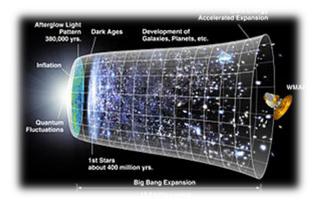
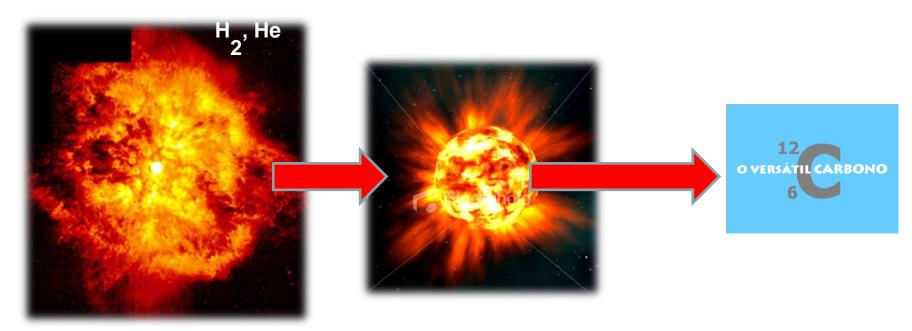
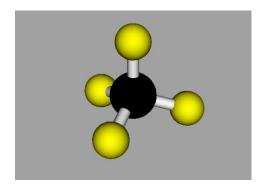
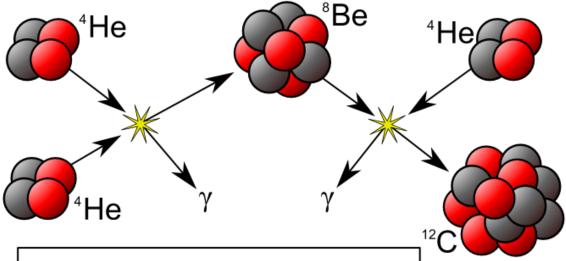
LIGAÇÕES QUÍMICAS

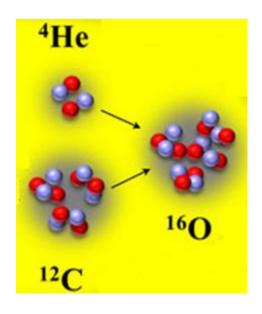


Ligação Química : Uma revisão









Proton γ Gamma Ray
Neutron

Ressonância de Hoyle: 8Be no estado fundamental tem a mesma energia de duas partículas alpha. 8Be + 4He tem mesma energia do que um estado excitado do 12C. Essas duas "incríveis coincidências" aumentam em muito a probabilidade da síntese e estabilidade de 12C impedidindo também sua transformação em O .

as ligações químicas classificam-se em:

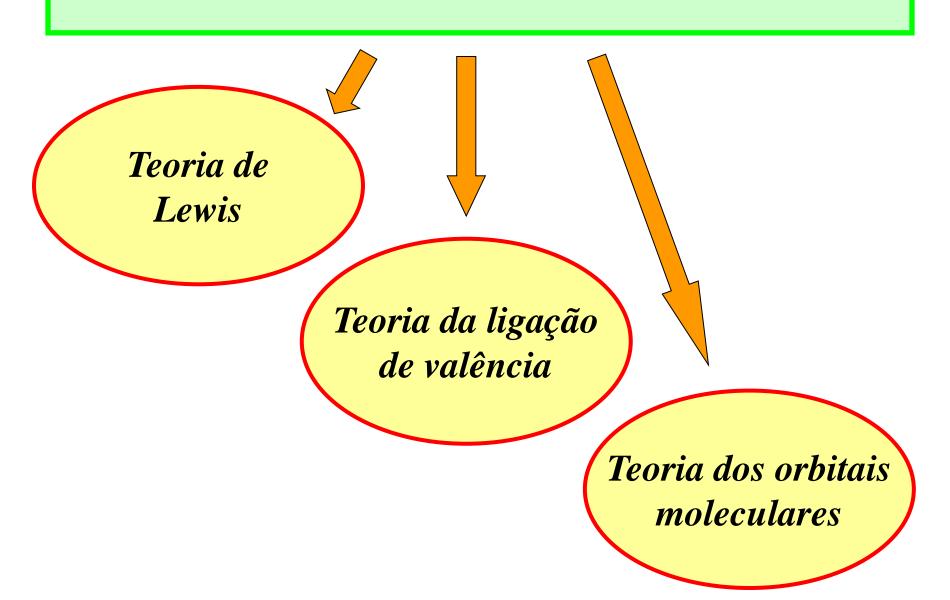
ligações intramoleculares:

- ocorrem entre os átomos para formar "moléculas";
- responsáveis pelas propriedades químicas dos compostos;
- são elas: iônica, covalente e metálica.

ligações (ou forças) intermoleculares:

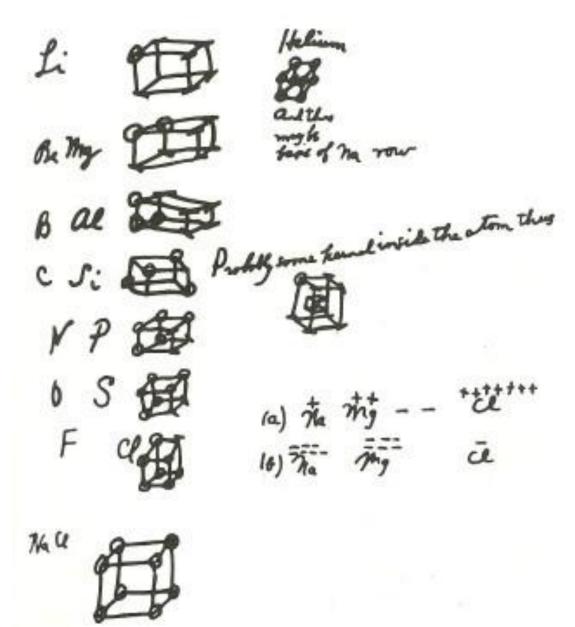
- ocorrem entre as "moléculas";
- responsáveis pelas propriedades físicas dos compostos;
- são elas: íon-dipolo; dipolo-dipolo, dipolo-induzido e ligação de hidrogênio.

Teorias das ligações químicas



Teoria de Lewis





Teoria de Lewis

Hydrogen H* •ċ• ٠Ç٠ Carbon н-<mark>о</mark>-н H:Ö:H Water Ċ=Ċ Ethylene

H:C:::C:H

H-C≣C-H

Acetylene

E QUANDO HÁ MAIS DE UMA ESTRUTURA DE LEWIS POSSÍVEL? CARGA FORMAL (CF)

 Definição: Número de elétrons que o átomo ganha ou perde quando participa de uma ligação perfeitamente covalente.

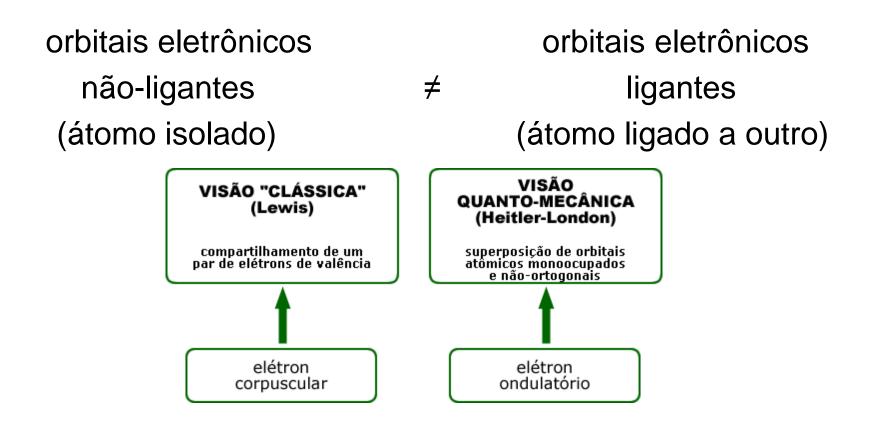
nº de e⁻ de nº de e⁻ 1/2 nº de e⁻

CF = valência do átomo − isolados − compartilhados neutro

 A estrutura de Lewis com menor energia (mais estável) é aquela com as menores cargas formais nos átomos.

AS LIGAÇÕES INTRAMOLECULARES:

• "um átomo isolado apresenta propriedades bem diferentes do que quando se encontra ligado a outro(s) átomo(s)".

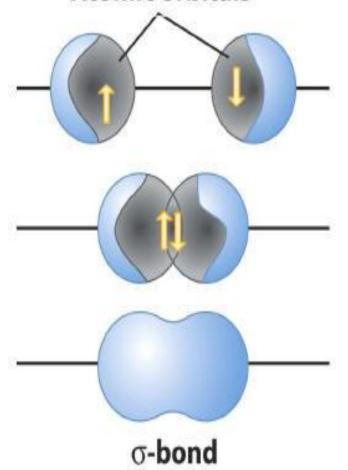


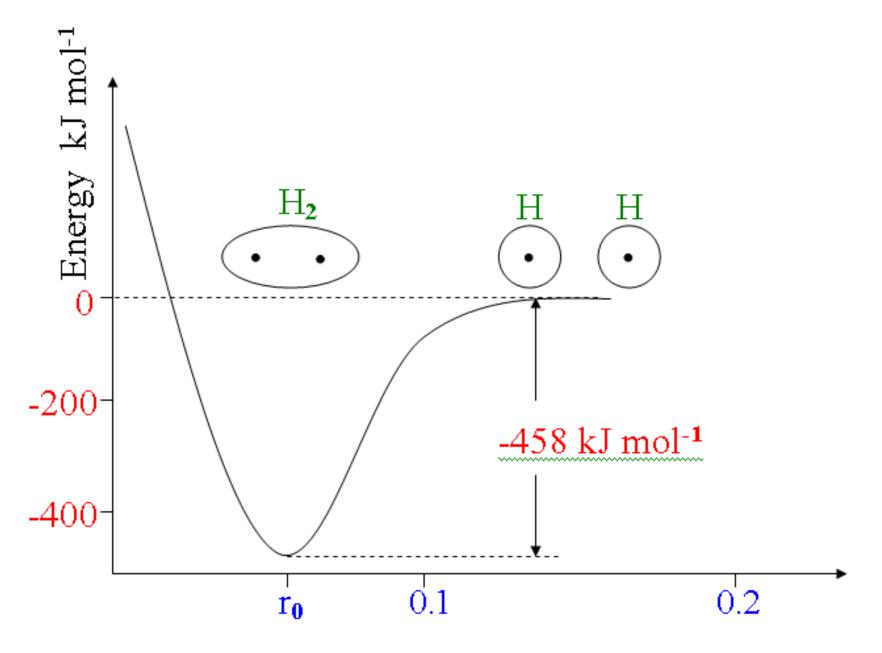
Teoria da ligação de valência

1) H₁ e H₁

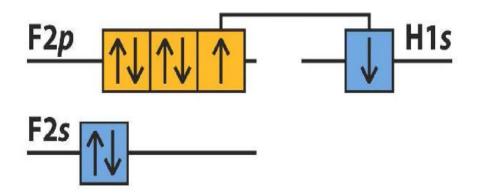
$$H \times \bullet H \longrightarrow H \longrightarrow H_2$$
ligação sigma (s—s)

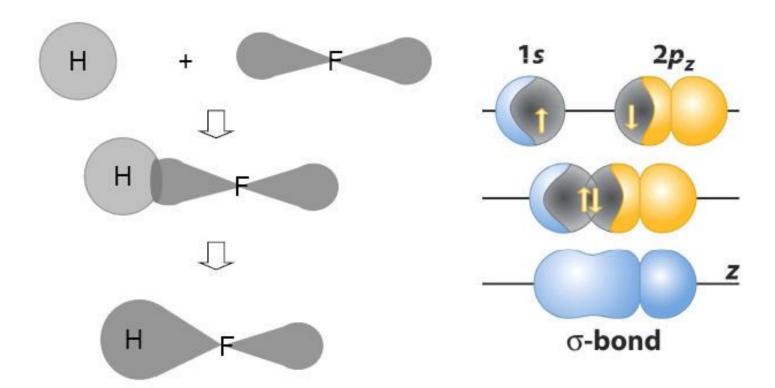
Atomic orbitals

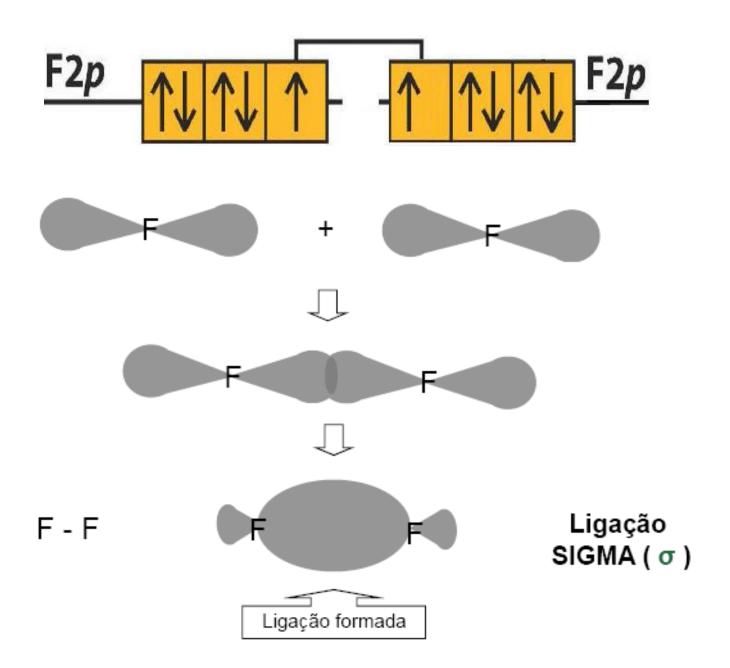




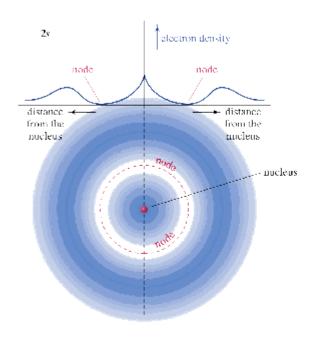
Internuclear distance, r (nm)



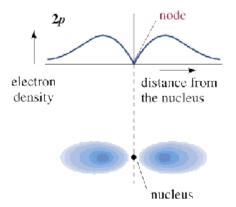


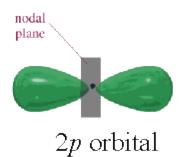


Orbitais Atômicos

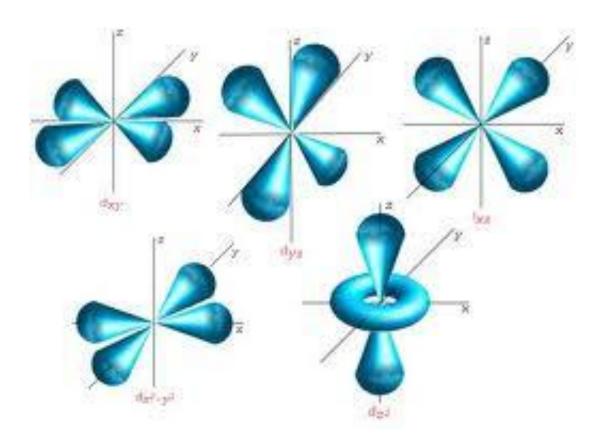


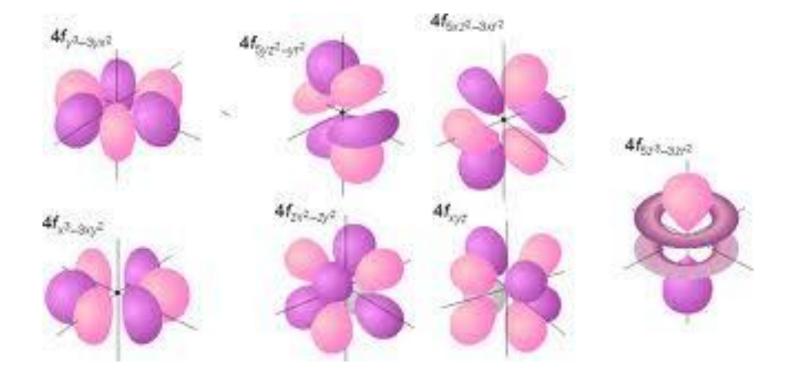
2s orbital (spherical)



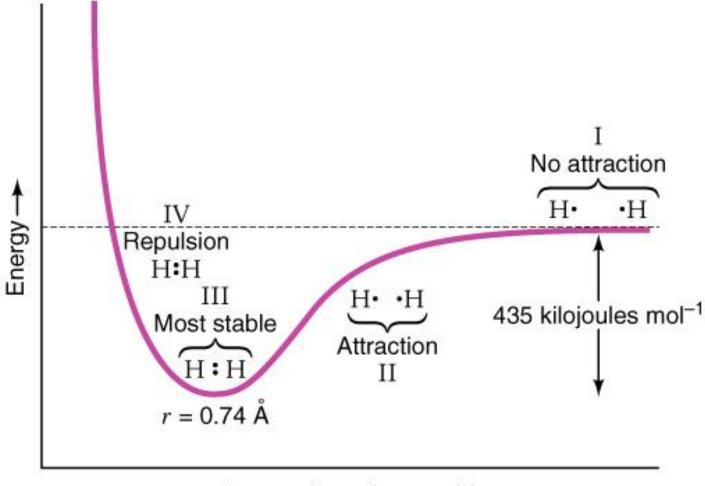


=>





• "um sistema sempre caminha, naturalmente, para um estado de menor energia e maior estabilidade".



Internuclear distance (r)

 regra do octeto: "numa ligação química um átomo tende a ficar com oito elétrons na última camada (config.eletrônica semelhante a de um gás nobre)".



$$F + F \longrightarrow F F$$

LIGAÇÃO COVALENTE

LIGAÇÃO IÔNICA

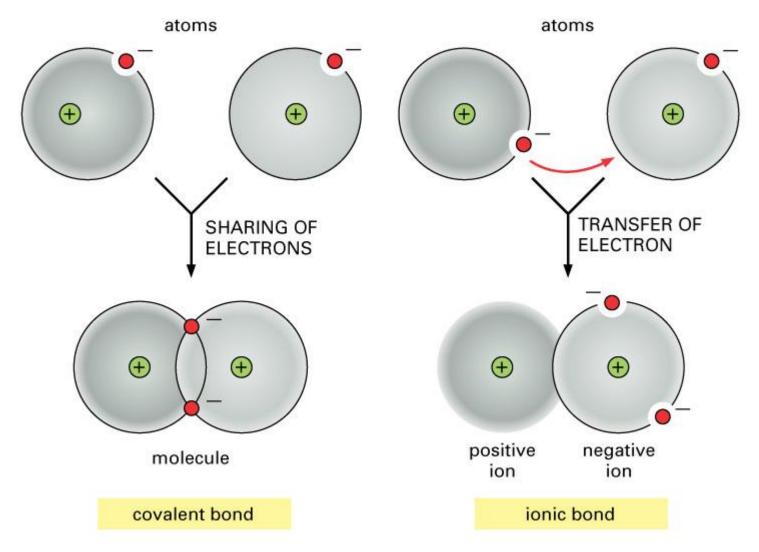
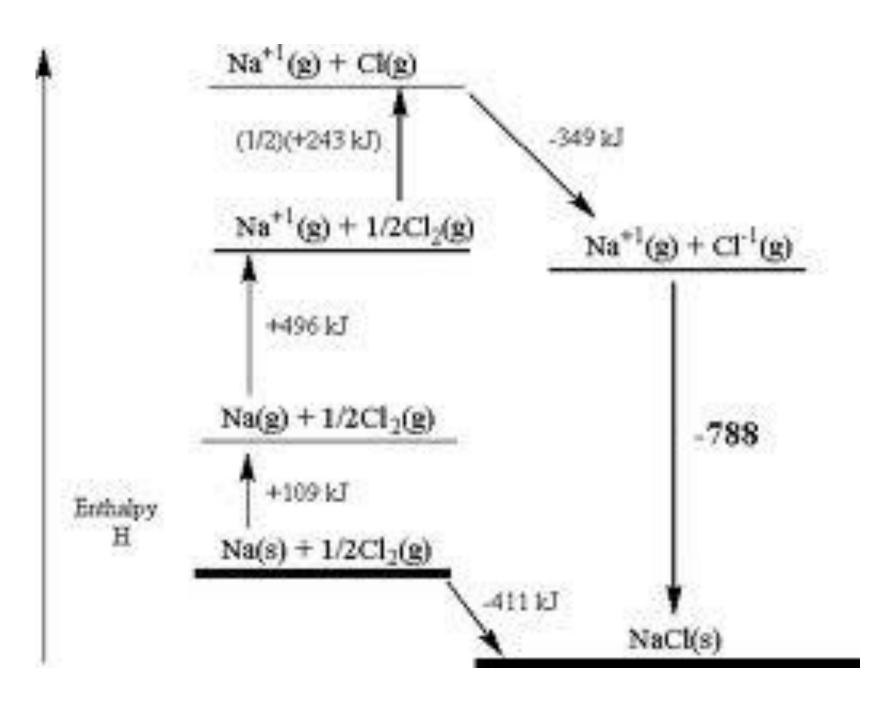


Figure 2.6 Essential Cell Biology, 2/e. (© 2004 Garland Science)



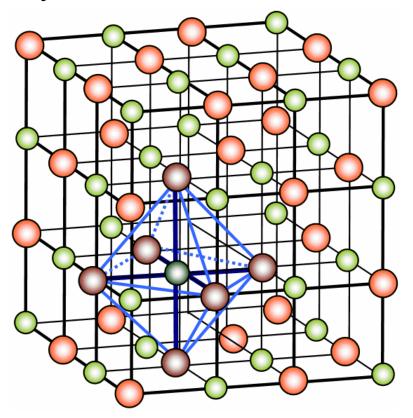
1 – A LIGAÇÃO IÔNICA: (eletrovalente ou heteropolar)

ocorre com transferência definitiva de elétrons;

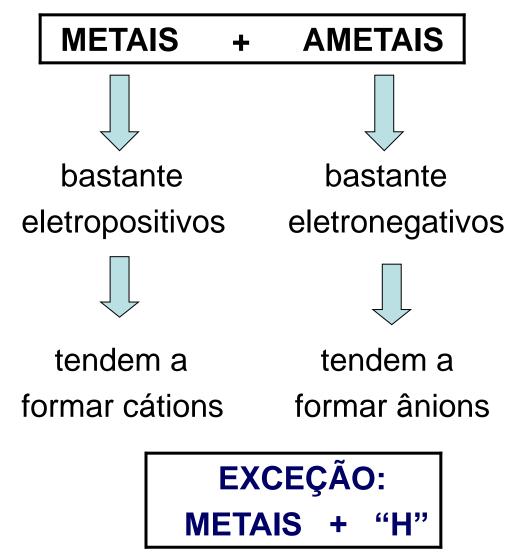
há a formação de íons;

os íons se arranjam em retículos cristalinos (são sólidos

cristalinos):



geralmente ocorre entre:



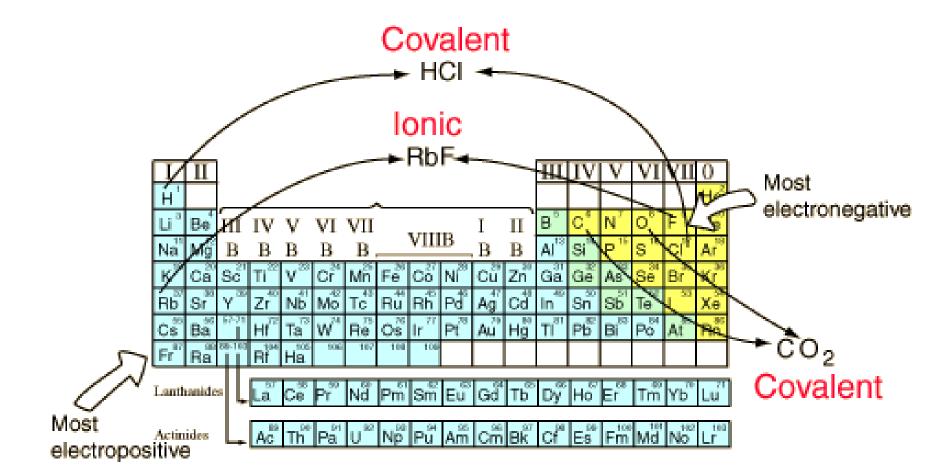
 o número de elétrons cedidos é igual ao número de elétrons recebidos:

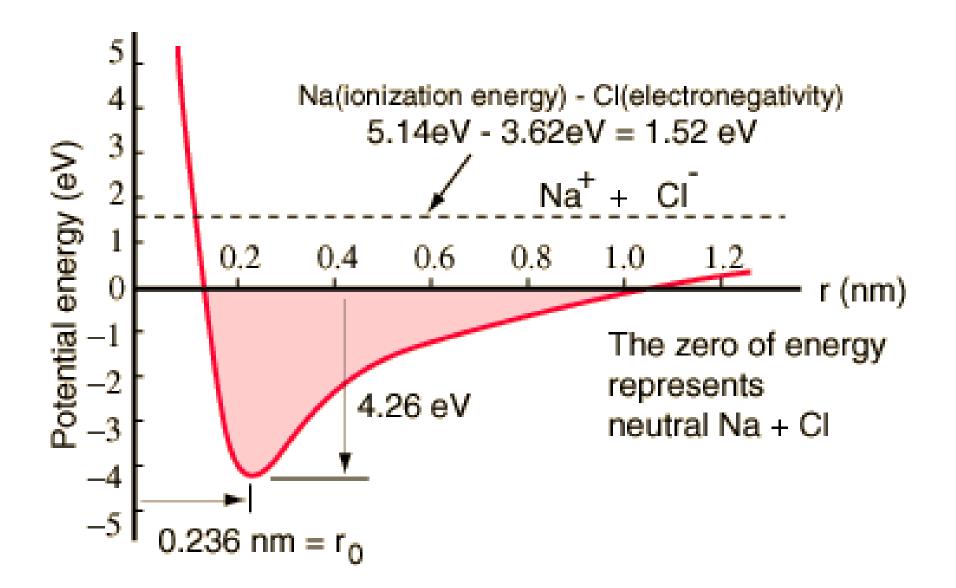
$$_{13}$$
 Al - $_{1}s^2$ $_{2}s^2$ $_{2}p^6$ $_{3}s^2$ $_{3}p^1$ $\xrightarrow{perde\ 3\ e}$ Al $_{3}^{3+}$ - $_{1}s^2$ $_{2}s^2$ $_{2}p^6$ $_{3}e$ elétrons $_{8}$ O- $_{1}s^2$ $_{2}s^2$ $_{2}p^4$ $\xrightarrow{ganha\ 2\ e}$ O $_{2}$ - $_{1}s^2$ $_{2}s^2$ $_{2}p^6$ $_{6}$ elétrons $_{8}$ elétrons

Al₂O₃, esse é o composto iônico formado por Al e O. Onde o indice indica o número de átomos do elemento no composto.

fórmula geral de um composto iônico:

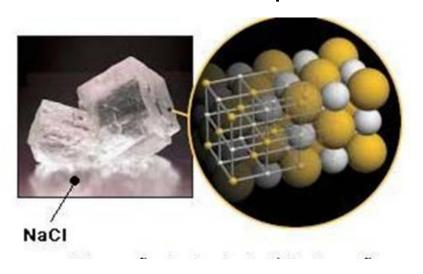
$$A^{x+} + B^{y-} \rightarrow A_y B_x$$

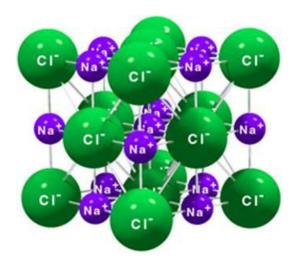




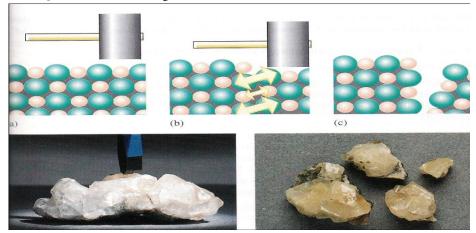
CARACTERÍSTICAS DOS COMPOSTOS IÔNICOS:

* são sólidos à temperatura ambiente (sólidos cristalinos);

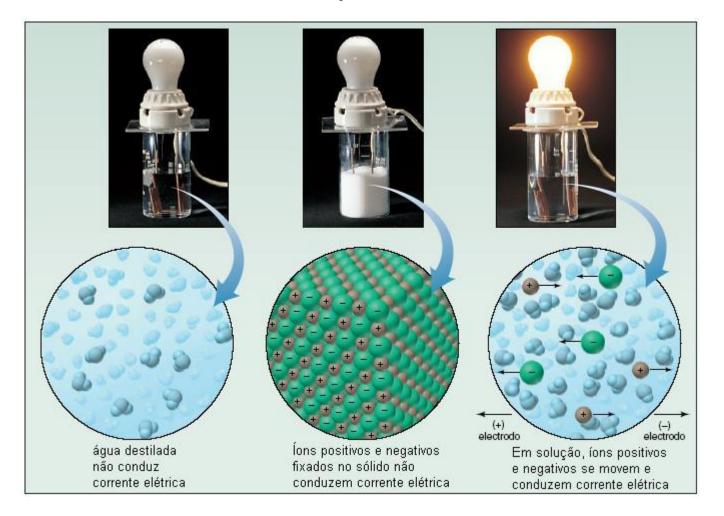




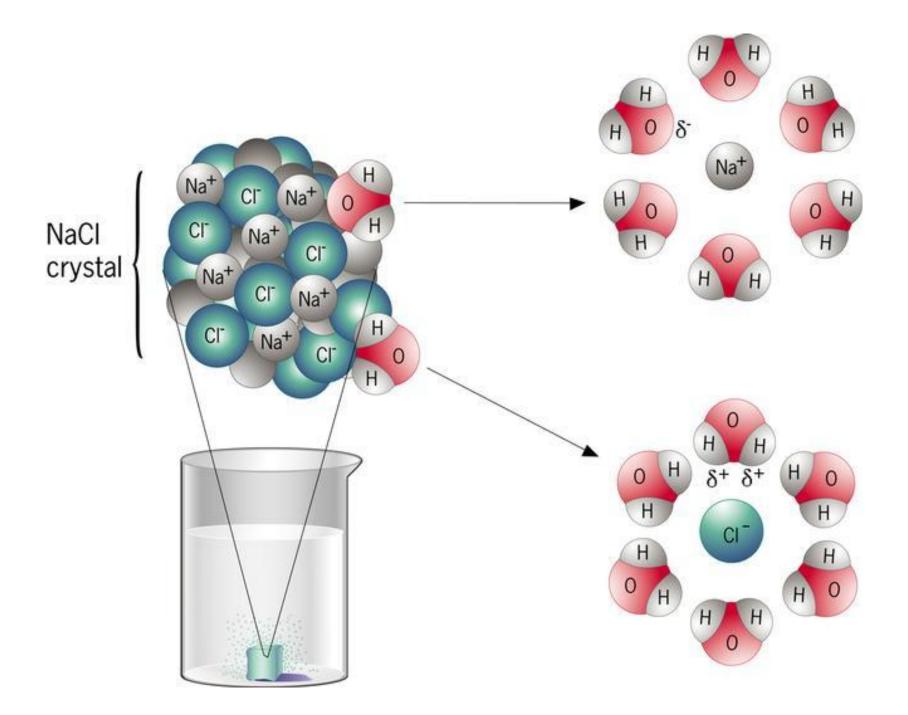
* são duros e quebradiços;



* conduzem corrente elétrica quando: fundidos ou em solução;



^{*} possuem alto ponto de fusão e de ebulição.



2 – A LIGAÇÃO COVALENTE: (molecular ou homopolar)

- ocorre com compartilhamento de elétrons;
- não há a formação de íons;

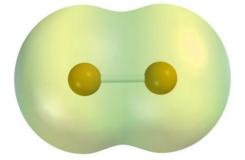
ligação covalente:

polar: os átomos são diferentes

apolar: os átomos são idênticos

Cl:Cl

A nonpolar covalent bond

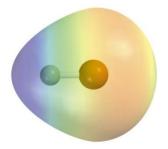


$$^{\delta+}H-Cl^{\delta-}$$

[H :Cl]

A polar covalent bond.

The bonding electrons are attracted more strongly by Cl than by H.



TIPOS DE LIGAÇÕES COVALENTES:

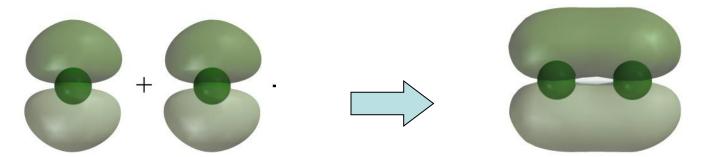
Por aproximação frontal dos orbitais atômicos:

Ligações σ (sigma)

- σs-s σs-p σp-p
- Forma ligações fortes.
- Apresentam simetria cilíndrica em torno do eixo de ligação.
- Átomos podem rotar em torno do eixo da ligação.
- Não apresentam plano nodal no eixo internuclear.
- ■Todas as ligações covalentes simples são sigma (primeira ligação é sempre sigma).

Por aproximação lateral dos orbitais atômicos:

Ligações π (pi)



- São formadas entre átomos que já possuem ligação σ.
- Possuem um plano nodal no eixo internuclear.
- Não permitem rotação dos átomos em torno do eixo internuclear.
- São mais fracas que as ligações σ.
- Átomos grandes raramente formam duplas ligações a sobreposição é difícil.
- Orbitais "s" não formam ligações pi.

Obs.: na verdade, toda ligação apresenta um caráter intermediário entre iônico e covalente.



diferença de eletronegatividade



caráter iônico

diferença de eletronegatividade (Δ):

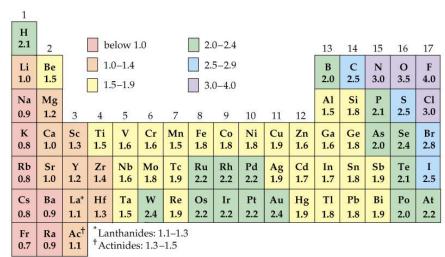
$$\Delta < 1,7$$
 $\Delta = 1,7$ $\Delta > 1,7$

$$\Delta = 1,7$$

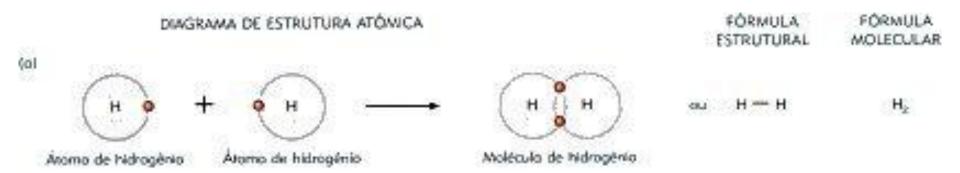
$$\Delta = 1,7$$
 $\Delta > 1,7$ ligação iônica

ligação covalente

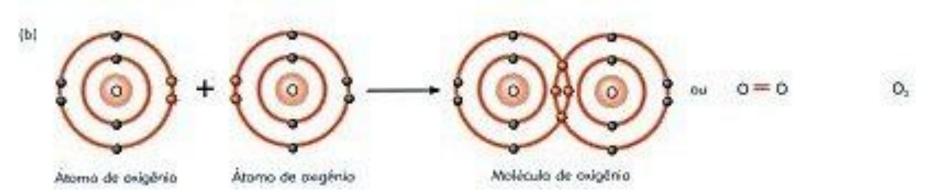




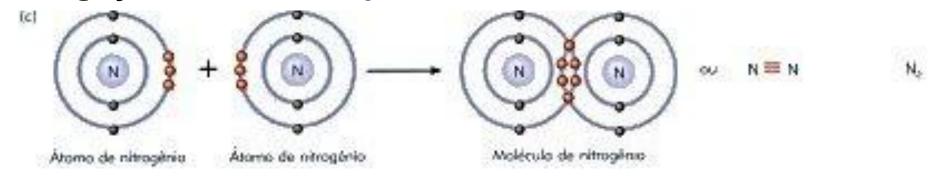
ligação covalente simples:



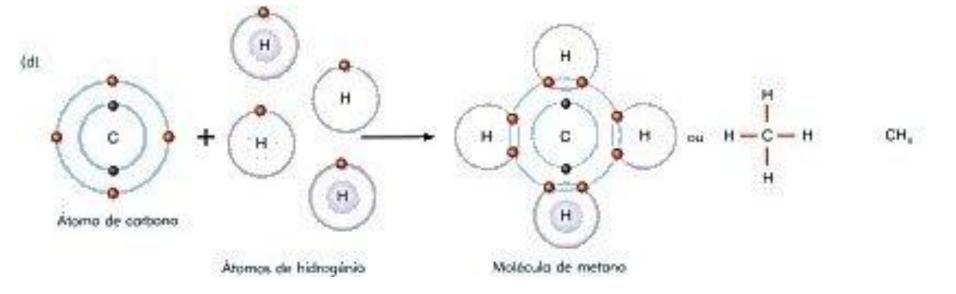
ligação covalente dupla:



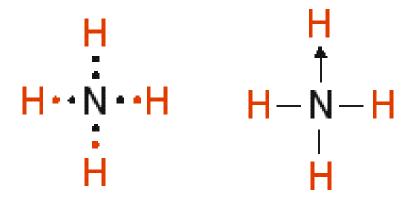
ligação covalente tripla:



· molécula de metano:



o caso da ligação covalente dativa ou coordenada:



exceções à regra do octeto:

menos de 8 elétrons

número ímpar de elétrons (radical livre)

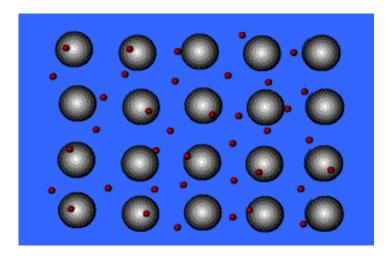
mais de 8 elétrons

CARACTERÍSTICAS DOS COMPOSTOS MOLECULARES:

- * podem ser encontradas nos três estados físicos à temperatura ambiente;
- * ponto de fusão e ebulição, geralmente, inferiores ao das substâncias iônicas;
- * quando puras não conduzem corrente elétrica;
- * algumas substâncias conduzem corrente elétrica quando em solução (ionização);

3 – A LIGAÇÃO METÁLICA:

- é uma ligação desorientada;
- modelo do mar de elétrons: os cátions permanecem em um arranjo regular e estão cercados por um mar de elétrons.



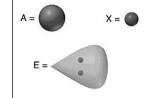
 grande movimentação eletrônica: boa condutividade térmica e elétrica, e alta maleabilidade e ductibilidade.

GEOMETRIA MOLECULAR:

- * é a forma espacial das moléculas (orientação dos átomos no espaço);
- * primeiramente, deve-se montar a estrutura de Lewis da molécula:
- 1) Somar o número de elétrons da camada de valência de cada átomo;
- 2) Escolher o átomo central (geralmente o menos eletronegativo) e fazer uma ligação para cada átomo ligante;
- 3) Completar o octeto dos átomos ligantes. Os pares que sobrarem são colocados no átomo central;

- 4) Faça a pergunta: Todos os elementos têm o octeto completo?
- 5) Completar o octeto do átomo central, formando ligações duplas e triplas.
- 6) Se o átomo central for um elemento do 3º período em diante, observar a hipervalência;
- 7) Determinar a geometria através da T.R.P.E.C.V.:(teoria da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência)
- "os pares de elétrons, ligantes e não ligantes, de uma molécula se interagem e se dispõem espacialmente de modo que a repulsão entre eles seja a menor possível."

Species type	Orientation of electron pairs	Predicted bond angles	Example	Ball and stick model
AX ₂	Linear	180°	BeF ₂	180°
AX_3	Triangular Planar	120°	BF ₃	120°
AX ₄	Tetrahedron	109.5°	$\mathrm{CH_4}$	109.5°
AX_5	Triangular Bipyramid	90° 120° 180°	PCl ₅	90°
AX ₆	Octahedron	90° 180°	SF ₆	90°

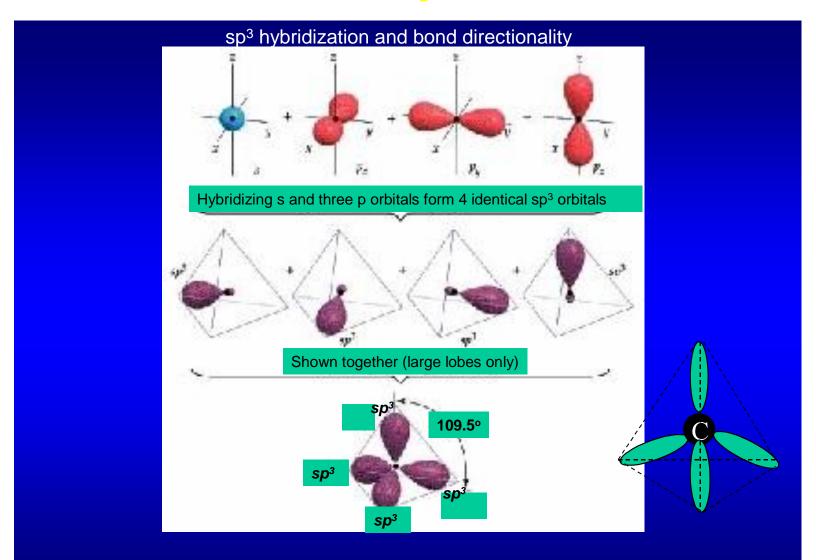


TIPO	FORMA DA MOLÉCULA	GEOMETRIA MOLECULAR	ÂNGULO LIGAÇÕES	EXEMPLO
AX ₂ E	Bent (V shaped)	angular	variável	SO ₂ O ₃
AX ₂ E ₂		angular	variável	H ₂ O
AX ₃ E		piramidal	variável	NH3 PCl3
AX ₄ E ₂		quadrado planar	90°	XeF ₄
AX ₅ E		pirâmide de base quadrada	90°	IF ₅

HIBRIDIZAÇÃO:

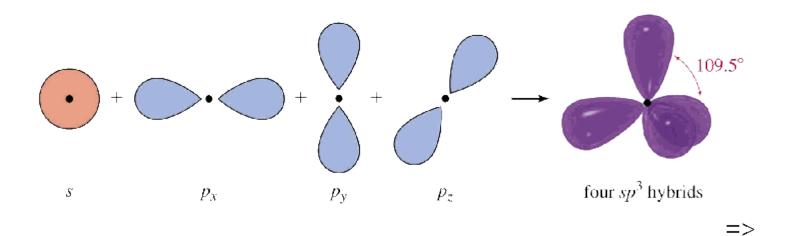
- Mistura de orbitais atômicos (OA) com energias semelhantes, dando origem a novos OAs com energia com valor intermediário com relação aos valores dos orbitais atômicos originais.
- Os orbitais híbridos são formados de maneira a minimizar a energia da molécula. Afasta as nuvens eletrônicas. Determinante para a geometria molecular.
- Alguns OAs podem permanecer na forma pura.
- Alguns híbridos podem não participar de ligações, mantendo pares de elétrons isolados.
- Orbitais híbridos só participam de ligações sigma. Estas ligações podem ser realizadas com outro OA híbrido ou com um OA puro.
- Serão formados tantos orbitais híbridos quantos forem os OAs puros que se envolveram no processo.

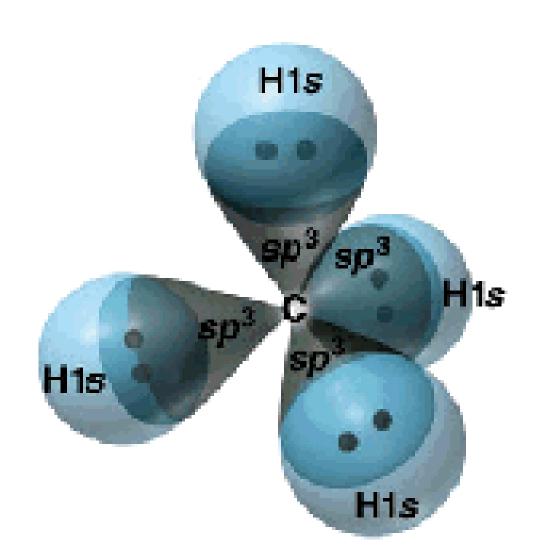
HIBRIDIZAÇÃO SP3:



Orbitalis hibridos sp3

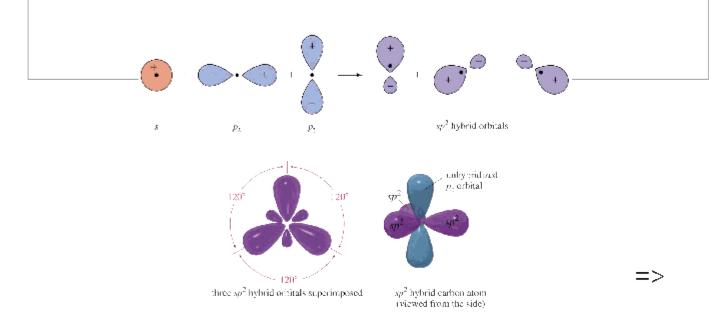
- 4 VSEPR pares
- Geometria tetraédrica
- 109.5° ângulo ligação

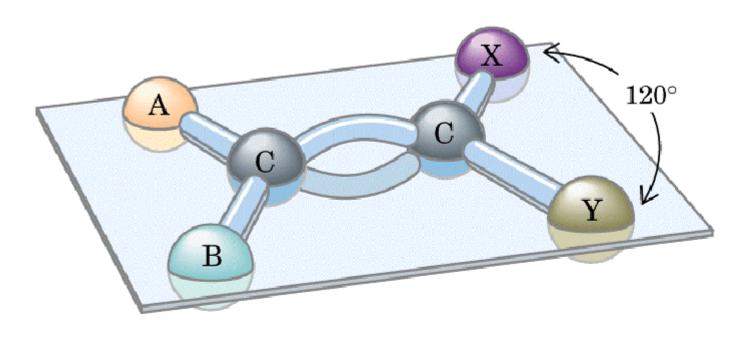




Orbitais híbridos sp²

- 3 VSEPR pares
- Geometria trigonal planar
- 120° ângulo ligação





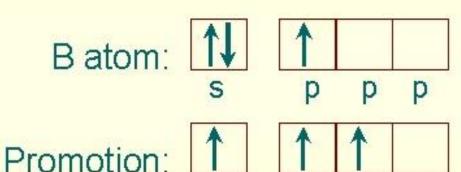
(c)

HIBRIDIZAÇÃO SP2:

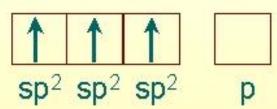
sp² Hybrid Orbitals in BF₃

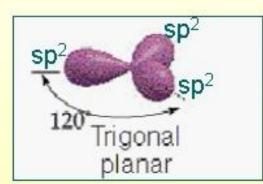
Trigonal planar geometry is achieved using

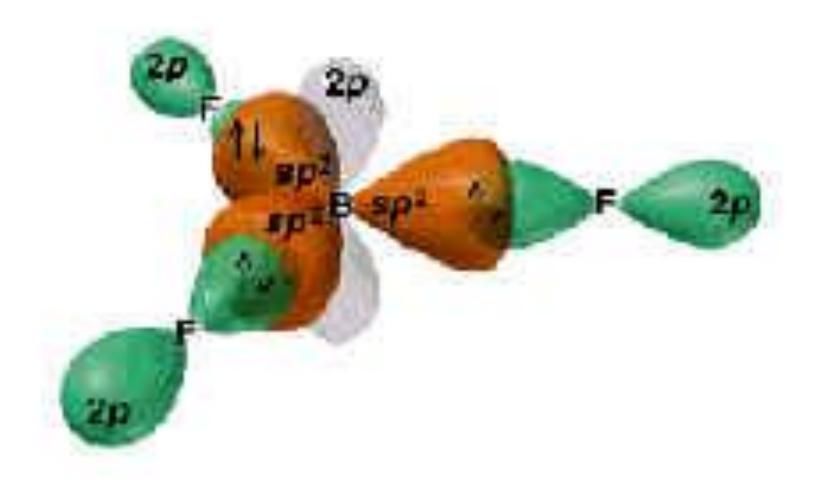
three sp² hybrid orbitals.



Hybridization:

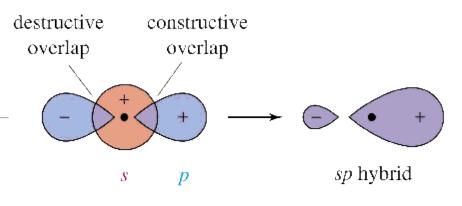


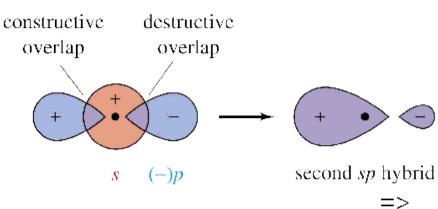




Orbitais híbridos sp

- 2 VSEPR pares
- Geometria linear
- l∆O° ângulo ligação





HIBRIDIZAÇÃO SP:

sp Hybrid Orbitals in BeF₂

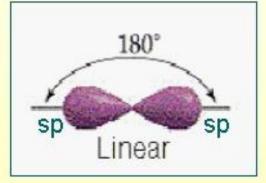
Linear geometry is achieved using two sp hybrid orbitals.

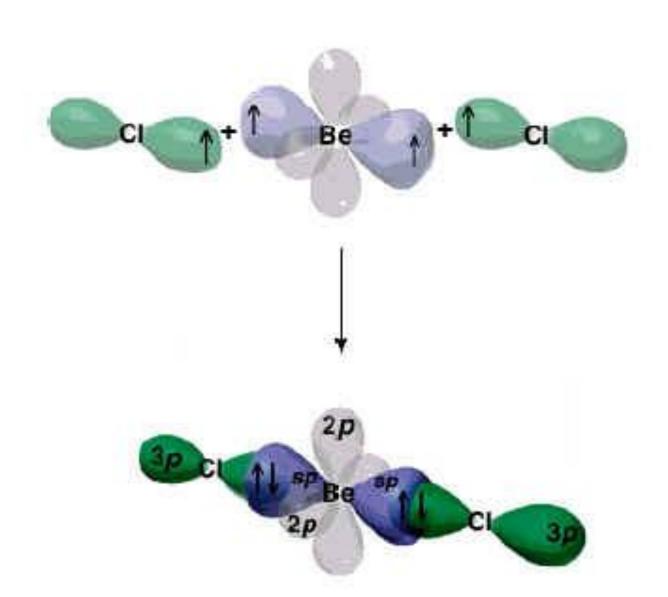
sp

sp

p

p

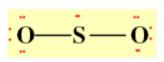


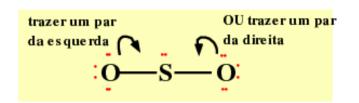


Nº DE e ⁻ DE VALÊNCIA DO ÁTOMO NEUTRO	6	4	6	6	4	6
-						
Nº DE e⁻ ISOLADOS	4	0	4	6	0	2
1/ NO DC 0-	2	1	2	4	4	2
½ № DE e ⁻ COMPARTILHADOS	2	4	2	1	4	3
C.F. =	0	0	0	-1	0	+1

RESSONÂNCIA:

* moléculas que não são expressas corretamente por uma única estrutura de Lewis





$$\circ = s - o \leftrightarrow o - s = o$$

* todas as estruturas são idênticas (mesma energia) ou

sabe-se que:

* Como explicar? Elétrons delocalizados

* mais exemplos:

NO₃ (N=O: 1,2 A°; N-O: 1,4 A°; NO₃: 1,24 A°)

no benzeno:



(C-C: 1,54A°; C=C: 1,34A°; benzeno: 1,39A°)

IMPORTANTE: a ressonância é uma mistura das estruturas individuais de Lewis e não uma alternância entre as mesmas.

ORDEM E COMPRIMENTO DE LIGAÇÃO:

* ordem de ligação (O.L.) é o número de pares de elétrons compartilhados por dois átomos numa molécula.

$$N^0$$
 de pares compartilhados / N^0 de interações O.L.(X-Y) = por X e Y X-Y

IMPORTANTE!!!



ORDEM DA LIGAÇÃO



COMPRIMENTO DA LIGAÇÃO

* em estruturas ressonantes temos ordem fracionária:

no ozônio: ordem= 3/2

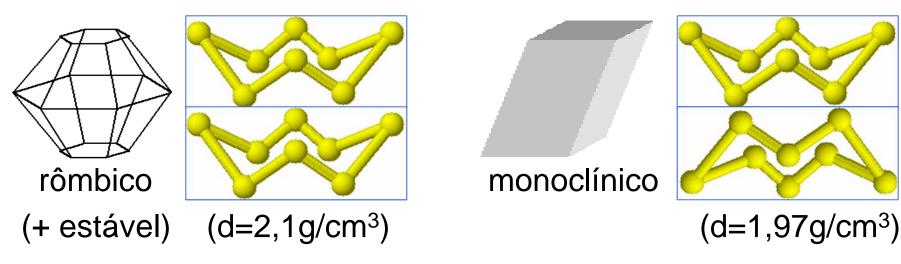
no carbonato (CO_3^2) : ordem= 4/3

ALOTROPIA:

* é a capacidade que um determinado elemento químico possui de formar substâncias simples diferentes.

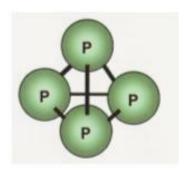
A) ENXOFRE: (rômbico e monoclínico)

- a diferença é o arranjo molecular que formam cristais diferentes.

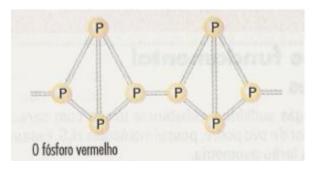


B) FÓSFORO: (branco, vermelho e negro)

- diferem pelo tipo de arranjo molecular:



(fósforo branco)
altamente reativo e tóxico
queima espontaneamente
em contato com o ar
d = 1,8 g/cm³



(fósforo vermelho)(+ estável)

pouco tóxico

não queima em contato

com o ar

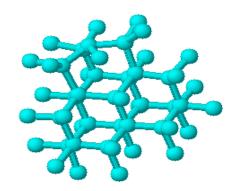
d = 2,4 g/cm³

C) OXIGÊNIO: (molecular (O2) e ozônio)

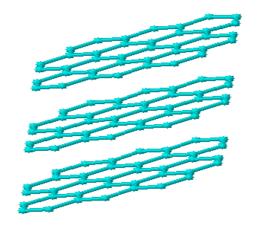
- diferem pelo número de átomos que formam a molécula:

SUBSTÂNCIA	FÓRMULA	REPRESENTAÇÃO	Tebulição
GÁS OXIGÊNO	O ₂		- 182,8°C
GÁS OZÔNIO	О3		- 111,3°C

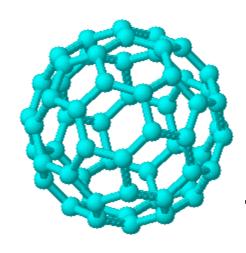
D) CARBONO: (grafite, diamante e fulerenos)



Diamante: cada átomo de carbono está ligado quatro outros átomos de carbono. O diamante é a substância mais dura da natureza de acordo com a escala de MOHS.



Grafite: os átomos de carbono se ligam de modo a formar lâminas de átomos de carbono.



Fulerenos: o mais conhecido é o C₆₀.Estrutura formada por 20 hexágonos e 12 pentágonos, semelhante a uma bola de futebol.