

Orbitales moleculares IV

Tópicos en los orbitales moleculares pi

Los textos siempre hacen referencia a funciones hidrogenoides que corresponde a la combinación lineal de la función $2p_y$ o $2p_z$. Tomemos el $2p_y$:

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

Aplicada al hidrógeno Z' carga nuclear efectiva =1, $a_0=1$, como en los casos anteriores, tomará la expresión anterior.

La CLOA proporciona estas dos funciones

$$\phi = 0,1 \left[y * e^{-\frac{\sqrt{(x-0,75)^2 + y^2}}{2}} \pm y * e^{-\frac{\sqrt{(x+0,75)^2 + y^2}}{2}} \right]$$

Representadas con un programa de gráficos superficiales nos da la combinación enlazante (fig.1) y la antienlazante (fig.2). Se aprecian perfectamente en los dibujos los planos nodales procedentes de los OA p_y y los planos nodales generados por la combinación lineal antienlazante

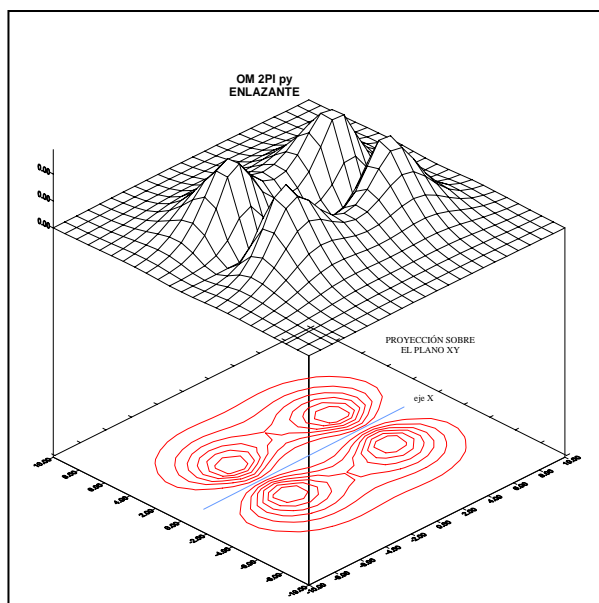


Fig.1

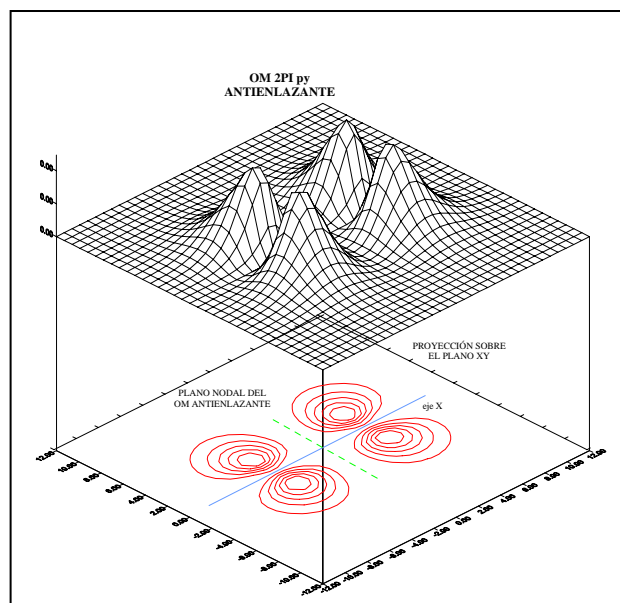


Fig.2

Si ahora aplicamos a los OM de otros átomos del segundo período, por ejemplo, para el carbono, la función OM tomará, al realizar la combinación lineal, teniendo en cuenta que $Z'=3,25$, y la distancia media interatómica es 2,92 bohr, la siguiente expresión:

$$\phi = 1,9 \left[y * e^{-\frac{3,25 * \sqrt{(x-1,46)^2 + y^2}}{2}} \pm y * e^{-\frac{3,25 * \sqrt{(x+1,46)^2 + y^2}}{2}} \right]$$

Que al representarse, da lugar a las gráficas presentadas en Fig.3, 4, 5 y 6

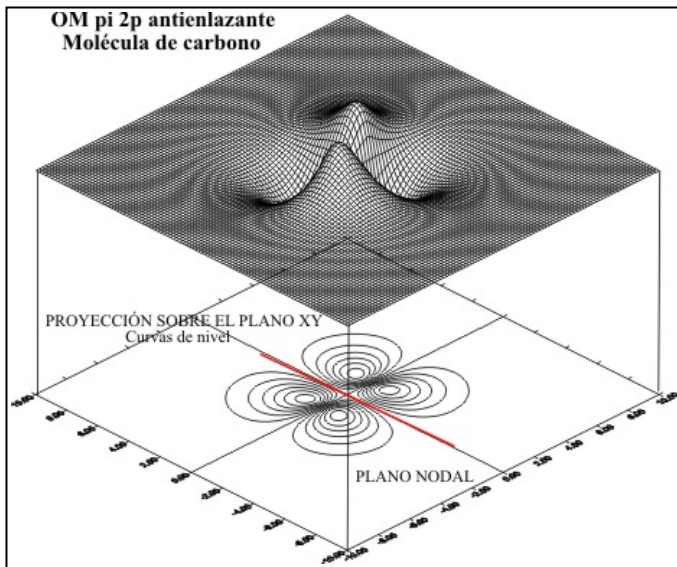


Fig.3

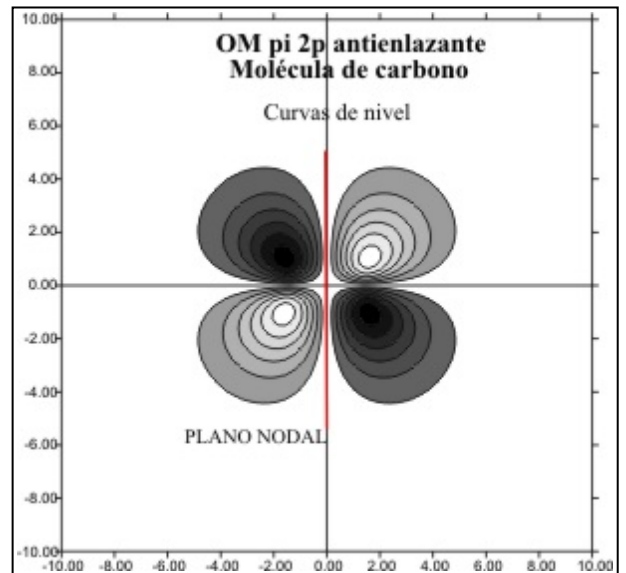


Fig.4

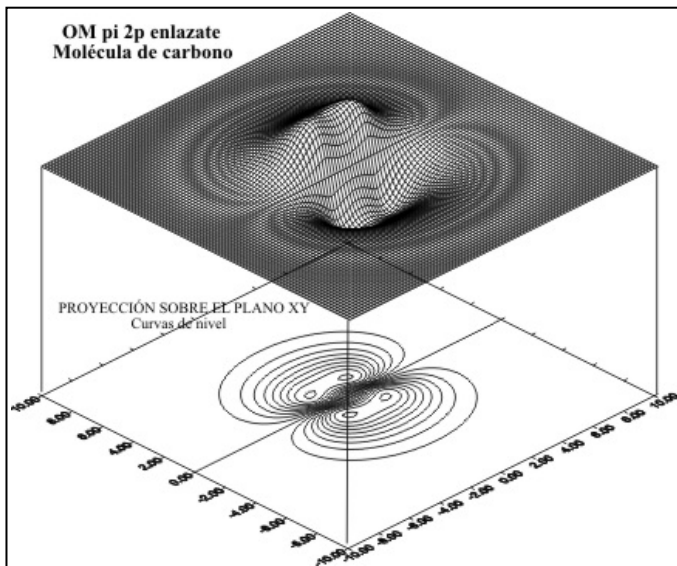


Fig.5

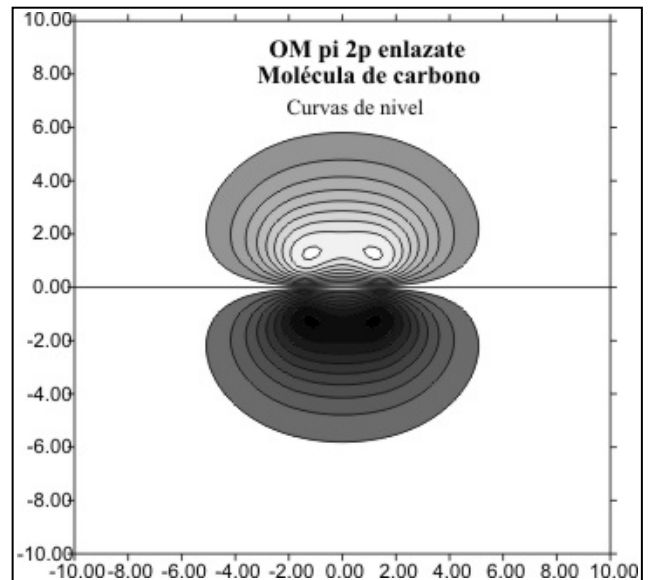


Fig.6

Si queremos comparar estos OM, con los del mismo tipo para el Si_2 , especie molecular del “elemento hermano” en el tercer periodo, se deberá emplear la función:

$$\psi_{3py} = \left(\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \right) * \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) * y * e^{-\frac{Zr}{3a_0}} = 0.01 * \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} * \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) * y * e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Al hacer la combinación lineal, teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, los OM antienlazantes con sus curvas de nivel y enlazantes con las suyas vendrán representadas en las figuras 7, 8, 9 y 10.

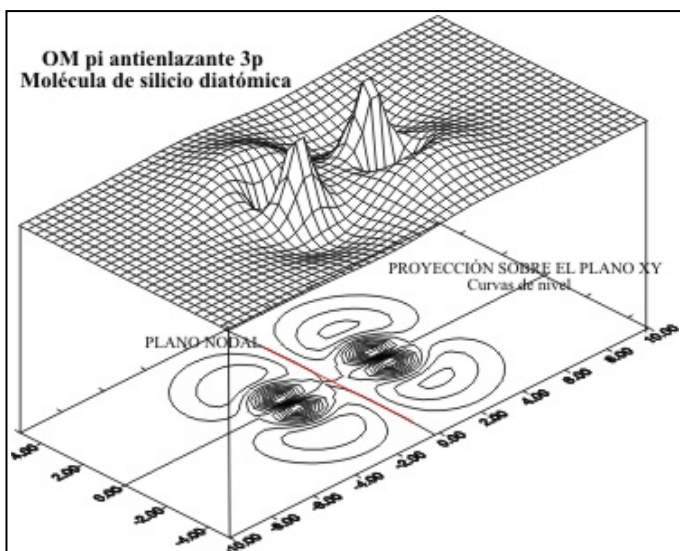


Fig.7

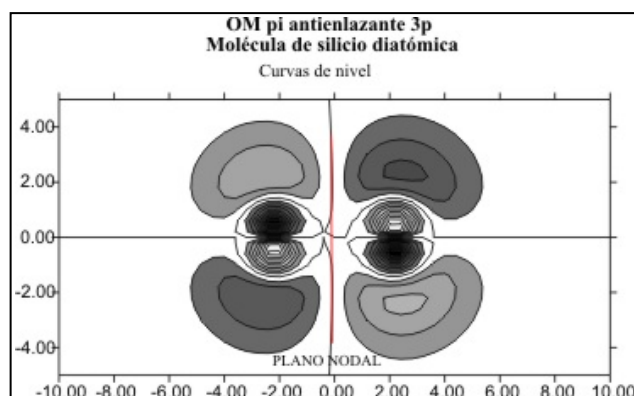


Fig.8

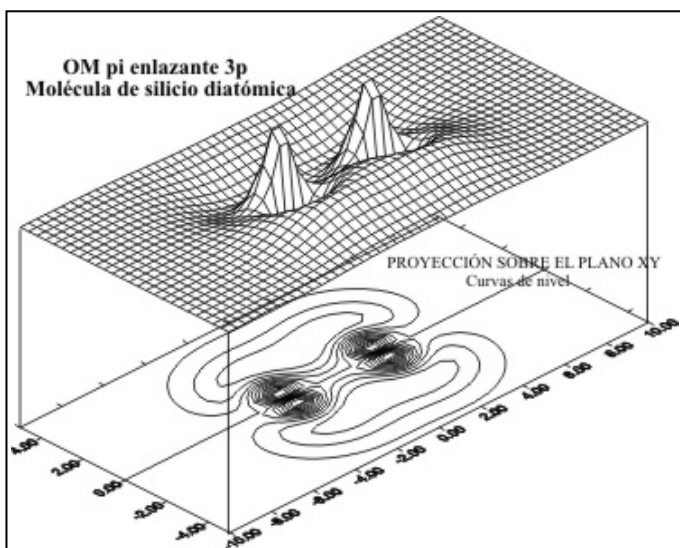


Fig.9

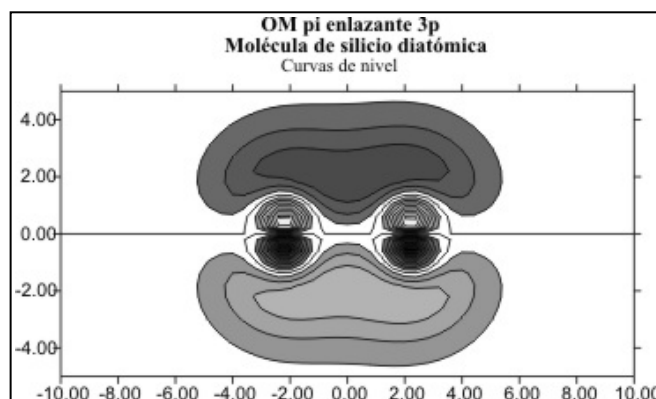


Fig.10

Comparando la fig 4 y la 8, por un lado, y la 5 con la 10, se pueden establecer las diferencias entre los OM de moléculas diatómicas de elementos del mismo grupo pero de distinto período. Se observa que tanto en la combinación enlazante como en la antienlazante, aparece una superficie nodal interior, heredada de la que surge en los OA respectivos.

Si pasamos a otros elementos como el nitrógeno y el oxígeno, avanzando hacia la derecha del sistema periódico (deberá disminuir el radio y volumen atómico), veremos como influye este hecho en el tamaño del OM. Así las curvas de nivel de los OM antienlazantes y enlazantes, se representan en las figuras 11, 12, 13 y 14

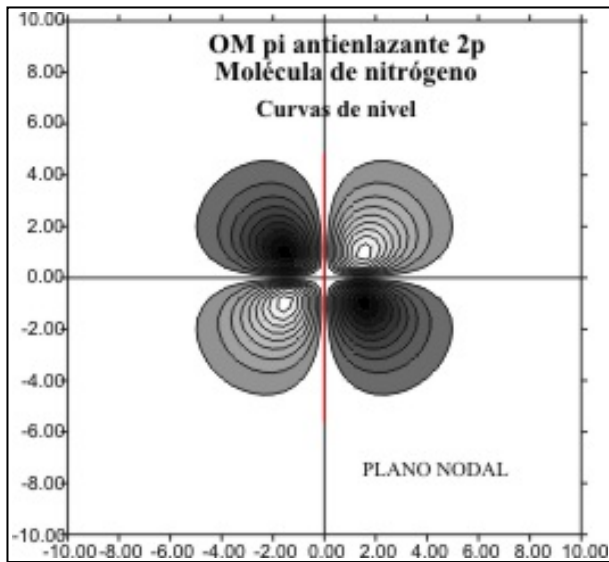


Fig.11

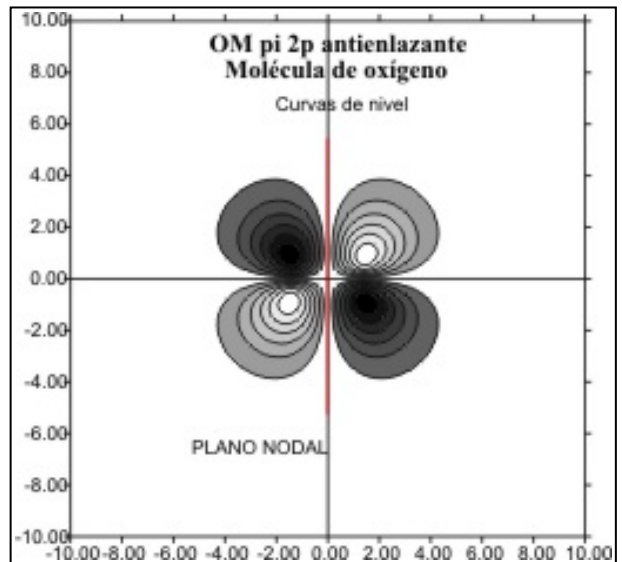


Fig.12

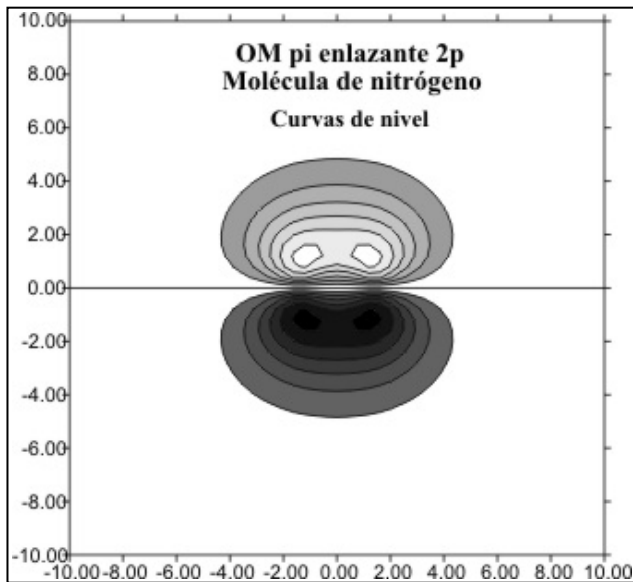


Fig.13

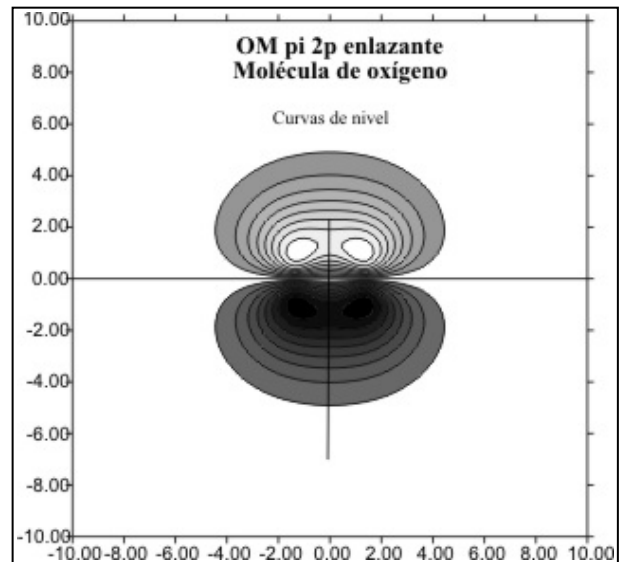


Fig.14

El efecto de la modificación del radio atómico tiene menos incidencia al avanzar hacia la derecha en el período 3, tal como se puede apreciar al considerar el OM enlazante del azufre diatómico, con su curva de nivel (fig. 15 y 16) y compararlo con el del silicio diatómico (fig 9 y 10).

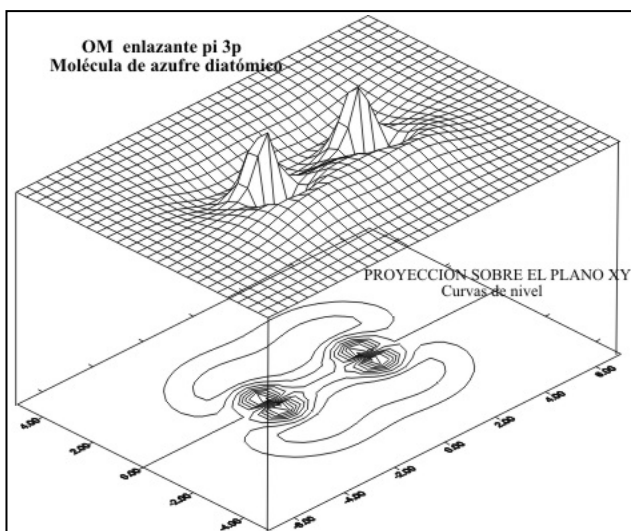


Fig.15

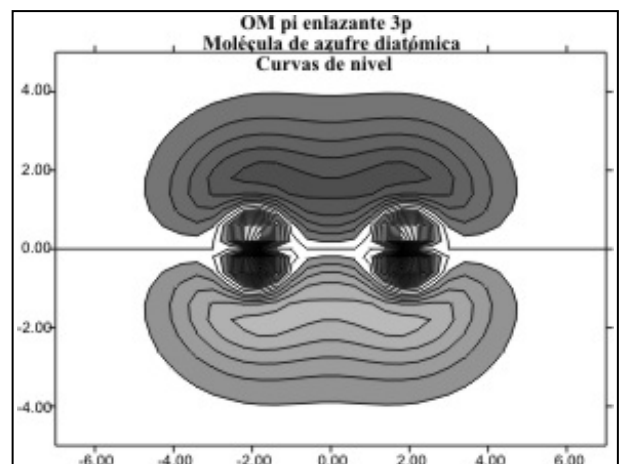


Fig.16