

Teoría de Orbitales Moleculares

Ejercicios

P1. (Control 2, Otoño 2001) Se introducen a presión CO_2 y NO_2 en un reactor a alta velocidad. Se sabe que sólo se formarán moléculas diatómicas y que éstas escaparán por un conducto en donde se encuentran 3 filtros... El primero es un arco voltaico que ioniza a la molécula con carga positiva, el segundo aplica un campo eléctrico que desvía a las moléculas polares y el tercero es un imán que desvía a las moléculas paramagnéticas...

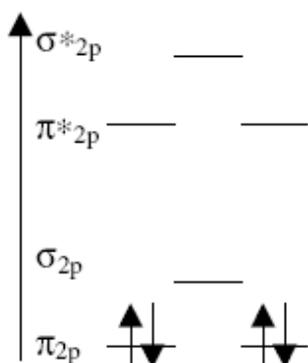
a) Si el arco voltaico está apagado, y los campos eléctricos y magnéticos encendidos. ¿Cuáles moléculas lograrán escapar?

b) Si ahora pongo primero el imán y luego el campo eléctrico (con el arco voltaico apagado). ¿Cuáles escapan?

c) Lo mismo que a) y b), pero con el arco voltaico encendido.

Solución: Lo primero que hacemos es escribir las configuraciones de las moléculas diatómicas... Si mezclo CO_2 y NO_2 , entonces las moléculas que puedo formar son... O_2 , C_2 , N_2 , CO , NO , CN . Con sus respectivos iones positivos. Existe una forma de escribir la configuración, con una notación parecida a la de la configuración electrónica...

Por ejemplo para C_2 :



Ésto se puede escribir también como:

$$C_2 = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2$$

Escribamos los elementos que faltan

$$N_2 = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\sigma_{2p})^2$$

$$O_2 = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^1 (\pi_{2py}^*)^1$$

$$CO = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2$$

$$NO = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^1$$

$$CN = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\sigma_{2p})^1$$

Ahora veamos los ionizados...

$$C_2^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^1$$

$$N_2^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\sigma_{2p})^1$$

$$O_2^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^1$$

$$NO^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2$$

$$CN^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2$$

$$CO^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^1$$

Es decir...

	Neutra	Ión (+)
C ₂	diamagnética apolar	paramagnética polar
O ₂	paramagnética apolar	paramagnética polar
N ₂	diamagnética apolar	paramagnética polar
CO	diamagnético polar	diamagnética polar
NO	paramagnético polar	diamagnética polar
CN	paramagnético polar	paramagnética polar

* Los iones son afectados por campos eléctricos...

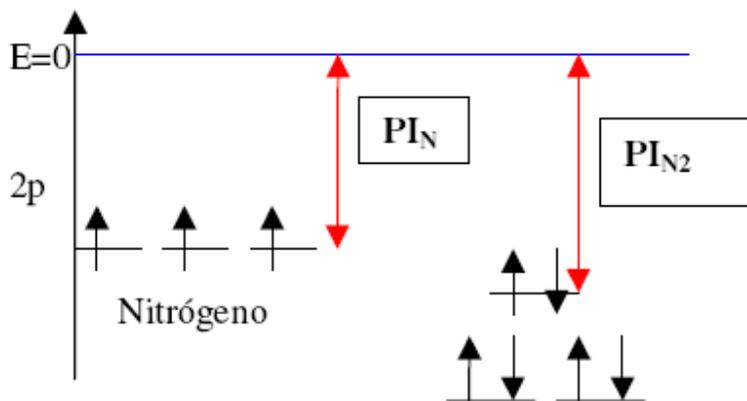
- Logran escapar C₂ y N₂.
- Logran escapar C₂ y N₂.
- No escapa ninguno.

P2. (P1.a Examen Recuperativo 2004/1) PROPUESTO. Diga si existen las siguientes moléculas diatómicas. H-He, H₂, He₂ y He₂⁺

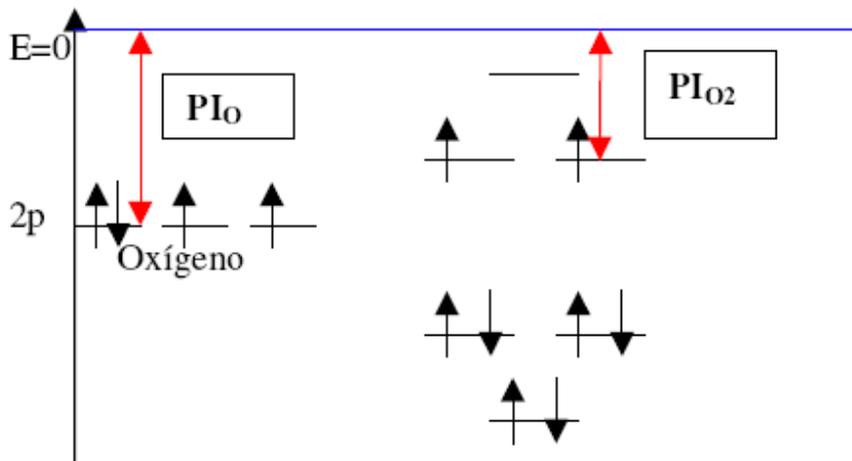
HINT: Como vimos en clase, las moléculas existen si el Orden de Enlace es mayor estricto que cero.

P3. (P3 Examen 2004/1) El Potencial de Ionización del Oxígeno atómico es mayor que el PI del Oxígeno diatómico. A su vez el PI del Nitrógeno atómico es menor que el PI del Nitrógeno diatómico. Explique.

Solución: Hacemos el diagrama energético...



Recordemos que los orbitales enlazantes poseen MENOR energía que los orbitales de partida. Ahora para el Oxígeno...



Acá recordemos que los orbitales antienlazantes poseen MAYOR energía que los orbitales de partida.

Otros conceptos:

- El orden de enlace aparte de determinar el tipo de enlace que posee la molécula y saber si ésta existe o no. También nos entrega la longitud del tipo de enlace. A medida que el orden de enlace aumenta, la longitud de enlace disminuye. O sea un enlace triple es más corto que un enlace simple.
- La propiedad de paramagnetismo se puede aplicar a átomos... Por ejemplo, la configuración electrónica del Nitrógeno: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ posee electrones desapareados, por lo tanto el Nitrógeno atómico es paramagnético.

P4. Suponga que el oxígeno diatómico puede ganar o perder 2 o más electrones. Con esto, ordene las moléculas de mayor a menor longitud de enlace.

$$O_2^{-2} = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^2 (\pi_{2py}^*)^2 \text{OE} = 1$$

$$O_2^- = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^2 (\pi_{2py}^*)^1 \text{OE} = 1.5$$

$$O_2 = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^1 (\pi_{2py}^*)^1 \text{OE} = 2$$

$$O_2^+ = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2px}^*)^1 \text{OE} = 2.5$$

$$O_2^{+2} = (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 \text{OE} = 3$$

$$O_2^{+2} < O_2^+ < O_2 < O_2^- < O_2^{-2}$$

P5. Científicos han descubierto un meteorito compuesto por elementos X,Y,M. Los datos que poseen los científicos son los siguientes...

- **M se ve afectado por campos magnéticos y su número de protones varía entre 18 y 20.**
- **El número de protones de X e Y varían entre 6 y 8.**
- **X₂ es diamagnética y X₂⁻ es menos estable que su forma neutra.**
- **XY es isoelectrónica con X₂⁺**

Para M

Ar(Z=18) es diamagnético

K(Z=19) es paramagnético (sirve)

Ca(Z=20) es diamagnético.

M=K (Potasio).

X e Y pueden ser C, N u O.

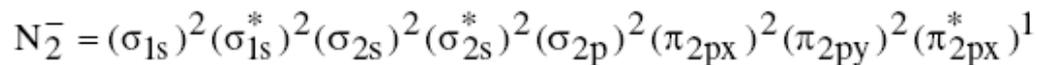
C₂ es diamagnética

N₂ es diamagnética

O₂ es paramagnética (no sirve)

C₂⁻ no puebla orbitales antienlazantes (estable)

N₂⁻ puebla orbitales antienlazantes (inestable)



X=N (Nitrógeno)

N₂⁺ posee 13 electrones en su configuración...

NO posee 15 electrones

CN posee 13 electrones

Y=C (Carbono)