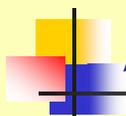


Química Orgânica

Teoria Estrutural



Algumas configurações de e⁻

Element	Atomic number Z	Number of electrons in indicated orbital					
		1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	3s
Hydrogen	1	1					
Helium	2	2					
Lithium	3	2	1				
Beryllium	4	2	2				
Boron	5	2	2	1			
Carbon	6	2	2	1	1		
Nitrogen	7	2	2	1	1	1	
Oxygen	8	2	2	2	1	1	
Fluorine	9	2	2	2	2	1	
Neon	10	2	2	2	2	2	
Sodium	11	2	2	2	2	2	1
Magnesium	12	2	2	2	2	2	2

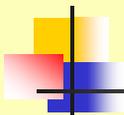
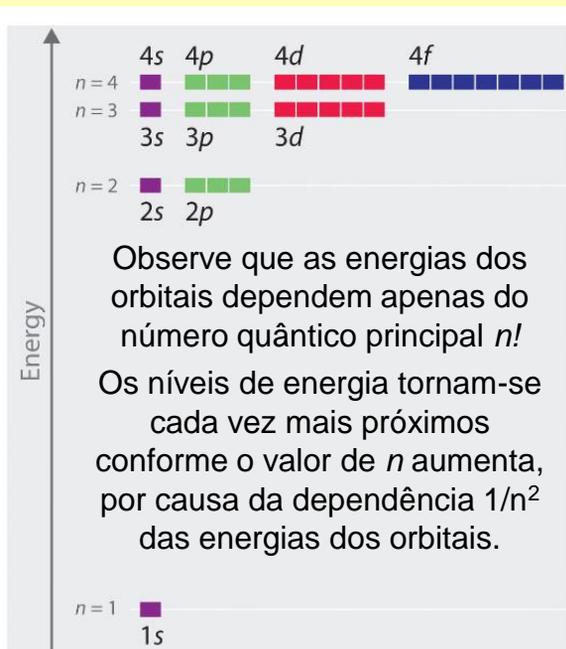


Diagrama de nível para comparação das energias de orbitais.



Orbitais Moleculares formados por elétrons p

- Orbitais moleculares também são formados a partir de orbitais atômicos do tipo p.

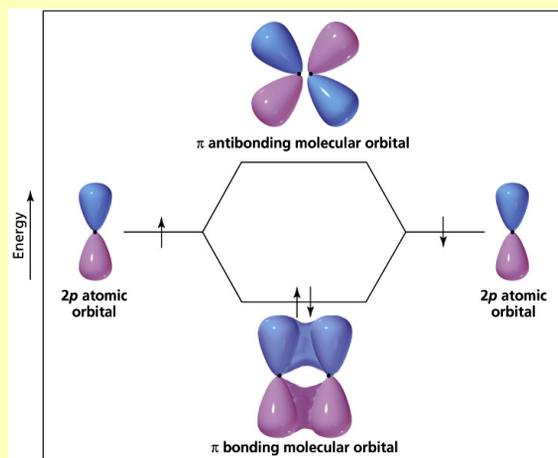
•Ligação sigma (σ)



•Ligação pi (π)

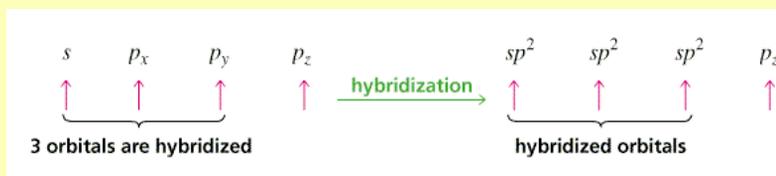


A sobreposição lateral de orbitais atômicos p leva à formação de ligações π



Hibridização sp^2 no Eteno

- Os dois carbonos do eteno ligam-se através de uma ligação dupla C=C.
- Cada carbono liga-se a 2 átomos de hidrogênio.
- Para ligar-se somente a 3 outros átomos, cada átomo de C do eteno hibridiza 3 orbitais (e não 4, como etano) → hibridização sp^2 .



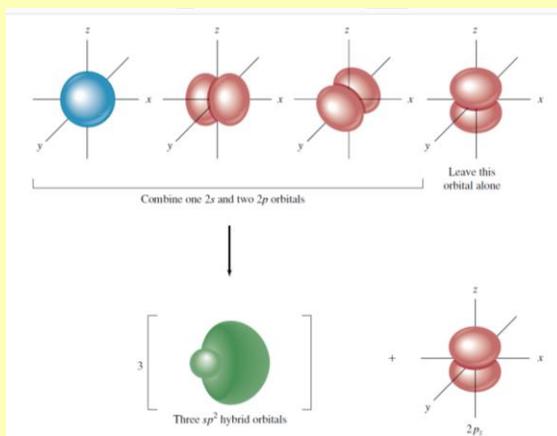
Hibridização sp^2

4 orbitais atômicos \rightarrow 3 orbitais híbridos equivalentes + 1 orbital p não hibridizado

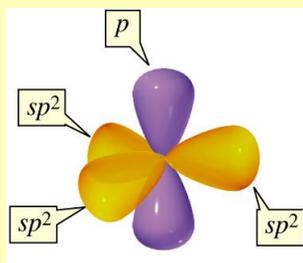
$$s + p_x + p_y + p_z \rightarrow 3 sp^2 + 1 p = 3 sp^2 + 1 p$$

Formato = trigonal plano (ângulo entre $sp^2 = 120^\circ$)

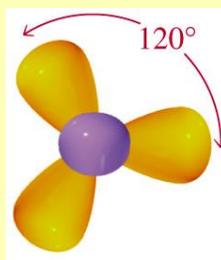
O orbital p não hibridizado permanece perpendicular ao plano dos orbitais sp^2 hibridizados



Hibridização sp^2 no Eteno



visão lateral

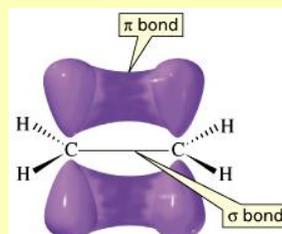
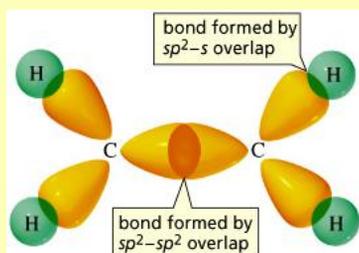


visão superior

- Os três orbitais híbridos sp^2 ficam em um plano, formando ângulos de 120° entre si.
- Tais carbonos são chamados “trigonais planos”

Hibridização sp^2 no Eteno

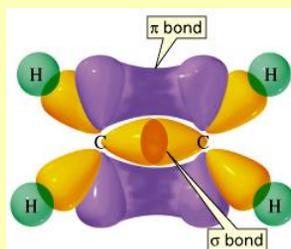
- A ligação C-C resultante da sobreposição entre o orbital sp^2 de um dos carbonos com o orbital sp^2 do outro carbono resulta em uma ligação sigma (σ).



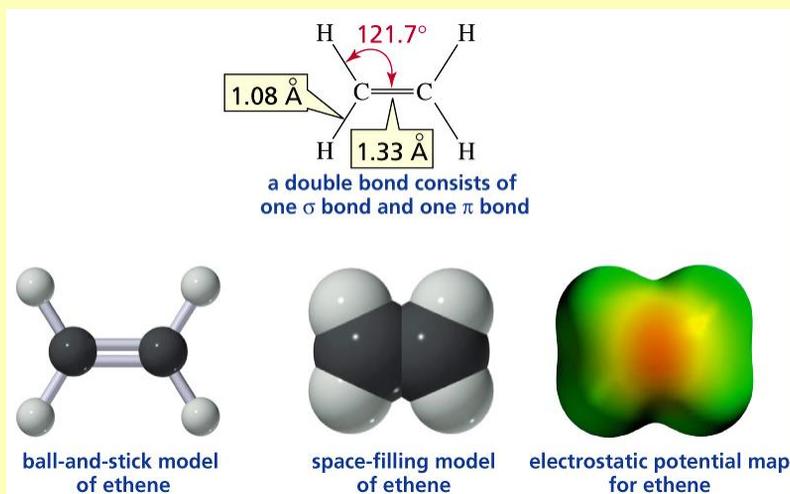
- Uma segunda ligação é formada entre os dois átomos de C, através da sobreposição lateral dos orbitais p "puros", não hibridizados
- A ligação resultante da sobreposição dos orbitais p é chamada ligação pi (π).

Hibridização sp^2 no Eteno

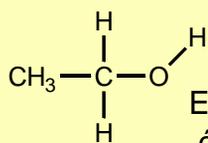
- Para formar a ligação π , os orbitais p devem estar paralelos um aos outro.
- Como os hidrogênios irão se ligar aos orbitais sp^2 , os hidrogênios estarão todos no mesmo plano.
- A ligação dupla é rígida, e não permite rotação entre os dois átomos de carbono.



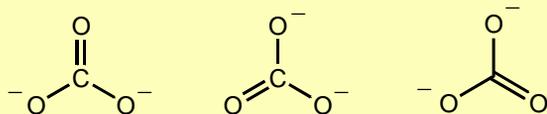
Hibridização sp^2 no Eteno



Fórmulas estruturais e Ressonância



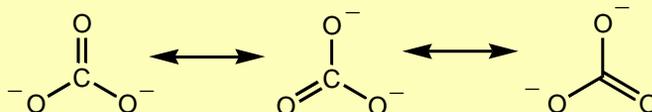
Etanol: apenas 1 estrutura de Pauling (e de Lewis) é possível



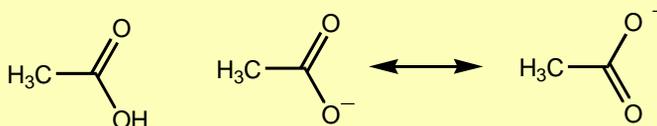
Ânion carbonato (CO_3^{2-}) \rightarrow ao menos três representações possíveis

Qual delas é a melhor? Na verdade, **NENHUMA DELAS!!**

Fórmulas estruturais e conjugação (ressonância)



O ânion carbonato apresenta 3 **formas de ressonância** que são idênticas entre si.



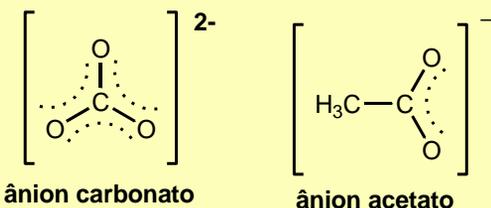
ácido acético

ânion acetato

Ácido acético → uma única fórmula **relevante** de Pauling

Ânion acetato → duas **formas de ressonância**

Fórmulas estruturais ...



ânion carbonato

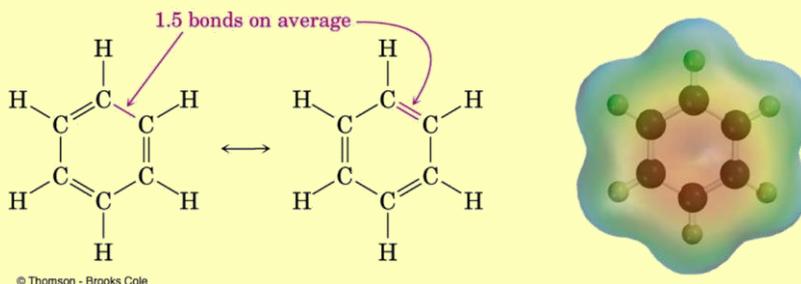
ânion acetato

Tanto o ânion carbonato como o ânion acetato apresentam **elétrons deslocalizados**, que podem estar em diferentes ligações na molécula.

As estruturas possíveis do ânion carbonato e do ânion acetato são chamadas de **híbridos (misturas) de ressonância**.

Fórmulas estruturais e ressonância

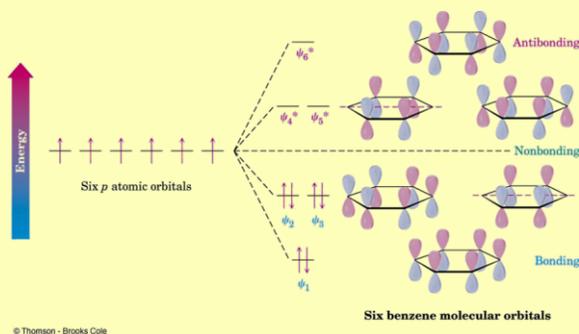
- O benzeno, C_6H_6 , é o melhor exemplo de moléculas que apresentam elétrons deslocalizados
- Estrutura do benzeno \rightarrow ordem de ligação = 1.5



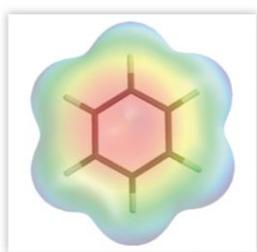
- Os orbitais p se interpenetram todos ao longo do anel. Não existem duplas ligações localizadas (em posições fixas).

Fórmulas estruturais e Ressonância

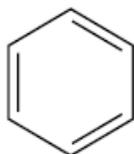
- O benzeno, C_6H_6 , é o melhor exemplo de moléculas que apresentam elétrons deslocalizados
- Estrutura do benzeno \rightarrow ordem de ligação = 1.5



- Os orbitais p se interpenetram todos ao longo do anel. Não existem duplas ligações localizadas (em posições fixas).



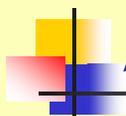
Compostos aromáticos: Benzeno



Benzeno: parent compound of a large family of organic substances

		pKa
Benzene	 / 	43
Propene	$\text{H}_2\text{C}=\underset{\text{H}}{\text{C}}-\text{CH}_3$ / $\text{H}_2\text{C}=\underset{\text{H}}{\text{C}}-\overset{-}{\text{C}}\text{H}_2$	43

17



Alcenos & Arenos

Organic Chemistry 
AL Chemistry

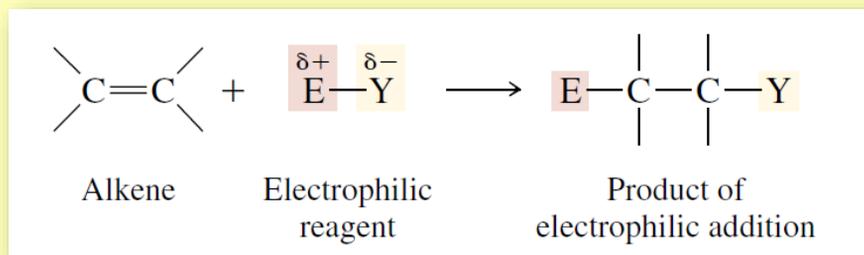
Alkene and Arene

Aromatic Alkene

C. Y. Yeung, 06/07

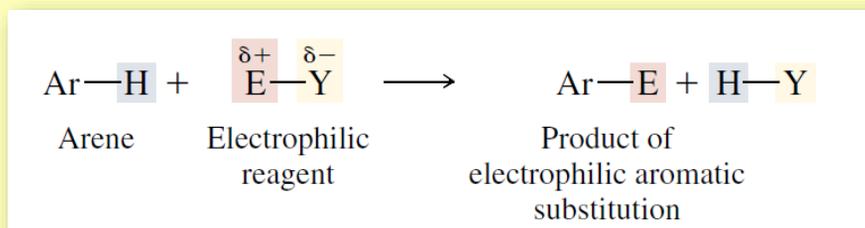
18

Reagentes eletrofílicos são adicionados a alcenos



19

Em arenos, a substituição é observada ao invés da adição



**Substituição Eletrofílica Aromática (S_{EAr}):
Um dos processos fundamentais em QO**

Hughes–Ingold symbol: S_{EAr} 20