



Como é que a teoria de Lewis explica as ligações na H_2 e no F_2 ?

Partilha de dois eletrões entre dois átomos.

Mas estas ligações tem características muito diferentes

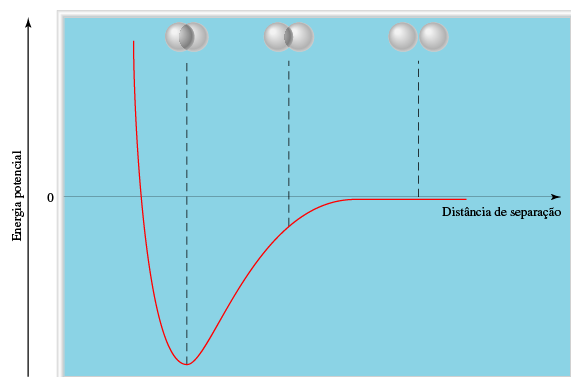
	<u>Energia de dissociação das ligações</u>	<u>Comprimento da ligação</u>	<u>Sobreposição</u>
H_2	436,4 kJ/mole	74 pm	2 orbitais 1s
F_2	150,6 kJ/mole	142 pm	2 orbitais 2p

Teoria da Ligação de Valência — os eletrões numa molécula ocupam orbitais atômicos dos átomos individuais.

1

1

Variação da energia potencial de dois átomos H durante a formação da molécula de H_2



3

3

Teoria da Ligação de Valência (TLV)

- Quando 2 átomos se aproximam suficientemente, as suas orbitais atômicas podem sobrepor-se.
- A formação de uma ligação pressupõe que os 2 e⁻ tenham spins opostos.
- O n° de ligações que um átomo pode formar é dado pelo n° de e⁻ desemparelhados.

Postulados da TLV

- 1- Quanto mais extensa for a sobreposição de orbitais atômicas mais forte a ligação.
- 2- As ligações simples, duplas e triplas resultam da partilha de 1, 2 ou 3 pares de eletrões, respetivamente.
- 3- Em moléculas covalentes, os eletrões podem ocupar orbitais híbridas, em vez das AO dos átomos isolados

2

Teoria da Ligação de Valência e o NH_3

${}_7N: 1s^2 2s^2 2p^3$



4

Teoria da Ligação de Valência e o NH₃

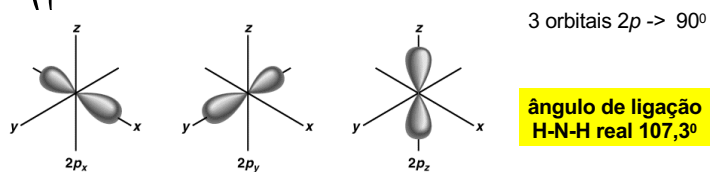
${}_7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3$



${}_1\text{H}: 1s^1$



Qual é a geometria molecular do NH₃ se as ligações se formarem a partir da sobreposição das orbitais 1s dos átomos de H e as orbitais p do átomo de N.



As ligações não podem formar-se a partir das orbitais atômicas simples

5

5

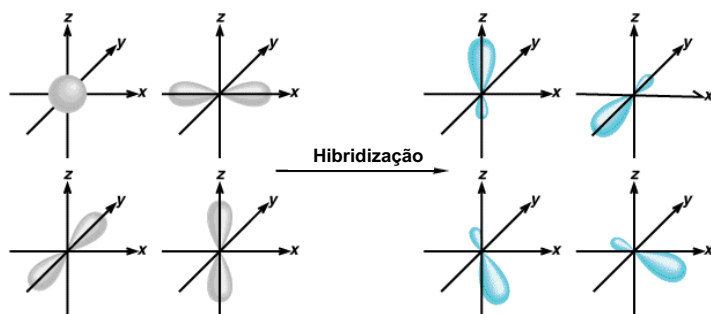
Hibridização — coalescência de duas ou mais orbitais atômicas para formar um novo conjunto de orbitais híbridas.

1. O conceito de **hibridização** não se aplica a átomos isolados.
2. Coalescência de, pelo menos, 2 orbitais atômicas não equivalentes (por ex., s e p). As orbitais híbridas têm uma **forma muito diferente** das orbitais atômicas originais.
3. **O número** de orbitais híbridas é igual ao número de orbitais atômicas puras que participam no processo de hibridização.
4. **As ligações covalentes são formadas** por:
 - a. Sobreposição de **orbitais atômicas puras**.
 - b. Sobreposição de **orbitais híbridas** com **orbitais atômicas puras**.
 - c. Sobreposição de **orbitais híbridas** com **outras orbitais híbridas**.
5. O processo de **hibridização** necessita de fornecimento de energia

6

6

Formação de Orbitais Híbridas sp^3



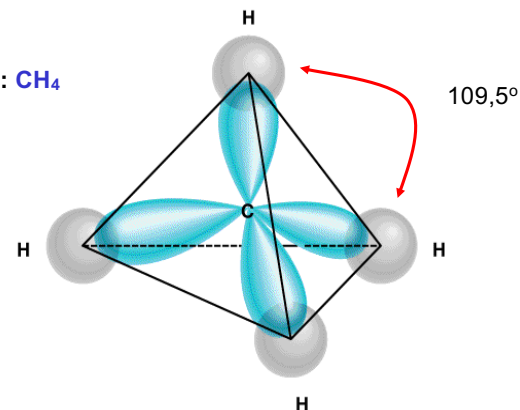
$1s + 3p = 4 \text{ orbitais } sp^3$

7

7

Formação de Ligações Covalentes

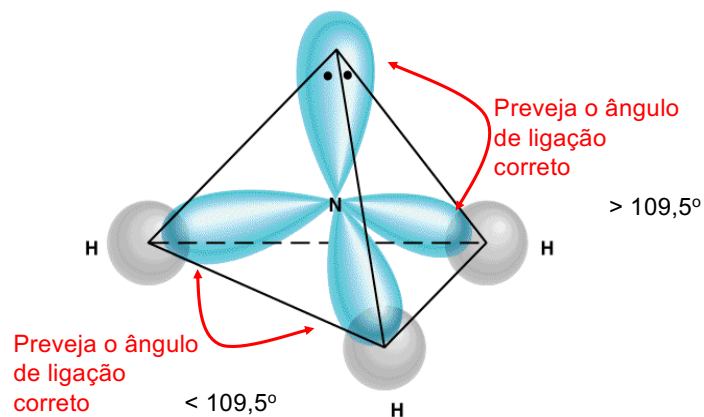
Exemplo: CH₄



8

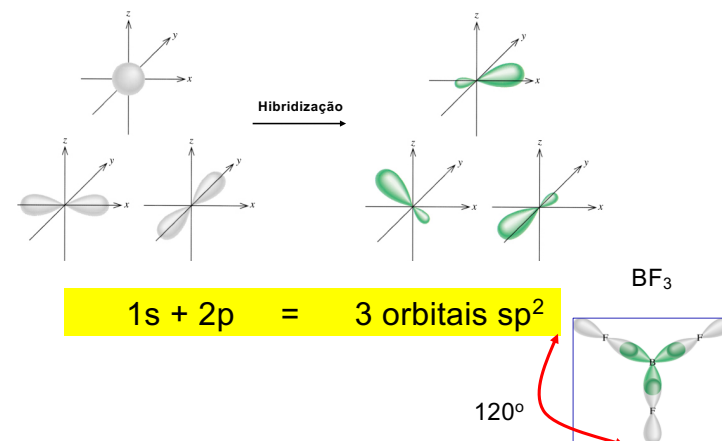
8

sp^3 — O átomo hibridizado N no NH_3



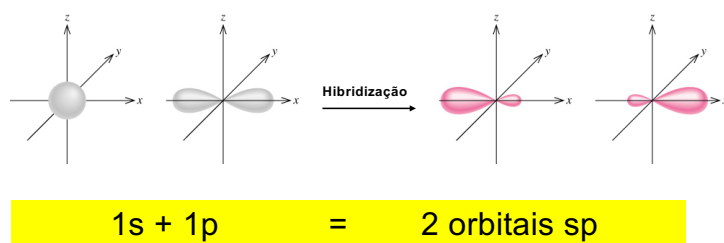
9

Formação de Orbitais Híbridos sp^2



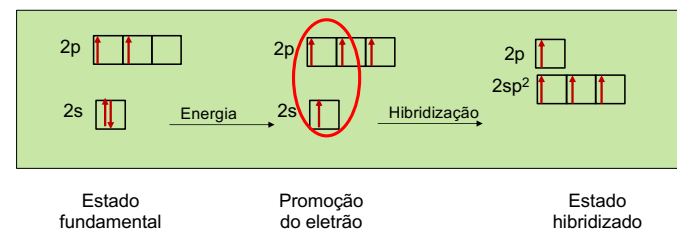
10

Formação de Orbitais Híbridos sp

 BeCl_2 

11

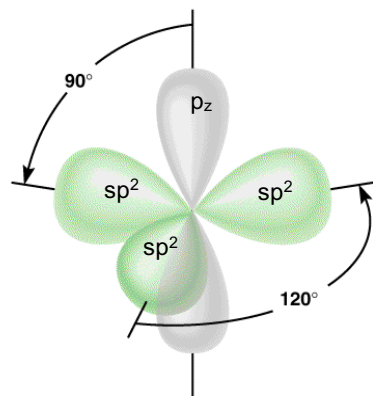
Hibridização sp^2 de um átomo de carbono que possui uma ligação dupla



12

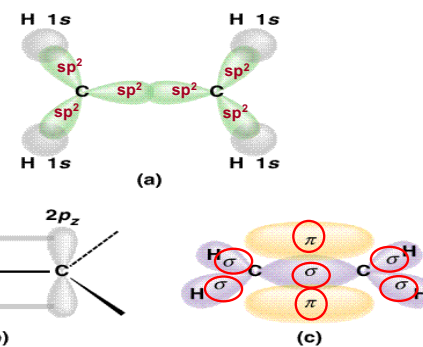
12

A orbital $2p_z$ é perpendicular ao plano das orbitais híbridas



13

**Ligações
no etileno
 C_2H_4**

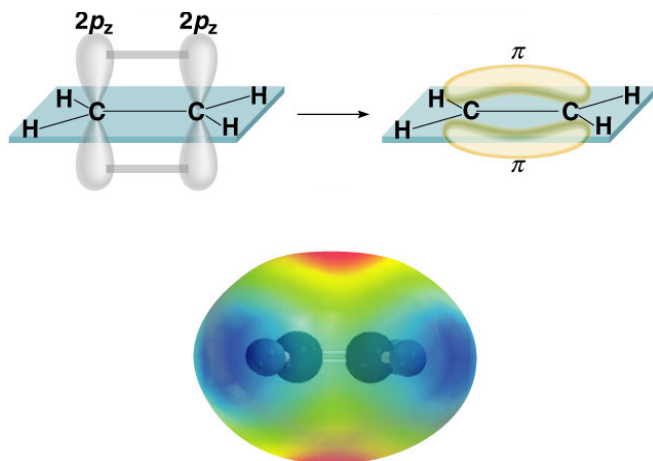


Ligação Sigma (σ) – densidade eletrônica entre os 2 átomos ligados.

Ligação Pi (π) – densidade eletrônica acima e abaixo dos núcleos dos átomos ligados.

14

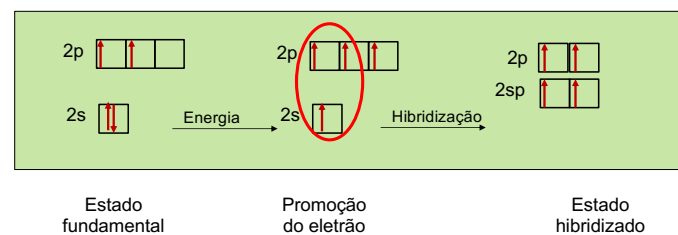
14



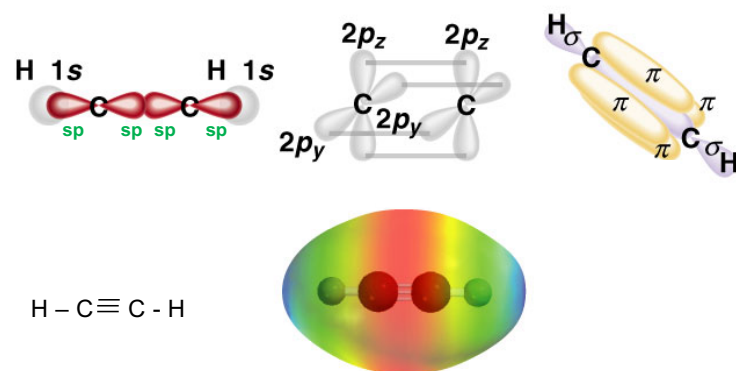
15

15

Hibridização sp de um átomo de carbono que possui uma ligação tripla ou duas ligações duplas



16



17

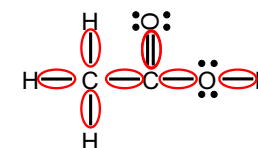
Ligações sigma (σ) e pi (π)

Ligação simples	1 ligação sigma
Ligação dupla	1 ligação sigma e 1 ligação pi
Ligação tripla	1 ligação sigma e 2 ligações pi

σ	π
s+s	p + p
p+p	paralelas
s+p	
s+híbrida	
p+híbrida	



Quantas ligações σ e π existem na molécula do ácido acético (vinagre) CH_3COOH ?



18

18

TABELA 10.4

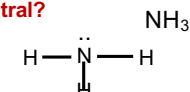
Orbitais Atômicos Puros do Átomo Central	Hibridação do Átomo Central	Número de Orbitais Híbridos	Geometria das Orbitais Híbridas	Exemplo
s, p	sp	2	Linear 180°	BeCl_2
s, p, p	sp ²	3	Triangular plana 120°	BF_3
s, p, p, p	sp ³	4	Tetraédrica 109,5°	$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$
s, p, p, p, d	sp ³ d	5	Bipirâmide trigonal 120°/90°	PCl_5
s, p, p, p, d, d	sp ³ d ²	6	Octaédrica 90°	SF_6

19

19

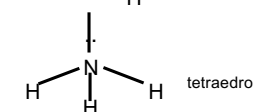
Como determino a hibridização do átomo central?

1- Escrever a estrutura de Lewis da molécula



2- Prever a sua geometria usando a TRPECV

- 4 pares de e- em torno do N
- A repulsão deve ser mínima

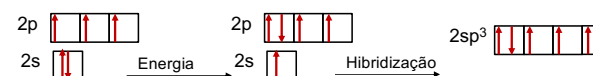


3- Ver configuração eletrônica do átomo no nível de valência



4- Prever o tipo de hibridização que o átomo terá que sofrer para arranjar o nº de orbitais híbridos necessárias para a geometria prevista anteriormente

São necessárias 4 orbitais iguais



20

20

Configuração eletrônica do átomo de N hibridizado



Exercício: Descrever o estado de hibridização do fósforo no pentabrometo de fósforo (PBr₅)

¹⁵P

P hibridizado

21