

### 1.3.1 Teoria da ligação de valência (TLV)

Os princípios da mecânica quântica, a teoria que estabeleceu as configurações eletrônicas dos átomos e as formas das orbitais atômicas, quando se aplicaram às moléculas, originaram duas teorias de ligação covalente que se desenvolveram separadamente, mas que, em muitos aspetos se complementam. São a **teoria da ligação de valência (TLV)** e a **teoria das orbitais moleculares (TOM)**. Esta última será abordada mais adiante.

A TLV surgiu primeiro e considera que se forma uma ligação quando duas orbitais atômicas, uma de cada átomo, se aproximam e se sobrepõem, de modo que o par de eletrões com os seus *spins* emparelhados passa a ser partilhado pelos dois átomos. O termo **sobreposição de orbitais** é característico desta teoria e refere-se à porção das duas orbitais atômicas dos dois átomos que partilham o mesmo espaço.

Um ponto a destacar é que apenas um par de eletrões com *spins* emparelhados pode ser partilhado por duas orbitais que se sobrepõem. Este par eletrónico fica localizado na região da sobreposição e ajuda a manter os núcleos próximos, de modo que quando a ligação se forma, a diminuição de energia potencial é determinada, em parte, pela maior ou menor extensão da sobreposição das ditas orbitais.

Deste modo, os átomos tendem a posicionar-se de tal forma que ocorra o máximo de sobreposição das orbitais, pois isto implica um mínimo na energia potencial e, conseqüentemente, ligações mais fortes.

Relembre-se que os eletrões que participam nas ligações químicas são apenas os **eletrões de valência**.

Interpretemos agora a formação de algumas moléculas, de acordo com os princípios da TLV.

#### I. Molécula H<sub>2</sub>

Recordemos que a configuração eletrónica de um átomo H no estado fundamental é 1s<sup>1</sup>.



Figura 18 – Formação de uma ligação  $\sigma$  por sobreposição de orbitais s.

Quando os eletrões das duas orbitais atômicas 1s de cada átomo de hidrogénio, representados pelos seus *spin* (a vermelho, na figura 18), se sobrepõem, formam uma ligação  $\sigma$  (sigma), representada na figura 18 pela superfície da nuvem eletrónica molecular. Esta nuvem localiza-se à volta do eixo internuclear e espalha-se sobre ambos os núcleos, tridimensionalmente. Diz-se que tem **simetria cilíndrica**.

#### II. Molécula HCl

Veja-se o caso da molécula de HCl (Fig. 19). As configurações eletrónicas de H e de Cl no estado fundamental são:



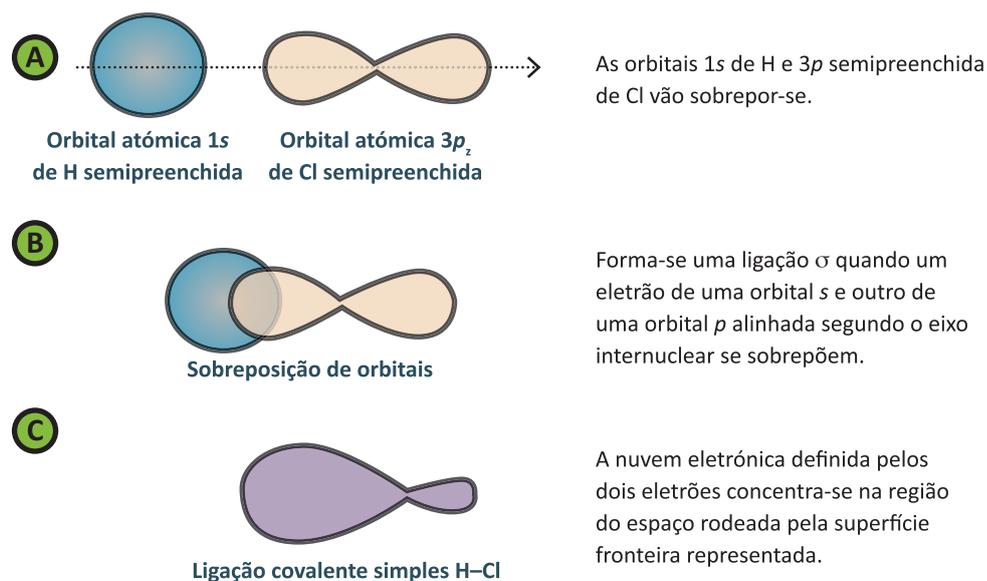


Figura 19 – Formação da molécula HCl.

Em moléculas homonucleares, isto é, moléculas obtidas por ligação de átomos iguais, como  $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $Br_2$ ,  $I_2$ , em cada átomo, a orbital com um único eletrão desemparelhado é do tipo  $p_z$ . No caso da molécula do flúor,  $F_2$ , a sobreposição dá-se entre as duas orbitais  $2p_z$  que se aproximam «de topo». Nestas moléculas, a **ligação  $\sigma$**  forma-se quando os eletrões emparelhados de duas orbitais  $2p_z$  passam a partilhar o espaço resultante da sobreposição daquelas orbitais. Os contornos da orbital molecular passam a ser definidos como se indica na figura 20:

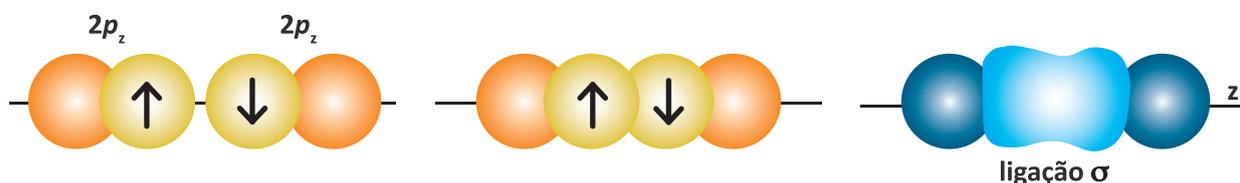
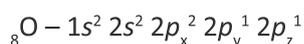


Figura 20 – Formação de uma ligação  $\sigma$  por sobreposição de duas orbitais  $2p_z$  de topo.

Mas nem sempre é esta a orientação das orbitais que se sobrepõem. Consideremos como exemplo a molécula  $O_2$  (Fig. 21). A configuração eletrónica de O no estado fundamental é a seguinte:



Neste caso, a sobreposição dá-se entre as orbitais  $2p_y$  e as orbitais  $2p_z$  de cada átomo de O e então:

- Haverá para partilhar dois pares de eletrões;
- Dar-se-á sobreposição entre as orbitais  $2p_z$  para formar uma ligação  $\sigma$ ;
- Haverá sobreposição de duas orbitais  $2p_y$  (ou  $2p_x$ ) cujo eixo é perpendicular ao eixo internuclear para formar uma **ligação  $\pi$** .

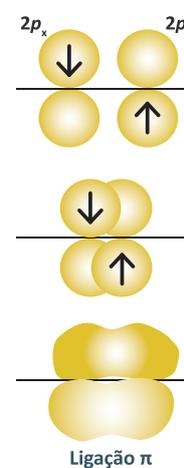


Figura 21 – Formação de uma ligação  $\pi$  por sobreposição lateral de duas orbitais  $2p$ .

Existe, assim, entre os átomos de oxigénio, uma **ligação dupla**, assegurada por **duas ligações**, uma  $\sigma$  e outra  $\pi$ .

## Questão



Indique que orbitais se devem sobrepor, de acordo com a TLV, para formar a ligação tripla numa molécula de azoto,  $N_2$ .

**Resposta:** Configuração eletrónica, no estado fundamental, de  ${}_7N - 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Aproximação e sobreposição «de topo» das orbitais  $2p_x$  de cada átomo N, com formação de uma ligação  $\sigma$ .

Aproximação e sobreposição lateral de cada uma das orbitais  $2p_y$  e  $2p_z$  de cada átomo de N, com formação de duas ligações  $\pi$ .

Forma-se, então, uma ligação tripla (uma ligação  $\sigma$  + duas ligações  $\pi$ ).

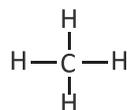
Mas a TLV não é aplicável de forma tão simples, como nas moléculas que acabámos de analisar, a outras moléculas, como a do metano, etano, eteno e etino.

### 1.3.2 Hibridação de orbitais atómicas

No 10º Ano, quando explicámos a molécula de  $CO_2$  utilizando o modelo da ligação de Lewis, admitimos que a configuração eletrónica do carbono sofria um rearranjo para poder interpretar as quatro ligações que o átomo de carbono sempre estabelece:



A molécula de metano,  $CH_4$ , explicar-se-ia do mesmo modo e, na notação de Lewis, representa-se:



A TLV, aplicada a esta molécula, consideraria a sobreposição das orbitais  $1s$  de H com cada uma das orbitais de valência semipreenchidas de C, para formar quatro ligações  $\sigma$  (sigma) entre C e H, sugerindo uma geometria plana para a molécula.

Contudo, de acordo com dados espectroscópicos, a geometria da molécula de metano é tetraédrica, com quatro ligações iguais que fazem entre si ângulos de  $109,5^\circ$ , o que não é explicável pela TLV.

Para completar a descrição da molécula do metano, a TLV introduziu o conceito de **hibridação**.

A mecânica quântica sugere que:

- Quando os átomos formam ligações, as suas orbitais atômicas combinam-se originando orbitais híbridas iguais no mesmo átomo;
- O número de orbitais híbridas é igual ao número de orbitais atômicas que se combinam;
- As orbitais híbridas são diferentes na forma e na energia das que lhe deram origem e podem caracterizar-se como se indica na tabela 5.

Orbitais híbridas	
Representação	Caracterização
$sp^3$	<ul style="list-style-type: none"><li>• Resulta da combinação de três orbitais <math>p</math> com uma orbital <math>s</math>, formando quatro novas orbitais denominadas híbridas <math>sp^3</math>, todas com igual energia.</li><li>• A geometria das quatro orbitais <math>sp^3</math> é tetraédrica (as quatro orbitais partem do centro do tetraedro e dirigem-se, cada uma, para um vértice do tetraedro).</li><li>• O ângulo entre as orbitais <math>sp^3</math> é, aproximadamente, de <math>109^\circ</math>.</li></ul>
$sp^2$	<ul style="list-style-type: none"><li>• Resulta da combinação de uma orbital <math>s</math> com duas orbitais <math>p</math>, formando três novas orbitais denominadas híbridas <math>sp^2</math>, todas com igual energia.</li><li>• As três orbitais híbridas <math>sp^2</math> situam-se no mesmo plano formando ângulos de <math>120^\circ</math> entre si – geometria triangular plana.</li><li>• Permitem explicar a formação de ligações duplas entre átomos de carbono.</li><li>• Num átomo de C com hibridação do tipo <math>sp^2</math> resta uma orbital <math>p</math> que participará em ligações covalentes do tipo <math>\pi</math> (<math>\pi</math>).</li></ul>
$sp$	<ul style="list-style-type: none"><li>• Resulta da combinação de uma orbital <math>s</math> com 1 orbital <math>p</math>, formando duas orbitais denominadas híbridas <math>sp</math>, com igual energia.</li><li>• As orbitais híbridas <math>sp</math> formam um ângulo de <math>180^\circ</math> entre si – geometria linear.</li><li>• Permitem explicar a formação de uma ligação tripla entre átomos de carbono.</li><li>• Numa ligação tripla, formam-se uma ligação <math>\sigma</math> (sigma) e duas <math>\pi</math> (<math>\pi</math>).</li></ul>

Tabela 5 – Caracterização de orbitais atômicas híbridas obtidas combinando orbitais  $s$  e  $p$ .

## I. Molécula de metano $CH_4$

A hibridação das orbitais ocorre apenas no átomo de carbono:

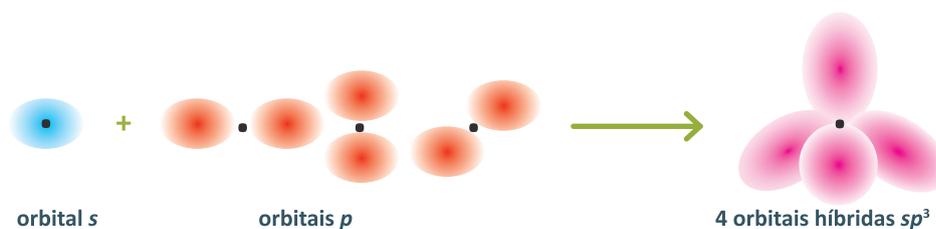


Figura 22 – Formação de orbitais  $sp^3$ .

Agora as orbitais 1s de cada H sobrepõem-se a cada uma das orbitais híbridas  $sp^3$  de C:

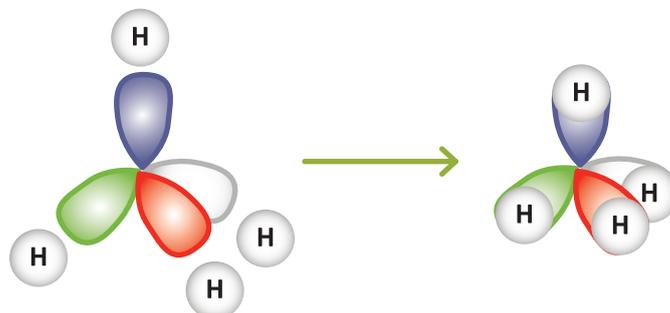


Figura 23 – Formação da molécula de metano,  $CH_4$

## II. Molécula de eteno $C_2H_4$

A hibridação das orbitais ocorre apenas em cada um dos átomos de carbono:

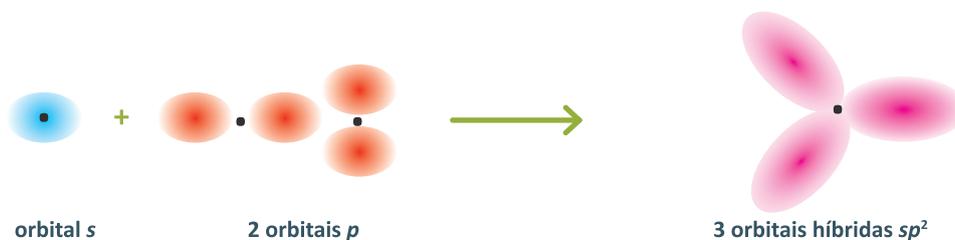


Figura 24 – Formação de orbitais  $sp^2$ .

Agora acontece o seguinte:

- As duas orbitais  $sp^2$ , uma de cada átomo de C, que estão orientadas de frente, sobrepõem-se e formam uma ligação  $\sigma$  (sigma) C-C;
- As orbitais 1s de cada H sobrepõem-se a cada uma das orbitais híbridas  $sp^2$  de C que estão orientadas nas outras direções e formam quatro ligações  $\sigma$  (sigma) C-H;
- As duas orbitais  $p$  que não sofreram hibridação, sobrepõem-se lateralmente e formam uma ligação  $\pi$  (pi).

Entre os átomos de carbono estabelece-se assim uma ligação dupla: 1  $\sigma$  + 1  $\pi$

A figura 25 ilustra a formação das ligações em  $C_2H_4$ .

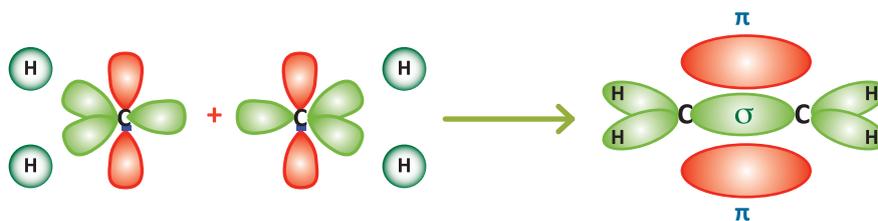


Figura 25 – Formação das ligações  $\sigma$  e  $\pi$  na molécula de eteno,  $C_2H_4$ .

### III. Molécula de etino, $C_2H_2$

A hibridação das orbitais ocorre apenas em cada um dos átomos de carbono.



Figura 26 – Formação de orbitais sp.

Agora acontece o seguinte:

- As duas orbitais sp, uma de cada átomo de C, que estão orientadas de frente, sobrepõem-se e formam uma ligação  $\sigma$  (sigma) C-C;
- As orbitais 1s de cada H sobrepõem-se a cada uma das orbitais híbridas sp de C que estão orientadas nas outras direções e formam duas ligações  $\sigma$  (sigma) C-H;

As quatro orbitais p (duas de cada átomo de C) que não sofreram hibridação, sobrepõem-se lateralmente e formam duas ligações  $\pi$  (pi).

Entre os átomos de carbono estabelece-se assim uma ligação tripla:  $1 \sigma + 2 \pi$

A figura 27 ilustra a formação das ligações em  $C_2H_2$ .

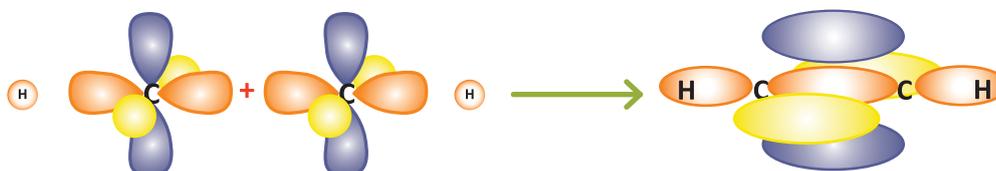
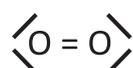


Figura 27 – Formação das ligações  $\sigma$  e  $\pi$  na molécula de etino (acetileno),  $C_2H_2$ .

Apesar da TLV e da sua extensão com a hibridação ser capaz de ultrapassar algumas limitações apontadas à teoria de Lewis, nem todas as estruturas podem ser explicadas por esta teoria. Uma das limitações surgiu com a molécula de oxigénio,  $O_2$ .

#### 1.3.3 Teoria das orbitais moleculares para moléculas simples

O oxigénio ( $O_2$ ) é uma substância **paramagnética**, o que significa que é atraída por campos magnéticos. Contudo, o paramagnetismo é uma propriedade das substâncias cujas moléculas contêm eletrões desemparelhados, cujo valor de *spin* num sentido de rotação é maior do que no sentido inverso, não se anulando assim o efeito magnético dos eletrões, que atuam como pequeníssimos magnetes. A estrutura de Lewis proposta para a molécula desta substância é, como sabemos:



Tanto a teoria de Lewis como a TLV admitiam que todos os eletrões estavam emparelhados. As substâncias cujas moléculas têm os seus eletrões totalmente emparelhados geralmente são repelidas ligeiramente por campos magnéticos e designam-se por **diamagnéticas**. Qual a razão de o oxigénio ser uma substância paramagnética?

A **Teoria das Orbitais Moleculares (TOM)** responde a esta e a outras questões. Nesta teoria, os eletrões ocupam orbitais definidas, chamadas **orbitais moleculares (OM)**, que se estendem por toda a molécula.

- Inicialmente, não se consideram os eletrões de valência dos átomos na molécula;
- Considera-se a combinação de orbitais atómicas de valência vazias;
- Quando dois átomos se aproximam, duas orbitais *s*, duas orbitais *p* orientadas «de topo» ou uma orbital *s* e uma *p*, combinam-se para formar uma **orbital molecular**, designada por **OM  $\sigma$** ;
- Quando dois eletrões emparelhados ocupam essa orbital, formam uma **ligação  $\sigma$** , tal como na TLV;
- Quando dois átomos se aproximam, duas orbitais *p* orientadas «de lado», combinam-se para formar uma orbital molecular, designada por **OM  $\pi$** ;
- Quando dois eletrões emparelhados ocupam essa orbital, formam uma **ligação  $\pi$** , tal como na TLV.

As orbitais moleculares resultam da combinação de orbitais atómicas e só depois serão, ou não, ocupadas por eletrões. Na TLV, os eletrões estão envolvidos na formação das orbitais e não se admitem regiões de ligação sem eletrões. Analisemos agora a formação de algumas espécies simples, à luz da TOM.

### I. Orbitais moleculares na molécula $H_2$

As duas orbitais  $1s$ , representadas na figura 28, combinam-se originando duas orbitais moleculares:

- Uma orbital de menor energia que as orbitais atómicas quando separadas, a **orbital molecular ligante (OML)** que se representa por  $\sigma_{1s}$  e que contribui para aproximar os dois núcleos. A letra  $\sigma$  mantém-se, como na TLV, para representar orbitais que têm densidade eletrónica máxima numa linha imaginária que une os núcleos atómicos. O índice **1s** da letra que representa a orbital  $\sigma$ , evidencia a origem da orbital molecular;
- Uma outra orbital, de energia superior à das orbitais atómicas, designada por **orbital molecular antiligante (OMAL)**, que se representa-se por  $\sigma_{1s}^*$  e que não contribui para aproximar os dois núcleos. O expoente \* na letra  $\sigma$ , indica a natureza antiligante da orbital molecular.

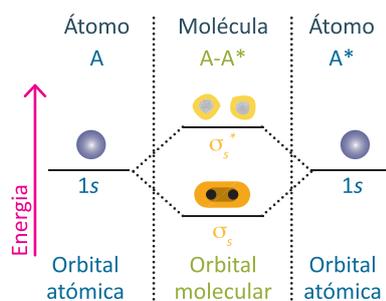


Figura 28 – Formação da molécula de hidrogénio de acordo com a Teoria das Orbitais Moleculares.

Quando os elétrons disponíveis ocupam as orbitais moleculares, segundo os postulados da TOM, fazem-no cumprindo as regras e princípios do preenchimento de orbitais atômicas:

- Princípio da energia mínima;
- Princípio de exclusão de Pauli;
- Regra de Hund.

Deste modo, para a molécula  $H_2$  será:

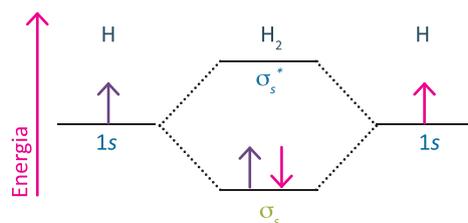


Figura 29 – Formação da molécula de hidrogênio de acordo com a TOM.

A molécula  $H_2$  tem dois elétrons que, segundo as regras e princípios citados ocupam a OML  $\sigma_{1s}$ . A sua configuração eletrónica representa-se:  $\sigma_{1s}^2$

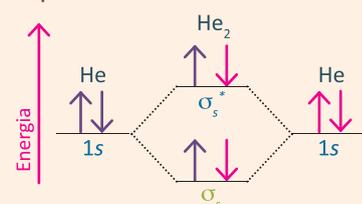
A molécula  $H_2$  existe e é estável, o que está de acordo com a TOM. Esta teoria pode ser usada para prever a existência de algumas moléculas e a inexistência de outras.

## Questão



Elabora um diagrama de energias para a hipotética molécula  $He_2$  e escreve a sua configuração eletrónica.

Resposta:



Configuração eletrónica de  $He_2 - \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2}$

## II. Ordem de ligação

A ordem de uma ligação (OL) entre dois átomos define-se pela expressão:

$$OL = \frac{\text{n}^\circ \text{ de elétrons ligantes} - \text{n}^\circ \text{ de elétrons antiligantes}}{2}$$

- A OL define-se para uma ligação entre dois átomos que a asseguram.
- Os valores da OL podem ser fracionários.

Exemplos:

- 1 - Ordem de ligação para  $H_2$   $OL = \frac{2-0}{2} = 1$  → ligação simples
- 2 - Ordem de ligação para  $He_2$   $OL = \frac{2-2}{2} = 0$  → a molécula não se forma

### III. Ligações em moléculas diatómicas do 2º Período da Tabela Periódica

O nível mais externo dos átomos dos elementos do 2º período da TP (do Lítio ao Néon) comporta orbitais atômicas 2s e 2p. Quando átomos destes elementos se ligam entre si, as ditas orbitais atômicas originam orbitais moleculares.

- As orbitais 2s combinam-se e formam as orbitais moleculares  $\sigma_{2s}$  e  $\sigma_{2s}^*$ , cujas formas são essencialmente as mesmas que as das orbitais moleculares  $\sigma_{1s}$  e  $\sigma_{1s}^*$ .
- As orbitais 2p combinam-se e formam orbitais moleculares diferentes, de acordo com a sua orientação espacial relativa:
  - As orbitais atômicas 2p, orientadas segundo o eixo internuclear, combinam-se originando duas orbitais moleculares do tipo  $\sigma$ , que se representam por  $\sigma_{2p}$  e  $\sigma_{2p}^*$
  - As outras orbitais atômicas 2p, que não estão orientadas segundo o eixo internuclear, combinam-se originando orbitais moleculares do tipo  $\pi$ , respetivamente  $\pi_{2py}$ ,  $\pi_{2py}^*$  e  $\pi_{2px}$ ,  $\pi_{2px}^*$ .

A figura 30 representa as energias relativas destas orbitais, devendo notar-se que a ordem crescente das energias das orbitais moleculares difere para moléculas diatómicas de elementos do 2º período. Assim:

- Da molécula  $Li_2$  até à molécula  $N_2$ , a ordem crescente de energia obedece ao esquema da figura 30 A;
- Da molécula  $O_2$  até  $Ne_2$ , a ordem crescente de energia obedece ao esquema da figura 30 B.

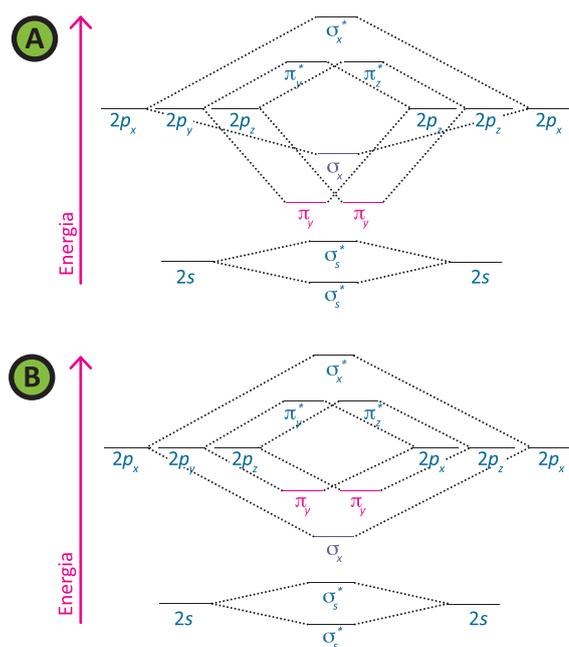


Figura 30 – Ordem das energias das orbitais moleculares para moléculas de elementos do 2º período da TP:  $B_2$ ,  $C_2$  e  $N_2$  (A);  $O_2$ ,  $F_2$  e  $Ne_2$  (B).

Usando o diagrama da figura 30, é possível prever as **configurações eletrônicas** das moléculas diatómicas de elementos do 2º período. Elas obtêm-se usando as mesmas regras e princípios que se utilizaram para estabelecer as configurações eletrônicas de átomos, ou seja, para preencher orbitais atômicas e aplicar a TLV:

- Os elétrons preenchem as orbitais moleculares de menor energia que estiverem disponíveis – princípio da energia mínima;
- Uma orbital molecular só pode ser preenchida no máximo por dois elétrons, cujos *spins* devem estar emparelhados – princípio de exclusão de Pauli;
- Nas orbitais moleculares com igual energia, em primeiro lugar, os elétrons distribuem-se um por cada orbital, mantendo os *spins* desemparelhados e só depois ocupam as orbitais semipreenchidas, emparelhando os *spins* – regra de Hund.

**Exemplos:**

### A molécula de oxigênio, O<sub>2</sub>

O<sub>2</sub> -  $\sigma_{2s}$   $\sigma_{2s}^*$   $\sigma_{2pz}$   $\pi_{2px}, \pi_{2py}$   $\pi_{2px}^*, \pi_{2py}^*$   $\sigma_{2pz}^*$  - ordem crescente de energia das orbitais moleculares

Há 12 elétrons para distribuir de acordo com as regras e princípios atrás enunciados.

**Configuração eletrônica** na molécula de oxigênio:

O<sub>2</sub> -  $\sigma_{2s}^2$   $\sigma_{2s}^{*2}$   $\sigma_{2pz}^2$   $\pi_{2px}^2, \pi_{2py}^2$   $\pi_{2px}^{*1}, \pi_{2py}^{*1}$   $\sigma_{2pz}^{*0}$

A ordem de ligação será:

$OL = \frac{8-4}{2} = 2$ , o que significa que a ligação é **dupla**, assegurada por quatro elétrons ligantes.

Torna-se agora fácil compreender o paramagnetismo do oxigênio, que se explica por haver elétrons desemparelhados ( $\pi_{2px}^{*1}, \pi_{2py}^{*1}$ ) nas suas moléculas, os quais atuam como pequenos magnetes.

### A molécula de nitrogênio, N<sub>2</sub>

N<sub>2</sub> -  $\sigma_{2s}$   $\sigma_{2s}^*$   $\pi_{2px}, \pi_{2py}$   $\sigma_{2p}$   $\pi_{2px}^*, \pi_{2py}^*$   $\sigma_{2pz}^*$  - ordem crescente de energia das orbitais moleculares

Há 10 elétrons para distribuir por estas orbitais, respeitando as regras e princípios atrás enunciadas:

**Configuração eletrônica** da molécula de nitrogênio:

N<sub>2</sub> -  $\sigma_{2s}^2$   $\sigma_{2s}^{*2}$   $\pi_{2px}^2, \pi_{2py}^2$   $\sigma_{2p}^2$   $\pi_{2px}^{*0}, \pi_{2py}^{*0}$   $\sigma_{2pz}^{*0}$

Pode determinar-se a ordem de ligação nesta molécula, que será:

$OL = \frac{8-2}{2} = 3$ , o que significa que a ligação N≡N é tripla, assegurada por 6 elétrons ligantes.

### 1.3.4 Transições eletrônicas entre orbitais e a cor de certas substâncias

Tal como nos átomos, também os elétrons das moléculas podem ser excitados. Deste modo, ocorrem transições eletrônicas entre as orbitais moleculares. Assim, por absorção de energia, os elétrons transitam de orbitais moleculares de menor energia para orbitais moleculares de maior energia. Posteriormente, os elétrons transitam para menores níveis energéticos, emitindo energia com vários comprimentos de onda, tal como acontece com as transições eletrônicas em átomos, referidas em B 1.1.

Em geral, as transições entre orbitais moleculares envolvem radiações ultravioletas (Fig. 31). As de menor energia envolvem orbitais  $\pi$ . Em algumas circunstâncias, pode ocorrer uma das seguintes situações:

- Existem ligações duplas onde está presente o átomo de azoto;
- Existem duas ligações duplas no mesmo átomo de carbono (chamadas **ligações duplas conjugadas**).

Nestes casos, a energia envolvida nas transições é menor e pode, em vez de radiações ultravioletas, envolver radiações visíveis. Isso significa que os compostos onde existem estes tipos de ligações duplas são muitas vezes compostos corados.

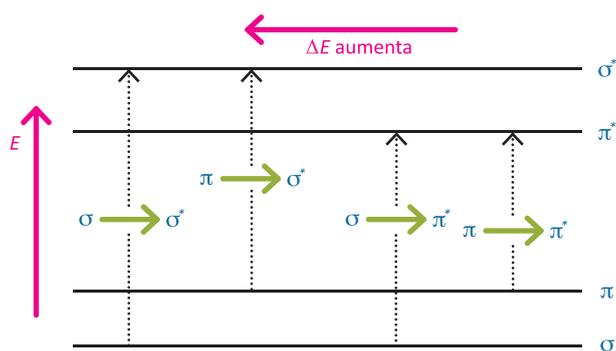
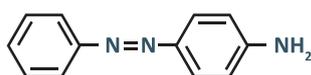


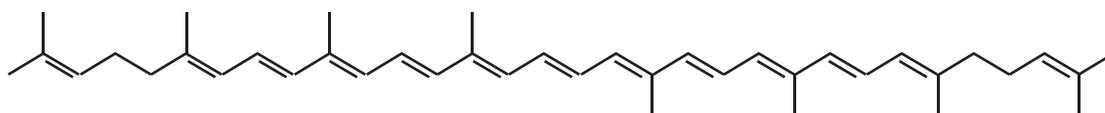
Figura 31 – Transições entre orbitais moleculares; as que envolvem ligações  $\pi$  são as menos energéticas.

Os **azocompostos** são compostos que incluem sempre ligações N=N, que lhes conferem cor. São usados como corantes (chamados *corantes azóicos*). É o caso do amarelo de anilina, um corante amarelo usado, por exemplo, em tintas para impressoras. Por ser muito tóxico e cancerígeno, não pode ser usado como corante de alimentos.



Os **carotenos** são pigmentos orgânicos encontrados em plantas. São constituídos por moléculas com um número variável de ligações duplas conjugadas, que lhes conferem a propriedade de absorver luz visível com comprimentos de onda entre 400 e 500 nm. Por isso, as suas cores vão do amarelo ao vermelho, e são amplamente usados como corantes na indústria alimentar.

O licopeno, composto que dá a cor vermelha a certos vegetais, como o tomate é um caroteno. A sua fórmula de estrutura tem várias ligações duplas conjugadas:



Estes exemplos mostram que os compostos corados são quase sempre compostos insaturados. Reveja-se alguns exemplos de testes colorimétricos rápidos, incluídos em A.1.2 (tabela 3).

## Controlo de Qualidade, Segurança e Saúde

### A cor da água

Numa água superficial podem existir evidências visíveis de poluição, como, por exemplo, peixes ou vegetação morta, crescimento excessivo de algas, manchas de óleo, resíduos a boiar ou espuma persistente.



A cor da água também pode ser usada para avaliar a sua qualidade. A água tem cor azul, embora na maioria das vezes não se note. É necessário observar uma grande massa de água para notar essa tonalidade azul. Se a água apresentar uma cor diferente, pode significar que está poluída.

A - Se a cor da água for castanha, em particular à saída de uma torneira ou conduta, pode indicar a contaminação com ferro.

B - Se a superfície da água apresentar as cores do arco-íris, indica a presença de uma fina camada de óleo ou de combustíveis (gasóleo, gasolina). Esta coloração é devida à interação da radiação visível com essa camada superficial e a fenómenos de interferência.

C - Se a água apresentar cor branca ou cinzenta clara, indica elevada carga poluente, de matéria orgânica e de materiais em suspensão ou dissolvidos, incluindo detergentes. Os detergentes também costumam formar espuma abundante.

D - Se a água apresentar cor verde, estará contaminada com excesso de nutrientes e com algas.

## B.1.4 – Espetroscopia molecular

### 1.4.1 Quantização de energia em moléculas

A energia dos eletrões em átomos e moléculas está quantizada, o que significa que há quantização da energia de orbitais atómicas e moleculares. A absorção de radiações por materiais deve-se a transições de eletrões entre diferentes níveis de energia em átomos ou moléculas que os constituem.