

## Orbitales moleculares III

### Tópicos de la descripción de OM F 2p

#### 1.El modelo hidrogenoide

Si se aplica el sistema empleado en OM1 y OM2, veremos primero los OM hidrogenoides, que se representarán a partir de la combinación lineal de OA 2px. Para ello se tomará la función atómica

$$\psi_{2px} = \left( \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \right) * \left( \frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * x e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} = 0.1 * \left( \frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * x e^{-\frac{Z'r}{2a_0}} \quad (1)$$

Aplicándola al H; Z'=1, a0=1, y la posición de los núcleos sobre el eje X, en unidades bohr en x+0,75 y x-0,75.

Obteniéndose las dos funciones enlazante y antienlazante:

$$\Phi_{\sigma 2px} = 0.1 * (x - 0,75) * e^{-\frac{\sqrt{((x-0,75)*(x-0,75)-y*y)}}{2}} \pm 0.1 * (x + 0,75) * e^{-\frac{\sqrt{((x+0,75)*(x+0,75)-y*y)}}{2}}$$

que representadas producen las figuras 1 y 2

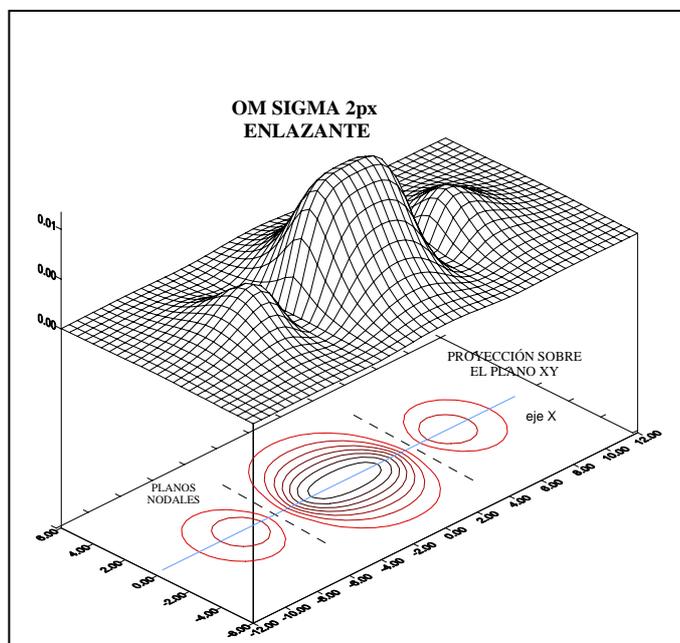


Fig.1

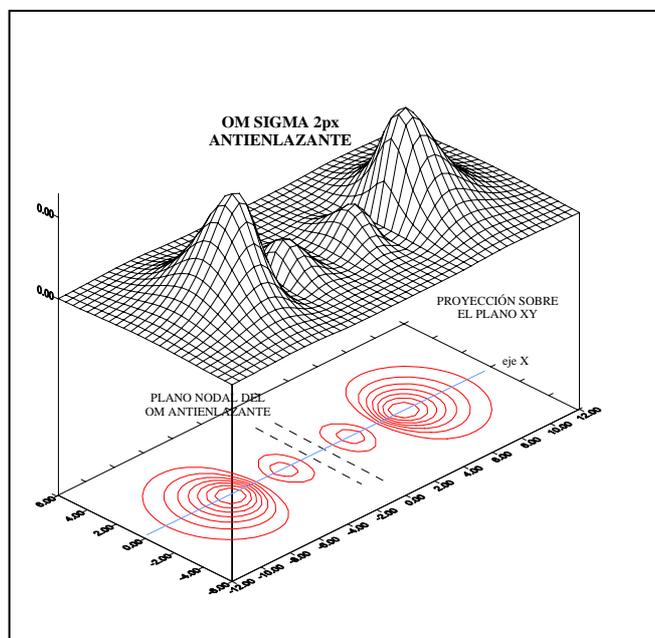


Fig. 2

En las proyecciones sobre el plano XY, se aprecian perfectamente en el fig 1, los dos planos nodales procedente de los OA 2px, que hereda el OM. En cambio en el caso del OM antienlazante (fig.2). se produce el plano nodal molecular y los dos atómicos, o sea que existen tres planos nodales.

## 2. Moléculas homonucleares de átomos no hidrogenoides

Si en la ecuación 1, se introducen para cada elemento los parámetros de  $Z'$ , y las distancias correspondientes al radio covalente de cada elemento, para una hipotética molécula  $Li_2$ , tendríamos unas funciones moleculares:

$$\phi' = 0,19 * \left[ (x - 2,53).e^{-\left(\frac{1,32 * \sqrt{(x-2,53)^2 + y^2}}{2}\right)} \pm (x + 2,53).e^{-\left(\frac{1,32 * \sqrt{(x+2,53)^2 + y^2}}{2}\right)} \right]$$

Al representarlas se obtienen las figuras 3 y 4 para la combinación antienlazante y 5 y 6 para la enlazante

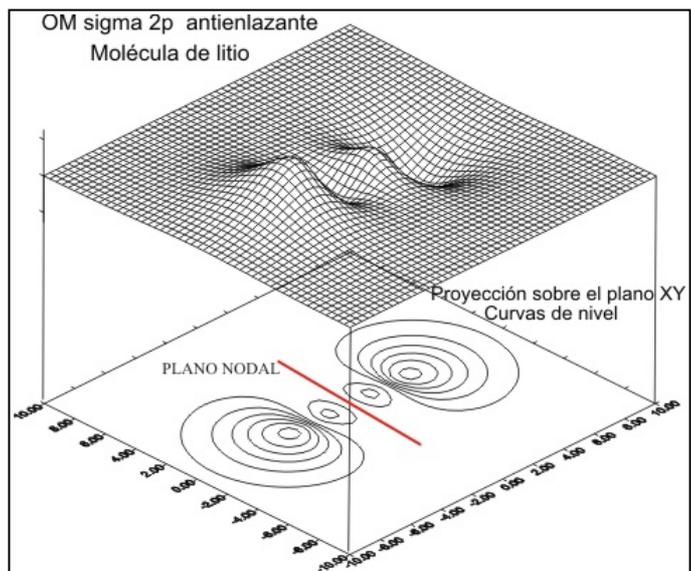


Fig.3

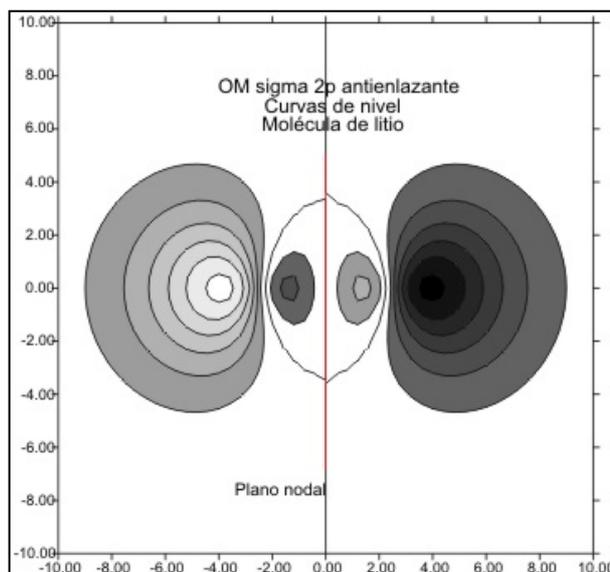


Fig.4

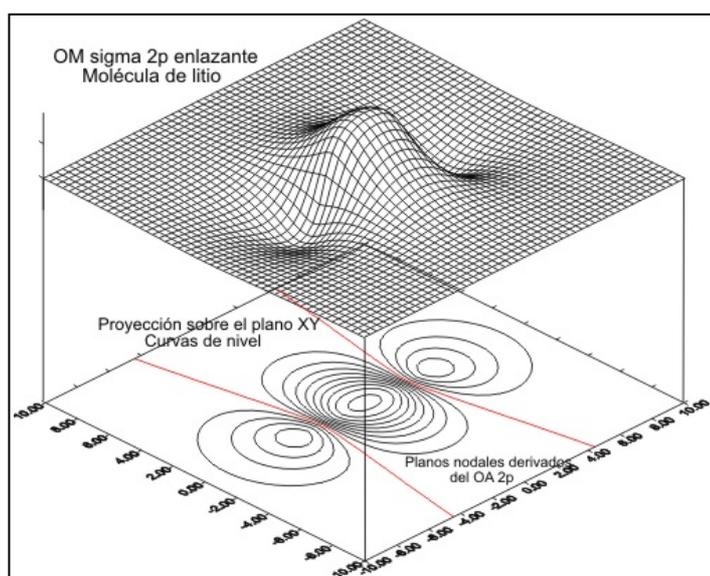


Fig.5

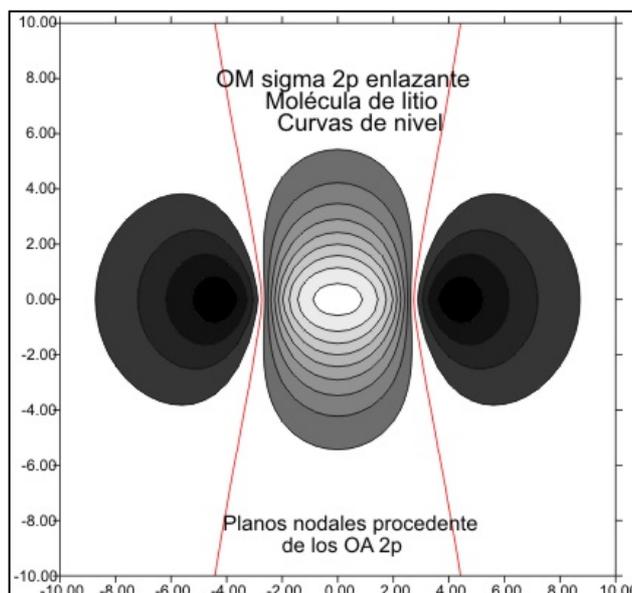


Fig.6

Las curvas de nivel (fig 4 y 6), permiten diferenciar perfectamente estos OM

Al trasladarnos a otros elementos del segundo período, hacia la derecha del litio, observaremos la disminución del tamaño. Por ejemplo para el caso de los OM **F** 2p para el nitrógeno, el antienlazante (fig 7 y 8) y el enlazante (fig 9 y 10)

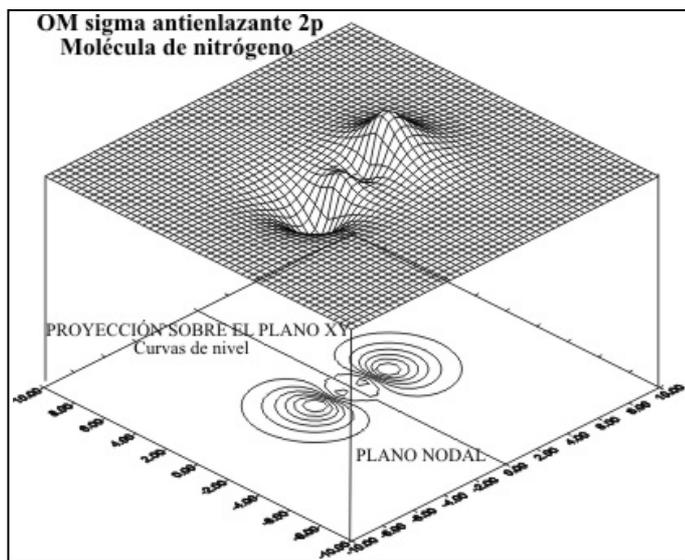


Fig.7

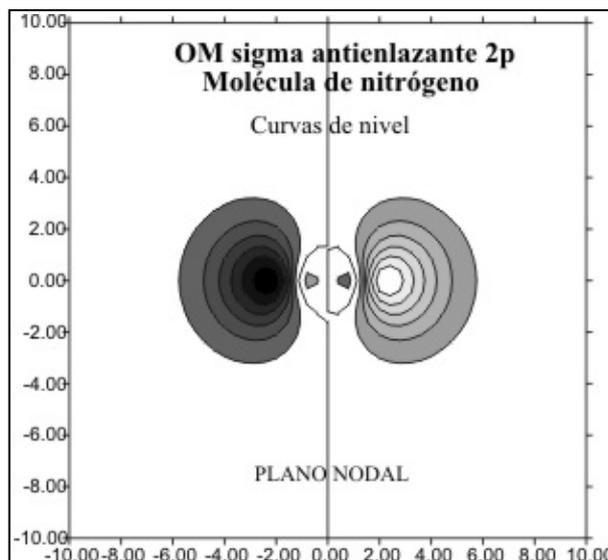


Fig.8

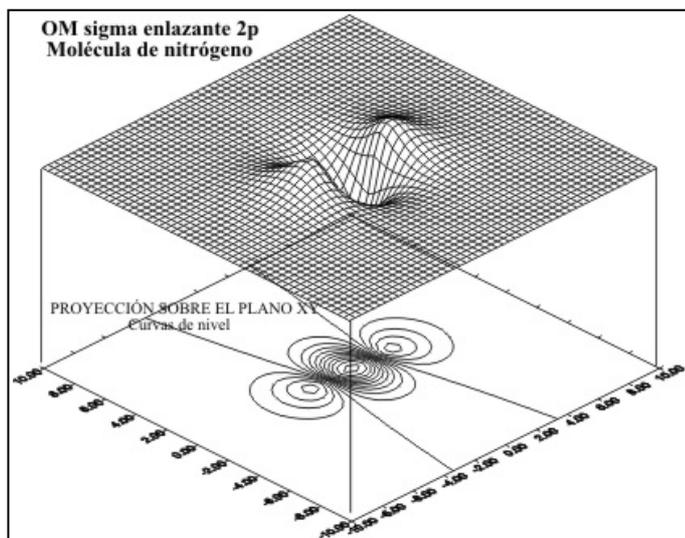


Fig. 9

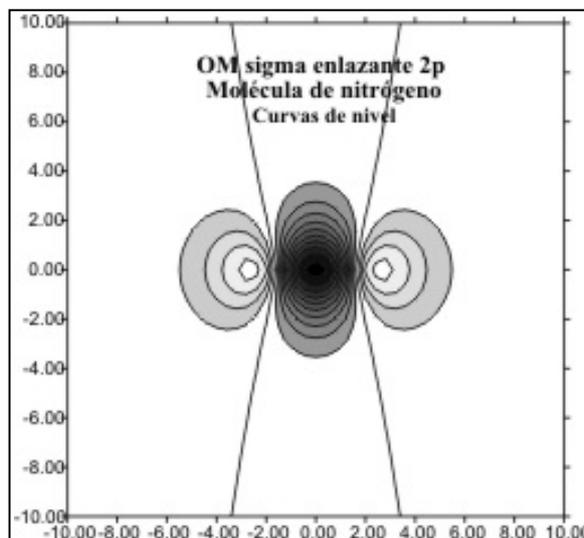


Fig.10

Se puede comparar el tamaño del OM desde el  $\text{Li}_2$  al  $\text{N}_2$ , relacionando las figuras 6 y 10, y 4 y 8.

Casi en el extremo del período, el  $\text{O}_2$ , presenta unas funciones de onda molecular **F**2px

$$\phi = 4,41 \left[ (x-1,38) * e^{-\left(\frac{4,45 * \sqrt{((x-1,38)^2 + y^2)}}{2}\right)} \pm (x+1,38) * e^{-\left(\frac{4,45 * \sqrt{((x+1,38)^2 + y^2)}}{2}\right)} \right]$$

Su representación gráfica se presenta en las fig 11 y 12 para el OM antienlazante y 13 y 14 para el enlazante

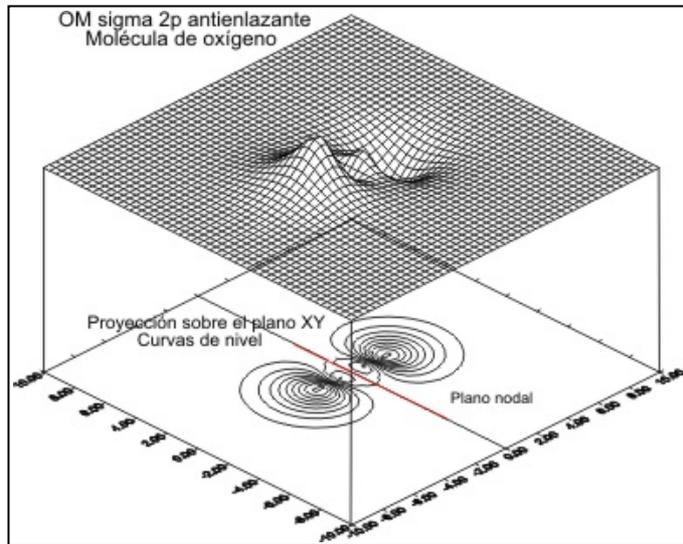


Fig.11

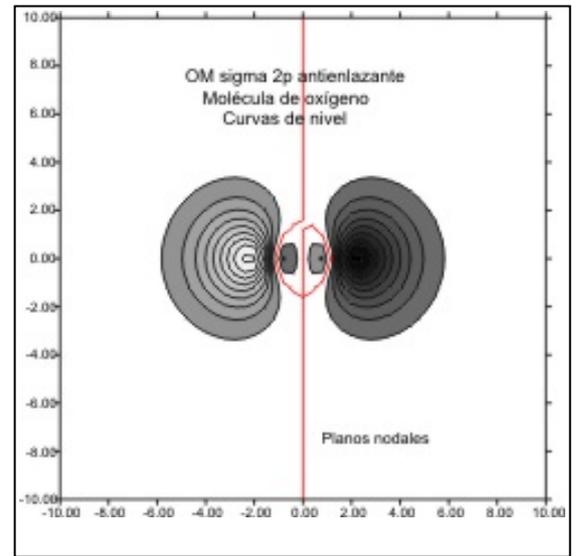


Fig.12

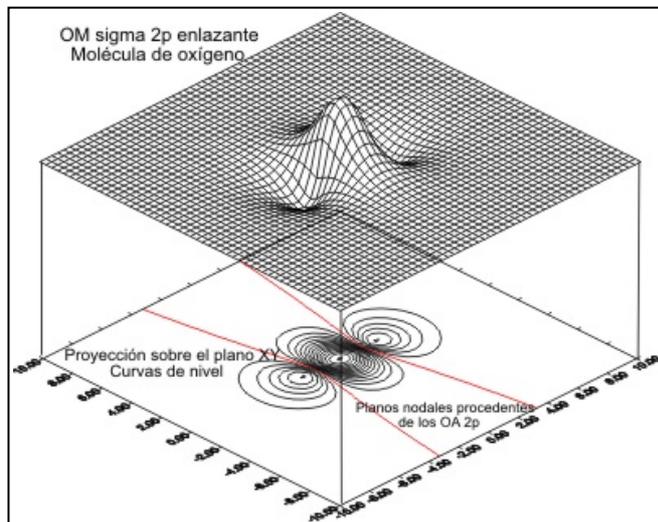


Fig.13

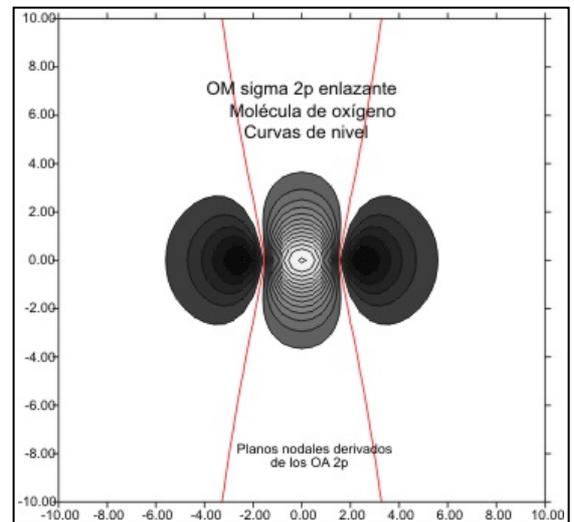


Fig.14