Universidad Nacional Autónoma de México

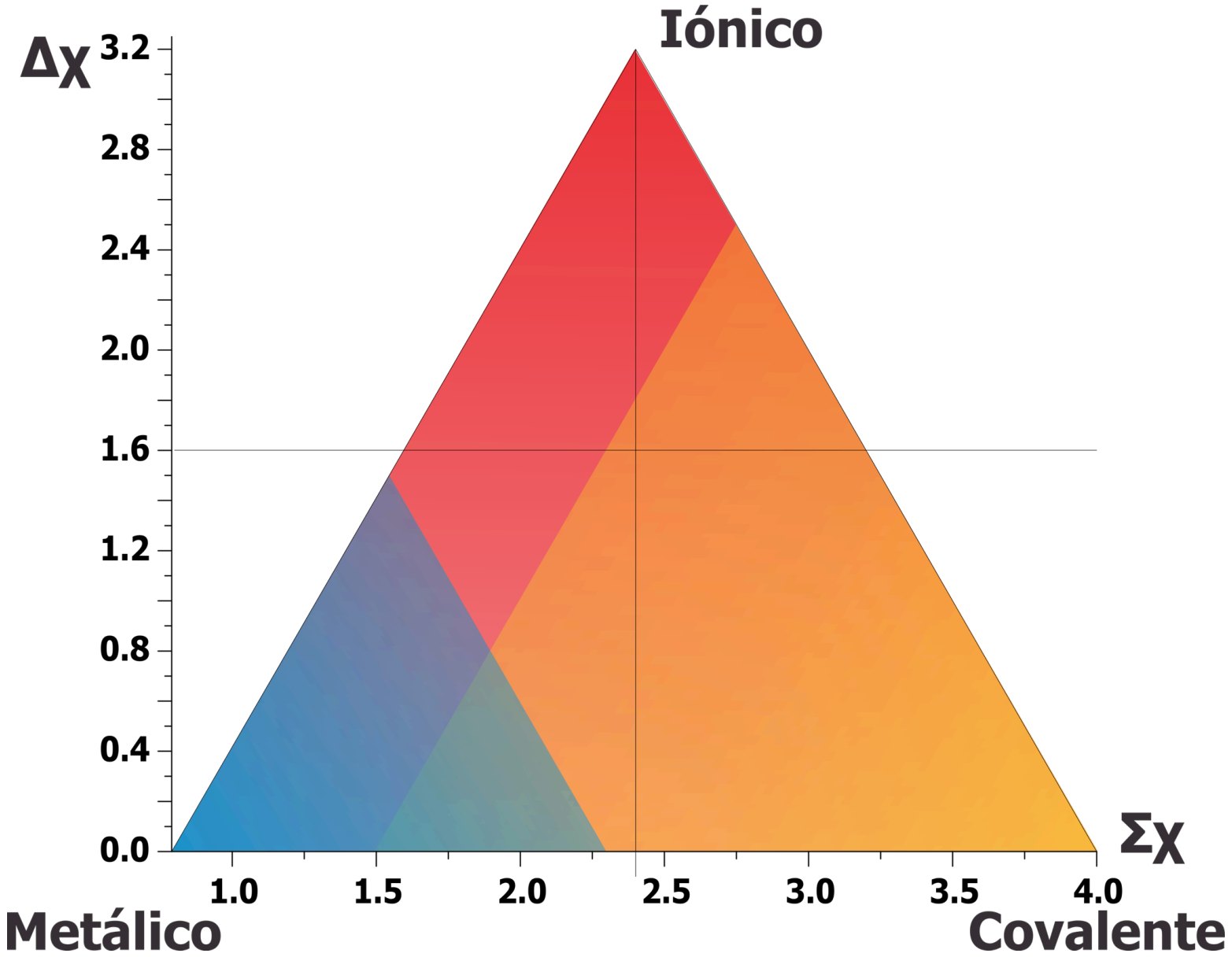
Facultad de Química

Química Inorgánica I

3. Modelos de enlace

Modelo Covalente
Teoría de Enlace Valencia

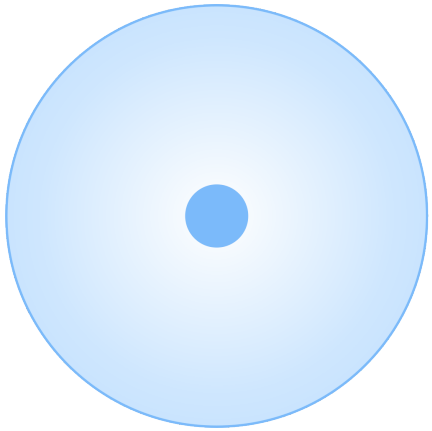
Víctor Fabián Ruiz Ruiz.

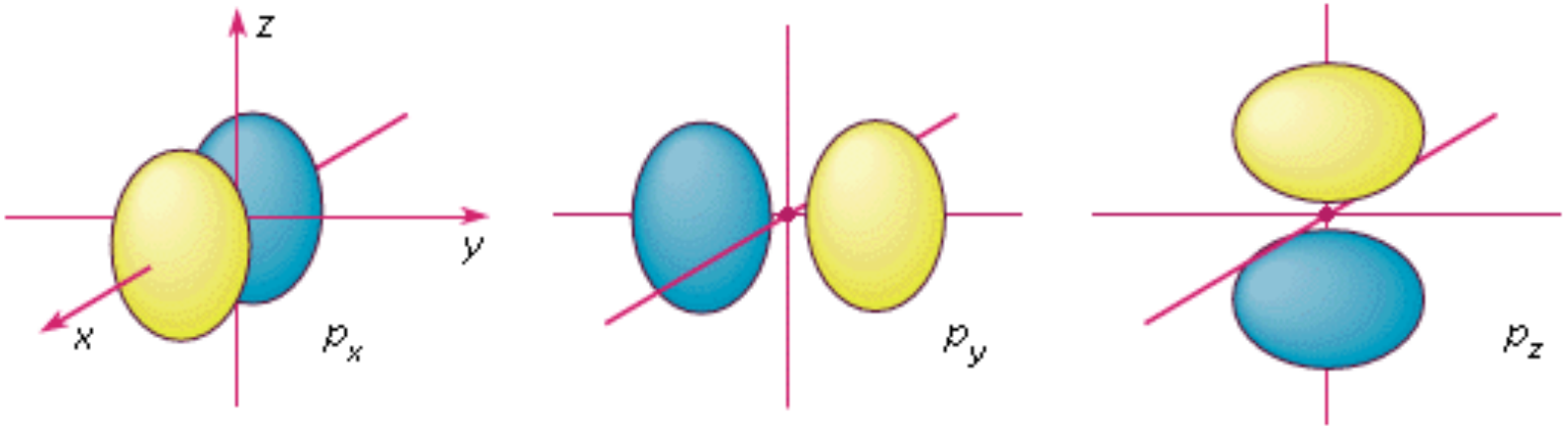

Iónico
Δχ
3.2
2.8
2.4
2.0
1.6
1.2
0.8
0.4
0.0
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0
Σχ
Metálico
Covalente

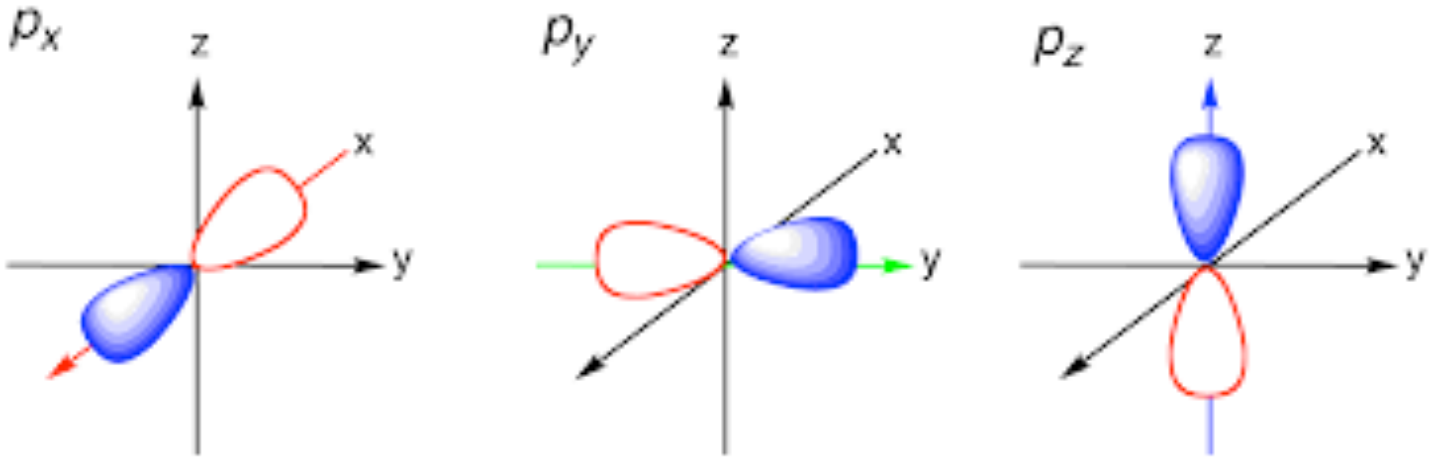
Propiedades Periódicas

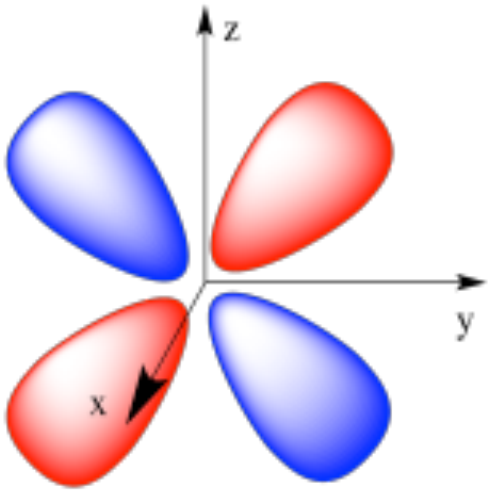
Pero, primero…

$$\psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r)\, Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$$

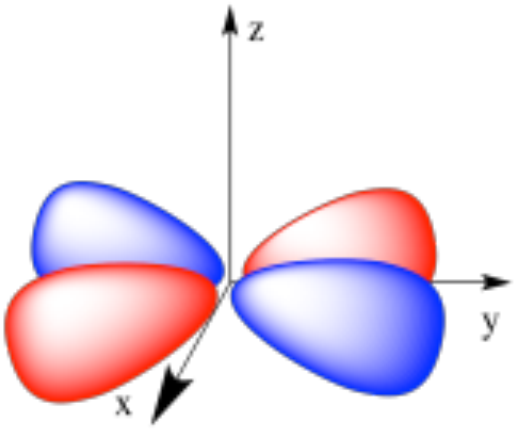




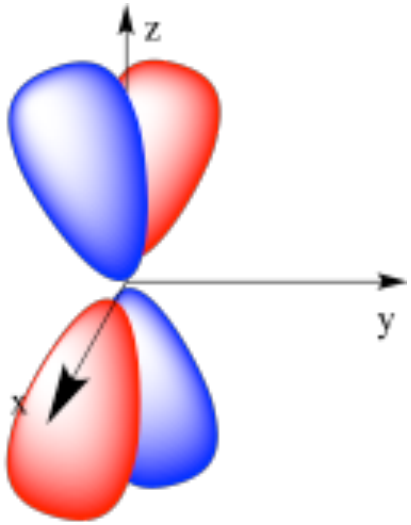




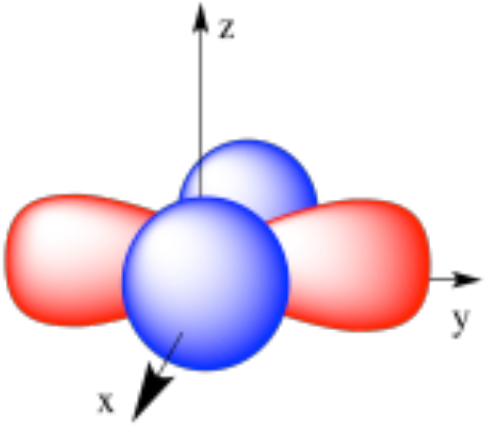
d_{yz}



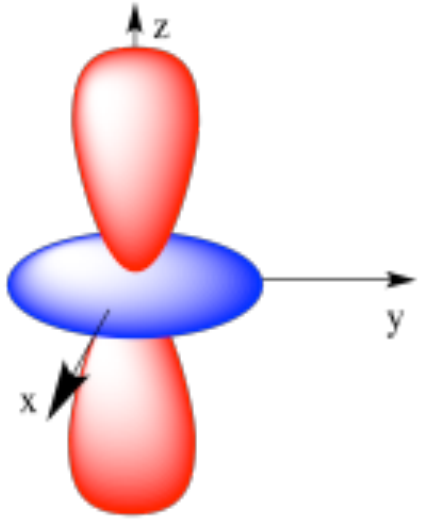
d_{xy}



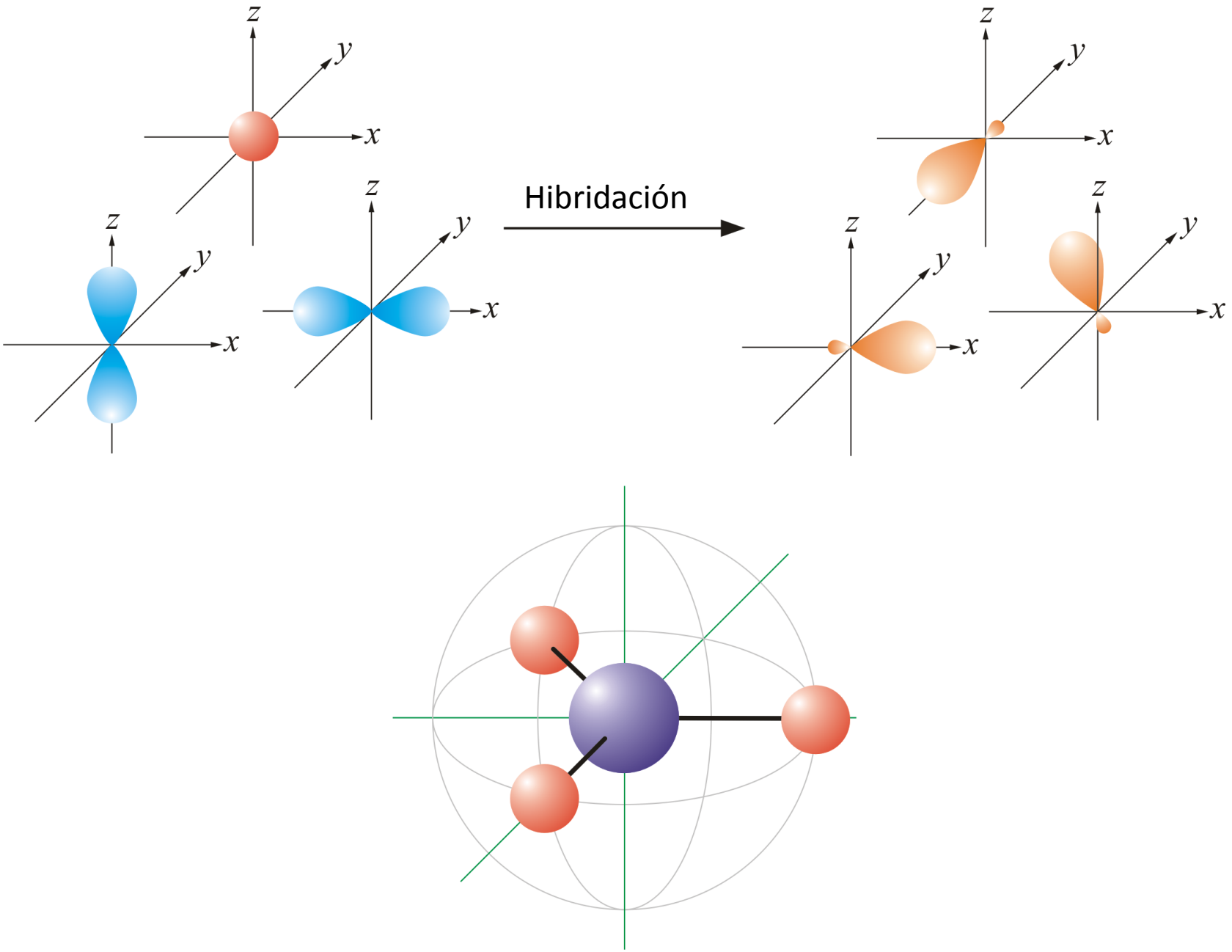
d_{xz}



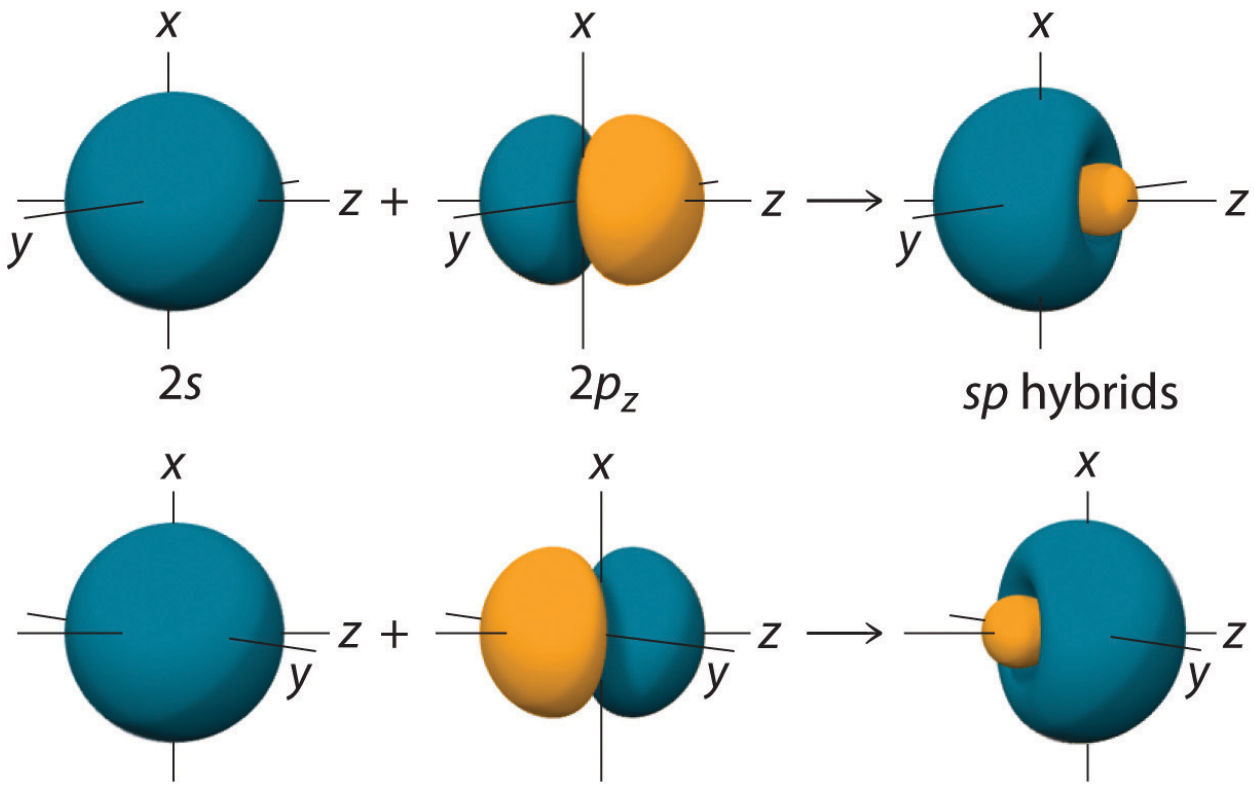
$d_{x^2-y^2}$

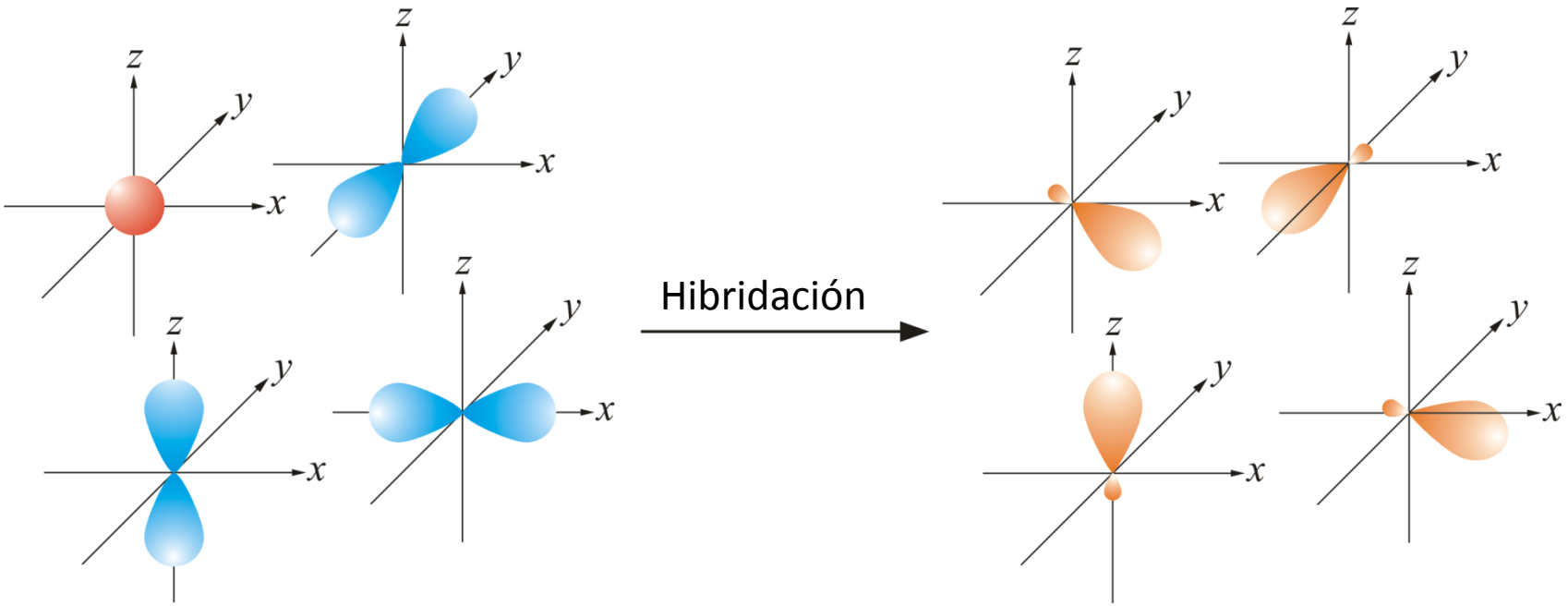


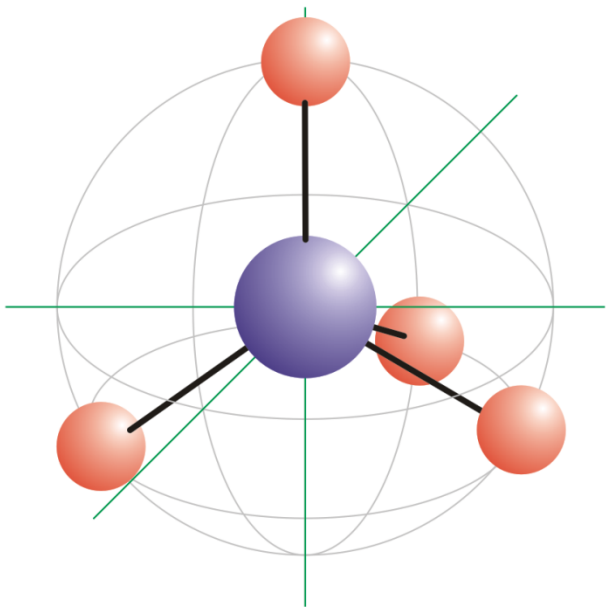
d_{z^2}


z
y
x
z
y
x
z
y
x
Hibridación
z
y
x
z
y
x
z
y
x

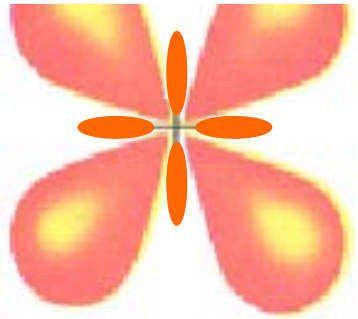
Representación esquemática de la **hibridación** de orbitales **s** y **p**:



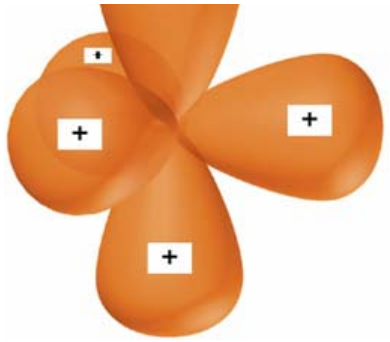

Hibridación



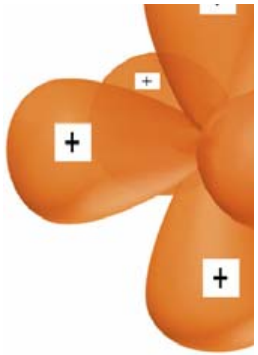
Ahora, con la participación de orbitales ***d***:



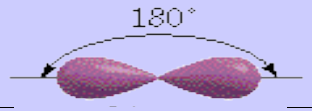
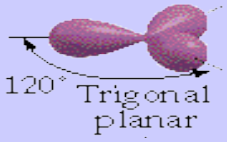
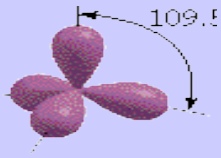
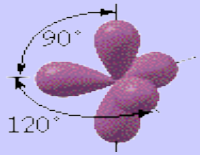
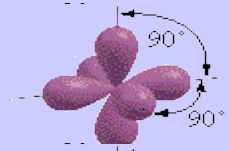
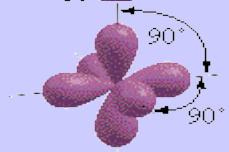
25 % carácter s
50 % carácter p
25 % de carácter d



20 % carácter s
20 % de carácter p
20 % carácter d



16.6 % cará
49.8 % de c
33.2 % cará

Tipo de híbrido	Orb. atómicos de origen	Número de orb. Hib. producidos	Ángulo de enlace	Geometría resultante	Ejemplos
sp	s + p	2	180º Lineal		BeH_2, $HgCl_2$
sp^2	s + 2 (p)	3	120º Trigonal plana		BF_3
sp^3	s + 3 (p)	4	109º Tetraédrica		CH_4, $[Ni(CO)_4]$
dsp^2	d + s +2 (p)	4	90º	Cuadrada	$[Pt(NH_3)_2Cl_2]$
sp^3d	s + 3 (p) + d	5	90º y 120º Bipirámide triangular		$PCl_5(g)$, $[Fe(CO)_5]$
$*d^2sp^3$	2 (d) + s + 3 (p)	6	90º Octaédrica		$[Cr(NH_3)_6]^{3+}$ $[Fe(CN)_5]^{3-}$
sp^3d^2	s + 3 (p) + 2 (d)	6	90º Octaédrica		$[Fe(H_2O)_6]^{3+}$

*** Se indican en primer término los orbitales d, si su número cuántico principal es menor al del orbital s. Cuando se trata de compuestos de coordinación de metales de transición, pertenece a la capa anterior.**

Alos complejos con hibridación d^2sp^3 se les denomina complejos de bajo espín o complejos de campo fuerte. Mientras que a los que tienen hibridación sp^3d^2, se les conoce como complejos de alto espin o complejos de campo débil.

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Química

Química Inorgánica I

3. Modelos de enlace

Modelo Covalente
Teoría de Orbitales Moleculares

Víctor Fabián Ruiz Ruiz.

Orbitales Moleculares

Asume que los núcleos se posicionan en una distancia de equilibrio y los electrones se agregan en niveles análogos a los orbitales atómicos.

Una de las aproximaciones para resolver es el métodos de La Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (**CLOA**).

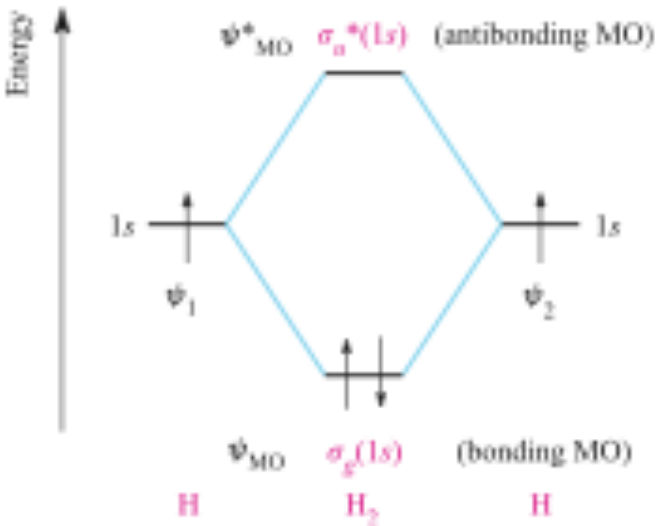
Orbitales Moleculares

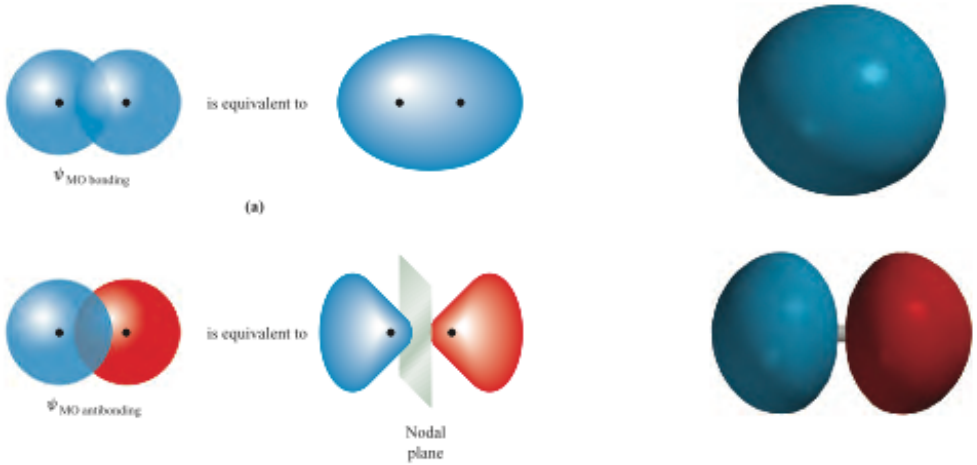
Cada orbital molecular surge de la interacción entre los orbitales de los átomos en la molécula y estas interacciones pueden ser:

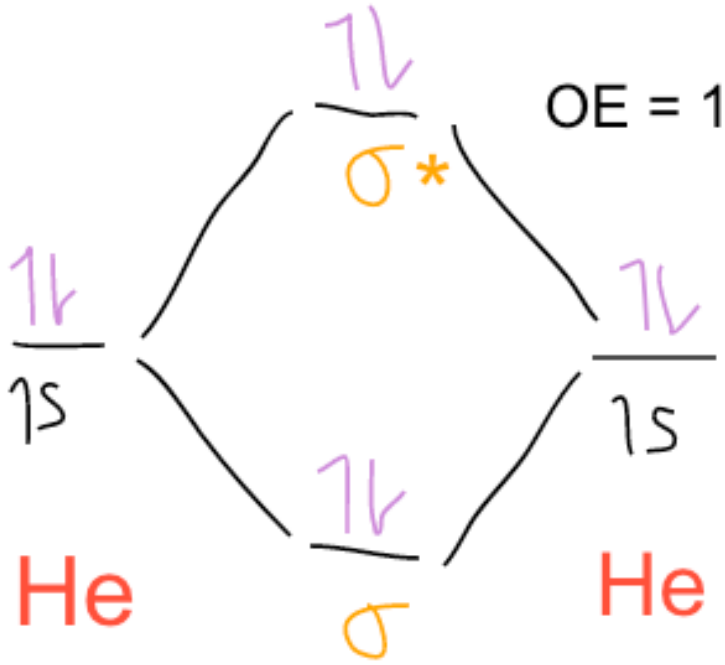
Permitidas. Cuando ambos orbitales atómicos tienen la misma simetría.

Eficiente. Si la región de traslape entre ambos orbitales es considerable.

Eficiente. Si los orbitales atómicos tienen valores de energía similar.

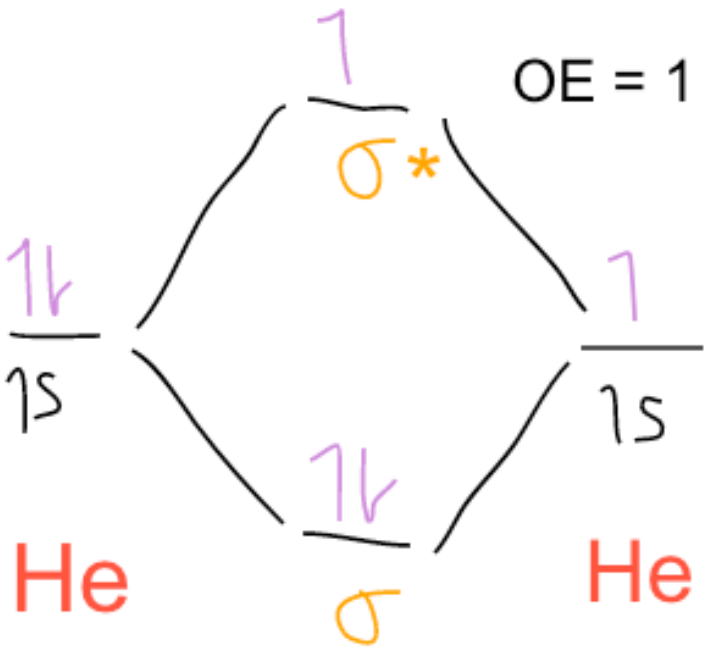






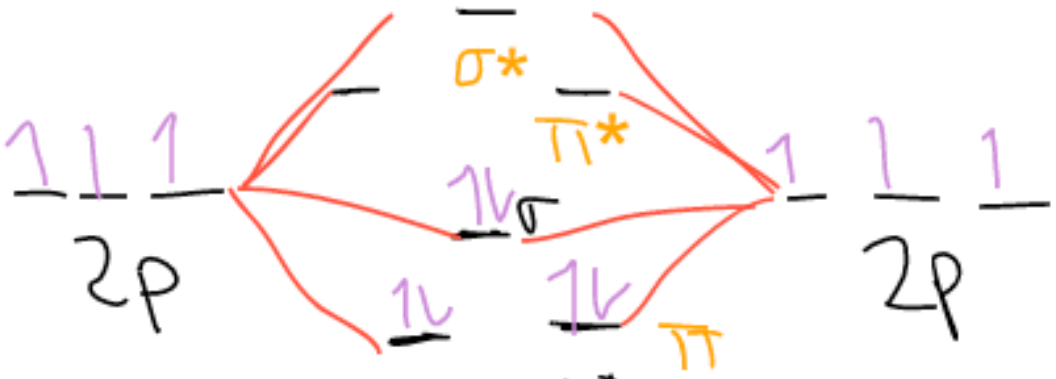
OE = 1 - 1 = 0

He_2

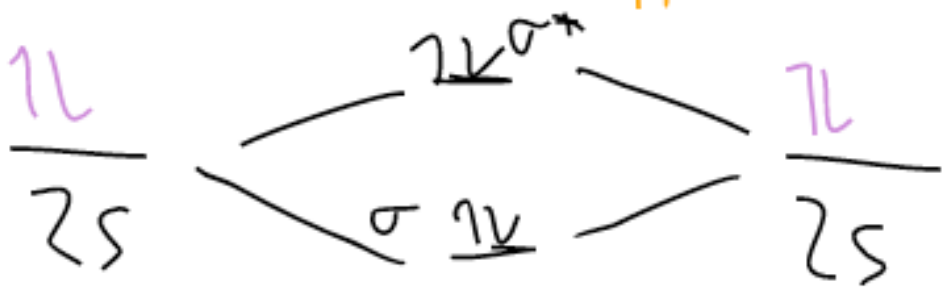


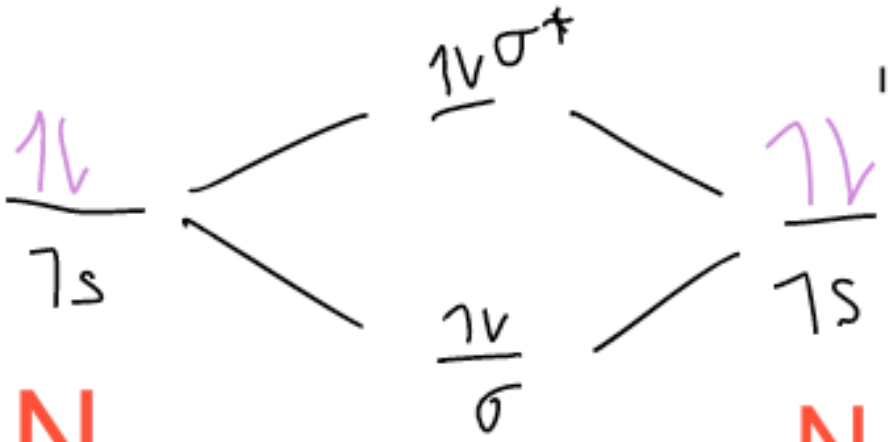
OE = 1 - 0.5 = 0.5

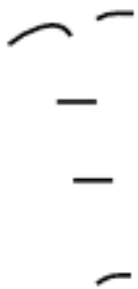
He_2^+



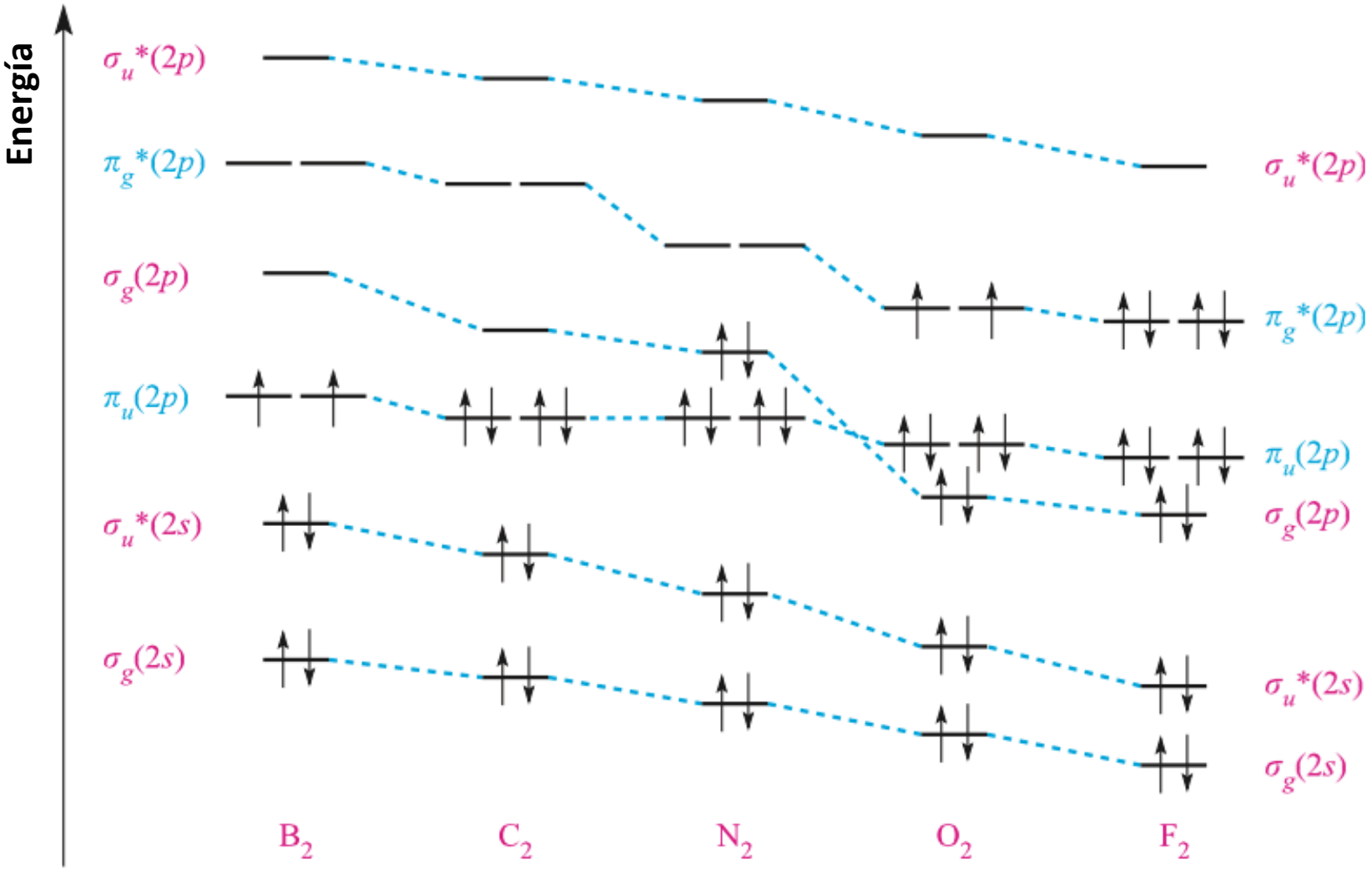
OE = 5 - 2 = 3





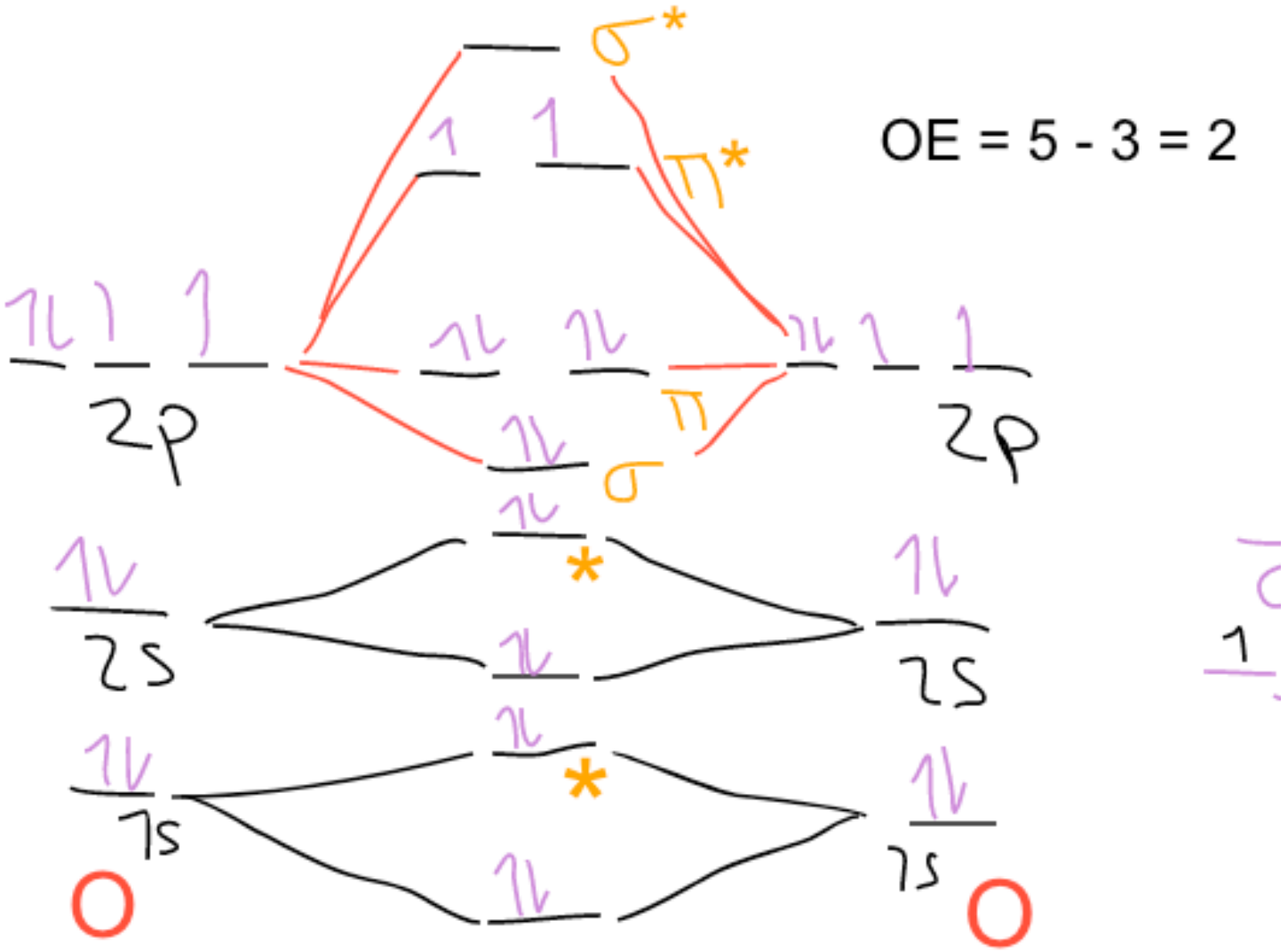


N N N_2

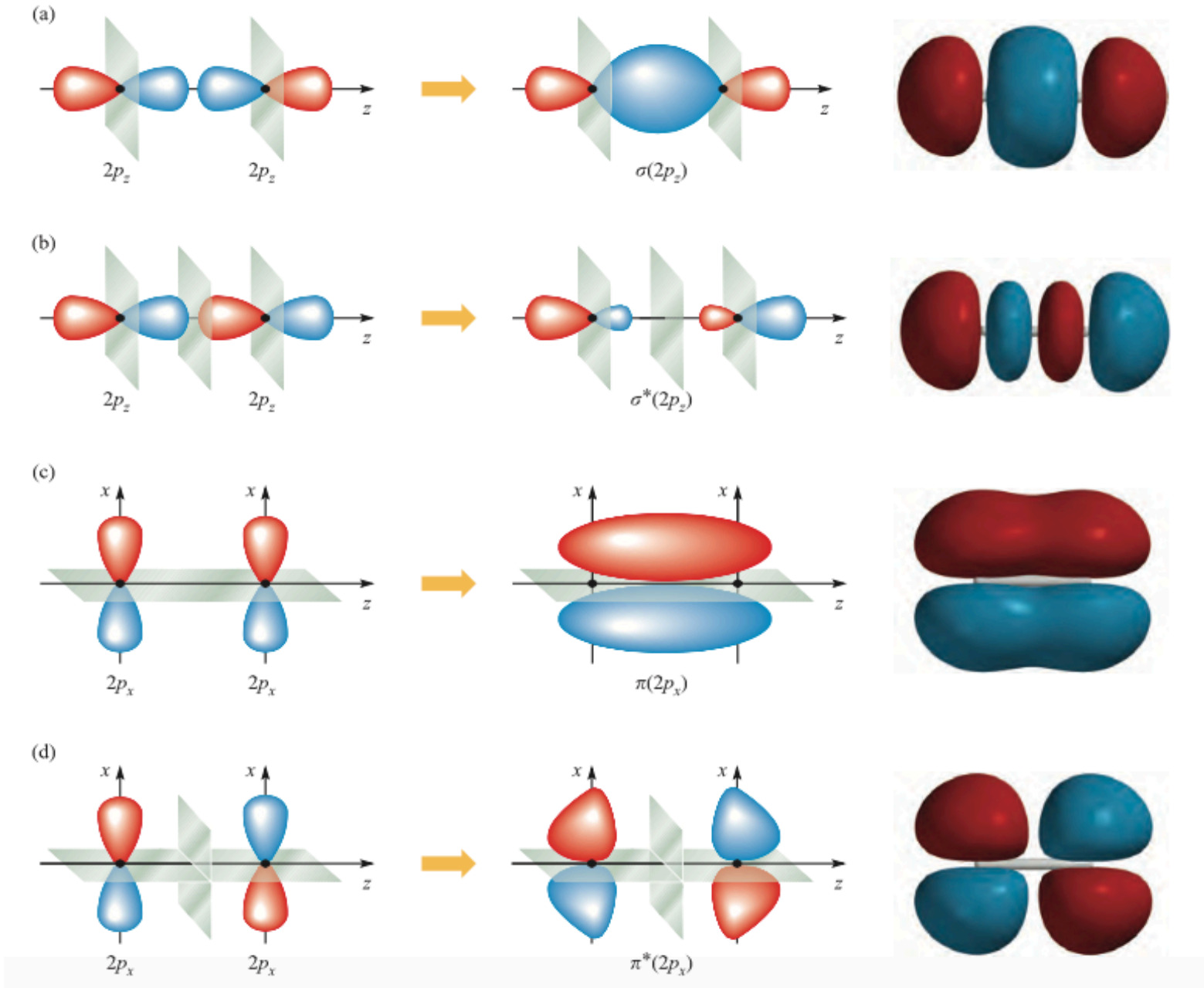


Cambios en los niveles de energía de los OM de las moléculas homonucleares de elementos del segundo periodo del bloque *p*.

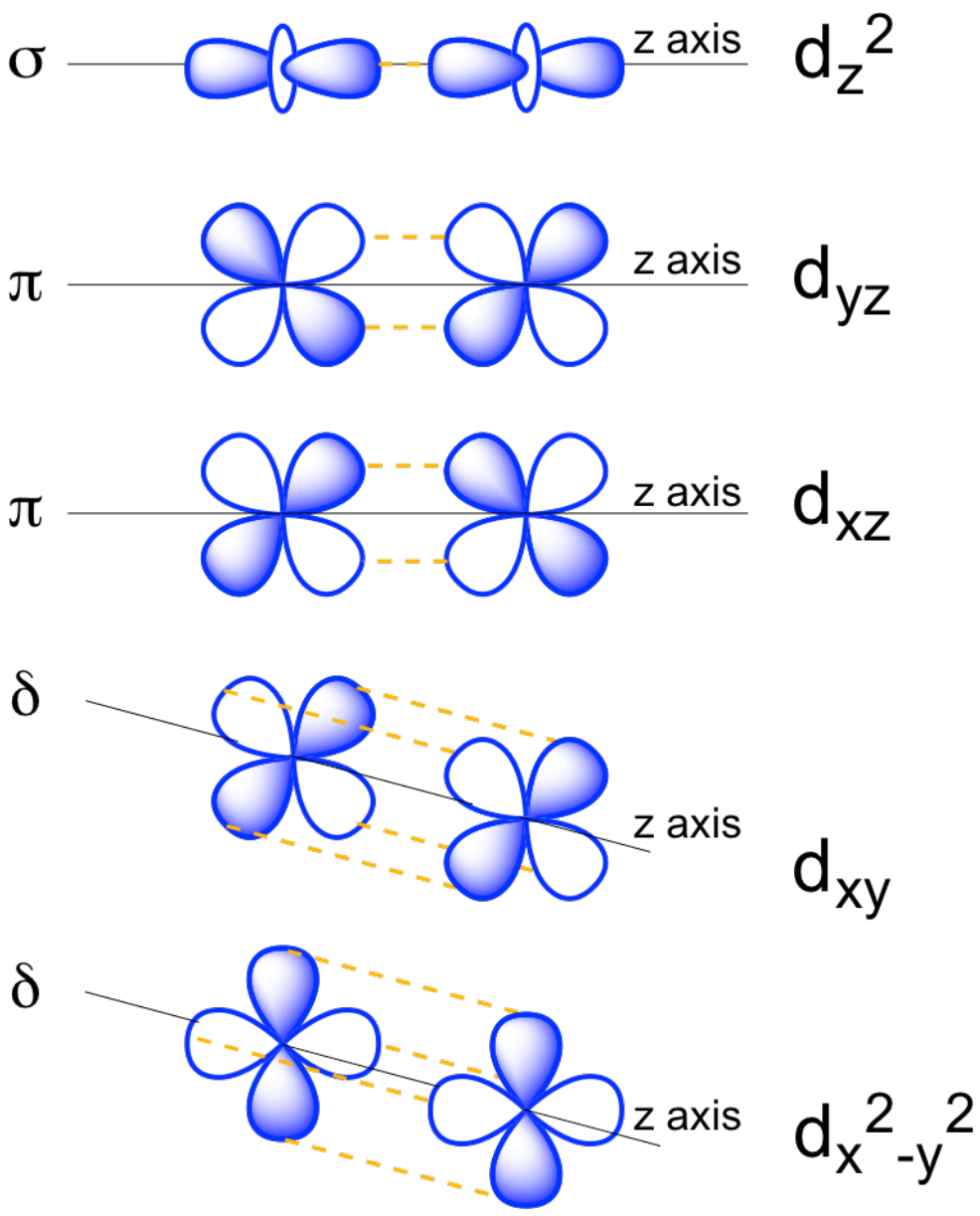
Housecroft, C.E.; Sharpe, A. G. *Química Inorgánica*. 2ª edición. Pretince Hall



OE = 5 - 3 = 2

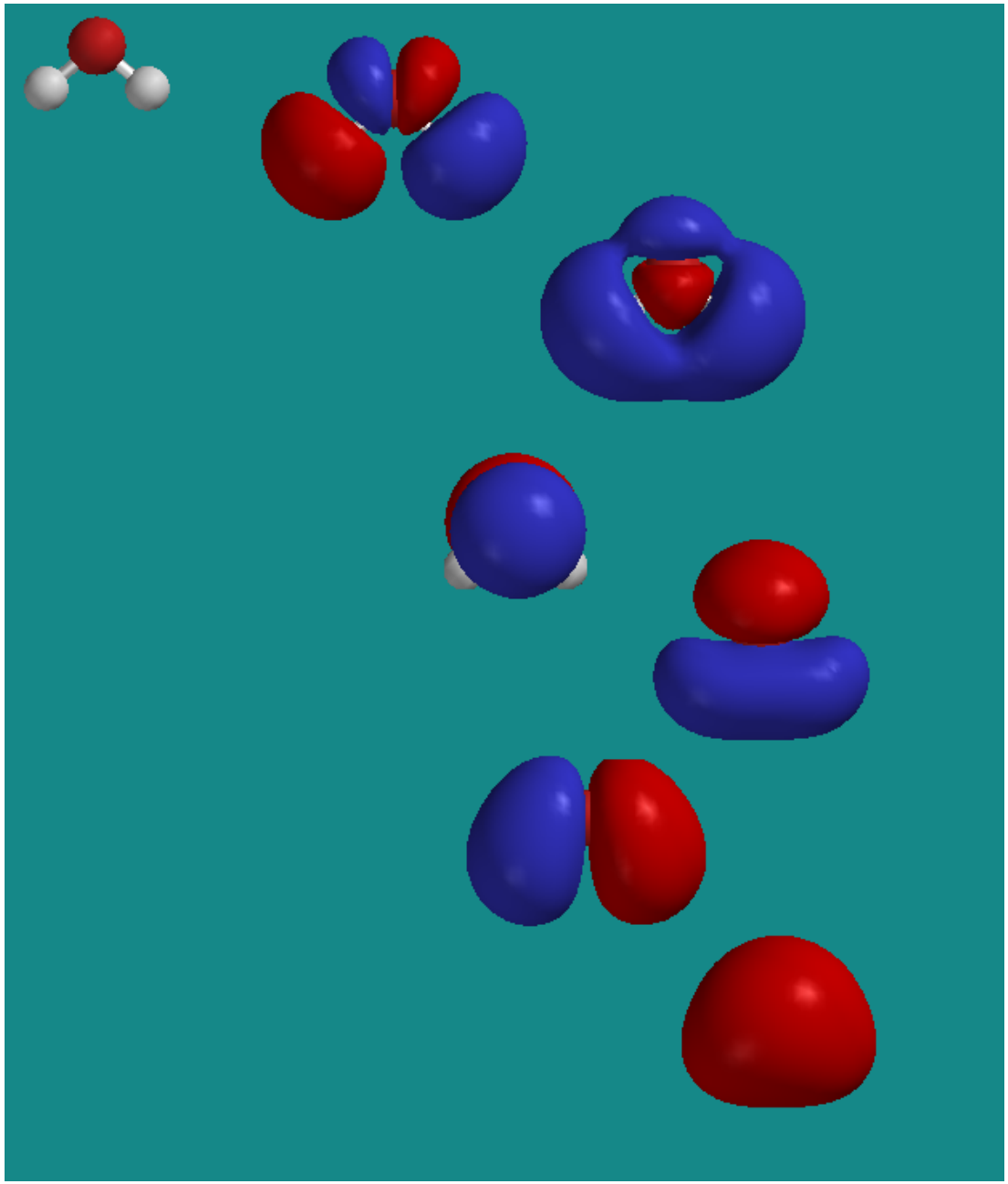


Housecroft, C.E.; Sharpe, A. G. *Química Inorgánica*. 2ª edición. Pretince Hall

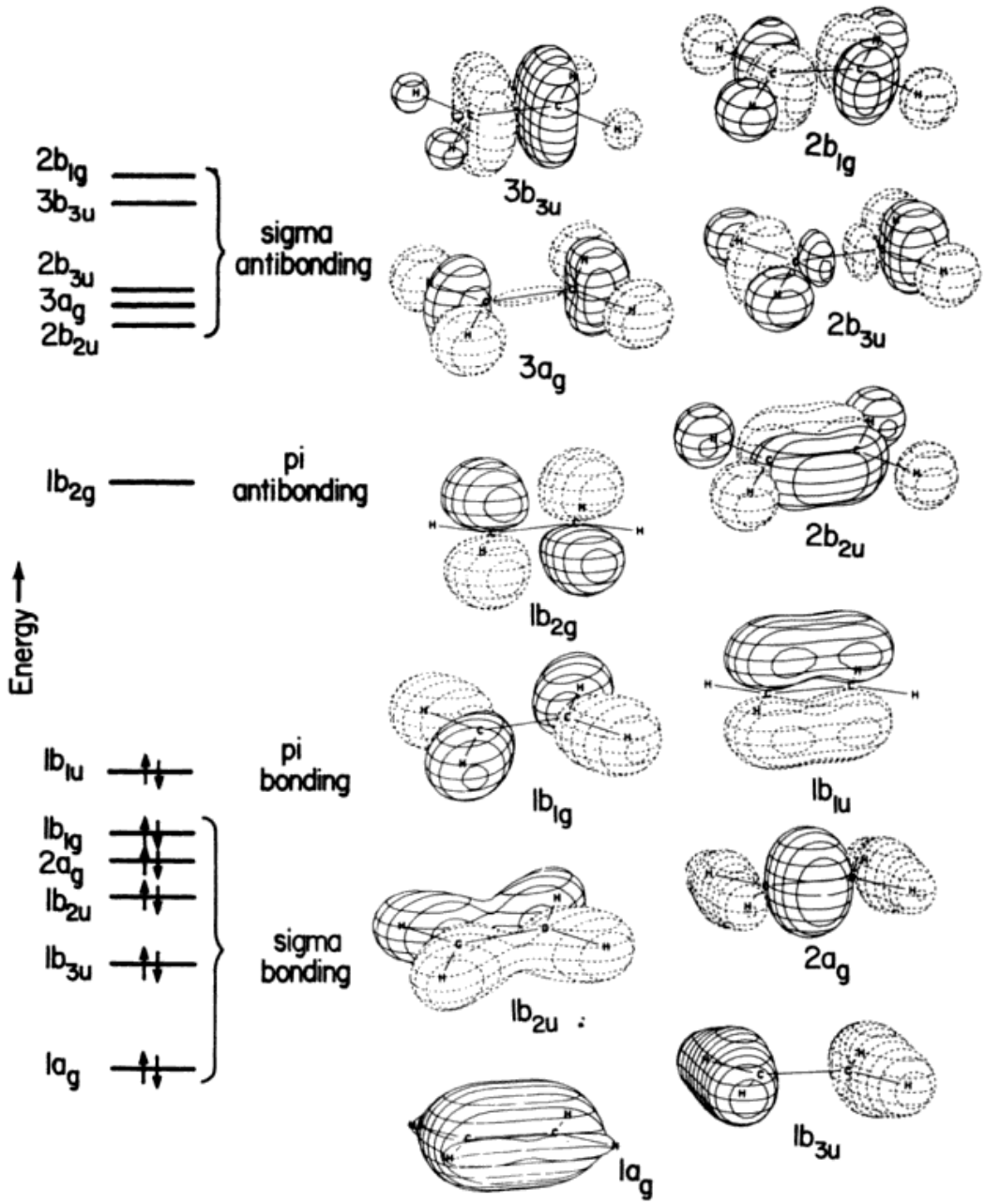


Otros tipos de interacciones entre orbitales que dan origen a los orbitales π y δ.

Para el caso del **H_2O**:



Para el caso del C_2H_4:



Para el caso del $\mathbf{C_2H_4}$: