

# Moléculas polares

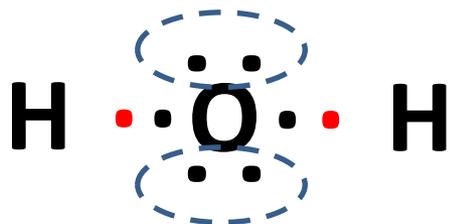
*Porque a polaridade das ligações e das moléculas é muito importante?*

*A água é polar ou apolar ?*

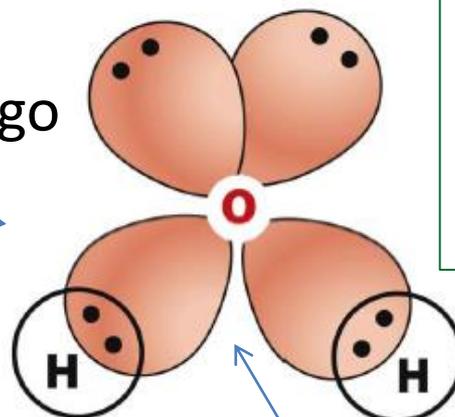
*Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 3>> p. 93-131*

# Voltando à molécula de água como exemplo

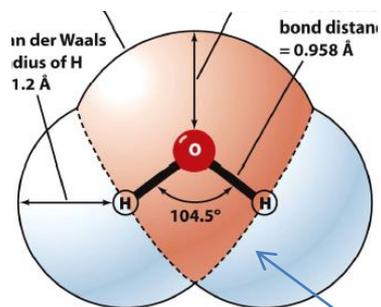
>> *moléculas com o átomo central contendo elétrons não compartilhados*



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°

*devido ao ângulo das ligações, o momento de dipolo resultante é diferente de zero*

# 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*

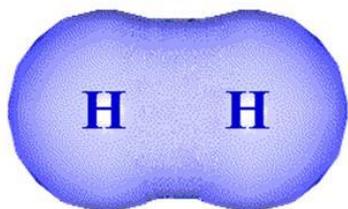
*>> distribuição de elétrons, octeto e modelo de repulsão de elétrons - quadro*

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

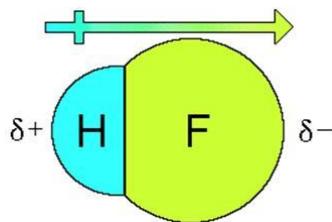
O gradiente de cores indica o  
gradiente de cargas:



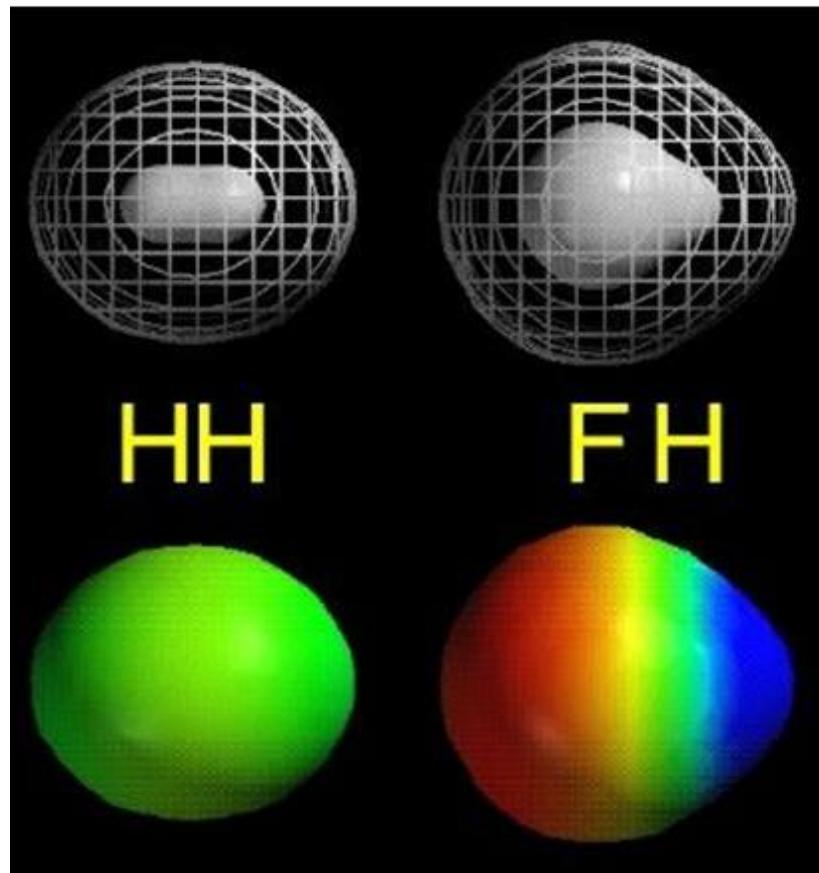
## Momento de dipolo da ligação



$$\mu = 0$$

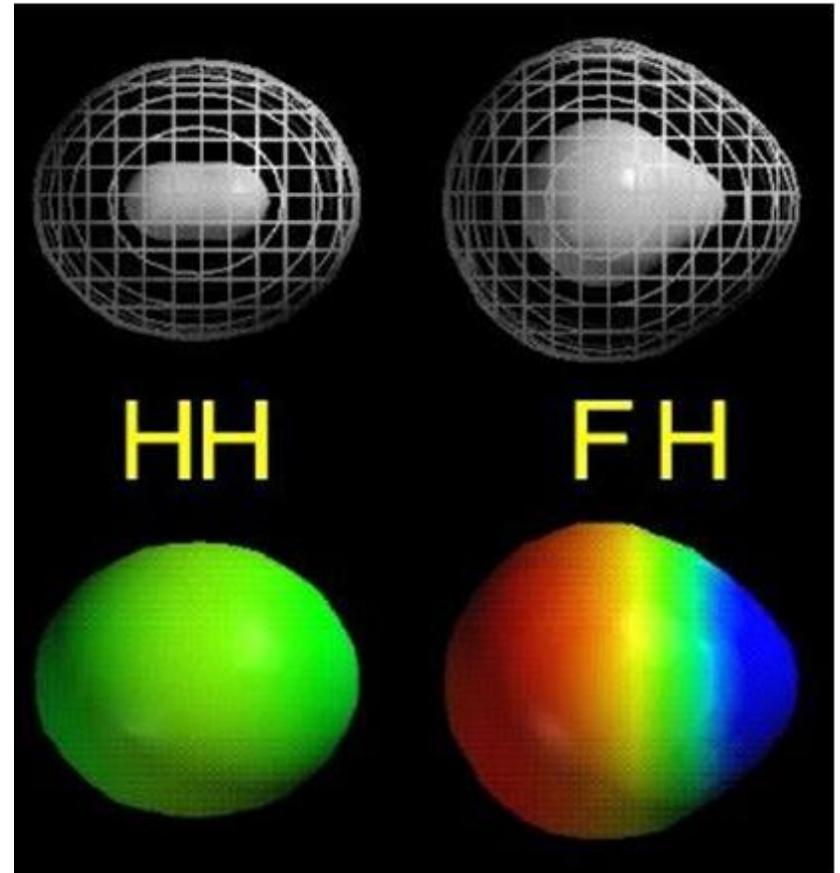


$$\mu \neq 0$$

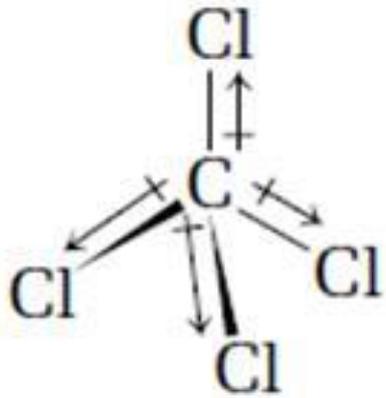


Se átomos de  
eletronegatividades diferentes  
estão envolvidos na ligação, há  
distorção na eletrosfera da  
molécula

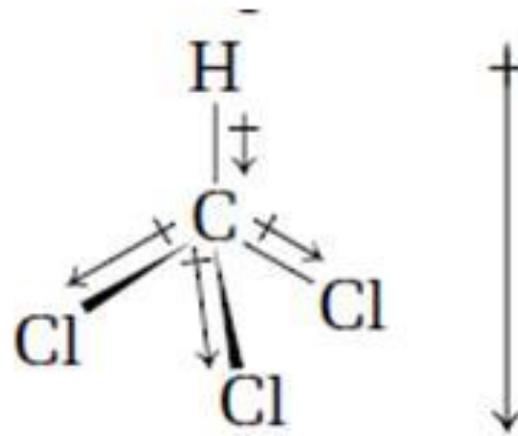
**Pense:** se as ligações covalentes em estudo quebrarem, qual seria a tendência de transferência de elétrons??



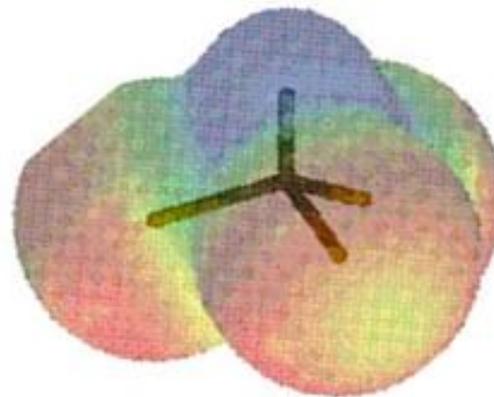
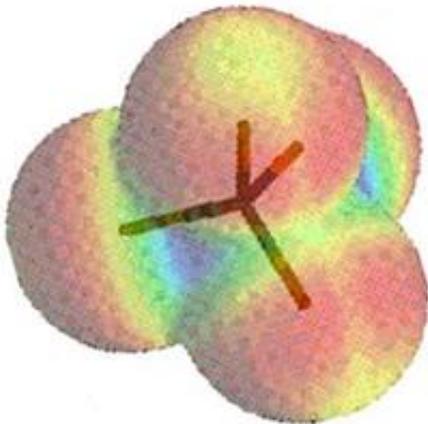
# Momento de dipolo em moléculas poliatômicas



non-polar



polar



# ***Pense e associe conhecimentos***

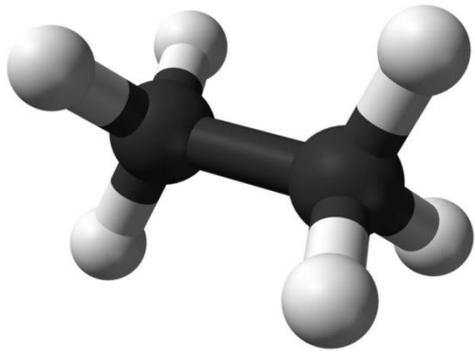
**>> Solubilidade em água de moléculas com ligações covalentes**

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

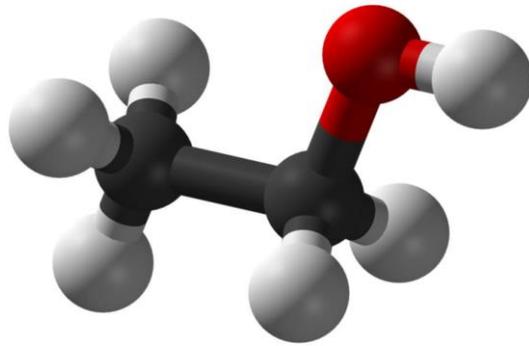
*Porque a molécula de etanol é solúvel em água?*

*Porque a molécula de glicose é solúvel em água?*

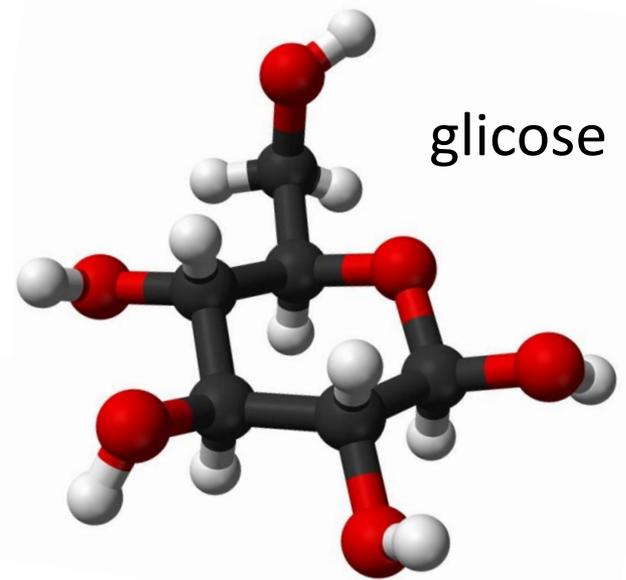
*Porque a molécula de celulose é insolúvel em água?*



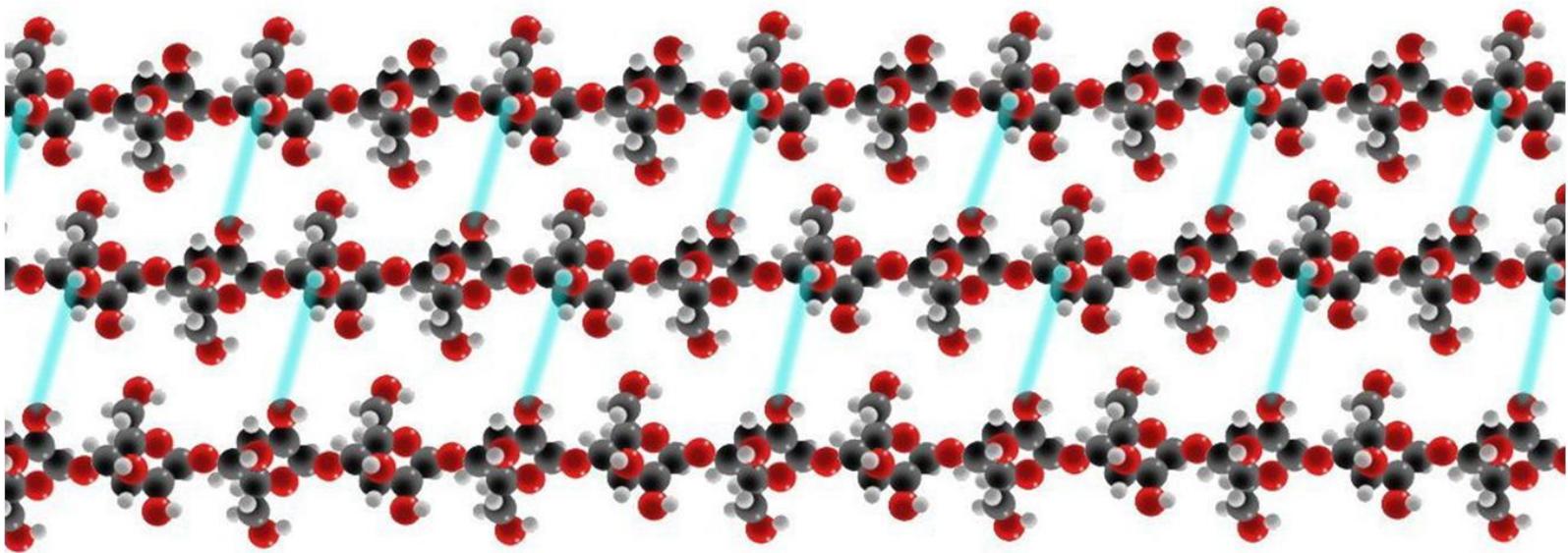
etano



etanol



glucose

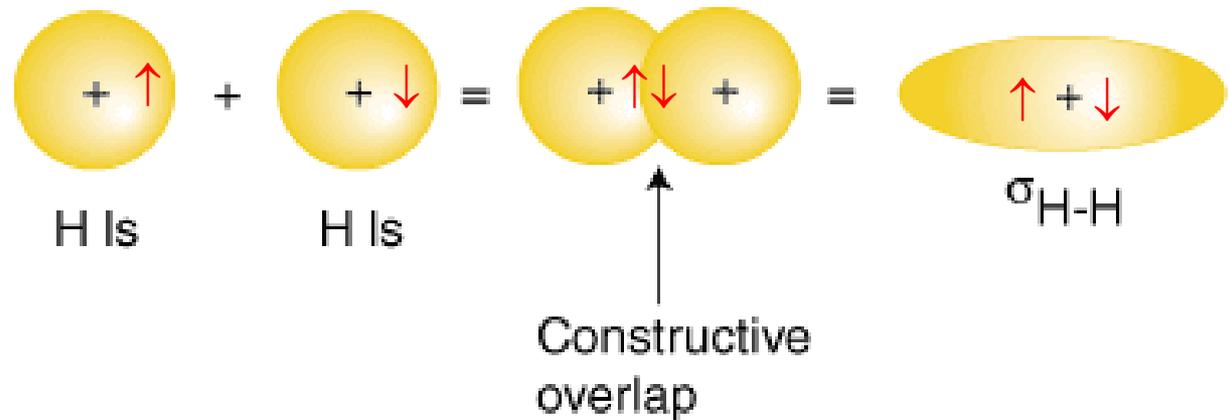


celulose

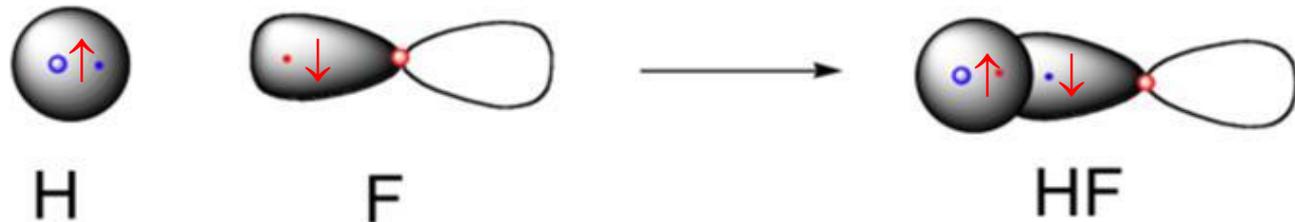
Sofisticando os modelos: **Teoria da ligação de valência**  
*combinando orbitais atômicos para formar um novo orbital*  
*"da molécula"*

*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 ( $\sigma$ )



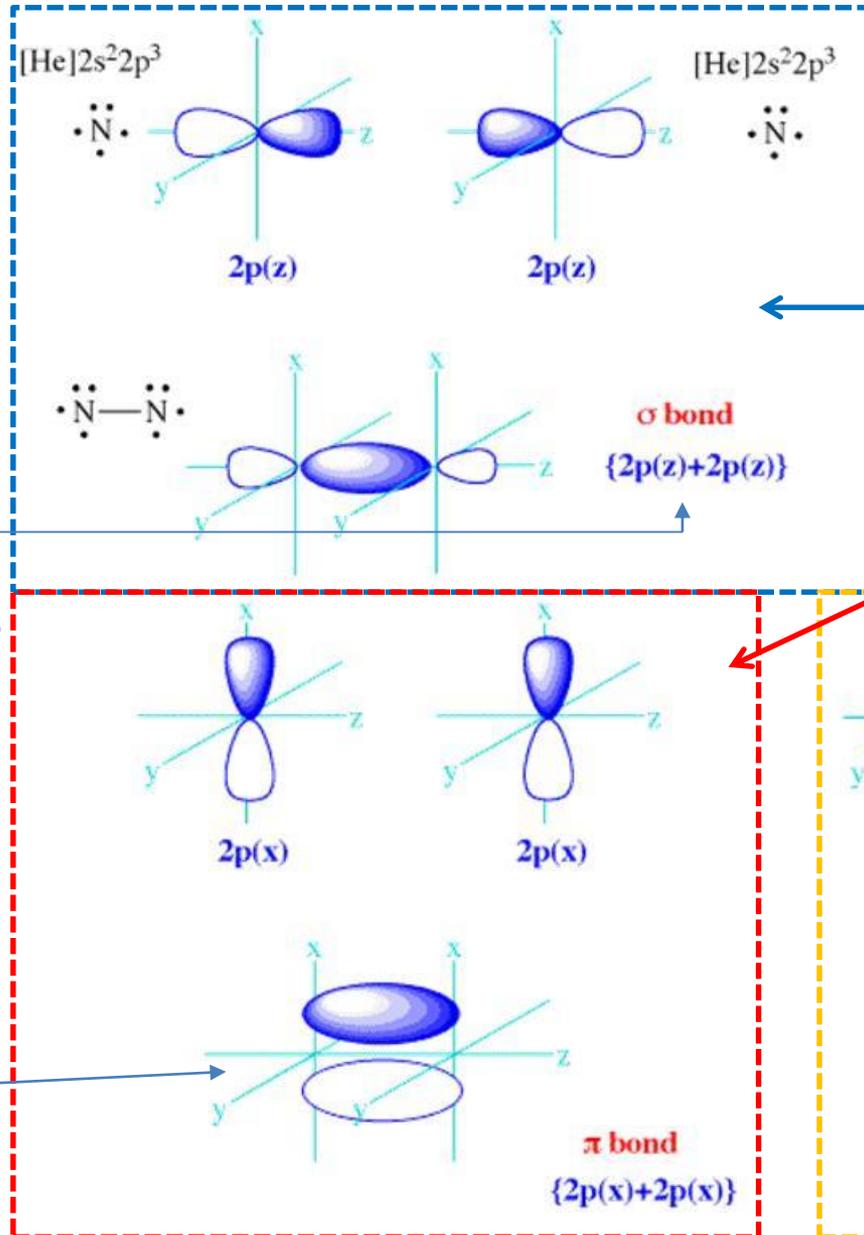
**A molécula de HF**  
a sobreposição  
frontal dos orbitais  
da origem a uma  
ligação Sigma ( $\sigma$ )



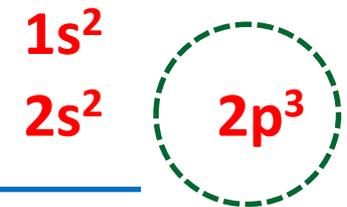
# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

## ligações $\pi$

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



Distribuição de elétrons no Nitrogênio:



# Orbitais envolvidos nas ligações da molécula de N<sub>2</sub>

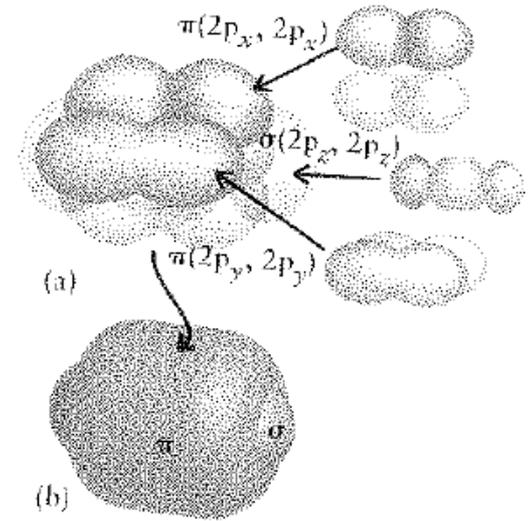
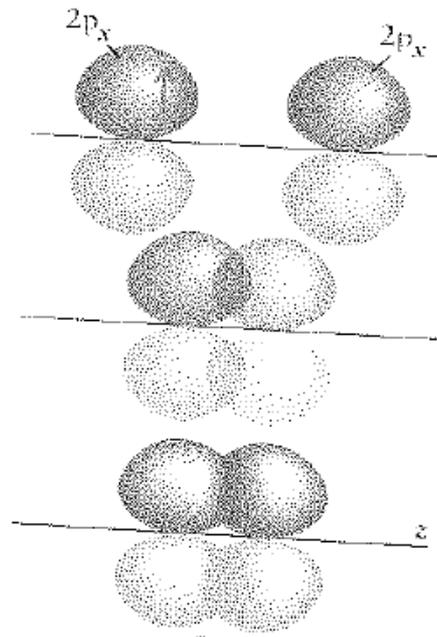
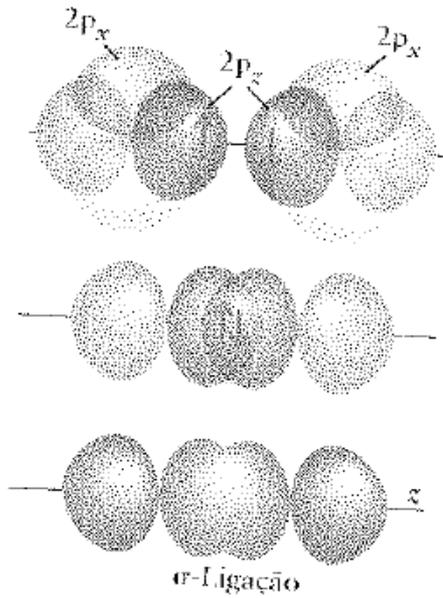
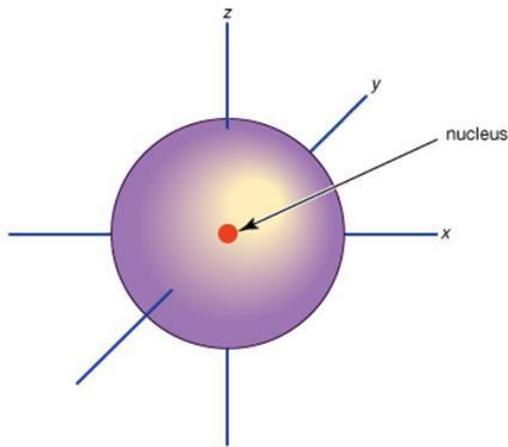


FIGURA 3.10 Uma ligação  $\sigma$  forma-se pelo emparelhamento de spins de elétrons...

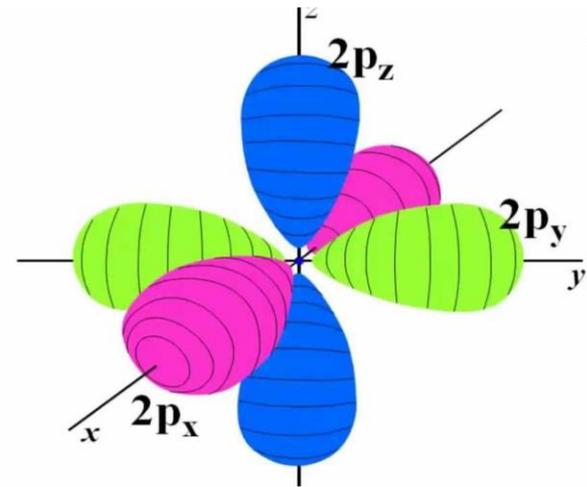
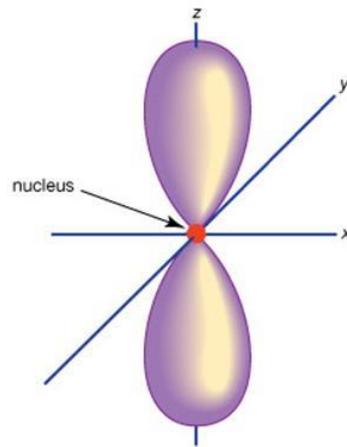
# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

**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  $90^\circ$

# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

## *Retornando à molécula de metano (CH<sub>4</sub>)*

Distribuição de elétrons no Carbono:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 6.

Número atômico 6 <<>> 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

1s<sup>2</sup>

2s<sup>2</sup>      2p<sup>2</sup>      (4 elétrons na camada de valência)

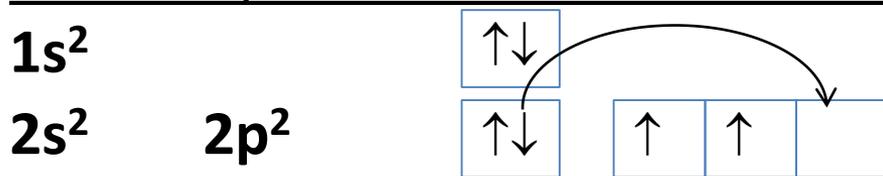
*Porque assumimos que os 4 elétrons da camada de valência são iguais se eles estão em orbitais atômicos diferentes?*

*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:

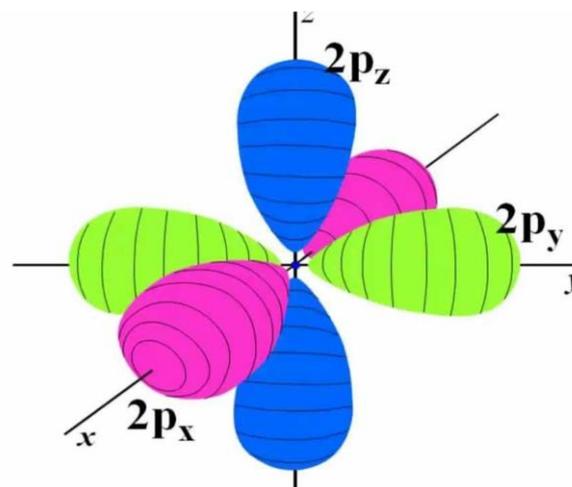
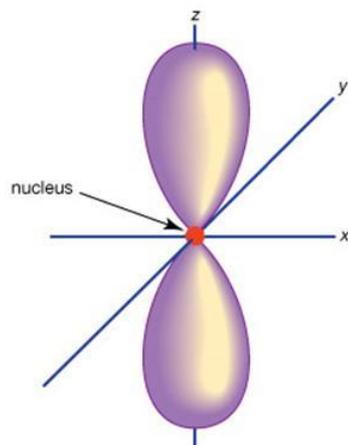
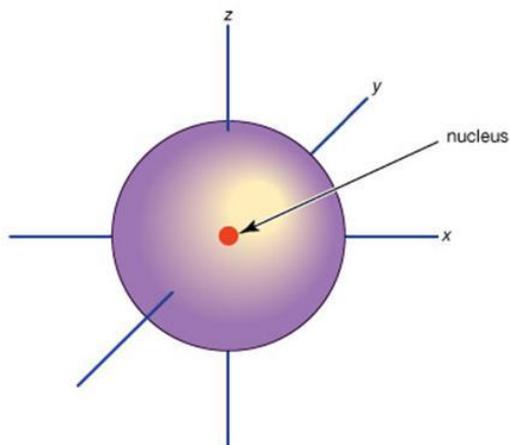


Distribuição de elétrons no Carbono hibridado  $sp^3$ :



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

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



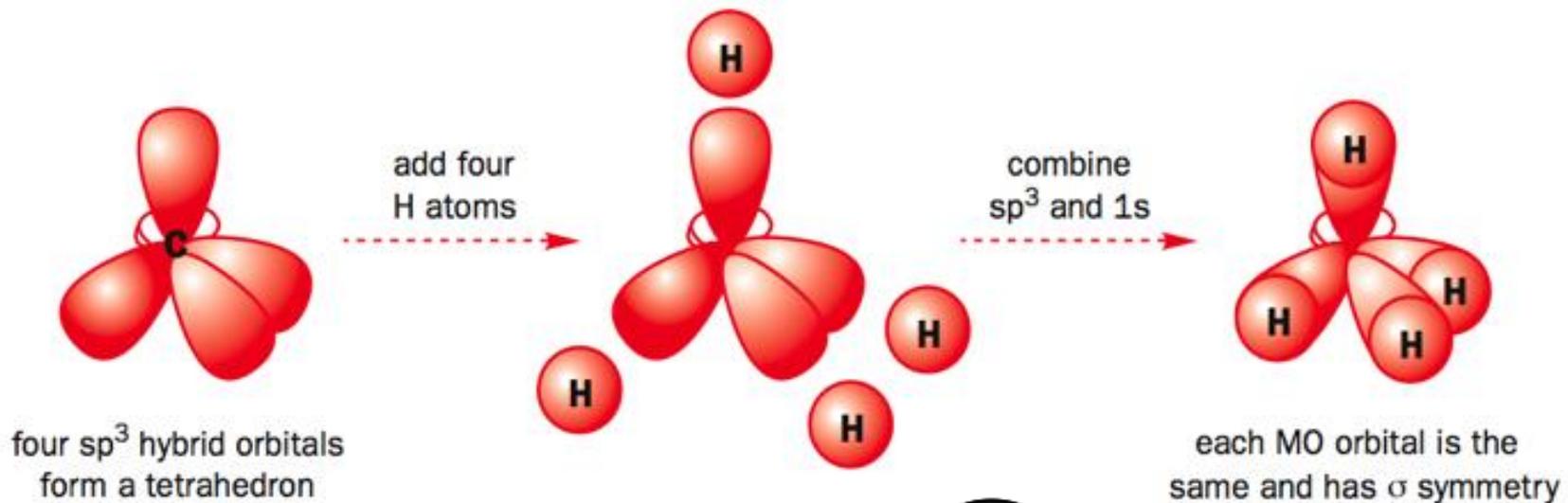
© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.

3 orbitais atômicos p  
idênticos, separados  
a  $90^\circ$

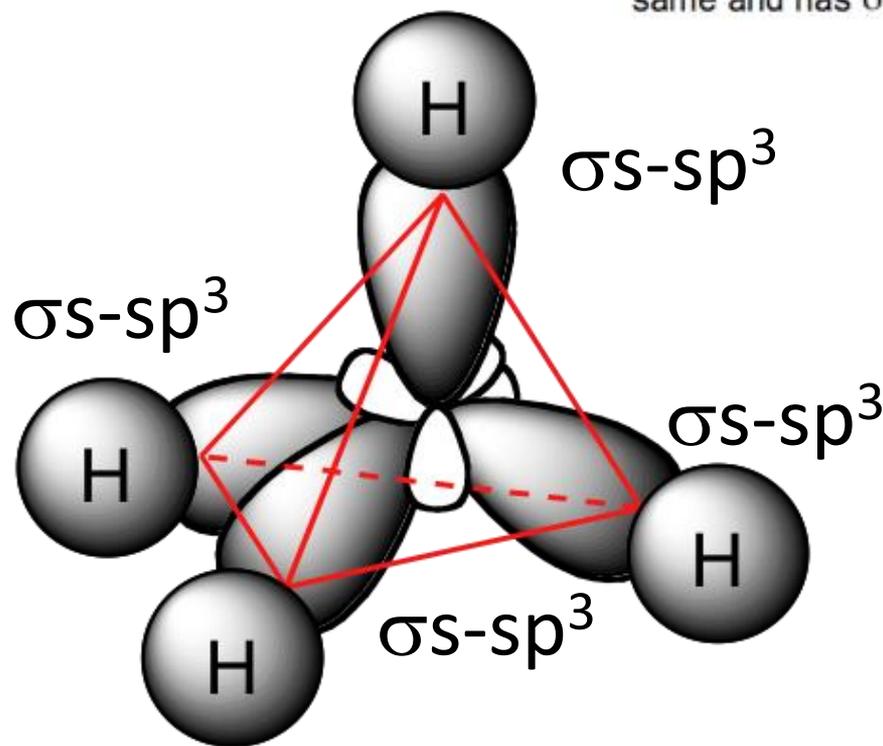


4 orbitais híbridos  
 $sp^3$  idênticos

# 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,  
possibilidades variadas de orbitais híbridos  
ONDE ESTUDAR??**

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

*Pense sobre como deve ser a molécula de ETENO*