
TEORIA DOS ORBITAIS MOLECULARES

1 – Orbitais nas Moléculas

A teoria dos orbitais moleculares (OM) constitui uma alternativa para se ter uma visão da ligação. De acordo com este enfoque, todos os elétrons de valência têm uma influência na estabilidade da molécula. (Elétrons dos níveis inferiores também podem contribuir para a ligação, mas para muitas moléculas simples o efeito é demasiado pequeno.) Além disso, a teoria OM considera que os orbitais atômicos, OAs, do nível de valência, deixam de existir quando a molécula se forma, sendo substituídos por um novo conjunto de níveis energéticos que correspondem a novas distribuições da nuvem eletrônica (densidade de probabilidade). Esses novos níveis energéticos constituem uma propriedade da molécula como um todo e são chamados, conseqüentemente de **orbitais moleculares**.

O cálculo das propriedades dos orbitais moleculares é feito comumente assumindo que os OAs se combinam para formar OMs. As funções de onda dos orbitais atômicos são combinados matematicamente para produzir as funções de onda dos OMs resultantes. O processo é remanescente da mistura de orbitais atômicos puros para formar orbitais híbridos, exceto que, na formação de orbitais moleculares, orbitais atômicos de mais de um átomo são combinados ou misturados. Como no caso da hibridização, o número de orbitais novos formados é igual ao número de orbitais atômicos originários da combinação.

Da mesma maneira que nos orbitais atômicos, estamos interessados em dois aspectos moleculares:

- as formas de suas distribuições espaciais da densidade de probabilidade;
- suas energias relativas.

O diagrama usual de $\psi \times r$ para o orbital 1s de um átomo A (figura 1a) deve, porém ser modificado para levar em conta a variação de r entre $-\infty$ e $+\infty$, resultando no diagrama mostrado na Figura 1b.

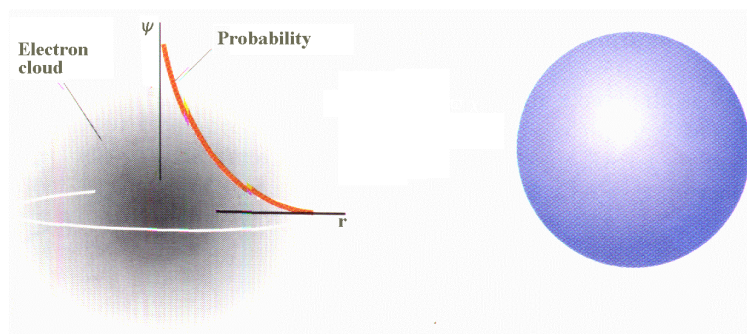
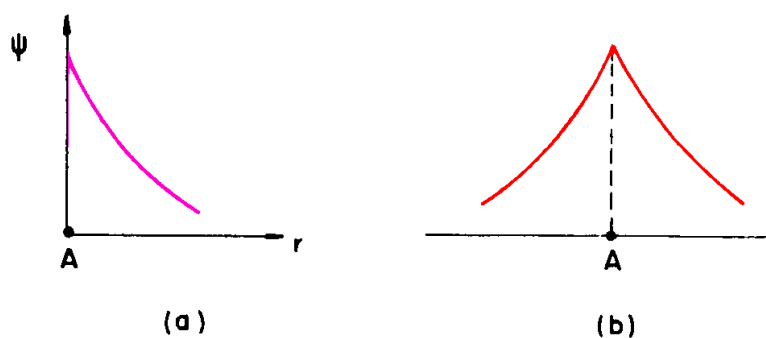


Figura 1. Diagramas de $\psi \times r$ para o orbital 1s.

2 – Distribuições Espaciais dos Orbitais Moleculares

Usando um enfoque simples, consideremos que um OA de um átomo se combina com um OA de um segundo átomo para formar dois OMs. Para que esse processo seja efetivo, duas condições devem ser introduzidas:

- os OAs devem ter energias comparáveis;
- os OAs devem se sobrepor de maneira significativa.

Os cálculos da mecânica quântica, para a combinação dos OAs originais, consistem em:

- uma adição das funções de onda do OA;**
- uma subtração das funções de onda do OA.**

Quando os dois átomos são diferentes, é incluído um fator que leva em conta o fato de que os dois OAs não contribuem igualmente para a formação dos OMs. Os resultados, então, são duas novas funções de onda OM, uma de adição e outra de subtração. Como sempre, o quadrado da função de onda para um elétron nos dá informações acerca da probabilidade de encontrar este elétron em várias regiões do espaço. Quando isto é feito para um OM, resultam informações sobre a densidade de

probabilidade para um elétron ocupando aquele OM e, a partir dessas informações, as superfícies limites correspondentes (e também os níveis energéticos) podem ser encontradas. Este método é conhecido como a combinação linear de orbitais atômicos, ou método LCOA (Linear Combinations Atomic Orbitals) (Figuras 2 e 3)

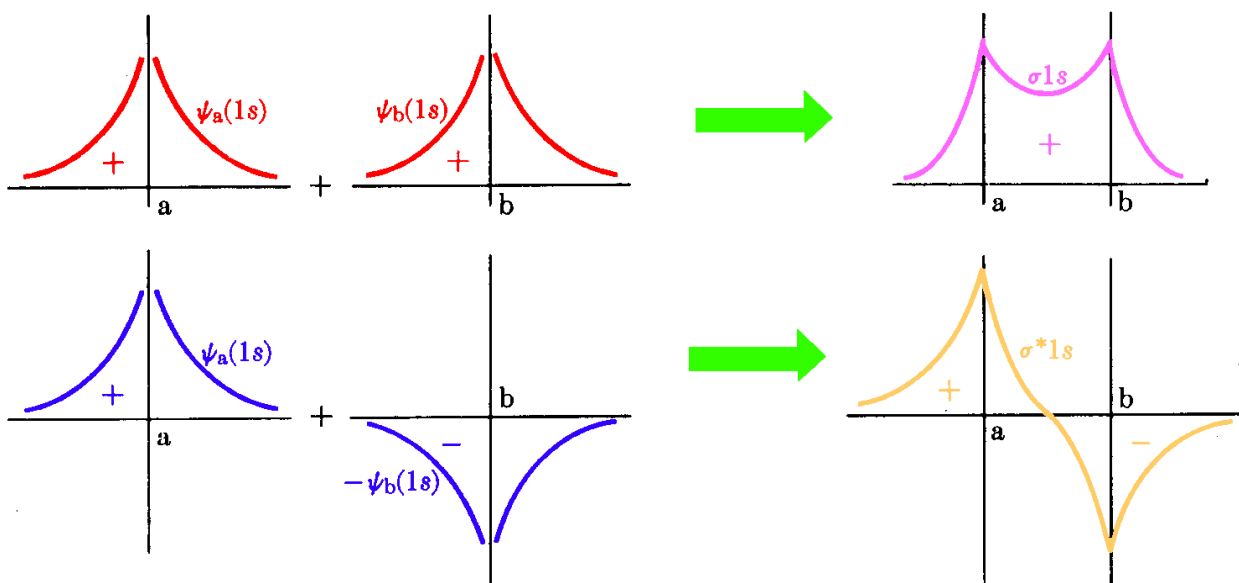


Figura 2. Formação de orbitais moleculares provenientes da adição e subtração dos orbitais atômicos

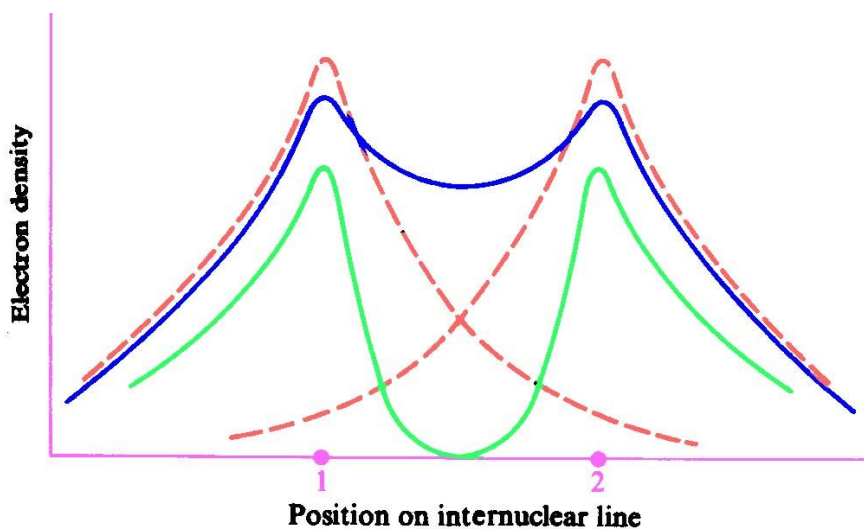


Figura 3. Gráfico das Densidades Eletrônicas dos orbitais Atômicos $1s_a$ e $1s_b$ (linha tracejada); Orbital Molecular Ligante (linha cheia superior); Orbital Molecular Antiligante (linha cheia inferior).

Quando duas funções 1s são somadas, elas se reforçam entre si por toda parte e principalmente na região entre os dois núcleos. Esta redistribuição de densidade eletrônica entre os núcleos ajuda a abaixar a energia potencial coulômbica. (Figura 3 - linha cheia superior). Como resultado, este orbital tem características ligantes e denomina-se **σ (sigma) ligante**. Quando a função de onda um orbital atômico é subtraída de outra função de onda, elas se cancelam exatamente entre si em um plano que está situado a meio caminho entre os núcleos, produzindo, portanto, um plano nodal. A nova função de onda molecular apresenta sinal oposto em cada lado deste plano nodal (Figura 2b). Quando se eleva a função de onda ao quadrado (Figura 3 - linha cheia inferior), a densidade de probabilidade resultante é obviamente positiva em todos os lugares, exceto no plano nodal, onde é zero. Esta deficiência de densidade eletrônica na região internuclear ajuda a aumentar a energia potencial coulômbica do sistema e o nó na função de onda produz um aumento na energia cinética do elétron. A energia total é conseqüentemente alta, e a molécula não está ligada e o orbital é descrito como **σ^* (sigma) antiligante**.

Deve-se ter em mente que as representações dos orbitais moleculares são análogas às representações dos OA e podem ser interpretadas de duas maneiras equivalentes, mostrando :

- c) a(s) região(ões) na(s) qual(is) o elétron passa a maior parte do tempo, isto é, a(s) região(ões) de maior probabilidade de encontrar o elétron ou, alternativamente,
- d) a(s) região(ões) na(s) qual(is) a densidade da carga eletrônica é alta.

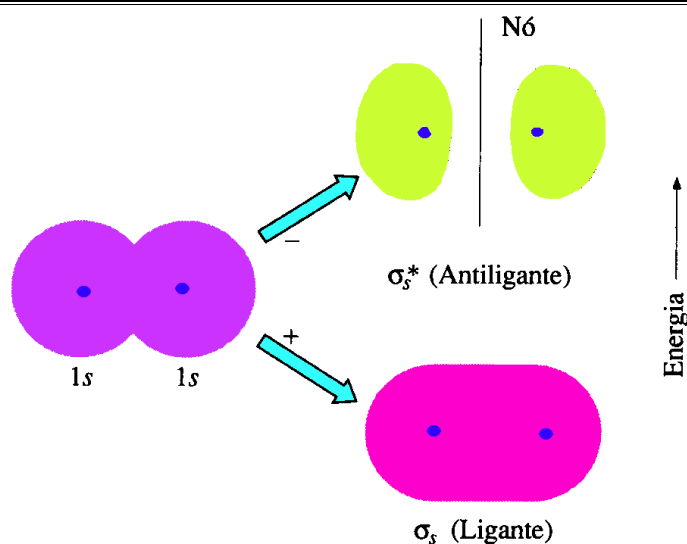


Figura 4. Combinação dos Orbitais Atômicos 1s para Formar os Orbitais Moleculares σ e σ^*

Na Figura 4 são mostradas as superfícies limites de dois orbitais moleculares formados pela combinação de dois orbitais atômicos 1s. Vemos à esquerda a sobreposição dos OAs 1s e, à direita, os OMs resultantes. O OM formado pela subtração das funções de onda AO deu origem ao orbital molecular representado por σ_s^* (leia: "sigma asterisco"), enquanto o formado pela adição originou o orbital molecular representado por σ_s . O contraste entre esses dois OMs é gritante. Há obviamente um aumento da densidade eletrônica de carga entre os núcleos no OM σ_s , mas um decréscimo na mesma região no OM σ_s^* . Por essa razão, o orbital, σ_s é chamado **orbital ligante**, e o σ_s^* , de **orbital antiligante**. O primeiro OM tende a estabilizar a ligação, enquanto o último tende a desestabilizá-la. Ambos são chamados orbitais σ porque estão centrados e são simétricos ao redor do eixo de ligação. Uma secção de cada orbital feita perpendicularmente ao eixo de ligação apresenta um formato circular.

Pela combinação linear de um orbital atômico 2s de um átomo A com um AO 2s do átomo B, obtemos aproximações dos orbitais moleculares σ_{2s} , Ligante e antiligante:

$$\sigma_{2s} \cong N[\psi_{A(2s)} + \psi_{B(2s)}]$$

$$\sigma_{2s}^* \cong N^*[\psi_{A(2s)} - \psi_{B(2s)}]$$

O processo é completamente análogo aquele empregado para σ_{1s} e σ_{1s}^* . As quantidades N e N* são fatores de normalização. O orbital σ_{2s}^* possui um plano nodal entre os dois núcleos, conseqüentemente ele é antiligante e tem energia maior do que o orbital σ_{2s} que não possui este plano nodal e é Ligante (Figura 44).

Observa-se que há uma superfície nodal rodeando os núcleos tanto no orbital σ_{2s} como no orbital σ_{2s}^* , o que os distingue dos orbitais σ_{1s} e σ_{1s}^* .

Na Figura 5, estão indicados os sinais das funções de onda de acordo com a convenção usual e podemos observar que, para os orbitais s, o lóbulo externo é sempre considerado positivo (Figura 5).

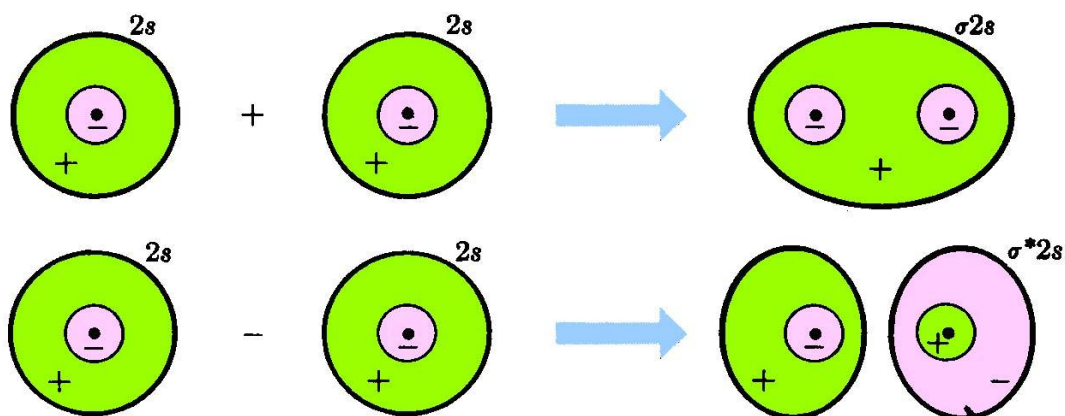


Figura 5. Formação dos orbitais σ_{2s} (ligante) e σ_{2s}^* (antiligante). Os sinais (+) e (-) referem-se ao sinal das funções de onda e não às cargas nucleares ou eletrônicas.

Se dois orbitais estão a uma distância infinita um do outro, a sua superposição é nula. Quando se aproximam, eles se superpõem e formam um orbital molecular Ligante (**superposição positiva**) e um antiligante (**superposição negativa**).

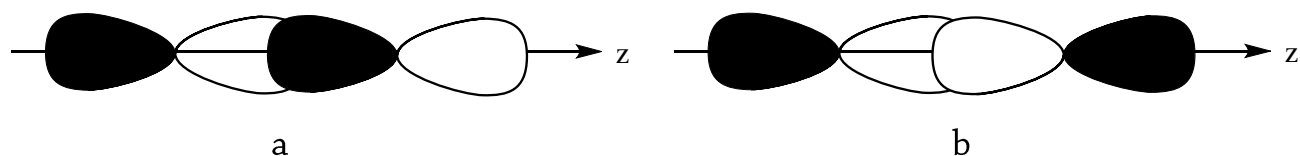


Figura 6. Exemplo de superposição negativa (a) e positiva (b) de orbitais atômicos

A superposição será positiva se corresponder à combinação de funções de onda de mesmo sinal e será negativa se os sinais forem opostos. A Figura 6 mostra estes resultados.

Notamos que, na Figura 6b, o orbital $2p_z$ da direita tem seu lóbulo negativo orientado segundo a direção positiva do eixo z , o que significa que ele foi multiplicado por menos 1. Isso equivale a dizer que, em vez de soma, foi feita uma subtração dos OA, enquanto que a Figura 6a mostra uma soma dos OA, pois ambos OA estão orientados na mesma direção do eixo z .

A combinação de dois orbitais p pode produzir resultados diferentes dependendo de quais orbitais p são usados. Se o eixo x é o eixo de ligação, então dois orbitais $2p_x$ podem se sobrepor apropriadamente se eles se aproximarem segundo um único eixo, como é mostrado na Figura 7. Os OMs resultantes constituem, como antes, um orbital ligante (σ_x) com carga eletrônica acumulada entre os núcleos e um OM antiligante (σ_x^*) com decréscimo de carga entre os núcleos. Esses orbitais são também classificados como σ , porque são simétricos ao redor do eixo de ligação. Eles são designados σ_x e σ_x^* para indicar que derivaram de orbitais atômicos p_x .

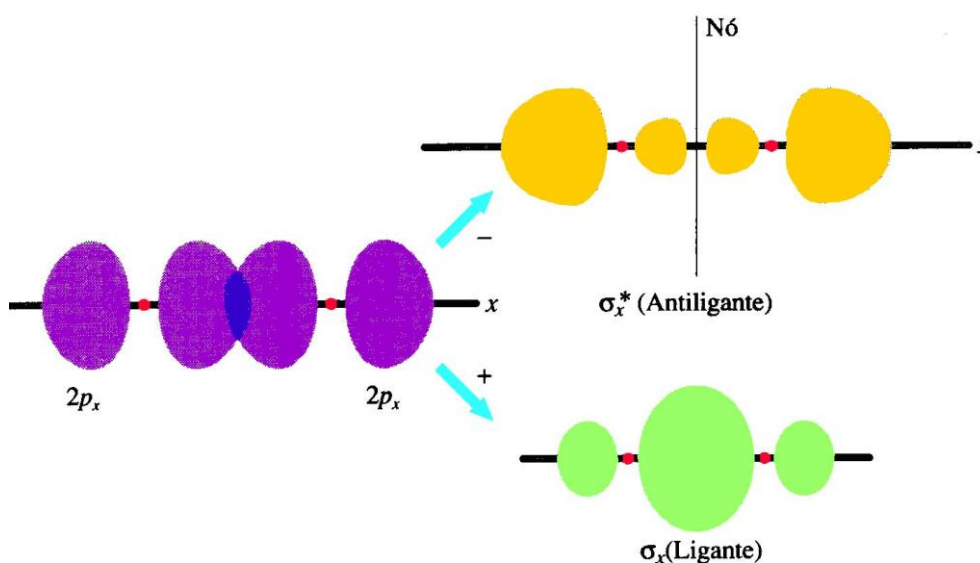


Figura 7. Combinação dos Orbitais Atômicos $2p_x$ para formar os OM σ e σ^*

Quando orbitais $2p_y$ e $2p_z$ se sobrepõem para formar OMs, eles o fazem lado a lado, como é apresentado na Figura 8. Em cada caso, o resultado é um orbital antiligante com quatro lóbulos e um orbital ligante com dois lóbulos. Esses orbitais não são simétricos em relação ao eixo de ligação; em vez disso, existem duas regiões, em lados opostos ao eixo da ligação, nas quais a densidade da nuvem de carga é alta. Isto é característico de um orbital π .

Observe que, como antes, o orbital ligante permite uma alta concentração da carga eletrônica na região entre os núcleos, enquanto o orbital antiligante mostra uma diminuição da densidade de carga nessa região. (Na realidade, cada orbital antiligante tem um plano nodal entre os dois núcleos).

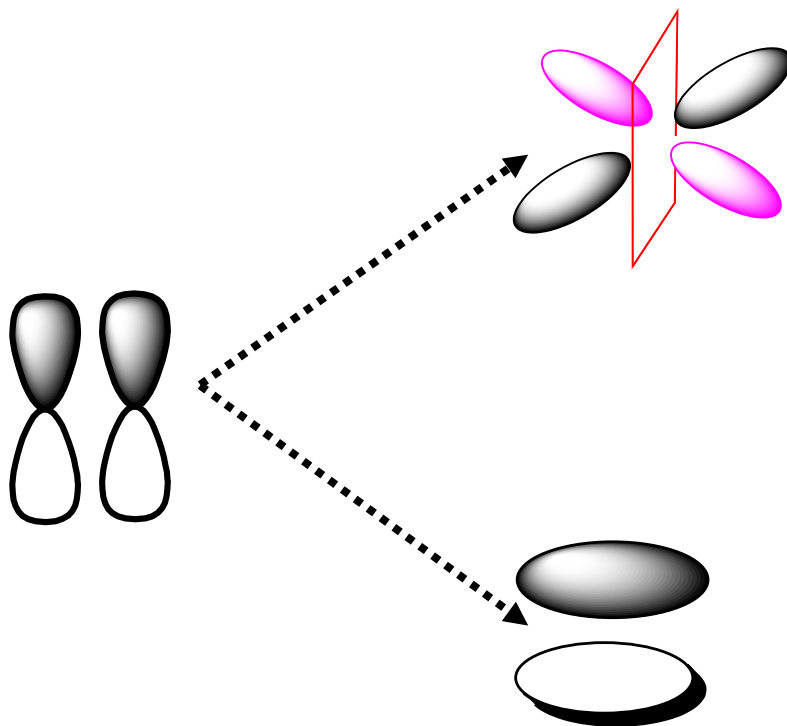


Figura 8. Combinação dos OAs $2p$ para a formação dos OMs π ligante e antiligante

Quando orbitais atômicos se combinam, eles passam a compartilhar uma região do espaço. Se a superposição entre os orbitais é positiva, os lóbulos envolvidos se fundem e formam um lóbulo único no orbital molecular resultante. Se a superposição entre os orbitais é negativa, não ocorre a fusão dos lóbulos, aparecendo um plano nodal entre eles e a densidade eletrônica na região internuclear diminui. A Figura 9 ilustra, de modo esquemático, as formas de diversos OM obtidos por combinações lineares de OA.

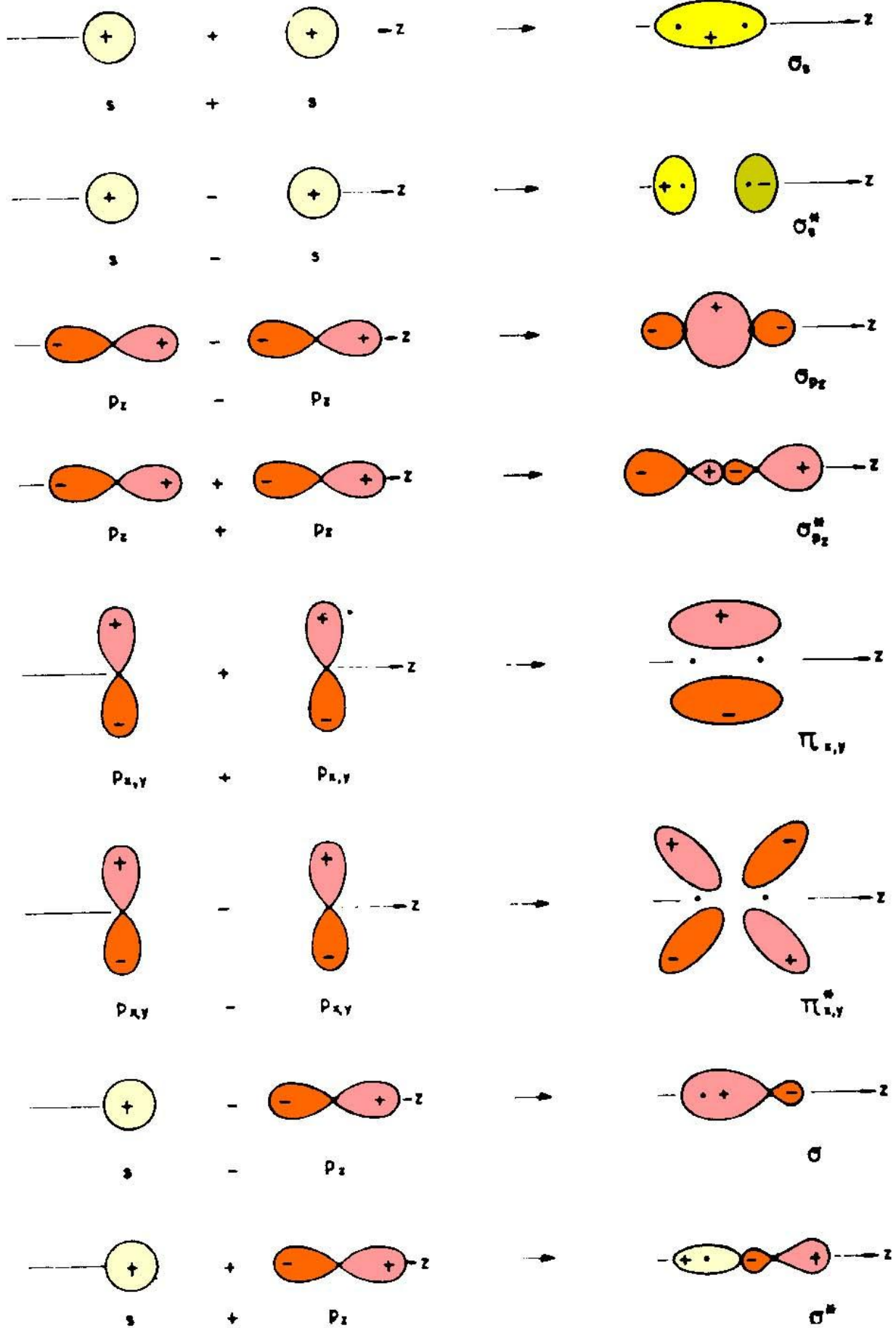


Figura 9. Combinações lineares de alguns orbitais atômicos

3 – Energias dos Orbitais Moleculares

Consideremos, como exemplo, a formação da molécula H_2 a partir dos dois átomos a uma distância infinita um do outro. Inicialmente, seus orbitais não se superpõem e a energia potencial do sistema é considerada igual a zero. À medida que eles se aproximam, começa haver interações entre seus orbitais, formando-se um OM Ligante e um OM antiligante. Os elétrons ocupam o orbital molecular ligante, em que é maior a densidade eletrônica na região internuclear. Dessa forma, será favorecida a atração núcleo-elétron e minimizada a repulsão núcleo-núcleo, com a conseqüente diminuição da energia potencial do sistema (Figura 10).

Quanto mais próximos os núcleos dos átomos de hidrogênio ficam um do outro, tanto mais se superpõem os orbitais e menor torna-se a energia. Há, todavia, um limite para a aproximação, a partir do qual passa a dominar a repulsão entre os núcleos. Existe, pois, uma separação de equilíbrio, que é denominada **comprimento de ligação**, ao qual corresponde uma energia mínima, a **energia de ligação**.

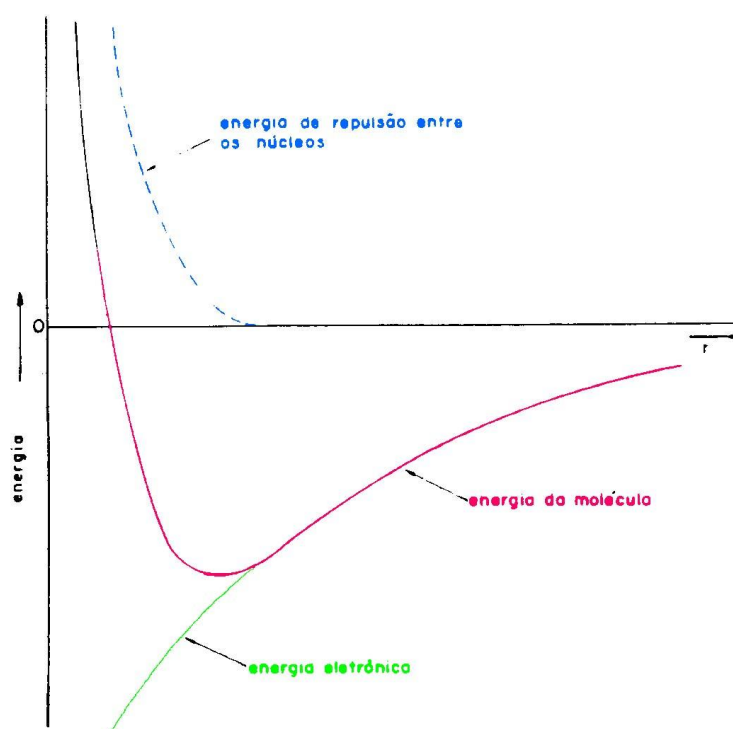


Figura 10. Variação da energia potencial de dois átomos de hidrogênio

Quando dois orbitais atômicos se combinam para formar dois orbitais moleculares, a energia do OM ligante é sempre menor do que a dos OAs, enquanto a

energia do OM antiligante é maior. Na Figura 11 apresenta as relação de energias entre os OAs $1s$ e os resultantes OMs σ_s e σ_s^* para o caso de uma molécula diatômica homonuclear, na qual os dois átomos são iguais. Na Figura 11, à esquerda e à direita estão os níveis de energia $1s$ de dois átomos do elemento A (identificados com A e A'). No centro encontram-se os níveis de energia σ_s e σ_s^* da molécula A-A'. As linhas tracejadas diagonais mostram que os OMs se formaram dos OAs indicados. A Figura 11 poderá ser usada para mostrar a formação dos OMs de um par de qualquer orbital s ($1s$, $2s$, $3s$, $4s$, etc.). Em cada caso, um orbital antiligante (de energia mais alta) e um orbital ligante (de energia mais baixa) são formados.

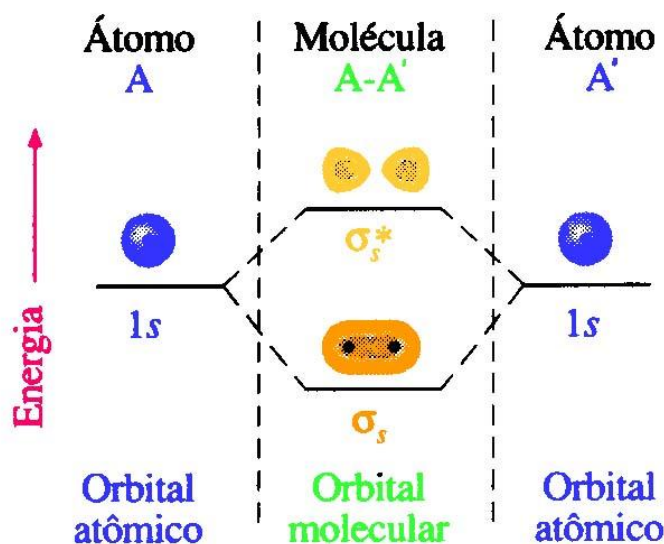


Figura 11. Energias relativas dos orbitais σ_s em moléculas diatômicas homonucleares

Consideremos a seguir a formação dos orbitais moleculares de um par de orbitais $2p_x$ cujos lóbulos estão dirigidos para o eixo de ligação. (Figura 12). Novamente, teremos a formação de um par de OMs, um ligante (σ_x) e um antiligante (σ_x^*).

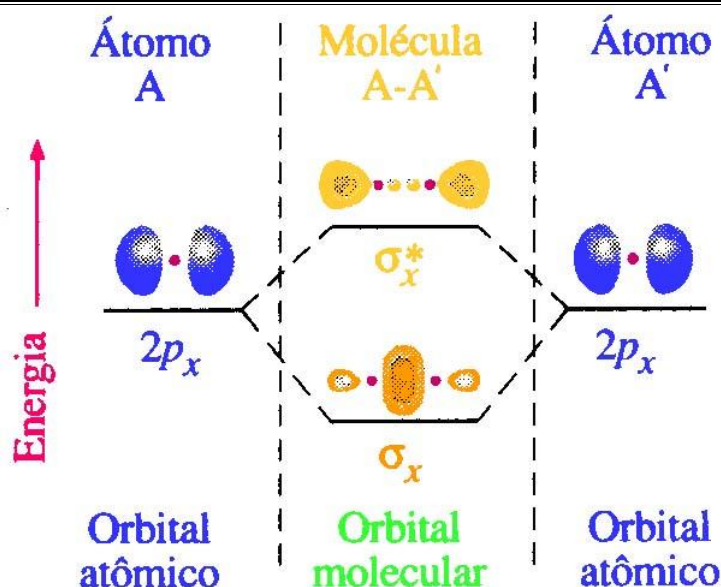


Figura 12. Energias relativas dos orbitais σ_x em moléculas diatômicas homonucleares

Em seguida observe os OAs $2p_y$ e $2p_z$, que se sobrepõem *lado a lado*, pois são perpendiculares ao orbital $2p_x$. Os OMs formados a partir deles são mostrados na Figura 13. A sobreposição p_y-p_y é exatamente igual à sobreposição p_z-p_z (exceto pela orientação) e assim os OMs formam dois conjuntos de orbitais de mesma energia: os orbitais π_y e π_z (ligantes) e os orbitais π_y^* e π_z^* (antiligantes).

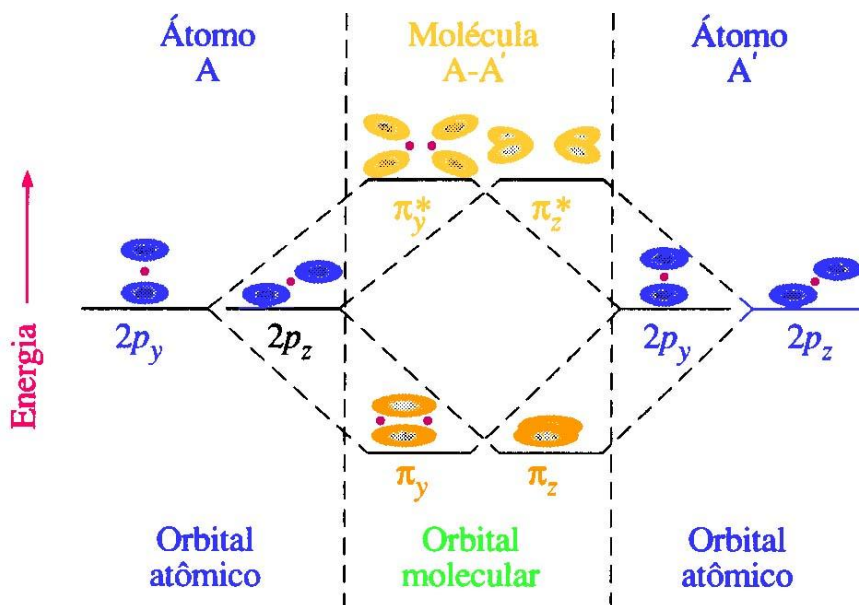


Figura 13. Energias relativas dos orbitais π_y e π_z em moléculas diatômicas homonucleares

4 – Preenchimento dos Orbitais Moleculares

Tendo-se em mente o procedimento Aufbau, pelo qual os elétrons são adicionados um a um ao diagrama de energia dos OAs com o objetivo de construir a configuração eletrônica dos átomos, usaremos agora uma técnica semelhante para preencher os níveis energéticos do diagrama de OM; desejamos construir a configuração eletrônica de moléculas diatômicas homonucleares no estado fundamental. Como antes, adicionaremos elétrons a partir da base do diagrama para cima, ou seja, dos orbitais moleculares de menor energia para os orbitais moleculares de maior energia.

H₂. A molécula mais simples é a de hidrogênio. A Figura 14 mostra, à esquerda e à direita, elétrons colocados em dois átomos de H não-ligados e, no meio do diagrama, a molécula de H₂ no estado fundamental. Os dois elétrons 1s vão constituir um par (spins opostos) no orbital σ_s (ligante) da molécula. Este par constitui uma ligação simples. A configuração eletrônica da molécula de hidrogênio pode ser escrita como: **H₂: (σ_s)².**

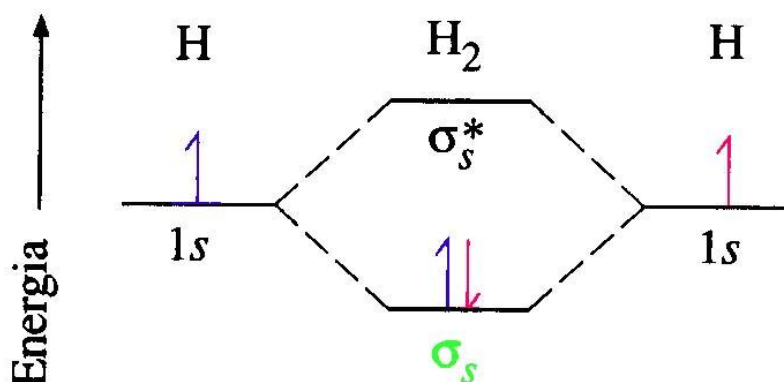


Figura 14. Preenchimento do diagrama de OM para a molécula de H₂

He₂. A molécula que poderia ser formada por dois átomos de hélio, cada um dos quais é capaz de fornecer dois elétrons para a molécula. O total é de quatro elétrons, dois a mais que no H₂, de maneira que a distribuição no OM será a da Figura 15. A configuração eletrônica da molécula de He₂ deverá ser: **He₂: (σ_s)²(σ_s^*)²**

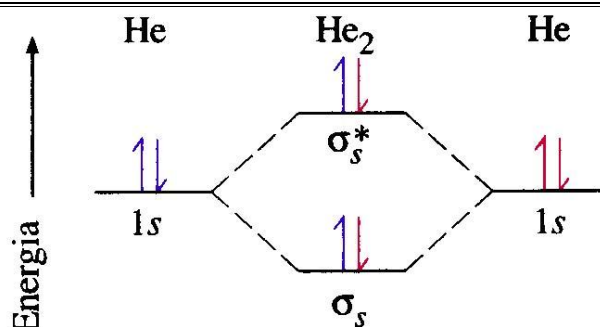


Figura 15. Diagrama de população do OM da molécula de He₂

Dizemos "deverá ser" devido ao fato de que o σ_s^* (antiligante) está agora preenchido e seu efeito desestabilizador cancela o efeito estabilizador do orbital σ_s . O resultado é que não há uma força de atração entre os dois átomos de hélio devido ao número igual de elétrons ligantes e antiligantes e, assim, He₂ não existe, pois a ordem de ligação é igual a zero.

Na teoria dos orbitais moleculares a **ordem de ligação** é definida como:

$$\text{Eq. 1. } \text{Ordem de ligação} = \frac{\text{número de elétrons ligantes} - \text{número de elétrons antiligantes}}{2}$$

Assim, a ordem de ligação na molécula de H₂ é:

$$\text{Ordem de ligação} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

enquanto na molécula hipotética de He₂ é:

$$\text{Ordem de ligação} = \frac{2 - 2}{2} = 0$$

Li₂ e Be₂. Desde que o preenchimento de dois OMs σ formados de orbitais 1s está completo, passa-se para os dois OMs σ formados a partir dos orbitais 2s. Estes OMs são similares àqueles que já foram preenchidos.

Li₂. Essa molécula possui um total de seis elétrons, mas quatro deles estão na "camada" K (interna) dos átomos de Li. Os elétrons de valência dos dois átomos de Li são usados para preencher um novo OM σ_s , como mostrado na Figura 16. Os orbitais

atômicos 1s estão praticamente não perturbados e não são mostrados no diagrama. A configuração é muito semelhante à do H_2 , e a ordem de ligação, que somente pode ser determinada com os elétrons de valência, é igual a $\frac{2-0}{2}$, ou seja, 1. Representando cada um dos orbitais 1s preenchidos por K (para a “camada” K), a configuração eletrônica do Li_2 pode ser escrita como: **$Li_2: KK(\sigma_s)^2$**

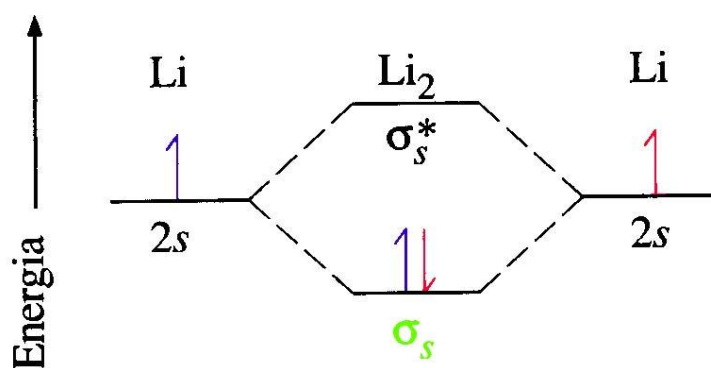
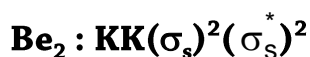


Figura 16. Diagrama de população do nível de valência dos OM's do Li_2

Com uma ordem de ligação igual a 1 é possível prever a existência da molécula Li_2 . Moléculas de lítio não existem no estado líquido ou sólido, mas sem dúvida as moléculas diatômicas são encontradas no lítio gasoso. A energia de ligação do Li_2 é 105 kJ mol^{-1} . Ela é menor do que a do H_2 (432 kJ mol^{-1}) porque há uma blindagem do núcleo pelo primeiro nível eletrônico completo de cada átomo.

Be_2 . Indo para a molécula hipotética Be_2 , encontraremos uma situação semelhante à do He_2 . O número atômico do berílio é 4 e o "sétimo" e o "oitavo" elétrons na molécula irão para o orbital σ_s^* . A desestabilização efetuada pelo σ_s^* preenchido cancela o efeito de estabilização do orbital σ_s , a ordem da ligação é zero e, portanto, a molécula de Be_2 não deve ser estável. Realmente, Be_2 estável no estado fundamental não existe. Se existir, a configuração eletrônica no estado fundamental seria:



B_2 até Ne_2 . A seguir consideraremos a seqüência B_2 , C_2 , N_2 , O_2 , F_2 e Ne_2 , percorrendo, assim, as demais moléculas diatômicas homonucleares do segundo período.

Os OMs a serem preenchidos são os orbitais ligantes e antiligantes σ e π que são representados nas Figuras 17a e 17b. Entretanto, quando tentamos combinar esses dois diagramas em um, encontramos uma pequena dificuldade. A energia relativa dos orbitais π_y e π_z é menor do que a do orbital σ_s (Figura 17a) do B_2 ao N_2 , mas maior para o resto da seqüência, O_2 até Ne_2 . Assim, as energias dos OM's para B_2 , C_2 e N_2 são mostradas na Figura 18 e para O_2 , F_2 e Ne_2 na Figura 19.

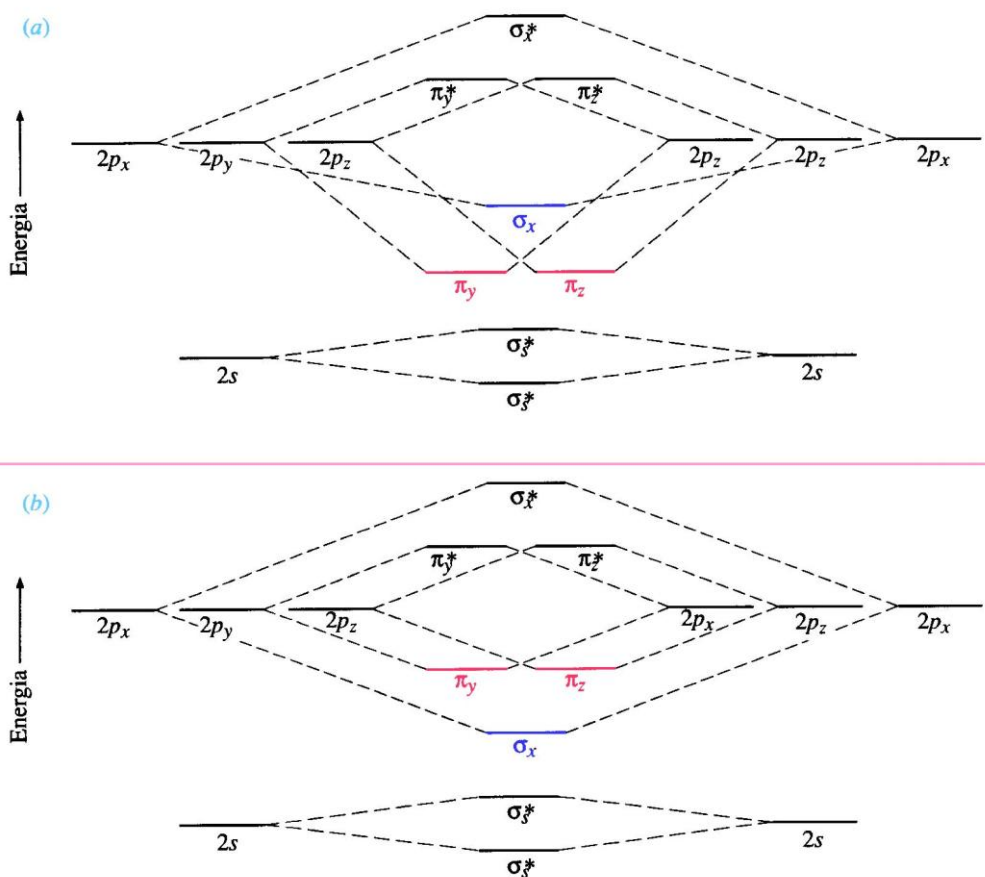


Figura 17. Energias dos Orbitais Moleculares do nível de valência. a) B_2 , C_2 e N_2 . b) O_2 , F_2 e Ne_2 .

B₂. A Figura 18 mostra o preenchimento dos OMs para B_2 , C_2 e N_2 . Na primeira molécula, B_2 , há somente um elétron em cada orbital π_y e π_z . Como são orbitais ligantes, e como em todos os níveis de energia mais baixos os elétrons antiligantes compensam exatamente os elétrons ligantes, a ordem de ligação é 1. (Podemos chamar a ligação de ligação simples, mas talvez ela seja melhor descrita como duas meias ligações π .) Note que os orbitais π_y e π_z têm igual energia, e assim, os dois elétrons não se emparelham no

mesmo orbital molecular. Por ocuparem diferentes orbitais moleculares, os elétrons podem ocupar regiões diferentes do espaço, reduzindo assim a repulsão inter-eletrônica.

A configuração eletrônica no B_2 é escrita como: $B_2: KK(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\pi_y)^1(\pi_z)^1$

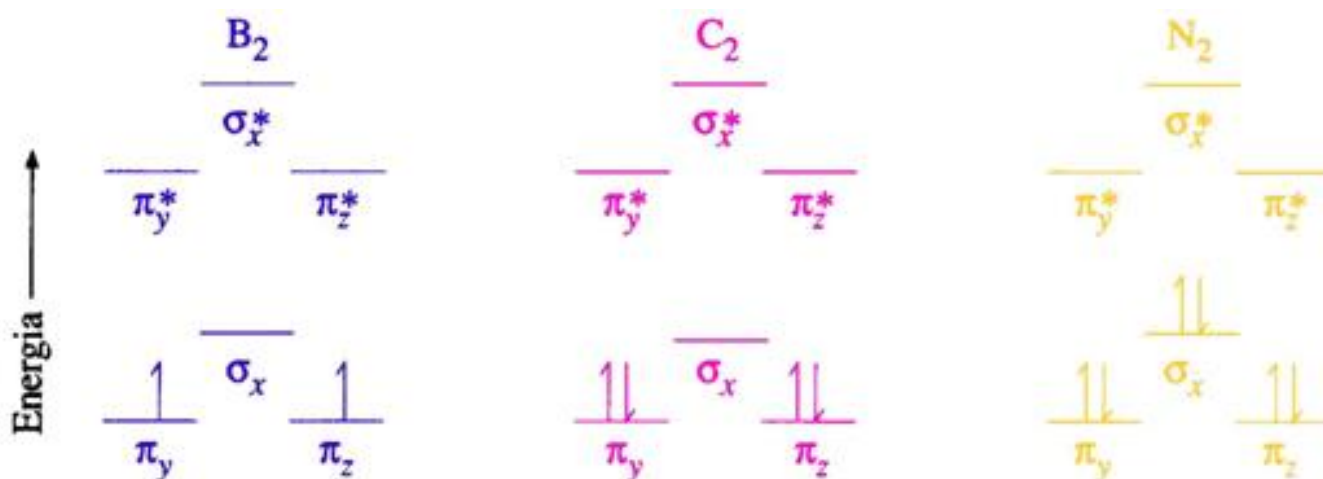


Figura 18. Diagrama de distribuição eletrônicas nos OM para B_2 , C_2 e N_2

A base experimental para essa configuração provém das medidas magnéticas: B_2 é paramagnético, e as medidas indicam que dois elétrons desemparelhados estão presentes na molécula.

Como o Li_2 , o B_2 não é uma molécula que se possa encontrar em um frasco, nas prateleiras do almoxarifado. O boro elementar é encontrado como um sólido, no qual o arranjo dos átomos de B é complexo. A temperatura muito alta, entretanto, as moléculas de B_2 podem ser detectadas no estado gasoso.

C_2 . Adicionando mais dois elétrons (um para cada átomo), obteremos a configuração para o C_2 vista na Figura 18. Esses elétrons são adicionados aos orbitais π_y e π_z , preenchendo-os. Todos os elétrons estão agora emparelhados e, assim, C_2 não é paramagnético e a ordem da ligação no C_2 é igual 2. A configuração eletrônica no C_2 é: $KK(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\pi_y)^2(\pi_z)^2$

Como a ordem de ligação é diferente de zero, o C_2 deve existir e na verdade foi detectado a altas temperaturas. (A temperatura ambiente, o carbono existe

principalmente em duas formas sólidas, grafite e diamante, cada um em retículo covalente).

N₂. O último preenchimento do diagrama de OM na Figura 18 é o da molécula de nitrogênio, N₂. Ela tem um conjunto de seis elétrons de ligação, que corresponde a uma ordem de ligação igual a 3. Estes elétrons ocupam os orbitais π_y e π_z e σ_x , dando ao N₂ a configuração: $KK(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\pi_y)^2(\pi_z)^2(\sigma_x)^2$

O N₂ é, sem dúvida, muito estável e comum, e nós o inalamos toda vez que respiramos. As medidas magnéticas indicam que todos os elétrons estão emparelhados no N₂. (Não é paramagnético). O modelo OM da molécula N₂ está muito bem correlacionado com aquele apresentado pela **Teoria da Ligação de Valência**. Os seis elétrons dos orbitais π_y e π_z e σ_x correspondem aos seis elétrons da estrutura de Lewis: N :: N.

O₂. A adição de mais dois elétrons à configuração do N₂ leva ao preenchimento dos níveis do O₂, como aparece à esquerda na Figura 19. Observe que esses dois elétrons devem ir para orbitais antiligantes, resultando em um decréscimo na ordem de ligação (de 3, no N₂) para 2. O valor mais baixo da ordem de ligação é consistente com o fato de O₂ ter uma energia de ligação menor e uma distância de ligação maior que o N₂. A configuração eletrônica do O₂ é $KK(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\sigma_x)^2(\pi_y)^2(\pi_z)^2(\pi_y^*)^1(\pi_z^*)^1$

Um dos primeiros triunfos da teoria OM foi a sua capacidade de mostrar que a molécula de O₂ é paramagnética. (Sua configuração eletrônica mostra que ele tem dois elétrons desemparelhados). Este é o grande contraste com a TLV, que leva à estrutura de Lewis (:Ö::Ö:).

F₂. A adição de mais dois elétrons nos dá o diagrama de OM da molécula de F₂, que é mostrado no centro da Figura 19. Como os orbitais π^* (antiligantes) estão ambos preenchidos, a ordem da ligação no F₂ é somente 1. Isto está de acordo com os dados experimentais determinados para a energia e o comprimento da ligação, pois ambos são aqueles esperados para uma ligação simples. Além disso, F₂ mostra ser diamagnético, o

que é consistente com a ausência de elétrons desemparelhados. A configuração do F_2 é:

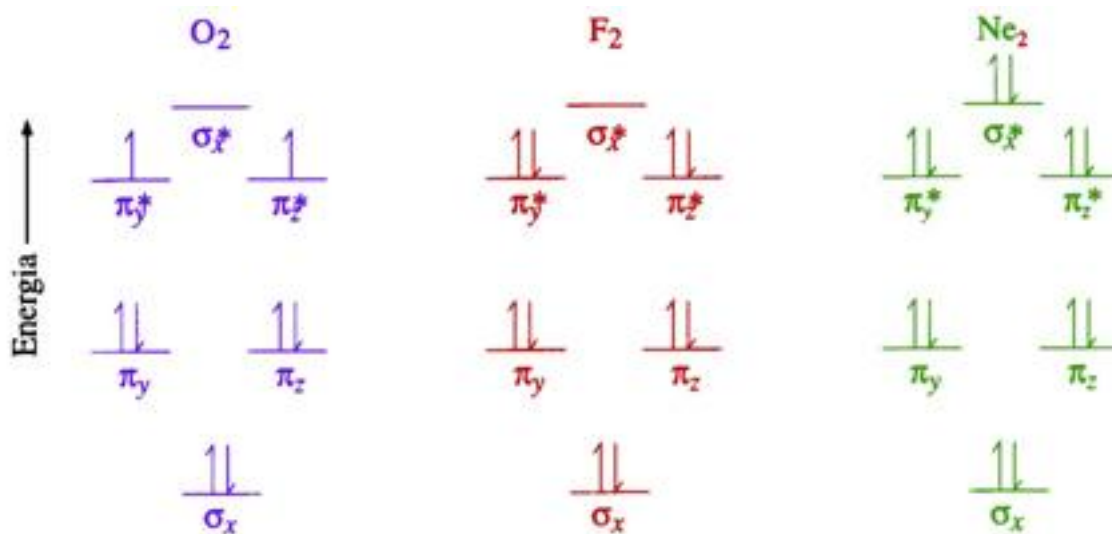
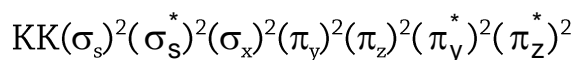


Figura 19. Diagrama de distribuição eletrônicas nos OM para O_2 , F_2 e Ne_2

Ne_2 . A adição de mais dois elétrons preenche o orbital σ_x^* , reduzindo a ordem de ligação para zero. O estado fundamental para Ne_2 nunca foi observado. Se existisse, sua configuração eletrônica seria: $KK(\sigma_s)^2(\sigma_s^*)^2(\sigma_x)^2(\pi_y)^2(\pi_z)^2(\pi_y^*)^2(\pi_z^*)^2(\sigma_x^*)^2$

Bibliografia

- 1 - Ballhausen, C.J.; "Introduction to Ligand Field Theory"; McGraw-Hill (1966).
 - 2 - Basolo, F. & Jonson, R.; "Química de los Compuestos de Coordinación"; Reverté (1980).
 - 3 - Cotton, F.A.; "Chemical Application of Group Theory"; Second Edition - Wiley (1971).
 - 4 - Cotton, F.A. & Wilkinson, G.; "Advanced Inorganic Chemistry"; Fifth Edition - Wiley Interscience (1988).
 - 5 - Cotton, F.A. & Wilkinson, G.; "Química Inorgánica Avanzada"; Editorial Limusa (1978).
 - 6 - Cross, A.D. & Alan Jones, R.; "Introduction to Practical Infra-red Spectroscopy"; Butterworths (1969)
 - 7 - Day, M.C. & Selbin, J.; "Theoretical Inorganic Chemistry"; Second Edition - Van Nostrand Reinhold (1969).
 - 8 - Douglas, B.; McDaniel, D.H. & Alexander, J.J.; "Concepts and Models of Inorganic Chemistry"; J. Wiley (1983).
 - 9 - Drago, R.S.; "Physical Methods in Inorganic Chemistry"; Van Nostrand (1965).
 - 10 - Figgis, B.N.; "Introduction to Ligand Field"; Interscience (1966).
 - 11 - Gray, H.B.; "Electron and Chemical Bonding"; W. Benjamin (1965).
 - 12 - Harvey, K.B. & Porter, G.B.; "Introduction to Physical Inorganic Chemistry"; Addison-Wesley (1963).
 - 13 - Heslop, R.B. & Robinson, P.L.; "Inorganic Chemistry"; Elsevier Sequoia (1967).
 - 14 - Huheey, J.E.; Keiter, A.A.; & Keiter, R.L.; "Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity"; Fourth Edition - Harper Collins College Publishers (1993).
 - 15 - Jolly, W.L.; "A Química dos Não Metais"; Edgard Blücher (1966).
 - 16 - Jolly, W.L.; "Modern Inorganic Chemistry"; McGraw-Hill International Editions (1986).
 - 17 - Jones, C.J.; "A Química dos Elementos dos Blocos d e f"; Bookman Cia Editora, São Paulo (2002).
 - 18 - Lever, A B.P.; "Inorganic Electronic Spectroscopy"; Elsevier (1984).
 - 19 - Phillips, C.S.G. & Willans, R.J.P.; "Inorganic Chemistry"; Vol. 1 e 2; Oxford (1965).
 - 20 - Purcell, K.F. & Kotz, J.C.; "Inorganic Chemistry"; W.B. Saunders (1979).
 - 21 - Shriver, D.F.; Atkins, P.W. & Langford, C.H.; "Inorganic Chemistry"; Oxford University (1998).
-