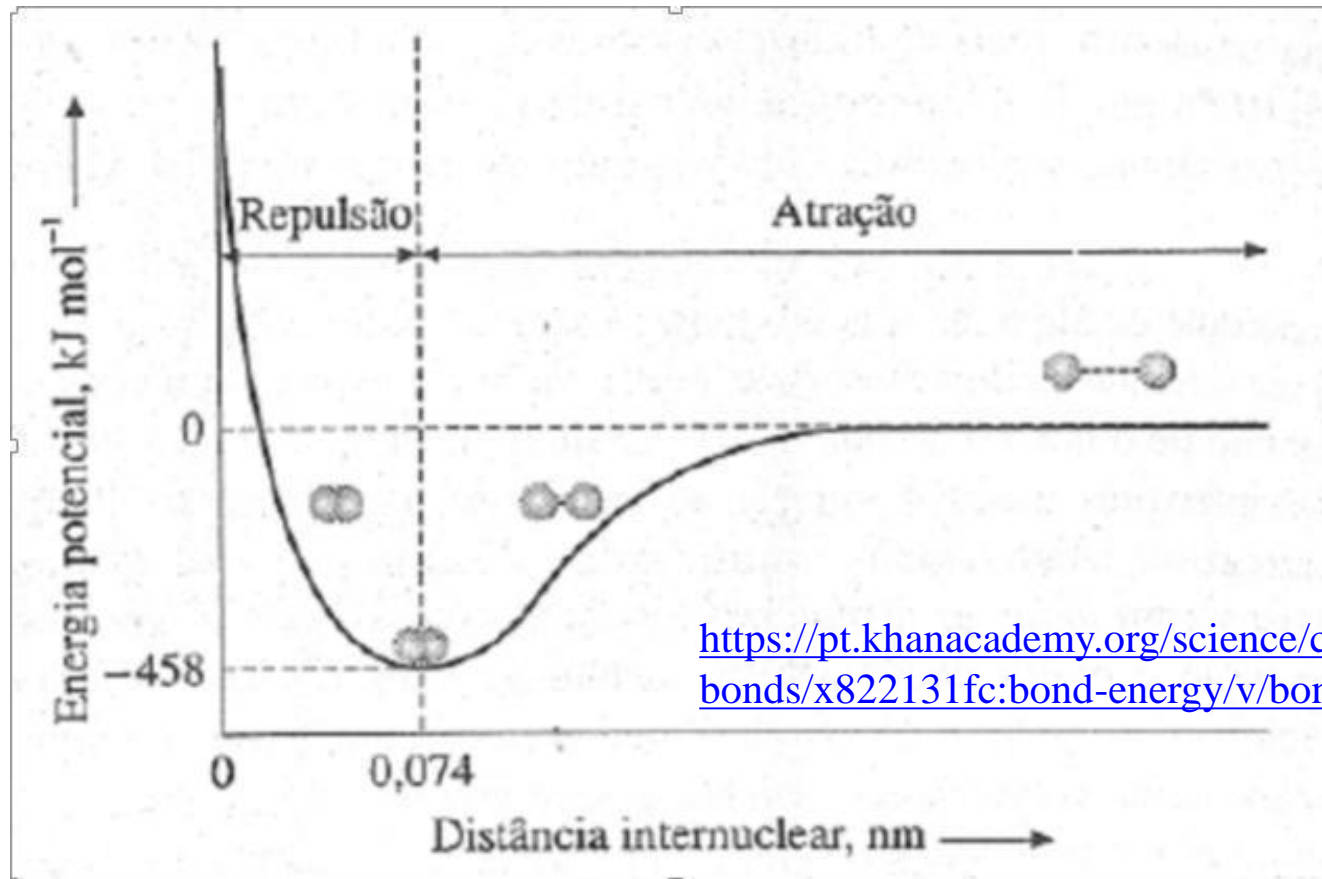


# Elétrons e a estrutura das moléculas

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

*Pense:* Por que dois átomos iguais podem formar uma ligação covalente? (*Ex.: a molécula de  $H_2$* )



# 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 ( $\text{CH}_4$ ) como exemplo

*Pense: O que a regra do octeto de Lewis prevê para o  $\text{CH}_4$ ? 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?  
(note que aqui estamos misturando um conceito muito mais recente)
  - 1c) Quais elétrons 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 <<>> 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

$1s^2$

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

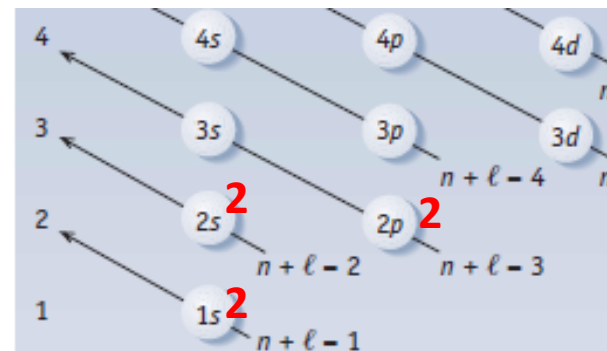
Distribuição de elétrons no **hidrogênio**:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 1.

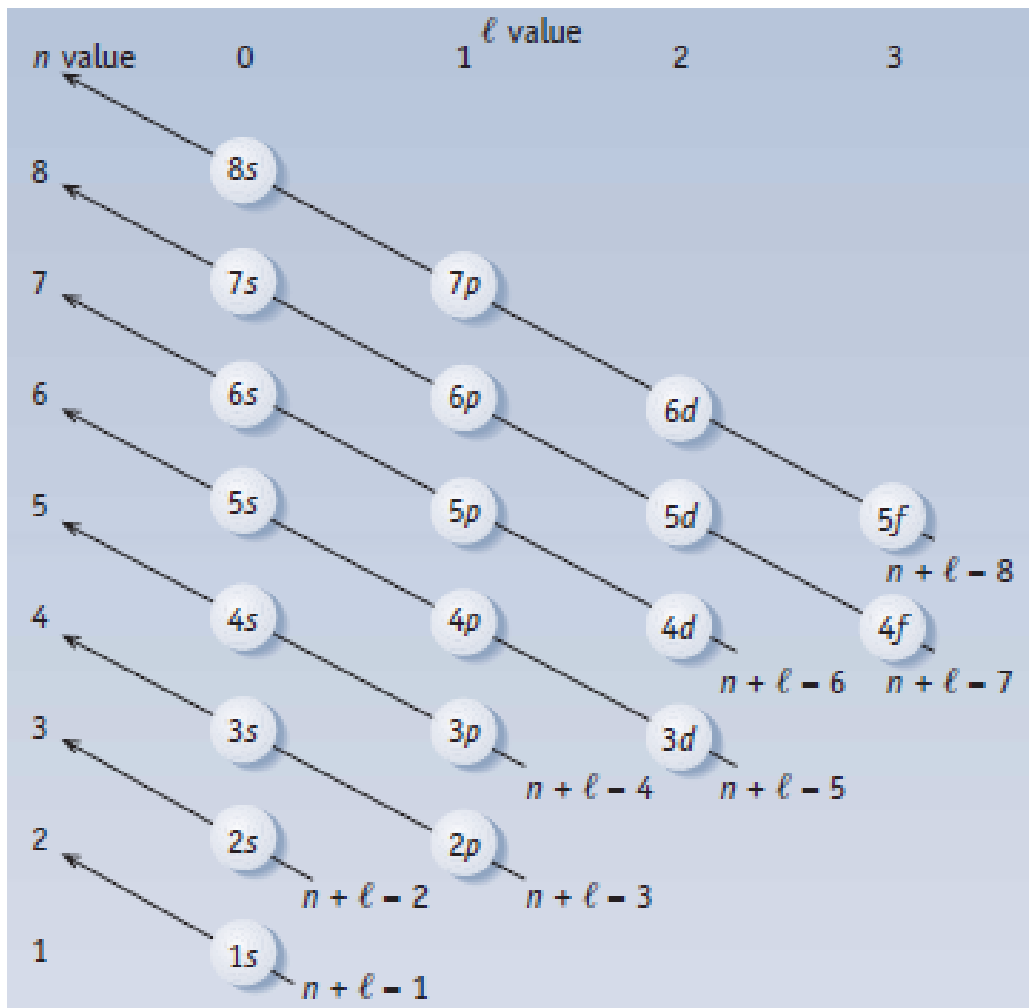
Número atômico 1 <<>> 1 próton

No estado fundamental temos, portanto, 1 elétron

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



## Reverendo a distribuição de elétrons nos orbitais atômicos



**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

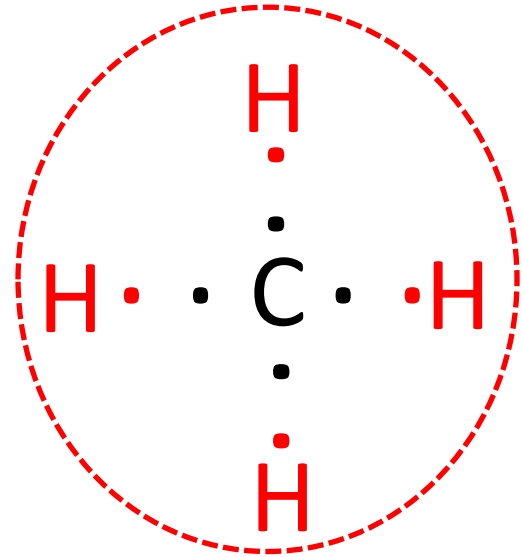
Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration	Z	Element	Configuration
1	H	1s <sup>1</sup>	37	Rb	[Kr]5s <sup>1</sup>	74	W	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>
2	He	1s <sup>2</sup>	38	Sr	[Kr]5s <sup>2</sup>	75	Re	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>
3	Li	[He]2s <sup>1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

*Quer decorar??*

*Melhor aprender a lógica .....*

## Regra do Octeto para o metano

8 elétrons na camada de valência →



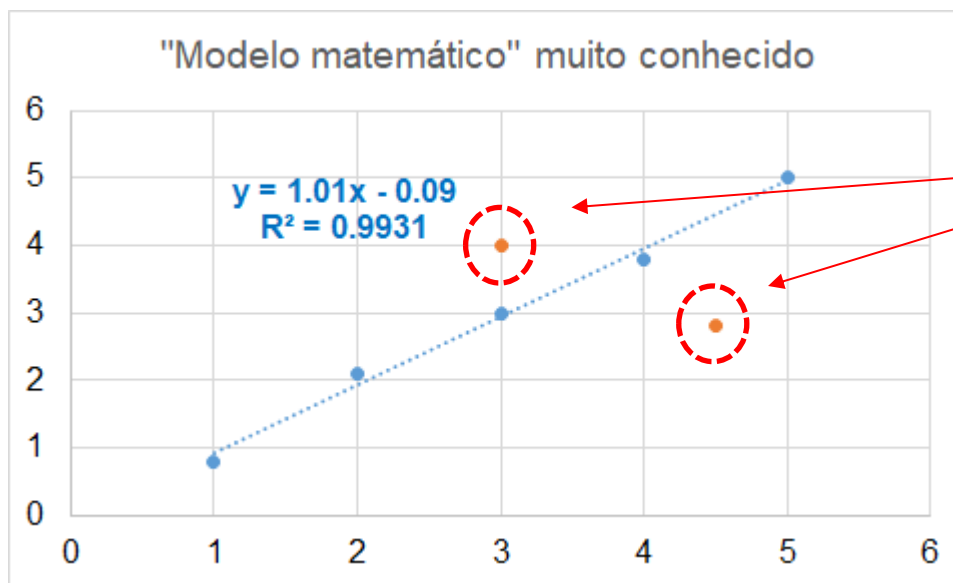
***Pense:*** Essa é a distribuição espacial dos átomos na molécula de metano?

Experimentalmente sabe-se que a molécula é angular com cerca de  $109^\circ$  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**



*E esses dados??*

*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

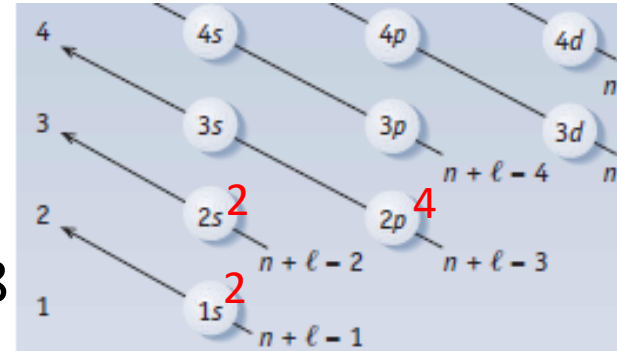
$1s^2$   
 $2s^2$        $2p^4$       (6 elétrons na camada de valência)

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)

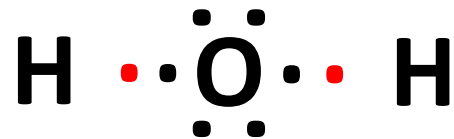


**Modelo para a molécula ???** >> regra do octeto >>

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  $104^\circ$  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**

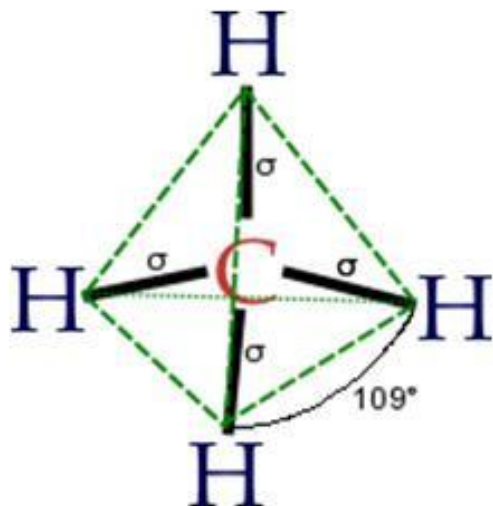
## ***Voltando à molécula de metano***

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

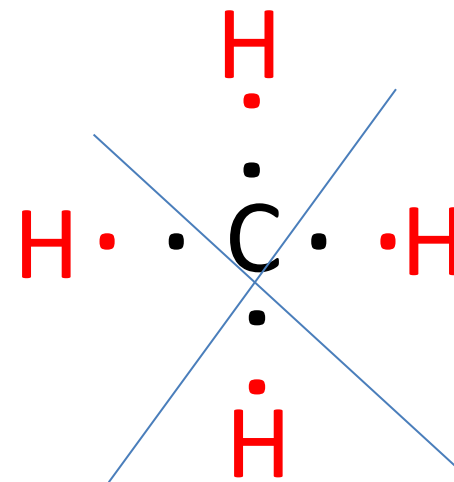
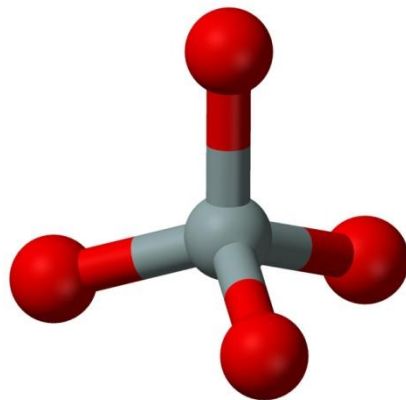
*prevê que, devido a repulsão eletrostática, os pares de elétrons estarão o mais separados possível no arranjo espacial da molécula*

*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**

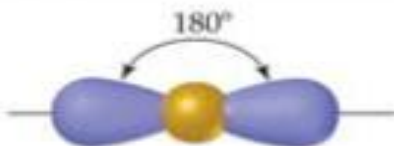
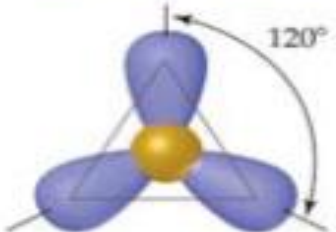
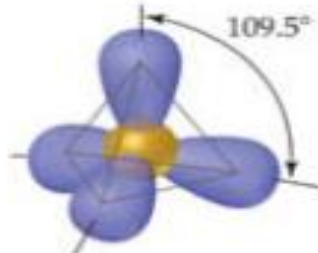
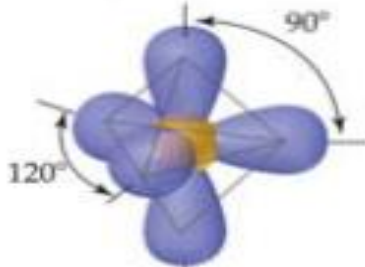
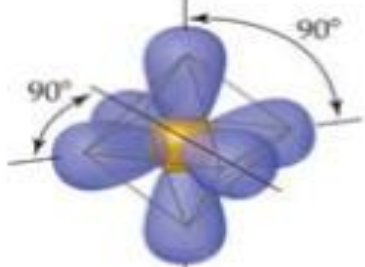
*O modelo prevê que, em **um arranjo molecular**, as regiões de maior densidade eletrônica contendo **os elétrons de valência** se **distanciam o máximo possível no espaço** devido à repulsão eletrostática elétron-elétron.*

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

*De fato, esses  
arranjos são  
experimentalmente  
observados para  
um número  
enorme de  
moléculas*

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

# 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*

>> Pense: *Como abordar o problema??*