

Semana 19

Estabilidade das Moléculas



Estabilidade das Moléculas

Com as estruturas de Lewis, foi possível entender como se estabelecem as ligações covalentes entre os átomos e a composição química das moléculas. Porém, a fórmula eletrônica não mostra um dos aspectos mais importantes - a forma espacial das moléculas.

As formas espaciais e os tamanhos das moléculas são definidos pelos ângulos e pelas distâncias entre os núcleos dos átomos envolvidos, e juntamente com as interações e a polaridade determinam as propriedades de uma **substância**.

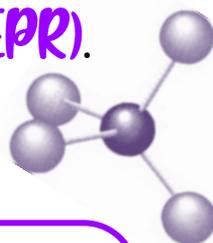


Uma pequena variação na forma ou no tamanho de uma substância, por exemplo, pode aumentar a efetividade de um medicamento ou reduzir seus efeitos colaterais.



Geometria Molecular

Quando ocorre uma ligação química, os átomos formam ângulos entre si, adotando determinada geometria. Existem várias teorias que permitem fazer uma previsão sobre a geometria das moléculas, entretanto, um método confiável é o **modelo de repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência (VSEPR)**.



De acordo com o modelo, os pares de elétrons que ligam os átomos (pares ligantes) e os pares não ligantes se repelem mutuamente e se orientam atingindo o maior distanciamento possível, ou seja, ficam em posições mais afastadas no espaço.



A tabela demonstra, de forma simplificada, como a geometria é definida pelos pares de elétrons ao redor do átomo central:

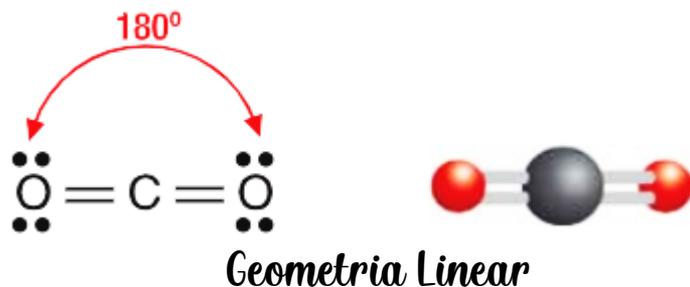
Número de pares ligantes	Número de pares isolados	Número de nuvens eletrônicas	Geometria molecular	Exemplos
2	0	2	 linear	<chem>O=C=O</chem>
$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$	3	$\begin{bmatrix} \text{trigonal plana} \\ \text{angular} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \text{H}-\text{C}=\text{O} \\ \text{O}=\text{S} \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$	4	$\begin{bmatrix} \text{tetraédrica} \\ \text{piramidal} \\ \text{angular} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \text{H}-\text{O} \end{bmatrix}$
5	0	5	 bipirâmide trigonal	<chem>Cl-P-Cl</chem>
$\begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}$	6	$\begin{bmatrix} \text{octaédrica} \\ \text{quadrado planar} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \text{F}-\text{S}-\text{F} \\ \text{F}-\text{Xe}-\text{F} \end{bmatrix}$

A geometria dos pares de elétrons é adotada por todos os elétrons de valência dispostos ao redor do núcleo do átomo central, mas é a geometria molecular que determina o arranjo espacial do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele.

Ex.:

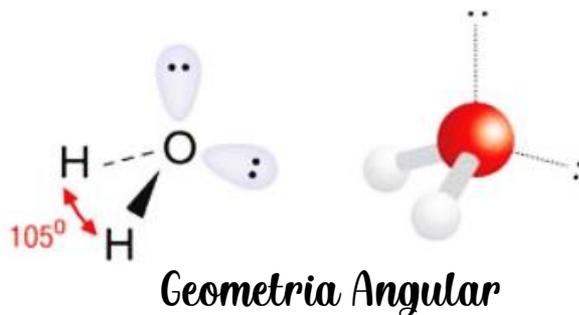
❖ Gás Carbônico (CO₂)

Na molécula de CO₂, o átomo de carbono (central) está ligado a dois átomos de oxigênio por meio de uma ligação dupla, conforme se observa nas fórmulas eletrônica e estrutural. Como o átomo central não apresenta pares de elétrons isolados, pode-se dizer, de acordo com as fórmulas, que há dois pares de elétrons nessa molécula, ou seja, duas nuvens eletrônicas. Portanto, esse composto apresenta **geometria linear**.



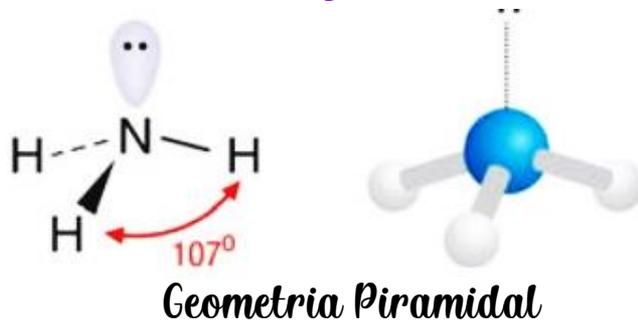
❖ Água (H₂O)

A molécula de água apresenta quatro pares de elétrons, ou seja, quatro nuvens eletrônicas. Duas correspondem ao número de pares de elétrons ligantes e as outras duas, aos pares de elétrons não ligantes (isolados). Neste exemplo, tem-se a **geometria angular**.



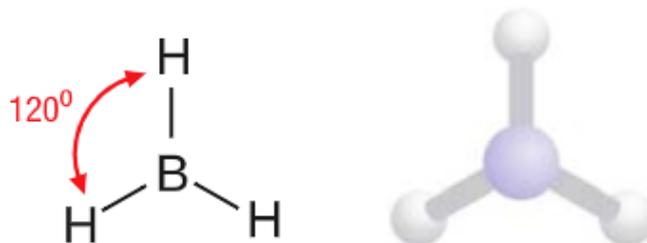
❖ Amônia (NH₃)

Da mesma forma que na molécula de água, na molécula de amônia também há quatro nuvens eletrônicas. A diferença é que, desses quatro pares de elétrons, três são ligantes e um isolado. Por isso, conclui-se que a molécula de NH₃ é representada pela **geometria piramidal**.



❖ Hidreto de Boro (BH_3)

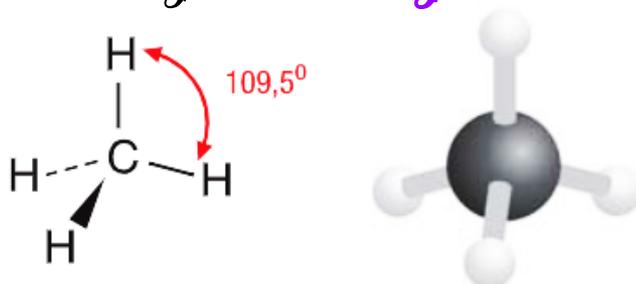
A molécula de BH_3 contém três nuvens eletrônicas que correspondem a três pares de elétrons ligantes. Como não há par de elétrons não ligante, a geometria é definida como **trigonal plana**.



Geometria Trigonal Plana

❖ Metano (CH_4)

Na molécula de metano, o átomo de carbono apresenta quatro ligações covalentes simples em quatro átomos de hidrogênio, sendo uma ligação para cada átomo H. A presença de quatro pares de elétrons ligantes e nenhum isolado ao redor do átomo central justifica a **geometria tetraédrica**.



Geometria Tetraédrica

Os arranjos eletrônicos nas moléculas

Os arranjos eletrônicos nos átomos centrais dos pares de elétrons do metano, da amônia e da água são tetraédricos, pois todos apresentam quatro pares de nuvens eletrônicas. O metano, entretanto, com quatro pares ligantes, apresenta geometria tetraédrica ($109,5^\circ$). A amônia com três pares ligantes e um par não ligante tem geometria piramidal (107°).

A água com dois pares ligantes e dois pares não ligantes apresenta geometria angular (105°). A diminuição do ângulo de ligação nesta série pode ser explicada pelo fato de os pares não ligantes (isolados) terem uma exigência espacial maior que os pares ligantes.