Geometria molecular (hibridização)

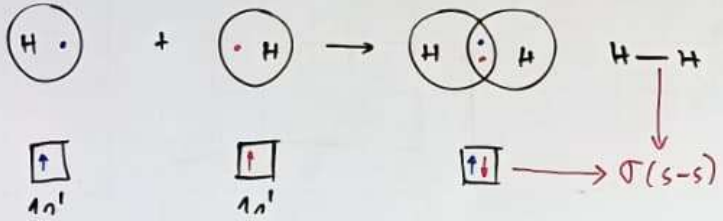
Prof. Diego J. Raposo
UPE – Poli
2025.2

HIBRIDIZAÇÃO

VSEPR → GEOMETRIAS ← ORBITAIS

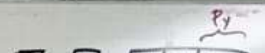
HIBRIDIZAÇÃO: EXPLICAR LIGAÇÃO QUÍMICA A PARTIR DOS ORBITAIS DOS ÁTOMOS

* LIGAÇÕES SIMPLES, DOIS ÁTOMOS

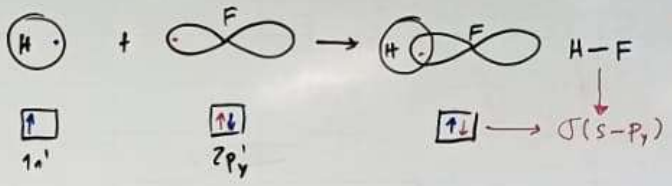


- LIGAÇÃO QUÍMICA É SOBREPOSIÇÃO DE ORBITAIS ATÔMICOS COM 1 ELÉTRON
- LIGAÇÃO SIGMA (σ): FORMADA PELA SOBREPOSIÇÃO DOS ORBITAIS AO LONGO DO EIXO DA LIGAÇÃO

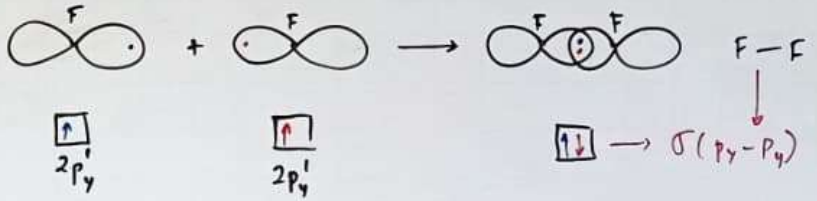
H—F: ⇒ F (z=9): $1s^2\ 2s^2\ 2p^5$ ⇒



ORBITAL COM 1 e^- ↓ LIGAÇÃO



:F—F:



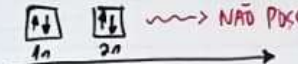
* LIGAÇÕES SIMPLES, MAIS ÁTOMOS

$Be H_2$ ⇒ H—Be—H ⇒  ⇒ 2 DOMÍNIOS LIGANTES

FÓRMULA MOLECULAR — ESTRUTURAS DE LEWIS — GEOMETRIA MOLECULAR

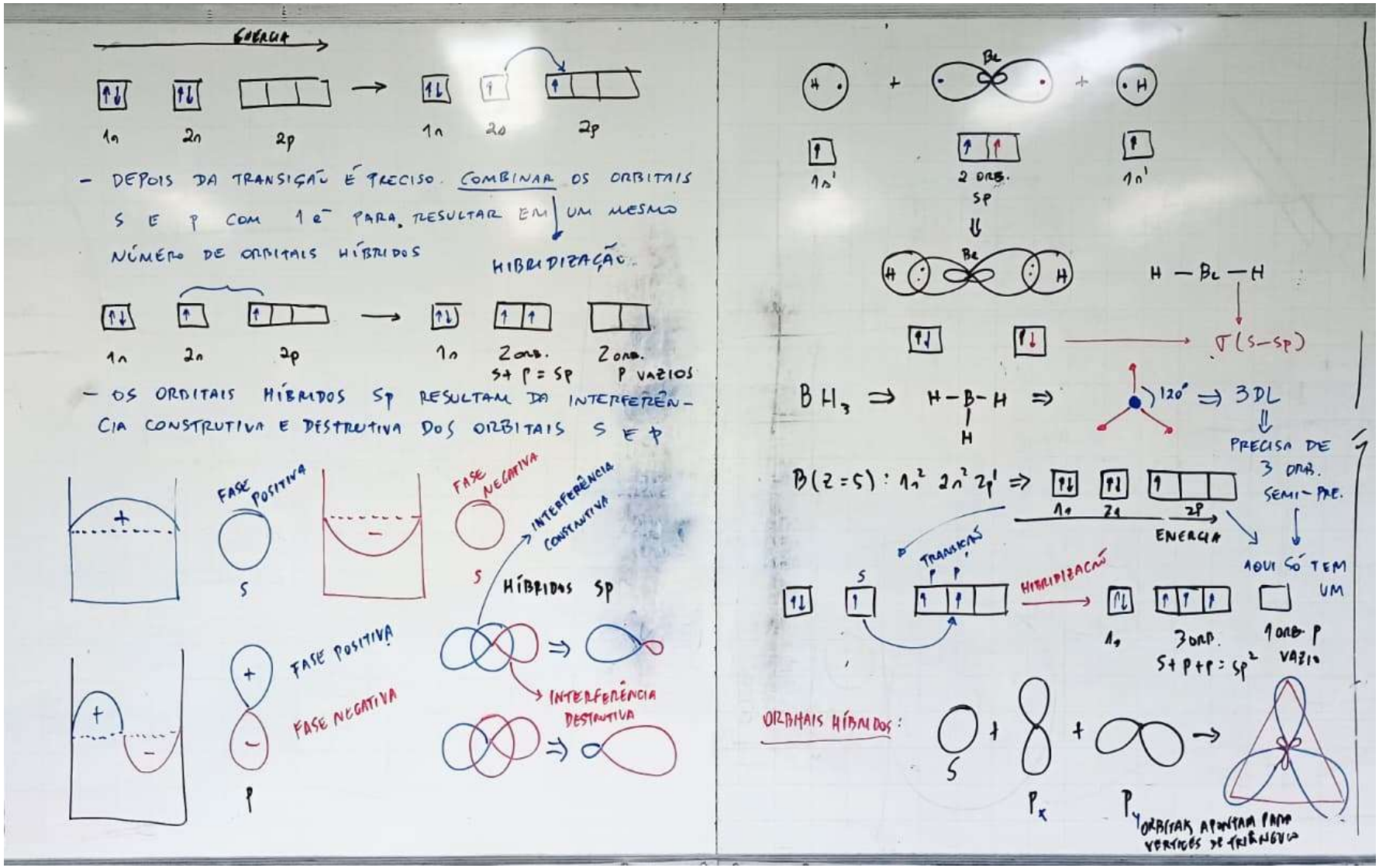
⇓

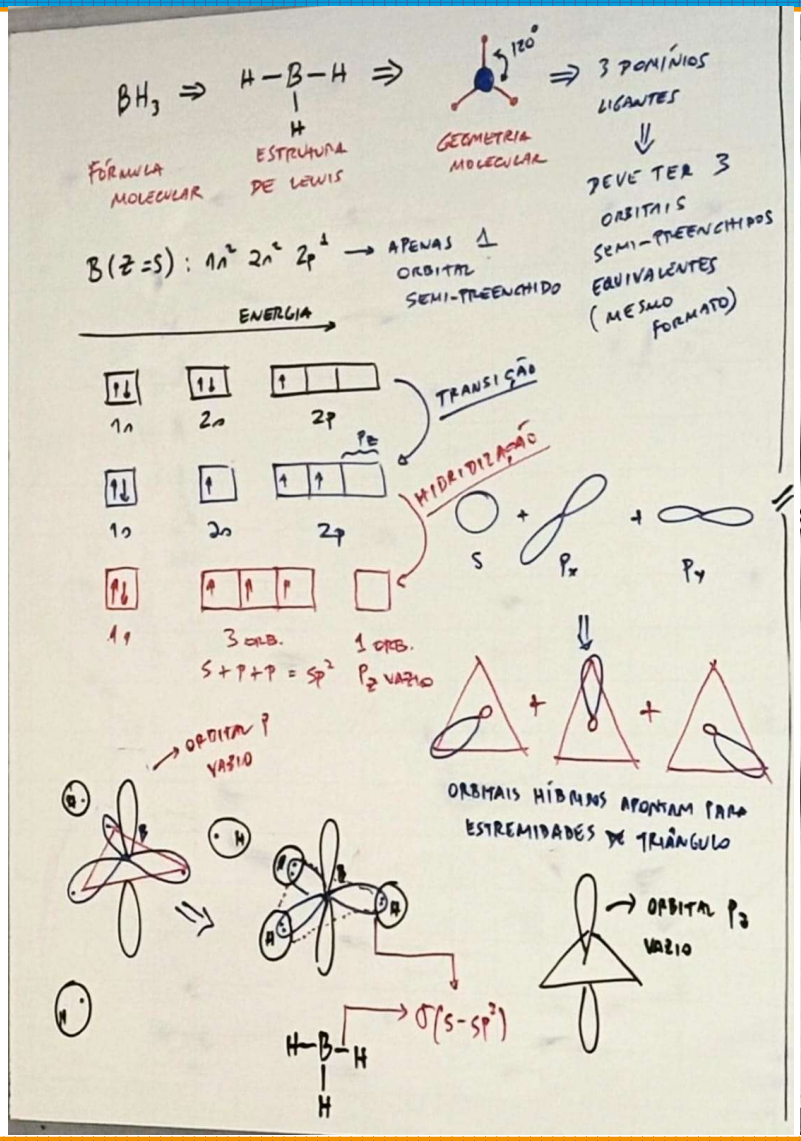
PRECISA DE 2 ORBITAIS SEMI-PREENCHIDOS

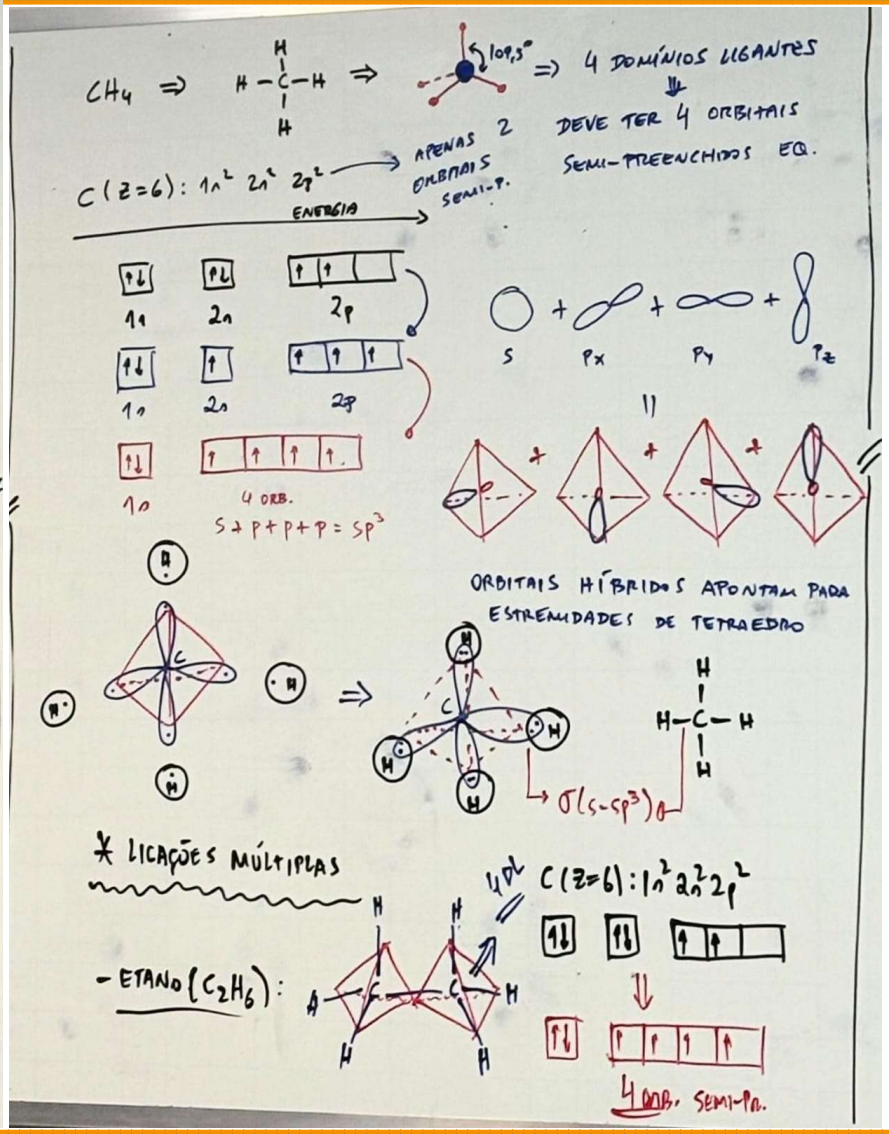
Be (z=4): $1s^2\ 2s^2$  ⇝ NÃO POSSUI NENHUM ORBITAL SEMI-PREENCHIDO

⇓

TRANSIÇÃO PARA ORBITAIS VAZIOS


ENERGIA
1s 2s 2p
1s 2s 2p
- DEPOIS DA TRANSIÇÃO É PRECISO COMBINAR OS ORBITAIS S E P COM 1 e⁻ PARA RESULTAR EM UM MESMO NÚMERO DE ORBITAIS HÍBRIDOS
HIBRIDIZAÇÃO
1s 2s 2p
S + P = SP
1s 2 orb. SP
2 orb. P vazios
- OS ORBITAIS HÍBRIDOS Sp RESULTAM DA INTERFERÊNCIA CONSTRUTIVA E DESTRUTIVA DOS ORBITAIS S E p
FASE POSITIVA
FASE NEGATIVA
S
INTERFERÊNCIA CONSTRUTIVA
HÍBRIDOS SP
FASE POSITIVA
FASE NEGATIVA
P
INTERFERÊNCIA DESTRUTIVA
Be
1s' 2 ORB. SP 1s'
H — Be — H
σ (S–SP)
BH₃ ⇒ H–B–H ⇒ 120° ⇒ 3DL
PRECISA DE 3 ORB. SEMI-PRE.
B (Z=5): 1s² 2s² 2p¹ ⇒
1s 2s 2p
ENERGIA
AQUI SÓ TEM UM
TRANSIÇÃO
HIBRIDIZAÇÃO
1s 3 ORB. 1 ORB P VAZIO
S + P + P = SP²
ORBITAIS HÍBRIDOS:
S
Px
Py
ORBITAIS APONTAM PARA VÉRTICES DE TRIÂNGULO


BH_3 ⇒ H–B–H ⇒ 120° ⇒ 3 DOMÍNIOS LIGANTES
FÓRMULA MOLECULAR
ESTRUTURA DE LEWIS
GEOMETRIA MOLECULAR
DEVE TER 3 ORBITAIS SEMI-PREENCHIDOS EQUIVALENTES (MESMO FORMATO)
B(Z=5): 1s² 2s² 2p¹ → APENAS 1 ORBITAL SEMI-PREENCHIDO
ENERGIA
1s 2s 2p
TRANSIÇÃO
HIBRIDIZAÇÃO
2p_z
s + p_x + p_y
3 ORB. s+p+p = sp²
1 ORB. p_z VAZIO
ORBITAIS HÍBRIDOS APONTAM PARA ESTREMIDADES DE TRIÂNGULO
ORBITAL p VAZIO
ORBITAL p_z VAZIO
σ(s-sp²)


CH_4 ⇒ H–C(H)(H)–H ⇒ 109,5° ⇒ 4 DOMÍNIOS LIGANTES
APENAS 2 ORBITAIS SEMI-P.
DEVE TER 4 ORBITAIS SEMI-PREENCHIDOS EQ.
C(Z=6): 1s² 2s² 2p²
ENERGIA
1s 2s 2p
4 ORB. s+p+p+p = sp³
s + p_x + p_y + p_z
ORBITAIS HÍBRIDOS APONTAM PARA ESTREMIDADES DE TETRAEDRO
σ(s-sp³)
* LIGAÇÕES MÚLTIPLAS
- ETANO (C_2H_6):
4 DOR.
C(Z=6): 1s² 2s² 2p²
4 ORB. SEMI-PR.

DL	HIBRIDIZAÇÃO	
1	NENHUMA (S E/OU P)	$H-H$, $H-F$, $F-F$
2	sp	BeH_2
3	sp^2	BH_3
4	sp^3	CH_4
5	sp^3d	PCl_5
6	sp^3d^2	SF_6

LIGAÇÕES IGUAIS

→ FAZER PARA ESSES CASOS

$C\ (Z=6): 1s^2 2s^2 2p^2$

ENERGIA

1s 2s 2p → TRANSIÇÃO

CRIAÇÃO NOVA PARTICIPAÇÃO DE HIB. / LIG. QUÍM.

1s 2s 2p → HIBRIDIZAÇÃO → 1s | 4 ORB. sp^3 → $s+p+p+p$

✳ LIGAÇÕES MÚLTIPLAS

- ETANO (C_2H_6)

DE=4
DL=4

DL → HIBRIDIZAÇÃO $s+p+p+p=sp^3$

$\sigma(sp^3-sp^3)$

$\sigma(s-sp^3)$

- ETENO (C_2H_6):

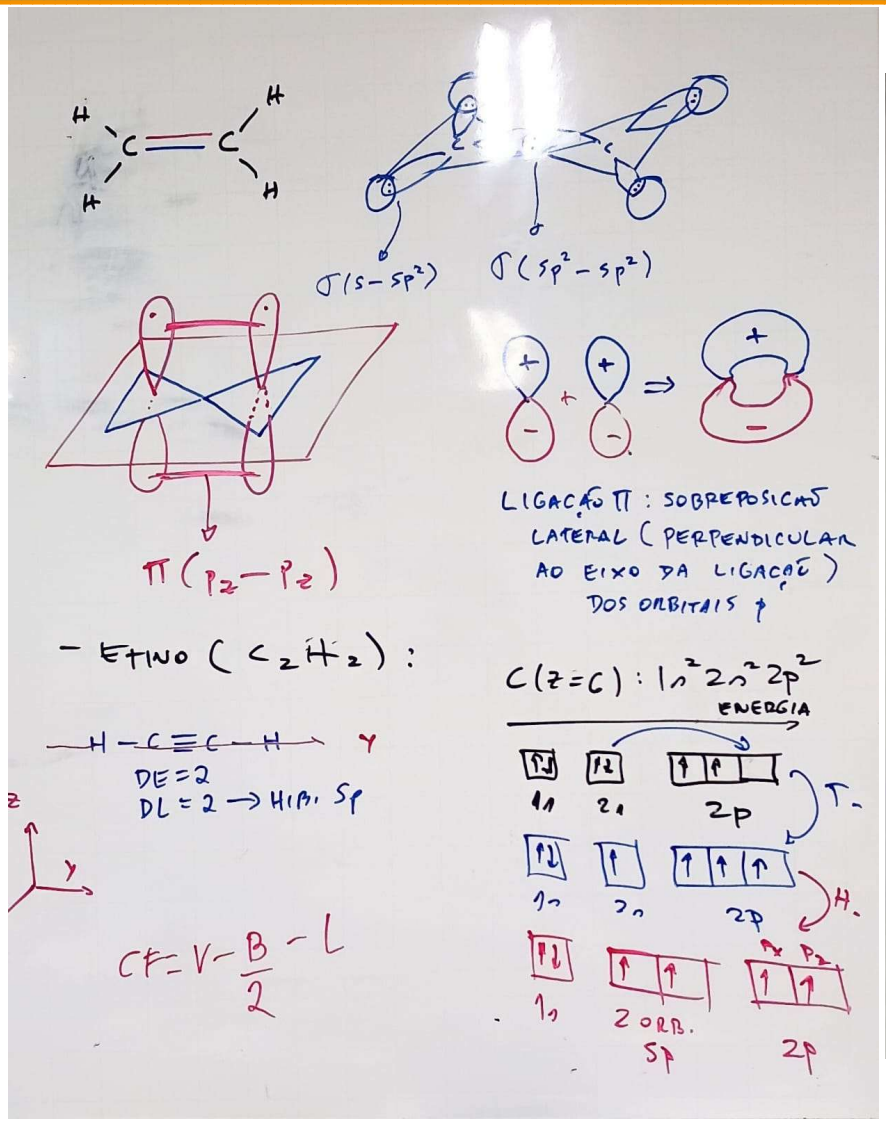
DL → HIBRIDIZAÇÃO → sp^2

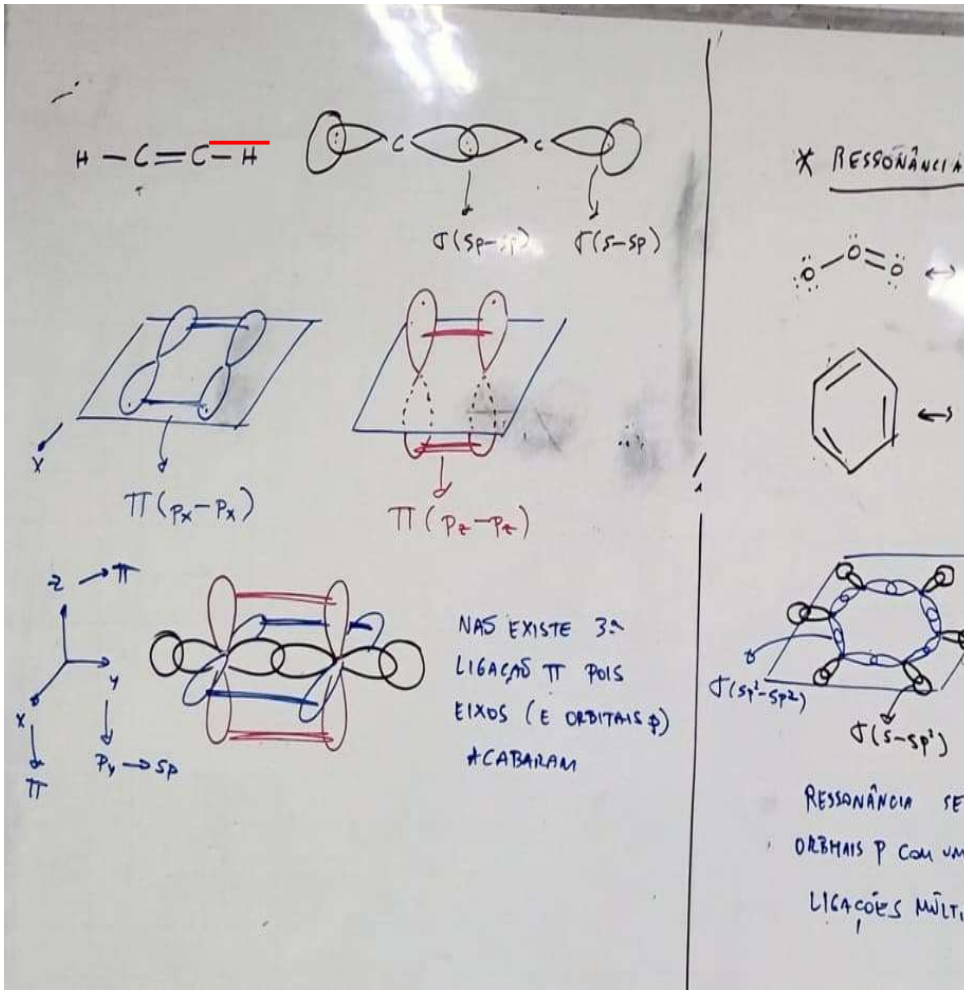
LIGAÇÕES MÚLTIPLAS → ORBITAIS P NÃO HIBRIDIZADOS COM 1 ELÉTRON

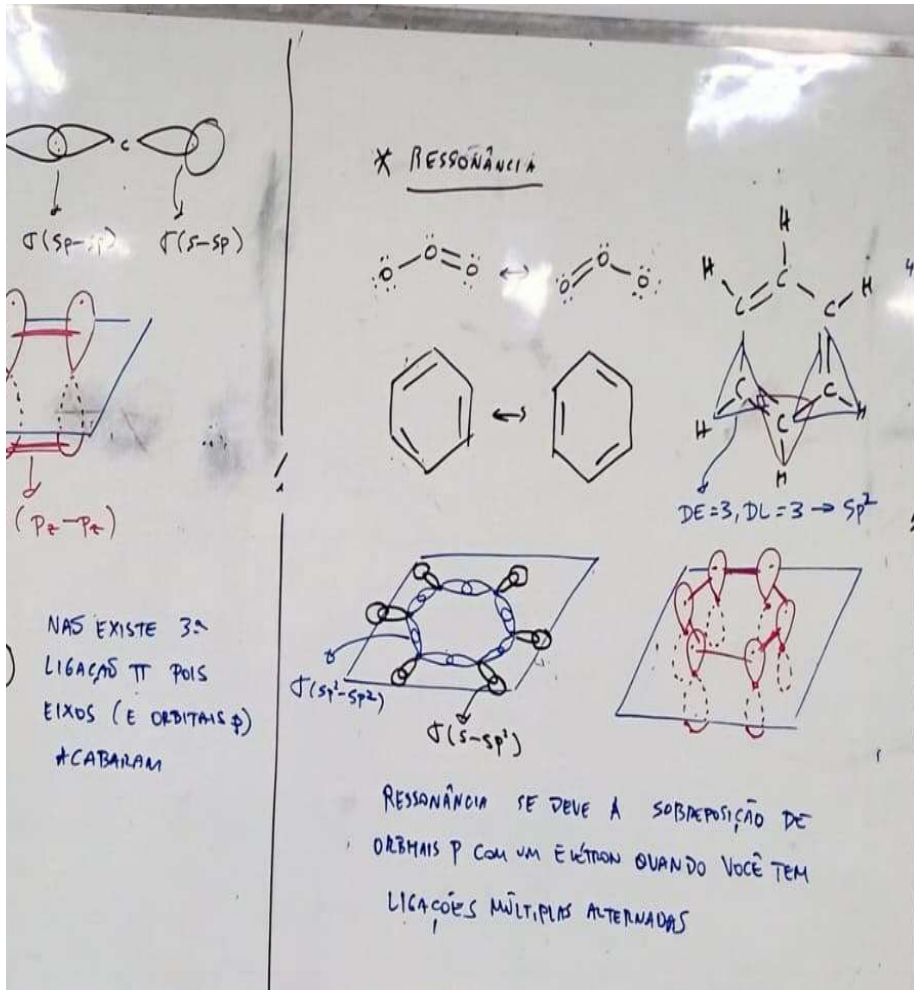
$C(Z=6): 1s^2 2s^2 2p^2$

1s 2s 2p → TRANSIÇÃO

1s 2s 2p → HIB. → 1s | 3 ORB. sp^2 | p_z

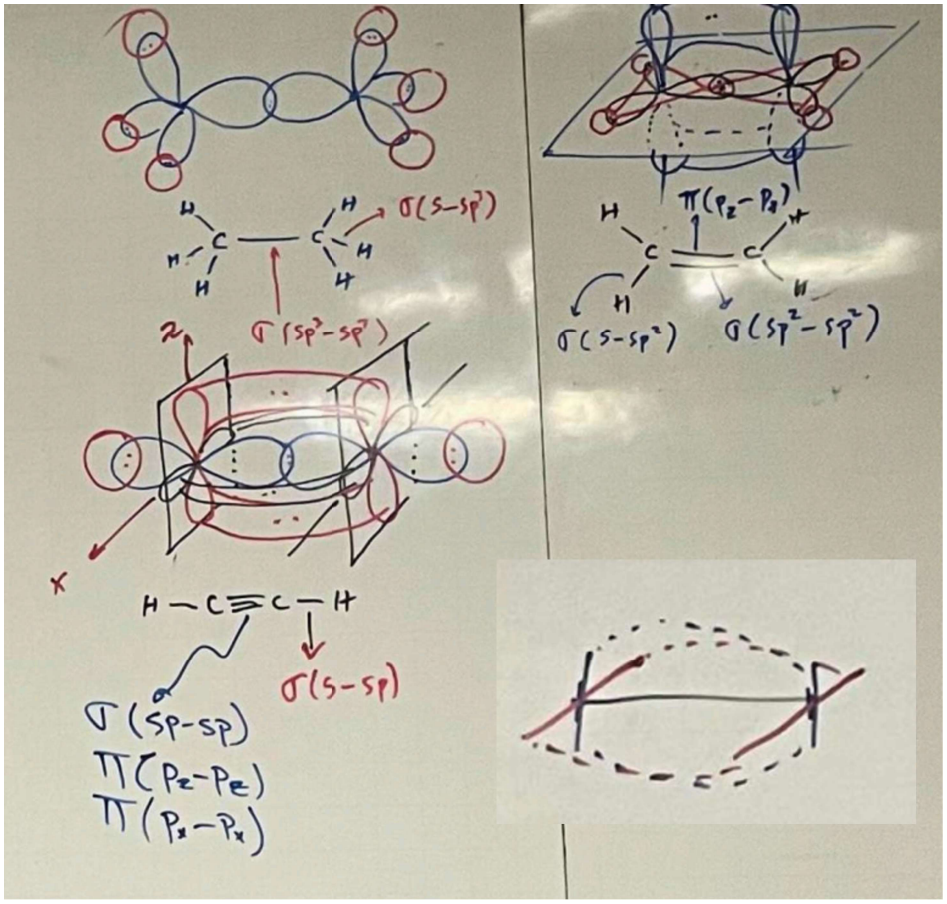

σ(s−sp²)
σ(sp²−sp²)
π(pz−pz)
LIGAÇÃO π: SOBREPOSIÇÃO LATERAL (PERPENDICULAR AO EIXO DA LIGAÇÃO) DOS ORBITAIS p
- ETINO (C2H2):
DE=2
DL=2 → HIBR. Sp
CF=V−B/2−L
C(z=C): 1s²2s²2p²
ENERGIA
2p
2 ORB. Sp
2p

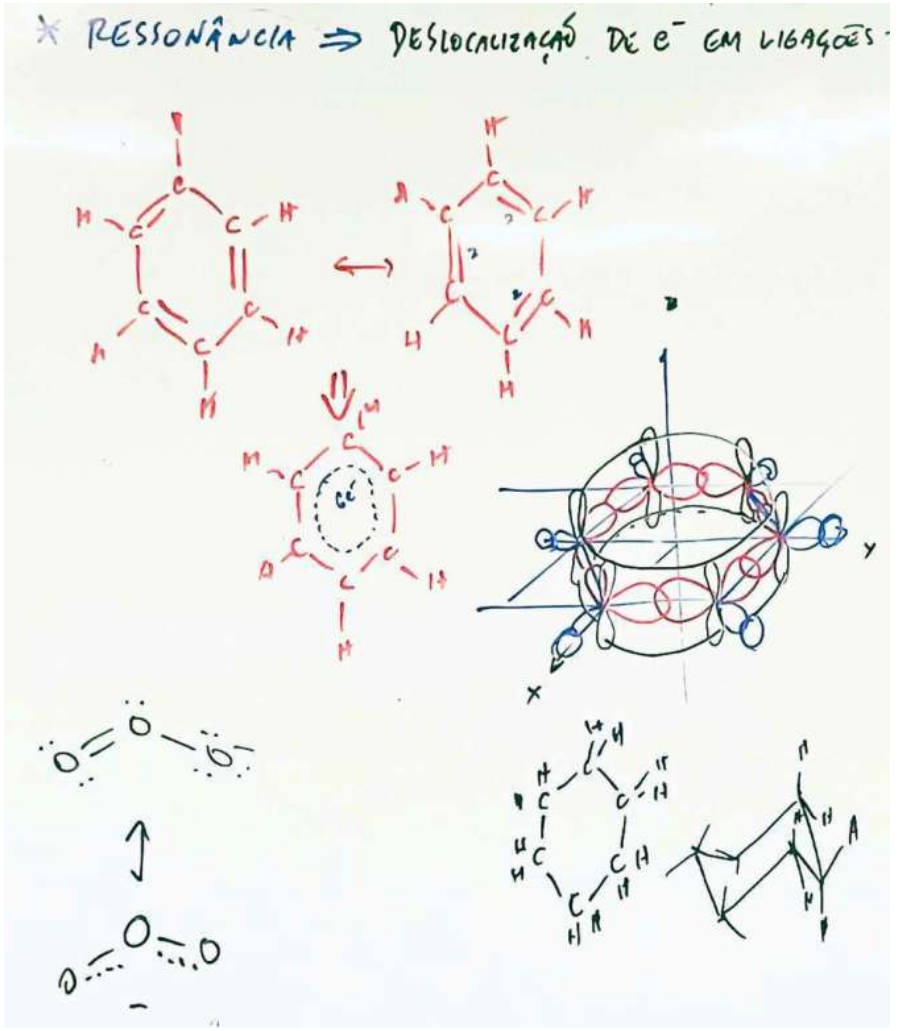

σ(sp−sp)
σ(s−sp)
π(px−px)
π(pz−pz)
NAS EXISTE 3ª LIGAÇÃO π POIS EIXOS (E ORBITAIS p) #CABARAM
* RESSONÂNCIA
σ(sp²−sp²)
σ(s−sp²)
RESSONÂNCIA SE
ORBITAIS p COM UM
LIGAÇÕES MÚLT.

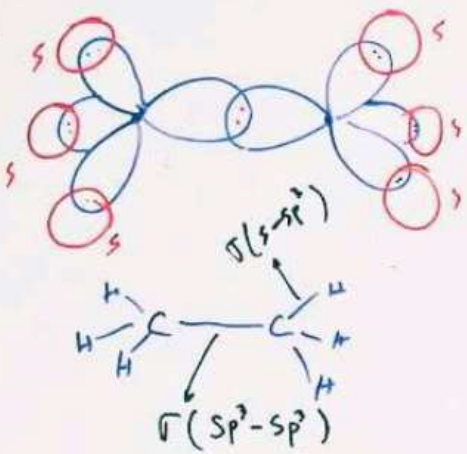

σ(sp-sp)
σ(s-sp)
(pπ-pπ)
NAS EXISTE 3ª LIGAÇÃO π POIS EIXOS (E ORBITAIS p) #CABARIAM
* RESSONÂNCIA
DE=3, DL=3 → sp²
σ(sp²-sp²)
σ(s-sp²)
RESSONÂNCIA SE DEVE À SOBREPOSIÇÃO DE ORBITAIS p COM UM ELÉTRON QUANDO VOCÊ TEM LIGAÇÕES MÚLTIPLAS ALTERNADAS

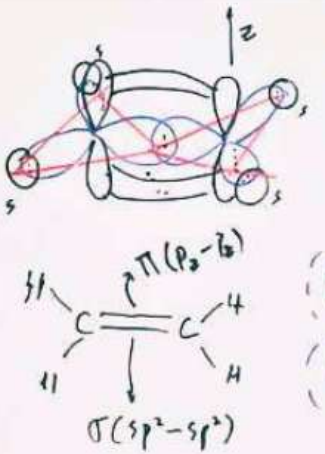
Obrigado e boa sorte!

Apêndices


σ(s-sp³)
σ(sp³-sp³)
π(pz-pz)
σ(s-sp²)
σ(sp²-sp²)
z
x
H—C≡C—H
σ(s-sp)
σ(sp-sp)
π(pz-pz)
π(py-py)


* RESSONÂNCIA ⇒ DESLOCALIZAÇÃO DE e⁻ EM LIGAÇÕES
y
x

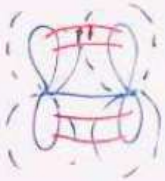


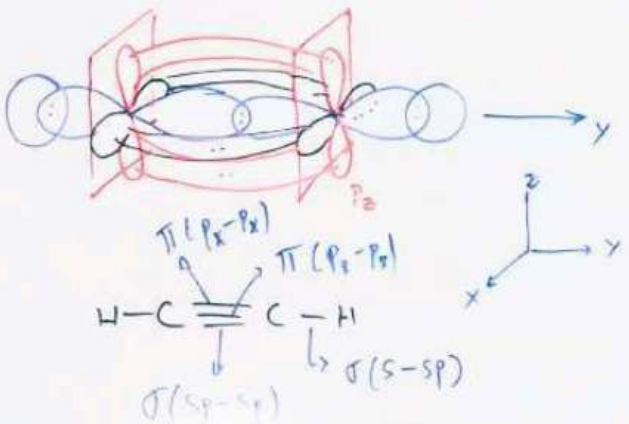


LIGAÇÃO ENTRE ORBITAIS DE 1e⁻ EM EIXOS PARALELOS PERPENDICULARES À LIGAÇÃO

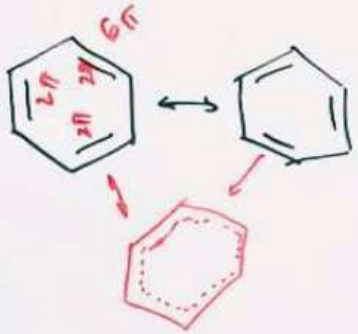
⇓

LIGAÇÃO π





* RESSONÂNCIA : INTERAÇÃO ENTRE ORBITAIS π DE VÁRIOS ÁTOMOS



DESLOC. DOS ELÉTRONS NOS ORBITAIS π