



# *Introdução à ligações Químicas*

Wendel A. Alves, Ph.D.

*Universidade Federal do ABC, Santo André, SP, Brazil*

<http://wendel.ufabc.edu.br/>  
E-mail: [wendel.alves@ufabc.edu.br](mailto:wendel.alves@ufabc.edu.br)

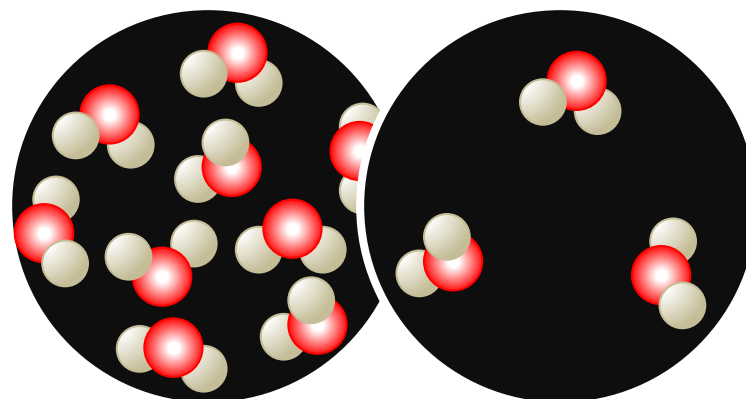
# Transformações **Físicas**

NÍVEL MACROSCÓPICO:  
(observação de mudanças)

NÍVEL SUBMICROSCÓPICO:  
(interpretação molecular)

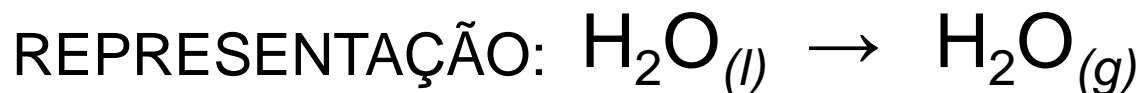
água  
(vapor)

água  
(líquido)



água líquida

água gasosa



Apesar de o estado físico ter mudado,  
a identidade da substância água é preservada.

# Transformações Químicas

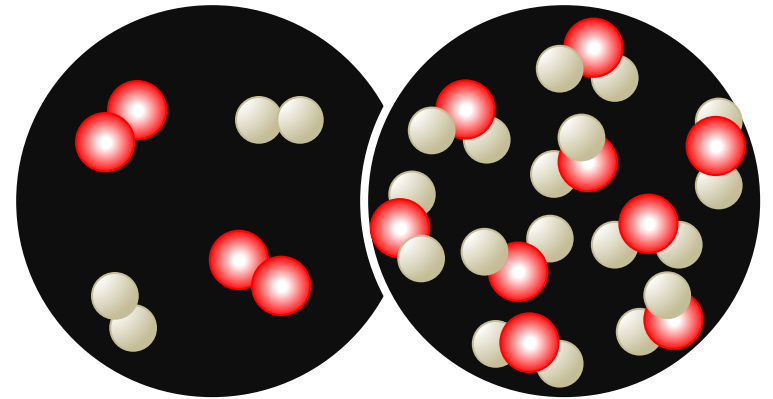
NÍVEL MACROSCÓPICO:  
(observação de mudanças)

vapor de água



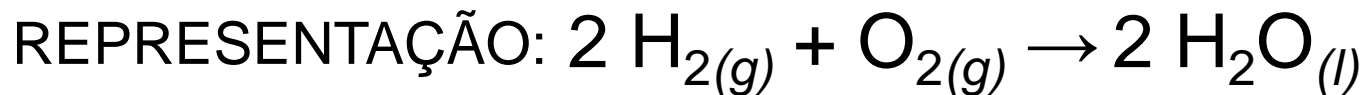
Hidrogênio e oxigênio

NÍVEL SUBMICROSCÓPICO:  
(interpretação molecular)



hidrogênio + oxigênio

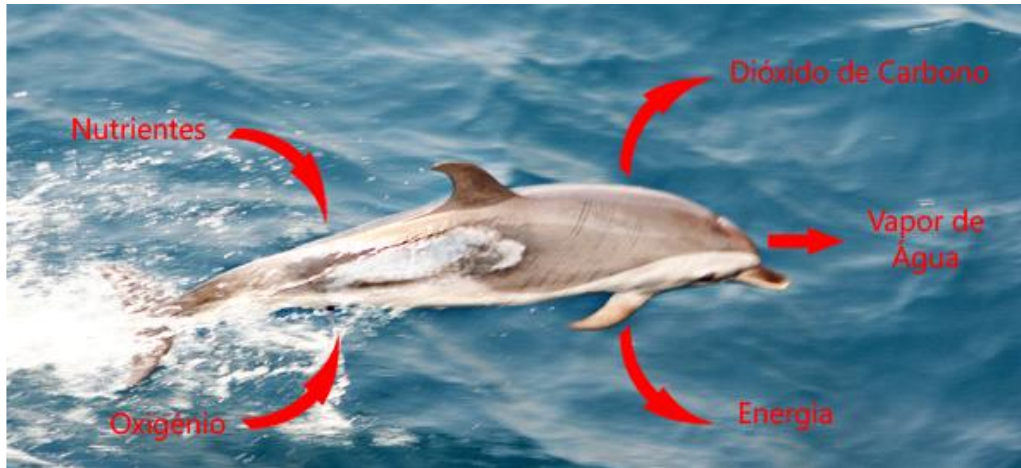
água



Uma ou mais substâncias são transformadas  
em substâncias diferentes.

O que caracteriza uma transformação química?

# Exemplos de transformação química....



As transformações químicas podem ocorrer por ação de...

- ✓ Calor
- ✓ Corrente elétrica
- ✓ Luz
- ✓ Mecânica

# Características para uma transformação química:

- ✓ Presença de reagentes!
- ✓ Formação de produtos!
- ✓ Mudanças qualitativas (cor, odor, vapor, temperatura, etc);
- ✓ Conservação das massas (Lavoisier, Prost e Dalton)
- ✓ Mudança na orientação dos átomos (isomeria)

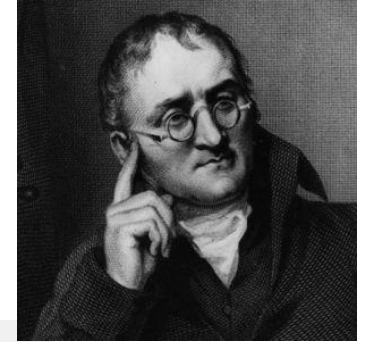
# Transformações Químicas na Escala de Átomos e Moléculas

Antes de investigar as transformações químicas, precisamos entender:

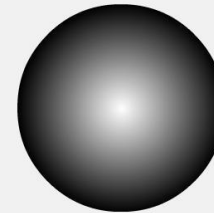
- 1) como os átomos se combinam para formar moléculas  
(ligação química)
- 2) como as moléculas interagem entre si  
(interações intermoleculares)



# Teoria atômica da matéria



- John **Dalton (1808):**
  - Cada molécula é composta de átomos.
  - Todos os átomos de um elemento são idênticos.
  - Nas reações químicas, os átomos não são alterados (na reação nuclear sim! Perdem massa do núcleo).
- Os compostos são formados quando átomos de mais de um elemento se combinam.

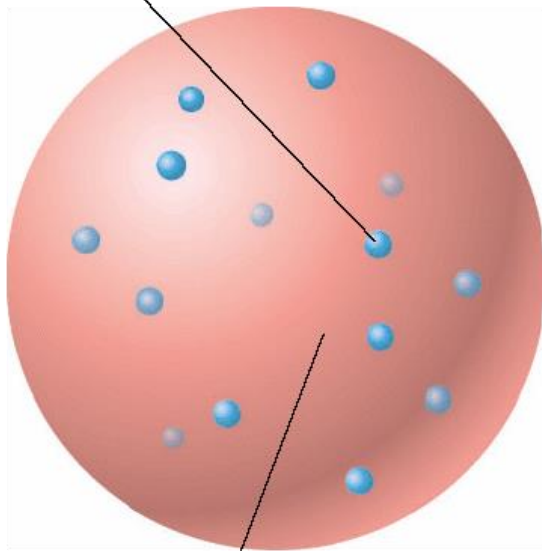




A descoberta da estrutura atômica:

**Thomson (1897)**

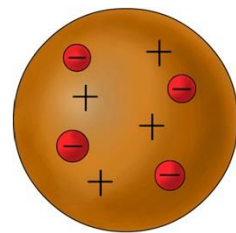
Elétron  
negativo



Carga positiva  
espalhada sobre a esfera

O átomo: entidades neutras,  
negativas e positivas.

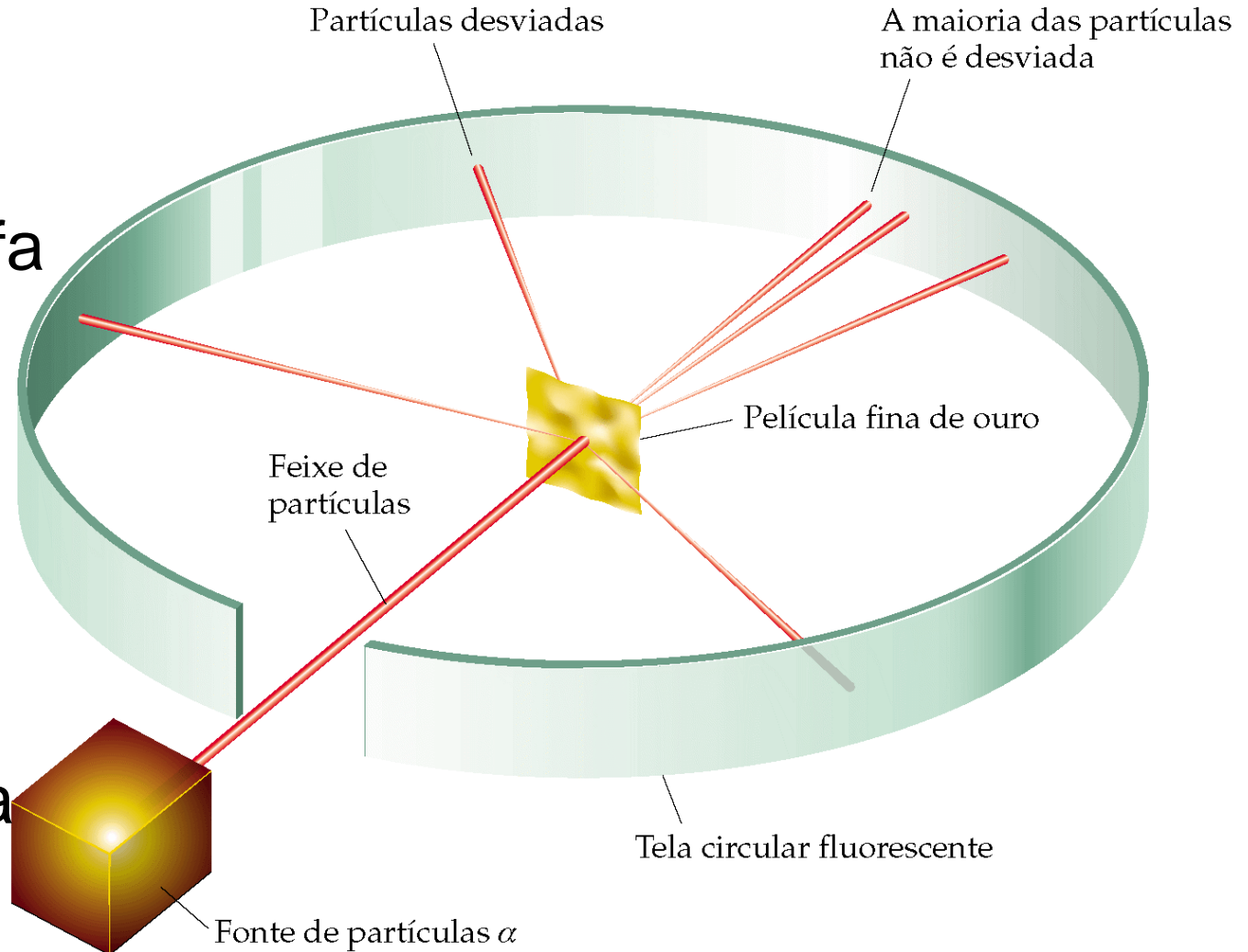
- todas entidades eram encontradas em uma esfera.
- Sem núcleo.
- Pudim de passas!





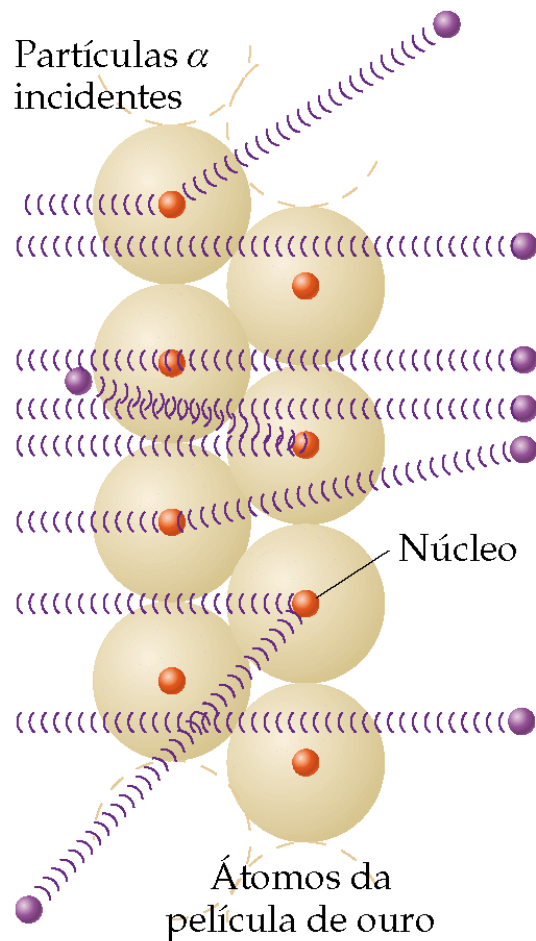
# A descoberta da estrutura atômica: **Rutherford (1911)**

Partículas alfa  
(2P e 2N)  
incidentes



Poucos  
desvios das  
partículas alfa

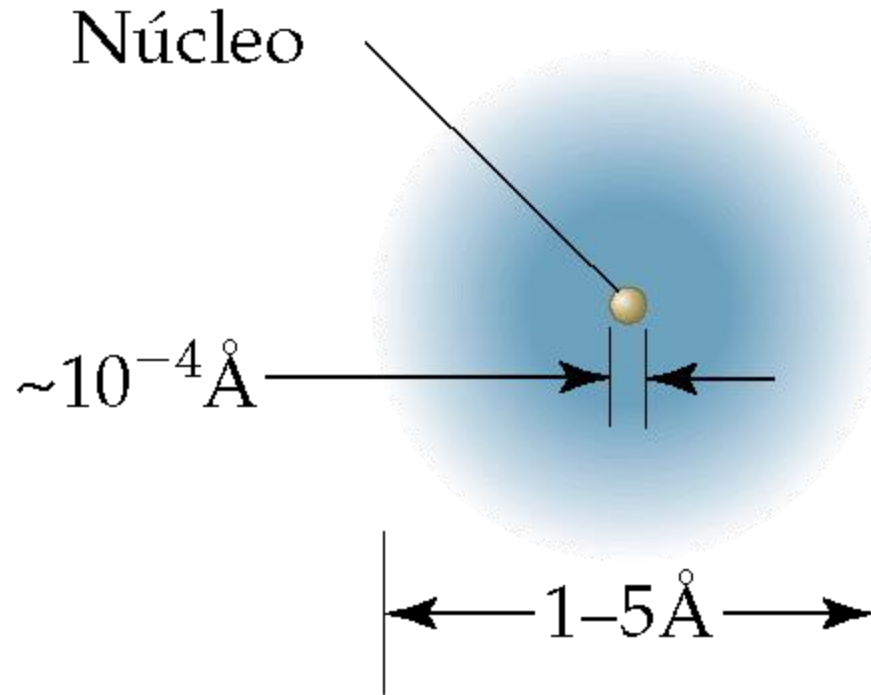
# A descoberta da estrutura atômica: Rutherford



O átomo com núcleo!

Único meio de desviar poucas partículas alfa seria a presença de um núcleo denso (prótons e nêutrons) e o restante do átomo de maior volume (elétrons)

# A descoberta da estrutura atômica



- Número atômico ( $Z$ ) = número de prótons no núcleo.
- Número de massa ( $A$ ) = número total de prótons e nêutrons.
- Por convenção, para um elemento  $X$ , escreve-se  ${}_Z^A X$ .

# Ligações químicas interatômicas

- **Ligação química:** é a força atrativa que mantém dois ou mais átomos unidos.
- **Ligação iônica:** resulta da transferência de elétrons de um metal (**muito eletropositivo**) para um não-metal (**muito eletronegativo**).
- **Ligação metálica:** é a força atrativa que mantém metais puros unidos. Ligas.
- **Ligação covalente:** compartilhamento de elétrons entre dois átomos. Normalmente ocorre entre elementos não-metálicos (**e não metais e H**).

# Símbolos de Lewis

Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
Li	[He]2s <sup>1</sup>	Li·	Na	[Ne]3s <sup>1</sup>	Na·
Be	[He]2s <sup>2</sup>	·Be·	Mg	[Ne]3s <sup>2</sup>	·Mg·
B	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	·B·	Al	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	·Al·
C	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	·C·	Si	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	·Si·
N	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	·N:	P	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	·P:
O	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	:O:	S	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	:S:
F	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	·F:	Cl	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	·Cl:
Ne	[He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	:Ne:	Ar	[Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	:Ar:

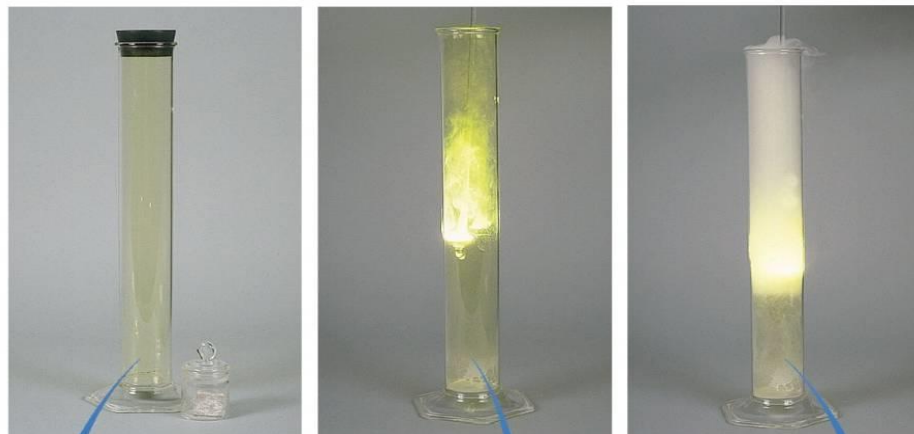
**Exemplo: Cl 1e livre + Na 1e livre = NaCl**

**Exemplo: Ar: sem elétrons livres**

**Exemplo: C 4e livres + 4 Cl com 1e livre cada = CCl<sub>4</sub>**

## Ligação iônica - Exercício

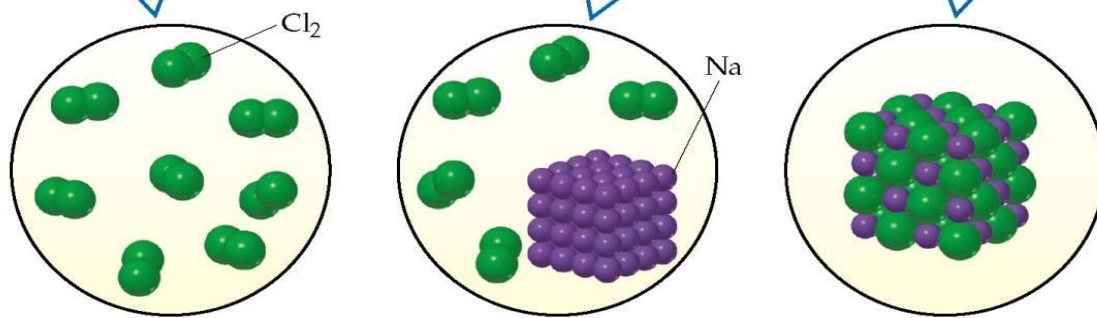
Considere a reação:



(a)

(b)

(c)



- Por que podemos dizer que o NaCl é mais estável do que os elementos que o constituem?





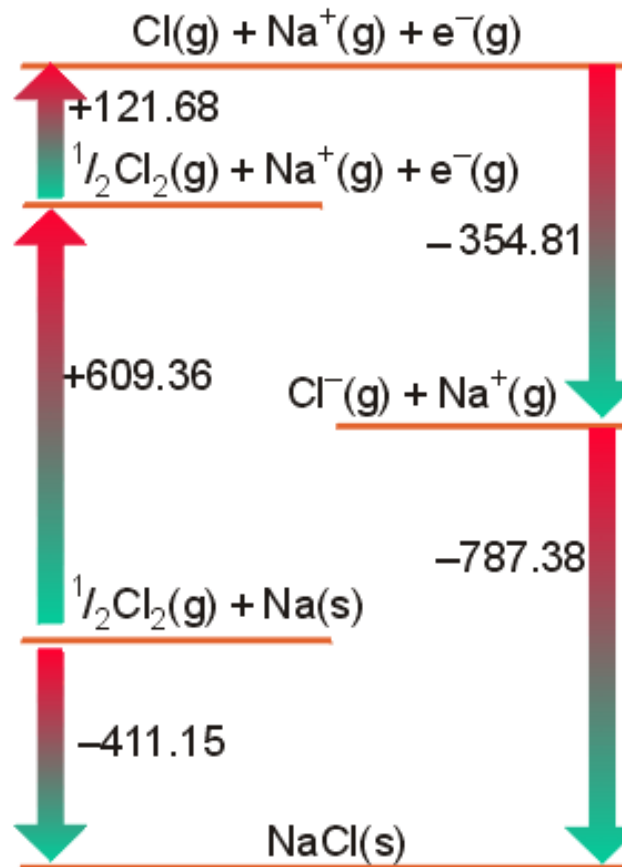
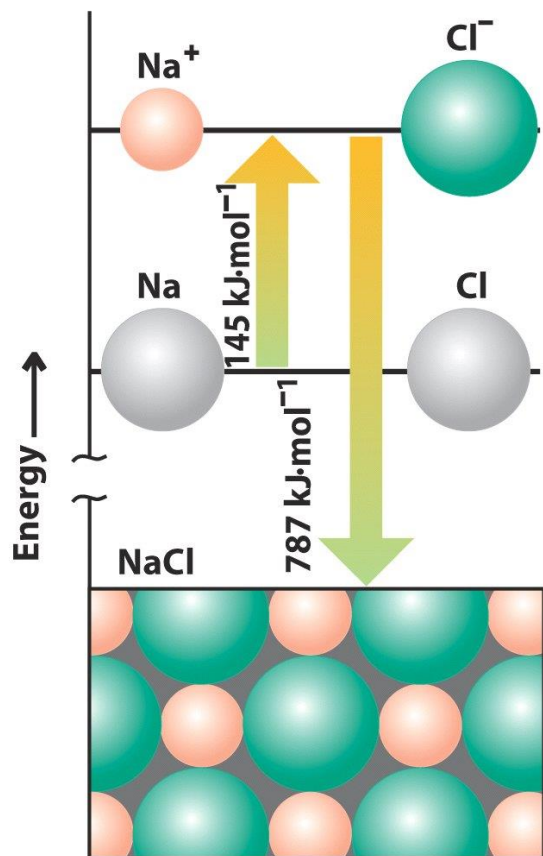
# IUPAC Periodic Table of the Elements

1																		18																	
1 H Hydrogen (1.00784)																	2 He Helium (4.002602)																		
3 Li Lithium (6.941)	4 Be Beryllium (9.012182)	Key: Atomic number Symbol Name Relative atomic weight																5 B Boron (10.811)	6 C Carbon (12.0107)	7 N Nitrogen (14.007)	8 O Oxygen (15.999)	9 F Fluorine (18.9984)	10 Ne Neon (20.1797)												
11 Na Sodium (22.989769)	12 Mg Magnesium (24.304)																	13 Al Aluminum (26.9815385)	14 Si Silicon (28.0855)	15 P Phosphorus (30.973762)	16 S Sulfur (32.06)	17 Cl Chlorine (35.453)	18 Ar Argon (39.948)												
19 K Potassium (39.0983)	20 Ca Calcium (40.078)	21 Sc Scandium (44.955912)	22 Ti Titanium (47.88)	23 V Vanadium (50.9415)	24 Cr Chromium (51.9961)	25 Mn Manganese (54.938045)	26 Fe Iron (55.845)	27 Co Cobalt (58.933195)	28 Ni Nickel (58.6934)	29 Cu Copper (63.546)	30 Zn Zinc (65.408)	31 Ga Gallium (69.723)	32 Ge Germanium (72.64)	33 As Arsenic (74.9216)	34 Se Selenium (78.96)	35 Br Bromine (79.904)	36 Kr Krypton (83.798)																		
37 Rb Rubidium (85.4678)	38 Sr Strontium (87.62)	39 Y Yttrium (88.90584)	40 Zr Zirconium (91.224)	41 Nb Niobium (92.90638)	42 Mo Molybdenum (95.94)	43 Tc Technetium (97.907)	44 Ru Ruthenium (101.07)	45 Rh Rhodium (101.07)	46 Pd Palladium (106.42)	47 Ag Silver (107.8682)	48 Cd Cadmium (112.411)	49 In Indium (114.818)	50 Sn Tin (118.710)	51 Sb Antimony (121.757)	52 Te Tellurium (127.603)	53 I Iodine (126.905)	54 Xe Xenon (131.29)																		
55 Cs Cesium (132.90545196)	56 Ba Barium (137.327)	57-71 Lanthanoids	72 Hf Hafnium (178.49)	73 Ta Tantalum (180.94788)	74 W Tungsten (183.84)	75 Re Rhenium (186.207)	76 Os Osmium (190.23)	77 Ir Iridium (192.222)	78 Pt Platinum (195.084)	79 Au Gold (196.966569)	80 Hg Mercury (200.59)	81 Tl Thallium (204.3833)	82 Pb Lead (207.2)	83 Bi Bismuth (208.9804)	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (208.9804)	86 Rn Radon (222.0176)																		
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89-103 Actinoids	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 Ds Darmstadtium (267)	111 Rg Roentgenium (268)																									
57 La Lanthanum (138.90471)	58 Ce Cerium (140.12)	59 Pr Praseodymium (140.90766)	60 Nd Neodymium (144.242)	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium (150.36)	63 Eu Europium (151.964)	64 Gd Gadolinium (157.25)	65 Tb Terbium (158.92535)	66 Dy Dysprosium (162.50)	67 Ho Holmium (164.93032)	68 Er Erbium (167.259)	69 Tm Thulium (168.93032)	70 Yb Ytterbium (173.045)	71 Lu Lutetium (174.967)																					
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium (232.0377)	91 Pa Protactinium (231.03688)	92 U Uranium (238.02891)	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (260)																					

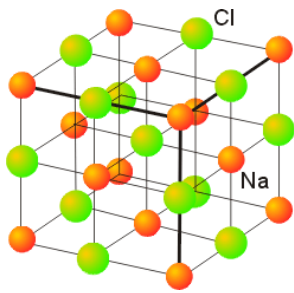


# Ligações Iônicas

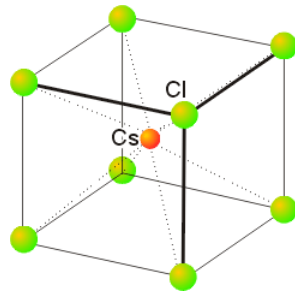
## Ciclo de Born-Haber



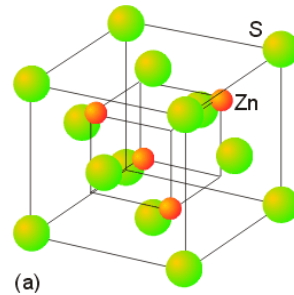
# Modelos de sólidos cristalinos



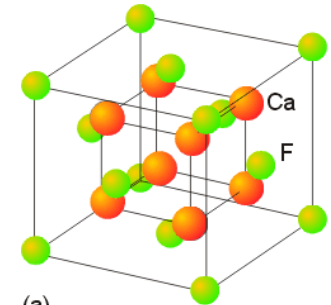
**NaCl (CFC)**



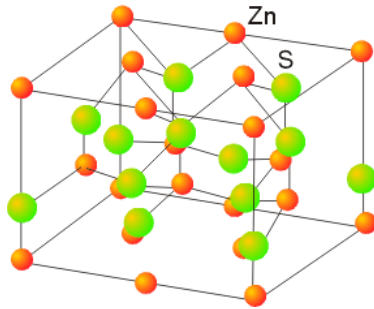
**CsCl (CS)**



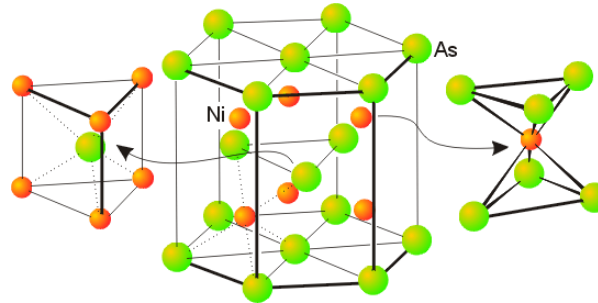
**esfarelita (ZnS)**



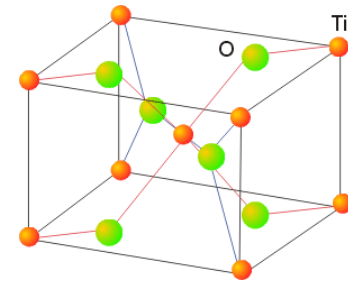
**fluorita (CaF<sub>2</sub>)**



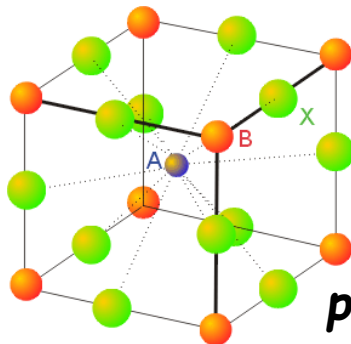
**wurtzita (ZnS)**



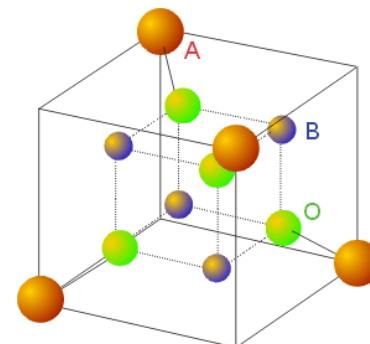
**arseneto de níquel**



**rutilo**



**perovskita**



**espinélio, AB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>**

# Energia de rede

$$U = -A \times |z_1 \cdot z_2| N_A e^2 / 4\pi\epsilon_0 d$$

## Constantes de Madelung

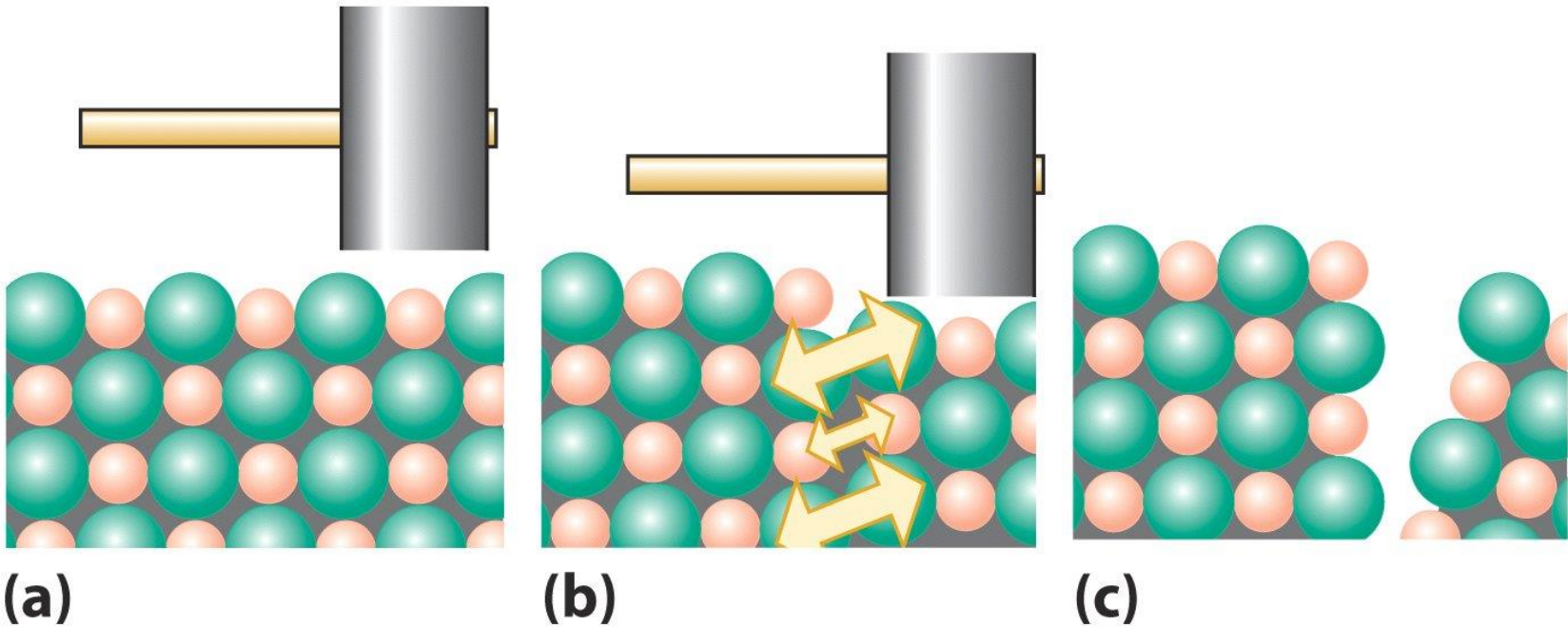
<i>Tipo de Estrutura</i>	<i>A</i>
cloreto de césio	1,763
fluorita	2,519
cloreto de sódio	1,748
rutilo	2,408

# Energia de rede

TABELA 8.2 Energias de rede para alguns compostos iônicos

Composto	Energia de rede (kJ/mol)	Composto	Energia de rede (kJ/mol)
LiF	1.030	MgCl <sub>2</sub>	2.326
LiCl	834	SrCl <sub>2</sub>	2.127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3.795
NaCl	788	CaO	3.414
NaBr	732	SrO	3.217
NaI	682		
KF	808	ScN	7.547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

# Propriedades dos Compostos Iônicos



# Propriedades dos Compostos Iônicos

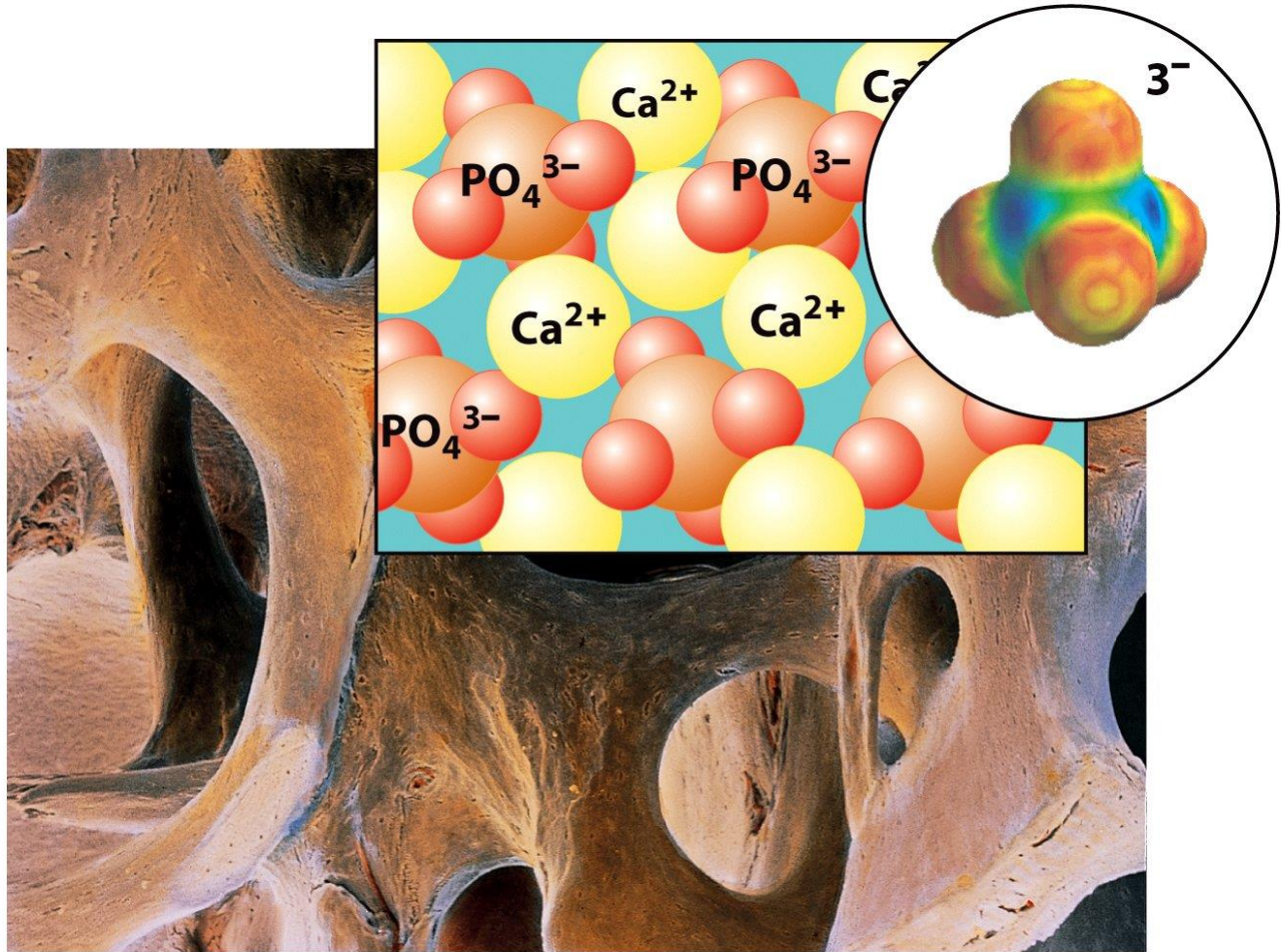


# Propriedades dos Compostos Iônicos





# Propriedades dos Compostos Iônicos



# Estequiometrias Comuns dos Compostos Iônicos

	$X^-$	$X^{2-}$	$X^{3-}$
$M^+$	$MX$	$M_2X$	$M_3X$
$M^{2+}$	$MX_2$	$MX$	$M_3X_2$
$M^{3+}$	$MX_3$	$M_2X_3$	$MX$

# Estruturas de Lewis dos Compostos Iônicos

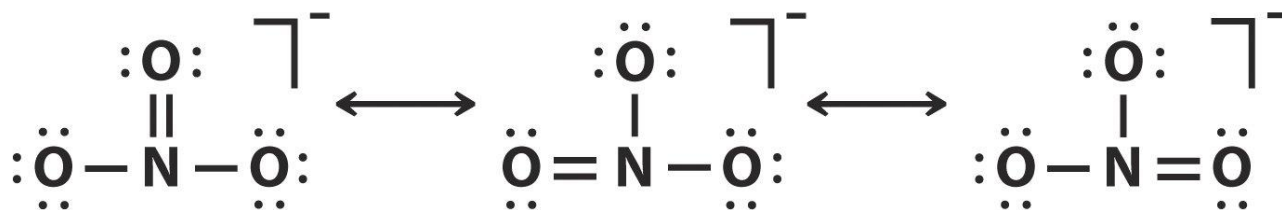
NaCl	$K_2O$	$Na_3N$
$CaF_2$	MgO	$Ca_3P_2$
$FeBr_3$	$Al_2O_3$	AlN



# Ligações Covalentes

## (A) Ressonância

Algumas moléculas têm estruturas que não podem ser expressas corretamente por uma única estrutura de Lewis.



**Híbrido de ressonância:** é a mistura de duas ou mais estruturas de Lewis.

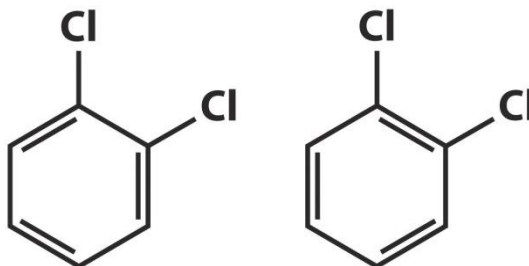
A ressonância entre estruturas de Lewis reduz a energia calculada da molécula e modela o caráter de ligação, distribuindo-a sobre toda a molécula. As estruturas de Lewis com energias similares fornecem uma maior estabilização por ressonância.

# Ligações Covalentes

## Evidências experimentais:

Uma única estrutura de Lewis para molécula de benzeno,  $C_6H_6$ , não explica todas as evidências experimentais:

- **Reatividade:** O benzeno não sofre as reações típicas de compostos com ligações duplas.
- **Comprimento de ligação:** Todas as ligações carbono-carbono têm o mesmo comprimento.
- **Evidência estrutural:** Só existe um dicloro-benzeno no qual os dois átomos de cloro estão ligados a carbonos adjacentes.



# Ligações Covalentes

## (B) Carga formal

É a carga que um átomo teria se os pares de elétrons fossem compartilhados igualmente. As estruturas de Lewis com baixas cargas formais geralmente têm a menor energia.

$$f = V - L - \frac{1}{2} P$$

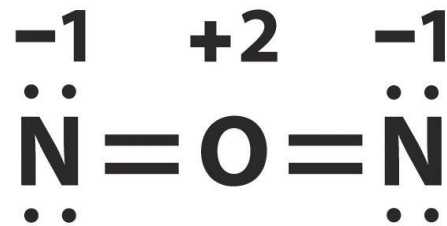
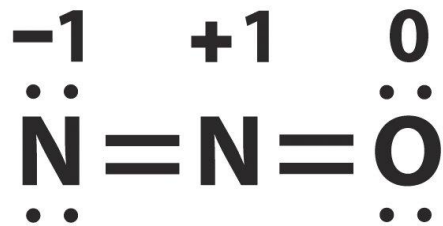
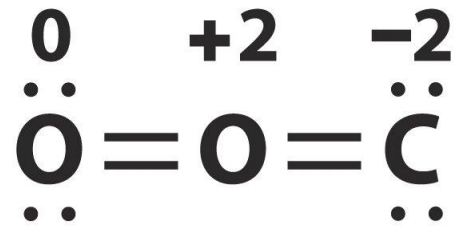
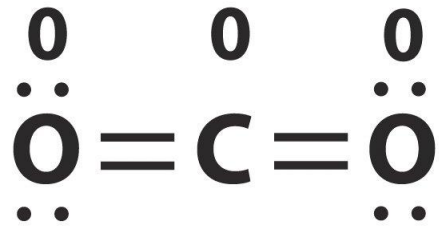
onde:  $V = n^{\circ}$ . de elétrons de valência do átomo livre;

$L = n^{\circ}$ . de elétrons presentes nos pares isolados;

$P = n^{\circ}$ . de elétrons compartilhados.

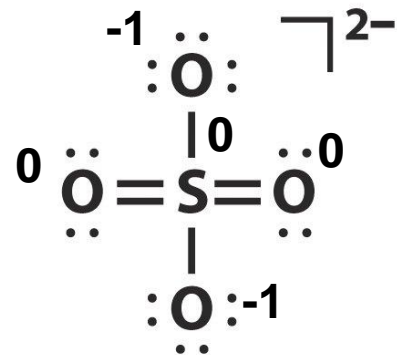
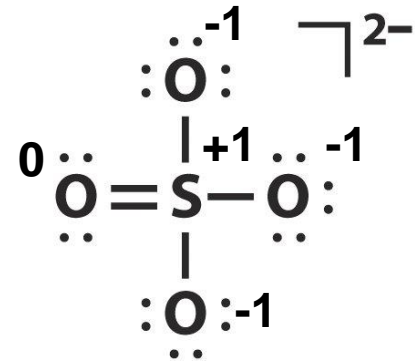
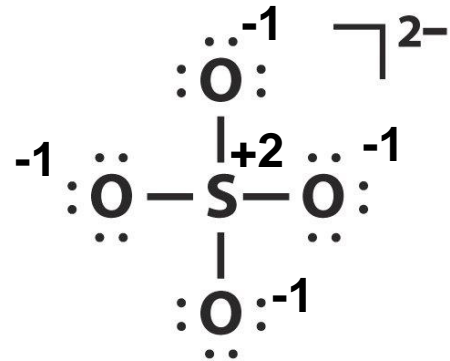
Geralmente a estrutura de menor energia é aquela com: **(1)** a menor carga formal nos átomos; e **(2)** a estrutura na qual ao elemento mais eletronegativo é atribuída uma carga formal negativa e ao elemento menos eletronegativo é atribuída uma carga formal positiva.

# Ligações Covalentes





# Ligações Covalentes



# Ligações Covalentes

## (C) Número de oxidação

A carga formal é um parâmetro obtido exagerando-se o caráter covalente de uma ligação. O número de oxidação é um parâmetro obtido exagerando-se o caráter iônico de uma ligação.

Ele pode ser considerado como a carga que um átomo teria se o átomo mais eletronegativo em uma ligação ficasse com os dois elétrons da ligação.

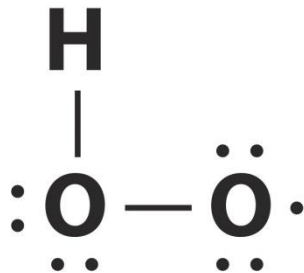
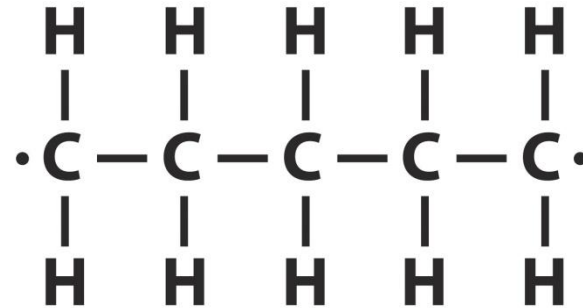
Na prática, os NOXs são atribuídos aplicando-se uma série de regras.

**Exemplo 1:** Qual é o número de oxidação de (a) N no íon azida,  $\text{N}_3^-$ , e (b) do Mn no íon permanganato,  $\text{MnO}_4^-$ ?

# Ligações Covalentes

## (D) Radicais

As espécies que têm elétrons com spins não emparelhados são chamados de radicais. Eles são, em geral, muito reativos.



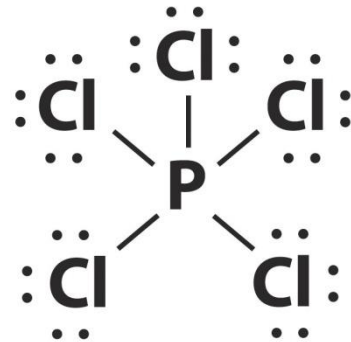
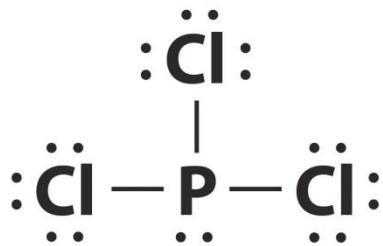
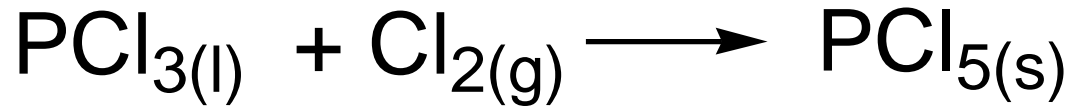
Hydrogenperoxyl,  $\text{HO}_2\cdot$



# Ligações Covalentes

## (E) Hipervalência

Espécies as quais demandam a presença de mais do que um octeto de elétrons ao redor de um átomo, são denominados hipervalentes.



# Ligação Iônica vs Ligações Covalentes

## Electronegativity (Pauling)

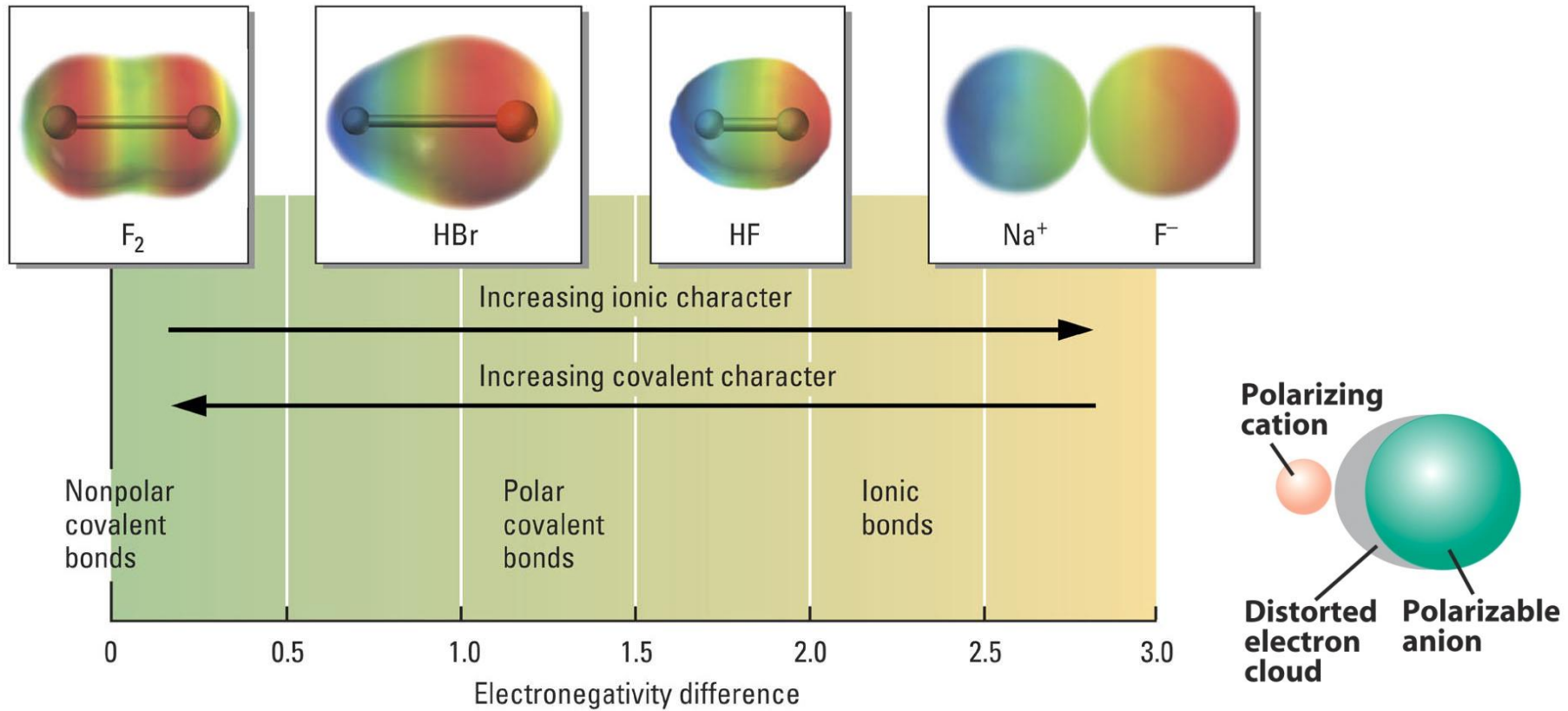
H	Name: fluorine (F) Atomic number: 9																He
Li	Be	Group: 17 Period: 2 Value: 3.98 Pauling scale														Ne	
Na	Mg															Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

## WebElements

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

# Ligação Iônica vs Ligações Covalentes

## Característica da Ligação



# Estrutura e propriedades de ligação

## (A) Comprimento de ligação

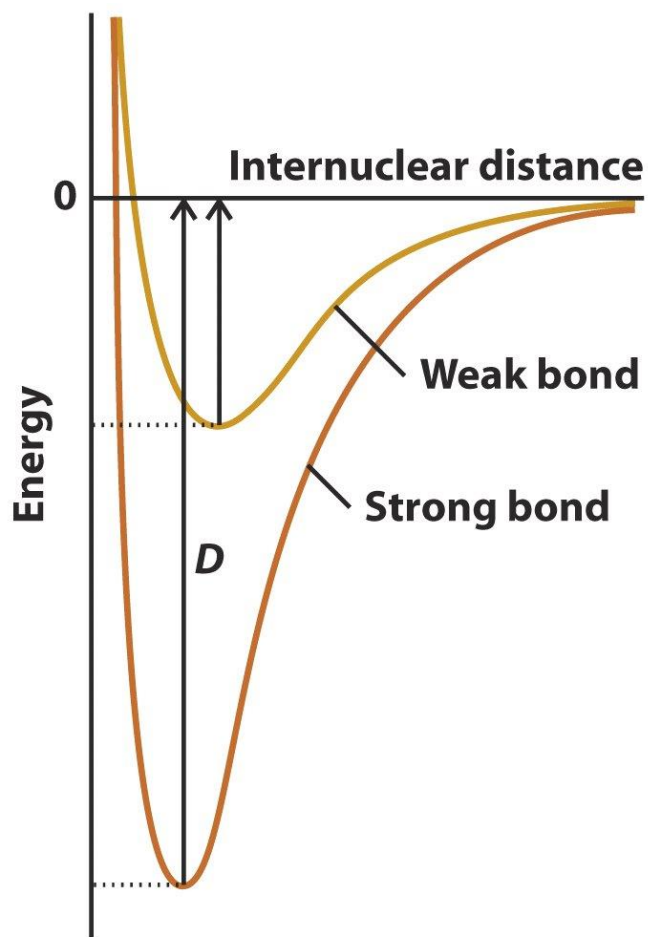
**TABLE 2.4** Average and Actual Bond Lengths (pm)

Bond	Average bond length	Molecule	Bond length
C—H	109	H <sub>2</sub>	74
C—C	154	N <sub>2</sub>	110
C=C	134	O <sub>2</sub>	121
C···C*	139	F <sub>2</sub>	142
C≡C	120	Cl <sub>2</sub>	199
C—O	143	Br <sub>2</sub>	228
C=O	112	I <sub>2</sub>	268
O—H	96		
N—H	101		
N—O	140		
N=O	120		

\*In benzene.

# Estrutura e propriedades de ligação

## (B) Energia de ligação



**TABLE 2.2** Bond Dissociation Energies of Diatomic Molecules ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )

Molecule	Bond dissociation energy
$\text{H}_2$	424
$\text{N}_2$	932
$\text{O}_2$	484
$\text{CO}$	1062
$\text{F}_2$	146
$\text{Cl}_2$	230
$\text{Br}_2$	181
$\text{I}_2$	139
$\text{HF}$	543
$\text{HCl}$	419
$\text{HBr}$	354
$\text{HI}$	287



## Forças e Energias de Ligação (Caso Unidimensional)

- Quando dois átomos se aproximam, eles exercem uma força um no outro:

$$\mathbf{F}_N = \mathbf{F}_A + \mathbf{F}_R$$

onde:

$F_A \equiv$  força de atração

$F_R \equiv$  força de repulsão

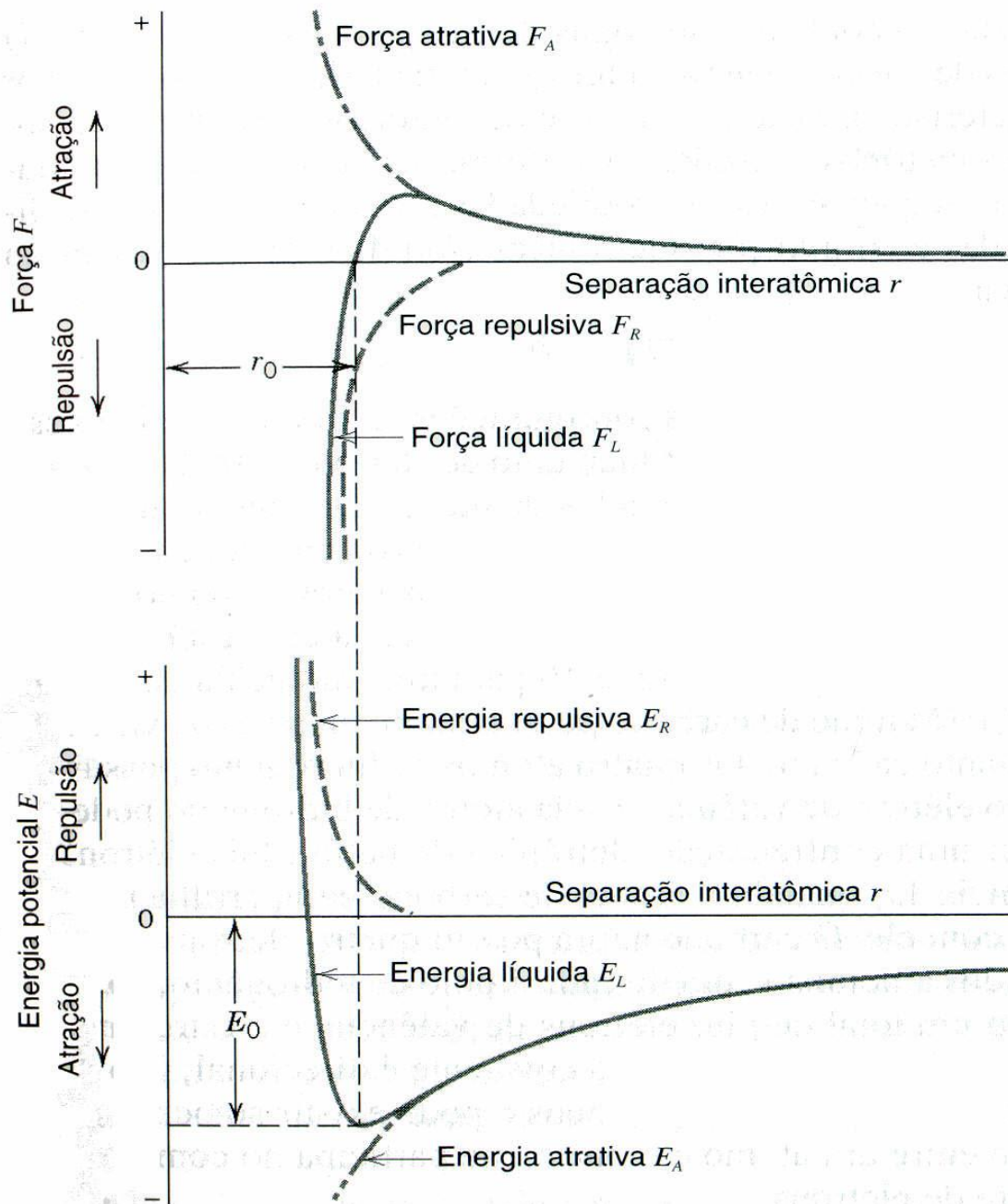
$F_N \equiv$  força resultante

- A energia potencial ( $E_N$ ) será dada por:

$$E_N = \int F_N dr = \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr$$

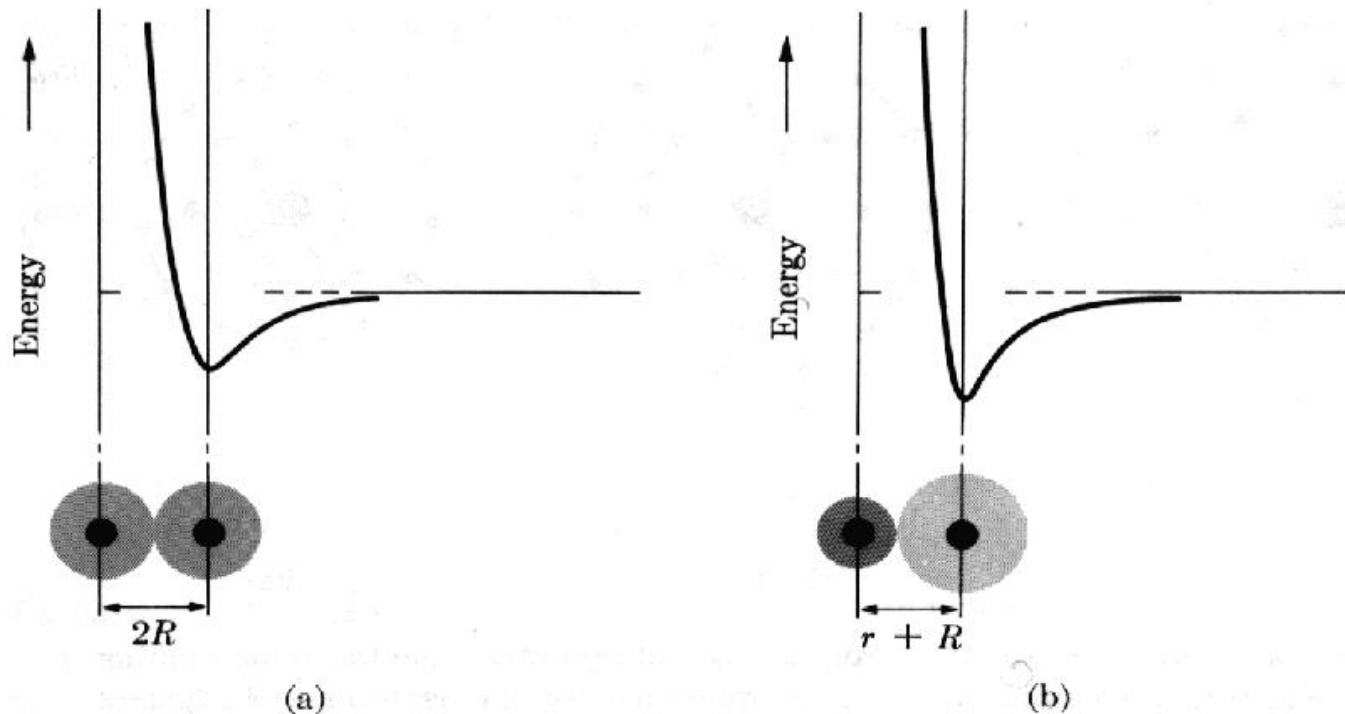
onde:

$r \equiv$  distância interatômica



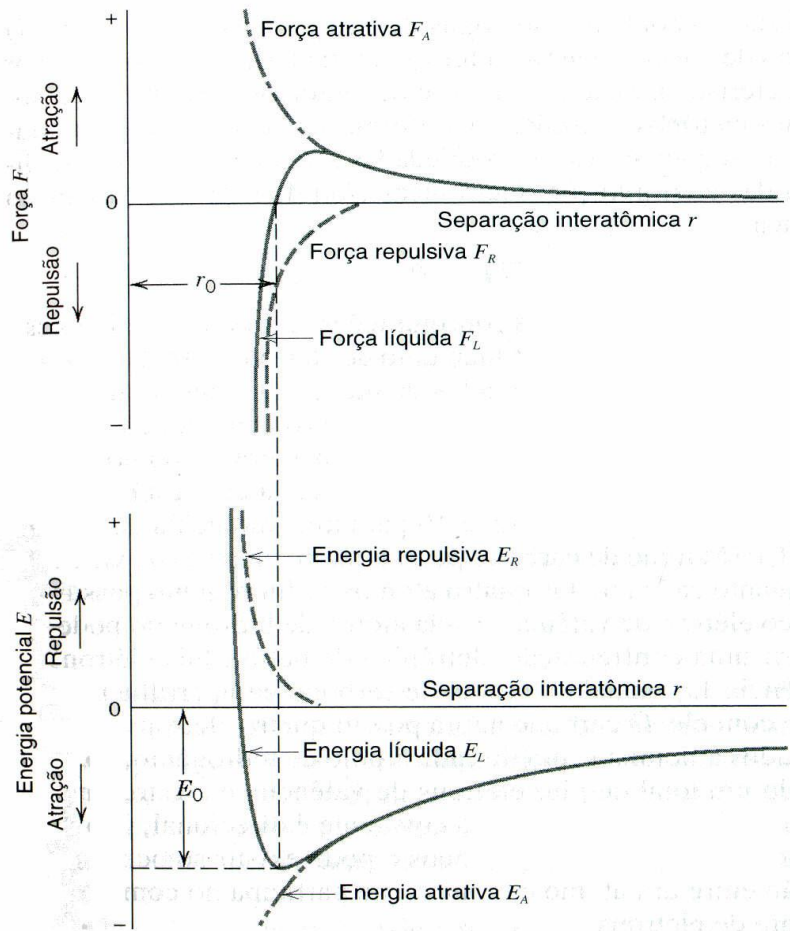
Forças de atração e de repulsão em função da distância interatômica ( $r$ ) para dois átomos isolados

Energia Potencial em função da distância interatômica ( $r$ ) para dois átomos isolados



A distância de ligação entre dois átomos é a distância correspondente ao ponto de mínima energia (soma dos dois raios atômicos). (a) *Para metais puros*, todos os átomos têm o mesmo raio atômico. (b) *Para sólidos iônicos*, os raios atômicos são diferentes, uma vez que íons adjacentes nunca são idênticos.

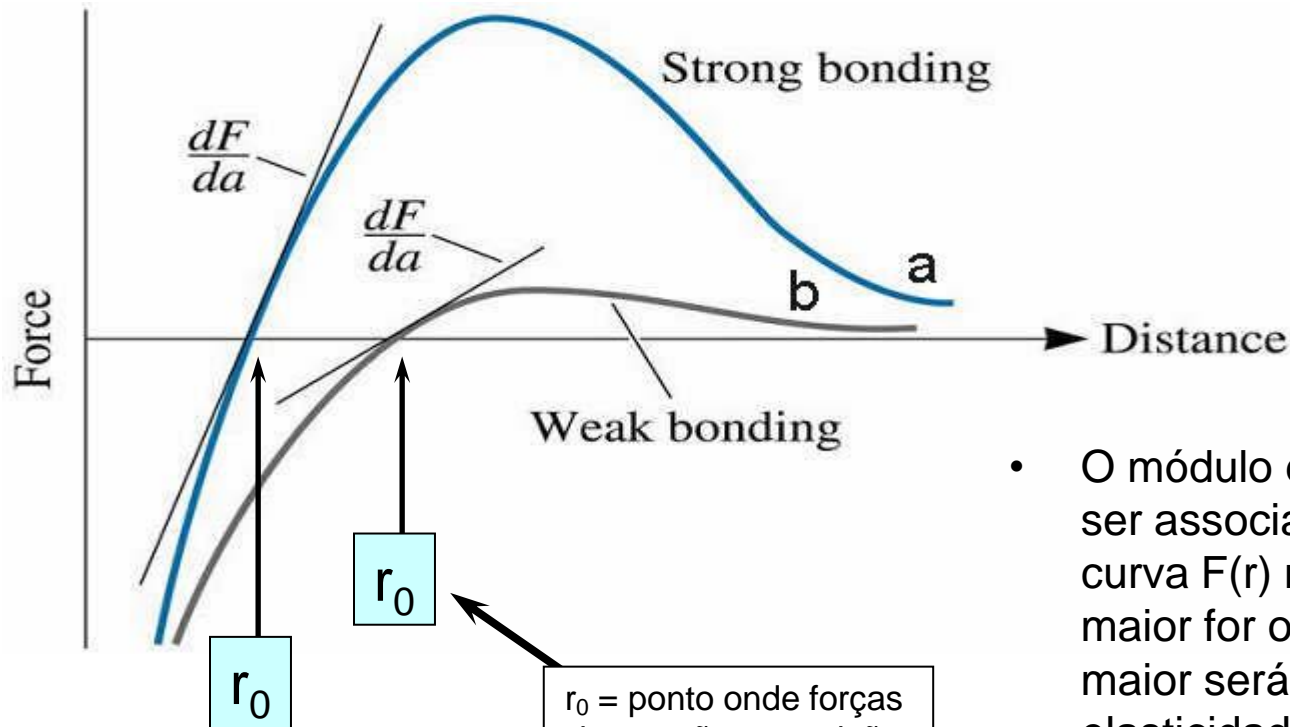
# Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



## • Propriedades Mecânicas

- Em escala atômica, a **DEFORMAÇÃO ELÁSTICA** é manifestada como uma pequena alteração na distância interatômica e na energia da ligação.
- A profundidade do poço de potencial é uma medida da energia de ligação; quanto maior for sua profundidade, maior será a energia de ligação e, portanto, também maior será a resistência à deformação elástica (RIGIDEZ).
- O **MÓDULO DE ELASTICIDADE** é uma medida da rigidez de um material.

# Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



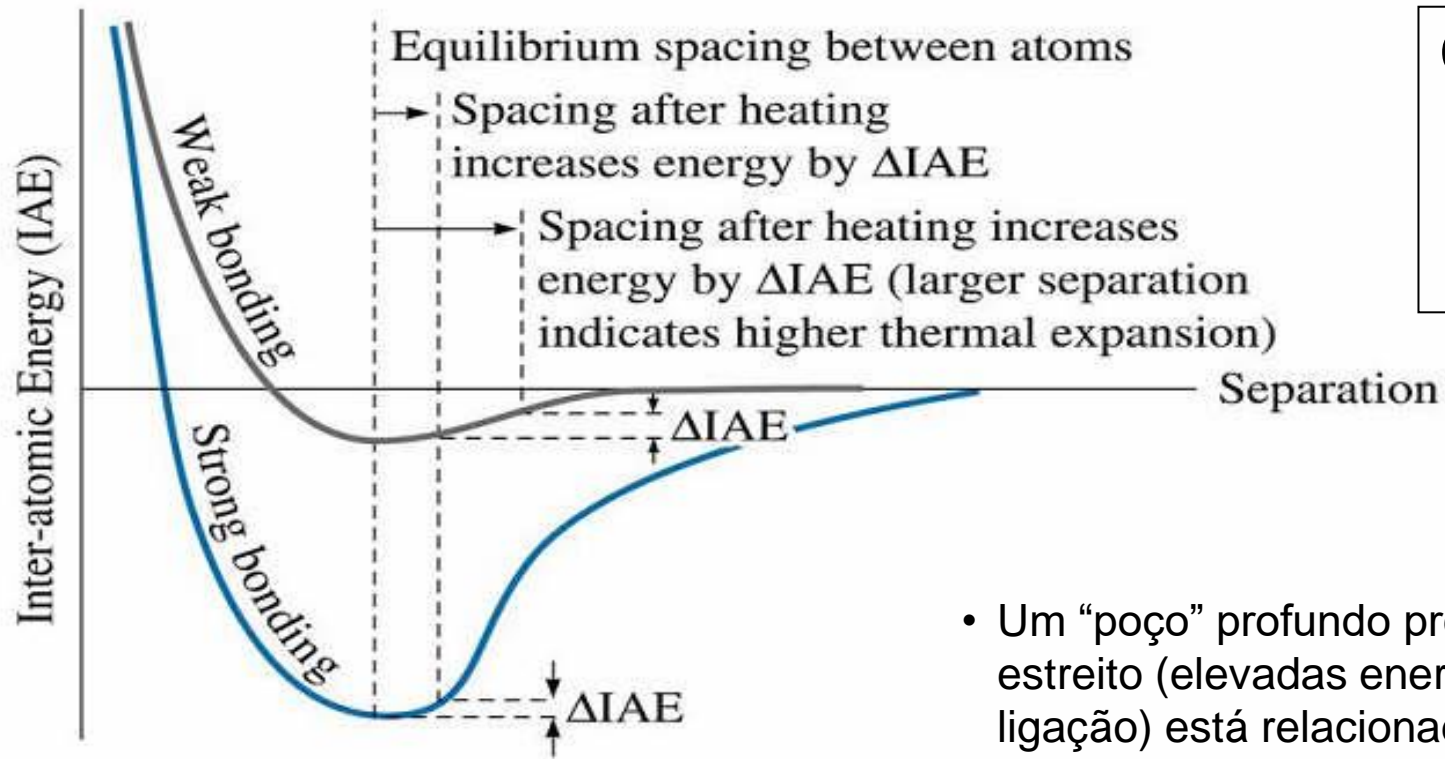
Módulo de Elasticidade

- O módulo de elasticidade pode ser associado à derivada da curva  $F(r)$  no ponto  $r = r_0$ ; quanto maior for o valor da derivada, maior será o módulo de elasticidade.
- O material a apresenta *maior rigidez* do que o material b.

$r_0$  = ponto onde forças de atração e repulsão são iguais

Obs.: o *módulo de elasticidade* é uma propriedade mecânica que será estudada em detalhe mais à frente no curso

# Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação

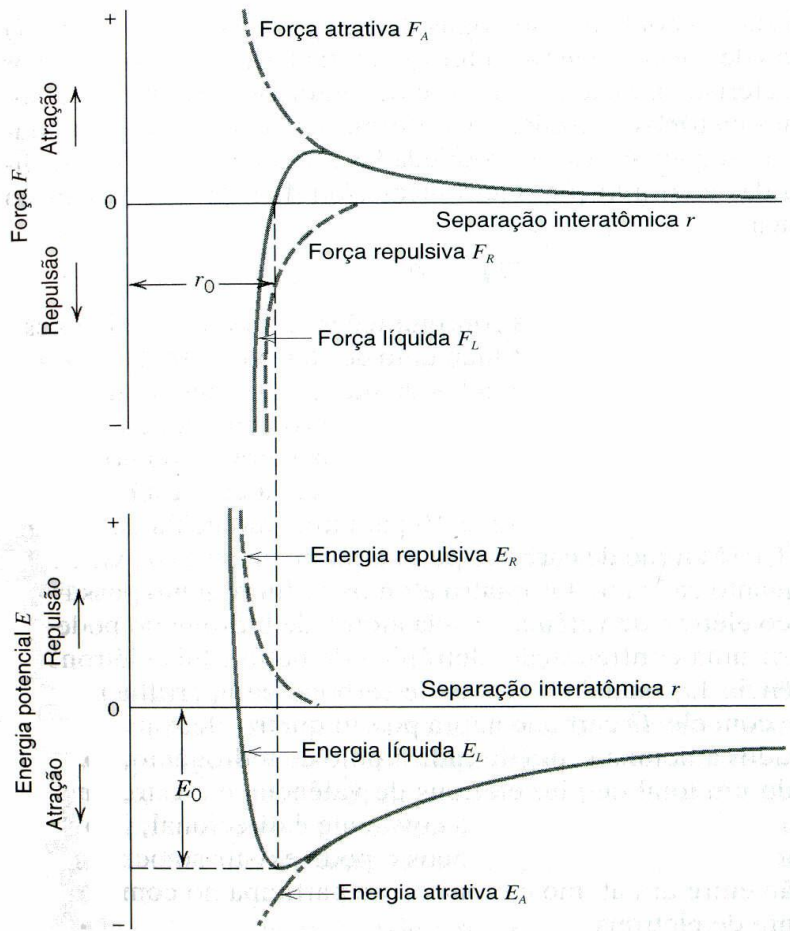


Coeficiente de Expansão Térmica

- Um “poço” profundo e estreito (elevadas energias de ligação) está relacionado a um baixo coeficiente de expansão térmica.

Obs.: IAE = interatomic energy

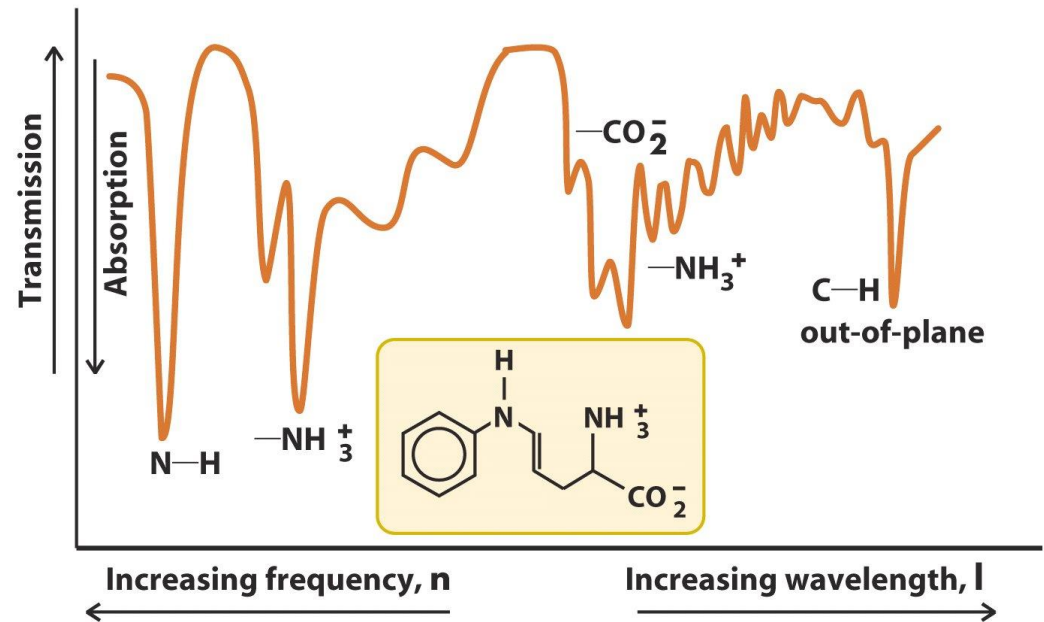
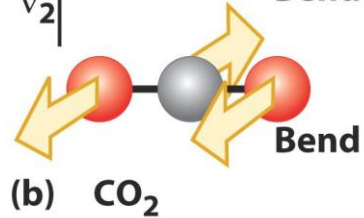
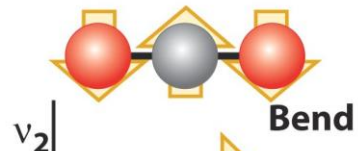
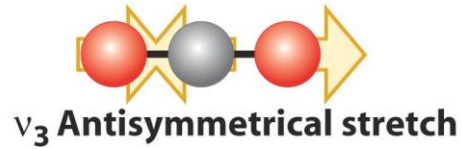
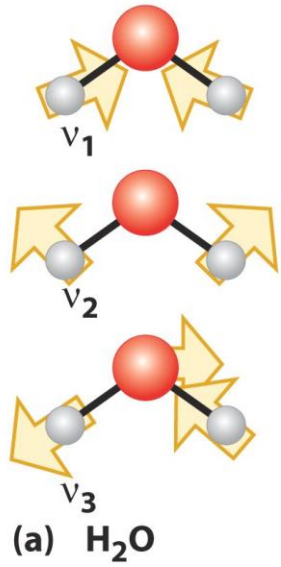
# Relação Entre Algumas Propriedades e as Curvas de Força e Energia de Ligação



## Pontos de fusão e de ebulição

- Materiais que apresentam grandes energias de ligação (ou seja, poços de potencial profundos) também apresentam temperaturas de fusão e de ebulição elevadas.

# Espectroscopia no IR

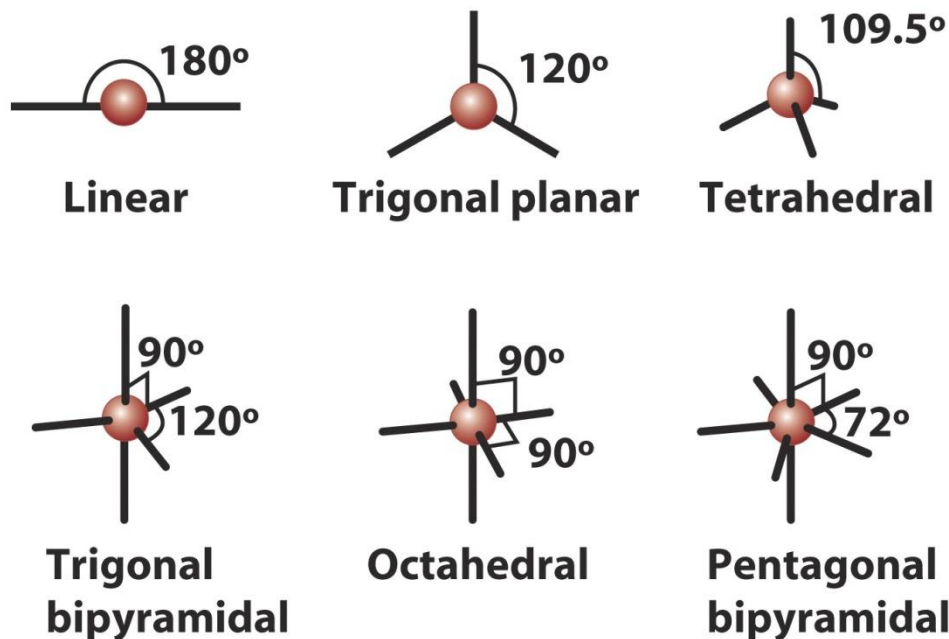




# Modelo RPECV ou VSEPR

O modelo da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (modelo RPECV ou VSEPR) amplia a teoria da ligação química de Lewis para explicar as formas das moléculas, adicionando regras que explicam os ângulos de ligação.

**Primeira regra:** as regiões de altas concentrações de elétrons se repelem e, para reduzir ao máximo essa repulsão, elas tendem a se afastar o máximo possível, mantendo a mesma distância do átomo central.

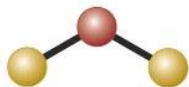


# Forma e Estrutura das Moléculas

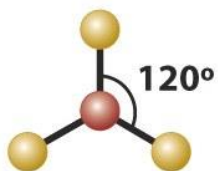
**Segunda regra:** tendo identificado o arranjo que localiza os pares de elétrons na posição “mais distante” (ligações e pares isolados do átomo central), que é chamado de *arranjo dos elétrons* na molécula, determinamos a posição dos átomos e identificamos a forma da molécula, dando-lhe um nome de acordo com as formas.



Linear



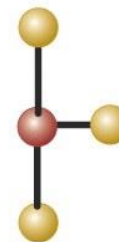
Angular



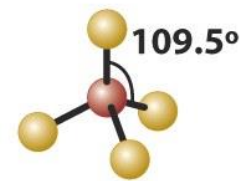
Trigonal planar



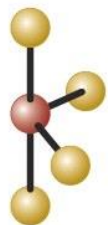
Trigonal pyramidal



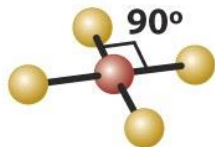
T-shaped



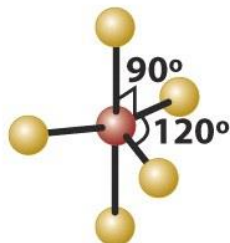
Tetrahedral



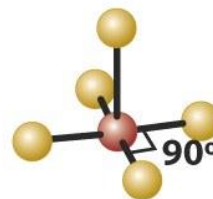
Seesaw



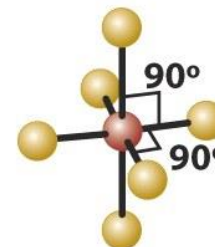
Square planar



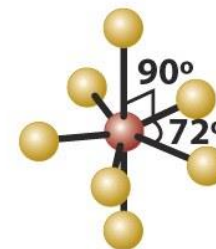
Trigonal bipyramidal



Square pyramidal



Octahedral



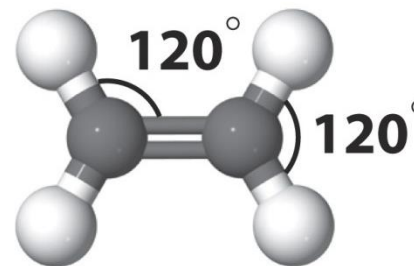
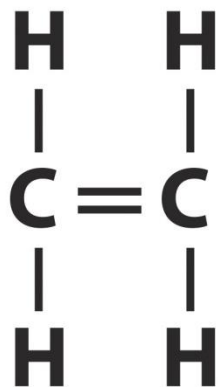
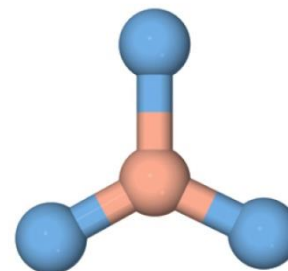
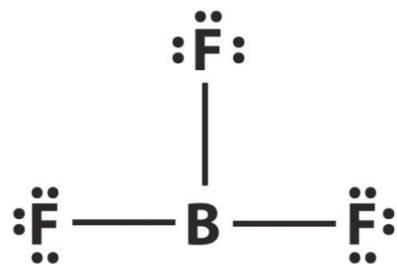
Pentagonal bipyramidal

# Forma e Estrutura das Moléculas

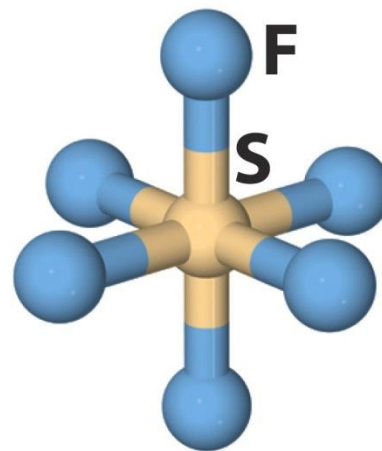
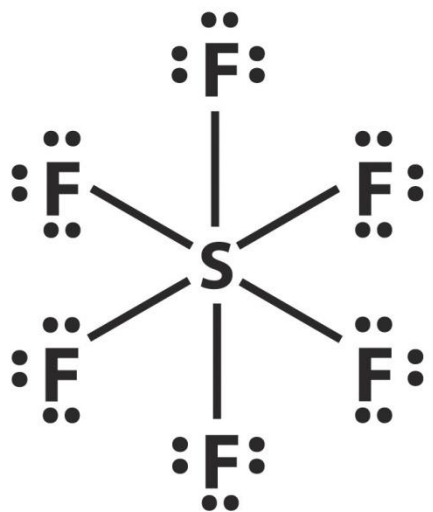
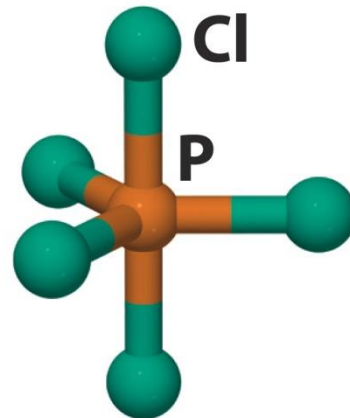
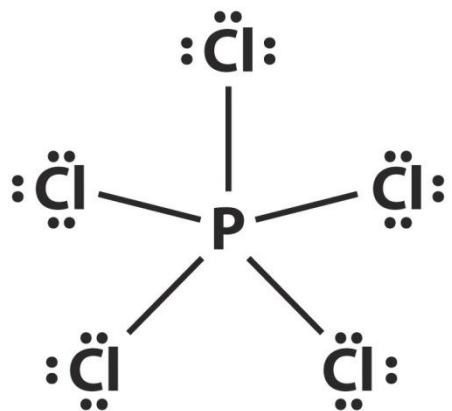
**Terceira regra:** não existe distinção entre ligações simples ou múltiplas.

**Quarta regra:** quando existe mais de um átomo central, as ligações de cada átomo são tratados independentemente.

Exemplos:



# Forma e Estrutura das Moléculas





# Forma e Estrutura das Moléculas

Moléculas com pares de elétrons isolados no átomo central

**Fórmula Geral:  $AX_nE_m$**

**onde:**

**A = átomo central;**

**X = átomo ligado;**

**E = par isolado.**

Os pares de elétrons isolados do átomo central de uma molécula são regiões de densidade de elétrons elevada e devem ser considerados na identificação da forma molecular.

# Forma e Estrutura das Moléculas

Todos os pares de elétrons, ligantes ou não, são incluídos na descrição do arranjo de elétrons. Todavia, somente as posições dos átomos são consideradas quando descrevemos a forma de uma molécula.

## **Predição da forma de uma molécula com pares isolados.**

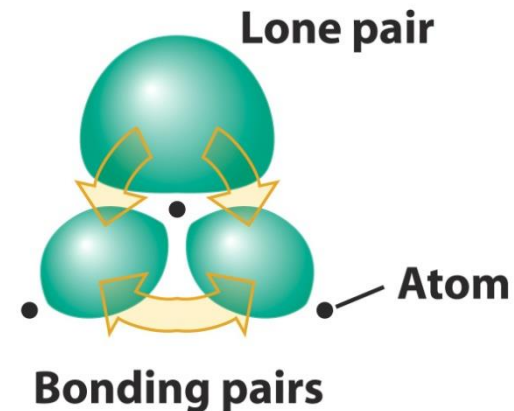
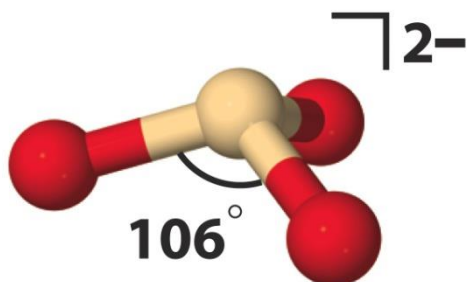
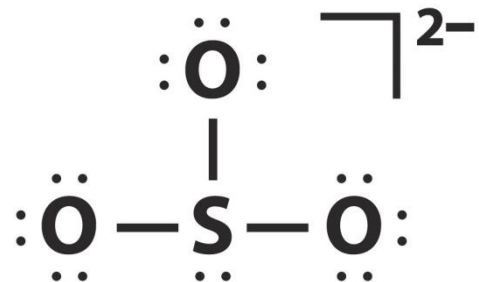
**Etapa 1.** Desenhe a estrutura de Lewis;

**Etapa 2.** Conte as ligações e pares isolados do átomo central;

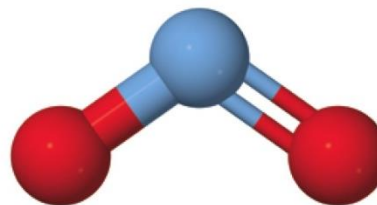
**Etapa 3.** Determine o arranjo de elétrons;

**Etapa 4.** Identifique a forma considerando apenas os átomos.

# Forma e Estrutura das Moléculas



Td = 109,5°  
Pirâmide trigonal = 106°



**Exemplo 6:** Prediga (a) o arranjo dos elétrons e (b) a forma da molécula trifluoreto de nitrogênio,  $\text{NF}_3$ .



# Forma e Estrutura das Moléculas

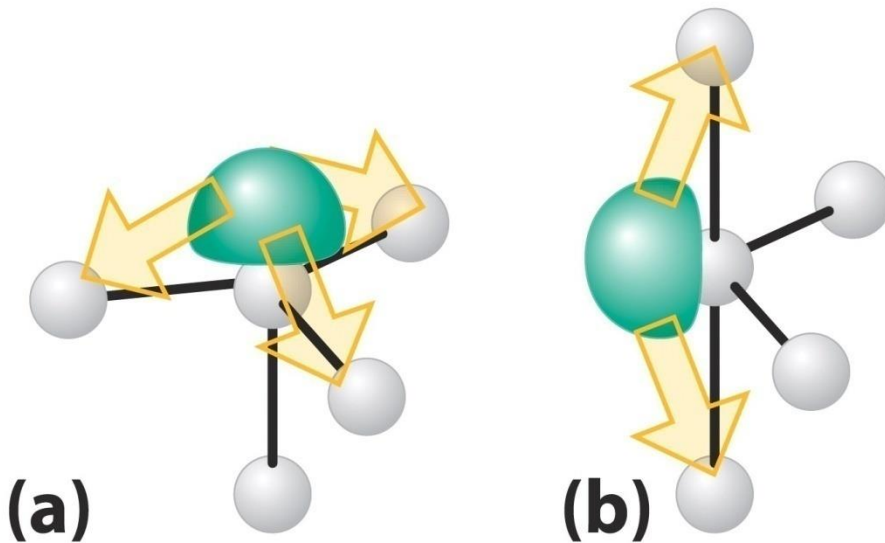
par isolado-par isolado > par isolado-par ligante > par ligante-par ligante

## Resumo do modelo RPECV ou VSEPR:

1. Regiões de alta concentração de elétrons ocupam posições que as afastam o máximo possível;
2. Todas as ligações se repelem da mesma maneira, independentemente de serem simples, duplas ou triplas;
3. A ligação em torno de um átomo central não depende do número de “átomos centrais” da molécula;
4. Os pares de elétrons isolados contribuem para a forma da molécula, embora eles não sejam incluídos na descrição da forma molecular;
5. Os pares de elétrons isolados exercem uma repulsão maior do que os pares de elétrons de ligação e tendem a comprimir os ângulos de ligação.

# Forma e Estrutura das Moléculas

Moléculas do tipo  $AX_4E$  (bipirâmide trigonal)

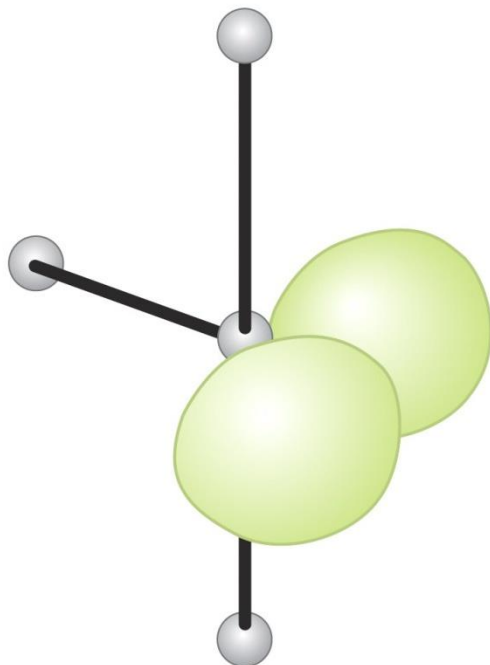


Forma de balanço

Exemplo:  $SF_4$

# Forma e Estrutura das Moléculas

Moléculas do tipo  $AX_3E_2$  (bipirâmide trigonal)

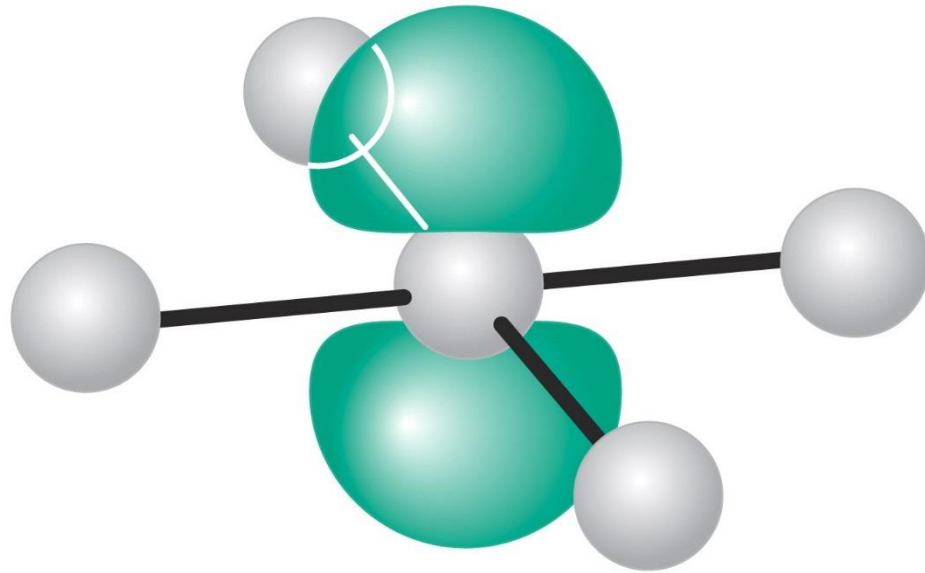


**Forma de um T**

**Exemplo:  $ClF_3$**

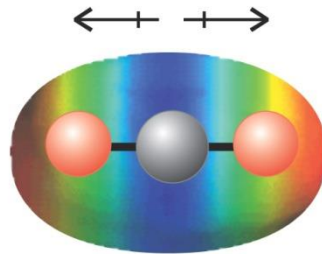
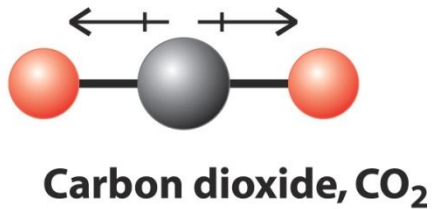
# Forma e Estrutura das Moléculas

Moléculas do tipo  $AX_4E_2$  (arranjo octaédrico)

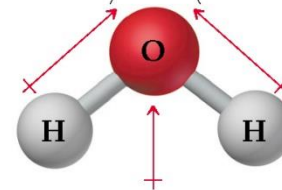


**quadrado planar**

# Moléculas Polares e Apolares

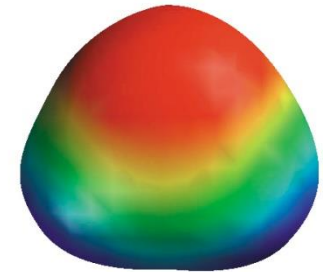


Dipolos de ligação

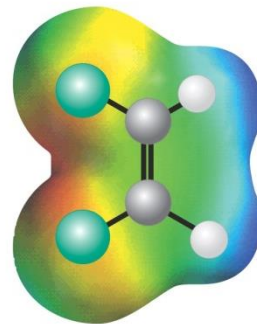
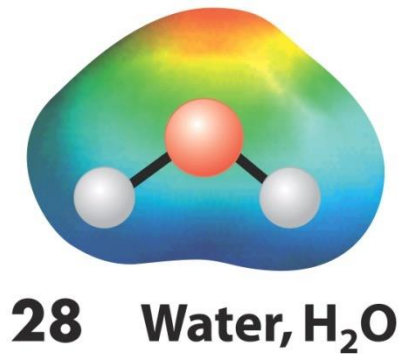


Momento  
de dipolo  
total

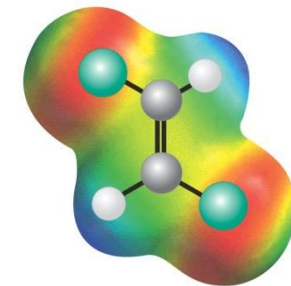
(a)



(b)

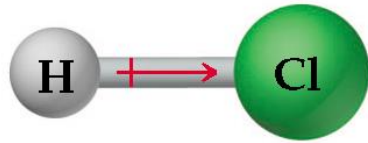


*cis*-Dichloroethene,  $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$

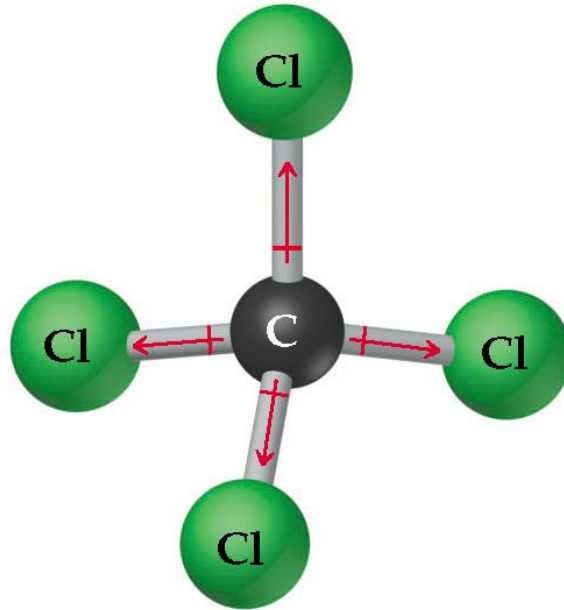


*trans*-Dichloroethene,  $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$

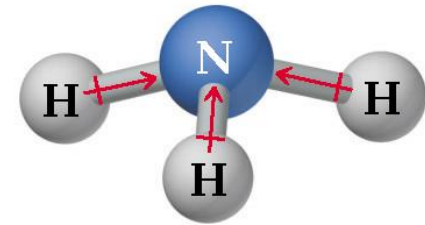
# Moléculas Polares e Apolares



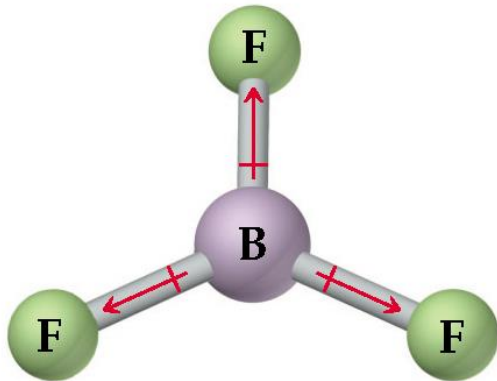
Polar



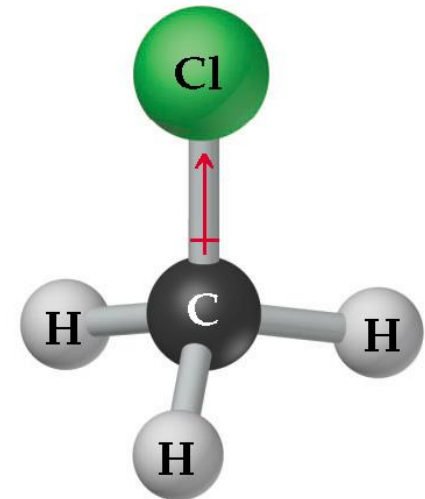
Apolar



Polar

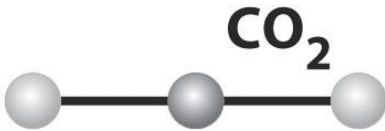

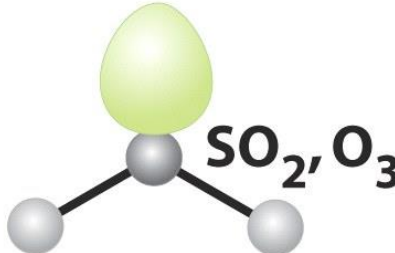
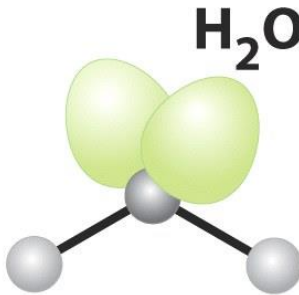


Apolar

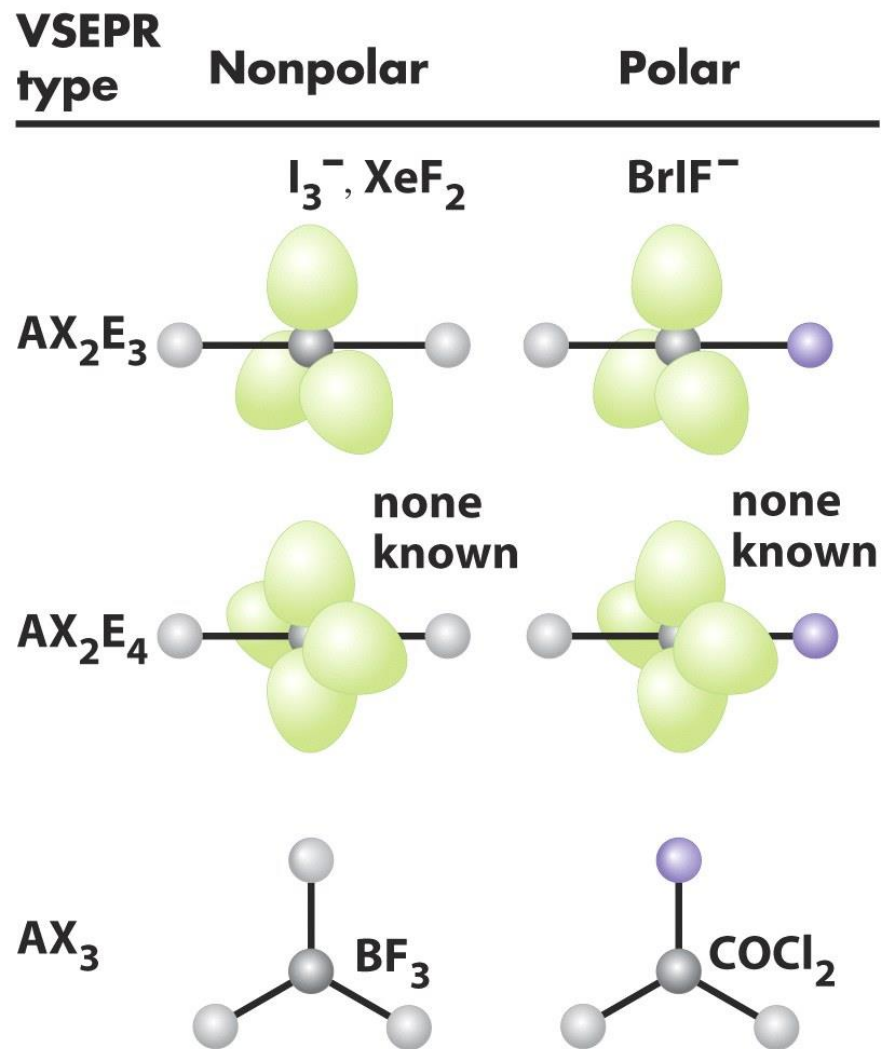


Polar

# Moléculas Polares e Apolares

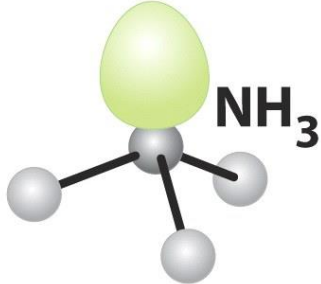
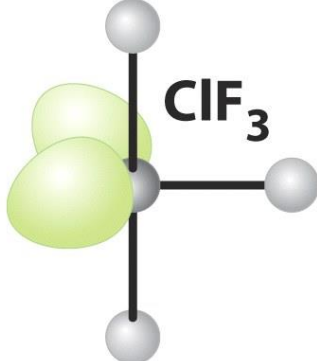
VSEPR type	Nonpolar	Polar
$AX_2$	 <p><math>CO_2</math></p>	 <p><math>N_2O</math></p>
$AX_2E$		 <p><math>SO_2, O_3</math></p>
$AX_2E_2$	<p><math>I_3^-, XeF_2</math></p>	 <p><math>H_2O</math> <math>BrF^-</math></p>

# Moléculas Polares e Apolares





# Moléculas Polares e Apolares

<b>VSEPR type</b>	<b>Nonpolar</b>	<b>Polar</b>
<b><math>AX_3E</math></b>		 <p><b>NH<sub>3</sub></b></p>
<b><math>AX_3E_2</math></b>		 <p><b>ClF<sub>3</sub></b></p>

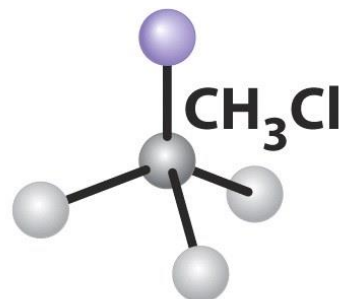
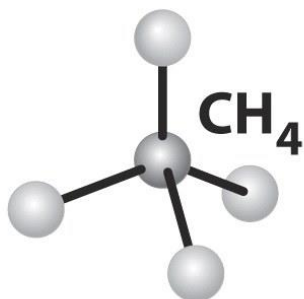
# Moléculas Polares e Apolares

**VSEPR  
type**

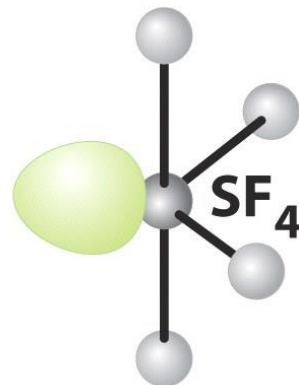
**Nonpolar**

**Polar**

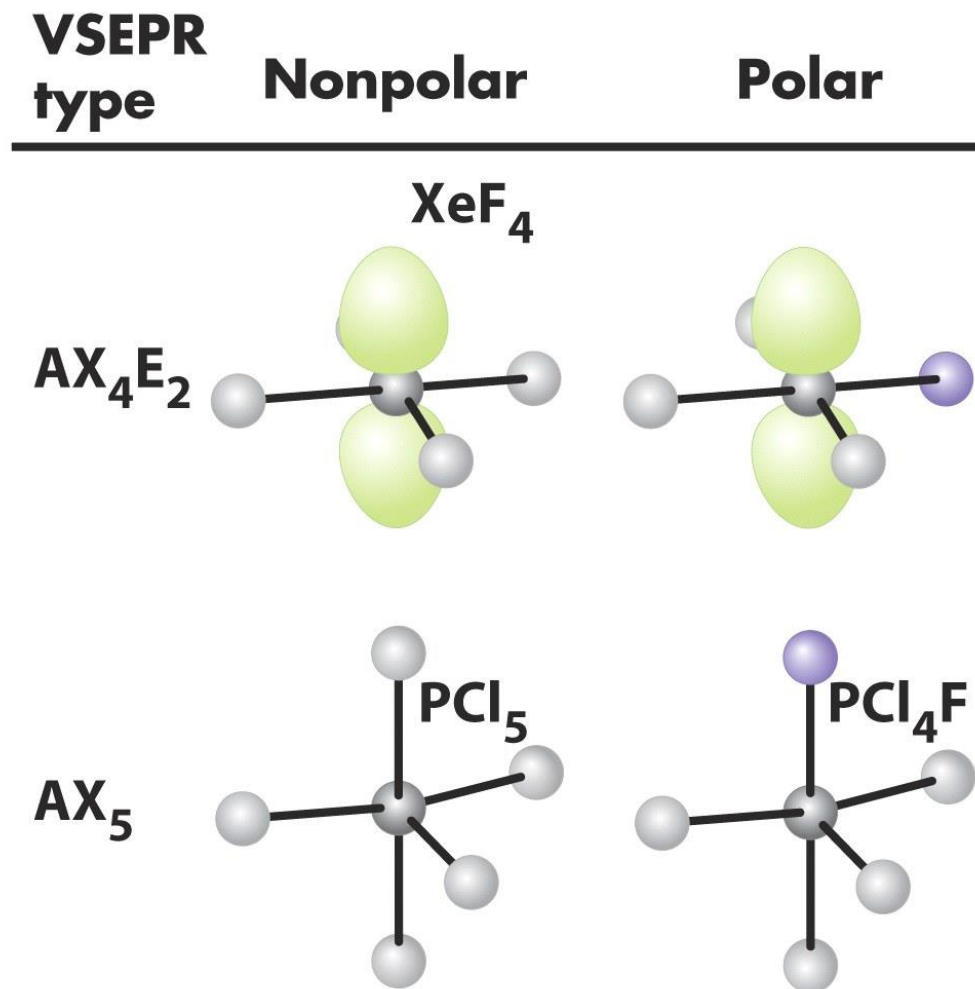
**$AX_4$**



**$AX_4E$**



# Moléculas Polares e Apolares



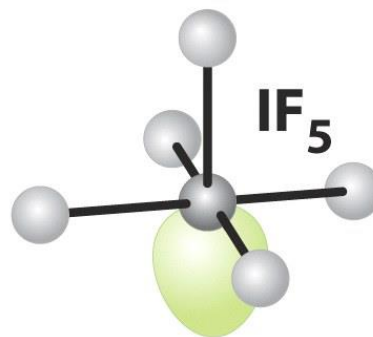
# Moléculas Polares e Apolares

**VSEPR  
type**

**Nonpolar**

**Polar**

**AX<sub>5</sub>E**



**AX<sub>6</sub>**

