

Orbitales moleculares II

Tópicos en la descripción de OM

En “Orbitales moleculares I”, se criticó la curiosa la descripción gráfica de los orbitales moleculares (OM) en los textos en Enseñanzas Medias. Al aplicar el método CLOA (combinación lineal de orbitales atómicos), siempre se tomaban los orbitales atómicos hidrogenoides, aunque la molécula de hidrógeno no excitada no forme enlaces con combinaciones lineales superiores al 1s. Este era el primer tópico que surgía en los textos mientras que el segundo era creer que los OM moleculares del mismo tipo tienen la misma forma o son aparentemente iguales.

En este trabajo vamos a comparar los OM F_{2s} , formados por combinaciones lineales de átomos no hidrogenoides comparados con los hidrogenoides (que aparecen en los textos).

La función de onda atómica R_{2s} general y aplicada a un hipotético átomo de hidrógeno con los condicioantes de la carga nuclear efectiva $Z'=1$, y en unidades bohr $a_0=1$ es:

$$\psi_{2s} = \left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \right) * \left(\frac{Z'}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} * \left(2 - \frac{Z' r}{a_0} \right) * e^{-\frac{Z' r}{2a_0}} = 0,1 * \left(2 - \sqrt{((x-x_1)^2 + (y*y))} \right) * e^{-\left(\frac{\sqrt{((x-x_1)^2 + (y*y))}}{2} \right)}$$

Por lo que aplicándolo a dos átomos de hidrógeno cuyas funciones se sumarían o restarían y tomando una distancia de 1,5 radios de bohr, sería:

$$\psi_{2s} = 0,1 * \left(2 - \sqrt{((x-0,75)^2 + (y*y))} \right) * e^{-\left(\frac{\sqrt{((x-0,75)^2 + (y*y))}}{2} \right)}$$

y

$$\psi_{2s} = 0,1 * \left(2 - \sqrt{((x+0,75)^2 + (y*y))} \right) * e^{-\left(\frac{\sqrt{((x+0,75)^2 + (y*y))}}{2} \right)}$$

La combinación lineal produciría los OM cuyas gráficas y curvas de nivel serían los dados en las fig 1 y 2, en combinaciones enlazantes y 3 y 4, en antienlazantes.

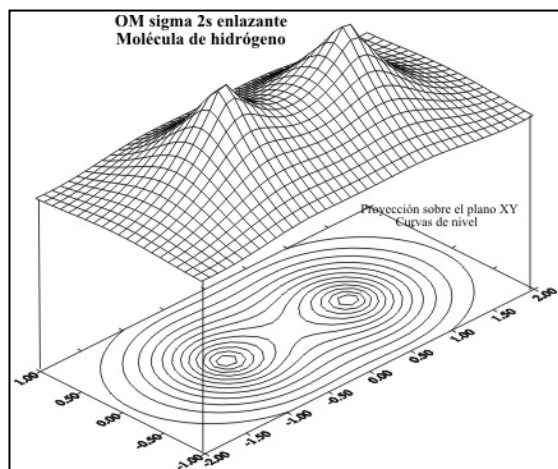


Fig.1

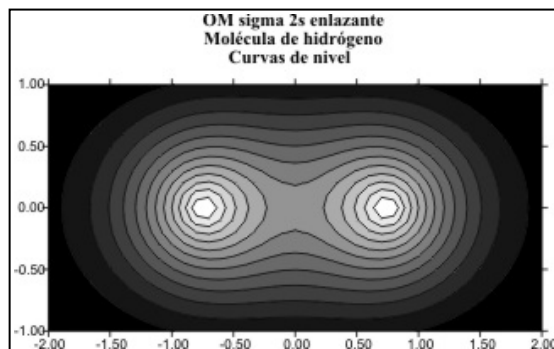


Fig.2

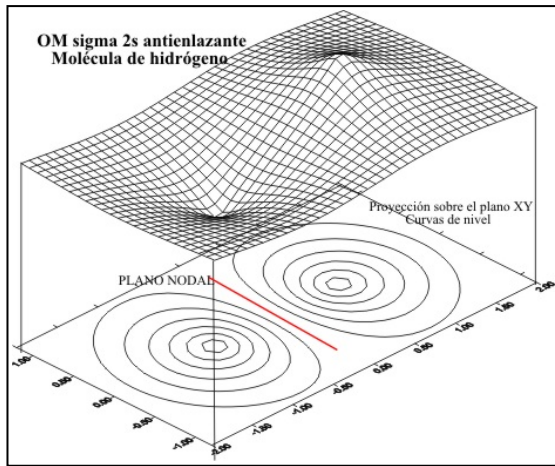


Fig.3

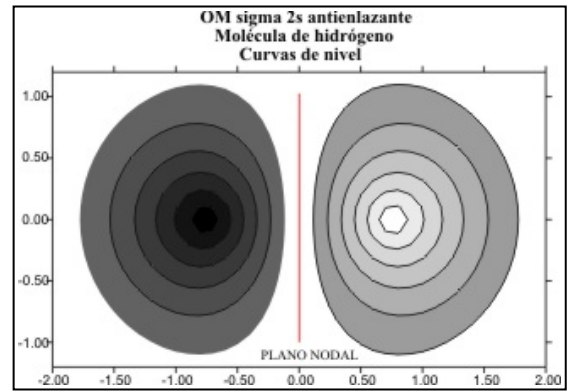


Fig.4

Sin embargo esta misma combinación lineal, si cambiamos las condiciones de contorno, extendiéndolas hasta los 10 bohr, como se hará con la mayoría de los elementos del segundo período, producirían unos gráficos muy diferentes como se vé en las fig 5 y 6.

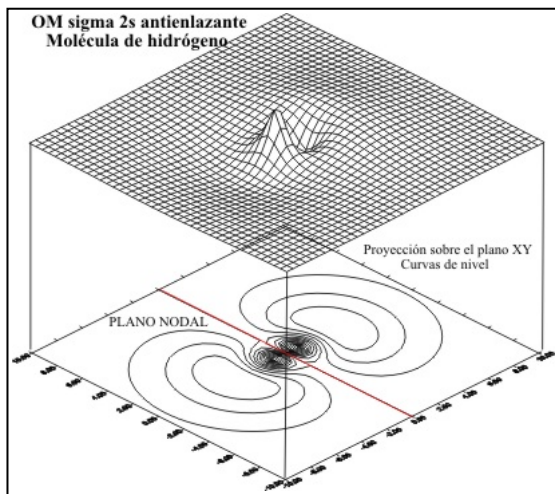


Fig.5

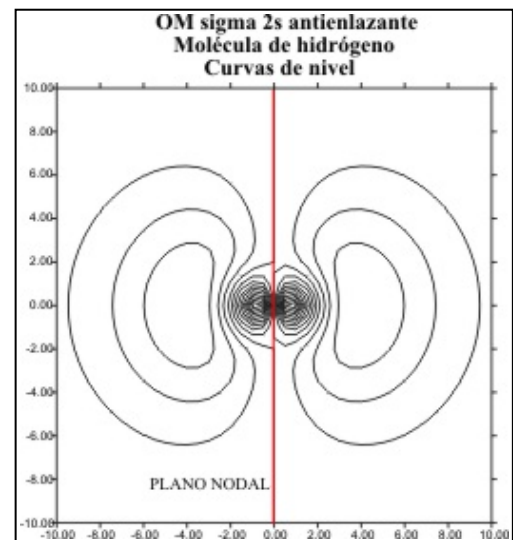


Fig.6

Al aplicarlo a sucesivos elementos del segundo período la expresión $\psi_{2s} = \left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}}\right) * \left(\frac{Z'}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} * \left(2 - \frac{Z'r}{a_0}\right) * e^{-\frac{Z'r}{2a_0}}$ vendría modificada no sólo por los valores de r (la distancia de separación aumenta) sino sobre todo por los de de Z' (carga nuclear efectiva), con lo que la combinación lineal para el Li₂, de orbitales 2s, proporciona una función **N**2s:

$$0,56 * 1,48 \left(e^{-1,3 * (\sqrt{(x-2,53)^2 + y^2})} \pm e^{-1,3 * (\sqrt{(x+2,53)^2 + y^2})} \right)$$

que representada nos da los gráficos de las figuras 7 y 8

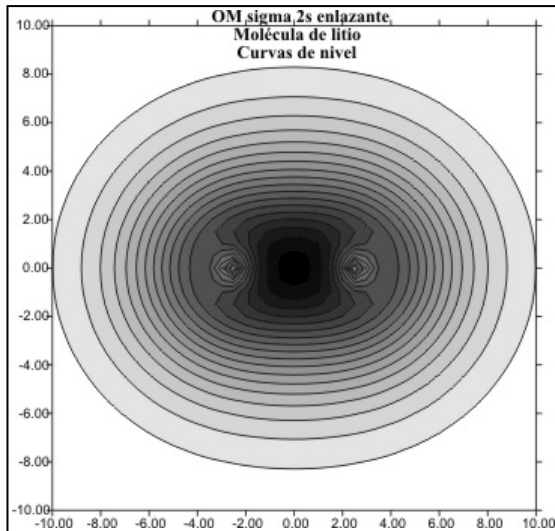


Fig.7

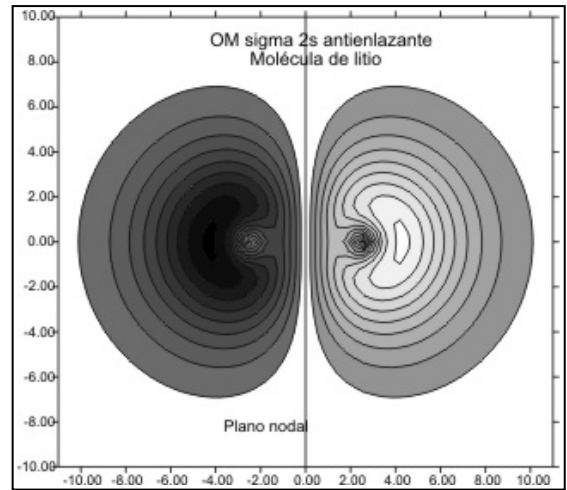


Fig.8

Si se eleva al cuadrado se obtendría la densidad de probabilidad, que para el Li_2 antienlazante sería

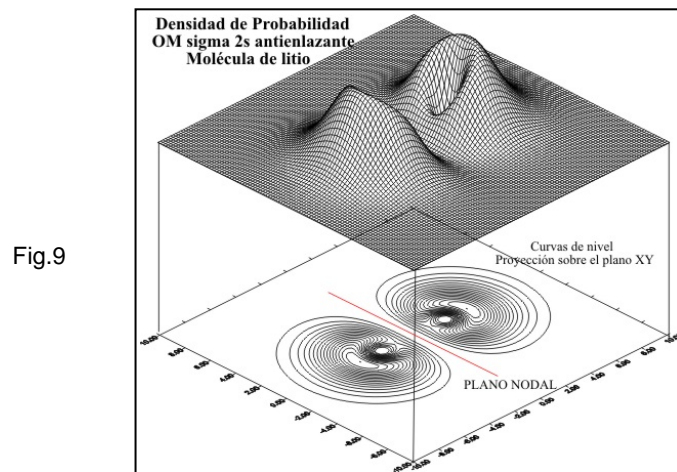


Fig.9

Como se observa los límites de la densidad de probabilidad son inferiores a los del OM

Al trasladarnos hacia la derecha a través del sistema periódico a otros elementos del segundo período, desde el litio hasta los correspondiente del oxígeno (fig 10 y 11) y del flúor (fig 12 y 13) percibiremos en los gráficos de las curvas de nivel, la disminución del tamaño del OM $\mathbf{F}2s$. Esta disminución, va de unos límites de " 10 bohr en el $\mathbf{F}2s$ del Li_2 hasta los " 3 bohr para el correspondiente del F_2 .

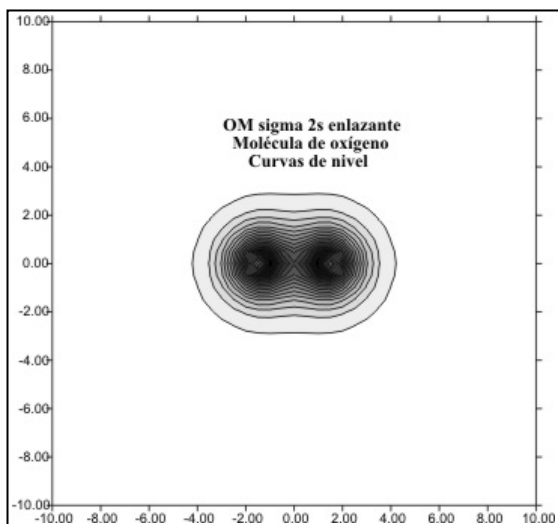


Fig.10

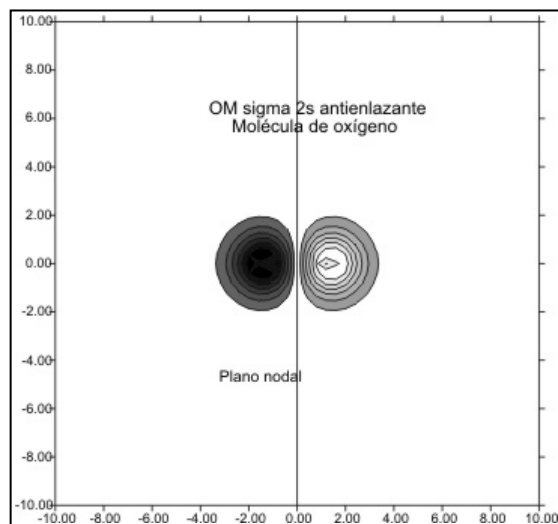


Fig.11

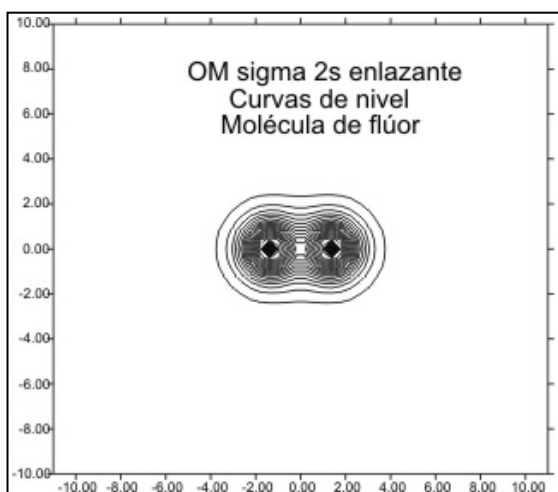


Fig.12

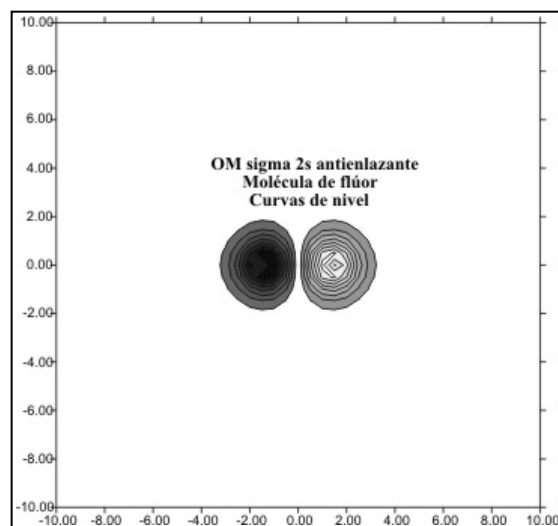


Fig.13

Como es lógico esta disminución del tamaño todavía es mas acusada en las curvas de densidad de probabilidad, para OM F_{2s} del mismo tipo, como las de la hipotética molécula de carbono (C_2), y la de O_2 (fig 14 y 15)

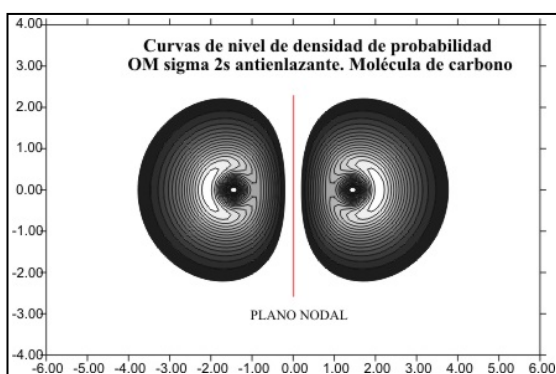


Fig.14

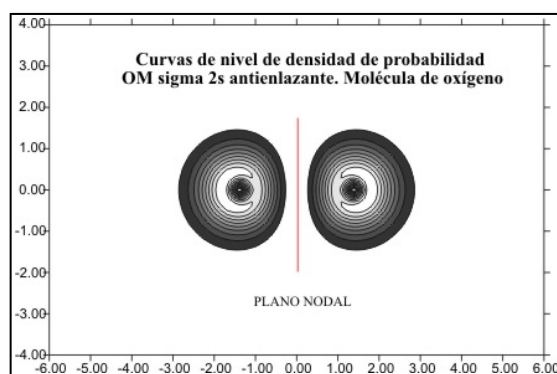


Fig.15