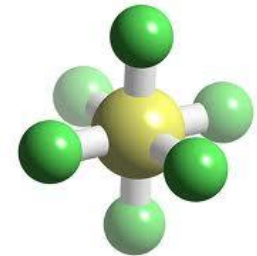




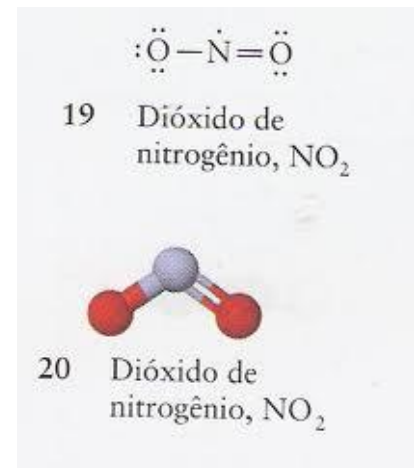
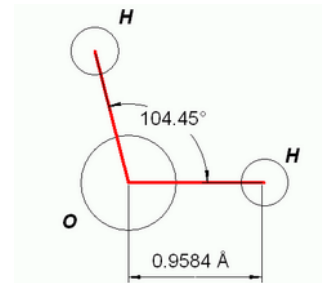
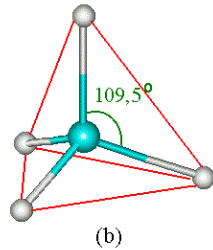
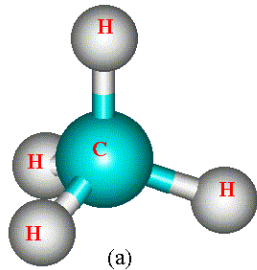
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos
Departamento de Ciências Básicas



ZAB1007- Química Geral

Ligação covalente: geometria molecular e teorias de ligação

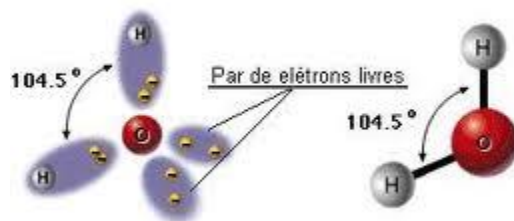
(aula 5)




Prof. Dr. Gelson Andrade Conceição

Geometria molecular

- como os átomos e os pares de elétrons não-ligantes estão distribuídos no espaço tridimensional?



- geometria molecular influencia:
 - polaridade das moléculas
 - propriedades: solubilidade, ponto de fusão, ponto de ebulição etc..



Como prever a geometria de uma molécula composta de um átomo central ligado covalentemente a vários átomos periféricos?

R: as ligações e os pares de elétrons não-ligantes se orientam de maneira que:

1. as **repulsões** elétron-elétron são **as menores possíveis**;
2. as **atrações** elétron-núcleo são **as maiores possíveis**.

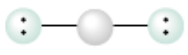

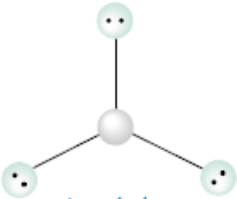
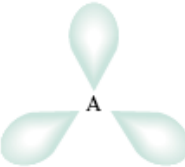
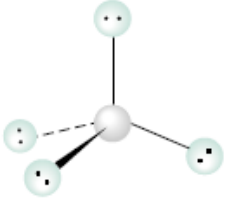
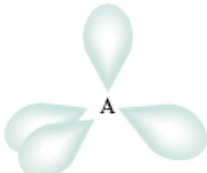
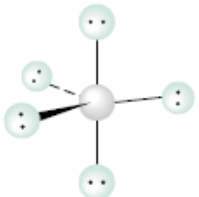

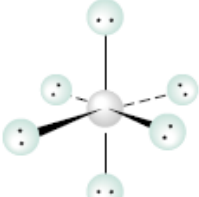

- O método utilizado para determinar essa orientação de menor energia é o chamado “Repulsão entre os pares de elétrons da camada de valência” ou VSEPR (do inglês *Valence Shell Electron Pair Repulsion*)

Geometria molecular - VSEPR

- As bases do método são:
 1. Minimização da repulsão entre pares de elétrons e maximização da atração elétron-núcleo.
 2. A repulsão entre pares de elétrons não compartilhados > entre um par não compartilhado e um compartilhado > entre dois pares de elétrons compartilhados.
 3. As forças de repulsão decrescem rapidamente com o aumento do ângulo entre os pares de elétrons. São fortes a 90° , mais fracas a 120° , e muito pequenas a 180° .

Geometria molecular - VSEPR

- Os passos para se obter a geometria molecular a partir do método VSEPR são:
 1. Determinar a estrutura de Lewis da molécula
 2. Determinar o número estéreo – número de pares de elétrons compartilhados ou não ao redor do átomo central.
 3. Determinar a geometria eletrônica que melhor satisfaça as bases do método VSEPR.
 4. Distribuir os pares de elétrons não compartilhados de forma a reduzir a repulsão eletrônica.

número estérico	geometria eletrônica	ângulo com o átomo central	Orientação do orbital hibridizado		geometria molecular
2	 linear	sp (180°)		BeCl ₂ HgBr ₂ CdI ₂ CO ₂ ^b C ₂ H ₂ ^c	linear linear linear linear
3	 trigonal planar	sp^2 (120°)		BF ₃ BCl ₃ NO ₃ ^{-e} SO ₂ ^{d,e} NO ₂ ^{-d,e} C ₂ H ₄ ^f	trigonal planar trigonal planar trigonal planar angular (AB ₂ U) angular (AB ₂ U) planar (trig. planar at each C)
4	 tetrahedral	sp^3 (109.5°)		CH ₄ CCl ₄ NH ₄ ⁺ SO ₄ ²⁻ CHCl ₃ NH ₃ ^d SO ₃ ^{2-d} H ₃ O ^{+d} H ₂ O ^d	tetrahedral tetrahedral tetrahedral tetrahedral distorted tet. pyramidal (AB ₃ U) pyramidal (AB ₃ U) pyramidal (AB ₃ U) angular (AB ₂ U ₂)
5	 trigonal bipyramidal	sp^3d (90°, 120°, 180°)		PF ₅ SbCl ₅ SF ₄ ^d ClF ₃ ^d XeF ₂ ^d I ₃ ^{-d}	trigonal bipyramidal trigonal bipyramidal seesaw (AB ₄ U) T-shaped (AB ₃ U ₂) linear (AB ₂ U ₃) linear (AB ₂ U ₃)
6	 octahedral	sp^3d^2 (90°, 180°)		SF ₆ SeF ₆ PF ₆ ⁻ BrF ₅ ^d XeF ₄ ^d	octahedral octahedral octahedral square pyramidal (AB ₅ U) square planar (AB ₄ U ₂)

A e B são átomos diferentes, e U é o par de elétrons não compartilhado

Geometria molecular - VSEPR

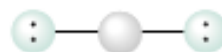
número estéreo

geometria eletrônica
ângulo

disposição espacial

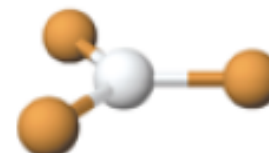
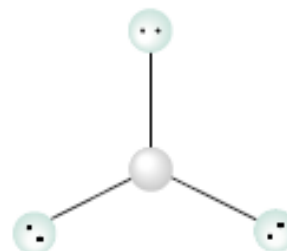
2

linear
 180°



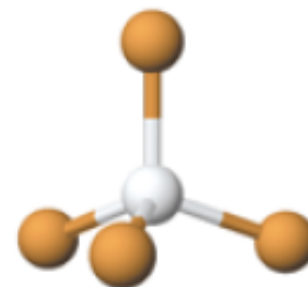
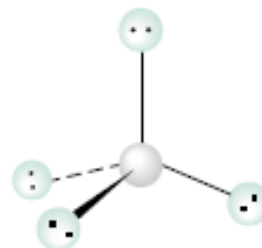
3

trigonal planar
 120°



4

Tetraédrica
 $109,5^\circ$



Geometria molecular - VSEPR

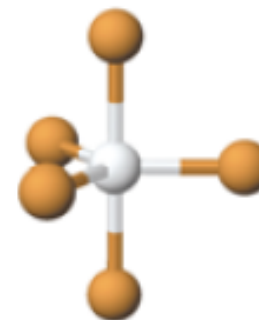
número estéreo

geometria eletrônica
ângulo

disposição espacial

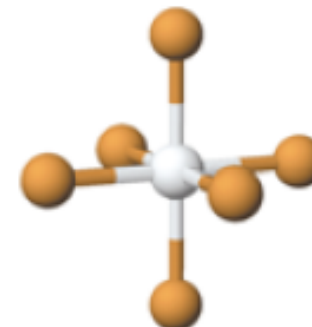
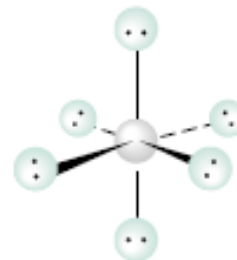
5

bipirâmide trigonal
 $90^\circ, 120^\circ, 180^\circ$



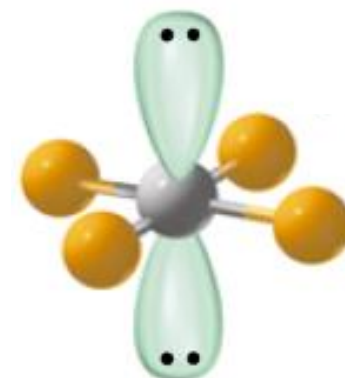
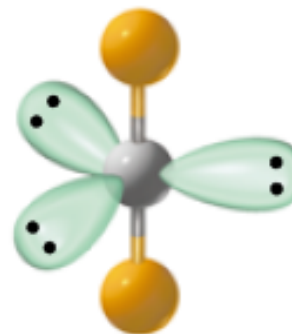
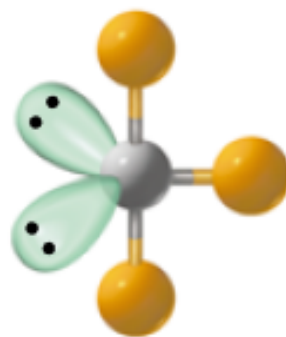
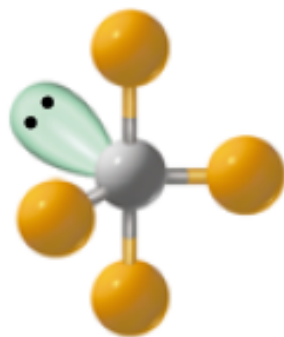
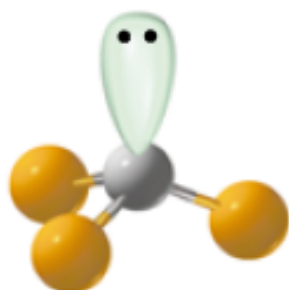
6

Octaédrica
 $90^\circ 180^\circ$



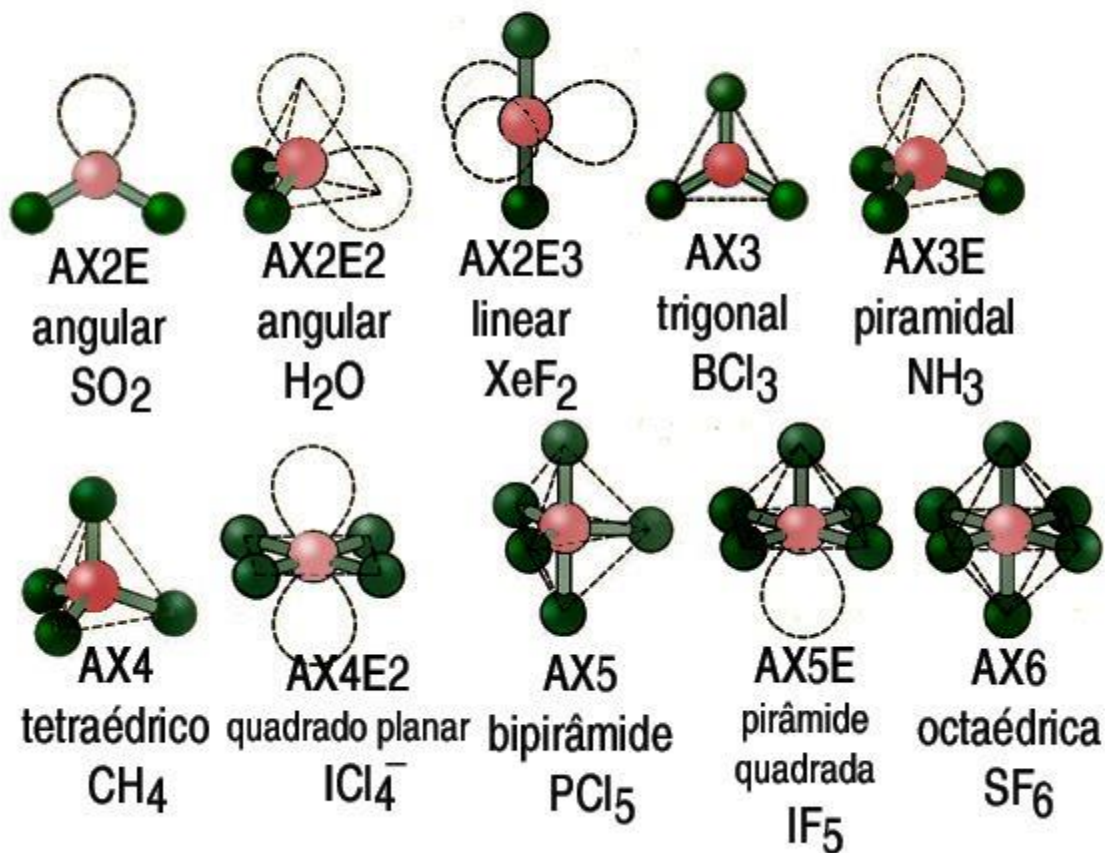
Geometria molecular - VSEPR

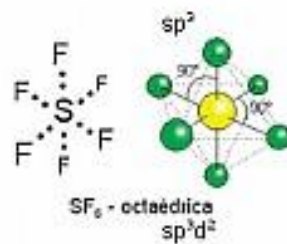
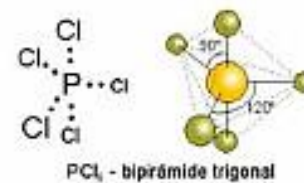
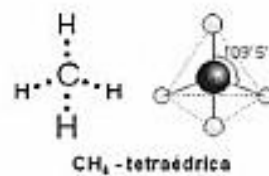
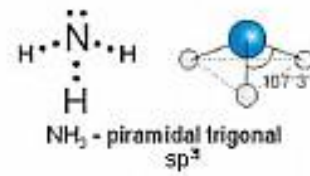
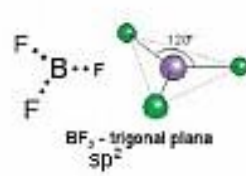
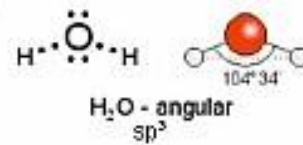
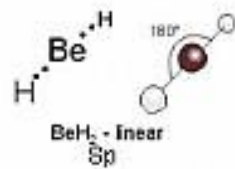
Determinar a geometria molecular das seguintes moléculas:



Geometria Molecular

Teoria da Repulsão dos Pares de Elétons de Valência





A quantificação da polaridade

momento de dipolo = o produto da cargas envolvidas na ligação pela distância que as separa.

$$\mu = e \cdot d$$

em que, e = carga e d = distância entre cargas

Unidade = coulomb.metro (C.m) ou Debye (D)

Uma ligação covalente será mais ou menos polar conforme o seu valor de momento de dipolo.

Diferença de eletronegatividade ↔ **momento de dipolo** ↔ **polaridade**

Exemplos:

C - C ligação apolar (momento de dipolo igual a zero)

C - Cl ligação polar (momento de dipolo diferente de zero)

Polaridade das moléculas

A polaridade das moléculas é definida pela soma vetorial dos momentos de dipolo de todas as ligações constituintes. Dando origem ao momento de dipolo da molécula.

↑ Momento de dipolo da molécula ↑ polaridade

Ex:

Moléculas apolares

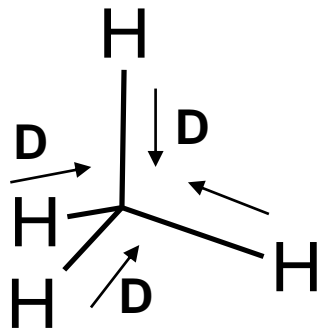
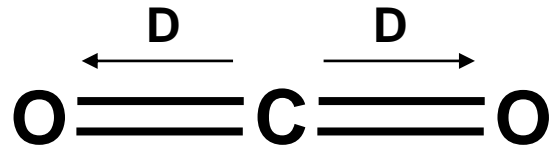
O_2 , Br_2 , CO_2 , CH_4 ,

Moléculas polares

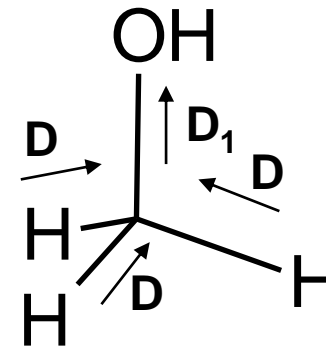
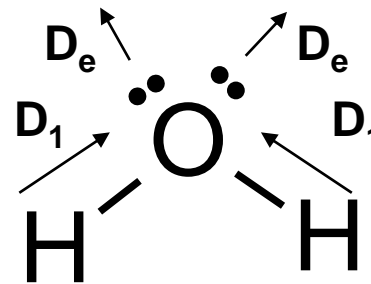
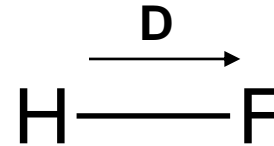
HF , H_2O , CH_3OH ,

Polaridade das moléculas

Moléculas apolares



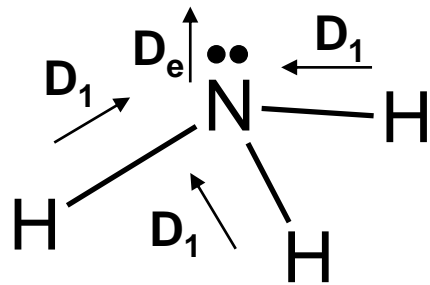
Moléculas polares



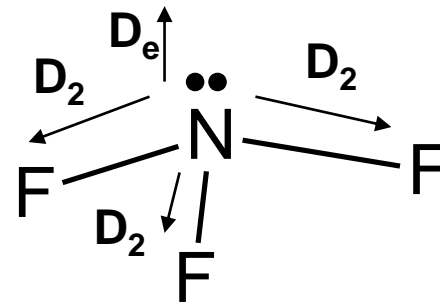
Qual das moléculas possui maior momento de dipolo, NH_3 NF_3 ?

Moléculas

Geometria, momento de dipolo e Polaridade



$$\Sigma_D = 1,46 \text{ D}$$



$$\Sigma_D = 0,24 \text{ D}$$

A polaridade das moléculas depende essencialmente não só das polaridades das ligações químicas, mas também de como os momentos de dipolo estão dispostos no espaço (geometria molecular).

Ligações covalentes: teoria de ligação pela valência

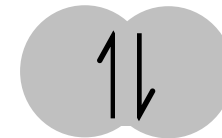
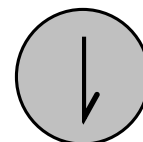
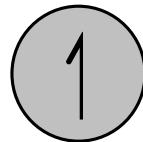
De acordo com esta teoria as ligações entre dois átomos de uma molécula se dão através da sobreposição entre os orbitais atômicos dos átomos, estando os elétrons da ligação compartilhados em ambos os orbitais.

Ex.: • molécula de H_2

átomo A

átomo B

molécula de H_2

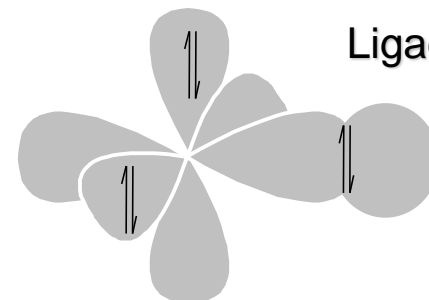
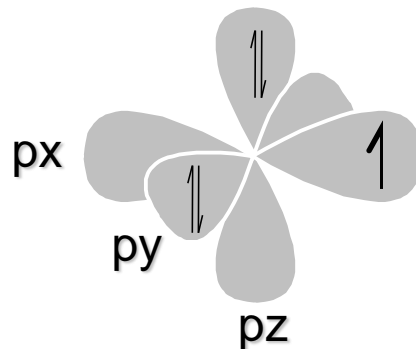


Ligação sigma (δ)

• molécula de HF

F

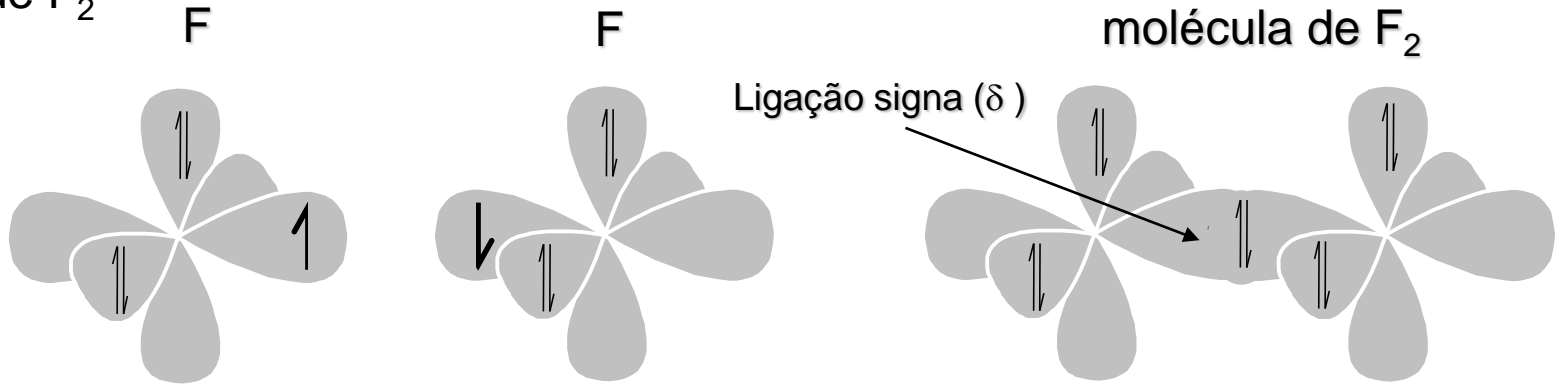
H



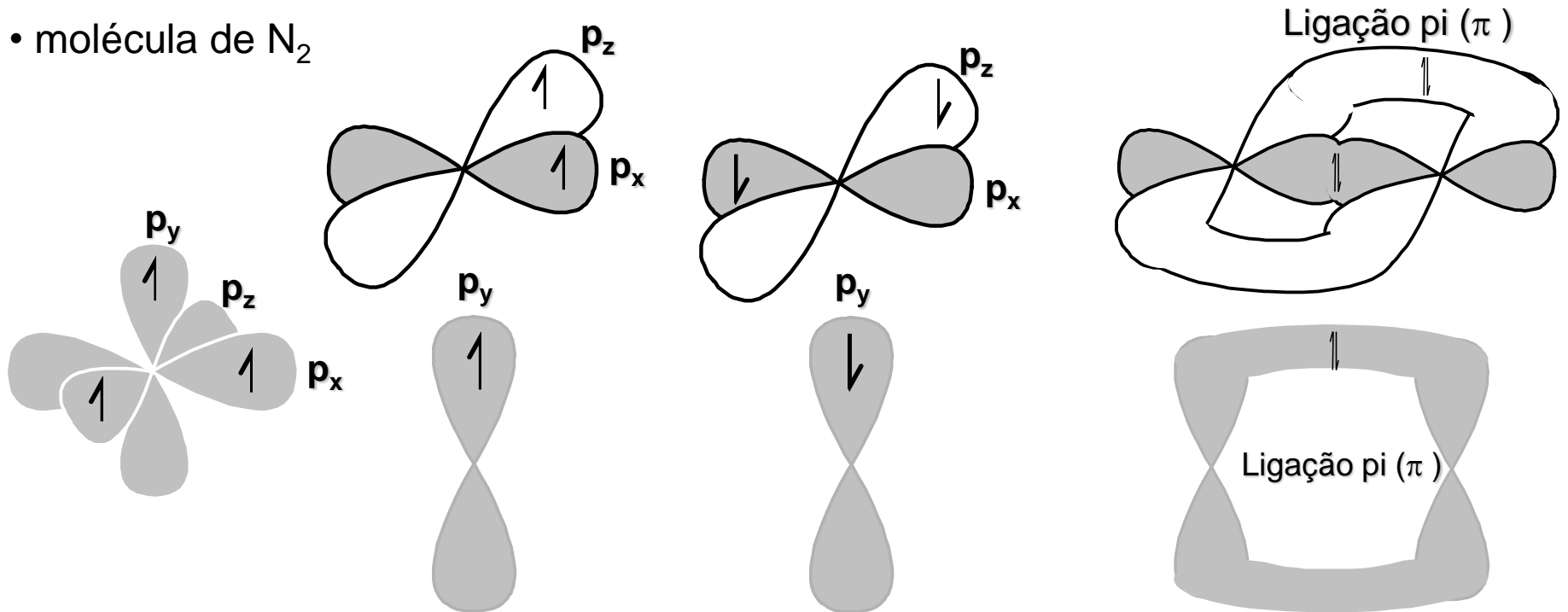
Ligação sigma (δ)

Ligações covalentes: teoria de ligação pela valência

- molécula de F_2



- molécula de N_2



Teoria de ligação pela valência: hibridização

- Na presença de outros átomos, os orbitais da camada de valência de um determinado átomo podem se combinar para formar um novo arranjo de orbitais de menor energia em relação aos seus orbitais atômicos normais. Este processo é chamado de **hibridização**. Os novos orbitais assim formados são chamados de **orbitais híbridos**, podendo se sobrepor aos orbitais de outros átomos fazendo ligações covalentes.
 - Esses orbitais híbridos normalmente nos dão uma visão mais apropriada da geometria observada das moléculas e íons.
 - O número de orbitais híbridos é igual a somatória do número de orbitais atômicos que entraram na combinação.
 - A nomenclatura dos orbitais híbridos é a junção dos orbitais que o deram origem, com um número sobrescrito igual ao número de cada tipo de orbital que gerou a combinação.
- Ex.: orbitais sp^2 – gerado a partir de um orbital “s” e dois orbitais “p”.

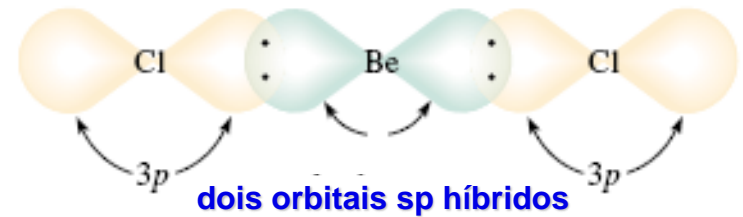
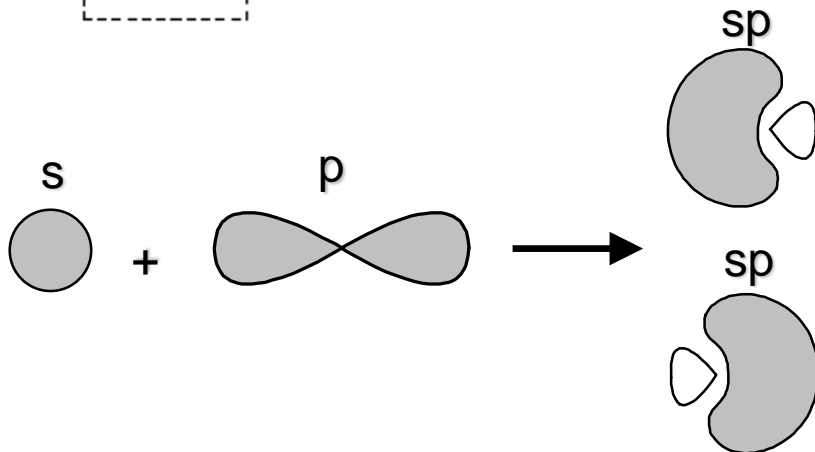
Hibridização sp: exemplos

- A molécula de BeCl_2

Características: linear e apolar



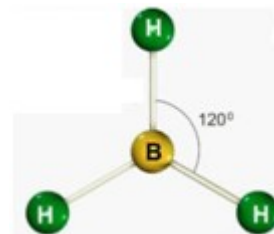
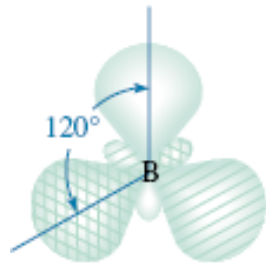
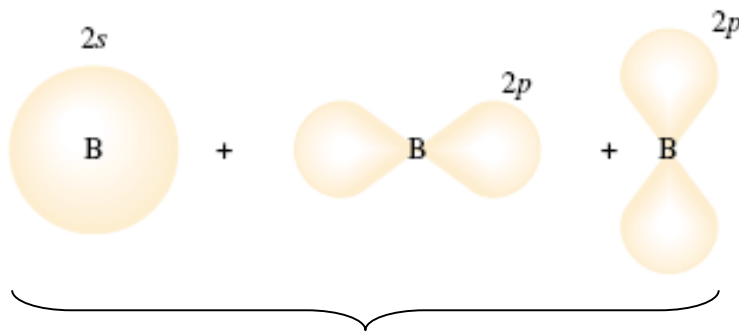
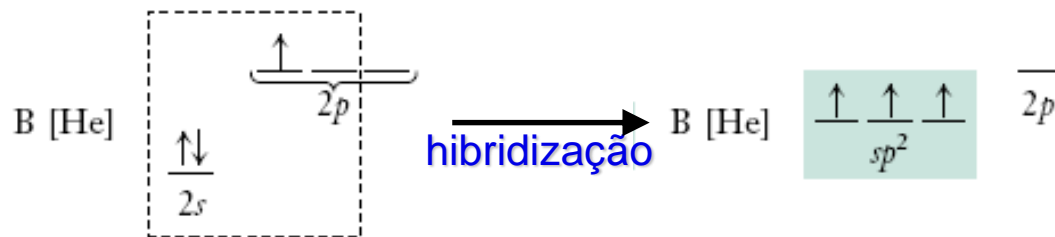
Representação simplificada de dois orbitais sp do Be



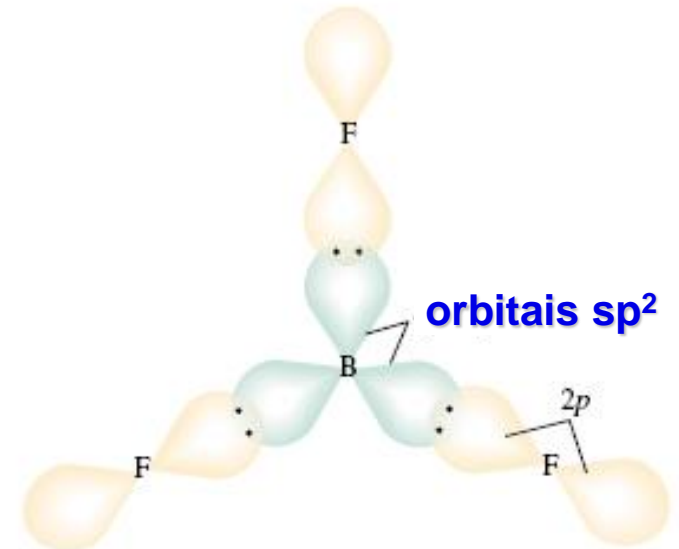
Hibridização sp^2 : exemplos

- A molécula de BF_3

Características: trigonal planar e apolar



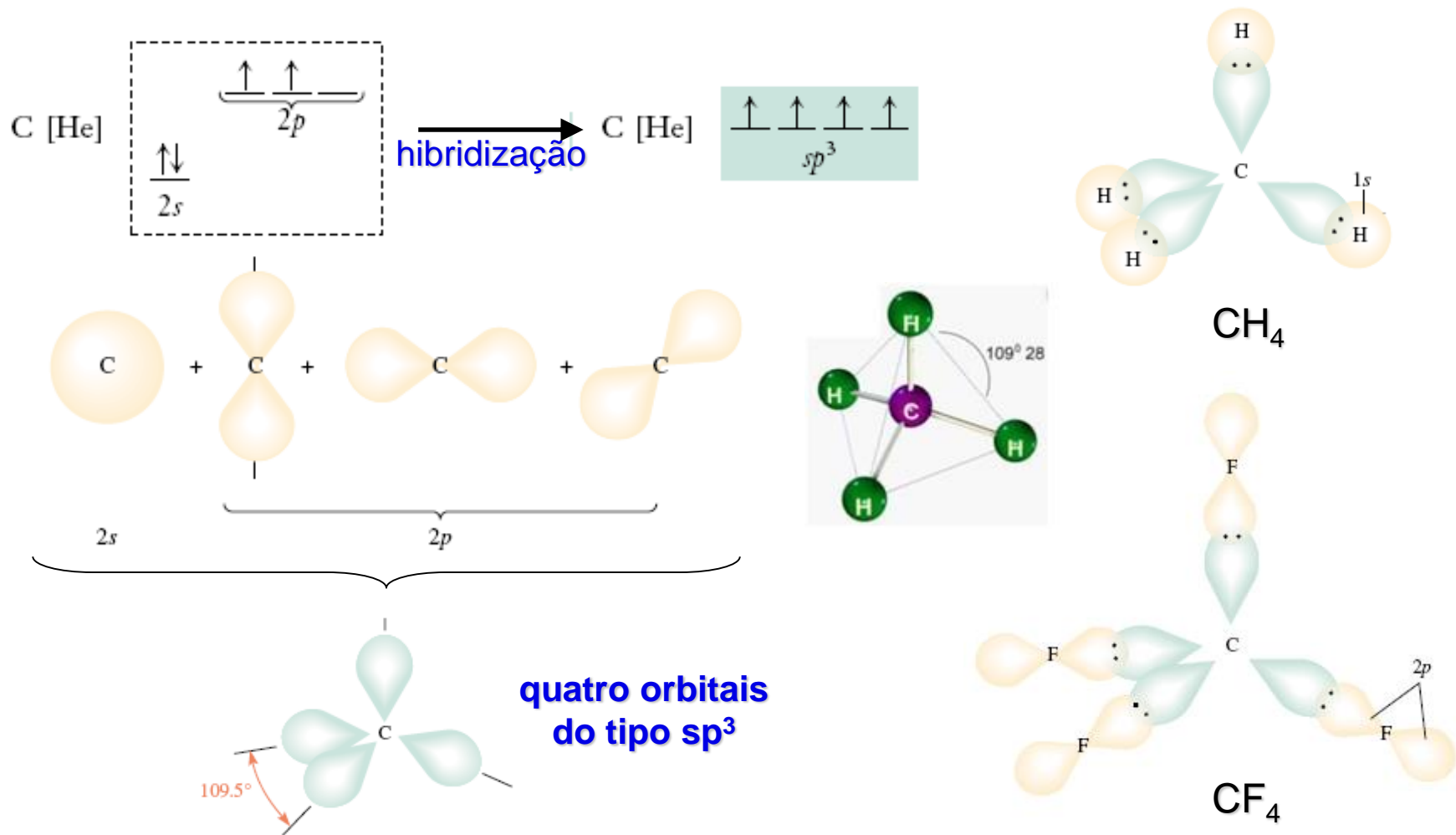
Representação simplificada de três orbitais sp^2 do B



Hibridização sp^3 : exemplos

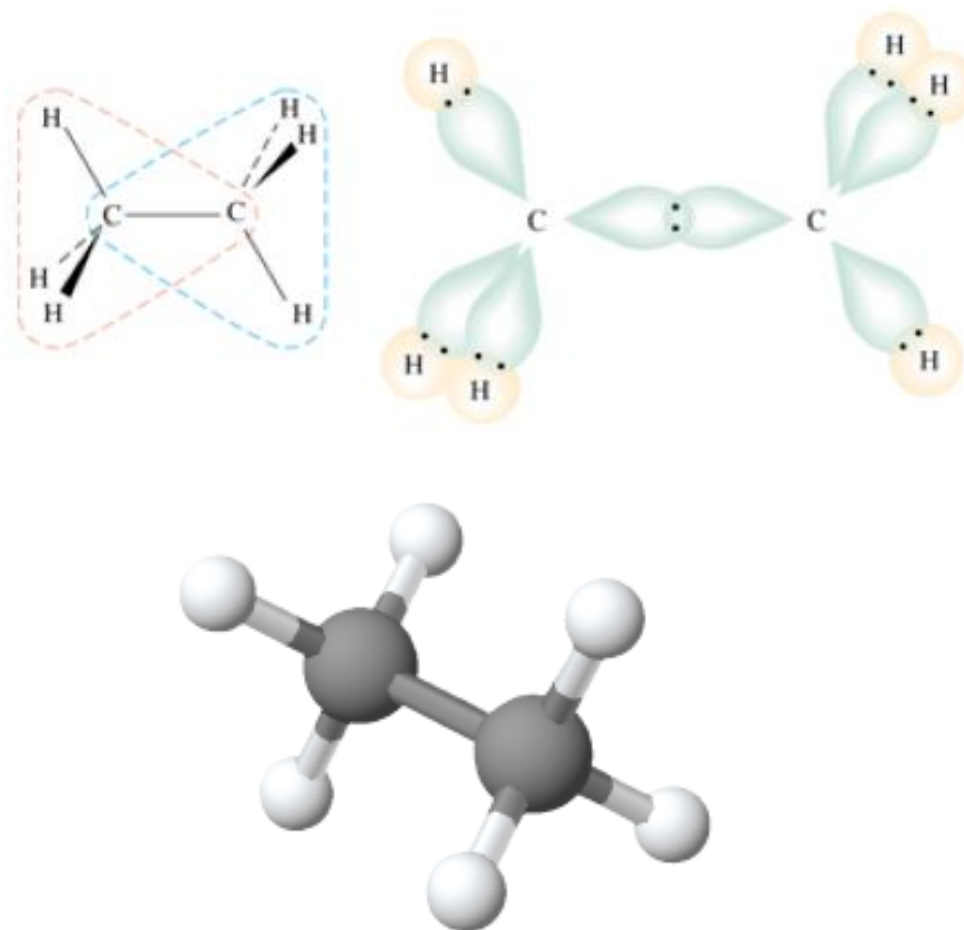
- As moléculas CH_4 e CF_4

Características: ângulos entre as ligações de $109,5^\circ$ e apolares



Hibridização sp^3 : exemplos

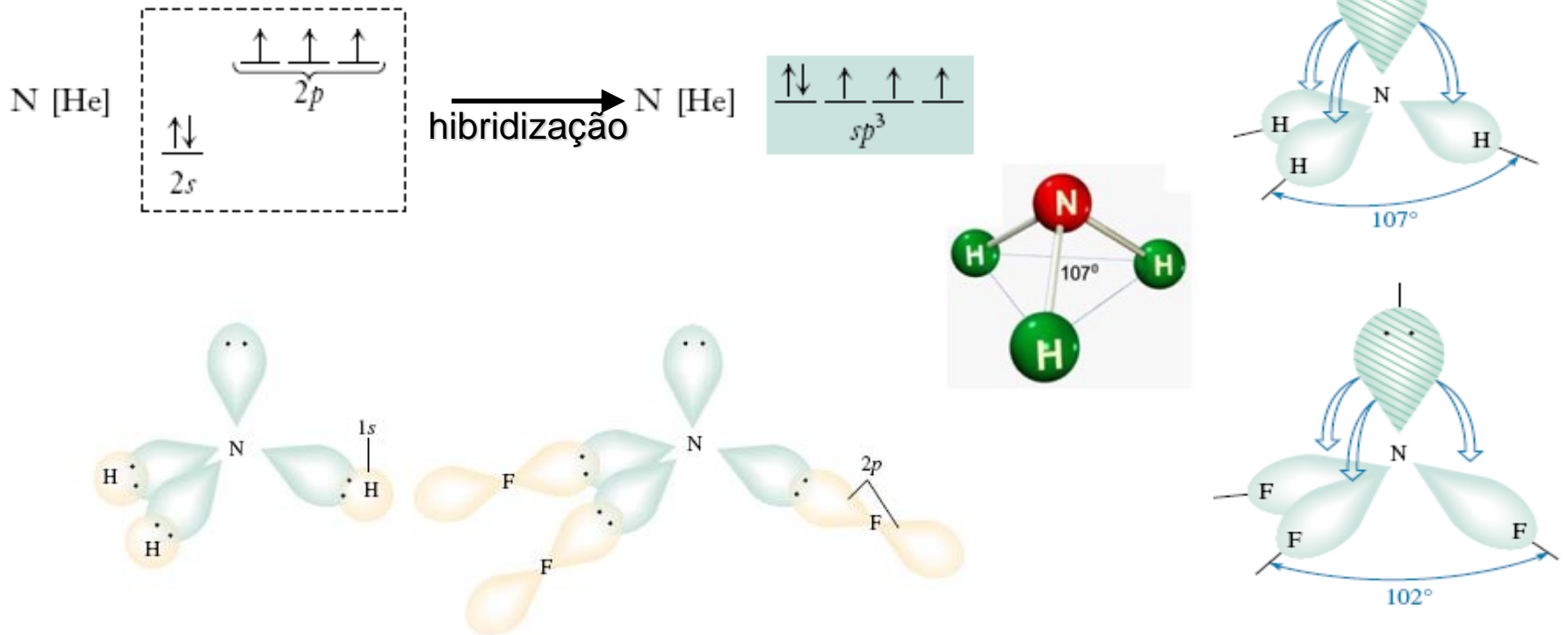
- A molécula de etano C_2H_6



Hibridização sp^3 : exemplos

- As moléculas NH_3 e NF_3

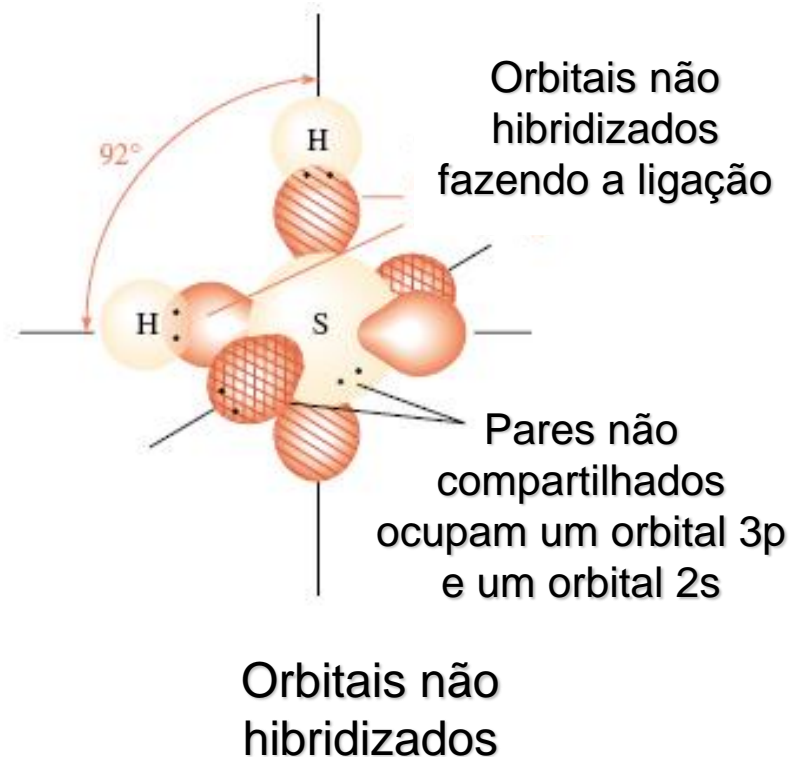
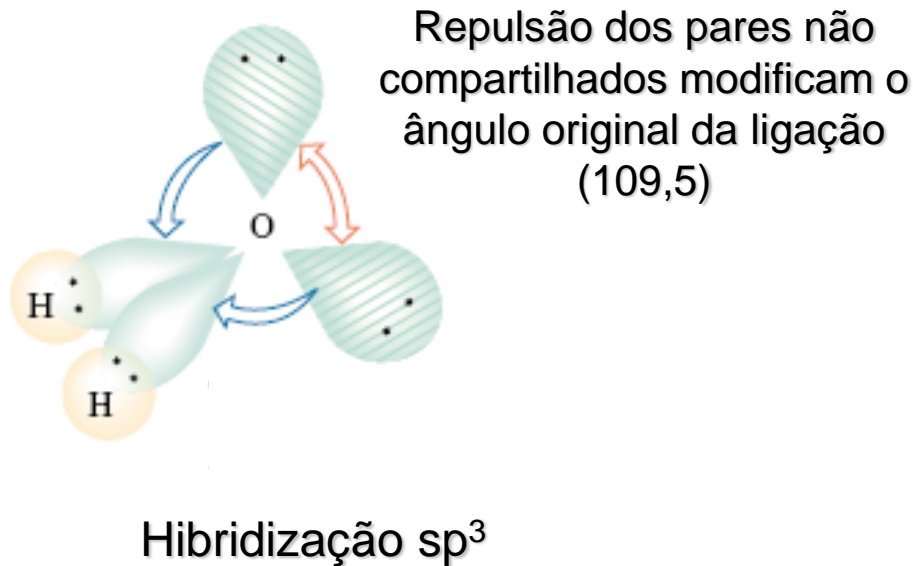
Características: polares com geometria pirâmide trigonal e ângulos iguais a 107° e 102° respectivamente.



Hibridização sp^3 : exemplos

- As moléculas de H_2O e H_2S

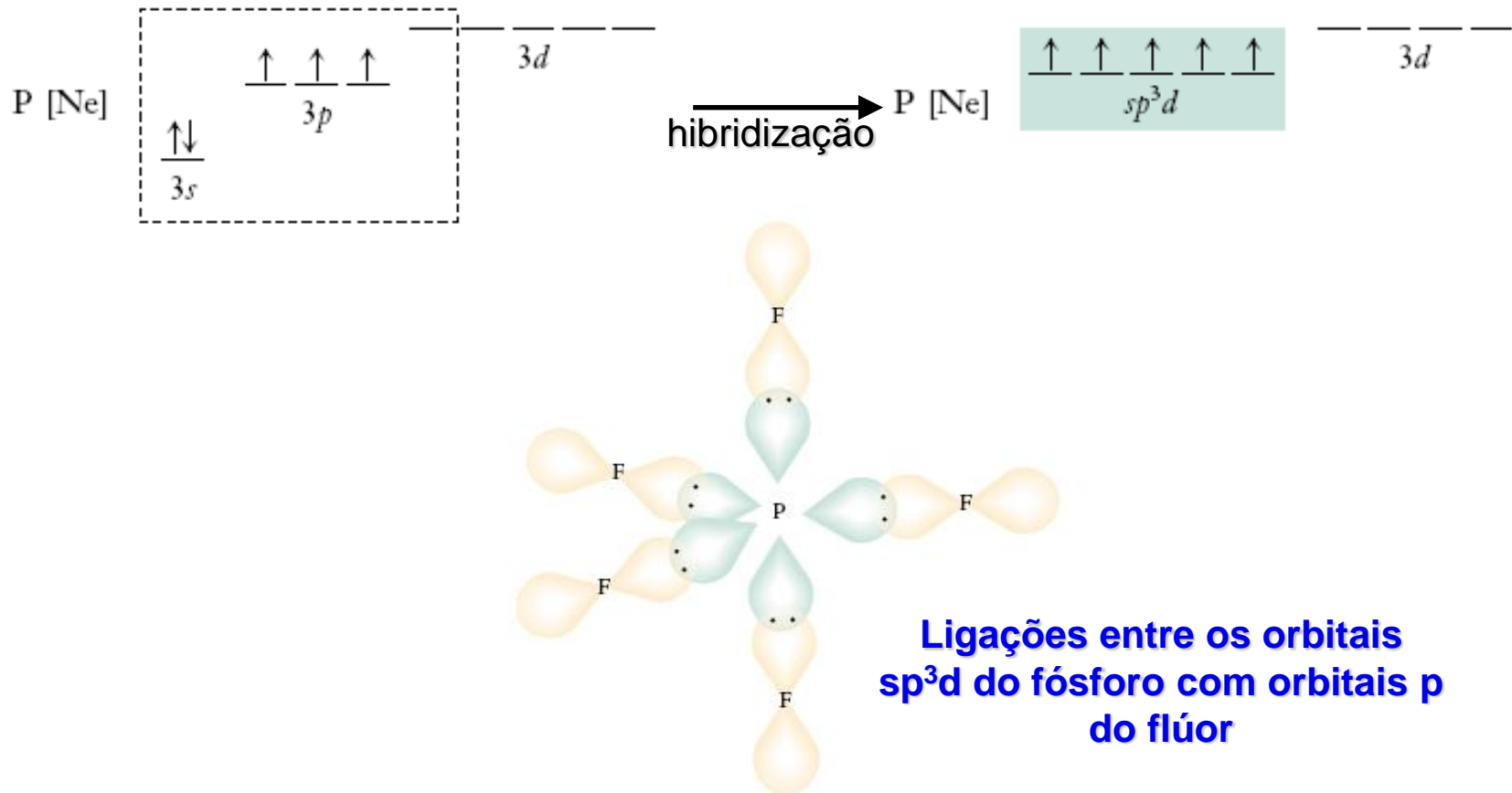
Características: polares com ângulos de ligação iguais a $104,5^\circ$ e $92,2^\circ$ respectivamente.



Hibridização sp^3d : exemplos

- A molécula de PF_5

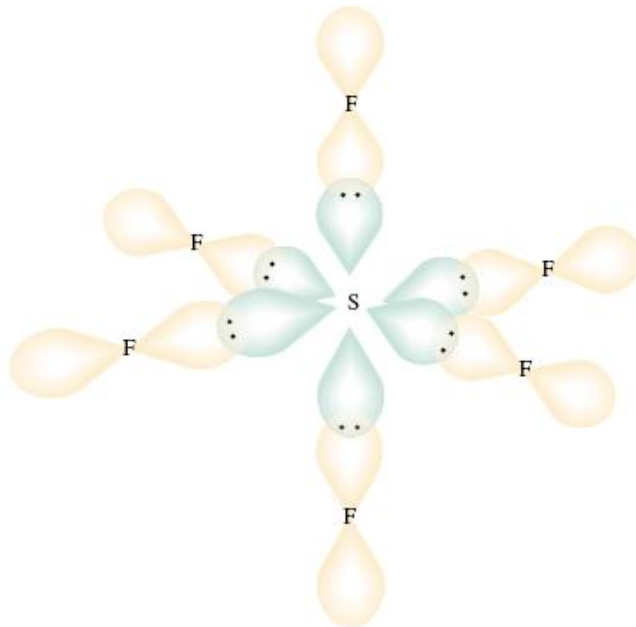
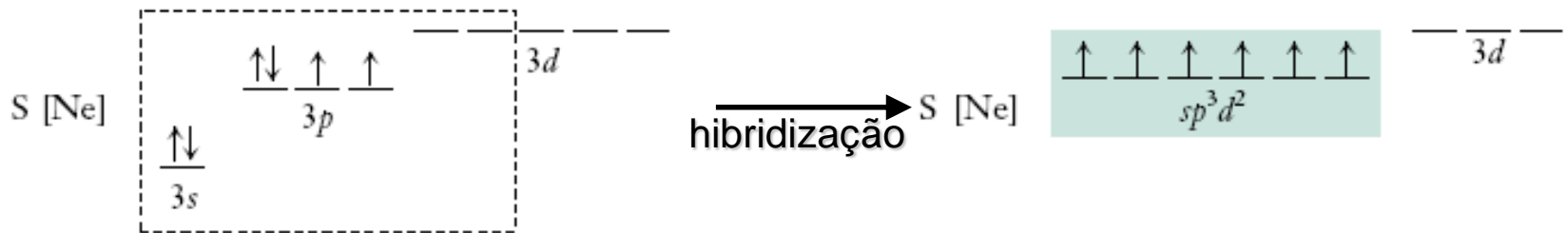
Características: apolar com geometria bipirâmide trigonal.



Hibridização sp^3d^2 : exemplos

- A molécula de SF_6

Características: apolar com geometria octaédrica.

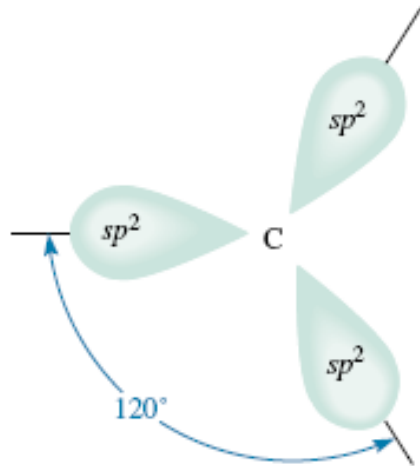
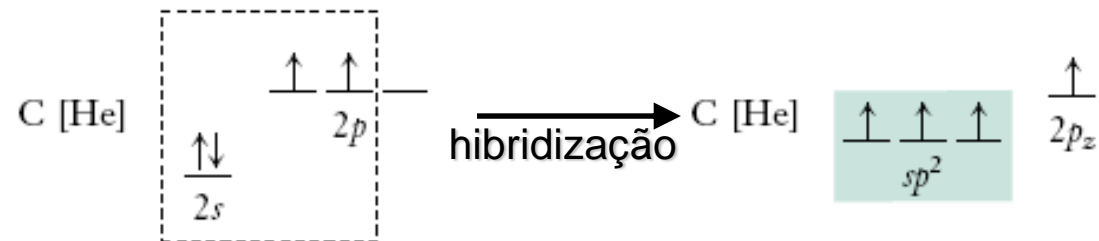


Ligações entre os orbitais sp^3d^2 do enxofre com orbitais p do flúor

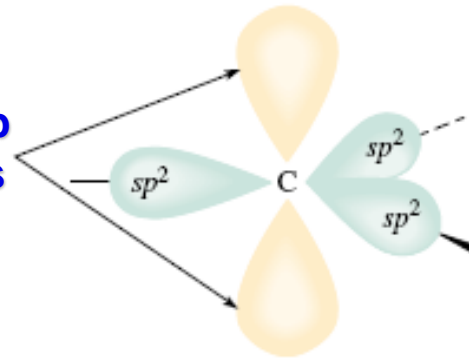
Hibridização sp^2 : exemplos

- A molécula do eteno C_2H_4

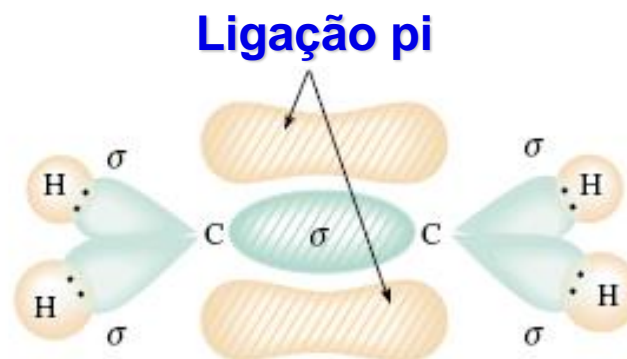
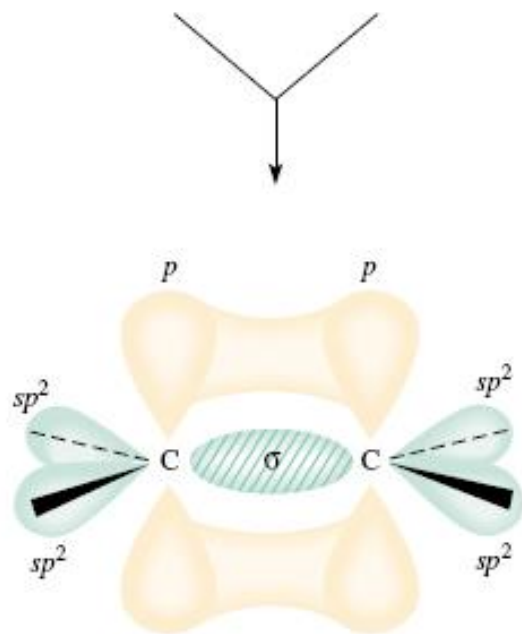
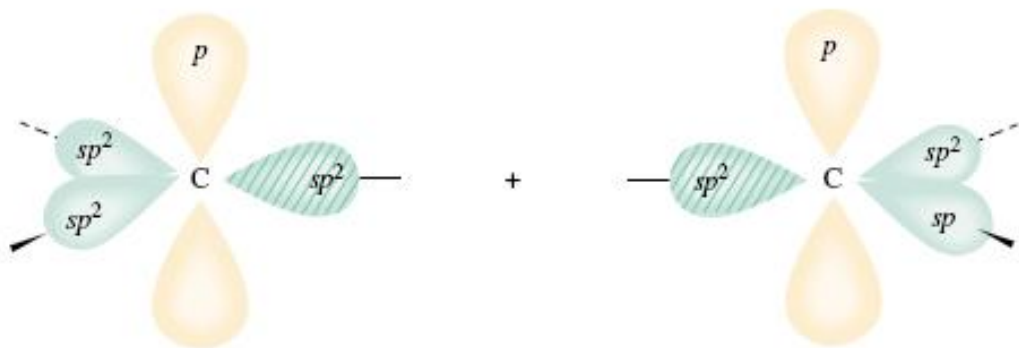
Características: apolar com geometria planar.



orbital p
simples



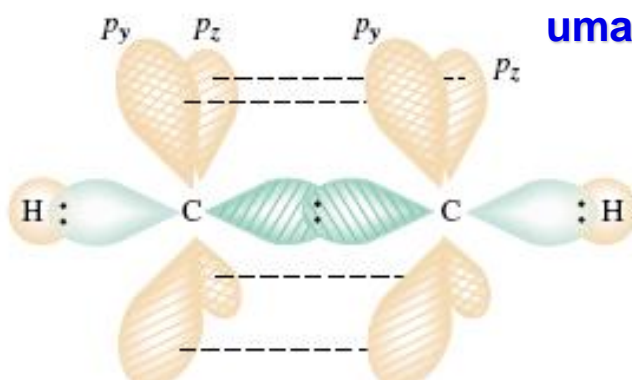
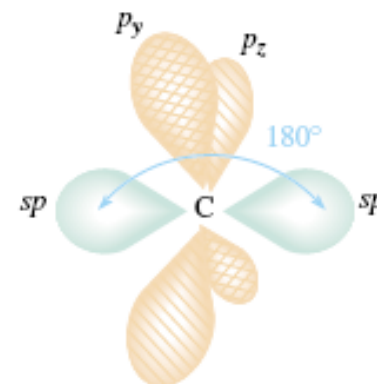
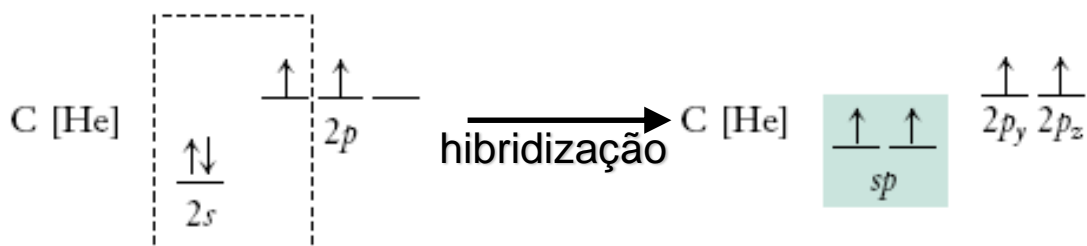
Hibridização: exemplos



Hibridização sp: exemplos

- A molécula do etino C_2H_2

Características: apolar com geometria linear.



uma ligação pi

outra ligação pi

