



A tabela periódica:

Basta ler no livro do Callister -- Trata-se de uma forma de se organizar os elementos químicos segundo suas propriedades.

OBS: Deixarei esta página em branco para possíveis inserções posteriores que se mostrarem necessárias sobre esse assunto.

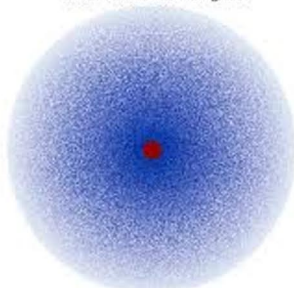
Forças e Energias de Ligação

Vamos iniciar esta seção através de uma visão mais fundamental acerca da estrutura eletrônica (nuvens eletrônicas, cada nuvem associada a um único elétron) de dois átomos quaisquer quando estão separados – e de como a proximidade desses átomos pode afetar a distribuição eletrônica (em outras palavras, deformar as nuvens eletrônicas), promovendo interações e, possivelmente, a ligação entre eles.

Quando a distância média entre átomos é grande em comparação com seus tamanhos, podemos considerá-los como isolados. Desta forma, as nuvens eletrônicas assumem suas formas tradicionais, simetricamente dispostas em torno do núcleo. Os formatos das nuvens dependem do número quântico de momento angular l , como ilustrado abaixo.

Orbital s

Nuvem Eletrônica do Hidrogênio



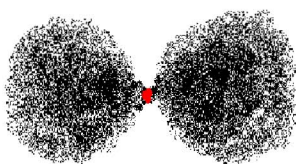
Fonte: <http://www.infopedia.pt/>

Toda a nuvem azul representa um único elétron em uma subcamada do tipo s (ou seja, $l=0$). Esta camada é esférica e simétrica ao redor do núcleo, o que faz resultar em um momento angular nulo.

OBS: A Figura dá a impressão que a nuvem tem uma borda externa em uma região bem determinada. Isto não é verdade; na verdade a nuvem começa fraca na região nuclear (região vermelha), aumenta sua densidade até atingir um valor máximo (o raio de Bohr, caso a camada s em questão esteja no primeiro nível energético $n=1$), e então começa a enfraquecer tendendo a

zero quando a distância ao centro tende ao infinito. Isto significa que o elétron pode estar em qualquer parte do espaço, mesmo no infinito -- contudo, a probabilidade dele se afastar significativamente é extremamente pequena, concentrando-se em regiões da ordem de Ângstrons.

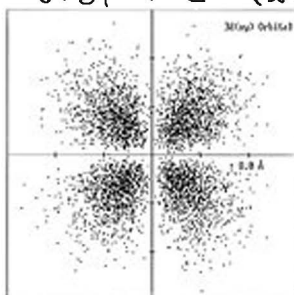
Orbital p ($l=1$)



A análise é semelhante. A distribuição da nuvem associada a um elétron de um orbital p é simétrica em relação ao núcleo, quando o átomo está isolado. No caso, o elétron no orbital p não possui momento angular nulo e sua ocupação é direcional ao longo de algum eixo.

OBS: Ao longo de qual eixo? Os eixos coordenados são escolhidos aleatoriamente pelo observador. Geralmente o eixo z coincide com a direção de aplicação de campos externos utilizados para estudar-se o sistema atômico.

Orbital d ($l=2$)



Análise similar.

Pergunta:

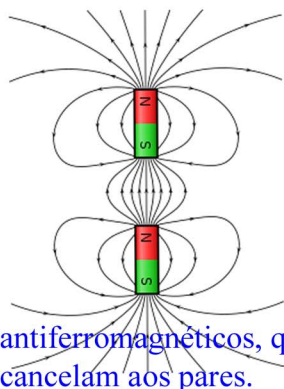
Quais os potenciais nas vizinhanças da nuvem eletrônica, devido às propriedades do elétron?

Resposta:

- 1) O elétron possui carga elétrica, portanto existe um potencial elétrico nas vizinhanças da nuvem eletrônica (consequentemente campo elétrico).
- 2) O elétron pode ter momento angular não nulo. Quando este for o caso, temos uma carga elétrica girando ao redor do núcleo; isso produz algo como uma espira de corrente elétrica que, como sabemos, produz campo magnético. Portanto, pode existir campo magnético nas vizinhanças da nuvem eletrônica.
- 3) Vimos que o elétron possui um spin próprio (algo que se imagina como se fosse ele girando em torno do próprio eixo), o que lhe confere um momento magnético de spin. Portanto, também temos o momento magnético de spin nas vizinhanças da nuvem eletrônica.

OBS: Listamos acima as interações que nos são classicamente familiares. Vale comentar que existem outras interações de origem puramente quântica, dentre as quais a que origina o princípio de exclusão de Pauli.

Parece “óbvio” que ao aproximarmos dois átomos as nuvens eletrônicas mais externas (com densidade concentrada nas regiões mais externas) poderão interagir de diversas maneiras entre si (a nuvem mais externa de um átomo passa a interagir com a do outro). Embora a primeira ideia que nos vem à cabeça é que deve então haver uma repulsão entre os átomos, devido a terem mesmo sinal de carga elétrica, devemos lembrar que esta não é a única interação; adicionalmente, devemos lembrar que se a distância entre os átomos for considerável o potencial originado pelas nuvens eletrônicas se cancela com o potencial de sinal contrário do núcleo, pois ambos são tratados como se estivessem concentrados na origem (simetria esférica como na gravitação). Contudo, existem, por exemplo, as interações de momento magnético orbital e de spin, que tendem a aproximar as nuvens eletrônicas, essas não são compensadas pelo núcleo. Exemplo: Dois ímãs interagindo magneticamente tendem a girarem em sentido contrário e colarem um no outro, como na Figura abaixo;

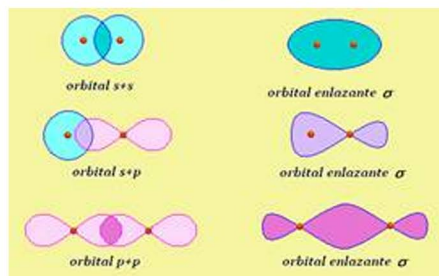


Semelhante à tendência de acoplamento entre elétrons (spins antiparalelos). Contudo, vale ressaltar que no caso de partículas quânticas (muito pequenas), existe outra força envolvida chamada força de troca (uma força que só se manifesta em sistemas quânticos). Esta força de troca é muito mais forte que a dipolar e, dependendo da distância entre os dois momentos magnéticos e também do sistema em questão, pode fazer com que os átomos se acoplem paralelamente ou antiparalelamente. Quando ocorre o acoplamento paralelo, formam-se os materiais ferromagnéticos (como o ferro)

Quando os átomos acoplam-se antiferromagneticamente, formam-se os materiais antiferromagnéticos, que não apresentam magnetismo em escala macroscópica, os momentos dos átomos se cancelam aos pares.

Em resumo, quando dois átomos se aproximam existem muitas interações envolvidas, algumas repulsivas e outras atrativas. Como no exemplo acima, sabe-se que os elétrons, após ocuparem metade de uma camada (ficando com seus spins todos em mesma direção -- regra de Hund, explicada posteriormente através da equação de Schrödinger -- fazendo resultar em maior afastamento espacial, pois momentos magnéticos paralelos tendem a se afastarem entre eles), tendem a se acoplar antiparalelamente até preencherem toda a camada em questão, atingindo assim a estabilidade. Ou seja, ao aproximarmos átomos, que não estão em uma situação totalmente estável (como os gases nobres) a tendência é de atração para preenchimento de orbitais em camadas não completas. Naturalmente esta atração promove maior proximidade das nuvens eletrônicas que se repelem, quando a proximidade é tal que promove superposição, por interação coulombiana deformando a forma dos orbitais atômicos.

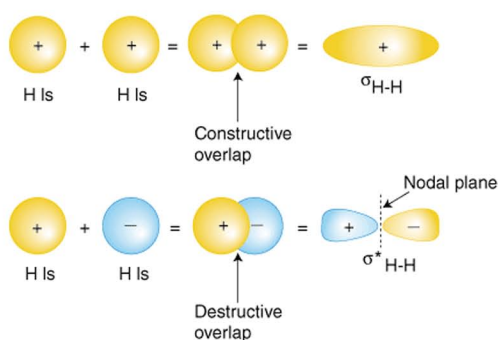
Naturalmente esta atração (de acoplamento de spins por interação de troca) promove maior proximidade das nuvens eletrônicas que interagem também por interação de coulombiana. O resultado é que as nuvens eletrônicas se deformam diferenciando-se da forma dos átomos isolados. Essas novas formas deformadas mutuamente dão origem aos orbitais moleculares, pois só existem devido ao acoplamento dos átomos formando a molécula, como ilustrado na Figura abaixo



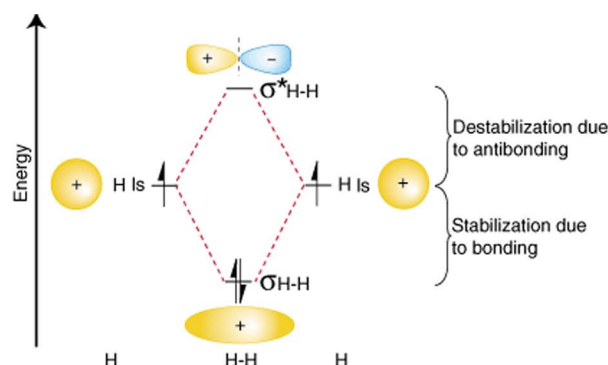
Neste ponto é comum perguntar-se: Como se sabe a forma final da nuvem eletrônica molecular?

Resposta: Todas as respostas, em princípio, vêm da solução da equação de Schrödinger da mecânica quântica. De uma forma geral, a equação de Schrödinger não possui solução analítica para sistemas compostos como é o caso das moléculas. As soluções, nestes casos, são obtidas numericamente.

São estas soluções que dirão quando uma interação de troca entre determinado par de átomos é ligante ou não ligante, como representamos abaixo.



(a) ↗



(b) ↗

As duas situações representadas na Figura acima (aproximação entre dois átomos de Hidrogênio), traduzem a solução da equação de Schrodinger para os dois sistemas interagindo.

Em resumo, quando dois átomos de Hidrogênio se aproximam, existem duas possibilidades para os elétrons se acoplarem: Paralelamente (spins no mesmo sentido) e antiparalelamente (spins contrários). Através das equações de onda para cada caso é possível calcular-se a região de probabilidade de se encontrar os elétrons e também a energia do sistema.

Encontra-se: Quando os dois elétrons estão paralelos, a função de onda encontrada é do tipo conhecido como antissimétrica e é representada pelo orbital ante-ligante σ^+ (observe a figura (b) acima). Quando os dois elétrons estão antiparalelos, a função de onda encontrada é uma função simétrica (ligante = bonding), representada pelo orbital σ_{H-H} (veja Figura acima). Perceba que a energia é menor quando a autofunção é simétrica, por isso os dois elétrons tendem a se acoplarem antiparalelamente e a molécula de H_2 se forma com autofunção espacial simétrica. OBS: auto função para o conjunto.

Pergunta: Quando uma ligação é iônica e quando é covalente?

As respostas para essa pergunta não são tão simples quando se possa imaginar. As respostas tradicionais são:

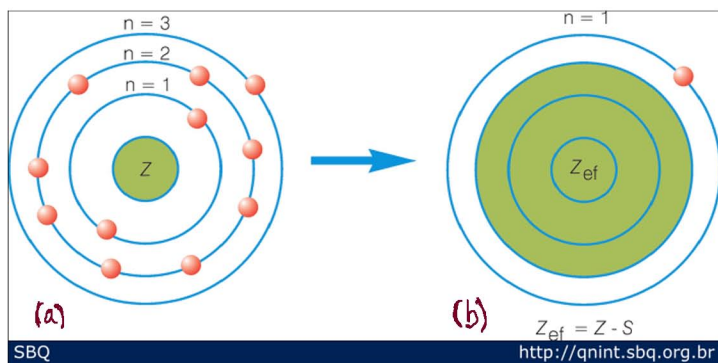
- 1) É iônica quando a ligação ocorre entre átomos carregados com sinais contrários .
- 2) É covalente quando dois átomos compartilham elétrons .

Obviamente as respostas acima representam algum tipo de informação memorizada e não têm qualquer conexão com o motivo físico que diferencia os dois tipos de ligação. Adicionalmente, a primeira resposta leva o leitor a um erro conceitual -- O leitor tende a entender que uma ligação iônica só ocorre se houverem átomos carregados com sinais contrários, tal que se atraem e se acoplam eletricamente -- Isto realmente não corresponde à verdade:

Em geral, antes de se acoplarem Ionicamente, os átomos não estão carregados (não há excesso nem falta de elétrons); eles se tornam Íons somente após a ligação, pois um acaba perdendo elétron para o outro -- Em resumo, só são Íons quando estão acoplados. Vamos exemplificar este processo utilizando um caso particular para o acoplamento entre o Na com o Cl, formando o NaCl (ligação iônica $\text{Na}^+(\text{Cl}^-)$).

Na $\Rightarrow Z = 11 \Rightarrow$ Um átomo neutro possui 11 elétrons
 $\Rightarrow 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1 \rightarrow$ elétron mais externo.
 $\rightarrow$ Camadas mais internas, totalmente ocupadas.

Os elétrons mais internos, populando as camadas completas, se distribuem tridimensionalmente e simetricamente ao redor do núcleo positivo. Então, temos o núcleo de carga positiva, e um conjunto de camadas eletrônicas carregadas negativamente dispersas simetricamente ao redor do núcleo. veja representação abaixo:



Note, na Fig.(a) que o elétron mais externo está em $n = 3$. Os demais elétrons internos ($Z-1$ elétrons), produzem uma região aproximadamente esférica de carga carga negativa, o que tende a enfraquecer a ação do núcleo sobre o elétron mais externo. A Figura (b) diz que o potencial aproximado que o elétron mais externo percebe é o equivalente a um número atômico efetivo com

$Z - (Z-1)$ -- Sendo Z prótons subtraído de $(Z-1)$ elétrons que resulta em um próton. Resulta em um poten-

cial semelhante ao do átomo de Hidrogênio -- e o nível $n = 3$, equivalendo a $n = 1$. OBS: trata-se de um aproximação grosseira. Na realidade não é exatamente isso que o último elétron sente, afinal sua posição espacial é uma distribuição espacial de probabilidades; isto significa que mesmo os elétrons mais externos frequentam, com certa probabilidade, as regiões mais internas (próximas ao núcleo e internamento às demais camadas eletrônicas). Portanto, a energia de ionização para o último elétron não é igual à do Hidrogênio, tende a ser menor devido às repulsões coulombianas.

A explicação acima tem o objetivo de mostrar que em um átomo com muitos elétrons, cada elétron que é acomodado altera o potencial e, portanto, os próximos níveis energéticos. Sendo assim, deve-se resolver a equação de Schrödinger novamente após cada elétron ser acomodado, para achar-se o novo valor de energia devido ao novo potencial resultante. Isso afeta as energias, mas não os momentos angulares e magnéticos. Portanto, a relação entre os números quânticos permanece inalterada.

Para a nossa abordagem -- forças e energias de ligação -- o que devemos guardar do exemplo acima é que o elétron mais externo fica mais fracamente ligado ao núcleo efetivo e, por isso, tem mais facilidade de interagir com átomos vizinhos, inclusive podendo migrar para outro átomo caso existe alguma outra interação que se sobreponha ao seu potencial enfraquecido de ligação. Além disso, como esses elétrons mais externos não estão em camadas completas, eles tendem a produzir momentos magnéticos não nulos devido ao movimento orbital não compensado e ao seu spin (OBS: importante vocês olharem para uma distribuição eletrônica e perceberem porquê as camadas não totalmente preenchidas podem produzir momentos magnéticos não nulos).

Os elétrons p não são tão blindados quanto os elétrons s . Isso devido ao fato que os elétrons p , possuem maior probabilidade nas proximidades do núcleo que os elétrons s . (veja a forma de uma nuvem eletrônica p e a compara com a forma de s). O formato da nuvem do tipo p assemelha-se a um 8, e tem maior densidade na região próxima ao núcleo; enquanto que a nuvem do tipo s assemelha-se a uma esfera com densidade concentrada em regiões mais distantes do núcleo (claro, considerando-as em um mesmo valor do número quântico principal n).

O halogênio (Cl) tem uma afinidade eletrônica relativamente alta, ou seja, o íon de camadas fechadas é mais estável do que o átomo neutro, sua energia fica 3,8eV inferior. Em outras palavras, o átomo de Cl possui menor energia se tiver um elétron a mais e ficar negativo -- isso baixaria sua energia em 3,8eV.

Para retirarmos o elétron mais externo do Na, gastamos 5,1eV -- ou seja-- o sistema composto pelo átomo de sódio separado de seu último elétron ($\text{Na}^+ + e$) tem sua energia aumentada.

Isto significa que se tirarmos o elétron do sódio a energia aumenta em 5,1eV -- se então levarmos esse elétron para o Cl, a energia cai em 3,8eV. Esse processo todo nos custou $5,1 - 3,8 = 1,3\text{eV}$ de energia.

Se temos que gastar energia pra produzir o NaCl, então este sistema não seria estável e se separaria. Contudo, no fim ficamos com um Na carregado positivamente e um Cl carregado negativamente. Esses dois Ions se atraem por interação coulombiana. Como a energia coulombiana é negativa (atração) a energia do sistema vai caindo a medida que os ions se aproximam e esta variação negativa de energia é bem superior a 1,3eV. Isto significa que o sistema NaCl junto possui energia mais baixa que quando estão separados, portanto, tornando-se um sistema estável.

Continuando a aproximação: A medida que os Íons se aproximam ainda mais, as nuvens eletrônicas começam a se superpor. Isso acarreta dois efeitos no sentido de aumentar a energia potencial:

- (1) Os núcleos positivos ficam menos blindados que antes e começam a se repelir mutuamente
- (2) Para pequenas separações intermoleculares teremos um único sistema para o qual o princípio de exclusão deve ser aplicado. Isto significa que uma região de superposição não pode haver dois elétrons no mesmo estado

Ex: O Na possui 6 elétrons no subnível 2p, Mas o Cl também tem. Se estes subnível se superporem, isso não poderá continuar acontecendo e alguns elétrons deverão pular para níveis superiores de energia aumentando a energia do sistema. Em outras palavras, ocorre uma atração coulombiana entre os átomos, e eles se aproximam até um ponto onde começa haver aumento de energia devido aos fatores acima -- então a aproximação cessa e o átomo assume sua configuração final.

Sendo assim o NaCl é uma molécula que se mantém através da transferência de um elétron do Na para o Cl, portanto, uma ligação iônica. Existe então uma região da molécula que possui elétron faltando (região positiva) e uma região que tem elétron sobrando (região negativa). Isso faz da molécula um dipolo elétrico, e é chamada molécula polar.

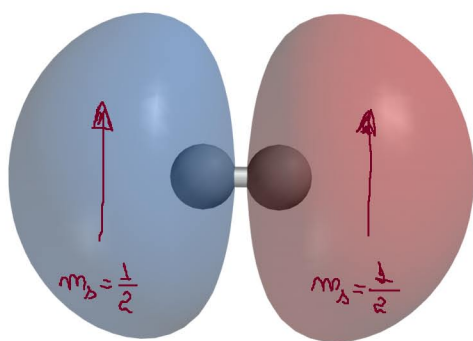
Quando uma ligação ocorre com camadas completas, o resultado final não privilegia qualquer direção espacial, pois os átomos ficam com distribuição tridimensional simétrica de cargas (ligação não direcional).

Ligação Covalente:

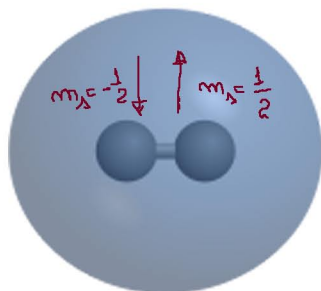
Vamos analisar o caso particular da formação da molécula H_2 .

Neste caso, como se trata de uma ligação entre átomos idênticos, podemos concluir, em princípio, que não existe qualquer motivo (simetria) para que algum dos dois átomos esteja mais populado eletronicamente que o outro.

Adicionalmente nota-se que, neste caso, ambos têm um elétron na camada de valência $1s^1$, faltando um para fecharem esta camada e atingirem a configuração do átomo de He (configuração eletrônica estável). A aproximação de átomos de H ao ponto de as nuvens eletrônicas começarem a se sobrepor produz, novamente, diferentes tipos de interações, sendo as mais importantes a interação de troca entre os spins eletrônicos e a interação coulombiana. A interação de troca é mais forte que a coulombiana. Como dito anteriormente, existem duas possibilidades para o acoplamento spin-spin; acoplamento paralelo ou antiparalelo. O acoplamento paralelo (mesmo número quântico de spin), produz uma interação de troca positiva (aumento de energia) e produz um afastamento entre os elétrons. Neste caso teríamos o acoplamento não ligante, representado na Figura abaixo.



O acoplamento antiparalelo produz uma interação de troca negativa. Neste caso os elétrons tendem a se aproximarem -- Esta aproximação acarreta em um aumento na energia Coulombiana mas, como dito no parágrafo acima, a energia associada à interação de troca supera a coulombiana e a molécula de H_2 assume uma configuração estável como representamos na Fig. abaixo.





BREVE DISCUSSÃO SOBRE A INTERAÇÃO DE TROCA CITADA NOS PARÁGRAFOS ACIMA.

Do que se trata a referida interação de troca?

Vimos que os sistemas atômicos se comportam segundo as leis da mecânica quântica. A descrição teórica de sistemas quânticos é baseada no módulo quadrático da função de onda resultante da equação de Schrödinger. Quando dois sistemas quânticos estão interagindo, como por exemplo dois átomos de H cuja proximidade promove uma superposição de suas funções de onda, então, neste novo potencial, a função de onda para o sistema de dois elétrons sujeitos ao potencial proveniente dos núcleos (estamos aqui desprezando, em primeira aproximação, a interação elétron-elétron) é dada por

$$\Psi_{\alpha\beta}(x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) = \Psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) * \Psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2),$$

onde $\Psi_{\alpha\beta}$ é a função de onda do par de elétrons, $\Psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1)$ é a função associada ao elétron 1 e $\Psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2)$ é a função de onda associada ao elétron 2.

Os índices α e β representam os conjuntos de números quânticos associados às partículas 1 e 2, respectivamente.

$$\Rightarrow \alpha = (n_1, l_1, m_1, m_{s_1})$$

$$\beta = (n_2, l_2, m_2, m_{s_2})$$

Note que as funções $\Psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1)$ e $\Psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2)$ são diferentes pois suas formas matemáticas dependem dos números quânticos α e β .

A questão por trás da regra de Hunt e Princípio de exclusão de Pauli, e que diferencia os sistemas quânticos dos sistemas clássicos está na seguinte questão:

Os elétrons são indistinguíveis. Significa que se simplesmente trocarmos as coordenadas de 1 pra 2 e vice-versa, o resultado obtido pela função de onda acima deveria ficar inalterado, afinal, quem define a forma matemática das funções são os índices α e β . Notadamente não é o que ocorre; trocando os índices, por exemplo:

$$\Psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) * \Psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2) \longrightarrow \Psi_{\alpha}(x_2, y_2, z_2) * \Psi_{\beta}(x_1, y_1, z_1)$$

"Em outras palavras, trocar o rótulo das partículas".

teríamos resultados diferentes pois tratam-se de funções diferentes aplicadas em pontos diferentes.

Este resultado não é aceitável.

Como resolver este impasse?



Descartar uma teoria de tanto sucesso não é uma opção antes de se esgotarem todas as possibilidades.

Os cientistas perceberam que haviam outras possibilidades para a solução da equação de Schrödinger, através de uma combinação das soluções com os índices trocados. Isto é possível pois a soma de soluções da equação também é uma solução (**este fato devido ao caráter linear da equação diferencial -- visto no curso de cálculo IV**) da equação diferencial em questão. Em outras palavras, ocorre que

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(x_1, y_1, z_1) \cdot \Psi_\beta(x_2, y_2, z_2) + \Psi_\beta(x_1, y_1, z_1) \cdot \Psi_\alpha(x_2, y_2, z_2) \right] \quad (1)$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(x_1, y_1, z_1) \cdot \Psi_\beta(x_2, y_2, z_2) - \Psi_\beta(x_1, y_1, z_1) \cdot \Psi_\alpha(x_2, y_2, z_2) \right] \quad (2)$$

São ambas soluções da equação de Schrödinger. Contudo, estas soluções resolvem o impasse citado na página anterior. Note na Equação (1) que a troca dos índices leva à mesma equação, como segue:

Invertendo os índices 1 e 2, na Equação (1), temos

$$\Psi'_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(x_2, y_2, z_2) \cdot \Psi_\beta(x_1, y_1, z_1) + \Psi_\beta(x_2, y_2, z_2) \cdot \Psi_\alpha(x_1, y_1, z_1) \right]$$

Portanto $\Psi_S = \Psi'_S$, refletindo o caráter de indistinguibilidade dos elétrons.

No caso da Equação (2), temos que se $1 \leftrightarrow 2$

$$\Psi'_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(x_2, y_2, z_2) \cdot \Psi_\beta(x_1, y_1, z_1) - \Psi_\alpha(x_2, y_2, z_2) \cdot \Psi_\beta(x_1, y_1, z_1) \right]$$

Perceba que, neste caso, a equação com índices trocados fica multiplicada por -1 , portanto

$$\Psi_A = -\Psi'_A$$

Isto não é problema pois a física é extraída do módulo quadrático destas funções, ou seja,

$$|\Psi_A|^2 = |-\Psi'_A|^2.$$

Pela simetria acima (de sinais) Ψ_S é chamada solução simétrica e Ψ_A de solução antissimétrica.

?? Masssss -- teriam estas duas soluções significados físicos diferenciados?
-- Se sim, os experimentos confirmam?

Vamos então à interpretação física destas duas soluções:

Tenhamos em mente que a física está na probabilidade, ou seja, no módulo quadrático das funções de onda. Sendo assim, rapidamente percebemos uma diferença fundamental entre as duas soluções.

Vamos reescrevê-las pelo módulo quadrático a fim de analisarmos o que representam:

$$|\Psi_s|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_\alpha^{(1)} \Psi_\beta^{(2)} + \Psi_\beta^{(1)} \Psi_\alpha^{(2)} \right) \right|^2 \quad \text{"Simétrica"}$$

Obs: Fig $x_1, y_1, z_1 \equiv 1$ e $x_2, y_2, z_2 \equiv 2$.

$$|\Psi_A|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_\alpha^{(1)} \Psi_\beta^{(2)} - \Psi_\beta^{(1)} \Psi_\alpha^{(2)} \right) \right|^2 \quad \text{"Antissimétrica".}$$

⇒ Note que se colocarmos as duas partículas na mesma posição temos resultados diferenciados, como segue:

Solução simétrica -- Se colocarmos os dois elétrons na mesma posição espacial, a probabilidade é aumentada pois trata-se de uma soma, tal que resultaria em

Se $1=2=x, y, z$

$$|\Psi_s|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_\alpha(x, y, z) \Psi_\beta(x, y, z) + \Psi_\beta(x, y, z) \Psi_\alpha(x, y, z) \right) \right|^2$$

$$|\Psi_s|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 2 \Psi_\alpha(x, y, z) \Psi_\beta(x, y, z) \right|^2 = 2 |\Psi_\alpha \cdot \Psi_\beta|^2$$

$$|\Psi_s|^2 = 2 \cdot \Psi_\alpha^* \Psi_\beta^* \cdot \Psi_\alpha \cdot \Psi_\beta$$

"Portanto a probabilidade é aumentada por um fator de 2 se a solução for do tipo simétrica"

Nesto ponto é importante frisar que: É possível (e relativamente simples) mostrar que a auto função total simétrica corresponde a um estado de **spin antiparalelo**. Isto significa que o acoplamento antiparalelo entre os spins dos dois elétrons tende a aproximá-los espacialmente.

Analisemos agora a solução antissimétrica.



Aproximando os dois elétrons, ou seja, fazendo $1 \leftrightarrow 2$, ou equivalentemente, $x_1, y_1, z_1 = x_2, y_2, z_2 \equiv x, y, z$.

"O mesmo que fizemos para ψ_s ".

$$\Rightarrow |\psi_A|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_\alpha(x, y, z) \cdot \psi_\beta(x, y, z) - \psi_\beta(x, y, z) \cdot \psi_\alpha(x, y, z) \right) \right|^2$$

$$\Rightarrow |\psi_A|^2 = \text{zero}$$

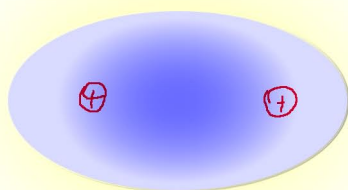
Portanto, o estado antissimétrico representa uma baixa probabilidade de os elétrons se aproximarem.

É possível, e relativamente simples, mostrar que o estado antissimétrico representa o estado em que os dois elétrons estão com **Spins paralelos (mesmo sentido)**.

RESUMO

ESTADO SIMÉTRICO: No estado simétrico (spins antiparalelos), os elétrons tendem a se aproximarem. Esta tendência de aproximação dos elétrons é o que chamamos de força de troca. Esta força só se manifesta em sistemas quânticos e não têm qualquer análogo clássico -- por este motivo não nos é familiar.

O estado simétrico é o estado conhecido como ligante -- faz com que os elétrons se concentrem na região intermediária entre os núcleos atômicos dos dois elétrons de Hidrogênio (exemplo particular utilizado).



"Estado ligante com spins antiparalelos e aproximação das nuvens eletrônicas".

Estado antissimétrico: No estado antissimétrico (spins paralelos), a probabilidade aumenta quando os spins se distanciam.

O estado antissimétrico é conhecido como estado antiligante -- faz com que os elétrons se concentrem em regiões contrárias. No caso particular da molécula de Hidrogênio seria algo do tipo:



"Estado não ligante com spins paralelos e distanciamento das nuvens eletrônicas".



Ambos os estados são possíveis -- afinal são soluções da equação diferencial representando o sistema -- Contudo, para elétrons, é possível mostrar que em uma ligação covalente o estado ligante (equação antissimétrica) possui energia inferior relativamente ao estado simétrico. Portanto, os spins tendem a se acoplarem antiparalelamente.



LIGAÇÃO METÁLICA

A seguir.