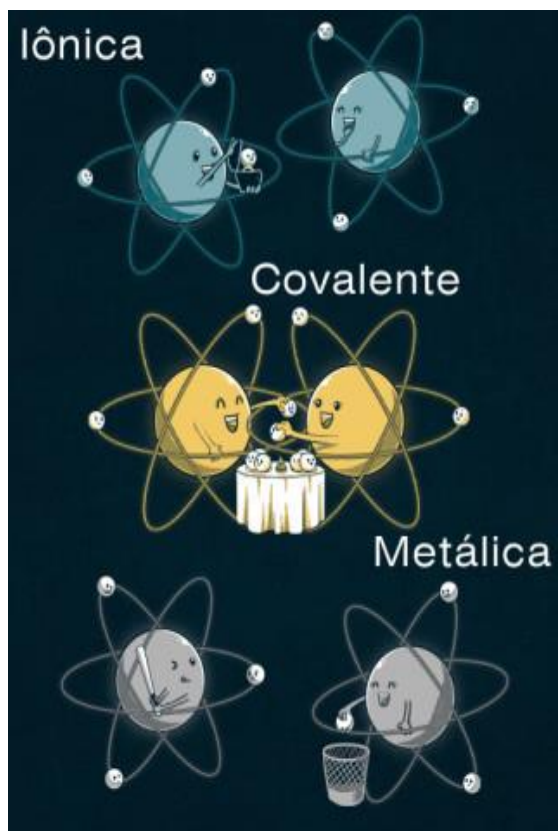
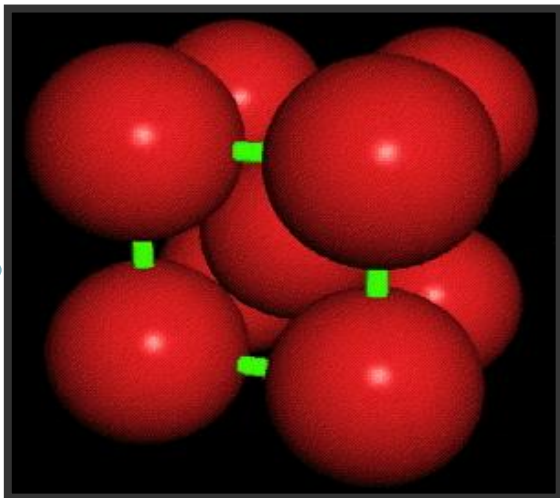
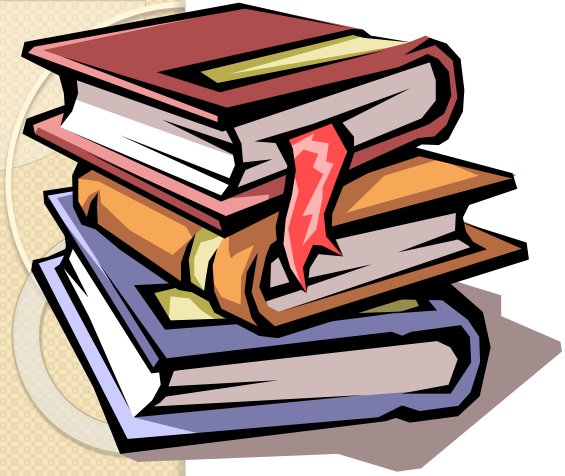




CIÊNCIA DOS MATERIAIS

LIGAÇÕES QUÍMICAS EM MATERIAIS SÓLIDOS

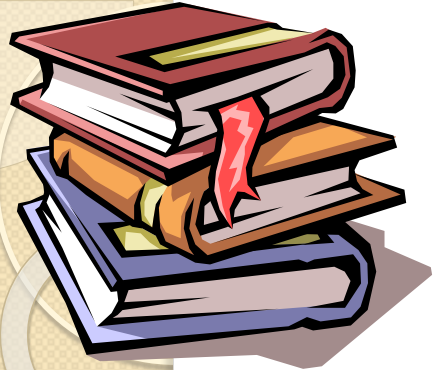
Profº Abrão C. Merij



Por que estudar ligação interatômica?

O tipo de ligação interatômica interfere nas propriedades de um material!

Muitas das ***propriedades dos materiais*** dependem dos ***arranjos atômicos*** e das ***interações*** existentes entre ***átomos*** e/ou ***moléculas***.



Por que estudar ligação interatômica?

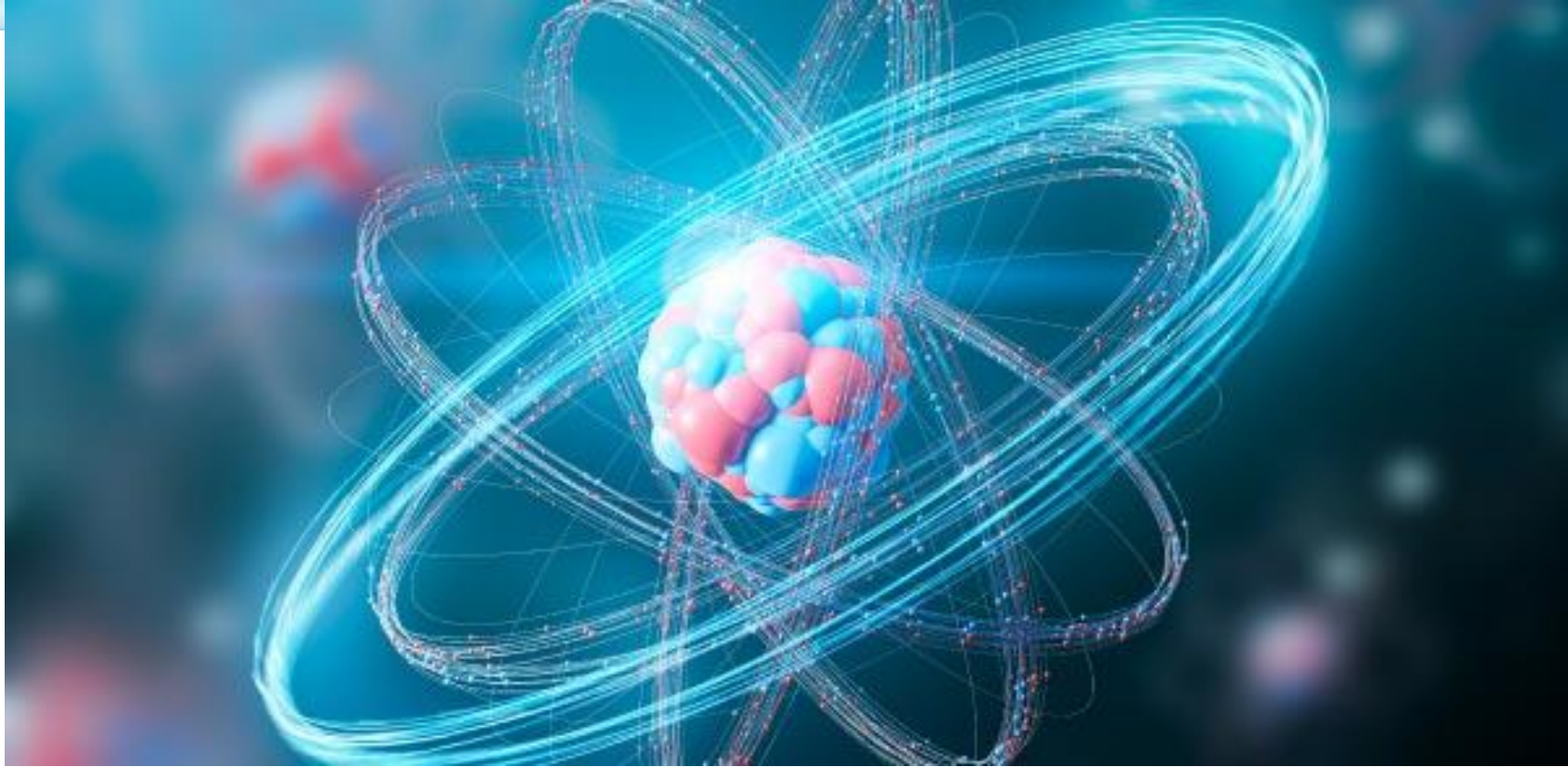
- Exemplo: O **carbono** pode existir na forma de **grafite** que é mole, escuro e “gorduroso” e na forma de **diamante** que é extremamente duro e brilhante;
- Essa **diferença** nas **propriedades** é diretamente atribuída ao **tipo** de **ligação química** que é encontrada no **grafite** e **inexistente** no **diamante**.



CONCEITOS FUNDAMENTAIS

- **NÚMERO ATÔMICO** (Z): *número de prótons* no núcleo do elemento químico;
- **MASSA ATÔMICA** (A): *soma* das *massas* de *prótons* e *nêutrons* no interior do núcleo;
 - *Isótopos*: átomos com duas ou mais massas atômicas diferentes (número de nêutrons pode ser variável);
 - *Exemplos*: *carbono-12*, *carbono-13* e *carbono-14* são três isótopos do elemento carbono.

ESTRUTURA ATÔMICA

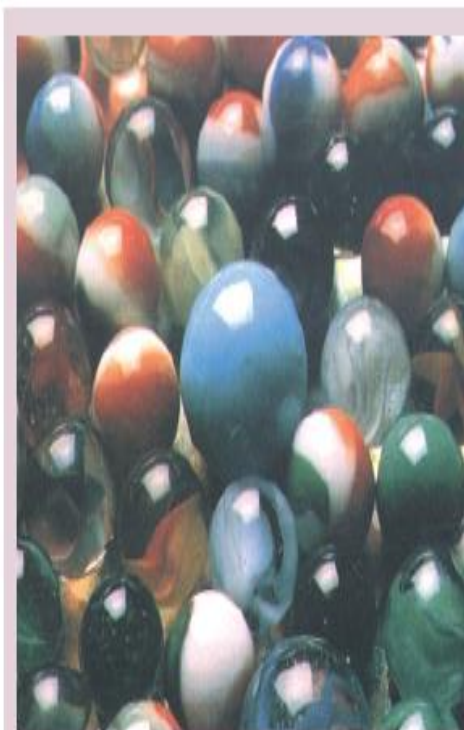




TEORIA ATÔMICA DE DALTON

Essa teoria possibilitaria, posteriormente, a criação do primeiro modelo do átomo, a qual expressa, em termos gerais, o seguinte:

1. A matéria é constituída de pequenas partículas esféricas maciças e indivisíveis denominadas átomos.
2. Um conjunto de átomos com as mesmas massas e tamanhos apresenta as mesmas propriedades e constitui um **elemento químico**.
3. Elementos químicos diferentes apresentam átomos com massas, tamanhos e propriedades diferentes.
4. A combinação de átomos de elementos diferentes, numa proporção de números inteiros, origina substâncias diferentes.
5. Os átomos não são criados nem destruídos: são simplesmente rearranjados, originando novas substâncias.



Dalton acreditava que os átomos fossem maciços, esféricos e indivisíveis como bolinhas de gude.

Joseph John Thomson, mais conhecido como **J. J. Thomson**, [OM](#), [PRS^{\[3\]}](#) ([Manchester](#), 18 de dezembro de 1856 — [Cambridge](#), 30 de agosto de 1940) foi um [físico](#) britânico vencedor do [Nobel de Física](#), creditado com a descoberta e identificação do [elétron](#), a primeira [partícula subatômica](#) a ser descrita.^[4]

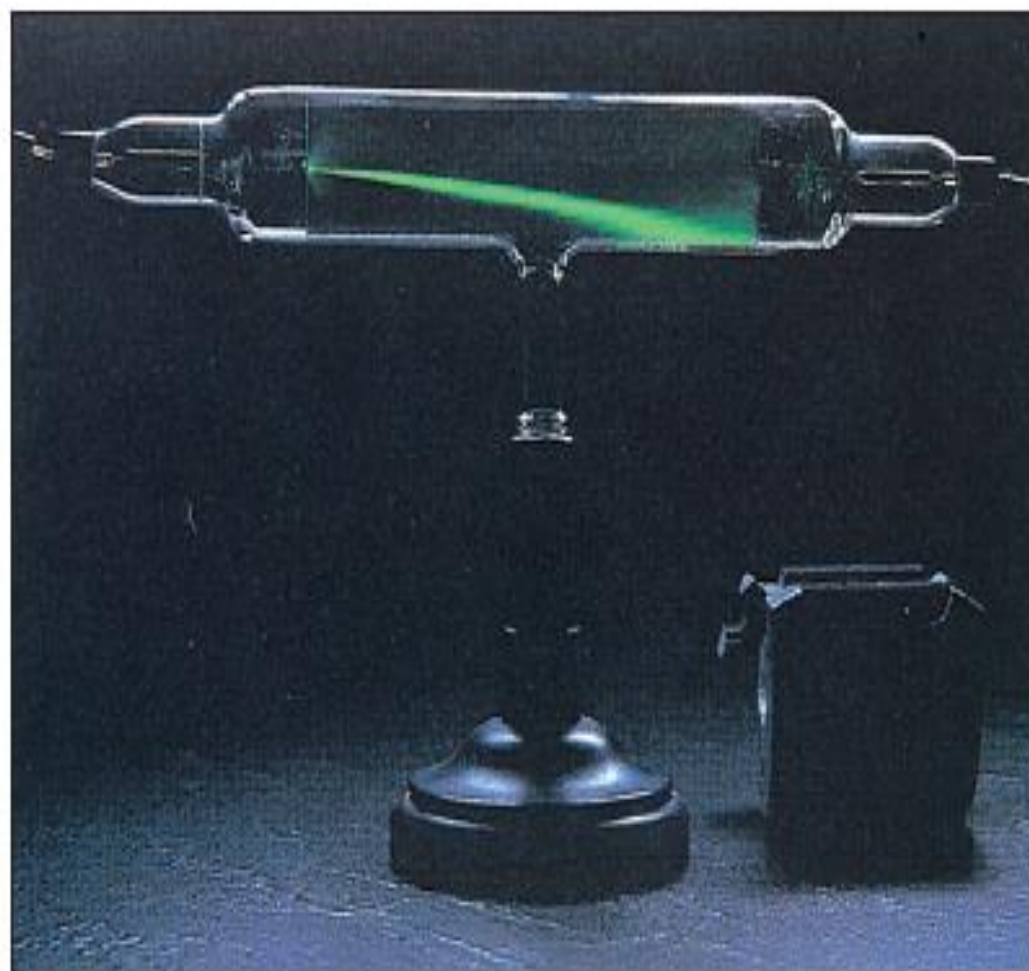


A DESCOBERTA DAS PARTÍCULAS SUBATÔMICAS

O elétron (e)

Em 1897, Joseph John Thomson (1856-1940) conseguiu demonstrar que o átomo não é indivisível, utilizando uma aparelhagem denominada tubo de raios catódicos.

Dentro do tubo de vidro havia, além de uma pequena quantidade de gás, dois eletrodos ligados a uma fonte elétrica externa. Quando o circuito era ligado, aparecia um feixe de raios provenientes do cátodo (eletrodo negativo), que se dirigia para o ânodo (eletrodo positivo). Esses raios eram desviados na direção do pólo positivo de um campo elétrico.



Considerações propostas pelo modelo atômico de Thomson

Com os experimentos realizados com o tubo de raios catódicos, Thomson propôs sua interpretação de como seria o átomo e sua constituição. Assim, de acordo com ele:

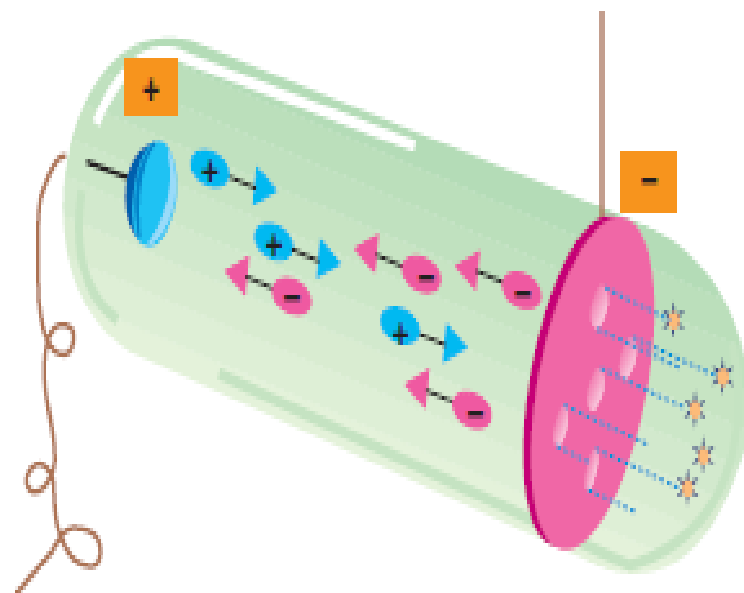
- O átomo é uma esfera, mas não maciça como propunha o [modelo atômico de John Dalton](#);
- O átomo é neutro, já que toda matéria é neutra;
- Como o átomo apresenta elétrons, que possuem cargas negativas, logo, deve apresentar partículas positivas para que a carga final seja nula;
- Os elétrons não estão fixos ou presos no átomo, podendo ser transferidos para outro átomo em determinadas condições;
- O átomo pode ser considerado como um fluido contínuo de cargas positivas onde estariam distribuídos os elétrons, que possuem carga negativa;
- Associou o seu **modelo a um pudim de passas** (as quais representam os elétrons);

A analogia entre o pudim de passas e o modelo atômico de Thomson mostra que as uvas passas ficam distribuídas aleatoriamente e incrustadas na massa, sendo que a carga positiva do átomo corresponde a essa massa e os elétrons correspondem às uvas passas.

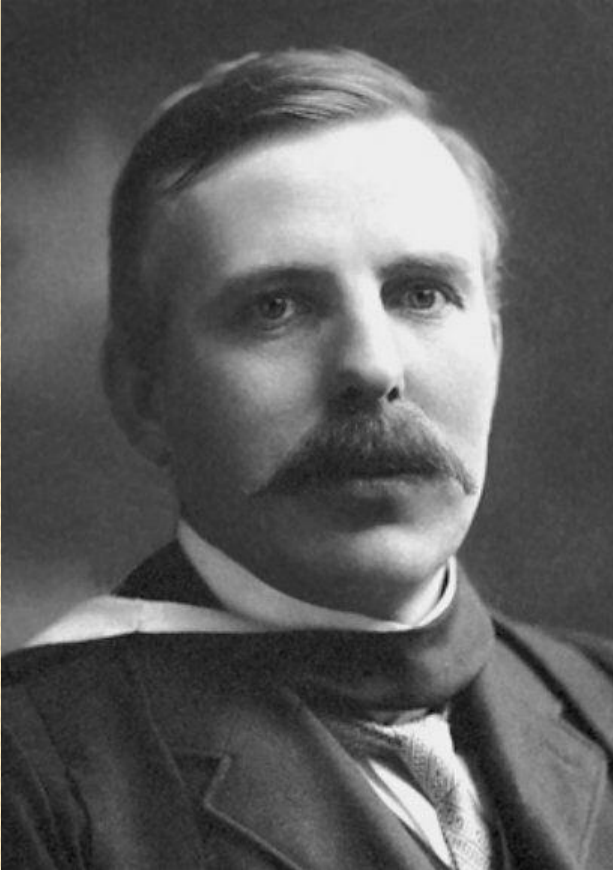


O próton (p)

Em 1886, o físico alemão Eugen Goldstein, usando uma aparelhagem semelhante à de Thomson, observou o aparecimento de um feixe luminoso no sentido oposto ao dos elétrons. Concluiu que os componentes desse feixe deveriam apresentar carga elétrica positiva.



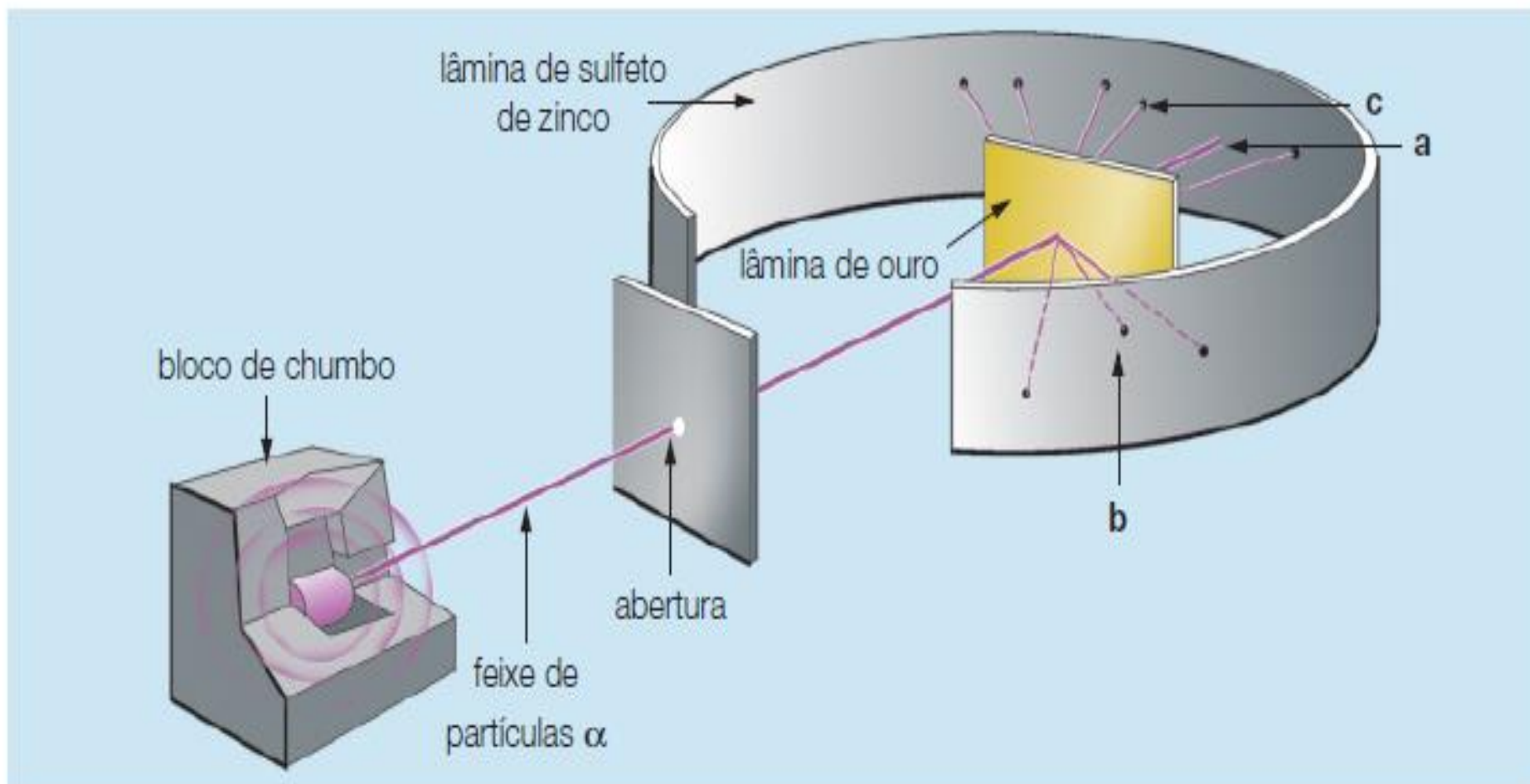
Posteriormente, em 1904, Ernest Rutherford, ao realizar o mesmo experimento com o gás hidrogênio, detectou a presença de partículas com carga elétrica positiva ainda menores, as quais ele denominou **prótons** (p). A massa de um próton é aproximadamente 1 836 vezes maior que a de um elétron.



Ernest Rutherford, ([Brightwater](#), [Nova Zelândia](#), 30 de agosto de 1871 — [Cambridge](#), 19 de outubro de 1937), foi um [físico](#) e [químico](#) neozelandês naturalizado britânico, que se tornou conhecido como o pai da [física nuclear](#).^{[2][3]} Em um trabalho no começo da carreira, descobriu o conceito de meia-vida radioativa, provou que a radioatividade causa a transmutação de um elemento químico em outro, e também distinguiu e nomeou as radiações alfa e beta. Foi premiado com o [Nobel de Química](#) em 1908 "por suas investigações sobre a desintegração dos elementos e a química das substâncias radioativas"

A experiência de Rutherford

Para verificar se os átomos eram maciços, Rutherford bombardeou uma finíssima lâmina de ouro (de aproximadamente 0,0001 cm) com pequenas partículas de carga elétrica positiva, denominadas partículas alfa (α), emitidas por um material radioativo.



As observações feitas durante o experimento levaram Rutherford a tirar uma série de conclusões:

Interpretações dos resultados do experimento de Rutherford

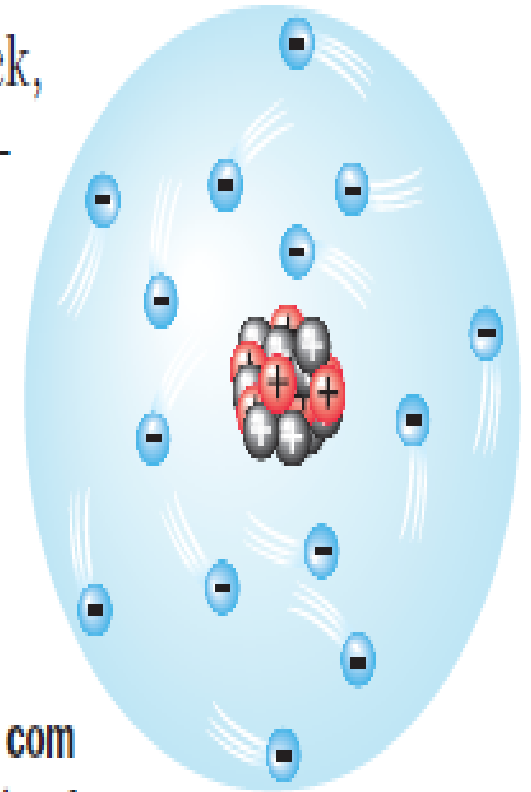
- **Interpretação sobre a região 1:** Como grande parte da radiação alfa atravessou a lâmina de ouro sem nenhum empecilho, isso quer dizer que os átomos apresentavam grandes espaços vazios (eletrosfera), ou seja, regiões que não possuíam nada capaz de influenciar a radiação alfa;
- **Interpretação sobre a região 2:** A quantidade pequena de radiação alfa que sofreu desvios passou próximo de uma região positiva (núcleo) do átomo, provavelmente de tamanho pequeno, o que promoveu o desvio.
- **Interpretação sobre a região 3:** Como uma quantidade extremamente pequena de radiação alfa foi rebatida, isso quer dizer que elas se chocaram com uma região do átomo extremamente pequena que apresentava característica positiva.

O nêutron (n)

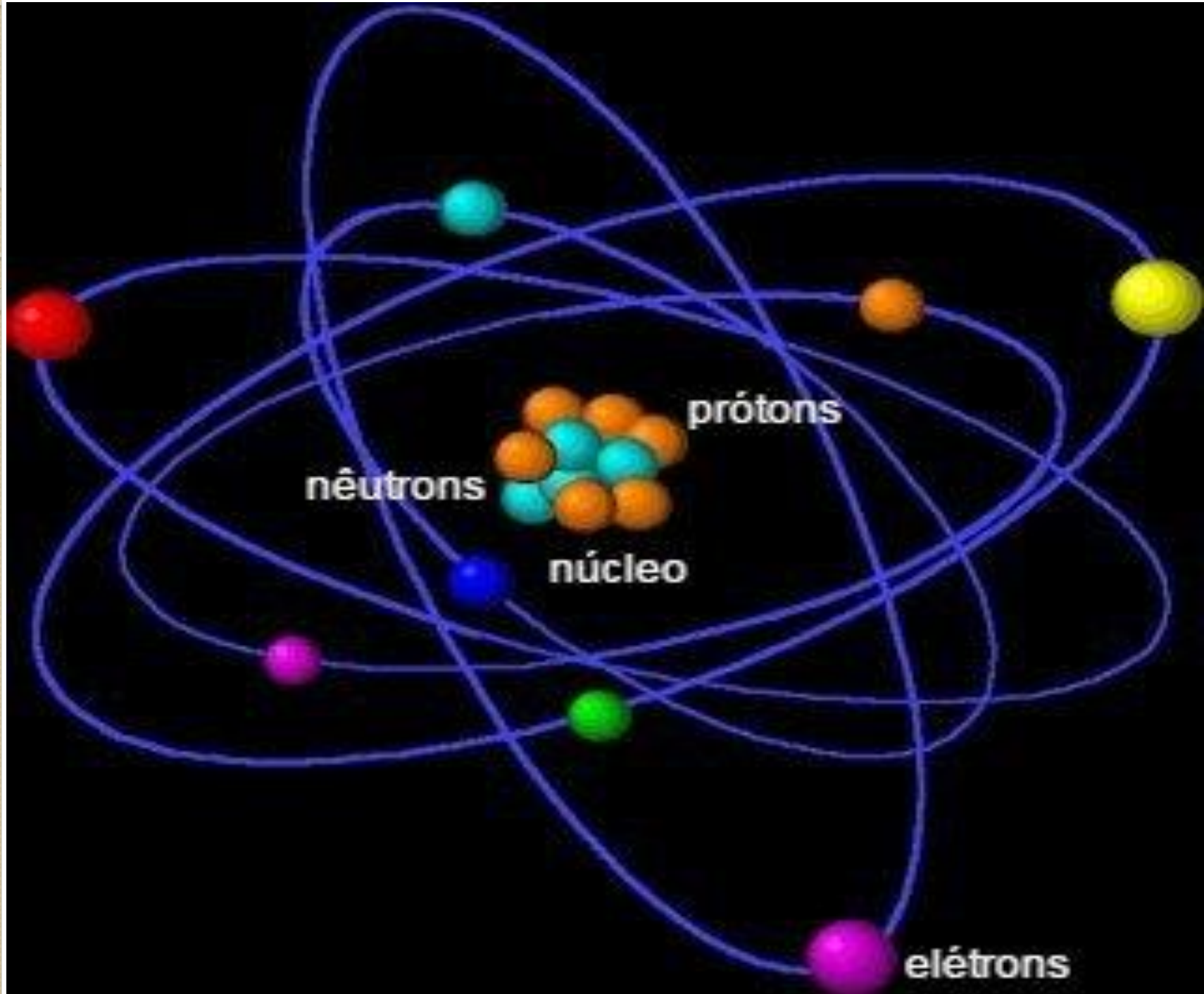
Essas partículas foram descobertas em 1932 por Chadwick, durante experiências com material radioativo. Ele as denominou **nêutrons**.

Os nêutrons estão localizados no núcleo e apresentam massa muito próxima à dos prótons, mas não têm carga elétrica.

O modelo atômico mais utilizado até hoje é o de Rutherford, com a inclusão dos nêutrons no núcleo.



**Núcleo formado por prótons e nêutrons com
elétrons girando na eletrosfera.**

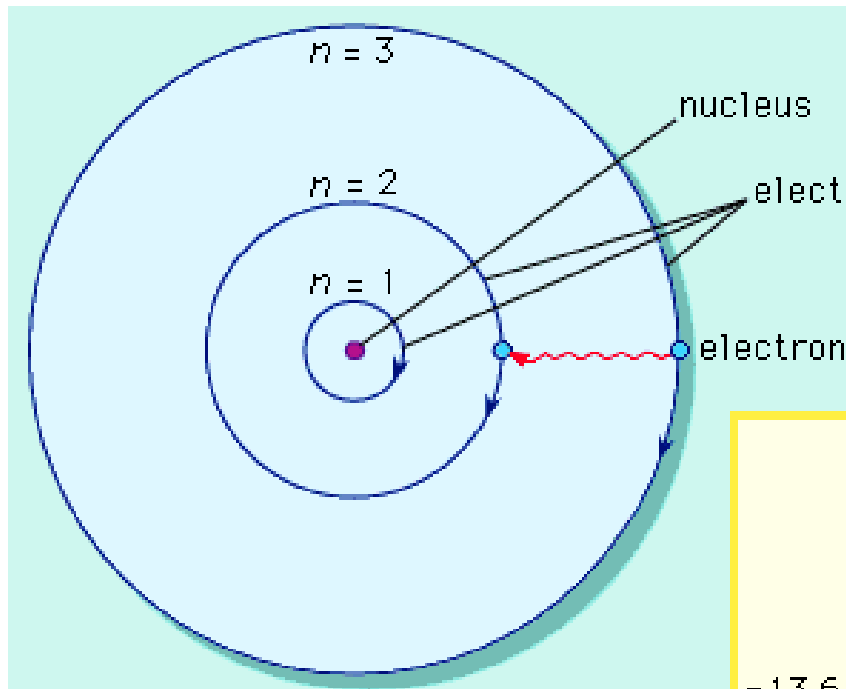


Modelo Atômico

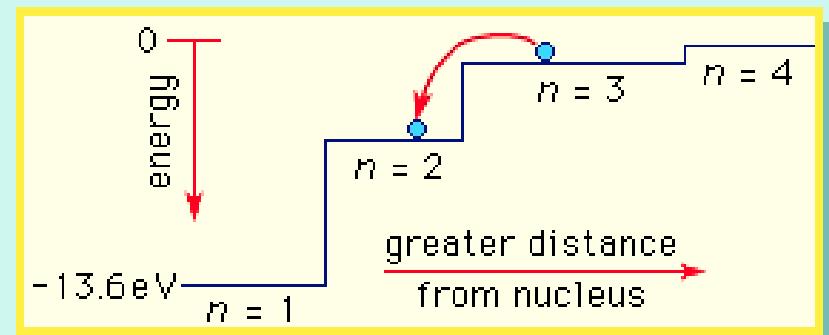
Modelo atômico de Bohr



Niels Bohr
(1885-1962)



©1998 Encyclopaedia Britannica, Inc.



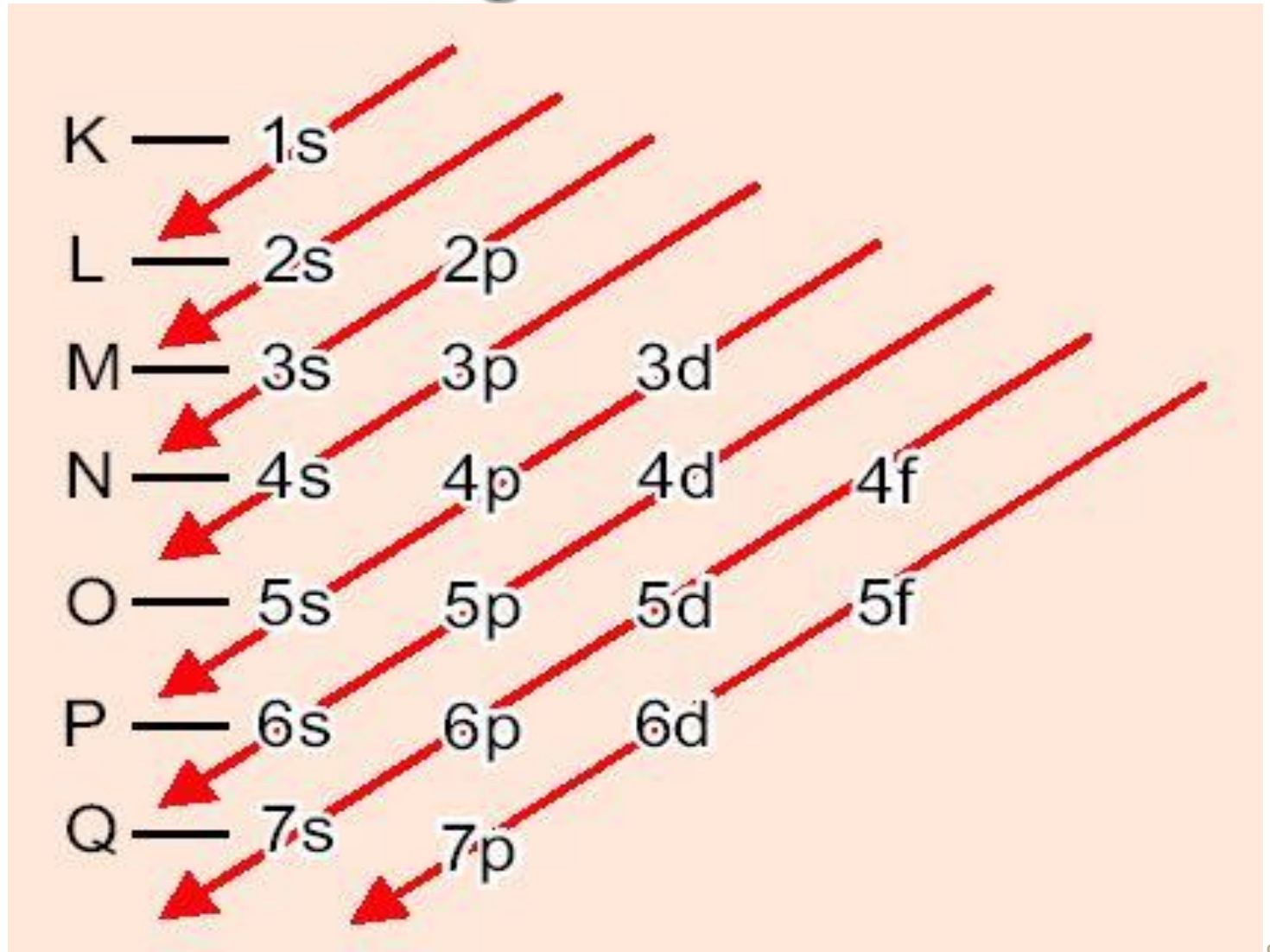
O **modelo de Bohr** representa uma tentativa inicial para **descrever** os **elétrons** nos **átomos**, em termos de **posição** (orbital) e de **energia** (saltos de níveis de energia).

Números Quânticos

Número de **estados eletrônicos** disponíveis em algumas **camadas** e **subcamadas** eletrônicas:

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

Diagrama de Energia ou Diagrama de Linus Pauling



Configurações Eletrônicas

- **Estado fundamental:** quando todos os **elétrons** ocupam as **menores energias possíveis**;
- **Elétrons de valência:** ocupam a **camada** preenchida **mais externa**. Esses elétrons participam da **ligação** entre os **átomos** para **formar** os **agregados atômicos** e **moleculares**;
- **Configurações eletrônicas estáveis:**

Camada eletrônica **mais externa** ou **de valência** estão **completamente preenchida**, como para os gases inertes ou gases nobres (He, Ar, Ne, Xe, etc.).

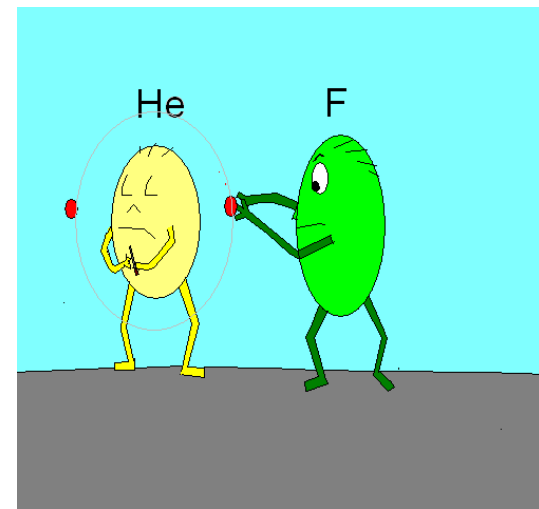


TABELA PERIÓDICA

- Os **elementos químicos** são **classificados** de acordo com a sua **configuração eletrônica**.
- **Posicionamento:** ordem crescente de **número atômico** (Z), em sete **fileiras horizontais** chamadas períodos;
- Cada **coluna** ou grupo possui estruturas semelhantes dos **elétrons de valência**, como **propriedades físicas** e **químicas**.

Maio

Maior “facilidade” em **ceder** elétrons

Maior “facilidade” em **ganhar** elétrons

IA 1 H 2.1																	0 2 He -
IIA 3 Li 1.0	4 Be 1.5											IIIA 5 B 2.0	IVA 6 C 2.5	VA 7 N 3.0	VIA 8 O 3.5	VIIA 9 F 4.0	
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB	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															

- **Elementos Eletropositivos:** tendem a **ceder** seus poucos **elétrons de valência** tornando-se cátions;
- **Elementos Eletronegativos:** tendem a **receber elétrons de valência** tornando-se ânions.

LIGAÇÕES ATÔMICAS EM MATERIAIS SÓLIDOS

- A **natureza das ligações** depende das **estruturas eletrônicas** dos **átomos constituintes**;
- Os elementos se ligam para formar os sólidos para atingir uma **configuração estável** da **camada de valência**;
- A **ligação química** é formada pela **interação dos elétrons de valência** através de um dos seguintes mecanismos:
 - **Ganho** de elétrons;
 - **Perda** de elétrons;
 - **Compartilhamento** de elétrons.

TIPOS DE LIGAÇÕES

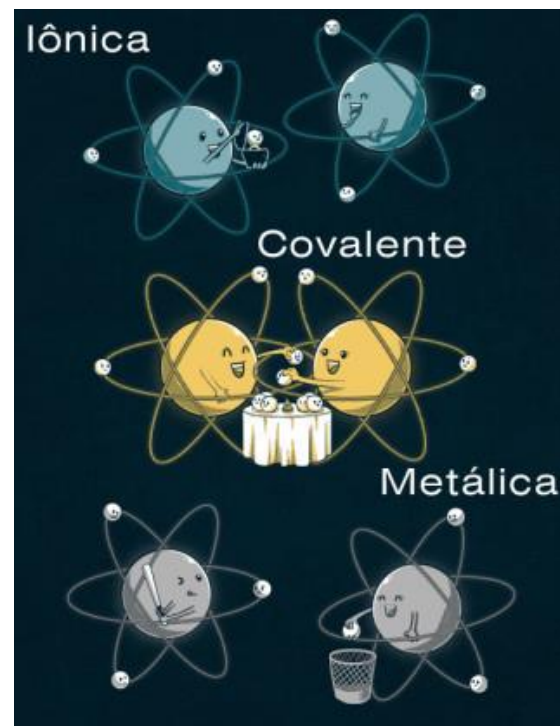
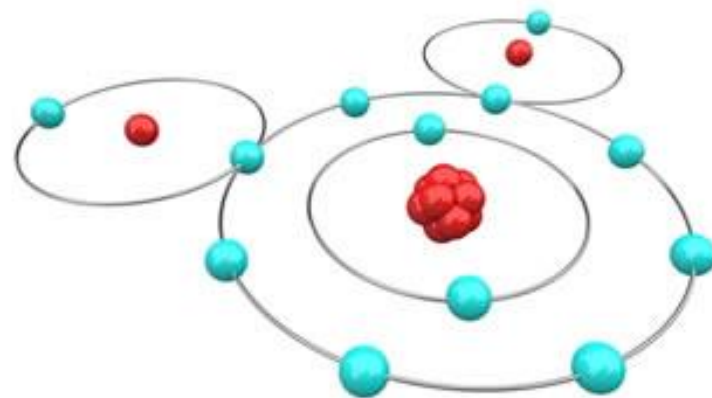
Ligações Primárias:

- Iônica
- Covalente
- Metálica

Ligações Secundárias:

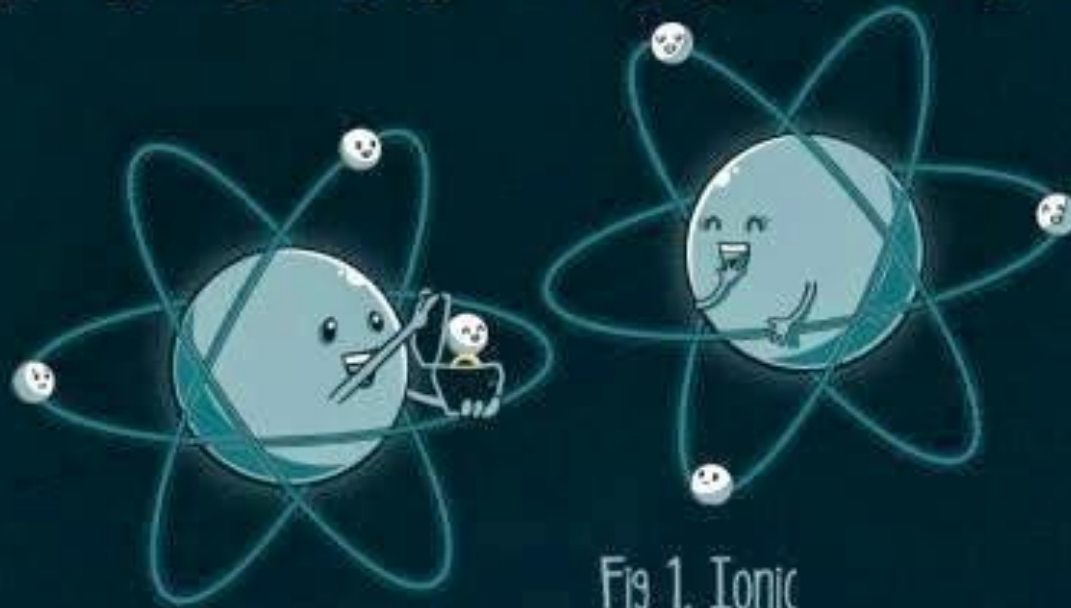
- Van der Waals

O tipo de ligação depende das estruturas eletrônicas dos átomos constituintes do material.



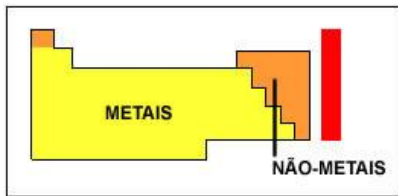
ligações iônicas

Aceita esse elétron como
prova do meu amor?

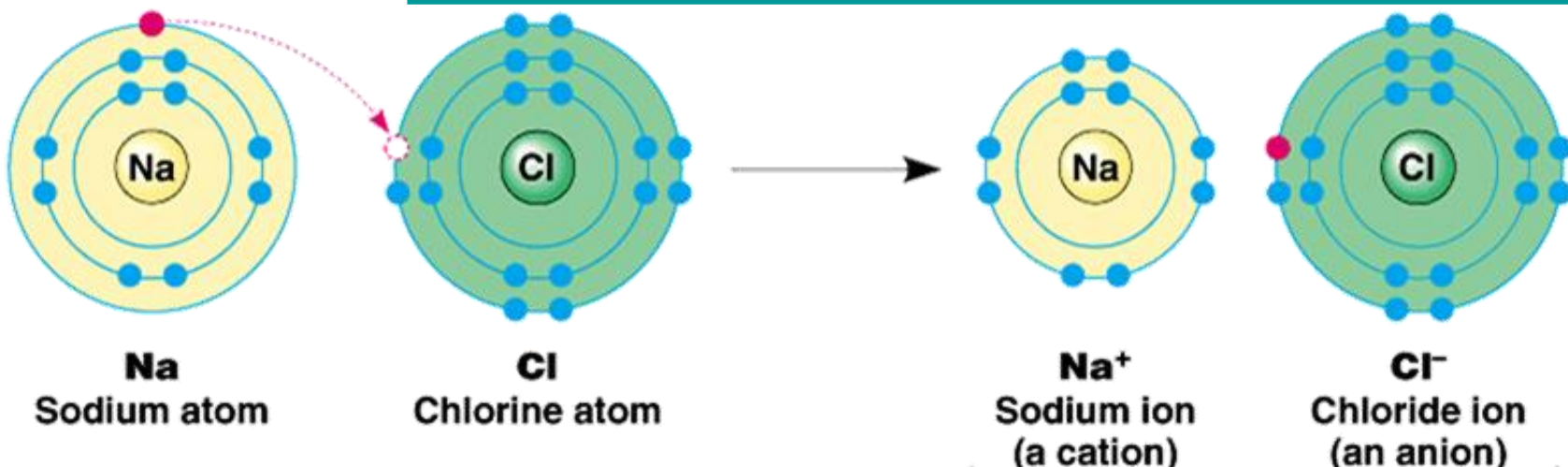


LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

lônica



- Compostos com elementos **metálicos** e **não-metálicos**;
- Envolve a **transferência** de **elétrons de valência** de um átomo para outro, **produzindo íons**;
- A ligação resulta da **atração eletrostática** entre dois **íons de cargas opostas**.



O sódio (Na) transfere um elétron para o cloro (Cl) formando íons Na⁺ e Cl⁻ com estruturas eletrônicas estáveis.

LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

lônica

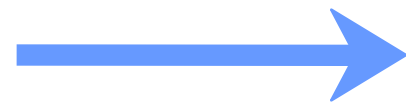
Ocorre predominantemente nas cerâmicas.

NaCl
MgO
CaF₂
CsCl

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII	VIII	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	0
H 2.1	Li 1.0	Be 1.5								B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	He -
Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.8	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1
Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.1-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac-No 1.1-1.7													



Cede elétrons

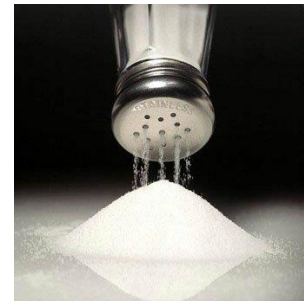
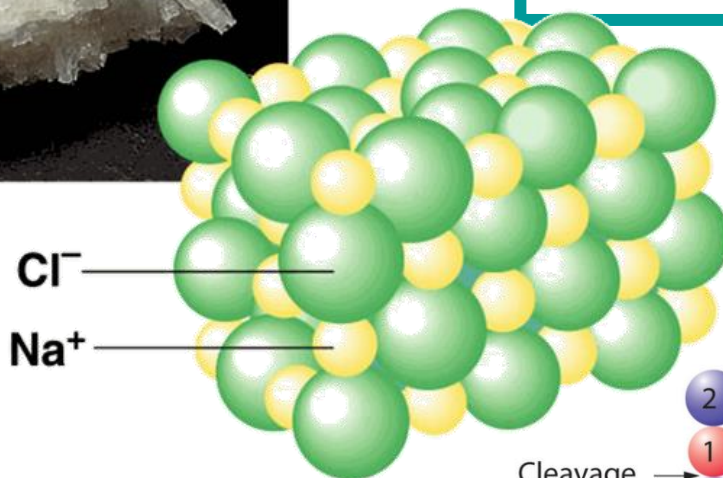


Recebe elétrons

LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

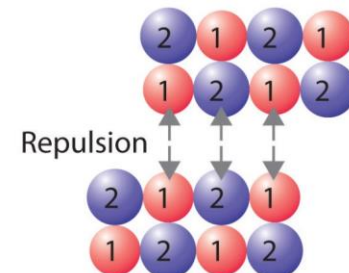
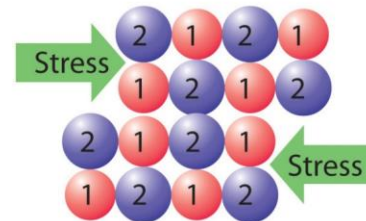
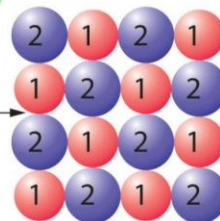
Iônica

- As **energias** de **ligação** são **altas** (**600-1500 KJ/mol**) por isso o **ponto de fusão** é geralmente **alto**;
- Grande diferença de eletronegatividade entre os elementos: Ex: Na=0,9 e Cl=3,0;
- Em geral são materiais **duros** e **frágeis**, **isolantes elétricos** e **térmicos**.



Íons de mesma carga se repelem

Cleavage plane



LIGAÇÃO IÔNICA

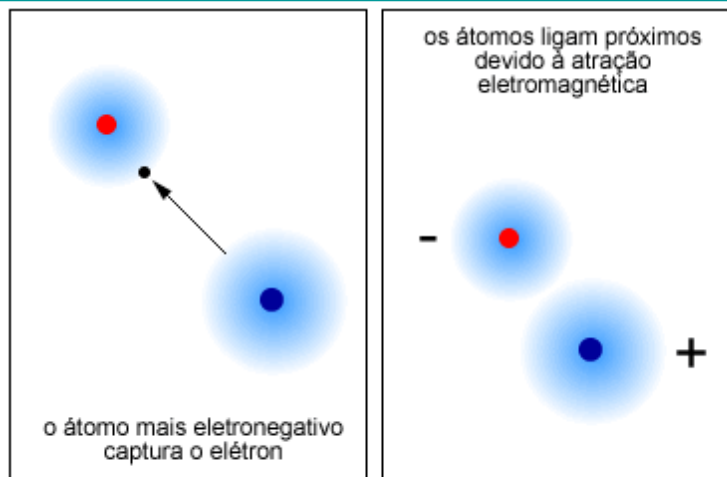
- As **forças atrativas** entre os átomos é **não-direcional** → são **iguais** em **todas as direções**;
- A magnitude da força obedece a **Lei de Coulomb**, ou seja, os íons positivos e negativos se atraem entre si;
- Os átomos num material iônico arranjam-se de forma que **todos** os **íons positivos** têm como **vizinhos** mais próximo **íons negativos**.

Força Elétrica (atração ou repulsão)

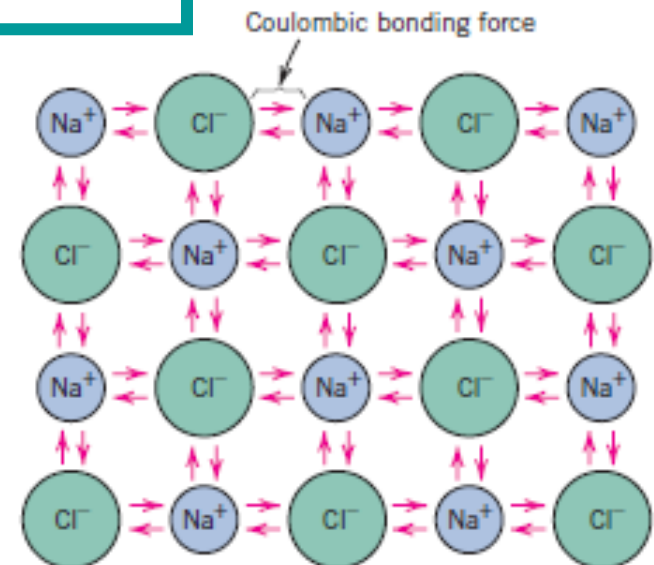


Charles Coulomb

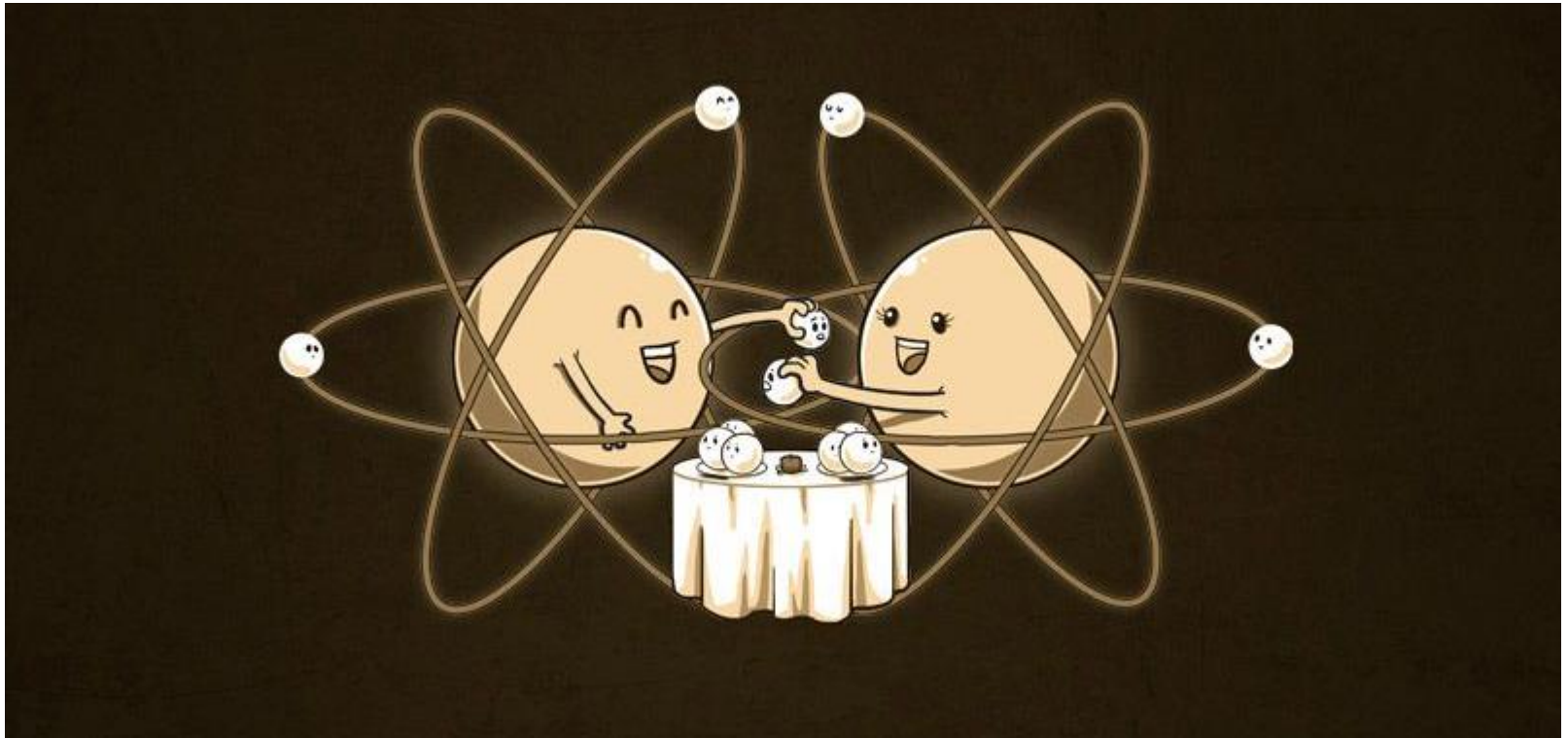
$$F = K \frac{|Q| \cdot |q|}{r^2}$$



LIGAÇÃO IÔNICA

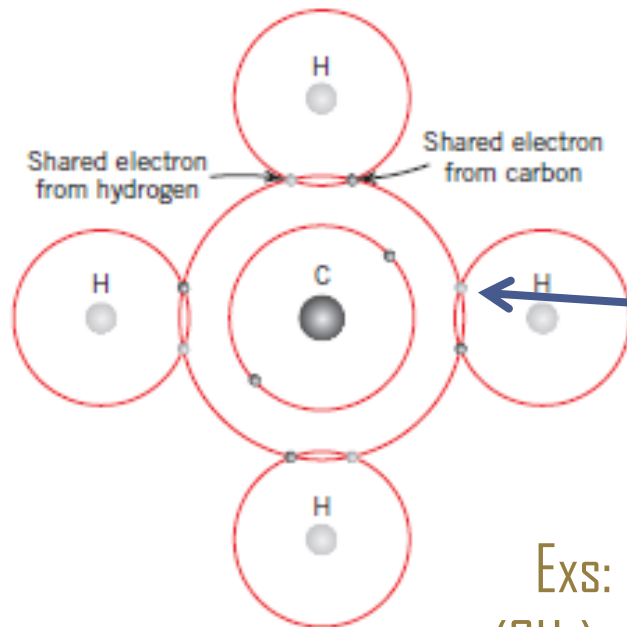


Ligações Covalentes

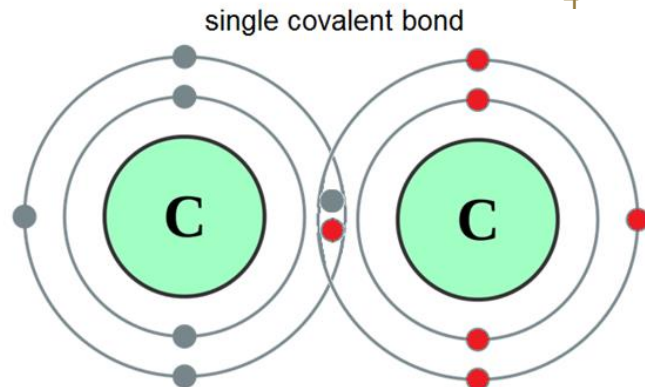


LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

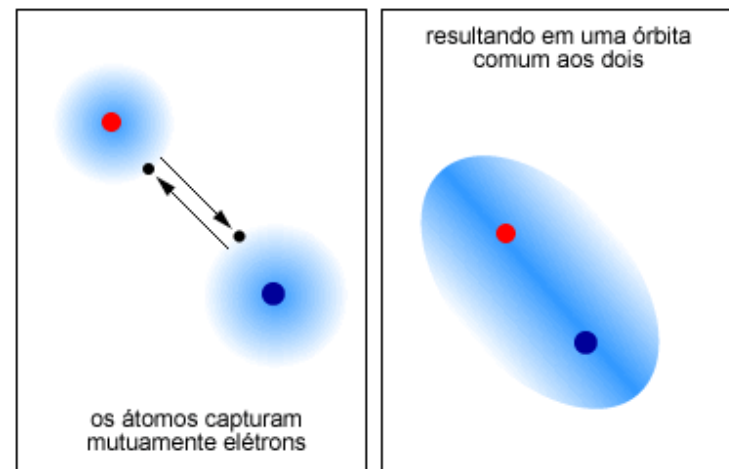
Covalente



Exs: Metano
(CH₄) e Carbono.



- Os **elétrons de valência** são **compartilhados** entre **átomos** adjacentes, e são considerados **pertencentes** a **ambos os átomos**;
- O átomo de **hidrogênio** **compartilha** com **um elétron**, e o **carbono** compartilha **4 elétrons**, um para **cada átomo** de **H**.



LIGAÇÃO COVALENTE

LIGAÇÃO COVALENTE

Esse tipo de ligação é comum nas **cerâmicas**, nos **polímeros** e **semicondutores**.

polímero

s

C(diamond)

SiC

GaAs

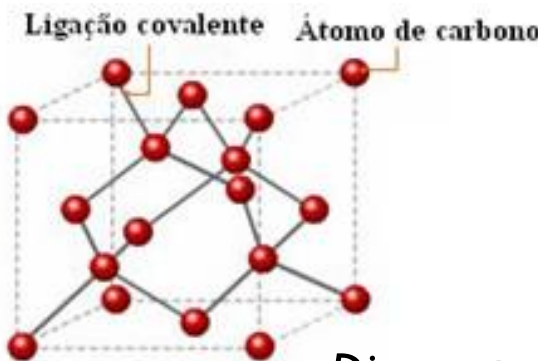
IA																		0	
H 2.1																		He -	
Li 1.0	Be 1.5																		
Na 0.9	Mg 1.2																		
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII			IB	IIB	IIIA	IVA	VIA	VIIA				
K 0.8	Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.8	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8			
Rb 0.8	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			
Cs 0.7	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			
Fr 0.7	Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															118 Rn -		

LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

Covalente

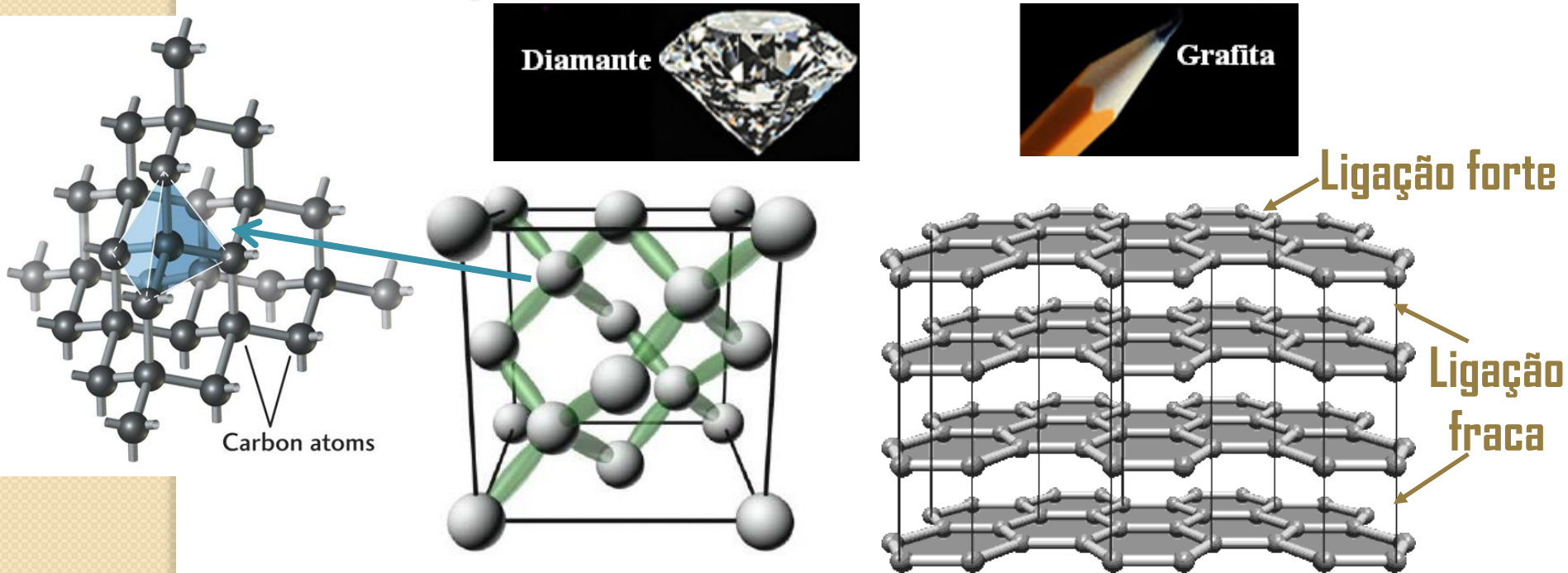


- As ligações covalentes podem ser **muito fortes**, como no caso do **diamante** (**713 KJ/mol** e PF alto **>3550°C**) ou moderada como no **silício** (**450 KJ/mol** e que se funde a **1410°C**);
- **Menor diferença** de **eletronegatividade** entre os elementos do que o observado em ligações iônicas;
- São **maus condutores** de **eletricidade** (com exceção do grafite, que conduz bem eletricidade no estado sólido).



Diamante - alta dureza e baixa condutividade elétrica.

LIGAÇÃO COVALENTE

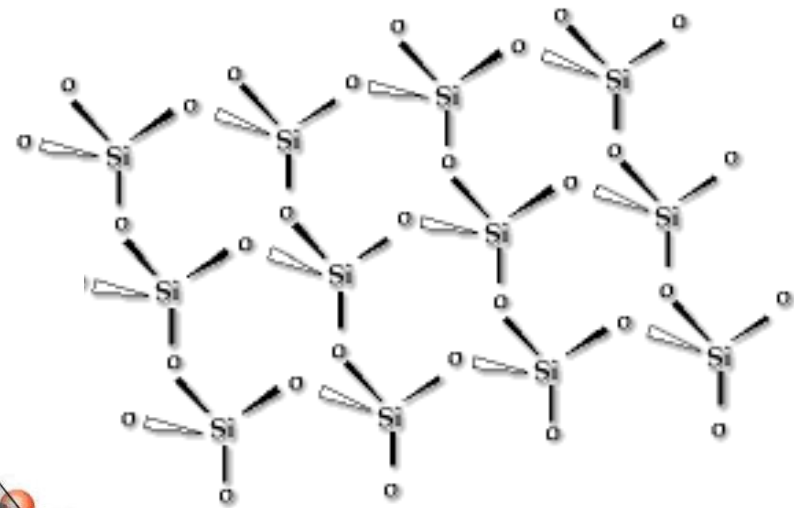
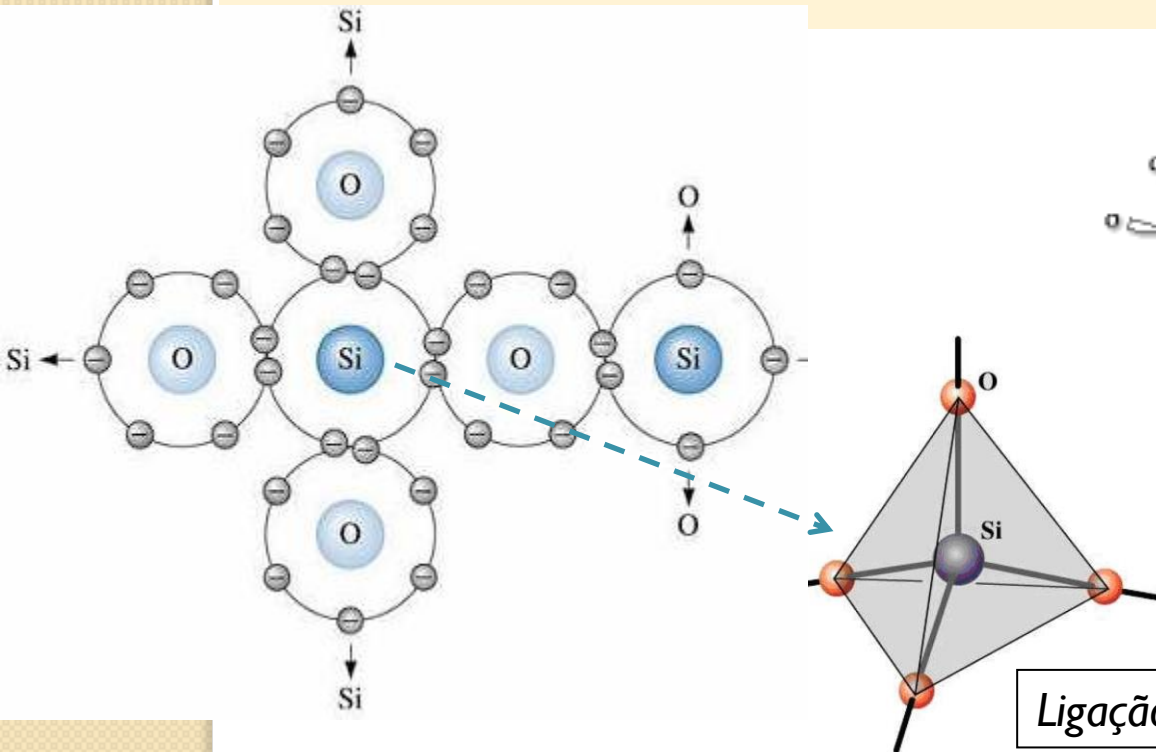
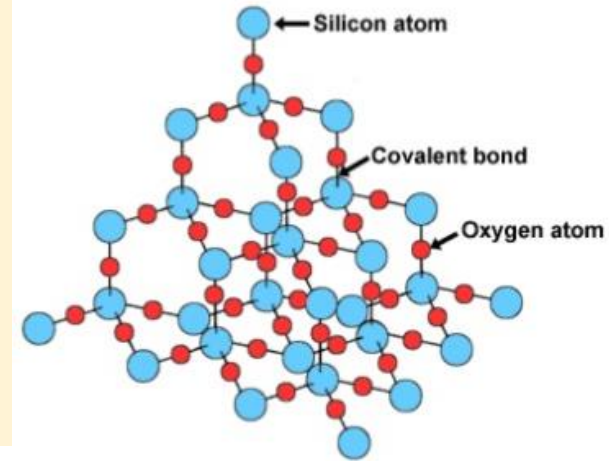


Os átomos de carbono na **grafita** também são **unidos fortemente** através de ligações covalentes, mas **só dentro de um arranjo hexagonal**, diferentemente da rede 3D das ligações do diamante. Estes **planos de átomos de carbono** simplesmente **empilham-se** uns sobre os outros, sendo as **forças** de união entre os planos **muito fracas**. Os planos de átomos de carbono podem então deslizar facilmente uns sobre os outros. **Por isto a grafita é importante lubrificante!**

LIGAÇÃO COVALENTE

- A **ligação** é **direcional** → ocorre entre átomos específicos e pode existir somente na **direção** entre um **átomo** e um **outro** que **participa no compartilhamento de elétrons**;
- **Ângulo de ligação bem definido.**

Silicon Dioxide

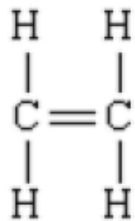


Ligação covalente na sílica (SiO₂)

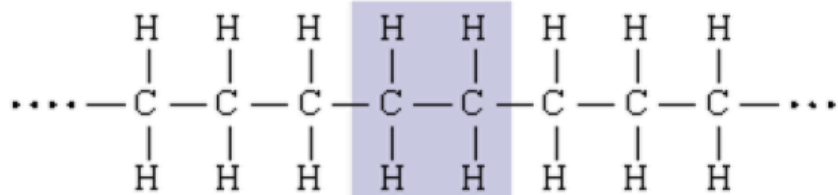
LIGAÇÃO COVALENTE

Exemplo em Polímeros:

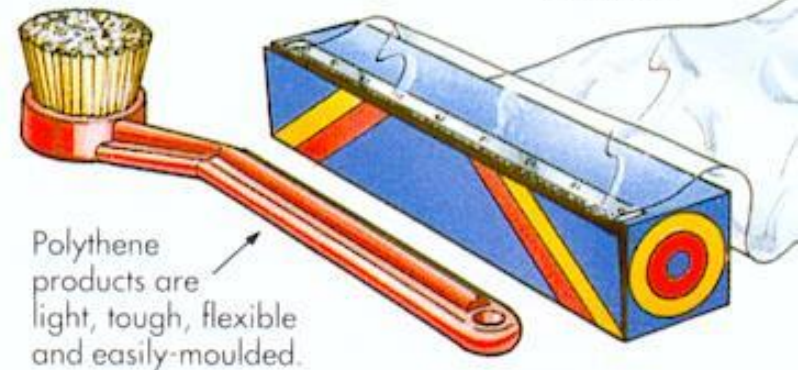
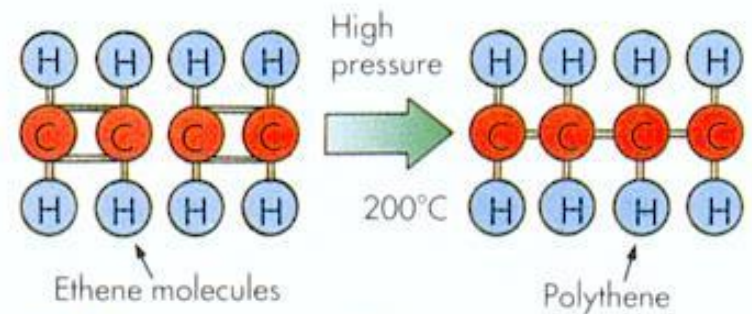
- Na molécula de etileno (C_2H_4), os **carbonos compartilham dois pares de elétrons**;
- A ligação covalente dupla pode se romper em duas simples para formar uma longa molécula de polietileno.



Molécula de etileno



Molécula de polietileno



LIGAÇÃO IÔNICA E COVALENTE

- Poucos compostos exibem **ligação puramente iônica e covalente**;
- A maioria das ligações iônicas tem um certo **grau** de **ligação covalente** e vice-versa (transferem e compartilham elétrons);

O **grau** da **ligação** depende da **eletronegatividade** dos **átomos constituintes**:

- Quanto **maior a diferença** nas eletronegatividades **mais iônica** é a ligação;
- Quanto **menor a diferença** nas eletronegatividades **mais covalente** é a ligação.

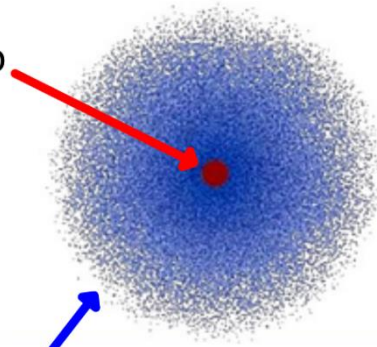
LIGAÇÃO IÔNICA E COVALENTE

Percentuais de Caráter Iônico e Covalente de alguns Materiais:

<i>Material</i>	<i>Percentual de Caráter Iônico (%)</i>	<i>Material</i>	<i>Percentual de Caráter Covalente (%)</i>
CaF ₂	89	HfC	70
MgO	73	TiC	78
NaCl	67	WC	85
Al ₂ O ₃	63	B ₄ C	94
SiO ₂	51	SiC	88
Si ₃ N ₄	30	C (diamante)	100
ZnS	18		
SiC	12		

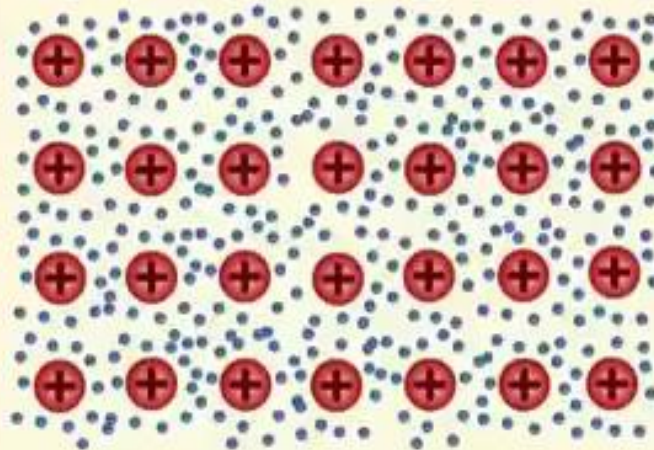
Núcleo

Nuvem eletrônica



Σωκρατικά

Por que metais são maleáveis?

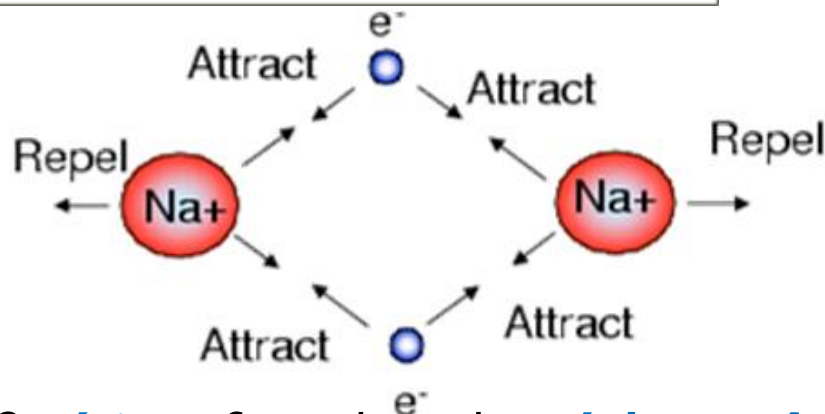
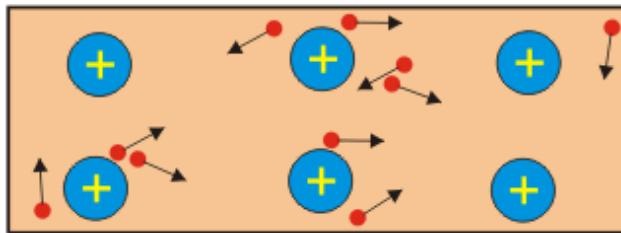


SOCRATICA

LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

Metálica

Condutor sólido - metal



O **cátions** formados pelos **núcleos atômicos** são **unidos** por uma **nuvem de elétrons livres**. Estes elétrons atraem os **núcleos positivos** que se **repelem mutuamente**.

- É encontrada nos **metais** e suas ligas. Apresentam no máximo **3 elétrons de valência**;
- Os **elétrons de valência** não estão ligados a nenhum átomo em particular e assim eles estão **livres** para se **movimentar**.

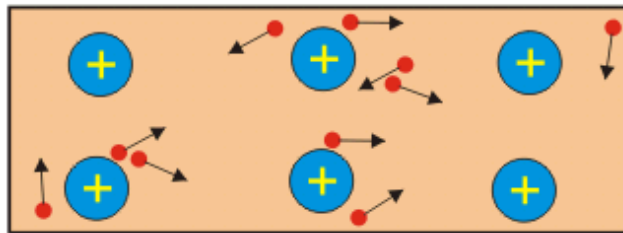


LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

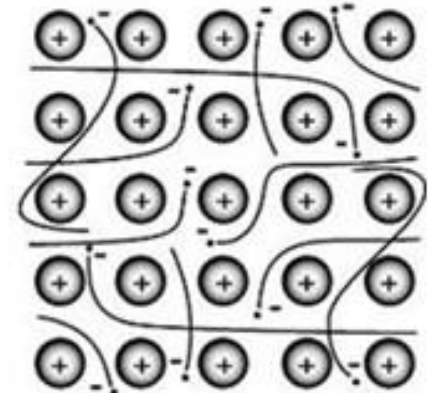
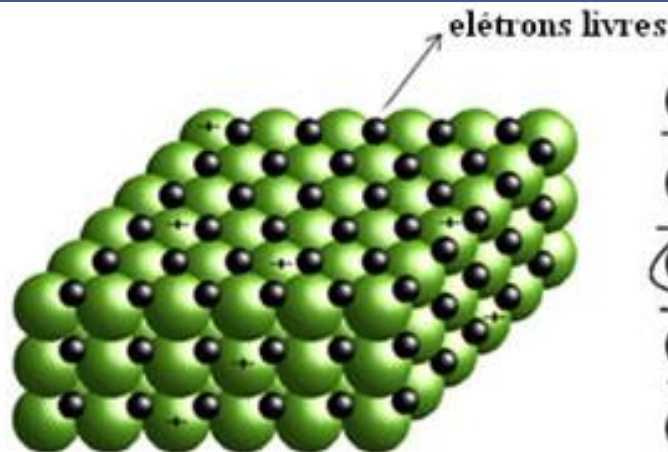
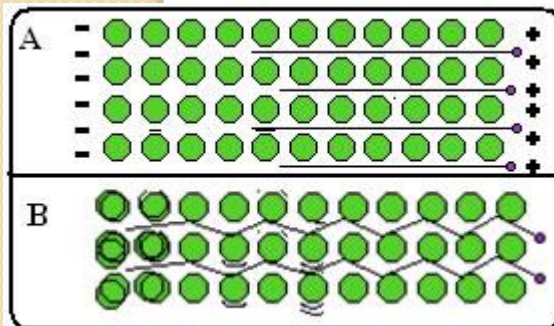
Metálica

- Os elétrons livres, formam uma **nuvem eletrônica** ou “**mar de elétrons**”;
- A ligação metálica é **não-direcional**, e como consequência dos elétrons livres os metais apresentam **boa condutividade térmica e elétrica**.

Condutor sólido - metal



<< íon positivo << elétron livre



A: os **elétrons livres** podem se **mover rapidamente** em resposta à campos elétricos, portanto, os metais são **bons condutores de eletricidade**.

B: os **elétrons livres** podem **transmitir energia cinética** rápida, daí os metais são **bons condutores de calor**.

LIGAÇÕES METÁLICAS

Metálica



tungstênio

- A ligação metálica possui uma ampla faixa de **energias de ligação** (pode ser **fraca** ou **forte**) que vão desde o mercúrio (**Hg**), com **68 kJ/mol** e ponto de fusão de **-39°C**, até o tungstênio (**W**) com **849 kJ/mol** e ponto de fusão de **3410°C**.

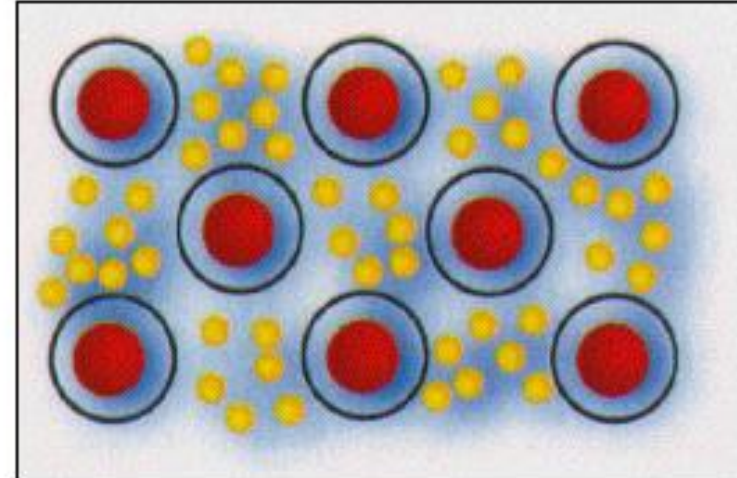
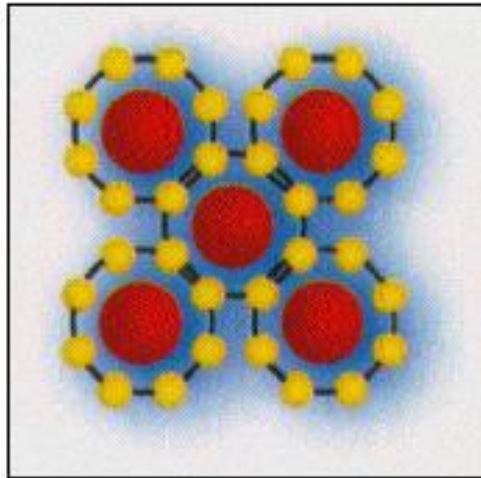
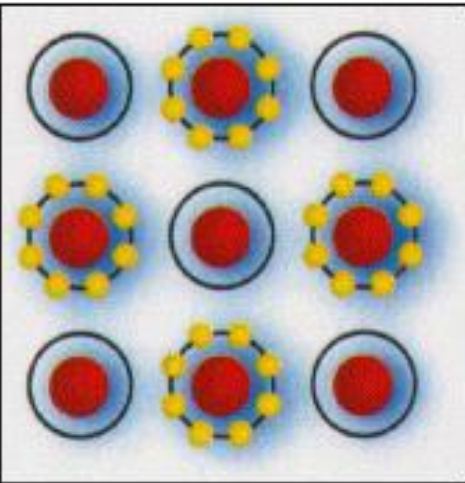


LIGAÇÕES PRIMÁRIAS

* Iônica

* Covalente

* Metálica



- binary compounds between group I + VII : NaCl
- II + VI : MgO

- semi-conductors GaAs, InSb, SiC

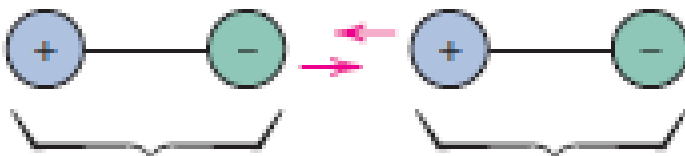
- molecules CH_4 ...
- elements C, Si, Ge

- intermetallic bonding

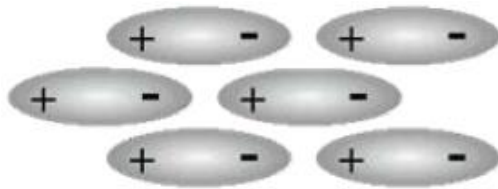
- elemental metals

LIGAÇÕES SECUNDÁRIAS

Van der Waals

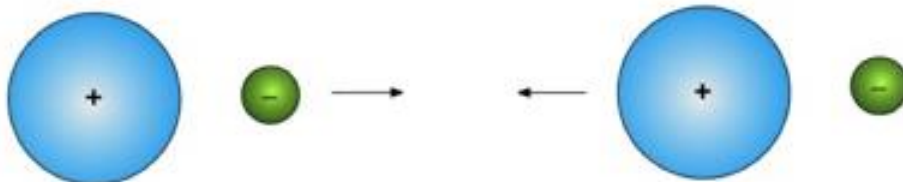


Atomic or molecular dipoles



Força de Van der Waals

Dipolo #1



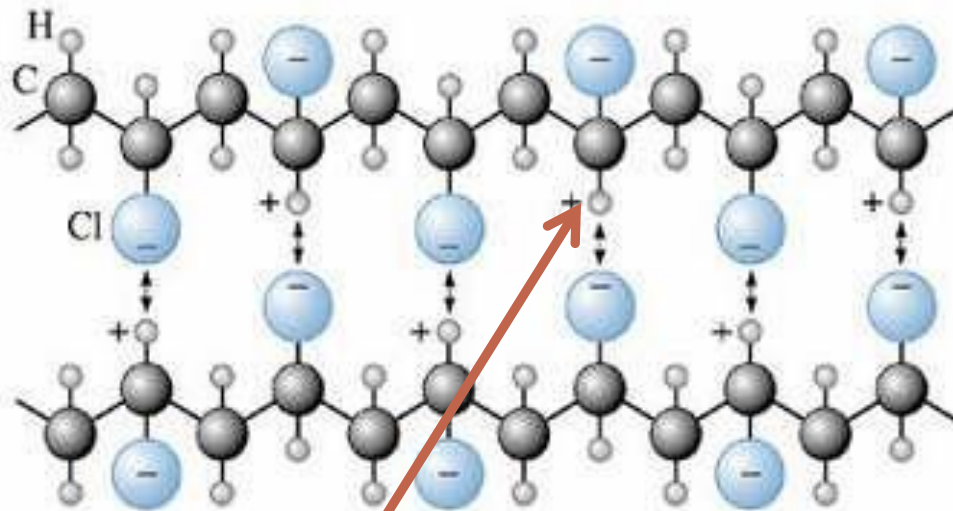
Força de atração entre dipolos.

- São **ligações secundárias** ou físicas (fracas);
- A **forças de ligação** surgem a partir de **dipolos** (par de **cargas elétricas** com **sinais opostos**, que se encontram **separadas** por uma **distância**);
- Forças atrativas, porém **não existem elétrons transferidos**;
- A ligação de Van der Waals é **não-direcional** com energias de ligação da ordem de **10kJ/mol**;

LIGAÇÕES SECUNDÁRIAS

Van der Waals

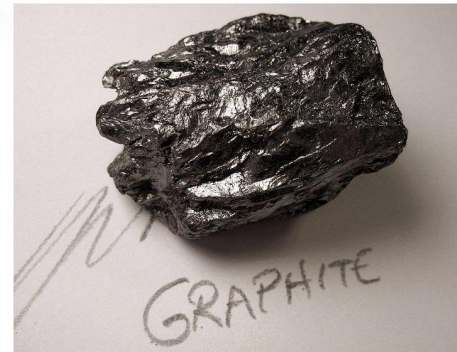
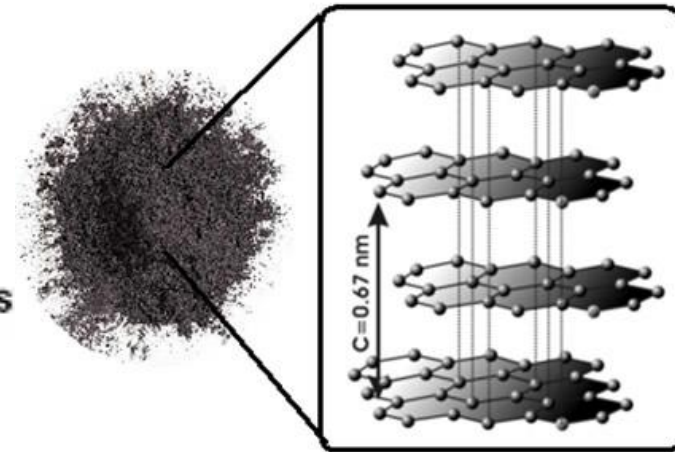
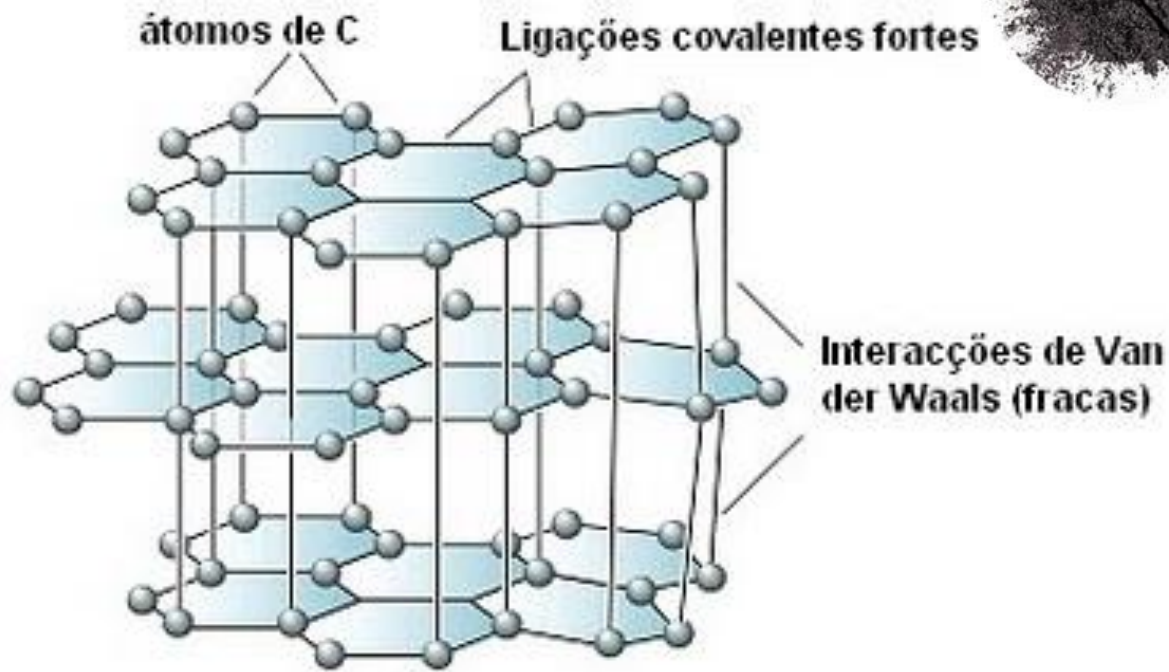
- Acontece entre átomos de H e C e moléculas polares;
- Os **polímeros** em geral, têm sua estrutura formada por longas **moléculas covalentes** unidas por meio de **ligações dipolares fracas**.



Ligações de **Van de Waals** no PVC (entre duas moléculas distintas).

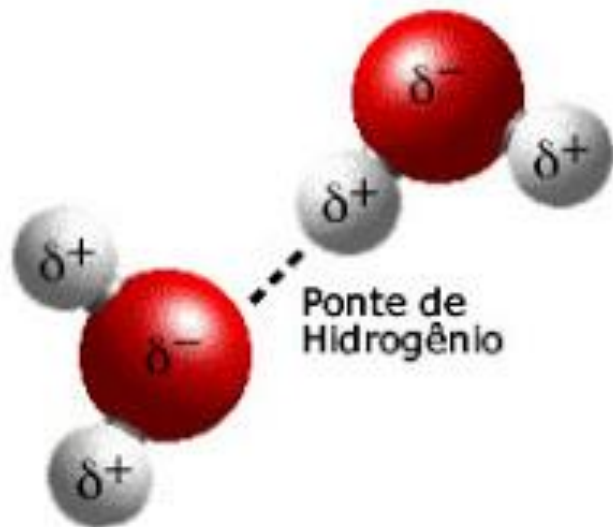
LIGAÇÕES SECUNDÁRIAS

Van der Waals



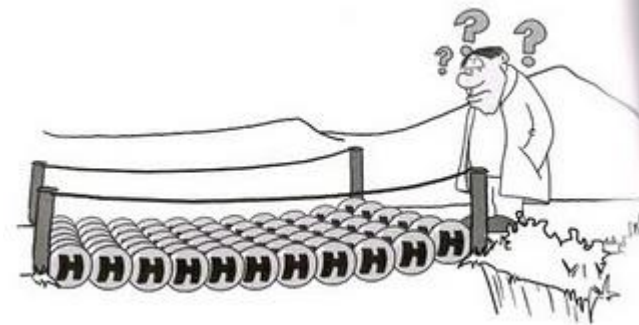
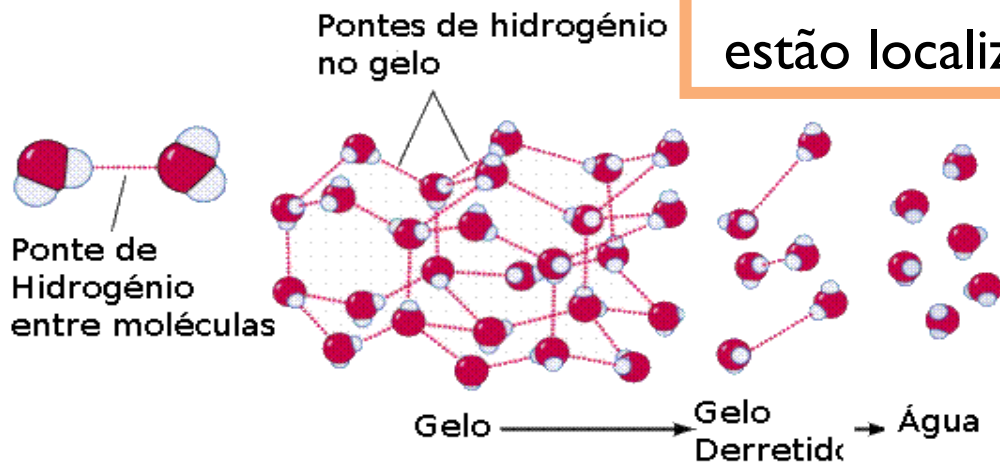
No **grafite**, as **ligações de Van der Waals** estão presentes entre os planos hexagonais de átomos de carbono. Como resultado, uma camada desliza sobre a outra, permitindo uma espécie de deslizamento ou deslocamento dos planos.

LIGAÇÃO SECUNDÁRIA: MOLÉCULA DE ÁGUA

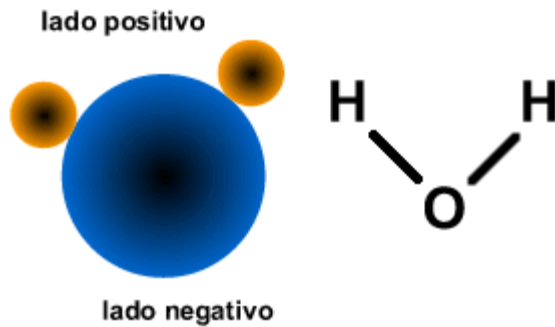


- O tipo mais forte de ligação secundária é a ligação de **hidrogênio** (energias de ligação da ordem de **51 kJ/mol**);

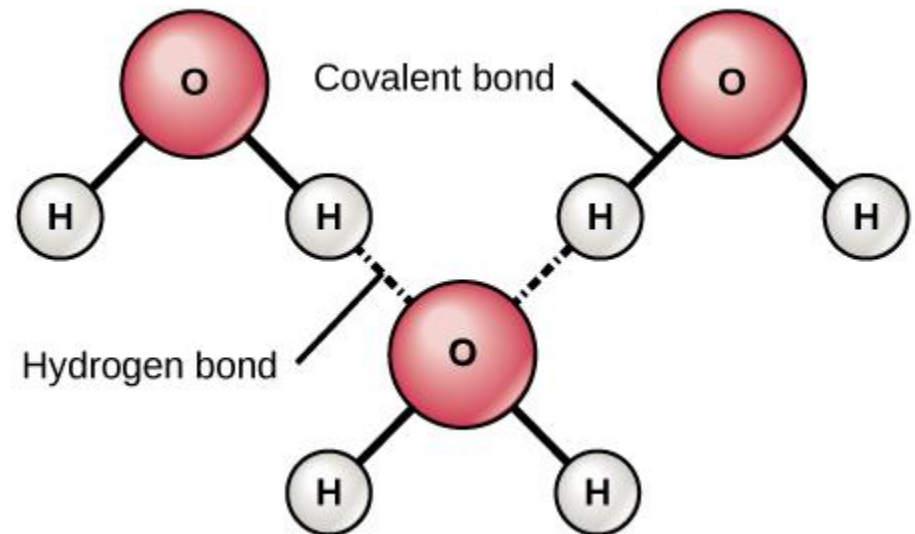
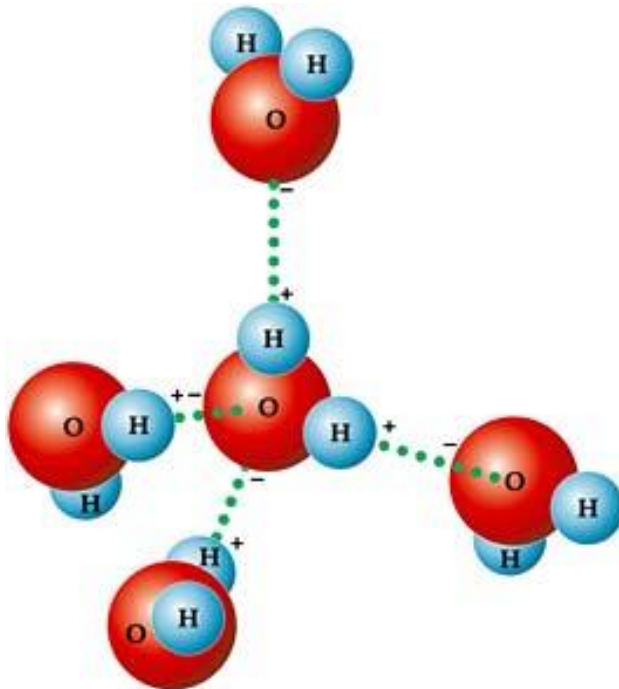
- A molécula de água apresenta **formação de dipolos**: **extremidade positiva** próxima aos **átomos de H** e uma **extremidade negativa** onde os **elétrons** de valência do **oxigênio** estão localizados.



LIGAÇÃO SECUNDÁRIA: MOLÉCULA DE ÁGUA



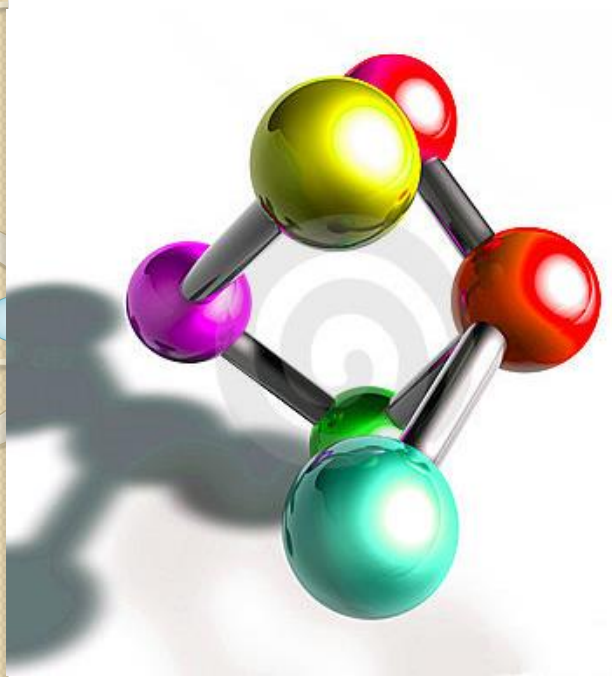
- *Forças de Van der Waals* entre as moléculas fazem com que as mesmas tendam a **alinhar os pólos negativos** com **positivos**.



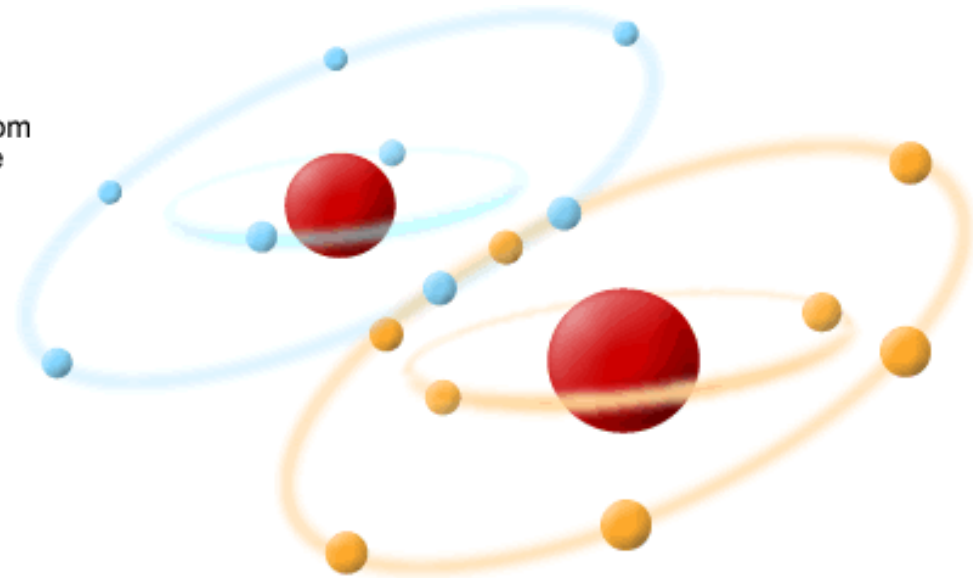
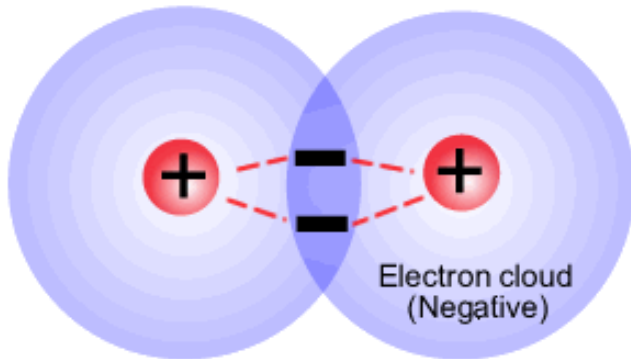
Energias de Ligação e Temperaturas de Fusão para Várias Substâncias

Tipo de ligação	substância	Energia de ligação		Temperatura de fusão (°C)
		KJ/mol (kcal/mol)	EV/átomo, íon, molécula	
Iônica	NaCl	640 (153)	3,3	801
	MgO	1000 (239)	5,2	2800
	Si	450 (108)	4,7	1410
	C (diamante)	713 (170)	7,4	>3550
	Hg	68 (16)	0,7	- 39
Metálica	Al	324 (77)	3,4	660
	Fe	406 (97)	4,2	1538
	W	849 (203)	8,8	3410
van der Waals	Ar	7,7 (1,8)	0,08	- 189
	Cl ₂	31 (7,4)	0,32	- 101
Hidrogênio	NH ₃	35 (8,4)	0,36	- 78
	H ₂ O	51 (12,2)	0,52	0

FORÇAS E ENERGIAS DE LIGAÇÃO



The electrons experience a force of attraction from both nuclei. This negative - positive - negative attraction holds the two particles together



FORÇA E ENERGIA DE LIGAÇÃO

- Muitas **propriedades físicas dos materiais** está baseada no conhecimento das **forças interatômicas** que unem os **átomos entre si**;
- Considerando-se **dois átomos isolados** que se aproximam, cada um exerce uma **força sobre o outro**:

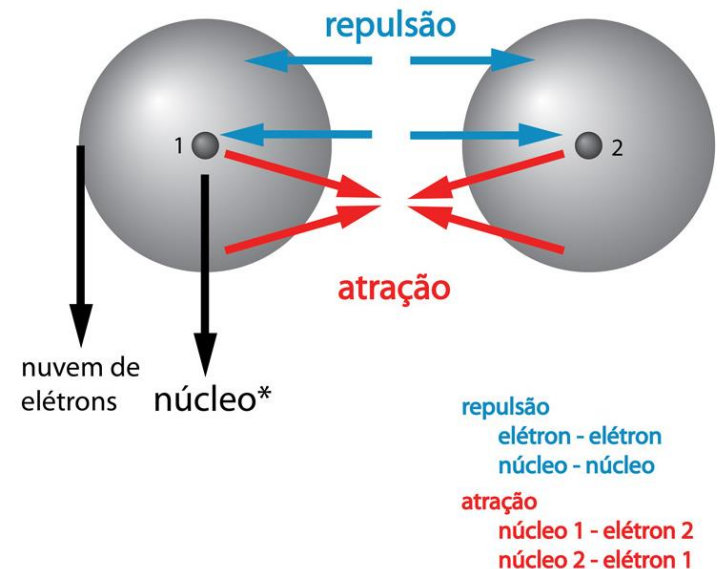
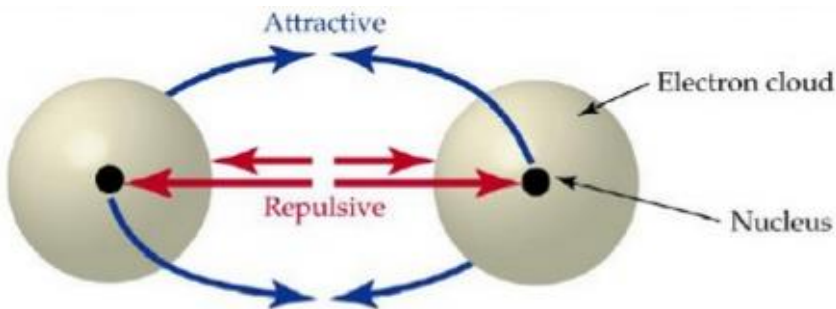
$$F_T = F_A + F_R$$

Onde:

$F_A \equiv$ força de atração;

$F_R \equiv$ força de repulsão;

$F_T \equiv$ força resultante.



FORÇA E ENERGIA DE LIGAÇÃO

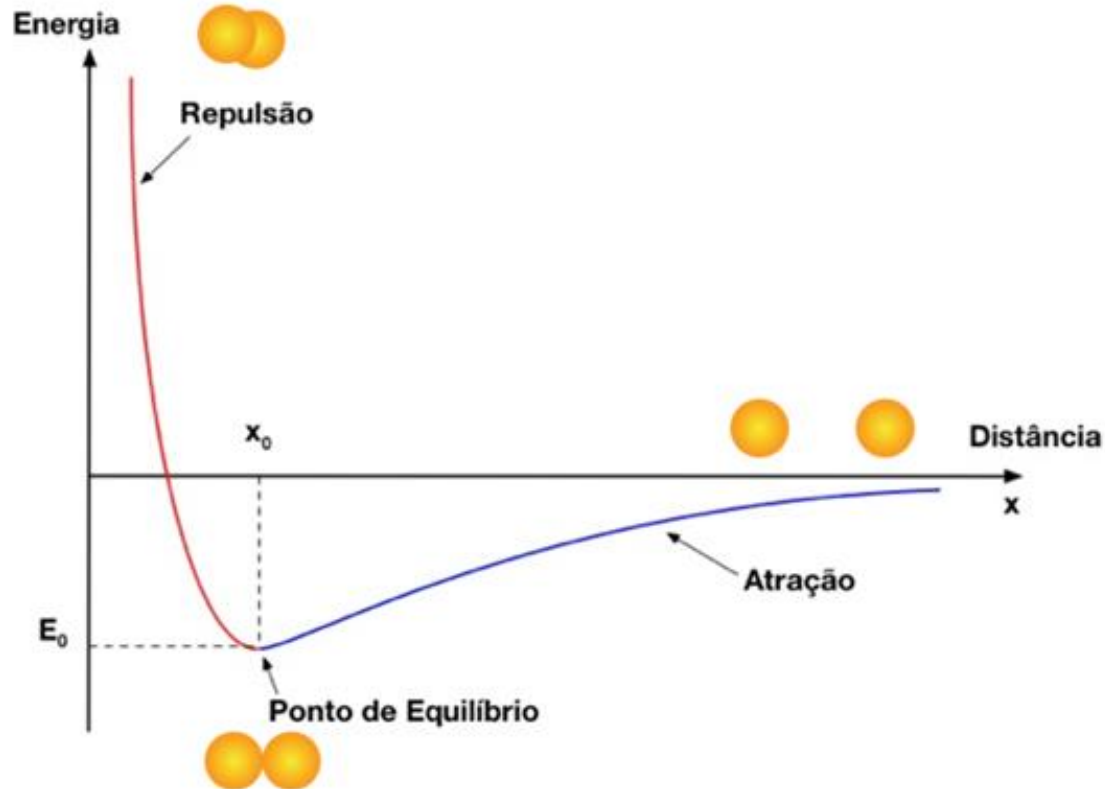
- A **distância de equilíbrio** (r_0) entre os átomos ocorre em função do **balanço** entre as **forças atrativas** e **repulsivas** (se igualam);
- **Forças de atração**: resulta da **ligação existente** e é responsável pela agregação atômica;
- **Forças de repulsão** atuam devido a **sobreposição** das **camadas mais externas**;



- A **magnitude** de cada uma das **forças** resulta na separação ou **distância interatômica**.

FORÇA E ENERGIA DE LIGAÇÃO

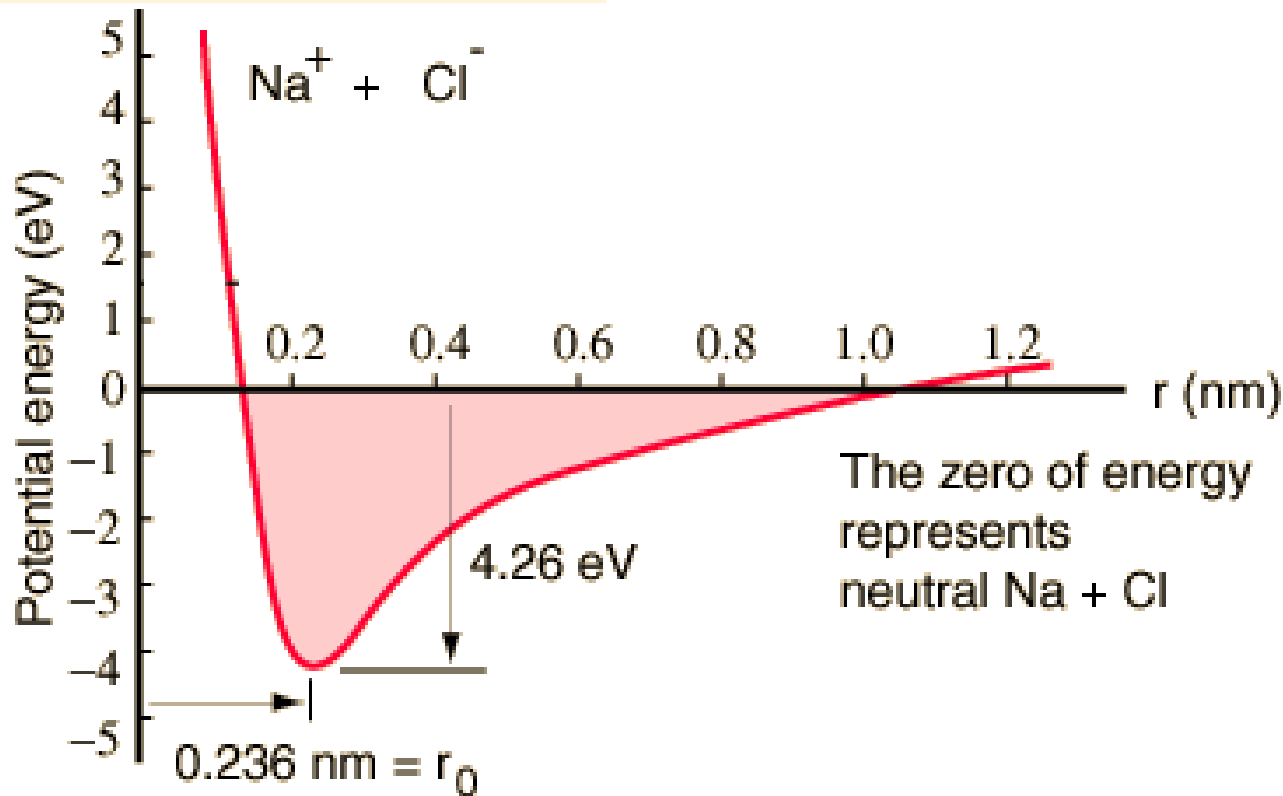
- Em termos de **energia**, a **distância de equilíbrio** é conseguida quando a **energia potencial** do par de átomos **atinge um mínimo** ou **nenhuma força está atuando**.



$E_0 \rightarrow$ Energia necessária para separar dois átomos.

FORÇA E ENERGIA DE LIGAÇÃO

- *Ligação iônica: NaCl*



A curva de **energia potencial** do **NaCl** mostra que há uma **distância mínima de separação** de **0,236 nm** para uma **energia** de **4,26 eV**.

FORÇA E ENERGIA DE LIGAÇÃO

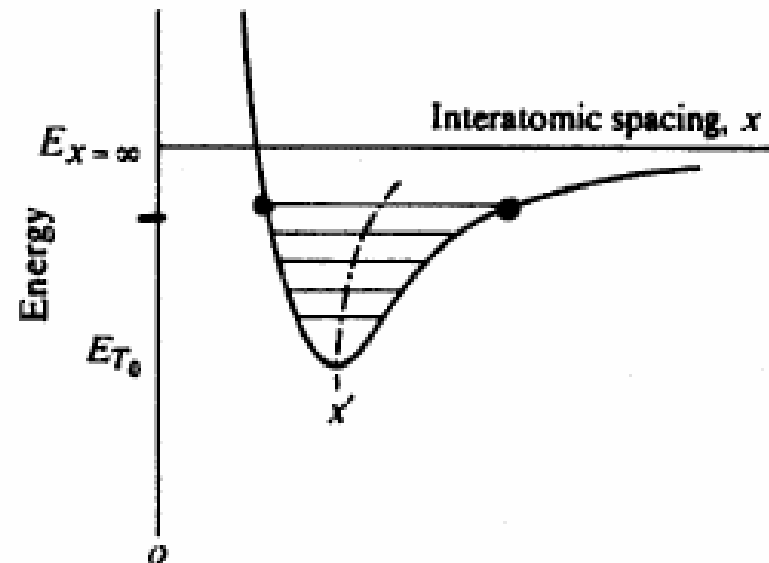
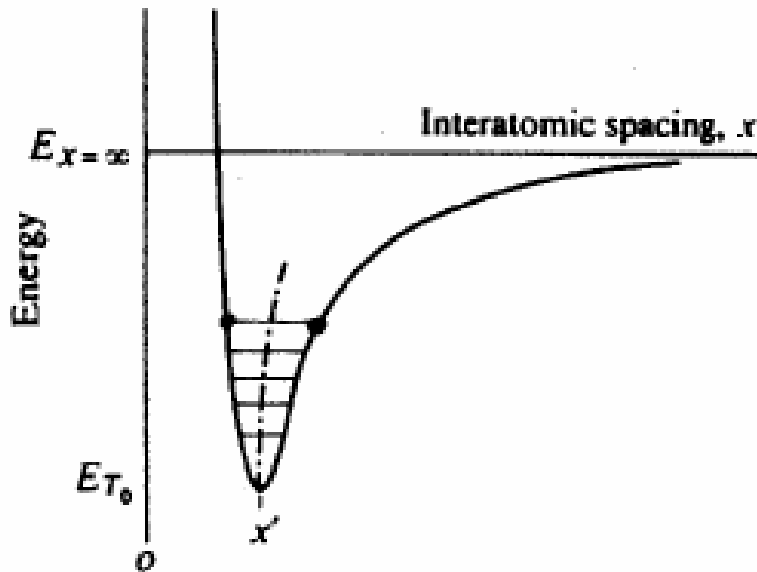
- A **magnitude** dessa energia de ligação e a forma da curva da energia em função da **distância interatômica** **variam** de **material para material**; ambas dependem do tipo de ligação e **definem** algumas **propriedades dos materiais**.

Exemplos:

- **Temperatura de fusão;**
- **Módulo de elasticidade;**
- **Coeficiente de expansão térmica.**

Relação entre Propriedades Físicas e Força e Energia de Ligação

Pontos de Fusão e Ebulição



Energia e dilatação: (a) material com ligações atômicas fortes (b) material com ligações fracas.

- Materiais que apresentam **grandes energias de ligação** (ou seja, poços de potencial profundos) também apresentam **temperaturas de fusão** e de **ebulição elevadas**.

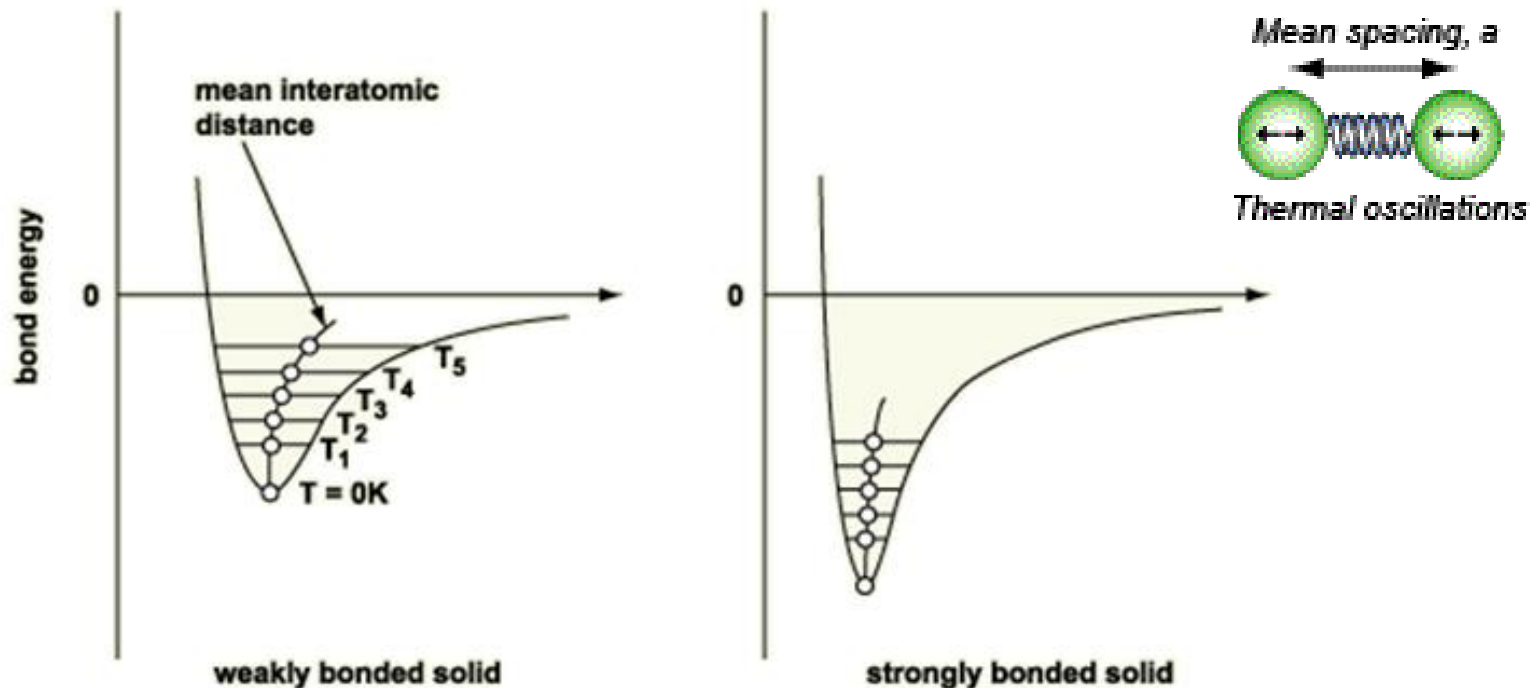
Relação entre Propriedades Físicas e Força e Energia de Ligação

Propriedades Mecânicas

- O **MÓDULO DE ELASTICIDADE** é uma **medida** da **rigidez de um material** (**resistência à deformação** - separação dos átomos adjacentes);
- Em escala atômica, a **DEFORMAÇÃO ELÁSTICA** é manifestada como uma pequena alteração na distância interatômica;
- A profundidade do poço de potencial é uma medida da energia de ligação; **quanto maior** for sua **profundidade, maior** será a **energia de ligação** e, portanto, também maior será a resistência à deformação elástica (**RIGIDEZ**).

Relação entre Propriedades Físicas e Força e Energia de Ligação

Coeficiente de Expansão Térmica

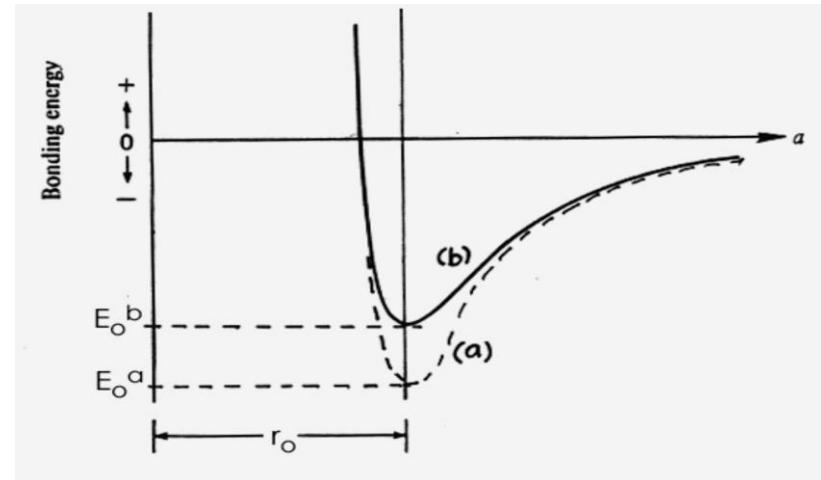


- Um “poço” **profundo** e **estrito** (elevadas energias de ligação) está relacionado a um **baixo coeficiente de expansão térmica**.

Relação entre Propriedades Físicas e Força e Energia de Ligação

Podemos concluir que a **energia de ligação química relaciona-se** com as seguintes **propriedades**:

- **Resistência mecânica:** aumenta com a força máxima e com a profundidade do poço da curva de energia.



- **Pontos de fusão:** aumentam com a profundidade do poço da curva de energia.
- **Coeficiente de expansão térmica:** diminui com a profundidade do poço da curva de energia.