

**Teoría de Orbitales Moleculares****Teoría de Orbitales Moleculares:**

Describe a los electrones en una molécula utilizando funciones de onda llamadas orbitales moleculares (OM).

Los OM se forman por combinación lineal entre orbitales atómicos (OA)

Estas combinaciones lineales representan el traslape entre OA cuando los átomos están en una molécula.

El número de OM formados es igual al número de OA combinados para formarlos.

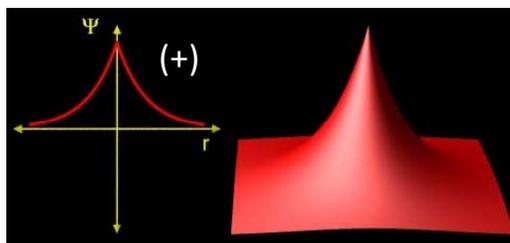
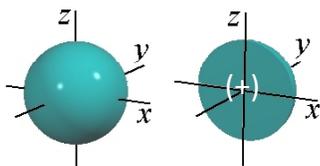
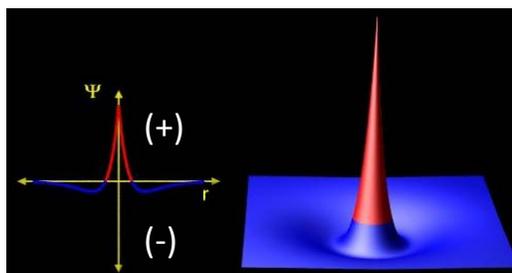
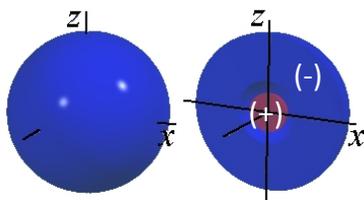
Para moléculas diatómicas por cada par de OA, se forman 2 OM: uno de enlace y otro de antienlace.

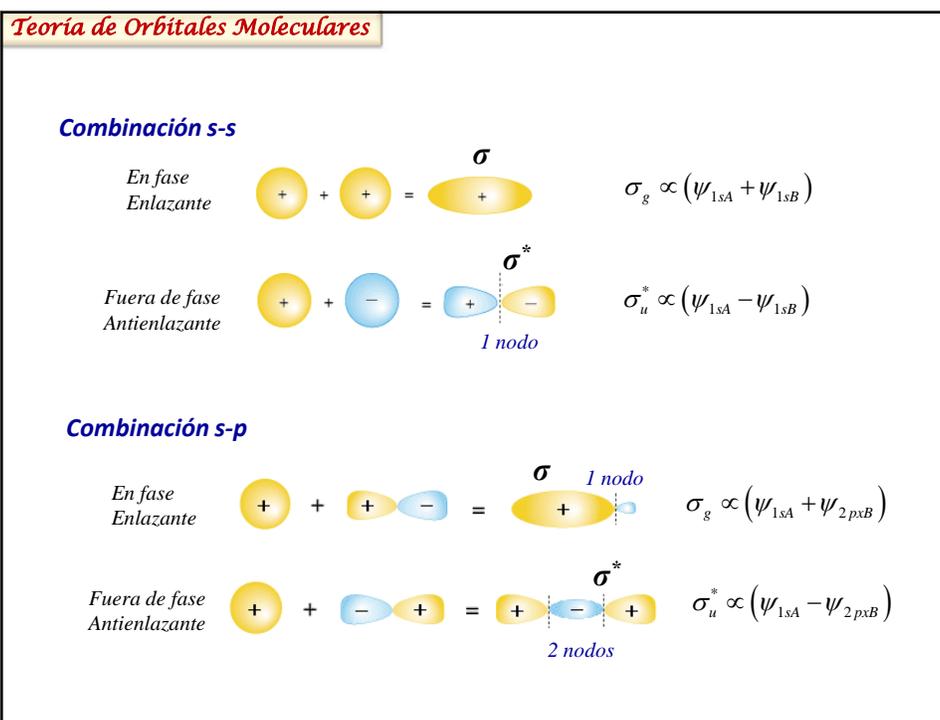
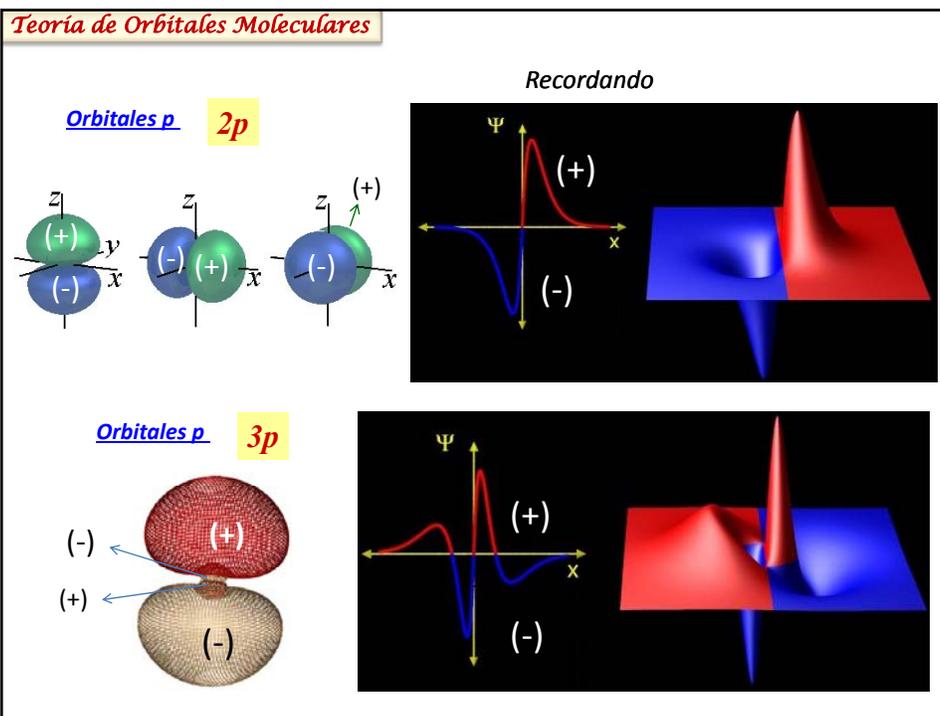
El OM de enlace tiene menor energía que el OM de antienlace correspondiente.

Los OM pueden representarse en diagramas de niveles de energía, conocidos como diagramas de orbitales moleculares.

En estos diagramas los OA se ubican en los extremos y los OM en el centro.

Los OM cumplen, al igual que los OA, con el principio de exclusión de Pauli y con la regla de máxima multiplicidad de Hund.

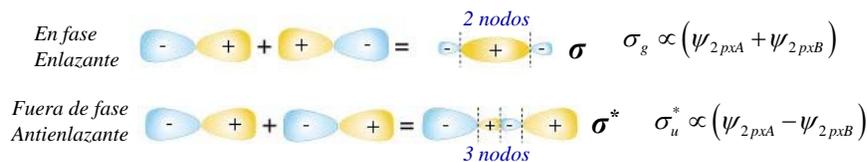
**Teoría de Orbitales Moleculares****Recordando****Orbitales s****1s****Orbitales s****2s**



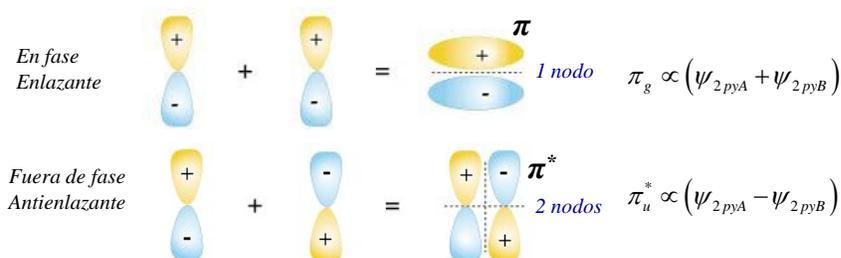
### Teoría de Orbitales Moleculares

#### Combinación p-p

Traslape frontal ( a lo largo del eje internuclear)



Traslape lateral ( perpendicular al eje internuclear)



### Teoría de Orbitales Moleculares

Cuando se suman dos funciones *con la misma fase* se suman *constructivamente*, esto es la función resultante tiene una amplitud mayor.

Cuando se suman dos funciones *con fases opuestas* se suman *deconstructivamente*, esto es se cancelan entre sí.

Las interacciones constructivas entre OA dan lugar a OM enlazantes, esto es con densidad electrónica aumentada entre los dos átomos que forman el enlace.

Las interacciones destructivas entre OA dan lugar a OM antienlazantes, o sea formando un nodo entre los dos átomos que forman el enlace.

**Los orbitales moleculares no están asignados a un átomo (o par de átomos) sino que pertenecen a toda la molécula.**

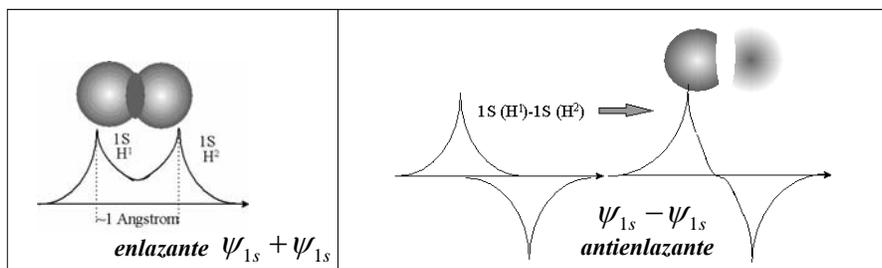
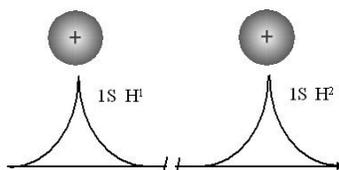
**Los enlaces se forman por la combinación de los orbitales atómicos de todos los átomos en la molécula.**

## Teoría de Orbitales Moleculares

### Formación de Enlaces a partir de Orbitales Atómicos

Las funciones de onda que describen a los orbitales atómicos pueden combinarse:  
*aditivamente* o *en fase* (si son del mismo signo)  
*destruictivamente* o *fuera de fase* (si son de signos opuestos).

#### Combinación s-s



## Teoría de Orbitales Moleculares

### Formación de Enlaces a partir de Orbitales Atómicos

El número total de orbitales moleculares formados  
 será igual al número total de orbitales atómicos que le dieron origen

#### Principio de Building UP:

1. El número de electrones en un átomo es igual a su número atómico
2. Cada electrón añadido se irá incorporando a los orbitales en orden creciente de energía
3. No puede haber más de 2 electrones en el mismo orbital.

En orbitales de igual energía (3 orb p, 5 d, 7 f) los electrones se distribuyen, siempre que sea posible, con sus espines paralelos, es decir, separados.

El sistema es más estable (< energía) cuando tiene electrones desapareados (spines paralelos) que cuando esos electrones están apareados (spines opuestos o antiparalelos).

#### Regla de máxima multiplicidad de Hund

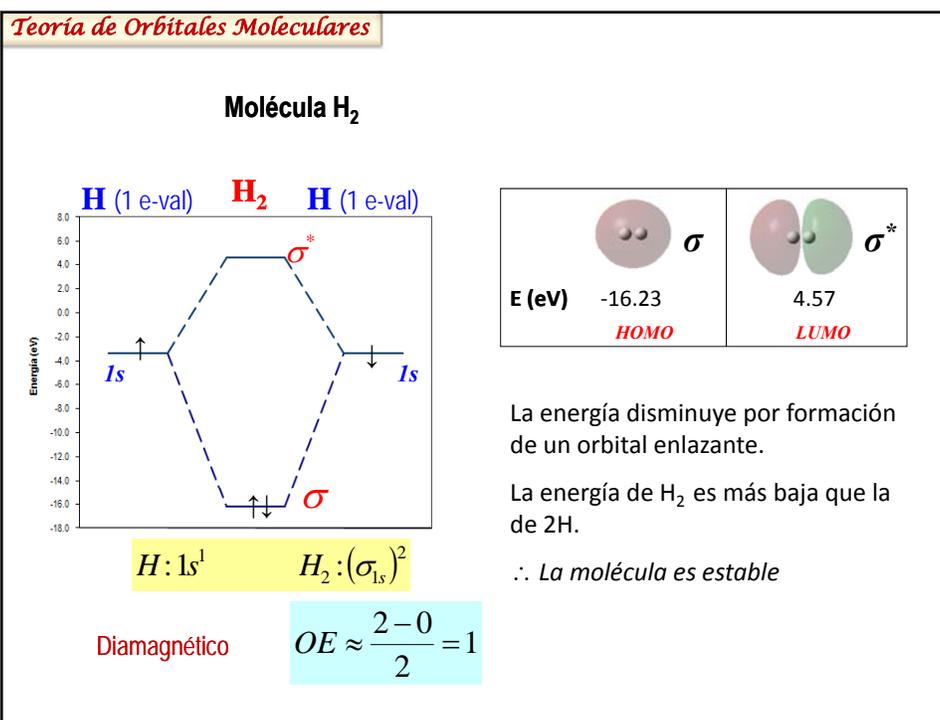
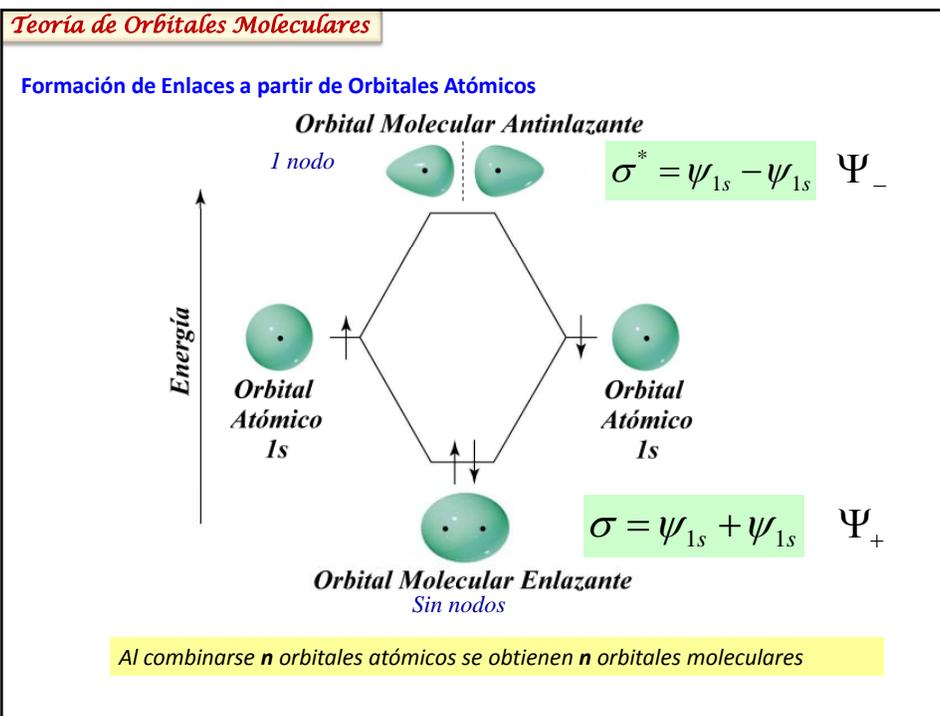
Cuando varios electrones están descritos por orbitales degenerados, la mayor estabilidad energética es aquella en donde los espines electrónicos están desapareados.

#### Principio de exclusión de Pauli:

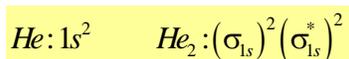
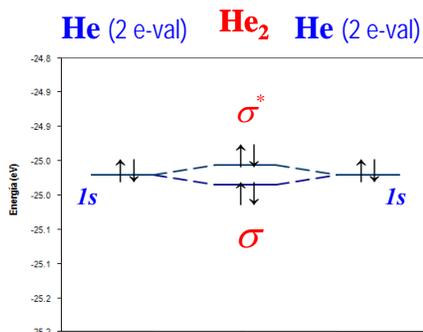
En un mismo estado cuántico no puede haber dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos.

Fermión: partícula de espín semientero  
 Ej: electrones, protones, neutrones

#### Diagramas Orbitales



## Teoría de Orbitales Moleculares

Molécula He<sub>2</sub>

$$OE \approx \frac{2-2}{2} = 0$$

No hay traslape, a pesar de tener igual fase

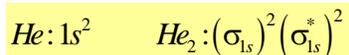
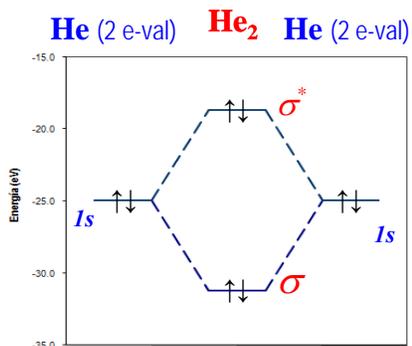


El incremento de E por ocupación del orbital  $\sigma^*$  es de igual magnitud que la disminución de E por ocupación del orbital  $\sigma$ .

La energía de He<sub>2</sub> no es más baja que la de 2 átomos de He.

$\therefore$  La molécula de He<sub>2</sub> no se forma

## Teoría de Orbitales Moleculares

Molécula He<sub>2</sub>

$$OE \approx \frac{2-2}{2} = 0$$

Distancia de enlace fija (1 Å)



El incremento de E por ocupación del orbital  $\sigma^*$  es ligeramente de mayor magnitud que la disminución de E por ocupación del orbital  $\sigma$ .

La energía de He<sub>2</sub> es más alta que la de 2 átomos de He.

$\therefore$  La molécula de He<sub>2</sub> no se forma

