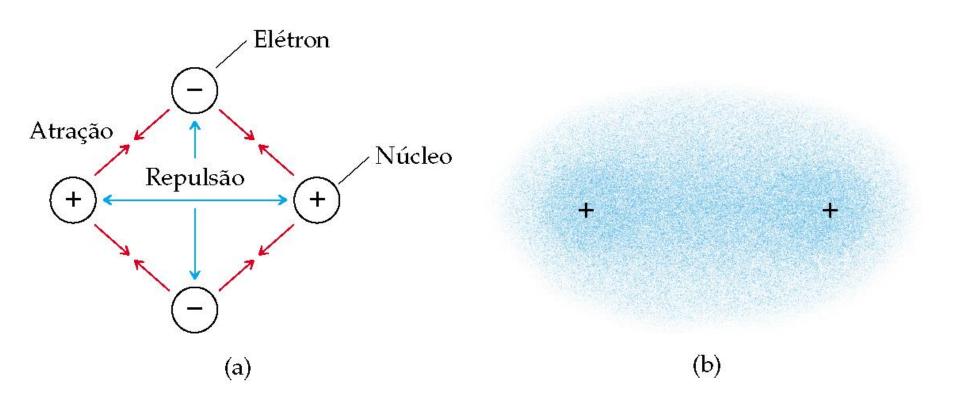
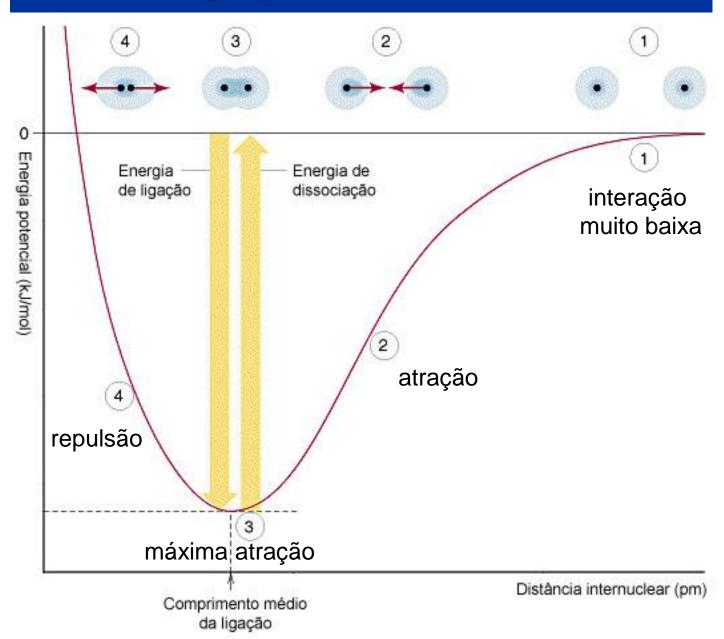


- Átomos similares = eletronegatividade similares
- Quando dois átomos similares se ligam, nenhum deles quer perder ou ganhar um elétron para formar um octeto.
- Quando átomos similares se ligam, eles compartilham pares de elétrons para que cada um atinja o octeto.
- Cada par de elétrons compartilhado constitui uma ligação química.
- Por exemplo: H + H → H₂ tem 2 elétrons conectando os dois núcleos de H.





Tipos de ligação

A: A \rightarrow Covalente apolar (não polar): H₂, N₂, O₂, Cl₂

 $A^{\delta+}:B^{\delta-} \rightarrow Covalente polar: H^{\delta+}:Cl^{\delta-}, H^{\delta+}:O^{\delta-}$

$$\begin{array}{c}
\delta + H & \longrightarrow C I \delta \\
\mu & = \delta . d
\end{array}$$

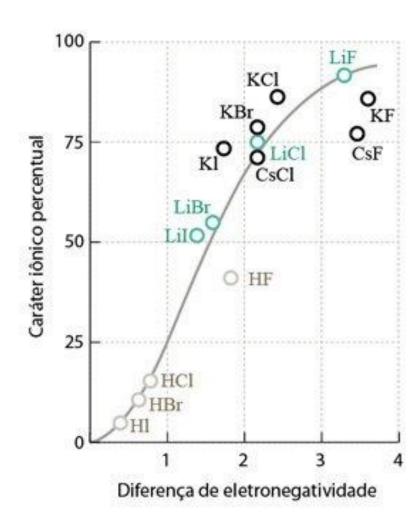
A+[:**B**]⁻ → Iônica: Na+[Cl]⁻

Tipos de ligação

"Regra do 1,7" H+[Cl]- ou Hδ+ :Clδ-??

Eletronegatividades:

H = 2,2 CI = 2,8

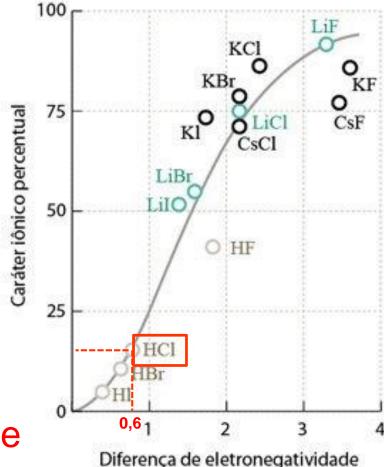


Tipos de ligação

Eletronegatividades:

$$H = 2,2$$
 $CI = 2,8$

$$2,8-2,2=0,6$$



predominantemente covalente

Tipos de ligação

H⁺ [CI]⁻
$$\rightarrow \mu = 6,08 D$$

 δ ⁺ H \leftrightarrow CI δ ⁻

H^{δ+} :Cl^{δ-}
$$\rightarrow \mu$$
 = 1,08 D
 δ + = 0,178+
 δ - = 0,178-

Brown - pág 264, COMO FAZER 8.5

Estruturas de Lewis

 As ligações covalentes podem ser representadas pelos símbolos de Lewis dos elementos:

 Nas estruturas de Lewis, cada par de elétrons em uma ligação é representado por uma única linha:

Ligações múltiplas

- É possível que mais de um par de elétrons seja compartilhado entre dois átomos (ligações múltiplas):
 - Um par de elétrons compartilhado = ligação simples (H₂);
 - Dois pares de elétrons compartilhados = ligação dupla (O_2) ;
 - Três pares de elétrons compartilhados = ligação tripla (N_2) .

• Em geral, a distância entre os átomos ligados diminui à medida que o número de pares de elétrons compartilhados aumenta.

N-N	N=N	$N \equiv N$
1,47Å	1,24Å	1,10Å

- 1. Some os elétrons de valência de todos os átomos.
- 2. Escreva os símbolos para os átomos a fim de mostrar quais átomos estão ligados entre si e una-os com uma ligação simples (2 elétrons).
- 3. Complete o octeto dos átomos *ligados ao átomo central*.
- 4. Coloque os elétrons que sobrarem no átomo central.
- 5. Se não existem elétrons suficientes para dar ao átomo central um octeto, tente ligações múltiplas.

Exemplos:

Moléculas: H₂, HF, CH₄, NH₃, H₂O, CCl₄, HClO₄

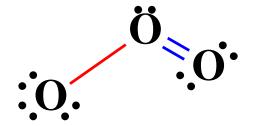
Íons: NH₄⁺, ClO⁻

2 átomos centrais: C₂H₆, N₂H₄

Ligações múltiplas: O₂, N₂, C₂H₄, C₂H₂, HCN, O₃

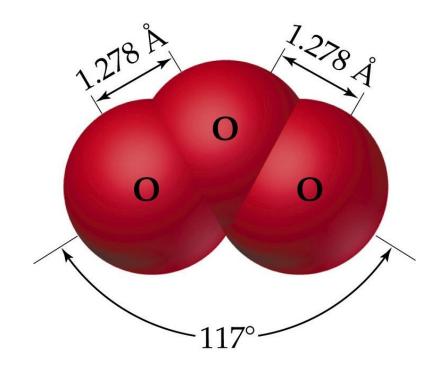
Estruturas de ressonância

- Algumas moléculas não são bem representadas pelas estruturas de Lewis.
- Exemplo: <u>experimentalmente</u>, <u>o ozônio tem duas ligações</u> <u>idênticas</u>, ao passo que a estrutura de Lewis requer uma simples (mais longa) e uma ligação dupla (mais curta).



O - O 1,480 Å O = O 1,210 Å

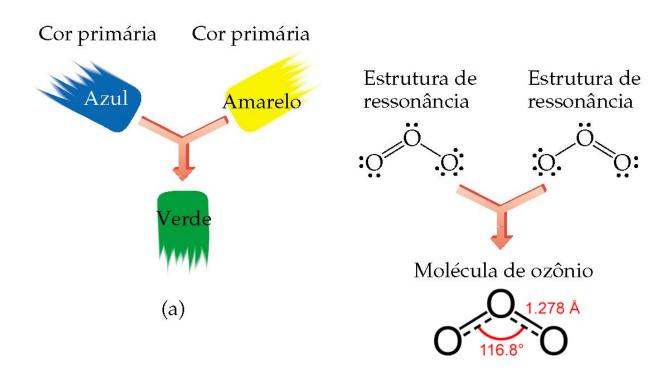
Estruturas de ressonância



O - O 1,480 Å O = O 1,210 Å

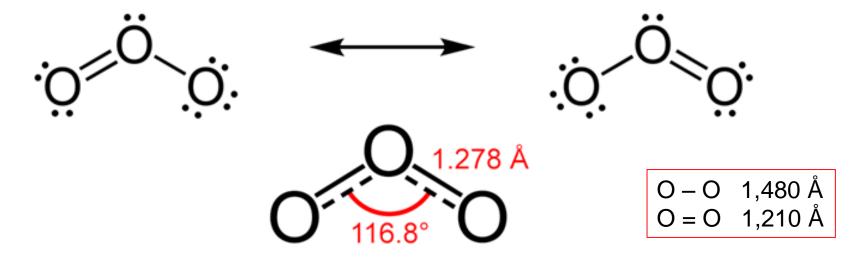
Estruturas de ressonância

• As estruturas de ressonância são <u>tentativas</u> de representar uma estrutura <u>real</u>, que é uma <u>mistura</u> entre várias possibilidades extremas.



Estruturas de ressonância

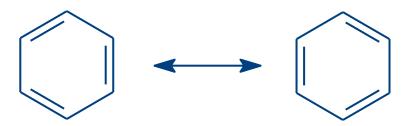
 No ozônio, a estrutura de ressonância tem duas ligações idênticas, de <u>caráter intermediário</u>.



• Outros exemplos comuns: NO₂-, NO₃-, SO₂, SO₃, C₆H₆.

Ressonância no benzeno

- O benzeno consiste de seis átomos de carbono em um anel hexagonal. Cada átomo de C está ligado a dois outros átomos de C e um átomo de hidrogênio.
- Pela estrutura de Lewis, existem ligações simples e duplas alternadas entre os átomos de C.



 A estrutura experimental do benzeno mostra que todas as ligações <u>C-C têm o mesmo comprimento</u>.

Ressonância no benzeno

Escrevemos as estruturas de ressonância para o benzeno de tal forma que haja ligações simples entre cada par de átomos de C e os seis elétrons adicionais estejam <u>deslocalizados</u> sobre todo o anel:



 $C - C \sim 1,50 \text{ Å}$ $C = C \sim 1,30 \text{ Å}$

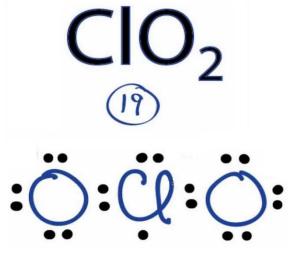
No benzeno: C = C ~ 1,40 Å

Existem três classes de exceções à regra do octeto:

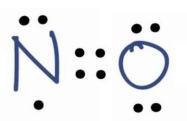
- moléculas com número ímpar de elétrons;
- moléculas nas quais um átomo tem menos de um octeto, ou seja, moléculas deficientes em elétrons;
- moléculas nas quais um átomo tem mais do que um octeto, ou seja, moléculas com expansão de octeto.

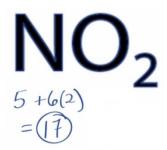
Número impar de elétrons

• Poucos exemplos. ClO₂, NO e NO₂ têm um número ímpar de elétrons.





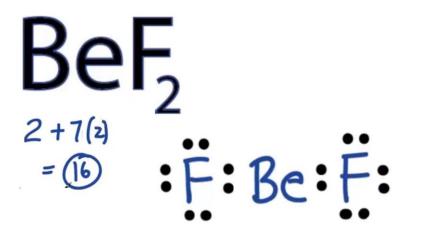


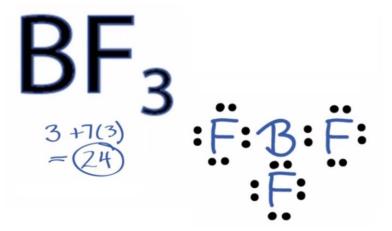




Deficiência em elétrons

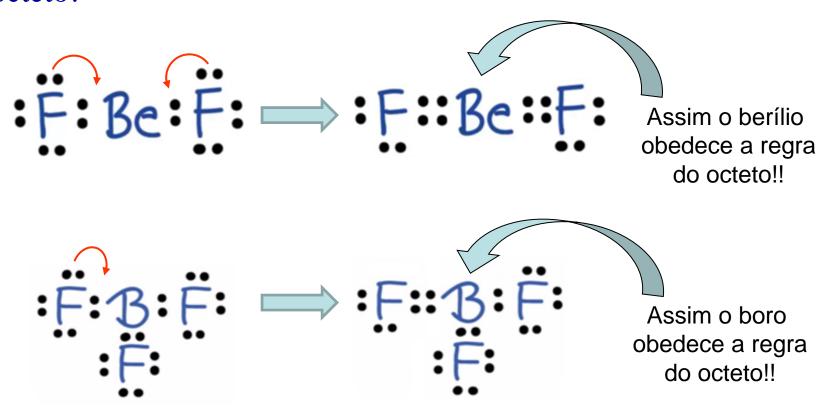
- Relativamente raro.
- As moléculas com menos de um octeto são típicas para compostos dos Grupos 2A, e 3A.
- Os exemplos mais típicos São o BeF₂ e BF₃.





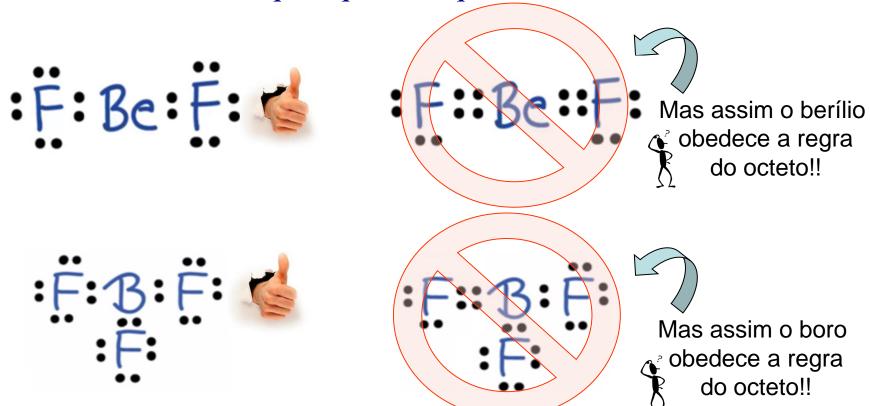
Deficiência em elétrons

 As estruturas de Lewis podem ser escritas seguindo a regra do octeto!



Deficiência em elétrons

As estruturas de Lewis nas quais existe uma ligação dupla com F são menos realistas que aquela na qual existe deficiência de elétrons.



- É possível desenhar mais de uma estrutura de Lewis, obedecendose ou não a regra do octeto para todos os átomos.
- Para determinar qual estrutura é mais razoável, usamos a carga formal.
- A carga formal é a carga que um átomo teria em uma molécula se todos os outros átomos tivessem a mesma eletronegatividade.
- <u>Exagero do caráter covalente</u> de uma ligação: compartilhamento perfeito de elétrons.

Número de oxidação: Exagero do caráter *iônico* de uma ligação: transferência total de elétrons:

Carga formal: Exagero do caráter *covalente* de uma ligação: compartilhamento perfeito de elétrons (não consideramos a diferença de eletronegatividade):

- Para calcular a carga formal:
 - Todos os elétrons não ligados são atribuídos ao átomo no qual estão localizados.
 - Metade dos elétrons ligados é atribuída a cada átomo em uma ligação (compartilhamento perfeito)

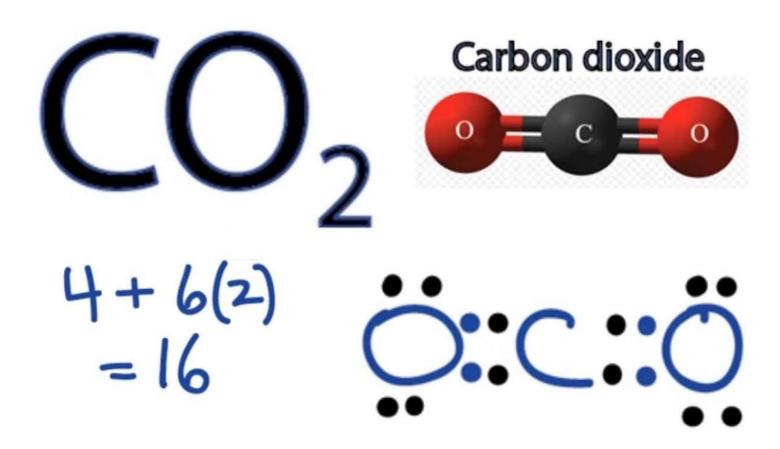
$$: A \cdot + \cdot B : \longrightarrow : A : B :$$

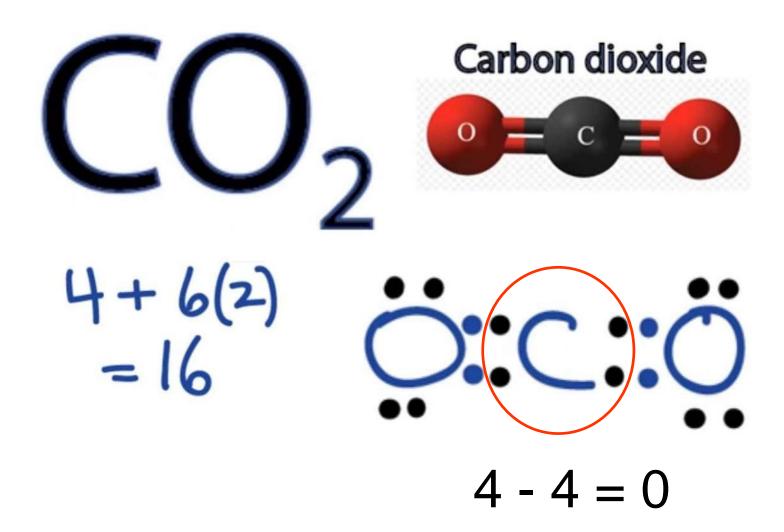
A carga formal é:

(n° de e- de valência no átomo isolado)

menos

(n° de e- atribuídos ao átomo na estrutura de Lewis)





A estrutura mais estável tem:

A carga formal mais próxima de zero em cada átomo;

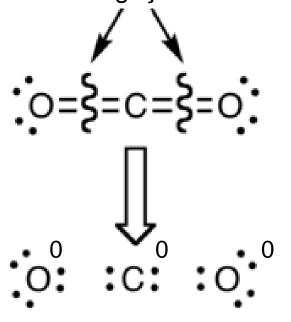
A carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

Ex. O CO₂ possui duas formas da estrutura de Lewis. Qual deve ser a mais estável?

$$\ddot{O} = C = \ddot{O}$$
 $\vdots \ddot{O} - C \equiv O$:
 e^- valência: 6 4 6 6 4 6
 e^- atr. ao átomo: 6 4 6 7 4 5

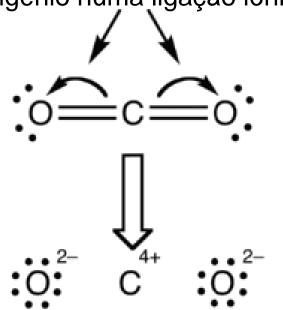
Carga formal: $0 \quad 0 \quad 0 \quad -1 \quad 0 \quad +1$

Compartilhamento igual dos elétrons da ligação covalente



CARGA FORMAL

Transferência dos elétrons para o oxigênio numa ligação iônica

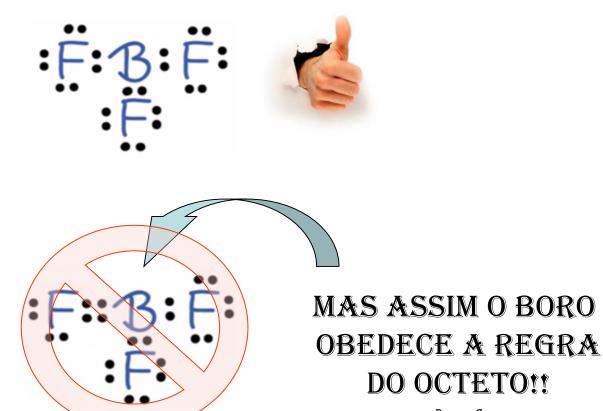


NÚMERO DE OXIDAÇÃO

Existem ainda outras esturutas de Lewis possíveis para o CO₂ nas quais o átomo central não é o átomo de carbono. São mais realistas? Não.

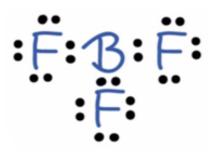
(a)
$$|\bar{o}| = c = \bar{o}|$$
 (b) $|\bar{o}| = c = o|$

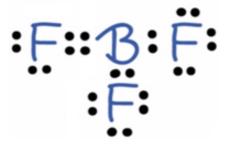
$$(c) | \bar{O} = 0 = \bar{C}|$$
 $(d) | \bar{C} = 0 = 0|$ $(e) | \bar{O} = 0 = 0|$



A estrutura mais estável tem:

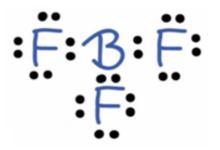
- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

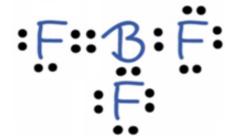




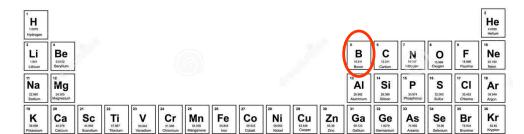
A estrutura mais estável tem:

- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

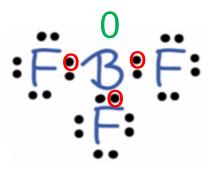


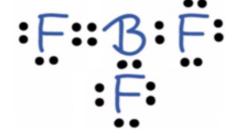


C.F. (B): 3 -



- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

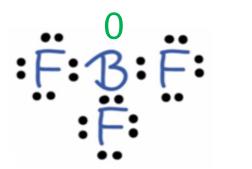


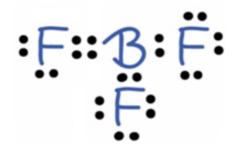


C.F. (B):
$$3 - 3 = 0$$

A estrutura mais estável tem:

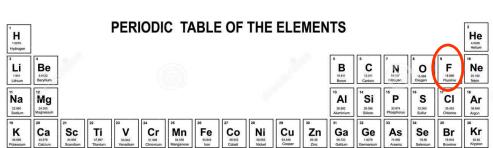
- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.





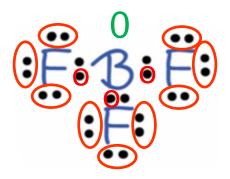
C.F. (B): 3 - 3 = 0

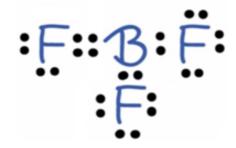
C.F. (F): 7 -



A estrutura mais estável tem:

- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

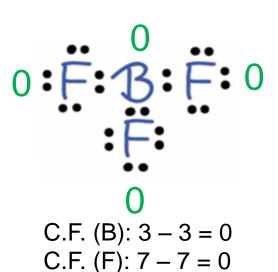


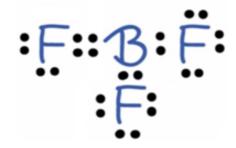


C.F. (B): 3 - 3 = 0

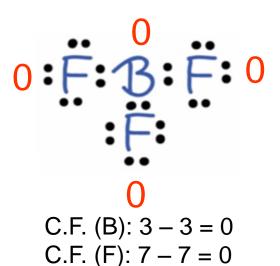
C.F. (F): 7 - 7

- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.



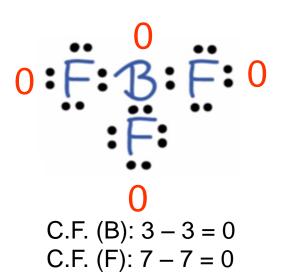


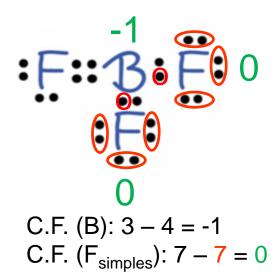
- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.



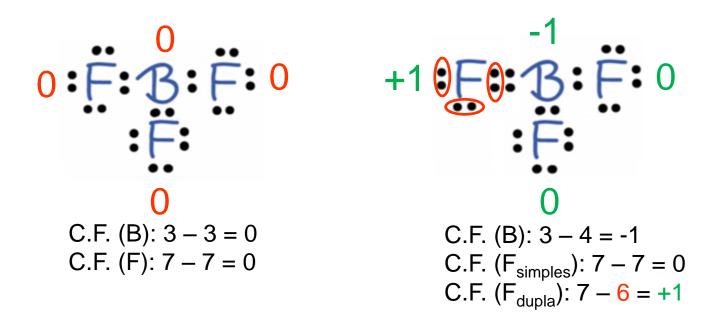
C.F. (B):
$$3 - 4 = -1$$

- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

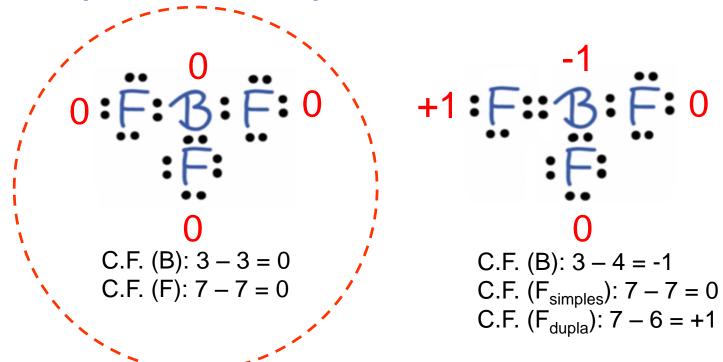




- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.



- a carga formal mais baixa em cada átomo,
- a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.



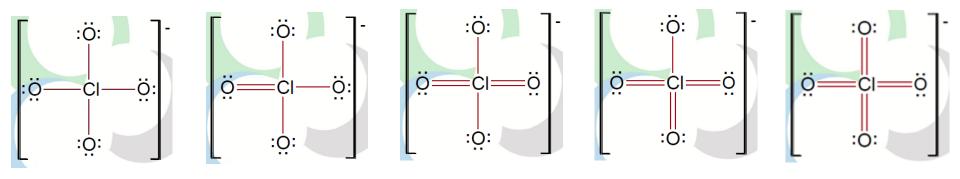
A estrutura de Lewis do íon fulminato, CNO⁻ (nitrogênio como átomo central), possui três contribuições de ressonância, <u>todas obedecendo à regra do octeto</u>. Pede-se:

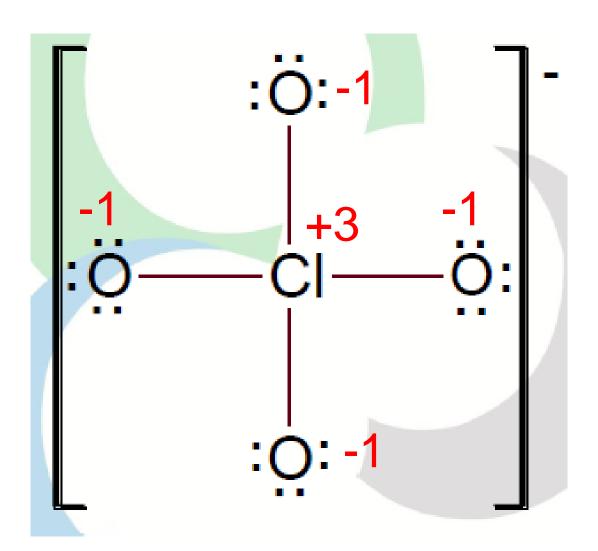
- Construa as estruturas de Lewis de contribuições de ressonância;
- Determine a carga formal em cada átomo.
- Indique qual estrutura de ressonância que deve possuir a maior contribuição para a estrutura real da molécula

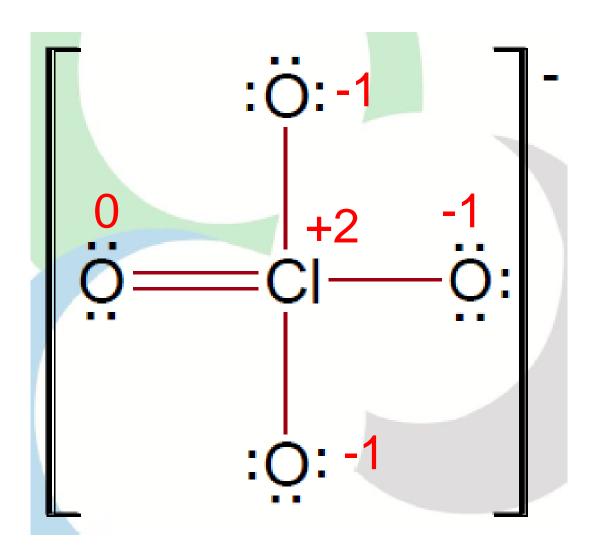
A estrutura de Lewis do íon ClO₄⁻ possui diferentes contribuições de ressonância, <u>obedecendo ou não à regra do octeto</u>. Pede-se:

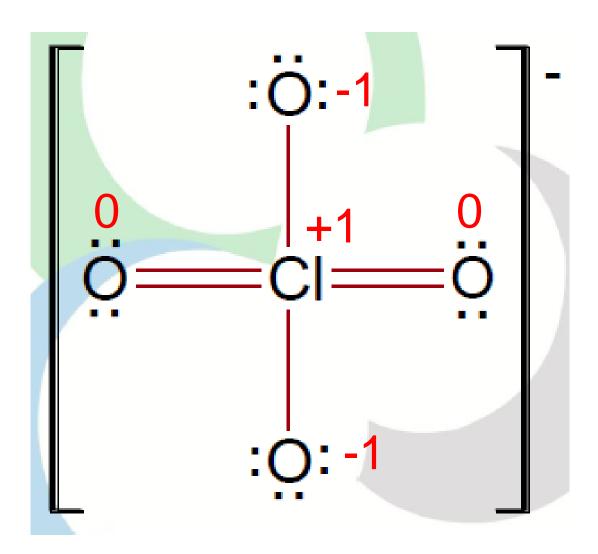
- Construa as estruturas de Lewis de contribuições de ressonância;
- Determine a carga formal em cada átomo.
- Indique qual estrutura de ressonância que deve possuir a maior contribuição para a estrutura real da molécula

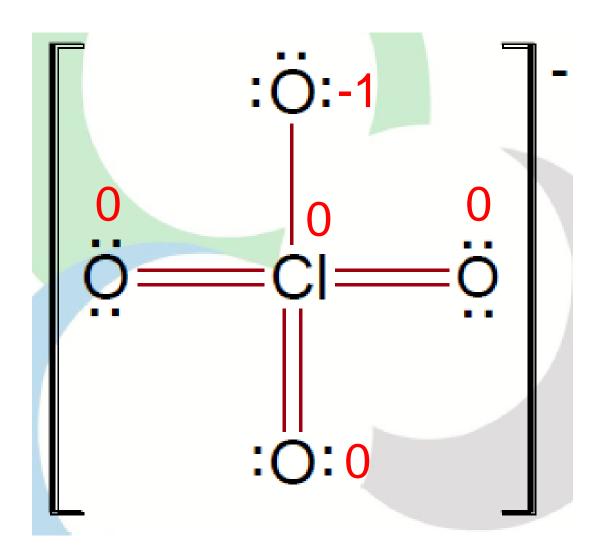
A estrutura de Lewis do íon ClO₄⁻ possui diferentes contribuições de ressonância, <u>obedecendo ou não à regra do octeto</u>.

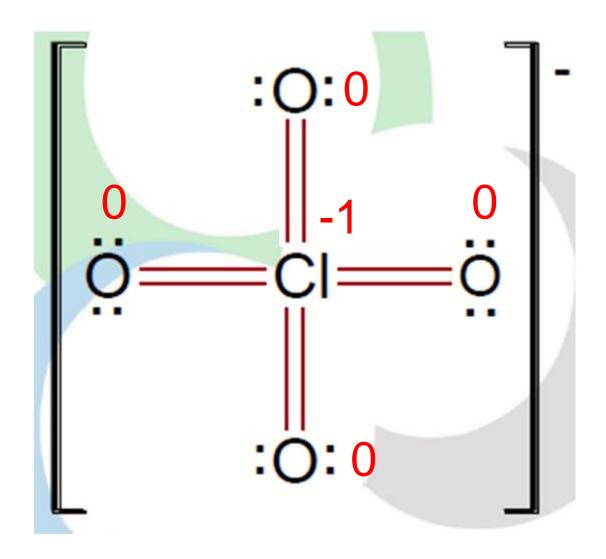


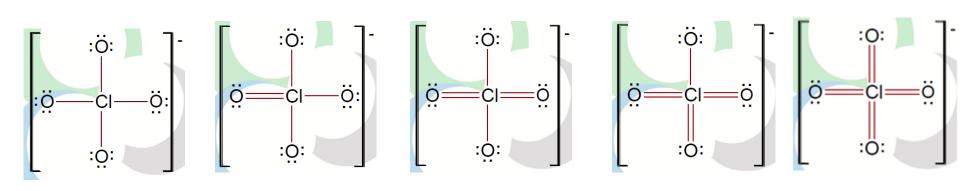






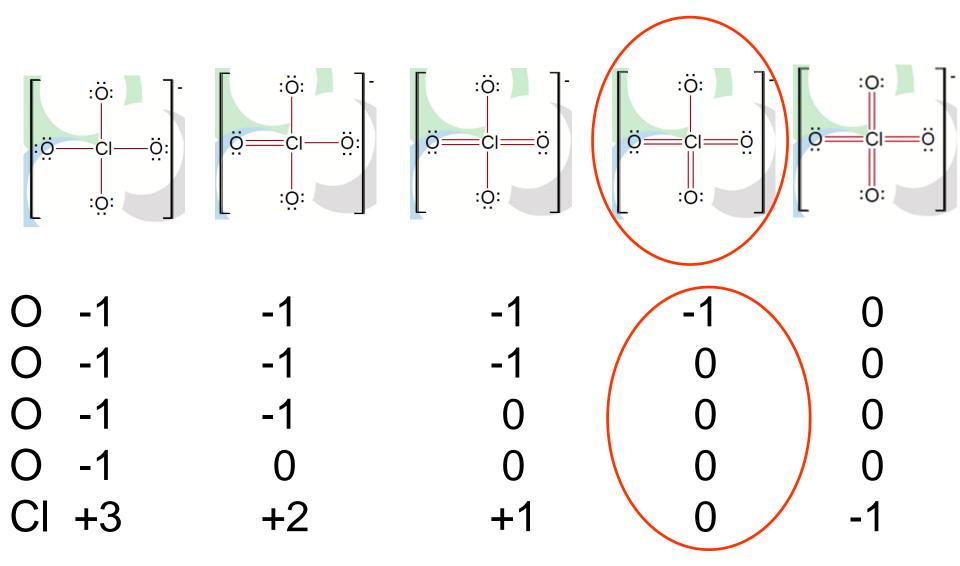


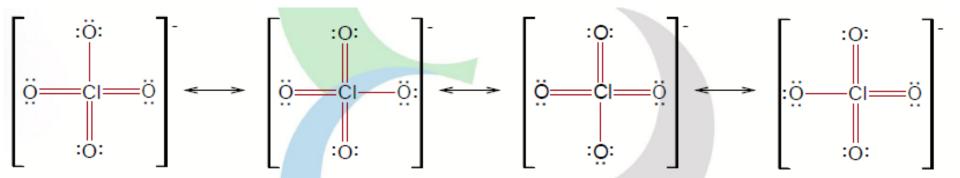


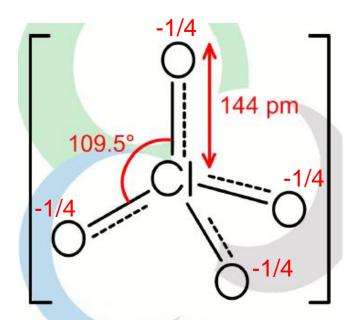


$$CI + 3$$

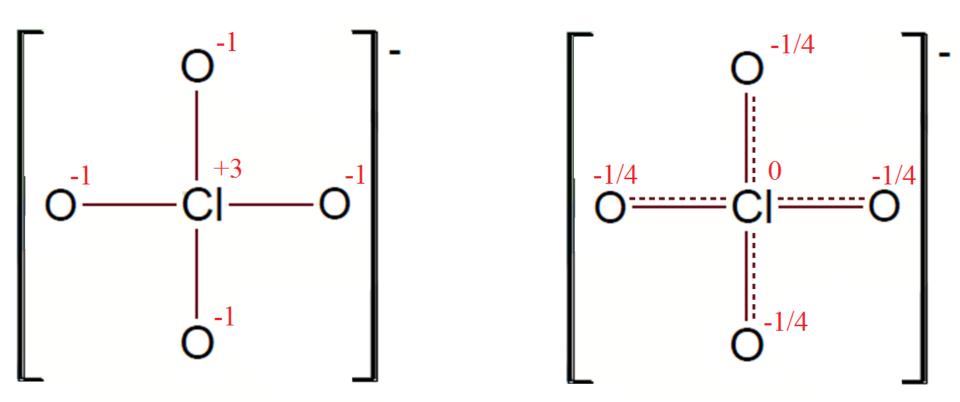
$$\cap$$







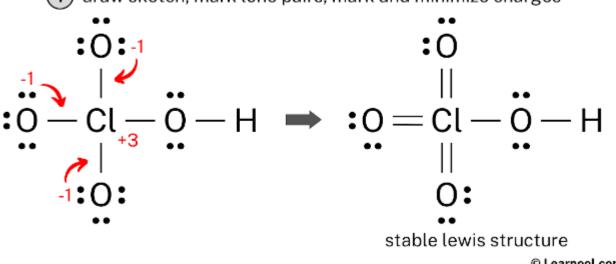
Geometria molecular tetraédrica



"A estrutura de Lewis mais provável é aquela que possui a carga formal mais próxima de zero em cada átomo"

HClO₄ Lewis Structure

draw sketch, mark lone pairs, mark and minimize charges



© Learnool.com

"A estrutura de Lewis mais provável é aquela que possui a carga formal mais próxima de zero em cada átomo"

Expansão do octeto

- Esta é a maior classe de exceções.
- Para que um átomo possua possuir mais que 8 elétrons em sua camada de valência (mais que 4 ligações), essa deve ser *expandida:*

Camada de valência *completa:* ns²np⁶

Camada de valência *expandida:* $ns^2np^6nd^x$

- Os átomos do 3º período em diante podem acomodar mais de um octeto utilizando os *orbitais d*
- No segundo período só existem os subníveis 2s e 2p
- No 2° nível de energia não tem subnível "2d"
- Os orbitais *d* são baixos o suficiente em energia para participarem de ligações e receberem a densidade eletrônica extra.

Expansão do octeto

- PCl₅
- SF₄
- ClF_3
- XeF_2

- SF₆
- BrF_5
- XeF₄
- ICl₄-

Representar a estrutura de Lewis de cada um dos compostos acima, usando apenas ligações simples, e veja como o átomo central de cada molécula possui mais do que 8 elétrons na camada de valência (camada de valência expandida).

