

ESCOLA BÁSICA E SECUNDÁRIA DA CALHETA

Física e Química A – 10.º Ano

Resumo Q2.1

Unidade 2: Propriedades e transformações da matéria / 2.1. Ligação Química

2.1.1. Tipos de ligações químicas

2.1.2. Ligação covalente.

Estruturas de Lewis;

Energia de ligação e comprimento de ligação;

Geometria molecular;

Polaridades das ligações e polaridade das moléculas.

Estrutura de moléculas orgânicas e biológicas

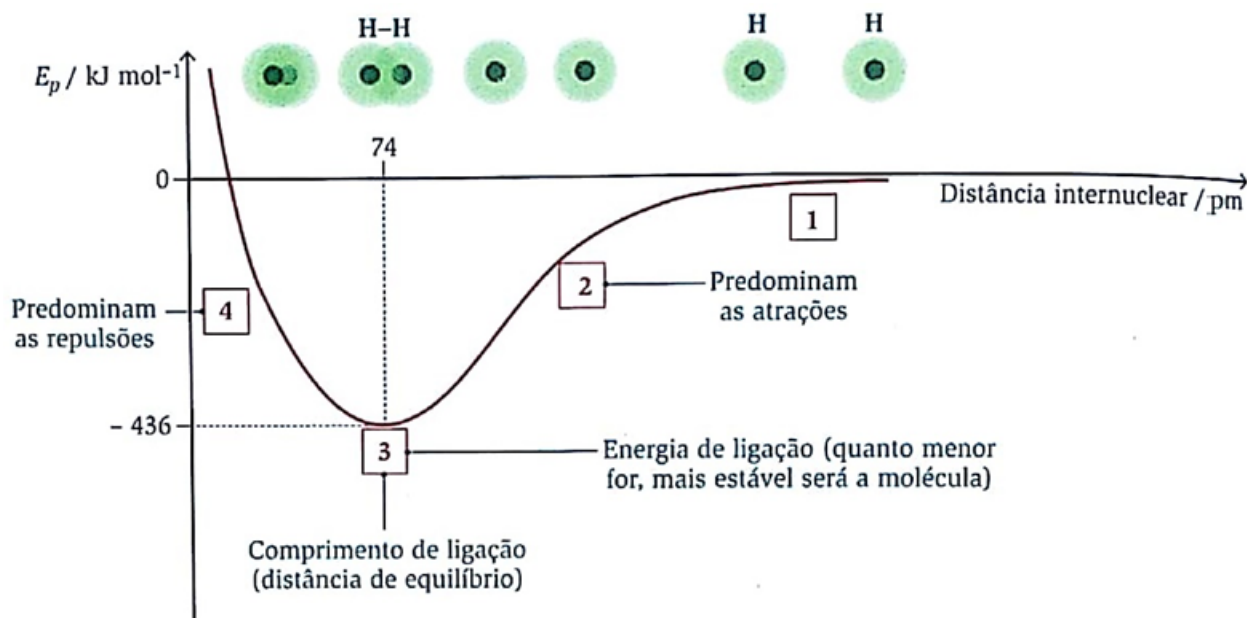
2.1.3. Ligações intermoleculares

2.1.1. Tipos de ligações químicas

A formação de ligações químicas baseia-se no **Princípio da Energia Mínima**:

todos os sistemas tendem a adquirir o estado de menor energia possível, por ser esse o estado mais estável.

Estabelece-se uma ligação química quando, durante a aproximação dos átomos, **as forças atrativas** equilibram com **as forças repulsivas**. O estabelecimento de ligações químicas confere maior estabilidade a um sistema de dois ou mais átomos, em comparação com a sua energia quando os átomos estão separados.



Variação da energia potencial em função da distância internuclear na formação de uma molécula diatômica (H_2)

Posição 1: Os dois átomos estão muito afastados e não interagem entre si - a energia do sistema é zero.

Posição 2: à medida que os átomos se aproximam, a energia do sistema vai diminuindo até atingir um mínimo – as forças atrativas (núcleo – eletrão) são mais intensas do que as forças repulsivas (núcleo – núcleo e eletrão-eletrão).

Posição 3: Os núcleos atingem uma distância mínima (a que corresponde uma **energia mínima**) à qual está associado um estado de **máxima estabilidade** formando-se a **ligação química**:

- a distância entre os núcleos dos átomos quando a energia é mínima corresponde a uma distância de equilíbrio denominada por **comprimento de ligação**.
- quanto maior for o valor (em módulo) da energia mínima, maior será a estabilidade da molécula. Denomina-se **energia de ligação** e o seu valor corresponde à energia que é necessário fornecer para quebrar a ligação entre os átomos.

Posição 4: Se a distância entre os dois núcleos diminuísse, as **forças de repulsão** (núcleo - núcleo e eletrão-eletrão) seriam **mais intensas** do que as forças atrativas (núcleo – eletrão), o que levava a um aumento da energia da molécula. O sistema tornar-se-ia instável.

Tipos de ligação química

Ligação covalente	Ligação iónica	Ligação metálica
Ocorre entre átomos de não metais que se ligam através da partilha de eletrões, como na molécula de H₂ .	Resulta da transferência de eletrões de valência entre os átomos que se ligam. Ocorre entre metais (que formam catiões) e não metais (que formam aniões) . Desta atração resulta uma estrutura em rede muito ordenada .	Os átomos mantêm-se juntos devido às forças de atração que exercem sobre os eletrões de valência dos átomos vizinhos. Esta atração é tão forte que os eletrões de valência acabam por ter liberdade de movimento, deslocando-se ao longo da estrutura – eletrões deslocalizados

2.1.2. Ligação covalente.

Nas ligações covalentes existe partilha significativa de eletrões de valência entre os átomos que formam a molécula.

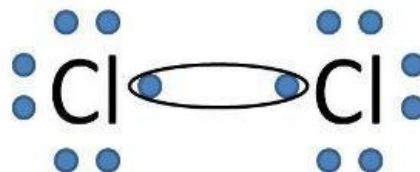
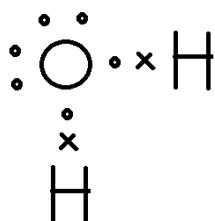
Para analisar as ligações covalentes que se estabelecem entre os átomos recorre-se à **notação de Lewis**, de acordo com a qual os eletrões de valência do átomo são representados por pontos (ou cruzeiros) à volta do símbolo químico.

Por convenção, os quatro primeiros eletrões são colocados sequencialmente em torno dos quatro lados do símbolo do elemento e os restantes são adicionados posteriormente, formando pares.

Regra do octeto - quando um átomo estabelece uma ligação covalente, partilha eletrões até estar rodeado de oito eletrões de valência.

Esta regra não se aplica ao átomo de hidrogénio, que apenas pode estabelecer uma ligação, ou seja, só partilha dois eletrões, uma vez que só possui um eletrão de valência.

Exemplos: Formação da molécula de H_2O e Cl_2 com as notações de Lewis dos átomos. A estabilidade destas moléculas segue a regra dos octeto à excepção do Hidrogénio que segue a regra do duplete.



Tipos de ligação covalente:

- **Ligação covalente simples:** Ligação em que há partilha de dois eletrões (um de cada átomo), ou seja, há partilha de **um par de eletrões**.
- **Ligação covalente dupla:** Ligação em que há partilha de quatro eletrões (dois de cada átomo), ou seja, há partilha de **dois pares de eletrões**.
- **Ligação covalente tripla:** Ligação em que há partilha de seis eletrões (três de cada átomo), ou seja, há partilha de **três pares de eletrões**.

ENERGIA DE LIGAÇÃO E COMPRIMENTO DE LIGAÇÃO

A energia de ligação e o comprimento de ligação são dois parâmetros que permitem caracterizar a ligação covalente.

Energia de ligação - é a energia necessária para quebrar uma dada ligação numa mole de moléculas no estado gasoso. Corresponde ao valor absoluto da energia potencial mínima da molécula na posição de equilíbrio.

A energia de ligação avalia a força de uma ligação covalente:

Maior estabilidade = Maior energia de ligação = Maior número de eletrões partilhados

Comprimento de ligação - é a distância média entre os núcleos dos átomos envolvidos na ligação química quando se atinge o máximo de estabilidade. Depende da ordem de ligação e do tamanho dos átomos ligados.

Ordem de ligação

Quanto maior for o número de pares de eletrões ligantes, maior será a ordem de ligação e mais fortes serão as interações electrostáticas atrativas entre os eletrões e os núcleos

dos átomos ligados e menor será o comprimento de ligação (distância internuclear para a qual se verifica um equilíbrio entre as interações atrativas e repulsivas)



A molécula de CO tem maior ordem de ligação do que a molécula de CO₂.

Maior ordem de ligação $\longrightarrow$ Menor comprimento de ligação, ligação mais estável e maior $|E_{\text{Ligação}}|$

Ordem de ligação do $\text{:}\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}\text{:}$ é 2

Ordem de ligação do $\text{:}\text{C}\equiv\text{O}\text{:}$ é 3 $\rightarrow$ menor comprimento de ligação $\rightarrow$ maior energia de ligação

Tamanho dos átomos ligados

De uma forma geral, o comprimento de ligação aumenta à medida que aumenta o raio dos átomos envolvidos: quanto maior for o raio atómico, mais distantes do núcleo estão os eletrões de valência, o que implica uma maior distância internuclear.

GEOMETRIA MOLECULAR

Geometria molecular - corresponde ao arranjo tridimensional dos átomos (numa molécula) que confere menor energia, ou seja, maior estabilidade (à molécula).

Para prever o arranjo tridimensional que o menor valor de energia confere à molécula usa-se a **Teoria das repulsões dos pares eletrónicos de valência (TRPEV)**, segundo a qual os eletrões de valência existentes em torno do átomo central organizam-se de forma a que as repulsões eletrónicas sejam minimizadas.

A **intensidade das forças repulsivas** entre os pares de eletrões varia da seguinte forma:

Repulsão entre pares **não** ligante $>$ Repulsão entre pares **não** ligantes e ligantes $>$ Repulsão entre pares **ligantes**

A geometria apresentada por uma molécula depende do número de pares não ligantes existentes em torno do átomo central e do número de átomos ligados ao átomo central.

Ângulo de ligação - é o ângulo interno originado pela interseção dos dois segmentos de reta que passam pelo núcleo do átomo central e pelo núcleo dos dois átomos a ele ligados. O ângulo de ligação é tanto menor quanto maior for o número de pares não ligantes existentes em torno do átomo central.

A tabela seguinte resume as possíveis geometrias adotadas pelas moléculas.

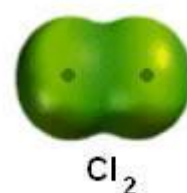
Geometria molecular	Moléculas	Átomo central	Exemplos	Notação de Lewis		ângulos
Linear	diatómicas	Sem átomo central	H – H F-H (ou átomos do grupo 17)			
	poliatómicas	não pode ter pares não ligantes	BeH ₂ (átomos do grupo 2) ou CO ₂	•Be•		
Triangular plana	poliatómicas	não pode ter pares não ligantes	BH ₃ (ou átomos do grupo 13)			
Tetraédrica		não pode ter pares não ligantes	CH ₄ (ou átomos do grupo 14)			
Piramidal trigonal		Tem um par de eletrões não ligantes	NH ₃ (ou átomos do grupo 15)			
Angular		Tem dois pares de eletrões não ligantes	OH ₂ (ou átomos do grupo 16)			

Uma molécula é polar ou apolar dependendo da distribuição global da carga elétrica, o que se relaciona com os tipos de ligações existentes na molécula e com a geometria molecular.

POLARIDADE DA LIGAÇÃO

Numa molécula diatómica constituída por átomos iguais (homonucleares), os eletrões ligantes são igualmente partilhados pelos dois núcleos, o que origina uma distribuição simétrica da carga elétrica. Estas moléculas denominam-se por **moléculas apolares**.

Ligação covalente apolar – ligação covalente entre dois átomos iguais, em que os eletrões ligantes são igualmente partilhados pelos átomos da molécula.



Numa molécula diatômica constituída por átomos diferentes (heteronucleares), os eletrões vão ser mais atraídos para um dos núcleos envolvidos na ligação, o que vai levar a uma distribuição desigual da carga elétrica. Estas moléculas denominam-se por moléculas polares

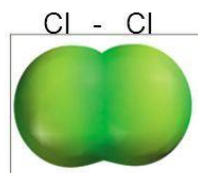
Ligação covalente polar – ligação covalente entre dos átomos diferentes, em que um dos átomos atrai mais fortemente os eletrões ligantes.



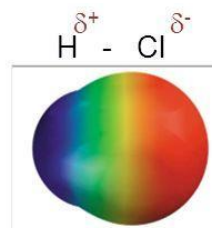
POLARIDADE DAS MOLÉCULAS

A polaridade das **moléculas diatômicas** relaciona-se com a polaridade da ligação covalente estabelecida.

- Ligação apolar → molécula apolar
exemplo: Cl_2



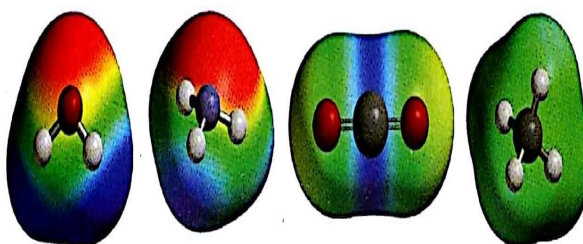
- Ligação polar → molécula polar
exemplo: HCl



Nas **moléculas poliatômicas** analisa-se a simetria (ou a assimetria) da distribuição de carga elétrica em torno do átomo central. Esta análise pode ser feita a partir de mapas do potencial eletrostático das moléculas.

Um mapa de potencial eletrostático traduz a distribuição tridimensional da carga elétrica na molécula. As zonas vermelhas representam a região da molécula com maior densidade de carga negativa (δ^-), enquanto as zonas azuis representam a região da molécula com menor densidade de carga negativa (δ^+). A análise destes mapas permite visualizar a distribuição eletrónica numa molécula.

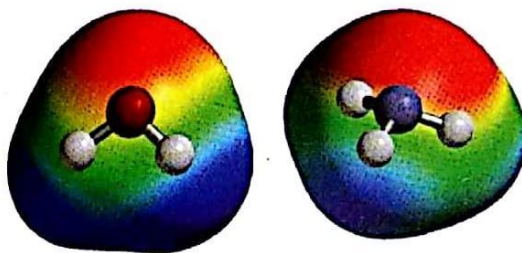
Análise dos mapas de potencial eletrostático das moléculas de CO_2 e CH_4 .



Nestas duas moléculas, apesar de as ligações entre o C=O e C-H serem polares, como a geometria é linear, no caso do CO_2 , e tetraédrica, no caso do CH_4 , verifica-se uma

distribuição simétrica da carga eletrónica em torno do átomo central (C). Por isso, estas moléculas são apolares.

Análise dos mapas de potencial eletrostático das moléculas H_2O e NH_3 .



Nestas duas moléculas existem um ou mais pares de eletrões não ligantes em torno do átomo central. Este facto faz com que se verifique uma **assimetria na distribuição da carga elétrica**. Por isso, as moléculas adquirem uma geometria em que estas **moléculas são polares**.

Exemplos de polaridade em moléculas poliatómicas:

Geometria	Carga elétrica	Polaridade	Moléculas	Formula de estrutura
Linear	Distribuição simétrica	Moléculas apolares	CO_2	$\text{:O}=\text{C}=\text{O:}$
Tetraédrica			CH_4	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Triangular plana			BH_3	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{B}-\text{H} \end{array}$
Linear	Distribuição assimétrica	Moléculas polares	HCN	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N:}$
Tetraédrica			CH_3Cl	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{Cl} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Triangular plana			BH_2Cl	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{B}-\text{Cl} \end{array}$
Angular			H_2O	$\begin{array}{c} \text{H}-\text{O} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Piramidal trigonal			NH_3	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

ESTRUTURA DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS E BIOLÓGICAS

Hidrocarbonetos - são os compostos orgânicos mais simples, constituídos apenas por átomos de carbono e hidrogénio.

CLASSIFICAÇÃO DE HIDROCARBONETOS

Quanto à forma da cadeia:

- **Acíclicos** – cadeia aberta
- **Cíclicos** – cadeia fechada

Quanto à disposição dos átomos de carbono:

- **Lineares** – Constituídos apenas por uma única cadeia de átomos de carbono
- **Ramificados** – na cadeia principal de átomos de carbono identificam-se cadeias secundárias (ramificações).

Quanto ao tipo de ligação:

- **Saturados** – só apresentam ligações covalentes simples entre os átomos de carbono.
- **Insaturados** – Podem apresentar ligações covalentes duplas e triplas para além das simples, entre os átomos de carbono.

Os átomos de carbono podem estabelecer entre si ligações simples, duplas ou triplas.

Energia e comprimento de ligação das ligações múltiplas carbono-carbono		
Hidrocarbonetos	Energia de ligação (KJ mol ⁻¹)	Comprimento de ligação C-C (pm)
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $ Etano	345	154
$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C} = \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \end{array} $ Eteno	612	133
$ \begin{array}{c} \text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H} \\ \text{Etino} \end{array} $	809	120

Quanto maior for o número de eletrões partilhados, mais estável será a ligação, pois a energia de ligação é maior e tem um menor comprimento de ligação.

Família dos alcanos

Os hidrocarbonetos (com apenas H e C) que pertencem à família dos alcanos são aqueles que apresentam **apenas ligações covalentes simples** entre os carbonos.

Haloalcanos - são derivados halogenados dos alcanos. Formam-se quando átomos de hidrogénio são substituídos por átomos de halogéneos (flúor, cloro, bromo ou iodo).

Família dos alcenos e alcinos (hidrocarbonetos insaturados)

Os hidrocarbonetos que pertencem à família dos alcenos ou alcinos são aqueles que apresentam, respetivamente, **ligações covalentes duplas ou triplas** entre os carbonos.

OUTRAS FAMÍLIAS DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

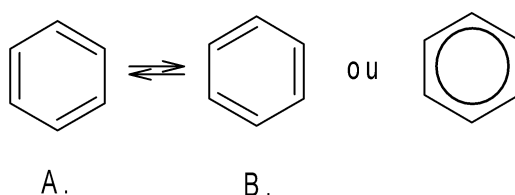
Estes compostos orgânicos apresentam, para além do carbono e do hidrogénio, também oxigénio ou nitrogénio. Cada família de compostos orgânicos apresenta um **grupo funcional** que **carateriza a família** a que pertence.

Grupo funcionais – grupo de átomos de outros elementos químicos que se encontram ligados à molécula orgânica, atribuindo-lhe características e propriedades específicas.

Grupo funcional	Família	Exemplo
Hidroxilo $R-OH$	Álcool	H_3C-CH_2-OH
Carbonilo (no fim da cadeia) ou grupo Formilo (-CHO) $R-C(=O)H$	Aldeído	$CH_3-C(=O)H$
Carbonilo (no meio da cadeia) $R-C(=O)-R$	Cetona	$H_3C-C(=O)-CH_3$
Carboxilo $R-C(=O)OH$	Ácido carboxílico	$H_3C-C(=O)OH$
Amina $R-N(R)_2$	Amina	$H_3C-N(CH_3)_2$

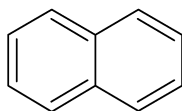
Compostos aromáticos:

Compostos aromático são compostos que na sua constituição aparece uma molécula de benzeno. O **benzeno** (C_6H_6) é um anel de seis carbono com ligação duplas alternadas e é a base estrutural dos compostos aromáticos a sua representação pode ser:



Note que: nestas moléculas de benzeno as ligações entre C-C e C=C têm o mesmo comprimento porque trata-se de uma hibridação em que coexiste a ligação simples e a ligação dupla. Não existe apenas a molécula A ou B, por isso normalmente o benzeno é representado um anel circular dentro da cadeia.

exemplo:



Naftaleno

2.1.3. Ligações intermoleculares

As ligações intermoleculares resultam das forças de natureza eletrostática atrativas que existem entre as moléculas fazendo com que estas permaneçam próximas umas das outras, principalmente no estado sólido e líquido.

Neste tipo de ligações não existe partilha significativa de eletrões entre as moléculas.

Existem dois tipos de ligações intermoleculares:

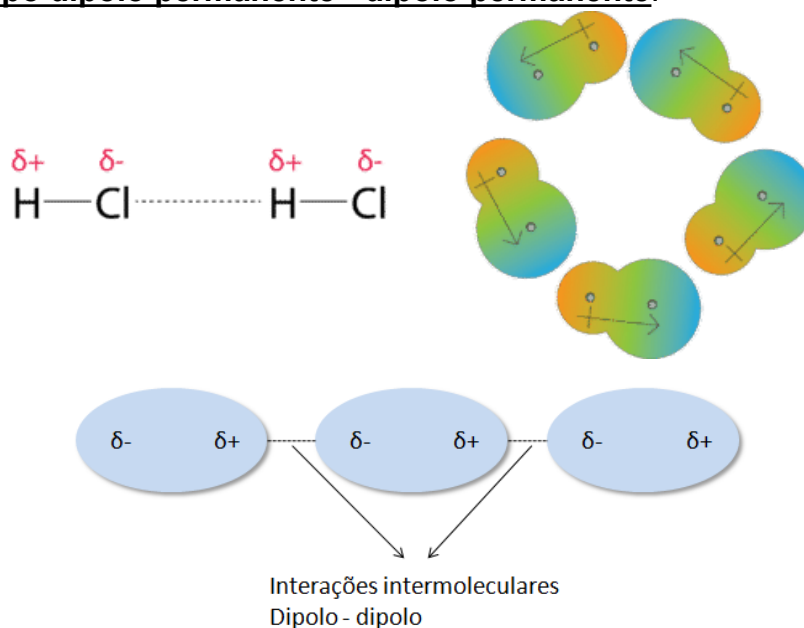
- Forças de Van der Waals
- Ligações de hidrogénio

Forças de Van der Waals

As forças de Van der Waals ocorrem:

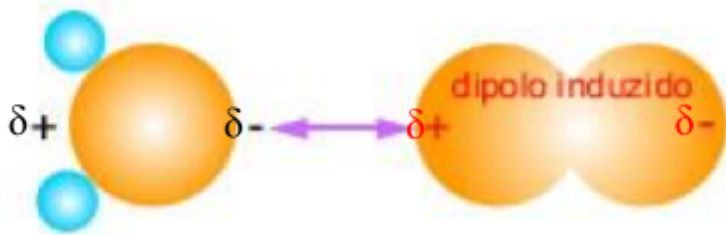
- Entre moléculas polares
- Entre moléculas polares e apolares:
- Entre moléculas apolares (forças de London)

Ligações entre moléculas polares: a ligação estabelece-se por atração eletrostática entre as cargas opostas dos dipolos permanentes de duas moléculas polares vizinhas. Este tipo de ligação resulta da distribuição assimétrica de carga elétrica nas moléculas polares e é do **tipo dipolo permanente - dipolo permanente**.



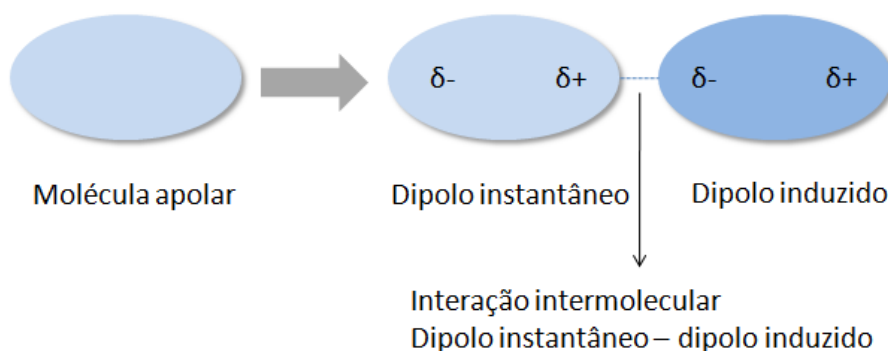
Ligação intermolecular dipolo permanente – dipolo permanente

Ligações entre moléculas polares e moléculas apolares: a ligação estabelece-se por atração eletrostática entre o dipolo permanente de uma molécula polar e o dipolo induzido de uma molécula apolar. Este tipo de ligação resulta do facto de uma molécula polar (dipolo permanente) poder induzir uma distribuição assimétrica de carga numa molécula apolar (dipolo induzido) - **são ligações dipolo permanente-dipolo induzido**.



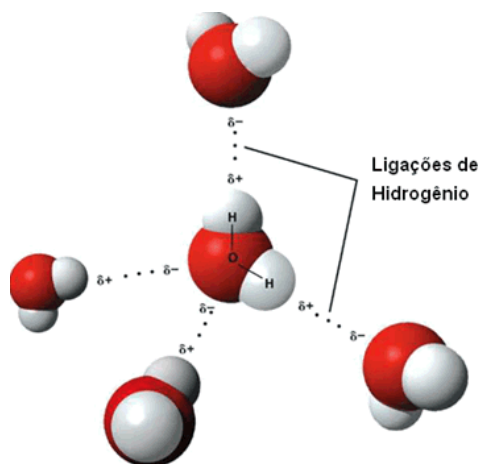
Ligação intermolecular dipolo permanente – dipolo induzido

Ligações entre moléculas apolares (forças de London): verificam-se ligações dipolo instantâneo-dipolo induzido. Por instantes, a carga elétrica numa molécula apolar pode estar distribuída assimetricamente, o que cria um dipolo instantâneo que pode induzir uma distribuição assimétrica da carga elétrica nas moléculas apolares vizinhas, formando-se um dipolo induzido. Estabelecem-se, então, atrações eletrostáticas entre os dois dipolos. Estas interações são as únicas que existem entre moléculas apolares.

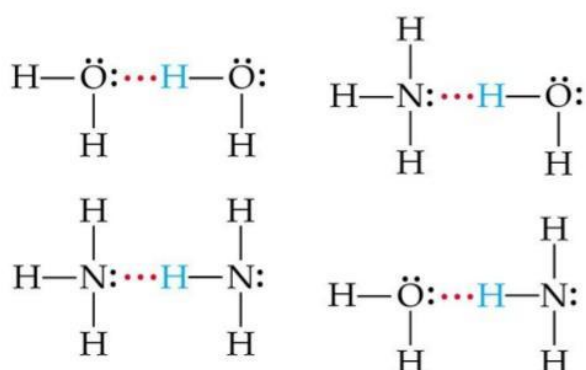


Ligações de hidrogénio:

As ligações de hidrogénio são, de entre as ligações intermoleculares, **as mais fortes**. Estabelecem-se quando o átomo de hidrogénio, **numa ligação fortemente polar ligado** a um elemento apresente muita tendência para atrair eletrões, se aproxima de um átomo de oxigénio (O), nitrogénio (N) ou flúor (F), com eletrões não ligantes. Este tipo de ligação verifica-se, por exemplo, entre moléculas de água (H₂O).

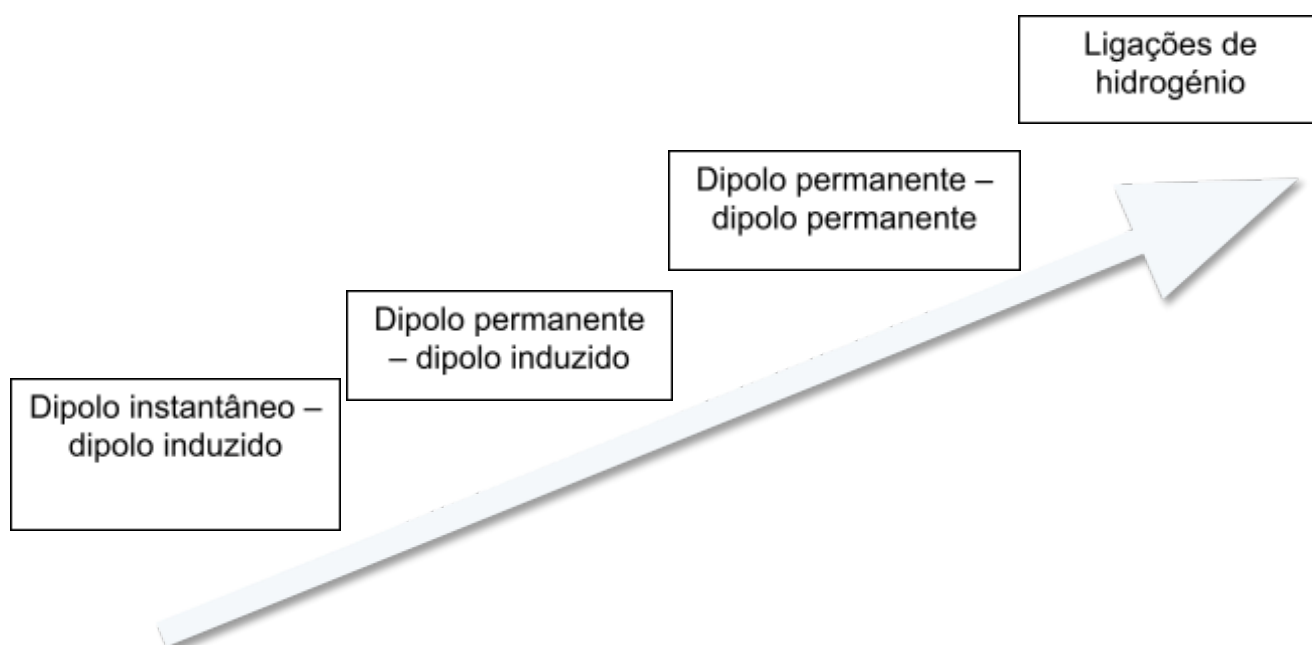


Ligações de hidrogénio



NOTA: As ligações intermoleculares são aditivas, isto é, podem existir simultaneamente e os seus efeitos somam-se.

Sentido do aumento da intensidade das ligações intermoleculares



MISCIBILIDADE DE LÍQUIDOS

A miscibilidade de dois líquidos depende de vários fatores, sendo um deles o tipo de ligações intermoleculares que se estabelecem entre as moléculas dos dois líquidos.

De uma forma geral, pode afirmar-se que uma substância polar tende a dissolver-se noutra substância polar e uma substância apolar tende a dissolver-se noutra substância apolar.

“Igual dissolve igual”

Isto acontece porque o tipo de ligação intermolecular que predomina numa substância é o tipo de ligação intermolecular que tem tendência a predominar quando se juntam as duas substâncias e estas se misturam.

Nas moléculas polares, em que predominam as ligações de hidrogénio, a miscibilidade com outras moléculas polares onde não predominem as ligações de hidrogénio é mais difícil, uma vez que é necessário quebrar as ligações de hidrogénio (mais fortes) para se estabelecerem ligações de Van der Waals, mais fracas.