

Elétrons e a estrutura das moléculas

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

Relembre: Estrutura de Lewis e a regra do octeto

- Antiga (introduzida por GN Lewis em 1916), mas útil até hoje para explicar compostos onde os átomos possuem valência simples.

- *"Os átomos se combinam formando moléculas ou sais de tal forma que cada um dos átomos envolvidos contenha 8 elétrons na camada de valência"* >> Isso representa uma configuração muito estável, de forma similar ao que se observa nos gases nobres que são pouco reativos, exatamente devido a elevada estabilidade

A *"regra do octeto"* permite antecipar a proporção de átomos numa determinada molécula ou sal, mas **não indica nada sobre a estrutura (distribuição espacial)** desta molécula ou retículo cristalino

Revise: Distribuição de elétrons nos orbitais atômicos

Bom livro para revisão de QG: Kotz - Quim Geral I e reações químicas

A regra do octeto, o modelo da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência e a estrutura de moléculas simples

A molécula de metano (CH_4) como exemplo

Pense: O que a regra do octeto de Lewis prevê para o CH_4 ? Qual seria a distribuição no espaço destes átomos? - aplique o modelo da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência.

Pesquise em casa: Qual é o ângulo de ligação determinado experimentalmente na molécula de metano?

1. Como podemos definir quais são os elétrons de valência no C e no H?
 - 1a) Quantos elétrons tem o C?
 - 1b) Como eles se distribuem nos subníveis s, p e d?
 - 1c) Quais ocupam a "camada de valência"?
2. Idem para os elétrons do H

.....a molécula de metano

1. Como podemos definir quais são os elétrons de valência no C e no H?

1a) Quantos elétrons tem o C? *Tabela periódica é para usar.....*

1b) Como eles se distribuem nos subníveis s, p e d?

1c) Quais ocupam a "camada de valência"?

2. Idem para os elétrons do H

TABELA PERIÓDICA É PARA USAR.....

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓Period																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
	*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
	**	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

.....a molécula de metano

1. Como podemos definir quais são os elétrons de valência no C e no H?

1a) Quantos elétrons tem o C?

1b) Como eles se distribuem nos subníveis s, p e d?

1c) Quais ocupam a "camada de valência"?

2. Idem para os elétrons do H

Distribuição de elétrons no **Carbono**:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 6

Número atômico 6 $\llcorner\llcorner$ 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

$1s^2$

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

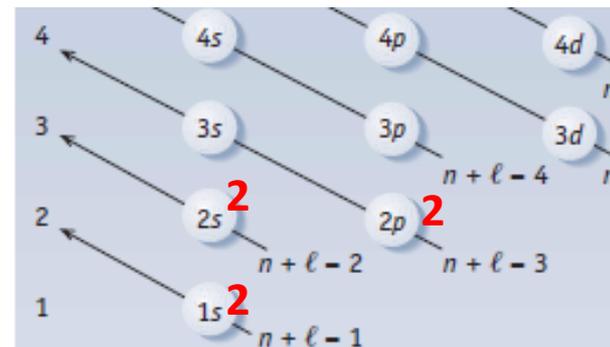
Distribuição de elétrons no **hidrogênio**:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 1.

Número atômico 1 $\llcorner\llcorner$ 1 próton

No estado fundamental temos, portanto, 1 elétron

$1s^1$ (1 elétron na camada de valência)



Reverendo a distribuição de elétrons nos átomos

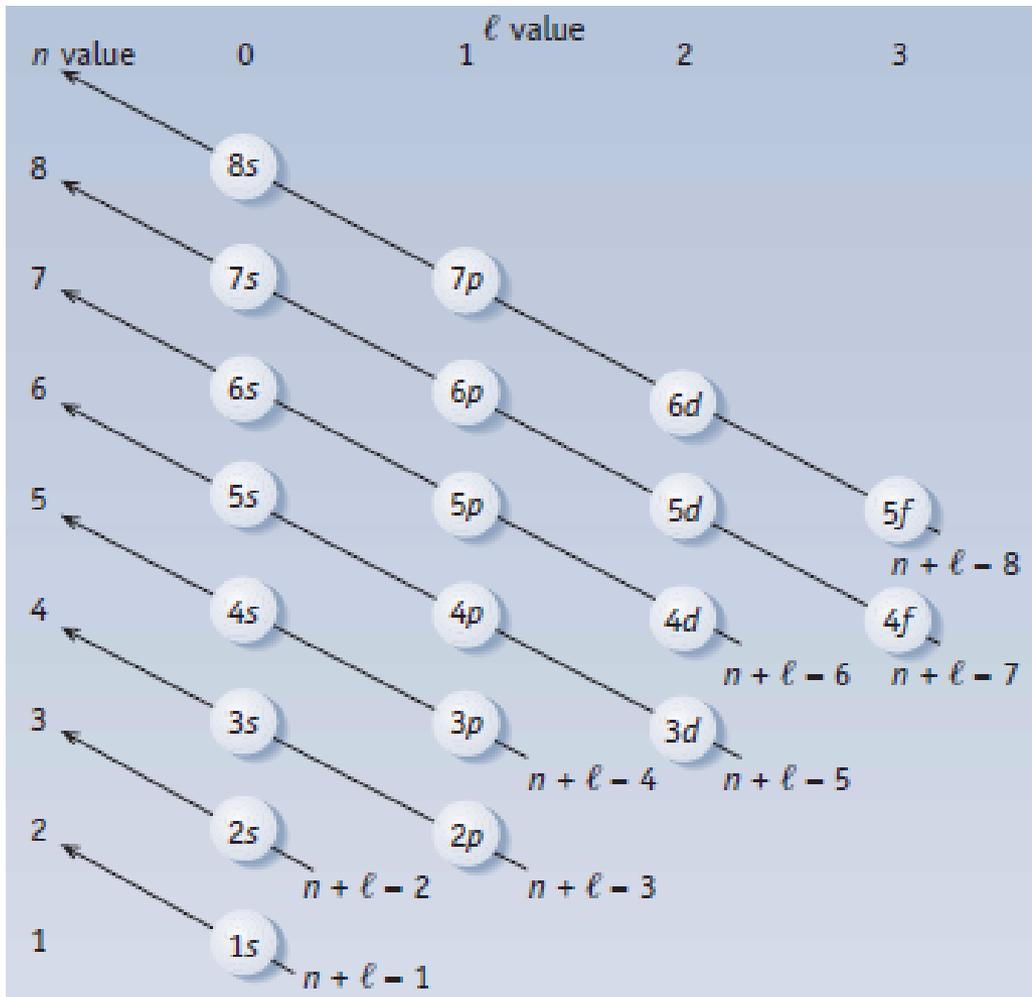


Figure 8.5 Subshell filling order. Subshells in atoms are filled in order of increasing $n + \ell$. When two subshells have the same $n + \ell$ value, the subshell of lower n is filled first. To use the diagram, begin at 1s and follow the arrows of increasing $n + \ell$. (Thus, the order of filling is $1s \Rightarrow 2s \Rightarrow 2p \Rightarrow 3s \Rightarrow 3p \Rightarrow 4s \Rightarrow 3d$ and so on.)

Table 8.3 Electron Configurations of Atoms in the Ground State

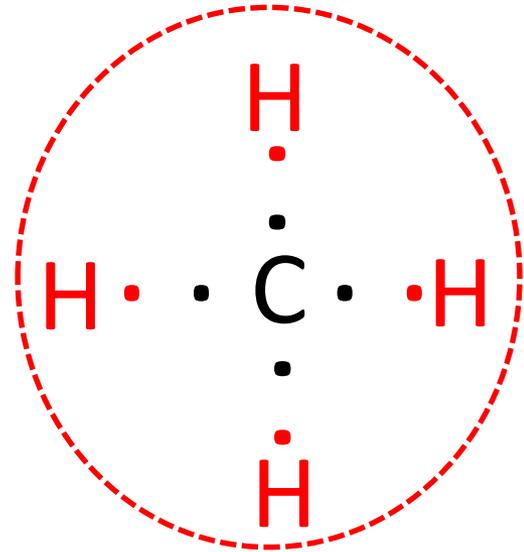
Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration
1	H	1s ¹	37	Rb	[Kr]5s ¹	74	W	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²
2	He	1s ²	38	Sr	[Kr]5s ²	75	Re	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²
3	Li	[He]2s ¹	39	Y	[Kr]4d ¹ 5s ²	76	Os	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²
4	Be	[He]2s ²	40	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	77	Ir	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²
5	B	[He]2s ² 2p ¹	41	Nb	[Kr]4d ⁴ 5s ¹	78	Pt	[Xe]4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹
6	C	[He]2s ² 2p ²	42	Mo	[Kr]4d ⁵ 5s ¹	79	Au	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹
7	N	[He]2s ² 2p ³	43	Tc	[Kr]4d ⁵ 5s ²	80	Hg	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²
8	O	[He]2s ² 2p ⁴	44	Ru	[Kr]4d ⁷ 5s ¹	81	Tl	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹
9	F	[He]2s ² 2p ⁵	45	Rh	[Kr]4d ⁸ 5s ¹	82	Pb	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²
10	Ne	[He]2s ² 2p ⁶	46	Pd	[Kr]4d ¹⁰	83	Bi	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³
11	Na	[Ne]3s ¹	47	Ag	[Kr]4d ¹⁰ 5s ¹	84	Po	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴
12	Mg	[Ne]3s ²	48	Cd	[Kr]4d ¹⁰ 5s ²	85	At	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵
13	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	49	In	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	86	Rn	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
14	Si	[Ne]3s ² 3p ²	50	Sn	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	87	Fr	[Rn]7s ¹
15	P	[Ne]3s ² 3p ³	51	Sb	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	88	Ra	[Rn]7s ²
16	S	[Ne]3s ² 3p ⁴	52	Te	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	89	Ac	[Rn]6d ¹ 7s ²
17	Cl	[Ne]3s ² 3p ⁵	53	I	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	90	Th	[Rn]6d ² 7s ²
18	Ar	[Ne]3s ² 3p ⁶	54	Xe	[Kr]4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	91	Pa	[Rn]5f ² 6d ¹ 7s ²
19	K	[Ar]4s ¹	55	Cs	[Xe]6s ¹	92	U	[Rn]5f ³ 6d ¹ 7s ²
20	Ca	[Ar]4s ²	56	Ba	[Xe]6s ²	93	Np	[Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ²
21	Sc	[Ar]3d ¹ 4s ²	57	La	[Xe]5d ¹ 6s ²	94	Pu	[Rn]5f ⁶ 7s ²
22	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	58	Ce	[Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ²	95	Am	[Rn]5f ⁷ 7s ²
23	V	[Ar]3d ³ 4s ²	59	Pr	[Xe]4f ³ 6s ²	96	Cm	[Rn]5f ⁷ 6d ¹ 7s ²
24	Cr	[Ar]3d ⁵ 4s ¹	60	Nd	[Xe]4f ⁴ 6s ²	97	Bk	[Rn]5f ⁹ 7s ²
25	Mn	[Ar]3d ⁵ 4s ²	61	Pm	[Xe]4f ⁵ 6s ²	98	Cf	[Rn]5f ¹⁰ 7s ²
26	Fe	[Ar]3d ⁶ 4s ²	62	Sm	[Xe]4f ⁶ 6s ²	99	Es	[Rn]5f ¹¹ 7s ²
27	Co	[Ar]3d ⁷ 4s ²	63	Eu	[Xe]4f ⁷ 6s ²	100	Fm	[Rn]5f ¹² 7s ²
28	Ni	[Ar]3d ⁸ 4s ²	64	Gd	[Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	101	Md	[Rn]5f ¹³ 7s ²
29	Cu	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	65	Tb	[Xe]4f ⁹ 6s ²	102	No	[Rn]5f ¹⁴ 7s ²
30	Zn	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	66	Dy	[Xe]4f ¹⁰ 6s ²	103	Lr	[Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²
31	Ga	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	67	Ho	[Xe]4f ¹¹ 6s ²	104	Rf	[Rn]5f ¹⁴ 6d ² 7s ²
32	Ge	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	68	Er	[Xe]4f ¹² 6s ²	105	Db	[Rn]5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²
33	As	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	69	Tm	[Xe]4f ¹³ 6s ²	106	Sg	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²
34	Se	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	70	Yb	[Xe]4f ¹⁴ 6s ²	107	Bh	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ²
35	Br	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	71	Lu	[Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	108	Hs	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ²
36	Kr	[Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	72	Hf	[Xe]4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	109	Mt	[Rn]5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ²
			73	Ta	[Xe]4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²			

Quer decorar??

Melhor aprender a lógica

Regra do Octeto para o metano

8 elétrons na camada de valência →



Pense: Essa é a distribuição espacial dos átomos na molécula de metano?

Experimentalmente sabe-se que a molécula é angular com cerca de 109° entre as ligações do C com o H

Como explicar???

>> Muitas teorias são criadas tomando como base observações experimentais

>> As teorias comumente "evoluem" na medida em que os dados experimentais vão sendo mais detalhados

mais um exemplo antes de generalizar.....

*2. Pense: Como é a distribuição de elétrons na **molécula de água** segundo a regra do octeto de Lewis? Qual seria a estrutura espacial?*

Mais um
exemplo:
**a molécula
de água**

Pense: Como é a distribuição de elétrons na molécula de água segundo a regra do octeto de Lewis? Qual seria a estrutura espacial?

2 Hidrogênios e 1 Oxigênio

Distribuição de elétrons no oxigênio:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 8

Número atômico 8 \leftrightarrow 8 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 8 elétrons

$1s^2$

$2s^2$ $2p^4$ (6 elétrons na camada de valência)

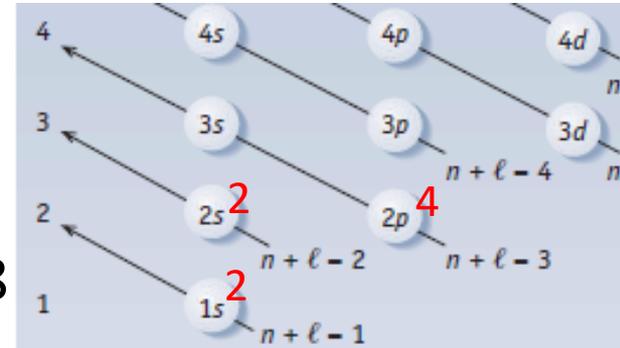
Distribuição de elétrons no hidrogênio:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 1.

Número atômico 1 \leftrightarrow 1 próton

No estado fundamental temos, portanto, 1 elétrons

$1s^1$ (1 elétron na camada de valência)

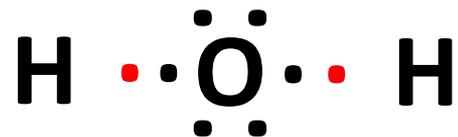


Modelo para a molécula ??? >> regra do octeto >>

Oxigênio demanda 2 elétrons para o octeto

Hidrogênio demanda 1 elétron para 2 elétrons na camada de valência (para ser similar o gás He, que é estável no estado fundamental)

Primeiro modelo para a molécula de água, segundo regra do octeto



*Pense: O momento de dipolo da água é diferente de zero; **uma estrutura linear seria compatível com isso?***

Experimentalmente sabe-se que a molécula é angular com cerca de 104° entre as ligações do O com o H

Com explicar???

>> Muitas teorias são criadas tomando como base observações experimentais

>> As teorias comumente "evoluem" na medida em que os dados experimentais vão sendo mais detalhados

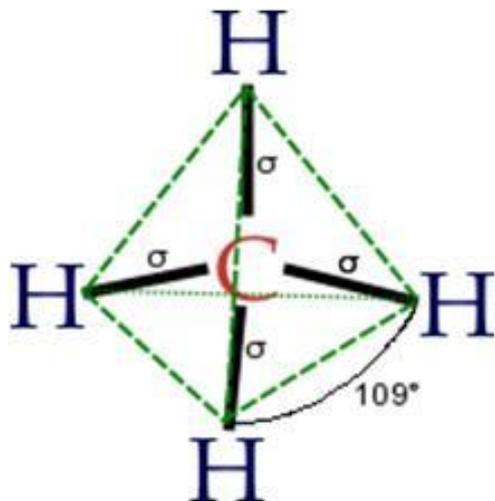
Voltando à molécula de metano

O modelo **da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência**

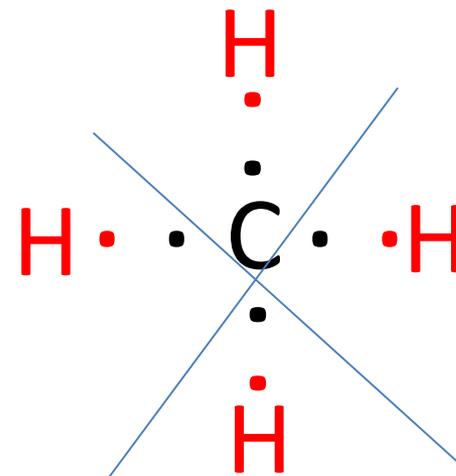
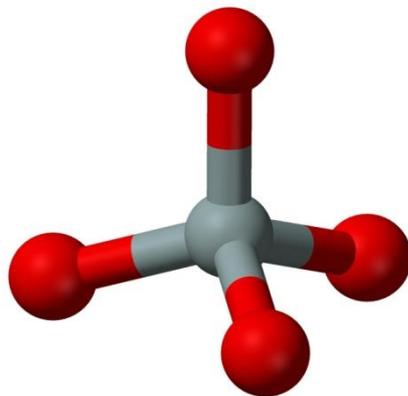
prevê que, devido a repulsão eletrostática, os pares de elétrons estarão o mais separados possível no arranjo espacial da molécula

Qual a melhor forma de separar 4 pares de elétrons no espaço?

"é a forma que permita a maior distância angular entre os eixos nos quais estes elétrons estejam dispostos"



ESTRUTURA TETRAÉDRICA



a molécula não é plana

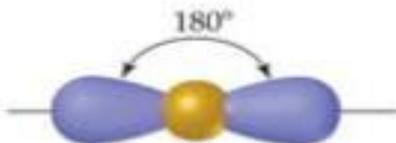
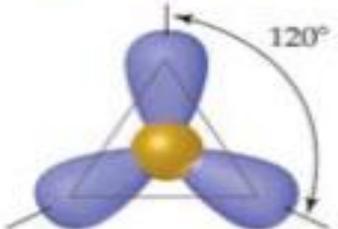
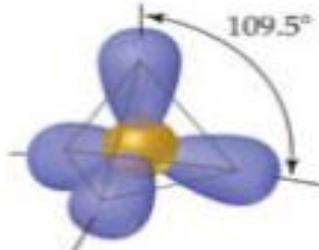
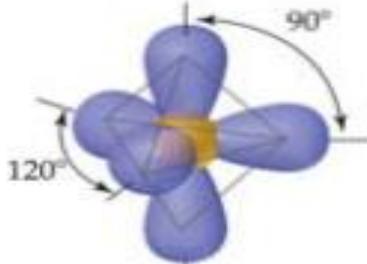
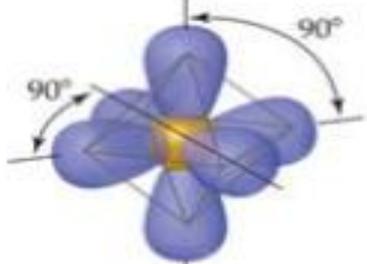
O modelo de **repulsão de pares de elétrons da camada de valência** (*aquela com oito elétrons da teoria de Lewis*) representa um **avanço para a teoria do octeto** e **pode prever uma série de estruturas de compostos covalentes**

*O modelo prevê que, em **um arranjo molecular**, as regiões de maior densidade eletrônica contendo **os elétrons de valência** se **distanciam o máximo possível no espaço** devido à repulsão eletrostática elétron-elétron.*

Disso resultam arranjos moleculares básicos, descritos à seguir:

Número de regiões de elétrons	Arranjo mais estável
2	Linear
3	Trigonal plano
4	Tetraédrico
5	Bipiramidal trigonal
6	Octaédrico

Arranjos
moleculares
mencionados
no slide anterior

Number of Electron Domains	Arrangement of Electron Domains	Electron-Domain Geometry	Predicted Bond Angles
2		Linear	180°
3		Trigonal planar	120°
4		Tetrahedral	109.5°
5		Trigonal bipyramidal	120° 90°
6		Octahedral	90°

Moléculas polares

Porque a polaridade das ligações e das moléculas são muito importantes?

Pense para a próxima aula

A água é polar ou apolar ?

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

Resolução no quadro

>> *Como abordar o problema??*