

Enlaces

3. - C. L. O. A.

Teoría propuesta por Hund y Mulliken.

Los electrones de una molécula están bajo la acción de todos los núcleos que la componen.

A semejanza de los orbitales atómicos, hay unos orbitales moleculares formados por la combinación de los orbitales atómicos.

Los orbitales moleculares se consideran asignados por combinación - superposición - de orbitales atómicos. - C. L. O. A. -

Orbital molecular enlazante: Tienen la energía menor que los orbitales atómicos de partida. La mayor densidad electrónica está entre los núcleos. Minimizando la repulsión de los núcleos y colaborando para mantenerlos unidos.

Orbital molecular antienlazante: Su energía es mayor que la de los átomos de partida y la mayor densidad electrónica no está entre los núcleos.

Tipos:

σ : sigma, simétrico, puede ser de dos tipos: $\left\{ \begin{array}{l} \sigma \text{ Enlazante} \\ \sigma^* \text{ Antienlazante} \end{array} \right.$

π : Pi $\left\{ \begin{array}{l} \pi = \text{Pi enlazante} \\ \pi^* = \text{P}^* \text{ n}^* \text{ienlazante} \end{array} \right.$

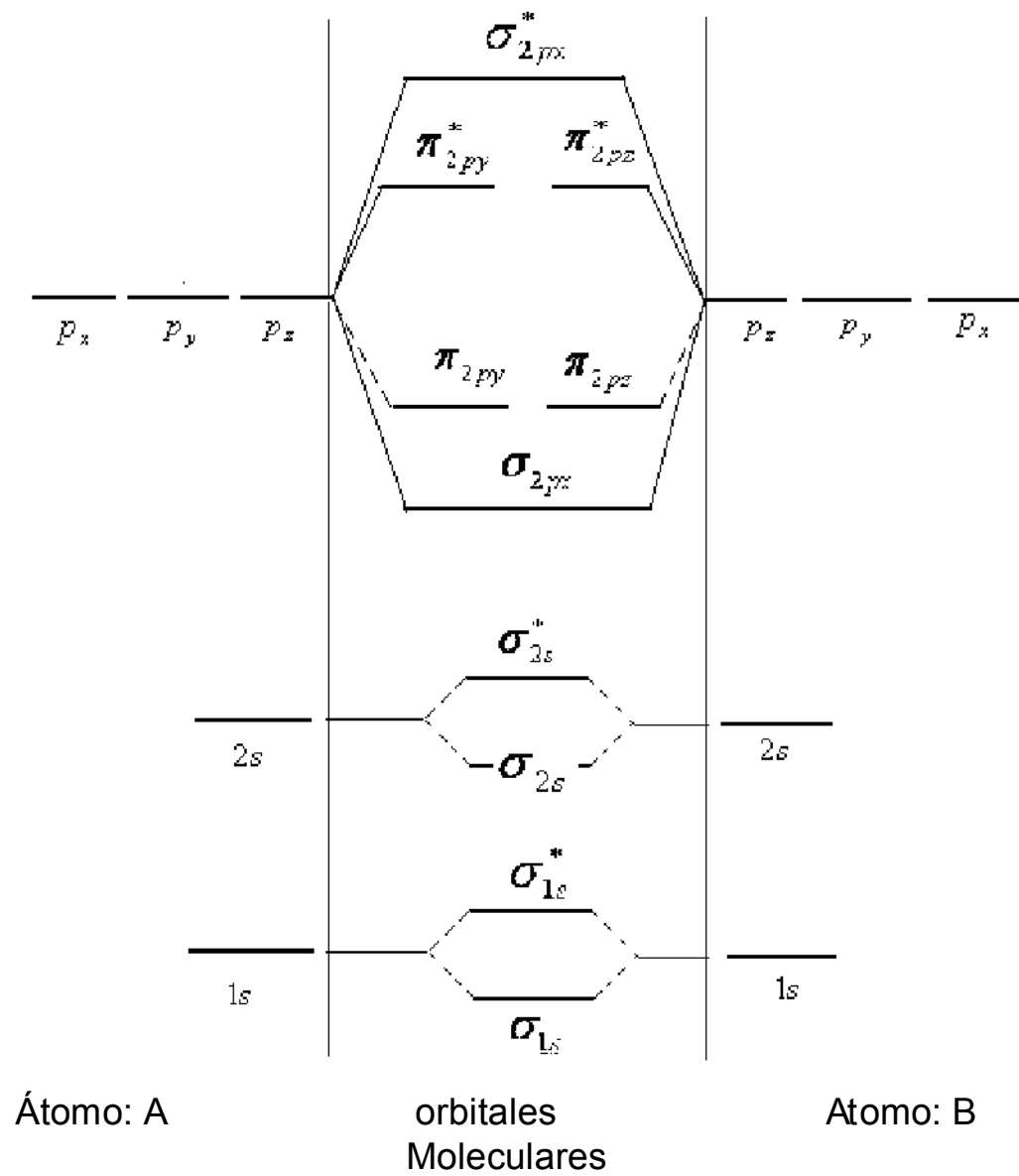
Propiedades magnéticas:

Substancias PARAMAGNÉTICAS: cuando quedan electrones desapareados en los orbitales moleculares.

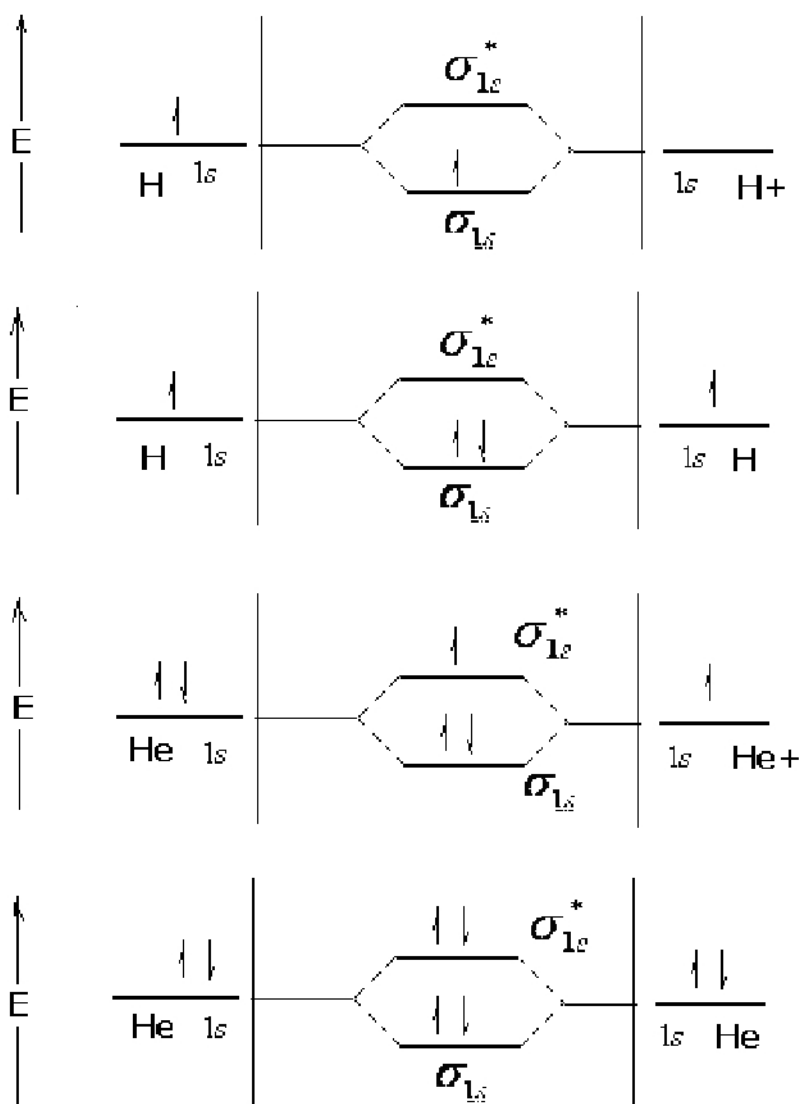
Substancias DIAMAGNÉTICAS: cuando todos los electrones están apareados de manera que su momento magnético es nulo.

Ordenación de energías:

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \sigma_{2px} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \pi^*_{2py} = \pi^*_{2pz} < \sigma^*_{2px}$$

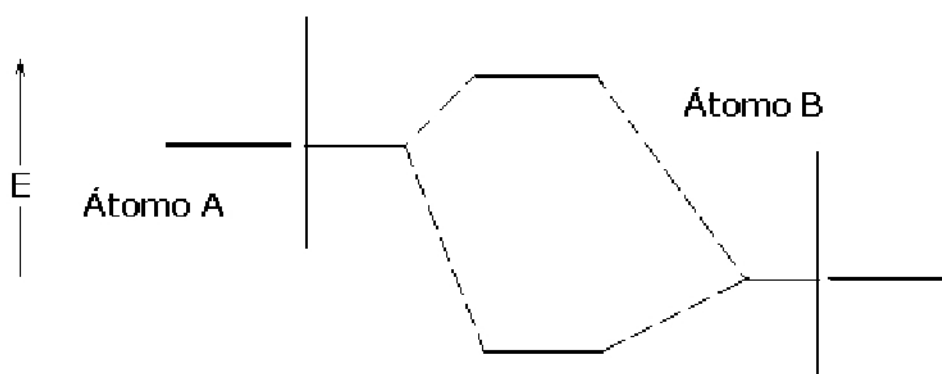


Ejemplos

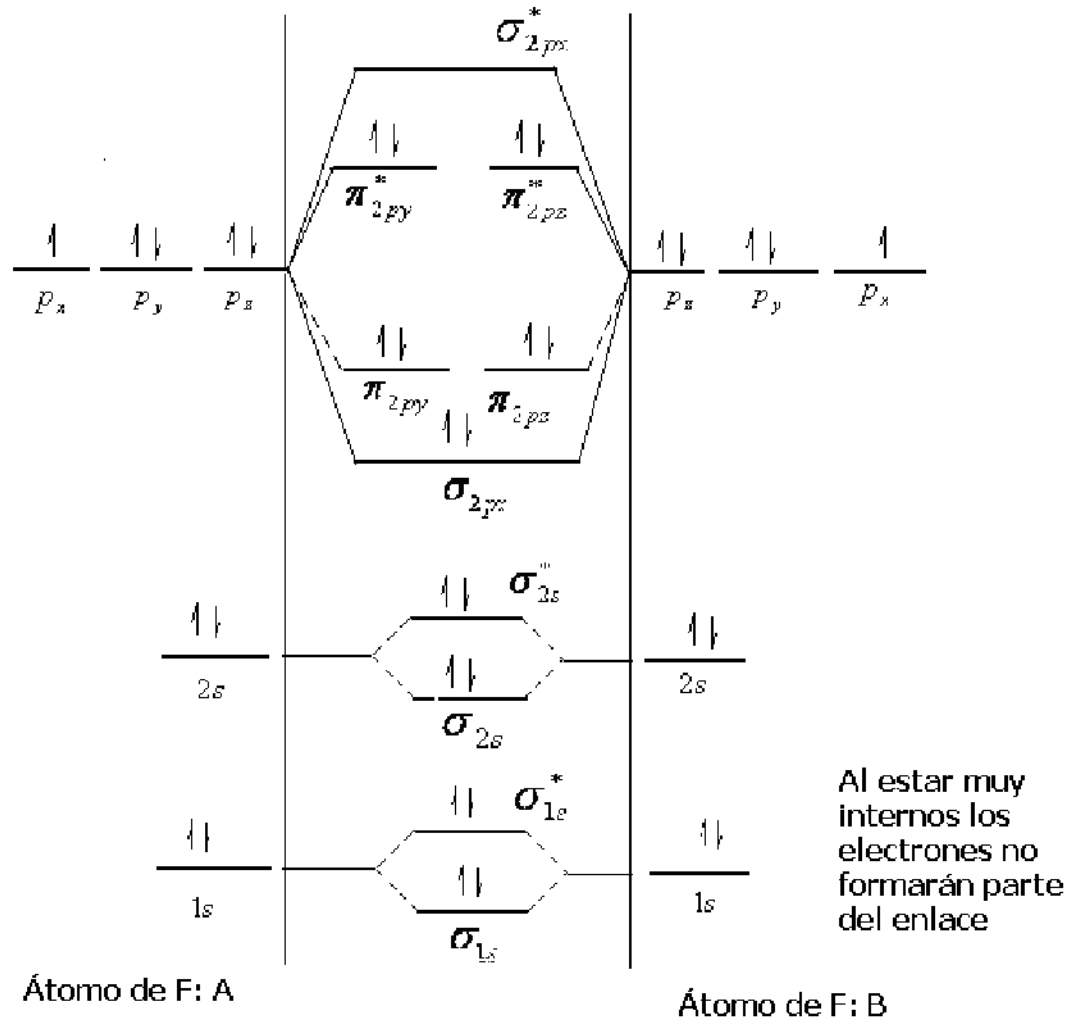


Los σ_{1s} y σ_{1s}^* no forman enlace, el He existe como gas monoatómico.

Cuando se unen átomos diferentes:



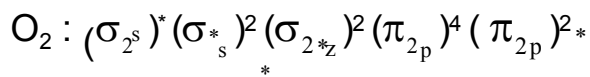
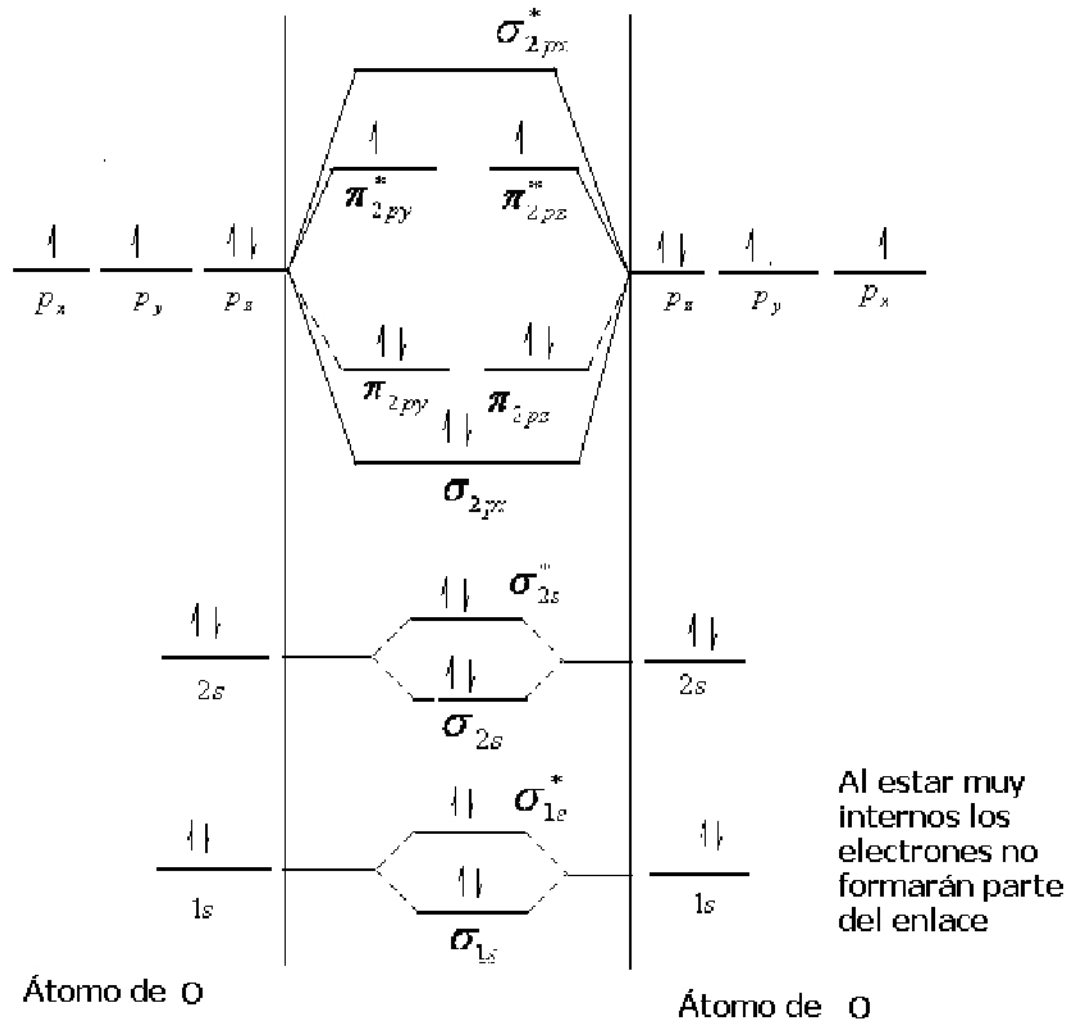
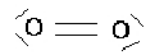
Ejemplo: $F = 9 e^- \longrightarrow 1s^2 2s^2 2p^*$



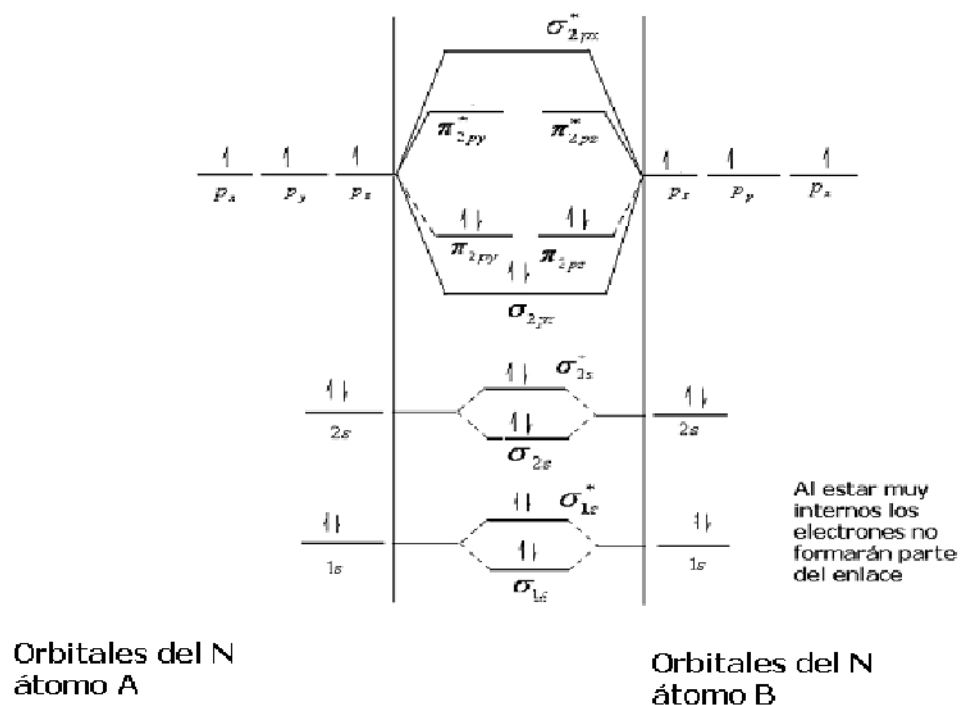
$F_2 : (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2p})^4 (\pi_{2p}^*)^4$ la molécula de F_2 estará

formada por un solo enlace F - F

Ejemplo: O₂ La teoría del Octeto no explica la existencia de 2e⁻ desapareados y por tanto sus propiedades paramagnéticas.



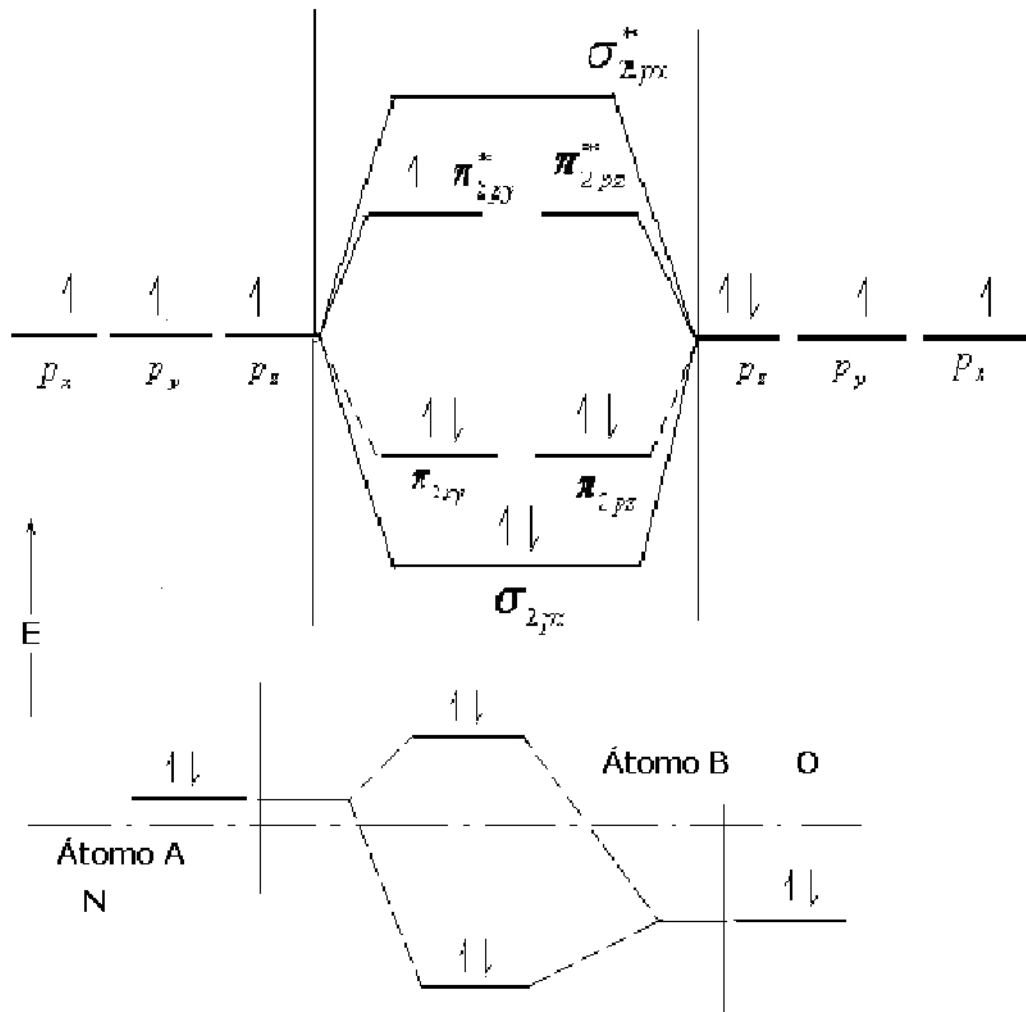
Ejemplo $N_2 : 1s^2 2s^2 2p^3$



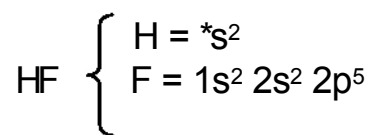
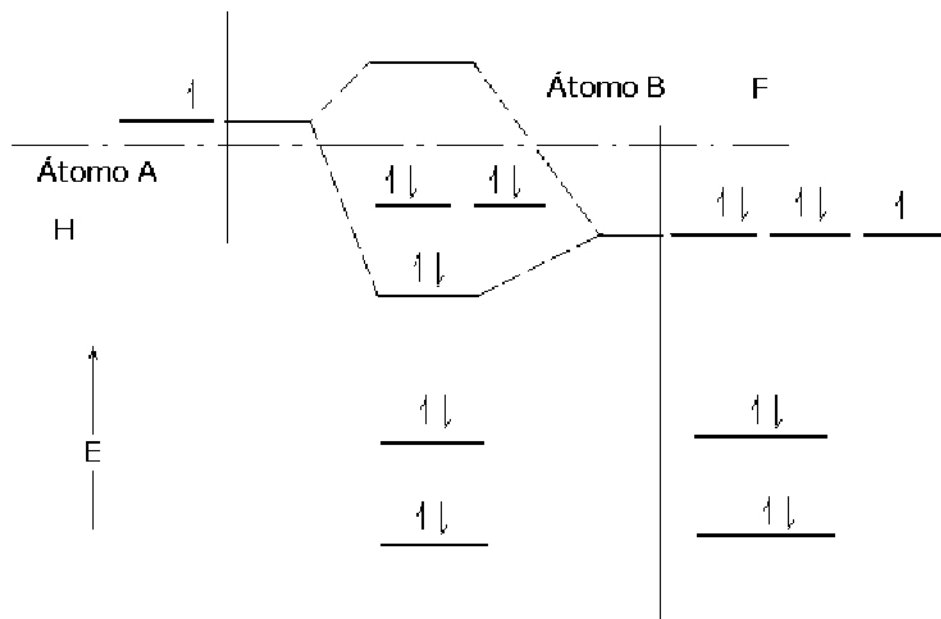
$N_2 : (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2pz})^2 (\pi_{2p})^4$ Todos los electrones apareados *
molécula Diamagnética.

→

Molécula de NO



Molécula HF:Diamagnética



Molécula de agua

