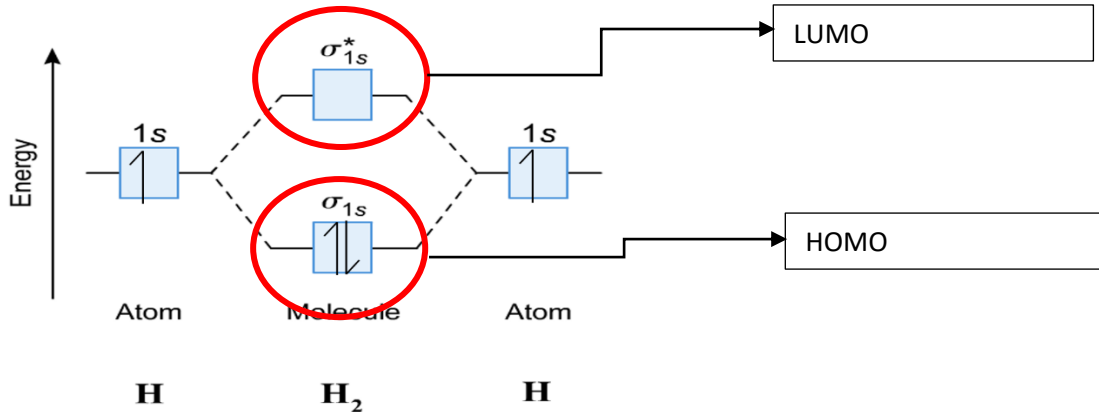




TEORIA DOS ORBITAIS MOLECULARES (TOM)

- os orbitais moleculares podem acomodar no máximo dois elétrons de spins diferentes

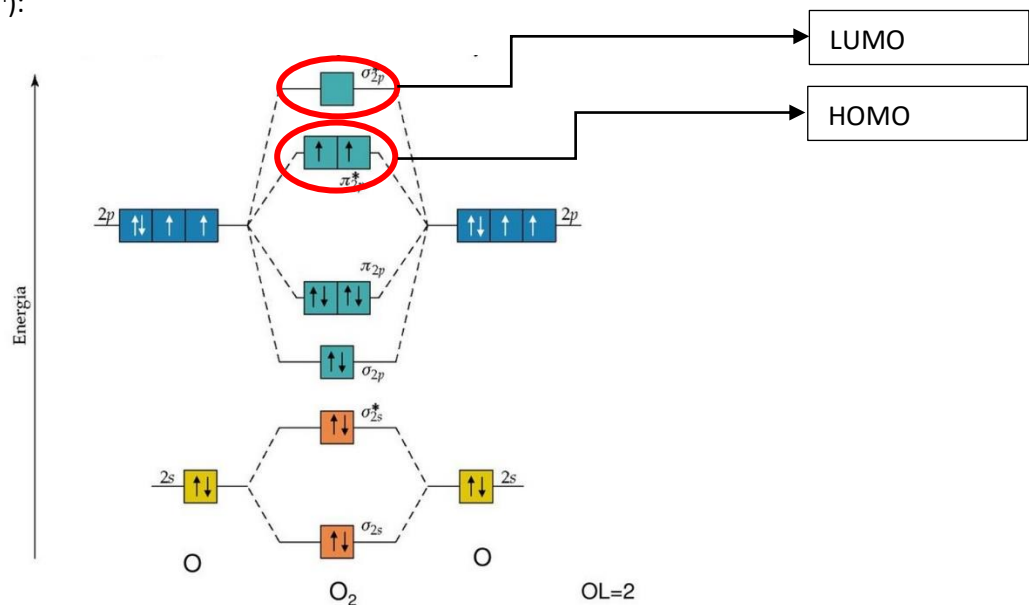
H₂:



- orbital molecular ligante: baixa energia e tem densidade eletrônica entre os núcleos
- orbital molecular antiligante: baixa energia e pouca densidade eletrônica entre os núcleos
- ordem de ligação (O.L.): quanto maior é a O.L., maior a estabilidade e menor o comprimento da ligação

$$OL = \frac{1}{2} \times (\text{n}^\circ \text{ de elétrons ligantes} - \text{n}^\circ \text{ de elétrons antiligantes})$$

O₂ (1s², 2s², 2p⁴):



$$OL = \frac{1}{2} \times (\text{n}^\circ \text{ de elétrons ligantes} - \text{n}^\circ \text{ de elétrons antiligantes})$$

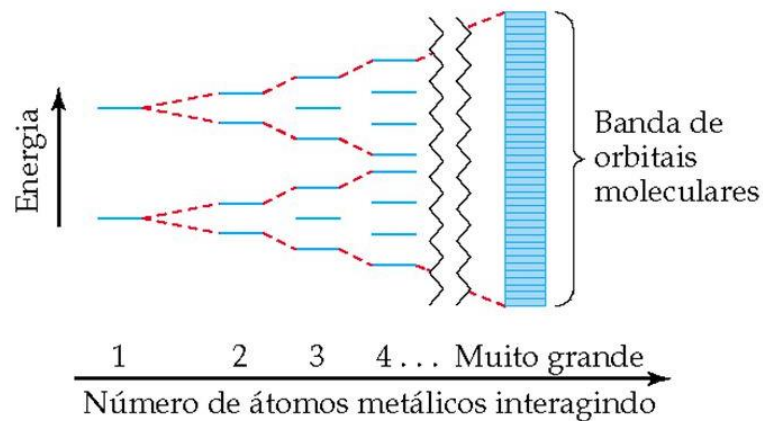
$$OL = \frac{1}{2} \times (8 - 4) = 2$$

Pode-se concluir que, além de o O₂ possuir uma ligação dupla, o O₂ também é paramagnético

TEORIA DE BANDAS

- condutor: condutividade elétrica diminui com o aumento da temperatura
- semiconductor: condutividade elétrica aumenta com o aumento da temperatura
- supercondutor: resistência zero a passagem de corrente elétrica, sem perda de energia

Modelo orbital molecular para os metais:



- quanto maior o número de orbitais menor é o espaçamento de energia
- o número de e^- não preenche completamente a banda de orbitais
- os e^- podem ser promovidos para banda de energia desocupadas

