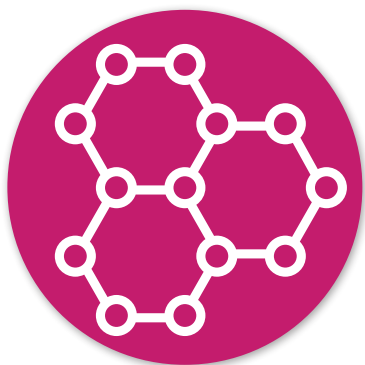


# MOLÉCULAS E PROPRIEDADES



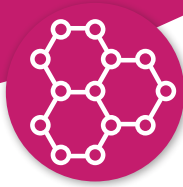


# MOLÉCULAS E PROPRIEDADES

Descubra como os átomos se unem através de ligações químicas. Fique você também ligado aprendendo geometria molecular e interações intermoleculares.

**Esta subárea é composta pelos módulos:**

- 1. Ligações Químicas**
- 2. Geometria Molecular**
- 3. Interações Intermoleculares**



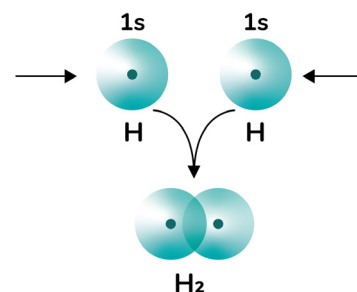
# LIGAÇÕES QUÍMICAS

Agora que já estudamos os átomos, podemos começar o estudo das moléculas. Veremos como as ligações químicas acontecem, quais os tipos de ligações e suas propriedades.

## LIGAÇÕES COVALENTES

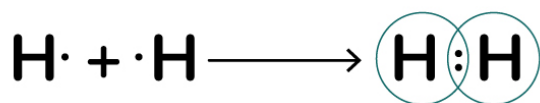
Podemos entender as ligações químicas covalentes como compartilhamento de elétrons. Neste modelo, consideramos que dois orbitais atômicos se combinam e formam ligações químicas.

Vimos na apostila sobre números quânticos e orbitais atômicos que os orbitais s têm formato de esfera. Vamos olhar agora para o modelo mais simples, como ocorre uma ligação entre dois átomos de hidrogênio ( $1s^1$ ), formando a molécula de  $H_2$ :



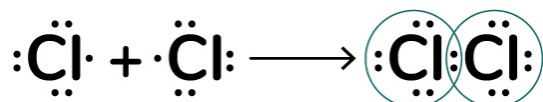
Assim, vemos que os dois orbitais se combinaram, permitindo que o elétron que ocupava cada um desses orbitais ocupe toda a região entre esses átomos, e eles passam a ser compartilhados. Cada um dos hidrogênios está, então, com seus orbitais  $1s$  completos ( $1s^2$ ), e permanecem estáveis.

Podemos representar essa ligação química através de um modelo mais simplificado, onde somente representamos com um ponto cada elétron da camada de valência dos átomos, pois são somente esses elétrons que participam da ligação química. Chamamos isso de Representação de Lewis:



No caso do hidrogênio,  $1s^1$ , só existe um elétron na camada de valência. Representamos os dois átomos com um elétron cada, formando uma ligação química.

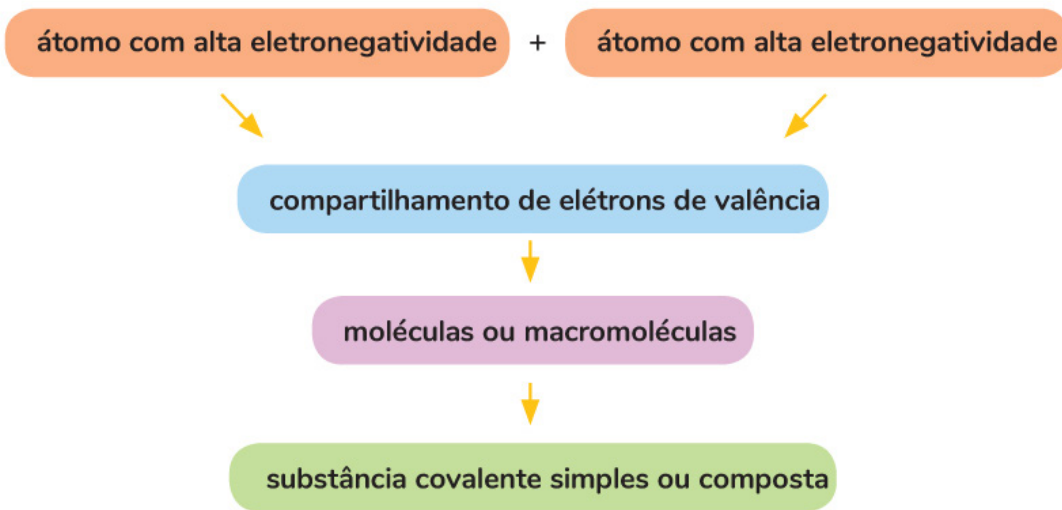
Vejamos o exemplo do  $Cl_2$ . O átomo de cloro, de número atômico 17, tem 7 elétrons na sua camada de valência, com distribuição eletrônica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ . Como os átomos nos orbitais  $3s$  e  $3p$  representam a camada de valência, podemos ilustrar uma ligação Cl-Cl da seguinte maneira:



Desenhamos os sete elétrons da camada de valência ao redor do átomo de cloro. Agora que os átomos compartilham elétrons, eles obedecem à regra do octeto e têm 8 elétrons na sua camada de valência, ficando com os subníveis s e p completos.



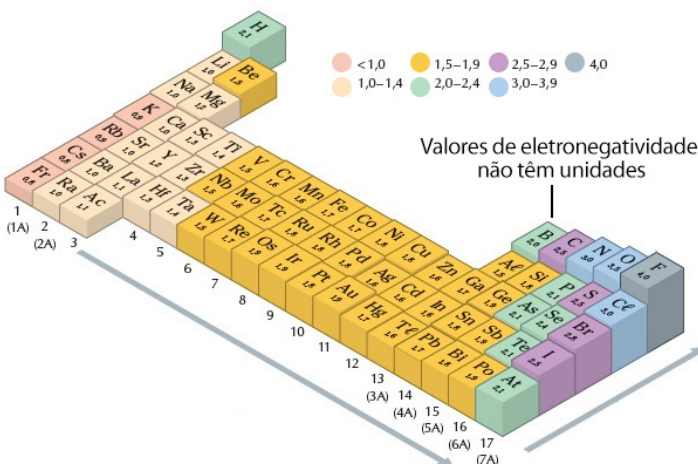
As ligações covalentes podem ser entendidas como compartilhamento de elétrons entre dois átomos com eletronegatividades parecidas.



Para determinarmos se uma ligação é covalente ou não, podemos fazer a diferença da eletronegatividade dos átomos. De acordo com esse valor, classificamos as ligações entre:

- ▶ **Ligação covalente apolar:** ligação que ocorre entre dois átomos do mesmo elemento. Fazendo a diferença entre os valores de eletronegatividade entre os átomos, chegamos a 0.
- ▶ **Ligação covalente polar:** ligação entre dois átomos diferentes, que conseqüentemente, têm eletronegatividades diferentes. A diferença de eletronegatividade entre os átomos nesta ligação precisa estar entre 0 e 1,69.

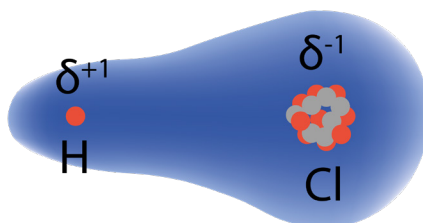
Para resolvermos alguns exemplos e entendermos as conseqüências da diferença de eletronegatividade dos átomos nas ligações químicas, vamos lembrar a tendência da eletronegatividade na tabela periódica, que cresce da esquerda para a direita, e de baixo para cima:



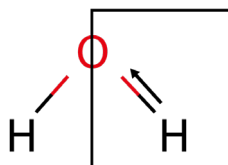
Vejam agora exemplo do  $HCl$ . Segundo a tabela periódica, a eletronegatividade do  $Cl$  é 3,0; e do hidrogênio, 2,1. Assim, sabemos que a diferença de eletronegatividade é 0,9 ( $3,0 - 2,1 = 0,9$ ); tratando-se de uma ligação **covalente polar**. Como o cloro é mais eletronegativo que o hidrogênio, sabemos que os elétrons estarão mais próximos do  $Cl$  do que do  $H$ . Representamos esse deslocamento com um **vetor**.



Aqui, representamos o deslocamento da nuvem eletrônica, em azul. O símbolo delta  $\Delta$ , acompanhado de um sinal de + ou -, representa a carga parcial (positiva ou negativa) sobre aquele átomo.

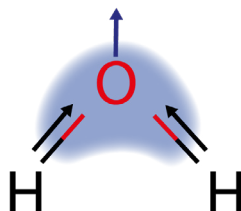


Vejam os outros exemplos:



Eletronegatividade do H: 2,1; Eletronegatividade do O: 3,5.

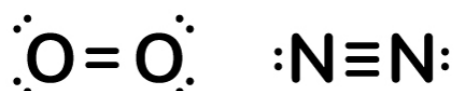
Analisando a ligação em destaque, vemos que se trata também de uma ligação covalente polar, já que a diferença de eletronegatividade é de 1,4. Os elétrons estão atraídos em direção ao oxigênio, como nos mostra o vetor da ligação.



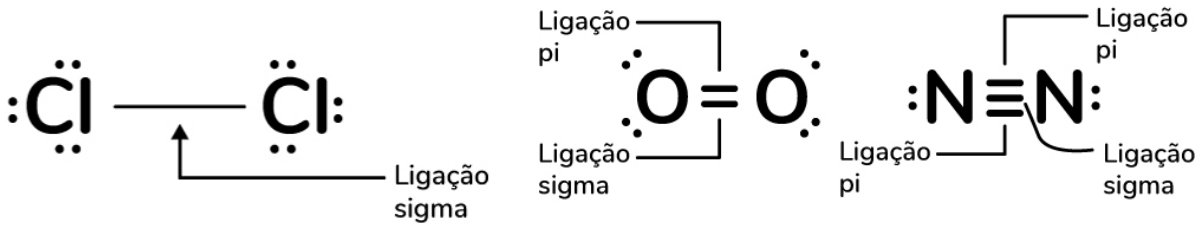
Assim, nos exemplos, vemos que existe diferença de eletronegatividade entre os átomos participantes da ligação química. Por isso, são consideradas ligações covalentes polares.

## LIGAÇÕES MULTIPLAS

Algumas moléculas têm mais de uma ligação covalente entre seus átomos constituintes. Essas ligações podem ser duplas ou triplas. É o caso da molécula de  $\text{O}_2$  e de  $\text{N}_2$ , como mostrado abaixo.



As ligações duplas e triplas são formadas a partir de uma ligação simples. Primeiro a ligação simples é formada, o que chamamos de ligação sigma ( $\sigma$ ). Depois, outra ligação pode ser formada, que chamamos de ligação pi ( $\pi$ ). Esse é o caso das ligações duplas. Quando a ligação é tripla, existem duas ligações pi ( $\pi$ ), e uma sigma ( $\sigma$ ).



É importante lembrar que ligações simples, duplas e triplas têm tamanhos e comprimentos diferentes. Quanto mais forte a ligação entre os átomos, menor o comprimento da ligação.

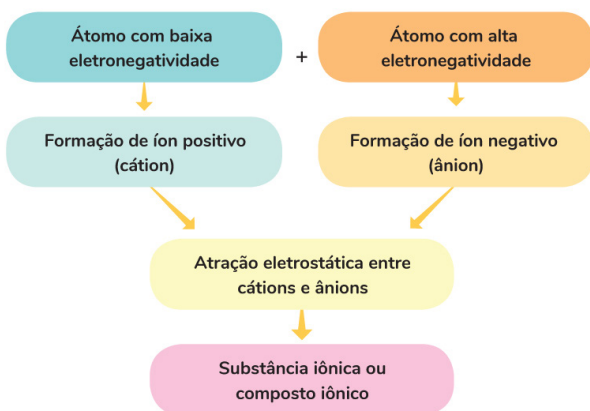
Força da ligação →		
Simples	Duplas	Triplas
← Comprimento da ligação		

No entanto, a ligação pi é mais fraca do que a ligação sigma. Só que quando têm suas forças somadas (pi + sigma), o resultado é que as ligações duplas são mais fortes do que as simples, e as triplas, mais fortes do que as duplas.

Principais características dos compostos covalentes:

- ▶ Suas ligações ocorrem por compartilhamento de pares eletrônicos
- ▶ Podem ser sólidos, líquidos ou gasosos à temperatura ambiente
- ▶ Geralmente têm baixo PF e baixo PE
- ▶ Não conduzem corrente elétrica

## LIGAÇÕES IÔNICAS



No entanto, quando a diferença de eletronegatividade entre os átomos é muito acentuada, não podemos mais chamar a ligação que fazem entre si de ligação covalente. Quando esse valor é igual ou maior do que 1,7, dizemos que essa ligação é iônica.

As ligações iônicas são ligações muito fortes, por causa da diferença de eletronegatividade entre seus átomos. Assim, o átomo mais eletronegativo atrai os elétrons para si, “ganhando” elétrons, e o outro átomo,

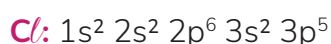
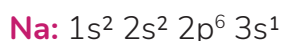
menos eletronegativo, “perde” elétrons.



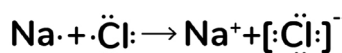
Para entendermos melhor essas ligações, precisamos conhecer o conceito de NOX, ou **número de oxidação**. O NOX nos fala quantos elétrons esses átomos ganharam ou perderam numa ligação iônica. Vejamos o exemplo do NaCl, o sal de cozinha, um composto iônico.

A eletronegatividade do sódio, Na, é de 0,9, enquanto a do cloro, como já vimos, 3,0. Como esse valor é muito maior para o cloro, concluímos que os elétrons da ligação ficarão deslocados em sua direção.

Vamos lembrar também a distribuição eletrônica desses átomos:



Vemos que, se o sódio perder um elétron do orbital 3s, fica com seu octeto completo. Se o cloro ganhar um elétron no orbital 3p, também fica com o octeto completo. Então, uma ligação iônica entre Na e Cl podemos representar da seguinte maneira, indicando a carga de cada um dos átomos:



Dizemos então que o sódio Na tem número de oxidação +1, e o cloro Cl, número de oxidação -1.

Quando um átomo **perde** elétrons e se torna um cátion: **oxida**

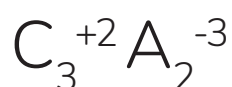
Quando um átomo **ganha** elétrons e se torna um ânion: **reduz**

Assim, como os átomos numa ligação iônica estão eletricamente carregados, as ligações iônicas têm caráter **eletrostático**: cargas de sinais opostos se atraindo (positivas e negativas).

Para determinar a fórmula de compostos iônicos, podemos obedecer à seguinte regra:



Em que y é a carga do cátion e equivale ao número de elétrons perdidos, e x é a carga do ânion e equivale ao número de elétrons recebidos. Por exemplo, se quisermos ligar um cátion +2 com um ânion -3, precisamos de três átomos do cátion e dois átomos do ânion:





Principais características dos compostos iônicos:

- ▶ Formação de íons
- ▶ Transferência de elétrons
- ▶ Sólidos a temperatura ambiente
- ▶ Formam compostos cristalinos (cristais)
- ▶ Em meio aquoso conduzem corrente elétrica

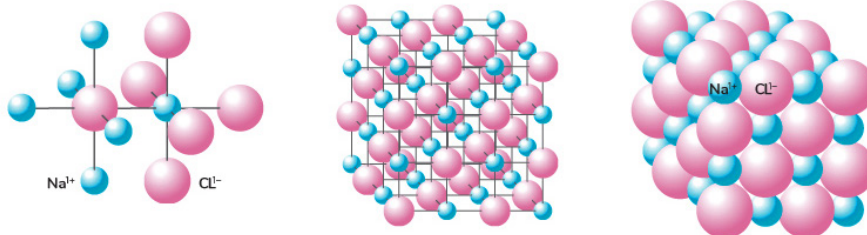
## FÓRMULAS UNITÁRIAS

Nos compostos iônicos, uma coisa muito interessante acontece: a formação de estruturas cristalinas. No caso do  $\text{NaCl}$ , podemos observar os cristais no nosso sal de cozinha.

Os cristais que observamos a olho nu são resultado de sua estrutura microscópica, da forma como os átomos de cloro e sódio se ligam, como no esquema abaixo. Cada átomo de sódio está ligado a diversos átomos de cloro e vice-versa.



Cristais de  $\text{NaCl}$



No entanto, como as unidades de ligação  $\text{Na-Cl}$  sempre se repetem na estrutura, representamos esse composto químico apenas como  $\text{NaCl}$ , porque sabemos que um átomo de sódio está ligado a diversos átomos de cloro, e os átomos de cloro estão ligados a diversos átomos de sódio, formando uma estrutura cristalina.

O mesmo é válido para os mais diversos compostos iônicos, como  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{AlF}_3$ ,  $\text{PbO}_2$ ,..., mesmo com os átomos nos mais diversos números de oxidação.

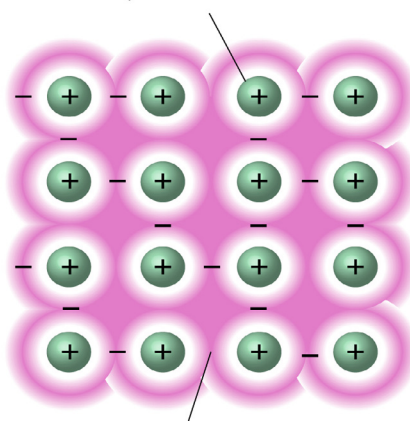
## LIGAÇÕES METÁLICAS

Um outro tipo de ligação é a ligação metálica, que acontece somente entre metais. Enquanto nas demais ligações, os elétrons estão restritos ao espaço próximo àqueles dois átomos, nas ligações metálicas, os elétrons estão muito mais livres para se movimentarem entre quaisquer átomos da liga. É por isso que os metais são tão bons condutores de eletricidade. Chamamos esse modelo de mar de elétrons.





Íon metálico (núcleo + elétrons internos)



"Mar" de elétrons de valência (móveis)

Principais características dos compostos metálicos:

- ▶ Bons condutores de corrente elétrica;
- ▶ Bons condutores de calor;
- ▶ Brilho metálico;
- ▶ Resistência a tração;
- ▶ Ductibilidade;
- ▶ Maleabilidade.

## LIGAÇÕES QUÍMICAS: CASOS ESPECIAIS

### Ligações Dativas

Como vimos até agora, as ligações químicas são formadas pelo compartilhamento de elétrons de dois átomos. Porém, algumas vezes, o par compartilhado na ligação é proveniente de um único átomo. Mas como isso é possível?

Veja abaixo o exemplo do CO. O átomo de carbono precisa quatro elétrons para que seu octeto fique completo. O átomo de O, precisa de apenas dois. Quando se tem uma ligação dupla entre eles, o átomo de O "recebeu" dois elétrons: um de cada ligação dupla, e seu octeto está completo.

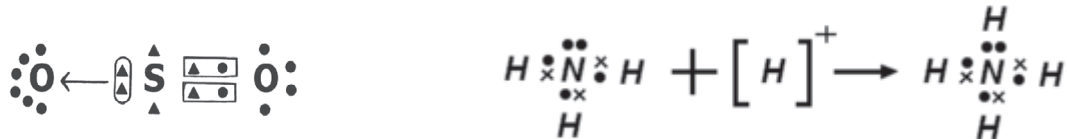
Molécula de gás monóxido de carbono				
Configuração eletrônica	Para completar o octeto	Fórmula molecular	Fórmula eletrônica	Fórmula estrutural
${}_{6}\text{C} : 1s^2 2s^2 2p^2$	Precisa de mais 4 elétrons. ${}_{10}\text{Ne} : 1s^2 2s^2 2p^6$	CO	$\cdot\ddot{\text{C}}\cdot + :\ddot{\text{O}}\cdot \rightarrow :\text{C}::\ddot{\text{O}}:$ $:\text{C}::\ddot{\text{O}}: \rightarrow :\text{C}::\ddot{\text{O}}:$	$ \text{C} \equiv \text{O} $ ou $:\text{C} \equiv \text{O}:$ ou $\text{C} \equiv \text{O}$
${}_{8}\text{O} : 1s^2 2s^2 2p^4$	Precisa de mais 2 elétrons. ${}_{10}\text{Ne} : 1s^2 2s^2 2p^6$			



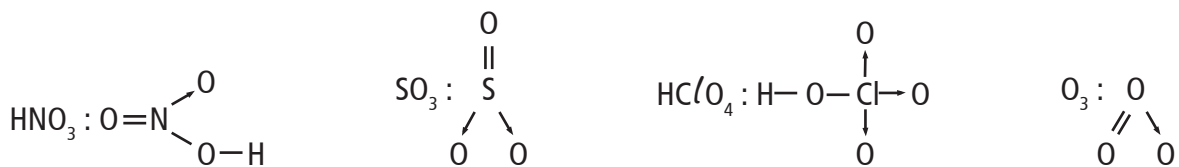
Porém, o átomo de C também só recebeu dois elétrons do O, um de cada ligação dupla. Ele precisa de mais dois elétrons para ficar com seu octeto completo. Assim, um dos pares eletrônicos sobressalentes do oxigênio (tem dois pares não ligantes) passa a ser compartilhado entre os átomos, formando uma ligação chamada dativa ou covalente coordenada.

Forma-se, então, uma ligação tripla entre os átomos, que ficam ambos com o octeto completo.

Veja outros casos em que ocorrem ligações dativas:



Representamos as ligações dativas com uma seta, a partir do átomo doador para o átomo receptor.



## Expansão e Contração da Camada de Valência

Existem casos também que os átomos se estabilizam com um número diferente de 8 elétrons na camada de valência. Essas anomalias acontecem por propriedades específicas de cada átomo e de cada ligação química. Porém, também seguem algumas regras, e é possível saber quando isso acontece, se conhecermos as condições que permitem que esse tipo de condição ocorra.

Primeiro, vamos ver a expansão da camada de valência. A expansão somente pode acontecer com átomos a partir do terceiro período da tabela periódica. Mas por que somente a partir do terceiro período?

### Vamos retomar a distribuição eletrônica e alguns conceitos de orbitais!

Lembre-se de que, no terceiro período do bloco P (não metais), a distribuição eletrônica sempre termina em 3p. Como a terceira camada é a primeira que tem orbitais d, que compartilham 10 elétrons, teoricamente seria possível que o octeto seja expandido em até 10 elétrons! Na prática, porém, isso não acontece.

Octeto normal:  $s^2 + p^6 = 8$  elétrons

Octeto expandido:  $s^2 + p^6 + d^n = 8 + n$  elétrons

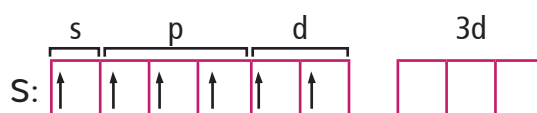
Vamos ver o exemplo do enxofre, que comumente expande o seu octeto. Esta é a distribuição eletrônica da sua camada de valência:



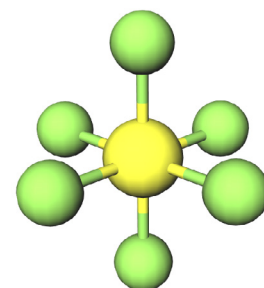
Para fazer mais ligações, é possível que os orbitais s, p e d se fundam, em um fenômeno chamado **hibridização**. Assim, todas as ligações realizadas pelo enxofre podem ter a mesma energia.

Lembre-se de que a energia de cada orbital é diferente. Quando ocorre a hibridização, essa diferença de energia deixa de existir, e os orbitais híbridos são considerados iguais!

Esse é o caso do  $\text{SF}_6$ . Naturalmente, o enxofre só faz duas ligações. Porém, nesse caso, ele faz quatro além da conta. Isso só é possível com a combinação dos orbitais de sua camada de valência, que dá origem a novos orbitais.



Veja que houve a combinação de 1 orbital s, 3 orbitais p, e 2 orbitais d, dando origem a um grande orbital  $sp^3d^2$ . Assim, essa é a hibridização do átomo de enxofre nessa molécula. Ainda sobraram três orbitais d que não foram utilizados nessa hibridização.



Outras hibridizações são possíveis, em outras moléculas, como  $sp^3d$ . Átomos de fósforo também têm comumente seu octeto expandido.

Esses, porém, são os casos em que houve expansão da camada de valência. Ainda há casos em que a camada de valência é contraída, e os átomos se estabilizam com menos elétrons. Chamamos de contração da camada de valência.

A contração acontece geralmente com átomos de boro e berílio, que quase não têm os orbitais p preenchidos. No caso do berílio, há somente dois elétrons na camada de valência, ocupando somente orbitais 2s. No caso do boro, há três elétrons nesta camada, com configuração  $2s^2 2p^1$ .

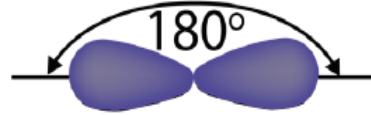
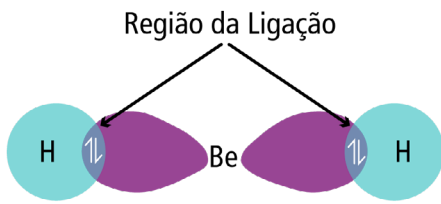
Assim, é mais “cômodo”, mais energeticamente favorável, que os orbitais sejam hibridizados, se estabilizando com poucas ligações, do que preencher os orbitais p com mais 5 ou 6 elétrons para que a regra do octeto seja seguida. Vamos ver como isso acontece.

No caso da molécula de  $\text{BeH}_2$ , o berílio faz apenas duas ligações. Para isso, um elétron do orbital  $2s^2$  é promovido a um orbital  $p^0$ :

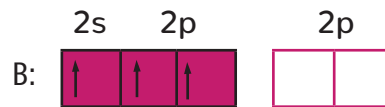
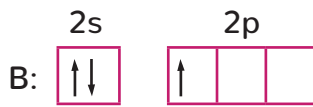




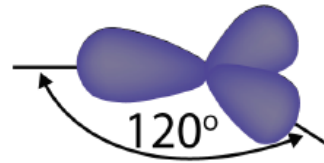
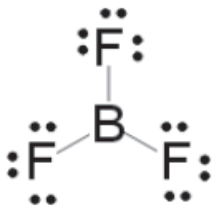
Assim, surge um orbital híbrido sp, que permite que sejam feitas duas ligações de mesma energia com dois átomos de H, dos quais recebe um elétron de cada. Assim, esse fica o formato de seus orbitais:



Outro caso é do boro, com 5 elétrons. Analogamente, um elétron do orbital 2s é promovido a um orbital p, e os orbitais se fundem dando a origem a um orbital sp<sup>2</sup>: um orbital s + 2 orbitais p.



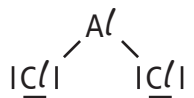
Assim, o Boro fica estável com seis elétrons em sua camada de valência, permitindo que moléculas como BF<sub>3</sub> existam. Assim, essa é a geometria de seu orbital sp<sup>2</sup>:



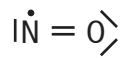
Esses são outros exemplos de contração da camada:



NO



Tricloreto de alumínio



Monóxido de nitrogênio

### ANOTAÇÕES

---



---



---



---