

GEOMETRIA MOLECULAR



Geometria Molecular

Modelo de Repulsão de Pares de Elétrons no Nível de Valência (**VSEPR**).

Desenvolvido por Gillespie e Nyholm em 1957. A geometria molecular descreve o arranjo espacial do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele.

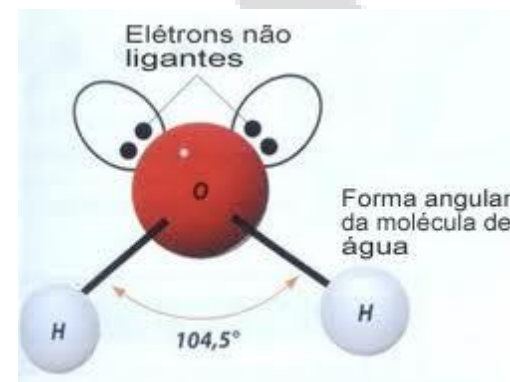
Geometria Molecular

Número de Coordenação Total (**NCT**) = número de pares ligantes (**PL**) + número de pares não ligantes (**PNL**) ao redor do átomo central

Ex.: H_2O

$$\text{NCT} = \text{PL} + \text{PNL}$$

$$\text{NCT} = 2 + 2 = 4$$



- Os PNL são mais volumosos que os PL
- Somente e^- das ligações σ são contados como PL

Regras para determinar a geometria de moléculas e íons

1. Fazer a estrutura de Lewis
2. Determinar o NCT
3. Verificar o número de PL e o número de PNL
4. Repulsão de pares eletrônicos:
$$\text{PNL-PNL} > \text{PNL-PL} > \text{PL-PL}$$
5. Repulsão quanto aos ângulos: $90^\circ > 120^\circ > 180^\circ$
6. Inicialmente considerar somente as repulsões a 90°
7. Optar pela geometria onde a repulsão entre os pares eletrônicos seja a menor possível
8. Cada ligação dupla ou tripla é contada como uma única ligação

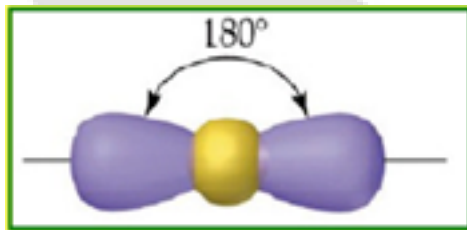
Geometria Molecular

• Os pares eletrônicos da camada de valência de um átomo tendem a se orientar de maneira que sua energia total seja mínima. Isto significa que eles ficam tão próximos quanto possível do núcleo e ao mesmo tempo ficam o mais afastado possível entre si, a fim de minimizar as repulsões inter eletrônicas.

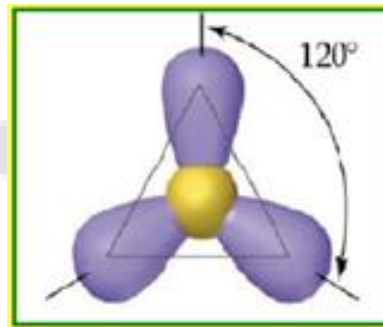
Arranjo Geométrico

As geometrias abaixo apresentam repulsões mínimas entre os pares de elétrons. NCT = 2, 3, 4, 5 e 6, respect.

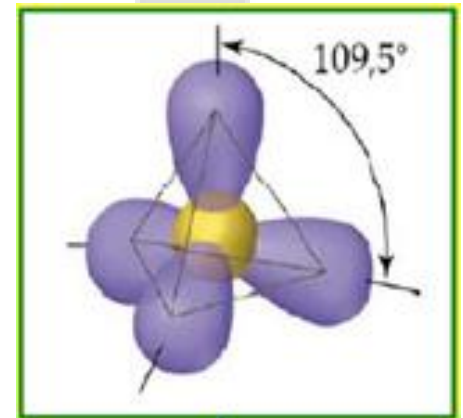
Linear



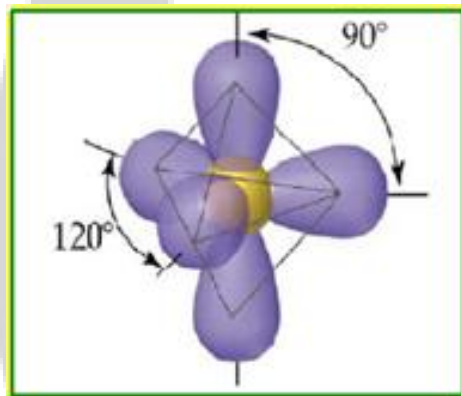
Trigonal Planar



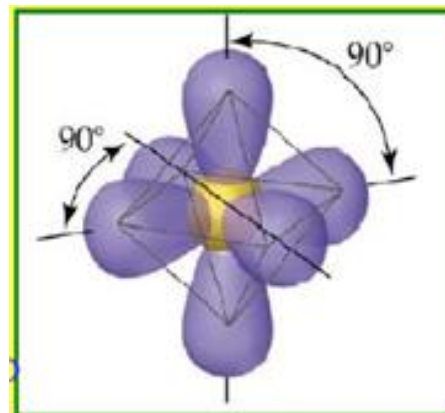
Tetraédrico



Bipiramide Trigonal

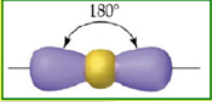
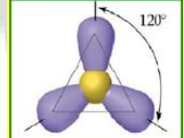
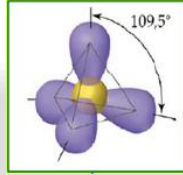
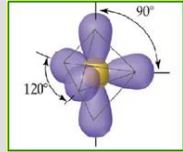
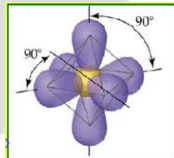


Octaédrico



Geometria Molecular

Átomo central possui apenas PL de elétrons

| NCT | exemplo | geometria | ângulos | |
|-----|-----------------------------------|---------------------|-----------------------|---|
| 2 | BeF_2 | linear | 180° |  |
| 3 | BF_3 | trigonal plana | 120° |  |
| 4 | $\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$ | tetraédrica | $109,5^\circ$ |  |
| 5 | PCl_5 | bipirâmide trigonal | $120^\circ, 90^\circ$ |  |
| 6 | $\text{SF}_6, \text{SnCl}_6^{2-}$ | octaédrica | 90° |  |

Geometria Molecular

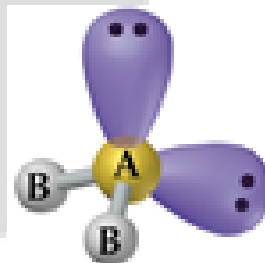
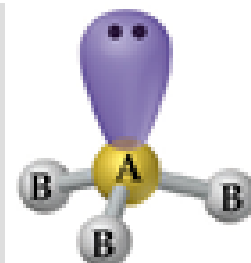
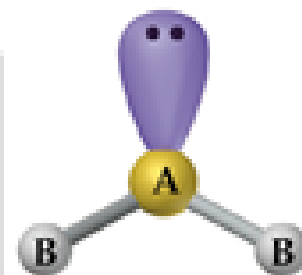
Átomo central possui PL e PNL de elétrons

NCT **PNL** **exemplo** **geometria** **ângulos**

3 1 $\text{GeCl}_2, \text{SO}_2$ angular $< 120^\circ$

4 1 NH_3 piramide
trigonal $107,5^\circ$

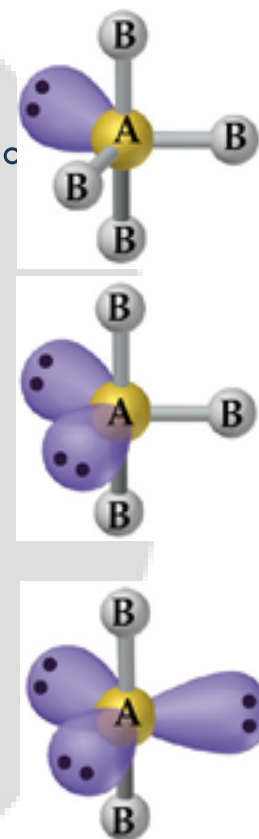
4 2 H_2O angular 105°



Geometria Molecular

Átomo central possui PL e PNL de elétrons

| NCT | PNL | exemplo | geometria | ângulos |
|-----|-----|----------------|------------|---------------------------|
| 5 | 1 | SF_4 | gangorra | $< 120^\circ, < 90^\circ$ |
| 5 | 2 | ClF_3 | forma de T | $< 90^\circ$ |
| 5 | 3 | XeF_2, I_3^- | linear | 180° |



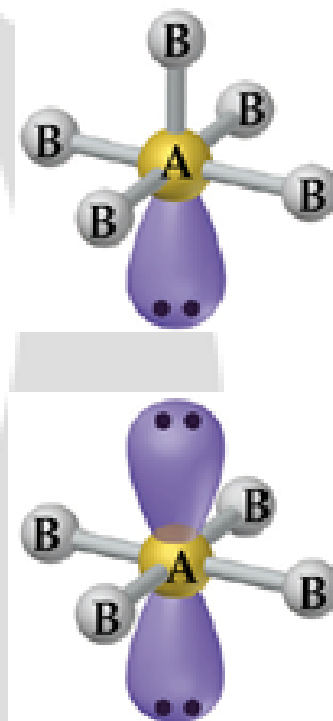
Geometria Molecular

Átomo central possui PL e PNL de elétrons

| NCT | PNL | exemplo | geometria | ângulos |
|-----|-----|---------|-----------|---------|
|-----|-----|---------|-----------|---------|

| | | | | |
|---|---|-----------------|---------------------------|-------|
| 6 | 1 | IF ₅ | pirâmide de base quadrada | < 90° |
|---|---|-----------------|---------------------------|-------|

| | | | | |
|---|---|------------------|-----------------|-----|
| 6 | 2 | XeF ₄ | quadrado planar | 90° |
|---|---|------------------|-----------------|-----|



Geometria Molecular

| NCT | PL | PNL | GEOMETRIA | ÂNGULO | HIBRIDAÇÃO DO ÁTOMO CENTRAL | EXEMPLOS |
|-----|----|-----|----------------------|--------------|--------------------------------|--|
| 2 | 2 | 0 | linear | 180° | sp | CO ₂ , CS ₂ , C ₂ H ₂ , BeH ₂ |
| 3 | 3 | 0 | trigonal plana | 120° | sp ² | BF ₃ , COCl ₂ , NO ₃ ⁻ |
| | 2 | 1 | angular | <120° | sp ² | SO ₂ , NO ₂ ⁻ |
| 4 | 4 | 0 | tetraédrica | 109,5° | sp ³ | NH ₄ ⁺ , CCl ₄ , CH ₄ , BF ₄ ⁻ , ClO ₄ ⁻ |
| | 3 | 1 | piramidal trigonal | <109,5° | sp ³ | NH ₃ , ClO ₃ ⁻ , H ₃ O ⁺ |
| | 2 | 2 | angular | <109,5° | sp ³ | H ₂ O, ClO ₂ ⁻ |
| 5 | 5 | 0 | bipiramidal trigonal | 90° e 120° | dsp ³ | PCl ₅ , PF ₅ , PBr ₃ F ₂ |
| | 4 | 1 | gangorra | <90° e <120° | dsp ³ | SF ₄ , IF ₄ ⁺ , SeCl ₄ |
| | 3 | 2 | forma de T | ----- | dsp ³ | ClF ₃ , ClBr ₃ |
| | 2 | 3 | linear | ----- | dsp ³ | ICl ₂ ⁻ , XeF ₂ , I ₃ ⁻ |
| 6 | 6 | 0 | octaédrica | 90° | d ² sp ³ | SF ₆ , PF ₆ |
| | 5 | 1 | piramidal quadrada | ----- | d ² sp ³ | BrF ₅ , IF ₅ , TeF ₅ |
| | 4 | 2 | quadrática plana | ----- | d ² sp ³ | XeF ₄ , BrF ₄ |