



QUÍMICA

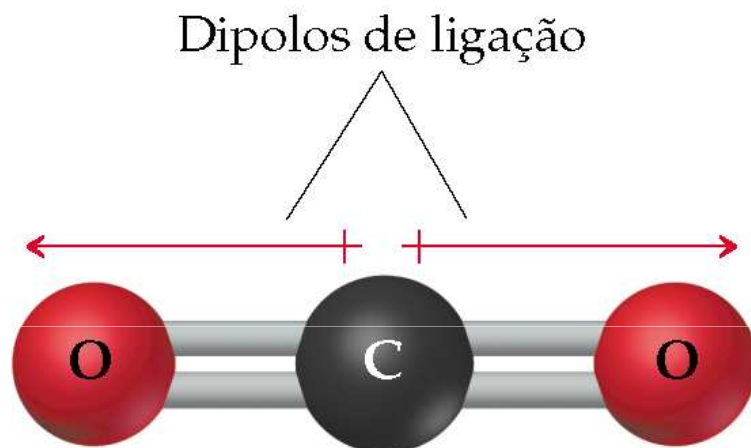
A Ciência Central

9ª Edição

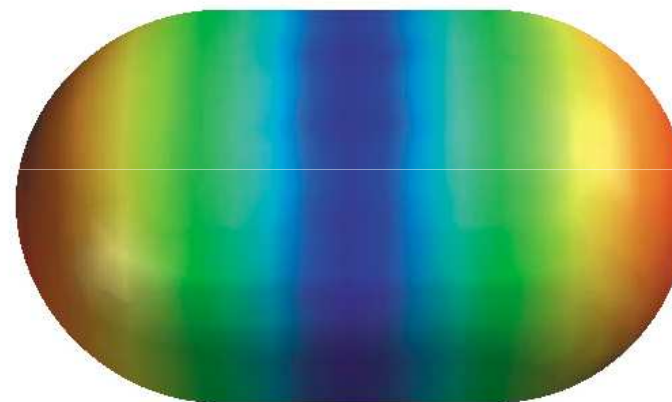
Geometria molecular e teorias de ligação

David P. White

Forma molecular e polaridade molecular



(a)

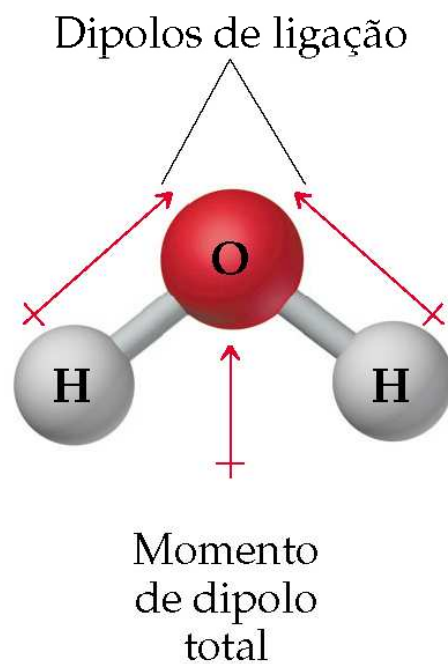


(b)

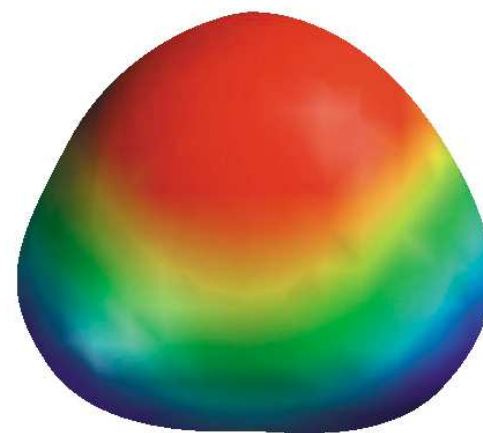
- Os dipolos de ligação no CO₂ cancelam-se porque o CO₂ é linear.

Forma molecular e polaridade molecular

- Na água, a molécula não é linear e os dipolos de ligação não se cancelam.
- Conseqüentemente, a água é uma molécula polar.



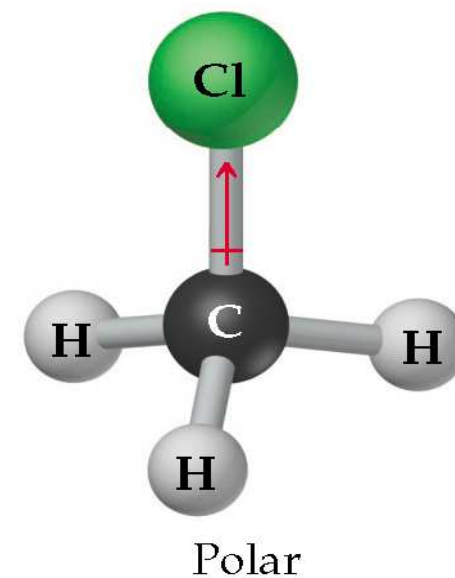
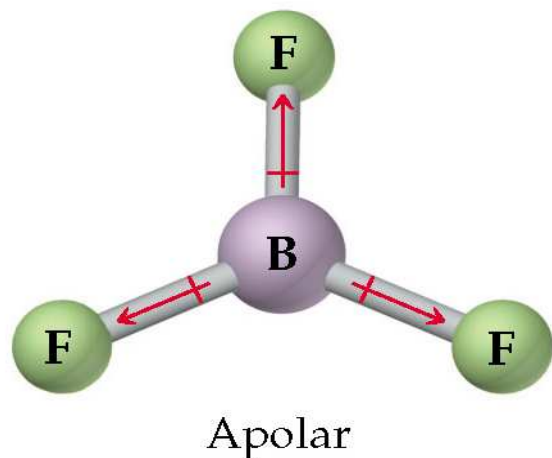
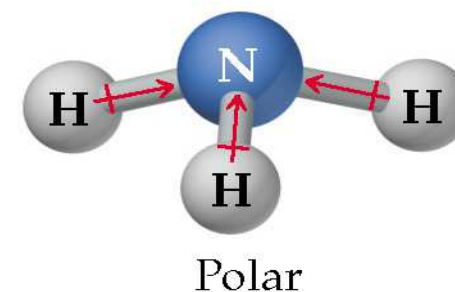
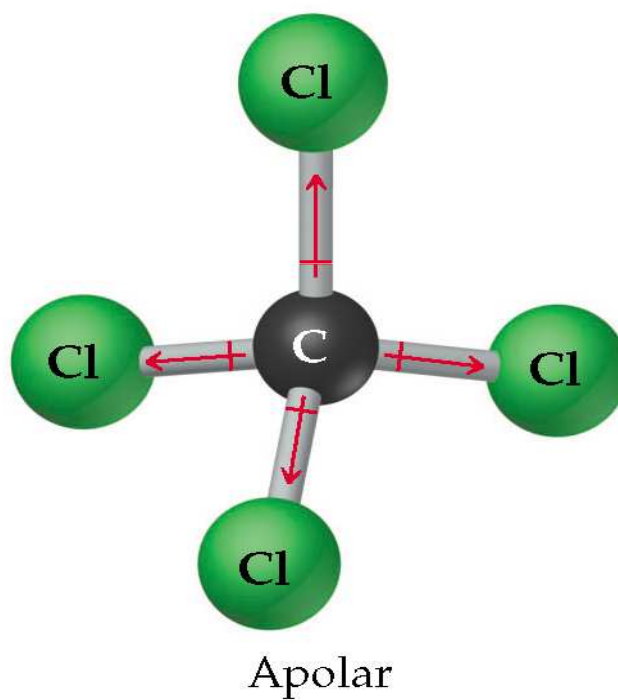
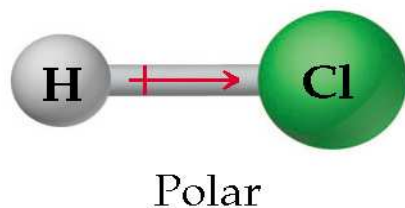
(a)



(b)

Forma molecular e polaridade molecular

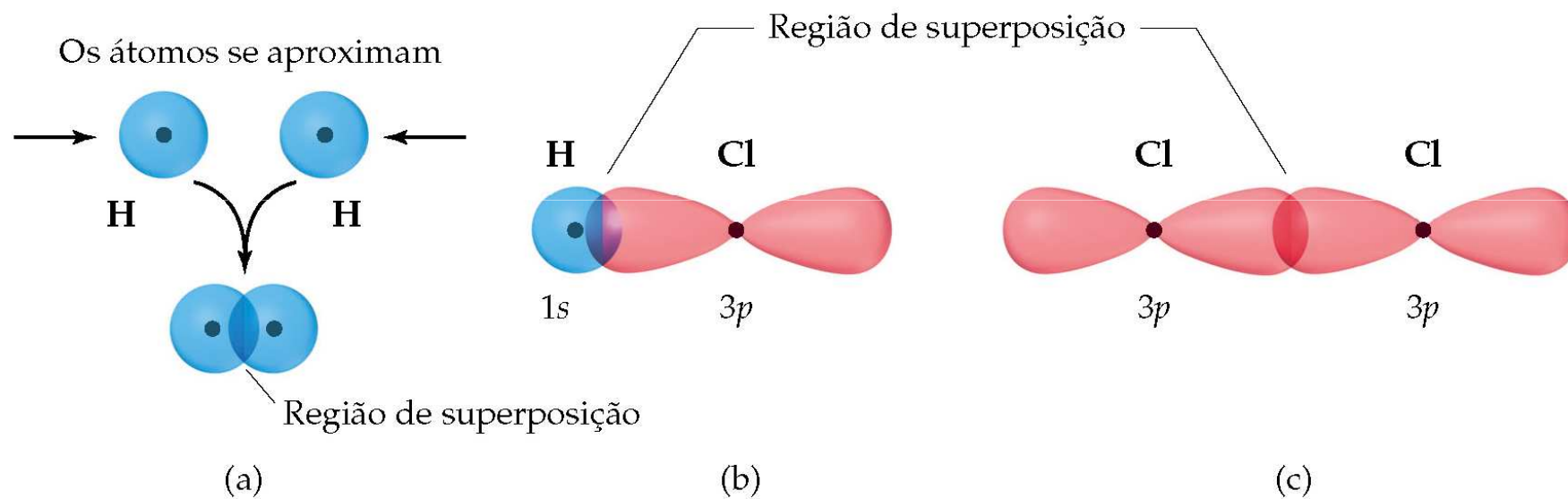
- A polaridade como um todo de uma molécula depende de sua geometria molecular.



Ligação covalente e Superposição de orbitais

- As estruturas de Lewis e o modelo RPENV não explicam porque uma ligação se forma.
- Como devemos considerar a forma em termos da mecânica quântica?
- Quais são os orbitais envolvidos nas ligações?
- Usamos a **teoria de ligação de valência**:
 - As ligações formam quando os orbitais nos átomos se superpõem.
 - Existem dois elétrons de spins contrários na superposição de orbitais.

Ligação covalente e Superposição de orbitais

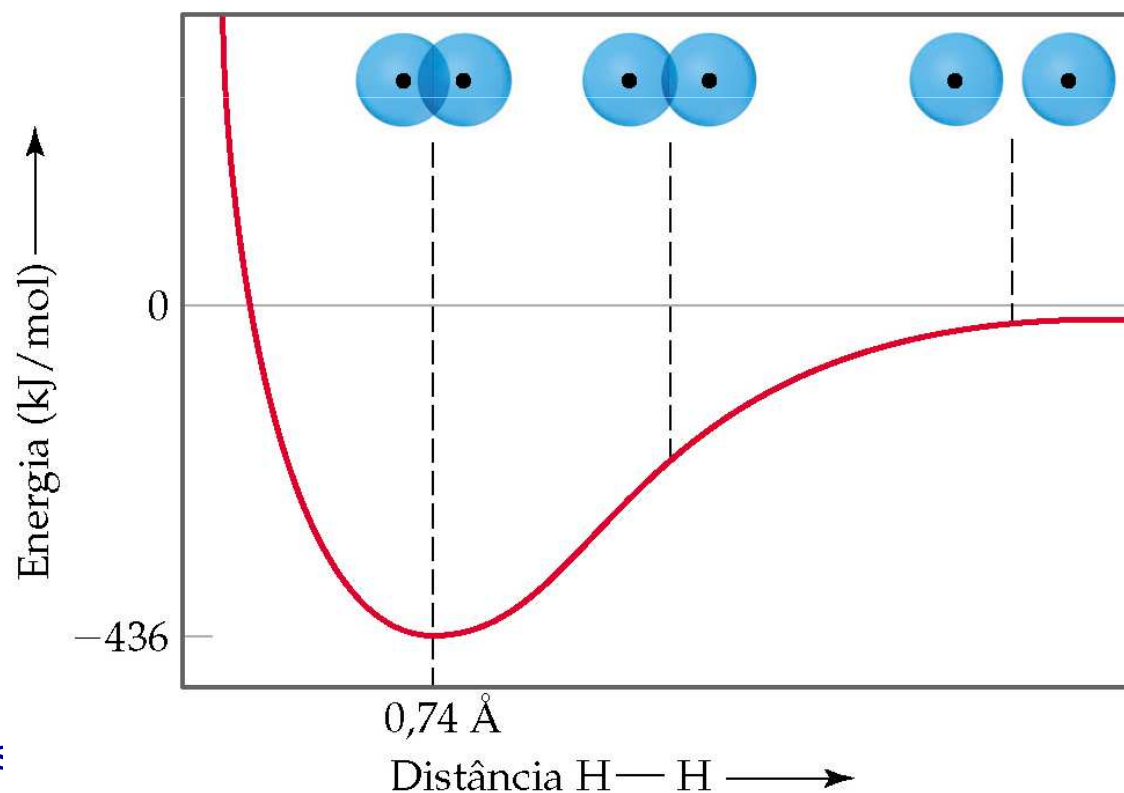


Ligação covalente e Superposição de orbitais

- À medida que dois núcleos se aproximam, seus orbitais atômicos se superpõem.
- À medida que a superposição aumenta, a energia de interação diminui.
- A uma determinada distância, a energia mínima é alcançada.
- A energia mínima corresponde à distância de ligação (ou comprimento de ligação).
- Quando os dois átomos ficam mais próximos, seus núcleos começam a se repelir e a energia aumenta.

Ligação covalente e Superposição de orbitais

- À distância de ligação, as forças de atração entre os núcleos e os elétrons equilibram exatamente as forças repulsivas (núcleo-núcleo, elétron-elétron).



Orbitais híbridos

- Os orbitais atômicos podem se misturar ou se **hibridizar** para adotarem uma geometria adequada para a ligação.
- A hibridização é determinada pelo arranjo.

Orbitais híbridos *sp*

- Considere a molécula de BeF_2 (sabe-se experimentalmente que ela existe):



Orbitais híbridos

Orbitais híbridos *sp*

- O Be tem uma configuração eletrônica $1s^2 2s^2$.
- Não existem elétrons desemparelhados disponíveis para ligações.
- Concluimos que os orbitais atômicos não são adequados para descreverem os orbitais nas moléculas.
- Sabemos que o ângulo de ligação F-Be-F é de 180° (teoria de RPENV).
- Sabemos também que um elétron de Be é compartilhado com cada um dos elétrons desemparelhados do F.

Orbitais híbridos

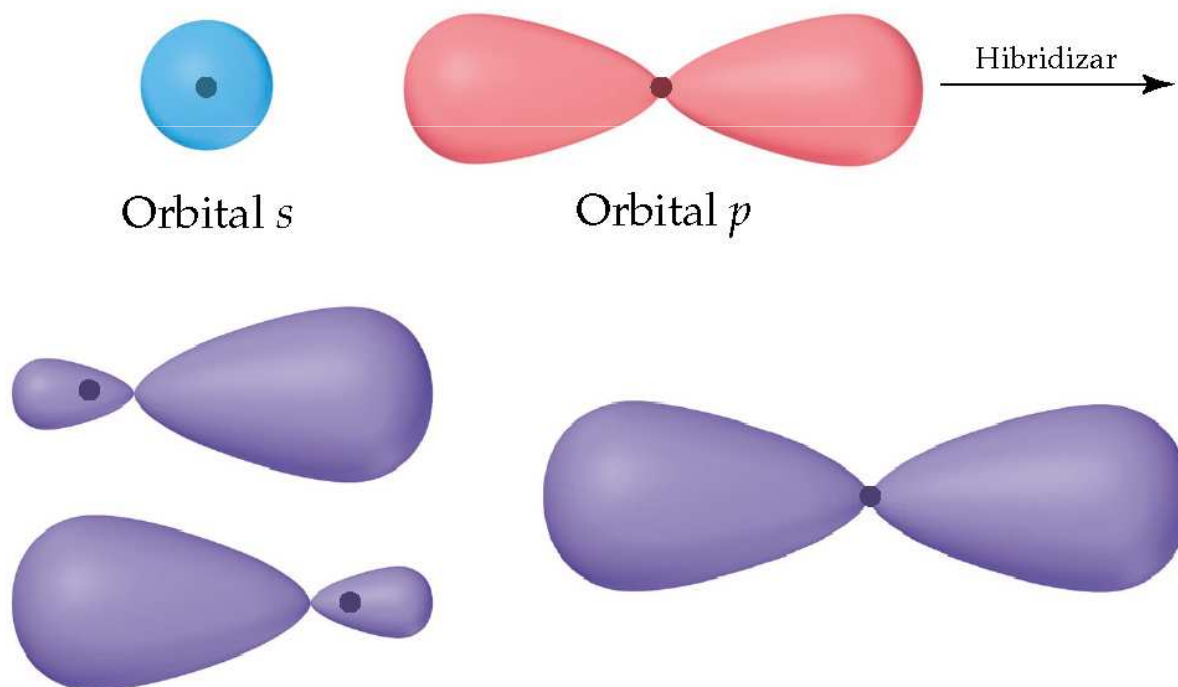
Orbitais híbridos sp

- Admitimos que os orbitais do Be na ligação Be-F estão distantes de 180° .
- Poderíamos promover um elétron do orbital $2s$ no Be para o orbital $2p$ para obtermos dois elétrons desemparelhados para a ligação.
- Mas a geometria ainda não está explicada.
- Podemos solucionar o problema admitindo que o orbital $2s$ e um orbital $2p$ no Be misturam-se ou formam um orbital híbrido.
- O orbital híbrido surge de um orbital s e de um orbital p e é chamado de orbital híbrido sp .

Orbitais híbridos

Orbitais híbridos sp

- Os lóbulos dos orbitais híbridos sp estão a 180° de distância entre si.



Orbital *s*

Orbital *p*

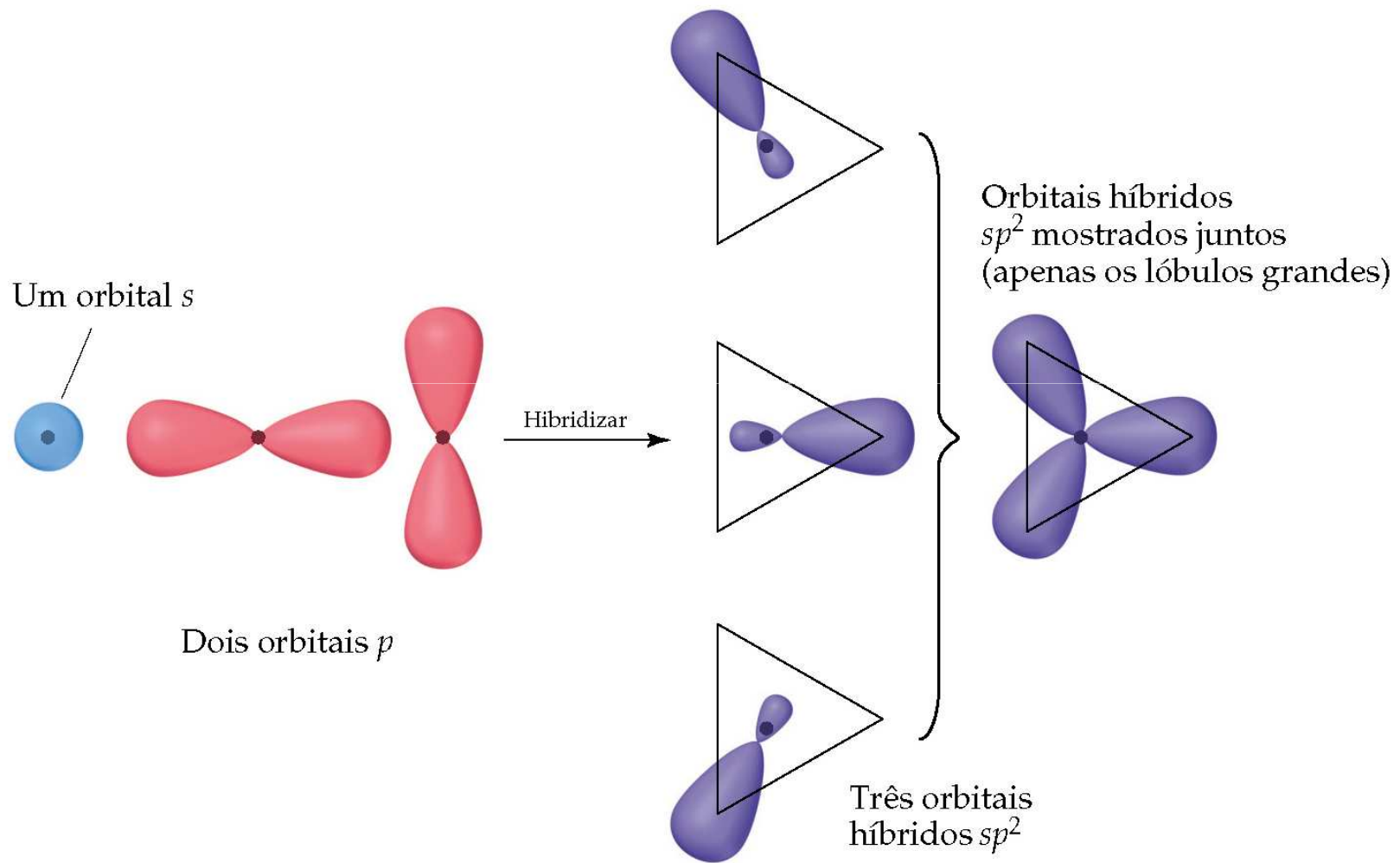
Dois orbitais híbridos sp

Orbitais híbridos sp mostrados juntos (apenas os lóbulos grandes)

Orbitais híbridos

Orbitais híbridos sp^2 e sp^3

- *Importante:* quando misturamos n orbitais atômicos, devemos obter n orbitais híbridos.
- Os orbitais híbridos sp^2 são formados com um orbital s e dois orbitais p . (Conseqüentemente, resta um orbital p não-hibridizado.)
- Os grandes lóbulos dos híbridos sp^2 encontram-se em um plano trigonal.
- Todas as moléculas com arranjos trigonais planos têm orbitais sp^2 no átomo central.

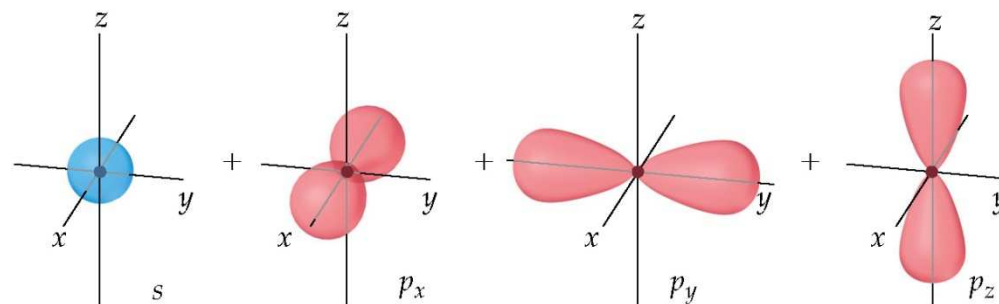


Orbitais híbridos

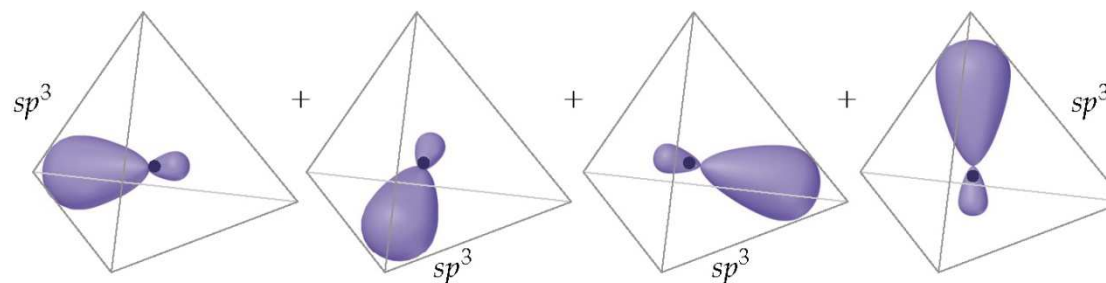
Orbitais híbridos sp^2 e sp^3

- Os orbitais híbridos sp^3 são formados a partir de um orbital s e três orbitais p . Conseqüentemente, há quatro lóbulos grandes.
- Cada lóbulo aponta em direção ao vértice de um tetraedro.
- O ângulo entre os grandes lóbulos é de $109,5^\circ$.
- Todas as moléculas com arranjos tetraédricos são hibridizadas sp^3 .

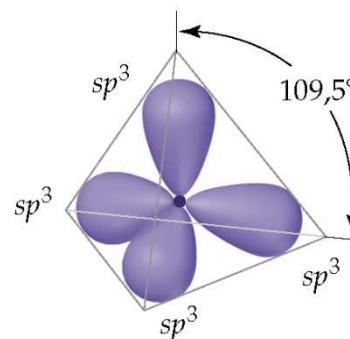
Orbitais híbridos sp^2 e sp^3



Hibridizar para formar quatro orbitais híbridos sp^3

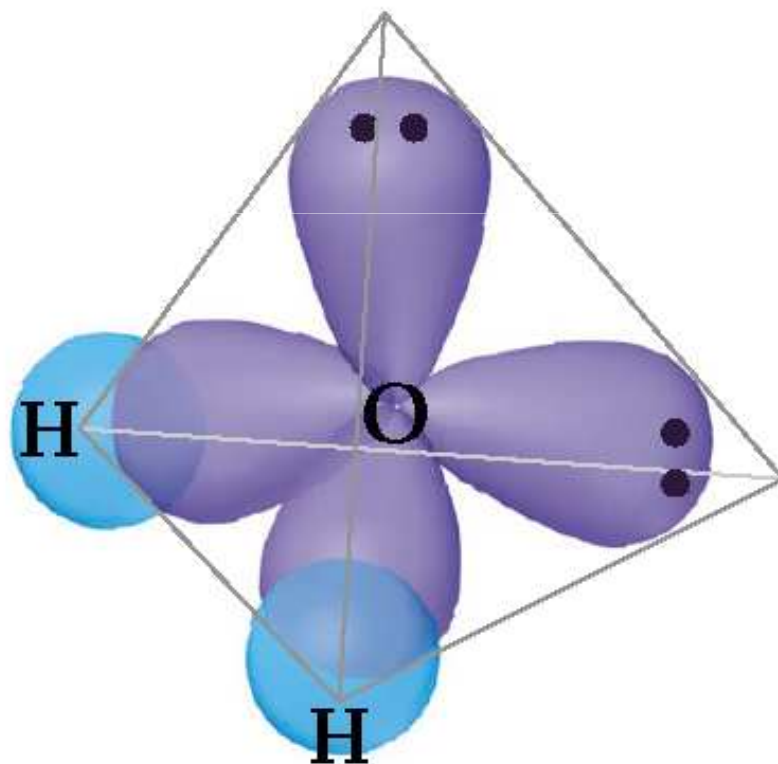


Mostrados juntos (apenas os lóbulos)



Orbitais híbridos

Orbitais híbridos sp^2 e sp^3



Exercício em casa H₂O

Resumo

1. Desenhe a estrutura de Lewis para a molécula ou íon.
2. Determine o arranjo usando o modelo RPENV.
3. Especifique os orbitais híbridos necessários para acomodar os pares de elétrons com base em seu arranjo geométrico.

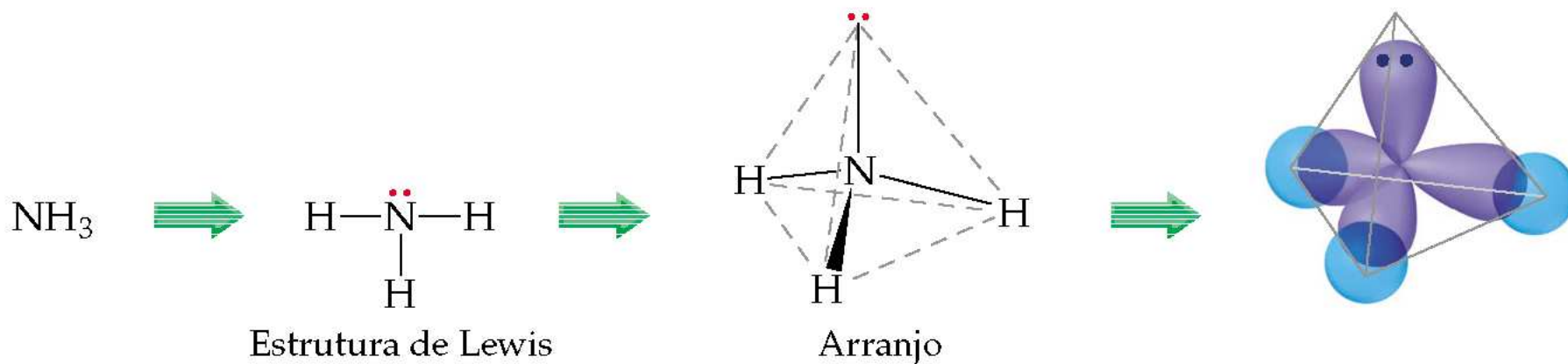
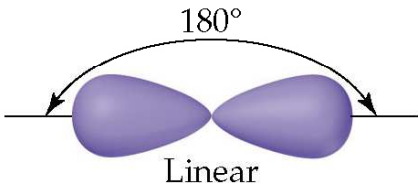
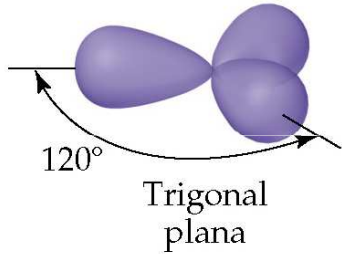
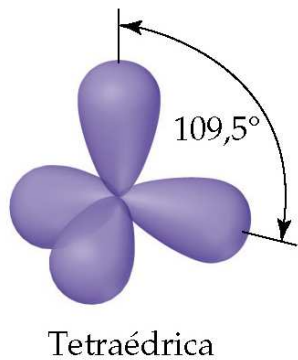


TABELA 9.4 Distribuições geométricas características dos conjuntos de orbitais híbridos

Conjunto de orbitais atômicos	Conjunto de orbitais híbridos	Geometria	Exemplos
s, p	Dois sp	 <p>Linear</p>	$\text{BeF}_2, \text{HgCl}_2$
s, p, p	Três sp^2	 <p>Trigonal plana</p>	BF_3, SO_3
s, p, p, p	Quatro sp^3	 <p>Tetraédrica</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_4^+$