A. Gil Santos FCT/UNL

Teoria da Ligação Química

Lic. em Química Aplicada
e
M.I. em Eng. Química e Bioquímica

A. Gil Santos FCT/UNL

Aula 9

Estrutura molecular

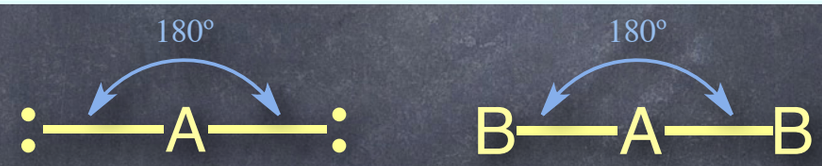
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV.
  - Depois de estabelecermos a melhor estrutura de Lewis para uma determinada molécula, podemos recorrer ao modelo de RPECV para prever a sua estrutura.
  - O modelo de RPECV permite a previsão de geometrias moleculares a partir da repulsão eletrostática entre pares de eletrões (não ligantes ou ligantes).
  - A geometria adotada por uma molécula resulta da distribuição espacial de todos os pares eletrónicos (ligantes e não ligantes) da camada de valência do átomo central da molécula.
  - A estrutura mais provável será aquela em que a repulsão entre os pares de eletrões seja mínima.

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Geometria eletrónica

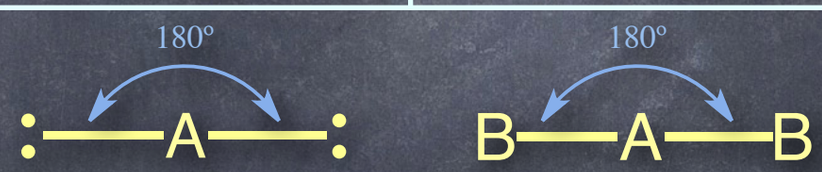
Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear



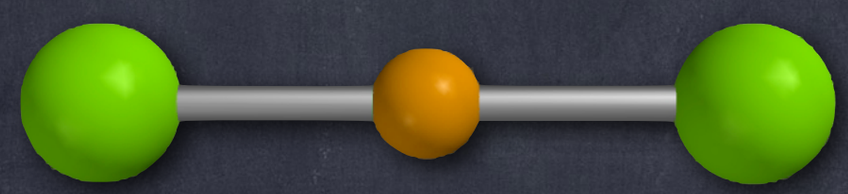
Estrutura molecular

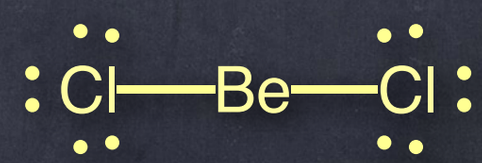
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear



Exemplo: $BeCl_2$



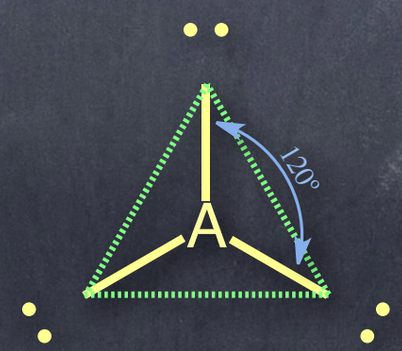


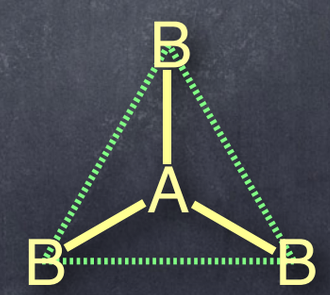
Dois átomos ligados ao átomo central
Zero pares não ligantes no átomo central

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana



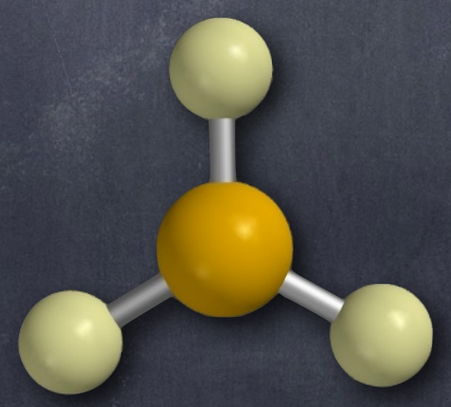


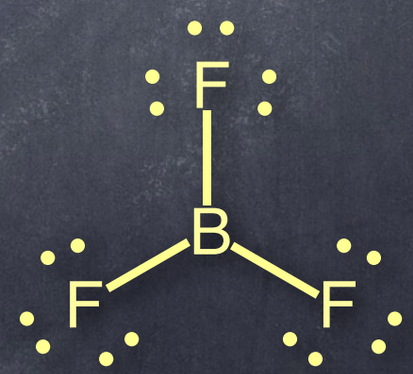
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana

Exemplo: BF_3



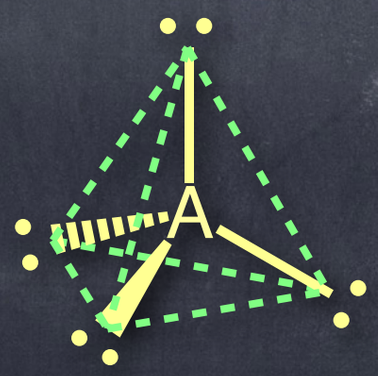


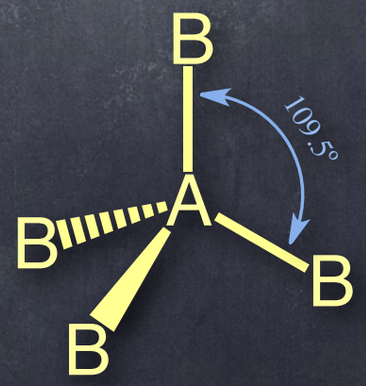
Três átomos ligados ao átomo central
Zero pares não ligantes no átomo central

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica



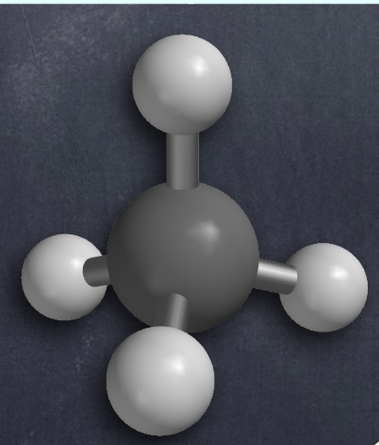


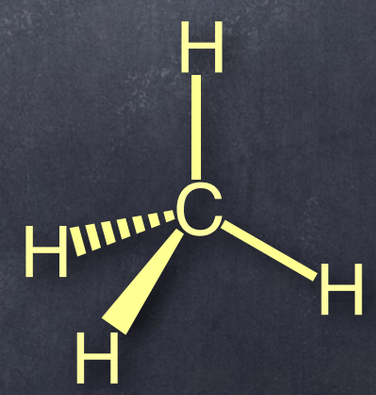
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica

Exemplo: CH_4



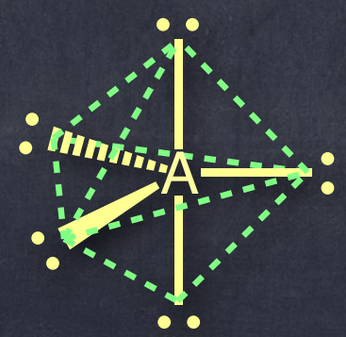


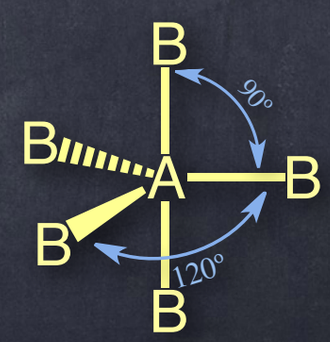
Quatro átomos ligados ao átomo central
Zero pares não ligantes no átomo central

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal





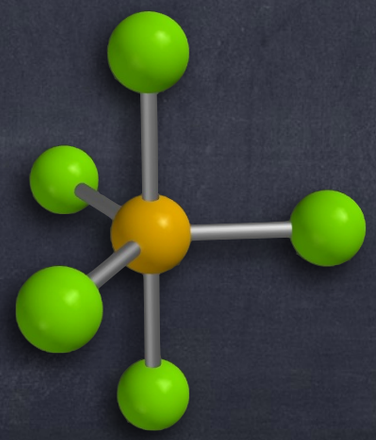
Estrutura molecular

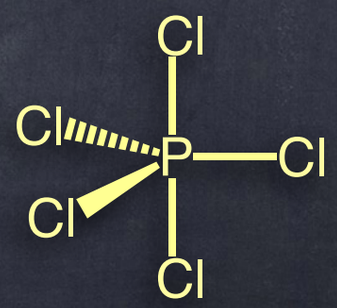
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal

Exemplo: PCl_5

Cinco átomos ligados ao átomo central
Zero pares não ligantes no átomo central



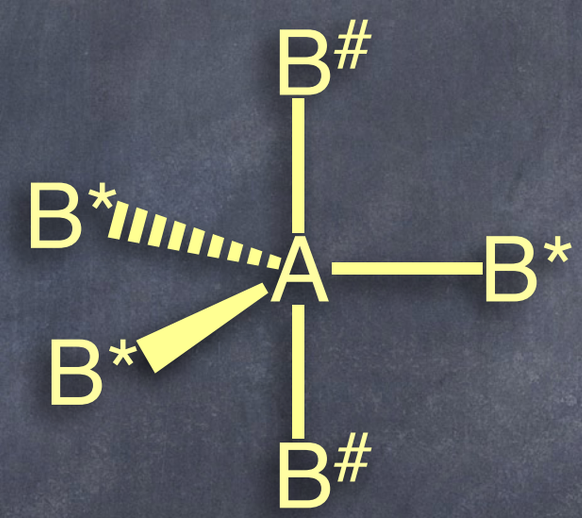


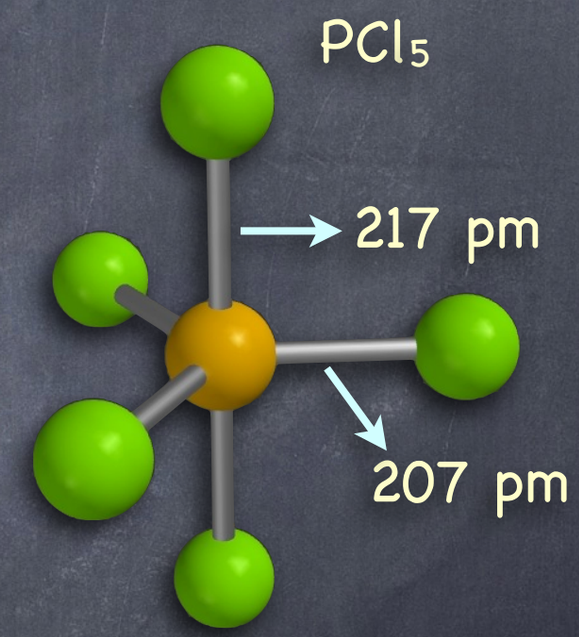
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Bipirâmide trigonal:

Duas posições apicais (B#)
Três posições equatoriais (B*)



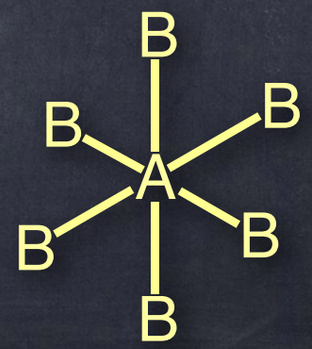


As posições apicais fazem ângulos de 90º com as equatoriais.
As posições equatoriais fazem ângulos de 120º entre si.
Cada orbital em B* experimenta 2 repulsões a 90º devido a orbitais localizadas em B#.
Cada orbital em B# experimenta 3 repulsões a 90º devido a B*. Por isso, o comprimento de ligação apical é superior (ver a figura para o PCl_5)

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_6	6	0	Octaédrica	Octaédrica



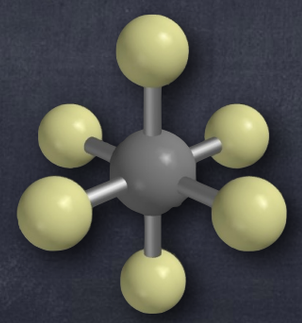
Estrutura molecular

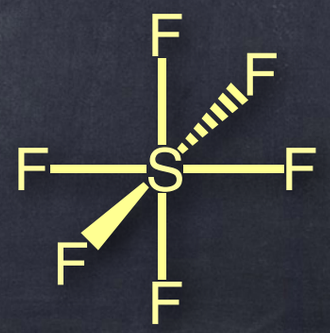
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_2	2	0	Linear	Linear
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_6	6	0	Octaédrica	Octaédrica

Exemplo: SF_6

Seis átomos ligados ao átomo central
Zero pares não ligantes no átomo central



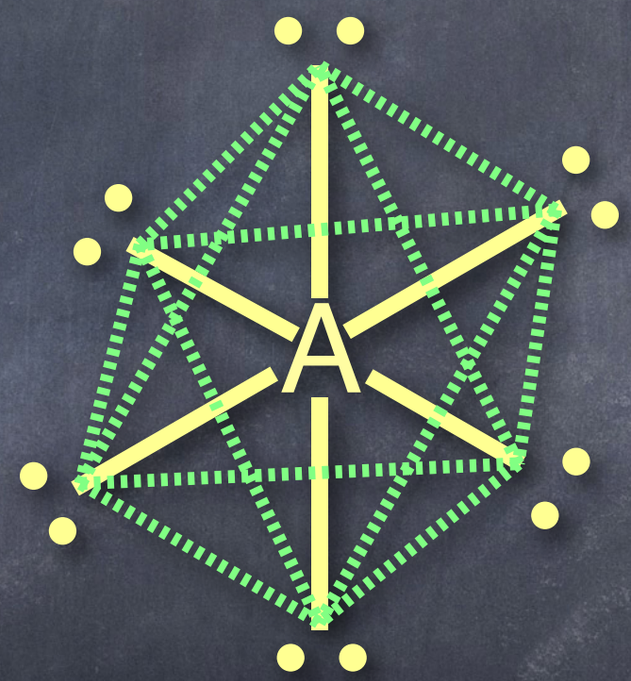


Estrutura molecular

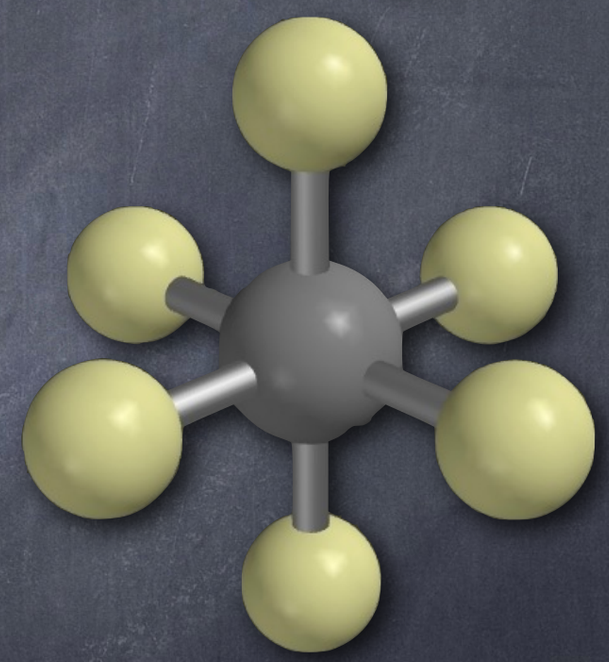
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV -exemplos.

Octaédrica:

Todas as posições são equivalente.
Todos os ângulos são de 90º.



SF_6

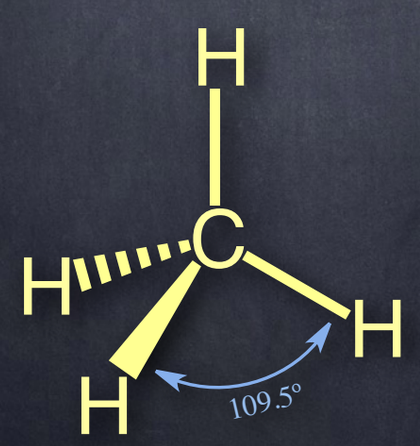


Estrutura molecular

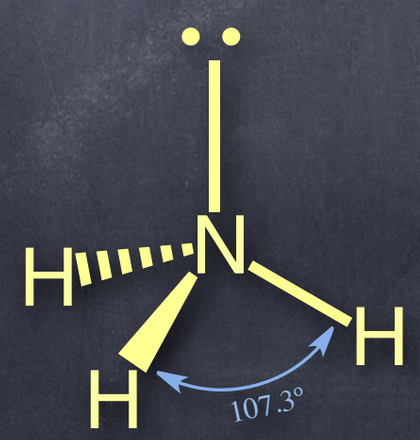
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.
  - Até agora vimos apenas moléculas em que não há eletrões não ligantes no átomo central.
  - Assim, a geometria molecular resultava apenas das repulsões entre os átomos periféricos.
  - Caso haja eletrões não ligantes no átomo central, a repulsão entre os pares não ligantes e os átomos periféricos é, em regra, mais importante do que a repulsão entre apenas átomos periféricos.
  - A repulsão é máxima entre pares de eletrões não ligantes no átomo central.

Estrutura molecular

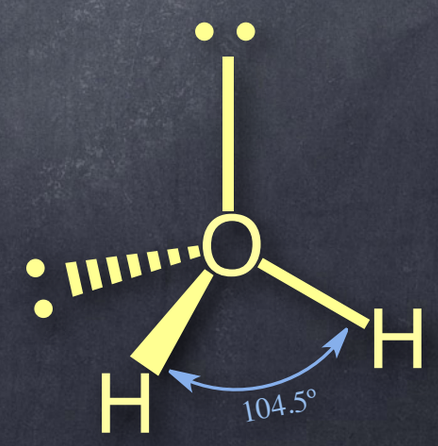
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.
  - Caso haja eletrões não ligantes no átomo central, a repulsão entre os pares não ligantes e os átomos periféricos é, em regra, mais importante do que a repulsão entre apenas átomos periféricos.
  - A repulsão é máxima entre pares de eletrões não ligantes no átomo central.



Metano



Amoníaco



Água

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central (Eletrões não ligantes)	Disposição dos pares de eletrões (Geometria eletrónica)	Geometria molecular
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_2E	2	1	Triangular plana	Angular

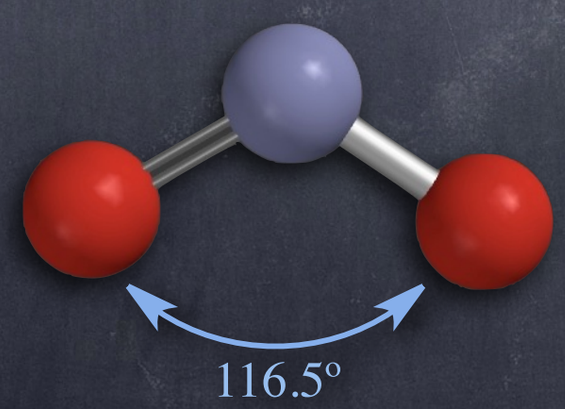
A geometria eletrónica não se altera, visto que continuamos a ter o mesmo número de pares eletrónicos. No entanto, a geometria molecular altera-se, uma vez que é definida apenas entre os átomos.

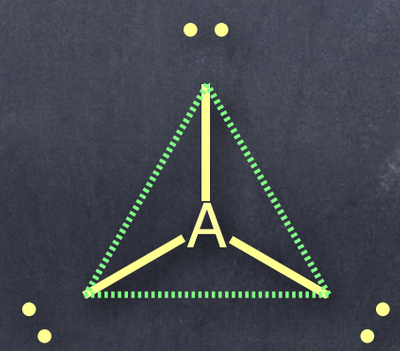
Estrutura molecular

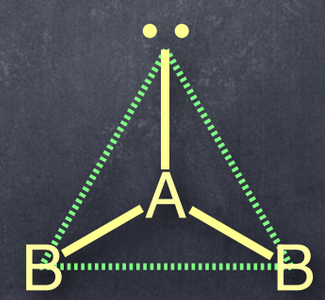
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_3	3	0	Triangular plana	Triangular plana
AB_2E	2	1	Triangular planar	Angular

Exemplo: NO_2^-





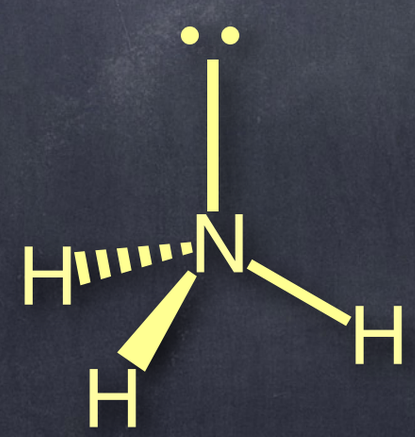


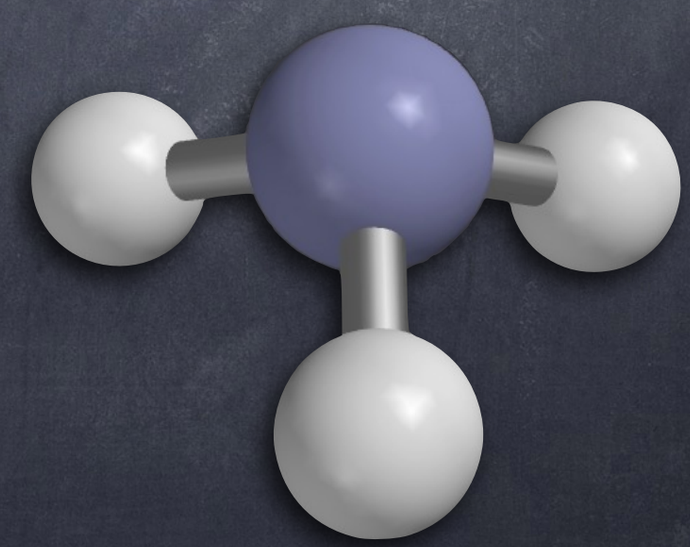
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_4	4	0	Tetrédrica	Tetraédrica
AB_3E	3	1	Tetraédrica	Piramidal trigonal

Exemplo: NH_3



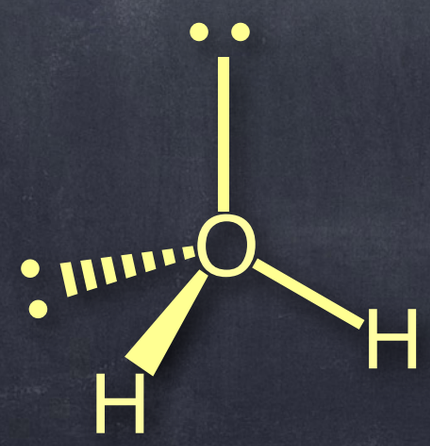


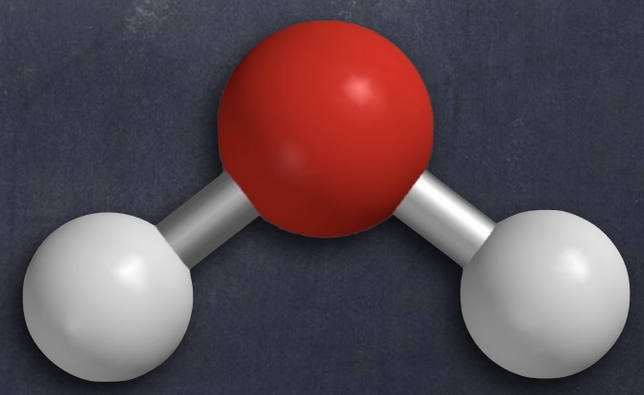
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_4	4	0	Tetrédrica	Tetraédrica
AB_3E	3	1	Tetraédrica	Piramidal trigonal
AB_2E_2	2	2	Tetraédrica	Angular

Exemplo: H_2O



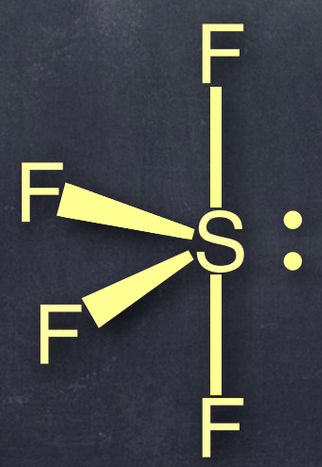


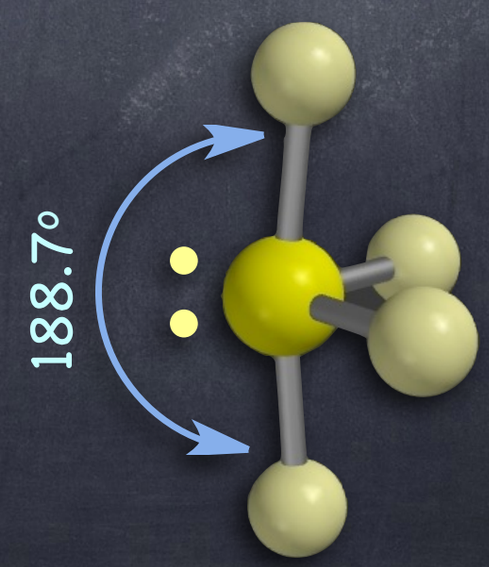
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Tetraedro distorcido

Exemplo: SF_4



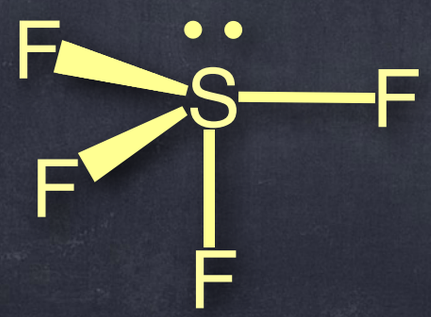


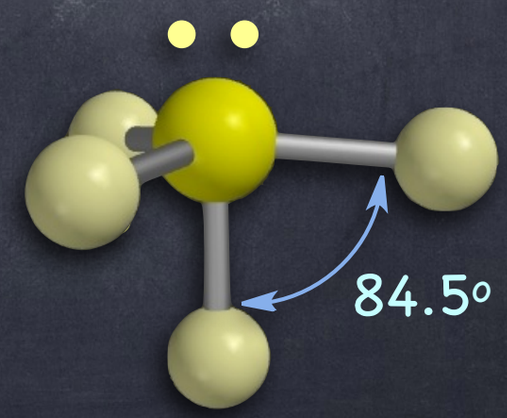
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal

Exemplo: SF_4



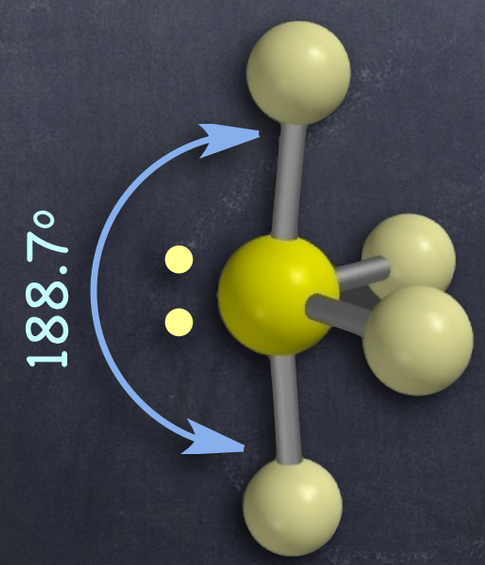


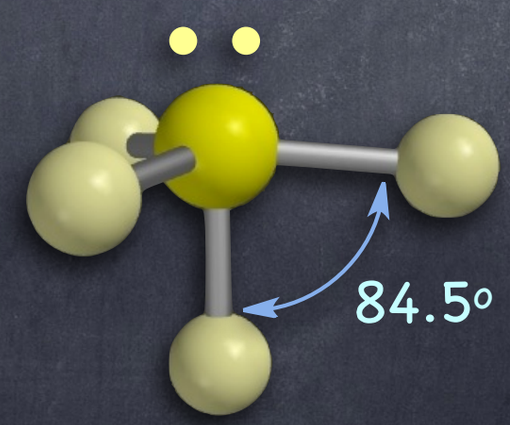
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Exemplo: SF_4

Qual será a estrutura mais estável?
Porquê?





Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Exemplo: SF_4

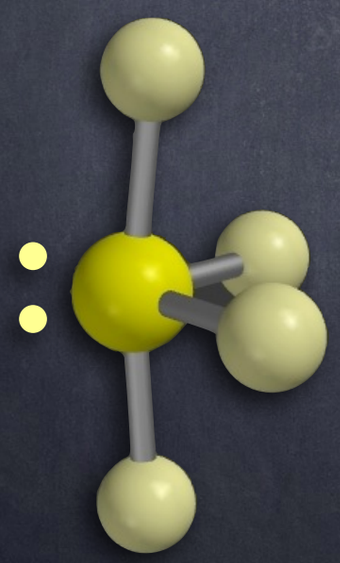
As repulsões mais importantes para avaliar qual a estrutura mais estável são as que ocorrem a ângulos de 90º. Interacções a 120º ou 180º não são significativas pois a repulsão entre pares eletrónicos decai muito rapidamente com a distância.

Estrutura molecular

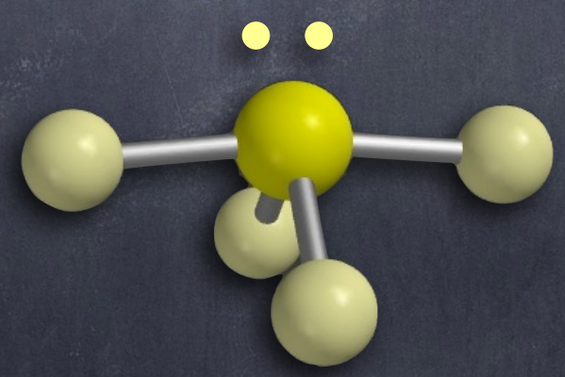
- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Exemplo: SF_4

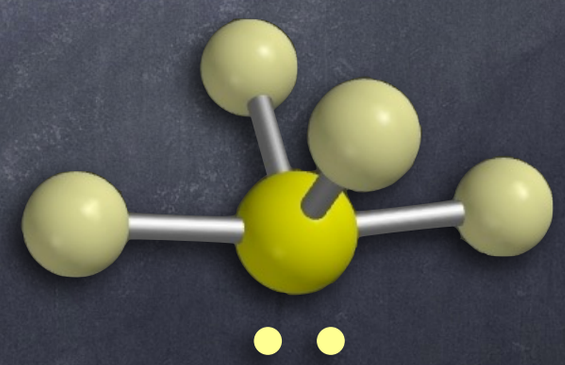
Diferentes designações para a mesma estrutura:



Tetraedro distorcido



Balancé



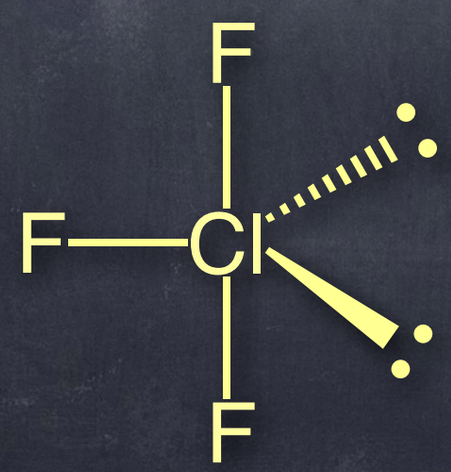
Borboleta

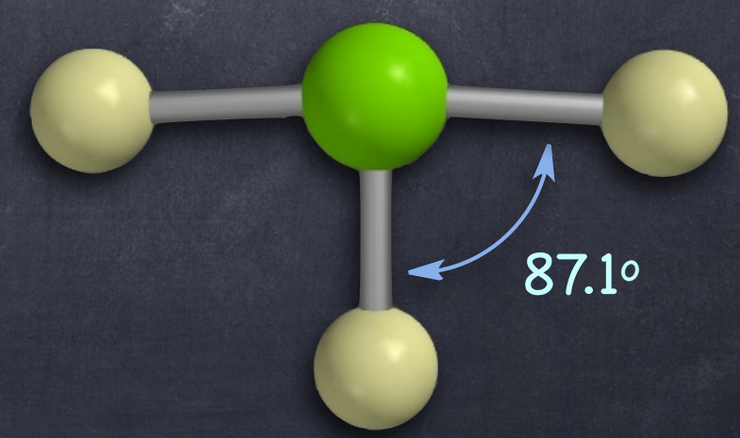
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal
AB_3E_2	3	2	Bipiramidal trigonal	Em forma de T

Exemplo: ClF_3



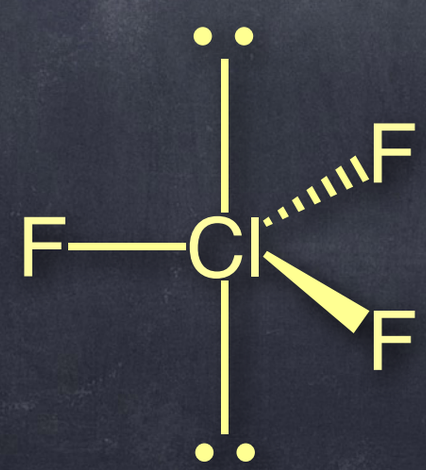


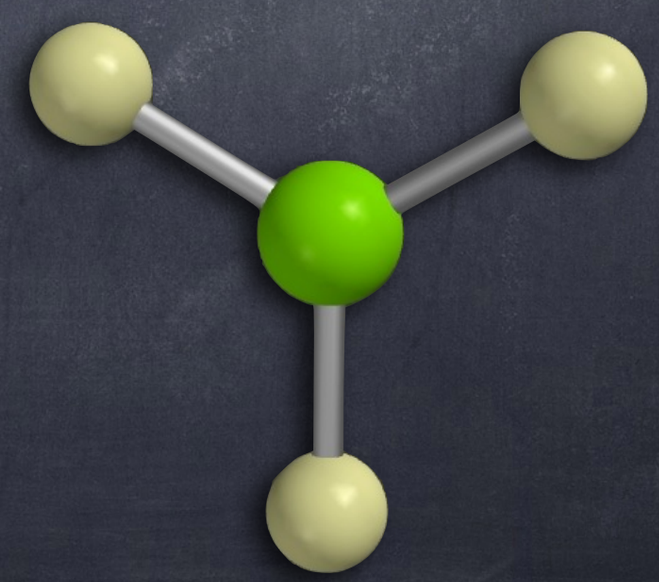
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal
AB_3E_2	3	2	Bipiramidal trigonal	Triangular plana

Exemplo: ClF_3



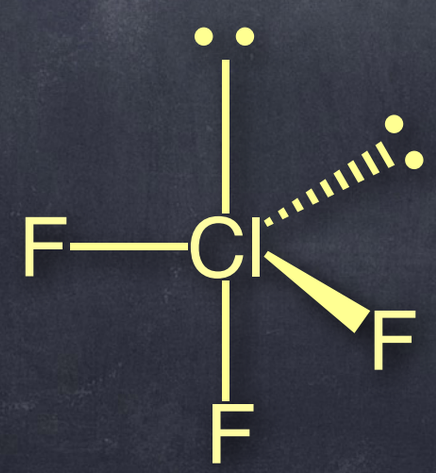


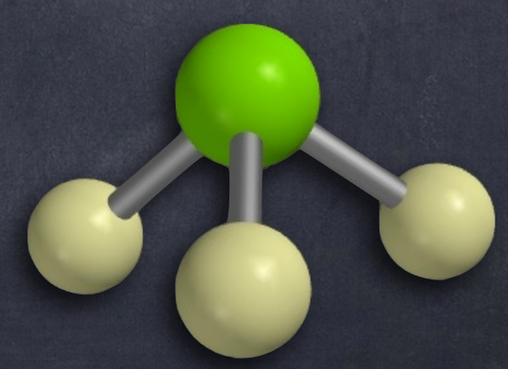
Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal
AB_3E_2	3	2	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal

Exemplo: ClF_3



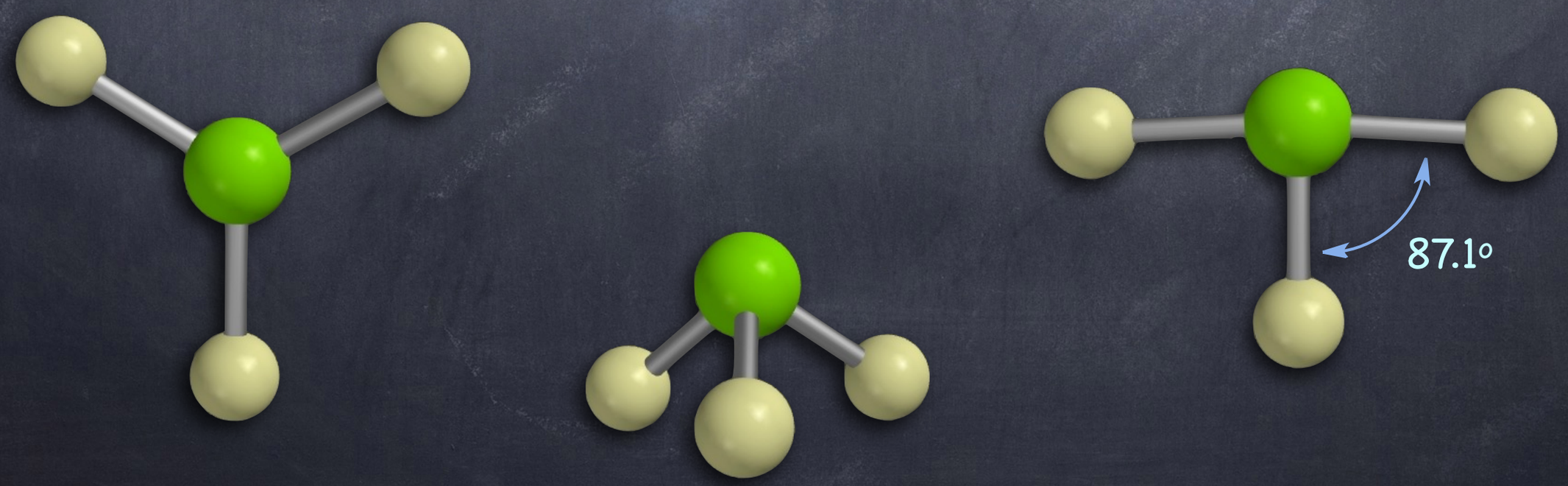


Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Exemplo: ClF_3

Qual será a estrutura mais estável?
Porquê?



Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	Bipiramidal trigonal	Piramidal trigonal
AB_3E_2	3	2	Bipiramidal trigonal	Em forma de T
AB_2E_3	2	3	Bipiramidal trigonal	Linear

Exemplo: I_3^-

Faça a distribuição eletrónica e justifique a geometria.

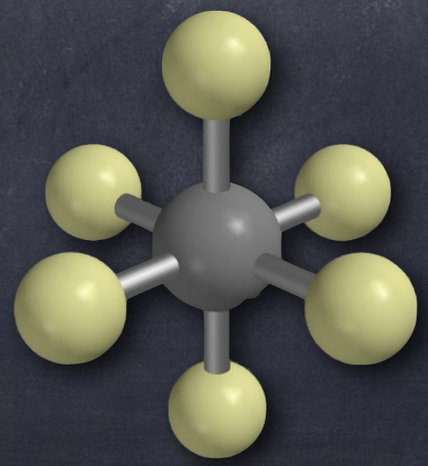
Haverá mais geometrias? Quais?

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.

Classe	Nº de átomos ligados ao átomo central	Nº de pares isolados no átomo central	Disposição dos pares de eletrões	Geometria molecular
AB_6	6	0	Octaédrica	Octaédrica
AB_5E	5	1	Octaédrica	Piramidal quandrangular
AB_4E_2	4	2	Octaédrica	Quadrangular plana

Justifique as geometrias da tabela acima, e preveja se haverá outras possíveis.



SF_6

Estrutura molecular

- Previsão de geometrias moleculares - o modelo RPECV - exemplos.
  - Resumindo:
  - Desenhe a estrutura de Lewis da molécula.
  - Conte o número de pares não ligantes e de pares ligantes em redor do átomo central.
  - Utilize o modelo de RPECV para prever a geometria da molécula.