

Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)

II – Método do Enlace de Valência

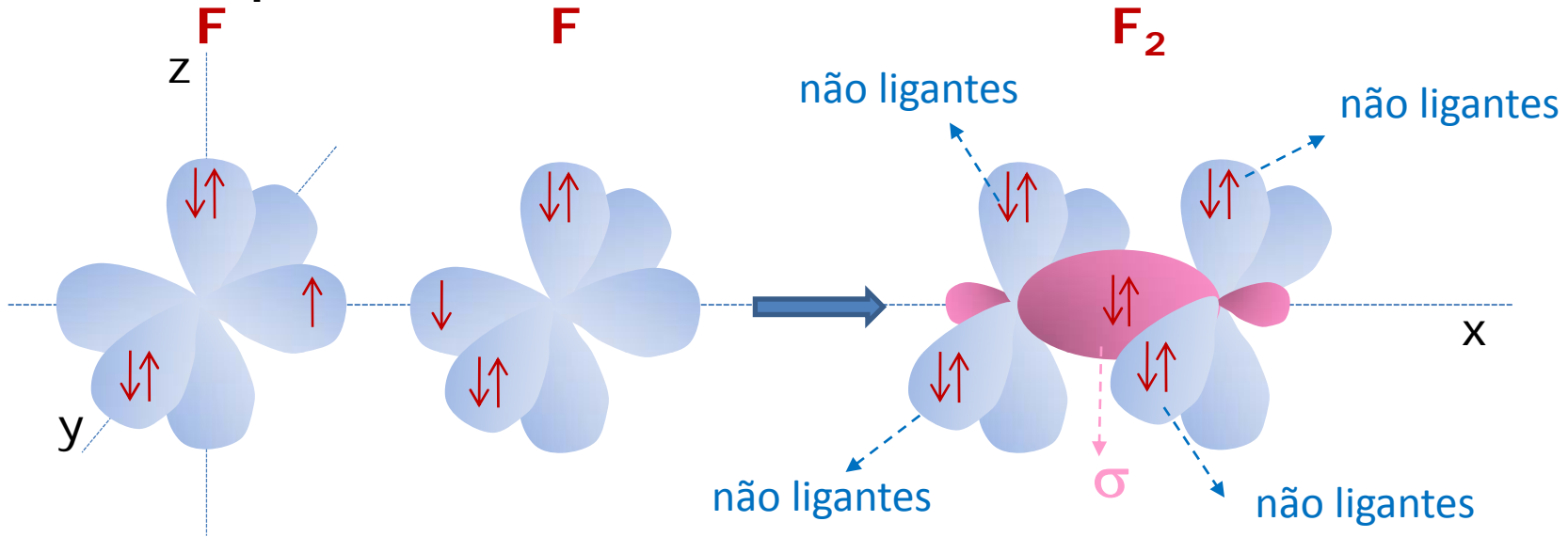
A formação de uma ligação entre dois átomos é descrita como a coalescência (enlace) de 2 orbitais atômicas de **valência semi-preenchidas**, 1 de cada átomo, ou de 1 orbital atômica totalmente preenchida de um átomo e outra vazia do outro átomo (ligação dativa).

Como se usa o método?

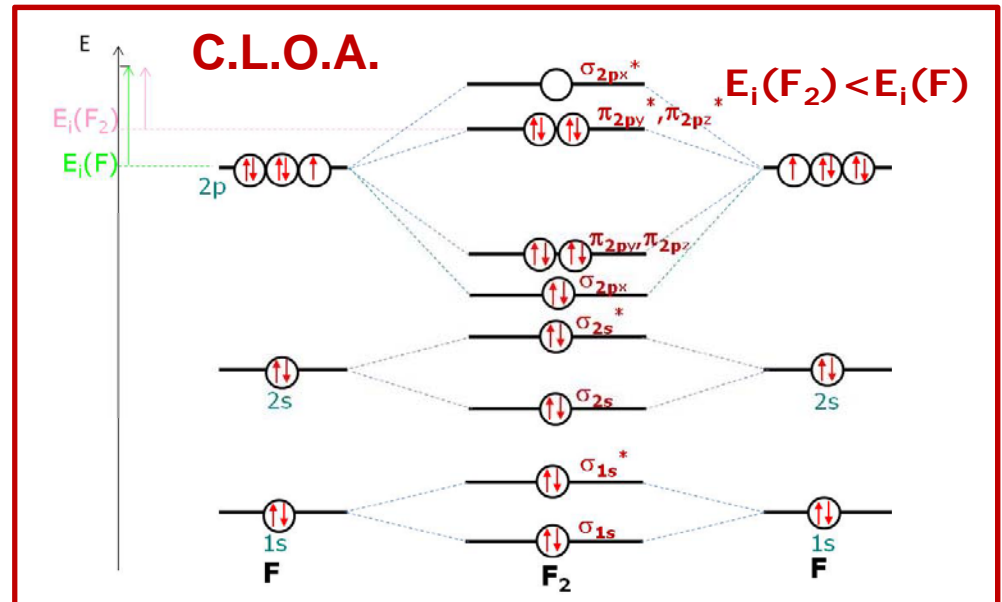
- Apenas se consideram as orbitais atômicas de valência;
- Só se fazem combinações de orbitais atômicas duas a duas, uma de cada átomo;
- Os e-s de camadas interiores conservam carácter atômico;
- Só há orbitais ligantes e não-ligantes (atômicas)

Contornos de isoprobabilidade dos electrões mais externos na molécula de F_2 pelo método do Enlace de Valência

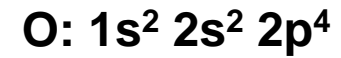
$F: 1s^2 2s^2 2p^5$



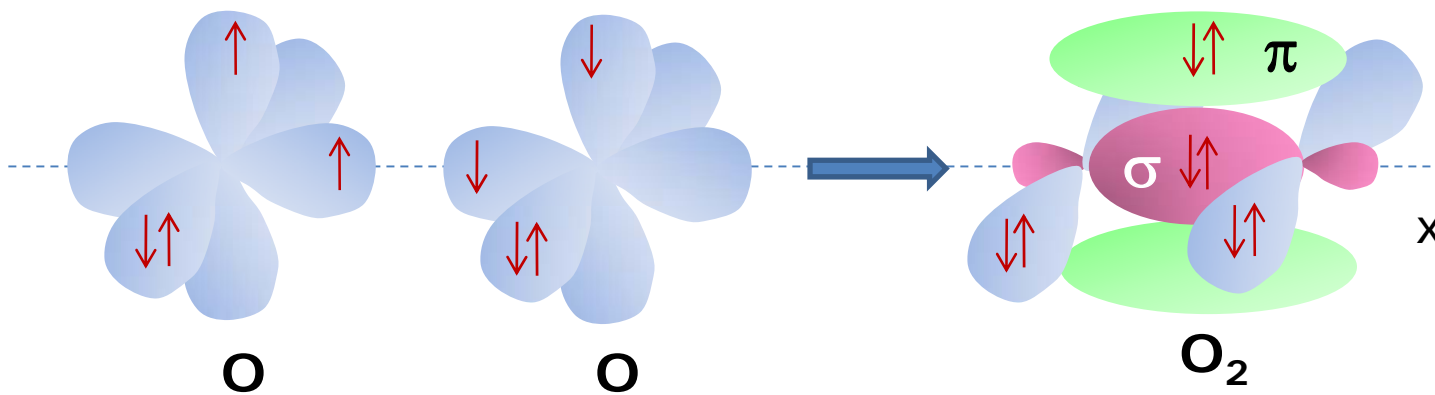
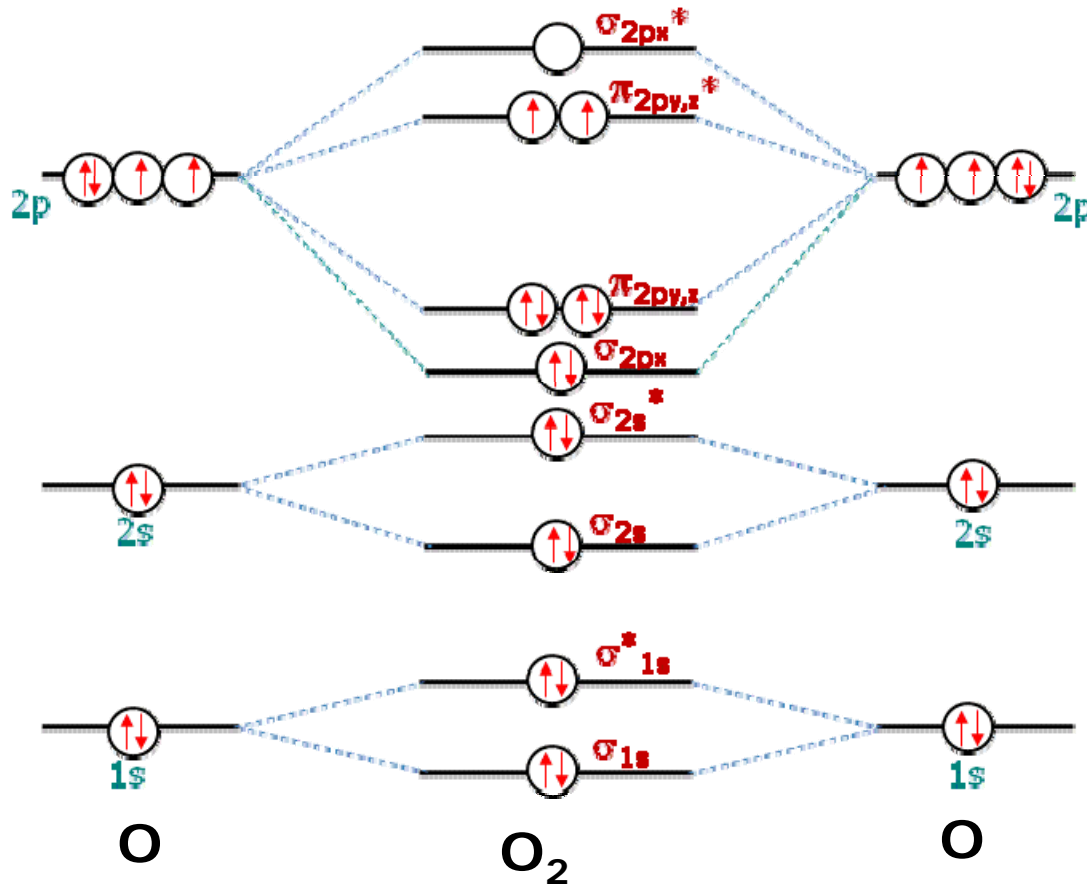
Em vez dos electrões anti-ligantes previstos pela C.L.O.A. há electrões não ligantes, o que levaria a:
 $E_i(F_2) = E_i(F)$



Molécula de O₂

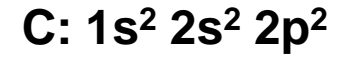


Pelo método da **C.L.O.A.** há 2 electrões desemparelhados, antiligantes.

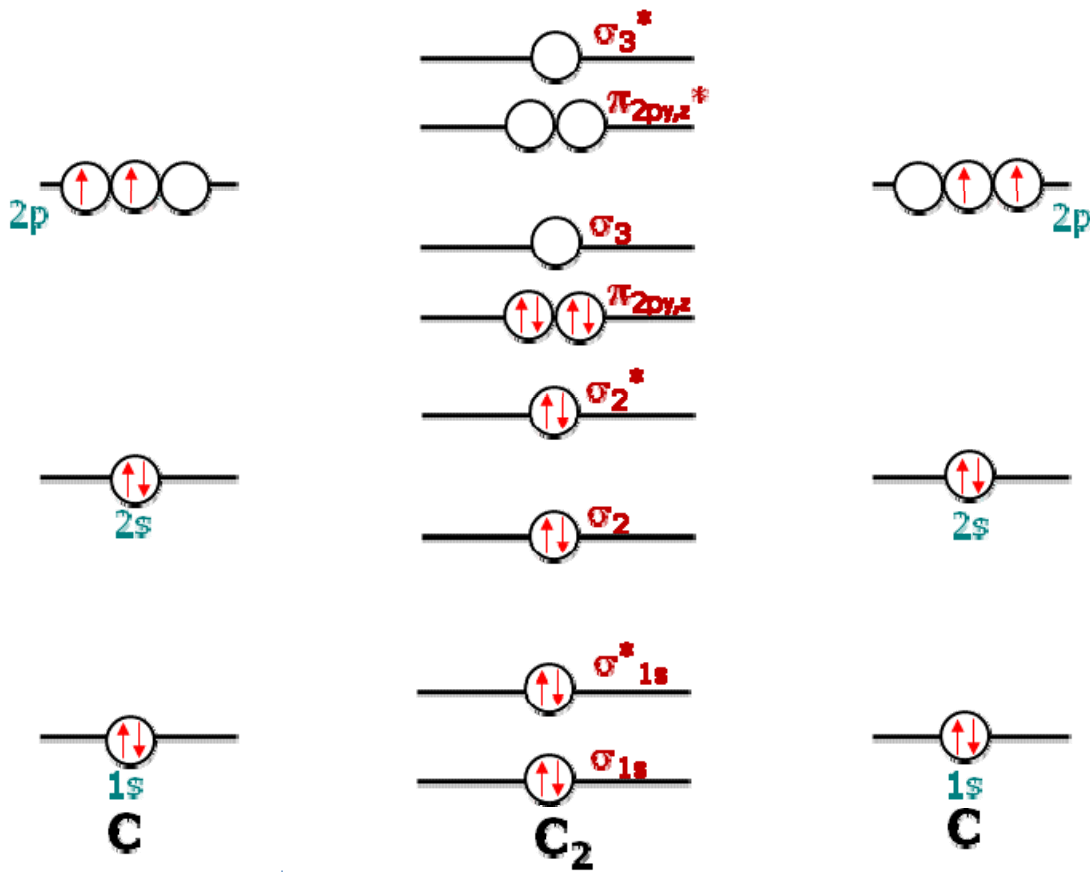


Pelo método do **E. V.** não há electrões desemparelhados.

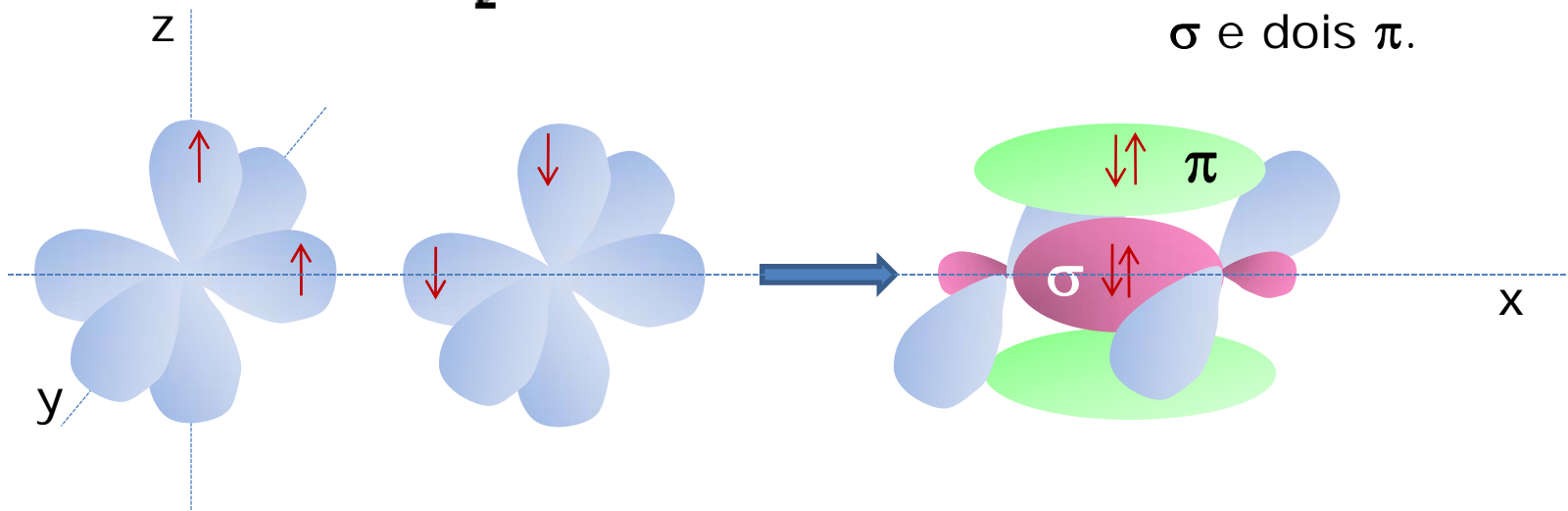
Molécula de C_2



Pelo método da **C.L.O.A.** há 4 electrões ligantes π



Pelo método do **E. V.** há 2 electrões ligantes σ e dois π .



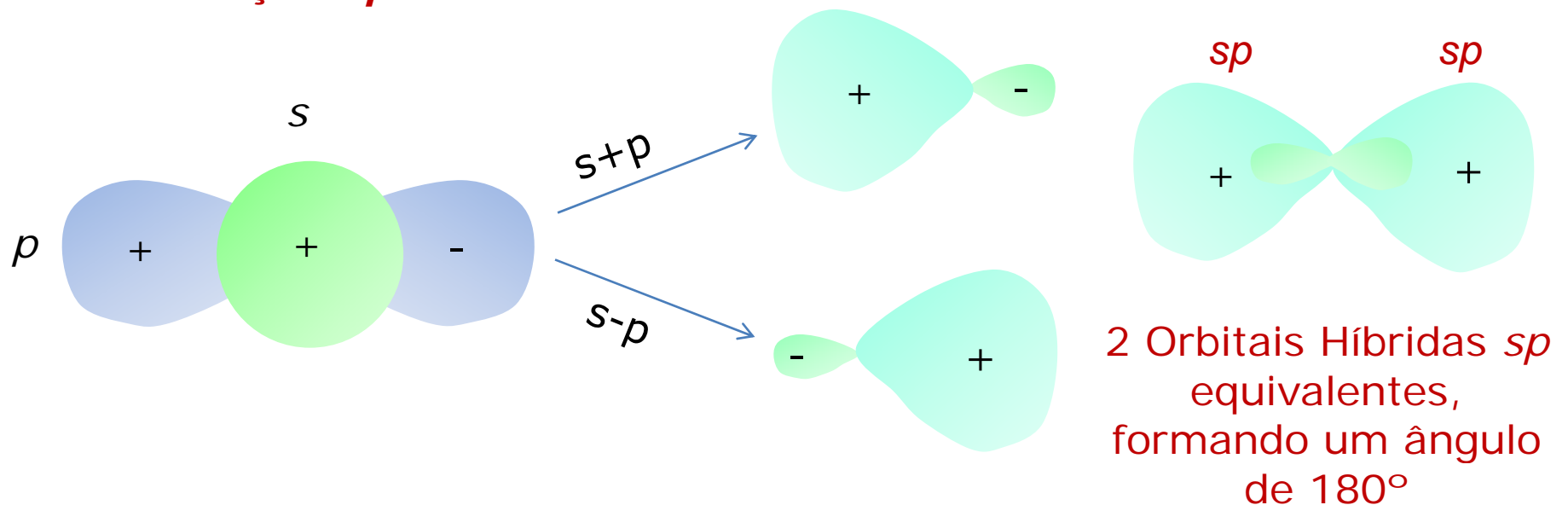
Moléculas Poliatômicas

Orbitais Atômicas Híbridas

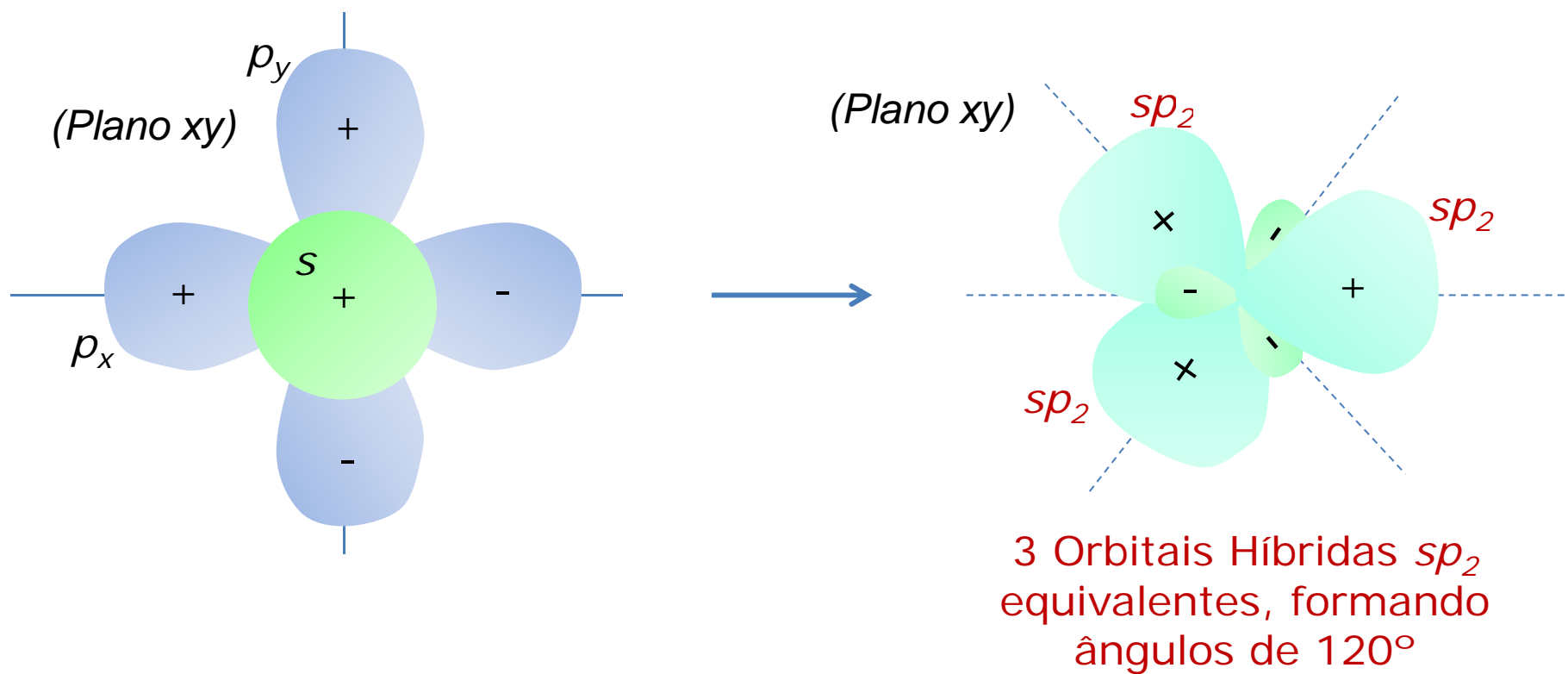
(Forma elegante de introduzir no método do E. V. a mistura de orbitais s e p)

1. Antes de se estabelecer a ligação, em cada um dos átomos há uma combinação de orbitais (por ex. s e p) \rightarrow orbitais atômicas híbridas
2. As orbitais atômicas híbridas combinam-se com as de valência dos outros átomos para formar orbitais moleculares.

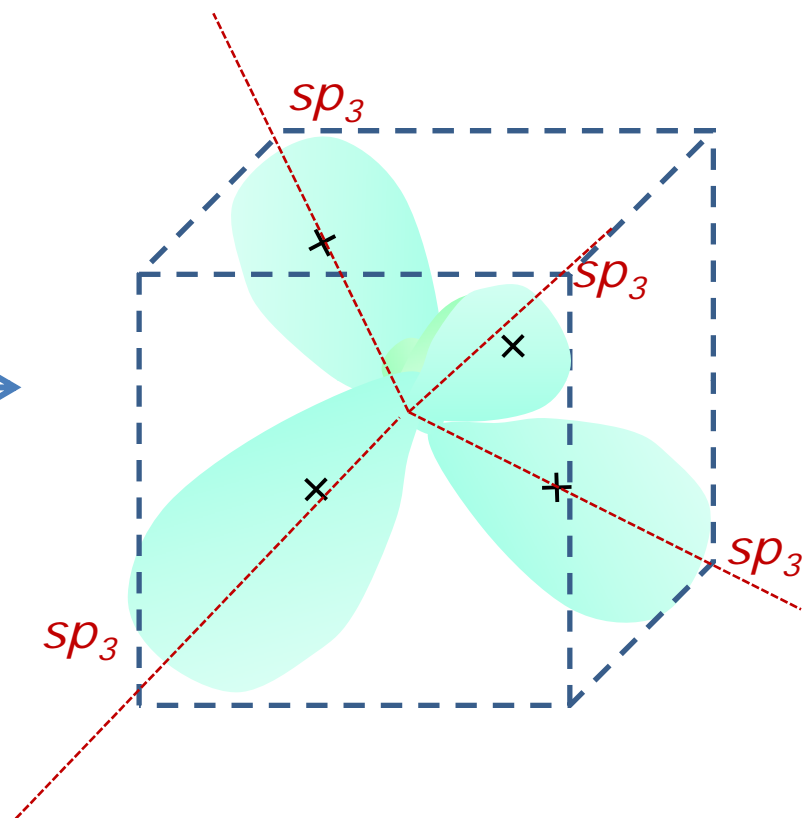
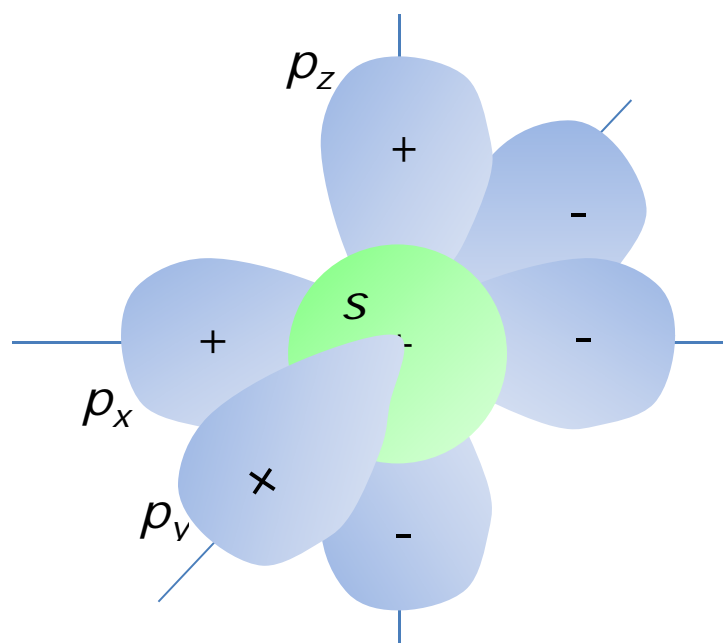
Ex: hibridação sp



Ex: hibridação sp_2

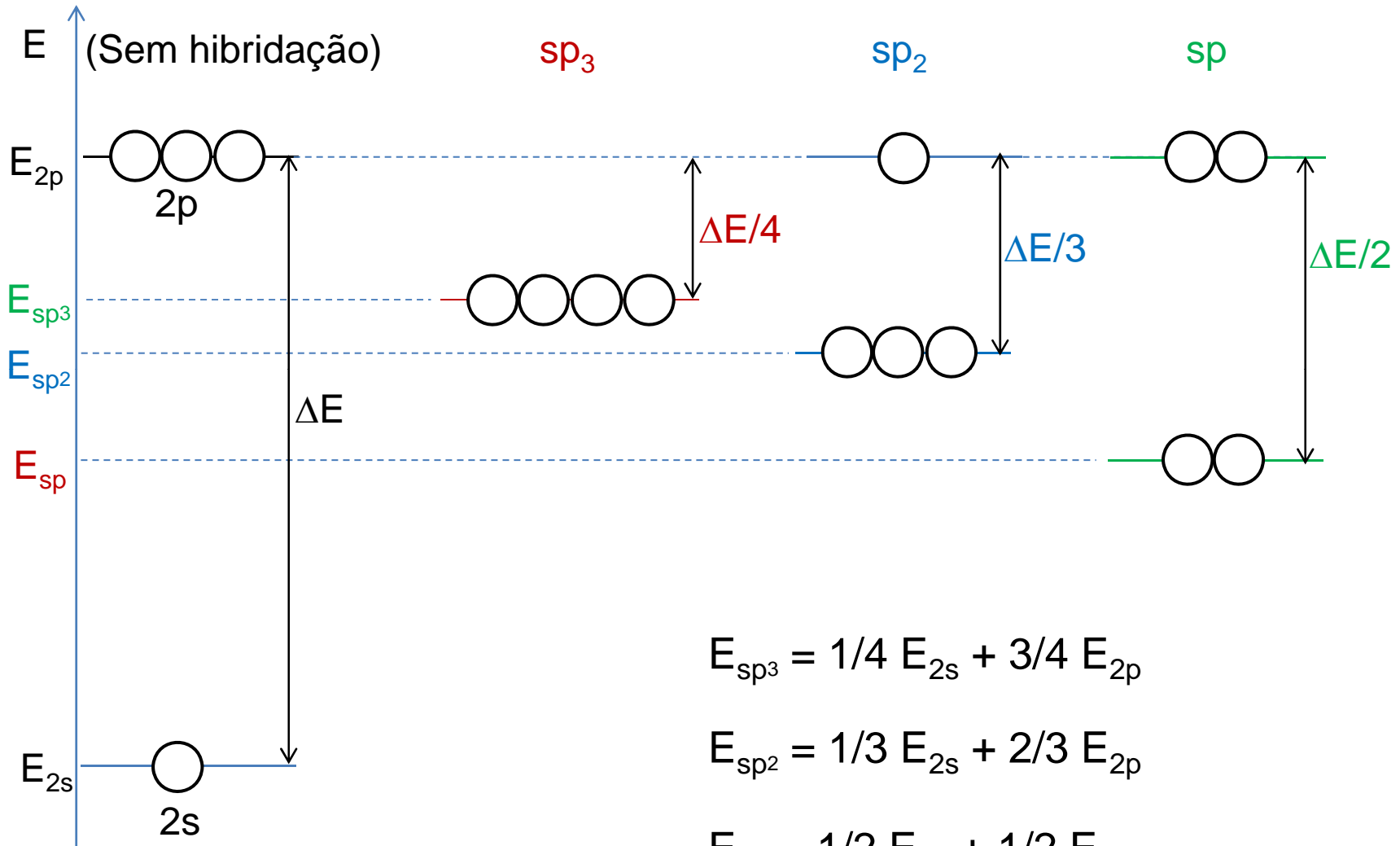


Ex: hibridação sp_3



4 Orbitais Híbridas sp_3
equivalentes, formando
ângulos de $109^\circ 28'$

Energias das Orbitais Híbridas



$$E_{sp^3} = 1/4 E_{2s} + 3/4 E_{2p}$$

$$E_{sp^2} = 1/3 E_{2s} + 2/3 E_{2p}$$

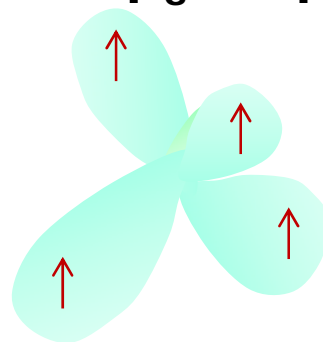
$$E_{sp} = 1/2 E_{2s} + 1/2 E_{2p}$$

HIDROCARBONETOS: C_xH_y

C: $1s^2 2s^2 2p^2$

Carbono em hibridação sp_3 : $1s^2 2sp_3^1 2sp_3^1 2sp_3^1 2sp_3^1$

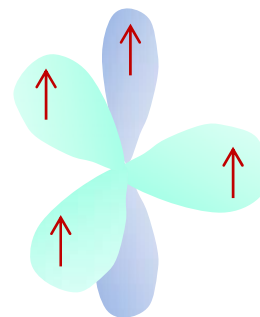
Alcanos: $C_nH_{(2n+2)}$



Capacidade para formar 4 ligações σ

Carbono em hibridação sp_2 : $1s^2 2sp_2^1 2sp_2^1 2sp_2^1 2p_z^1$

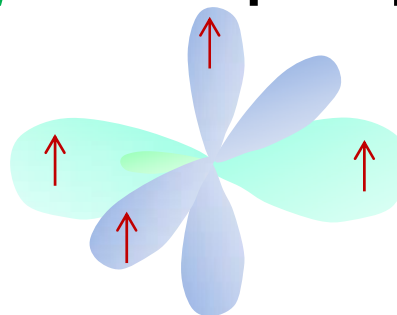
Alcenos: C_nH_{2n}



Capacidade para formar 3 ligações σ e 1 ligação π

Carbono em hibridação sp : $1s^2 2sp^1 2sp^1 2p_y^1 2p_z^1$

Alcinos: $C_nH_{(2n-2)}$

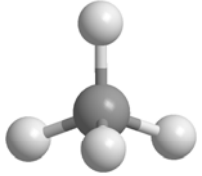


Capacidade para formar 2 ligações σ e 2 ligações π

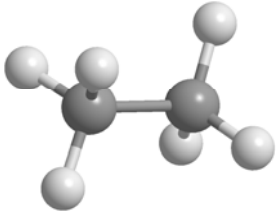
HIDROCARBONETOS

Alcanos: $C_nH_{(2n+2)}$

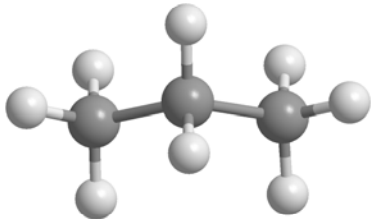
Metano: CH_4



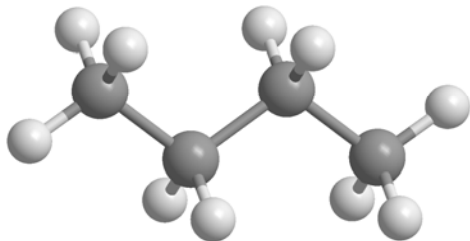
Etano: C_2H_6



Propano: C_3H_8

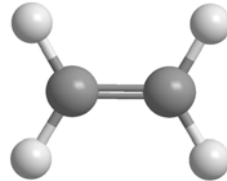


Butano: C_4H_{10}

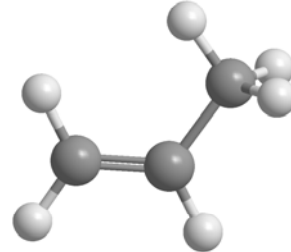


Alcenos: C_nH_{2n}

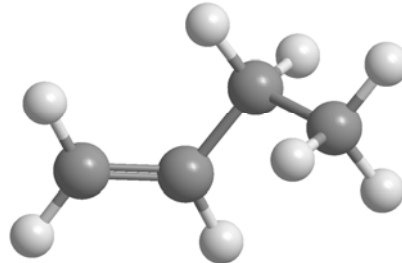
Eteno: C_2H_4



Propeno: C_3H_6

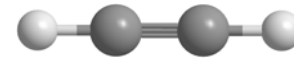


1-Buteno: C_4H_8

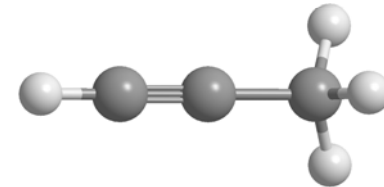


Alcinos: $C_nH_{(2n-2)}$

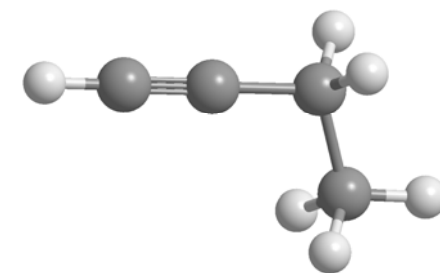
Etino: C_2H_2



Propino: C_3H_4

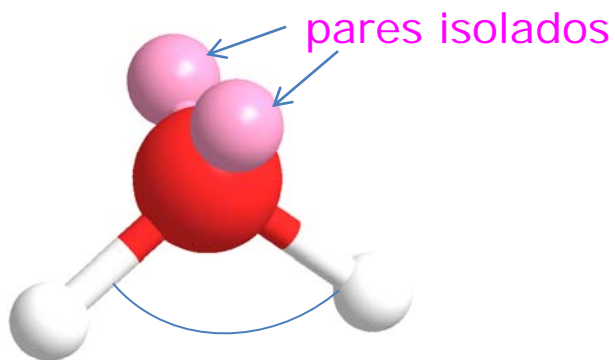


1-Butino: C_4H_6

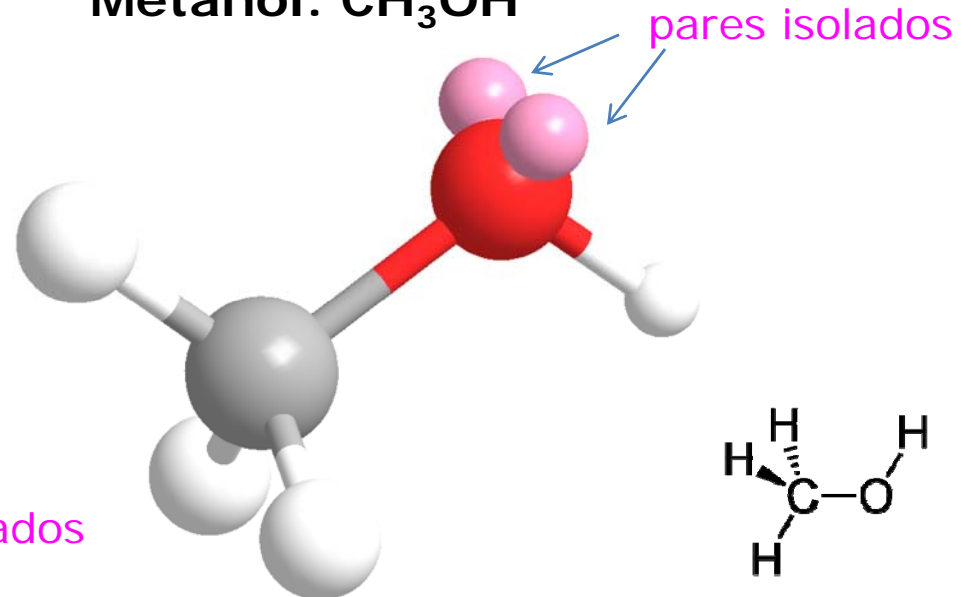


Oxigênio em hibridação sp_3 : $1s^2 2sp_3^2 2sp_3^2 2sp_3^1 2sp_3^1$

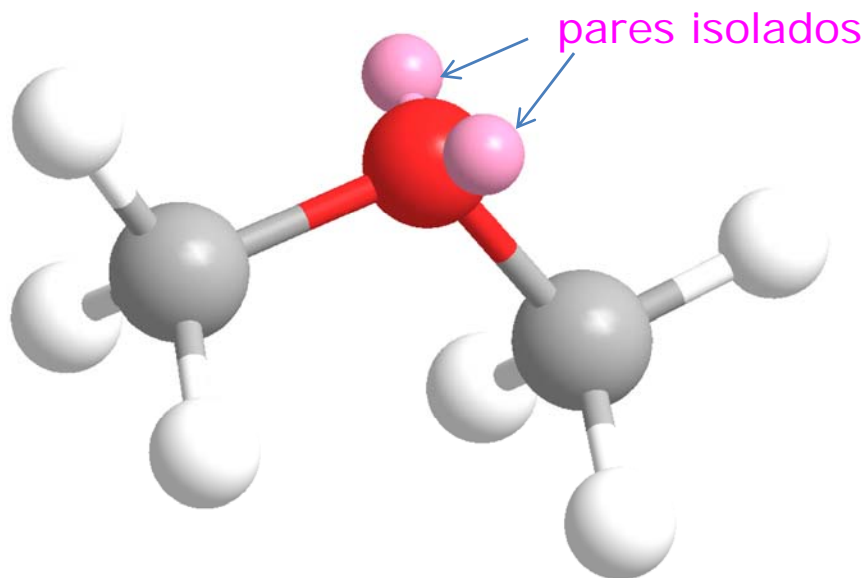
H_2O



Metanol: CH_3OH



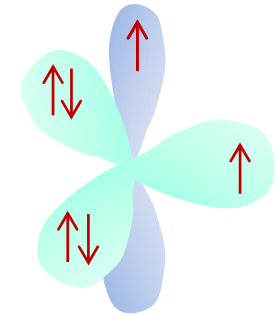
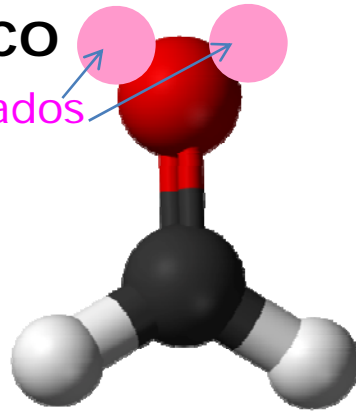
Dimetiléter: CH_3OCH_3



Oxigênio em hibridação sp_2 : $1s^2 2sp_2^2 2sp_2^2 2sp_2^1 2p_z^1$

Formaldeído
ou metanal: H_2CO

pares isolados

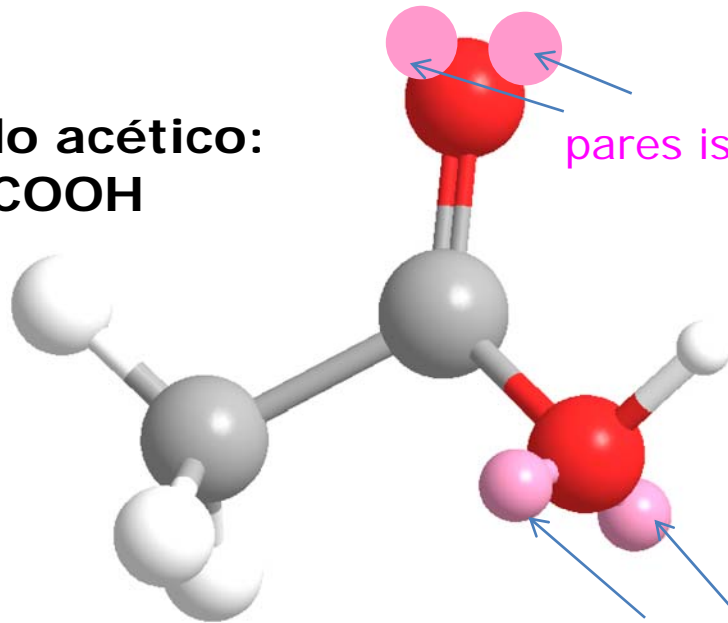


Acetona

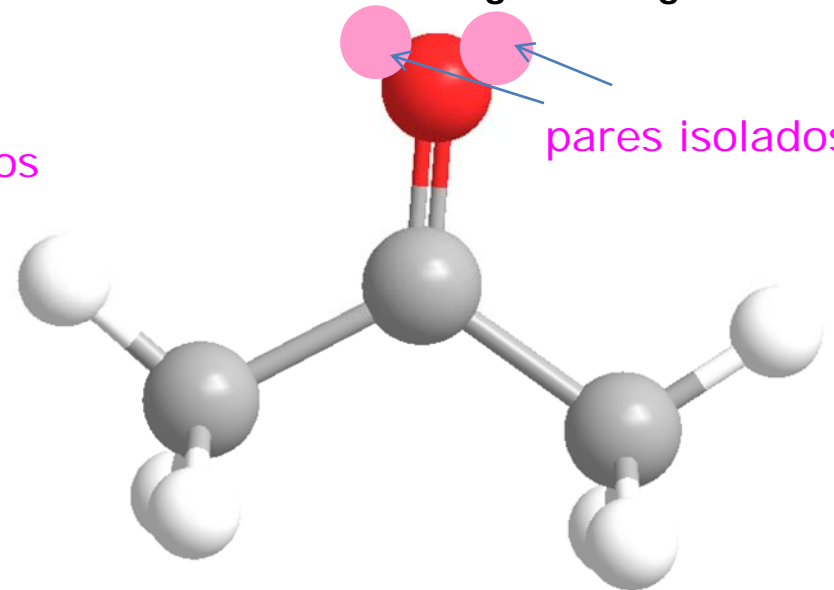
ou dimetilcetona: CH_3COCH_3

Ácido acético:
 CH_3COOH

pares isolados



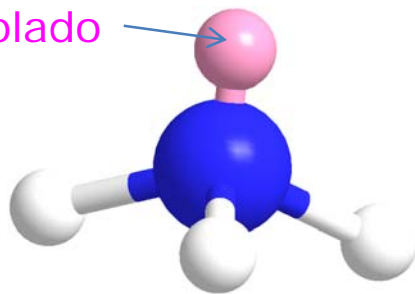
pares isolados



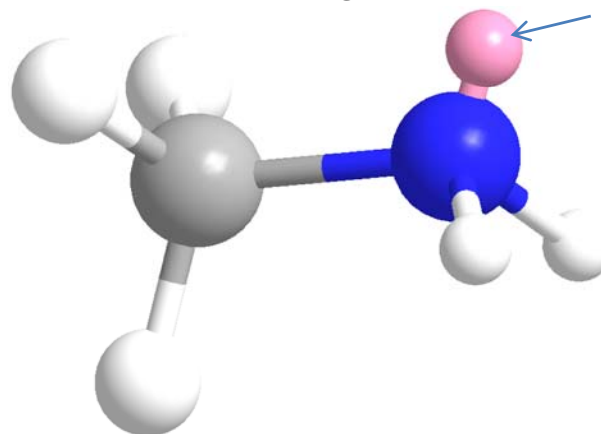
Azoto em hibridação sp_3 : $1s^2 2sp_3^2 2sp_3^1 2sp_3^1 2sp_3^1$



par isolado



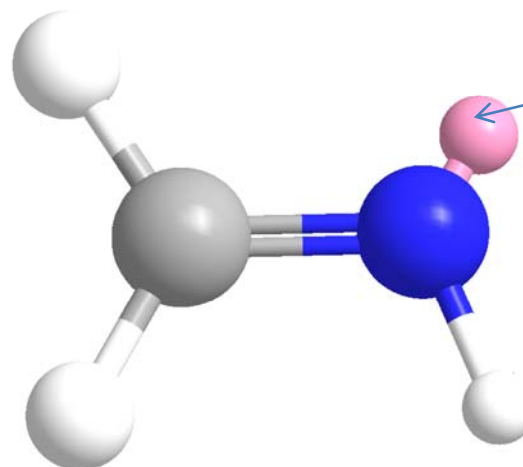
par isolado



Azoto em hibridação sp_2 : $1s^2 2sp_2^2 2sp_2^1 2sp_2^1 2p_z^1$



par isolado



Sumário 7

Ligação Química

- Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)
- II. Método do Enlace de Valência (EV)
 - Moléculas diatómicas
 - Análise Comparativa dos métodos da CLOA e EV
 - Moléculas Poliatômicas
 - Hibridações sp , sp_2 e sp_3
 - Contornos de isoprobabilidade das Orbitais Híbridas
 - Balanço energético das Hibridações. Vantagens da hibridação
 - Moléculas Formadas por um Elemento do 2º Período e H
 - Carbono: CH_4 e Alcanos. Alcenos e Alcinos
 - Oxigénio: H_2O e Álcoois
 - Azoto: NH_3 e Aminas