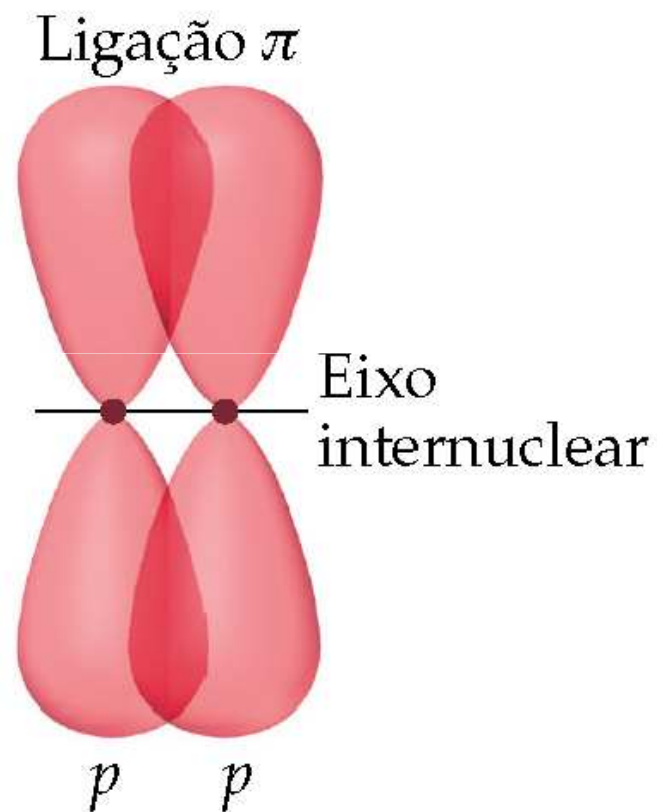


# Ligações múltiplas

- Ligações  $\sigma$ : a densidade eletrônica encontra-se no eixo entre os núcleos.
- Todas as ligações simples são ligações  $\sigma$ .
- Ligações  $\pi$ : a densidade eletrônica encontra-se acima e abaixo do plano dos núcleos.
- Uma ligação dupla consiste de uma ligação  $\sigma$  e de uma ligação  $\pi$ .
- Uma ligação tripla tem uma ligação  $\sigma$  e duas ligações  $\pi$ .
- Normalmente, os orbitais  $p$  envolvidos nas ligações  $\pi$  vêm de orbitais não-hibridizados.

# Ligações múltiplas

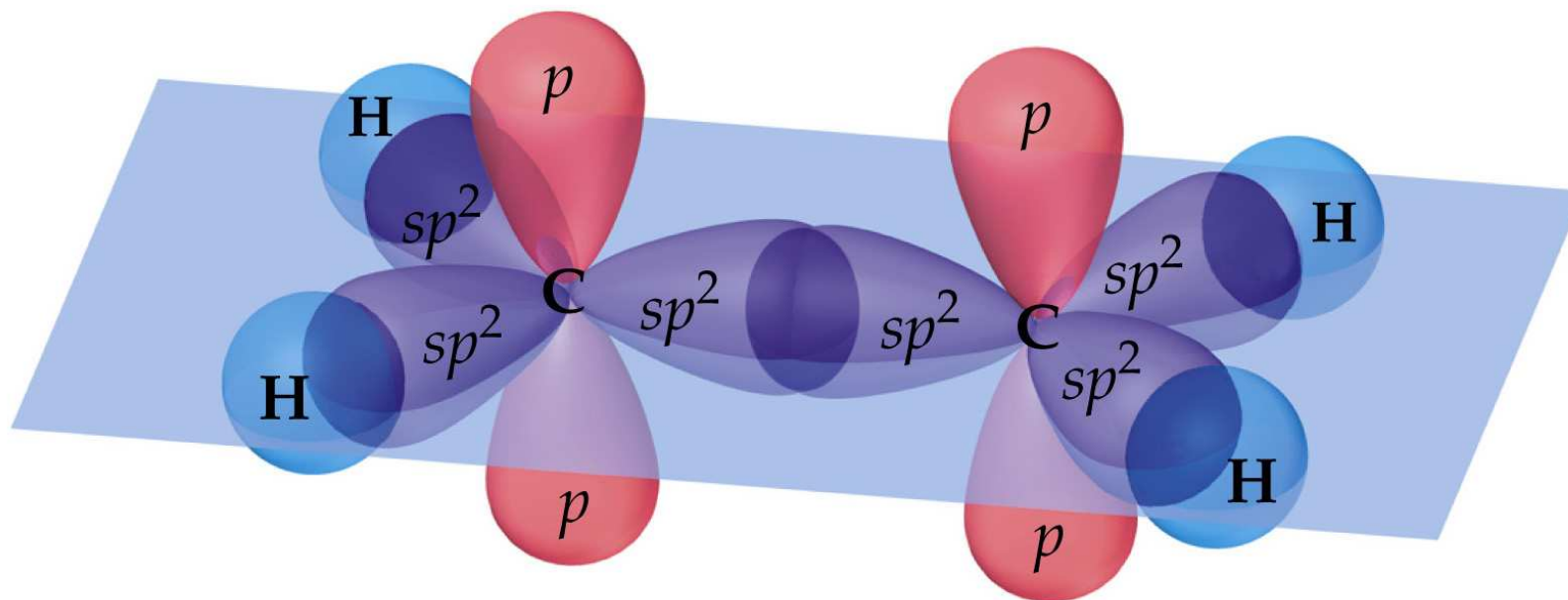


# Ligações múltiplas

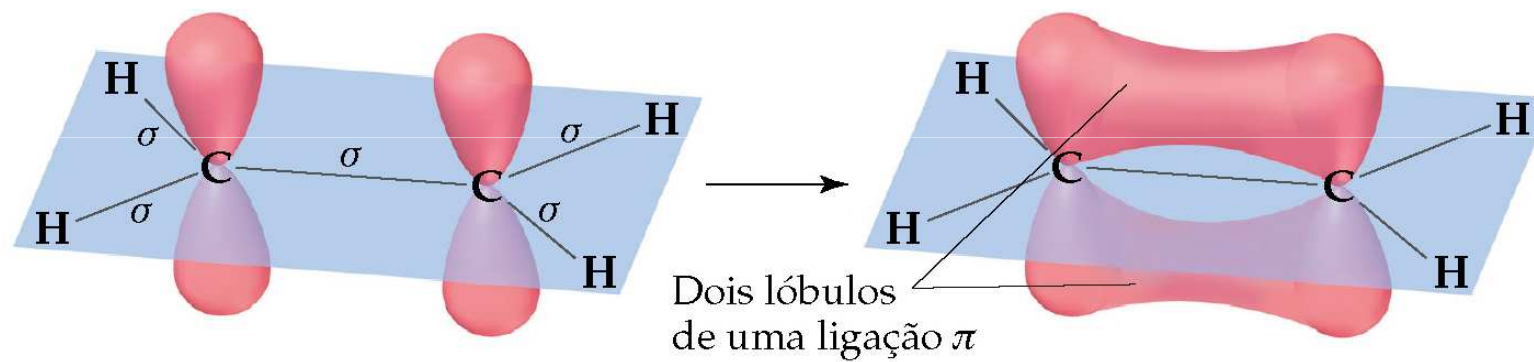
O etileno,  $C_2H_4$ , tem:

- uma ligação  $\sigma$  e uma ligação  $\pi$ ;
- ambos os átomos de C estão hibridizados  $sp^2$ ;
- ambos os átomos de C possuem arranjos e geometrias moleculares trigonais planos.

# Ligações múltiplas



# Ligações múltiplas

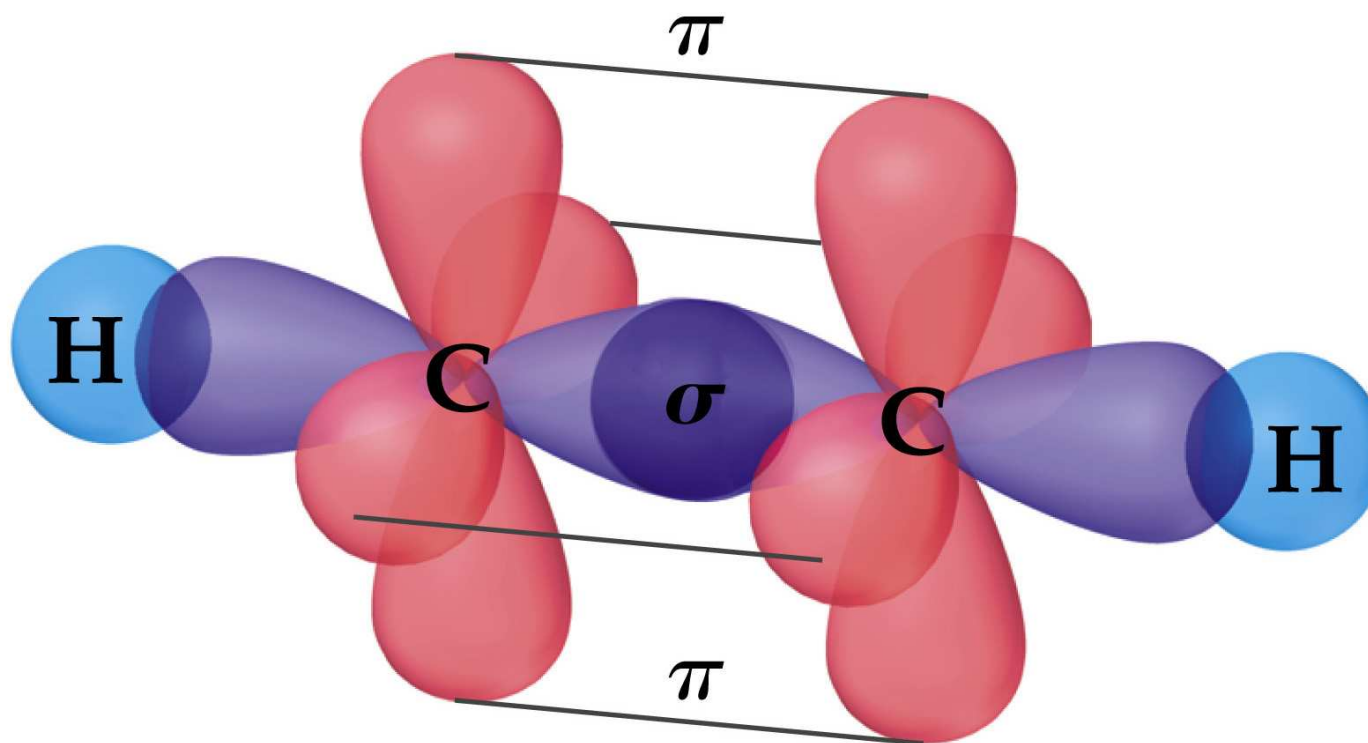


# Ligações múltiplas

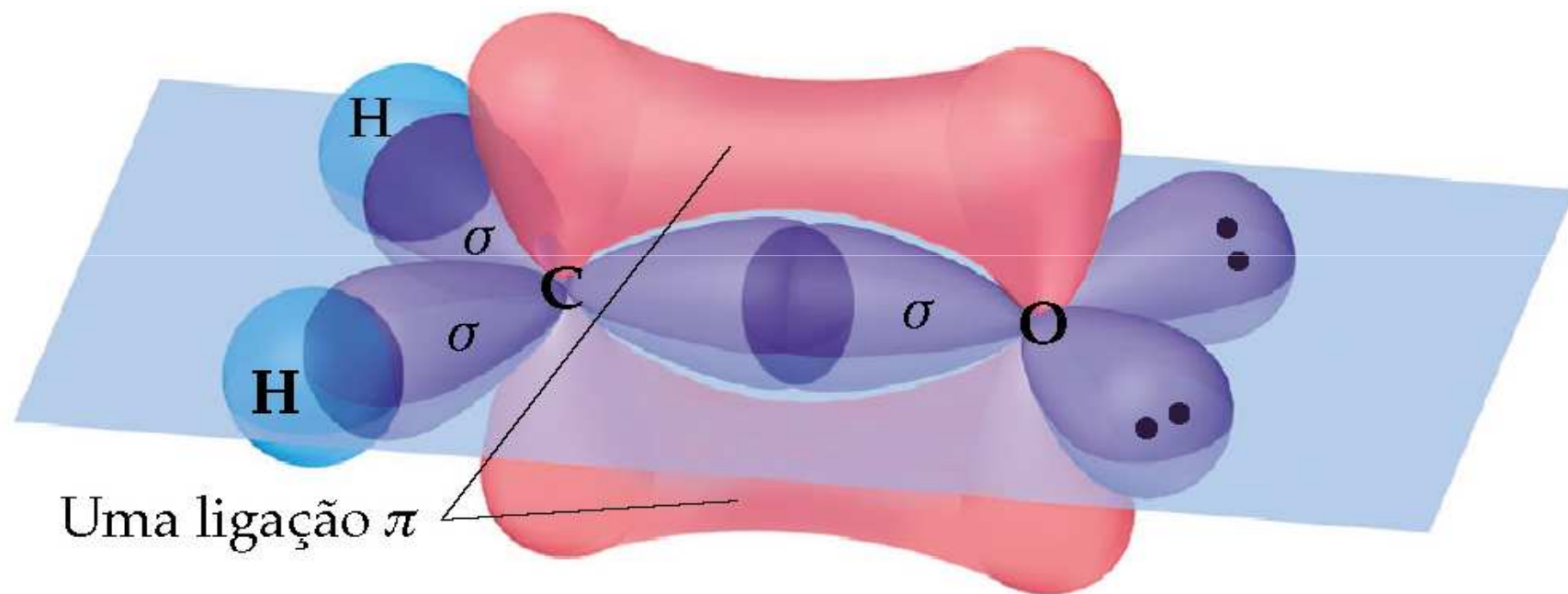
Considere o acetileno,  $C_2H_2$

- o arranjo de cada C é linear;
- conseqüentemente, os átomos de C são hibridizados  $sp$ ;
- os orbitais híbridos  $sp$  formam as ligações  $\sigma$  C-C e C-H;
- há dois orbitais  $p$  não-hibridizadas;
- ambos os orbitais  $p$  não-hibridizados formam as duas ligações  $\pi$ ;
- uma ligação  $\pi$  está acima e abaixo do plano dos núcleos;
- uma ligação  $\pi$  está à frente e atrás do plano dos núcleos.

# Ligações múltiplas



# Ligações múltiplas





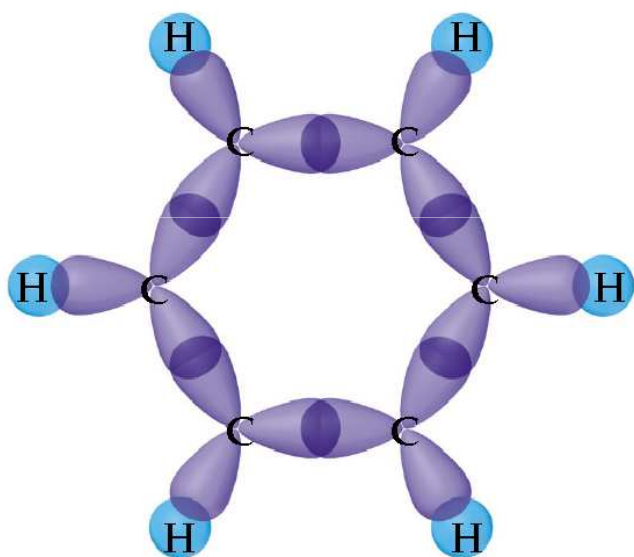
# Ligações múltiplas

## Ligações $\pi$ deslocalizadas

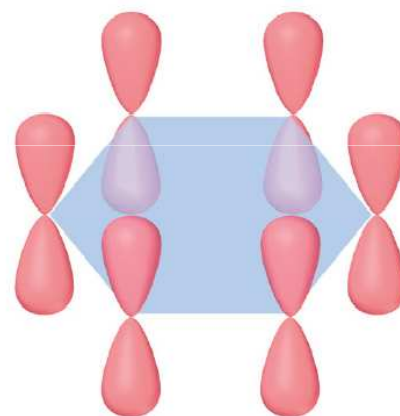
- Até agora, todas as ligações encontradas estão localizadas entre os dois núcleos.
- No caso do benzeno:
  - existem 6 ligações  $\sigma$  C-C, 6 ligações  $\sigma$  C-H,
  - cada átomo de C é hibridizado  $sp^2$
  - e existem 6 orbitais  $p$  não-hibridizados em cada átomo de C.

# Ligações múltiplas

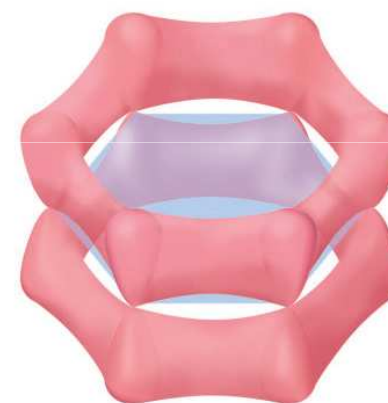
## Ligações $\pi$ deslocalizadas



(a) Ligações  $\sigma$



(b) Orbitais atômicos  $2p$



(c) Ligações  $\pi$  deslocalizadas

# Ligações múltiplas

## Ligações $\pi$ deslocalizadas

- No benzeno há duas opções para as três ligações  $\pi$ :
  - localizadas entre os átomos de C ou
  - deslocalizadas acima de todo o anel (neste caso, os elétrons  $\pi$  são compartilhados por todos os seis átomos de C).
- Experimentalmente, todas as ligações C-C têm o mesmo comprimento no benzeno.
- Conseqüentemente, todas as ligações C-C são do mesmo tipo (lembre-se de que as ligações simples são mais longas do que as ligações duplas).

# Ligações múltiplas

## Conclusões gerais

- Cada dois átomos compartilham no mínimo 2 elétrons.
- Dois elétrons entre átomos no mesmo eixo dos núcleos são ligações  $\sigma$ .
- As ligações  $\sigma$  são sempre localizadas.
- Se dois átomos compartilham mais do que um par de elétrons, o segundo e o terceiro pares formam ligações  $\pi$ .
- Quando as estruturas de ressonância são possíveis, a deslocalização também é possível.