

Geometria Molecular ou a Forma das Moléculas

Margarida Salema

Se uma molécula é diatómica, não é difícil prever a sua geometria: ela é, necessariamente, linear. Mas se uma molécula se compõe de 3 ou mais átomos, a geometria molecular, ou seja, o arranjo espacial dos átomos na molécula, já não é imediatamente previsível. Por exemplo, pode ser mais ou menos sabido que a molécula da água, H_2O , é angular e não linear; ou que na molécula do metano, CH_4 , os quatro hidrogénios não se dispõem em quadrado em volta do carbono, mas sim segundo a forma de um tetraedro. Mas qual é a geometria da molécula de BeH_2 , hidreto de berílio? Ou, na molécula de XeF_4 , qual será a forma como os quatro flúores se arrumam em volta do xénon? E qual a geometria da espécie I_3^- ?

Quem assistir a esta conversa, no fim deverá saber responder a este tipo de perguntas e ser capaz de prever a geometria de qualquer molécula, com base em que o arranjo dos átomos numa molécula será sempre determinado pelo facto de que a energia da molécula deve ser minimizada, isto é, a geometria adoptada será aquela que torna a molécula mais estável. A ferramenta que nos vai permitir prever a geometria de uma molécula, e que será objecto desta palestra, chama-se Teoria da Repulsão dos Pares Electrónicos da Camada de Valência (TRPECV): é um modelo muito simples, que será explicado e por fim aplicado a diferentes exemplos.

