

LIGAÇÃO COVALENTE

Princípios e estruturas de Lewis

LIGAÇÕES QUÍMICAS

```
graph TD; A[LIGAÇÕES QUÍMICAS] --- B[LIGAÇÃO IÔNICA]; A --- C[LIGAÇÃO COVALENTE]; A --- D[LIGAÇÃO METÁLICA];
```

LIGAÇÃO IÔNICA:

refere-se às forças de atração eletrostáticas que existem entre íons de cargas opostas.

LIGAÇÃO COVALENTE:

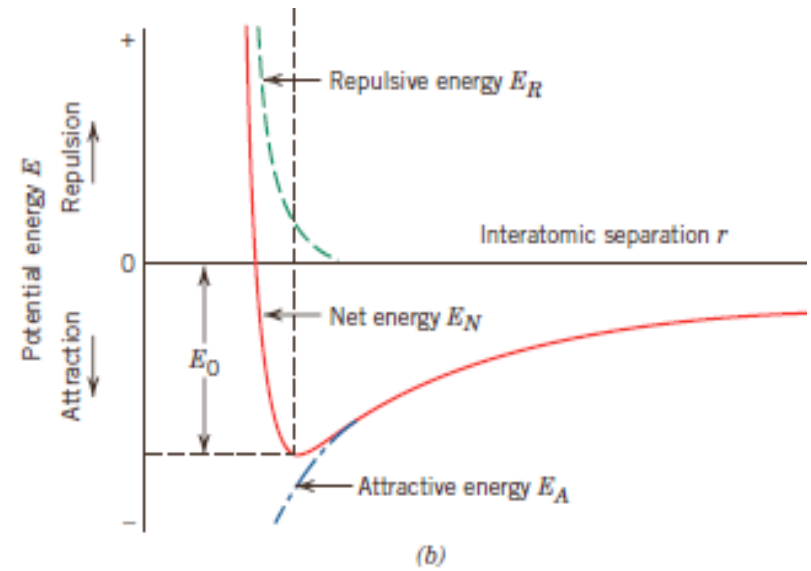
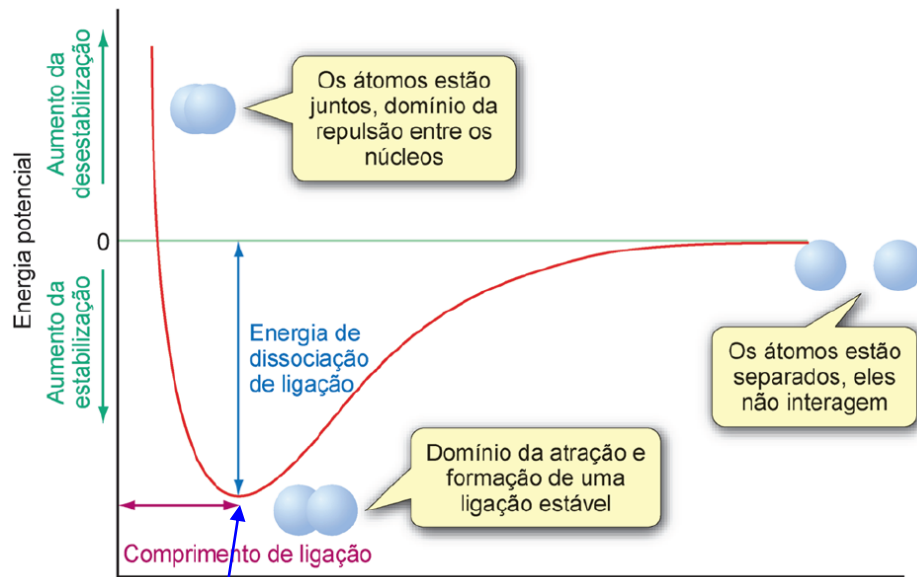
resulta do compartilhamento de elétrons entre dois átomos.

LIGAÇÃO METÁLICA:

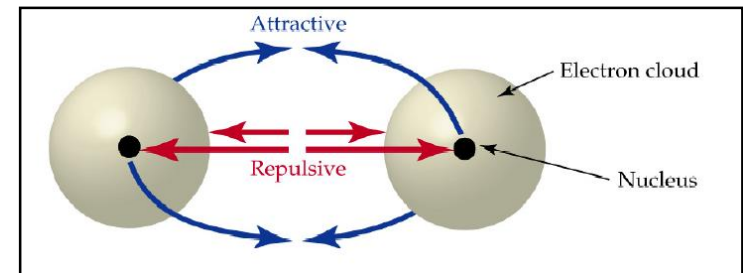
são encontradas em metais como Cu, Fe e Al. Cada átomo está ligado a vários átomos vizinhos.

Característica de moléculas diatômicas homonucleares

A energia potencial de dois átomos de H varia com a distância



O mínimo da curva de energia potencial corresponde ao comprimento de ligação em equilíbrio e a força de ligação



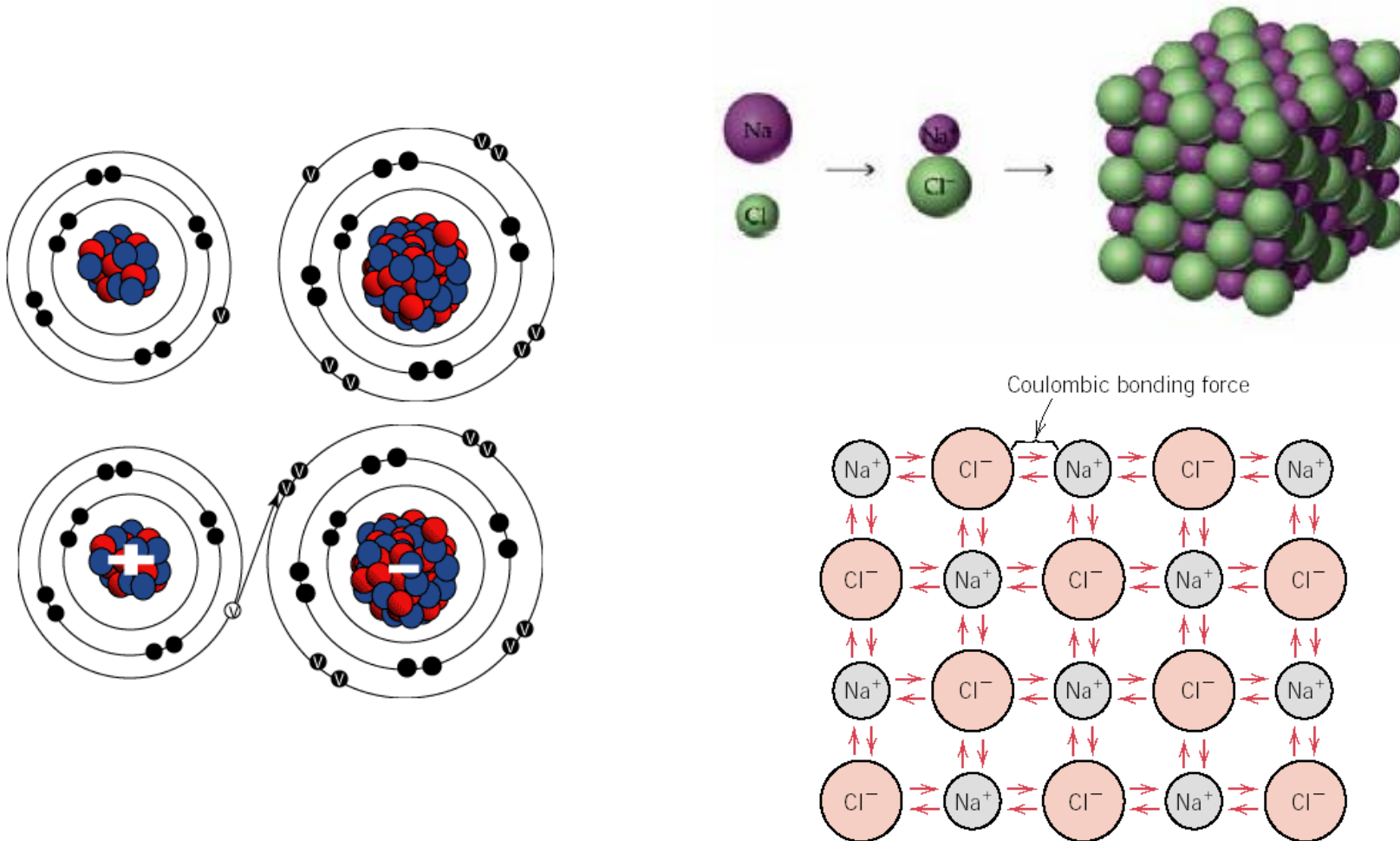
- O **comprimento de ligação** é definido como a distância média entre os centros de átomos de uma molécula.
- Para moléculas **diatômicas homonucleares** (ex. H₂), o comprimento de ligação é duas vezes o valor do raio atômico.
- A **entalpia de dissociação de ligação (D)** é definida como a variação de entalpia padrão para a reação em que a ligação é quebrada



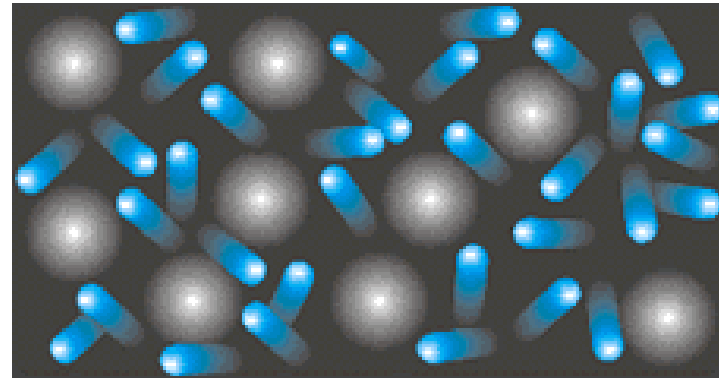
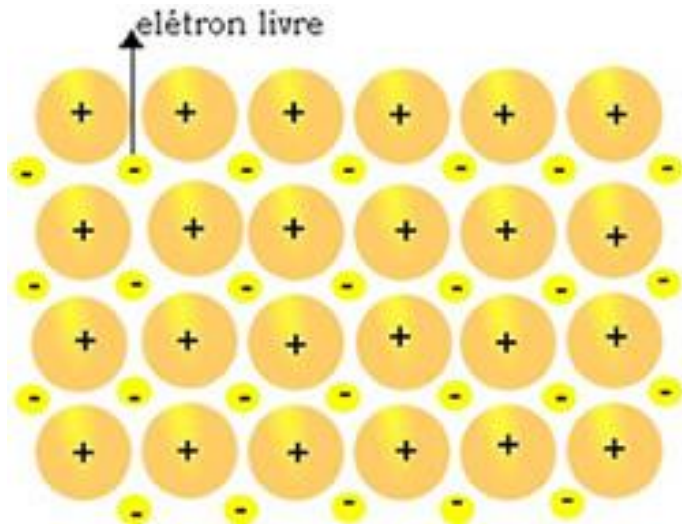
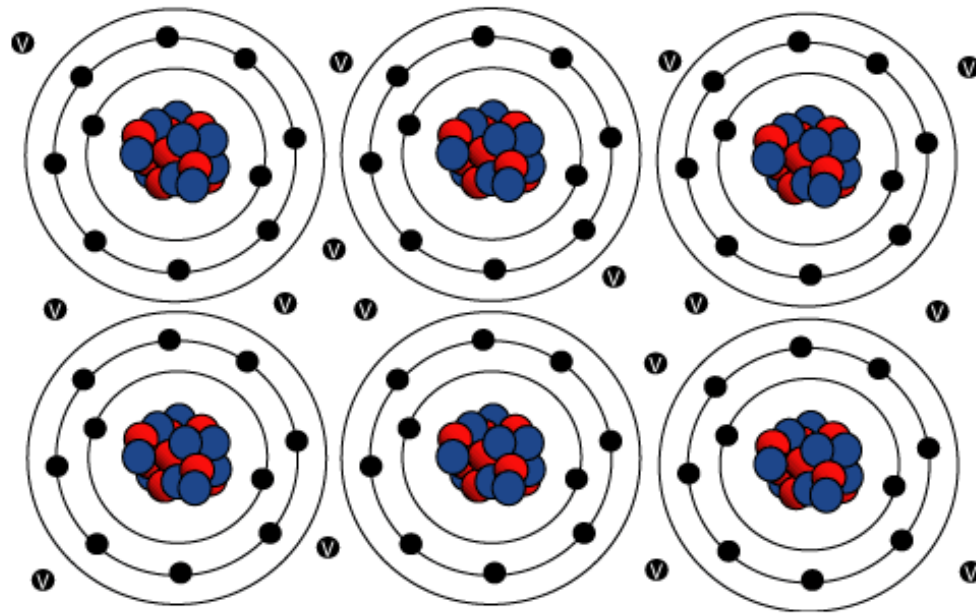
- Os comprimentos de ligação podem ser medidos por meio da técnica de difração de raios X.
- Moléculas gasosas: difração de elétrons.

Ligação iônica para o NaCl

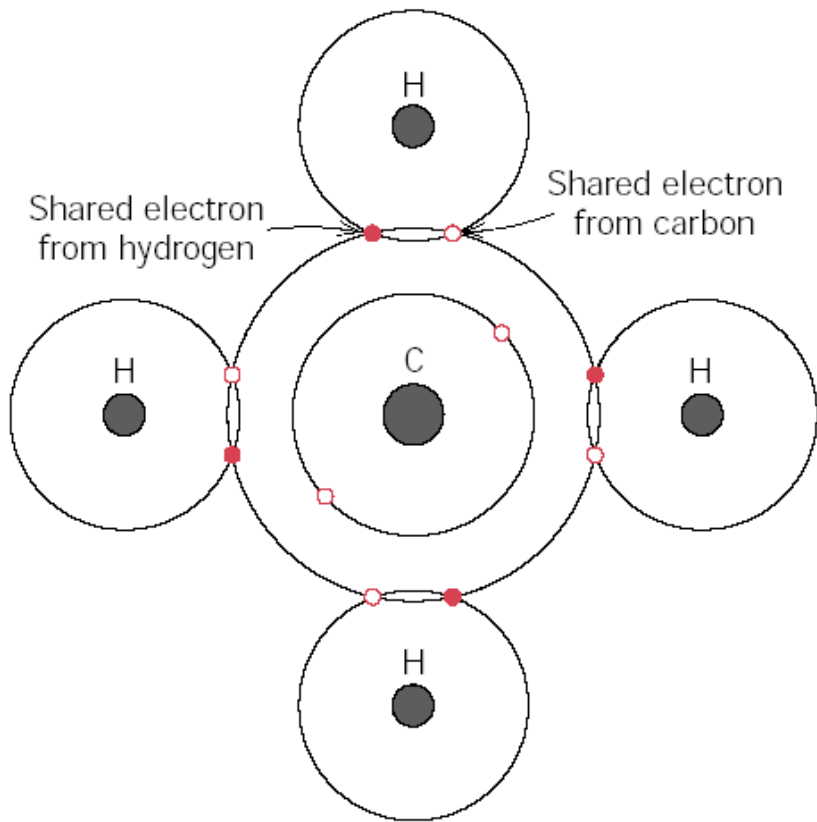
Resulta da atração mútua entre íons positivos e negativos



Modelo da Ligação Metálica



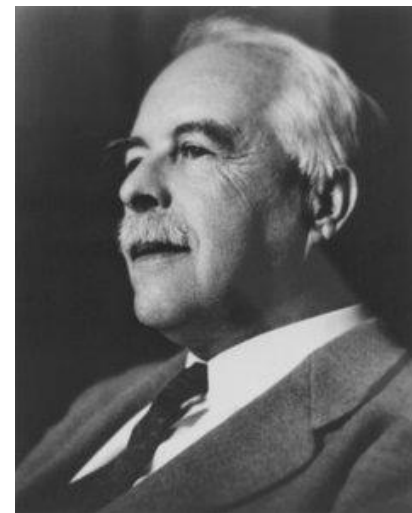
Ligação covalente molécula de CH₄



Os átomos atingem a configuração estável compartilhando elétrons com um átomo adjacente

LIGAÇÃO COVALENTE (1916)

Gilbert N. Lewis



G.N. Lewis (1875-1946)

Antes do desenvolvimento da mecânica quântica ou do conceito de orbitais Lewis propôs que

Uma Ligação covalente é um par de elétrons compartilhados por dois átomos.

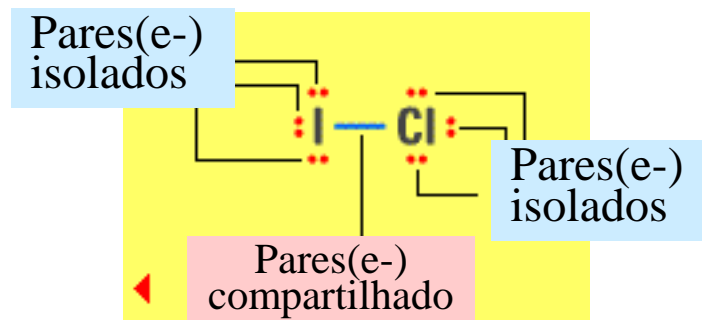
Os elétrons de valência são aqueles que determinam as propriedades de um elemento.

A estrutura de Lewis não retrata a forma molécula – indica simplesmente que átomos se ligam e quais têm pares isolados

Estrutura de Lewis

Li	[He]2s ¹	Li •
Be	[He]2s ²	•Be•
B	[He]2s ² 2p ¹	• •B•
C	[He]2s ² 2p ²	• •C• •
N	[He]2s ² 2p ³	• •N• •
O	[He]2s ² 2p ⁴	• •O• •
F	[He]2s ² 2p ⁵	• •F• •
Ne	[He]2s ² 2p ⁶	• •Ne• •

Elétrons de Valência - são aqueles que se localizam na camada mais externa de um átomo e determinam as propriedades de um elemento



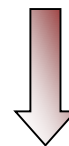
Elétrons de valência

Lewis Periodic Table Showing Outer Shell (Valence) Electrons

1	2	3	4	5	6	7	8
H•							•He•
Li•	•Be•	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
K•	•Ca•	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
Rb•	•Sr•	•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
Cs•	•Ba•						

REGRA DO OCTETO

Átomos perdem, ganham ou compartilham elétrons de forma que tenham oito elétrons em sua camada de valência.



Configuração eletrônica de gás nobre:

Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$

Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Válido especialmente para: C, N, O, halogênios, metais alcalinos/alcalino terrosos.

Existem muitas exceções!!!!!!!!!!!!

Regras para a elaboração de estruturas de Lewis

1. Átomo Central:

- Geralmente o átomo de menor afinidade eletrônica.
(normalmente, menor eletronegatividade)
- Frequentemente temos como átomo central C, N, P, S.
- Halogênios são normalmente átomos terminais, porém nos oxiácidos são os átomos centrais (HClO_4).
- Hidrogênio é sempre átomo terminal.

Exemplo: formaldeído

CH_2O , átomo central C

2. Determinar o número total de elétrons de valência de cada átomo na molécula:

- Exemplo, formaldeído **CH₂O**:

C: $1s^2 2s^2 2p^2$ = 4 elétrons

2H: $1s^1$ = 2×1 = 2 elétrons

O: $1s^2 2s^2 2p^4$ = 6 elétrons

Total: 12 elétrons / 2 (6 pares de elétrons)

- **Ânions:** adiciona-se ao número total de elétrons obtidos pela configuração eletrônica a carga formal do ânion.

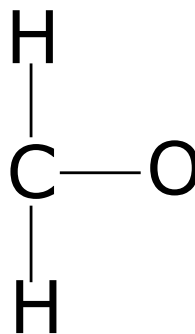
- **Cátions:** subtrai-se do número total de elétrons obtidos pela configuração eletrônica a carga formal do cátion.

3. Formação de ligações simples:

- Unir o átomo central aos periféricos.
- Para cada ligação simples é utilizado um par de elétrons entre cada par de átomos ligados.

Exemplo CH₂O:

(6 pares de elétrons)



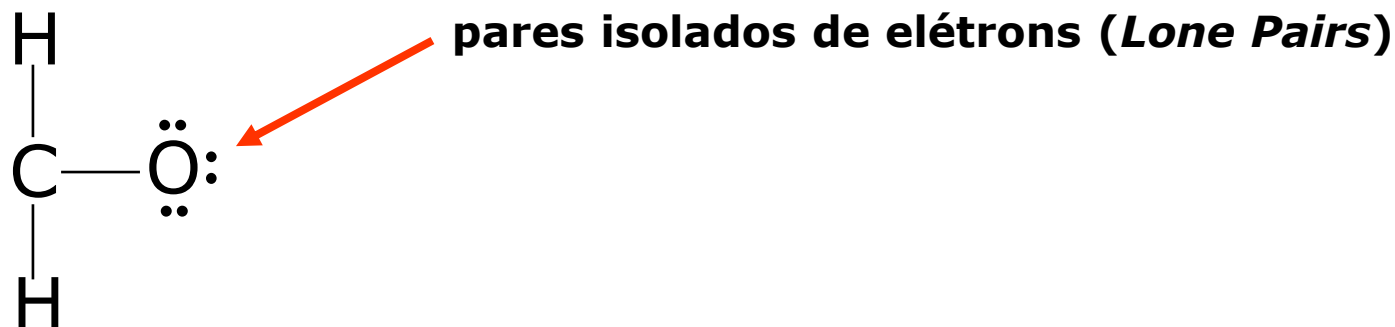
Três ligações simples \Rightarrow 3 pares de elétrons.

6-3= 3 pares de elétrons remanescentes

4. Distribuição dos pares de elétrons restantes:

- Os pares de elétrons restantes são distribuídos nos átomos periféricos (exceto H) de tal forma que o número total seja de oito elétrons (4 pares totais)

$\text{CH}_2\text{O} \rightarrow$ três pares remanescentes



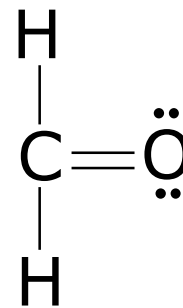
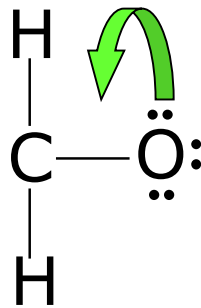
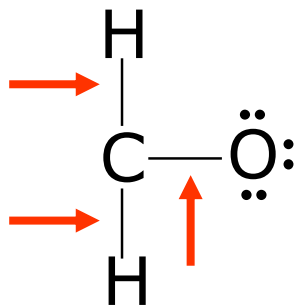
Se o átomo central for a partir 3^o período pode acomodar mais do que 8 elétrons !!!

5. Completar o octeto do átomo central:

- Caso o átomo central não tiver completado o octeto, mover os pares de elétrons isolados para formar ligações duplas ou triplas.

Exemplo: CH₂O

O átomo de carbono apresenta apenas três pares de elétrons. O quarto par é fornecido pelo oxigênio.

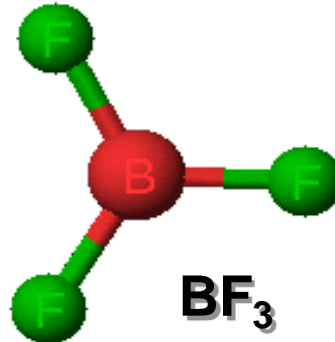
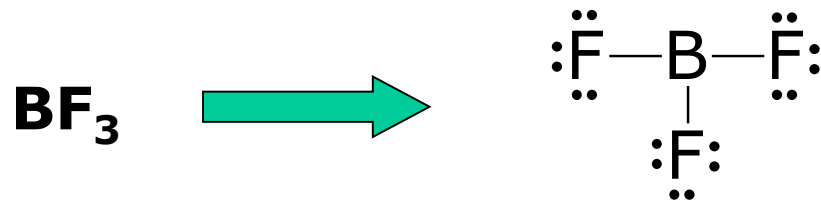


Meio Ambiente

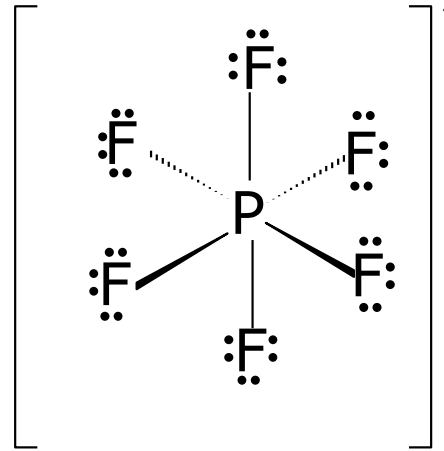


Violação da Regra do Octeto

Compostos com átomos contendo menos que oito elétrons:



Compostos com átomos contendo mais que oito elétrons (geralmente para os elementos do 3º período ou períodos superiores)



2º período: **NF₃**

~~**NF₅**~~

$2s^2 2p^3$

3º período: **PF₃**

PF₅

$2s^2 2p^3 3d$

Compostos com átomos contendo mais que oito elétrons (pares de elétrons livres) (alguns inter-halogênios):



Compostos com átomos contendo mais que oito elétrons (compostos de alguns gases nobres):



- Somente elementos do 3º período (ou maior) formam compostos onde o octeto é expandido. Envolvem orbitais d.
- Ex: compostos de P → Forma compostos de PH_3 , PH_4^+ e PF_3 . Ademais, existe PF_5 ...

TABLE 8.6 Lewis Structures in Which the Central Atom Exceeds an Octet

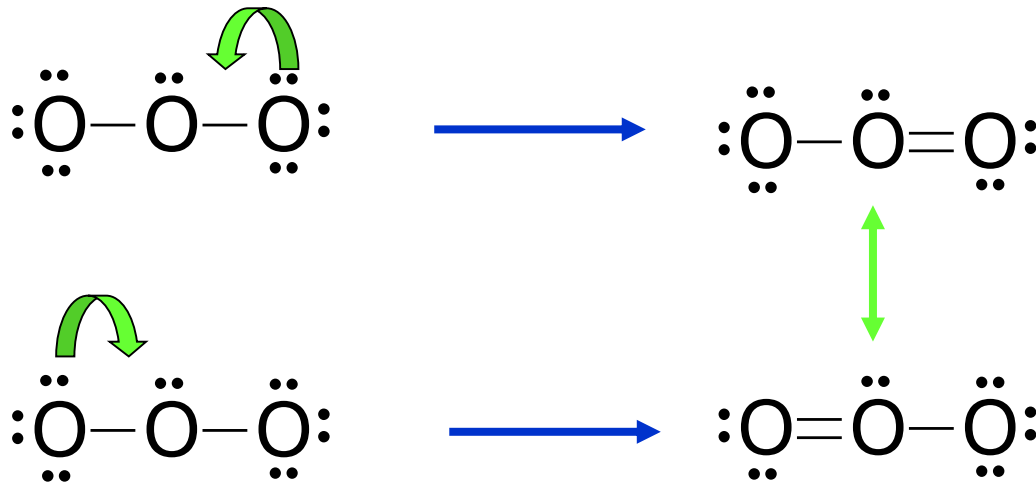
Group 4A	Group 5A	Group 6A	Group 7A	Group 8
SiF_5^- 	PF_5 	SF_4 	ClF_3 	XeF_2
SiF_6^{2-} 	PF_6^- 	SF_6 	BrF_5 	XeF_4

- Os elementos **B**, **C**, **N**, **O** e **F** (2º período) têm configuração eletrônica restrita ao máximo de oito elétrons.
- Ex: compostos de N → Forma compostos de NH_3 , NH_4^+ e NF_3 .
Porém, não existe NF_5 .

ESTRUTURAS DE LEWIS E RESSONÂNCIA

Ozônio: O_3

Existem duas maneiras de escrever a estrutura de Lewis

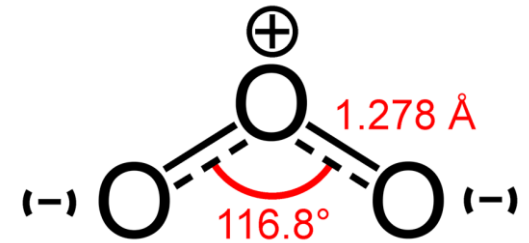


A estrutura de Lewis não corresponde corretamente a estrutura do O_3 !

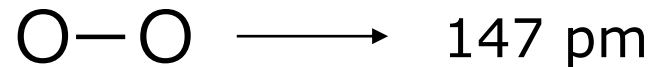
Ozônio O₃

Linus Pauling:

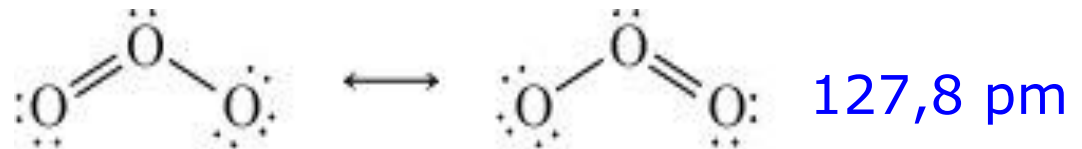
Estruturas ressonantes são uma maneira de representar as ligações em uma molécula ou íon, quando uma *única estrutura de Lewis* falha em descrever de forma precisa a estrutura eletrônica real.



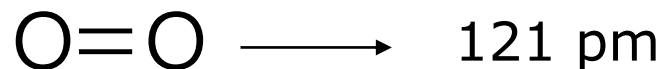
Ligação simples:



Ligação intermediária:

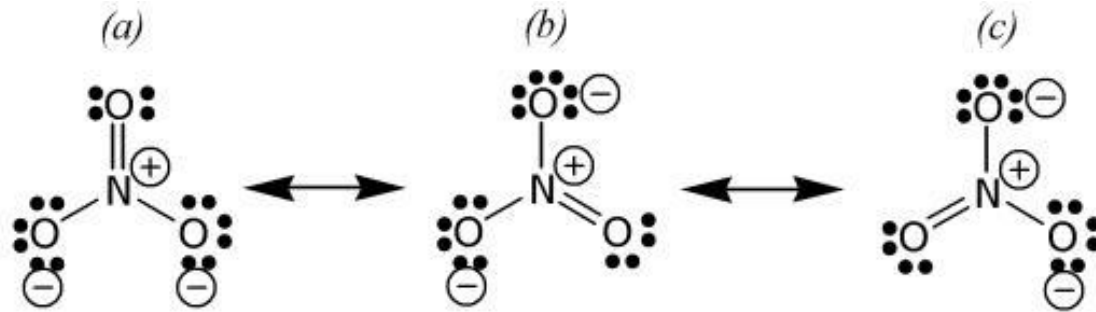


Ligação dupla:

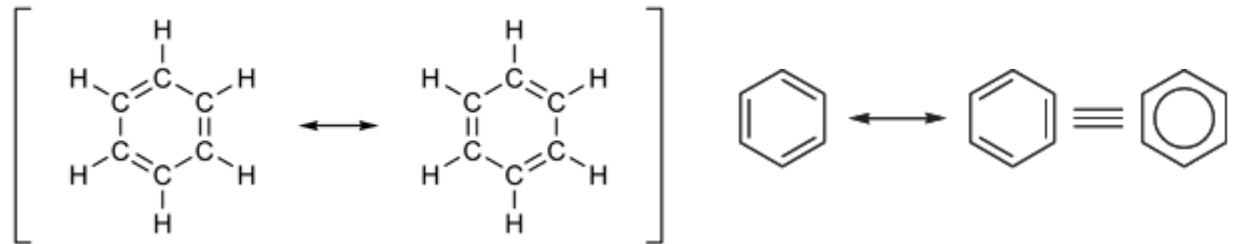


Efeito ressonante

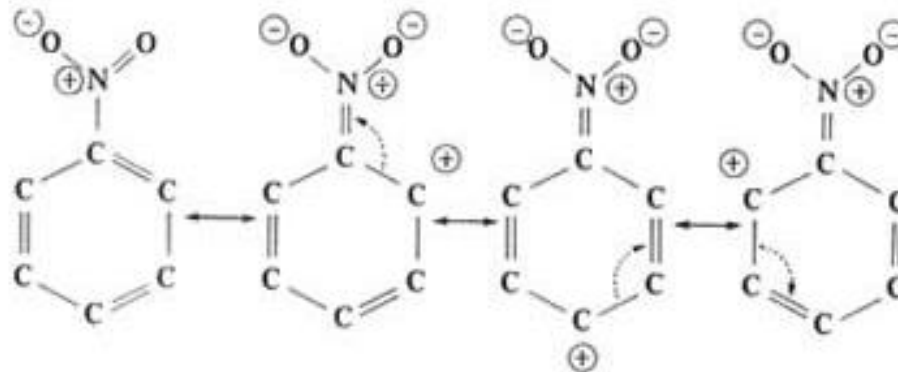
Nitrato



Benzeno



Nitrobenzeno



Ordem de ligação

OL: Número de pares de elétrons da ligação que são compartilhados por dois átomos (X-Y) em uma molécula.

$$OL = \frac{\text{N}^\circ \text{ de pares de elétrons compartilhados na ligação } X - Y}{\text{Número de ligações } X - Y \text{ na molécula ou íon}}$$

Ex:

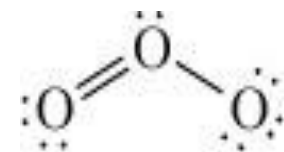
Comprimento de ligação

$$\text{C} - \text{O}: \quad L = \frac{1}{1} = 1 \quad \mathbf{143 \text{ pm}}$$

$$\text{C} = \text{O}: \quad L = \frac{2}{1} = 2 \quad \mathbf{122 \text{ pm}}$$

$$\text{C} \equiv \text{O}: \quad L = \frac{3}{1} = 3 \quad \mathbf{113 \text{ pm}}$$

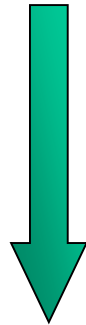
OL_{Fracionária}



$$L = \frac{3}{2} = 1,5$$

128 pm

Carga formal dos átomos nas moléculas



Definição:

A carga de um átomo em uma molécula ou íon é calculada assumindo um igual compartilhamento dos elétrons de ligação.

Carga formal dos átomos em moléculas e íons

$$CF = EV - [EPI + \frac{1}{2}(EPL)]$$

CF: Carga Formal

EV: N° de elétrons de valência

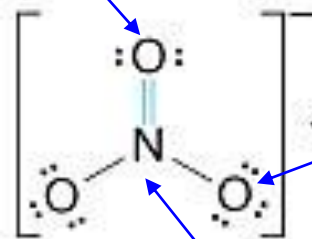
EPI: N° total de elétrons nos pares isolados

EPL: N° total de elétrons nos pares de ligação

Íon nitrato

$$\text{Carga formal} = 6 - [4 + \frac{1}{2}(4)] = 0$$

$$\text{Carga formal} = -1$$



$$\text{Carga formal} = 6 - [6 + \frac{1}{2}(2)] = -1$$

$$\text{Carga formal} = 5 - [0 + \frac{1}{2}(8)] = +1$$

A soma das cargas formais dos átomos em uma molécula ou íon é igual a sua carga líquida. (0 -1 -1 + 1 = -1)

Carga formal dos átomos nas moléculas

$$CF = EV - [EPI + \frac{1}{2}(EPL)]$$

CF= Carga Formal

EV= N° de elétrons de valência

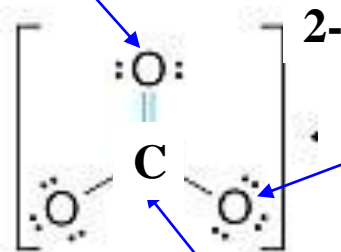
EPI= N° total de elétrons nos pares isolados

EPL= N° total de elétrons nos pares de ligação

Íon carbonato

$$\text{Carga formal} = 6 - [4 + \frac{1}{2}(4)] = 0$$

$$\text{Carga formal} = -1$$



$$\text{Carga formal} = 6 - [6 + \frac{1}{2}(2)] = -1$$

$$\text{Carga formal} = 4 - [0 + \frac{1}{2}(8)] = 0$$

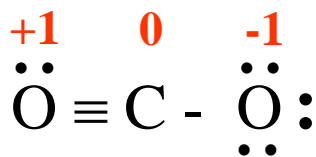
A soma das cargas formais dos átomos em uma molécula ou íon é igual a sua carga líquida. $(0 + 0 -1 -1 = -2)$

Carga formal dos átomos nas moléculas

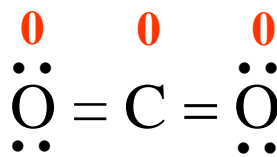
Uma carga formal baixa indica que um átomo sofreu a menor redistribuição de elétrons possível em relação ao átomo livre.



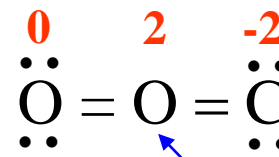
$$\text{CF} = 4 - [0 + \frac{1}{2}(8)] = 0$$



$$\text{CF} = 4 - [0 + \frac{1}{2}(8)] = 0$$



$$\text{CF} = 4 - [4 + \frac{1}{2}(4)] = -2$$



$$\text{CF} = 6 - [6 + \frac{1}{2}(2)] = -1$$

$$\text{CF} = 6 - [4 + \frac{1}{2}(4)] = 0$$

$$\text{CF} = 6 - [0 + \frac{1}{2}(8)] = 2$$

Uma estrutura de Lewis representa o arranjo de menor energia dos átomos e elétrons quando a carga formal de cada átomo está mais próximo de zero.

Cargas formais e atribuição da estrutura de Lewis correta

- Em uma estrutura de Lewis a soma das cargas formais deve ser igual a zero para uma molécula neutra e igual a carga de um íon.
- As cargas formais em uma estrutura devem ser as menores possíveis.
- Em uma determinada estrutura de Lewis as cargas formais negativas estão localizadas preferencialmente nos átomos mais eletronegativos e as cargas formais positivas nos átomos menos eletronegativos.
- Estruturas em que cargas formais de mesmo sinal aparecem em átomos adjacentes são improváveis.
- A carga formal prioriza o caráter covalente das ligações, enquanto que o número de oxidação prioriza o caráter iônico. As cargas formais dependem da estrutura de Lewis e ao contrário dos números de oxidação.

Estruturas de Lewis



A estrutura de Lewis auxilia :

- Forma Molecular**
- Geometria Molecular**

LIGAÇÃO COVALENTE

A forma da Molécula e a sua Estrutura

As formas das moléculas determinam:

- O cheiro, sabor, ação como medicamento;**
- As propriedades dos materiais (incluindo coloração e solubilidade).**

cis-[PtCl₂(NH₃)₂] – amarelo alaranjado - solub. 0,252 g (100g de H₂O) é usado no tratamento em quimioterapia de paciente cancerígeno

trans -[PtCl₂(NH₃)₂] – amarelo-escuro - solub. 0,037 g (100g de H₂O) e não exibe ação em quimioterapia.

O conhecimento da estrutura e a compreensão dos tipos de ligações envolvidas são pré-requisitos para explicar as propriedades químicas de diferentes compostos

água (PE = 100 °C) ?

NaCl (PF = 801 °C)?

Teoria VSEPR (VESPER)

VSPER: *Valence Shell Electron Pair Repulsion*

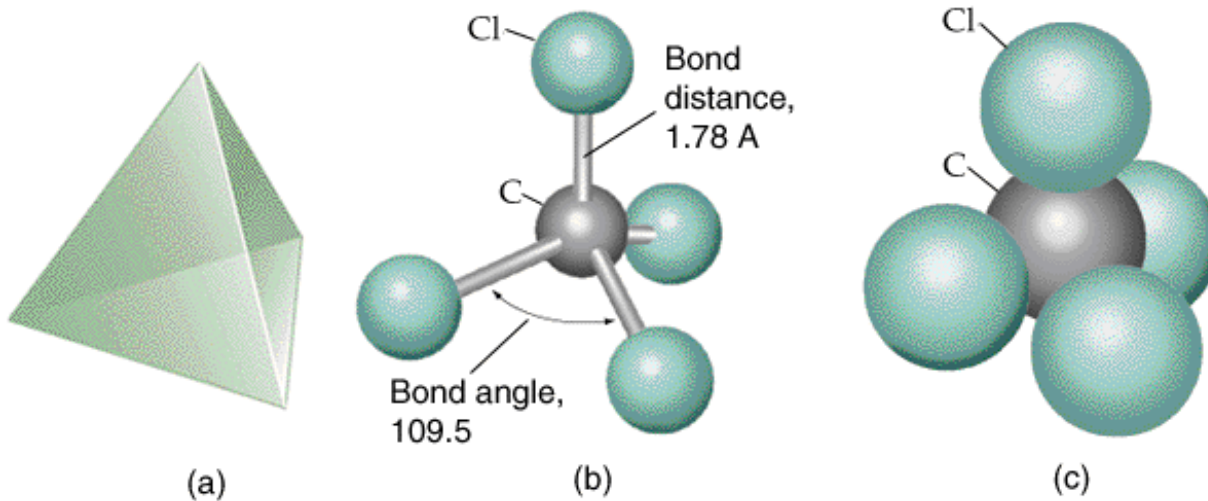
RPECV: Repulsão dos Pares de Elétrons de Camada de Valência

- Geometria: Definida pela repulsão dos pares de elétrons.
- Moléculas assumem a geometria que minimiza as repulsões dos pares de elétrons.
- O modelo VSEPR tem êxito na previsão de estrutura de moléculas e íons de elementos do grupo principal.
- Geralmente não aplica VSEPR para sistemas com elementos de metais d.

Forma Molecular

É determinada pelo ângulo de ligação.

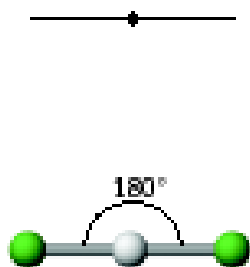
Ex: CCl_4 - Experimental – ângulo de ligação $109,5^\circ$



Estrutura Tetraédrica

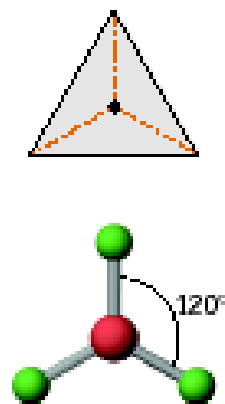
Geometria molecular dos pares de elétrons

Linear



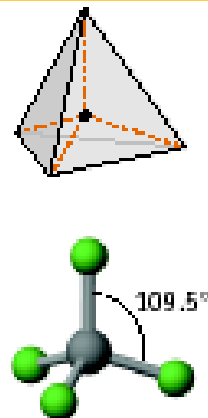
AX_2
Example: BeF_2

Trigonal-planar



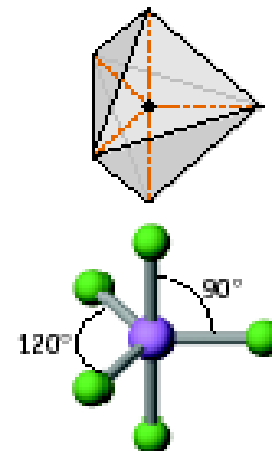
AX_3
Example: BF_3

Tetraedral



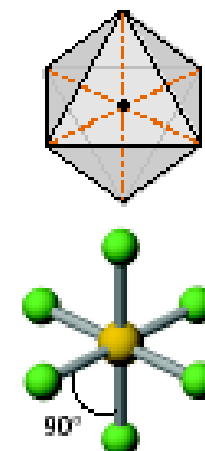
AX_4
Example: CF_4

Trigonal-bipiramidal



AX_5
Example: PF_5

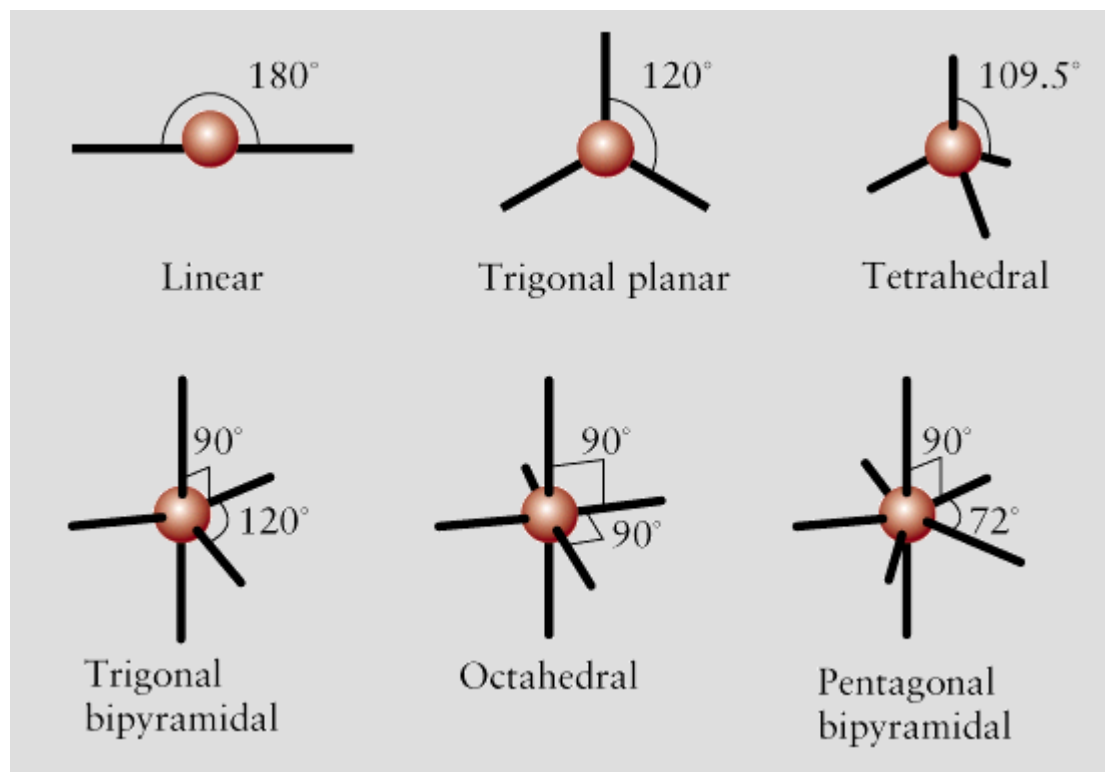
Octahedral



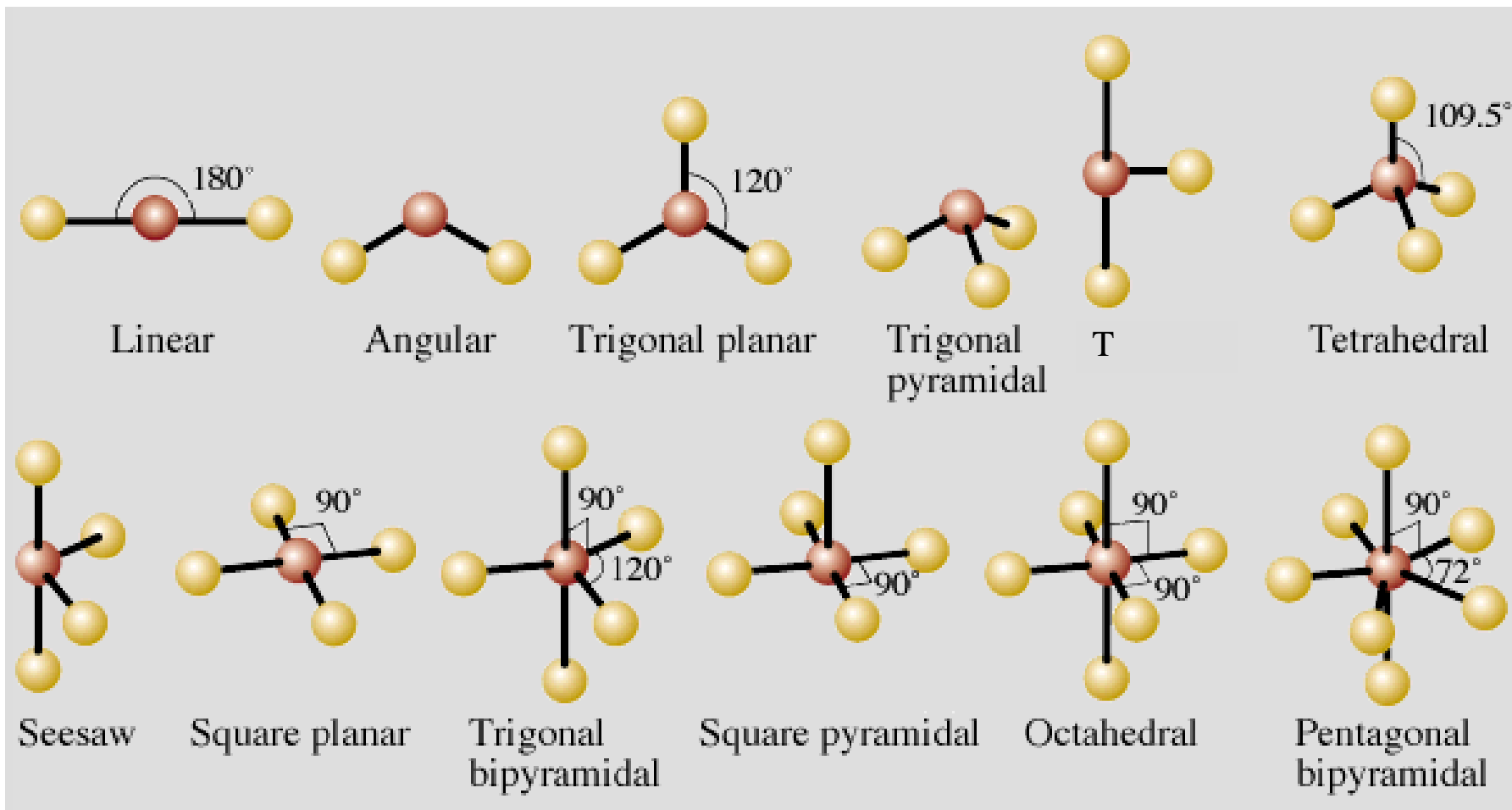
AX_6
Example: SF_6

Moléculas assumem a geometria que minimiza as repulsões dos pares de elétrons.

Geometria molecular dos pares de elétrons



Formas de moléculas simples e seus ângulos de ligação



O método VSEPR

- Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR)
(Repulsão entre os pares eletrônicos da camada de valência)

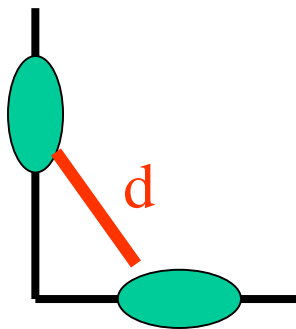
Desenvolvidos { Ronald J. Gillespie (1924-
Ronald S. Nyholm (1917-1971)

O método para determinar a orientação mais estável dos pares eletrônicos ao redor do átomo central em sistemas covalentes

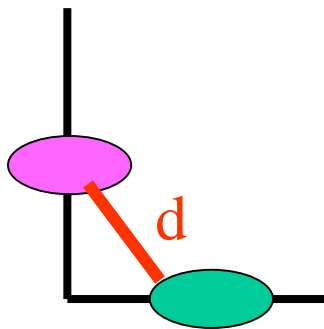
Requisitos:

- 1) Os pares eletrônicos da camada de valência do átomo central tendem a se orientar de forma que sua energia total seja mínima
 - Minimizar as repulsões intereletrônicas

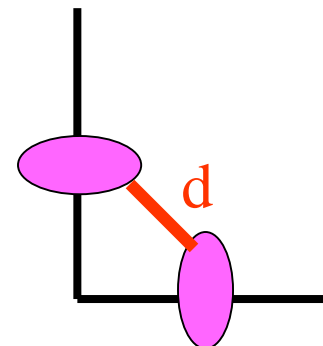
2) A magnitude da repulsão entre os pares eletrônicos dependem de estarem compartilhados ou isolados



a) **Par compartilhado**
Par compartilhado



b) **Par isolado -**
Par compartilhado



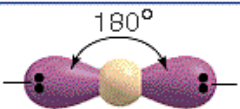
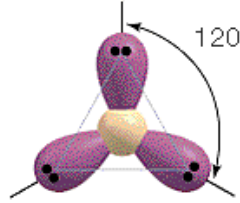
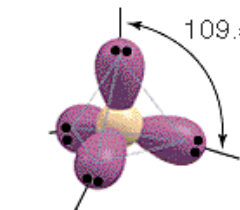
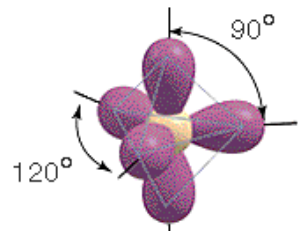
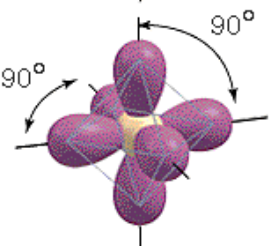
c) **Par isolado -**
Par isolado

—————→
Repulsão entre os pares eletrônicos crescentes

3) Forças repulsivas decrescem bruscamente com o aumento do ângulo entre os pares eletrônicos:

são fortes a 90° , mais fracas a 120° e extremamente fracas a 180°

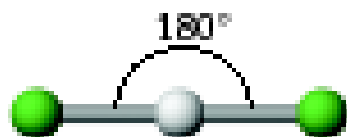
ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AS A FUNCTION OF THE NUMBER OF ELECTRON PAIRS

Number of Electron Pairs	Arrangement of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Predicted Bond Angles
2		Linear	180°
3		Trigonal planar	120°
4		Tetrahedral	109.5°
5		Trigonal bipyramidal	120° 90°
6		Octahedral	90° 180°

Geometria Molecular

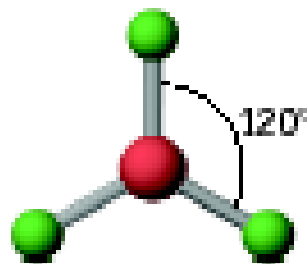
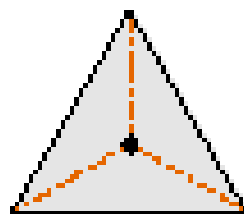
(2, 3 e 4 pares de elétrons)

Linear



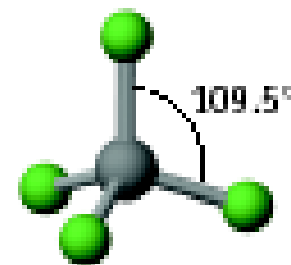
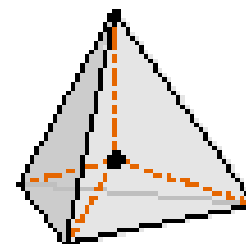
AX_2
Example: BeF_2

Trigonal-planar



AX_3
Example: BF_3

Tetraedral

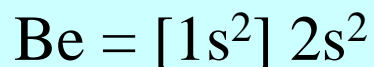


AX_4
Example: CF_4

Determinação da Geometria Molecular



- 1) Desenhar a estrutura de Lewis
- 2) Encontrar o número de pares de elétrons em torno do **átomo central**
- 3) Arranje os pares de elétrons em volta do átomo central para minimizar a repulsão entre pares de elétrons

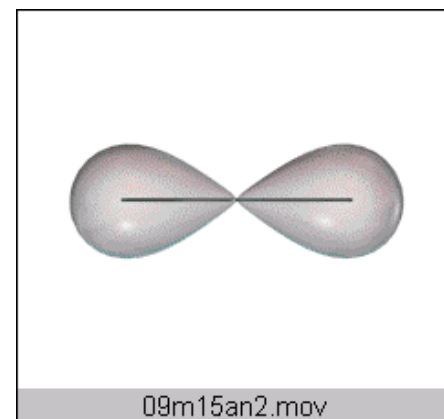


Nº de pares de elétrons de valência em torno do átomo central = 2

O átomo de F circundante
compartilha com 1 elétron

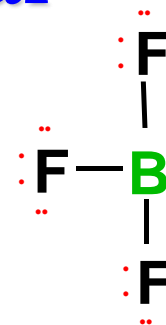
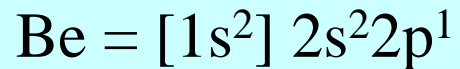


Forma Linear

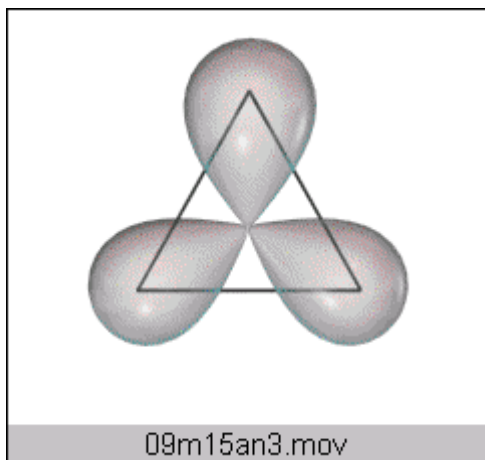


Geometria Linear

Determinação da Geometria Molecular

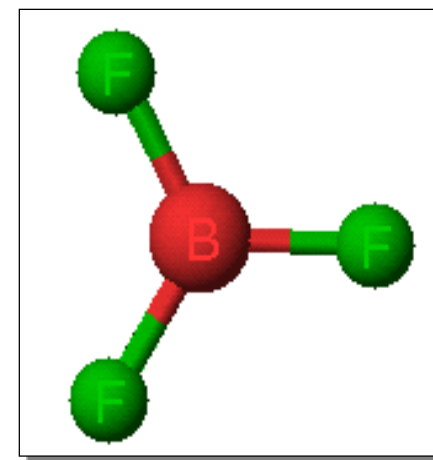


Nº de pares de elétrons de valência em torno do átomo central = 3
O átomo de F circundante compartilha com 1 elétron



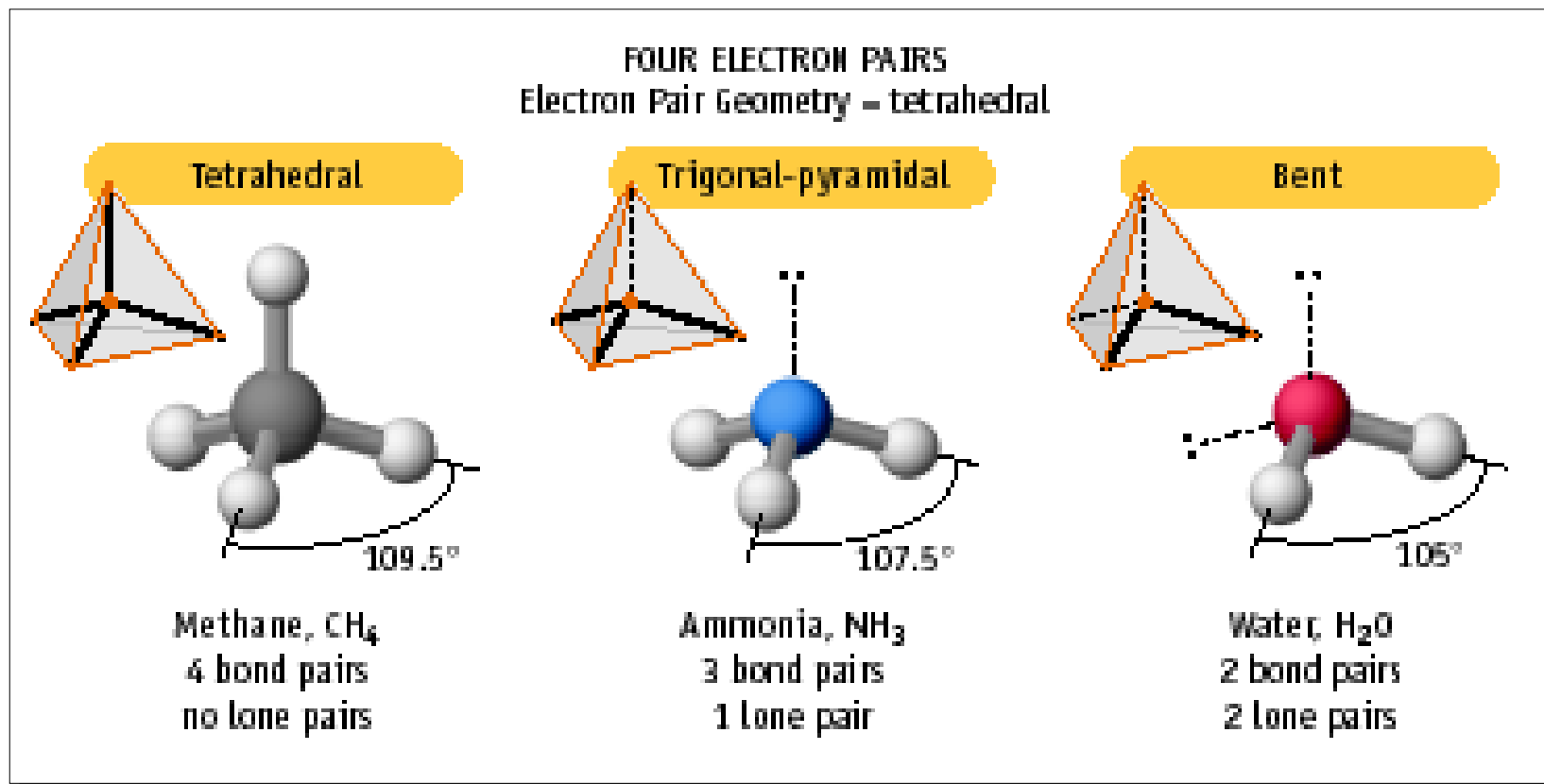
**Geometria dos
pares de elétrons
Trigonal planar**

Ângulo 120°



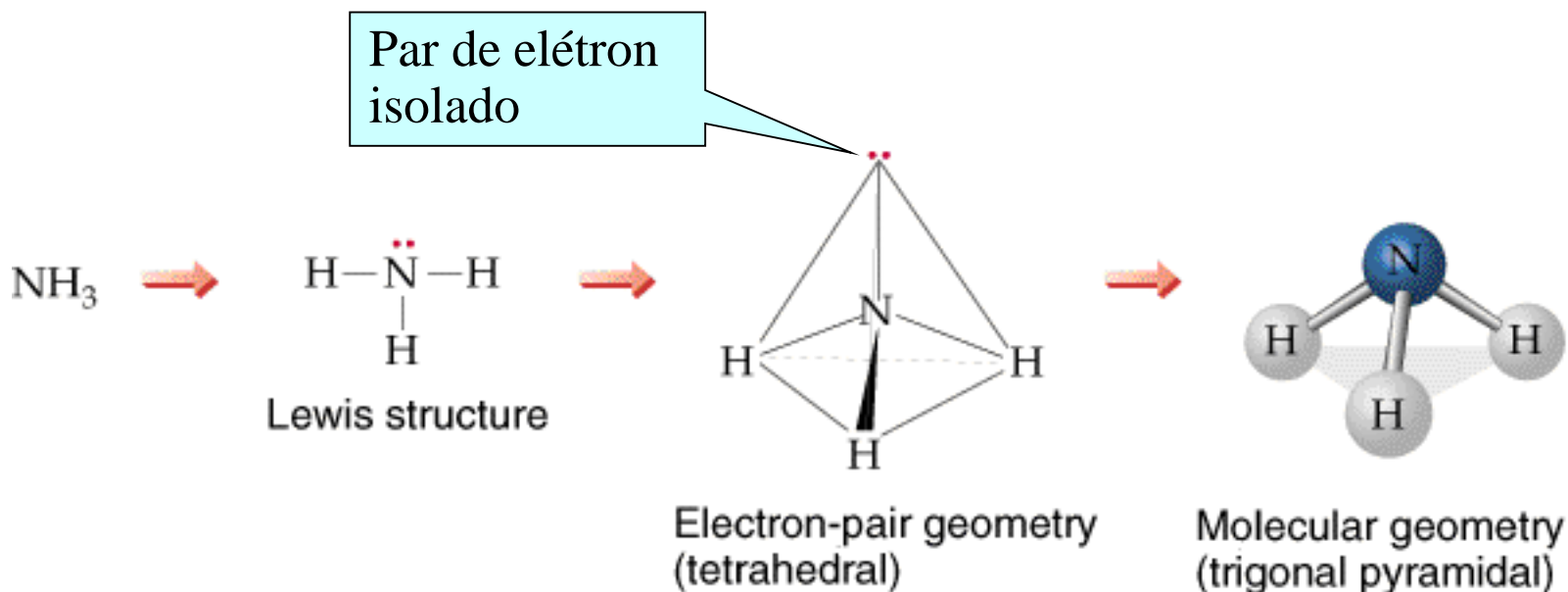
**Forma trigonal
planar**

Geometrias Moleculares (4 pares de elétrons)



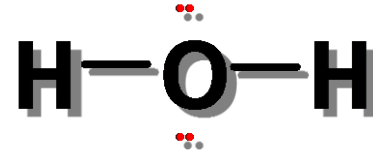
Determinação da forma geométrica da molécula NH_3

- 1) Desenhar a estrutura de Lewis
- 2) Encontrar o número de pares de elétrons em torno do átomo central
- 3) Arranje os pares de elétrons em volta do átomo central para minimizar a repulsão entre pares de elétrons
- 4) Considerar uma ligação múltipla como sendo um par de eletrônico

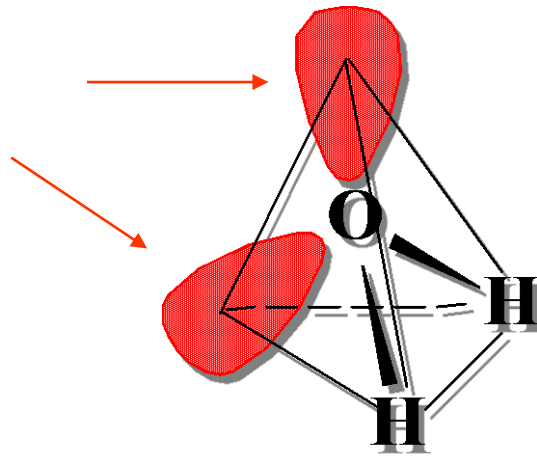


Determinação da Geometria Molecular

Água, H₂O

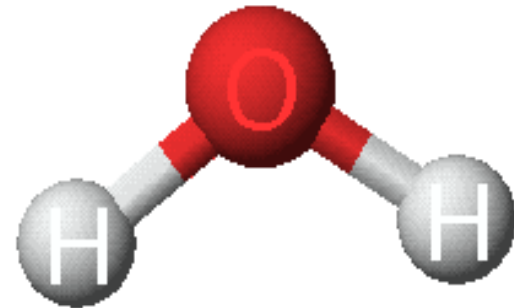


Pares de
elétrons
isolados



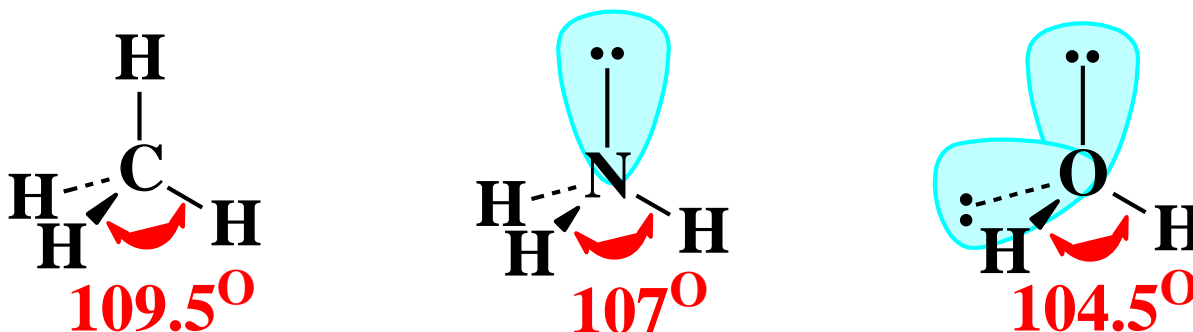
Geometria dos
elétrons
TETRAÉDRICA

A forma molecular
ANGULAR



Efeito dos pares de elétrons isolados sobre as ligações múltiplas e ângulos de ligação

Os ângulos de ligação H-X-H decrescem de $C > N > O$

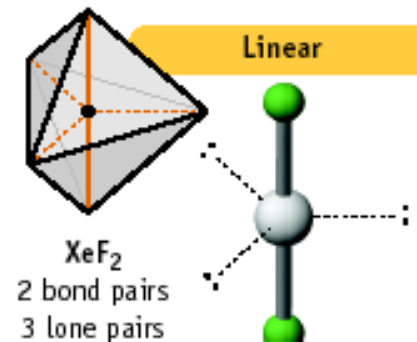
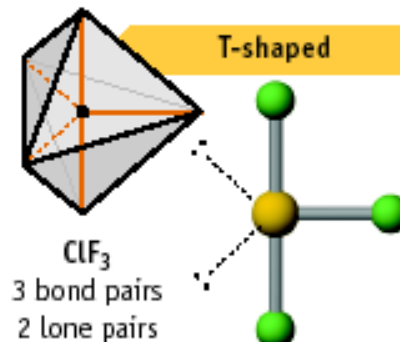
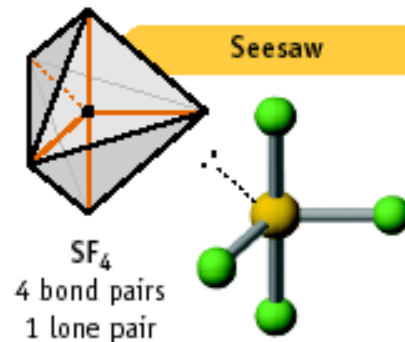
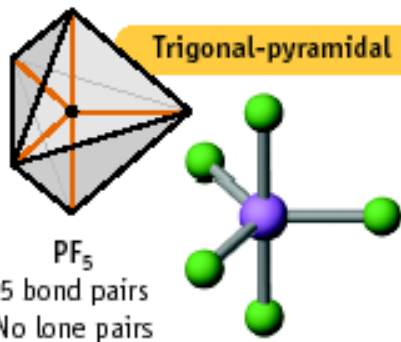


Desde que os elétrons na ligação são atraídos pelos dois núcleos, eles não repelem tanto quanto um par isolado

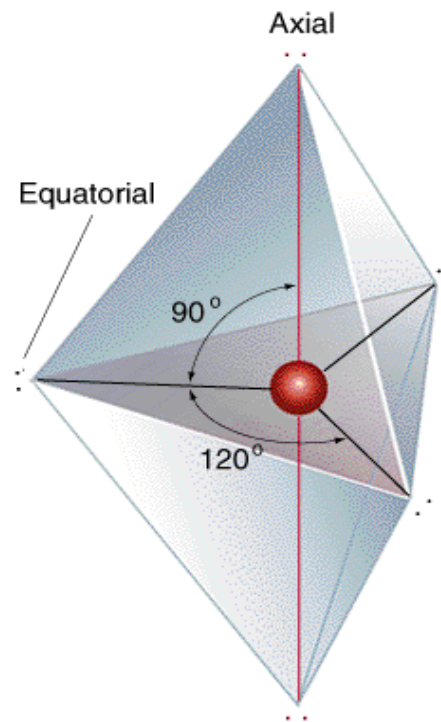
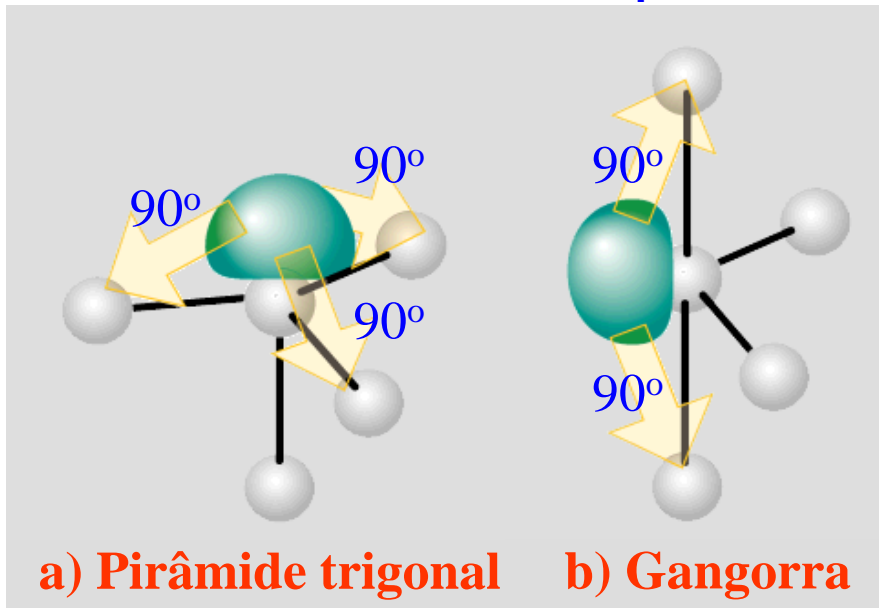
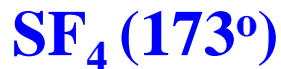
Os ângulos de ligação diminuem com aumento do número de pares isolados

Geometrias moleculares (5 pares de elétrons)

FIVE ELECTRON PAIRS
Electron Pair Geometry – trigonal bipyramid



Pirâmide Trigonal - Para minimizar a repulsão (e-)(e-), os pares isolados são sempre localizados na posição equatorial

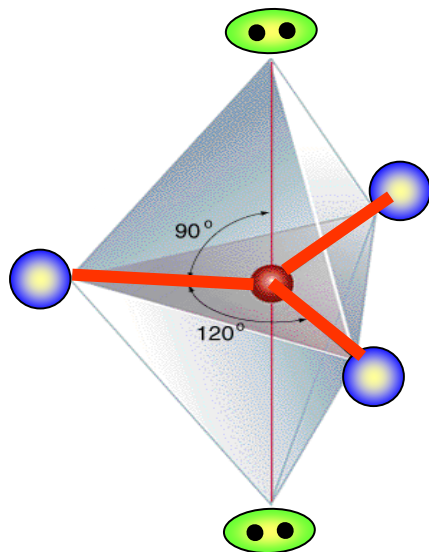


a) Um par isolado em posição axial está próximo a 3 átomos equatoriais

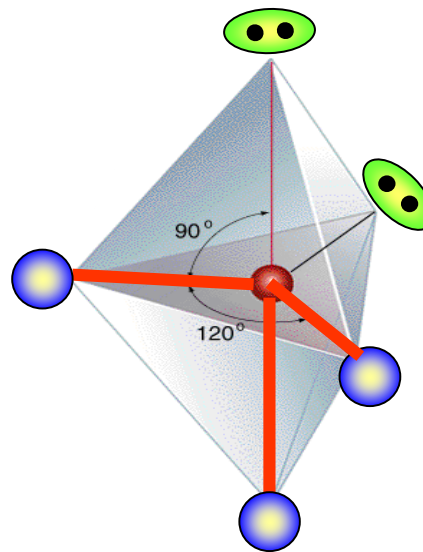
b) Um par isolado em posição equatorial está próximo somente a 2 átomos axiais

Estrutura

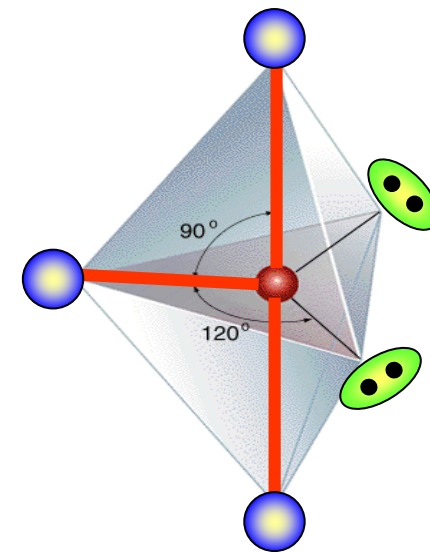
(I)



(II)



(III)



Posições dos Pares isolados



2 axiais

1 axial
1 equatorial

2 equatoriais

Repulsão em 90°:

Par isolado – Par isolado

0

1

0

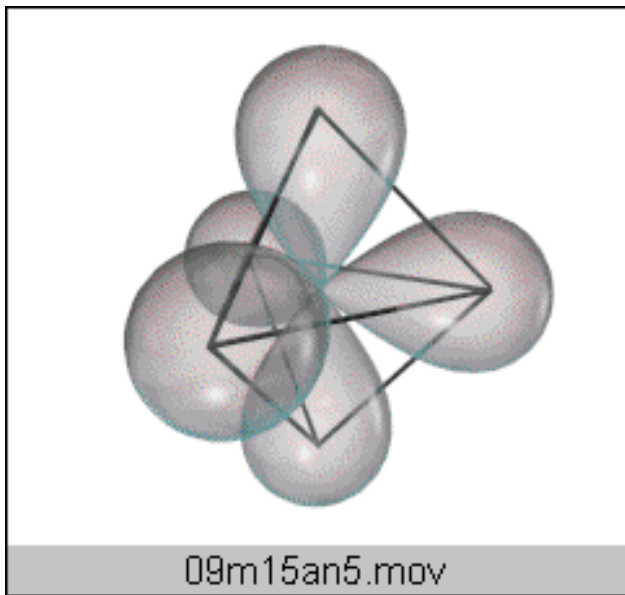
Par isolado – Par comp.

6

3

4

Pentafluoreto de fosforo

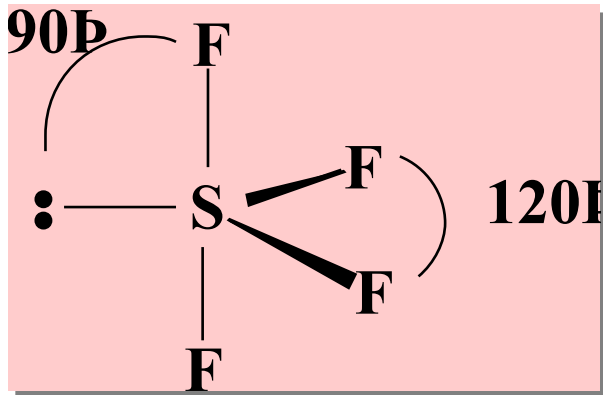
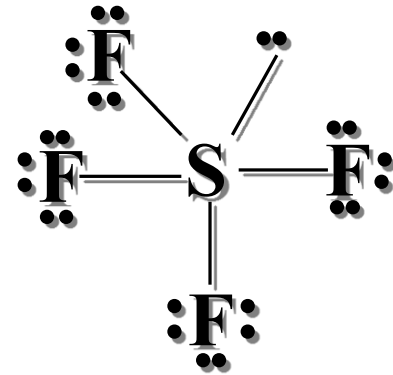
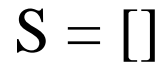


Geometria dos pares de elétrons
Bipirâmide Trigonal

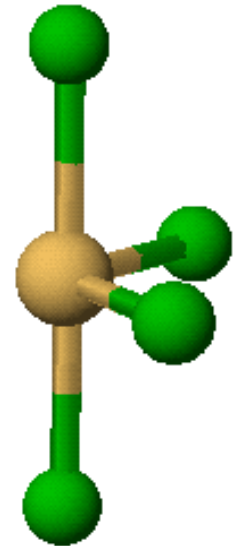


Forma bipirâmide
Trigonal

Tetrafluoreto de enxofre



Geometria dos pares de elétrons
Biperamide Trigonal



Forma Gangorra

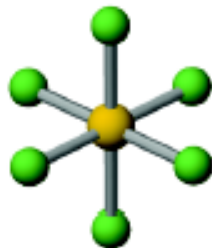
Geometrias Moleculares

(6 pares de elétrons)



Octahedral

SF_6
6 bond pairs
No lone pairs



SIX ELECTRON PAIRS
Electron Pair Geometry – octahedral



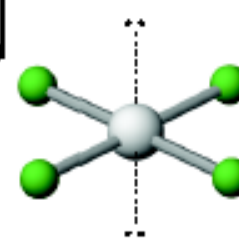
Square-pyramidal

BrF_5
5 bond pairs
1 lone pair



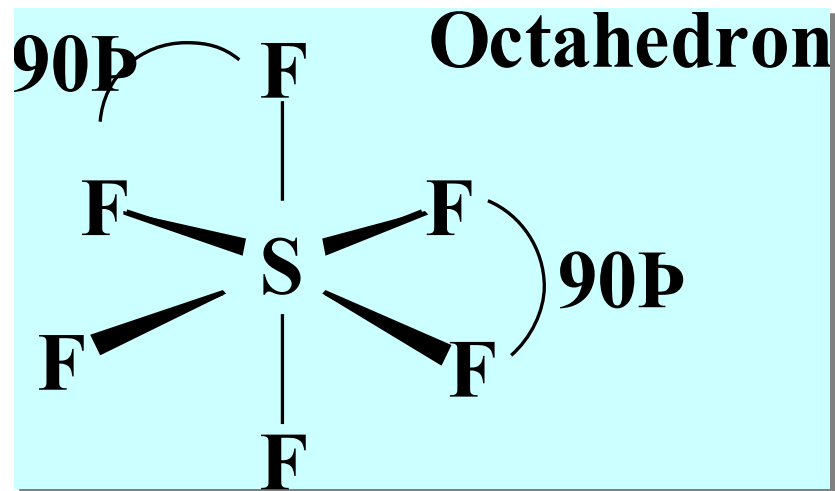
Square-planar

XeF_4
4 bond pairs
2 lone pairs



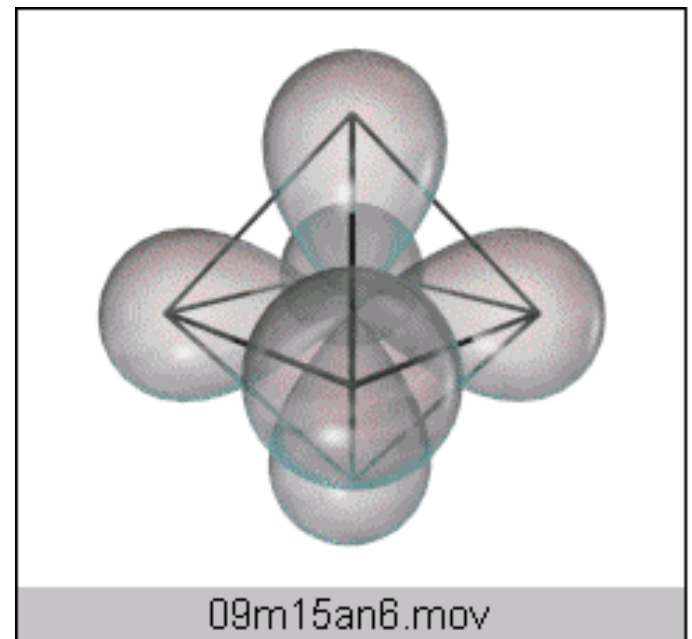
Geometrias Moleculares

(6 pares de elétrons)



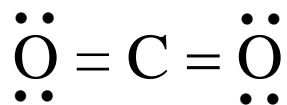
6 pares de elétrons

Octaédrica



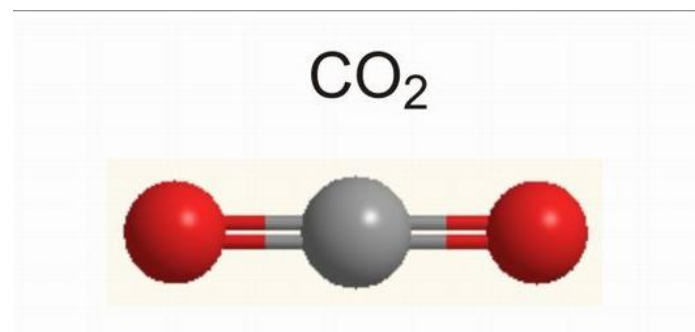
Geometria molecular e ligações múltiplas

Todos os pares de elétrons numa ligação múltipla contribuem para a geometria molecular como se fosse uma ligação simples.



Estrutura de Lewis

Não tem pares de elétrons isolados no átomo central

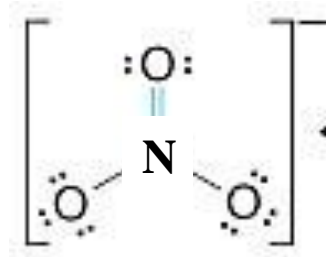


Estrutura molecular
(Linear: 180°)

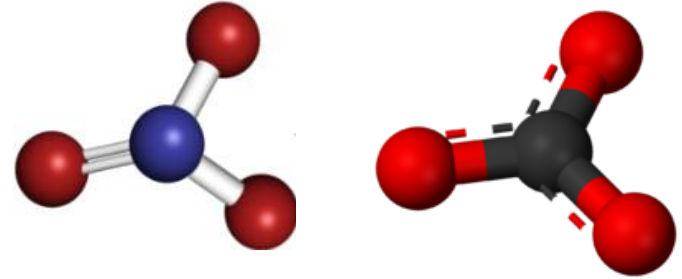
Cada ligação dupla como uma para se prever a geometria!!!

Geometria molecular e ligações múltiplas

Íon NO_3^{2-}



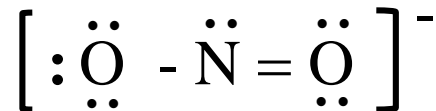
Estrutura de Lewis
(Estrutura ressonante)



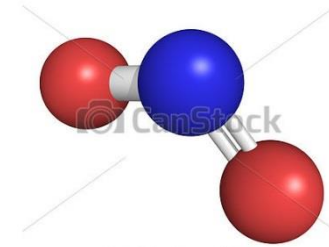
Estrutura molecular
(Trigonal planar: 120°)

Não tem pares de elétrons isolados no átomo central

Íon NO_2^-



Estrutura de Lewis
(Estrutura ressonante)





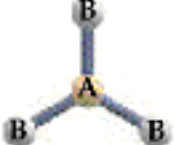
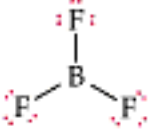

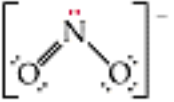
Estrutura molecular
(Trigonal angular: 115°)

Tem um par de elétrons isolado no átomo central

The VSEPR Model

Predicting Molecular Geometries



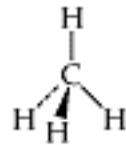
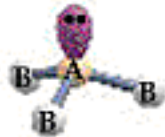
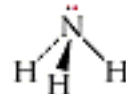
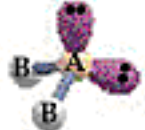

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH TWO, THREE, AND FOUR ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
2 pairs	 Linear	2	0	 Linear	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
3 pairs	Trigonal planar	3	0		
		2	1	 Bent	

The VSEPR Model

Predicting Molecular Geometries



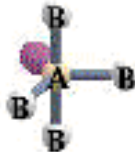
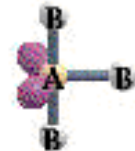

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH TWO, THREE, AND FOUR ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
4 pairs	 Tetrahedral	4	0	 Tetrahedral	
		3	1	 Trigonal pyramid	
		2	2	 Bent	

The VSEPR Model

Molecules with Expanded Valence Shells


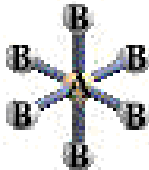
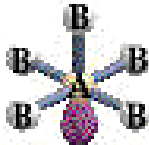

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
5 pairs	 Trigonal bipyramidal	5	0	 Trigonal bipyramidal	PCl_5
		4	1	 Seesaw	SF_4
		3	2	 T-shaped	ClF_3
		2	3	 Linear	XeF_2

The VSEPR Model

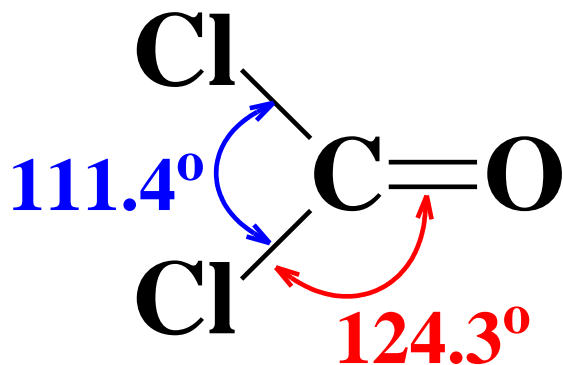
Molecules with Expanded Valence Shells

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
6 pairs	 Octahedral	6	0	 Octahedral	SF_6
		5	1	 Square pyramidal	BrF_5
		4	2	 Square planar	XeF_4

The Effect of Nonbonding Electrons and Multiple Bonds on Bond Angles

Similarly, electrons in multiple bonds repel more than electrons in single bonds.

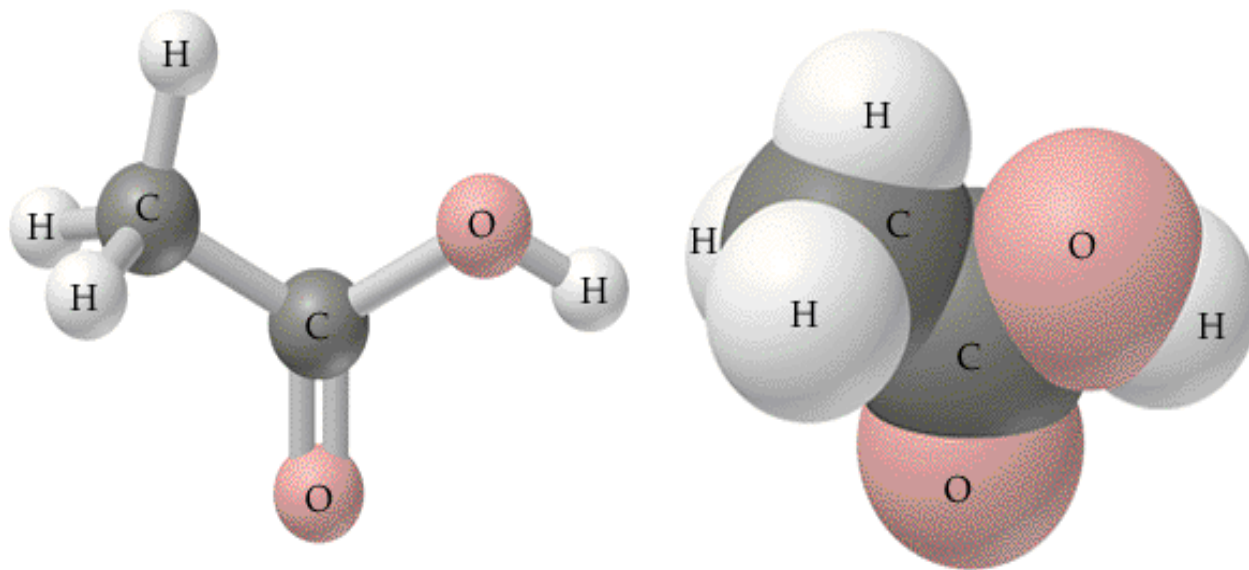


The VSEPR Model

Molecules with More than One Central Atom

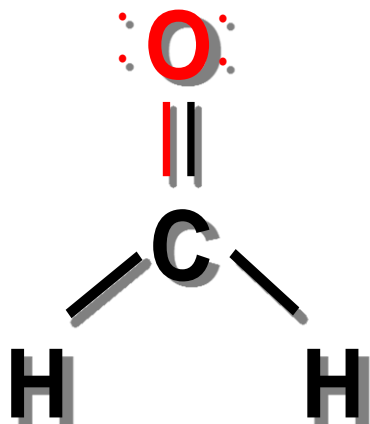
In acetic acid, CH_3COOH , there are three central atoms.

We assign the geometry about each central atom separately.



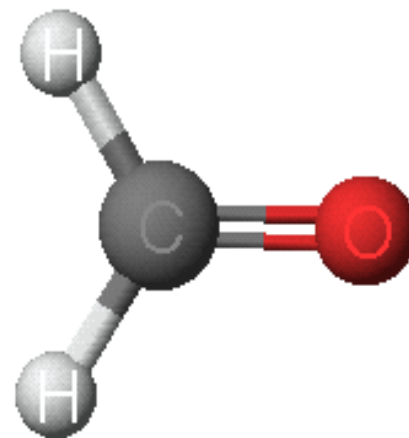
Structure Determination by VSEPR

Formaldehyde, CH_2O



The electron pair geometry is **PLANAR TRIGONAL**

The molecular geometry is also planar trigonal.



Structure Determination by VSEPR

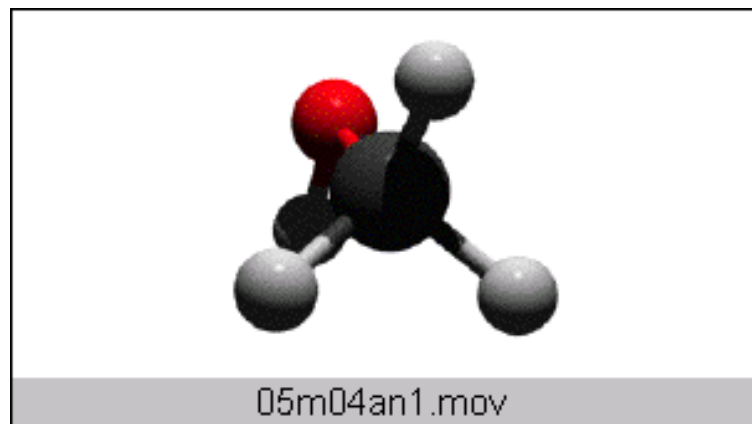
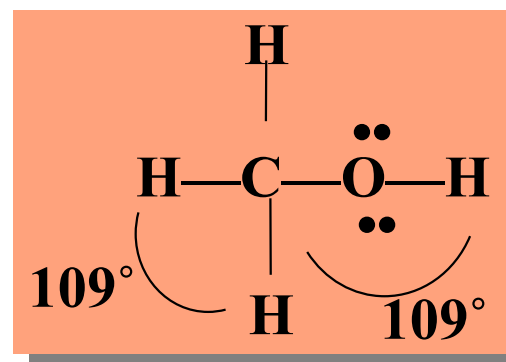
Methanol, CH_3OH

Define H-C-H and C-O-H
bond angles

H-C-H = 109°

C-O-H = 109°

In both cases the atom is
surrounded by 4 electron
pairs.



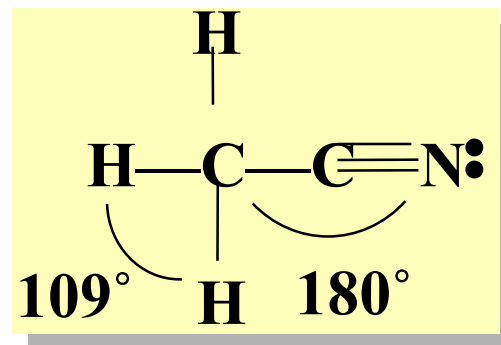
Structure Determination by VSEPR

Acetonitrile, CH_3CN

Define unique bond angles

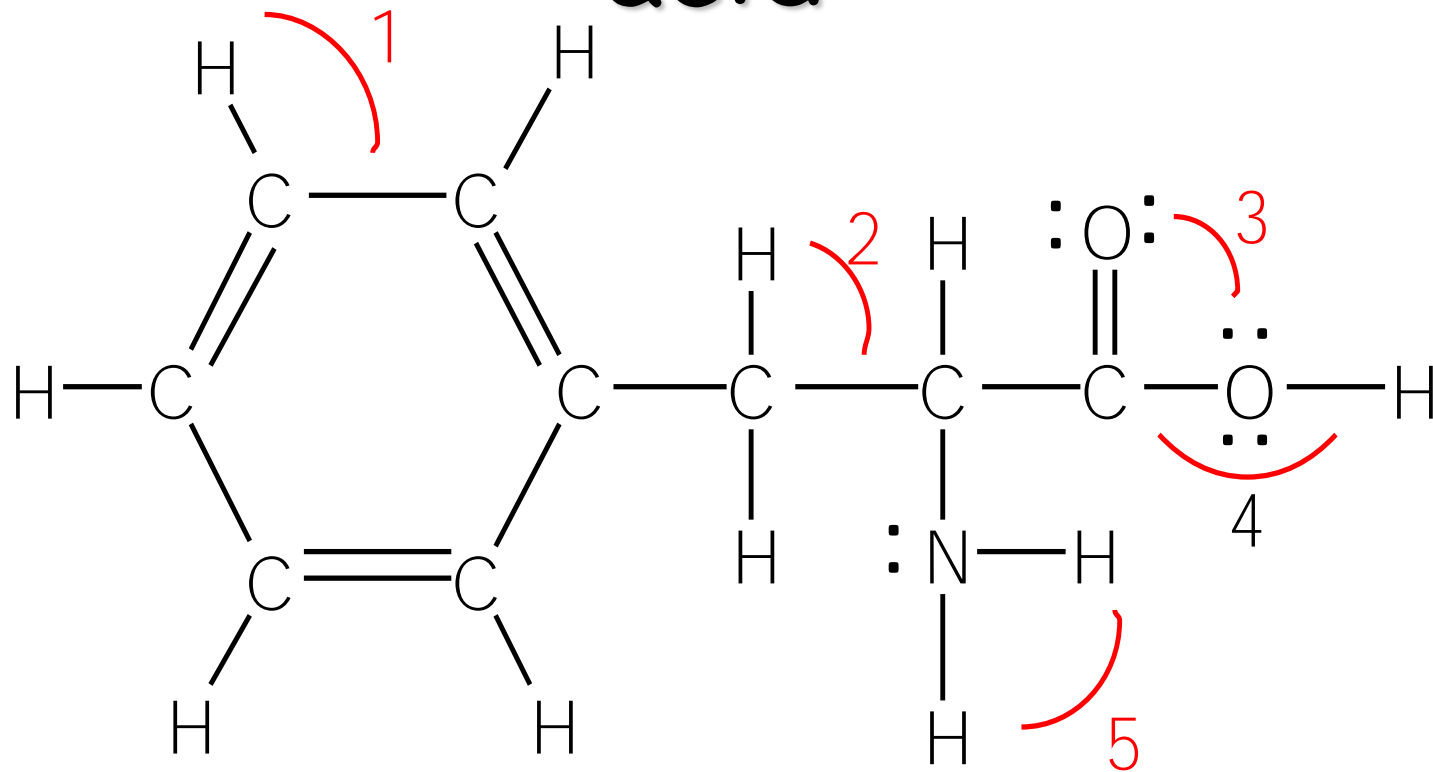
$$\text{H-C-H} = 109^\circ$$

$$\text{C-C-N} = 180^\circ$$

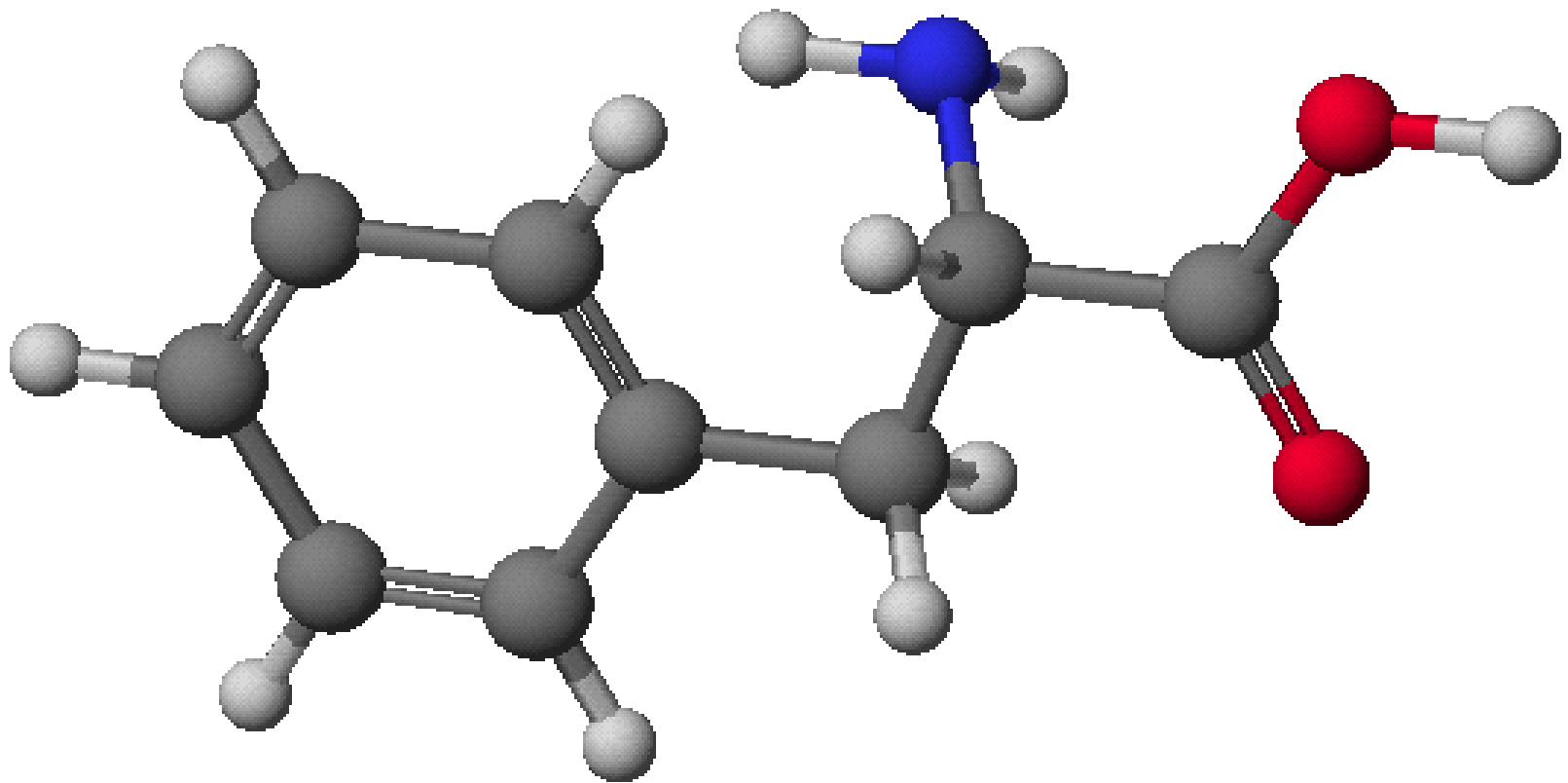




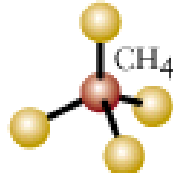
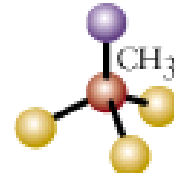
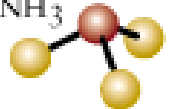


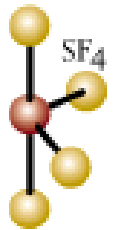
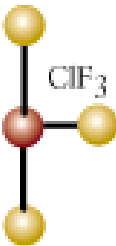

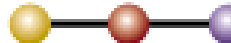

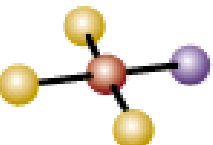
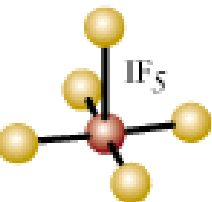


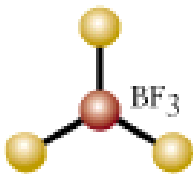
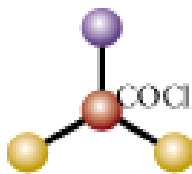
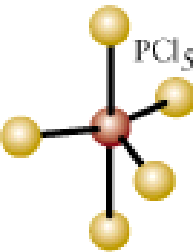
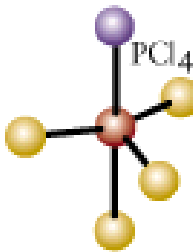
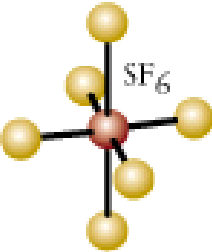
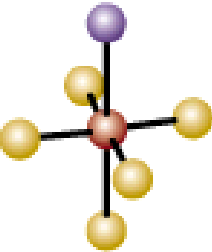
One C is surrounded by 4 electron
“lumps” and the other by 2 **“lumps”**

Phenylalanine, an amino acid



Phenylalanine



VSEPR type	Nonpolar	Polar	VSEPR type	Nonpolar	Polar	VSEPR type	Nonpolar	Polar
AX ₂	 CO ₂	 HCN	AX ₄	 CH ₄	 CH ₃ Cl	AX ₃ E		 NH ₃
AX ₂ E		 SO ₂ , O ₃						
AX ₂ E ₂		 H ₂ O	AX ₄ E		 SF ₄	AX ₃ E ₂		 ClF ₃
AX ₂ E ₃	 XeF ₂	 BrICl	AX ₄ E ₂	 XeF ₄		AX ₅ E		 IF ₅
AX ₂ E ₄	 none known	 none known						
AX ₃	 BF ₃	 COCl ₂	AX ₅	 PCl ₅	 PCl ₄ F	AX ₆	 SF ₆	

Periodic Table of the Elements

1 IA		New Original										13 IIIA						14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA																																																																																									
1 H Hydrogen 1.00794	2 He Helium 4.002602											5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.0107	7 N Nitrogen 14.00674	8 O Oxygen 15.9994	9 F Fluorine 18.9984032	10 Ne Neon 20.1797	11 Na Sodium 22.989770	12 Mg Magnesium 24.3050	13 Al Aluminum 26.981538	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973761	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948	19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titanium 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chromium 51.9961	25 Mn Manganese 54.938049	26 Fe Iron 55.8457	27 Co Cobalt 58.933200	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.409	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Selenium 78.96	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798	37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.293	55 Cs Cesium 132.90545	56 Ba Barium 137.327	57 to 71										72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.9479	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platinum 195.078	79 Au Gold 196.96655	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98038	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 to 103										104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (269)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Ds Darmstadtium (271)	111 Rg Roentgenium (272)	112 Uub Ununbium (285)	113 Uut Ununtrium (284)	114 Uuq Ununquadium (289)	115 Uup Ununpentium (288)	116 Uuh Ununhexium (292)	117 Uus Ununseptium	118 Uuo Ununoctium

Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.

Design Copyright © 1997 Michael Dayah (michael@dayah.com) <http://www.dayah.com/periodic/>

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.

57 La Lanthanum 138.9055	58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.90765	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactinium 231.03588	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (262)