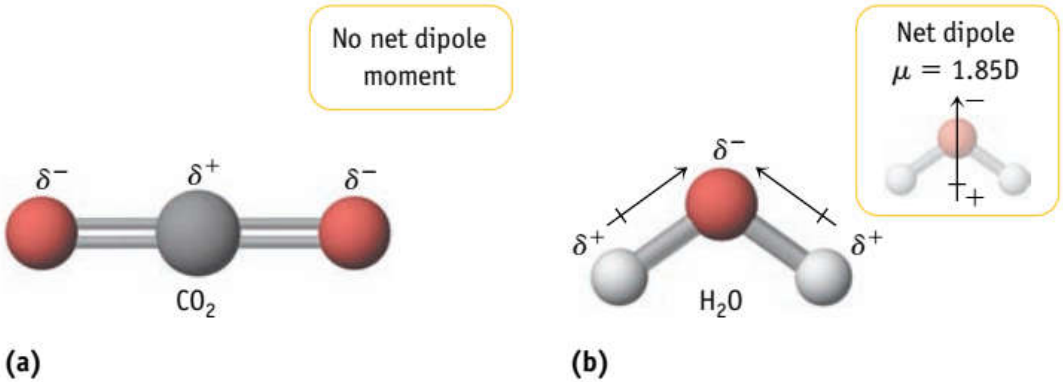
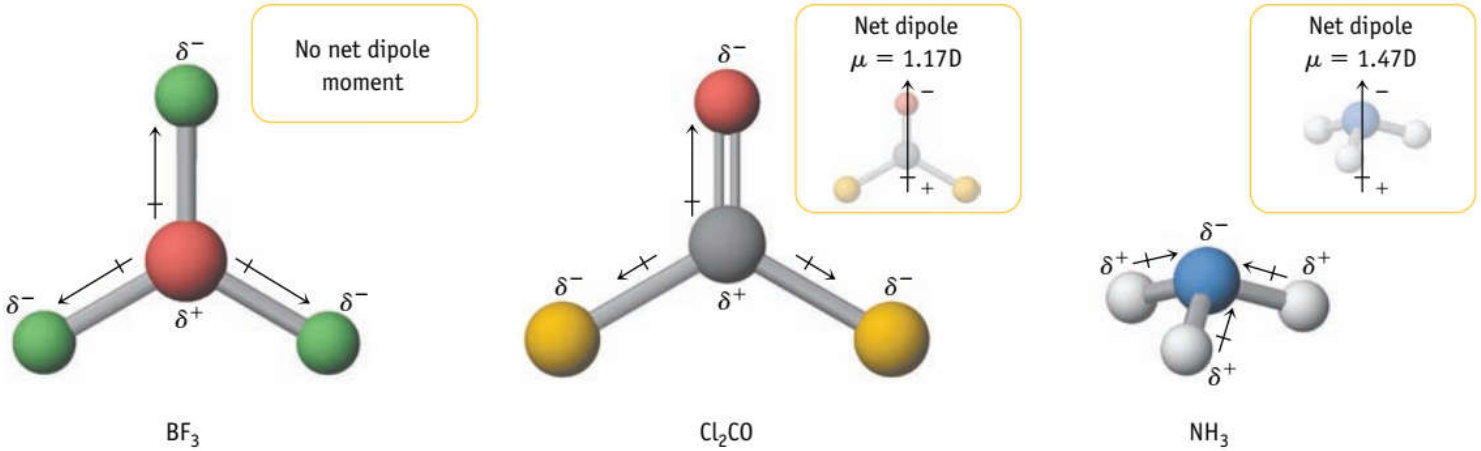
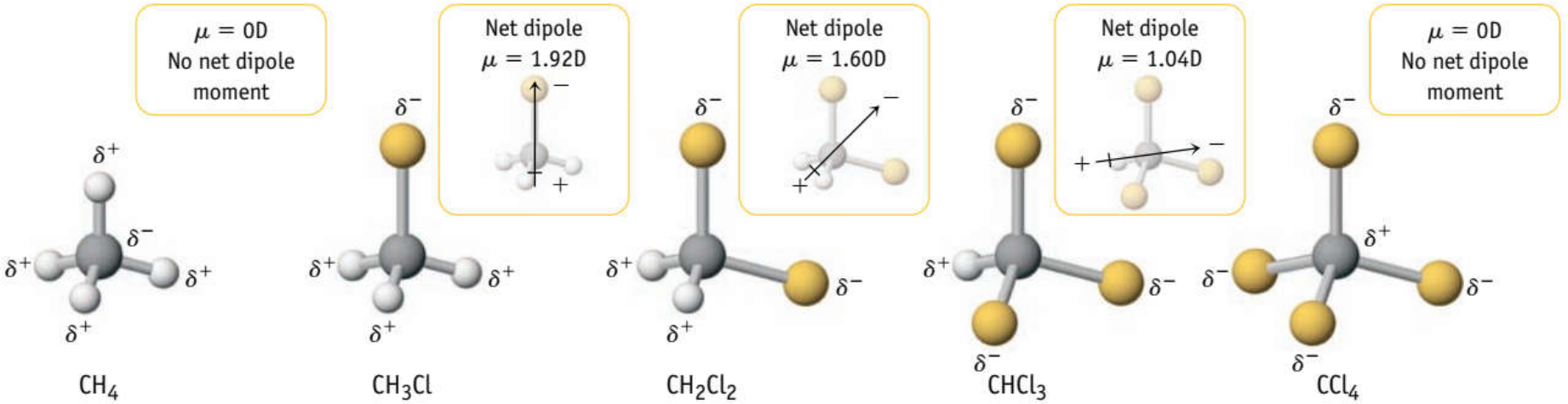
Aula 7 QE

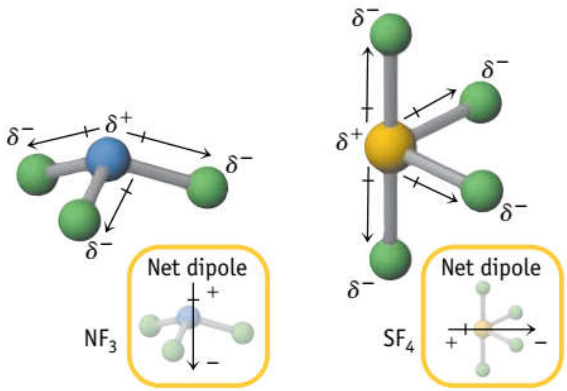
ELECTRONEGATIVITY

H 2,1																He
Li 1,0	Be 1,6											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0	Ne
Na 0,9	Mg 1,2											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0	Ar
K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	Kr
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	I 2,5	Xe
Cs 0,7	Ba 0,9	La 1,0	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 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,1	Rn

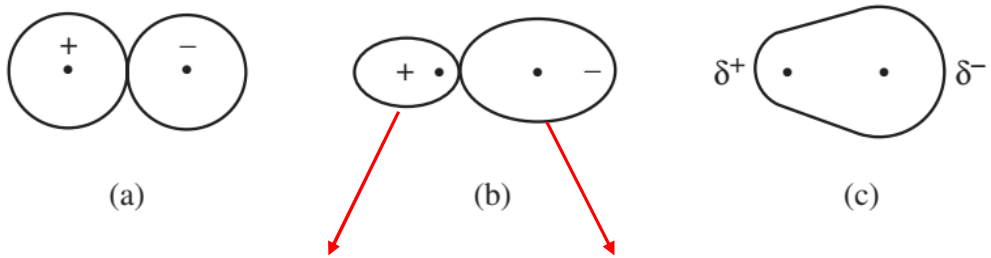

No net dipole moment
δ−
δ+
δ−
CO2
(a)
Net dipole
μ = 1.85D
δ−
δ+
δ+
H2O
(b)


No net dipole moment
δ−
δ−
δ+
δ−
BF3
Net dipole
μ = 1.17D
δ−
δ−
δ+
δ−
Cl2CO
Net dipole
μ = 1.47D
δ−
δ+
δ+
δ+
NH3


μ = 0D
No net dipole moment
Net dipole
μ = 1.92D
Net dipole
μ = 1.60D
Net dipole
μ = 1.04D
μ = 0D
No net dipole moment
δ+
δ−
CH4
CH3Cl
CH2Cl2
CHCl3
CCl4


δ−
δ+
Net dipole
NF3
SF4

Transição de Iônico para covalente – regra de Fajans



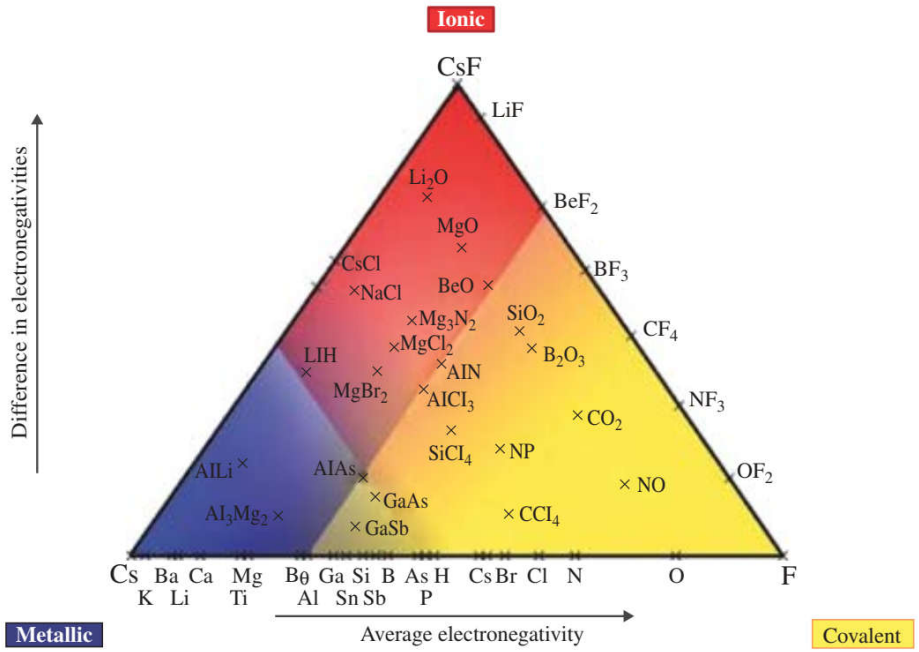
Poder polarizante

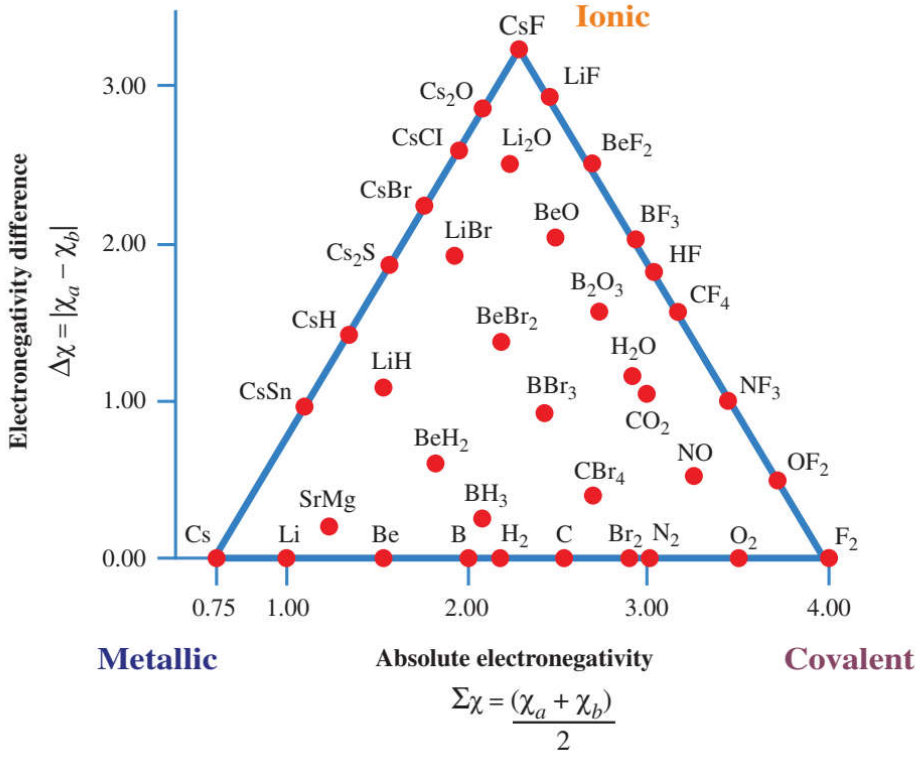
Polarizabilidade

(i) cátions com grande densidades carga,

(ii) ânions com nuvens de elétrons difusas,

(iii) cátions que têm parcialmente orbitais d preenchidos.


Ionic
CsF
LiF
Li2O
BeF2
MgO
CsCl
NaCl
BeO
BF3
Mg3N2
SiO2
CF4
MgCl2
B2O3
LIH
AlN
MgBr2
AlCl3
NF3
CO2
SiCl4
NP
OF2
AlLi
AlAs
NO
GaAs
Al3Mg2
CCl4
GaSb
Difference in electronegativities
Cs Ba Ca Mg Bθ Ga Si B As H Cs Br Cl N O F
K Li Ti Al Sn Sb P
Metallic
Average electronegativity
Covalent


Ionic
CsF
LiF
Cs2O
CsCl
Li2O
BeF2
CsBr
BeO
BF3
LiBr
Cs2S
HF
B2O3
CF4
CsH
BeBr2
H2O
LiH
CsSn
BBr3
NF3
CO2
BeH2
NO
OF2
CBr4
SrMg
BH3
Cs
Li
Be
B
H2
C
Br2
N2
O2
F2
Electronegativity difference
Δχ = |χa − χb|
3.00
2.00
1.00
0.00
0.75
1.00
2.00
3.00
4.00
Metallic
Absolute electronegativity
Covalent
Σχ = (χa + χb) / 2

Cargas Atômicas

As cargas atômicas (CA) podem ser calculadas a partir da mecânica quântica, particionando a função de onda ou com base nas densidades eletrônicas calculadas. A CA em um átomo em um molécula covalente polar é sempre intermediária entre seu número de oxidação (que assume que a ligação é 100% iônica) e sua carga formal (CF) (que assume que a ligação é 100% covalente). O percentual de caráter iônico da ligação pode ser estimado usando um fórmula desenvolvida por Linus Pauling:

$$\%\ \text{ionic character} = \frac{0.33\,(\chi_A - \chi_B)^2}{1 + 0.33\,(\chi_A - \chi_B)^2} * 100\%$$

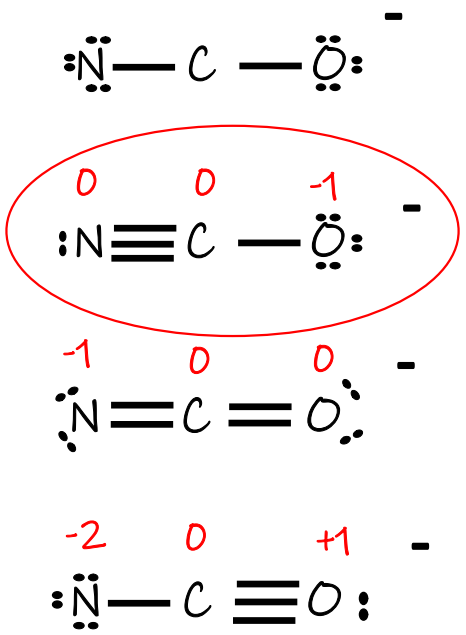
LiF — 74,8% — Iônico

$BeCl_2$ — 45,5% — Covalente

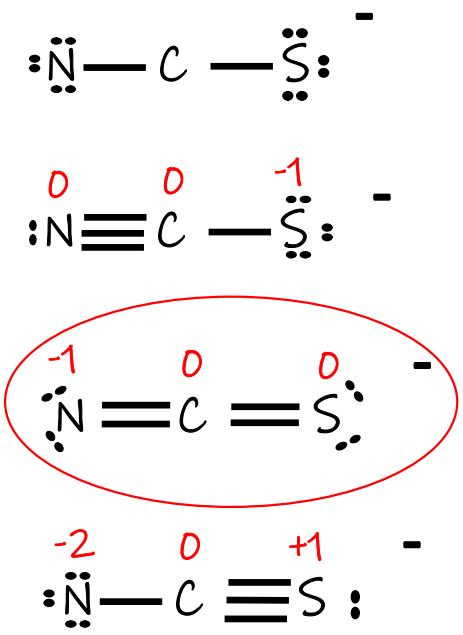
HF (F H)

$$\%\ \text{ionic character} = \frac{0.33\,(3.98 - 2.20)^2}{1 + 0.33\,(3.98 - 2.20)^2} * 100\% = 51.1\%$$

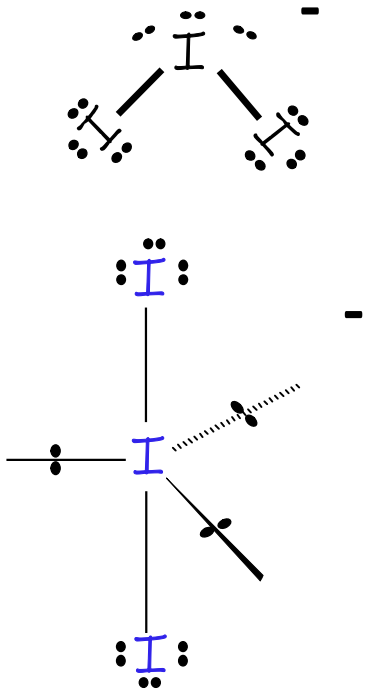
CNO^- 16 e^-



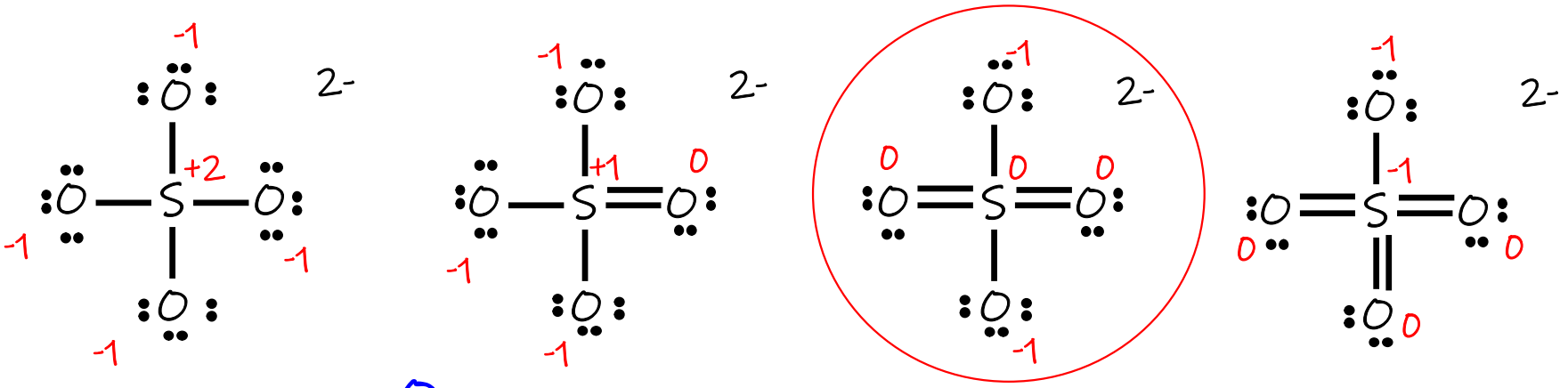
CNS^- 16 e^-

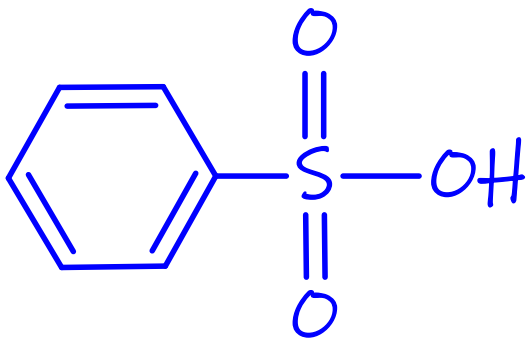


I_3^- 22 e^-



SO_4^{2-} 32 e⁻





ácido benzenossulfônico

Benzenesulfonic acid

ácido benzenossulfônico

Compare as formas, os ângulos de ligação, os comprimentos de ligação N-O e a hibridização do N nos íons de oxinitrogênios:

a) NO_2^-, 18 e^- b) NO_3^-, 24 e^- c) NO_2^+ 16 e^- d) NO_4^{3-} 32 e^- e) NO^+ 10 e^-