



# Simetria e Orbitais Moleculares

Roberto B. Faria

faria@iq.ufrj.br

www.iq.ufrj.br/~faria

*Universidade Federal do Rio de Janeiro*



Mudança de geometria  
metileno :CH<sub>2</sub>  
Simetrias C<sub>2v</sub> e D<sub>∞h</sub>

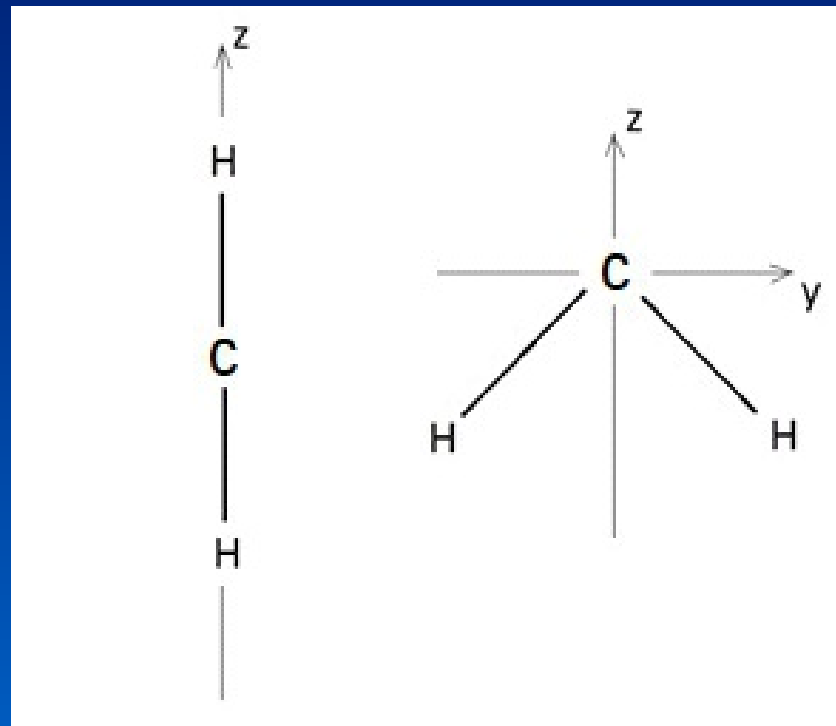
20/12/2022

**Metileno linear ( $D_{\infty h}$ )**

×

**Metileno angular ( $C_{2v}$ )**

---



**Metileno linear ( $D_{\infty h}$ )**

×

**Metileno angular ( $C_{2v}$ )**

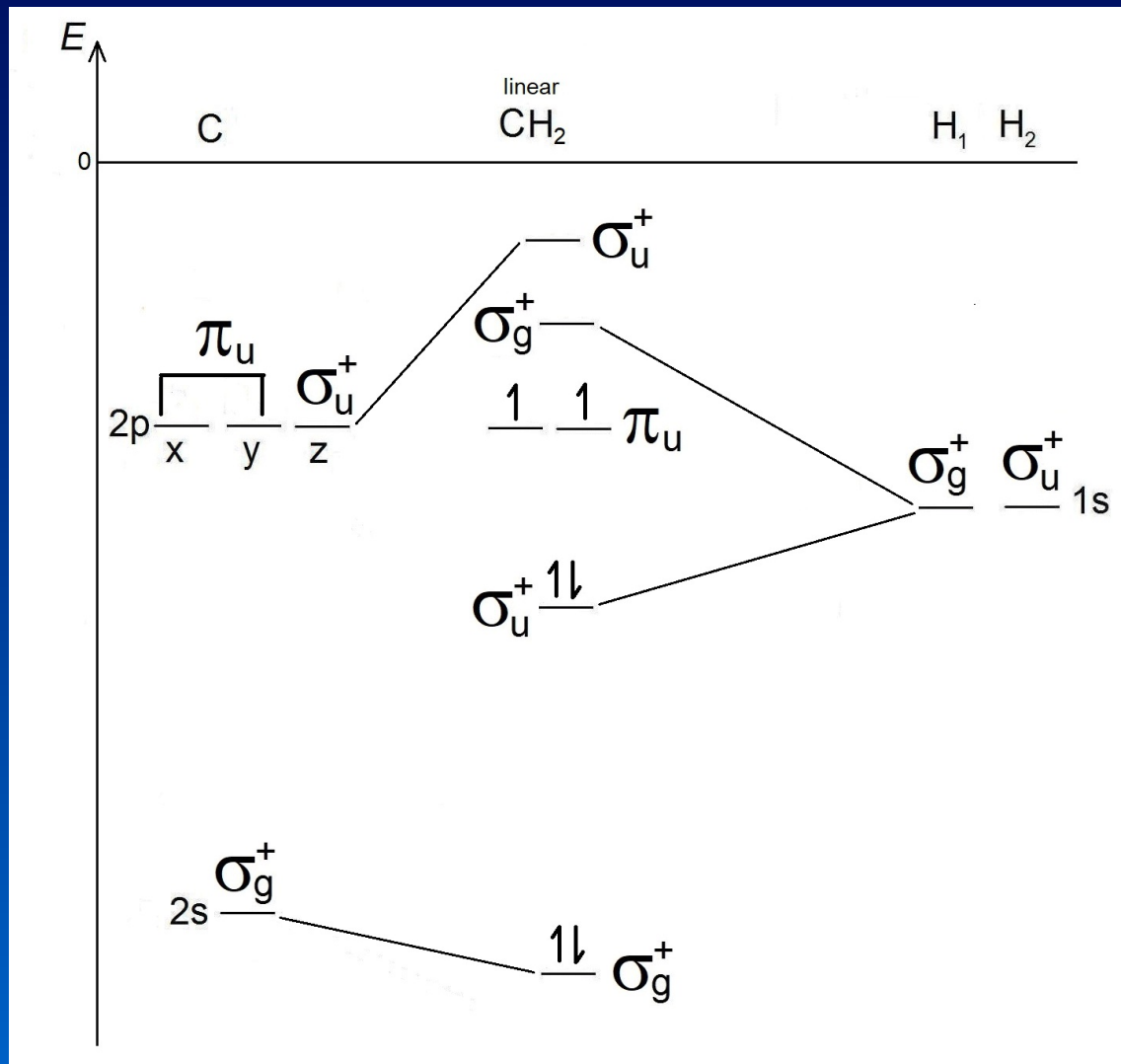
---

Os diagramas de orbitais moleculares são idênticos aos da água linear e angular, com as seguintes diferenças:

- o metileno tem 6 elétrons, ao invés dos 8 elétrons da água.
- os orbitais 1s dos H têm energia menor que os orbitais 2p do carbono, diferente do que ocorre no caso da água.

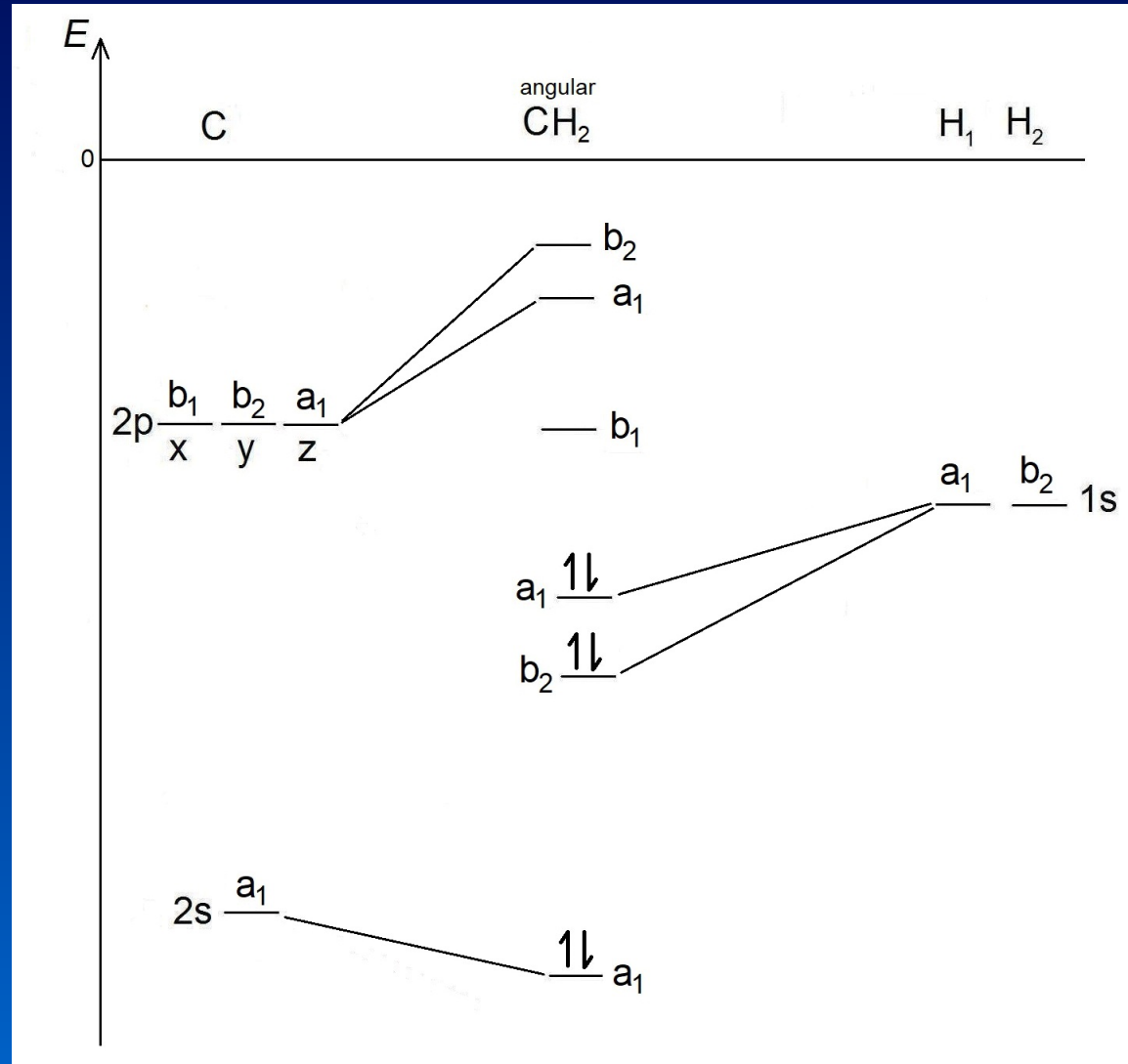
# Metileno (linear) - $D_{\infty h}$

Diagrama de energia dos orbitais moleculares



# Metileno (angular) - $C_{2v}$

Diagrama de energia dos orbitais moleculares



# Comparação metileno linear e angular

---

- No metileno linear, dois elétrons ficam nos orbitais  $\pi$  não ligantes, com a mesma energia dos orbitais 2p do carbono.
- No metileno angular, todos os elétrons ficam com energia menor que os orbitais 2p do carbono, o que justifica o fato do metileno ter geometria angular.