

# Símbolos de Lewis

- Para um entendimento através de figuras sobre a localização dos elétrons em um átomo, representamos os elétrons como pontos ao redor do símbolo do elemento.
- O número de elétrons disponíveis para a ligação é indicado por pontos desemparelhados.
- Esses símbolos são chamados símbolos de Lewis.
- Geralmente colocamos os elétrons nos quatro lados de um quadrado ao redor do símbolo do elemento.

# Símbolo de Lewis

TABELA 8.1 Símbolos de Lewis

Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis	Elemento	Configuração eletrônica	Símbolo de Lewis
Li	$[\text{He}]2s^1$	$\text{Li}\cdot$	Na	$[\text{Ne}]3s^1$	$\text{Na}\cdot$
Be	$[\text{He}]2s^2$	$\cdot\text{Be}\cdot$	Mg	$[\text{Ne}]3s^2$	$\cdot\text{Mg}\cdot$
B	$[\text{He}]2s^22p^1$	$\cdot\ddot{\text{B}}\cdot$	Al	$[\text{Ne}]3s^23p^1$	$\cdot\ddot{\text{Al}}\cdot$
C	$[\text{He}]2s^22p^2$	$\cdot\ddot{\text{C}}\cdot$	Si	$[\text{Ne}]3s^23p^2$	$\cdot\ddot{\text{Si}}\cdot$
N	$[\text{He}]2s^22p^3$	$\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$	P	$[\text{Ne}]3s^23p^3$	$\cdot\ddot{\text{P}}\cdot$
O	$[\text{He}]2s^22p^4$	$:\ddot{\text{O}}:$	S	$[\text{Ne}]3s^23p^4$	$:\ddot{\text{S}}:$
F	$[\text{He}]2s^22p^5$	$\cdot\ddot{\text{F}}:$	Cl	$[\text{Ne}]3s^23p^5$	$\cdot\ddot{\text{Cl}}:$
Ne	$[\text{He}]2s^22p^6$	$:\ddot{\text{Ne}}:$	Ar	$[\text{Ne}]3s^23p^6$	$:\ddot{\text{Ar}}:$

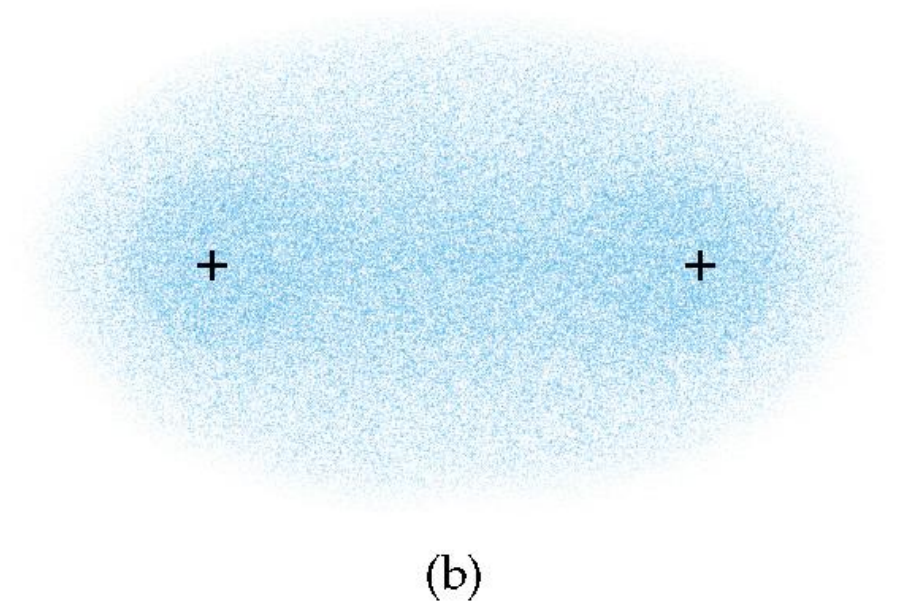
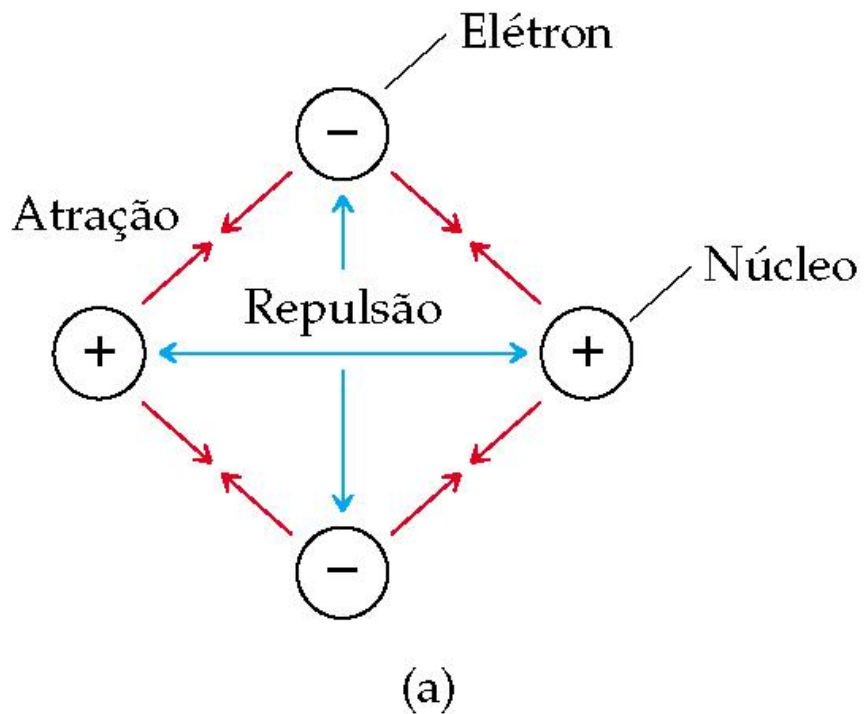
# Regra do octeto

- Todos os gases nobres, com exceção do He, têm uma configuração  $s^2p^6$ .
- **A regra do octeto:** os átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que eles estejam rodeados por 8 elétrons de valência (4 pares de elétrons).
- **Cuidado:** existem várias exceções à regra do octeto.

# Ligação covalente

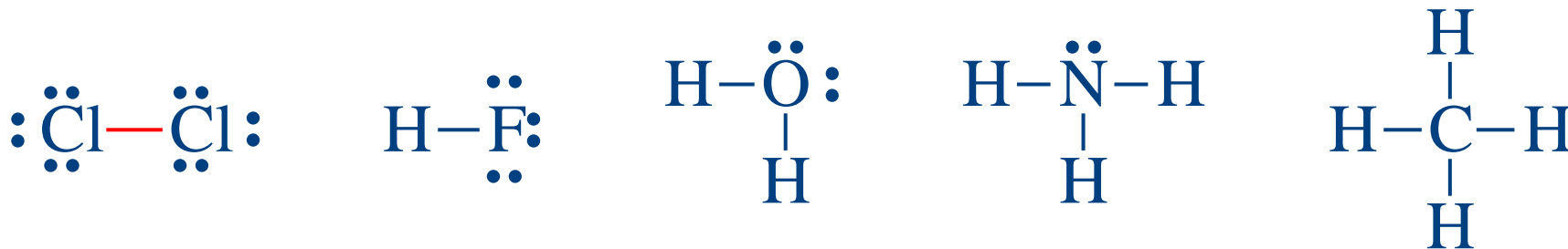
- Quando dois átomos similares se ligam, nenhum deles quer perder ou ganhar um elétron para formar um octeto.
- Quando átomos similares se ligam, eles compartilham pares de elétrons para que cada um atinja o octeto.
- Cada par de elétrons compartilhado constitui uma ligação química.
- Por exemplo:  $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$  tem elétrons em uma linha conectando os dois núcleos de H.

# Ligação covalente



# Ligação covalente

- As ligações covalentes podem ser representadas pelos símbolos de Lewis dos elementos:
- Nas estruturas de Lewis, cada par de elétrons em uma ligação é representado por uma única linha:



# Ligação covalente

## Ligações múltiplas

- É possível que mais de um par de elétrons seja compartilhado entre dois átomos (ligações múltiplas):
  - Um par de elétrons compartilhado = ligação simples ( $\text{H}_2$ );
  - Dois pares de elétrons compartilhados = ligação dupla ( $\text{O}_2$ );
  - Três pares de elétrons compartilhados = ligação tripla ( $\text{N}_2$ ).



- Em geral, a distância entre os átomos ligados diminui à medida que o número de pares de elétrons compartilhados aumenta.

# Polaridade da ligação e eletronegatividade

- Em uma ligação covalente, os elétrons estão compartilhados.
- O compartilhamento de elétrons para formar uma ligação covalente não significa compartilhamento igual daqueles elétrons.
- Existem algumas ligações covalentes nas quais os elétrons estão localizados mais próximos a um átomo do que a outro.
- O compartilhamento desigual de elétrons resulta em ligações polares.



# Polaridade da ligação e eletronegatividade

## Eletronegatividade

- **Eletronegatividade:** é a habilidade de um átomo de atrair elétrons para si *em certa molécula* .
- Pauling estabeleceu as eletronegatividades em uma escala de 0,7 (Cs) a **4,0 (F)**.
- A eletronegatividade aumenta:
  - ao longo de um período e
  - ao descendermos em um grupo.

# Polaridade da ligação e eletronegatividade

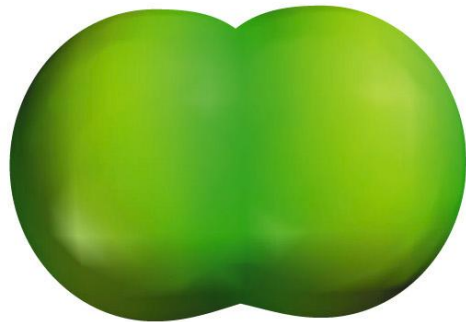
## Eletronegatividade e polaridade de ligação

- A diferença na eletronegatividade entre dois átomos é uma medida da polaridade de ligação:
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 0 resultam em ligações covalentes apolares (compartilhamento de elétrons igual ou quase igual);
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 2 resultam em ligações covalentes polares (compartilhamento de elétrons desigual);
  - as diferenças de eletronegatividade próximas a 3 resultam em ligações iônicas (transferência de elétrons).

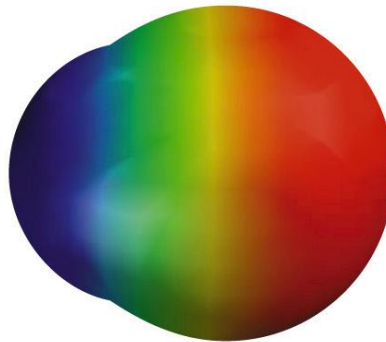
# Polaridade da ligação e eletronegatividade

## Eletronegatividade e polaridade de ligação

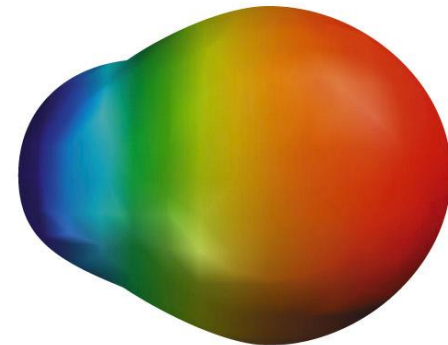
- Não há distinção acentuada entre os tipos de ligação.
- A extremidade positiva (ou polo) em uma ligação polar é representada por  $\delta+$  e o polo negativo por  $\delta-$ .



F<sub>2</sub>



HF



LiF

# Desenhando as estruturas de Lewis

1. Some os elétrons de valência de todos os átomos.
2. Escreva os símbolos para os átomos a fim de mostrar quais átomos estão ligados entre si e una-os com uma ligação simples.
  - Complete o octeto dos átomos ligados ao átomo central.
  - Coloque os elétrons que sobrarem no átomo central.
  - Se não existem elétrons suficientes para dar ao átomo central um octeto, tente ligações múltiplas.

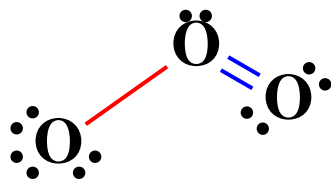
# Ressonância

Ressonância = mistura das estruturas individuais de Lewis

“ Ressonância é uma mistura com o mesmo arranjo de átomos, mas com diferentes arranjos de elétrons. Isto espelha o caráter de ligação múltipla sobre uma molécula e também diminui a sua energia”.

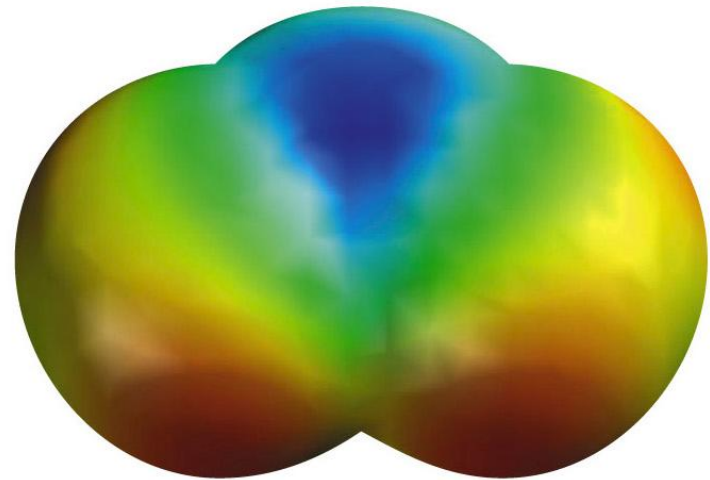
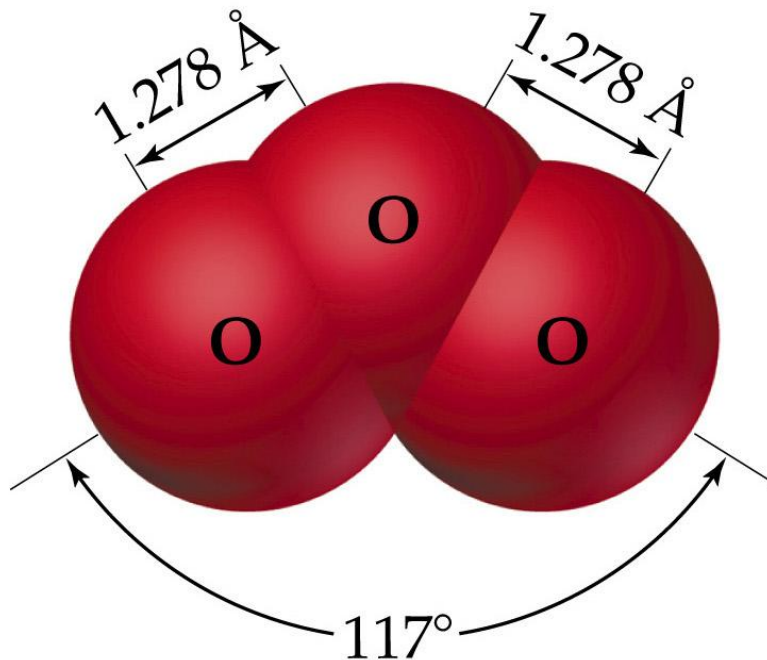
# Ressonância

- Exemplo: experimentalmente, o ozônio tem duas ligações idênticas, ao passo que a estrutura de Lewis requer uma simples (mais longa) e uma ligação dupla (mais curta).



# Desenhando as estruturas de Lewis

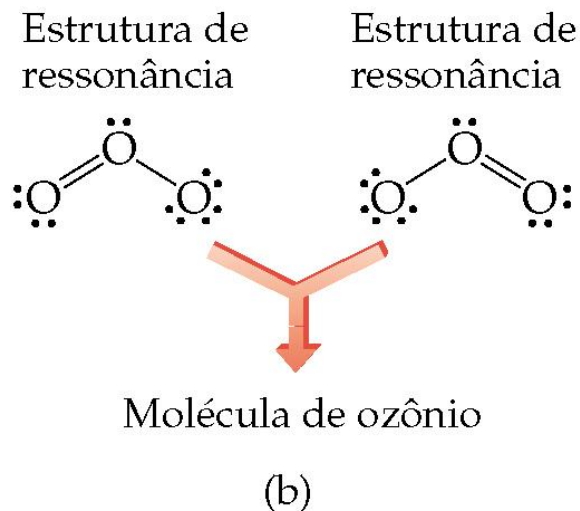
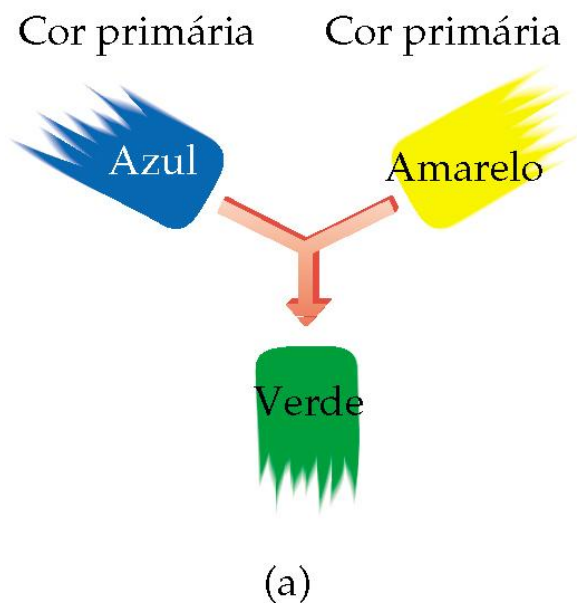
Estruturas de ressonância



# Desenhando as estruturas de Lewis

## Estruturas de ressonância

- As estruturas de ressonância são tentativas de representar uma estrutura real, que é uma mistura entre várias possibilidades extremas.

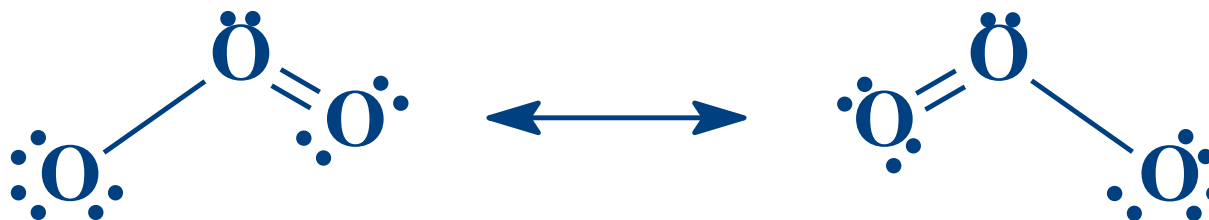




# Desenhando as estruturas de Lewis

## Estruturas de ressonância

- Exemplo: no ozônio, as possibilidades extremas têm uma ligação dupla e uma simples. A estrutura de ressonância tem duas ligações idênticas de caráter intermediário.



- Exemplos comuns:  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_2$  e benzeno.

# Desenhando as estruturas de Lewis

## Carga formal

- Para calcular a carga formal:

$$CF = V - (L + \frac{1}{2}S)$$

- $V$  = nº de elétrons de valência do átomo livre
- $L$  = nº de elétrons presentes como pares isolados
- $S$  = nº de elétrons compartilhados

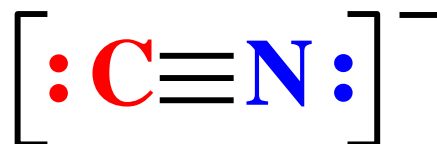
# Carga Formal – Outra Possibilidade

- 1º Um átomo possui um elétron de cada par de ligação preso a ele.
- 2º Um átomo possui seus pares de elétrons isolados completamente
- 3º Conte o número de elétrons atribuídos a um átomo dessa forma (área), e subtraia do número de elétrons de valência no átomo livre.

# Desenhando as estruturas de Lewis

## Carga formal

- Considere:

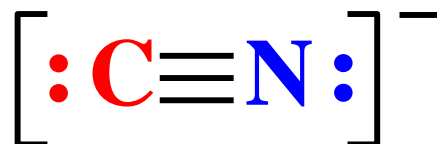


- Para o C:
  - Existem 4 elétrons de valência (pela tabela periódica).
  - Na estrutura de Lewis, existem 2 elétrons não-ligantes e 3 da ligação tripla. Há 5 elétrons pela estrutura de Lewis.
  - Carga formal:  $4 - 5 = -1$ .

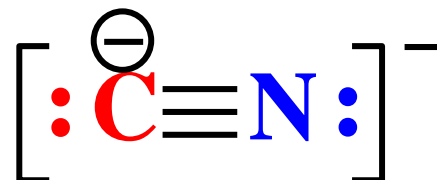
# Desenhando as estruturas de Lewis

## Carga formal

- Considere:



- Para o N:
  - Existem 5 elétrons de valência.
  - Na estrutura de Lewis, existem 2 elétrons não-ligantes e 3 da ligação tripla. Há 5 elétrons pela estrutura de Lewis.
  - Carga formal = 5 - 5 = 0.
- Escrevemos:



# Desenhando as estruturas de Lewis

- A estrutura mais estável tem:
  - a carga formal mais baixa em cada átomo,
  - a carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.

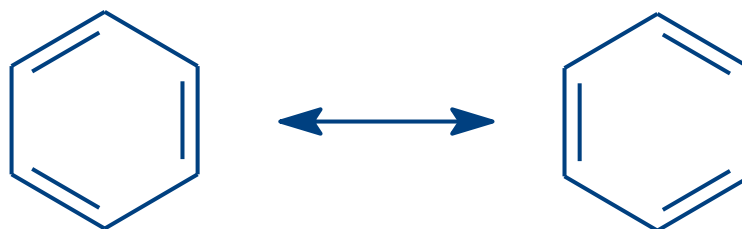
## Estruturas de ressonância

- Normalmente, as estruturas com ligações múltiplas podem ter estruturas similares às ligações múltiplas entre diferentes pares de átomos.
- “A carga formal dá uma indicação da extensão da perda ou ganho de elétrons por um átomo no processo da formação da ligação covalente; estruturas com as menores cargas formais são as mais prováveis de terem as menores energias”.

# Desenhando as estruturas de Lewis

## Ressonância no benzeno

- O benzeno consiste de seis átomos de carbono em um anel hexagonal. Cada átomo de C está ligado a dois outros átomos de C e um átomo de hidrogênio.
- Existem ligações simples e duplas alternadas entre os átomos de C.



- A estrutura experimental do benzeno mostra que todas as ligações C-C têm o mesmo comprimento.
- Da mesma forma, sua estrutura mostra que o benzeno é plano.

# Desenhando as estruturas de Lewis

## Ressonância no benzeno

- Escrevemos as estruturas de ressonância para o benzeno de tal forma que haja ligações simples entre cada par de átomos de C e os seis elétrons adicionais estejam deslocalizados por todo o anel:



- O benzeno pertence a uma categoria de moléculas orgânicas chamada de compostos aromáticos (devido ao seu cheiro).



# Exceções à regra do octeto

- Existem três classes de exceções à regra do octeto:
  - moléculas com número ímpar de elétrons;
  - moléculas nas quais um átomo tem menos de um octeto, ou seja, moléculas deficientes em elétrons;
  - moléculas nas quais um átomo tem mais do que um octeto, ou seja, moléculas com expansão de octeto.

## Número ímpar de elétrons

- Poucos exemplos. Geralmente, moléculas como  $\text{ClO}_2$ ,  $\text{NO}$  e  $\text{NO}_2$  têm um número ímpar de elétrons.



# Exceções à regra do octeto

## Deficiência em elétrons

- Relativamente raro.
- As moléculas com menos de um octeto são típicas para compostos dos Grupos 1A, 2A, e 3A.
- O exemplo mais típico é o  $\text{BF}_3$ .
- As estruturas de Lewis nas quais existe uma ligação dupla B—F são menos importantes que aquela na qual existe deficiência de elétrons.

# Exceções à regra do octeto

- $F - B - F \Rightarrow$  o Boro tem seu octeto incompleto
- $F$  Camada de valência com  $6e^-$
- $\Rightarrow$  Híbrido de ressonância entre 2 tipos de estruturas de Lewis  $\Rightarrow$  com ligações simples BF.
- $\Rightarrow$  O B completa seu octeto somente se outro átomo ou íons ceder um par isolado de  $e^-$  ambos  $e^-$ .
- $\Rightarrow$  Esta ligação de par de  $e^- \Rightarrow$  Ligação Covalente Coordenada

# Exceções à regra do octeto

- Ex:  $\text{AlCl}_3 \Rightarrow$  o Cl usa um de seus pares isolados para formar uma ligação covalente coordenada.
- “Compostos de boro e Al podem ter suas estruturas de Lewis não-usuais, nas quais o B e o Al têm seus octetos incompletos ou átomos de halogênios agindo como pontes”.

# Complexos ácidos e bases de Lewis

Formação de ligações covalentes coordenadas

- $\Rightarrow$  espécies que fornecem o par de  $e^- \Rightarrow$  bases de Lewis
- $\Rightarrow$  espécies que aceitam o par de  $e^- \Rightarrow$  ácidos de Lewis

# Complexos ácidos e bases de Lewis

- Ácido + : base  $\rightarrow$  complexo
- No exemplo anterior:  $\text{BF}_3$  é um ácido e  $\text{F}^-$  é a base de Lewis e  $\text{BF}_4^-$  é o complexo ácido –base de Lewis.
- “Um ácido de Lewis é um receptor de par de elétrons; uma base de Lewis é um doador de par de elétrons; eles reagem para formar um complexo ácido-base pela formação de uma ligação covalente coordenada”.

# Exceções à regra do octeto

## Expansão do octeto

- Esta é a maior classe de exceções.
- Os átomos do 3º período em diante podem acomodar mais de um octeto.
- Além do terceiro período, os orbitais *d* são baixos o suficiente em energia para participarem de ligações e receberem a densidade eletrônica extra.

# Forças das ligações covalentes

## Entalpia de ligação e comprimento de ligação

- Sabemos que as ligações múltiplas são mais curtas do que as ligações simples.
- Podemos mostrar que as ligações múltiplas são mais fortes do que as ligações simples.
- Quando o número de ligações entre os átomos aumenta, os átomos são mantidos mais próximos e mais firmemente unidos.