

## Aula do dia 03/08/06

---

Nesta aula foram explicados os conceitos básicos sobre a teoria dos orbitais moleculares.

### ***Histórico e conceitos preliminares***

Dois cientistas, Gilbert Newton Lewis (1875-1946) e Walther Kossel (1888-1956), propuseram que os elementos químicos podem se ligar através de dois tipos de ligação: Iônica e Covalente.

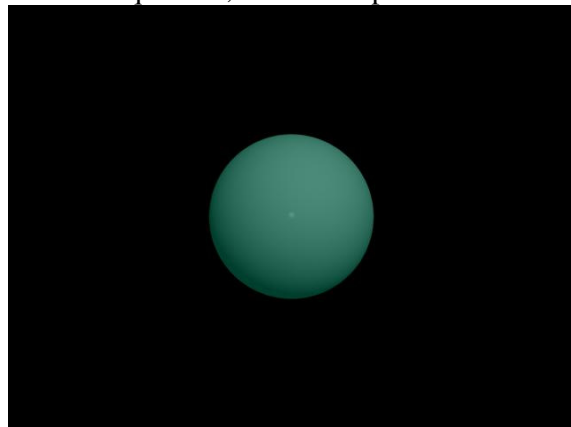
Na ligação iônica há uma transferência de elétrons do elemento menos eletronegativo para para o elemento mais eletronegativo (*em outras palavras, do metal para um não-metal*). O elemento que cedeu elétrons, fica com carga (+) e o elemento que aceitou elétrons fica com carga (-) e, segundo a Lei de

Coulomb  $\rightarrow F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1q_2}{r^2}$ , há entre estas duas estruturas uma atração eletrostática, que é a ligação

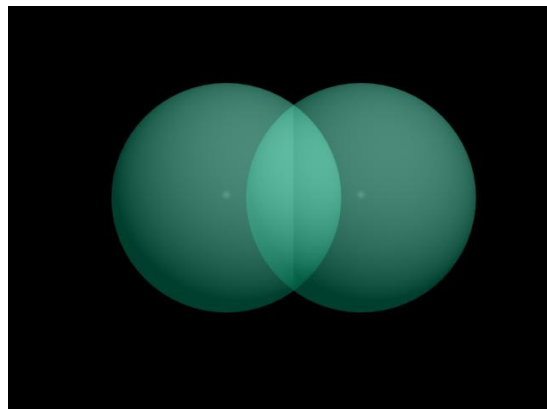
iônica. Já a ligação covalente, ocorreria entre elementos que não tem uma preponderância em suas eletronegatividades. Como não há um elemento que perde efetivamente seu elétron e nem tão pouco outro que o aceite de todo, há um compartilhamento deste elétron pelos átomos envolvidos na ligação. Como você dever ter percebido, este tipo ligação deve ocorrer entre elementos de mesma natureza: metal/metall; não-metal/não-metal.

### ***T.O.M. (Teoria do Orbital Molecular)***

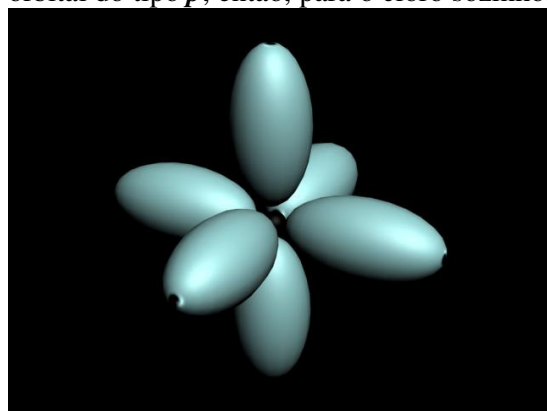
Teoria mais moderna que a de Kossel-Lewis, porque envolve a Mecânica Quântica e não apenas forças elétricas, prevê que a ligação química se dá entre os orbitais dos elementos químicos, alterando a densidade eletrônica entre os orbitais envolvidos na ligação. As equações de probabilidade dos orbitais do tipo *s* dão uma forma geométrica esférica. Então, um elemento como o H, sem se ligar com outro elemento químico, teria esta aparência:



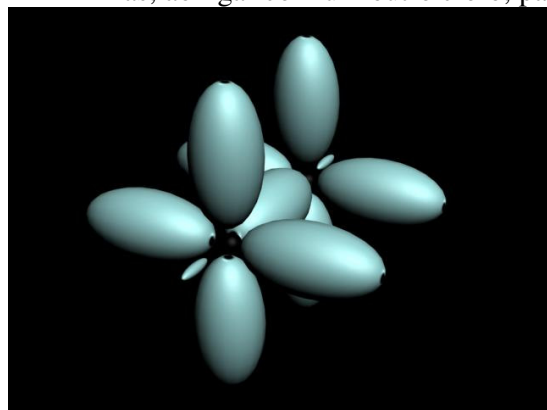
Mas se este hidrogênio se ligasse a outro hidrogênio, seus orbitais sofreriam uma mudança que traduziria uma nova densidade eletrônica entre seus núcleos. Assim...



No caso do cloro, Cl, seria algo diferente, porque este elemento se liga à outro elemento pelo orbital do tipo *p*, então, para o cloro sozinho, teríamos...

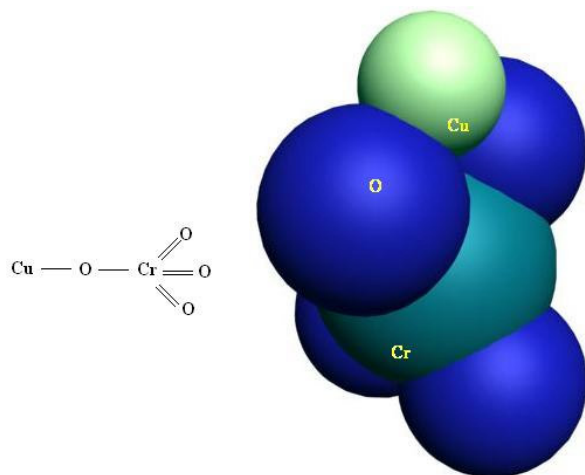


Mas, ao ligar com um outro cloro, para formar o gás cloro, Cl<sub>2</sub>, teríamos...

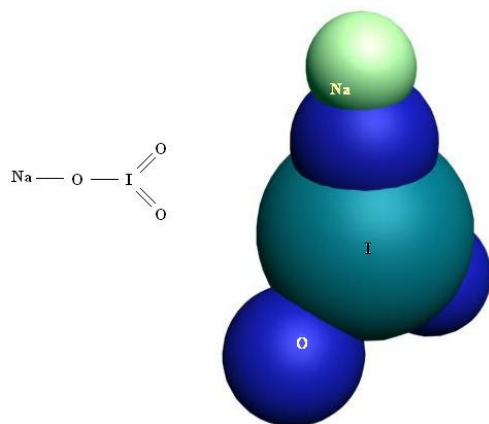


### ***Outras formas de representar uma ligação em 3D***

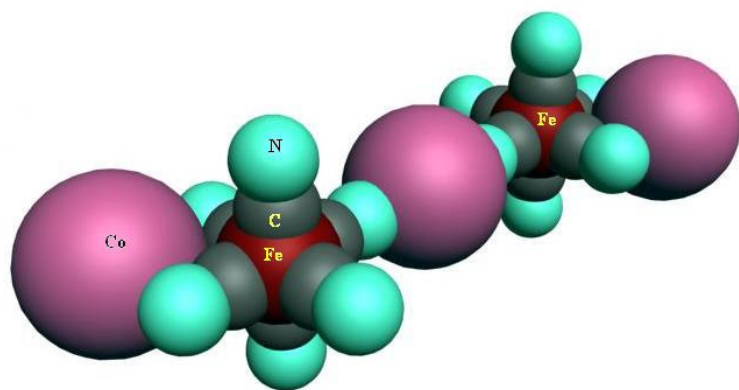
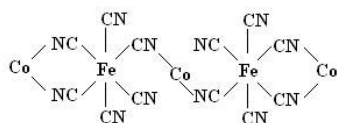
A geometria dos orbitais interfere na geometria da molécula com um todo. Por isso você deve olhar na página 112 do seu livro base, para entender a geometria destas moléculas:



Cromato de cobre II – geometria tetraédrica



Iodato de sódio – geometria trigonal plana



Ferricianeto de cobalto II – geometria bipiramidal para o Ferro

Todos os modelos acima são conhecidos como '*Modelo bola*'.