

Trigonal Pyramidal

Linear

Lição nº

Octahedral

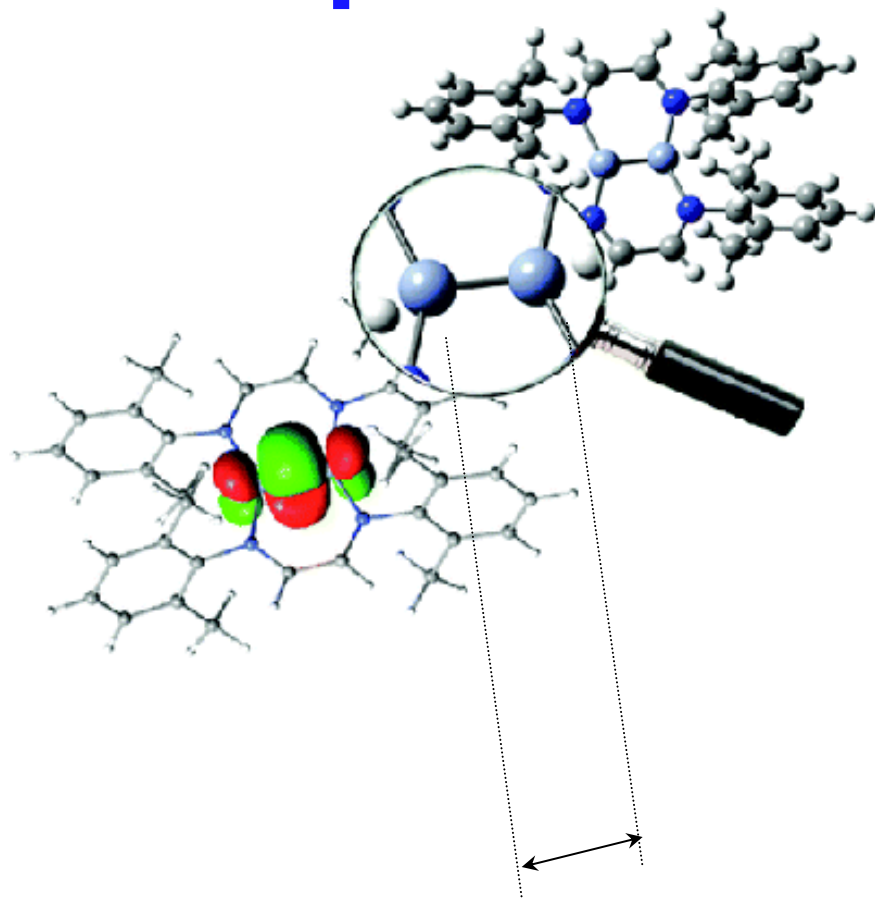
- Parâmetros de Ligação: Comprimento de ligação, ordem de ligação e energia de ligação.
- Geometria molecular.

Tetrahedral



Comprimento de ligação

Comprimento de Ligação

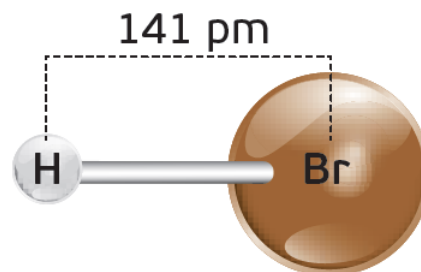
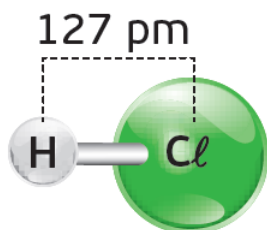
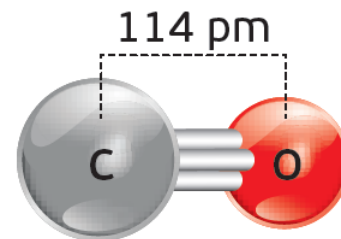
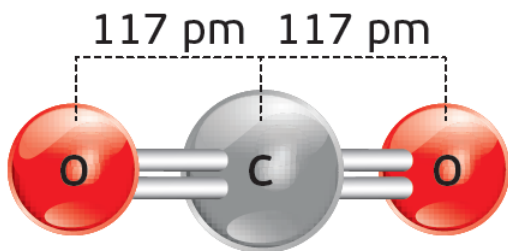


Distância de equilíbrio

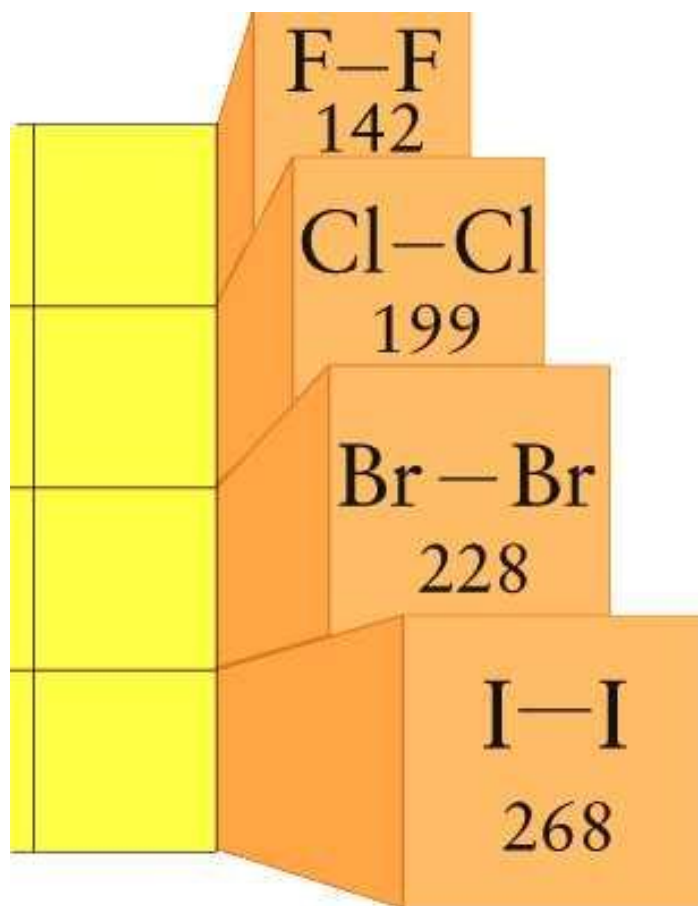
Comprimento de ligação

COMPRIMENTO DE LIGAÇÃO

- Distância média entre os centros atômicos envolvidos numa ligação química, na posição de maior estabilidade.



Comprimento de ligação

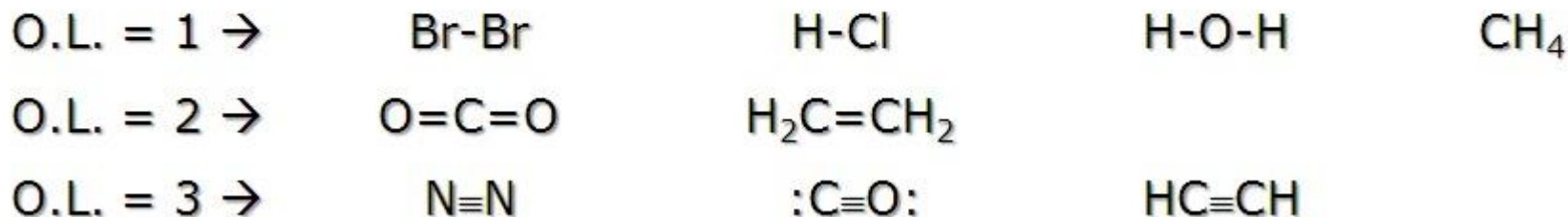


- Nas moléculas diatómicas o comprimento de ligação diminui com o aumento da ordem de ligação
- Aumenta à medida que o raio atômico aumenta.

Ordem de Ligação (ol)

- Indica o número de pares de electrões que asseguram a ligação.
- Quanto maior for a ordem de ligação, mais forte é a ligação e menor é o comprimento de ligação.

Exemplos:





Energia de Ligação



Energia de Ligação

- Energia que se **liberta** quando dois átomos se ligam (quebra de ligações);

Energia de Dissociação

- Quantidade de energia que é necessária fornecer para provocar a rutura de uma ligação numa mole de moléculas.

ENERGIA DE LIGAÇÃO OU ENERGIA DE DISSOCIAÇÃO DE LIGAÇÃO



TABELA II – COMPARAÇÃO ENTRE O COMPRIMENTO DE LIGAÇÃO E A ENERGIA DE LIGAÇÃO DE ALGUMAS MOLÉCULAS

Molécula	Dióxido de carbono	Monóxido de carbono	Cloreto de hidrogénio	Brometo de hidrogénio
Ligação	C = O	C \equiv O	H – Cl	H – Br
Comprimento de ligação / pm	117	114	127	141
Energia de ligação / kJ mol ⁻¹	799	1072	431	368

- A energia de ligação varia inversamente com o comprimento de ligação pois, quanto mais afastados estiverem os átomos menor será a energia requerida para romper a ligação.

Molécula	Ligação	Comprimento / pm	Energia / kJ mol ⁻¹
H ₂	H—H	74	436
N ₂	N≡N	110	944
O ₂	O=O	121	496
F ₂	F—F	142	158
HF	H—F	92	565
Cl ₂	Cl—Cl	199	242
HCl	H—Cl	127	431
Br ₂	Br—Br	228	193
HBr	H—Br	141	366
H ₂ O	O—H	96	463
H ₂ S	S—H	133,6	339
I ₂	I—I	268	151

Ordem de ligação e a reactividade de uma molécula

Maior ordem de ligação



Ligação mais forte



Maior energia de ligação



Maior estabilidade



Menor reactividade

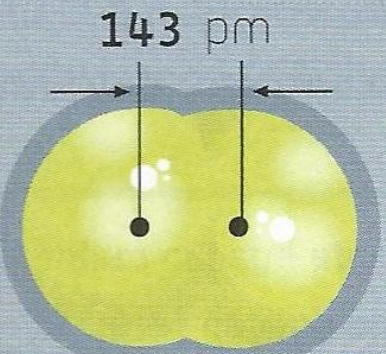
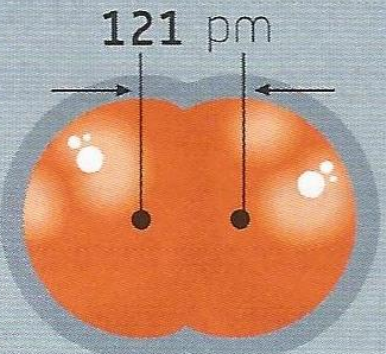
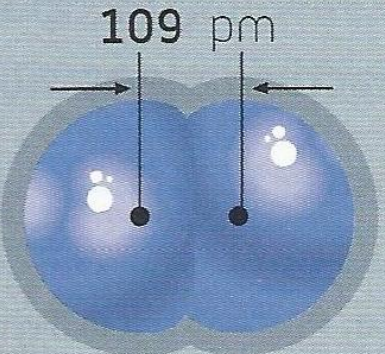
exemplo



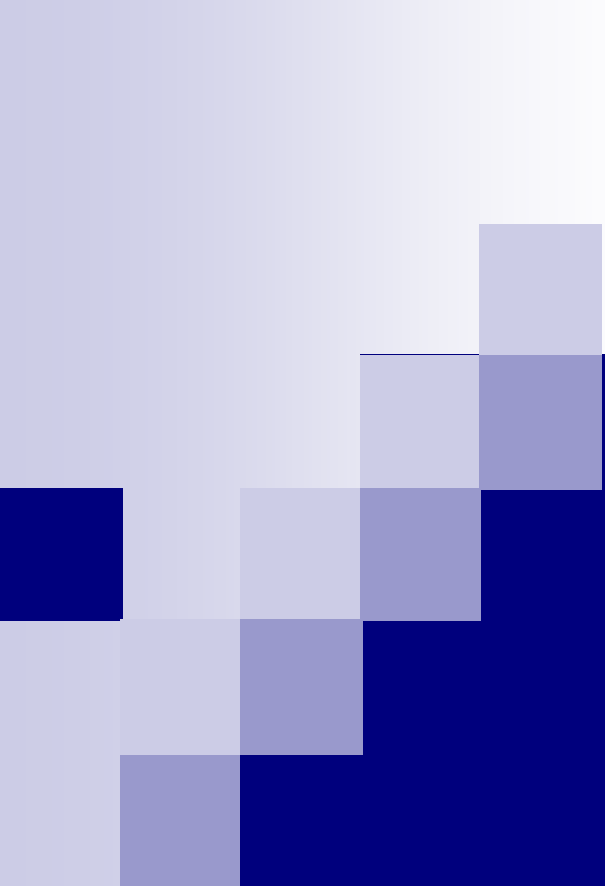
Diminui a reactividade

- A energia de dissociação da molécula de azoto é maior do que a energia de dissociação da molécula do oxigénio e do que do H_2 , pelo que a estabilidade é maior para o N_2 .

Comprimento de ligação

Distância internuclear [comprimento de ligação]	 F — F	 O = O	 N ≡ N
Ordem de ligação	1	2	3
Energia de ligação	159 kJ/mol	497 kJ/mol	946 kJ/mol

O comprimento da ligação aumenta no sentido $N_2 \rightarrow O_2 \rightarrow F_2$. As energias de ligação variam no sentido contrário.



Geometria molecular

Geometria Molecular

- A geometria de uma molécula é, em regra, aquela que permite **minimizar as repulsões** entre electrões, isto é, a que possibilite uma orientação espacial que torna mínima a energia potencial da molécula

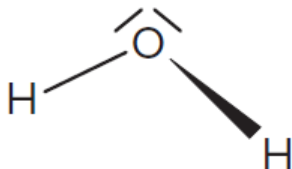
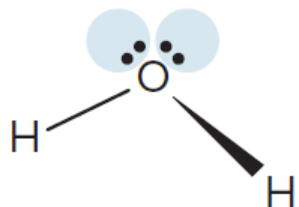
Geometria espacial das moléculas

A geometria de uma molécula, ou seja, a disposição espacial dos átomos na molécula, é a que torna **mínima a sua energia**, isto é, a que torna mínimas as repulsões na molécula.

Admite-se que a repulsão entre pares de eletrões não-ligantes (**PNL**) seja superior à repulsão entre um par de eletrões não-ligantes e um par de eletrões ligantes (**PL**), e que esta repulsão seja superior à repulsão entre pares de eletrões ligantes.

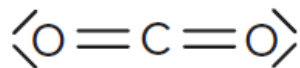
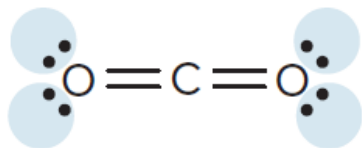
Repulsões: $\text{PNL-PNL} > \text{PNL-PL} > \text{PL-PL}$

Molécula de água, H_2O



Geometria angular

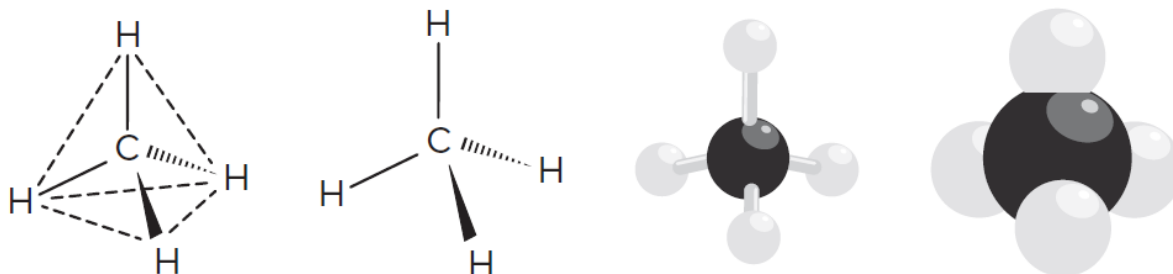
Molécula de dióxido de carbono, CO_2



Geometria linear

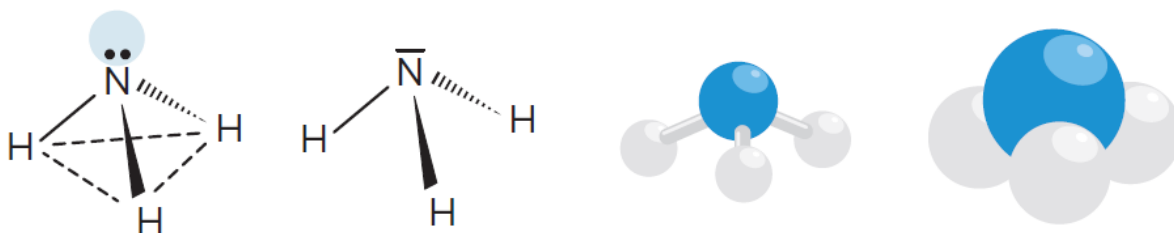
Geometria espacial das moléculas

Molécula de metano, CH_4



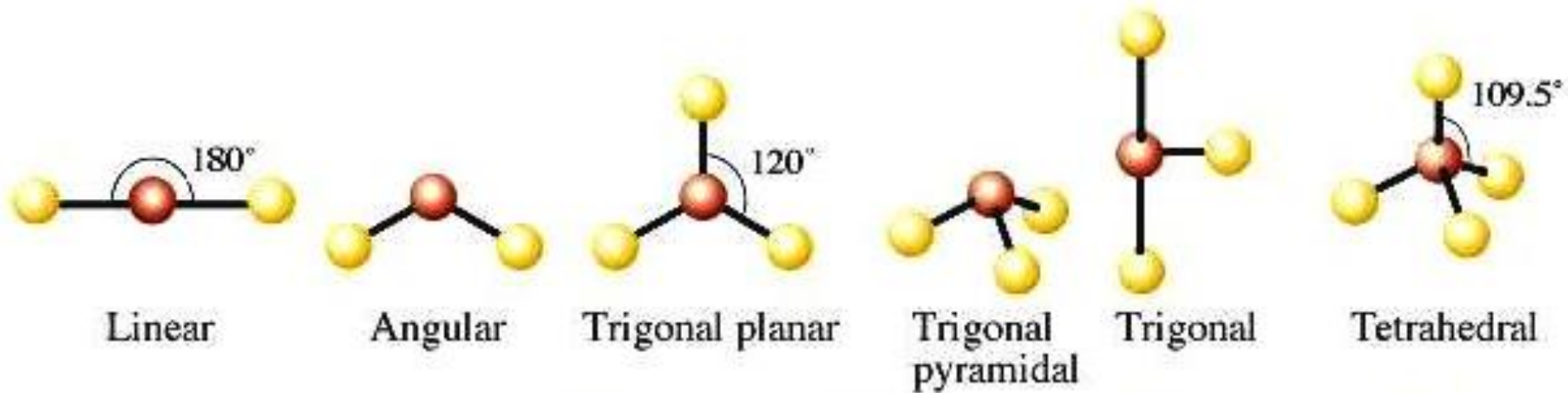
Geometria tetraédrica

Molécula de amoníaco, NH_3



Geometria piramidal trigonal

Geometrias

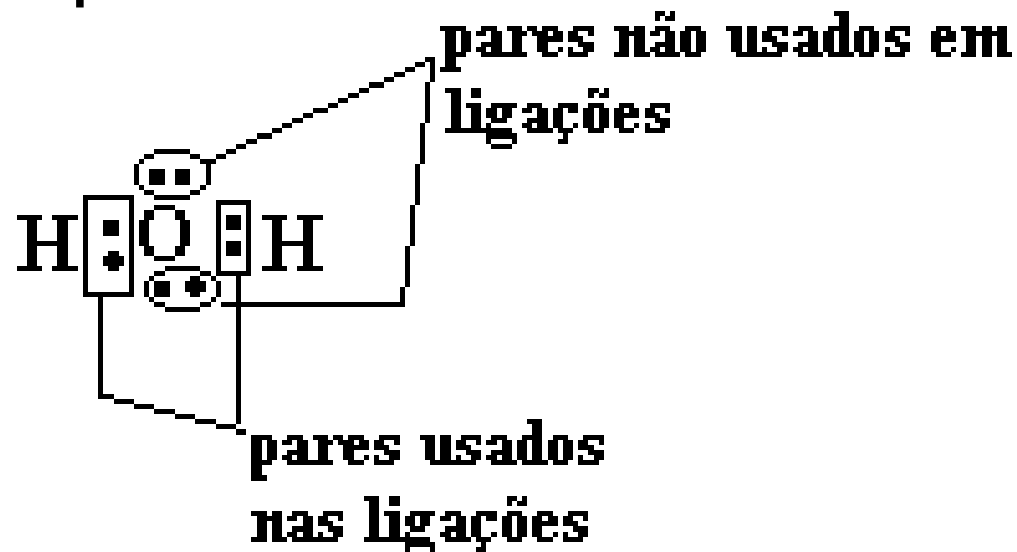




Previsão de Geometrias

Exemplo: Prever a geometria para a água (H_2O)

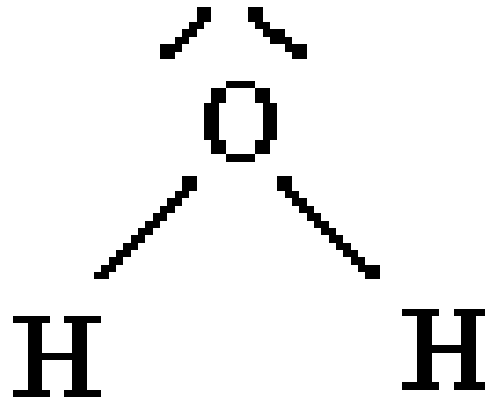
- ${}_1\text{H} : 1s^1$
- ${}_8\text{O} : 1s^2 2s^2 2p^4$



Tipo de Geometria

- Geometria Angular: AX_2E_2
- X \equiv Indica-nos os pares de electrões usados na ligação
- E \equiv Indica-nos os pares de electrões não usados na ligação

Geometria angular

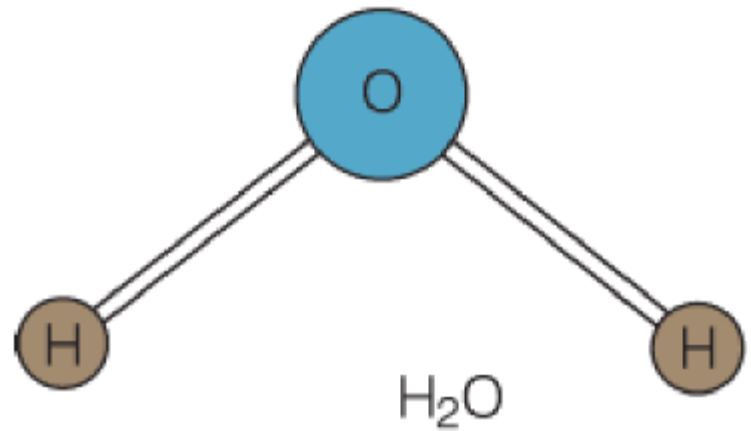


Geometria Linear



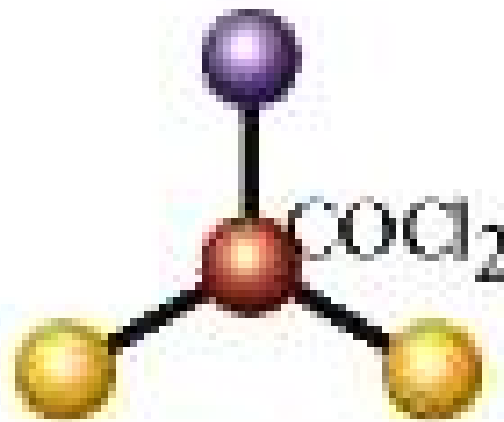
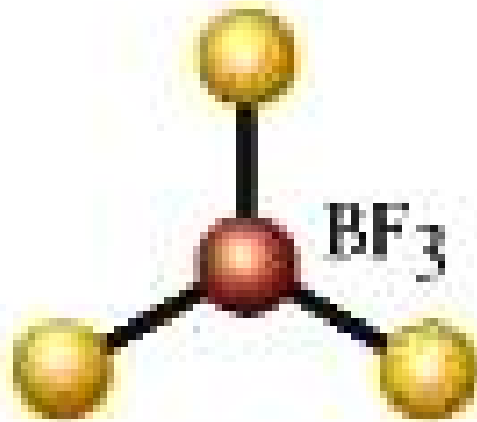
Geometria angular

AX_2E_2

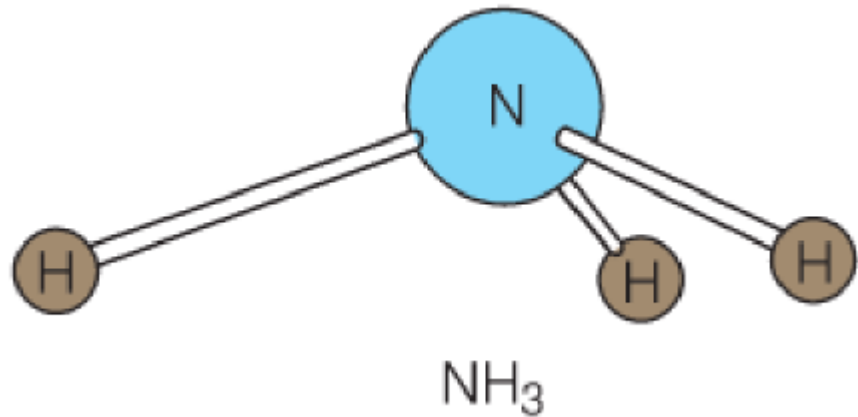


Geometria Triangular

AX_3

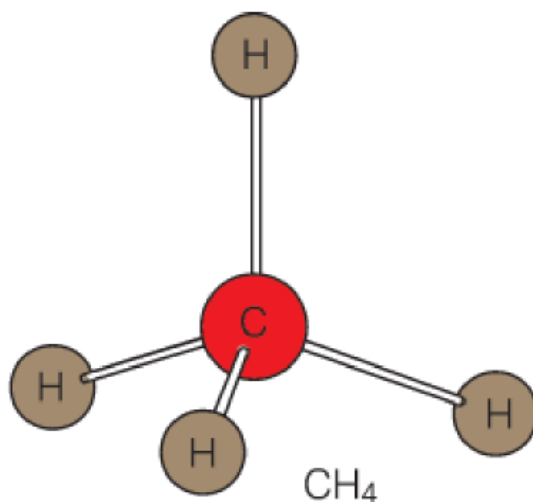


Geometria piramidal Trigonal

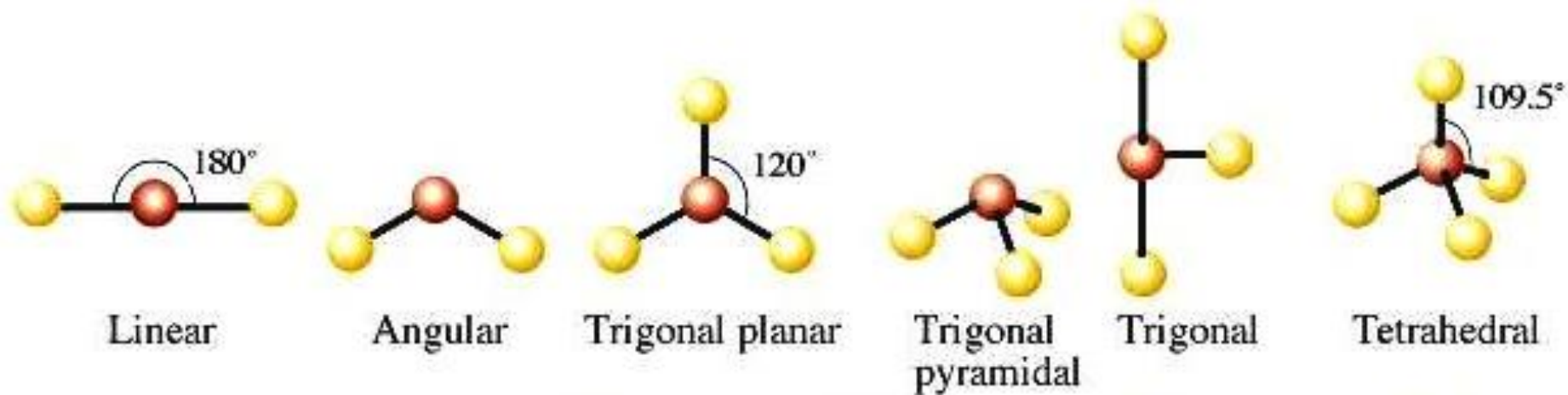


Geometria Tetraédrica

AX_4

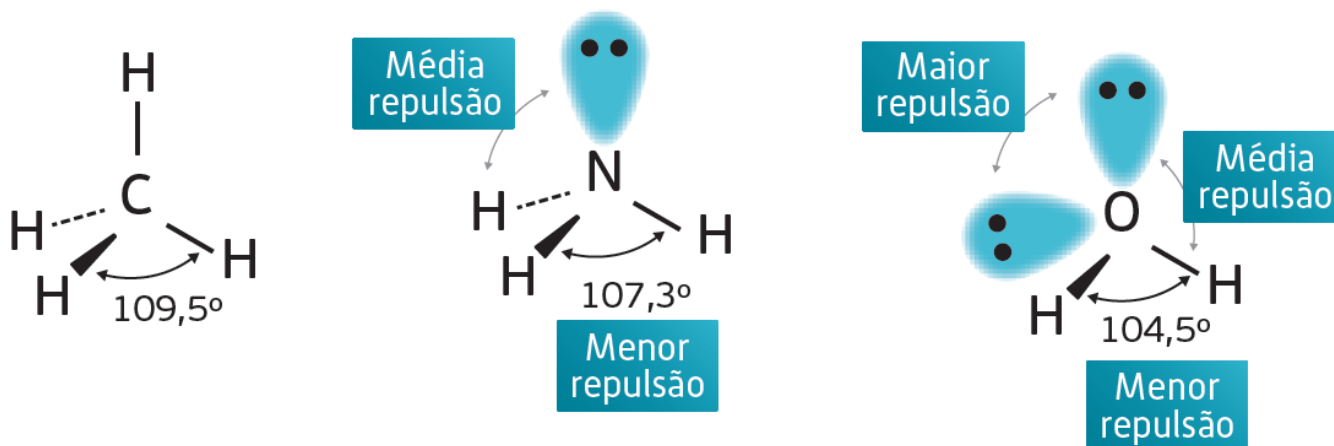


Ângulos



ÂNGULO DE LIGAÇÃO

- É o menor ângulo formado pelos dois segmentos de reta que passam pelo centro do núcleo do átomo central e pelos centros dos núcleos de dois átomos a ele ligados.



- Na **geometria linear** o ângulo de ligação é **180°** ;
- Na **geometria triangular plana** o ângulo de ligação é **120°** ;
- Nas geometrias que resultam de um arranjo espacial tetraédrico, como a **tetraédrica**, a **piramidal trigonal** ou a **angular**, o ângulo de ligação tem um valor igual ou próximo de **$109,5^\circ$** .

2 Notas

- Quanto menor for o número de electrões ligantes no átomo central, maiores serão os ângulos de ligação, tendo em conta o efeito que esses electrões (não-ligantes) exercem sobre os electrões ligantes.
- Os ângulos de ligação variam com :
 - Raio do átomo central
 - Raio dos átomos ligados

The background of the slide features a complex molecular structure. It consists of a network of black spheres (carbon) and red spheres (oxygen) connected by gray rods, representing chemical bonds. Some black spheres are also bonded to white spheres (hydrogen). The structure is arranged in a somewhat hexagonal pattern, resembling a portion of a crystal lattice or a large organic molecule. In the top right corner, there is a small circular logo with the letters 'ev' inside. The word 'Polaridade' is centered in a blue box with white text.

Polaridade



0:00 / 1:47

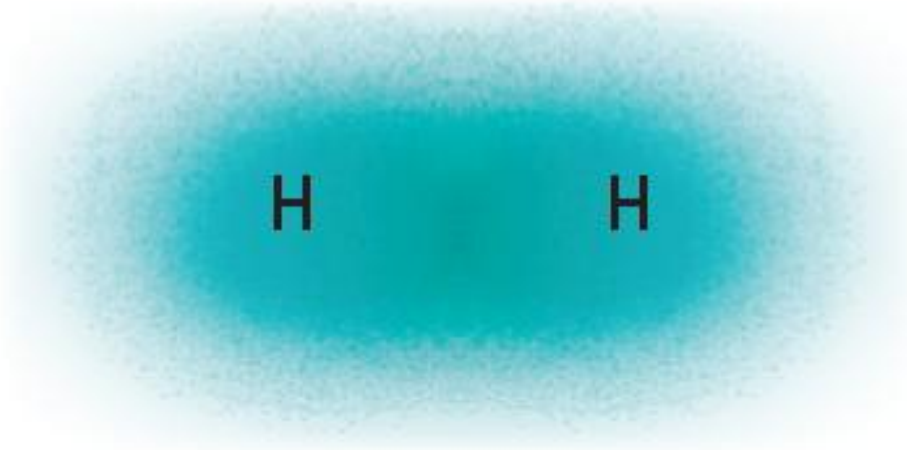




Moléculas Apolares

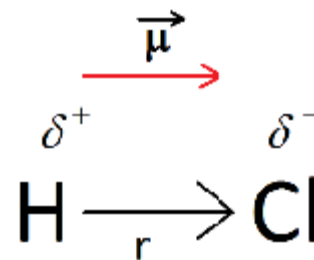
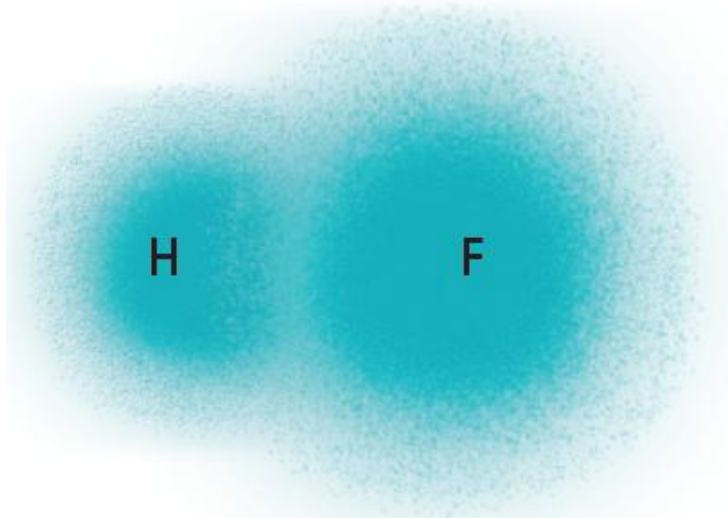
Ligação Apolar

- Ligação covalente em que os eletrões ligantes são igualmente partilhados pelos átomos unidos

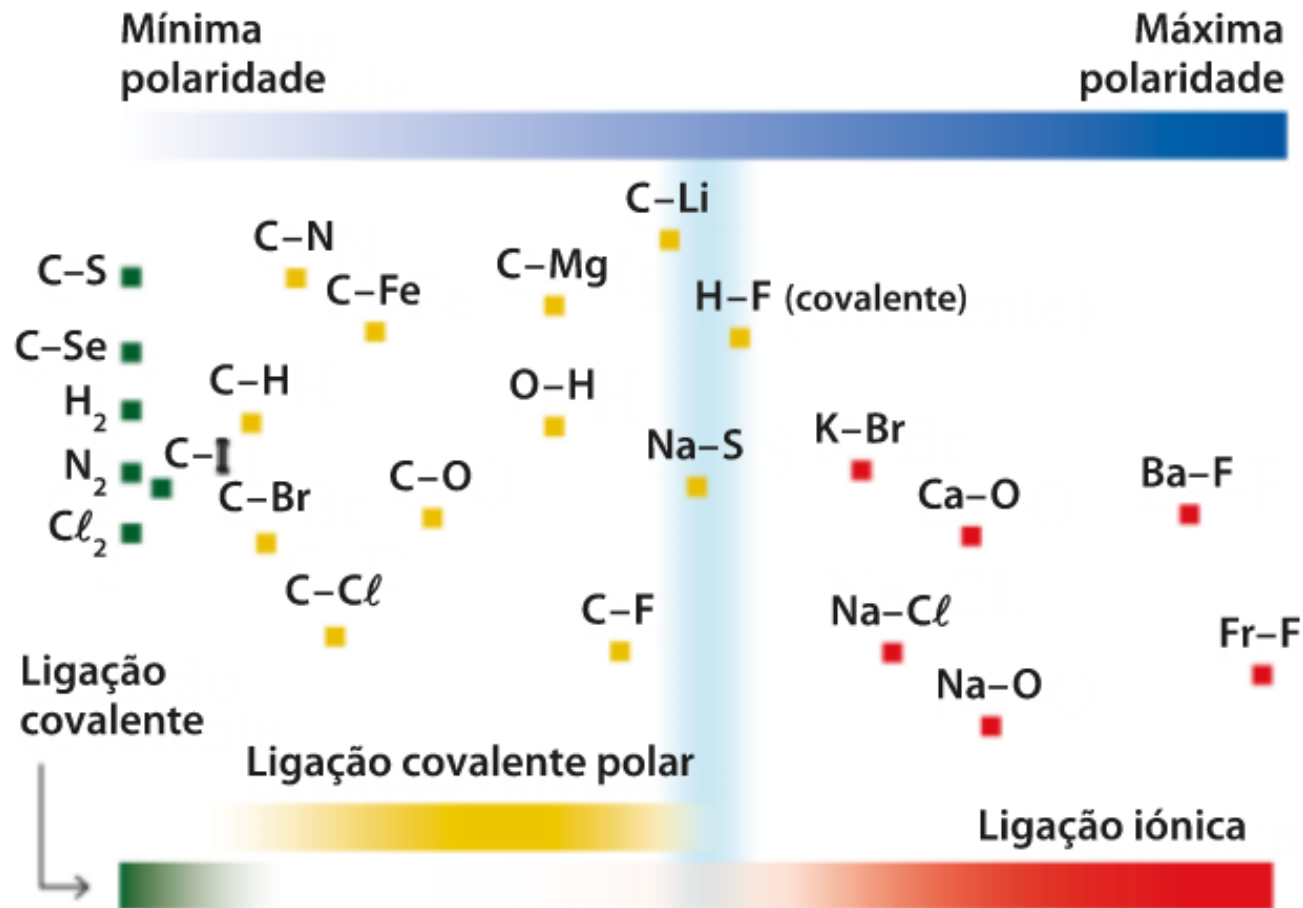


Ligação covalente Polar

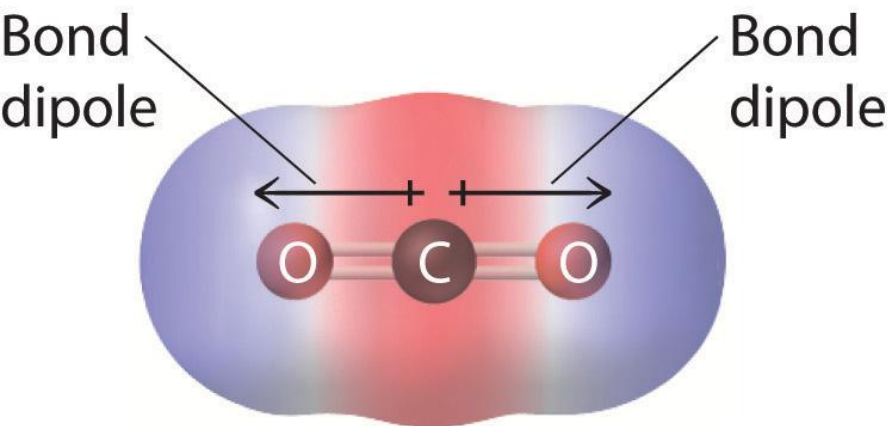
- Quando dois átomos de elementos químicos diferentes se ligam por uma ligação covalente, um desses átomos atrai com maior intensidade os elétrons da ligação do que o outro



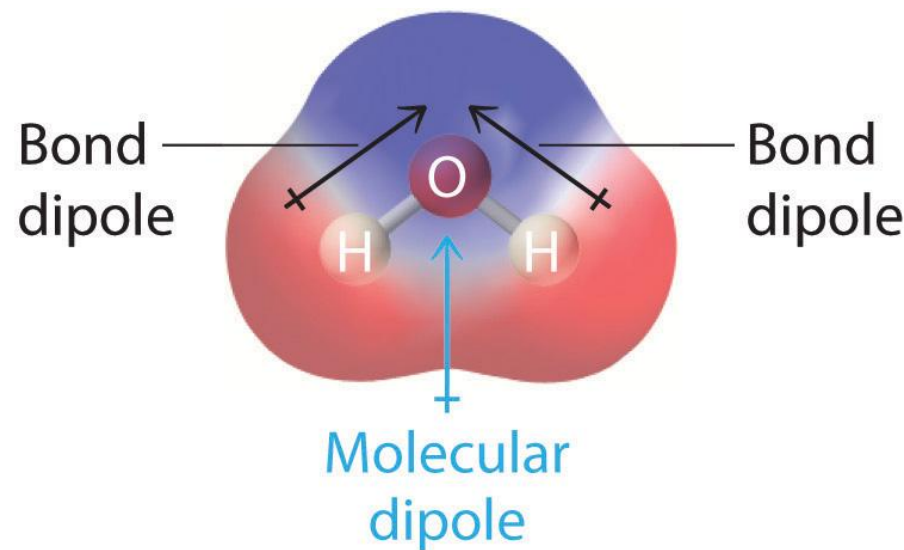
Variação da polaridade das ligações



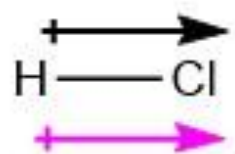
Moléculas com mais de dois átomos



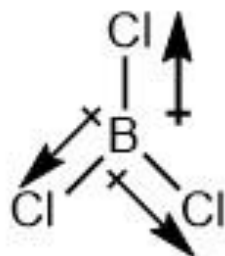
(a) No net dipole moment



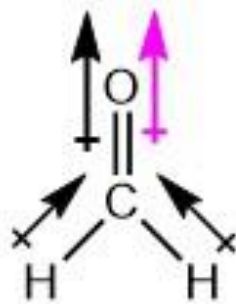
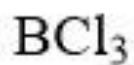
(b) Net dipole moment



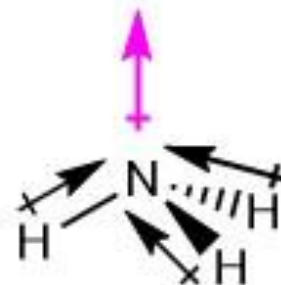
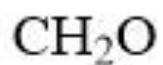
Net dipole



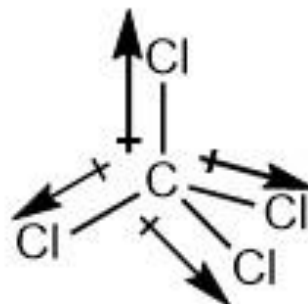
No net dipole



Net dipole



Net dipole



No net dipole

