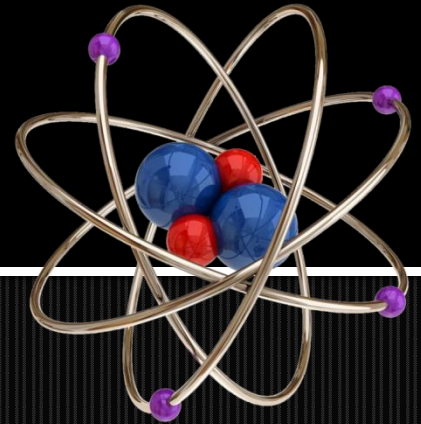


Estrutura Atômica

Conceitos e Modelos Atômicos

Capítulo 1

O Átomo



- Do grego, átomo significa indivisível;
- É a menor parte em que a matéria pode ser dividida.
- Cada átomo é composto por um núcleo muito pequeno contendo prótons e nêutrons envolvidos por elétrons em movimento.

CARGAS

- Tanto prótons quanto elétrons possuem cargas elétricas de $1,60 \times 10^{-19} \text{C}$.
- Prótons possuem carga positiva;
- Elétrons possuem carga negativa;
- Nêutrons são eletricamente neutros.

Massas

- As massas dos prótons e nêutrons são aproximadamente a mesma ($1,67 \times 10^{-27} \text{kg}$) enquanto os elétrons possuem massa muito menor ($9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$).

MASSA ATÔMICA

- Cada elemento químico possui seu **número atômico (Z)** caracterizado pelo número de prótons do núcleo.
- A **massa atômica (A)** de um átomo é calculada pela soma da massa de prótons (Z) e nêutrons (N) no interior de seu núcleo
$$A=Z+N$$

Modelos Atômicos

- Ao longo dos séculos XIX e XX, grandes cientistas estudavam o comportamento dos átomos e desenhavam modelos explicativos como resultados experimentais que possibilitavam a realização de previsões de como seria a forma de um átomo.

Modelo Atômico de Dalton

Em 1808, Dalton propôs a teoria do modelo atômico, onde átomo é uma minúscula esfera maciça, impenetrável, indestrutível, indivisível e sem carga, dando origem ao modelo da bola de bilhar.



Segundo Dalton:

- “Toda matéria é composta por minúsculas partículas – os átomos.”

Dalton

- “Os átomos de um determinado elemento são idênticos entre si.”
- “Átomos de diferentes elementos apresentam massa e propriedades diferentes.”
- “Átomos são permanentes e indivisíveis, não podendo ser criados nem destruídos.”
- “As reações químicas correspondem a uma reorganização de átomos.”
- “Os compostos são formados pela combinação de átomos de elementos diferentes em proporções fixas.”

Modelo Atômico de Thomson

Após a descoberta do elétron, em 1904, Thomson sugere o modelo do pudim de passas.

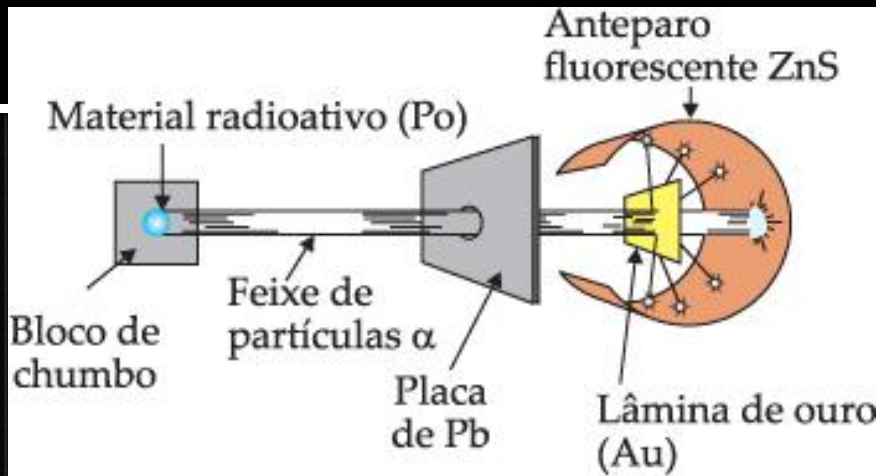


De acordo com esse modelo o átomo seria composto por elétrons que giravam em círculos imersos em uma bolha esférica de uma substância carregada positivamente.

Modelo Atômico de Rutherford

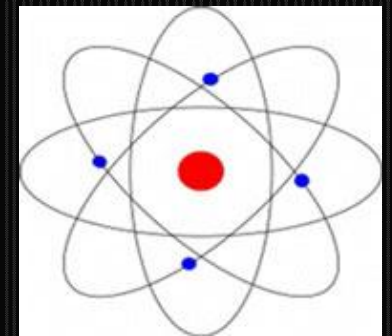
Em 1911, Ernest Rutherford, estudando a trajetória de partículas α emitidas pelo elemento polônio, bombardeou uma fina lâmina de ouro e observou que:

- A maioria das partículas α atravessavam a lâmina de ouro sem sofrer desvio em sua trajetória;
- Algumas partículas sofriam desvio em sua trajetória;
- Um número muito pequeno de partículas batiam na lâmina e voltavam.



Rutherford concluiu que a lâmina de ouro seria constituída por átomos formados por um núcleo muito denso e pequeno

rodeado por uma região carregada positivamente, maior onde estariam os elétrons, surgindo a ideia de que os elétrons estariam em movimentos circulares ao redor do núcleo.



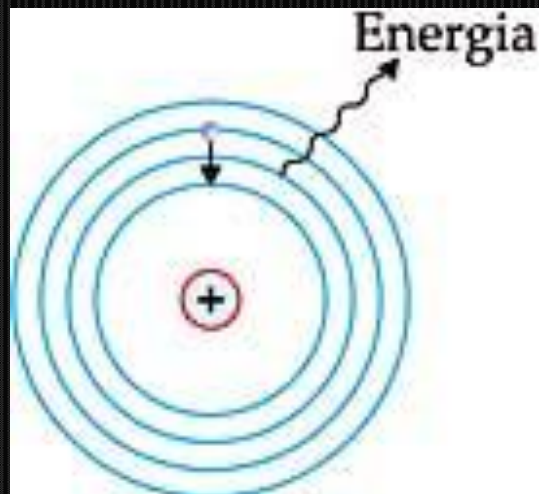
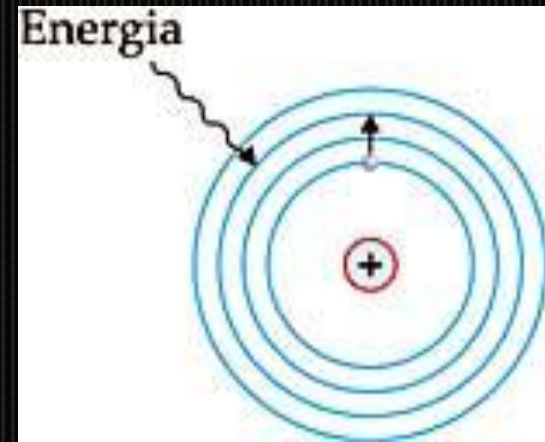
Modelo Atômico de Bohr

O modelo proposto por Rutherford foi aperfeiçoado por Bohr. Os seguintes postulados foram propostos:

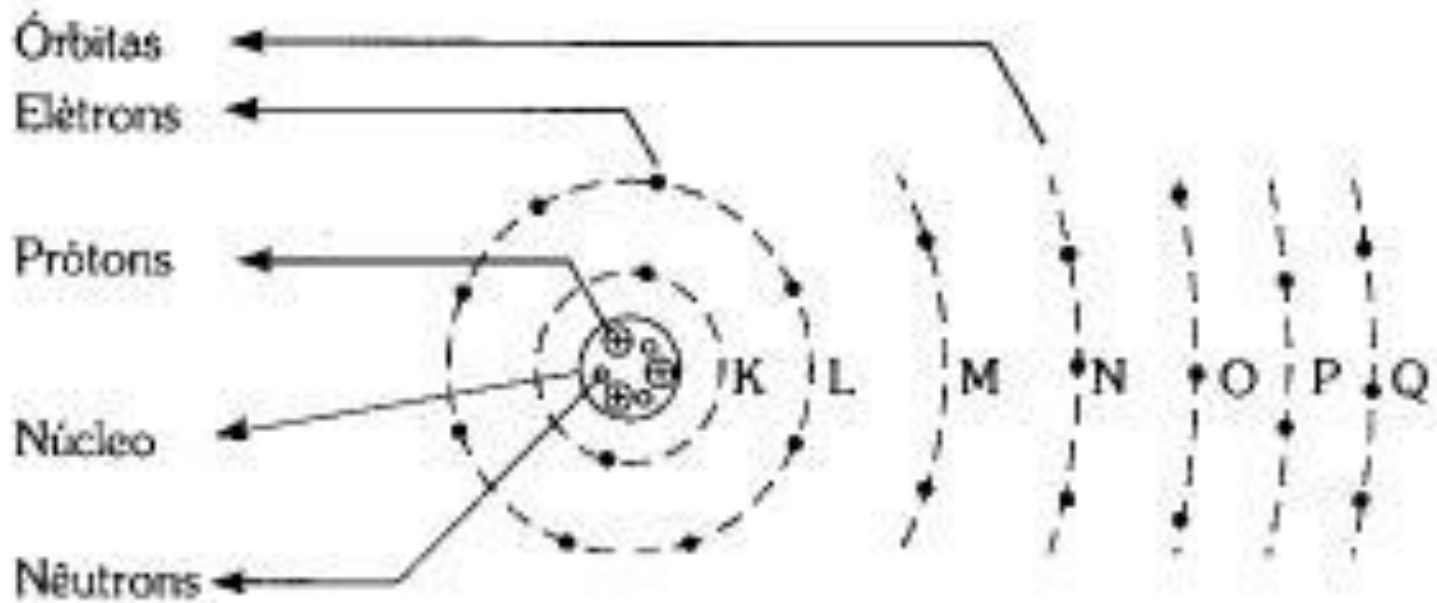
- Na eletrosfera, os elétrons descrevem sempre órbitas circulares ao redor do núcleo, chamadas de níveis de energia;
- Cada nível ocupado por um elétron possui um valor determinado de energia;

- Os elétrons só podem ocupar os níveis que tenham uma determinada quantidade de energia, não sendo possível ocupar estados intermediários;

- Ao saltar de um nível para outro mais externo, os elétrons absorvem uma quantidade definida de energia;



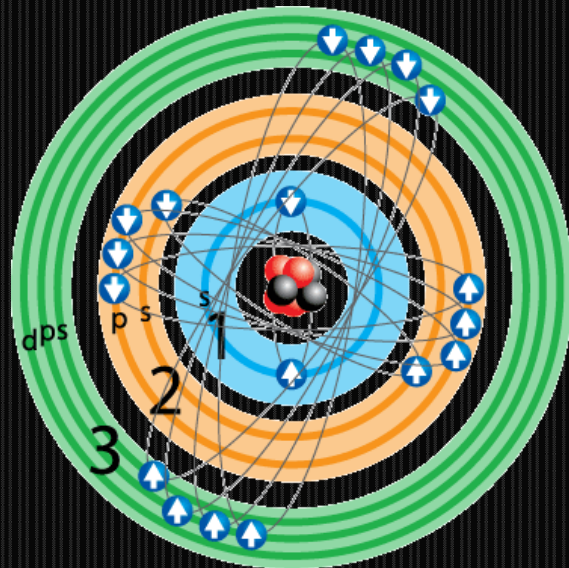
- Ao retornar ao nível mais interno, o elétron emite um quantum de energia;



- Cada órbita é denominada de estado estacionário e pode ser designada por letras (K, L, M, N, O, P, Q). A energia cresce com o afastamento da camada.
- Cada nível de energia é caracterizado por um número quântico que pode assumir valores inteiros.

Modelo Atômico de Sommerfeld

- Em 1916, ao pesquisar o átomo, Sommerfeld concluiu que átomos de um mesmo nível ocupam órbitas de trajetórias diferentes. Essas órbitas foram denominadas de subníveis (s, p, d, f).

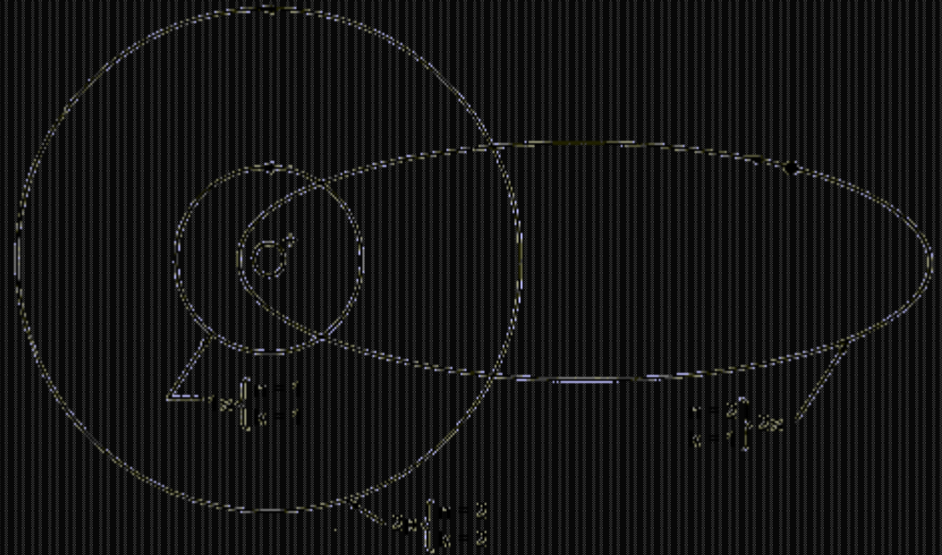
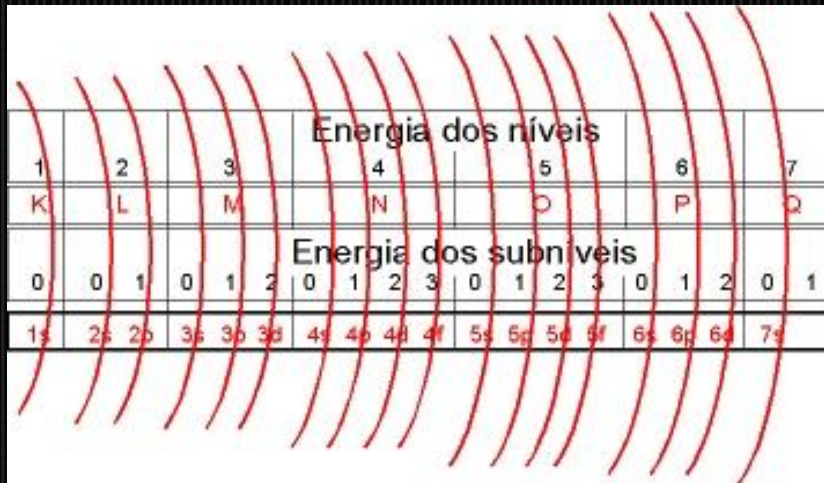


Modelo Atômico de Sommerfeld



1916 – *Arnold Sommerfeld*. Modelo das órbitas elípticas para o elétron - introdução dos subníveis de energia.

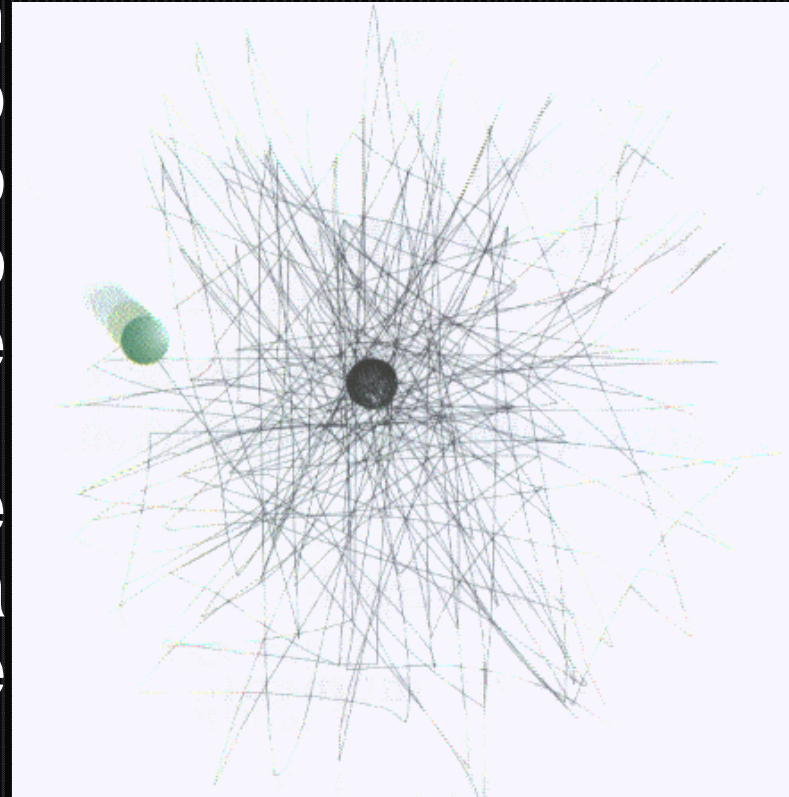
Para cada camada eletrônica (n), há uma órbita circular e $(n-1)$ orbitas elípticas.



Modelo Atômico de Schrödinger

Em 1927, Erwin Schrödinger descreveu o movimento do elétron ao redor do núcleo atômico por intermédio de equações matemáticas. De acordo com esse modelo, o elétron é uma partícula-onda que se movimenta e uma **orbital**.

Orbital é definida como uma região do espaço onde há a maior probabilidade de se encontrar um elétron.



Números Quânticos

De acordo com a mecânica ondulatória, cada elétron é caracterizado por quatro parâmetros, conhecidos como números quânticos. São os modelos que nos auxiliam na localização e identificação da posição do elétron na órbita de um átomo.

São eles:

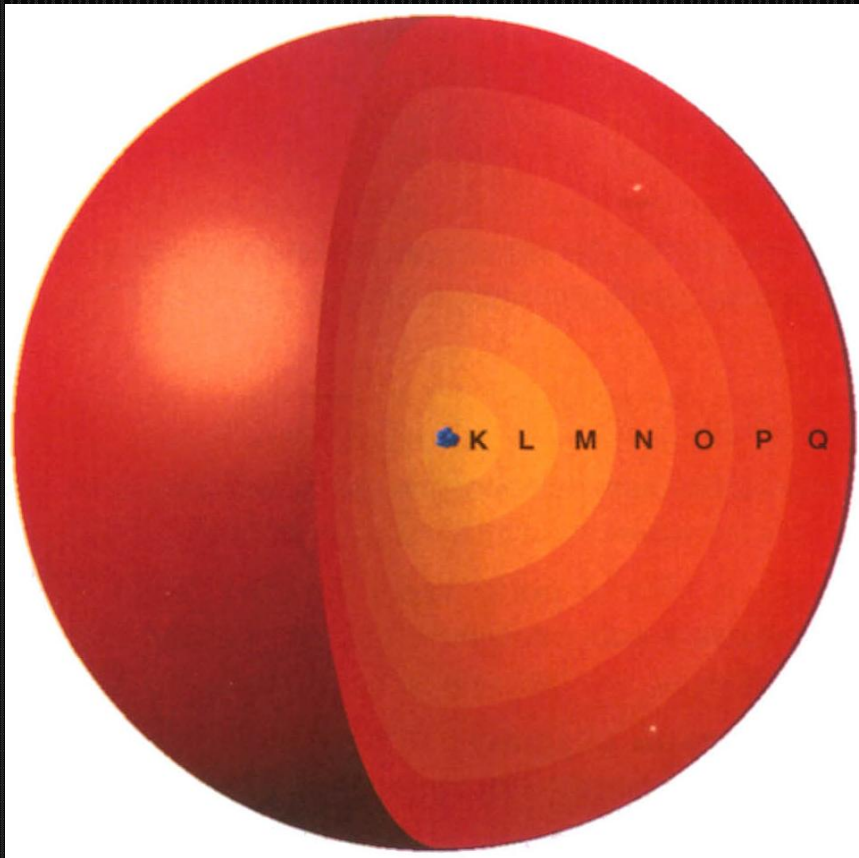
n : número quântico **principal**;

l : número quântico **secundário**;

m_l : número quântico **magnético**;

m_s : número quântico de *spin*.

Número Quântico Principal (n)



- Está relacionado à distância de um elétron ao núcleo, ou à sua posição;
- Só assume valores inteiros: $n=1$; $n=2$; $n=3$...
- As camadas são designadas pelas letras K, L, M, N, O, e assim por diante, que correspondem, respectivamente, a $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$

Número Quântico Secundário (l)

caracteriza a uma subdivisão de energia dentro de cada camada;

- A quantidade destas subcamadas está limitada pela magnitude de n .

$$l = 0; 1; 2; \dots; n - 1$$

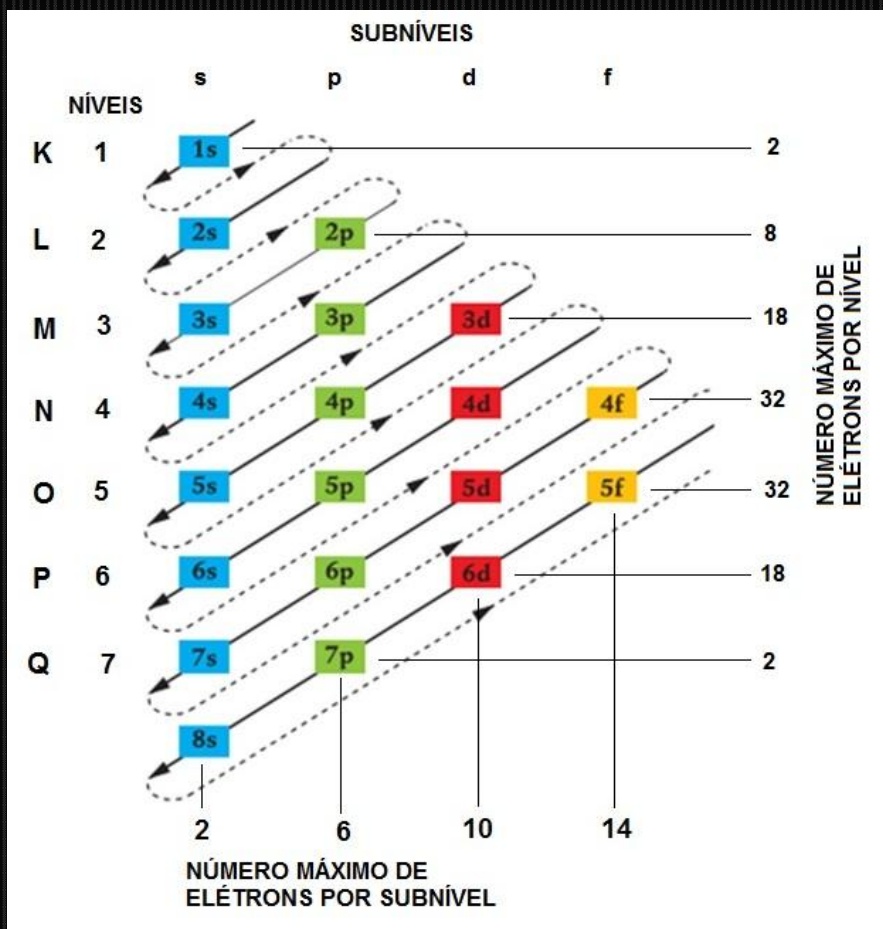
$l = 0$ → indica o subnível **s**

$l = 1$ → indica o subnível **p**

$l = 2$ → indica o subnível **d**

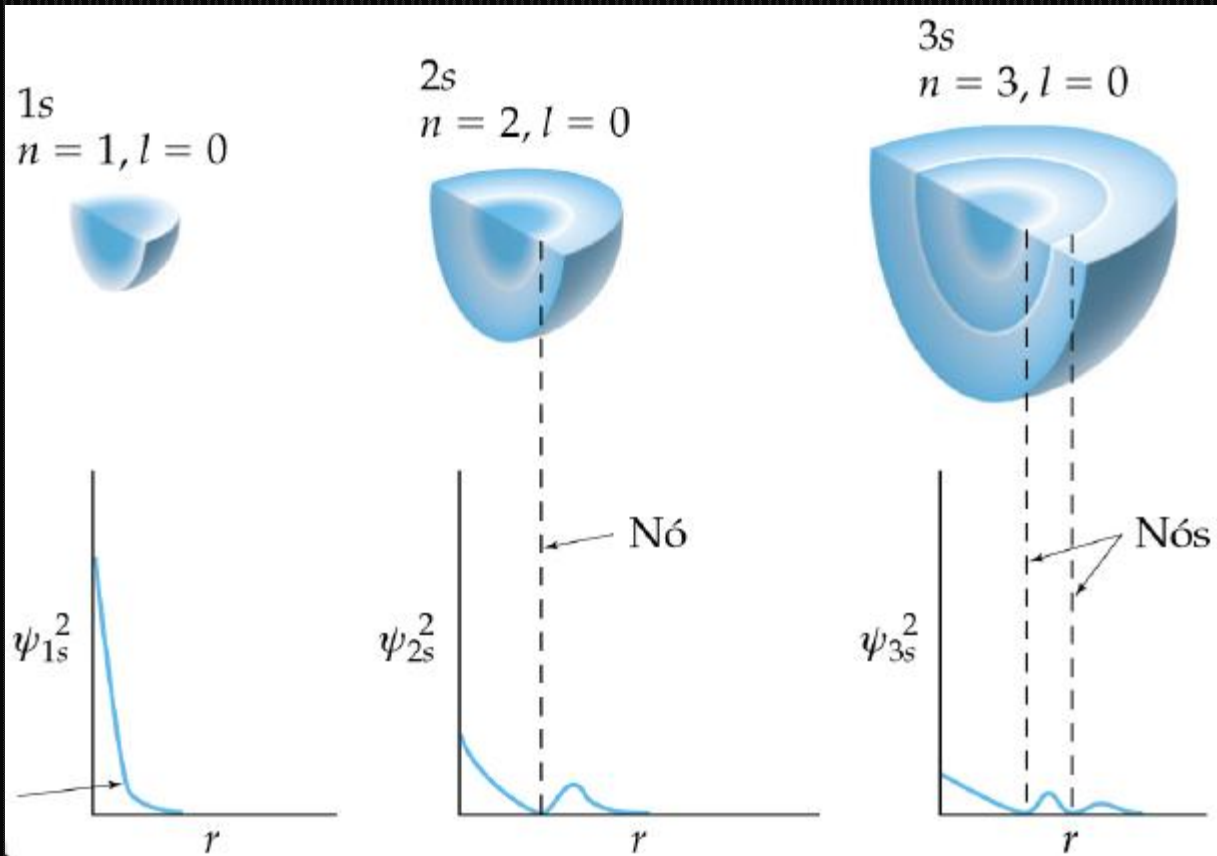
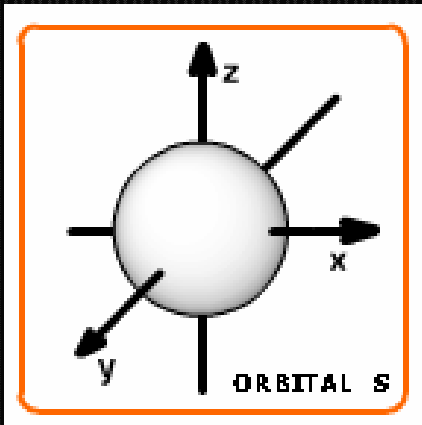
$l = 3$ → indica o subnível **f**

Número Quântico Secundário (l)

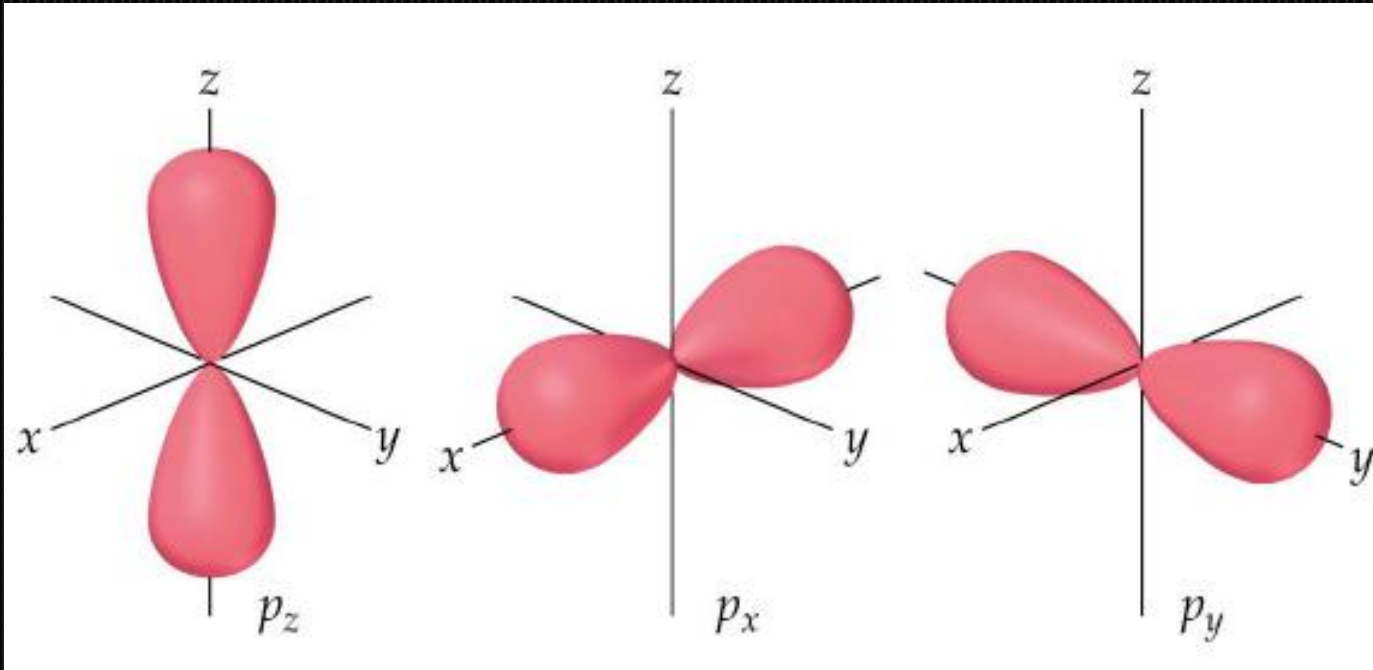


Camada	Subníveis Existentes na Camada
K (n = 1)	s (l = 0);
L (n = 2)	s (l = 0); p (l = 1)
M (n = 3)	s (l = 0); p (l = 1); d (l = 2);
N (n = 4)	s (l = 0); p (l = 1); d (l = 2); f (l = 3)
O (n = 5)	s (l = 0); p (l = 1); d (l = 2); f (l = 3)
P (n = 6)	s (l = 0); p (l = 1); d (l = 2);
Q (n = 7)	s (l = 0);

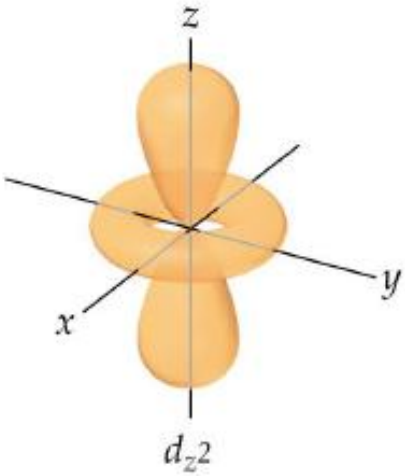
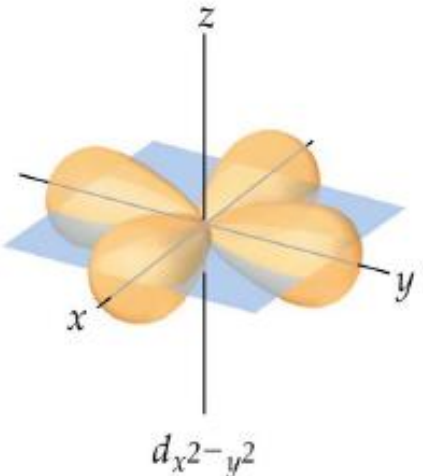
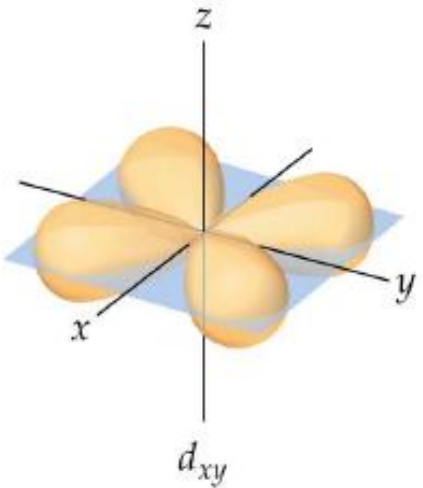
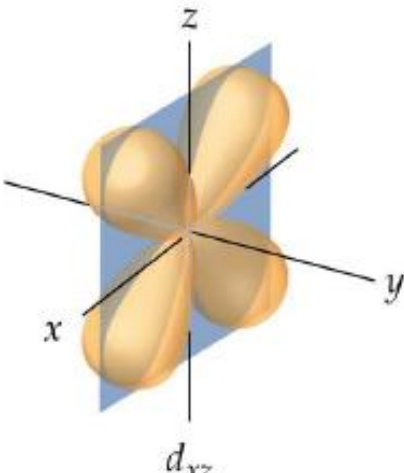
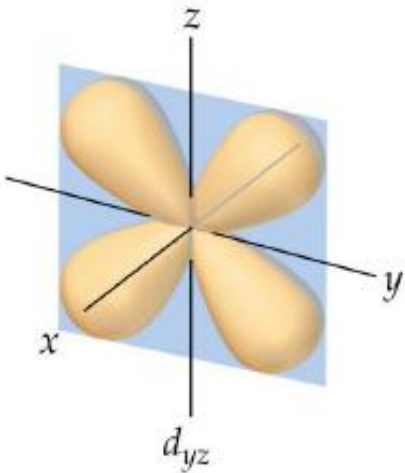
ORBITAIS s



ORBITAIS p



ORBITAIS d



Número Quântico magnético (m_l)

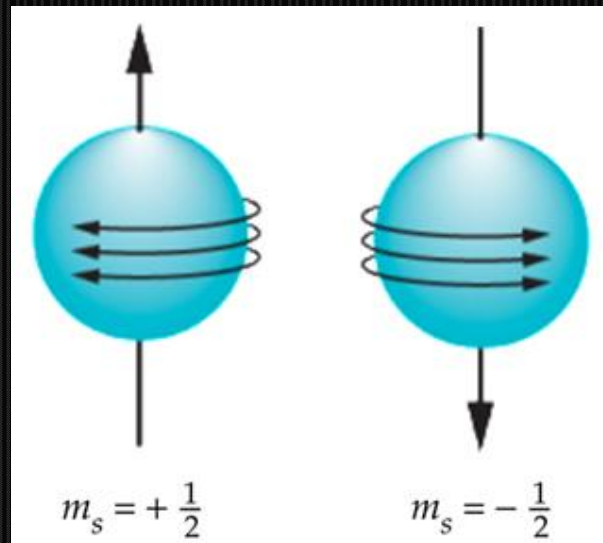
Determina o número de estados energéticos para cada subcamada,

- Caracteriza o orbital em que existe a probabilidade de se encontrar o elétron;
- Pode ter qualquer valor inteiro entre +3 e -3, inclusive zero.

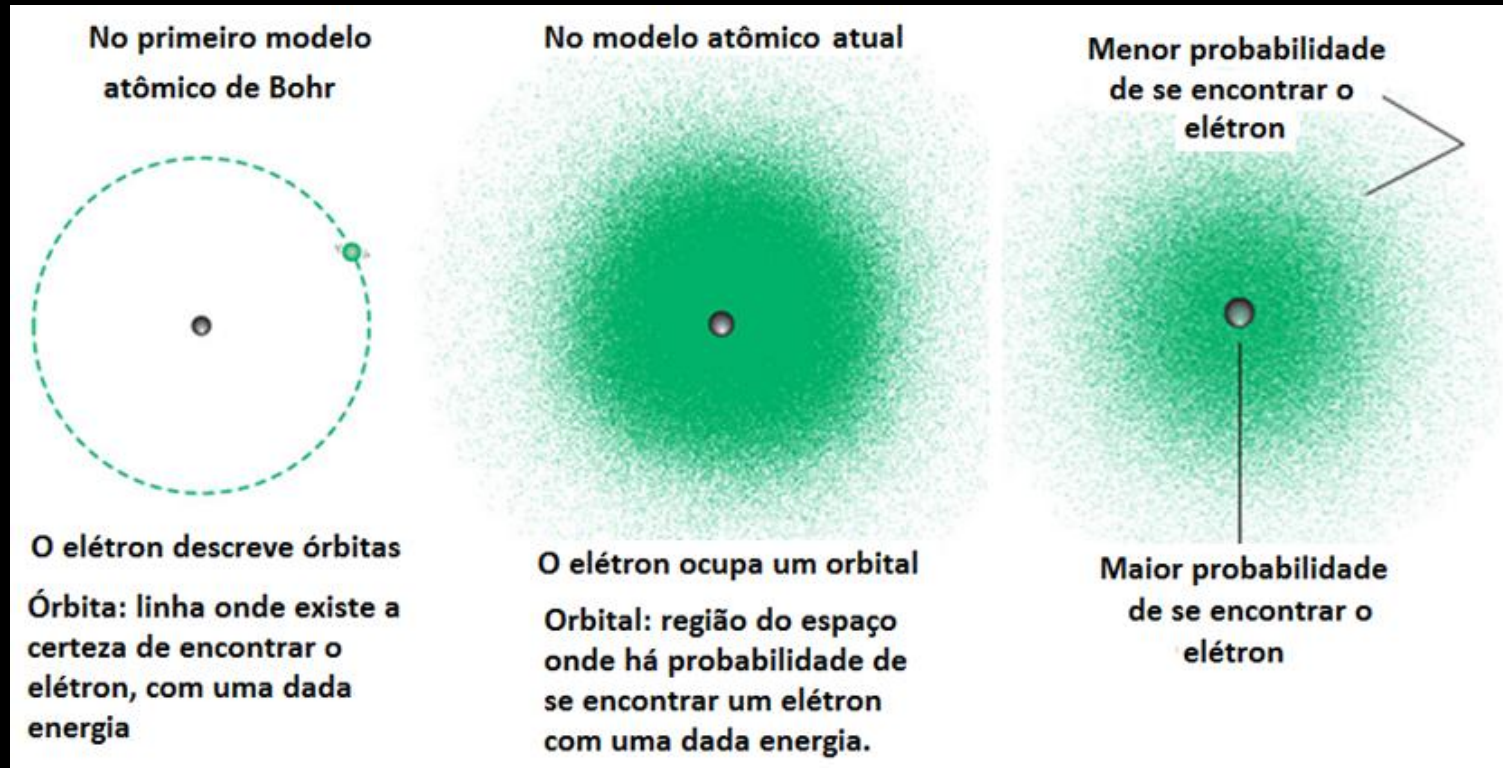
0	s — há 1 orbital
-1 0 +1	p — há 3 orbitais
-2 -1 0 +1 +2	d — há 5 orbitais
-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	f — há 7 orbitais

Número Quântico *spin* (m_s)

- Descreve a rotação do elétron em torno do seu eixo;
- Associado a cada elétron há *momento de spin* (momento de rotação), que deve estar orientado para cima ou para baixo;
- Esse é o quarto número quântico, para o qual existem dois possíveis valores ($+1/2$ e $-1/2$), um para cada uma das orientações de *spin*.

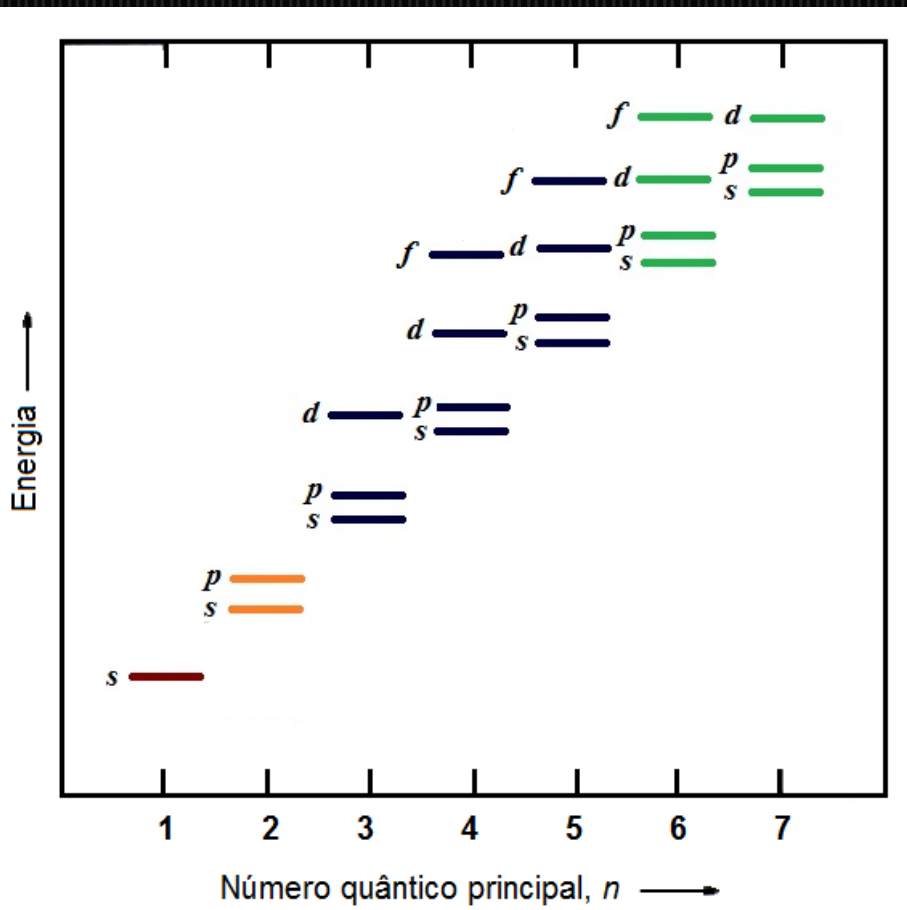


O modelo de Bohr foi refinado pelo modelo mecânico-ondulatório.



O elétron não é mais tratado como uma partícula que se move em torno de um orbital discreto, em lugar disso, a posição do elétron é considerada como a probabilidade de um elétron estar em vários lugares ao redor do núcleo.

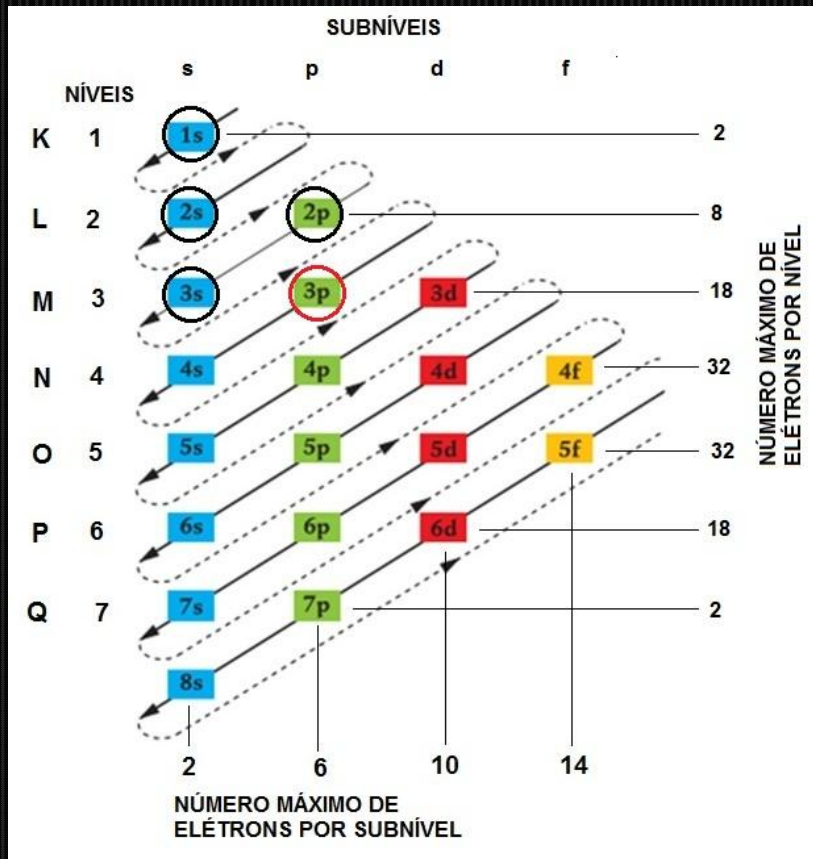
Representação esquemática das energias relativas dos elétrons para as várias camadas e subcamadas



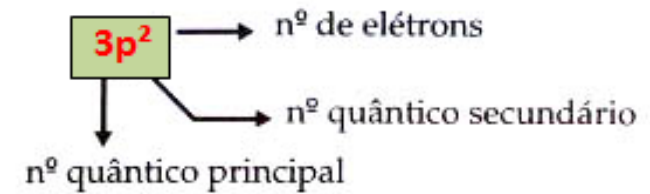
- Quanto menor é o número quântico principal, menor é o nível energético;
- Dentro de cada camada a energia de uma subcamada aumenta com o valor do número quântico l ;
- Podem existir superposições de energia de um estado em uma camada com os estados em uma camada adjacente.

EXERCÍCIO

Encontrar o conjunto de números quânticos que caracteriza o elétron mais energético do Si ($Z = 14$)



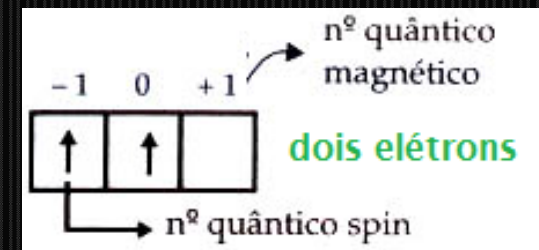
$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^2$



Número quântico principal
(da camada): $n = 3$

Número quântico secundário
Subnível p $\rightarrow l = 1$

Número quântico magnético
Subnível p $\rightarrow 3$ orbitais

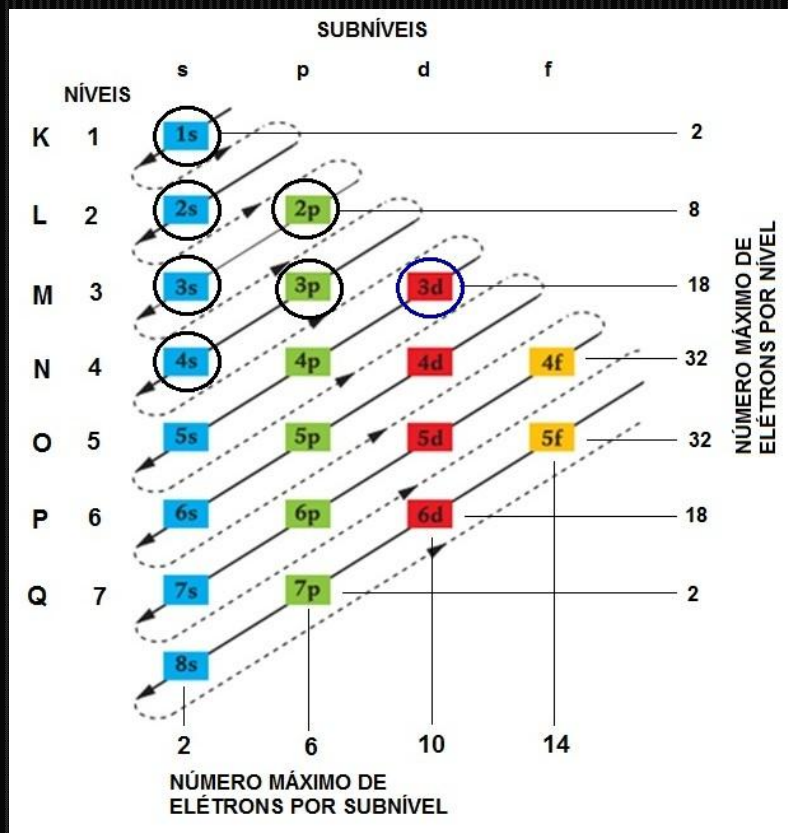


Número quântico magnético $m_l = 0$

Número quântico spin $m_s = +1/2$

EXERCÍCIO

Encontrar o número atômico que caracteriza o conjunto de números quânticos: $n = 3$; $l = 2$; $m_l = -2$; $m_s = -1/2$



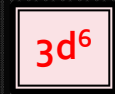
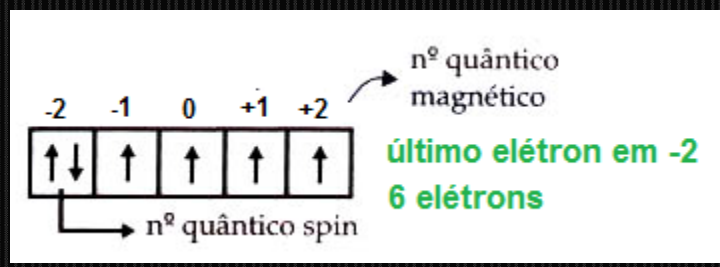
$$2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 2 + 6 = 26 \rightarrow Z = 26$$

Número quântico principal (da camada): $n = 3$

Número quântico secundário $l = 2$
Subnível d



Número quântico magnético
Subnível $d \rightarrow 5$ orbitais



Número quântico magnético $m_l = -2$
Número quântico $spin$ $m_s = -1/2$

PRÍNCIPIO DA EXCLUSÃO DE PAULI

Em um mesmo átomo, não existem dois elétrons com quatro números quânticos iguais. Como consequência desse princípio, dois elétrons de um mesmo orbital têm spins opostos. Um orbital semicheio contém um elétron desemparelhado. Um orbital cheio contém dois elétrons emparelhados (de spins opostos).

Wolfgang Pauli (1900-1958)



Configurações Eletrônicas

- Estados Eletrônicos – valores de energia permitidos para elétrons;
- Determinar maneira que estes estados são preenchidos com elétrons
 - **Princípio da exclusão de Pauli** - conceito quântico mecânico;
 - Cada estado orbital eletrônico pode comportar um máximo de dois elétrons, que devem possuir **valores de spin opostos**;
 - Subcamadas **s, p, d e f** acomodam **2, 6, 10 e 14** elétrons respectivamente.

Configurações Eletrônicas

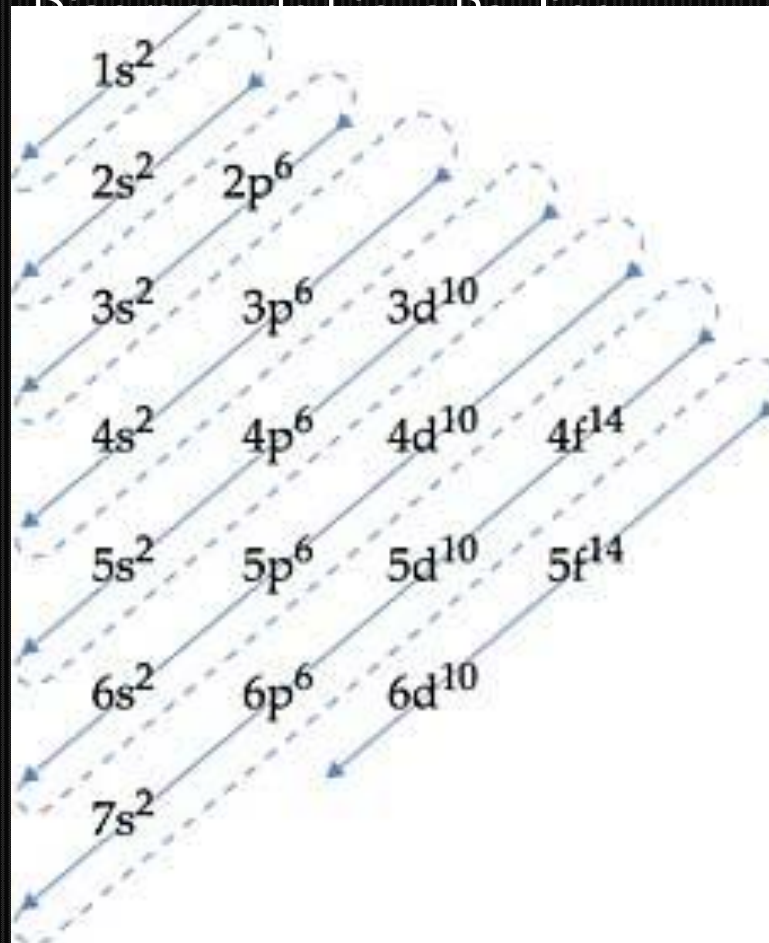
- Número máximo de elétrons que pode ocupar cada uma das quatro primeiras camadas

Número Quântico Principal n	Designação da Camada	Subcamadas	Número de estados	Número de Elétrons	
				Por Subcamadas	Por Camada
1	K	s	1	2	2
2	L	s	1	2	8
		p	3	6	
3	M	s	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	N	s	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	

Configurações Eletrônicas

- Nem todos os estados eletrônicos são preenchidos por elétrons;
- Para a maioria dos átomos, os elétrons preenchem os estados eletrônicos de energias mais baixas nas camadas e subcamadas, dois elétrons (*spins*) por estado;
- Quanto todos os elétrons ocupam as menores energias possíveis o átomo está no seu **estado fundamental**;
- A *configuração eletrônica* é a representação da maneira segundo a qual esses estados são ocupados.

Configurações Eletrônicas



Fonte: Russel, 1994.

Configurações Eletrônicas

- Notação convencional
 - Número de elétrons em cada subcamada é indicado por um índice sobescrito após a indicação da camada e subcamada.
 - H – $1s^1$
 - He – $1s^2$
 - Na – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Configurações Eletrônicas

- **Elétrons de Valência**
 - Os **elétrons de valência** são aqueles que ocupam a camada mais externa;
 - Os elétrons de valência participam da ligação atômica, de maneira a formar agregados de átomos ou moléculas e muitas propriedades físicas e químicas estão baseadas nestes elétrons.

Configurações Eletrônicas

- Elétrons de Valência – Gases Nobres
 - Átomos como Neônio, Criptônio, Argônio são conhecidos pela configuração eletrônica estável
 - Camada de Valência completamente preenchida, totalizando oito elétrons;
 - Exceção He – apenas dois elétrons $1s$;
 - Gases inertes ou gases nobres.

Configurações Eletrônicas

- Elétrons de Valência - Íons
 - Alguns átomos dos elementos que possuem camadas de valência não totalmente preenchidas **assumem configurações estáveis pelo ganho ou perda de elétrons** para formar *íons* carregados ou através do compartilhamento de elétrons com outros átomos.
 - Esta é a base para algumas reações químicas e também para as ligações atômicas em sólidos.

Configurações Eletrônicas

- Orbitais s e p formam híbridos sp^n sob circunstâncias especiais;
- n indica o número de orbitais p envolvidos e pode assumir os valores 1, 2 ou 3;
- Grupos 3A, 4A e 5A da tabela periódica formam esses híbridos com maior frequência.

Tabela Periódica

- Os elementos são posicionados em ordem crescente de números atômico em sete fileiras horizontais chamadas de períodos

Ordem crescente →

1 H 2.1																	2 He -
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2			13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -								
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

Períodos

(Adaptado por Linus Pauling, The Nature of the Chemical Bond, 3ª. Ed. Copyright 1939 e 1940, copyright da 3ª edição © 1960, por Cornell Universit)

Grupos IIIB a IIB

- São os elementos nos três períodos mais longos, possuem estados eletrônicos *d* parcialmente preenchidos e em alguns casos, um ou dois elétrons na próxima camada energética mais elevada.

IA												0													
1	H											2	He												
2.1												-													
IIA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA									
3	Li	4	Be											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne
1.0		1.5												2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	-						
11	Na	12	Mg											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar
0.9		1.2												1.5	1.8	2.1	2.5	3.0	-						
19	K	20	Ca	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36						
0.8		1.0		III B	IV B	VB	VIB	VIIB	VIII			IB	IIB	31	32	33	34	35	36						
				Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
				1.3	1.5	1.6	1.6	1.5	1.8	1.8	1.8	1.9	1.6	1.6	1.8	2.0	2.4	2.8	-						
37	Rb	38	Sr	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54						
0.8		1.0		Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
				1.2	1.4	1.6	1.8	1.9	2.2	2.2	2.2	1.9	1.7	1.7	1.8	1.9	2.1	2.5	-						
55	Cs	56	Ba	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86						
0.7		0.9		La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
				1.1-1.2	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9	1.8	1.8	1.9	2.0	2.2	-						
87	Fr	88	Ra	89-102																					
0.7		0.9		Ac-No																					
				1.1-1.7																					

(Adaptado por Linus Pauling, The Nature of the Chemical Bond, 3ª. Ed. Copyright 1939 e 1940, copyright da 3ª edição © 1960, por Cornell Universit)

Grupo IIA, IVA e VA

- Apresentam características intermediárias entre as dos metais e dos ametais em virtude das estruturas dos seus elétrons de valência.

IA												0					
1 H 2.1	IIA										III A	IV A	V A	VIA	VII A	2 He -	
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
		III B	IV B	V B	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9						
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

(Adaptado por Linus Pauling, The Nature of the Chemical Bond, 3ª. Ed. Copyright 1939 e 1940, copyright da 3ª edição © 1960, por Cornell University)

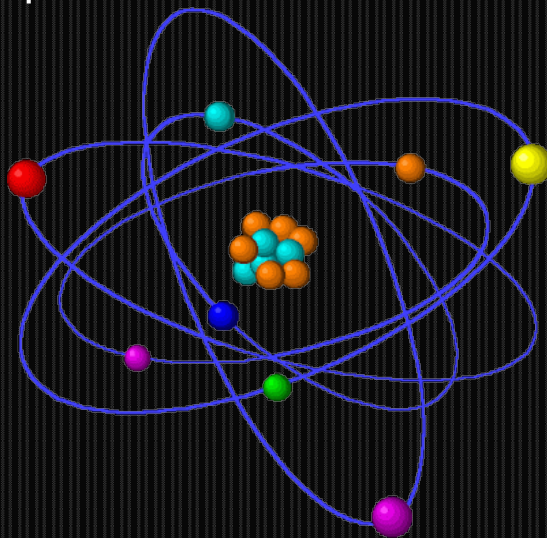
Elementos eletropositivos

- Como observado anteriormente, a maioria dos elementos da tabela periódica enquadra-se realmente sob a classificação de metal.
 - São chamados de elementos eletropositivos
 - São capazes de ceder seus poucos elétrons de valência para se tornarem íons carregados positivamente.



Elementos eletronegativos

- São os elementos que estão situados no lado direito da tabela:
 - Aceitam elétrons para formar íons carregados negativamente, ou algumas vezes compartilham elétrons com outros átomos.



Eletronegatividade

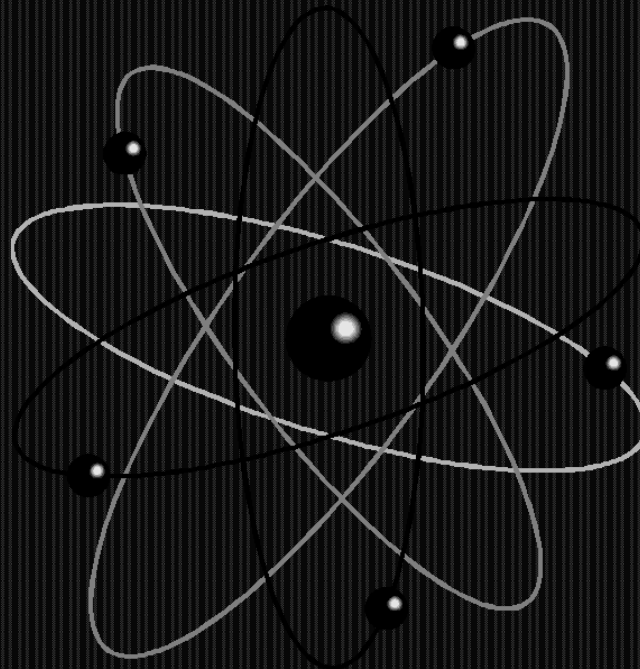
IA																0				
1 H 2.1	IIA										IIIA IVA VA VIA VIIA					2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -			
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -			
		VIII										IB		IIB						
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -			
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -			
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -			
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7																		



**Maior
Eletronegatividade**

Átomos

- Os átomos apresentam maior tendência em aceitar elétrons se suas camadas mais externas estiverem quase totalmente preenchidas e se estiverem menos “protegidas” (isto é, mais próximas) do núcleo.



FORÇAS E ENERGIAS DE LIGAÇÃO

A compreensão de muitas propriedades físicas dos materiais está baseada no conhecimento das forças interatômicas que mantem os átomos unidos.

FORÇAS INTERATÔMICAS: ATRATIVAS (F_a)
REPULSIVAS (F_r)

A distância interatômica é a distância de equilíbrio onde as forças de atração e repulsão são iguais.

$$F_a + F_r = 0$$

A distância interatômica em um metal sólido é aproximadamente igual ao diâmetro atômico ou duas vezes o raio atômico.

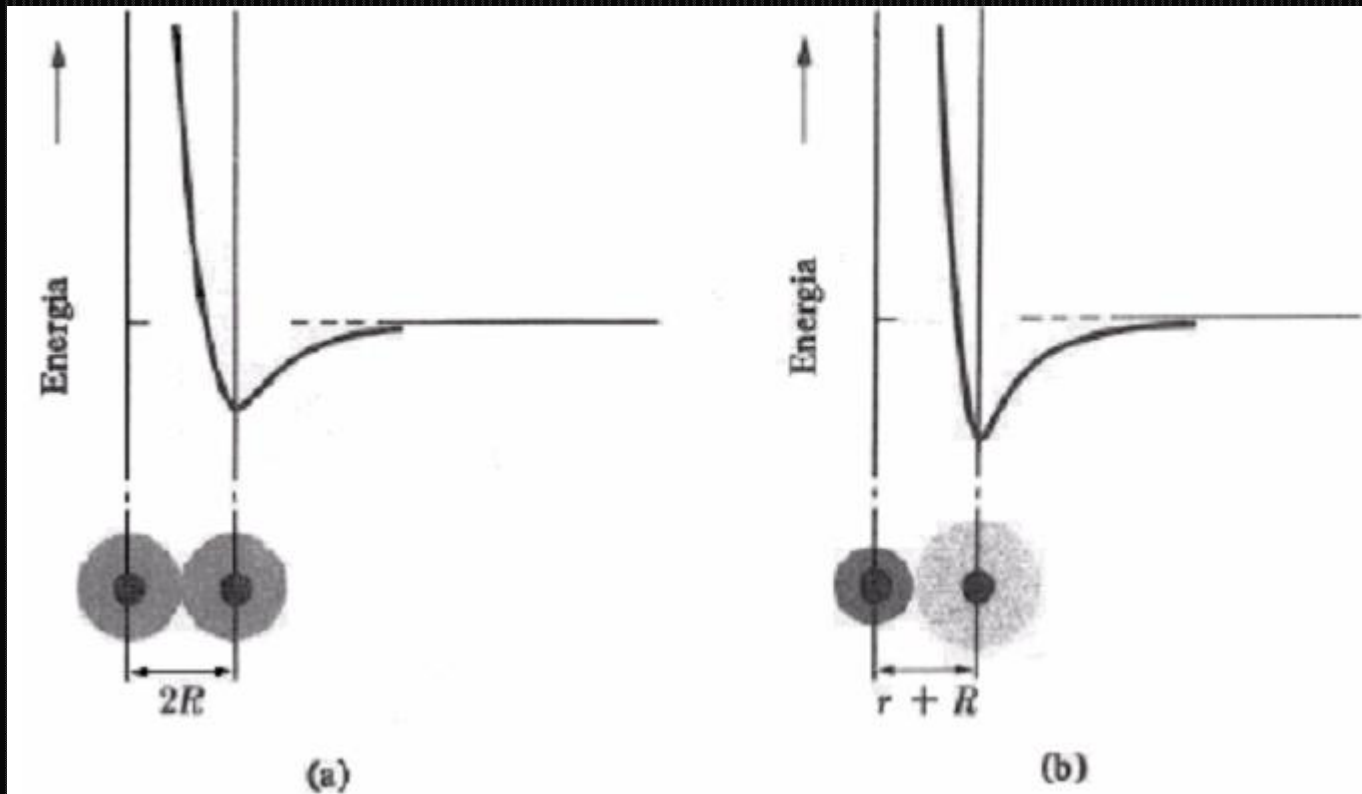


Figura 01: Distância interatômica.

Fatores que alteram a distância e suas causas

- Aumento da temperatura. O espaçamento entre os átomos é responsável pela expansão térmica dos materiais.
- A valência iônica.
- Número de átomos adjacentes. Quanto maior o número de átomos adjacentes, maior a repulsão eletrônica proveniente dos átomos vizinhos e, conseqüentemente, maiores as distâncias interatômicas.

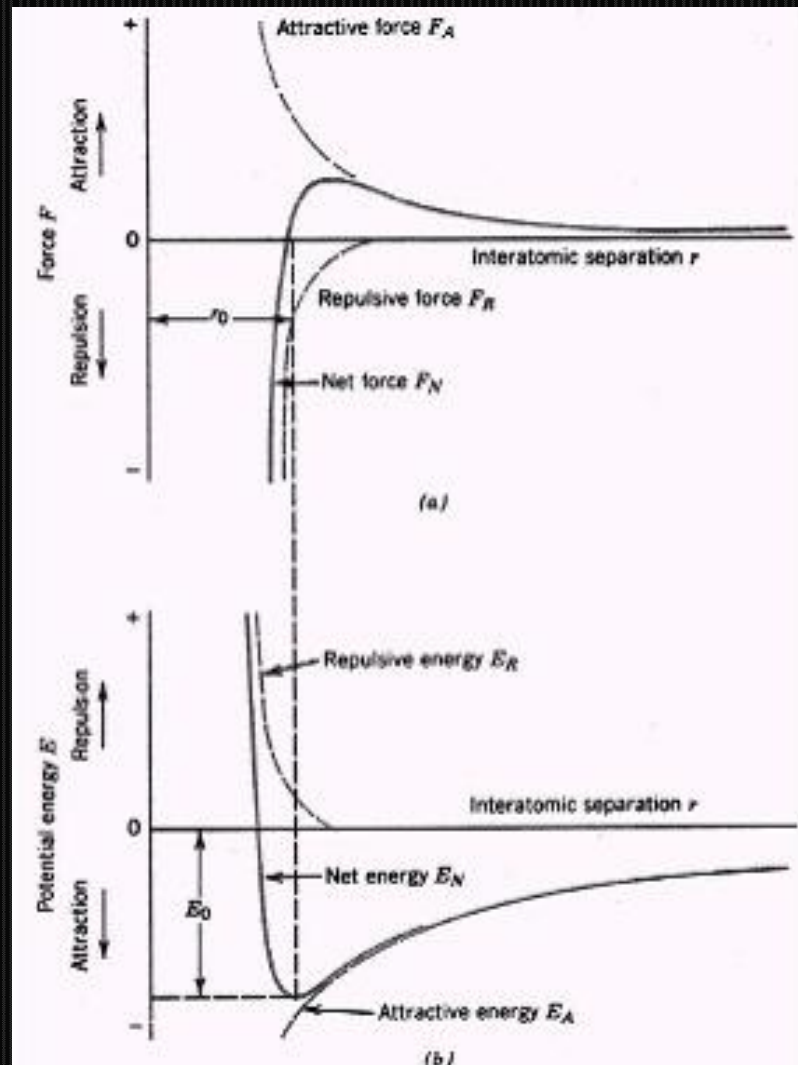
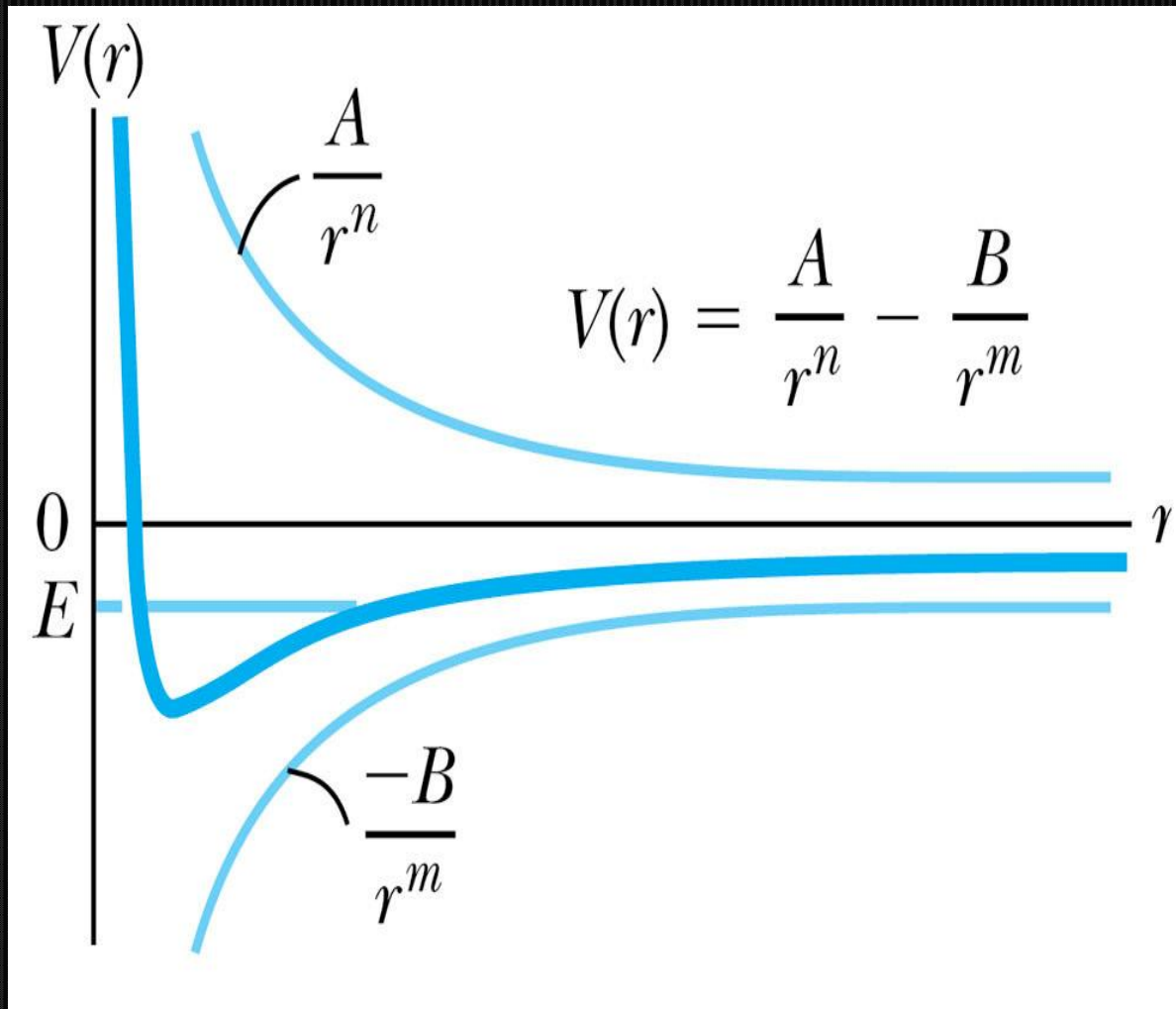


Figura 02: (a) forças atrativa, repulsiva e total em função da distância Interatômica (b) E_A, E_R, E_N em função da separação interatômica dos dois átomos.

Forças e energias de ligação

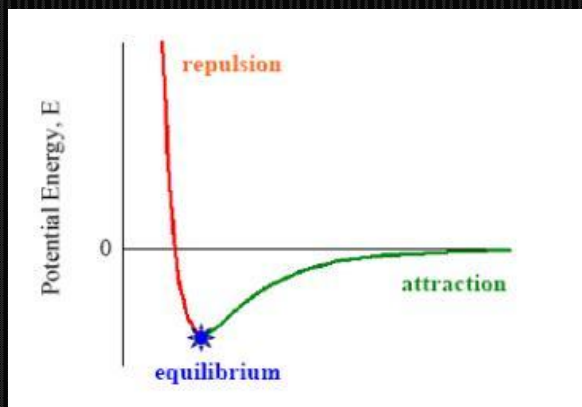


A e B são constantes.
R = raio
N e m depende das camadas de energia.

ENERGIA DE ATRAÇÃO E REPULSÃO

Energia de atração

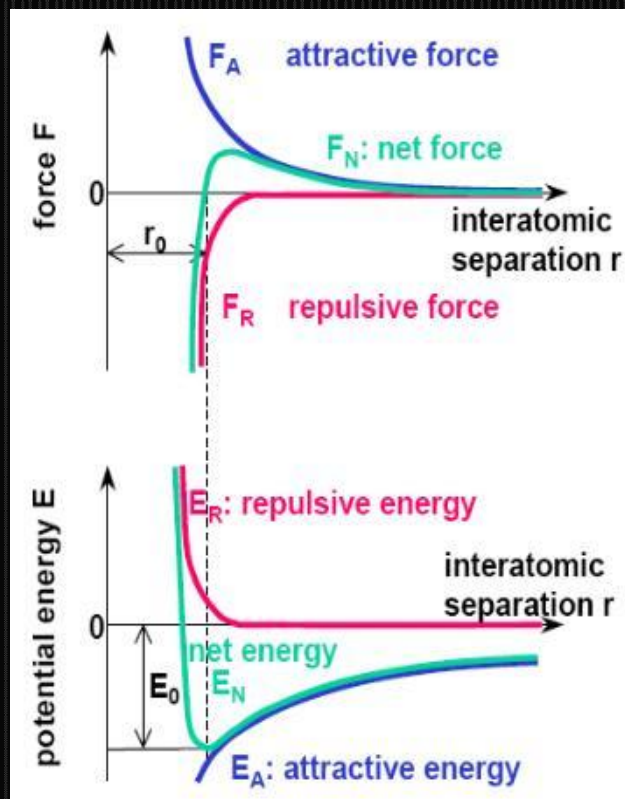
- $E_A = -A/r$



Altos valores de eletronegatividade indicam tendência de seqüestrar elétrons.

Energia de repulsão

- $E_R = B/r^n$



Estado de equilíbrio:

$$F_A + F_R = 0$$

Energia total:

$$E_N = E_R + E_A$$

Energia de ligação:

E_0 r_0 = distância interatômica

Energia de atração:

$$E_A = -A/r$$

Energia de repulsão:

$$E_R = B/r^n \quad n \approx 8$$

A força líquida (FI) entre dois átomos é:

$$F_l = F_a + F_r$$

Materiais com energia de ligação elevada têm alta resistência mecânica e alta temperatura de fusão.

Energias de ligação para os quatro tipos de ligação	
<i>Ligação</i>	<i>Energia de Ligação (KJ/mol)</i>
Iônica	150 - 370
Covalente	125 - 300
Metálica	25 - 200
Van der Waals	< 10

*Fonte: Estrutura Atômica – Ciência e Engenharia dos Materiais –
Donald R. Askeland – Pradeep P. Phulé*

LIGAÇÕES IÔNICAS

- É procedente da transferência de elétrons entre um átomo de elemento não metal e outro átomo de elemento metal produzindo configuração estável ou gás inerte;
- Configuração estável: Como arranjo tridimensional, Os Íons com cargas + devem ter vizinhos carregados com cargas -;
- As ligações iônicas são denominadas *não direcionais*, ou seja, a ligação é igual em todas as direções ao redor do Íon.

- *NaCl: Cloreto de sódio clássico – Todo cloreto e todo sódio existem como Íons.*
- *Depois que o átomo de sódio transfere o único elétron de valência 3s para o átomo de cloro, ele assume a estrutura eletrônica do neônio (carga +) e o cloro assume estrutura eletrônica do argônio (carga -). > Na⁺ Cl⁻*
- *União entre os átomos: Teoria Eletrônica da Valência, baseada na Regra do Octeto que diz:*
- *“Um átomo adquire estabilidade quando possui oito (8) elétrons na camada eletrônica mais externa, ou dois (2) elétrons quando possui apenas a camada K”.*

- **As ligações iônicas estão presentes nas
*substâncias compostas;**

- *Substâncias compostas:

- São formadas por átomos de dois ou mais elementos químicos (água - H_2O , Gás carbônico - CO_2)

Características dos compostos iônicos

- São todos sólidos cristalinos, duros e quebradiços à temperatura ambiente.
- Bons condutores de corrente elétrica quando fundidos ou em solução aquosa (dissolvidos em água).
- Não conduzem corrente elétrica na forma sólida pura.

As ligações iônicas são encontradas em elementos metálicos e não metálicos.

NÃO METAIS

- Os Não-Metais são eletronegativos: Ganham elétrons de valência de outros átomos;
- Os Não-Metais são: Hidrogênio (H), Carbono (C), Fósforo (P), Enxofre (S), Selênio (Se) e Nitrogênio (N);
- Um Não-Metal pode ser um isolador ou um semicondutor;
- Os Não-Metais ao ganharem elétrons podem formar ligações iônicas com os metais;

Tabela periódica – Elementos verdes não metal

1A																												8A
1																												2
H Hidrogênio																												He Hélio
2																		3A	4A	5A	6A	7A	8A					
3		4																	5	C Carbono	N Nitrogênio	O Oxigênio	9	10				
Li Lítio		Be Berílio																	B Boro	Si Silício	P Fósforo	S Enxofre	F Flúor	Ne Neônio				
11		12	3B	4B	5B	6B	7B	8B				1B	2B	13	14	15	16	17	18									
Na Sódio		Mg Magnésio											Al Alumínio	Si Silício	P Fósforo	S Enxofre	Cl Cloro	Ar Argônio										
19		20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36										
K Potássio		Ca Cálcio	Sc Escândio	Ti Titânio	V Vanádio	Cr Cromo	Mn Manganês	Fe Ferro	Co Cobalto	Ni Níquel	Cu Cobre	Zn Zinco	Ga Gálio	Ge Germânio	As Arsênio	Se Selênio	Br Bromo	Kr Criptônio										
37		38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54										
Rb Rubídio		Sr Estrôncio	Y Ítrio	Zr Zircônio	Nb Nióbio	Mo Molibdênio	Tc Tecnécio	Ru Rutênio	Rh Ródio	Pd Paládio	Ag Prata	Cd Cádmio	In Índio	Sn Estanho	Sb Antimônio	Te Telúrio	I Iodo	Xe Xenônio										
55		56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86										
Cs Césio		Ba Bário	*	Hf Háfnio	Ta Tântalo	W Tungstênio	Re Rênio	Os Ósmio	Ir Íridio	Pt Platina	Au Ouro	Hg Mercúrio	Tl Tálio	Pb Chumbo	Bi Bismuto	Po Polônio	At Astató	Rn Radônio										
87		88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118										
Fr Frâncio		Ra Rádio	**	Rf Rutherfordio...	Db Dúbnio	Sg Seabórgio	Bh Bóhrnio	Hs Hássio	Mt Meitnério	Ds Darmstádio	Rg Roentgênio	Cn Copernício	Uut Ununtrio	Uuq Ununquádro	Uup Ununpentio	Uuh Ununhéxio	Uus Ununséptio	Uuo Ununóctio										
			*	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71										
				La Lantânio	Ce Cério	Pr Praseodímio	Nd Neodímio	Pm Promécio	Sm Samário	Eu Európio	Gd Gadolínio	Tb Térbio	Dy Disprósio	Ho Hólmio	Er Érbio	Tm Túlio	Yb Ítérbio	Lu Lutécio										
			**	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103										
				Ac Actínio	Th Tório	Pa Protactínio	U Urânio	Np Neptúnio	Pu Plutônio	Am Américio	Cm Cúrio	Bk Berquélio	Cf Califórnio	Es Einstênio	Fm Férmio	Md Mendelévio	No Nobélio	Lr Laurêncio										

www.tabelaperiodicacompleta.com

Disponível no endereço: www.tabelaperiodicacompleta.com/nao-metals

METAIS

- Reagem facilmente com a água;
 - Essa reação forma hidróxidos ao liberar hidrogênio;
 - Também reagem com oxigênio produzindo óxidos;
- Características dos Metais Alcalinos:
 - Baixa densidade, moles, muito reativos e eletropositivos;
 - Os elementos que estão na parte de baixo do grupo 1A possuem a eletropositividade maior e são mais reativos que os elementos de cima dessa mesma família.

Tabela periódica – Elementos laranja metal

1A																	8A						
1 H Hidrogênio																	2 He Hélio						
2 Li Lítio	4 Be Berílio																	5 B Boro	6 C Carbono	7 N Nitrogênio	8 O Oxigênio	9 F Flúor	10 Ne Neônio
3 Na Sódio	12 Mg Magnésio	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	13 Al Alumínio	14 Si Silício	15 P Fósforo	16 S Enxofre	17 Cl Cloro	18 Ar Argônio							
4 K Potássio	20 Ca Cálcio	21 Sc Escândio	22 Ti Titânio	23 V Vanádio	24 Cr Cromo	25 Mn Manganês	26 Fe Ferro	27 Co Cobalto	28 Ni Níquel	29 Cu Cobre	30 Zn Zinco	31 Ga Gálio	32 Ge Germânio	33 As Arsênio	34 Se Selênio	35 Br Bromo	36 Kr Criptônio						
5 Rb Rubídio	38 Sr Estrôncio	39 Y Ítrio	40 Zr Zircônio	41 Nb Nióbio	42 Mo Molibdênio	43 Tc Tecnécio	44 Ru Rutênio	45 Rh Ródio	46 Pd Paládio	47 Ag Prata	48 Cd Cádmio	49 In Índio	50 Sn Estanho	51 Sb Antimônio	52 Te Telúrio	53 I Iodo	54 Xe Xenônio						
6 Cs Césio	56 Ba Bário	57-71 *	72 Hf Háfnio	73 Ta Tântalo	74 W Tungstênio	75 Re Rênio	76 Os Ósmio	77 Ir Íridio	78 Pt Platina	79 Au Ouro	80 Hg Mercúrio	81 Tl Tálio	82 Pb Chumbo	83 Bi Bismuto	84 Po Polônio	85 At Astató	86 Rn Radônio						
7 Fr Frâncio	88 Ra Rádio	89-103 **	104 Rf Rutherfordio...	105 Db Dúbnio	106 Sg Seabórgio	107 Bh Bóhrio	108 Hs Hássio	109 Mt Meitnério	110 Ds Darmstádio	111 Rg Roentgênio	112 Cn Copernício	113 Uut Ununtrio	114 Uuq Ununquádro	115 Uup Ununpentio	116 Uuh Ununhécio	117 Uus Ununséptio	118 Uuo Ununoctio						
		*	57 La Lantânio	58 Ce Cério	59 Pr Praseodímio	60 Nd Neodímio	61 Pm Promécio	62 Sm Samário	63 Eu Európio	64 Gd Gadolínio	65 Tb Térbio	66 Dy Disprósio	67 Ho Hólmio	68 Er Érbio	69 Tm Túlio	70 Yb Ítérbio	71 Lu Lutécio						
		**	89 Ac Actínio	90 Th Tório	91 Pa Protactínio	92 U Urânio	93 Np Neptúnio	94 Pu Plutônio	95 Am Amérgio	96 Cm Cúrio	97 Bk Berquélio	98 Cf Califórnio	99 Es Einsténio	100 Fm Férmio	101 Md Mendelévio	102 No Nobélio	103 Lr Laurêncio						

www.tabelaperiodicacompleta.com

- Os elementos metálicos perdem elétrons de valência para átomos de elementos não metal.

LIGAÇÃO COVALENTE

- *É um tipo de ligação química caracterizada pelo compartilhamento de um ou mais pares de elétrons entre átomos, que causa atração mútua entre eles, o que mantém a molécula resultante unida – resultado de forças atrativas e repulsivas.*
- *Há dois tipos de ligação covalente:*
 - A σ (sigma) > Primeira covalência estabelecida entre dois átomos – Ligação forte
 - A π (pi) > Segunda e terceira covalência estabelecida entre dois átomos – Ligação fraca.
- As ligação (simples, dupla ou tripla) são caracterizada por uma certa distância entre os átomos envolvidos. Quanto maior o número de ligações entre dois átomos, menor a distância entre os átomos.

Ligações covalentes

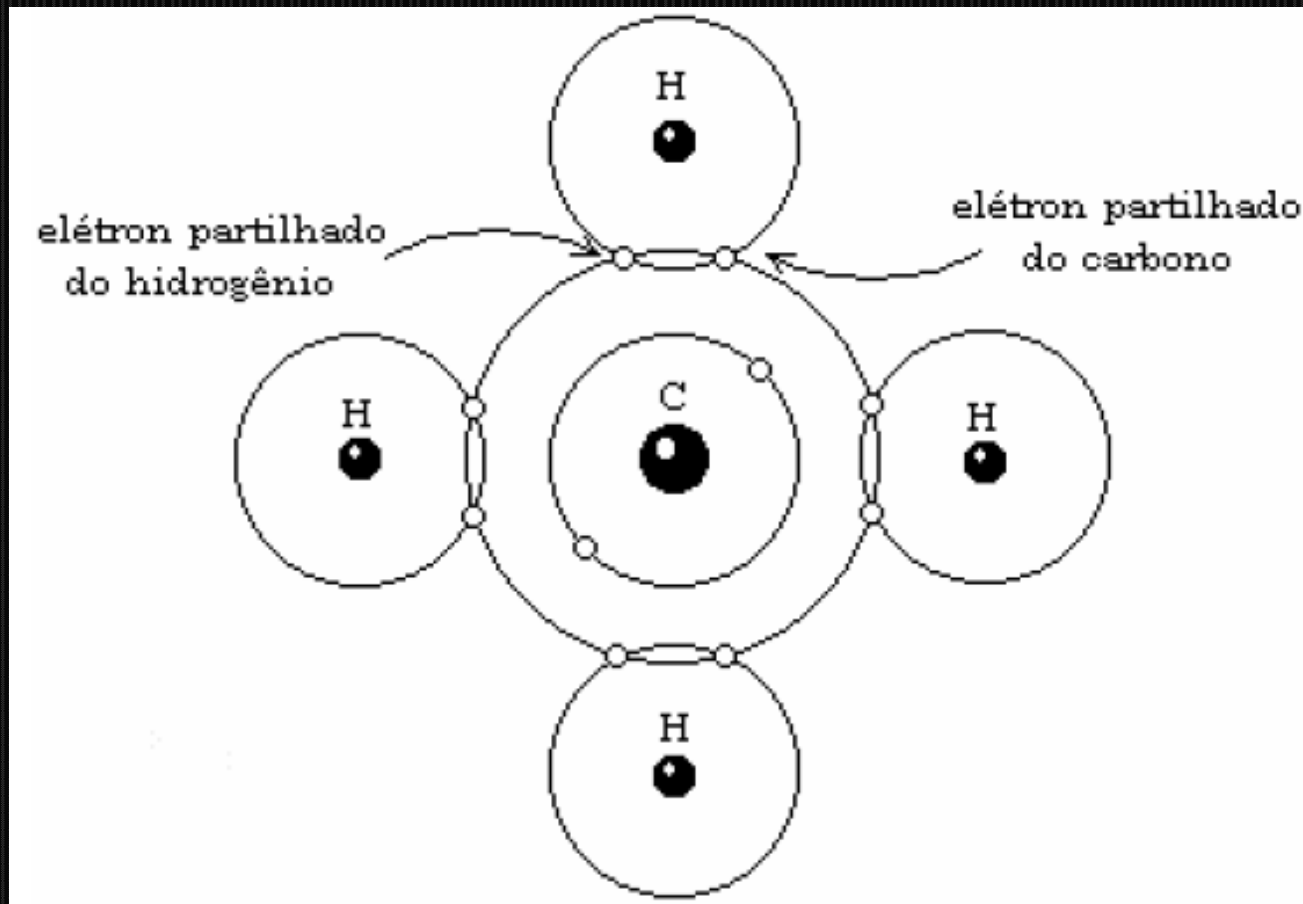
- Ocorrem entre átomos com eletronegatividade iguais e altas (entre dois não-metais);
- Remover completamente um elétron dessa ligação, requer muita energia.
- *Os materiais poliméricos são típicos de ligações covalentes:*
 - Exemplo: Plásticos
- *É possível haver ligações interatômicas parcialmente iônica e parcialmente covalente.*

As Ligações covalentes podem ser muito fortes, como o diamante, que além de ser duro resiste a alta temperatura de fusão, $> 3550\text{ }^{\circ}\text{C}$, também podem ser muito fracas, como o bismuto, que se funde a $270\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Ligações covalentes

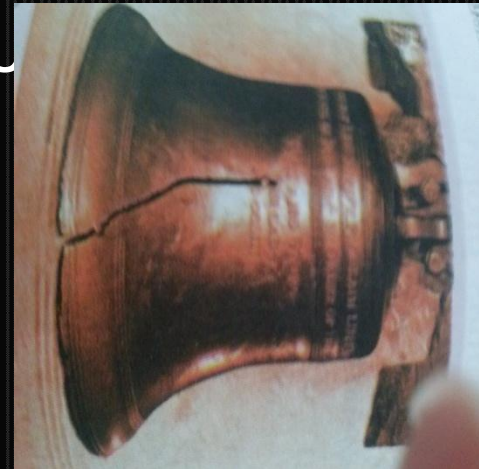
- Possuem propriedades direcionais bem definidas;
- As moléculas das substâncias covalentes são resistentes as transformações físicas como fusão ou vaporização;
- *As ligações fortes, tanto iônicas como covalentes, pode ser classificadas como polares ou apolares.*

Representação esquemática da ligação covalente em uma molécula de metano – CH_4



Os Metais.

- A maioria é sólida à temperatura ambiente (25°C) e apresenta cor prateada. As exceções são: mercúrio (líquido), cobre (de



Fonte: Usberco e Salvador, 2002.

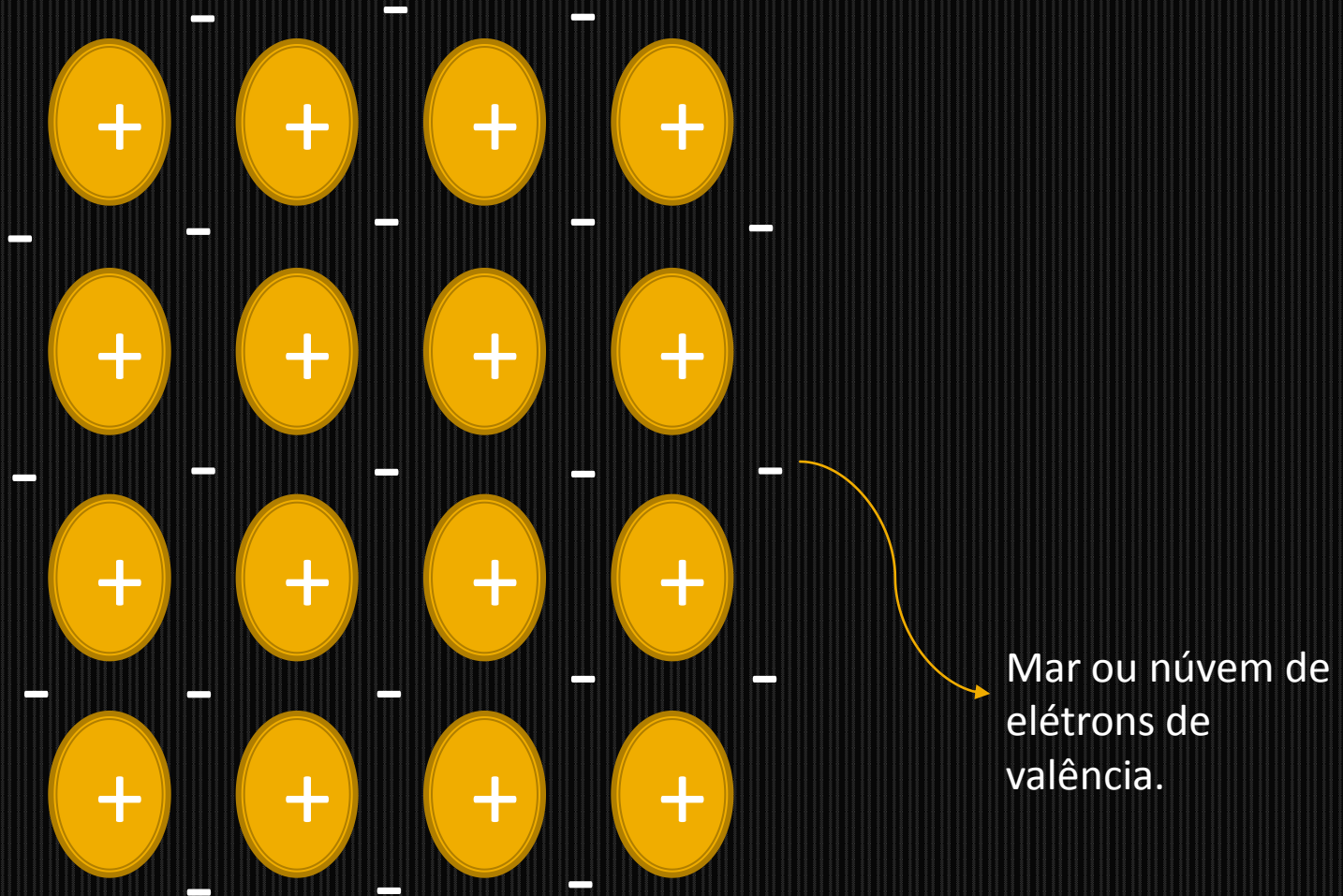
A ligação Metálica.

- É encontrada nos metais e nas suas ligas [Usberco e Salvador, 2002].
- Experiências mostram que os materiais metálicos possuem um, dois ou no máximo três elétrons de valência.
- Esses elétrons de valência não são ligados a qualquer átomo em particular e se encontram livres para se movimentarem por todo o metal, pertencentes ao metal como um todo: “mar de elétrons” ou “nuvem de elétrons”.
- O núcleo atômico somado aos demais elétrons (não os de valência) formam o chamado núcleo iônico. Este possui carga resultante positiva, com magnitude igual à carga total dos elétrons de valência por átomo [Callister, 2011].

A ligação Metálica.

- Os elétrons livres mantem unidos os núcleos iônicos e protegem esses núcleos carregados positivamente das forças eletrostáticas repulsivas que eles iriam, de outra forma, exercer uns sobre os outros. Por isso esse tipo de ligação exibe uma natureza não direcional. Embora esses elétrons livres não esteja ligados a nenhum átomo específico, eles devem receber algum tipo de energia (pouca) para se tornar elétrons de condução [Callister, 2011].

Ilustração da ligação metálica.



[Adaptado de Callister, 2011].



- Ondas de elétrons sobre a superfície de um cristal de cobre obtida por um microscópio com ampliação de 215 milhões de vezes.

Energias de ligação e temperatura de fusão.

Substância	kJ/mol	eV/Átomo, íon, molécula	Temperatura de Fusão (°C)
Alumínio (Al)	324	3,4	660
Ferro (Fe)	406	4,2	1538
Tungstênio (W)	849	8,8	3410

Propriedades dos metais.

- A capacidade de os elétrons se movimentarem no interior do metal é responsável pelas propriedades que o caracteriza:
 - **Condutibilidade:** de corrente elétrica e calor; Sendo que para metais puros a condutibilidade é bem maior do que para ligas metálicas. Já que os átomos dos elementos de liga servem como centros de espalhamento para elétrons livres envolvidos no processo de transporte térmico e elétrico [Callister, 2011];
 - **Maleabilidade:** capacidade de produzir lâminas [Usberco e Salvador, 2002];
 - **Ductibilidade:** habilidade de um material de manter uma deformação plástica, por um período apreciável antes de fraturar (capacidade de formação de fios) [Callister 2011 e Usberco e Salvador, 2002].

Ligas metálicas.

- Materias com propriedades metálicas que contém dois ou mais elementos, sendo ao menos um deles metal [Usberco e Salvador, 2002].
- Ex:
 - Ouro 18 quilates: Ouro e Cobre.
 - Aço Inox: Ferro, Carbono, Cromo, Niquel.
 - Latão: Liga de cobre e Zinco.
 - Bronze: Liga de cobre e Estanho

Exercícios:

- Ao que se deve as propriedades de condutibilidade térmica e elétrica própria dos metais?
- Como os elétrons mantem a estrutura do metal e não se repelem entre si?

Respostas:

- **Ao que se deve as propriedades de condutibilidade térmica e elétrica própria dos metais?**

R: Se deve a **núvem de elétrons**. Os elétrons, ao receberem energia saltam para camadas exteriores transmitindo para os demais elétrons livres a energia armazenada.

- **Como os elétrons mantem a estrutura do metal e não se repelem entre si?**

R: O núcleo atômico somado aos demais elétrons (não os de valência) formam o chamado núcleo iônico. Este possui carga resultante positiva, com magnitude igual à carga total dos elétrons de valência por átomo. Os elétrons livres mantem unidos os núcleos iônicos e protegem esses núcleos carregados positivamente das forças eletrostáticas repulsivas que eles iriam, de outra forma, exercer uns sobre os outros.

LIGAÇÃO SECUNDÁRIA OU DE VAN DE WAALS

CARACTERÍSTICAS:

- São fracas comparadas as ligações primárias e químicas.
- Gases inertes que possuem estruturas eletrônicas estáveis, tem essa ligação evidenciada, e também, entre moléculas em estruturas moleculares que são covalentemente ligadas. Surgem dos dipolos atômicos ou moleculares (CALLISTER, 2011);

- Dipolo elétrico: resultado da separação das porções positiva e negativa de um átomo ou molécula
- Ligação: resulta da atração de Coulomb entre o terminal positivo de um dipolo e a região negativa de um outro dipolo adjacente.

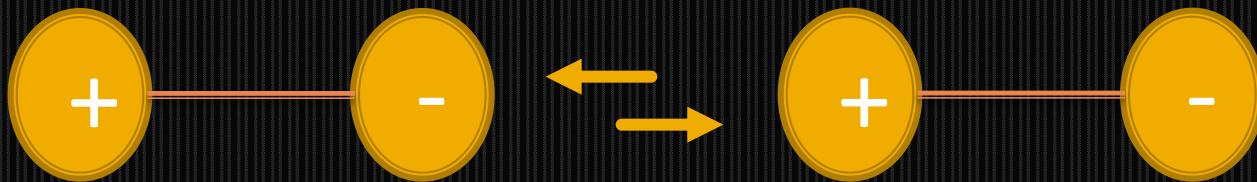


Figura 01- Ilustração esquemática de ligação de van der Waals entre dois dipolos (Adaptado de CALLISTER, William D.; 1991).

~~Interações de dipolo ocorrem entre~~

- Dipolos induzidos;
 - Dipolos induzidos e moléculas polares (que possuem dipolos permanentes);
 - Moléculas polares.
-
- Classe especial de ligação secundária é a ligação de hidrogênio, e ela existe entre algumas moléculas que tem hidrogênio como um dos constituintes.

LIGAÇÕES DE DIPOLO INDUZIDO FLUTUANTE:

- Um dipolo pode ser criado ou induzido num átomo ou molécula que é normalmente simétrico eletricamente.



Figura 02 - Representações esquemáticas de um átomo eletricamente simétrico (Adaptado de CALLISTER, William D.; 1991).

- Movimento vibracional constante dos átomos pode causar distorções instantâneas ou de curta duração da simetria elétrica, e a criação de pequenos dipolos elétricos.

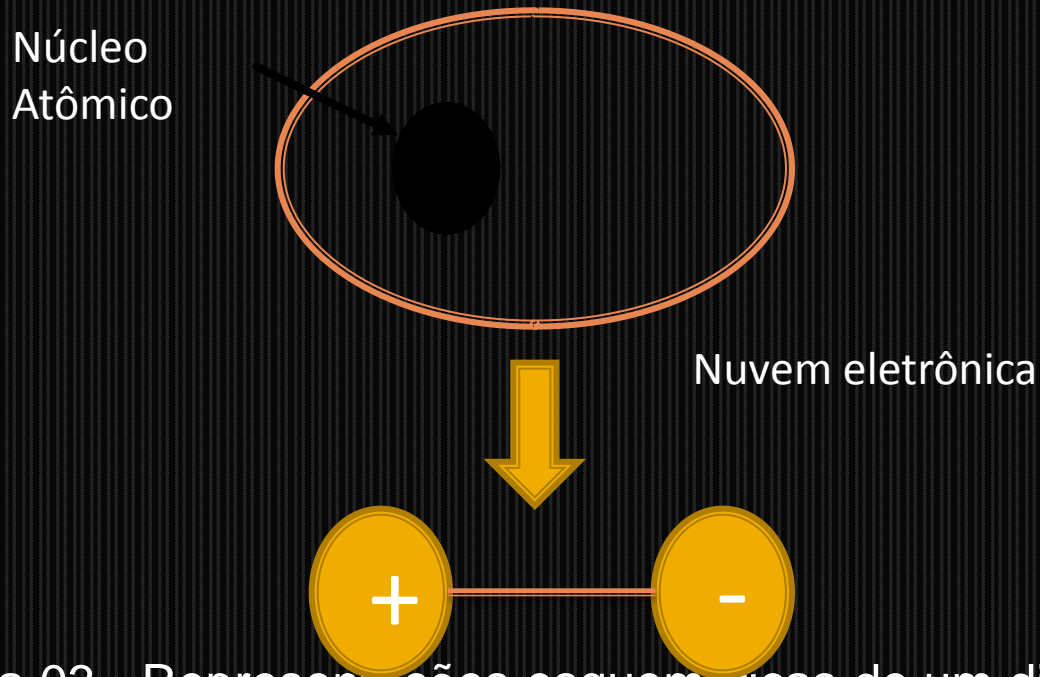


Figura 03 - Representações esquemáticas de um dipolo atômico induzido (Adaptado de CALLISTER, William D.; 1991).

- Um dipolo produz um deslocamento na distribuição eletrônica de uma molécula ou átomo, induzindo este a também se tornar um dipolo que é então fracamente atraído ao primeiro.
- Estas forças atrativas podem existir entre grande número de átomos ou moléculas, cujas forças são temporárias e flutuam com o tempo.

- Devido a essa ligação, acontece a liquefação e, em alguns casos, a solidificação dos gases inertes e outras moléculas eletricamente neutras e simétricas.
- Em materiais onde predominam dipolos de ligação induzidos; as temperaturas de fusão e de ebulição são muito baixas.
- De todas as ligações intermoleculares, estas são as mais fracas.
- Alguns exemplos são: **H₂, O₂, F₂, Cl₂**

LIGAÇÕES ENTRE MOLÉCULAS POLARES E DIPOLOS INDUZIDOS:

- Devido ao arranjo assimétrico de regiões com cargas positivas ou negativas, surgem momentos de dipolo permanentes nas moléculas.
- As moléculas são denominadas, assim, polares.

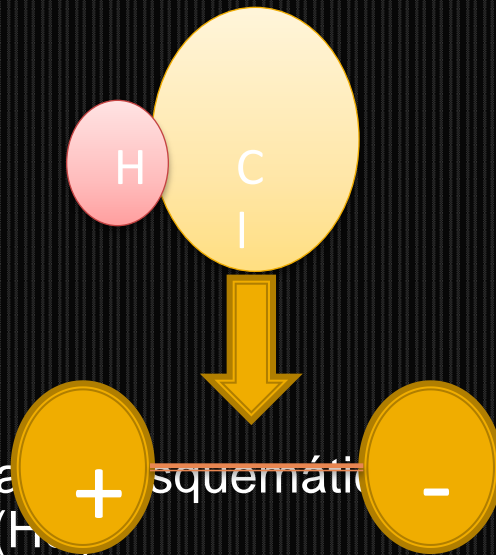


Figura 04 - Representação esquemática de uma molécula polar de cloreto de hidrogênio (HCl).

- ~~Moléculas polares podem induzir dipolos em moléculas apolares, formando uma ligação.~~
- A magnitude desta ligação é maior do que a de dipolos induzidos flutuantes.
- Alguns exemplos são: **HCl, HBr, H₂S, CO**

LIGAÇÕES DE DIPOLO PERMANENTES OU PONTES DE HIDROGÊNIO:

- Ligação de hidrogênio, é um caso especial de ligação entre moléculas polares.
- É a ligação secundária mais forte.
- Ocorre entre moléculas nas quais hidrogênio é covalentemente ligado a átomos de flúor, oxigênio e nitrogênio, os quais são altamente eletronegativos.

- Para cada ligação H-F, H-O, ou H-N, o único elétron de hidrogênio é compartilhado com o outro átomo, ficando na extremidade da ligação um próton isolado não neutralizado.
- Dessa forma, a extremidade carregada da molécula exerce uma força de atração sobre a extremidade negativa de uma outra molécula.

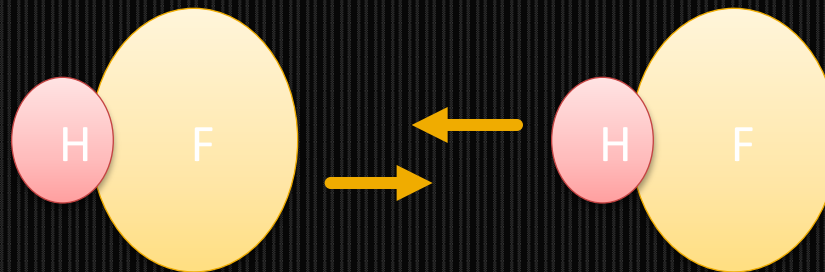


Figura 05 - Representação esquemática de ligação de hidrogênio em fluoreto de hidrogênio (HF) (Adaptado de CALLISTER, William D.; 1991).

Exemplo: Pontes de Hidrogênio existentes entre as moléculas de H₂O (Figura 06):

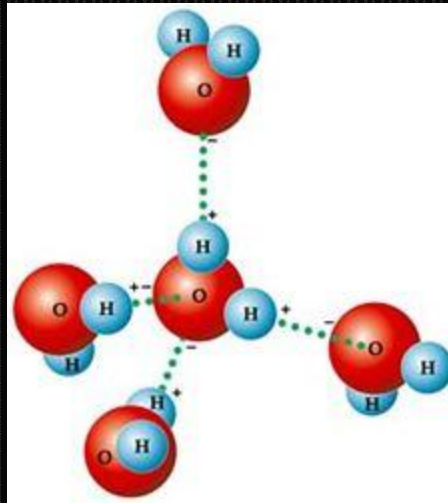


Figura 06 – Pontes de Hidrogênio existentes entre as moléculas de água (LIRA, 2015).

FORÇAS INTERMOLECULARES E TEMPERATURA DE FUSÃO E EBULIÇÃO:

Dois fatores que influenciam nas TE:

- O tipo de força intermolecular: quanto mais intensa é, maior a sua TE.
- O tamanho das moléculas: quanto maior o tamanho, maior será sua superfície e maior o número de interações com outras moléculas, acarretando TE maior.

EXERCÍCIO

1. Explique por que o fluoreto de hidrogênio (HF) possui uma temperatura de ebulição mais elevada do que o cloreto de hidrogênio (HCl) (19,4 *versus* -85°C), apesar de o HF ter um peso molecular menor.

R.: Devido ao tipo de ligação secundária existente, pois a ligação entre o HF é mais forte que a do HCl. Quanto mais intensa é a força intermolecular, maior a sua TE; e também *“As temperaturas de fusão e de ebulição para o fluoreto de hidrogênio e para a água são anormalmente elevadas em relação aos seus baixos pesos moleculares, como consequência da ligação de hidrogênio.”*

Referências

USBERCO, Joao; SALVADOR, Edgard. **Química**.
Volume Único. 5ª ed. São Paulo: Saraiva, 2002.
672p.

CALLISTER, William, D. **Ciência e Engenharia de
Materiais – Uma introdução**. 7ª ed. Rio de Janeiro:
LTC, 2011. 705p.

Referências

- http://profs.ccems.pt/PauloPortugal/CFQ/Orbitais/Orbitais_nmeros_qunticos.html
- <http://www.infoescola.com/quimica/modelo-atomico-de-schrodinger/>
- <http://www.explicatorium.com/CFQ9-Evolucao-atomo.php>
- http://web.ccead.pucrio.br/condigital/mvsl/Sala%20de%20Leitura/conteudos/SL_estrutura_atomica.pdf
- [LIRA, Julio Cezar Lima. Acesso em 26 de março de 2015. http://www.infoescola.com/wp-content/uploads/2012/03/ligacao-de-hidrogenio-agua.jpg](http://www.infoescola.com/wp-content/uploads/2012/03/ligacao-de-hidrogenio-agua.jpg)