

POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA

CONCEITOS CHAVE:

- ESTRUTURA MOLECULAR E ELETRÔNICA
- LIGAÇÃO QUÍMICA
- CARGA PARCIAL, ELETRONEGATIVIDADE, MOMENTO DE DIPOLO E POLARIDADE

TÓPICOS EM QUÍMICA CONTEMPORÂNEA

MÓDULO 02: Poluição Atmosférica: A Química da Estratosfera e a Camada de Ozônio

EIXO: **MEIO AMBIENTE/ SAÚDE**

TÓPICOS EM QUÍMICA CONTEMPORÂNEA

PROF. ZÉ HÉLCIO, FEVEREIRO, 2022

Estrutura molecular

“A Teoria Atômico-Molecular estabelece o conceito de estrutura molecular e eletrônica”:

Com ela podemos entender o conceito de ligação química, desde Lewis à Mecânica Quântica, e ainda os conceitos de carga parcial, eletronegatividade, momento de dipolo de ligação e polaridade.

Aplicações para esta disciplina:

- *Dissociação molecular fotoquímica na atmosfera*
- *Como uma molécula absorve radiação na região UV-visível*
- *Como uma molécula absorve radiação no infravermelho*

Conceitos \Rightarrow Estrutura Molecular \Rightarrow Ligação Química

Lewis, 1916

- Teoria qualitativa da ligação covalente
- Símbolos e estruturas de Lewis \leftrightarrow "Regra do Octeto"

Pauling, 1930

- teoria quantitativa da ligação química pela teoria quântica.
- eletronegatividade.
- polaridade (carga parcial e momento de dipolo)

Estruturas de Lewis

=> define a conectividade entre os átomos e que tipo de ligação é formada entre eles, para a molécula de determinada substância.

Passos:

1. A partir da fórmula química, somam-se todos elétrons de valência da molécula e divide por dois. Para moléculas não radicalares (c/ elétrons desemparelhados), o resultado da divisão é o n° de pares de elétrons de Lewis (pares de elétrons emparelhados $\uparrow\downarrow$).

2. Define-se um esqueleto para a molécula - uma disposição dos átomos que defina a **conectividade**, isto é, que átomo está ligado a qual...

3. Sabendo-se que os pares de Lewis dividem-se em **pares ligantes** (representados por traços " $-$ ") e **pares isolados** (representados por dois pontos " $:$ "), distribuir todos os pares entre as duplas de átomos conectados ($-$) e ao redor dos átomos os pares que restarem ($:$), atendendo às seguintes regras:

- a) a valência de cada átomo (símbolos de Lewis);
- b) a regra do octeto;
- c) distribuir os pares ligados formando ligações simples (apenas um par " $—$ "), duplas (dois pares " $=$ "), até o limite máximo de ligações triplas (três pares " \equiv ");

Exemplo: molécula de hidrogênio $\Rightarrow \text{H}_2$

1. elétrons de valência:

configuração eletrônica do H $\Rightarrow \text{H}: 1s^1$



$$2 \times 1 = 2 \text{ elétrons de valência}$$

$$2 \div 2 = 1 \text{ par de Lewis}$$

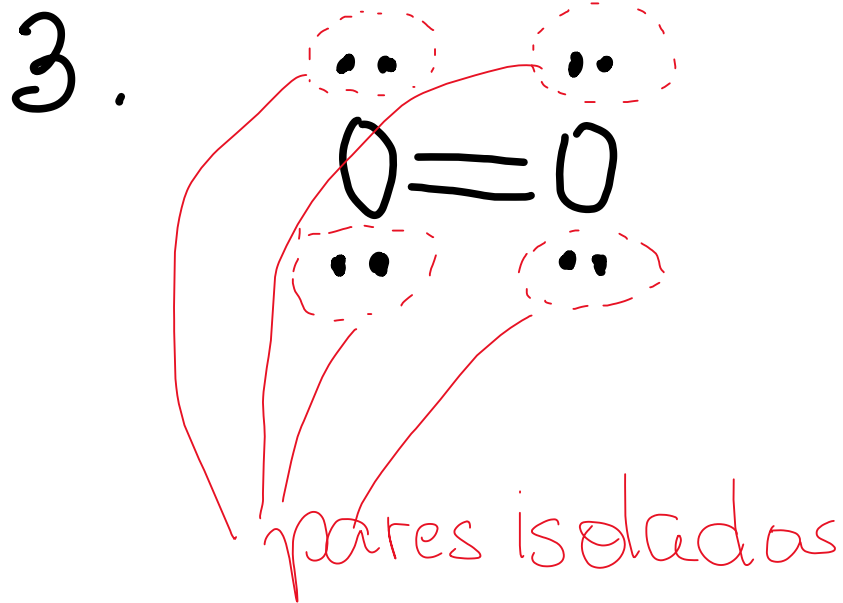
2. Esqueleto: $\text{H}-\text{H}$

3. O traço no item 2 já corresponde a um par ligado. (obs: o hidrogênio - 1º período não é regido pela regra do octeto)

Molécula de Oxigênio $\Rightarrow O_2$

1. $O: 1s^2 \underbrace{2s^2 2p^4}_{\text{valência}} \Rightarrow n^\circ \text{ e valência} \Rightarrow 2 \times 6 = 12 //$
 $n^\circ \text{ de pares} \Rightarrow 12 \div 2 = 6 //$

2. esqueleto $\Rightarrow O-O$



obs: \checkmark a valência do oxigênio é 2, isto é, ele pode formar duas ligações.

\checkmark O O_2 é um bi-radical e só a teoria quântica é capaz de prever.

Polaridade

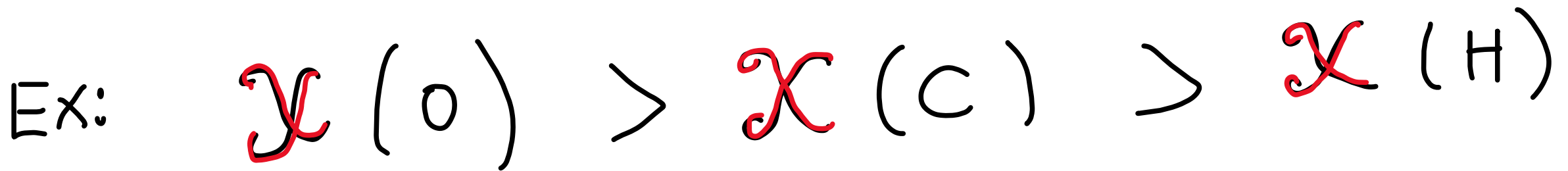
Conceito desenvolvido a partir da teoria quântica.

✓ Par de Lewis ligante \Rightarrow igualmente compartilhado entre quaisquer átomos ligados.

✓ Ligação covalente (Pauling) \Rightarrow se os átomos ligados forem diferentes o que tem a maior eletronegatividade atrairá o par para si.
 \Rightarrow compartilhamento desigual.

Eletronegatividade (χ)

É a tendência que um átomo possui de atrair para si o par de elétrons por meio do qual faz ligação com outro átomo.



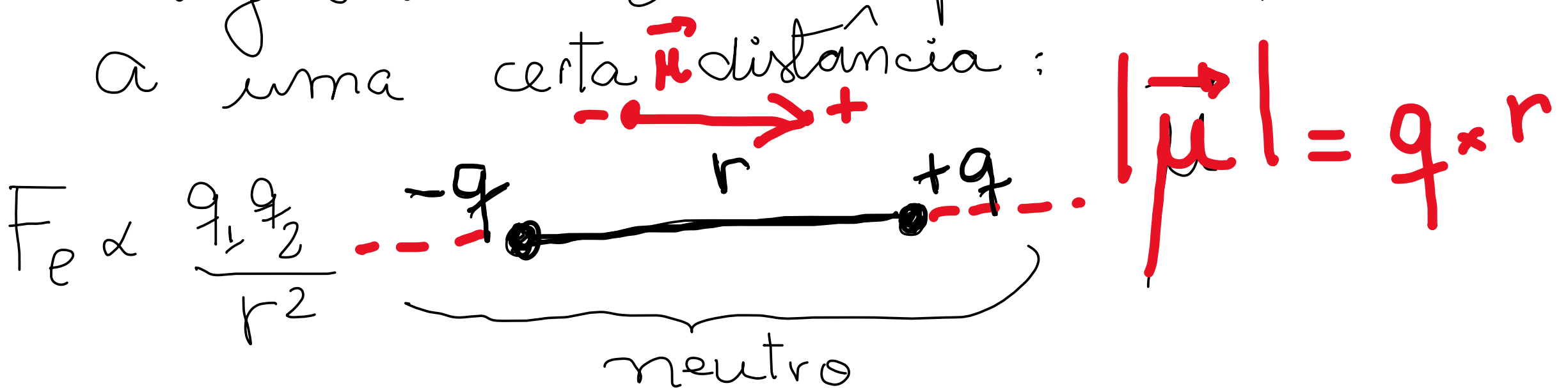
Cargas parciais

- ✓ Na teoria de Lewis é possível formar polaridade entre pares de átomos apenas no sentido de doação total de carga (par iônico)
⇒ "cargas formais" (inteiras)
- ✓ Com o conceito de eletronegatividade define-se doação "parcial", gerando cargas fracionárias.
⇒ "cargas parciais" (represent. por " δ ")

Momento de Dipolo Elétrico

↗ sistema neutro

São duas cargas pontuais de mesma magnitude e sinais opostos separadas a uma certa distância:

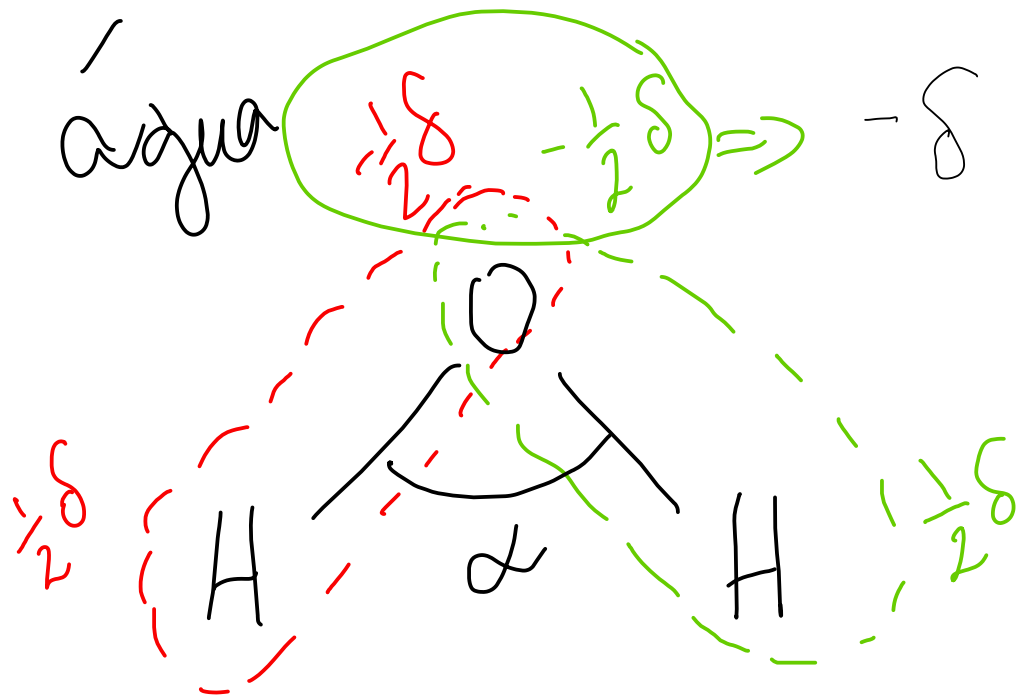


Momento de dipolo molecular

\Rightarrow Quanto maior for a diferença entre as eletronegatividades dos átomos ligados, maior será a magnitude do momento de dipolo elétrico.

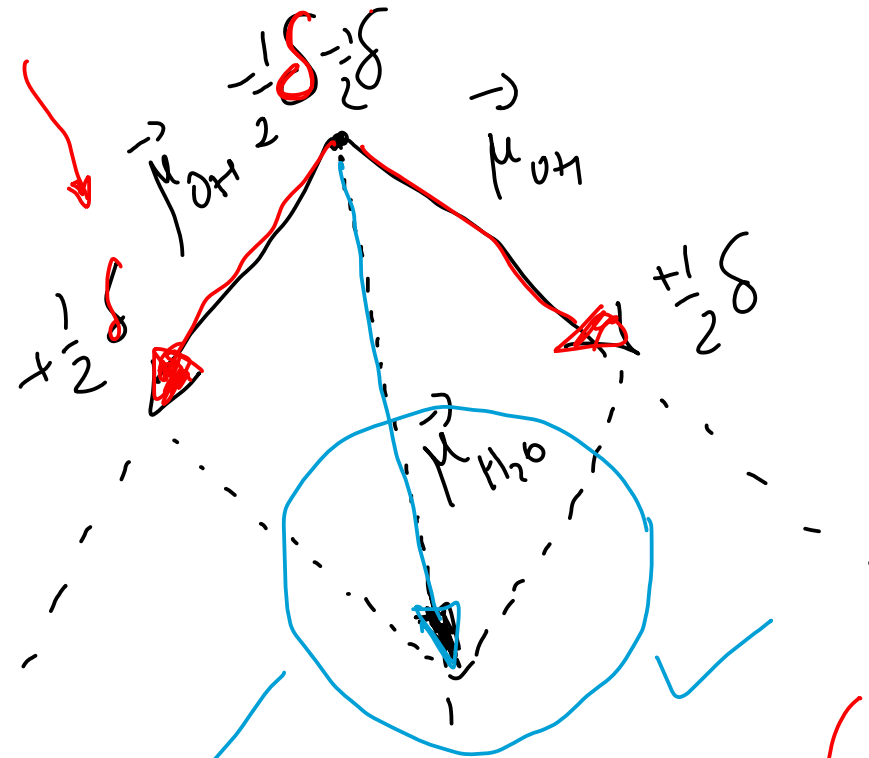
Toda molécula que apresentar variação do valor de seu momento de dipolo elétrico no tempo, durante o movimento de vibração, pode absorver radiação na faixa do IV (infravermelho)!

Momento de dipolo de ligação



neutra

\Rightarrow



possa medir

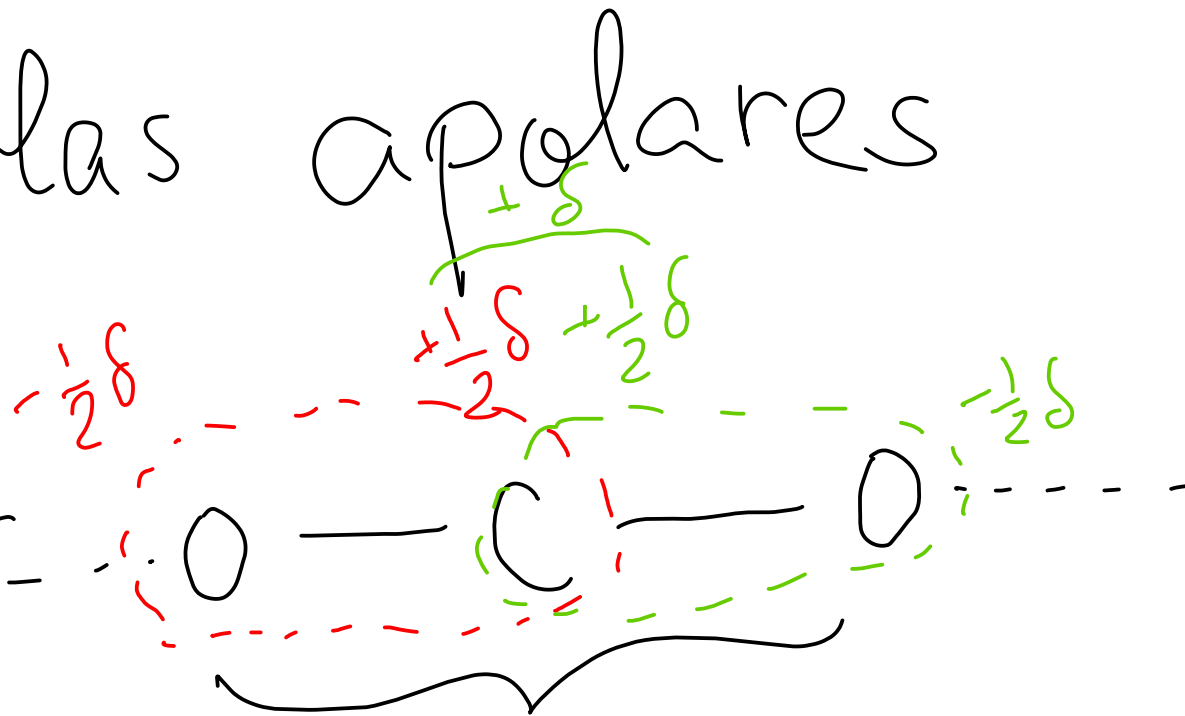
$$|\vec{\mu}| = \delta r$$

Caso de moléculas apolares

ativas na IV:

exº CO_2

linear



Exercício: fazer a estrutura de Lewis do CO_2 .

conectividade
 $\vec{\mu}_{\text{CO}}$ $\vec{\mu}_{\text{CO}}$
cancelamento $\Rightarrow |\vec{\mu}_{\text{CO}_2}| = 0$