

SERIE 2

1- Empleando la aproximación de orbitales moleculares proveniente de moléculas diatómicas homonucleares, desarrolla el diagrama de orbitales moleculares, construye la configuración electrónica molecular y menciona las propiedades magnéticas que se espera para las siguientes moléculas.

- | | |
|------------------------------------|------------------------------------|
| A) Cianuro, CN^- | D) Fluoruro de cloro, ClF |
| B) Óxido nítrico, NO | E) Nitrosonio, NO^+ |
| C) Ácido clorhídrico, HCl | |

2- Propón una explicación fundamentada, en la teoría de orbitales moleculares, para los siguientes datos experimentales.

Molécula	CN^-	NO	HCl	ClF	CO	HF	NO^+
Longitud de enlace (pm)	114.1	114.9	127.4	162.8	112.8	91.7	106.2
Energía de enlace (kJ/mol)	887	607	428	225	1072	565	1048

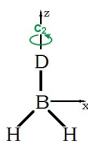
3- Construye el diagrama de orbitales moleculares para la molécula CO_2 a partir de la combinación lineal de los orbitales atómicos del átomo de carbono (átomo central) y los orbitales moleculares, derivados de la combinación lineal de orbitales atómicos del átomo de oxígeno para formar la molécula de oxígeno, O_2 . No olvides mostrar la función angular resultante en cada combinación lineal.

4- Empleando la tabla de caracteres, desarrolla el diagrama de orbitales moleculares para:

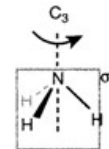
A) la molécula BH_2D (Grupo puntual C_{2v})

B) la molécula NH_3 (Grupo puntual C_{3v})

C_{2v}	E	C_2	$\sigma (\text{xz})$	$\sigma (\text{yz})$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1



C_{3v}	E	2C_3	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0



5- Describe la geometría molecular de cada una de las siguientes moléculas y asigna un grupo puntual para cada una de ellas. Todas las moléculas poseen un solo centro.

- | | | | |
|--------------------|-------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| A) BeCl_2 | G) NH_3 | M) XeF_4 | S) XeO_2F_2 |
| B) BF_3 | H) OF_2 | N) CO_2 | T) BrF_5 |
| C) CH_4 | I) SF_4 | O) F_4SO | U) CH_2F_2 |
| D) PCl_5 | J) ClF_3 | P) XeO_2F_2 | V) XeOF_4 |
| E) SF_6 | K) I_3^- | Q) NCl_3 | W) SO_2F_2 |
| F) SnCl_2 | L) BrF_5 | R) N_2O | X) SO_3 |

6- Explica, utilizando la regla de Bent, el comportamiento del ángulo de enlace para las moléculas de fósforo, PX_3 .

Molécula	PF_3	PCl_3	PBr_3	PI_3
Ángulo de enlace (grados)	97.8	100.3	101.5	102.0

7- Explica, utilizando la regla de Bent, el comportamiento en el ángulo de enlace de las moléculas.

Molécula	NF ₃	PF ₃	AsF ₃
Ángulo de enlace (grados)	102.3	97.8	96.1

8- Empleando la tabla de caracteres que se brinda, desarrolla el diagrama de orbitales moleculares para la molécula BH₂⁺. Menciona el orden de enlace, la configuración electrónica molecular y la propiedad magnética.

D _{2h}	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)	<i>i</i>	σ (xy)	σ (xz)	σ (yz)
A _g	1	1	1	1	1	1	1	1
B _{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B _{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
B _{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
A _u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B _{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
B _{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

9- La molécula neutra NO₂ presenta un ángulo de enlace de 134 grados mientras que en el ión nitrito NO₂⁻ el ángulo de enlace es 115 grados. Determina la contribución de orbitales *s* y *p* de nitrógeno para soportar su densidad electrónica, es decir, aquella que no forma enlaces y compara tu resultado con la dictada por el concepto de hibridación.

10- La molécula fluoruro de carbonilo, F₂CO, presenta un ángulo de enlace F-C-F de 111.4 grados mientras que en el formaldehído, H₂CO, el ángulo de enlace H-C-H es 118.0 grados. Explica por qué y fundamenta con la regla de Bent.