



Estruturas de Lewis

Luiza Lanza L. Temponi





1 Ligação Covalente

Porque átomos se ligam, formando moléculas? A teoria da ligação covalente tenta explicar esse fenômeno, que pode ser observado em determinadas espécies periódicas.

Definimos, de maneira clássica, como *ligação covalente* o compartilhamento do pares eletrônicos entre átomos da mesma espécie ou de espécies diferentes. Como em todo fenômeno que ocorre de maneira espontânea, a ligação covalente é formada para diminuir a energia potencial armazenada no sistema, devido as forças de atração (próton-elétron) e repulsão eletrostática (próton-próton).

$$-e^2 = \frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b}$$

1.1 Estabilidade atômica

1.1.1 Regra do octeto

Segundo a teoria do octeto, os átomos buscam uma configuração semelhante à dos gases nobres para se manterem estáveis. Isso porque os gases nobres quase sempre são encontrados na natureza em sua forma monoatômico (espécies com baixíssimas interações), o que leva a conclusão de que estas espécies são estáveis em sua configuração eletrônica fundamental.

Como a maioria dos gases nobres, com exceção do Hélio, apresentam oito elétrons na camada de valência, formulou-se a teoria do octeto, que diz:

Os átomos buscam a estabilidade, compartilhando pares eletrônicos, ganhando ou perdendo elétrons afim de obterem 8 elétrons na camada de valência, o que permite uma configuração semelhante à dos gases nobres e maior estado de estabilidade.

Esse fato se verifica experimentalmente para a maioria das moléculas: o carbono, que possui 4 elétrons de valência, realiza 4 ligações covalentes, ficando com 8 elétrons de valência. Na molécula de N_2 , os átomos de nitrogênio que tem 5 e^- de valência cada, compartilham 3 pares de elétrons e ficam com 8 e^- cada.

Porém, nem todos os elementos seguem essa configuração: o Hidrogênio segue a configuração do Hélio, e fica estável com dois e^- de valência. Além disso, alguns átomos realizam apenas 3 ligações e outros realizam até 6 ligações (12 e^- de valência) para se manterem estáveis, a chamada expansão do octeto.

1.1.2 Exceções à regra do octeto

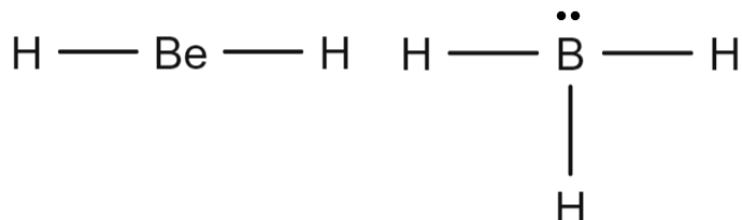
Contração do octeto:

O primeiro caso e mais comum é do hidrogênio, como anteriormente citado, se estabiliza com apenas uma ligação covalente, sendo impossível encontrá-lo realizando duas ou mais ligações por ser um átomo monoprótico.



O Berílio (*Be*) se estabiliza com 4 elétrons na camada de valência, ou seja, realiza comumente apenas 2 ligações covalente. Já o Boro *B* se estabiliza com 6 elétrons na camada de valência, ou seja, 3 ligações covalentes.

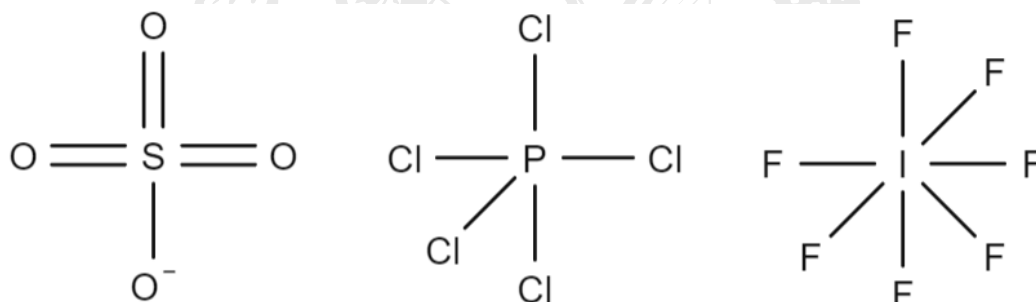
Ex.: BeF_2 e BCl_3



Expansão do octeto:

Elementos do 3º período em diante podem sofrer a chamada expansão do octeto, suportando mais de 8 elétrons na camada de valência e realizando mais ligações covalentes que o previsto para a família. Apesar de todos os átomos a partir do 3º período poderem sofrer expansão do octeto, isso é mais comumente observado nas famílias VIA, VIIA e VIIIA, principalmente com os elementos Fósforo (*P*), Enxofre (*S*), Iodo (*I*) e Xenônio (*Xe*).

Ex.: SO_4^{2-} , PCl_5 e IF_7 .



1.2 Classificação da ligação covalente

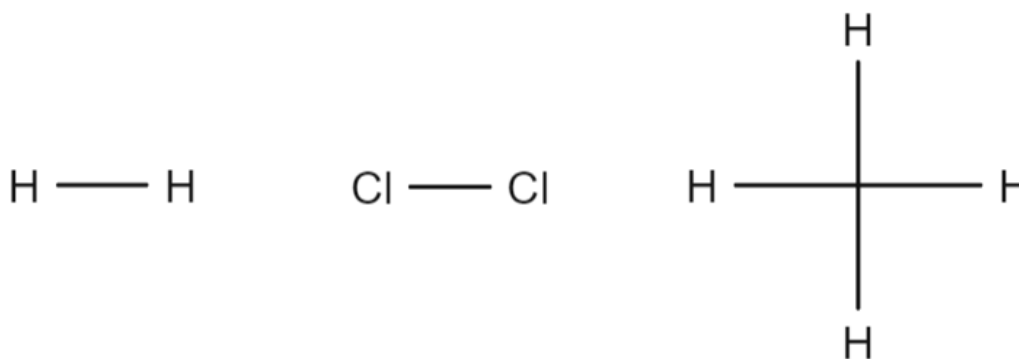
1.2.1 Quanto à ordem da ligação

As ligações podem ser classificadas como simples, duplas ou triplas de acordo com o número de pares eletrônicos compartilhados. Ainda existem substâncias formadas por ligações quádruplas, mas esse caso é bem menos comum e só ocorre sob condições de temperatura e pressão bem específicas, pois é menos estável.

Ligação simples: os átomos compartilham um par de elétrons, representado por um traço na estrutura de Lewis. Os átomos realizam uma ligação σ , caracterizada pela aproximação frontal dos átomos.

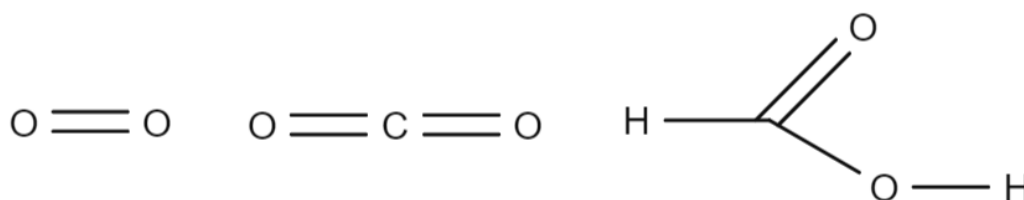
Obs.: Daqui em diante os carbonos serão omitidos, pela representação da química orgânica.

Ex.: H_2 , Cl_2 e CH_4 .



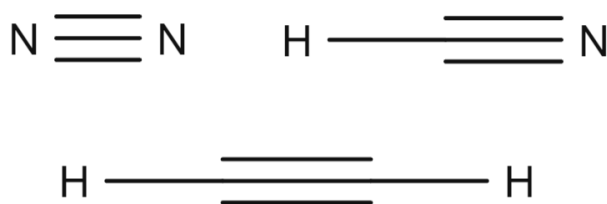
Ligação dupla: os átomos compartilham dois pares de elétrons, representado por dois traços na estrutura de Lewis. Os átomos realizam uma ligação σ , caracterizada pela aproximação frontal dos átomos, e uma π , caracterizada pela aproximação lateral dos átomos.

Ex.: O_2 , CO_2 , e CO em CH_2O_2 .



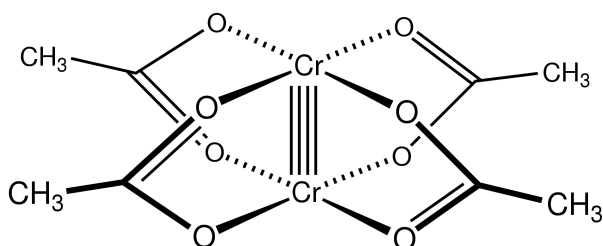
Ligação tripla: os átomos compartilham três pares de elétrons, representado por três traços na estrutura de Lewis. Os átomos realizam uma ligação σ , caracterizada pela aproximação frontal dos átomos, e duas π , caracterizada pela aproximação lateral dos átomos.

Ex.: N_2 , CN em HCN e CC em C_2H_2 .



Ligação quádrupla: os átomos compartilham quatro pares de elétrons, representado por quatro traços na estrutura de Lewis. Os átomos realizam uma ligação σ , caracterizada pela aproximação frontal dos átomos, e três π , caracterizada pela aproximação lateral dos átomos.

Ex.: CrCr em $\text{C}_4\text{H}_{12}\text{O}_8\text{Cr}_2$





1.2.2 Quanto à origem do par eletrônico

As ligações podem ser classificadas em normal ou coordenadas (também chamada anteriormente de dativa, mas este nome caiu em desuso) quanto à origem do par eletrônico da ligação covalente. É importante ressaltar que independente da origem do par a ligação em nada se difere por ser simples ou coordenada, pois o compartilhamento de e^- depende somente das características como eletronegatividade e raio atômico dos átomos. Por isso, é opcional representar a origem do par eletrônico nas estruturas de Lewis.

Ligação covalente normal: cada átomo contribui com um elétron para o par eletrônico compartilhado, que caracteriza a ligação covalente.

Ex.: NH_3 , H_2O e HCl .

Ligação covalente coordenada: o par eletrônico da ligação covalente tem origem apenas de um dos átomos da ligação. O outro átomo não contribui com elétrons para a ligação.

Ex.: O_3 , SO_3 , NH_4^+ .

1.3 Domínios eletrônicos e domínios ligantes

Este conceito será importante principalmente para compreender a hibridização dos orbitais atômicos. Domínios eletrônicos é a soma da quantidade de pares de elétrons desemparelhados e locais de ligações covalentes. Dizemos local e não ligação covalente pois uma ligação covalente com o mesmo átomo - seja ela simples, dupla ou tripla - representa apenas um domínio eletrônico.

Domínio ligante: corresponde à uma região de ligação(es) covalente(s) entre dois átomos.

Domínio não ligante: corresponde à um par eletrônico desemparelhado.

1.3.1 Hibridização de acordo com o número de domínios eletrônicos:

A hibridização de um átomo pode ser deduzida à partir do número de domínios eletrônicos que este possui (tópico a ser aprofundado em outro artigo):

1 domínio eletrônico: s ;

2 domínios eletrônicos: sp ;

3 domínios eletrônicos: sp^2 ;

4 domínios eletrônicos: sp^3 ;

5 domínios eletrônicos: sp^3d .

Casos raros:

6 domínios eletrônicos: sp^3d^2 ;

7 domínios eletrônicos: sp^3d^3 .

2 Representação das estruturas de Lewis

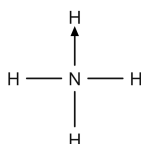
Nas estruturas de Lewis, representamos cada par eletrônico compartilhado por dois átomos por duas bolinhas entre os dois átomos, que podem ser substituídas por um único tracinho, que representa



a ligação covalente. Os pares eletrônicos não ligantes devem ser representados em volta do átomo ao qual pertencem.

No caso da ligação covalente coordenada, também é possível substituir o tracinho por uma setinha, partindo do átomo de origem do par eletrônico da ligação. Além disso, as estruturas de Lewis não se preocupam com a disposição espacial dos átomos, sendo uma representação 2D.

Exemplo:



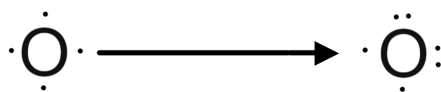
Montando as estruturas de Lewis: Tendo em vista as explicações anteriores sobre ligações covalentes, para montar a estrutura de Lewis dada a fórmula estrutural do composto, seguimos os seguintes passos:

1º) Identificar qual átomo precisa realizar mais ligações covalentes para se manter estável. Este será o átomo central. Se houver dois ou mais átomos com esta característica, eles devem estar ligados entre si.

2º) Os átomos da camada de valência dos átomos devem ser representados, a começar pelo átomo central.

IMPORTANTE! Os elétrons podem ser representados em até, no máximo, 4 domínios eletrônicos. É obrigatório representar todos os elétrons desemparelhados se o número de elétrons de valência for menos ou igual a 4. Para átomos com mais de 4 elétrons de valência, só é permitido completar os pares eletrônicos após desenhar os 4 primeiros elétrons desemparelhados.

Ex.: Representação do Oxigênio (VIA): inicialmente, representamos 4 domínios de elétrons desemparelhados. Porém, faltam 2 elétrons de valência. Então emparelhamos dois domínios eletrônicos, ficando com dois elétrons emparelhados e dois desemparelhados ao redor do O.



3º) Ligar ao átomo central outros átomos até completar sua camada de valência, seguindo a regra do octeto, salvo exceções.

4º) Os Hidrogênios sempre vão nas pontas da cadeia, sendo o último átomo que deve ser representado. Isso porque, ao ligar um Hidrogênio a outro átomo, não é possível que nenhum outro átomo esteja realizando uma segunda ligação covalente com o Hidrogênio.

5º) Representar os pares ou elétrons não ligantes em volta dos átomos por bolinhas.

Ex.: representar a estrutura de Lewis para o NH_3 .

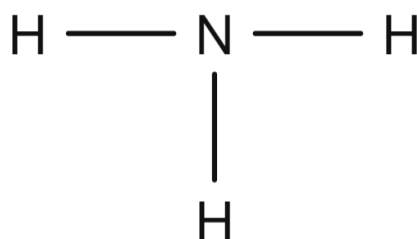
1º) O Nitrogênio precisa realizar 3 ligações para completar a sua camada de valência, enquanto o Hidrogênio só precisa realizar uma ligação. Logo, o Nitrogênio é o átomo central.



2°)

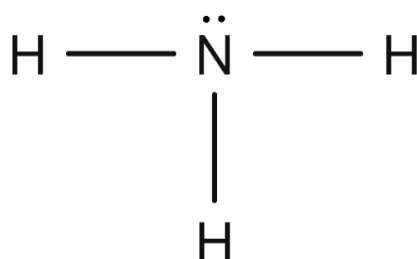


3°) Ligando o Nitrogênio à 3 Hidrogênios, todos os átomos possuem a camada de valência preenchida. Substituiremos os pares de elétrons compartilhados por traços (opcional).

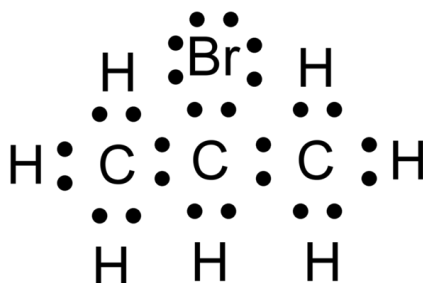


4°) OK.

5°) Como o Nitrogênio possui 5 e^- de valência e apenas 3 são ligantes, falta representar o par eletrônico não ligante.



Exemplo 2.: representar a estrutura de Lewis para o C_3H_7Br .
Gabarito:



Observação: É de conhecimento geral que nem todas as estruturas seguem esse formato tradicional, e algumas vezes torna-se extremamente difícil encontrar a fórmula de Lewis para substâncias que fogem à regra do octeto. Além disso, algumas vezes é impossível determinar a estrutura correta da substância a partir somente da sua fórmula estrutural, como no caso dos isômeros. Por isso, esse



modelo como todo outro científico possui suas limitações, mas é uma boa ferramenta para determinadas análises. Por fim, não se preocupe com as exceções: as estruturas de Lewis são cobradas em prova tendo em vista os casos mais gerais e as limitações do modelo. Seguindo esses cinco passos, você conseguirá resolver quase todas as questões.

