

# TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

La Teoría de Orbital Molecular (TOM) considera que en una molécula covalente, al estar tan cerca los núcleos de los átomos que conforman la molécula, la ecuación de ondas actúa de forma distinta y los orbitales normales ( $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$ ) de los átomos se combinan para formar orbitales moleculares.

Estos orbitales moleculares se pueden explicar como un solapamiento de los orbitales comunes de cada uno de los átomos. Así, se tiene que los orbitales solapados generan una zona de mayor estabilidad, pero al mismo tiempo deben generar una de menor estabilidad que los orbitales originales. Por ejemplo, en el caso de los orbitales  $s$ , el solapamiento es como se indica en la figura 1:

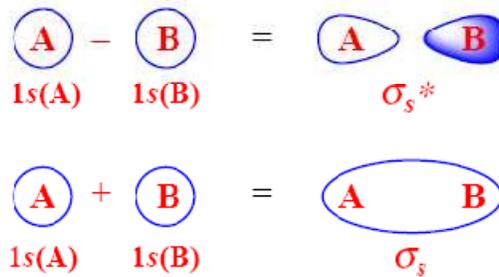


FIGURA 1: SOLAPAMIENTO DE LOS ORBITALES  $s$

Entonces, el orbital  $\sigma_s$  es el llamado orbital enlazante, porque causa cohesión entre los átomos, mientras que el orbital molecular  $\sigma_s^*$  es el orbital anti-enlazante, ya que causa una separación de los núcleos (A y B).

Por otro lado, para los orbitales  $p$ , el solapamiento es distinto dependiendo de la dirección espacial de los orbitales solapados, teniéndose orbitales que solapan verticalmente y otros horizontalmente.

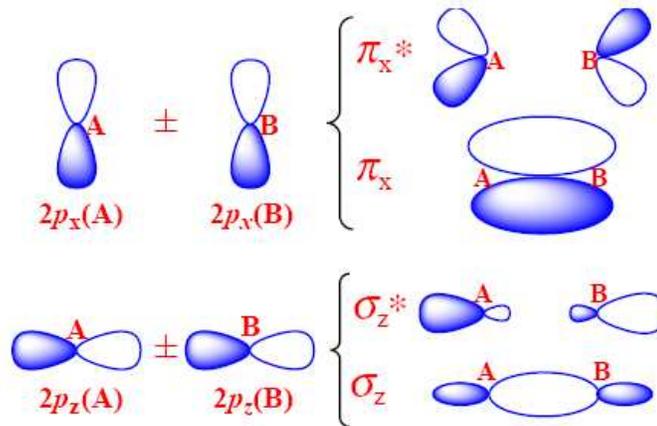


FIGURA 2: SOLAPAMIENTO DE ORBITALES  $p$

La estabilidad agregada de los orbitales moleculares se debe a una reducción en la energía de los electrones, ya que el orbital enlazante se encuentra en un nivel menor de energía que los orbitales atómicos. Compensatoriamente, un orbital anti-enlazante tiene una energía mayor a la del orbital original, como ilustra el siguiente diagrama:

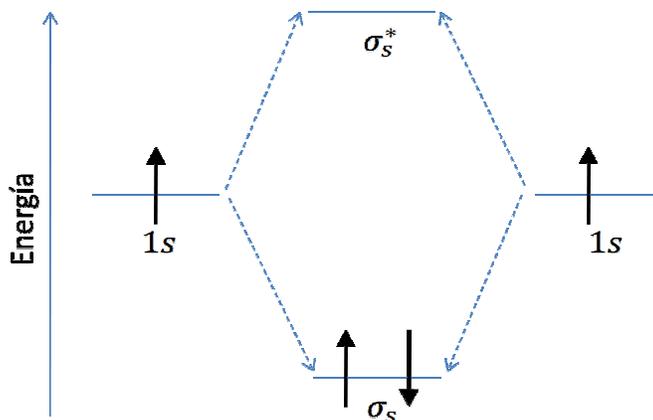


FIGURA 3: TOM PARA UNA MOLÉCULA DE HIDRÓGENO

Considerando lo anterior, podemos introducir un nuevo concepto, llamado **Orden de Enlace**:

$$OE = \frac{(\# e^- \text{ enlazantes} - \# e^- \text{ anti enlazantes})}{2}$$

El orden de enlace es un indicador de la cantidad de enlaces presentes en la molécula en cuestión, teniendo la molécula de hidrógeno 1 enlace. Por ejemplo, se puede analizar una molécula de  $He_2$  según TOM:

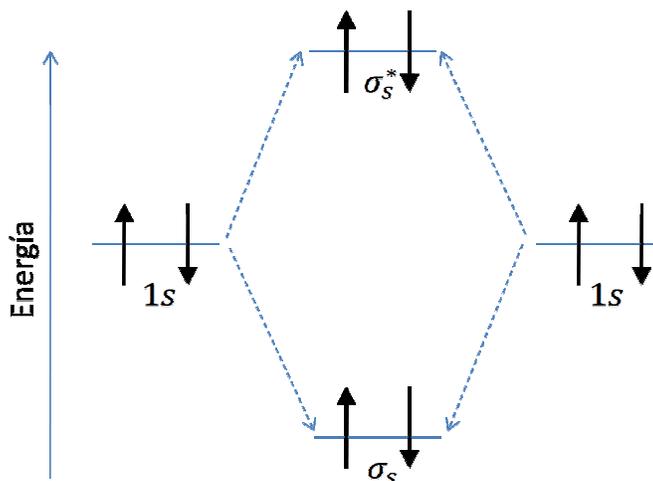


FIGURA 4: TOM PARA UNA MOLÉCULA DE DOS HELIOS

Se tiene entonces que el OE del  $He_2 = 0$ , por lo tanto no existen enlaces y los átomos se separarán. Otro caso que vale la pena observar es el del Oxígeno:

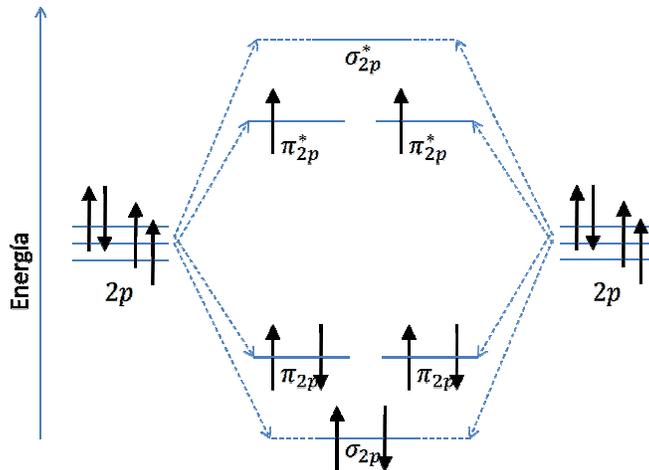


FIGURA 5: TOM PARA UNA MOLÉCULA DE OXÍGENO

En este caso se puede observar cómo se ordenan los orbitales moleculares de  $p$  según su energía. Considerando eso, es fácil notar que el orden de enlace para el oxígeno es 2,5, que al truncarlo se entiende que es de doble enlace. Ahora, tal vez lo más importante que se puede rescatar de este análisis es el hecho de que los electrones en los orbitales  $\pi^*$  se encuentren desapareados. Esto explica porqué al oxígeno sí le afectan los campos magnéticos (**paramagnético**), fenómeno que Lewis y la TEV no podían explicar si todos los electrones de la moléculas están apareados.

Un análisis similar se debe hacer para el nitrógeno, para resaltar una excepción que considera la TOM:

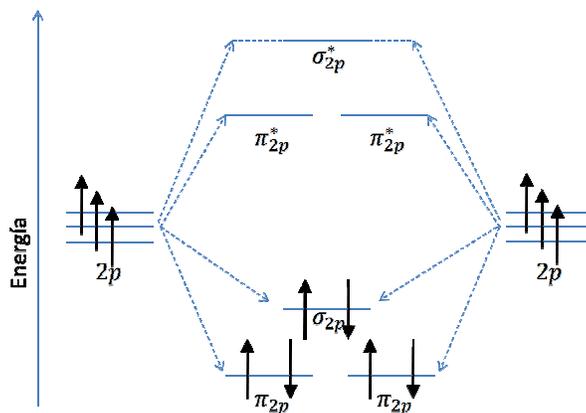


FIGURA 6: TOM PARA EL NITRÓGENO

Orden de enlace = 3. **No existen electrones desapareados**  $\rightarrow$  **diamagnético**. Lo más importante es el reordenamiento de los orbitales enlazantes. Esto sucede por un rechazo que se produce entre los electrones presentes en el orbital anti-enlazante  $\sigma_{2s}$  causan un rechazo de los electrones en el  $\sigma_{2p}$ , ya que físicamente, estos orbitales se encuentran muy próximos. Este fenómeno está ilustrado en la figura 7, y sucede en todas las moléculas homoatómicas y heteroatómicas que contengan un elemento de  $Z=7$  o menor.

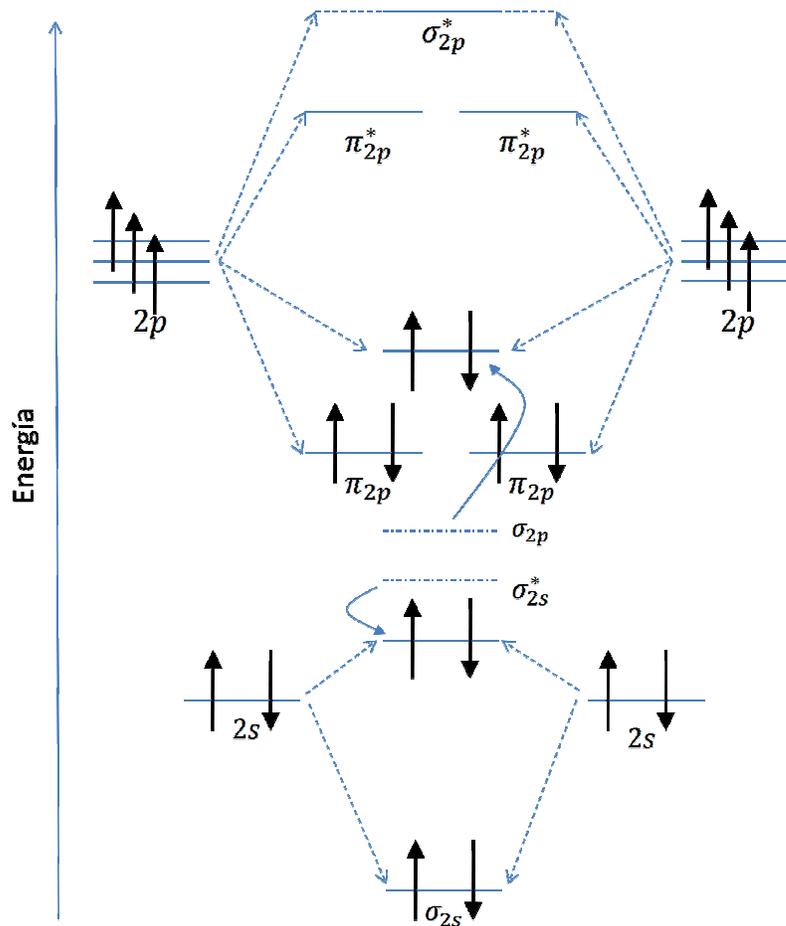


FIGURA 7: REPRESENTACIÓN DEL RECHAZO ENTRE ORBITALES SIGMA DEL NIVEL 2