

**Tema 6**  
**El enlace en las moléculas.**  
**Conceptos avanzados**

**Juan José Borrás**  
**Almenar**  
**Departamento de**  
**Química Inorgánica**

**Asignatura:**

12865–Estructura y Enlace de la Materia  
Licenciatura de Química

## 1. Orbitales Moleculares

**EJERCICIO 1.** Construye el diagrama de orbitales moleculares de  $\text{H}_2^-$  e indica el orden de enlace y si este ion será paramagnético o diamagnético.

**EJERCICIO 2.** a) Construye el diagrama de orbitales moleculares de las especies químicas  $\text{O}_2^+$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{O}_2^-$  y  $\text{O}_2^{2-}$  y escribe la configuración electrónica de cada una de ellas. b) Comenta sus propiedades magnéticas y la variación en la longitud de enlace.

**EJERCICIO 3.** Explica cuál es el efecto en la distancia de enlace cuando se pierde el electrón más externo en las moléculas  $\text{C}_2$ ,  $\text{O}_2$  y  $\text{F}_2$ .

**EJERCICIO 4.** Para cada una de las siguientes especies  $\text{C}_2^+$ ,  $\text{O}_2^-$  y  $\text{F}_2^+$ : 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.

**EJERCICIO 5.** Para los siguientes pares de orbitales moleculares indica el que pueda tener la energía más baja. Razona la respuesta. a)  $\sigma_{1s}$  o  $\sigma_{1s}^*$ , b)  $\sigma_{2s}$  o  $\sigma_{2p}$ , c)  $\sigma_{1s}^*$  o  $\sigma_{2s}$ , d)  $\sigma_{2p}$  o  $\sigma_{2s}^*$

**EJERCICIO 6.** 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.

**EJERCICIO 7.** ¿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.

**EJERCICIO 8.** 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.

**EJERCICIO 9.** Utiliza un diagrama de OM para determinar el orden de enlace en el anión  $\text{H}_2^-$ . ¿Será diamagnético o paramagnético?

**EJERCICIO 10.** Esperarías que existiera la molécula de  $\text{Be}_2$ . Razona la respuesta utilizando un diagrama de OM.

**EJERCICIO 11.** Utiliza un diagrama de OM para determinar el orden de enlace en el catión  $\text{N}_2^+$ . Escribe la configuración electrónica (del tipo  $\text{KK}(\sigma_{2s})^2 \dots$ ) para este catión.

**EJERCICIO 12.** Utiliza un diagrama de OM para determinar el orden de enlace en el catión  $O_2^+$ . Escribe la configuración electrónica (del tipo  $KK(\sigma_{2s})^2 \dots$ ) para este catión.

**EJERCICIO 13.** a) Construye el diagrama de orbitales moleculares de las especies químicas BN, NO y  $NO^+$  y escribe la configuración electrónica de cada una de ellas. b) Comenta sus propiedades magnéticas y el orden de enlace.

**EJERCICIO 14.** a) Construye el diagrama de orbitales moleculares de las especies químicas CN, CO y  $CN^-$  y escribe la configuración electrónica de cada una de ellas. b) Comenta sus propiedades magnéticas y el orden de enlace.

**EJERCICIO 15.** Asumiendo que el diagrama de OM de la especie NO es semejante al del CO, deduce el orden de enlace en las especies  $NO^+$  y  $NO^-$ .

**EJERCICIO 16.** Construye el diagrama de OM para el  $B_2$ . ¿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 cual de los dos diagramas es el adecuado?

**EJERCICIO 17.** 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.

## 2. Orbitales Híbridos

**EJERCICIO 18.** Comenta la siguiente frase: *La molécula de metano es tetraédrica porque el átomo de carbono utiliza híbridos  $sp^3$ .*

**EJERCICIO 19.** Indica el tipo de hibridación que utiliza el átomo central en las siguientes moléculas:  $NF_3$ ,  $BrF_3$ ,  $BrF_5$ ,  $ICl_2^+$  e  $ICl_4^-$ ,  $XeOF_4$ ,  $XeO_3$ .

### Inicio del Test

1. ¿Cuál de las siguientes moléculas necesitará más energía para disociarse en sus átomos constituyentes?

$Cl_2$         $F_2$         $I_2$         $N_2$        Os

2. Utiliza la TOM para predecir qué especie de las siguientes no debería existir

$H_2^+$         $Be_2$         $Li_2$         $He_2^+$         $C_2$

3. Se sabe que la longitud de enlace en  $O_2$  es de 121 pm. Utiliza la TOM para elegir la especie con su distancia correcta.

$O_2^-$ , 115 pm        $O_2^{2-}$ , 110 pm        $O_2^-$ , 121 pm  
  $O_2^+$ , 133 pm        $O_2^+$ , 112 pm

4. ¿Cuántos enlaces  $\sigma$  y  $\pi$ , respectivamente, hay en la molécula de  $F_2C=CF_2$
- 5 y 1       4 y 2       5 y 2       4 y 1       6 y 0
5. ¿Qué geometrías son posibles para compuestos cuyos enlaces pueden describirse utilizando orbitales híbridos  $sp^3$ ?
- Tetraédrica, angular y bipirámide trigonal  
 Tetraédrica, lineal y angular  
 Tetraédrica, trigonal plana y lineal  
 Tetraédrica, piramidal trigonal y angular  
 Tetraédrica, piramidal trigonal y lineal
6. ¿En cuál de los siguientes compuestos hay orbitales híbridos  $sp^2$ ?
- $CH_3-CH_2-CH_3$   
  $CH_3-C\equiv CH$   
  $CH_3-CHOH-CH_3$   
  $CH_3-NH_2$   
  $CH_2=CH-C\equiv CH$
7. Utilice la teoría de orbitales moleculares para predecir cuál de las siguientes especies tiene la mayor energía de enlace
- $OF^+$         $NO^-$         $CF^+$         $NF$         $O_2$
8. Utiliza la teoría de OM para predecir qué especie tiene mayor energía de enlace
- $NO^-$         $CF^+$         $O_2$         $NF$         $OF^+$
9. Elige la molécula cuyo átomo central no utiliza hibridación  $sp^3d$
- $ICl_2^-$         $ICl_3$         $ICl_4^-$         $IBr_4^+$         $BrF_3$
10. ¿En qué geometrías moleculares idealizadas se podría presentar la utilización de híbridos  $sp^3$  del átomo central para describir el enlace?
- Sólo tetraédrica  
 Tetraédrica, trigonal plana y lineal  
 Tetraédrica y piramidal  
 Tetraédrica, angular y bipirámide trigonal  
 Tetraédrica, angular y piramidal
11. Elige la molécula en la cual existan orbitales híbridos  $sp^2$ :
- $H_3C-CH_3$   
  $HC\equiv CH$   
  $H_3C-O-CH_3$   
  $H_2C=CH_2$   
  $H_2S$

Final del Test

--	--