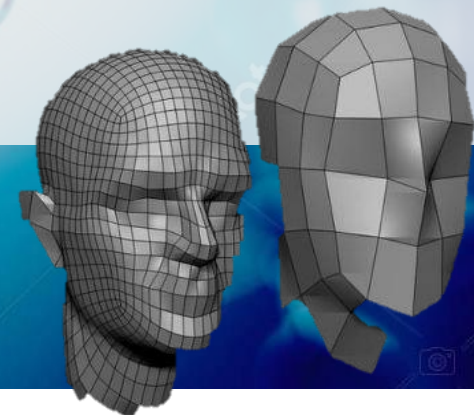




Geometria Molecular

Princípio | Arranjo eletrônico | Geometrias



Campus XXE
2º ano do Ensino Médio Integrado
Profº MsC. Carlos Augusto Cabral Kramer

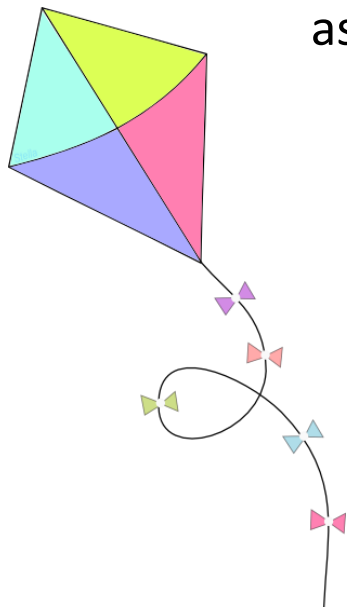


INSTITUTO FEDERAL

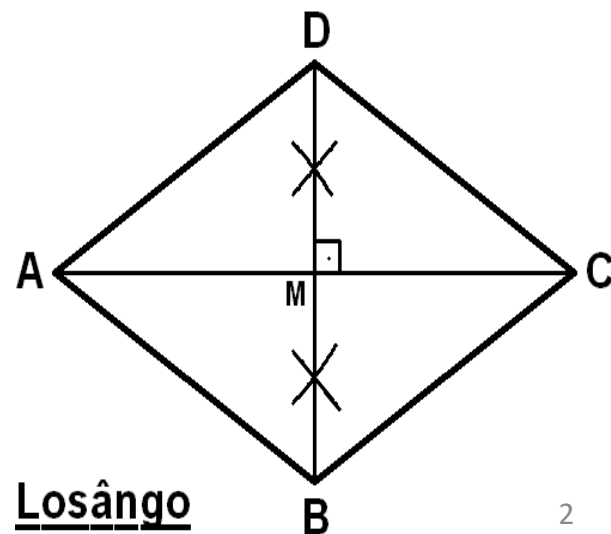
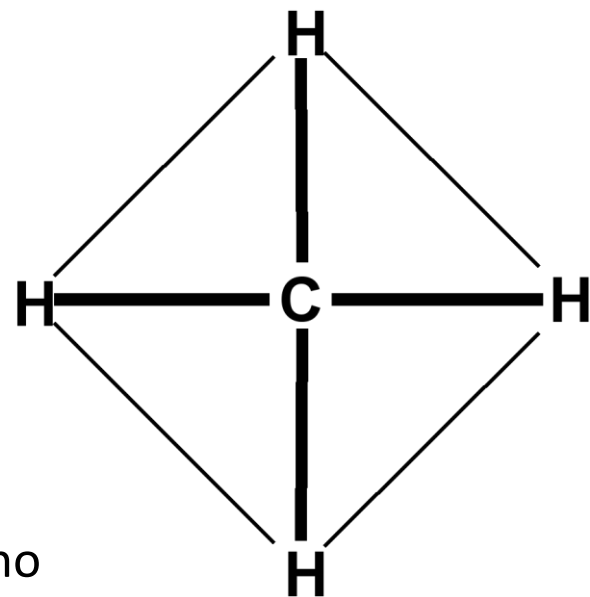
INTRODUÇÃO

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

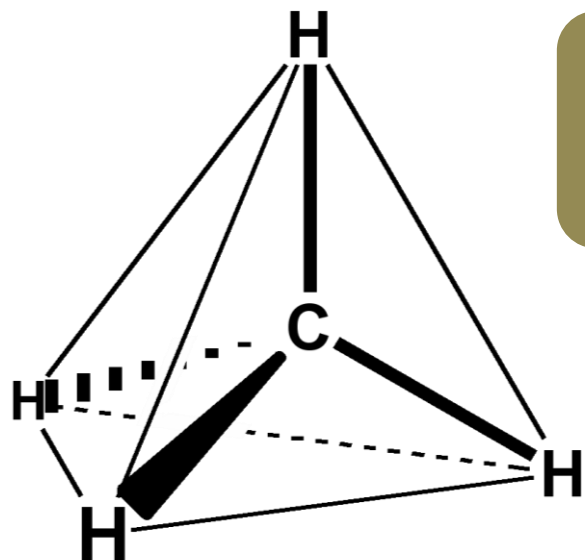
Será que estas quatro ligações do carbono assumiriam um arranjo planar?



Seria o arranjo espacial do carbono como um losango ou uma pipa?

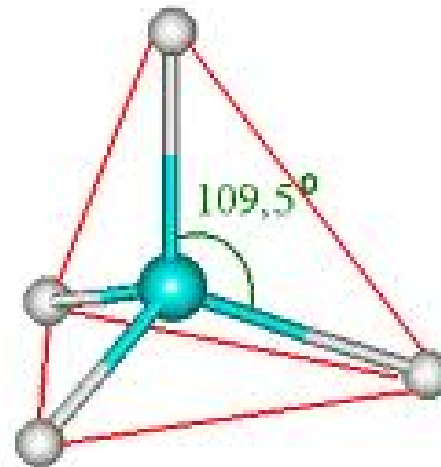


INTRODUÇÃO

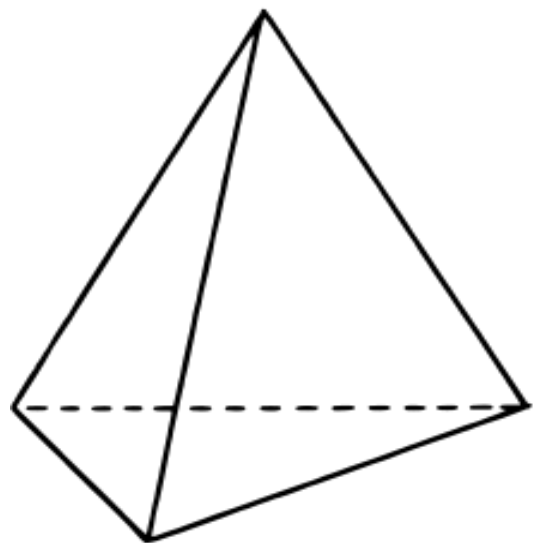


Na verdade as quatro ligações do carbono sp^3 possuem um arranjo tetraédrico

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

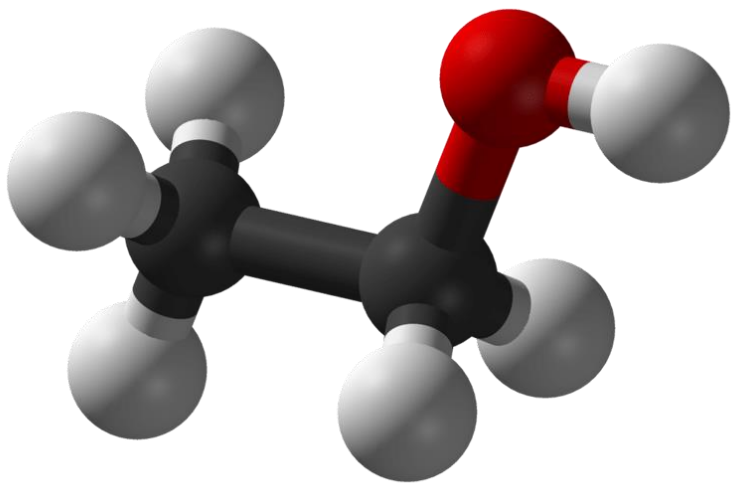


As ligações apontam para os vértices de um tetraedro, que é uma pirâmide de três lados, também conhecida como pirâmide de base triangular



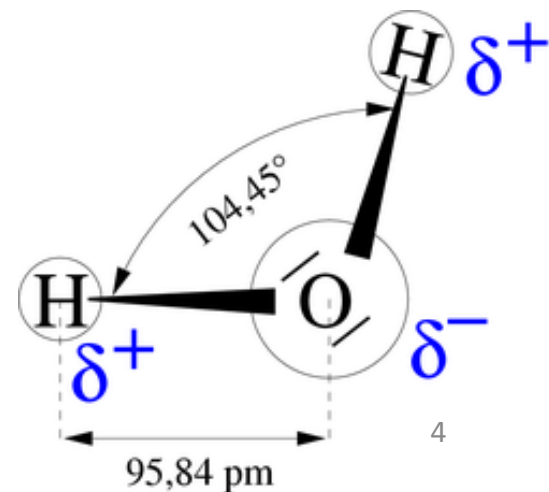
INTRODUÇÃO

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



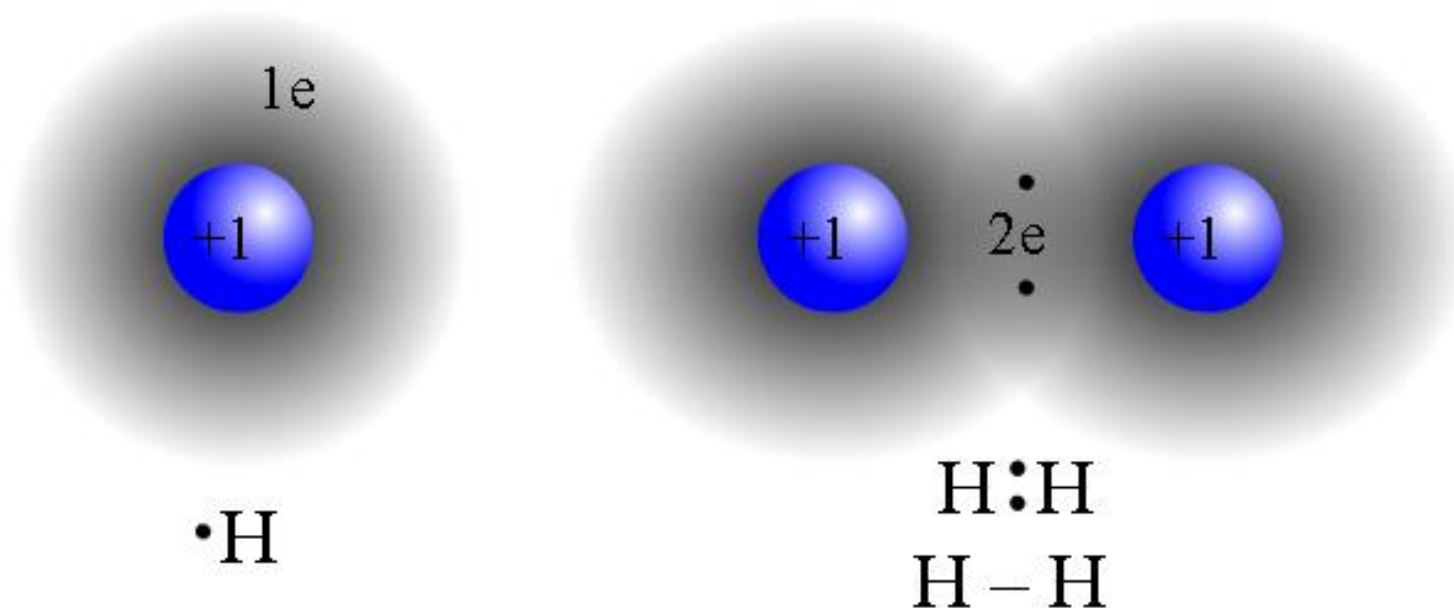
Arranjo espacial do etanol

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



INTRODUÇÃO

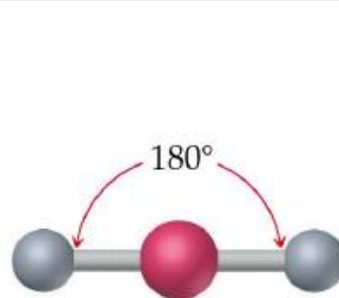
Relembrando: Pela teoria da ligação de valência (TLV), as ligações são formadas pela sobreposição de orbitais atômicos e o par eletrônico fica contido nesta sobreposição – isto é a ligação química



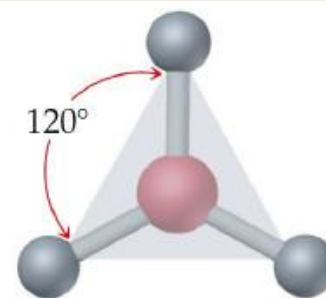
Formação da ligação do H_2

MODELO RPECV

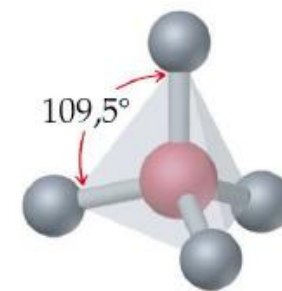
O modelo da repulsão de pares de elétrons na camada de valência (RPECV) prevê as formas das moléculas e íons dispondo os pares de elétrons na camada de valência, em torno do átomo central, de maneira que sejam os maiores possíveis os afastamentos mútuos, de modo a ser **mínima a repulsão entre estes pares**.



Linear

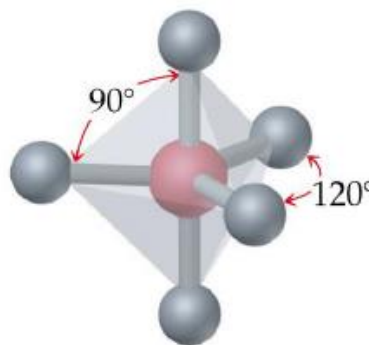


Trigonal plana

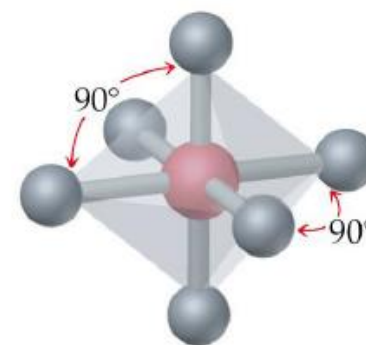


Tetraédrica

Exemplos de arranjos geométricos de moléculas



Bipiramidal trigonal

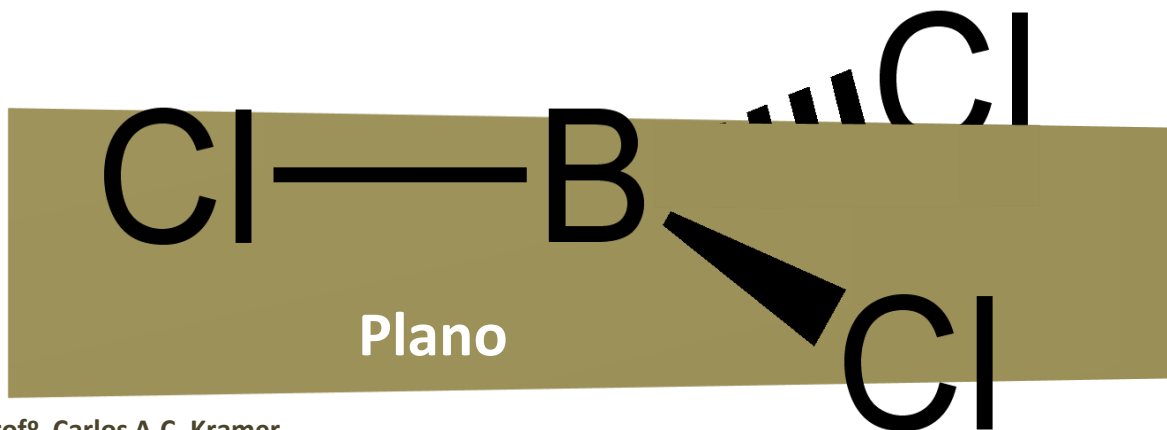
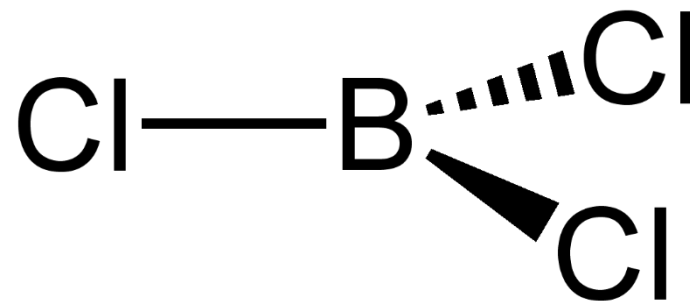


Octaédrica

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

Vejamos o exemplo do tricloreto de boro (BCl_3)

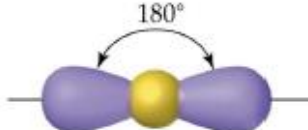
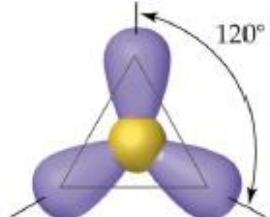
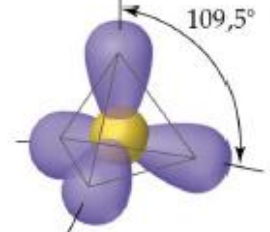


MODELO RPECV

Para entender a geometria molecular, precisamos entender antes o arranjo eletrônico do átomo central, isto é, como estão dispostos espacialmente os pares eletrônicos ligantes e não ligantes (pares eletrônicos livres)

Isto é:

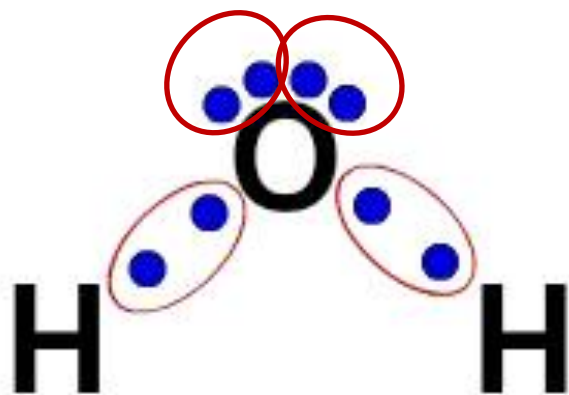
- Dois pares eletrônicos ao redor do átomo central = arranjo eletrônico linear
- Três pares eletrônicos ao redor do átomo central = arranjo eletrônico trigonal plano
- Quatro pares eletrônicos ao redor do átomo central = arranjo eletrônico tetraédrico

Número de domínios de elétrons	Distribuição dos domínios de elétrons	Arranjo	Ângulos de ligação previstos
2		Linear	180°
3		Trigonal plano	120°
4		Tetraédrico	109,5°

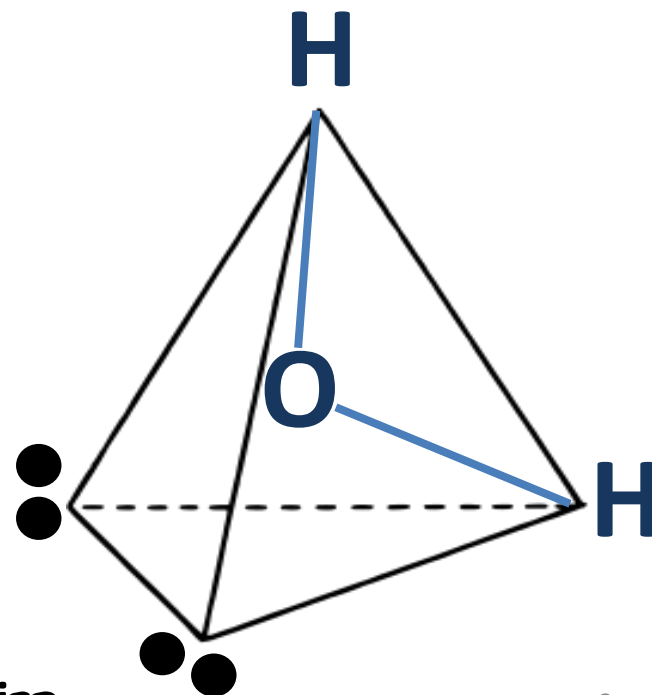
COMO ENCONTRAR O ARRANJO ELETRÔNICO

1. Determina-se, pela fórmula de Lewis, o número de pares de elétrons em torno do átomo central.
2. Contam-se as ligações múltiplas como se fossem 1 par só de elétrons.
3. Se houver ressonância, aproveita-se apenas uma das fórmulas para entrar esse número.

Exemplo: Qual o arranjo eletrônico da água (H_2O)?



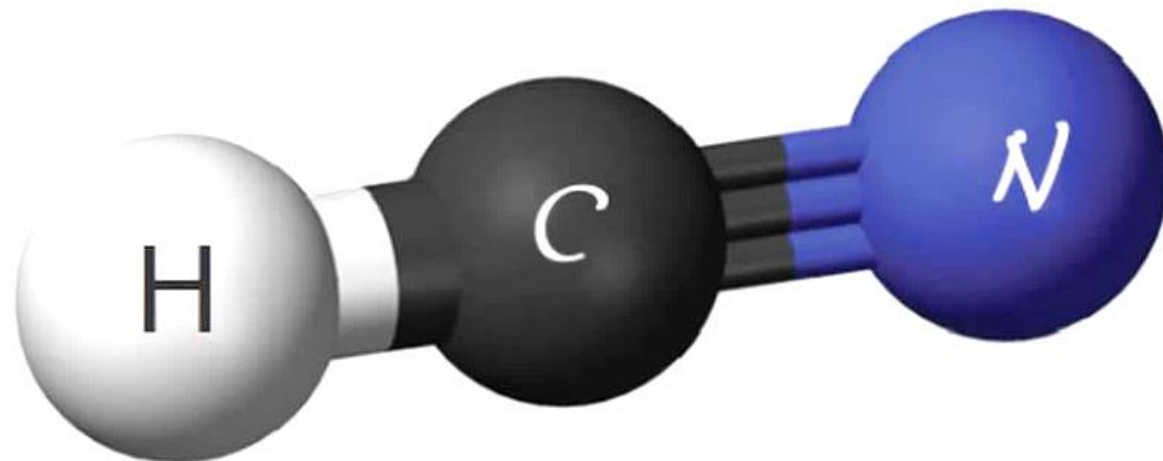
Arranjo eletrônico tetraédrico



COMO ENCONTRAR O ARRANJO ELETRÔNICO

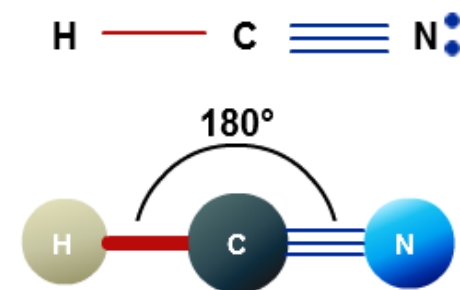
Encontre o arranjo eletrônico do Ácido cianídrico (HCN)

Estrutura de Lewis



Arranjo eletrônico linear

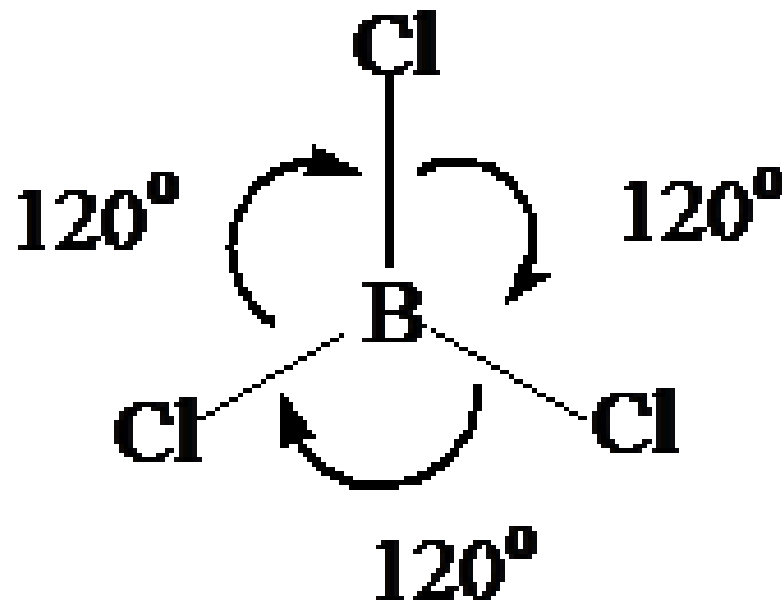
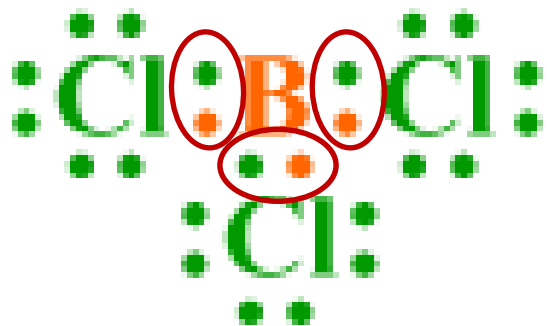
Ligações múltiplas contam como se fossem ligações simples para a determinação do arranjo eletrônico, assim, é como se o carbono possuísse apenas 2 pares eletrônicos ao seu redor



COMO ENCONTRAR O ARRANJO ELETRÔNICO

Encontre o arranjo eletrônico do tricloreto de boro (BCl_3)

Estrutura de Lewis

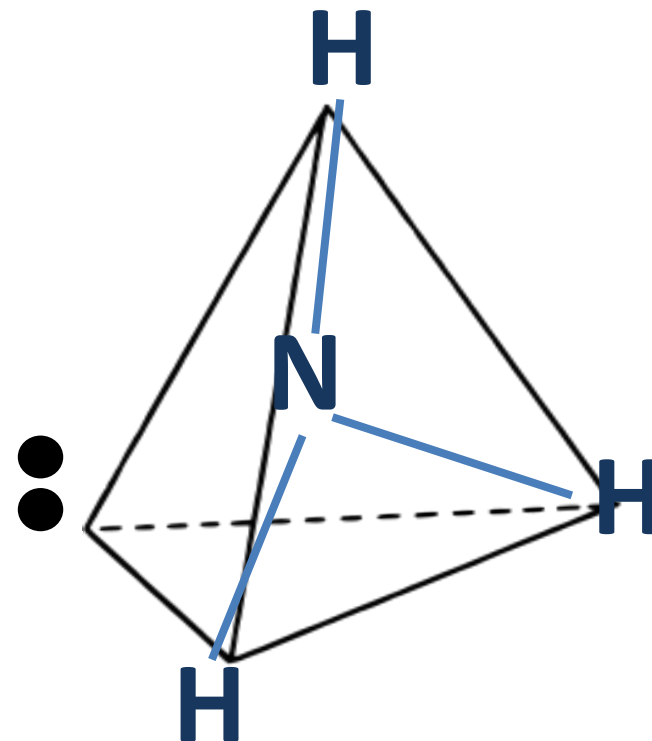
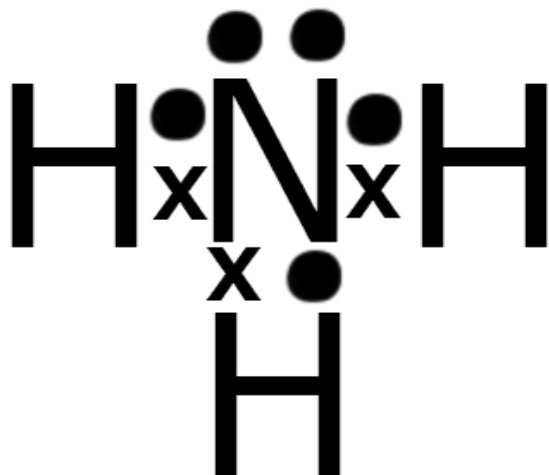


Arranjo eletrônico Trigonal plano

COMO ENCONTRAR O ARRANJO ELETRÔNICO

Encontre o arranjo eletrônico da amônia (NH_3)

Estrutura de Lewis da amônia (NH_3)

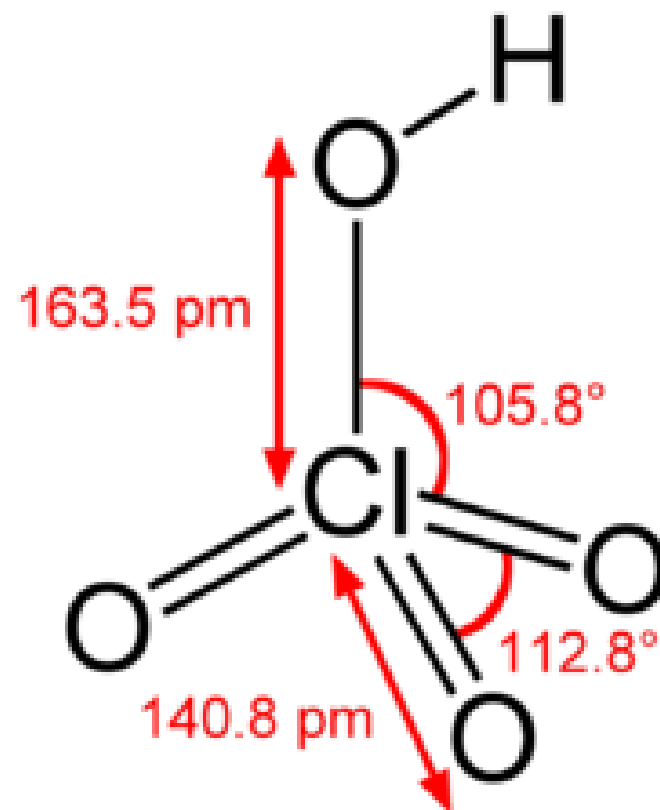
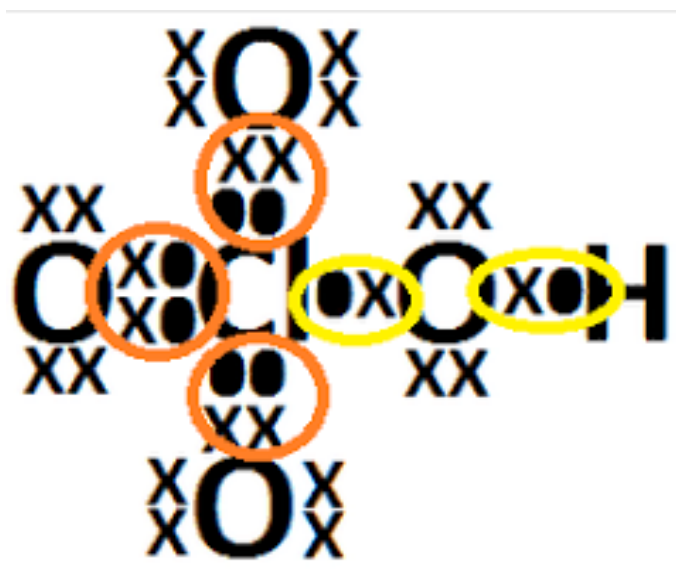


Arranjo eletrônico tetraédrico

COMO ENCONTRAR O ARRANJO ELETRÔNICO

Encontre o arranjo eletrônico do ácido perclórico (HClO_4)

Estrutura de Lewis do ácido perclórico (HClO_4)

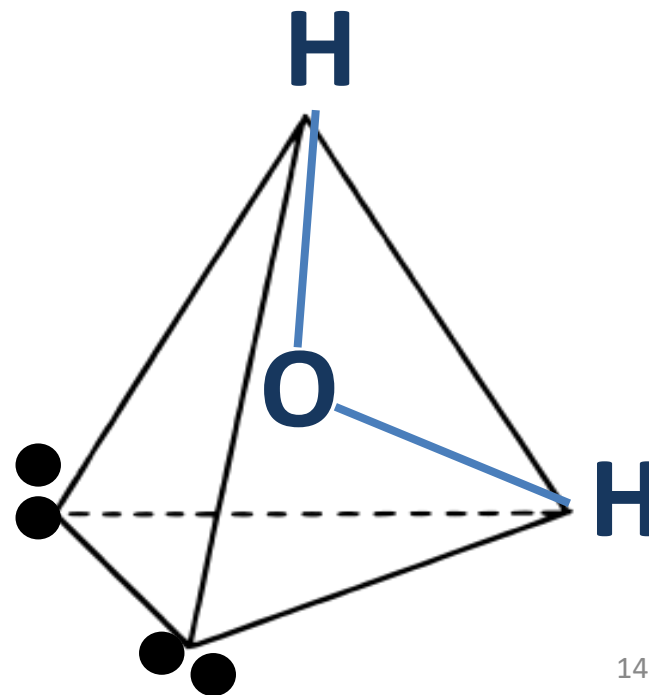


Arranjo eletrônico tetraédrico

GEOMETRIA MOLECULAR

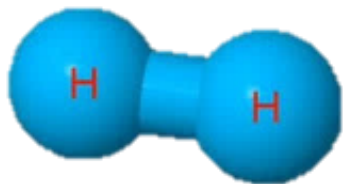
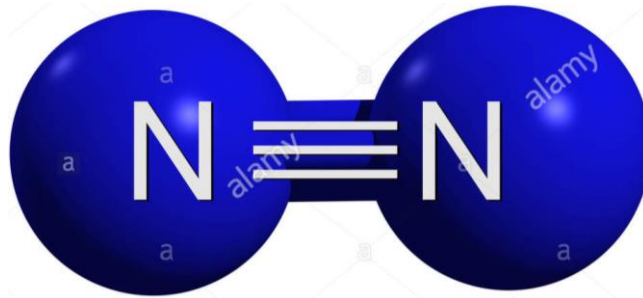
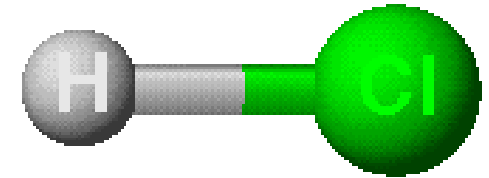
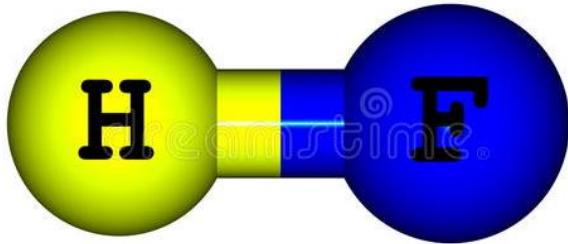
Conhecendo a estrutura eletrônica dos pares eletrônicos do átomo central, podemos prever a geometria molecular, para isso iremos apenas focar atenção nos pares eletrônicos ligantes, isto é, nas ligações

Assim, embora o arranjo eletrônico da água seja tetraédrico, sua geometria molecular é **ANGULAR**



GEOMETRIA MOLECULAR

Moléculas que são formadas por apenas dois átomos sempre serão lineares



GEOMETRIA MOLECULAR

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)

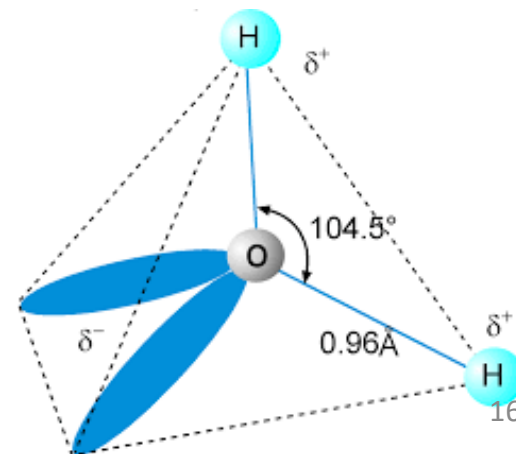
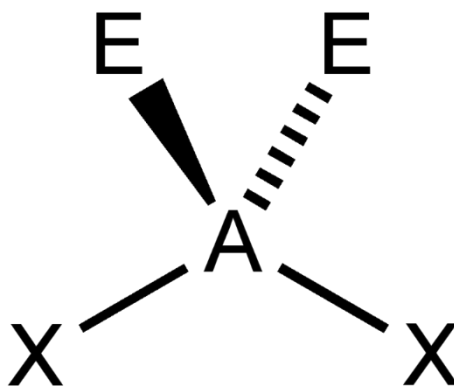
Para entender melhor vamos colocar denominar genericamente (método AXE):

A: Representa o 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

Por exemplo: Água possui configuração AX₂E₂



GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico 2

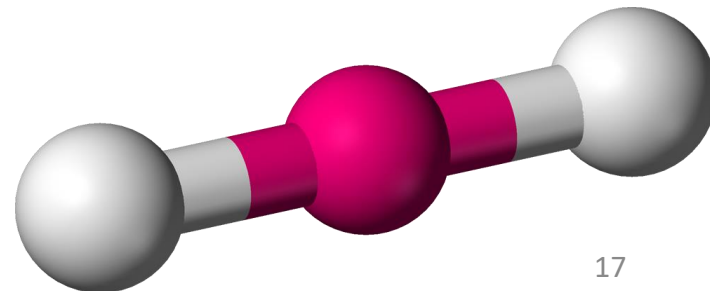
Configuração AX_2

- Arranjo eletrônico: Linear
- Geometria Molecular: Linear



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

Exemplos: CO_2 , CSO , HCN , SiO_2



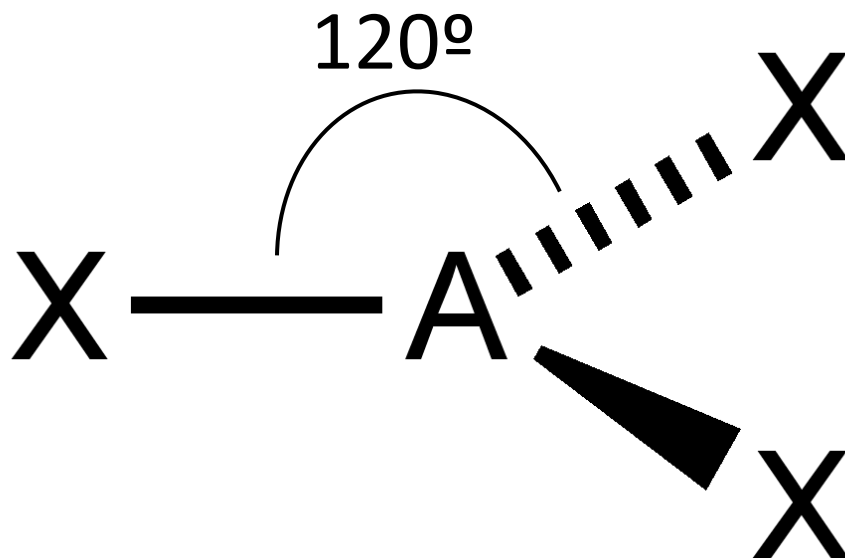
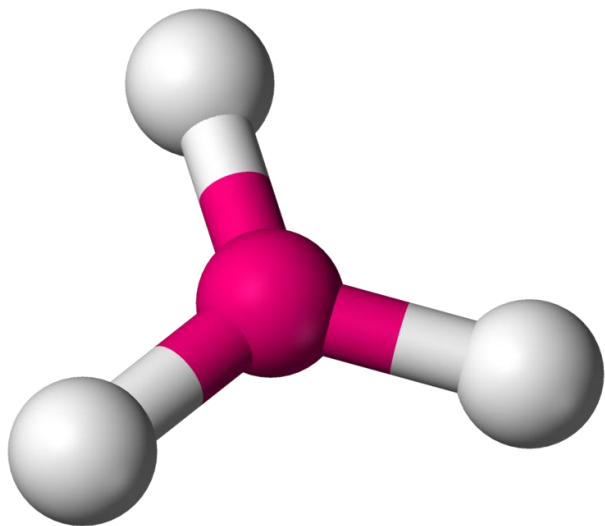
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **3**

Configuração AX_3

- Arranjo eletrônico: Trigonal plana
- Geometria Molecular: Trigonal plana

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



Exemplos: BCl_3 , SO_3 , BF_3

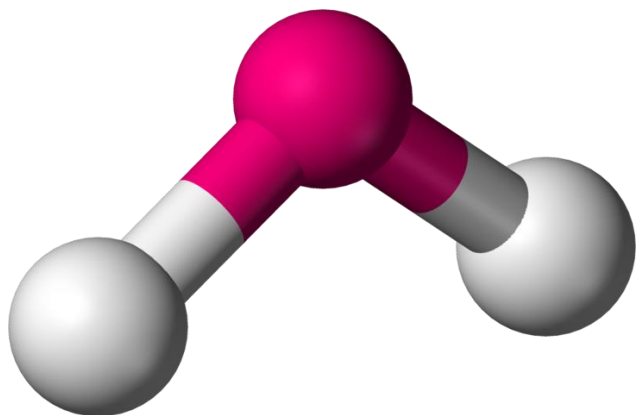
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **3**

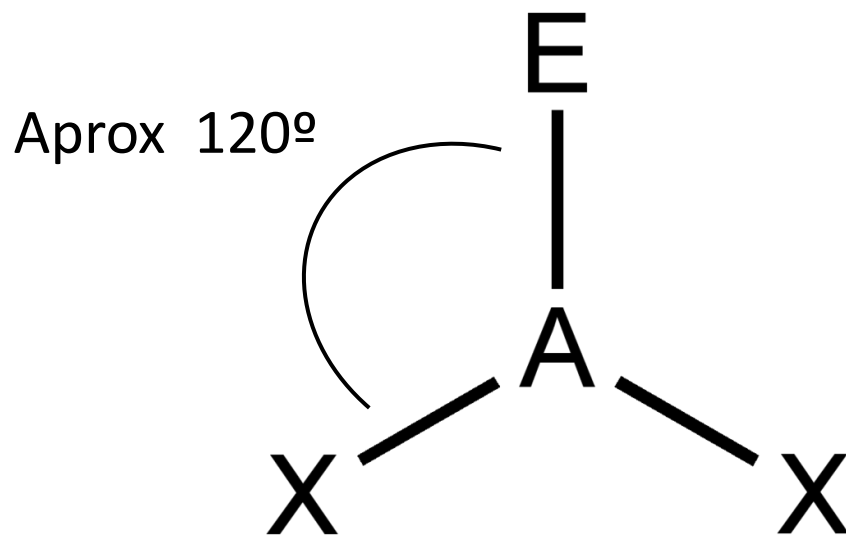
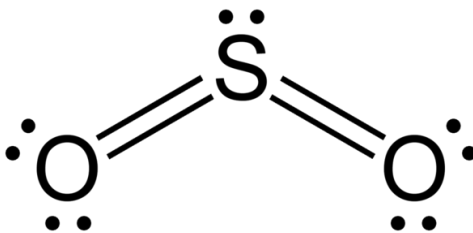
Configuração AX_2E_1

- Arranjo eletrônico: **Trigonal plana**
- Geometria Molecular: **Angular**

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



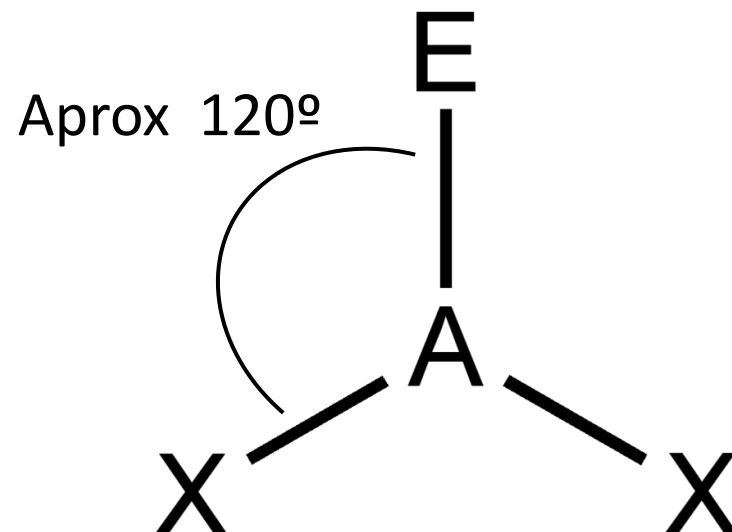
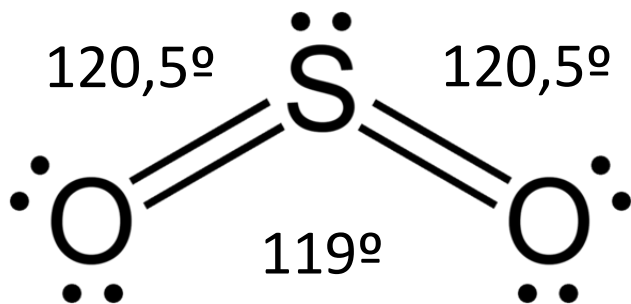
Exemplos: SO_2



GEOMETRIA MOLECULAR

Mas por que aproximadamente 120° ?

A resposta está nos pares eletrônicos livres, pois eles são mais “repelentes” que os pares que de elétrons em ligação, primeiro porque eles estão mais perto do átomo central. E os elétrons da ligação também são atraídos pelo núcleo do átomo da ligação, distanciando do átomo central



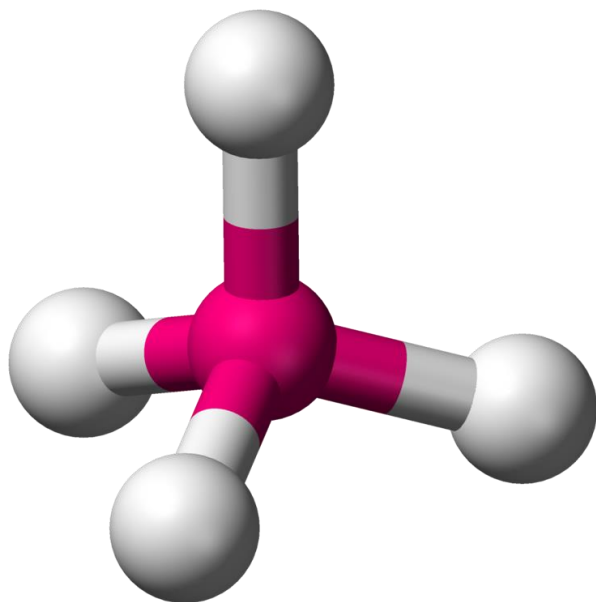
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **4**

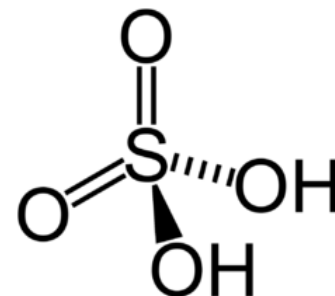
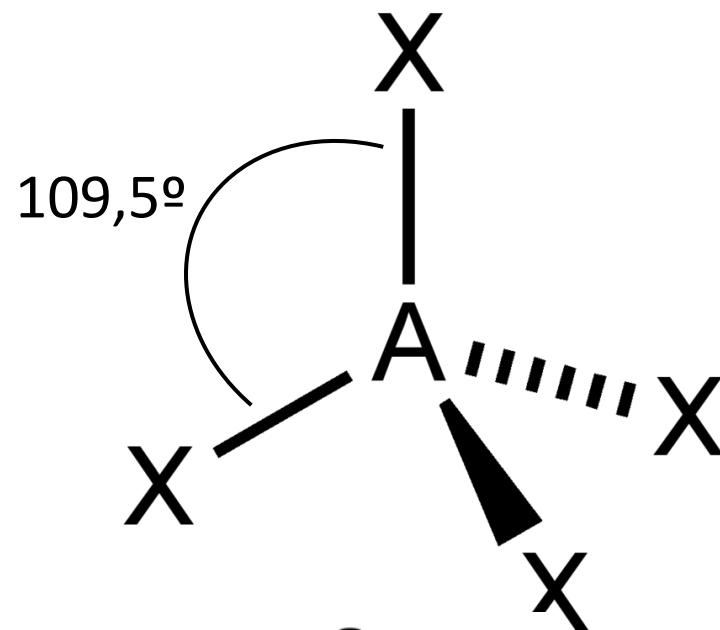
Configuração AX_4

- Arranjo eletrônico: Tetraédrico
- Geometria Molecular: Tetraédrico

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



Exemplos: CH_4 , H_2SO_4 ,



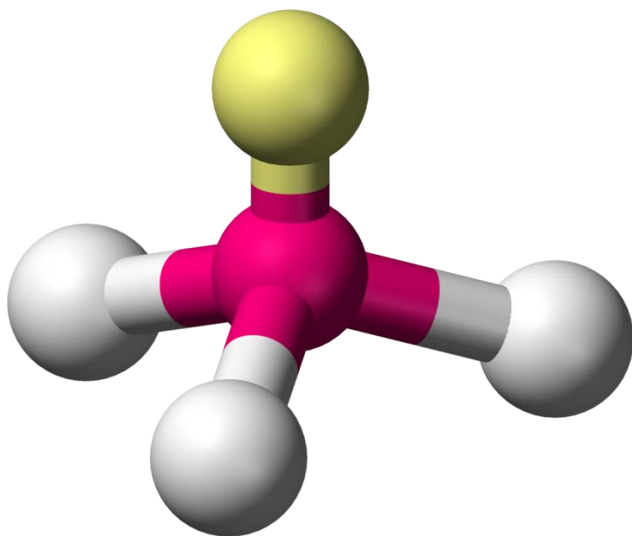
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **4**

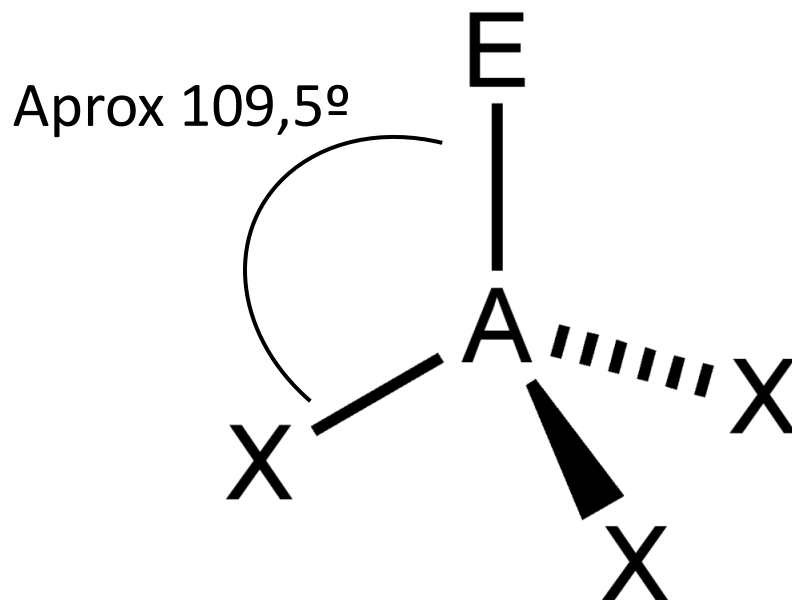
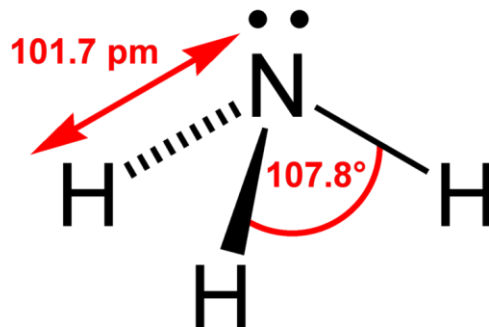
Configuração AX_3E

- Arranjo eletrônico: Tetraédrico
- Geometria Molecular: Piramidal

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



Exemplos: NH_3



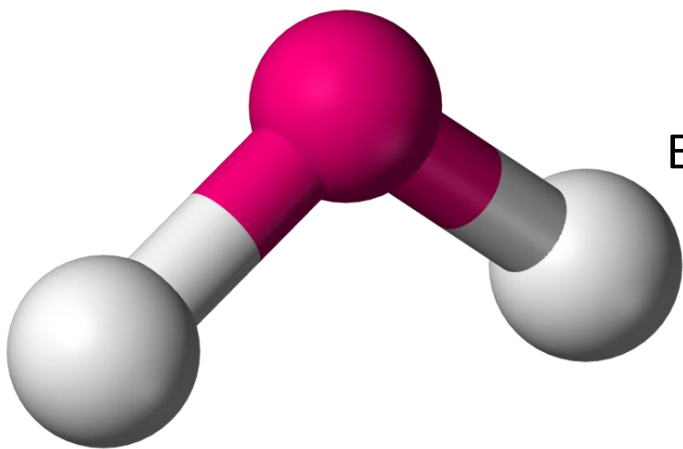
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **4**

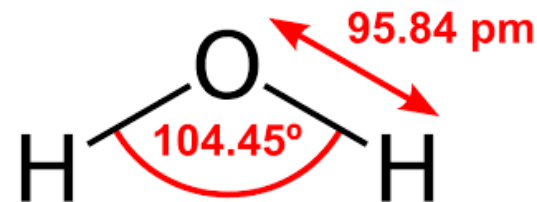
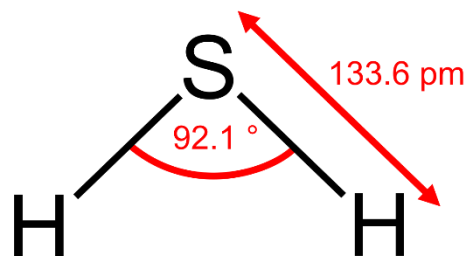
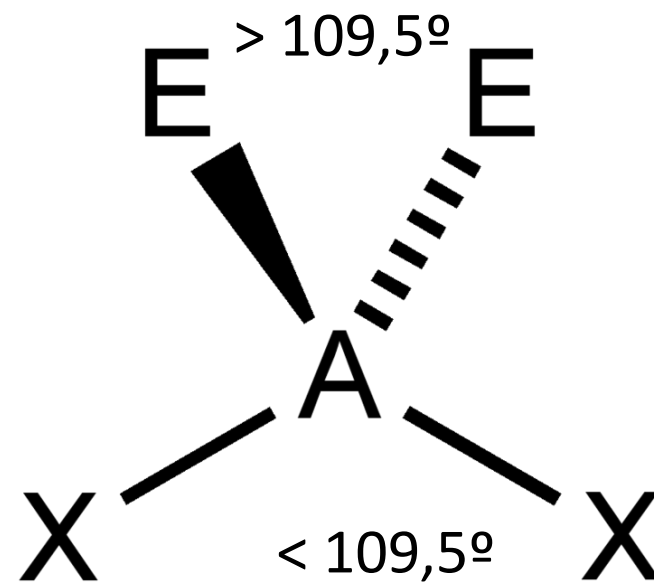
Configuração AX_2E_2

- Arranjo eletrônico: Tetraédrico
- Geometria Molecular: Angular

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



Exemplos: H_2O , H_2S



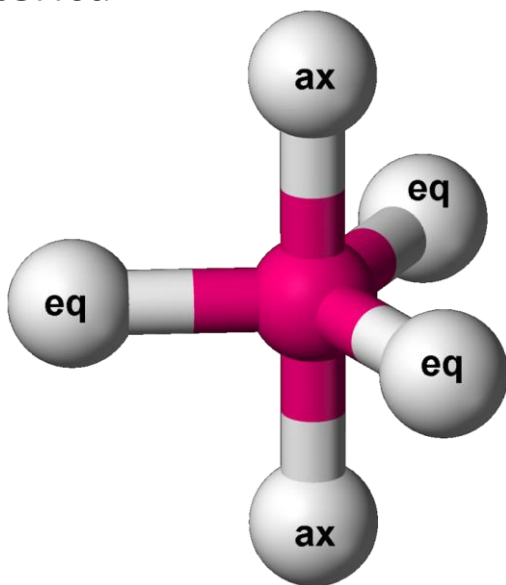
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico 5

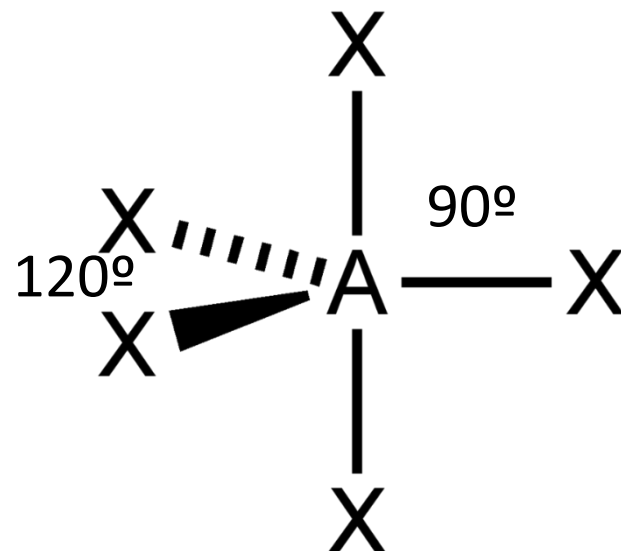
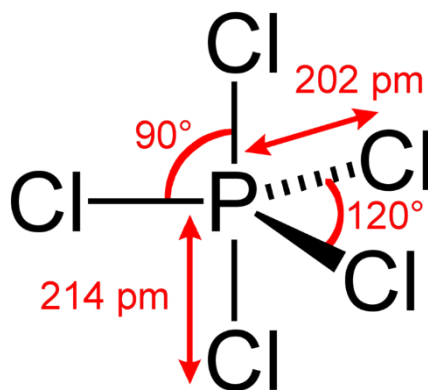
Configuração AX_5

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

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal trigonal (base triangular)**
- Geometria Molecular: **Bipiramidal trigonal (base triangular)**

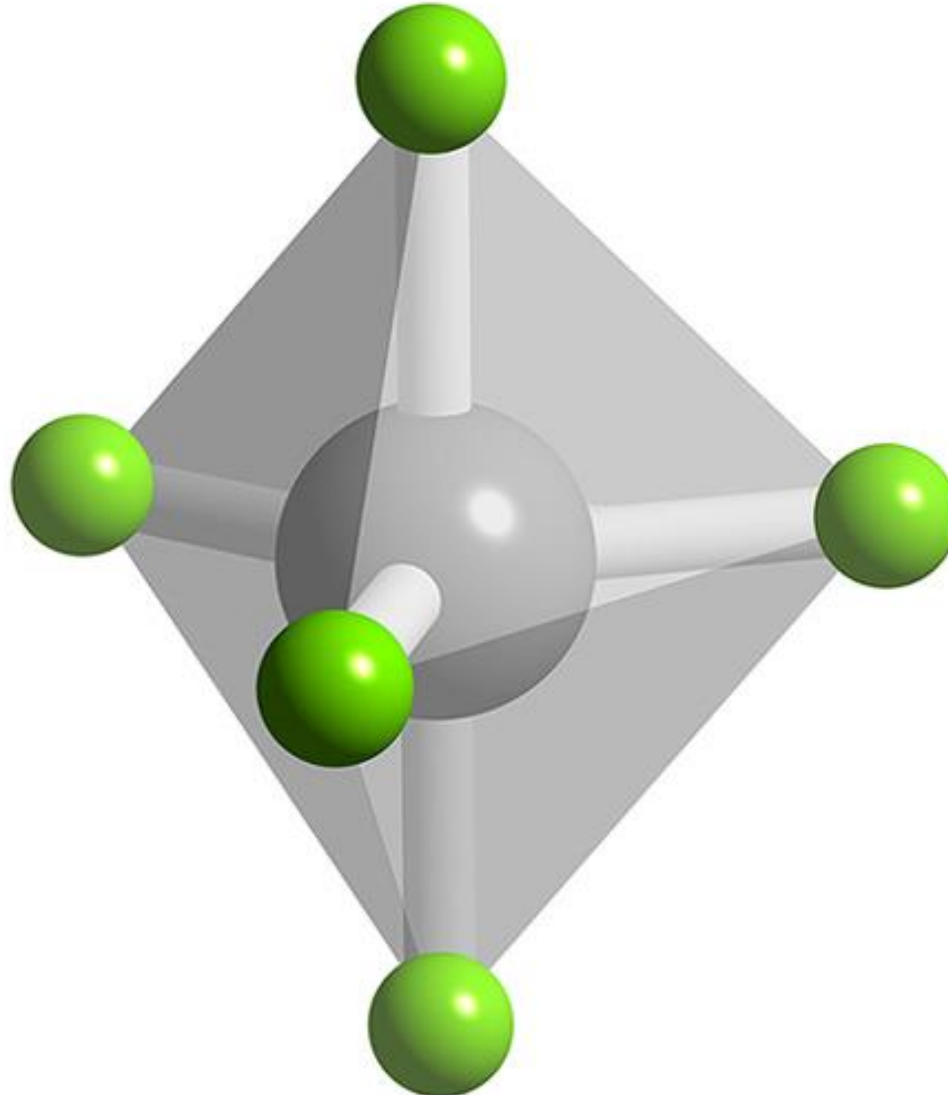


Exemplos: PCl_5



GEOMETRIA MOLECULAR

Por que bipirâmide de base triangular?



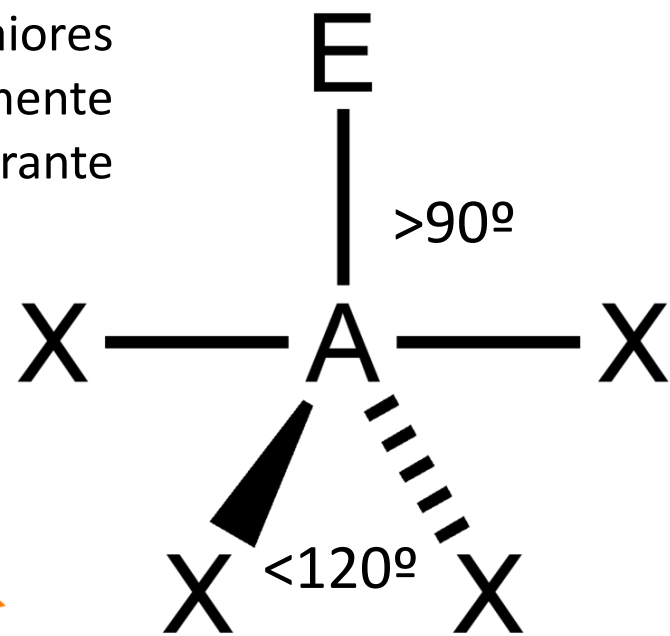
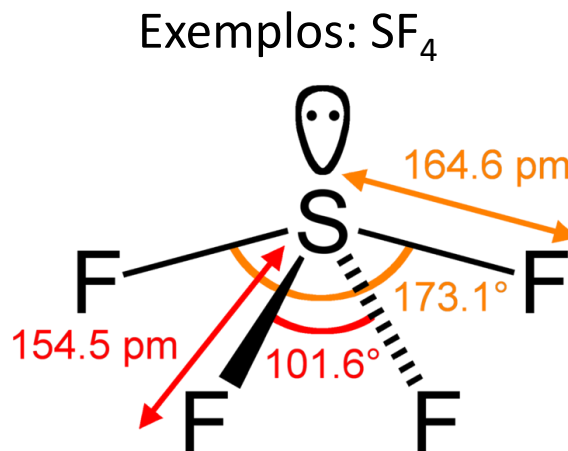
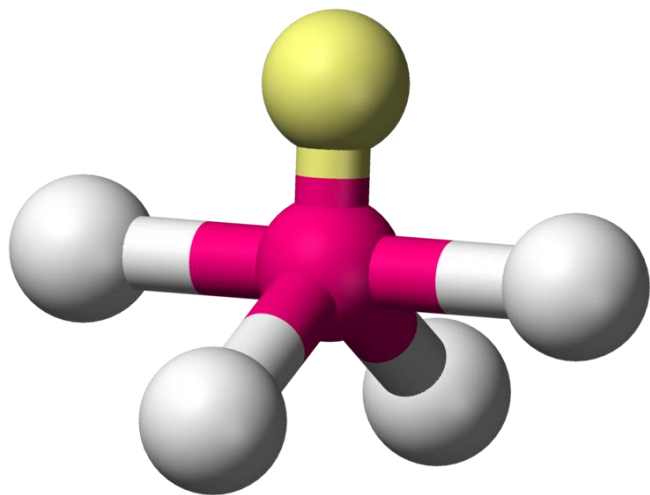
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico 5

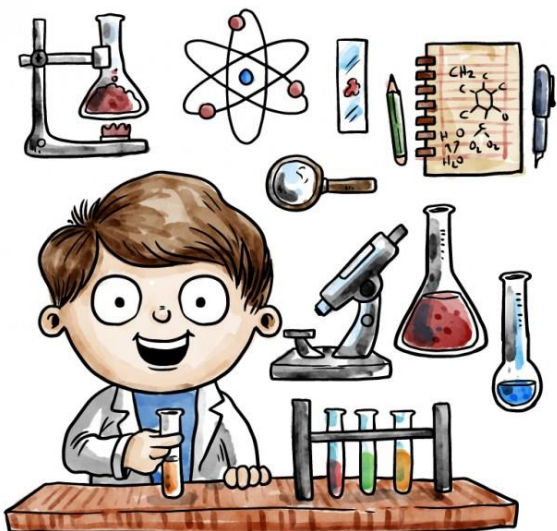
Configuração AX_4E

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal trigonal (base triangular)**
- Geometria Molecular: **Gangorra**

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

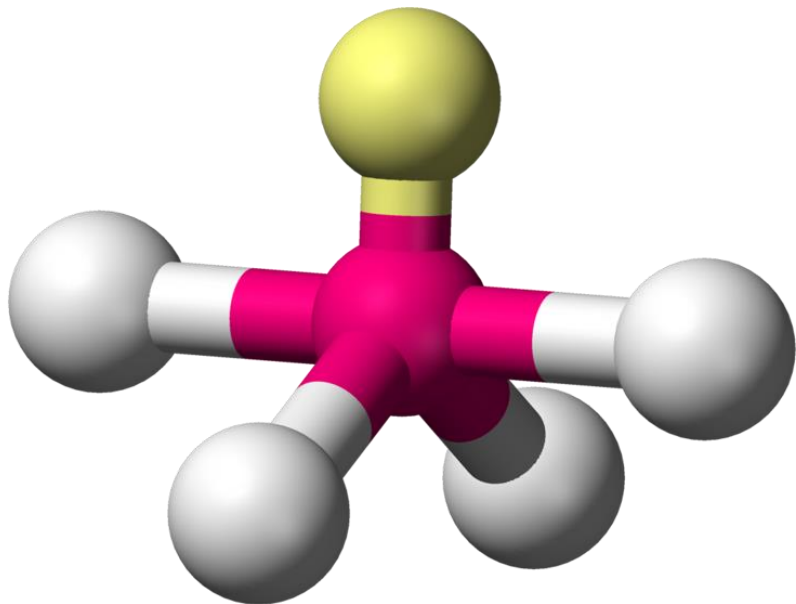


GEOMETRIA MOLECULAR DOS RADICAIS



designed by freepik.com

Químicos são seres de imaginação muito fértil!



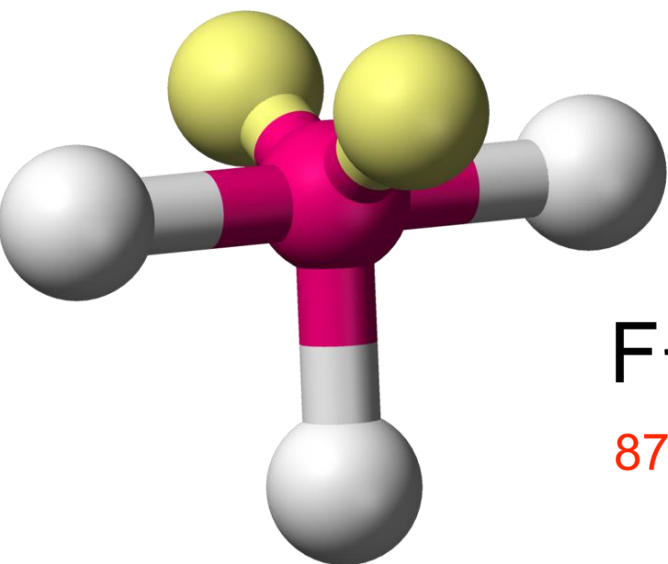
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico 5

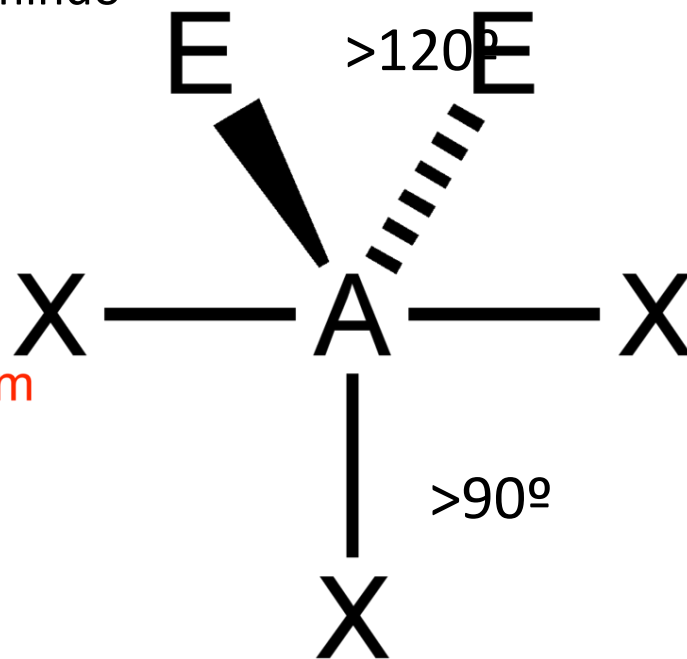
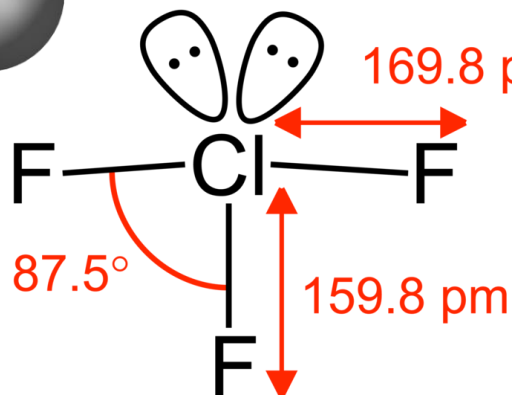
Configuração AX_3E_2

- Arranjo eletrônico: Bipiramidal trigonal (base triangular)
- Geometria Molecular: Formato em T

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



Exemplos: SF_3



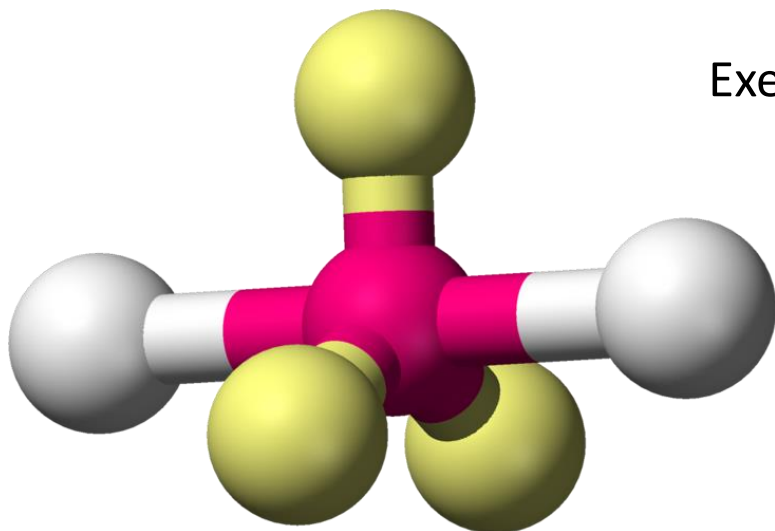
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico 5

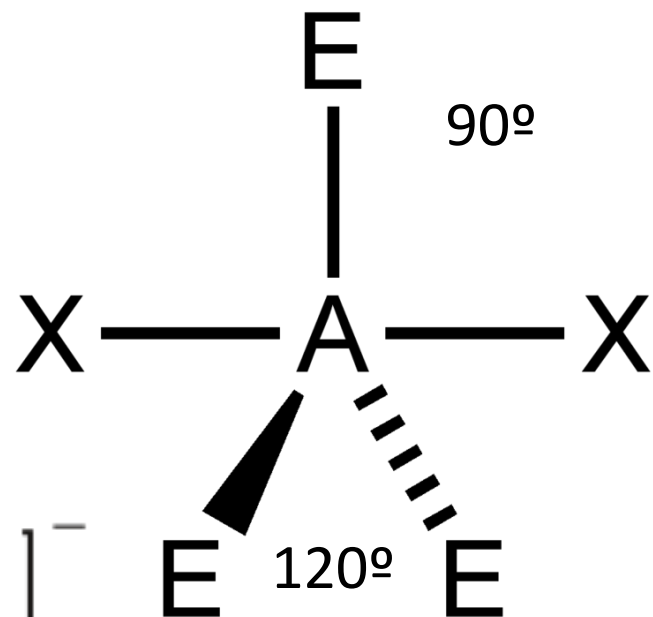
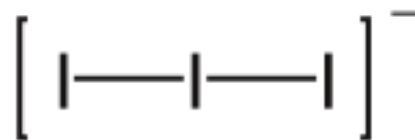
Configuração AX_2E_3

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal trigonal (base triangular)**
- Geometria Molecular: **Linear**

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



Exemplos: I_3^- , XeF_2



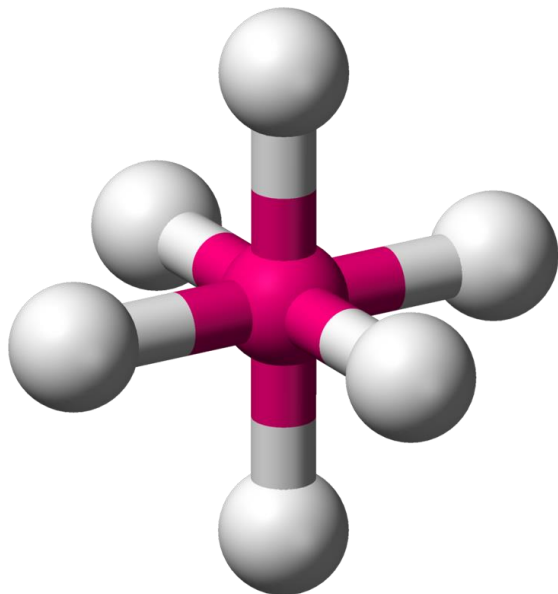
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **6**

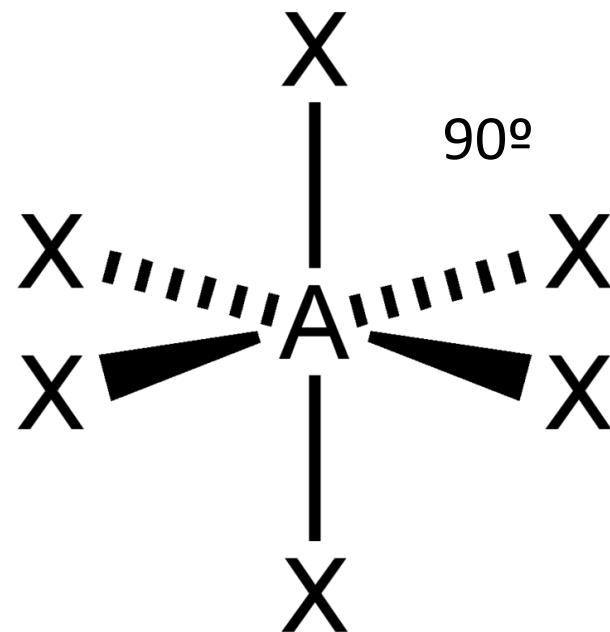
Configuração AX_6

- Arranjo eletrônico: **Octaédrico (bipiramidal de base quadrada)**
- Geometria Molecular: **Octaédrico**

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



Exemplos: $Cu(NH_3)_6$



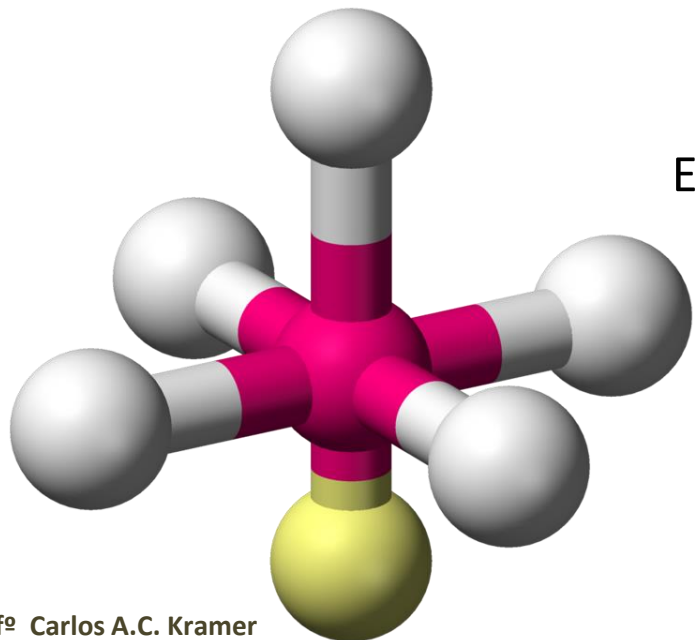
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **6**

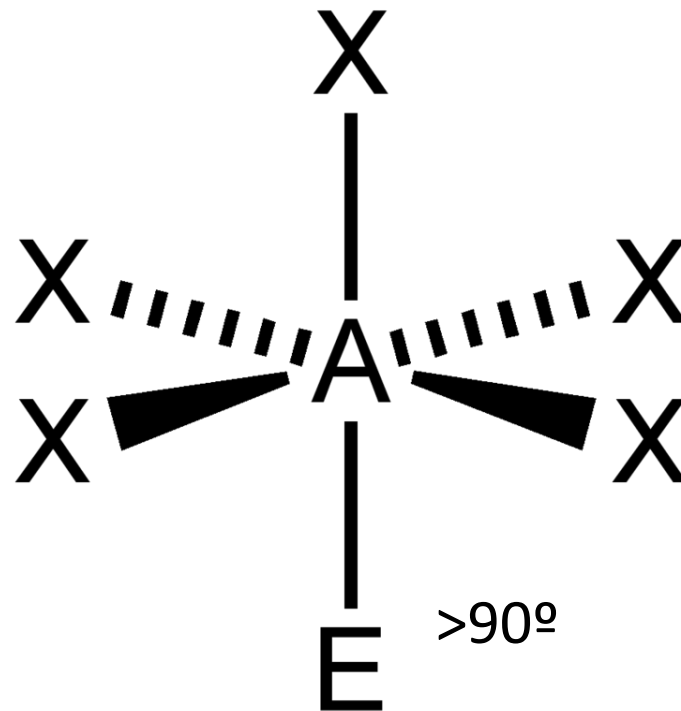
Configuração AX_5E

- Arranjo eletrônico: **Octaédrico (bipiramidal de base quadrada)**
- Geometria Molecular: **Piramidal de base quadrada**

Neste tipo de configuração



Exemplos: BrF_5



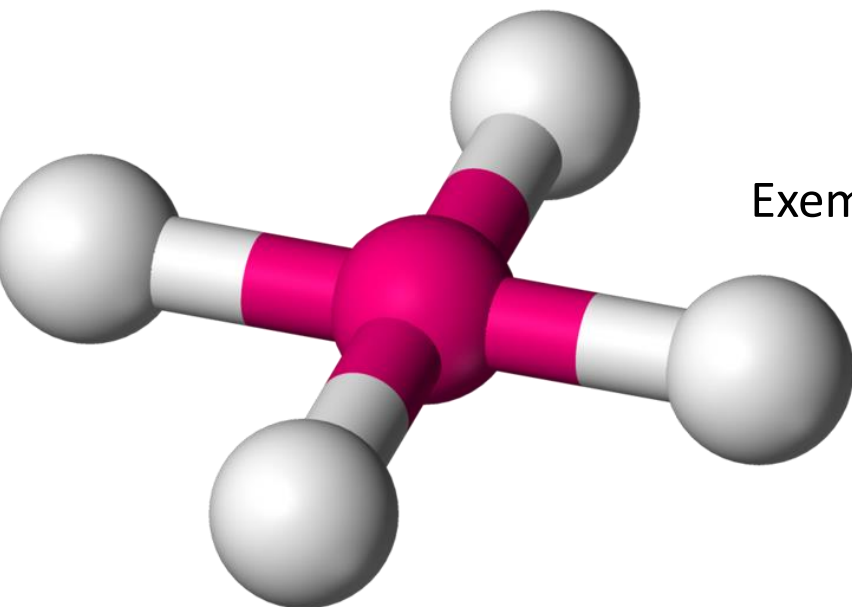
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **6**

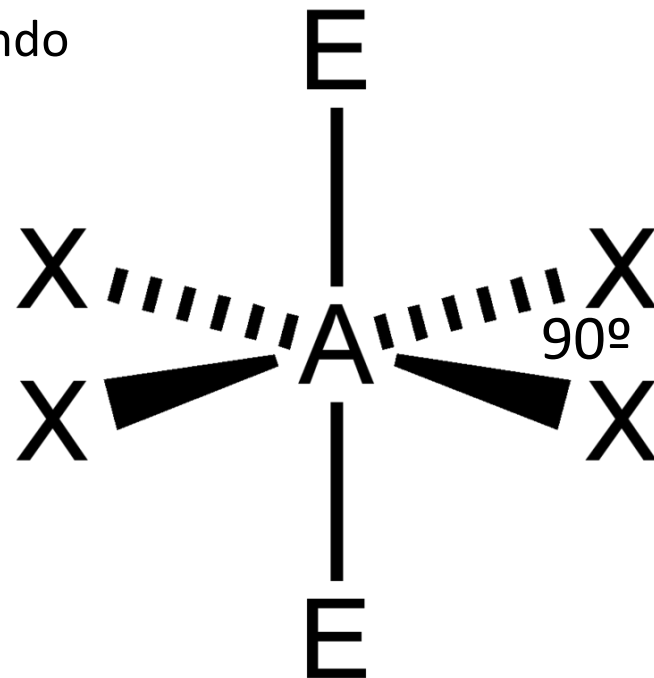
Configuração AX_4E_2

- Arranjo eletrônico: **Octaédrico (bipiramidal de base quadrada)**
- Geometria Molecular: **Quadrado planar**

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



Exemplos: XeF_4



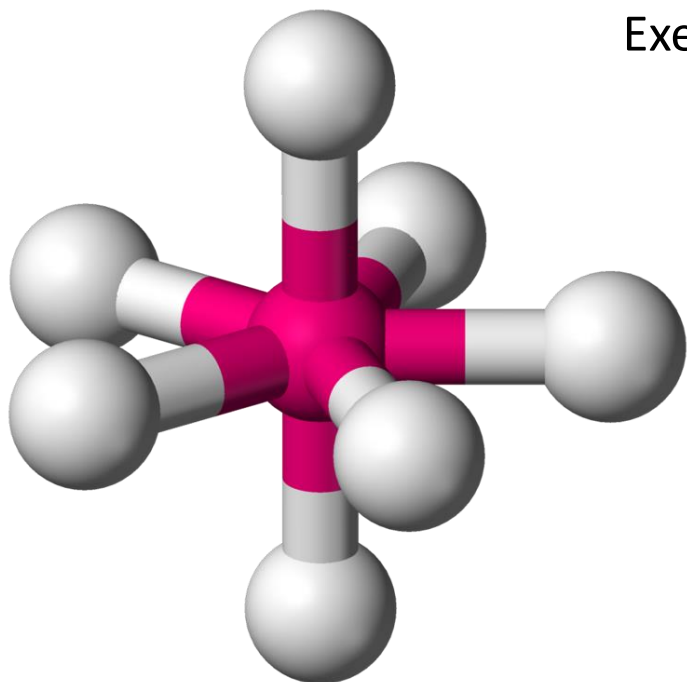
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **7**

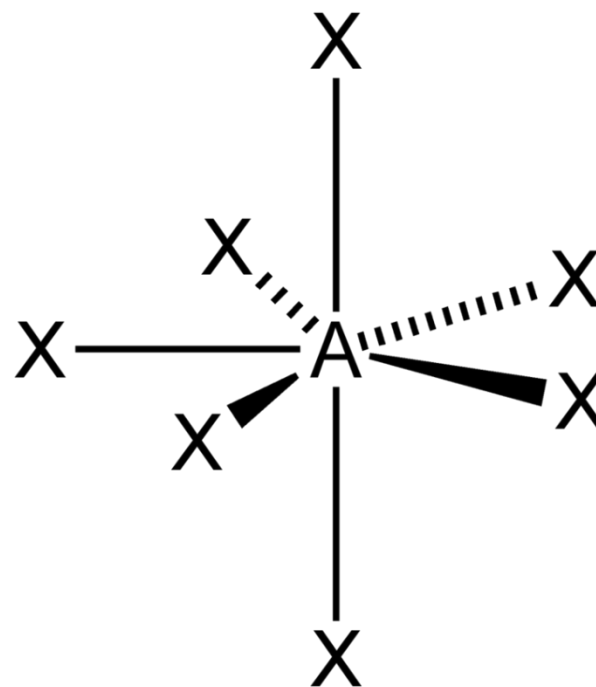
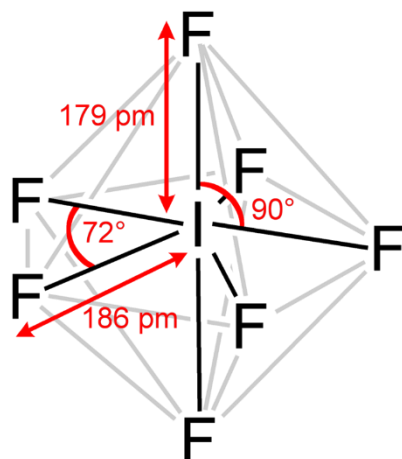
Configuração AX_7

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal de base pentagonal**
- Geometria Molecular: **Bipiramidal de base pentagonal**

Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os ma



Exemplos: IF_7



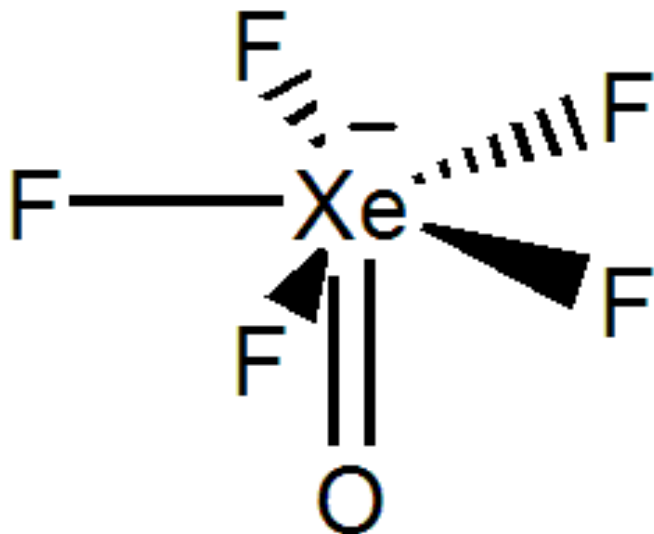
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **7**

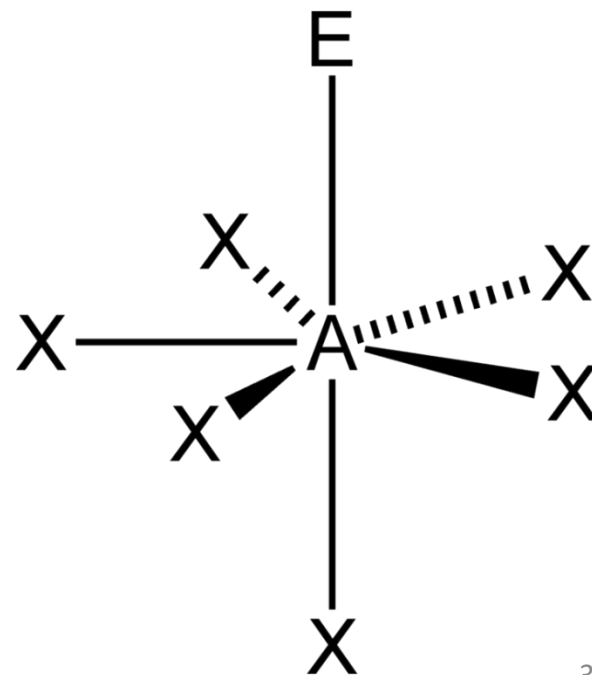
Configuração AX_6E

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal de base pentagonal**
- Geometria Molecular: **Piramidal de base pentagonal**

Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os ma



Exemplos: $XeOF_5^-$



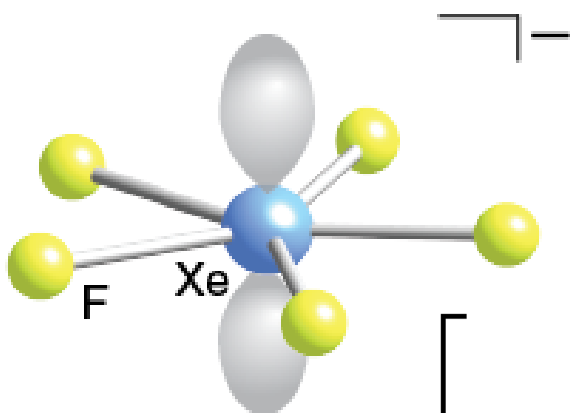
GEOMETRIA MOLECULAR

Numero estérico **7**

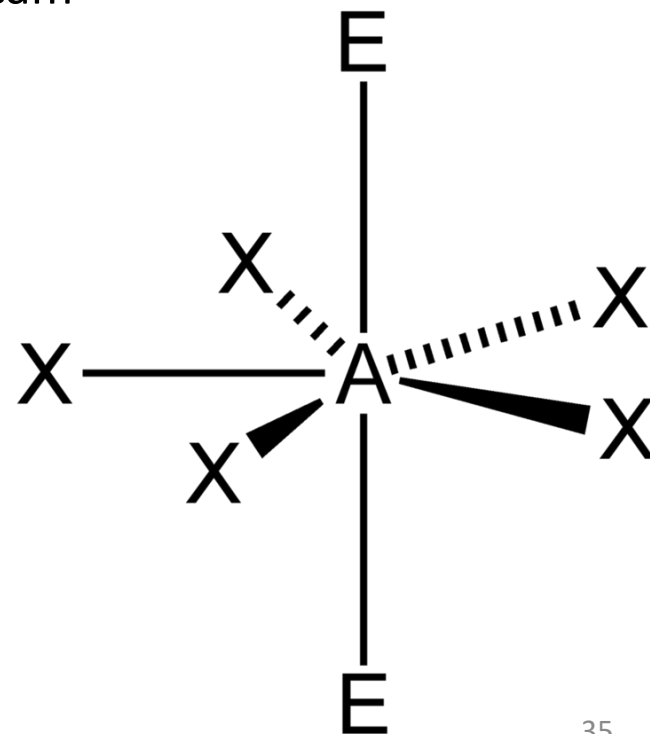
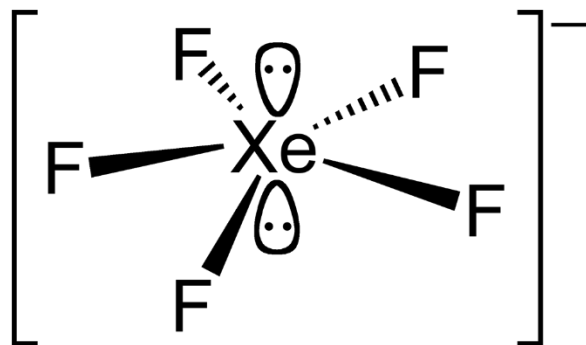
Configuração AX_5E_2

- Arranjo eletrônico: **Bipiramidal de base pentagonal**
- Geometria Molecular: **Pentagonal Plana**

Neste tipo de configuração os pares eletrônicos ficam os ma



Exemplos: XeF₅⁻

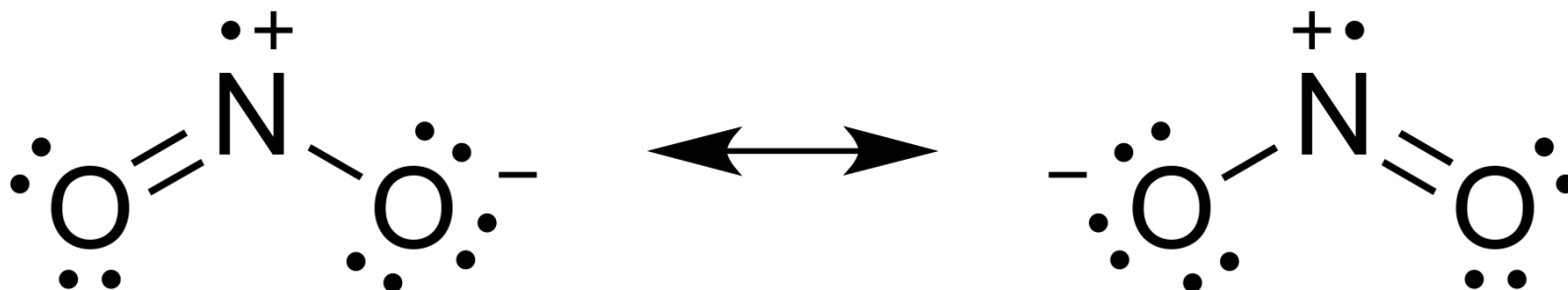
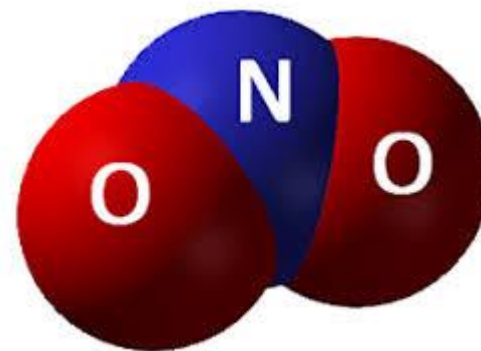


GEOMETRIA MOLECULAR DOS RADICAIS

Os radicais (elétrons desemparelhados) serão vistos como um zona de repulsão, assim como um par eletrônico, porém, os radicais irão repelir menos que um par eletrônico

Exemplo: o dióxido de nitrogênio que possui um elétron de desemparelhado sobre o átomo central o nitrogênio

Arranjo eletrônico: Trigonal plano
Geometria: **Angular**



GEOMETRIA MOLECULAR (RESUMO)

Número estérico (Zonas de repulsão)

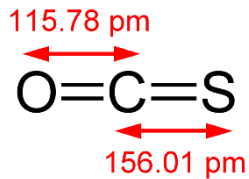
Arranjo eletrônico
Tetraédrico

2

Arranjo eletrônico
Linear

AX_2

Geometria: Linear



OBS: AXE
Geometria: Linear

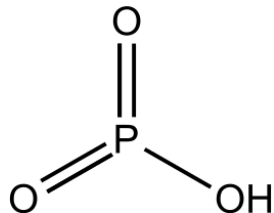


3

Arranjo eletrônico
Trigonal plano

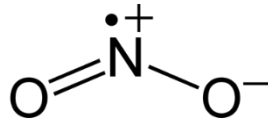
AX_3

Geometria:
Trigonal plana



AX_2E

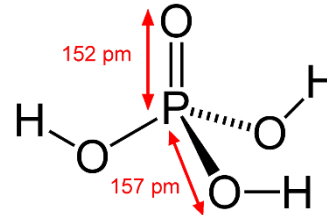
Geometria:
Angular



4

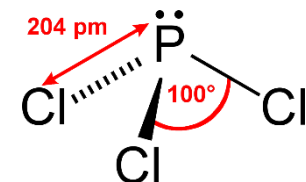
AX_4

Geometria:
Tetraédrica



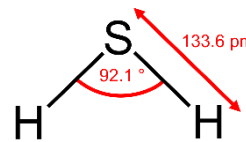
AX_3E

Geometria:
Piramidal

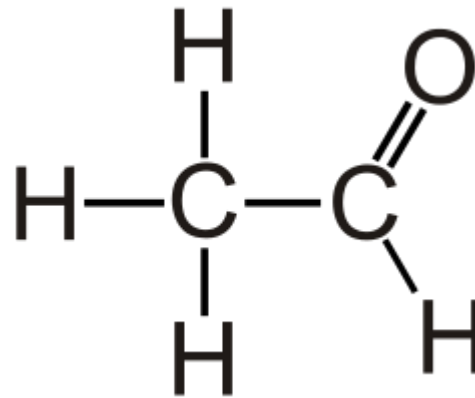
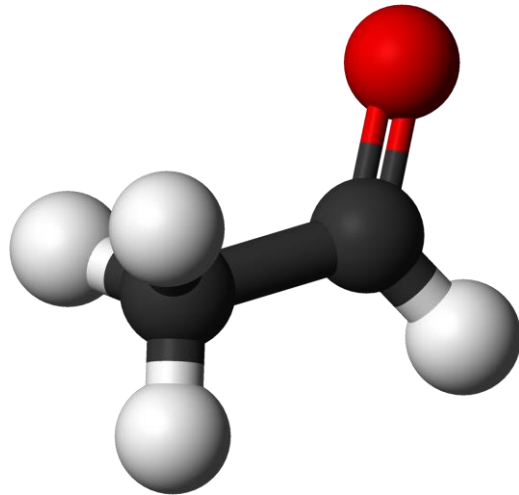


AX_2E_2

Geometria:
Angular



GEOMETRIA MOLECULAR DOS ÁTOMOS DE CARBONO



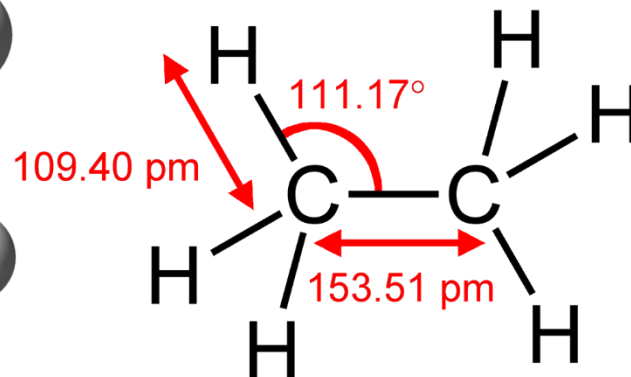
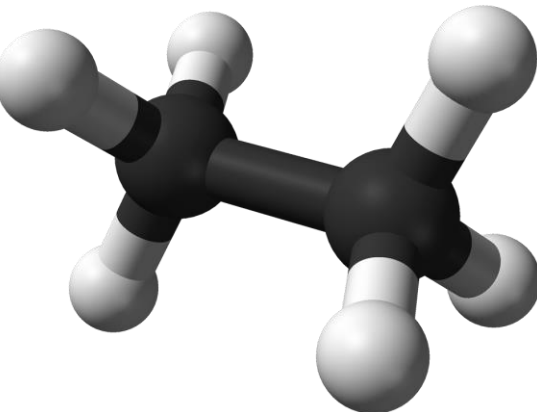
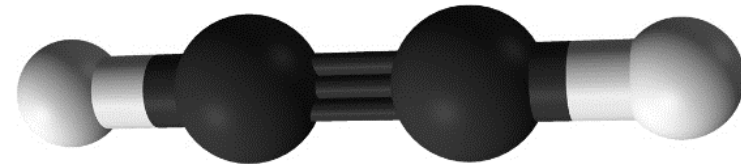
Carbono sp^2

Geometria: Trigonal plana
Exemplo: Etanal

Carbono sp



Geometria: Linear
Exemplo: Etino

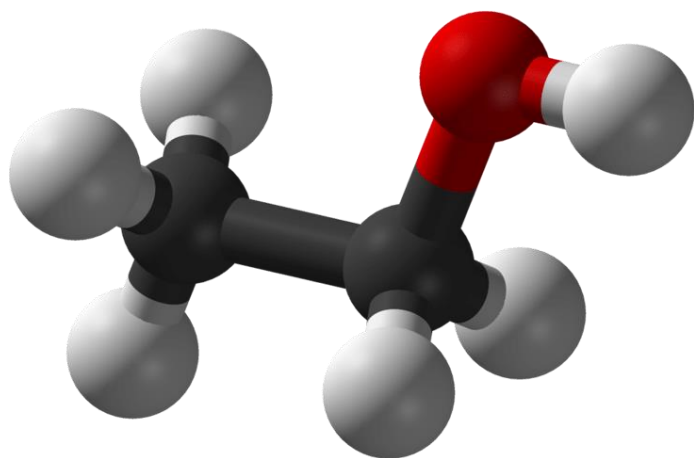


Carbono sp^3

Geometria: Tetraédrica
Exemplo: Etano

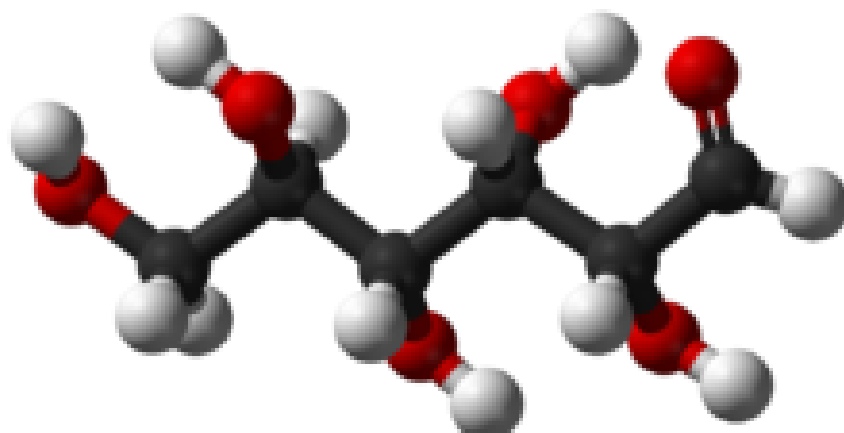
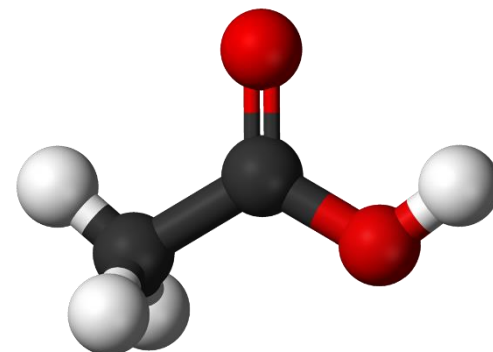
GEOMETRIA DE UMA MOLÉCULA

Para entender o arranjo espacial de molécula, precisamos analisar todos os átomos como sendo átomo centrais e aplicar a lógica da geometria já estudada para cada um deles



Etanol

Ácido acético



D-Glucose

MOMENTO DIPOLAR

O momento dipolar (μ) é calculado como sendo a carga entre dois núcleos (em Coulombs, C) vezes a distância (em metros)

$$\mu = \delta d.$$

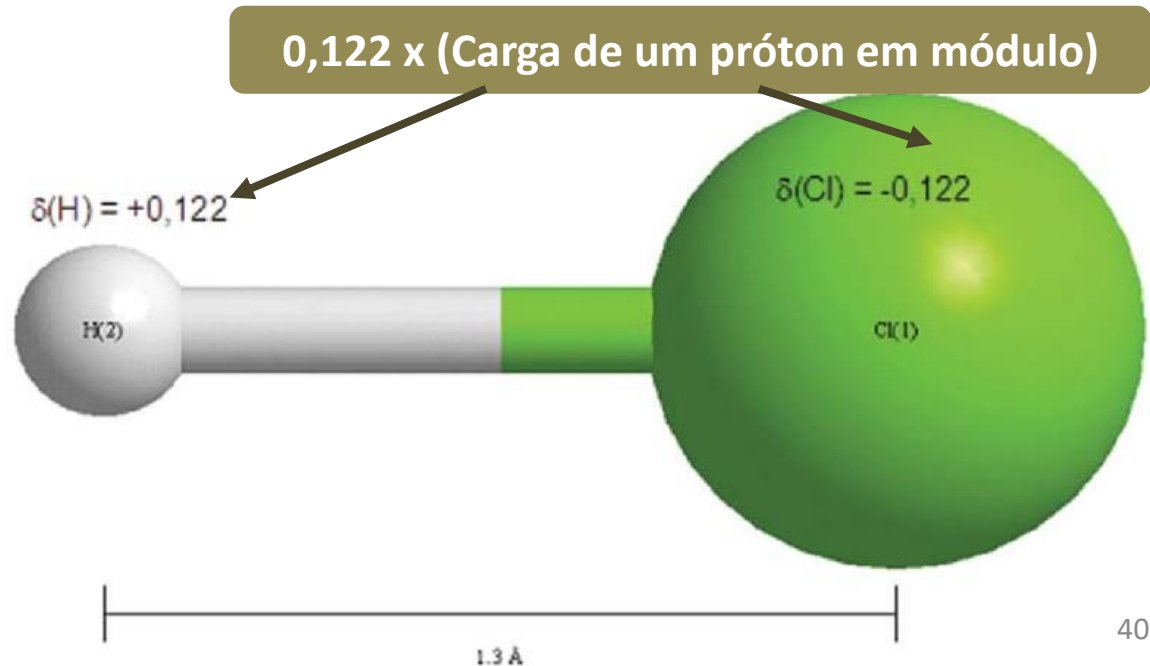
A ligação H-Cl apresenta momento dipolo (μ) = $0,122 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}) \times 1,3 \cdot 10^{-10} \text{m}$

$$\mu = 2,54 \cdot 10^{-30} \text{ C.m ou } 0,77 \text{D} \quad (\text{Lê-se Debye})$$

$$|Q_{p^+}| = |Q_{e^-}| = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}$$

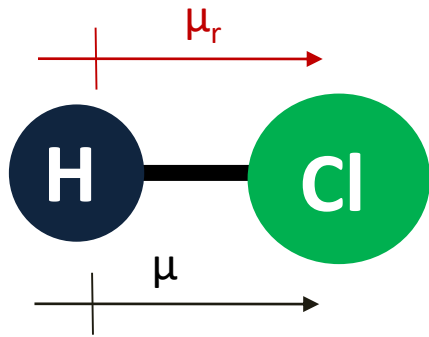
$$1 \text{Å} = 10^{-10} \text{m}$$

$$1 \text{D} = 3,3 \cdot 10^{-30} \text{C.m}$$

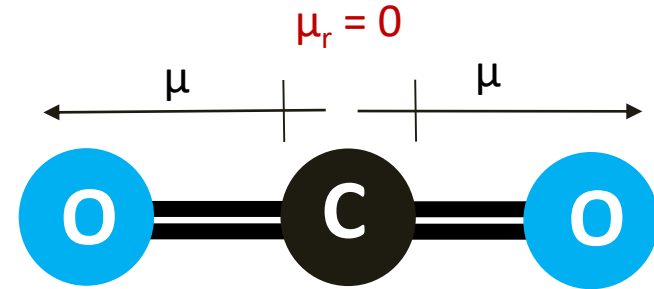


AVALIANDO A POLARIDADE DE UMA MOLÉCULA

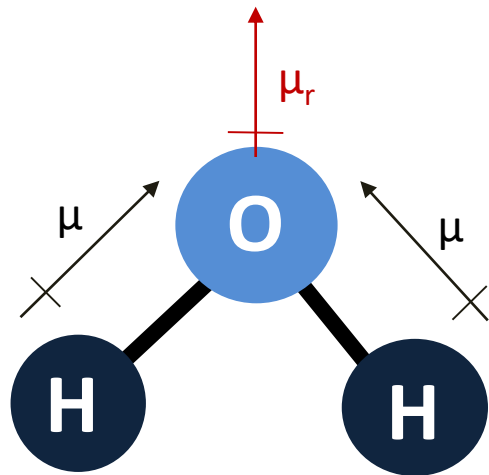
Para checar a polaridade de uma molécula devemos somar todos os momentos dipolar das ligações (μ), isto é, somar os vetores conforme as geometrias das ligações, obtendo um vetor resultante (μ_r)



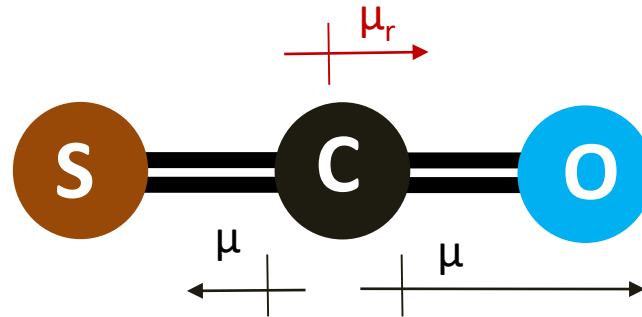
$\mu_r \neq 0$, logo, HCl é uma molécula polar



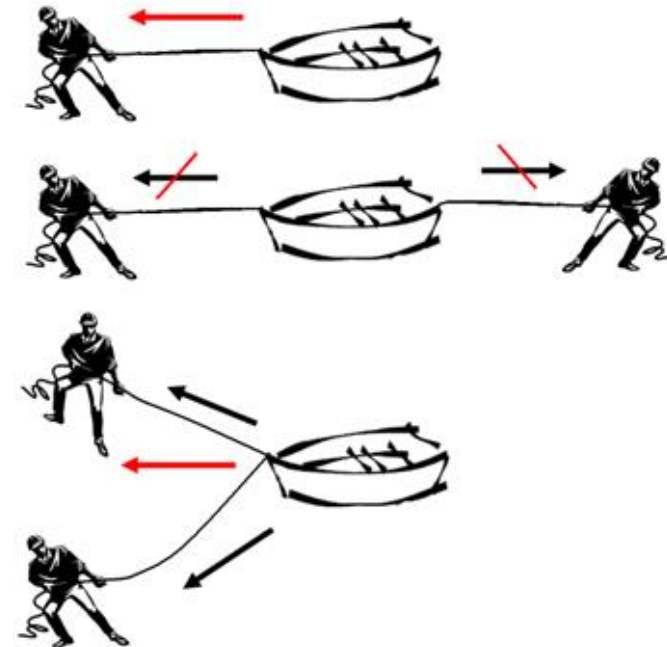
$\mu_r = 0$, logo, CO₂ é uma molécula apolar



$\mu_r \neq 0$, logo, H₂O é uma molécula polar (1,85D)

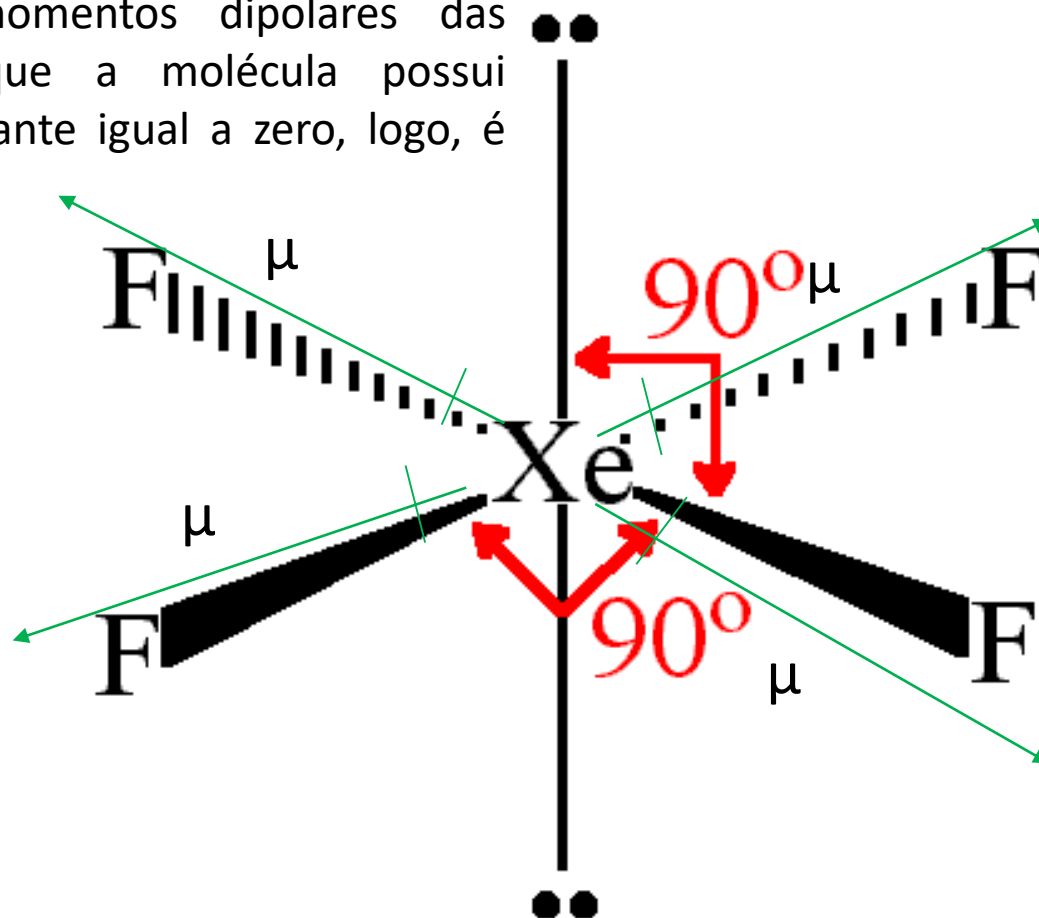


$\mu_r \neq 0$, logo, CSO (sulfeto de carbonila) é uma molécula polar (0,65D)



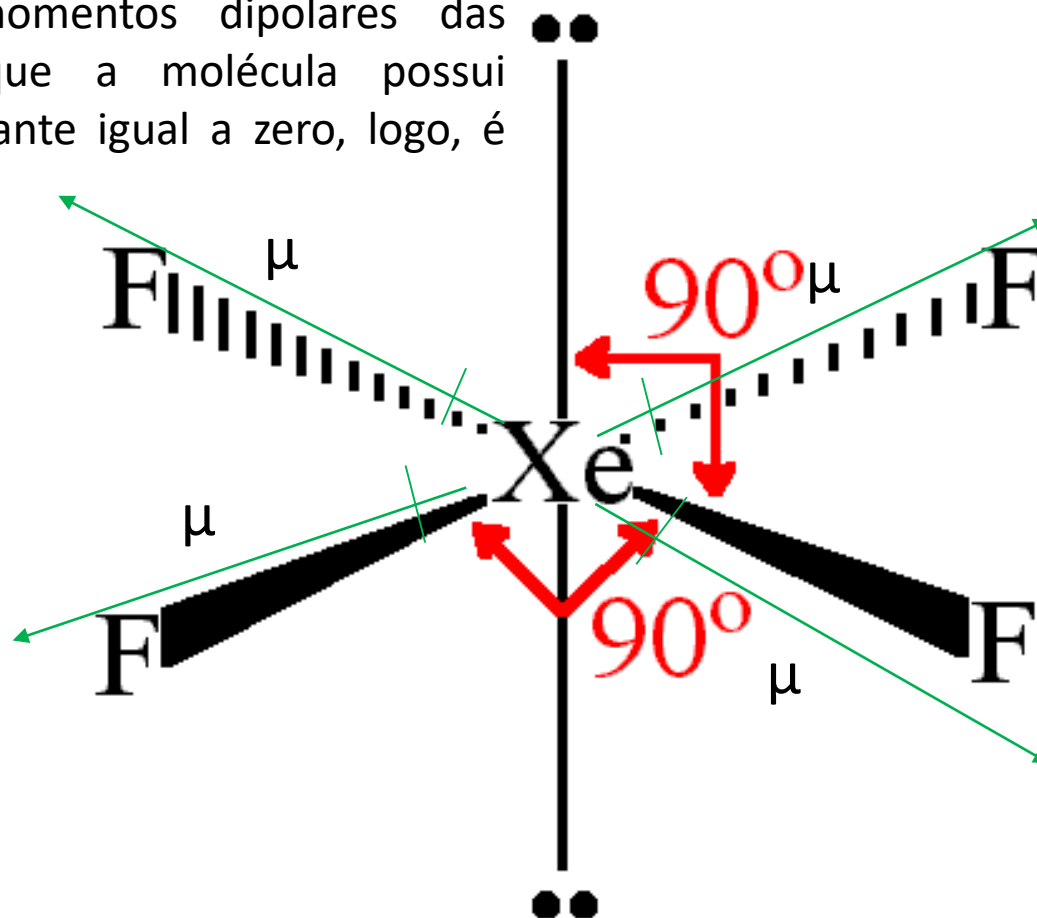
AVALIANDO A POLARIDADE DE UMA MOLÉCULA

Vamos avaliar a polaridade da molécula de XeF_4 , somando todos os momentos dipolares das ligações, percebe-se que a molécula possui momento dipolar resultante igual a zero, logo, é **apolar**



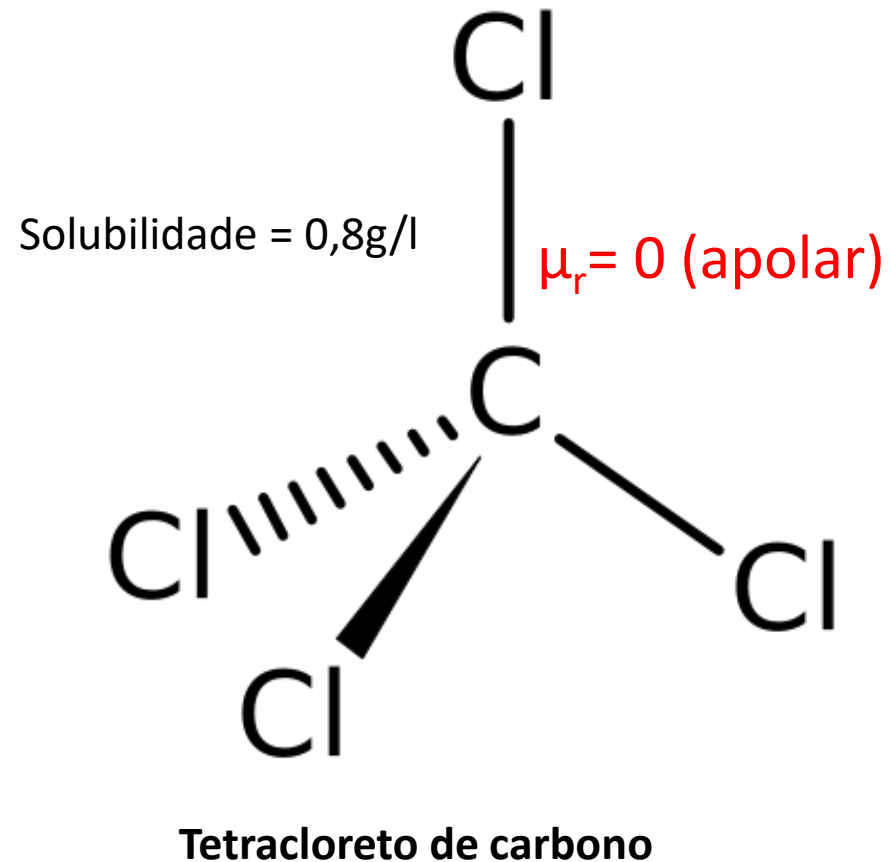
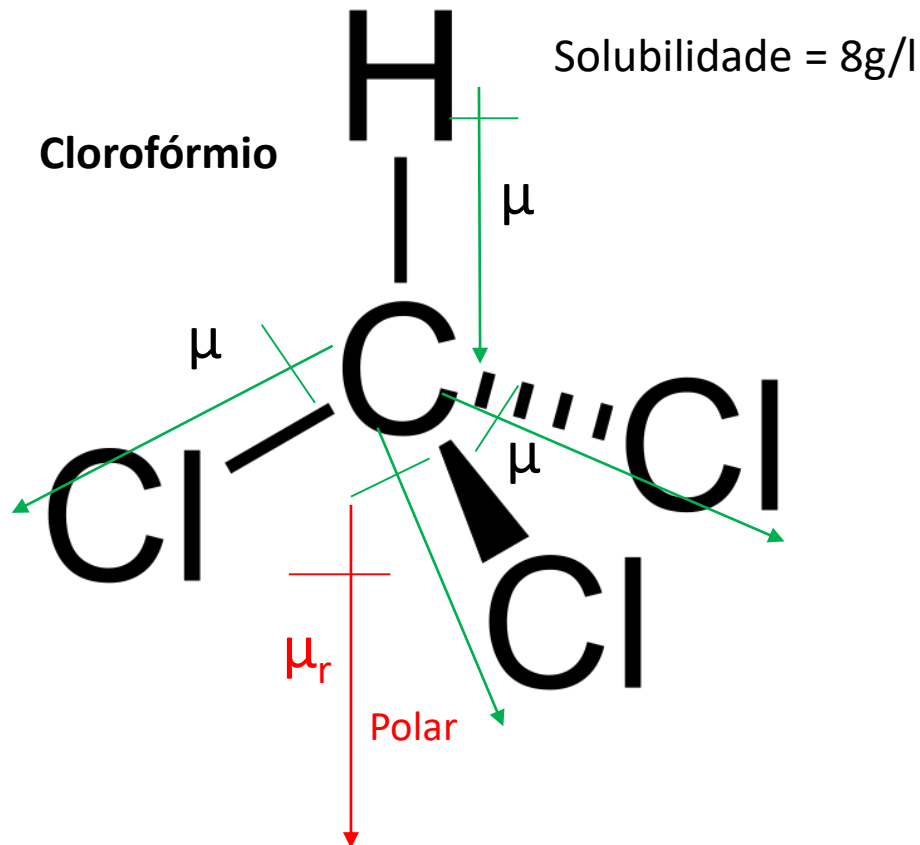
AVALIANDO A POLARIDADE DE UMA MOLÉCULA

Vamos avaliar a polaridade da molécula de XeF_4 , somando todos os momentos dipolares das ligações, percebe-se que a molécula possui momento dipolar resultante igual a zero, logo, é **apolar**



AVALIANDO A POLARIDADE DE UMA MOLÉCULA

O clorofórmio, tecnicamente chamado de triclorometano (CHCl_3) se diferencia do tetraclorometano (CCl_4) pois possui um átomo de cloro a mais ligado. Esta ligação confere diferentes polaridades para ambas moléculas e consecutivamente diferente solubilidades em água (solvente apolar). Qual delas deverá ser mais solúvel?



EXERCÍCIOS

(UFPR) Assinale a alternativa que associa corretamente a coluna de compostos químicos com a coluna de estruturas geométricas.

- | | |
|--------------------|----------------|
| I. NH_3 | A. Linear |
| II. HF | B. Angular |
| III. SO_2 | C. Piramidal |
| IV. CH_4 | D. Tetraédrica |

a) I-A, II-B, III-C, IV-D

b) I-A, III-B, IV-C, II-D

c) II-A, III-B, I-C, IV-D

d) II-A, IV-B, III-C, I-D

e) III-A, II-B, IV-C, I-D

