5930300 – Química Quântica

Prof. Dr. Antonio G. S. de Oliveira Filho

Orbitais Híbridos e a Geometria Molecular

- Estado fundamental do C: $1s^2\ 2s^2\ 2p_x^{\ 1}\ 2p_y^{\ 1}$
- Duas ou quatro ligações químicas?
- Hibridização

Orbitais Híbridos e a Geometria Molecular

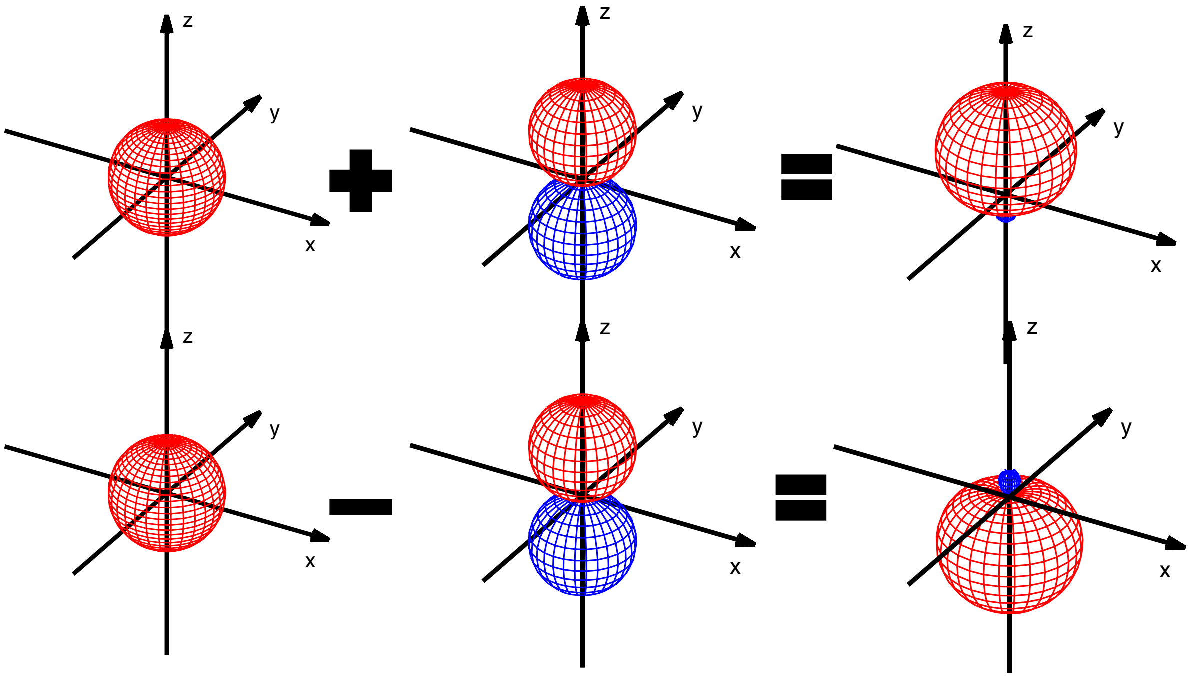
- Molécula BeH_2
- Linear, rBeH = 1,33 Å, estável
- Configuração eletrônica Be: $1s^2 2s^2$
- Como construir os orbitais moleculares adequados?
- Contribuição de mais de um orbital atômico
- $\psi_{Be-H} = \underbrace{c_1\psi_{Be(2s)} + c_2\psi_{Be(2p)}}_{\text{Orbital híbrido}} + c_3\psi_{H(1s)}$

Orbital híbrido

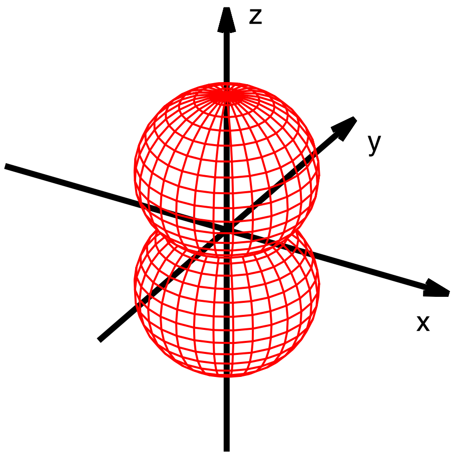
- Coeficientes determinam se é ligante ou antiligante

Orbitais híbridos sp

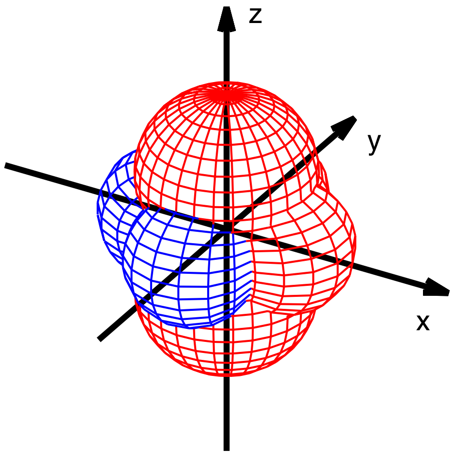
$$\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2s \pm 2p_z)$$



Orbitais híbridos sp

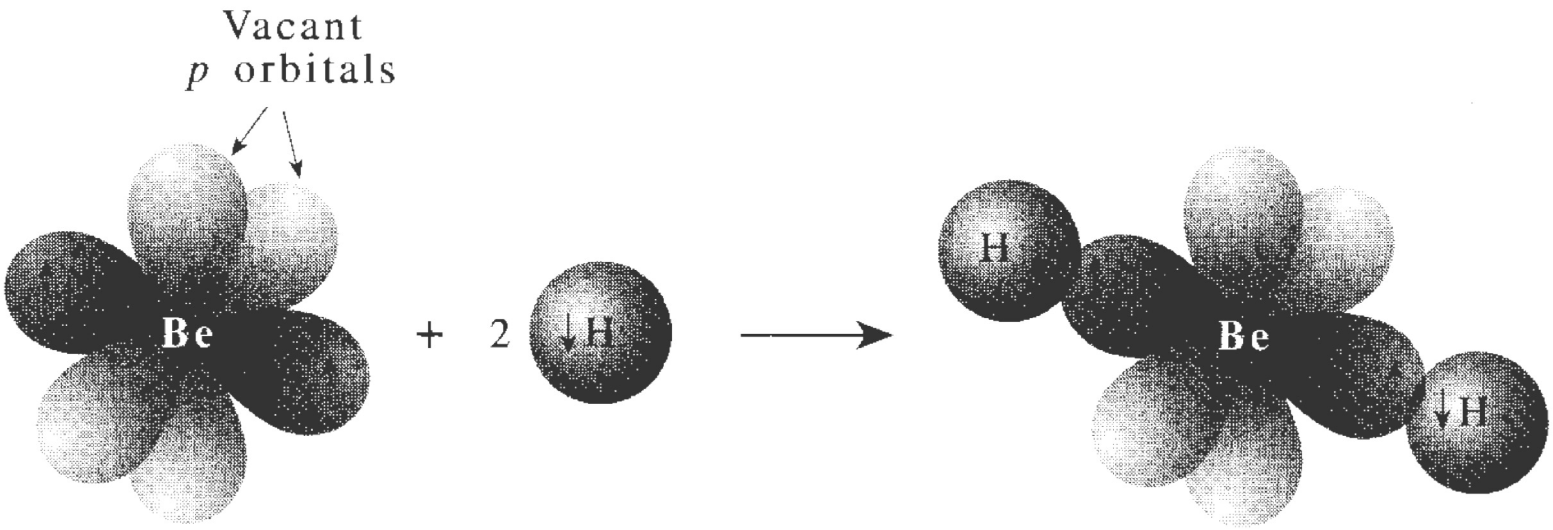


Orbitais sp



Orbitais sp, p_x e p_y

Orbitais híbridos sp – BeH_2



Orbitais Híbridos e a Geometria Molecular

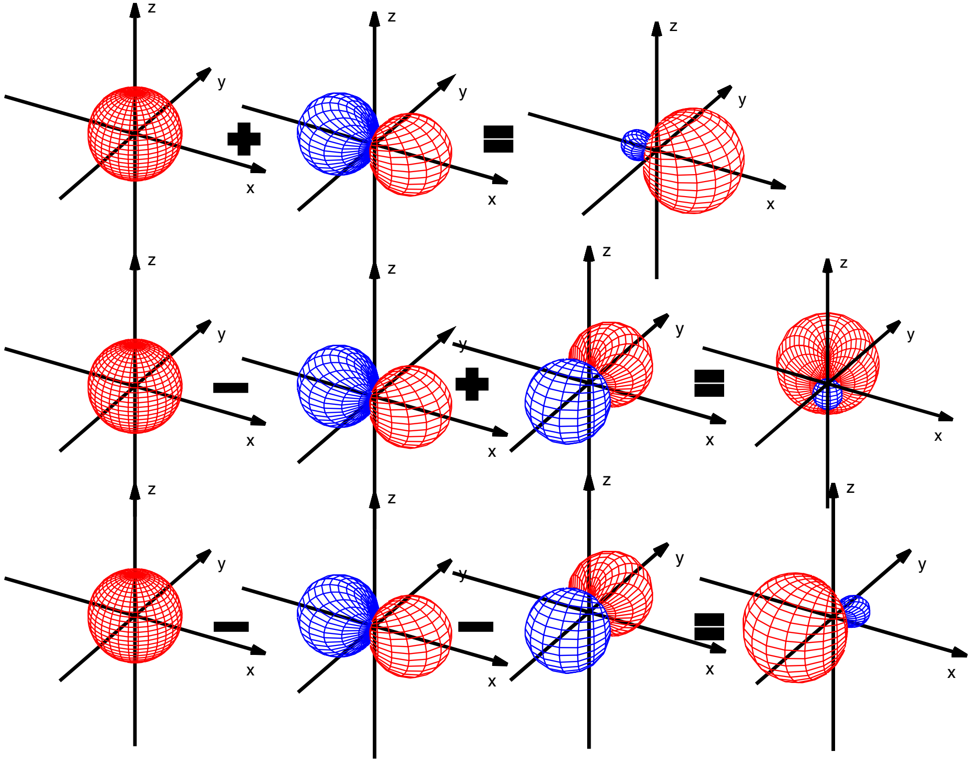
- Molécula BH_3
- Planar, rBH = 1,19 Å, estável
- Configuração eletrônica B: $1s^2 2s^2 2p$
- Três ligações equivalentes: três orbitais atômicos (s + p_x + p_y)
- Orbitais híbridos sp^2

Orbitais híbridos sp^2

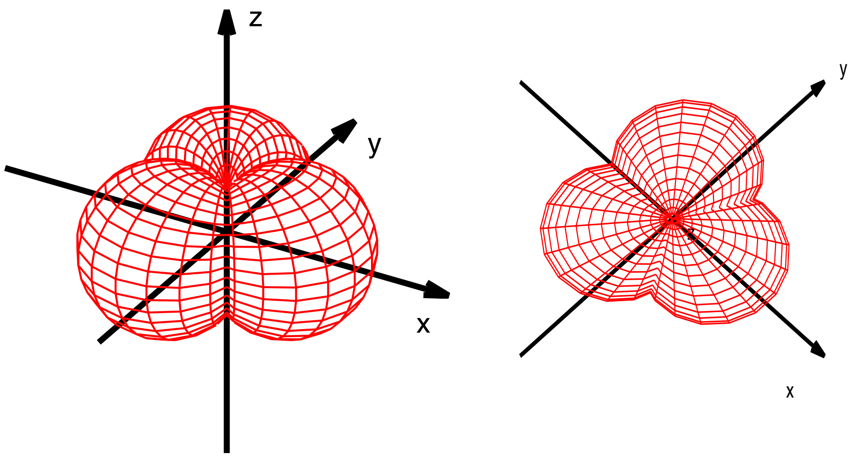
$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} 2s + \sqrt{\frac{2}{3}} 2p_x$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} 2s - \frac{1}{\sqrt{6}} 2p_x + \frac{1}{\sqrt{2}} 2p_y$$

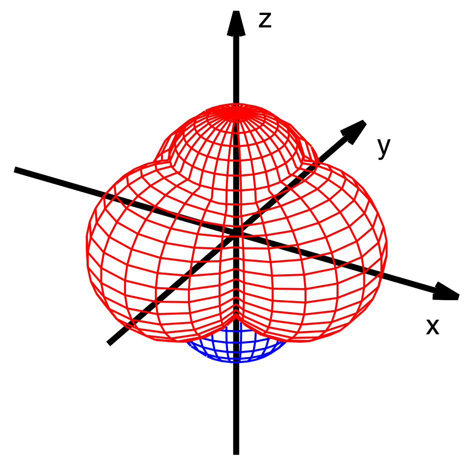
$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} 2s - \frac{1}{\sqrt{6}} 2p_x - \frac{1}{\sqrt{2}} 2p_y$$



Orbitais híbridos sp^2

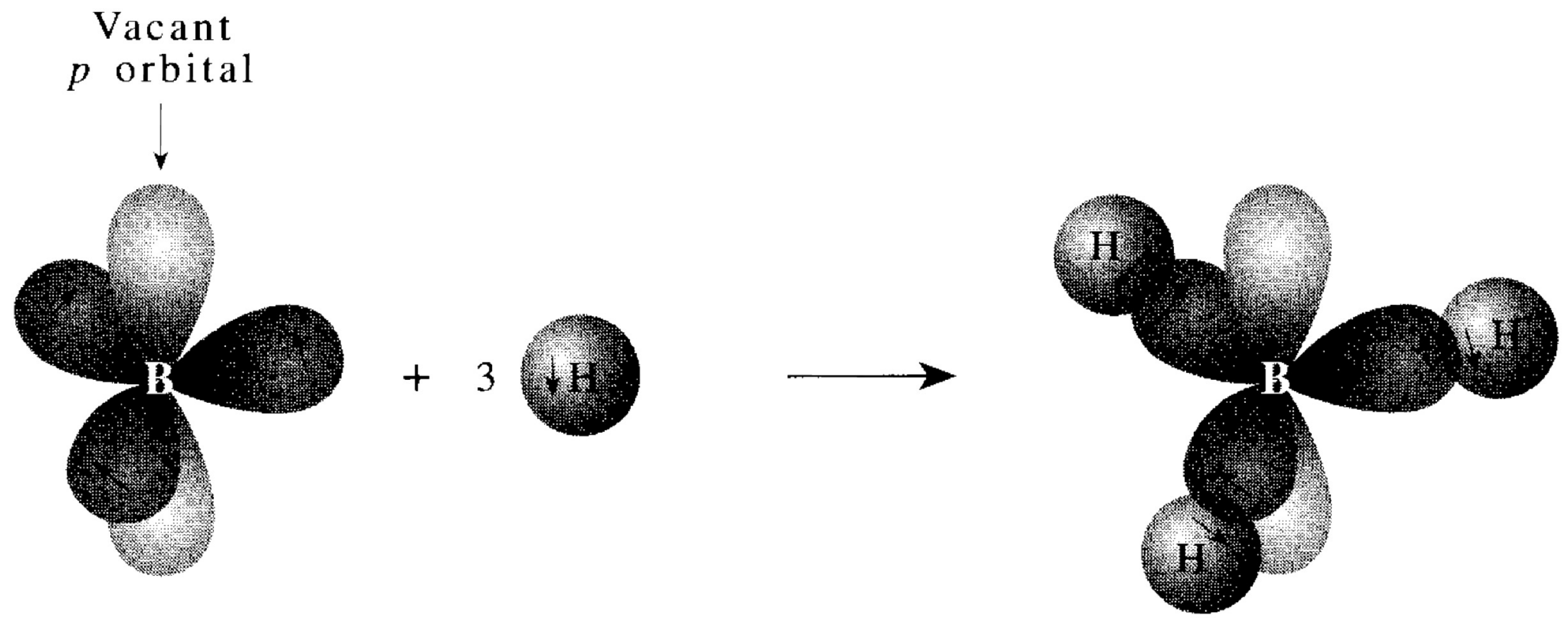


Orbitais sp^2



Orbitais sp^2 e p_z

Orbitais híbridos sp^2 – BH_3



Orbitais Híbridos e a Geometria Molecular

- Molécula CH_4
- Tetraédrico, rCH = 1,09 Å, estável
- Configuração eletrônica C: $1s^2 2s^2 2p^2$
- Quatro ligações equivalentes: quatro orbitais atômicos ($s + p_x + p_y + p_z$)
- Orbitais híbridos sp^3

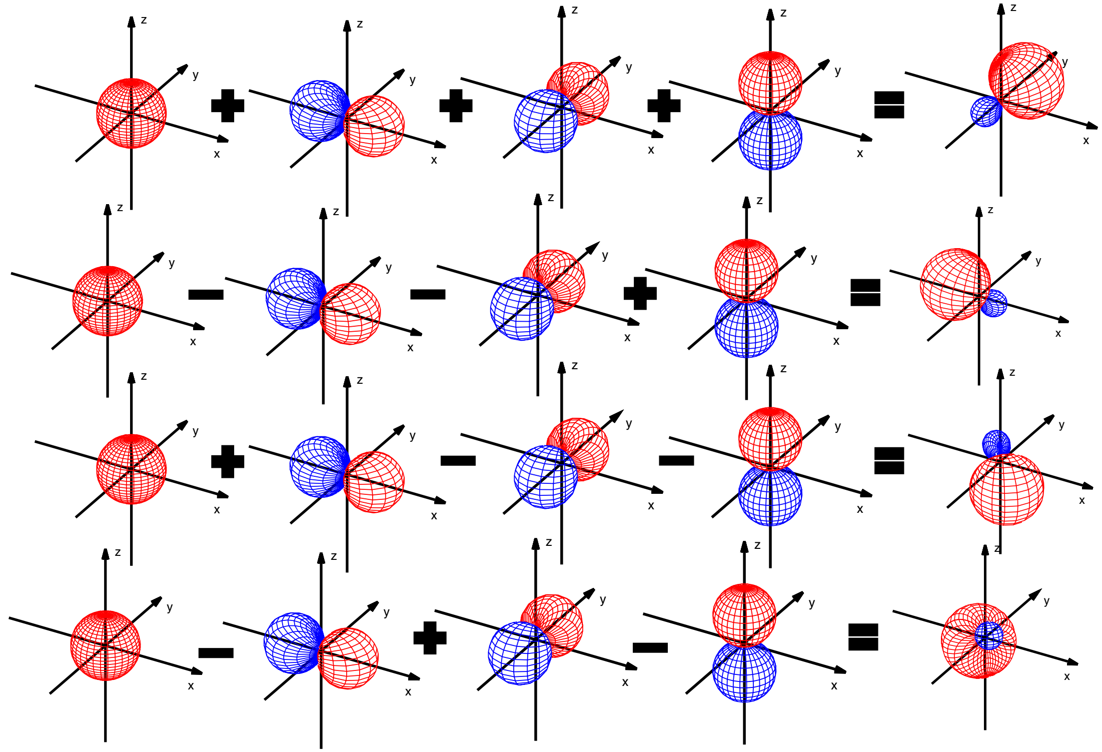
Orbitais híbridos sp^3

$$\psi_1 = \frac{1}{2}\left(2s + 2p_x + 2p_y + 2p_z\right)$$

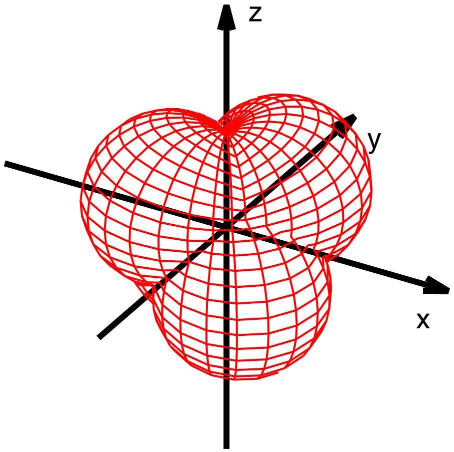
$$\psi_2 = \frac{1}{2}\left(2s - 2p_x - 2p_y + 2p_z\right)$$

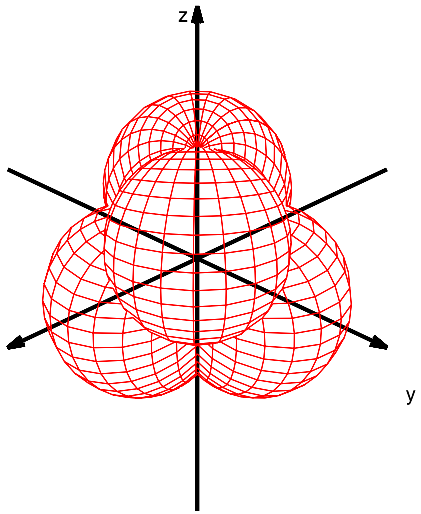
$$\psi_3 = \frac{1}{2}\left(2s + 2p_x - 2p_y - 2p_z\right)$$

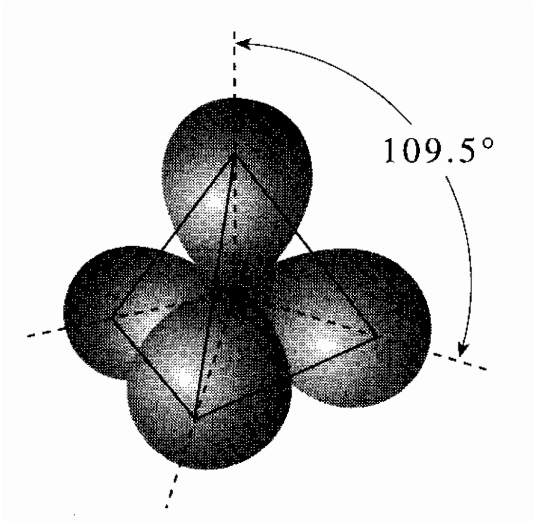
$$\psi_4 = \frac{1}{2}\left(2s - 2p_x + 2p_y - 2p_z\right)$$



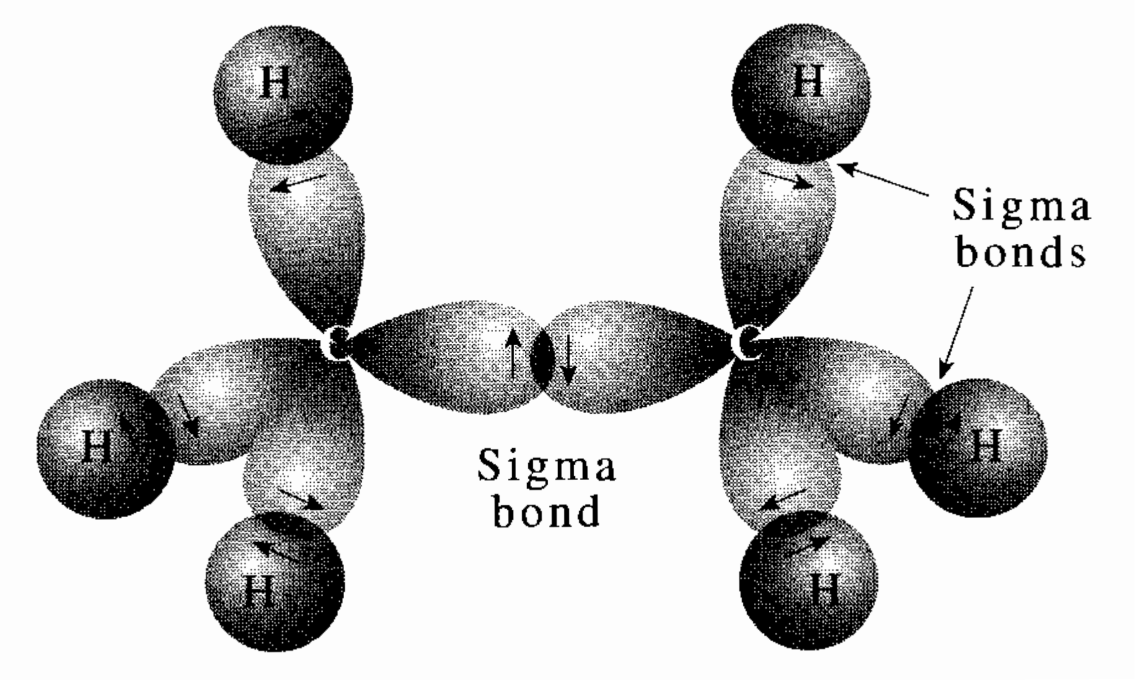
Orbitais híbridos sp^3



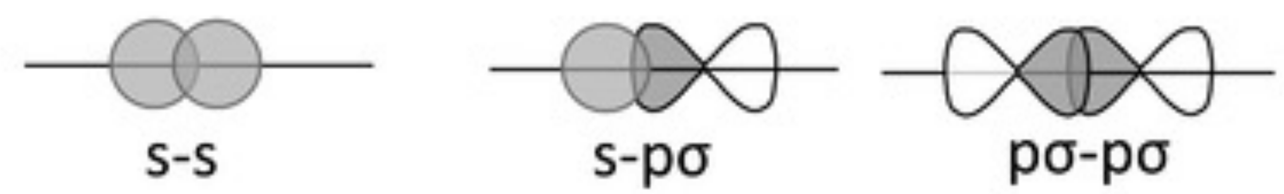




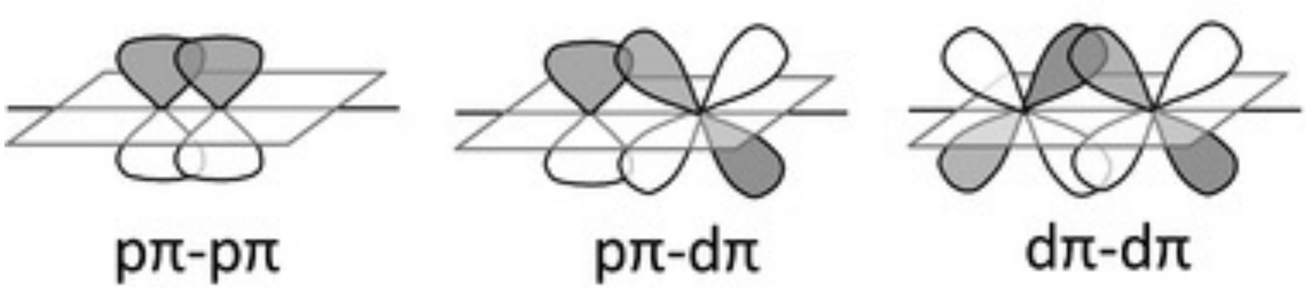
Orbitais híbridos sp^3 – CH_3CH_3



Ligações σ, π, δ e ϕ

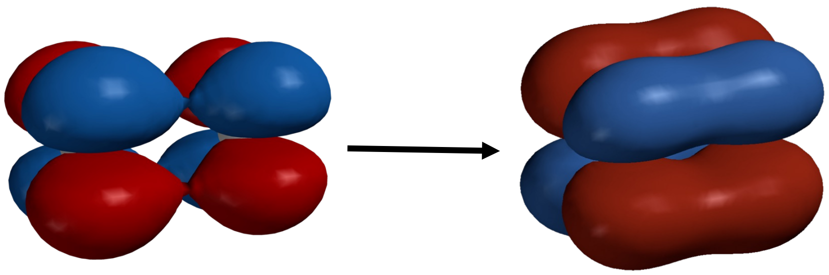


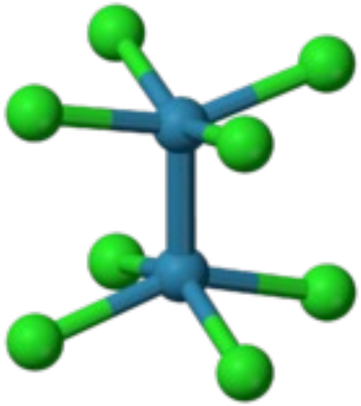
Ligações σ: nenhum plano nodal contendo o eixo internuclear



Ligações π: um plano nodal contendo o eixo internuclear

Ligações σ, π, δ e ϕ



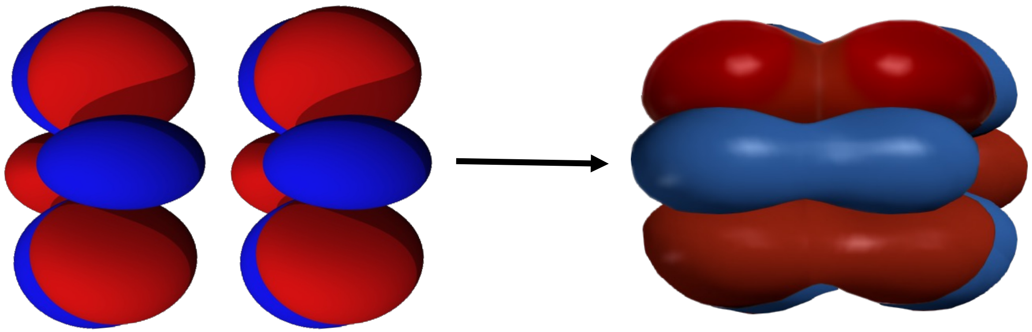


Ligações δ: dois planos nodais contendo o eixo internuclear

$[Re_2Cl_8]^{2-}$: Ligação quádrupla ReRe

- 1 ligação σ
- 2 ligações π
- 1 ligação δ

Ligações σ, π, δ e ϕ



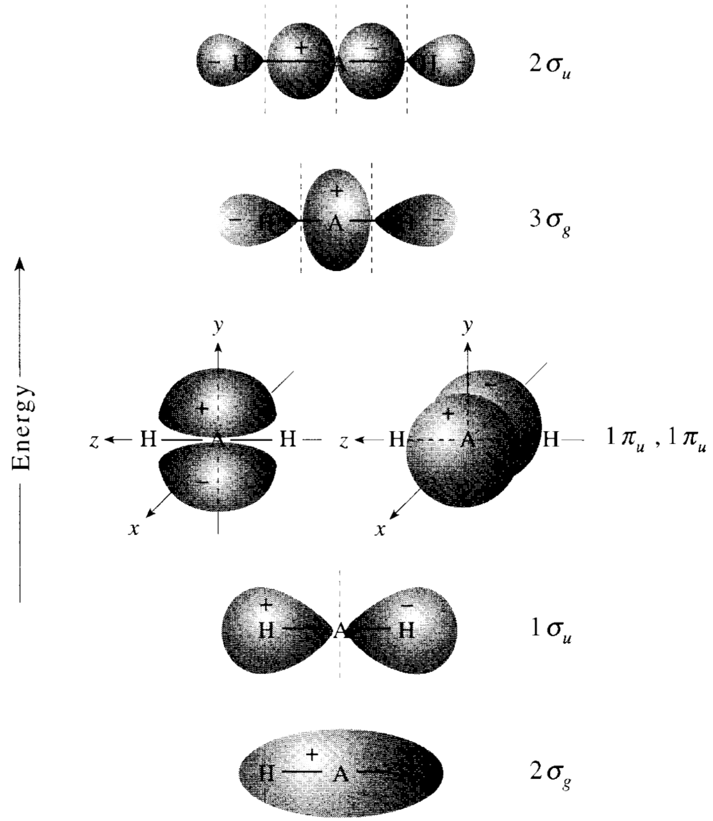
U_2 : Ligação quíntupla UU

- 1 ligação σ
- 2 ligações π
- 1 ligação δ
- 1 ligação ϕ

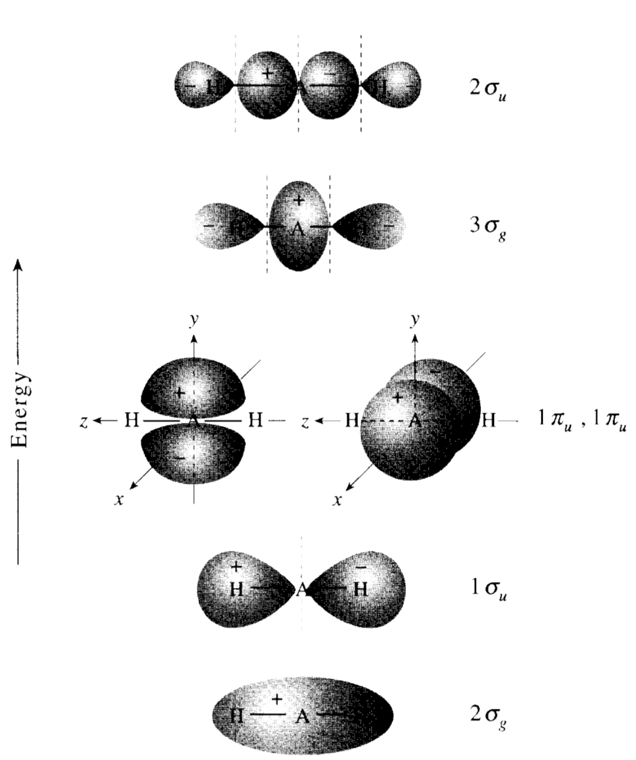
Ligações ϕ : três planos nodais contendo o eixo internuclear

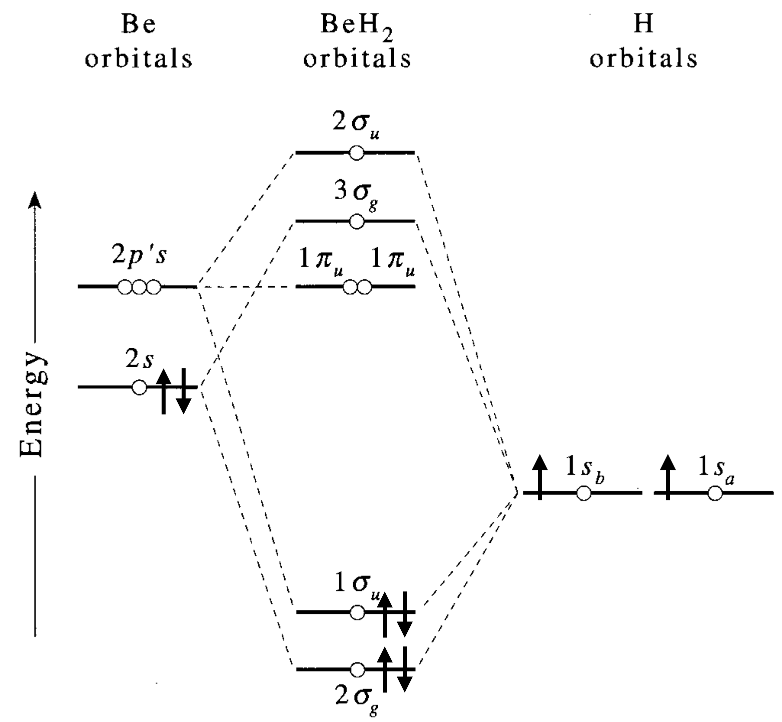
Por que BeH_2 é linear e H_2O é angular?

$$\psi = c_1 1s_{H_a} + c_2 1s_{H_b} + c_3 2s_A + c_4 2p_{xA} + c_5 2p_{yA} + c_6 2p_{zA}$$

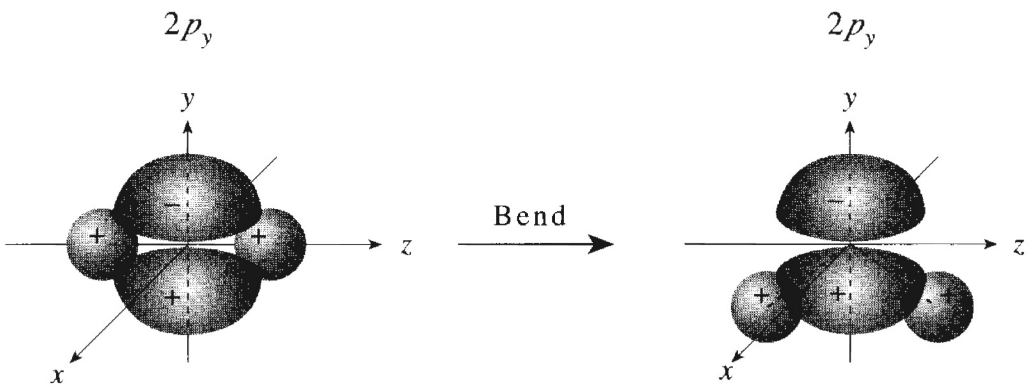


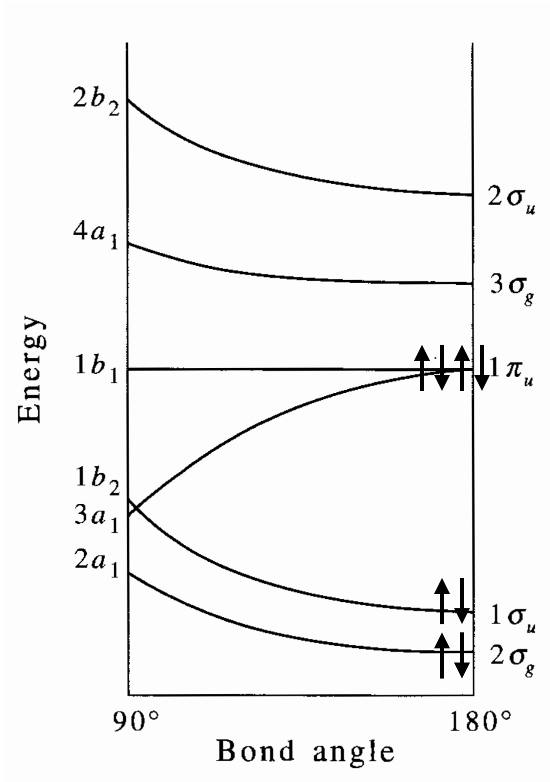
Por que BeH_2 é linear e H_2O é angular?





Por que BeH_2 é linear e H_2O é angular?





Por que BeH_2 é linear e H_2O é angular?