

TEMA 3: ESTRUCTURA MOLECULAR

- 3.1 Introducción a la Teoría de Orbitales Moleculares.
- 3.2 Orbitales Moleculares. Molécula de hidrógeno.
- 3.3 Estructura y simetría de los orbitales moleculares.
- 3.4 Diagrama de niveles energéticos.
- 3.5 Diagramas de niveles energéticos – Dependencia del tipo de orbital.
- 3.6 Propiedades de los enlaces.

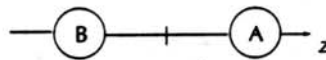


Figura 3.1: Orientación de la molécula de H_2 .

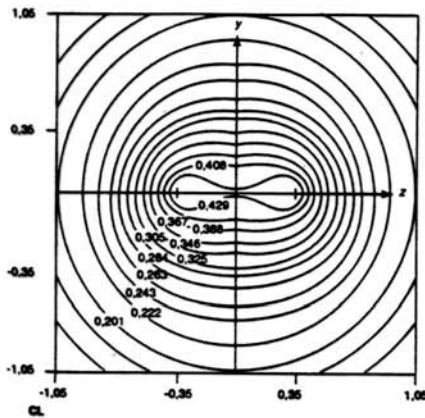


Figura 3.2: Curvas de nivel sobre el plano zy del orbital molecular σ_g .

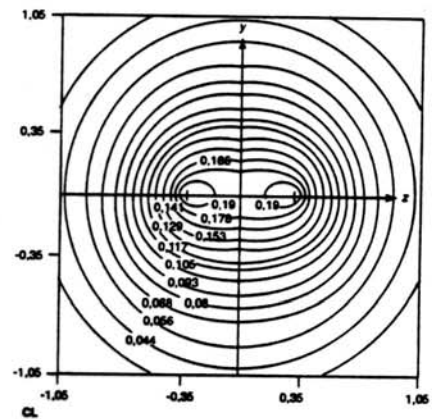


Figura 3.3: Curvas de nivel sobre el plano zy la función de distribución de probabilidades σ_g^2 .

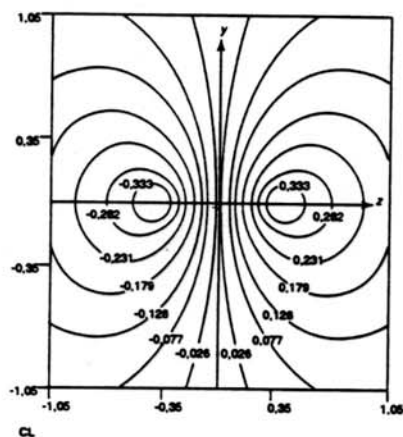


Figura 3.4: Curvas de nivel sobre el plano zy del orbital molecular σ_u .

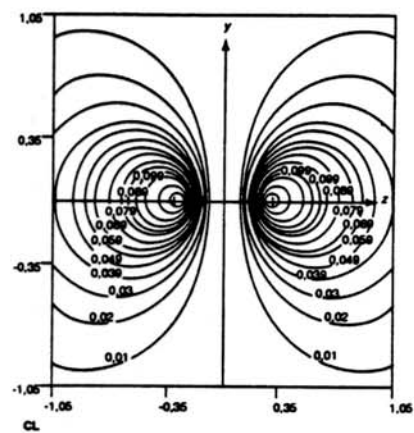


Figura 3.5: Curvas de nivel sobre el plano zy la función de distribución de probabilidades σ_u^2 .

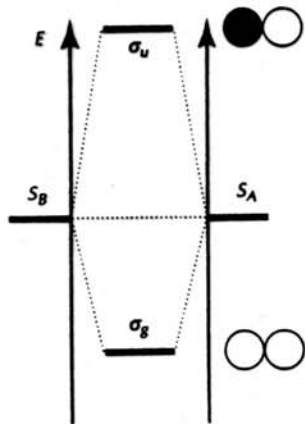


Figura 3.6: Diagrama cualitativo de los niveles de energéticos de los orbitales moleculares del H_2 .

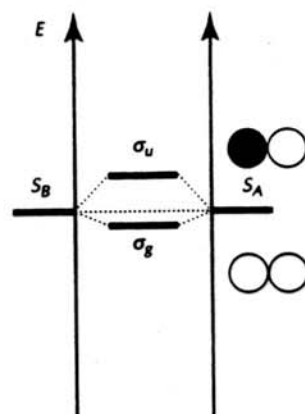


Figura 3.7: Diagrama energéticos de orbitales moleculares del H_2 .

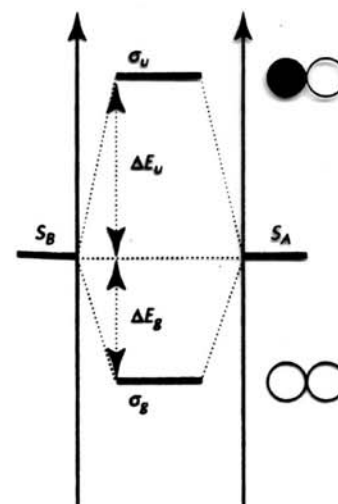


Figura 3.8: Llenado del diagrama energético de los orbitales moleculares del H_2 .

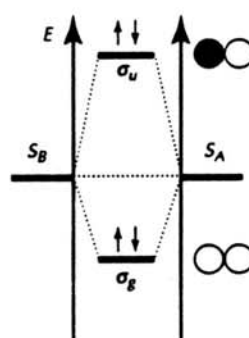
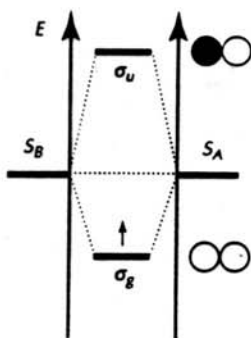


Figura 3.9: Diagrama energéticos de orbitales moleculares del H_2^+ y He_2 .

Tabla 3.1

Molécula	Orden de enlace	Distancia de enlace (Å)	Entalpia de enlace (Kcal/mol)
H_2^+	0,5	1,06	83
He_2^+	0,5	1,08	—
H_2	1	0,74	104
He_2^{2+}	1	0,74	—
He_2	0	—	—

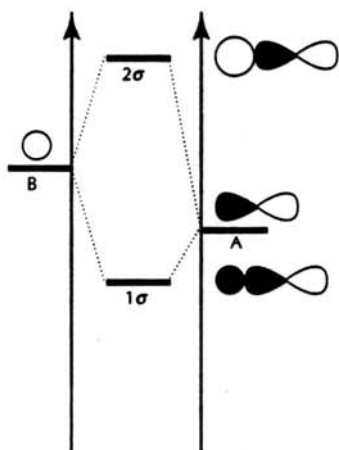


Figura 3.13: Diagrama energético de orbitales moleculares formados por la Interacción σ - sp .

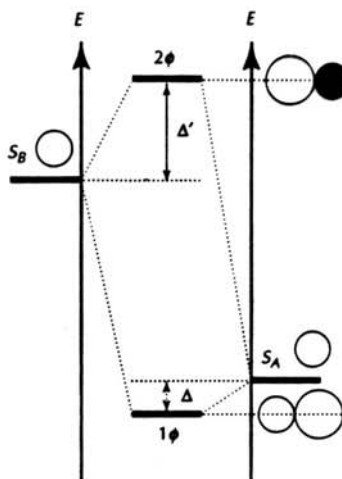


Figura 3.10: Diagrama energético de orbitales moleculares de un sistema AB.

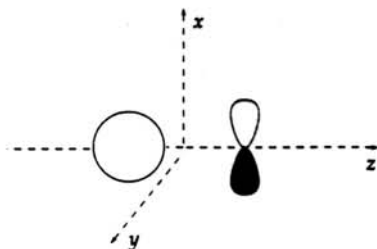


Figura 3.11 Interacción sp .

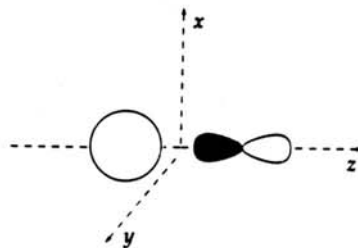


Figura 3.12: Interacción σ - sp .

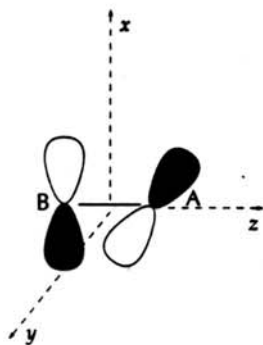
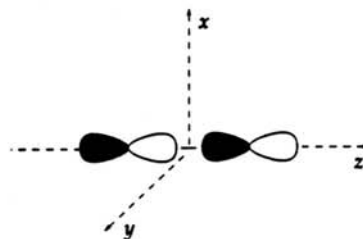


Figura 3.14: Interacción de orbitales p , con sus planos nodales perpendiculares, o bien orientados según el eje z .



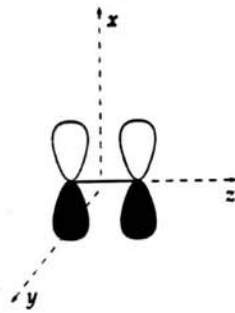


Figura 3.15: Interacción π -pp de orbitales p.

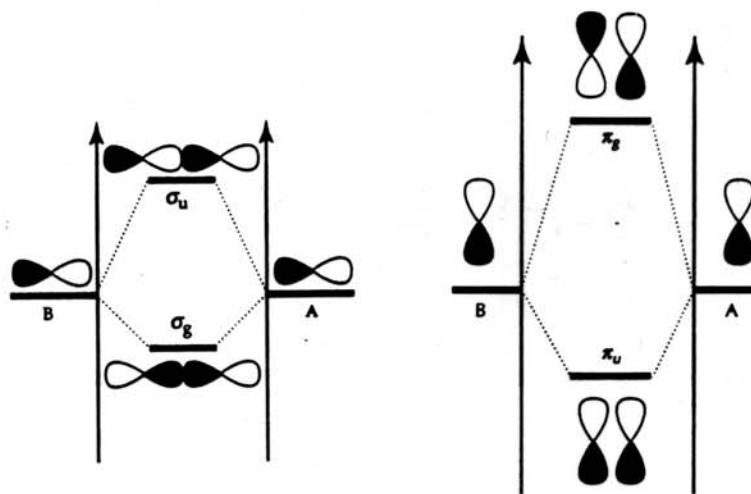


Figura 3.16: Diagrama energético de orbitales moleculares formados por interacción σ -pp y π -pp de orbitales p.

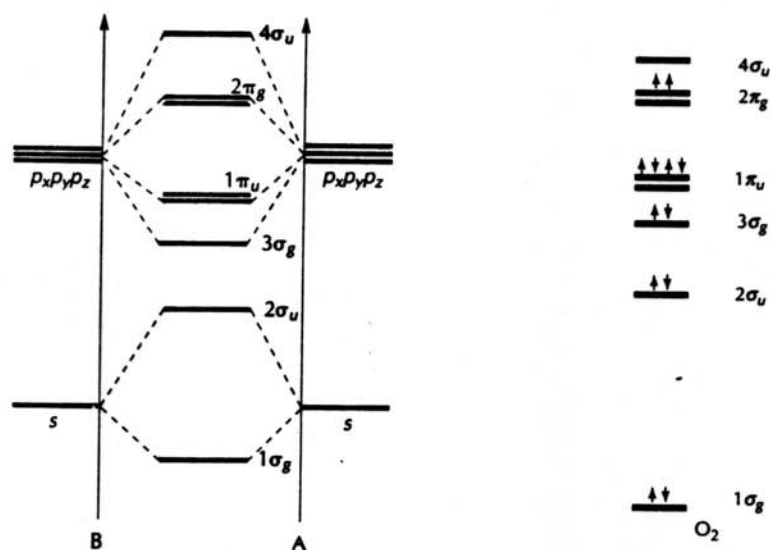
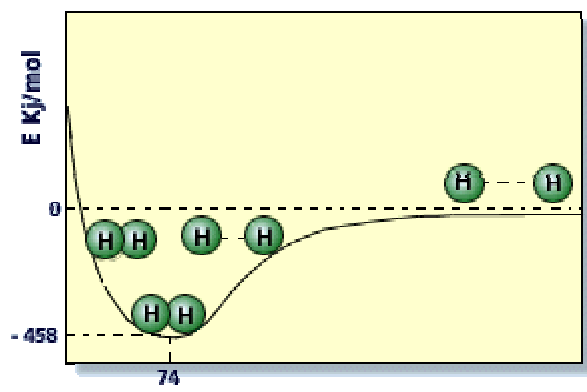
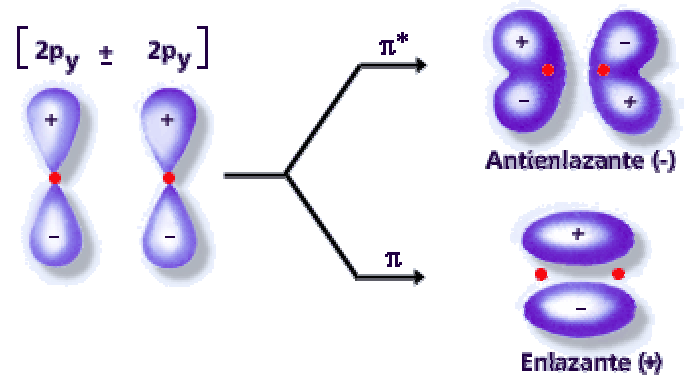
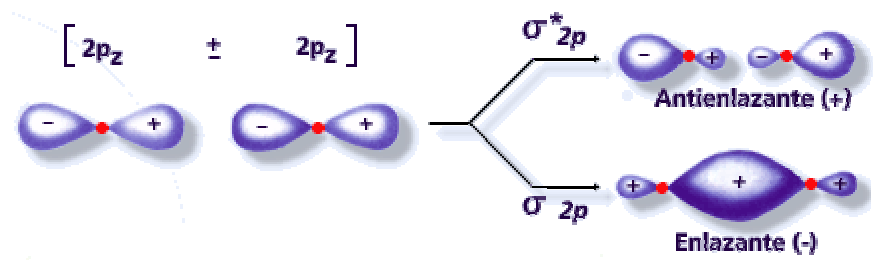
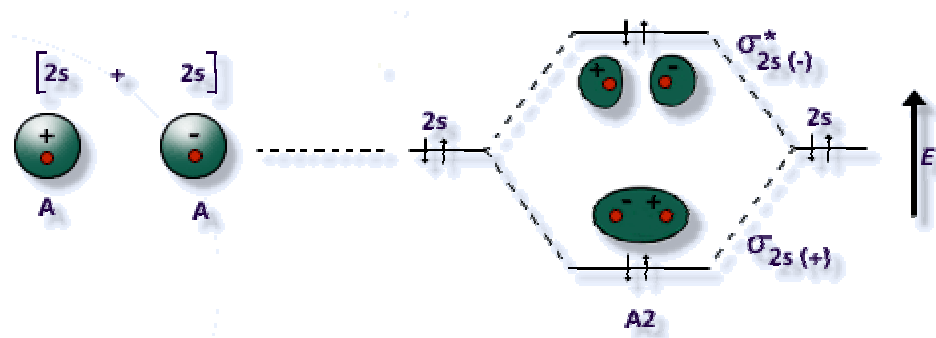
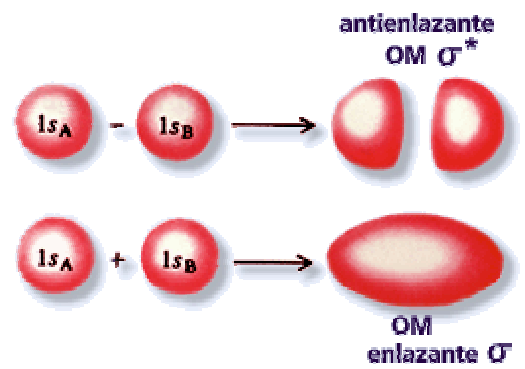


Figura 3.18: Diagrama completo de orbitales moleculares de moléculas diatómicas homonucleares. Configuración electrónica de la molécula de O_2 .



Distancia Internuclear pm



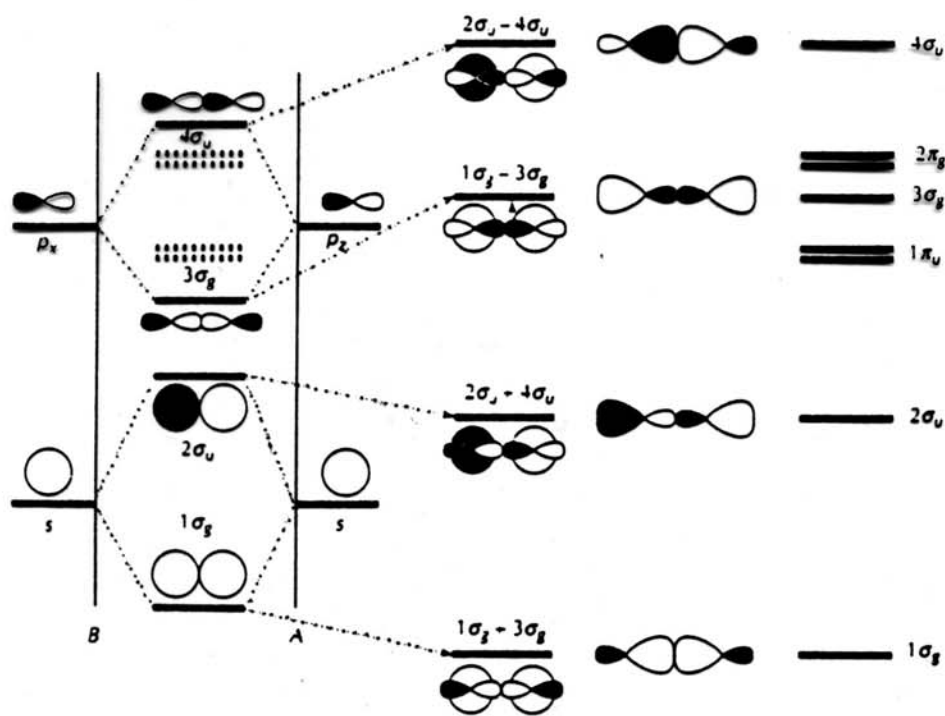


Figura 3.19: Diagrama completo de orbitales moleculares de moléculas diatómicas homonucleares con interacciones cruzadas σ - sp .

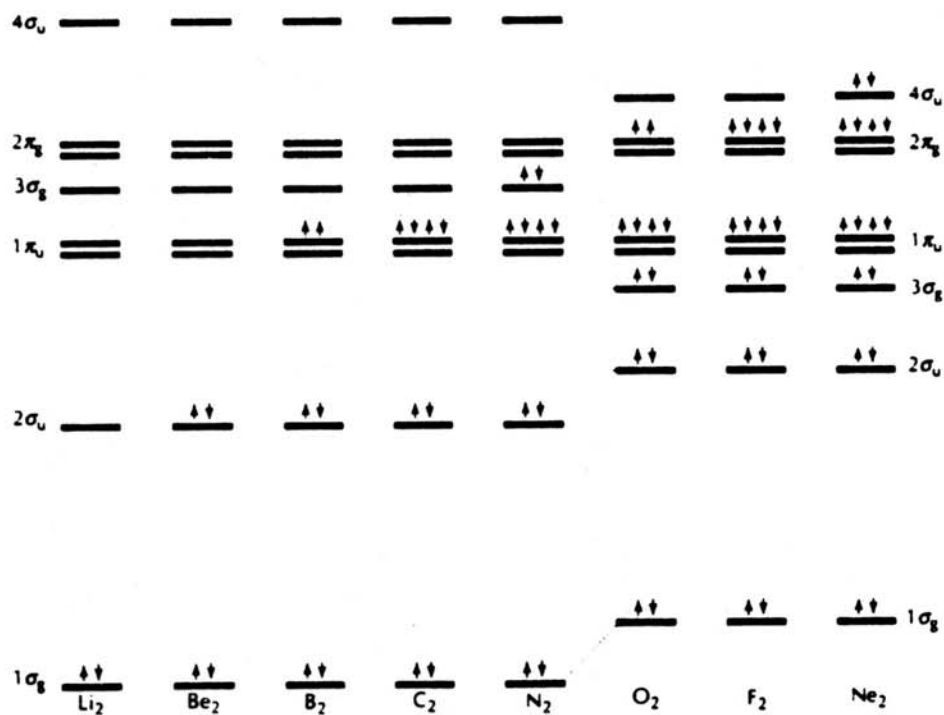
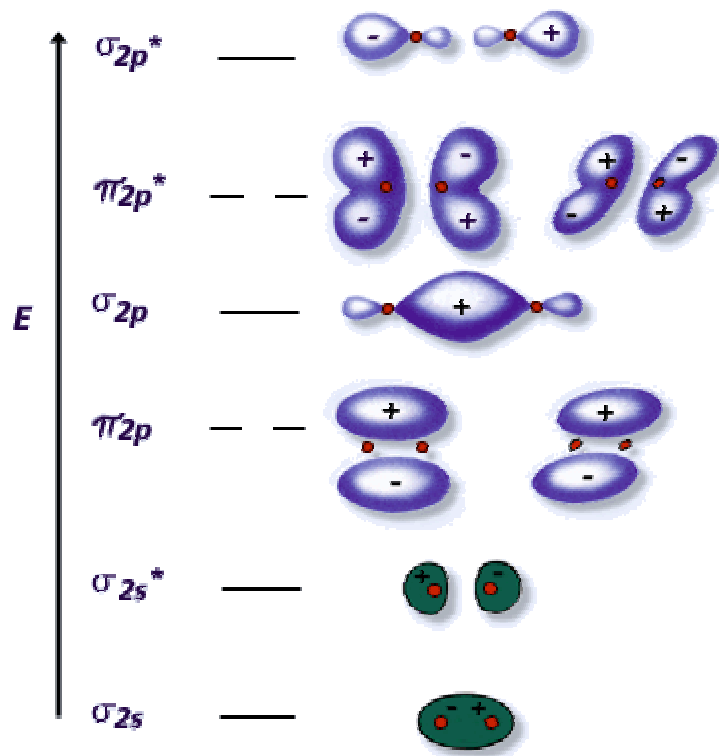


Figura 3.20: Configuración electrónica en el estado fundamental de las moléculas diatómicas de los elementos del segundo periodo.



	B2	C2	N2	O2	F2	
σ_{2p}^*	—	—	—	—	—	σ_{2p}^*
π_{2p}^*	—	—	—	$\uparrow \uparrow$	$\uparrow \downarrow$	π_{2p}^*
σ_{2p}	—	—	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	π_{2p}
π_{2p}	$\uparrow \uparrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	σ_{2p}
σ_{2s}^*	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	σ_{2s}^*
σ_{2s}	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$	σ_{2s}
Carácter	Paramagn	Diamagn	Diamagn	Paramagn	Diamagn	Carácter
O. Enlace	1	2	3	2	1	O. Enlace
Energía Disociación	290	620	942	495	154 kJ/mol	Energía Disociación
Long-Enlace	1.59	1.31	1.10	1.21	1.43 Å	Long-Enlace

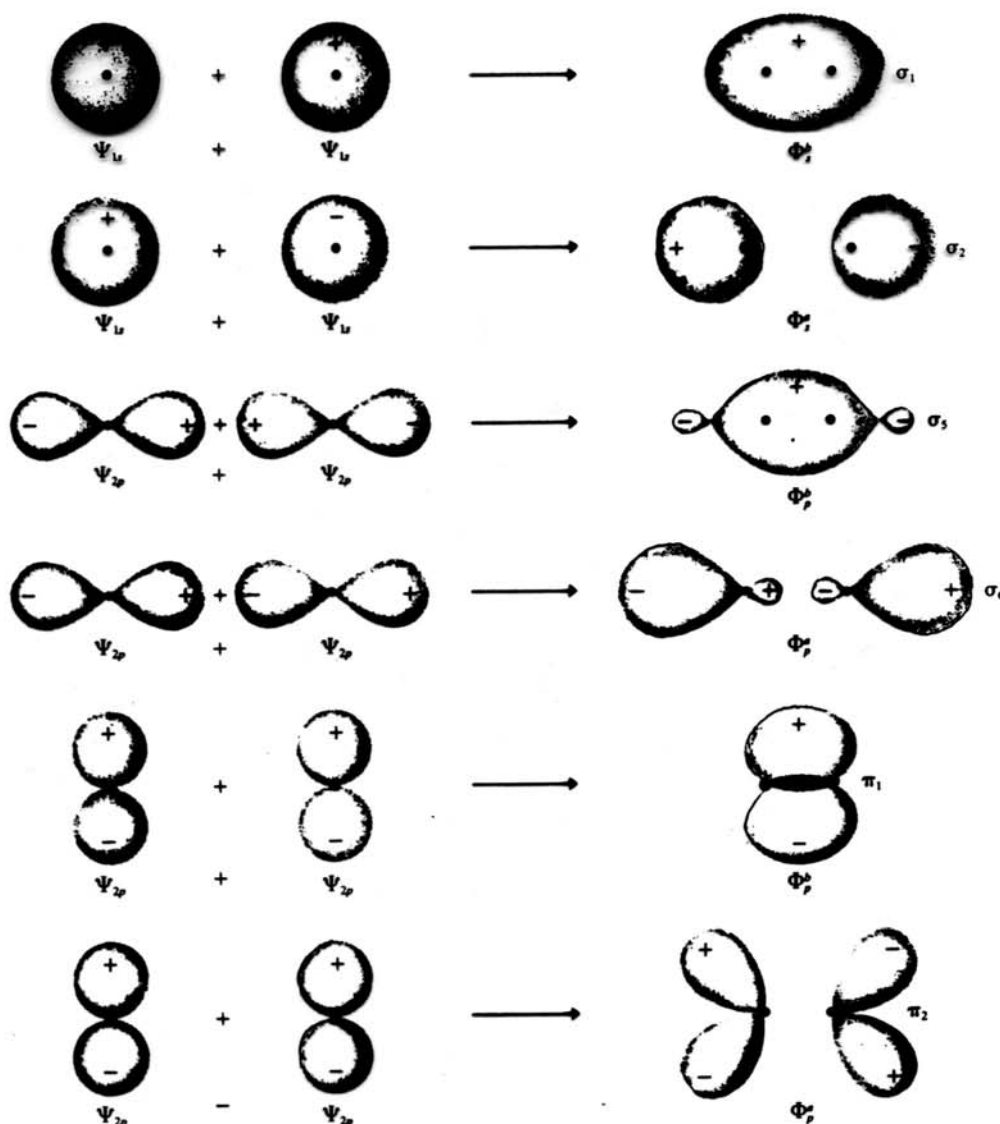


Figura 3.17: Representación gráfica de las combinaciones lineales de los orbitales s y p .

Tabla 3.2 Distancias de enlace

Molécula	Enlace	Distancia/Å
H ₂	H-H	0,74
F ₂	F-F	1,44
Cl ₂	Cl-Cl	1,99
I ₂	I-I	2,67
HF	H-F	0,92
HCl	H-Cl	1,27
HBr	H-Br	1,41
HI	H-I	1,60
O ₂	O=O	1,21
N ₂	N≡N	1,09

Tabla 3.3 Radios covalentes/Å

Elemento	Orden de enlace:		
	simple	doble	triple
H	0,37		
F	0,64		
O	0,66	0,57	
N	0,74	0,65	0,55
C	0,71	0,67	0,60
Cl	0,99		
S	1,04	0,95	
P	1,10		

Tabla 3.4 Energías de enlace (kcal/mol)

	H	C	N	O	F
H	104,6				
C	98,88	83,52(-)			
		146,88(=)			
		194,00(=)			
N	93,12	73,20(-)	39,12(-)		
		147,12(=)	98,16(=)		
		213,60(=)	227,04(=)		
O	111,1	86,40(-)	37,68	35,04(-)	
		178,32(=)		119,28(=)	
F	135,6	116,16	64,8	44,4	37

Los símbolos que acompañan a algunos valores se refieren al orden de enlace entre los correspondientes átomos.

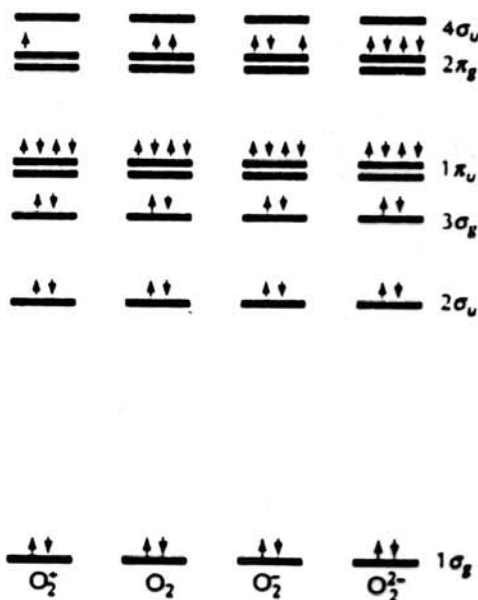


Figura 3.21: Configuración electrónica en el estado fundamental de las especies diatómicas homonucleares derivadas de la molécula de O₂.

Tabla 3.5. Parámetros significativos de especies diatómicas derivadas de la molécula de O ₂	O ₂ ⁺	O ₂	O ₂ ⁻	O ₂ ²⁻
Orden de enlace total	2.5	2	1.5	1
Orden de enlace σ	1	1	1	1
Orden de enlace π	1.5	1	0.5	0
Longitud de enlace (Å)	1.12	1.21	1.33	1.49

