TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (TEV)

Heitler y London 1927

Pauling

BASES:

Los electrones de enlace están localizados en la región de solapamiento de los orbitales atómicos.

Para que se produzca el enlace debe existir apareamiento de electrones: Los orbitales atómicos que solapan deben tener electrones desapareados.

Un átomo puede formar tantos enlaces covalentes como electrones desapareados posea o puedan desaparearse, siempre que la energía

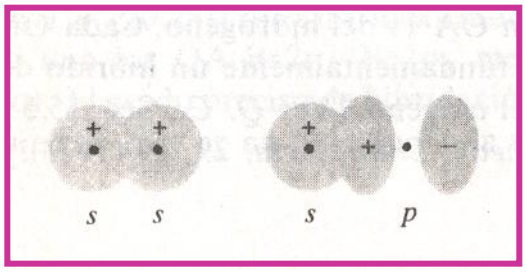
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

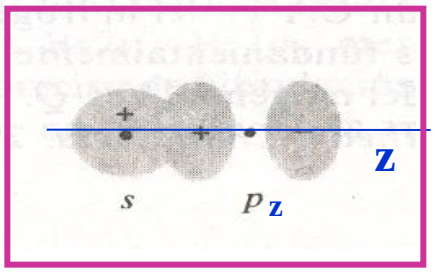
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

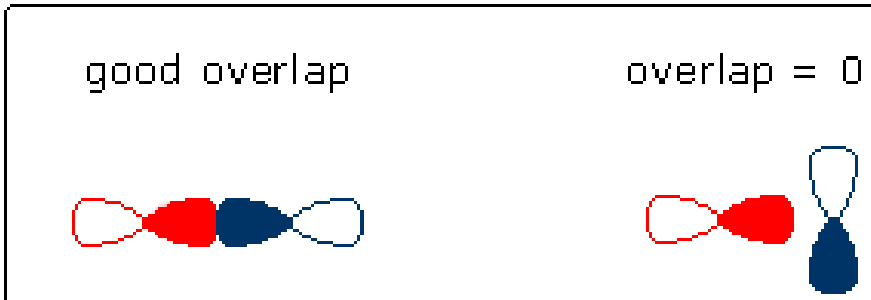
CONDICIONES QUE DEBEN CUMPLIR LOS ORBITALES PARA UN SOLAPAMIENTO EFECTIVO:

-**Los orbitales de los átomos que participan en el enlace han de ser de energía semejante y de simetría adecuada.**

-**Las funciones de onda correspondientes a dichos orbitales atómicos han de tener el mismo signo matemático.**







Cartagena99

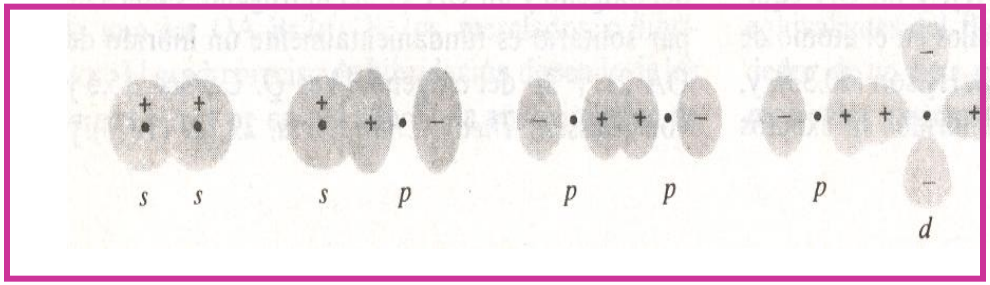
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

los orbitales atómicos correspondientes.

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

TIPOS DE ENLACE: (eje Z)

-ENLACE σ: solapamiento frontal de los orbitales atómicos. Densidad electrónica entre los núcleos.



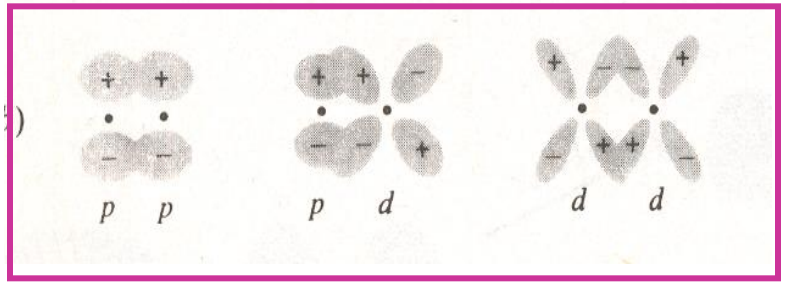
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU
Universidad
San Pablo

-ENLACE π: solapamiento lateral de los orbitales, en dirección perpendicular a la del enlace: plano nodal en la línea del enlace.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

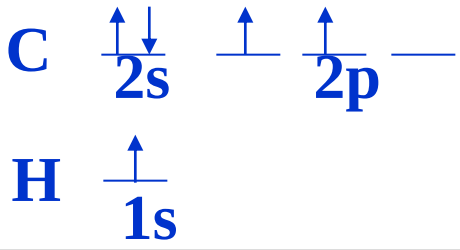
CEU Universidad San Pablo

HIBRIDACIÓN DE ORBITALES ATÓMICOS

La simetría de los O.A. marca la formación y dirección del enlace, con lo que se puede averiguar algo de la geometría molecular, pero hay muchos ejemplos que no se pueden explicar por solapamiento de O.A.

→ ***Uso de orbitales híbridos.***

Ejemplo: CH_4



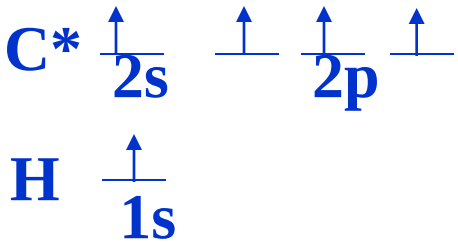
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

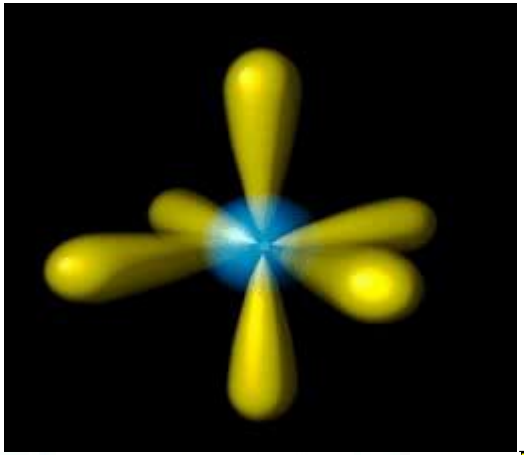
solo podrían formarse dos enlaces C-H.

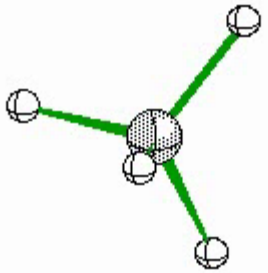
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Son necesarios cuatro electrones desapareados en el átomo de carbono para explicar la formación de cuatro enlaces
C-H



Según la TEV: tres enlaces C-H equivalentes. HCH = 90°.
Cuarto enlace, posición no Equivalente.HCH = 135°





Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

HIBRIDACIÓN

Concepto: Es la combinación lineal de dos o más orbitales atómicos no equivalentes de un átomo (átomo central) para generar un conjunto de nuevos orbitales atómicos equivalentes llamados orbitales híbridos.

Reglas para la hibridación:

1.- El numero de orbitales atómicos híbridos es igual al número de orbitales atómicos puros que se combinan.

2.- Los orbitales híbridos representan estados excitados del átomo, lo que exige un suministro de energía previo a la formación del

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

3.- Al "colocar" los electrones en los nuevos orbitales atómicos híbridos el átomo puede pasar a encontrarse en un estado más energético que usando orbitales atómicos "puros".
A esta diferencia de energía se la denomina *energía de promoción.*

4.- Los orbitales híbridos son direccionales, presentan por tanto una determinada orientación. Cada hibridación está relacionada con una determinada geometría.

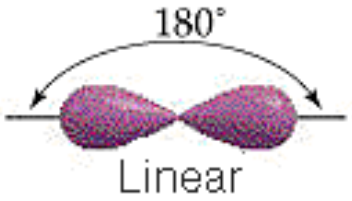
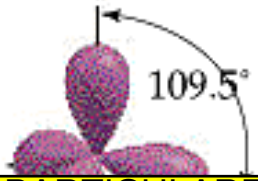
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

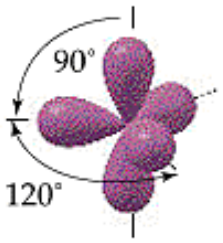
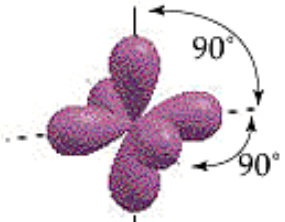
Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
sp	Two *sp*	 Linear	BeF_2, $HgCl_2$
spp	Three sp^2	Trigonal planar	BF_3, SO_3
sppp	Four sp^3		CH_4, NH_3, H_2O, NH_4^+

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
spppd	Five sp^3d	 Trigonal bipyramidal	PF_5, SF_4, BrF_3, $SbCl_5^{2-}$
spppdd , *d*	Six sp^3d^2		SF_6, ClF_5, XeF_4, PF_6^-

Cartagena99

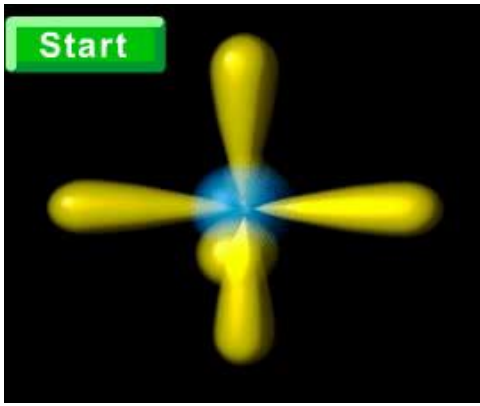
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

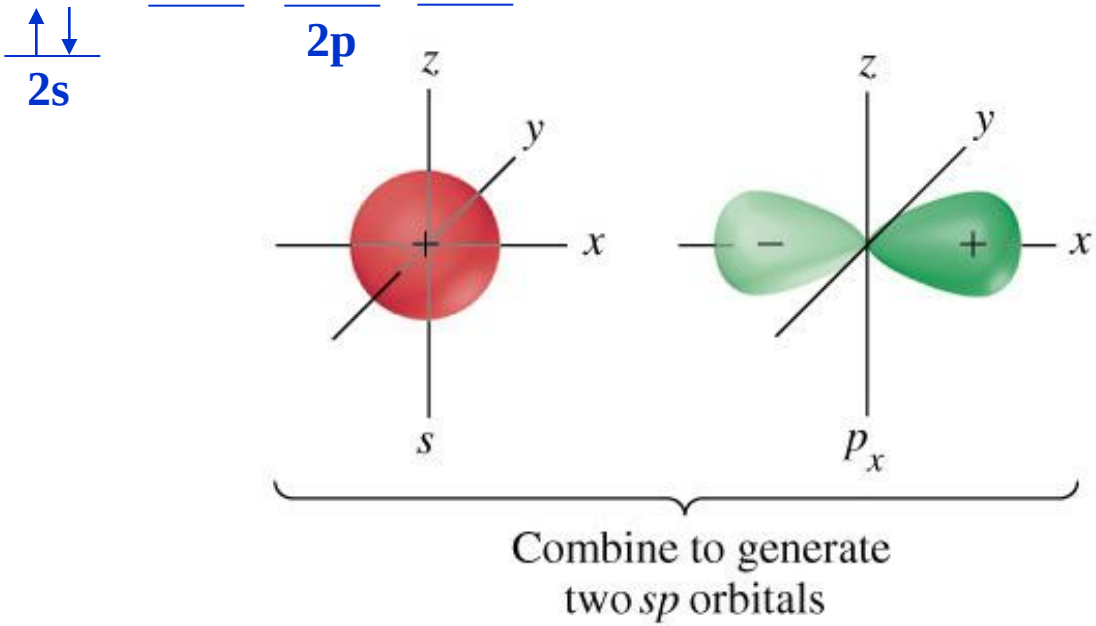
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

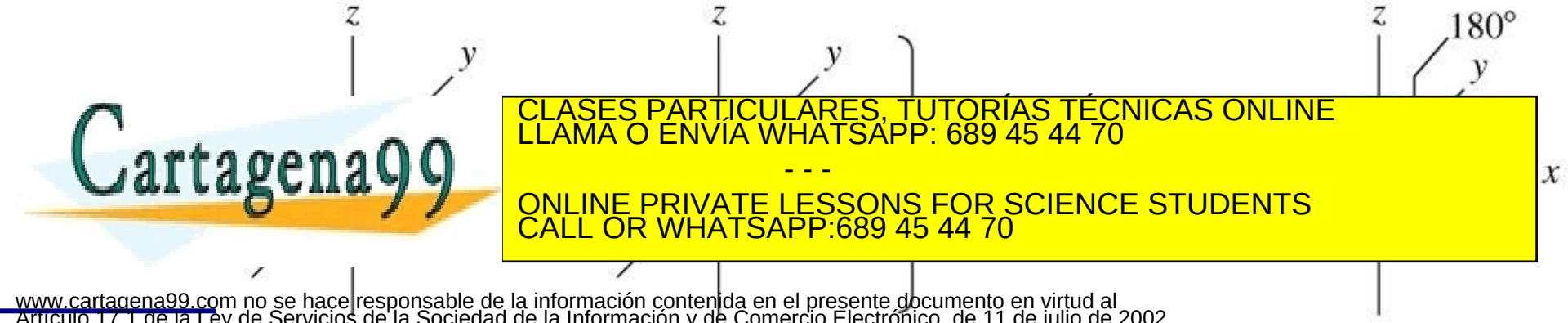
Hibridación *sp*

Ejemplo: $BeCl_2$

Be: $[He]2s^2$ **Cl:** $[Ne]3s^23p^5$





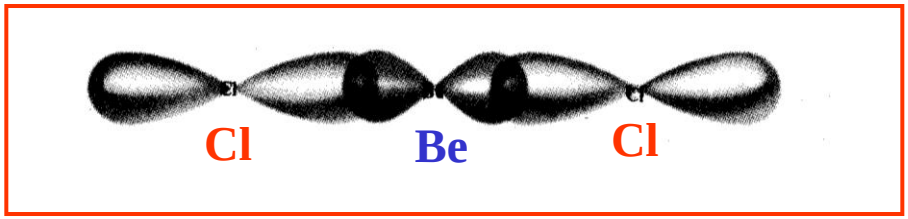


Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Cada enlace BeCl está formado por el solapamiento de un Orbital híbrido *sp* del Be y un orbital *3p* del Cl.



GEOMETRIA LINEAL

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

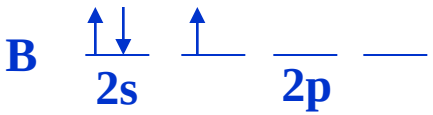
CEU Universidad San Pablo

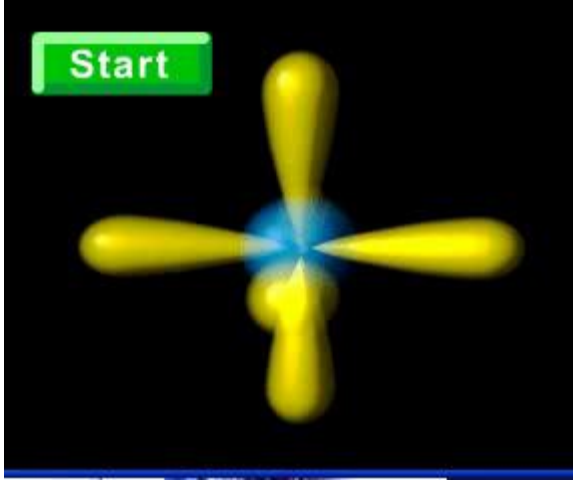
Hibridación sp^2

Ejemplo: BF_3

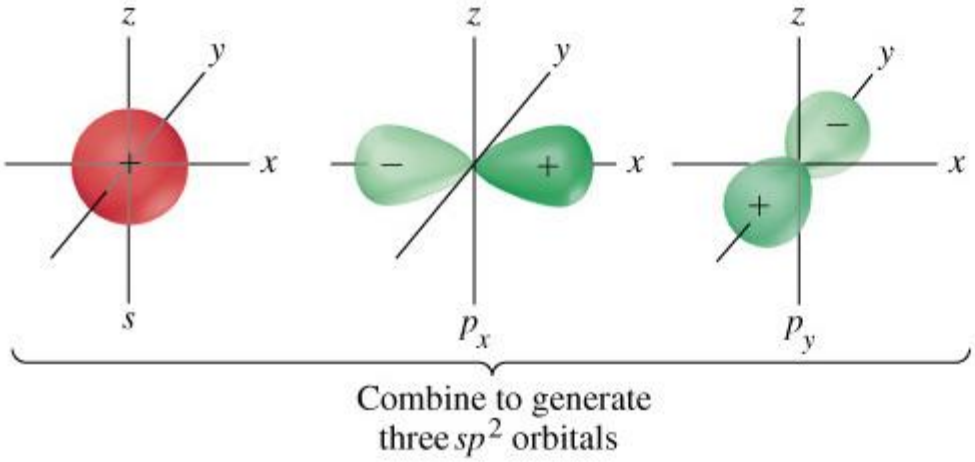
B: $[He]2s^2 2p^1$

F: $[He]2s^2 2p^5$





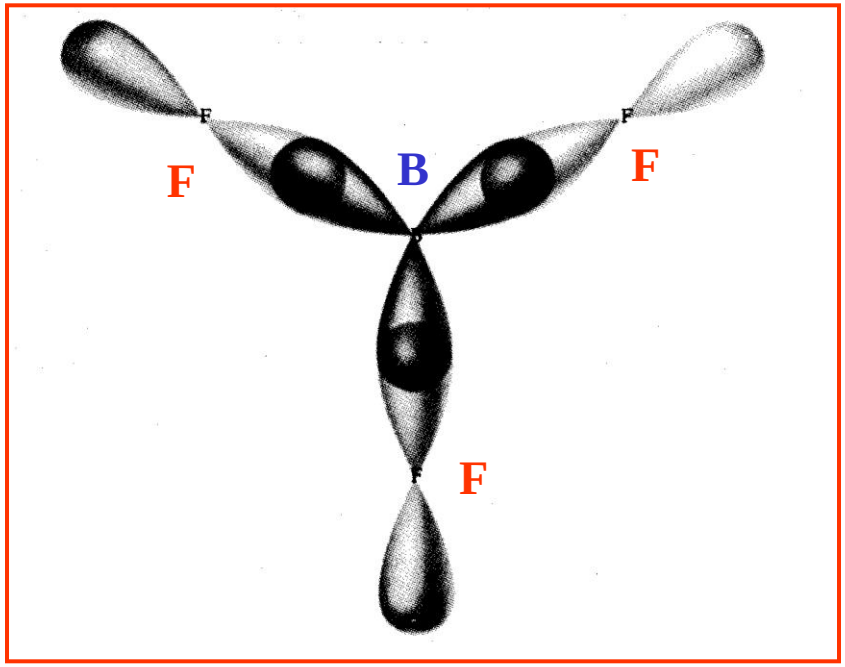
Formación de orbitales híbridos sp^2:



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

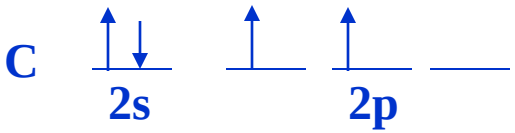
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

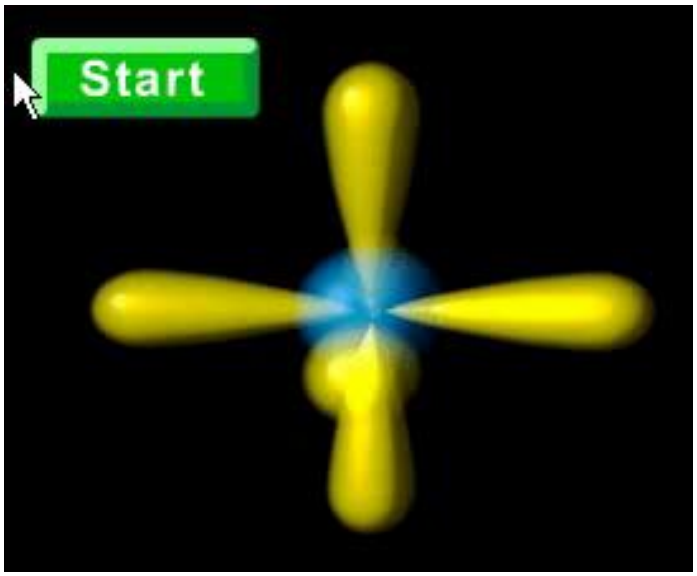
Hibridación sp^3

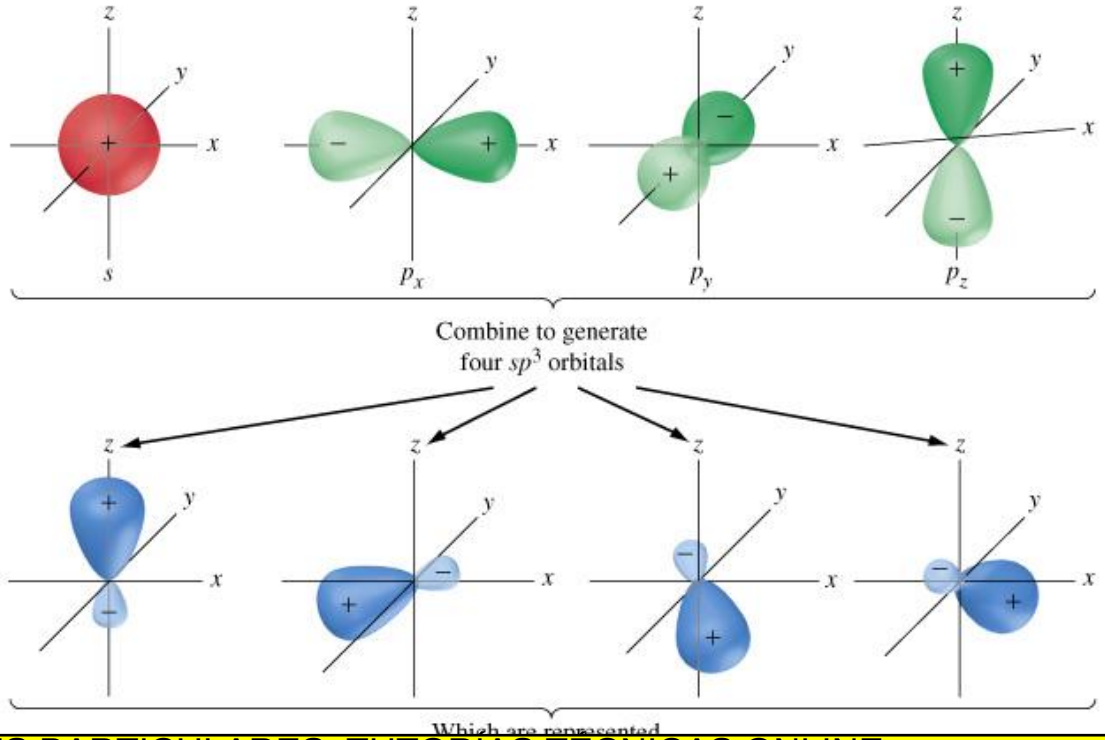
Ejemplo: CH_4

C:[He]$2s^2 2p^2$



Formación de orbitales sp^3:





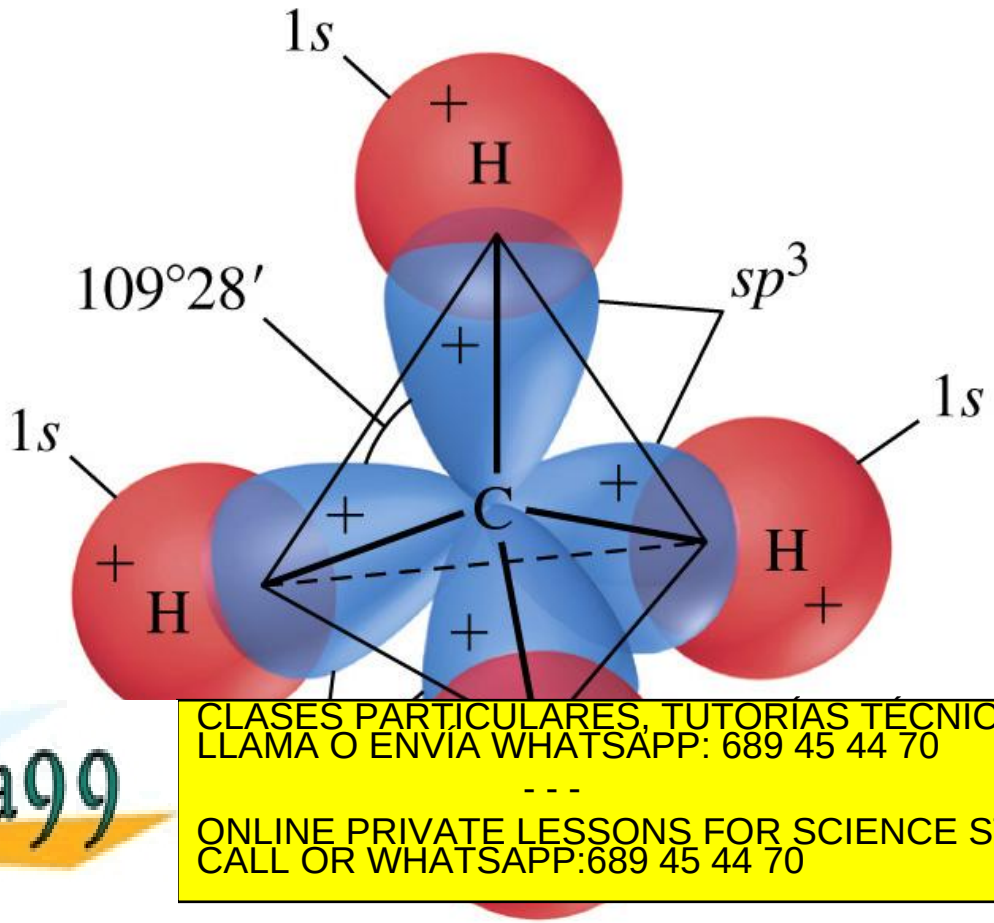
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

La molécula se explica por solapamiento de los orbitales sp^3 con los orbitales *s* de los átomos de hidrógeno.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU Universidad San Pablo

Elementos del tercer periodo y siguientes:

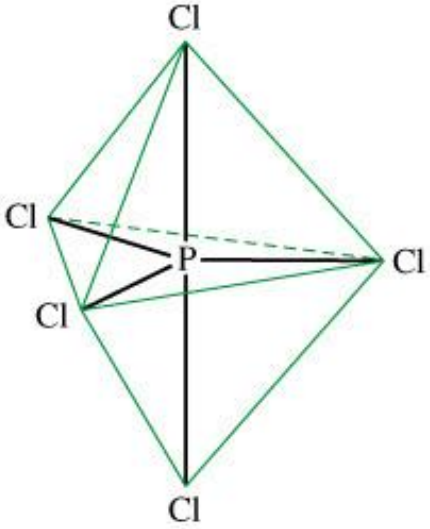
Necesario incluir orbitales *d* para las siguientes geometrías:

- **Plano-cuadrada (dsp^2)**
- **Bipirámide trigonal, (sp^3d o dsp^3)**
- **Octaédrica. (d^2sp^3 o sp^3d^2)**

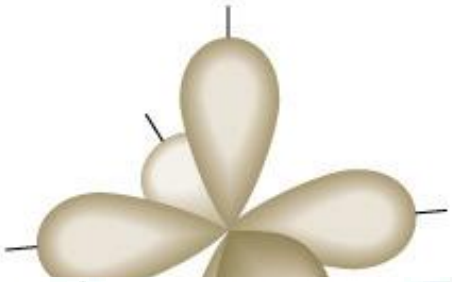
Cartagena99

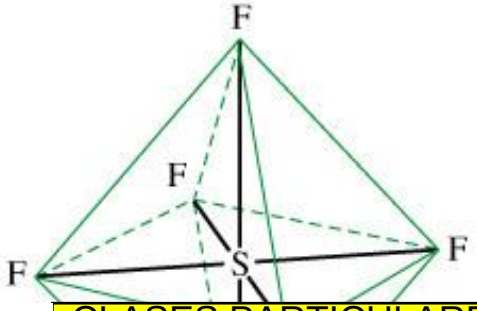
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.



(a) sp^3d orbitals Trigonal-bipyramidal structure





(b) sp^3d^2 orbitals Octahedral structure

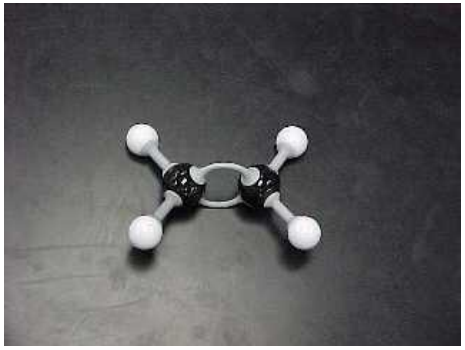
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

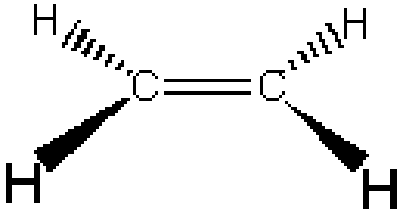
HIBRIDACIÓN EN MOLÉCULAS CON DOBLES Y TRIPLES ENLACES

CEU Universidad San Pablo

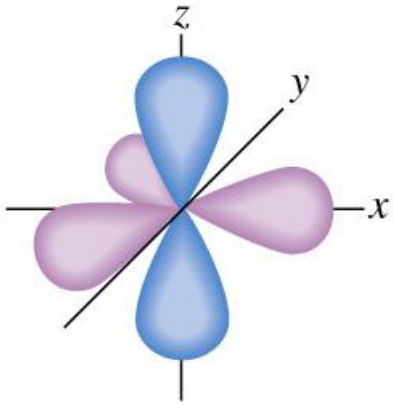
Ejemplo: C_2H_4



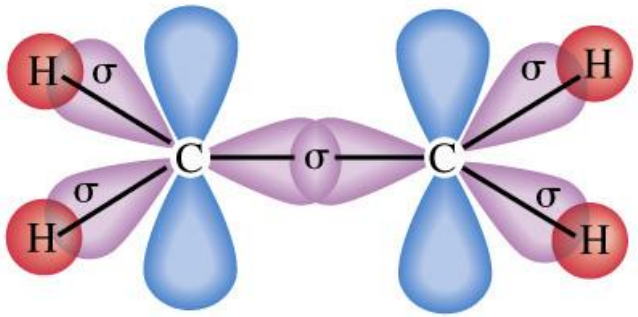
C: Hibridación sp^2



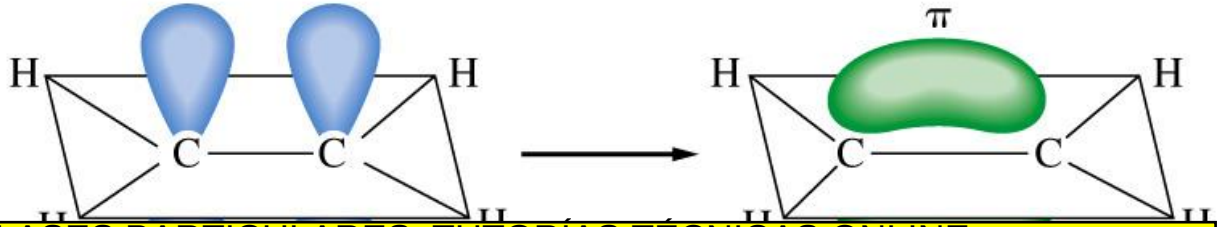
Enlace



The set of orbitals $sp^2 + p$



Sigma (σ) bonds



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Dos tipos de enlaces covalentes:

-Solapamiento frontal: enlace σ. La densidad electrónica se concentra en el espacio situado entre los dos núcleos enlazados en la dirección del enlace.

-Solapamiento lateral: enlace π. La densidad electrónica se concentra entre los dos núcleos por encima y por debajo del plano

Cartagena99

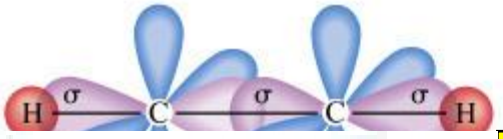
CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

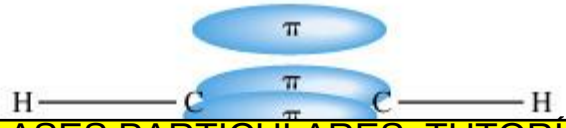
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Ejemplo: C_2H_2

Geometría lineal y enlaces

Hibridación *sp* en los átomos de carbono.

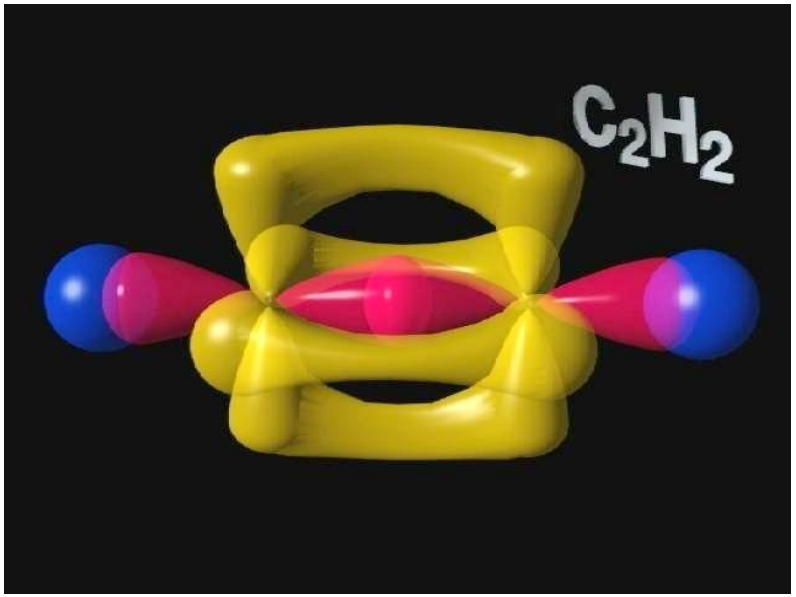




Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES

Surge por extensión de la mecánica cuántica a los sistemas Químicos.

Intenta explicar fallos de la TEV: Ej

Considera todos los electrones de la molécula como pertenecientes a toda la molécula.

Diferencias en el enlace entre la TEV y la TOM

TEV:

Enlaces localizados entre dos átomos.

Solapamiento de orbitales atómicos

TOM:

Orbitales extendidos a toda la molécula.

Se forman orbitales moleculares

Se forman orbitales σ y π.

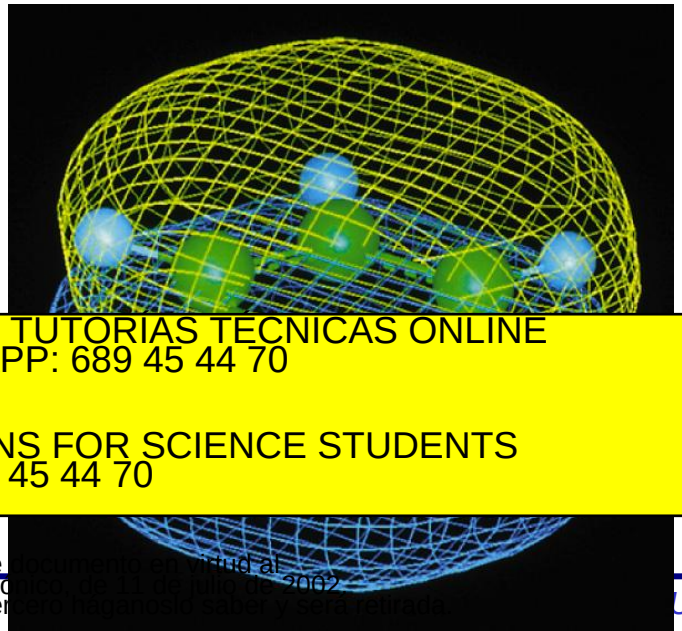
CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

TOM: Considera los núcleos en posiciones de equilibrio y a los electrones ocupando orbitales que pertenecen al conjunto del sistema.

ORBITAL MOLECULAR: Espacio en el que es posible encontrar un electrón de energía específica en la vecindad de dos o más núcleos que se hallan enlazados.

Los ORBITALES MOLECULARES están definidos por las correspondientes FUNCIONES DE ONDA y unos valores de energía.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero hagándolo saber y será retirada

La función de onda que describe un orbital molecular se obtiene por *combinación lineal* de la función de onda de un orbital atómico de un átomo con la función de onda de un orbital atómico del otro átomo con el que forma enlace.

O.M. Se obtiene por C.L.O.A. De los átomos que forman la molécula.

n OA ⟹ n OM

Orbitales moleculares

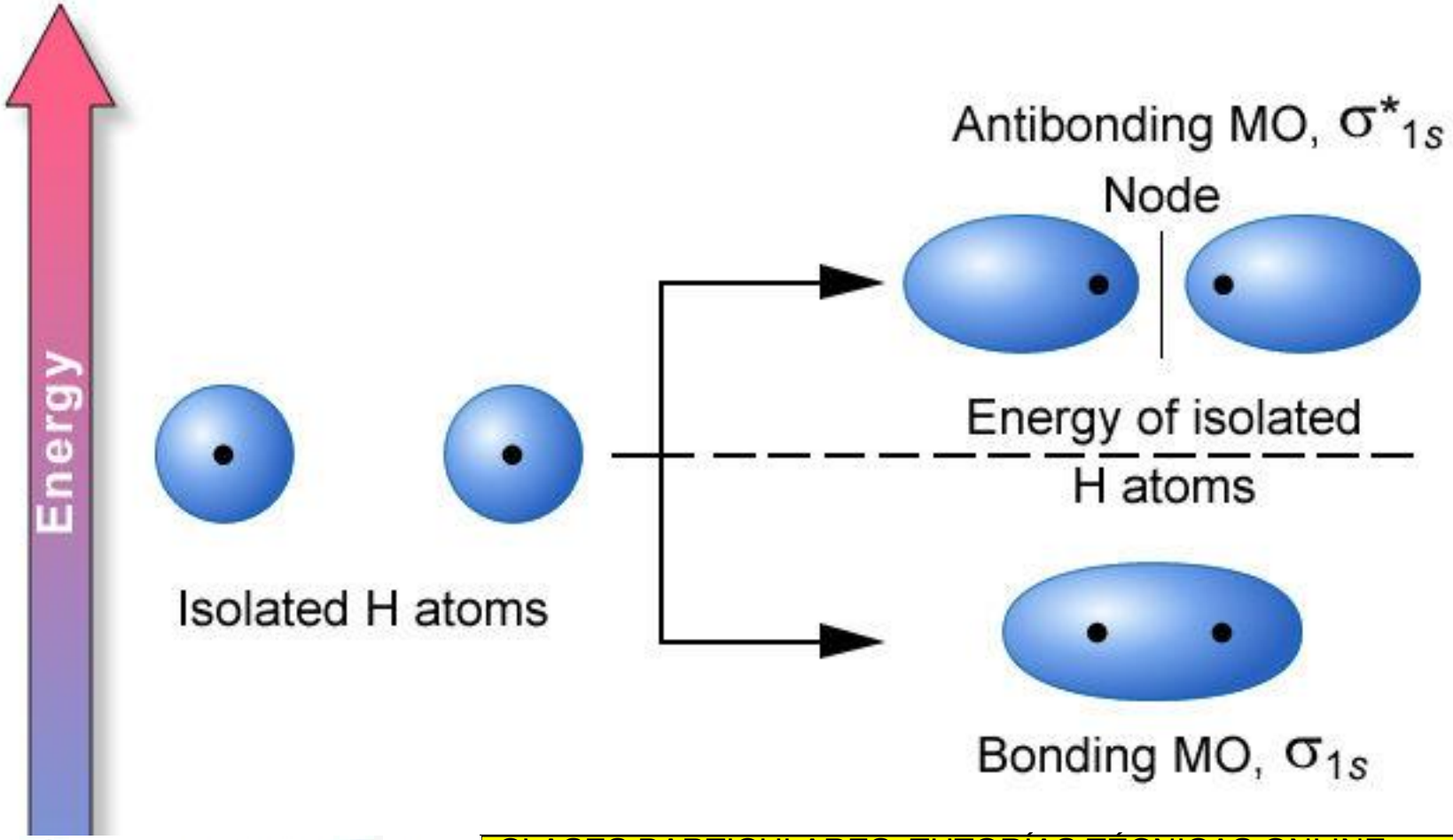
ENLAZANTE	**S>0**
ANTIENLAZANTE	**S<0**
NO ENLAZANTE	**S=0**

$$S_{ij} = \int \psi_i \, \psi_j \, dx$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

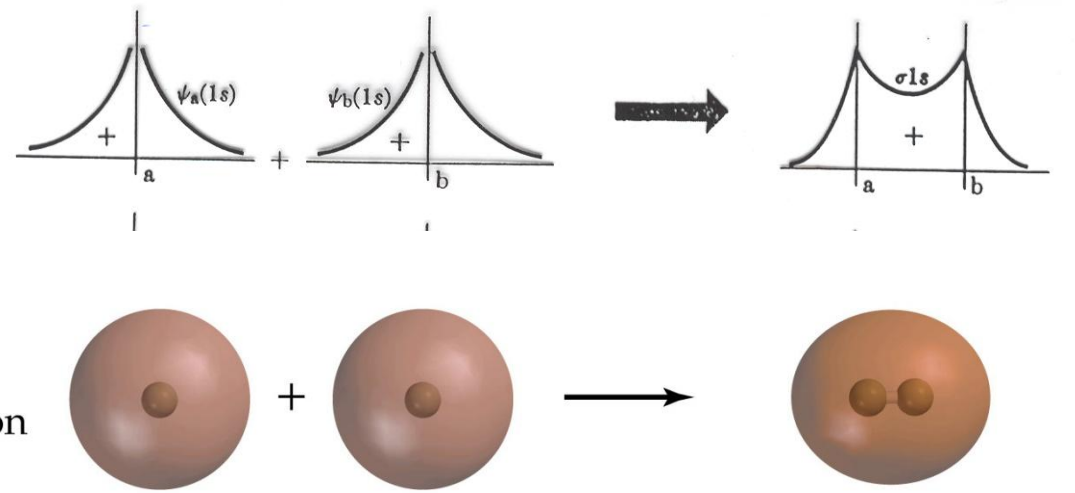
©NCSSM 2003

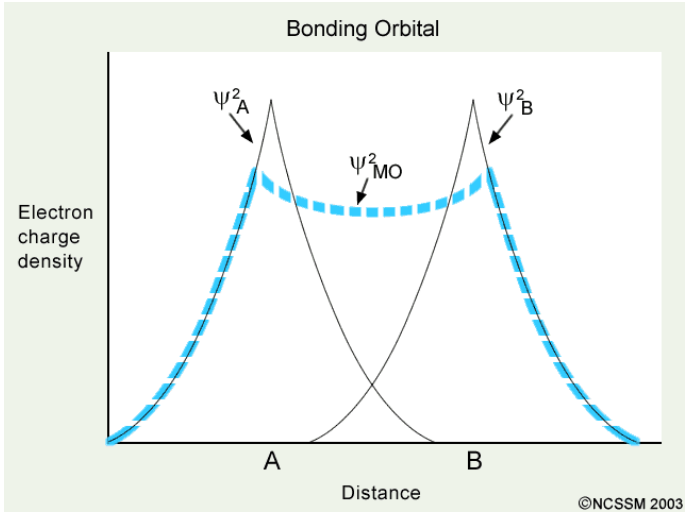
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

ORBITAL MOLECULAR ENLAZANTE:

Se refuerzan entre sí las Ψ de los átomos que lo componen en la región situada entre los núcleos: acumulación de densidad electrónica entre los núcleos.

Disminuye la energía potencial coulombica del sistema.





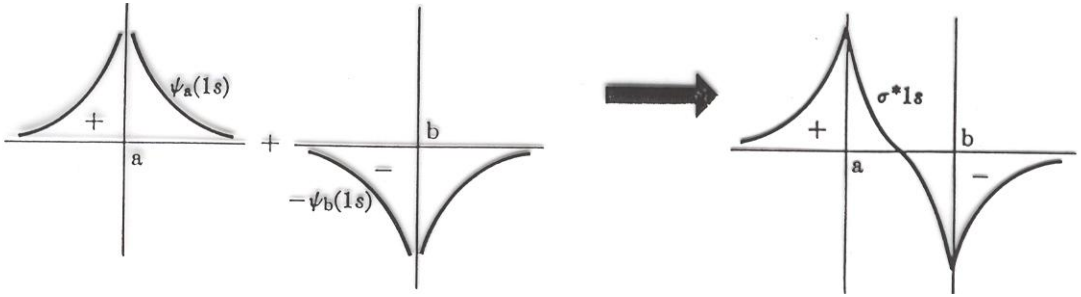
Cartagena99

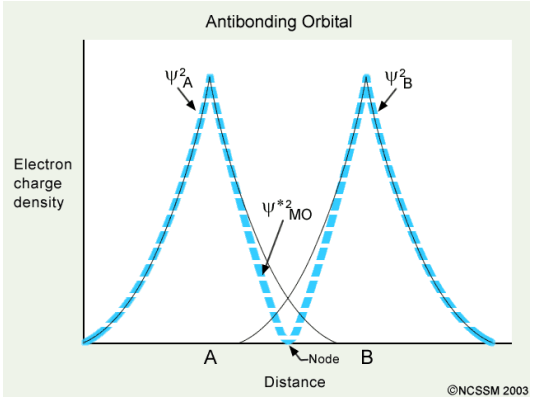
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

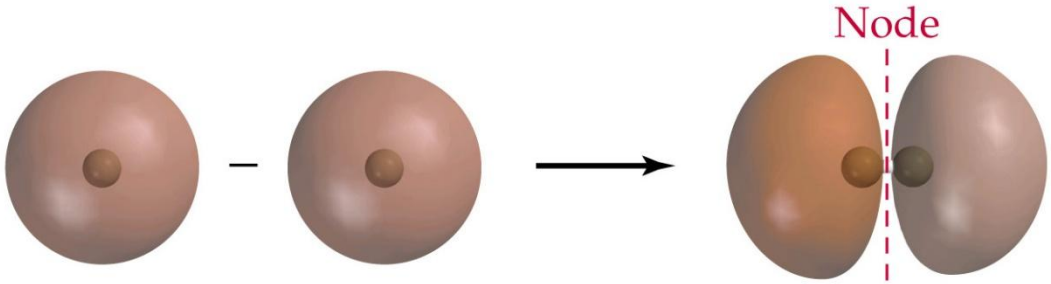
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

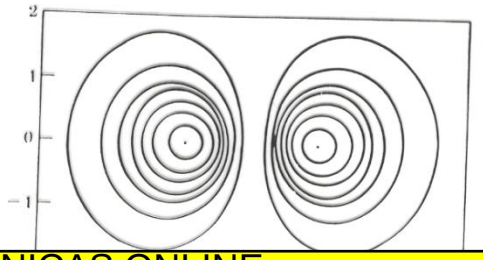
ORBITAL MOLECULAR ANTIENLAZANTE:

Se anulan las Ψ de los átomos que lo componen en la región situada entre los núcleos produciéndose un *nodo*: deficiencia de densidad electrónica entre los núcleos.
Aumenta la energía potencial coulombica del sistema.









Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

CEU
Universidad
San Pablo

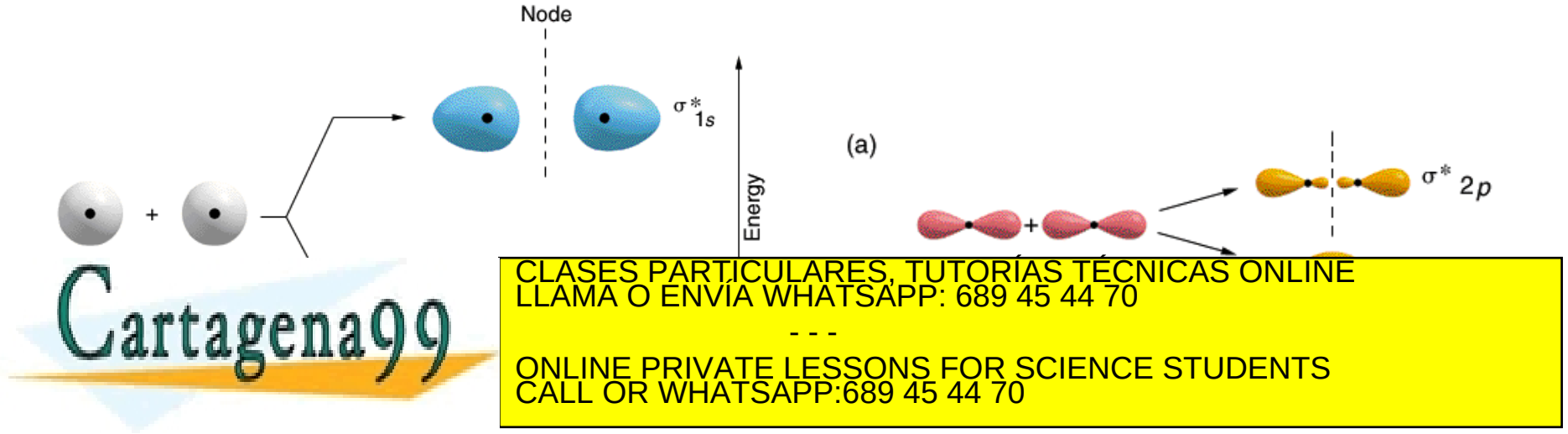
TIPOS DE ORBITALES MOLECULARES:

ORBITAL MOLECULAR σ:

Presenta simetría de revolución sobre el eje que une los núcleos de los átomos enlazados.

Los orbitales *s* siempre forman OM σ.

Los orbitales *p* forman OM σ si solapan frontalmente.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

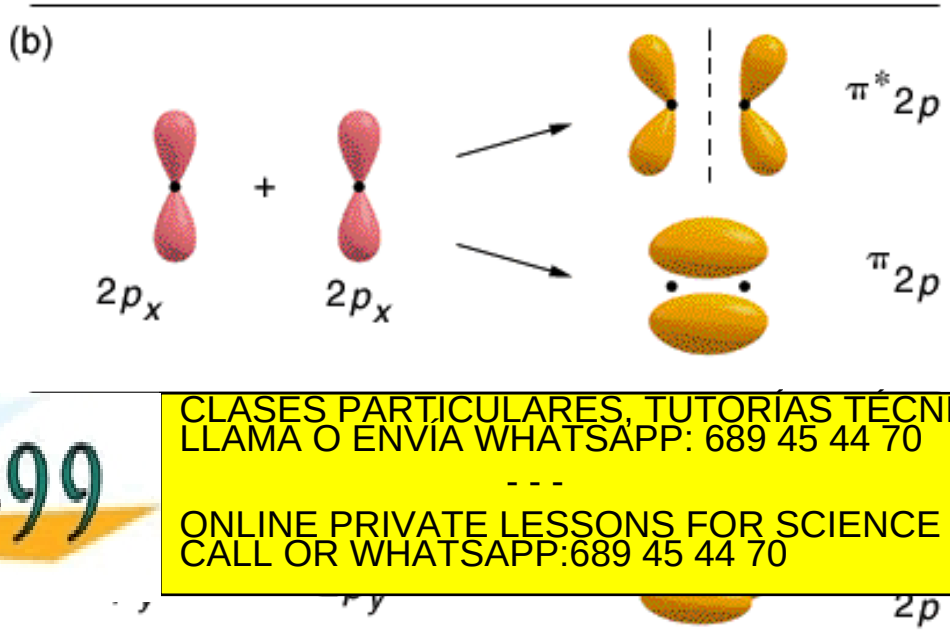
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

ORBITAL MOLECULAR π :

La densidad electrónica se concentra por encima y por debajo de la línea de unión de los átomos enlazados.

Plano nodal que contiene a los núcleos.

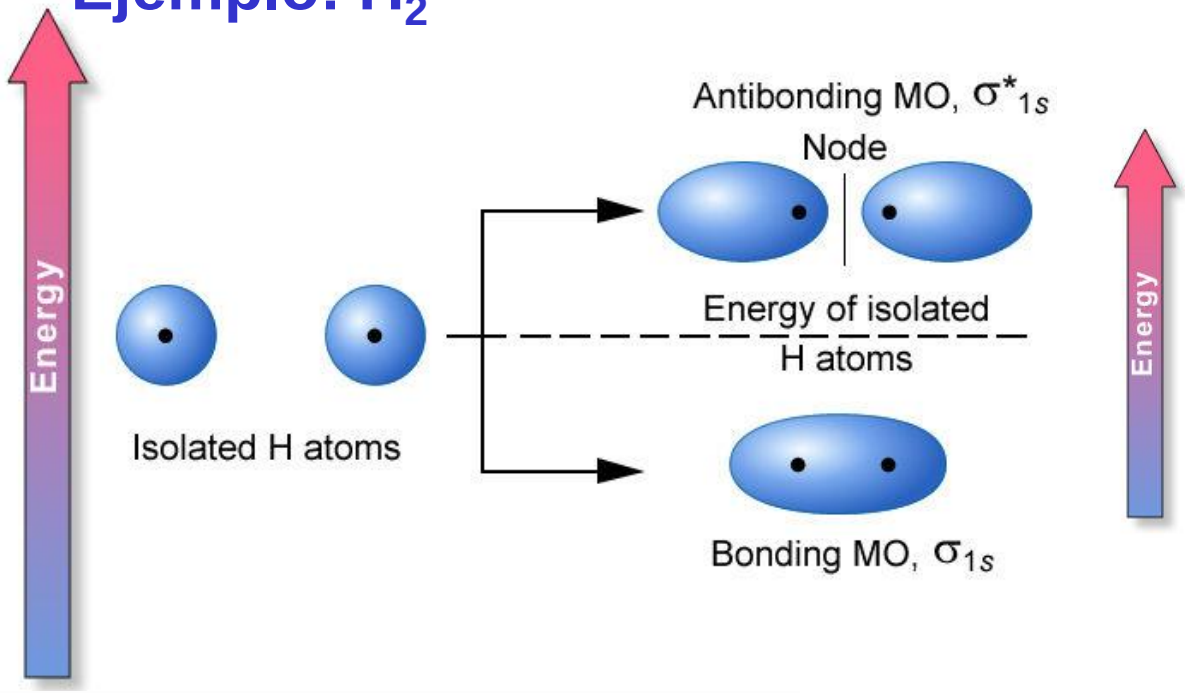
Los orbitales p forman OM π si solapan lateralmente.

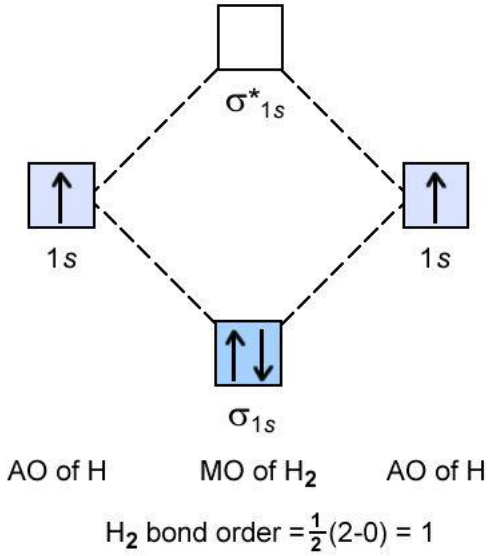


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

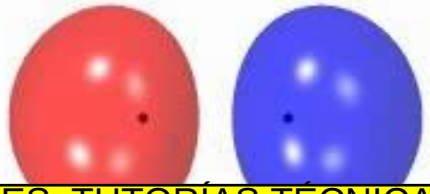
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Ejemplo: H_2





©NCSSM 2003



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Configuración electrónica molecular:

1.-El número de orbitales moleculares es igual al número de orbitales atómicos que se combinan.

2.-Los orbitales moleculares se construyen por CLOA de energía similar y simetría adecuada.

3.-El centro de gravedad de energía de los orbitales atómicos se conserva al realizar la CLOA. La combinación de OA es tanto más eficaz cuanto más próximos en energía estén los OA que se combinan.

Cartagena99
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

5.-En una molécula estable el número de electrones en OM enlazantes es siempre mayor que el número de electrones en orbitales moleculares antienlazantes.

6.-Cada orbital molecular acomoda dos electrones con espines opuestos (principio de exclusión de Pauli).

7.-Cuando se sitúan electrones en orbitales moleculares degenerados, la distribución más estable es la que permite mayor desapareamiento de espines (regla de Hund).

8.-El número de electrones en los orbitales moleculares

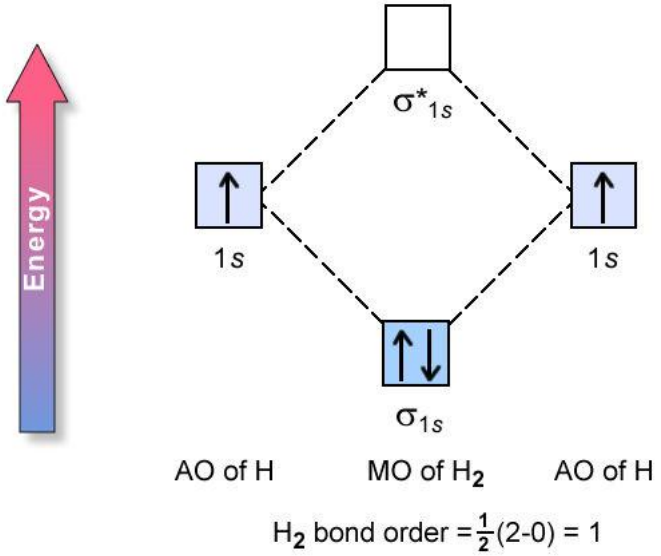
Cartagena99

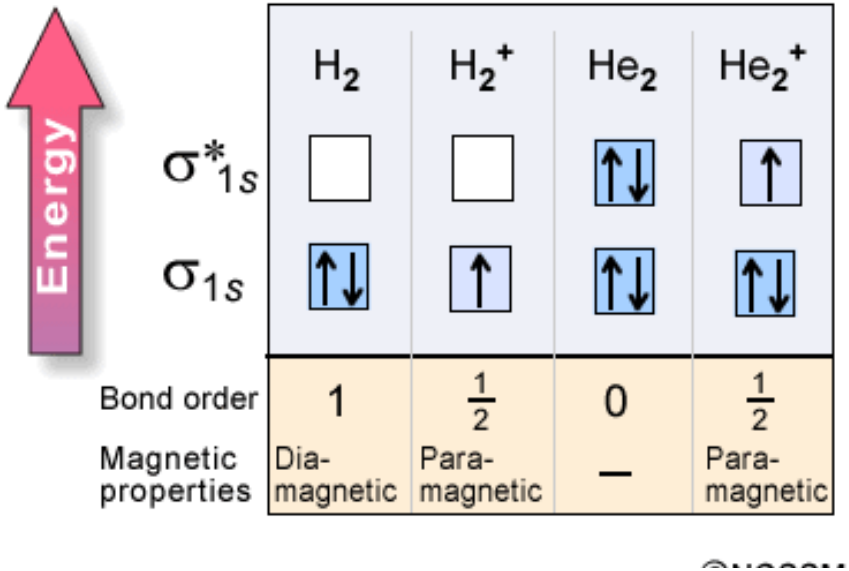
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Estabilidad relativa de las moléculas:

En una molécula estable el número de electrones en los orbitales moleculares enlazantes es siempre mayor que el número de electrones en orbitales moleculares antienlazantes.





En la TOM la estabilidad de un enlace covalente está relacionado con

Util a efectos cualitativos

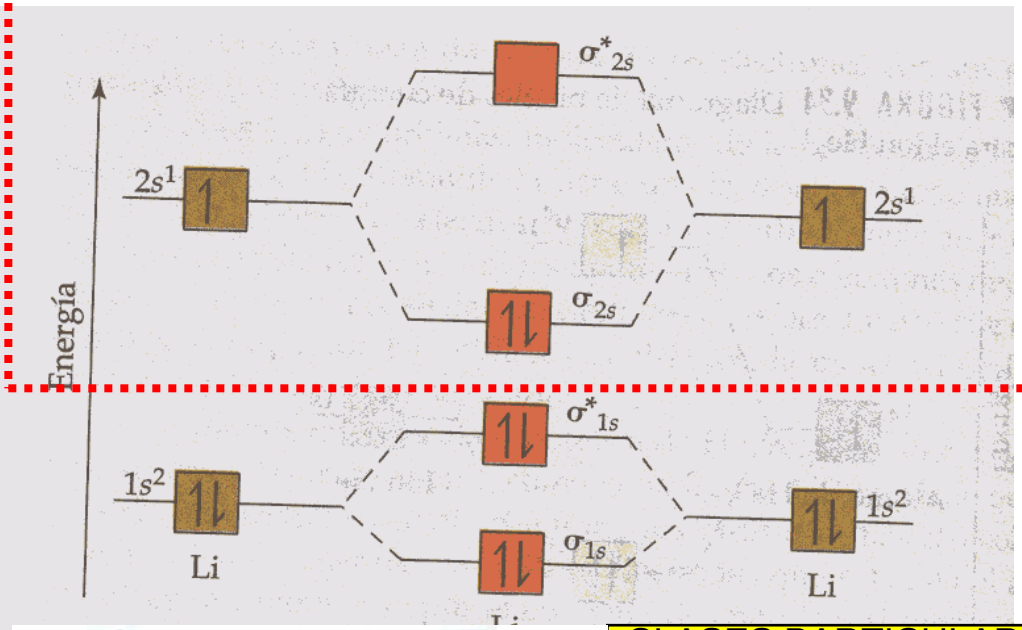
Cartagena99

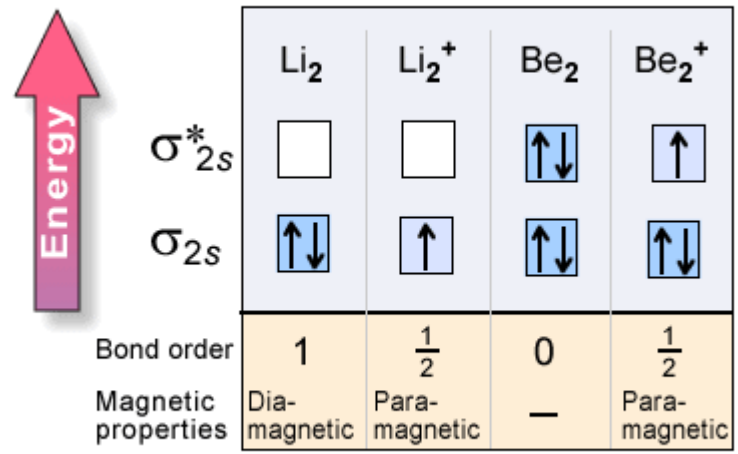
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

MOLÉCULAS DIATÓMICAS HOMONUCLEARES DEL SEGUNDO PERIODO (A_2)

Hasta ocho electrones: Li_2 y Be_2
Li_2: Li c.e. $1s^2 2s^1$
Diagrama de niveles de energía Li_2





©NCSSM 2003

Li_2: $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2$ o.e = 1
molécula estable, diamagnética.
Experimentalmente 1347ºC

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

0.
No existe.

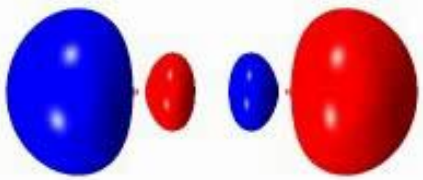
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

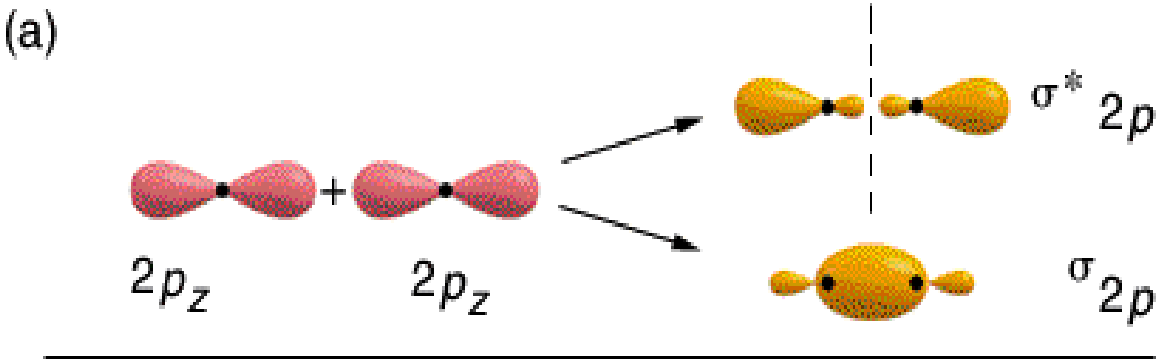
CEU Universidad San Pablo

Más de ocho electrones B_2, C_2, N_2, O_2, F_2.

Es necesario considerar los OA 2p.
Modos de interacción de los orbitales atómicos 2p:

Eje internuclear de referencia *eje z*.

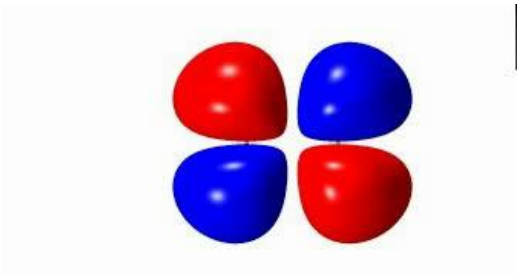


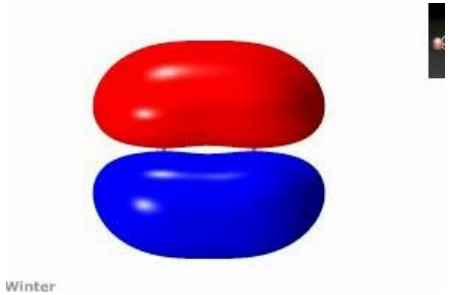


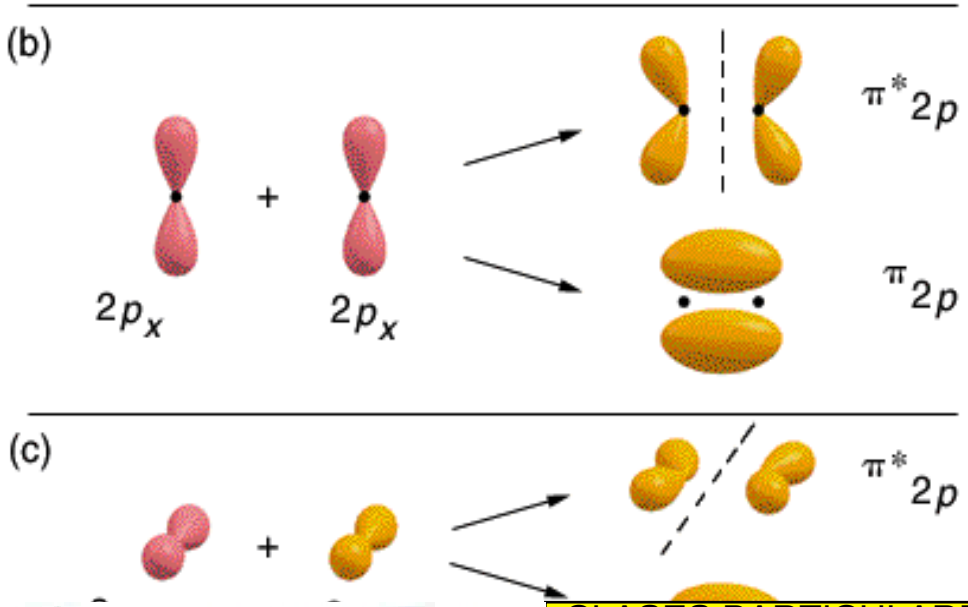
Cartagena99

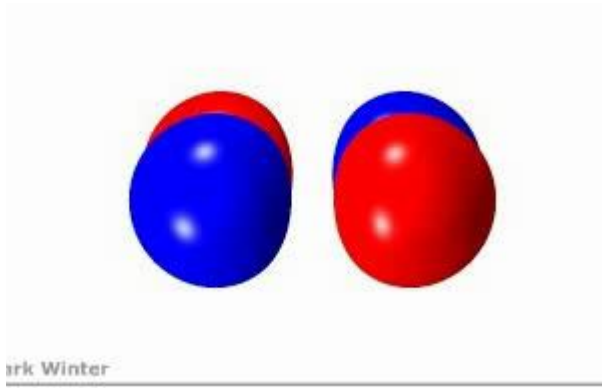
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.









Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Configuraciones electrónicas del B_2 al F_2

En general:

Los OM σ_{2s} y σ_{2s}* tienen menor energía que el OM de más baja energía que se deriva de los OA 2p.

El OM σ_{2p} tiene menor energía que los OM π_{2p} y el OM σ_{2p}* tiene mayor energía que los OM π_{2p}*.

Los OM π_{2p} y π_{2p}* son doblemente degenerados.

Cartagena99

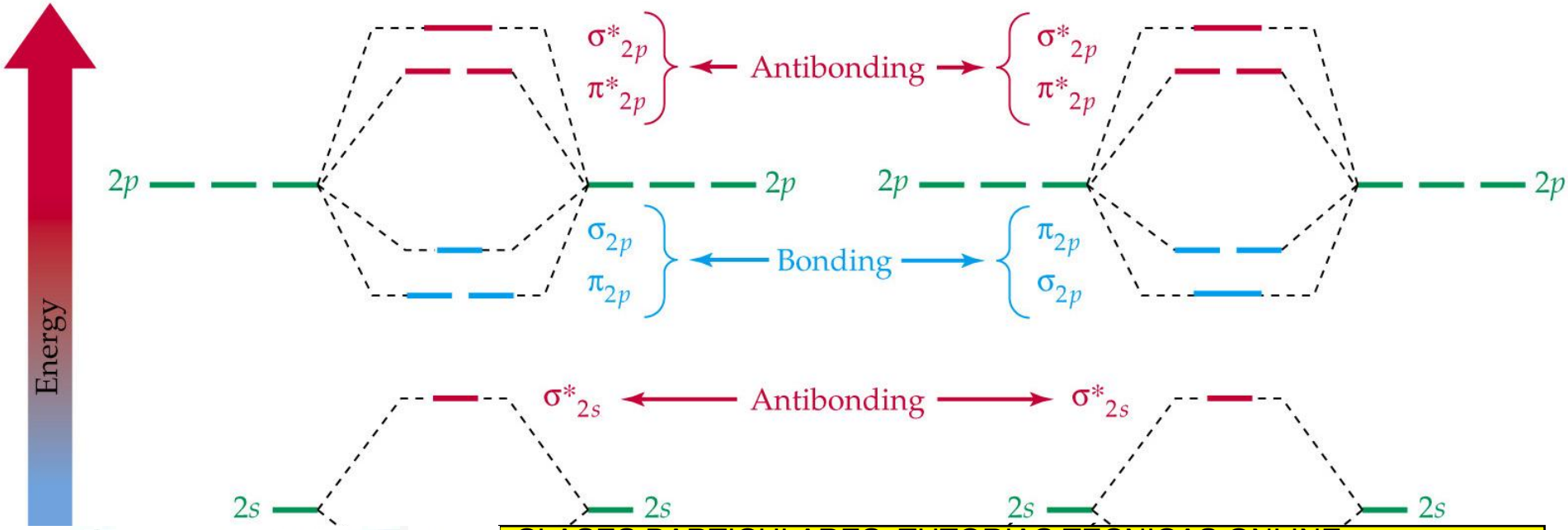
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Diagrama general de niveles de energía para los OM de las moléculas diatómicas homonucleares del segundo periodo.

Con interacción entre los OA 2s y 2p de distintos átomos:

Sin interacción entre los OA 2s y 2p de distintos átomos:

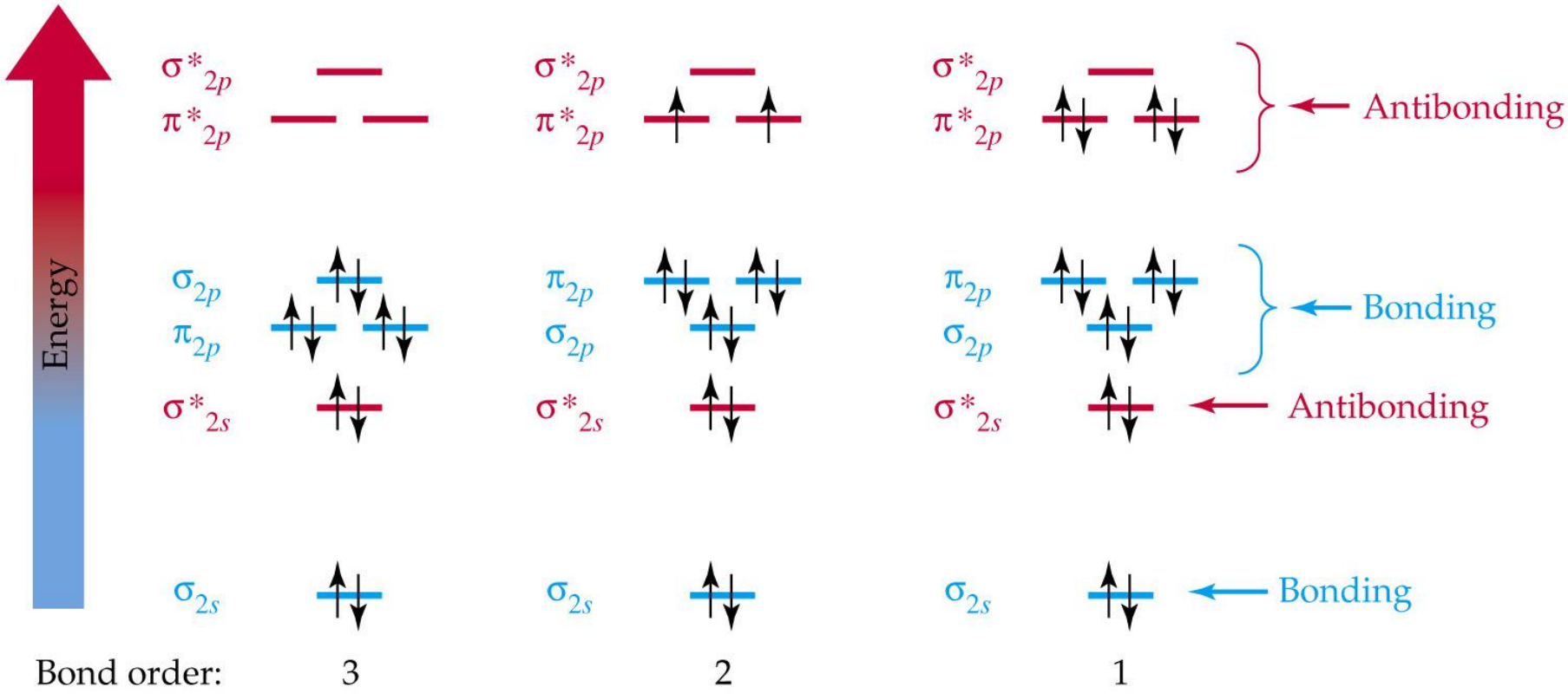


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

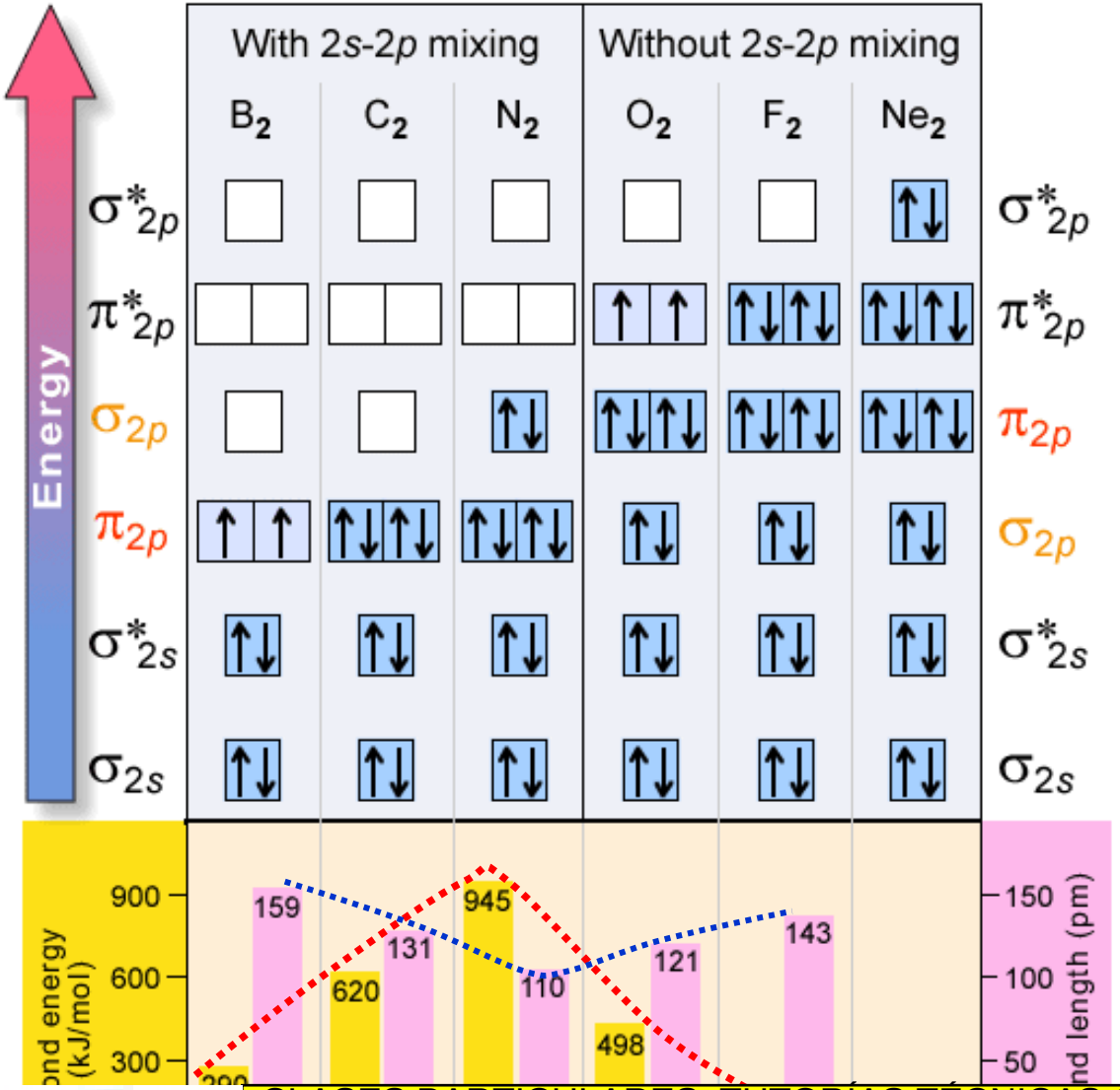
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

(a) N_2 (b) O_2 and F_2



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.



CEU Universidad San Pablo

Cartagena99

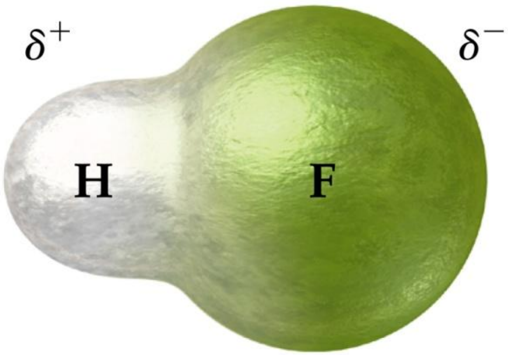
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

MOLÉCULAS DIATÓMICAS HETERONUCLEARES (AB)

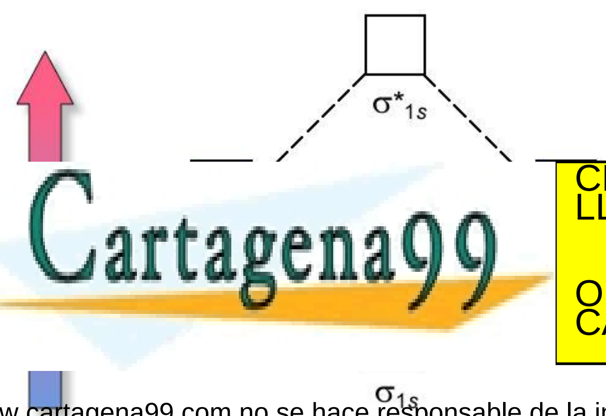
Los dos núcleos no comparten por igual los electrones situados en un determinado OM.

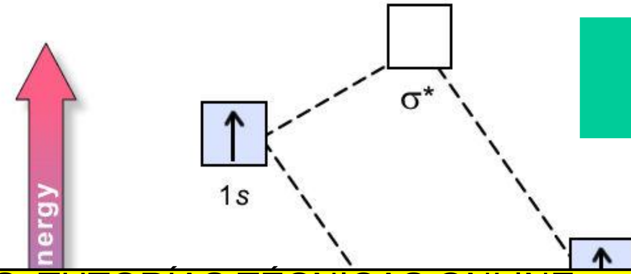
Los OM enlazantes están energéticamente más próximos a los OA del átomo más electronegativo.



Los OM antienlazantes están más próximos a los niveles de OA del átomo menos electronegativo.

Distribución asimétrica de la densidad electrónica.





CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

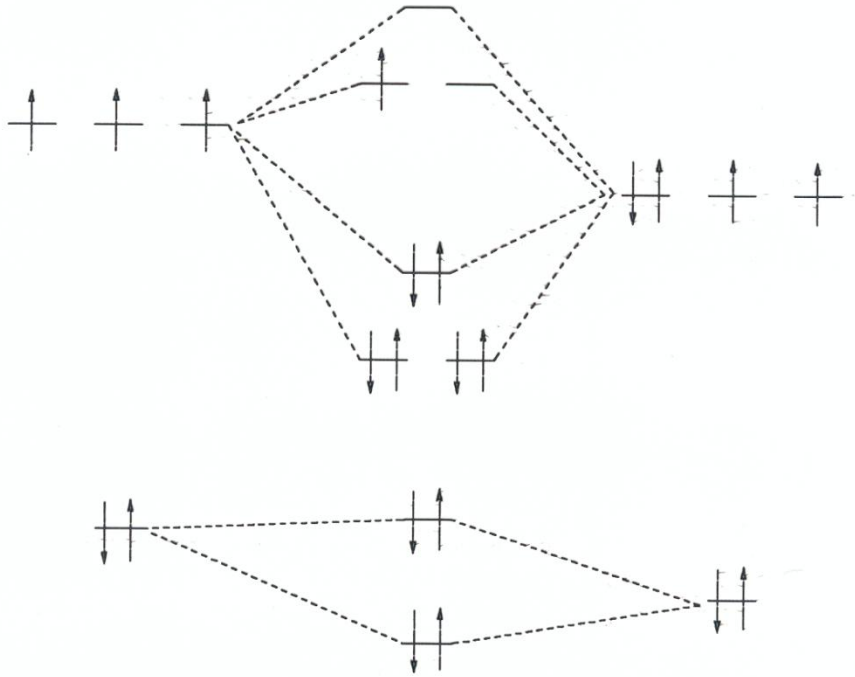
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.
Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

©NCSSM 2003

Al aumentar la diferencia de electronegatividad disminuye la energía de enlace covalente.

Por otra parte, mayor diferencia de electronegatividad produce un incremento de enlace iónico.

Ejemplo: NO, óxido nítrico.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
- - -
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002. Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.