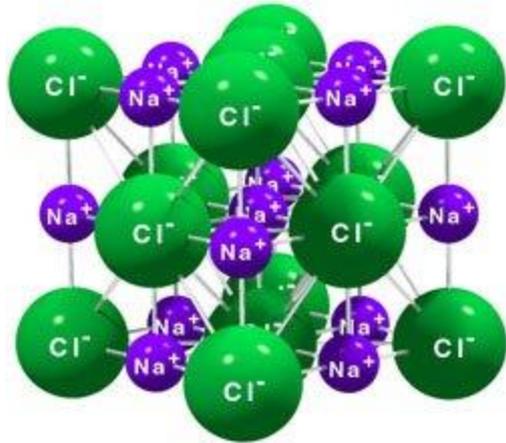
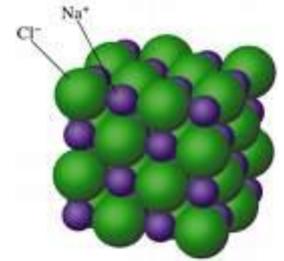


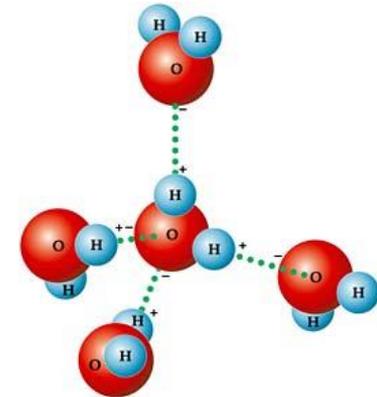


UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos
Departamento de Ciências Básicas



ZAB1007- Química Geral
Ligação Química
Parte 1

Prof. Dr. Gelson Andrade Conceição





Por que o hidrogênio ficou triste quando foi preso?

a. Porque ele só pode fazer uma ligação

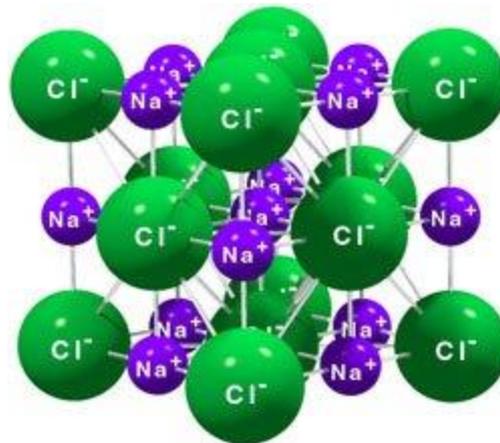
b. Porque ele está sozinho na cela.

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 metálica:** interação entre átomos no metal
- **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 em geral sólidos na temperatura ambiente com altos pontos de fusão.
- Muitos compostos são solúveis em solventes polares (água, por exemplo)
- Maioria é insolúvel 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 é solúvel 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 **côr verde**.
- São chamados: - representativos ou não de transição os elementos dos grupos - A (todos) e B (isomere 1B e 2B)
- transição simples: 3B até 8B
- transição interna: Terras Raras (Lantanídeos (57 a 71) Actinídeos (89 a 103))

ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO

	1	2											3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
PERÍODO	1	2											3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
(K)	1	2											3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
(L)	3	4											5	6	7	8	9	10	11	12		
(M)	11	12											13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
(N)	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
(O)	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
(P)	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76
(Q)	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108

LEGENDA:

- Metais
- Não-Metais
- Artificiais
- Gases e Não-Metais
- Semimetais
- Líquidos

<p>CHAVE</p> <p>14.0067</p> <p>5.35.62</p> <p>7.00</p> <p>0.81</p> <p>14.0067</p> <p>Nitrogênio</p>	<p>ESTADOS DE OXIDAÇÃO (sem negrito e mais exóticos)</p> <p>SÍMBOLO</p> <p>ESTRUTURA ELETRÔNICA</p>
---	---

*	58	140.12	59	140.907	60	144.24	61	(147)	62	162.50	63	151.96	64	157.25	65	158.924	66	162.50	67	164.930	68	167.26	69	168.934	70	172.04	71	174.97
	Ce		Pr		Nd		Pm		Sm		Eu		Gd		Tb		Dy		Ho		Er		Tm		Yb		Lu	
*	90	232.0377	91	(231)	92	238.02891	93	(237)	94	(242)	95	(243)	96	(247)	97	(247)	98	(248)	99	(251)	100	(252)	101	(258)	102	(264)	103	(267)
	Th		Pa		U		Np		Pu		Am		Cm		Bk		Cf		Es		Fm		Md		No		Lw	

Orbitais atômicos

O modelo mecânico-quântico do átomo é um modelo matemático baseado na equação de Schrödinger. As soluções são uns números chamados números quânticos., representados da seguinte forma:

n: Número quântico principal. Toma valores de $n = 1$ a 7. Indicam a energia do orbital e seu tamanho (proximidades do núcleo). Representam as camadas K, L, M, N etc de energia dos elétrons.

l: Número quântico secundário ou azimutal. Toma valores de 0 a $n-1$. Indicam a forma e o tipo do orbital.

- Se $l = 0$ o orbital é tipo s. (há 1).
- Se $l = 1$ o orbital é tipo p. (há 3).
- Se $l = 2$ o orbital é tipo d. (há 5).
- Se $l = 3$ o orbital é tipo f. (há 7).

Subnível	Número máximo de elétrons
s	$2e^-$
p	$6e^-$
d	$10e^-$
f	$14e^-$

m: Número quântico magnético. Toma valores de $-l$ a $+l$ passando por 0. Indicam a orientação espacial do orbital.

m_s : Número quântico de spin (rotação). Toma valores $-1/2$ ou $1/2$. Indica o giro do elétron em um sentido e ao contrário .

Por exemplo,

Se $n = 1$ (camada 1 ou K), então l (quântico secundário) = 0 e há apenas um orbital, o 1s.

Se $n = 2$, temos $l = 0$ (1 orbital 2s) e $l = 1$ (3 orbitais 2p).

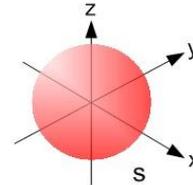
Se $n = 3$, temos $l = 0$ (1 orbital 3s), $l = 1$ (3 orbitais 3p) e $l = 2$ (5 orbitais 3d).

Se $n = 4$, temos $l = 0$ (1 orbital 4s), $l = 1$ (3 orbitais 4p), $l = 2$ (5 orbitais 4d) e $l = 3$ (7 orbitais 4f).

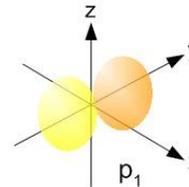
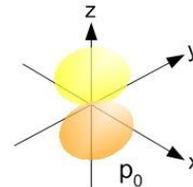
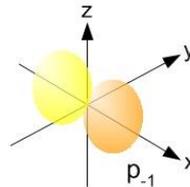
Orbitais atômicos

Tipo

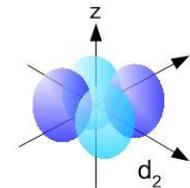
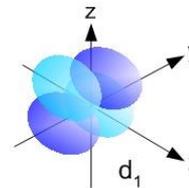
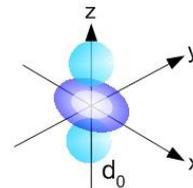
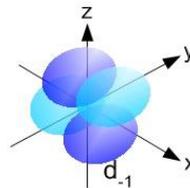
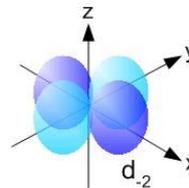
s (1)



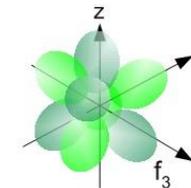
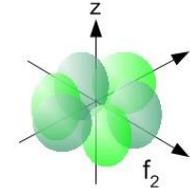
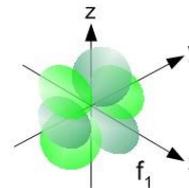
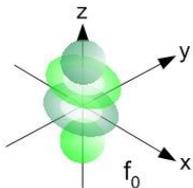
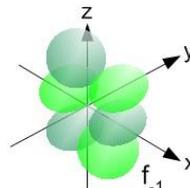
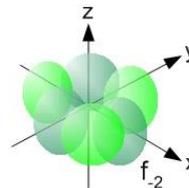
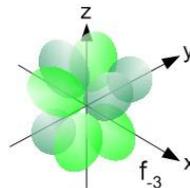
p (3)



d (5)



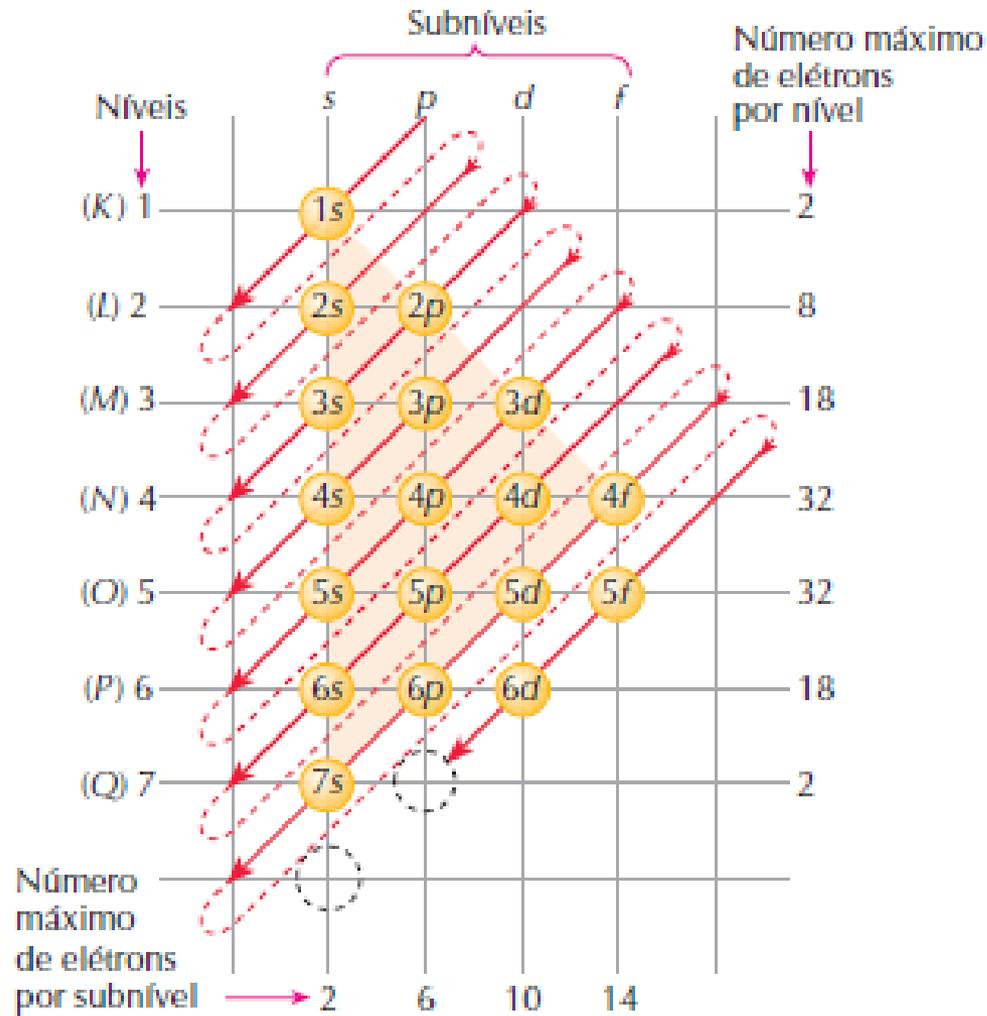
f (7)



Orbitais atômicos são **subcamadas de energia** na camada principal:

	s ($l=0$)	p ($l=1$)	d ($l=2$)	f ($l=3$)
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	 $m=-3$  $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$  $m=3$
$n=5$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=6$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=7$	 $m=0$			

Diagrama de Pauling



Estrutura de Lewis para os elementos representativos

Apenas elétrons da camada de valência (última camada)

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

É preciso entender:

- **Energia de ionização:** energia necessária para remover um elétron
- **Afinidade Eletrônica:** ligada à energia liberada quando um elétron é doado
- **Eletronegatividade:** medida da capacidade de um átomo atrair elétrons para seu núcleo

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

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

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 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**.

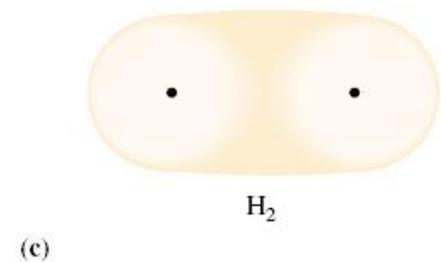
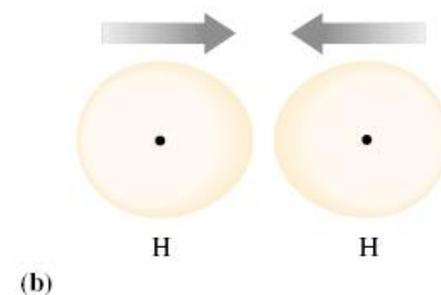
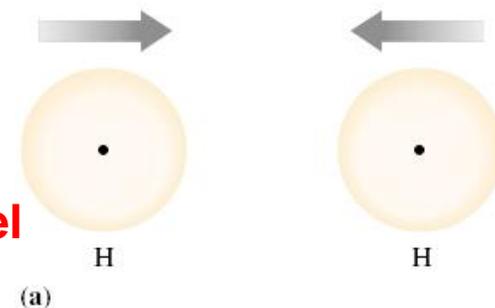
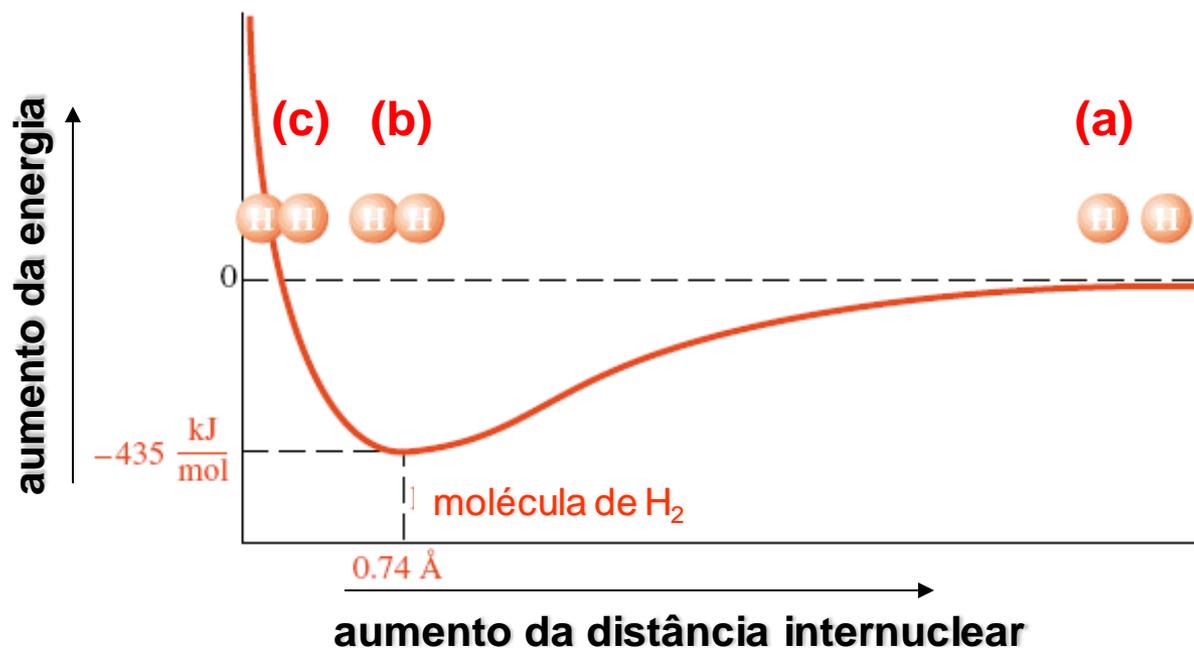
Ligações covalentes

A molécula de hidrogênio (H_2)

Menor energia = maior estabilidade = processo favorável

A distância internuclear $0,74 \text{ \AA}$ = **comprimento da**

ligação H-H = MÍNIMO DE ENERGIA NA CURVA



Ligações covalentes – A regra do octeto

- Para elementos do 2º período 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).
 - Nr max de elétrons por período da tabela:
 - 1 = 2e
 - 2 = 8e (regra do octeto)
 - 3 = 18e
 - 4 = 32e
 - 5 = 32e
- Elementos destes períodos (P, S, Cl, Br, I etc) podem aceitar + que 8e na camada de valência = aparente violação da regra do octeto = podem formar ligações covalentes muito além do previsto na regra do octeto, sem problema algum! O que não pode é se exceder o max de elétrons permitido para a camada de valência (última camada eletrônica do átomo).

Ligações covalentes – Estruturas de Lewis

Como obter uma estrutura de Lewis?

Cloreto de Berílio: BeCl_2

Contagem dos e^- de valência:

Be: 2

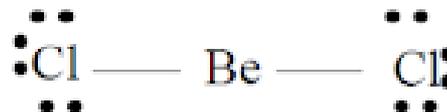
2Cl: $2(7) = 14$

Total: 16 e^- de valência



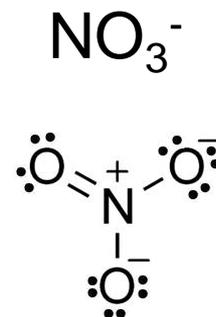
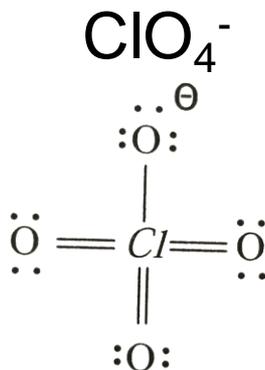
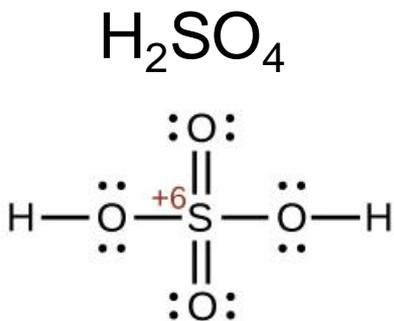
átomo central: Be

Estrutura de Lewis: não tem pares isolados de elétrons no átomo central (por quê?):



elétrons ligantes: qualquer elétron de ligações covalentes

elétrons não ligantes: qualquer elétron não compartilhado



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.

$$\text{Carga Formal (CF)} = \text{NeV} - (\text{NeL}/2 + \text{NeNC})$$

NeV: número de elétrons de valência do átomo

NeL: número de ligações do átomo na espécie considerada

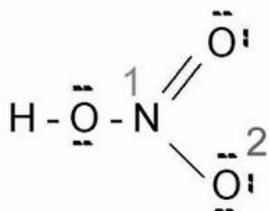
NeNC: número de elétrons não-compartilhados (não ligantes)

- 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 – Carga formal

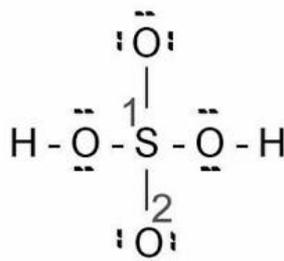
Exemplos de cálculo da carga formal:

Molécula de HNO₃



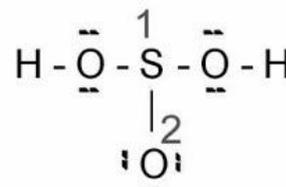
$$\begin{aligned} 1) & 5 - (0 + 4) = +1 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

Molécula de H₂SO₄



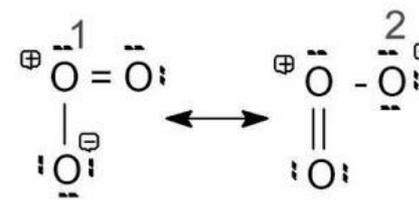
$$\begin{aligned} 1) & 6 - (0 + 4) = +2 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

Molécula de H₂SO₃



$$\begin{aligned} 1) & 6 - (2 + 3) = +1 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

Molécula de Ozônio



$$\begin{aligned} 1) & 6 - (2 + 3) = +1 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

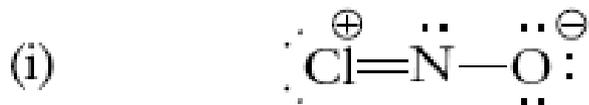
Resumindo...

Carga Formal é ...	}	... a carga que um átomo teria se suas ligações fossem partidas...	}	... homoliticamente
Número de Oxidação é heteroliticamente

Ligações covalentes – Carga formal

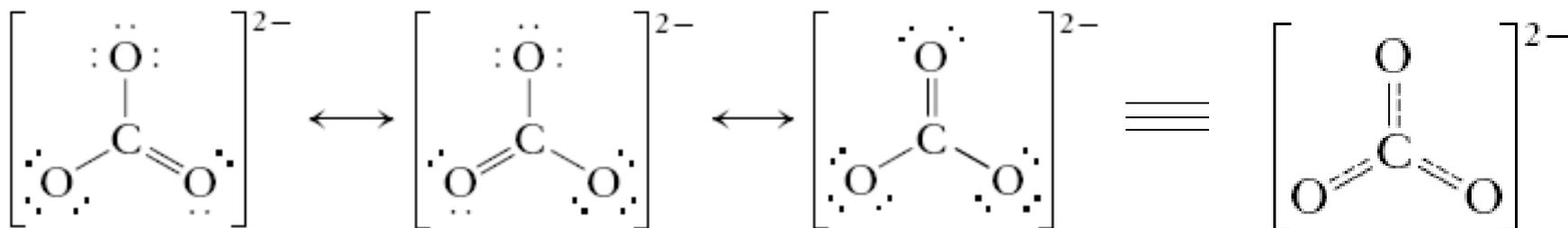
Tarefa de fixação

- Ex.: Calcular a carga formal dos átomos no íon amônio NH_4^+ .
- Ex.: Calcular a carga formal dos átomos na água H_2O .
- Qual das estruturas de ressonância abaixo é a mais provável? Pq?



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 Angstrons

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

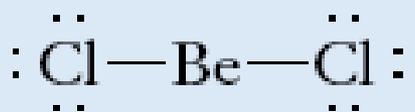
Comprimento de ligação C-O no íon carbonato: 1,29 Angstrons

Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

- Compostos covalentes de Be

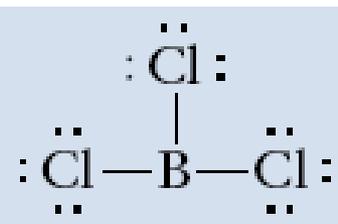
O berílio faz duas ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 4.

Ex.: Estrutura de Lewis para BeCl_2



- Compostos covalentes do grupo IIIA

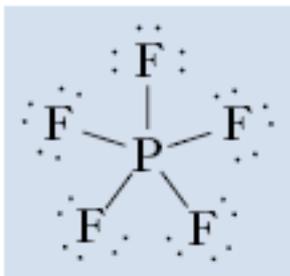
A maior parte dos átomos da família IIIA (especialmente o boro) fazem 3 ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 6. Ex.: BCl_3



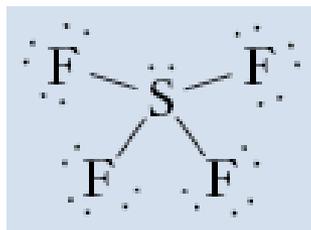
Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

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

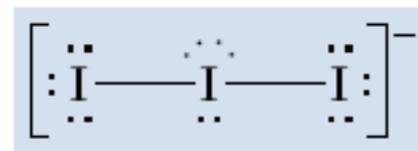
Ex.: PF₅



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

