

Ligação Química
1º Semestre de 2019

4ª Prática – A ligação química em moléculas iônicas e covalentes-polares, com o uso do método NBO.

06 de maio

- Objetivos

Determinação das principais características de uma ligação iônica e de uma ligação polar covalente, pelo uso do método NBO (Natural Bond Orbitals).

Desenvolvimento

a) Otimização de geometria da água:

- Usando o arquivo *h2o_opt.com*, otimize a geometria e calcule as frequências vibracionais, usando o comando *g09 h2o_opt*. O método e função de base é *B3LYP/6-31+G(d,p)*.
- Usando o software *jmol*, determine os comprimentos e ângulos de ligação e visualize os modos normais de vibração.

b) Cálculo NBO e dos orbitais moleculares para a água

- Usando o arquivo *h2o_nbo.com*, realize a análise NBO usando *g09 h2o_nbo*.
- Usando o programa *jmol*, abra o arquivo dos orbitais moleculares, *h2o.40*. Abra o console e digite os comandos: *background white; mo mesh nofill; mo cutoff 0.04; mo 1*. Salve a imagem. Repita para todos os orbitais ocupados. Classifique se os orbitais são ligantes ou antiligantes e a representação irreduzível.
- Abra o arquivo de saída do cálculo NBO e obtenha:
 - as cargas atômica naturais (NPA),
 - a configuração eletrônica natural (NEC),
 - a porcentagem de contribuição da estrutura de Lewis,
 - os NBOs ligantes (BD), anti-ligantes (BD*) e de par isolado (LP).
 - As interações de segunda ordem.
 - As ordens de ligação naturais.
- Usando os programas *jmolnbo* e *jmol* Visualize os NBOs BD, BD* e LP e uma das interações de segunda ordem.

c) Otimização e cálculo NBO para o hidróxido de lítio

- Siga os passos dos itens a) e b) para a molécula LiOH.