

Clase Auxiliar Jueves 6 de Septiembre 2007
Teoría de Orbitales Moleculares

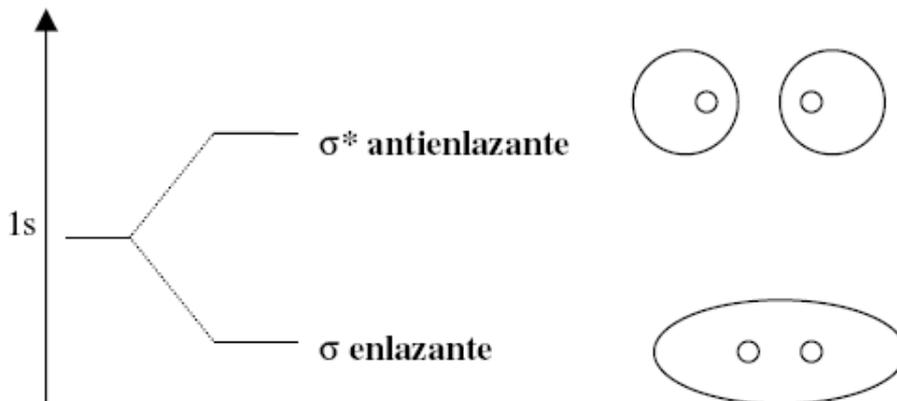
Los orbitales moleculares se forman por una combinación lineal de orbitales atómicos. Como los orbitales atómicos estaban definidos por una función de onda, las combinaciones entre ellos se tomarán como interferencias constructivas o destructivas. Esto define tipos de orbitales moleculares enlazantes y antienlazantes.

O.M Enlazante	O.M Antienlazante
Energía menor que el orbital de partida	Energía mayor que el orbital de partida
Interferencia constructiva	Interferencia destructiva
Genera Enlace Químico	Orbital Antienlazante (densidad electrónica baja entre núcleos)

La combinación de ciertos orbitales atómicos dará origen a diferentes tipos de orbitales moleculares.

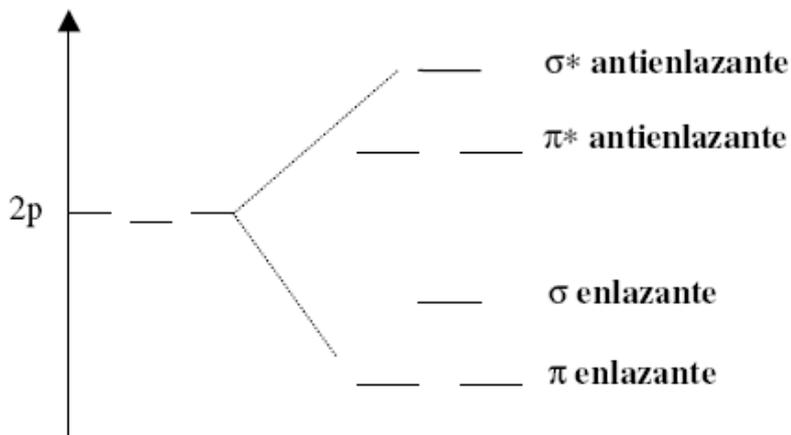
Orbitales tipo σ

Se generan a partir de una combinación lineal de dos orbitales atómicos tipo s.



Orbitales tipo $\pi p, \sigma p$

Se generan a partir de una combinación lineal de dos orbitales atómicos tipo np_x , y np_y .



***Nota importante:** Después del Nitrógeno ($Z=7$) el orden entre orbitales enlazantes se invierte (primero viene el sigma y después el pi)

Tipos de Moléculas Diatómicas:

Homonucleares: Poseen los mismos núcleos (H_2 , Li_2 , O_2 , N_2)

Heteronucleares: Poseen núcleos distintos (CN , NO , CO , BN , LiH , HHe)

Paramagnéticas: Poseen electrones desapareados, se ven afectadas por campos magnéticos.

Diamagnéticas: Poseen todos sus electrones apareados y no se ven afectadas por campos magnéticos.

Polares: Su vector momento dipolar es distinto de cero, son afectadas por campos eléctricos (Moléculas heteronucleares).

Apolares: Su vector momento dipolar es igual a cero, no se ven afectadas por campos eléctricos (Moléculas homonucleares).

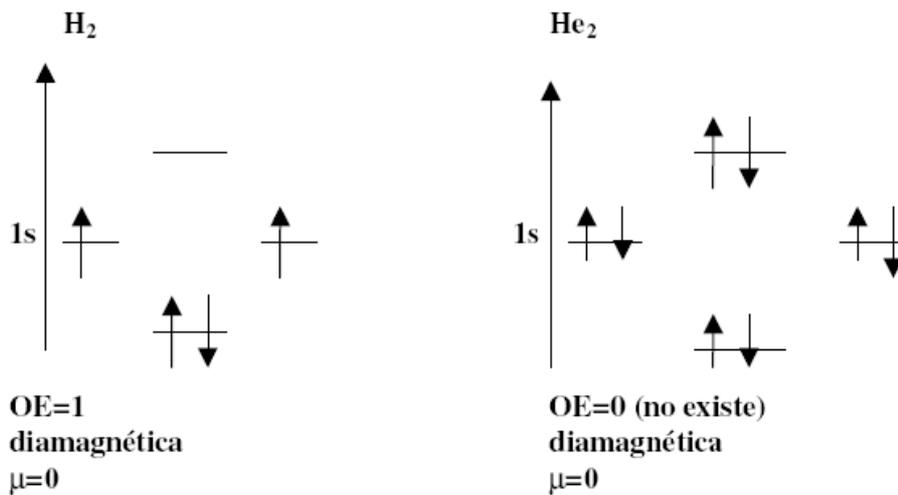
Vector momento dipolar: Vector cuya magnitud está determinada por la diferencia de electronegatividades entre átomos, cuya dirección está definida por el ángulo definido por la geometría de la molécula y cuyo sentido está definido desde el átomo menos electronegativo hacia el átomo más electronegativo.

Orden de enlace

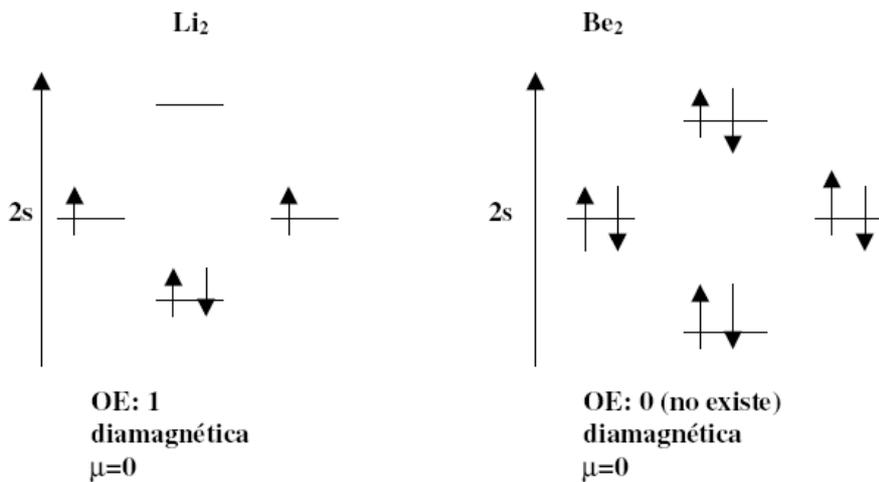
El orden de enlace determina el número de enlaces que tiene la molécula. En caso de ser cero, ésta no existe. Se calcula con la siguiente fórmula:

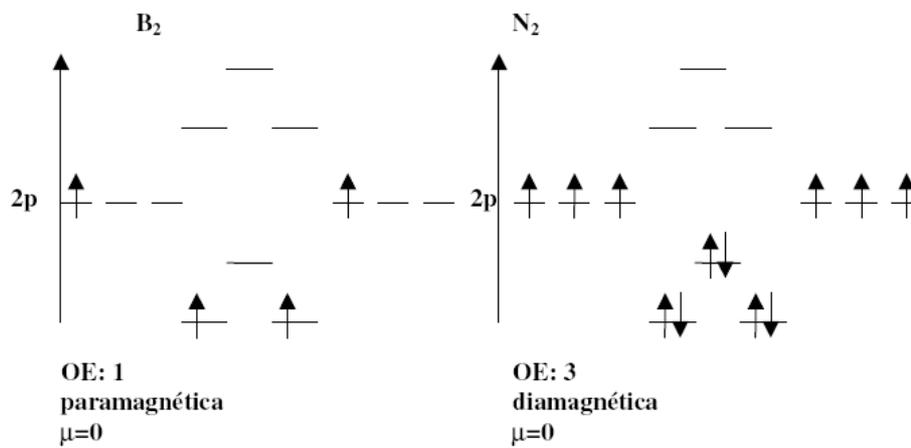
$$OE = \frac{1}{2}(n^{\circ} \bar{e} \text{ enlazantes} - n^{\circ} \bar{e} \text{ antienlazantes})$$

Moléculas diatómicas homonucleares

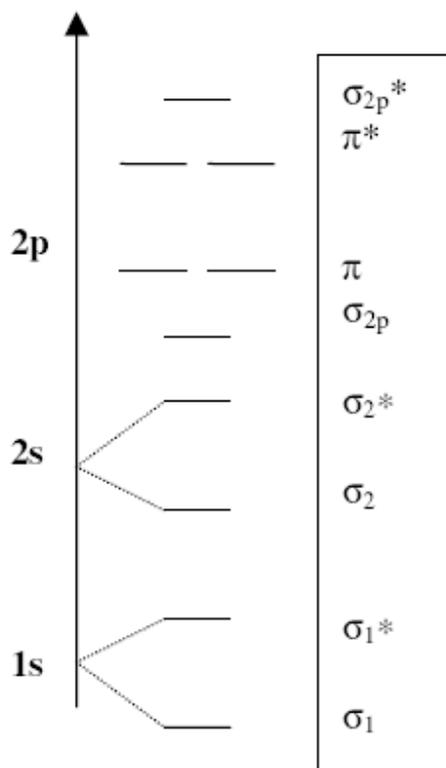


Noten que las reglas para llenar los orbitales moleculares son las mismas de las de orbitales atómicos: Principio de mínima energía, principio de exclusión de Pauli, Regla de Hund.





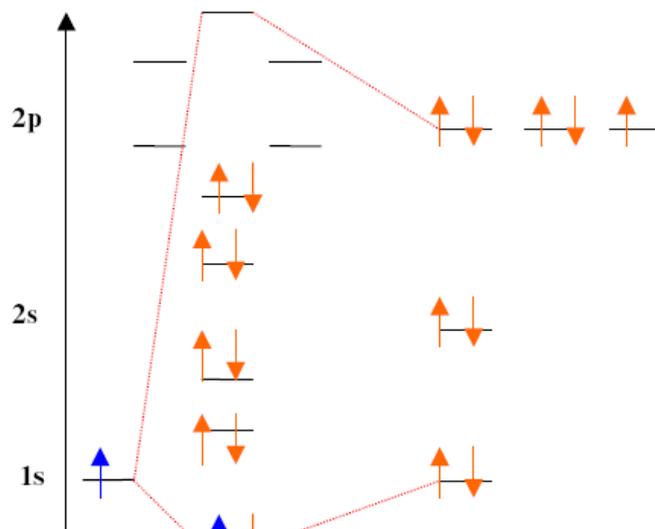
En general, la regla para llenar las moléculas es la siguiente...



Más ejemplos...

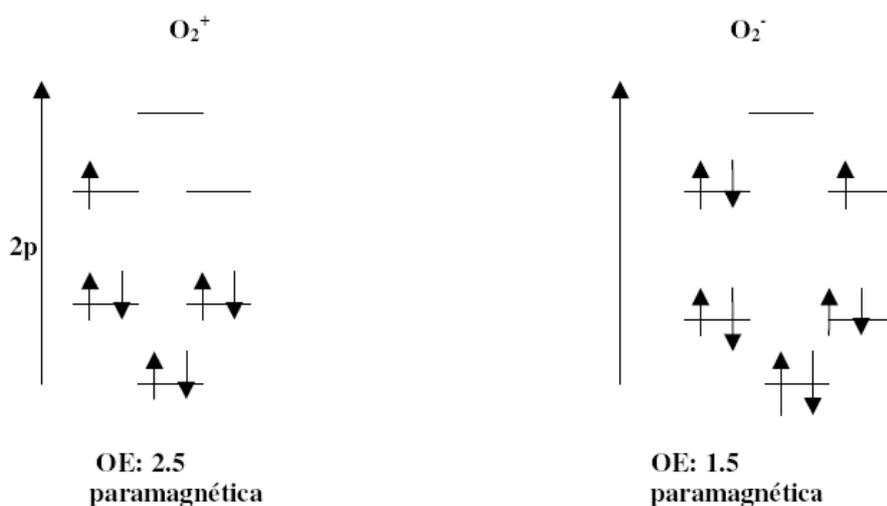
HF (Ácido Fluorhídrico):

El Flúor otorga 9 electrones y el Hidrógeno 1. Debemos llenar los OM con 10 electrones.



OE: $0.5 \cdot (6-4) = 1$
Diamagnética
Momento dipolar distinto de cero.

Para moléculas con carga positiva, recuerden que se resta un electrón...
Para moléculas con carga negativa, se agrega un electrón...



OE: 2.5
paramagnética

OE: 1.5
paramagnética

Momento dipolar

Para moléculas con 3 o más átomos, calculamos la geometría con los AXE... y vemos los vectores que resultan... Tomemos como ejemplo la molécula de Agua. H₂O

Por Lewis:
EO: 4+8=12
EV: 2+6=8
n° enlaces: 2
n° electrones libres: 4

El ángulo H-O-H, vale 105°
(AX₂E₂)

Electronegatividad O: 3.5
Electronegatividad H: 2.1

$$\mu_x = (3.5 - 2.1) \cdot \cos(52.5^\circ) + (3.5 - 2.1) \cdot \cos(-52.5^\circ) = 1.19$$

$$\mu_y = (3.5 - 2.1) \cdot \sin(52.5^\circ) + (3.5 - 2.1) \cdot \sin(-52.5^\circ) = 0$$

Es una molécula polar y la magnitud del vector vale 1.19.

