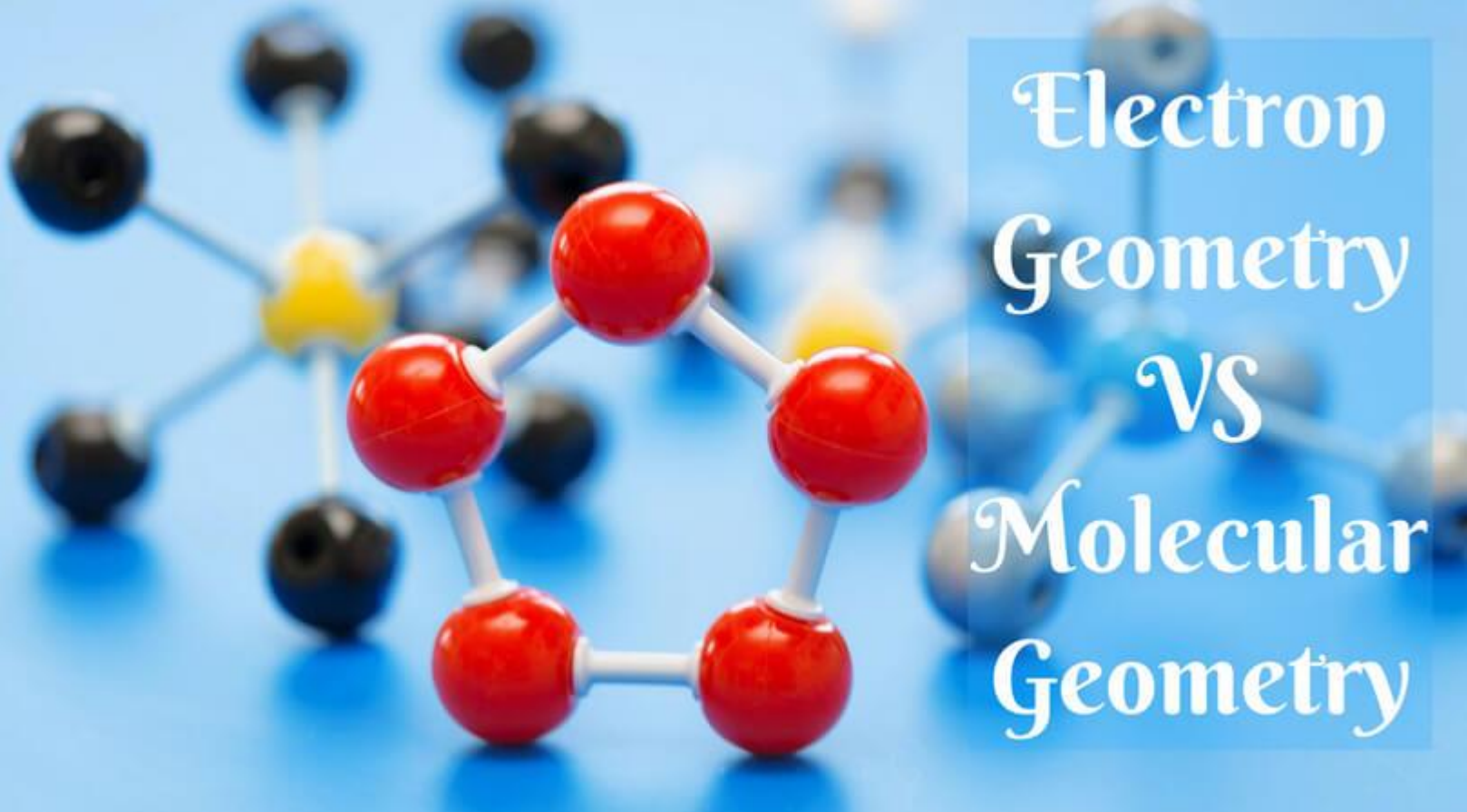


Geometria molecular



Electron
Geometry
VS
Molecular
Geometry

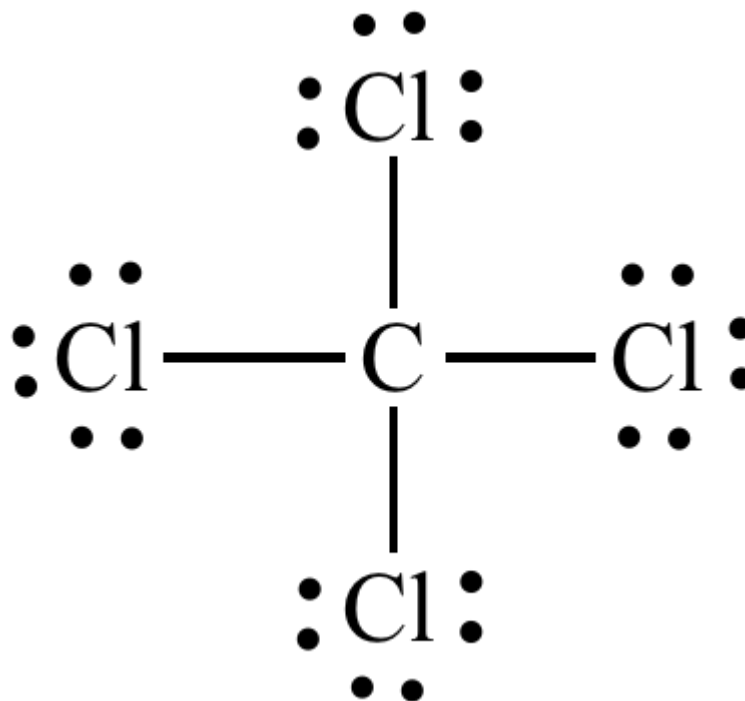
The image shows several ball-and-stick molecular models on a blue background. In the foreground, a water molecule (H₂O) is clearly visible, with two red spheres representing oxygen atoms and two white spheres representing hydrogen atoms. In the background, there are other models, including one with a central yellow sphere and several black spheres, and another with a central blue sphere and several white spheres. The text 'Electron Geometry VS Molecular Geometry' is overlaid on the right side of the image in a white, serif font.

Formas espaciais moleculares

- As estruturas de Lewis fornecem a conectividade atômica: elas nos mostram o número e os tipos de ligações entre os átomos.
- A forma espacial de uma molécula é determinada por seus ângulos de ligação.

Formas espaciais moleculares

- Considere o CCl_4 :



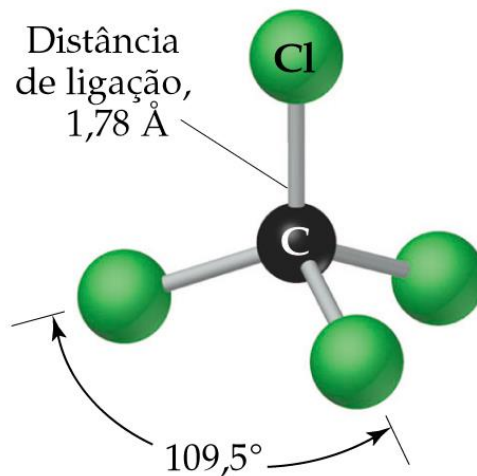
Experimentalmente, verificamos que todos os ângulos de ligação Cl-C-Cl são de $109,5^\circ$.

- Conseqüentemente, a molécula não pode ser plana.
- Todos os átomos de Cl estão localizados nos vértices de um tetraedro com o C no seu centro.

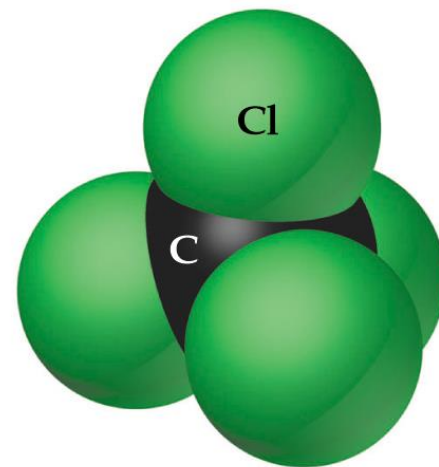
Formas espaciais moleculares



(a)



(b)



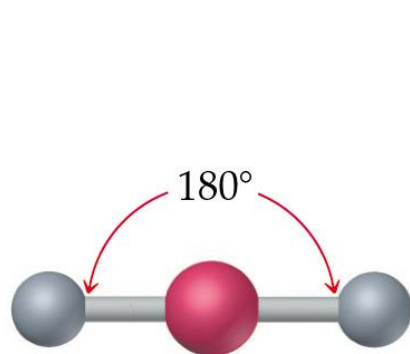
(c)

Formas espaciais moleculares

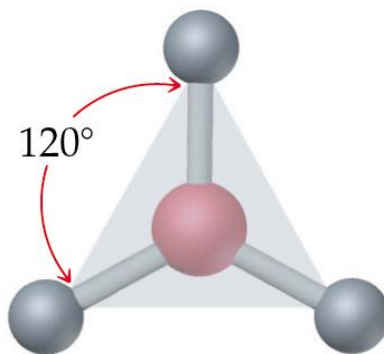
- Para prevermos a forma molecular, supomos que os elétrons de valência *do átomo central* se repelem e, conseqüentemente, a molécula assume qualquer geometria 3D que minimize essa repulsão.
- *Regiões eletrônicas* em torno do átomo central compreendem ligações (simples ou múltiplas) e pares de elétrons não ligados
- Denominamos este processo de teoria de **Repulsão do Par de Elétrons no Nível de Valência (RPENV, ou VSEPR em inglês)**.

VSEPR: Formas espaciais moleculares

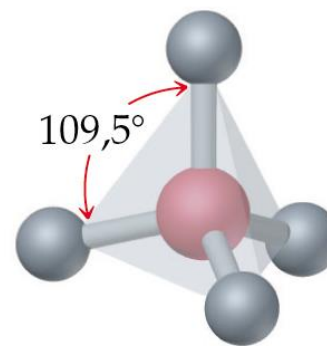
Existem cinco geometrias fundamentais para a forma molecular:



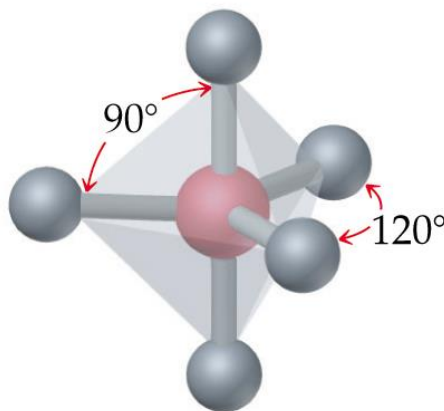
Linear



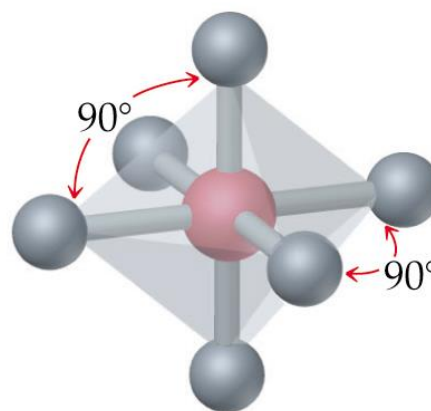
Trigonal plana



Tetraédrica

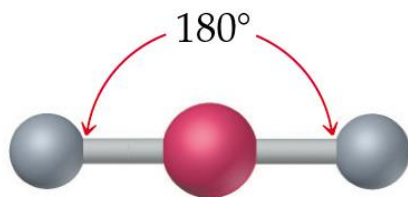


Bipiramidal trigonal

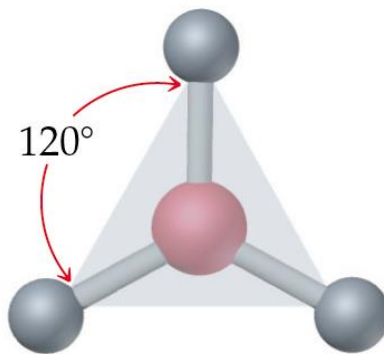


Octaédrica

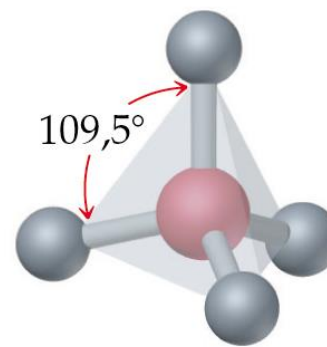
VSEPR: Formas espaciais moleculares



Linear



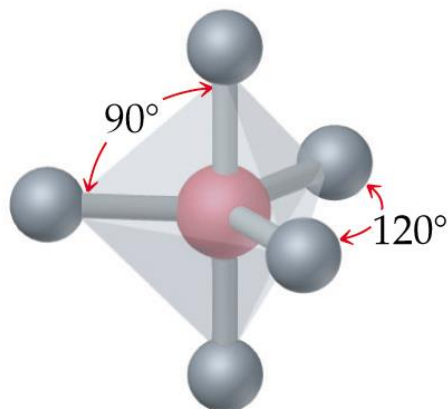
Trigonal plana



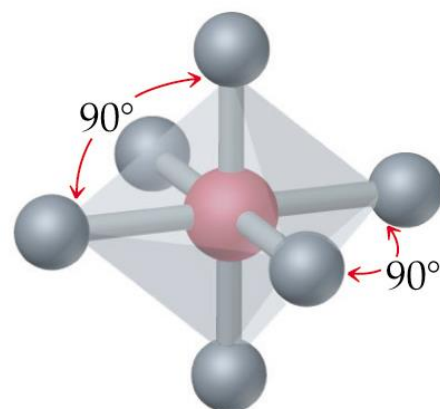
Tetraédrica



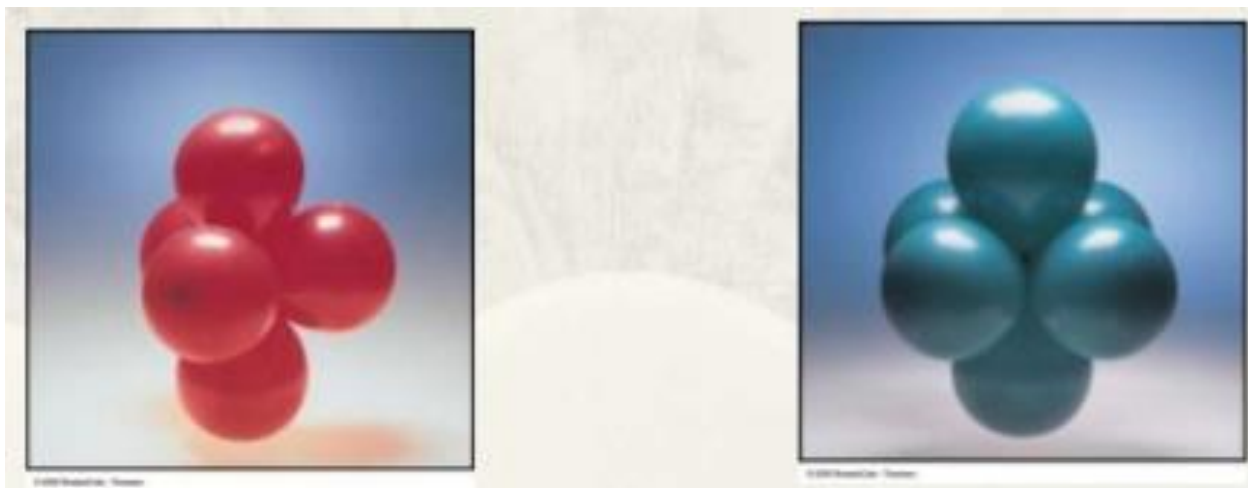
VSEPR: Formas espaciais moleculares



Bipiramidal trigonal



Octaédrica



VSEPR: Formas espaciais moleculares

https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulation/molecule-shapes

The screenshot displays the PhET 'Molecule Shapes' simulation. The main window shows a 3D model of a tetrahedral molecule. On the right side, there are controls for 'Ligação' (Bond) with single, double, and triple bond options, and 'Par Solitário' (Lone Pair) with a lone pair icon. Below these is a 'Remover Tudo' (Remove All) button. The 'Opções' (Options) section includes checkboxes for 'Ver Pares Solitários' (Show Lone Pairs) and 'Ver Ângulos de Ligação' (Show Bond Angles). At the bottom left, there are checkboxes for 'Geometria Molecular' and 'Geometria do Elétron', both set to 'Tetraédrica'. The PhET logo is in the bottom right corner. The browser's address bar shows the URL https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_pt_BR.html. The taskbar at the bottom shows various application icons and the system clock indicating 09:45 on 28/09/2017.

Modelo VSEPR

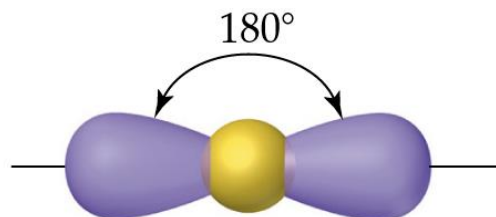
Para determinar o *arranjo eletrônico em torno do átomo central*:

- Desenhe a estrutura de Lewis,
- conte o número total de *regiões eletrônicas* (ou domínios de elétrons ou número estérico) ao redor do átomo central,
 - *regiões eletrônicas* = ligações (simples ou múltiplas) e pares de elétrons não ligados.
- ordene as regiões eletrônicas em um dos arranjos básicos para minimizar a repulsão $e^- \leftrightarrow e^-$.

TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

2

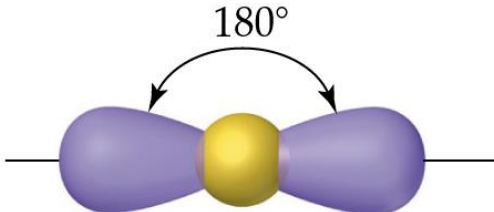


Linear

180°



TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
2		Linear	180°

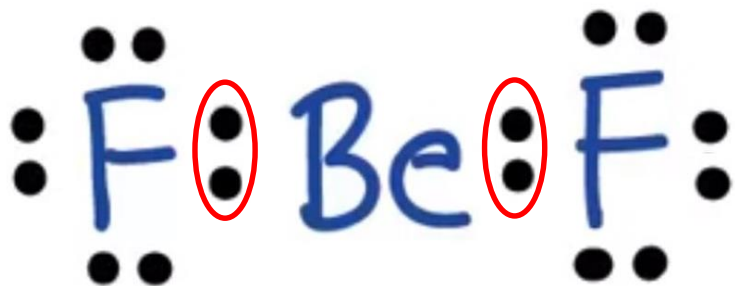
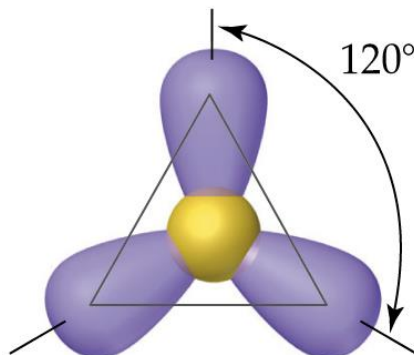


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

3



Trigonal
plano

120°

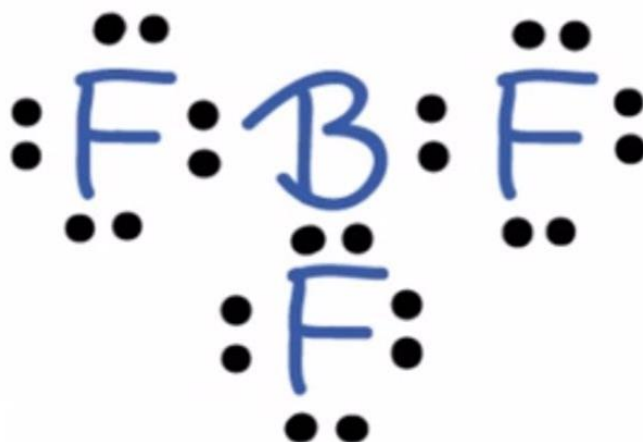
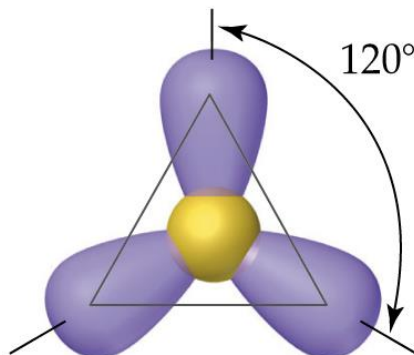


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

3



Trigonal plano

120°

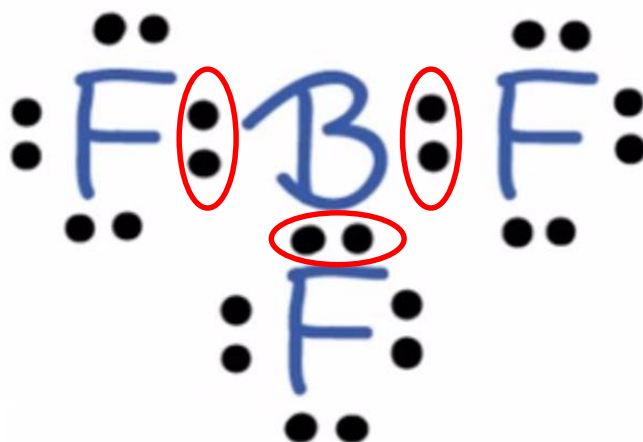
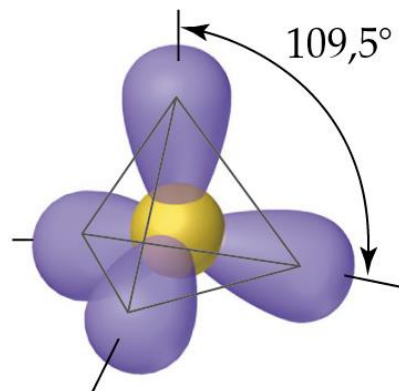


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

4



Tetraédrico

109,5°

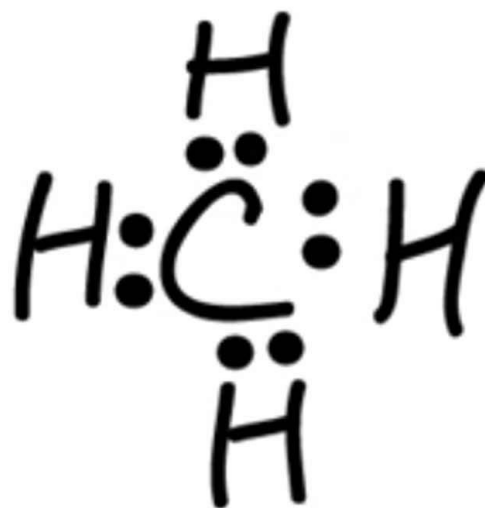
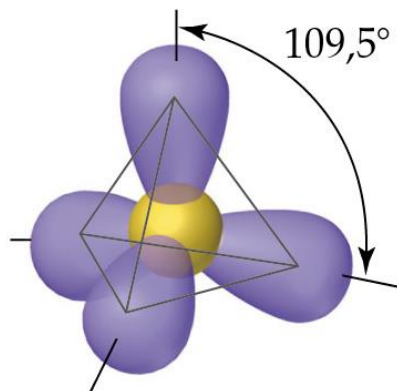


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

4



Tetraédrico

109,5°

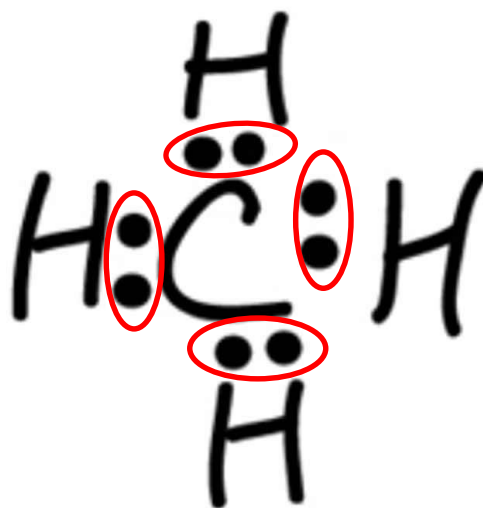
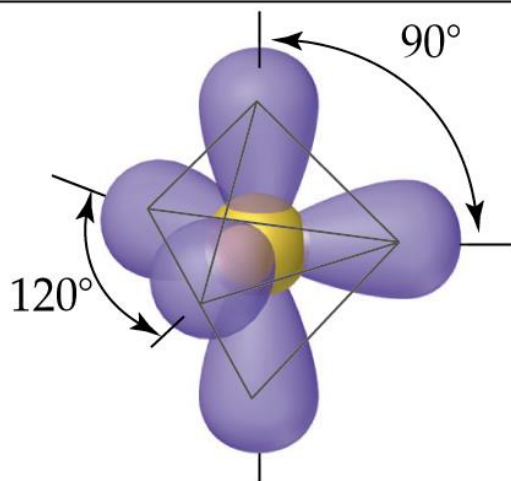


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

5



Bipiramidal
trigonal

120°
90°

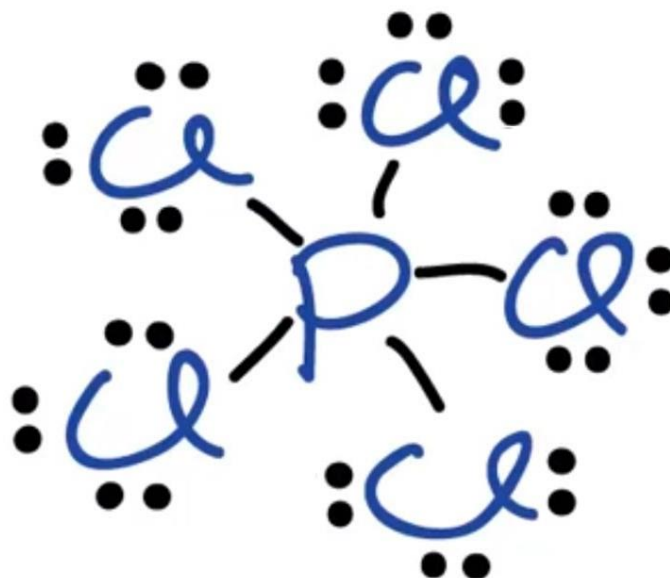
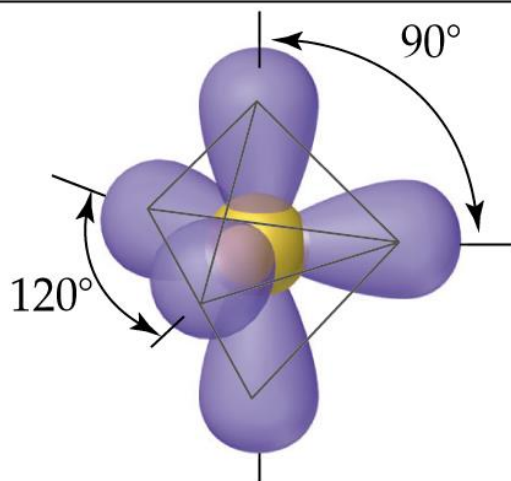


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

5



Bipiramidal
trigonal

120°
90°

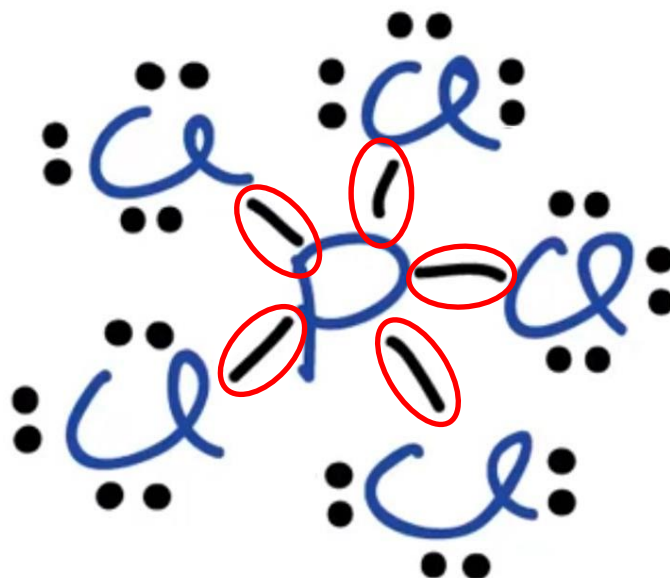
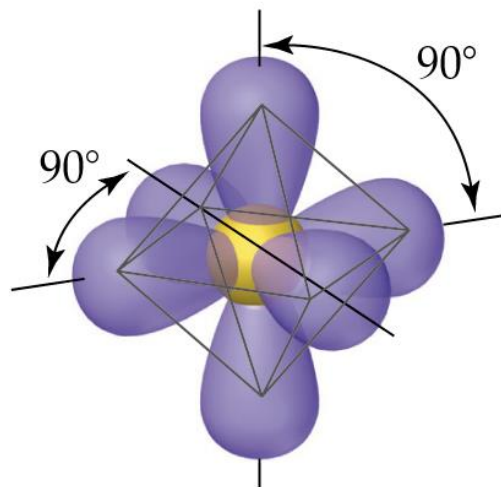


TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------

6



Octaédrico

90°

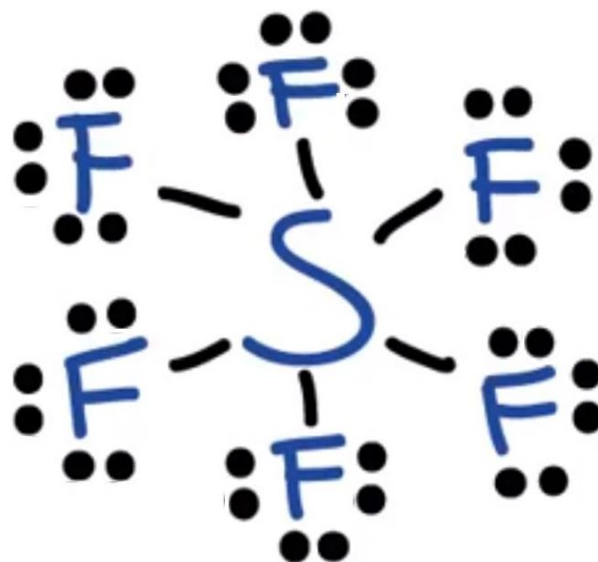
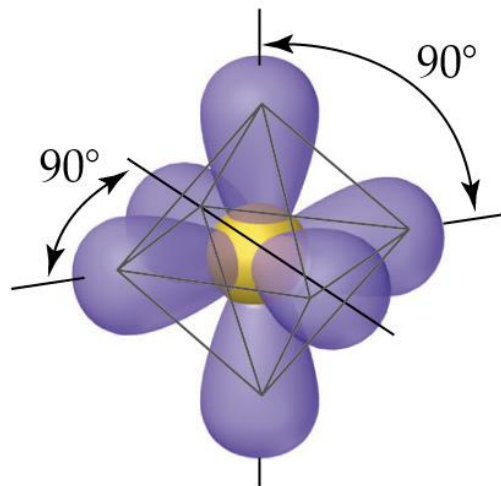


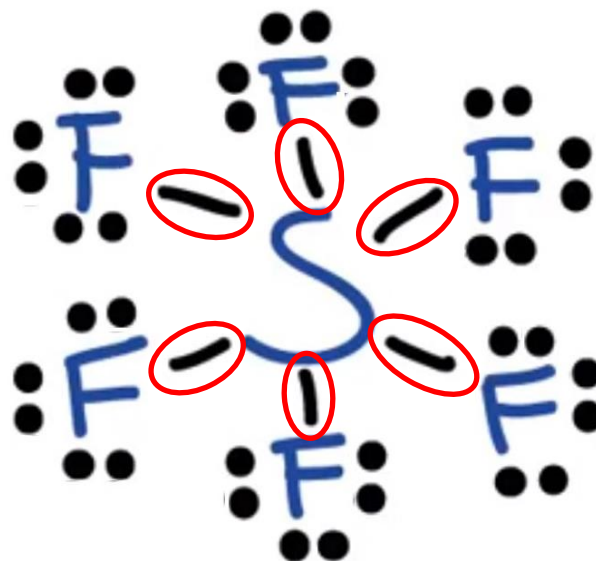
TABELA 9.1 Arranjos em função do número de domínios de elétrons

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
--------------------------------	---------------------------------------	---------	------------------------------



Octaédrico

90°

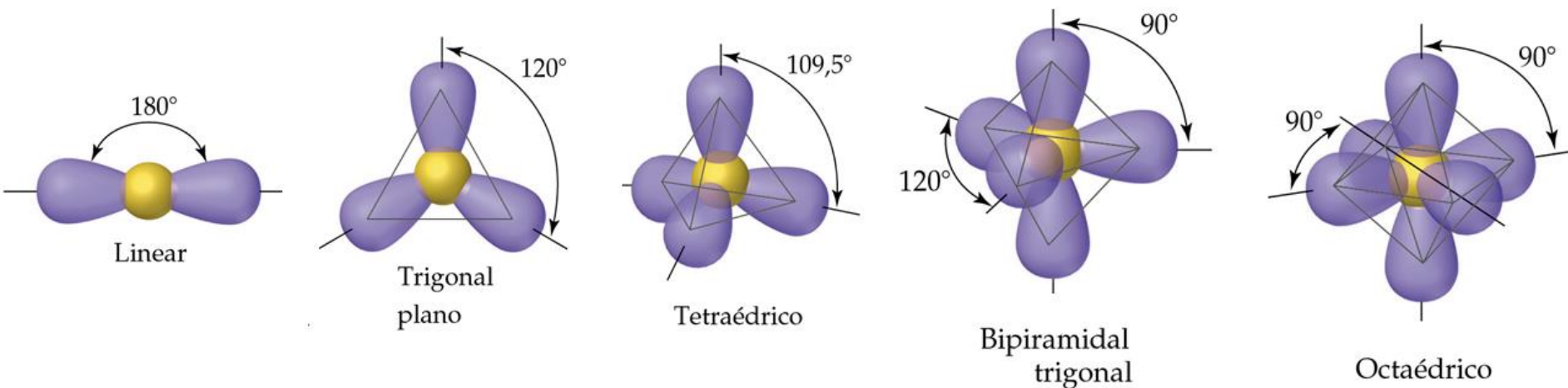


6

Modelo VSEPR

Para determinar o *arranjo eletrônico*:

- Desenhe a estrutura de Lewis
- conte o número total de *regiões eletrônicas* (ou domínios de elétrons ou número estérico) ao redor do átomo central,
- ordene as regiões eletrônicas em um dos cinco arranjos básicos para minimizar a repulsão $e^- \leftrightarrow e^-$:



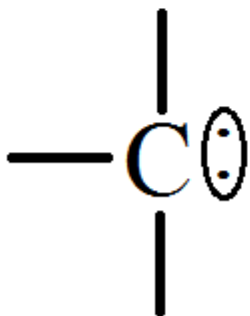
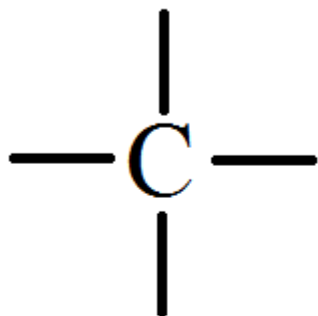
Modelo VSEPR

Regiões eletrônicas:

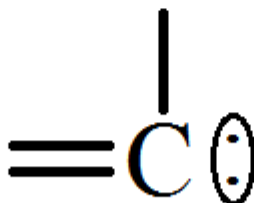
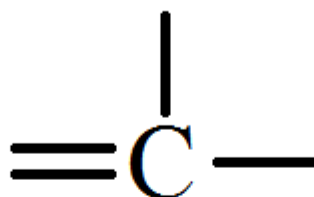
Pares de elétrons ligados (ligações simples, duplas ou triplas)

Pares de elétrons não ligados (pares solitários, pares isolados)

4 regiões eletrônicas



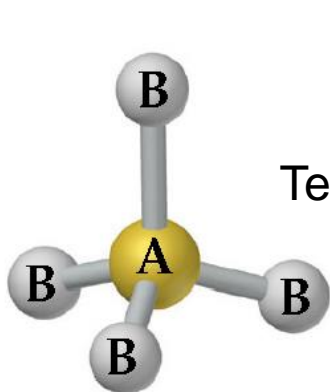
3 regiões eletrônicas



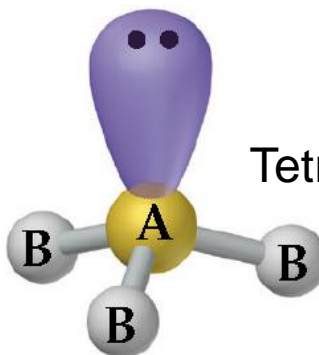
2 regiões eletrônicas



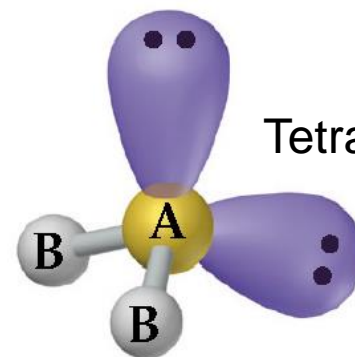
Electron Geometry VS Molecular Geometry



Tetraédrica



Tetraédrica

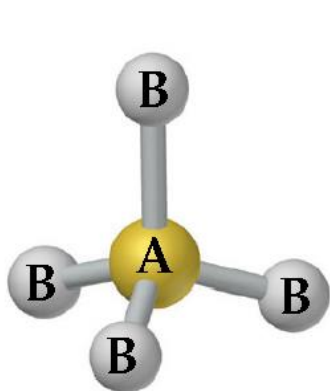


Tetraédrica

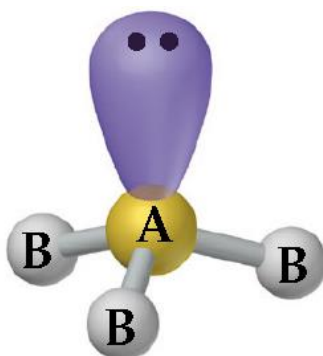
Electron
Geometry

VS

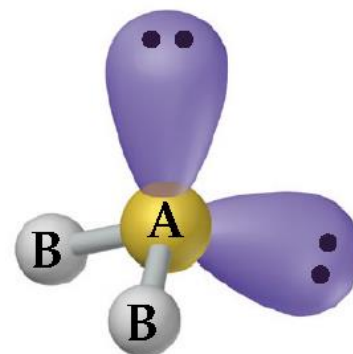
Molecular
Geometry



Tetraédrica



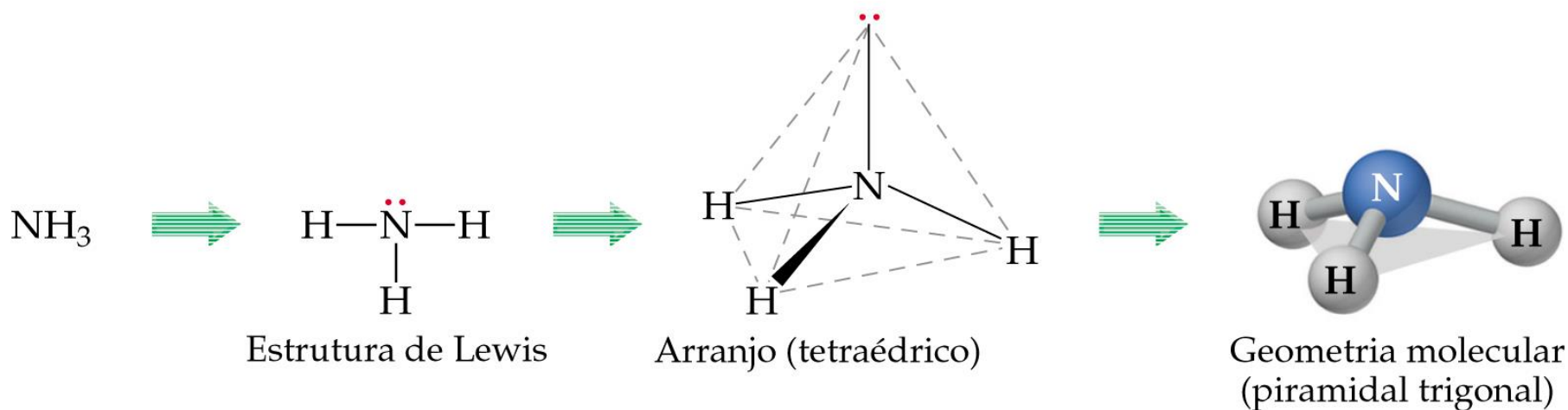
Piramidal
trigonal



Angular

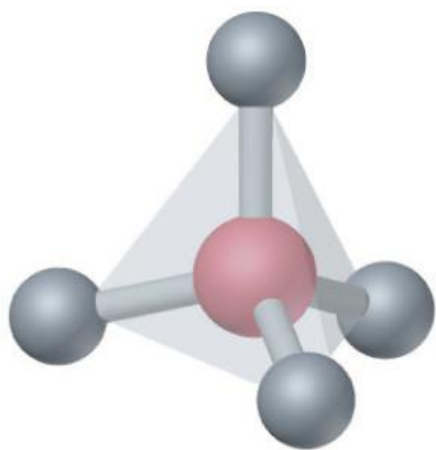
Formas espaciais moleculares: *arranjo eletrônico e geometria molecular*

- Definimos o *arranjo eletrônico* (ou *geometria dos elétrons*) pelas posições no espaço 3D de **TODAS** as regiões eletrônicas (ligantes ou não-ligantes).
- Para se determinar a *geometria de uma molécula*, fazemos a distinção entre pares de elétrons não-ligados (aqueles que não formam ligação) e pares ligados (aqueles encontrados entre dois átomos).

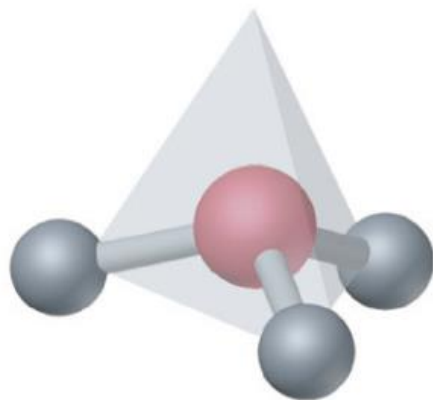


Formas espaciais moleculares

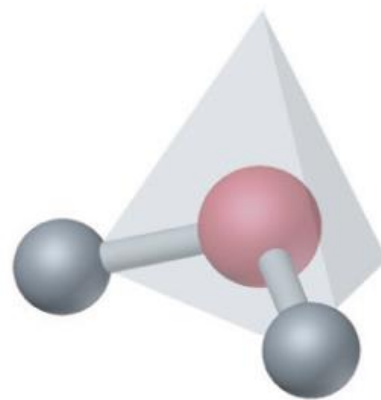
- Ao considerarmos o *arranjo eletrônico* ao redor do átomo central, consideramos todos os elétrons (pares não-ligantes e pares ligantes).
- Quando damos nome à *geometria molecular*, focalizamos somente na posição dos átomos.



Tetraédrica



Piramidal trigonal



Angular

TABELA 9.2 Arranjos e formas espaciais para moléculas com dois, três e quatro domínios de elétrons ao redor do átomo central

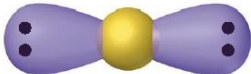

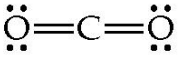
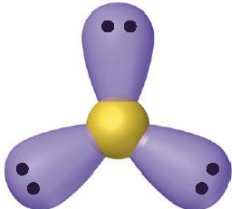
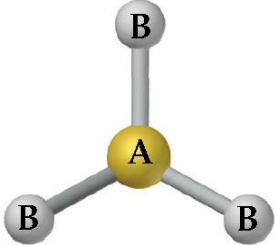
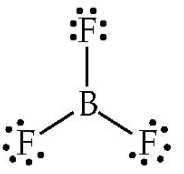
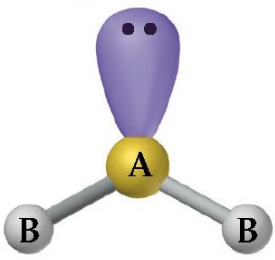
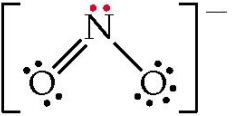
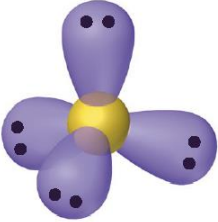
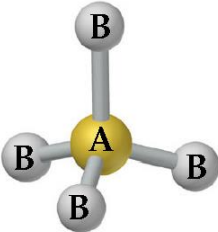
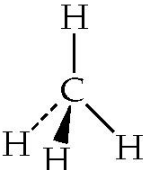
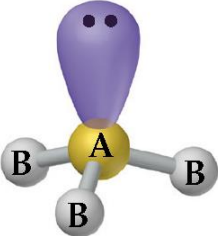
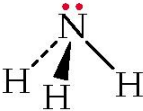
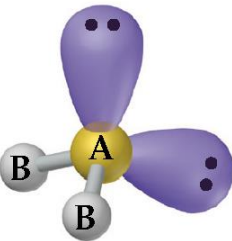
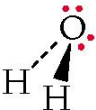
Número de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
2	 Linear	2	0	 Linear	
3	 Trigonal plano	3	0	 Trigonal plana	
		2	1	 Angular	

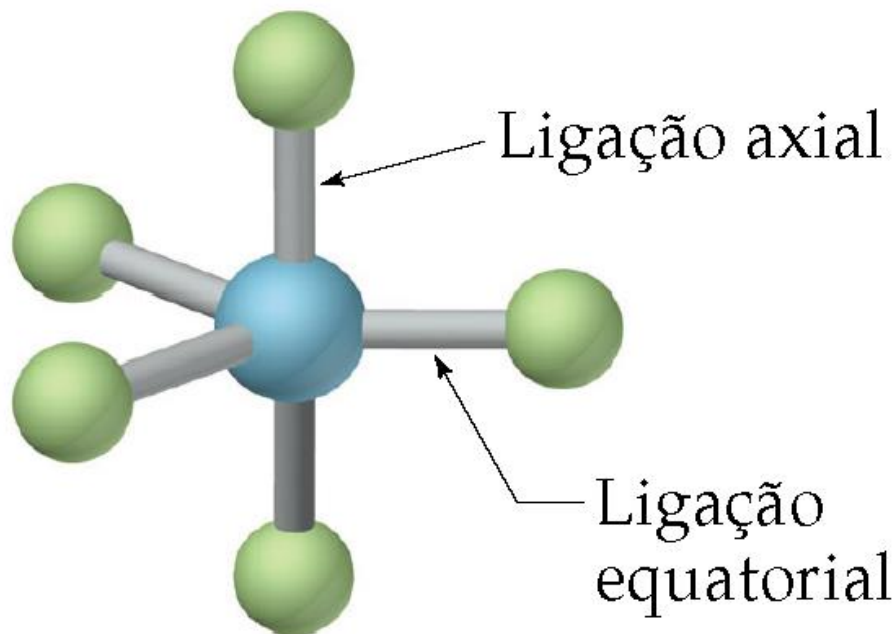
TABELA 9.2 Arranjos e formas espaciais para moléculas com dois, três e quatro domínios de elétrons ao redor do átomo central

Número de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
4	 Tetraédrico	4	0	 Tetraédrica	
		3	1	 Piramidal trigonal	
		2	2	 Angular	

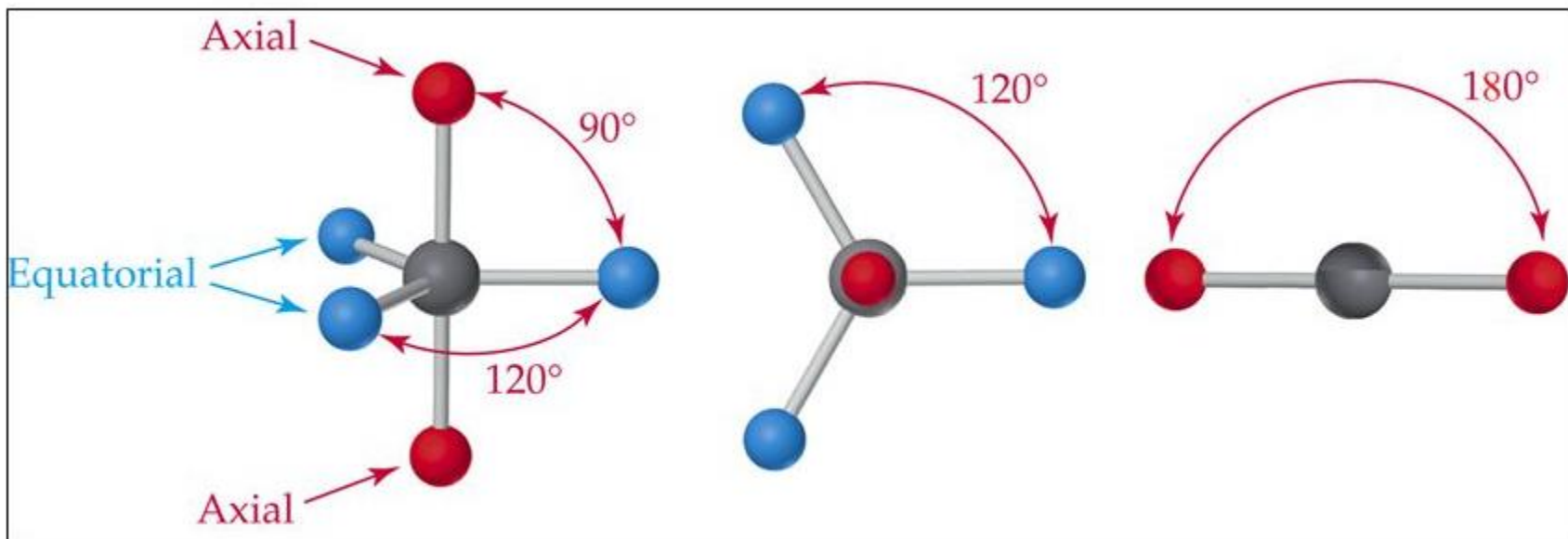
Modelo VSEPR

Moléculas com níveis de valência expandidos

- Átomos que têm expansão de octeto
- Para as estruturas de *bipirâmides trigonais* existe um plano contendo três pares de elétrons. O quarto e o quinto pares de elétrons estão localizados acima e abaixo desse plano.



Modelo VSEPR



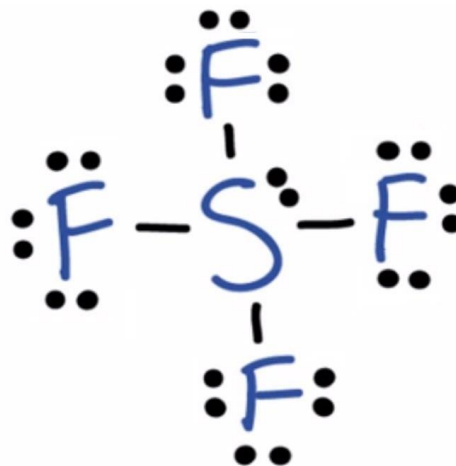
- **As forças de repulsão são muito intensas em 90°**
- **As forças de repulsão são menores em 120°**
- **As forças de repulsão são ainda menores em 180°**

Modelo VSEPR

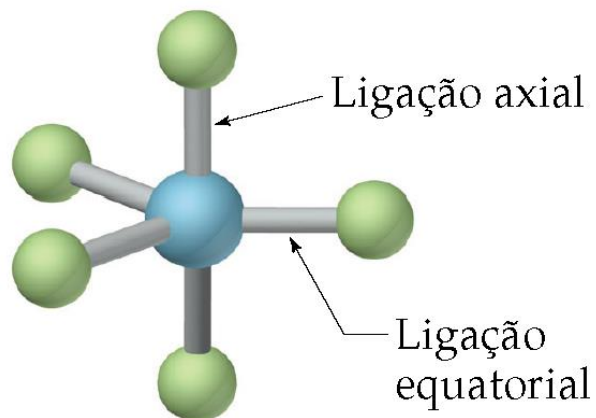


$$6 + 7(4) = 34$$

Sulfur Tetrafluoride



5 regiões eletrônicas, arranjo bipirâmide trigonal

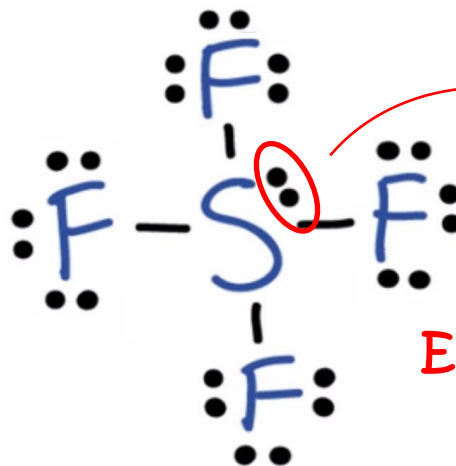


Modelo VSEPR

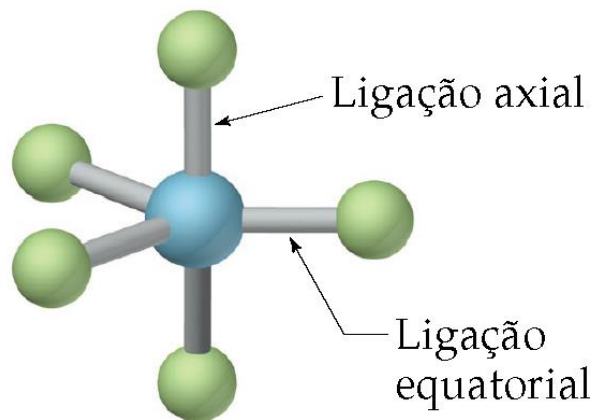


$$6 + 7(4) = 34$$

Sulfur Tetrafluoride



5 regiões eletrônicas, arranjo bipirâmide trigonal

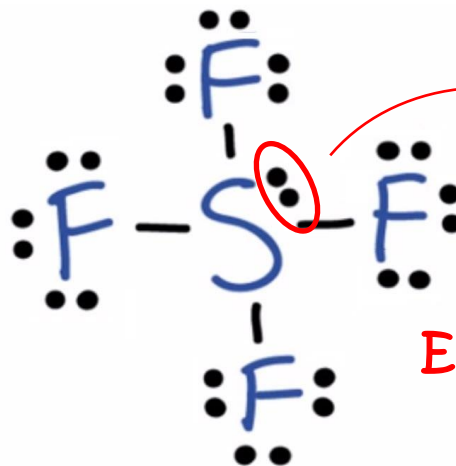


Modelo VSEPR



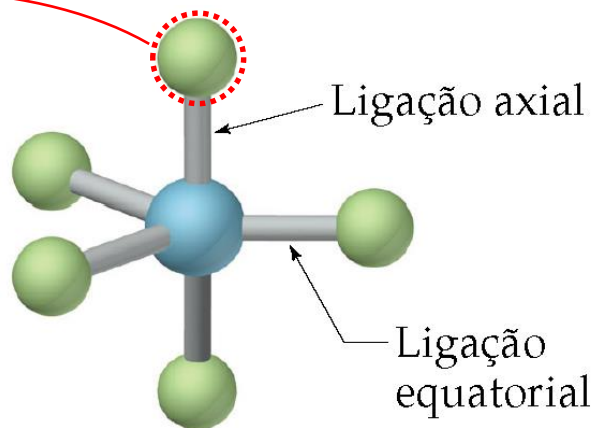
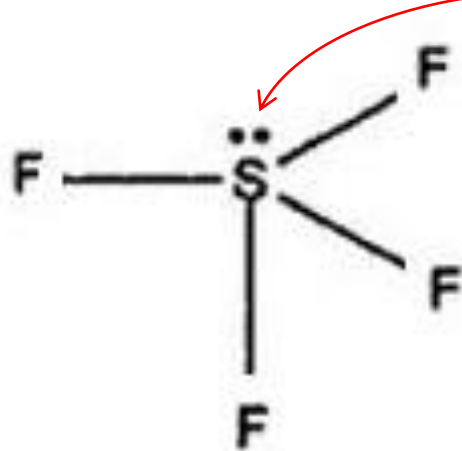
$$6 + 7(4) = 34$$

Sulfur Tetrafluoride



Em qual posição entra o par não ligado?

5 regiões eletrônicas, arranjo bipirâmide trigonal

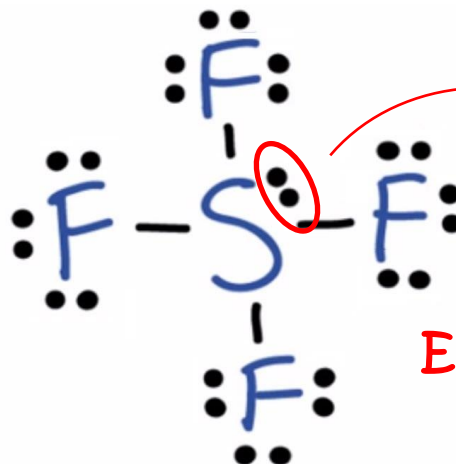


Modelo VSEPR



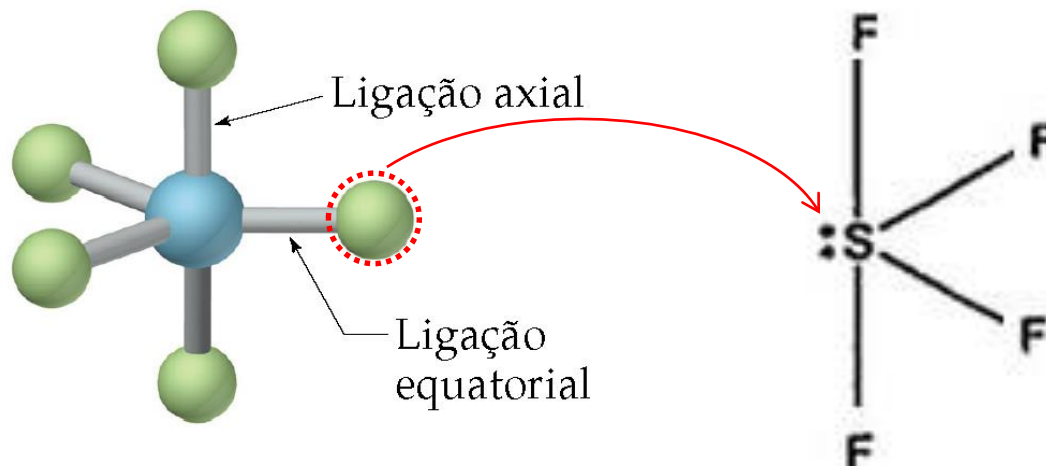
$$6 + 7(4) = 34$$

Sulfur Tetrafluoride



Em qual posição entra o par não ligado?

5 regiões eletrônicas, arranjo bipirâmide trigonal

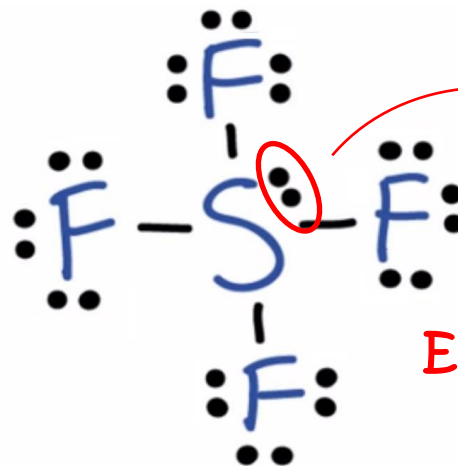


Modelo VSEPR



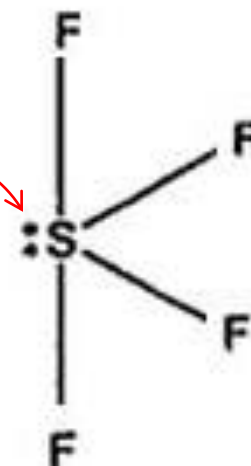
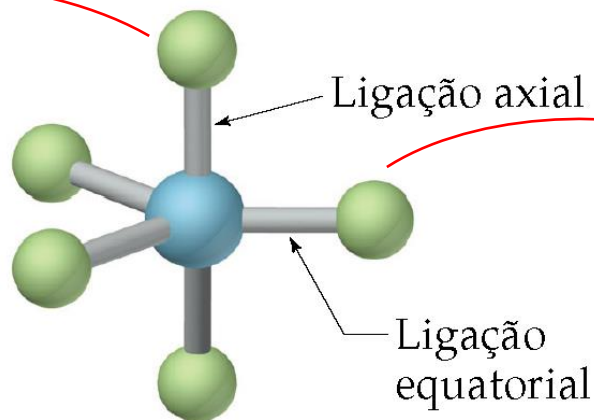
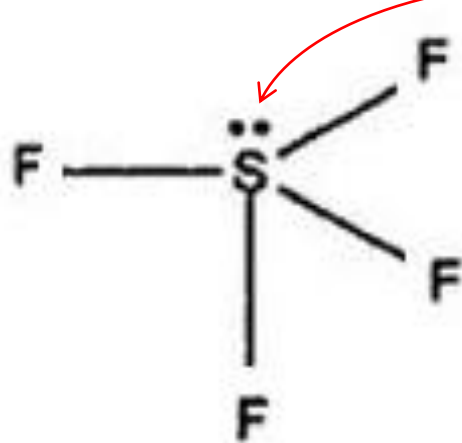
$$6 + 7(4) = 34$$

Sulfur Tetrafluoride



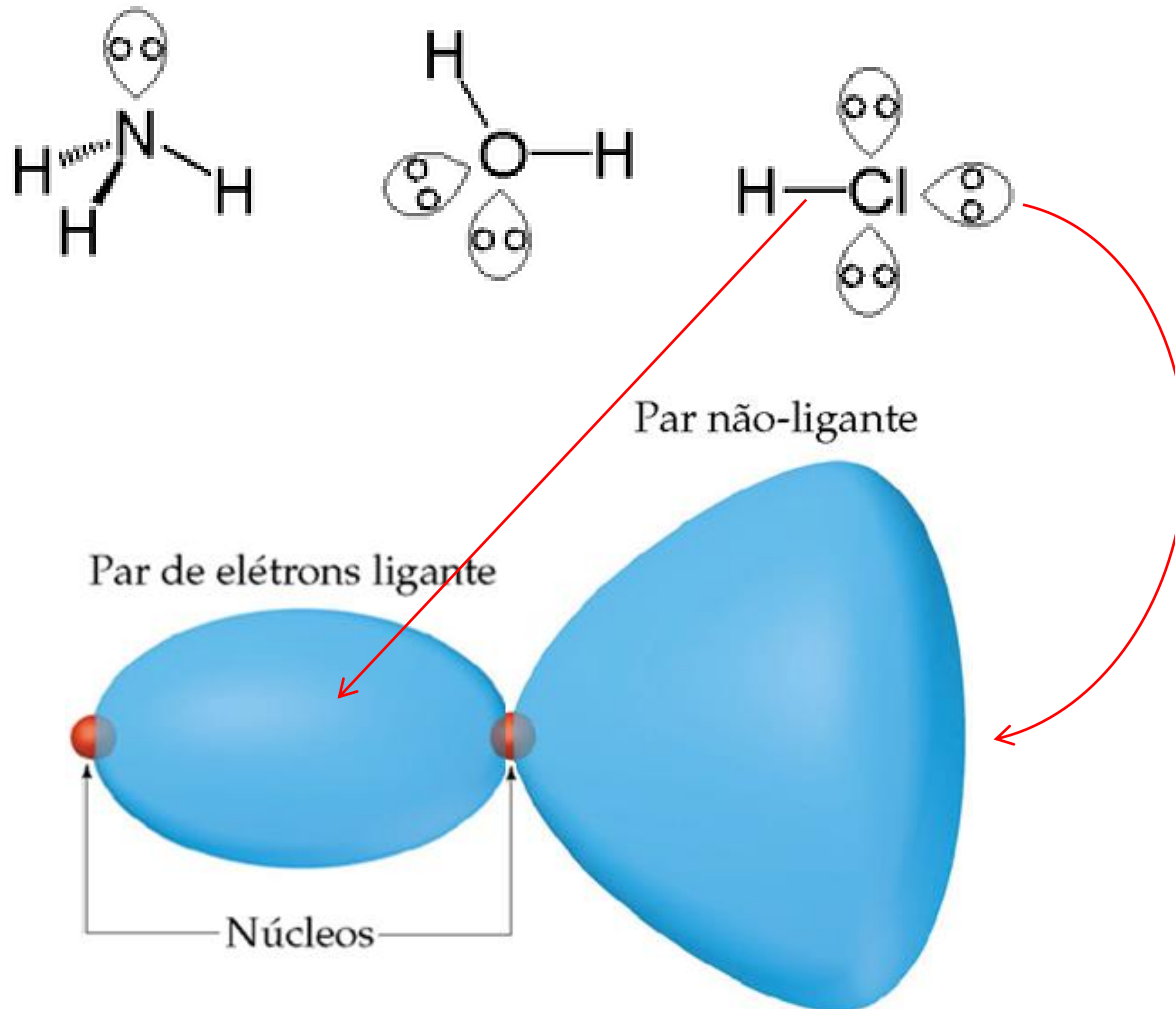
Em qual posição entra o par não ligado?

5 regiões eletrônicas, arranjo bipirâmide trigonal

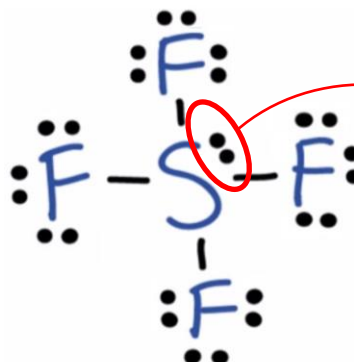
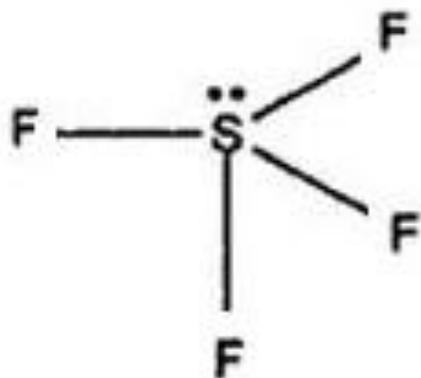


Modelo VSEPR

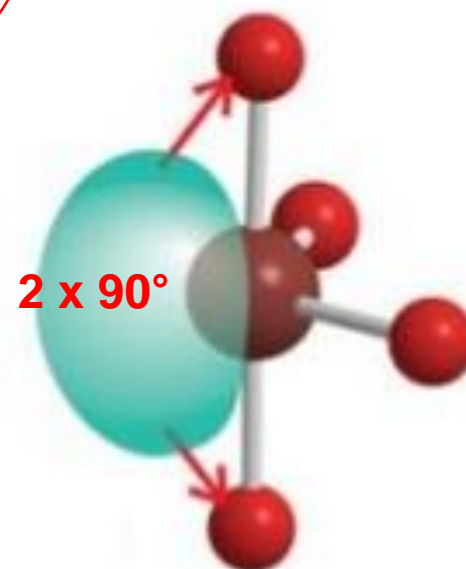
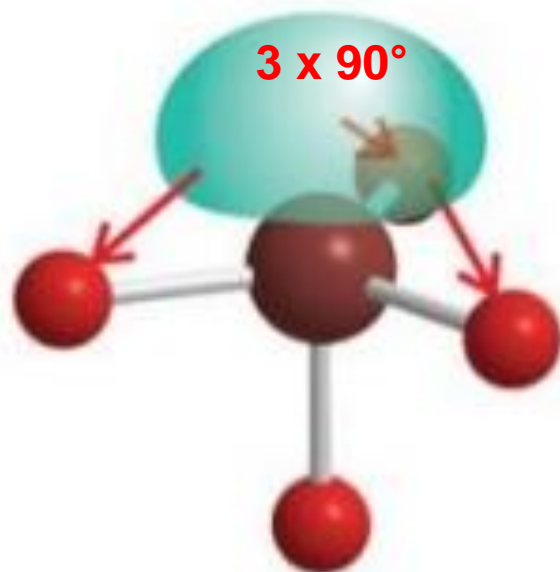
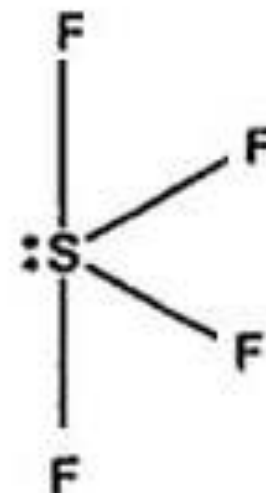
Pares de elétrons não-ligantes:



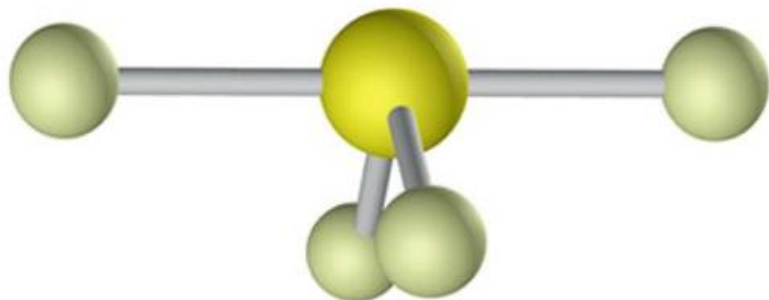
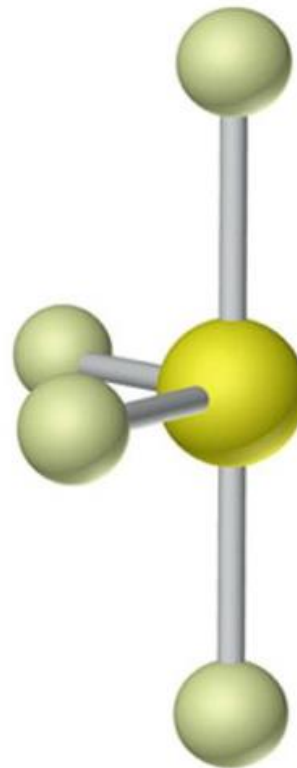
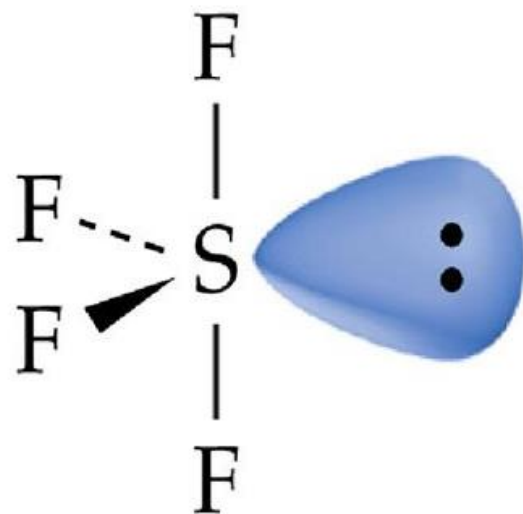
Modelo VSEPR



Em qual posição entra
o par não ligado?



Modelo VSEPR



“Gangorra”

Modelo VSEPR

Para minimizar a repulsão $e^- - e^-$ em um arranjo *bipirâmide trigonal*, os pares não-ligantes são sempre colocados em posições equatoriais.

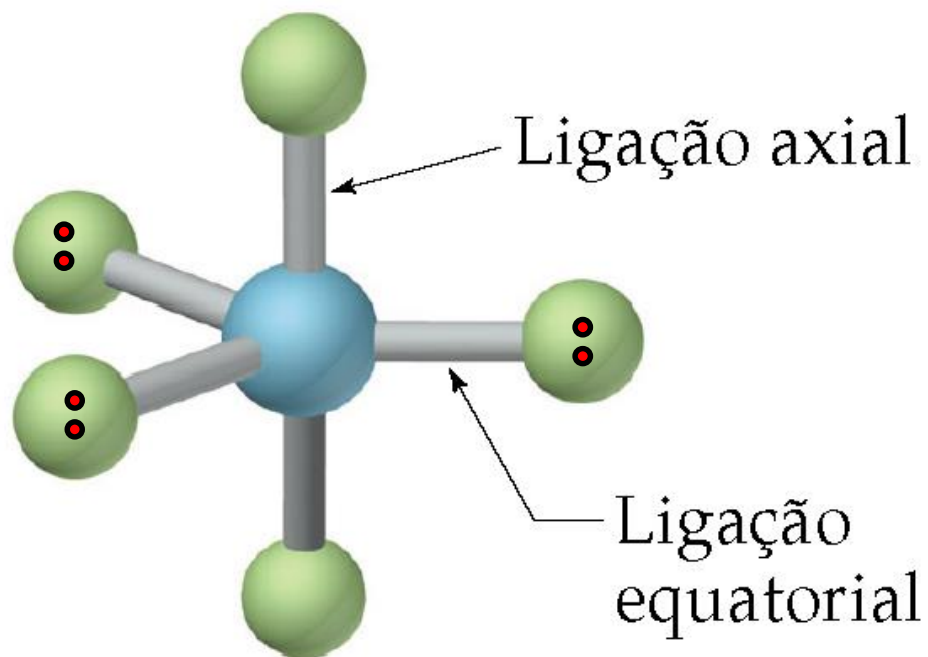
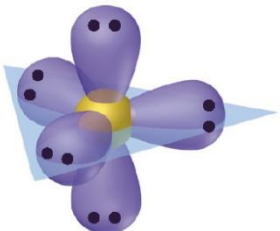
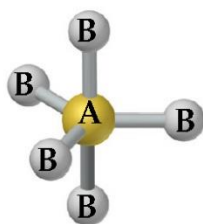
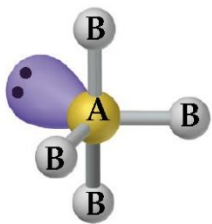
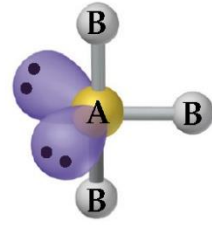
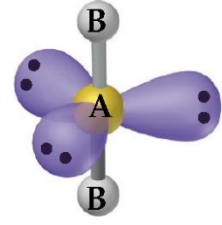


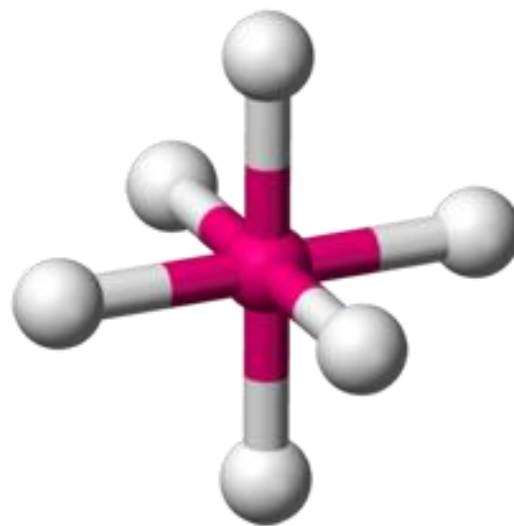
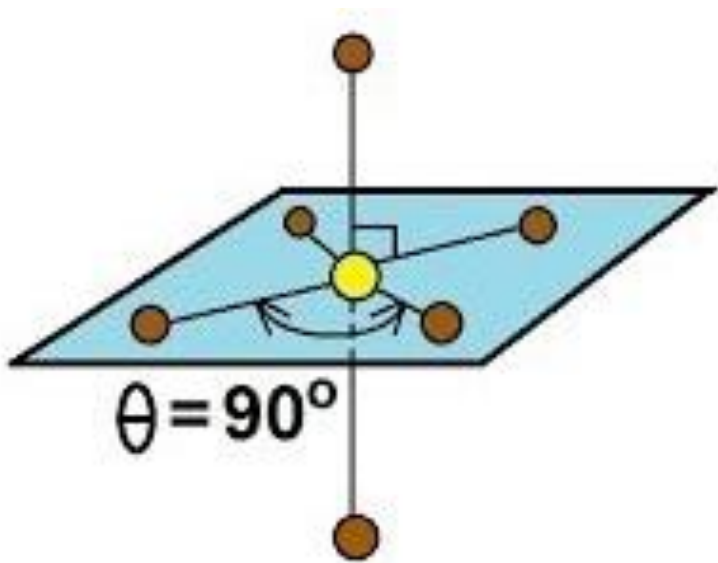
TABELA 9.3 Arranjos e formas espaciais para moléculas com cinco e seis domínios de elétrons ao redor do átomo central

Total de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
5	 Bipiramidal trigonal	5	0	 Bipiramidal trigonal	PCl ₅
		4	1	 Gangorra	SF ₄
		3	2	 Em 'T'	ClF ₃
		2	3	 Linear	XeF ₂

Modelo VSEPR

Moléculas com níveis de valência expandidos

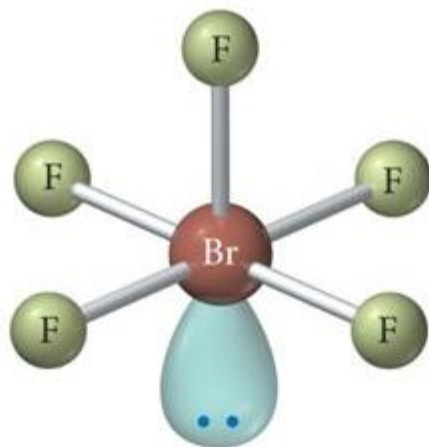
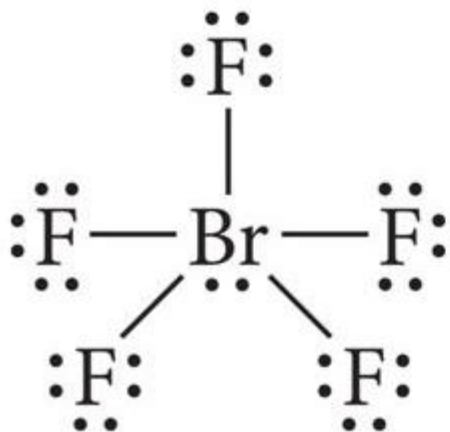
- Para as estruturas *octaédricas*, existe um plano contendo quatro pares de elétrons. Da mesma forma, o quinto e o sexto pares de elétrons estão localizados acima e abaixo desse plano.



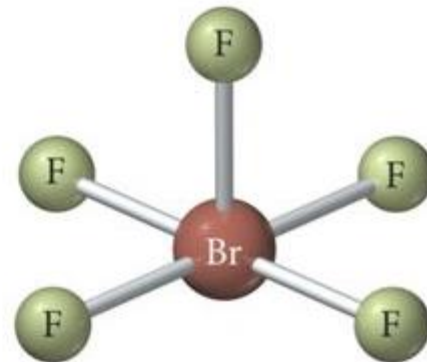
Modelo VSEPR

Moléculas com níveis de valência expandidos

- As seis posições do arranjo octaédrico são geometricamente equivalentes.
- O primeiro par de elétrons não-ligante entra em qualquer posição.



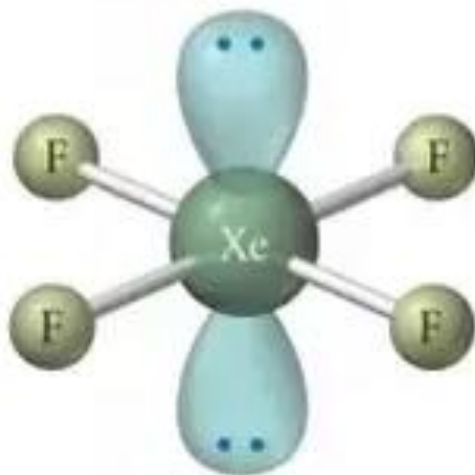
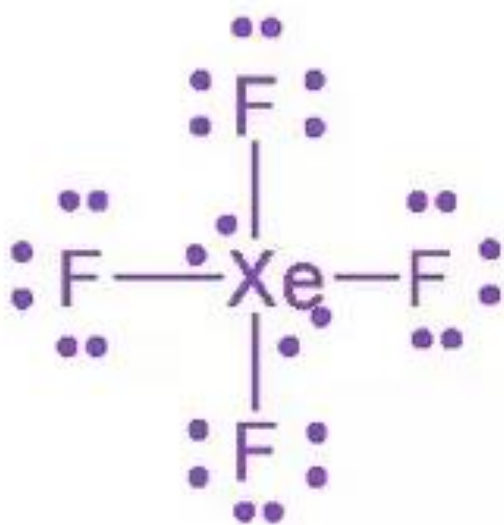
Arranjo
octaédrico



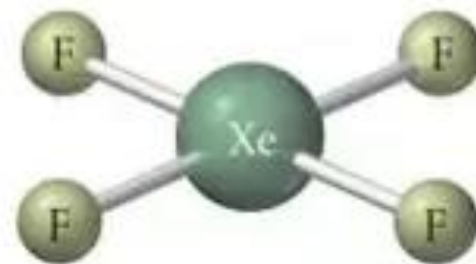
Geometria
piramidal quadrada

Modelo VSEPR

- Para minimizar a repulsão $e^- \leftrightarrow e^-$ num arranjo *octaédrico com dois pares de elétrons não-ligantes*, eles devem ser colocados em posições opostas (180°).

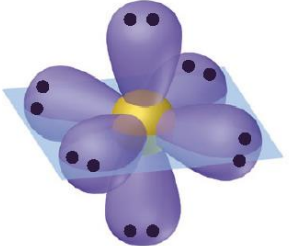
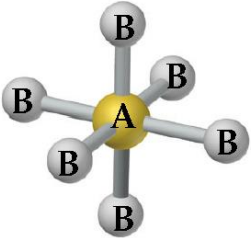
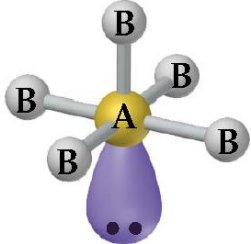
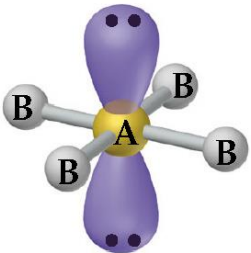


Arranjo
octaédrico



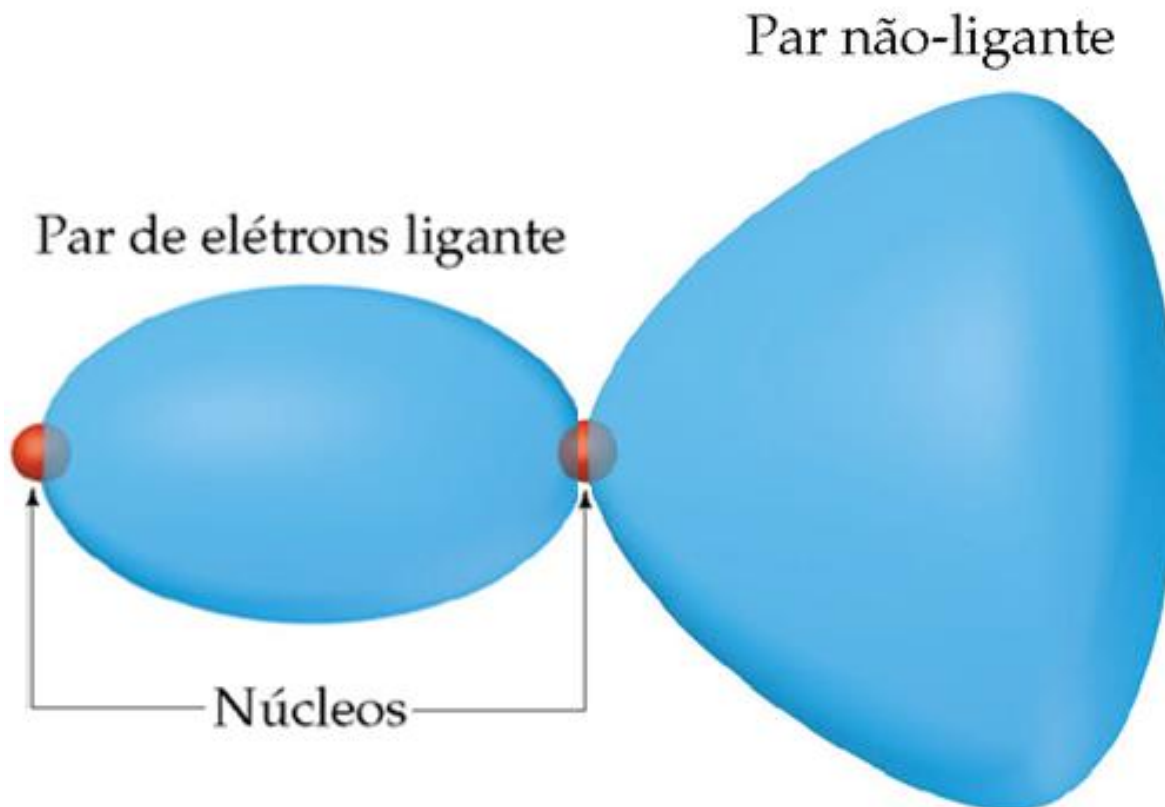
Geometria
quadrática plana

TABELA 9.3 Arranjos e formas espaciais para moléculas com cinco e seis domínios de elétrons ao redor do átomo central

Total de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
6	 Octaédrico	6	0	 Octaédrica	SF_6
		5	1	 Piramidal quadrada	BrF_5
		4	2	 Quadrática plana	XeF_4

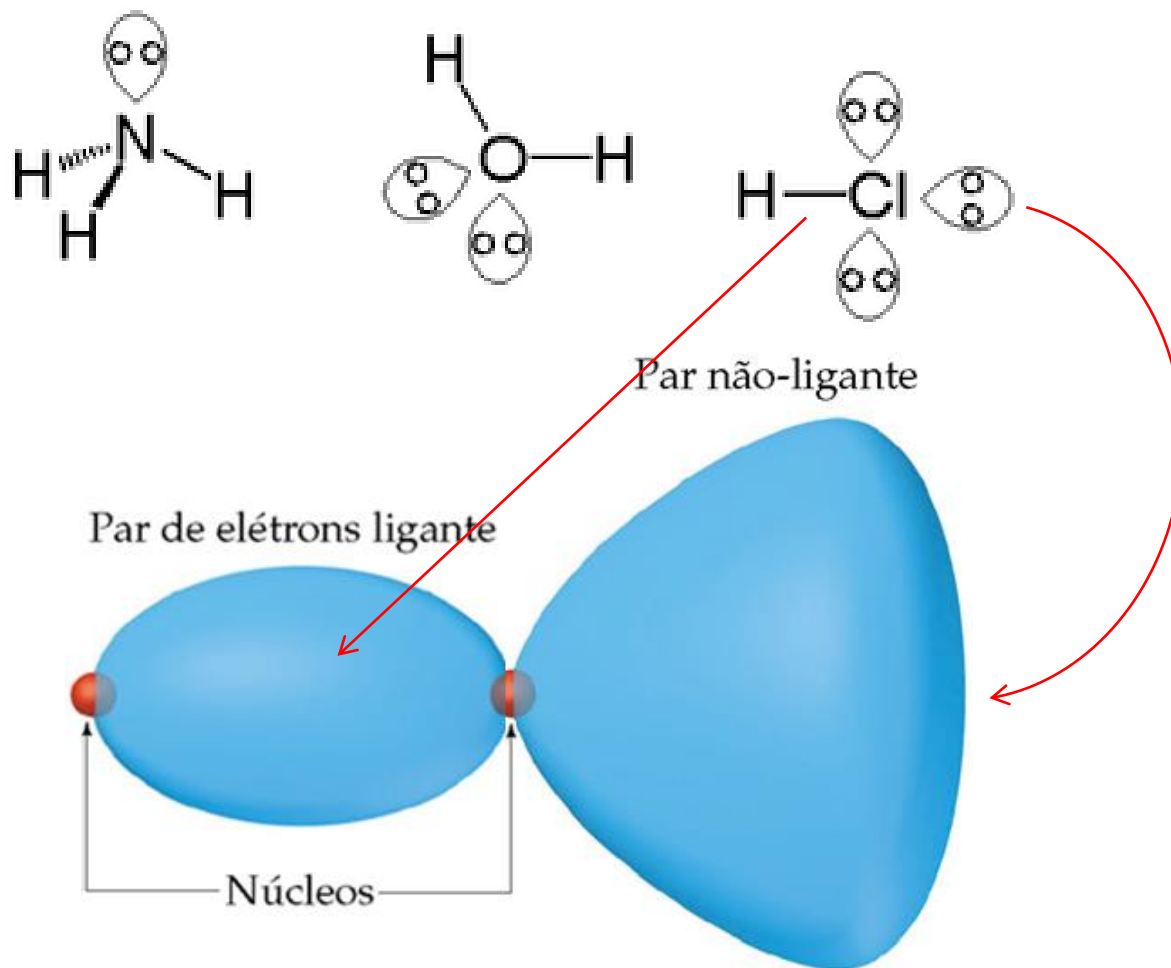
Modelo VSEPR

O efeito dos elétrons não-ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação



Modelo VSEPR

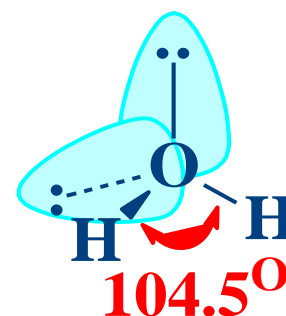
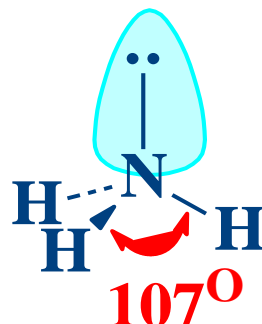
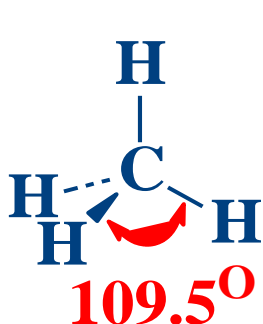
O efeito dos elétrons não-ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação



Modelo VSEPR

O efeito dos elétrons não-ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação

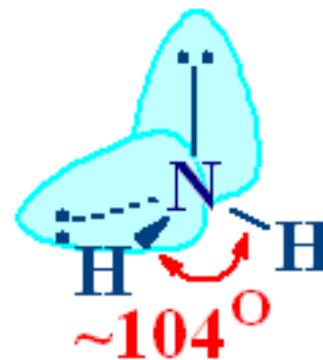
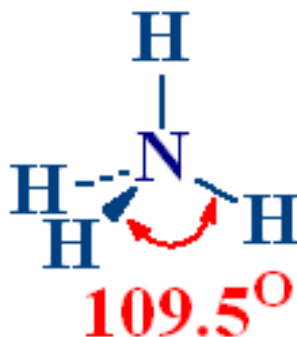
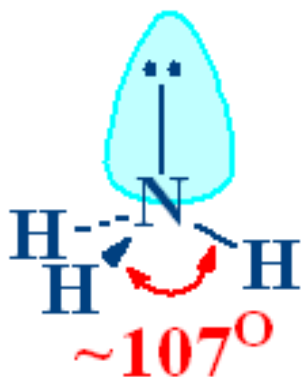
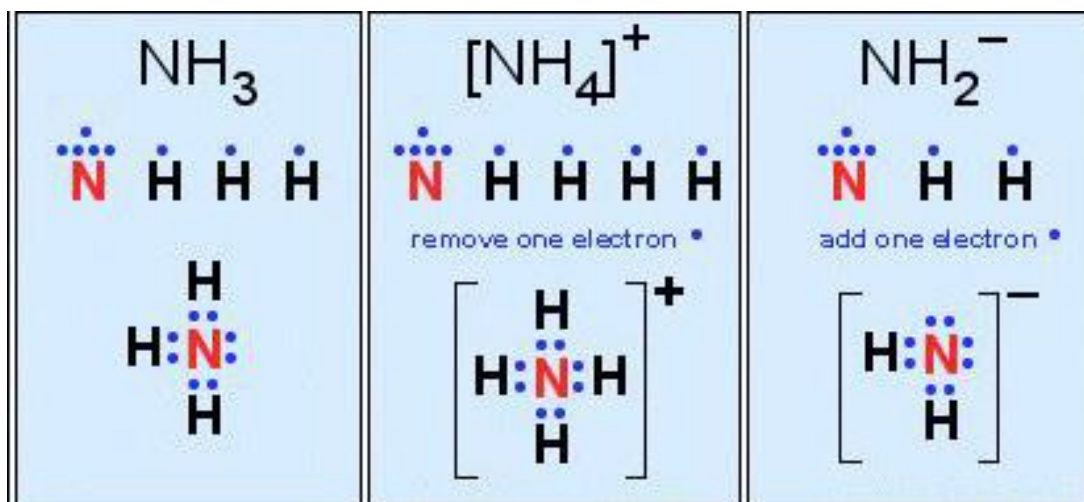
- No nosso modelo experimental, o ângulo de ligação H-X-H diminui ao passarmos do C para o N e para o O:



- Como os elétrons em uma ligação são atraídos por dois núcleos, eles não se repelem tanto quanto os pares não ligantes.
- Conseqüentemente, os ângulos de ligação diminuem quando o número de pares de elétrons não-ligantes aumenta.

Modelo VSEPR

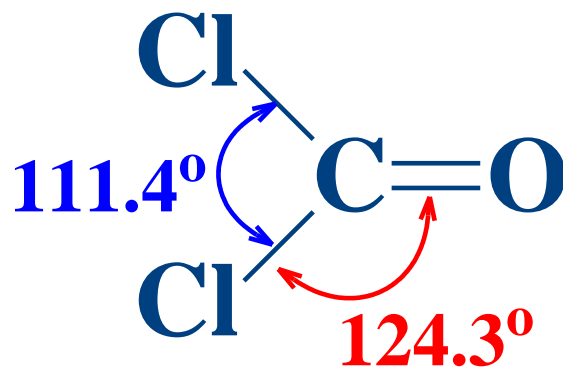
O efeito dos elétrons não-ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação



Modelo VSEPR

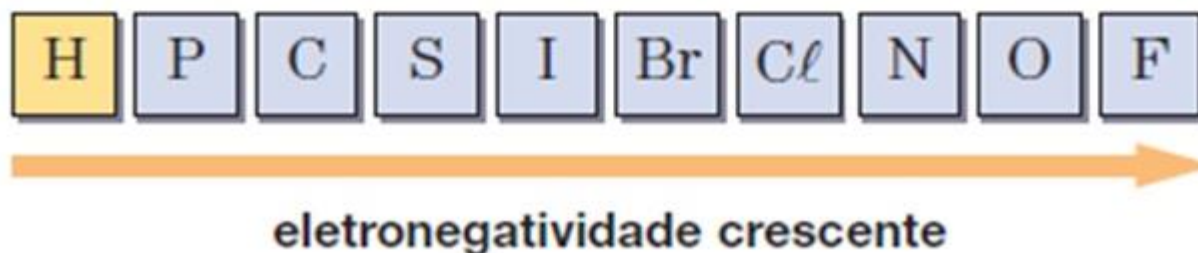
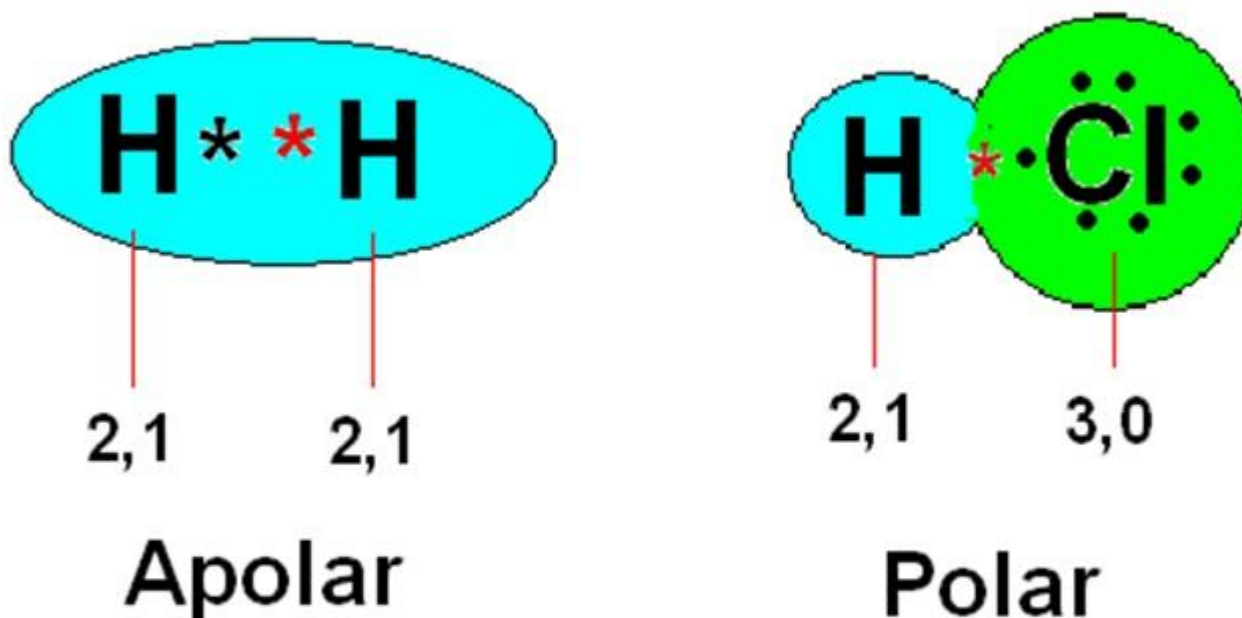
O efeito dos elétrons não-ligantes e ligações múltiplas nos ângulos de ligação

- Os elétrons nas ligações múltiplas se repelem mais do que os elétrons nas ligações simples.

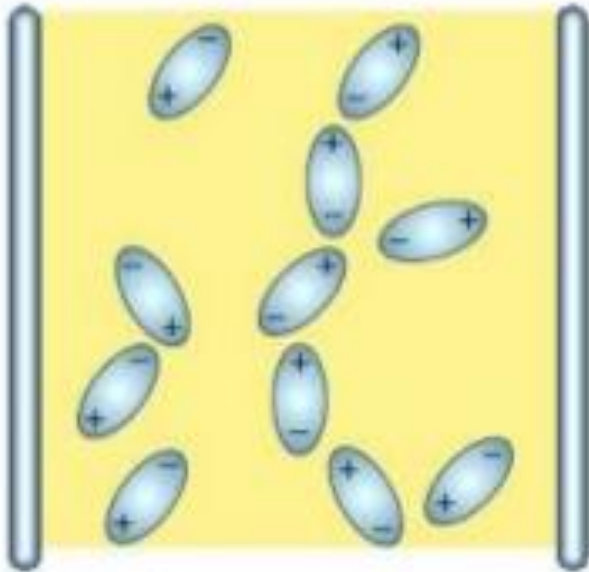


Forma molecular e polaridade molecular

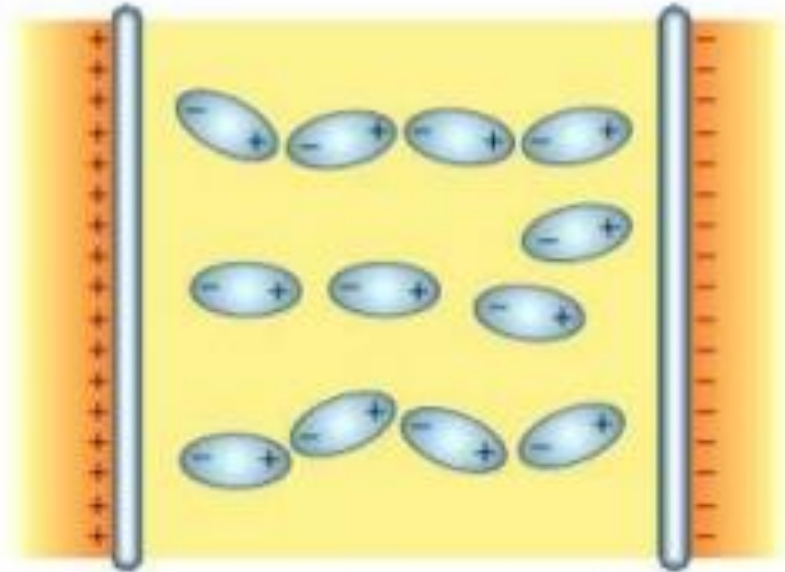
Polaridade das ligações



Forma molecular e polaridade molecular



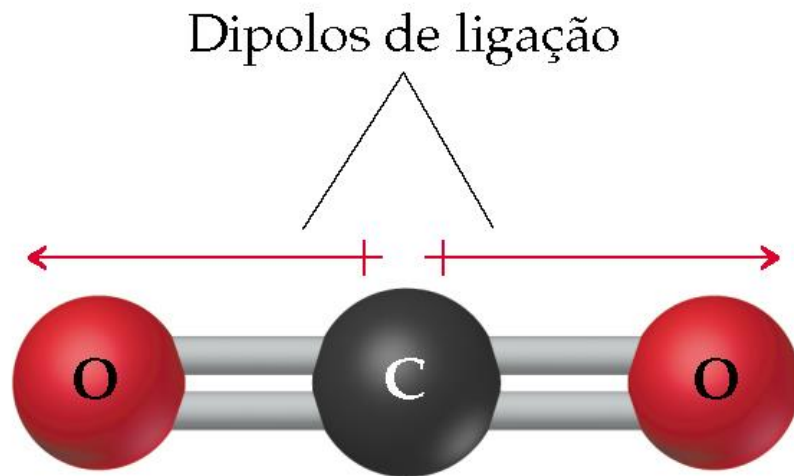
Sem a ação do campo elétrico, as moléculas polares se dispõem ao acaso.



Sob a ação do campo elétrico, as moléculas polares se orientam, procurando voltar seu lado positivo na direção das cargas negativas do campo elétrico e vice-versa.

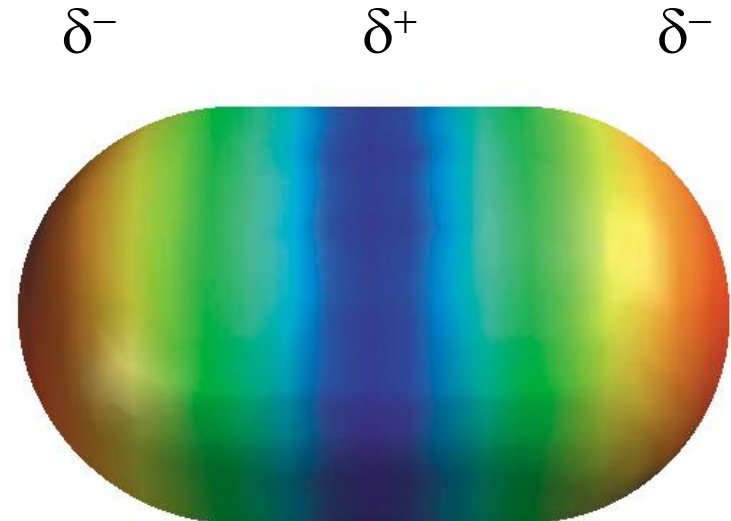
Forma molecular e polaridade molecular

- É possível que uma molécula que contenha ligações polares não seja polar.
- Por exemplo, os dipolos de ligação no CO_2 **cancelam-se** *porque o CO_2 é linear*.



Momento de dipolo total = 0

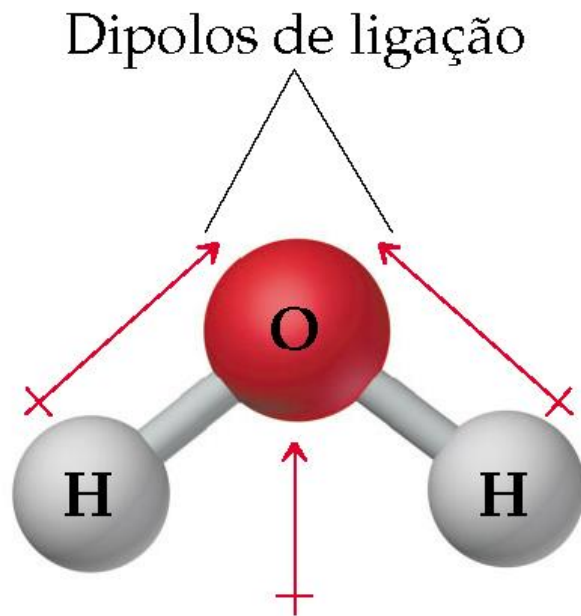
(a)



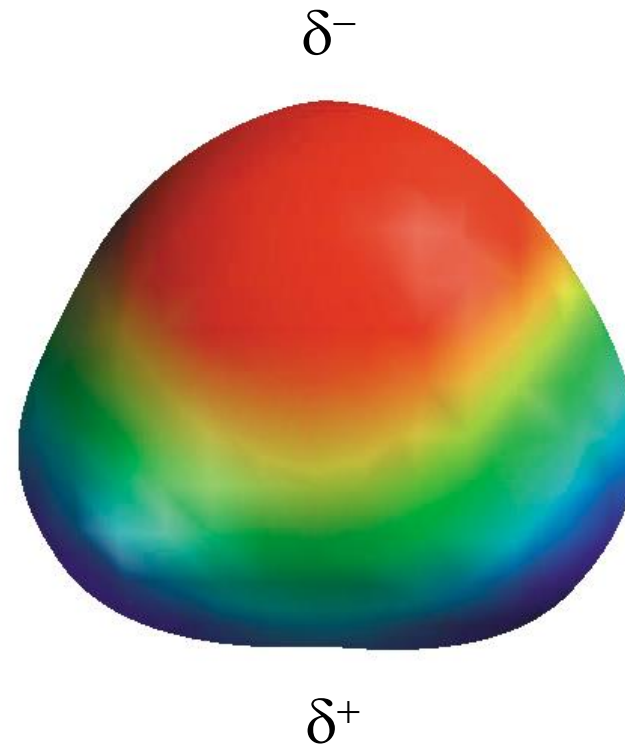
(b)

Forma molecular e polaridade molecular

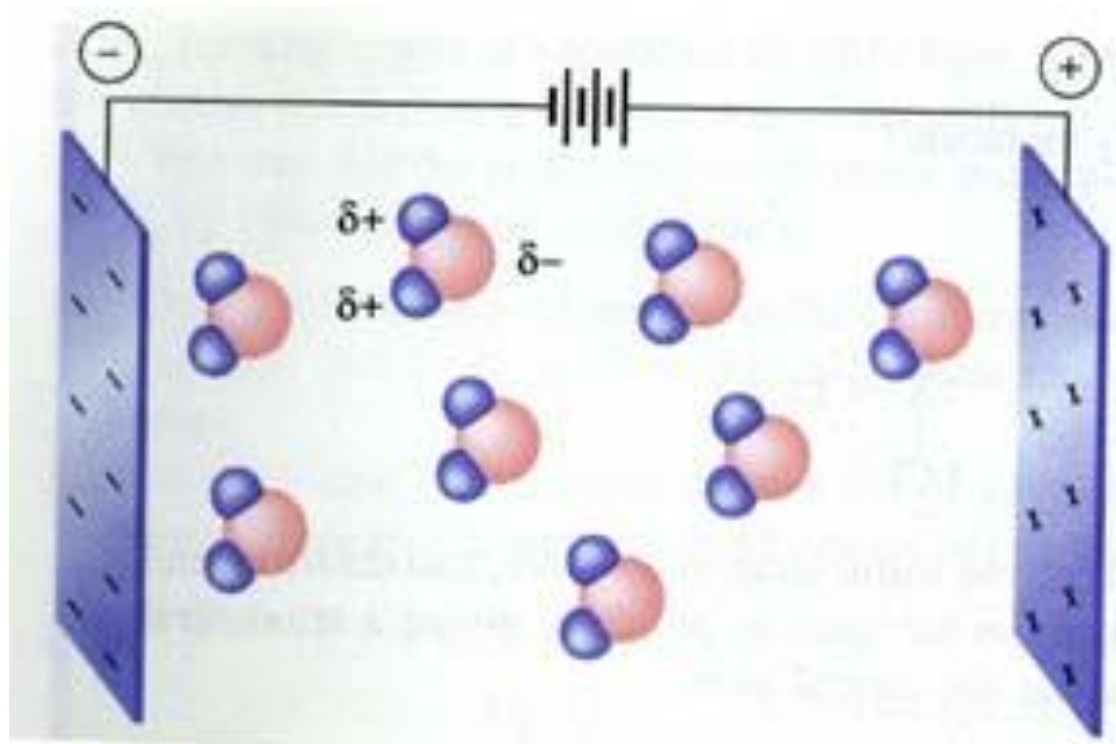
- Na água, a molécula não é linear e os dipolos de ligação não se cancelam. Consequentemente, a água é uma molécula polar.



Momento
de dipolo
total
($\mu \neq 0$)

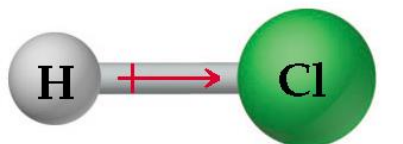


Forma molecular e polaridade molecular

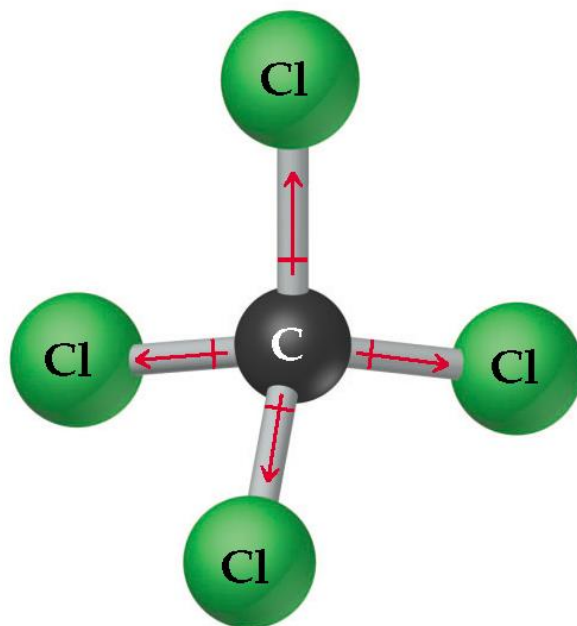


Forma molecular e polaridade

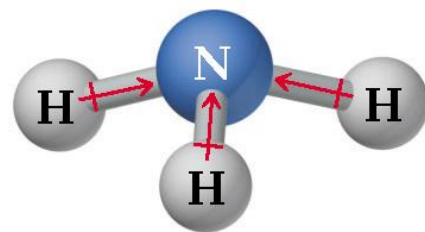
A polaridade de uma molécula *depende da sua geometria molecular*.



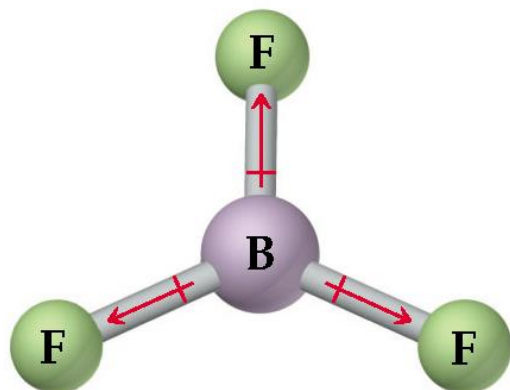
Polar ($\mu \neq 0$)



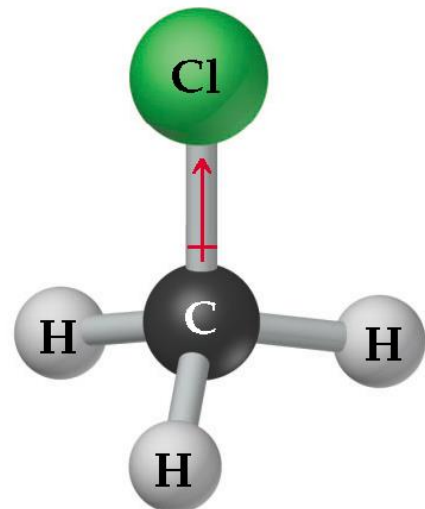
Apolar ($\mu = 0$)



Polar ($\mu \neq 0$)



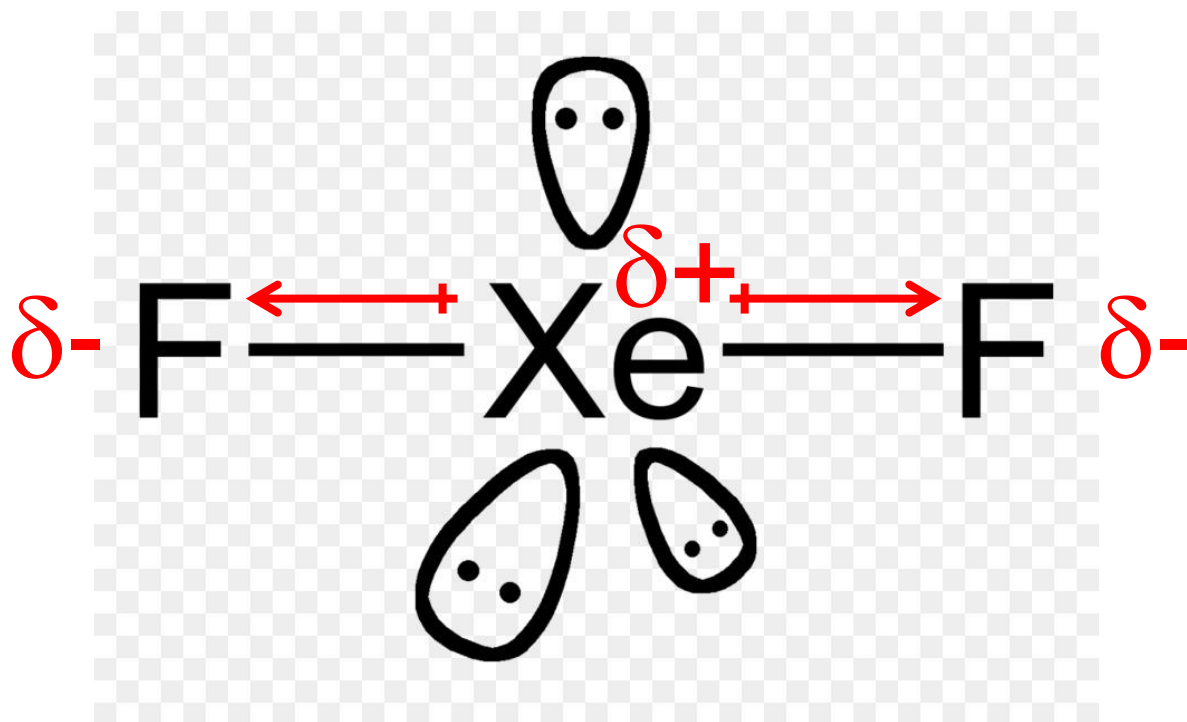
Apolar ($\mu = 0$)



Polar ($\mu \neq 0$)

Forma molecular e polaridade

A polaridade de uma molécula *depende da sua geometria molecular, e não da presença de pares de elétrons não ligados.*

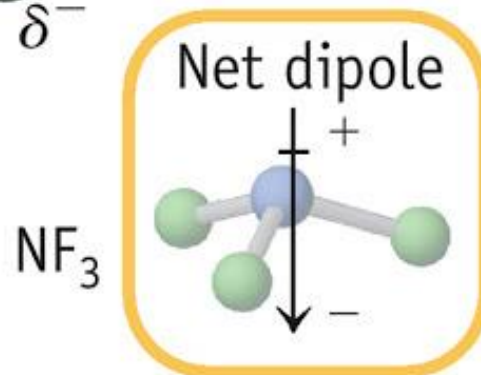
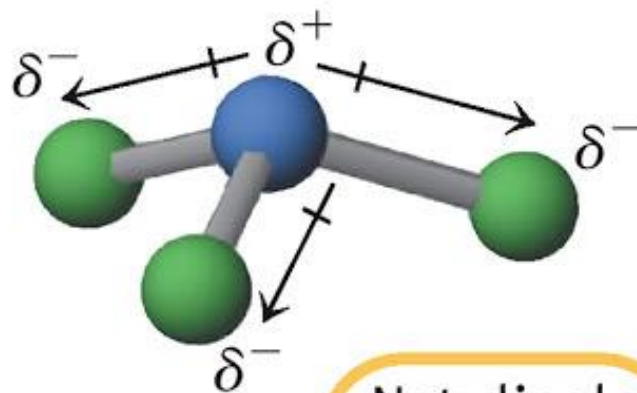
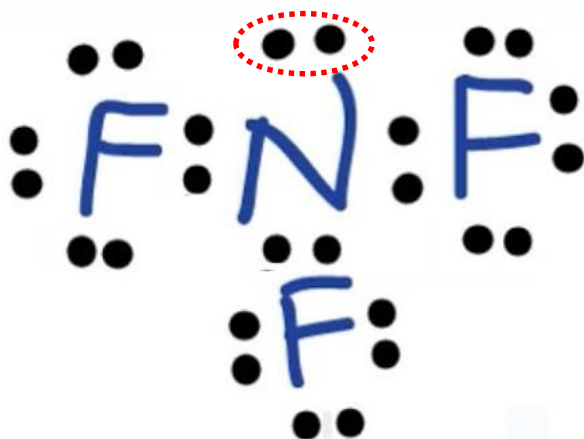


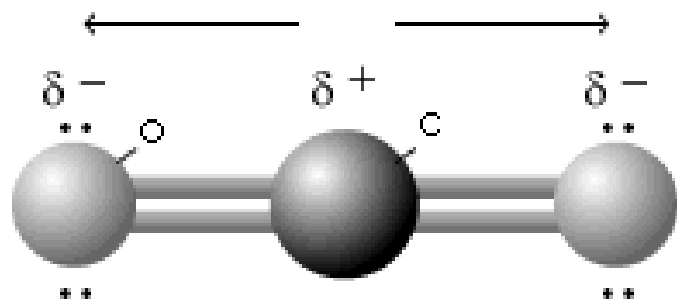
$\mu = 0$, apolar

Forma molecular e polaridade

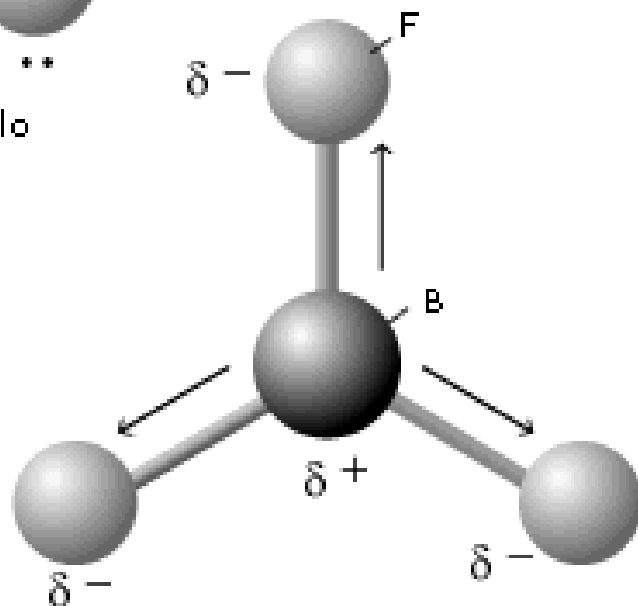
A polaridade de uma molécula *depende da sua geometria molecular*.

Par de elétrons não ligados no N, onde concentra-se a carga parcial *positiva*!!

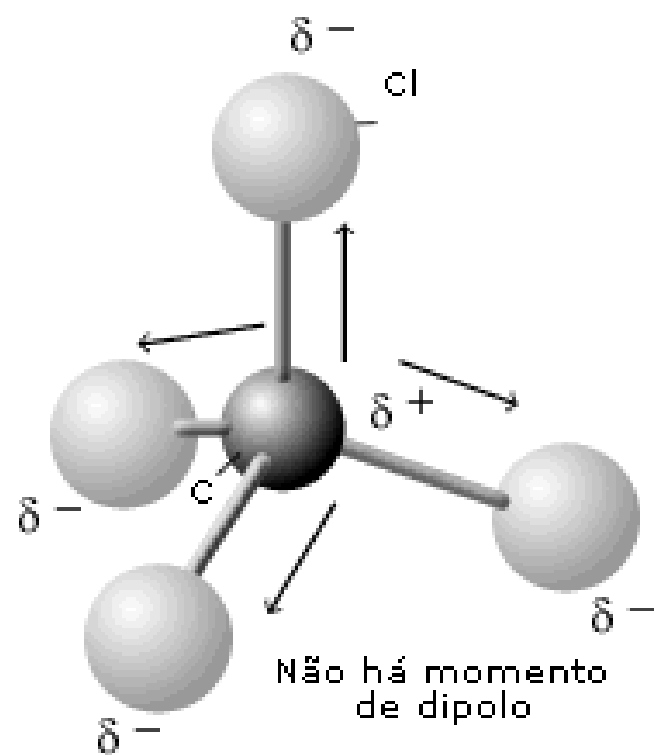




Não há momento de dipolo



Não há momento de dipolo



Não há momento de dipolo



