

## Aula 1 - Geometria Molecular

A geometria molecular estuda a forma tridimensional das moléculas no espaço. A determinação de tal geometria é baseada na teoria VSEPR, ou seja, Teoria da Repulsão dos Elétrons da Camada de Valência.

## **Teoria VSEPR**

- Pares eletrônicos da camada de valência de um átomo central, estejam ou não fazendo ligação química, comportamse como nuvens eletrônicas que se repelem mutuamente, ficando com a maior distância angular possível uns dos outros.
- Uma nuvem eletrônica pode ser constituída por uma ligação simples, dupla, tripla ou mesmo por um par de elétrons não-ligantes, ou seja, aqueles que não estão comprometidos numa ligação química.
- Para determinar a geometria de uma molécula devemos contar a quantidade de nuvens eletrônicas ao redor do átomo central e também a quantidade de ligantes neste mesmo átomo.
- Vale lembrar que qualquer molécula biatômica (ex.: H<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, ...) são todas lineares.

| Número de<br>nuvens ao<br>redor do átomo<br>central | Fórmula eletrônica                                      | Orientação das nuvens (pares eletrônicos) | Disposição dos<br>ligantes | Geometria<br>Molecular              |
|---|---|---|----------------------------|-------------------------------------|
| 2   | o∰c∰o<br>H⊙c∰N  | Linear A —                                | O = C = O $H - C = N$      | Linear                              |
| 3   | O S O O O O O O O O O O O O O O O O O O                 | Trigonal plana<br>(Triangular)            |                            | Angular<br>Trigonal plana           |
| 4   | HOOOH  2 ligantes  HOOHH  3 ligantes  HOOHH  4 ligantes | Tetraédrica                               | + O H H H H C H            | Angular<br>Piramidal<br>Tetraédrica |



## Aula 2 - Hibridização

- Por definição a Hibridização é a mistura dos orbitais atômicos e sua consequente mudança/alteração para formação de ligações covalentes. Vale lembrar que um orbital atômico é uma região onde se tem a máxima probabilidade de se encontrar um elétron.
- O processo de hibridização ocorre sempre por uma promoção inicial de um elétron para um nível mais alto de energia seguido de uma mistura (hibridização).
- Quanto misturamos um certo número de orbitais atômicos, conseguimos o mesmo número de orbitais híbridos. Cada orbital híbrido é equivalente entre si, mas apontam em direções opostas no espaço.

## Tipos de Hibridização

- Há três tipos básicos de hibridização (existem outros): Hibridização sp<sup>3</sup>, sp<sup>2</sup> e sp
- Existe uma regra prática para reconhecermos o tipo de hibridização de um átomo. Para isso devemos contar o número de nuvens eletrônicas ao redor do átomo de interesse.
  - Hibridização  ${\rm sp^3-4}$  nuvens ao redor do átomo Hibridização  ${\rm sp^2-3}$  nuvens ao redor do átomo

  - Hibridização sp 2 nuvens ao redor do átomo

## Aula 4 - Polaridade de Ligações

- As ligações químicas podem ser descritas como Polares ou Apolares.
- Toda ligação iônica é polar. De fato a ligação iônica apresenta a máxima polaridade dentre as ligações, uma vez que é formada pela interação entre íons (cátions e ânions).
- Para as ligações covalentes compartilhamento de pares eletrônicos entre átomos devemos verificar se existe ou não diferença de eletronegatividade entre os átomos da molécula.
- Vale lembrar que a eletronegatividade é uma propriedade periódica que indica uma capacidade em atrair um par eletrônico de uma ligação covalente para si.
- Ordem crescente de eletronegatividade: F > O > N > Cl > Br > I > S > C > P > H > metais
- Ligações Covalentes Apolares: átomos ligados de igual eletronegatividade. Exemplos:

H-HCI-CI Br-Br

Ligações Covalentes Polares: átomos ligados de eletronegatividade diferente. Exemplos:

H-CI H-0-H H-Br

## Aula 5 - Polaridade de Moléculas

- As moléculas são divididas em Polares e Apolares.
- É interessante notar que todo hidrocarboneto é APOLAR.
- A determinação correta da polaridade das moléculas envolve o cálculo do momento resultante de dipolo. O momento de dipolo é um vetor que aponta sempre na direção do átomo mais eletronegativo da ligação covalente.
- Ordem crescente de eletronegatividade: F > O > N > CI > Br > I > S > C > P > H > metais
- Fazendo a soma vetorial dos momentos de dipolos, temos dois resultados possíveis com as seguintes interpretações química da polaridade da molécula:



 $\stackrel{\rightarrow}{\mu} = 0 \implies \text{Molécula APOLAR}$ 

 $\stackrel{'}{\mu_{r}} \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Molécula POLAR}$ 

| Fórmula         | Geometria   | →<br>μ <sub>R</sub>             | Polaridade |
|-----------------|---|---------------------------------|------------|
| НСℓ             | +δ -δ μ   | $\overrightarrow{\mu_R} \neq 0$ | Polar      |
| CO <sub>2</sub> | $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | $\overrightarrow{\mu_R} = 0$    | Apolar     |
| H₂O             | -δ -δ<br>μ<br>+δ +δ                                   | <del>µ</del> <sub>R</sub> ≠ 0   | Polar      |

## Regra prática para determinação da polaridade de moléculas

 Pela regra prática podemos determinar rapidamente a polaridade de moléculas. Basta para isso contar o número de nuvens eletrônicas ao redor do átomo central e o número de ligantes IGUAIS conectados a estes átomos.

> Moléculas Apolares n° de nuvens = n° de ligantes IGUAIS

 $\begin{tabular}{ll} Moléculas Polares \\ n^\circ \ de \ nuvens \ \neq \ n^\circ \ de \ ligantes \ IGUAIS \end{tabular}$ 

## Aula 7 - Forças Intermoleculares

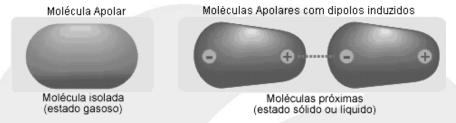
 As forças intermoleculares, também chamadas de interações ou ligações intermoleculares, são forças que mantém moléculas unidas no estado sólido e no estado líquido. No estado gasoso, devido à distância entre as partículas e também a sua velocidade, não falamos destas forças.



- Para determinarmos corretamente o tipo de interação entre moléculas, devemos conhecer antes a suas polaridades.
- Três tipos de forças intermoleculares você deve reconhecer:
  - Ocorre entre moléculas apolares:
    - 1. Dipolo Induzido Dipolo Induzido
  - Ocorrem entre moléculas polares:
    - 2. Dipolo Permanente Dipolo Permanente
    - 3. Pontes de Hidrogênio

## <u>Dipolo Induzido – Dipolo Induzido</u>

Também chamada de Dipolo Instantâneo ou Forças de London, ocorre entre moléculas apolares.



Disponível em: http://www.10emtudo.com.br/\_img/upload/aula/\_1888\_36.gif

Exemplos: O gelo-seco (CO<sub>2</sub>), o iodo (I<sub>2</sub>), as pedras de naftalina e as de cânfora. Outros exemplos:  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$ ,  $C\ell_2$ ,  $Br_2$ ,  $P_4$ ,  $S_8$ ,  $CH_4$  e todos os hidrocarbonetos.

### <u>Dipolo Permanente – Dipolo Permanente</u>

Ocorre entre **moléculas**: o polo positivo de uma molécula atrai o polo negativo de outra molécula e assim sucessivamente, por toda a extensão do líquido ou do sólido.

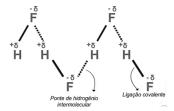
Exemplo: Moléculas de cloreto de hidrogênio no estado líquido.

#### Ligação ou Pontes de Hidrogênio

É um caso particular das forças de dipolo permanente (dipolo-dipolo), no qual a intensidade é tão grande que recebe um nome particular. Ocorre em moléculas que apresentam átomos de hidrogênio (elemento com baixa eletronegatividade) com elementos muito eletronegativos, no caso, flúor, oxigênio ou nitrogênio.

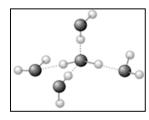
## Exemplos:

HF

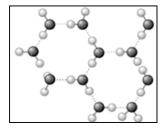




<u>H<sub>2</sub>O</u>



água no estado líquido



água no estado sólido

<u>NH</u>3

Disponível em: http://3.bp.blogspot.com/-X3lsm5zXkoE/UGZ11eheALI/AAAAAAAAAAAAJk/qwzTk4eGC-s/s1600/blog.bmp