

EJERCICIOS

● Indica ejercicios de **razonamiento molecular**

▲ Señala ejercicios **avanzados**

Los ejercicios con **número azul** están resueltos en el *Manual de respuestas para el estudiante*.*

Teoría de los om: conceptos generales

1. Describa las diferencias principales entre la teoría del enlace de valencia y la teoría de los orbitales moleculares.
2. En la teoría de los orbitales moleculares, ¿qué es un orbital molecular? ¿Cuáles son los dos tipos de información que pueden obtenerse de los cálculos de orbitales moleculares? ¿Cómo utilizamos esta información para describir al enlace de una molécula?
3. ¿Qué relación existe entre el número máximo de electrones que puede acomodarse en una serie de orbitales moleculares y el número máximo que puede acomodarse en los orbitales atómicos a partir de los cuales se forman los om? ¿Cuál es el número máximo de electrones que puede contener un om?
4. Conteste el ejercicio 3, pero antes sustituya “orbitales moleculares” por “orbitales atómicos híbridos”.
5. ¿Qué diferencias y semejanzas hay entre a) orbitales atómicos, b) orbitales atómicos híbridos localizados según las teorías del enlace de valencia y c) de los orbitales moleculares?
6. Describa la forma de los orbitales σ y σ^* incluyendo la posición de los núcleos.
7. Describa la forma de los orbitales π y π^* incluyendo la posición de los núcleos.
8. Mencione las tres reglas para colocar electrones en orbitales moleculares.
9. ¿Qué significa el término “orden de enlace”? ¿Cómo se calcula el valor del orden de enlace?
10. Compare y ejemplifique las diferencias entre a) orbitales atómicos y orbitales moleculares, b) orbitales moleculares enlazantes y antienlazantes, c) orbitales σ y orbitales π , y d) orbitales moleculares localizados y deslocalizados.
11. ● ¿Es posible que un ion o molécula poliatómicos en su estado fundamental tenga un orden de enlace negativo? ¿Por qué?
12. ¿Qué relación existe entre la energía de un orbital molecular enlazante y la energía de los orbitales atómicos originales? ¿Cuál es la relación entre la energía de un orbital molecular antienlazante y las energías de los orbitales atómicos originales?
13. Compare y contraste los tres conceptos siguientes: a) orbitales enlazantes, b) orbitales antienlazantes, c) orbitales no enlazantes.

Especies diatómicas homonucleares

14. ¿Qué significa decir que una molécula o ion es a) homonuclear, b) heteronuclear o c) diatómica?

15. ● Use diagramas de energía de los orbitales moleculares adecuados para escribir la configuración electrónica de las moléculas y iones siguientes: a) Be_2 , Be_2^+ , Be_2^- ; b) B_2 , B_2^+ , B_2^- .
16. ● ¿Cuál es el orden de enlace de las especies del ejercicio 15?
17. ● ¿Qué especies del ejercicio 15 son diamagnéticas y cuáles paramagnéticas? ¿Cuántos electrones desapareados indica la descripción om de cada especie?
18. Utilice la teoría de los om para predecir la estabilidad relativa de las especies del ejercicio 15. Comente la validez de estas predicciones. ¿Qué otra cosa *debe* considerarse además de la ocupación de electrones en los om?
19. ● Use diagramas de energía de los orbitales moleculares adecuados para escribir la configuración electrónica de las especies siguientes; calcule el orden de enlace de cada una y pronostique cuál sí puede existir. a) H_2^+ ; b) H_2 ; c) H_2^- ; d) H_2^{2-} .
20. ● Repita el ejercicio 19 con a) Ne_2^+ ; b) Ne_2 ; c) Ne_2^{2-} .
21. ● Repita el ejercicio 19 con a) N_2 ; b) He_2 ; c) C_2^{2-} .
22. ● Repita el ejercicio 19 con a) Li_2 ; b) Li_2^+ ; c) O_2^{2-} .
23. ● ▲ ¿Qué moléculas o iones diatómicos homonucleares del segundo periodo tienen la configuración electrónica en om siguiente? En otras palabras, identifique X en cada caso.
 - a) $\text{X}_2 \quad \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p_y}^2 \pi_{2p_z}^2 \sigma_{2p}^2$
 - b) $\text{X}_2 \quad \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p}^2 \pi_{2p_y}^2 \pi_{2p_z}^2 \pi_{2p_y}^{*1} \pi_{2p_z}^{*1}$
 - c) $\text{X}_2^- \quad \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p_y}^2 \pi_{2p_z}^2 \sigma_{2p}^2 \pi_{2p_y}^{*1}$
24. ● ¿Cuál es el orden de enlace de las especies del ejercicio 23?
25. ● Escriba la configuración electrónica om de a) F_2 , F_2^- , F_2^+ ; b) C_2 , C_2^+ , C_2^- .
26. ● a) ¿Cuál es el orden de enlace de cada especie del ejercicio 25? b) ¿Son diamagnéticas o paramagnéticas? c) ¿Qué predice la teoría de los om sobre la estabilidad de estas especies?
27. ● a) Escriba la designación om de las especies O_2 , O_2^- , O_2^{2-} , O_2^+ y O_2^{2+} . b) Determine el orden de enlace en cada caso. c) Dados los valores observados de longitud de enlace siguientes: 1.04 Å, 1.12 Å, 1.21 Å, 1.33 Å y 1.49 Å, adjudique a cada especie el que le corresponde.
28. ● a) Escriba la designación om de las especies N_2 , N_2^- y N_2^+ . b) Determine el orden de enlace en cada caso. c) Ordene estas tres especies por su longitud de enlace predicha creciente.

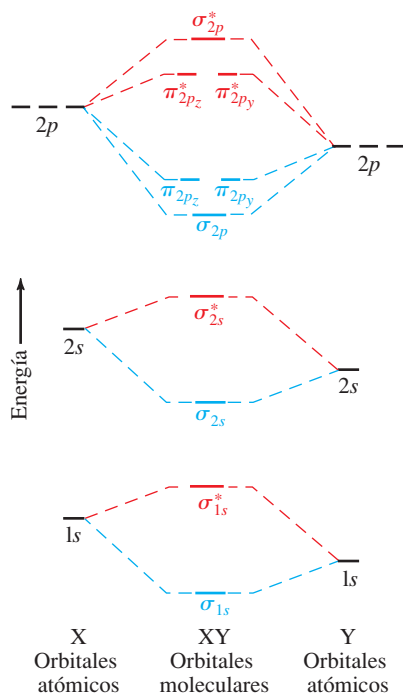
● Indica ejercicios de **razonamiento molecular**

▲ Señala ejercicios **avanzados**

Los ejercicios con **número azul** están resueltos en el *Manual de respuestas para el estudiante*.*

Especies diatómicas heteronucleares

El diagrama siguiente de niveles de energía de orbitales moleculares corresponde a una molécula diatómica heteronuclear, XY, donde tanto X como Y son del periodo 2, y Y es un poco más electronegativo. Este diagrama puede usarse para contestar los ejercicios de esta sección.



29. ● Utilice el diagrama precedente para llenar un diagrama om del NO^- . ¿Cuál es el orden de enlace del NO^- ? ¿Es paramagnético? ¿Cómo evalúa su estabilidad?
30. ● Repita el ejercicio 29 para el NO^+ .
31. ● Repita el ejercicio 29 para el CN^- . Use el diagrama precedente, pero considere que los om π_{2p_y} y π_{2p_z} son de menor energía que el om σ_{2p} .
32. ● Compare las descripciones om del CN , CN^+ , CN^{2+} , CN^- y CN^{2-} . Use el diagrama precedente, pero suponga que los om π_{2p_y} y π_{2p_z} son de menor energía que el om σ_{2p} . ¿Cuál es el más estable? ¿Cuál predeciría es paramagnético? ¿Por qué? Determine el orden de enlace de cada uno.
33. ● El oxígeno, O_2 , puede adquirir dos electrones para convertirse en O_2^- (ion superóxido) o O_2^{2-} (ion peróxido). Escriba la configuración electrónica para los iones en términos del orbital molecular y compare con los de la molécula de O_2 considerando a) carácter magnético, b) número neto de enlaces σ y π ; c) orden de enlace, d) tamaño del enlace oxígeno-oxígeno.
34. ● Dadas las dos especies siguientes NF y NF^+ , a) dibuje diagramas om de niveles de energía, b) escriba las configuraciones de electrones, c) determine el orden de enlace y prediga la estabilidad relativa, y d) prediga paramagnetismo o diamagnetismo.

35. ● El ion nitrosilo, NO^+ , posee una química interesante.
- ¿Es el NO^+ diamagnético o paramagnético? Si es paramagnético, ¿cuántos electrones no apareados posee?
 - Tomando en cuenta el diagrama de orbitales moleculares para una molécula diatómica homonuclear (véase la figura 9.5a) aplíquela para el NO^+ . ¿Cuál es el orbital molecular de mayor energía ocupado por los electrones?
 - ¿Cuál es el orden de enlace para nitrógeno-oxígeno?
 - El enlace $\text{N}-\text{O}$ en el NO^+ , ¿es más fuerte o más débil que el del NO ?
36. Para reducir la fuerza del enlace del compuesto hipotético BC, ¿agregaría o quitaría un electrón? Explique su respuesta con ayuda de una estructura om de los electrones.

Deslocalización

37. ● Use fórmulas de Lewis para escribir las estructuras resonantes de las especies siguientes desde el punto de vista del enlace de valencia y luego dibuje om de los sistemas deslocalizados π : a) NO_3^- , ion nitrato; b) HCO_3^- , ion carbonato ácido (el H está enlazado al O); c) NO_2^- , ion nitrito.
38. ● Use fórmulas de Lewis para escribir estructuras resonantes de las especies siguientes desde el punto de vista del enlace de valencia y luego dibuje om de los sistemas deslocalizados π : a) SO_2 , dióxido de azufre; b) O_3 , ozono; c) HCO_2^- , ion formato (el H está enlazado al C).

Ejercicios mixtos

39. ● Dibuje y clasifique los diagramas om de niveles de energía de las siguientes especies. Para cada una, determine el orden de enlace, prediga la estabilidad de las especies y pronostique si la especie será paramagnética o diamagnética. a) He_2^+ , b) CN , c) HeH^+ .



© Charles D. Winters

Un material paramagnético es atraído por un campo magnético

40. ● Dibuje y clasifique los diagramas om de niveles de energía completos de las especies siguientes. De cada una, determine el orden de enlace, prediga la estabilidad de las especies y pronostique si la especie será diamagnética o paramagnética. a) O_2^{2+} , b) HO^- , c) HF .