



Rede São Paulo de

Formação Docente

Cursos de Especialização para o quadro do Magistério da SEESP
Ensino Fundamental II e Ensino Médio

São Paulo
2011



UNESP – Universidade Estadual Paulista
Pró-Reitoria de Pós-Graduação
Rua Quirino de Andrade, 215
CEP 01049-010 – São Paulo – SP
Tel.: (11) 5627-0561
www.unesp.br



Governo do Estado de São Paulo
Secretaria de Estado da Educação
Coordenadoria de Estudos e Normas Pedagógicas
Gabinete da Coordenadora
Praça da República, 53
CEP 01045-903 – Centro – São Paulo – SP



**SECRETARIA
DA EDUCAÇÃO**



Ficha da Disciplina:

Ligação Química



Luiz Antonio Andrade de Oliveira



Camila Silveira da Silva



Olga Maria Mascarenhas de Faria Oliveira



Estrutura da Disciplina

Semana	Temas	Ativ.	Datas
1	1. Evolução Histórica do Conceito de Ligação Química	1	4/abr a 10/abr
2	2. A ligação Química no Contexto do Átomo Divisível 2.1 Regra do Octeto: Importância Histórica, Limites de sua Utilização	<u>2</u>	11/abr a 17/abr
3	3. Ligação Química: Conceito e Tipos 3.1 Características Gerais das Ligações Químicas: Ligação Covalente 3.2 Características Gerais das Ligações Químicas: Ligação Iônica 3.3 Características Gerais das Ligações Químicas: Ligação Metálica 3.4 Características Gerais das Ligações Químicas: Ligações (ou Interações) Intermoleculares	<u>3</u> , <u>4</u> , <u>5</u>	18/abr a 24/abr
4	4. Ligação Covalente em Entidades Isoladas 4.1 Ligação Covalente versus Iônica - O Caso do NaCl e do HCl 4.2 Geometria de Moléculas Isoladas: Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons da Camada de Valência (TRPECV) 4.3 Outros Exemplos de Aplicação da TRPECV	<u>7</u> , <u>8</u> , 9	25/abr a 1/mai
5	5. Obedecer ou não a Regra do Octeto? 5.1 O Caso do H_2SO_4 e do ânion SO_4^{2-} 5.2 O Caso em que não há Átomo Central na Molécula.	<u>10</u> , <u>11</u> , 12, 13	2/mai a 8/mai

Resumo

A busca da compreensão do por que a matéria sofre transformações, gerando nova matéria com propriedades diferentes das iniciais, e as explicações para essas transformações, têm ocupado a mente humana desde a Antiguidade. Só muito mais recentemente estas transformações foram interpretadas como sendo decorrente da quebra e formação de ligações químicas.

Atualmente, a **ligação química** é interpretada como resultante da interação entre os elétrons das camadas de valência dos átomos que formam uma **substância**. Esses elétrons são atraídos por todos os núcleos dos átomos que compõem a substância, e ao mesmo tempo interagem e se repelem entre si, tendo como resultado final um abaixamento de energia da substância formada em relação aos átomos iniciais isolados.

O comportamento dos elétrons ligados aos núcleos de cada um dos átomos isolados que formam uma substância, por sua vez, a rigor é descrito à luz dos conceitos da **Química Quântica**. Deste modo, a descrição da ligação química requer, em algum grau, a utilização de conceitos associados à descrição probabilística do elétron, envolvendo termos como **orbital**, densidade eletrônica, sobreposição de orbitais, ordem de ligação, dentre outros.

- Segundo definição recomendada pela IUPAC, diz-se que há uma ligação química entre dois átomos ou grupos de átomos quando há forças atuando entre eles, de modo que leve à formação de um agregado com estabilidade suficiente que torne conveniente para o químico considerá-lo como uma “espécie molecular” independente. Com base nesta definição são quatro os tipos de interações existentes entre os átomos que formam uma substância química: ligação iônica, ligação covalente, ligação metálica e interações intermoleculares.
- As três primeiras interações – ligação iônica, covalente e metálica – são fortes, e constituem o que tradicionalmente é incluído nos livros didáticos como ligações químicas. O quarto tipo de interação – as interações moleculares – normalmente é muito mais fraca que as três primeiras, e usualmente não são classificadas nos textos didáticos tradicionais como ligações químicas. Embora mais fracas, as interações intermoleculares são muito importantes na compreensão das características físicas de uma substância, como por exemplo, o ponto de fusão, densidade de suas fases, estrutura e estabilidade de proteínas e DNA.
- Este importante aspecto da Química, a ligação química, que juntamente com a estrutura e reatividade das substâncias, constitui a espinha dorsal do conhecimento químico atual, será o objeto do terceiro módulo do nosso Curso.



Sumário

1. Evolução histórica do conceito de ligação química	6
--	---



1. Evolução histórica do conceito de ligação química

As primeiras idéias das quais se tem registro, sobre o que hoje conhecemos como ligação química, remonta a 410-450 a.C., estando associadas aos nomes de Demócrito. Seguindo a proposição do modelo do átomo indivisível proposto por Leucipo e Demócrito, este último propôs que os átomos eram dotados de “colchetes e ganchos”, através dos quais se uniam para formar sólidos. Posteriormente, antes da afirmação da Química como ciência exata, surgiram outras explicações não científicas para a formação da ligação química, como sendo decorrentes de “as partículas em repouso estarem coladas” e “as partículas serem mantidas juntas por movimentos conspiratórios”.

Durante quase dois mil anos, a idéia de átomo dos filósofos gregos, e suas idéias adjacentes sobre ligação química, foram abandonadas, sendo substituída pelas idéias do modelo dos quatro elementos de Empédocles e Aristóteles e, posteriormente, pelas da Alquimia. No século XVII, com o reaparecimento das idéias da Teoria Atômica da matéria, através dos trabalhos de René Descartes (filósofo e físico francês, 1596-1650), Pierre Gassendi (filósofo e cientista francês, 1592 – 1650) e Isaac Newton (físico e matemático inglês, 1643 – 1727), as idéias dos filósofos gregos para explicar como as partículas se uniam também foram retomadas. Descartes, por exemplo, adotou a idéia da interação dos átomos ocorrerem através de algo semelhante aos colchetes e ganchos dos gregos.

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/39/GodfreyKneller-IsaacNewton-1689.jpg>

[http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/6/65/Etienne-Francois Geoffroy.jpg](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/6/65/Etienne-Francois_Geoffroy.jpg)

http://fr.wikipedia.org/wiki/Image:Pierre_gassendi.jpg

Em 1661, Robert Boyle (filósofo e químico inglês, 1627 – 1691), em seu livro “O Químico Cético”, postulou que a matéria é constituída de “aglomerados de partículas”, e que as mudanças químicas resultam de rearranjos dos aglomerados. Em 1704, Newton postulou que as partículas se atraíam por alguma força, a qual “em contato próximo é extremamente forte, em pequenas distâncias realiza as operações químicas, e em distâncias maiores das partículas não têm efeito sensível”.



<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/4/43/SS-buckland.jpg>

Em 1718, utilizando as idéias de Boyle, o químico e físico francês Etienne Francois Geoffroy (1672-1731) desenvolveu a Teoria Da Afinidade Química, representada na tabela que se segue.

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/ee/Affinity-table.jpg>

Em 1803, John Dalton (químico inglês, 1766-1844), após propor sua Teoria do Átomo Indivisível, também propôs incorretamente que os átomos simples se “enganchavam” para formar átomos compostos. Em 1808 Dalton resumiu suas idéias na tabela apresentada a seguir.

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/9/97/A_New_System_of_Chemical_Philosophy_fp.jpg

O primeiro a ter idéia clara sobre a diferença entre átomo simples e molécula, como conhecemos hoje, foi o cientista italiano Lorenzo Romano Amedeo Avogadro (1776-1856), em 1811. No entanto, só em 1860, após a morte de Avogadro, sua idéia sobre molécula foi aceita pela comunidade química da época.

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/3d/Avogadro_Amedeo.jpg

Embora durante o século XIX vários pesquisadores tenham contribuído para o desenvolvimento da idéia de ligação química, arbitrariamente selecionamos e destacamos apenas os trabalhos do químico inglês Edward Frankland (1825-1899) e do físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906). Em 1852 Frankland, a partir dos resultados de seus trabalhos, propôs o conceito de valência, conceito que influenciou todo o desenvolvimento do conhecimento químico da época. Em 1898, aplicando o conceito de valência, Boltzmann explicou a formação da molécula de I_2 , e postulou que esta atração química deveria estar associada com uma região relativamente pequena da superfície de cada átomo, que ele chamou de “região sensível”. Nas palavras de Boltzmann “Quando dois átomos estão situados de modo que suas regiões sensíveis estão em contato, ou se sobrepõe parcialmente, haverá uma atração química entre eles. Dizemos então que eles estão quimicamente ligados um ao outro”. Embora rudimentar este quadro é surpreendente, pois envolve a primeira descrição detalhada da ligação química como resultante da sobreposição de orbitais atômicos, numa época em que ainda não se dispunha de

um modelo para o átomo divisível. É importante lembrar que a descoberta do elétron como constituinte universal da matéria havia sido feita por J. J. Thomson em 1897, apenas um ano antes de Boltzmann publicar suas idéias!

Com o estabelecimento indiscutível da natureza elétrica e divisível do átomo, começou-se a atribuir a formação da ligação química ao compartilhamento de pares de elétrons entre os átomos que a formam, o que posteriormente seria conhecido como ligação covalente. Essas idéias foram inicialmente desenvolvidas pelo químico americano Gilbert Lewis (1875-1946), no período compreendido aproximadamente entre 1902 e 1916. Inicialmente, com base na idéia da grande estabilidade associada a átomos com oito elétrons em suas camadas atômicas, os gases nobres, propôs seu modelo de átomo cúbico, assim como os diagramas de pontos, que viriam a ser conhecidos posteriormente. Suas idéias, incluindo a interpretação da ligação química como sendo devido ao compartilhamento de pares de elétrons, em número suficiente para satisfazer o octeto, foram explicitadas no seu trabalho clássico “The Atom and the Molecule” Lewis, (1916).

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/3/32/Lewis-cubic-notes.jpg>

As idéias de Lewis sobre a ligação química foram expandidas pelo físico e químico americano Irving Langmuir (1881-1957), que culminaram nos estudos sobre a natureza da ligação química pelo químico americano Linus Pauling (1901-1994). As idéias de Pauling sobre a ligação estão reunidas no seu livro clássico Pauling, L. *The Nature of the Chemical Bond*. Cornell University Press, publicado pela primeira vez em 1939, constituindo as bases da Teoria de Ligação de Valência. Na visão de Pauling estão incluídas as idéias da ligação química

Molécula: Uma entidade eletricamente neutra que consiste de mais de um átomo. A rigor, uma molécula deve corresponder a uma depressão na superfície de energia potencial que seja suficientemente profunda para confinar pelo menos um estado vibracional da entidade.

Orbitais híbridos: Um orbital atômico obtido pela hibridação de orbitais com diferentes números quânticos de momentos angulares (l) localizados num mesmo átomo.

como sendo devido à sobreposição de orbitais dos átomos que compõem a **molécula**, a formação de **orbitais híbridos** para explicar a geometria e número de ligações feitas por átomos como carbono e nitrogênio e a **ressonância** para explicar a equivalência das ligações em estruturas como o benzeno.

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/d/db/Pauling.jpg>

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/7/77/GilbertLewis.jpg>

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/9/96/Langmuir-sitting.jpg>

Ressonância: No contexto da química, o termo se refere à representação da estrutura eletrônica de uma entidade molecular em termos da contribuição de mais de uma estrutura. Ressonância entre diversas estruturas contribuintes significa que a função de onda total é representada pela “mistura” das funções de onda das estruturas contribuintes. O conceito é a base dos métodos da Mecânica Quântica aplicados que descrevem a ligação de valência. A estabilização resultante da ressonância está ligada ao conceito mecânico-quântico de “energia de ressonância”.

Em 1900 o físico alemão Max Planck (1858- 1947) postulou o conceito de **quantização da energia** para descrever fenômeno relacionado com a emissão e absorção de energia por um corpo em função da temperatura. Posteriormente, o conceito de quantização dos níveis de energia foi incorporado na descrição do comportamento do elétron no átomo de hidrogênio, num modelo proposto pelo físico dinamarquês Niels Henrik David Bohr (1885-1962) em 1913.

http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Max_planck.jpg

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/6/6d/Niels_Bohr.jpg

Como a formação das ligações químicas está associada à interação dos elétrons dos átomos que a formam, era inevitável que os conceitos e métodos da Física Quântica fossem utilizados em sua descrição. Isto foi feito com sucesso em 1927, pelos físicos alemães Fritz London (1900-1954) e Walter Heinrich Heitler (1904-1981), que aplicaram a **Mecânica Quântica** para explicar a formação da ligação covalente na molécula de hidrogênio. Esta abordagem, que é a base do que hoje se conhece como Teoria da Ligação de Valência, marcou o nascimento da **Química Quântica**.

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/8/8c/London%2CFritz_1928_M%C3%BCnchen.jpg

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/d/db/Heitler%2CWalter_1937.jpg

Em 1929 o químico inglês John Lennard-Jones (1894-1954) propôs descrever a formação dos orbitais moleculares através da combinação linear dos orbitais atômicos (Método CLOA) que compõem uma molécula. Sugeriu também métodos para derivar as estruturas eletrônicas de moléculas como F_2 e O_2 a partir de princípios quânticos básicos. Essas idéias constituem as bases do que hoje se conhece como Teoria do Orbital Molecular.

<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/fb/Lennard-jones.jpg>

Esses métodos, e seus desdobramentos subsequentes, constituem a base dos cálculos iniciais feitos atualmente pela Química Quântica. No entanto, é bom se destacar que nenhum dos métodos permite uma solução exata dos sistemas, devido à complexidade dos cálculos envolvidos. Mesmo com essa limitação, os cálculos aproximados podem ser desenvolvidos até um ponto em que há excelente concordância entre os resultados obtidos teoricamente e os valores experimentais. Essa concordância obtida entre resultados calculados e experimentais, ao longo dos anos convenceu a comunidade científica da validade da aplicação da Química Quântica na descrição da ligação. Atualmente, embora a realização de cálculos teóricos mais completos esteja restrita aos pesquisadores da área, todas as teorias atuais que explicam a formação dos diferentes tipos de substâncias e ligações químicas, levam em seu bojo as idéias da Química Quântica. Por essa razão, a compreensão dos princípios quânticos básicos, e os conceitos deles derivados – descrição probabilística da matéria, densidade eletrônica, orbital atômico, sobreposição de orbitais, combinação linear de orbitais atômicos, teoria da ligação de valência, teoria do orbital molecular – são essenciais à plena compreensão dos conhecimentos sobre ligação química na atualidade.

Pró-Reitora de Pós-graduação

Marilza Vieira Cunha Rudge

Equipe Coordenadora

Cláudio José de França e Silva

Rogério Luiz Buccelli

Ana Maria da Costa Santos Menin

Coordenadores dos Cursos

Arte: Rejane Galvão Coutinho (IA/Unesp)

Filosofia: Lúcio Lourenço Prado (FFC/Marília)

Geografia: Raul Borges Guimarães (FCT/Presidente Prudente)

Inglês: Mariangela Braga Norte (FFC/Marília)

Química: Olga Maria Mascarenhas de Faria Oliveira (IQ Araraquara)

Equipe Técnica - Sistema de Controle Acadêmico

Ari Araldo Xavier de Camargo

Valentim Aparecido Paris

Rosemar Rosa de Carvalho Brena

Secretaria

Márcio Antônio Teixeira de Carvalho

NEaD – Núcleo de Educação a Distância

(equipe Redefor)

Klaus Schlünzen Junior

Coordenador Geral

Tecnologia e Infraestrutura

Pierre Archag Iskenderian

Coordenador de Grupo

André Luís Rodrigues Ferreira

Marcos Roberto Greiner

Pedro Cássio Bissetti

Rodolfo Mac Kay Martinez Parente

Produção, veiculação e Gestão de material

Elisandra André Maranhe

João Castro Barbosa de Souza

Lia Tiemi Hiratomi

Liliam Lungarezi de Oliveira

Marcos Leonel de Souza

Pamela Gouveia

Rafael Canoletti

Valter Rodrigues da Silva