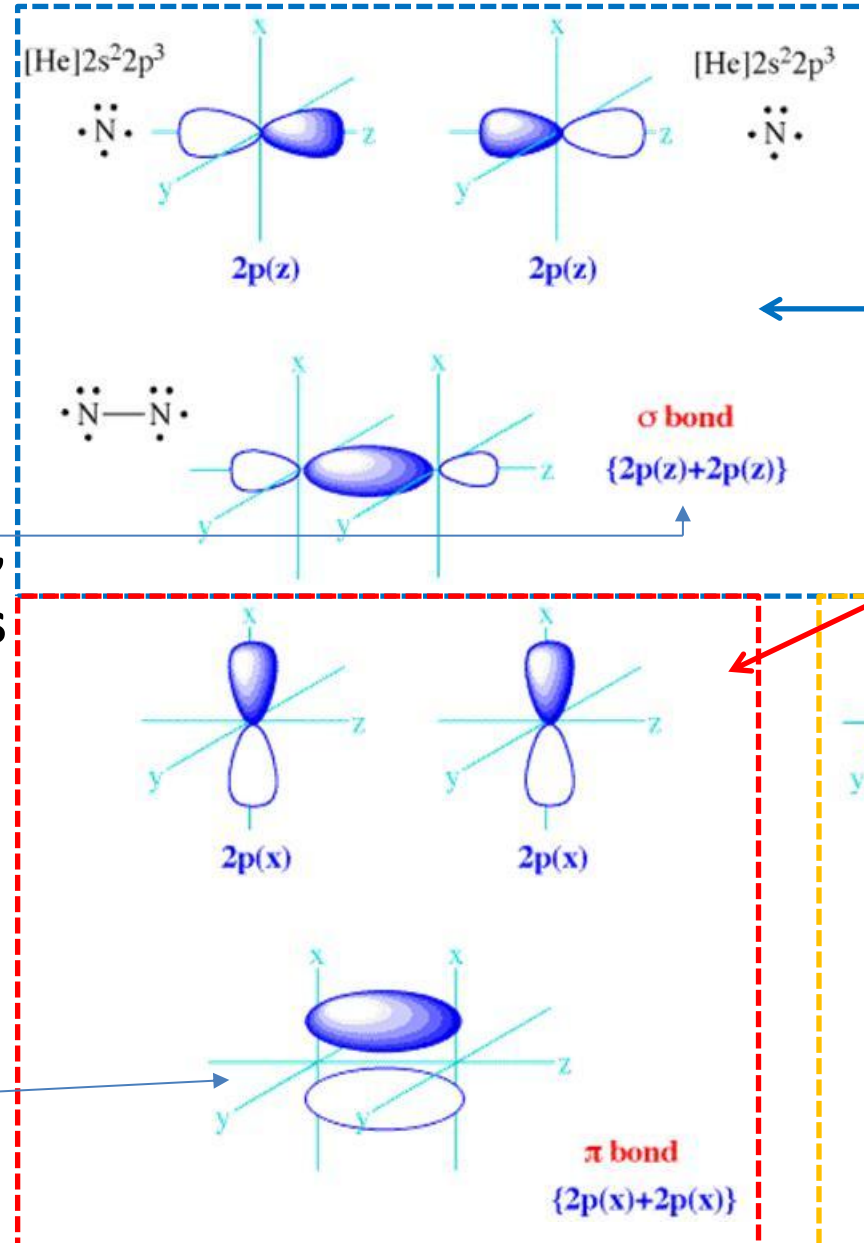


Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

ligações π

A molécula de N_2
A sobreposição frontal dos orbitais da origem a uma ligação Sigma (σ), mas há mais duas ligações com sobreposição lateral dos orbitais atômicos dando origem a ligações Pi (π)



Distribuição de elétrons no Nitrogênio:

$1s^2$

$2s^2$

$2p^3$

Orbitais envolvidos nas ligações da molécula de N₂

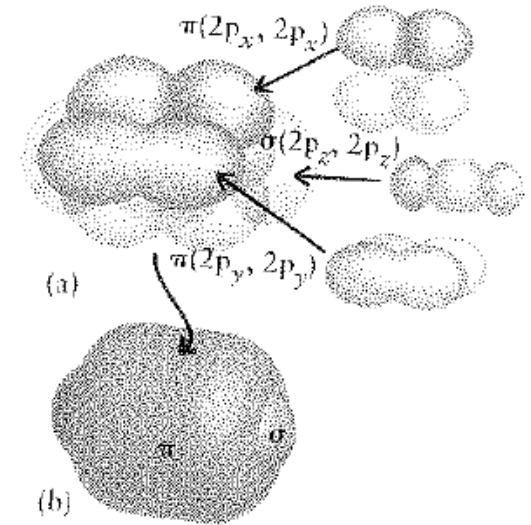
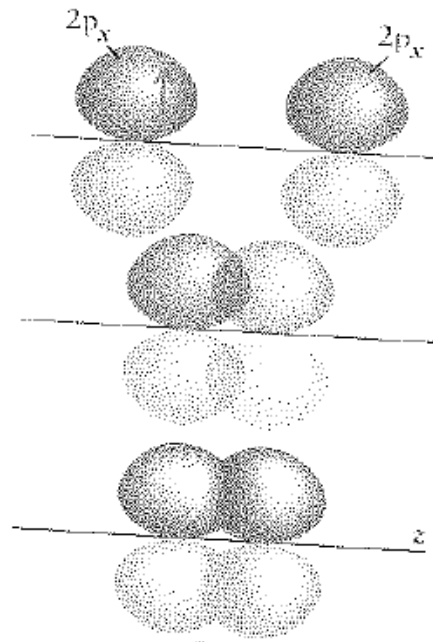
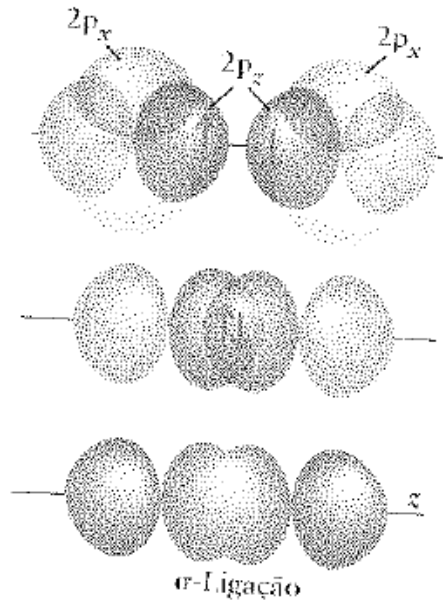


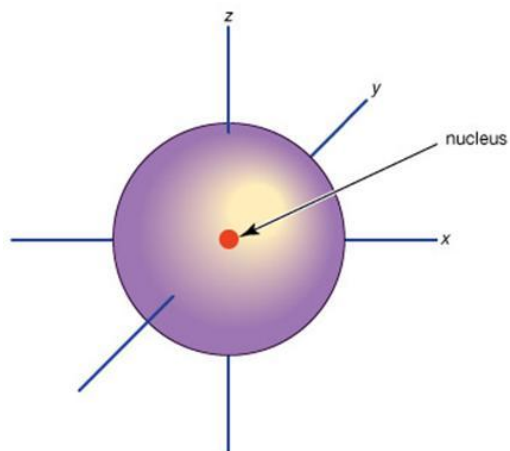
FIGURA 3.10 Uma ligação σ forma-se pelo emparelhamento de spins de elétrons...

Como deve ser a estrutura da molécula de eteno (C_2H_4)?

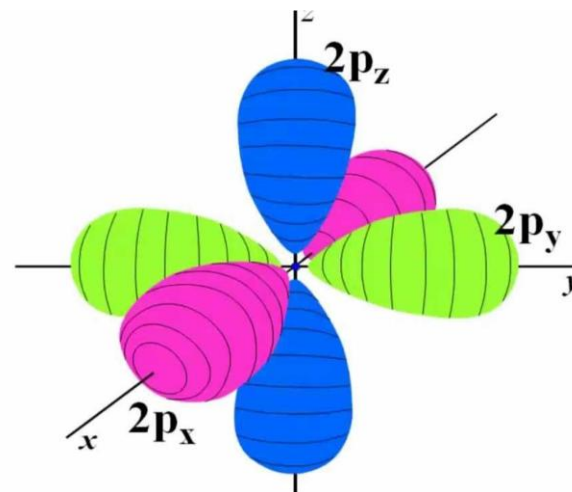
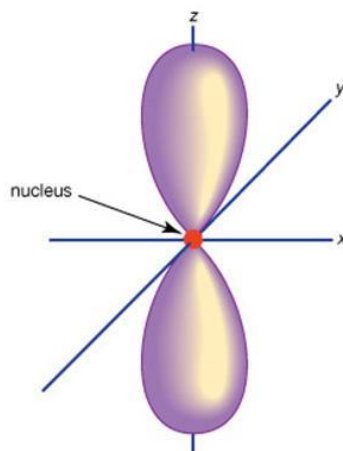
Teoria da ligação de valência - *recaptulando*

Pense: como podemos explicar o fato do carbono realizar 4 ligações em todas as moléculas em que ele ocorre

Recordando informações sobre os orbitais atômicos >> a base para a teoria de ligação de valência



© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.



3 orbitais atômicos p
idênticos, separados
a 90°

Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

Retornando à molécula de metano (CH_4)

Distribuição de elétrons no Carbono:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 6.

Número atômico 6 $\leftrightarrow$ 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

$1s^2$

$2s^2$ $2p^2$ (4 elétrons na camada de valência)

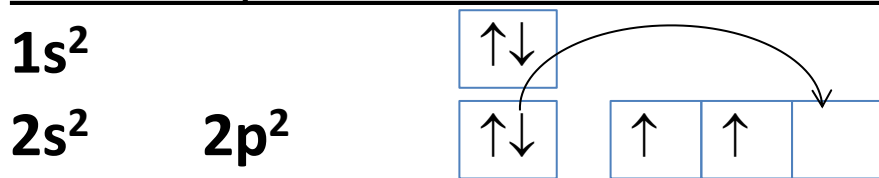
Porque assumimos que os 4 elétrons da camada de valência são iguais se eles estão em orbitais atômicos diferentes?

Note ainda que o orbital $2s$ está completo e não demandaria formar uma ligação química para atingir a máxima estabilidade

Promoção de elétrons e hibridação de orbitais

A molécula de Metano

Distribuição de elétrons no Carbono:



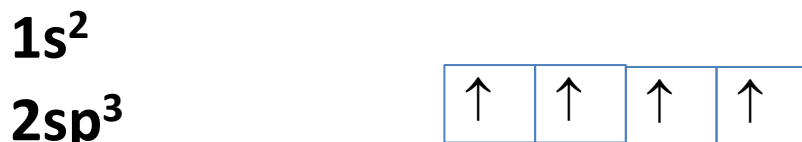
C no estado fundamental
a diferença entre os níveis de energia dos orbitais 2s e 2p é pequena >> a promoção do elétron 2s ocorre facilmente

Distribuição de elétrons no Carbono:



promoção de 1 elétron 2s para 2p

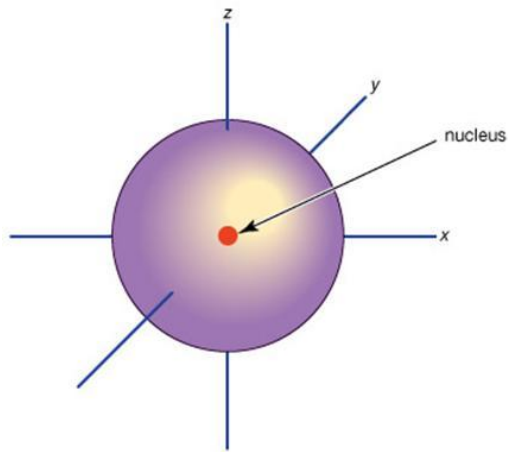
Distribuição de elétrons no Carbono hibridado sp^3 :



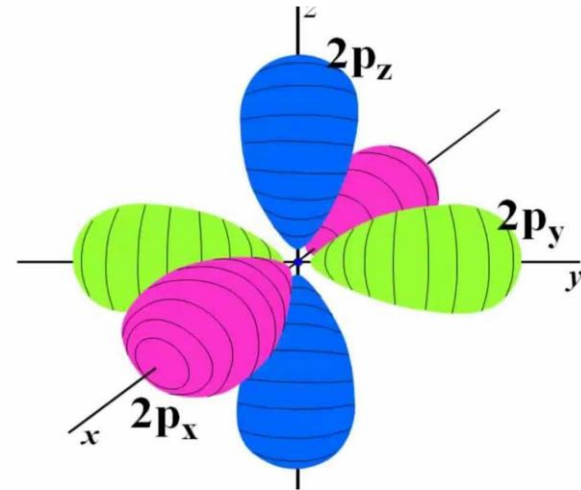
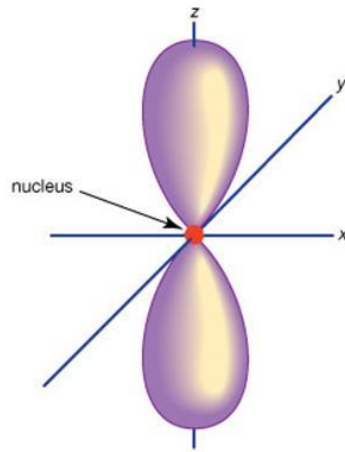
4 orbitais híbridos sp^3 idênticos

Pense: qual a melhor forma de separar estes orbitais no espaço?

Densidade eletrônica em orbitais atômicos s, p e híbrido sp^3



© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.

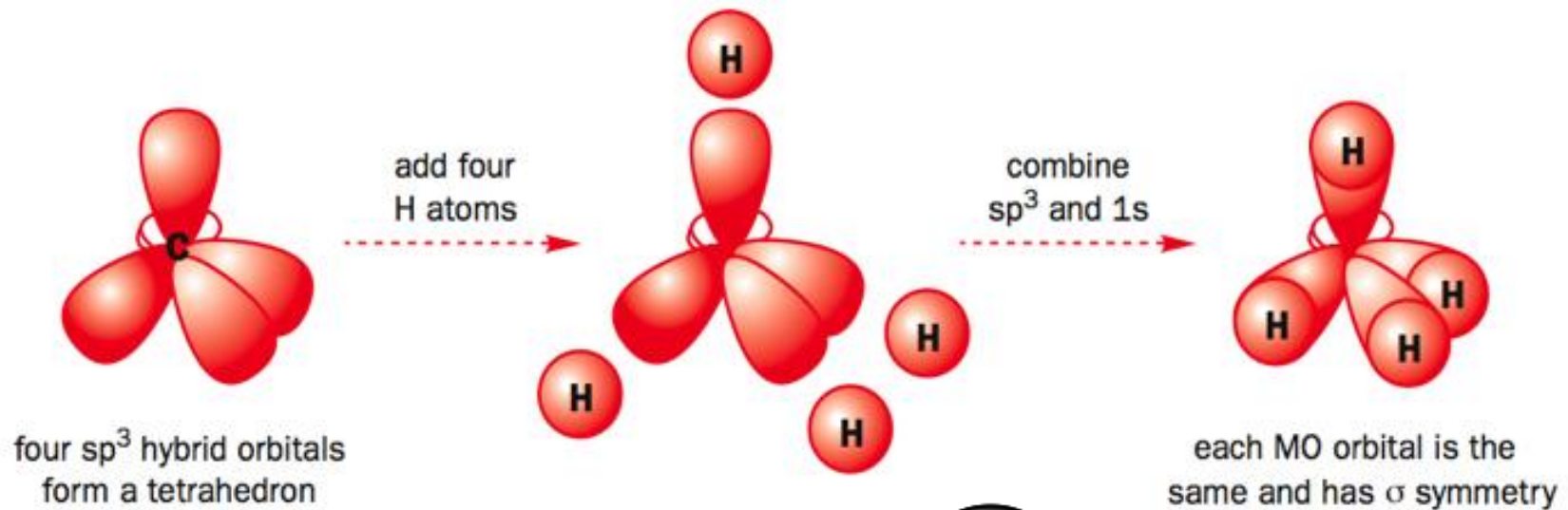


3 orbitais atômicos p
idênticos, separados
a 90°

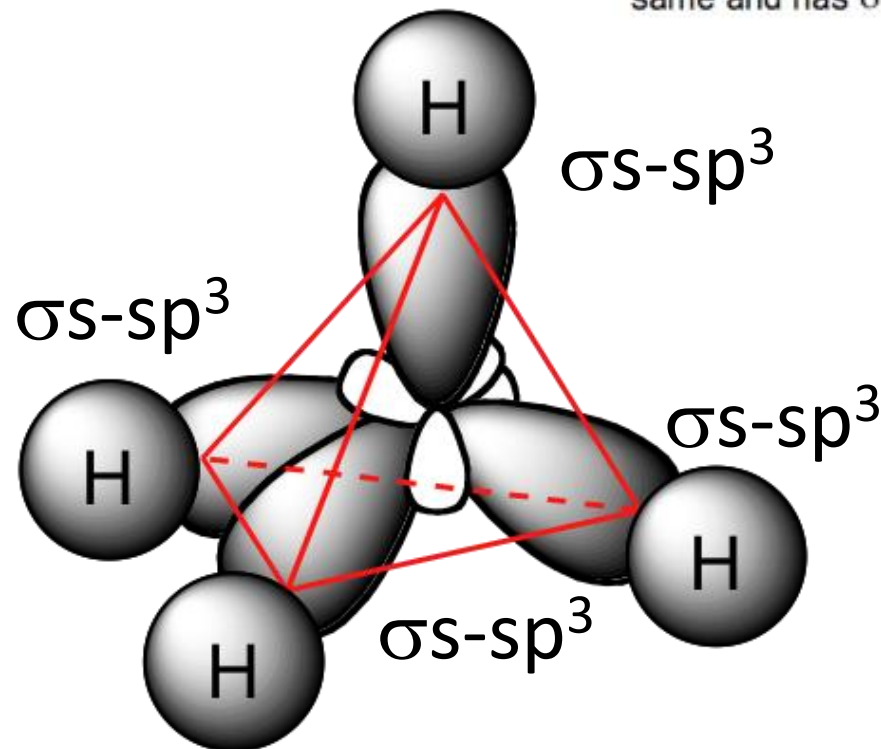


4 orbitais híbridos
 sp^3 idênticos

A molécula de Metano: ilustrações tridimensionais



4 ligações
idênticas $\sigma s-sp^3$



Ligações π e deslocalização de elétrons

As moléculas do eteno e do benzeno

Eteno (C_2H_4) - *Pense: quais devem ser as ligações no eteno?*
(use a regra do octeto sem receio)

Distribuição de elétrons no Carbono:

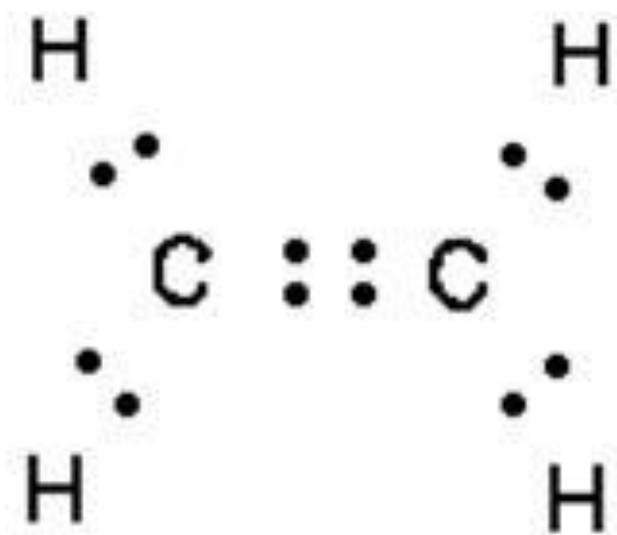
$1s^2$

$2s^1$

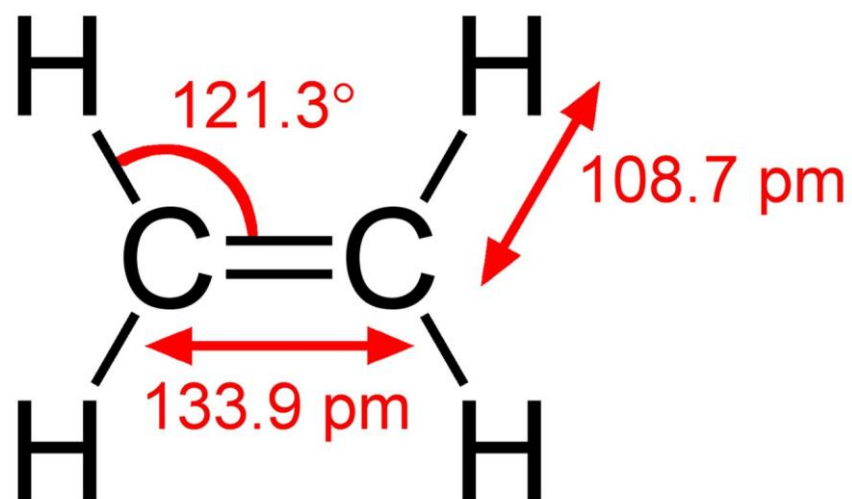
$2p^3$



*Como adaptamos a teoria de ligação de valência? >>
O número de átomos envolvidos exige imaginar que há uma ligação dupla entre os Carbonos*



octeto



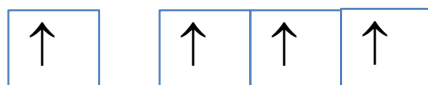
Máx. separação elétrons de valência

Distribuição de elétrons no **Carbono**:

1s²

2s¹

2p³

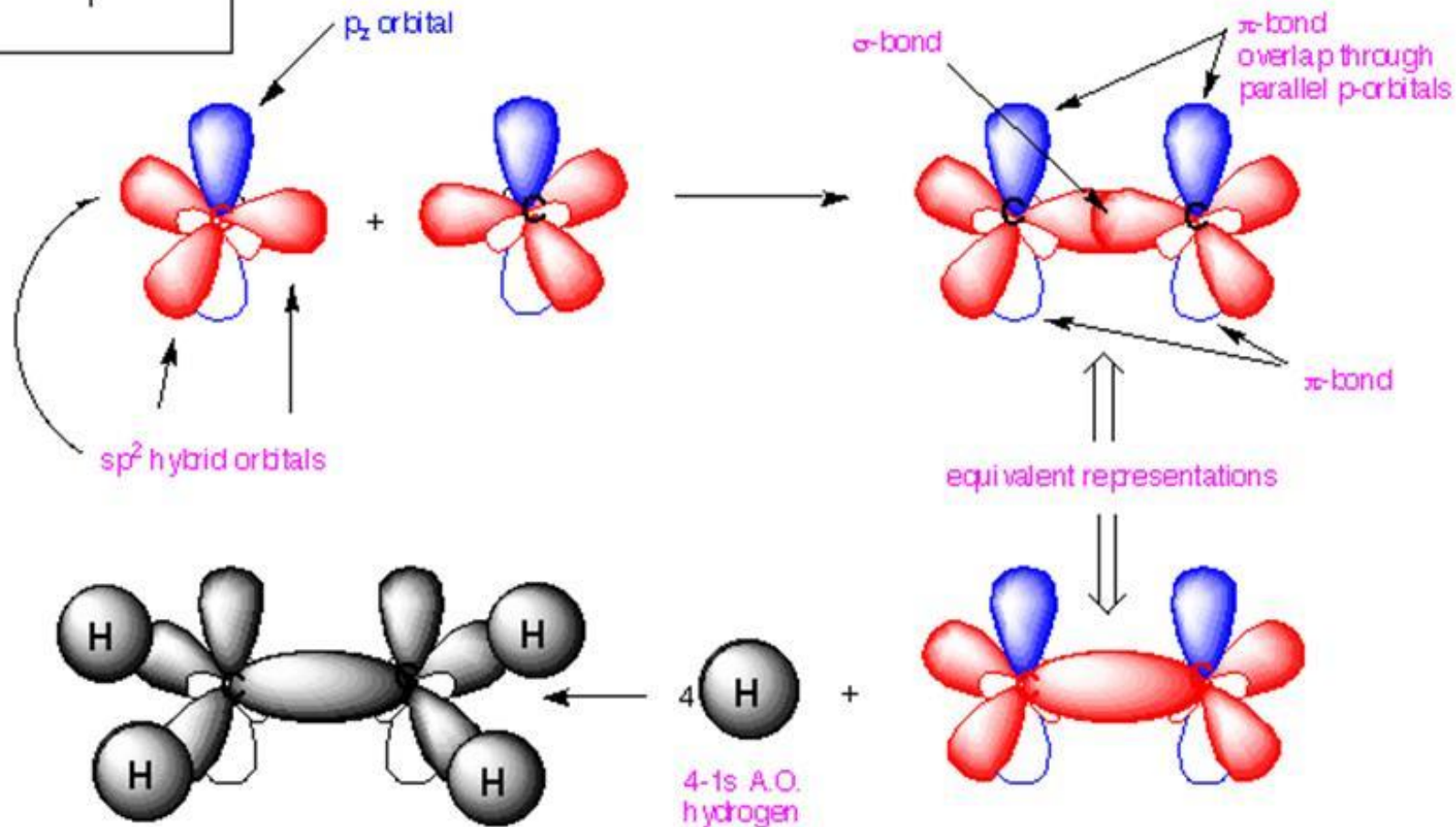
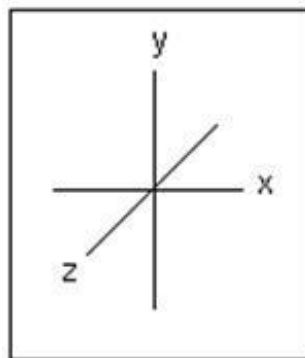


sp²

p ("puro" para a ligação π)

Ligação de valência - hibridação

Hybridization of Ethylene

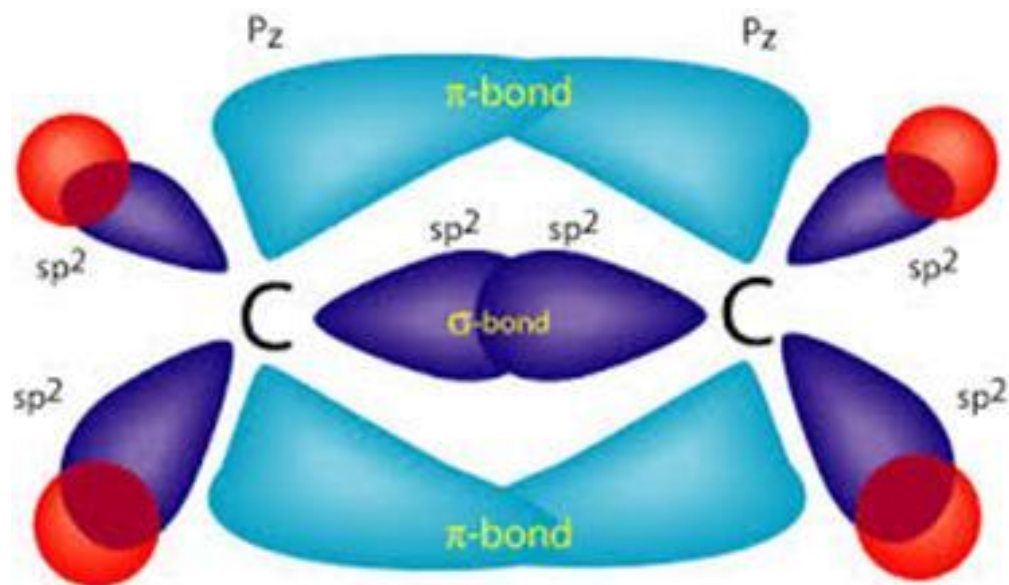
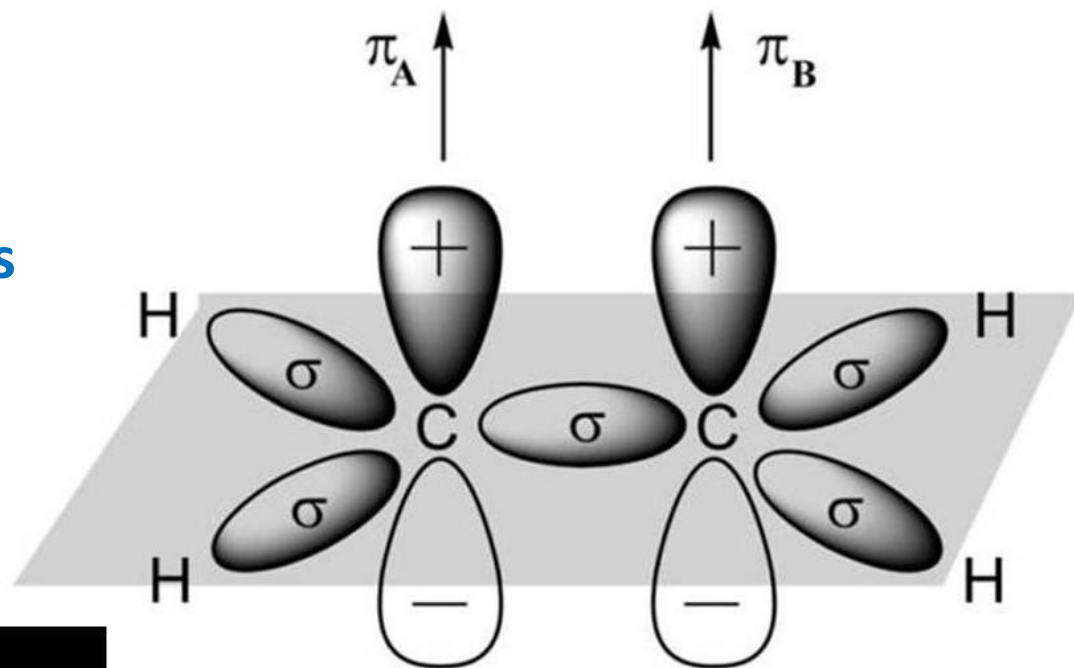
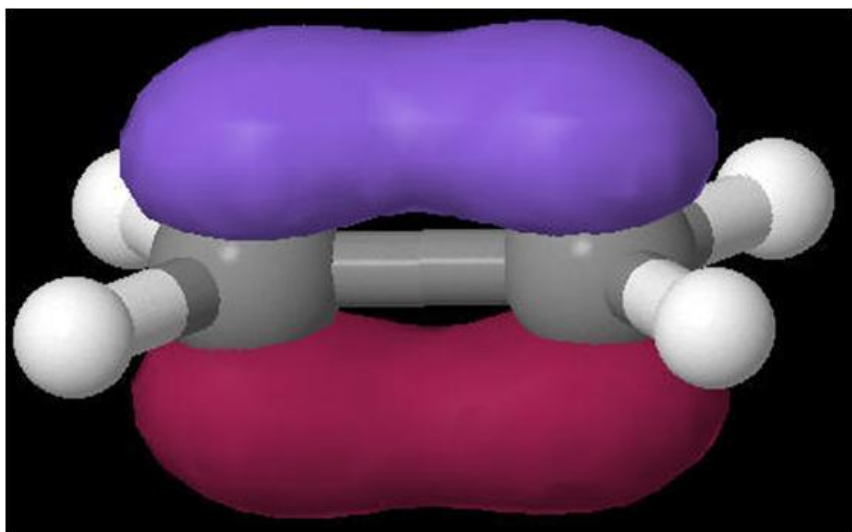


ethylene - a planar molecule

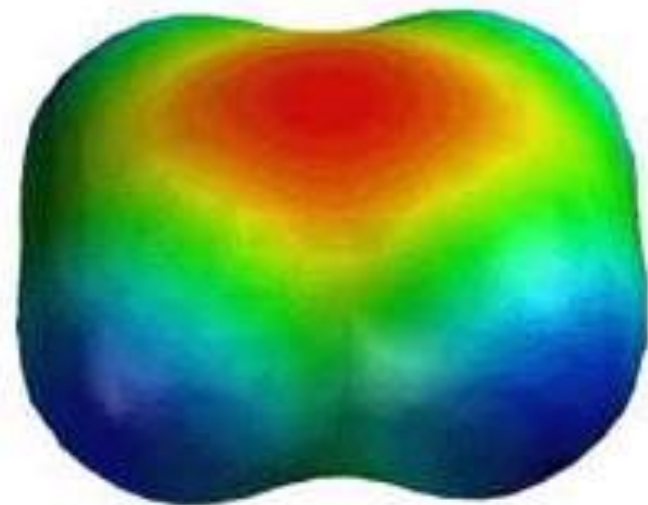
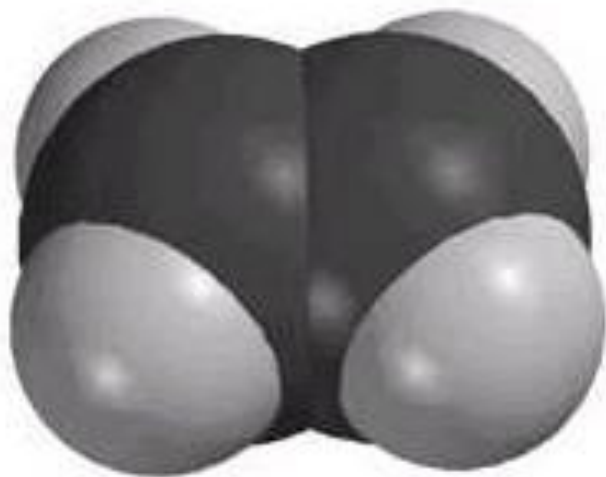
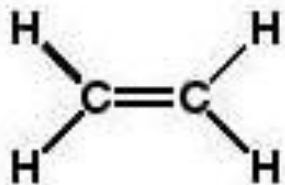
CC bond - 1.33 Å, 152 kcal/mol (p-bond ~ 54 kcal/mol)

CH bond - 1.076 Å, 107 kcal/mol

A molécula de Eteno: ilustrações tridimensionais



"Heat map" calculado para a densidade eletrônica



Elétrons de ligações π permanecem **mais longe do eixo central** entre os átomos que formam também uma ligação σ . Por isso, são mais **fracamente atraídos pelos núcleos dos átomos** em questão.

PORTANTO:

- >> Podem ser mais **facilmente atraídos pelo átomo mais eletronegativo**
- >> Podem ser mais **facilmente transferidos para um "aceptor" de elétrons**



Ligações π e deslocalização de elétrons

Benzeno (C_6H_6) - *Pense: quais devem ser as ligações nos 6 carbonos do benzeno?*

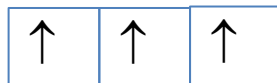
(use a regra do octeto sem receio)

Distribuição de elétrons no **Carbono**:

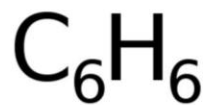
$1s^2$

$2s^1$

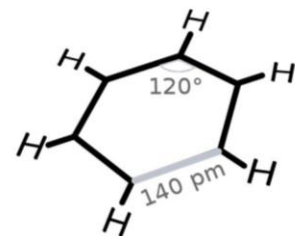
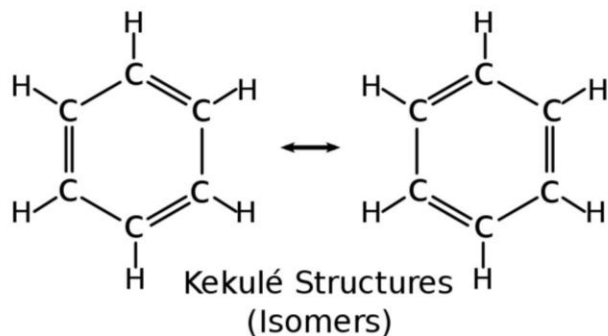
$2p^3$



Como adaptamos a teoria de ligação de valência?



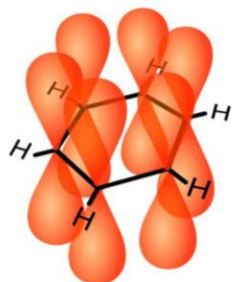
Benzene
Molecular formula



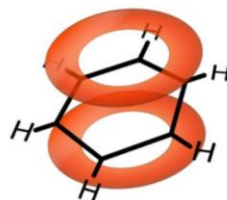
Planar Hexagon
Bond Length 140 pm



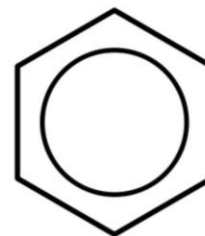
Sigma Bonds
 sp^2 Hybridized orbitals



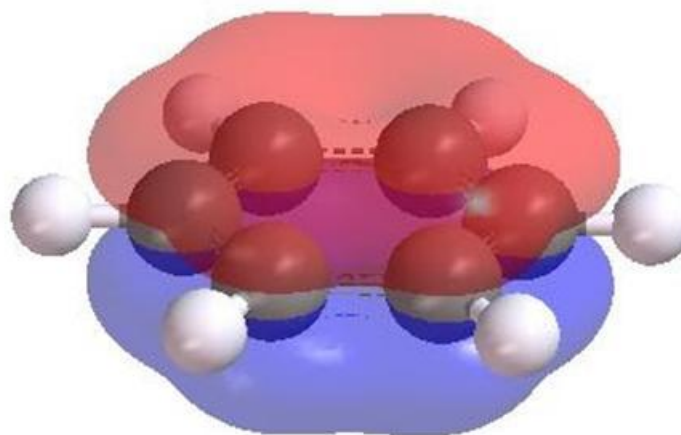
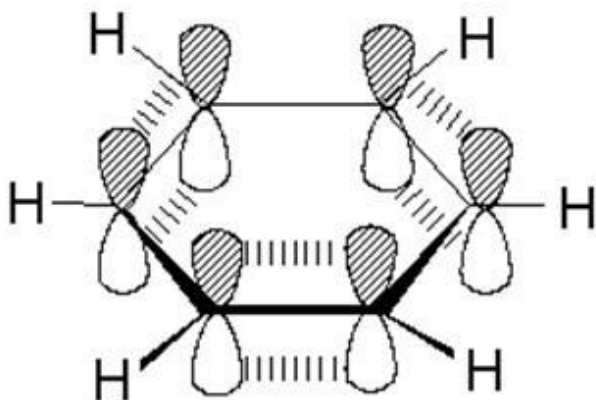
6 p_z orbitals



delocalized pi
system



Benzene ring
Simplified depiction



Pense para a próxima aula

Onde estudar??

Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 3>> p. 93-131

Polaridade das ligações C-O