

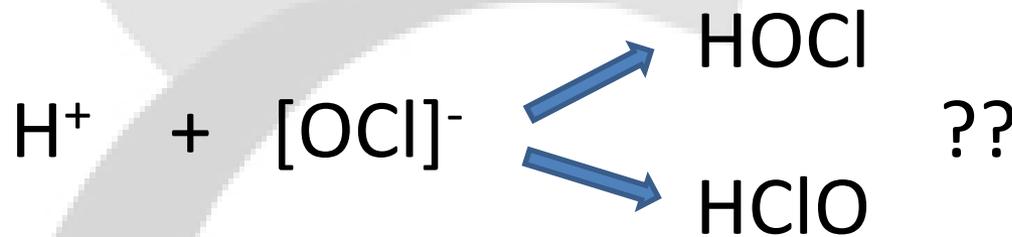
MOLÉCULAS POLARES



MOLÉCULAS POLARES

A distribuição da densidade eletrônica (ou cargas !) em uma molécula é responsável pela reatividade da mesma.

Exemplo:



Espera-se que o íon H^+ se ligue ao átomo mais negativamente carregado !!

Como obter a distribuição de cargas na molécula ?

MOLÉCULAS POLARES

Primeira aproximação:

Através do cálculo da carga formal (*CF*):

Átomo
isolado

Após a formação
da ligação

Carga residual que
permanece sobre o átomo
após a ligação ser
formada.

$$CF = EV - (1/2 EL + ENL)$$

Número de
elétrons de
valência

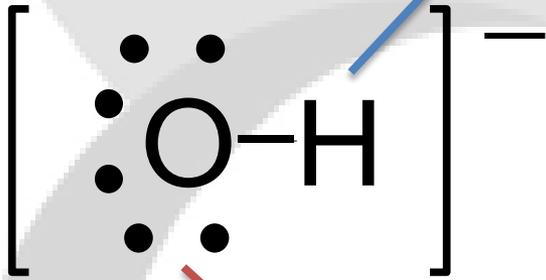
Número de
elétrons
envolvidos nas
ligações

Número de
elétrons não
ligados

MOLÉCULAS POLARES

Exemplo:

$$CF = 1 - [\frac{1}{2}(2) + 0] = 0$$

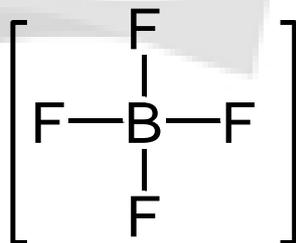
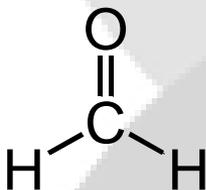
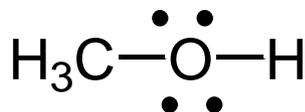
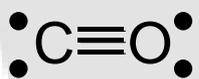


A soma das cargas formais nos átomos em uma molécula ou íon é sempre igual à sua carga líquida total !!

$$CF = 6 - [\frac{1}{2}(2) + 6] = -1$$

MOLÉCULAS POLARES

Problemas com a carga formal:



A distribuição das cargas nestas moléculas é inconsistente com a reatividade das mesmas !!!

Este termo implica que a densidade eletrônica é dividida igualmente entre os átomos, independente da natureza dos mesmos !!

A origem do problema:

$$CF = EV - (1/2 EL + ENL)$$

Precisamos de outro conceito para avaliarmos a distribuição da densidade eletrônica !!!

POLARIDADE DA LIGAÇÃO E ELETRONEGATIVIDADE

Quando dois átomos diferentes formam uma ligação covalente, o par de elétrons será compartilhado de forma desigual, dando origem a uma ligação covalente polar !!



$\delta+$ $\delta-$

A ——— B



μ

$\delta+$ e $\delta-$
designam
cargas parciais

dipolo da ligação.

Quanto maior a diferença de eletronegatividade entre os dois átomos participantes da ligação, maior será a polaridade da mesma !!!

A seta aponta para a direção de crescimento da densidade eletrônica

POLARIDADE DA LIGAÇÃO E ELETRONEGATIVIDADE

A eletronegatividade é uma medida da tendência que um elemento possui de, **estando em um ambiente molecular**, atrair a densidade eletrônica para regiões mais próxima dele.

Desta forma, para sabermos a direção do dipolo gerado ao longo da ligação, e por conseguinte, a direção da polarização da densidade eletrônica, basta avaliarmos a diferença de eletronegatividade entre os átomos participantes da ligação.



$$\chi_{(\text{H})} = 2,1$$

$$\chi_{(\text{F})} = 4,0$$



$$\chi_{(\text{C})} = 2,5$$

$$\chi_{(\text{O})} = 3,5$$

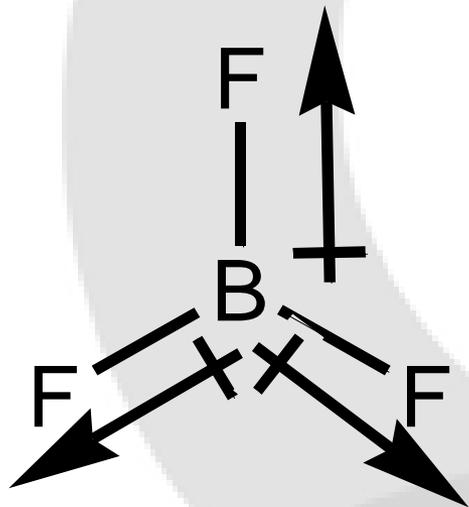
MOLÉCULAS POLARES

O dipolo molecular é uma grandeza vetorial, desta forma, depende da orientação e sentido. O dipolo molecular total é dado como uma soma dos dipolos individuais das ligações:

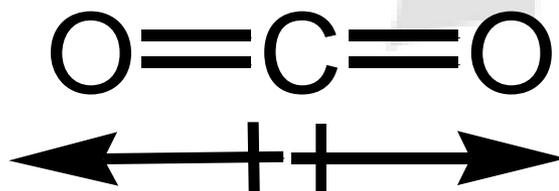
$$\mu_{total} = \sum_{i=1}^{Ligações} \mu_i \quad \text{Se} \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mu_{total} = 0 & \text{Apolar} \\ \mu_{total} \neq 0 & \text{Polar} \end{array} \right.$$

Desta forma, o dipolo molecular total irá depender da magnitude e orientação dos dipolos individuais das ligações e portanto, **DEPENDE DA GEOMETRIA MOLECULAR !!**

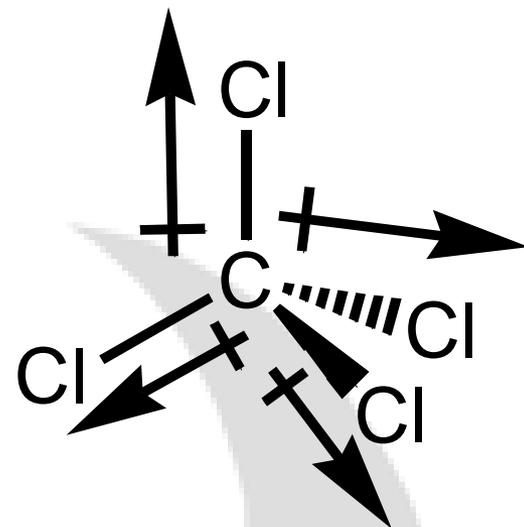
MOLÉCULAS POLARES



Trigonal Plana



Linear

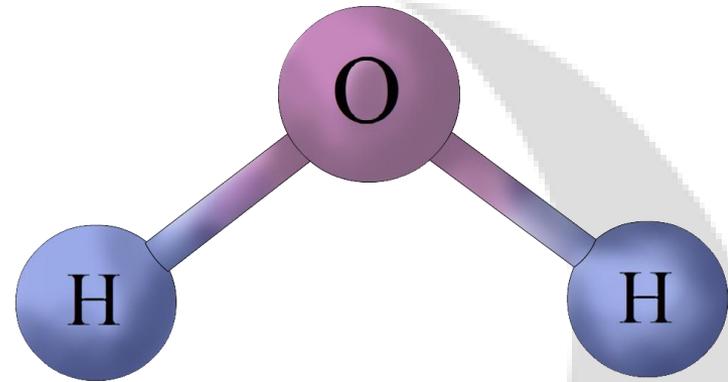
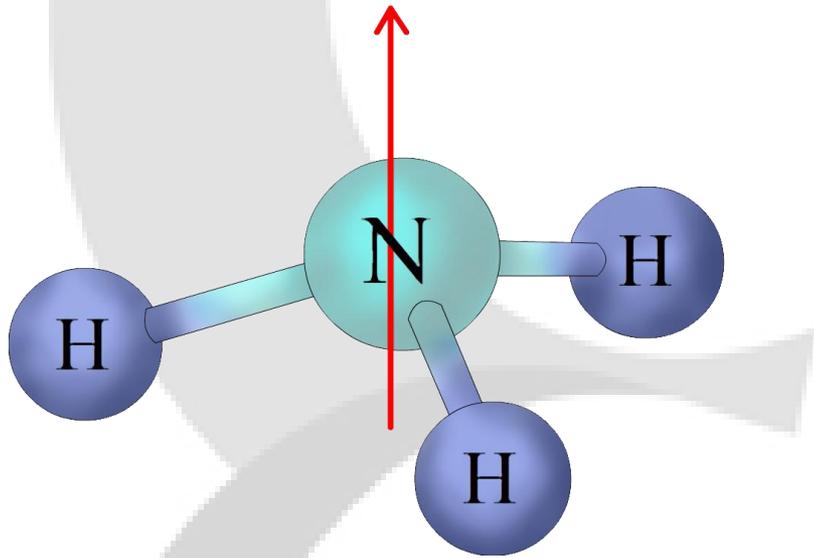


Tetraédrica

A soma dos dipolos individuais das ligações é igual a zero !! (A soma dos vetores é nula !!)

Repare que apesar das moléculas acima possuírem **ligações polares**, as **moléculas são apolares** !!

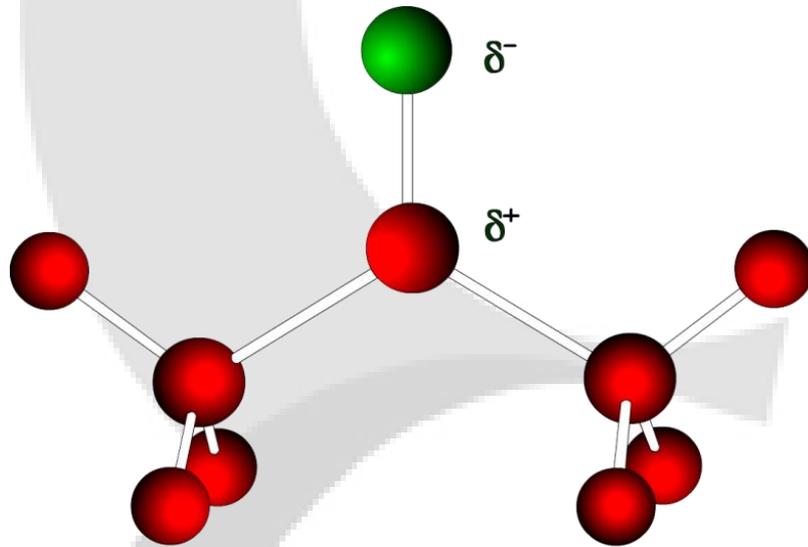
MOLÉCULAS POLARES



As moléculas Polares possui um dipolo resultante diferente de Zero ! (A soma dos vetores não é nula !!)

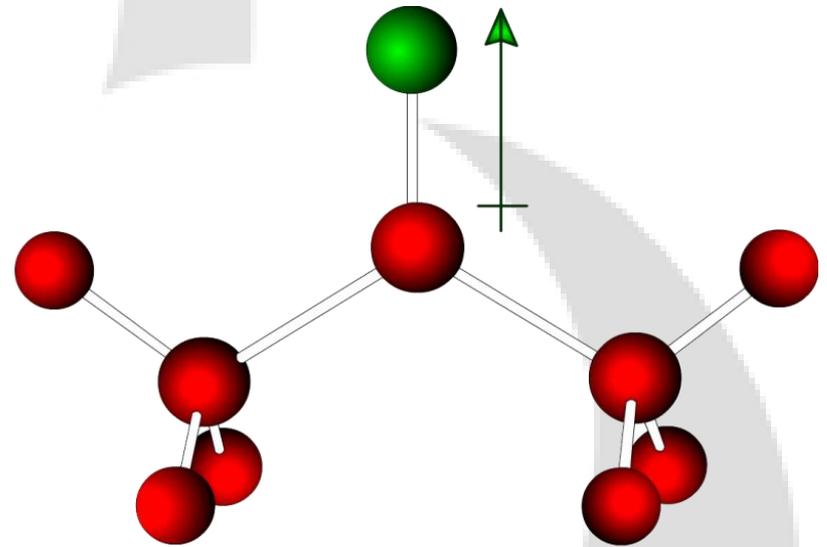
Moléculas polares possuem o que chamamos de um dipolo permanente !!

MOLÉCULAS POLARES



(A)

Distribuição de Cargas



(B)

Orientação do Vetor Momento de dipolo resultante

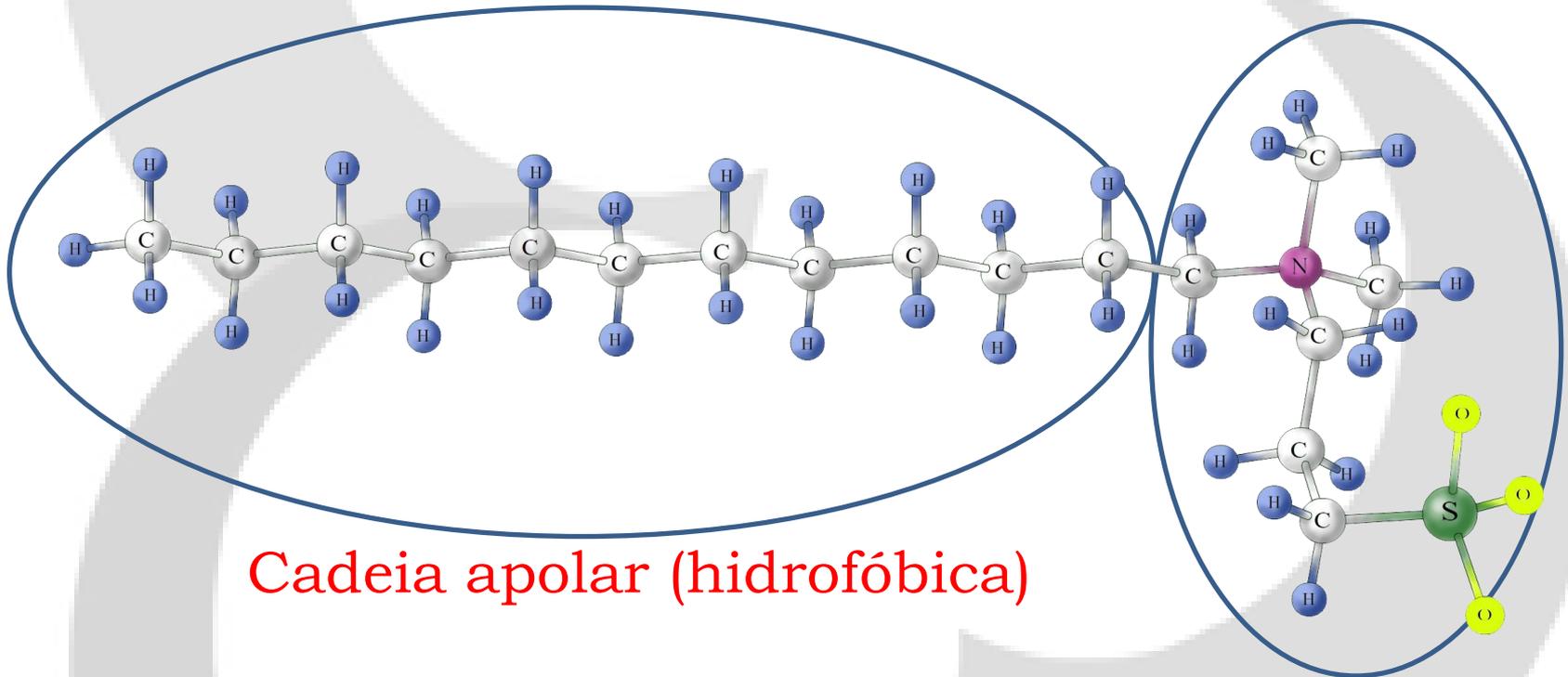
MOMENTOS DE DIPOLO - μ

Molécula (AB)	μ	Geometria
HF	1,78	linear
HCl	1,07	linear
HBr	0,79	linear
HI	0,38	linear
H ₂	0	linear
CO	0,11	linear
Molécula (AB₂)	μ	Geometria
H ₂ O	1,85	angular
H ₂ S	0,95	angular
CO ₂	0	linear
Molécula (AB₃)	μ	Geometria
NH ₃	1,47	piramide trigonal
BF ₃	0	trigonal plana
Molécula (AB₄)	μ	Geometria
CH ₄	0	tetraédrica
CH ₃ Cl	1,92	tetraédrica
CH ₂ Cl ₂	1,60	tetraédrica
CHCl ₃	1,04	tetraédrica
CCl ₄	0	tetraédrica

MOLÉCULAS POLARES

Podemos ter em uma molécula regiões polares e regiões apolares:

Exemplo: *n*-dodecil-*n,n*-dimetilamônio-1-propano sulfonato



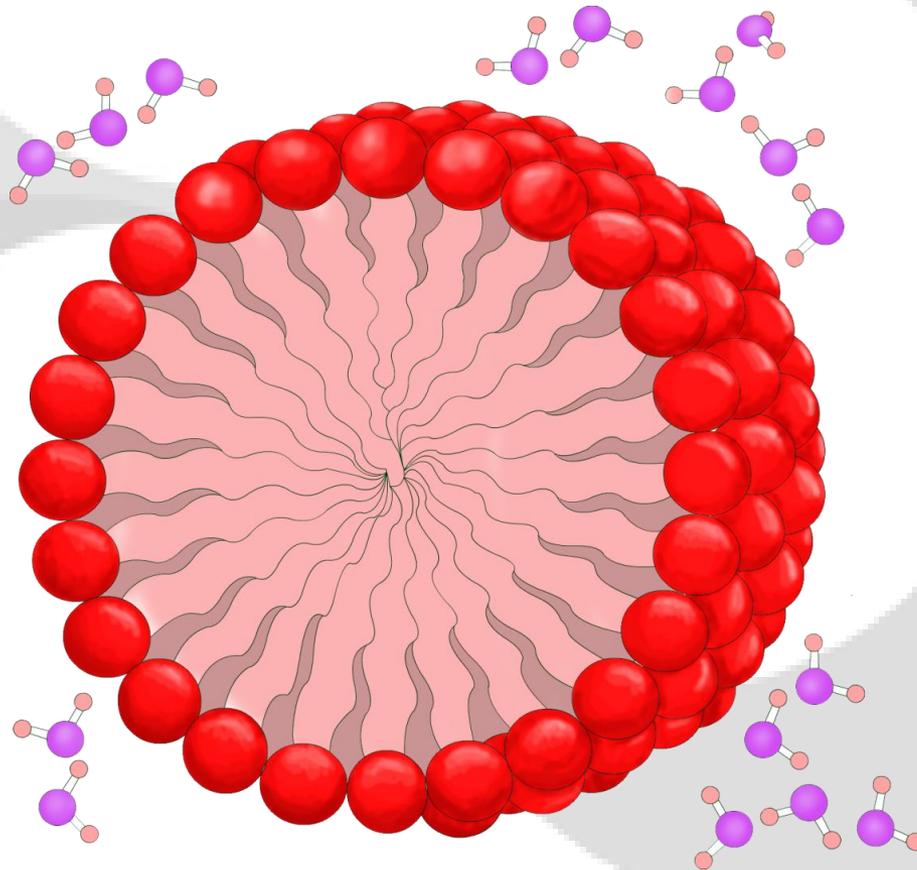
Cadeia apolar (hidrofóbica)

Surfactante !!

Cabeça polar
(hidrofílica)

MOLÉCULAS POLARES

Quando os surfactantes são colocados em água, a parte hidrofílica se “expoem” ao solvente, formando uma micela:



MOLÉCULAS POLARES

Encontramos vários destes exemplos em sistemas biológicos

