

Teórico-Prática: Estruturas de Lewis, Geometria molecular e Teoria da Ligação de Valência

Escrita de estruturas de Lewis

Etapas fundamentais:

1- Escrever o esqueleto estrutural do composto, pondo em evidência os átomos que se encontram ligados entre si.

- Em geral o átomo menos electronegativo ocupa a posição central
- H e F ocupam geralmente posições terminais.

2- Contar o nº total de electrões presentes.

- Somar o nº total dos electrões de valência dos átomos.
- Para aniões poliatômicos, adicionar o nº de cargas negativas ao valor anterior. Ex: CO_3^{2-} , adicionar 2 electrões.
- Para catiões poliatômicos: subtrair o nº de cargas positivas ao valor anterior. Ex: NH_4^+ , subtrair 1 electrão.
- Transformar o nº de electrões em pares de electrões.

3- Desenhar uma ligação simples (covalente) entre o átomo central e cada um dos átomos em redor.

4-Distribuir os restantes pares de electrões em torno dos elementos mais electronegativos até completar o octeto.

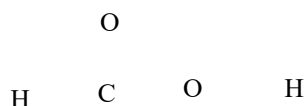
5- Determinar a carga formal de cada elemento.

6- Tentar eliminar as cargas formais utilizando pares não ligantes, tendo em atenção se os átomos obedecem à regra do octeto.

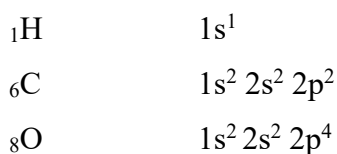
Exemplo:

Escrever a estrutura de Lewis do ácido fórmico (HCOOH).

etapa 1: O esqueleto estrutural de HCOOH é:

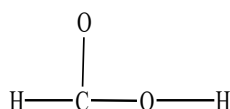


etapa 2: As configurações electrónicas para os vários elementos :

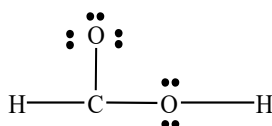


Existem $1 + 4 + (6 \times 2) + 1 = 18$ electrões de valência para distribuir no HCOOH, ou seja 9 pares.

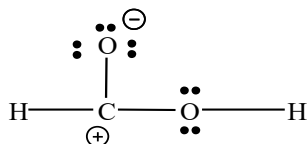
etapa 3: Desenhamos a ligação covalente simples entre o C e o H e os 2 átomos de O e entre o O e o H.



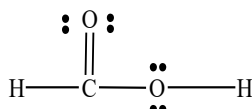
etapa 4: Distribuir os restantes pares de electrões em torno dos elementos mais electronegativos até completar o octeto.



etapa 5: determinar a carga formal de cada elemento.



etapa 6- Tentar eliminar as cargas formais utilizando pares não ligantes, tendo em atenção se os átomos obedecem à regra do octeto.



Exercícios

1- Escreva as estruturas de Lewis para os seguintes átomos:

K, O, Br, N, Pb

2- Escreva as estruturas de Lewis para as seguintes moléculas orgânicas:

a) metanol (CH_3OH)

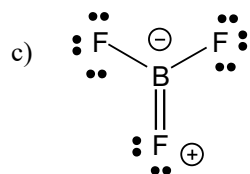
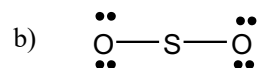
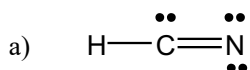
b) formaldeído (HCHO)

3- Escreva a estrutura de Lewis para os seguintes compostos:

N_2H_4 , H_2S , CS_2 , H_2SO_4 , H_3PO_4

4- Escreva as estruturas de Lewis para os iões: CO_3^{2-} , O_2^{2-} , NH_4^+

5- As seguintes estruturas de Lewis estão incorrectas. Explicar o que está mal em cada uma delas e indicar a estrutura correcta para a molécula. (As posições relativas dos átomos estão indicadas de um modo correcto).



Geometria molecular e Teoria da Ligação de Valência

1) Utilize a Teoria da Ligação de Valência para explicar as ligações químicas nas moléculas de Cl_2 e HCl . Mostre graficamente o processo de coalescência das orbitais atômicas adequadas.

2) Considere os seguintes pares de orbitais atômicas pertencentes a núcleos. Admita que o eixo dos xx é o eixo internuclear (ou seja a linha que une os núcleos dos 2 átomos).

i) $1s$ e $1s$

ii) $1s$ e $2p_x$

iii) $2p_x$ e $2p_y$

iv) $3p_y$ e $3p_z$

v) $2p_x$ e $2p_x$

vi) $1s$ e $2s$

a) Quais podem coalescer para formar ligações sigma?

b) Quais podem coalescer para formar ligações pi.

c) Quais não podem coalescer (não há formação de qualquer ligação).

3) Para as moléculas seguintes:

a) PCl_3

b) H_2O

c) AlF_3

d) CHCl_3

e) PCl_5

f) SF_6

a) Utilize o modelo RPECV (Repulsão dos Pares de Electrões da Camada de Valência) para prever a sua geometria.

b) Diga qual é a hibridização do átomo central.

c) Quais são as moléculas polares? Justifique.

4) Quais as orbitais híbridas que o átomo de azoto utiliza para formar ligações nas seguintes espécies químicas:

a) NH_3

b) $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$

c) NO_3^-

5) Qual a hibridização do(s) átomo(s) de carbono nas seguintes moléculas:

a) CH_3CH_3

b) CH_3CHCH_2

c) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

d) CH_3CHO

e) CH_3COOH

6) Qual o número de ligações sigma (σ) e de ligações pi (π) em cada uma das seguintes moléculas:

