

# Moléculas polares

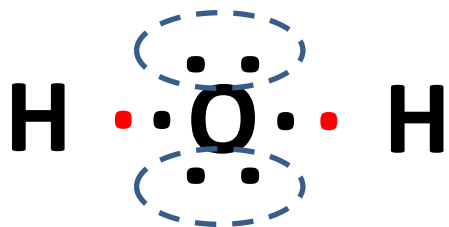
*Porque a polaridade das ligações e das moléculas é muito importante?*

*A água é polar ou apolar ?*

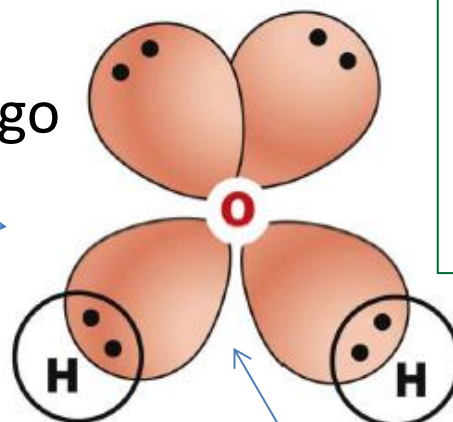
*Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 3>> p. 93-131*

# Voltando à molécula de água como exemplo

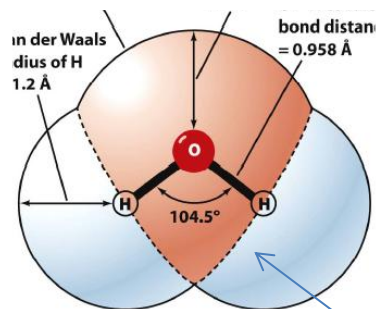
>> *moléculas com o átomo central contendo elétrons não compartilhados*



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*

# TABELA PERIÓDICA É PARA USAR.....

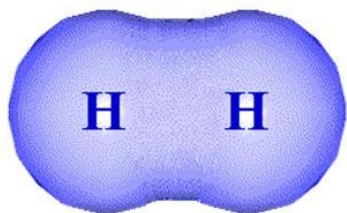
Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓Period																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	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		

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

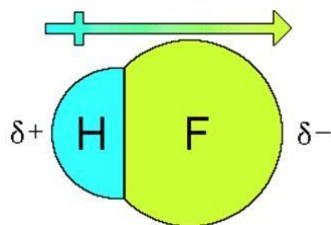
O gradiente de cores indica o  
gradiente de cargas:



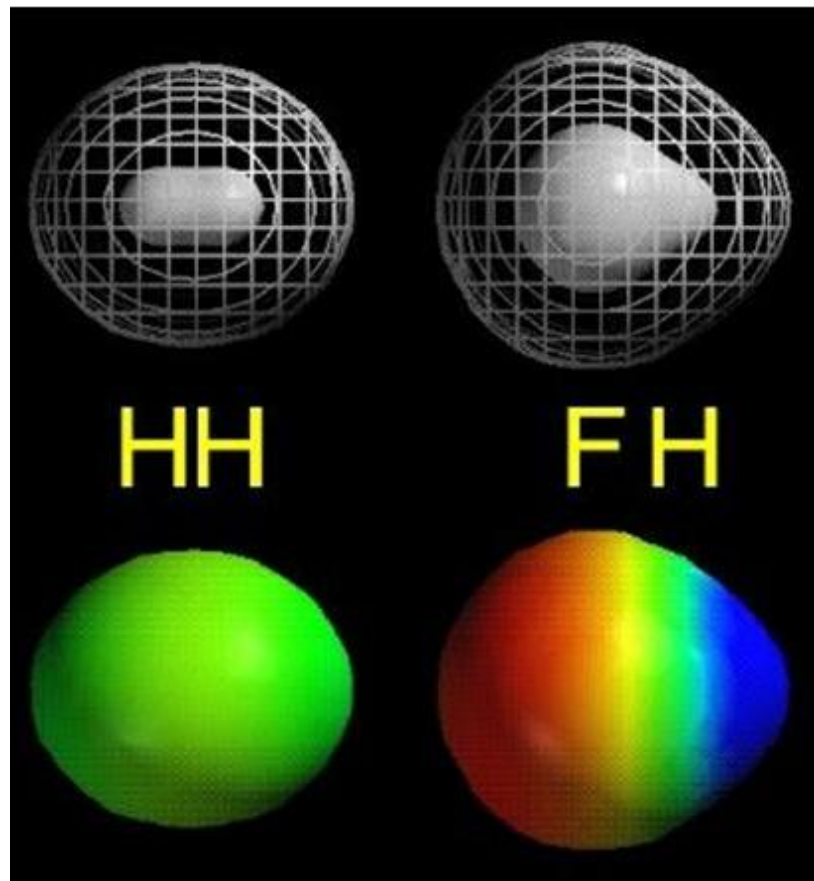
## Momento de dipolo da ligação



$$\mu = 0$$

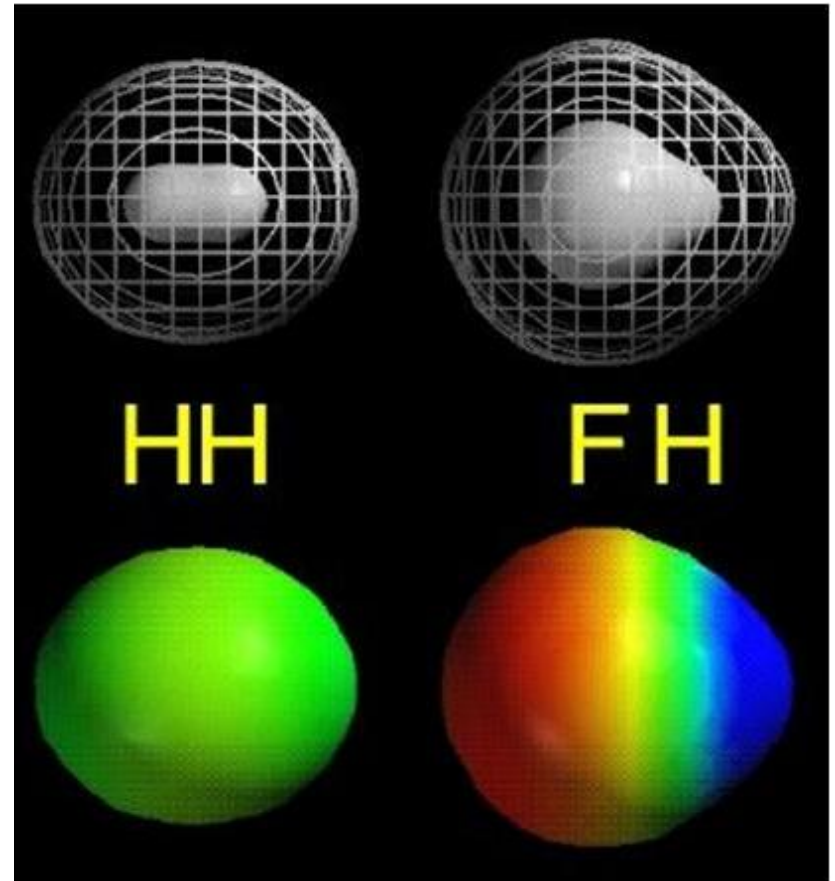


$$\mu \neq 0$$

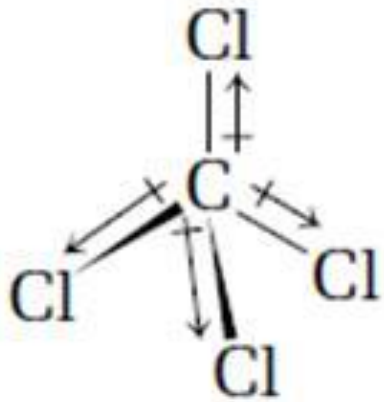


Se átomos de  
eletronegatividades diferentes  
estão envolvidos na ligação, há  
distorção na eletrosfera da  
molécula

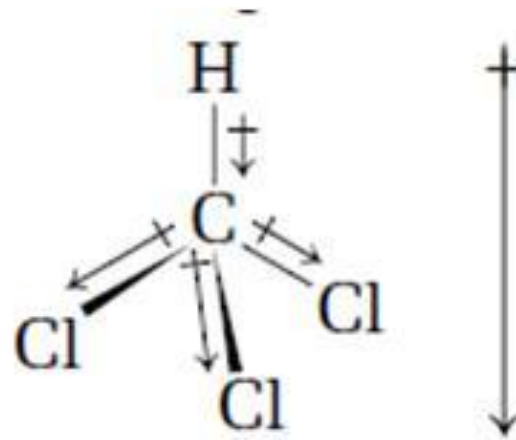
**Pense:** se as ligações covalentes em estudo quebrarem, qual seria a tendência de transferência de elétrons??



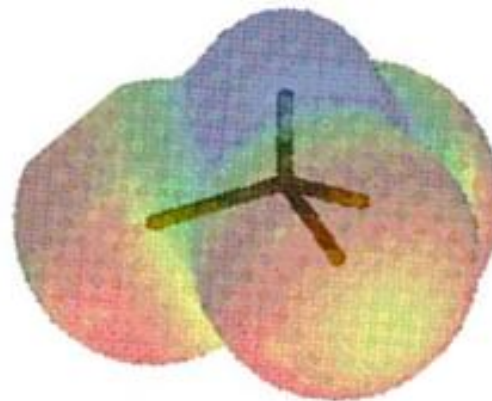
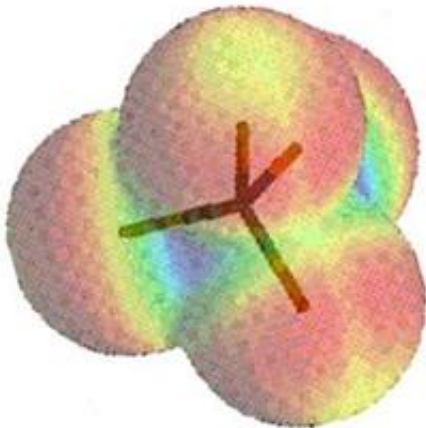
# Momento de dipolo em moléculas poliatômicas



non-polar



polar



# ***Pense e associe conhecimentos***

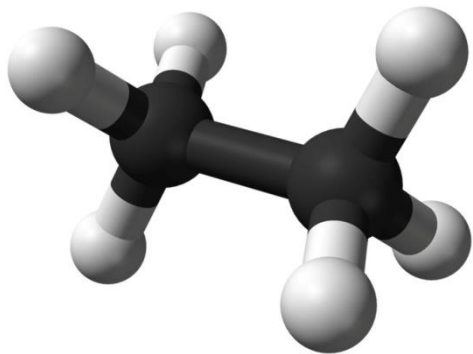
***>> Solubilidade em água de moléculas com ligações covalentes***

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

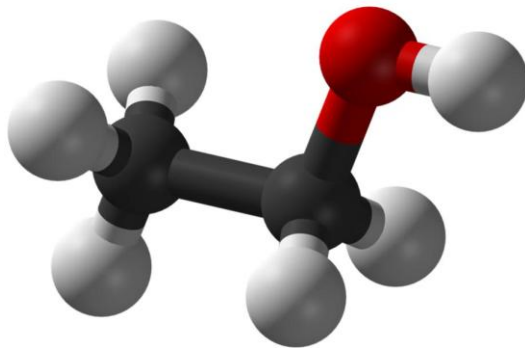
*Porque a molécula de etanol é solúvel em água?*

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

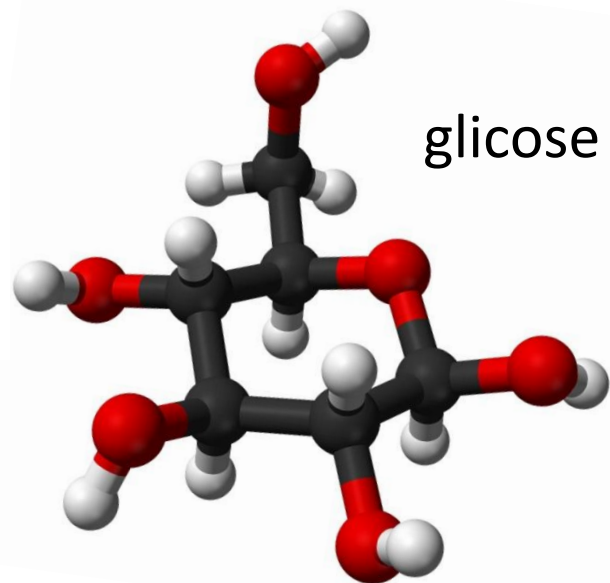
*Porque a molécula de celulose é insolúvel em água?*



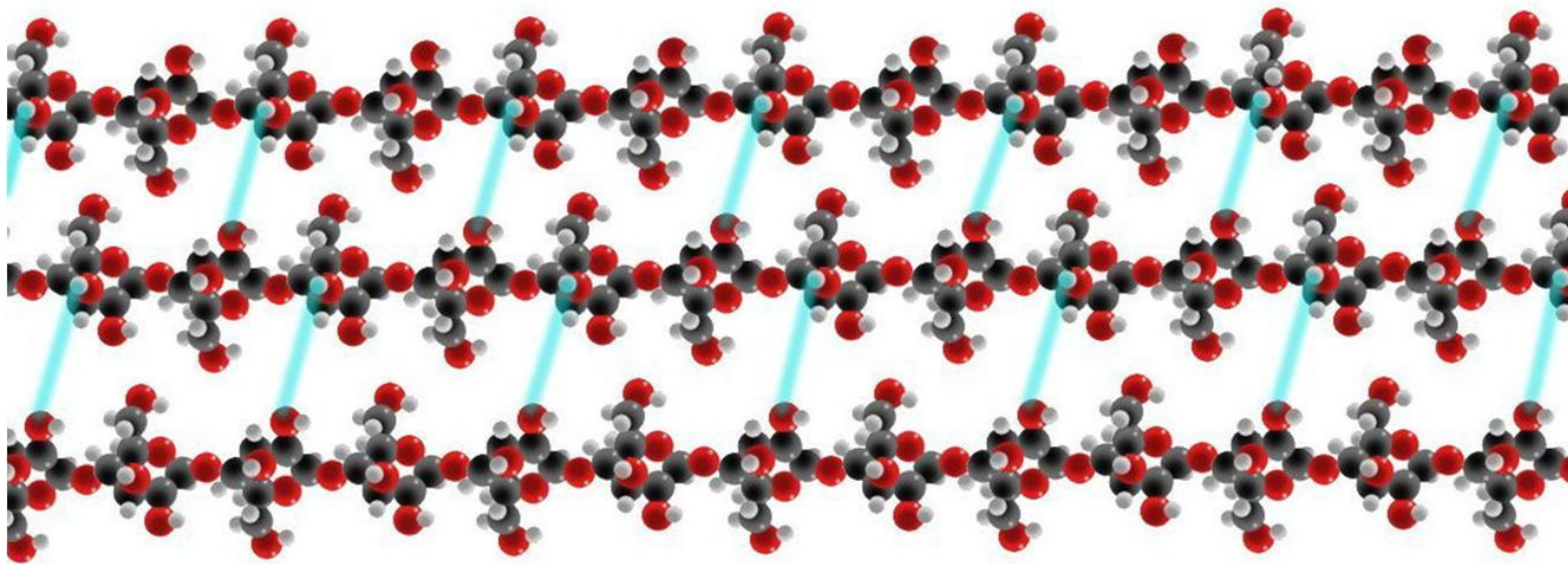
etano



etanol



glucose

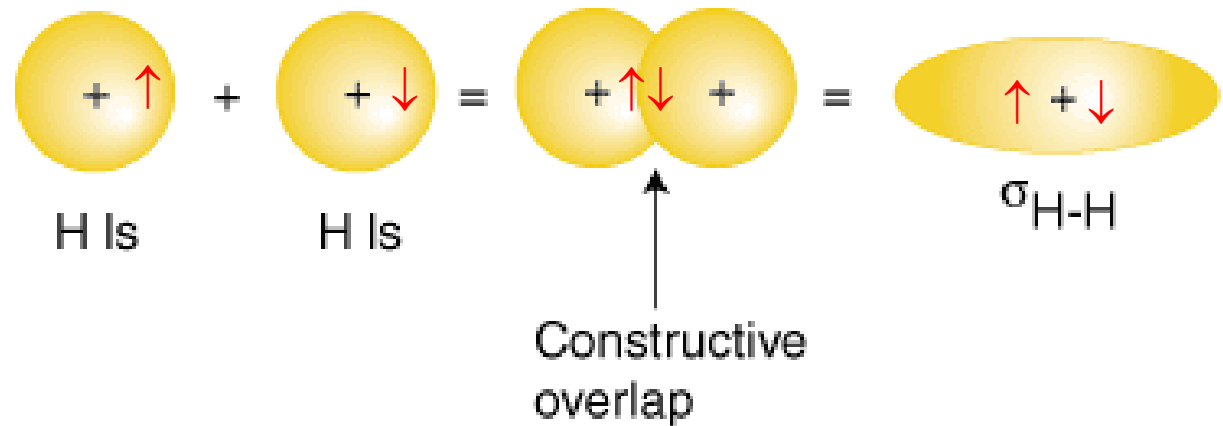


celulose

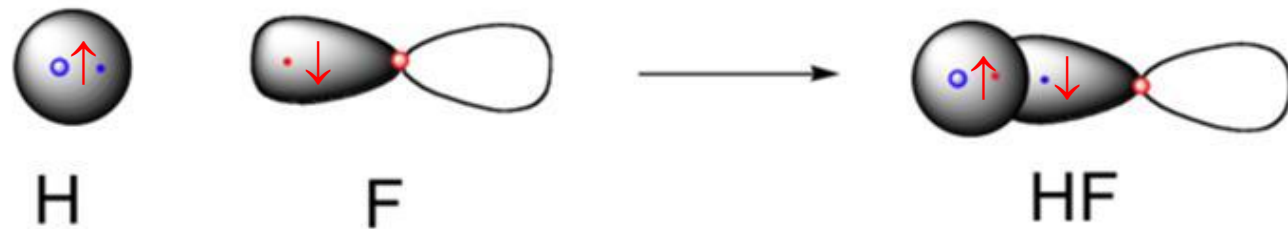
Sofisticando os modelos: **Teoria da ligação de valência**  
combinando orbitais atômicos para formar um novo orbital  
"da molécula"

*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 ( $\sigma$ )



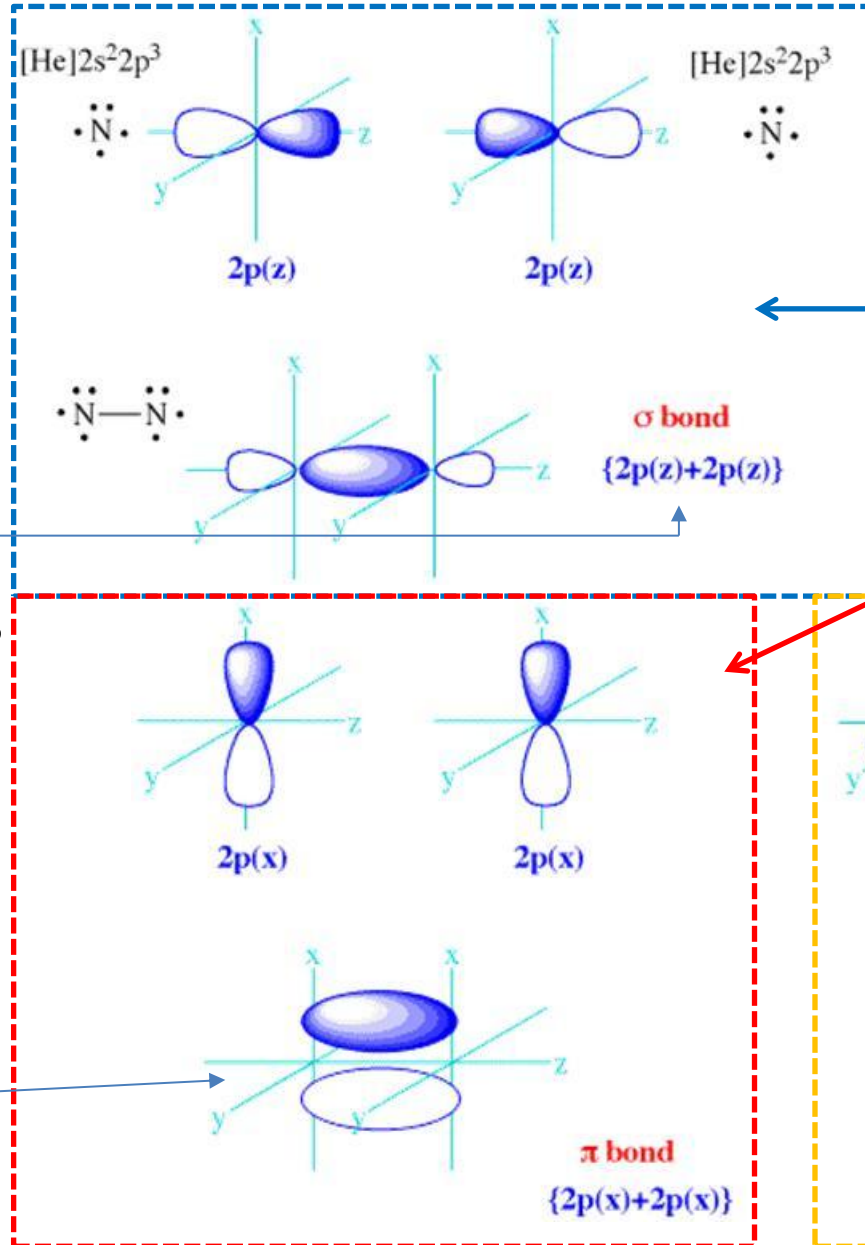
**A molécula de HF**  
a sobreposição  
frontal dos orbitais  
da origem a uma  
ligação Sigma ( $\sigma$ )



# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

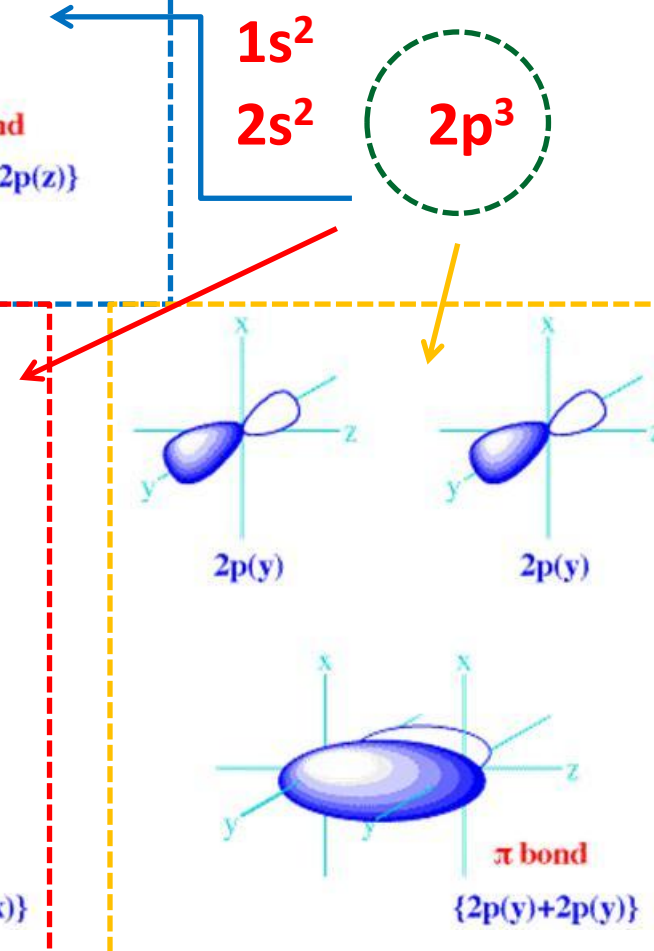
## ligações $\pi$

A molécula de  $N_2$   
A sobreposição frontal dos orbitais dá 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:

$1s^2$   
 $2s^2$   $2p^3$



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

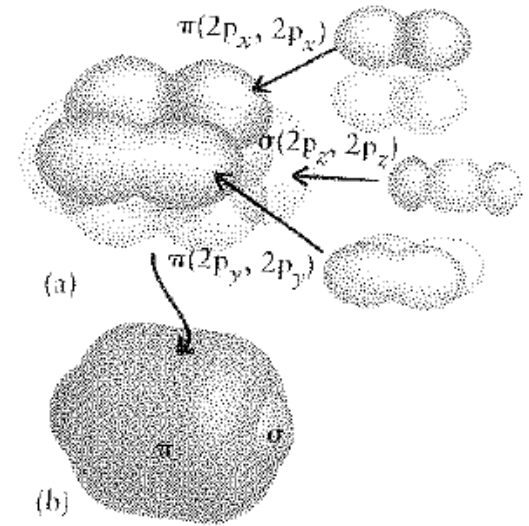
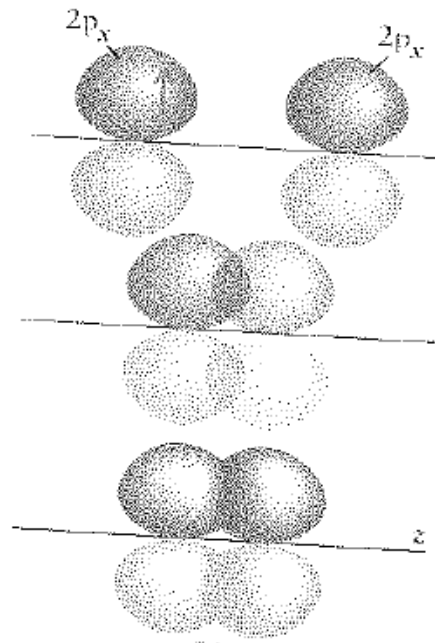
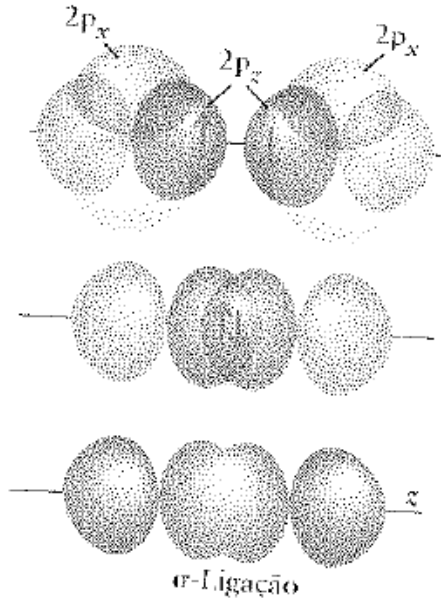
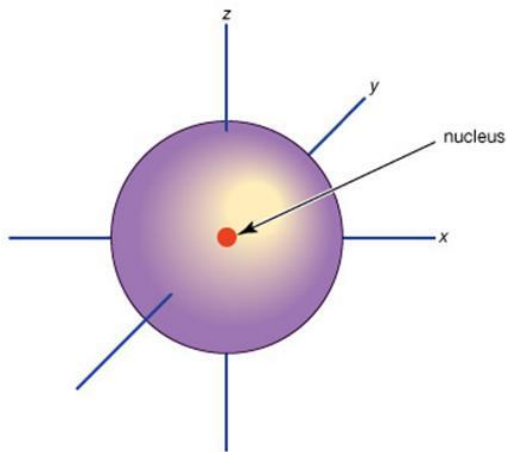


FIGURA 3.10 Uma ligação  $\sigma$  forma-se pelo emparelhamento de spins de elétrons...

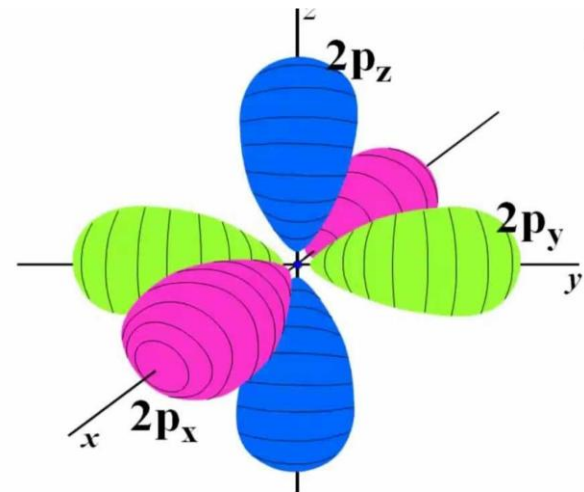
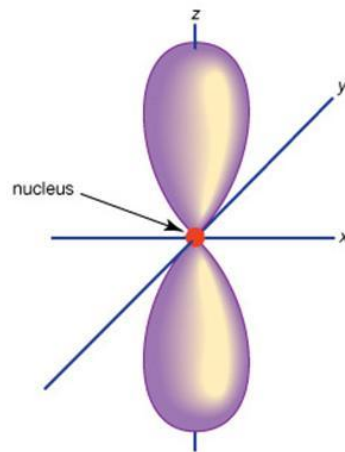
# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

**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°

# 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)

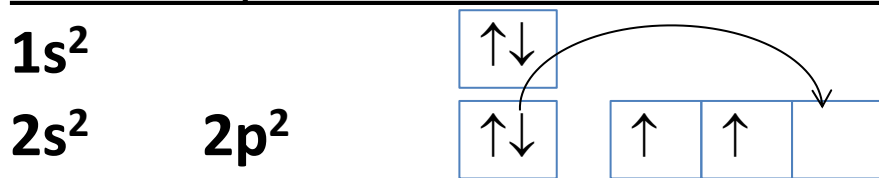
*Porque assumimos que os 4 elétrons da camada de valência são iguais se eles estão em orbitais atômicos diferentes?*

*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:

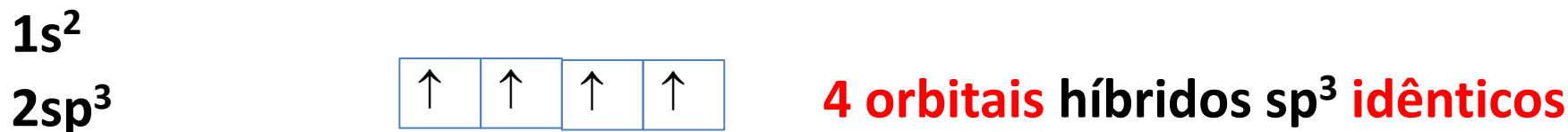


**C** no estado fundamental  
*a diferença entre os níveis de energia dos orbitais 2s e 2p é pequena → a promoção do elétron 2s ocorre facilmente*

Distribuição de elétrons no Carbono:

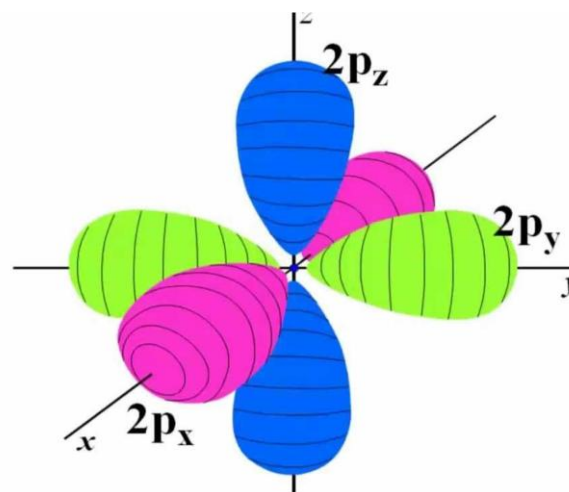
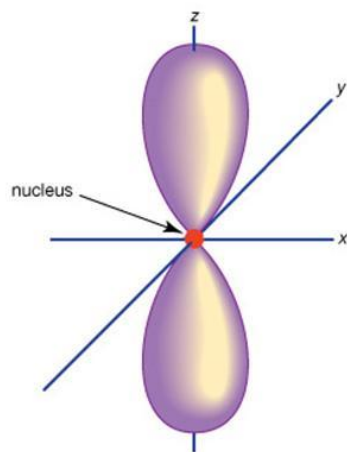
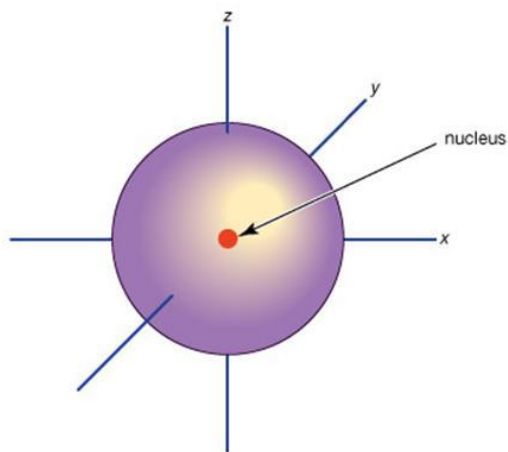


Distribuição de elétrons no Carbono hibridado  $sp^3$ :



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

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



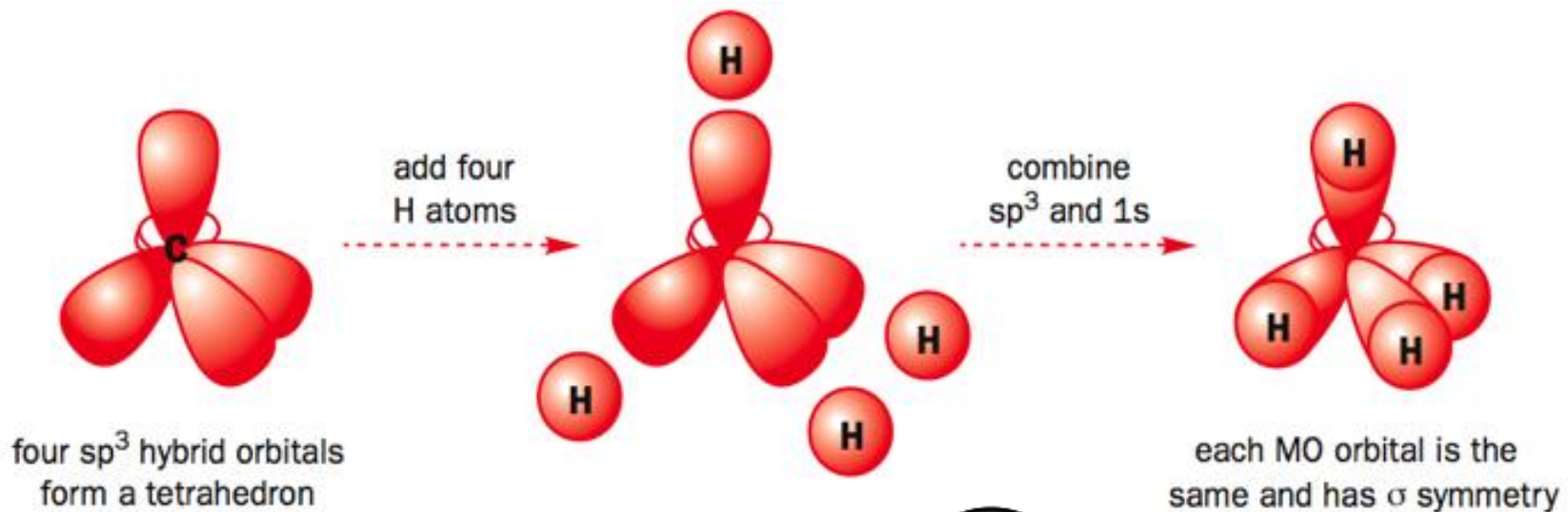
© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.

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

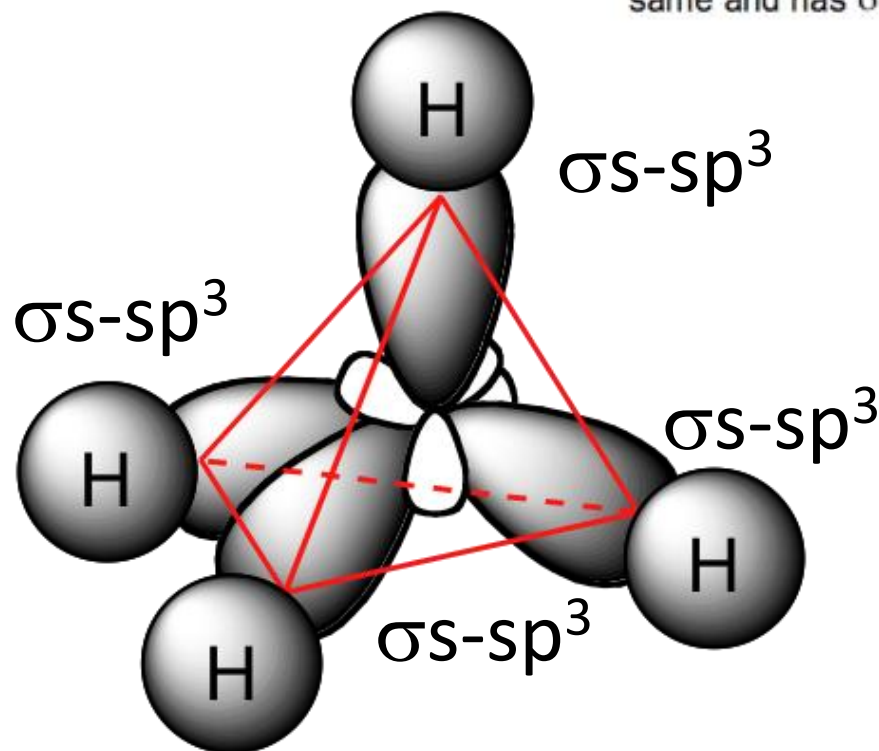


4 orbitais híbridos  
 $sp^3$  idênticos

# 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*