

## RESUMO TEÓRICO

A T.L.V. explica a geometria de moléculas simples, mas não permite explicar a geometria das moléculas de metano, de eteno ou de etino, por exemplo. Para isso, é necessário recorrer ao conceito de orbitais híbridas.

**Hibridação** é o processo de mistura das orbitais atômicas num átomo (geralmente de um átomo central) originando um novo conjunto de orbitais designadas orbitais híbridas.

**Orbitais híbridas** são orbitais atômicas, todas iguais, que se obtêm quando duas ou mais orbitais, não equivalentes, se combinam, sendo utilizadas na formação de ligações covalentes.

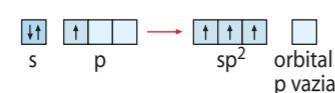
As orbitais híbridas podem ser:

**sp<sup>3</sup>** – resultam da combinação de uma orbital s preenchida com 3 orbitais p, em que duas estão semi-preenchidas.



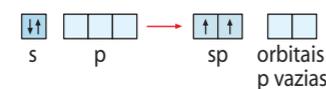
A geometria da molécula é tetraédrica quando o átomo central estabelece 4 ligações com 4 átomos de modo a preencher as orbitais sp<sup>3</sup>. O ângulo de ligação é de 109,5°.

**sp<sup>2</sup>** – resultam da combinação de uma orbital s preenchida e 2 orbitais p, em que só uma está semi-preenchida.



A geometria da molécula é triangular plana e o ângulo de ligação é de 120°.

**sp** – resultam da combinação de uma orbital s, preenchida e 1 orbital p, vazia.



Os átomos dispõem-se na mesma linha, originando moléculas com geometria linear. O ângulo de ligação é de 180°.

A Teoria das Ligações de Valência e as orbitais híbridas não conseguem explicar as propriedades magnéticas do dióxigénio e de espécies com número ímpar de electrões. Em geral, como alternativa à T.L.V. e à hibridação, existe a **Teoria das Orbitais Moleculares (T.O.M.)**.

### Teoria das Orbitais Moleculares – T.O.M.

A ligação covalente é descrita através das orbitais moleculares que têm origem na interação de todas as orbitais atômicas de valência dos átomos que estão envolvidos na ligação, estando associadas à molécula como um todo. Cada sobreposição de duas orbitais de dois átomos dá origem a duas orbitais moleculares – uma **ligante** e uma **antiligante**.

## RESUMO TEÓRICO

**Tipos de orbitais**

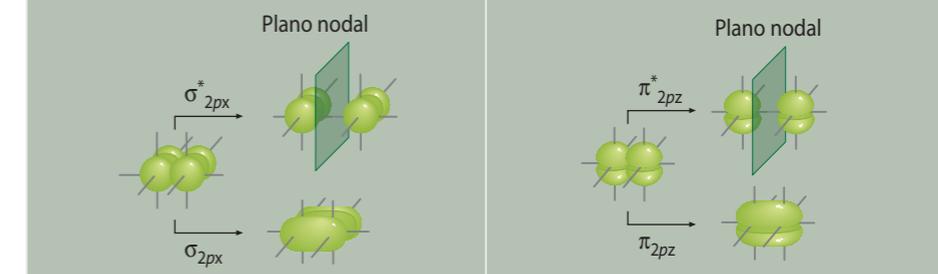
**Ligantes** – orbitais com menos energia do que cada uma das orbitais atômicas que lhe dão origem, logo mais estável.

**Antiligantes** – orbitais com mais energia do que qualquer das orbitais atômicas que lhe deu origem, logo mais instáveis.

### TIPOS DE ORBITAIS MOLECULARES

**σ (sigma)** – resultam da sobreposição de duas orbitais atômicas s, duas orbitais p, quando orientadas de topo, ou uma orbital s e uma p.

**π (pi)** – ocorrem quando se sobrepõem duas orbitais p (p<sub>y</sub> ou p<sub>z</sub>) orientada de lado.



O número de orbitais moleculares de valência é igual ao número de orbitais atômicas de valência dos átomos.

