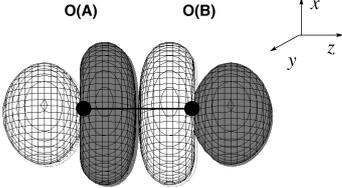
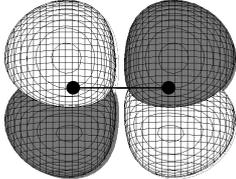
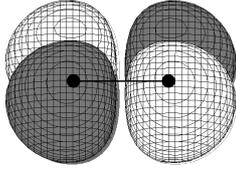
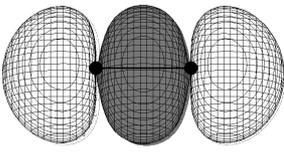


# Anexo al tema 2

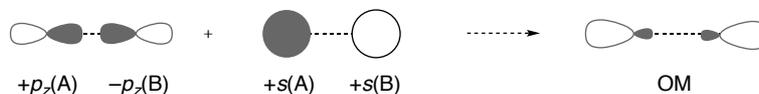
## Orbitales calculados para la molécula de dióxigeno

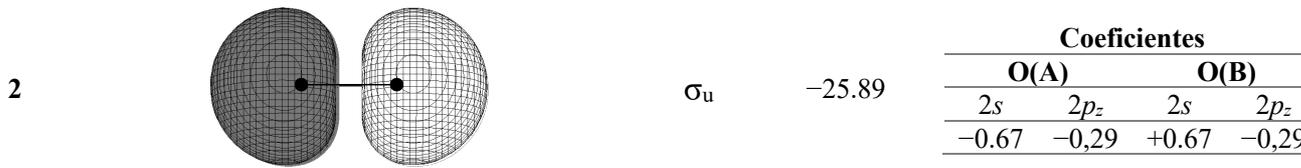
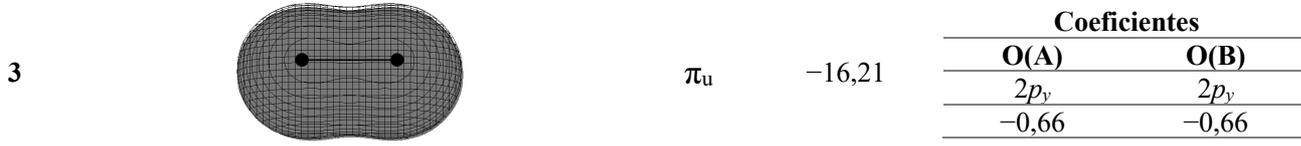
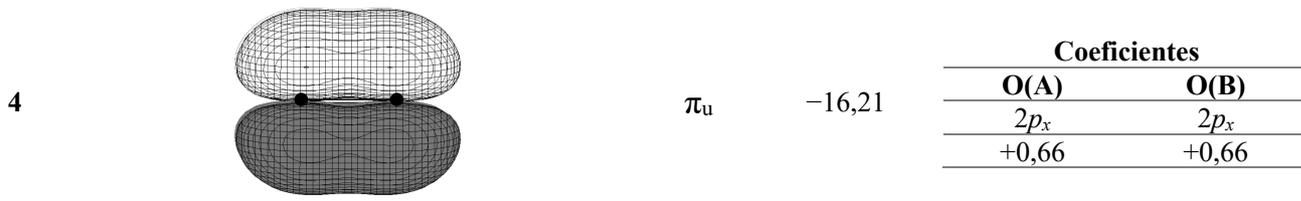
Las energías y funciones de onda de los orbitales de oxígeno que se dan en la tabla 1 han sido calculadas mediante el método de Hückel extendido. Se trata de un método de mecánica-cuántica semiempírico de muy baja exigencia computacional, cuyos resultados tienen una utilidad más cualitativa que cuantitativa.

**Tabla 1. Orbitales de la molécula de dióxigeno**

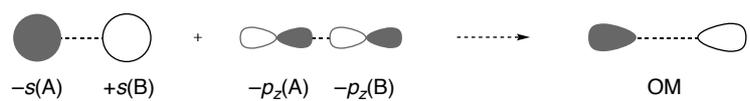
Núm.	Representación	Simetría	Energía (eV)	Función de onda expresada como combinación lineal de orbitales atómicos																			
				O(A)		O(B)																	
8		$\sigma_u$	4,81	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="4">Coeficientes</th> </tr> <tr> <th colspan="2">O(A)</th> <th colspan="2">O(B)</th> </tr> <tr> <th>2s</th> <th>2p<sub>z</sub></th> <th>2s</th> <th>2p<sub>z</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>-0,64</td> <td>-0,90</td> <td>+0,64</td> <td>+0,90</td> </tr> </tbody> </table>				Coeficientes				O(A)		O(B)		2s	2p <sub>z</sub>	2s	2p <sub>z</sub>	-0,64	-0,90	+0,64	+0,90
Coeficientes																							
O(A)		O(B)																					
2s	2p <sub>z</sub>	2s	2p <sub>z</sub>																				
-0,64	-0,90	+0,64	+0,90																				
7		$\pi_g$	-12,91	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="4">Coeficientes</th> </tr> <tr> <th colspan="2">O(A)</th> <th colspan="2">O(B)</th> </tr> <tr> <th>2p<sub>x</sub></th> <th>2p<sub>x</sub></th> <th>2s</th> <th>2s</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>+0,76</td> <td>-0,76</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>				Coeficientes				O(A)		O(B)		2p <sub>x</sub>	2p <sub>x</sub>	2s	2s	+0,76	-0,76		
Coeficientes																							
O(A)		O(B)																					
2p <sub>x</sub>	2p <sub>x</sub>	2s	2s																				
+0,76	-0,76																						
6		$\pi_g$	-12,91	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="4">Coeficientes</th> </tr> <tr> <th colspan="2">O(A)</th> <th colspan="2">O(B)</th> </tr> <tr> <th>2p<sub>y</sub></th> <th>2p<sub>y</sub></th> <th>2s</th> <th>2s</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>-0,76</td> <td>+0,76</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>				Coeficientes				O(A)		O(B)		2p <sub>y</sub>	2p <sub>y</sub>	2s	2s	-0,76	+0,76		
Coeficientes																							
O(A)		O(B)																					
2p <sub>y</sub>	2p <sub>y</sub>	2s	2s																				
-0,76	+0,76																						
5		$\sigma_g$	-15,69	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="4">Coeficientes</th> </tr> <tr> <th colspan="2">O(A)</th> <th colspan="2">O(B)</th> </tr> <tr> <th>2s</th> <th>2p<sub>z</sub></th> <th>2s</th> <th>2p<sub>z</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>+0,18</td> <td>+0,64</td> <td>+0,18</td> <td>-0,64</td> </tr> </tbody> </table>				Coeficientes				O(A)		O(B)		2s	2p <sub>z</sub>	2s	2p <sub>z</sub>	+0,18	+0,64	+0,18	-0,64
Coeficientes																							
O(A)		O(B)																					
2s	2p <sub>z</sub>	2s	2p <sub>z</sub>																				
+0,18	+0,64	+0,18	-0,64																				

**Comentario:** El orbital molecular está formado en gran medida por la combinación enlazante de orbitales  $2p_z$ , pero la mezcla con los orbitales  $2s$  disminuye el solapamiento, reduce su carácter enlazante y aumenta su energía:



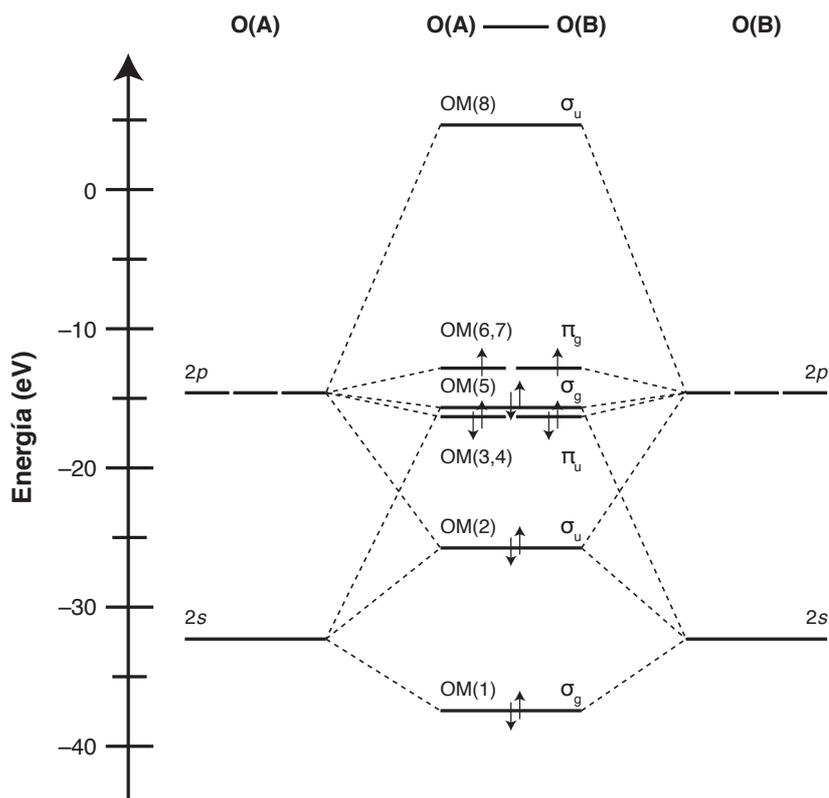


**Comentario:** El orbital molecular está formado en gran medida por la combinación antienlazante de orbitales  $2s$ , pero la mezcla con los orbitales  $2p_z$  disminuye el solapamiento, reduce su carácter antienlazante y disminuye su energía:



**Comentario:** El orbital molecular está formado esencialmente por la combinación enlazante de orbitales  $2s$ .

Para construir el diagrama de orbitales moleculares del dióxigeno a partir de la interacción de los orbitales atómicos del oxígeno (Figura 1), hay que saber que la energía de estos últimos orbitales vale  $-32,30$  ( $2s$ ) y  $-14,80$  ( $2p$ ).



**Figura 1.** Diagrama de interacción calculado para la molécula de dióxigeno mediante el método de Hückel extendido.