Resumo – Estrutura de Lewis

Estrutura de Lewis e estabilidade

Podemos avaliar a estabilidade de uma molécula usando a **Teoria do Octeto**. Os gases nobres são os únicos elementos encontrados na natureza na forma monoatômica, ou seja, não se ligam a outros átomos, mostrando que o átomo é individualmente estável. A configuração eletrônica da camada mais externa (camada de valência) para um gás nobre (Família 8A) apresenta oito elétrons, com exceção do hélio. A estabilidade de um átomo pode ser correlacionada a sua configuração eletrônica, frequentemente os átomos se combinam com o objetivo de conseguir uma estrutura eletrônica semelhante a um gás nobre, isto é, 8 elétrons na camada de valência. Há uma exceção para átomos menores em número de elétrons, nesses casos há uma tendência em se alcançar um dueto, dois elétrons na camada de valência (ex. hidrogênio (H) e lítio (Li)).

Desenhando estruturas de Lewis

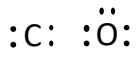
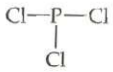
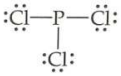
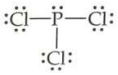
Usamos as **estruturas de Lewis** para representar uma substância ou composto, mostrando a conectividade entre os átomos dos elementos que compõe a molécula. Podemos desenhar uma proposta de estrutura para uma molécula de dois modos pelo menos:

Modo 1	Modo 2
1. Encontre a família de cada átomo, identificando os elétrons de valência. 2. Escreva os símbolos para os átomos a fim de mostrar os elétrons de valência de cada átomo. 3. Compartilhe os elétrons aos pares (ligações "normais" ou coordenadas) a fim de completar os octetos de todos os átomos. 4. Se não existem elétrons suficientes para que todos os átomos atinjam um octeto, tente ligações múltiplas.	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. 3. Complete o octeto dos átomos ligados ao átomo central. 4. Coloque os elétrons que sobrarem no átomo central. 5. Se não existem elétrons suficientes para dar ao átomo central um octeto, tente ligações múltiplas.

Obs.: Em geral, o átomo menos eletronegativo ocupa a posição central. Numa molécula catiônica (carga positiva), cada carga positiva corresponde à saída de um elétron, e numa molécula aniônica (carga negativa), cada carga negativa corresponde à entrada de um elétron na contagem.

<table>
<tr><th colspan="2">Exemplo modo 1:</th><th colspan="3">Exemplo modo 2:</th></tr>
<tr><td colspan="2">CO

Passo 1:
Carbono (C) família 4A = 4 elétrons; Oxigênio (O) família 6A = 7 elétrons</td><td colspan="3">PCl_3

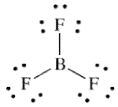
Passo 1:
Fósforo (P) família 5A = 5 elétrons; Cloro (Cl) família 7A = 7 elétrons
TOTAL ELÉTRONS = (1 X 5) + (3 X 7) = 26</td></tr>
<tr><td>Passo 2:
</td><td>Passo 3:
</td><td>Passo 2:
</td><td>Passo 3:
</td><td>Passo 4:
</td></tr>
</table>

Exceções à regra do octeto

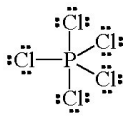
- ✓ **Número ímpar de elétrons:** Moléculas geralmente compostas por dois átomos sendo que um de família par e outro de família impar.

  Ex. ClO_2, NO e NO_2 

- ✓ **Deficiência em elétrons:** Moléculas com menos de um octeto, geralmente 2A e 3A.

  Ex. BeH_2, BH_3, BF_3 

  Expansão do octeto: 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.

  Ex. SO_2, PCl_5, SO_4^{2-} 

Resumo – Estrutura de Lewis

Carga Formal

Uma molécula pode apresentar diferentes estruturas de Lewis que respeitam a regra do octeto, atentando a possíveis exceções como mencionado anteriormente, porém devemos identificar a estrutura mais estável. Para isso usamos a **carga formal**. As Cargas formais dos átomos são atribuídas dividindo cada par de elétrons de ligação igualmente entre os átomos da ligação, como se a ligação fosse puramente covalente (mesma eletronegatividade entre os átomos). O número de elétrons "pertencente" a cada átomo (pares isolados e pares de ligação) é comparado com o átomo neutro (**elétrons de valência**). Lembrando que **pares de ligação** são compartilhados ente os átomos, **pares isolados** são contabilizados a um único átomo, **elétrons de valência** correspondem a família do elemento. O somatório das cargas formais de cada átomo deve ser igual a carga da molécula.

$$Carga\ formal = (EV) - (EI) - ½\ (EL)$$

***EV**: elétrons de valência; **EI**: elétrons isolados; **EL**: elétrons de ligação*

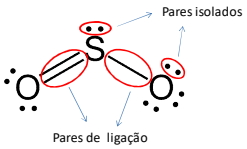
A estrutura mais estável tem:

- *A carga formal mais baixa em cada átomo.*
- *A carga formal mais negativa nos átomos mais eletronegativos.*

Exemplo:

A molécula SO_2 pode apresentar duas estruturas de Lewis possíveis, uma delas considerando expansão do octeto pelo enxofre.

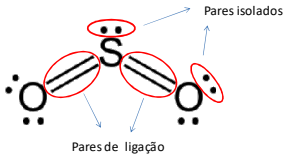
Estrutura (I)



Cargas formais da estrutura (I):

C.F. (*Oxigênio esquerda*) = 6 – 4 – ½ (4) = **0**
C.F. (*Oxigênio direita*) = 6 – 6 – ½ (2) = **-1**
C.F. (*enxofre*) = 6 – 2 – ½ (6) = **+1**

Estrutura (II)



Cargas formais da estrutura (II):

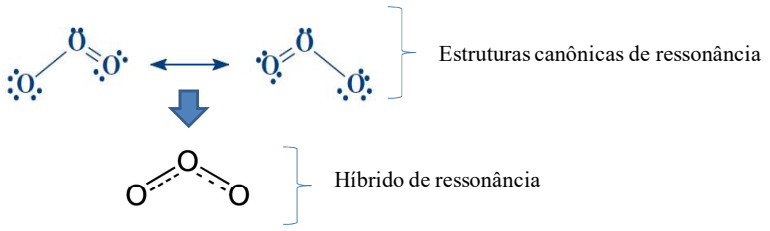
C.F. (*Oxigênio esquerda*) = 6 – 4 – ½ (4) = **0**
C.F. (*Oxigênio direita*) = 6 – 4 – ½ (4) = **0**
C.F. (*enxofre*) = 6 – 2 – ½ (8) = **0**

Baseado nos valores de carga formal a estrutura II é mais estável

Ressonância

Algumas moléculas não são bem representadas pelas estruturas de Lewis. Normalmente, as estruturas com ligações múltiplas podem ter estruturas similares às ligações múltiplas entre diferentes pares de átomos. Quando duas ou mais estruturas de Lewis diferem apenas na distribuição de elétrons, nenhuma estrutura sozinha (estruturas canônicas) é capaz de descrever sua verdadeira distribuição eletrônica. Nesses casos, a estrutura que melhor representa a molécula é chamada de **híbrido 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. Mas, experimentalmente, o ozônio tem duas ligações idênticas.



Referências
Esse resumo baseia-se no material bibliográfico dos seguintes livros:
Kotz, J.C. Treichel, P. Química Geral e Reações Químicas. Cengage Learning. 6ª Ed. 2009.
Brown, T.L.; Lemay, H.E.; Bursten, B.E. Química - A Ciência Central. Prentice Hall. 9ª Ed. 2005.