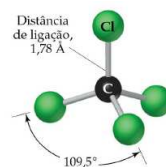
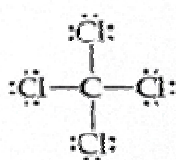


### Previsão de geometrias moleculares

As estruturas de Lewis nos mostram a composição das moléculas e a conectividade de seus átomos. Entretanto, elas não mostram um dos mais importantes aspectos das moléculas, que é a sua forma espacial. A forma e o tamanho de uma molécula, juntamente com a força e a polaridade de suas ligações influenciam as suas propriedades. As estruturas de Lewis nos mostram o número e os tipos de ligações entre os átomos, a forma espacial de uma molécula é determinada por seus ângulos de ligação.

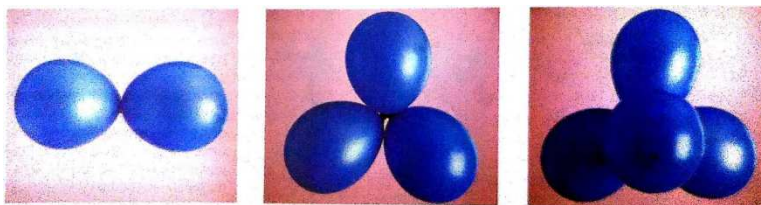
#### Exemplo:

A molécula de tetracloreto de carbono ( $\text{CCl}_4$ ) possui quatro átomos de cloro (Cl) ligados a um átomo central de carbono (C), conforme a estrutura de Lewis abaixo.



Os ângulos de ligação Cl-C-Cl são de  $109,5^\circ$  e não  $90^\circ$ ; Todos os átomos de Cl estão localizados nos vértices de um tetraedro com o C no seu centro.

Para prevermos a forma molecular, supomos que os elétrons de valência se repelem e, conseqüentemente, a molécula assume qualquer geometria 3D que minimize essa repulsão. Denominamos este processo de **teoria de Repulsão do Par de Elétrons no Nível de Valência (RPENV)**, que é baseado na ideia de que pares de elétrons isolados e de ligação na camada de valência de um átomo repelem uns aos outros e buscam ficar o mais longe possível uns dos outros. Os balões abaixo amarrados juntos pelos seus bicos adotam naturalmente seus arranjos de mais baixa energia, sendo a junção dos balões o núcleo do átomo central. Cada balão é equivalente a um domínio eletrônico, onde dois balões adotam um arranjo linear, três balões adotam um arranjo trigonal plano e quatro balões adotam um arranjo tetraédrico.



Os ângulos de uma molécula são obtidos pelo **Arranjo dos Pares de Elétrons**, que é a geometria adotada por todos os pares de elétrons de valência em torno de um átomo central, incluindo elétron não-ligantes. Enquanto a **Geometria Molecular** descreve o arranjo espacial do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele, considerando apenas os pares de elétrons ligantes.

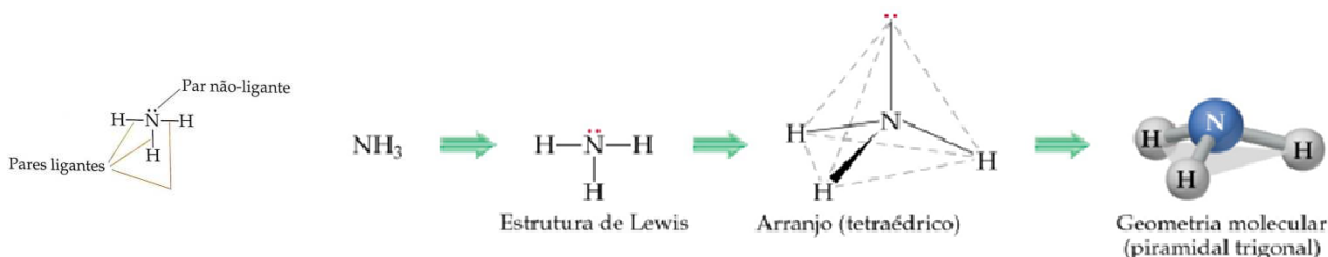
#### Regras para Determinar o Arranjo/Geometria

1. Desenhe a estrutura de Lewis.
2. Determinar o número de **domínios eletrônicos** da molécula.
3. Verificar o número de pares ligantes e o número de pares não-ligantes.
4. Ordene os pares de elétrons em uma das geometrias abaixo para minimizar a repulsão elétron-elétron.

Um **domínio eletrônico** consiste em um par de elétron, podendo ser *um par não-ligante, uma ligação simples ou uma ligação múltipla*. Uma vez que os domínios de elétrons são carregados negativamente, eles se repelem.










#### Exemplo:








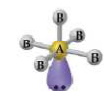
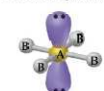
Considere a molécula de amônia ( $\text{NH}_3$ ).



## Resumo – Geometria Molecular

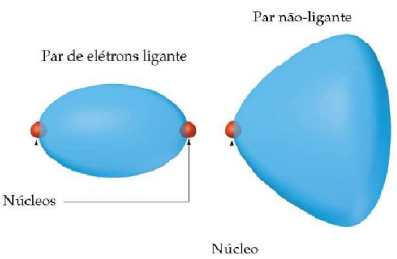
Arranjos e geometrias para diferentes moléculas:

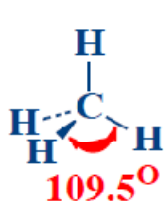
Número de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
2	 Linear	2	0	 Linear	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$
3	 Trigonal plano	3	0	 Trigonal plana	$\text{BF}_3$
		2	1	 Angular	$[\text{NO}_2]^-$
4	 Tetraédrico	4	0	 Tetraédrica	$\text{CH}_4$
		3	1	 Piramidal trigonal	$\text{NH}_3$
		2	2	 Angular	$\text{H}_2\text{O}$

Total de domínios de elétrons	Arranjo	Domínios ligantes	Domínios não-ligantes	Geometria molecular	Exemplos
5	 Bipiramidal trigonal	5	0	 Bipiramidal trigonal	$\text{PCl}_5$
		4	1	 Gangorra	$\text{SF}_4$
		3	2	 Em T	$\text{ClF}_3$
		2	3	 Linear	$\text{XeF}_2$
6	 Octaédrico	6	0	 Octaédrica	$\text{SF}_6$
		5	1	 Piramidal quadrada	$\text{BrF}_5$
		4	2	 Quadrática plana	$\text{XeF}_4$

### Efeito de pares não-ligantes nos ângulos das ligações

Algumas distorções nos ângulos de moléculas com mesmo arranjo podem ser explicadas pela presença de domínios eletrônicos composto por pares não ligantes. Um par de elétrons ligantes é atraído por ambos os núcleos dos átomos ligados. Em contrapartida, um par não-ligante sofre menor atração pelos núcleos, e com isso o volume de seus domínios de elétrons são maiores se comparados a um par ligante, conforme figura abaixo.

	<p><b>Exemplo:</b></p> <p>As quatro moléculas abaixo apresentam arranjos tetraédricos, contudo diferentes números de pares de elétrons, enquanto a molécula de metano (<math>\text{CH}_4</math>) apresenta apenas domínios com elétrons ligantes, as moléculas de amônia (<math>\text{NH}_3</math>) e água (<math>\text{H}_2\text{O}</math>) apresentam, um e dois pares não-ligantes, respectivamente. A maior repulsão dos pares isolados reduz os ângulos das ligações, conforme representado abaixo.</p>
-------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------



## Resumo – Geometria Molecular

As forças relativas de repulsão seguem a ordem:

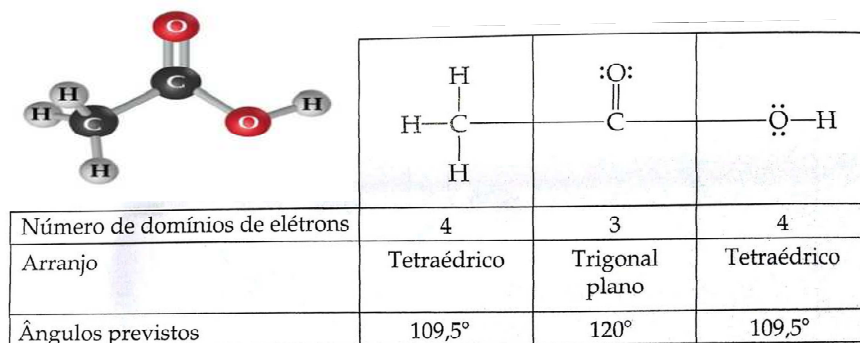


### Determinação de ângulos em moléculas

Frequentemente usamos como exemplos pequenas moléculas, com um único átomo central, porém podemos empregar os mesmos conceitos para moléculas mais complexas.

#### Exemplo:

Considere a molécula de ácido acético ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ), para determinarmos os ângulos das ligações, devemos considerar o arranjo de cada átomo central, como representado abaixo.



**Obs.:** A representação das moléculas frequentemente não mostra os pares de elétrons não-ligantes.

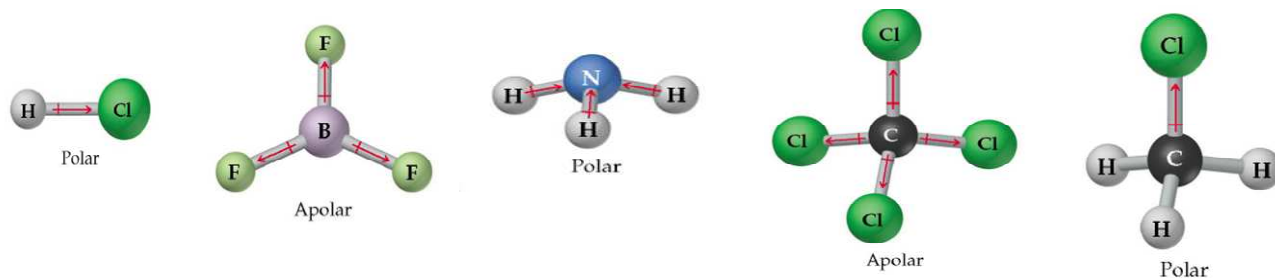
### Polaridade de moléculas

Quando existe uma diferença de **eletronegatividade** entre dois átomos, a ligação entre eles é polar. Contudo, a **polaridade** de uma molécula não pode ser determinada unicamente pela diferença na eletronegatividade dos átomos que a compõe, para a completa determinação da polaridade da molécula é necessário também empregar a geometria molecular. Para moléculas diatômicas, sempre que houver uma diferença de eletronegatividade nos átomos que a compõe, haverá uma maior separação das cargas e um maior **momento de dipolo**, logo a molécula será **polar**. Caso a molécula seja composta por átomos iguais a mesma será **apolar**.

Para uma molécula com mais de dois átomos além do momento de dipolo da ligação, devemos considerar o momento resultante da molécula. Os dipolos de ligação e os momentos de dipolo são grandezas vetoriais, e o dipolo total de uma molécula poliátômica é a soma de seus dipolos de ligação.



#### Exemplos:



### Referências

Esse resumo baseia-se no material bibliográfico dos seguintes livros:

Kotz, J.C. Treichel, P. Química Geral e Reações Químicas. Cengage Learning. 6ª Ed. 2009.

Brown, T.L.; Lemay, H.E.; Bursten, B.E. Química - A Ciência Central. Prentice Hall. 9ª Ed. 2005.