

Geometrias Moleculares e Polaridade

T09 - José Pestana

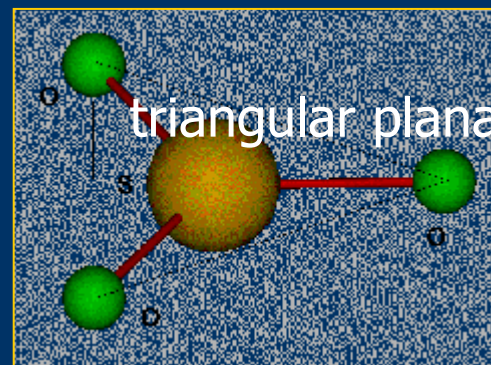
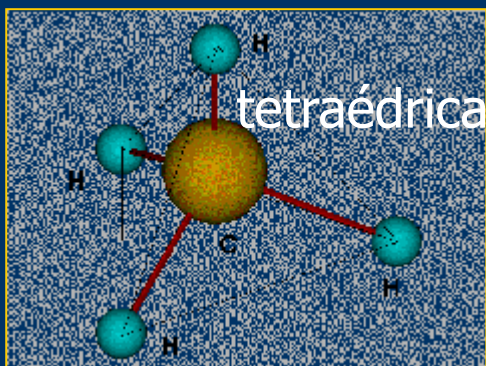
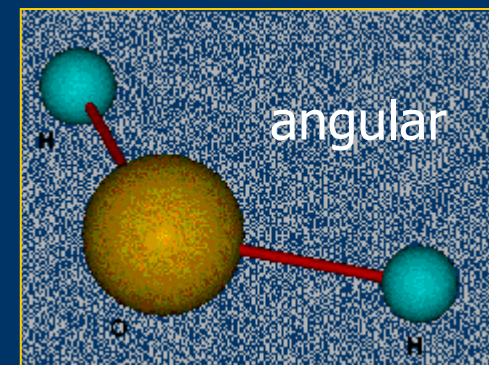
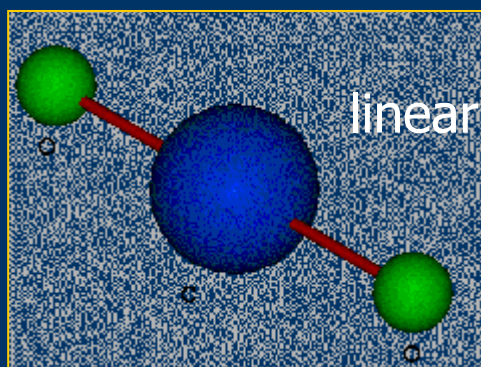
Sumário:

- a) Geometrias moleculares;
- b) Polaridade das moléculas;
- c) Exemplos;
- d) Moléculas polares.

Geometria molecular*

Os **pares de elétrons** que rodeiam o **átomo central** **distribuem-se** no **espaço**, de forma a que a **repulsão** entre eles seja a **menor possível** garantindo, assim, a **maior estabilidade** da **molécula**.

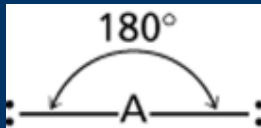
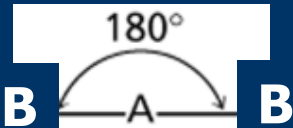
Alguns exemplos:



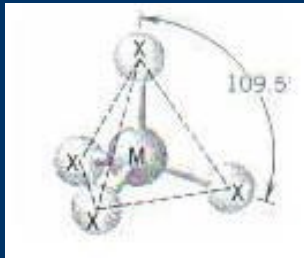
* É o arranjo tridimensional dos átomos em uma molécula. A geometria afeta muitas das suas propriedades físicas e químicas como P.F, P.E. a densidade e o tipo de reações de que a molécula participa.

Modelo de Repulsão dos Pares Electrónicos da Camada de Valência (RPECV)

Permite-nos prever a geometria da molécula a partir da repulsão eletrostática entre pares de electrões (ligados e não ligados).

Classe	N.º de átomos ligados ao átomo central	N.º de pares isolados no átomo central	Disposição pares de electrões	Geometria molecular
AB ₂	2	0	linear 	linear 

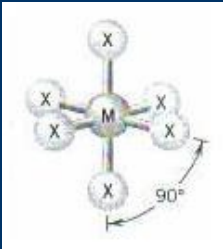
Geometrias moleculares com 4 pares de elétrons em volta do átomo central

Pares elétrons em ligações	Pares elétrons não ligantes	Estrutura	Geometria
4	0		Tetraédrica ; todos os ângulos $109,5^\circ$ (Ex: CH_4)
3	1		Pirâmide trigonal ângulos $107,3^\circ$ (Ex: NH_3)
2	2		Angular ângulo $104,5^\circ$ (Ex: H_2O)

Geometrias moleculares com 5 pares de elétrons em volta do átomo central

Número de pares em ligações	Número de pares não ligantes	Estrutura	Geometria
5	0		Bipirâmide trigonal (Ex: PCl_5)
4	1		Tetraedro irregular ou distorcido (Ex: SF_4)
3	2		Em forma de T (Ex: ClF_3)
2	3		Linear Ângulo 180° (Ex: BeF_2)

Geometrias moleculares com 6 pares de elétrons em volta do átomo central

Número de pares ligantes	Números de pares não ligantes	Estrutura	Geometria
6	0		Octaédrica todos os ângulos com 90° , (Ex: SF_6)
5	1		Pirâmide quadrangular (Ex: BrF_5)
4	2		Quadrangular plana (Ex: CuF_4)

Polaridade das moléculas e geometria molecular

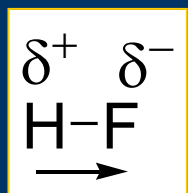
A **Polaridade** das **moléculas** **influencia** as **propriedades físicas** dos **compostos**, como o **Ponto de Fusão** e de **Ebulição**.

Momento dipolar (μ): $\mu = Q \times r$

é definido como o produto da carga Q pela distância entre as cargas r e é uma **medida quantitativa da polaridade de uma ligação química**. Exprime-se em D (*Debye*) = $3,33 \times 10^{-30}$ C m. É uma **grandeza vetorial**.

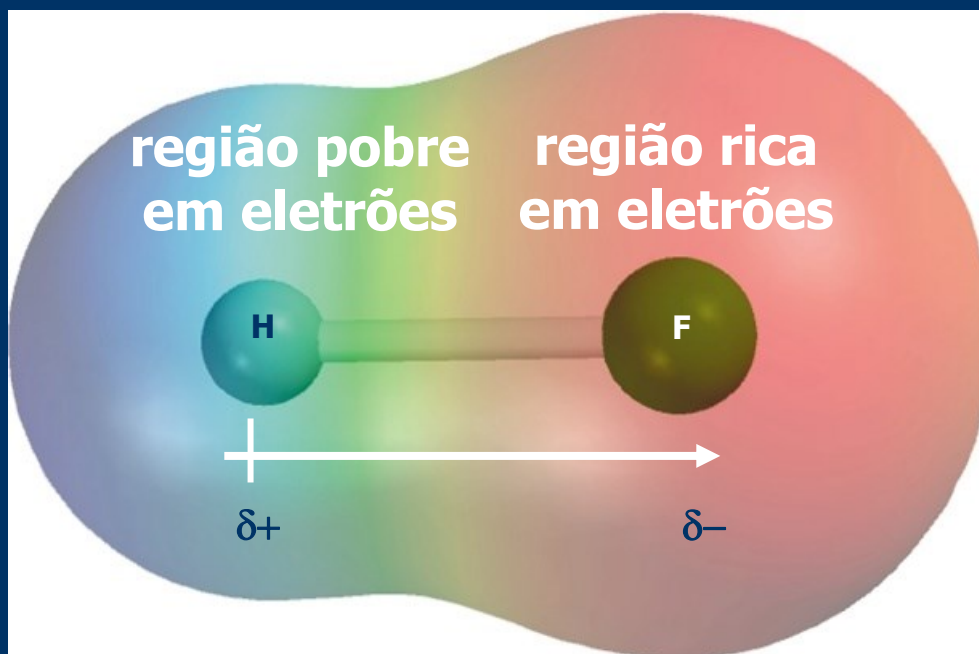
Polaridade das moléculas e geometria molecular

Exemplo: Na molécula de **fluoreto de hidrogénio (HF)** verifica-se um deslocamento de densidade eletrónica do H para o F, pois o **flúor** é **mais eletronegativo** do que o átomo de **H**. Existe uma **separação de cargas** que se pode representar por:



Vetor momento dipolar

A direção do deslocamento da densidade eletrónica é representada por uma seta cruzada



■ Polaridade das moléculas

→ Há moléculas **POLARES**

Exemplos: H_2O , NH_3

→ Há moléculas **APOLARES**

Exemplos: H_2 , CH_4

Polaridade nas moléculas

EM GERAL:

■ *Moléculas diatômicas:*

1- Com átomos do **mesmo** elemento são **apolares**, porque não têm momentos dipolo.

Exemplo: F_2

2- Com átomos de **diferentes** elementos são **polares**, têm momentos dipolo.

Exemplo: HF

■ *Moléculas poliatômicas (3 ou mais átomos)- a sua polaridade depende:*

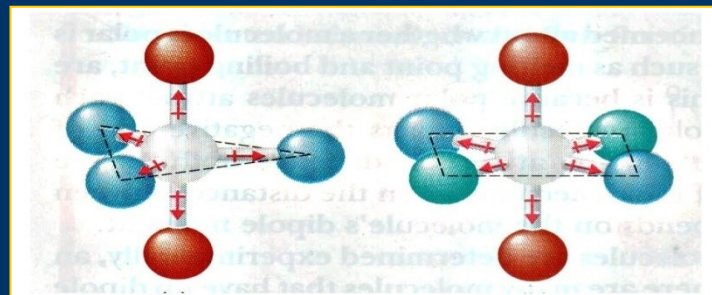
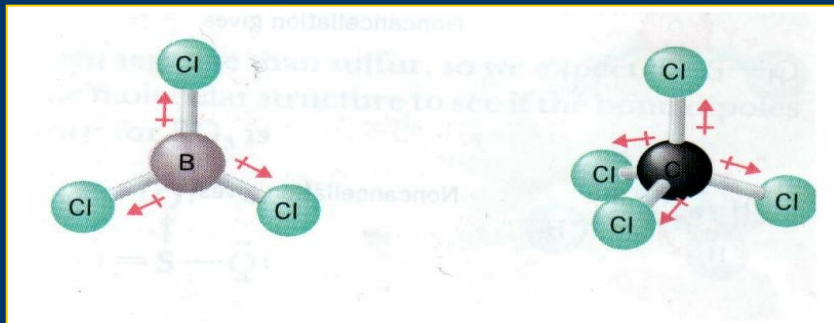
1- Polaridade das ligações

2- Geometria molecular

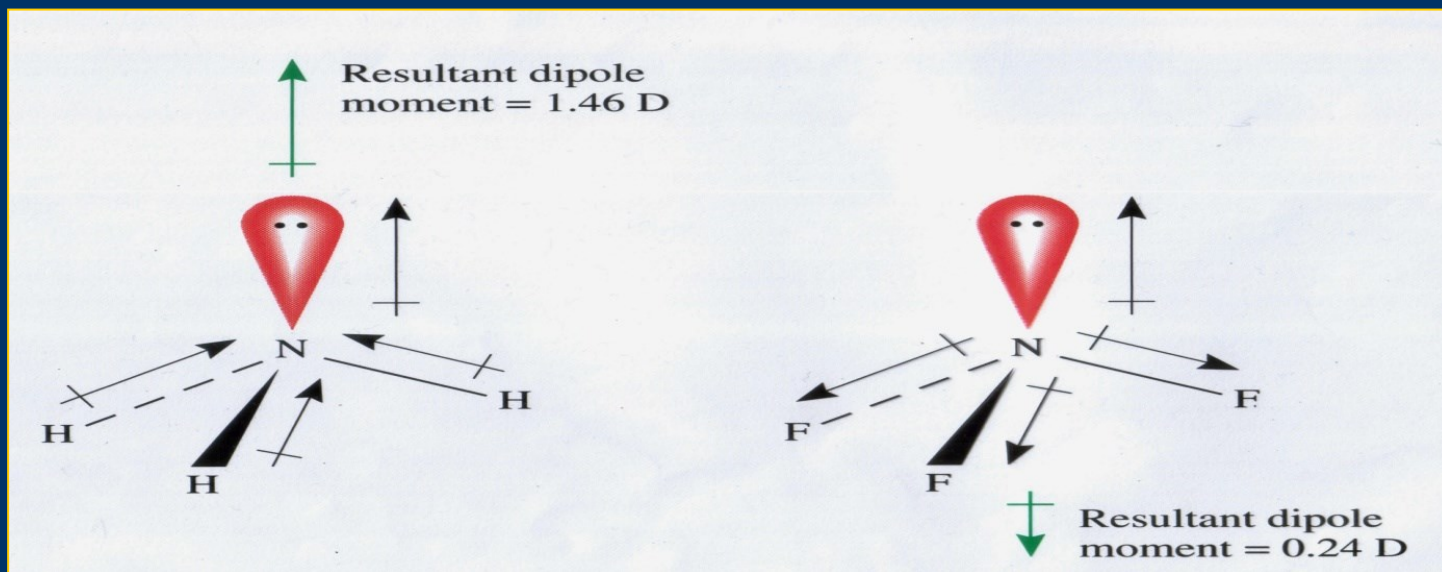
Moléculas apolares

Exemplos de **moléculas poliatômicas** com **ligações polares**, mas com **geometrias** que conduzem a um momento dipolar resultante **zero**, logo **apolares**, são o **BeCl₂**, **BCl₃** e **CCl₄**.

Apontam em direções opostas, a sua soma ou o momento de dipolo resultante será zero.

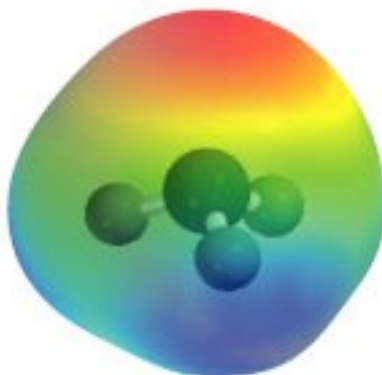
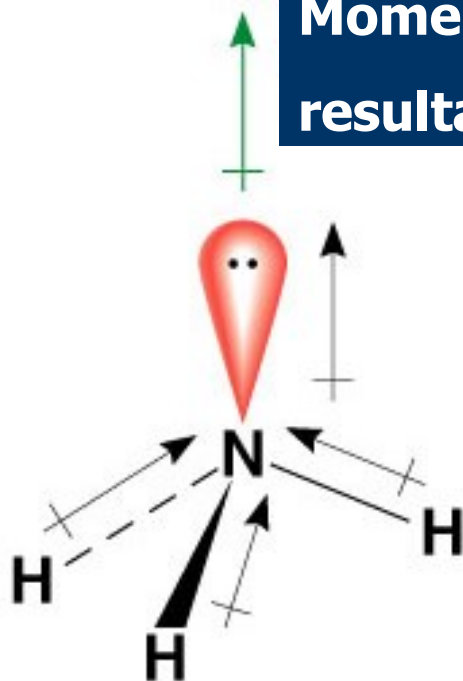


Moléculas polares

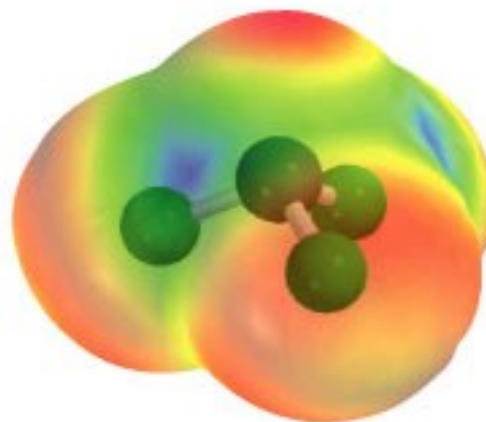
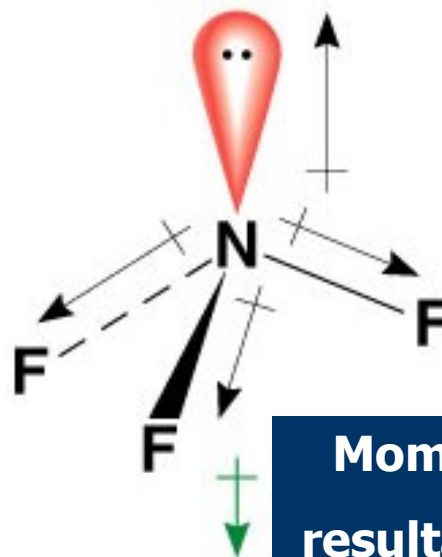


Em ambos os casos, o átomo central de N possui um par isolado cujo "momento de dipolo de ligação" aponta na direção oposta a de N. N é mais eletronegativo que o H e que o F é mais eletronegativo que N. O deslocamento da densidade eletrônica em NH_3 verifica-se na direção de N, o que vai contribuir para o maior momento de dipolo da molécula. Já os momentos das ligações NF estão em direção oposta a N e, no seu conjunto, sobrepõem-se à contribuição do par isolado para o momento de dipolo. Logo, o momento de dipolo resultante em NH_3 é maior que em NF_3 .

**Momento dipolar
resultante = 1,46 D**

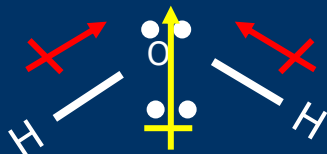


**Momento dipolar
resultante = 0,24 D**



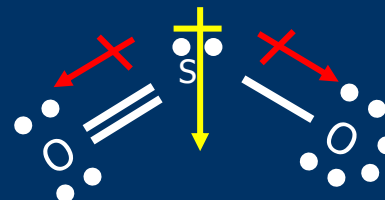
Quais das seguintes moléculas tem momento dipolar?

H_2O , CO_2 , SO_2 e CH_4



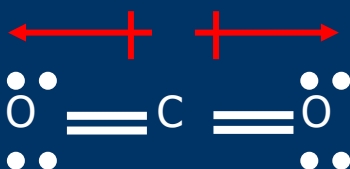
momento dipolar

molécula polar



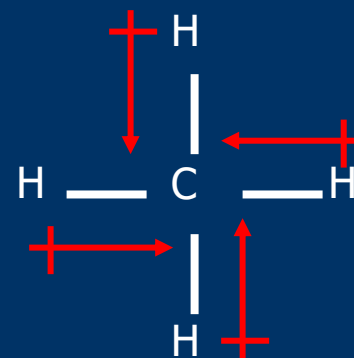
momento dipolar

molécula polar



sem momento dipolar

molécula apolar



sem momento dipolar

molécula apolar

Momentos Dipolares de Algumas Moléculas Polares

Molécula	Geometria	Momento Dipolar (D)
HF	Linear	1,92
HCl	Linear	1,08
HBr	Linear	0,78
HI	Linear	0,38
H ₂ O	Angular	1,87
H ₂ S	Angular	1,10
NH ₃	Piramidal trigonal	1,46
SO ₂	Angular	1,60

"O semelhante dissolve o semelhante"

A água (POLAR) é imiscível com o hexano (APOLAR).

A água (POLAR) é miscível com o amoníaco (POLAR).

A água (POLAR) é imiscível com o tetracloreto de carbono (APOLAR).

O tetracloreto de carbono (APOLAR) é miscível com o hexano (APOLAR).

... está relacionado com o tipo das forças que se estabelecem entre as moléculas - forças intermoleculares