

Ligações Químicas

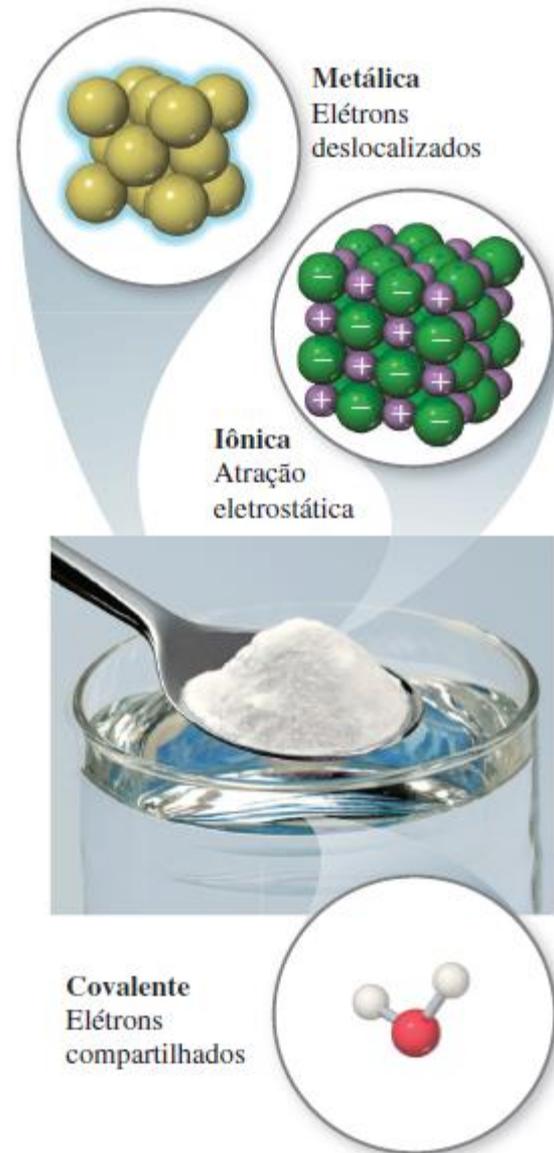


Figura 8.1 Ligações iônicas, covalentes e metálicas. Nas três diferentes substâncias mostradas aqui, há diferentes tipos de ligações químicas.

Ligações Químicas

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

Símbolos de Lewis e regra do octeto

- ✓ O **símbolo de Lewis** para um elemento consiste no símbolo químico do elemento mais um ponto representando cada elétron de valência. Os pontos são colocados nos quatro lados do símbolo, e cada lado pode acomodar até dois elétrons.

Tabela 8.1 Símbolos de Lewis.

Grupo	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
1A	Li	[He]2s ¹	Li·	Na	[Ne]3s ¹	Na·
2A	Be	[He]2s ²	·Be·	Mg	[Ne]3s ²	·Mg·
3A	B	[He]2s ² 2p ¹	·B·	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	·Al·
4A	C	[He]2s ² 2p ²	·C·	Si	[Ne]3s ² 3p ²	·Si·
5A	N	[He]2s ² 2p ³	·N:	P	[Ne]3s ² 3p ³	·P:
6A	O	[He]2s ² 2p ⁴	:O:	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	:S:
7A	F	[He]2s ² 2p ⁵	·F:	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	·Cl:
8A	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	:Ne:	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	:Ar:

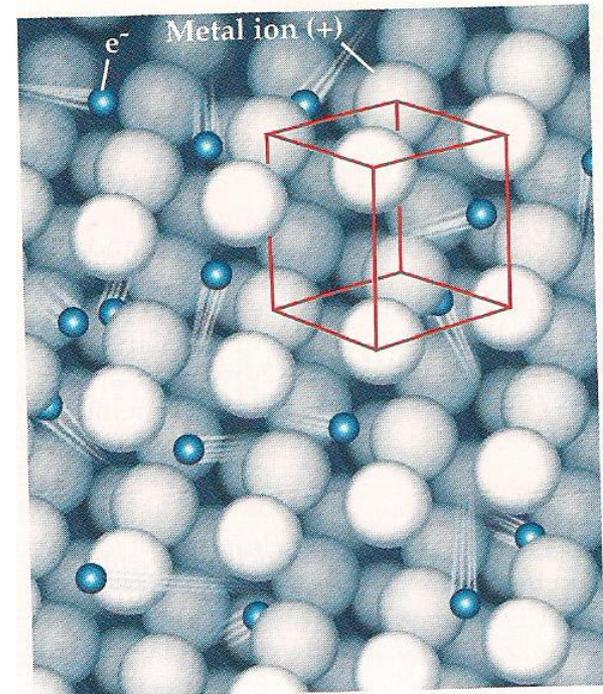
Símbolos de Lewis e regra do octeto

- ✓ Todos os gases nobres, com exceção do He, apresentam oito elétrons na camada de valência, assim como muitos átomos, em reações, acabam ficando com oito elétrons de valência.
- ✓ Essa observação levou a uma regra conhecida como **regra do octeto**: átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que estejam circundados por oito elétrons de valência.
- ✓ Um octeto de elétrons em um átomo consiste em subcamadas s e p preenchidas. Em um símbolo de Lewis, o octeto é formado por quatro pares de elétrons de valência dispostos em torno do símbolo do elemento.

Metais

Grande número de entidades iguais mantidas coesas em um retículo cristalino.

Os metais exibem uma série de propriedades em comum: todos são sólidos nas condições ambientes (exceto o Hg), têm brilho metálico, maleabilidade, ductilidade, boa condutividade térmica e elétrica.



Ligações Metálicas

Metais: 1 a 3 elétrons na camada de valência.



Baixos valores de **EI**: tendência a formar cátions.
(Alta eletropositividade)



Liberação parcial dos elétrons mais externos dos átomos do elemento metálico.



Cátions formados + elétrons livres.

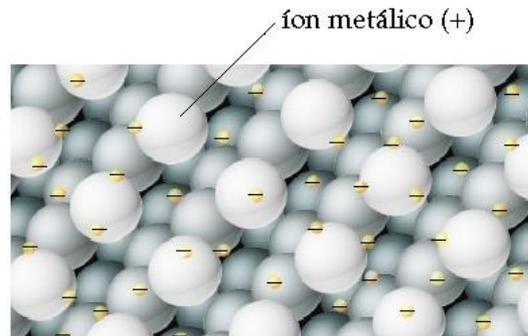


Substância simples metálica.

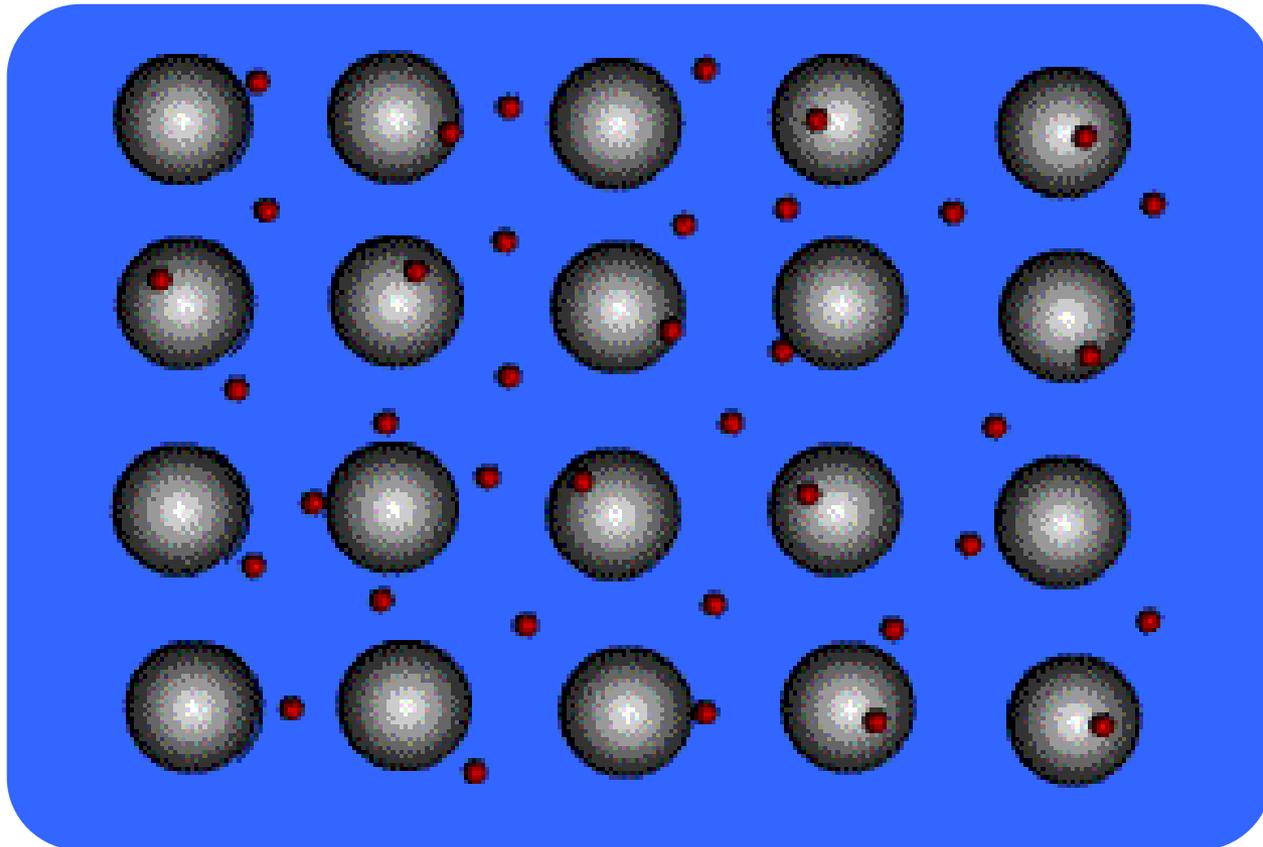
Modelo Mar de Elétron

Utilizamos um modelo deslocalizado para os elétrons em um metal.

- Nenhum elétron é localizado entre 2 átomos de metal.
- Os elétrons podem fluir livremente através do metal.
- Sem quaisquer ligações definidas, os metais são fáceis de deformar (e são maleáveis e dúcteis).



Os elétrons de valência não estão ligados aos átomos, mas deslocalizados por todo o cristal, movendo-se livremente em todas as direções e sendo “*utilizados*” por todos os cátions com igual probabilidade.



Modelo da Ligação Metálica

Os cátions do metal agrupam-se segundo um arranjo geométrico definido, denominado **estrutura cristalina** ou **célula unitária**.

Nas células unitárias têm suas cargas positivas estabilizadas pelos elétrons livres, que ficam envolvendo a estrutura como uma nuvem eletrônica.

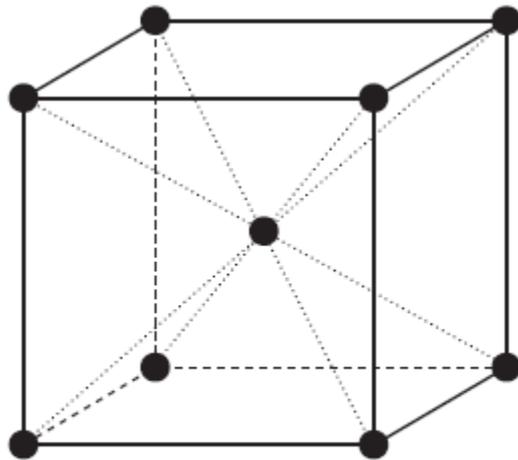
Os elétrons livres são dotados de certo movimento, o que justifica a propriedade que os metais possuem de conduzir corrente elétrica na fase sólida.

Modelo da Ligação Metálica

Uma amostra de metal é constituída por um número imenso de células unitárias.

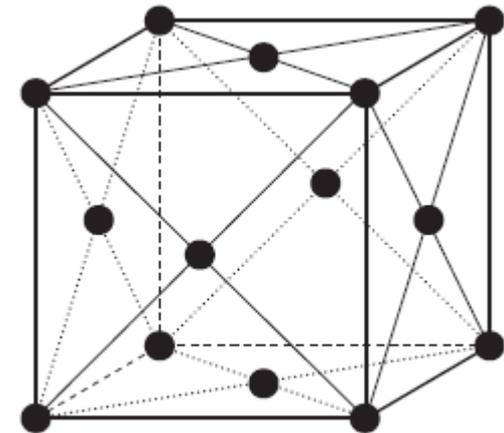
Exemplos:

Sódio metálico: arranjo cúbico de corpo centrado, Ccc.



Na(s): Ccc.

Alumínio metálico: arranjo cúbico de face centrada. Cfc.



Al(s): Cfc.

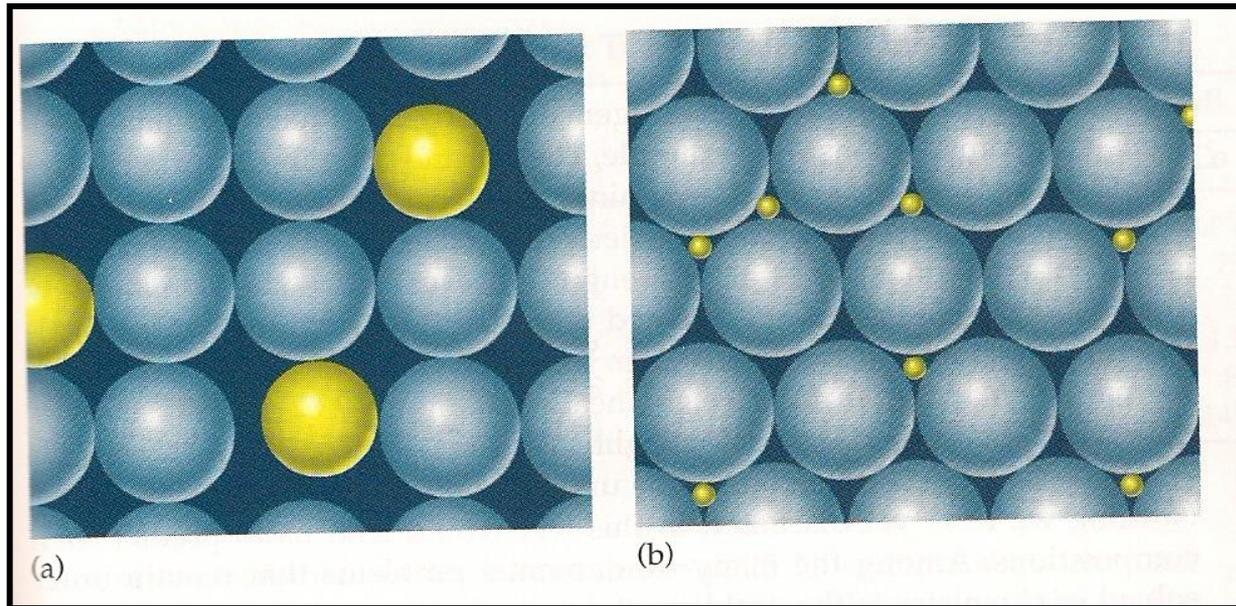
Modelo da Ligação Metálica

Logo, a correta representação de uma substância metálica como o sódio, por exemplo, seria Na_n (s), na qual n é um número muito grande e indeterminado.

De qualquer forma, é costume abolir o índice n , representando a substância metálica apenas pelo símbolo do elemento químico (que não existe isoladamente), no caso, apenas por Na (s).

Ligas Metálicas

- São materiais com propriedades metálicas que contêm dois ou mais elementos sendo que pelo menos um deles é metal.



- As ligas possuem propriedades diferentes dos elementos que as originam. Algumas propriedades são tais como diminuição ou aumento do ponto de fusão, aumento da dureza , aumento da resistência mecânica.

Ligas Metálicas

Para obter uma liga metálica, é necessário submeter as substâncias que formarão a liga a uma temperatura elevada até a fusão completa para, em seguida, deixar a mistura esfriar e solidificar totalmente.

Exemplos de Ligas:

Aço: \simeq 98,5% de ferro, de 0,5 a 1,7% de carbono e traços de silício, enxofre e fósforo.

Empregado na fabricação das mais diversas ligas destinadas a diferentes aplicações

Ligas Metálicas

Aço inox: 74% de aço, 18% de cromo e 8% de níquel.
Usado na fabricação de talheres, utensílios de cozinha, decoração.

Bronze comum: 90% de cobre e 10% de estanho.
Usado na fabricação de engrenagens, artesanato e objetos de decoração.

Latão amarelo: 67% de cobre e 33% de zinco.
Usado na confecção de tubos, torneiras, decorações.

Ligas Metálicas

Ouro de 18 quilates: 75% de ouro, 13% de prata e 12% de cobre.

Usado em joalheria, próteses, circuitos eletrônicos de alto desempenho.

Duralumínio: 95,5% de alumínio, 3% de cobre, 1% de manganês e 0,5% de magnésio.

Usado na fabricação de peças de aviões e de automóveis.

Para uso em hidroaviões, são adicionados outros componentes, como o Zr, que protegem contra a corrosão da água do mar.

Características dos Metais

- Força da ligação metálica: depende da carga dos cátions
- Brilho metálico – interação dos elétrons do metal com os diversos comprimentos de onda incidentes.
- Condução da energia elétrica: elétrons são promovidos a níveis energéticos mais elevados que estão disponíveis (vazios).

Características dos Metais

Condução da Energia Térmica:

- ✓ Elétrons “deslocalizados” interagem fracamente com os núcleos.
- ✓ No aquecimento os elétrons adquirem grande quantidade de energia cinética e deslocam-se para as regiões mais frias.
- ✓ Ocorre dissipação desta energia através de choque com outras partículas levando a aquecimento do retículo.

Características dos Metais

- **Ductilidade e Maleabilidade: capacidade de formar fios e lâminas**
- Dureza, ponto de fusão e ponto de ebulição: dependem primordialmente da força da ligação metálica.
- Os átomos de um metal no estado sólido estão arrançados de modo a formar figuras geométricas bem definidas (retículos metálicos).

Ligações Químicas

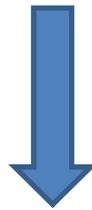
- Uma ligação química é uma união entre átomos.
- Ela se forma entre dois átomos se o arranjo resultante de seus dois núcleos e seus elétrons tiver:



Energia mais baixa que a energia total dos átomos separados.

Ligações Químicas

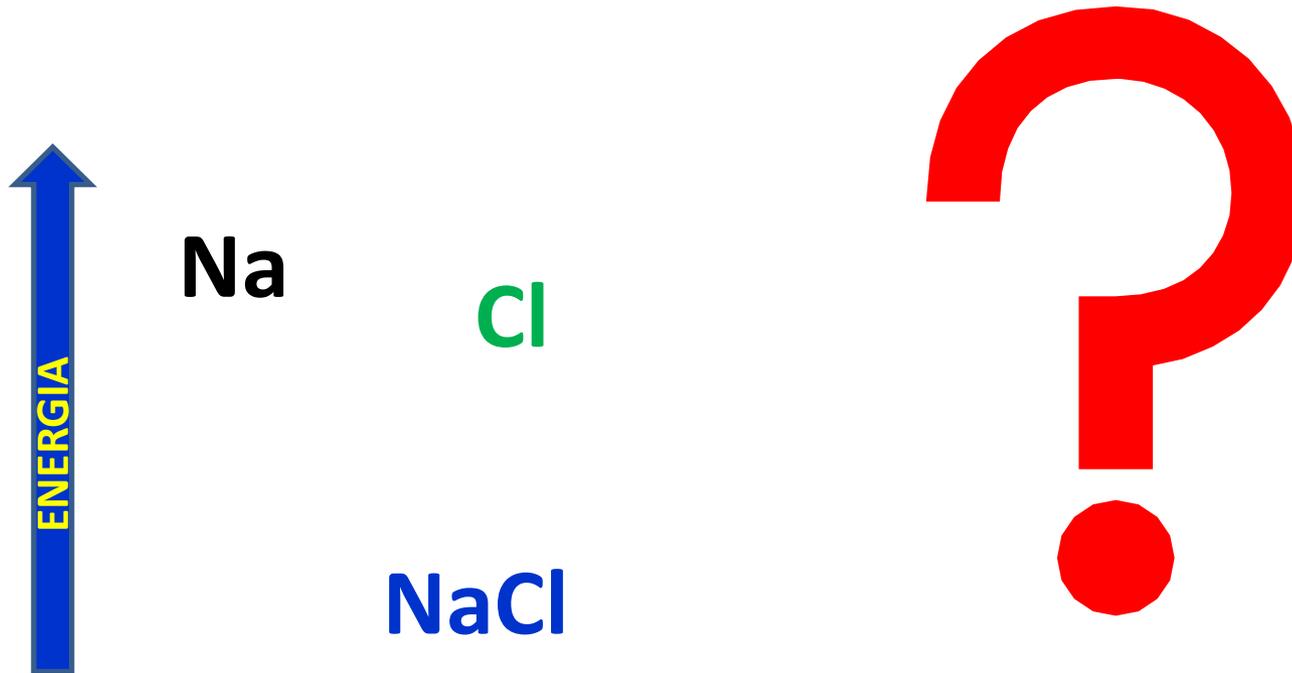
- Se a energia mais baixa for atingida pela transferência completa de um ou mais elétrons forma-se íons;
- O composto formado será mantido pela atração eletrostática entre estes dois íons.



Esta atração é chamada de Ligação Iônica

Ligações Iônicas

Exemplo: Vamos analisar porque o cloreto de sódio
Tem a energia mais baixa



do que os átomos de sódio e cloro, totalmente separados.

Ligações Iônicas

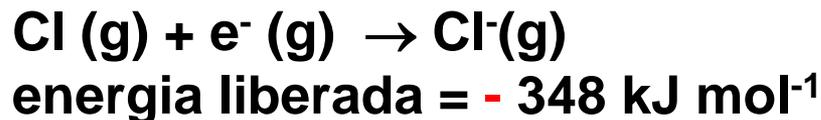
Descrevemos a formação do sólido acontecendo em 3 etapas:

1. átomos de sódio perdem elétrons;

Grupo 1 da Tabela Periódica e tem configuração $[\text{Ne}]3s^1$.



2. estes elétrons ligam-se aos átomos de cloro;



O balanço de energia é $495 - 348 = +147 \text{ kJmol}^{-1}$,
EI AF



um *aumento* de energia.



os íons sódio e cloro totalmente separados tem energia mais alta que os átomos de sódio e cloro.



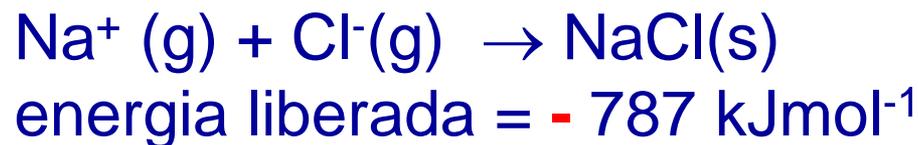
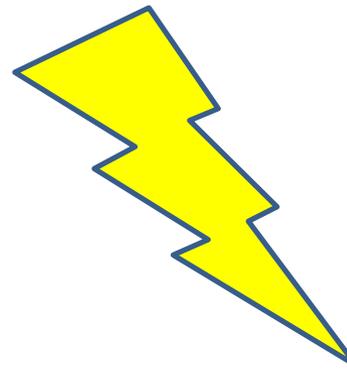
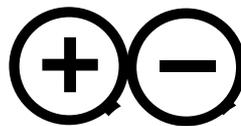
.

Dessa forma, não há razão para se formar NaCl.

3. A contribuição que falta é a forte atração eletrostática entre os íons de carga oposta.



Quando os íons se juntam para formar um sólido cristalino, sua atração mútua libera uma grande quantidade de energia:



Ligações Iônicas

Então, a mudança de energia líquida no processo global:



é

$$147 - 787 = -640 \text{ kJmol}^{-1}, \text{ decréscimo de energia.}$$

(EI- AF) - Er

O sólido, composto de íons Na^+ e Cl^- , tem energia mais baixa que um gás de átomos de Na e Cl.

Ciclo de Haber-Born ou Born-Haber

Considere a reação global:
 $\text{Na}(s) + \frac{1}{2}\text{Cl}_2(g) \rightarrow \text{NaCl}(s) \quad \Delta H_f^\circ = ? \text{ kJ}$



Figura 8.2 Reação entre o sódio metálico e o gás cloro para formar o composto iônico cloreto de sódio.

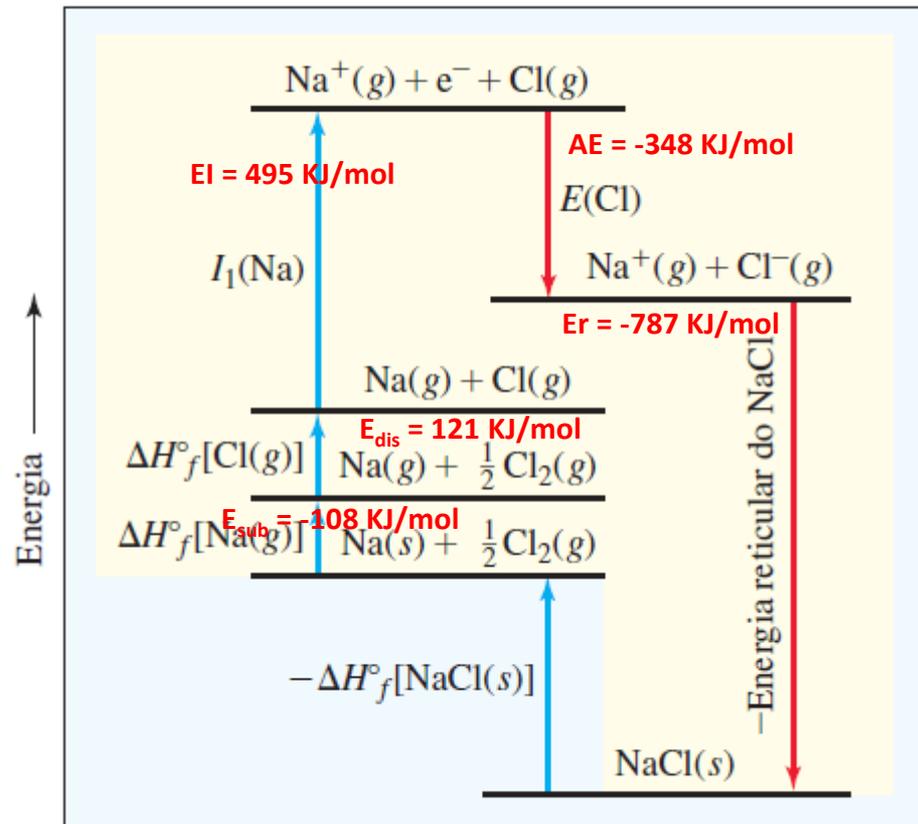


Figura 8.5 O ciclo de Born-Haber para a formação do NaCl.

$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_1^\circ + \Delta H_2^\circ + \Delta H_3^\circ + \Delta H_4^\circ + \Delta H_5^\circ$$

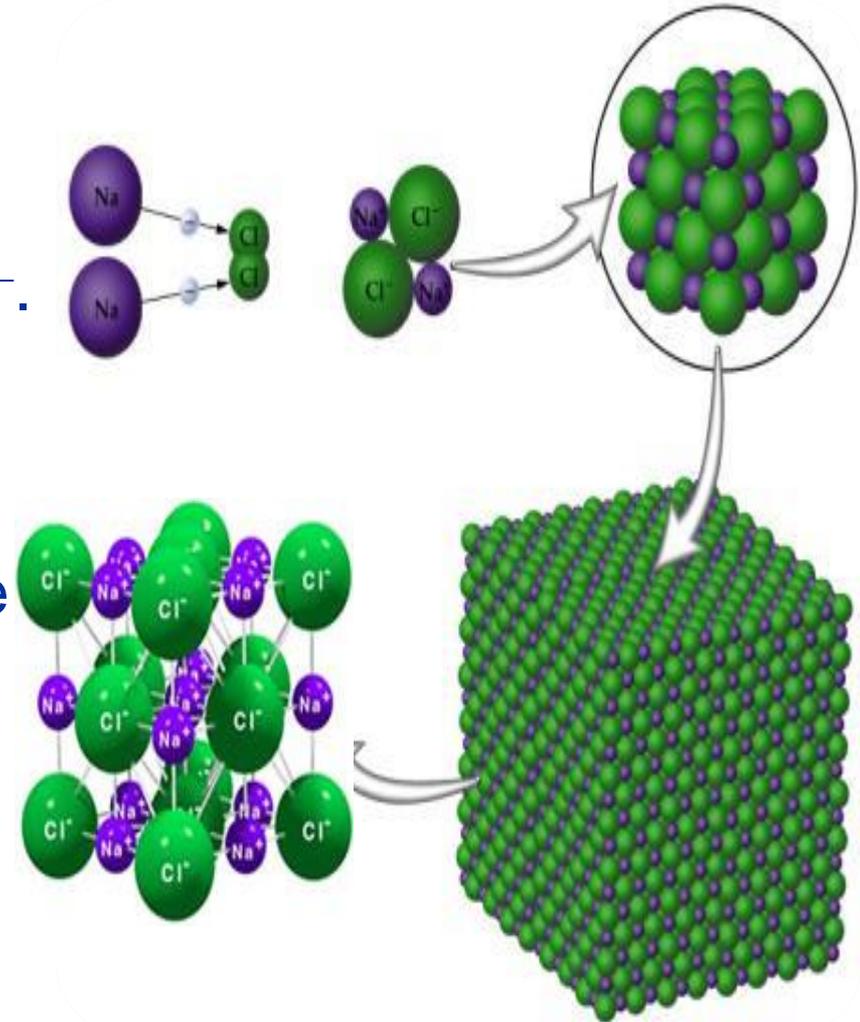
$$\Delta H_f^\circ = 108 + 121 + 495 + (-348) + (-787)$$

$$\Delta H_f^\circ = -411$$

Ligação iônica

- O NaCl forma uma estrutura muito regular na qual cada íon Na^+ é circundado por 6 íons Cl^- .
- Similarmente, cada íon Cl^- é circundado por seis íons Na^+ .
- Há um arranjo regular de Na^+ e Cl^- em 3D.
- Observe que os íons são empacotados o mais próximo possível.

- Estrutura CFC (Cúbica de Face Centrada)



Ligação iônica: energia envolvidas

Energia de Rede (E_r): é a energia necessária para separar completamente um mol de um composto sólido iônico em íons.

TABELA 8.2 Energias de rede para alguns compostos iônicos

Composto	Energia de rede (kJ/mol)	Composto	Energia de rede (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl ₂	2.326
LiCl	834	SrCl ₂	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		

Exemplos envolvendo Energia de Rede (Er):

$$E_r = k \frac{Q_+ Q_-}{d}$$

K é uma constante ($8,99 \times 10^9 \text{ J m/C}^2$)

Q_+ é a carga do cátion

Q_- é a carga do ânion

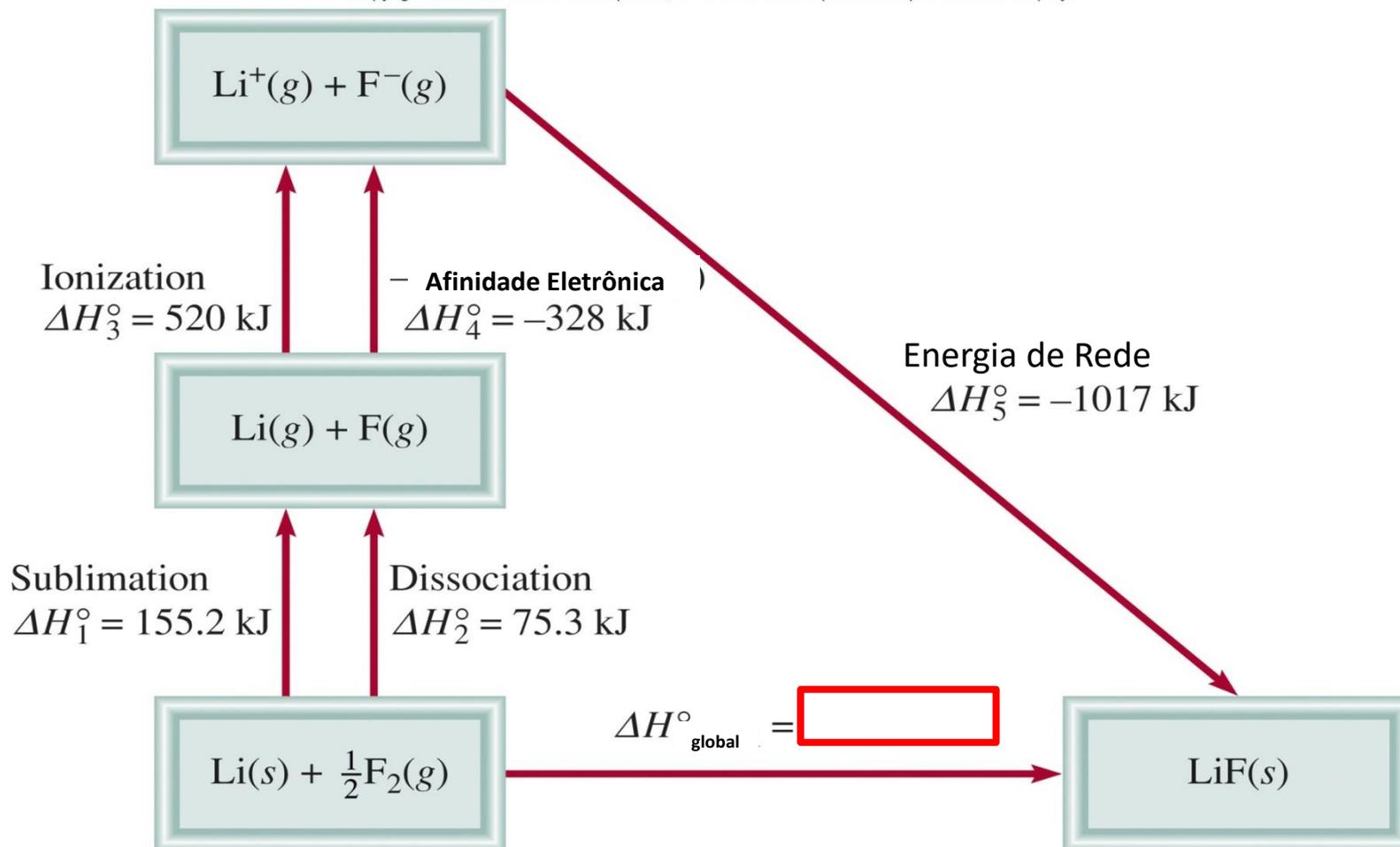
d é a distância entre os íons

Aumento da Er:
 Aumento das Cargas **Q**
 e/ou
 Diminuição da distância **d**

<u>Composto</u>	<u>Energia de Rede</u> (kJ/mol)	
MgCl ₂	2326	Q: +2,-1
MgO	3795	Q: +2,-2
LiF	1030	$d \text{ F}^- < d \text{ Cl}^-$
LiCl	834	

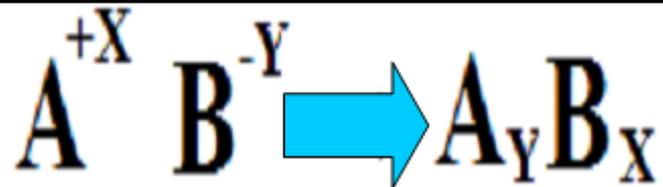
Exemplo: Calcule a Energia de Rede de Formação do LiF:

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



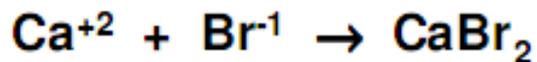
$$\Delta H^\circ_{\text{global}} = \Delta H_1^\circ + \Delta H_2^\circ + \Delta H_3^\circ + \Delta H_4^\circ + \Delta H_5^\circ$$

Ligação iônica

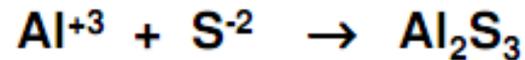


$$\Sigma \text{ Cargas} = +xy - xy = \text{zero}$$

Exemplo 1:



Exemplo 2:



Previsão da Estrutura de um composto iônico

Exemplo 3: Preveja qual será a fórmula química do composto formado entre o metal alcalino terroso do quinto período, e o halogênio do terceiro período.

Propriedades dos Compostos Iônicos

- Maus condutores de eletricidade no estado sólido:
- Apresentam elevadas energias de ligação.
- Ligações não são direcionais – forças eletrostáticas.
- São duros.
- PE e PF elevados:
 - NaCl – 801°C e 1413°C
 - CsCl - 646°C e 1290°C
 - ZnS - 1700°C (PF)
 - CaCl₂ - 782°C e > 1600°C
 - CaO - 2900°C (PF) - Efeito da carga iônica e do tamanho dos íons.
- São frágeis.

Bibliografia:

BROWN, Theodore L.; LEMAY JR., H. Eugene; BURSTEN, Bruce E.; BURDGE, Julia R. Química: A Ciência Central. 9 ed. São Paulo: Editora Pearson Prentice Hall Inc., 2005.

BROWN, Theodore L. et al. **Química: a ciência central.** 13. ed. São Paulo, SP: Pearson, 2016.

Chang R. Goldsby K. Química 11ª edição, Porto Alegre, AMGH, 2013.

MAIA, Daltamir Justino e BIANCHI, J. C. de A. Química geral. 1 ed. São Paulo: Pearson, 2007.

KOTZ, John C.; TREICHEL JR., Paul M.; WEAVER, Gabriela C. **Química Geral e Reações Químicas - Vol. 1.** 6 ed. São Paulo: Editora Cengage Learning, 2009.

ATKINS, Peter; JONES, Loretta. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente.** 5 ed. Porto Alegre: Editora Bookman, 2012.

BROWN, L.S. e HOLME, T.A.; **Química geral aplicada à engenharia.** Tradução: Maria Lucia Godinho de Oliveira. Revisão técnica: Robson Mendes Matos. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

Raymond Chang, Trad. 4.ed. Maria J. F. Rebelo, et. All. **Química Geral - Conceitos Essenciais,** Porto Alegre, AMGH, 2010.