

el Enlace de Orbitales Moleculares (TOM)

Fundamentales: **C**ombinación **L**ineal de **O**rbitales **A**tómicos:

diatómicas sencillas homonucleares:

enlazantes y antienlazantes.

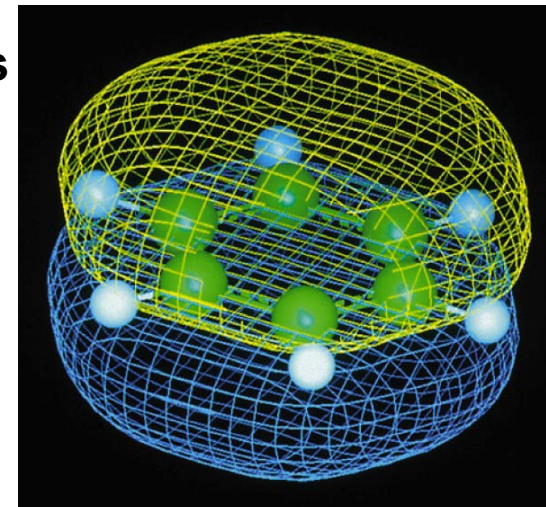
σ y π

ión electrónica molecular: reglas para su construcción.

ión electrónica molecular y diagrama de OM.

la moléculas diatómicas sencillas heteronucleares.

la moléculas poliatómicas: OM multicéntricos
y no enlazantes.



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

Conceptos Fundamentales

Orbitales Moleculares

Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (CLOA)

Los orbitales moleculares se describen en términos de **Orbitales Moleculares** análogos a los orbitales atómicos.

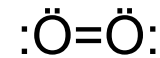
Los orbitales moleculares (OM) se construyen por **Combinación Lineal (CLOA) de Orbitales Atómicos** de orbitales atómicos que forman la molécula.

Los electrones de la molécula (incluidos los de un determinado enlace) pertenecen a toda la molécula.

¿Por qué surgió la TOM?

una **extensión natural** de la mecánica cuántica aplicada a átomos: **átomos** → **moléculas**

aplicar **ciertas** propiedades de algunas **moléculas** (p.ej. el elemento magnético)



Molécula diamagnética (electrones apareados)

experimentalmente que la molécula presenta un paramagnetismo correspondiente a electrones desapareados

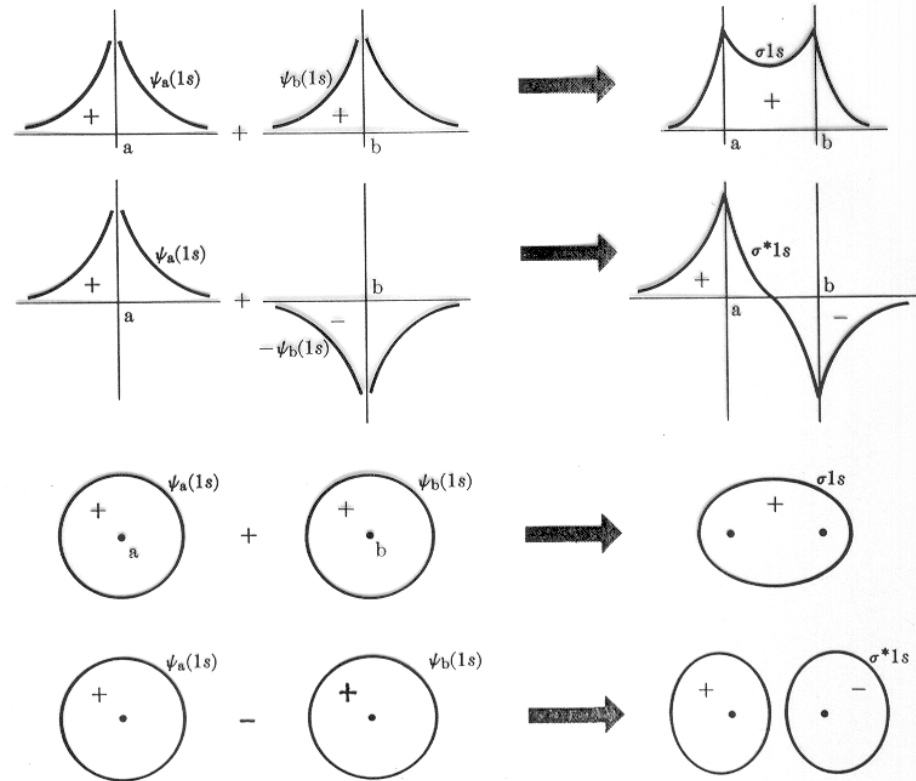
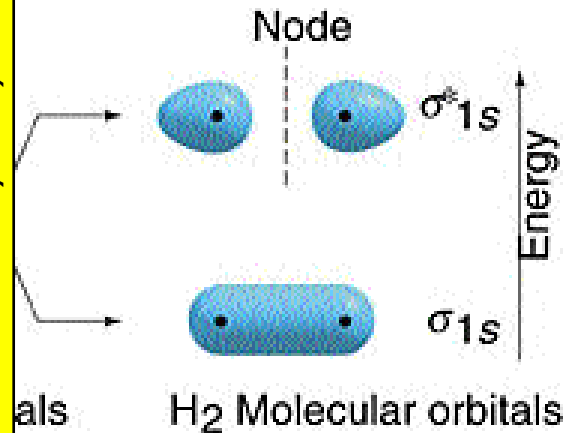


Moléculas diatómicas homonucleares sencillas:

OM enlazantes y antienlazantes

La onda que describe un orbital molecular se obtiene por combinación (suma o resta) de la función de onda del orbital atómico de un átomo con la función de onda del orbital atómico del otro átomo.

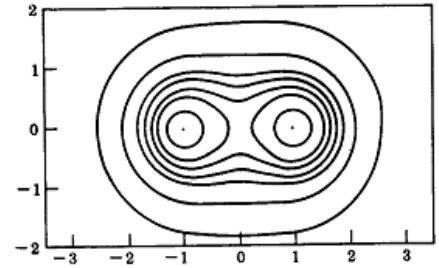
La combinación de orbitales de los átomos de H produce orbitales moleculares (enlazante y antienlazante)



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

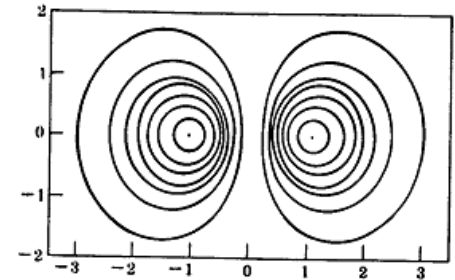
MOLECULAR ENLAZANTE (σ_{1s})

$\psi_a(1s)$ y $\psi_b(1s)$ se produce **acumulación de electrónica entre los núcleos** y **disminuye la potencial coulombica del sistema.**



MOLECULAR ANTIENTLAZANTE (σ_{1s}^*)

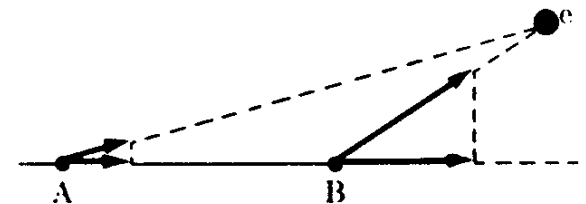
$\psi_a(1s)$ y $\psi_b(1s)$ se produce **deficiencia de electrónica entre los núcleos** y **aumenta la potencial coulombica del sistema.**



¿Por qué un orbital es enlazante o antienlazante?

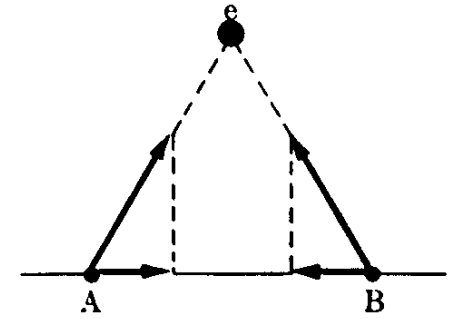
Considerando las **fuerzas** que ejerce el **electrón** sobre los dos **núcleos** tenemos:

el electrón está en una región **zona internuclear**, la **fuerza** tiende a **separar los núcleos**



(a)

trón en el **espacio internuclear** ejerce sobre los núcleos que tienden a **ros (enlace)**

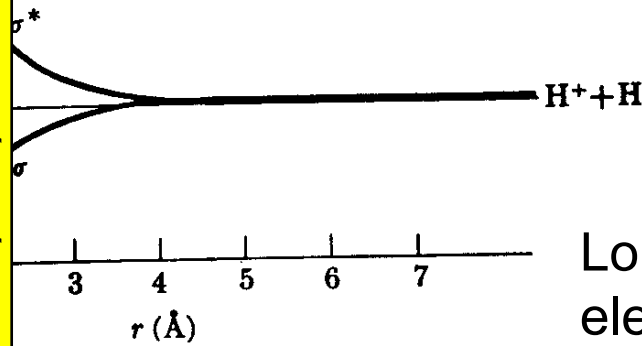


(b)

¿Cómo varía la energía total del sistema H_2^+ ?

Depende del orbital molecular que ocupe el electrón compartido por los dos núcleos de H.

La sola compartición de electrones por dos núcleos NO da automáticamente lugar a la formación de un enlace.



Lo importante es que la compartición de electrones se haga de tal manera que **la energía total del sistema disminuya**.

Las A_2 formadas por **átomos del segundo período y sucesivos** hay que **orbitales atómicos distintos de los 1s**. Para orbitales **ns** el tratamiento es **como los 1s**

Existen dos tipos de O.M. Según la simetría que tienen se denominan

σ y π

La nomenclatura σ indica que el O.M. tiene **simetría de revolución** (debe ser simétrica sobre el **eje que une los núcleos** de los átomos enlazados. **No tiene plano nodal**; la nomenclatura es análoga a la de O.A. (corresponde a "s")

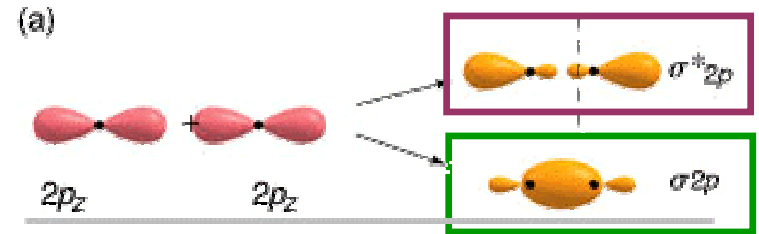
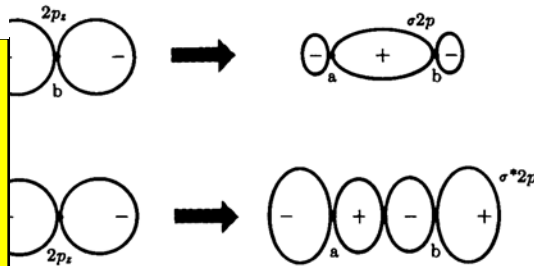
La nomenclatura π indica que el O.M. concentra la densidad electrónica **por encima y por debajo de la línea de unión** entre los núcleos de los átomos enlazados.

Tiene un plano nodal que contiene a los dos núcleos; tiene simetría plana. Nomenclatura análoga a la de O.A. ("π" corresponde a "p")

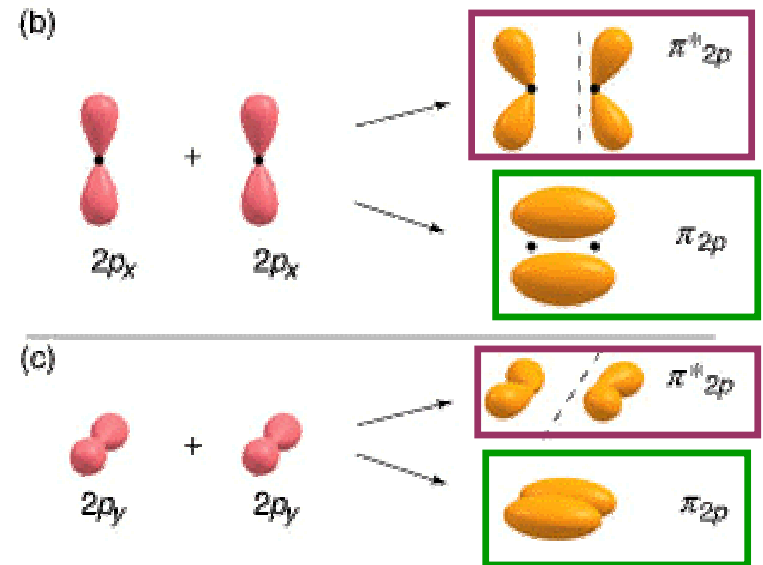
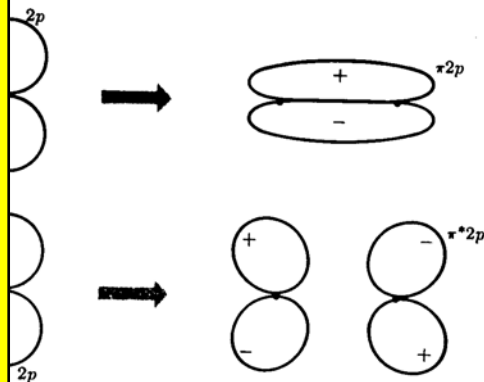
CLOA de orbitales atomicos np

posibilidades en función de las propiedades de **simetría** y **orientación** de orbitales atómicos

Enfoque Frontal Formación de OM tipo σ (enlazante y antienlazante)



Enfoque Lateral formación de OM tipo π (enlazante y antienlazante)



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



Construcción electrónica molecular: Reglas para su construcción.

análoga a como se escriben las configuraciones electrónicas atómicas, se pueden hacer configuraciones electrónicas de las moléculas.

O.M. es **igual** al **número de O.A.** que usamos para CLOA.

Se **construye** por **CLOA** de **OA** de **similar energía y simetría adecuada.**

La **energía** de **energía de los OA se conserva al realizar la CLOA.**

El **más estable** es un **OM enlazante** más **inestable** es el **OM antienlazante** correspondiente. La combinación de **OA** es tanto más eficaz cuanto más próximos en energía estén los **OA** que combinamos.

Al **colocar los electrones**, los **OM** deben colocarse en un diagrama en **orden de energía.**

Para **determinar** **la** **molécula estable** el número de **electrones** en **OM enlazantes** es siempre **mayor** que el número de **electrones** en **OM antienlazantes.**

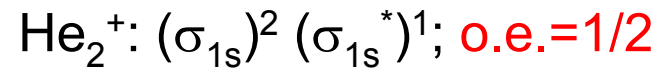
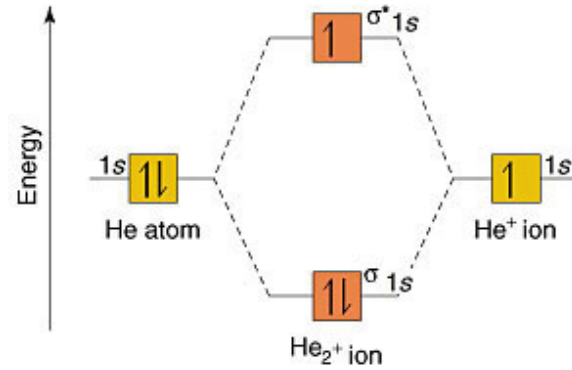
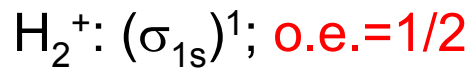
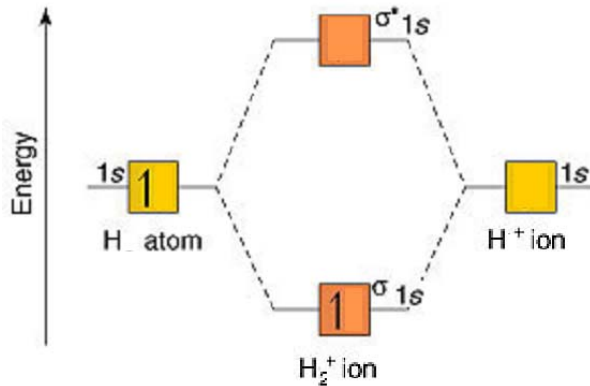
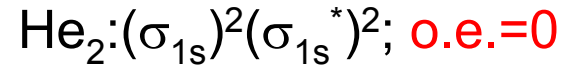
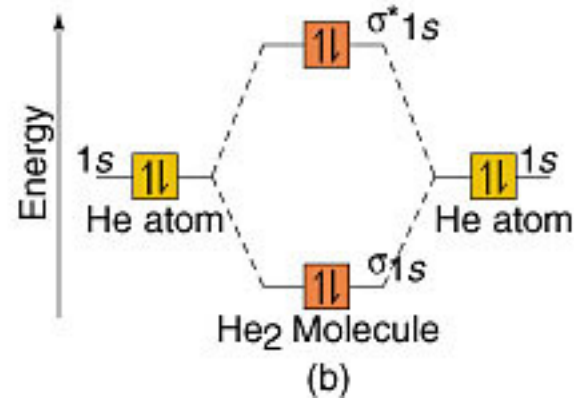
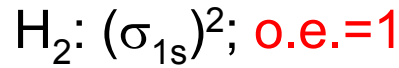
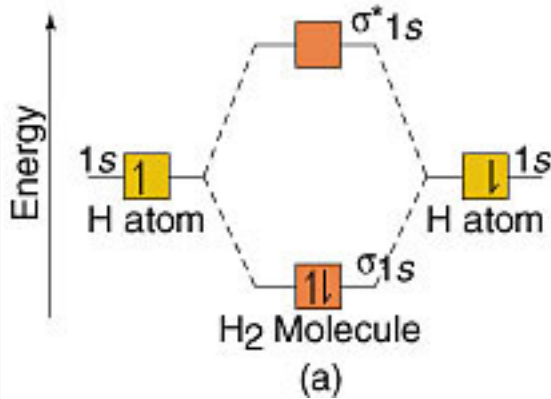
Cada **OM** **acomoda** dos electrones con spins opuestos (**Principio de Pauli**).

Al **distribuir** electrones en **OM degenerados**, la distribución más estable es la que produce el **mayor desapareamiento** de spins (**Regla de Hund**)

El **número de electrones** en los **OM de la molécula** es igual a la suma de los **electrones** en los **átomos** que la forman.

Configuración electrónica molecular y diagrama de OM.

formas equivalentes de representar la misma información sobre el enlace.

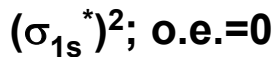


enlace

$$\frac{\text{n.º de } e^- \text{ en OM enlazantes} - \text{n.º de } e^- \text{ en OM antienlazantes}}{2}$$

Predecir la estabilidad de una molécula:

Una molécula estable el número de **electrones** en OM **enlazantes** es siempre **mayor** que el número de **electrones** en OM **antienlazantes**.



El enlace no tiene estabilidad y la molécula no puede existir

La cualitativa de la fuerza de un enlace:

Un enlace **de enlace** supone **enlace más fuerte**.

Orden de estabilidad relativa: $H_2 > H_2^+ > He_2^+ > He_2$
 o.e. $H_2^+ = \text{o.e. } He_2^+$; en H_2^+ hay menor repulsión e^-e^-

Orbitales Moleculares de moléculas diatómicas homonucleares de elementos del 2º Periodo

Para moléculas con más de 8 electrones es necesario considerar también los O.A. 2p

La interacción σ_{2p} es más eficaz que la π_{2p} resultante de menor energía y antienlazante de mayor energía que los π

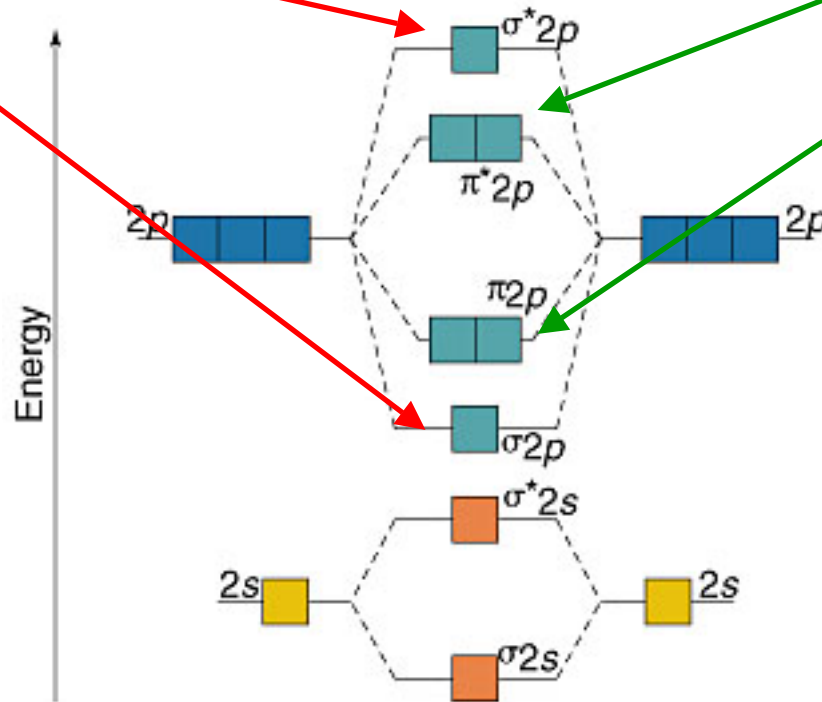


Diagrama de O.M. esperado

$(\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2$
 molécula estable y diamagnética

$(\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2$
 existe la molécula Be_2

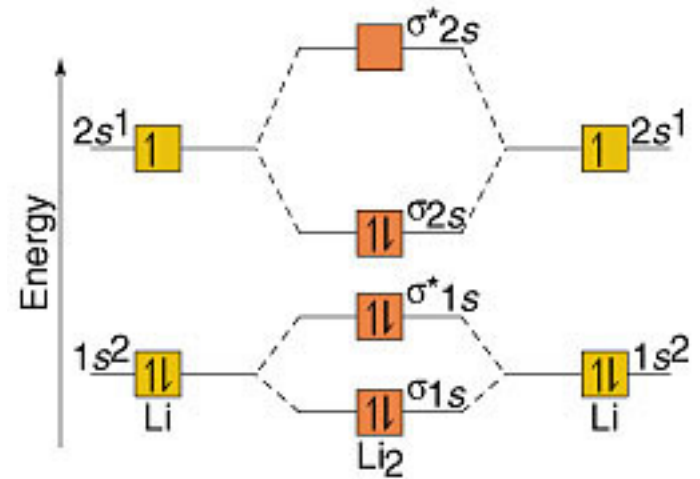
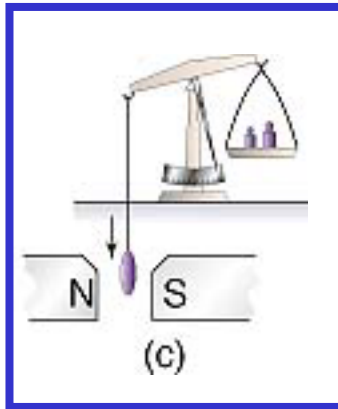
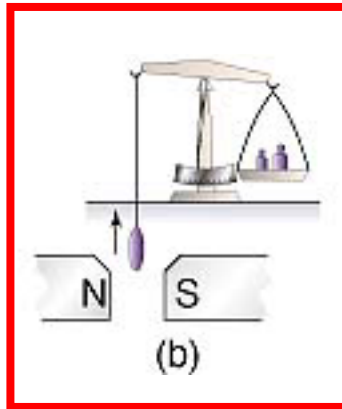


Diagrama O.M. de la molécula Li_2

Comportamiento magnético



Diamagnéticas:

repelen el campo magnético
 (NO tienen electrones desapareados)

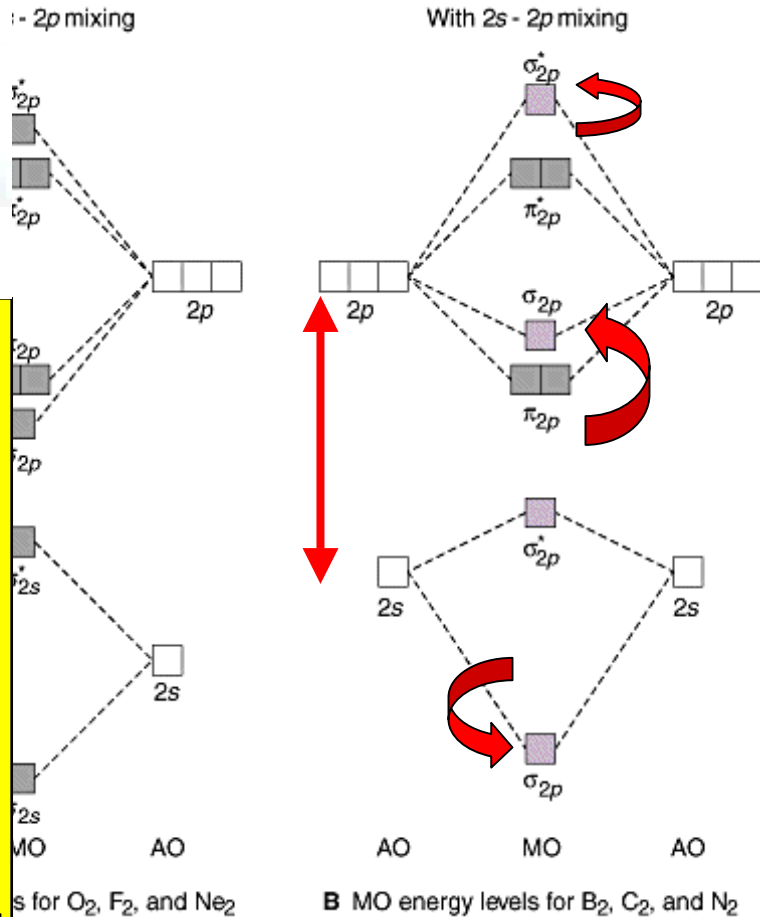
Paramagnéticas:

son atraídas por el campo magnético
 (tienen electrones desapareados)

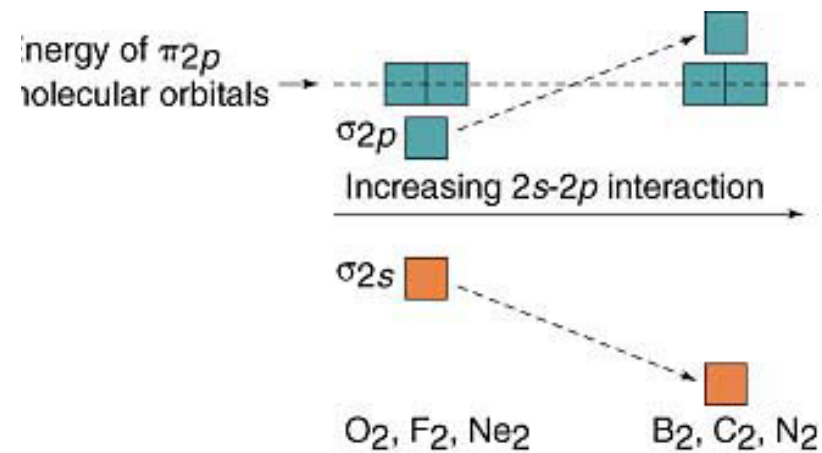


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

, O_2 y F_2 Es necesario considerar también los O.A. 2p



¿Por qué se da la inversión entre los O.M. σ_{2p_z} y π_{2p} ?



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

Diagramas de O.M. de moléculas diatómicas homonucleares de elementos del 2º Periodo

	Large 2s-2p interaction			Small 2s-2p interaction		
	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	Ne ₂
σ* _{2p}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
π* _{2p}	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>
π _{2p}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ _{2p}	<input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ* _{2s}	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ _{2s}	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
ΔE (kJ/mol)	<input type="checkbox" value="1"/>	<input type="checkbox" value="2"/>	<input type="checkbox" value="3"/>	<input type="checkbox" value="2"/>	<input type="checkbox" value="1"/>	<input type="checkbox" value="0"/>
χ (kJ/mol)	<input type="checkbox" value="290"/>	<input type="checkbox" value="620"/>	<input type="checkbox" value="941"/>	<input type="checkbox" value="495"/>	<input type="checkbox" value="155"/>	<input type="checkbox" value="—"/>
μ _B	<input type="checkbox" value="1.59"/>	<input type="checkbox" value="1.31"/>	<input type="checkbox" value="1.10"/>	<input type="checkbox" value="1.21"/>	<input type="checkbox" value="1.43"/>	<input type="checkbox" value="—"/>
Propor	Paramagnetic	Diamagnetic	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic	—

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

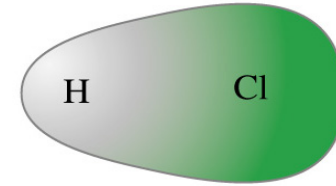
Orbitales de O.M. de moléculas diatómicas heteronucleares (AB)

Las moléculas heteronucleares **NO** poseen simetría en cuanto a la **compartición de los núcleos** enlazados.

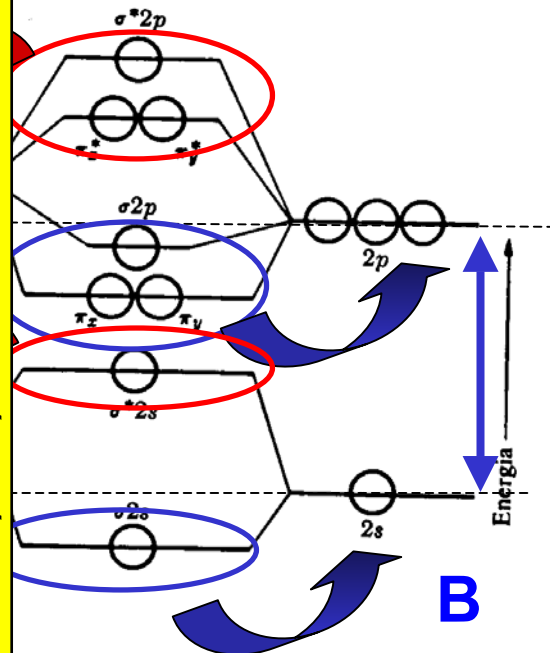
Nonpolar covalent bond



Polar covalent bond



En moléculas AB constituidas por átomos de número atómico pequeño y similares (CN) es posible utilizar un modelo similar al de moléculas A₂



Los O.M. enlazantes están energéticamente **más próximos** a los O.A. del átomo más electronegativo (**B**) (mayor Z*); y los O.M. antienlazantes están **más próximos** a los O.A. del átomo menos electronegativo (**A**) (menos Z*)

La **densidad electrónica** de los O.M. enlazantes está **más concentrada** sobre el átomo más electronegativo mientras que la de los O.M. antienlazantes lo está sobre el menos electronegativo

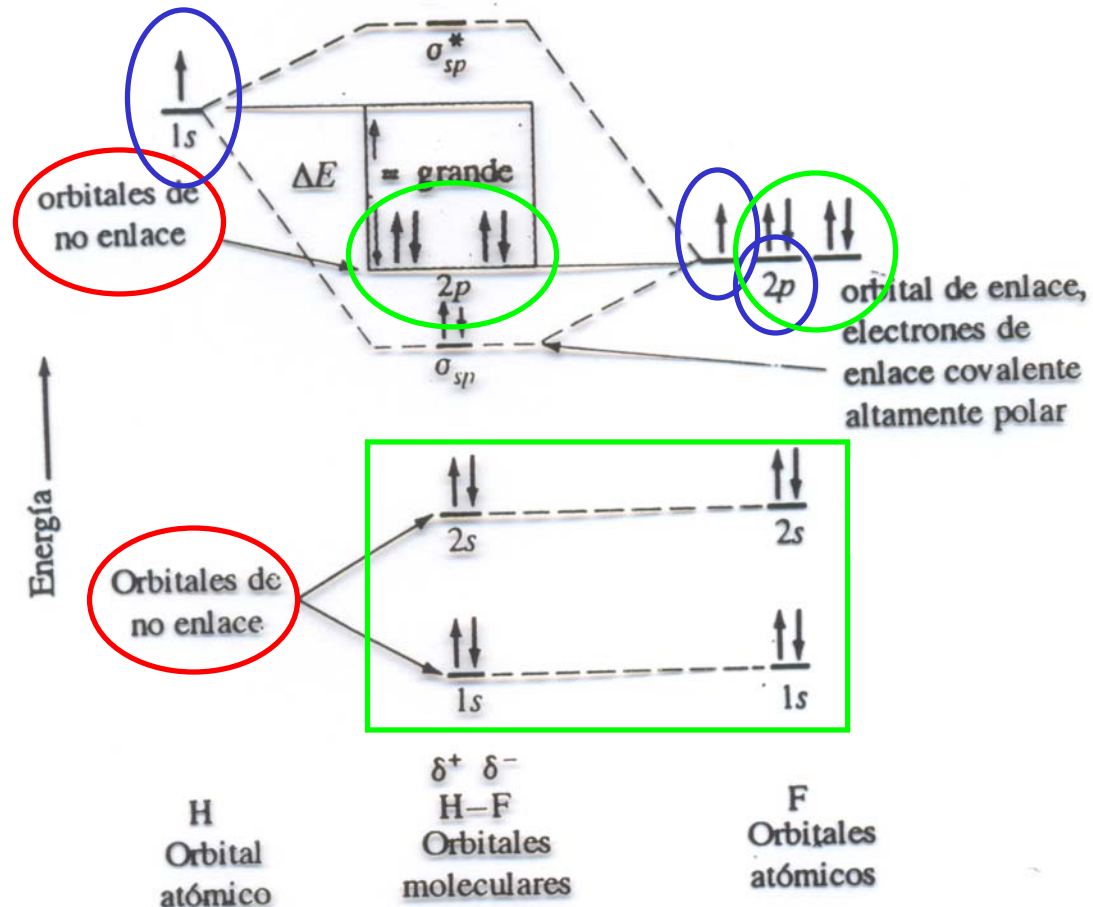
$$\chi(B) > \chi(A)$$

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

construye por **CLOA de OA de similar energía y simetría adecuada.**

ferencia entre los números atómicos de A y B es muy grande, los dan lugar a los Orbitales Moleculares **NO** son del mismo tipo (s, p, etc..)

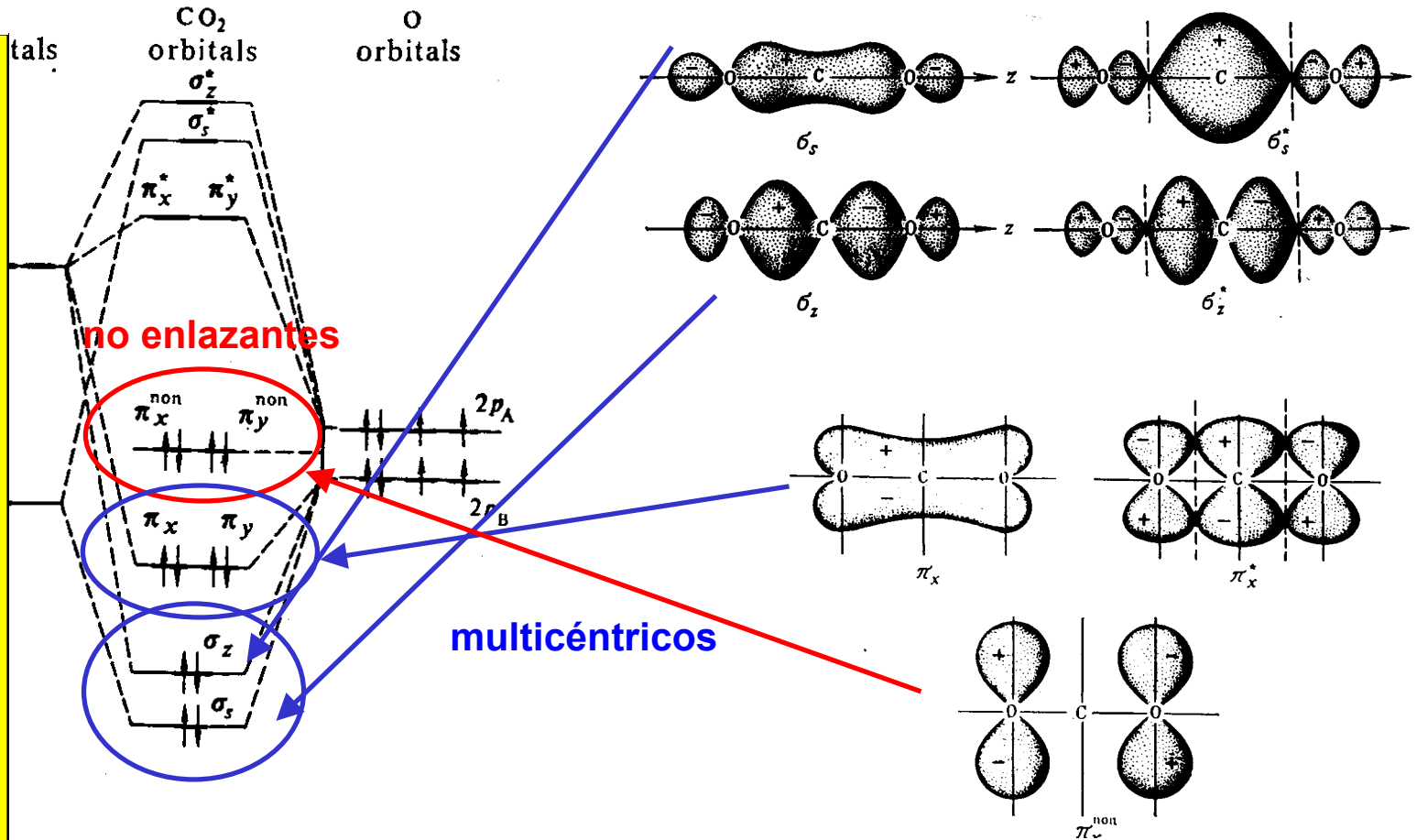


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

a moléculas poliatómicas:

OM multicéntricos y OM no enlazantes

a lineal CO₂



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

a angular O_3 (Ozono)

→ **ESQUELETO** (geometría)

→ **REFORZAMIENTO** enlace

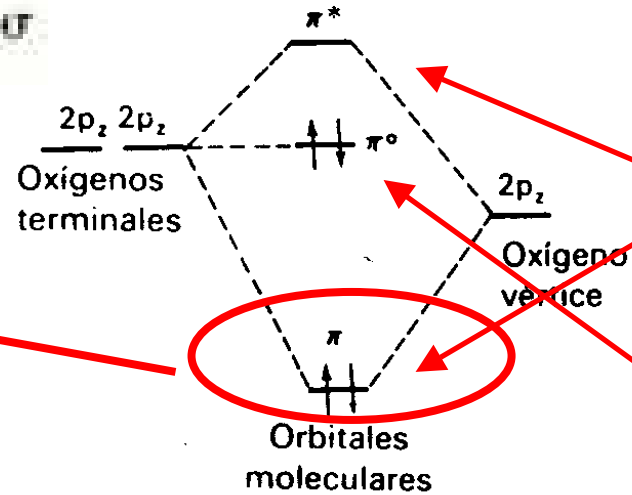
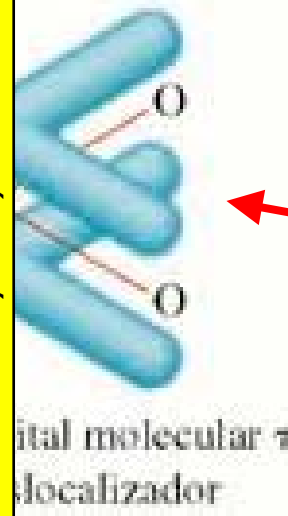
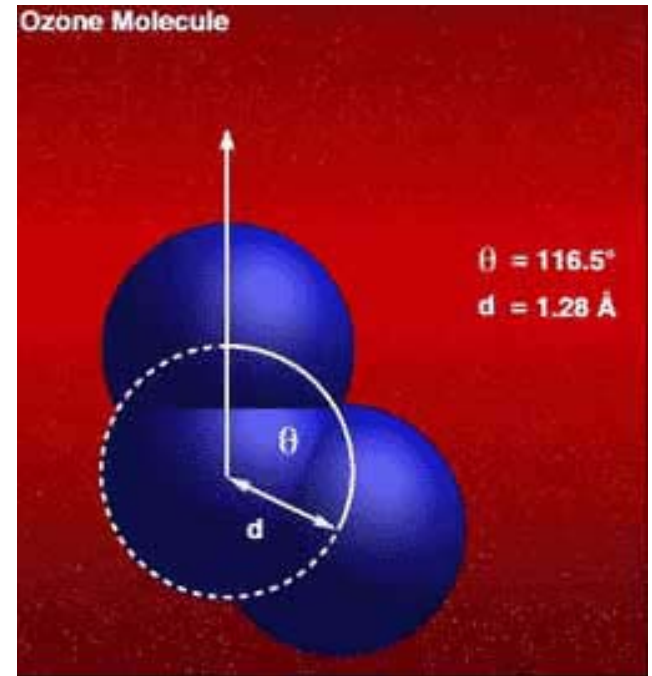
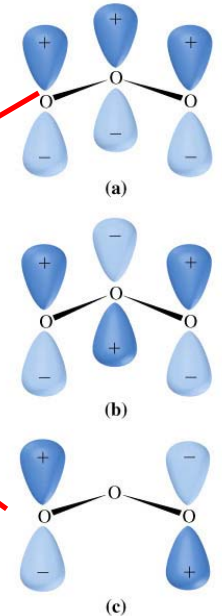
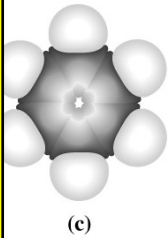
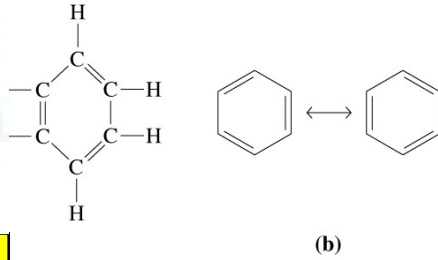


FIG. 7-6. Diagrama de niveles de energía en el O_3

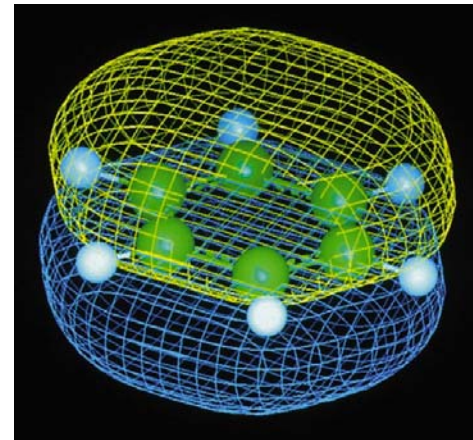
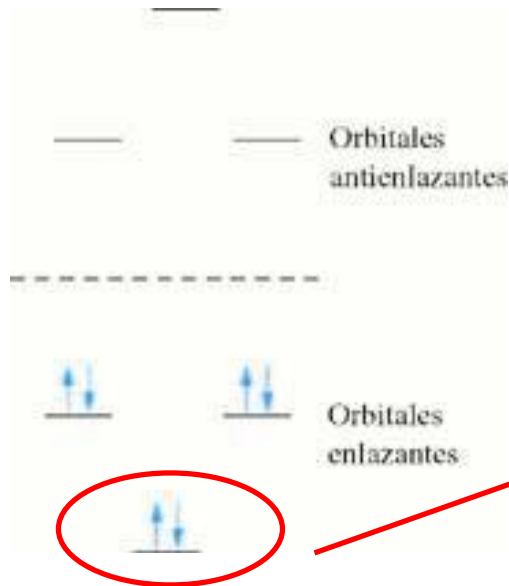
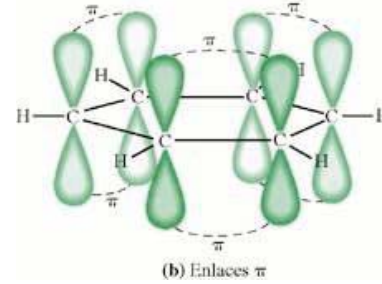
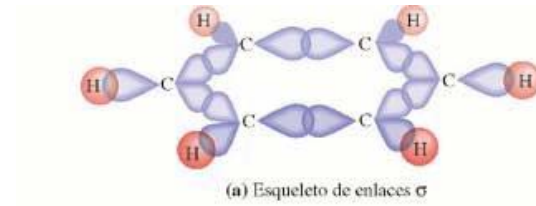


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Orbitales deslocalizados



Benceno



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