

# 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:

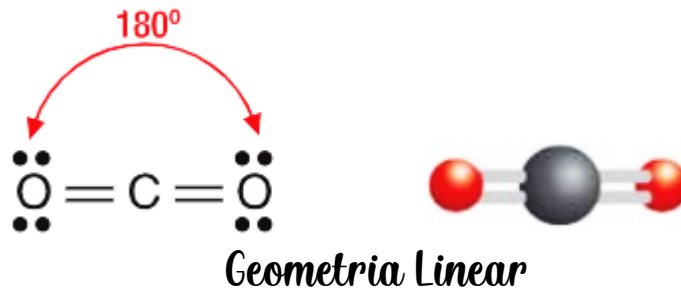
Número de pares ligantes	Número de pares isolados	Número de nuvens eletrônicas	Geometria molecular	Exemplos
2	0	2	 linear	<chem>O=C=O</chem>
$\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$	3	$\begin{bmatrix} \text{trigonal plana} \\ \text{angular} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}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

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.:

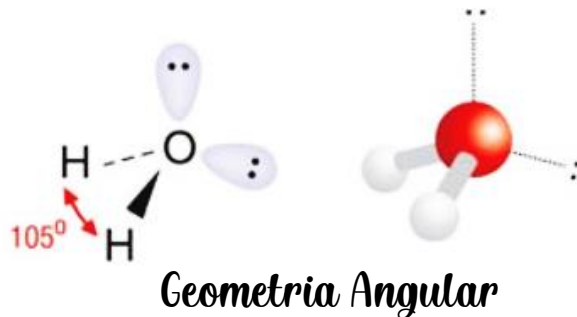
### ❖ Gás Carbônico (CO<sub>2</sub>)

Na molécula de CO<sub>2</sub>, 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**.



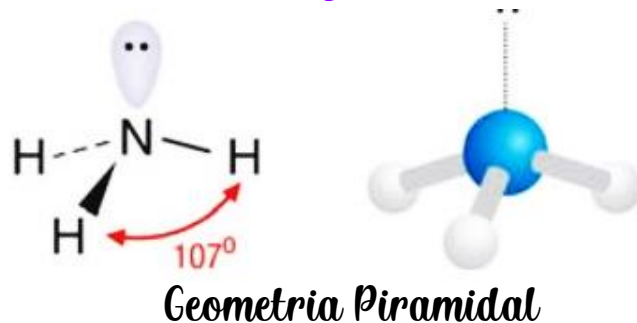
## ❖ Água (H<sub>2</sub>O)

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**.



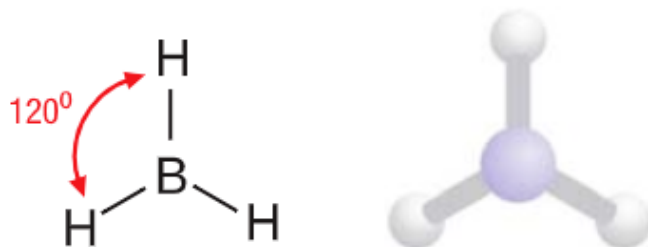
## ❖ Amônia (NH<sub>3</sub>)

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 NH<sub>3</sub> é representada pela **geometria piramidal**.



## ❖ Hidreto de Boro ( $\text{BH}_3$ )

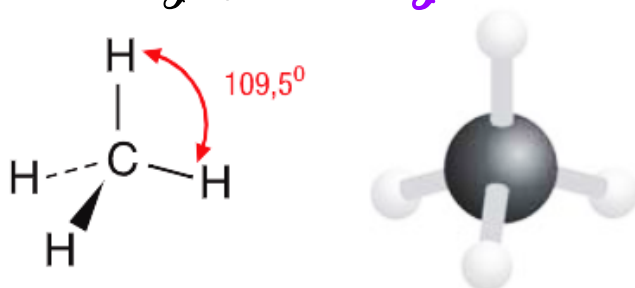
A molécula de  $\text{BH}_3$  contém três nuvens eletrônicas que correspondem a três pares de elétrons ligantes. Como não há par de elétrons não ligante, a geometria é definida como **trigonal plana**.



Geometria Trigonal Plana

## ❖ Metano ( $\text{CH}_4$ )

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 ( $107^\circ$ ).

A água com dois pares ligantes e dois pares não ligantes apresenta geometria angular ( $105^\circ$ ). 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.