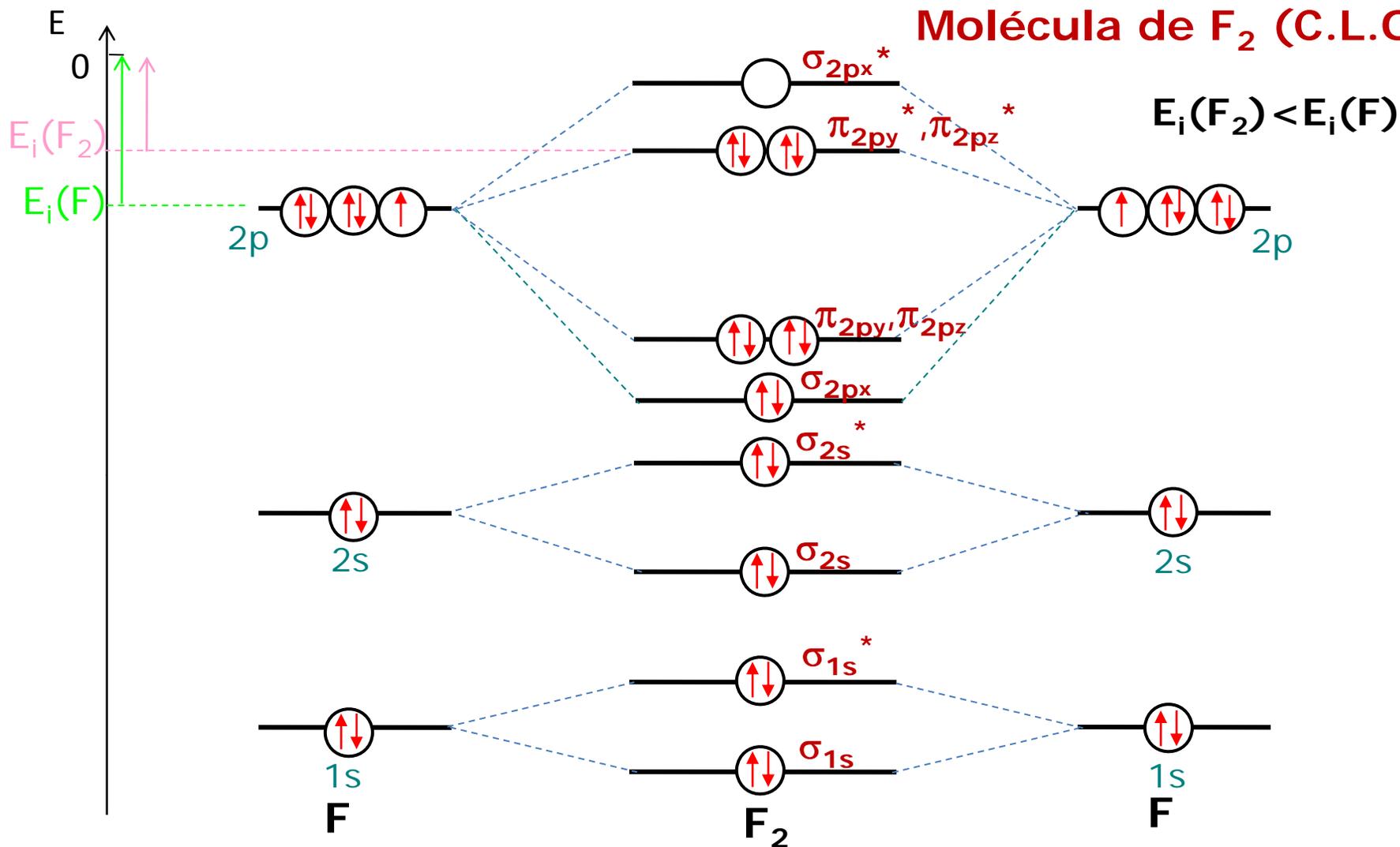


Molécula de F₂ (C.L.O.A.)



- Os electrões das camadas internas ocupam orbitais moleculares cujas energias são semelhantes às das orbitais atômicas que lhes dão origem.
- N^o e⁻s ligantes = N^o de e⁻s anti-ligantes, logo não contribuem para a ligação.

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

Logo: A ordem da ligação é determinada pelos e⁻s de valência

Diagrama de Energia das Orbitais Moleculares: C₂

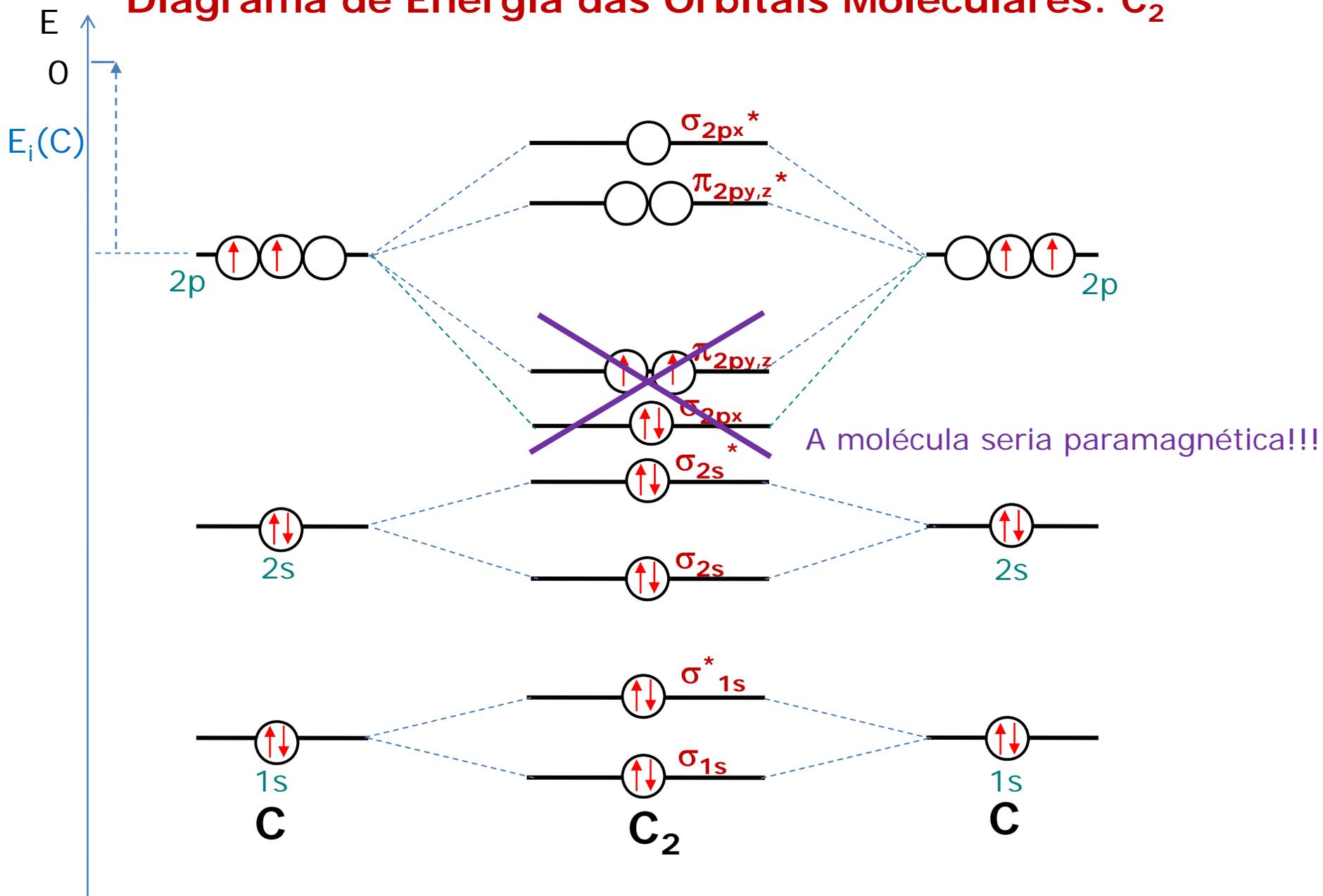
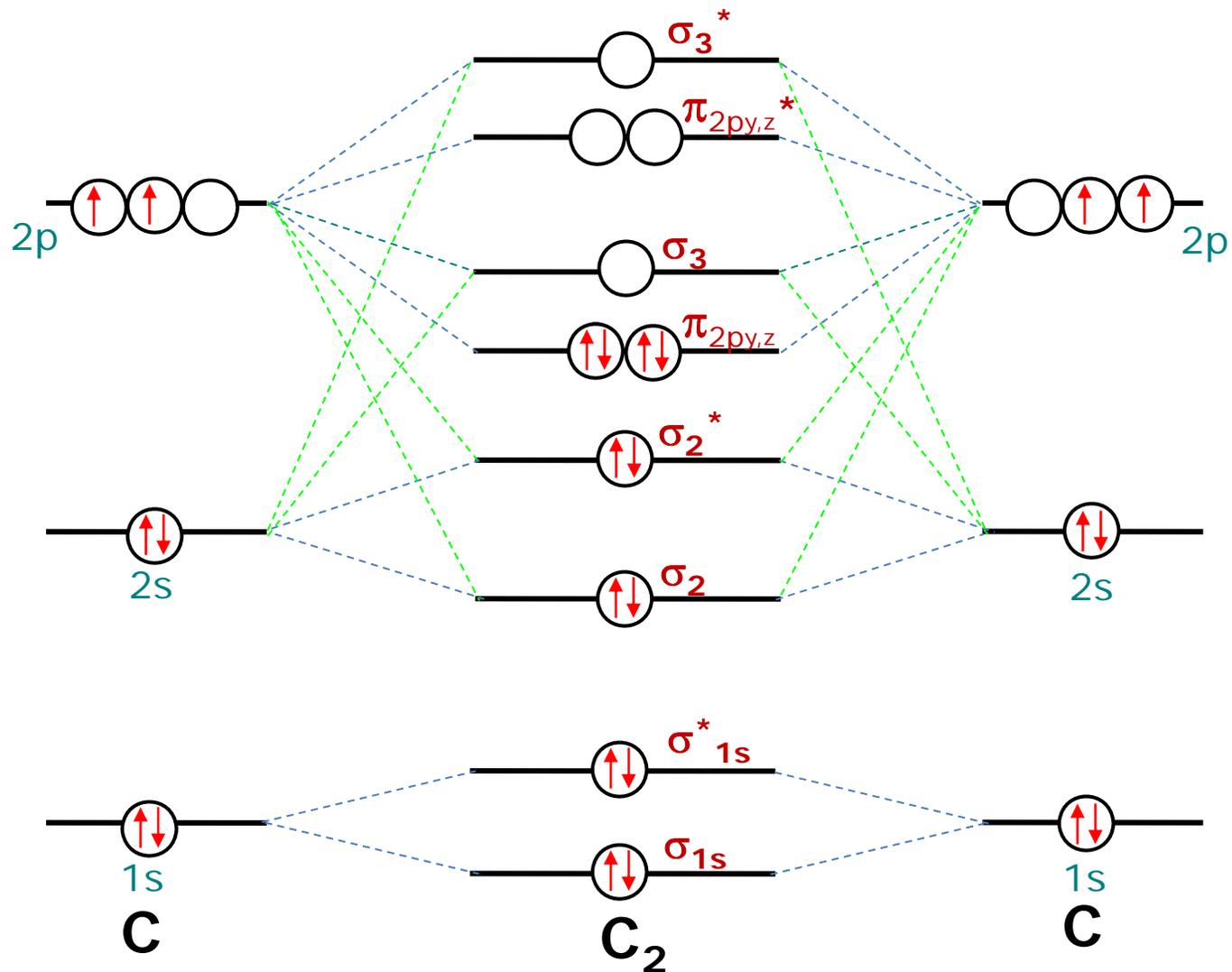


Diagrama de Energia das Orbitais Moleculares para o C_2

Corrigido considerando a mistura $s-p$: **molécula diamagnética**



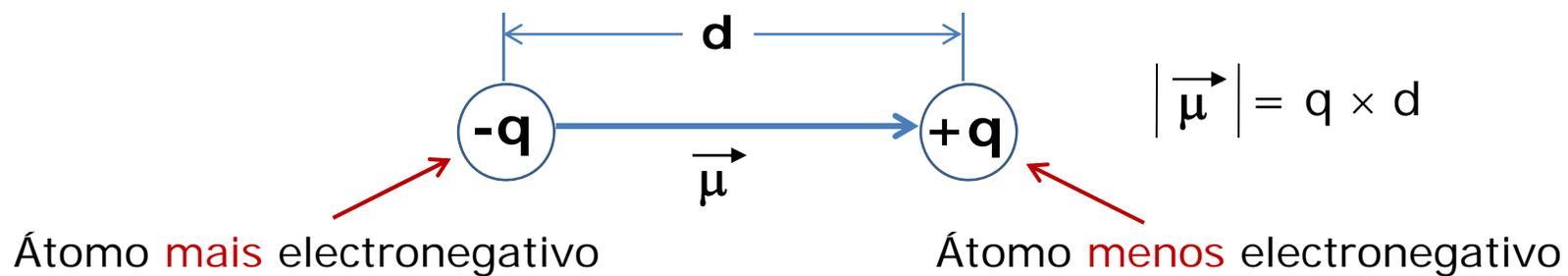
A mistura $s-p$ considera-se para n° total de e⁻s <14

Moléculas Diatómicas Heteronucleares

A-B

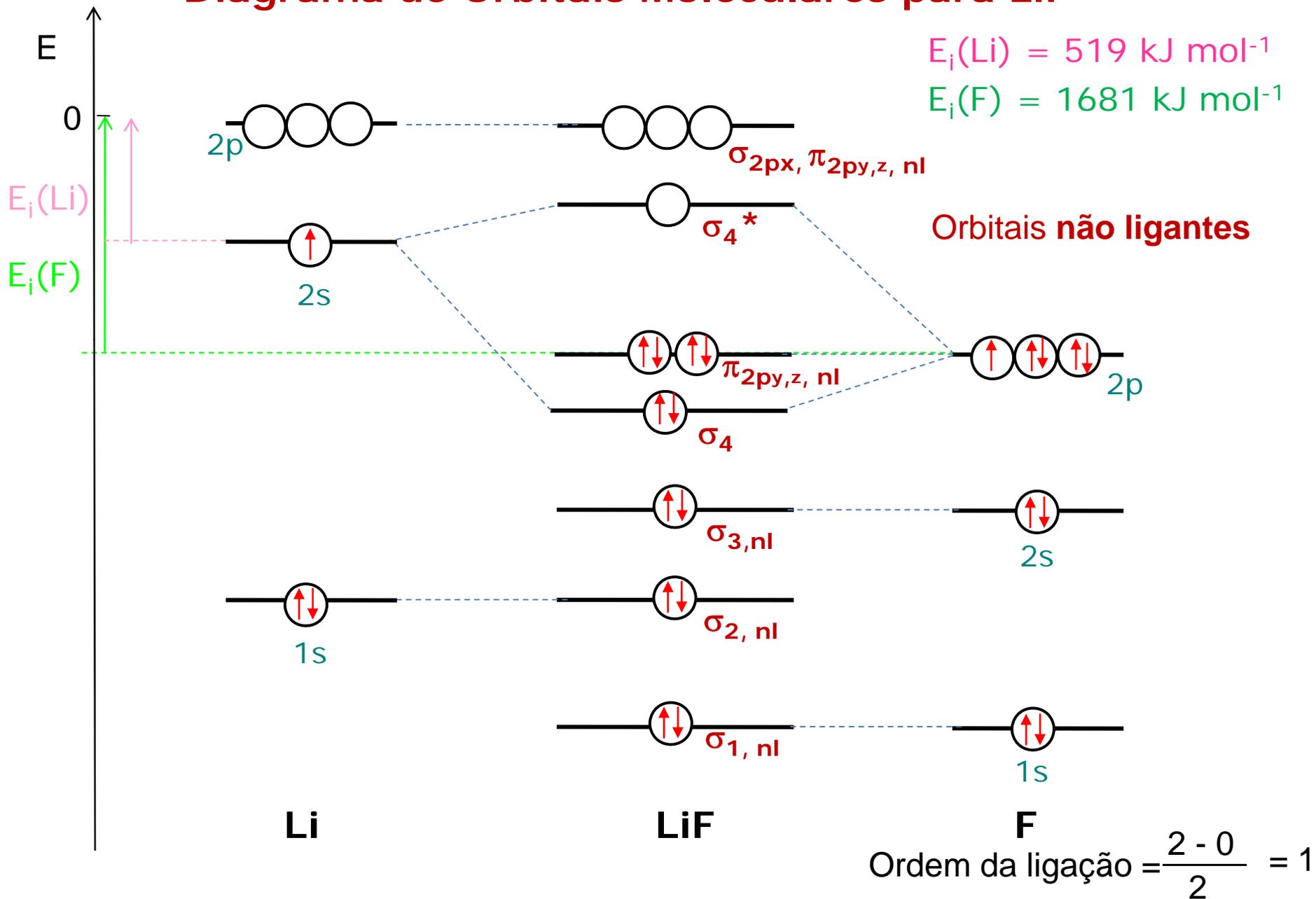
$$\chi_A \neq \chi_B$$

Dipolo molecular



$$1 \text{ Debye (D)} = 3.3333 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

Diagrama de Orbitais Moleculares para LiF



T_{eb} (K)	11	22,98977	Estados de oxidação mais prováveis
T_{f} (K)	1156	1	
Massa volúmica a 300 K (g.cm ⁻³)	0,97	Na	
		[Ne]3s ¹	
		Sodium	

No verso da Tabela Periódica:

	Na	
Raio covalente (Å)	1,54	Electronegatividade de Pauling
Raio atómico (Å)	2,23	
Volume atómico (cm ³ . mol ⁻¹)	23,7	
Energia de 1 ^a ionização (eV)	5,139	

Percentagem de carácter iónico de uma ligação química (electronegatividades de Pauling)

		$\chi_A - \chi_B$																																							
		0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	...	2,3	2,4	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3,0	3,1	3,2											8A						
		%c.i.																																							
		0.5	1	2	4	6	9	12	15	19	22	26	30	...	74	76	79	82	84	86	88	89	91	92											2						
1A	1 H 2.20																											8A													
2A	3 Li 0.98	4 Be 1.57																	3A	4A	5A	6A	7A	10 Ne no data																	
		<table border="1" style="margin: auto; text-align: center;"> <tr> <td style="background-color: #d9e1f2;">1.0</td><td style="background-color: #cfe2f3;">1.3</td><td style="background-color: #a6c9ec;">1.6</td><td style="background-color: #7fb3d5;">1.9</td><td style="background-color: #5499c7;">2.2</td><td style="background-color: #2fb8e0;">2.5</td><td style="background-color: #00b0f0;">2.8</td><td style="background-color: #0070c0;">3.1</td> </tr> </table>																1.0	1.3	1.6	1.9	2.2	2.5	2.8	3.1	5 B 2.04	6 C 2.55	7 N 3.04	8 O 3.44	9 F 3.98											18 Ar no data
1.0	1.3	1.6	1.9	2.2	2.5	2.8	3.1																																		
3B	11 Na 0.93	12 Mg 1.31	19 K 0.82	20 Ca 1.00	21 Sc 1.36	22 Ti 1.54	23 V 1.63	24 Cr 1.66	25 Mn 1.55	26 Fe 1.83	27 Co 1.88	28 Ni 1.91	29 Cu 1.90	30 Zn 1.65	31 Ga 1.81	32 Ge 2.01	33 As 2.18	34 Se 2.55	35 Br 2.96	36 Kr 3.00																					
4B	37 Rb 0.82	38 Sr 0.95	39 Y 1.22	40 Zr 1.33	41 Nb 1.6	42 Mo 2.16	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.28	46 Pd 2.20	47 Ag 1.93	48 Cd 1.69	49 In 1.78	50 Sn 1.96	51 Sb 2.05	52 Te 2.1	53 I 2.66	54 Xe 2.6																							
5B	55 Cs 0.79	56 Ba 0.89	57-71 Lanthanides	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 2.36	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.20	78 Pt 2.28	79 Au 2.54	80 Hg 2.00	81 Tl 1.62	82 Pb 2.33	83 Bi 2.02	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn no data																							
6B	87 Fr 0.7	88 Ra 0.89	89-103 Actinides	*** Elements > 104 exist only for very short half-lives and the data is unknown.***																																					

Lanthanides	57 La 1.10	58 Ce 1.12	59 Pr 1.13	60 Nd 1.14	61 Pm 1.13	62 Sm 1.17	63 Eu 1.2	64 Gd 1.2	65 Tb 1.2	66 Dy 1.22	67 Ho 1.23	68 Er 1.24	69 Tm 1.25	70 Yb 1.1	71 Lu 1.27
Actinides	89 Ac 1.1	90 Th 1.3	91 Pa 1.5	92 U 1.38	93 Np 1.36	94 Pu 1.28	95 Am 1.3	96 Cm 1.3	97 Bk 1.3	98 Cf 1.3	99 Es 1.3	100 Fm 1.3	101 Md 1.3	102 No 1.3	103 Lr no data

Carácter iónico de uma ligação e momento dipolar:

Se a ligação fosse 100% iónica: $|\vec{\mu}|_{\text{iónico}} = e \times d$

Mas há apenas transferência parcial de carga: $|\vec{\mu}|_{\text{exp}} = q \times d$

$$\longrightarrow r = \frac{|\vec{\mu}|_{\text{exp}}}{|\vec{\mu}|_{\text{iónico}}} = \frac{q}{e}$$

r - carácter iónico da ligação
% c.i. = $100 \times r$

O carácter iónico é determinado pela **diferença de electronegatividades**

LiF

$$\chi_{\text{Li}} = 0.98$$

$$\chi_{\text{F}} = 3.98$$

$$\chi_{\text{F}} - \chi_{\text{Li}} = 3.0 \longrightarrow \% \text{ c.i.} = 89\% \text{ (Tabela periódica, Pauling)}$$

Carácter iónico: $r = 0.89$

Estimativa do momento dipolar da molécula:

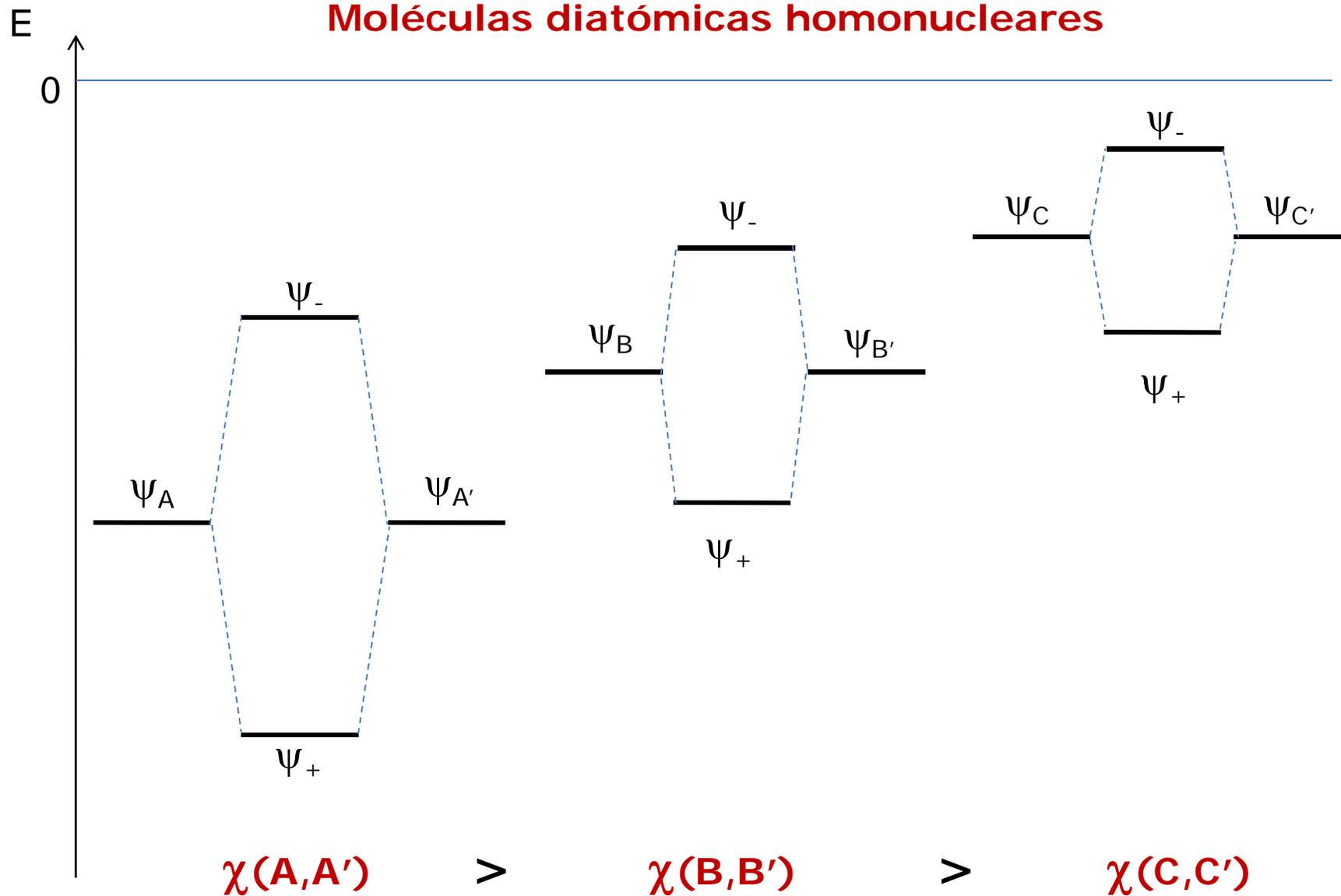
$$|\vec{\mu}|_{\text{exp}} = r |\vec{\mu}|_{\text{iónico}} = 0.89 \times e \times d$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

d – distância internuclear

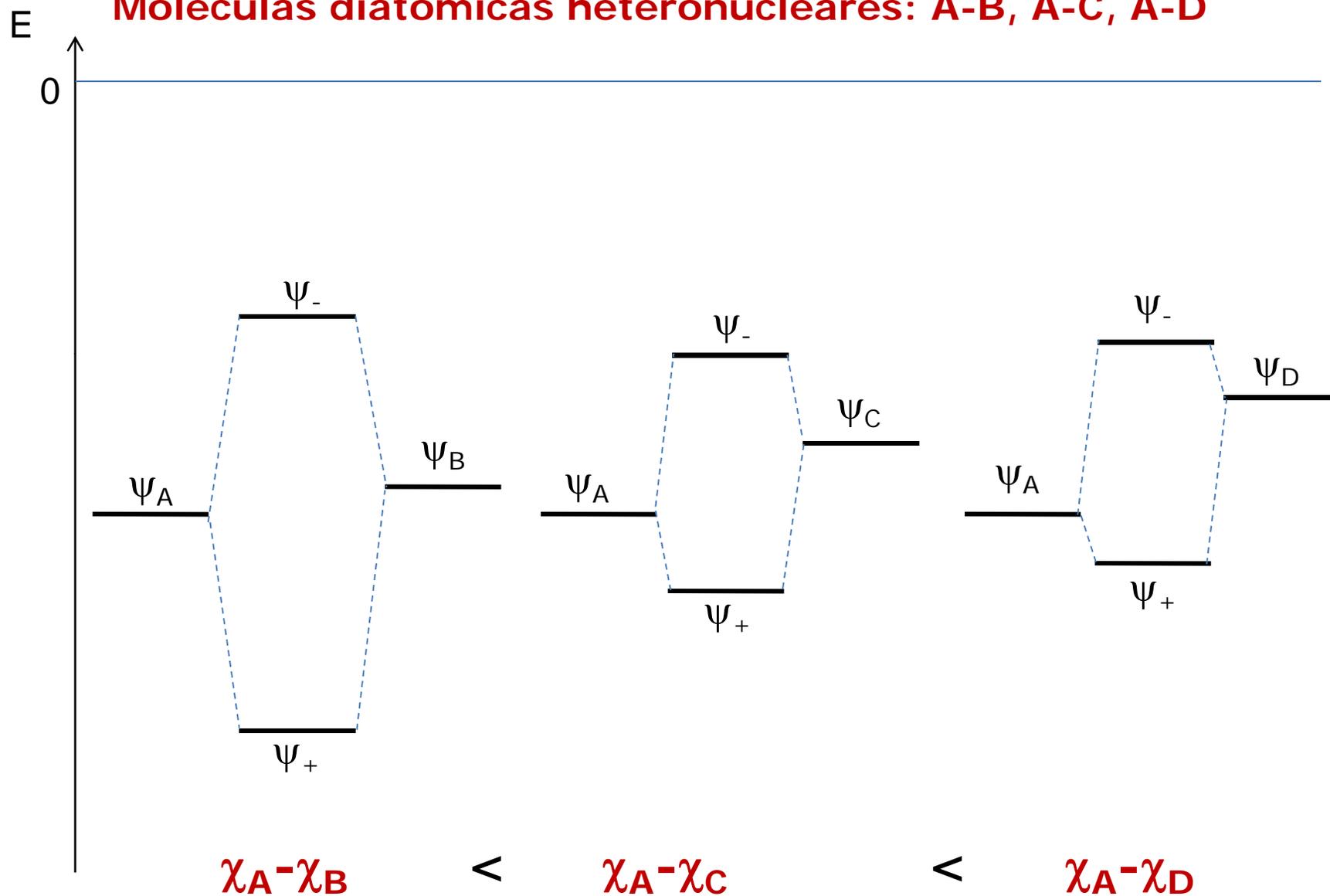
Influência da Electronegatividade sobre a energia das orbitais moleculares

Moléculas diatómicas homonucleares



Influência da Electronegatividade sobre a energia das orbitais moleculares

Moléculas diatómicas heteronucleares: A-B, A-C, A-D



Sumário 6

Ligação Química

- Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)
- I .Método da Combinação Linear das Orbitais Atômicas (C.L.O.A)
 - Diagramas de Energia de Orbitais Moleculares
 - Moléculas Diatómicas Homonucleares: Moléculas de O_2 e F_2
 - Molécula de C_2 . Mistura de orbitais s e p
 - Moléculas Diatómicas Heteronucleares: Molécula de HF
 - Orbitais moleculares não ligantes
 - Molécula de LiF
 - Dipolo Molecular
 - Carácter iónico da ligação
 - Influência da Electronegatividade sobre a energia das orbitais moleculares

Teoria: Capítulo 4, pág. 25-41