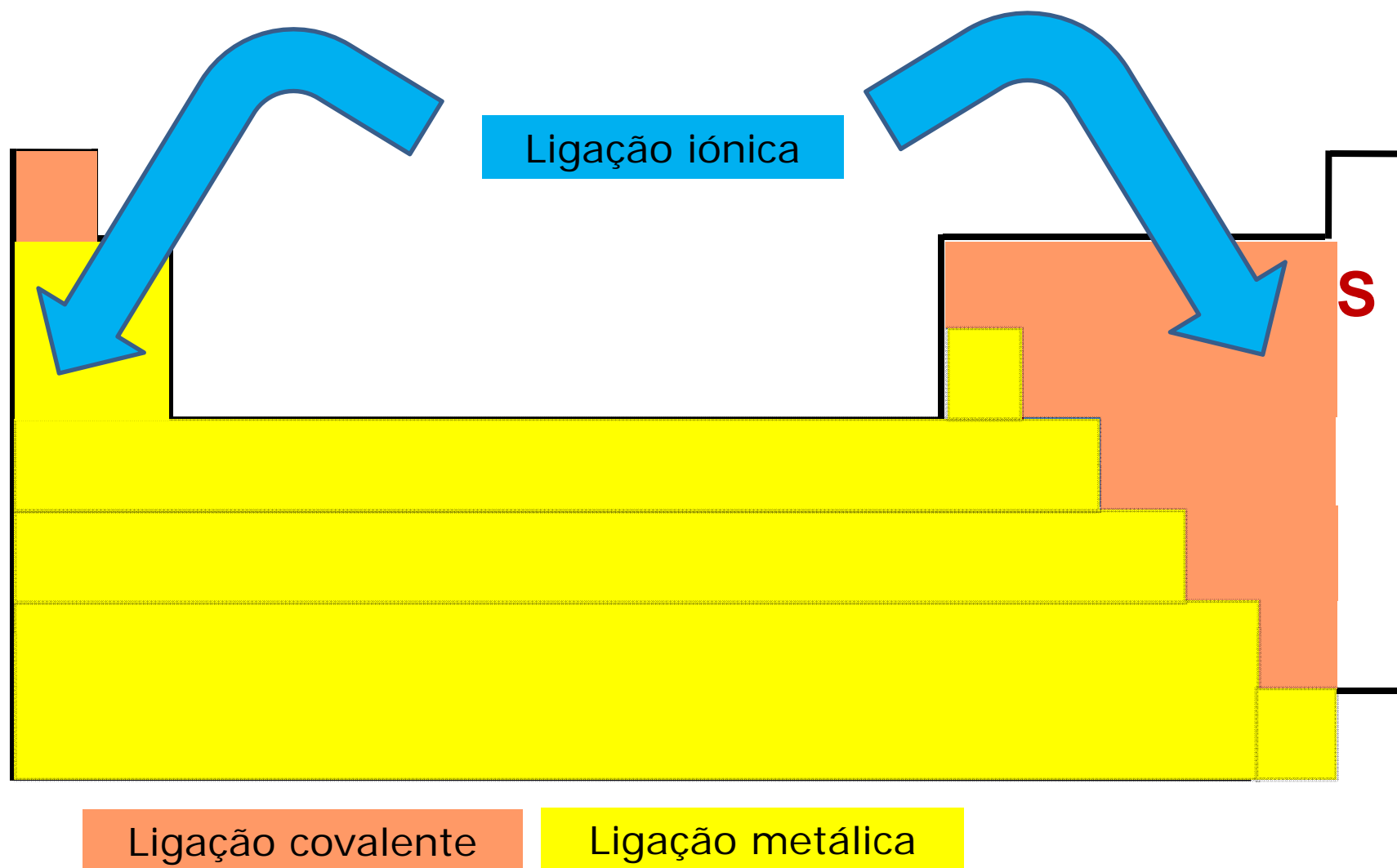


Carácter dos Elementos e Modelo de Ligação Química



Na realidade: carácter **misto** das ligações entre os átomos

LIGAÇÃO QUÍMICA

Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)

I. Método da Combinação Linear das Orbitais Atômicas (C.L.O.A)

APROXIMAÇÕES:

1- Aproximação de Born-Oppenheimer:

Os núcleos encontram-se em repouso, à distância internuclear de equilíbrio.

2- As orbitais moleculares, Ψ_j , são combinações lineares de todas as orbitais atômicas, Ψ_i , de todos os átomos: para cada orbital molecular **j:**

$$\Psi_j = c_{j1} \Psi_1 + c_{j2} \Psi_2 + \dots c_{jn} \Psi_n$$

3- Os electrões distribuem-se pelas orbitais moleculares seguindo os Princípios de Energia Mínima e de Exclusão de Pauli.

Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)

Método da Combinação Linear das Orbitais Atômicas (C.L.O.A)

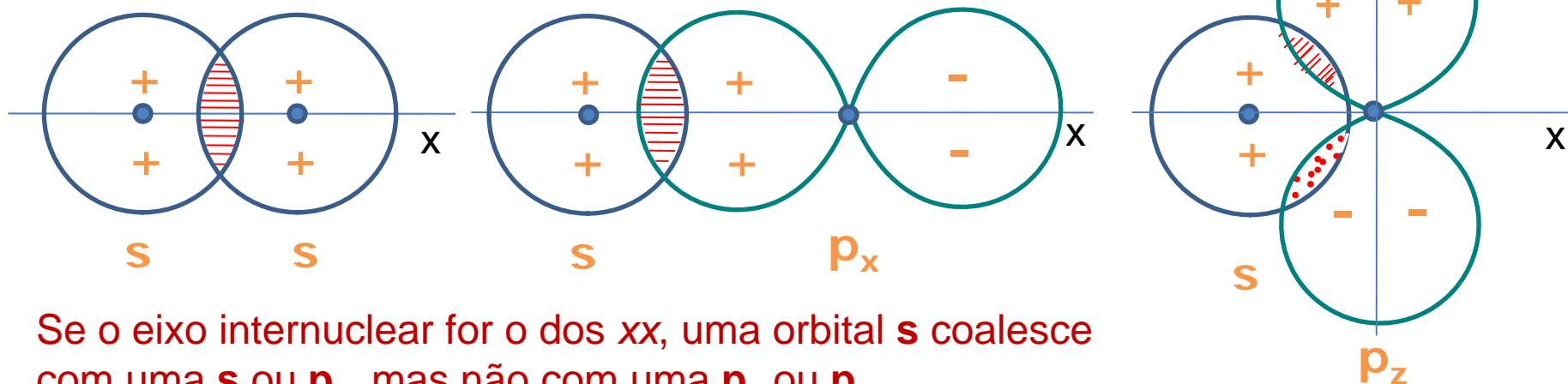
CRITÉRIOS DE SIMPLIFICAÇÃO:

1- Critério da Semelhança de Energias:

Só há mistura de orbitais atômicas se as suas energias forem semelhantes (se os átomos forem iguais: 1s com 1s, 2s e 2p com 2s e 2p, etc).

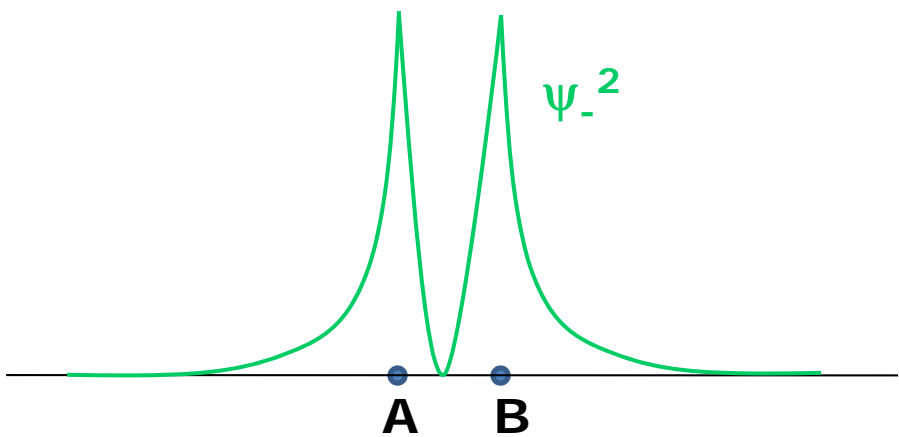
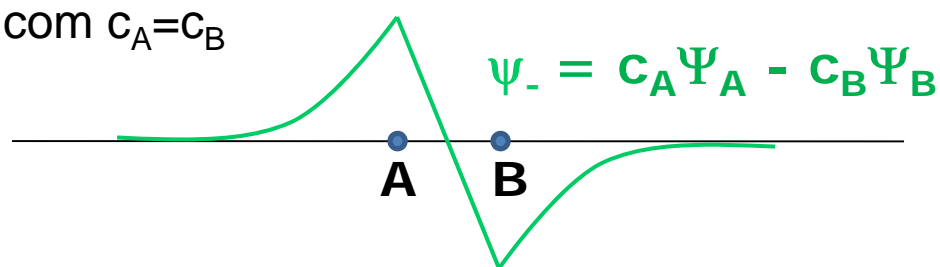
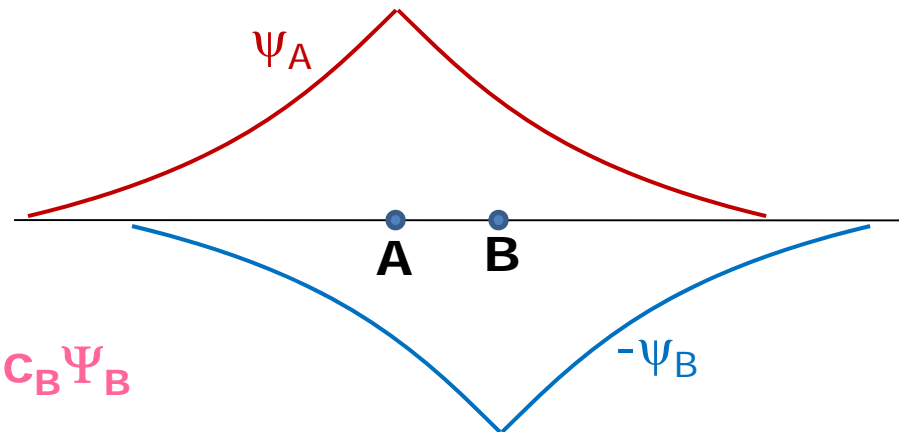
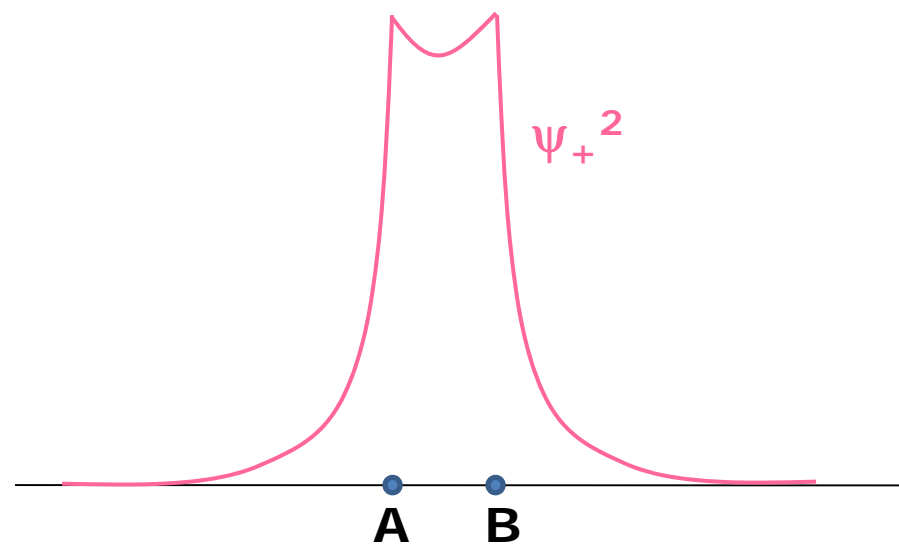
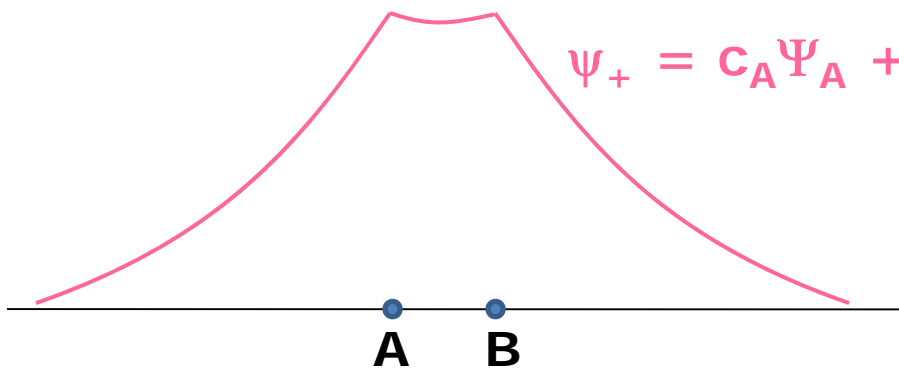
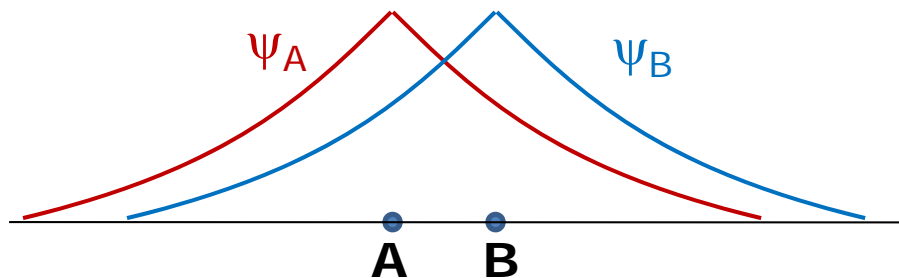
2- Critério da Coalescência:

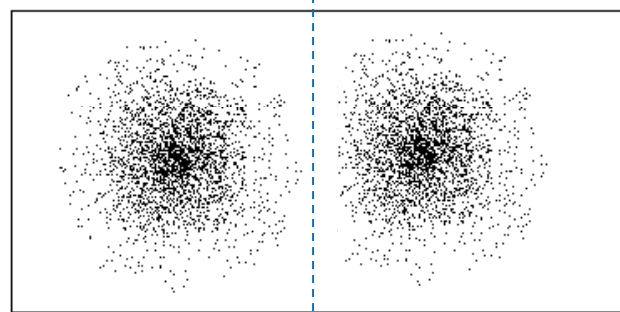
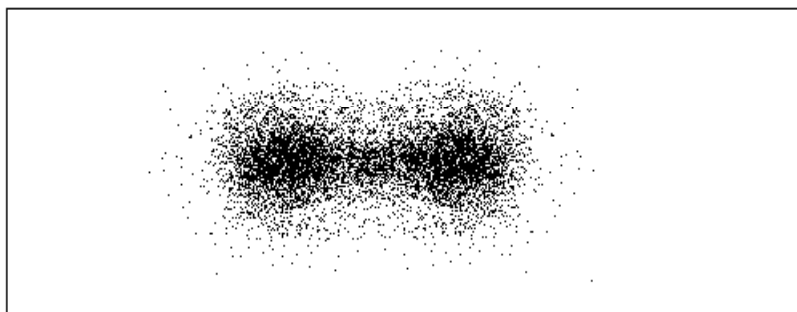
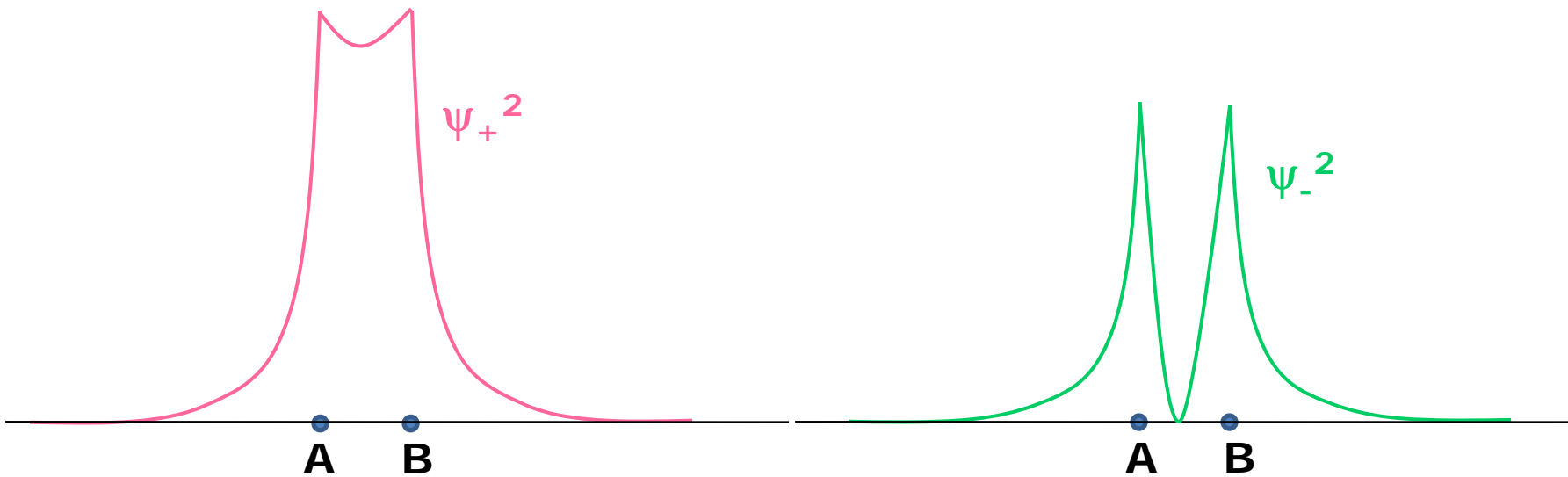
Só há mistura de orbitais atômicas se a interferência das respectivas funções de onda for não nula:



Se o eixo internuclear for o dos xx , uma orbital s coalesce com uma s ou p_x , mas não com uma p_y ou p_z .

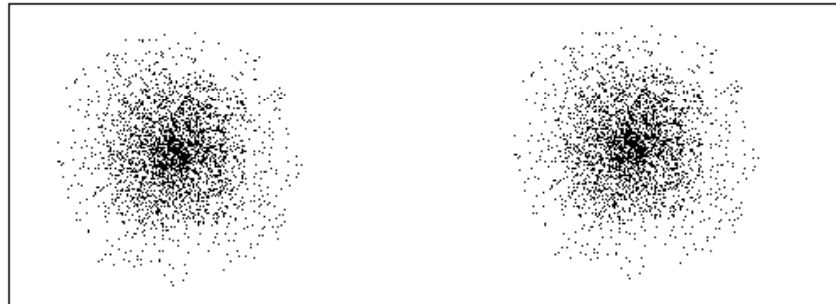
Interferência construtiva e destrutiva das funções de onda ψ_A e ψ_B



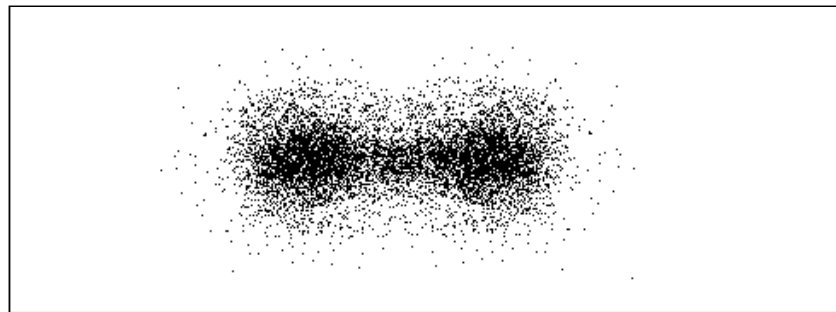
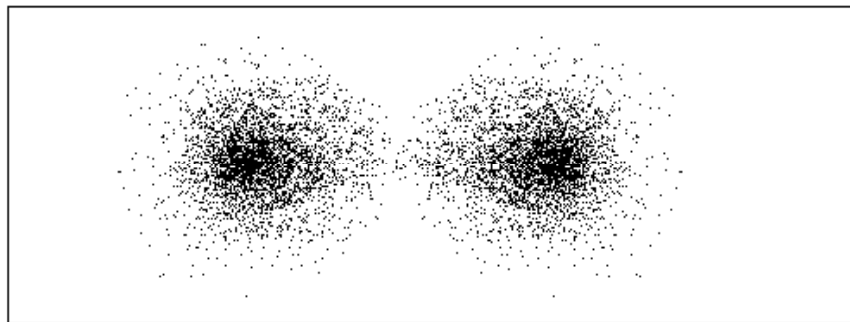


Plano nodal

Formação de uma orbital molecular ligante



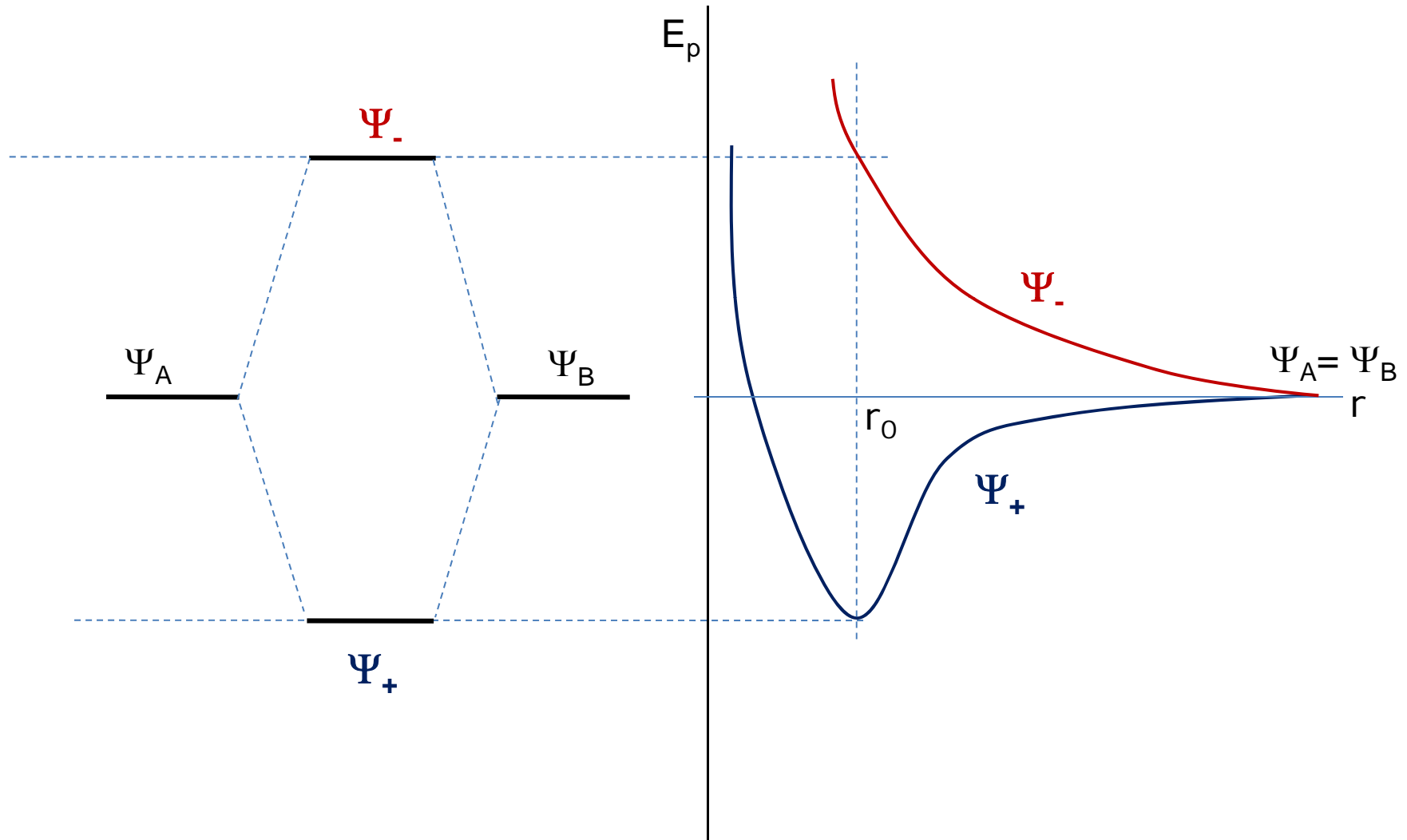
átomos não interactuantes



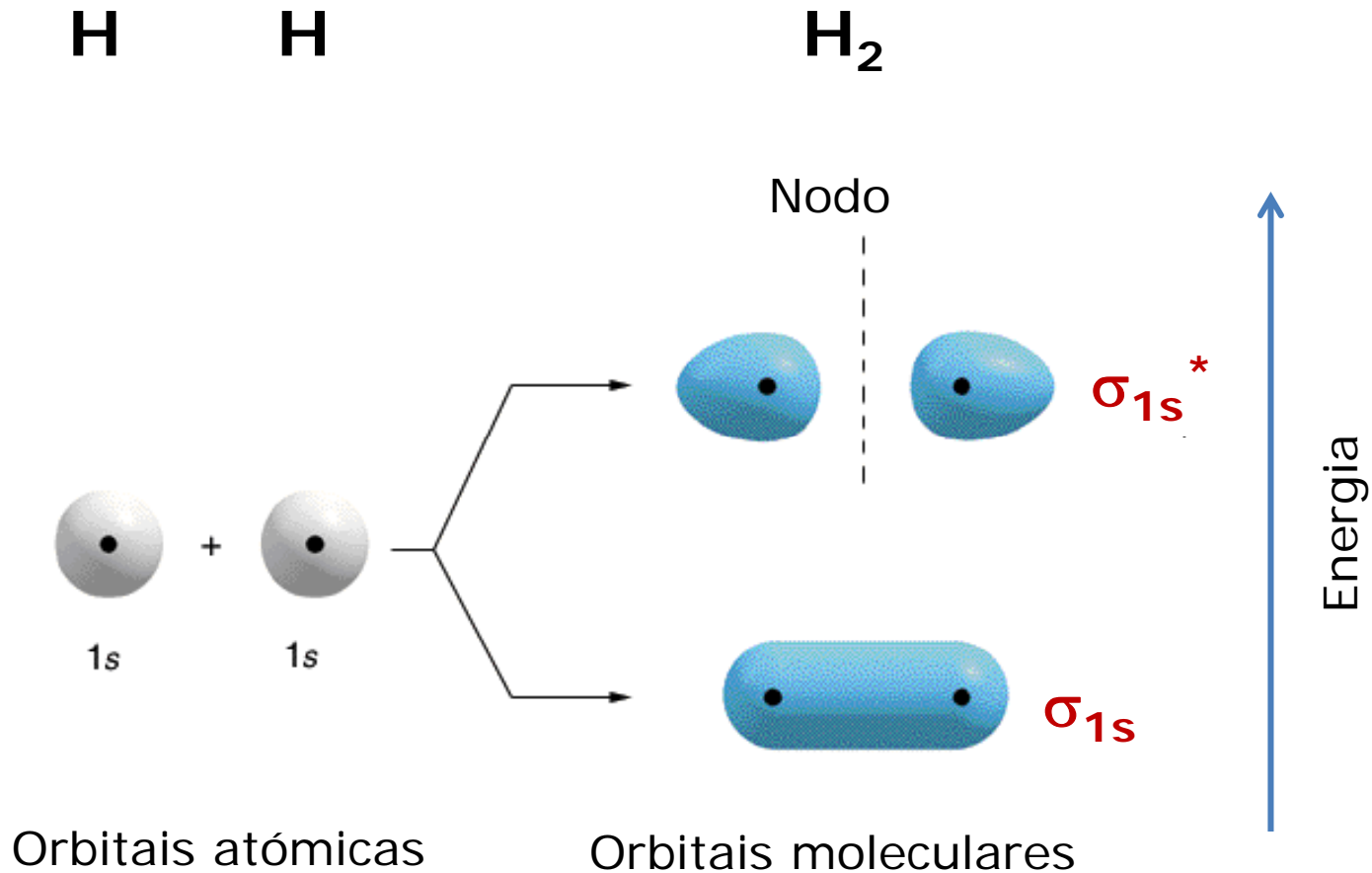
à distância internuclear
de equilíbrio

Energias das Orbitais Ligante e Antiligante à distância internuclear de equilíbrio

Varição da Energia Potencial durante a formação das orbitais moleculares

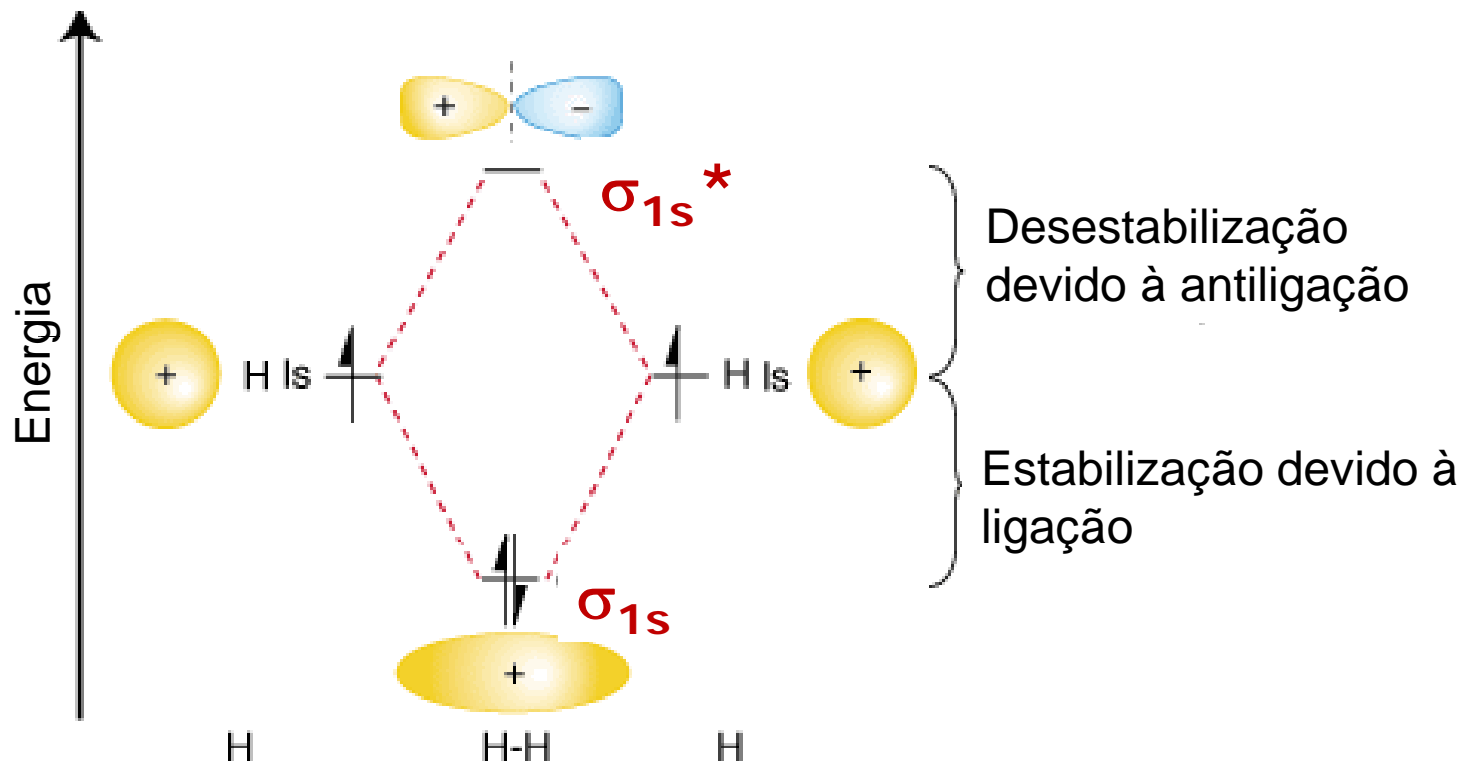


Orbitais Moleculares para a molécula de H₂



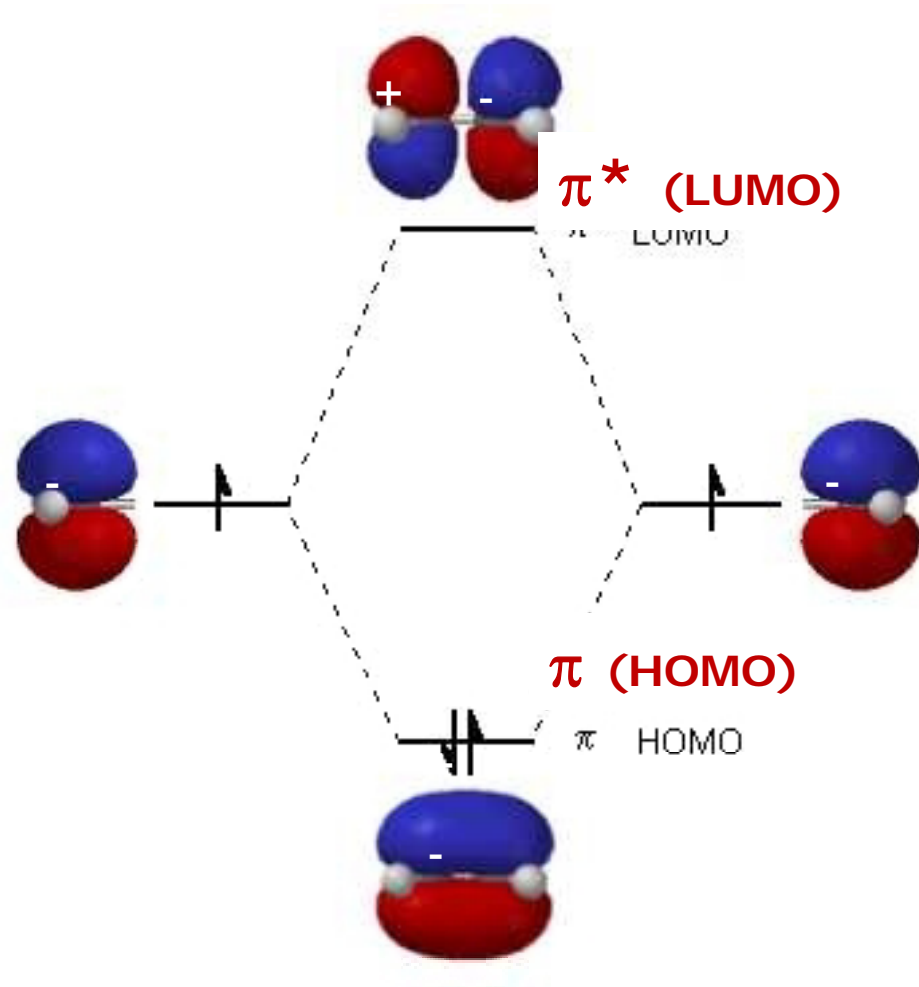
orbitais moleculares σ : simetria cilíndrica coincidente com o eixo internuclear

Diagrama de Orbitais Moleculares: H₂ Orbitais σ

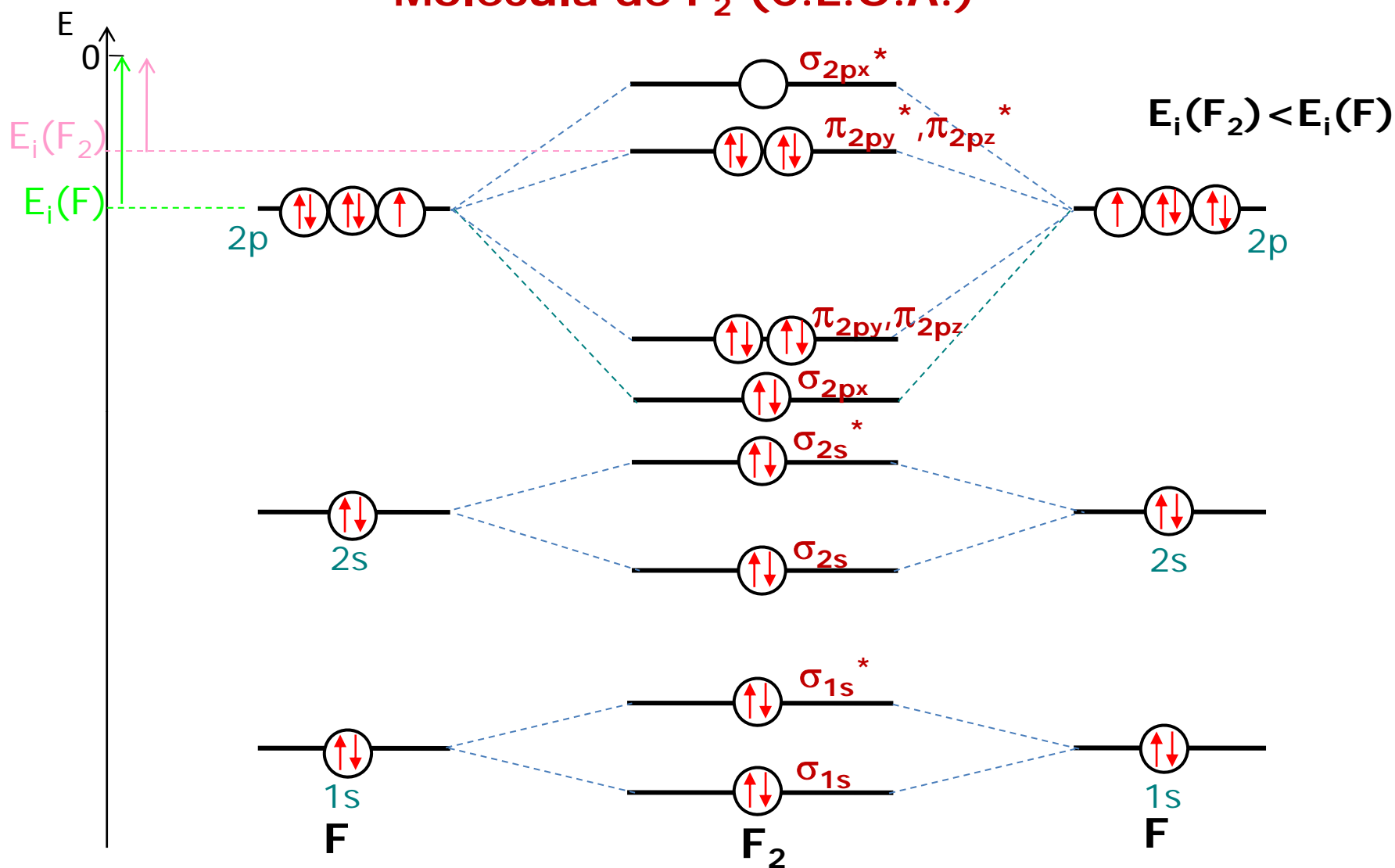


$$\text{Ordem da ligação} = \frac{\text{N}^\circ \text{ de e}^- \text{ s ligantes} - \text{N}^\circ \text{ de e}^- \text{ s antiligantes}}{2} = 1$$

Nomenclatura das Orbitais Moleculares: orbitais π



Molécula de F₂ (C.L.O.A.)



$$\text{Ordem da ligação} = \frac{10 - 8}{2} = \frac{8 - 6}{2} = 1$$

Molécula diamagnética
(sem electrões
desemparelhados)

Sumário 5

Ligação Química

- **Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)**
- **I. Método da Combinação Linear das Orbitais Atômicas (C.L.O.A)**
 - Aproximação de Born-Oppenheimer
 - Critérios de Simplificação
 - Contribuição de cada Orbital Atômica
 - Nomenclatura e Representação das Orbitais Moleculares
 - Energias das Orbitais Moleculares Ligantes e Anti-ligantes
- **Diagramas de Energia de Orbitais Moleculares**
 - Moléculas Diatómicas Homonucleares: H_2 ; He_2 ; N_2 ; F_2
 - Ordem de ligação
 - Propriedades magnéticas

Teoria: Capítulo 4, pág. 1-25