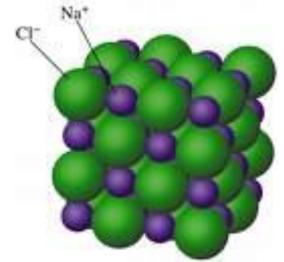
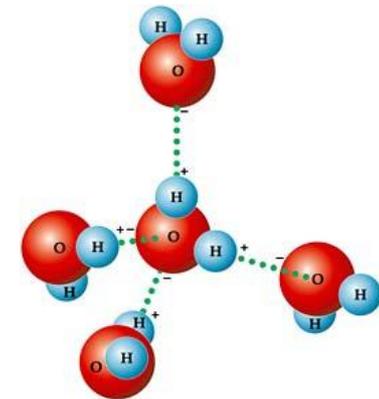
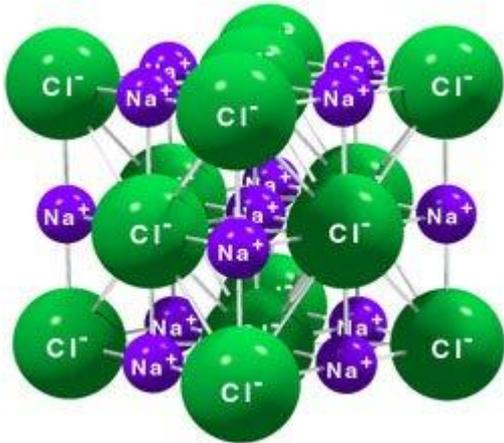




UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos
Departamento de Ciências Básicas



ZAB1007- Química Geral
Ligação Química



Prof. Dr. Gelson Andrade Conceição

**Será que você domina os
mistérios ocultos da Química?**





Por que o hidrogênio ficou triste quando foi preso?

a. () Porque ele só pode fazer uma ligação

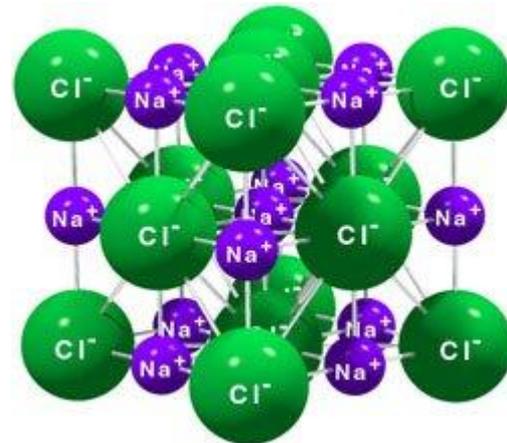
b. () Porque ele está sozinho na cela.

c. () Porque tem direito a uma ligação, mas não tem família.

Ligações Químicas

Ligações químicas referem-se às forças que agem entre os átomos mantendo-os unidos nos compostos. Os dois principais tipos de ligações químicas são:

- **Ligação iônica:**
 - interações de origem eletrostática
 - “doação” de um ou mais elétrons de um átomo ou espécie para outro.



Ligações Químicas

- **Ligação covalente:** resulta do compartilhamento entre um ou mais pares de elétrons entre dois átomos.

Na maioria dos compostos as ligações não são nem 100% iônicas, nem 100% covalentes, mas um intermediário entre ambas



Generalizações a respeito de propriedades de compostos iônicos e covalentes

Compostos iônicos

- São sólidos na temperatura ambiente com altos pontos de fusão.
- Muitos compostos são solúveis em solventes polares (água, por exemplo)
- Maioria são insolúveis em solventes apolares, como hexano e tetracloreto de carbono.
- Compostos fundidos são condutores de eletricidade (presença de íons).
- Soluções aquosas conduzem eletricidade (presença de íons).
- São normalmente formados por átomos com diferença de eletronegatividade acentuada (metal e não metal, por exemplo)

Compostos covalentes

- São gases, líquidos ou sólidos de baixo ponto de fusão na temperatura ambiente.
- Muitos compostos são insolúveis em solventes polares
- Maioria são solúveis em solventes apolares, como hexano e tetracloreto de carbono.
- Compostos líquidos ou fundidos não conduzem eletricidade.
- Soluções aquosas normalmente são maus condutores de eletricidade.
- São normalmente formados por átomos com eletronegatividades similares (não metal e não metal, por exemplo)

Ligações Químicas

- envolvem elétrons da última camada dos elementos. É a chamada **camada de valência**.

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS.
Com massas atômicas referidas ao isótopo 12 do Carbono

TABELA PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

ATENÇÃO:

- O carbono 12 serve como referência às massas atômicas.
- Os elementos artificiais são apresentados em cor verde.
- São chamados: - representativos ou não de transição os elementos dos grupos - A (todos) - B (somente 1B e 2B)
- transição simples: 3B até 8B
- transição interna: Terras Raras - Lantanídeos (57 a 71) - Actínidos (89 a 103)

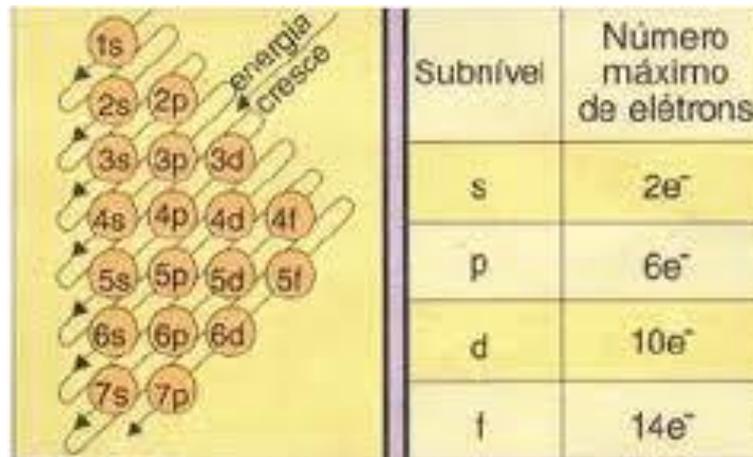
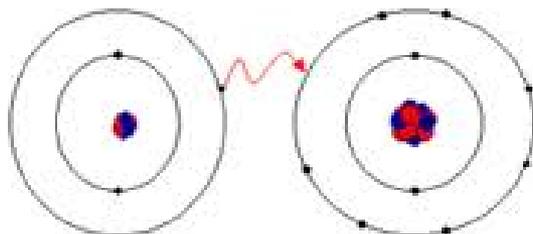
ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO

LEGENDA: Metais, Não-Metais, Artificiais, Gases e Não-Metais, Semimetais, Líquidos

CHAVE

NÚMERO ATÔMICO: 14,0067
 MASSA ATÔMICA: 14,0067
 PUNTO DE EMBUIÇÃO °C: -210,15
 PUNTO DE FUSÃO °C: -210,15
 DENSIDADE (g/cm³): 0,917
 ESTADOS DE OXIDAÇÃO: +1, +2, +3, +4, +5, +6
 SÍMBOLO: N
 ESTRUTURA ELETRÔNICA: 1s² 2s² 2p³
 NOME: Nitrogênio

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H 1,00794	2 He 4,0026	3 Li 6,941	4 Be 9,0122	5 B 10,811	6 C 12,011	7 N 14,0067	8 O 15,9994	9 F 18,9984	10 Ne 20,183	11 Na 22,9898	12 Mg 24,312	13 Al 26,9815	14 Si 28,0855	15 P 30,9738	16 S 32,065	17 Cl 35,453	18 Ar 39,948
19 K 39,0983	20 Ca 40,078	21 Sc 44,956	22 Ti 47,88	23 V 50,942	24 Cr 51,996	25 Mn 54,938	26 Fe 55,847	27 Co 58,933	28 Ni 58,71	29 Cu 63,54	30 Zn 65,37	31 Ga 69,72	32 Ge 72,63	33 As 74,922	34 Se 78,96	35 Br 79,904	36 Kr 83,80
37 Rb 85,47	38 Sr 87,62	39 Y 88,906	40 Zr 91,224	41 Nb 92,906	42 Mo 95,94	43 Tc 98,906	44 Ru 101,07	45 Rh 102,905	46 Pd 106,42	47 Ag 107,868	48 Cd 112,411	49 In 114,818	50 Sn 118,710	51 Sb 121,757	52 Te 127,60	53 I 126,905	54 Xe 131,29
55 Cs 132,905	56 Ba 137,33	57 La 138,905	72 Hf 178,49	73 Ta 180,948	74 W 183,85	75 Re 186,207	76 Os 190,23	77 Ir 192,225	78 Pt 195,084	79 Au 196,967	80 Hg 200,59	81 Tl 204,37	82 Pb 207,19	83 Bi 208,98	84 Po 209	85 At 210	86 Rn 222
87 Fr 223	88 Ra 226	89 Ac 227	104 Ku 238	105 Ha 261	106 Nh 285	107 Ds 285	108 Nh 285	109 Nh 285	110 Nh 285	111 Nh 285	112 Nh 285	113 Nh 285	114 Nh 285	115 Nh 285	116 Nh 285	117 Nh 285	118 Nh 285



- Nos estudos de ligação química é mais conveniente representarmos os átomos e suas ligações em função dos elétrons da camada de valência. Essas representações são as chamadas **“representações de Lewis”**

Representação de Lewis para os elementos representativos

Grupo	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
elétrons na camada de valência	1	2	3	4	5	6	7	8 elétrons exceto He
Período 1	H ·							He :
Período 2	Li ·	Be :	·B·	·C·	·N·	·O:	·F:	:Ne:
Período 3	Na ·	Mg :	·Al·	·Si·	·P·	·S:	·Cl:	:Ar:
Período 4	K ·	Ca :	·Ga·	·Ge·	·As·	·Se:	·Br:	:Kr:
Período 5	Rb ·	Sr :	·In·	·Sn·	·Sb·	·Te:	·I:	:Xe:
Período 6	Cs ·	Ba :	·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po:	·At:	:Rn:
Período 7	Fr ·	Ra :						

Ligações iônicas

- Ligações iônicas são formadas pela **atração eletrostática** entre íons.
- Íons com cargas positivas são chamados de **cátions** e íons com cargas negativas são chamados de **ânions**.
- Íons que consistem de apenas um átomo são chamados de **monoatômicos** (Na^+ , Cl^-), enquanto íons com mais de um átomo são chamados de **poliatômicos** (NH_4^+ , SO_4^{-2}).
- Os átomos de um **íon poliatômico** estão normalmente unidos por ligações covalentes.

Ligações iônicas

De acordo com as discussões anteriores a respeito de:

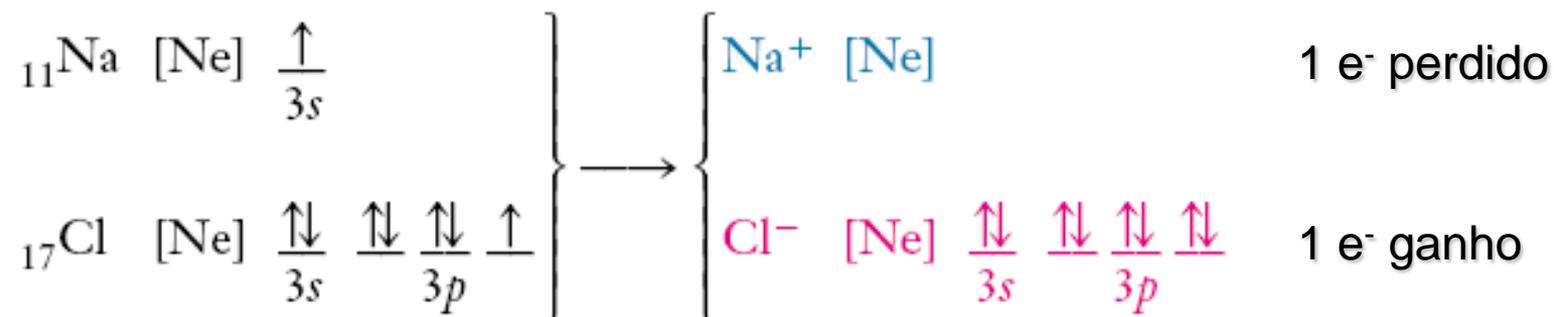
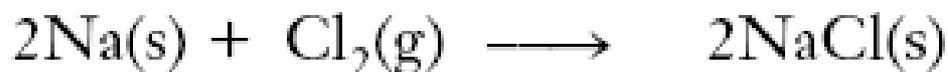
- Energia de ionização
- Afinidade Eletrônica
- Eletronegatividade

ligações iônicas sejam formadas mais facilmente quando elementos com **baixa energia de ionização** (metais) reagem com elementos que possuem valores bastante negativos de **afinidade eletrônica** (não metais).

Ligações iônicas são formadas por elementos com grande diferença entre suas eletronegatividades.

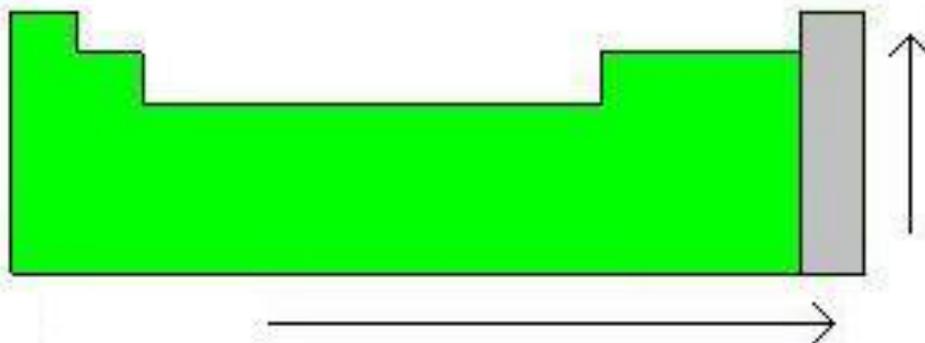
Ligações iônicas – metais do grupo IA e não metais do grupo VIIA

- Formação do cloreto de sódio



Ligações iônicas – metais do grupo IA e não metais do grupo VIIA

- A fórmula NaCl não quer dizer que o composto é iônico, e uma vez que os valores absolutos de eletronegatividade nem sempre estão disponíveis, deve-se conhecer a regra geral de variação periódica da eletronegatividade. Em geral:



Em qual composto o caráter de ligação iônica é mais pronunciado ?

CsF e LiI

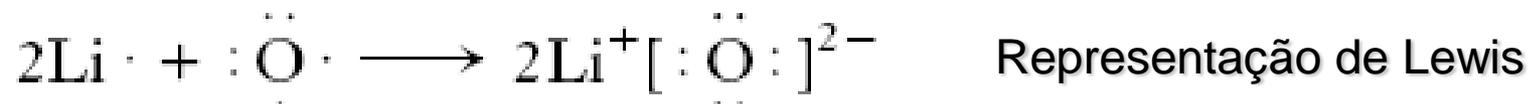
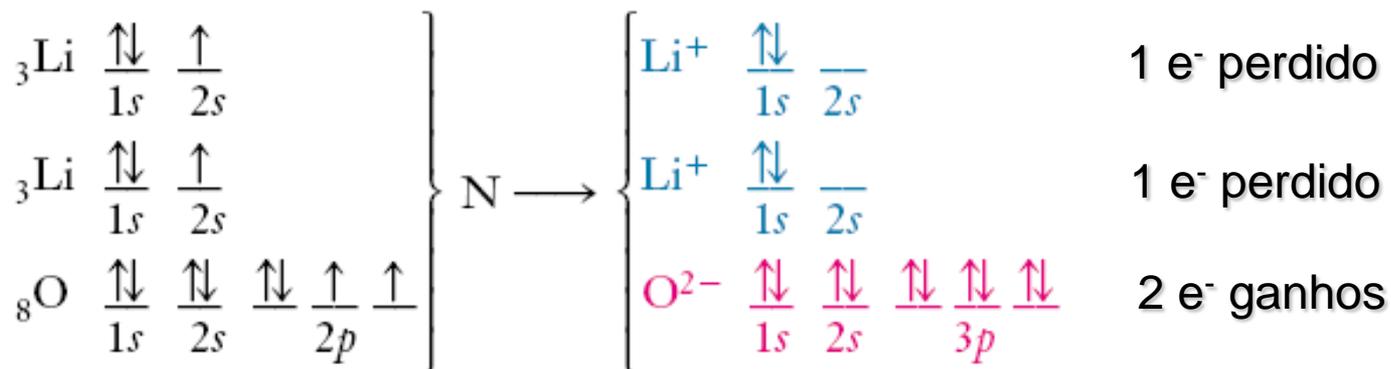
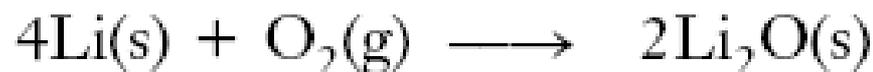
Ligações iônicas

- A **formação de íons isolados** (cátions e ânions) a partir de átomos **pode não ser um processo favorável**. Desta forma deve existir algum processo que torne a formação de compostos iônicos favoráveis do ponto de vista da estabilidade.
- Esse processo é a atração eletrostática entre os dois íons (positivo e negativo). De acordo com a lei de Coulomb:

$$F \propto \frac{q^+ \cdot q^-}{d^2}$$

- *Quanto maior a carga dos íons e menor os seus tamanhos, maior será a força de atração eletrostática.*

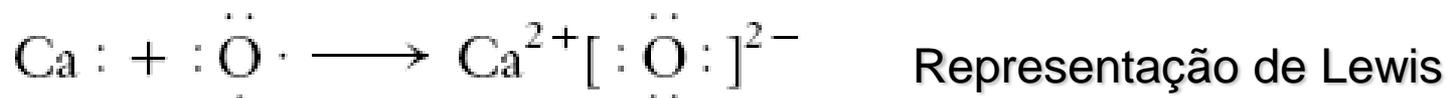
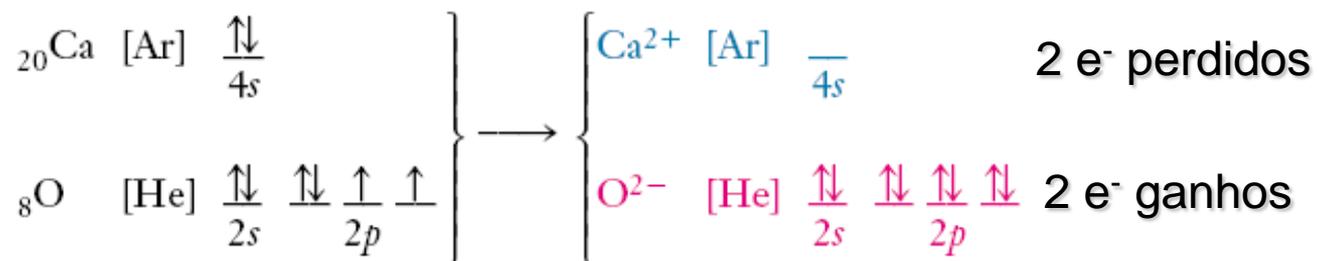
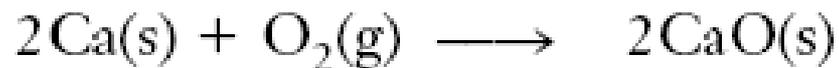
Ligações iônicas – metais do grupo IA e não metais do grupo VIA



Ligações iônicas – metais do grupo IA e não metais do grupo VIA

- Em comparação com os íons Na^+ , íons Li^+ tem um raio muito menor.
- Em comparação com os íons Cl^- , os íons O^{2-} tem um raio menor, além de possuir 2 cargas negativas.
- o produto das cargas (numerador da lei de Coulomb) é maior, e a distância que separa as cargas (denominador da lei de Coulomb) é menor. **A força eletrostática que une Li^+ e O^{2-} é maior que a que une Na^+ e Cl^- .**
- O ponto de fusão de Li_2O ($>1700\text{ }^\circ\text{C}$) é muito maior que o do NaCl ($801\text{ }^\circ\text{C}$).

Ligações iônicas – metais do grupo IIA e não metais do grupo VIA



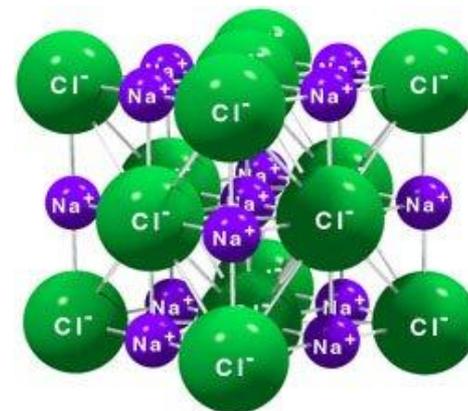
Ligações iônicas – metais do grupo IIA e não metais do grupo VIA

- Os íons Ca^{+2} tem aproximadamente o mesmo raio que os átomos de Na^+ , porém duas cargas ao invés de uma.
- Novamente, comparação com os íons Cl^- , os íons O^{-2} tem um raio menor, além de possuir 2 cargas negativas.
- Como consequência o produto das cargas (numerador da lei de Coulomb) é maior, e a distância que separa as cargas (denominador da lei de Coulomb) é menor. **A força eletrostática que une Ca^{+2} e O^{-2} é maior que a que une Li^+ e O^{-2} , e muito maior que a que une Na^+ e Cl^- .**
- O ponto de fusão de CaO é aproximadamente $2580\text{ }^\circ\text{C}$.

Ligações iônicas e energia

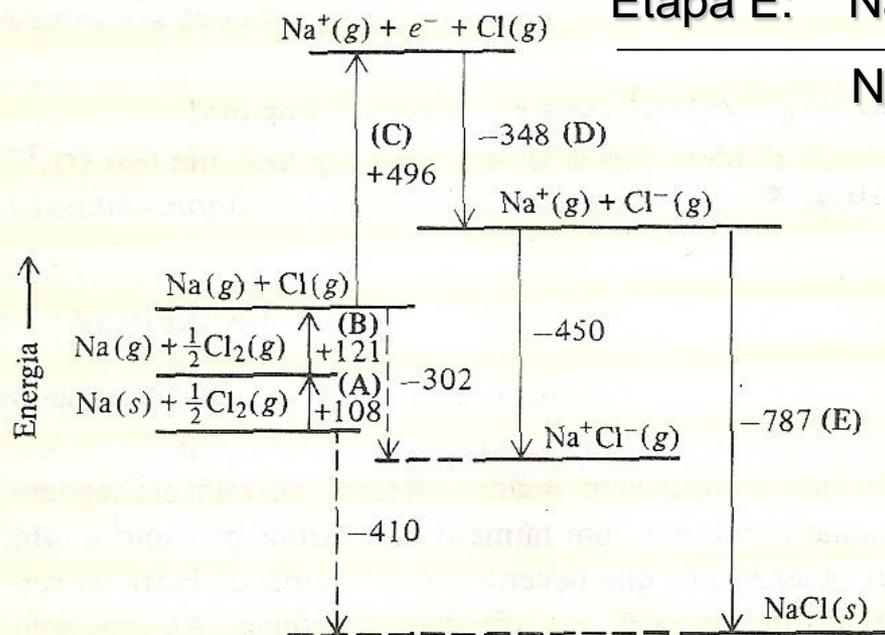
- A “**energia do retículo cristalino**” é definida como a energia necessária para que 1 mol do composto no seu estado sólido cristalino passe para o estado de íons gasosos.
- Energia do retículo cristalino do NaCl é igual a -787 KJ/mol

• Isso quer dizer que: *1 mol de NaCl sólido é 789 KJ mais estável do que se tivéssemos 1 mol de íons Na^+ e 1 mol de Cl^- separados no estado gasoso.*



- A estabilidade de um composto iônico pode ser medida computando-se toda a energia gasta ou liberada desde a produção dos íons até a formação do retículo cristalino.

Ligações iônicas e energia – formação do NaCl



Compostos iônicos binários simples

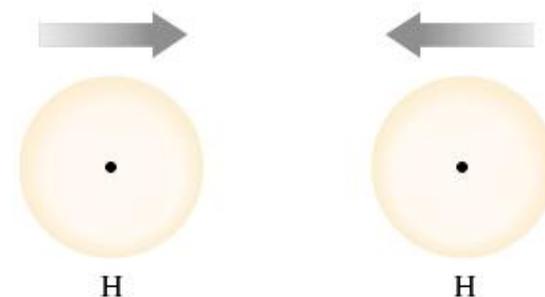
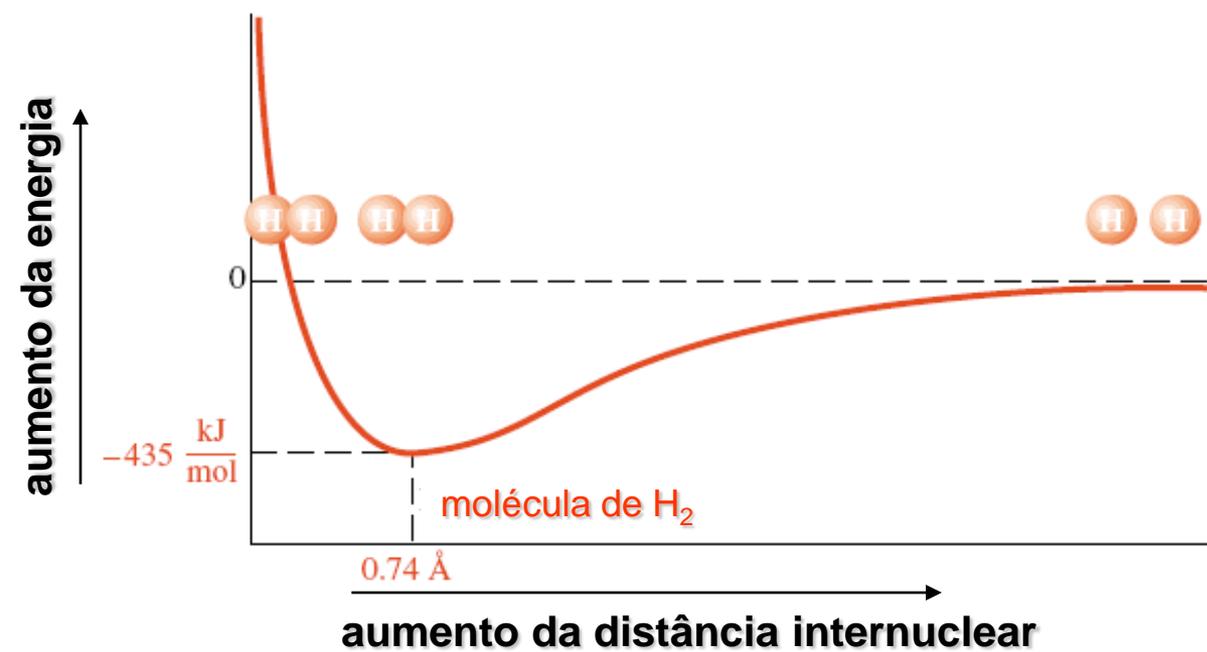
metal		não metal		fórmula geral	íons presentes	exemplo
IA*	+	VIIA	→	MX	(M ⁺ , X ⁻)	LiBr
IIA	+	VIIA	→	MX ₂	(M ²⁺ , 2X ⁻)	MgCl ₂
IIIA	+	VIIA	→	MX ₃	(M ³⁺ , 3X ⁻)	GaF ₃
IA*†	+	VIA	→	M ₂ X	(2M ⁺ , X ²⁻)	Li ₂ O
IIA	+	VIA	→	MX	(M ²⁺ , X ²⁻)	CaO
IIIA	+	VIA	→	M ₂ X ₃	(2M ³⁺ , 3X ²⁻)	Al ₂ O ₃
IA*	+	VA	→	M ₃ X	(3M ⁺ , X ³⁻)	Li ₃ N
IIA	+	VA	→	M ₃ X ₂	(3M ²⁺ , 2X ³⁻)	Ca ₃ P ₂
IIIA	+	VA	→	MX	(M ³⁺ , X ³⁻)	AlP

Ligações covalentes

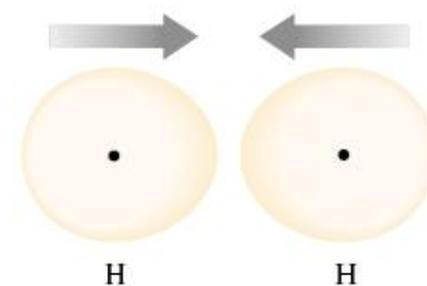
- Ligações covalentes são formadas em geral por dois ou mais átomos de elementos não-metálicos.
- Em ligações covalentes a diferença entre a eletronegatividade dos átomos participantes é nula ou muito reduzida.
- Apesar de serem originados por ligações intra-moleculares fortes, as forças que mantêm as substâncias covalentes unidas (forças intermoleculares) são relativamente fracas, o que resulta em substâncias com pontos de fusão e ebulição reduzidos quando comparados às substâncias iônicas.

Ligações covalentes

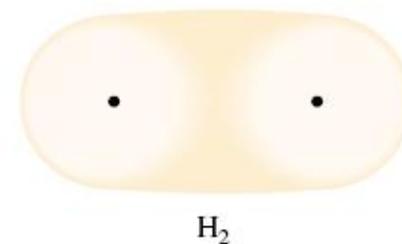
A molécula de hidrogênio (H_2)



(a)



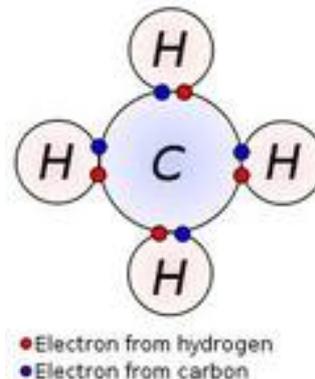
(b)



(c)

Ligações covalentes – A regra do octeto

- Quando participam em ligações químicas os átomos tendem a maior estabilidade adquirindo a configuração do gás nobre anterior ao seu número atômico, ou seja, **8 elétrons** na camada de valência (com exceção do He que possui 2 elétrons).



Ligações covalentes – Fórmulas de Lewis

Como obter uma estrutura de Lewis?

Escrever as fórmulas de Lewis para as seguintes espécies covalentes:



Ligações covalentes – Carga formal

- A **carga formal é uma carga hipotética** atribuída a um átomo em uma molécula ou íon poliatômico no sentido de auxiliar na determinação mais provável da estrutura de Lewis.

$$\text{Carga Formal} = N_{ev} - Nl - N_{enc}$$

N_{ev} : número de elétrons de valência do átomo

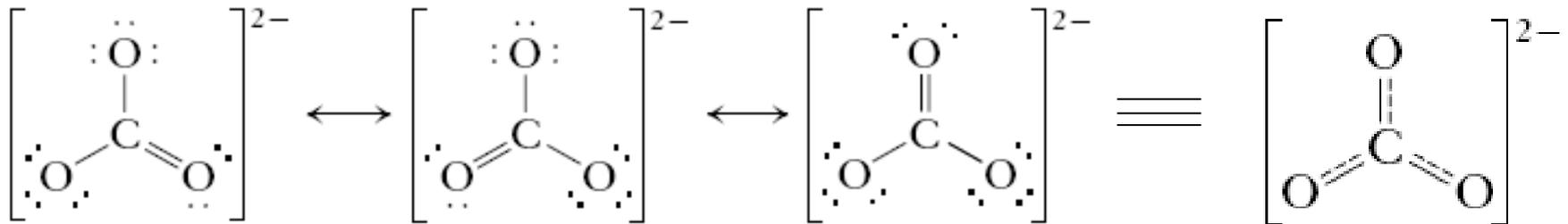
Nl : número de ligações do átomo na espécie considerada

N_{enc} : número de elétrons não-compartilhados

- A **estrutura mais favorável de uma determinada espécie** (molécula ou íon poliatômico) é aquela na qual o valor da carga formal dos átomos que a compõem é igual a zero, ou próximo deste valor.
- A **somatória da carga formal** de todos os átomos de uma molécula neutra deve ser igual a zero, e de **um íon poliatômico** deve ser igual a carga deste íon.
- **Cargas formais negativas** devem preferencialmente situarem-se em átomos mais eletronegativos

Ligações covalentes – Ressonância

- Quando uma molécula ou um íon poliatômico pode ser representado por mais de uma estrutura de Lewis sem que se modifique o arranjo atômico diz-se que esta espécie apresenta o “efeito de ressonância”



- Experimentos mostram que as ligações C-O no íon carbonato não possuem caráter nem de simples ligação, nem de dupla ligação.

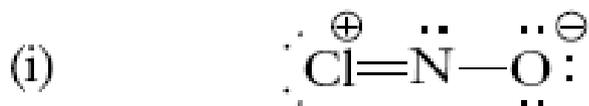
Comprimento de ligação típica C-O simples: 1,43 Angstroms

Comprimento de ligação típica C-O dupla: 1,22 Angstroms

Comprimento de ligação C-O no íon carbonato: 1,29 Angstroms

Ligações covalentes – Carga formal

- Ex.: Calcular a carga formal dos átomos no íon amônio NH_4^+ .
- Ex.: Calcular a carga formal dos átomos no ácido perclórico HClO_4 .
- Qual das estruturas de ressonância abaixo é a mais provável ?

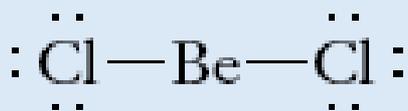


Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

- Compostos covalentes de Be

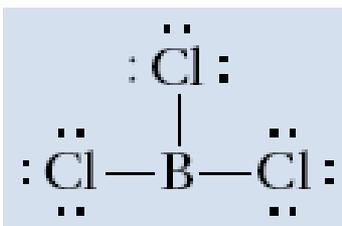
O berílio faz duas ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 4.

Ex.: Estrutura de Lewis para BeCl_2



- Compostos covalentes do grupo IIIA

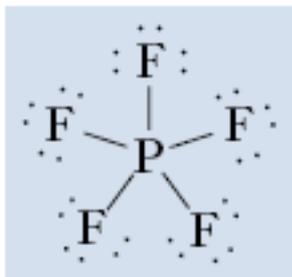
A maior parte dos átomos da família IIIA (especialmente o boro) fazem 3 ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 6. Ex.: BCl_3



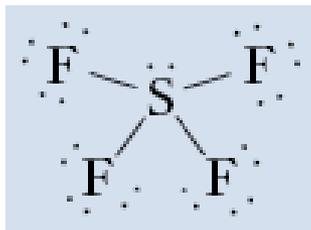
Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

- Compostos no qual o número de elétrons a serem compartilhados é inferior ao número necessário.

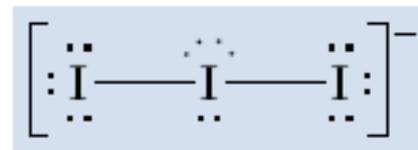
Ex.: PF₅



Ex.: SF₄



Ex.: I₃⁻



Ligações covalentes – Polaridade

Quanto maior a diferença entre os valores de eletronegatividade, maior será a polaridade da ligação

	F—Br	F—Cl	Cl—I	Cl—Br	Cl—Cl	F—F
EN:	$\underbrace{4.0 \quad 2.8}$	$\underbrace{4.0 \quad 3.0}$	$\underbrace{3.0 \quad 2.5}$	$\underbrace{3.0 \quad 2.8}$	$\underbrace{3.0 \quad 3.0}$	$\underbrace{4.0 \quad 4.0}$
$\Delta(\text{EN})$:	1.2	1.0	0.5	0.2	0	0

$\Delta(\text{EN})$ for the bonding atoms	zero	→ intermediate	→ large
Bonding types	nonpolar covalent	→ polar covalent	→ ionic

