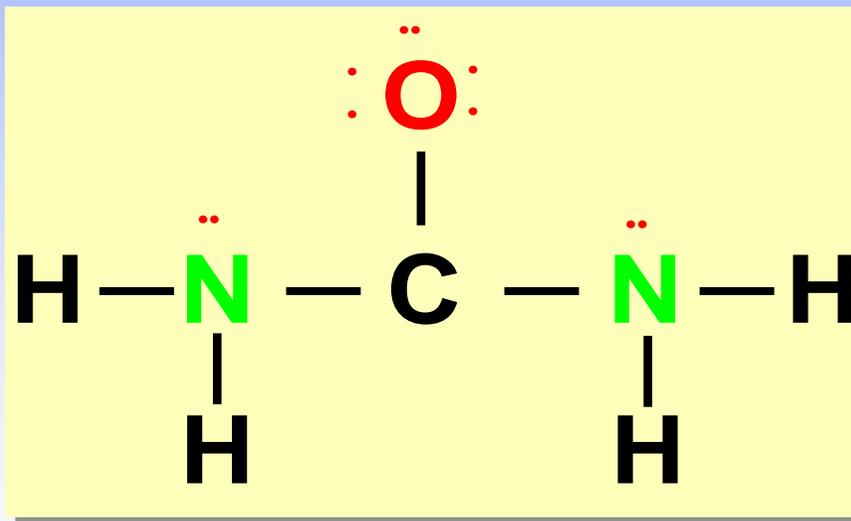
Ureia, $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$

1. Número de elétrons de valência = $4 \times 1 + 2 \times 5 + 1 \times 4 + 1 \times 6 = 24 e^- = 12$ pares
2. Desenhe as ligações simples (sigma).



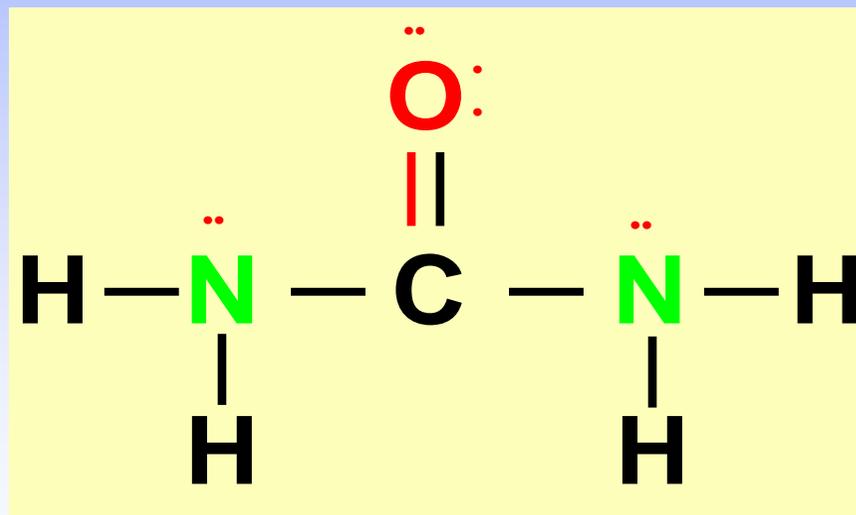
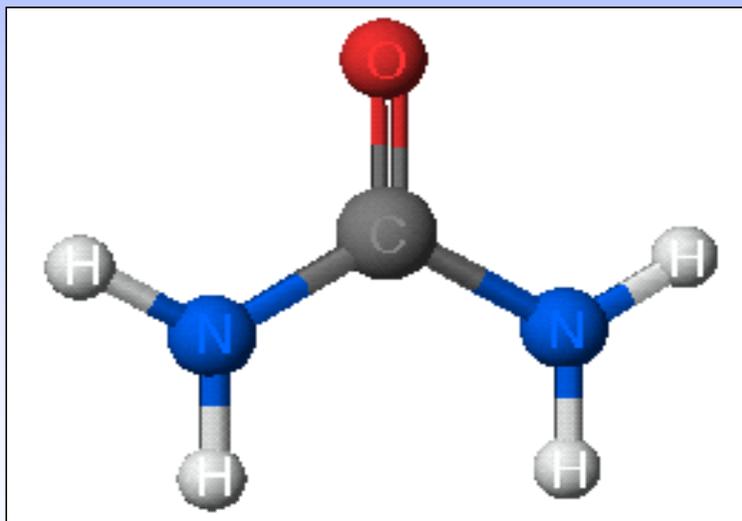
Ureia, $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$

3. Localize os pares restantes na molécula.



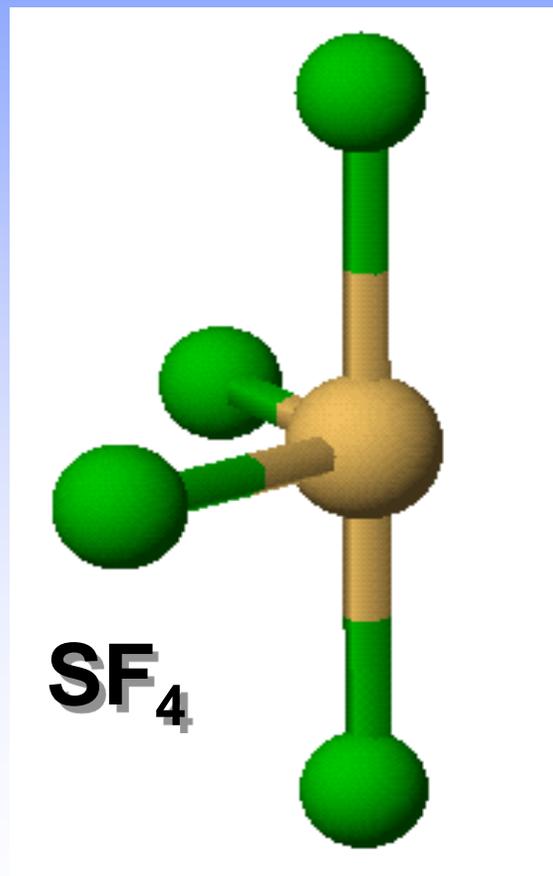
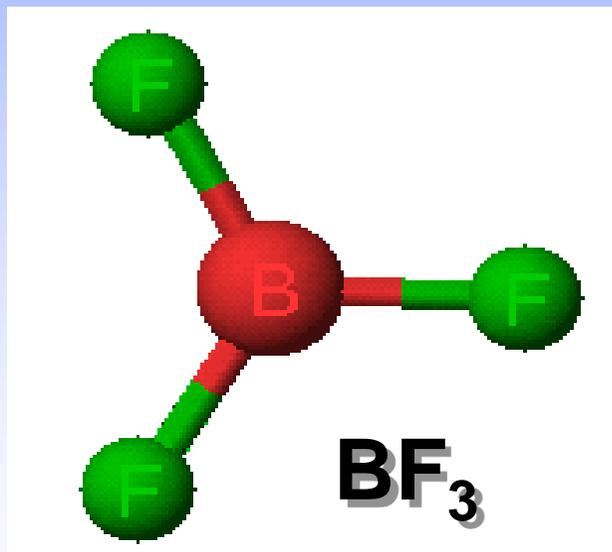
Ureia, $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$

4. Complete o octeto no átomo de C com uma ligação dupla.



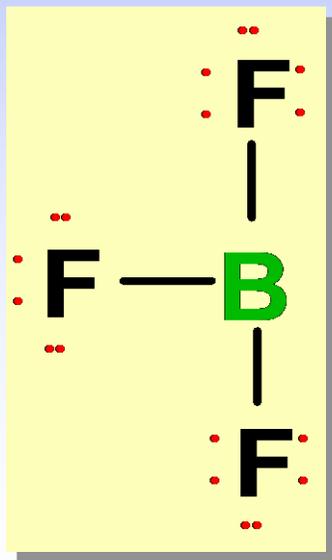
Violações da Regra do Octeto

Em geral ocorre com o B e elementos de períodos mais altos.



Trifluoreto de Boro

- Átomo central = B
- Elétrons de Valência = $1 \times 3 + 3 \times 7 = 24$
ou pares de elétrons = 12
- Monte a estrutura de pontos.

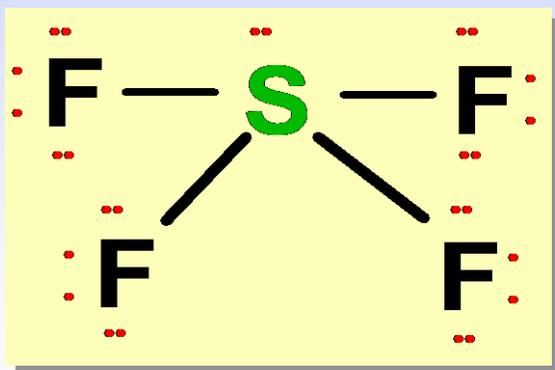


O átomo de B é circundado por somente 6 elétrons (ou 3 pares).

O átomo de B é deficiente em elétrons em muitas moléculas.

Tetrafluoreto de enxofre, SF₄

- Átomo Central = S
- Elétrons de Valência = $1 \times 6 + 4 \times 7 = 34$ ou 17 pares.
- Forme ligações e distribua os pares de elétrons.



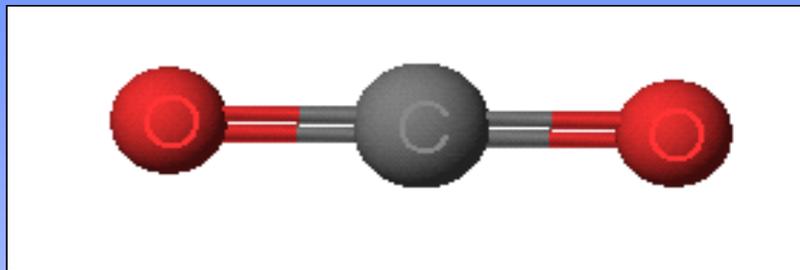
5 pares em torno do átomo de S.

Ocorrência comum for a do 2º período.

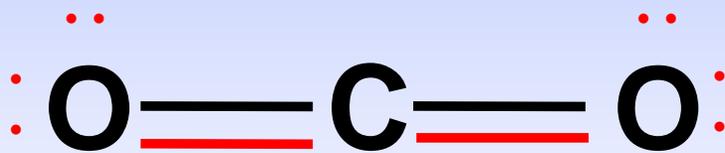
Cargas Formais nos Átomos

- Átomos em moléculas frequentemente levam uma carga (+ or -) formal.
- **Carga Formal = No. do Grupo**
- **$-1/2$ (no. de e^- em Ligações)**
 - (no. de elétrons em Pares Isolados)

Dióxido de Carbono, CO_2



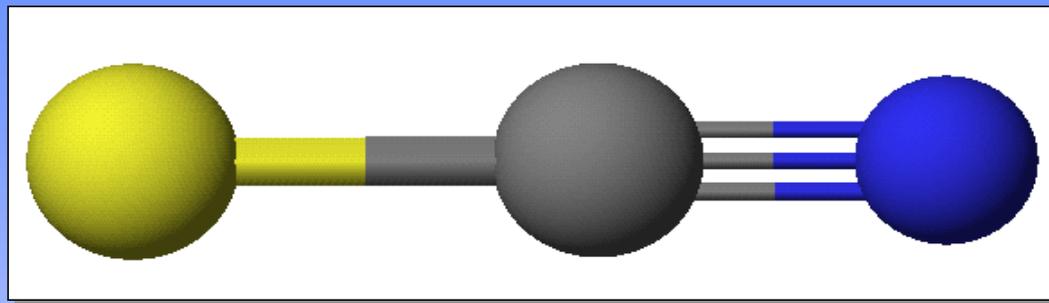
$$6 - (1/2)(4) - 4 = 0$$



$$4 - (1/2)(8) - 0 = 0$$

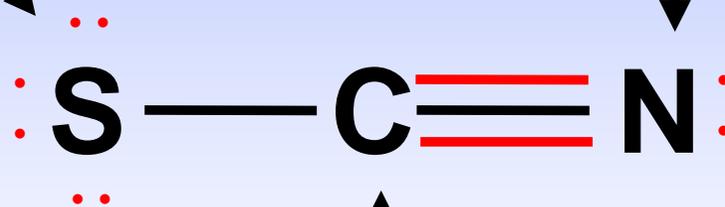
Íon Tiocianato, SCN^-

31



$$6 - (1/2)(2) - 6 = -1$$

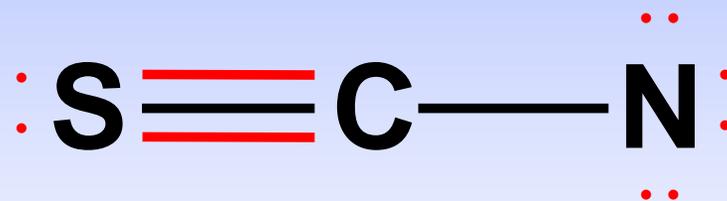
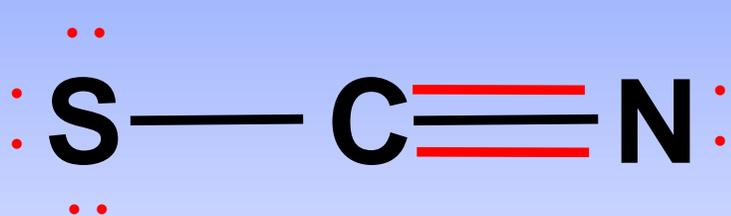
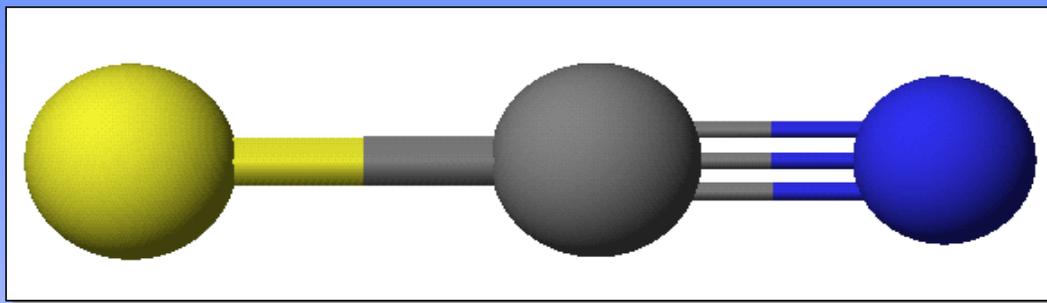
$$5 - (1/2)(6) - 2 = 0$$



$$4 - (1/2)(8) - 0 = 0$$

Íon Tiocianato, SCN⁻

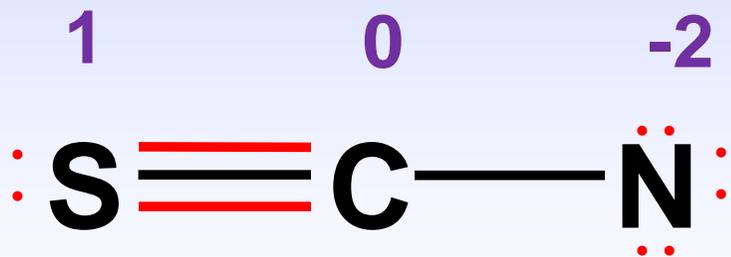
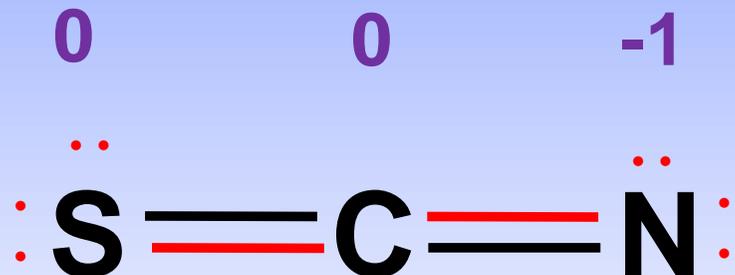
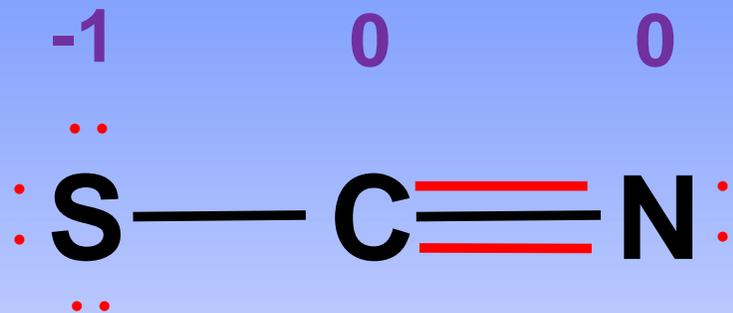
32



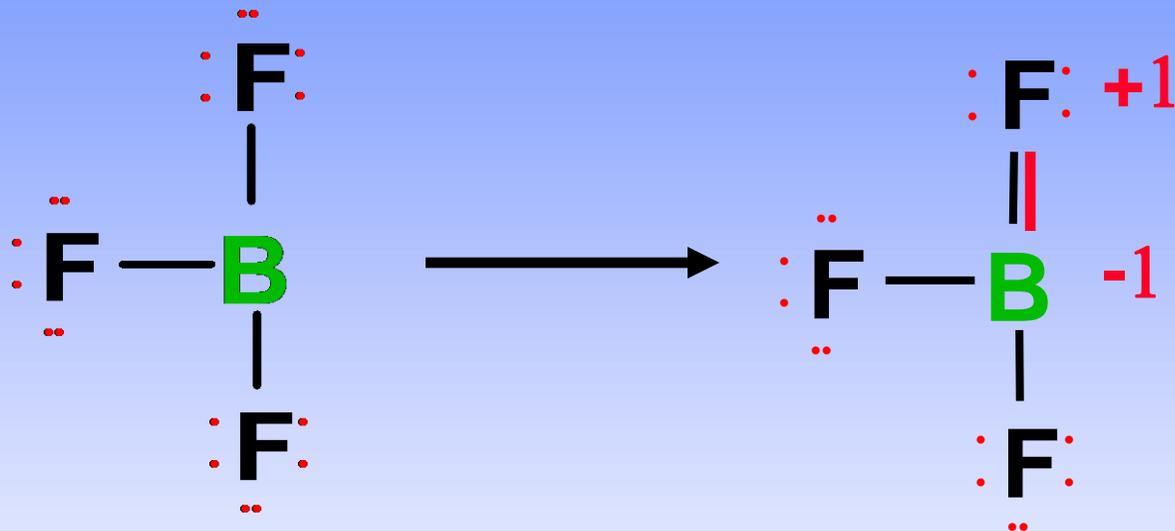
Qual é a forma de ressonância mais importante?

A estrutura de ressonância predominante é aquela com cargas (formais) mais próximas possíveis de zero.

Cargas Parciais no SCN⁻



Trifluoreto de Boro, BF_3



E se formarmos um ligação dupla entre B e F para completarmos o octeto em torno do átomo de B?