



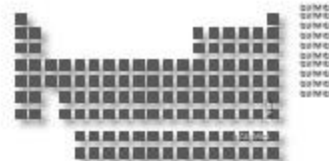
QUÍMICA GERAL

LIGAÇÕES QUÍMICAS

VSEPR – VALENCE SHELL ELECTRON PAIR REPULSION

GEOMETRIA MOLECULAR

HIBRIDIZAÇÃO



Geometria molecular

Geometria molecular

Distribuição espacial dos átomos em uma molécula

É essencial pra entender a polaridade dessas moléculas

Elétrons têm carga negativa, se repelem entre si

Esta repulsão eletrostática influencia de modo definitivo a geometria molecular, ou seja o formato do agrupamento de átomos que constitui a molécula.

Elétrons e Polos de Repulsão

Quando dois átomos se unem para formar uma molécula, suas eletrosferas entram em contato e o formato de seus orbitais (esféricos ou elípticos) influenciará o formato final da ligação.

REPECV OU RPECV

Teoria da repulsão dos pares de elétrons da camada de valência.

VSEPR – Valence Shell Electron Pair Repulsion

Repulsão eletrônica entre os pares de elétrons na camada de valência –

RPECV

ou REPECV

Geometria molecular

Zonas ou Polos de Repulsão



Um Polo de repulsão se cria em torno de uma ligação molecular

É a influência das cargas elétricas negativas dos elétrons na disposição geométrica da molécula.

Quem são os Polos de Repulsão?

Ao redor do átomo central



Ligação simples, dupla, tripla ou simplesmente 1 ligação sigma

Par de elétron livre ou elétron desemparelhado

Obs.: Basta ter um compartilhamento de elétrons para essa ligação ser classificada como sigma

1 nuvem eletrônica



sigma



Geometria molecular

POLOS DE REPULSÃO

sigma

Par de e- livres (não compartilhado)

e- livre ou desemparelhado

 σ

••

•



Obs.: Basta ter um compartilhamento de elétrons para essa ligação ser classificada como sigma

POLOS DE REPULSÃO

2 polos

Linear

3 polos

Trigonal plana ou trigonal

Angular

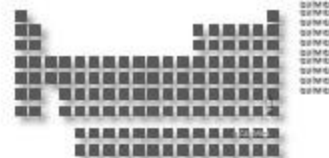
4 polos

Tetraédrica

Angular

Piramidal

Geometria molecular



49 B

A - 34

QUÍMICA GERAL |

JOTA

	Sigma	Par de e- livres	e- livre	Polos de Repulsão
	No átomo central	No átomo central	No átomo central	
— A —	2	0	0	2 polos
= A =	2	0	0	2 polos
A	3	0	0	3 polos
= A	3	0	0	3 polos
— A ≡	2	0	0	2 polos



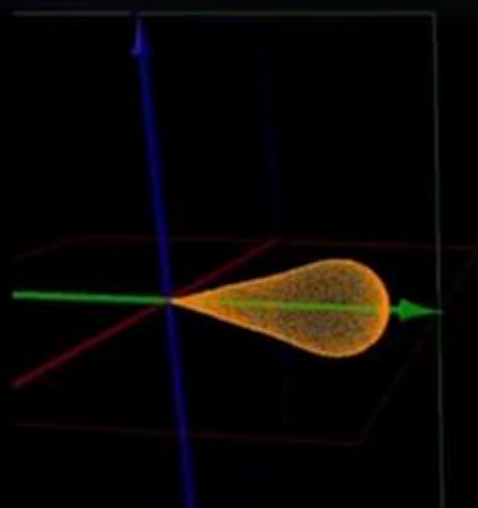
	Sigma	Par de e- livres	e- livre	Polos de Repulsão
	No átomo central	No átomo central	No átomo central	
— A =	2	0	1	3 polos
— A —	3	1	0	4 polos
— A —	2	2	0	4 polos
— A —	4	0	0	4 polos



Geometria molecular

Pré geometria

Como regiões de carga negativa se comportam no espaço



Ainda não é a geometria da molécula

Pré geometria

RPECV

Repulsão dos pares de e⁻ da CV

Nuvens eletrônicas

Regiões de carga negativa

Pode conter até 6 pares de elétrons

2 Regiões de carga negativa

= 2 nuvens eletrônicas

Diametralmente opostas

Na mesma linha

linear

3 Regiões de carga negativa

= 3 nuvens eletrônicas

No mesmo plano

Trigonal plana

4 Regiões de carga negativa

= 4 nuvens eletrônicas

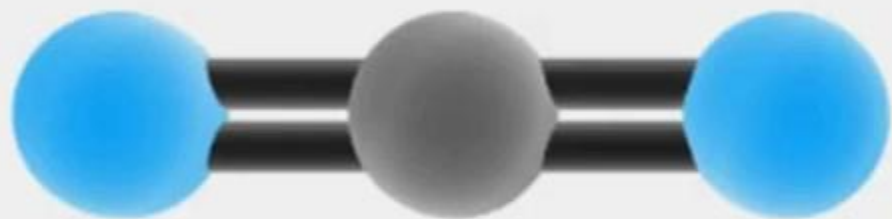
Não está no mesmo plano

Geometria espacial

Tetraédrica

Geometria molecular

Linear



3 Átomos

2 polos

Linear

180°

A geometria é entre os átomos

3 Átomos

2 polos

Linear

180°

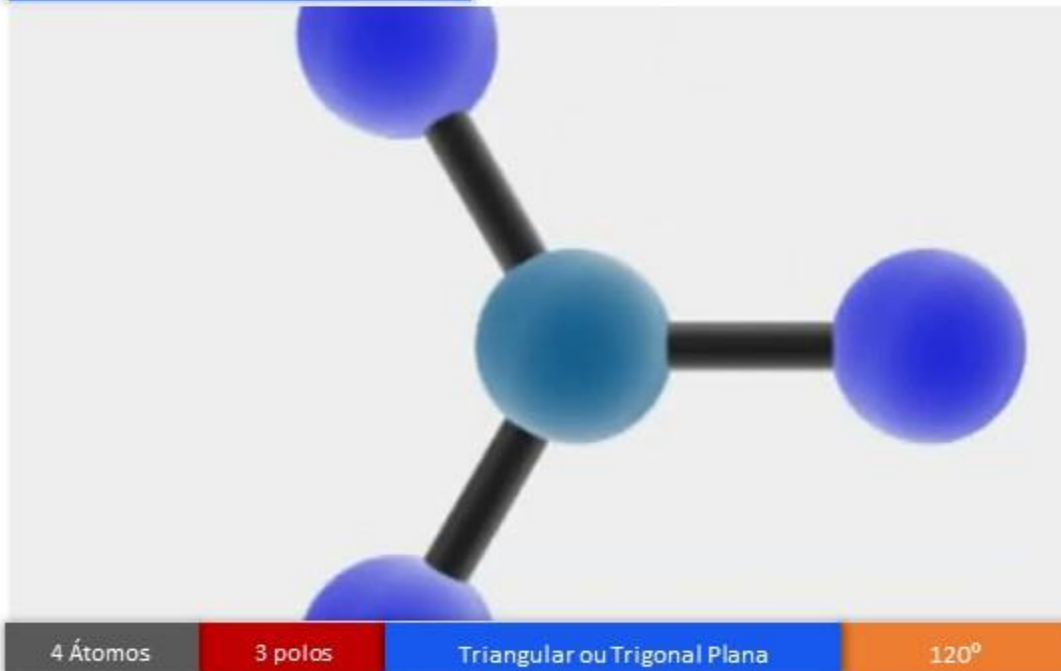


GEOMETRIA LINEAR

3 ÁTOMOS

Geometria molecular

Triangular ou Trigonal Plana



4 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

4 Átomos

3 polos

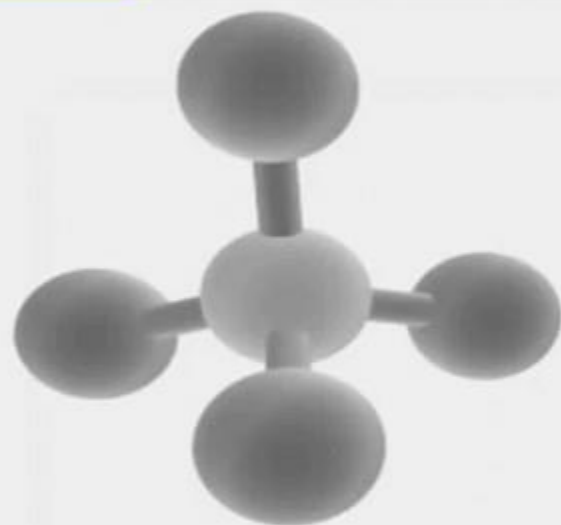
Triangular ou Trigonal Plana

120°

GEOMETRIA TRIGONAL PLANA OU TRIANGULAR

Geometria molecular

TETRAÉDRICA



5 Átomos

4 polos

Tetraédrica

109,28°

A geometria é entre os átomos

5 Átomos

4 polos

Tetraédrica

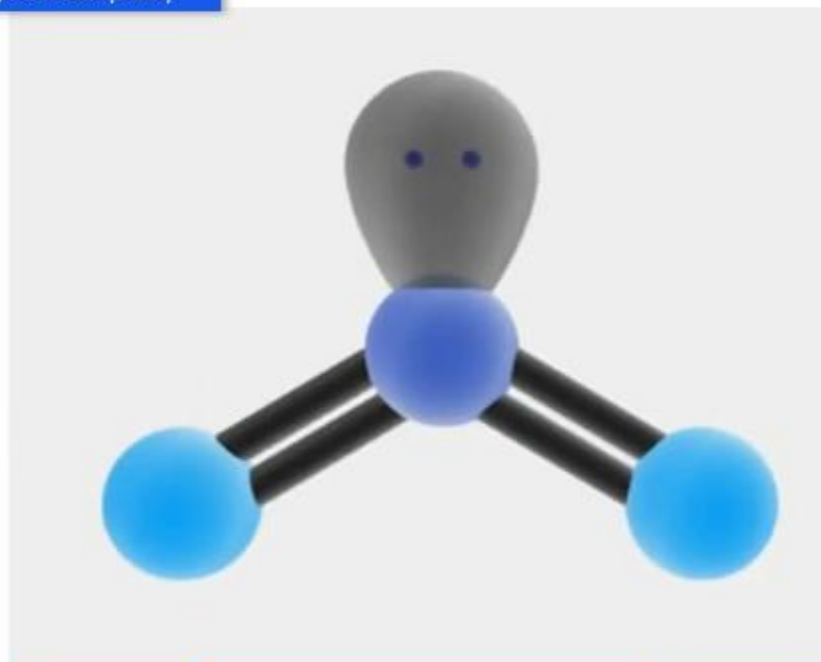
109,28°

GEOMETRIA TETRAÉDRICA

5 ÁTOMOS

Geometria molecular

ANGULAR (triângulo incompleto)



3 Átomos

3 polos

Angular

119°, 120°

A geometria é entre os átomos

3 Átomos

3 polos

Angular

119°, 120°



Derivação

Derivou da GEOMETRIA TRIANGULAR OU TRIGONAL PLANA

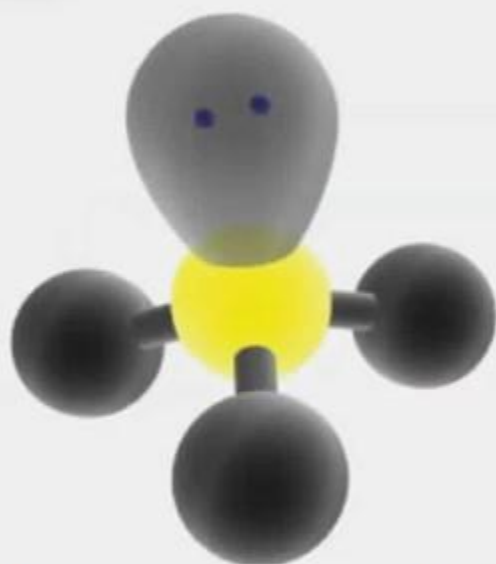
ANGULAR (triângulo incompleto)

GEOMETRIA ANGULAR

3 ÁTOMOS

Geometria molecular

PIRAMIDAL (tetraedro incompleto)



4 Átomos

4 polos

Piramidal

 $109,5^\circ, 107,5^\circ$

A geometria é entre os átomos

4 Átomos

4 polos

Piramidal

 $109,5^\circ, 107,5^\circ$ 

Derivação



Derivou da GEOMETRIA TETRAÉDRICA

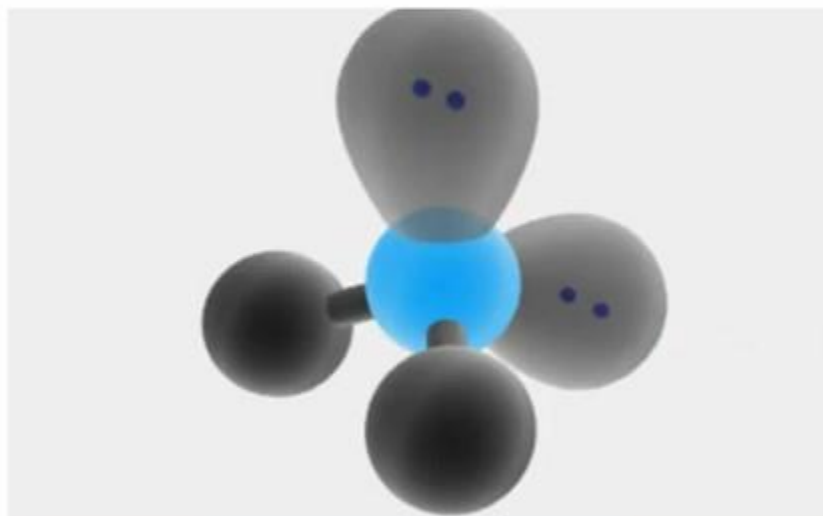
PIRAMIDAL

GEOMETRIA PIRAMIDAL

4 ÁTOMOS

Geometria molecular

ANGULAR (tetraedro incompleto)



3 Átomos

4 polos

Angular

109,5°, 104,5°

A geometria é entre os átomos

3 Átomos

4 polos

Angular

109,5°, 104,5°



Derivação

Derivou da GEOMETRIA TETRAÉDRICA

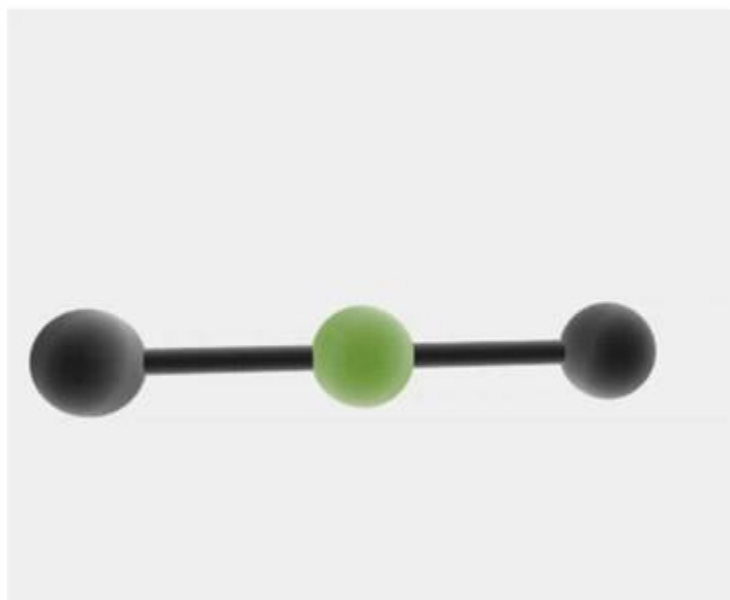
ANGULAR

GEOMETRIA ANGULAR

3 ÁTOMOS

Geometria molecular

Angular



3 Átomos

4 polos

Angular

109,5°, 104,5°

3 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

3 Átomos

4 polos

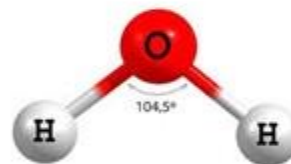
Angular

109,5°, 104,5°



Caso especial - Água

104,5°



Geometria molecular

BipiramidalTrigonal



6 Átomos

5 polos

BipiramidalTrigonal

A geometria é entre os átomos

6 Átomos

5 polos

BipiramidalTrigonal

Ângulo da base 120°

Triangular

Ângulo de 90°

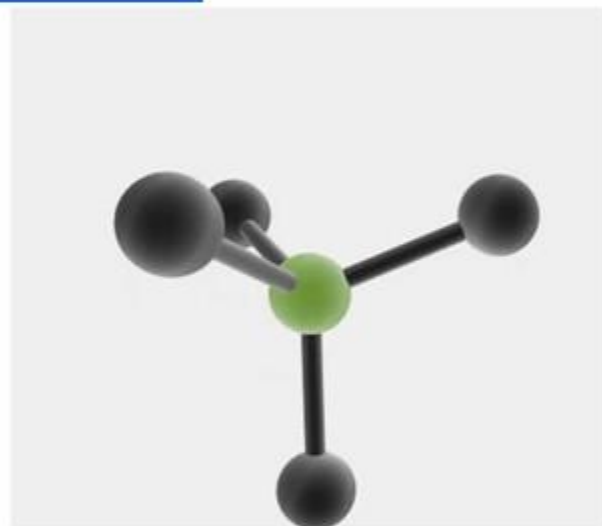
Entre o eixo e a base

BIPIRAMIDAL TRIGONAL

6 ÁTOMOS

Geometria molecular

Gangorra



5 Átomos

5 polos

Gangorra

5 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

5 Átomos

5 polos

Gangorra

Ângulos: 180° , 120° , ($173,1^\circ$, $101,6^\circ$)

Derivação



Derivou da BIPIRAMIDAL TRIGONAL

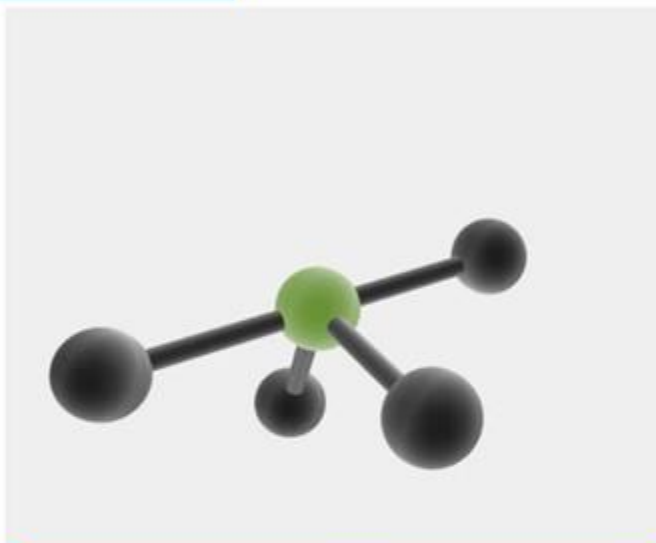
GANGORRA

GANGORRA



Geometria molecular

Forma de T



4 Átomos

5 polos

Forma de T

4 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

4 Átomos

5 polos

Forma de T

Ângulos: 90° , 180° , $(87,5^\circ, <180^\circ)$



Derivação



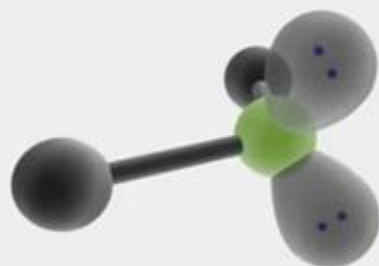
Derivou da BIPIRAMIDAL TRIGONAL

Forma de T

GEOMETRIA T

Geometria molecular

Linear



3 Átomos

5 polos

Linear

3 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

3 Átomos

5 polos

Linear

Ângulo: 180°

Derivação

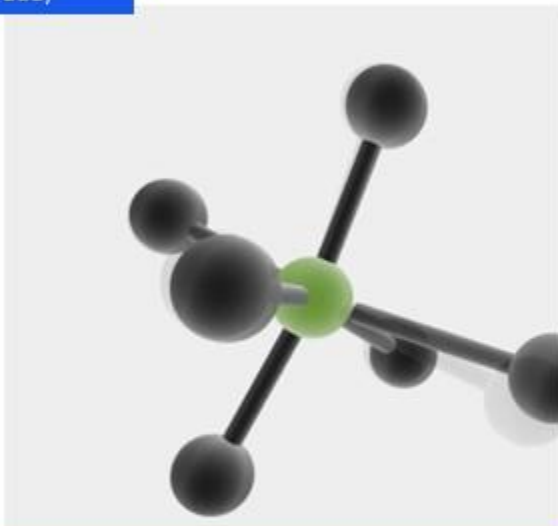
Derivou da BIPYRAMIDAL TRIGONAL

LINEAR

GEOMETRIA LINEAR

Geometria molecular

Octaédrica (bipiramidal de base quadrada)



7 Átomos

6 polos

Octaédrica (bipiramidal de base quadrada)

A geometria é entre os átomos

7 Átomos

6 polos

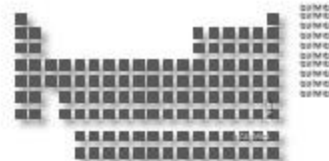
Octaédrica (bipiramidal de base quadrada)

Ângulos: 90°



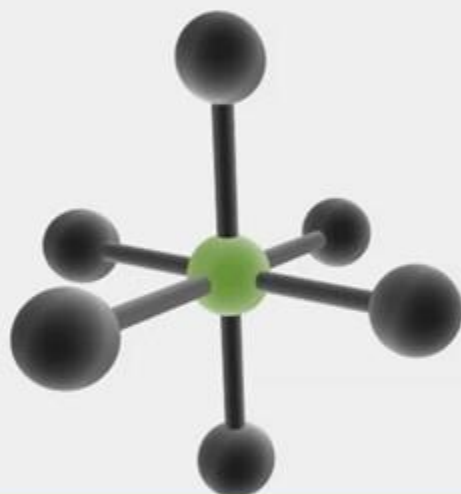
GEOMETRIA OCTAÉDRICA

7 ÁTOMOS



Geometria molecular

Piramidal Quadrada



6 Átomos

6 polos

Piramidal Quadrada

6 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

6 Átomos

6 polos

Piramidal Quadrada

Ângulo: 90° ($84,8^\circ$)

Derivação

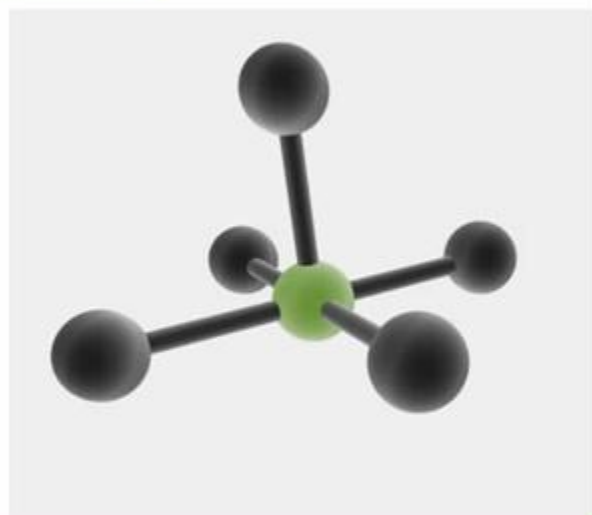
Derivou da Octaédrica (Bipirâmide de base quadrada)

Piramidal Quadrada

GEOMETRIA PIRAMIDAL QUADRADA

Geometria molecular

Quadrada Plana



5 Átomos

6 polos

Quadrada Plana

5 ÁTOMOS

A geometria é entre os átomos

5 Átomos

6 polos

Quadrada Plana

Ângulo: 90°

Derivação



Derivou da Octaédrica (Bipirâmide de base quadrada)

Quadrada Plana

GEOMETRIA QUADRADA PLANA

Geometria molecular

FÓRMULA DE PERSPECTIVA

Fórmula de perspectiva de Haworth. Nela, as fórmulas das substâncias não se encontram de forma exatamente plana no espaço.



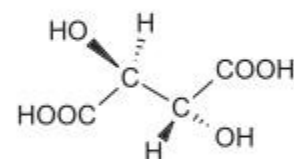
À FRENTE DO PLANO



ATRÁS DO PLANO

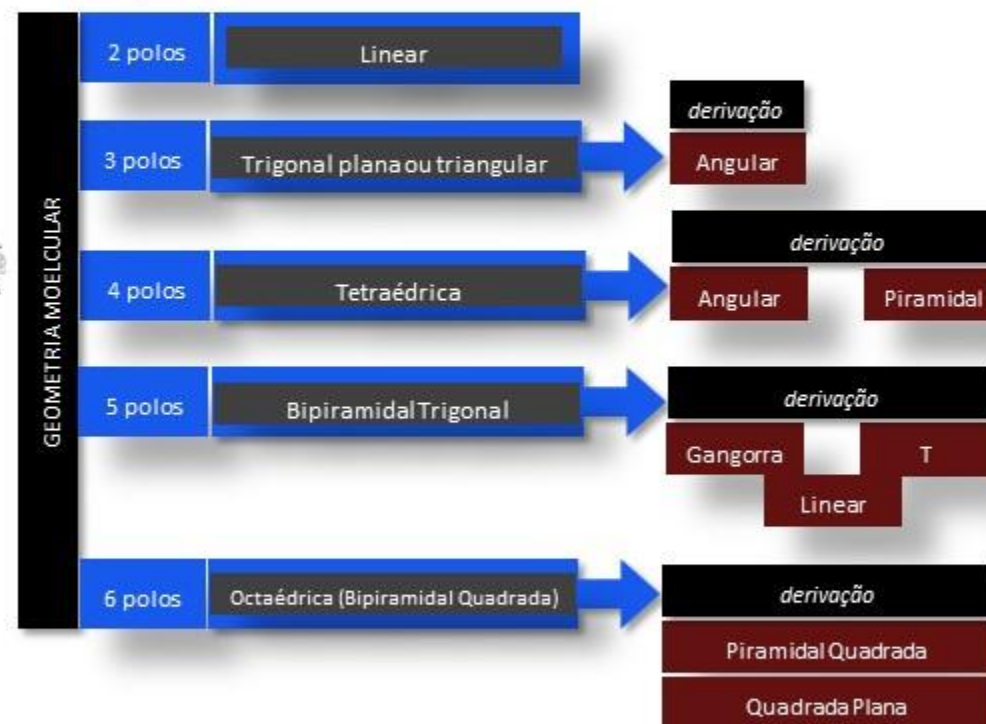


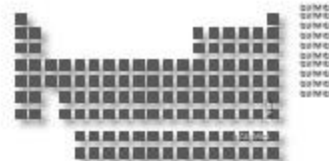
À FRENTE DO PLANO



Para dar uma ideia mais espacial, as ligações podem indicar se o átomo está no plano (traço normal), atrás do plano (cunha pontilhada) ou à frente do plano (cunha cheia):

POLOS DE REPULSÃO





Hibridização

HIBRIDIZAÇÃO

Hibridização

É o nome do fenômeno que ocorre com o átomo de um determinado elemento químico, permitindo que ele realize um número maior de ligações covalentes ou que seja capaz de realizar essas ligações.

COMO OCORRE

O átomo recebe energia do meio externo

Os elétrons dos orbitais mais externos absorvem essa energia

Esses elétrons são excitados

A tendência é que um elétron saia de um orbital completo e ocupe um orbital vazio

os orbitais incompletos unem-se

HIBRIDIZAÇÃO

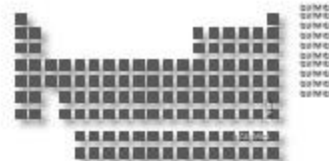
ORBITAIS INCOMPLETOS X LIGAÇÕES

O número de ligações covalentes que um átomo realiza

está relacionado com

o número de orbitais incompletos que ele apresenta em sua camada de valência.

Grupo ou Família	Elétrons de valência	Orbitais incompletos	Ligações
IIIA	3	3	3
IVA	4	4	4
VA	5	3	3
VIA	6	2	2
VIIA	7	1	1



Hibridização

HIBRIDIZAÇÃO

Alguns elementos químicos, como é o caso do **CARBONO**, **BERÍLIO** e **BORO** os quais realizam ligações covalentes apenas após passarem pelo fenômeno da **hibridização**.

Orbitais puros

São aqueles que não participam da hibridização

Orbitais Degenerados

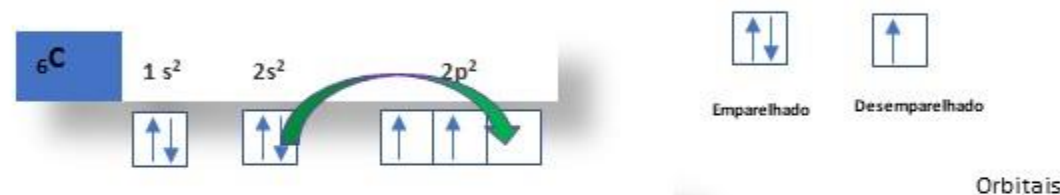
Orbitais que possuem a mesma energia (hibridização)

O número de ligações covalentes que um átomo realiza

está relacionado com

o número de orbitais incompletos que ele apresenta em sua camada de valência.

HIBRIDIZAÇÃO



2 elétrons desemparelhados

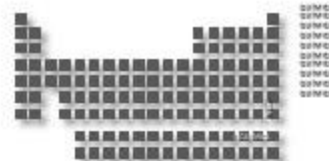
Deveria realizar 2 ligações

HIBRIDIZAÇÃO

Rearranjo dos orbitais atômicos para a formação de ligações



O Carbono deveria fazer apenas duas ligações, por ter 2 orbitais semipreenchidos. Mas a molécula CH_2 (metileno) é altamente reativa, não estando em equilíbrio. Aí que entra a hibridização.



Hibridização

HIBRIDIZAÇÃO

EXEMPLOS

PCl_5

15P

$1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^3$



3 elétrons desemparelhados

Deveria realizar 3 ligações



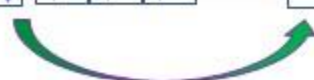
HIBRIDIZAÇÃO

Rearranjo dos orbitais atômicos para a formação de ligações

15P

$3s^2 \ 3p^3$

$3d^0$



HIBRIDIZAÇÃO

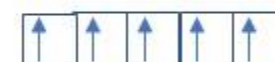
EXEMPLOS

15P

s^1

p^3

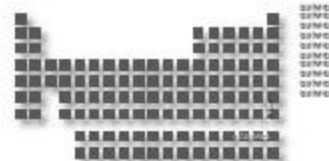
d^1



Hibridização do tipo

sp^3d

Quando analisamos a substância PCl_5 , temos a certeza de que, nessa molécula, o fósforo sofreu hibridização, pois realizou cinco ligações. Como o cloro, que pertence à família VIIA, necessita de uma ligação para ficar estável e a molécula possui cinco átomos desse elemento, cada um deles deverá realizar uma ligação, o que faz com que o átomo de fósforo, por sua vez, também tenha que realizar cinco ligações. Essa ocorrência só é possível por meio da hibridização (união de orbitais atômicos incompletos) do fósforo.



Hibridização

HIBRIDIZAÇÃO

EXEMPLOS



Orbitais

O berílio não apresenta orbital incompleto, logo não realizaria nenhuma ligação covalente.

Porém, na prática, nas moléculas, o berílio sempre é encontrado realizando duas ligações, as quais ocorrem por causa do fenômeno da **hibridização**

HIBRIDIZAÇÃO

Rearranjo dos orbitais atômicos para a formação de ligações



energia



Estado excitado

HIBRIDIZAÇÃO

Rearranjo dos orbitais atômicos para a formação de ligações



Hibridização

Hibridização do tipo

sp

Geometria molecular

HIBRIDIZAÇÃO

Tipo de Molécula	Forma Geométrica	Hibridização Associada
AX_2	Linear	sp
AX_3	Triangular	sp^2
AX_2E	Angular	sp^2
AX_4	Tetraédrica	sp^3
AX_2E_2	Angular	sp^3
AX_5	Bipiramidal trigonal	sp^3d

HIBRIDIZAÇÃO

Tipo de Molécula	Forma Geométrica	Hibridização Associada
AX_4E	Tetraédrica - Gangorra	sp^3d
AX_3E_2	Forma de T	sp^3d
AX_2E_3	Linear	sp^3d
AX_6	Octaédrica	sp^3d^2
AX_5E	Pirâmidal de base quadrada	sp^3d^2
AX_4E_2	Quadrado planar	sp^3d^2

Geometria molecular

Lewis

As estruturas de Lewis ajudam-nos a entender as composições das moléculas e respectivas ligações covalentes. Entretanto, elas não mostram um dos mais importantes aspectos das moléculas – **sua forma espacial** como um todo.

As estruturas de Lewis fornecem a conectividade atômica: elas nos mostram o número e os tipos de ligações entre os átomos.

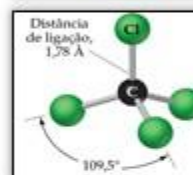
Geometria

As moléculas têm formas espaciais e tamanhos definidos **pelos ângulos e pelas distâncias entre os núcleos de seus átomos constituintes**.

A forma espacial de uma molécula é determinada por seus ângulos de ligação.



Um **Tetraedro** possui quatro vértices. Cada face é um triângulo equilátero



Geometria da molécula CCl4. Cada ligação C-Cl na molécula aponta em direção ao vértice de um tetraedro



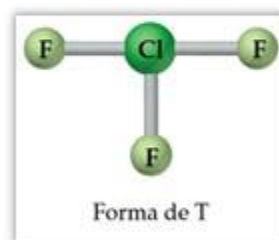
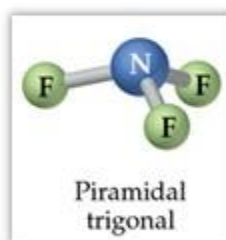
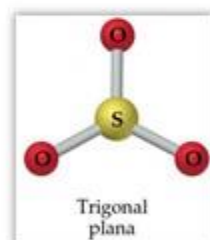
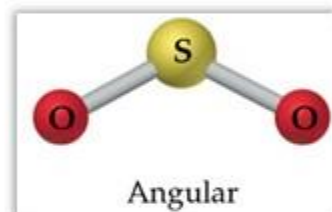
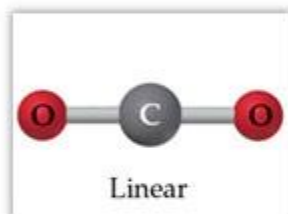
Um octaedro é um poliedro com oito faces e seis vértices. Cada face é um triângulo equilátero.

Para prevermos a forma molecular, supomos que os elétrons de valência se repelem e, conseqüentemente, a molécula assume qualquer geometria 3D que minimize essa repulsão.

Denominamos este processo de teoria de Repulsão do Par de Elétrons no Nível de Valência (VSEPR, em inglês) ou RPENV em português.

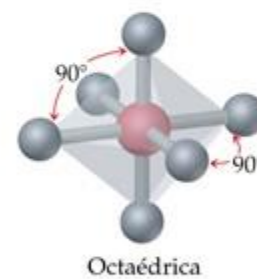
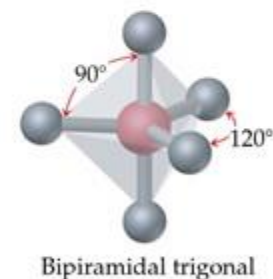
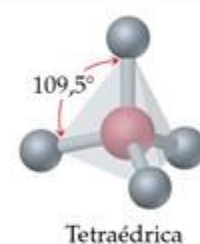
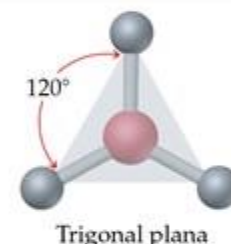
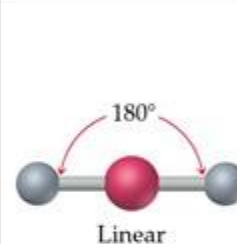
Geometria molecular

As formas espaciais de algumas moléculas simples do tipo AB_2 e AB_3

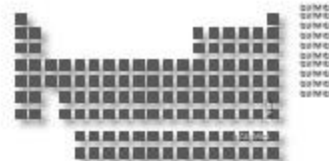


Formas espaciais moleculares

Existem cinco geometrias fundamentais para a forma molecular AB_n :



Por que as moléculas do tipo AB_n tem fórmulas espaciais relacionadas às estruturas básicas ao lado?



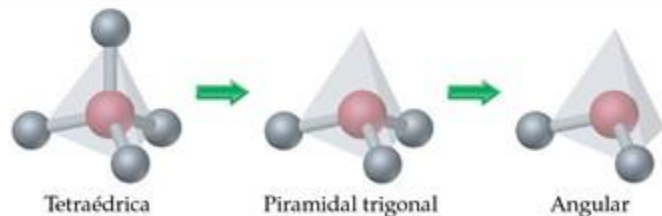
Geometria molecular

Formas espaciais moleculares

Por que as moléculas do tipo AB_n tem fórmulas espaciais relacionadas às estruturas básicas ao lado?

Quando damos nome à geometria molecular, focalizamos somente na posição dos átomos.

Ao considerarmos a geometria ao redor do átomo central, consideramos todos os elétrons (pares solitários e pares ligantes).



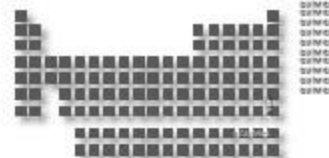
Modelo VSEPR

(Repulsão do Par Eletrônico no Nível de Valência)

Para se determinar a forma de uma molécula, fazemos a distinção entre pares de elétrons solitários (ou pares não-ligantes, aqueles que não participam de uma ligação) e pares ligantes (aqueles encontrados entre dois átomos).

Definimos o arranjo eletrônico pelas posições no espaço 3D de TODOS os pares de elétrons (ligantes ou não ligantes).

Os elétrons assumem um arranjo no espaço para minimizar a repulsão elétron-elétron.



Geometria molecular

Tabela - Arranjos em Função do Número de Domínios de Elétrons

Tabela - Arranjos em Função do Número de Domínios de Elétrons

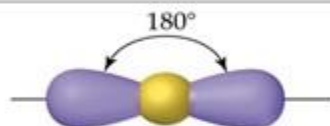
Número de domínios de e-

Distribuição dos domínios de elétrons

Arranjo

Ângulos de ligação previstos

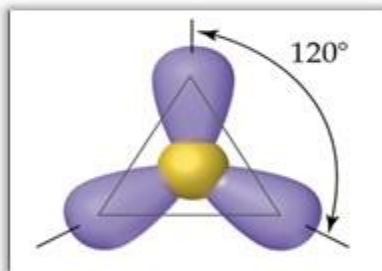
2



Linear

180°

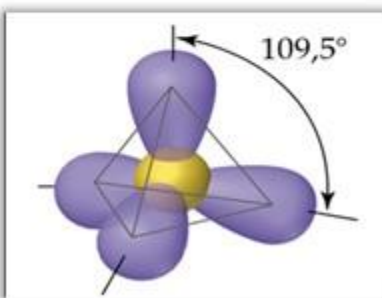
3



Trigonal plano

120°

4



Tetraédrico

109,5°

GEOMETRIA MOLECULAR

Tabela -Arranjos em Função do Número de Domínios de Elétron

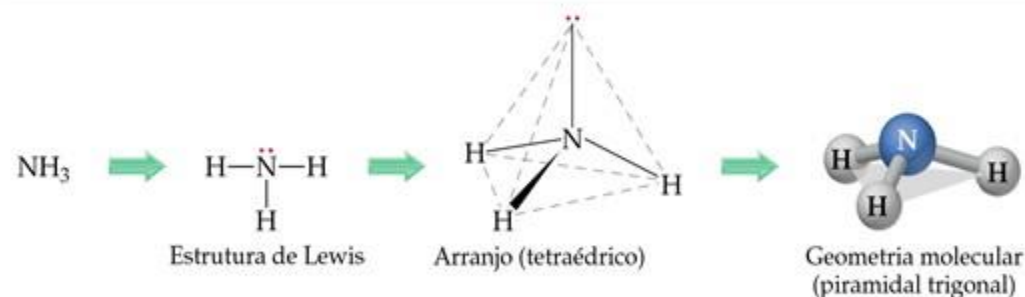
Número de domínios de e-	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
5		Bipiramidal Trigonal	120° 90°
6		Octaédrico	120° 90°

Geometria molecular

Modelo VSEPR

Para determinar o arranjo:

- desenhe a estrutura de Lewis,
 - conte o número total de pares de elétrons ao redor do átomo central
 - ordene os pares de elétrons em uma das geometrias para minimizar a repulsão e--e-.

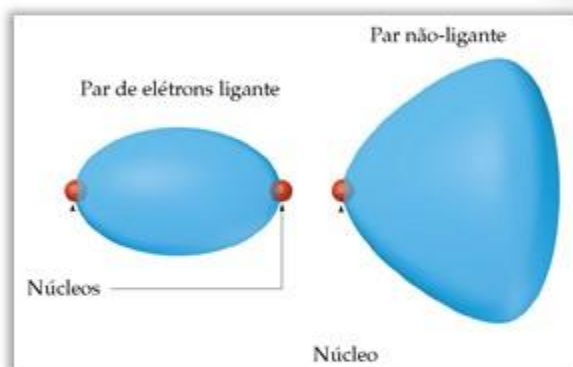


Modelo VSEPR

- Em geral um domínio de elétron consiste em um par não ligante, uma ligação simples ou uma ligação múltipla.
- Uma vez que os domínios de elétrons são carregados negativamente, eles se repelem.
- A melhor disposição de determinado número de domínios de elétrons é a que minimiza a repulsão entre eles.
- A forma espacial molecular descreve a distribuição dos átomos, não a distribuição do domínio de elétrons.

Geometria molecular

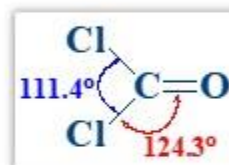
MODELO VSEPR



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

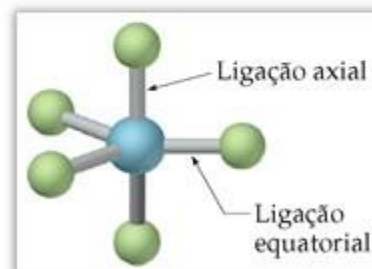
Os domínios de elétrons para pares não ligantes exercem forças repulsivas maiores nos domínios de elétrons adjacentes e, portanto, tendem a comprimir os ângulos de ligação.

MODELO VSEPR

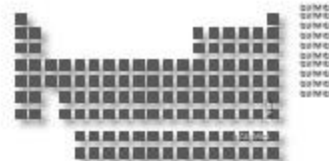


Os elétrons nas ligações múltiplas se repelem mais do que os elétrons nas ligações simples.

Moléculas com Níveis de Valência Expandidos



Para minimizar a repulsão elétron-elétron, os pares solitários são sempre colocados em posições equatoriais.



Geometria molecular

MODELO VSEPR

Pares solitários

=

Pares não ligantes

Pares ligantes

Ao considerarmos a geometria ao redor do átomo central consideramos todos os elétrons (pares solitários e pares ligantes).

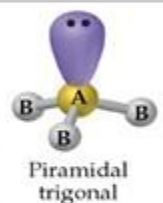
Para se determinar a forma de uma molécula, fazemos a distinção entre pares de elétrons solitários (ou pares não ligantes, aqueles que não participam de uma ligação) e pares ligantes (aqueles encontrados entre dois átomos).

MODELO VSEPR

Arranjo eletrônico

Definimos o arranjo eletrônico pelas posições no espaço 3D de TODOS PARES DE ELÉTRONS (ligantes ou não ligantes).

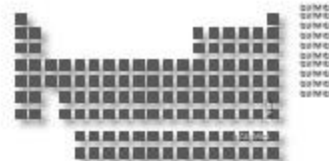
A distribuição dos domínios de elétrons ao redor do átomo central ou ion do tipo AB_n é chamada de arranjo.



Domínio de elétrons

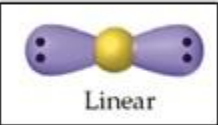

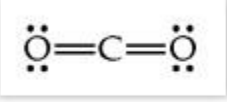
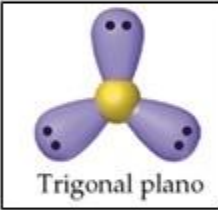
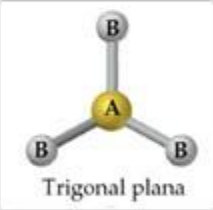
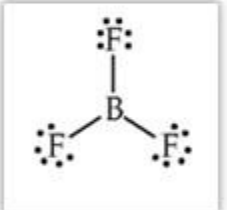
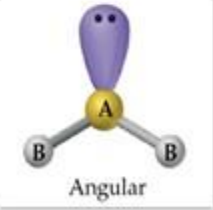
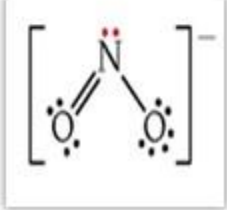
Um domínio de elétrons define uma região no espaço, na qual é mais provável que os elétrons sejam encontrados.

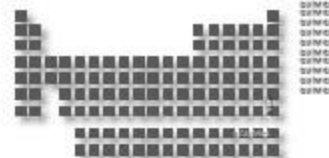
Em geral um domínio de elétron consiste em um par não ligante, uma ligação simples ou uma ligação múltipla.



Geometria molecular


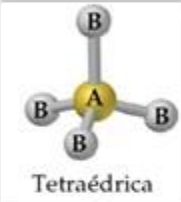
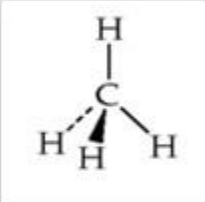
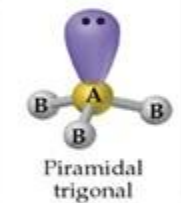
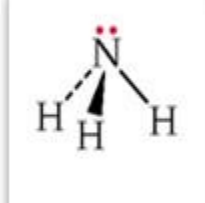
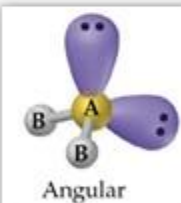
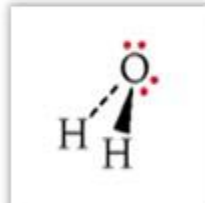
Tabela - Arranjos e formas espaciais para moléculas com dois, três e quatro domínios de elétrons ao redor do átomo central

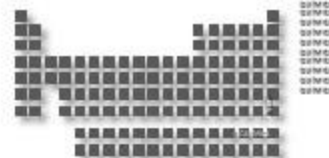
Total de domínios de e-	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não ligantes	Geometria molecular	Exemplos
2	 Linear	2	0	 Linear	
3	 Trigonal plano	3	0	 Trigonal plana	
		2	1	 Angular	



Geometria molecular

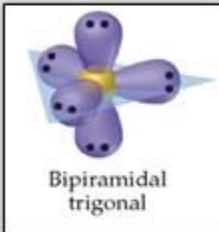
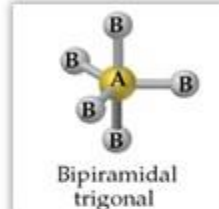
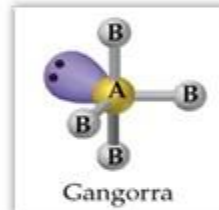
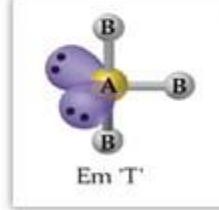
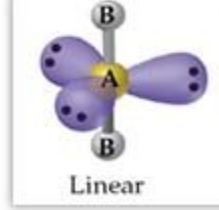
Tabela - Arranjos e formas espaciais para moléculas com dois, três e quatro domínios de elétrons ao redor do átomo central

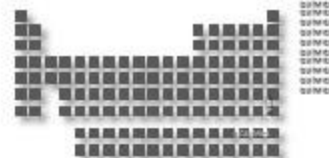
Total de domínios de e-	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não ligantes	Geometria molecular	Exemplos
4	 <p>Tetraédrico</p>	4	0	 <p>Tetraédrica</p>	
		3	1	 <p>Piramidal trigonal</p>	
		2	2	 <p>Angular</p>	



Geometria molecular



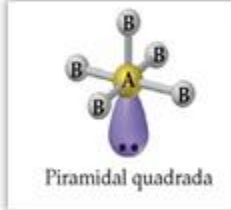
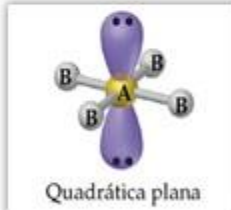
Tabela - Arranjos e formas espaciais para moléculas com dois, três, quatro e cinco domínios de elétrons ao redor do átomo central

Total de domínios de e-	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não ligantes	Geometria molecular	Exemplos
5	 <p>Bipiramidal trigonal</p>	5	0	 <p>Bipiramidal trigonal</p>	PCl_5
		4	1	 <p>Gangorra</p>	SF_4
		3	2	 <p>Em 'T'</p>	ClF_3
		2	3	 <p>Linear</p>	XeF_2



Geometria molecular

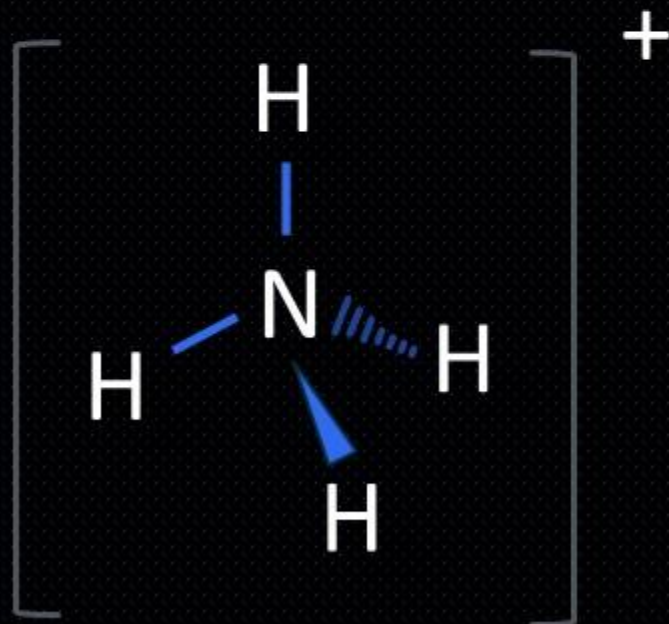
Tabela - Arranjos e formas espaciais para moléculas com quatro, cinco e seis domínios de elétrons ao redor do átomo central

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



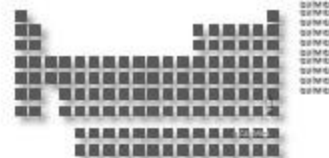
Geometria molecular

Representação de geometria molecular para compostos que apresentam carga.



Entre colchetes e a carga do lado de fora.

Fórmula: íon amônio: NH_4^+



TAREFA



Pratique os exercícios <envie os exercícios da lista>

Orientações: Faça no caderno e envie em formato pdf. Menção de atitude – cumprimento de tarefas individuais