



Universidade Federal de Ouro Preto

Ligações químicas e Hibridização

Aula 1

Flaviane Francisco Hilário

QUIMICA ORGÂNICA



**O QUE É QUIMICA
ORGÂNICA?**

EM 1828 – FRIEDRICH WÖHLER



cianato de amônio

URÉIA

Constituinte da urina

HOJE:

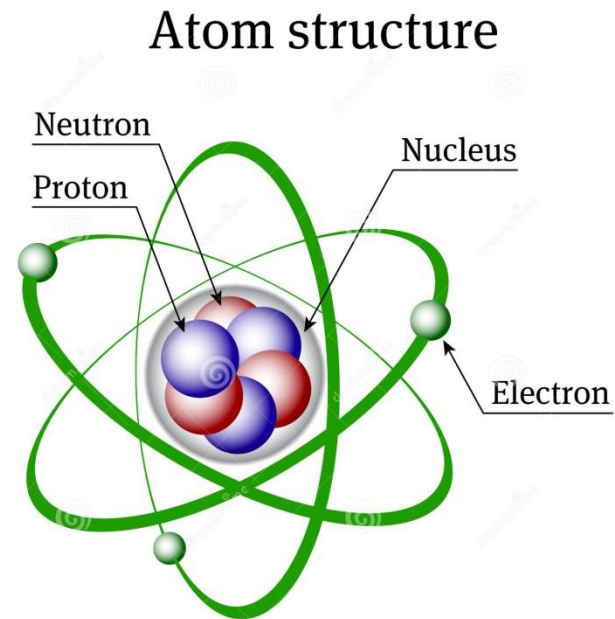
QUÍMICA ORGÂNICA É A QUÍMICA QUE **ESTUDA OS COMPOSTOS DE CARBONO.**

1 - Estudo do átomo

• Um átomo é formado por:

- prótons (carregados positivamente) e nêutrons (sem carga), que constituem o núcleo atômico e são responsáveis pela massa atômica.

- elétrons (carregados negativamente), que circulam o núcleo em órbitas definidas.



	Nêutron	Próton	Elétron
Carga	0	+1	-1
Massa/ m_p	1	1	1/1840

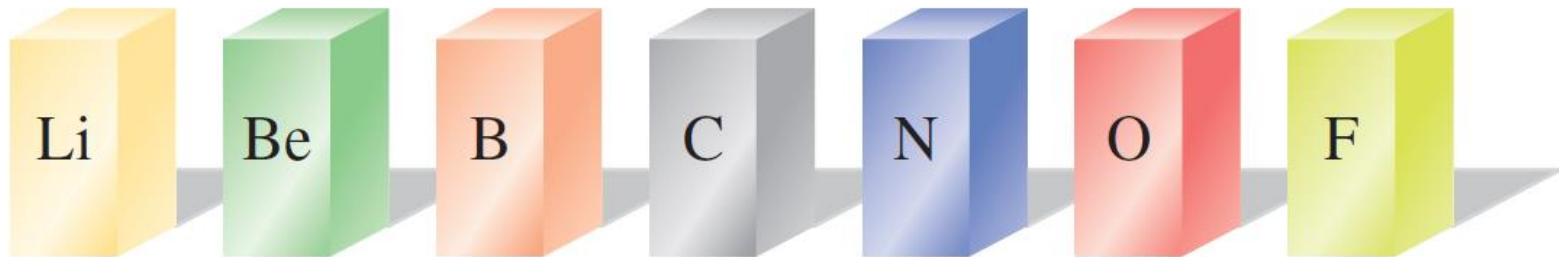
- Número atômico: número de prótons de um átomo.
- Massa atômica: a soma de prótons e nêutrons de um átomo.

ÁTOMO NEUTRO



MESMO NÚMERO DE PRÓTONS E ELÉTRONS

- Os elétrons formam ligações químicas.
- Elétrons – papel predominante sobre as propriedades químicas e físicas dos elementos e compostos.



O segundo período da tabela periódica

- O carbono não libera nem aceita elétrons **prontamente**.
- O carbono compartilha elétrons com outros átomos de carbono bem como com diferentes tipos de átomos.

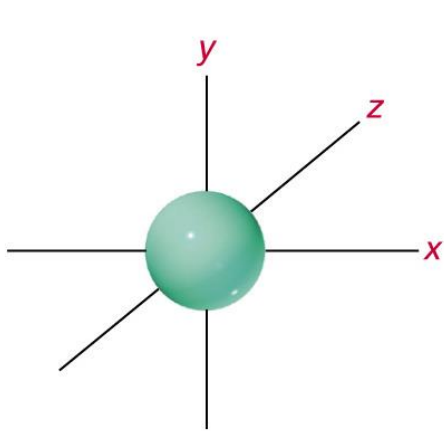
1.1 - ORBITAIS ATÔMICOS

- 1924 – Broigle - elétrons apresentavam, também, propriedade de onda – início da mecânica quântica;
- 1926 – Schrödinger – comportamento dos elétrons pode ser descrito por equações de onda;

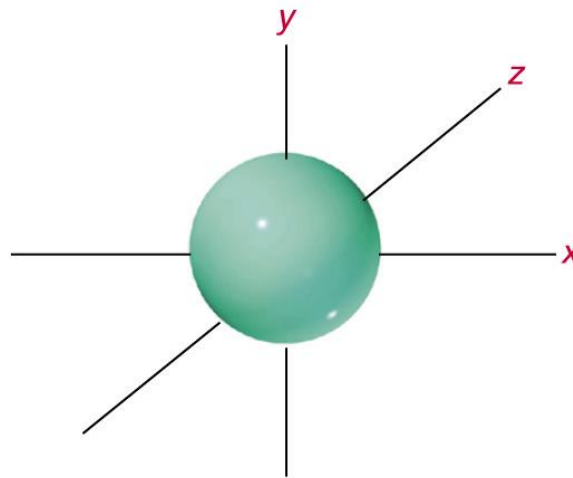
As soluções para essas equações são chamadas funções de onda ou **ORBITAIS**.

- O orbital é a região do espaço onde é mais provável encontrar um elétron.
- Os orbitais atômicos são designados pelas letras *s*, *p*, *d* e *f*.

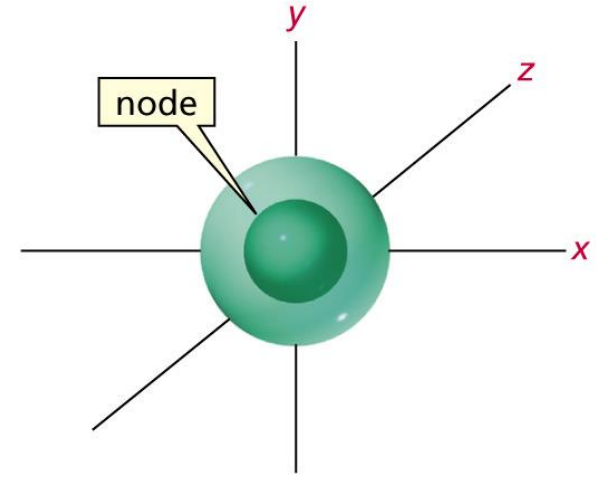
- O orbital s é esférico.



1s atomic orbital

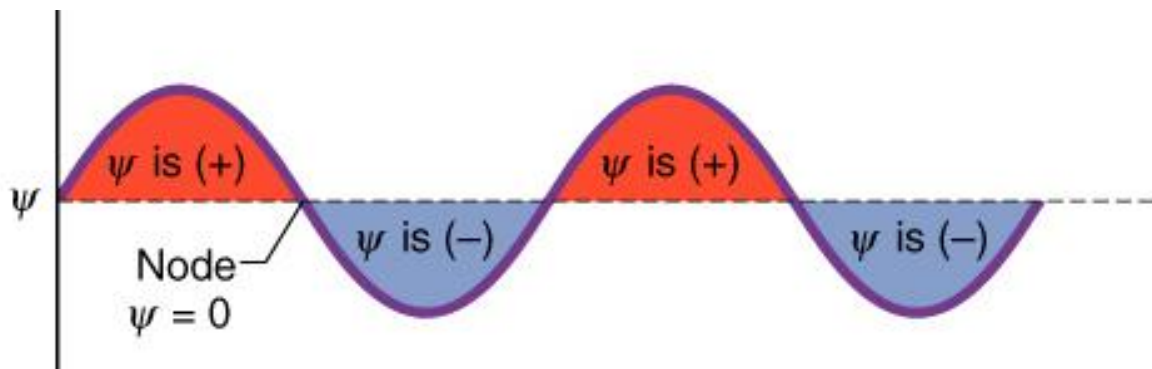


2s atomic orbital
node not shown

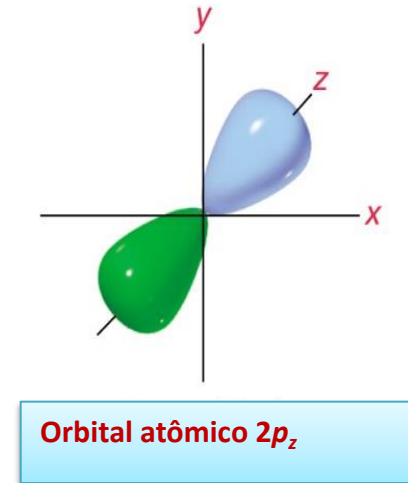
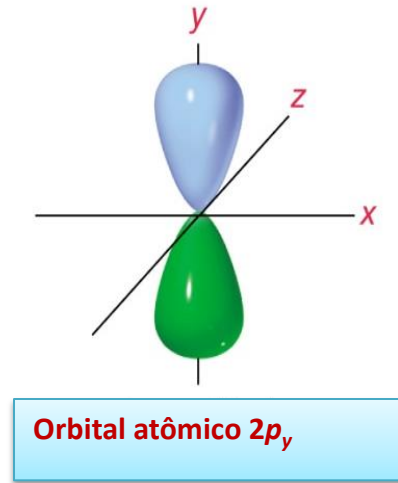
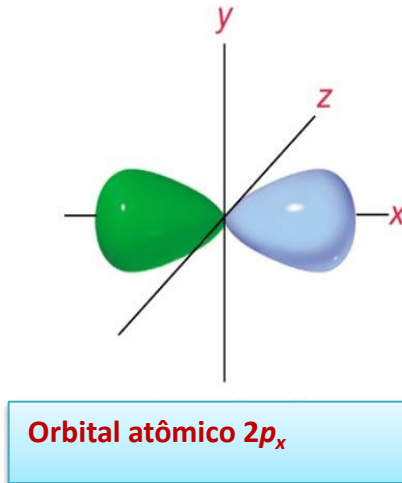


2s atomic orbital
node shown

Nodo – região onde a probabilidade de se encontrar um elétron é zero.



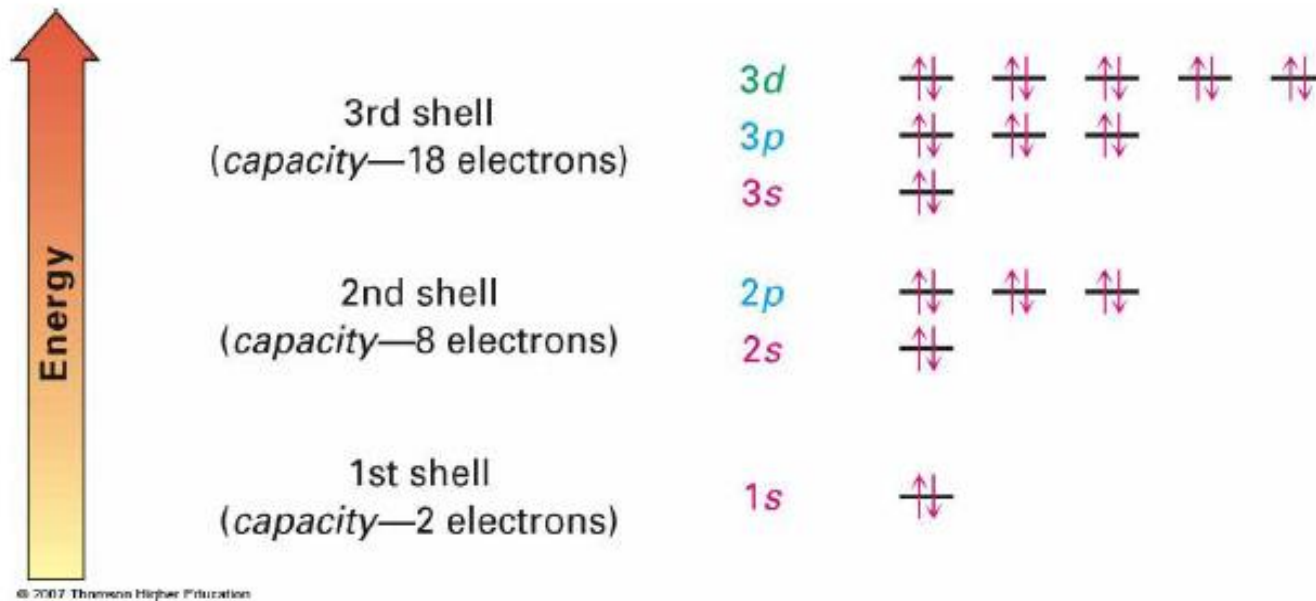
- O orbital p tem forma de alteres distribuídos sobre os três eixos cartesianos (x , y , z).



- **Orbitais degenerados** têm a mesma energia.

- Os orbitais atômicos se localizam sobre diversos níveis de energia ou camadas, que são designados por números (1 a 7).

Orbitais s, p, d: Universo de possibilidades



- O orbital atômico mais perto do núcleo tem a menor energia.
- Os orbitais 2p têm energia mais alta que o orbital 2s → mais distantes do núcleo.

- Exemplos: configuração eletrônica de alguns elementos.

Tabela 1.2 Configuração no estado fundamental de átomos pequenos

Átomo	Nome do elemento	Número atômico	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	3s
H	Hidrogênio	1	↑					
He	Hélio	2	↑↓					
Li	Lítio	3	↑↓	↑				
Be	Berílio	4	↑↓	↑↓				
B	Boro	5	↑↓	↑↓	↑			
C	Carbono	6	↑↓	↑↓	↑	↑		
N	Nitrogênio	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
O	Oxigênio	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
F	Flúor	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Ne	Neônio	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	
Na	Sódio	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑

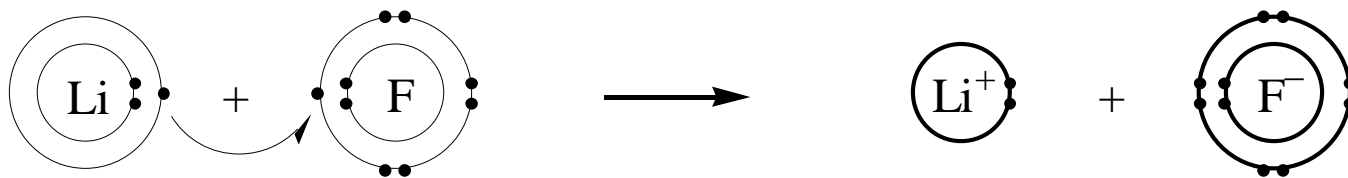
- O princípio de Aufbau: primeiro os elétrons ocupam os orbitais de menor energia.
- O princípio de exclusão de Pauli: somente dois elétrons podem ocupar o mesmo orbital e os dois elétrons têm que ter *spins* opostos.
- A regra de Hund: os elétrons ocuparão orbitais degenerados vazios antes de serem emparelhados em um mesmo orbital.

2 – Ligações químicas

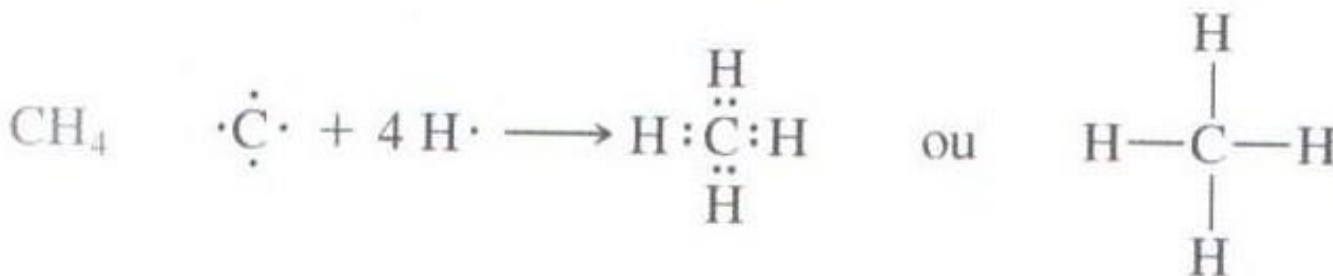
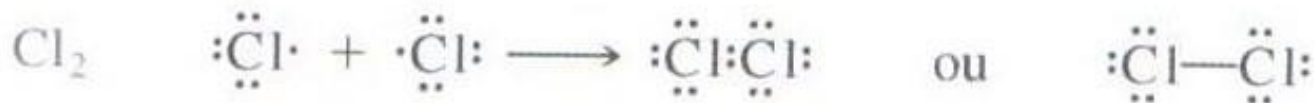
- *Lewis propôs a regra do octeto: “um átomo é mais estável se sua camada mais externa contém oito elétrons”* - configuração de gás nobre.
- Elétrons mais internos – elétrons do cerne.
- Elétrons da camada mais externa (última camada) – **elétrons de valência.**
- **Elétrons de valência – participam de ligações químicas e de reações orgânicas.**

Tipos de ligações químicas:

- **Ligação iônica** (ou eletrovalente) ➡ formada pela transferência de um ou mais elétrons de um átomo para outro ➡ íons.

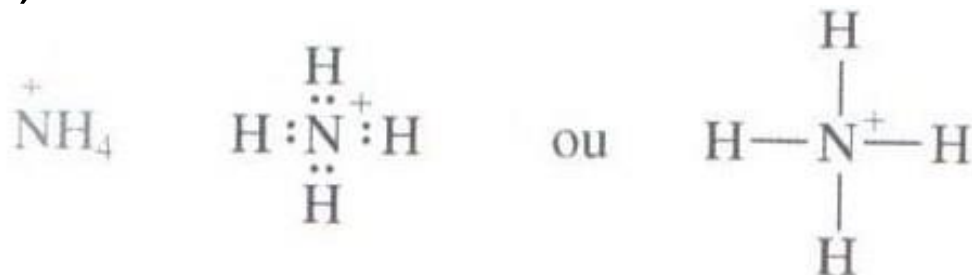


- **Ligação covalente** ➡ formada quando os átomos compartilham elétrons.

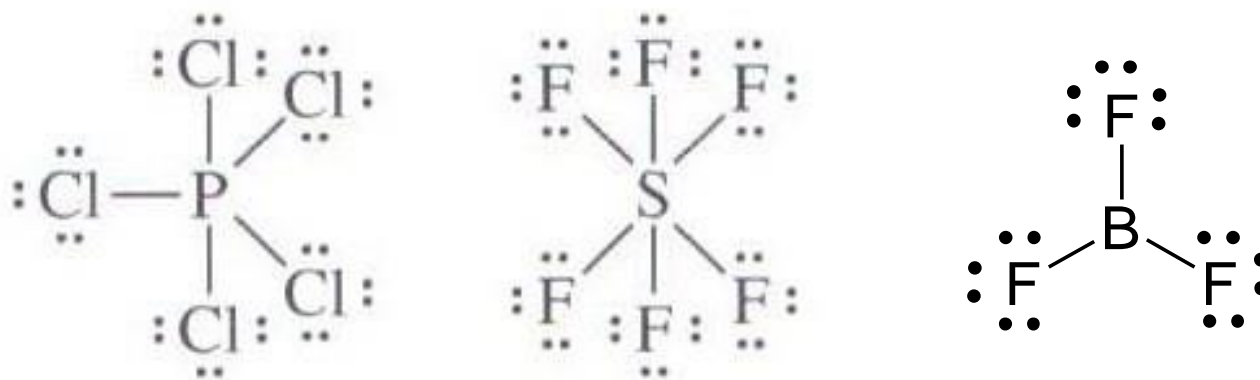


OBSERVAÇÕES:

- Íons podem conter ligações covalentes. (íons covalentes).



- Exceções à regra do octeto



Ligações
covalentes

Ligações
iônicas

Diferença de eletronegatividade



Tipos de ligações químicas

Ligação iônica

Ligação covalente polar

Ligação covalente apolar



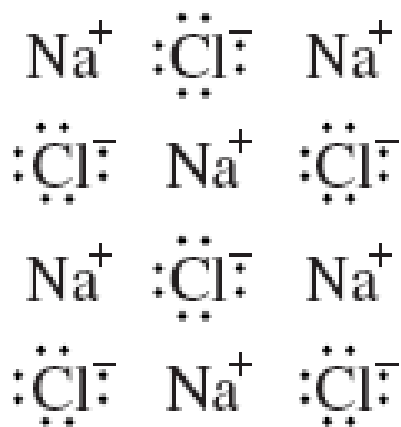
Eletronegatividade de alguns elementos

IA	IIA	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
H 2.1								
Li 1.0	Be 1.5			B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.2			Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
K 0.8	Ca 1.0							Br 2.8
								I 2.5

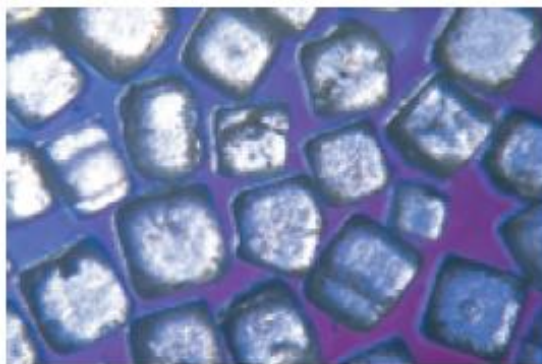


2.1 – LIGAÇÃO IÔNICA

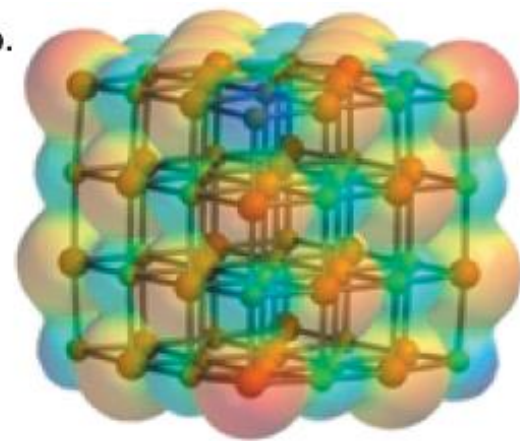
- Quando se passa gás cloro sobre sódio metálico, obtêm-se o sal cloreto de sódio.
- Atração eletrostática ➡ força atrativa de cargas opostas.
- Ligação resultante de **força eletrostática** ➡ **ligação iônica**.



a.



b.



2.2 – LIGAÇÃO COVALENTE



Dois átomos de Hidrogênio: cada um com um elétron desemparelhado.



Molécula de Hidrogênio: ligação covalente por compartilhamento de par de elétrons.



Dois átomos de Flúor: cada um com sete elétrons na camada de valência.



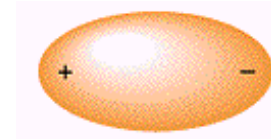
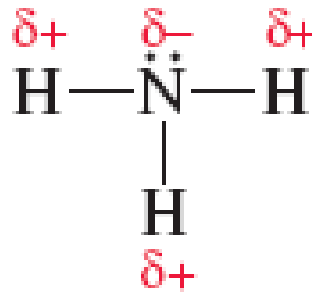
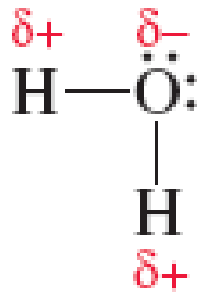
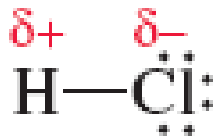
Molécula de Flúor: ligação covalente por compartilhamento de par de elétrons.

- Outros exemplos de ligações covalentes:

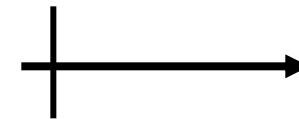


2.2.2 – Ligação covalente **POLAR**

- Ocorre entre átomos de eletronegatividades diferentes.
- Quanto mais eletronegativo for o átomo mais fortemente ele atrairá os elétrons.



Dipolo
gerando um
momento
dipolo (μ)



Extremidade
positiva

Extremidade
negativa

2.2.2.1 - Momento de dipolo da ligação

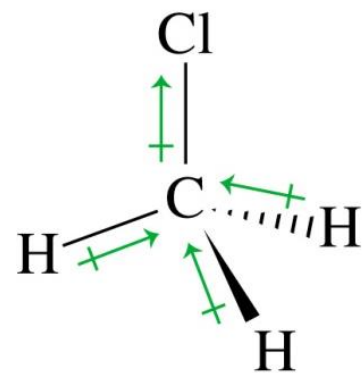
- Uma ligação polar possui uma extremidade positiva e uma negativa.

Tabela 1.4 Momentos de dipolo das ligações mais comumente encontradas

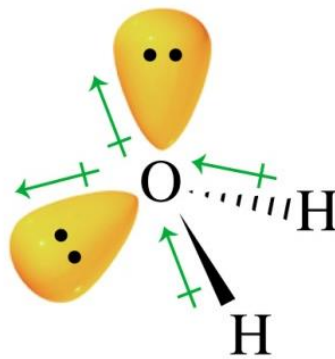
Ligação	Momento de dipolo (D)	Ligação	Momento de dipolo (D)
H—C	0,4	C—C	0
H—N	1,3	C—N	0,2
H—O	1,5	C—O	0,7
H—F	1,7	C—F	1,6
H—Cl	1,1	C—Cl	1,5
H—Br	0,8	C—Br	1,4
H—I	0,4	C—I	1,2

2.2.2.2 – Momento de dipolo da molécula

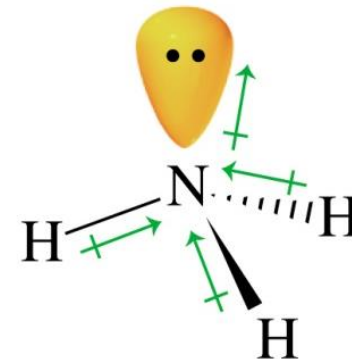
- Moléculas poliatômicas - o momento de dipolo será a resultante da soma vetorial dos momentos de dipolo de todas as ligações.
- Moléculas POLARES ($\mu \neq 0$)
 - Átomos de eletronegatividades diferentes, cujos momentos de dipolo NÃO se anulam.



chloromethane
 $\mu = 1.87 \text{ D}$



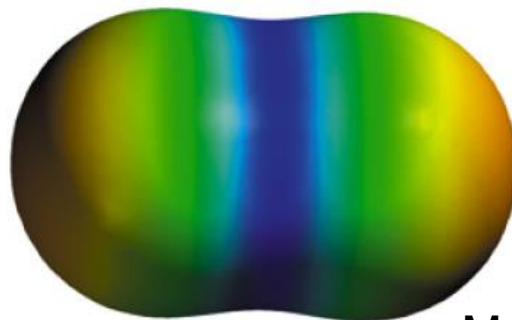
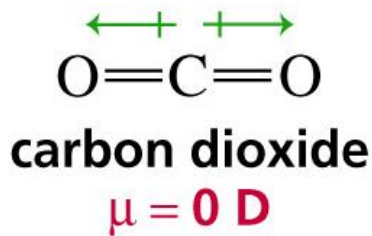
water
 $\mu = 1.85 \text{ D}$



ammonia
 $\mu = 1.47 \text{ D}$

- Pares de elétrons não ligantes fazem grandes contribuições para o μ .

- Moléculas APOLARES ($\mu = 0$)
- Átomos de mesma eletronegatividade.
- Átomos de eletronegatividades diferentes, cujos momentos de dipolo se anulam → GEOMETRIA da molécula.

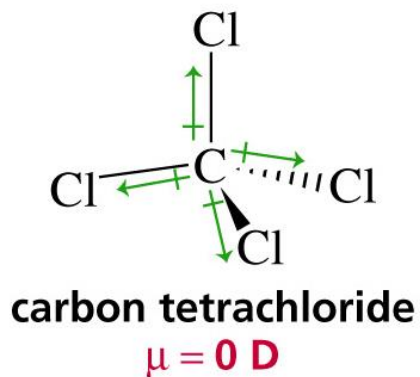


Mapa de potencial eletrostático

Vermelho < **alaranjado** < **amarelo** < **verde** < **azul**

Mais negativo

Mais positivo



- Existem moléculas formadas por ligações **polares**, mas que são **apolares** (possuem $\mu = 0$).

Fórmula	$\mu(D)$	Fórmula	$\mu(D)$
H ₂	0	CH ₄	0
Cl ₂	0	CH ₃ Cl	1,87
HF	1,91	CH ₂ Cl ₂	1,55
HCl	1,08	CHCl ₃	1,02
HBr	0,42	CCl ₄	0
HI	0,42	NH ₃	1,47
BF ₃	0	NF ₃	0,24
CO ₂	0	H ₂ O	1,85

Observar geometria das moléculas

- **Geometria das moléculas**

- Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons do Nível de Valência (RPENV)

elétrons ligantes



Menor força de repulsão

elétrons não-ligantes



Maior força de repulsão

Devido às forças de repulsão, os elétrons do nível de valência tendem a ficar o mais distante possível.



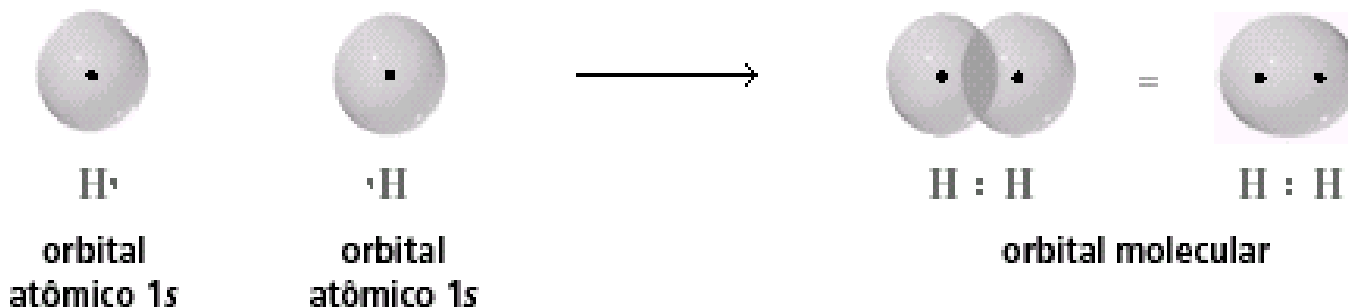
Geometria das Moléculas

- Geometria das moléculas e dos íons pela teoria RPENV

Número de Pares de Elétrons no Átomo Central					
Ligantes	Não–ligantes	Total	Estado de Hibridização do Átomo Central	Geometria da Molécula ou Íon	Exemplo
2	0	2	sp	Linear	BeH ₂
3	0	3	sp ²	Trigonal plana	BF ₃ , CH ₃ ⁺
4	0	4	sp ³	Tetraédrica	CH ₄ , NH ₄ ⁺
3	1	4	~ sp ³	Pirâmide trigonal	NH ₃
2	2	4	~ sp ³	Angular	H ₂ O

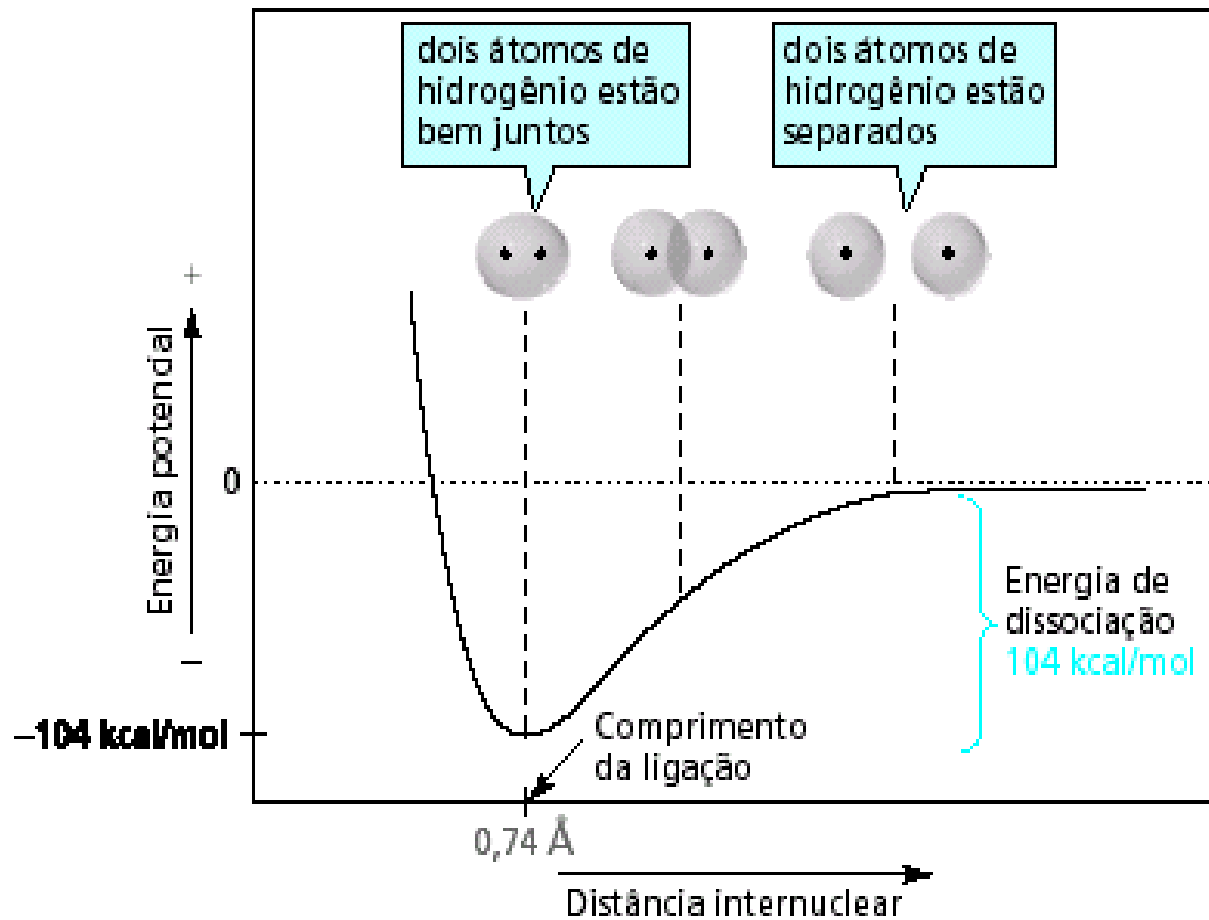
3 – Teoria do Orbital Molecular (TOM)

- Ligações covalentes - resultam da combinação de orbitais atômicos para formar os **orbitais moleculares**.



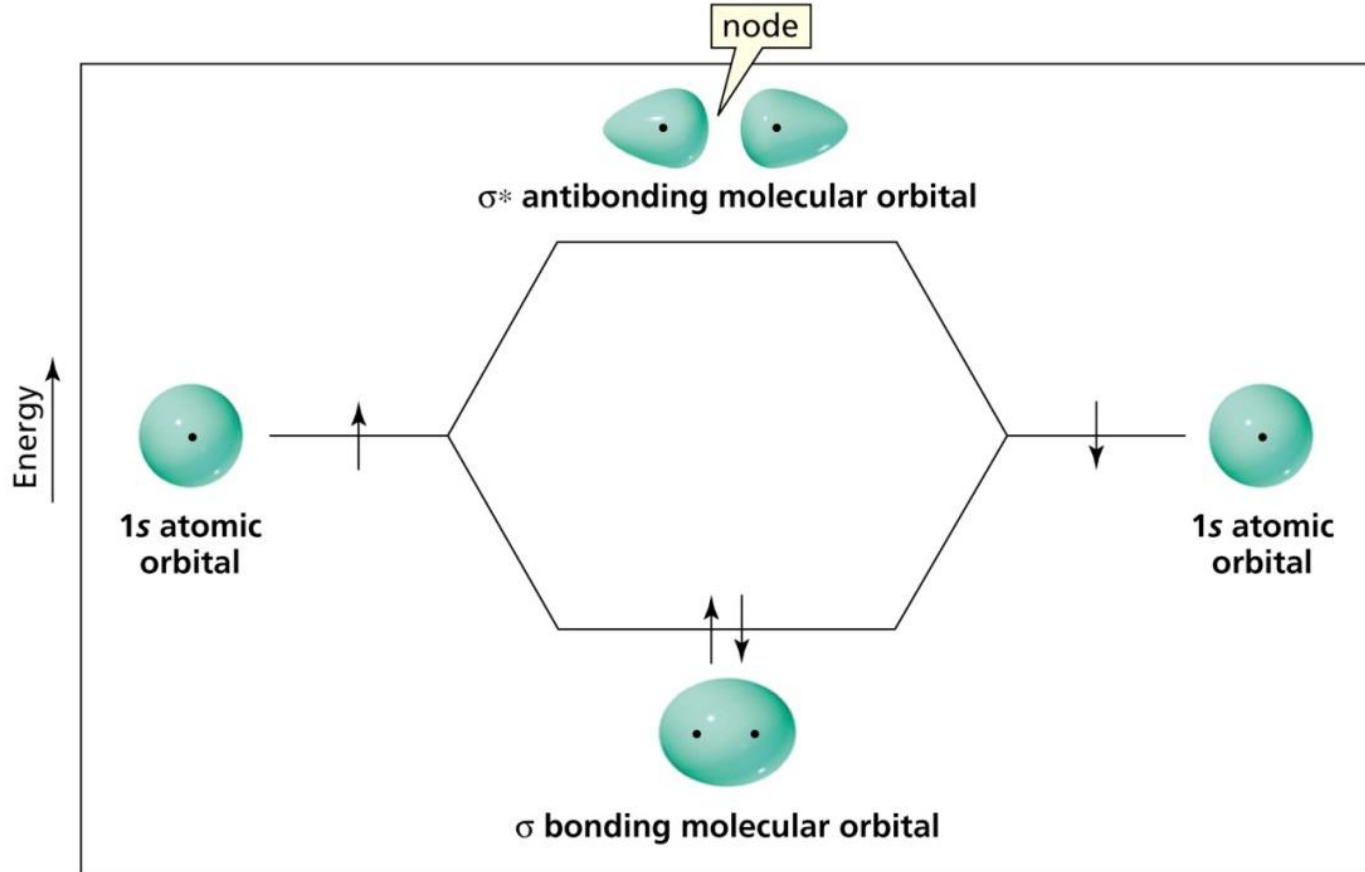
- Ligação sigma (σ): formada pela sobreposição de dois orbitais s.
- Força de ligação: energia requerida para quebrar uma ligação ou energia liberada para formar uma ligação.

Formação da molécula de hidrogênio



Força da ligação = energia de dissociação da ligação

O número de orbitais é conservado

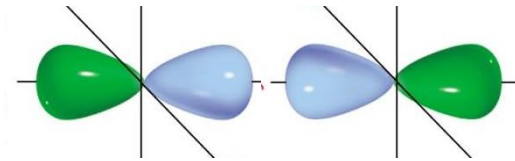


- Sobreposição em fase forma um OM **ligante**.
- Sobreposição fora de fase forma um OM **antiligante**.
- Estado fundamental x Estado excitado.

Sobreposição de orbitais p

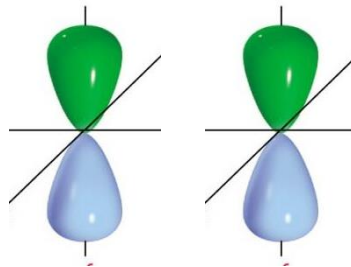
- Ligação σ : formada pela sobreposição frontal de dois orbitais

p .



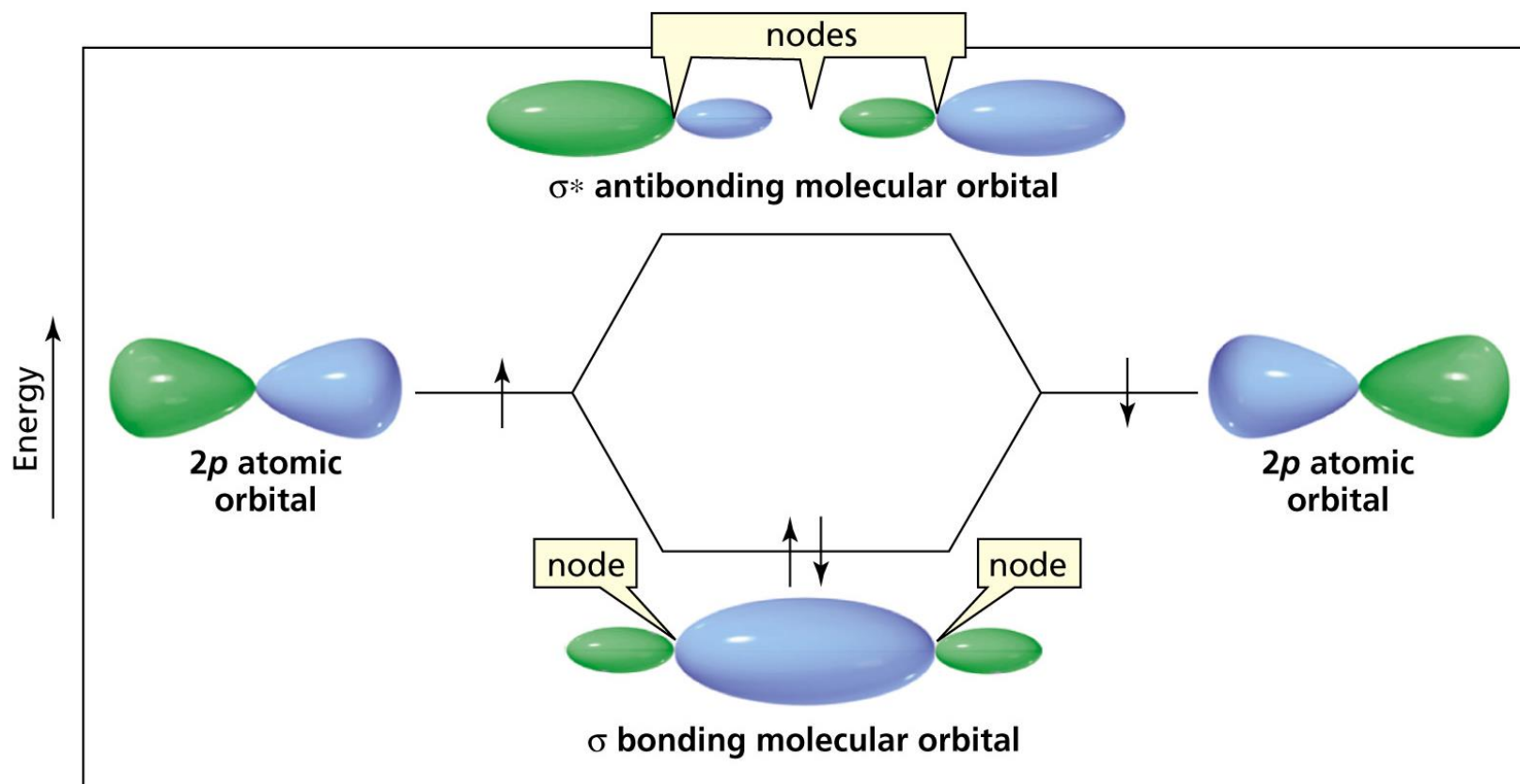
- Ligação π : formada pela sobreposição lateral de dois orbitais

p .

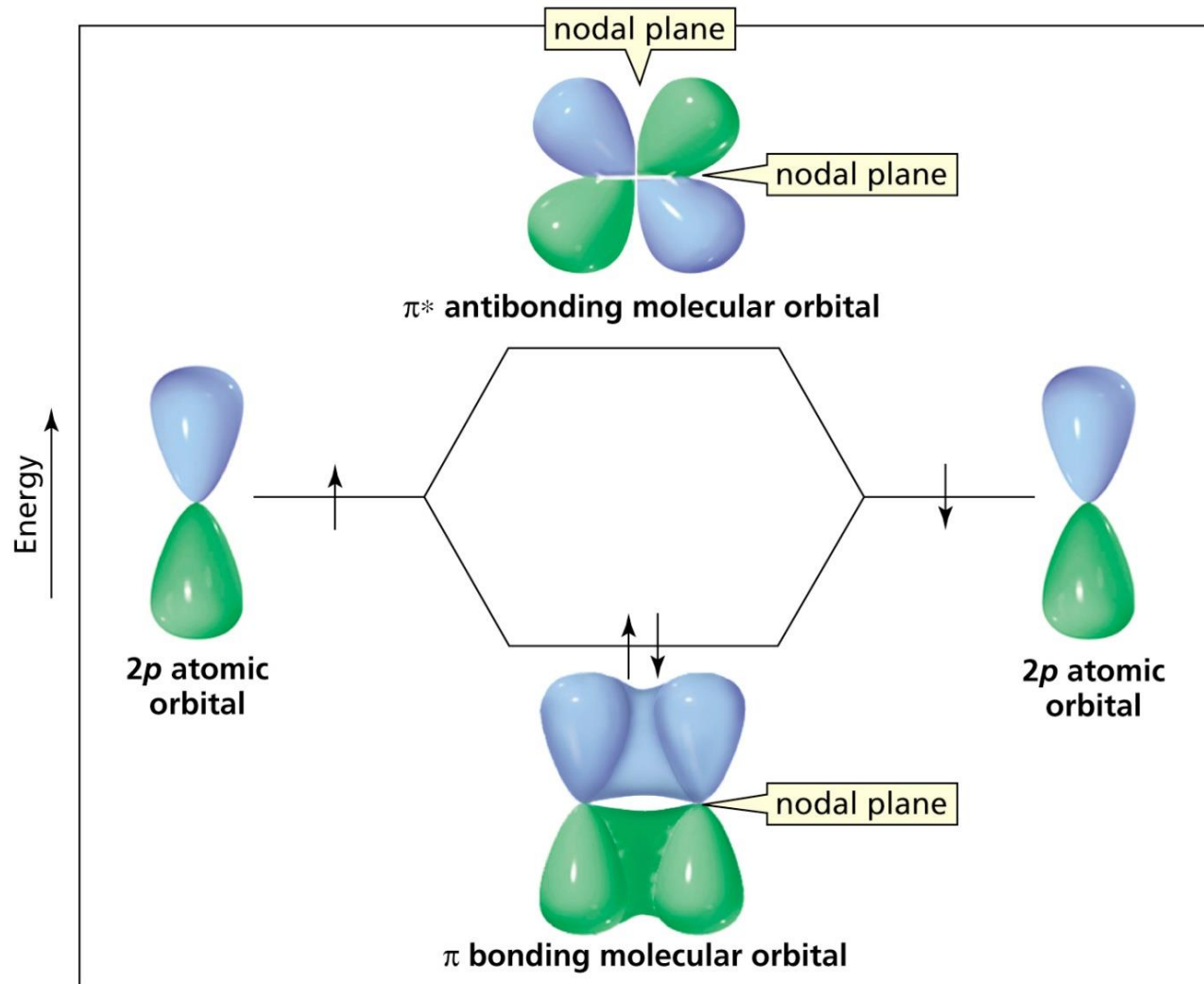


Uma ligação σ é mais forte que uma ligação π .

Uma ligação σ é formada pela sobreposição frontal de dois orbitais p



Uma ligação pi (π) é formada pela sobreposição lateral de dois orbitais p paralelos



4 – Estudo do átomo de carbono

4.1 - Configuração eletrônica do átomo de carbono

C: tem 6 elétrons.

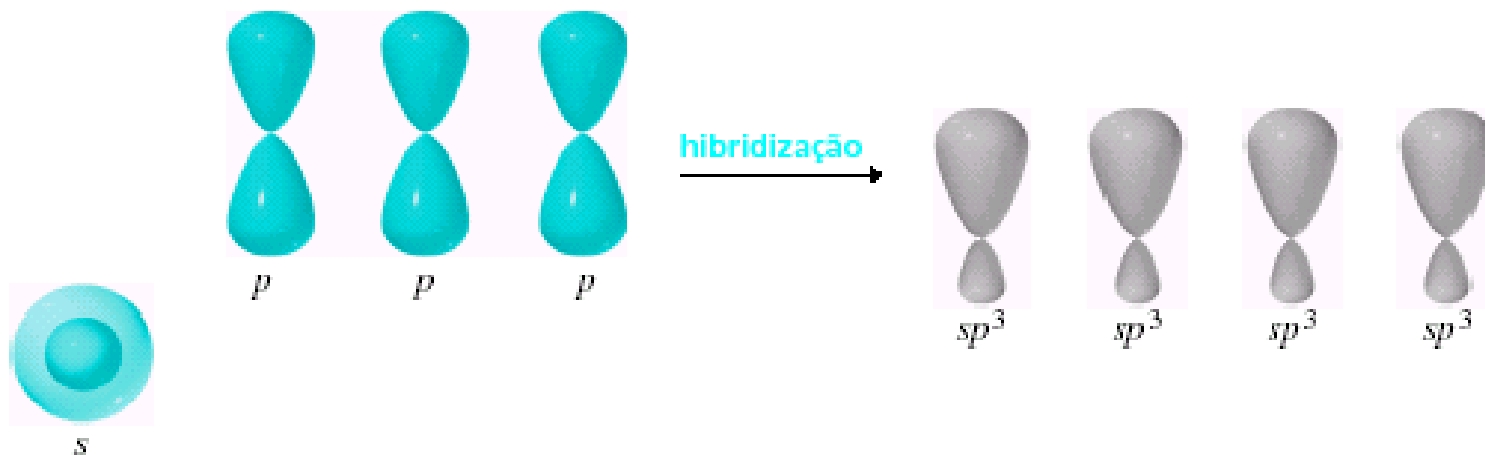
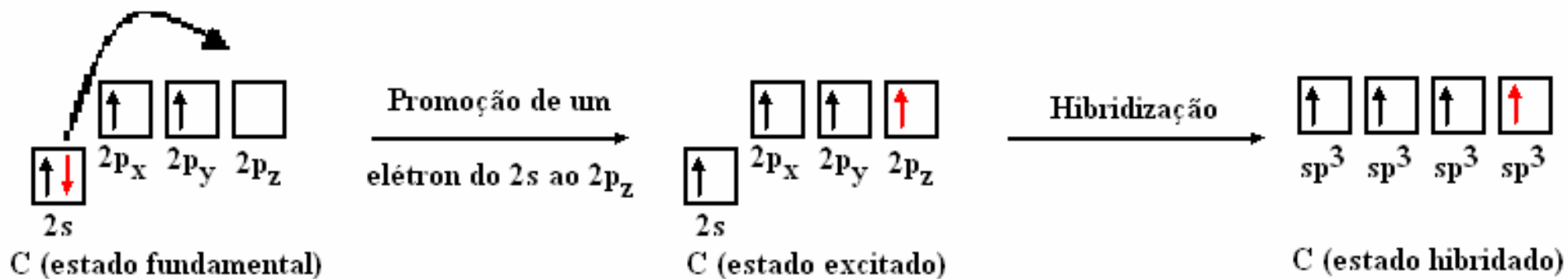
Distribuição eletrônica → $1s^2$

$2s^2 2p^2$ → Camada de Valência

4.2 - Hibridização dos orbitais do átomo de carbono

- Hibridização de orbitais ➡ mistura de orbitais do nível de valência. No caso do átomo de carbono, mistura de orbitais s e p .

➤ Hibridização sp^3

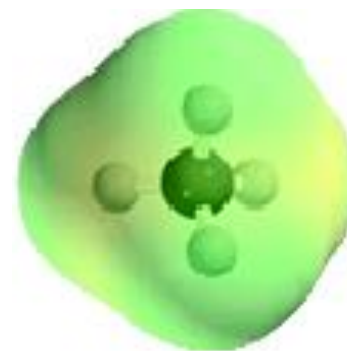
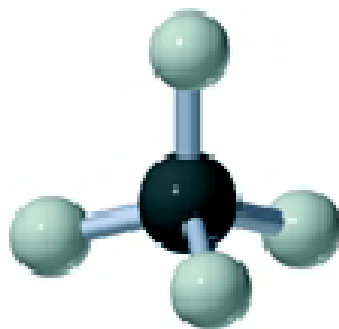
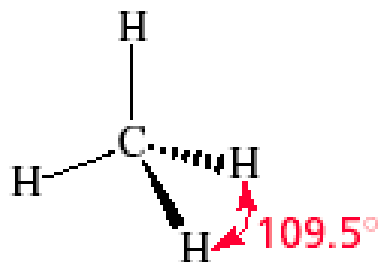


Cada ligação sigma formada $105 \text{ kcal} = 420 \text{ kcal. mol}^{-1}$
 Promoção do elétron = $96 \text{ kcal. mol}^{-1}$

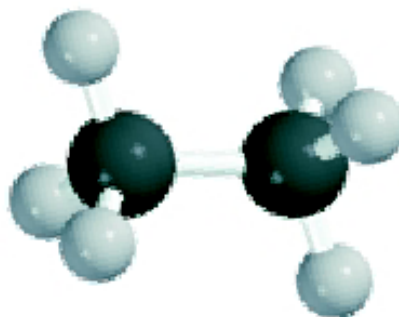
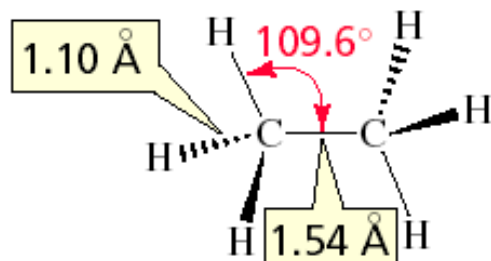
4 ligações covalentes do tipo sigma (σ)

Exemplos:

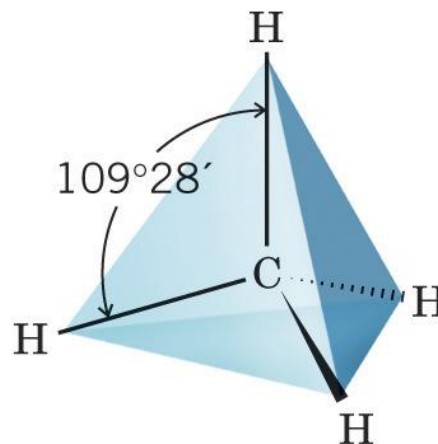
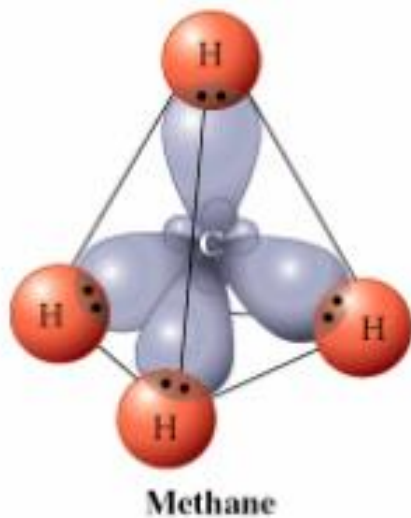
- Metano



- Etano

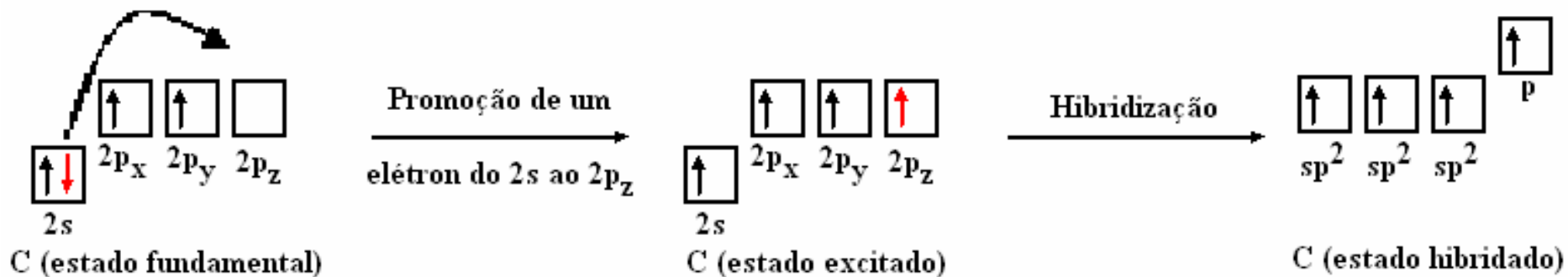


- Os orbitais utilizados na formação da ligação determinam o ângulo de ligação.



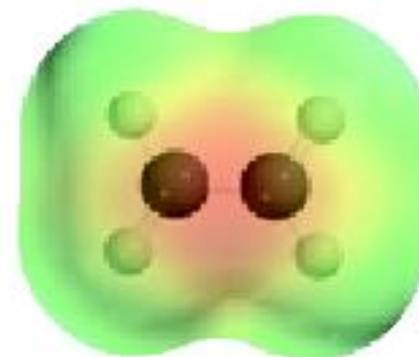
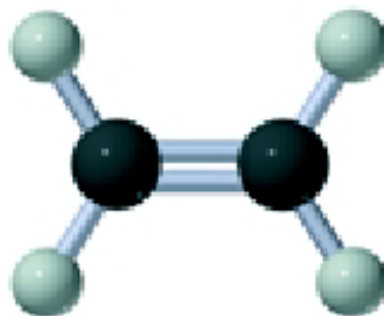
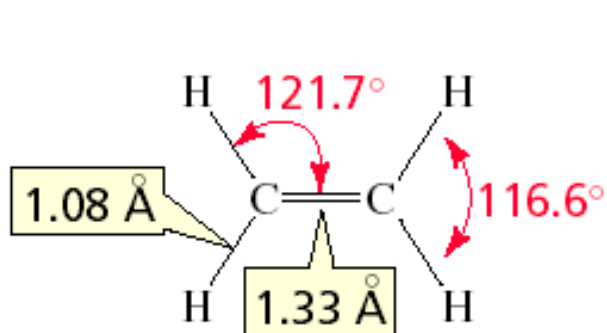
- Ângulo entre as ligações: $109,5^\circ$
- Os pares de elétrons se distribuem no espaço o mais distante possível uns dos outros.
- **Geometria** do átomo de **carbono sp^3** : **tetraédrica**.

➤ Hibridização sp^2

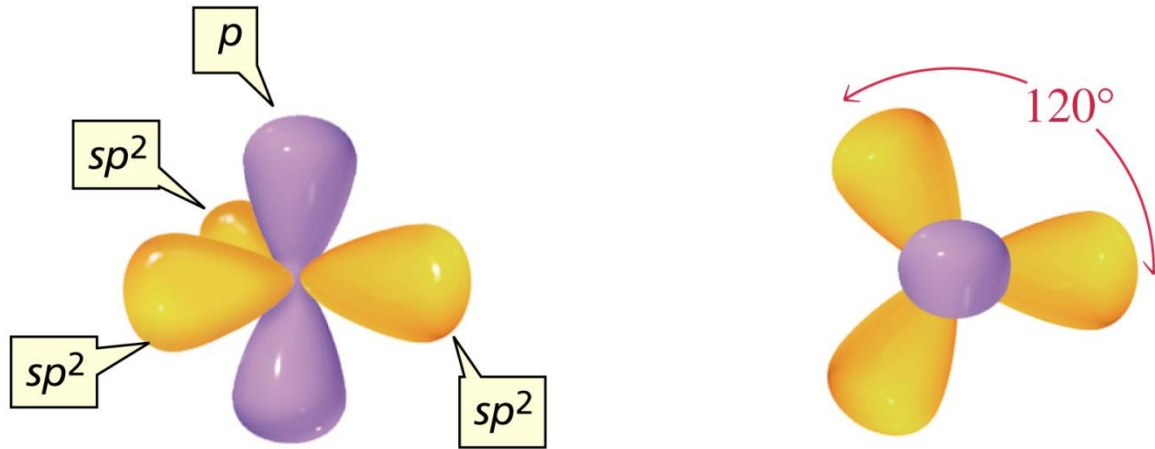


3 ligações covalentes do tipo sigma (σ)
1 ligação covalente do tipo pi (π)

Exemplo: Eteno

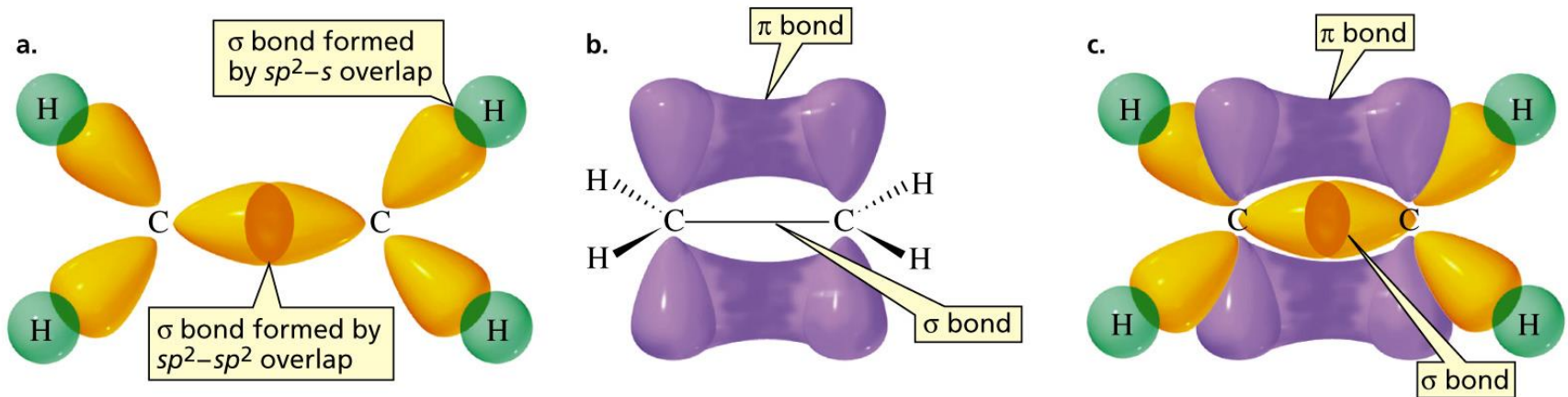


Carbono hibridizado sp^2



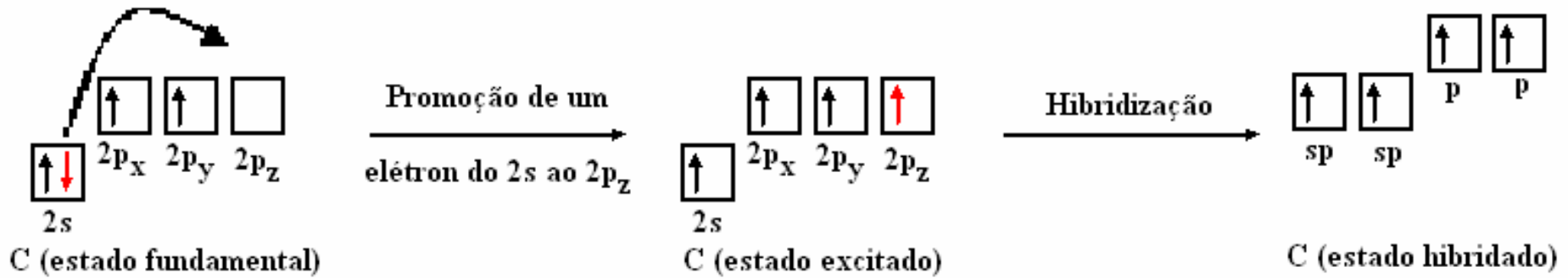
- Ângulo entre as ligações: 120°
- **Geometria** do átomo de **carbono sp^2** : **trigonal plana**.

Eteno: ligação dupla



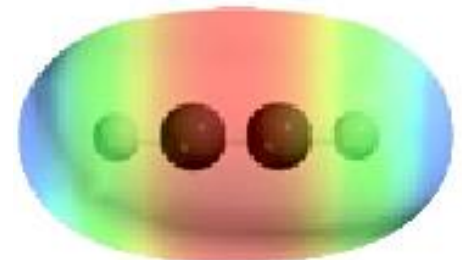
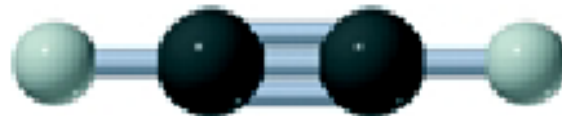
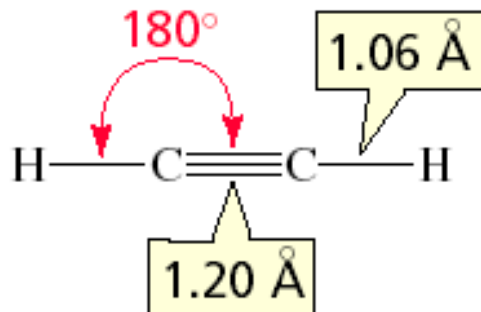
- Uma ligação dupla consiste de: 1 ligação sigma (σ) + 1 ligação pi (π).
- Ligação pi (π) é mais fraca que a ligação sigma (σ).

➤ Hibridização sp

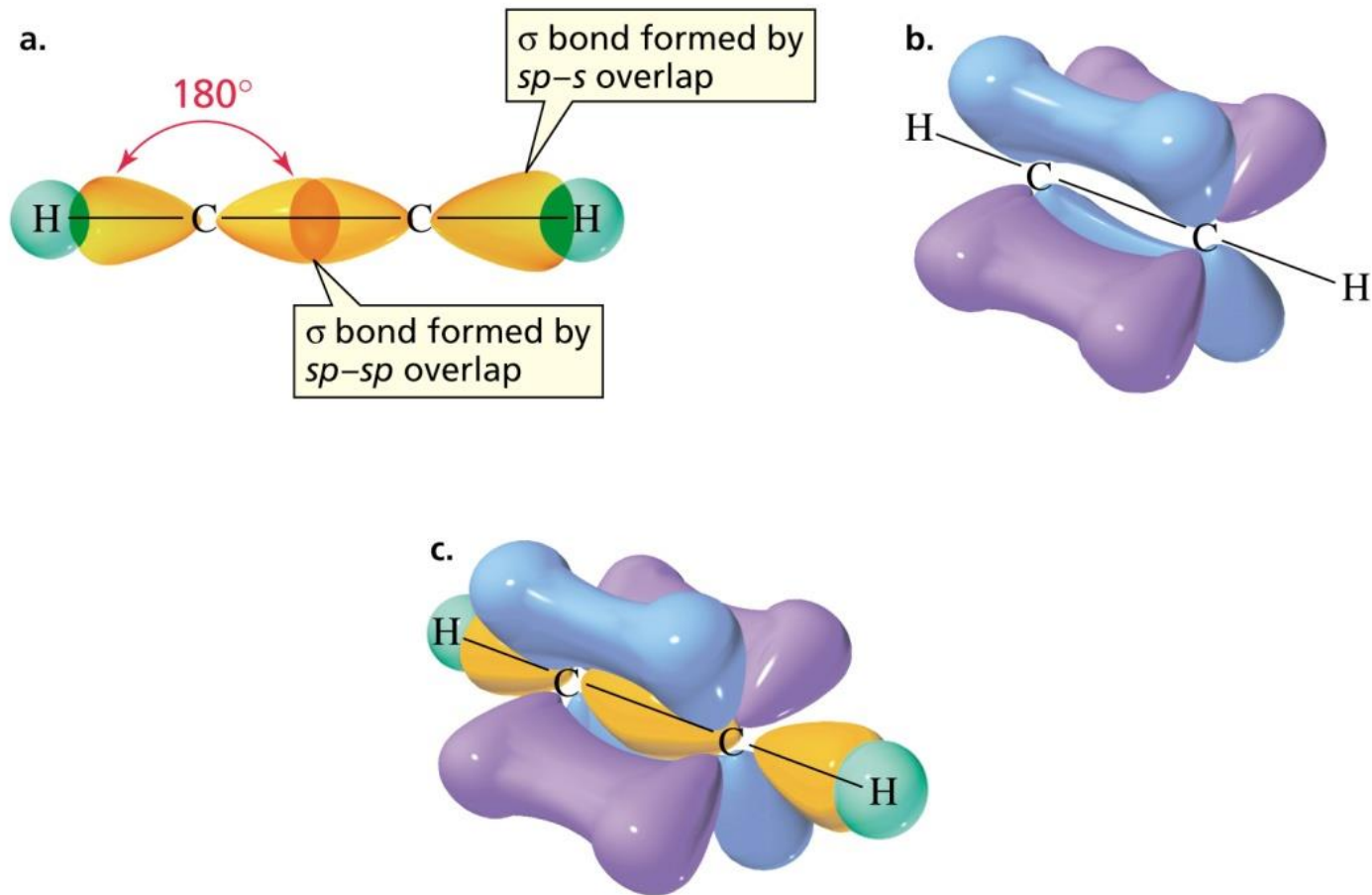


2 ligações covalentes do tipo sigma (σ)
2 ligações covalentes do tipo pi (π)

Exemplo: Etino



Etino: ligação tripla



- Uma ligação tripla consiste de: 1 ligação sigma (σ) + 2 ligações pi (π).

4.3 - Propriedades do átomo de carbono em função do tipo de hibridização

- Como em cada tipo de carbono híbrido o percentual de caráter **s** difere, teremos diferenças significativas nas suas propriedades.

sp³ ⇒ 25 % de caráter **s** e 75 % de caráter **p**

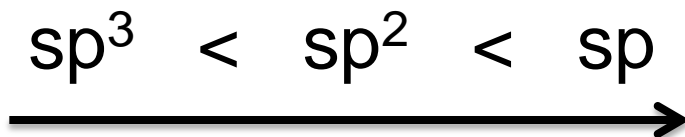
sp² ⇒ 33,3 % de caráter **s** e 66,6 % de caráter **p**

sp ⇒ 50 % de caráter **s** e 50 % de caráter **p**

- orbital **s** está mais próximo do núcleo em relação ao orbital **p**



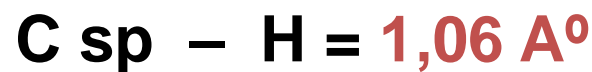
- quanto maior o percentual de caráter **s**, maior eletronegatividade do carbono.



- Efeitos da diferença de eletronegatividade

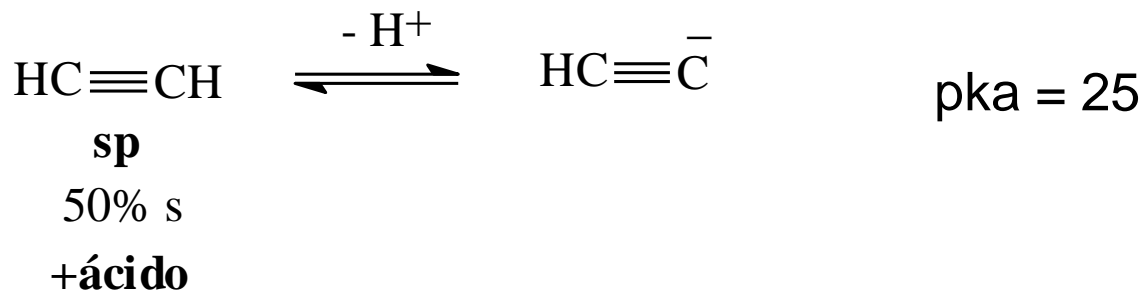
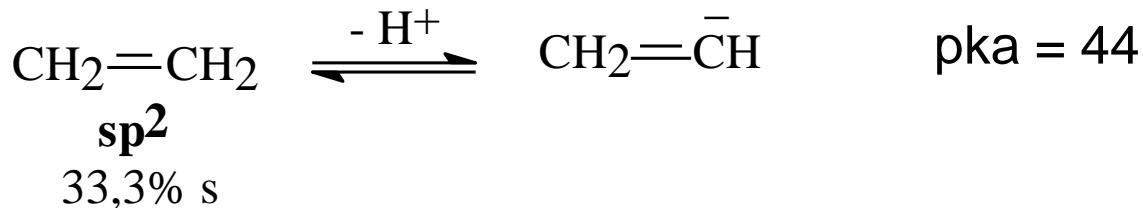
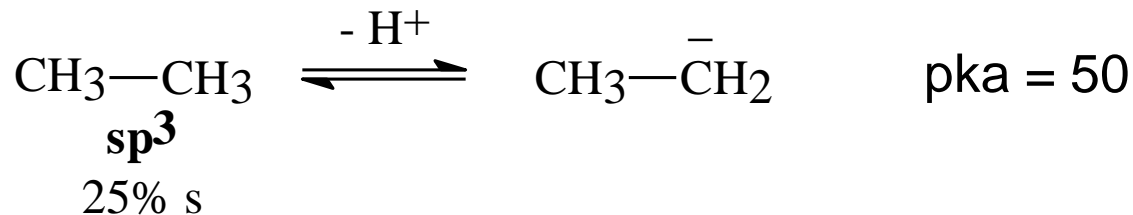
Na ligação:

- quanto maior a eletronegatividade do carbono, menor é o comprimento de ligação, inclusive na ligação C – H.



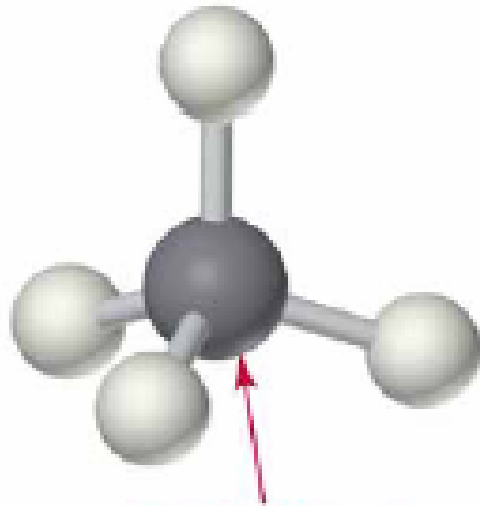
Na acidez do átomo de H:

- quanto maior a eletronegatividade do carbono, maior é a acidez do átomo de hidrogênio (na ligação C – H).

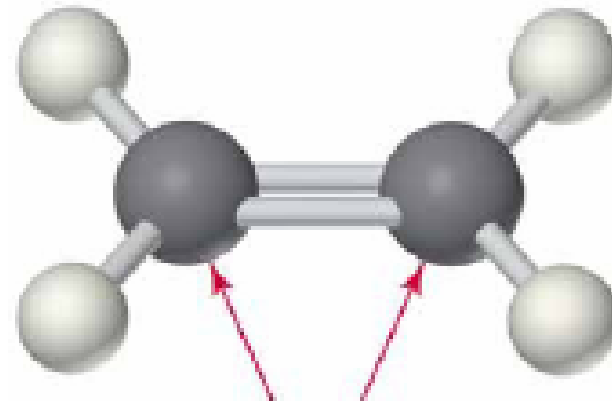


Quanto maior o caráter s mais ácido!!!

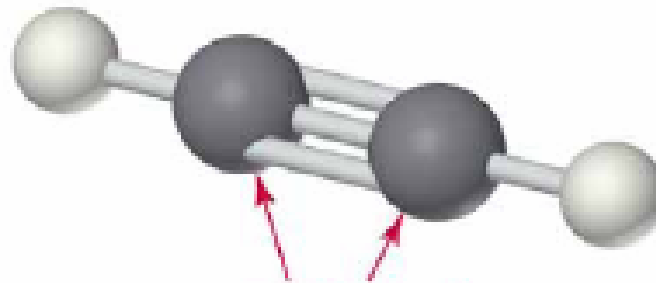
Na geometria molecular:



sp^3 hybridized



sp^2 hybridized



sp hybridized

Nas propriedades físicas:

- o ponto de ebulição aumenta na ordem:

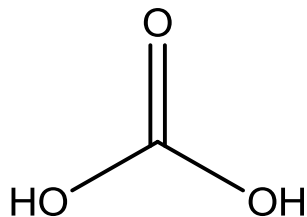
C sp³ (alcanos) ; C sp² (alcenos) ; C sp (alcinos)



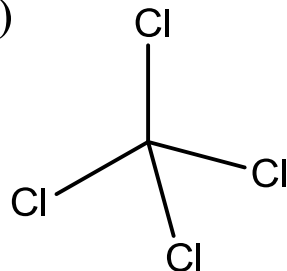
EXERCÍCIO

Identifique qual é a hibridização e a geometria de cada átomo de carbono nas estruturas representadas a seguir:

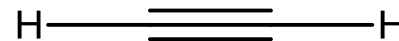
a)



b)



c)



5 – Bibliografia

- SOLOMONS, G.; FRYHLE, C. **Química Orgânica**, vol. 1, 7 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
- BRUICE, P. **Química Orgânica**, vol.1, 4 ed. São Paulo, Pearson, 2006.