

GEOMETRIAS MOLECULARES



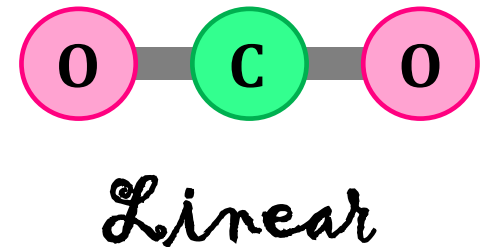
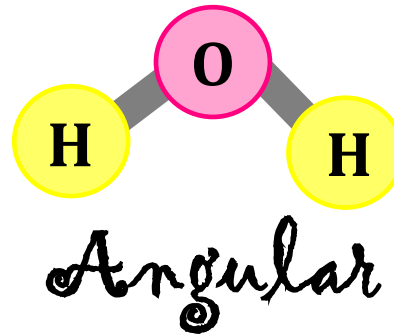
Professora: Aline de Oliveira

Contagem, 2021

GEOMETRIAS MOLECULARES

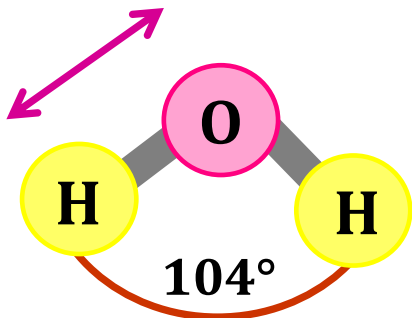
Geometria Molecular

É o arranjo tridimensional dos átomos em uma molécula.

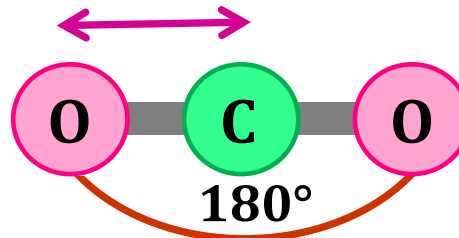


- Influencia muitas das propriedades físicas e químicas das substâncias, tais como: temperaturas de fusão e ebulição, densidade, viscosidade e reatividade.

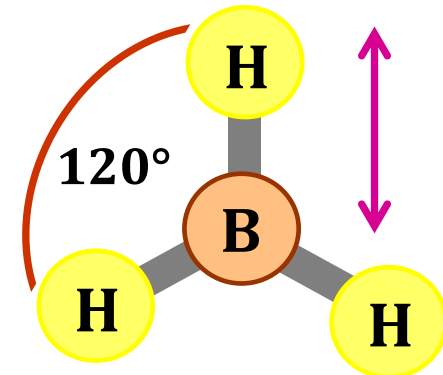
Comprimentos de ligações
e ângulos:



Determinados
experimentalmente por



- Difração de raios X e
- Microscopia eletrônica.



GEOMETRIAS MOLECULARES

As estruturas de Lewis não indicam a forma da molécula, mostram apenas o número e o tipo de ligações.

Existe um método que permite **prever** com considerável sucesso a geometria global de uma molécula ou íon.



Teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos da Camada de Valência (RPECV)

(VSEPR – Valence Shell Electron Pair Repulsion)

Procura explicar o arranjo geométrico dos pares eletrônicos em torno de um átomo central em termos da repulsão eletrostática entre pares de elétrons.

GEOMETRIAS MOLECULARES

Método VSEPR

Bases do método:

- ❑ Os pares de elétrons se orientam ao redor do átomo de modo a minimizarem a repulsão eletrostática;
- ❑ Os pares de elétrons não compartilhados são mais volumosos que os pares ligantes.

Os pares de elétrons da camada de valência de um átomo em uma molécula tendem a se distanciar o máximo possível uns dos outros, devido à existência de forças de repulsão eletrostática entre eles.

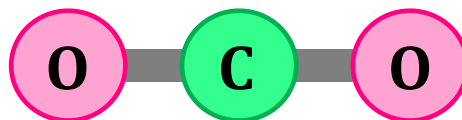
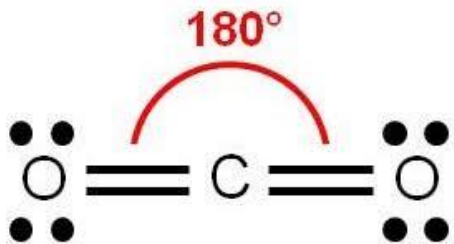


(Analogia à repulsão estérea em balões)

Método VSEPR

Outras considerações:

- Apenas os elétrons da camada de valência são envolvidos (nessa camada encontram-se os elétrons que estão normalmente envolvidos na formação de ligações químicas);
- Comportam-se como se fossem um único par de elétrons: um par de elétrons não compartilhado e uma ligação covalente (seja ela simples, dupla ou tripla).



GEOMETRIAS MOLECULARES

Método VSEPR

Como prever a geometria de uma molécula:

1. Propor uma estrutura de Lewis válida;
2. Verificar o número de pares eletrônicos ao redor do átomo central;
3. Verificar a orientação espacial desses pares, admitindo a máxima repulsão entre eles;
4. Colocar os demais átomos da molécula;
5. Finalmente: a geometria da molécula será dada pela posição dos átomos.

Intensidade das repulsões:

PL = Par Ligante; PNL = Par Não Ligante

PL x PL PNL x PL PNL x PNL

Repulsão crescente com o tipo
de par de elétron

180° 120° 90°

Repulsão crescente com o ângulo
entre os pares de elétrons

GEOMETRIAS MOLECULARES


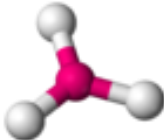
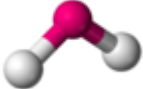
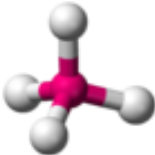
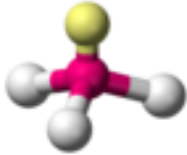
Método VSEPR

Composto	Estruturas	
	Lewis	Espacial
H ₂		
BeH ₂		
CH ₄		
H ₂ O		
NH ₃		
BF ₃		

GEOMETRIAS MOLECULARES

Método VSEPR

Geometrias de moléculas com até cinco átomos do tipo AB_n:

Pares de elétrons do átomo central	n	Fórmula molecular	Geometria	Exemplo	Modelo
2	2	AB ₂	Linear	CO ₂	
3	3	AB ₃	Trigonal plana	BF ₃	
3	2	AB ₂	Angular	SO ₂	
4	4	AB ₄	Tetraédrica	CH ₄	
4	3	AB ₃	Piramidal	NH ₃	
4	2	AB ₂	Angular	H ₂ O	