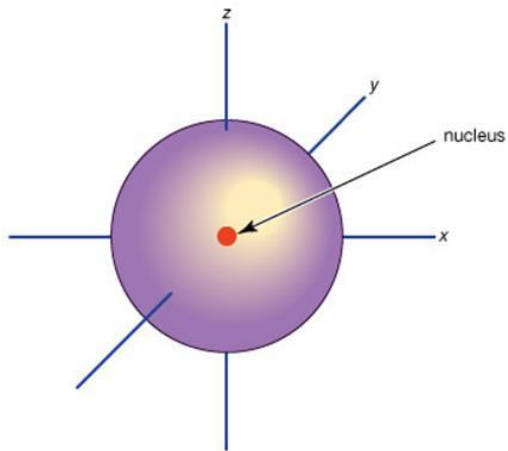


Como deve ser a estrutura da molécula de eteno ( $C_2H_4$ )?

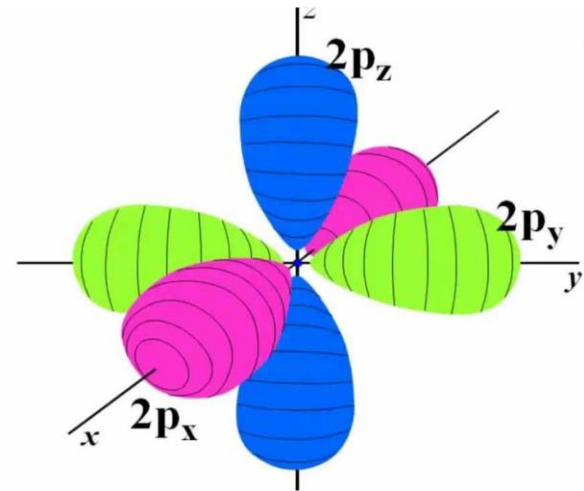
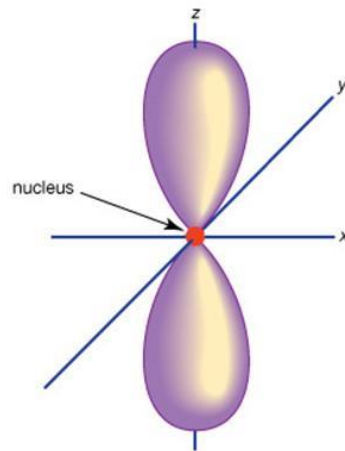
## Teoria da ligação de valência - *recaptulando*

**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  $90^\circ$

# Sofisticando os modelos: Teoria da ligação de valência

## *Retornando à molécula de metano (CH<sub>4</sub>)*

Distribuição de elétrons no Carbono:

A TABELA PERIÓDICA indica número atômico 6.

Número atômico 6 <<>> 6 prótons

No estado fundamental temos, portanto, 6 elétrons

1s<sup>2</sup>

2s<sup>2</sup>      2p<sup>2</sup>      (4 elétrons na camada de valência)

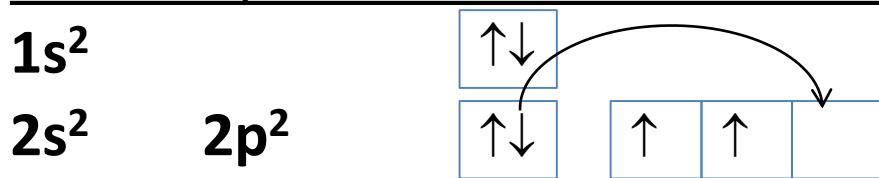
*Porque assumimos que os 4 elétrons da camada de valência são iguais se eles estão em orbitais atômicos diferentes?*

*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

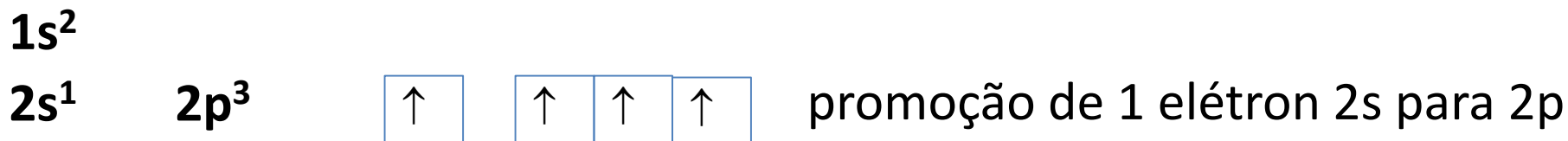
## A molécula de Metano

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:

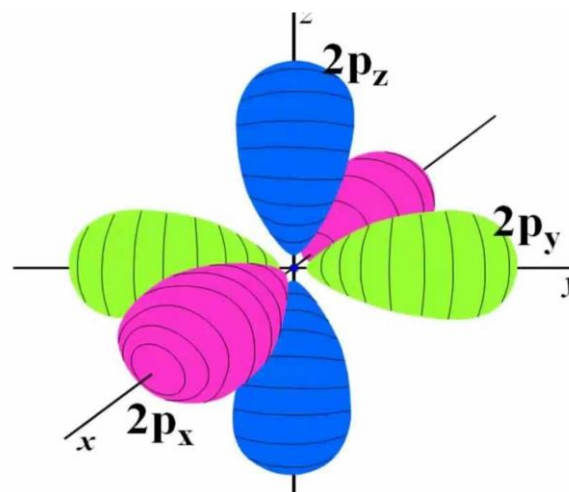
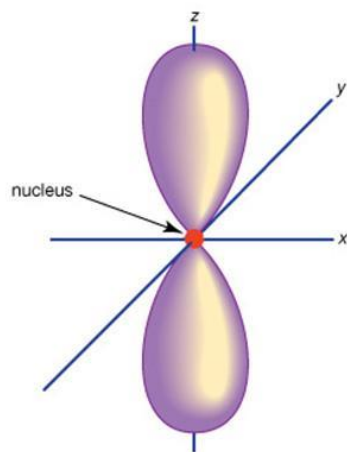
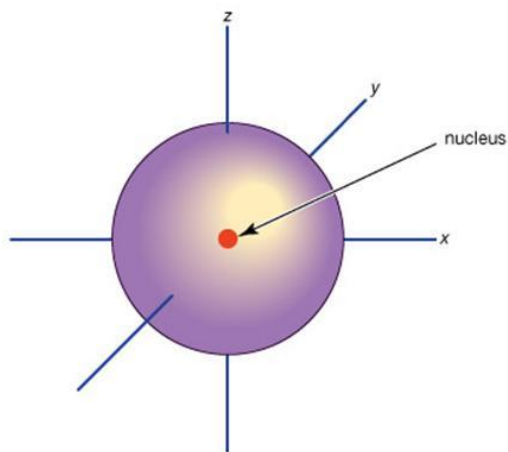


Distribuição de elétrons no Carbono hibridado  $sp^3$ :



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

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



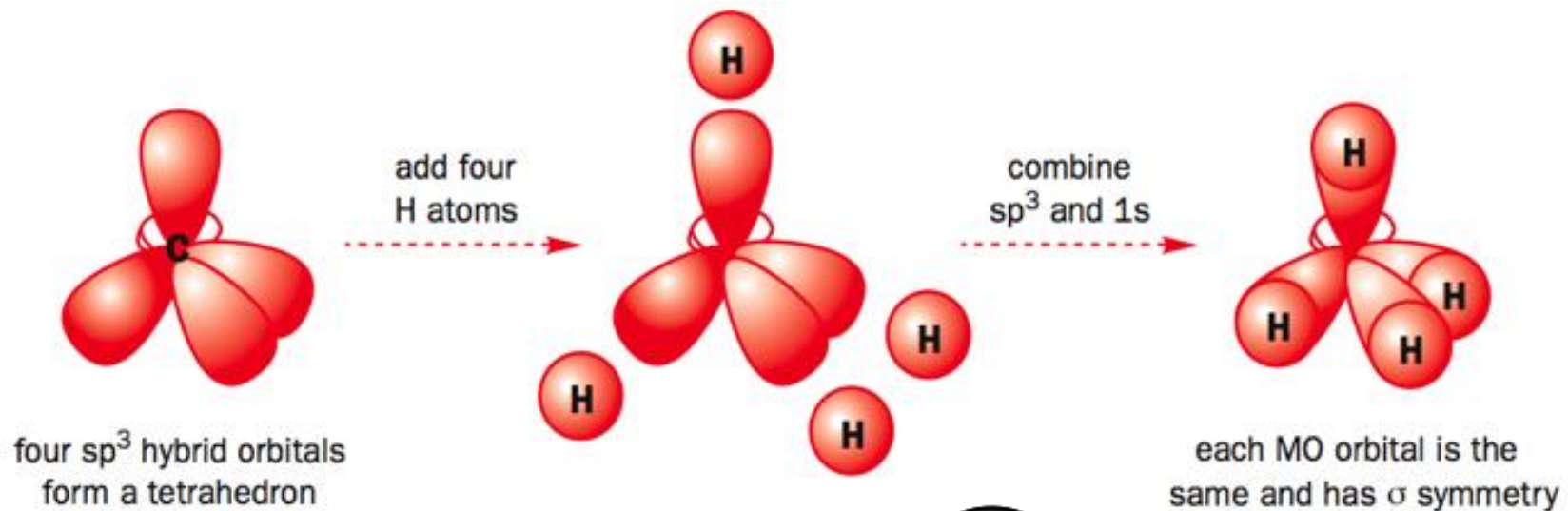
© 2010 Encyclopædia Britannica, Inc.

3 orbitais atômicos p  
idênticos, separados  
a  $90^\circ$

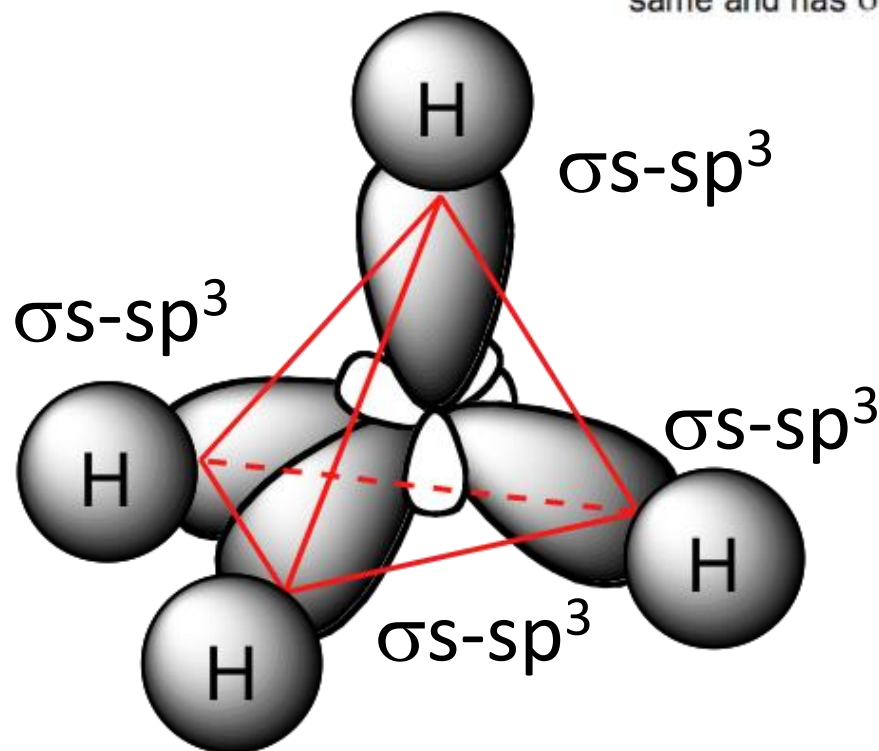


4 orbitais híbridos  
 $sp^3$  idênticos

# A molécula de Metano: ilustrações tridimensionais



4 ligações  
idênticas  $\sigma s-sp^3$



## Ligações $\pi$ e deslocalização de elétrons

## As moléculas do eteno e do benzeno

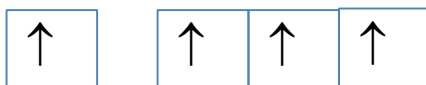
Eteno ( $C_2H_4$ ) - *Pense: quais devem ser as ligações no eteno?*  
(use a regra do octeto sem receio)

Distribuição de elétrons no Carbono:

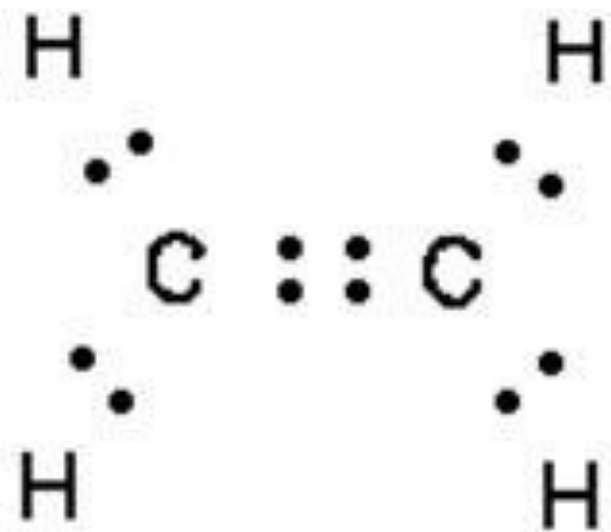
$1s^2$

$2s^1$

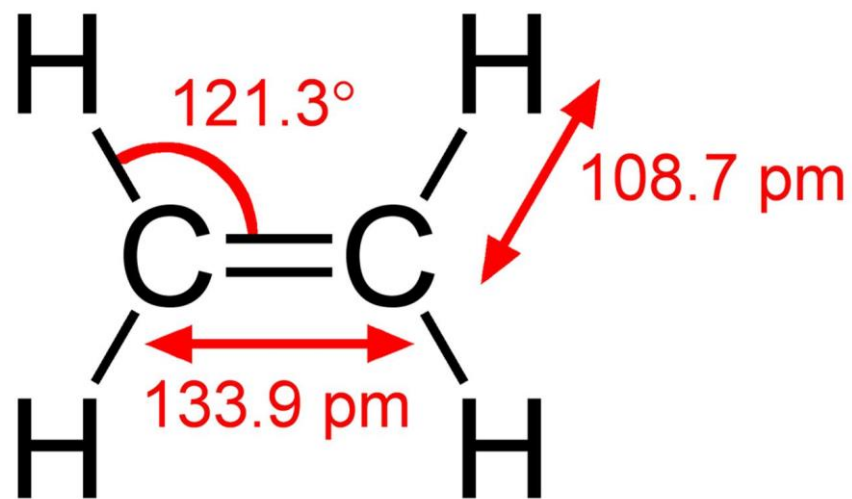
$2p^3$



*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:

$1s^2$

$2s^1$

$2p^3$



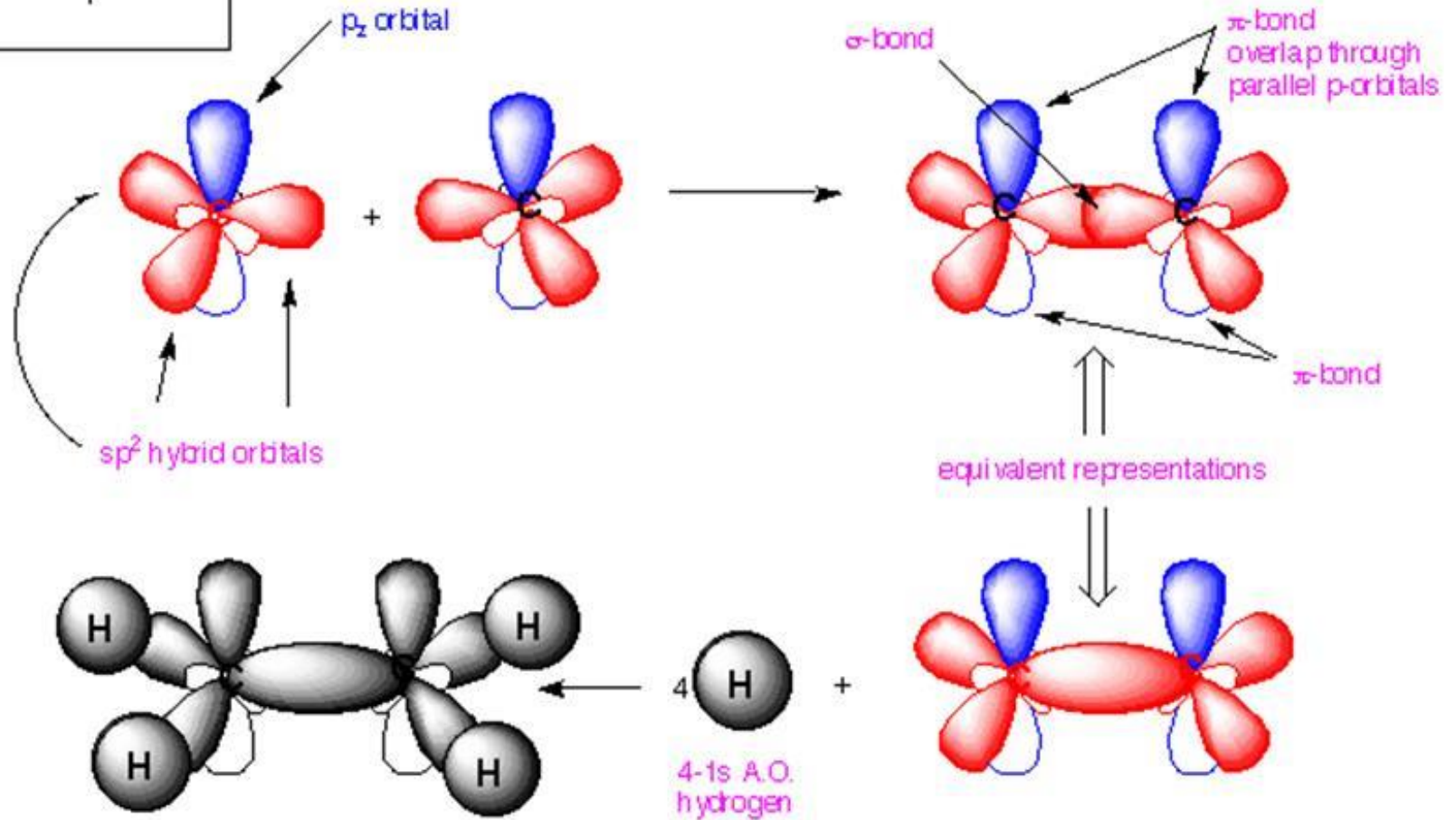
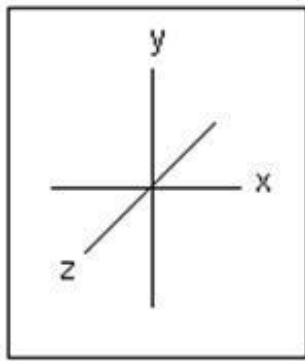
$sp^2$

**p** ("puro" para a ligação  $\pi$ )



# Ligação de valência - hibridação

## Hybridization of Ethylene

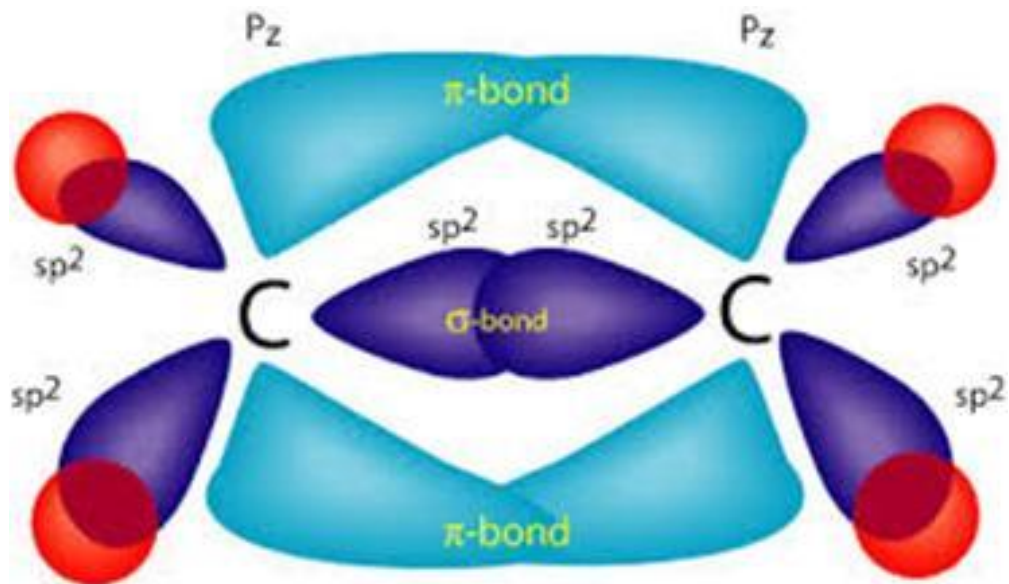
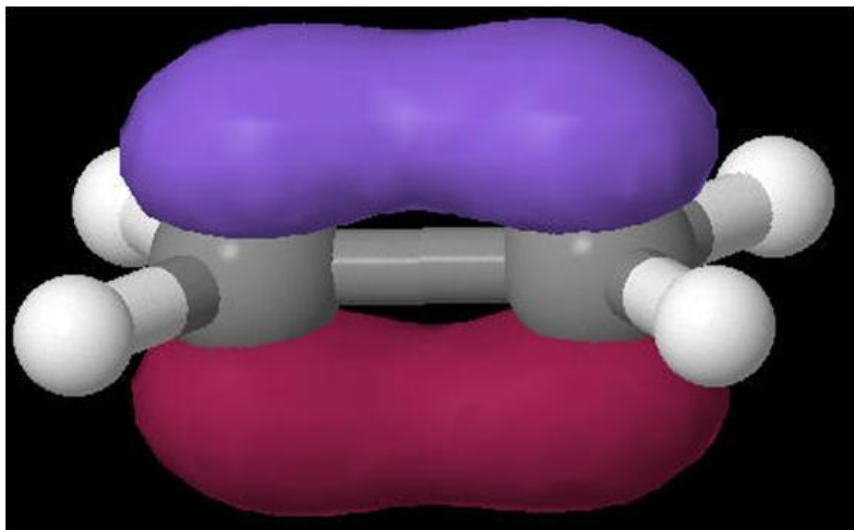
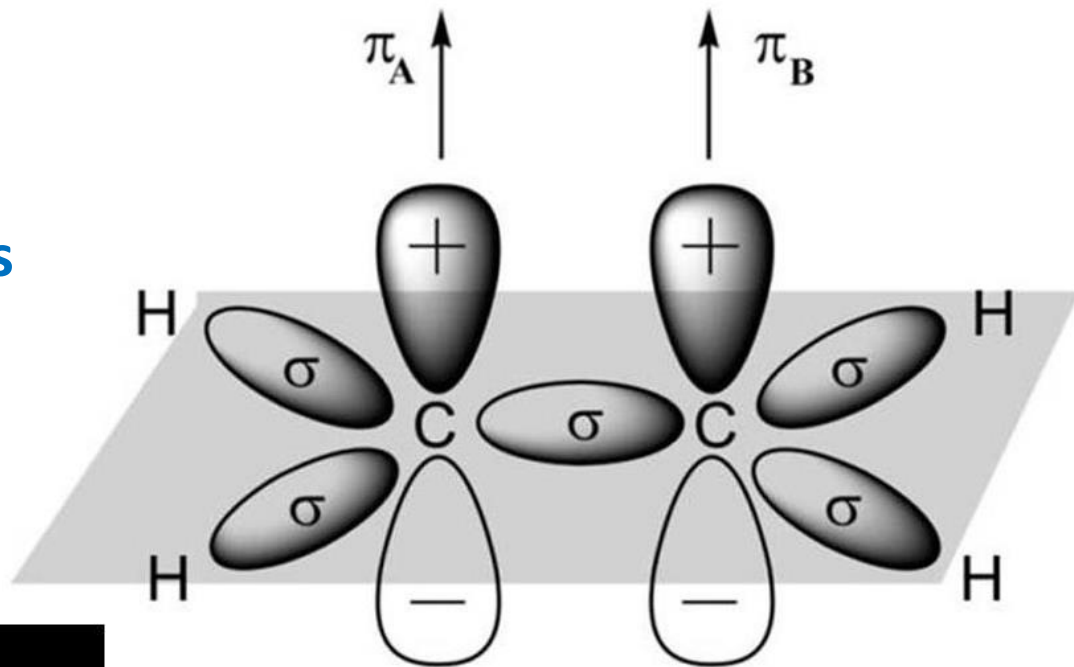


ethylene - a planar molecule

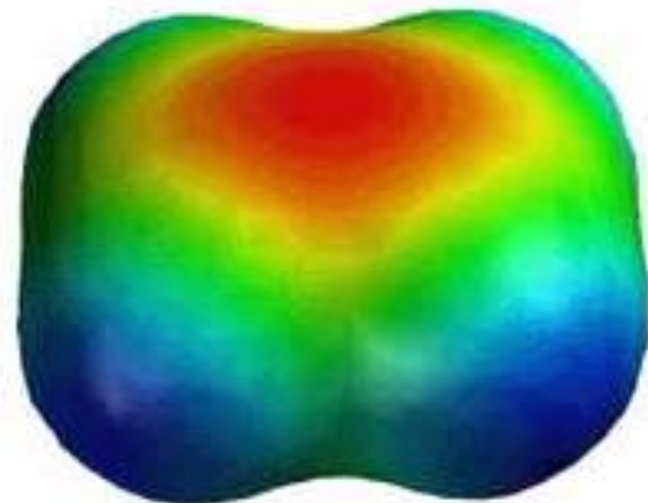
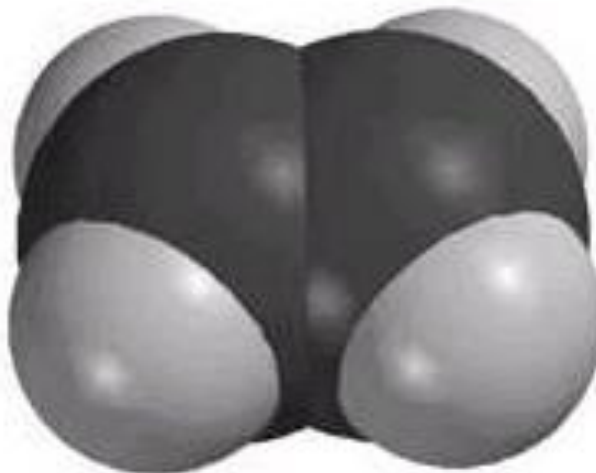
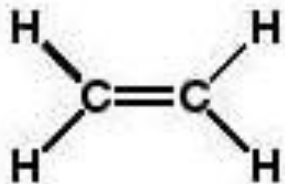
CC bond - 1.33 Å, 152 kcal/mol ( $\sigma$ -bond ~ 54 kcal/mol)

CH bond - 1.076 Å, 107 kcal/mol

## A molécula de Eteno: ilustrações tridimensionais



## "Heat map" calculado para a densidade eletrônica



Elétrons de ligações  $\pi$  permanecem **mais longe do eixo central** entre os átomos que formam também uma ligação  $\sigma$ . 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 "acceptor" de elétrons**



# Ligações $\pi$ e deslocalização de elétrons

**Benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)** - *Pense: quais devem ser as ligações nos 6 carbonos do benzeno?*

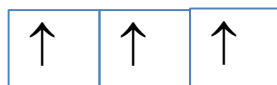
*(use a regra do octeto sem receio)*

Distribuição de elétrons no **Carbono**:

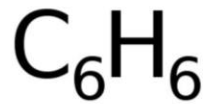
**1s<sup>2</sup>**

**2s<sup>1</sup>**

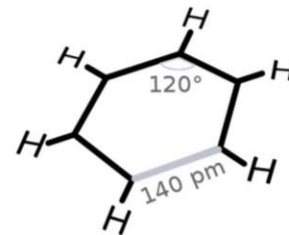
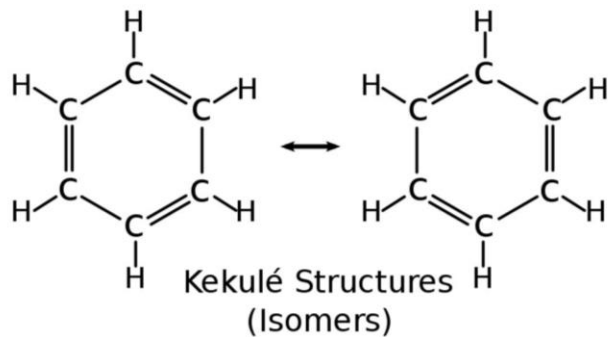
**2p<sup>3</sup>**



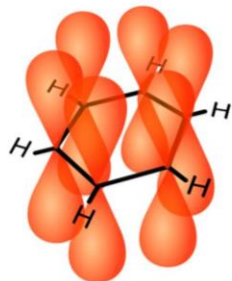
*Como adaptamos a teoria de ligação de valência?*



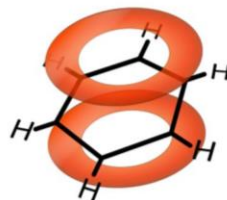
Benzene  
Molecular formula



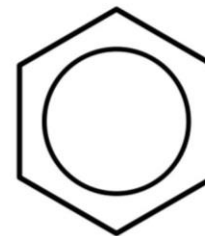
Sigma Bonds  
 $sp^2$  Hybridized orbitals



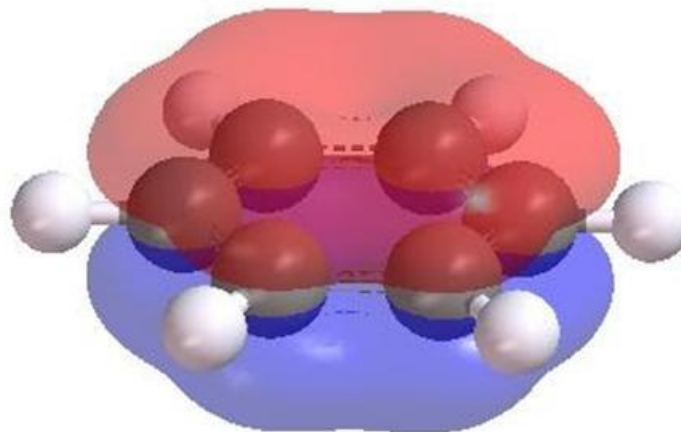
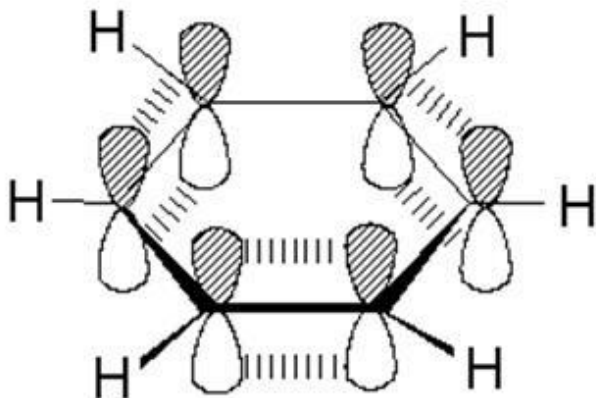
6  $p_z$  orbitals



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**