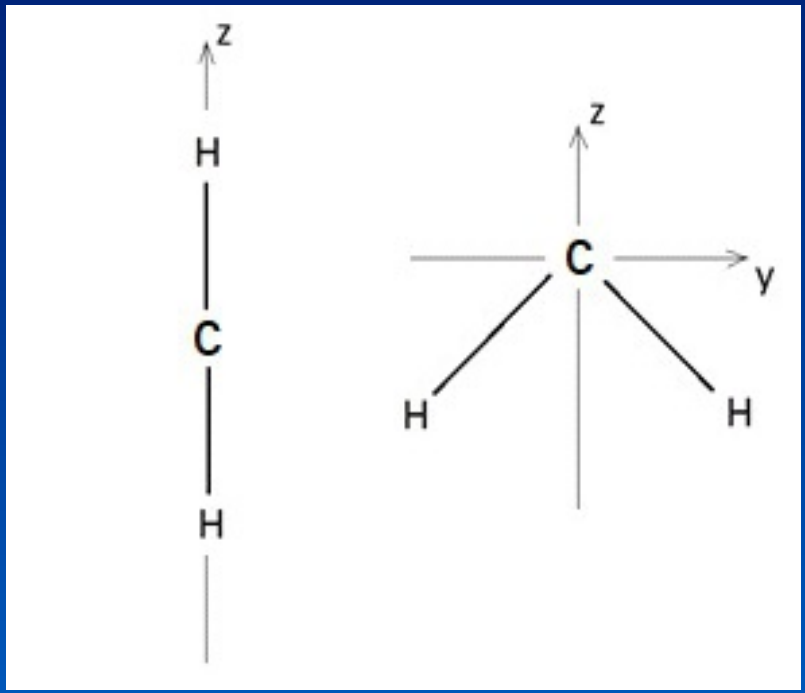
Simetria e Orbitais Moleculares

Roberto B. Faria
faria@iq.ufrj.br
www.iq.ufrj.br/~faria
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Mudança de geometria
metileno :CH_2
Simetrias C_{2v} e $D_{\infty h}$

21/05/2024

Metileno linear ($D_{\infty h}$)
×
Metileno angular (C_{2v})



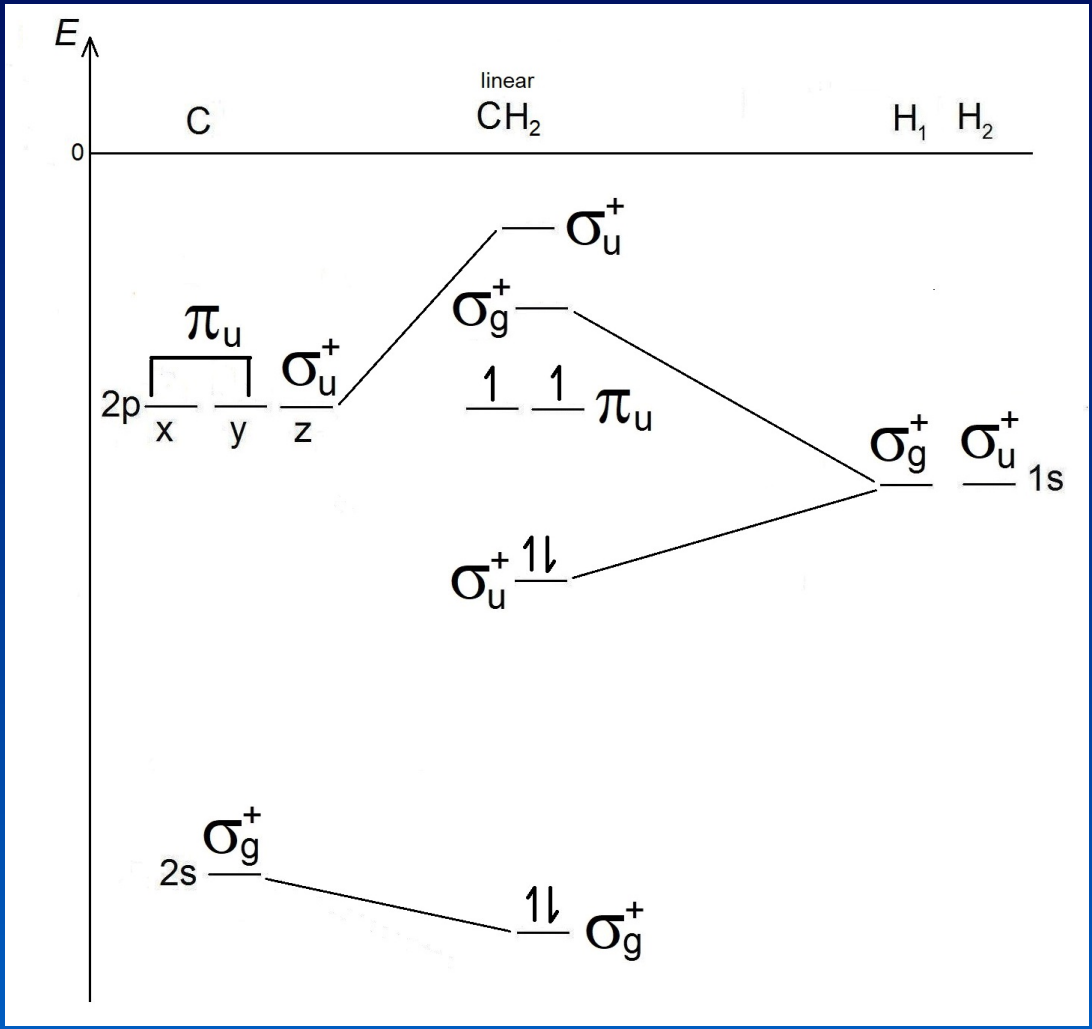
Metileno linear ($D_{\infty h}$)
×
Metileno angular (C_{2v})

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.

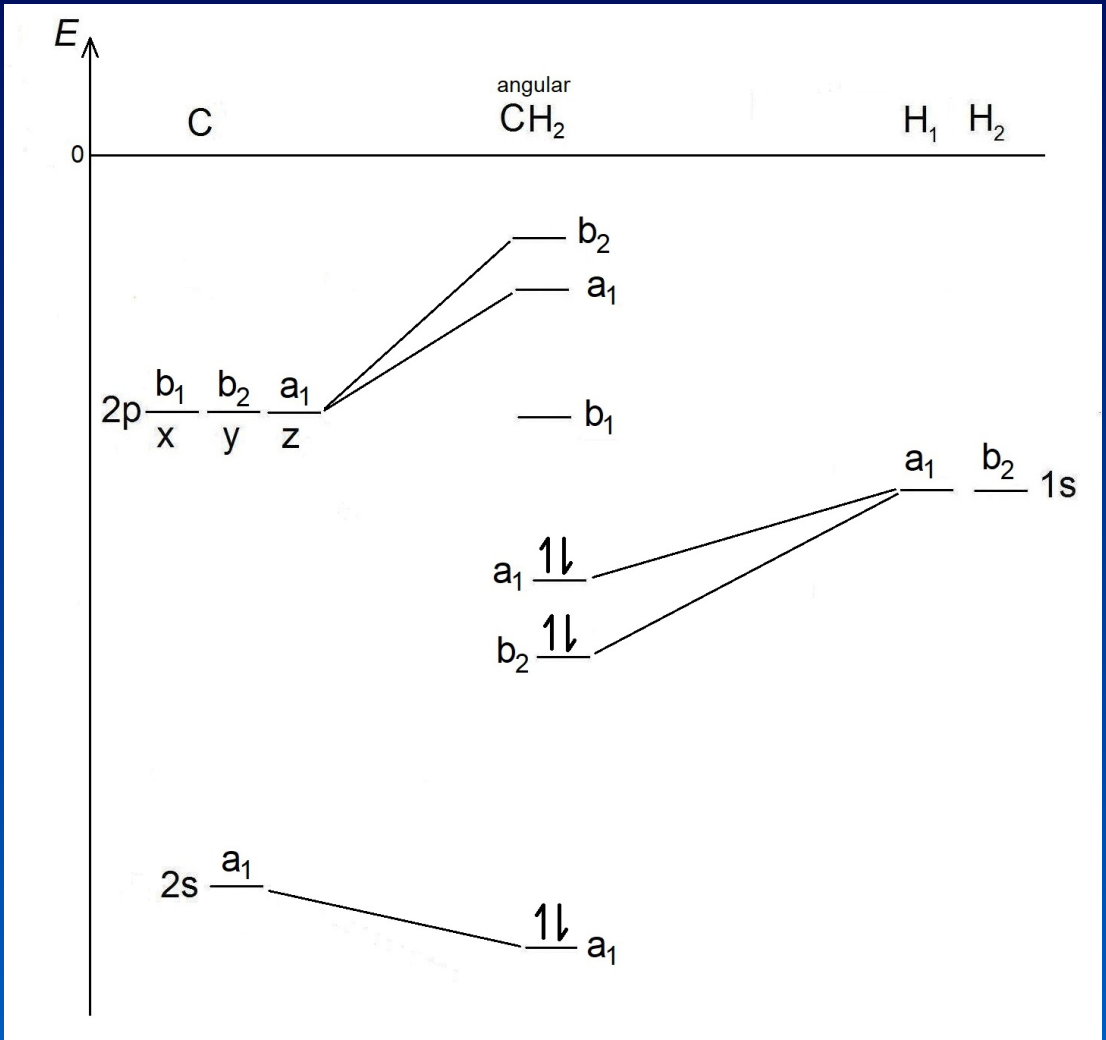
Metileno (linear) - $D_{\infty h}$

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 π 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.