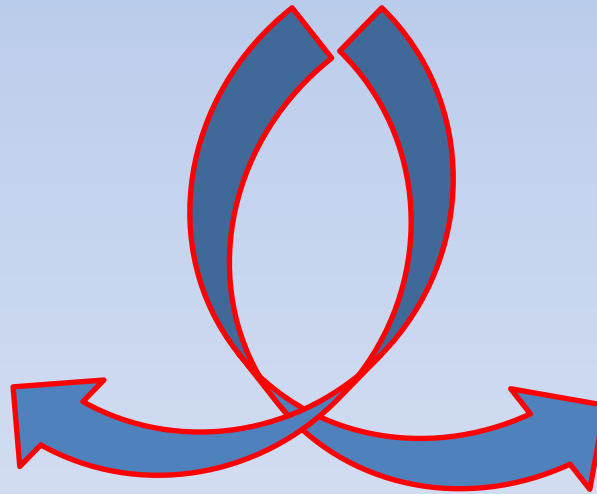


# Teoría de unión de la Mecánica Cuántica

Teoría de Enlace  
de Valencia  
(TEV)



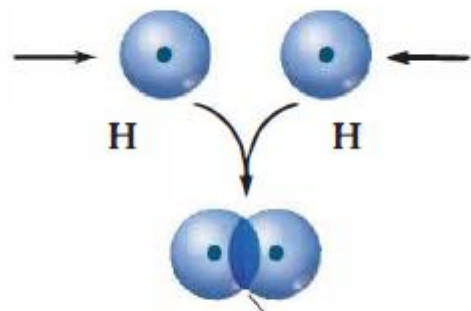
Teoría de Orbitales  
Moleculares  
(OM)

# Teoría de Enlace de Valencia

Esta teoría considera la formación de uniones a partir de la superposición o solapamiento de orbitales

## Uniones simples – Enlaces $\sigma$

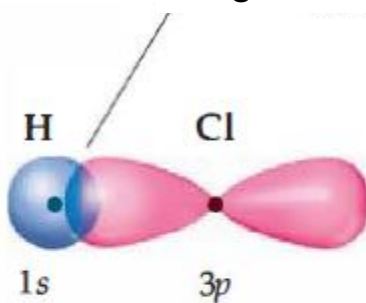
Aproximación de los átomos



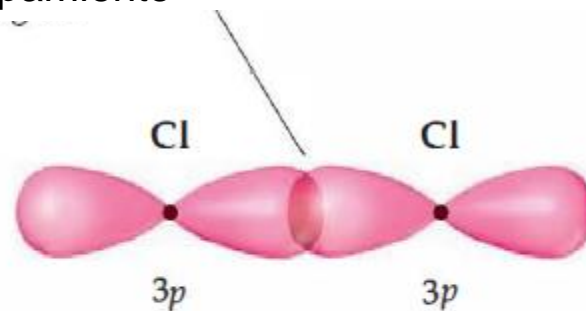
Región de solapamiento

(a)

Región de solapamiento



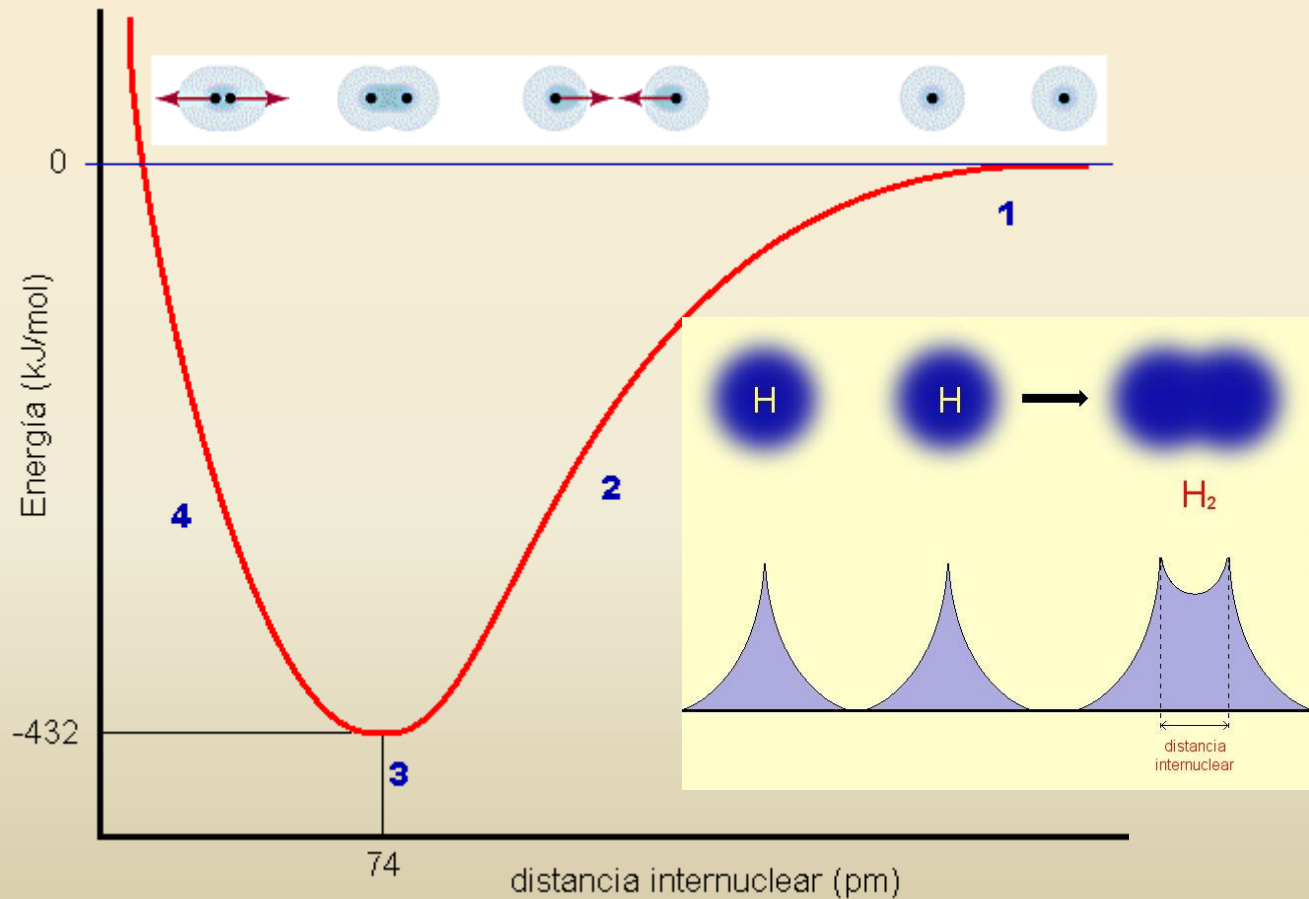
(b)



(c)

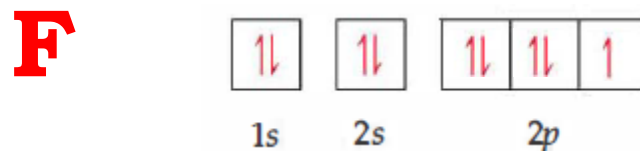
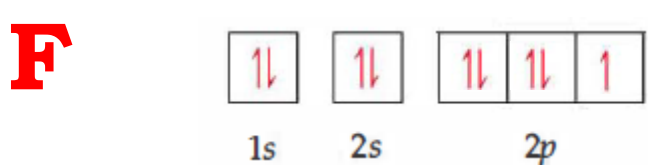
# Teoría de enlace de valencia

La unión química se produce por solapamiento de orbitales atómicos hasta encontrar una distancia óptima entre los núcleos atómicos.



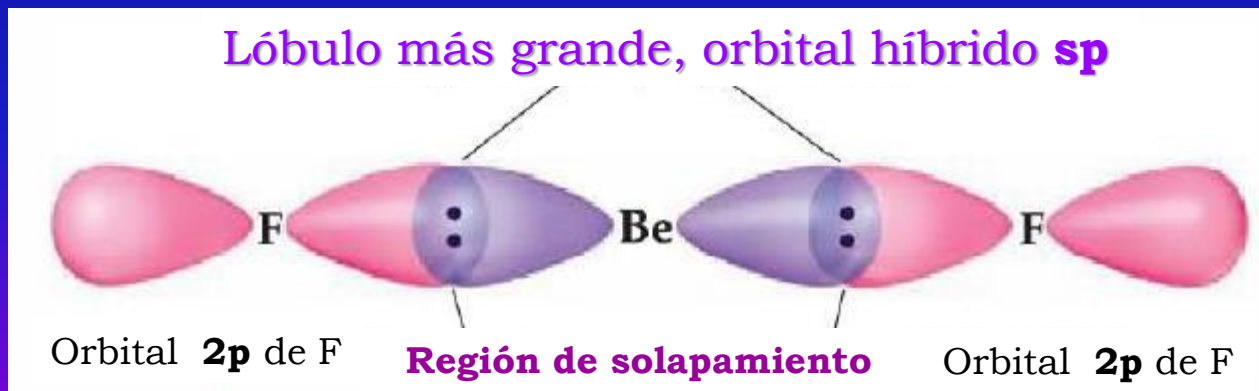
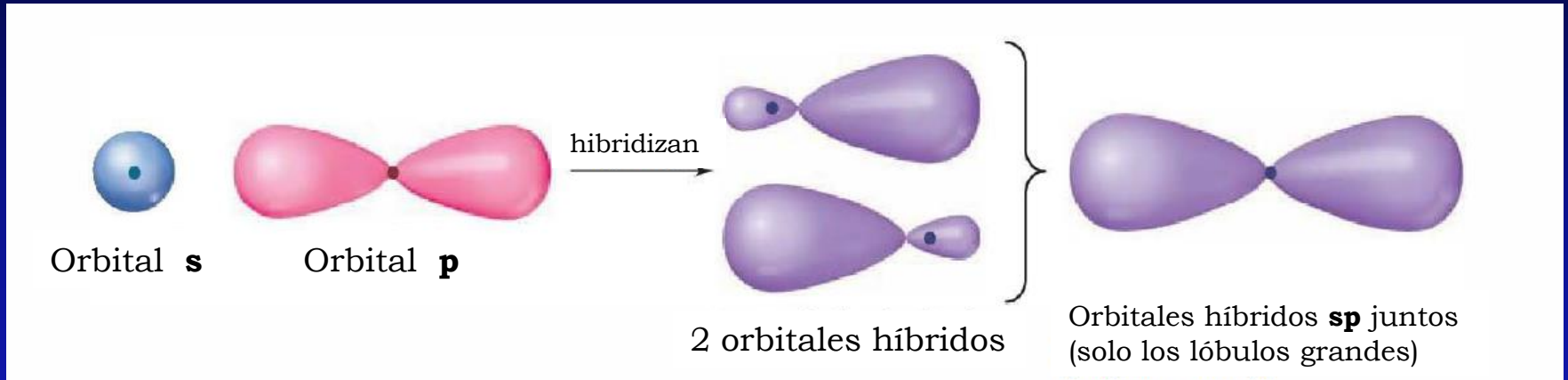
# Hibridación de orbitales

## Orbitales híbridos **sp**

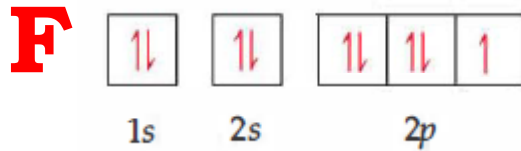
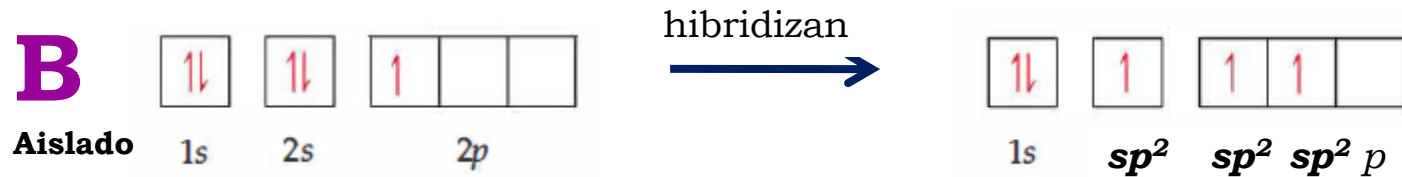
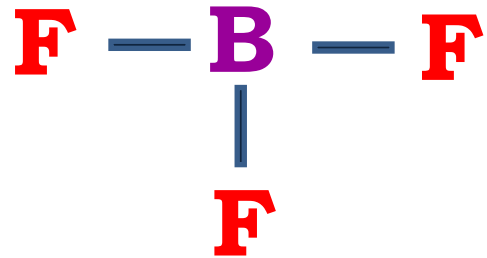


Los orbitales atómicos en un átomo (generalmente el átomo central) se mezclan para formar ORBITALES HIBRIDOS, disponibles para la unión con otros átomos.

# ORBITALES HÍBRIDOS **sp**

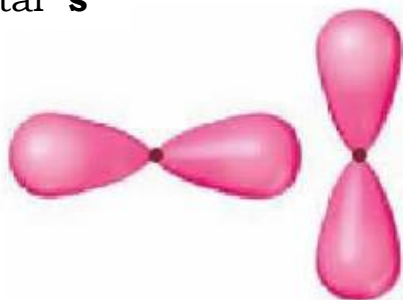


# Orbitales híbridos $sp^2$



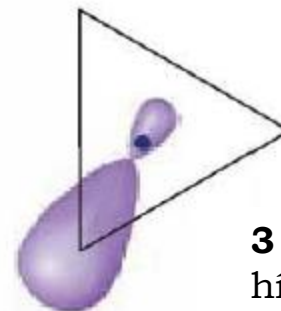
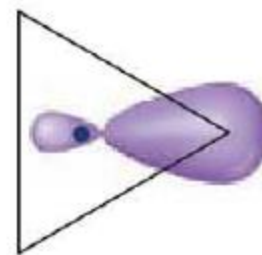
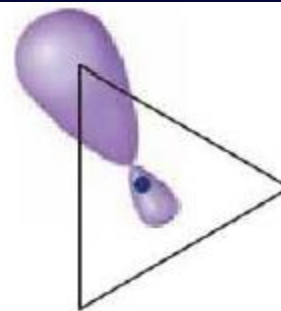
# ORBITALES HÍBRIDOS $sp^2$

1 Orbital **s**

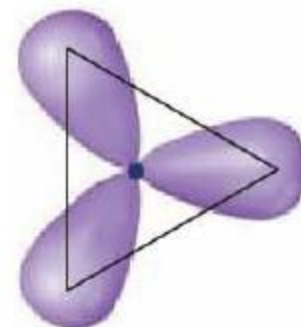


2 orbitales **p**

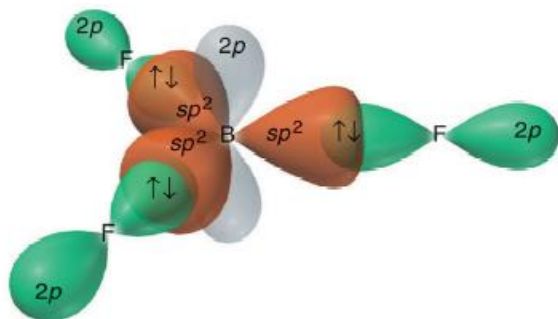
hibridizan



Orbitales híbridos  $sp^2$  juntos  
(solo los lóbulos grandes)

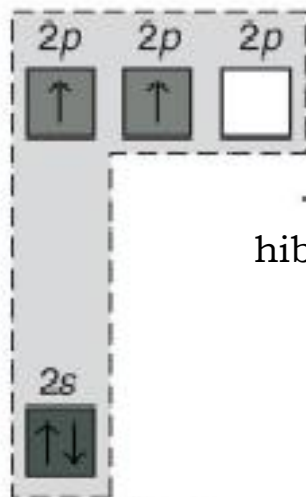


3 orbitales  
híbridos  $sp^2$

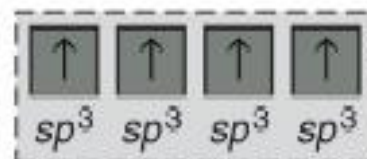


# Orbitales híbridos $sp^3$

**C**  
**Aislado**

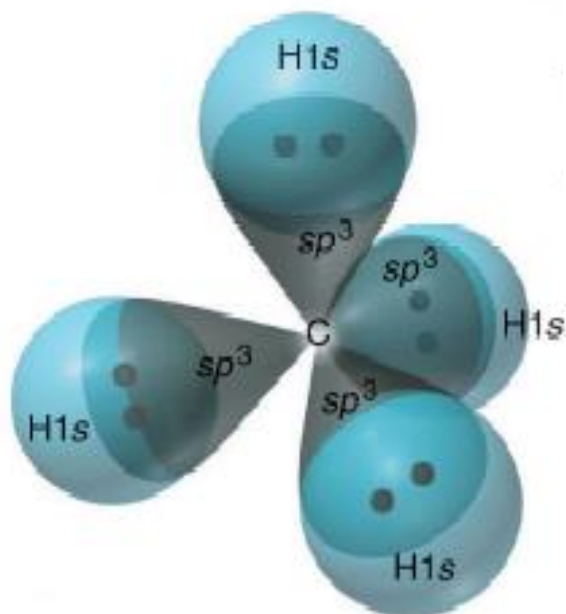


hibridizan



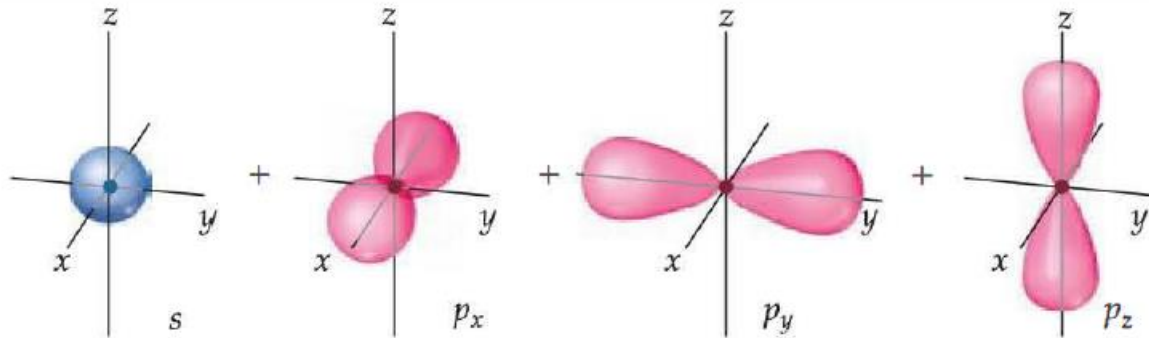
Átomo de C hibridizado

Átomo de C aislado

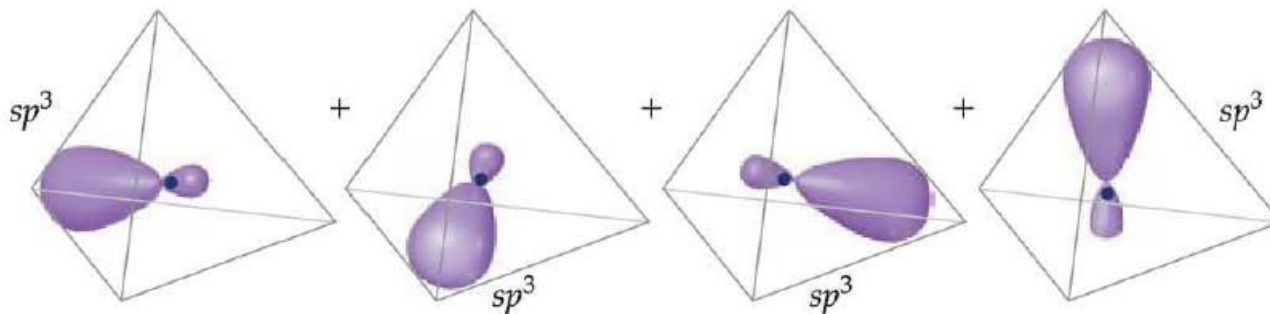




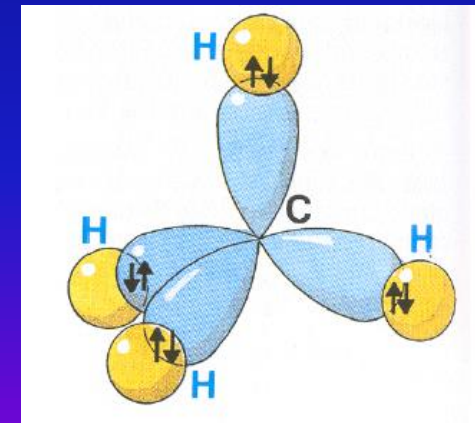
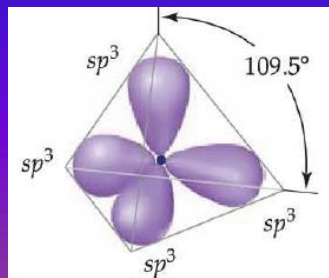
# ORBITALES HÍBRIDOS $sp^3$



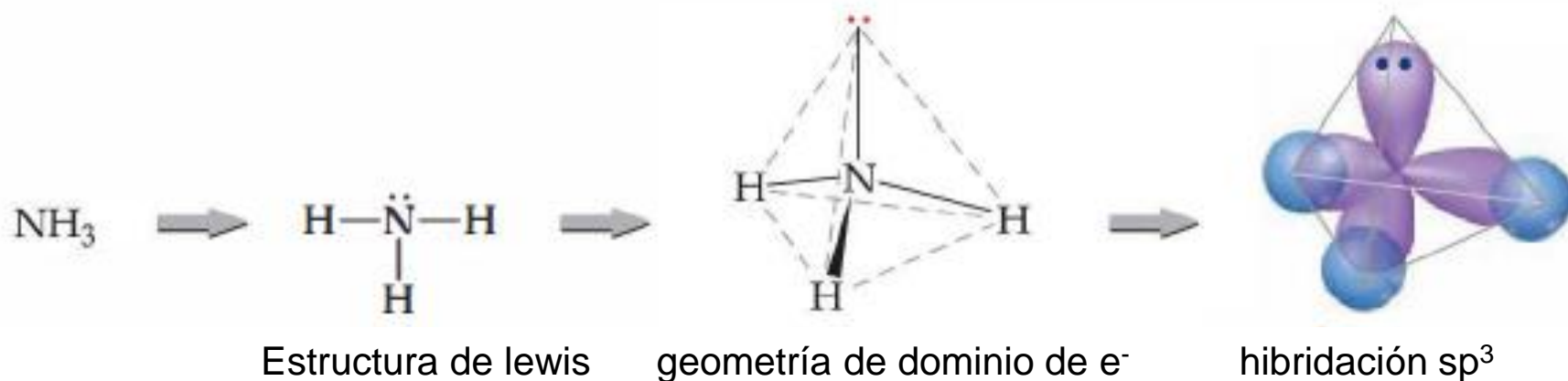
Hibridizan para formar **4** orbitales  $sp^3$



**4** Orbitales híbridos  $sp^3$  juntos (solo los lóbulos grandes)

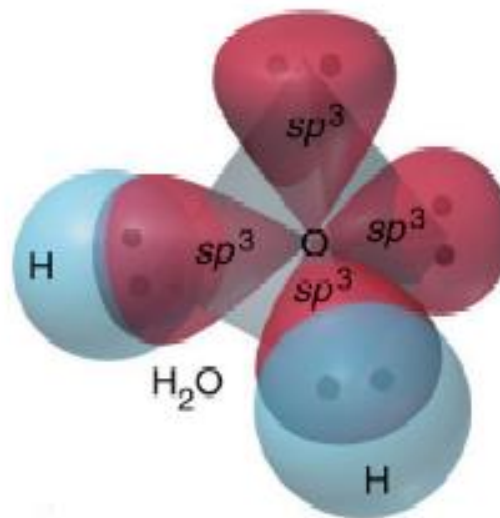
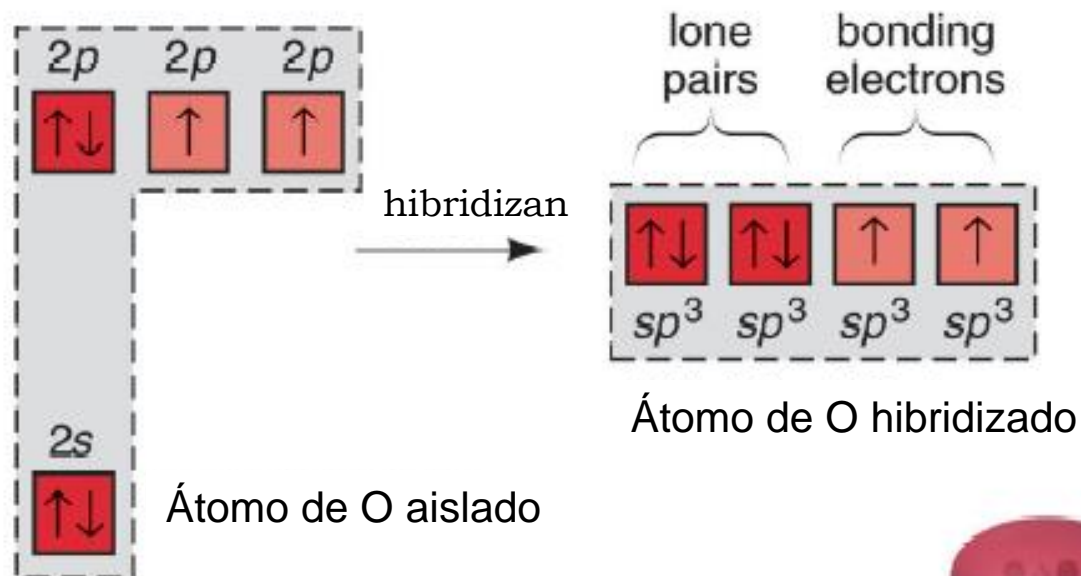


## RESUMEN

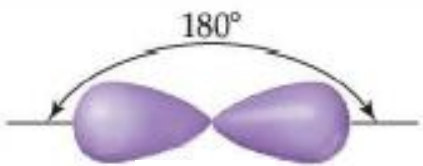
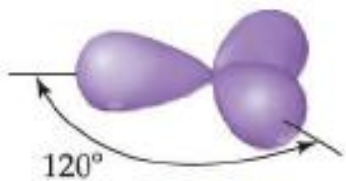
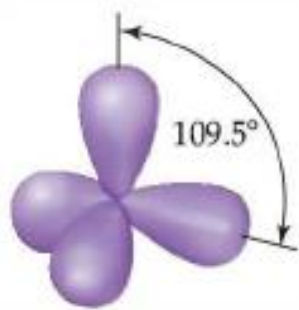


1. Dibujar la estructura de Lewis para la molécula o ión
2. Determinar la geometría de dominio de electrones utilizando el modelo de Repulsión de Pares electrónicos de Capa de Valencia.
3. Especificar los orbitales híbridos necesarios para acomodar los pares de electrones basados en su geometría electrónica

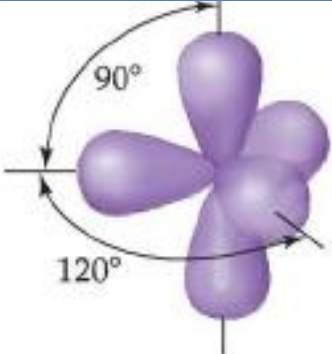
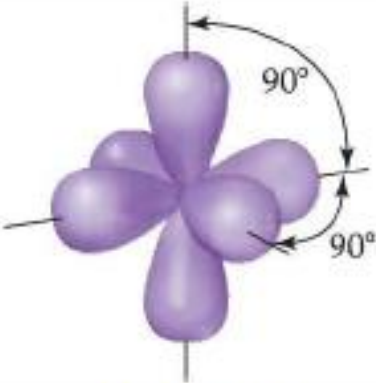
## Otro ejemplo de Orbitales híbridos $sp^3$



## Tipo de hibridación y geometría electrónica

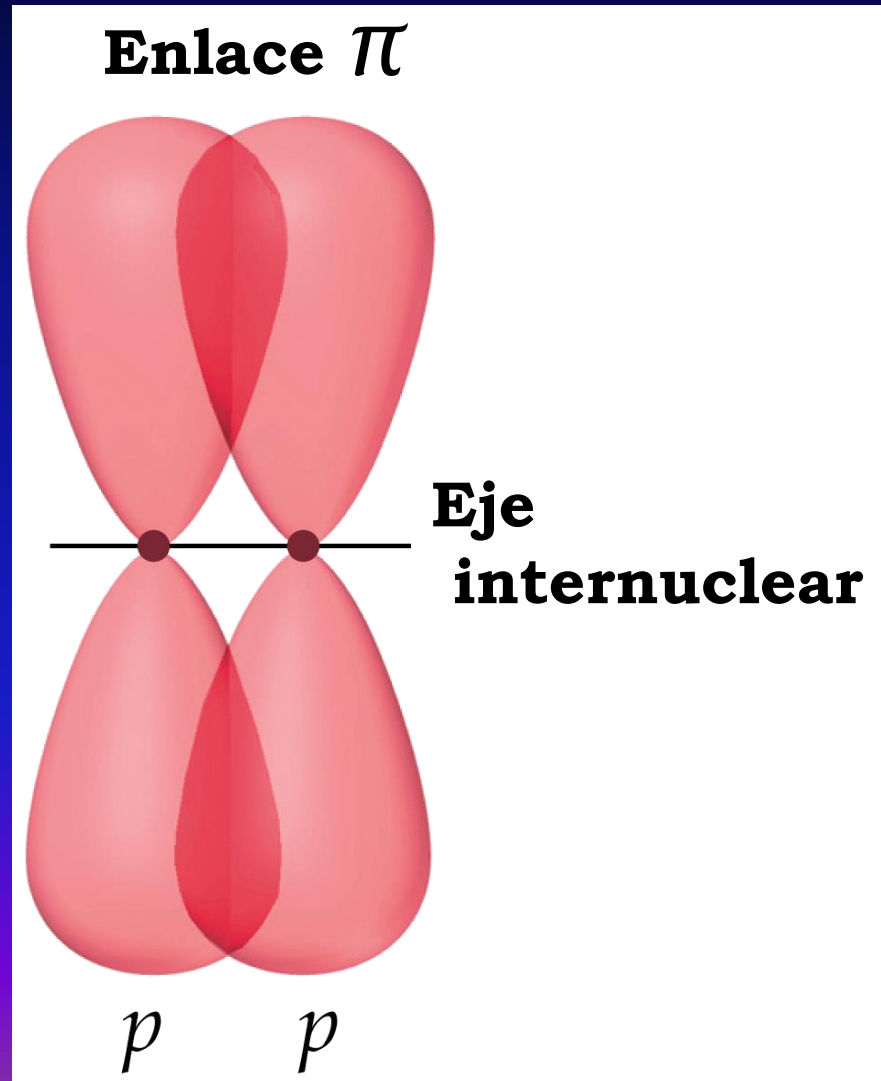
Orbitales atómicos	Orbitales híbridos	Geometría electrónica	
$s, p$	Two $sp$	 <p>lineal</p>	$\text{BeF}_2, \text{HgCl}_2$
$s, p, p$	Three $sp^2$	 <p>Trigonal plana</p>	$\text{BF}_3, \text{SO}_3$
$s, p, p, p$	Four $sp^3$	 <p>Tetraedro</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_4^+$

## Tipo de hibridación y geometría electrónica

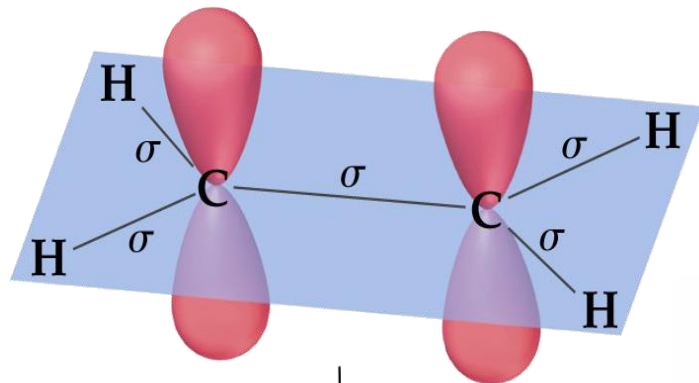
Orbitales atómicos	Orbitales híbridos	Geometría electrónica
$s, p, p, p, d$	Five $sp^3d$	 <p>Trigonal bipyramidal</p> <p><math>PF_5, SF_4, BrF_3</math></p>
$s, p, p, p, d, d$	Six $sp^3d^2$	 <p>Octahedral</p> <p><math>SF_6, ClF_5, XeF_4, PF_6^-</math></p>

# Solapamiento de orbitales $p$

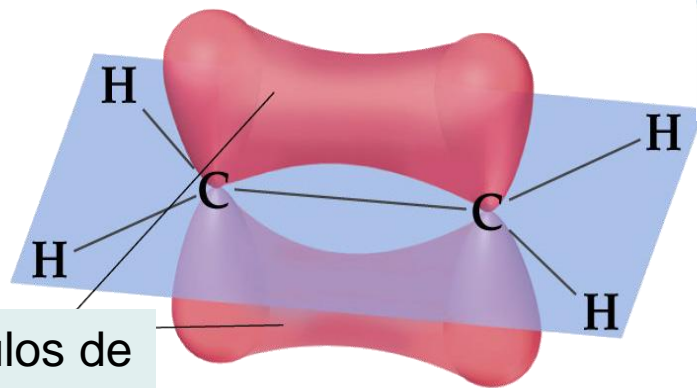
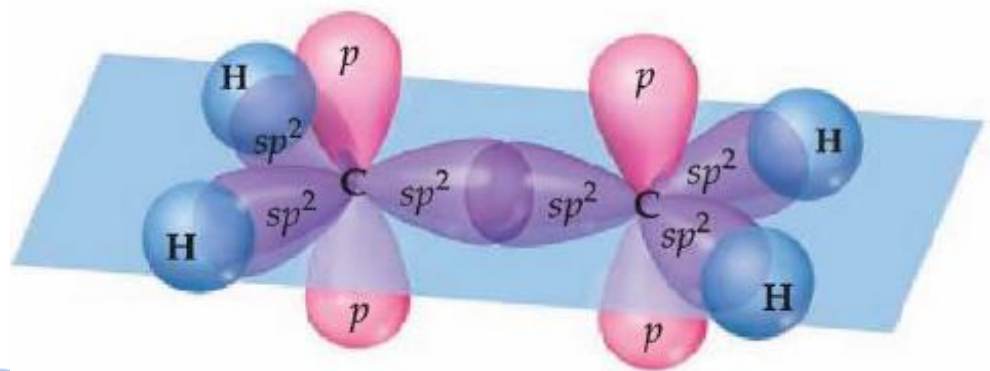
## Uniones Múltiples – enlace $\pi$



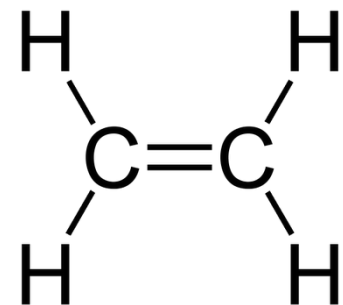
# Unión doble $C=C$



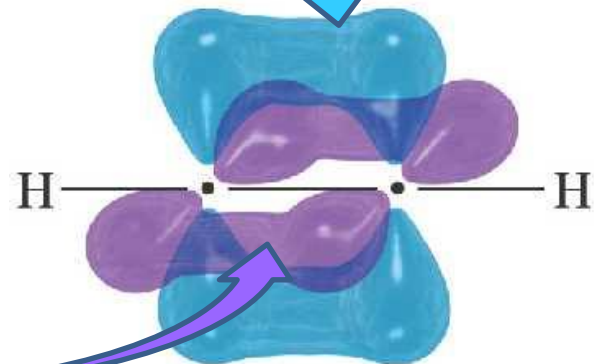
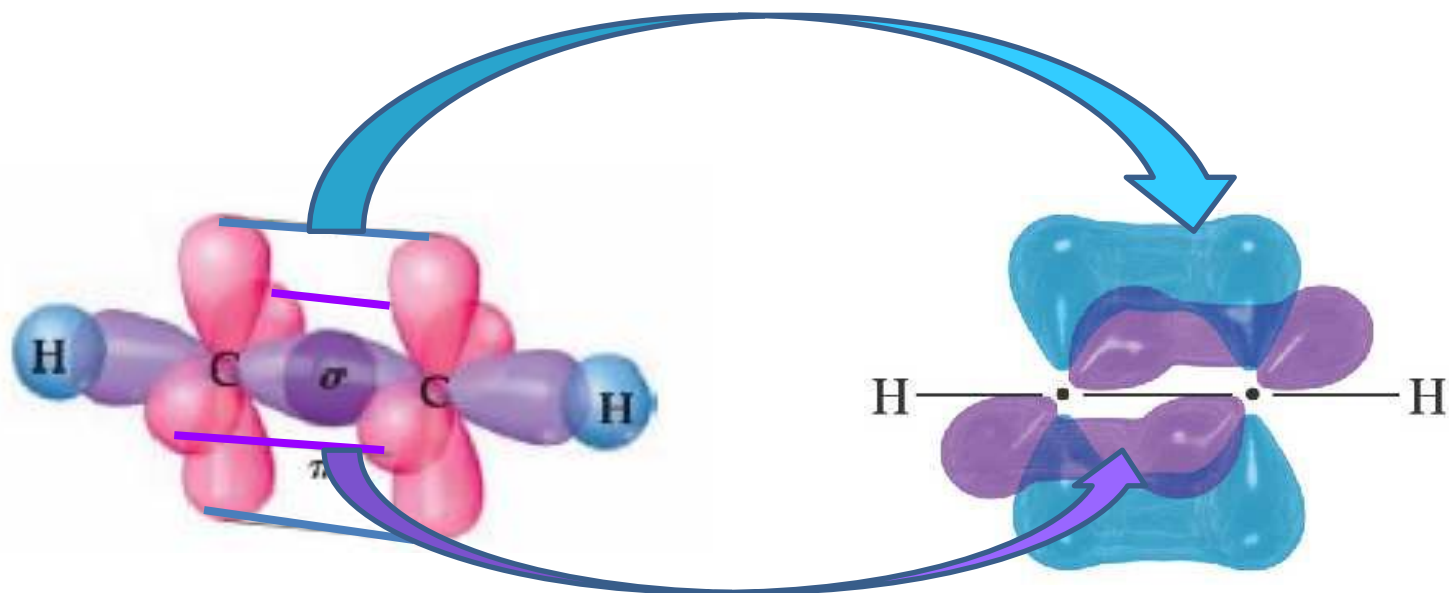
Una unión  $\sigma$



Dos lóbulos de  
una unión  $\pi$



# Unión triple $\text{C}\equiv\text{C}$

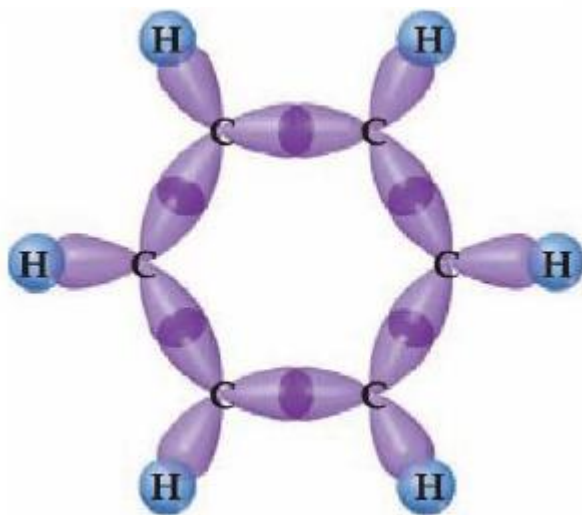




# Electrones deslocalizados

## TEV

Uniones **simples**



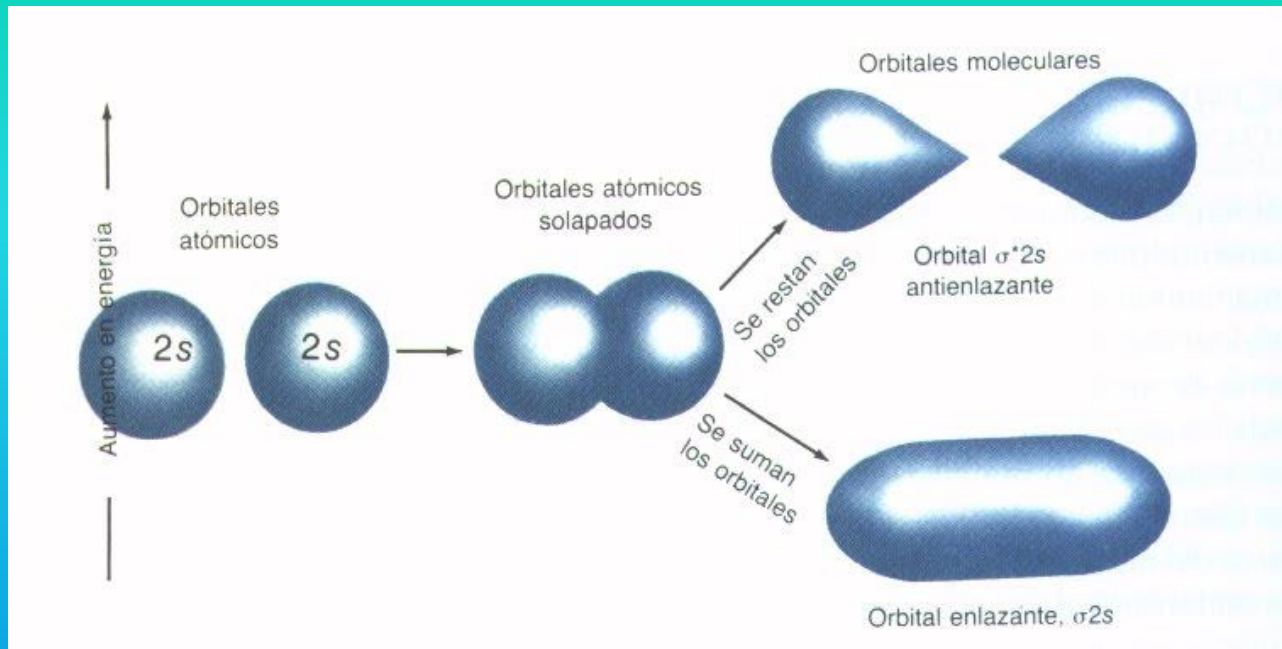
Uniones **dobles**



# Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)

- Cuando dos átomos se aproximan, sus orbitales atómicos se mezclan. Los **electrones** ya no pertenecen a cada átomo sino a la molécula en su conjunto.
- La combinación de dichos orbitales resulta en orbitales moleculares (**OM**), y se formarán tantos OM como orbitales atómicos se combinan.

# Orbitales Moleculares $H_2$

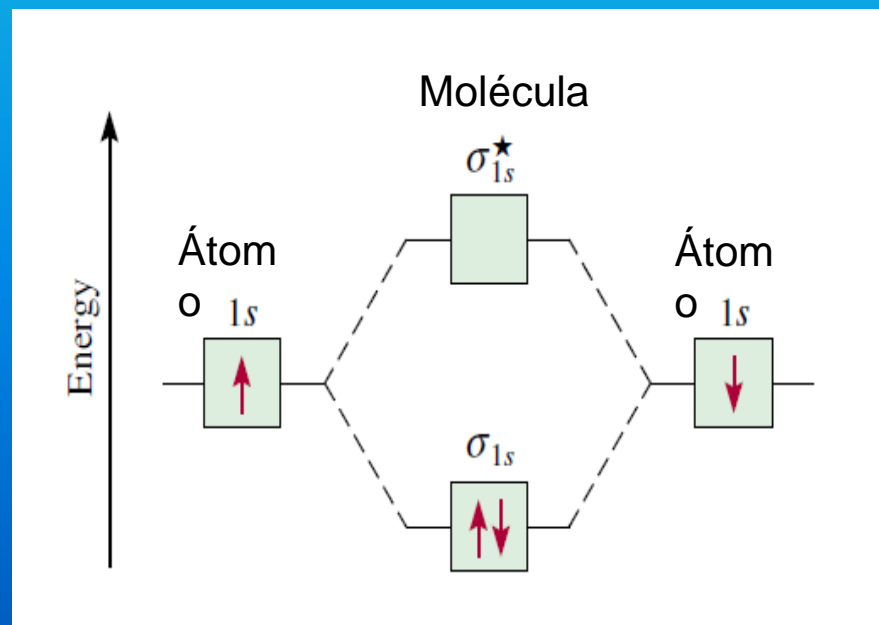


**Interacción destructiva**

**$\sigma^*_{2s}$  (anti-enlazante)**

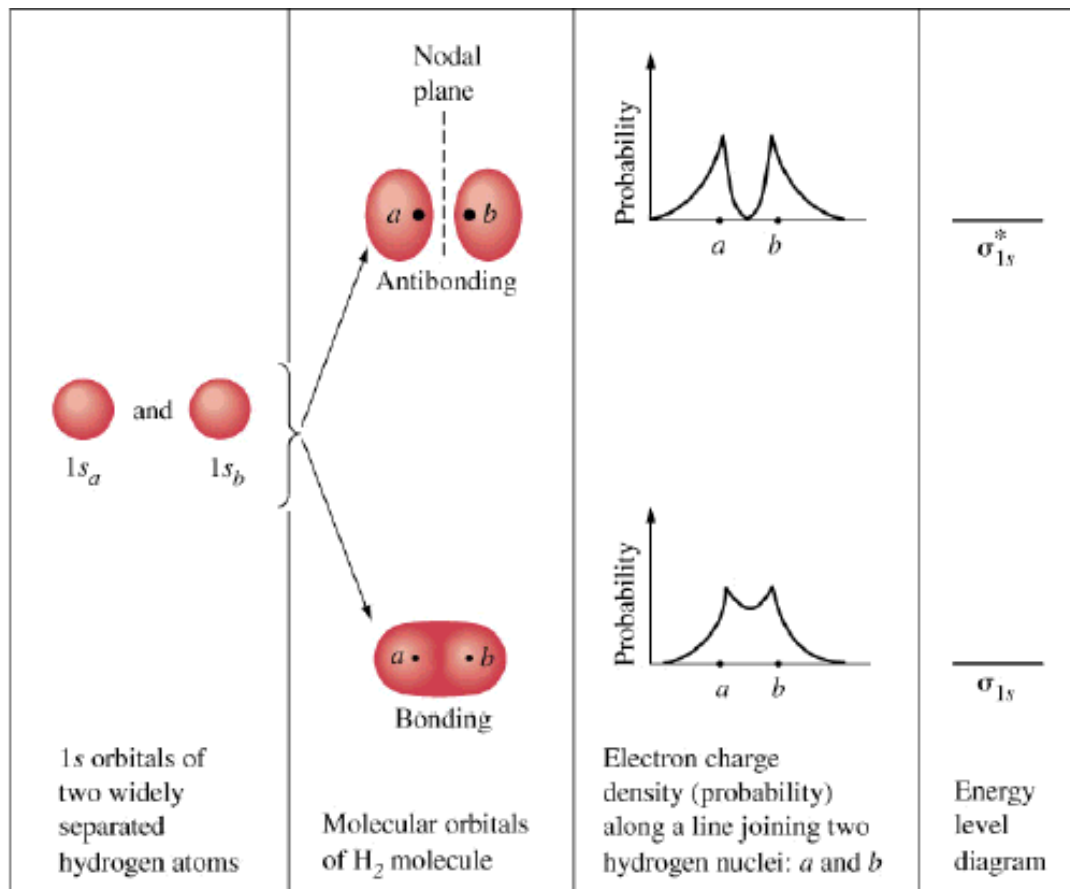
**Interacción constructiva**

**$\sigma_{2s}$  (enlazante)**



# Teoría de Orbitales Moleculares (OM)

- Una forma más general es:



## Orbital antienlazante

La densidad electrónica en la zona internuclear disminuye por lo que los átomos experimentan una repulsión electrostática

## Orbital enlazante

La densidad electrónica en la zona internuclear aumenta; los átomos experimentan una atracción por esa zona

Orbitales  
atómicos

Orbitales  
moleculares

Densidad  
electrónica

# ESTABILIDAD DE ENLACE COVALENTE

La estabilidad de un enlace covalente está relacionada con el **Orden de Unión**, que se define:

$$\text{Orden de Unión} = 1/2 (\text{n}^\circ \text{ de e}^- \text{ enlazantes} - \text{n}^\circ \text{ de e}^- \text{ anti-enlazantes})$$

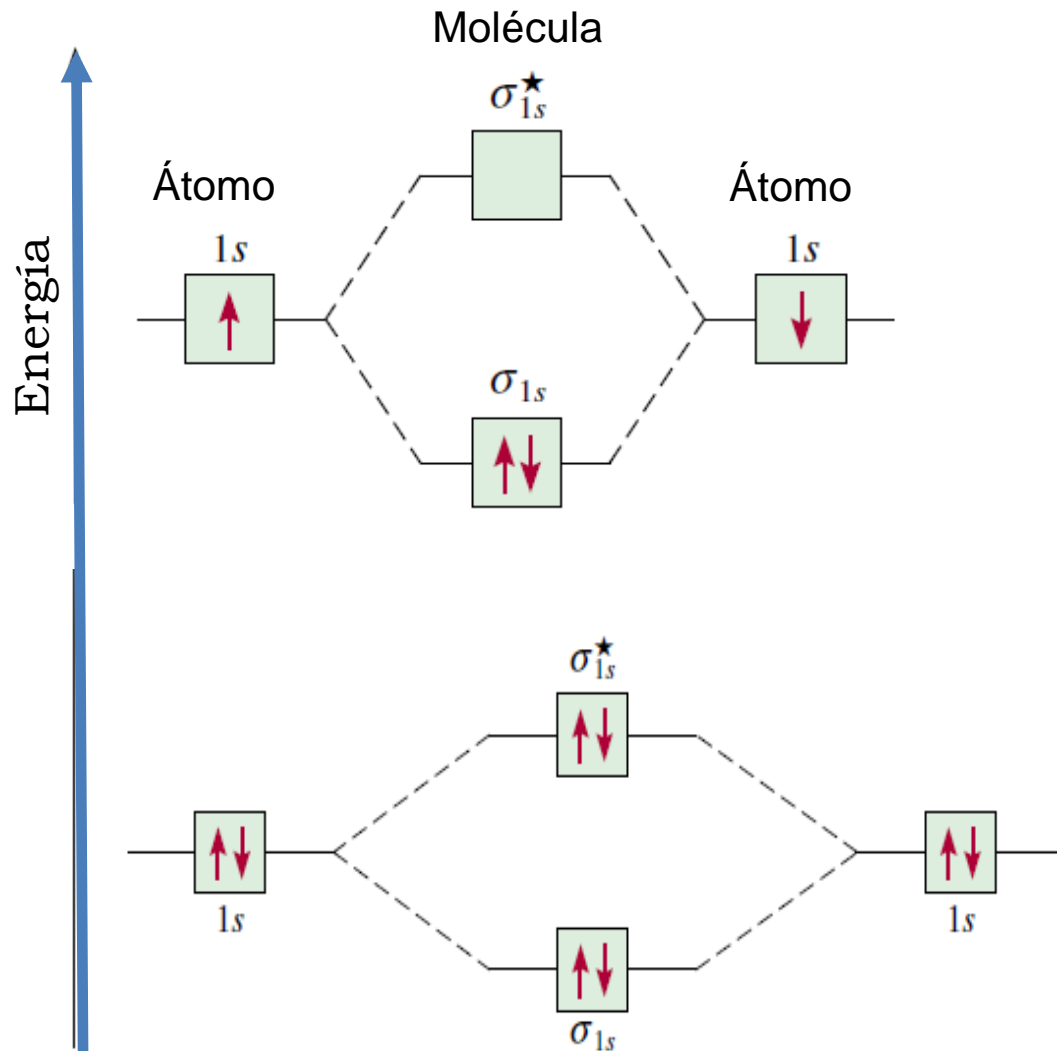
Orden n° **1**  $\longrightarrow$  unión simple

Orden n° **2**  $\longrightarrow$  unión doble

Orden n° **3**  $\longrightarrow$  unión Triple

Orden n° **fraccionario**  $\longrightarrow$  es posible

# Diagrama de Energía de OM de moléculas biatómicas homonucleares del primer período



**H<sub>2</sub>**

**He<sub>2</sub> ?**

## REGLAS PARA COMPRENDER ESTABILIDAD DE LAS UNIONES

- 1) El número de orbitales moleculares formado es igual al número de orbitales atómicos que se combina.
- 2) Los orbitales moleculares enlazantes son más estables que los correspondientes anti-enlazantes.
- 3) Los orbitales moleculares se van llenando desde los de menor energía hacia los de mayor energía. En una molécula estable, el número de electrones en orbitales moleculares enlazantes es siempre mayor que en orbitales anti-enlazantes porque los electrones se ubican primero en los orbitales enlazantes , que son de menor energía.

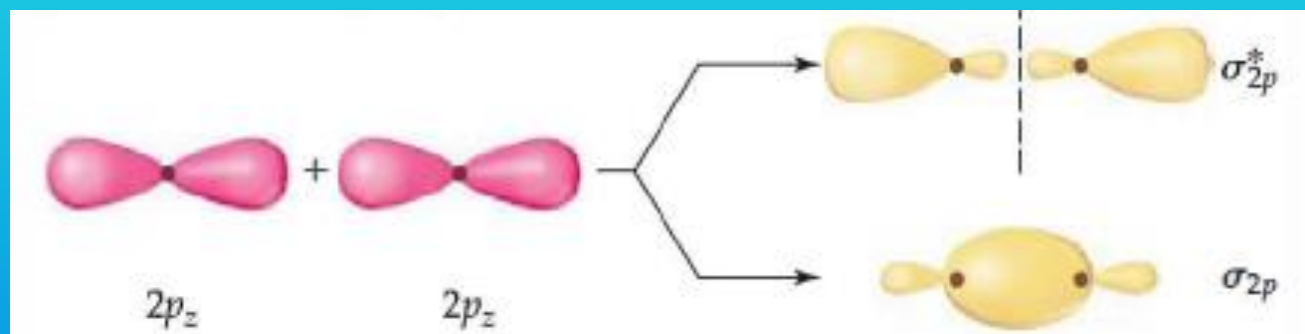
4) Como los orbitales atómicos, cada orbital molecular puede acomodar hasta 2 electrones con espines opuestos de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli.

5) Cuando se agrega electrones a los orbitales moleculares de igual energía, el ordenamiento más estable es el predicho por la regla de Hund (los electrones ingresan a los orbitales con espines paralelos).

6) El número de electrones en un orbital molecular es igual a la suma de los electrones sobre los átomos que se unen.



# OM por Solapamiento de orbitales p



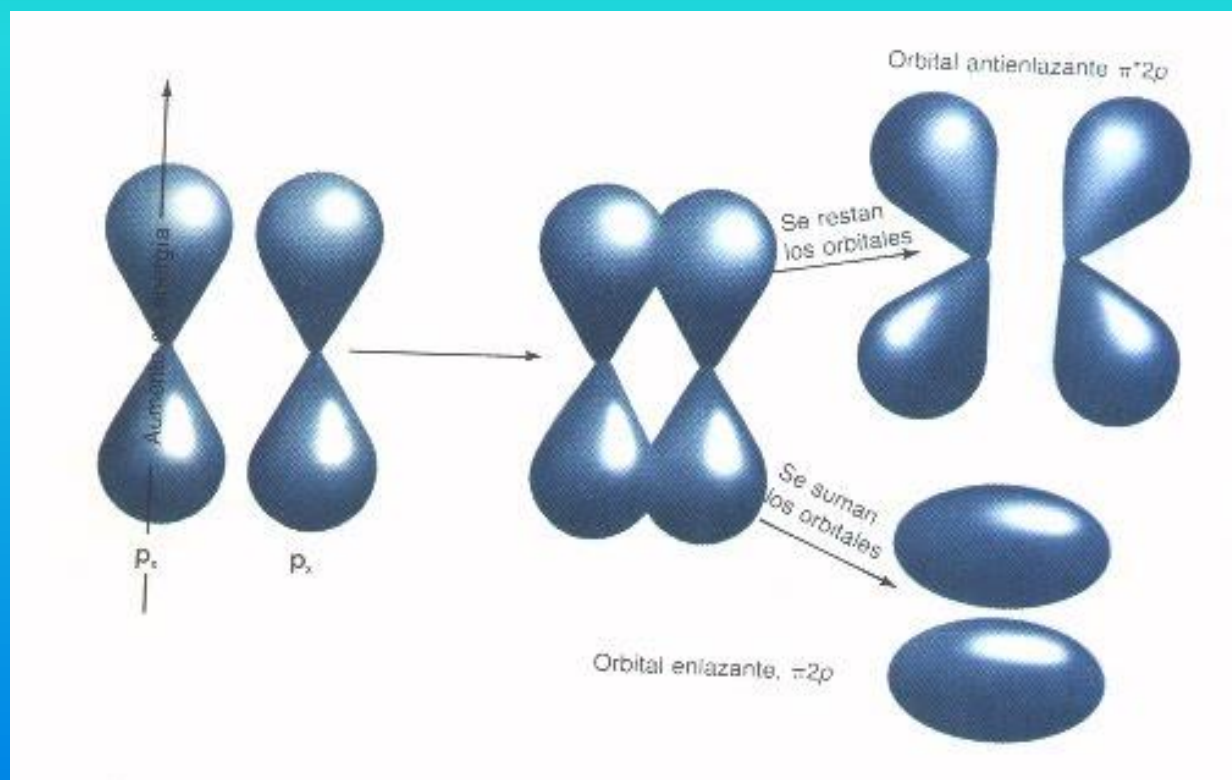
**Interacción  
destructiva**

$\sigma_{2p}^*$  (anti-  
enlazante)

**Interacción  
constructiva**

$\sigma_{2p}$  (enlazante)

# OM por Solapamiento de orbitales p

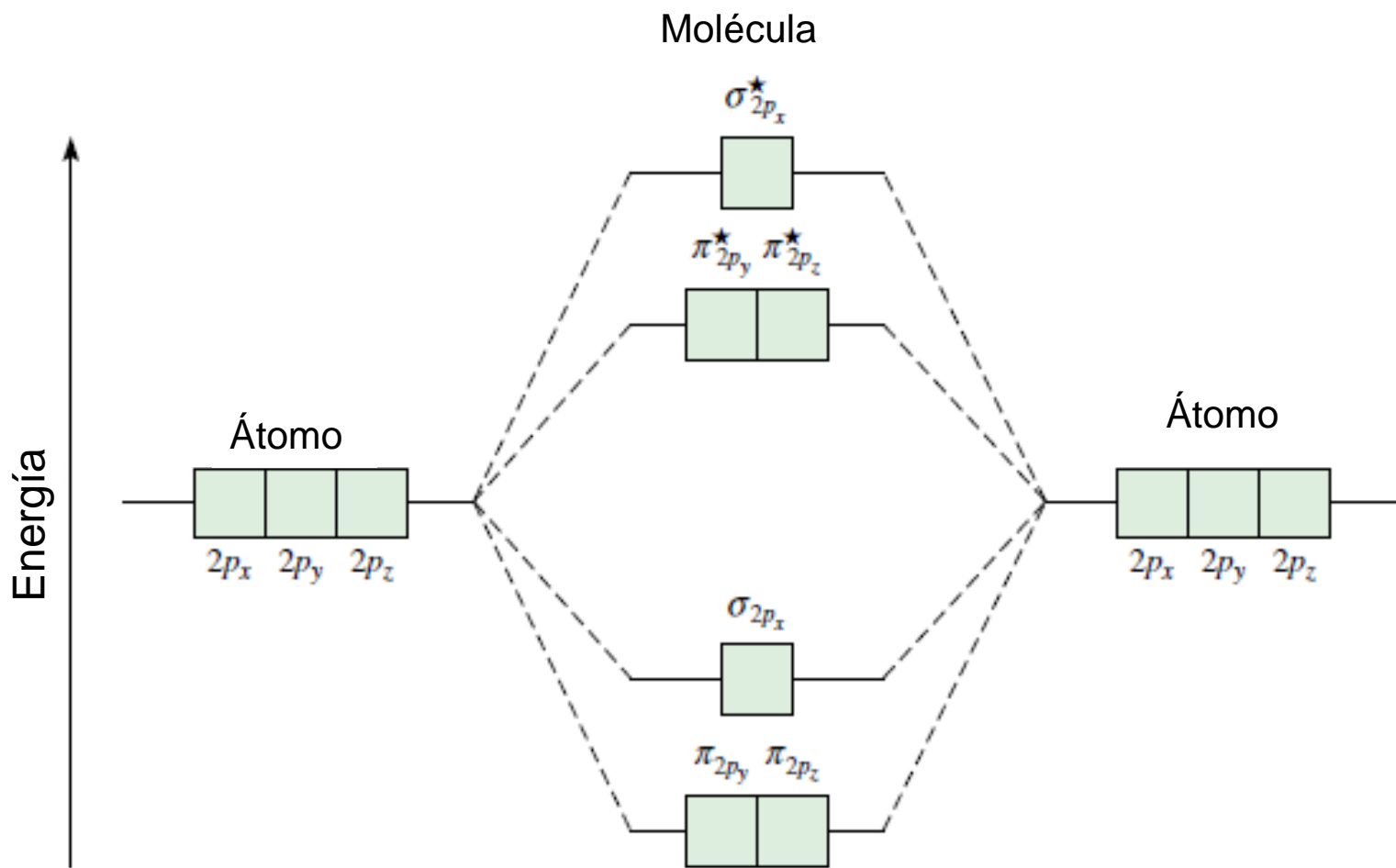


**Interacción destructiva**  
 **$\pi^* p$  (anti-enlazante)**

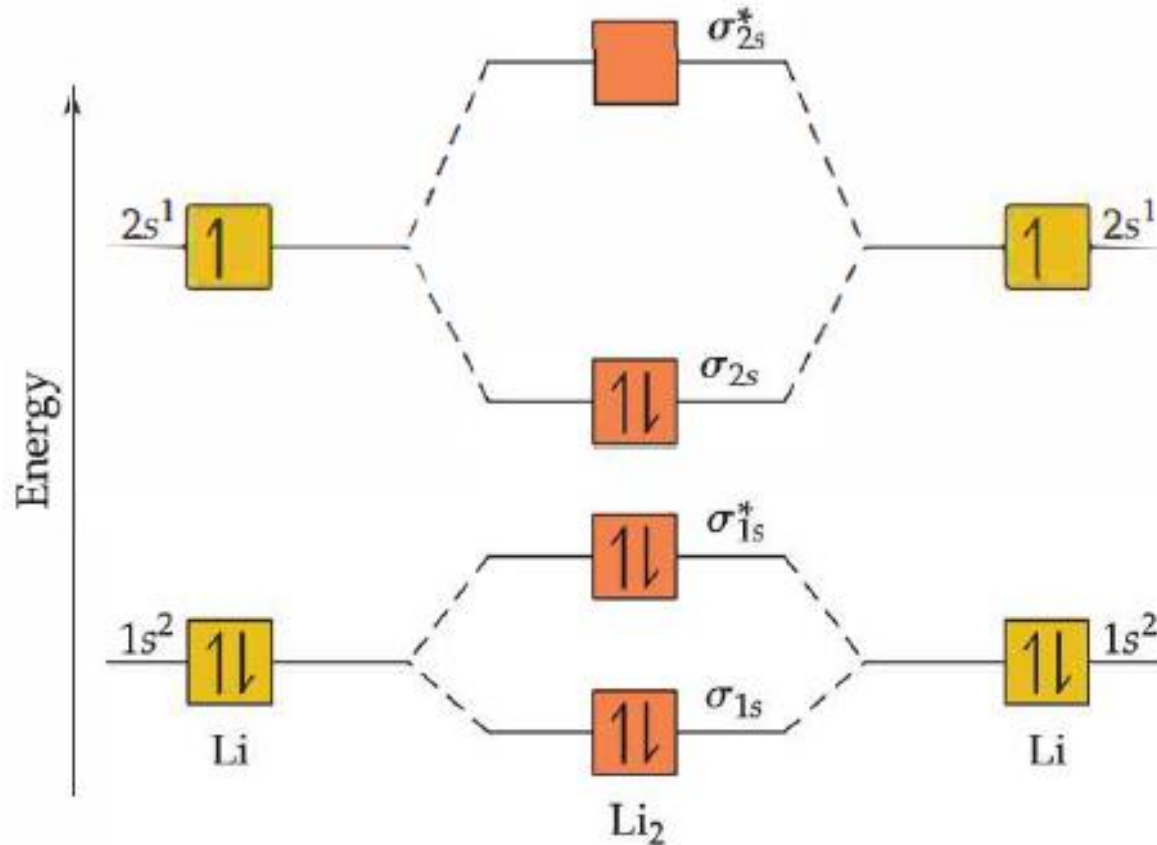
**Interacción constructiva**  
 **$\pi p$  (enlazante)**

# Diagrama de Energía para moléculas biatómicas homonucleares de elementos del segundo período

$\text{Li}_2$ ,  $\text{Be}_2$ ,  $\text{B}_2$ ,  $\text{C}_2$ , y  $\text{N}_2$



## Diagrama de E de OM de la molécula biatómica de **Li**







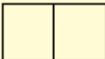

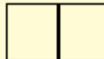

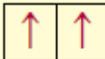
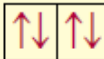





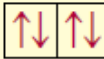
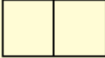
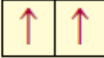


















**Li<sub>2</sub>**

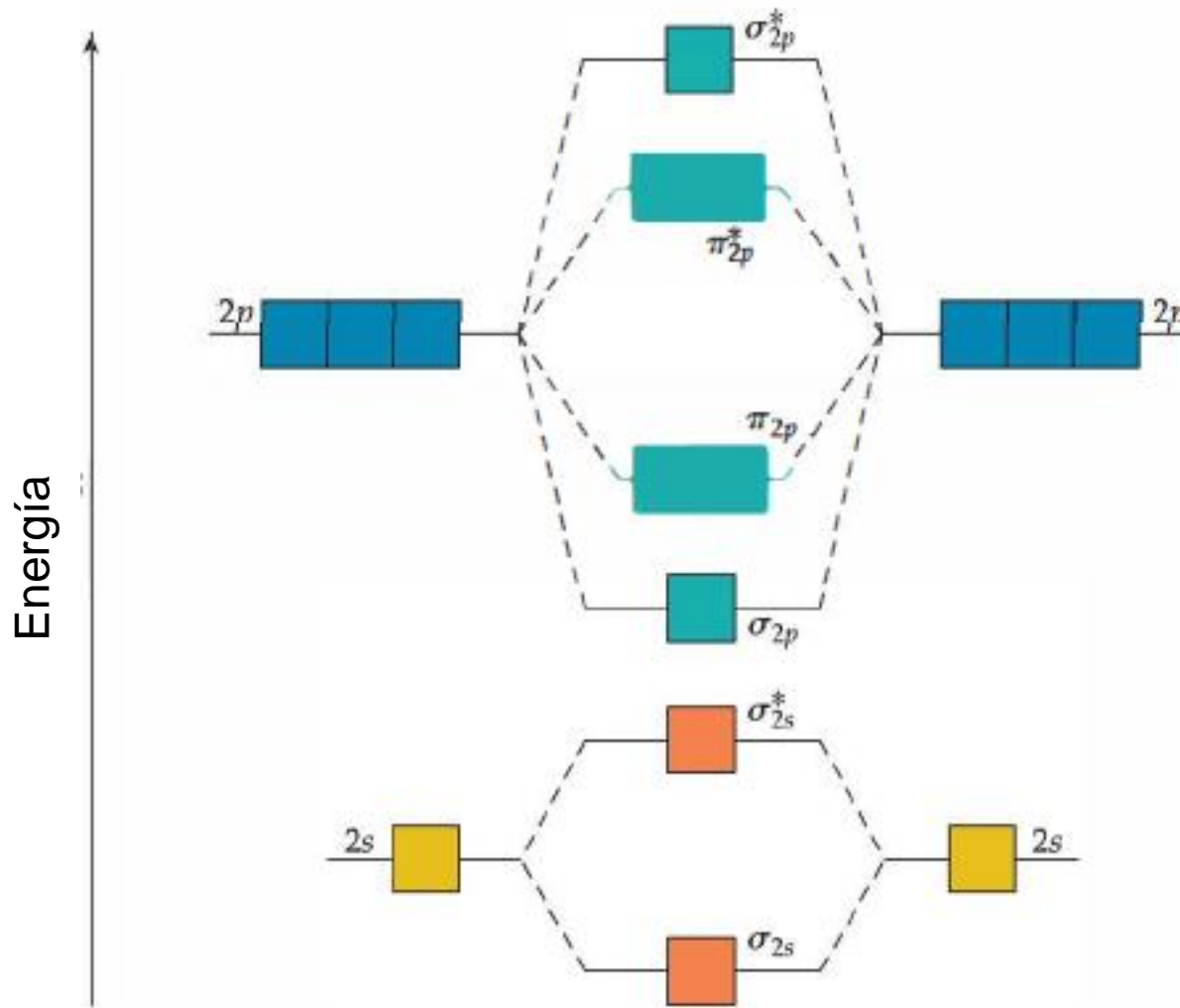
**Orden de Unión =  $1/2 (4 - 2) = 1$**

Los electrones de capas internas generalmente no contribuyen significativamente en la unión átomos de una molécula en formación.

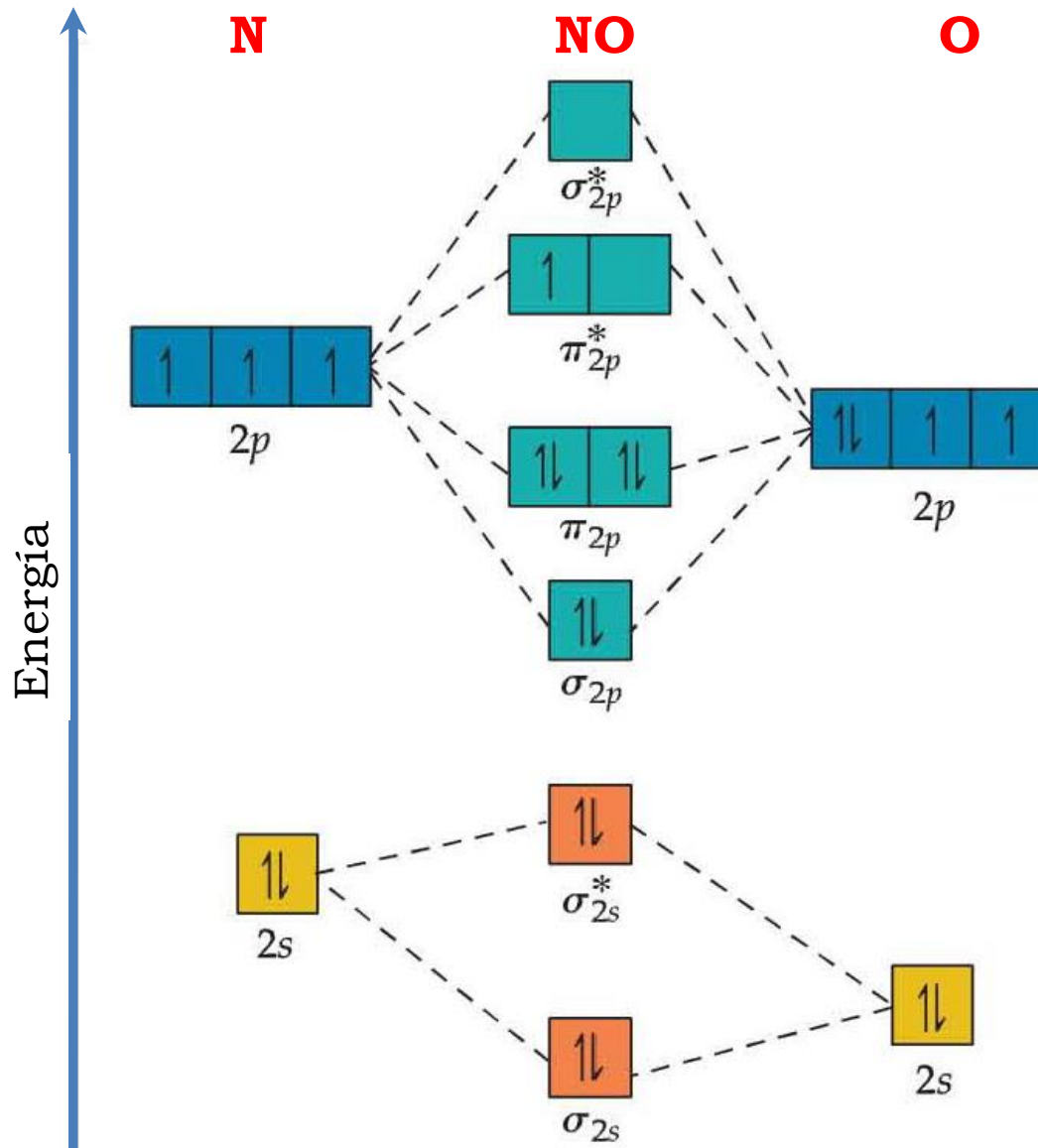
# Configuración electrónica de moléculas biatómicas homonucleares de elementos del segundo período

	Li <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	F <sub>2</sub>	
$\sigma_{2p_x}^*$							$\sigma_{2p_x}^*$
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$							$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$
$\sigma_{2p_x}$							$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$
$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$							$\sigma_{2p_x}$
$\sigma_{2s}^*$							$\sigma_{2s}^*$
$\sigma_{2s}$							$\sigma_{2s}$
Orden de unión	1	1	2	3	2	1	
Long. Unión (pm)	267	159	131	110	121	142	
E de disociación (KJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9	
Propiedades Magnét.	D	P	D	D	P	D	

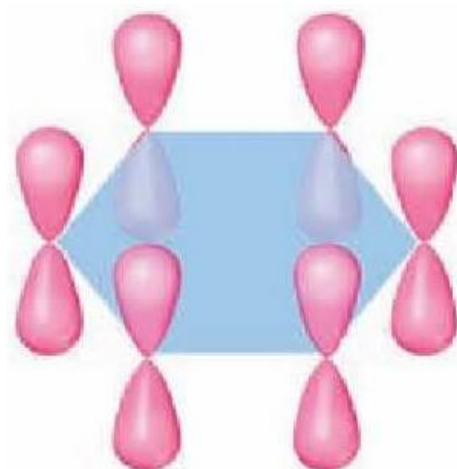
# Diagrama de Energía general para moléculas biatómicas *homonucleares* de $O_2$ y $F_2$



# Diagrama de Energía para moléculas diatómicas heteronucleares de elementos del segundo período



# Electrones deslocalizados OM



Uniones  $\pi$  (enlaces dobles, electrones deslocalizados)

