



Universidad de Concepción  
Facultad de Ciencias Químicas - Departamento de Físico-Química  
Profesor: Dr. Stefan Vogt  
Asignatura: 530.301 Estructura Atómica y Molecular

## Guía: Estructura electrónica molecular

**Ejercicio 1.** Escriba la forma explícita de cada uno de los operadores  $\hat{K}_e$ ,  $\hat{K}_N$ ,  $\hat{V}_{NN}$ ,  $\hat{V}_{Ne}$ ,  $\hat{V}_{ee}$ , para la molécula de  $H_2$ . Utilice letras mayúsculas para el núcleo y números para los electrones. Utilice  $r_{1A}$  para indicar la distancia entre el electrón 1 y el núcleo A.

**Ejercicio 2.** Para el estado electrónico fundamental del  $H_2^+$  con los núcleos separados a la distancia de equilibrio ( $2.00a_0$ ), utilice la función de onda aproximada en (20.15 *Levine Físicoquímica* sec. 20.4) para calcular la probabilidad de encontrar al electrón en una caja de volumen  $10^{-6}\text{Å}^3$ , si la misma está localizada en:

- (a) En uno de los núcleos
- (b) En el punto medio del eje internuclear
- (c) A un tercio de la distancia del núcleo A respecto al B.

Utilice la tabla 20.3 (*Levine Físicoquímica* sec. 20.4), y la ecuación

$$S(R) = e^{-\frac{R}{a_0}} \left( 1 + \frac{R}{a_0} + \frac{R^2}{3a_0^2} \right)$$

**Ejercicio 3.** Escriba la función de onda OM para el estado electrónico fundamental (repulsivo) del  $He_2$ . ¿Por qué es un estado repulsivo?

**Ejercicio 4.** Escriba la configuración electrónica de las siguientes especies y determine si se trata de una molécula paramagnética. Además señale el orden de enlace de cada una de ellas.

- $He_2^+$ ,  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$ ,  $N_2$ ,  $F_2$

**Ejercicio 5.** Para cada una de las especies  $NF$ ,  $NF^-$  y  $NF^+$  utilice el método de OM para (a) escribir la configuración electrónica; (b) encontrar el orden de enlace; (c) decidir si la especie es paramagnética. (Pista: El orbital molecular  $1\pi$  es de menor energía que el orbital molecular  $2\sigma$ ).

**Ejercicio 6.** Utilizando la teoría RPECV prediga las formas geométricas de las siguientes moléculas e iones: (a)  $N_2$ ; (b)  $HCN$ ; (c)  $NH_4^+$ ; (d)  $NO_3^-$ ; (e)  $NSF$  (f)  $OCl_2$ .

**Ejercicio 7.** Uno de los siguientes iones tiene una forma de trigonal plana:  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\text{PF}_6^-$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ . ¿De qué ión se trata?

**Ejercicio 8.** Dibuje la estructura de Lewis adecuada para cada una de las siguientes moléculas e iones: (a)  $\text{ClF}_2^-$ ; (b)  $\text{ClF}_3$ ; (c)  $\text{ClF}_4^-$ ; (d)  $\text{ClF}_5$ . Describa la geometría de grupos de electrones y la geometría molecular.

**Ejercicio 9.** Para cada uno de las siguientes especies, identifique el átomo central y proponga un esquema de hibridación para esos átomos:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HONO}_2$ ,  $\text{ClO}_3^-$  y  $\text{BF}_4^-$ .

**Ejercicio 10.** Asocie cada una de las siguientes moléculas con un esquema de hibridación:  $\text{COS}$ ,  $\text{SiCl}_4$ ,  $\text{NO}_3^-$ .

**Ejercicio 11.** Prediga la hibridación del átomo en **negrita** de los siguientes compuestos:  $\text{CH}_3\text{C}\text{OCH}_3$ ,  $\text{HCCH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}\text{H}_2\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}\text{H}_3$ .

**Ejercicio 12.** Calcule el carácter s y p de los orbitales híbridos:

$$\psi_a = -0.45\phi_{2p_z} - 0.55\phi_{2s} + 0.71\phi_{2p_x}$$

$$\psi_b = -0.45\phi_{2p_z} - 0.55\phi_{2s} - 0.71\phi_{2p_x}$$