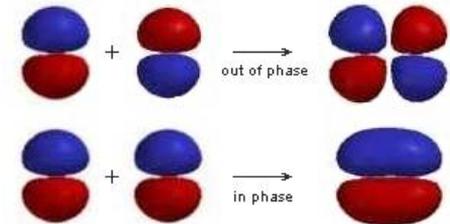
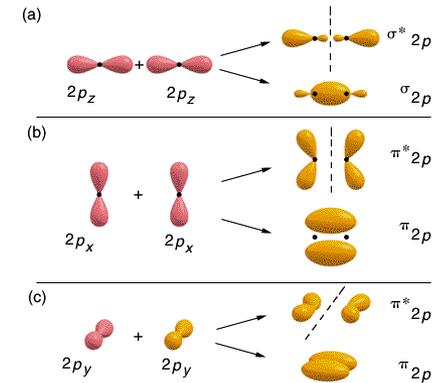
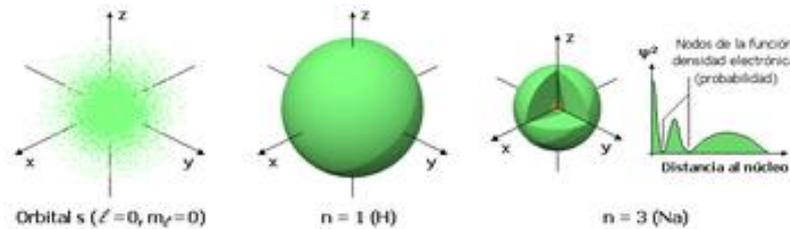
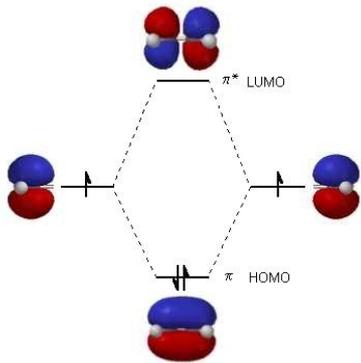


Ligação covalente: teoria dos orbitais moleculares

(aula 6)

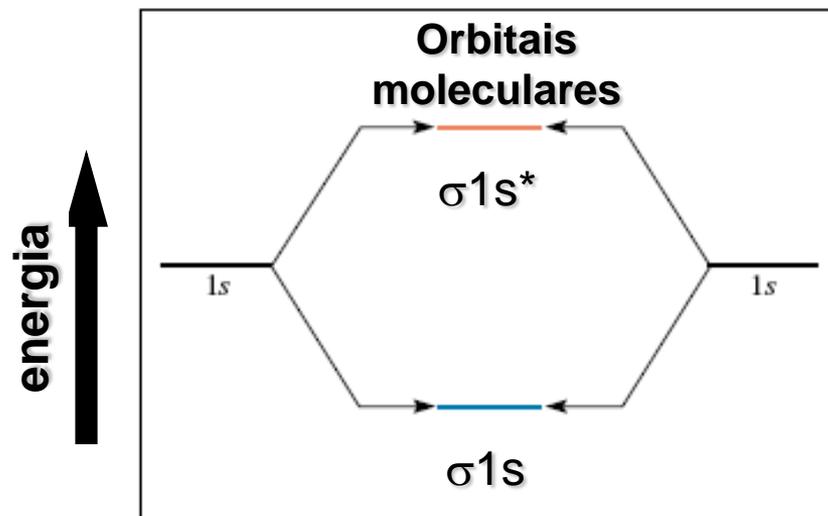
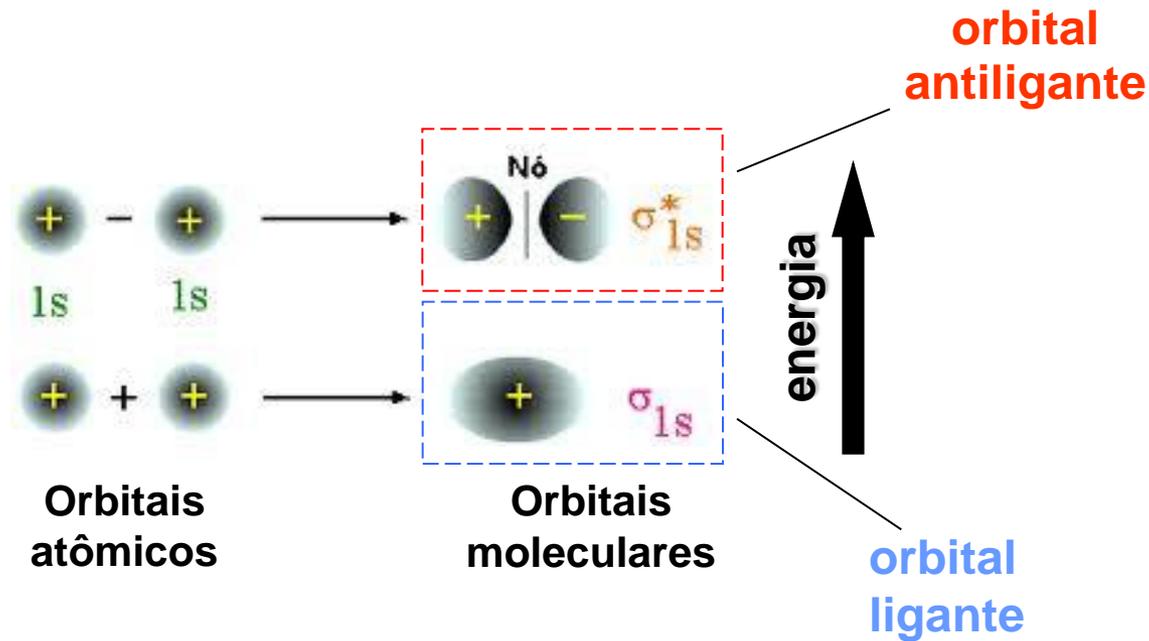


Prof. Dr. Gelson Andrade Conceição

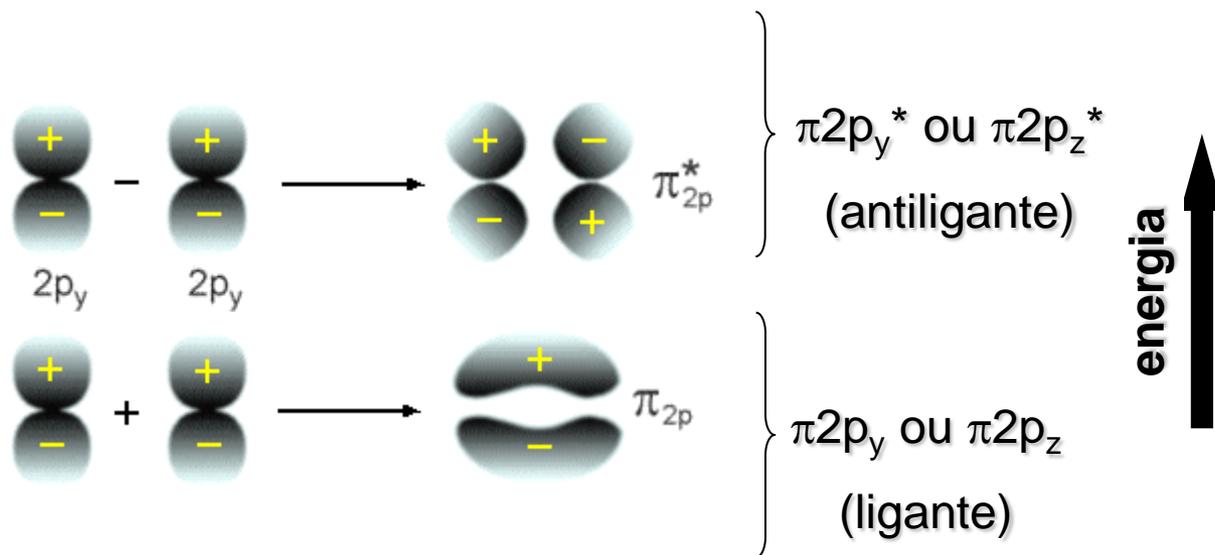
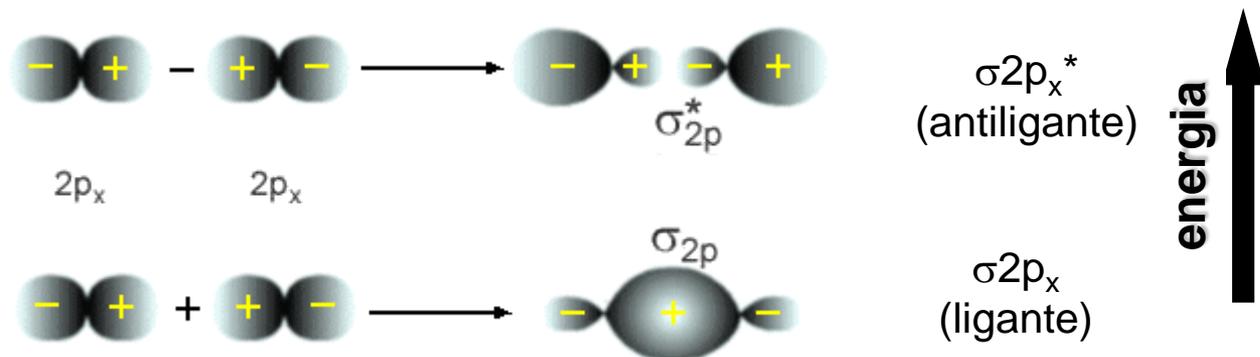
Teoria dos orbitais moleculares

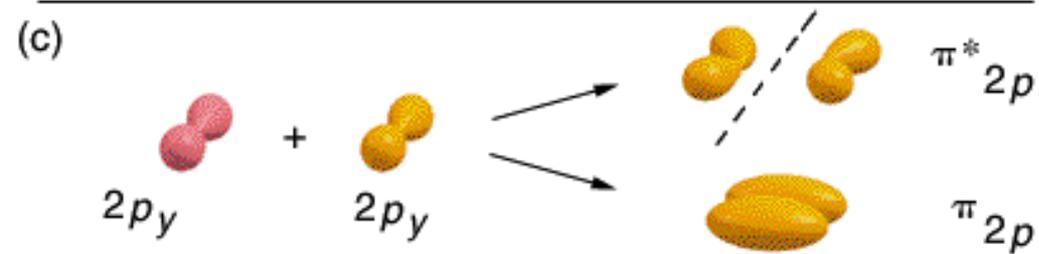
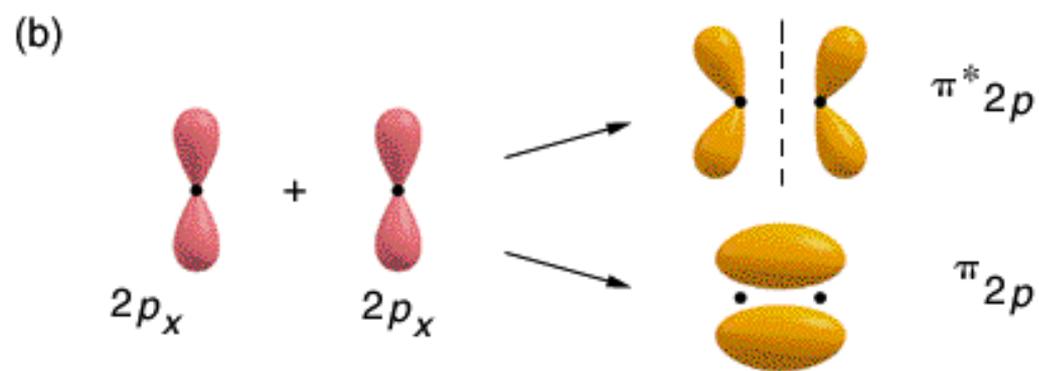
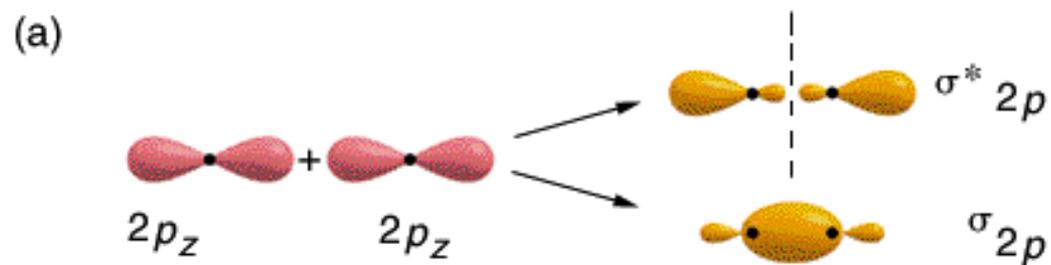
- De acordo com a teoria dos orbitais moleculares, quando dois átomos se unem formando uma ligação covalente, **existe uma combinação entre os orbitais atômicos dos dois átomos, dando origem aos orbitais moleculares.** **CUIDADO:** isso não é hibridização
- O número de orbitais moleculares formados é igual ao número de orbitais atômicos combinados.
- Metade dos orbitais moleculares formados tem menor energia que os orbitais atômicos que os deram origem, são os ***orbitais moleculares ligantes.***
- A outra metade dos orbitais moleculares possuem energia maior que os orbitais atômicos que os deram origem, são os ***orbitais moleculares anti-ligantes.***

Orbitais s

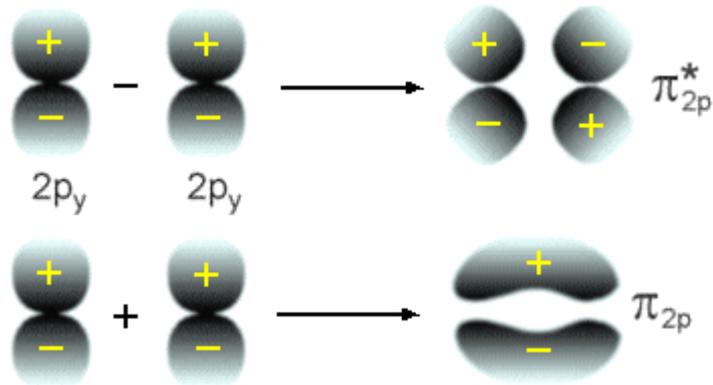


Orbitais p





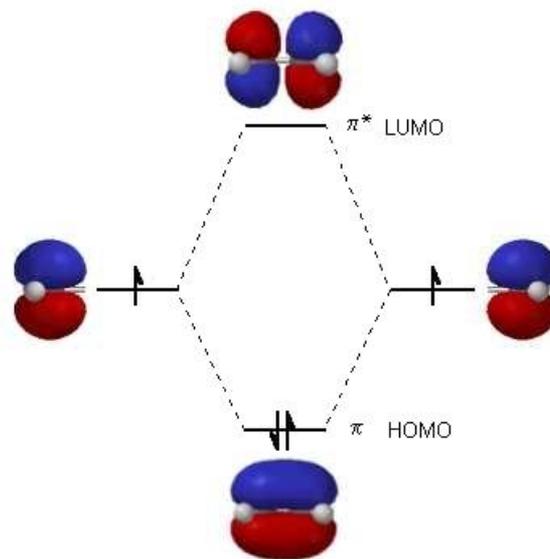
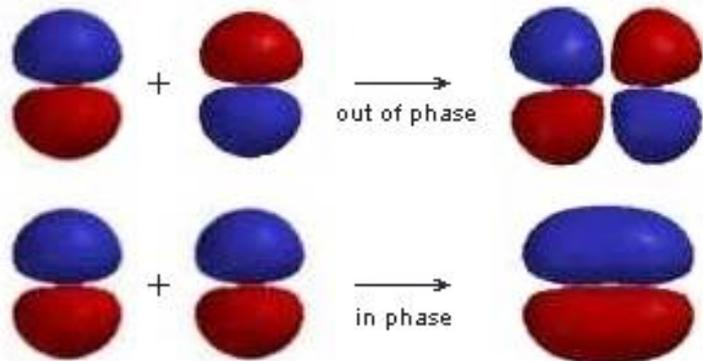
Orbitais p



$\pi 2p_y^*$ ou $\pi 2p_z^*$
(antiligante)

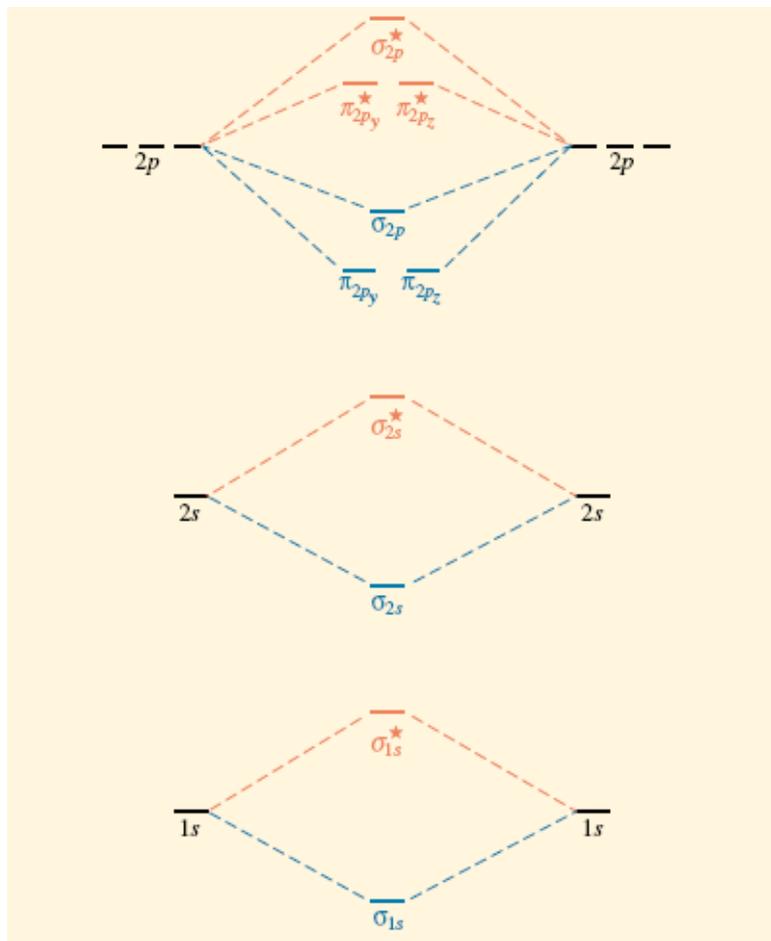
$\pi 2p_y$ ou $\pi 2p_z$
(ligante)

energia ↑

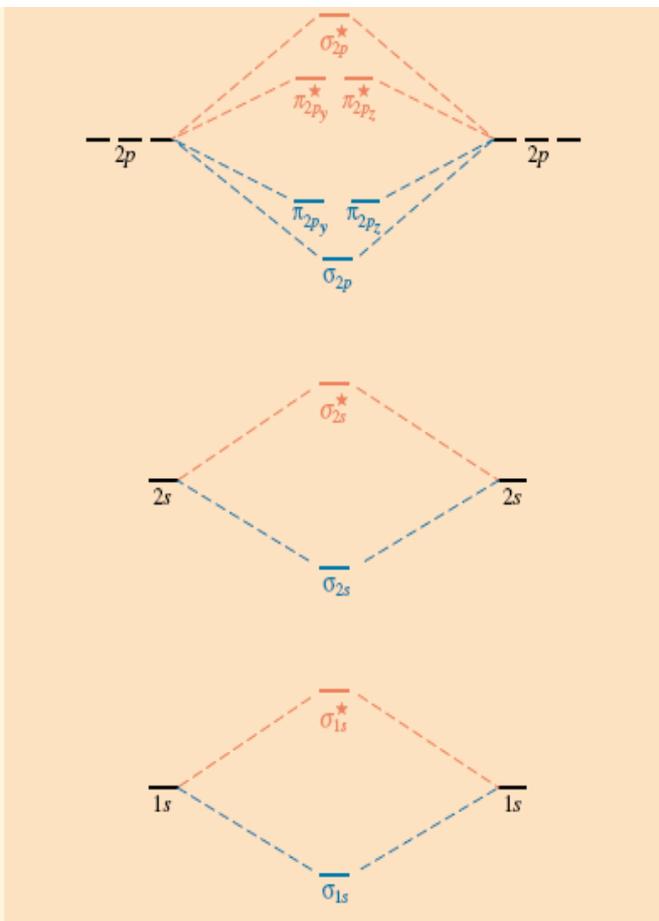


Diagramas de energia dos orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares

H₂ até N₂



O₂ até Ne



Teoria dos orbitais moleculares

- A distribuição dos elétrons nos orbitais moleculares segue a mesma idéia da distribuição dos elétrons nos orbitais atômicos, ou seja, a regra de Hund e o princípio da exclusão de Pauli.
- A estabilidade de uma molécula pode ser prevista pelo seu valor de **ordem de ligação (OL)**.

$$OL = \frac{ne_{\text{lig}} - ne_{\text{antilig}}}{2} ,$$

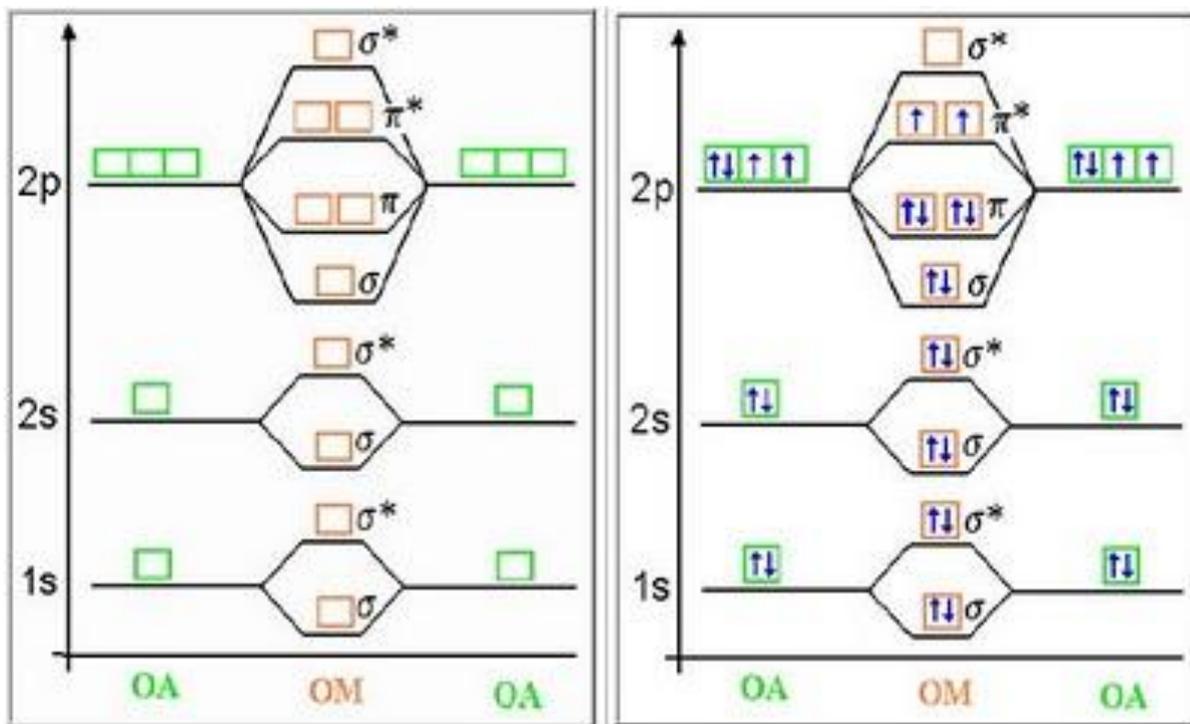
ne_{lig} é o número de elétrons em orbitais ligantes,

ne_{antilig} é o número de elétrons em orbitais antiligantes.

- Quanto maior a ordem de ligação menor será o comprimento da ligação e conseqüentemente maior será a energia da ligação.

Diagramas de energia dos orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares

Molécula do O_2 - paramagnética

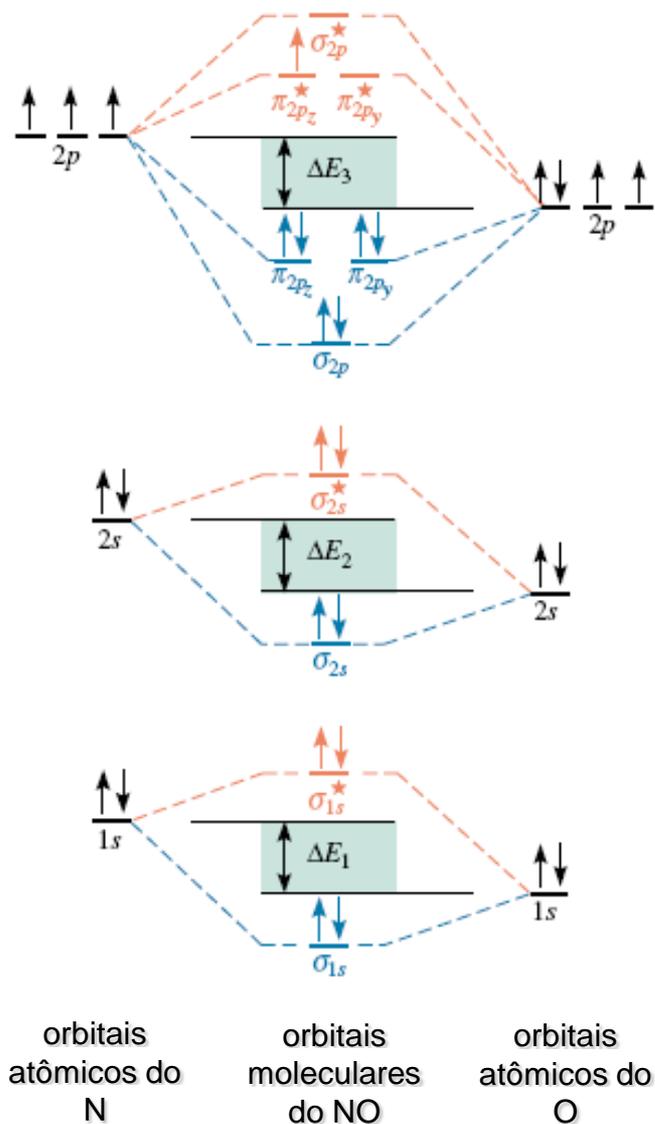


Teoria dos orbitais moleculares

- Ex.: Efetuar a distribuição dos elétrons nos orbitais moleculares, dar a ordem da ligação, e dizer se as moléculas são paramagnéticas ou diamagnéticas.



Teoria dos orbitais moleculares: moléculas diatômicas heteronucleares – molécula de NO

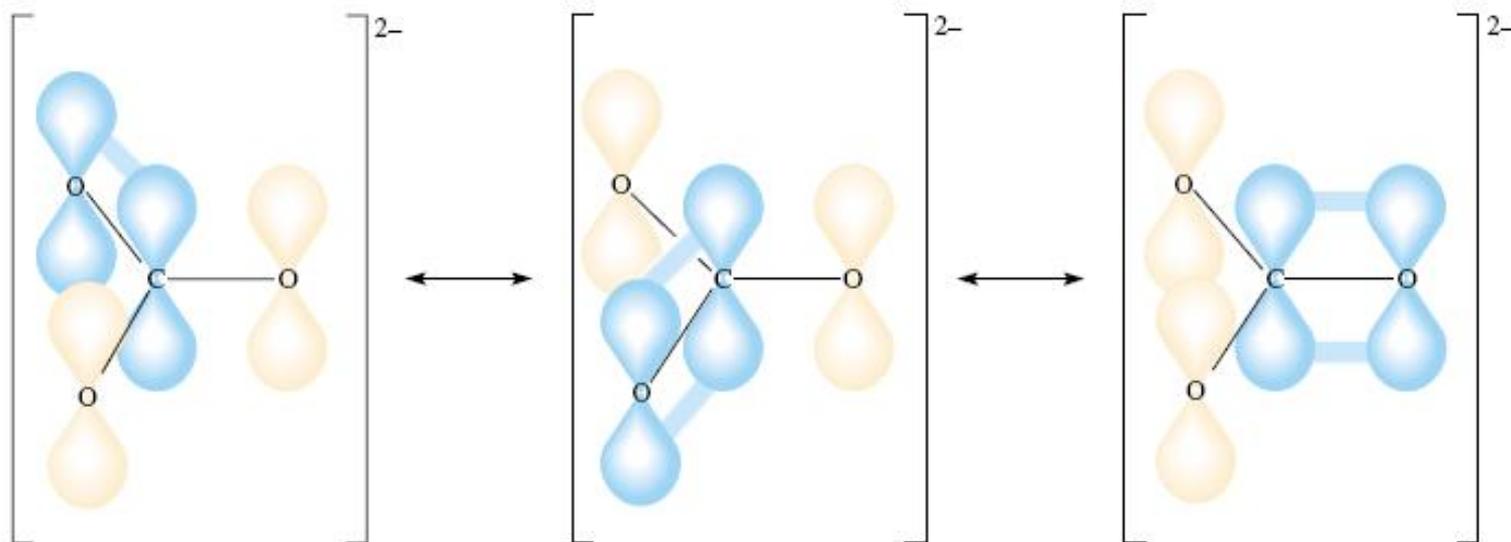
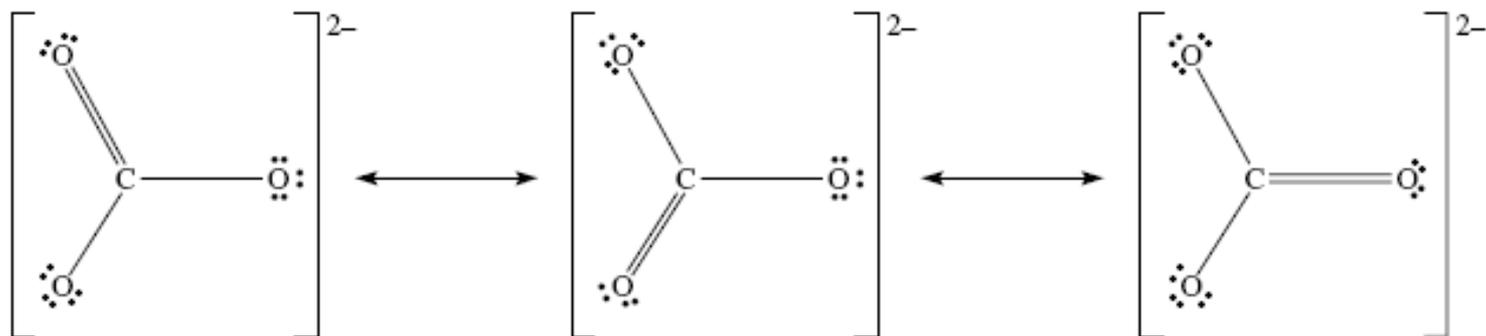


- Quanto mais eletronegativo um átomo for com relação ao átomo com o qual ele se liga, menor é a energia de seu orbital atômico com relação ao do outro átomo.

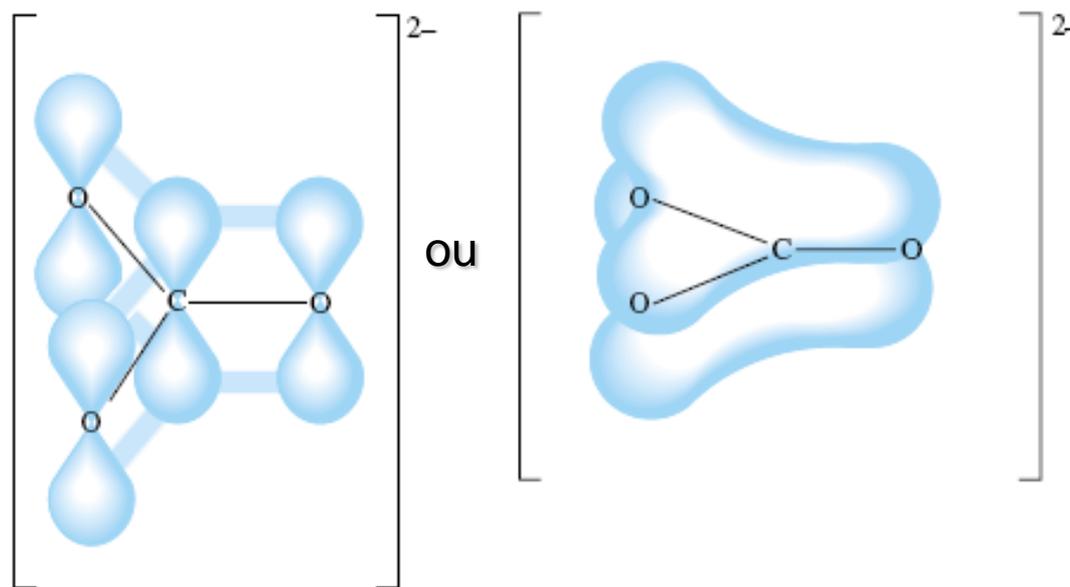
- Dessa forma os orbitais moleculares ligantes formados se aproximam mais em termos energético dos orbitais atômicos do átomo de maior eletronegatividade, enquanto que os orbitais antiligantes se aproximam mais dos orbitais atômicos do átomo de menor eletronegatividade.

Teoria dos orbitais moleculares: deslocalização

- O íon carbonato - CO_3^{2-}

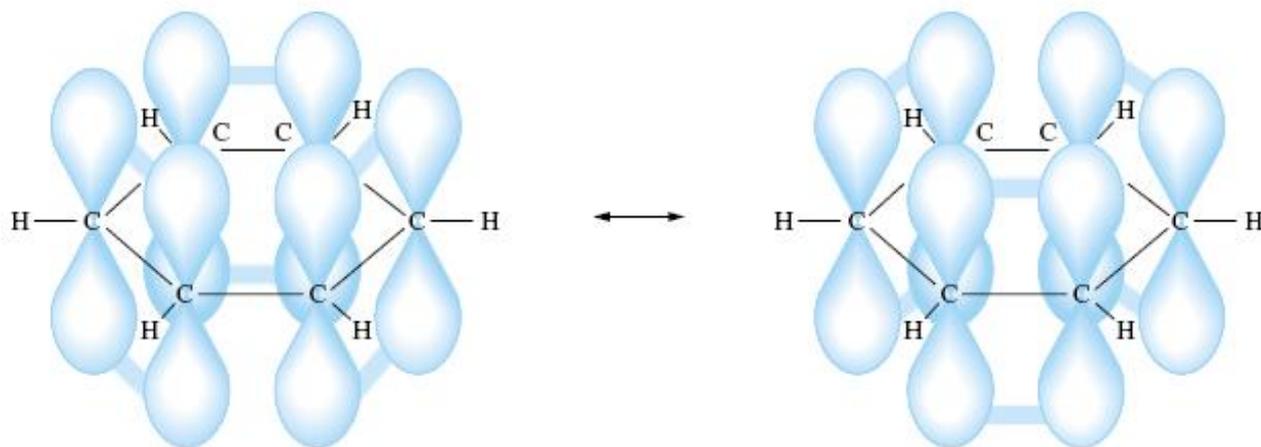
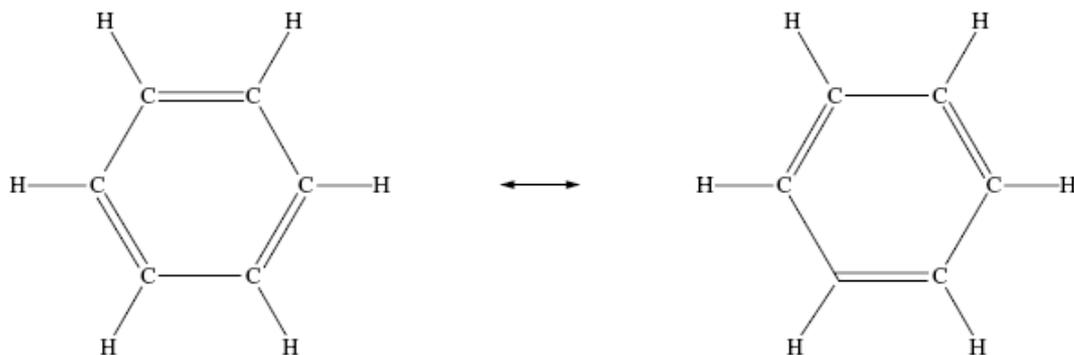


• O íon carbonato - CO_3^{-2}



Teoria dos orbitais moleculares: delocalização

- A molécula de benzeno - C_6H_6



Teoria dos orbitais moleculares: delocalização

- A molécula de benzeno - C_6H_6

