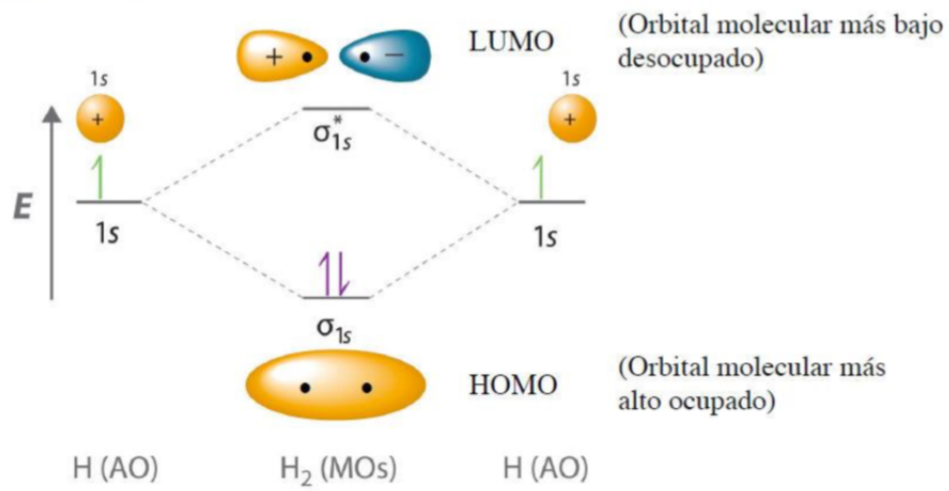


Diagrama de Orbitales Moleculares:



Orden de Enlace (OE): 
$$OE = \frac{1}{2}(N_b - N_a)$$

$N_b$  = número de electrones de enlace

$N_a$  = número de electrones de antienlace

$OE (H_2) = \frac{1}{2}(2 - 0) = 1 \quad \rightarrow \quad H - H$

Un diagrama de OM **no correlacionado** se construye a partir de los OA ns, np cuyos niveles de energía no interfieren entre ellos. Los niveles energéticos de los OM resultantes siguen la secuencia:

$\sigma_s < \sigma_s^* < \sigma_z, (\pi_x, \pi_y) < (\pi_x^*, \pi_y^*) < \sigma_z^*$

Un diagrama de OM **correlacionado** se construye a partir de los OA ns, np cuyos niveles de energía están muy próximos entre ellos. Los niveles energéticos de los OM resultantes siguen la secuencia:

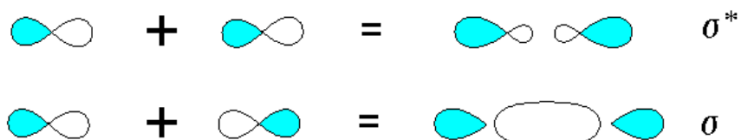
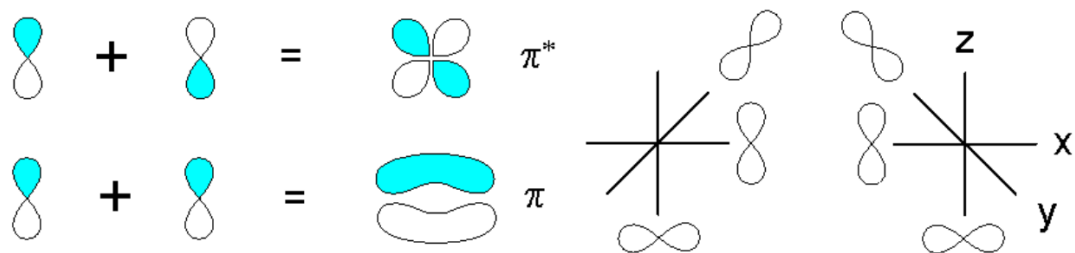
$\sigma_s < \sigma_s^* < (\pi_x, \pi_y) < \sigma_z < (\pi_x^*, \pi_y^*) < \sigma_z^*$

Las moléculas diatómicas homonucleares del segundo y tercer período tienen un diagrama de OM correlacionado, con excepción del  $O_2$ ,  $F_2$ ,  $Ne_2$ .

A continuación se enlistan los OM de las moléculas diatómicas homonucleares del 2do. Período:

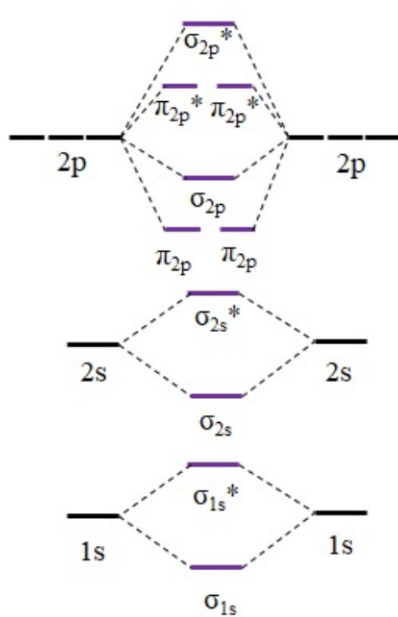
$H_2$	$\sigma_{1s}^2$
$He_2$	$\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2}$
$Li_2$	$\sigma_{2s}^2$
$Be_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2}$
$B_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^2$
$C_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4$
$N_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p}^4 \sigma_z^2$
$O_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_z^2 \pi_{2p}^4 \pi_{2p}^{*2}$
$F_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_z^2 \pi_{2p}^4 \pi_{2p}^{*4}$
$Ne_2$	$\sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_z^2 \pi_{2p}^4 \pi_{2p}^{*4} \sigma_z^{*2}$

# Pi

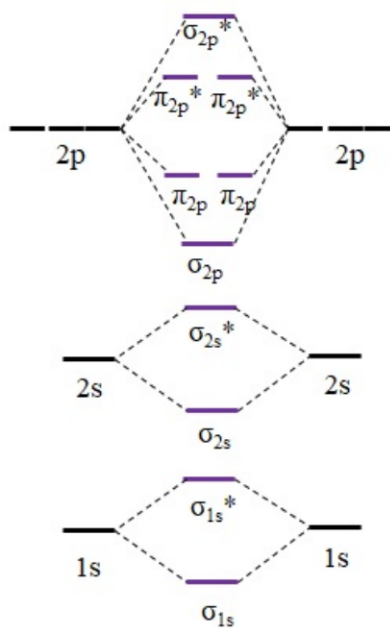


Enlaces sigma y pi derivados del traslapo de orbitales p. Fuente: VBrik at en.wikipedia, CC BY-SA 3.0 <<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>>, via Wikimedia Commons

**Diagrama OM para moléculas desde H<sub>2</sub> hasta N<sub>2</sub>.**

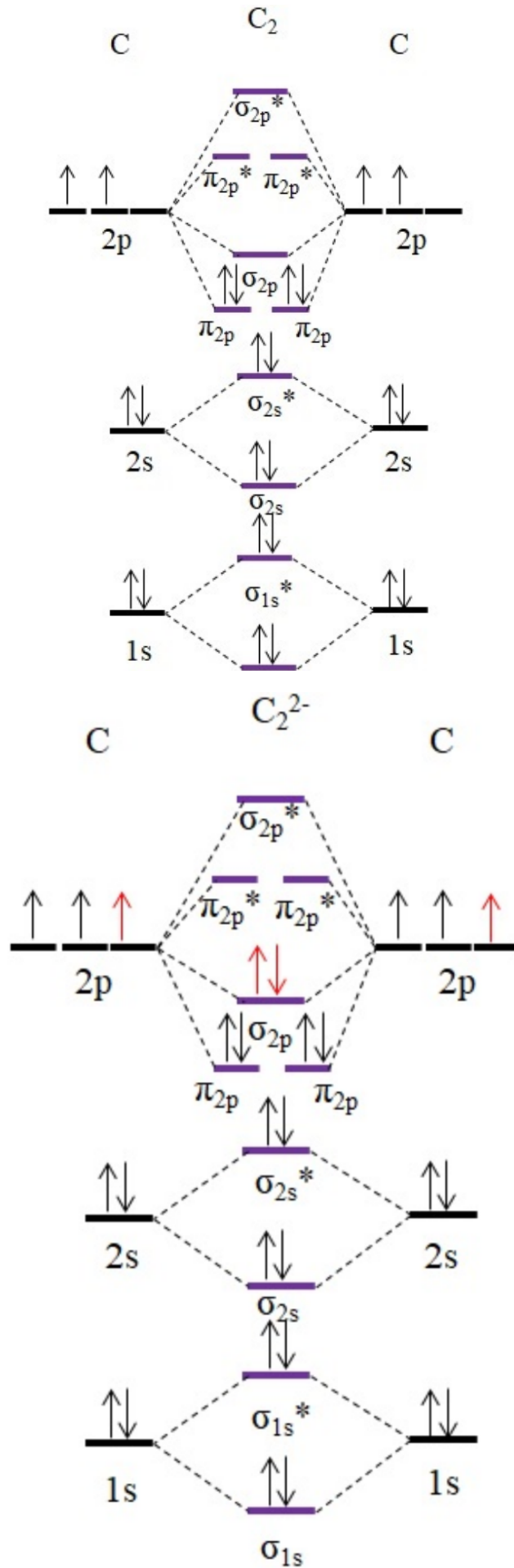


**Diagrama OM para moléculas desde O<sub>2</sub> hasta Ne<sub>2</sub>.**



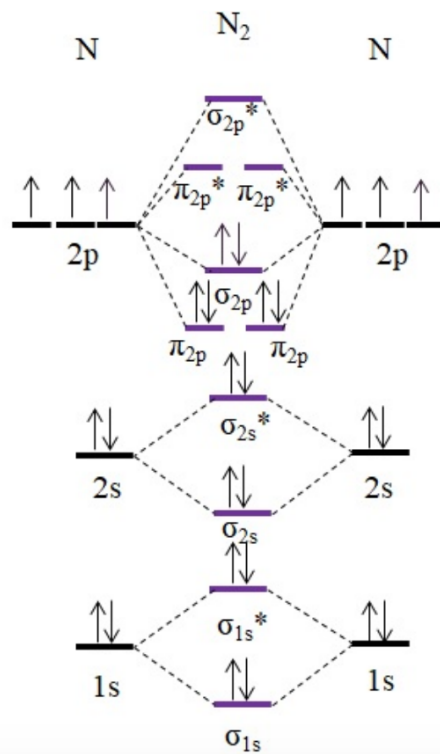
# $C_2$ y $C_2^{2-}$

Consideremos primero el diagrama de OM para la molécula  $C_2$ :

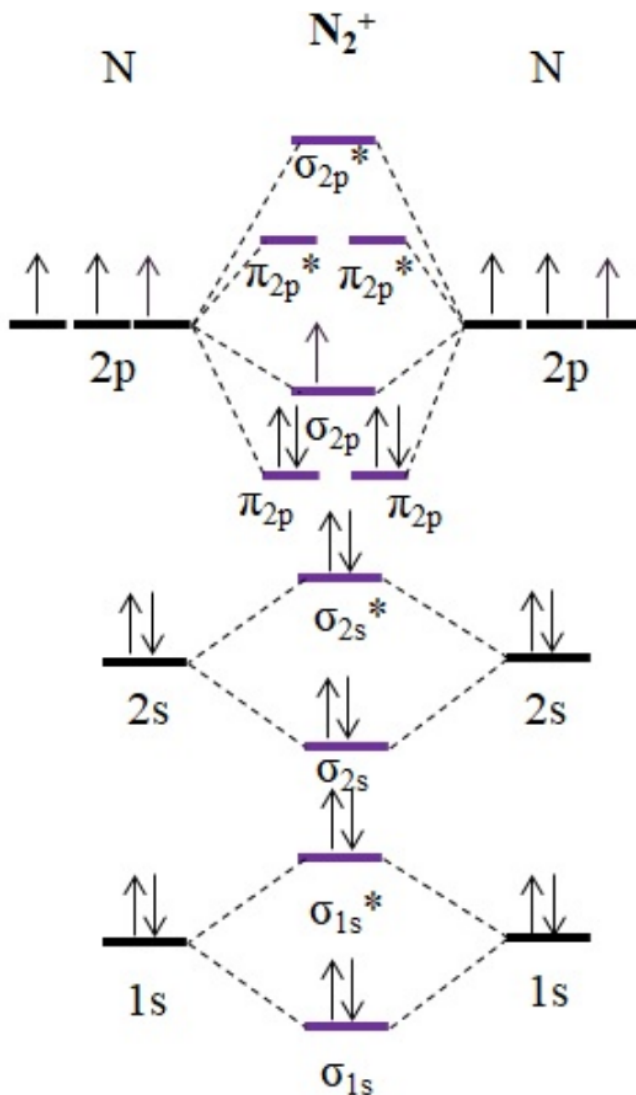


## $N_2$ y $N_2^+$

La famosa molécula del nitrógeno,  $N_2$ , también puede describirse perfectamente mediante el uso de diagramas de orbitales moleculares:

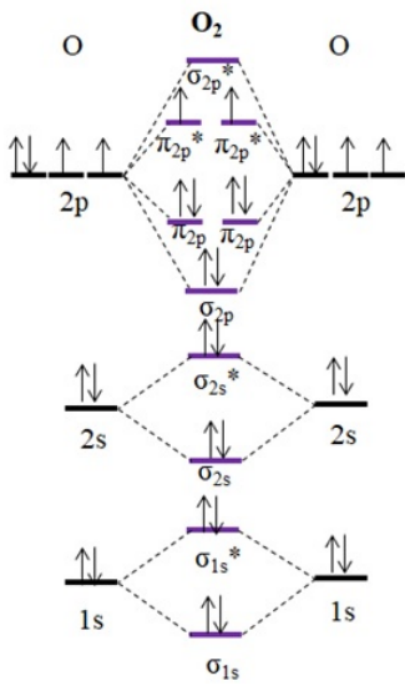


Diamagnético  
orden de enlace = 3



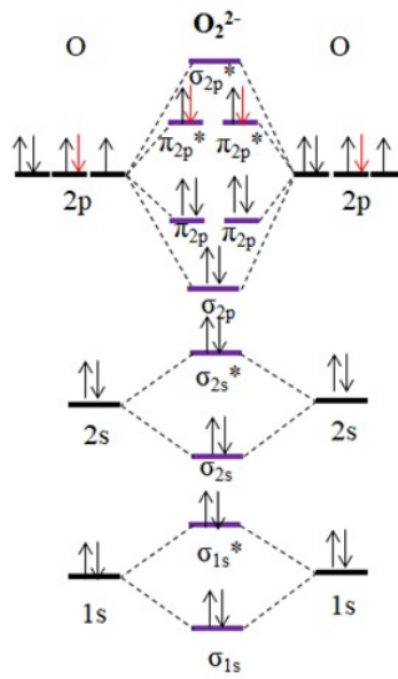
Paramagnético  
orden de enlace = 2.5

Debido a que el orden de enlace es menor a 3, la fuerza del enlace en  $N_2^+$  es inferior al del  $N_2$ , por lo que es menos estable.



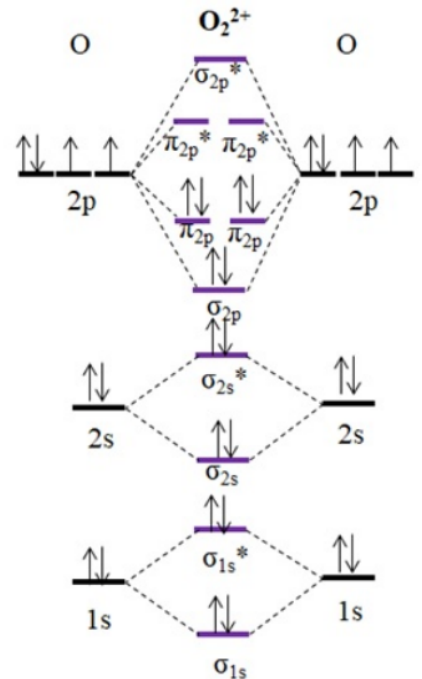
Paramagnético

Orden de enlace = 2



Diamagnético

Orden de enlace = 1



Diamagnético

orden de enlace = 3

Entre las ventajas de la teoría del orbital molecular podemos citar las siguientes:

- Permite evaluar órdenes de enlace que de ordinario no tendría mucho sentido en la teoría del enlace de valencia
- Se correlaciona bien con el diamagnetismo y paramagnetismo de las moléculas
- La distancia que separa los orbitales moleculares en los diagramas es igual a  $\Delta E$ , y sirve para explicar las transiciones electrónicas producto de la absorción de fotones
- Aplica no solo para moléculas diatómicas homonucleares, sino también para moléculas heteronucleares, tales como el  $\text{CO}_2$  y el benceno