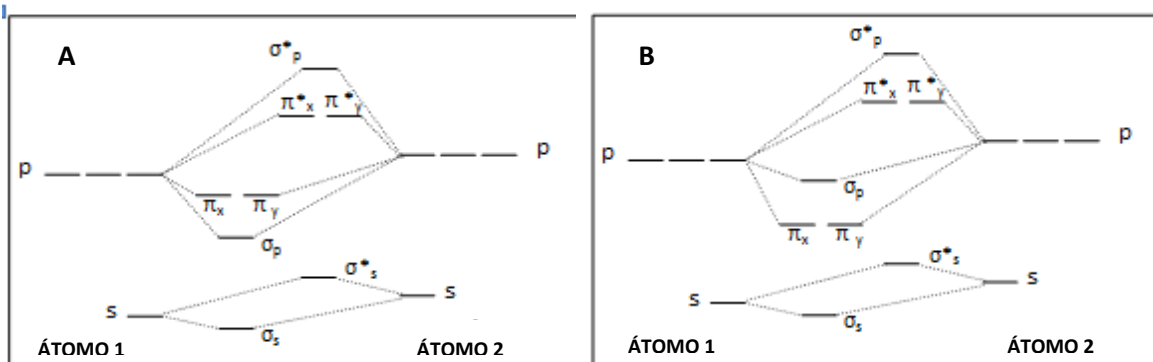


Soluciones de Teoría del orbital molecular. Moléculas diatómicas heteronucleares

1. Para las siguientes moléculas diatómicas heteronucleares, indicar:
- El diagrama de orbitales moleculares que le corresponde: A o B



- Indicar justificadamente que átomo es el átomo 1 y cuál el átomo 2.
- Escribir la configuración molecular.

A. BN

$$Z(\text{B})=5; Z(\text{N})=7$$

- Puesto que el número atómico ambos átomos es inferior a 7 le corresponde el diagrama de orbitales moleculares modificado (B). Los orbitales π enlazantes tienen menor energía que los σ_p enlazantes.
- El átomo 1 es el átomo de N ya que es el más electronegativo y por tanto:
 - Los orbitales atómicos tienen menor energía
 - Los orbitales moleculares enlazantes están desplazados hacia él.

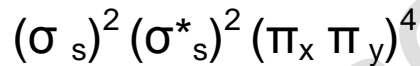
El átomo 2 es el átomo de B ya que es el menos electronegativo y por tanto:

- a. Los orbitales atómicos tienen mayor energía
- b. Los orbitales moleculares antienlazantes están desplazados hacia él

- c) La configuración electrónica del boro es $1s^2 2s^2 2p^1$ y la del nitrógeno $1s^2 2s^2 2p^3$, por tanto el átomo de boro tiene 3 electrones de valencia y el del nitrógeno 5.

3 electrones de valencia (B) + 5 electrones de valencia (N) = 8 electrones

La configuración molecular es:



B. CO

$Z(C)=6$; $Z(O)=8$

- a) Aunque el C tiene un número atómico inferior a 7, dado que la molécula contiene oxígeno, le corresponde el diagrama de orbitales moleculares no modificado (A). Los orbitales σ_p enlazantes tienen menor energía que los π enlazantes.
- b) El átomo 1 es el átomo de O ya que es el más electronegativo y por tanto:
 - a. Los orbitales atómicos tienen menor energía
 - b. Los orbitales moleculares enlazantes están desplazados hacia él.

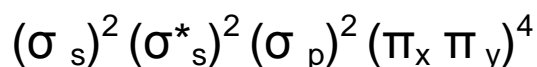
El átomo 1 es el átomo de C ya que es el menos electronegativo y por tanto:

- a. Los orbitales atómicos tienen mayor energía
- b. Los orbitales moleculares antienlazantes están desplazados hacia él

- c) La configuración electrónica del carbono es $1s^2 2s^2 2p^2$ y la del oxígeno es $1s^2 2s^2 2p^4$, por tanto el átomo de C tiene 4 electrones de valencia y el átomo de oxígeno tiene 6 electrones de valencia.

4 electrones de valencia (C) + 6 electrones de valencia (O)
= 10 electrones

La configuración molecular es:



C. CN⁻

Z(C)= 6; Z(N)=7

a) Puesto que el número atómico ambos átomos es inferior a 7 le corresponde el diagrama de orbitales moleculares modificado (B). Los orbitales π enlazantes tienen menor energía que los σ_p enlazantes.

b) El átomo 1 es el átomo de N ya que es el más electronegativo y por tanto:

- a. Los orbitales atómicos tienen menor energía
- b. Los orbitales moleculares enlazantes están desplazados hacia él.

El átomo 2 es el átomo de C ya que es el menos electronegativo y por tanto:

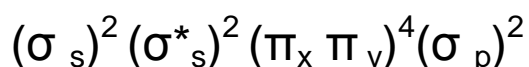
- c. Los orbitales atómicos tienen mayor energía
- d. Los orbitales moleculares antienlazantes están desplazados hacia él

c) La configuración electrónica del carbono es $1s^2 2s^2 2p^2$ y la del oxígeno es $1s^2 2s^2 2p^3$, por tanto el átomo de C tiene 4 electrones de valencia y el átomo de nitrógeno tiene 5 electrones de valencia.

4 electrones de valencia (C) + 5 electrones de valencia (N)
= 9 electrones

Pero dado que es un anión, hay sumarle 1 electrón. Por tanto hay que colocar 10 electrones

La configuración molecular es:



D. SCI^+

$Z(\text{S})=16$; $Z(\text{Cl})=17$

a) Puesto que ambos átomos tienen un número atómico superior a 7, le corresponde el diagrama de orbitales moleculares no modificado (A). Los orbitales σ_p enlazantes tienen menor energía que los π enlazantes.

b) El átomo 1 es el átomo de Cl ya que es el más electronegativo y por tanto:

- Los orbitales atómicos tienen menor energía
- Los orbitales moleculares enlazantes están desplazados hacia él.

El átomo 2 es el átomo de S ya que es el menos electronegativo y por tanto:

- Los orbitales atómicos tienen mayor energía
- Los orbitales moleculares antienlazantes están desplazados hacia él

c) La configuración electrónica del azufre es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ y la del cloro es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$, por tanto el átomo de S tiene 6 electrones de valencia y el átomo de cloro tiene 7 electrones de valencia.

6 electrones de valencia (O) + 7 electrones de valencia (Cl)
= 13 electrones

Pero dado que es un catión, hay restarle 1 electrón. Por tanto hay que colocar 12 electrones

La configuración molecular es:

