



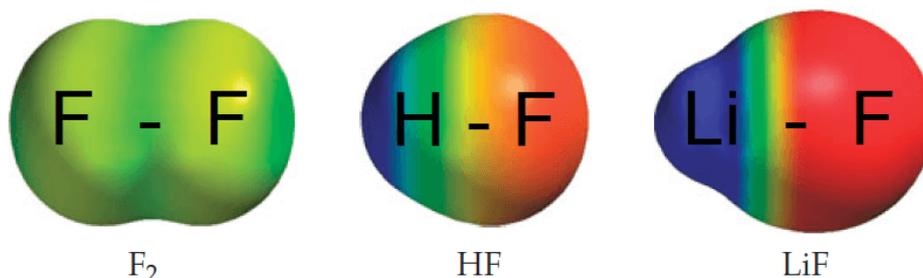
Polaridade de ligações e de moléculas

Ayumi Matsumoto



1 Introdução

Polaridade de ligações e de moléculas é uma característica importante para a determinação de diversas propriedades físicas das substâncias. A polaridade é a distribuição de carga elétrica entre átomos conectados por ligação covalente. Os elétrons envolvidos nesse compartilhamento podem sofrer influência da eletronegatividade do elemento ao qual estão ligados, criando cargas parciais em cada átomo.



2 Conceitos básicos

2.1 Eletronegatividade

Eletronegatividade é uma propriedade química que simboliza o poder de um átomo em uma molécula de atrair um par de elétrons compartilhados. O principal fator que a influencia é a carga nuclear efetiva, já que quanto maior a efetividade da carga do núcleo é, mais ele consegue "puxar" os elétrons. Para quantificá-la, o cientista Linus Pauling criou uma escala, representada na tabela periódica a seguir:

																		Maior eletronegatividade					
																		↑					
IA																	VIIA	He					
1	H																	Ne					
2	Li	Be															B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg	III B	IV B	V B	VII B	VIII B	VIII B						IB	II B	Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr					
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe					
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn					
7	Fr	Rd	Ac																				
																		Menor eletronegatividade					

2.2 Geometria molecular

Já sabemos que os elétrons têm cargas negativas e esses se repelem em uma molécula, sejam eles ligantes ou não. Dessa forma, os pares tentam se afastar o máximo possível ao redor do átomo central a fim de obter repulsão mínima e maior estabilidade. Assim, sua estrutura é definida pelo número de nuvens eletrônicas (pares não ligantes, ligações simples, duplas ou triplas) ao redor do átomo central, como nos exemplos a seguir:

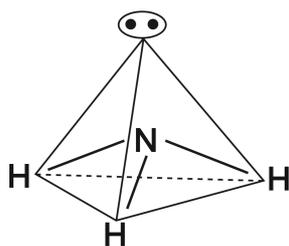


Figura 1: NH_3 é uma molécula de geometria piramidal trigonal

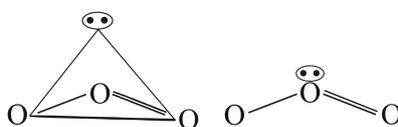
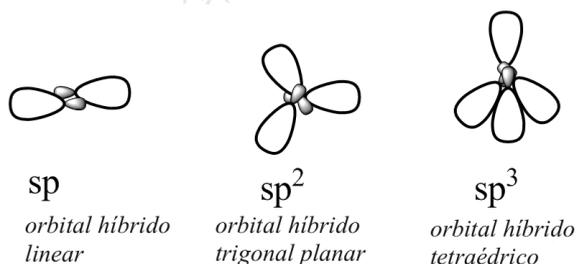


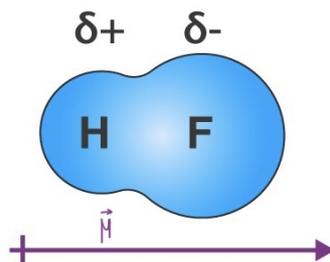
Figura 2: O_3 é uma molécula de geometria angular

Outra forma de explicar a geometria molecular é através dos orbitais híbridos. A equação do físico Schrödinger, conhecida como Ψ , contém informações sobre as funções de onda de cada orbital do átomo isolado e, ao se ligarem a outro em uma molécula, as funções de onda de cada um se combinam e formam novas expressões matemáticas, que apresentam formas, orientações e níveis de energia novos. Esse processo é conhecido com hibridização e seus resultados são os orbitais híbridos, que vão determinar a geometria da molécula. Veja alguns exemplos:



3 Polaridade das ligações

Como mencionado anteriormente, a polaridade de uma ligação sofre influência da eletronegatividade dos átomos nela. Observe a esquematização a seguir:



Na representação acima, tem-se uma ligação H-F, sendo o flúor mais eletronegativo do que o hidrogênio. Assim, os elétrons são mais atraídos por ele, criando uma carga parcial negativa, representada pela letra δ . Essa leve negatividade gera um dipolo elétrico, medido pelo vetor momento dipolar (μ) que aponta para o mais eletronegativo, na direção do eixo da ligação.

Analogamente, toda ligação na qual há diferença de eletronegatividade vai ser polar. A seguir temos alguns exemplos de ligações polares e apolares:

Polares: H-Cl ; C-O ; N-H

Apolares: H-H; C-C; O-O

4 Polaridade nas moléculas

Agora, parece intuitivo pensar que toda molécula com ligações polares será polar também, mas isso nem sempre é verdade. Isso se dá porque a polaridade em substâncias é definida pelo momento dipolar resultante, isso é, a soma vetorial de todos os momentos dipolares das ligações e de pares eletrônicos livres, a qual será dependente da geometria molecular. Veja os exemplos a seguir:



Figura 3: Apesar de ser constituída de ligações polares, percebe-se que os vetores "se cancelam", se tornando apolar ($\mu_{res}=0$)

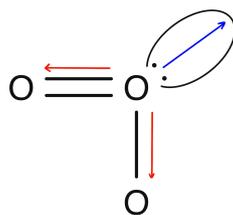


Figura 4: Os vetores não se cancelam, apesar de serem ligações apolares, pois a molécula não é linear e há um vetor do par eletrônico livre ($\mu_{res} \neq 0$)

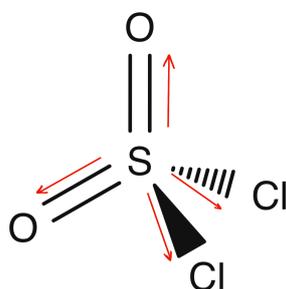


Figura 5: Os vetores se cancelam devido a soma vetorial da "base", que não é plana ($\mu_{res}=0$)

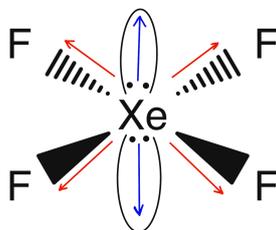


Figura 6: Apesar dos pares eletrônicos livres no átomo central, percebe-se que todos os vetores se cancelam ($\mu_{res}=0$)

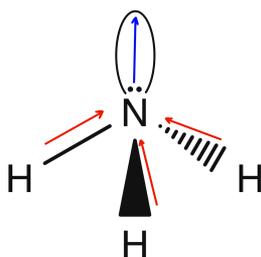


Figura 7: Percebe-se que os vetores não se cancelam ($\mu_{res} \neq 0$)

**DICA:**

Quando o átomo central não tiver pares eletrônicos livres e fizer ligações com outros átomos iguais entre si, a molécula vai ser apolar (IF_7 , CH_4 , PCl_5 , etc.).

5 Polaridade e propriedades das substâncias

Como já foi comentado, a polaridade das substâncias influencia em suas propriedades e uma delas é a miscibilidade, ou seja, a sua capacidade de dissolução, de forma que substâncias polares se dissolvem bem em outras substâncias polares e vice-versa. Um exemplo é o tiner, sendo principalmente tolueno, composto apolar, comumente usado para limpar graxa e óleos em oficinas (também apolares) e a clássica mistura de água, polar, e óleo, apolar, que não se misturam.



6 Considerações finais

Nos tópicos desse capítulo, aprendemos o que é e a identificar polaridade nas moléculas e ligações e revisamos conceitos básicos como a eletronegatividade e geometria molecular (importantíssimos para entender bem nosso assunto!). Essa matéria se relacionará com diversos conteúdos futuros, como forças intermoleculares, noções de estabilidade de moléculas e até mesmo reações químicas.