

QUÍMICA ORGÂNICA BÁSICA

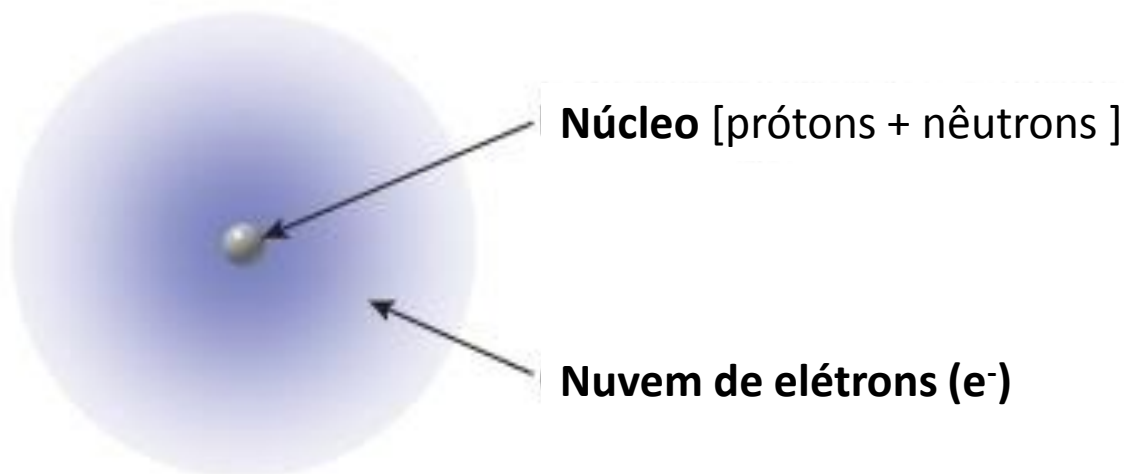
Hibridização

Revisão - Química Orgânica Básica

- 1 Tabela Periódica
- 2 Moléculas Diatômicas
- 3 Moléculas Poliatômicas
- 4 Eletronegatividade
- 5 A interação da luz e a matéria
- 6 Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas (OM)
- 7 Efeitos da Hibridização - caráter s
- 8 Polaridade

A Tabela Periódica

Representação Esquemática do Átomo



- O núcleo contém prótons com carga positiva e nêutrons sem carga elétrica.
- A nuvem de elétrons é composta de elétrons carregados negativamente.

A Tabela Periódica

A Tabela Periódica com elementos comuns a Química Orgânica

| Nº Grupo | 1A | 2A | | 3A | 4A | 5A | 6A | 7A | 8A |
|------------|----|----|----|----|----------|----|----|----|----|
| 1º Período | H | | // | | | | | | |
| 2º Período | Li | | // | B | C | N | O | F | |
| | Na | Mg | | | Si | P | S | Cl | |
| | K | | | | | | | Br | |
| | | | | | | | | I | |

↑ ↑
Colunas

- Ver a localização do átomo de carbono no 2º período, grupo 4A

A Tabela Periódica

A Tabela Periódica com elementos comuns a Química Orgânica

| Nº Grupo | 1A | 2A | // | | 3A | 4A | 5A | 6A | 7A | 8A |
|------------|----|----|----|--|----|----|----|----|----|----|
| 1º Período | H | | // | | | | | | | |
| 2º Período | Li | | // | | B | C | N | O | F | |
| | Na | Mg | // | | | Si | P | S | Cl | |
| | K | | // | | | | | | Br | |
| | | | // | | | | | | I | |

↑ ↑
Colunas

- Ver o tamanho relativo dos átomos no 2º período

Ligação Iônica

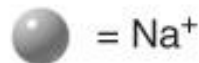
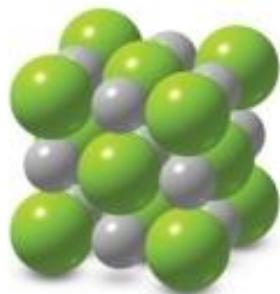
- Transferência de elétrons: Um cátion (carga positiva) formado a partir do elemento atrai um ânion (carregado negativamente). Um exemplo é o cloreto de sódio, NaCl.
- $\text{Na} - 1e^- \rightarrow \text{Na}^+$ (PI = 119) $\text{Cl} + 1e^- \rightarrow \text{Cl}^-$ (AE = 84)
formação do $\text{Na}^+\text{Cl}^- = 119 + (-83) = +36$ *não favorável, não explica formação*
- Considerando a Energia do retículo cristalino ($E_{\text{coulombica}}$)

$$E = \frac{332 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} (q)(-q)}{\text{Raio Na} + \text{Raio Cl}} = \frac{332 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}} -1}{1,0 + 1,8} = -118,5$$

diminuindo da $E_{\text{ionização}}$ teremos

$$= -118,5 + 36 = -82,5 \text{ (agora favorável)}$$

NaCl Retículo Cristalino



Caráter Iônico da ligação NaCl

$$\% \text{ Iônico} = \frac{\text{eletroneg Cl} - \text{eletroneg Na}}{\text{eletroneg Cl}} \cdot 100$$

$$\% \text{ Iônico} = \frac{3,2 - 0,9}{3,2} \cdot 100 = 72 \%$$

Eletronegatividade e Polaridade das Ligações

Eletronegatividade é a medida da atração do átomo pelos elétrons em uma ligação

Valores de Eletronegatividade

Aumenta a Eletronegatividade

| 1A | 2A | 3A | 4A | 5A | 6A | 7A |
|-----------|-----------|----------|-----------|----------|----------|-----------|
| H 2.2 | | | | | | |
| Li 1.0 | Be 1.6 | B 1.8 | C 2.5 | N 3.0 | O 3.4 | F 4.0 |
| Na 0.9 | Mg 1.3 | | Si 1.9 | P 2.2 | S 2.6 | Cl 3.2 |
| K 0.8 | | | | | | Br 3.0 |
| | | | | | | I 2.7 |

Eletronegatividade e Polaridade das Ligações

Valores de eletronegatividade são usados como um guia para indicar o compartilhamento de elétrons em uma ligação. Quando os elétrons são igualmente compartilhados, a ligação é **apolar**. Quando há diferença de eletronegatividade, há o compartilhamento desigual de elétrons, a **ligação é polar** e é dito ter uma "separação de carga" ou um "dipolo".



Pequena diferença de eletronegatividade entre C e H

- **A ligação carbono-carbono é apolar. O mesmo ocorre quando dois átomos diferentes tendo eletronegatividade semelhante são ligados juntos.**
- **A Ligação C-H é considerada apolares porque a diferença de eletronegatividade entre C e H é pequena (~0,3).**

Eletronegatividade e Polaridade das Ligações

Ligação entre átomos de eletronegatividade diferentes:

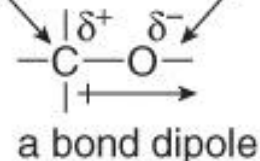
Exemplo: Ligação C - O, os elétrons são próximos ao O (3,4) e não C (2,5). A ligação é polar, ou covalente polar. A ligação é dita ter **dipolo**; ou seja, separação de carga.

C é deficiente em elétrons

O é rico em elétrons

δ^+ indica átomo deficiente em elétrons.

δ^- indica átomo rico em elétrons.



C - O é uma ligação polar

A direção da polaridade de uma ligação é indicada por uma seta com a cabeça da seta apontando para o elemento **mais eletronegativo**. A origem da seta é desenhada a partir do elemento **menos eletronegativo**.

1. Moléculas Diatômicas

Construção de orbitais moleculares de orbitais atômicos

Interferência construtiva (reforço) e destrutiva das ondas

Orbitais moleculares (OM) Ligante e antiligante

Diagramas de correlação de orbitais

Energia OM, OA e ordem de ligação

Moléculas diatômicas Homonuclear e Heteronuclear

1. Moléculas Diatômicas

Orbitais atômicos: orbitais que estão localizados em átomos.

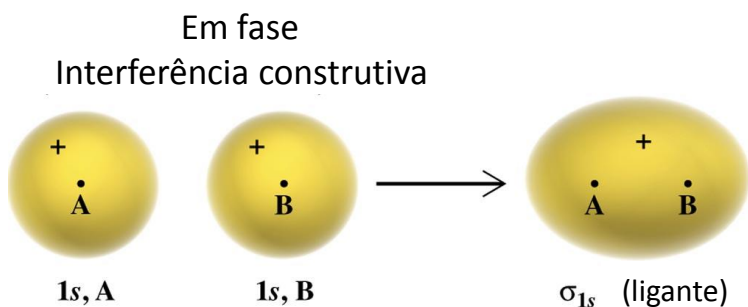
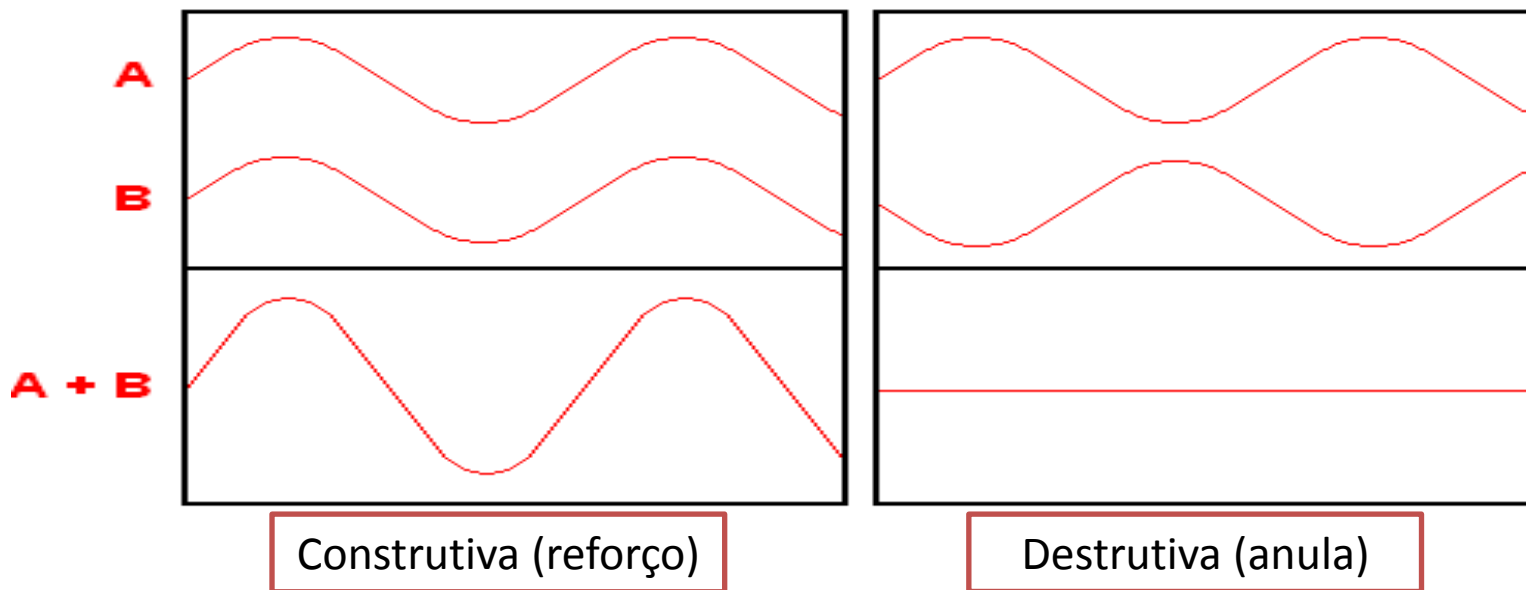
Orbitais moleculares: orbitais que ligam dois ou mais átomos.

Construção de orbitais moleculares (OMs) pela sobreposição de orbitais atômicos (OAs)

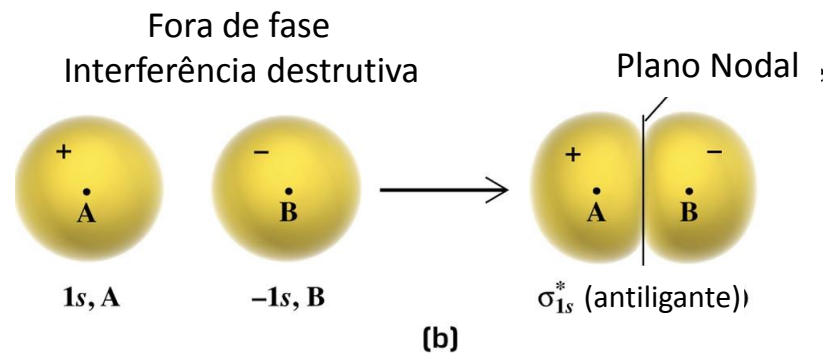
Ligação σ : densidade de elétrons do OM ao longo do eixo de ligação

Ligação π : densidade de elétrons do OM cujo plano nodal contém o eixo da ligação

Interferência de ondas Construtiva e destrutiva



(a)



(b)

Orbital atômico

Orbital Molecular

Diagrama de correlação para overlap de dois orbitais 1s

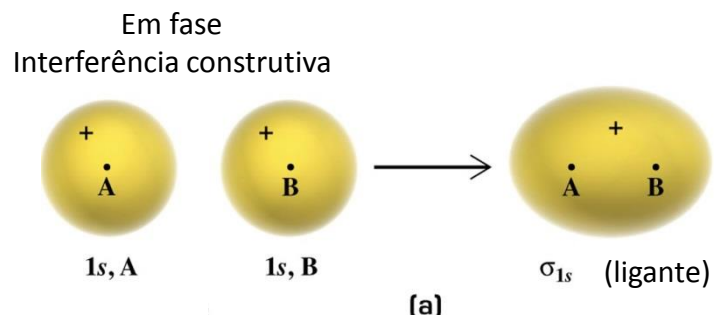
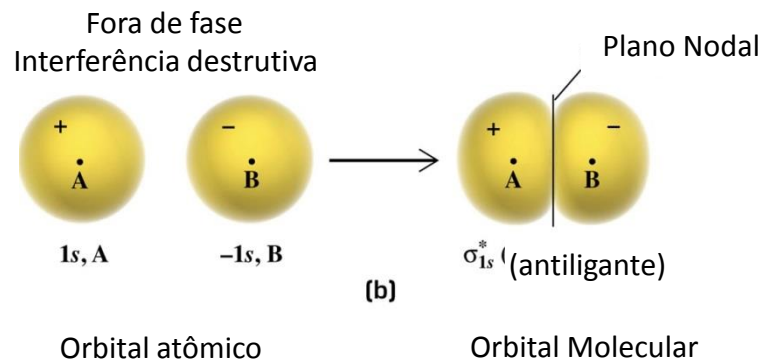
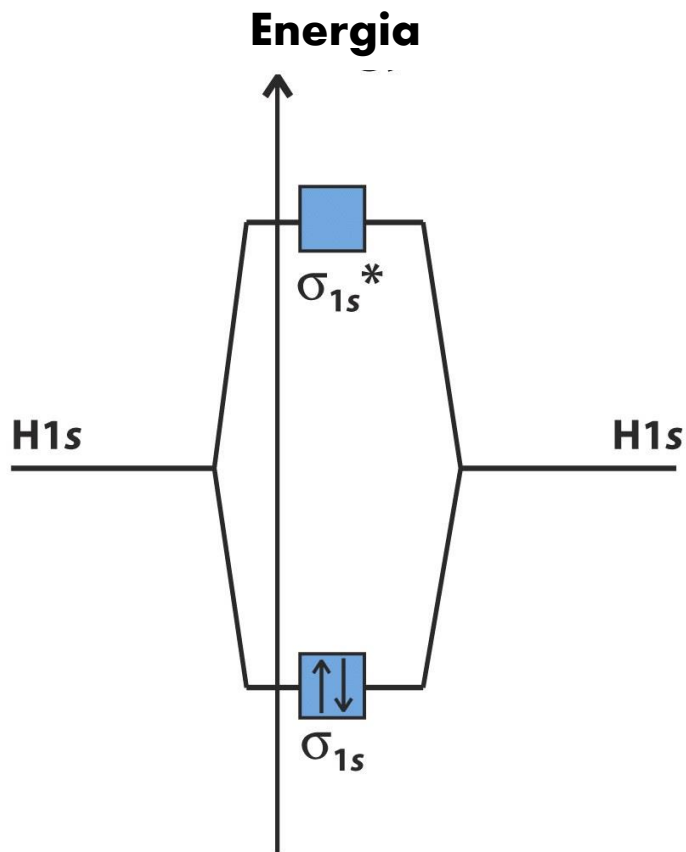
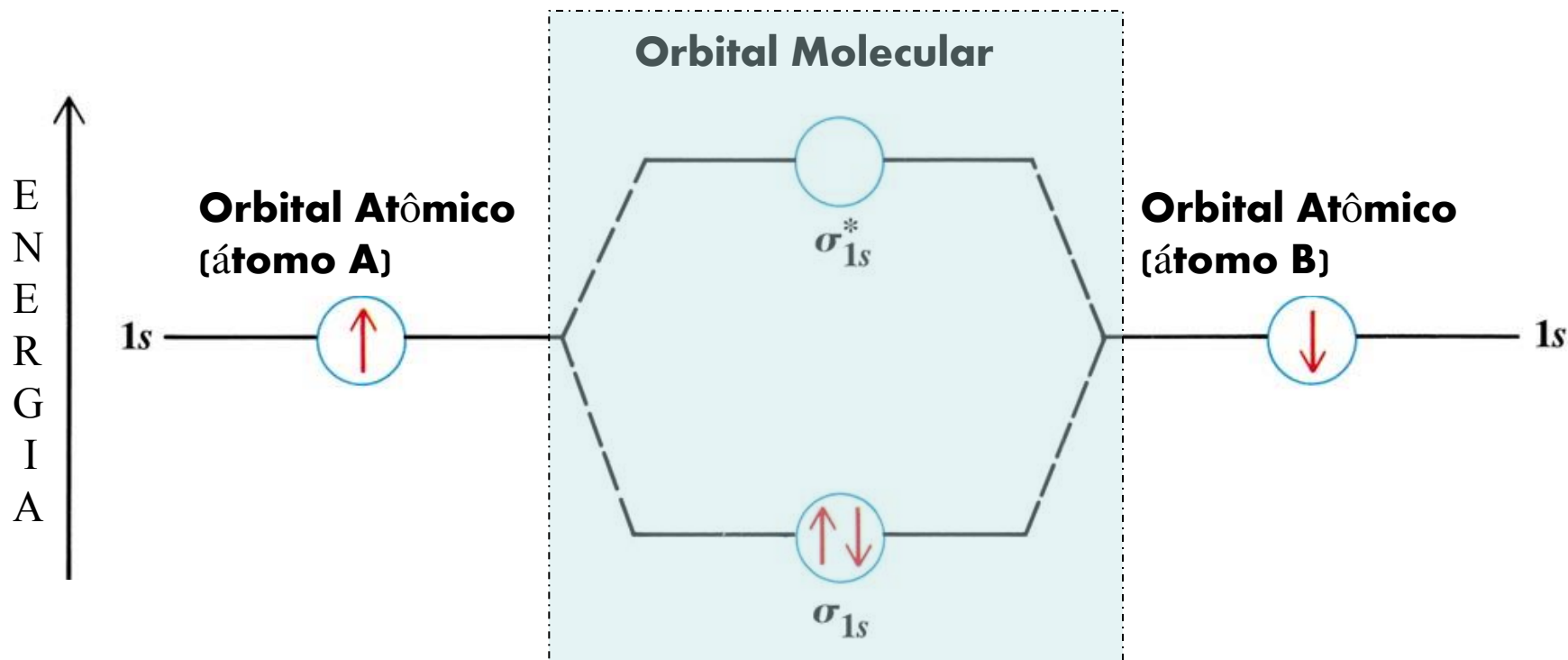
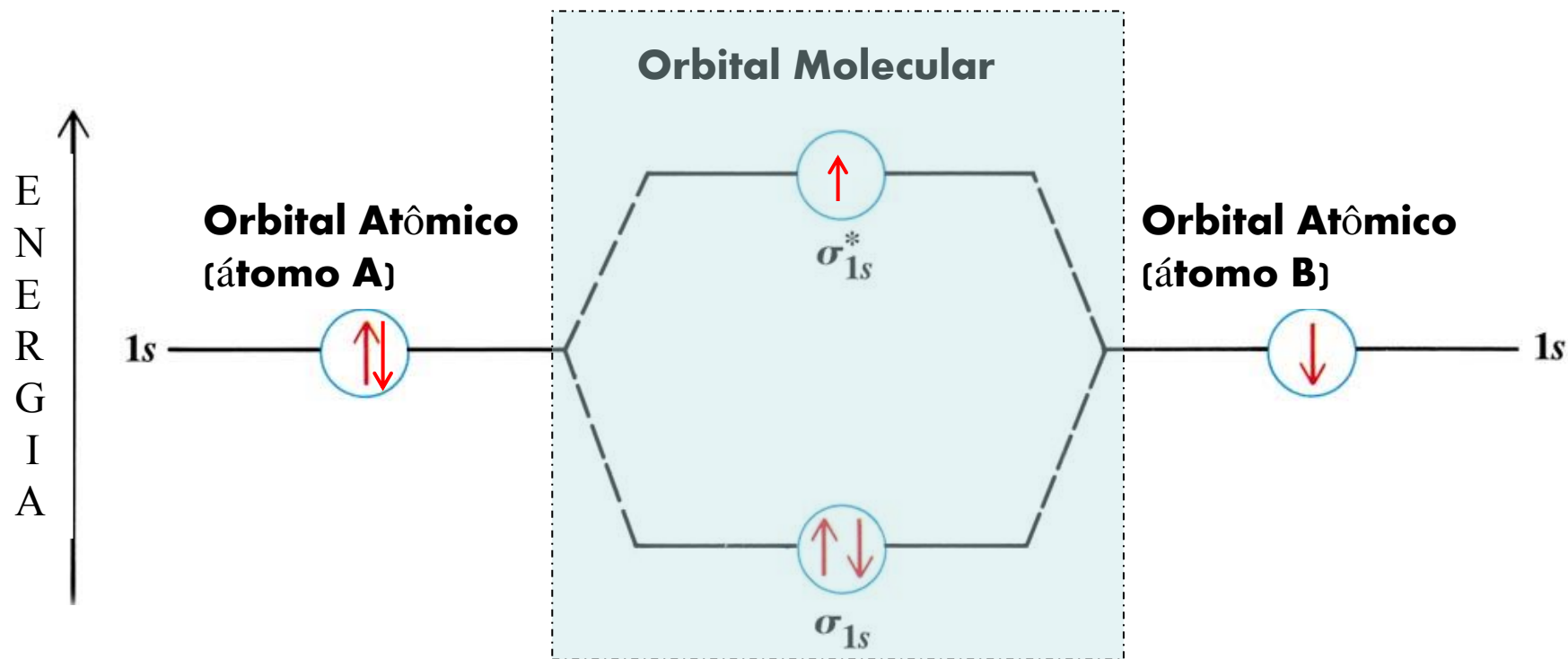


Diagrama de correlação para a molécula de hidrogênio, H_2 

A configuração eletrônica de uma molécula de H_2 é σ_{1s}^2

O subscrito ($_{1s}$) indica quais OA são combinados, o sobrescrito (2) indica quantos elétrons estão em OM

Que moléculas diatômicas hipotéticas podem ter a configuração eletrônica abaixo?



Resposta: qualquer molécula diatômica com Valência isoeletrônica com três elétrons $= (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^1$

Moléculas Diatômicas plausíveis, possuindo apenas combinações de átomos de H ou He : H_2^- , He_2^+ , HHe é a configuração $(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^1$

Ordem de Ligação (**OL**): o número de e^- em orbitais ligante, menos o n° de e^- em orbitais anti-ligantes

Podemos deduzir estabilidade molecular usando OL

$OL = 1/2(N - N^*)$ onde N = números elétrons em orbitais ligantes e N^* = número de elétrons em orbitais antiligantes

Exemplo: $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^1$

$N = 2, N^* = 1$

$OL = 1/2(N - N^*) = 1/2$

Qualquer molécula diatômica com $OL > zero$ é considerada estável em relação os dois átomos dissociados.

Um par de elétrons compartilhado faz uma ligação covalente simples

Elétrons em orbitais ligantes reforçam a ligação, (estabilizam). E elétrons em orbitais anti-ligantes reduzem a força da ligação

Ordem de ligação é uma medida da ligação entre dois átomos:

$$= \frac{1}{2} [(e^- \text{ em OMs ligantes}) - [(e^- \text{ em OMs anti-ligantes})]]$$

TABELA

Configuração e ordem de ligação para o Primeiro Período
Moléculas homonucleares

| Espécies | Configuração eletrônica | Ordem de ligação | Entalpia de ligação (Kj/mol) | Comprimento de ligação A |
|------------------------------|---|------------------|------------------------------|--------------------------|
| H ₂ ⁺ | (σ_{1s}) ¹ | $\frac{1}{2}$ | 255 | 1.06 |
| H ₂ | (σ_{1s}) ² | 1 | 431 | 0.74 |
| He ₂ ⁺ | (σ_{1s}) ² (σ_{1s}^*) ¹ | $\frac{1}{2}$ | 251 | 1.08 |
| He ₂ | (σ_{1s}) ² (σ_{1s}^*) ² | 0 | Não observado | |

Qual é a ordem de ligação do primeiro estado eletronicamente excitado de H₂?

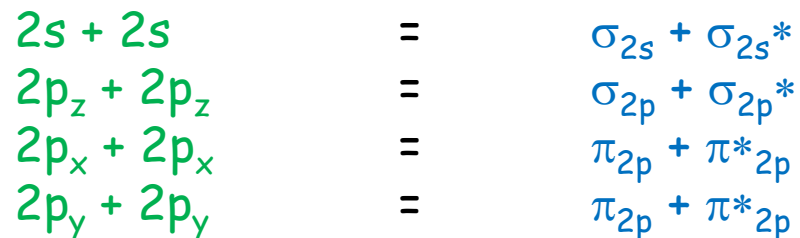
A configuração eletrônica do primeiro estado excitado de H₂ é $(\sigma_{1s})^1(\sigma^*_{1s})^1$.

$$\text{Ordem de ligação} = 1/2(1 - 1) = 0$$

Excitação Fotoquímica de H₂ forma 2 átomos de H.

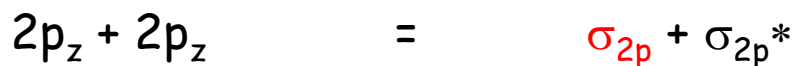
Construindo os OMs de moléculas diatômicas simples

Mistura de orbitais atômicos (OAs) de energias iguais ou similares formam orbitais moleculares (OMs)

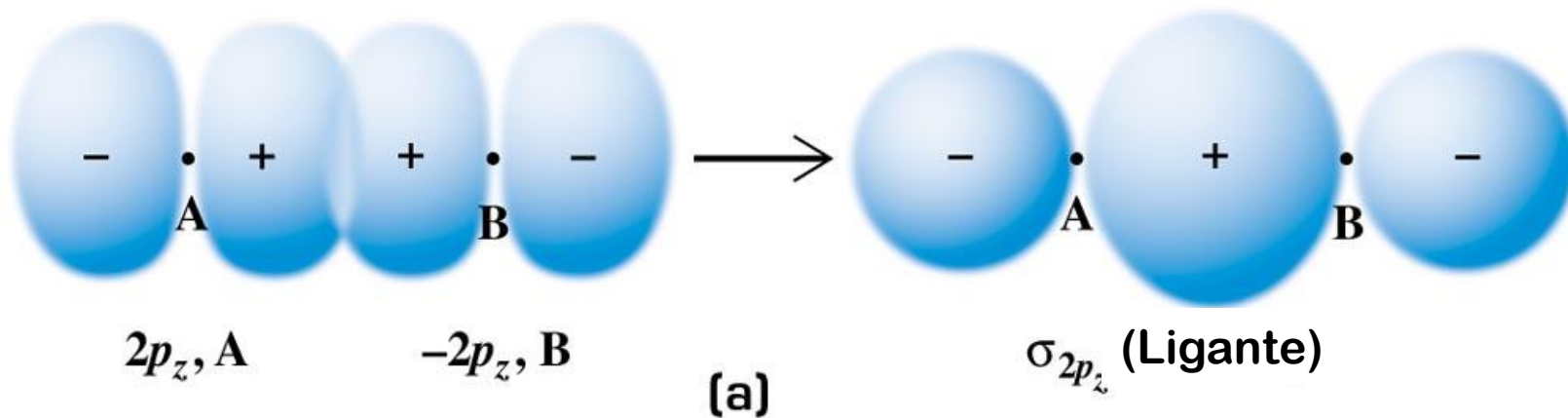


Total de 8 OMs que pode conter até 16 elétrons

A construção pela sobreposição de dois orbitais $2p_z$ em átomos vizinhos para produzir os orbitais da ligação σ_{2p_z}



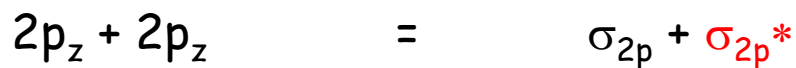
Em fase
(interferência construtiva)



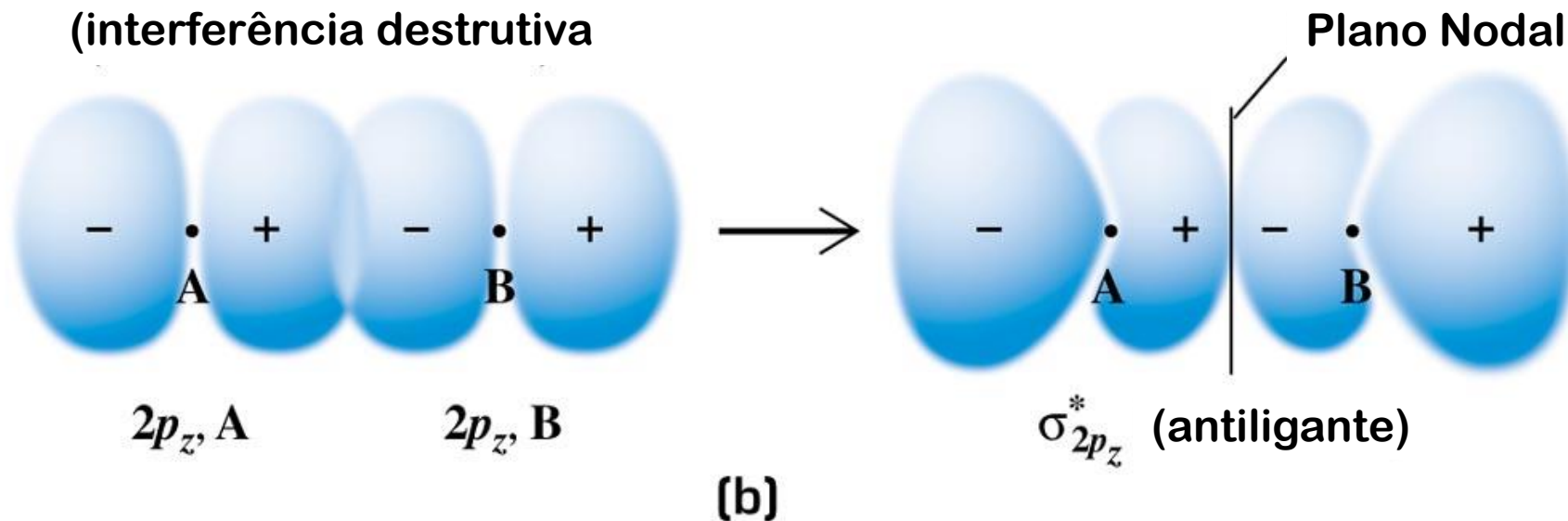
Orbitais Atômicos

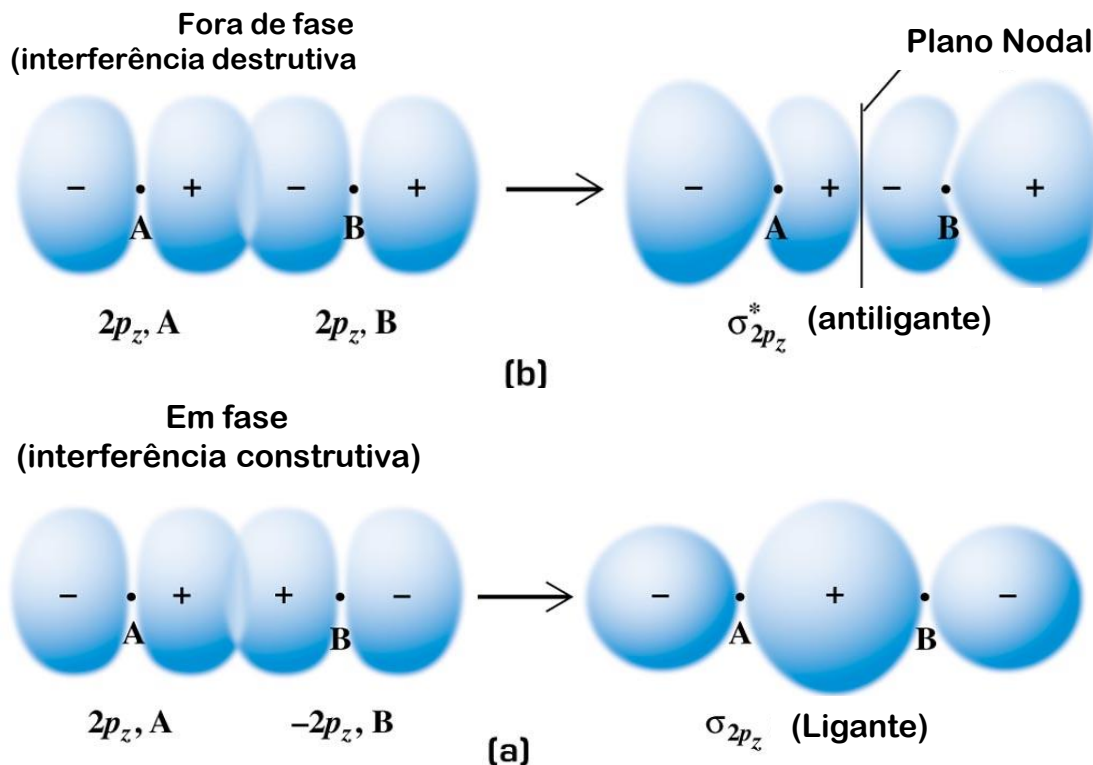
Orbitais Moleculares

A sobreposição destrutiva de dois orbitais $2p_z$ em átomos vizinhos para produzir os orbitais da ligação σ^*2p_z



Fora de fase
(interferência destrutiva)



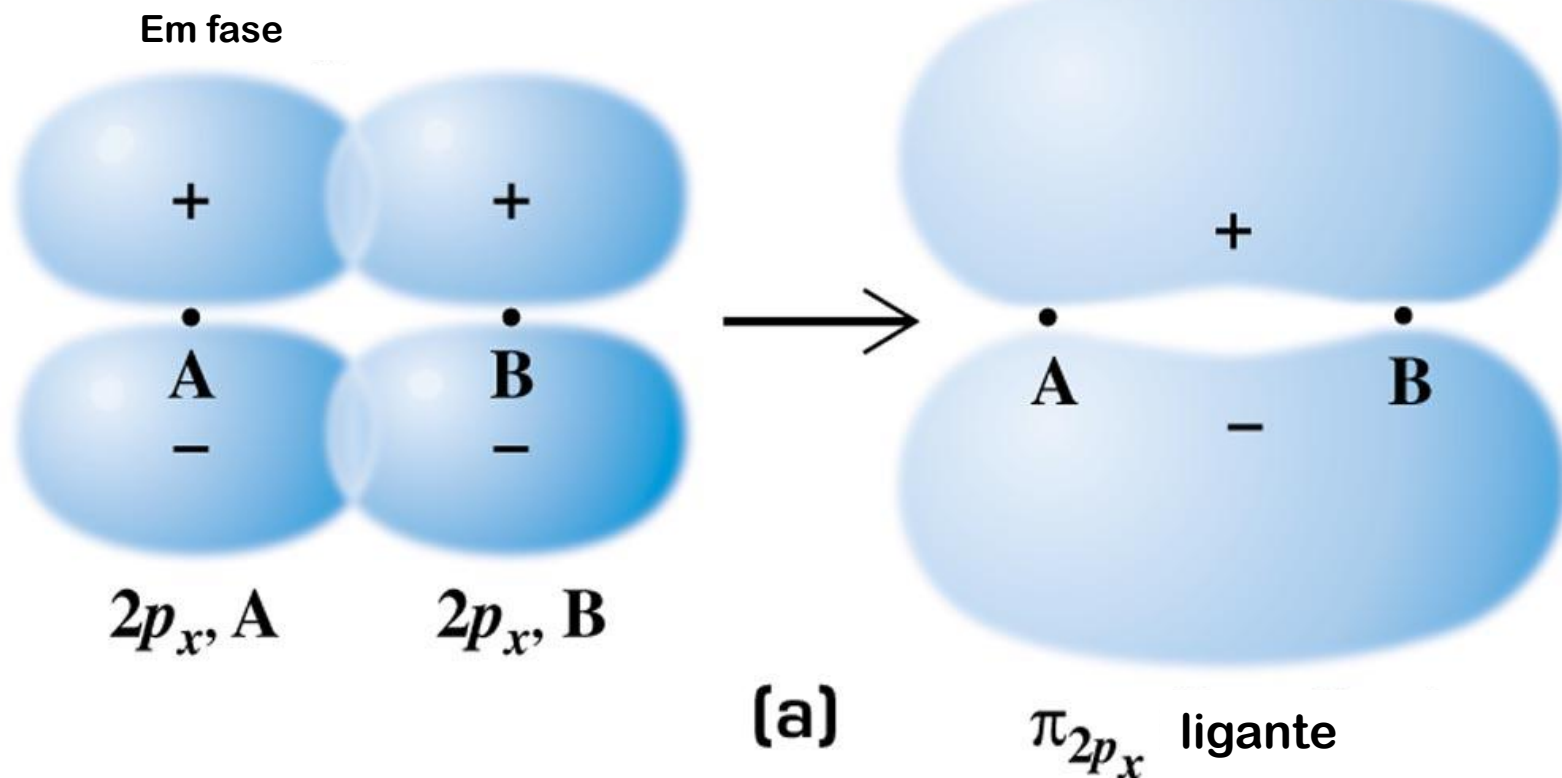
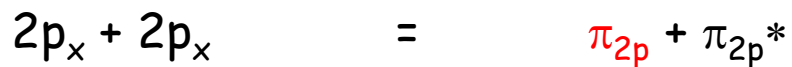
Sobreposição Construtiva e destrutiva dos orbitais 2P para orbitais σ e σ^* (a) σ orbital ligante; (b) orbital antiligante σ^* 

Orbitais Atômicos

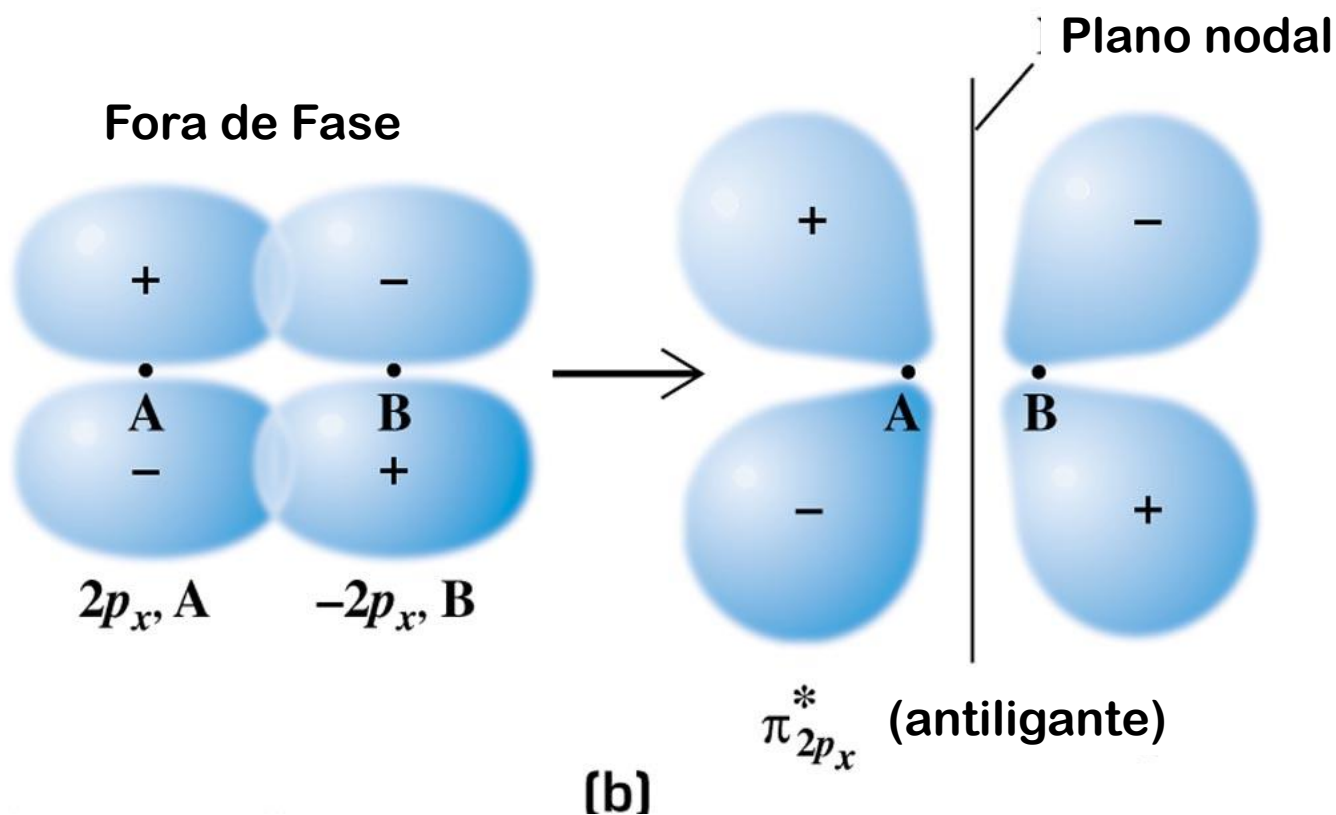
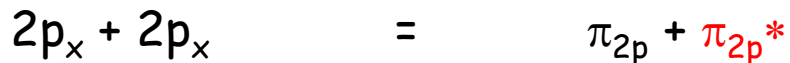
Molecular orbitals

Sobreposição internuclear ao longo do eixo é denominada σ *overlap*. Os orbitais resultantes são chamados de orbitais σ e σ^*

A sobreposição construtiva de dois orbitais $2p_x$ em átomos adjacentes produzem o π_{2p_x} orbital ligante

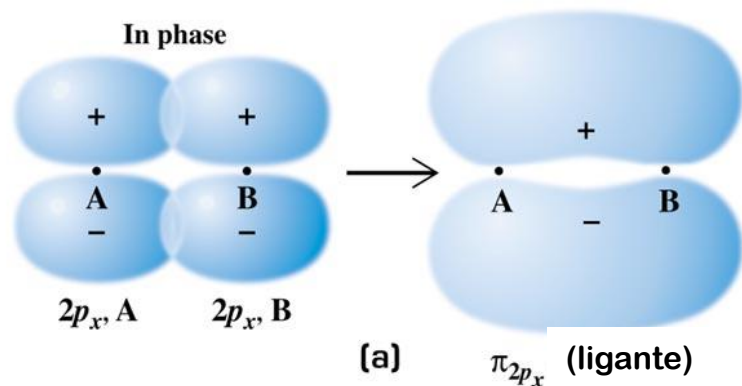
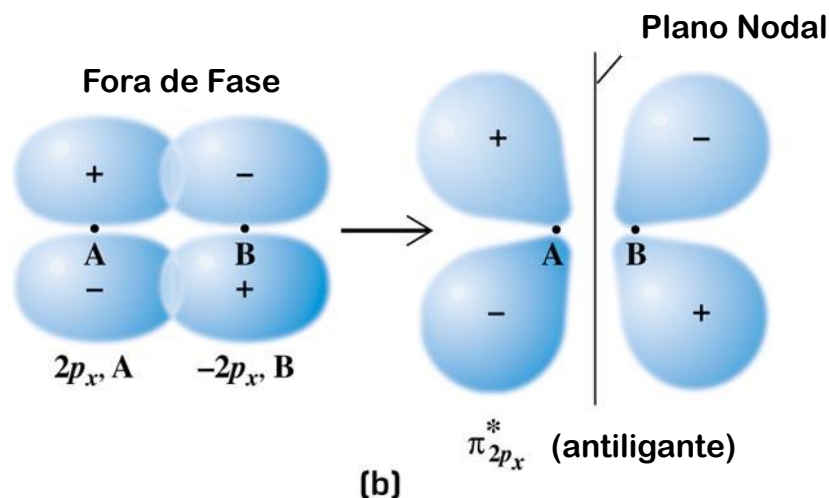


A sobreposição destrutiva entre dois orbitais $2p_x$ de átomos adjacentes gera um orbital $\pi_{2p_x}^*$ antiligante



"overlap" construtivo e destrutivo dos orbitais 2p para formar orbitais π e π^* .

(a) Orbital ligante π ; (b) orbital Antiligante π^*



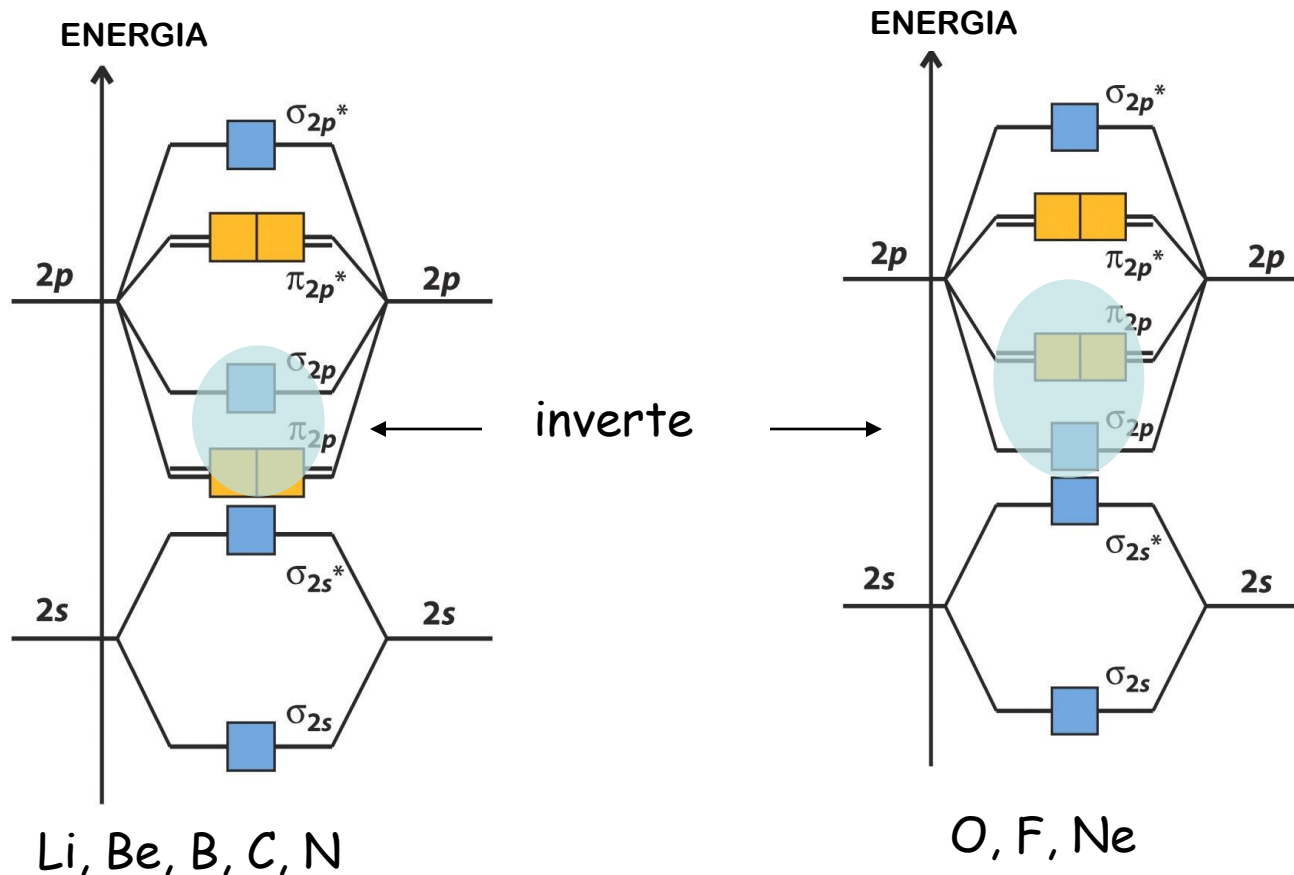
Sobreposição perpendiculares ao eixo internuclear é denominada overlap π . O plano nodal pode estar contido no eixo de ligação ou perpendicular. Os orbitais resultantes são chamados de orbitais π e π^*

Lembre-se:

+ e - referem-se a fases invertidas, e não a cargas

Energia dos Orbitais ${}^3\text{Li}-{}^{10}\text{Ne}$

Nota: (1) a energia dos orbitais π_{2p} e σ_{2p} trocam níveis de energia entre N e O;
 (2) a configuração eletrônica para qualquer valência isoeletrônica é a mesma



2. Moléculas Poliatômicas

Teoria de ligação de Valência e a teoria do **Orbital Molecular**

Teoria de ligação de Valência:

ligações localizados, como estruturas de Lewis

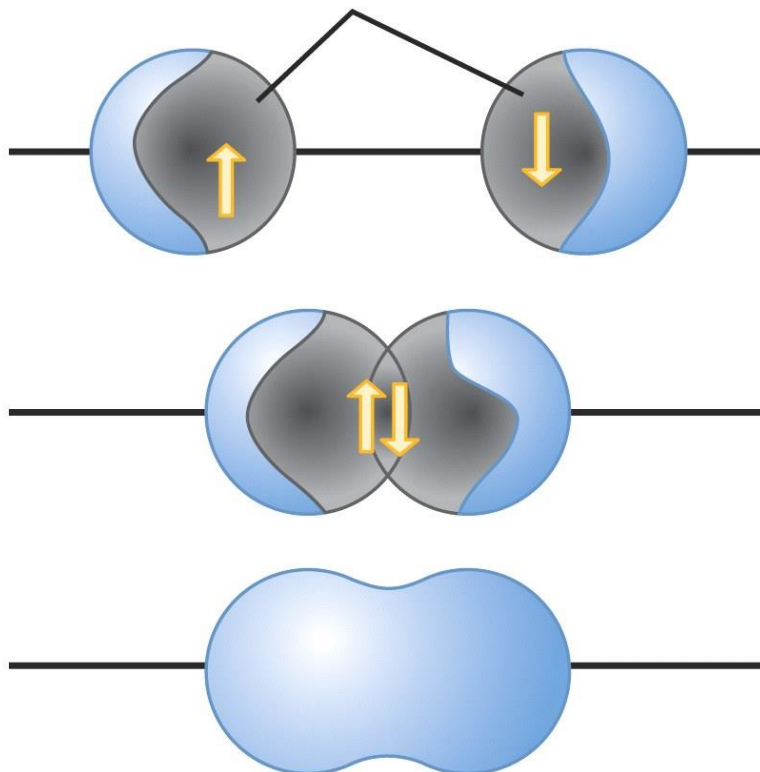
Hibridização dos orbitais para fazer ligações mais fortes

Hibridização e geometria molecular

Ordem de hibridização e Ligação: Ligações simples, duplas e triplas

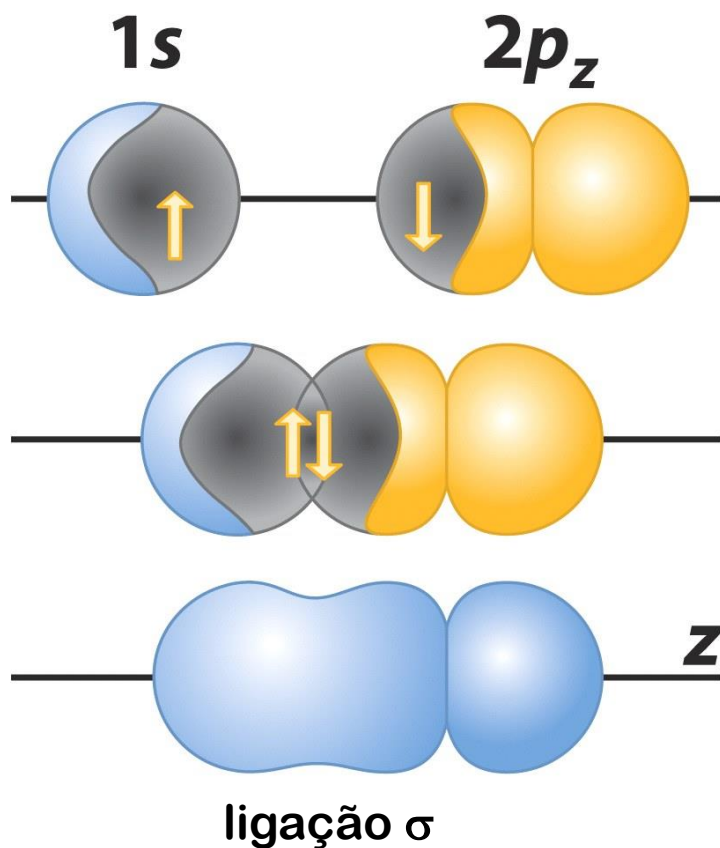
Ligação de Valência: "overlap" (sobreposição) de dois orbitais s para produzir uma ligação σ

Orbitais Atômicos

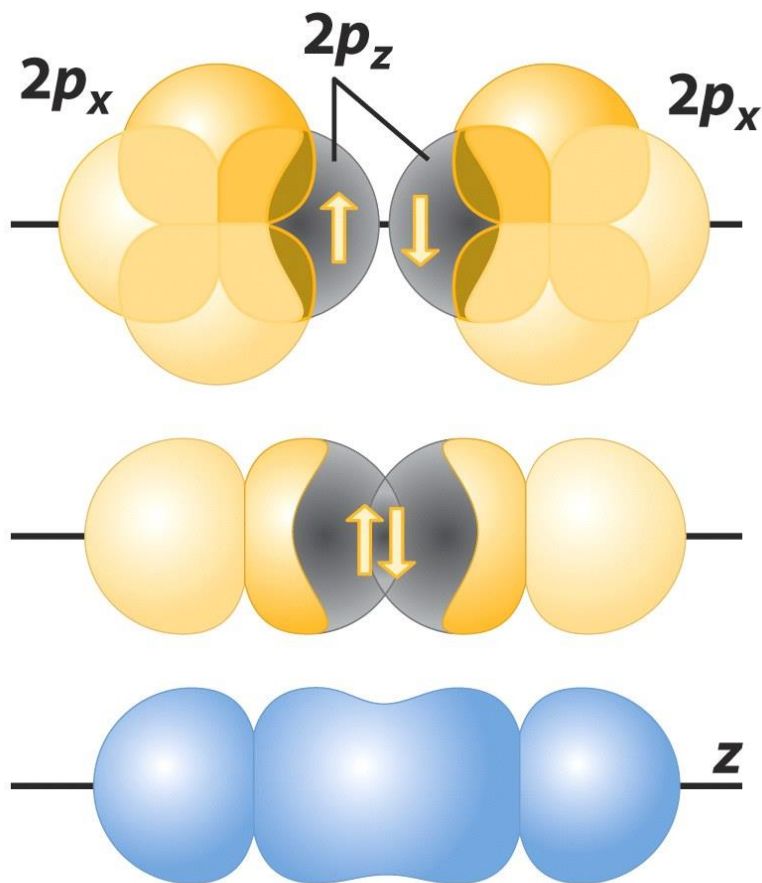


Orbital Molecular: ligação σ

Ligação de Valência:
sobreposição de um orbital s e um orbital p_z para produzir uma ligação σ .

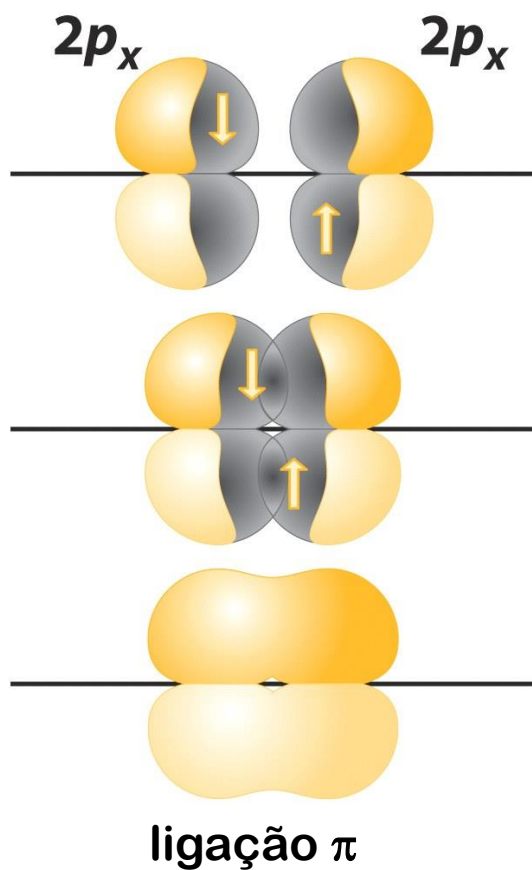


Ligação de Valência:
sobreposição de dois orbitais p_z para produzir uma ligação σ



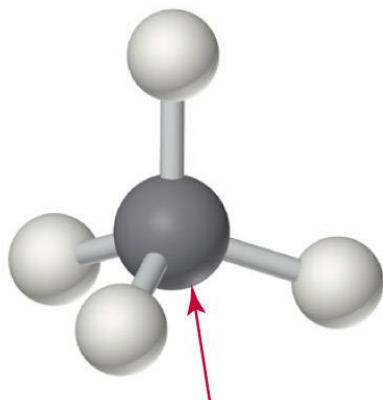
ligação σ

Ligação de Valência:
sobreposição de dois orbitais p_x para produzir uma ligação π

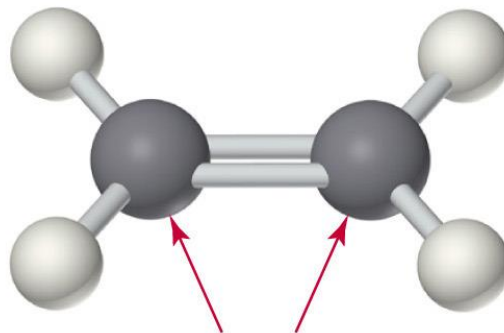


Hibridização

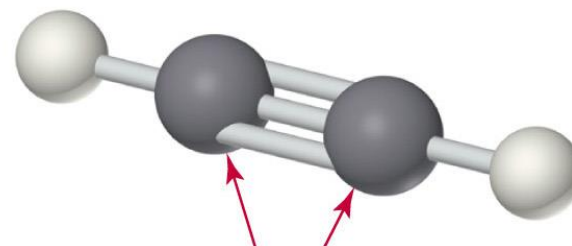
Se mais de dois átomos estão envolvidos em uma molécula, as formas dos orbitais devem coincidir com a forma das ligações (trigonal, tetraédrica, etc.). Os orbitais atômicos não tem estas formas e devem ser misturados para alcançar as formas necessárias



hibridização sp^3

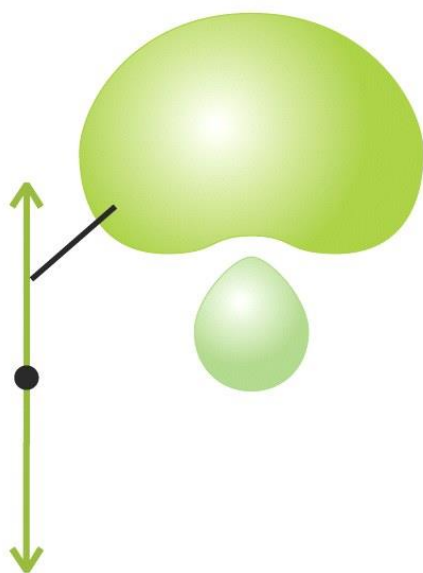


hibridização sp^2

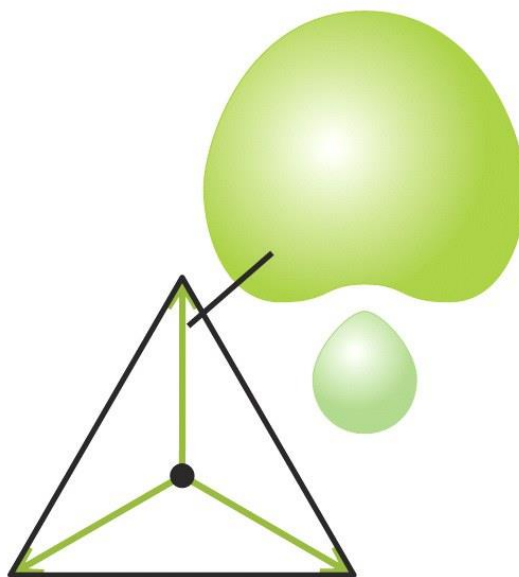


hibridização sp

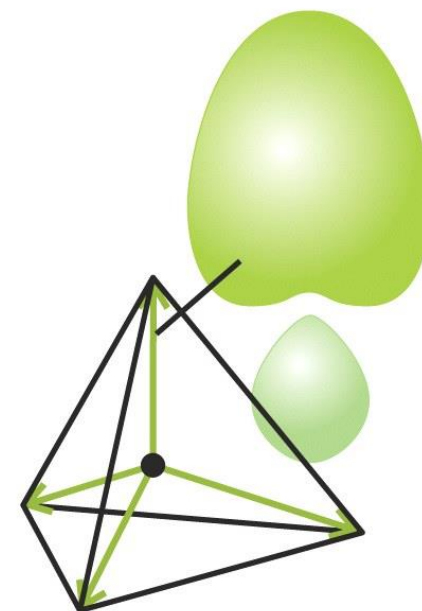
Formas de orbitais atômicos hibridizadas

(a) sp

Lembre-se:
caráter s 50 %

(b) sp^2

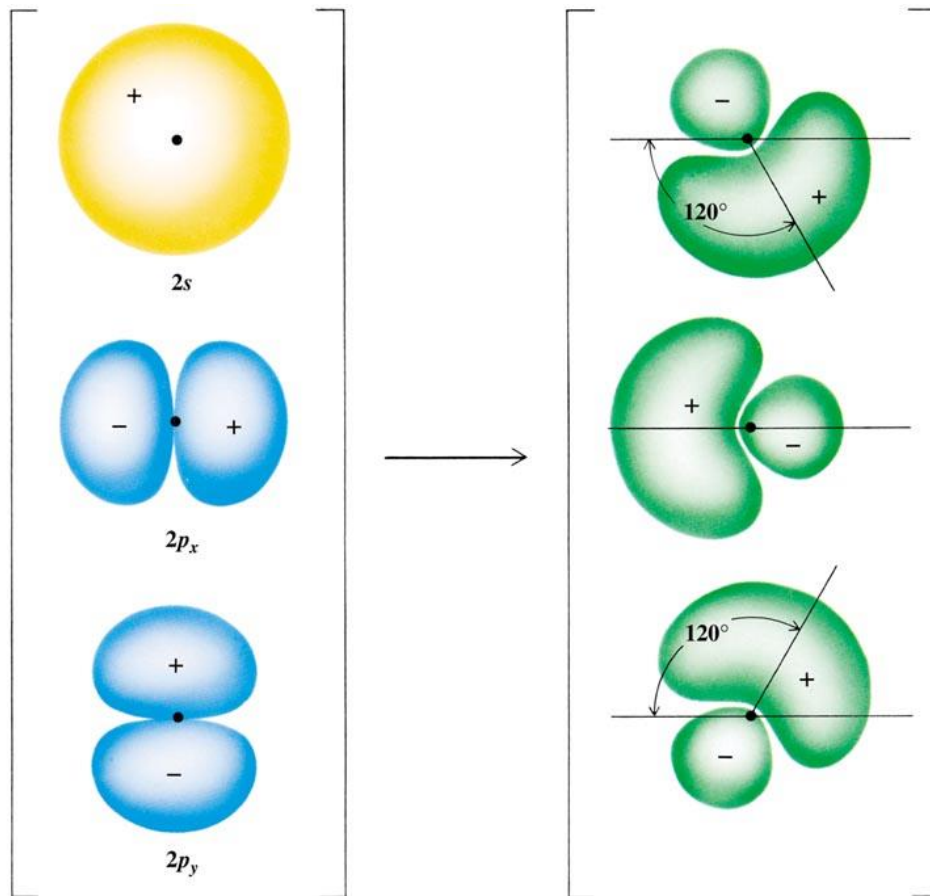
33 %

(c) sp^3

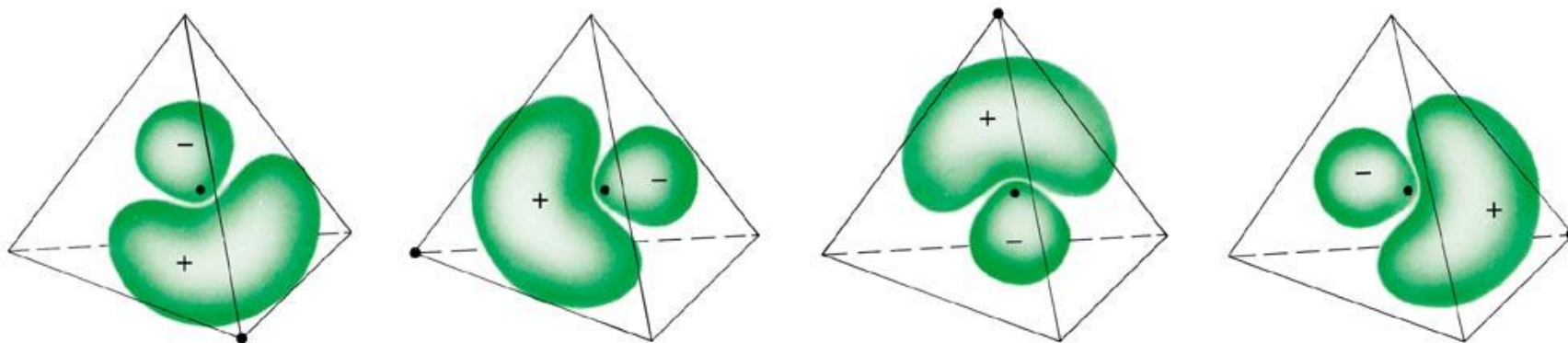
25 %

A hibridização de um orbital s e dois orbitais p para produzir três orbitais sp^2

Três orbitais atômicos OA $2s +$ dois $2p$

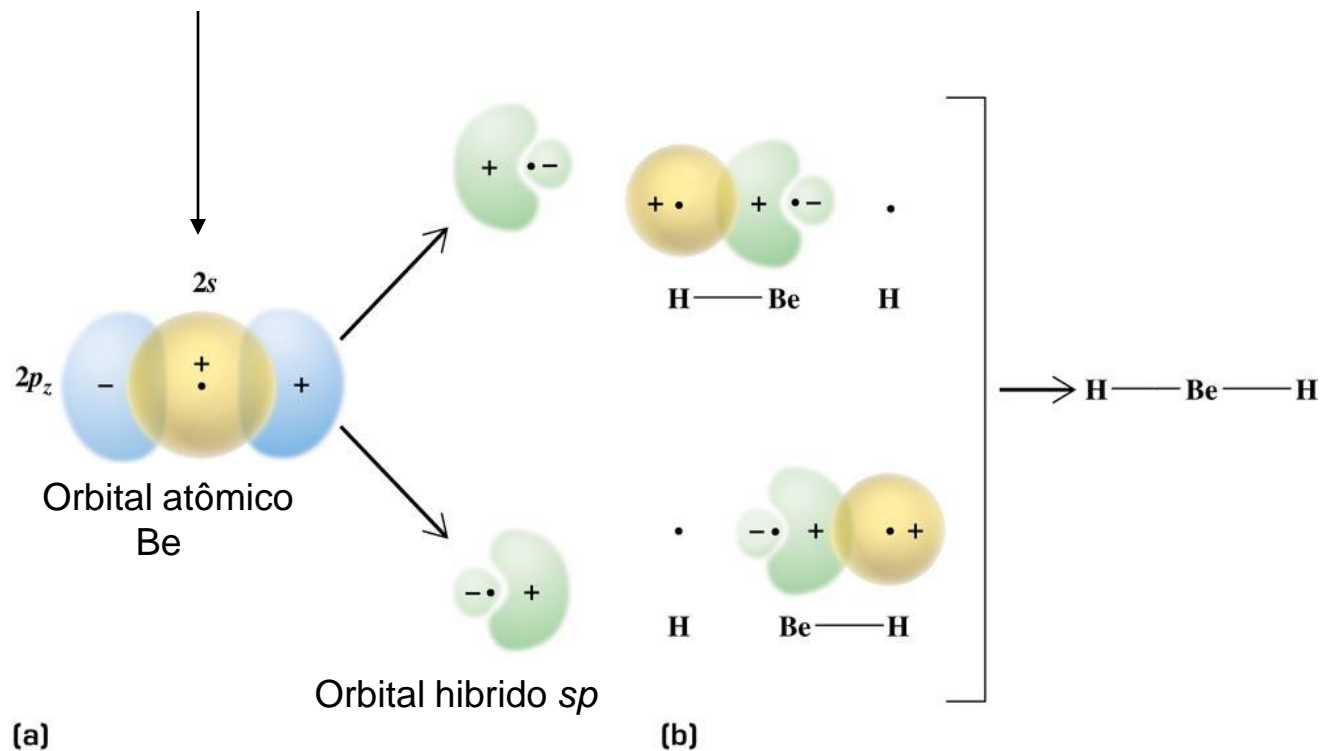


três orbitais Atômicos Híbridos OA sp^2

As orientações dos quatro orbitais sp^3 

A hibridação de um orbital s e um orbital p para produzir dois orbitais híbridos sp

orbital $2s$ pode ter fases diferentes



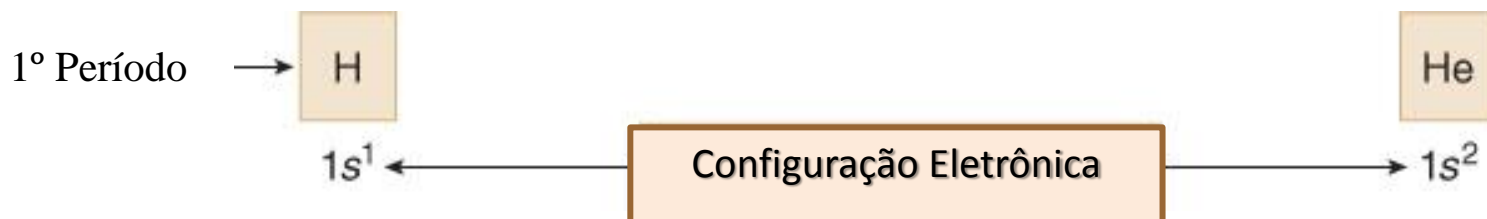
Tabela

| Hibridização e Geometria Molecular | | | |
|------------------------------------|-------|----------------------------|----------------------|
| Geometria | Nº OA | Hibridização átomo central | Nº orbitais híbridos |
| Linear | 2 | sp | 2 |
| Trigonal | 3 | sp^2 | 3 |
| Tetraédrica | 4 | sp^3 | 4 |
| Trigonal bipiramidal | 5 | sp^3d | 5 |

*Outras combinações de s,p e orbitais d podem levar a mesma forma ou diferentes distorções, mas as geometrias citadas são as mais comuns

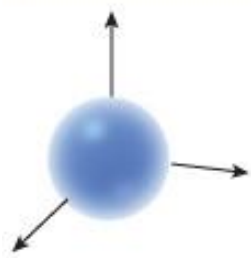
Orbital s, orbital p

Desde que há somente uma órbita no primeiro período e cada orbital pode conter no máximo dois elétrons, existem dois elementos na primeira linha, H e He.

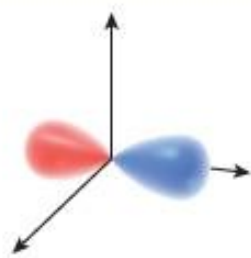


Cada elemento na segundo período da tabela periódica tem quatro orbitais disponíveis para aceitar elétrons adicionais: um orbital 2s e três orbitais 2p.

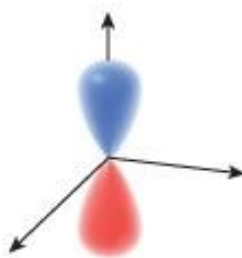
Os quatro orbitais na 2ª camada



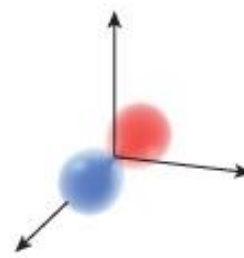
Orbital 2s



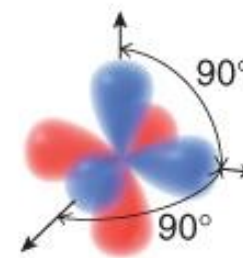
Orbital 2p_x



Orbital 2p_y



Orbital 2p_z

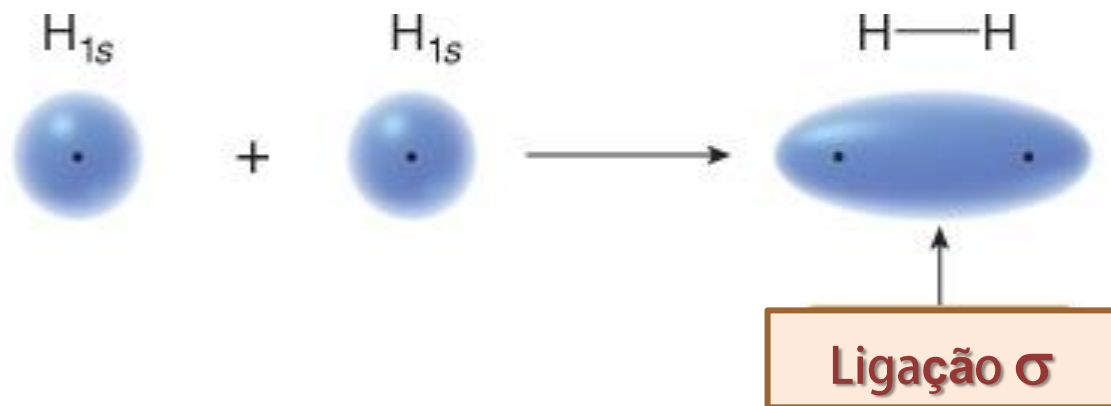


Os três orbitais 2p no mesmo sistema de eixos

Ligação Covalente: Hidrogênio

- a) Quando um orbital 1s do H de um átomo se sobrepõe ao orbital 1s do outro átomo de H, uma ligação sigma (σ) que concentra a densidade de elétrons entre os dois núcleos é formada.
- b) A forma da ligação é um cilindro simétrico, porque os elétrons que formam a ligação são distribuídos simetricamente sobre uma linha imaginária ligando os dois núcleos.

Overlap de dois orbitais 1s

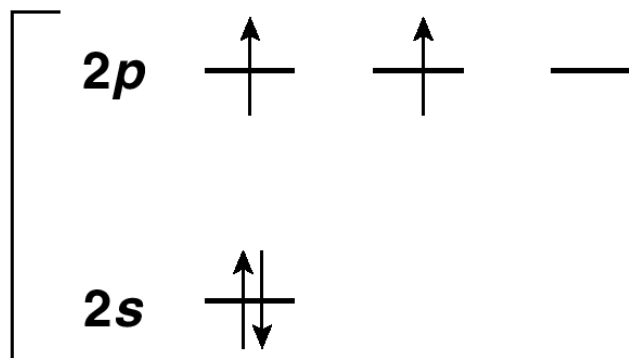


Ligação Covalente : Metano

Para avaliar as ligações padrões observadas em moléculas mais complexas, vamos detalhar os orbitais 2s e orbitais 2p de átomos no segundo período.

O Carbono tem dois elétrons de caroço (próximo ao núcleo), além de quatro elétrons de Valência. Para preencher os orbitais atômicos no arranjo mais estável, os elétrons são colocados nos orbitais de energia mais baixo. No carbono, isto coloca dois e⁻ no orbital 2s e os outros dois cada um em orbitais 2p.

**C (1s²) +
4 elétrons de valência**

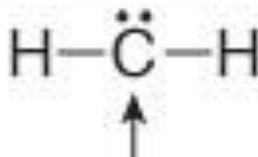


Nota: O arranjo de menor energia de elétrons para um átomo é chamado seu estado fundamental.

Ligação Covalente : Metano

- Nesta descrição, o carbono deve formar apenas duas ligações porque tem apenas dois elétrons de Valência não pareados e CH_2 deve ser uma molécula estável.
- No entanto, CH_2 é uma espécie muito instável que não pode ser isolada em condições típicas de laboratório. Observe que no CH_2 , o carbono não teria um octeto de elétrons.

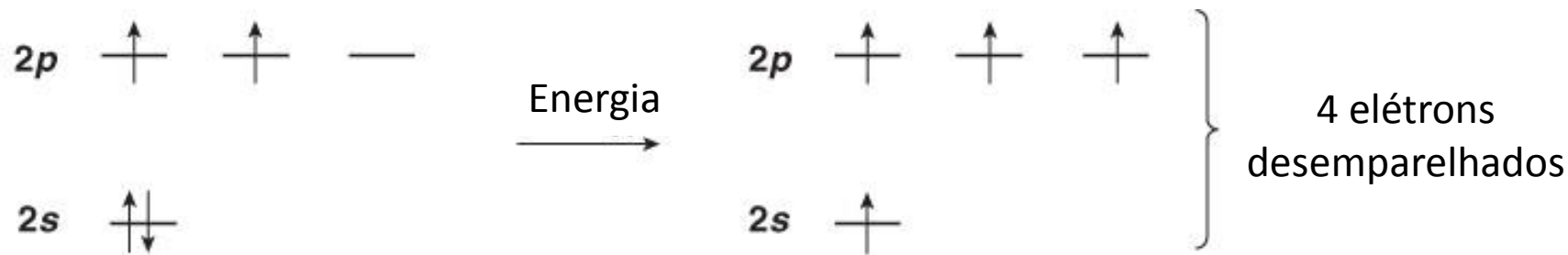
Duas Ligações a partir de dois elétrons desemparelhados



Octeto incompleto

Ligação Covalente : Metano

Há uma segunda possibilidade. Promoção de um elétron de um 2s para um orbital 2p vazio formaria quatro elétrons desemparelhados. Este processo requer energia, porque move um elétron para um orbital de maior energia. Esta configuração de elétrons de energia superior é chamada um estado eletronicamente excitado.



**Estado Fundamental do
Carbono**

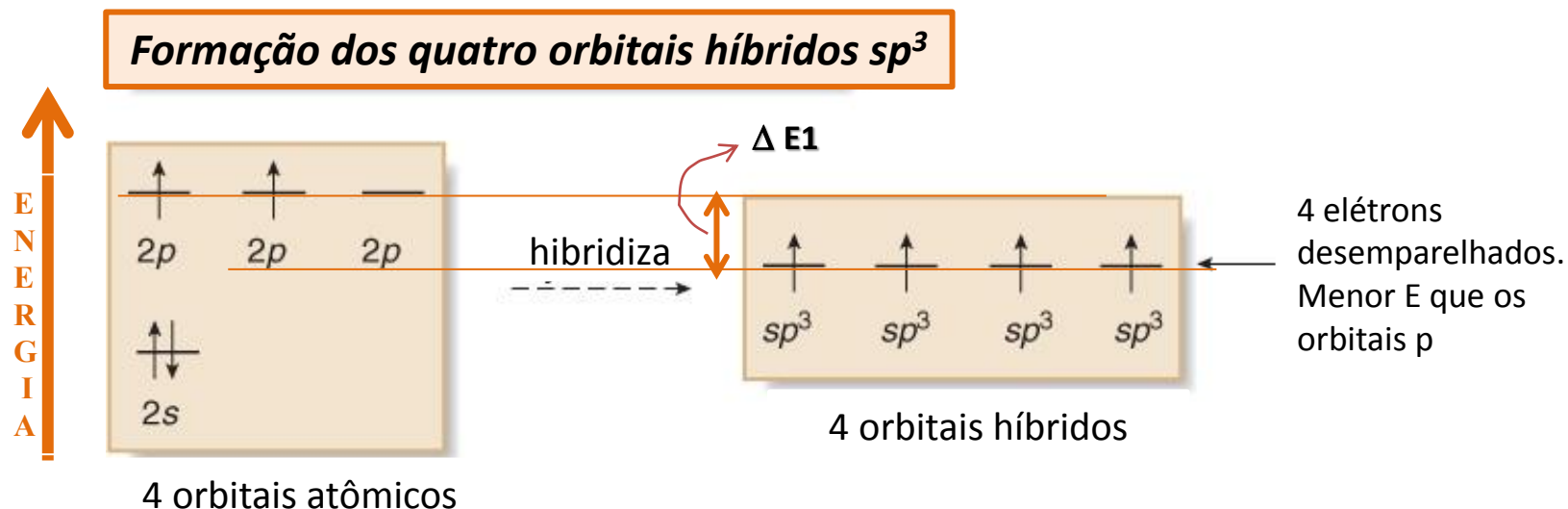
**Estado Excitado do
Carbono**

Mas essa descrição é não adequada. Carbono formaria dois tipos diferentes de ligação: três orbitais 2p e orbital 2s semipreenchidos. No entanto, evidências experimentais apontam para carbono a formação de quatro ligações idênticas no metano.

Ligação Covalente: Metano

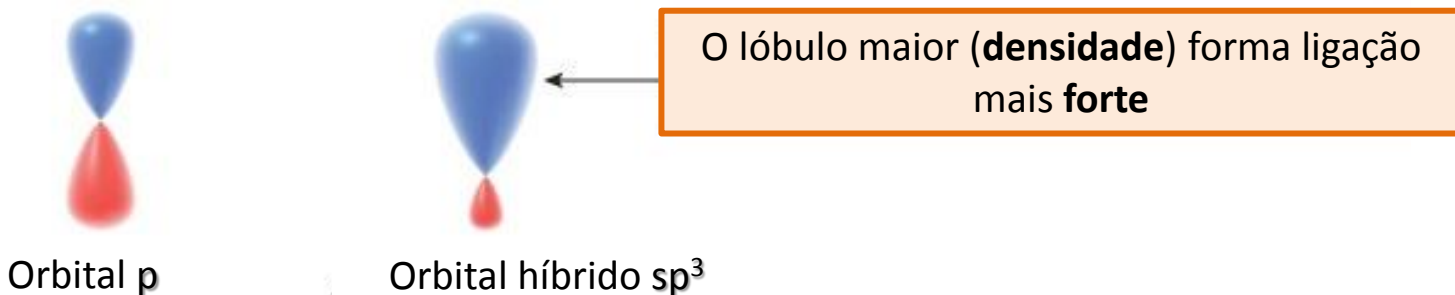
Para resolver esse dilema, químicos propõem que os átomos de carbono não utiliza s puro e puro orbitais p na formação de ligações. Em vez disso, os átomos usam um conjunto de novos orbitais, chamados orbitais híbridos.

- Hibridização é a combinação de dois ou mais orbitais atômicos para formar o mesmo número de orbitais híbridos, cada um com a mesma forma e energia.



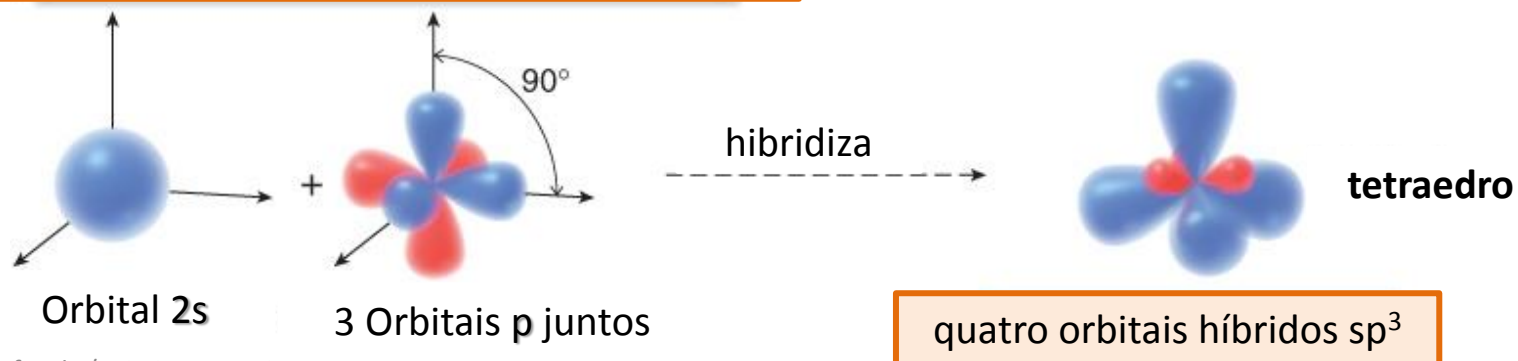
Forma e orientação das orbitais híbridos sp^3

A mistura de um orbital de 2s esférico e três orbitais 2P forma de haltere origina quatro orbitais híbridos, cada um tendo um lobo grande e um pequeno lobo.



Os quatro orbitais híbridos são orientados para os vértices de um tetraedro e formam quatro ligações equivalentes.

Forma e orientação dos orbitais híbridos sp^3



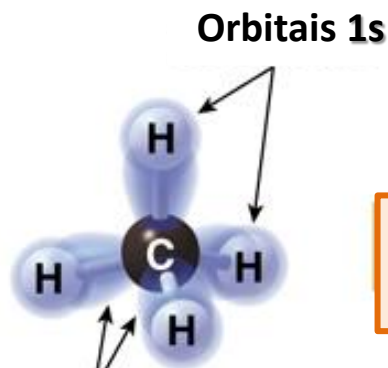
Ligação usando orbitais híbridos sp^3

Cada ligação no CH_4 é formado pela sobreposição de orbitais híbridos sp^3 do carbono com um orbital $1s$ do hidrogênio. Estas quatro ligações apontam para os vértices de um tetraedro.

Ligação no CH_4 usando orbitais híbridos sp^3



Modelo *ball-stick* do CH_4

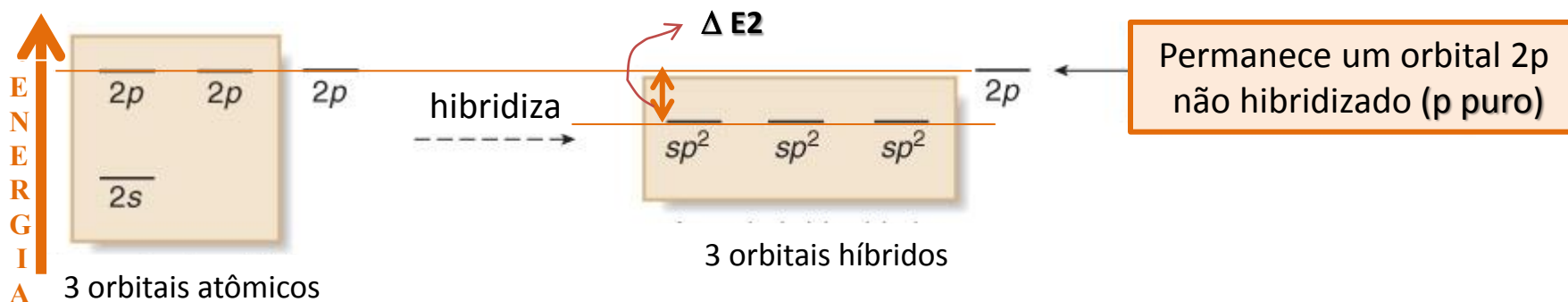


Orbitais sp^3

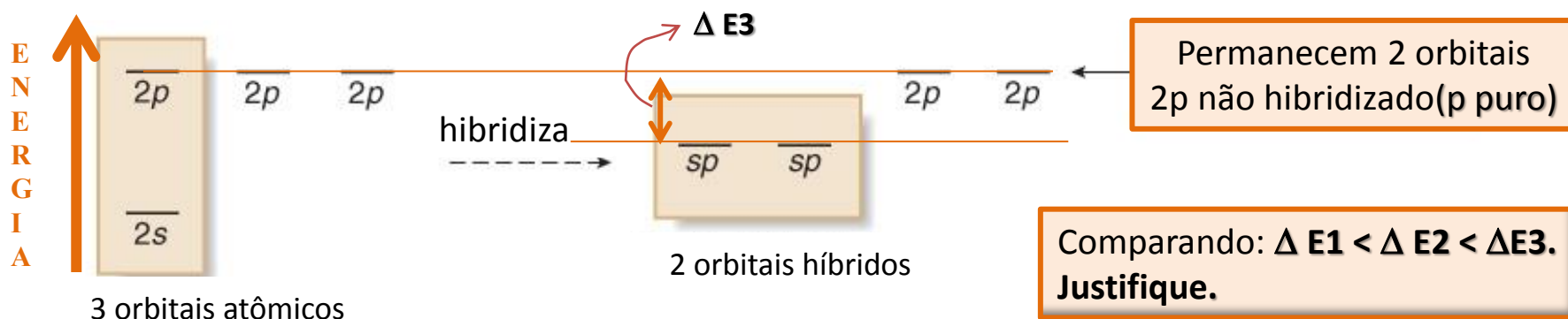
As 4 ligações C-H
são ligações σ

Outros padrões de hibridização

- Um Orbital 2s e três orbitais 2P formam quatro orbitais híbridos sp^3 .
- Um Orbital 2s e dois orbitais 2P formam três orbitais híbridos sp^2 .
- Um Orbital 2s e um orbital 2P formam dois orbitais híbridos sp .



- A formação de 3 orbitais híbridos sp^2 usa um 2s e 2 orbitais 2p, ficando um orbital 2p não hibridizado



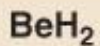
- A formação de 2 orbitais híbridos sp usa um 2s e um orbital 2p, ficando dois orbitais 2p não hibridizado

Outros padrões de hibridização

- Para determinar a hibridação de um átomo em uma molécula, contamos o número de grupos em torno do átomo.
- O número de grupos (átomos e ligações de pares de elétrons) corresponde ao número de orbitais atômicos que deve ser hibridizados formam os orbitais híbridos.

| Nº de grupos em torno do átomo | Nº de orbitais usados | Tipos de orbitais híbridos |
|--------------------------------|-----------------------|----------------------------|
| 2 | 2 | 2 orbitais híbridos sp |
| 3 | 3 | 3 orbitais híbridos sp^2 |
| 4 | 4 | 4 orbitais híbridos sp^3 |

Exemplos

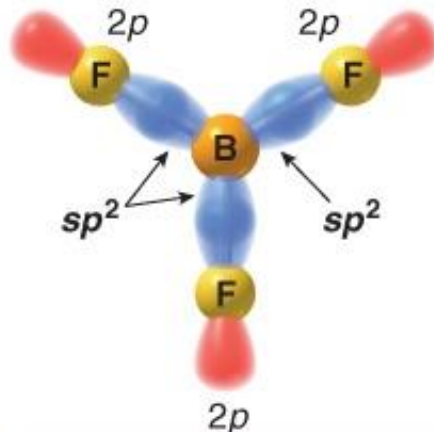


Orbitais sp

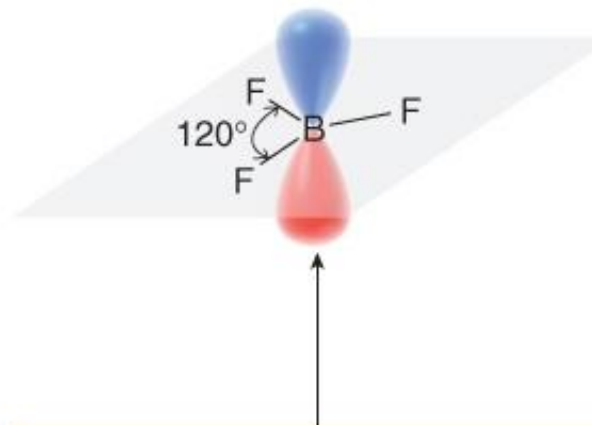
2 ligações Be-H



Vista de cima

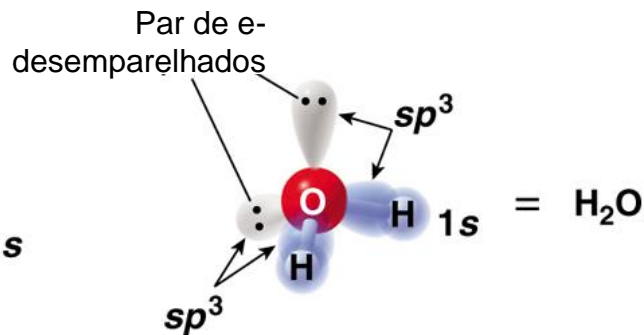
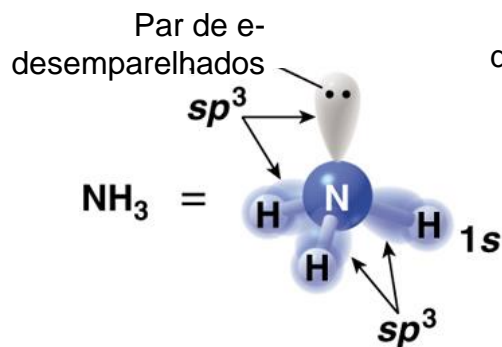


Vista de lado



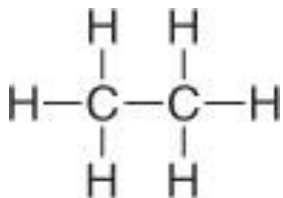
As três ligações **B-F** estão no plano, ângulo 120°

Os orbitais p (não hibridizados) ficam acima e abaixo do plano

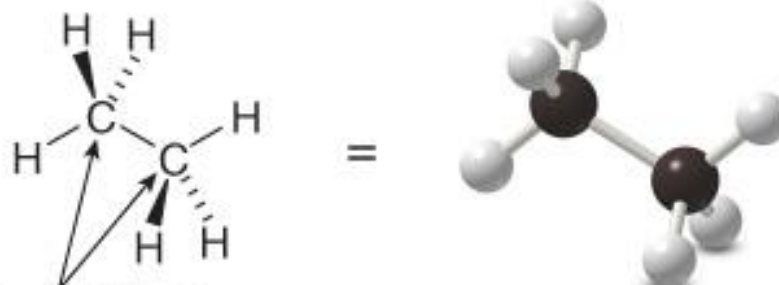


Orbitais híbridos de
NH₃ e H₂O

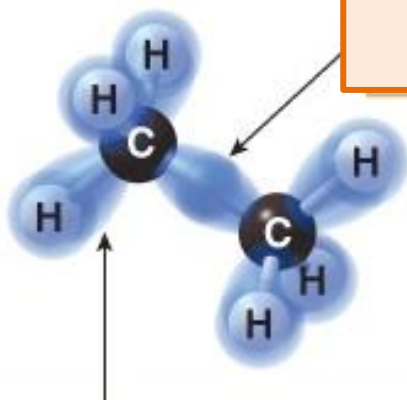
Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas



Etano



Carbono tetraédrico

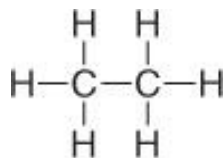


Overlap de 2 Orbitais híbridos sp^3
formam ligação C-C

**Ligações C-C e C-H
são ligações σ .**

Cada ligação C-H é formada pelo overlap do orbital sp^3 do C com $1s$ do H

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas



Etano

O modelo do etano ilustra uma característica adicional sobre sua estrutura. **Rotação ocorre em torno da ligação σ do C.**

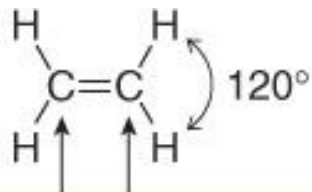


Rotação em torno da ligação σ

Observar a localização do **H** em ambas as estruturas

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

Etileno

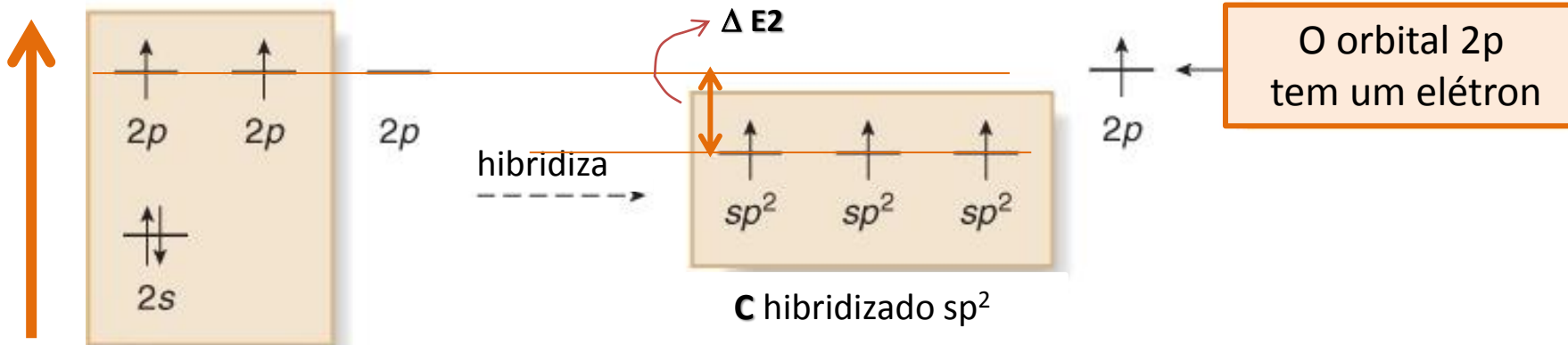


3 Centros em torno dos C

- Cada C é **trigonal e planar**.
- Cada C é **hibridizado sp^2**

Hibridização sp^2 do átomo de Carbono

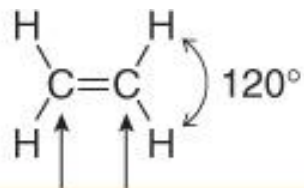
ENERGIA



C estado fundamental

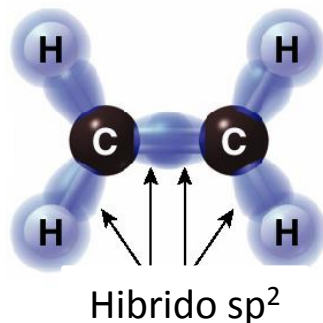
Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

Eteno



3 Centros em torno dos C

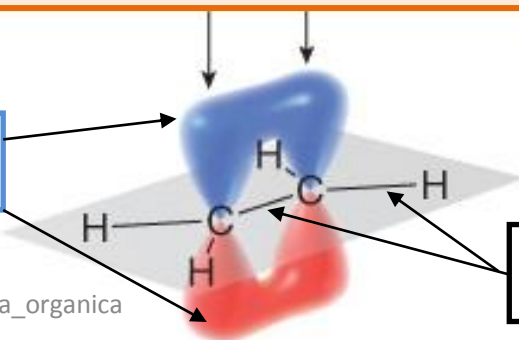
Vista de cima



Cada C tem três orbitais sp^2
A ligação C-H e C-C são ligações σ

Overlap dos orbitais $2p$ Forma a segunda ligação a C=C que é a ligações π

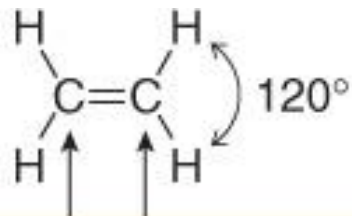
ligação π



Ligação σ

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

Eteno



3 Centros em torno dos **C**

Ao contrário da ligação $\text{C} - \text{C}$ no etano, a rotação é restrita na dupla ligação $\text{C}=\text{C}$ no etileno. Só pode ocorrer se a ligação π quebrar, em um processo que requer considerável energia.

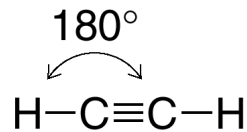
Rotação na ligação $\text{C}=\text{C}$ não ocorre



Centros marcados no mesmo lado da ligação $\text{C}=\text{C}$

Centros marcados lados opostos da ligação $\text{C}=\text{C}$

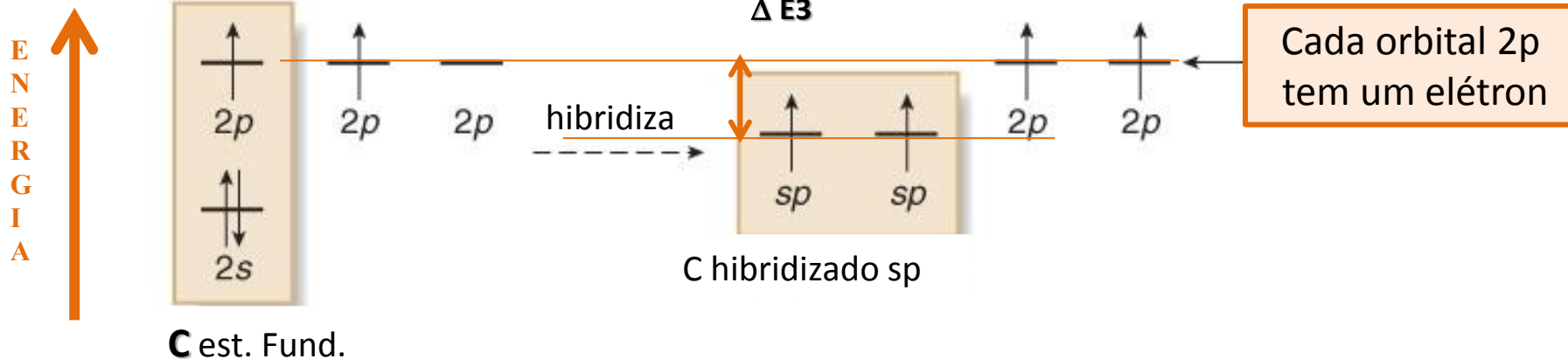
Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas



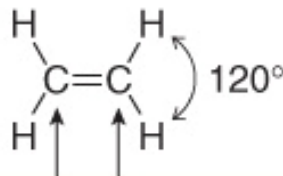
2 centros em torno do C

Acetileno

Hibridização sp do átomo de Carbono

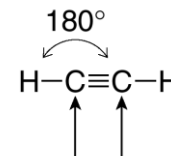


Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

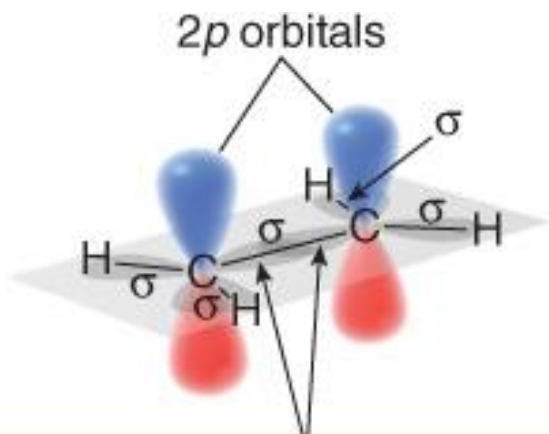


3 centros em torno do C

Acetileno

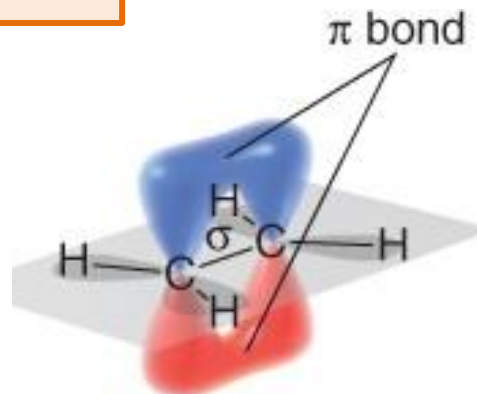


2 centros em torno do C

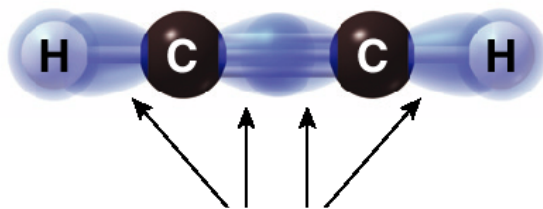


Overlap de 2 orbitais híbrido sp^2 formando a ligação σ C-C

ETILENO



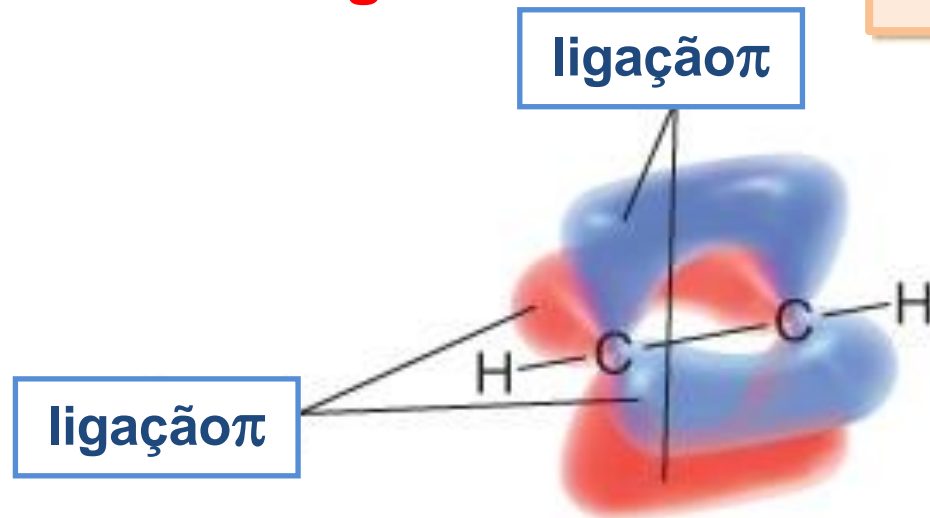
Overlap de 2 orbitais p formando a ligação π C-C



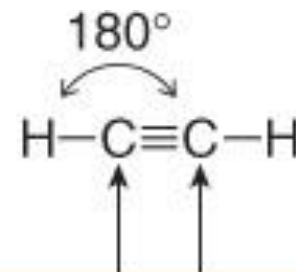
Orbitais sp

- Cada C tem 2 orbitais híbridos sp
- A ligação C-H e C-C são ligações σ

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas



Acetileno



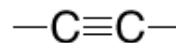
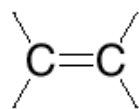
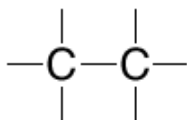
2 grupos em torno do C

- Cada átomo de carbono tem dois orbitais 2P não hibridizado que são perpendiculares uns aos outros e aos orbitais híbridos sp.
- A sobreposição paralela de dois orbitais 2P em um carbono com dois orbitais 2P do outro carbono cria as ligações π formando a ligação tripla
- Todos as ligações tripla são compostas de uma sigma (σ) e duas pi (π).

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

- À medida que aumenta a densidade eletrônica entre dois núcleos, ligações se tornam mais curtas e mais fortes.
- Assim, três ligações são mais curtas e mais forte do que ligações duplas, que são mais curtas e mais forte do que ligações simples.

Maior distância
Ligação mais fraca



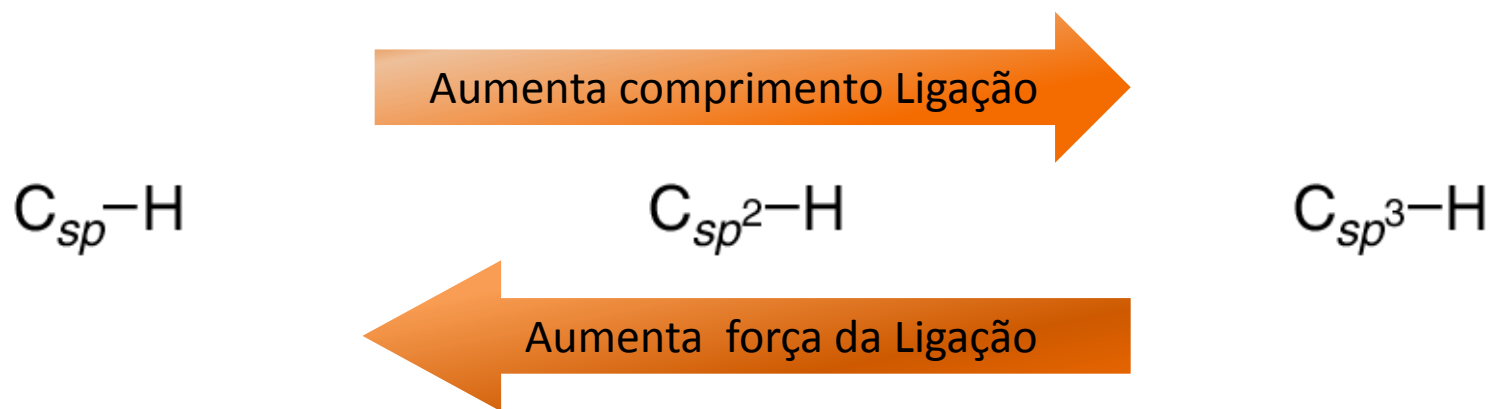
Menor distância
Ligação mais forte

Aumenta Força Ligação

Aumenta comprimento Ligação

Hibridização e a ligação em moléculas orgânicas

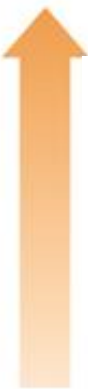



- O comprimento e a força da ligação C-H variam de acordo com a hibridização do átomo de carbono.



Força e Comprimento de ligação

Tabela

Comprimento e Força das Ligações
do Etano, Eteno e Acetileno

| Composto | C–C comprim. Lig. (Å) | | Força Ligação Kcal/mol (kJ/mol) |
|--|-----------------------|---|--|
| $\text{CH}_3\text{—CH}_3$ \uparrow $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ \uparrow $\text{HC}\equiv\text{CH}$ \uparrow | 1.53 |  Aumenta Compr. Lig | 88 (368) |
| | 1.34 | | 152 (635) |
| | 1.21 | | 200 (837) |
| | | |  Aumenta Força Lig |
| Composto | C–H comprim. Lig. (Å) | | Força Ligação Kcal/mol (kJ/mol) |
| $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{—H}$ \uparrow $\text{CH}_2=\text{C—H}$ \uparrow H \uparrow $\text{HC}\equiv\text{C—H}$ \uparrow | 1.11 |  Aumenta Compr. Lig | 98 (410) |
| | 1.10 | | 104 (435) |
| | 1.09 | | 125 (523) |
| | | |  Aumenta Força Lig |

Força e distância da ligação x Hibridização

Aumento da percentagem caráter s:

aumenta a força da ligação σ e diminui a distância da ligação σ

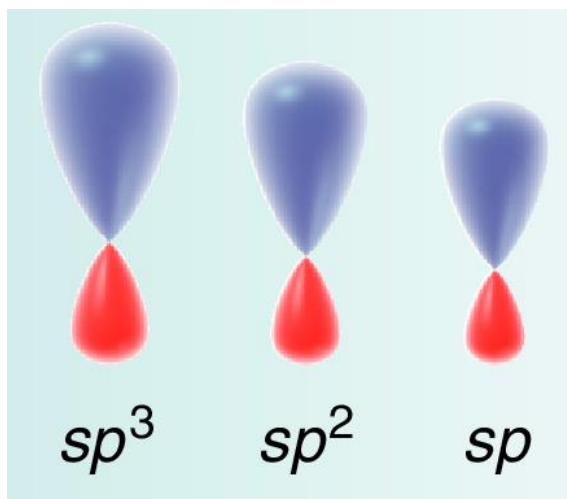
Hibridização sp^3 $x = \frac{\text{um orbital } s}{\text{quatro orbitais } 2p} = 25 \% \text{ caráter } s$

Hibridização sp^2 $x = \frac{\text{um orbital } s}{\text{tres orbitais } 2p} = 33 \% \text{ caráter } s$

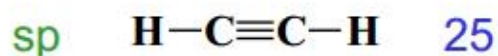
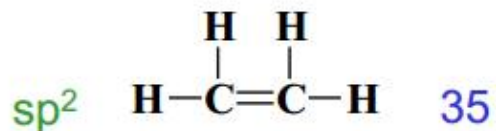
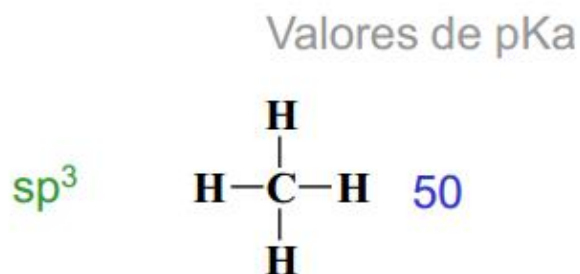
Hibridização sp $x = \frac{\text{um orbital } s}{\text{um orbital } 2p} = 50 \% \text{ caráter } s$

Força e distância da ligação x Hibridização

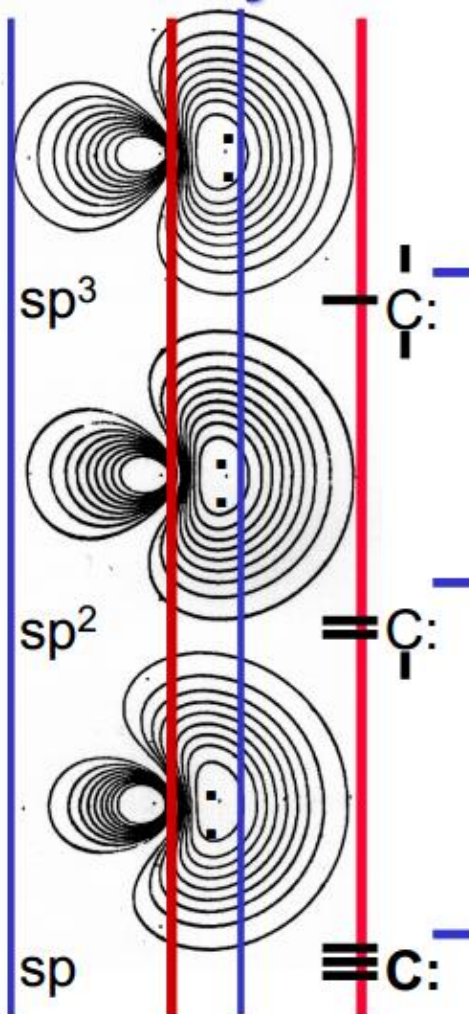
- A Medida que aumenta a porcentagem caráter s, o orbital híbrido mantém seus elétrons mais próximos ao núcleo, - geometria esférica-, a ligação fica mais curta e mais forte.
- Embora orbitais híbridos sp^3 , sp^2 e sp sejam similares na forma, eles são diferentes em tamanho.



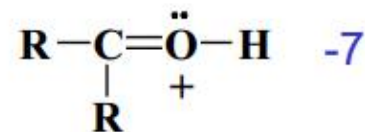
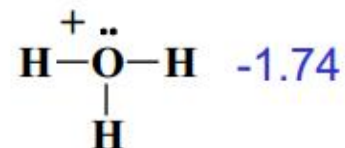
EFEITO DA HIBRIDIZAÇÃO



elétrons tem menor energia na hibridização sp ; mais próximo ao núcleo



Valores de pKa



Polaridade das moléculas

Use o procedimento a seguir para determinar se uma molécula tem um dipolo:

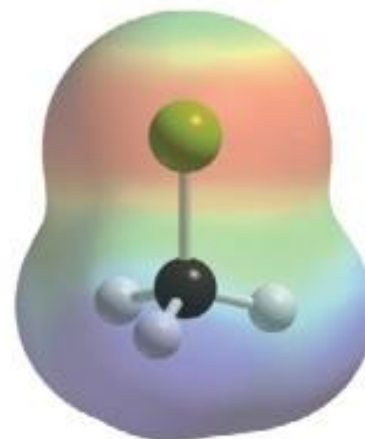
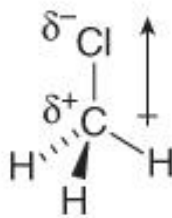
1. Use as diferenças de **eletronegatividade** para identificar todas as ligações polares e os sentidos dos dipolos de ligação.
2. Determinar a **geometria** em torno de átomos individuais, e decidir se os dipolos individuais se cancelam ou se reforçam mutuamente.

Potencial Eletrostático do CH_3Cl



↑ Aumenta
Densidade eletrônica

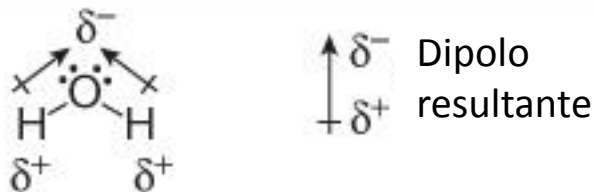
↓ Diminui
Densidade eletrônica



Polaridade das moléculas

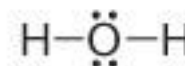
Uma **molécula polar** tem ligações polares, ou dois ou mais dipolos de ligação se reforçam. Um exemplo é a água :

As duas ligações reforçam o dipolo



O Dipolo resultante é a bissetriz do ângulo H-O-H. O ângulo mostra reforço do momento dipolar

Não representa a molécula de água

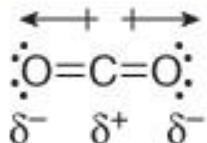


H₂O é uma molécula polar

Polaridade das moléculas

Uma molécula **apolar** tem ligações não polares, ou dois ou mais dipolos de ligação se cancelam. Um exemplo é o dióxido de carbono:

Os dois dipolos se cancelam



Não apresenta vetor
resultante

CO_2 é uma molécula apolar