

### Principios de Estructura de la Materia - Tarea 3.

1. Construcción del diagrama molecular del Li-H.  
Si las energías de los OA del H y Li son:  
 $1s(\text{H}) = -13.6 \text{ eV}$ ,  $1s(\text{Li}) = -67.3 \text{ eV}$ ,  $2s(\text{Li}) = -5.4 \text{ eV}$ ,  
 $\sigma = c_1\psi_{1s} + c_2\psi_{2s}$  con  $c_1 = 0.333$ ,  $S = 0.463$   
 $\sigma^* = b_1\psi_{1s} - b_2\psi_{2s}$  con  $b_1 = 1.078$ 
  - a) calcule en función de la integral de intercambio  $\beta_{12}$ , la energía de los niveles enlazante y antienlazante.
  - b) la energía de disociación experimental del LiH es de 242 kJ/mol.  
Calcule en eV el valor de la integral de intercambio en esta molécula.
2. Molécula triangular plana.  $\text{BF}_3$   
Considere que el enlace B-F<sup>1</sup> está en el eje Ox. (origen: átomo de B).  
Establecer los orbitales híbridos que se obtienen al combinar los orbitales 2s, 2p.
$$h_1 = c_{11}\varphi_s + c_{12}\varphi_{px} + c_{13}\varphi_{py}$$
$$h_2 = c_{21}\varphi_s + c_{22}\varphi_{px} + c_{23}\varphi_{py}$$
$$h_3 = c_{31}\varphi_s + c_{32}\varphi_{px} + c_{33}\varphi_{py}$$
3. Las energías de los orbitales atómicos de valencia para el F y el Cl son:  
F:  $E_{2s} = -37.9 \text{ eV}$ ,  $E_{2p} = -17.4 \text{ eV}$   
Cl:  $E_{3s} = -24.5 \text{ eV}$ ,  $E_{3p} = -13.0 \text{ eV}$   
En los dihalógenos el eje molecular es el eje Oz.
  - a) Esquematizar para  $\text{F}_2$  los recubrimientos orbitales que conducen a orbitales moleculares (recubrimientos entre los átomos F<sup>1</sup> y F<sup>2</sup>).
  - b) Construir cualitativamente el diagrama de orbitales moleculares.
  - c) ¿Cómo se debe modificar este diagrama para poder ser aplicado a  $\text{Cl}_2$ ?
4. Las moléculas de  $\text{N}_2$  y CO son isoelectrónicas.
  - a) comparar los niveles de energía 2s y 2p de C, N y O.
  - b) las energías de estabilización de  $\text{N}_2$  y CO son de -940 y -1070 kJ/mol, explicar esto.
5. El diagrama de O.M. de una especie  $\text{AB}_m$  se puede establecer combinando sucesivamente cada orbital  $a_j$  de A con los O.A.  $b_{ji}$  de misma simetría de los  $m$  átomos  $B_j$ . El diagrama de O.M. del dióxido de carbono se puede establecer cualitativamente admitiendo que los niveles 2s de los átomos de

oxígeno son muy profundos para enlazarse y por otro lado que el eje Oz está orientado en el sentido C-O<sup>1</sup>.

a) indicar la geometría de la molécula CO<sub>2</sub> y cuáles son los orbitales atómicos disponibles para la construcción de los O.M.

b) Identificar las combinaciones lineales que conducen a los cuatro O.M. de tipo  $\sigma$  (2 enlazantes, 2 de antienlace) de la molécula.

Los niveles de energía siguen la secuencia:

$$(s_1s_2) < \sigma_1 < \sigma_2 < (\pi_1, \pi_2) < (\pi_1^{\text{NL}}, \pi_2^{\text{NL}}) < ((\pi_1^*, \pi_2^*)) < \sigma_1^* < \sigma_2^*$$

NL = no enlazante

d) dar la configuración electrónica de la molécula (16 electrones de valencia),

6. Los niveles de energía de C y O son:

$$E_{2s}(\text{C}) = -19 \text{ eV}, E_{2p}(\text{C}) = -11.7 \text{ eV}, E_{2s}(\text{O}) = -33.7 \text{ eV}, E_{2p}(\text{O}) = -17.1 \text{ eV}$$

Obtener orbitales los 4 orbitales  $\sigma$  combinando orbitales

$2s(\text{C}), 2p_z(\text{C}), 2s(\text{O}), 2p_z(\text{O})$  y los 4 orbitales orbitales  $\pi$  combinando orbitales  $2p_x(\text{C}), 2p_y(\text{C}), 2p_x(\text{O}), 2p_y(\text{O})$

Especificar el carácter (antienlace, enlace)