



QUÍMICA GERAL

LIGAÇÕES QUÍMICAS

EXPANSÃO E CONTRAÇÃO DO OCTETO

GEOMETRIA MOLECULAR

MÉTODO AXE

Geometria molecular

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 | |
| 1 | H | | | | | | | | | | | | | | | | | He |
| 2 | Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne |
| 3 | Na | Mg | | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 4 | K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 5 | Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 6 | Cs | Ba | | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 7 | Fr | Ra | | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og |

Expansão do octeto:

Ocorre somente com átomos de elementos não metálicos do terceiro período em diante, ou seja, que possuem três ou mais camadas eletrônicas. Isso porque esses átomos possuem orbitais *d* vazios que podem acomodar 10, 12 ou mais elétrons.

Exemplos: Fósforo, Enxofre

Al

O alumínio é um elemento do terceiro período, mas ele pode sofrer contração do octeto e ficar estável com menos de oito elétrons na camada de valência. Isso acontece quando ele forma compostos do tipo AlX_3 . "X" corresponde a um halogênio, como o flúor ou o cloro. Ex.: AlF_3

Geometria molecular

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 | |
| 1 | H | 2 | | | | | | | | | | | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | He |
| 2 | Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne |
| 3 | Na | Mg | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 4 | K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 5 | Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 6 | Cs | Ba | | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 7 | Fr | Ra | | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og |

Contração do octeto

Ocorre principalmente com os átomos de elementos do segundo período da tabela periódica. O berílio e o boro são exemplos de elementos cujos átomos sofrem contração ao formar compostos, além também de alguns óxidos de nitrogênio.

Exemplos: BeF_2 , BeF_3

Geometria molecular

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 | |
| 1 | H | | | | | | | | | | | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | He | |
| 2 | Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne |
| 3 | Na | Mg | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 4 | K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 5 | Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 6 | Cs | Ba | | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 7 | Fr | Ra | | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og |

Estáveis com um número ímpar de elétrons

São poucos os elementos em que isso ocorre, mas os mais comuns são os radicais livres NO, NO₂ e ClO₂, em que os elétrons na camada de valência dos átomos centrais são apenas 7.

**Os radicais livres são átomos ou grupos de átomos que apresentam um ou mais elétrons livres (valências livres).*

Assim, deve-se ter em mente que os radicais livres são espécies químicas neutras e não devem ser confundidos com os íons, que são estruturas carregadas eletricamente.

Geometria molecular

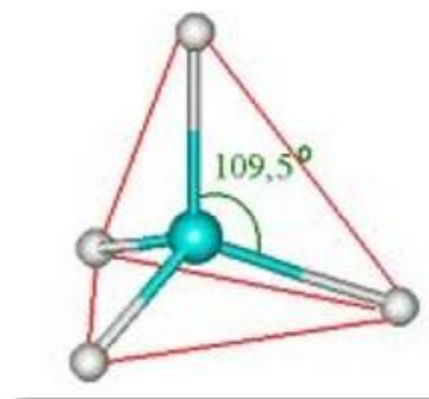
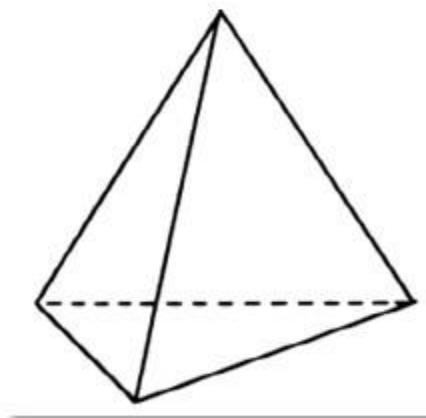
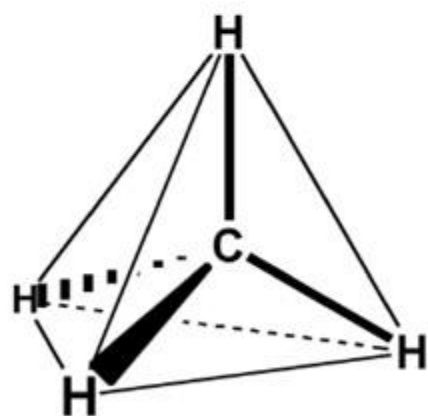
O carbono

Já sabemos que o carbono forma 4 ligações. Mas como estas ligações estão organizadas no espaço?

Na verdade as quatro ligações do carbono sp^3 possuem um arranjo tetraédrico

As ligações formam ângulos de $109,5^\circ$ entre elas, ao contrário da ideia do carbono planar (90°), mas porque?

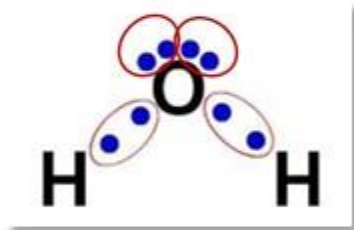
As ligações apontam para os vértices de um tetraedro, que é uma pirâmide de três lados, também conhecida como pirâmide de base triangular.



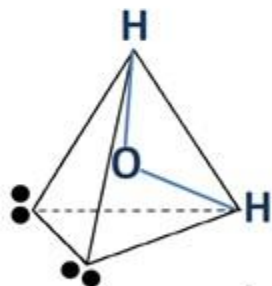
Geometria molecular

A água

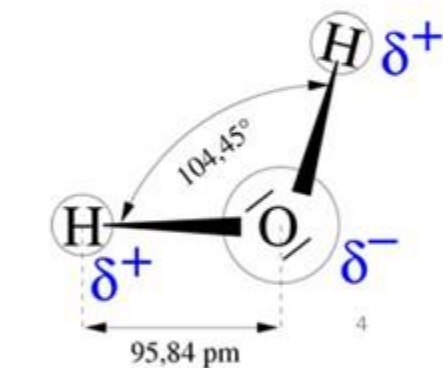
Numa molécula existem zonas de atração e repulsão eletrostática, como as repulsões entre os pares eletrônicos da ligação e outros elétrons da molécula, assim, as ligações irão assumir posições onde terão repulsão eletrostática e estérica mínima.



Arranjo eletrônico tetraédrico da água



Embora o arranjo eletrônico da água seja tetraédrico, sua geometria molecular é ANGULAR

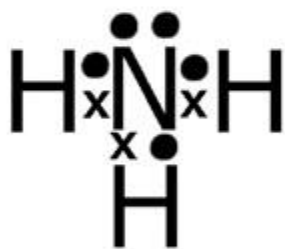


Na água os núcleos dos hidrogênios se repelem entre si, assim como os pares de elétrons das ligações também se repelem entre si e com o pares elétrons livres do oxigênio.

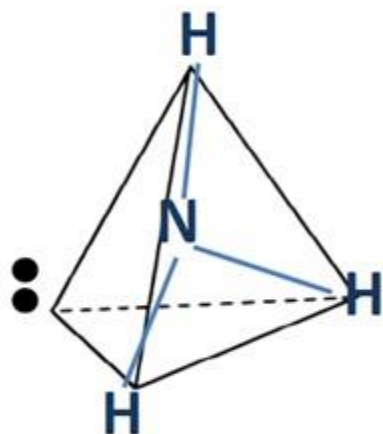
Geometria molecular

A amônia

Encontre o arranjo eletrônico da amônia (NH_3)



Estrutura de Lewis da amônia (NH_3)



Arranjo eletrônico tetraédrico

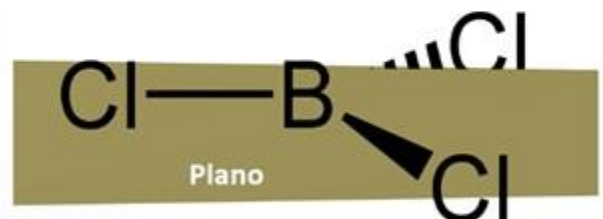
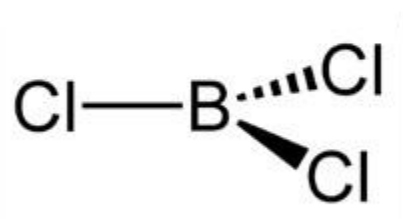
Geometria molecular

As cunhas

Para representar as orientações espaciais das ligações químicas, nós utilizamos as cunhas. Para indicar que uma ligação está no plano usamos uma reta normal, para indicar a ligação atrás do plano usamos uma cunha tracejada e para indicar a ligação à frente de plano usamos a cunha fechada.

Exemplo

Tricloreto de Boro BCl_3



Geometria molecular

Método AXE

A geometria irá depender do número estérico (zonas de repulsão) ao redor do átomo central, isto é, o somatório dos pares de elétrons livres e do número de átomos ligados (para eletrônicos ligantes)

Método AXE

A Átomo central

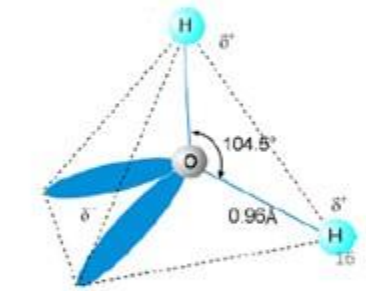
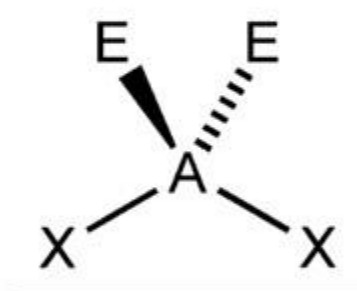
X_n Átomos ligado ao átomo central, onde n é o número de átomos ligados

E_n Pares eletrônicos LIVRES ao redor do átomo central, onde n é o número de pares eletrônicos

O **número estérico** (NE) é definido como o **número total de pares eletrônicos** (ligantes ou não ligantes) ao redor do átomo central.

Exemplo

A Água possui configuração AX_2E_2



Geometria molecular

Método AXE

A geometria irá depender do número estérico (zonas de repulsão) ao redor do átomo central, isto é, o somatório dos pares de elétrons livres e do número de átomos ligados (para eletrônicos ligantes)

Método AXE

A Átomo central

X_n Átomos ligados ao átomo central, onde n é o número de átomos ligados

E_n Pares eletrônicos LIVRES ao redor do átomo central, onde n é o número de pares eletrônicos

Exemplo

AX_2

Arranjo eletrônico

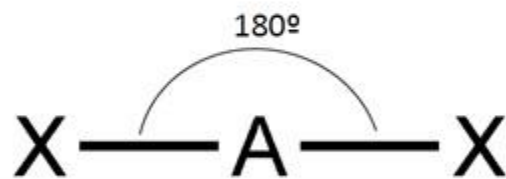
linear

Geometria molecular

linear

Número estérico

2



Neste tipo de configuração o ângulo de 180° entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo



Arranjo eletrônico

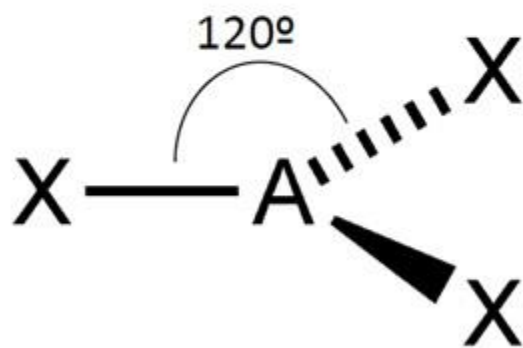
Trigonal Plana

Geometria molecular

Trigonal Plana

Número estérico

3



Neste tipo de configuração o ângulo de 120° entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica.

Exemplo



Arranjo eletrônico

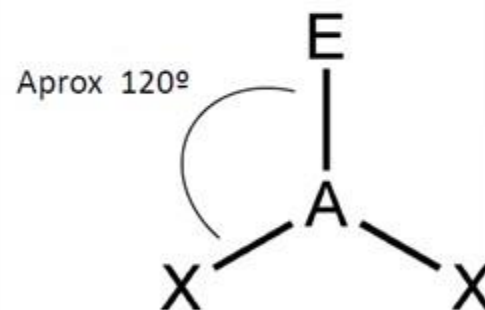
Trigonal plana

Geometria molecular

angular

Número estérico

3



Neste tipo de configuração o ângulo aproximado de 120° entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo

AX₄

Arranjo eletrônico

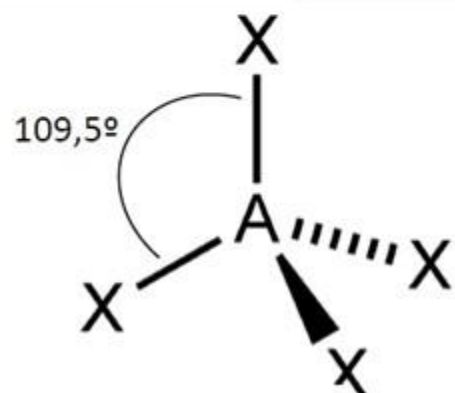
Tetraédrico

Geometria molecular

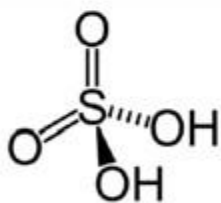
Tetraédrico

Número estérico

4



Neste tipo de configuração o ângulo 109,5° entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica



Exemplo

AX₃E

Arranjo eletrônico

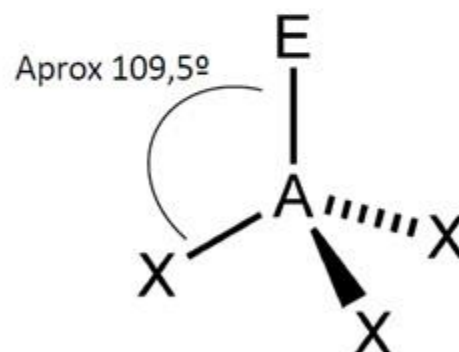
Tetraédrico

Geometria molecular

Piramidal

Número estérico

4



Neste tipo de configuração o ângulo aproximado de 109,5° entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo

AX₄

Arranjo eletrônico

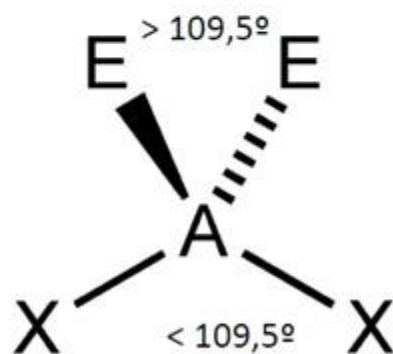
Tetraédrico

Geometria molecular

Angular

Número estérico

4



Neste tipo de configuração o ângulo aproximado de $109,5^\circ$ entre as ligações garante menor repulsão eletrostática e estérica

Exemplo

AX₅

Arranjo eletrônico

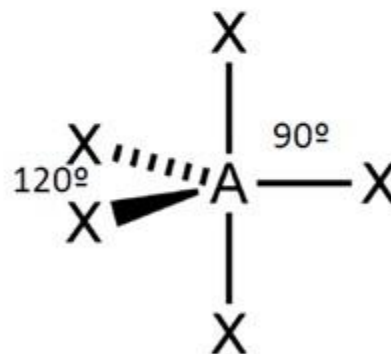
Bipiramidal Trigonal

Geometria molecular

Bipiramidal Trigonal

Número estérico

5



Neste tipo de configuração o de 90° entre as ligações axiais e equatoriais e 120° entre as ligações equatoriais garante menor repulsão eletrostática e estérica

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo

AX_4E

Arranjo eletrônico

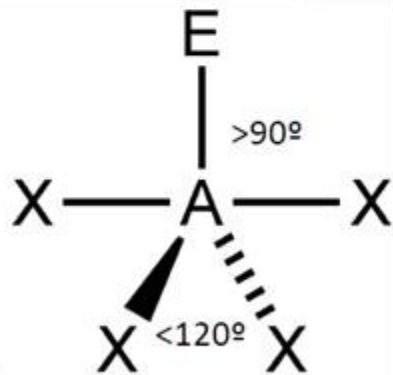
Bipiramidal Trigonal

Geometria molecular

Gangorra

Número estérico

5



Neste tipo de configuração os ângulos levemente maiores que 90° entre as ligações axiais e equatoriais e levemente menores que 120° entre as ligações equatoriais garante menor repulsão eletrostática e estérica

Exemplo

AX_3E_2

Arranjo eletrônico

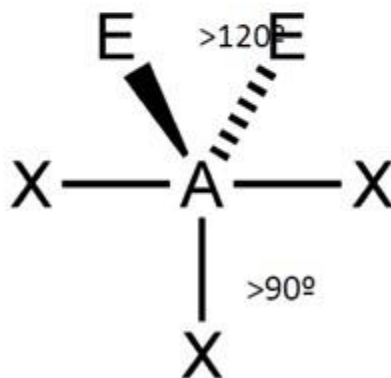
Bipiramidal Trigonal

Geometria molecular

Forma de T

Número estérico

5

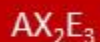


Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os mais distante possível um do outro assumindo ângulo levemente maiores que 120°

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo



Arranjo eletrônico

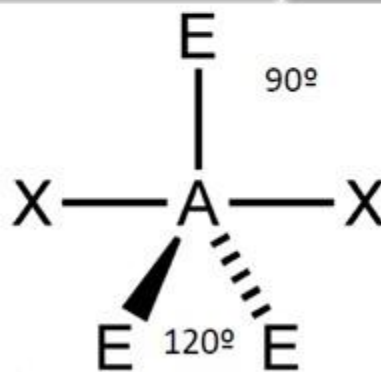
Bipiramidal Trigonal

Geometria molecular

Linear

Número estérico

5



Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os mais distante possível um do outro assumindo ângulo levemente maiores que 120°

Exemplo



Arranjo eletrônico

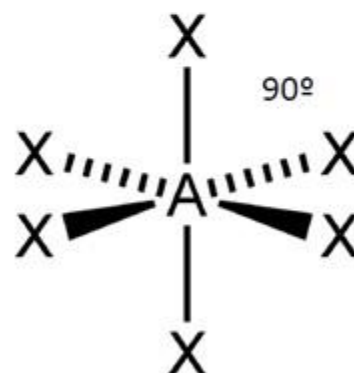
Octaédrico

Geometria molecular

Octaédrico

Número estérico

6



Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os mais distante possível um do outro assumindo ângulo levemente maiores que 120°

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo

AX_5E

Arranjo eletrônico

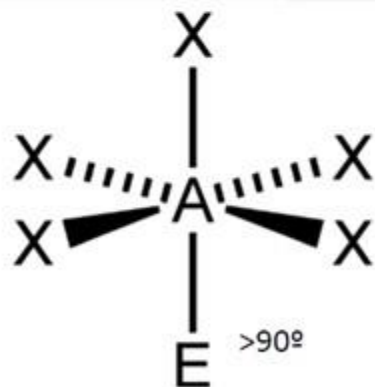
Octaédrico

Geometria molecular

Piramidal de base quadrada

Número estérico

6



Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os mais distante possível um do outro assumindo ângulos maiores que 90°

Exemplo

AX_4E_2

Arranjo eletrônico

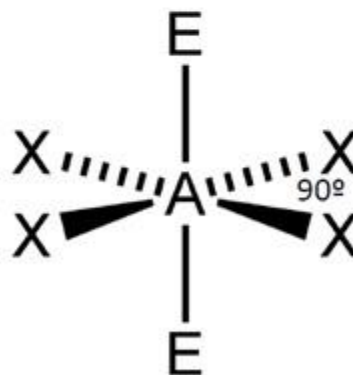
Octaédrico

Geometria molecular

Quadrado planar

Número estérico

6



Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os mais distante possível um do outro assumindo ângulo levemente maiores que 180° entre eles

Geometria molecular

Método AXE

Exemplo

AX_7

Arranjo eletrônico

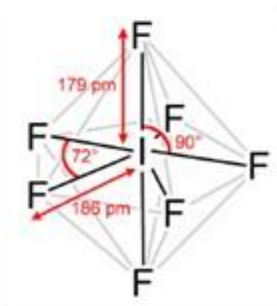
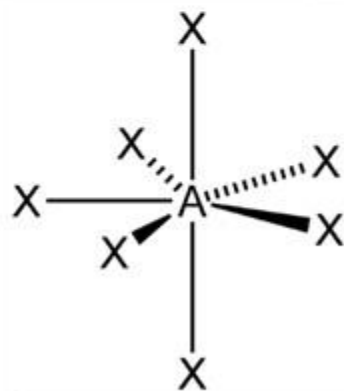
Bipiramidal de base pentagonal

Geometria molecular

Bipiramidal de base pentagonal

Número estérico

7



Exemplo

AX_6E

Arranjo eletrônico

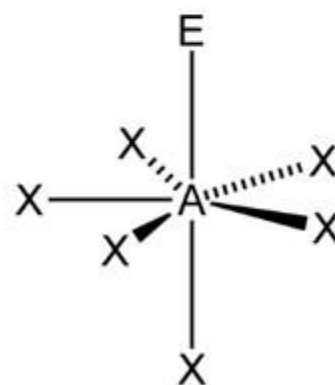
Bipiramidal de base pentagonal

Geometria molecular

Piramidal de base pentagonal

Número estérico

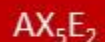
7



Geometria molecular

Método AXE

Exemplo



Arranjo eletrônico

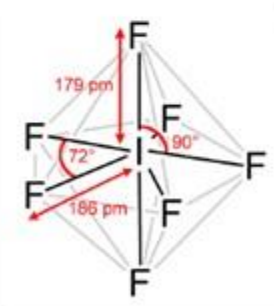
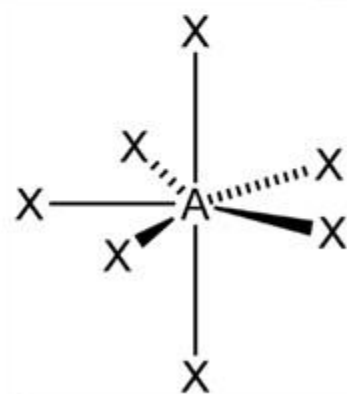
Bipiramidal de base pentagonal

Geometria molecular

Pentagonal Plana

Número estérico

7



Exemplo



Arranjo eletrônico

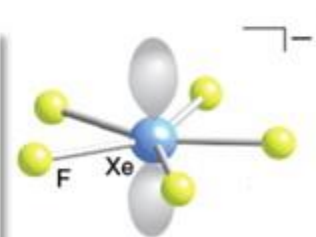
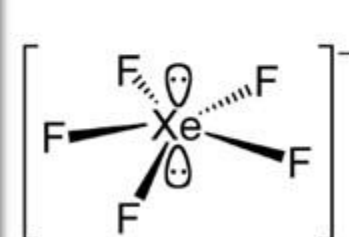
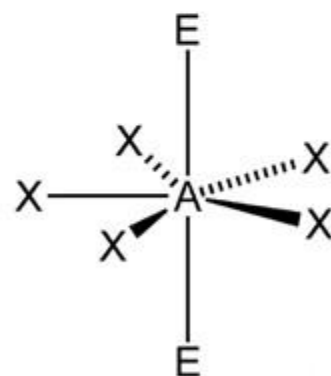
Bipiramidal de base pentagonal

Geometria molecular

Piramidal de base pentagonal

Número estérico

7



Geometria molecular

Método AXE

Número estérico (Zonas de repulsão)

