

Trigonal Pyramidal

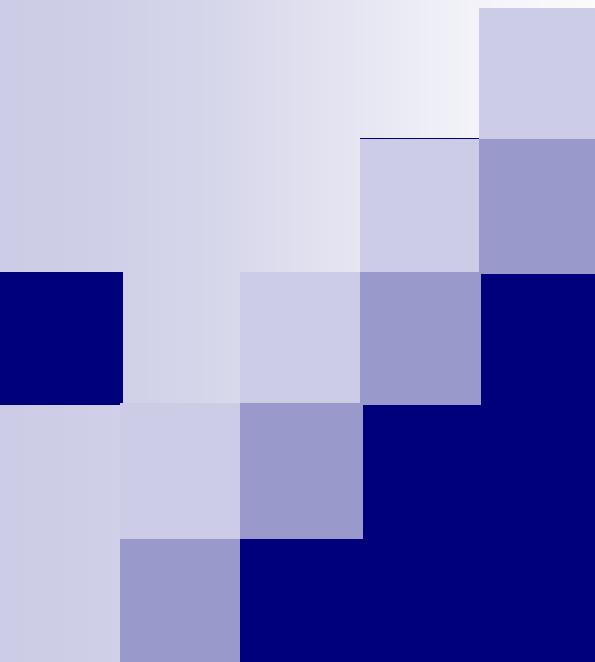
Linear

# Lição nº

Octahedral

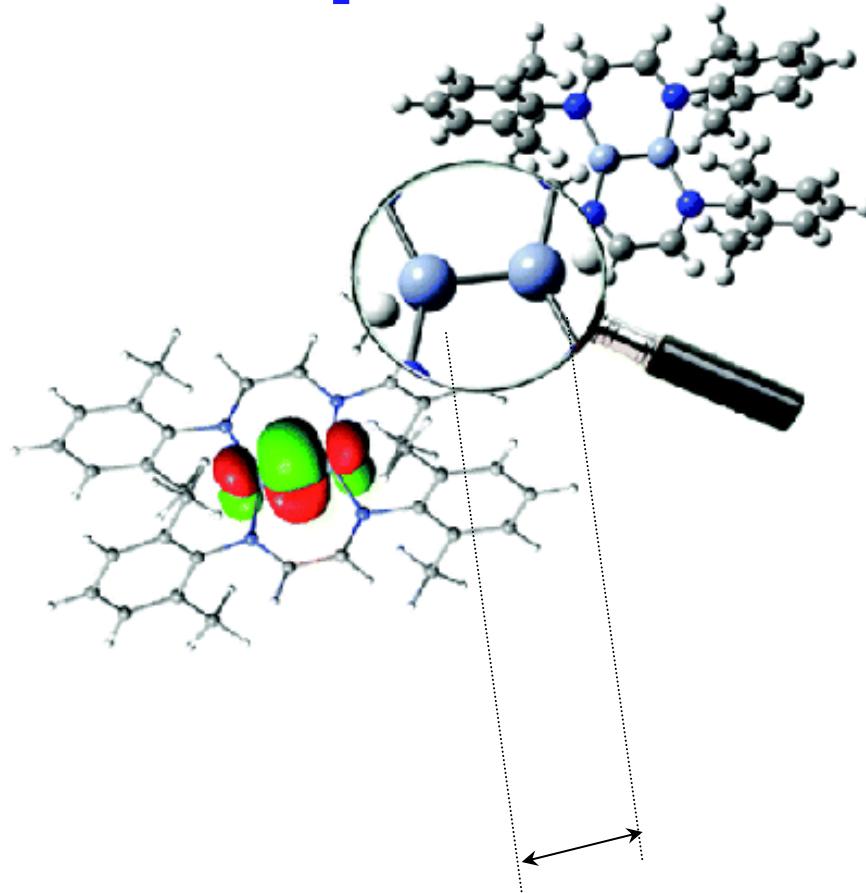
- Parâmetros de Ligação: Comprimento de ligação, ordem de ligação e energia de ligação.
- Geometria molecular.

Tetrahedral



# Comprimento de ligação

# Comprimento de Ligação

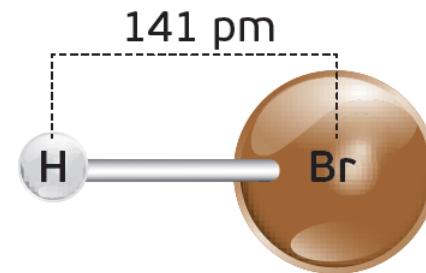
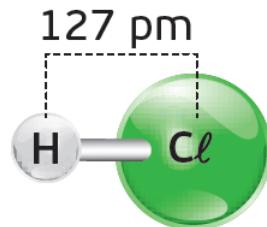
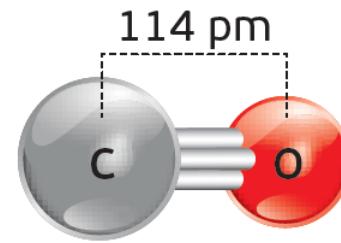
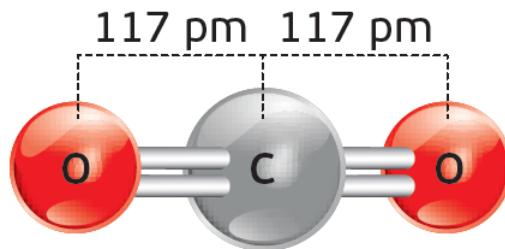


Distância de equilíbrio

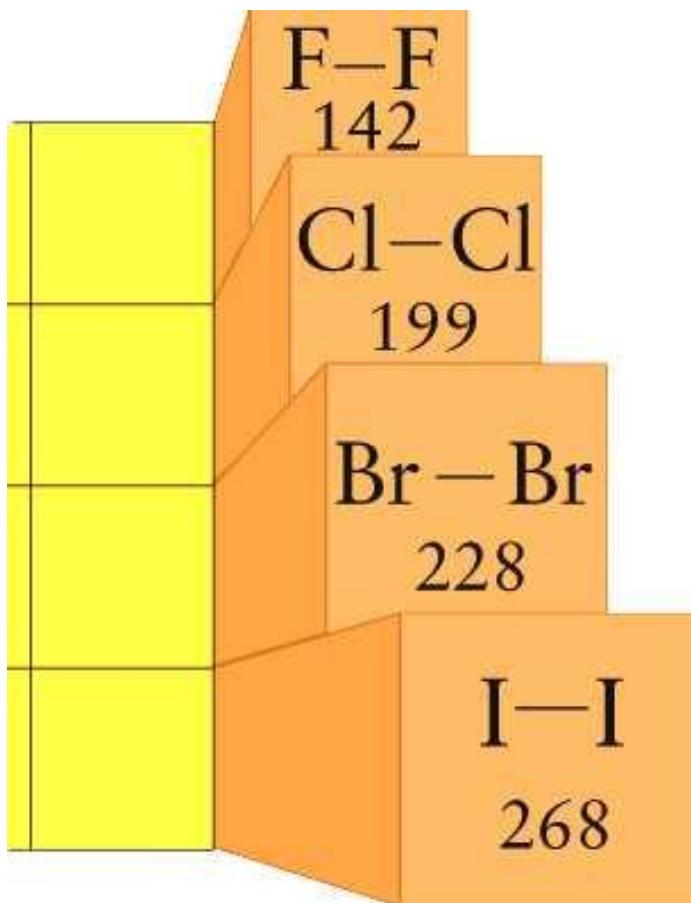
Comprimento de ligação

## COMPRIMENTO DE LIGAÇÃO

- Distância média entre os centros atómicos 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 atómico 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:*

O.L. = 1 →	Br-Br	H-Cl	H-O-H	CH <sub>4</sub>
O.L. = 2 →	O=C=O	H <sub>2</sub> C=CH <sub>2</sub>		
O.L. = 3 →	N≡N	:C≡O:	HC≡CH	



# 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	$\text{C} = \text{O}$	$\text{C} \equiv \text{O}$	$\text{H} - \text{Cl}$	$\text{H} - \text{Br}$
Comprimento de ligação / pm	117	114	127	141
Energia de ligação / kJ mol <sup>-1</sup>	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	Ligaçāo	Comprimento / pm	Energia / kJ mol <sup>-1</sup>
H <sub>2</sub>	H–H	74	436
N <sub>2</sub>	N≡N	110	944
O <sub>2</sub>	O=O	121	496
F <sub>2</sub>	F–F	142	158
HF	H–F	92	565
Cl <sub>2</sub>	Cl–Cl	199	242
HCl	H–Cl	127	431
Br <sub>2</sub>	Br–Br	228	193
HBr	H–Br	141	366
H <sub>2</sub> O	O–H	96	463
H <sub>2</sub> S	S–H	133,6	339
I <sub>2</sub>	I–I	268	151

# Ordem de ligação e a reactividade de uma molécula

**Maior ordem de ligação**



**Ligaçāo 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  $\text{H}_2$ , pelo que a estabilidade é maior para o  $\text{N}_2$ .

# Comprimento de ligação

Distância internuclear (comprimento de ligação)	143 pm	121 pm	109 pm
Ordem de ligação	1	2	3
Energia de ligação	159 kJ/mol	497 kJ/mol	946 kJ/mol

Diagram illustrating the internuclear distance (comprimento de ligação) for three diatomic molecules: F<sub>2</sub>, O=O, and N≡N. The internuclear distance is shown as 143 pm for F<sub>2</sub>, 121 pm for O=O, and 109 pm for N≡N. The table also shows the bond order (1, 2, 3) and bond energy (159 kJ/mol, 497 kJ/mol, 946 kJ/mol) for each molecule.

O comprimento da ligação aumenta no sentido N<sub>2</sub> → O<sub>2</sub> → F<sub>2</sub>. 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

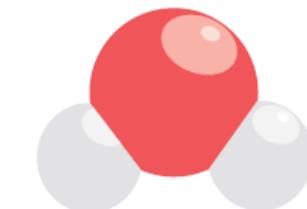
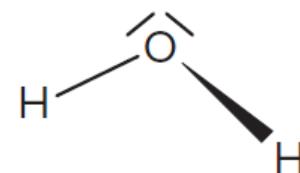
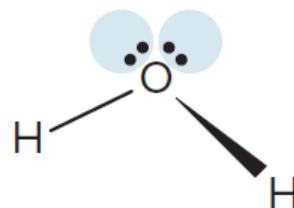
# Geometria espacial das moléculas

**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.

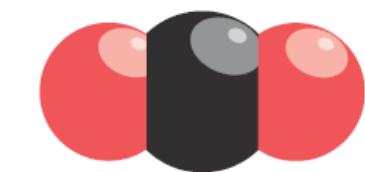
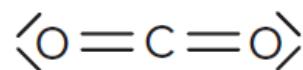
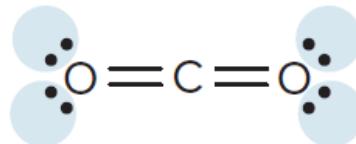
**Repulsões:** PNL–PNL > PNL–PL > PL–PL

## Molécula de água, $\text{H}_2\text{O}$



Geometria angular

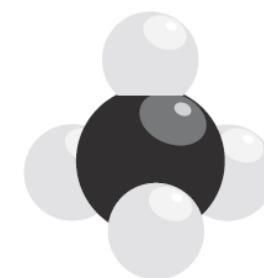
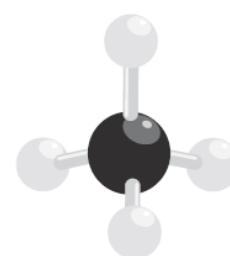
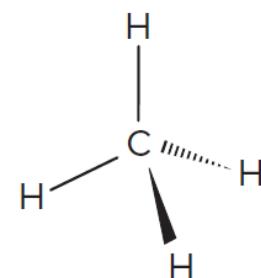
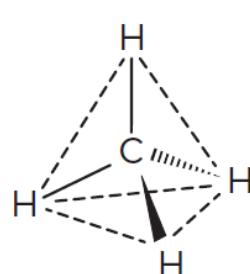
## Molécula de dióxido de carbono, $\text{CO}_2$



Geometria linear

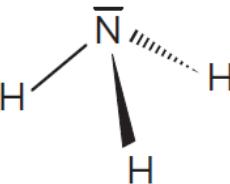
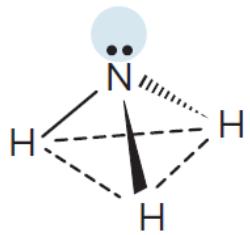
# Geometria espacial das moléculas

## Molécula de metano, $\text{CH}_4$



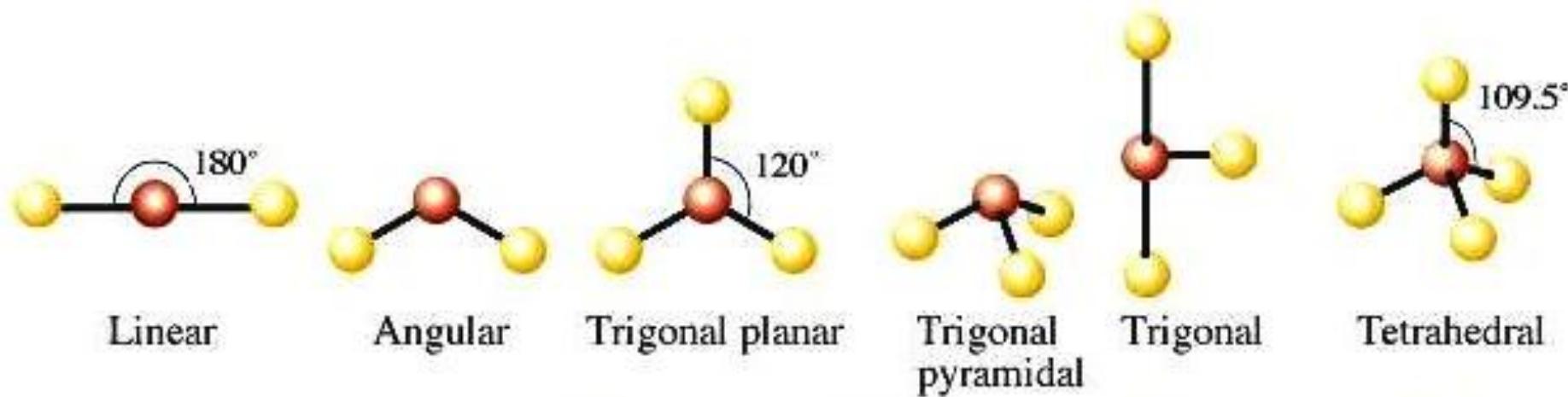
Geometria tetraédrica

## Molécula de amoníaco, $\text{NH}_3$



Geometria piramidal trigonal

# Geometrias

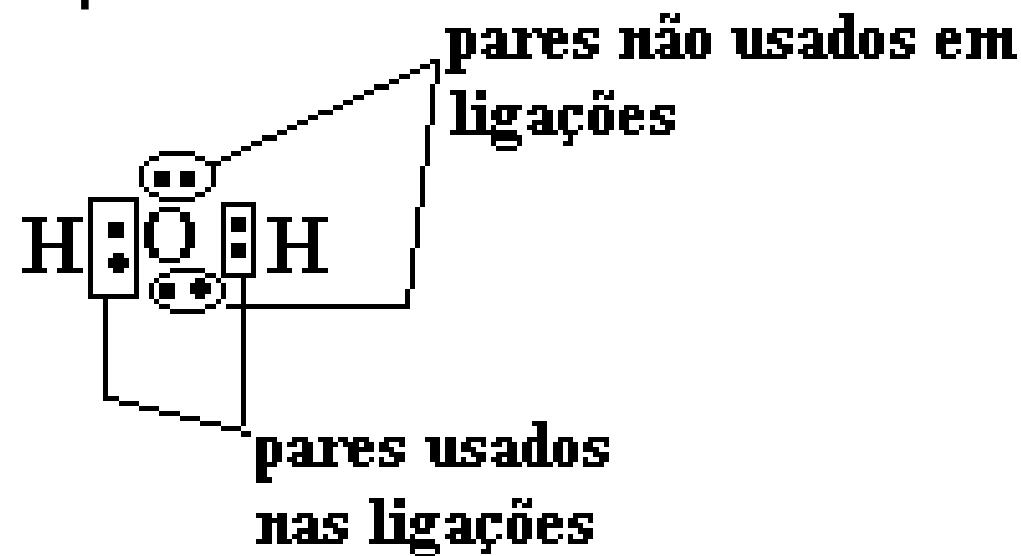




# Previsão de Geometrias

# **Exemplo:** Prever a geometria para a água (H<sub>2</sub>O)

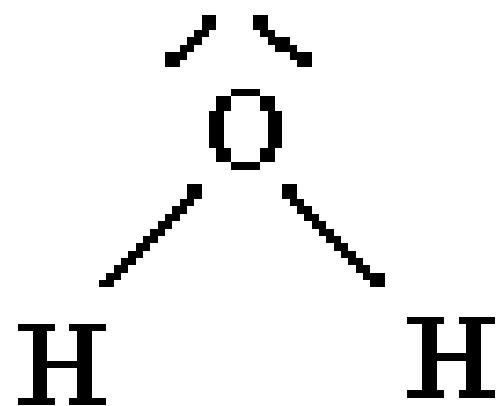
- <sub>1</sub>H : 1s<sup>1</sup>
- <sub>8</sub>O : 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup>



# Tipo de Geometria

- **Geometria Angular: AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>**
- **X** ≡ Indica-nos os pares de electrões usados na ligação
- **E** ≡ Indica-nos os pares de electrões não usados na ligação

# Geometria ângular

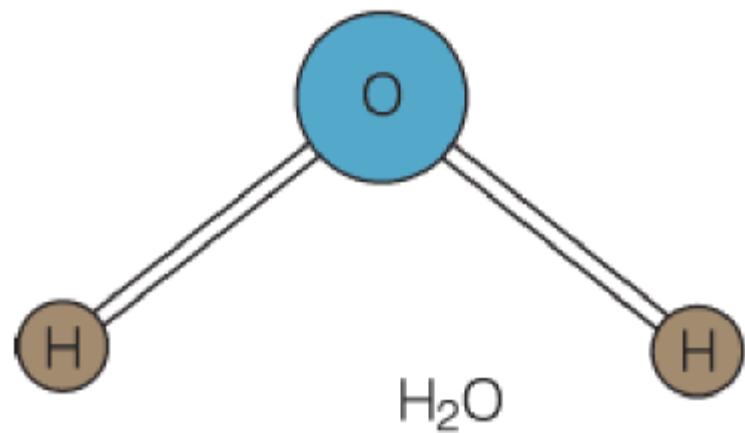


# Geometria Linear

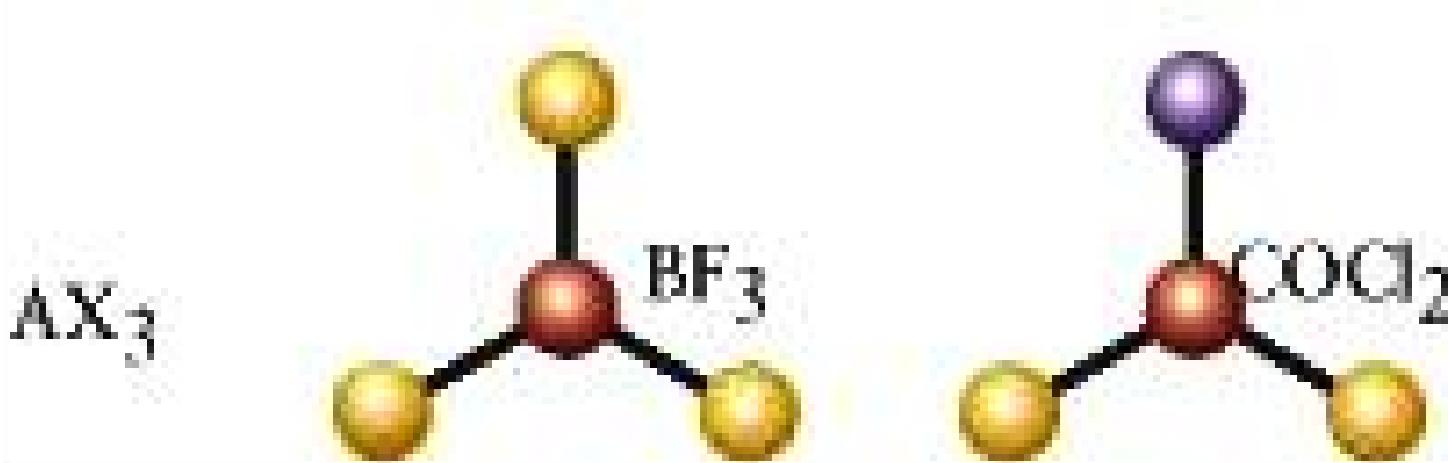


# Geometria angular

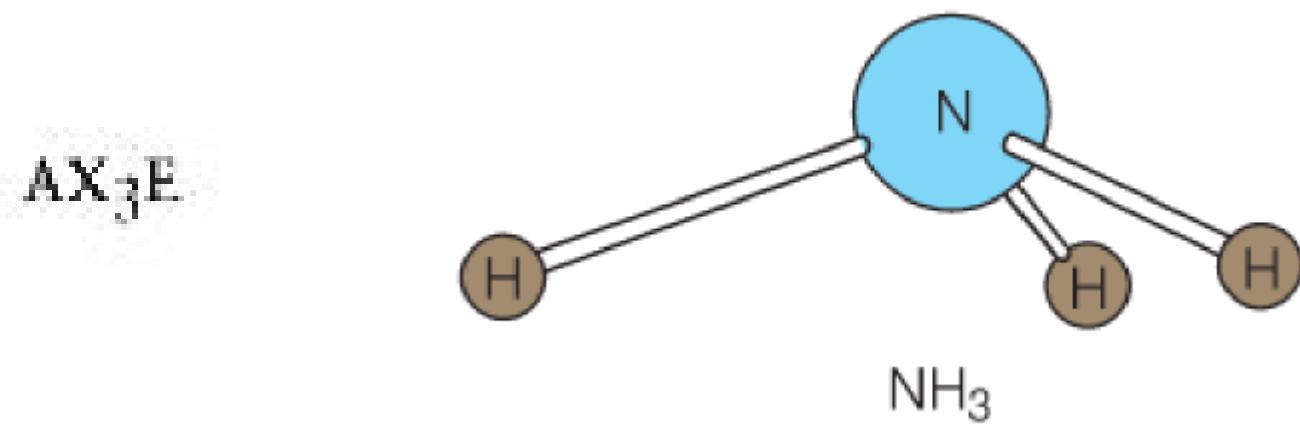
$AX_2E_2$



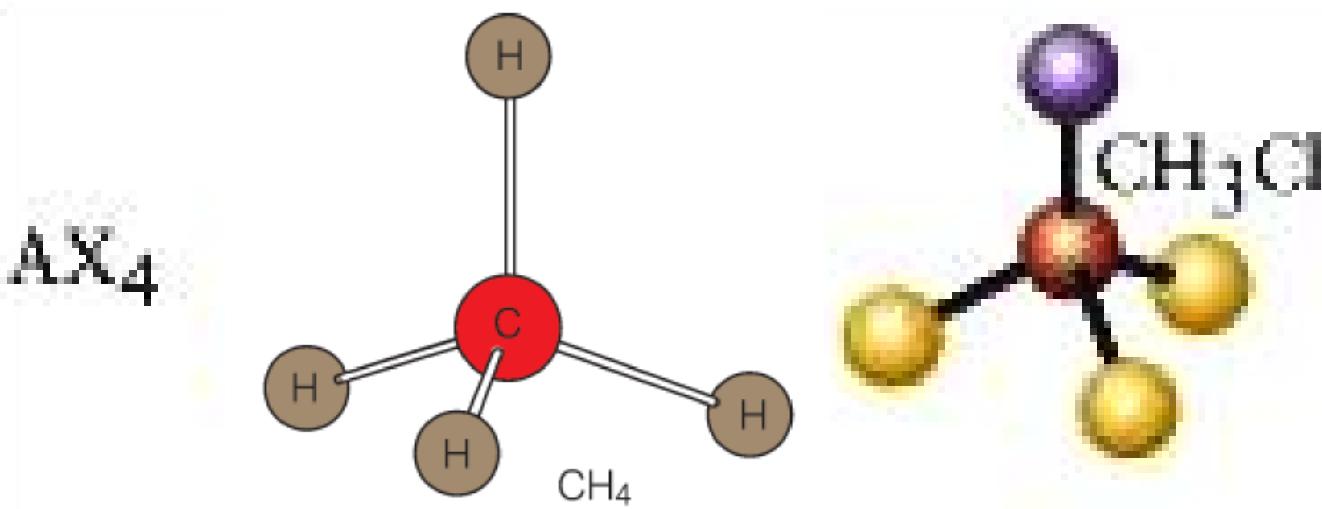
# Geometria Triangular



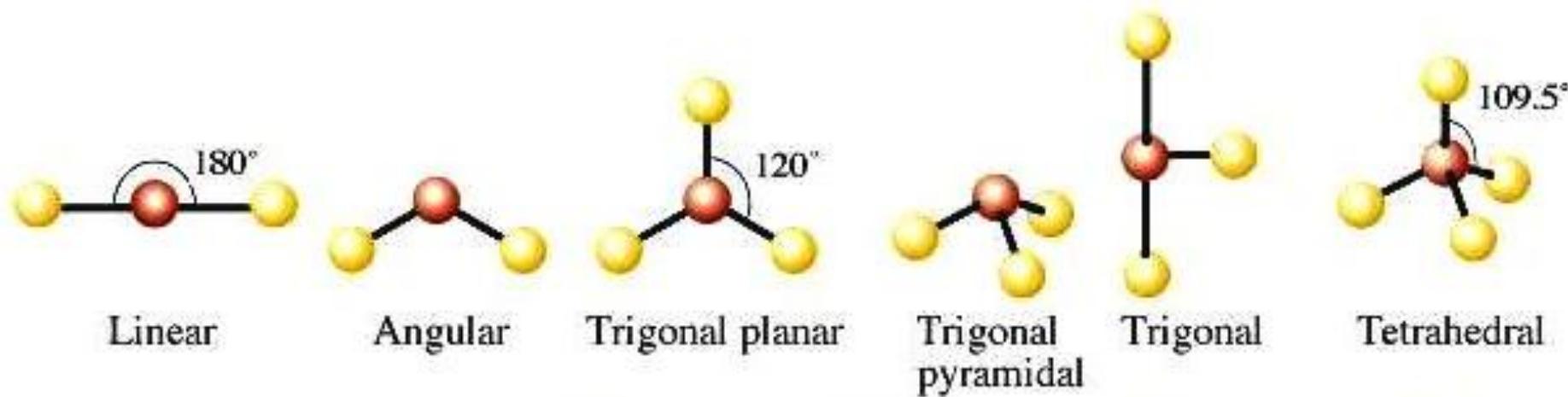
# Geometria piramidal Trigonal



# Geometria Tetraédrica

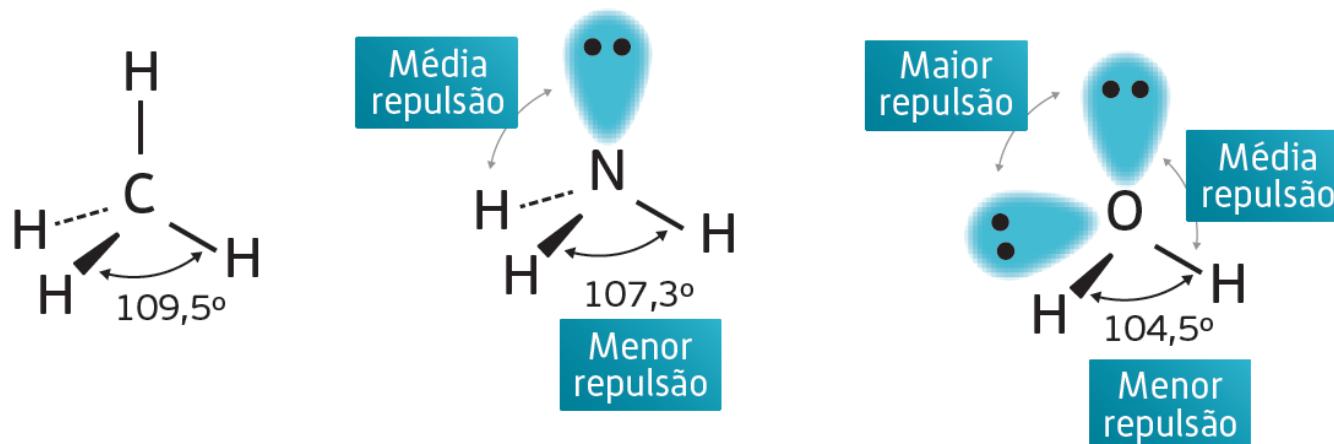


# Ângulos



# ÂNGULO DE LIGAÇÃO

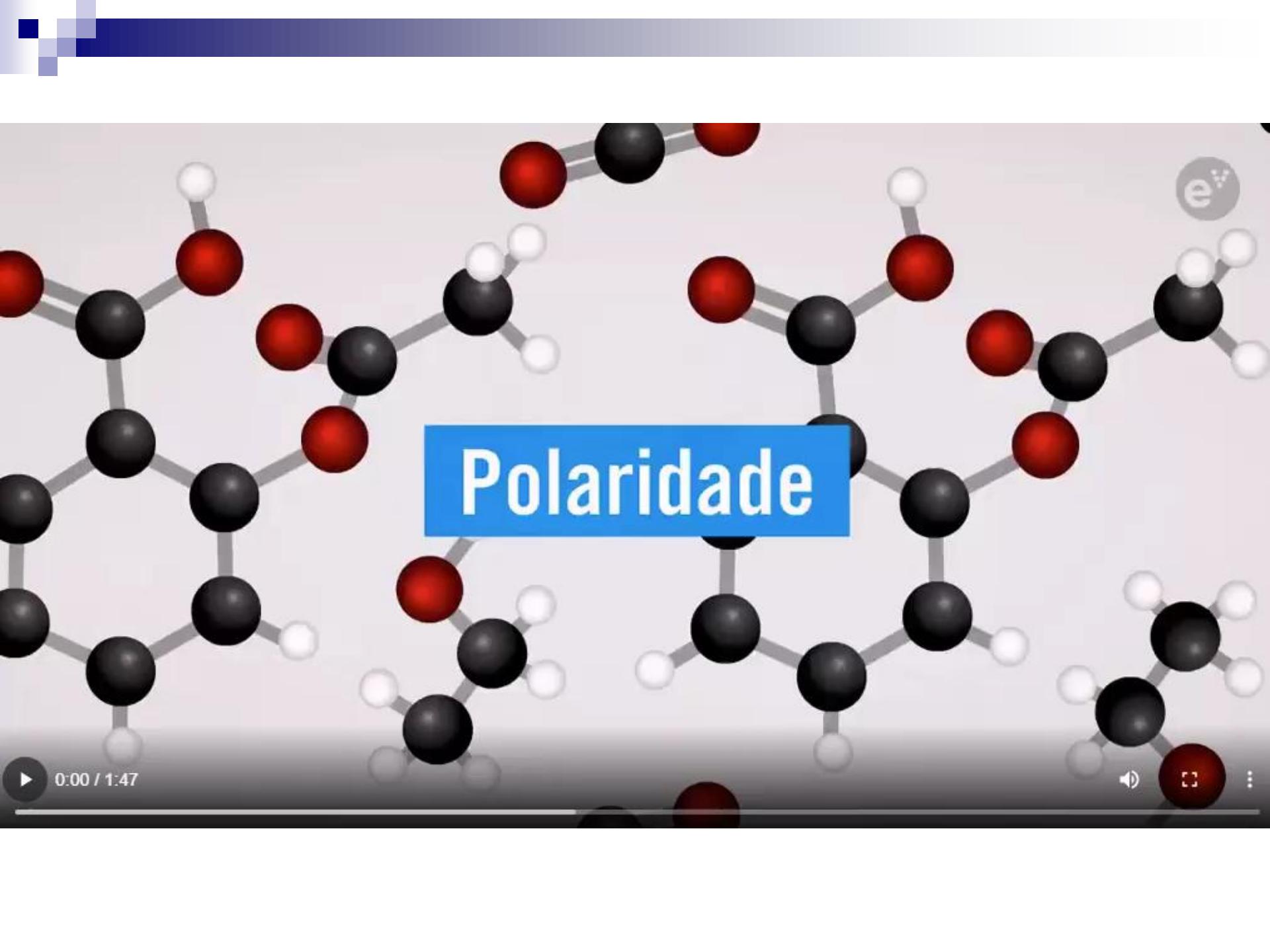
- É o menor ângulo formado pelos dois segmentos de reta que passam pelo centro do núcleo do átomo central e pelos centros dos núcleos de dois átomos a ele ligados.



- 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°**.

## 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 átmos ligados



Polaridade

0:00 / 1:47

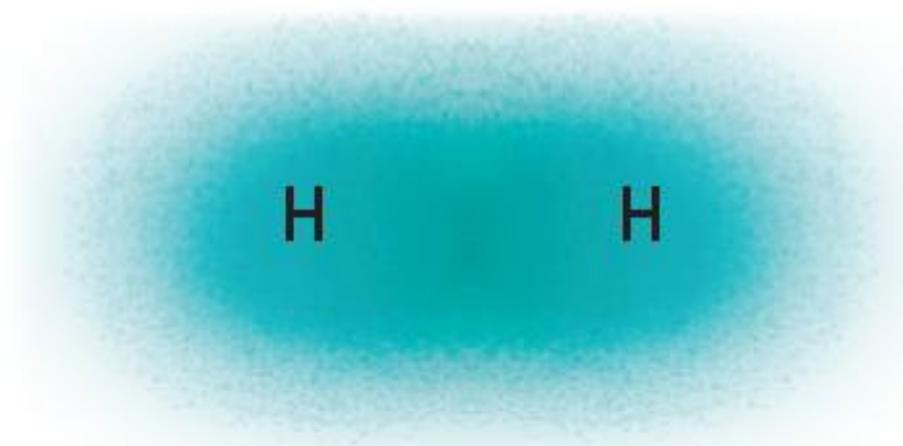




# Moléculas Apolares

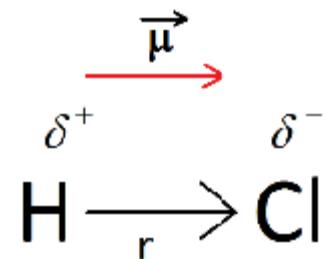
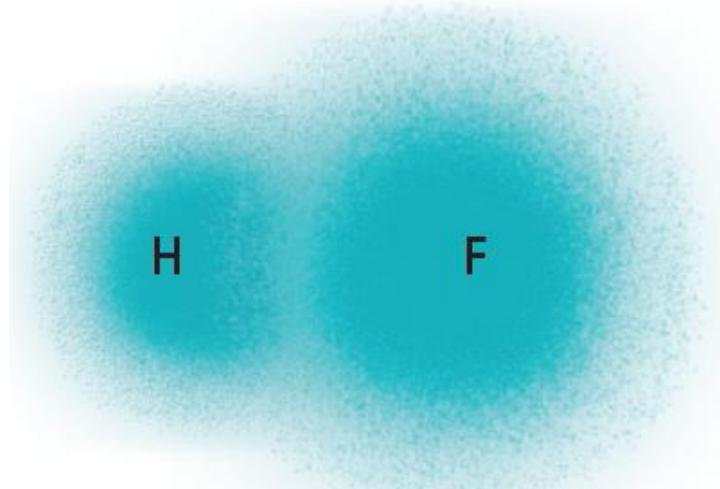
# Ligaçāo Apolar

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

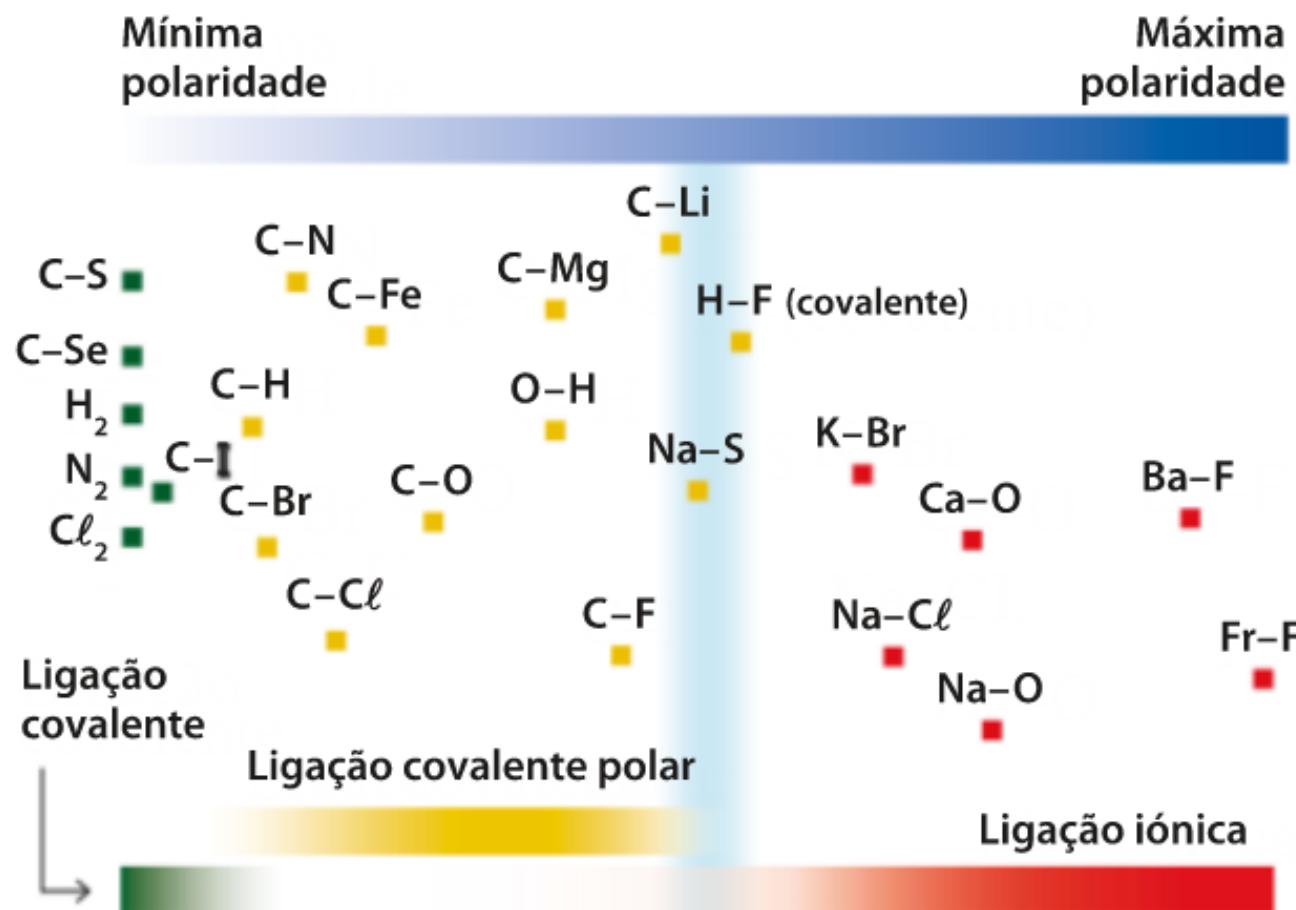


# Ligaçāo covalente Polar

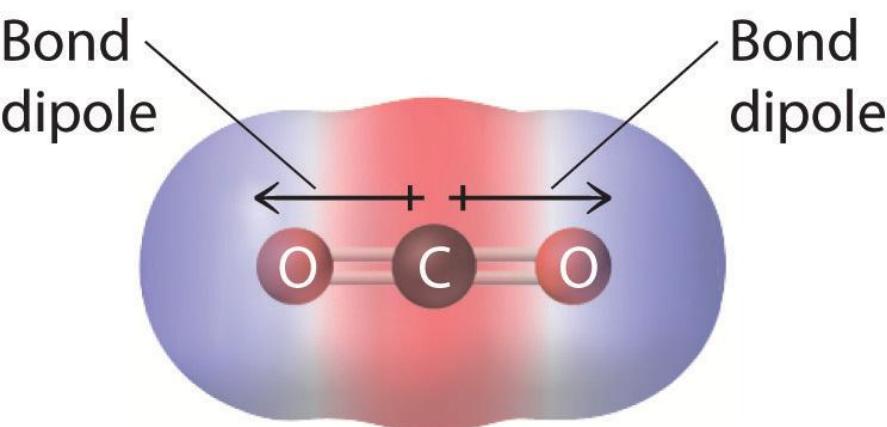
- Quando dois átomos de elementos químicos diferentes se ligam por uma ligação covalente, um desses átomos atrai com maior intensidade os eletrōes da ligação do que o outro



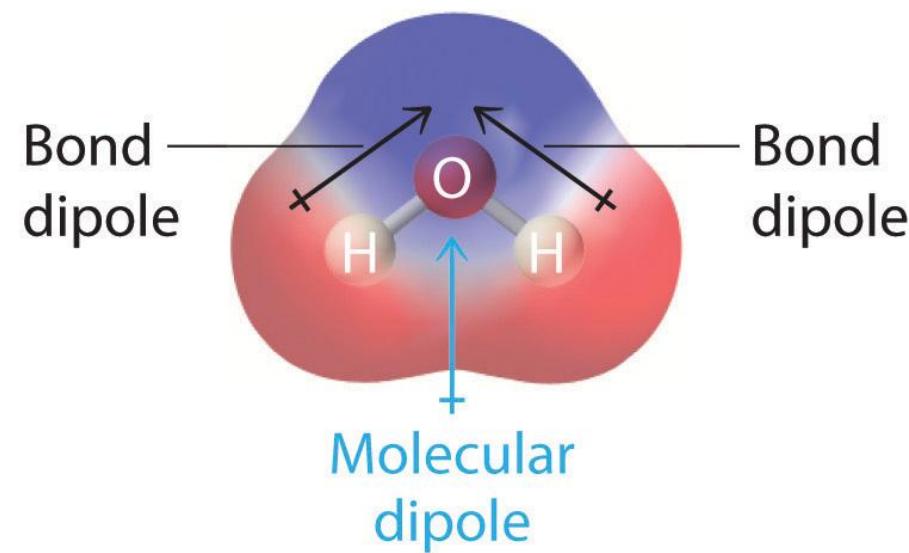
# Variação da polaridade das ligações



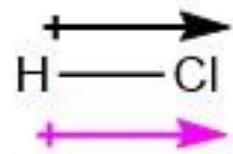
# Moléculas com mais de dois átomos



(a) No net dipole moment

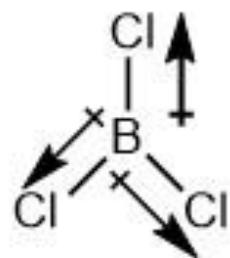


(b) Net dipole moment



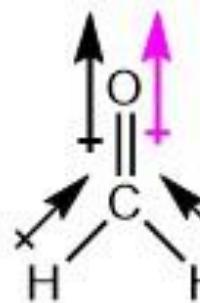
Net dipole

HCl



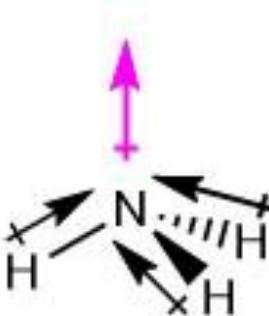
No net dipole

BCl<sub>3</sub>



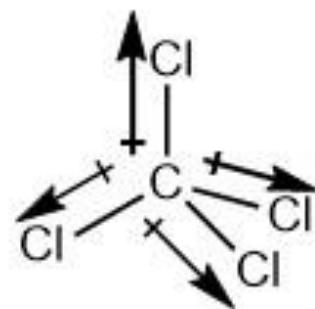
Net dipole

CH<sub>2</sub>O



Net dipole

NH<sub>3</sub>



No net dipole

CCl<sub>4</sub>