

Dúvida apresentada por aluno(a) >> 1. *Com relação ao conteúdo da teoria dos orbitais moleculares, após distribuir os elétrons no diagrama, verificar se ele possui orbitais moleculares ligantes e antiligantes;*

2. *Ver sua estabilidade a partir da ordem de ligação, é possível saber se ele é diamagnético, paramagnético ou ferromagnético(?)*

Discutiremos a teoria de orbitais moleculares (TOM) com maior simplicidade do que a abordada no livro, assim que possível. De qualquer forma, há **dois tópicos simples e relevantes nestas questões:**

1. Com base na TOM **haverá sempre um orbital antiligante para cada orbital ligante**. Isso decorre da “matemática envolvida na TOM” que considera duas opções (em fase e fora de fase) da combinação das funções de onda dos orbitais atômicos envolvidos, *independentemente de estar ocupado ou não por elétrons;*

2. *Os elétrons existentes em uma molécula em particular ocuparão os orbitais moleculares previstos em ordem crescente de energia. Havendo dois orbitais de mesma energia e somente dois elétrons (é o caso do  $O_2$  que estudaremos em mais detalhes), cada orbital será ocupado por 1 elétron. Isso gera uma **situação com elétrons desemparelhados na molécula, o que caracteriza uma molécula paramagnética.***