

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV



TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Walter Heitler, Fritz London, John Slater e Linus Pauling:

1ª descrição sobre ligações covalentes que levou em consideração os orbitais atômicos.

Teoria da Ligação de Valência (TLV):

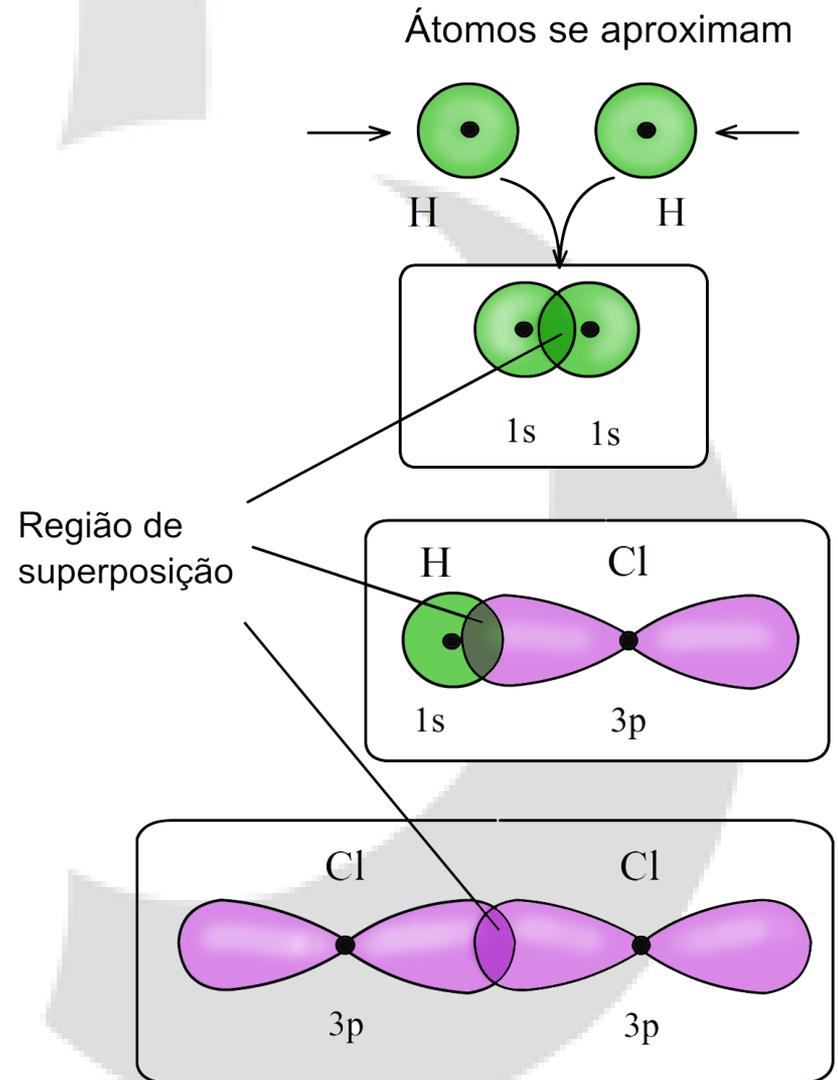
1º modelo quanto-mecânico a distribuir os elétrons através de ligações e que não é explicado pela teoria de Lewis e o modelo VSEPR.

Esta teoria permite o cálculo numérico dos ângulos e dos comprimentos de ligação.

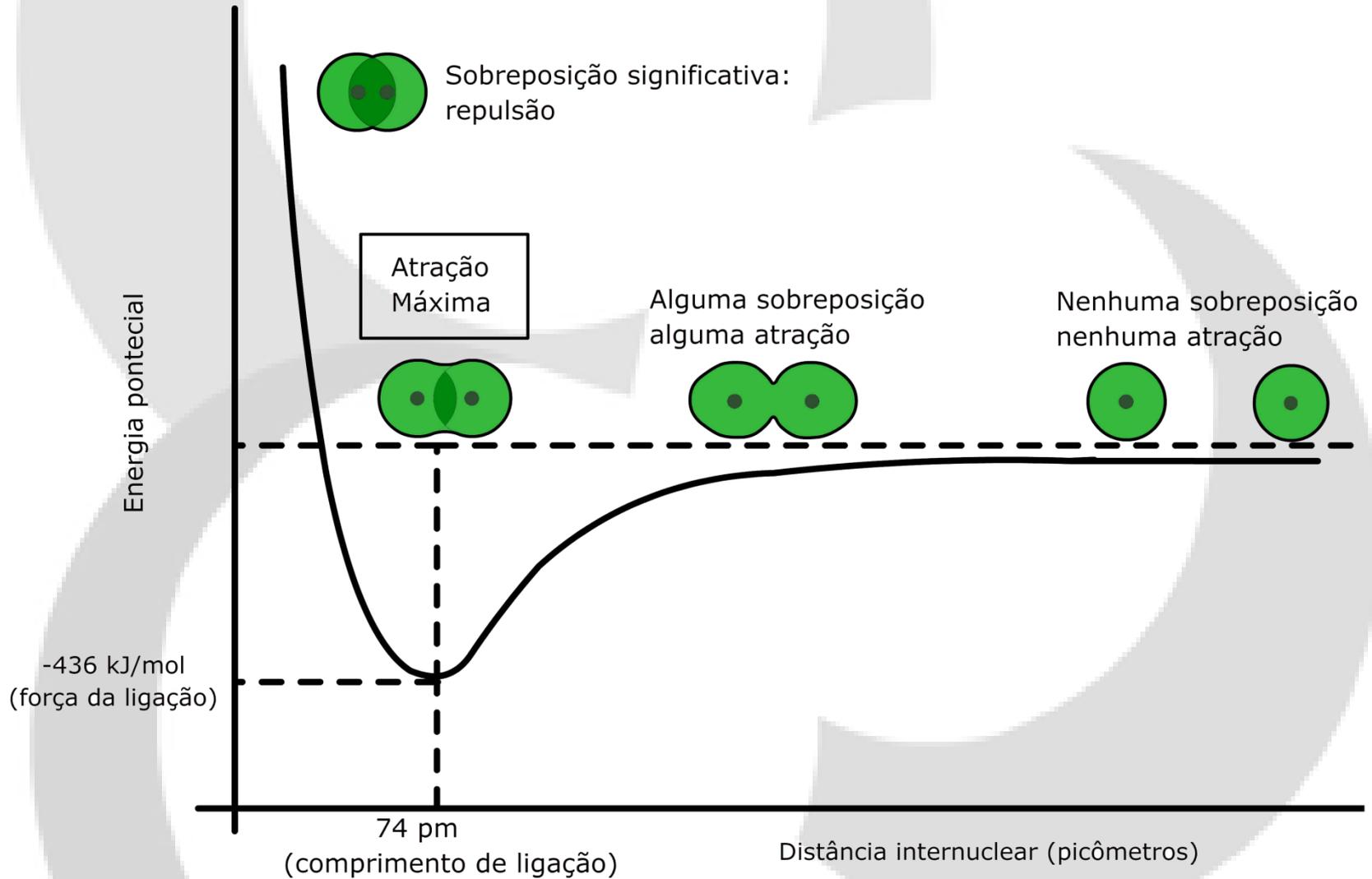
TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

De acordo com a TLV:

- As ligações são formadas quando os orbitais dos átomos se superpõem.
- Para que esta superposição ocorra existem dois elétrons de spins contrários.
- A sobreposição ocorre à medida que os núcleos se aproximam.



TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV



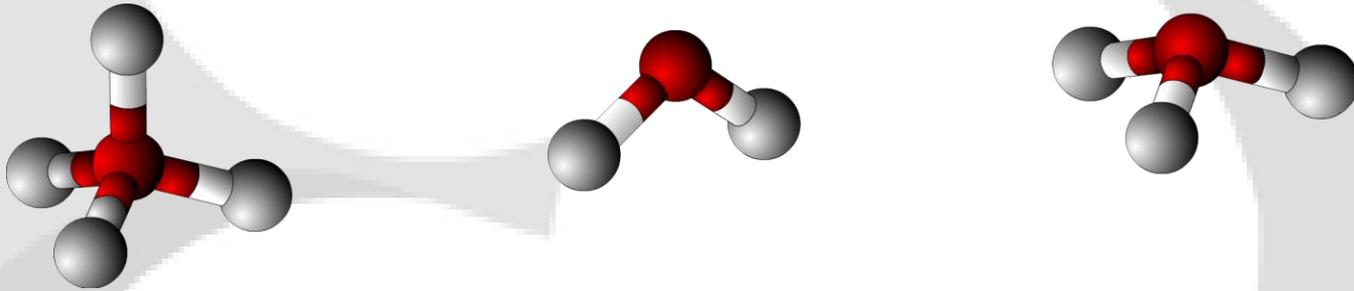
TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

A figura nos diz que:

- Com o aumento da sobreposição, a energia de interação diminui, e em uma determinada distância ela será mínima.
- Esta energia corresponde exatamente à distância de ligação (comprimento de ligação).
- Grande aproximação dos átomos \Rightarrow aparecimento de forças repulsivas, geradas pelos núcleos dos átomos, que levam a um aumento de energia.
- Comprimento de ligação \Rightarrow as forças de atração entre os núcleos e os elétrons equilibram-se às forças repulsivas (núcleo-núcleo, elétron-elétron).

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

A TLV, como estudada até agora, não explicou as ligações verificadas entre moléculas multicêntricas, tais como:



Hibridização de Orbitais Atômicos

Mistura de orbitais atômicos que têm como objetivo gerar novos orbitais de acordo com o arranjo eletrônico característico da forma molecular.

Orbitais Híbridos \Rightarrow energia intermediária entre os níveis a partir dos quais foram gerados.

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Orbitais Híbridos

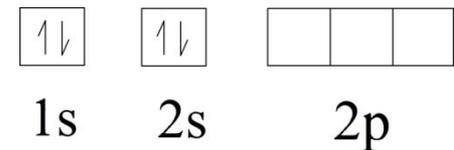
- São orbitais atômicos hipotéticos que ocorrem como uma preparação para a formação da ligação covalente.
- Podem ser gerados a partir da combinação de dois ou mais orbitais atômicos não equivalentes.
- O número de orbitais híbridos gerados é igual ao número de orbitais envolvidos na hibridização.
- Como nos demais orbitais, eles podem alocar dois elétrons de spins opostos, que serão compartilhados pelos átomos.
- Os elétrons não ligantes continuam como pares isolados mesmo após a hibridização.

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Orbitais Híbridos sp

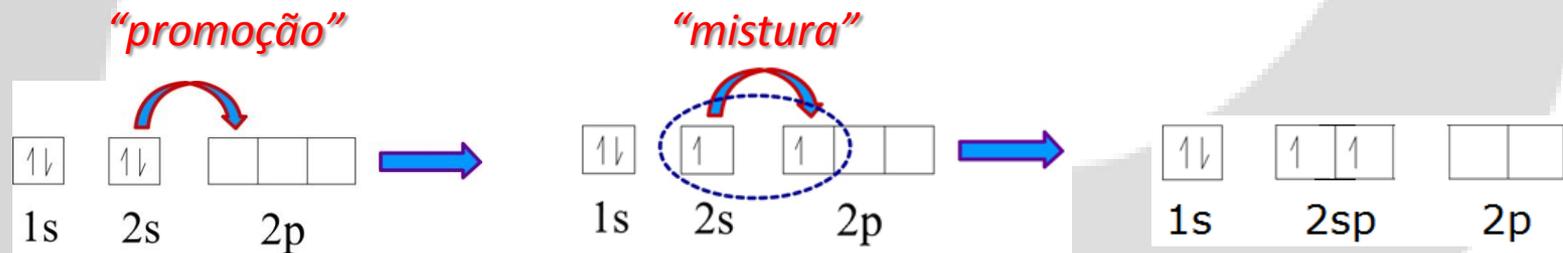
A molécula BeF_2 foi identificada experimentalmente:

A configuração eletrônica do Be é: $1s^2 2s^2$



Não existem elétrons desemparelhados para formar as ligações, assim, estes orbitais não são apropriados para descrever esta molécula.

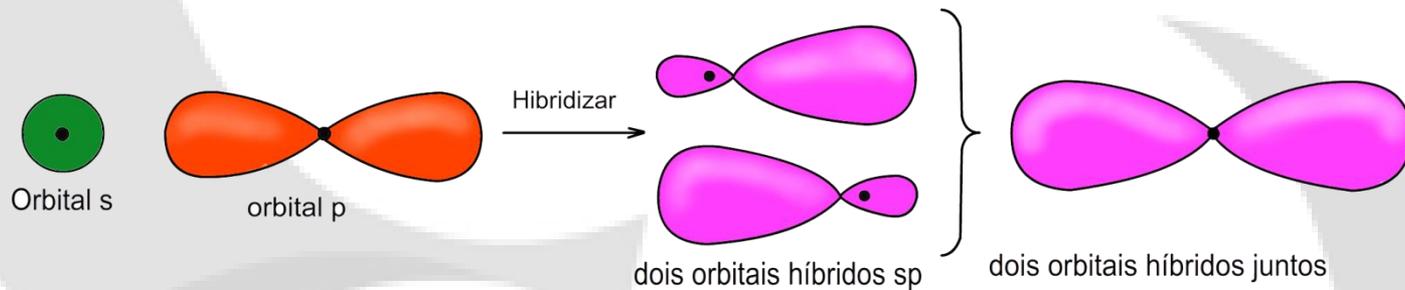
Dois elétrons do Be serão compartilhados com os elétrons desemparelhados dos átomos de F, para isso:



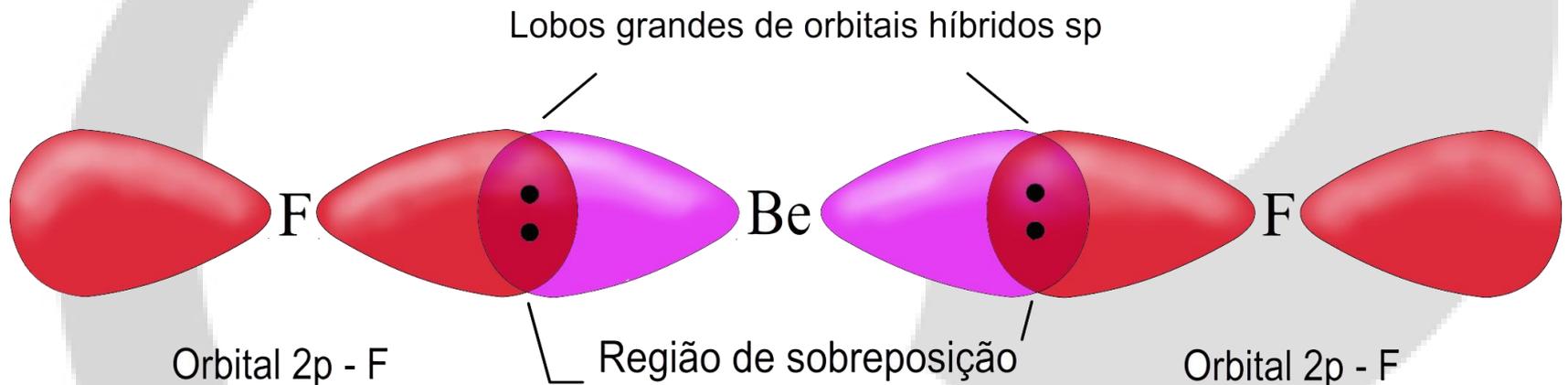
De acordo com a RPENV \Rightarrow o ângulo de ligação do F -Be- F será 180°

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Um orbital 2s e um orbital 2p misturam-se gerando dois orbitais híbridos sp:



Os lóbulos dos orbitais estão a 180° de distância entre si.

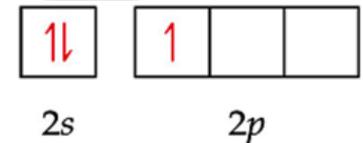


TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Orbitais Híbridos sp^2

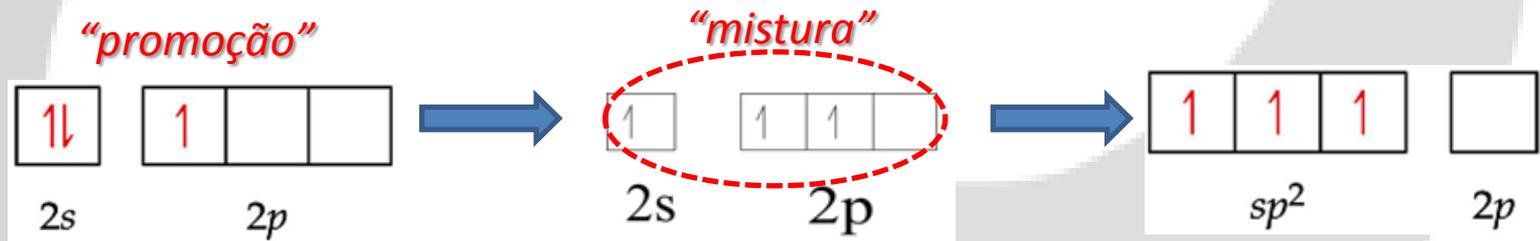
A molécula BF_3 foi identificada experimentalmente:

A configuração eletrônica do B é: $1s^2 2s^2 2p^1$



Estes orbitais não são apropriados para descrever esta molécula.

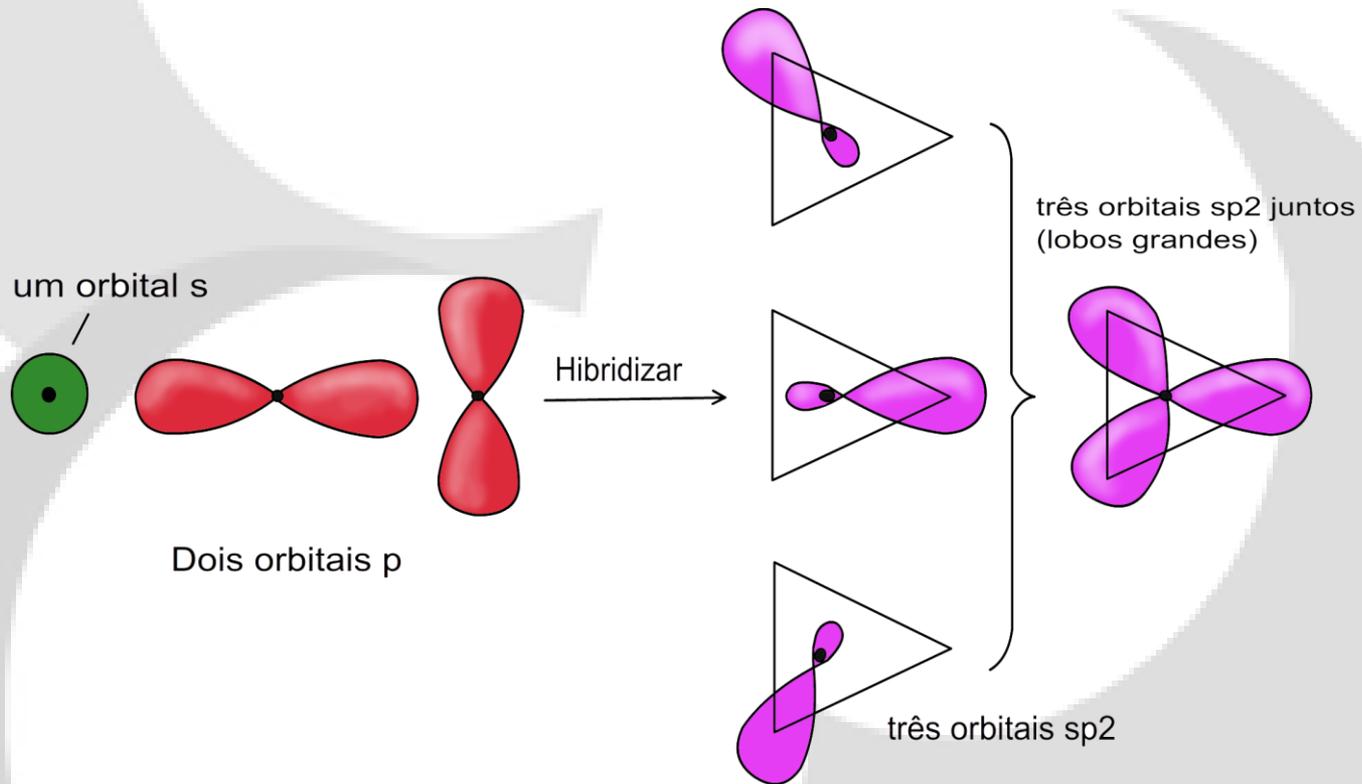
Três elétrons do B serão compartilhados com os elétrons desemparelhados dos átomos de F, para isso:



De acordo com a RPENV \Rightarrow o ângulo de ligação do BF_3 será 120°

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

orbitais híbridos sp^2 encontram-se no mesmo plano $\Rightarrow 120^\circ$



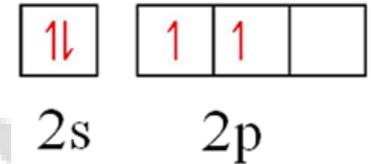
A grande maioria das moléculas que possuem arranjo trigonal plano possuem orbitais híbridos sp^2 no átomo central.

TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Orbitais Híbridos sp^3

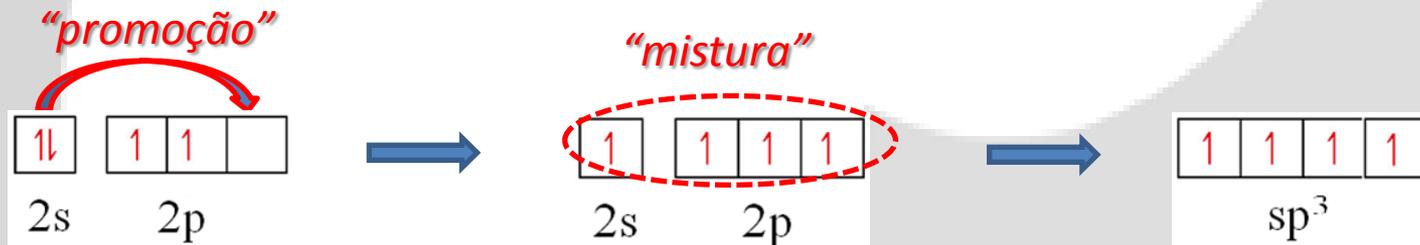
- A molécula de metano, CH_4 .

- A configuração eletrônica do C é: $1s^2 2s^2 2p^2$:



*Estes orbitais **não** são apropriados para descrever esta molécula.*

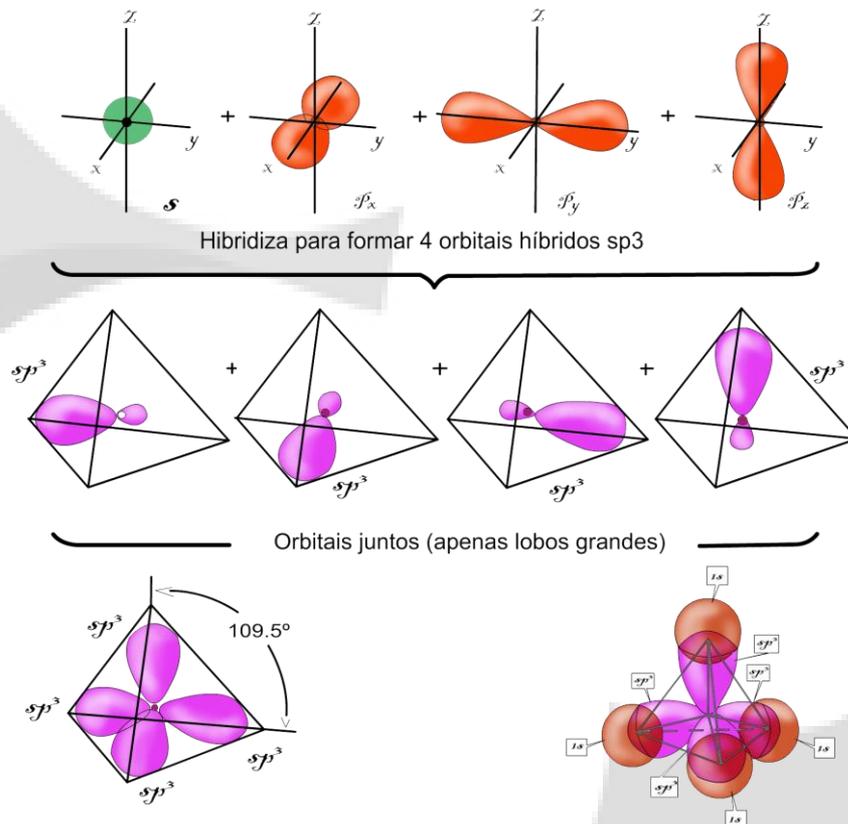
- Quatro elétrons do C serão compartilhados com os elétrons desemparelhados dos átomos de H , para isso:



De acordo com a RPENV \Rightarrow o ângulo de ligação do CH_4 será $109^\circ 28'$

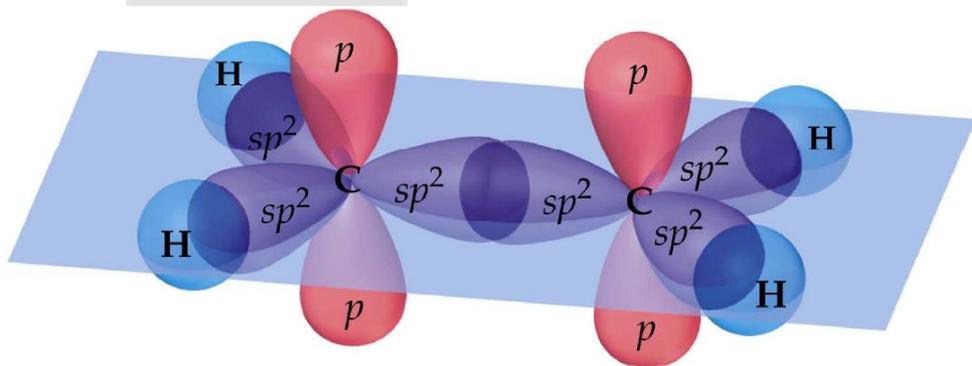
TEORIA DA LIGAÇÃO DE VALÊNCIA - TLV

Orbitais $sp^3 \Rightarrow$ lobos voltados em direção aos vértices de um tetraedro.



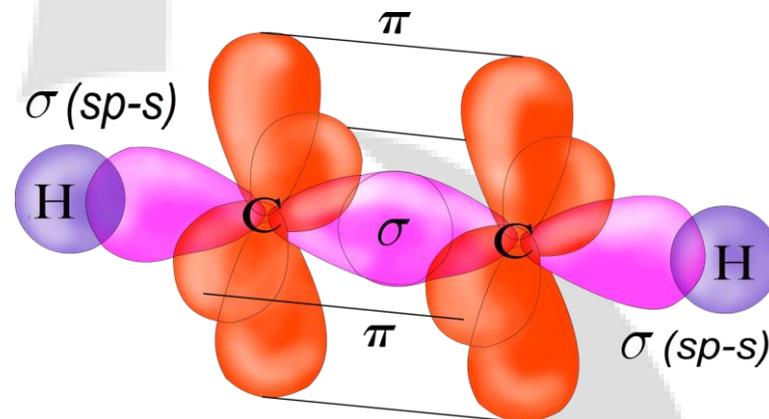
Moléculas que possuem arranjo tetraédrico são hibridizadas em sp^3 .

TLV - Ligações Múltiplas



ETENO – C₂H₄

- Interação frontal entre os orbitais híbridos sp^2 (azul) dos carbonos \Rightarrow
uma ligação sigma (σ)
- Interação lateral entre os orbitais não híbridos p (rosa) dos carbonos \Rightarrow
uma ligações pi (π)

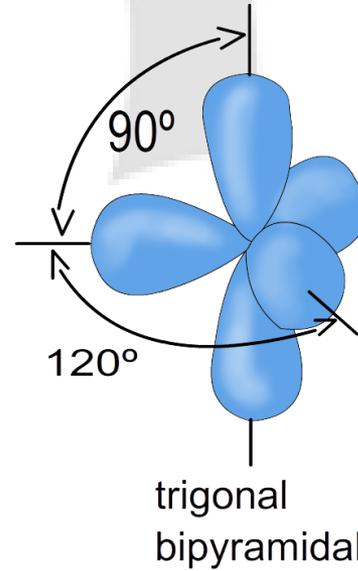


ETINO – C₂H₂

- Interação frontal entre os orbitais híbridos sp (rosa) dos carbonos \Rightarrow
uma ligação sigma (σ)
- Interação lateral entre os orbitais não híbridos p (laranja) dos carbonos \Rightarrow
duas ligações pi (π)

TLV - Orbitais Híbridos sp^3d e sp^3d^2

s, p, p, p, d $5 sp^3d$



s, p, p, p, d, d $6 sp^3d^2$

