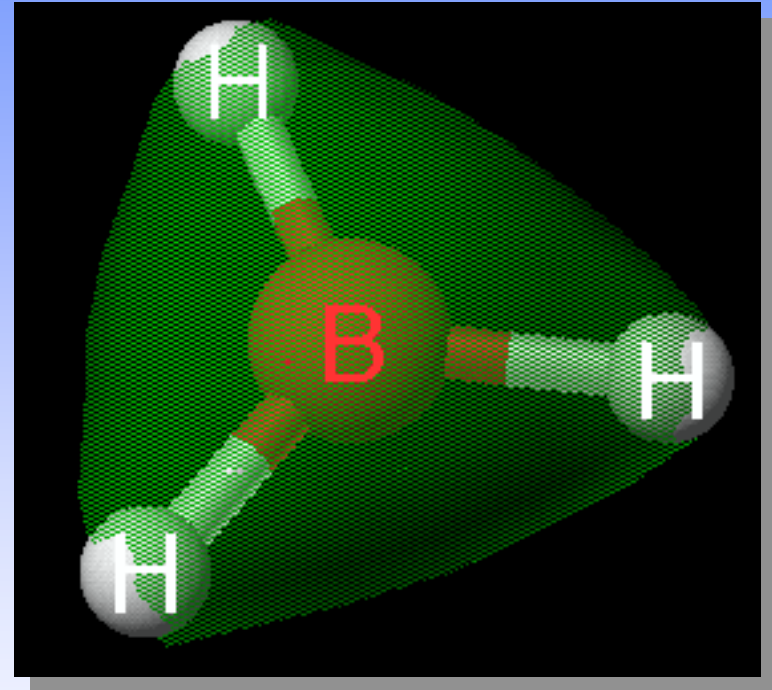
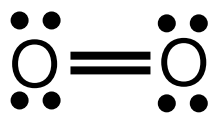


Teoria das Orbitais Moleculares

- **Electrões de valência estão deslocalizados.**
- **Electrões de valência ocupam orbitais moleculares que se espalham por toda a molécula.**



Experiências mostram que O_2 é paramagnética



Todos os electrões
estão emparelhados

O_2 deve ser diamagnético



Teoria das orbitais moleculares — as ligações resultam da interacção entre as orbitais atómicas para formar orbitais **moleculares**.

The Paramagnetism of O_2

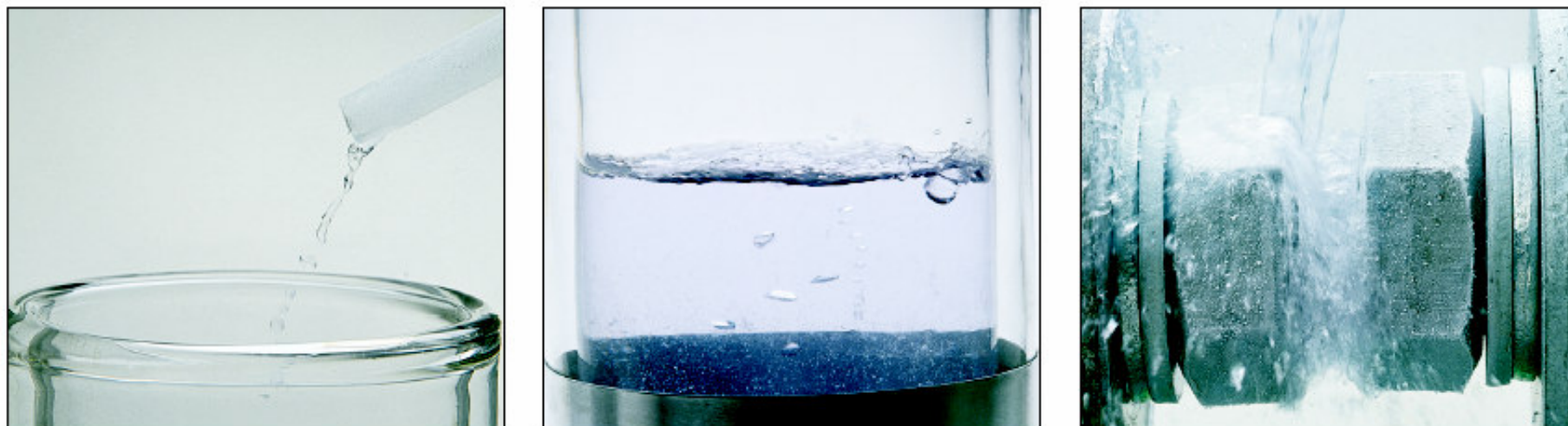
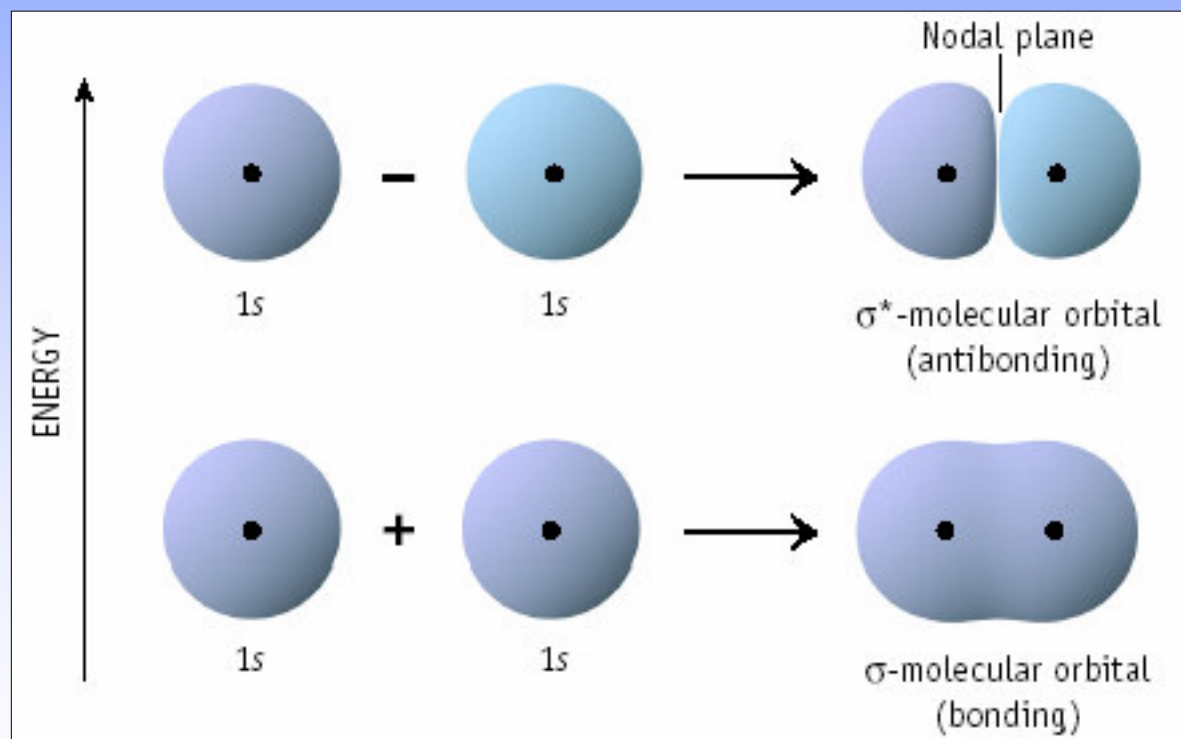
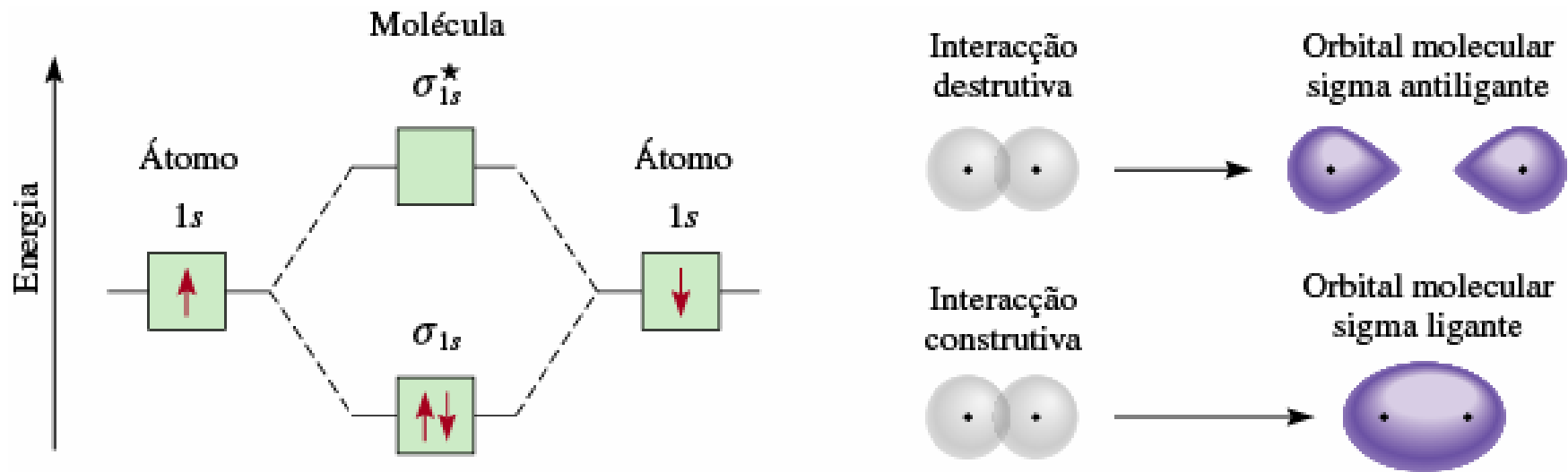


Figure 10.16 Liquid oxygen. Oxygen gas condenses to a liquid at $-183\text{ }^{\circ}\text{C}$ (*left*). Notice that liquid oxygen is very pale blue (*middle*). Oxygen in the liquid state is paramagnetic and clings to the poles of a magnet (*right*). (*Charles D. Winters*)

- Orbitais moleculares ligantes e anti-ligantes sigma formam-se a partir de orbitais 1s adjacentes.

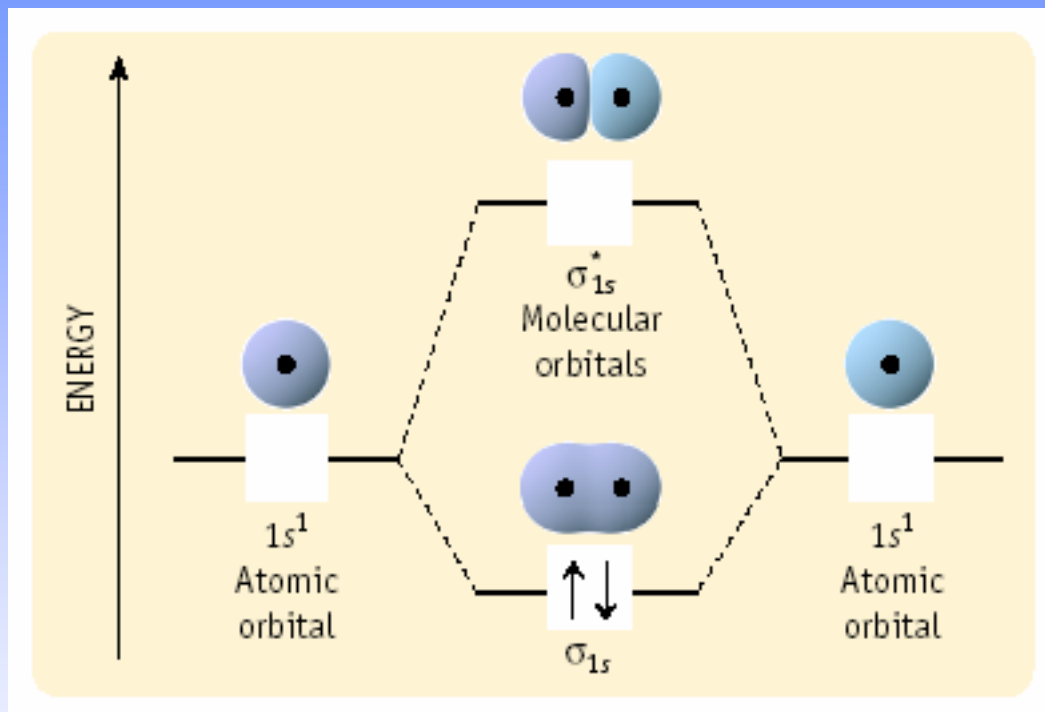


Níveis de energia das orbitais moleculares ligante e antiligante do hidrogénio (H_2).



Uma **orbital molecular ligante** tem menor energia e maior estabilidade do que as orbitais atômicas a partir das quais se formou.

Uma **orbital molecular antiligante** tem maior energia e menor estabilidade do que as orbitais atômicas a partir das quais se formou.

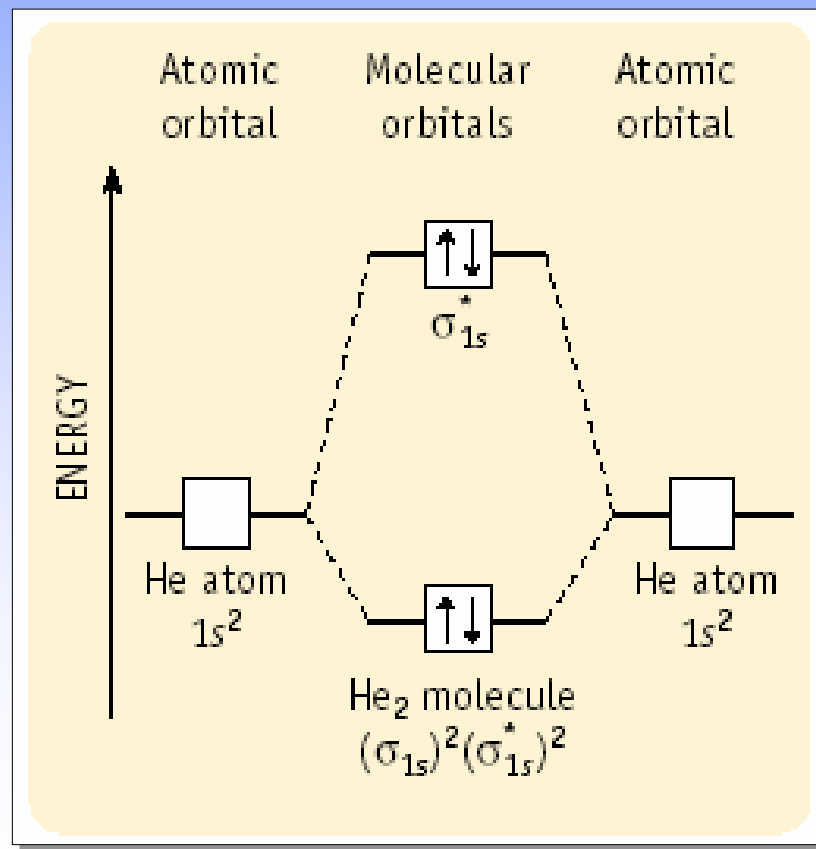


1. N^o. de OM = no. de orbitais atômicas utilizadas.

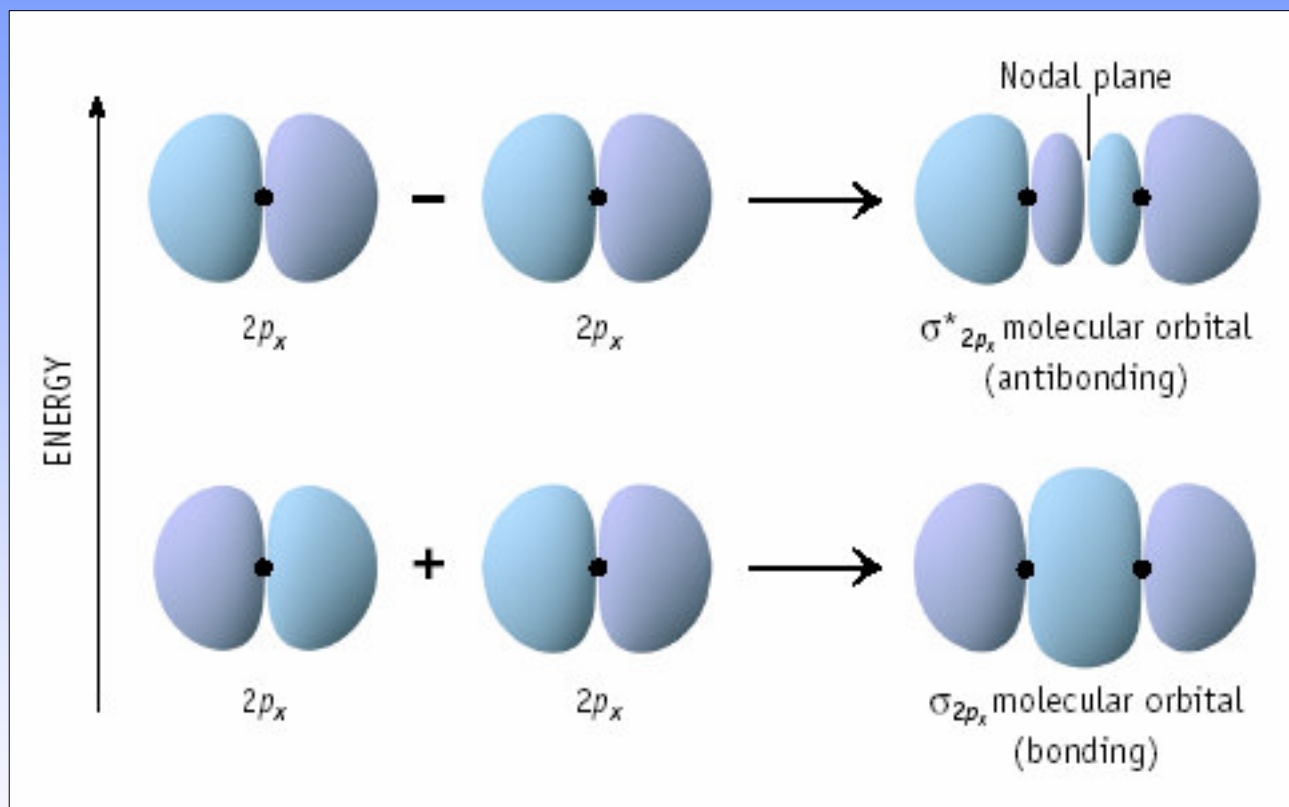
2. Electrons são atribuídos às OM de acordo com o princípio de Aufbau.

Molécula de Dihélio?

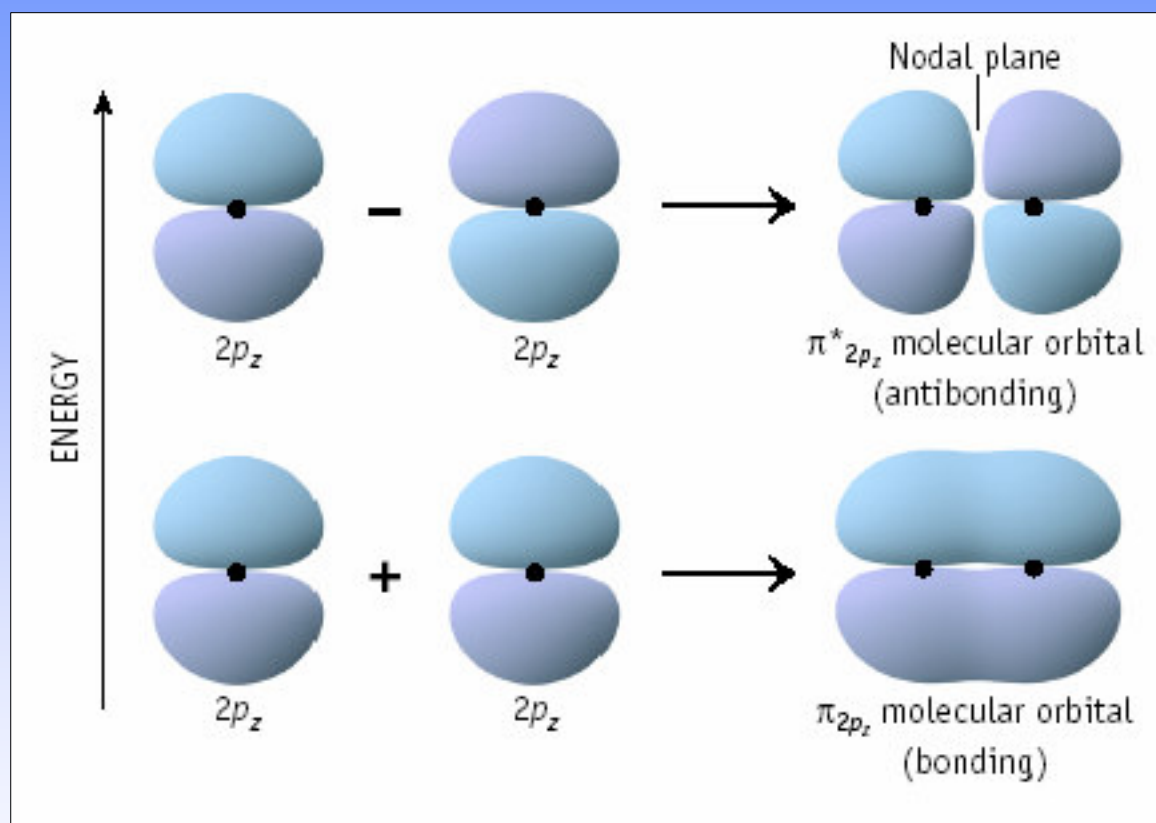
**Ordem de ligação = $1/2$ [nº de e- em OM ligantes
- nº de e- em OM anti-ligantes]**



Ligação sigma a partir de orbitais p



Ligação π a partir de orbitais p



Sideways overlap of atomic $2p$ orbitals that lie in the same direction in space give π bonding and antibonding MOs.

Duas possíveis interacções entre duas orbitais p equivalentes e as correspondentes orbitais moleculares

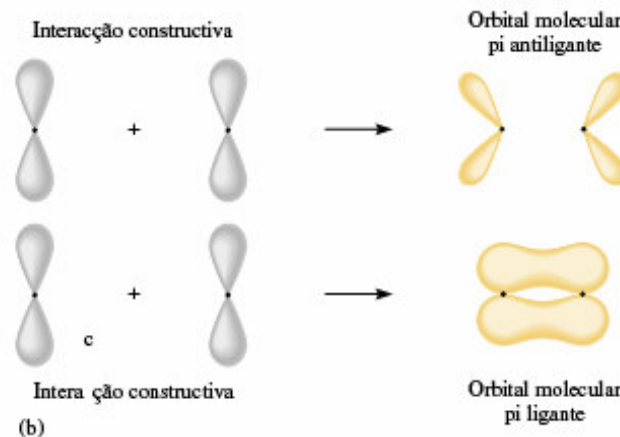
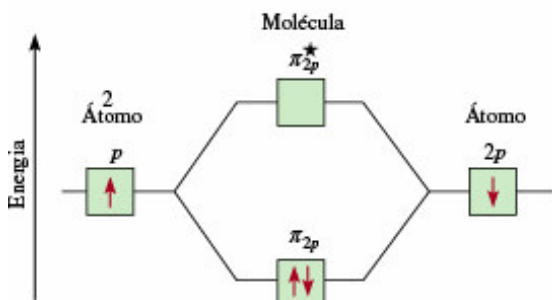
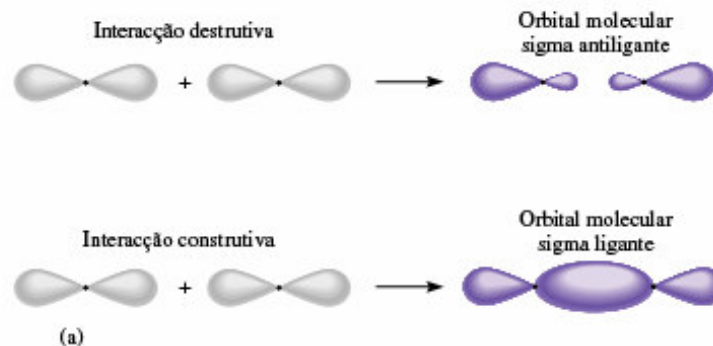
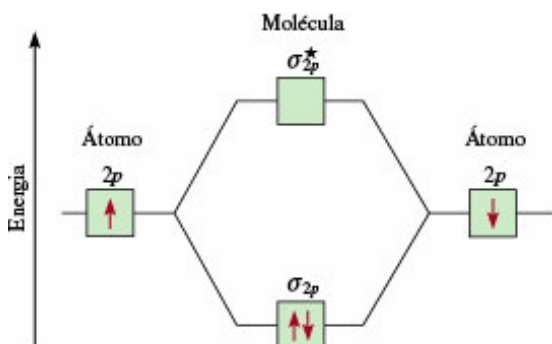
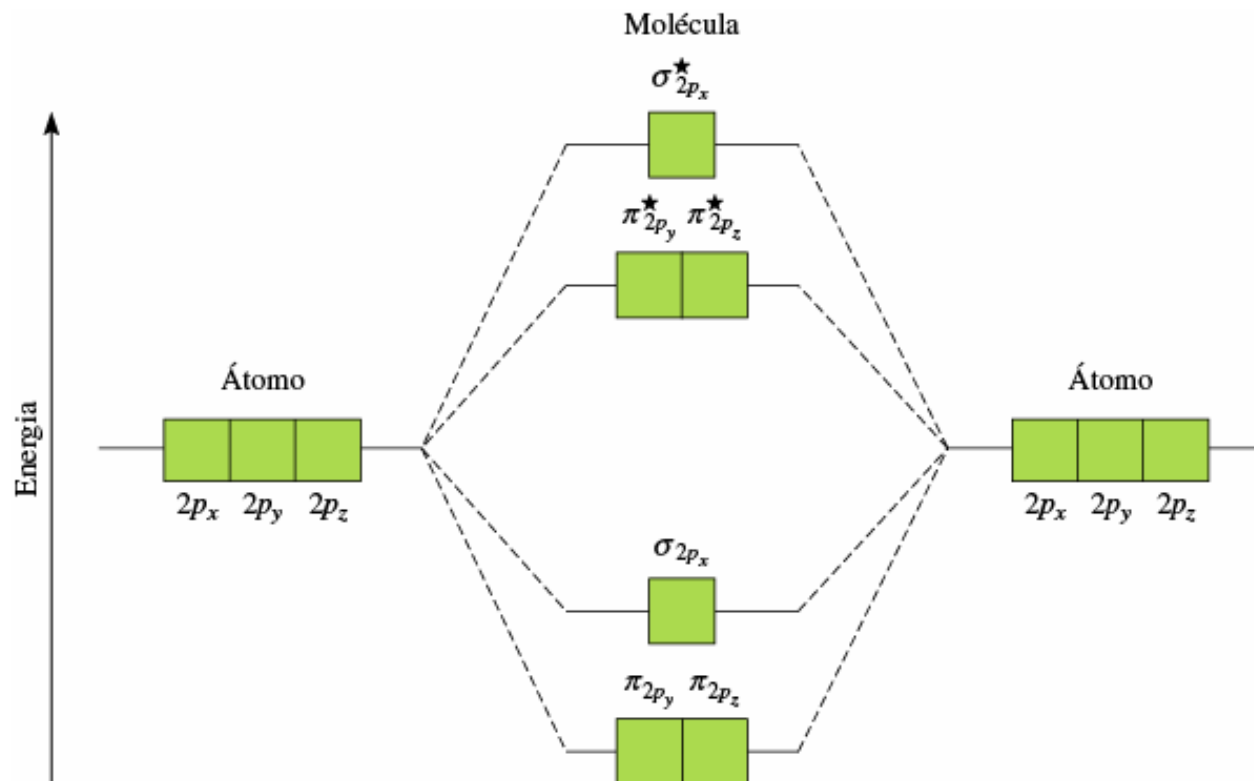


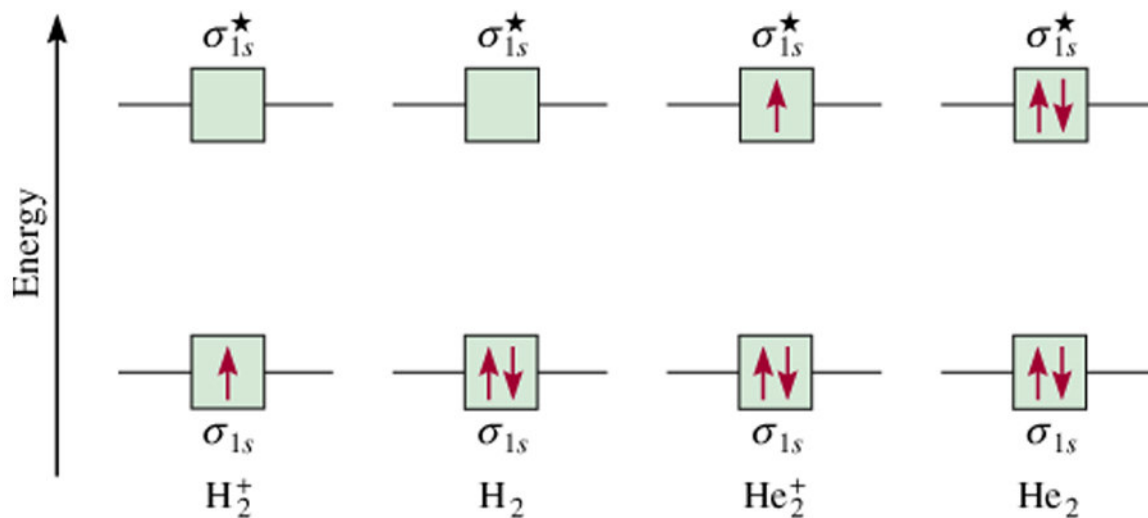
Diagrama geral de níveis de energia das orbitais moleculares para as moléculas diatómicas homonucleares de elementos do segundo período: Li₂, Be₂, B₂, C₂ e N₂.



Configuração das Orbitais Moleculares (OM)

- O número de orbitais moleculares (OM) formado é sempre igual ao número de orbitais atômicas que se combina.
- Quanto mais estável for a OM, menos estável será a correspondente OM antiligante.
- O preenchimento de OM faz-se por ordem crescente de energias.
- Cada OM pode acomodar no máximo dois electrões (com spins opostos de acordo com o Princípio de Exclusão de Pauli).
- Utilize a regra de Hund para preencher OM com a mesma energia.
- O número de electrões nas OM é igual à soma de todos os electrões dos átomos envolvidos na ligação.

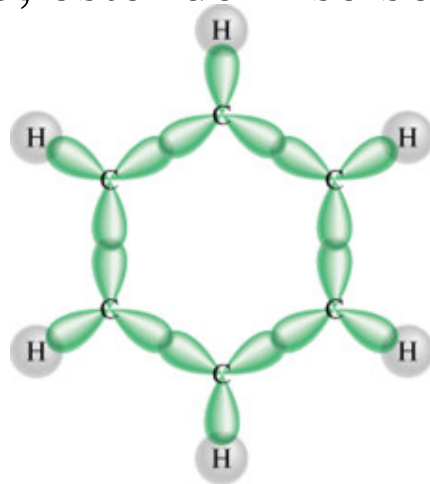
$$\text{Ordem de ligação} = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{N.º electrões} \\ \text{em OM} \\ \text{ligantes} \end{array} - \begin{array}{l} \text{N.º electrões} \\ \text{em OM} \\ \text{antiligantes} \end{array} \right)$$



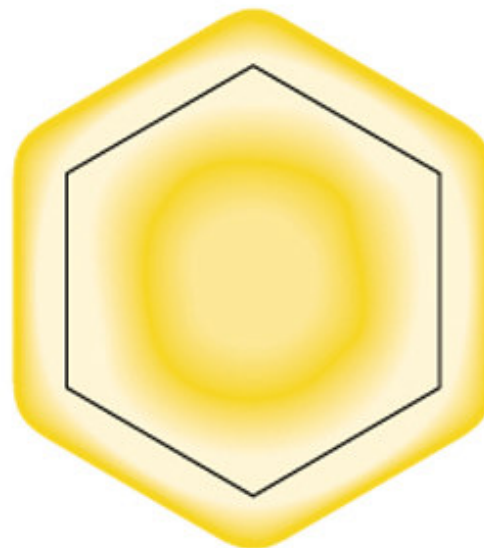
Propriedades de Moléculas Diatômicas Homonucleares de Elementos do Segundo Período*

	Li ₂	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	
$\sigma_{2p_z}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma_{2p_z}^*$
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$
σ_{2p_z}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	π_{2p_y}, π_{2p_z}
π_{2p_y}, π_{2p_z}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2p_z}
σ_{2s}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2s}^*
σ_{2s}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	σ_{2s}
Ordem de ligação	1	1	2	3	2	1	
Comprimento de ligação (pm)	267	159	131	110	121	142	
Energia de ligação (kJ/mol)	104,6	288,7	627,6	941,4	498,7	156,9	

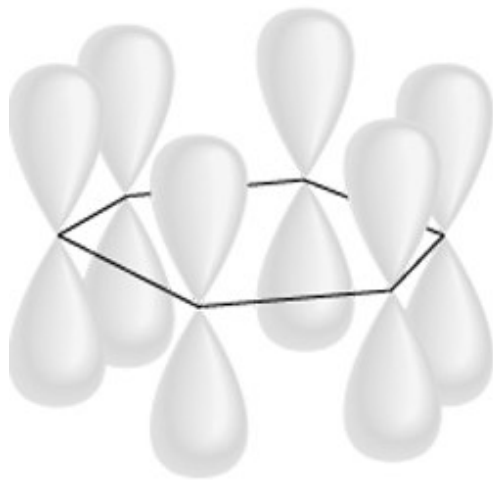
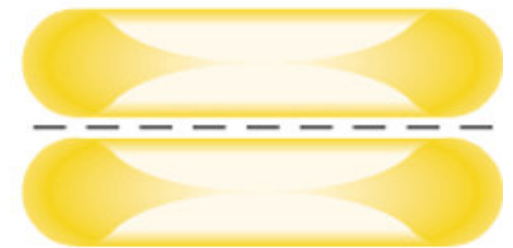
Orbitais moleculares deslocalizadas não estão confinadas ao espaço entre dois átomos adjacentes ligados, mas, pelo contrário, estendem-se sobre três ou mais átomos.



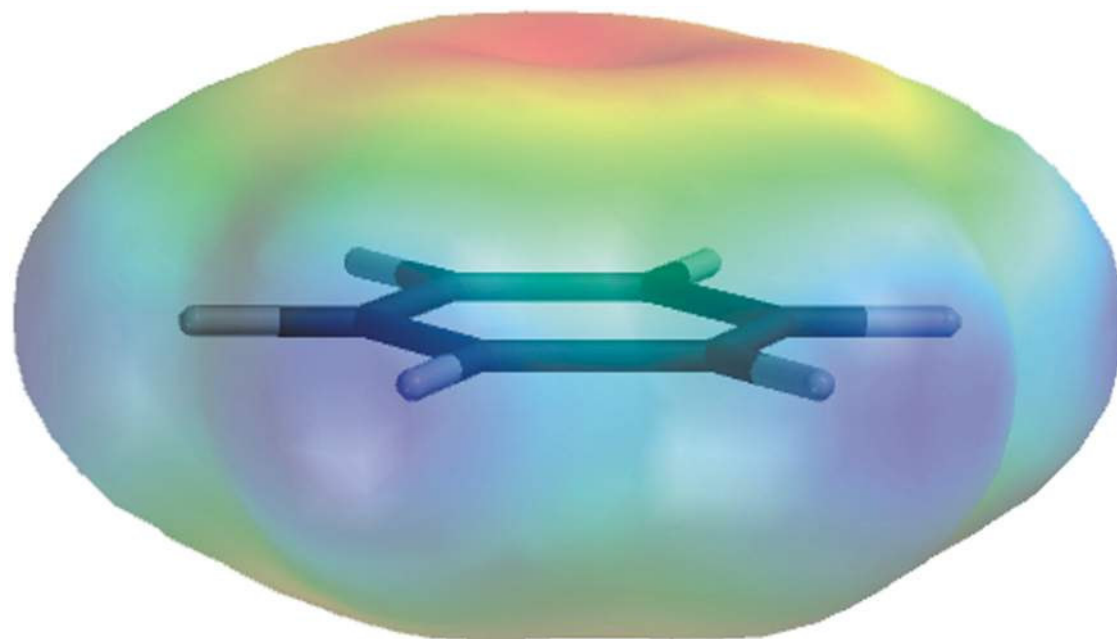
Vista de cima



Vista lateral



Densidade electrónica acima e abaixo do plano da molécula
do benzeno.



Ligações do íon carbonato

