Química Orgânica I

Profa. Dra. Alceni Augusta Werle
Profa. Dra. Tania Márcia do Sacramento Melo

Estruturas de Lewis, Carga Formal e Estruturas de Ressonância

Aula 2

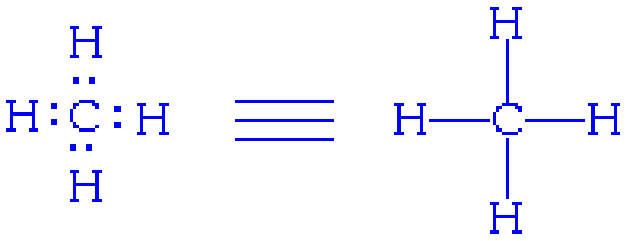
Introdução

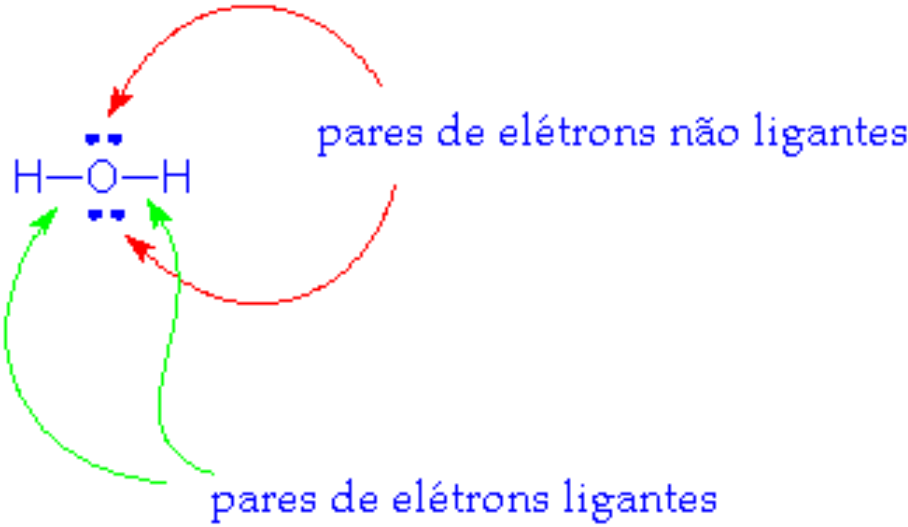
- Um **símbolo de Lewis** é um símbolo no qual os elétrons da camada de valência de um átomo ou de um íon simples são representados por pontos colocados ao redor do símbolo do elemento. Cada ponto representa um elétron.

Hidrogênio	$1s^1$	$H\cdot$
Cloro	$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^5$	$:\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}\cdot$
Íon Cloreto	$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6$	$:\ddot{\underset{\cdot\cdot}{Cl}}:$

Estruturas de Lewis

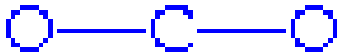
- A estrutura de Lewis de um composto covalente ou de um íon poliatômico mostra como os elétrons estão distribuídos entre os átomos, de forma a mostrar a conectividade entre eles.



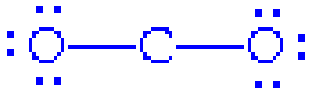


Escrevendo as estruturas de Lewis

- O primeiro passo para se desenhar uma estrutura de Lewis é determinar o número de elétrons de valência dos átomos que serão conectados. Depois é necessário determinar qual é o átomo central, e ligá-lo aos átomos periféricos por pares de elétrons. Ex: CO_2 :16 *e*- para serem colocados.
- Conecte o átomo central aos outros átomos na molécula com ligações simples;

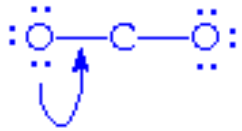


- Complete a camada de valência dos átomos da periferia da molécula;

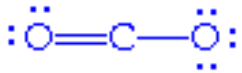


Estrutura de Lewis não é aceitável

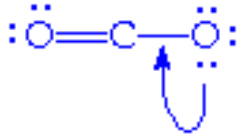
Continue o processo de fazer múltiplas ligações dos átomos periféricos com o átomo central, até completar as camadas de valência.



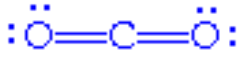
Torna-se



O átomo central ainda está deficiente de elétrons, portanto compartilhe outro par.



Torna-se



OBS: Se a estrutura for um íon, juntamos ou subtraímos elétrons a fim de conseguir a carga apropriada.

- Exercícios: Escrever a estrutura de Lewis correta para o CH_3F; CO_3^{2-}

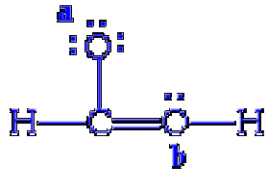
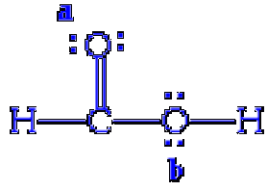
Carga Formal

- A carga formal é um procedimento de contabilidade eletrônica.Ela permite determinar a localização de uma carga na molécula assim como comparar várias estruturas de Lewis possíveis, e determinar qual a estrutura que mais se adequa para descrever a molécula (ou íon composto).
- A fórmula para a determinação da carga formal de um átomo em uma estrutura de Lewis é dada como:

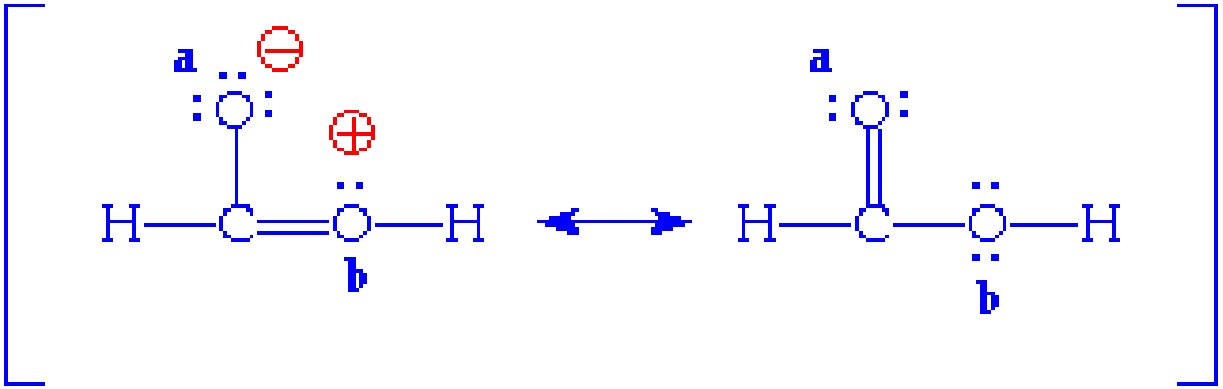
Carga Formal = n^o elétrons de valência - (n^o elétrons não ligantes + 1/2 n^o elétrons ligantes)

Considere a molécula do ácido fórmico, H_2CO_2.

- Qual das duas possibilidades melhor representa, segundo Lewis, a molécula de ácido fórmico?

	CF(H) = 1e - (0e +1/2 2e) = 0 CF(C) = 4e - (0e +1/2 8e) = 0 CF(Ob) = 6e - (2e +1/2 6e)= 1 CF(Oa) = 6e - (6e + 1/2 2e) = -1
	CF(C) = 4e - (0e + 1/2 8 e) =0 CF(Oa) = 6e - (4e + 1/2 4e) = 0 CF(Ob) = 6e - (4e + 1/2 4e) = 0

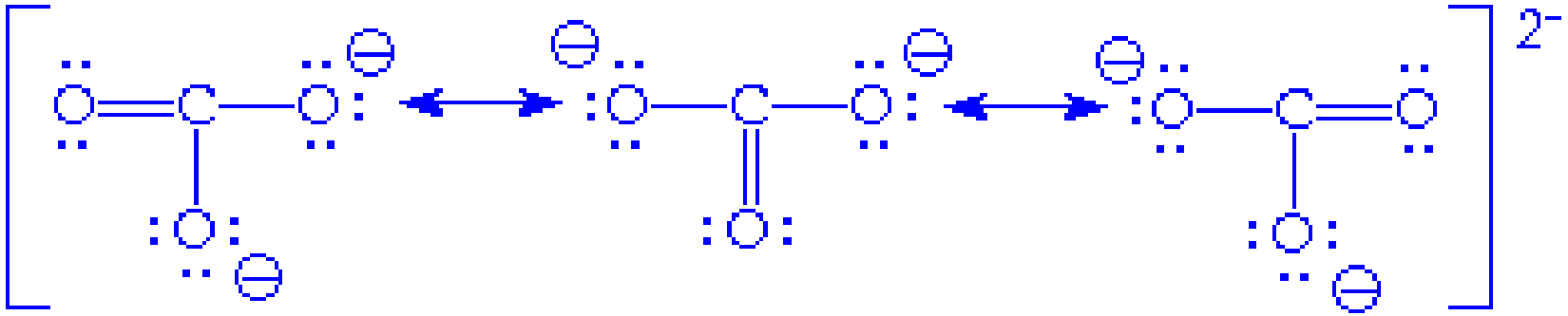
As duas possibilidades de estrutura de Lewis para o ácido fórmico são mostradas abaixo, as quais foram ligadas por uma seta de duas cabeças.



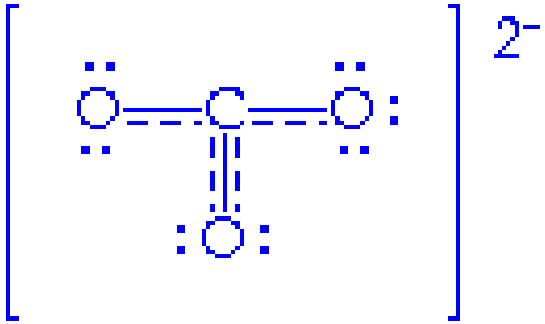
Menor a carga formal,
melhor a estrutura de Lewis

Estruturas de Ressonância

- Considere o íon carbonato, CO_3^{2-} onde temos um total de 24 *e*- para colocarmos na estrutura de Lewis.
- ***Formas de Ressonância***

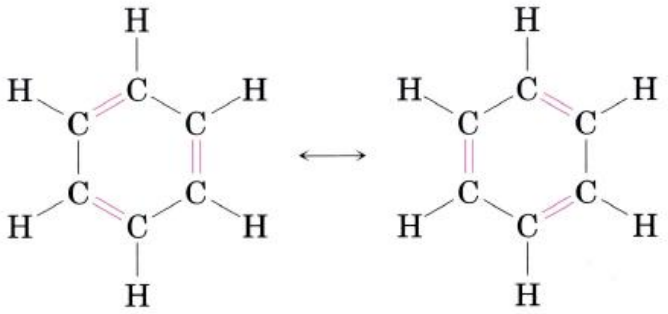


Esta estrutura de ressonância também pode ser representada por um *híbrido de ressonância* aonde uma linha pontilhada é utilizada para indicar os elétrons deslocalizados.

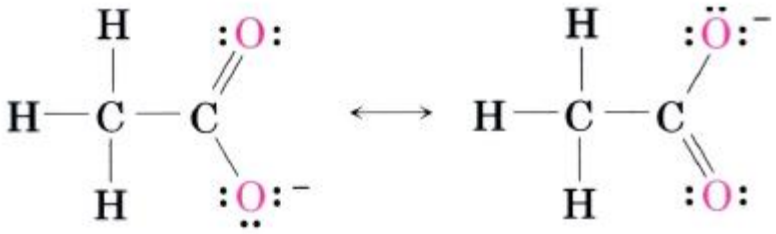


Ressonância é o deslocamento permanente de elétrons pi (p).

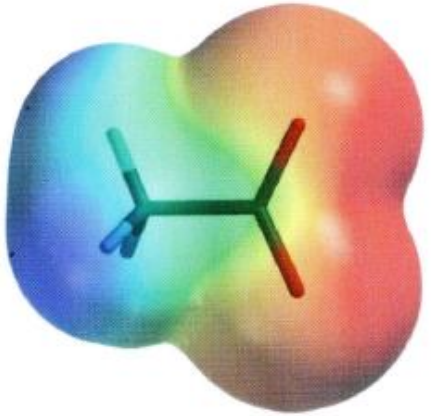
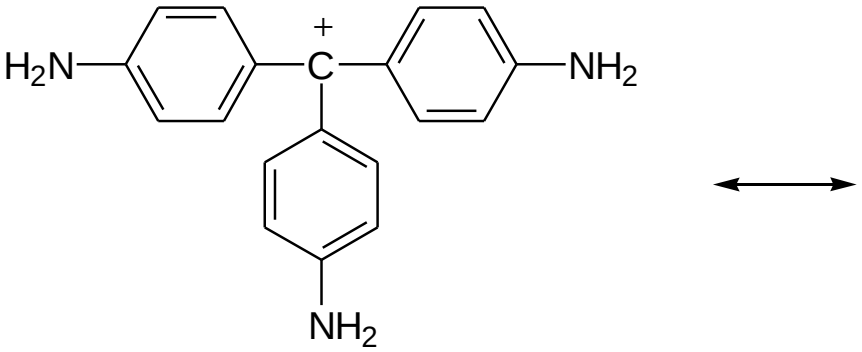
Outros exemplos



Benzene (two resonance forms)



Acetate ion (two resonance forms)



Apresente estruturas de ressonância para o cátion a seguir: