

**Estruturas de Lewis. Teoria de Repulsão Electrónica dos Pares de  
 Valência (VSEPR) e Teoria do Enlace de Valência (EV).  
 Momento dipolar.**

1. Construa as seguintes formas não ionizadas de alguns oxo-ácidos. Preste atenção ao tamanho e à forma. Inclua ligações duplas quando julgar necessário (use o seu conhecimento acerca das estruturas de Lewis).

|                         | Desenhe a Estrutura | Classifique a Geometria |
|-------------------------|---------------------|-------------------------|
| $\text{H}_2\text{CO}_3$ |                     |                         |
| $\text{H}_3\text{BO}_3$ |                     |                         |
| $\text{H}_2\text{SO}_4$ |                     |                         |
| $\text{H}_2\text{SO}_3$ |                     |                         |
| $\text{HNO}_3$          |                     |                         |
| $\text{HNO}_2$          |                     |                         |
| $\text{H}_3\text{PO}_4$ |                     |                         |
| $\text{HClO}_4$         |                     |                         |
| $\text{HClO}_3$         |                     |                         |
| $\text{HClO}_2$         |                     |                         |
| $\text{HClO}$           |                     |                         |

2. As formas alotrópicas do oxigénio são o oxigénio diatómico e o ozono triatómico. Desenhe a molécula de  $\text{O}_3$ . Construa a melhor estrutura de Lewis, desenhe a molécula e classifique a sua geometria. Justifique.

3. Construa a melhor estrutura de Lewis para a molécula de ácido acético  $\text{CH}_3\text{COOH}$ , desenhe a molécula e classifique a sua geometria. Justifique.

4. No âmbito da Teoria de Enlace de Valência responda às seguintes questões:

4.1 Descreva as ligações da molécula  $\text{AsH}_3$ .

4.2 Qual a hibridação do átomo de Si nas moléculas de  $\text{SiH}_4$  e  $\text{H}_3\text{Si-SiH}_3$ ?

4.3 Descreva a ligação na molécula de CO, explicitando a hibridação dos átomos de carbono e oxigénio, o número e tipo de ligações existentes ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ , etc.) e de pares de electrões não ligantes.

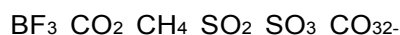
5. Considere a molécula de CO.

5.1 Escreva a estrutura de Lewis da molécula.

5.2 Determine as cargas formais nos átomos.

5.3 Em sentido está orientado o momento dipolar da molécula. Justifique a resposta.

6. Considere as seguintes moléculas e iões:



6.1 Escreva as respectivas estruturas de Lewis.

6.2 Para quais das moléculas ou iões existem estruturas de ressonância? Represente-as.

6.3 As ligações C-O são principalmente iónicas ou covalentes? Justifique a resposta.

6.4 Qual é a geometria das moléculas  $\text{CO}_2$  e  $\text{SO}_2$ ?

6.5 Alguma das moléculas  $\text{CO}_2$  e  $\text{SO}_2$  apresenta momento dipolar? Se sim, qual?

7. Descreva a ligação na molécula de  $\text{NH}_3$  utilizando a Teoria de Enlace de Valência, explicitando a hibridação do átomo de azoto, o número e tipo de ligações existentes ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ , etc.) e em que tipo de orbital estão os pares de electrões não ligantes, se existirem.

8. Escreva a estrutura de Lewis do ião  $\text{NO}_3^-$ , indicando os híbridos de ressonância se for esse o caso, e as cargas formais nos átomos. Diga qual é a geometria do ião  $\text{NO}_3^-$ .

9. Considere do ião  $\text{CN}^-$ .

9.1 Represente a estrutura de Lewis do ião.

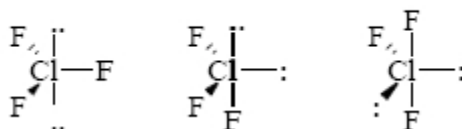
9.2 Descreva a ligação química do ião utilizando a teoria do enlace de valência. Refira a hibridação dos átomos de carbono e azoto, o número e tipo de ligações existentes ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ , etc.), e diga em que tipo de orbital se encontram os electrões não ligantes, se existirem.

10. A teoria da repulsão dos pares electrónicos de valência (VSEPR) pode ser usada para prever a forma das moléculas. Esta teoria diz que a molécula covalente mais estável é aquela na qual os pares de electrões em torno do átomo central se arranjam de forma a minimizar a repulsão electrostática. **Há duas coisas que é necessário distinguir: a geometria das orbitais em torno do átomo central e a geometria**

**da molécula.** A geometria das orbitais em torno do átomo central depende do número total de electrões de valência do átomo central. A geometria da molécula refere-se apenas ao **arranjo dos átomos ligados**.

Em alguns casos, a geometria das orbitais é igual à geometria da molécula, mas em muitos casos são coisas distintas. Há muitos compostos em que existem pares de electrões de valência que não são partilhados com outros átomos. Nestes casos a forma da molécula pode ser diferente, dependendo do sítio onde se situam estes pares de electrões **não ligantes**. Nestes casos o arranjo de energia mínima é aquele em que os pares de electrões não ligantes podem ocupar o máximo volume angular.

10.1 A tabela 1 contém exemplos de algumas combinações possíveis de pares não ligantes e pares ligantes que ocorrem com frequência em moléculas com ligações simples. Complete a tabela desenhando a melhor geometria possível das moléculas usando VSEPR. Mostre outras posições possíveis que os pares não ligantes podem ocupar nos casos em que existe mais de uma posição (indicado entre parênteses à frente da fórmula). Por exemplo as três estruturas possíveis para o  $\text{ClF}_3$  são as seguintes:



|                              | #pares<br>não<br>ligantes | #pares<br>ligantes | Hibridação do átomo<br>central | Geometria das<br>orbitais | Melhor estrutura<br>prevista |
|------------------------------|---------------------------|--------------------|--------------------------------|---------------------------|------------------------------|
| BeF <sub>2</sub>             |                           |                    |                                |                           |                              |
| BF <sub>3</sub>              |                           |                    |                                |                           |                              |
| NH <sub>3</sub>              |                           |                    |                                |                           |                              |
| PH <sub>3</sub>              |                           |                    |                                |                           |                              |
| CH <sub>4</sub>              |                           |                    |                                |                           |                              |
| H <sub>2</sub> O             |                           |                    |                                |                           |                              |
| H <sub>2</sub> S             |                           |                    |                                |                           |                              |
| SF <sub>4</sub> (2)<br>nl-eq |                           |                    |                                |                           |                              |
| SF <sub>4</sub><br>nl-ax     |                           |                    |                                |                           |                              |
| ClF <sub>3</sub>             |                           |                    |                                |                           |                              |

|  |  |  |  |  |  |
|--|--|--|--|--|--|
| SF <sub>6</sub>                                    |  |  |  |  |  |
| ClF <sub>3</sub> (3)<br>nl-eq-eq                   |  |  |  |  |  |
| ClF <sub>3</sub><br>nl-eq-ax                       |  |  |  |  |  |
| ClF <sub>3</sub><br>nl-ax-ax                       |  |  |  |  |  |
| I <sub>3</sub> <sup>-</sup> (3)<br>nl-eq-<br>eq-eq |  |  |  |  |  |
| I <sub>3</sub> <sup>-</sup><br>nl-eq-<br>eq-ax     |  |  |  |  |  |
| I <sub>3</sub> <sup>-</sup><br>nl-ax-<br>eq-ax     |  |  |  |  |  |
| BrF <sub>4</sub> <sup>-</sup> (2)<br>nl-ax-ax      |  |  |  |  |  |
| BrF <sub>4</sub> <sup>-</sup><br>nl-ax-eq          |  |  |  |  |  |

11. Preveja qual das moléculas deve ter momento dipolar, desenhe a geometria das moléculas e a direcção do momento dipolar nos casos em que existe.

| Molécula         |  |
|------------------|--|
| BeF <sub>2</sub> |  |
| BF <sub>3</sub>  |  |
| NH <sub>3</sub>  |  |
| PH <sub>3</sub>  |  |
| CH <sub>4</sub>  |  |
| H <sub>2</sub> O |  |
| H <sub>2</sub> S |  |
| ClF <sub>3</sub> |  |
| SF <sub>4</sub>  |  |
| SeF <sub>4</sub> |  |
| PCl <sub>5</sub> |  |
| PF <sub>5</sub>  |  |
| ClF <sub>5</sub> |  |
| PCl <sub>3</sub> |  |
| PBr <sub>3</sub> |  |
| SF <sub>6</sub>  |  |

12. Descreva a ligação química do etino, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, e do eteno, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, utilizando a Teoria do Enlace de Valência.