



TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

M. C. Q. Alfredo Velásquez Márquez

AVM



TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

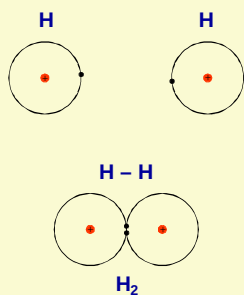
La teoría del enlace-valencia explica muchas propiedades de las sustancias; sin embargo, el diamagnetismo, el paramagnetismo y la estabilidad en las moléculas son propiedades que se explican mejor con otra teoría conocida como "Teoría del Orbital Molecular" (TOM). Esta teoría surge de la mecánica cuántica y en ella se considera que los orbitales atómicos puros de un átomo, se enlazan a los orbitales atómicos puros de otro átomo, generando orbitales moleculares, los cuales pertenecen a la molécula en conjunto.

AVM

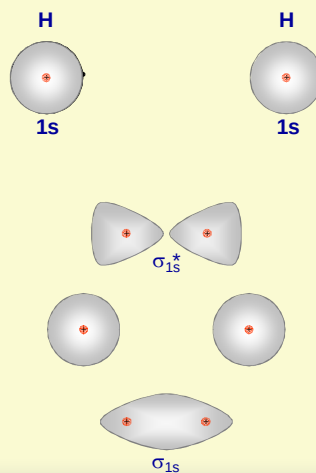


TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

Teoría del enlace-valencia



Teoría del Orbital Molecular

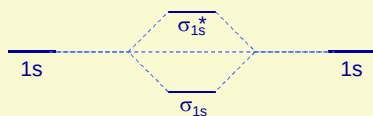


AVM

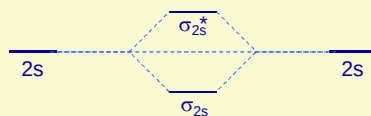


Combinación de los orbitales 1s y 2s

Orbitales 1s



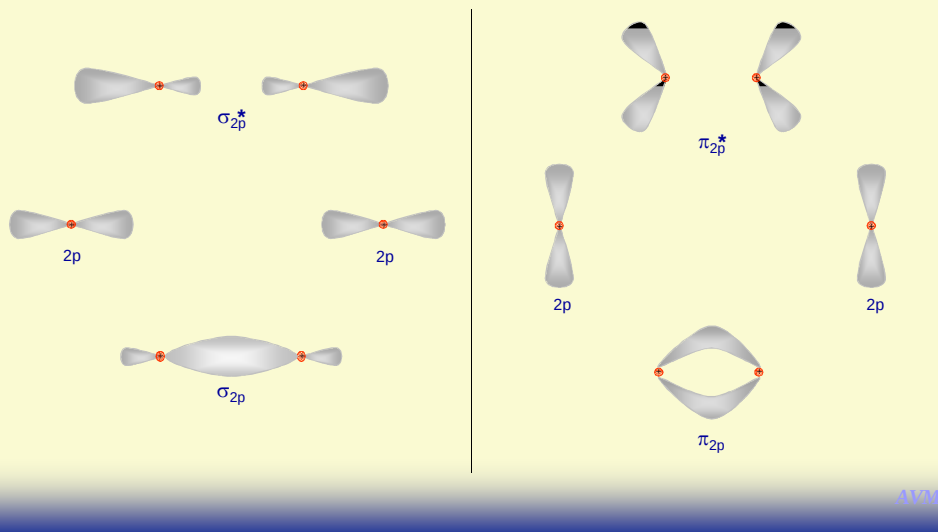
Orbitales 2s



AVM



Combinación de los orbitales p

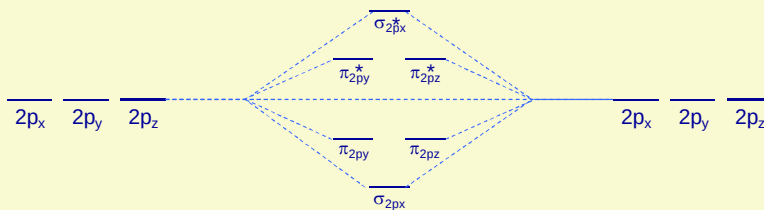


AVM



Combinación de los orbitales 2p

Los orbitales sigma (σ) son menos energéticos que los orbitales pi (π), pero en el caso de los orbitales de antienlace, sucede lo contrario; es decir, los orbitales sigma de antienlace (σ^*) son más energéticos que los orbitales pi de antienlace (π^*).



AVM



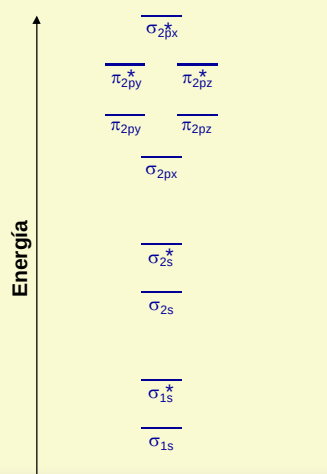
Contenido energético de los OM

En los orbitales atómicos puros, los orbitales 1s son los de más bajo contenido energético, le siguen los orbitales 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, etc; es decir, el contenido energético aumenta, al aumentar la órbita y la complejidad de la forma geométrica que describe el electrón. En el caso de los orbitales moleculares, su contenido energético depende del tipo de orbital atómico puro que le dio origen, del tipo de interacción (frontal o lateral) y del tipo de orbital formado (de enlace o de antienlace); de tal forma que, acomodando los orbitales moleculares en un diagrama de energía, éstos quedarían de la forma siguiente:

AVM



Contenido energético de los OM



AVM



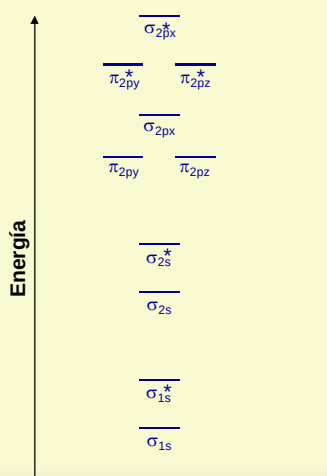
Contenido energético de los OM

Además de lo anterior, cuando los átomos que se unen son pequeños, no solo se presentan las interacciones **s – s** y **p – p**, sino que también se presenta la interacción **s – p**, la cual se denomina interacción cruzada; de tal forma que, acomodando los orbitales moleculares en un diagrama de energía, éstos quedarían de la forma siguiente:

AVM



Contenido energético de los OM



AVM



$\overline{\sigma_{2p_x}^*}$

$\overline{\pi_{2p_y}^*} \quad \overline{\pi_{2p_z}^*}$

$\overline{\sigma_{2p_x}}$

$\overline{\pi_{2p_y}} \quad \overline{\pi_{2p_z}}$

$\overline{\sigma_{2s}^*}$

$\overline{\sigma_{2s}}$

$\overline{\sigma_{1s}^*}$

$\overline{\sigma_{1s}}$

Para 14 o menos electrones

$\overline{\sigma_{2p_x}^*}$

$\overline{\pi_{2p_y}^*} \quad \overline{\pi_{2p_z}^*}$

$\overline{\pi_{2p_y}} \quad \overline{\pi_{2p_z}}$

$\overline{\sigma_{2p_x}}$

$\overline{\sigma_{2s}^*}$

$\overline{\sigma_{2s}}$

$\overline{\sigma_{1s}^*}$

$\overline{\sigma_{1s}}$

Para más de 14 electrones