

## Ligação Química: Aspectos contemporâneos.

Sérgio E. Galembeck<sup>1,\*</sup> (PQ), Marina Pelegrini<sup>2</sup> (PQ). [segalemb@usp.br](mailto:segalemb@usp.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, FFCLRP, Universidade de São Paulo, 14040-901, Ribeirão Preto – SP, Brazil

<sup>2</sup>Divisão de Ensino, Academia da Força Aérea, AFA,13631-972, Pirassununga – SP, Brazil

Teoria do orbital molecular, Teoria de ligação de valência, Métodos de análise da densidade eletrônica, Análises de decomposição de energia.

---

### Introdução

As teorias para se explicar os vários tipos de ligação química foram desenvolvidas a partir do início do século XX. Apesar disso, muitas questões sobre os vários tipos de ligações químicas, mesmo as mais fortes ainda persistem. Nesse minicurso abordaremos aspectos básicos das teorias de ligação química, métodos de análise da densidade eletrônica e os métodos de análise da decomposição de energia. Serão dados exemplos de ligações químicas não totalmente esclarecidas, como as ligações nos Be<sub>2</sub>, C<sub>2</sub> e F<sub>2</sub>. Também serão abordadas as ligações mais fracas, como ligações de hidrogênio e interações entre anéis  $\pi$ .

### Desenvolvimento do minicurso

Inicialmente serão analisados os quatro tipos básicos de ligações químicas fortes: as ligações covalentes e covalentes polares, iônicas, dativas e metálicas, pela visão das teorias de ligação de valência (VB) e de orbitais moleculares (MO). Estas *ligações químicas serão analisadas por algumas das teorias de análise da densidade eletrônica*, como NBO (*Natural Bond Orbital*) e métodos associados, QTAIM (*Quantum Theory of Atoms in Molecules*) e IQA (*Interacting Quantum Atoms*), ELF (*Electron Localization Function*), DORI (*Density Overlap Region Indicator*). Para todos esses métodos serão dados exemplos das potencialidades e limitações.

Em uma segunda parte do curso serão analisadas as ligações fracas, como as ligações de hidrogênio, ligações de halogênio, ligações pícogênicas e interações entre anéis aromáticos. Também serão analisados os métodos de análise da decomposição de energia (*Energy Decomposition Analysis*, EDA), como proposto originalmente por Kitaura-Morokuma, o SAPT (*Symmetry-Adapted Perturbation Theory*) e o LMOEDA (*Localized Molecular Orbital Energy Decomposition Analysis*), além do uso de potenciais eletrostáticos para a determinação de sítios de interação.

Alguns problemas recentes e ainda não totalmente esclarecidos serão abordados, como a origem física das ligações químicas, as ligações químicas em algumas moléculas diatômicas homo ou heteronucleares, as ligações de deslocamento de carga (*charge shift bonds*), ligações de um e de três elétrons e ligações dativas.