

Moléculas polares

Porque a polaridade das ligações e das moléculas é muito importante?

A água é polar ou apolar ?

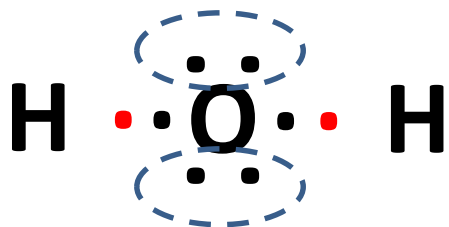
Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 3>> p. 93-131

Resolução no quadro

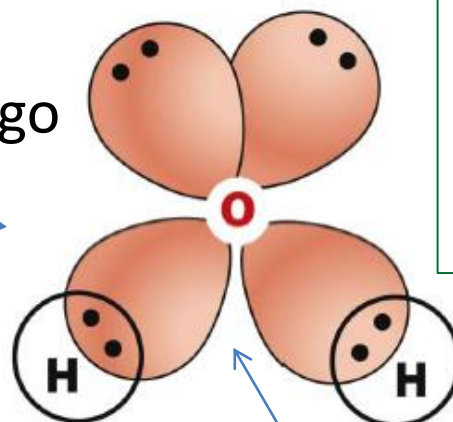
>> *Como abordar o problema??*

Voltando à molécula de água como exemplo

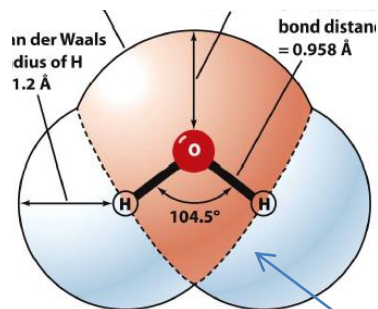
>> *moléculas com o átomo central contendo elétrons não compartilhados*



Os oito elétrons estariam melhor acomodados (*em uma estrutura mais estável*) se dispostos no espaço ao longo dos eixos de um tetraédro



Note que os elétrons "isolados" também são relevantes para o arranjo espacial dos átomos envolvidos



ângulo determinado experimentalmente (104,3°)

ângulo previsto para os eixos de um tetraedro 109,5°

Moléculas polares

A estrutura espacial e o momento de dipolo

Pense inicialmente em moléculas diatômicas:



depois em moléculas poliatômicas



Quais apresentam ligações polarizadas?

Quais são moléculas polares?

Monte as estruturas e tente responder as questões acima

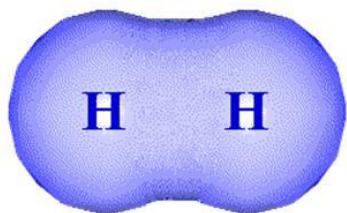
>> distribuição de elétrons, octeto e modelo de repulsão de elétrons - quadro

Mapas de contorno indicando a densidade de cargas em moléculas com ligações covalentes

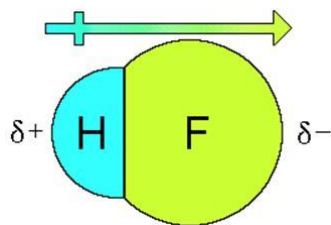
O gradiente de cores indica o
gradiente de cargas:



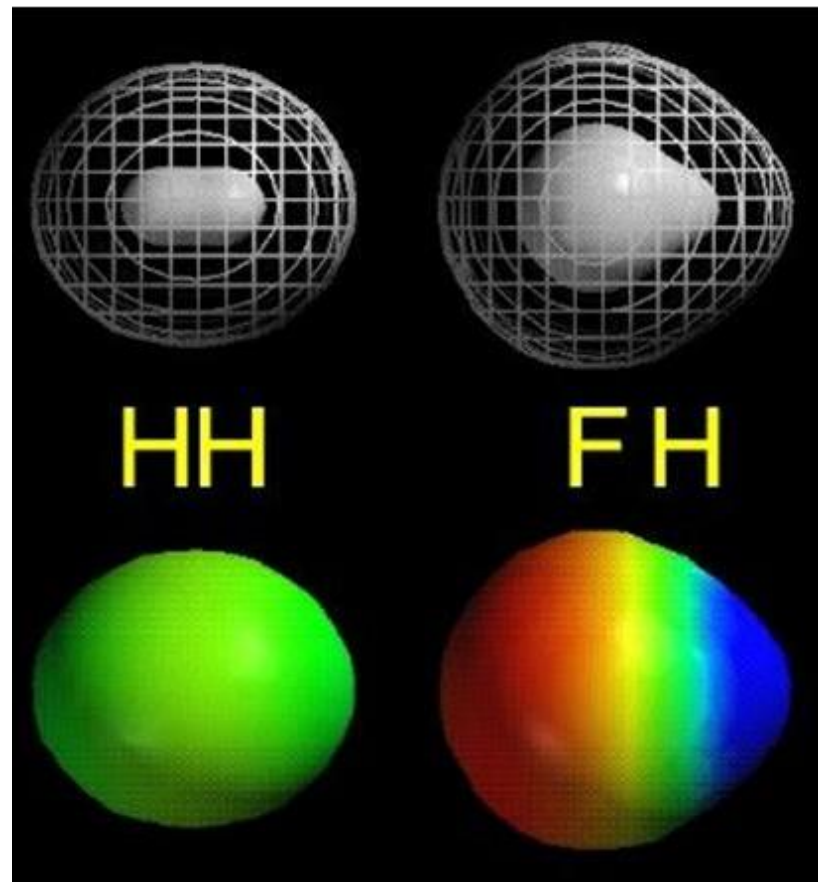
Momento de dipolo da ligação



$$\mu = 0$$

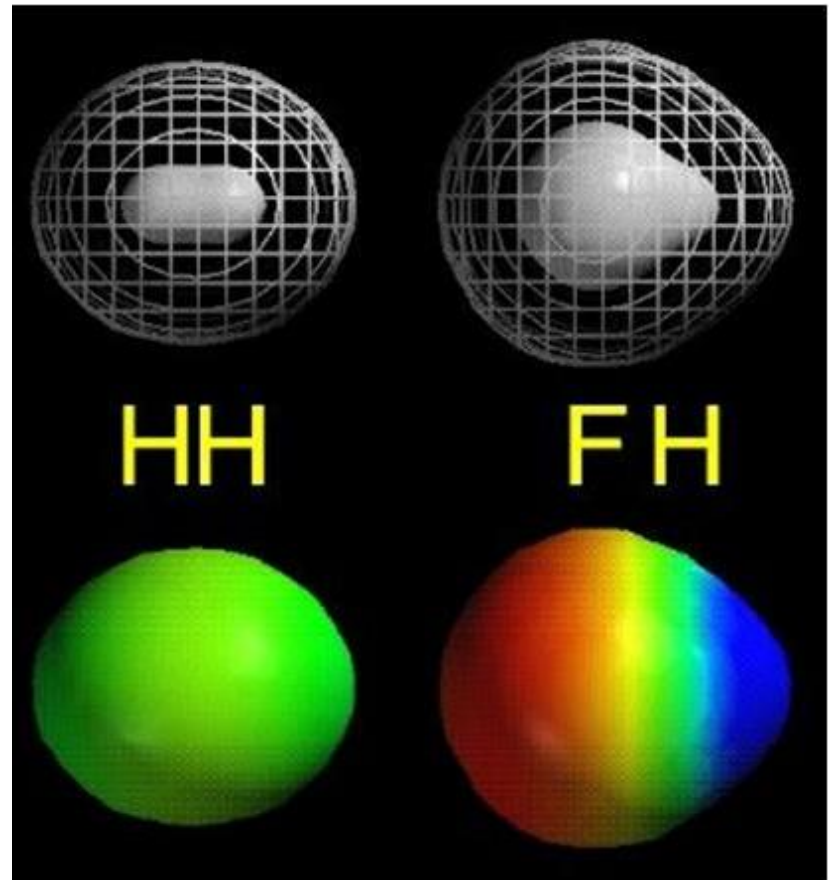


$$\mu \neq 0$$

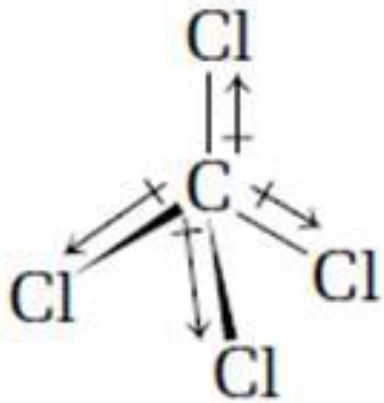


Se átomos de
eletronegatividades diferentes
estão envolvidos na ligação, há
distorção na eletrosfera da
molécula

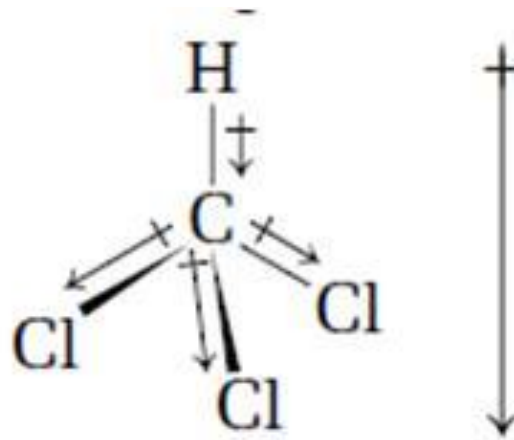
Pense: se as ligações covalentes em estudo quebrarem, qual seria a tendência de transferência de elétrons??



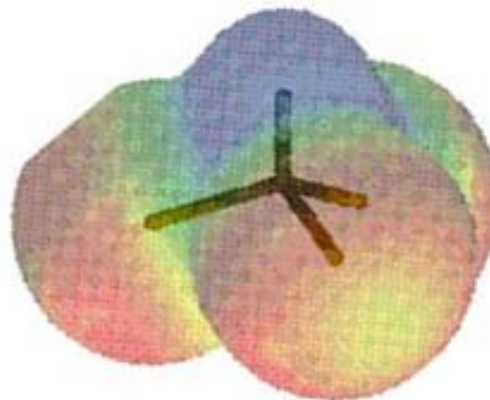
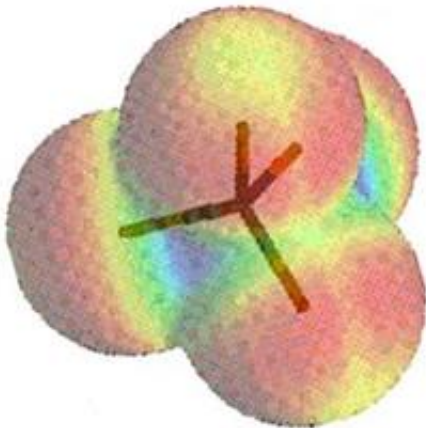
Momento de dipolo em moléculas poliatômicas



non-polar



polar



Pense e associe conhecimentos

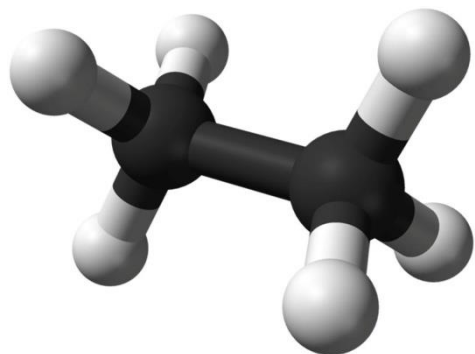
>> Solubilidade em água de moléculas com ligações covalentes

2. Pense: *Porque a molécula de etano é insolúvel em água?*

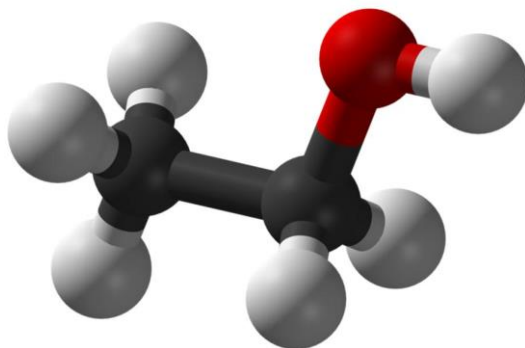
Porque a molécula de etanol é solúvel em água?

Porque a molécula de glicose é solúvel em água?

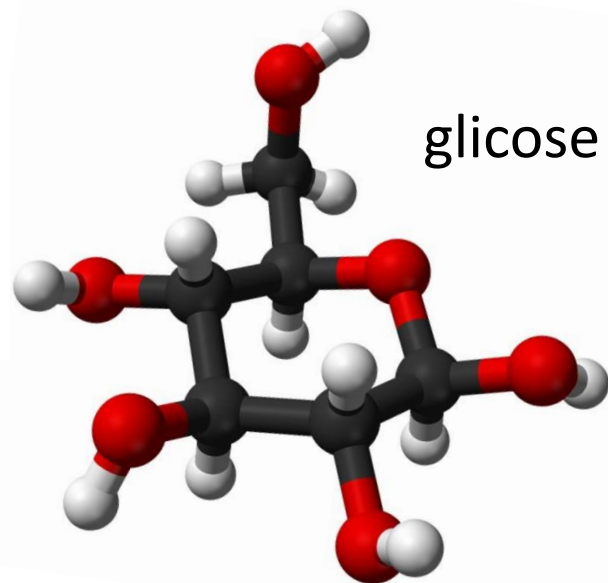
Porque a molécula de celulose é insolúvel em água?



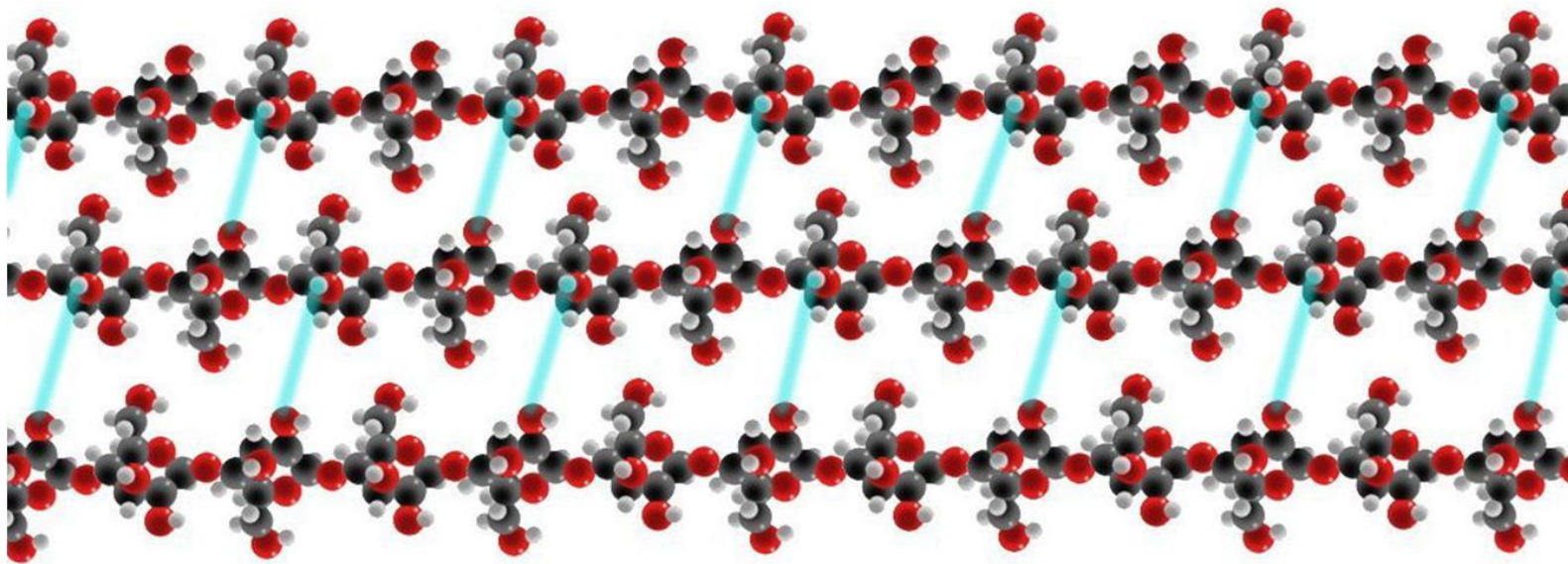
etano



etanol



glucose

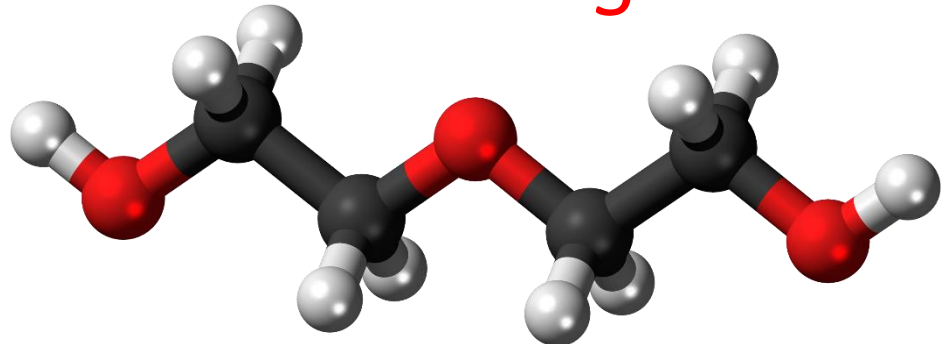
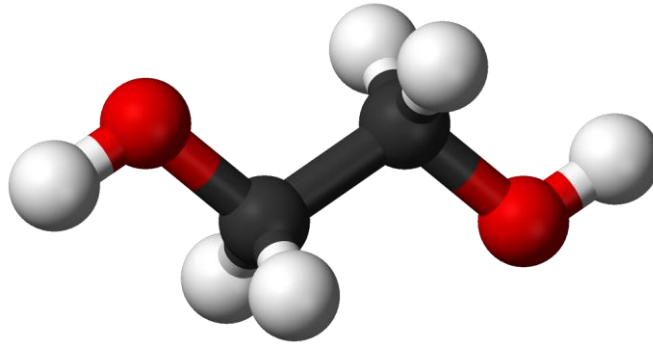
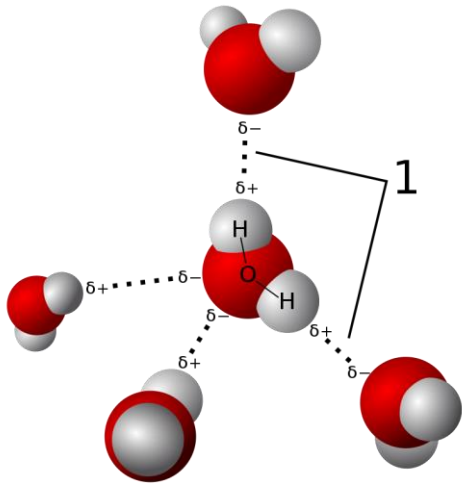


celulose

Um problema atual que apareceu na mídia

Água, monoetileno glicol, dietileno glicol

PENSE: Como o profissional de engenharia bioquímica lida com o problema?

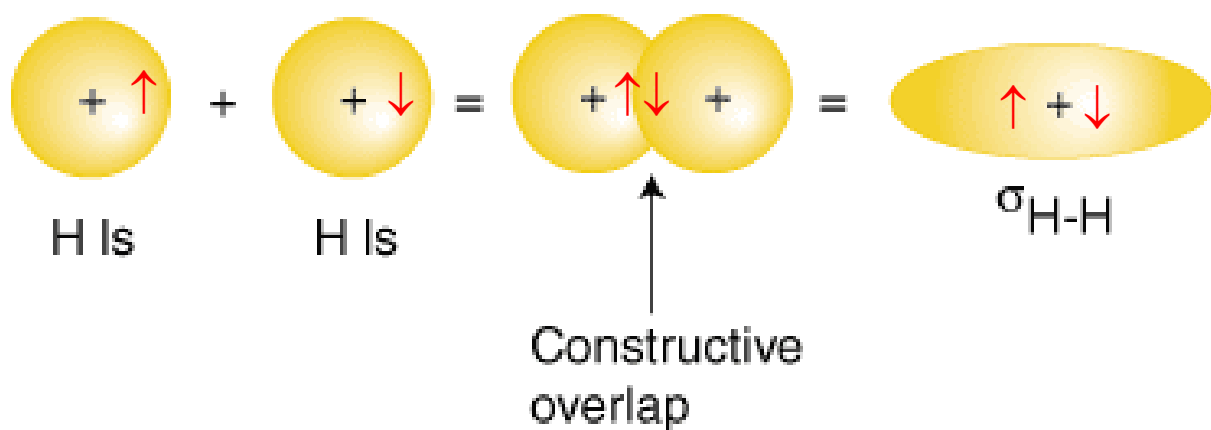


*São
solúveis
em
água??*

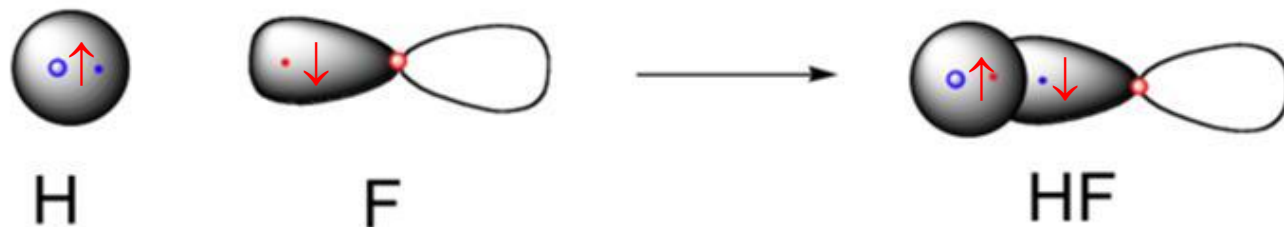
Sofisticando os modelos: **Teoria da ligação de valência**
*combinando orbitais atômicos para formar um novo orbital
"da molécula"*

Atkins e Jones, Princípios de Química, cap. 3, p. 93-131

A molécula de H_2
a sobreposição
frontal dos orbitais
da origem a uma
ligação Sigma (σ)



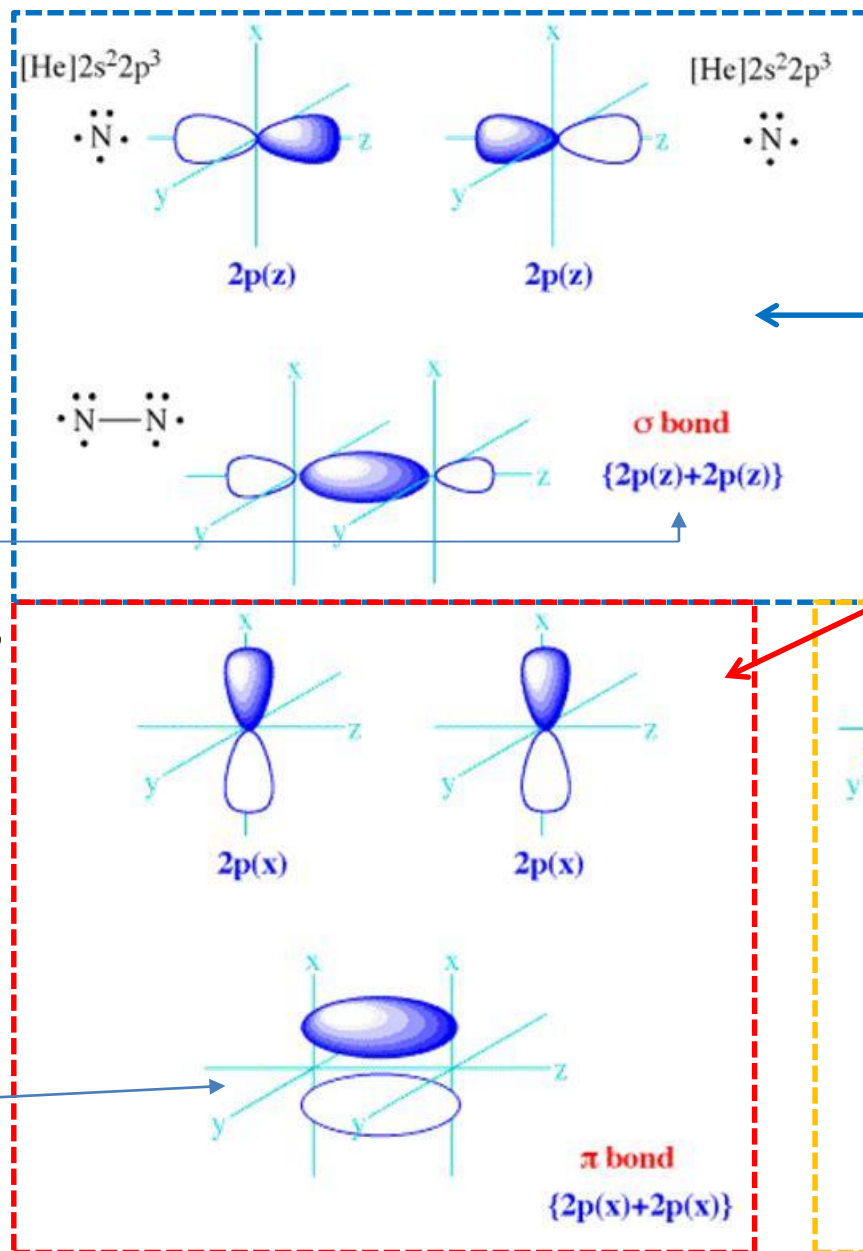
A molécula de HF
a sobreposição
frontal dos orbitais
da origem a uma
ligação Sigma (σ)



Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

ligações π

A molécula de N_2
A sobreposição frontal dos orbitais da origem a uma ligação Sigma (σ), mas há mais duas ligações com sobreposição lateral dos orbitais atômicos dando origem a ligações Pi (π)



Distribuição de elétrons no Nitrogênio:

$1s^2$

$2s^2$

$2p^3$

Orbitais envolvidos nas ligações da molécula de N₂

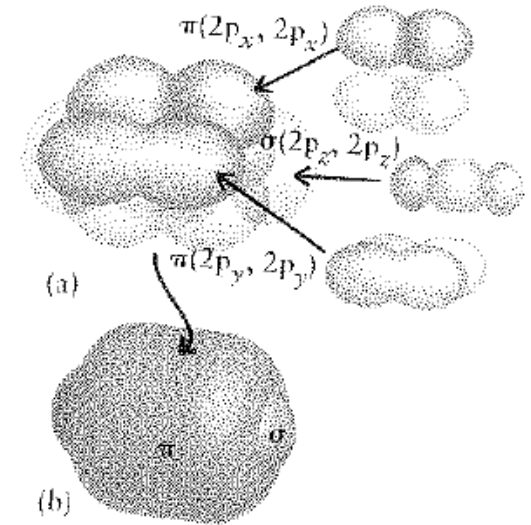
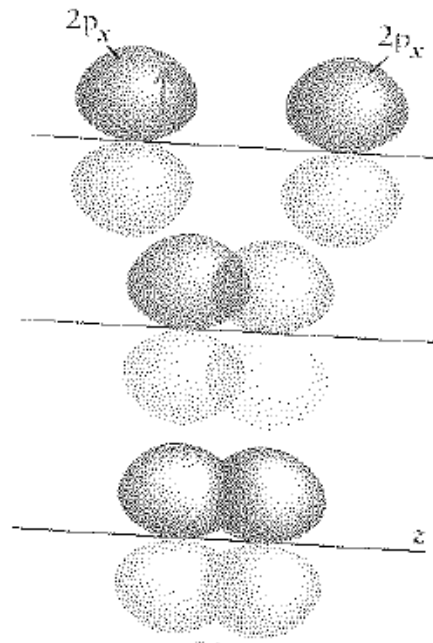
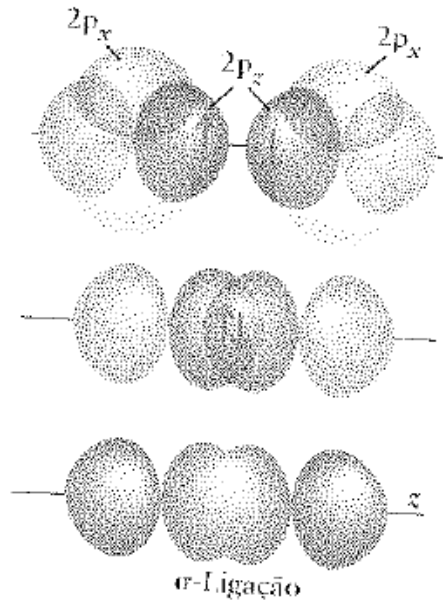
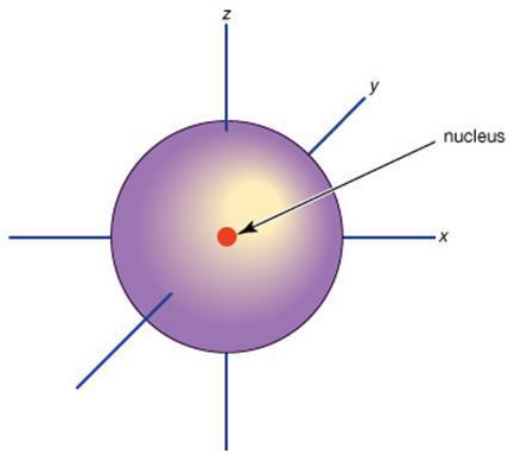


FIGURA 3.10 Uma ligação σ forma-se pelo emparelhamento de spins de elétrons...

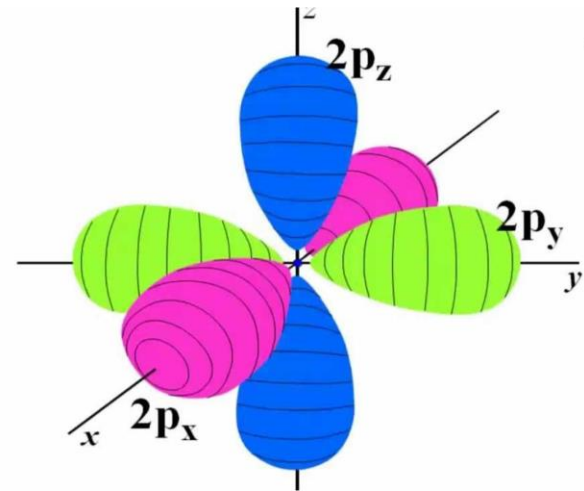
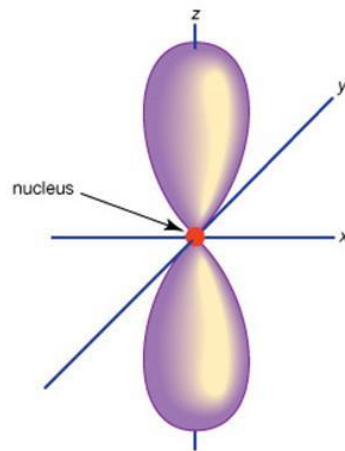
Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

Pense: como podemos explicar o fato do carbono realizar 4 ligações em todas as moléculas em que ele ocorre

Recordando informações sobre os orbitais atômicos >> a base para a teoria de ligação de valência



© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.



3 orbitais atômicos p
idênticos, separados
a 90°

Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

Retornando à molécula de metano (CH_4)

Distribuição de elétrons no Carbono:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 6.

Número atômico 6 $\leftrightarrow$ 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

$1s^2$

$2s^2$ $2p^2$ (4 elétrons na camada de valência)

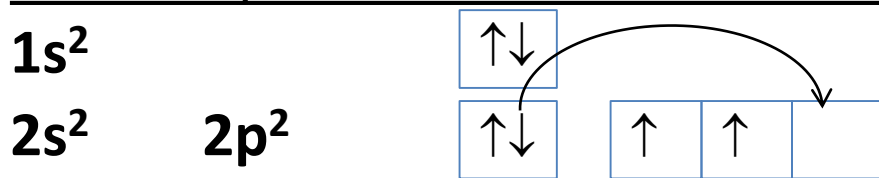
Porque assumimos que os 4 elétrons da camada de valência são iguais se eles estão em orbitais atômicos diferentes?

Note ainda que o orbital $2s$ está completo e não demandaria formar uma ligação química para atingir a máxima estabilidade

Promoção de elétrons e hibridação de orbitais

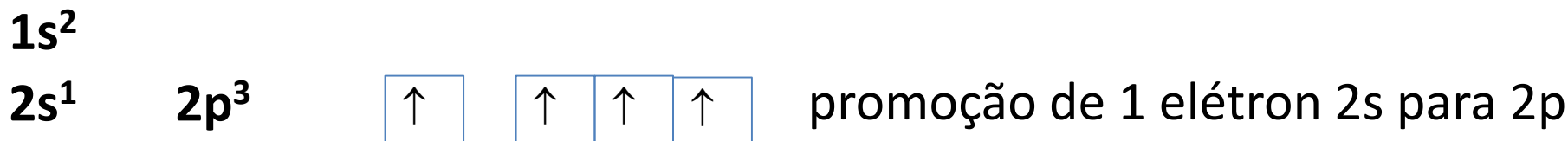
A molécula de Metano

Distribuição de elétrons no Carbono:



C no estado fundamental
a diferença entre os níveis de energia dos orbitais 2s e 2p é pequena → a promoção do elétron 2s ocorre facilmente

Distribuição de elétrons no Carbono:

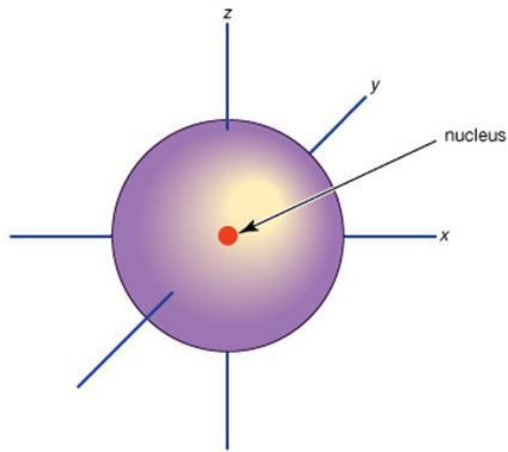


Distribuição de elétrons no Carbono hibridado sp^3 :

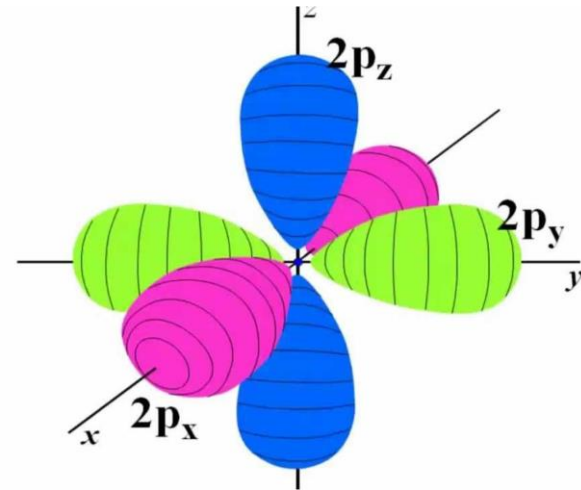
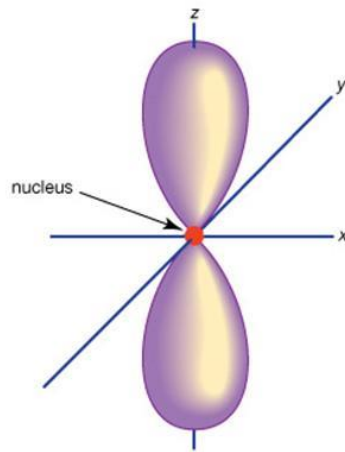


Pense: qual a melhor forma de separar estes orbitais no espaço?

Densidade eletrônica em orbitais atômicos s, p e híbrido sp^3



© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.

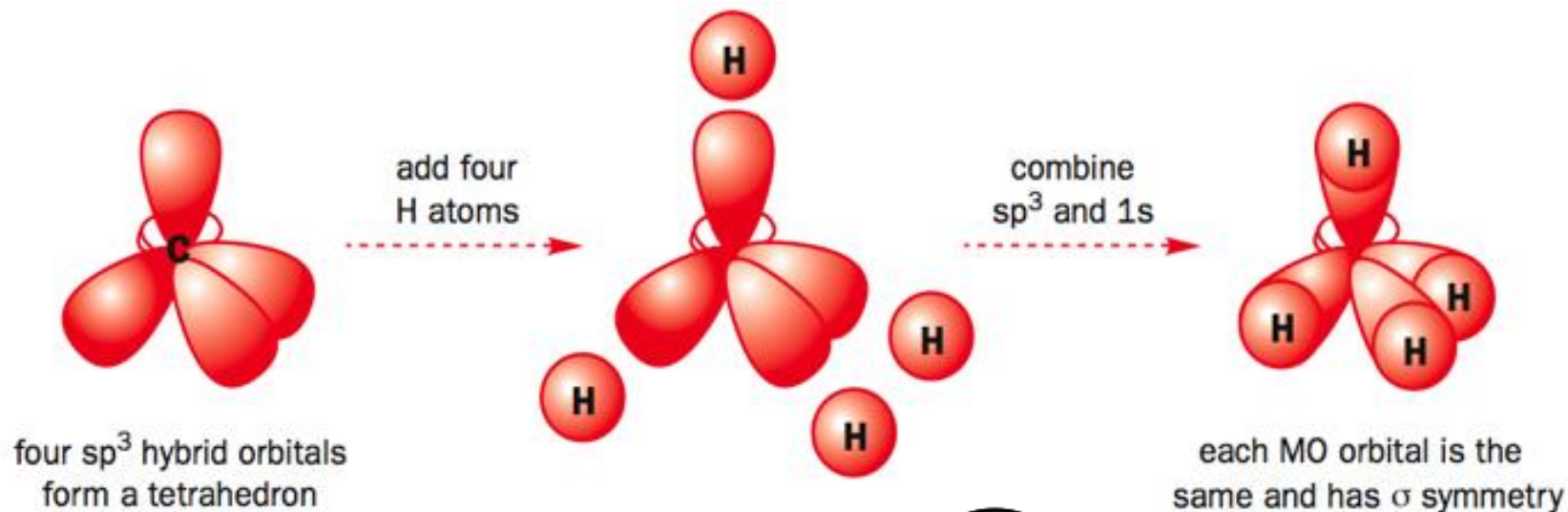


3 orbitais atômicos p
idênticos, separados
a 90°

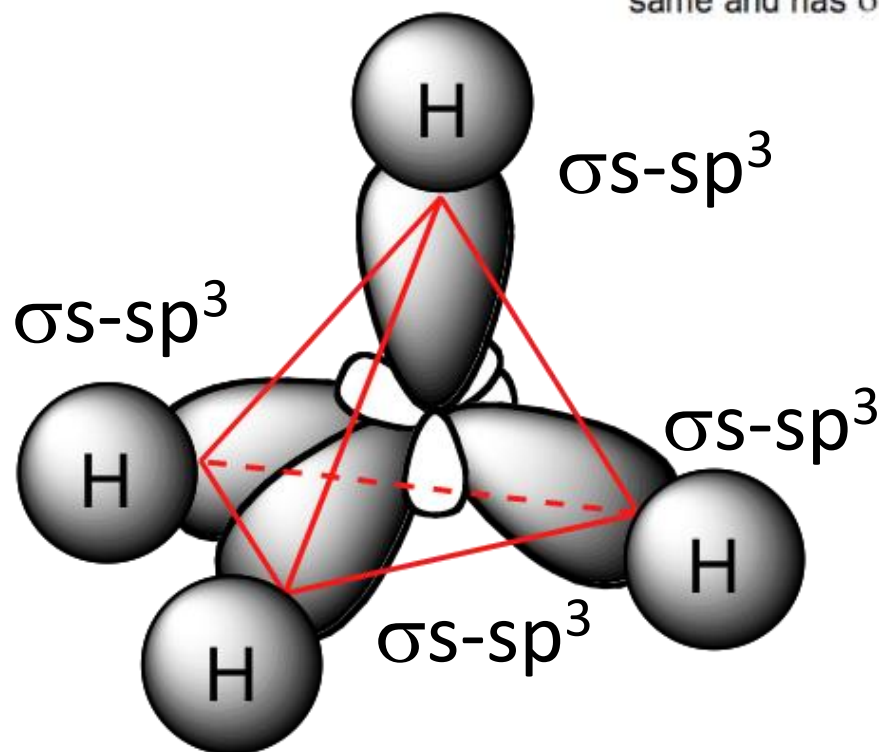


4 orbitais híbridos
 sp^3 idênticos

A molécula de Metano: ilustrações tridimensionais



4 ligações
idênticas $\sigma s-sp^3$



Próxima aula

**Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência,
promoção de elétrons à orbitais de maior energia,
hibridação**

ONDE ESTUDAR??

*Atkins e Jones, Princípios de Química, cap. 3, p. 93-131
(5ª edição)*

Pense sobre como deve ser a molécula de ETENO