

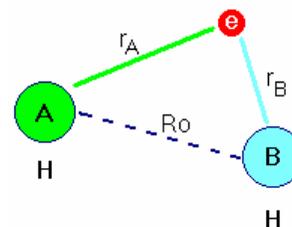
ORBITALES MOLECULARES, ENLACES, MOLECULAS

I.- MOLECULAS DIATOMICAS HOMONUCLEARES

I.1.- Método de Orbitales Moleculares (MOM):

La molécula ión hidrógeno, H_2^+

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} + \frac{e^2}{R_0}$$



– CLOA - combinación lineal de los orbitales atómicos

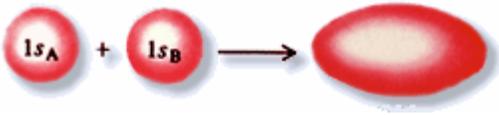
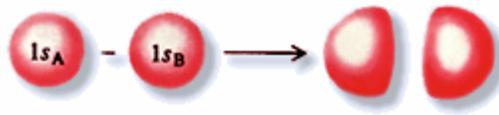
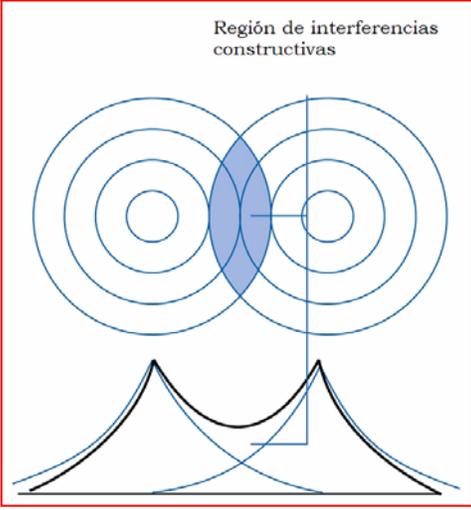
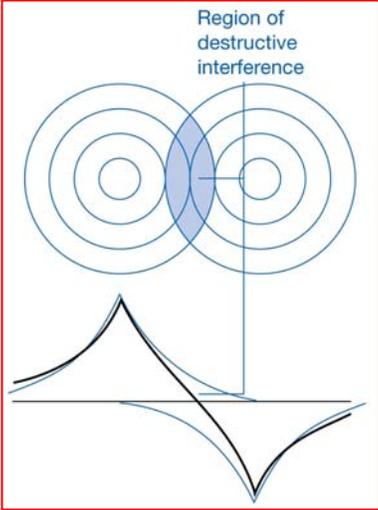
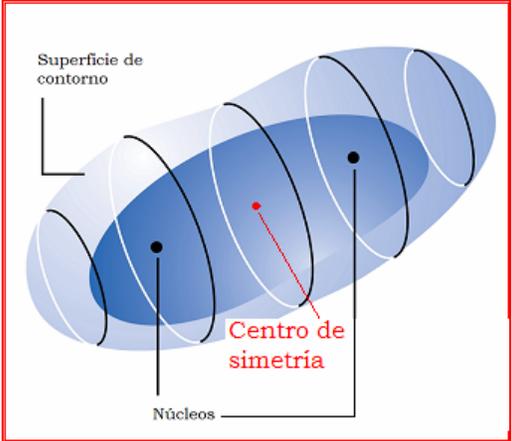
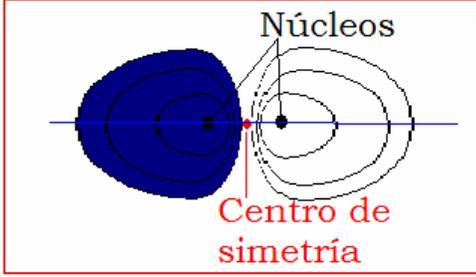
$$\Psi = N\{\psi_{1s}(A) \pm \psi_{1s}(B)\}$$

$$N: \text{factor de normalización} = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S)}}$$

$$S: \text{integral de recubrimiento} = \int \psi_{1s}(A)\psi_{1s}(B)d\tau$$

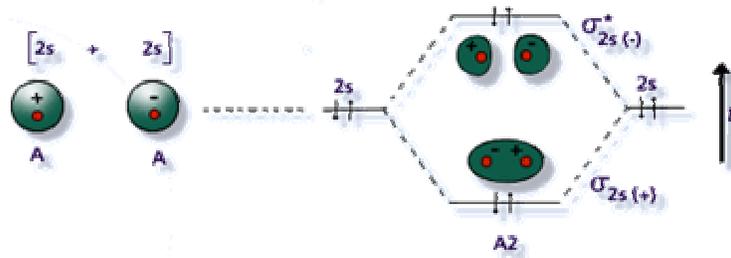
I.2.- Orbitales Moleculares σ Y σ^* :

$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} \{\psi_{1s}(A) + \psi_{1s}(B)\}$	$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} \{\psi_{1s}(A) - \psi_{1s}(B)\}$
$\langle E(OM\sigma) \rangle = \int \Psi^* \cdot \hat{H} \cdot \Psi \cdot d\tau = E_{1s} + \beta$	$\langle E(OM\sigma^*) \rangle = \int (\Psi')^* \cdot \hat{H} \cdot (\Psi') \cdot d\tau = E_{1s} + \beta'$
Su energía es menor que la del OA de partida	Su energía es mayor que la del OA de partida
Interferencia constructiva: corresponde a la adición de las dos funciones matemáticas	Interferencia destructiva: corresponde a la sustracción de las dos funciones matemáticas
El aumento de la densidad de carga electrónica entre los núcleos hace que se atraigan más entre si, formando un ENLACE QUIMICO.	Conduce a una probabilidad electrónica reducida entre los núcleos, produciendo un orbital molecular ANTIENLAZANTE, debido a su densidad electrónica muy baja entre núcleos.

ORBITAL MOLECULAR ENLAZANTE σ	ORBITAL MOLECULAR ANTIENLAZANTE σ^*
	
<p data-bbox="483 527 711 569">Región de interferencias constructivas</p> 	<p data-bbox="1105 516 1219 590">Region of destructive interference</p> 
<p data-bbox="280 1146 394 1188">Superficie de contorno</p>  <p data-bbox="475 1413 589 1476">Centro de simetría</p> <p data-bbox="394 1497 475 1518">Núcleos</p>	<p data-bbox="1122 1146 1260 1178">Núcleos</p>  <p data-bbox="1081 1329 1260 1402">Centro de simetría</p>

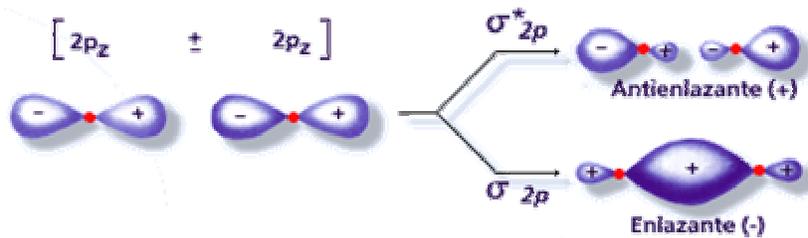
I.3.- MOLECULAS CON ORBITALES ATOMICOS 2S

Orbitales Moleculares σ : La forma de los OM σ_{2s} es similar a la de los σ_{1s} . No obstante tiene superficies internas nodales que provienen de las de los orbitales atómicos 2s de H

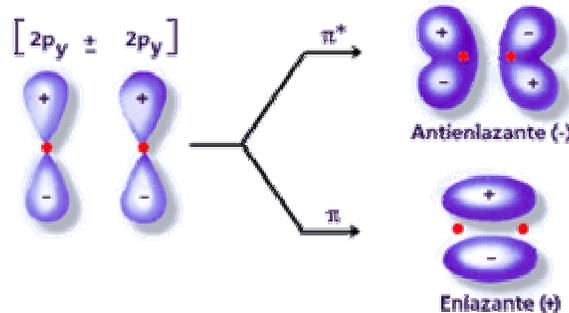


I.4.- MOLECULAS CON ORBITALES ATOMICOS 2P

Orbitales Moleculares σ



Orbitales Moleculares π



I.5.- PROPIEDADES DE MOLECULAS DIATOMICAS

ORDEN DE ENLACE (teoría de bolas y resortes)

$$O.E. = \frac{n^{\circ} \text{ elect OM enlazante} - n^{\circ} \text{ elect OM antienlazante}}{2}$$

\uparrow O.E. \Rightarrow \downarrow longitud de enlace

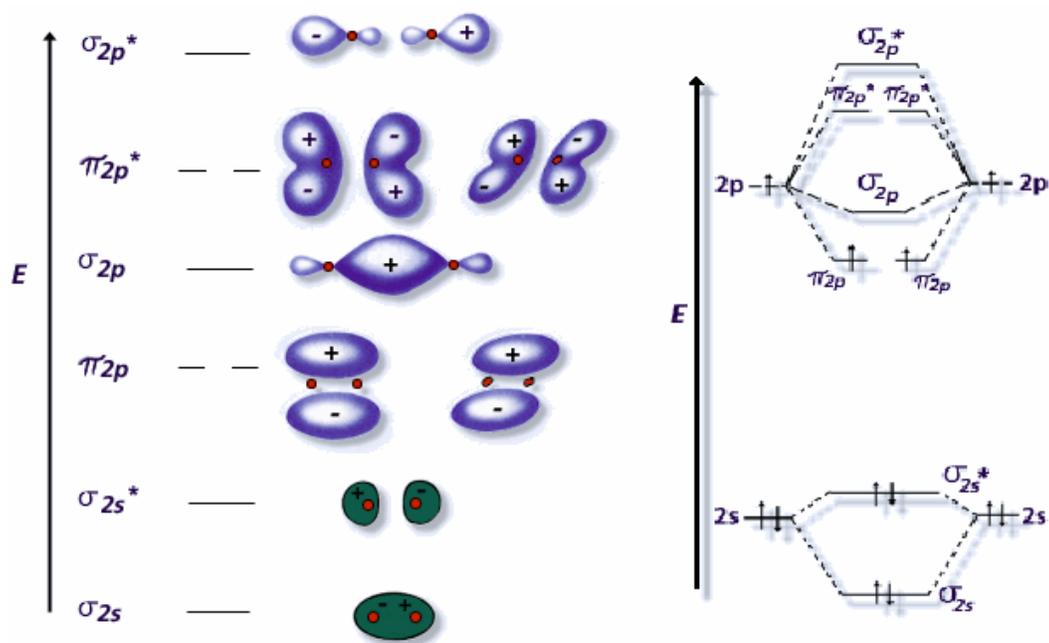
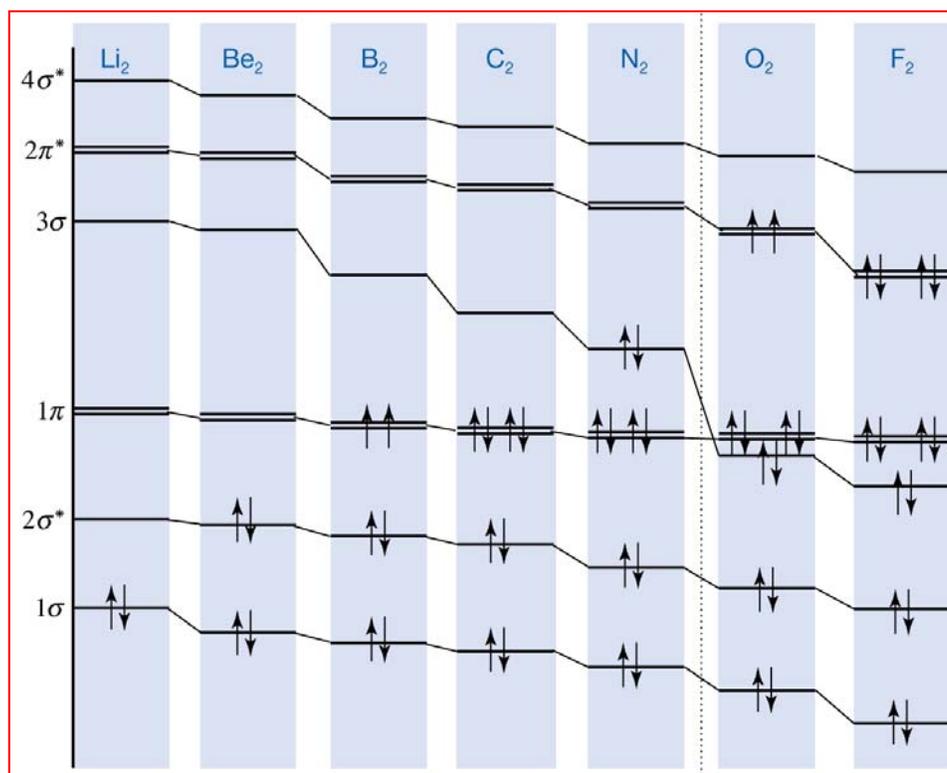
MOMENTO MAGNÉTICO

$$m \propto \sqrt{n(n+2)}$$

$m=0 \Rightarrow$ moléculas diamagnéticas

$m \neq 0 \Rightarrow$ moléculas paramagnéticas

I.6.- VARIACIÓN DE LA ENERGÍA DE LOS OM DE LAS MOLÉCULAS DIATÓMICAS HOMONUCLEARES DEL SEGUNDO PERIODO.



II.- MOLECULAS DIATOMICAS HETERONUCLEARES

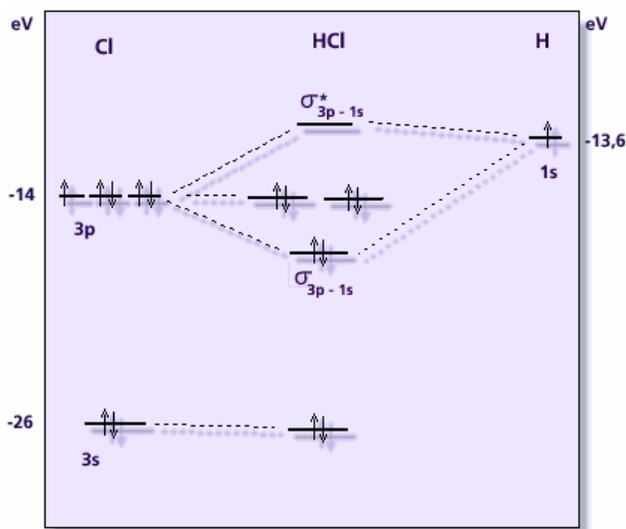
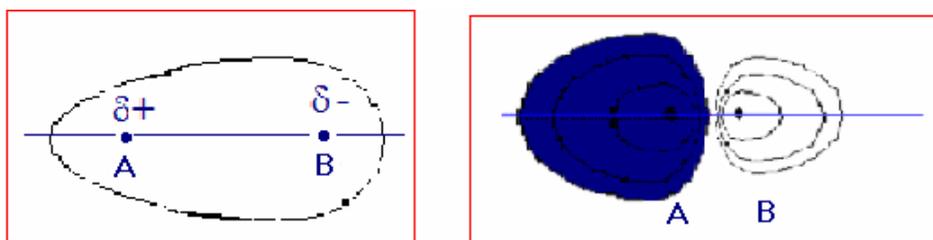
Los OM se obtienen aplicando el principio variacional con funciones variacionales que son CLOA. Aproximación en la que no se consideran los electrones internos, solo la capa de valencia

$$\Psi = c_A \cdot \psi_{1s}(A) \pm c_B \cdot \psi_{1s}(B)$$

$$\Psi = c_A \cdot \{\psi_{1s}(A) \pm \lambda \cdot \psi_{1s}(B)\}$$

$$|\lambda| = \begin{cases} > 1 & \text{si } \chi(B) > \chi(A) \\ < 1 & \text{si } \chi(B) < \chi(A) \end{cases}$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\lambda S + \lambda^2}} \cdot \{\psi_{1s}(A) \pm \lambda \cdot \psi_{1s}(B)\}$$



MOMENTO DIPOLAR ELECTRICO

$$\mu_A = e \left(\frac{R}{2} + \bar{z} \right) \cdot \hat{k}$$

Vector orientado desde + a -.