

Cuestiones tema 1 (III) Orbitales Moleculares

Selección de las propuestas en el texto de Brown

C 1 (9.71).- Contesta a las siguientes cuestiones: a) ¿Cuál es la diferencia entre orbitales híbridos y orbitales moleculares? b) ¿Cuántos electrones se pueden colocar en cada OM de una molécula? c) Los orbitales moleculares de antienlace, ¿pueden contener electrones?

C 2. (9.72).- Si se combinan dos orbitales atómicos de sendos átomos diferentes para formar un nuevo orbital, ¿es éste un orbital híbrido o un orbital molecular? b) Si se combina dos orbitales atómicos en un átomo para formar un orbital nuevo, ¿es éste un orbital híbrido o un orbital molecular? c) Se aplica el principio de exclusión de Pauli a los OMs?

C 3 (9.73).- Elabore un esquema de los orbitales moleculares del catión H_2^+ , y represente su diagrama de niveles de energía. b) Escriba la configuración electrónica del ion en términos de sus orbitales moleculares. c) Calcule el orden de enlace. d) Suponga que se excita el ion mediante luz, de tal modo que un electrón se mueve desde un orbital molecular de menor energía a uno de mayor energía. ¿Esperarías que el ion H_2^+ excitado sea estable?

C 4 (9.76a).- ¿Cuál es la probabilidad de encontrar un electrón en el eje internuclear si el electrón ocupa un orbital molecular π ?

C 5 (9.76b).- En una molécula diatómica homonuclear, ¿cuáles son las similitudes y las diferencias que existen entre el OM $\pi(2p)$ formado a partir de los orbitales atómicos $2p_x$ y el OM $\pi(2p)$ formado a partir de los orbitales atómicos $2p_y$?

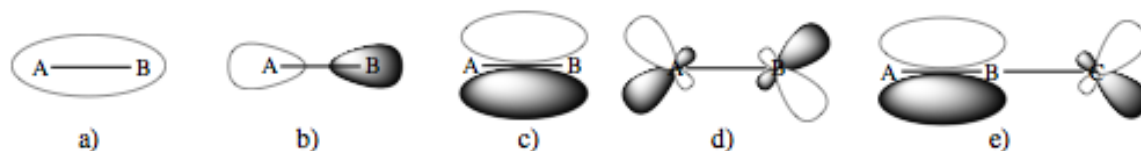
C 6 (9.76c).- ¿Por qué los orbitales $\pi(2p)$ tienen menos energía que los OMs $\pi^*(2p)$?

C 7 (9.78).- Explica lo siguiente: a) ¿Por qué el ion peróxido, O_2^{2-} , tiene una longitud de enlace más larga que el superóxido, O_2^- ? b) ¿Por qué el catión O_2^{2+} tiene un enlace O-O más fuerte que el propio O_2 . c) ¿Por qué el O_2 es una molécula paramagnética?

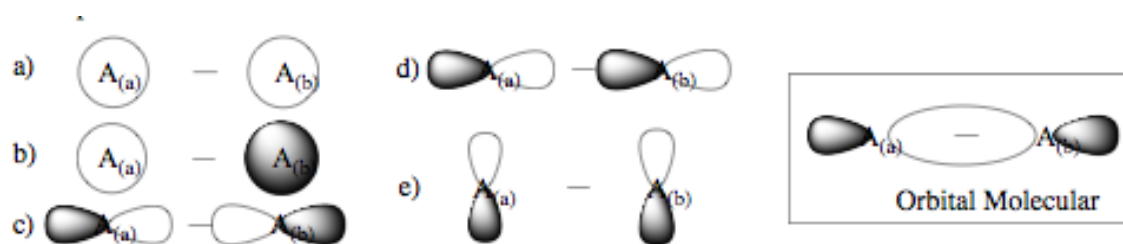
C 8 (9.79c).- ¿Cuál de las siguientes especies esperas que fuera paramagnética: O_2^+ , N_2^{2-} , Li_2^+ , O_2^{2-} . Para los iones que lo sean, determina el número de electrones desapareados.

C 9 (9.81).- Representa el diagrama de energías de las entidades siguientes. Escribe sus configuraciones electrónicas e indique, en cada caso, si la adición de un electrón incrementaría o disminuiría el orden de enlace de las especies: Be_2^+ , Li_2^+ , N_2^+ , Ne_2^{2+} .

C 10 .-¿Cuáles de los siguientes orbitales moleculares son enlazantes y cuáles antienlazantes? ¿Cuáles son sigma y cuáles π ?



C 11.- ¿Cuál de las siguientes combinaciones de los átomos A (a) y A(b) debe conducir al orbital molecular representado en la figura? ¿Es un orbital enlazante o antienlazante? ¿Qué combinación debe conducir al correspondiente orbital antienlazante?



C 12.- Para los siguientes pares de orbitales moleculares indica el que pueda tener la energía más baja. Razona la respuesta. a) σ_{1s} o σ_{1s}^* , b) σ_{2s} o σ_{2p} , c) σ_{1s}^* o σ_{2s} , d) σ_{2p} o σ_{2s}^*

C 13.- Una de las características de los orbitales moleculares antienlazantes es la presencia de planos nodales. ¿Cuáles de los orbitales moleculares enlazantes considerados en este tema tienen planos nodales? Explica cómo un orbital molecular puede tener un plano nodal y aún así ser un orbital molecular enlazante.

C 14.- Es correcto decir que cuando una molécula diatómica pierde un electrón la energía de enlace siempre disminuye; es decir, que el enlace siempre se hace más débil? Explícalo.

C 15.- Justifica a tenor de los diagramas de OM considerados en este tema que no es posible encontrar situaciones con un orden de enlace mayor que 3.

C 16.- Discute la existencia o no de las siguientes moléculas, clasificándolas por orden de estabilidad: H_2^+ , H_2^- , H_2^{2-} y H_2 .

C 17.- Explica cuál es el efecto en la distancia de enlace cuando se pierde el electrón más externo en las moléculas C_2 , O_2 y F_2 .

C 18.- Para cada una de las siguientes especies C_2^+ , O_2^- y F_2^+ : a) Dibuja el diagrama de orbitales moleculares, b) escribe la configuración electrónica de la entidad molecular, c) determina el orden de enlace e indica si es previsible que sean entidades estables o inestables, d) determina si la especie es paramagnética o diamagnética y en caso de que sea paramagnética, el número de electrones desapareados que presenta.

C 19.- Según la TOM, ¿cabría esperar que exista la molécula de Be_2 o Be_2^+ ?

C 20.- ¿Cuál es el orden de enlace del catión Cl_2^+ ? ¿Sería su energía de enlace mayor o menor que la del Cl_2 ? ¿Es paramagnético?

C 21.- Utiliza un diagrama de OM para determinar el orden de enlace en el catión N_2^+ . Escribe la configuración electrónica (del tipo $KK(\sigma_{2s})^2 \dots$) para este catión.

C 22.- Escribe las configuraciones electrónicas moleculares para las especies O_2^{2-} , O_2^- , O_2 y O_2^+ .

a) Diferencia las que sean diamagnéticas de las que sean paramagnéticas.

b) Ordénalas de mayor a menor distancia de enlace.

c) Ordénalas de menor a mayor energía de enlace.

C 23.- Escribe la configuración electrónica del primer estado excitado de N_2 (es decir, el estado en el que el electrón de más alta energía ha pasado al siguiente nivel de energía disponible). ¿Qué diferencias cabe esperar entre las propiedades del N_2 en su estado fundamental y en su primer estado excitado?

C 24.- ¿Podrían existir las siguientes moléculas (aplica la teoría que consideres más adecuada)?

a) He_2^{2+} , b) C_2 , c) Ne_2 , d) F_2 , e) F_2^+ .

C 25.- Construye el diagrama de OM para la molécula B_2 . ¿Cuál es el orden de enlace? Construye un diagrama similar pero ordenando los niveles como lo hacen los elementos más pesados del periodo 2. ¿Qué propiedad experimental utilizarías para confirmar cuál de los dos diagramas es el adecuado?

C 26.- La molécula de B_2 es paramagnética; ¿es congruente con el supuesto que los OM $\pi(2p)$ tienen más baja energía que los $\sigma(2p)$?

C 27.- Construye el diagrama de OM y escribe la configuración electrónica de las especies C_2^- y C_2^+ . Determina el orden de enlace de las dos especies.

C 28.- Utiliza la TOM para predecir cuáles de las siguientes especies diatómicas serían estables: N_2^{2-} , O_2^{2-} , F_2^{2-} .

C 29.- ¿Cuál de los siguientes iones cabría esperar que fueran diamagnéticos: N_2^{2-} , O_2^{2-} , Be_2^{2+} , C_2^- ?