

Química Inorgánica

Jesús Gracia Mora

jgracia@química.unam.mx

Modelo de Schrödinger “orbitales atómicos”

Átomos

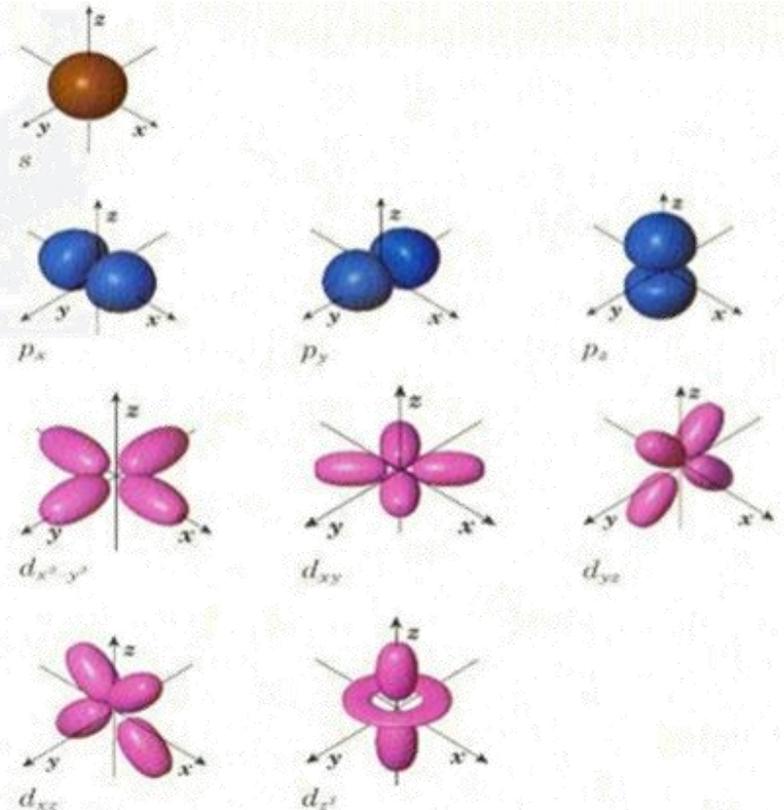


Función de onda

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

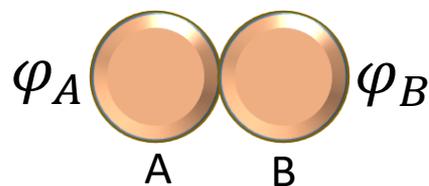
Energía cinética

Energía potencial



Teoría de Orbitales moleculares (TOM)

CLOA Combinación lineal de orbitales atómicos



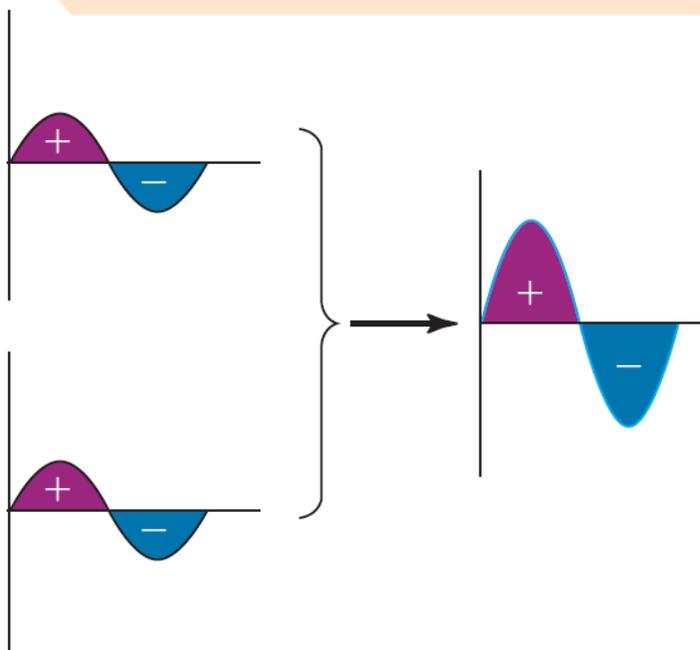
$$\varphi_{AB1} = \varphi_A + \varphi_B$$

$$\varphi_{AB2} = \varphi_A - \varphi_B$$

*= antienlace

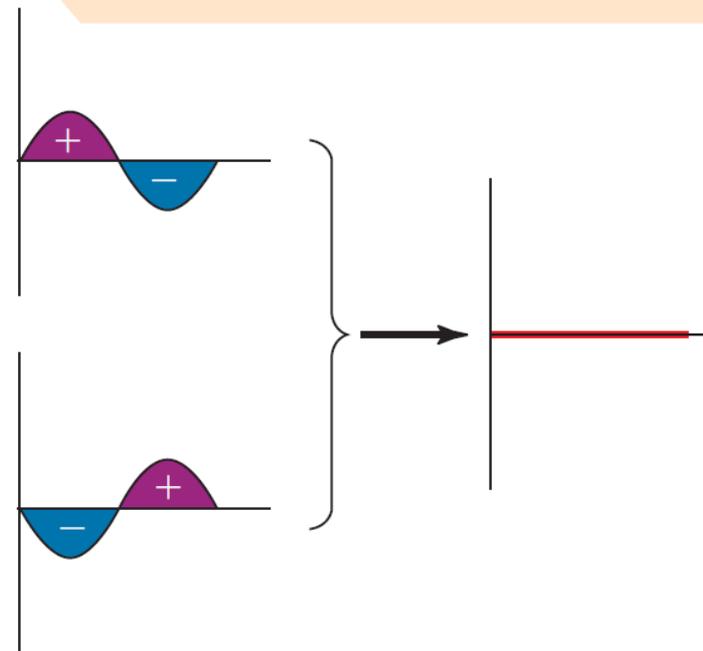
La combinación lineal de las funciones de onda entre dos átomos, da como resultado la función de onda de una molécula. La combinación lineal son sumas y restas.

Superposición en fase (suma)

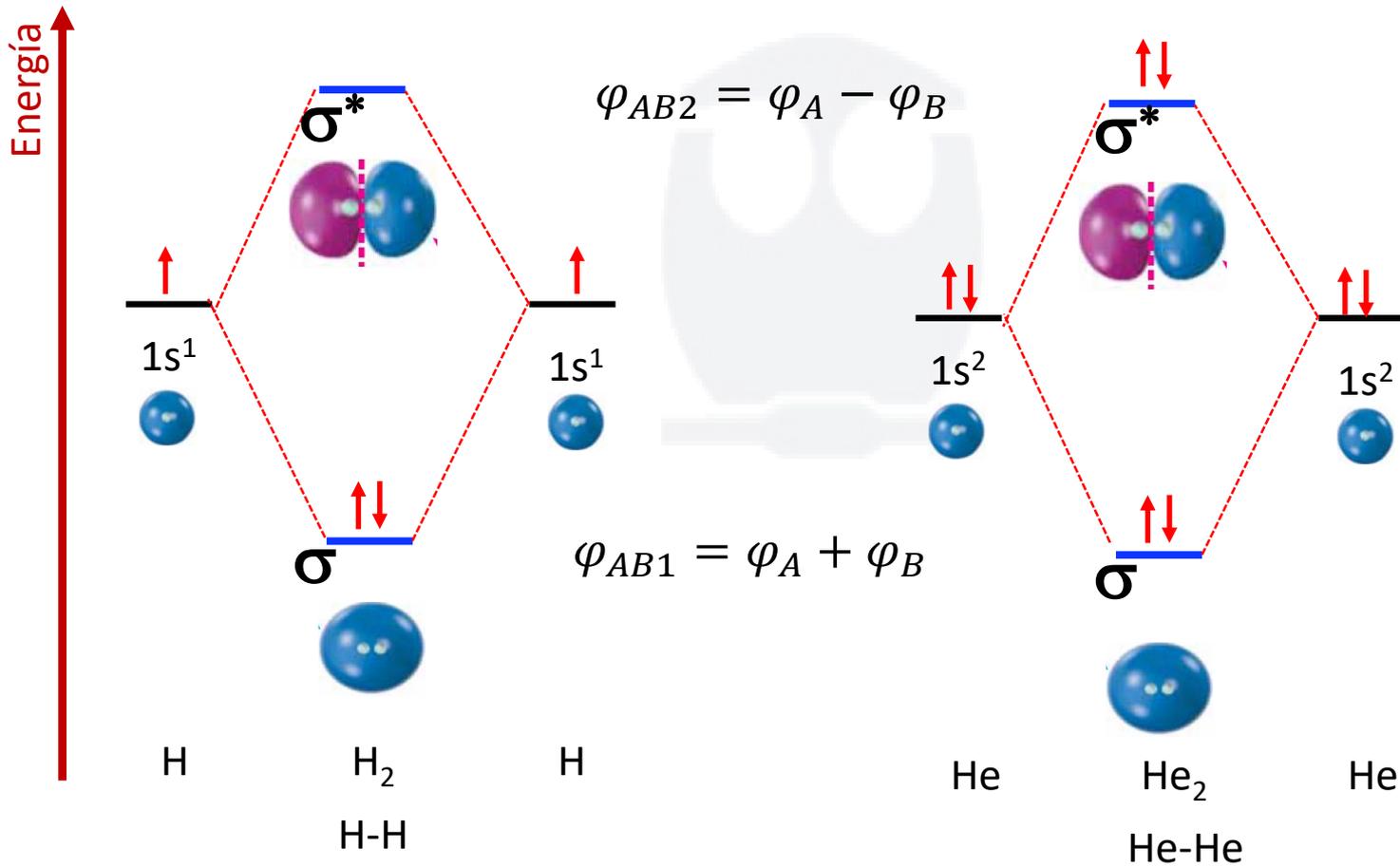


A Si se suman las dos ondas idénticas que se muestran a la izquierda, interfieren en forma constructiva y generan la onda más intensa de la derecha.

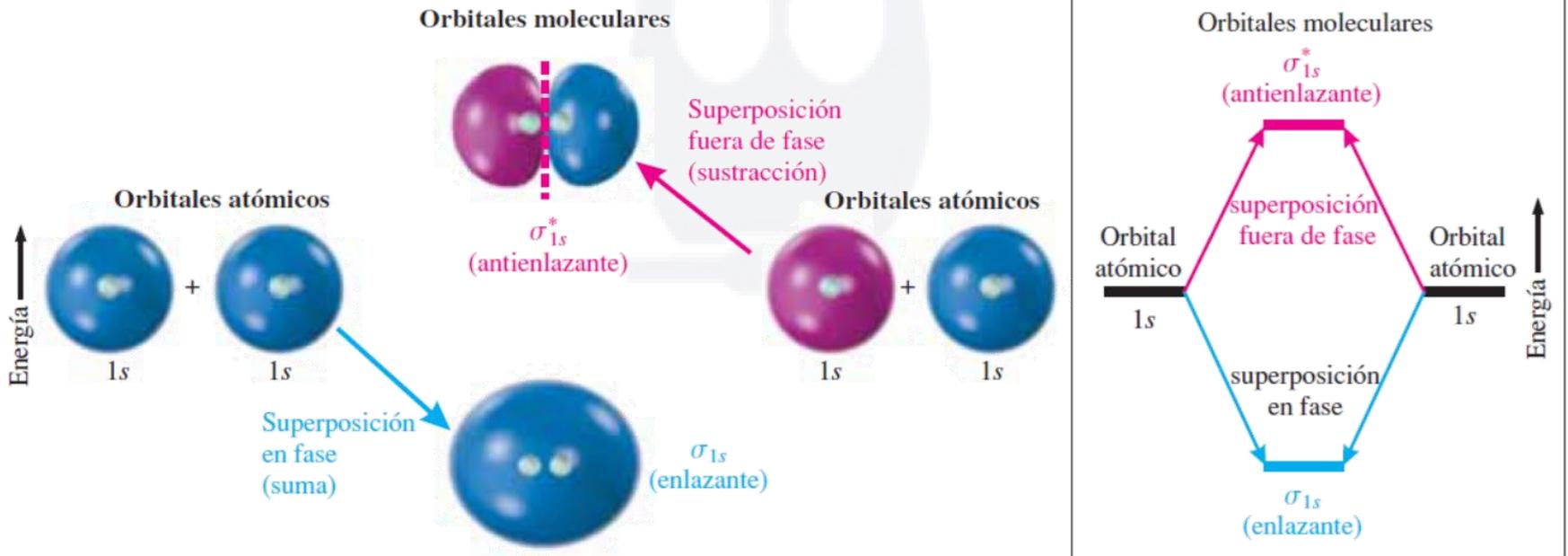
Superposición fuera de fase (sustracción)



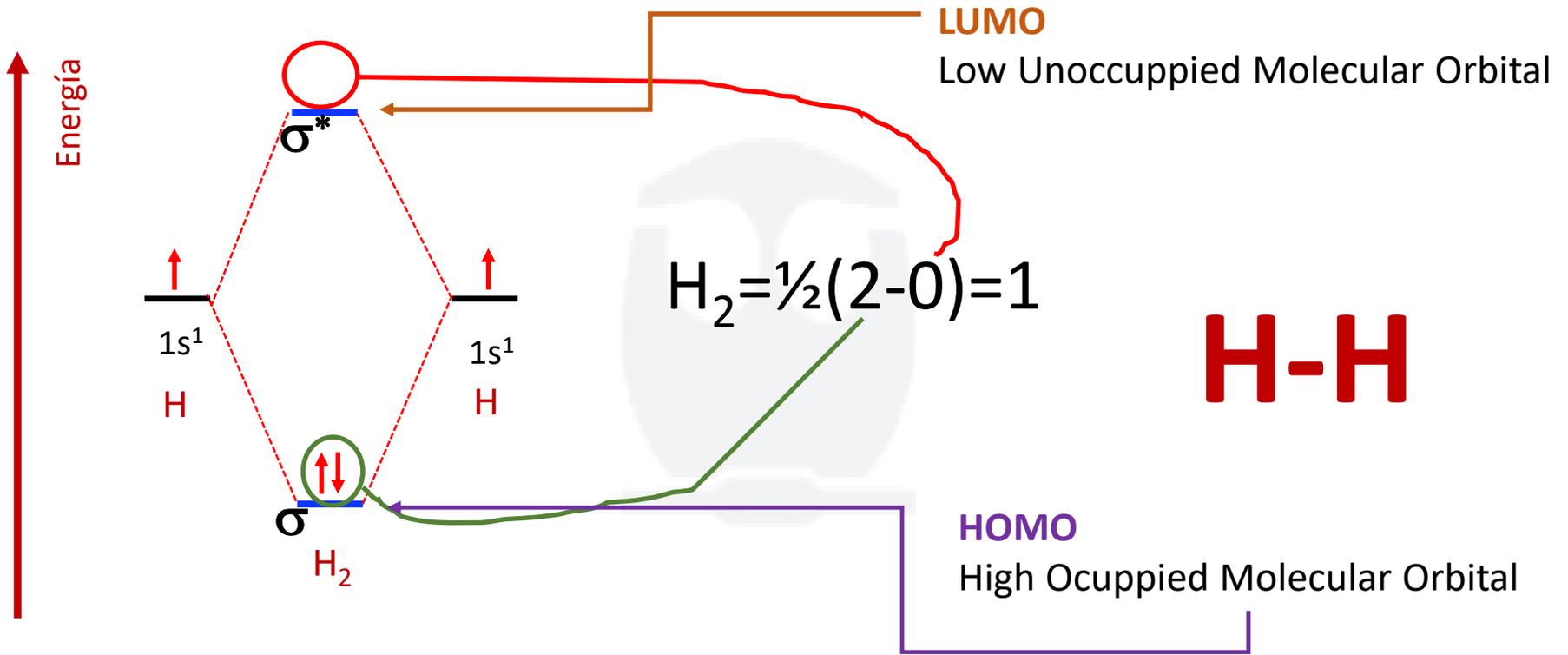
B Por el contrario, si éstas se sustraen, es como si las fases (signos) de una onda se invirtieran y se sumaran a la primera onda, lo que causa la interferencia destructiva y hace que la onda de la derecha tenga amplitud cero; esto es, da como resultado una línea recta.



Orbitales moleculares "s"

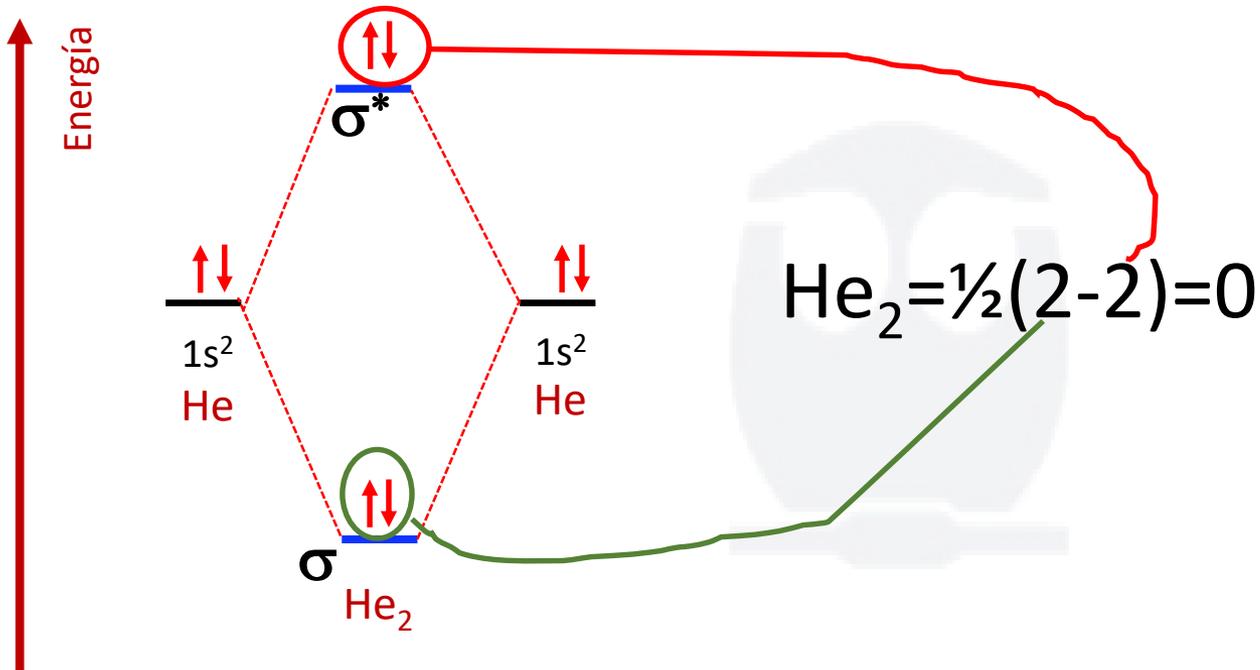


Orden de enlace



$$\text{orden de enlace} = \frac{(\text{número de electrones enlazantes}) - (\text{número de electrones antienlazantes})}{2}$$

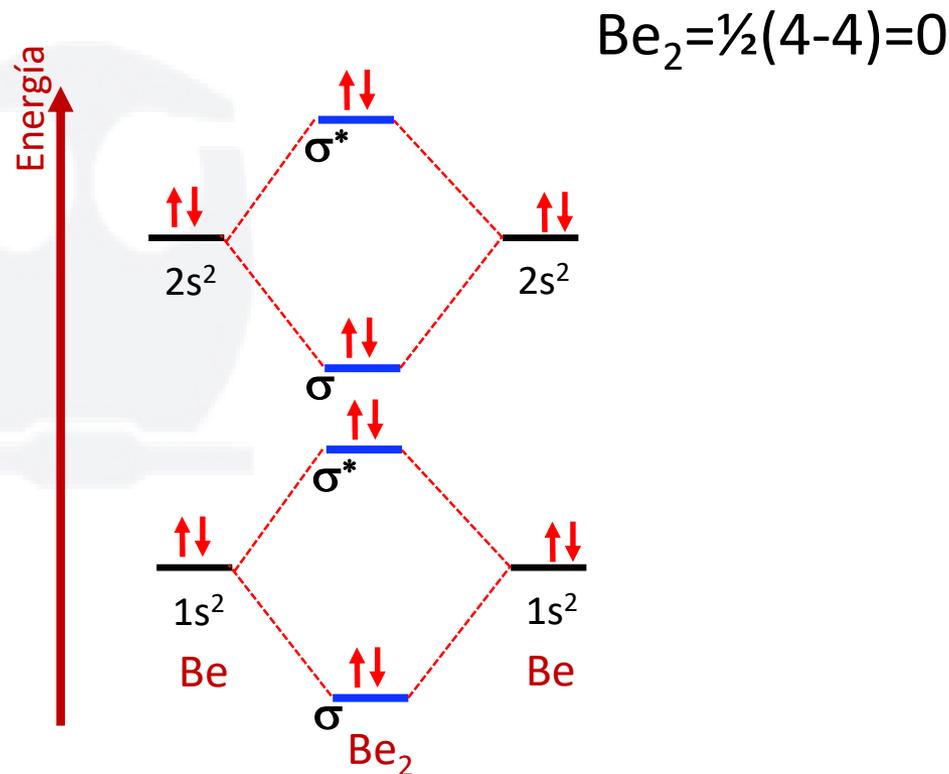
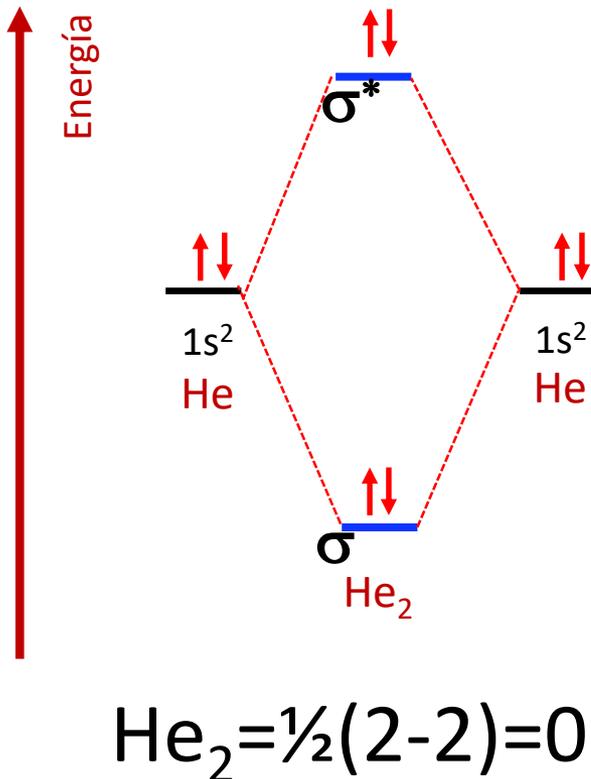
Orden de enlace



He₂

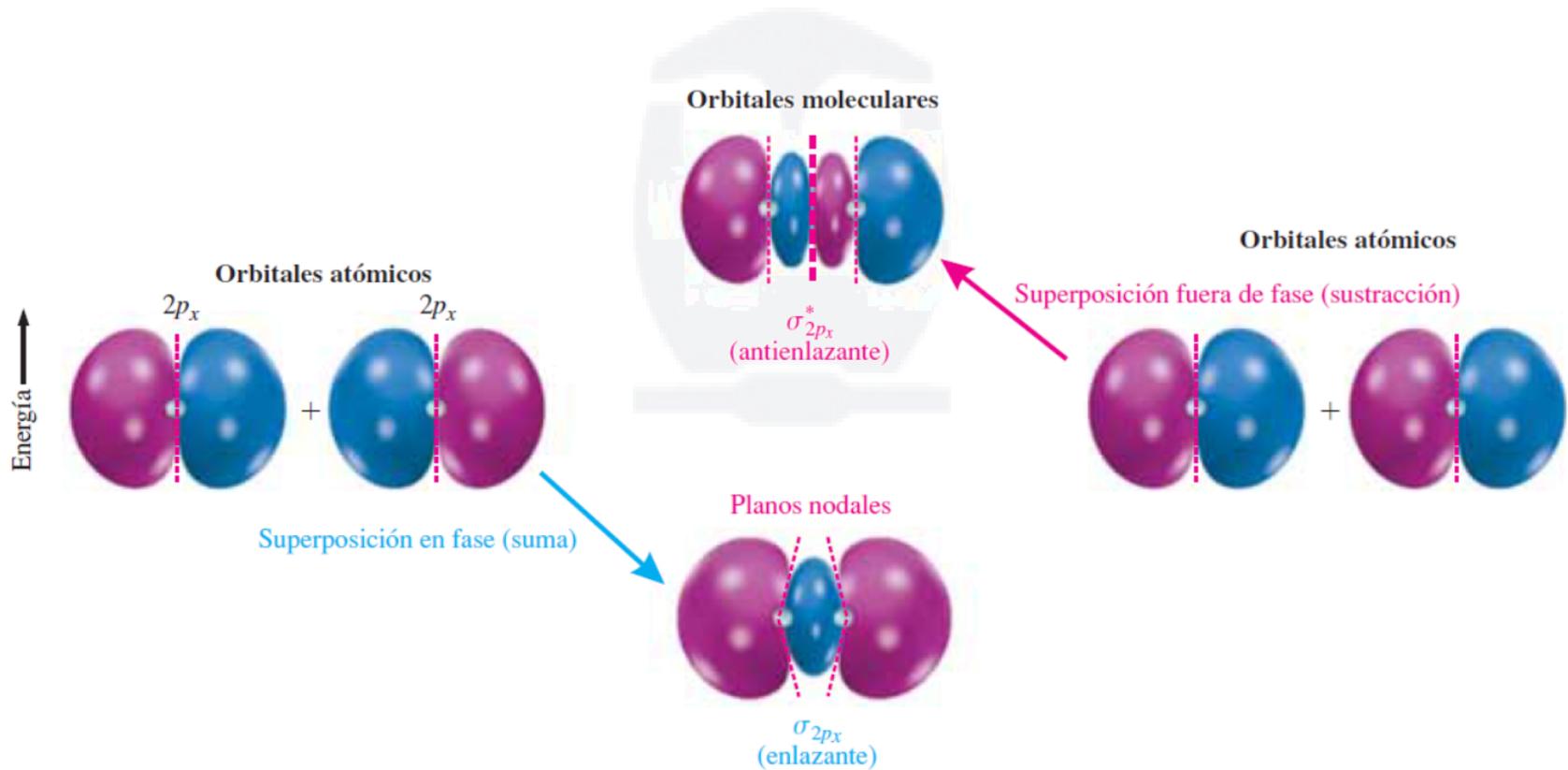
$$\text{orden de enlace} = \frac{(\text{número de electrones enlazantes}) - (\text{número de electrones antienlazantes})}{2}$$

Todos los niveles llenos no contribuyen al enlace



El número de electrones de enlace es igual al de antienlace

Orbitales moleculares σ provenientes de p



Orbitales moleculares π provenientes de p

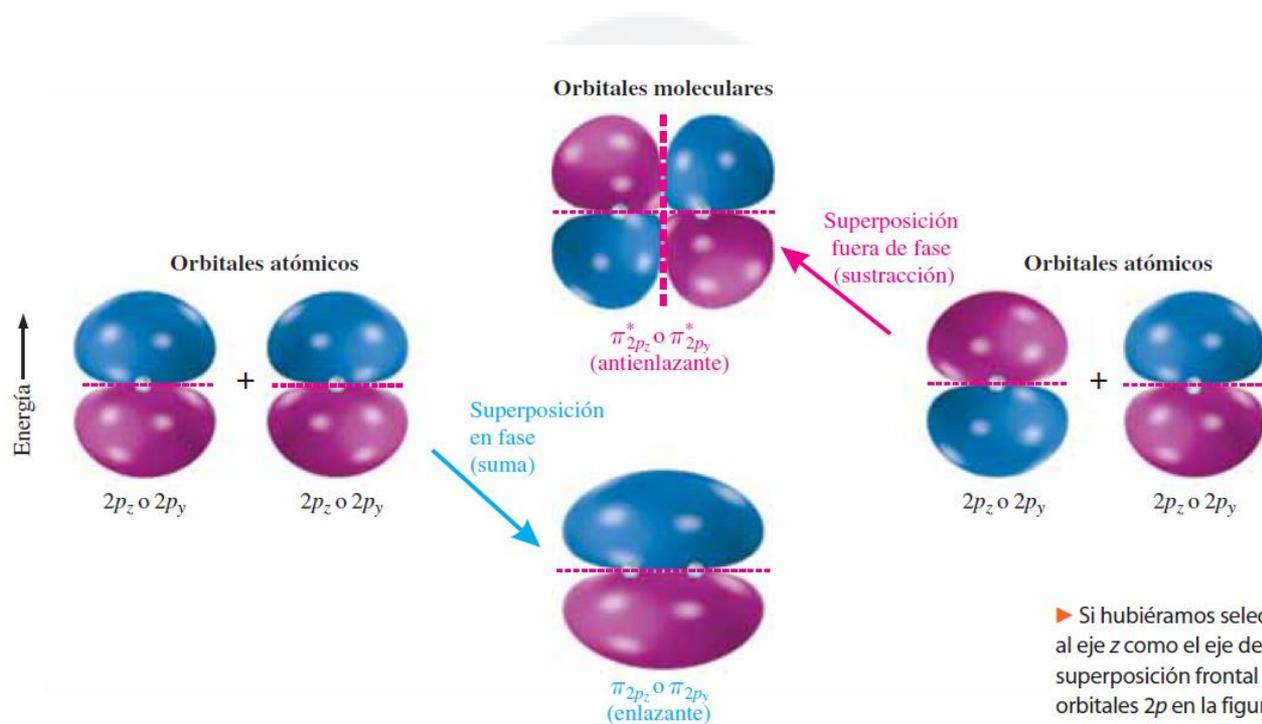
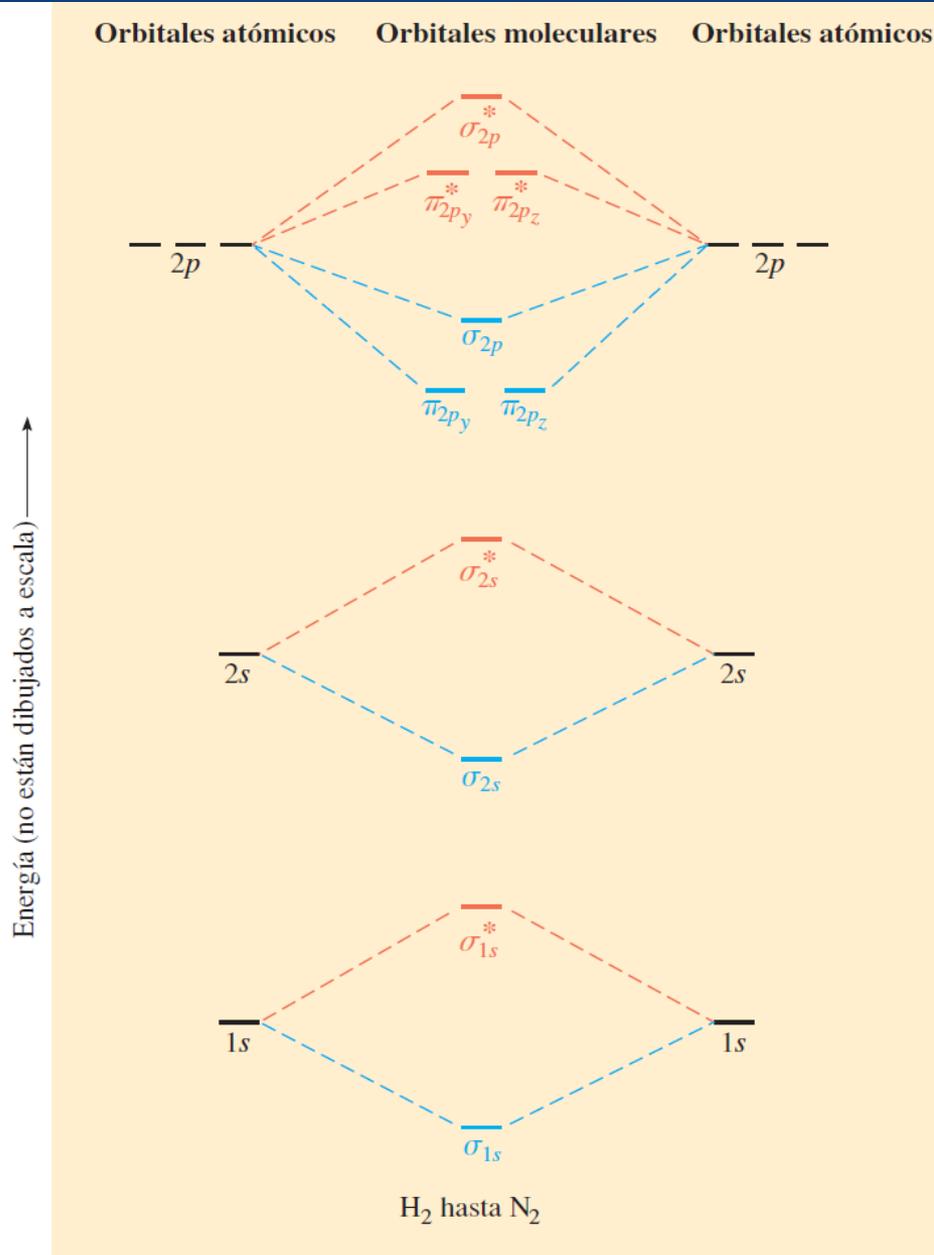
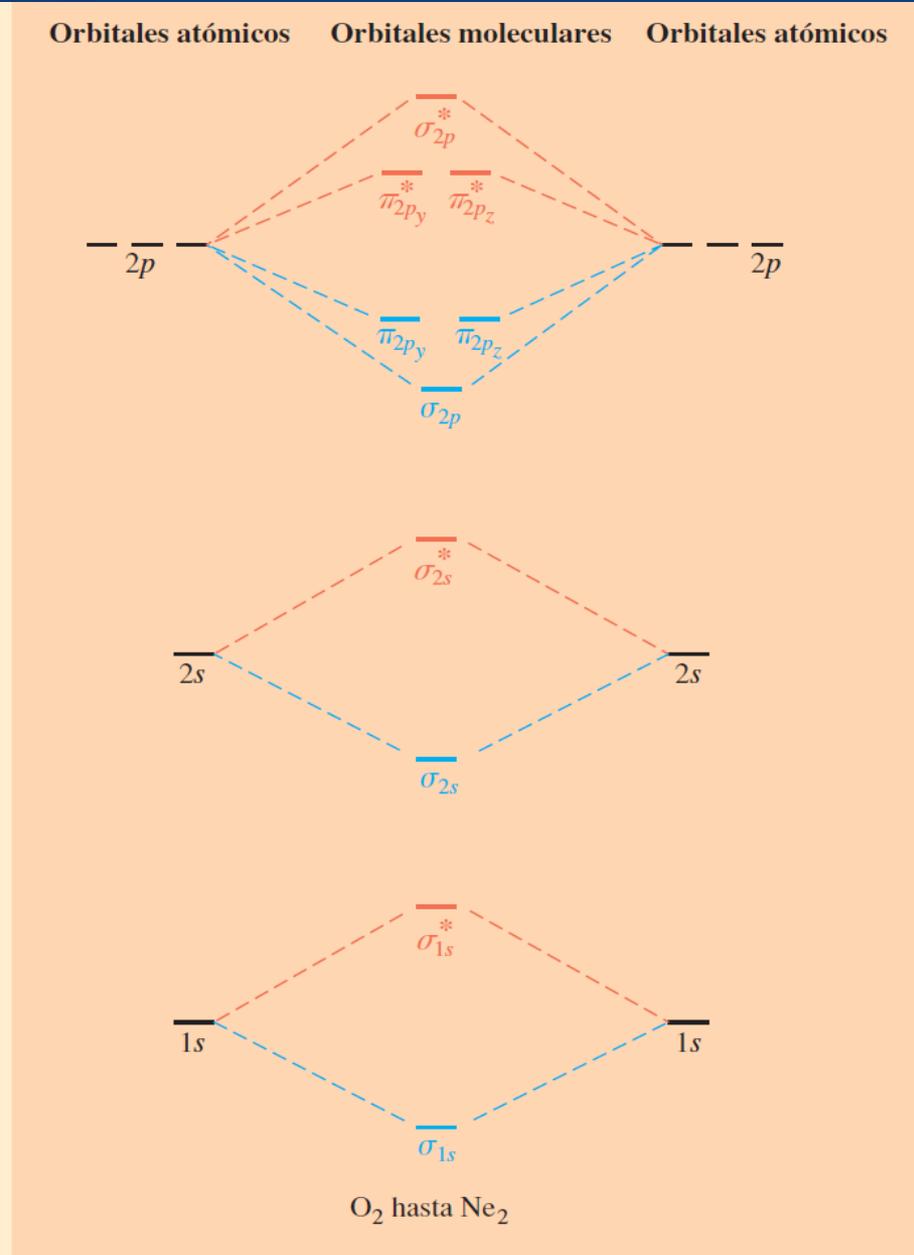


Figura 9.4 Orbitales moleculares π_{2p} y π_{2p}^* que se forman por superposición de un par de orbitales atómicos $2p$ (p. ej., orbitales $2p_y$). Puede haber un par idéntico de orbitales moleculares perpendicular a estos, formado por otro par de orbitales p de los dos mismos átomos (en este caso, orbitales $2p_z$).

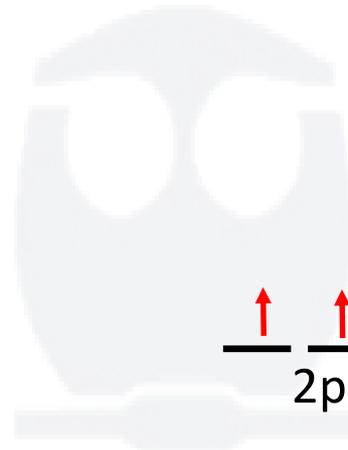
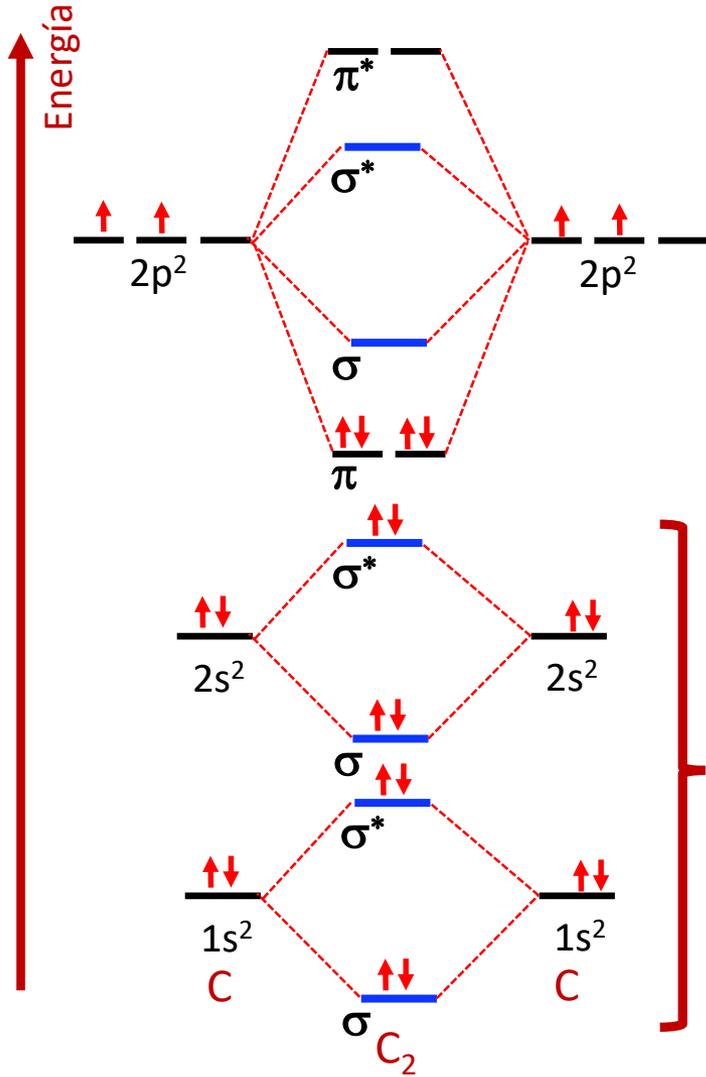
► Si hubiéramos seleccionado al eje z como el eje de superposición frontal de los orbitales $2p$ en la figura 9.3, la superposición lateral de los orbitales $2p_x - 2p_x$ y $2p_y - 2p_y$ formaría los orbitales moleculares tipo π .



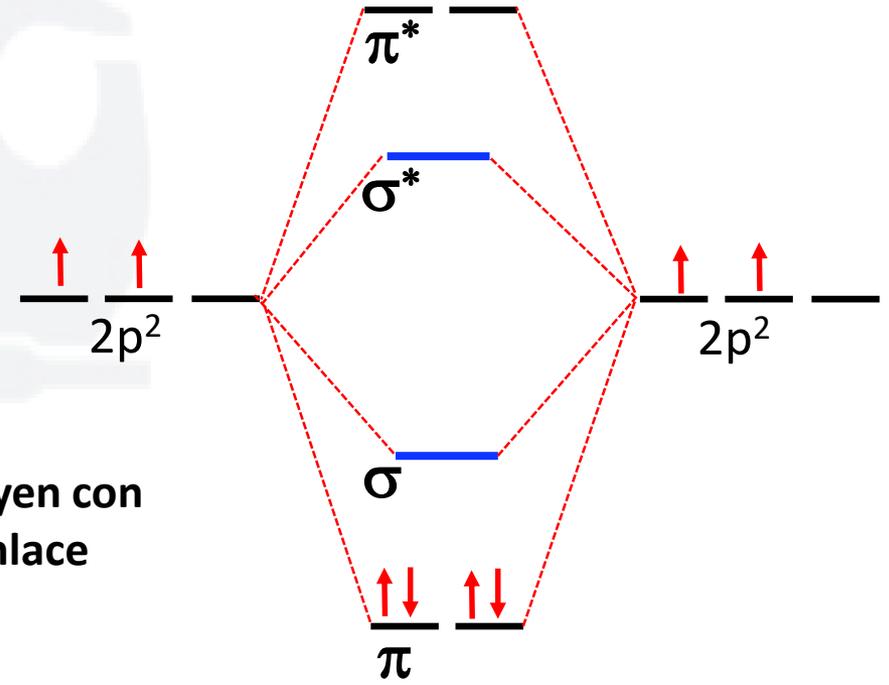
A Diagrama de las moléculas de H_2 , He_2 , Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 y N_2 y sus iones



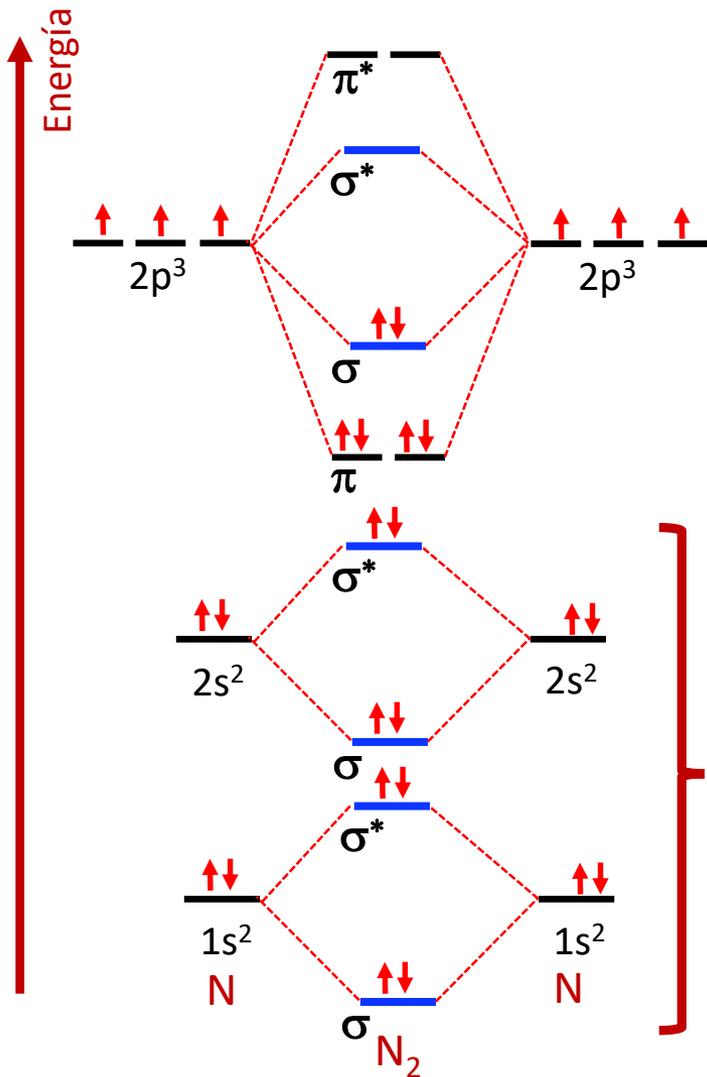
B Diagrama de las moléculas de O_2 , F_2 y Ne_2 y sus iones



Contribuyen con
cero al enlace



$$C_2 = \frac{1}{2}(4 - 0) = 2$$

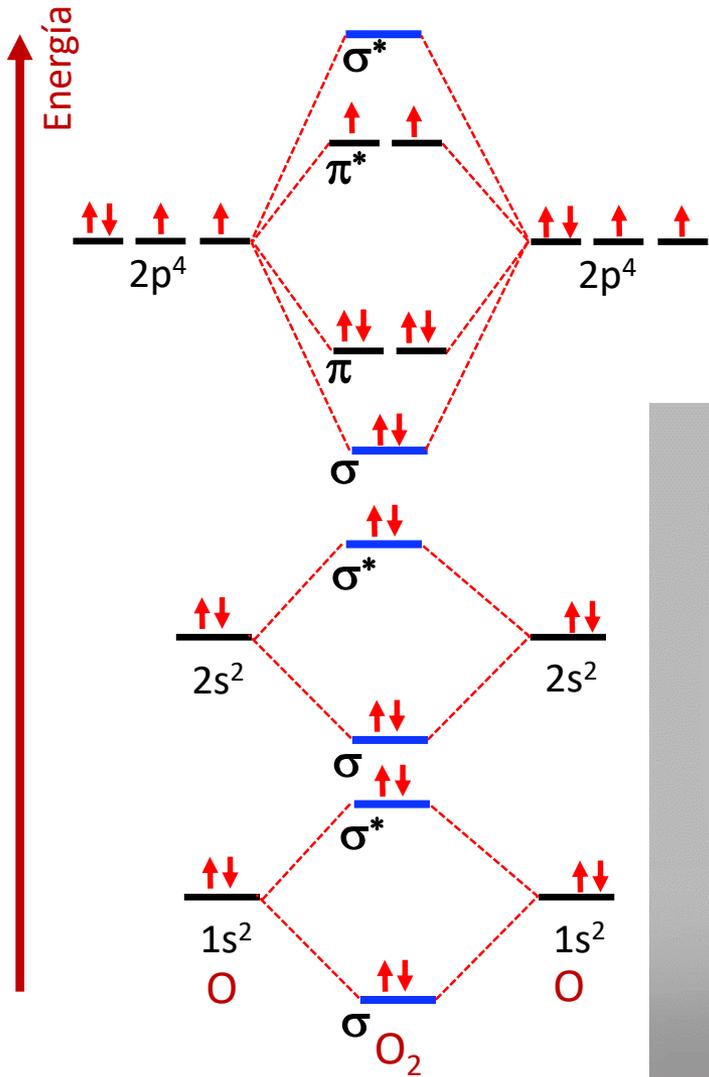


$$N_2 = \frac{1}{2}(6 - 0) = 3$$

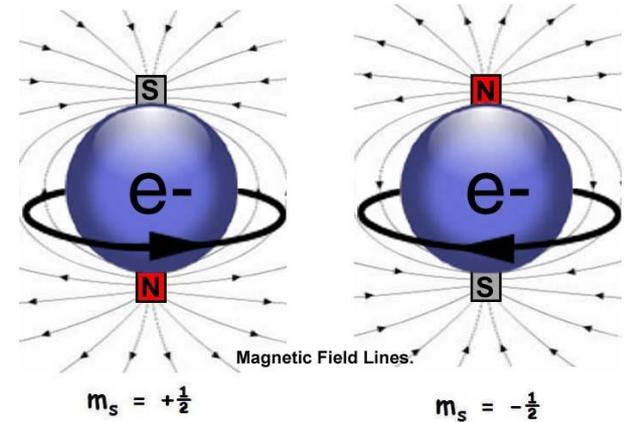


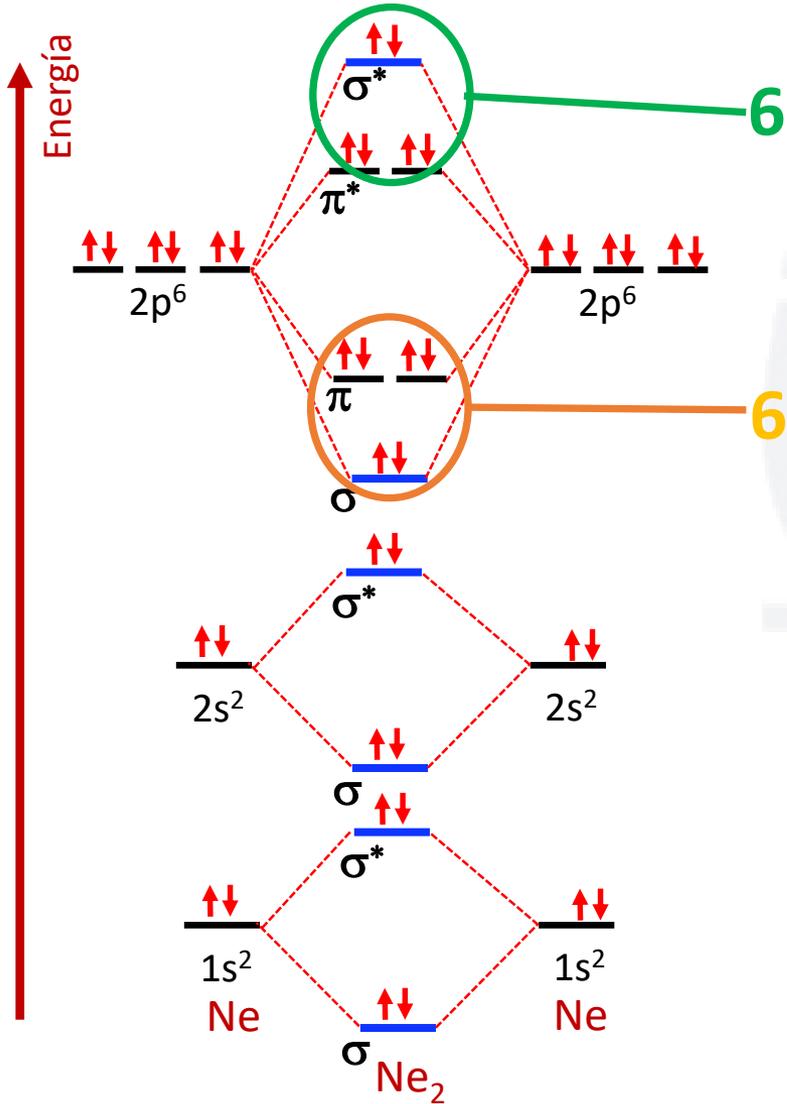
Distancia de enlace $N_2 = 109 \text{ pm}$, comparada con $B_2 = 159 \text{ pm}$; La energía $N_2 = 945 \text{ kJ/mol}$, comparada con $B_2 = 270 \text{ kJ/mol}$

1																	2	
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
7	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	



$$O_2 = \frac{1}{2}(6 - 2) = 2$$





$$Ne_2 = \frac{1}{2}(6 - 6) = 2$$

Ne × Ne

Sugerencia para resolver problemas Manejo de la teoría de los OM

La teoría de los OM es el mejor modelo para predecir el orden de enlace, la estabilidad de enlace o las propiedades magnéticas de una molécula o ion. El procedimiento es:

1. Seleccione (o dibuje) el diagrama OM de nivel de energía adecuado.
2. Cuente el número total de electrones de la molécula o ion.
3. A medida que coloque cada electrón en el orbital disponible que tenga la menor energía, debe cumplir con el principio de exclusión de Pauli y con la regla de Hund.
4. Calcule el orden de enlace = $\left(\frac{e \text{ enlazantes} - e \text{ antienlazantes}}{2} \right)$.
5. Utilice el orden de enlace para evaluar la estabilidad.
6. Investigue si hay electrones desapareados para determinar si la especie es **paramagnética**.



	H ₂	He ₂ ^c	Li ₂ ^b	Be ₂ ^c	B ₂ ^b	C ₂ ^b	N ₂	O ₂	F ₂	Ne ₂ ^c
Aumento de energía (no está a escala)	σ_{2p}^*	—	—	—	—	—	—	—	—	↑↓
	$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$	—	—	—	—	—	—	↑ ↑	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓
	σ_{2p}	—	—	—	—	—	—	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓
	π_{2p_y}, π_{2p_z}	—	—	—	—	↑ ↑	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓	↑↓
	σ_{2s}^*	—	—	—	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	σ_{2s}	—	—	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	σ_{1s}^*	—	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	σ_{1s}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
¿Paramagnética?	no	no	no	no	sí	no	no	sí	no	no
Orden de enlace	1	0	1	0	1	2	3	2	1	0
Longitud de enlace observada (Å)	0.74	—	2.67	—	1.59	1.31	1.09	1.21	1.43	—
Energía de enlace observada (kJ/mol)	436	—	110	9	≈ 270	602	945	498	155	—

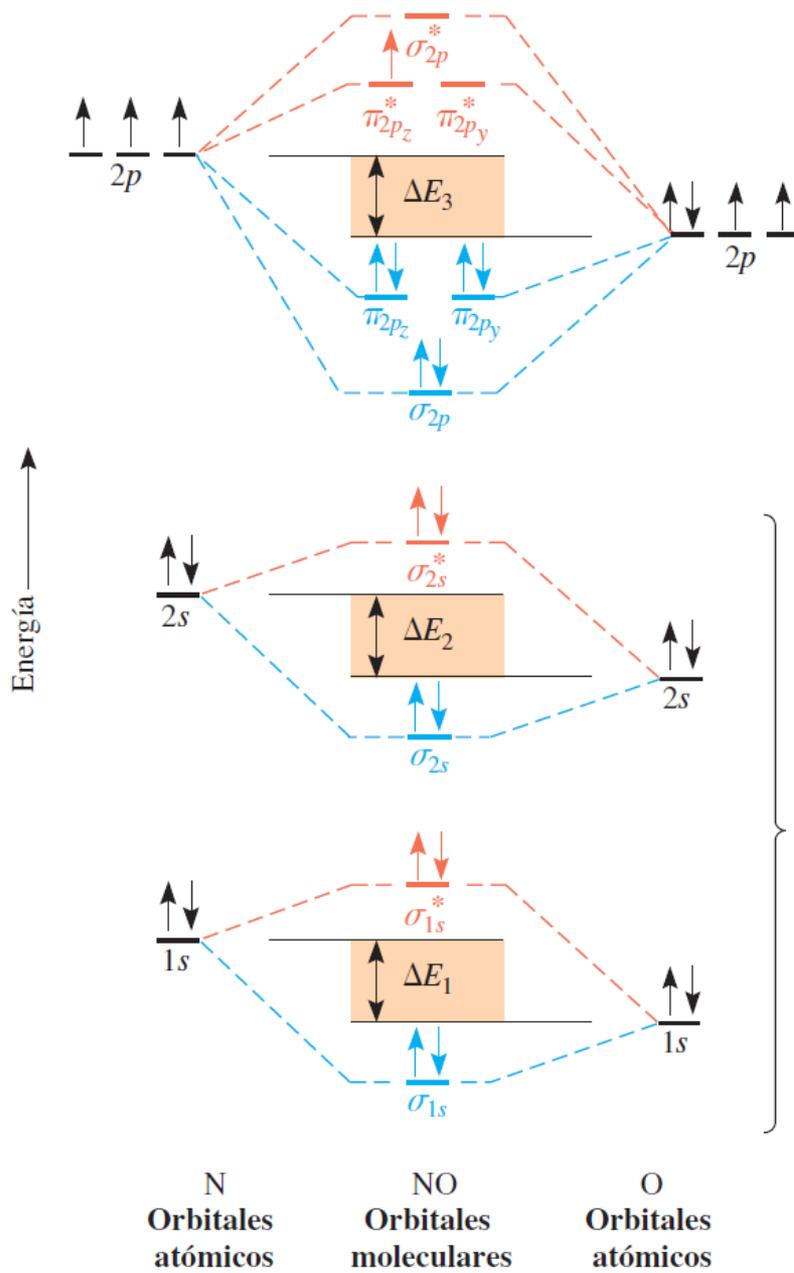


Figura 9.7 Diagrama OM de niveles de energía para el óxido de nitrógeno, NO: una molécula diatómica heteronuclear ligeramente polar ($\mu = 0.15$ D). La energía de los orbitales atómicos del oxígeno, el elemento más electronegativo, es un poco menor que la de los orbitales atómicos correspondientes del nitrógeno: el elemento menos electronegativo. En esta molécula, las diferencias de energía ΔE_1 , ΔE_2 y ΔE_3 no son muy grandes; la molécula no es tan polar.

	Metálico	Iónico	Molecular	Covalente
Partículas de la celda unitaria	Iones metálicos en “nube de electrones”	Aniones, cationes	Moléculas (o átomos)	Átomos
Fuerzas de interpartículas más potentes	Enlaces metálicos (debido a atracción entre cationes y electrones)	Electrostática	Dispersión, dipolo-dipolo o puentes de hidrógeno	Enlaces covalentes
Propiedades	De blandos a muy duros; buenos conductores del calor y electricidad; intervalo amplio de puntos de fusión (−39 a 3400 °C)	Duros; quebradizos; malos conductores del calor y electricidad; puntos de fusión elevados (400 a 3000 °C)	Blandos; malos conductores del calor y electricidad; puntos de fusión bajos (−272 a 400 °C)	Muy duros; malos conductores del calor y electricidad;* puntos de fusión elevados (1200 a 4000 °C)
Ejemplos	Li, K, Ca, Cu, Cr, Ni (metales)	NaCl, CaBr ₂ , K ₂ SO ₄ (sales típicas)	CH ₄ (metano), P ₄ , O ₂ , Ar, CO ₂ , H ₂ O, S ₈	C (diamante), SiO ₂ (cuarzo)

*Excepciones: el diamante es buen conductor del calor; el grafito es blando y es buen conductor de la electricidad.

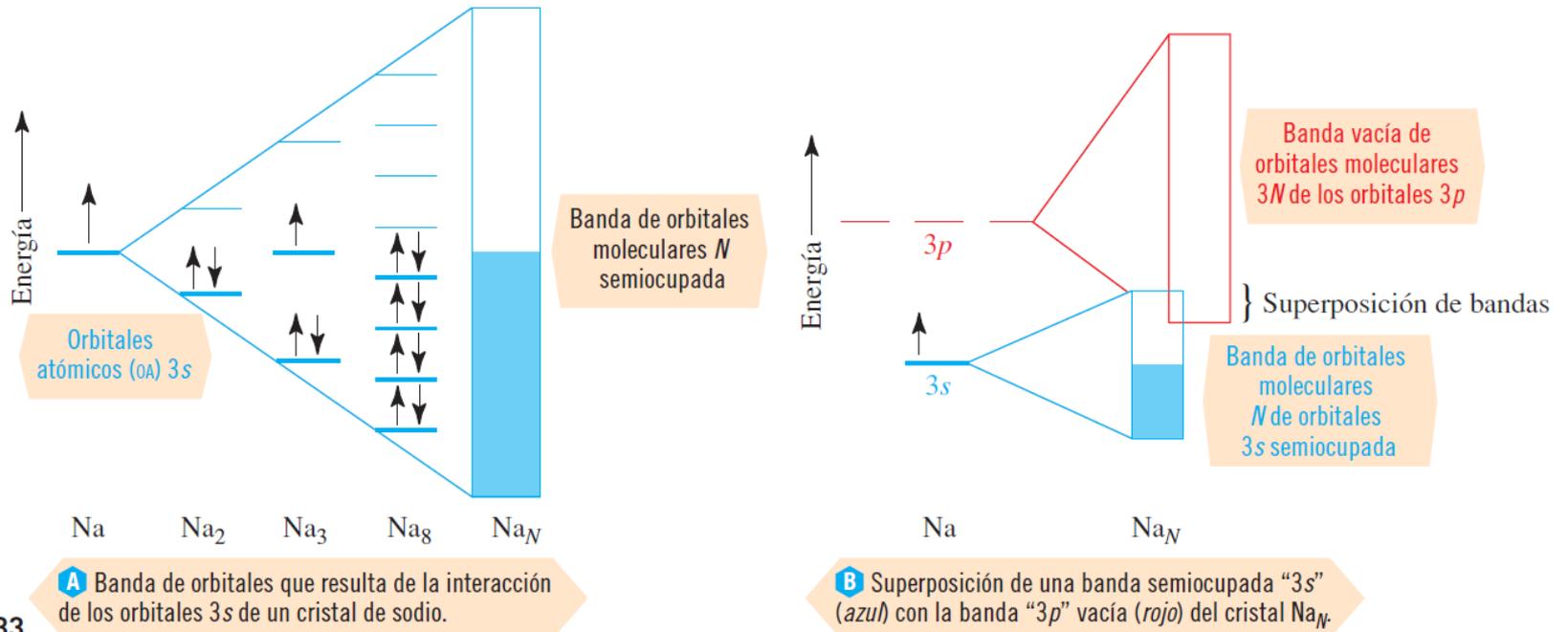
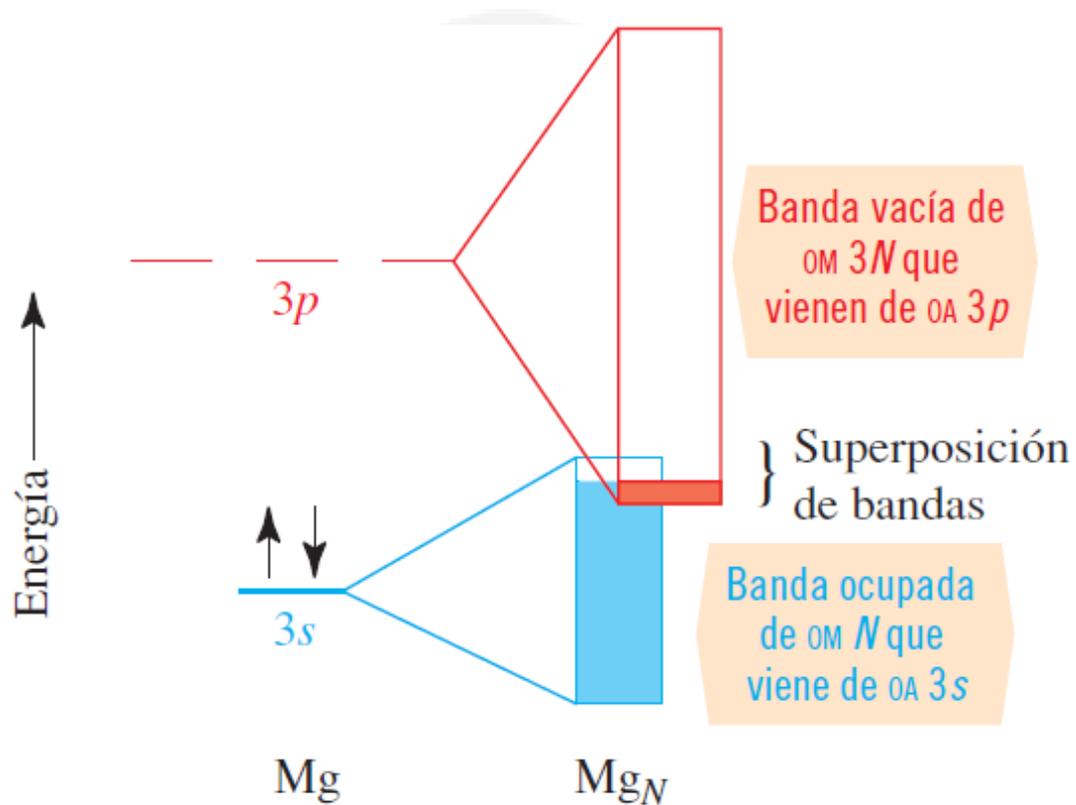


Figura 13.33

Conducción de la electricidad



1. Acaba de explicarse la *capacidad de los metales para conducir la electricidad*.
2. Los metales también *conducen el calor* y pueden absorber calor cuando sus electrones se excitan térmicamente y ocupan orbitales vacíos que residen abajo de una banda de conducción. El proceso inverso ocurre con desprendimiento de calor.
3. Los metales tienen *apariencia lustrosa* debido a que los electrones móviles pueden absorber un intervalo amplio de longitudes de onda de energía radiante cuando saltan a niveles de energía más altos; entonces emiten fotones de luz visible y regresan a niveles más bajos de la banda de conducción.
4. Los metales son *maleables o dúctiles* (o ambos). Un cristal de un metal se deforma con facilidad cuando se somete a tensión mecánica. Todos los iones metálicos son idénticos y forman parte de un “mar de electrones”. Conforme se rompen enlaces, rápidamente se forman nuevos con iones metálicos adyacentes. Las características de la distribución no cambian, y el entorno de cada ion metálico permanece intacto antes y después de la deformación (figura 13.36). La ruptura de enlaces comprende la promoción de electrones a niveles de energía más altos. La formación de enlaces conlleva el regreso de los electrones a su nivel energético original.

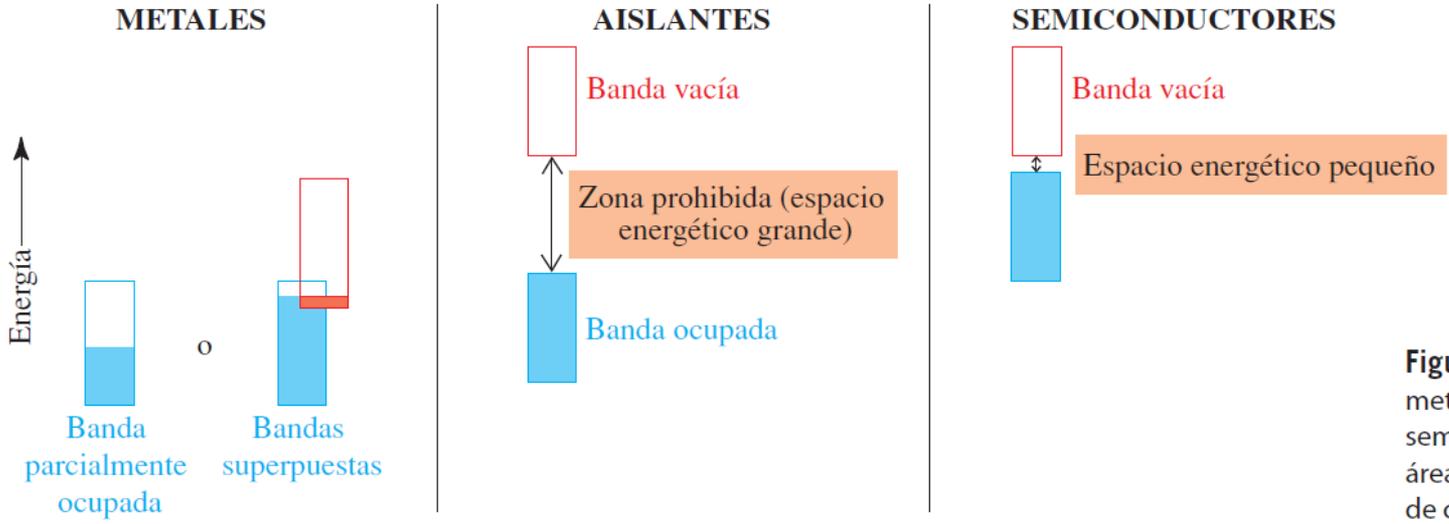


Figura 13.35 Distinción entre metales, aislantes y semiconductores. En cada caso, un área clara representa una banda de conducción.