

Teoria da Ligação de Valência

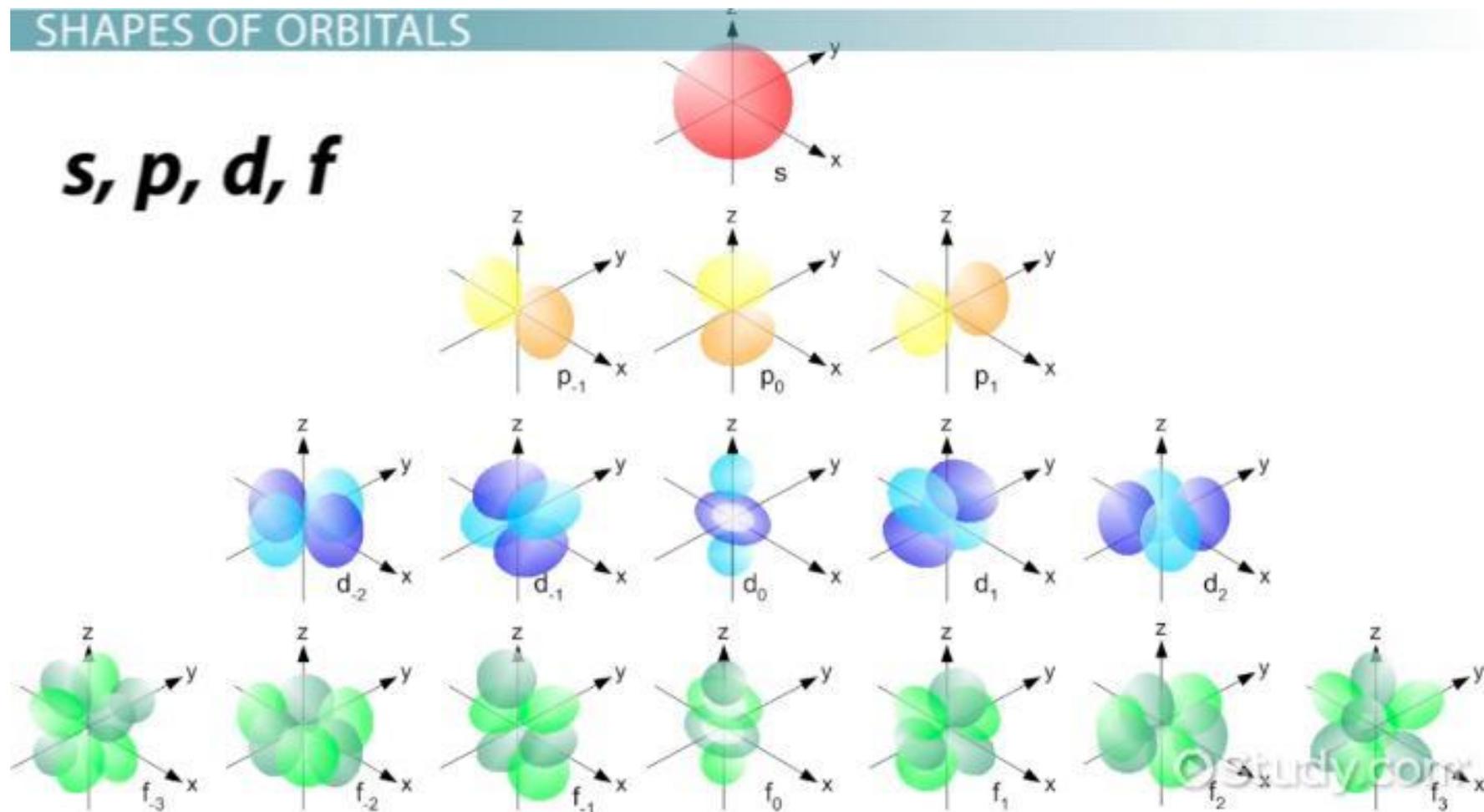
Prof. Jean Marcel R. Gallo



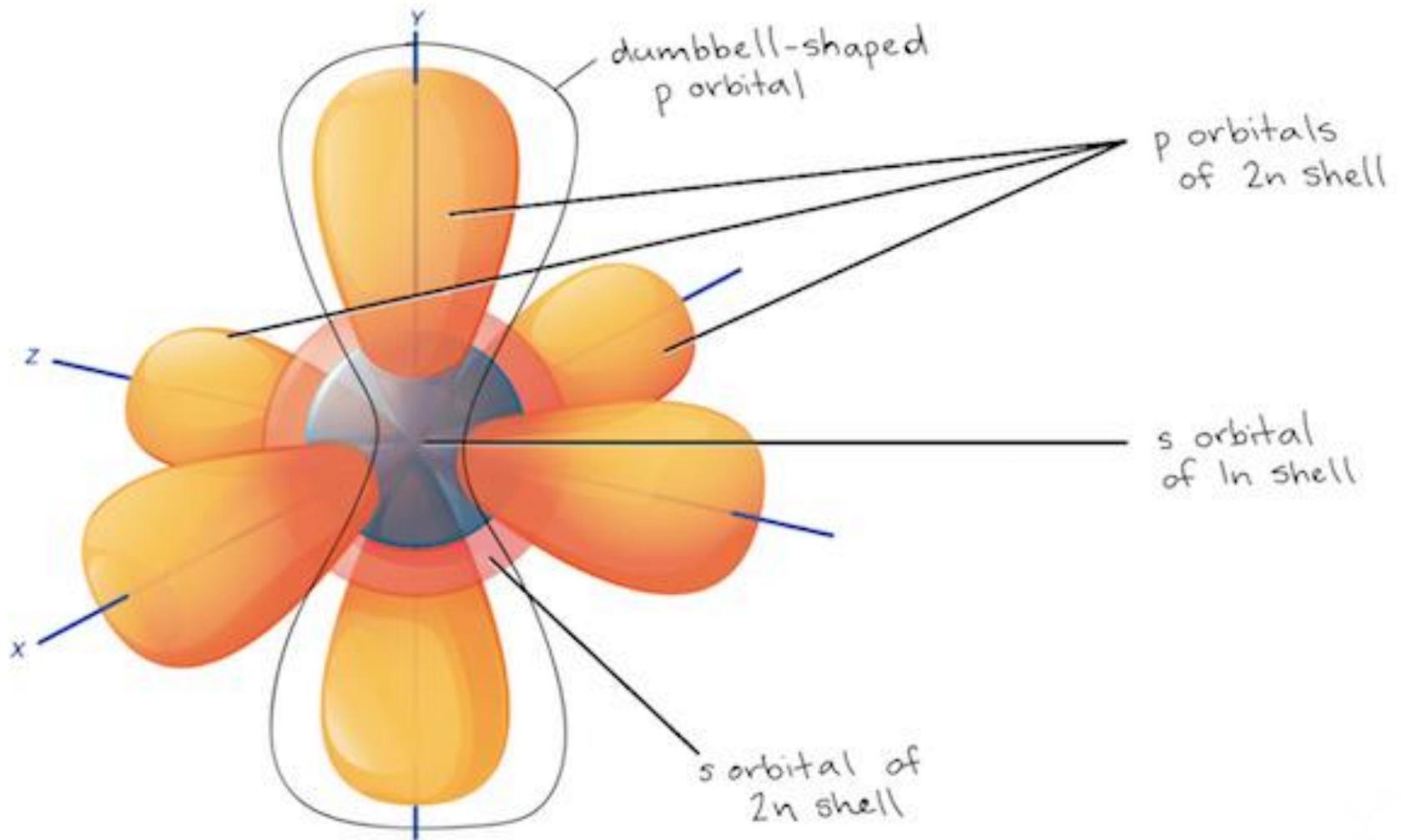
Os orbitals

SHAPES OF ORBITALS

s, p, d, f

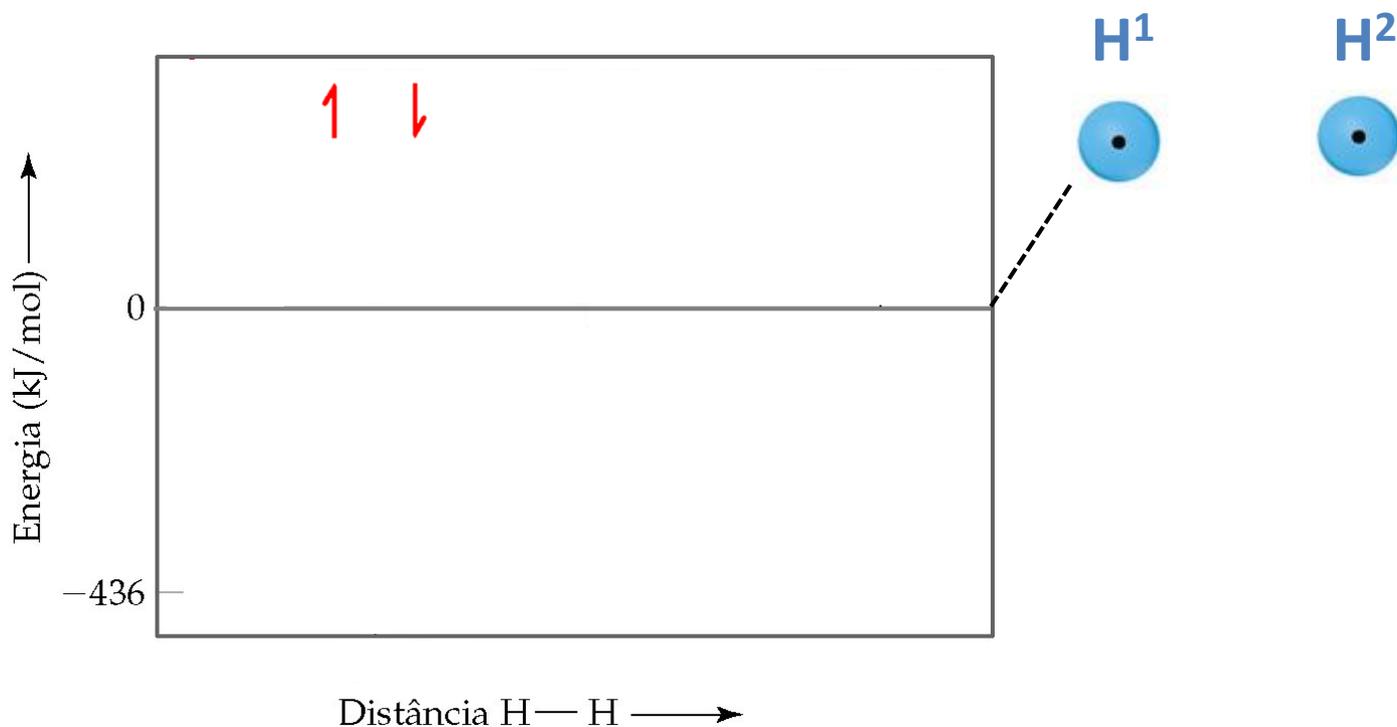


Os orbitais



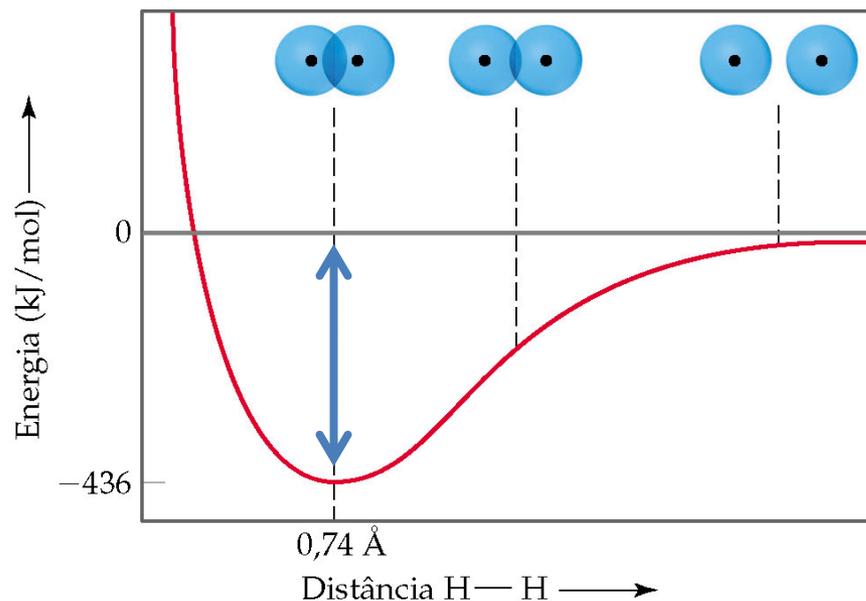
Teoria do Orbital de Valência

- É uma das teorias usada para explicar a ligação química.
- Primeira teoria de ligação a usar a mecânica quântica.



Teoria do Orbital de Valência

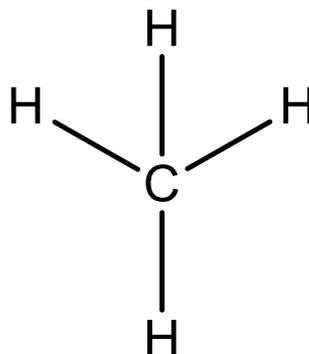
- Quantidade de energia em que a molécula é mais favorável que o átomo isolado
- Energia de ligação!
- Energia necessária para quebrar a ligação H-H



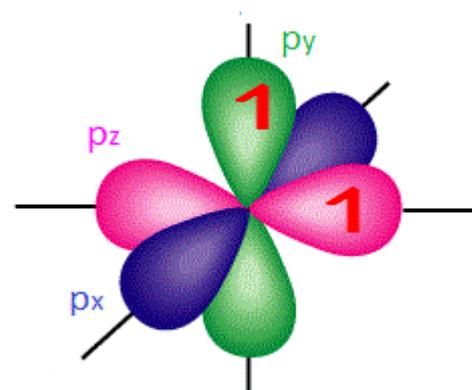
Energias envolvidas:

- Repulsão elétron-elétron
- Repulsão núcleo -núcleo
- Atração: núcleo1-elétron1, núcleo1-elétron2, núcleo2-elétron1 e núcleo2-elétron2
- **No mínimo de energia:** energia de atração contribuem mais que energias de repulsão

Moléculas poliatômicas: Metano (CH₄)



- Distribuição eletrônica do Carbono: $1s^2 2s^2 2p^2$ ($2p_y^1 2p_z^1 2p_x^0$)
- Distribuição eletrônica do Hidrogênio: $1s^1$



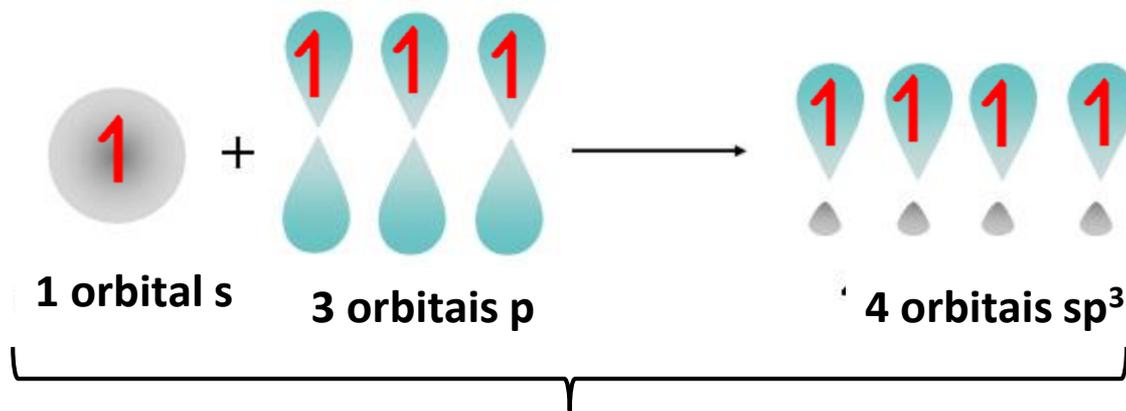
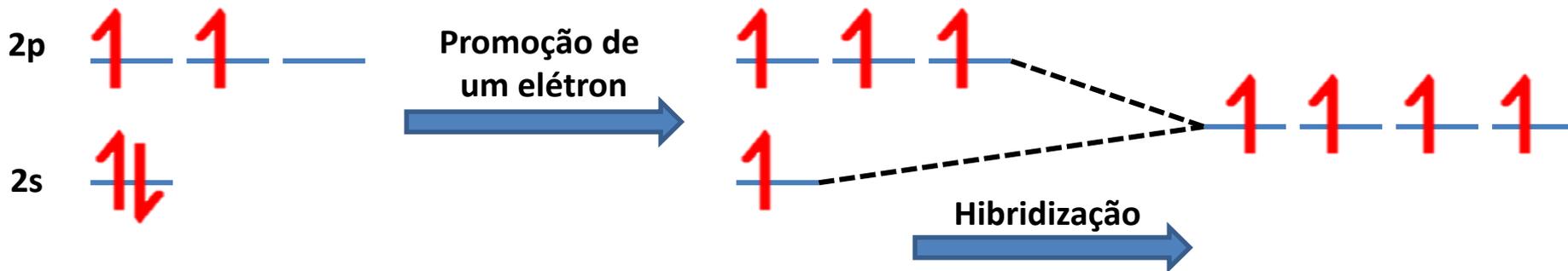
- Segundo o modelo, carbono faria apenas 2 ligações!

Hibridização

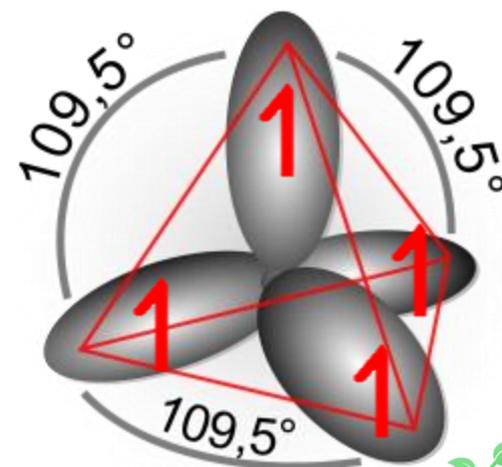
- **Parte integrante da teoria do orbital de valência.**
- **Propões que os orbitais de valência de um átomo podem se combinar.**
- **Os orbitais resultantes são degenerados (mesma energia).**
- **São formados tantos orbitais quantos forem combinado.**

Voltando ao Metano (CH₄)

- Distribuição eletrônica do Carbono: $1s^2 2s^2 2p^2$ ($2p_y^1 2p_z^1 2p_x^0$)



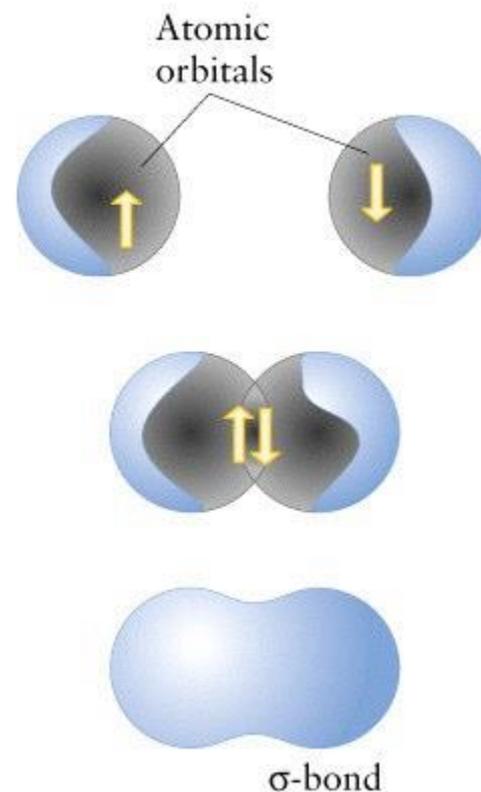
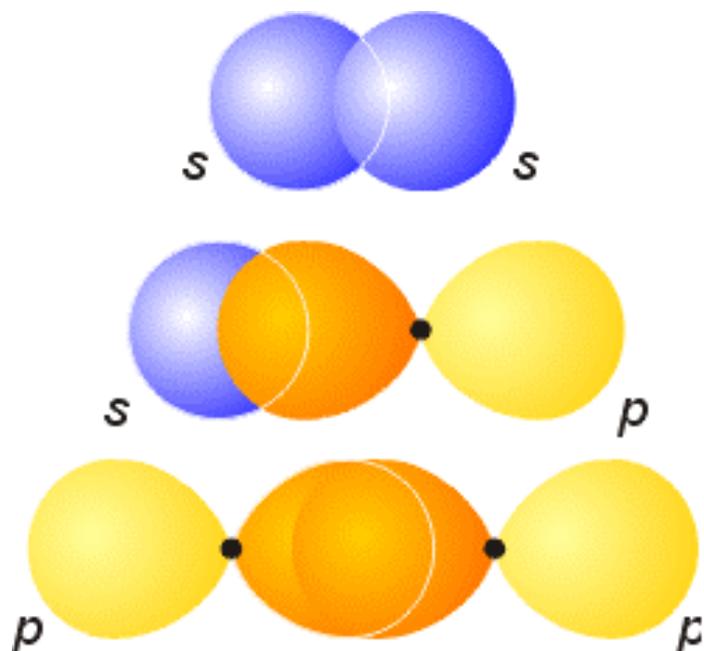
Hibridização do carbono é sp³



Geometria
Tetraédrica

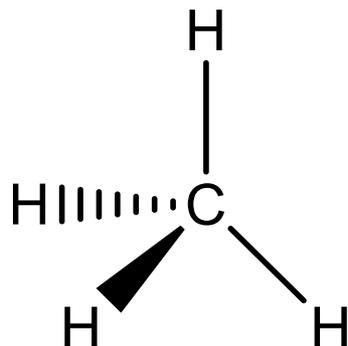
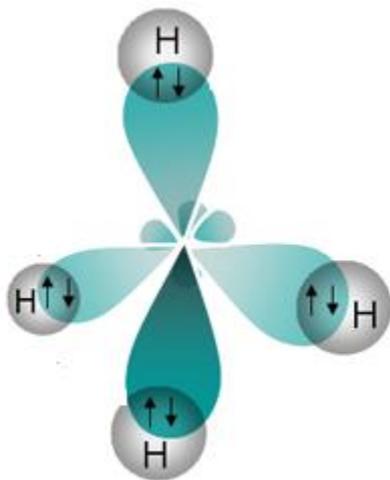


Ligação σ



- Envolve a interação frontal entre orbitais.
- Todos os orbitais (s, p, d, f...) podem formar ligações σ .
- Dois átomos podem fazer apenas 1 ligação σ entre si. As múltiplas ligações são π .
- É o tipo de ligação mais forte.
- Os lóbulos que formam a ligação devem ser de mesma fase.

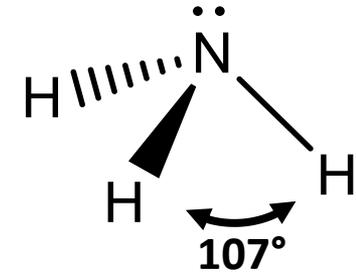
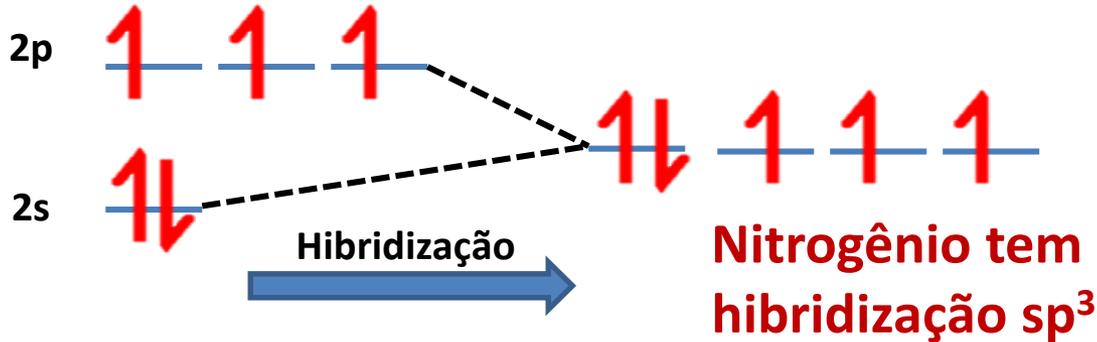
Metano (CH₄)



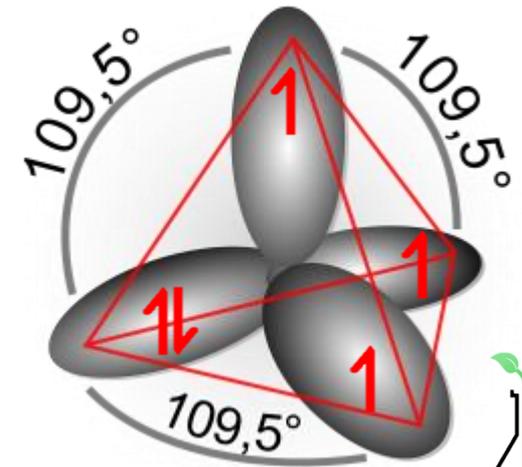
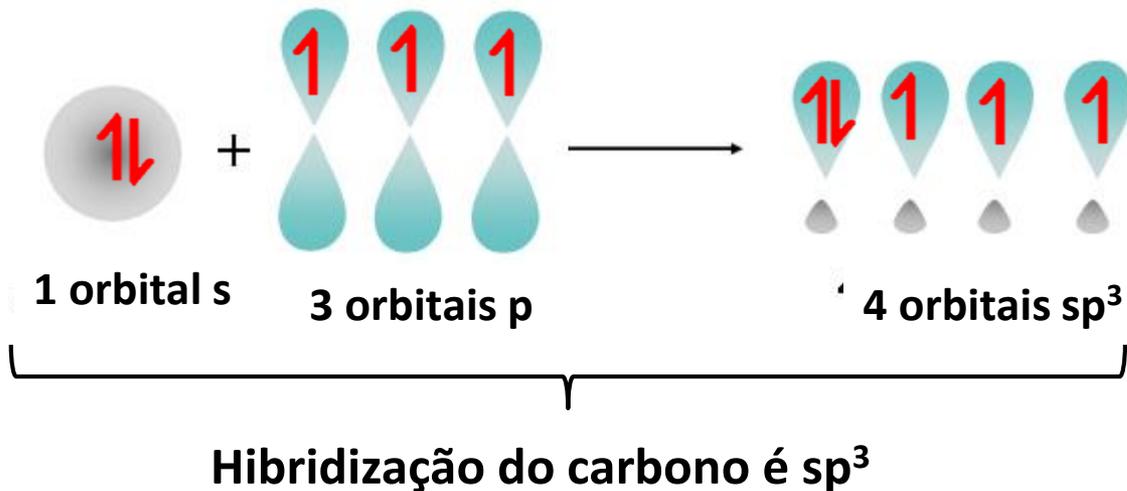
- Metano tem geometria tetraédrica.
- Ângulo entre as ligações é 109.5°.
- Todas as ligações são tipo σ .
- Orbitais hibridizados fazem apenas ligações σ .

Amônia (NH₃)

- Distribuição eletrônica do nitrogênio: $1s^2 2s^2 2p^3$ ($2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$)

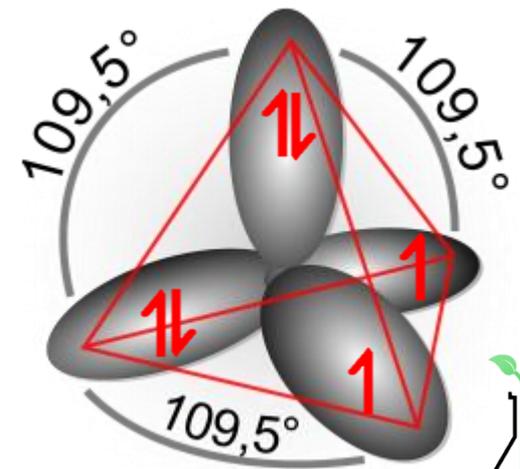
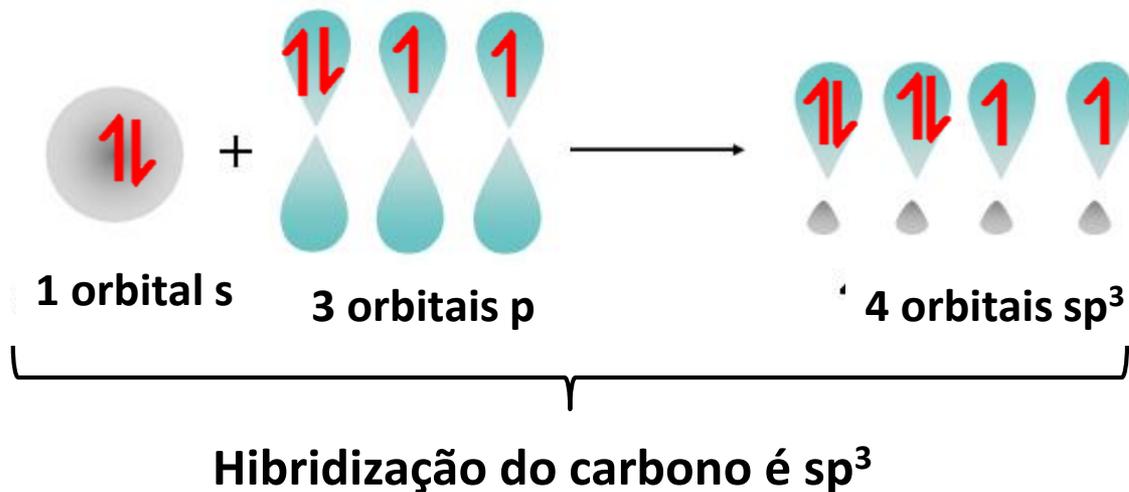
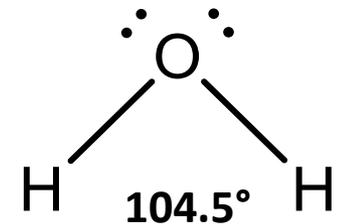
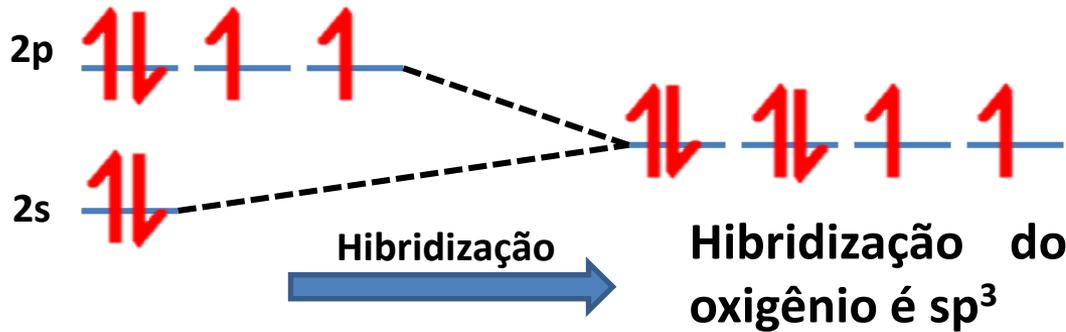


Geometria da molécula é piramidal



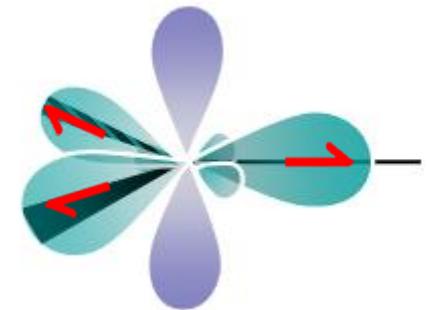
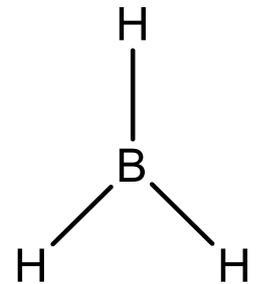
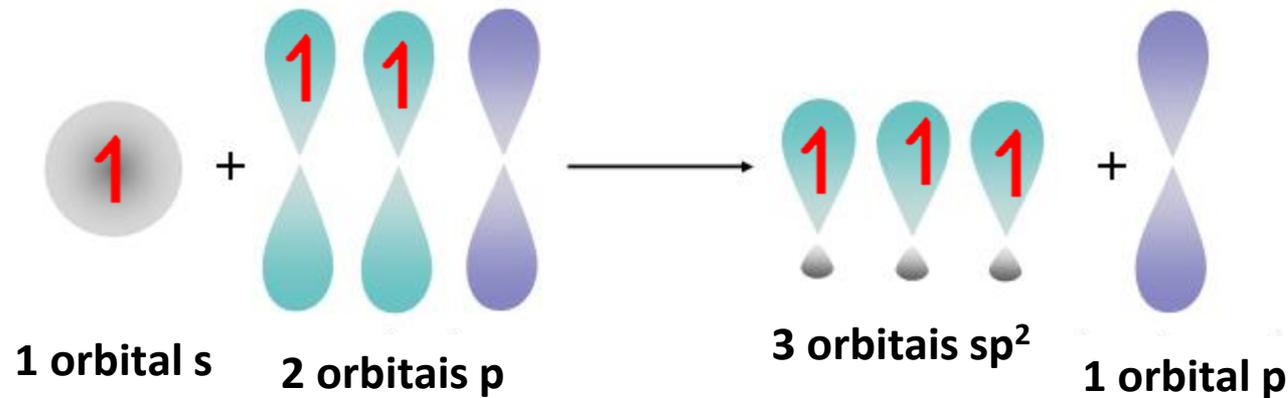
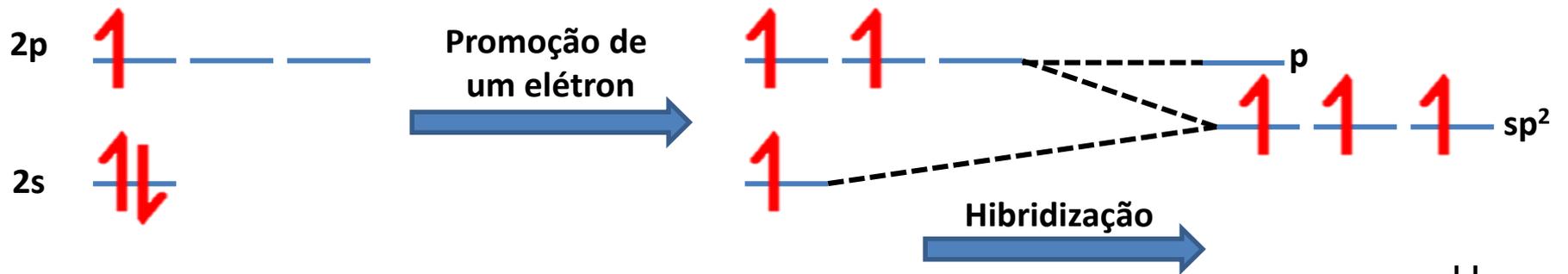
Água (H₂O)

- Distribuição eletrônica do Oxigênio: $1s^2 2s^2 2p^4$ ($2p_y^2 2p_z^1 2p_x^1$)



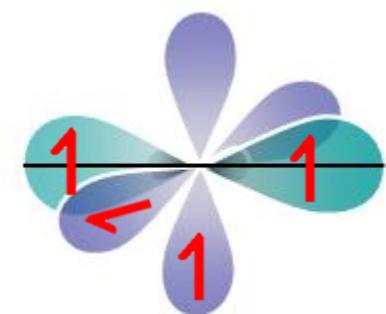
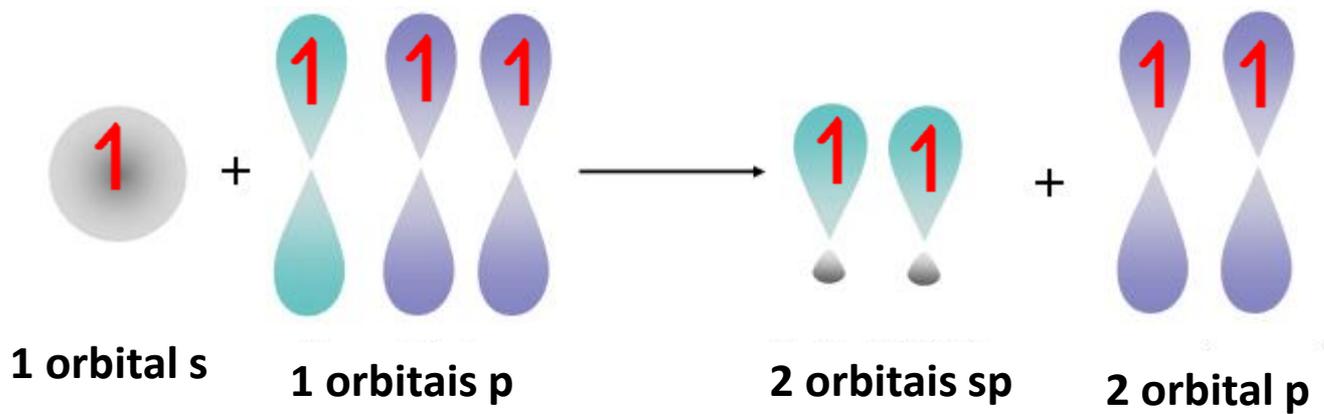
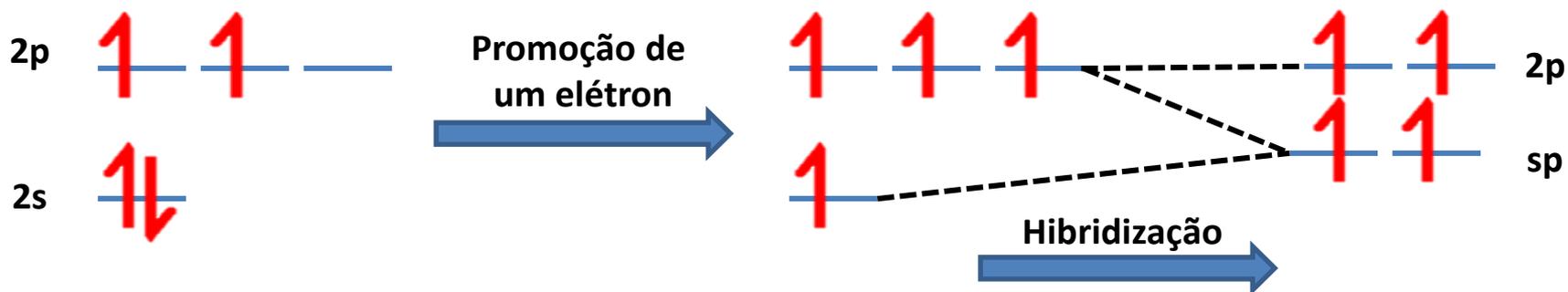
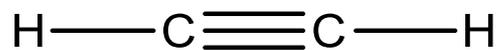
Hidreto de boro (BH_3): Hibridização sp^2

- Distribuição eletrônica do Boro: $1s^2 2s^2 2p^1$ ($2p_y^1 2p_z^0 2p_x^0$)



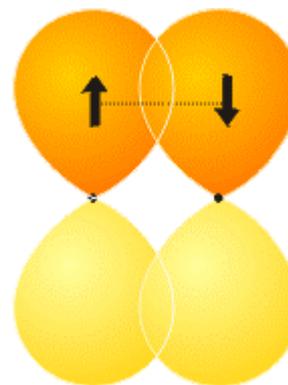
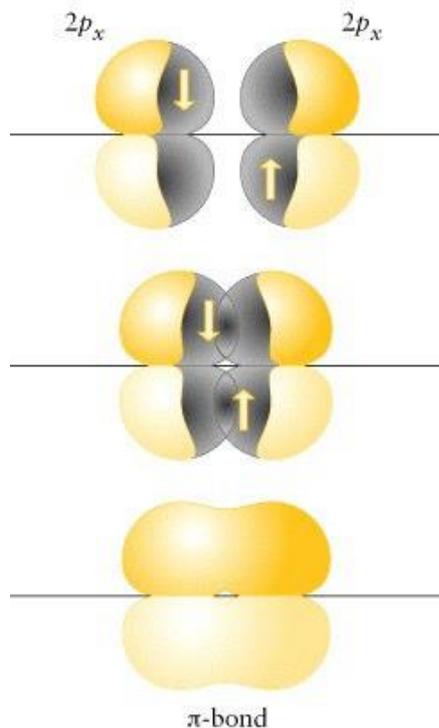
Hibridização do boro é sp^2

Etino: Carbono em hibridização sp



Hibridização do carbono é sp

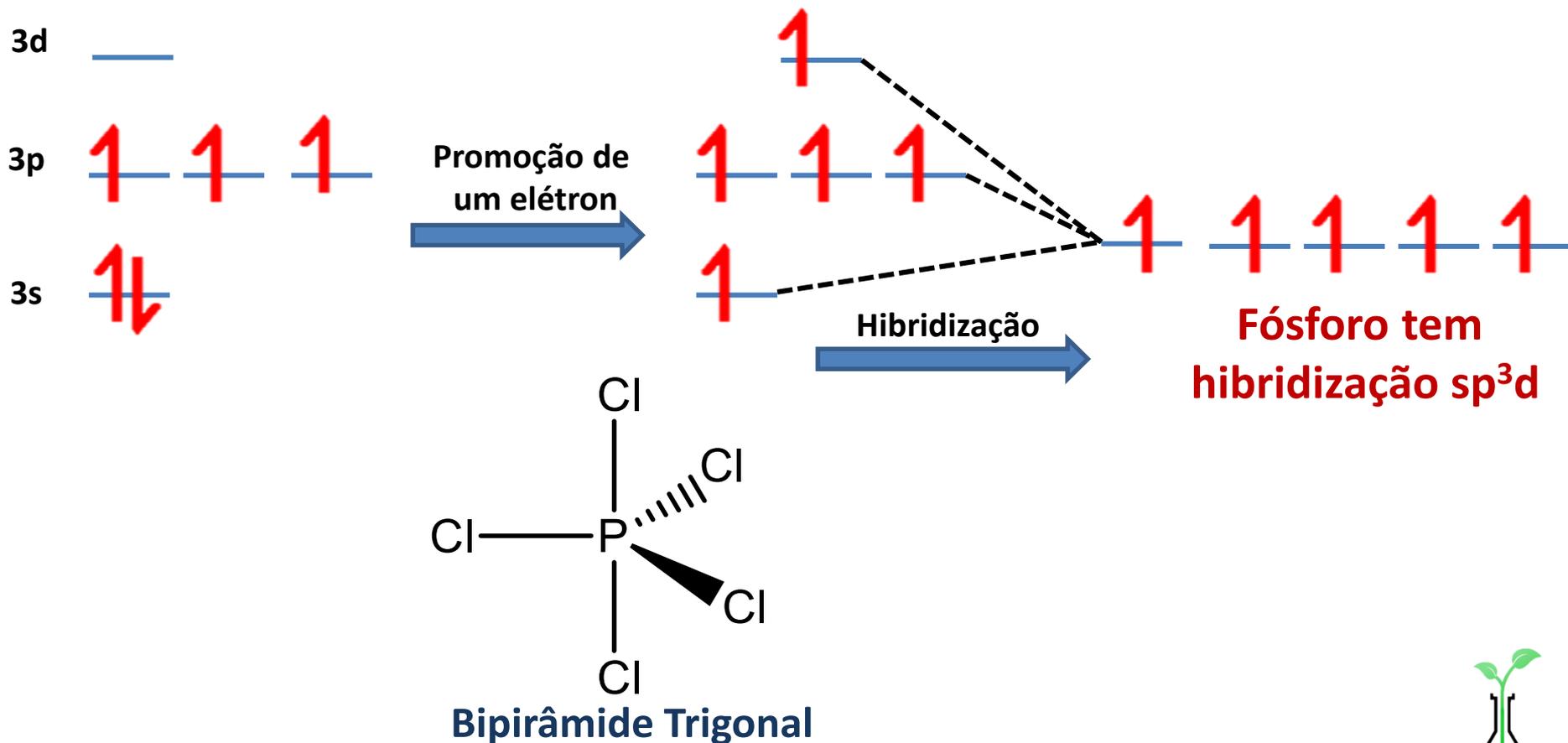
Ligação π



- Envolve a interação de orbitais perpendiculares a ligação σ e envolve 2 lóbulos de cada orbital.
- Apenas os orbitais s não fazem ligações π .
- Os lóbulos devem ser de mesma fase para interagir.

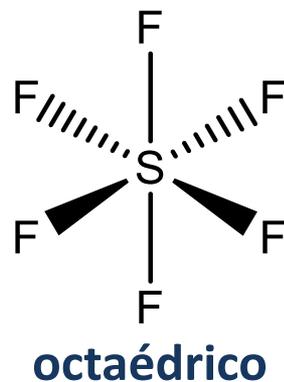
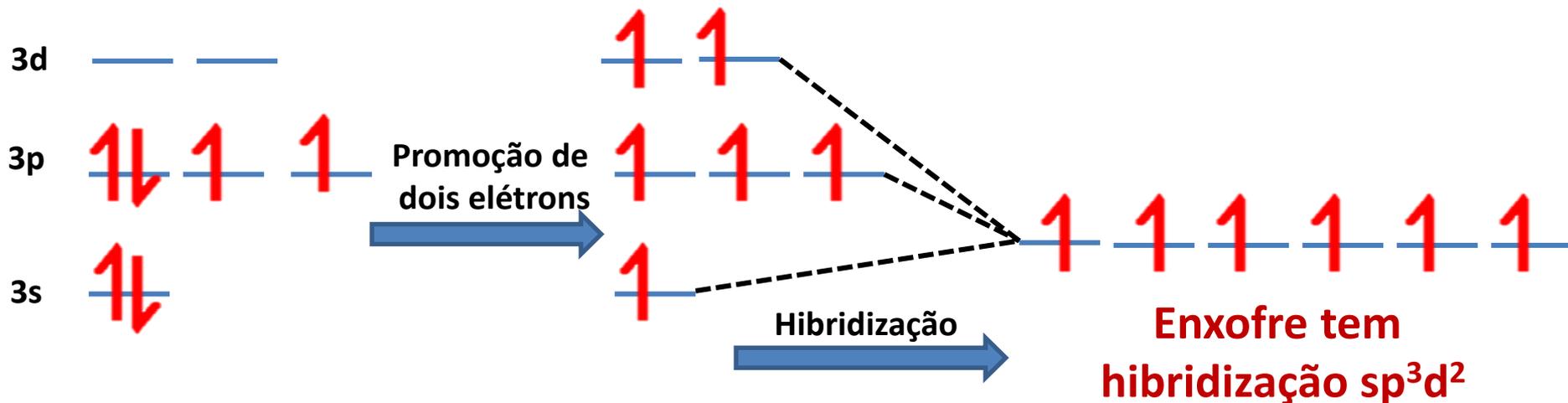
PCl₅: exemplo da hipervalência

- Fósforo tem seus elétrons de valência nos orbitais do nível de energia n=3, de forma que orbital 3d está presente, embora não esteja ocupado



SF₆: hibridização sp³d²

- Assim como o fósforo, o enxofre também tem seus elétrons de valência nos orbitais do nível de energia n=3, de forma que orbital 3d está presente, embora não esteja ocupado



Teoria de ligação

- Os conceitos de ligação que aprendemos nos permite representar moléculas e entender as ligações químicas envolvidas entre átomos de uma molécula.
- Teoria do orbital de valência explica a grande maioria das moléculas conhecidas e é, de forma prática, é muito usada.
- A teoria do orbital de valência falha em explicar algumas observações experimentais, mas isso não compromete sua importância.
- A teoria de ligação mais completa é a Teoria do Orbital Molecular.