

# Tema 11.- Estructura Electrónica Molecular

11.1. Aproximación de Born-Oppenheimer

11.2. La molécula de  $H_2^+$

11.3. Concepto de orbital molecular

11.4. Combinación de orbitales atómicos para formar orbitales moleculares

11.5 Orbitales para moléculas biatómicas homonucleares

11.6 Orden de enlace, energía de enlace y longitud de enlace

11.7 Moléculas biatómicas heteronucleares

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a background of light blue and orange wavy shapes that resemble a stylized horizon or water.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Hamiltoniano Molecular:  $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_A, \vec{R}_B, \dots, \vec{R}_M)$

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_A, \vec{R}_B, \dots, \vec{R}_M) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_A, \vec{R}_B, \dots, \vec{R}_M)$$

Términos del Hamiltoniano Molecular:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{e-n} + \hat{V}_{e-e} + \hat{V}_{n-n}$$

Aproximación Born-Oppenheimer: Separar Movimiento Nuclear del Electrónico

1ª Etapa:  $\hat{T}_n = 0$ ,  $\hat{V}_{n-n} = \sum_A \sum_{B>A} \frac{Z_A \cdot Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}}$

$$\hat{H}^{elec} = \hat{T}_e + \hat{V}_{e-n} + \hat{V}_{e-e}$$

$$\hat{H}^{elec} \Psi^{elec}(\vec{r}_i; \vec{R}_A) = E^{elec} \Psi^{elec}(\vec{r}_i; \vec{R}_A)$$

$$U = E^{elec} + V_{n-n} = U(\vec{R}_A)$$

2ª etapa nuclear:

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

# Aproximación Born-Oppenheimer

Molécula de  $H_2^+$

término constante mientras se resuelve el problema electrónico

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p}(\nabla_a^2 + \nabla_b^2) - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_b}{r_b}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{R}$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Molécula AB con un solo electrón

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_b}{r_b}\right)$$

Desacoplando el movimiento electrónico del nuclear

$$U = F + \frac{e^2 Z_a Z_b}{R}$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

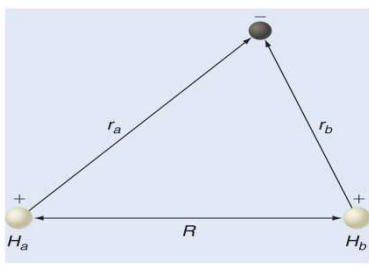
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

**funcion de ondas**

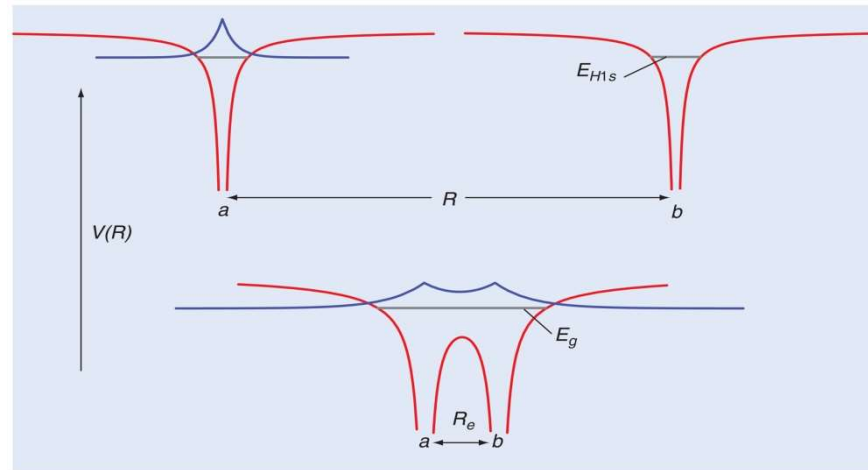
# La Molécula $H_2^+$



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p} (\nabla_a^2 + \nabla_b^2) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

La energía potencial de  $H_2^+$  para 2 valores distintos de  $R$



$R$  grande:  $H + H^+$

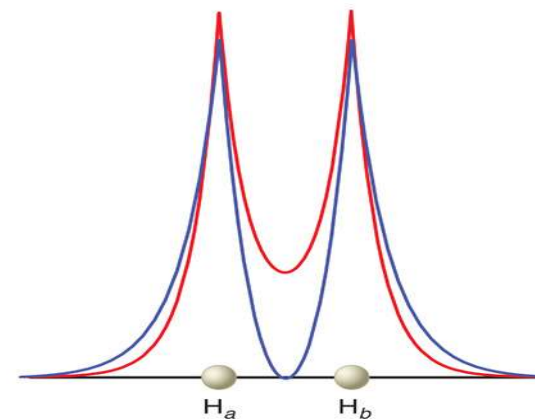
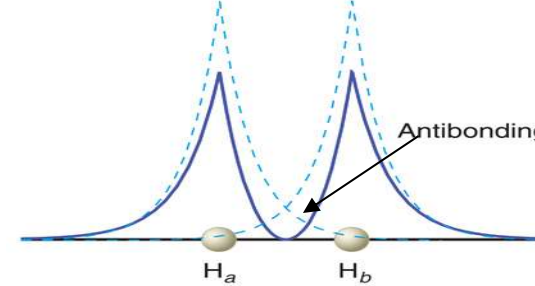
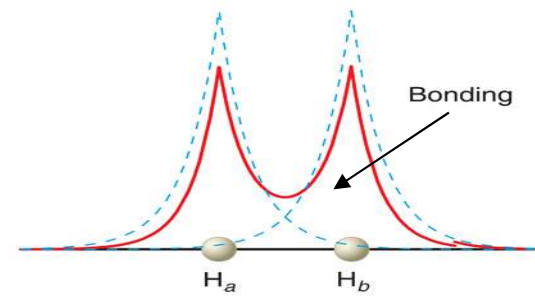
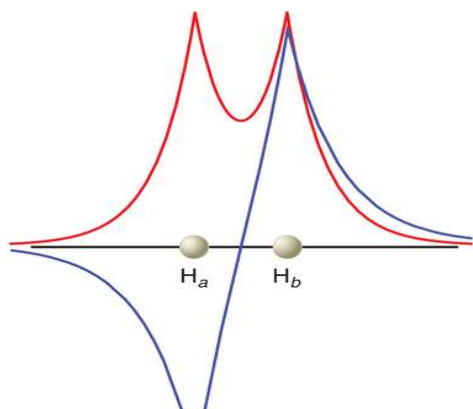
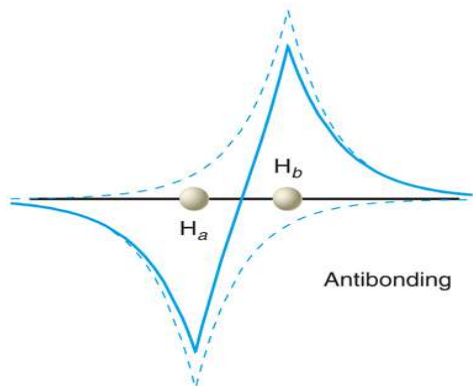
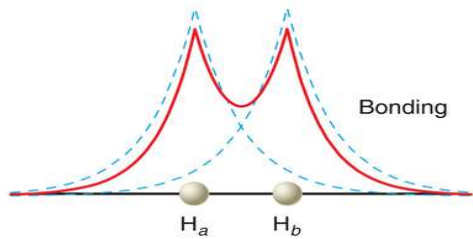
$R$  pequeña:  $H_2^+$

**Orbitales Moleculares** son las distribuciones espaciales sobre la molécula donde se definen los electrones

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99



© 2010 Pearson Education, Inc.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

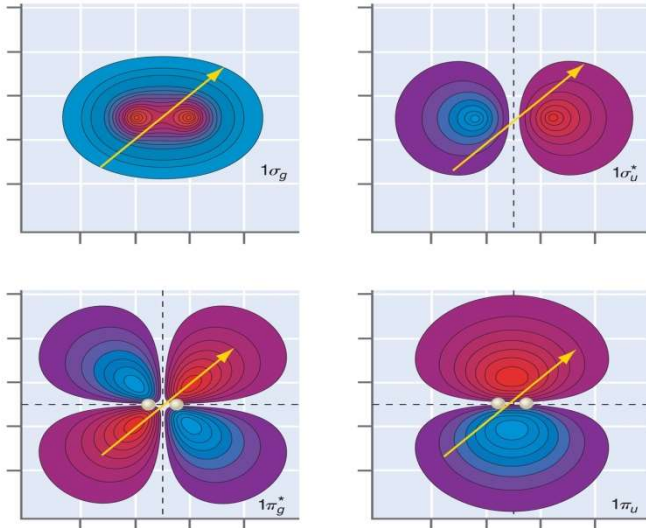
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Las funciones tomando los OA 1s del H)

Las funciones tomando los OA 1s del H)

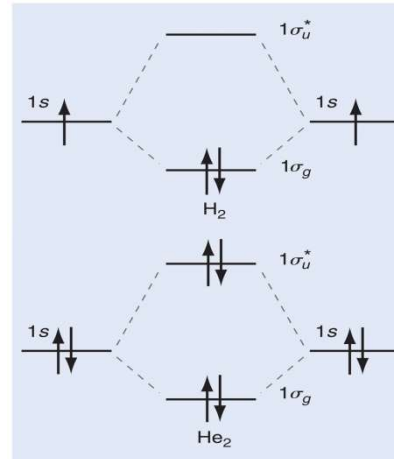
# Moléculas Diatómicas Homonucleares



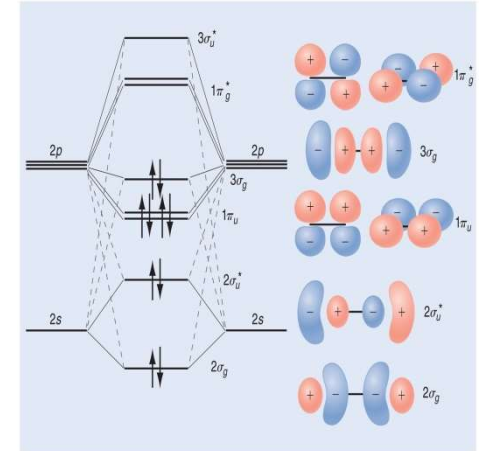
© 2010 Pearson Education, Inc.

Representaciones de contorno para varios OM enlazantes y antienlazantes de  $H_2^+$

Aplicación del principio Aufbau para relleno de LCAO-MO



© 2010 Pearson Education, Inc.

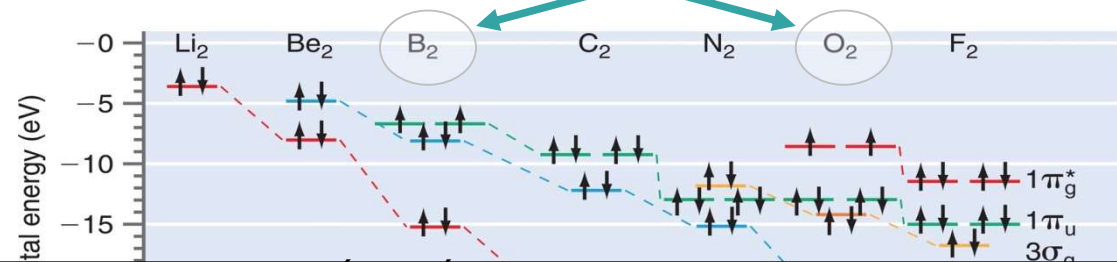


© 2010 Pearson Education, Inc.

Diagrama CLOA-OM para  $N_2$

TABLE 23.2 MOLECULAR ORBITALS USED TO DESCRIBE CHEMICAL BONDING IN HOMONUCLEAR DIATOMIC MOLECULES			
MO Designation	Alternate	Character	Atomic Orbitals
$1\sigma_g$	$\sigma_g(1s)$	Bonding	1s
$1\sigma_u^*$	$\sigma_u^*(1s)$	Antibonding	1s

## Moléculas paramagnéticas



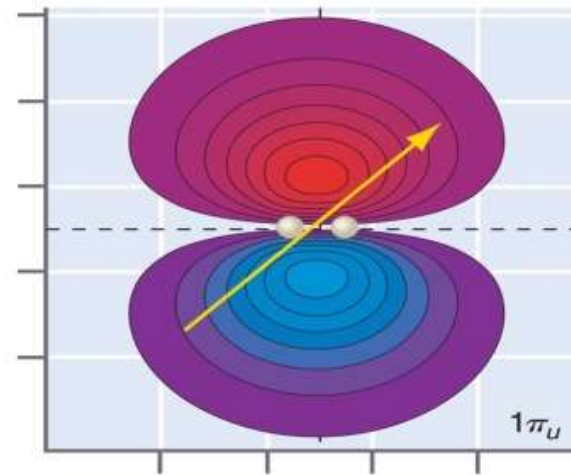
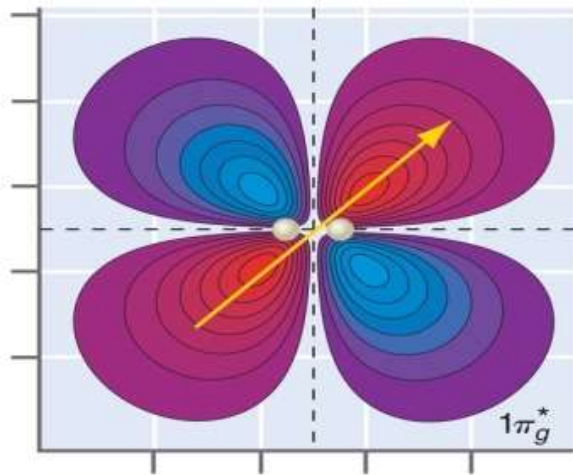
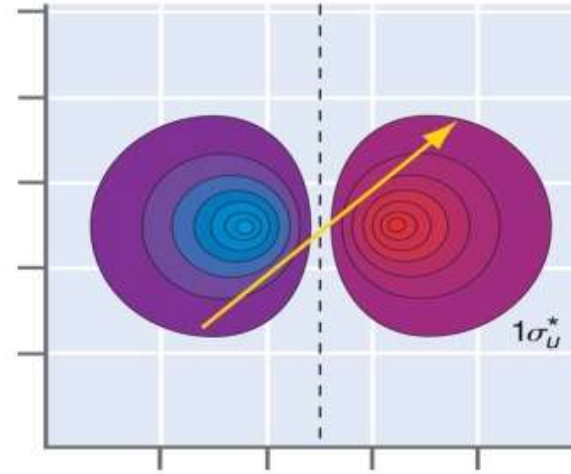
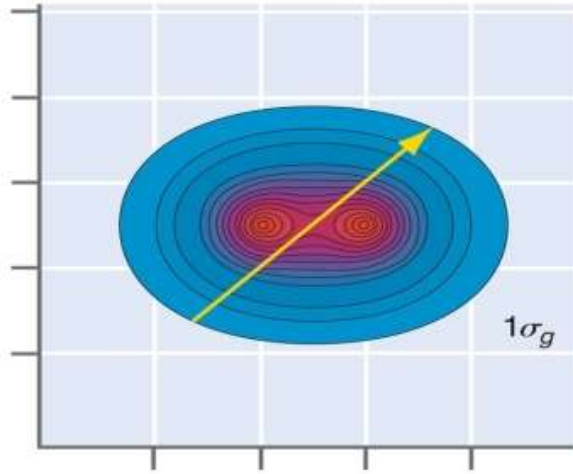
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

© 2010 Pearson Education, Inc.

Niveles de energía de OM ocupados para  $X_2$  (2º Período)



© 2010 Pearson Education, Inc.

### Centro de inversión

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Antisimétrico

Antisimétrico

Antisimétrico

\* (antienlazante)

# Las Partes por el Todo: Orden de Enlace, Energía de Enlace y Longitud de Enlace

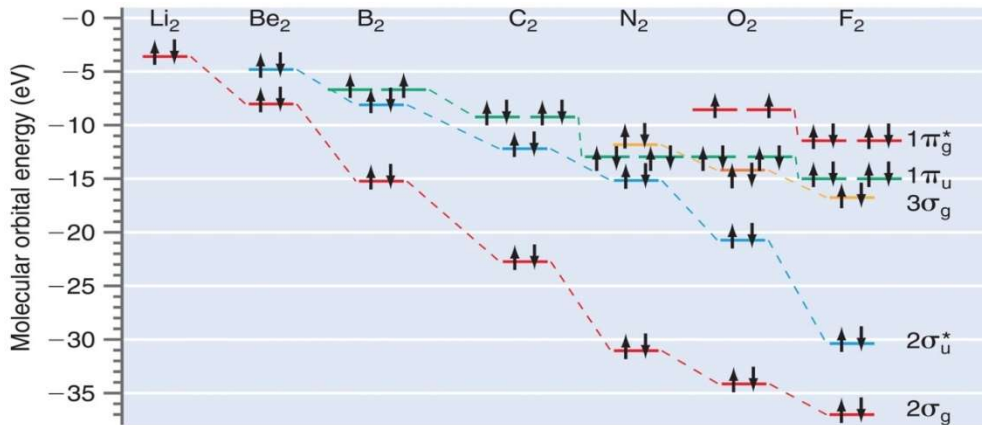
## Aproximación orbital

función de ondas  
polielectrónica

orbitales moleculares

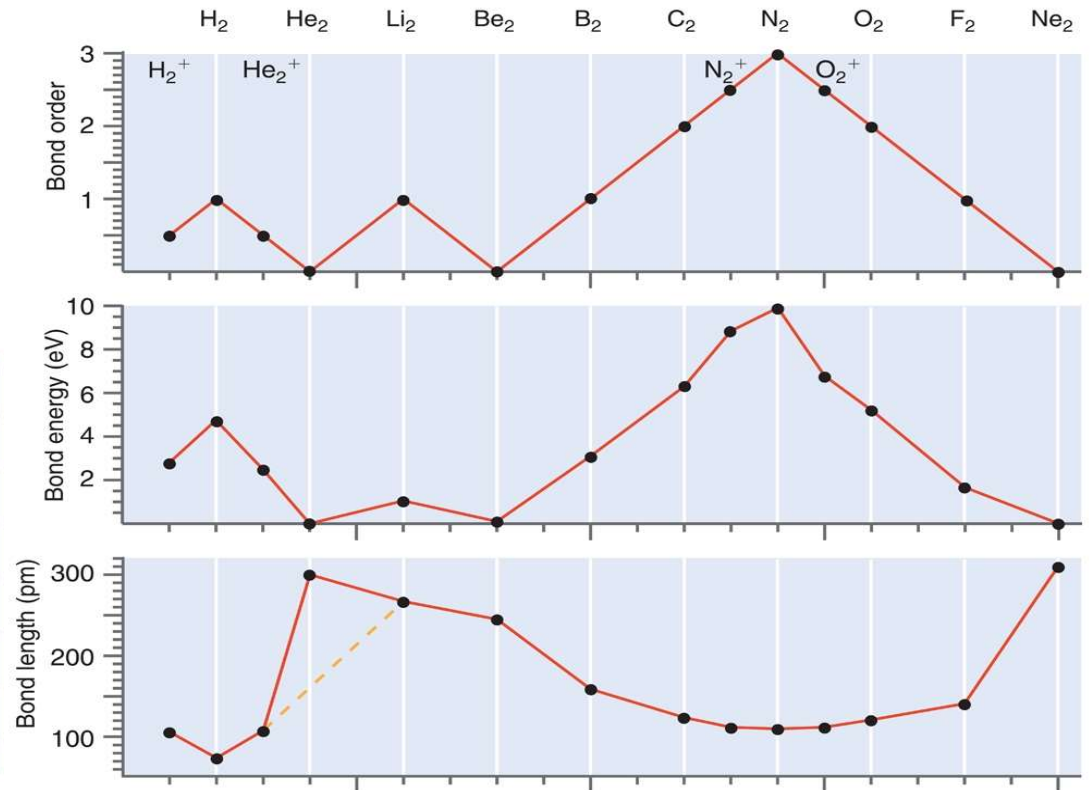
$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \dots \phi_n(\mathbf{r}_n)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.



© 2010 Pearson Education, Inc.

$$\text{Orden de enlace} = \frac{1}{2} (n^{\circ} e^{-}_{\text{enlazantes}} - n^{\circ} e^{-}_{\text{antienlazantes}})$$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

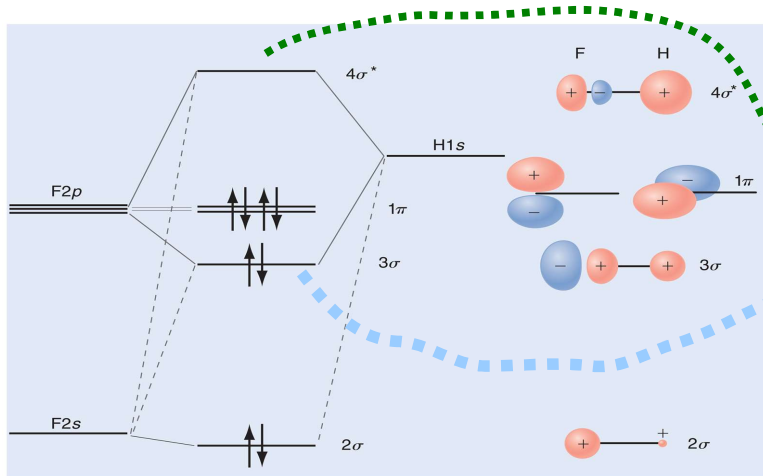
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

5 10 15 20  
Number of electrons



# Moléculas Bioatómicas Heteronucleares

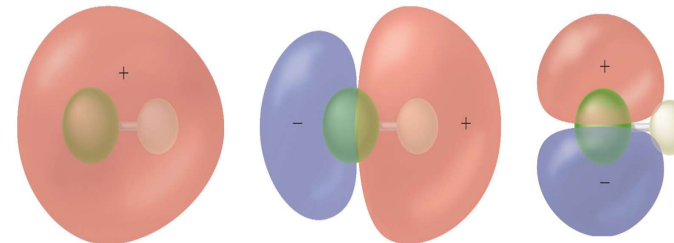


© 2010 Pearson Education, Inc.

$$\begin{aligned} \epsilon_b &= -19.6 \text{ eV} & \psi_b &= 0.34\phi_{H1s} + 0.84\phi_{F2p_z} \\ \epsilon_a &= -10.3 \text{ eV} & \psi_a &= 0.99\phi_{H1s} - 0.63\phi_{F2p_z} \end{aligned}$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

## Esquema CLOA-OM para FH

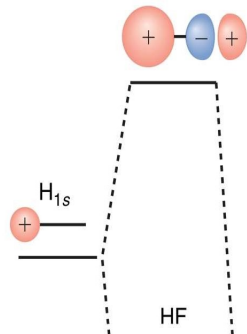


© 2010 Pearson Education, Inc.

2σ

3σ

1π



**Polarización de la distribución de carga**

obtenidos mediante

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

$i=1$

Cartagena99