

Orbitais em Átomos e Moléculas, Victor M. S. Gil

Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1996, ISBN 972-31-0711-2

É atribuída ao físico holandês H. A. Kramers a afirmação de que, em ciência, os conceitos mais importantes e frutuosos são aqueles a que é impossível associar um significado preciso. O conceito de orbital, apesar do esforço sério de muitos investigadores e dos resultados rigorosos existentes, cai dentro desta categoria de certo *desconforto*. Uma dificuldade de qualquer análise das orbitais moleculares é originada pela sua não univocidade. De facto, a soma e a diferença de quaisquer duas orbitais (feita a respectiva normalização) são tão aceitáveis como as orbitais iniciais. E isto é verdade tanto para as orbitais de Hartree-Fock usuais como para as orbitais de Kohn-Sham obtidas nos métodos ditos do funcional de densidade, o que acarreta dificuldades óbvias no uso de orbitais para interpretar a ligação química. Diversos critérios têm sido usados para fixar a forma das orbitais moleculares, o mais familiar correspondendo às chamadas orbitais canónicas que diagonalizam o hamiltoniano e são as obtidas com os algoritmos de cálculo mais correntes. Contudo estas orbitais são deslocalizadas, tornando a interpretação da ligação química na linguagem de Lewis difícil. Quando se usam funções de estado multi-determinante, o problema complica-se ainda por deixarmos de ter orbitais estritamente ocupadas e desocupadas, podendo-se definir uma ocupação fraccionária que é associada às chamadas orbitais naturais.

Desde a década de 60 que o conceito de orbital molecular ocupa um lugar central na interpretação da ligação e reactividade química. Contudo, não é fácil encarar uma apresentação introdutória da Química

Quântica com base no conceito de orbital; fazê-lo de uma forma que seja frutuosa para a compreensão de conceitos fundamentais, sem deixar de ser rigorosa e atenuando, na sua manipulação, o *desconforto* próprio do conceito! O Prof. Victor Gil consegue-o de uma forma coerente e abrangente. Depois de uma introdução histórica, ele faz no capítulo 2 uma introdução sumária das bases da Mecânica Quântica. Segue depois a ordem convencional da apresentação da Química Quântica, passando pela apresentação de sistemas mono-electrónicos (capítulos 3 e 4), de átomos poli-electrónicos, moléculas diatómicas e poliatómicas (capítulos 5 a 7). Em cada caso, o conceito de orbital tem um papel central, primeiro de forma rigorosa para sistemas mono-electrónicos e, depois, em sistemas polieletrónicos. Nos capítulos 8 a 11 é discutida a ligação química, em situações progressivamente mais complexas, usando sempre o conceito de orbital. Isto é feito de maneira programática explícita, mas sem sacrificar o rigor da linguagem. No capítulo final é feita a explanação de alguns conceitos básicos de reactividade e de espectroscopia química recorrendo sempre à linguagem das orbitais. O livro termina pela resolução abreviada dos 112 problemas distribuídos pelo texto e por uma extensa lista de referências bibliográficas que é dominada por *Journal of Chemical Education*, referências estas que podem ser de grande utilidade para quem queira aprofundar alguns dos tópicos tratados.

Todo o texto está muito cuidado, merecendo especial aplauso a seriedade que é posta na descrição qualitativa do efeito da

ligação química (entre dois átomos) como é apresentada na secção 4.3, evitando toda a tentação de sobre simplificação não raro encontrada. Sendo todos os autores citados pelo seu nome completo com datas de nascimento e morte, é pena que a mesma homenagem não seja prestada à única mulher a cujo nome é associado um teorema da Química Quântica, a holandesa T. Koopmans (pag.121). Alguns pequenos erros não afectam a lógica global do texto. Estão neste caso a eq. 3.10, a fig.3.11, no que se refere ao comportamento próximo da origem, e a interpretação de causalidade electrostática na pag.118.

No seu prelácio, o autor afirma que esta publicação beneficiou da sua experiência com publicações anteriores que vão desde um manual para o 12º ano até cursos de pós-graduação e formação contínua. Julgo que públicos tão diversificados desde alunos liceais (só os mais motivados) até licenciados poderão encontrar aqui material para motivação, reflexão e revisão de conhecimentos; contudo, será a alunos universitários de Química e de áreas afins que este livro se vai mostrar um companheiro mais fiel e valioso. Uma palavra final de apreço para o Serviço de Educação da Fundação Calouste Gulbenkian pela selecção deste tema e para a Imprensa de Coimbra pelo excelente trabalho tipográfico produzido.

J. A. N. F. Gomes, CEQUP/Departamento de Química, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, 4000Porto
jfgomes@fc.up.pt

LC/MSD da Série HP 1100 da Nossa Representada “Hewlett-Packard”

Detector Selectivo de Massas para Cromatografia Líquida

Complemento ideal ao Detector Diodo Array. Fornece ao utilizador as informações necessárias a uma identificação rápida dos compostos, verificação da pureza dos picos e quantificação de componentes, a nível de traços, em matrizes complexas.

Ionização positiva e negativa e possibilidade de escolha entre API-ES (Atmospheric pressure ionization electrospray) e APCI (Atmospheric pressure chemical ionization).

Informação dos espectros de massa aumenta a confiança nos resultados e diminui os tempos de análise.

Fragmentação na fonte fornece uma poderosa informação estrutural.

Possibilidade de ligação a qualquer HPLC.

Para mais informações, consulte a nossa Direcção Comercial.



SOQUÍMICA

Sociedade de Representações e Química, Lda.

Rua Coronel Santos Pedroso, 15 • 1500 LISBOA • Tel.: 716 51 60 • Fax: 716 51 69

Sede Social: Av. da Liberdade, 220-2º • 129 LISBOA CODEX

Rua 5 de Outubro, 269 • 4100 PORTO • Tels.: 609 30 69 • Fax: 600 08 34