

### UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ - UFPI CAMPUS MINISTRO PETRÔNIO PORTELA – TERESINA CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA- CCN DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

## CONCEITOS BÁSICOS DE LIGAÇÕES QUÍMICA

Teresina, PI

## Ligações Químicas

São forças que unem átomos formandos moléculas, agrupamentos de átomos ou sólidos iônicos.

Os elétrons mais externos do átomo são os responsáveis pela ocorrência da ligação química.

### Ligações Químicas

## Quebram-se facilmente



vidro

Difícil de quebrar



aço

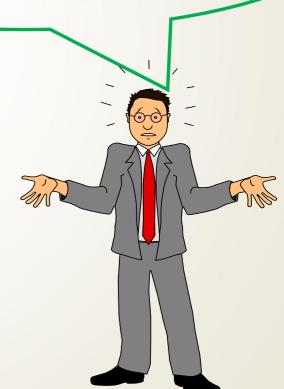
As ligações químicas tem forte influência sobre diversas propriedades dos materiais.

## Conduzem corrente elétrica



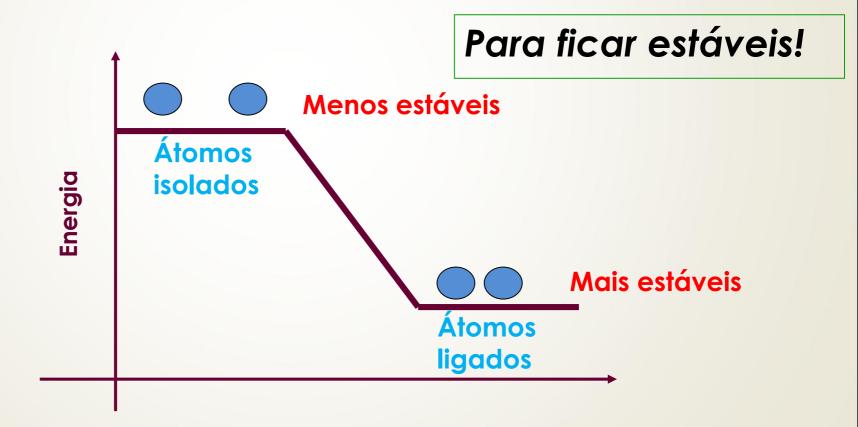
metais

Isolantes



## Ligações Químicas





- Ligação química: é a força atrativa que mantém dois ou mais átomos unidos.
- Ligação covalente: resulta do compartilhamento de elétrons entre dois átomos.
  - Normalmente encontrada entre elementos não-metálicos.
- Ligação iônica: resulta da transferência de elétrons de um metal para um nãometal.
- Ligação metálica: é a força atrativa que mantém metais puros unidos.

#### Símbolos de Lewis

- Para um entendimento através de figuras sobre a localização dos elétrons em um átomo, representamos os elétrons como pontos ao redor do símbolo do elemento.
- O número de elétrons disponíveis para a ligação é indicado por pontos desemparelhados.
- Esses símbolos são chamados símbolos de Lewis.
- Geralmente colocamos os elétrons nos quatro lados de um quadrado ao redor do símbolo do elemento.

#### Símbolos de Lewis

TABELA 8.1 Símbolos de Lewis					
Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
Li	$[He]2s^1$	Li·	Na	$[Ne]3s^1$	Na ·
Be	$[He]2s^2$	·Be·	Mg	$[Ne]3s^2$	·Mg·
В	[He] $2s^22p^1$	٠Ġ٠	Al	[Ne] $3s^23p^1$	·Àl·
C	[He] $2s^22p^2$	·ċ·	Si	[Ne] $3s^23p^2$	·Ṣi·
N	[He] $2s^22p^3$	·Ņ:	P	$[Ne]3s^23p^3$	·P·
O	[He] $2s^22p^4$	: <b>Ċ</b> :	S	[Ne] $3s^23p^4$	: <b>Ṣ</b> :
F	[He] $2s^22p^5$	٠ <u>Ë</u> :	Cl	[Ne] $3s^23p^5$	· Ël:
Ne	$[He]2s^22p^6$	:Ņe:	Ar	$[Ne]3s^23p^6$	:Är:

#### A regra do octeto

- Todos os gases nobres, com exceção do He, têm uma configuração  $s^2p^6$ .
  - A regra do octeto: os átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que eles estejam rodeados por 8 elétrons de valência (4 pares de elétrons).
  - Cuidado: existem várias exceções à regra do octeto.

#### Símbolos de Lewis

- Para um entendimento através de figuras sobre a localização dos elétrons em um átomo, representamos os elétrons como pontos ao redor do símbolo do elemento.
- O número de elétrons disponíveis para a ligação é indicado por pontos desemparelhados.
- Esses símbolos são chamados símbolos de Lewis.
- Geralmente colocamos os elétrons nos quatro lados de um quadrado ao redor do símbolo do elemento.

#### Símbolos de Lewis

TABELA 8.1 Símbolos de Lewis					
Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
Li	$[He]2s^1$	Li·	Na	$[Ne]3s^1$	Na ·
Be	$[He]2s^2$	·Be·	Mg	$[Ne]3s^2$	·Mg·
В	[He] $2s^22p^1$	٠Ġ٠	Al	[Ne] $3s^23p^1$	·Àl·
C	[He] $2s^22p^2$	·ċ·	Si	[Ne] $3s^23p^2$	·Ṣi·
N	[He] $2s^22p^3$	·Ņ:	P	$[Ne]3s^23p^3$	·P·
O	[He] $2s^22p^4$	: <b>Ċ</b> :	S	[Ne] $3s^23p^4$	: <b>Ṣ</b> :
F	[He] $2s^22p^5$	٠ <u>Ë</u> :	Cl	[Ne] $3s^23p^5$	· Ël:
Ne	$[He]2s^22p^6$	:Ņe:	Ar	$[Ne]3s^23p^6$	:Är:

# Mecânica quântica e orbitais atômicos

- Se resolvermos a equação de Schrödinger, teremos as funções de onda e as energias para as funções de onda.
- Chamamos as funções de onda de *orbitais*.
  - A equação de Schrödinger necessita números quânticos:
  - 1. Número quântico principal, n. Este é o mesmo n de Bohr. À medida que n aumenta, o orbital torna-se maior e o elétron passa mais tempo mais distante do núcleo.

# Mecânica quântica e orbitais atômicos

- **2. O número quântico azimuthal,** l. Esse número quântico depende do valor de n. Os valores de l começam de 0 e aumentam até n -1. Normalmente utilizamos letras para l (s, p, d e f para l = 0, 1, 2, e 3). Geralmente nos referimos aos orbitais s, p, d e f.
- **3. O** número quântico magnético,  $m_l$ . Esse número quântico depende de l. O número quântico magnético tem valores inteiros entre -l e +l. Fornecem a orientação do orbital no espaço.

# Mecânica quântica e orbitais atômicos

TABELA 6.2 Relação entre os valores de $n$ , $l$ e $m_l$ até $n=4$						
n	Valores possíveis de <i>l</i>	Designação do subnível	Valores possíveis de $m_l$	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível	
1	0	1 <i>s</i>	0	1	1	
2	0	2s	0	1		
	1	2 <i>p</i>	1, 0, –1	3	4	
3	0	3s	0	1		
	1	3 <i>p</i>	1, 0, –1	3		
	2	3 <i>d</i>	2, 1, 0, –1, –2	5	9	
4	0	4s	0	1		
	1	4p	1, 0, –1	3		
	2	4d	2, 1, 0, –1, –2	5		
	3	<b>4</b> <i>f</i>	3, 2, 1, 0, –1, –2, –3	7	16	

### Orbitais e Números Quânticos

4-Número Quântico de Spin (ms)

Esse número determina o sentido do giro de rotação do elétron em torno do seu próprio eixo.

Valores: ms = +1/2 e ms = -1/2

### Orbitais e números quânticos

#### Spin eletrônico

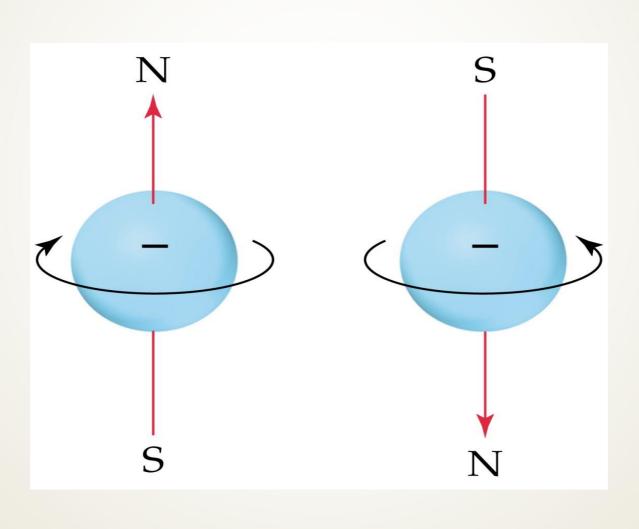


TABELA 6.2 Relação entre os valores de $n$ , $l$ e $m_l$ até $n$ = 4					
n	Valores possíveis de <i>l</i>	Designação do subnível	Valores possíveis de $m_l$	Número de orbitais no subnível	Número total de orbitais no nível
1	0	1 <i>s</i>	0	1	1
2	0	2s	0	1	
	1	2 <i>p</i>	1, 0, –1	3	4
3	0	3s	0	1	
	1	3 <i>p</i>	1, 0, –1	3	
	2	3 <i>d</i>	2, 1, 0, –1, –2	5	9
4	0	4s	0	1	
	1	4p	1, 0, –1	3	
	2	4d	2, 1, 0, –1, –2	5	
	3	4 <i>f</i>	3, 2, 1, 0, –1, –2, –3	7	16

n= 1, 2, 3,	4,
/ <b>=</b> 0, 1, 2, m <b>=</b> -1,,	.4, , n-1 (s, p, d, f,) 0,, +1
$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	1/2

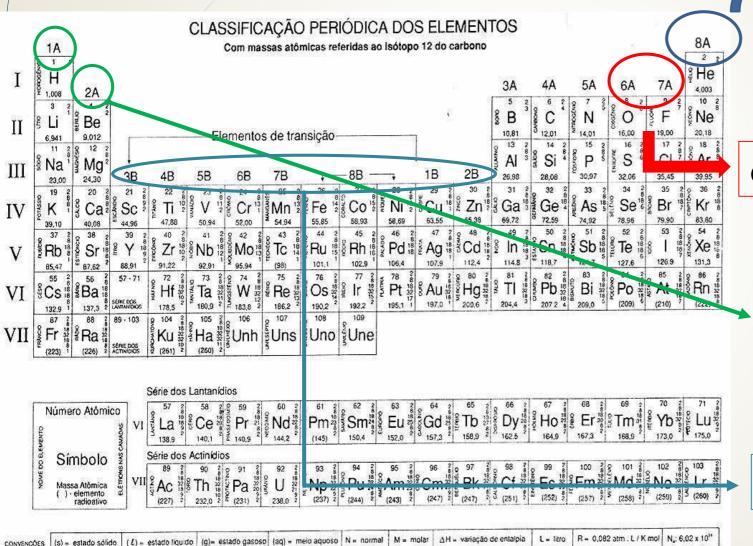
s:			
p:			
	d:	 	
	f:		

Ex.: 
$$1s^2$$

$$n = 1$$
;  $l = 0$ (subcamada s);  $m_l = 0$ ;  $m_s = +\frac{1}{2}$ 

$$n = 1$$
;  $I = 0$ (subcamada s);  $m_I = 0$ ;  $m_S = -\frac{1}{2}$ 

## TABELA PERIÓDICA



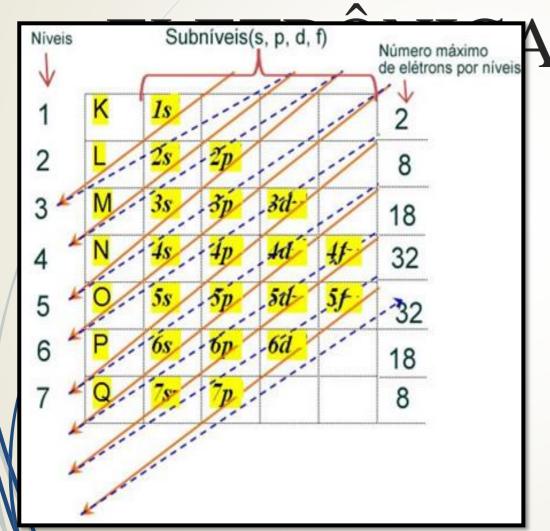
gases inertes

deficiência de 1 e 2 e

1 e 2 e

metais de transição

# CONFIGURAÇÃO



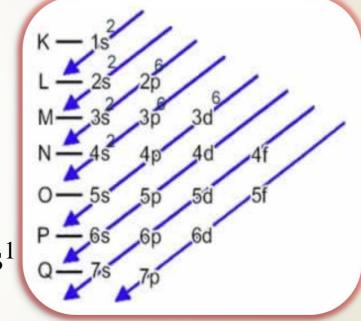
Estado fundamental → quando todos os elétrons ocupam as menores energias possíveis de acordo com as restrições anteriores;

Elétrons de valência  $\rightarrow$  são aqueles que ocupam a camada eletrônica mais externa.

# CONFIGURAÇÃO ELETRÔNICA

$$_{6}$$
 C  $\longrightarrow$  1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>

$$\longrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$$

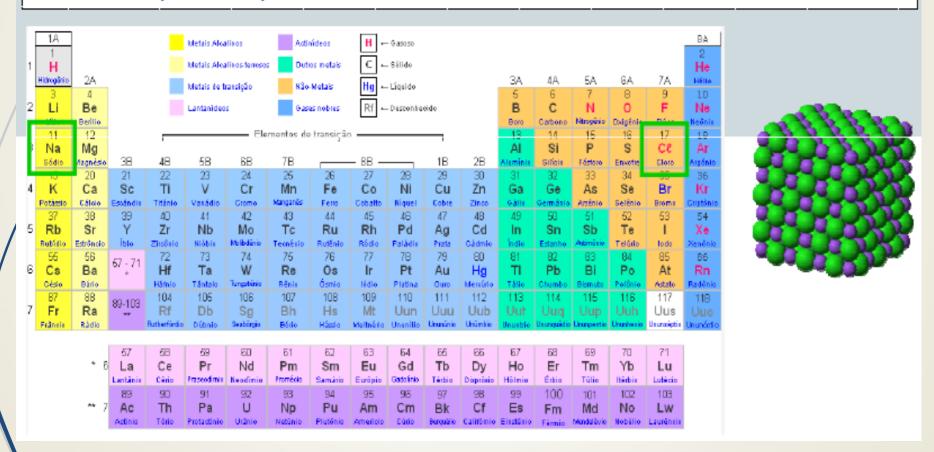


<sub>35</sub>Br

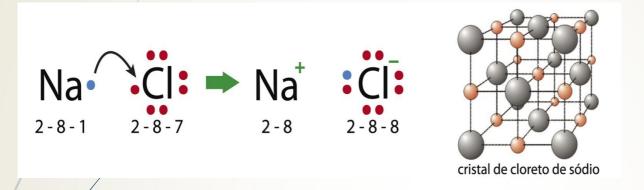
 $\rightarrow$  1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup> 3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup> 4p<sup>5</sup>

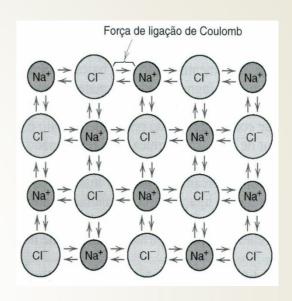
### LIGAÇÕES PRIMÁRIAS – LIGAÇÃO IÔNICA

Ocorre entre elementos metálicos que tendem a perder elétrons (cátions) e não-metálicos que tendem a ganhar elétrons (ânions).



# LIGAÇÃO IÔNICA





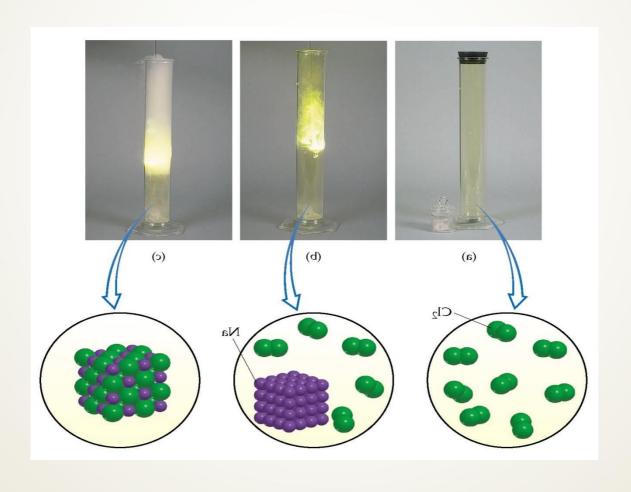
- A ligação é não-direcional e as forças são de origem eletrostática;
- A ligação predominantemente nos materiais cerâmicos é a iônica.
- → A energia de ligação são relativamente elevadas, na faixa de 600 a 1500 kJ/mol.

### Ligação iônica

Considere a reação entre o sódio e o cloro:

Na(s) + 
$$\frac{1}{2}$$
Cl<sub>2</sub>(g)  $\rightarrow$  NaCl(s)  $\Delta H^{\circ}_{f}$  = -410,9 kJ

$$\Delta H_{f}^{\circ} = -410.9 \text{ kJ}$$



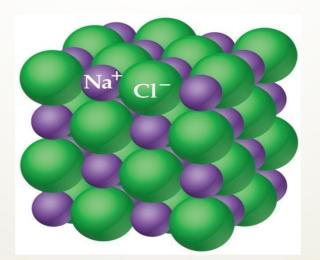
### Ligação iônica

- A reação é violentamente exotérmica.
- Inferimos que o NaCl é mais estável do que os elementos que o constituem. Por quê?
  - O Na perdeu um elétron para se transformar em Na<sup>+</sup> e o cloro ganhou o elétron para se transformar em Cl<sup>-</sup>. Observe: Na<sup>+</sup> tem a configuração eletrônica do Ne e o Cl<sup>-</sup> tem a configuração do Ar.
- Isto é, tanto o Na<sup>+</sup> como o Cl<sup>-</sup> têm um octeto de elétrons circundando o íon central.

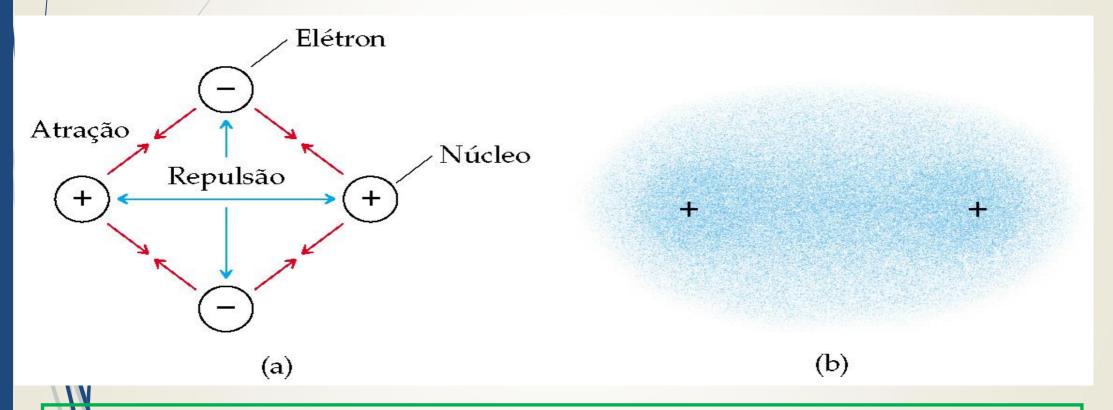


### Ligação iônica

- O NaCl forma uma estrutura muito regular na qual cada íon Na<sup>+</sup> é circundado por 6 íons Cl<sup>-</sup>.
- Similarmente, cada íon Cl<sup>-</sup> é circundado por seis íons Na<sup>+</sup>.
- Há um arranjo regular de Na<sup>+</sup> e Cl<sup>-</sup> em 3D.
- Observe que os íons são empacotados o mais próximo possível.
- Observe que não é fácil encontrar uma fórmula molecular para descrever a rede iôniça.



- Quando dois átomos similares se ligam, nenhum deles quer perder ou ganhar um elétron para formar um octeto.
- Quando átomos similares se ligam, eles compartilham pares de elétrons para que cada um atinja o octeto.
- Cada par de elétrons compartilhado constitui uma ligação química.
- Por exemplo:  $H + H \rightarrow H_2$  tem elétrons em uma linha conectando os dois núcleos de H.



O comprimento e força da ligação química resultam do equilíbrio devido à repulsão entre cargas iguais e atração entre cargas opostas.

#### Estruturas de Lewis

• As ligações covalentes podem ser representadas pelos símbolos de Lewis dos elementos:

Nas estruturas de Lewis, cada par de elétrons em uma ligação é representado por uma única linha:

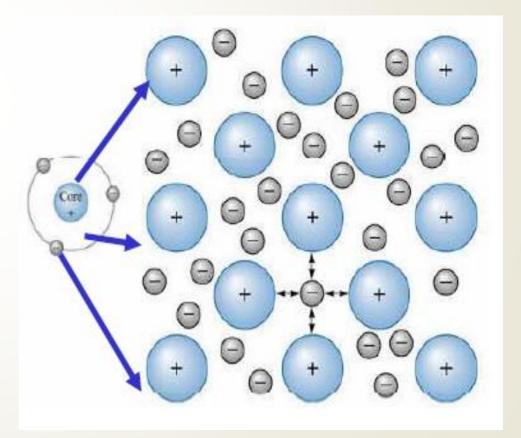
#### Ligações múltiplas

- É possível que mais de um par de elétrons seja compartilhado entre dois átomos (ligações múltiplas):
  - Um par de elétrons compartilhado = ligação simples (H<sub>2</sub>);
  - Dois pares de elétrons compartilhados = ligação dupla  $(O_2)$ ;
  - Três pares de elétrons compartilhados = ligação tripla  $(N_2)$ .

• Em geral, a distância entre os átomos ligados diminui à medida que o número de pares de elétrons compartilhados aumenta.

## LIGAÇÃO METÁLICA

- ✓ A ligação resultante é não direcional;
- Os elétrons de valência passam a se comportar como elétrons "livres"
- Formam uma "nuvem eletrônica".
- ✓ Encontrada em metais e suas ligas.



### Características dos Compostos Metálicos.

- > Alta condutividade elétrica e térmica.
- Permitem grande deformação plástica pois as ligações são móveis ou seja não são rígidas como as iônicas e as covalentes.
- Possuem o brilho metálico, como os elétrons são muito móveis trocam de nível energético com facilidade emitindo fótons.

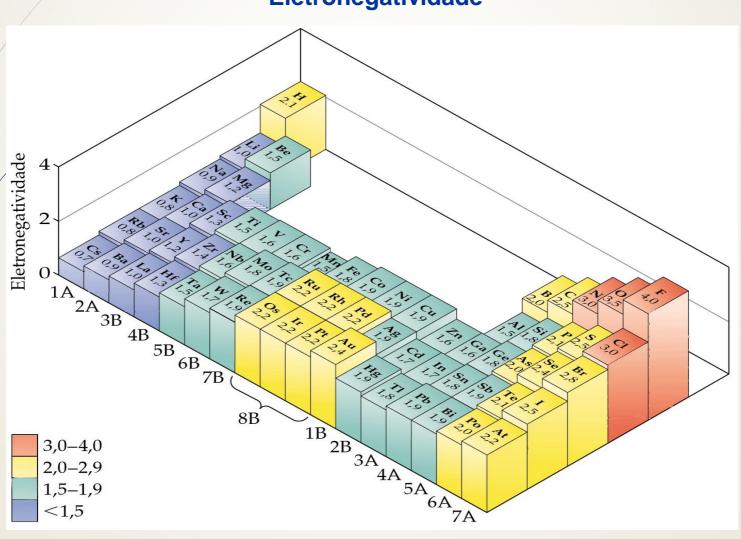
Aço - Fe e C.
Aço inoxidável - Fe, C , Cr e Ni.
Amálgama dental - Hg, Ag e Sn
Bronze — Cu e Sn
Latão — Cu e Zn

- Em uma ligação covalente, os elétrons estão compartilhados.
- O compartilhamento de elétrons para formar uma ligação covalente não significa compartilhamento igual daqueles elétrons.
- Existem algumas ligações covalentes nas quais os elétrons estão localizados mais próximos a um átomo do que a outro.
  - O compartilhamento desigual de elétrons resulta em ligações polares.

#### Eletronegatividade

- **Eletronegatividade:** é a habilidade de um átomo de atrair elétrons para si *em certa molécula* .
- Pauling estabeleceu as eletronegatividades em uma escala de 0,7 (Cs) a 4,0 (F).
  - A eletronegatividade aumenta:
    - ao logo de um período e
    - ao/subir em um grupo.



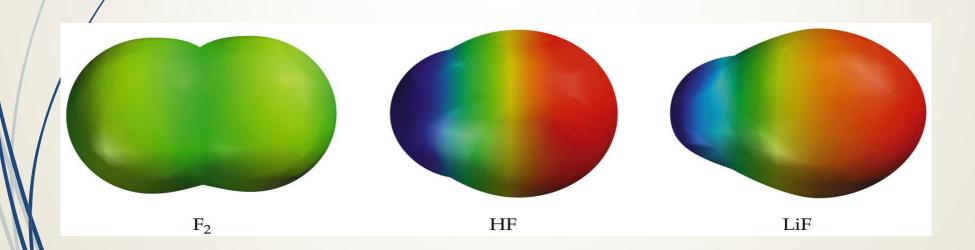


### Eletronegatividade e polaridade de ligação

- A diferença na eletronegatividade entre dois átomos é uma medida da polaridade de ligação:
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 0 resultam em ligações covalentes apolares (compartilhamento de elétrons igual ou quase igual);
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 2 resultam em ligações covalentes polares (compartilhamento de elétrons desigual);
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 3 resultam em ligações iônicas (transferência de elétrons).

### Eletronegatividade e polaridade de ligação

- Não há distinção acentuada entre os tipos de ligação.
- A extremidade positiva (ou polo) em uma ligação polar é representada por  $\delta$ + e o polo negativo por  $\delta$ -.



### >ATIVIDADE DE FIXAÇÃO

- 1- Determine a formula do composto binário estavel formado pela reação do Nitrogênio com o Flúor, e desenhe a correspondente estrutura de Lewis.
- 2. O elemento "A" possui número atômico igual a 6, enquanto o elemento "B" possui número atômico igual a 8. A molécula que representa corretamente o composto formado por esses dois elementos é:
- 3. À molécula de água, H<sub>2</sub>O, pode-se adicionar o próton H<sup>+</sup>, produzindo o íon hidrônio H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>.

$$H - \ddot{O} - H + H^+ \rightarrow \begin{pmatrix} H - \ddot{O} - H \\ H \end{pmatrix}^+$$

Formação do íon hidrônio

No hidrônio, quantos pares de elétrons pertencem, no total, tanto ao hidrogênio quanto ao oxigênio?