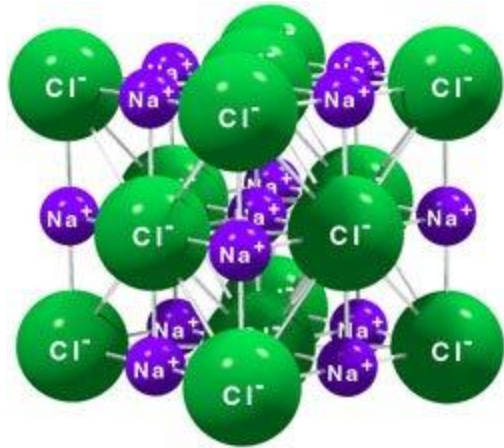
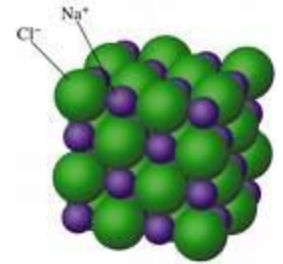




UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos
Departamento de Ciências Básicas

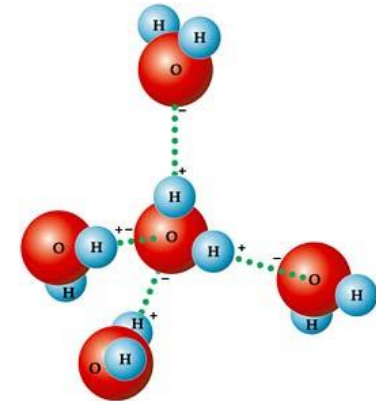


ZAB1007- Química Geral

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

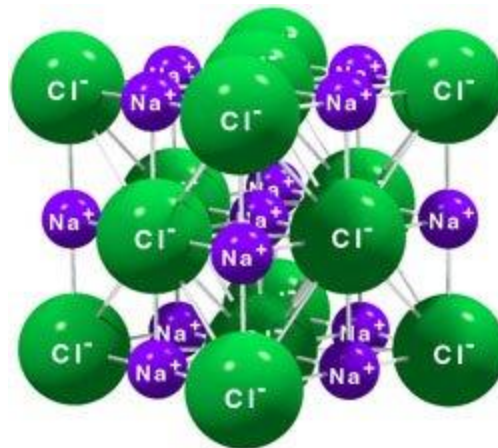
b. Porque ele está sozinho na cela.

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	IA												IIA												0																					
1. ^o (K)	1	2											3	4											5	6			7	8	9	10	11	12												
2. ^o (L)	3	4											5	6											7	8			9	10	11	12														
3. ^o (M)	11	12	ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO										13	14	15	16	17	18			19	20	21	22																						
4. ^o (N)	19	20	ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO										21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36																		
5. ^o (O)	37	38	ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO										39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54																		
6. ^o (P)	55	56	ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO										57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86				
7. ^o (Q)	87	88	ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO										89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107											108	109	110	111	112

LEGENDA:

	Metals	Não-Metals	Artificiais	Gases e Não-Metals	Semi-metals	Líquidos
--	--------	------------	-------------	--------------------	-------------	----------

<p>CHAVE</p> <p>14.0067</p> <p>5.35.62</p> <p>5.35.62</p> <p>0.81</p> <p>14.0067</p> <p>Nitrogênio</p>	<p>ESTADOS DE OXIDAÇÃO (sem negar o mais usual)</p> <p>SÍMBOLO</p> <p>ESTRUTURA ELETRÔNICA</p>
---	--

★	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu											Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
★	140.12	140.907	144.24	147	150.36	151.96	157.25	158.924	162.50	167.26	168.930	172.04	174.967	3											232	231	238.0289	237	244	243	247	248	251	252	257	258	262	263	267	268	271	272	287	288	293	294	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	301	302	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350	351	352	353	354	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	384	385	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410	411	412	413	414	415	416	417	418	419	420	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440	441	442	443	444	445	446	447	448	449	450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470	471	472	473	474	475	476	477	478	479	480	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510	511	512	513	514	515	516	517	518	519	520	521	522	523	524	525	526	527	528	529	530	531	532	533	534	535	536	537	538	539	540	541	542	543	544	545	546	547	548	549	550	551	552	553	554	555	556	557	558	559	560	561	562	563	564	565	566	567	568	569	570	571	572	573	574	575	576	577	578	579	580	581	582	583	584	585	586	587	588	589	590	591	592	593	594	595	596	597	598	599	600	601	602	603	604	605	606	607	608	609	610	611	612	613	614	615	616	617	618	619	620	621	622	623	624	625	626	627	628	629	630	631	632	633	634	635	636	637	638	639	640	641	642	643	644	645	646	647	648	649	650	651	652	653	654	655	656	657	658	659	660	661	662	663	664	665	666	667	668	669	670	671	672	673	674	675	676	677	678	679	680	681	682	683	684	685	686	687	688	689	690	691	692	693	694	695	696	697	698	699	700	701	702	703	704	705	706	707	708	709	710	711	712	713	714	715	716	717	718	719	720	721	722	723	724	725	726	727	728	729	730	731	732	733	734	735	736	737	738	739	740	741	742	743	744	745	746	747	748	749	750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766	767	768	769	770	771	772	773	774	775	776	777	778	779	780	781	782	783	784	785	786	787	788	789	790	791	792	793	794	795	796	797	798	799	800	801	802	803	804	805	806	807	808	809	810	811	812	813	814	815	816	817	818	819	820	821	822	823	824	825	826	827	828	829	830	831	832	833	834	835	836	837	838	839	840	841	842	843	844	845	846	847	848	849	850	851	852	853	854	855	856	857	858	859	860	861	862	863	864	865	866	867	868	869	870	871	872	873	874	875	876	877	878	879	880	881	882	883	884	885	886	887	888	889	890	891	892	893	894	895	896	897	898	899	900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916	917	918	919	920	921	922	923	924	925	926	927	928	929	930	931	932	933	934	935	936	937	938	939	940	941	942	943	944	945	946	947	948	949	950	951	952	953	954	955	956	957	958	959	960	961	962	963	964	965	966	967	968	969	970	971	972	973	974	975	976	977	978	979	980	981	982	983	984	985	986	987	988	989	990	991	992	993	994	995	996	997	998	999	1000

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).

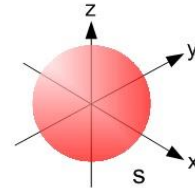
Se $n = 3$, temos $l = 0$ (1 orbital 3s), $l = 1$ (3 orbitais 3p) e $l = 2$ (5 orbitais 3d).

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).

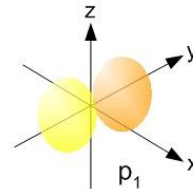
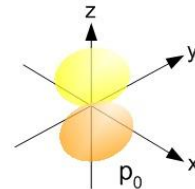
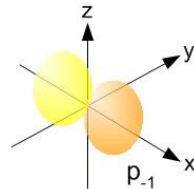
Orbitais atômicos

Tipo

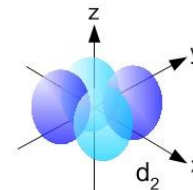
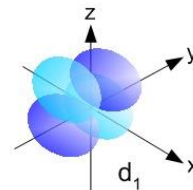
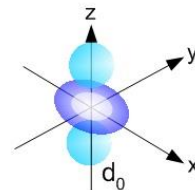
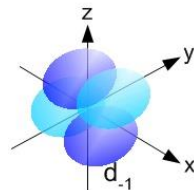
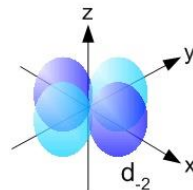
s (1)



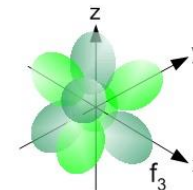
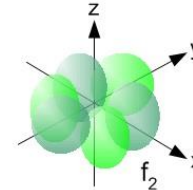
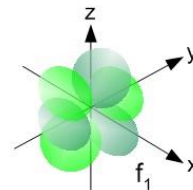
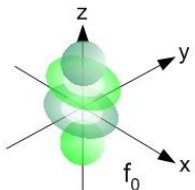
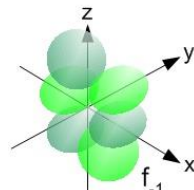
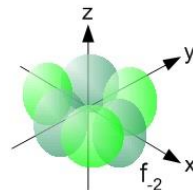
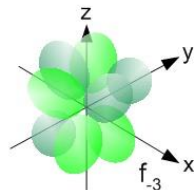
p (3)



d (5)



f (7)



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













































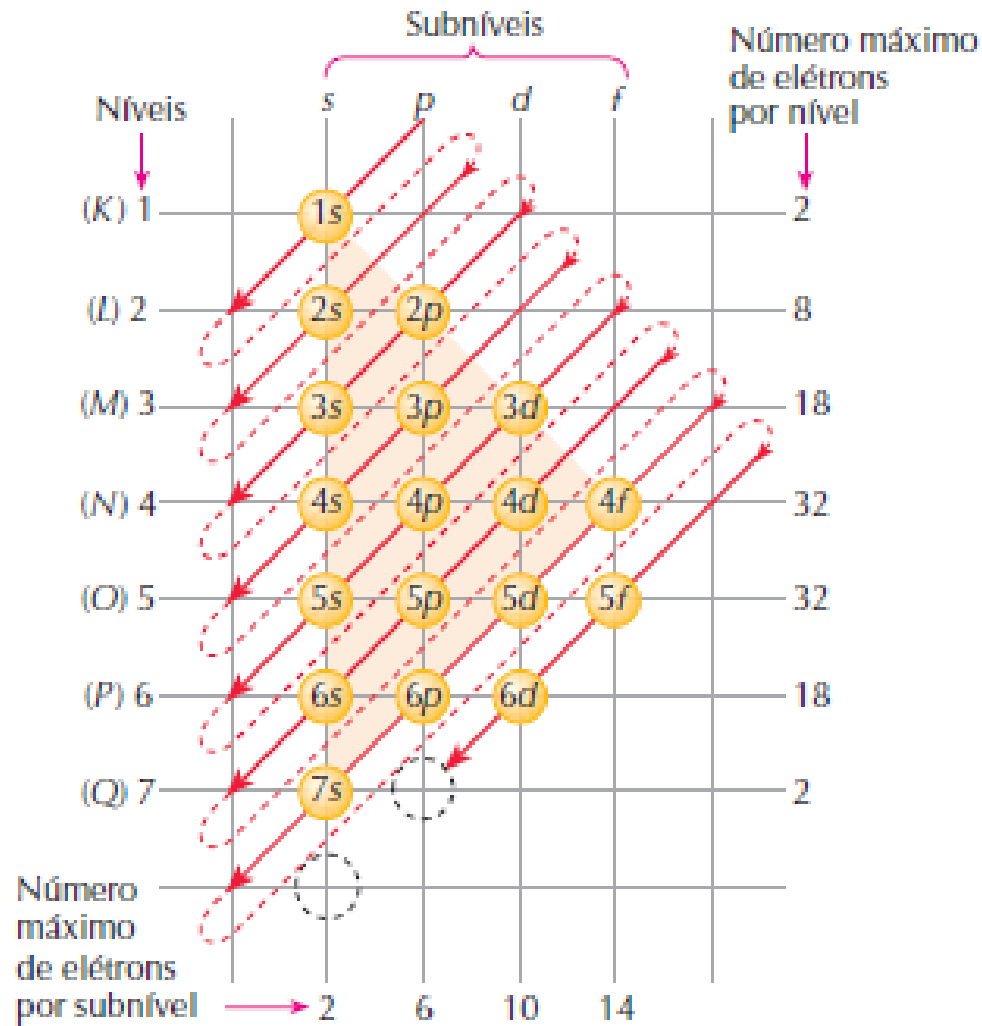
	s ($l=0$)	p ($l=1$)	d ($l=2$)	f ($l=3$)
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	 $m=-3$  $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$  $m=3$
$n=5$	 $m=0$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

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**.

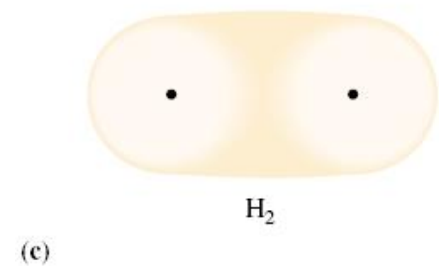
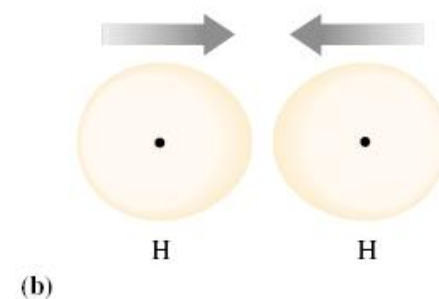
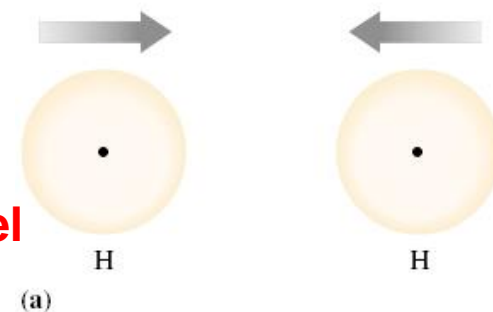
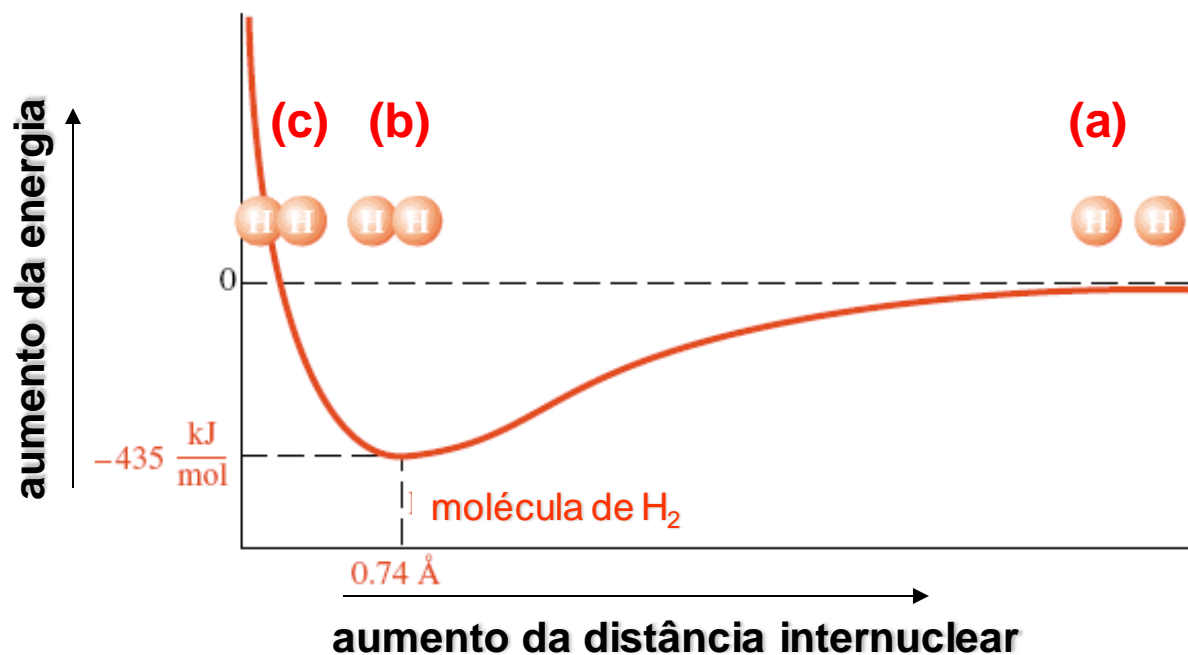
Ligações covalentes

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:

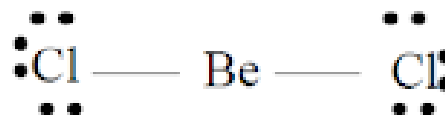
Be: 2

2Cl: $2(7) = 14$

Total: 16 e^- de valência

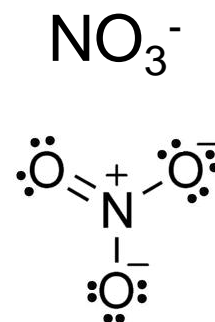
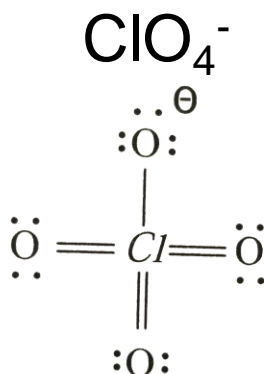
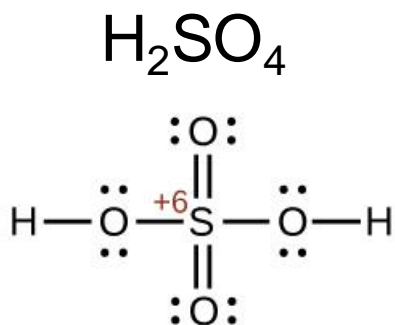
átomo central: Be

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

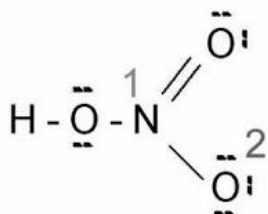
NeNC: número de elétrons não-compartilhados (não ligantes)

- 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

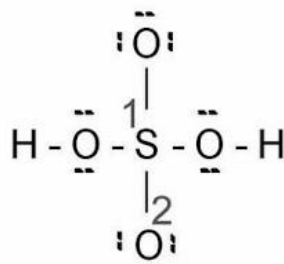
Exemplos de cálculo da carga formal:

Molécula de HNO₃



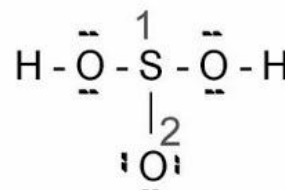
$$\begin{aligned} 1) & 5 - (0 + 4) = +1 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

Molécula de H₂SO₄



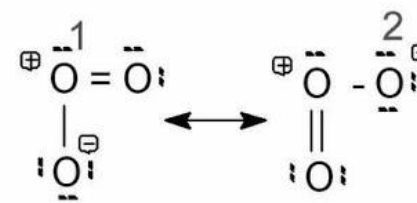
$$\begin{aligned} 1) & 6 - (0 + 4) = +2 \\ 2) & 6 - (6 + 1) = -1 \end{aligned}$$

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

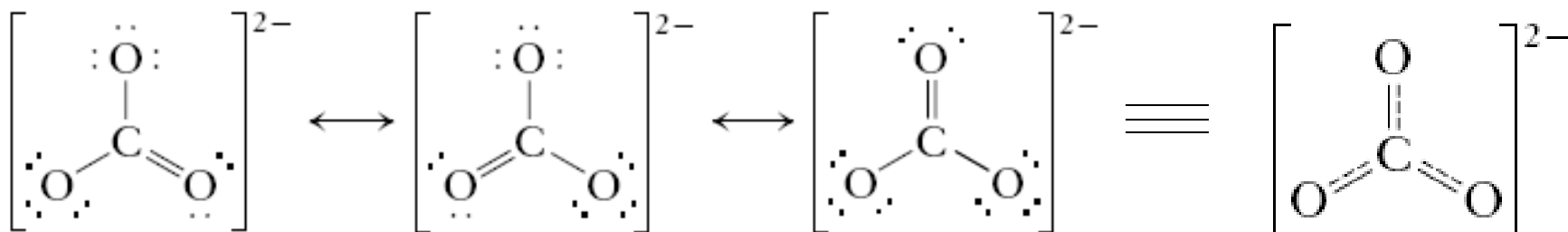
Tarefa de fixação

- 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

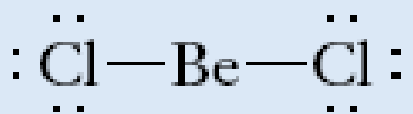
Comprimento de ligação C-O no íon carbonato: 1,29 Angstrons

Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

- Compostos covalentes de Be

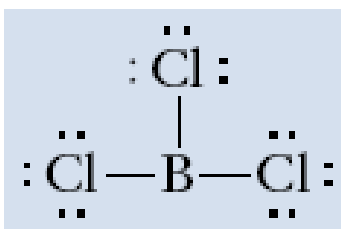
O berílio faz duas ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 4.

Ex.: Estrutura de Lewis para BeCl_2



- Compostos covalentes do grupo IIIA

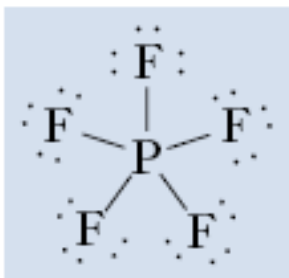
A maior parte dos átomos da família IIIA (especialmente o boro) fazem 3 ligações covalentes, desta forma considera-se o número de elétrons para se atingir a estabilidade igual a 6. Ex.: BCl_3



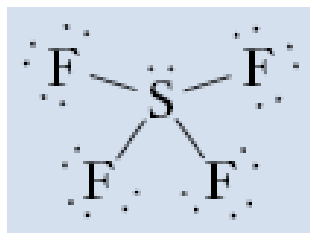
Ligações covalentes – Algumas exceções ao octeto

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

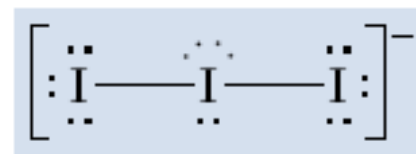
Ex.: PF₅



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

