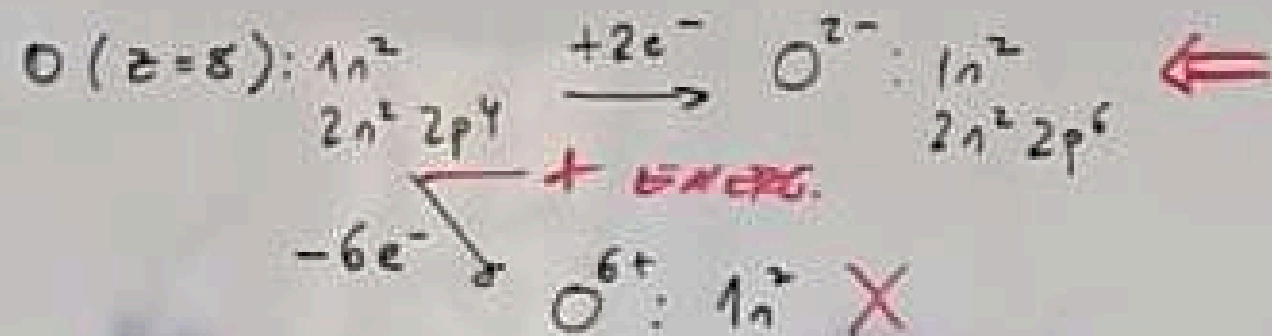


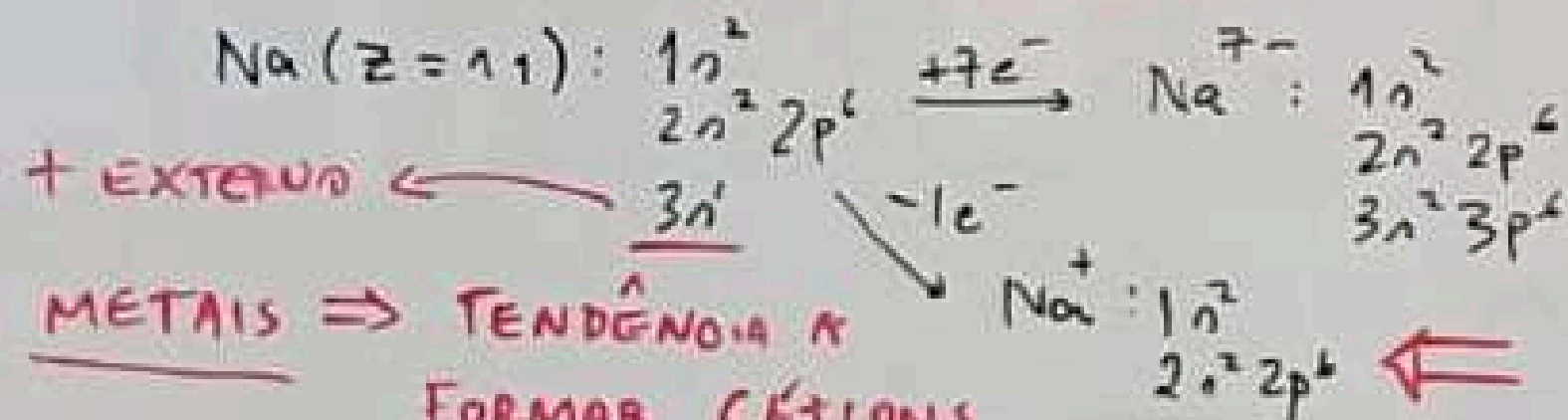
CAP. 9  
SECT. 2-7.5

## CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE ÍONS



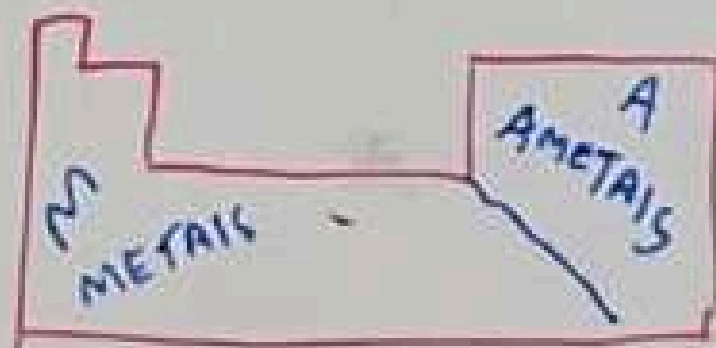
AMETAIS  $\Rightarrow$  TENDÊNCIA A FORMAR ÂNIONS

(ELÉTRONS ACRESCENTADOS NO  
SUBNÍVEL + ENERGÉTICO)

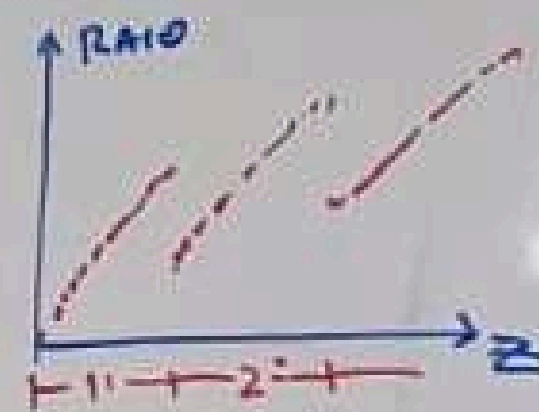
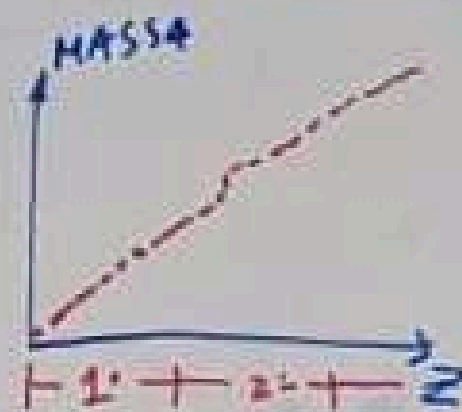


METAIS  $\Rightarrow$  TENDÊNCIA A  
FORMAR CÁTIONS

(ELÉTRONS RETIRADOS DO SUBNÍVEL + EXTENSO)



## \* PROPRIEDADES PERIÓDICAS

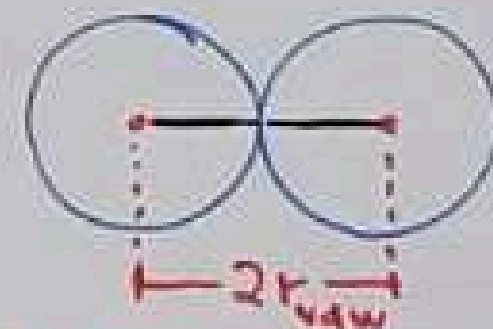


- RAIO ATÔMICO: OBTIDO A PARTIR DA DISTÂNCIA ENTRE NÚCLEOS, A DEPENDER DO TIPO DE LIGAÇÃO ENTRE OS ÁTOMOS

— ÁTOMOS NEUTROS

$\leadsto$  NÃO LIGADOS

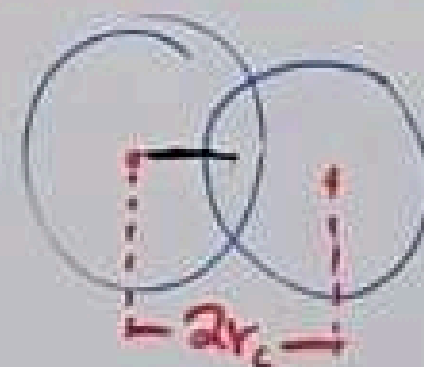
GASES  
NOBRES



RAIO DE VAN DER WAAL

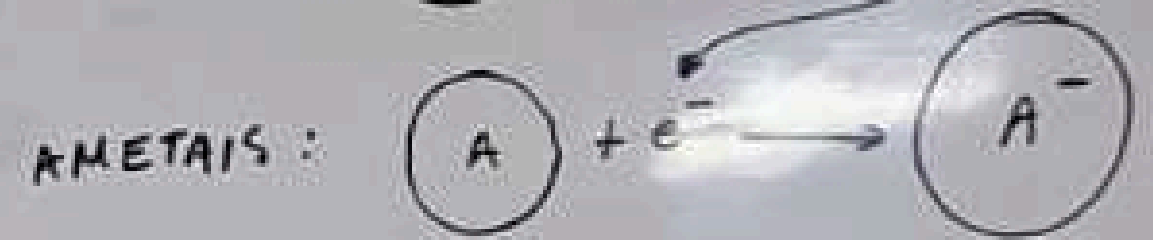
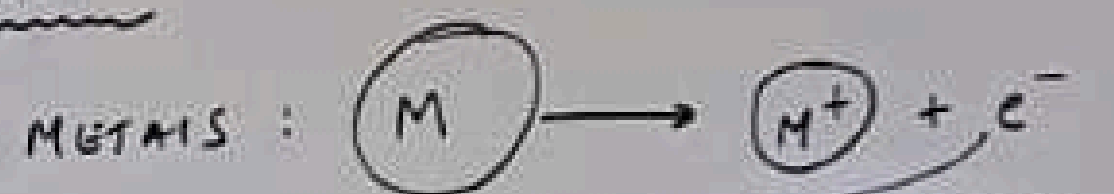
$\leadsto$  LIGADOS

AMETAIS

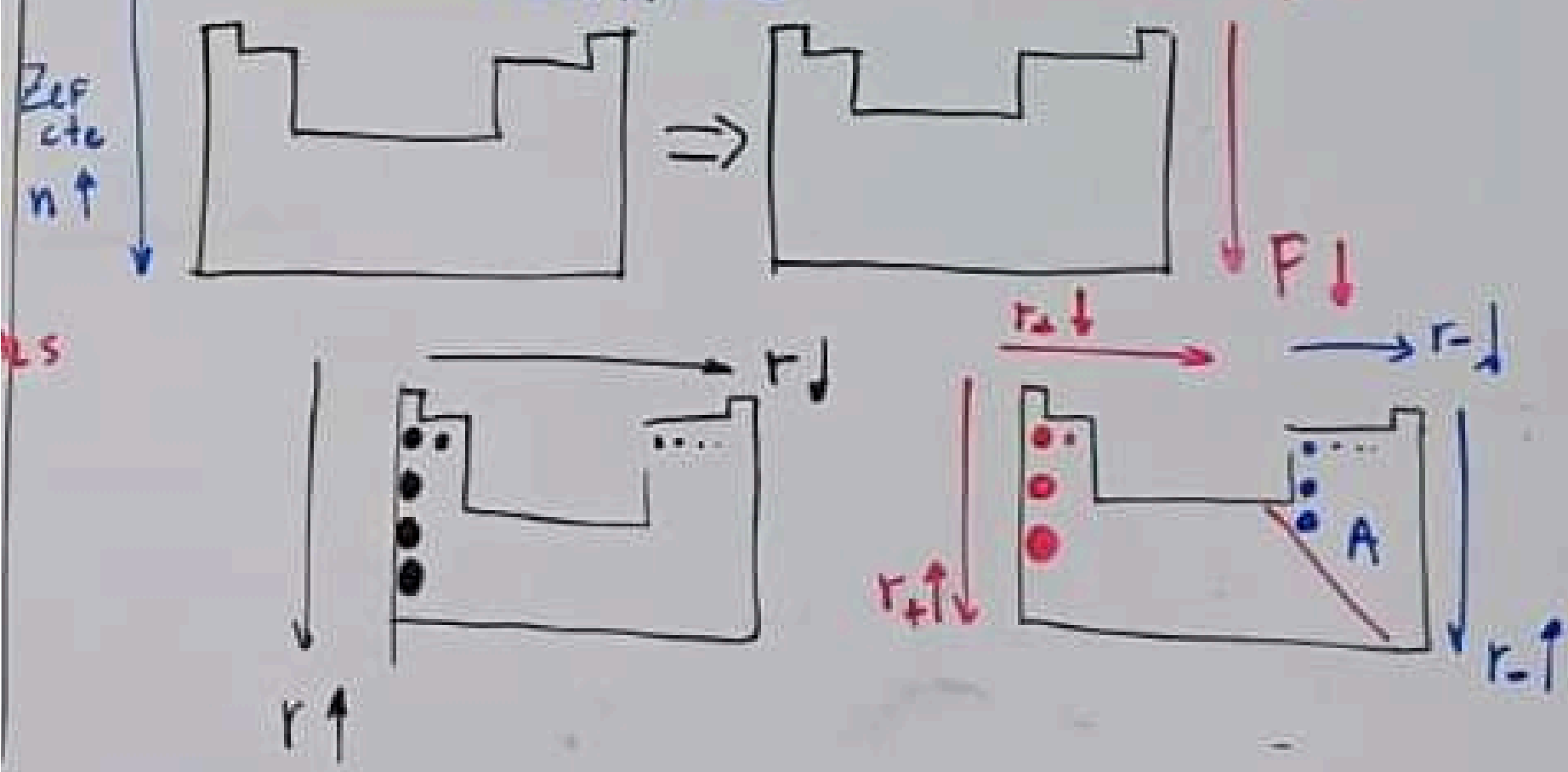


RAIO COVALENTE

ÍONS



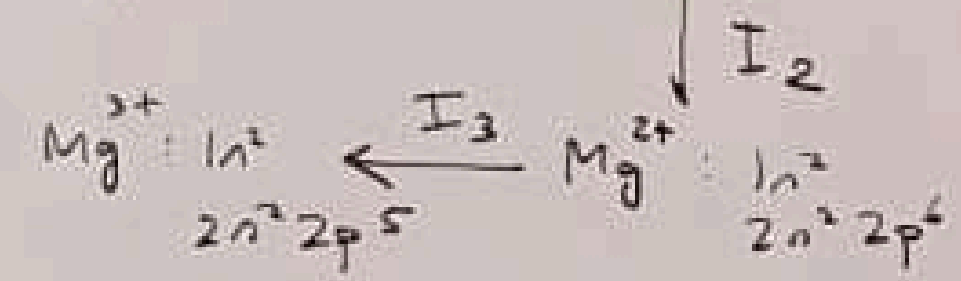
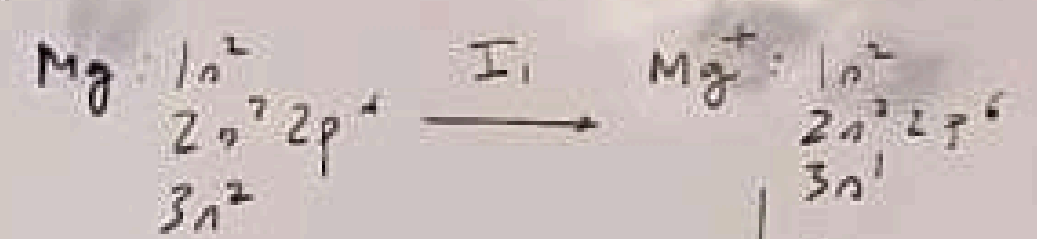
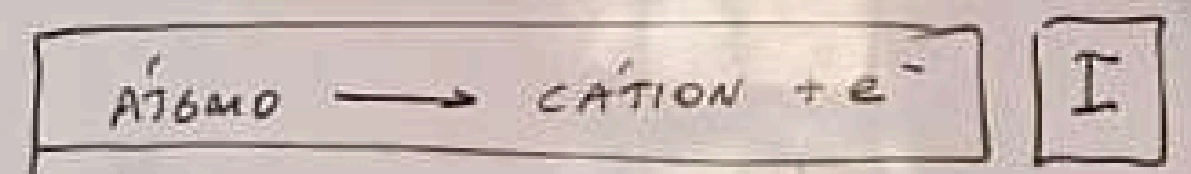
PERIODICIDADE  
→ Z, F, n, etc



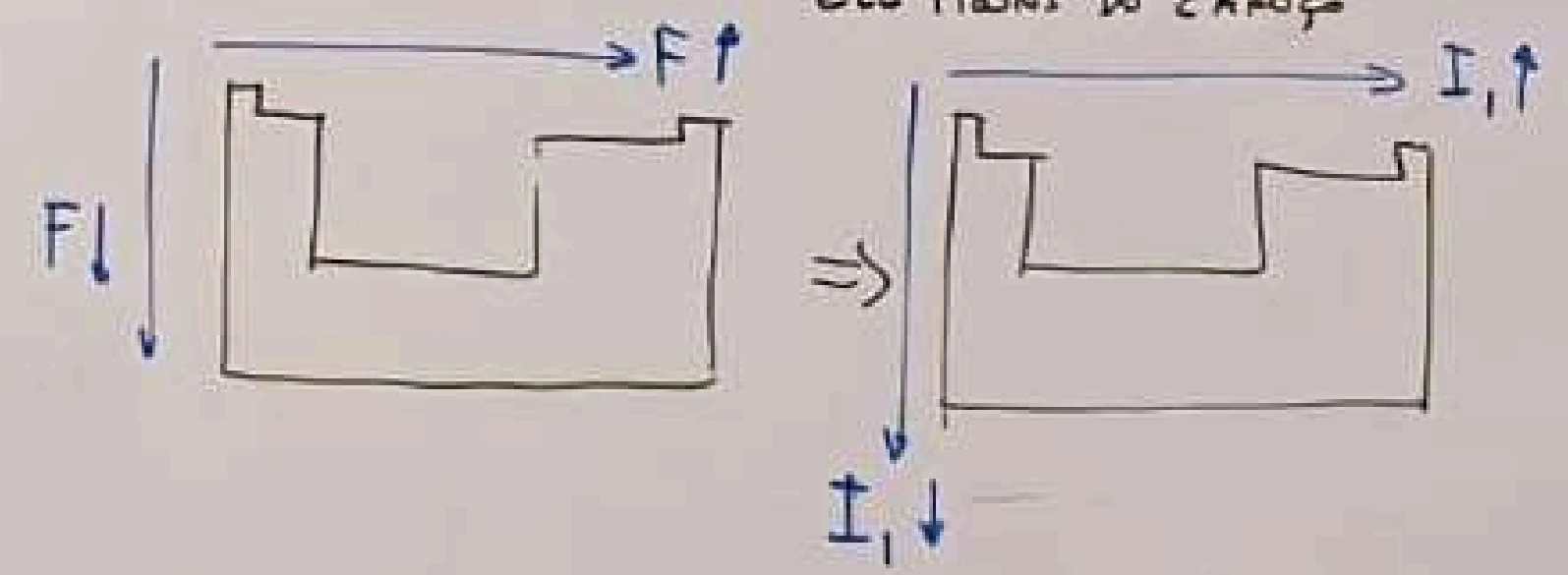
CAP. 7  
SELT. 2-7.5

ENERGIA DE IONIZAÇÃO  
- ENERGIA P/ RETIRAR  $e^-$  DO ÁTOMO NA FASE GASOSA

POSITIVA  
FORMAÇÃO  
DE CÁTIONS

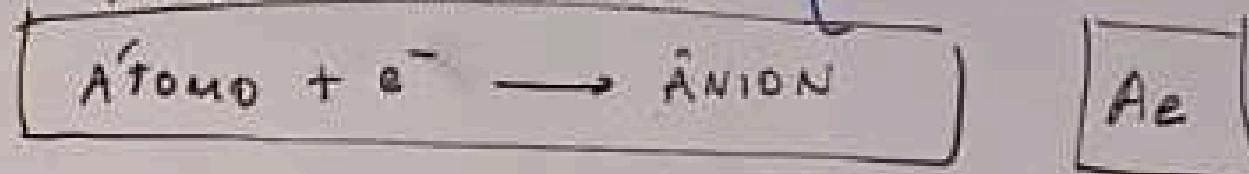


$I_3 > I_2 > I_1$   
↓  
ELÉTRONS DO CAROÇO



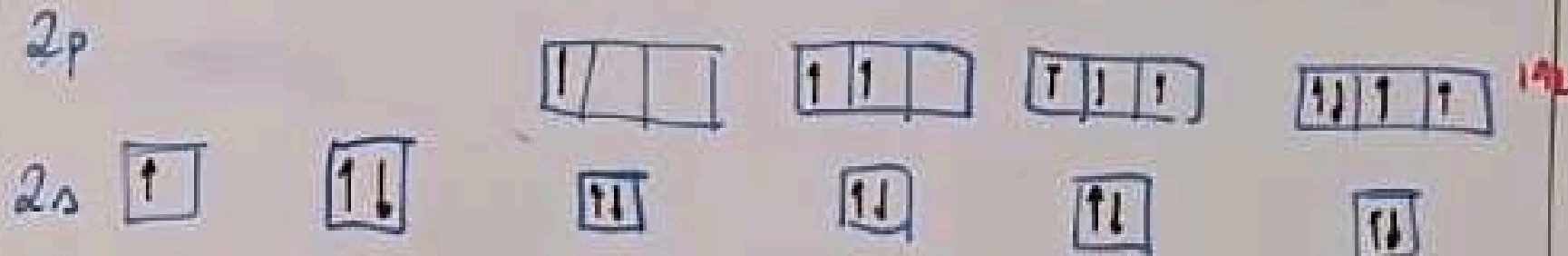
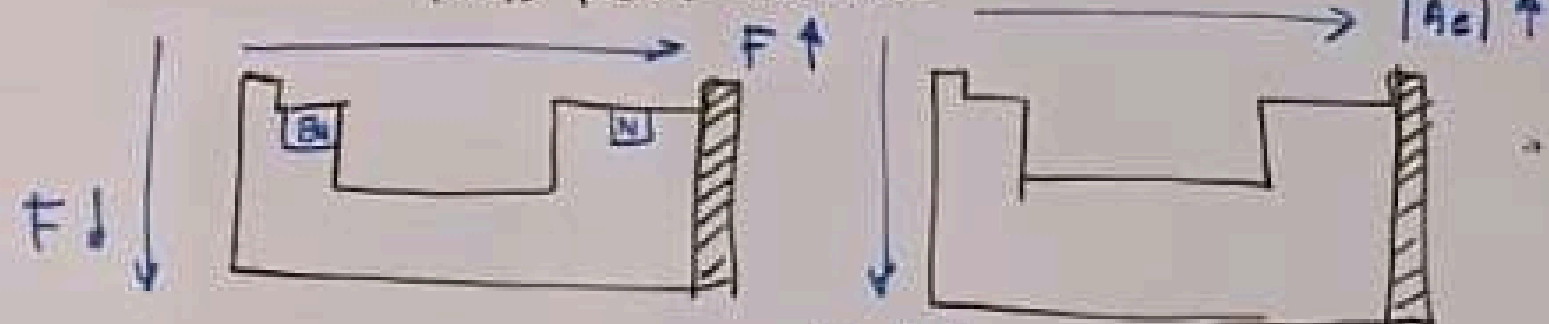
É PRECISO MAIS ENERGIA P/ RETIRAR  $e^-$  DE AMETAIS QUE DE METAIS: METAIS = I, BAIXO  
AMETAIS = I, ALTO

- AFINIDADE ELETRÔNICA {  
- ENERGIA ASSOCIADA À ADIÇÃO DE  $1e^-$  A UM ÁTOMO  
NEGATIVA (GERALMENTE)  
FORMAÇÃO DE ÂNIÔNS



- NORMALMENTE  $A_e < 0$  (PROCESSO ESPONTÂNEO)

MAS NEM SEMPRE



CAP. 8  
SEC. 8.1

## CONCEITOS BÁSICOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

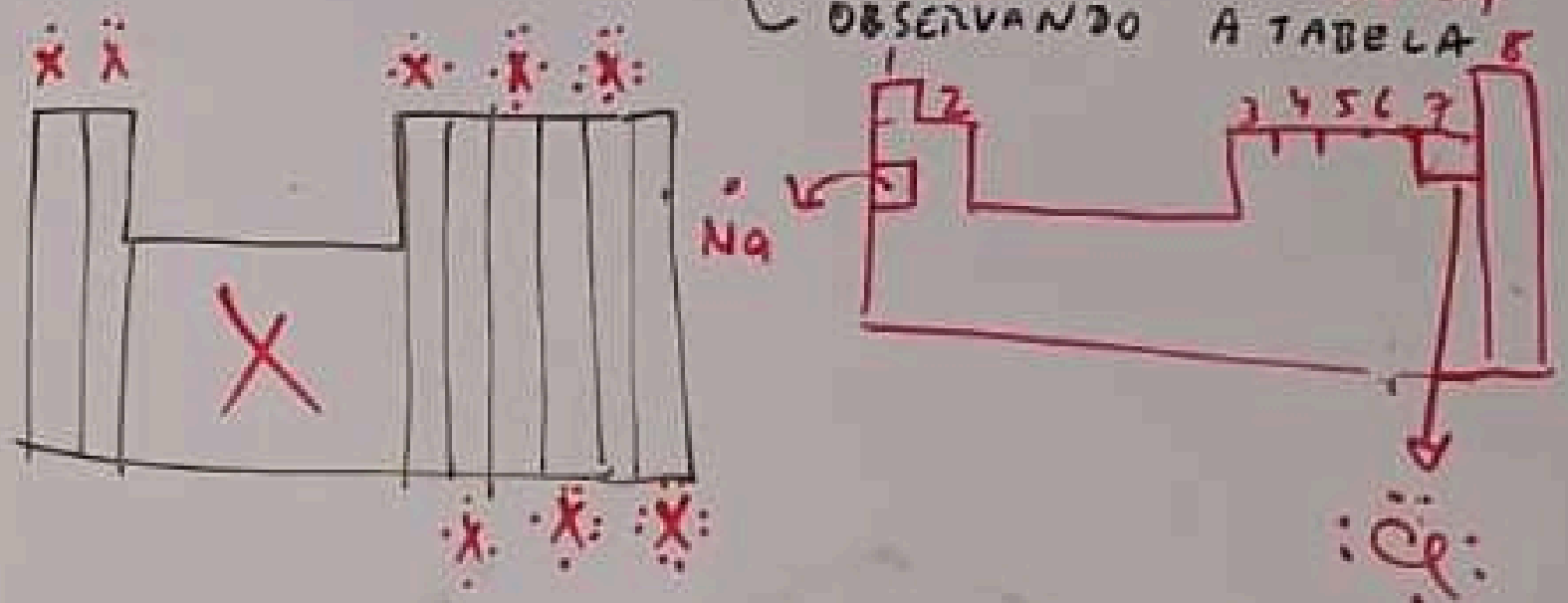
- ÁTOMOS SE LIGAM PARA OBTER CONFIGURAÇÃO DE GÁS NOBRE  $\rightarrow 8e^-$  NA CAMADA + EXTERNA
- VEREMOS LIGAÇÕES QUÍMICAS ENTRE METAIS DO BLOCO S E AMETAIS DO BLOCO P REGRAS DO OCTETO

• NOTAÇÃO DE LEWIS:  $\cdot \ddot{X} \cdot$  → ELÉTRONS DE VALENCIA  
→ SÍMBOLO



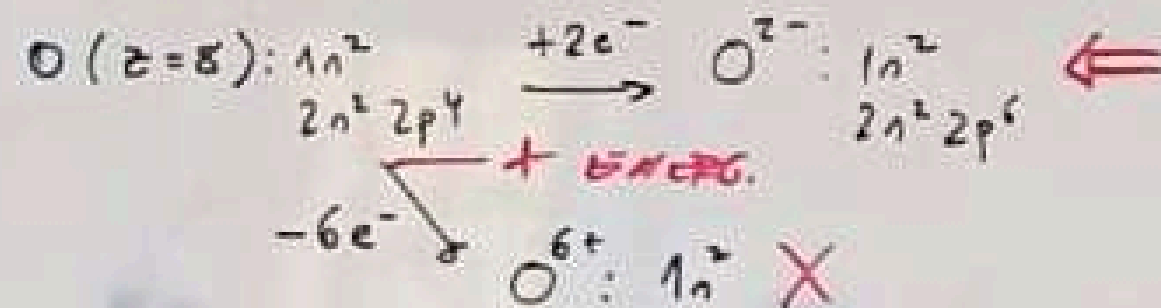
NÚMERO DE ELÉTRONS DE VALENCIA

FAZENDO CONFIG. ELETRÔNICAS  
Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  Cl:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$   
OBSERVANDO A TABELA 8



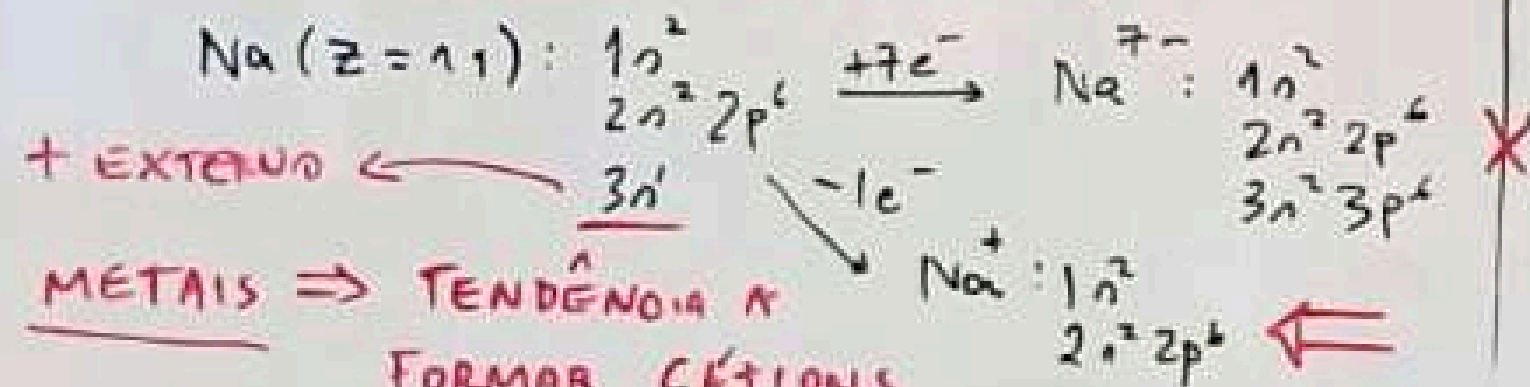
CAP. 7  
SE 7.2-7.5

## → CONFIGURAÇÕES ELETRÔNICAS DE ÍONS



AMETAIS ⇒ TENDÊNCIA A FORMAR ÂNIONS

(ELÉTRONS ACRESCENTADOS NO SUBNÍVEL + ENERGÉTICO)



METAIS ⇒ TENDÊNCIA A FORMAR CÁTIONS

(ELÉTRONS RETIRADOS DO SUBNÍVEL + EXTERNO)

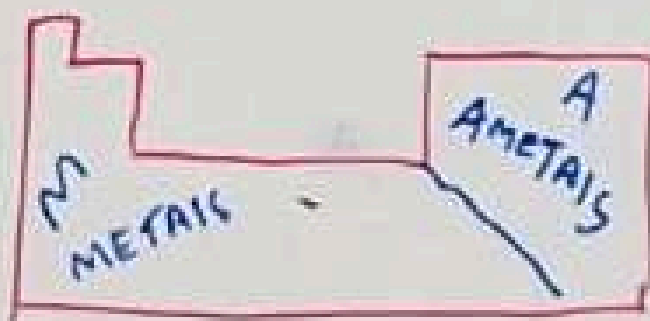


TABLE 1.4 Characteristics of Metals and Nonmetals

### Metals

#### Physical properties

good conductors of electricity

malleable

ductile

lustrous

typically: solid; high melting point;

good conductors of heat

#### Chemical properties

react with acids

form basic oxides (which react with acids)

form cations

form ionic halides

### Nonmetals

poor conductors of electricity

not malleable

not ductile

not lustrous

typically: solid, liquid, or gas; low melting point; poor conductors of heat

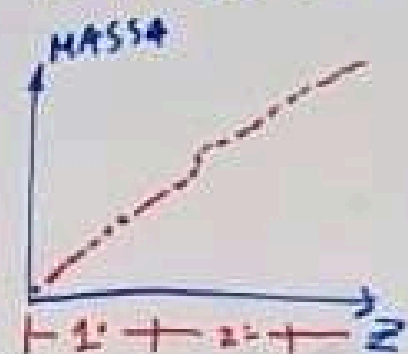
do not react with acids

form acidic oxides (which react with bases)

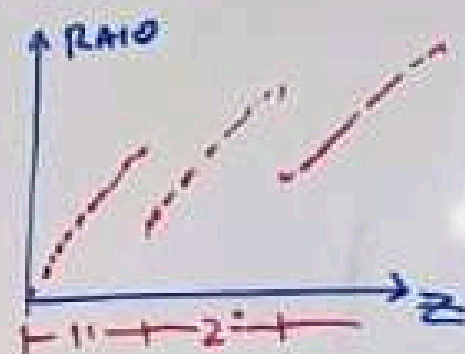
form anions

form covalent halides

# \* PROPRIEDADES PERIÓDICAS



NÃO PERIÓDICA  
(INDEPENDENTE DO PERÍODO)



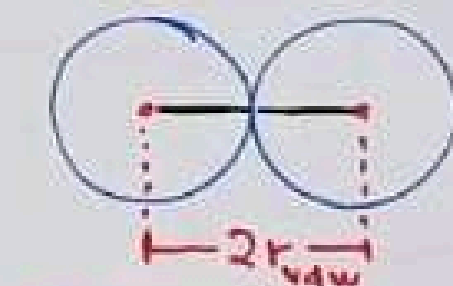
PERIÓDICA  
(DEPENDENTE DO PERÍODO)

- RAIO ATÔMICO: OBTIDO A PARTIR DA DISTÂNCIA ENTRE NÚCLEOS, A DEPENDER DO TIPO DE LIGAÇÃO ENTRE OS ÁTOMOS

## — ÁTOMOS NEUTROS

~ NÃO LIGADOS

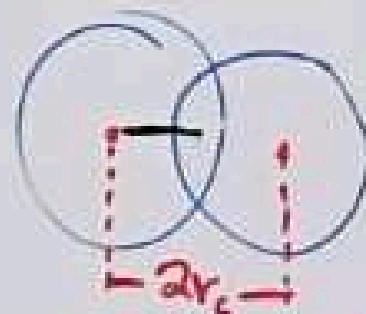
GASES  
NOBRES



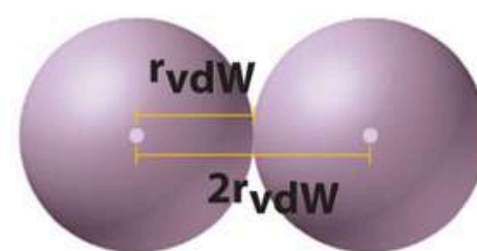
RAIO DE VAN DER WAAL

~ LIGADOS

AMETAIS

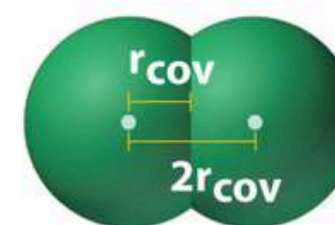


RAIO COVALENTE



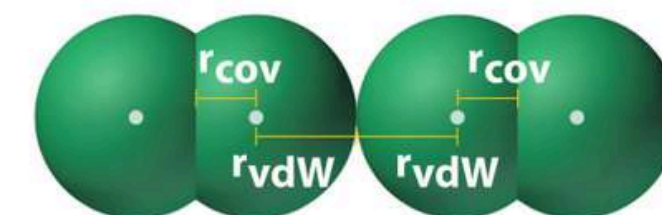
2Ar(s)

(c) van der Waals radius,  $r_{vdW}$



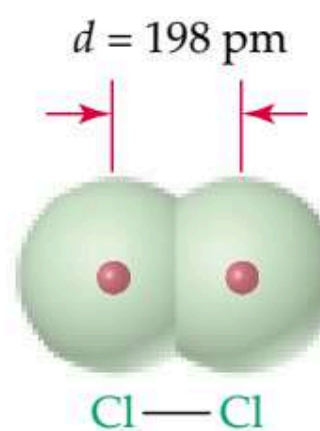
Cl<sub>2</sub>(g)

(a) Covalent radius,  $r_{cov}$

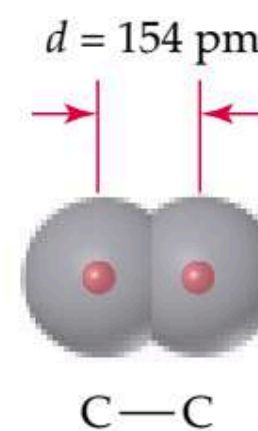


2Cl<sub>2</sub>(s)

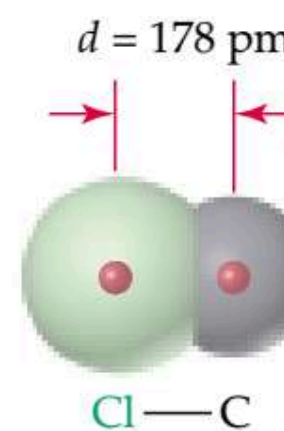
(d) Covalent vs. vdW radii



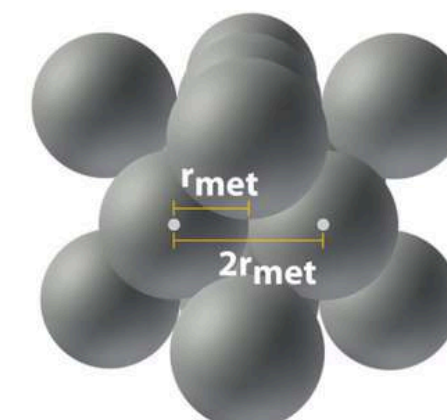
$$\frac{d}{2} = 99 \text{ pm}$$



$$\frac{d}{2} = 77 \text{ pm}$$



$$(99 \text{ pm} + 77 \text{ pm} = 176 \text{ pm}) \text{ predicted}$$



Al(s)

(b) Metallic radius,  $r_{met}$



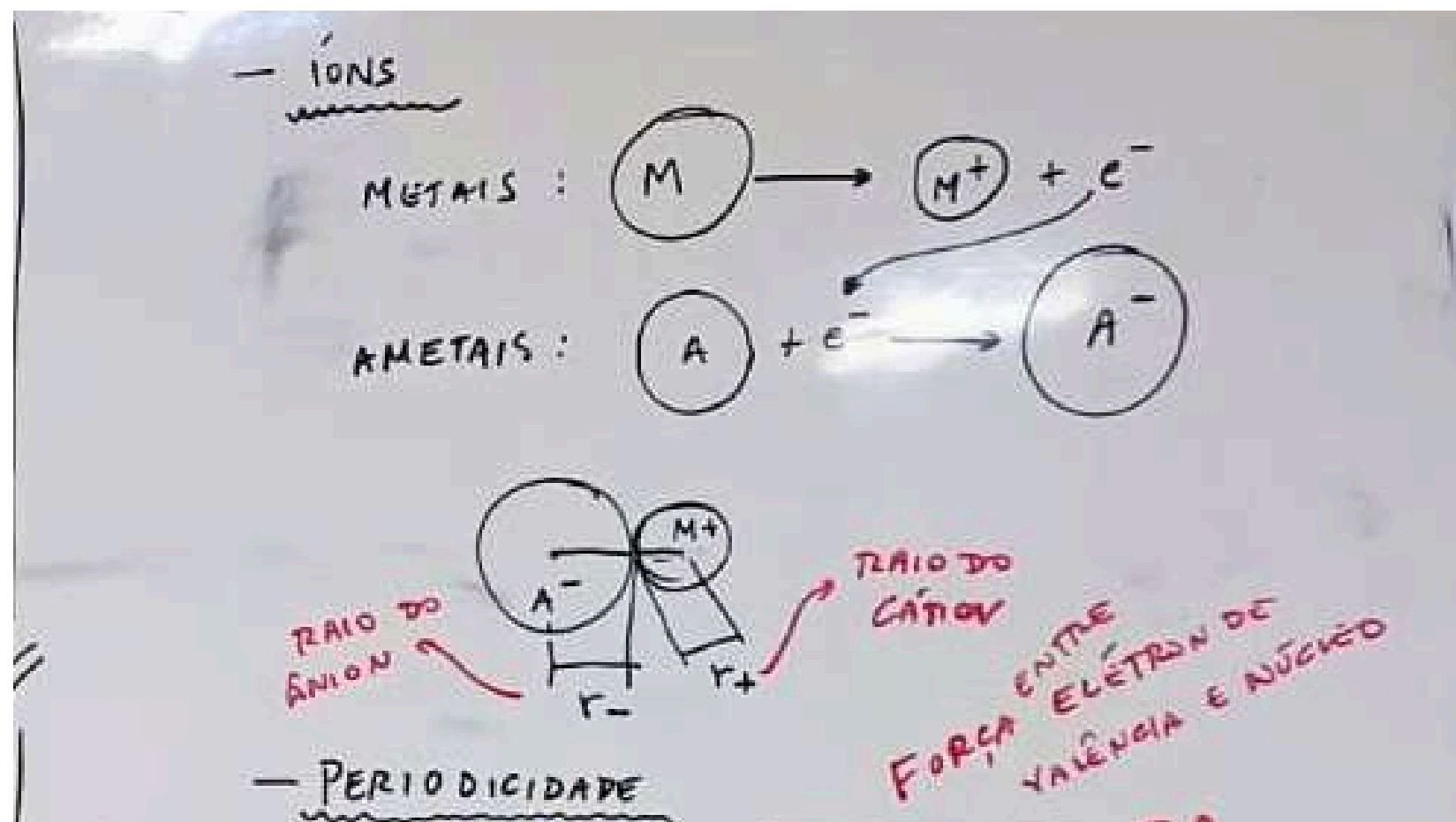
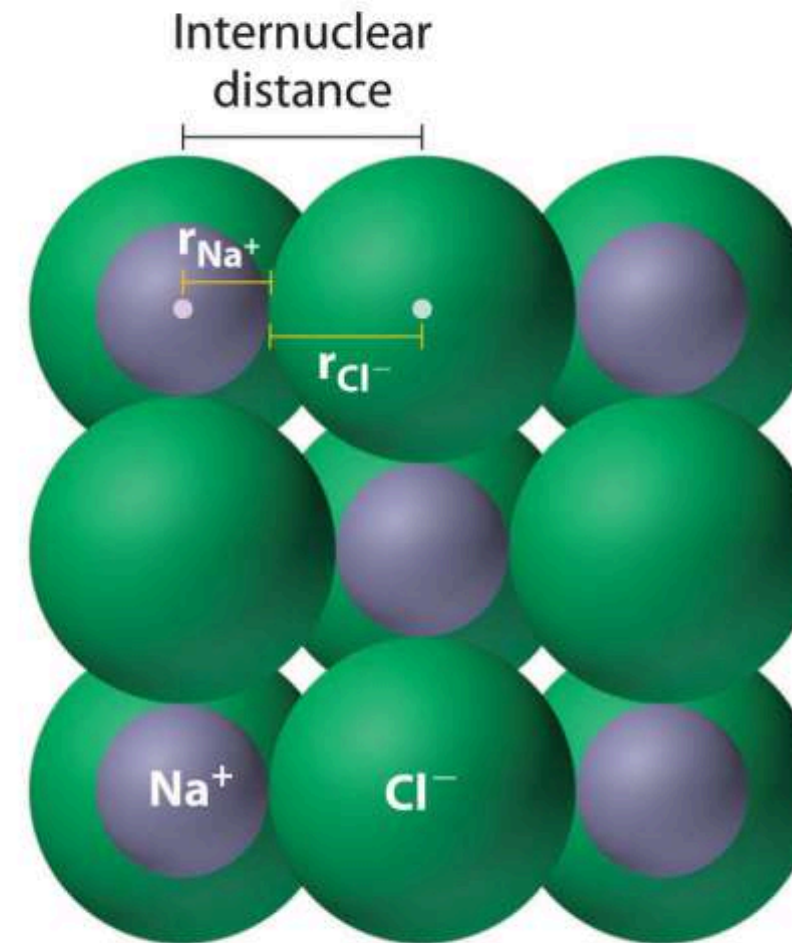
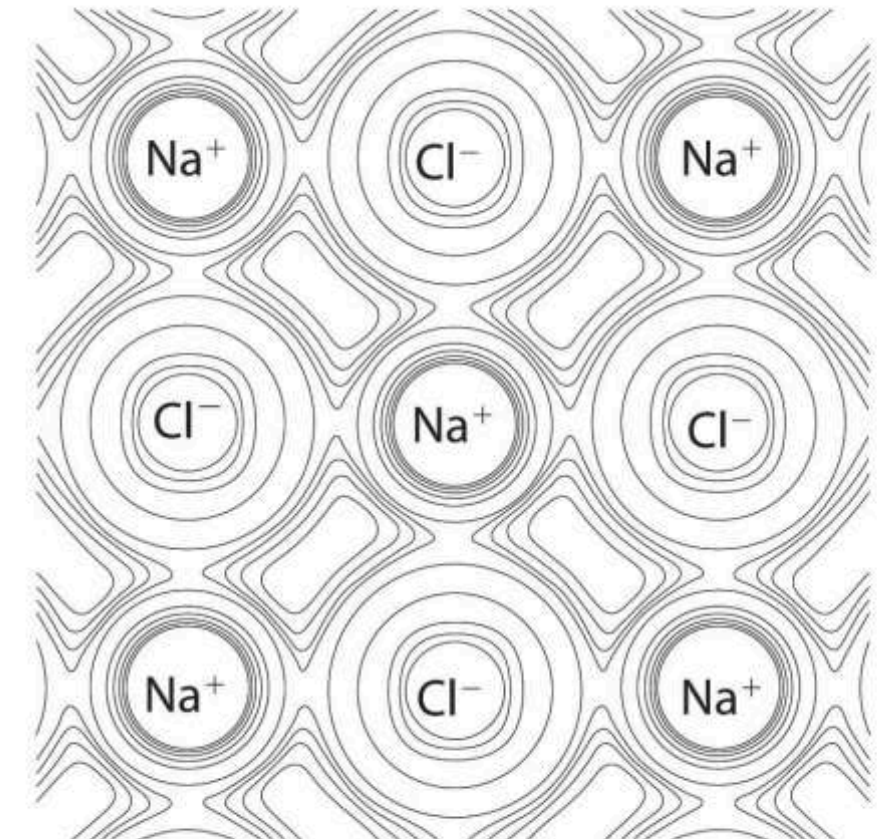


Figure 7.8 Definition of Ionic Radius

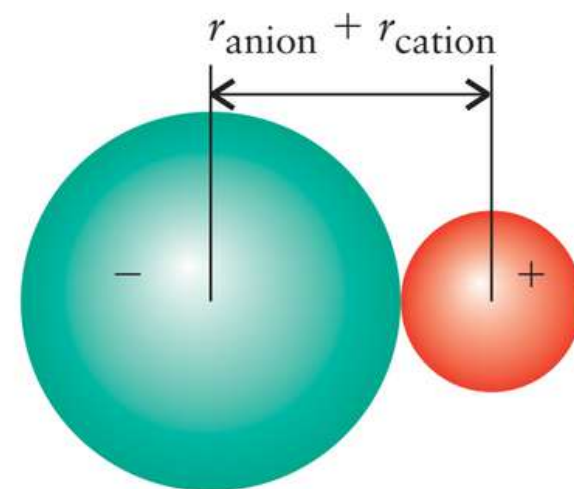
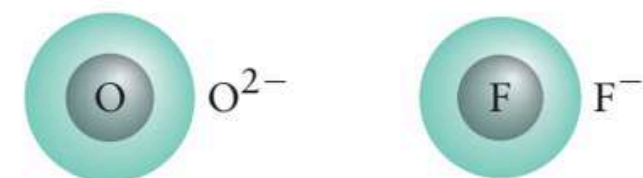
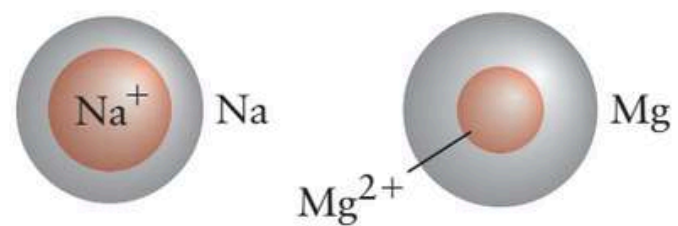
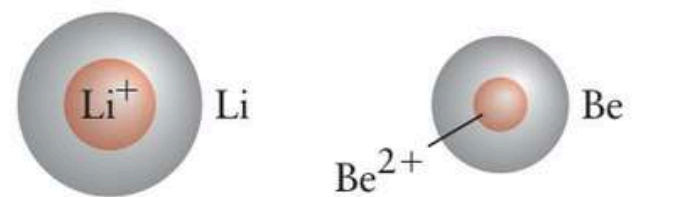


(a)



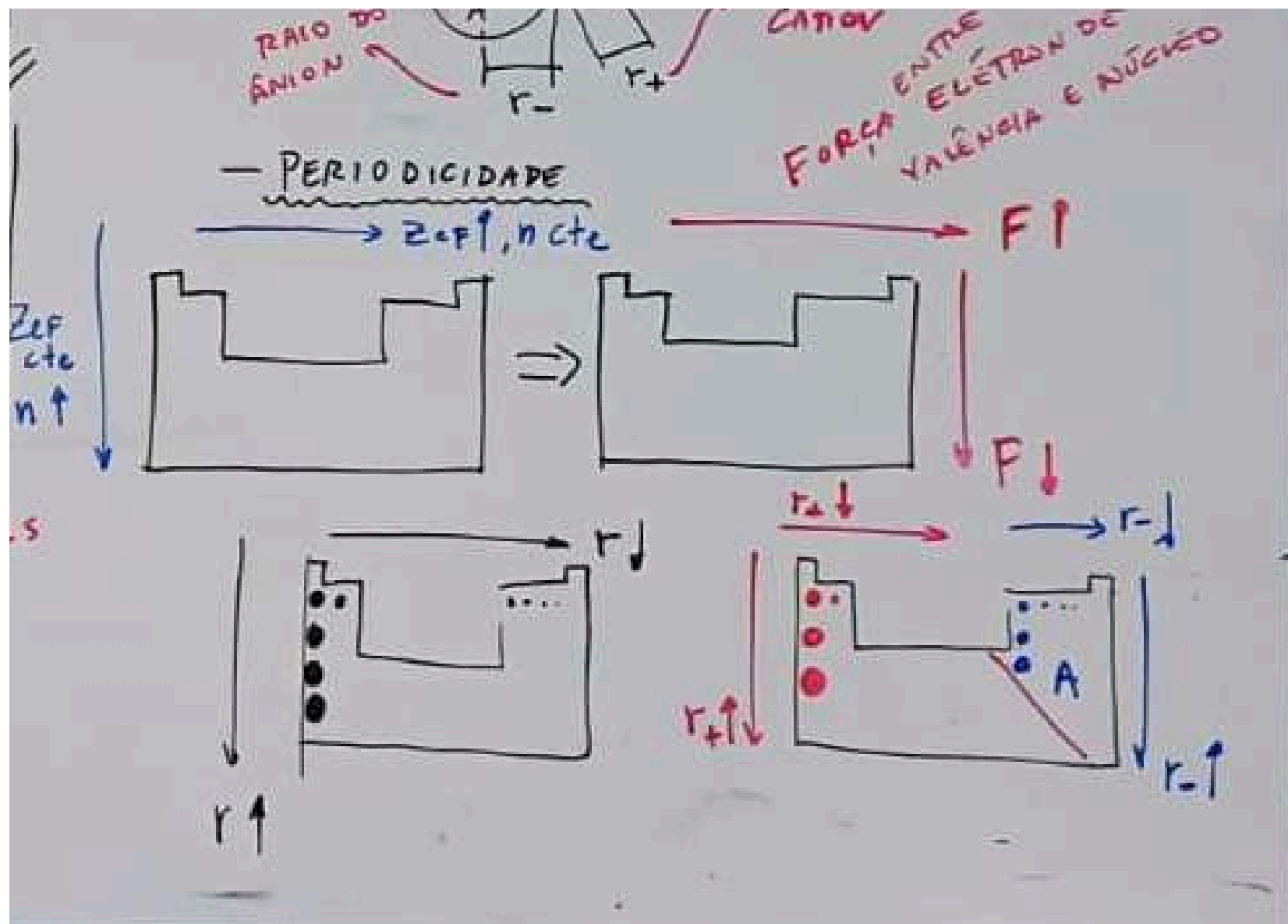
(b)

(a) The internuclear distance is apportioned between adjacent cations and anions in the ionic structure, as shown here for  $Na^+$  and  $Cl^-$  in sodium chloride. (b) This depiction of electron density contours for a single plane of atoms in the NaCl structure shows how the lines connect points of equal electron density. Note the relative sizes of the electron density contour lines around  $Cl^-$  and  $Na^+$ .



12 Ionic radius



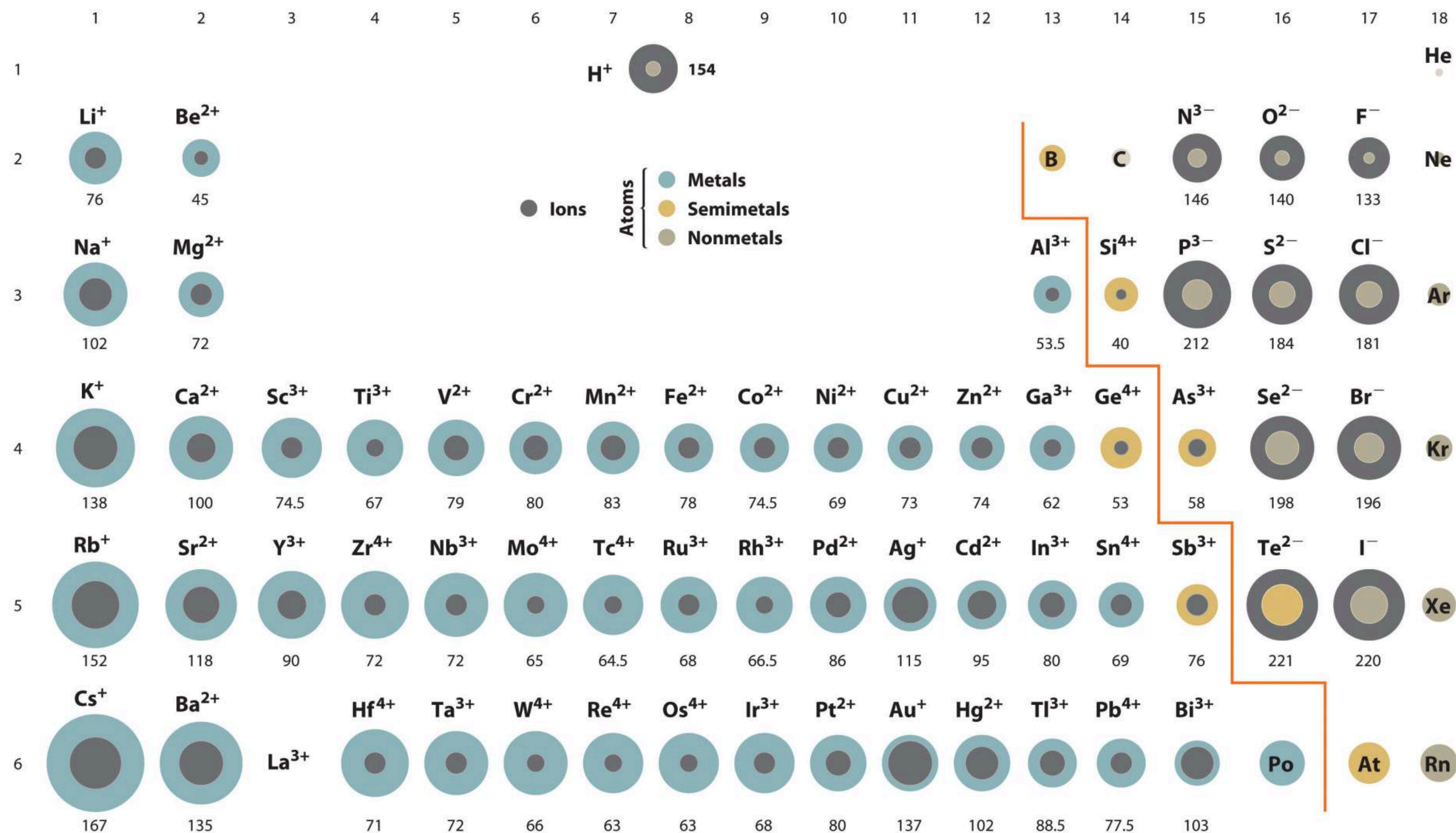


	1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
2	Li 152	Be 113	B 88	C 77	N 75	O 66	F 58	Ne
3	Na 154	Mg 160	Al 143	Si 117	P 110	S 104	Cl 99	Ar
4	K 227	Ca 197	Ga 122	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114	Kr
5	Rb 248	Sr 215	In 163	Sn 141	Sb 141	Te 137	I 133	Xe
6	Cs 265	Ba 217	Tl 170	Pb 175	Bi 155	Po 167	At	Rn

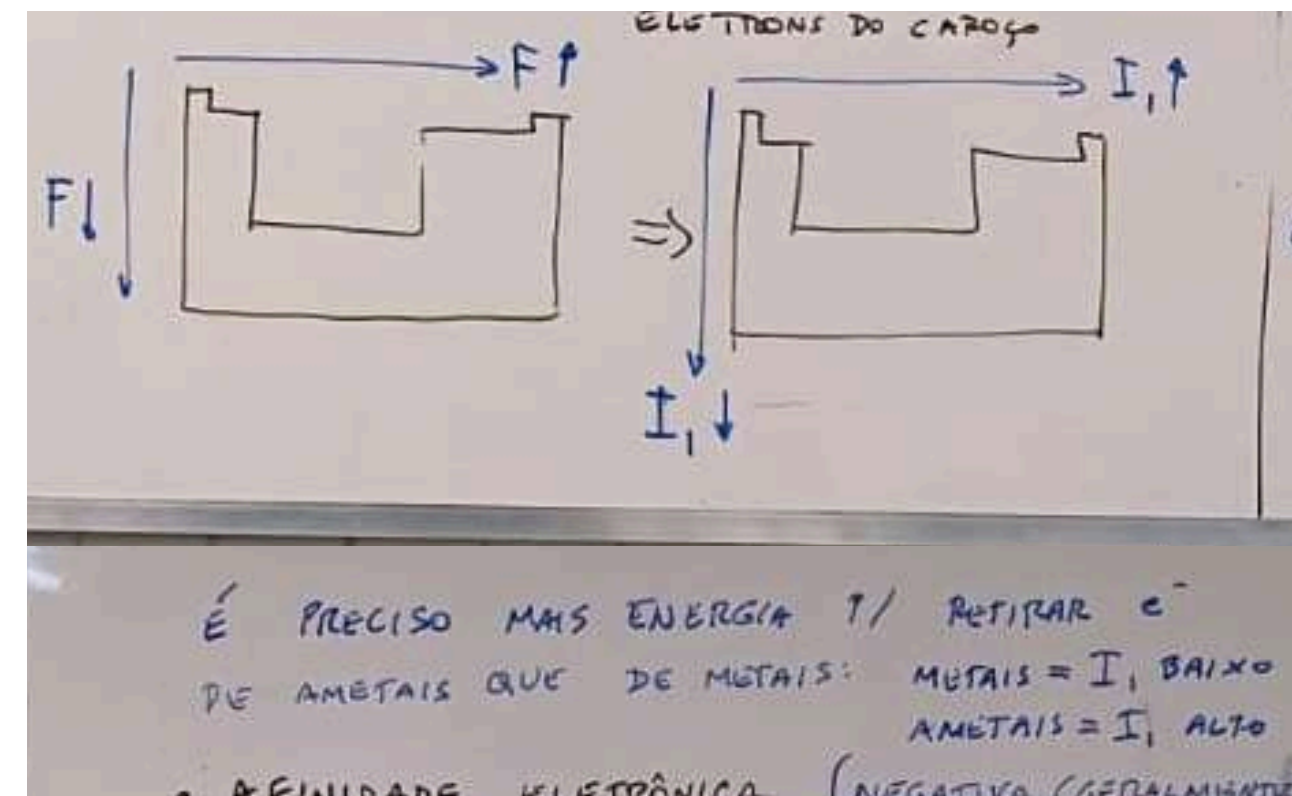
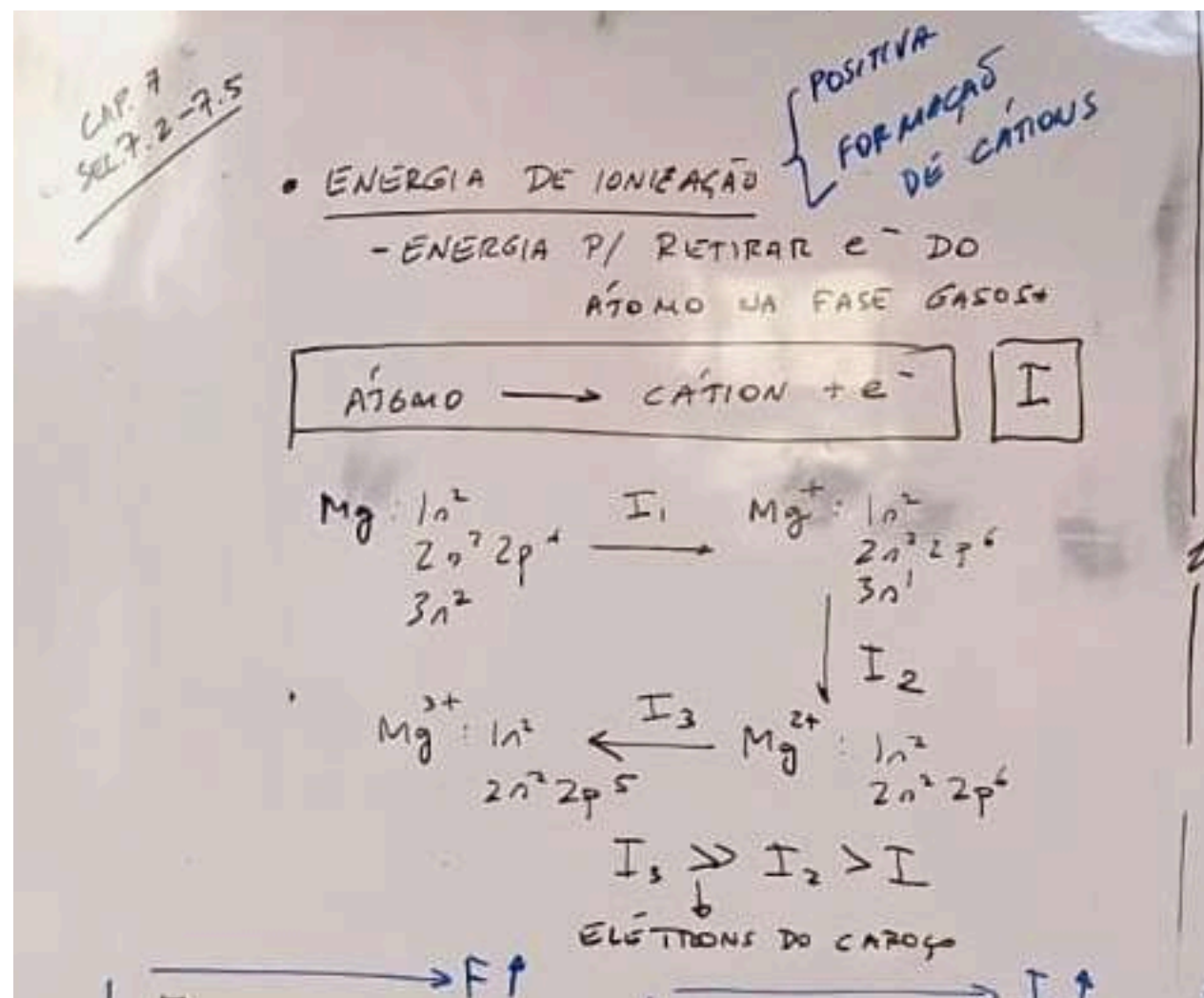
	1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
2	Li <sup>+</sup> 76	Be <sup>2+</sup> 45	B <sup>3+</sup> 23	C	N <sup>3-</sup> 171	O <sup>2-</sup> 140	F <sup>-</sup> 133	Ne
3	Na <sup>+</sup> 102	Mg <sup>2+</sup> 72	Al <sup>3+</sup> 54	Si	P <sup>3-</sup> 212	S <sup>2-</sup> 184	Cl <sup>-</sup> 181	Ar
4	K <sup>+</sup> 138	Ca <sup>2+</sup> 100	Ga <sup>3+</sup> 62	Ge	As <sup>3-</sup> 222	Se <sup>2-</sup> 198	Br <sup>-</sup> 196	Kr
5	Rb <sup>+</sup> 152	Sr <sup>2+</sup> 118	In <sup>3+</sup> 80	Sn	Sb	Te <sup>2-</sup> 221	I <sup>-</sup> 220	Xe
6	Cs <sup>+</sup> 167	Ba <sup>2+</sup> 135	Tl <sup>3+</sup> 89	Pb	Bi	Po	At	Rn



Figure 7.9 Ionic Radii (in Picometers) of the Most Common Oxidation States of the s-, p-, and d-Block Elements







**TABLE 6-1** First Ionization Energies (kJ/mol of atoms) of Some Elements

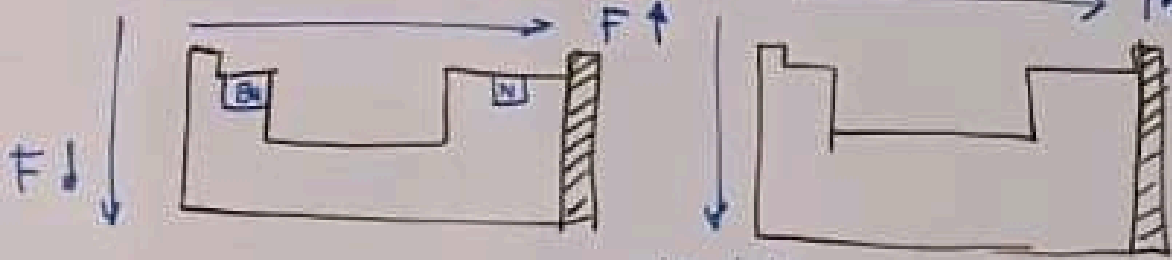
H 1312																He 2372	
Li 520	Be 899											B 801	C 1086	N 1402	O 1314	F 1681	Ne 2081
Na 496	Mg 738											Al 578	Si 786	P 1012	S 1000	Cl 1251	Ar 1521
K 419	Ca 599	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 652	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 757	Cu 745	Zn 906	Ga 579	Ge 762	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1351
Rb 403	Sr 550	Y 617	Zr 661	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 558	Sn 709	Sb 834	Te 869	I 1008	Xe 1170
Cs 377	Ba 503	La 538	Hf 681	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 589	Pb 715	Bi 703	Po 812	At 890	Rn 1037

**• AFINIDADE ELETRÔNICA** { NEGATIVA (GERALMENTE)  
- ENERGIA ASSOCIADA À ADIÇÃO DE 1e<sup>-</sup> A UM ÁTOMO  
FORMAÇÃO DE ÂNIONS

$$\text{ÁTOMO} + e^{-} \longrightarrow \text{ÂNION}$$

$$Ae$$

- NORMALMENTE  $Ae < 0$  (PROCESSO ESPONTÂNEO)  
MAS NEM SEMPRE



$$Li \xrightarrow{\ominus} Be \xrightarrow{\oplus} B \xrightarrow{\ominus} C \xrightarrow{\ominus} N \xrightarrow{\oplus} O$$

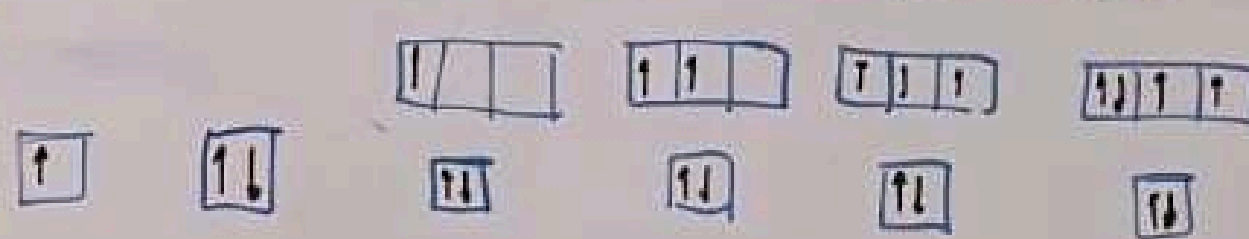
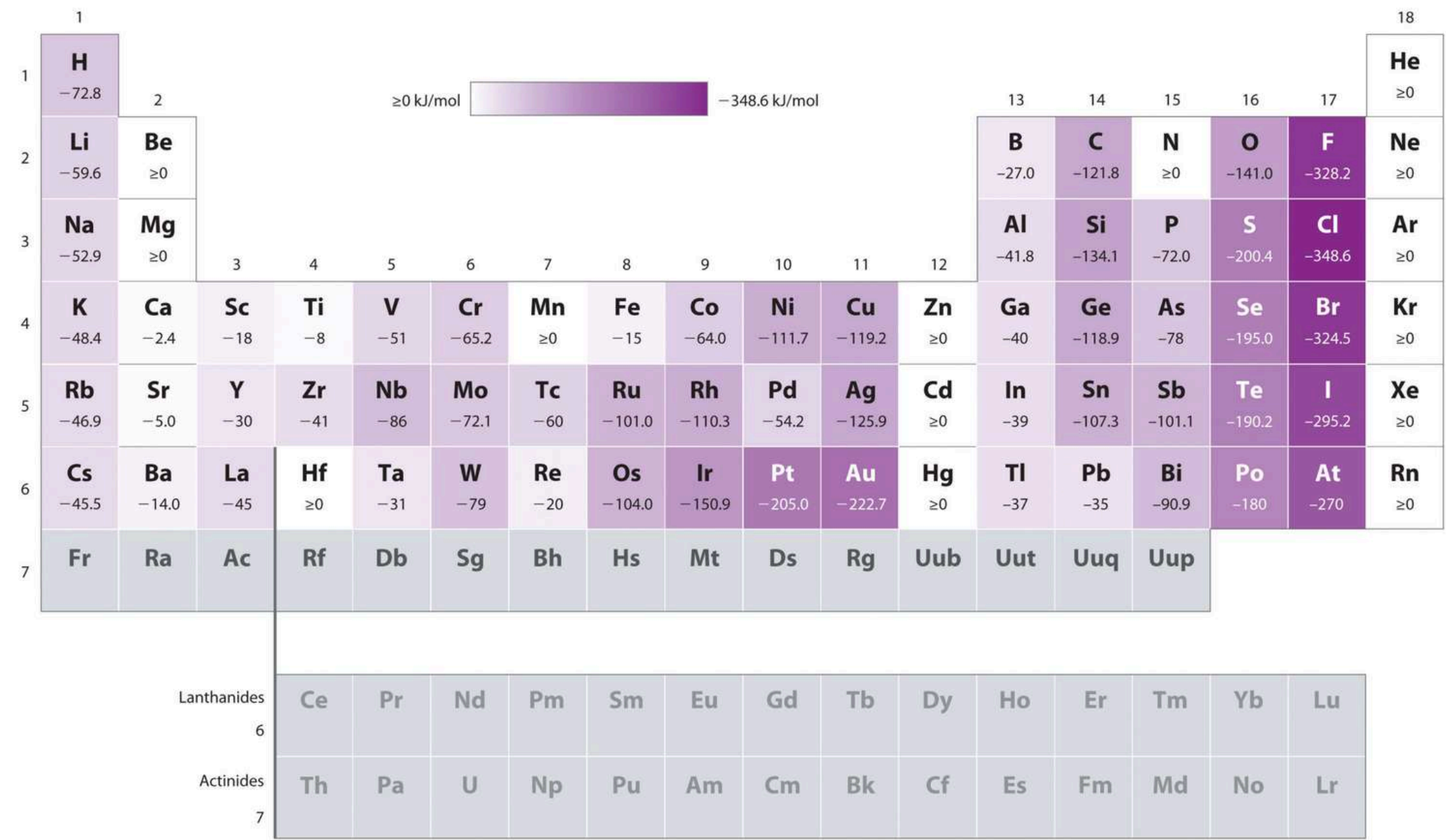


Figure 7.13 Electron Affinities (in kJ/mol) of the s-, p-, and d-Block Elements



CAP. 8  
SEC. 8.1

# CONCEITOS BÁSICOS DE LIGAÇÃO QUÍMICA

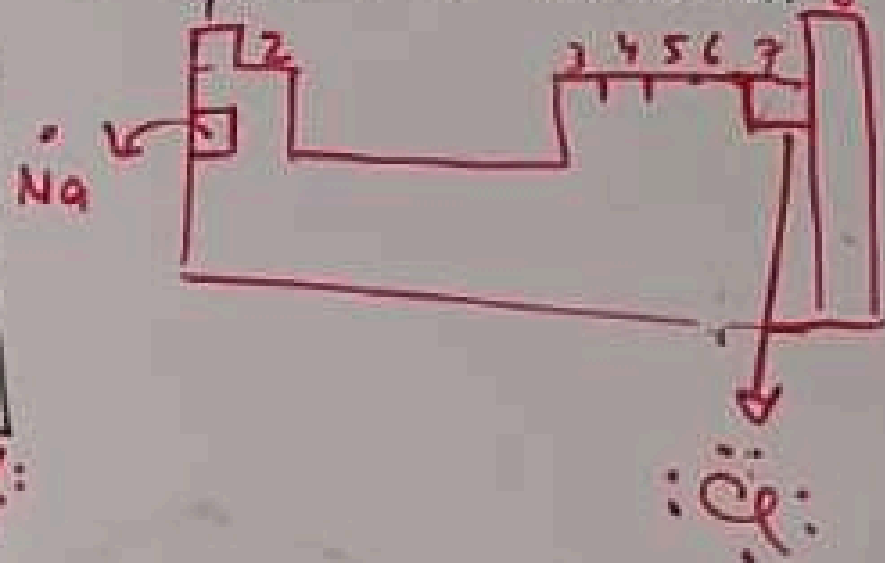
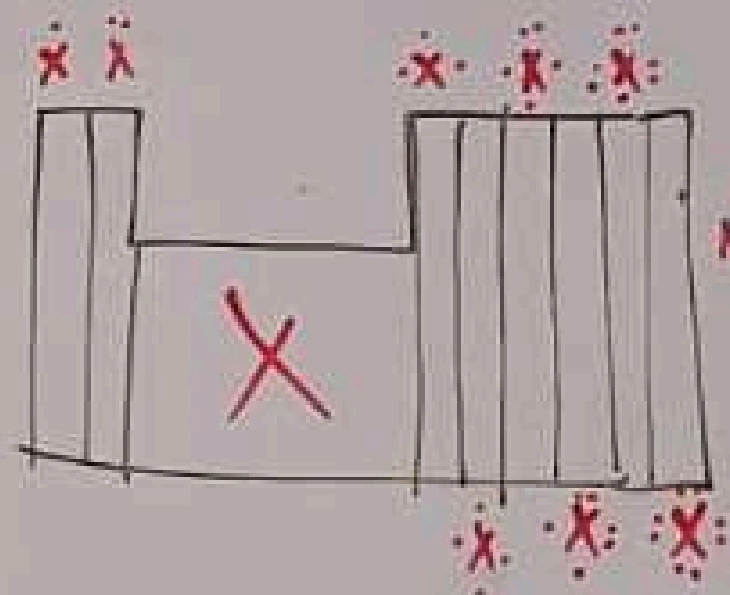
- ÁTOMOS SE LIGAM PARA OBTER CONFIGURAÇÃO DE GÁS NOBRE  $\rightarrow$   $8e^-$  NA CAMADA + EXTERNA
- VEREMOS LIGAÇÕES QUÍMICAS ENTRE METAIS DO BLOCO S E AMETAIS DO BLOCO P REGRAS DO OCTETO

• NOTAÇÃO DE LEWIS:  $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot X \cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$   $\rightarrow$  ELÉTRONS DE VALENCIA  
 $\rightarrow$  SÍMBOLO



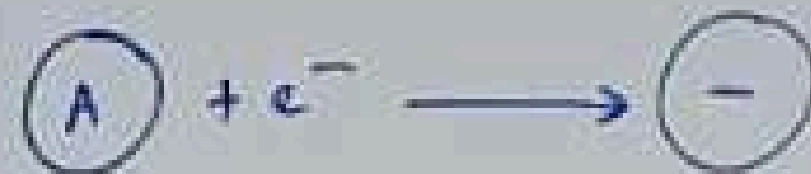
NÚMERO DE ELÉTRONS DE VALENCIA

FAZENDO CONFIG. ELETRÔNICAS  
Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  Ne  
Cl:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$  Ne  
OBSERVANDO A TABELA P





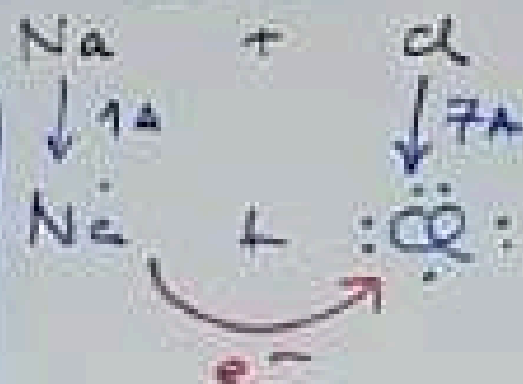
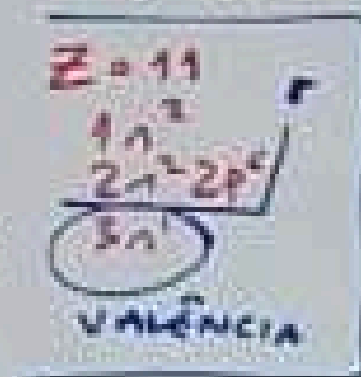
QUAL SAL POSSUI MAIOR ENERGIA RETICULAR,  
O KI OU O KBr? JUSTIFIQUE USANDO A  
TABELA PERIÓDICA



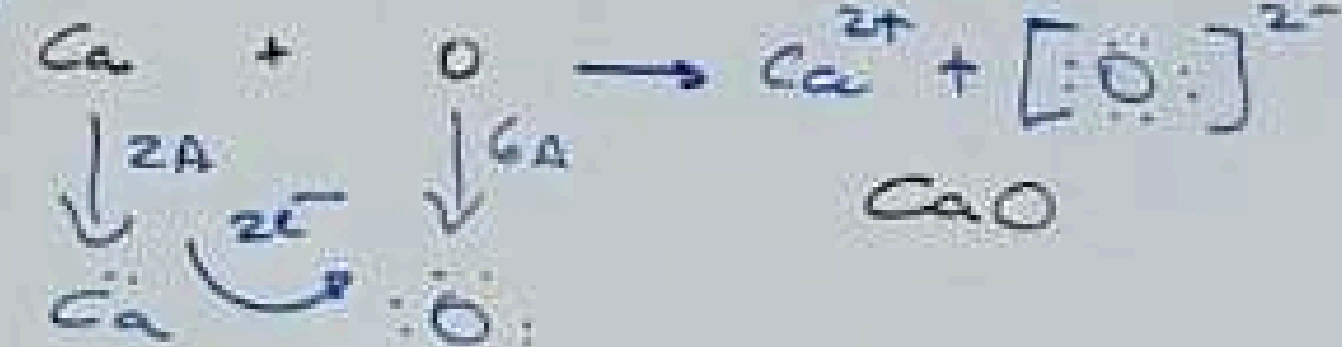
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A	9A	10A	11A	12A	13A	14A	15A	16A	17A	18A

USANDO LEWIS

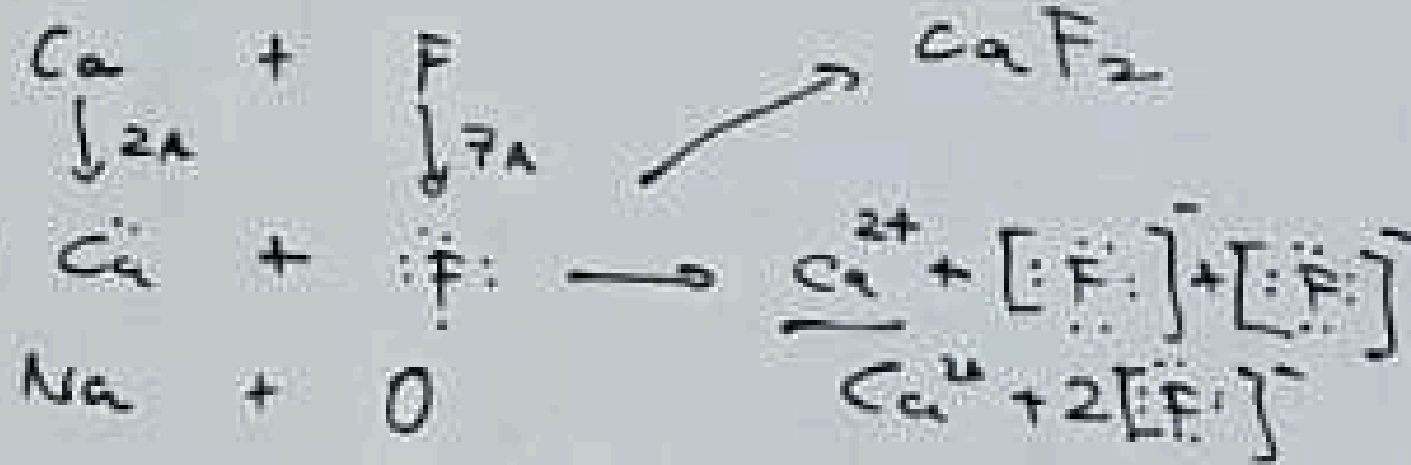
EX.:



EX.:



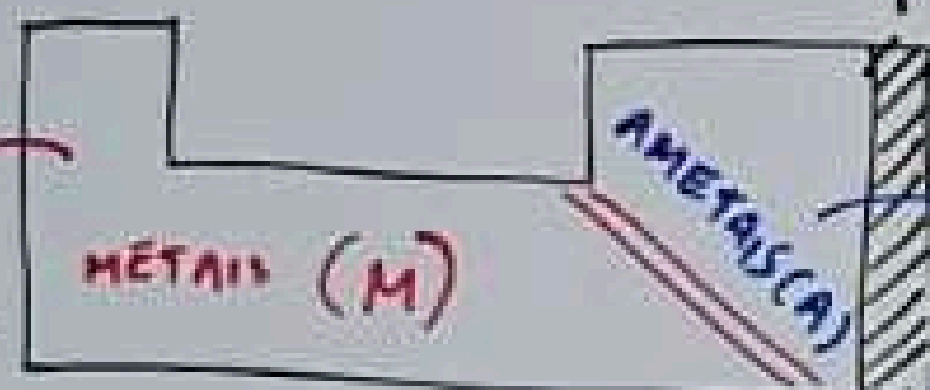
EX.:



EX.:



LIGAÇÃO IÔNICA



GASES  
NOBRES  
(SEM TENDÊNCIA  
DE GANHAR  
OU PERDER  
ELÉTRONS)

TÊM FACILIDADE  
DE RECEBER  
ELÉTRONS

= ALTA AFINIDADE  
DE ELETRÔNICA (A)  
(MUITO NEGATIVA)

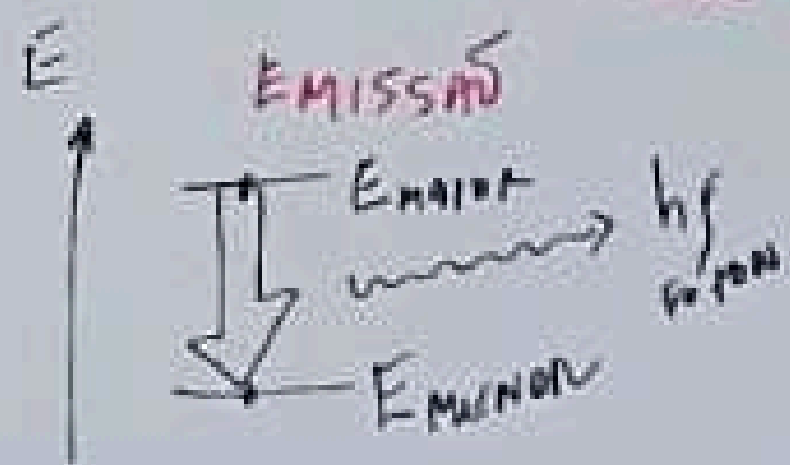
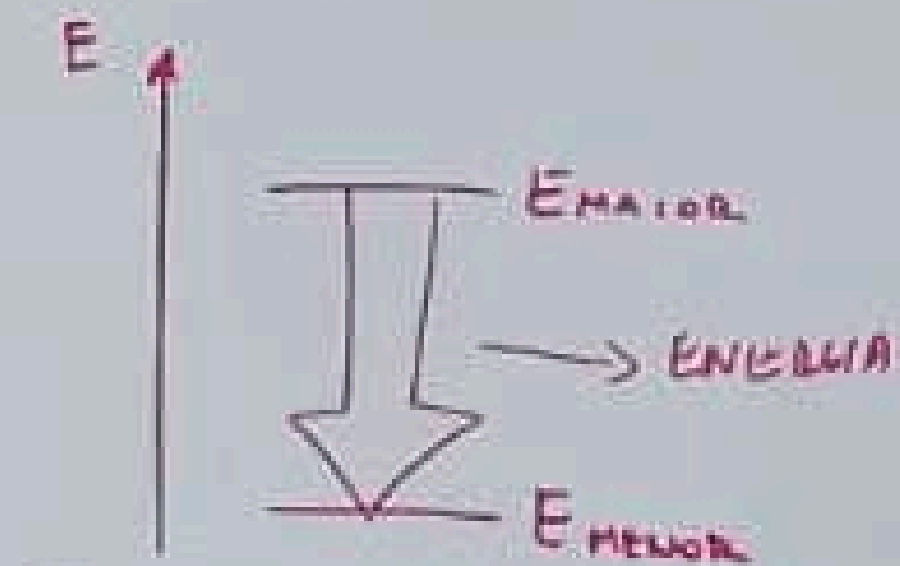
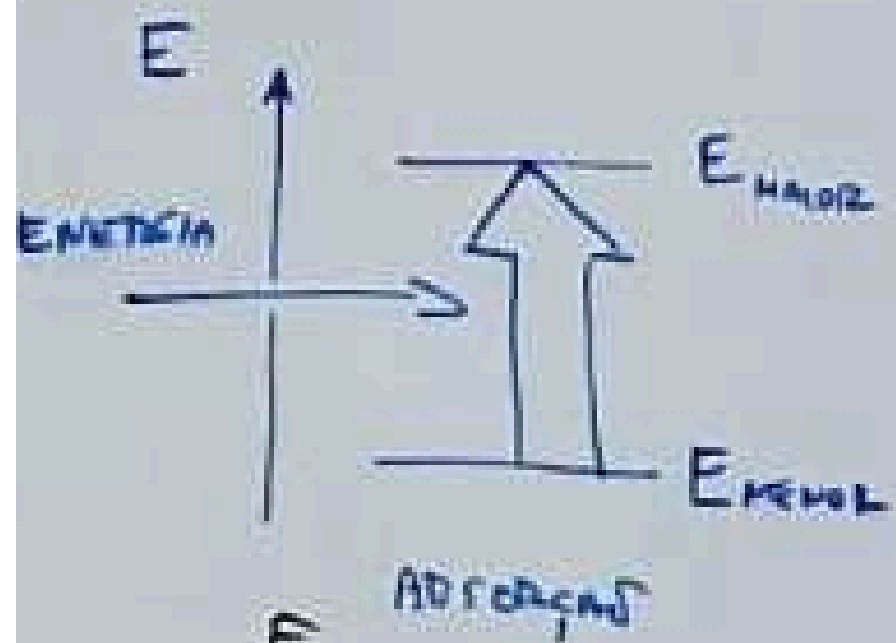
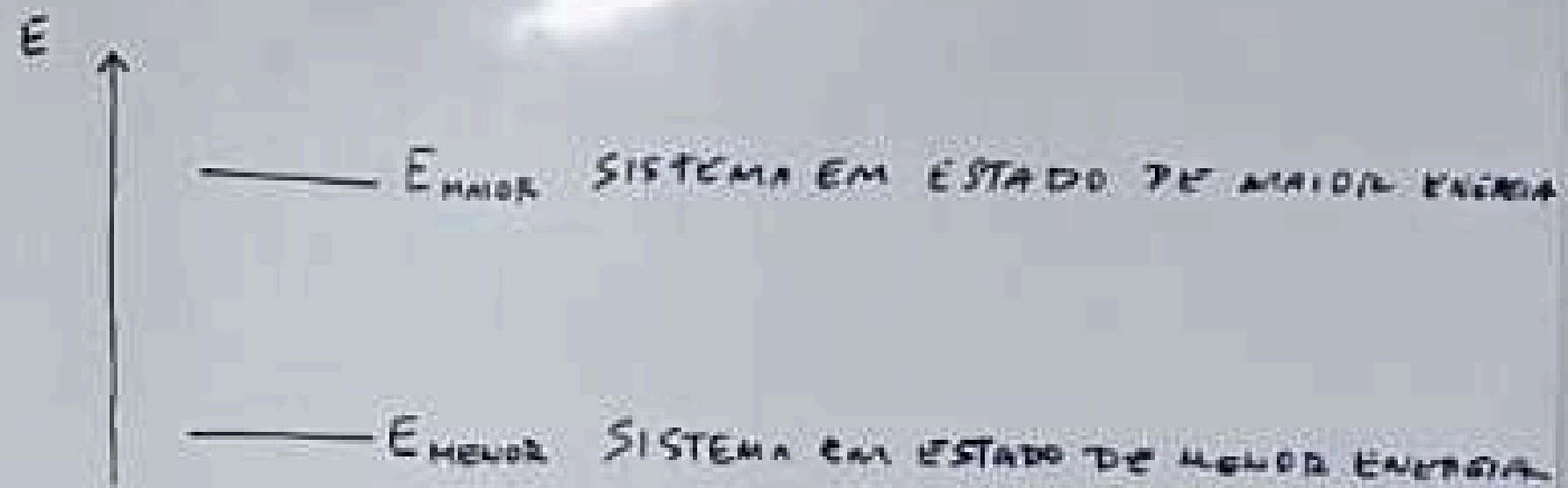
TÊM FACILIDADE EM  
PERDER ELÉTRONS  
= BAIXA ENERGIA DE  
IONIZAÇÃO (I)



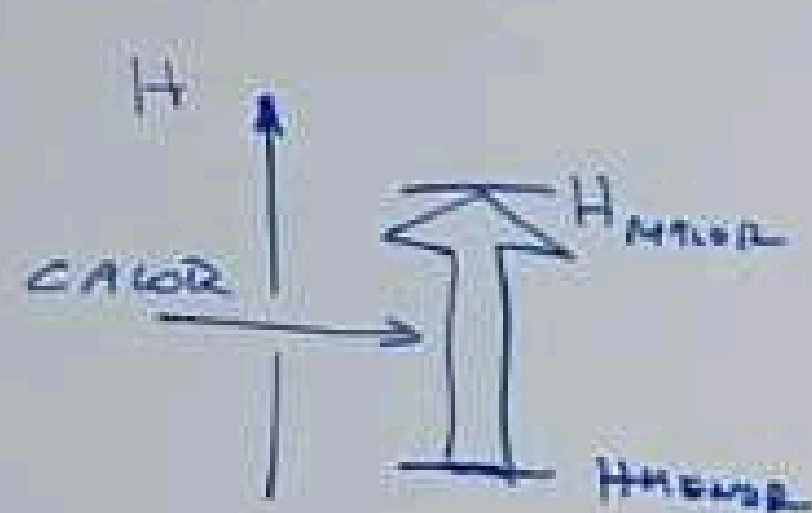
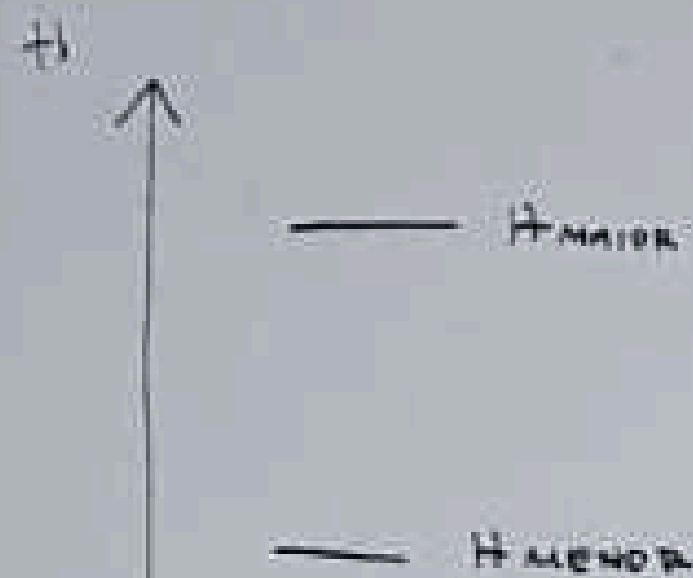
LIGAÇÃO IÔNICA  
(SUBSTÂNCIAS IÔNICAS)

## ENERGIAS NA FORMAÇÃO DE COMPOSTOS IÔNICOS

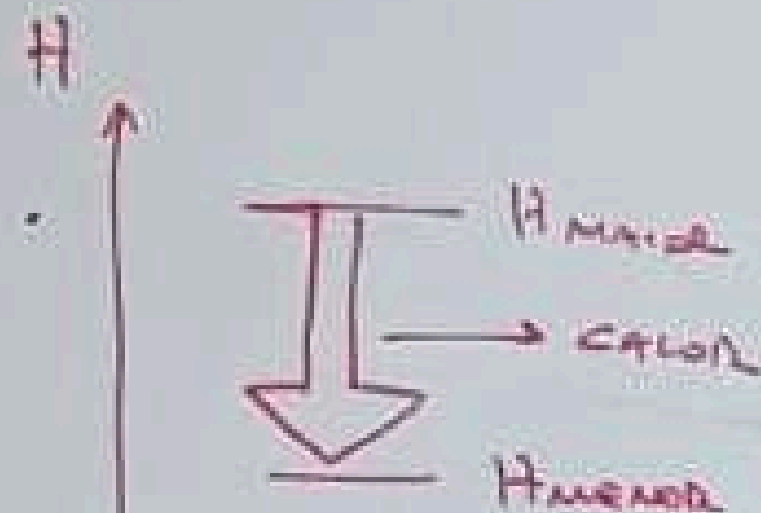
## - ALTERAÇÕES NA ENGENHARIA DE UM SISTEMA:



VARIACÃO DA ENERGIA NA FORMA DE CALOR :  
ENTALPIA



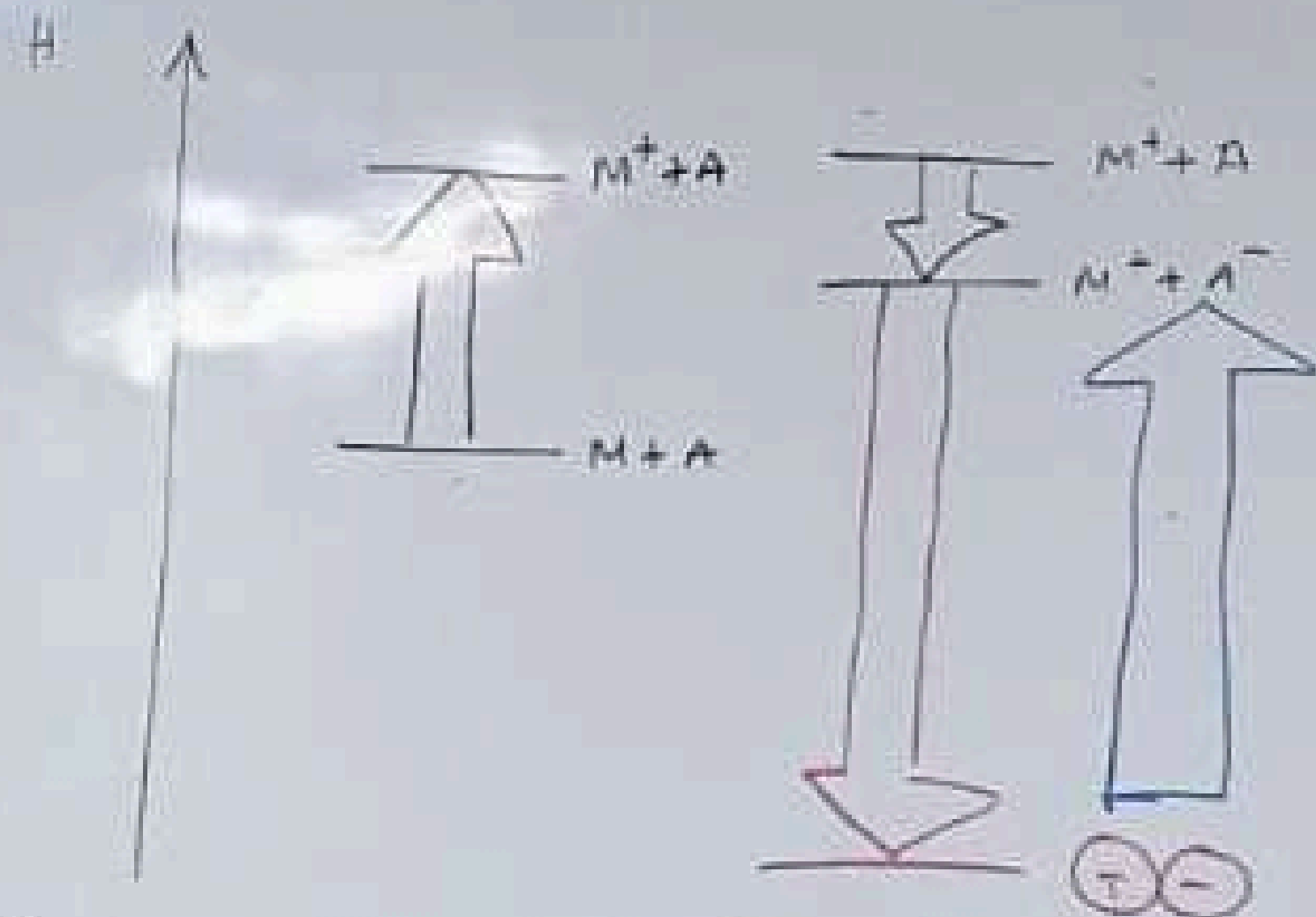
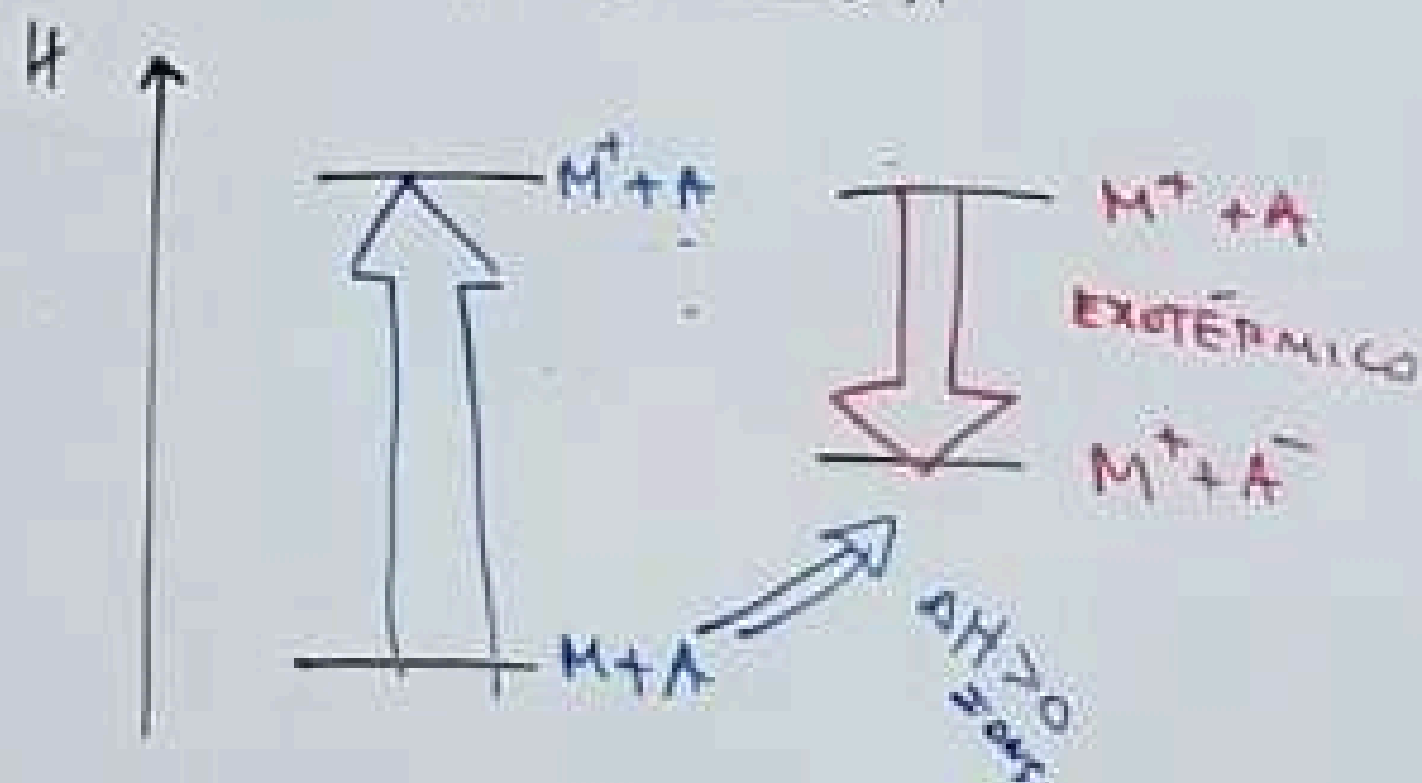
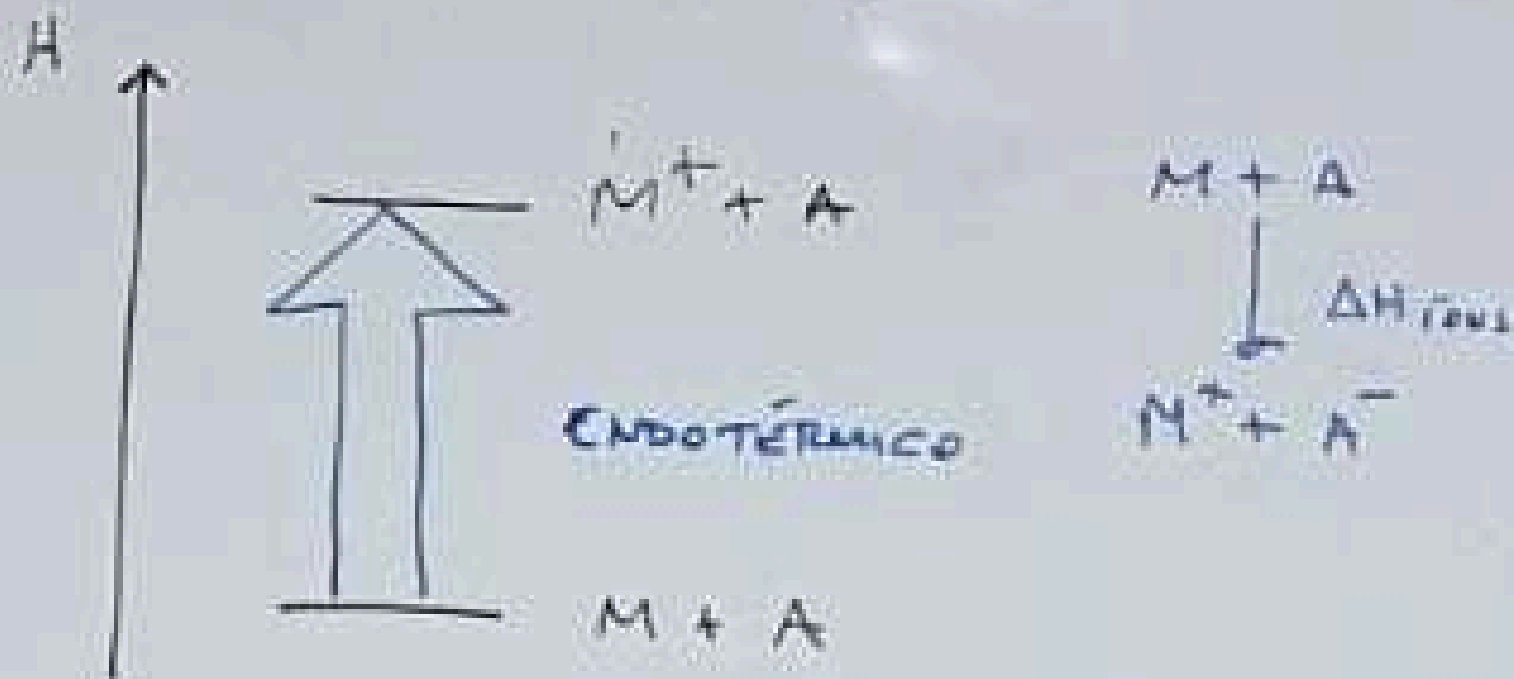
ABSORCIÓN  
 $\Delta H > 0$   
ENDOTÉRMICO S



EMISSÃO  
 $\Delta H < 0$   
EXOTÉRMICOS

# ETAPAS NA FORMAÇÃO DA LIGAÇÃO IÔNICA

## 1) FORMAÇÃO DOS ÍONS



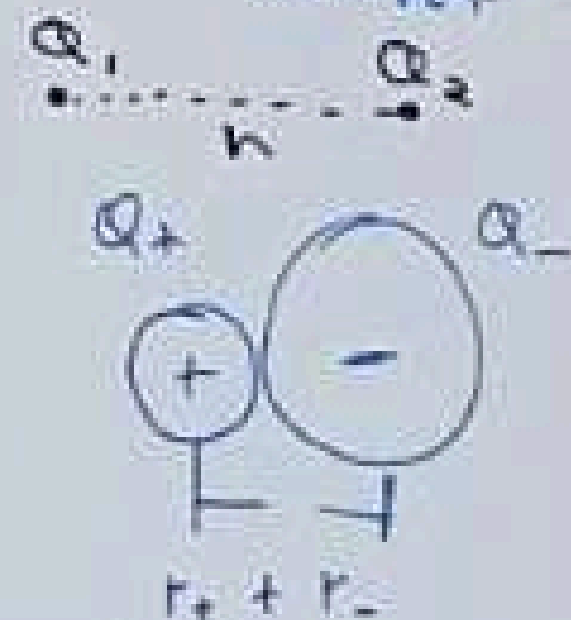
ORIGEM DE ENTALPIA RETICULAR

ENERGIA PARA SEPARAR ← ENTALPIA RETICULAR  $\Delta H_{\text{ret}}$

$$E_{el} = \frac{\text{CONSTANTE} \cdot |Q_1 Q_2|}{r}$$

Genal

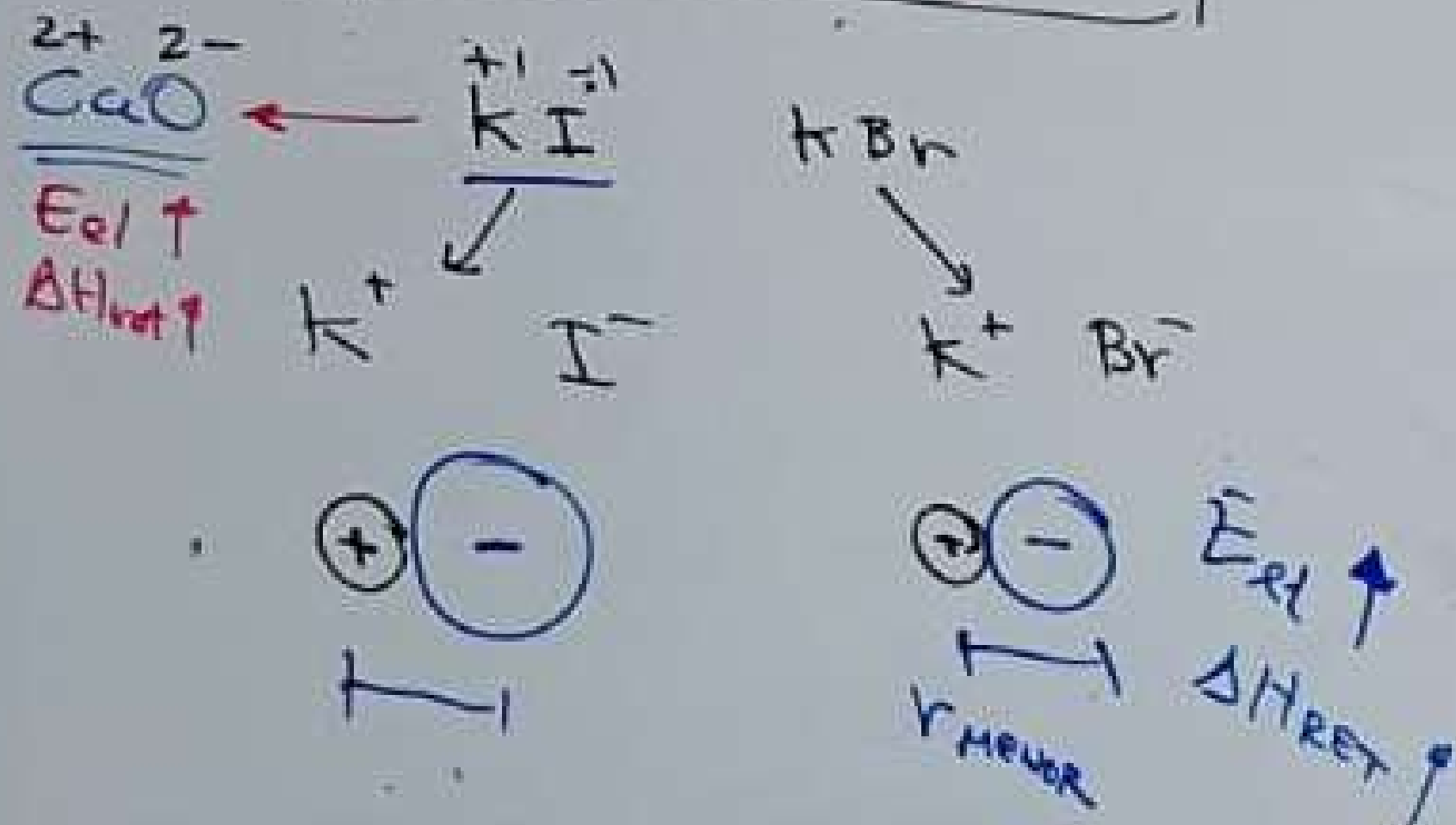
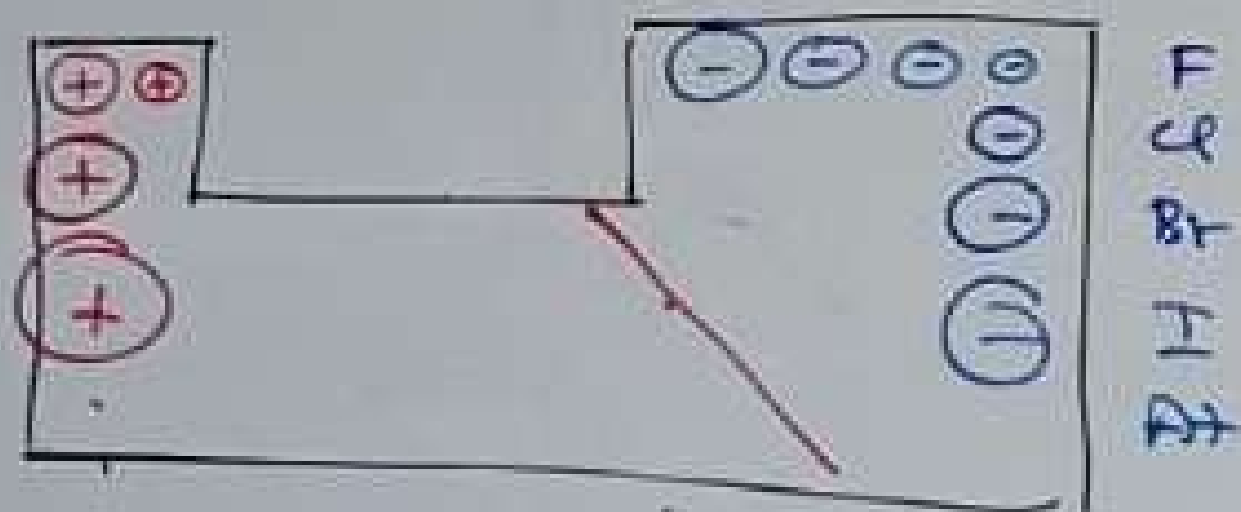
$$E_{el} = \frac{\text{CONSTANTE} \cdot |Q_+ Q_-|}{r_+ + r_-}$$





AUMENTO  
AS CARGAS  $\Rightarrow E_{el}$   
AUMENTA  $\Rightarrow \Delta H_{RET}$   
AUMENTA

AUMENTO  
DA DISTÂNCIA  $\Rightarrow E_{el}$   
DIMINUI  $\Rightarrow \Delta H_{RET}$   
DIMINUI

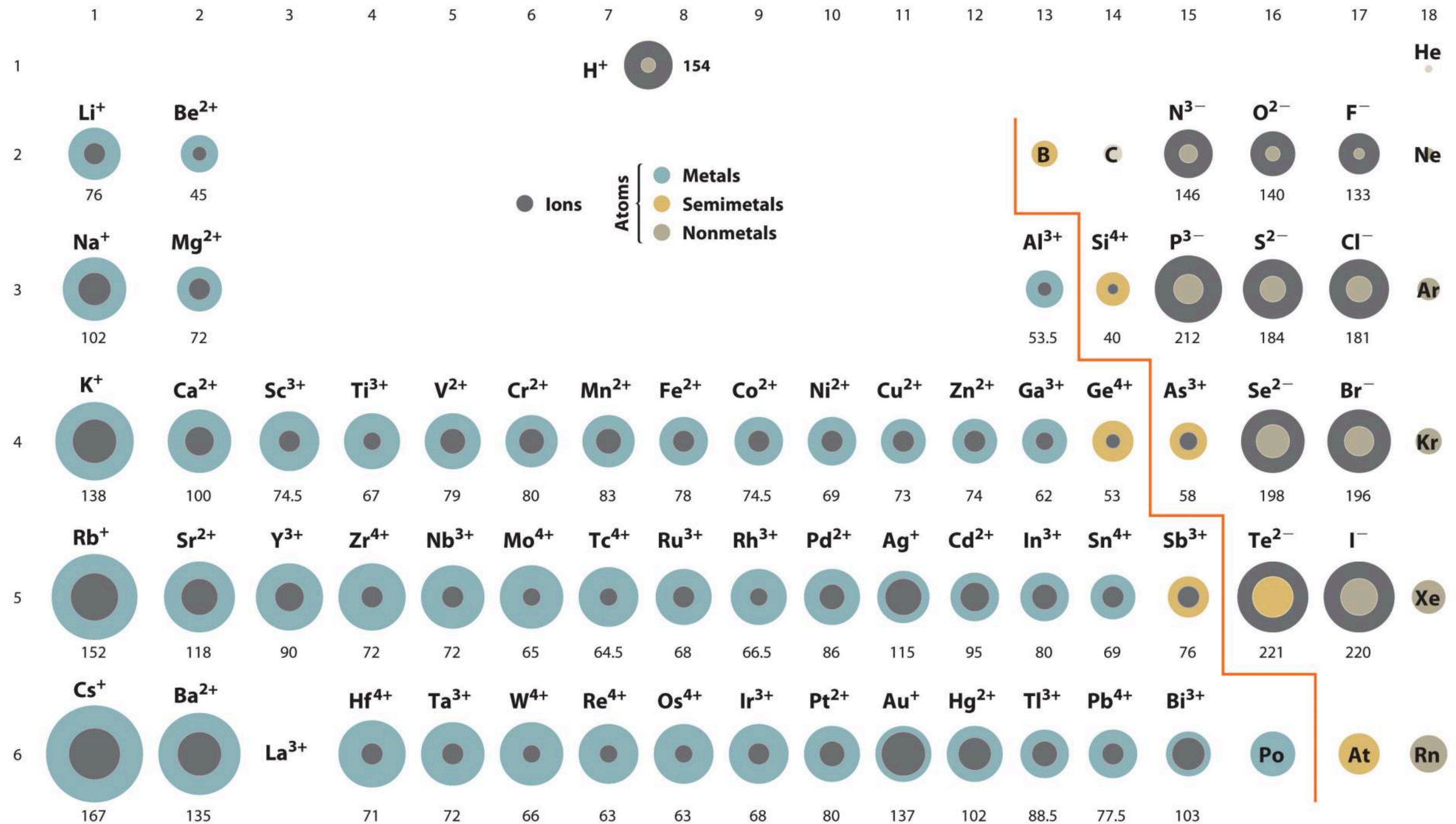


Composto	Energia reticular (kJ/mol)	Composto	Energia reticular (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl <sub>2</sub>	2.326
LiCl	834	SrCl <sub>2</sub>	2.127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3.795
NaCl	788	CaO	3.414
NaBr	732	SrO	3.217
NaI	682		
KF	808	ScN	7.547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

	1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
2	Li <sup>+</sup> 76	Be <sup>2+</sup> 45	B <sup>3+</sup> 23	C	N <sup>3-</sup> 171	O <sup>2-</sup> 140	F <sup>-</sup> 133	Ne
3	Na <sup>+</sup> 102	Mg <sup>2+</sup> 72	Al <sup>3+</sup> 54	Si	P <sup>3-</sup> 212	S <sup>2-</sup> 184	Cl <sup>-</sup> 181	Ar
4	K <sup>+</sup> 138	Ca <sup>2+</sup> 100	Ga <sup>3+</sup> 62	Ge	As <sup>3-</sup> 222	Se <sup>2-</sup> 198	Br <sup>-</sup> 196	Kr
5	Rb <sup>+</sup> 152	Sr <sup>2+</sup> 118	In <sup>3+</sup> 80	Sn	Sb	Te <sup>2-</sup> 221	I <sup>-</sup> 220	Xe
6	Cs <sup>+</sup> 167	Ba <sup>2+</sup> 135	Tl <sup>3+</sup> 89	Pb	Bi	Po	At	Rn



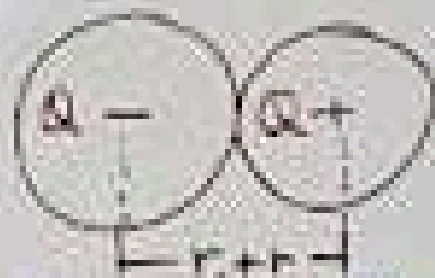
Figure 7.9 Ionic Radii (in Picometers) of the Most Common Oxidation States of the s-, p-, and d-Block Elements



ORDENS DE SAIS A SEGUIR EM ORDEM CRESCENTE DE ENERGIA PARTICULAR: NaF, CsI, CaS  
 (1) (2) (3)

$$E_c = \frac{k(Q_1 - Q_2)}{r_1 + r_2}$$

CONSTANTE



$E_c$  ALTA  
 $\Delta H_{DET}$  ALTA  
 PF ALTO

$$E \propto \frac{q_1 q_2}{r}$$

$$Cs + \ddot{I} : \rightarrow Cs^+ I^-$$

$$Ca + \ddot{S} : \rightarrow Ca^{2+} S^{2-}$$



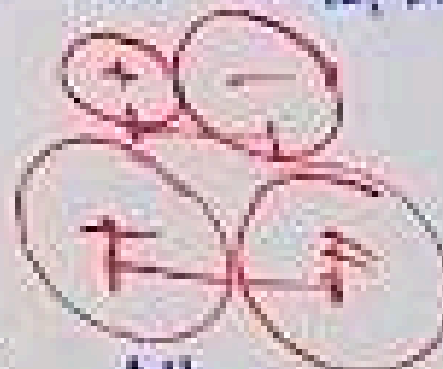
CARGAS MAIORES

$E_c \rightarrow \Delta H_{DET}$  MAIOR

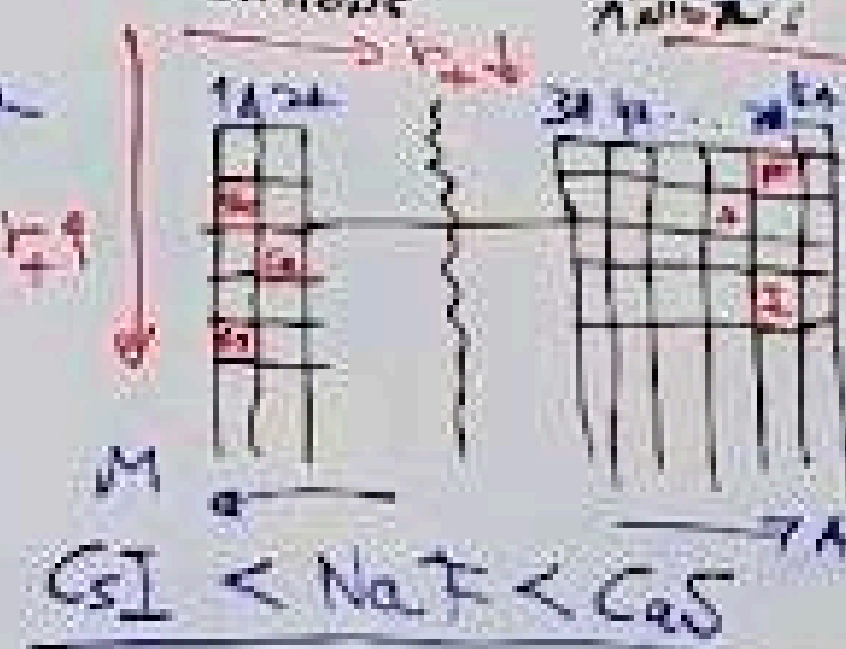
NaF

CsI

CaS



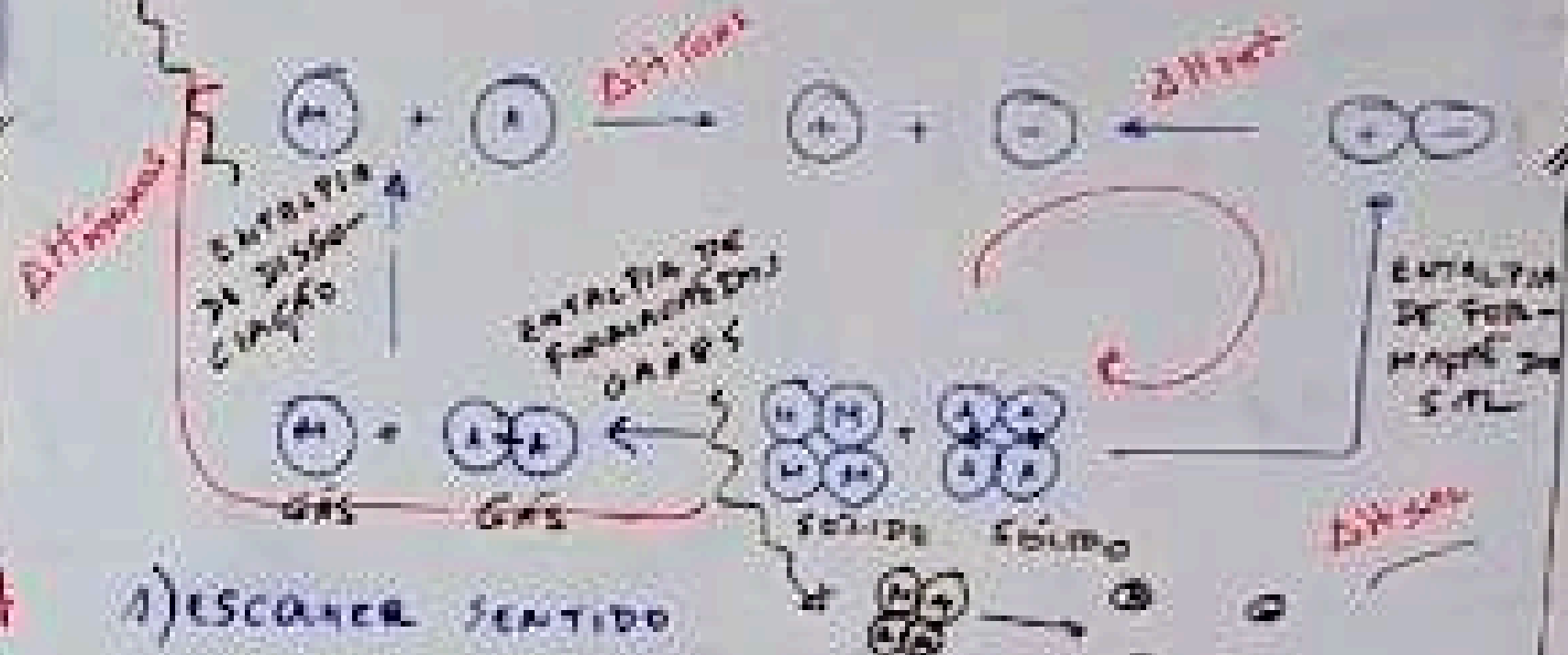
$\Delta H_{DET}$  MAIOR



# CICLO DE HABER-DORN

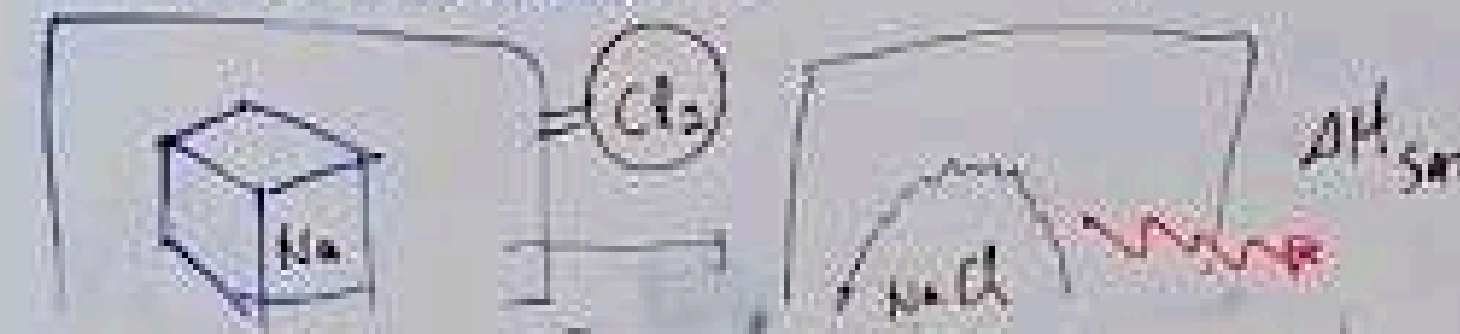


FAZER CICLO TERMODINÂMICO PARA DETERMINAR  $\Delta H_{DET}$  A PARTIR DE DADOS EXPERIMENTAIS

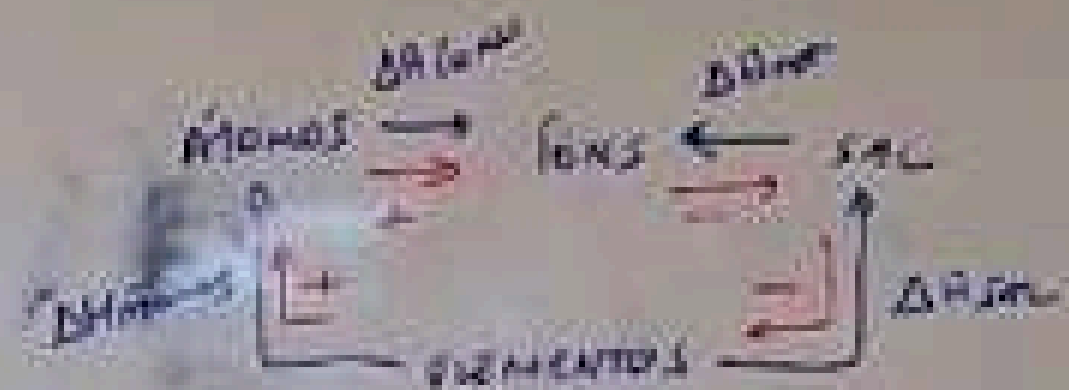


1) ESCOGER SENTIDO

2) NA DIREÇÃO DO SENTIDO: +  
 NO SENTIDO CONTRÁRIO: -



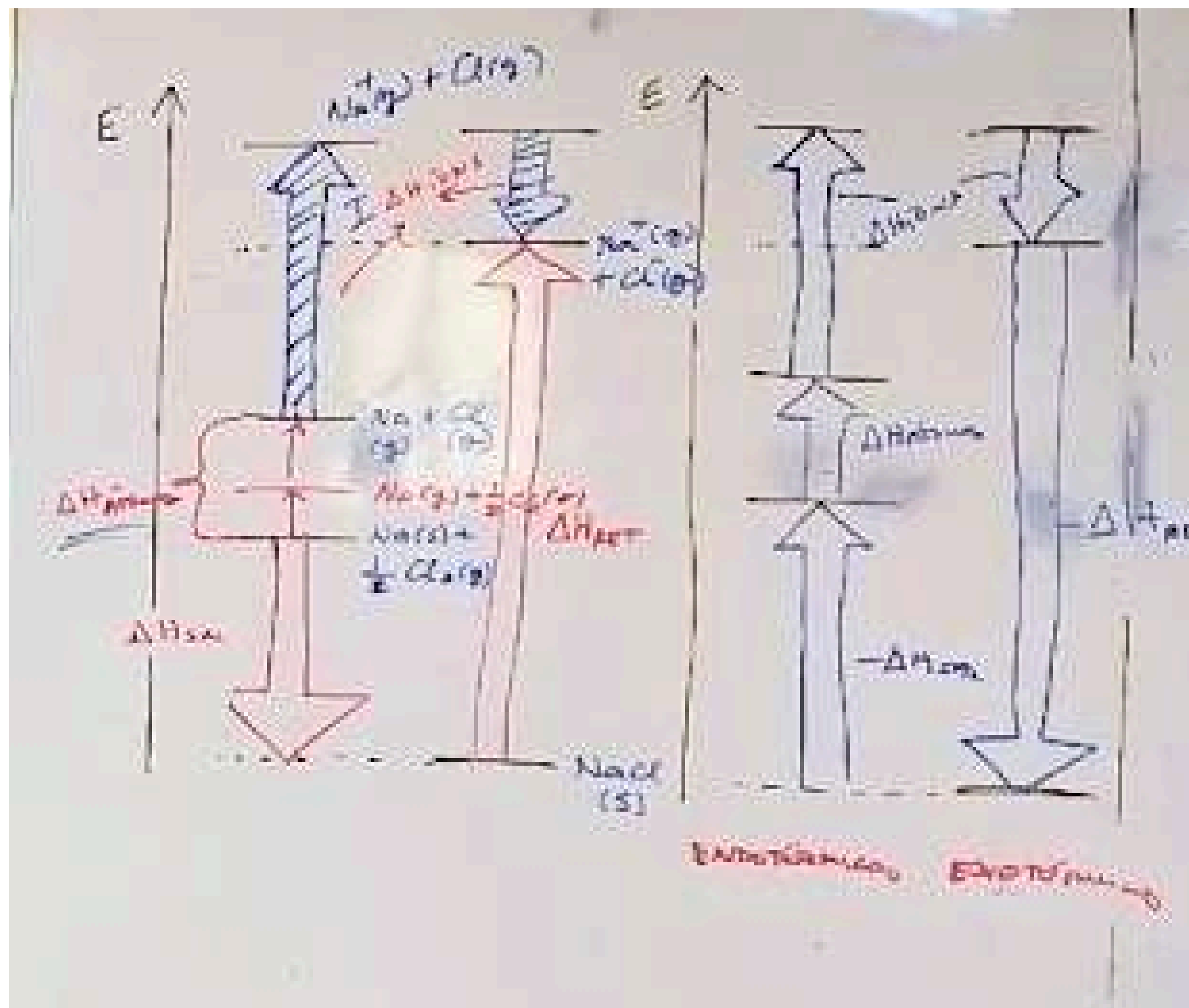
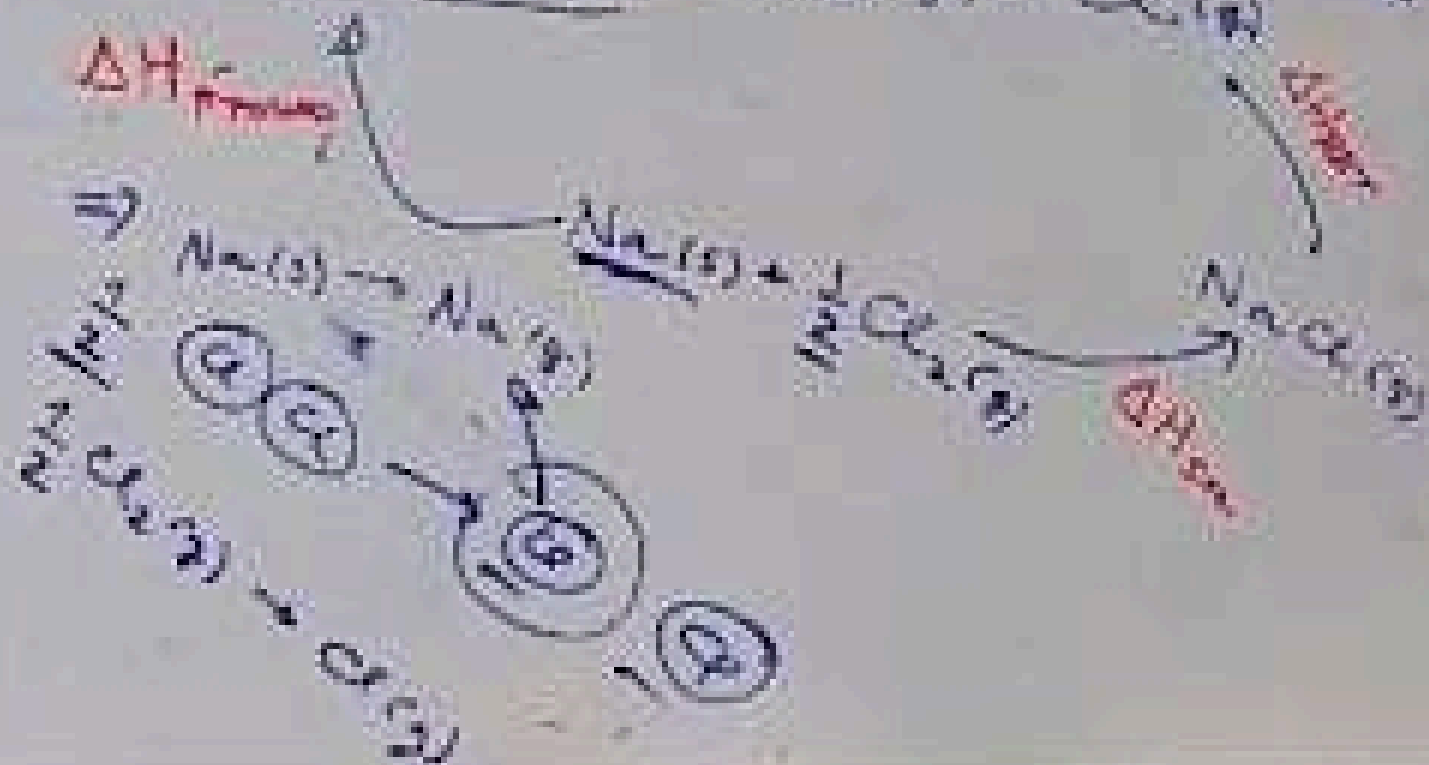




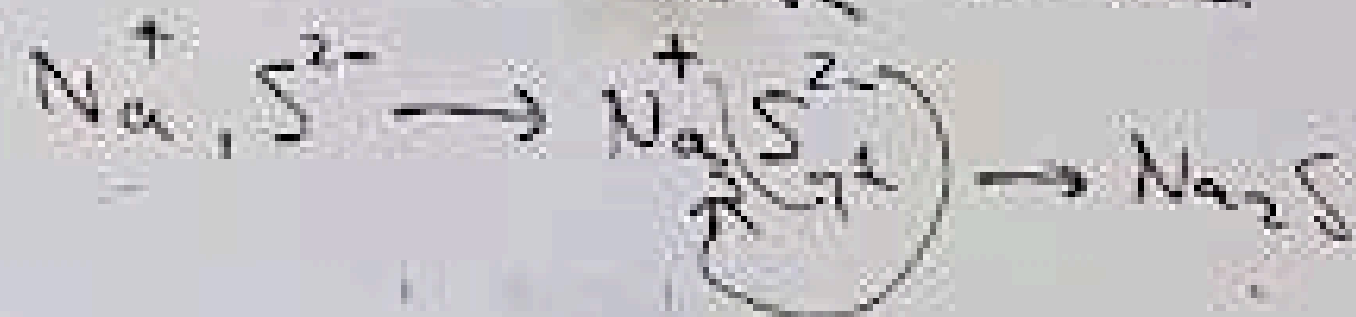
$$-\Delta H_{\text{f}} - \Delta H_{\text{ion}} + \Delta H_{\text{atom}} + \Delta H_{\text{sub}} = 0$$

$$\Delta H_{\text{f}} = \Delta H_{\text{atom}} + \Delta H_{\text{sub}} - \Delta H_{\text{ion}}$$

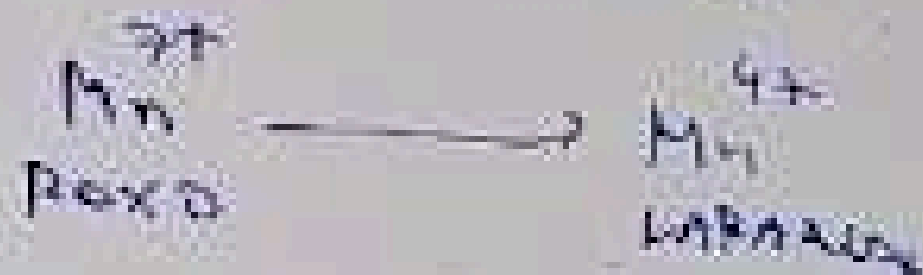
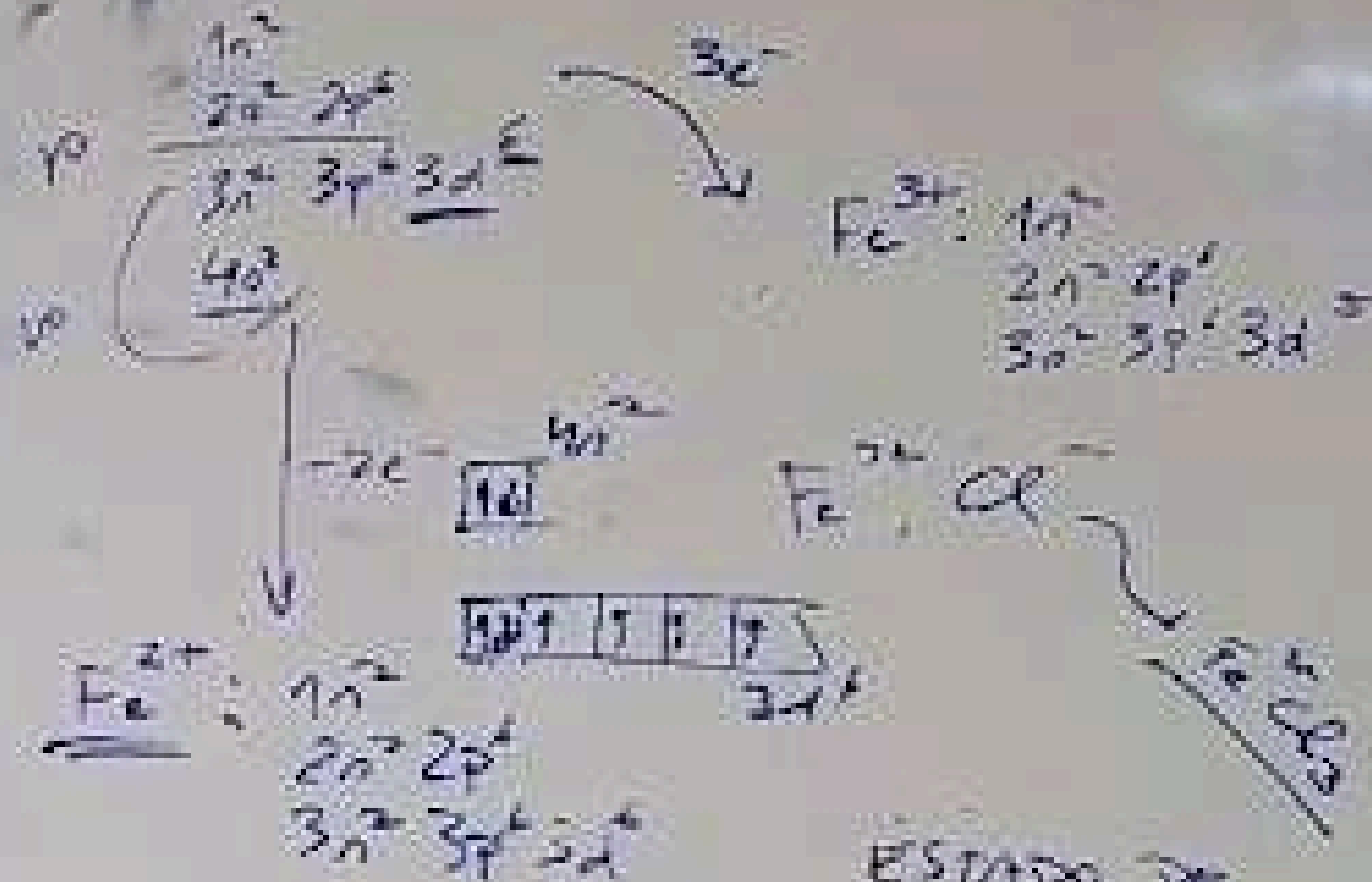
$\Delta H_{\text{atom}}$  (Energy to break bonds in elements)  
 $\Delta H_{\text{sub}}$  (Energy to break bonds in solid)  
 $\Delta H_{\text{ion}}$  (Energy to break bonds in solid)



# Fórmula dos Sais



Fe (Z = 26):



ESTADO DE  
 OXIDAÇÃO  
 ↓ ↑  
 FÓRMULA DO  
 SAL

# Ligações covalentes

**Prof. Diego J. Raposo**

**UPE – Poli**

**2025.1**



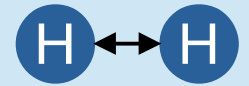
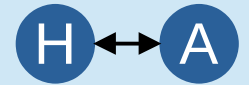
# Tipos de ligações

# Ligação metálica

## Ligação iônica

## Ligação covalente

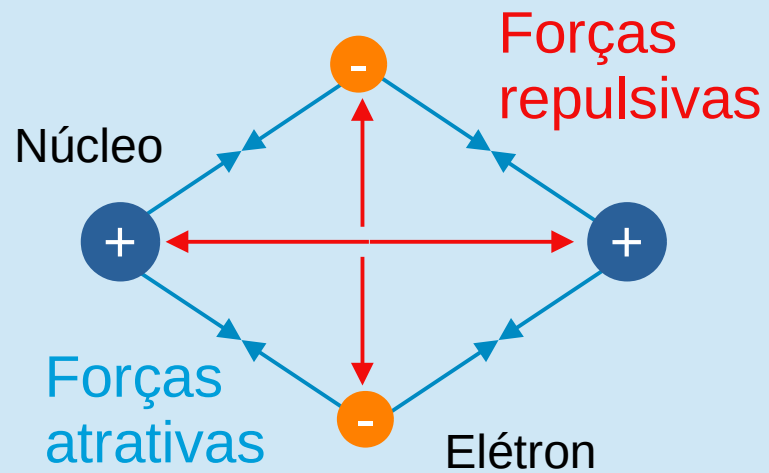
The diagram shows a periodic table with elements grouped into metals (pink), nonmetals (blue), and noble gases (light blue). A diagonal line separates the metals from the nonmetals. Above the table, two orange circles labeled 'M' are connected by a double-headed arrow, and two blue circles labeled 'A' are connected by a double-headed arrow. A long double-headed arrow connects the 'M' and 'A' groups, indicating that elements with similar properties recur at regular intervals.



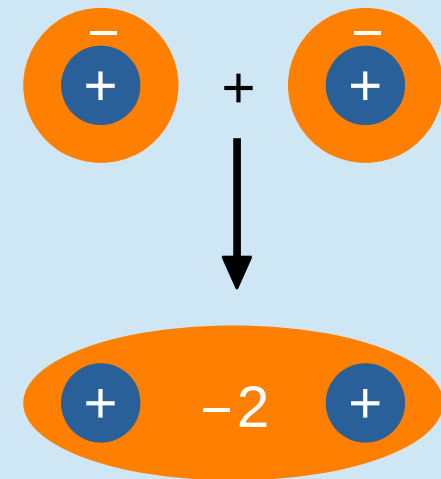
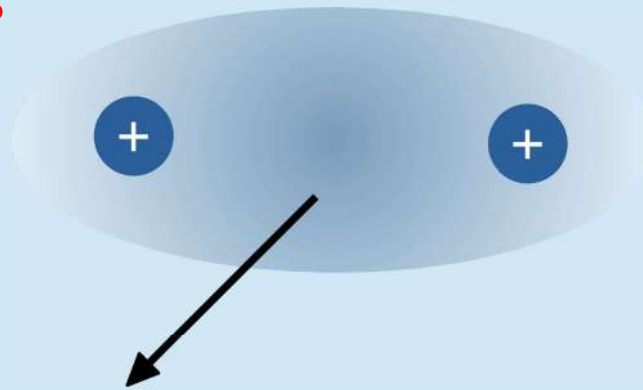
# O que são e porque se formam

- Muitas substâncias não possuem propriedades características de compostos iônicos;
- Lewis também propôs que átomos podem adquirir configuração de gás nobre **compartilhando um ou mais pares de elétrons**;
- Tal ligação é justificada (isto é, possível e estável) porque **forças atrativas** núcleo-elétrons **superam as repulsivas** (núcleo-núcleo e elétron-elétron):

# O que são e porque se formam



Densidade de probabilidade  
(probabilidade de encontrar elétron) maior



# O que são e porque se formam

- Átomos que compartilham elétrons formam **moléculas**, e as ligações são chamadas de ligações covalentes.
- **Substâncias covalentes** são formadas por um ou mais tipos de átomos ligados covalentemente. Geralmente:

## **Substâncias iônicas**

Pontos de fusão e ebulição altos  
Líquidos conduzem eletricidade  
Sólidos duros e quebradiços  
Formam soluções condutoras



## **Substâncias covalentes**

Pontos de fusão e ebulição baixos  
Líquidos não conduzem eletricidade  
Sólidos mais macios e flexíveis  
Formam soluções não condutoras



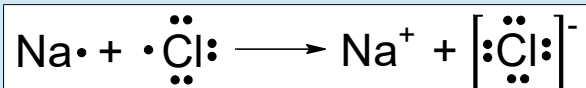


# Estruturas de Lewis

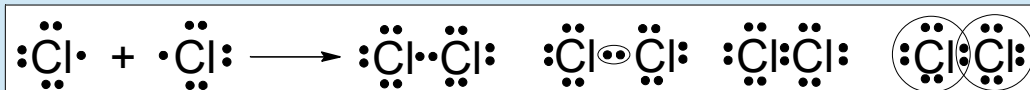
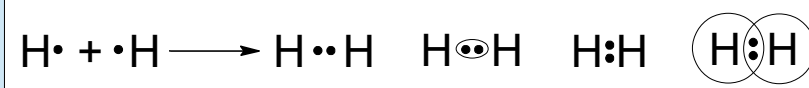
- A notação de Lewis pode ser aplicada para substâncias covalentes de duas formas:

a) **Elétrons como pontos**: similar à usada na representação de ligações iônicas, com a diferença de que agora os elétrons compartilhados são identificados entre átomos, sendo destacados ou não.

## Ligações iônicas

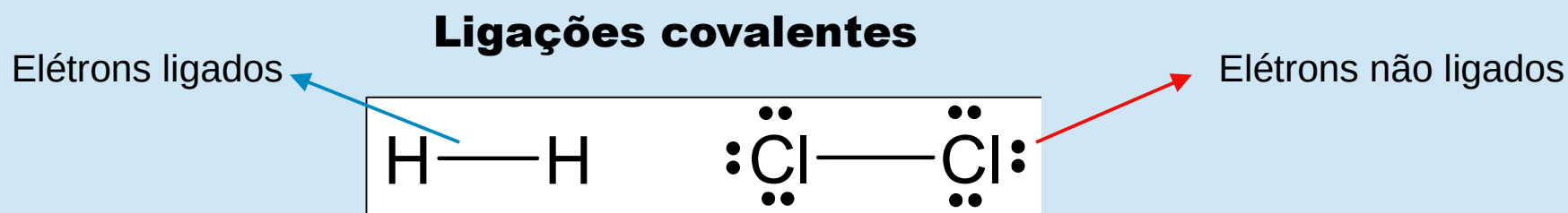


## Ligações covalentes



# Estruturas de Lewis

b) Elétrons livres (isto é, não ligados) como pontos: cada par de elétrons na ligação é representado como uma linha conectando os átomos que se ligam. Elétrons livres continuam sendo representados por pontos.



# Ligações simples

- Como o número de ligações simples que cada ametal pode fazer para completar o octeto depende do número de elétrons de valência, espera-se que cada família de átomos tenham números de ligações e de elétrons livres iguais.

## Ligação simples

**Com apenas um tipo de átomo  
(elemento)**

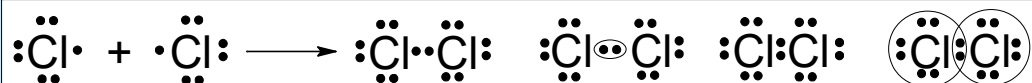


**Com mais de um tipo de átomo  
(composto)**

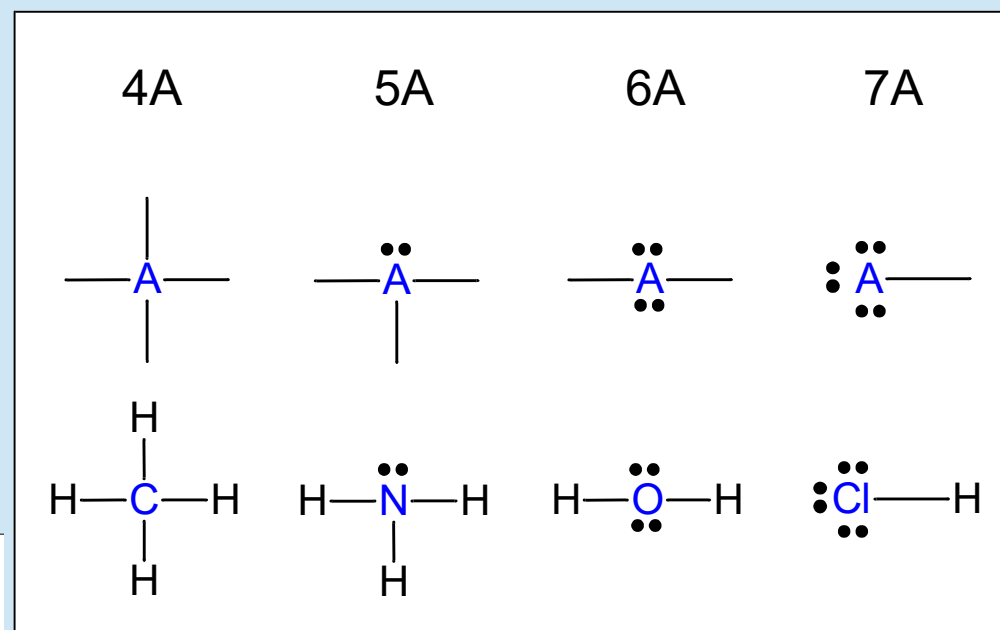


# Ligações simples

## Com apenas um tipo de átomo (elemento)



## Com mais de um tipo de átomo (composto)





# Ligações múltiplas

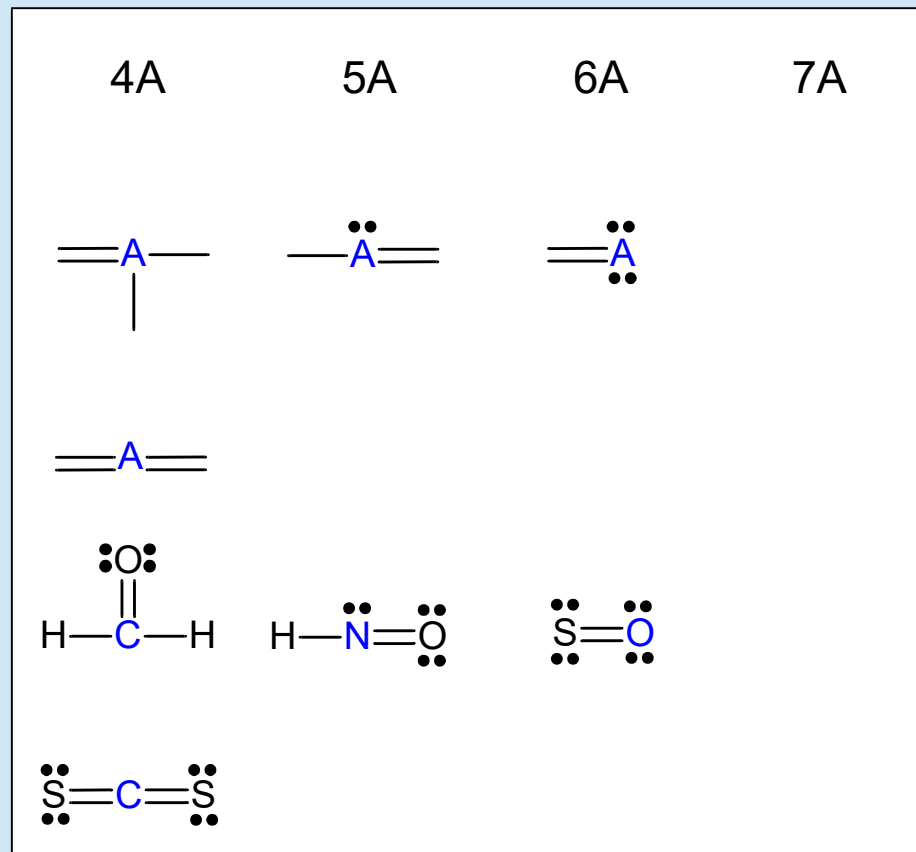
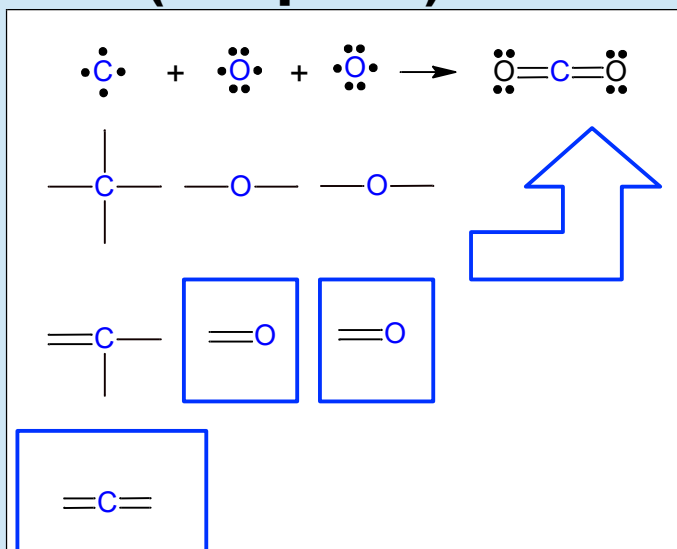
- **Ligações simples** são formadas entre átomos que compartilham apenas um par de elétrons.
- Em **ligações múltiplas** os átomos completam o octeto compartilhando mais de um par de elétrons. Cada ligação dessas é representada por um par de pontos (elétrons como pontos) ou uma linha (elétrons livres como pontos).
- **Ligação dupla:** se átomos compartilham 4 elétrons temos dois pares, ou duas linhas, na representação;
- **Ligações triplas:** quando átomos compartilham 6 elétrons (três pares, três linhas).

# Ligações duplas

## Com apenas um tipo de átomo (elemento)



## Com mais de um tipo de átomo (composto)

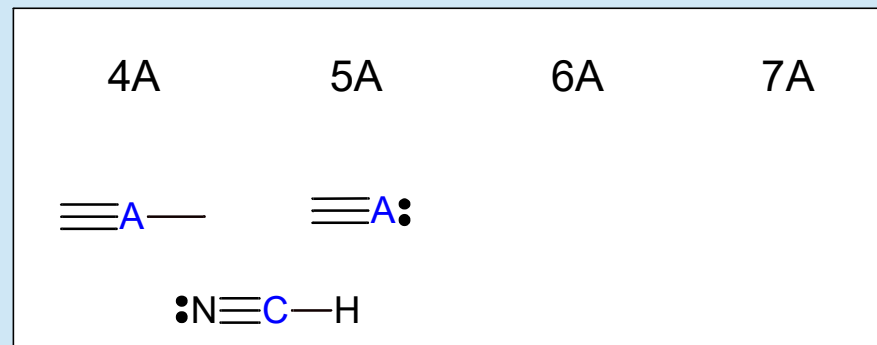
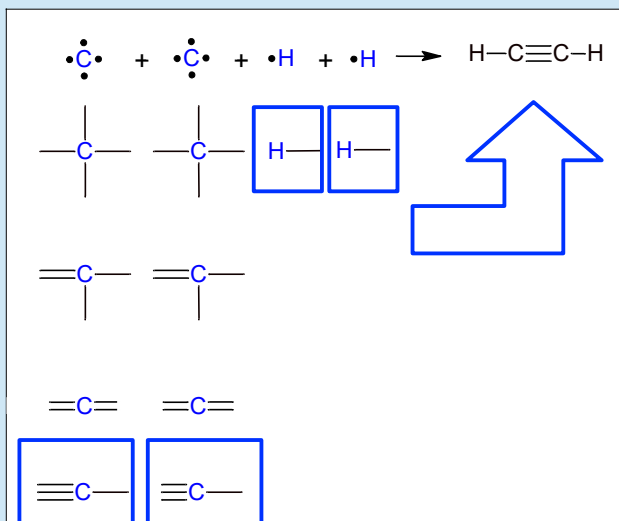


# Ligações triplas

## Com apenas um tipo de átomo (elemento)



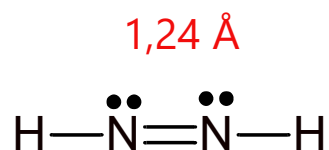
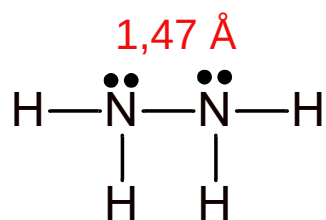
## Com mais de um tipo de átomo (composto)



# Força da ligação e distâncias

- Quanto mais elétrons compartilhados entre dois átomos:
  - Maior a **força** da ligação covalente (mais energia é necessária para rompê-la);
  - Menor é a **distância** entre átomos.

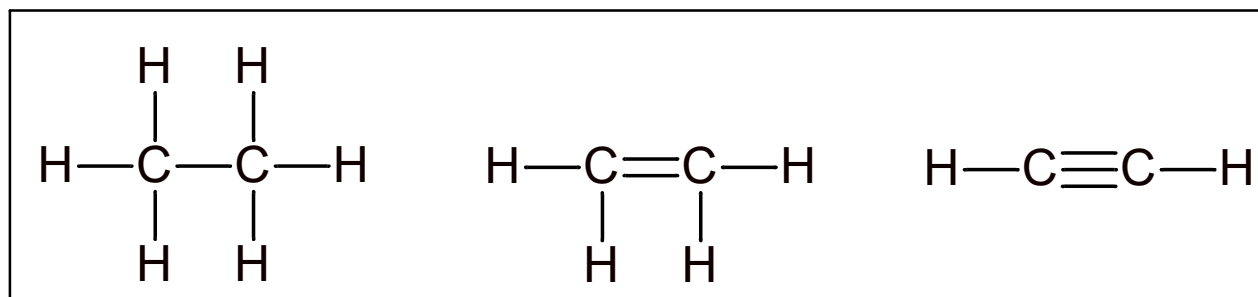
Distância entre os átomos de N aumenta



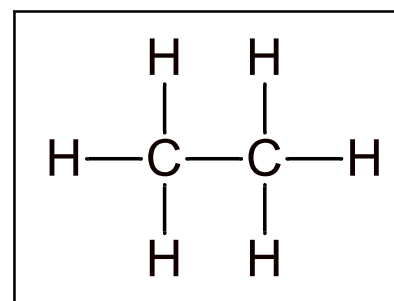
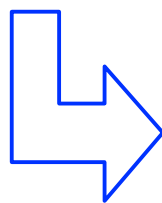
Força da ligação covalente aumenta



**Que molécula possui menor distância entre os átomos de carbono?  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$  ou  $\text{C}_2\text{H}_2$ .  
Mostre as estruturas de Lewis de cada uma.**



Distância entre  
os átomos de  
C aumenta



No  $\text{C}_2\text{H}_6$ : 1,54 Å

No  $\text{C}_2\text{H}_4$ : 1,34 Å

No  $\text{C}_2\text{H}_2$ : 1,20 Å

**Obrigado e boa sorte!**

# Polaridade e eletronegatividade

**Prof. Diego J. Raposo**

**UPE – Poli**

**2024.2**

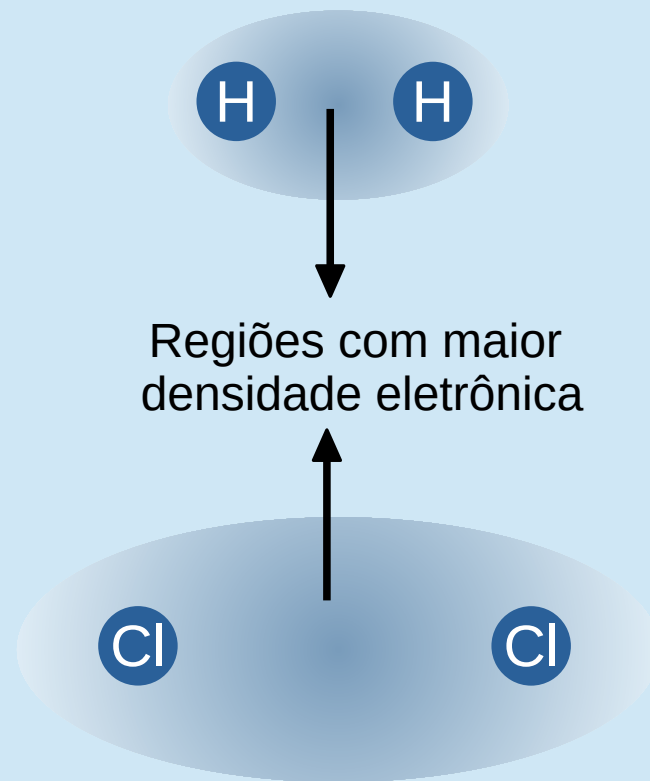
**Sec. 8.4**



**Calcule as cargas parciais dos átomos na molécula de BrCl, considerando que o momento de dipolo é 0,57 D e os raios atômicos do Br e do Cl são 1,20 Å e 1,02 Å.**

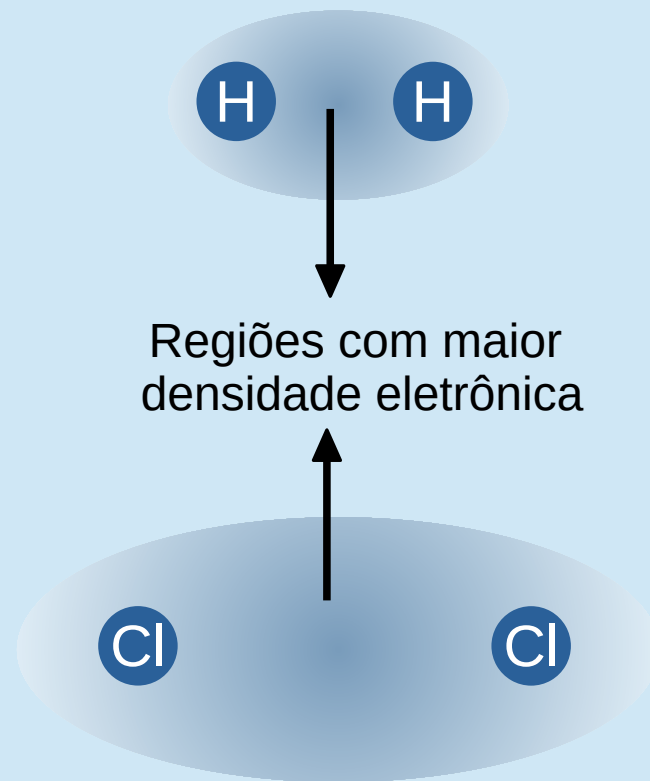
# Polaridade de ligação química

- Átomos possuem tendências próprias de atrair elétrons em ligação química;
- Isso caracteriza o tipo de ligação que será formada;
- Em moléculas formadas por **dois átomos de um mesmo elemento** a tendência de cada átomo é igual. Logo a densidade eletrônica (região com maior probabilidade de encontrar o elétron) se encontra exatamente no meio dos átomos.



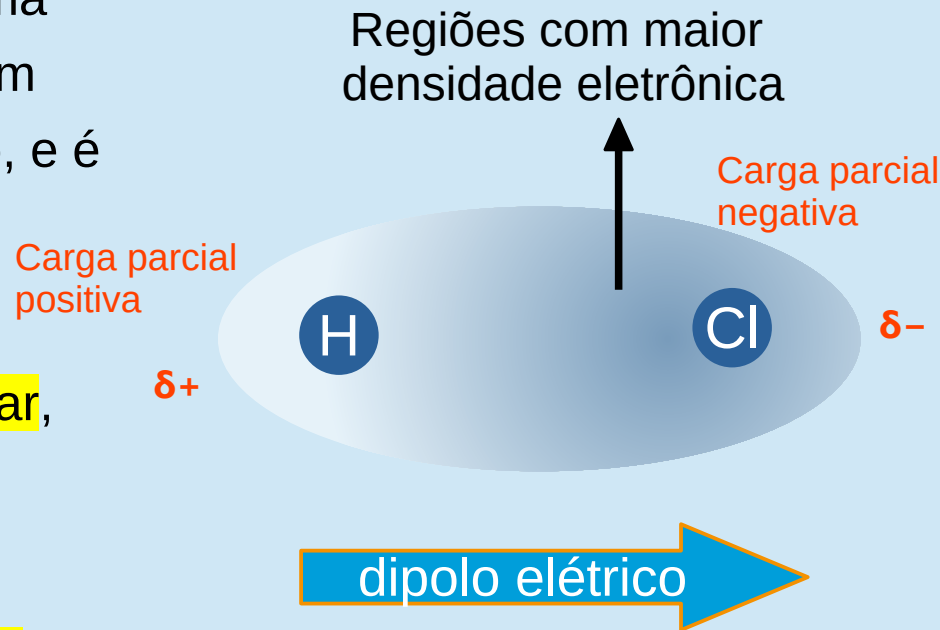
# Polaridade de ligação química

- Esse tipo de ligação é chamada de **covalente apolar**, pois não há dipolos elétricos, nem preferência da nuvem eletrônica por um dos átomos (cargas ao redor dos átomos são equivalentes);
- Ela ocorre entre **ametais de um mesmo elemento**, e entre átomos de hidrogênio ( $H_2$ ).



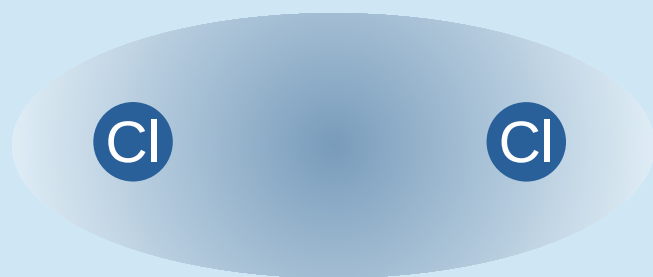
# Polaridade de ligação química

- Se, por outro lado, um dos átomos tem uma tendência maior de atrair elétrons, a nuvem estará mais deslocada em sua direção, e é mais provável encontrar o elétron mais próximo dele;
- Essa ligação é chamada de **covalente polar**, porque um dipolo elétrico permanente é formado na ligação;
- É comum entre **ametais de diferentes tipos entre si** ou ligados ao átomo de hidrogênio.



# Polaridade de ligação química

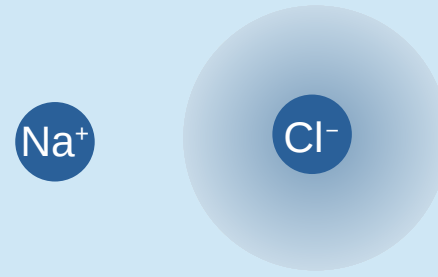
- Se a **diferença entre a capacidade relativa de atrair elétrons** entre os átomos é muito **grande**, haverá a transferência de elétrons para o com maior capacidade, ocorrendo uma ligação iônica. Como vimos, ela ocorre sobretudo entre metais e ametais.



**Covalente apolar**  
(ametais iguais)



**Covalente polar**  
(ametais diferentes)



**Iônica**  
(ametal + metal)



# Eletronegatividade

- A tendência de um átomo atrair elétrons é chamada de eletronegatividade, uma quantidade que ajuda a prever o tipo de ligação que é formada entre dois ou mais átomos. Ela também auxilia o estudo de propriedades físicas e químicas das substâncias.
- É possível estimar a eletronegatividade de diferentes formas. Uma delas, chamada de **eletronegatividade de Millikan**, combina a energia de ionização e a afinidade eletrônica de um átomo para estimar sua eletronegatividade:

$$\chi_M = \frac{I + A_e}{2}$$

# Eletronegatividade

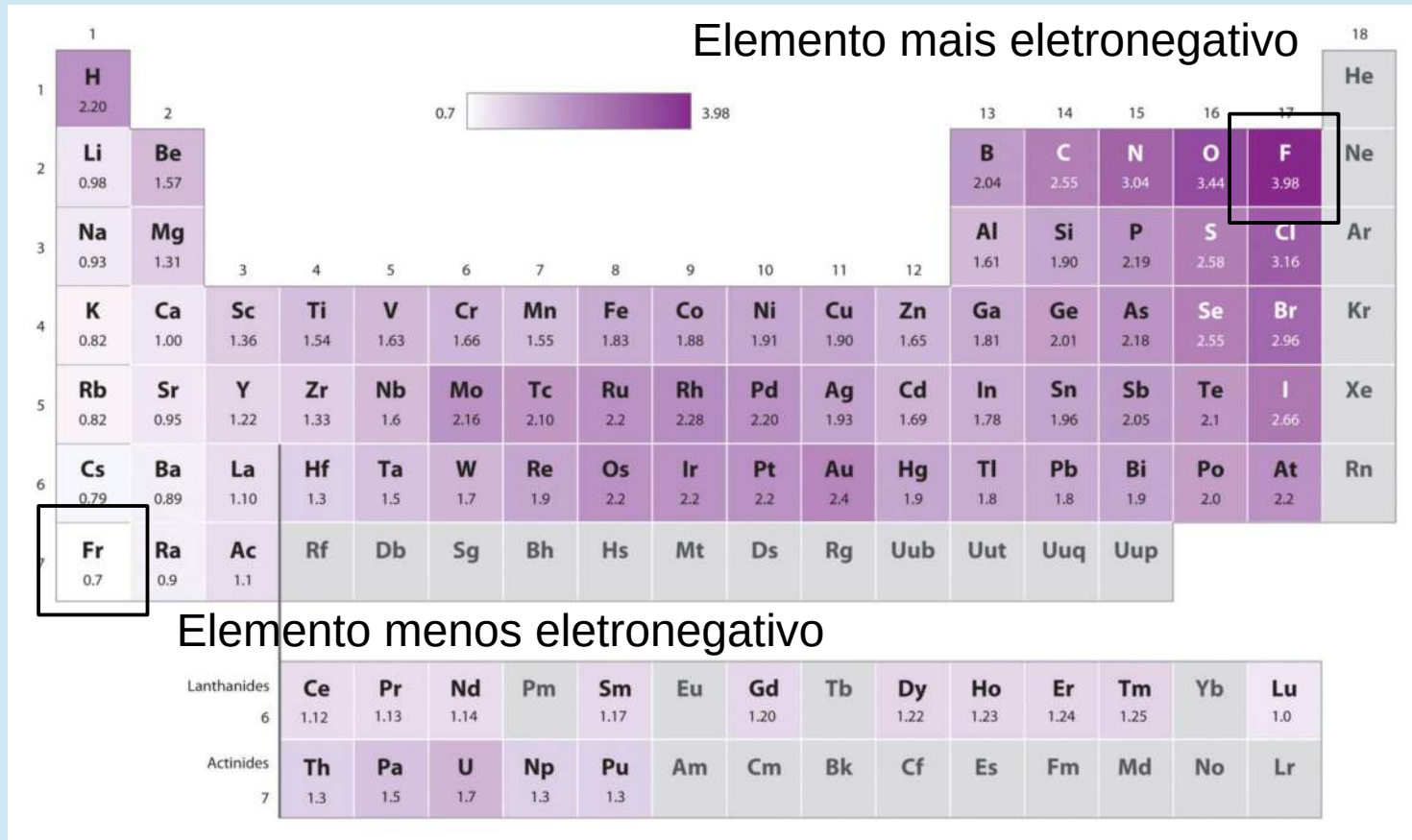
- Ou seja, átomos que possuem uma energia de ionização elevada (dificilmente perdem os elétrons que possuem) e uma afinidade eletrônica também alta (liberam muita energia quando recebem elétrons, pois diminuem bastante em energia ao incorporá-los) são muito eletronegativos.
- A mais usada medida de eletronegatividade é, no entanto, devida a Linus Pauling. A **eletronegatividade de Pauling** ( $\chi_P$ ) é calculada a partir de dados termoquímicos (energias necessárias para romper ligações entre átomos). Essa eletronegatividade se comporta como uma tendência periódica: ela aumenta quando  $Z$  aumenta em um período e diminui quando  $Z$  aumenta em um grupo).

# Eletronegatividade

Porque  $n$  aumenta  
(distância núcleo-elétrons)

Porque força núcleo-elétrons diminui

$\chi$  diminui



$\chi$  aumenta

Porque força núcleo-elétrons aumenta

Porque  $Z_{ef}$  aumenta

# Eletronegatividade

H	Metais têm baixa eletronegatividade																Ametais têm alta eletronegatividade						He
Li	Be																	B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg																	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og						
			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	Lr							

# Eletronegatividade

- Os átomos mais eletronegativos têm **carga nuclear efetiva maior e raios menores**, pois isso maximiza a interação dos elétrons de valência (inclusive os que estão na ligação covalente) com o núcleo;
- A eletronegatividade de Pauling varia de 0,7 (Fr) a 4,0 (F), mas memorizar tais valores não é importante. Por outro lado, saber quais os átomos são mais eletronegativos em um grupo é bastante relevante na determinação do tipo de cada ligação e na polaridade da ligação e da molécula. Essa **comparação relativa** pode ser feita via inspeção da **tabela periódica**.

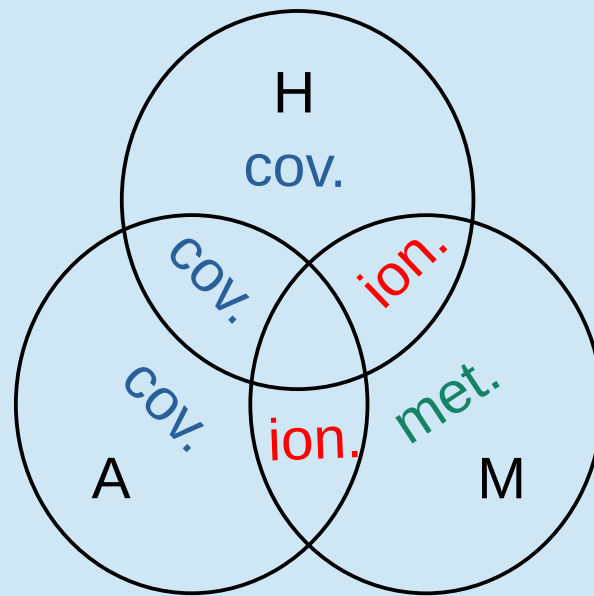


# Eletronegatividade e tipos de ligação

- Podemos inferir se a ligação tender a ser covalente (isto é, temos uma molécula) ou iônica (formando substâncias sólidas iônicas);

**Método 1:** identificando os elementos na tabela, e se são metais (M), ametais (A) e hidrogênio (H).

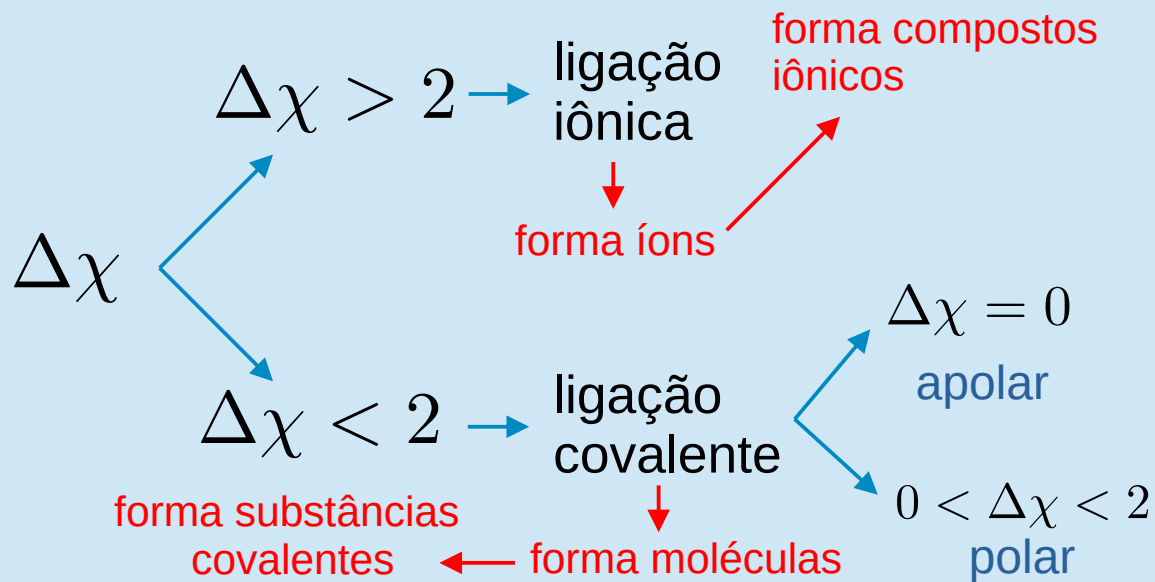
H + H → Ligação covalente apolar  
H + A → Ligação covalente polar  
A + A → Ligação covalente apolar  
A + A' → Ligação covalente polar  
M + M → Ligação metálica  
M + M' → Ligação metálica  
M + H → Ligação iônica  
M + A → Ligação iônica



Tal abordagem, porém, tem várias exceções. Ex.:  $\text{SnCl}_4$  é covalente embora seja M + A

# Eletronegatividade e tipos de ligação

- Método 2:** Cálculo de  $\Delta\chi = \chi_A - \chi_B$  para o par de átomos AB, onde  $\chi_A$  é a eletronegatividade do átomo mais eletronegativo e  $\chi_B$  é a eletronegatividade do átomo menos eletronegativo. Portanto:



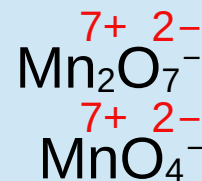
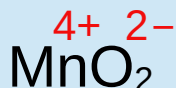
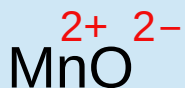
**Ex.:**  $\text{SnCl}_4$

$$\Delta\chi = \chi_{\text{Cl}} - \chi_{\text{Sn}} = 3,16 - 1,96 = 1,2$$

Logo é covalente polar!

# Eletronegatividade e tipos de ligação

- O método 2, no entanto, não funciona tão bem quando metais com **diferentes estados de oxidação** formam compostos. Em geral, quanto maior o estado de oxidação do metal (sobretudo acima de +4) mais significativo o grau de covalência;
- Quanto maior o estado de oxidação mais difícil retirar o elétron do metal, então a tendência é que haja um compartilhamento (ligação covalente) ao invés da transferência para o ametal (ligação iônica).



Ligação iônica

Ligação covalente

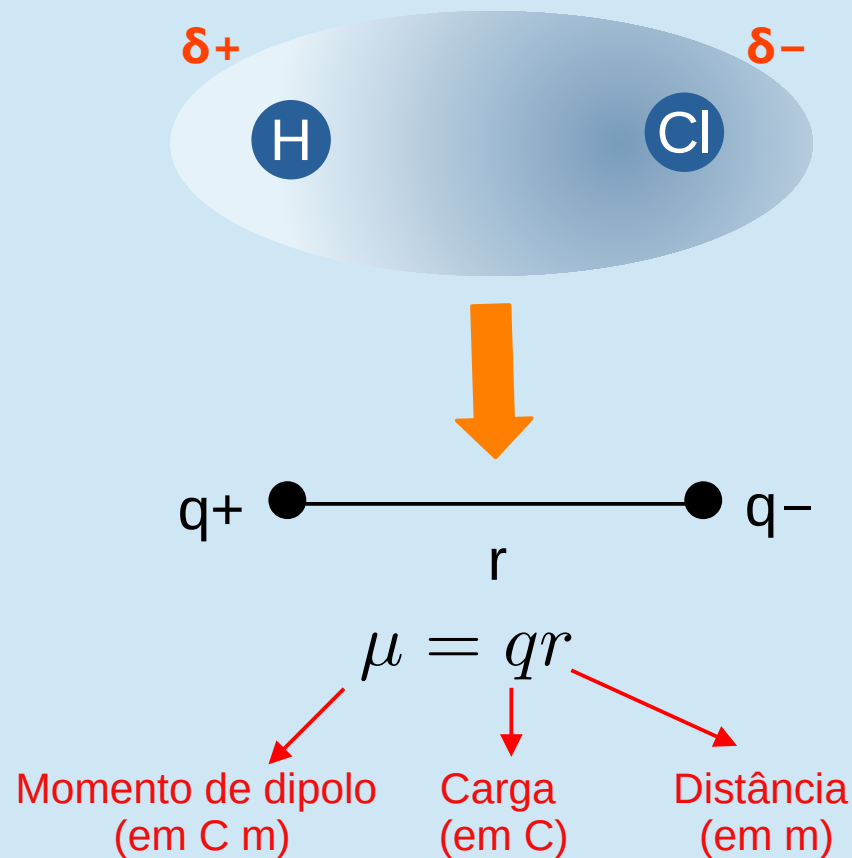
# Eletronegatividade e tipos de ligação

1A												3A	4A	5A	6A	7A	8A	
H <sup>+</sup>																H <sup>-</sup>	G A S E S  N O B R E S	
Li <sup>+</sup>															N <sup>3-</sup>	O <sup>2-</sup>		F <sup>-</sup>
Na <sup>+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Metais de transição											Al <sup>3+</sup>		P <sup>3-</sup>	S <sup>2-</sup>		Cl <sup>-</sup>
K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Sc <sup>3+</sup>	Ti <sup>4+</sup>	V <sup>5+</sup> V <sup>4+</sup>	Cr <sup>3+</sup>	Mn <sup>2+</sup> Mn <sup>4+</sup>	Fe <sup>2+</sup> Fe <sup>3+</sup>	Co <sup>2+</sup> Co <sup>3+</sup>	Ni <sup>2+</sup>	Cu <sup>+</sup> Cu <sup>2+</sup>	Zn <sup>2+</sup>				Se <sup>2-</sup>	Br <sup>-</sup>		
Rb <sup>+</sup>	Sr <sup>2+</sup>								Pd <sup>2+</sup>	Ag <sup>+</sup>	Cd <sup>2+</sup>		Sn <sup>2+</sup> Sn <sup>4+</sup>	Sb <sup>3+</sup> Sb <sup>5+</sup>	Te <sup>2-</sup>	I <sup>-</sup>		
Cs <sup>+</sup>	Ba <sup>2+</sup>								Pt <sup>2+</sup>	Au <sup>+</sup> Au <sup>3+</sup>	Hg <sub>2</sub> <sup>2+</sup> Hg <sup>2+</sup>		Pb <sup>2+</sup> Pb <sup>4+</sup>	Bi <sup>3+</sup> Bi <sup>5+</sup>				

**Figura 7.15 Estados de oxidação representativos dos elementos.** Observe que o hidrogênio apresenta números de oxidação positivo e negativo, sendo 1 e -1.

# Momento de dipolo

- A ligação covalente polar pode ser tratada aproximadamente como um dipolo elétrico, em que as cargas  $q^+$  e  $q^-$  estão separadas por uma distância  $r$ . Em moléculas diatômicas, como a única ligação é polar, a molécula é dita polar. Moléculas polares interagem fortemente entre si e com íons, levando a várias propriedades relevantes;
- O momento de dipolo permite quantificar a polaridade de uma ligação.





# Momento de dipolo

- Usamos essa equação para determinar o momento de dipolo de uma molécula, mas as unidades são tipicamente:
- Ao invés de C m usa-se Debye (D):  $1 \text{ D} = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
- Ao invés de C usa-se unidades da carga do elétron:  $1 e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- Ao invés de m usa-se Å:  $1 \text{ m} = 10^{-10} \text{ Å}$

$$\mu = qr$$

Momento de dipolo  
(em D)

Carga  
(em e)

Distância  
(em m)

A carga é tão maior quanto a diferença de eletronegatividade entre os átomos

A distância entre eles é tão maior quanto os raios dos átomos

# Momento de dipolo

- Ex.: Considere a molécula LiF, cujo momento de dipolo é 6,28 D e o comprimento de ligação é 1,53 Å. Determine a carga dos átomos.

$$\mu = q \cdot r \Rightarrow q = \frac{\mu}{r} = \frac{6,28 \cancel{\text{D}}}{1,53 \cancel{\text{Å}}} \left( \frac{3,34 \cdot 10^{-30} \cancel{\text{C m}}}{1 \cancel{\text{D}}} \right) \left( \frac{1 \cancel{\text{Å}}}{10^{-10} \cancel{\text{m}}} \right) \left( \frac{1 e}{1,602 \cdot 10^{-19} \cancel{\text{C}}} \right) = 0,857 e$$

- Se a ligação fosse completamente iônica (como esperado já que Li é um metal e F é um ametal, e a diferença de eletronegatividade entre eles é maior do que 2 (3,98 – 0,98 = 3,00) a carga seria 1. Mas ela é menor porque há certa parcela de compartilhamento entre os átomos. Ou seja, a ligação não é 100% iônica. Na verdade, nenhuma ligação tem tal característica: **haverá sempre um grau de covalência na ligação**. Por outro lado, ligações 100% covalentes existem: as ligações entre átomos de um mesmo elemento (como no H<sub>2</sub> ou no Cl<sub>2</sub>).

# Momento de dipolo

- Se carga e distância seguem tendências opostas, em geral a separação de **carga influencia mais** o momento de dipolo que a distância:

**Tabela 8.3** Comprimentos de ligação, diferenças de eletronegatividade e momentos de dipolo dos halogenetos de hidrogênio.

Composto	Comprimento da ligação (Å)	Diferença de eletronegatividade	Momento de dipolo (D)
HF	0,92	1,9	1,82
HCl	1,27	0,9	1,08
HBr	1,41	0,7	0,82
HI	1,61	0,4	0,44

$r$  cresce

$\chi$  decresce

$\mu$  decresce

**Calcule as cargas parciais dos átomos na molécula de BrCl, considerando que o momento de dipolo é 0,57 D e os raios atômicos do Br e do Cl são 1,20 Å e 1,02 Å.**

Distância aproximada:  $(1,20 + 1,02) \text{ Å} = 2,22 \text{ Å}$  Na verdade deve ser menor que isso (sobreposição dos orbitais)

$$\mu = q \cdot r \Rightarrow q = \frac{\mu}{r} = \frac{0,57 \text{ D}}{2,22 \text{ Å}} \left( \frac{3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}}{1 \text{ D}} \right) \left( \frac{1 \text{ Å}}{10^{-10} \text{ m}} \right) \left( \frac{1 e}{1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \right)$$
$$q = \frac{\mu}{r} = \frac{0,57 \cdot 3,34}{2,22 \cdot 1,602} \cdot 10^{-30+10+19} e = 0,054 e$$

A carga é próxima de zero, como esperado, já que a diferença de eletronegatividade entre cloro e bromo é pequena (0,1), e a molécula é muito pouco polar.

**Obrigado e boa sorte!**



# Eletronegatividade e tipos de ligação

- Podemos inferir se a ligação tender a ser covalente (isto é, temos uma molécula) ou iônica (formando substâncias sólidas iônicas);

$\Delta\chi_P$	0	0 – 2	> 2
Ligação	covalente apolar	covalente polar	iônica
Exemplo	$\overset{0}{\text{F}} \text{---} \overset{0}{\text{F}}$	$\overset{\delta+}{\text{H}} \text{---} \overset{\delta-}{\text{F}}$	$\text{Li}^+ \text{Cl}^-$
Cargas	sem cargas permanentes	com cargas parciais	com cargas totais
Tipo de substância	covalente (feita de moléculas)	covalente (feita de moléculas)	iônica (feita de íons)

DETERMINE AS ESTRUTURAS DE LEWIS DO  $\text{NO}_3^-$

4.5, 8.6

## ESTRUTURAS DE LEWIS

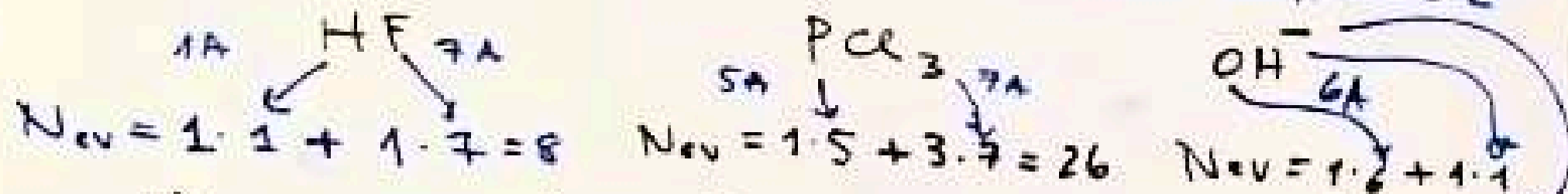
DETERMINE AS ESTRUTURAS DE LEWIS DAS MOLECULAS ABAIXO:

HF

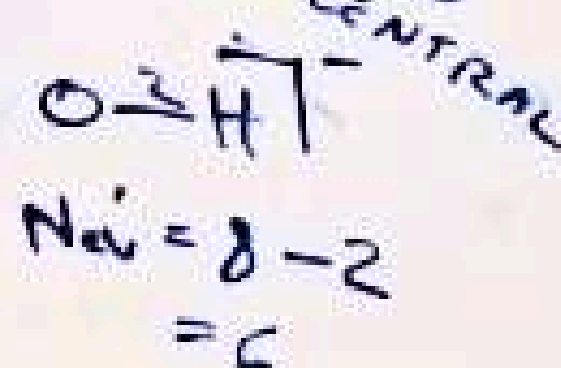
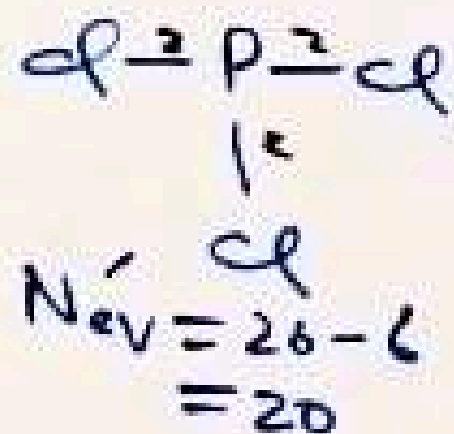
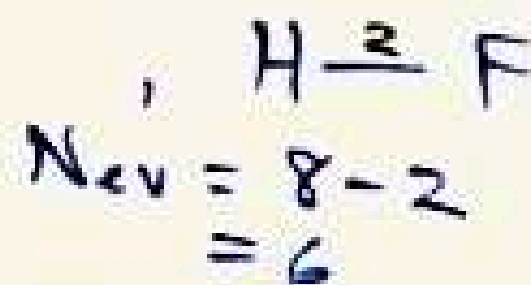
$\text{PCl}_3$

$\text{OH}^-$

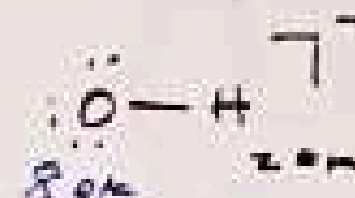
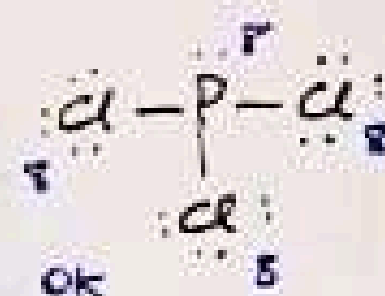
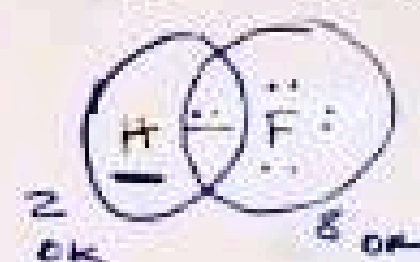
- 1) SOMAR N° DE ELÉTRONS DE VALÊNCIA DE TODOS OS ÁTOMOS → ANION: ADICIONA  $e^-$   
CATION: RETIRAR  $e^-$



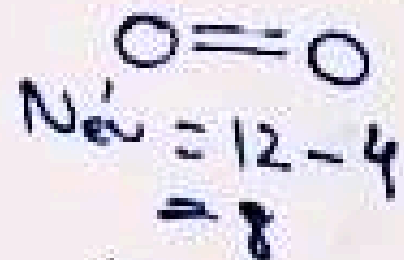
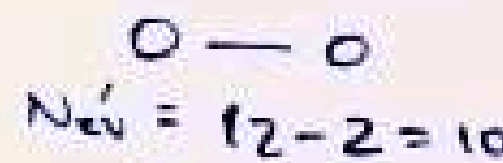
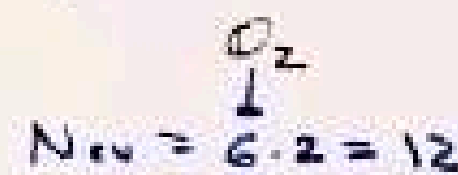
- 2) CONECTAR ÁTOMOS POR LIGAÇÕES SIMPLES  
ÁTOMOS EM MENOR QUANTIDADE ⇒ ÁTOMO CENTRAL



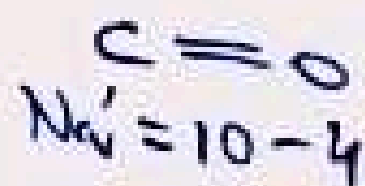
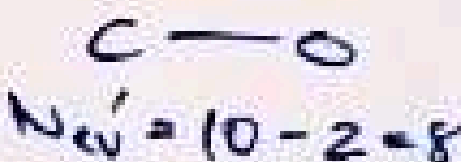
- 3) PREENCHER CAMADA DE VALÊNCIA DOS ÁTOMOS COM OS ELÉTRONS RESTANTES.



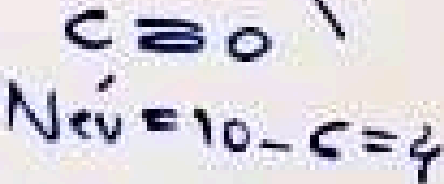
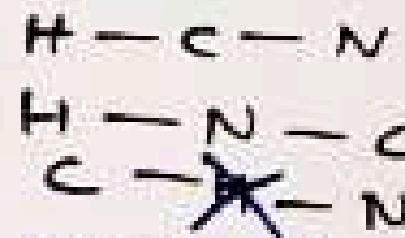
- 4) SE NÃO CONSEGUIR PREENCHER CAMADA DE VALÊNCIA, FAZER DUPLAS E TRIPLAS NA ETAPA 2:

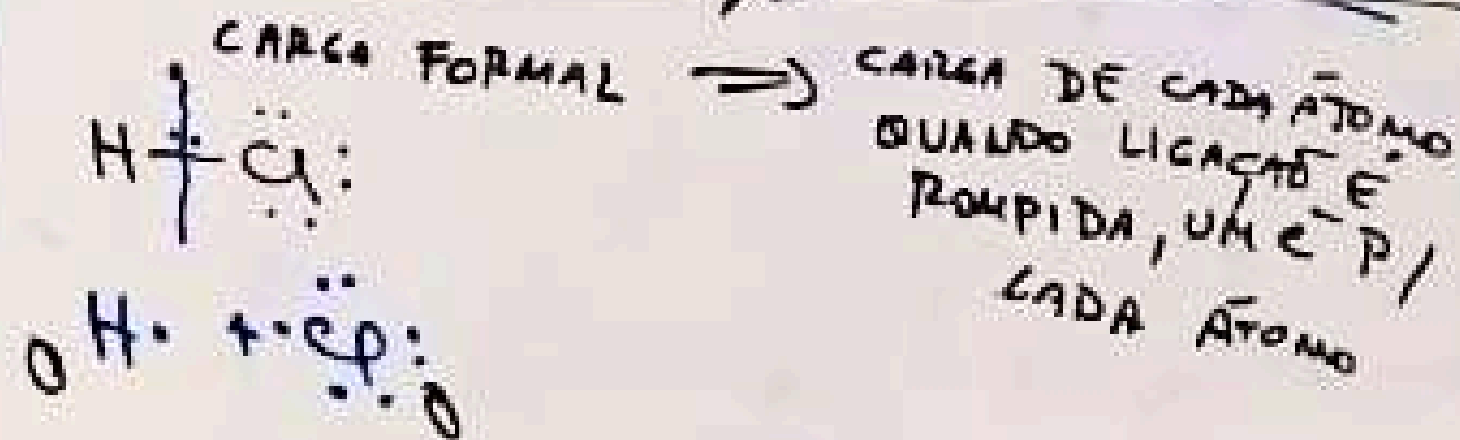
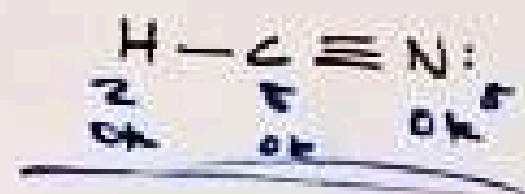
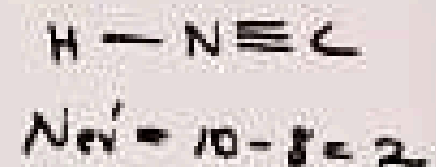
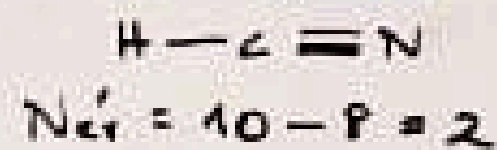
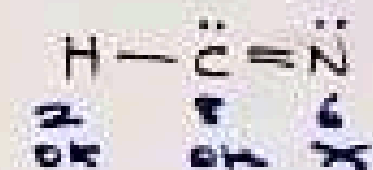
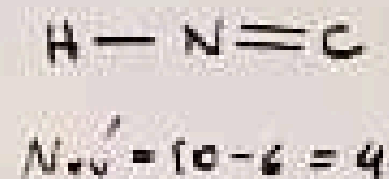
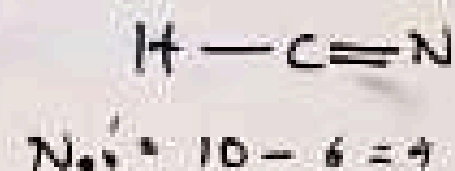
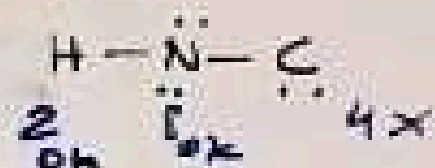
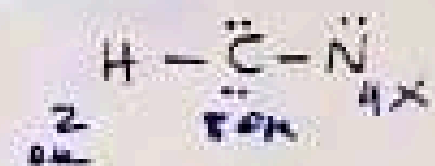
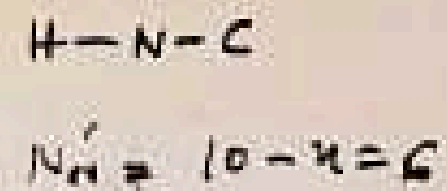
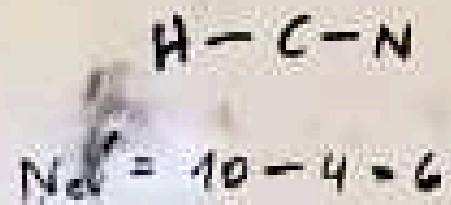


CO



HCN

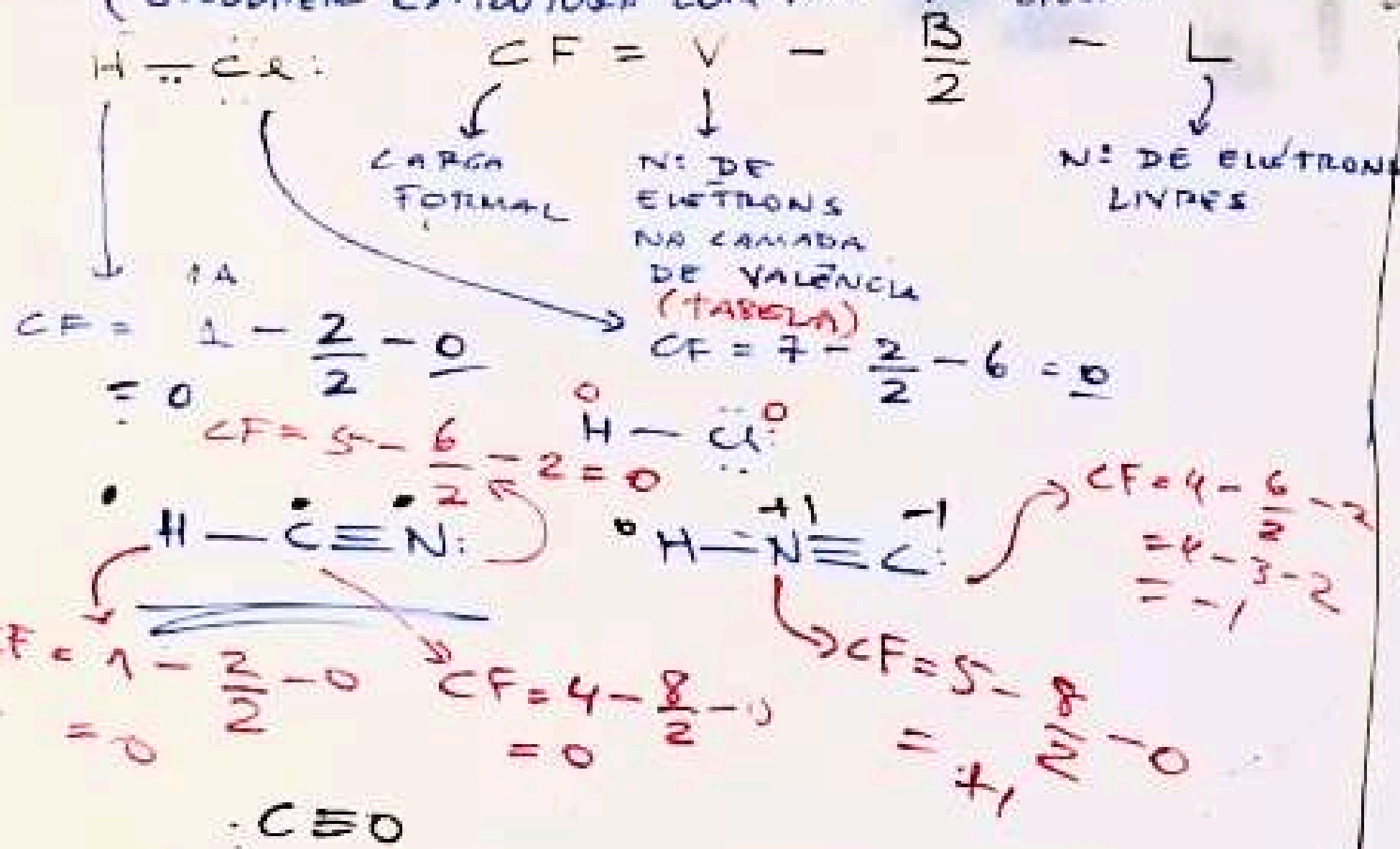




DETERMINE AS ESTRUTURAS DE LEWIS DO  $\text{NO}_3^-$

8.5, 8.6

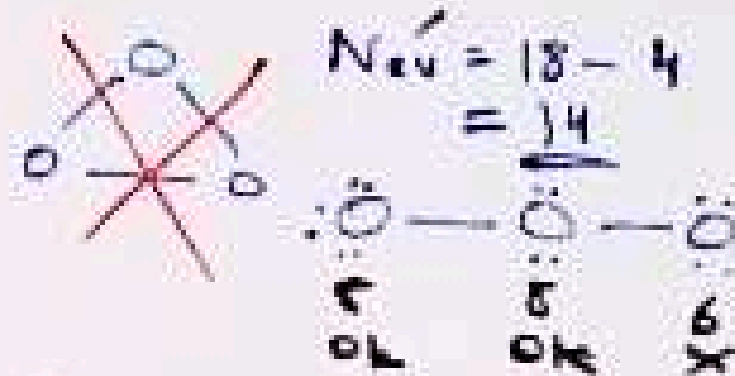
5) SE HOUVEREM MAIS DE UMA ESTRUTURA DE LEWIS POSSÍVEL, CALCULAR CARGA FORMAL DE CADA ÁTOMO  
COLHER ESTRUTURA COM MENOR SEPARAÇÃO DE CARGA  
Nº DE ELÉTRONS LIGADOS



6) SE ESTRUTURAS DE LEWIS POSSUEM MESMA SEPARAÇÃO DE CARGA, SÃO HÍBRIDOS DE RESSONÂNCIA



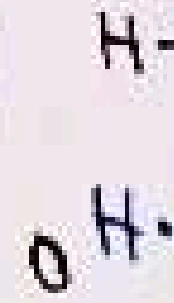
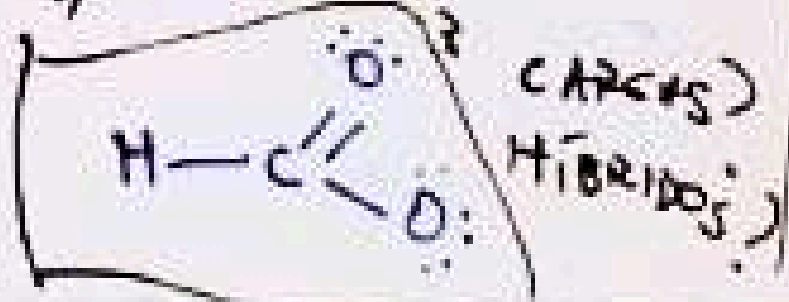
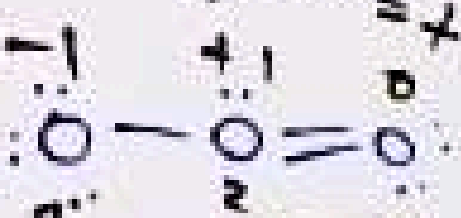
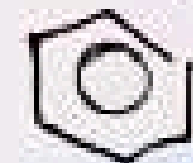
$N_{ev} = 6 \cdot 3 = 18$



$N_{ev} = 18 - 6 = 12$



MAIS ESTRUTURAS  $\Rightarrow$  MAIOR ESTABILIDADE DE RESSONÂNCIA



## EXCEÇÕES À REGRA DE OCTETOS

### 1) NOs IMPAR

$$NO \rightarrow N_v = 5 + 1 + 6 + 1 = 11$$

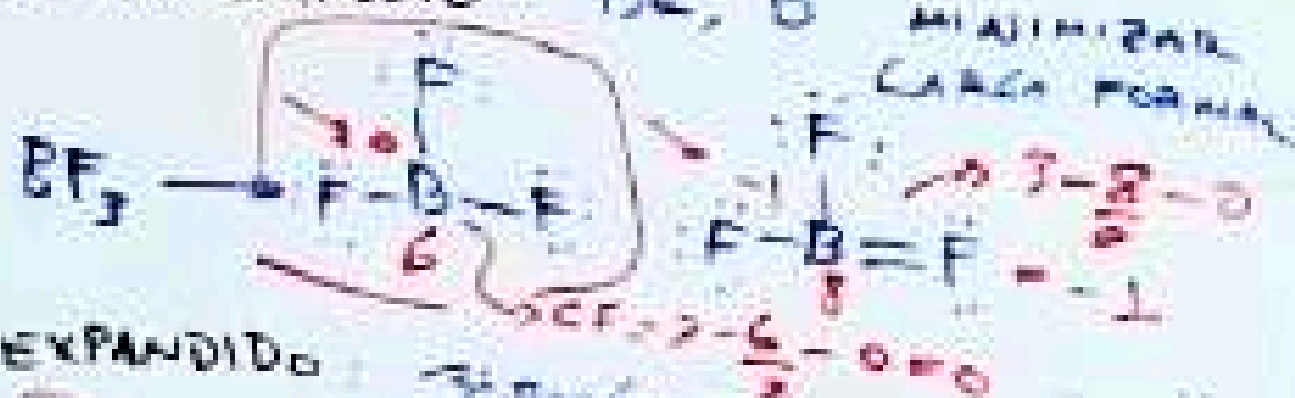
$$N-O \quad N_v = 11 - 2 = 9$$

$$N=O \quad N_v = 11 - 4 = 7$$

8V



### 2) OCTETO INCOMPLETO: $B$ , $Be$ , $B$



MINIMIZAR CARGA FORMAL

### 3) OCTETO EXPANDIDO



## GEOMETRIA MOLECULAR

LEWIS: CONECTIVIDADE, TIPO DE LIGAÇÃO, AL DA LIGAÇÃO

VSEPR: MODELO DE REPULSÃO DOS ELÉTRONS DA CAMADA DE VALÊNCIA

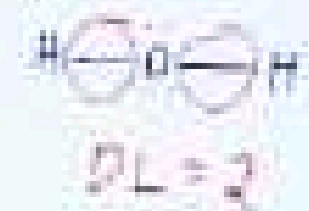
DOMÍNIO ELÉTRÔNICO

REGIÕES COM ALTA DENSIDADE ELÉTRÔNICA AO REDOR DE UM ÁTOMO

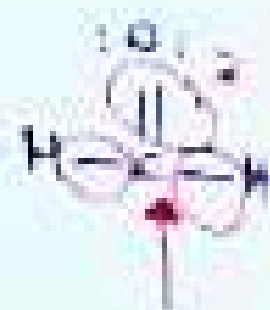
DOMÍNIO NÃO LIGANTE: ELÉTRONS LIVRES



DOMÍNIO LIGANTE: ELÉTRONS COMPARTILHADOS



DE = DL + DN



DE

GEOMETRIA



2



LINEAR



LINEAR

3



TRIANGULAR PLANA



TETRAEDRO

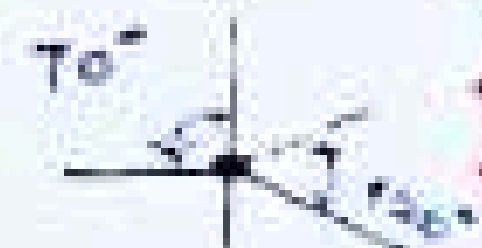
4



TETRAEDRO



TETRAEDRO



BIPIRAMIDE TRIGONAL



TRIGONAL BIPYRAMIDE

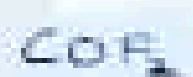
5



OCTAEDRO

6

• DETERMINAR A GEOMETRIA DO MOLÉCULA



1) FAZER ESTRUTURAS DE LONIS

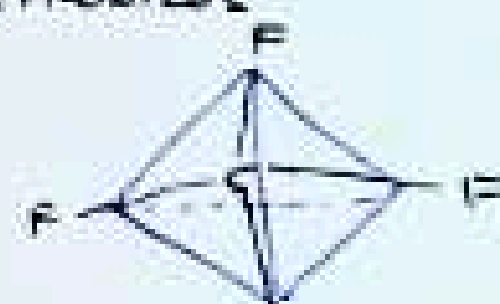


ÁTOMO CENTRAL



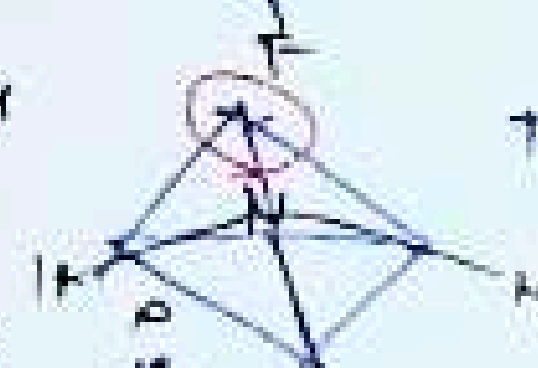
2) DOMÍNIOS ELETRÔNICOS

$CF_4$ : DE=4



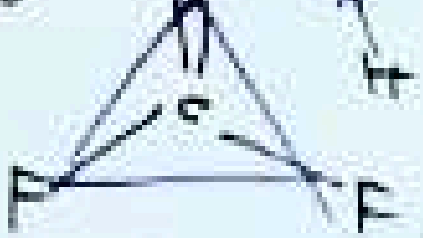
TETRAEDRO

$NH_3$ : DE=4



TETRAEDRO

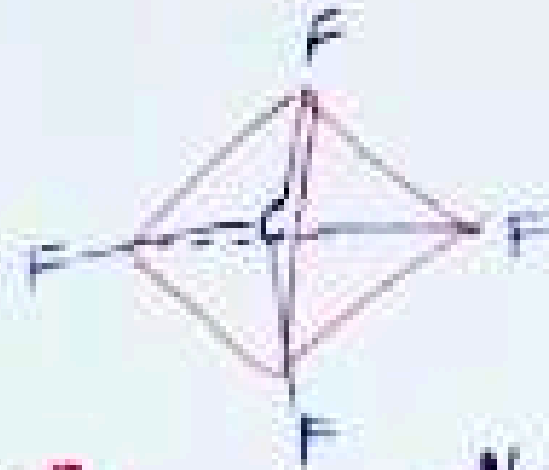
$COF_2$ : DE=3



TRIANGULAR PLANA



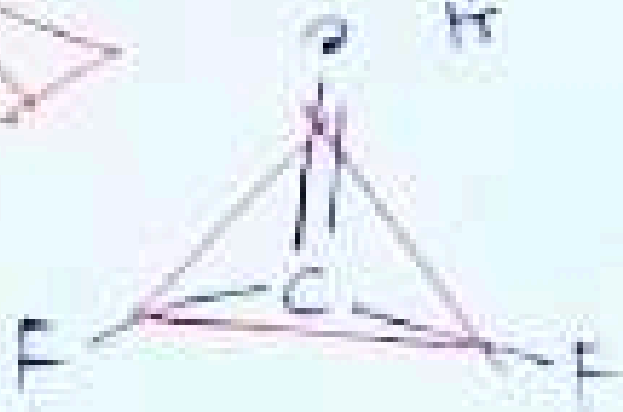
### 3) DOMÍNIOS LIGANTE E GEOMETRIA MOLECULAR



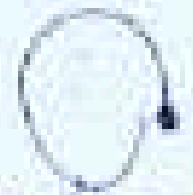
TETRAÉDRICA



PIRÂMIDE TRIGONAL



TRIGONAL PLANA

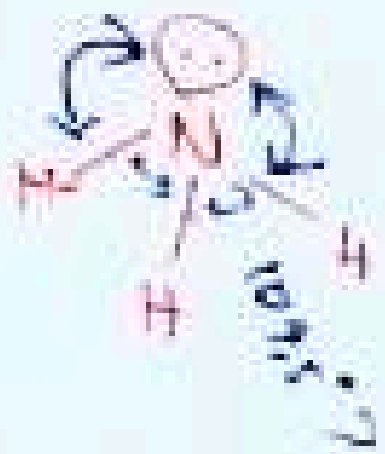


ELÉTRONS LIVRES

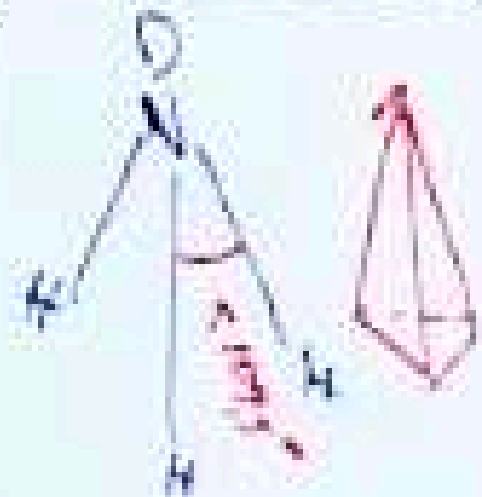


ELÉTRONS LIGADOS

### 4) ÂNGULOS DAS LIGAÇÕES



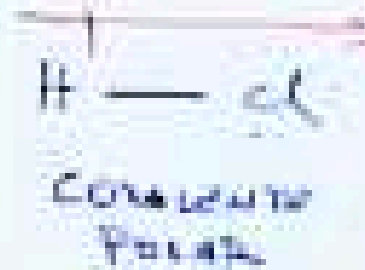
REFRATÍVIDADE



REFRATÍVIDADE



### 5) MOMENTO DE DIPÓLO DA MOLECULA



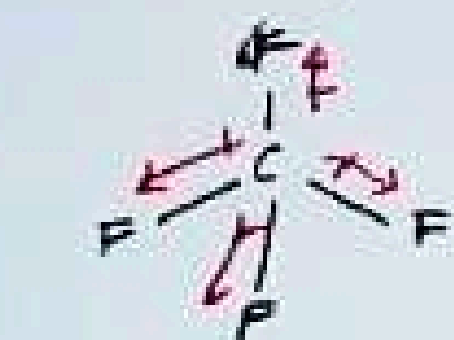
$\mu = \mu_R \neq 0$   
MOLECULA POLAR



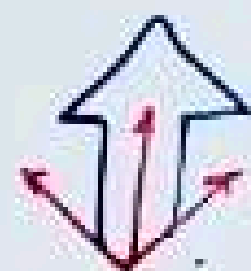
$\mu_R = 0$   
MOLECULA APOLAR



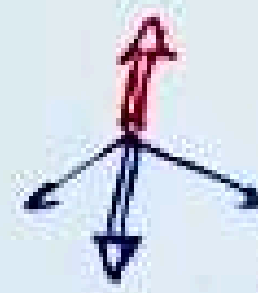
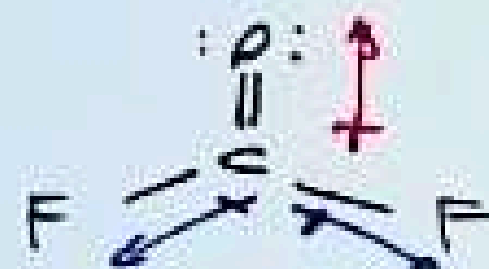
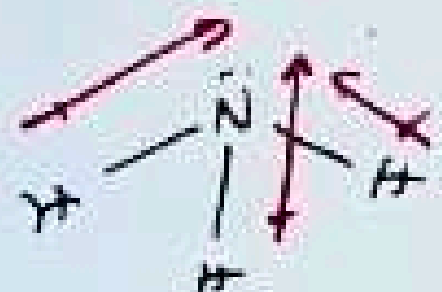
$\mu_R \neq 0$   
MOLECULA POLAR



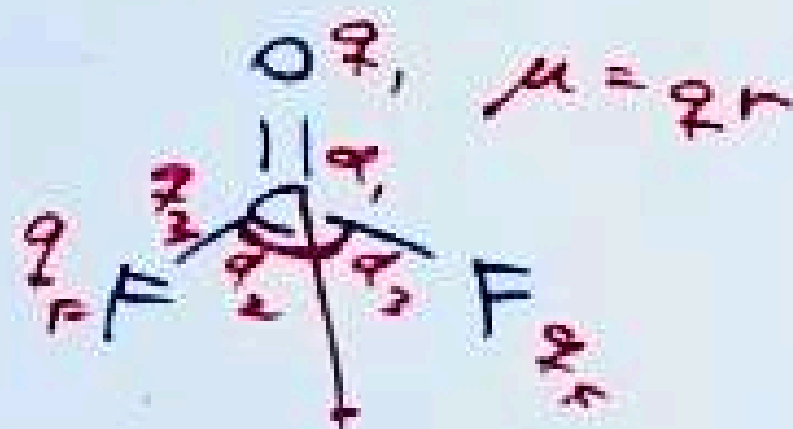
$\mu_R = 0$  APOLAR



$\mu_R \neq 0$  POLAR



$\mu_R \neq 0$  POLAR

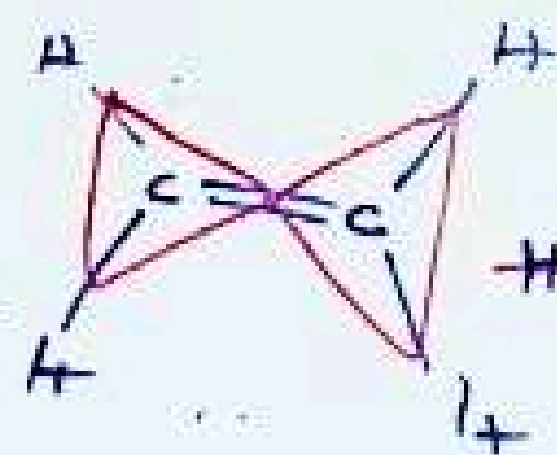
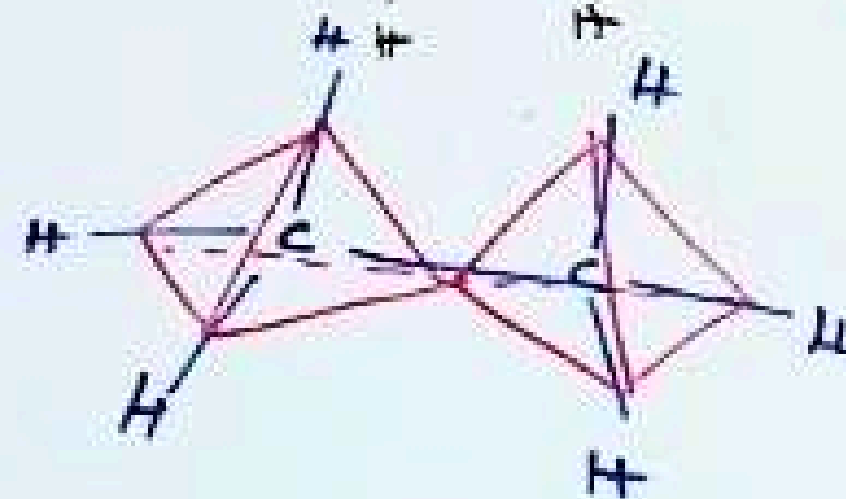
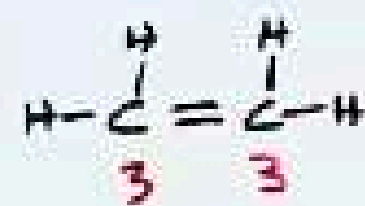


## 6) MAIS DE UM ÁTOMO CENTRAL

$C_2H_6$   
ETANO

$C_2H_4$   
ETENO

$C_2H_2$   
ETINO



# HIBRIDIZAÇÃO

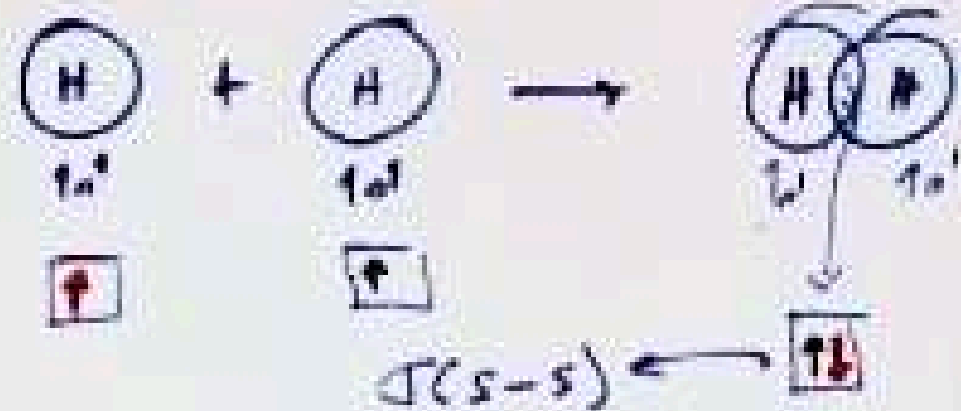
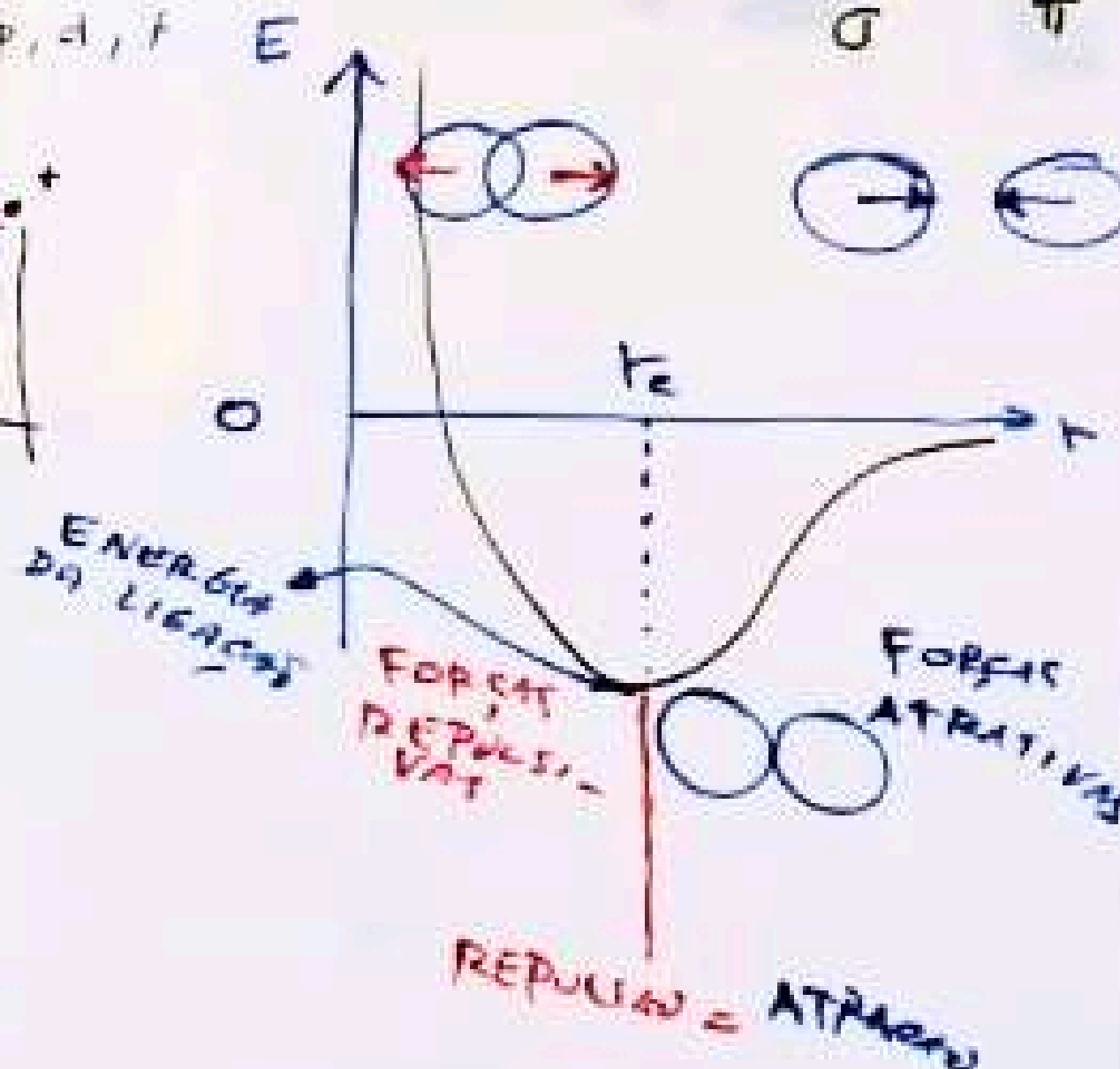
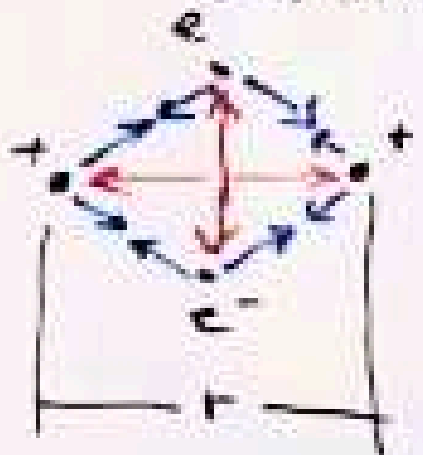
VSEPR  $\Rightarrow$  GEOMETRIA MOLECULAR

SOBREPOSIÇÃO DOS ORBITAIS

DO ATOMO

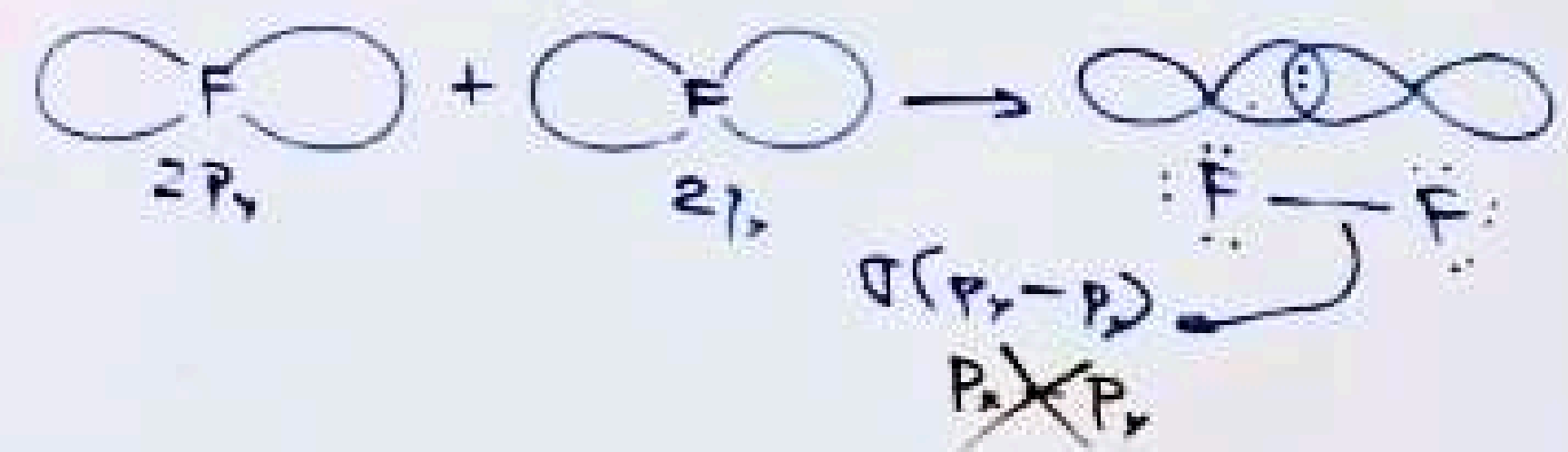
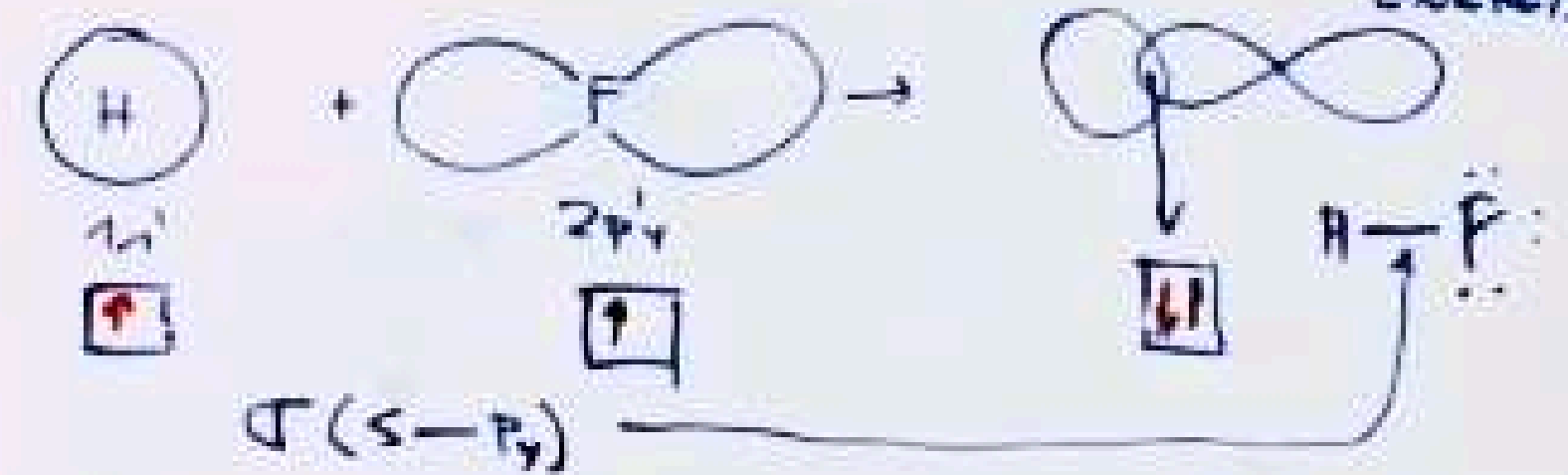
ORBITAIS DE ÁTOMOS  
s, p, d, f

ORBITAIS DA LIGAÇÃO

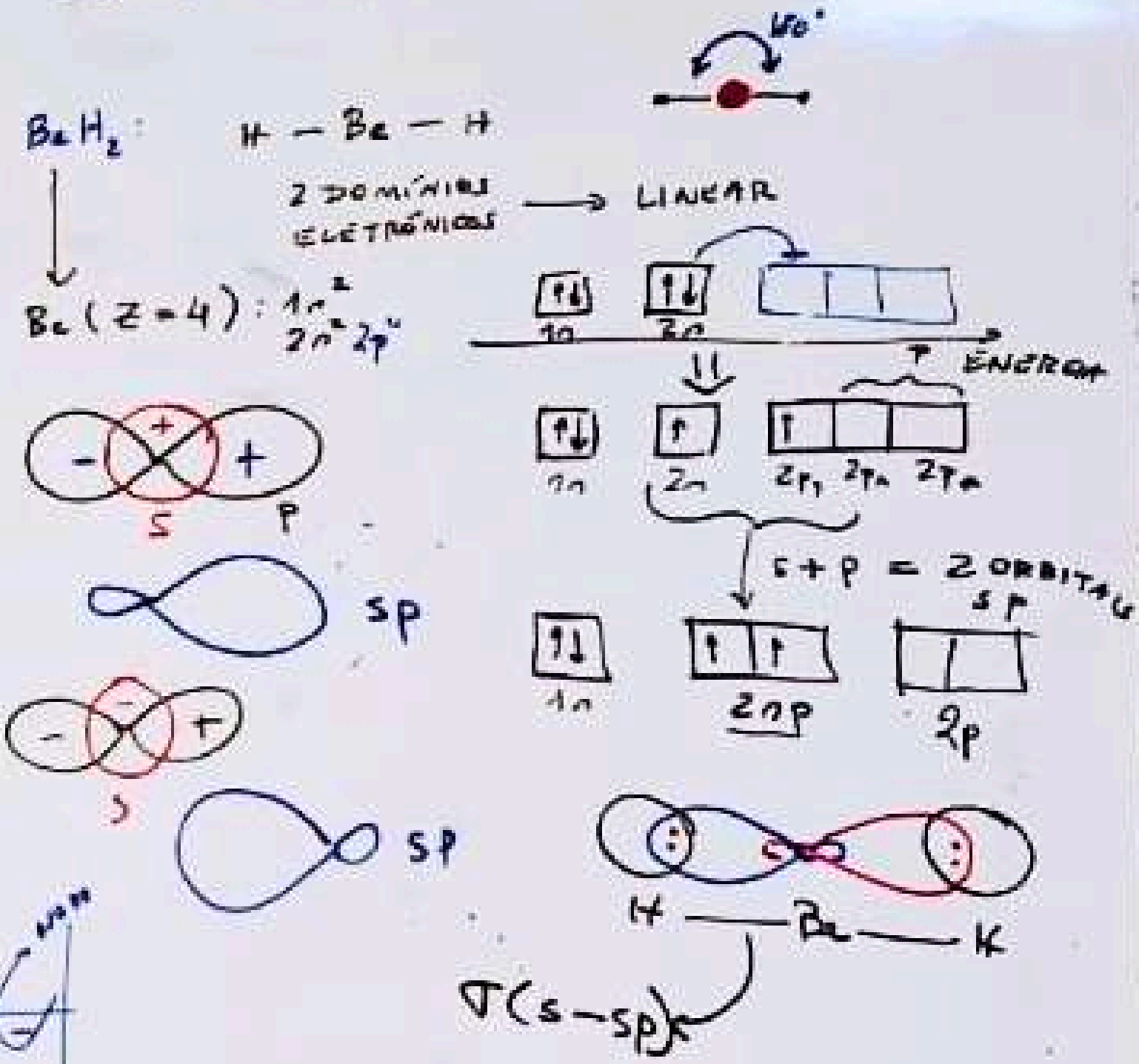


LIGAÇÃO AO LONGO DO EIXO DA LIGAÇÃO  
 $\downarrow$   
 $\sigma$

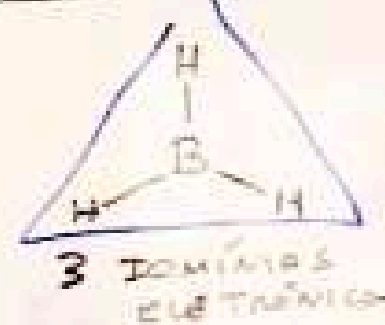
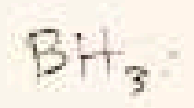
F (Z=9):  $\frac{1s^2}{2s^2} \frac{2p^5}{2p^5}$  CAROÇO



# ORBITAIS HÍBRIDAS

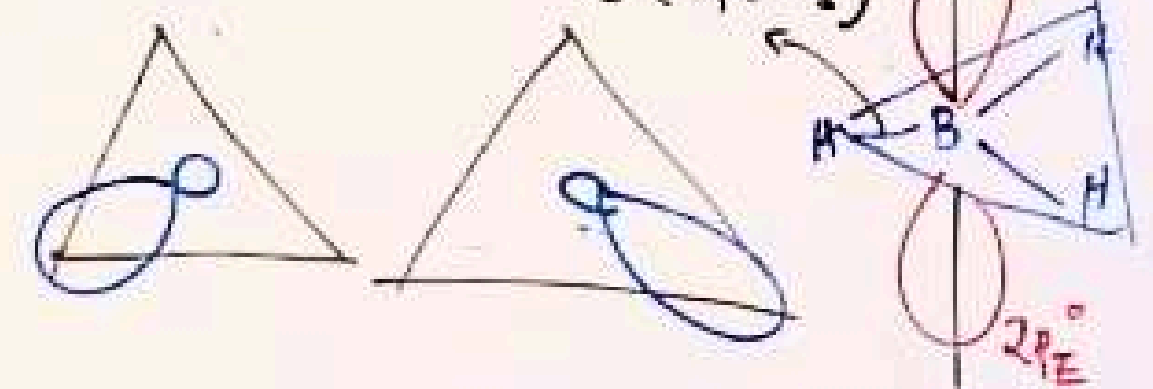
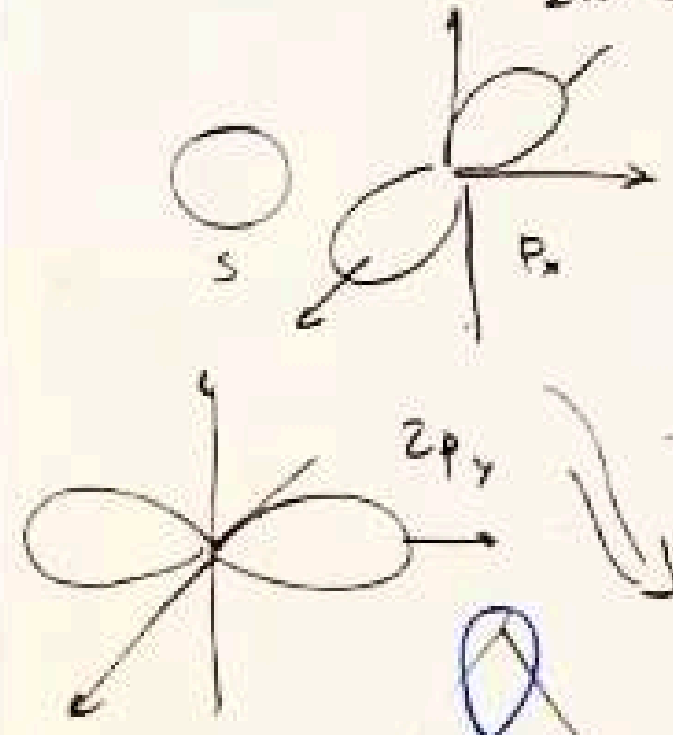
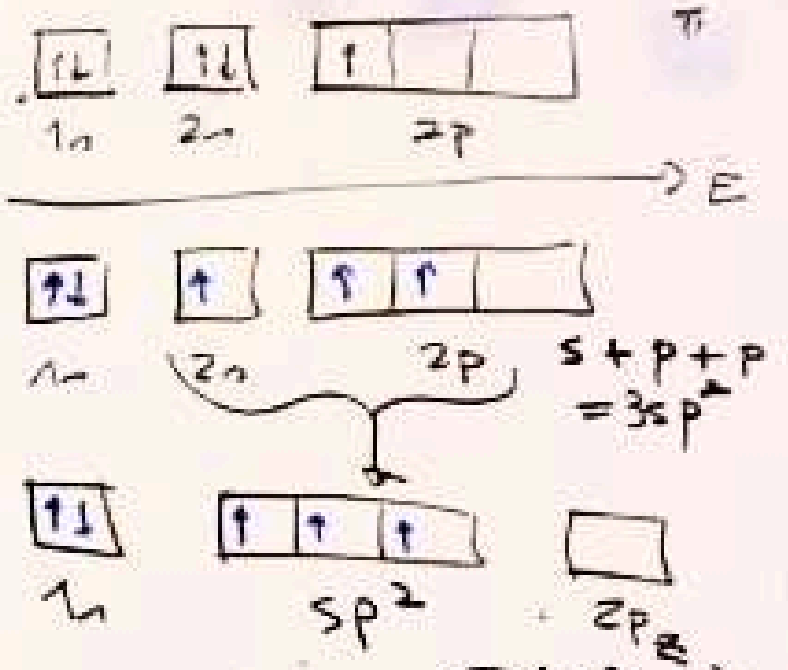


# HIBRIDIZAÇÃO

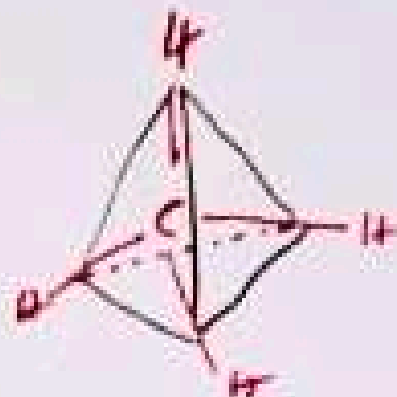


TRIGONAL PLANA

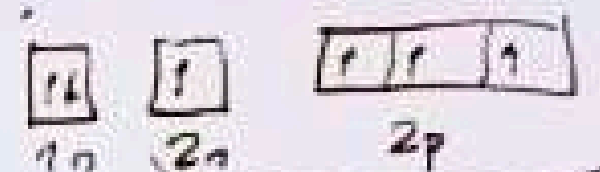
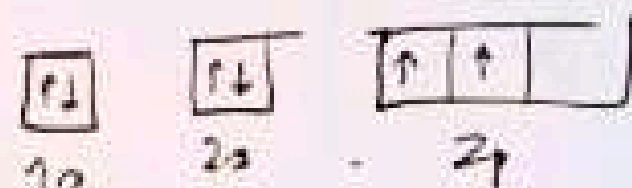
3 DOMÍNIOS ELETRÔNICOS



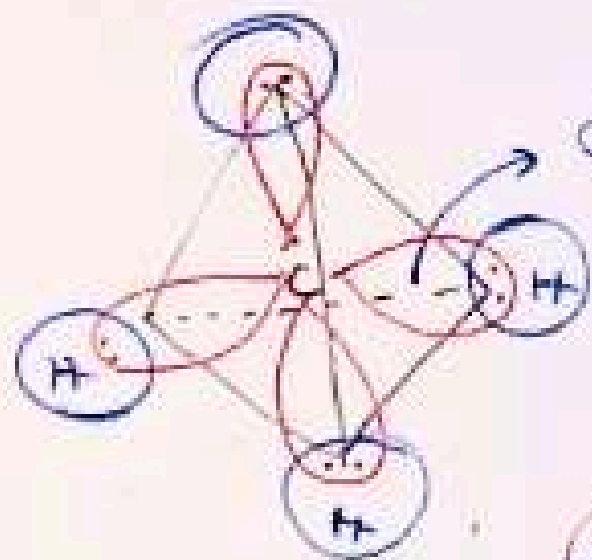
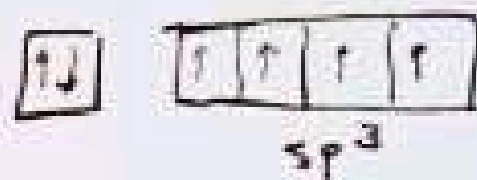
CH<sub>4</sub>:



C (Z=6): 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>

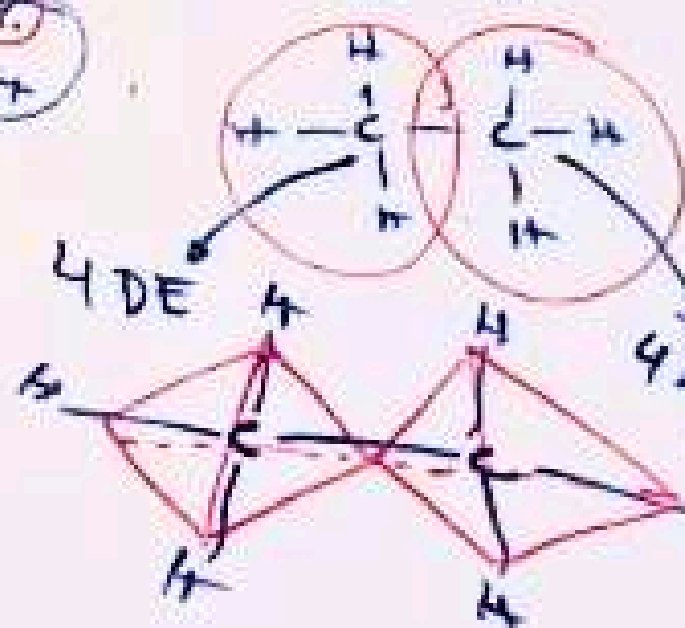


$$s + p + p + p = 4 sp^3$$



$\sigma(sp^3-s)$

C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>



4 DE

4 DE

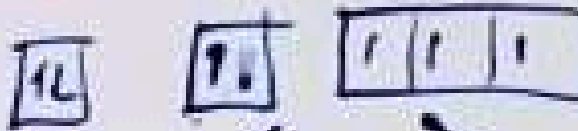
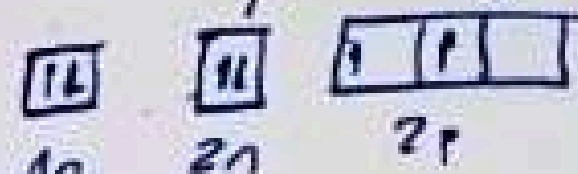
C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>



C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>



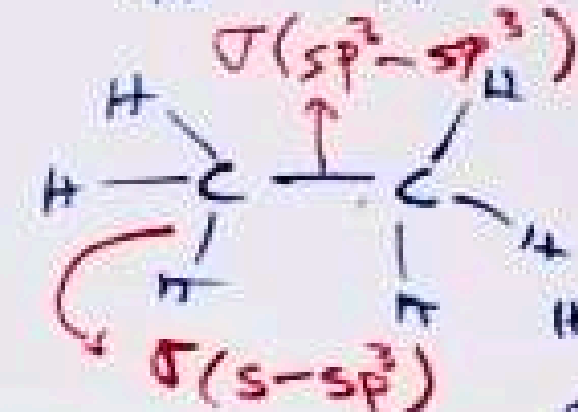
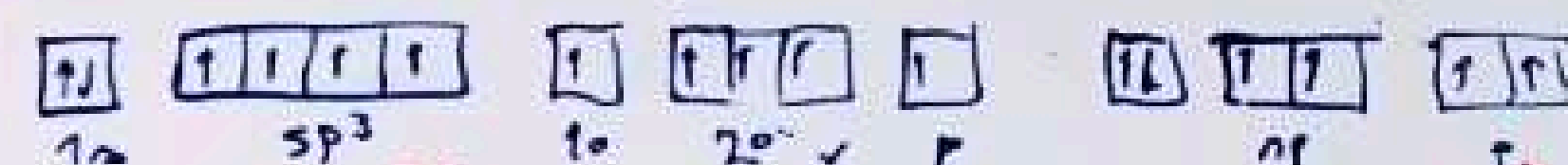
2 DE



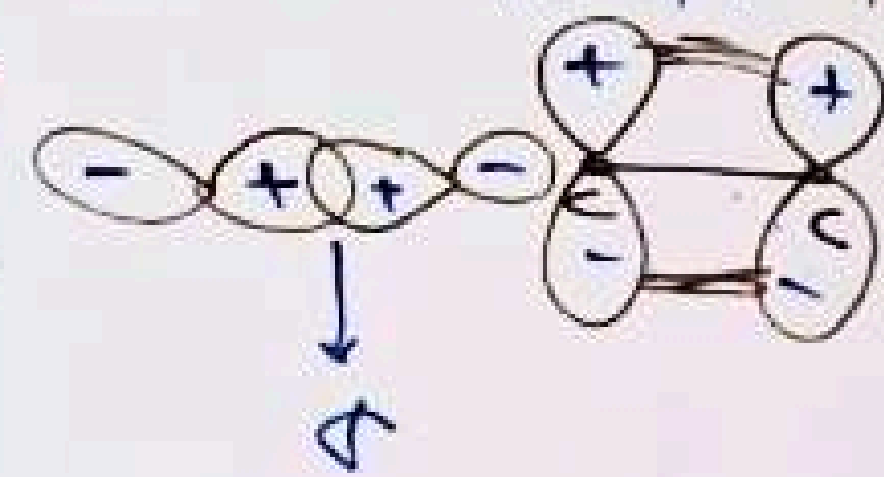
4 DE

3 DE

2 DE



$\sigma(sp^2-sp^2)$



$\sigma(s-sp^2)$

$\pi(p_x-p_x)$

$\pi(p_y-p_y)$

$\pi(sp^2-sp^2)$

$\pi =$  sobrepõeções  
perpendiculares  
ao eixo da  
ligação

# Interações intermoleculares

**Prof. Diego J. Raposo**  
**UPE - Poli**  
**2024.2**  
**11.3**

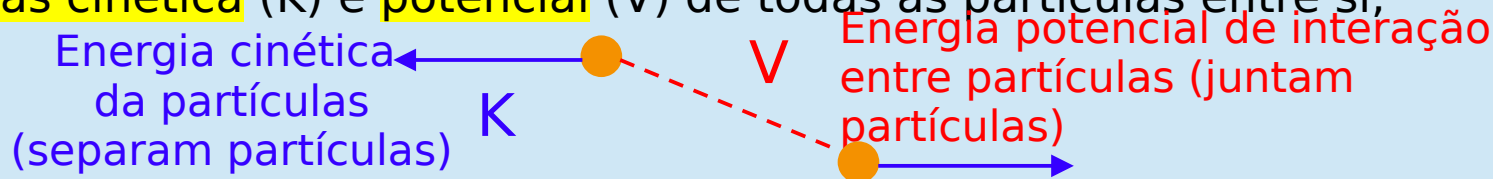
**Sec. 11.1 -**



**Quais tipos de interação permitem que acetona seja solúvel em água e que  $\text{CCl}_4$  seja insolúvel em água.**

# Fases

- **Ligações químicas** são fortes interações entre átomos visando preencher as **camadas de valência**;
- Uma vez preenchidas, os átomos podem interagir de maneira mais fraca, formando agregados que chamamos de **fases**. As interações são chamadas de **interações intermoleculares**;
- As fases mais relevantes são a **gasosa**, a **líquida** e a **sólida**;
- As características das substâncias nessas fases são determinadas pelas **energias cinética** (K) e **potencial** (V) de todas as partículas entre si;



# Fases

Interações **não limitam** movimento das partículas

espontaneamente ocupam volume disponível

Interações **limitam** movimento das partículas

Ocupam um volume definido, mas fluem para adaptar-se a forma do espaço e às

forças mecânicas

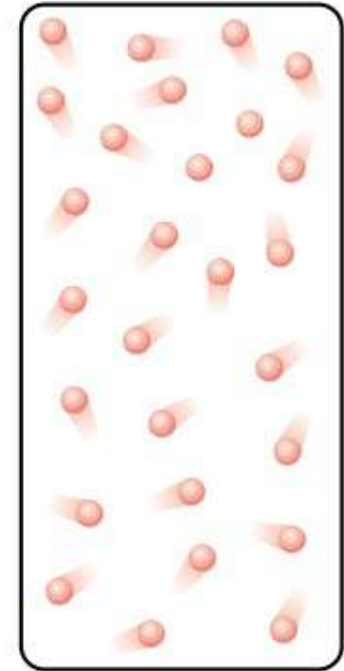
Interações **limitam muito** o movimento das partículas. ocupam um volume definido, com forma própria que resiste a deformações



Sólido



Líquido



Gás

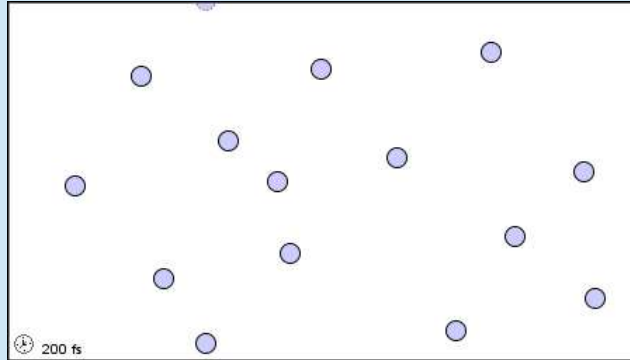
$$K \ll V$$

$$K \approx V$$

$$K \gg V$$

# Espaços vazios

## Gases

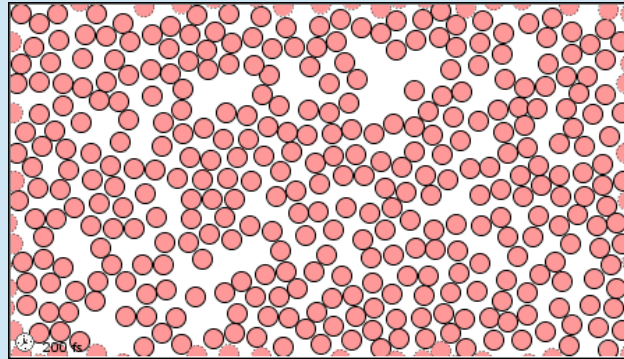


$$K \gg V$$

Muito espaço vazio:

Alta  
compressibilidade  
Baixa densidade

## Líquidos

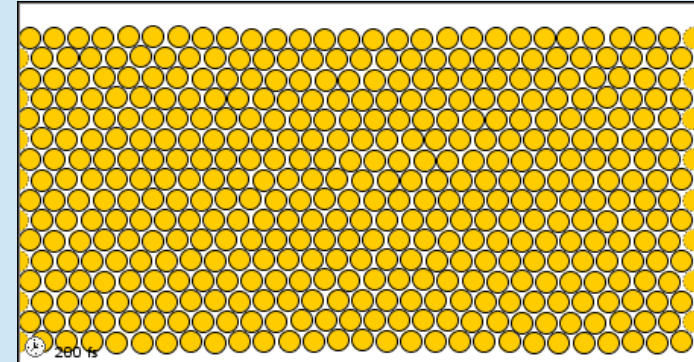


$$K \approx V$$

Pouco espaço vazio:

Baixa  
compressibilidade  
Densidade alta

## Sólidos



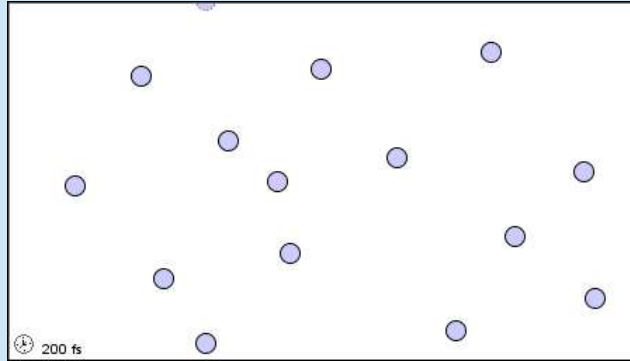
$$K \ll V$$

Sem espaço vazio:

Incompressíveis  
Densidade alta

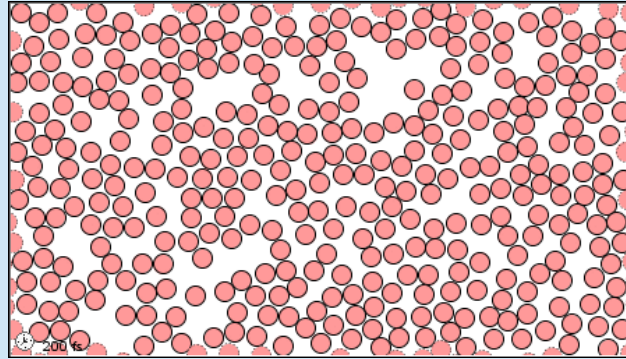
# Espaço

## Gases

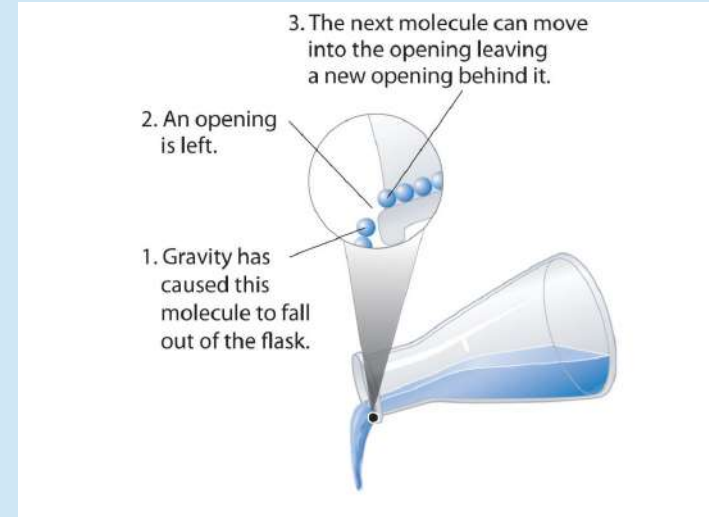


$$K \gg V$$

## Líquidos



$$K \approx V$$



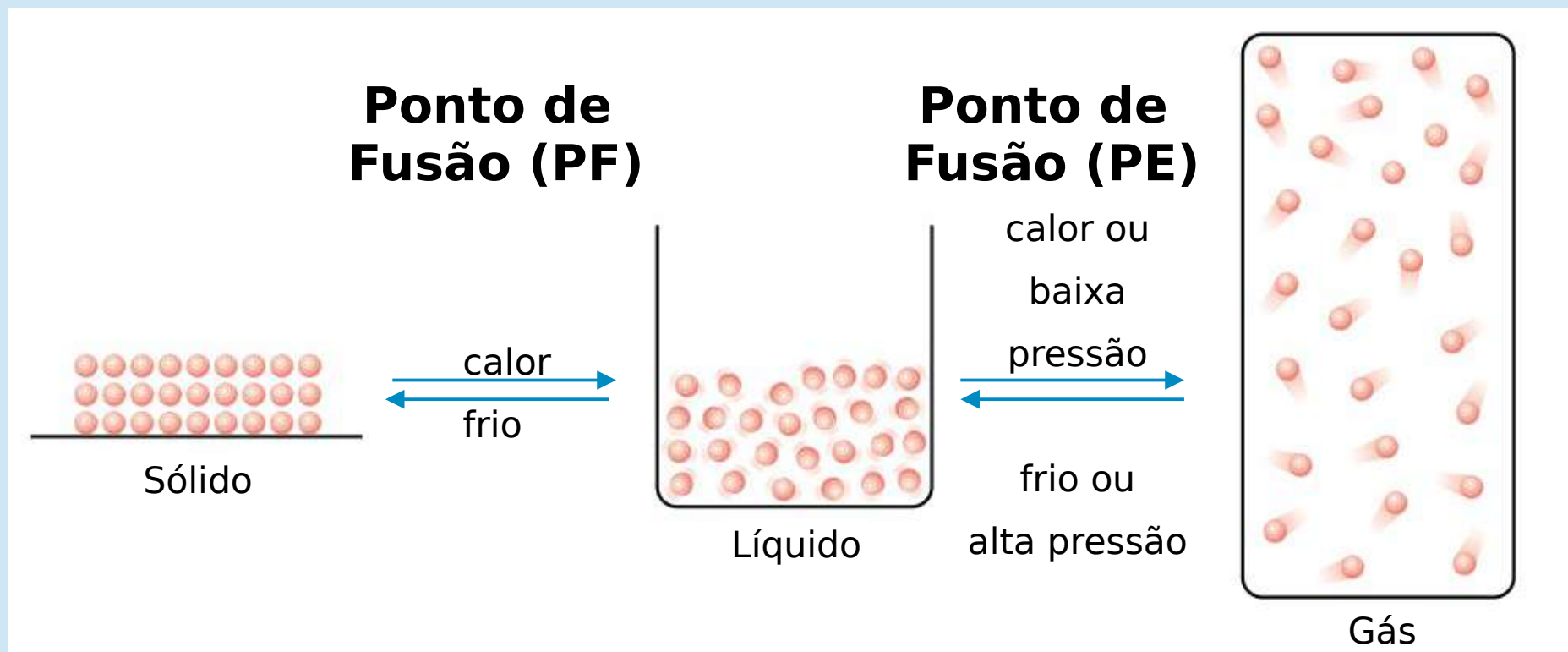
Fluidez diminui,  
Viscosidade aumenta

# V constante, varia K

- A quantidade de **energia cinética** das partículas está relacionada a **temperatura** da substância: quanto maior T, maior o valor de K para cada partícula;
- O fator de interação, ou **energia potencial**, depende da **natureza da substância** (quais átomos e com quais outros estão ligados). Se temos apenas uma substância, então podemos assumir que V é constante.
- Quando a temperatura é tal que  $K \ll V$ , ela estará na fase sólida. Com o aquecimento K aumentará, até o **ponto de fusão** ser atingido (**PF**), e se formará um líquido a partir do sólido. Neste caso as partículas possuem tanto K e V comparáveis. Caso aumentemos T ainda mais, o líquido vaporizará no **ponto de ebulição (PE)**, formando um gás. Dessa vez as partículas tem energia cinética grande o suficiente para não interagirem significativamente,  $K \ll V$ .



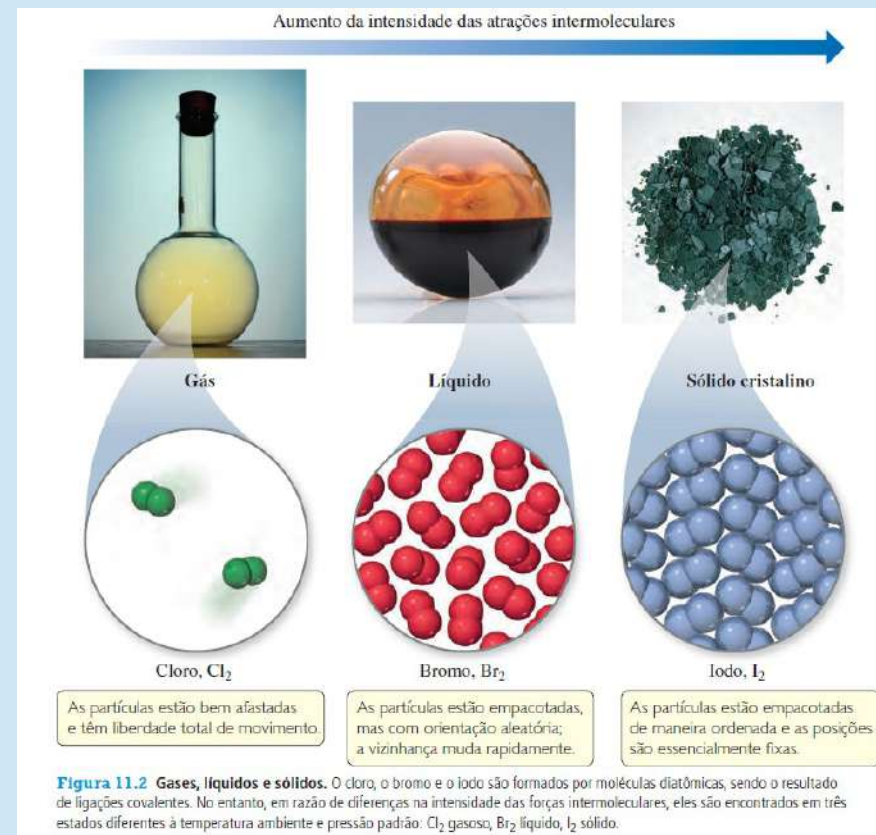
# V constante, varia K



Aumenta T  
Aumenta K

# V constante, varia K

- Como V é fixo, podemos usar a mudança de fase como uma referência para o quão forte as interações entre partículas de uma substância são. **Caso sejam muito elevadas, maiores serão as temperaturas de fusão e ebulição** (mais energia cinética precisa ser fornecida para  $K \gg V$ );
- Em uma temperatura fixa, o estado físico reflete a força relativa de interação entre as substâncias (isto é, K é aproximadamente constante, V varia).



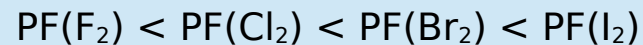
# Comparando PF(ou PE)

- Mas se duas substâncias possuem o mesmo tipo de fase (por exemplo, duas são líquidas), como saber qual possui interações moleculares mais fortes? Pelos pontos de fusão ou de ebulição: quanto maior PF ou PE maior a força.

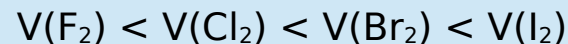


Halogênio	PF (K)	PE (K)
F <sub>2</sub>	53,5	85,0
Cl <sub>2</sub>	172,2	238,6
Br <sub>2</sub>	265,9	331,9
I <sub>2</sub>	386,7	457,5

Como:

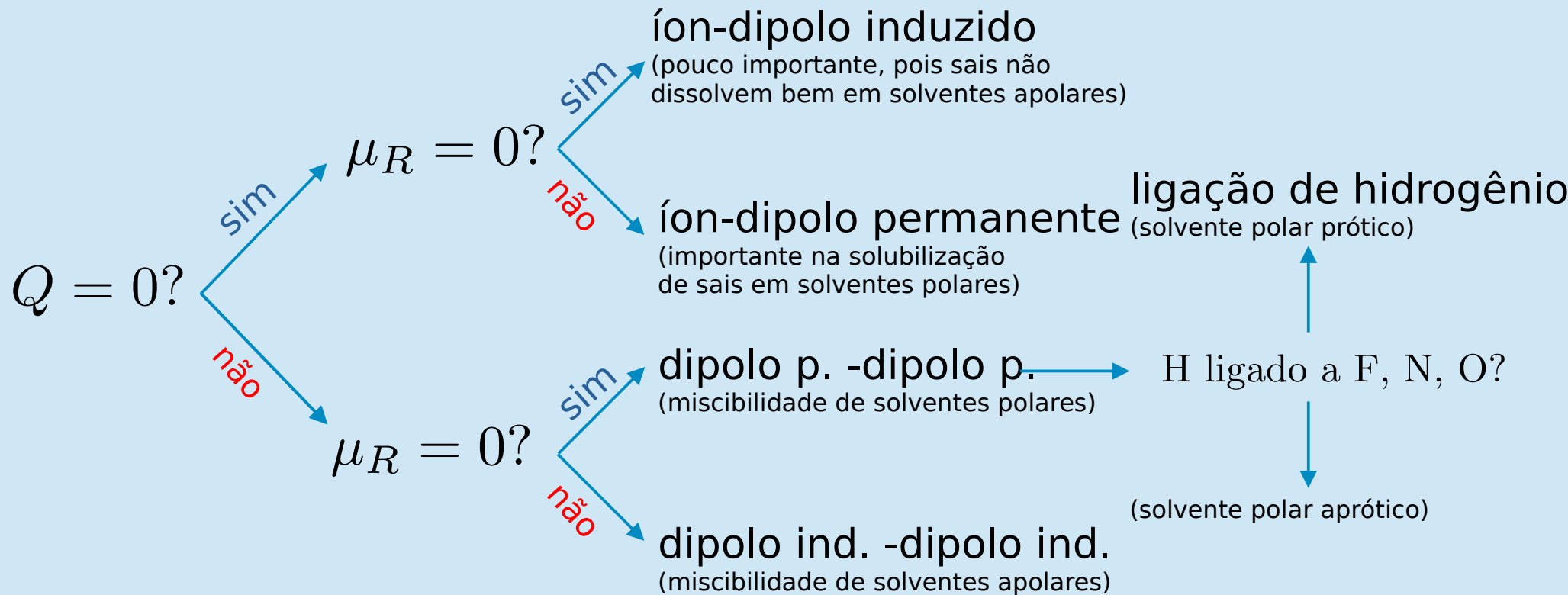


Então força relativa das interações é tal que



**Mas por que?**

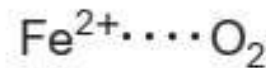
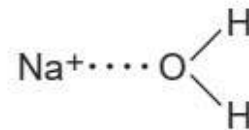
# Esquema básico



# Quando $Q \neq 0$

- **Íon-íon:**

- Potencial de coulomb (ligação iônica)
- Energia entre 400 e 4000 kJ mol<sup>-1</sup>.

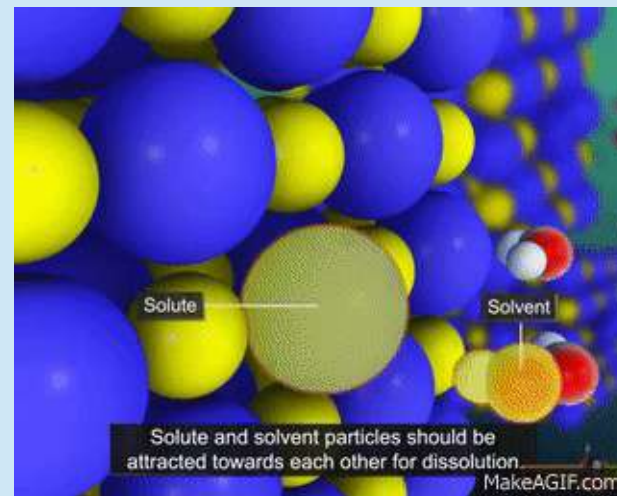


- **Íon-dipolo permanente:**

- Entre íons e moléculas polares;
- Responsável pela solvatação de sais em solventes polares;
- Energia entre 40 e 600 kJ mol<sup>-1</sup>;

- **Íon-dipolo induzido:**

- Entre dipolos induzidos e íons;
- Energia entre 3 e 15 kJ mol<sup>-1</sup>;



Íon-íon vs. Íon-dipolo permanente:  
solubilidade do sal

# Quando $Q = 0$

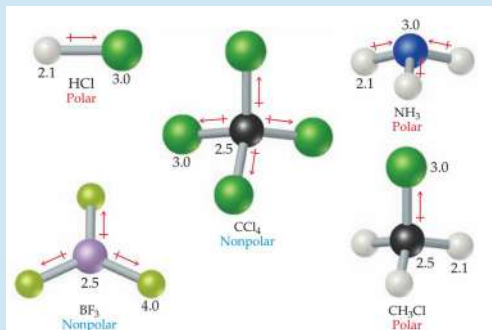
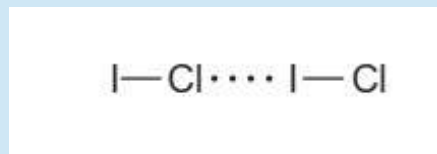
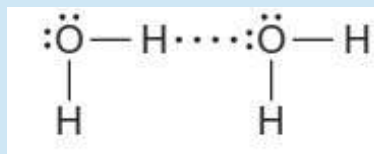
- Forças de van der Waals:**

- Dipolo-dipolo (forças de Debye); → Entre moléculas polares
- Dipolo-dipolo induzido (forças de Keesom); → Entre moléculas polares e apolares
- Dipolo induzido-dipolo induzido (forças de dispersão de London); → Entre moléculas apolares

- Interações específicas:**

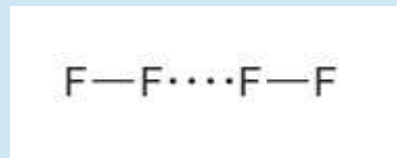
- Ligação de hidrogênio.

## Polaridade das moléculas



**Moléculas polares:**  $\mu_R \neq 0$

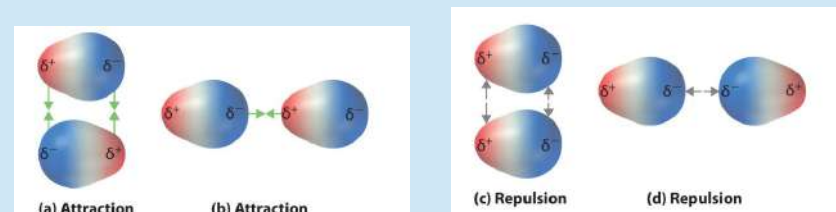
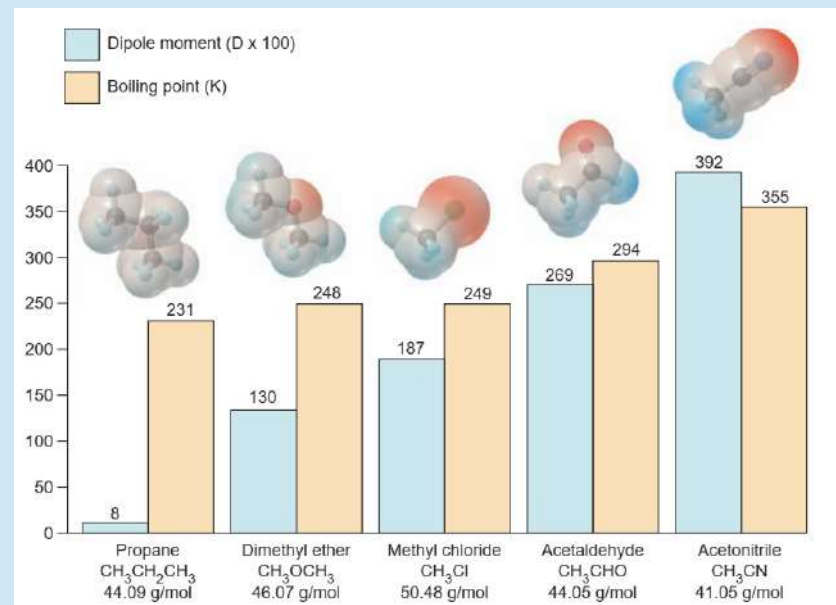
**Moléculas apolares:**  $\mu_R = 0$





# Interações dipolo-dipolo

- Também chamadas de interações dipolo permanente-dipolo permanente, ocorre entre moléculas polares, sejam de um mesmo tipo (substâncias puras) ou de tipos diferentes (misturas);
- Líquidos puros: quanto maior o **dipolo**, maior esse tipo de interação, e maior os PF e PE comparando diferentes substâncias.
- Misturas: misturas de substâncias polares são frequentemente homogêneas (uma fase), porque *igual dissolve igual*: **substâncias que interagem pelo mesmo tipo de força tendem a se misturarem melhor**;
- Varia de 5 a 25 kJ/mol.



# O que é dipolo induzido?

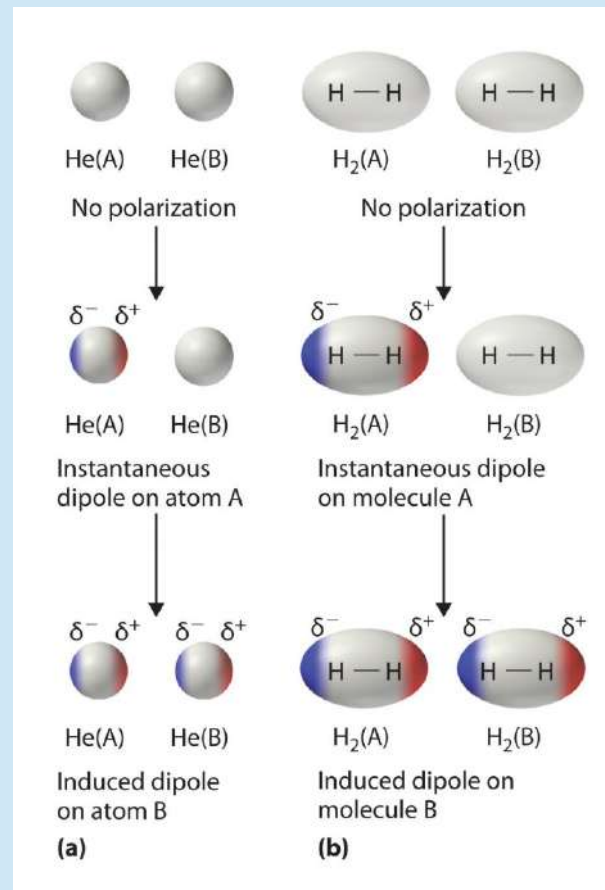
- Todo átomo ou molécula possui uma **nuvem eletrônica** que, como é composta de cargas elétricas, é suscetível a ser **distorcida** pela ação de um **campo elétrico**;



- Quanto **mais elétrons** maior a distorção, maior o momento de dipolo instantâneo criado. Quanto **maior a área superficial** da molécula, maior o dipolo instantâneo, pois mais expostos estão os elétrons ao campo elétrico gerado.
- O campo é gerado por **partículas carregadas e por outros dipolos** (instantâneos ou não).

# Dipolo induzido-dipolo induzido

- Forças de dispersão de London envolvem a interação entre dipolos instantâneos em moléculas apolares;
- **Moléculas apolares** interagem apenas através dessa interação, pois basta haver uma nuvem eletrônica para que a formação do dipolo instantâneo seja possível;
- **Moléculas polares** também podem interagir dessa forma, mas as interações dipolo-dipolo permanente são normalmente mais fortes nesses casos.

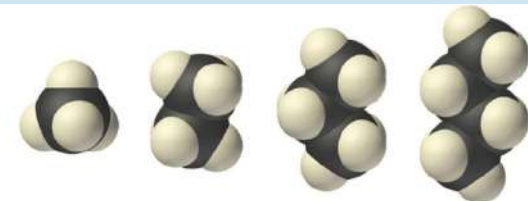


# Dipolo induzido-dipolo induzido

- É a força responsável pelos padrões nos pontos de ebulição de gases nobres e halogênios, por exemplo;
- É afetado pelo **número de elétrons** e pela **área superficial** das moléculas;
- É proporcional a polarizabilidade do átomo ou molécula;
- O processo de indução do dipolo instantâneo é chamado de **polarização**: uma molécula com dipolo induz a formação do dipolo em outra;
- Energia entre 0,05 a 40 kJ/mol

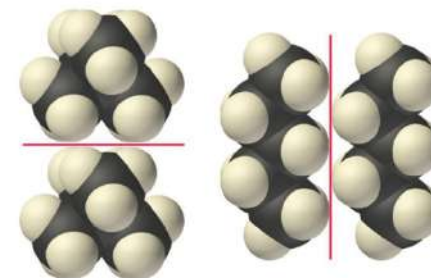
7A (17)	8A (18)
<b>Substance Model</b>	
<b>Molar mass</b>	
<b>Boiling point (K)</b>	
<b>F<sub>2</sub></b> 38.00 85.0	<b>He</b> 4.003 4.22
<b>Cl<sub>2</sub></b> 70.91 239	<b>Ne</b> 20.18 27.1
<b>Br<sub>2</sub></b> 159.8 333	<b>Ar</b> 39.95 87.3
<b>I<sub>2</sub></b> 253.8 458	<b>Kr</b> 83.80 120
	<b>Xe</b> 131.3 165

Increasing strength of dispersion forces



Methane	Ethane	Propane	n-Butane
16 g/mol	30 g/mol	44 g/mol	58 g/mol
-161.5°C	-88.6°C	-42.1°C	-0.5°C

(a) Increasing mass and boiling point

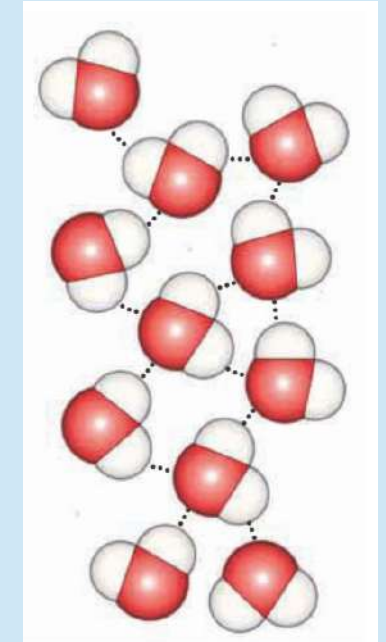
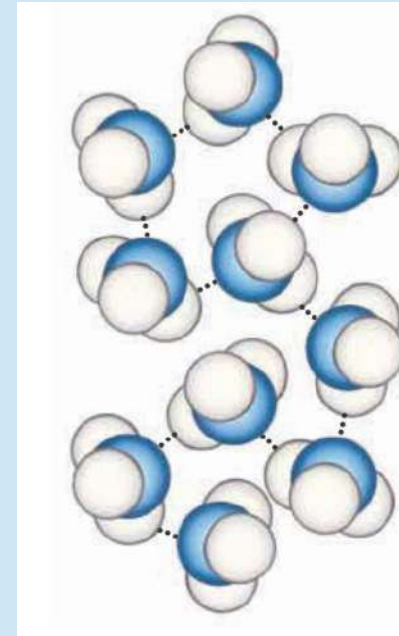
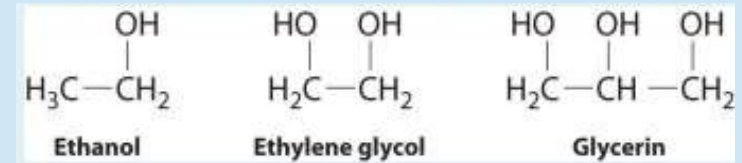


2,2-Dimethylpropane (neopentane)	n-Pentane
72 g/mol, 9.5°C	72 g/mol, 36.1°C

(b) Increasing surface area and boiling point

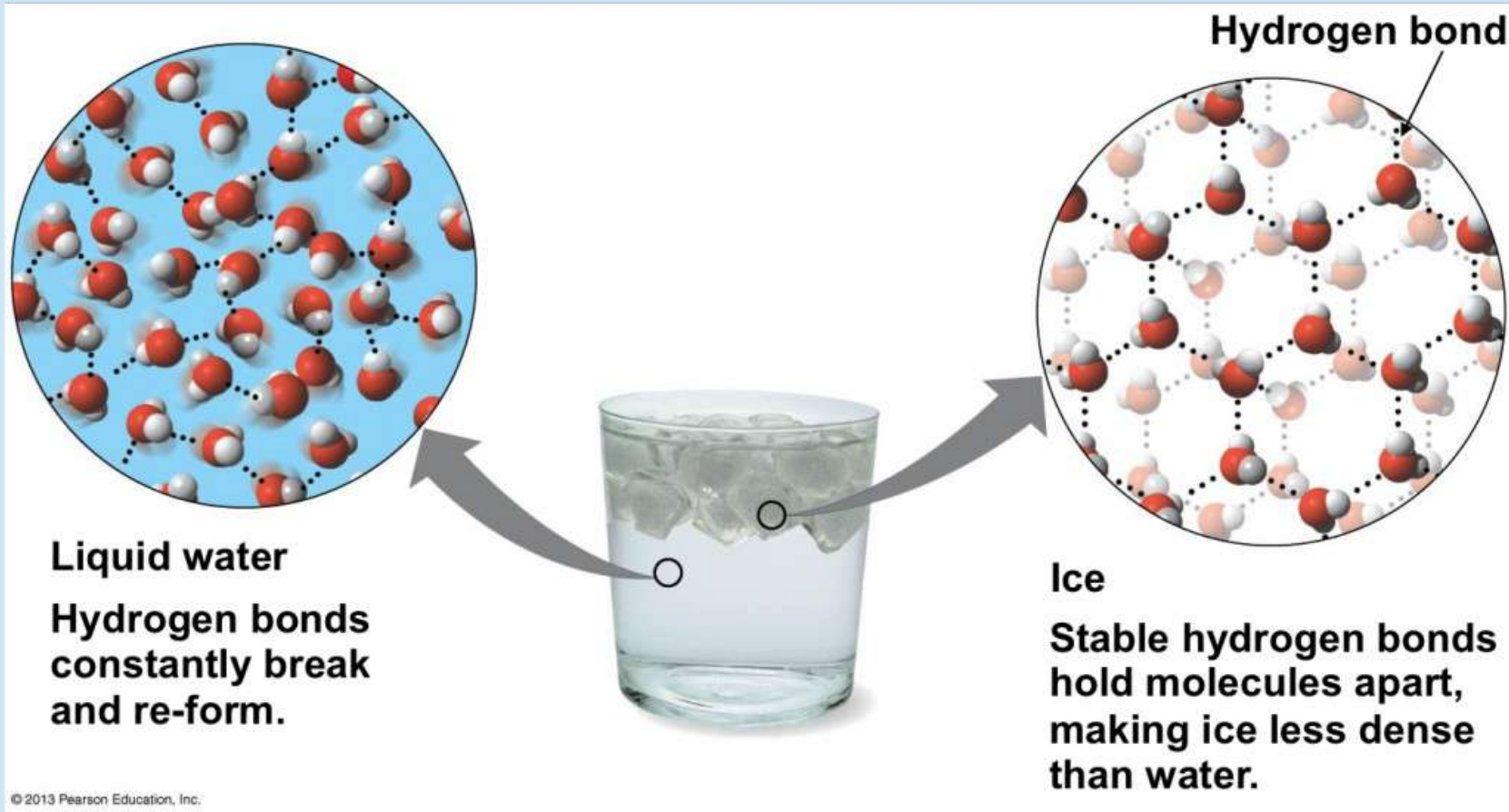
# Ligação de hidrogênio

- Ligação covalente formada entre moléculas com hidrogênio ligados a um dos três átomos muito pequenos e eletronegativos (F, N ou O) e o átomo eletronegativo de outra molécula (pode ser F, N, O ou outro);
- **Particularmente forte**, ela possui uma direcionalidade, dependendo não só da distância entre as moléculas (como as outras interações) mas da orientação relativa entre elas;
- Tipicamente fica entre 10 e 40 kJ/mol



Quanto mais ligações de hidrogênio, maior interação (e PF e

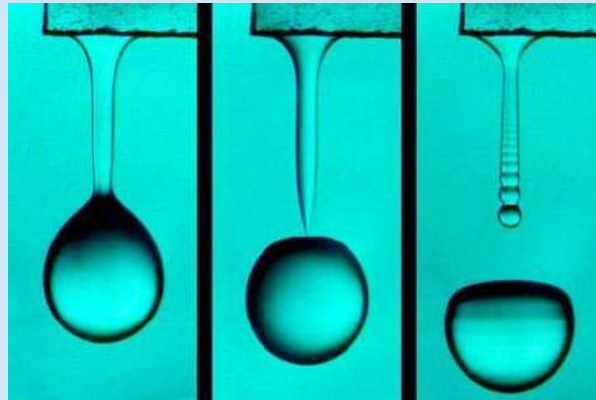
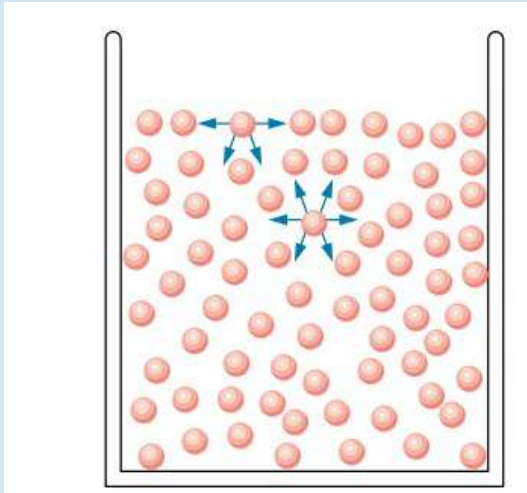
# Água





# Tensão superficial

- Força necessária para criar uma **área na superfície** de um líquido: quanto mais forte interação, maior a tensão;
- Na ausência de interações favoráveis na interface, **líquidos minimizam a área superficial**, pois assim um menor número de moléculas estarão desestabilizadas por



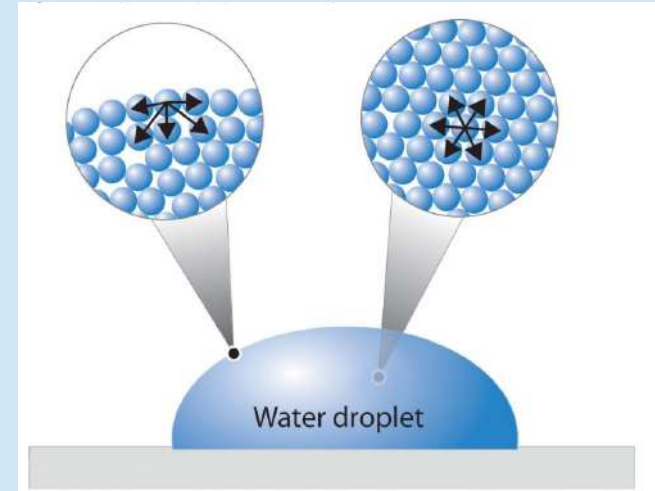


# Tensão superficial

- Caso haja uma superfície, ela atrairá o líquido (que maximizará sua área), ou o repelirá (levando a minimização da área por formação da esfera).

- **Superfícies hidrofóbicas:** repelem a água.

- **Su** gua.

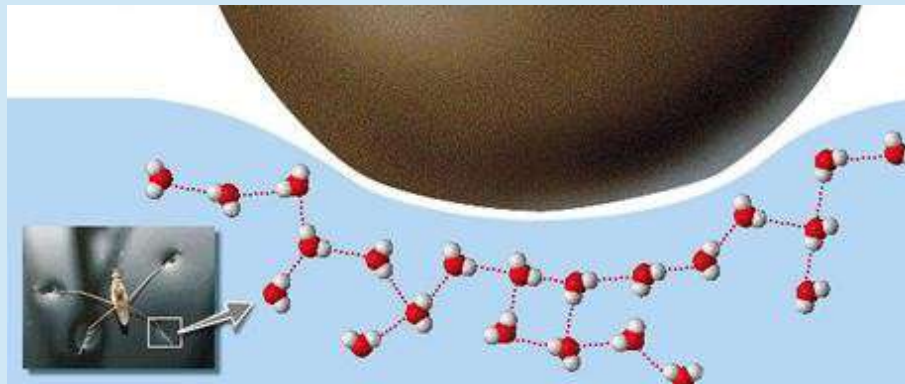


# Tensão superficial

- Ligações fortes na superfície

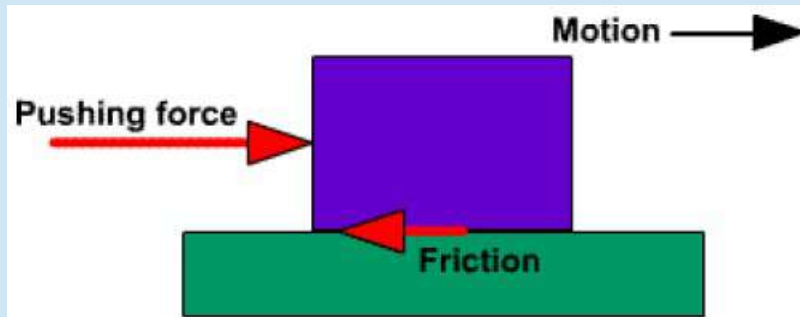
**Table 12.3** Surface Tension and Forces Between Particles

Substance	Formula	Surface Tension (J/m <sup>2</sup> ) at 20°C	Major Force(s)
Diethyl ether	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	$1.7 \times 10^{-2}$	Dipole-dipole; dispersion
Ethanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	$2.3 \times 10^{-2}$	H bonding
Butanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	$2.5 \times 10^{-2}$	H bonding; dispersion
Water	H <sub>2</sub> O	$7.3 \times 10^{-2}$	H bonding
Mercury	Hg	$48 \times 10^{-2}$	Metallic bonding



# Viscosidade

- Viscosidade: resistência do fluido a fluir;
- **Fricção entre líquidos;**
- Gases também possuem viscosidade, mas muito menor.



Water		Air
Viscosity, $\mu$ (Pa s $\times 10^5$ )	Kinematic viscosity, $\nu$ (m <sup>2</sup> /s $\times 10^6$ )	Viscosity, $\mu$ (Pa s $\times 10^5$ )
179.2	1.792	1.724
130.7	1.307	1.773
100.2	1.004	1.822
79.7	0.801	1.869
65.3	0.658	1.915



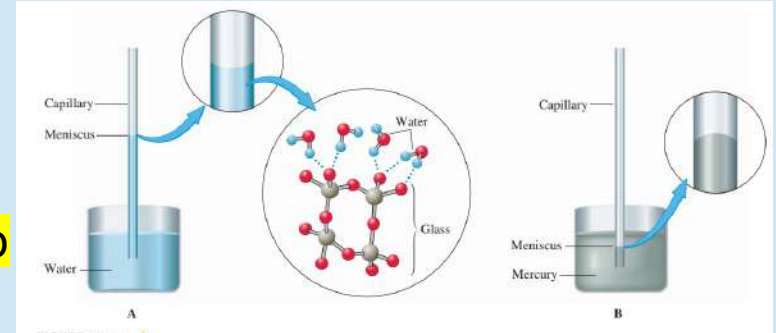
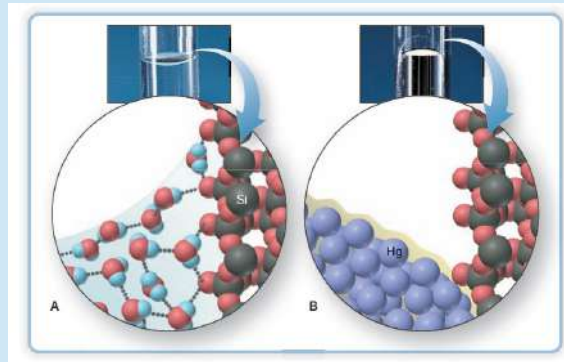
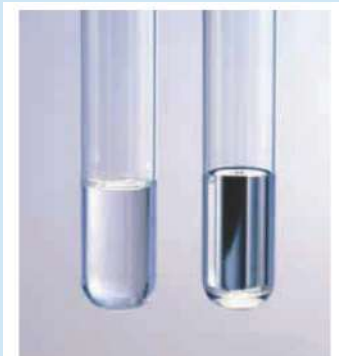
**FIGURE 11.20** ▲

**Comparison of the viscosities of two liquids**

Similar steel balls were dropped simultaneously into two graduated cylinders, the right one containing water and the left one glycerol. A steel ball takes considerably longer to fall through a column of glycerol than through a similar column of water, because glycerol has a greater viscosity than water.

# Ação capilar (capilaridade)

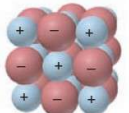

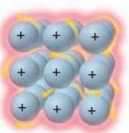


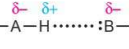
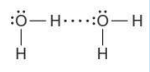




- Maximização ou minimização do contato com uma superfície;
- Há uma competição entre as **forças de adesão** (que “molham” o sólido com o líquido) e as **forças de coesão** (o quão firmemente as partículas do líquido estão unidas entre si).



# Atenção

- Ligações químicas** (forças de ligação) são diferentes de **interações intermoleculares** (forças intermoleculares). As primeiras são causadas pela busca de estabilidade eletrônica dos átomos (regra do octeto), e as segundas pela interação eletrostática entre partículas parcialmente ou totalmente carregadas, salvo algumas exceções específicas. As primeiras são muito mais fortes

Força que une as partículas	Substância	Ponto de fusão (K)	Ponto de ebulição (K)
<b>Ligações químicas</b>			
Ligações iônicas	Fluoreto de lítio (LiF)	1.118	1.949
Ligações metálicas	Berílio (Be)	1.560	2.742
Ligações covalentes	Diamante (C)	3.800	4.300
<b>Forças intermoleculares</b>			
Força de dispersão	Nitrogênio (N <sub>2</sub> )	63	77
Força dipolo-dipolo	Cloreto de hidrogênio (HCl)	158	188
Ligação de hidrogênio	Fluoreto de hidrogênio (HF)	190	293

Table 12.2 Comparison of Bonding and Nonbonding (Intermolecular) Forces				
Force	Model	Basis of Attraction	Energy (kJ/mol)	Example
Bonding				
Ionic		Cation-anion	400–4000	NaCl
Covalent		Nuclei-shared e <sup>-</sup> pair	150–1100	H—H
Metallic		Cations-delocalized electrons	75–1000	Fe
Nonbonding (Intermolecular)				
Ion-dipole		Ion charge–dipole charge	40–600	Na <sup>+</sup> ····· 
H bond		Polar bond to H–dipole charge (high EN of N, O, F)	10–40	
Dipole-dipole		Dipole charges	5–25	I—Cl·····I—Cl
Ion-induced dipole		Ion charge–polarizable e <sup>-</sup> cloud	3–15	Fe <sup>2+</sup> ·····O <sub>2</sub>
Dipole-induced dipole		Dipole charge–polarizable e <sup>-</sup> cloud	2–10	H—Cl·····Cl—Cl
Dispersion (London)		Polarizable e <sup>-</sup> clouds	0.05–40	F—F·····F—F

# Atenção

- Moléculas diferentes podem interagir por mais de um tipo de interação molecular! Embora seja importante determinar qual delas é a mais forte (se houver uma que se destaque). Mas **todas interagem via dipolo induzido-dipolo induzido** (pois possuem elétrons), **algumas por dipolo-dipolo induzido** (caso uma tenha dipolo não nulo) e **outras por dipolo-dipolo** (caso todas tenham dipolo não nulo).



# Quais tipos de interação permitem que acetona seja solúvel em água e que $\text{CCl}_4$ seja insolúvel em água.

Quais as propriedades das moléculas envolvidas?

Todas são neutras (interações com íons não são possíveis)

Algumas são polares (acetona e água) e uma é apolar ( $\text{CCl}_4$ )

Em geral moléculas polares se misturam bem devido a interação dipolo-dipolo.

Ela é responsável pela solubilidade da água em acetona.

Já o tetracloreto de carbono não possui momento de dipolo resultante.

Portanto ele não pode interagir tão facilmente com a molécula da água.



**Obrigado e boa sorte!**