

## TEST DE QUÍMICA CON ENUNCIADOS FORMATIVOS

### ENLACE COVALENTE 2

23. Inicialmente se introdujo el término “híbrido de resonancia”, propuesto por Arndt en 1924, para explicar el comportamiento de la molécula de benceno, debido a que explicaba con un supuesto e irreal movimiento oscilante de los electrones en la justificación de la aparición de sus dobles enlaces, en las fórmulas de Kekulé. Sin embargo actualmente se concibe la resonancia como:
- La oscilación de los electrones en un enlace químico
  - La posibilidad de que la estructura electrónica de una molécula se pueda describir por la contribución de varias configuraciones distintas
  - La necesidad para justificar el comportamiento químico de algunas moléculas
  - Una nueva teoría de enlace químico

#### SOLUCIÓN:

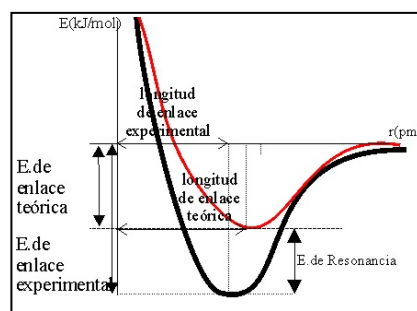
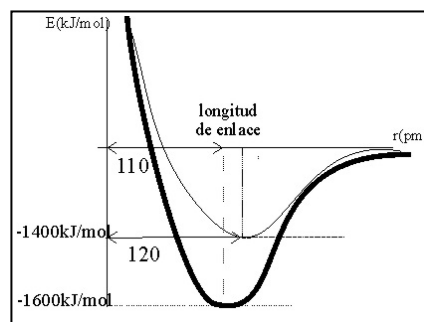
Las formas resonantes son disposiciones electrónicas de una misma molécula, que no la representan por sí mismas ya que no existen, sino a través de la contribución en mayor o menor proporción de todas ellas, y que justifican las propiedades físicas reales, dentro del mismo tipo de enlace. A lo largo de las diferentes cuestiones presentadas se afirmarán estas condiciones. Por lo tanto es correcta la respuesta b. Las propiedades químicas hacen referencia fundamentalmente a las reacciones específicas, que generalmente no suelen modificarse por las formas resonantes.

24. Si te dan el esquema de la figura para representar la energía de enlace real de una molécula (energía experimental) y la que corresponde a la fórmula que escribes para ella (energía teórica), sabiendo que la longitud de un doble enlace es de 120 pm (pico metros =  $10^{-12}$  m), podrá decir que :
- Que existen otras fórmulas para la misma molécula
  - Que tiene la energía de resonancia de 200 kJ
  - Que las fórmulas no descritas deben tener algún triple enlace
  - Que no sigue la ley del octeto de Lewis

Indica lo que no sea

#### SOLUCIÓN:

La diferencia energética entre el valor real, y el teórico obtenido se denomina Energía de Resonancia. Cuanto menor sea, el sistema estará mejor representado por la fórmula electrónica atribuida. Ello indica que existen otras disposiciones electrónicas capaces de representar a la molécula. Estas formas se denominan formas resonantes, vinculadas a la deslocalización de los electrones en la molécula. En este caso la energía de resonancia es 200 kJ/mol. Como la distancia real es menor de 120 pm, ello implica que entre las fórmulas electrónicas alguna tendrá un triple enlace. Sin embargo el que existan formas resonantes no implica que no se siga la teoría del octeto. Por lo tanto la d, es la propuesta incorrecta.



25. Aunque Abegg había anunciado la necesidad de los elementos de rodearse de 8 electrones, ya en 1904, puede considerarse a Lewis, padre de la teoría del octeto, y del enlace covalente, al introducirla desde 1916 a 1918. Según Lewis en la molécula de dióxido de carbono, este formaba dos dobles enlaces con los oxígenos, rodeándose por lo tanto de 8 electrones. Sin embargo, sus propiedades físicas, como la distancia de enlace y la energía de la molécula real son menores que los debidos a dicha estructura, por todo ello cabe predecir que dicha molécula:

- Tiene triples enlaces
- No cumple la teoría de Lewis
- Tiene enlaces sencillos
- Tiene formas resonantes con triples enlaces

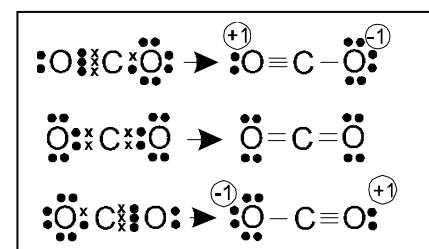
SOLUCIÓN:

El comportamiento de la molécula de  $\text{CO}_2$ , podría hacerse como una compartición de dos pares de electrones del C con cada oxígeno, para completar el octeto. Sin embargo la energía de formación de la molécula debida a esa configuración con dos dobles enlaces, es de 1475kJ/mol, mientras que la experimental es de 1596kJ/mol, por lo que existirá una diferencia energética de 121kJ/mol que es el primer síntoma para diagnosticar que existen más formas que esa. Pero no sólo es eso; si se considera la forma explicada, la longitud de enlace  $\text{C}=\text{O}$  es de 122pm, mientras que la experimental es de 115pm, teniendo en cuenta que la distancia  $\text{C}-\text{O}$  cuando existe un triple enlace es de 110pm, cabe esperar que en la descripción de la molécula de  $\text{CO}_2$  existan formas con algún triple enlace. Para redistribuir los electrones para escribir las formas extremas o canónicas deberán seguirse una serie de reglas. Las comenzó el propio Langmuir y las completó Halferich. Una explicación de las mismas implicaría que:

1ª. La disposición de los núcleos atómicos que forman la molécula deberá tener la menor repulsión posible, que se podrá valorar extrayendo los electrones de valencia, y considerando la repulsión coulombiana entre núcleos con sus electrones internos. Así para el  $\text{CO}_2$ , los núcleos son  $\text{C}^{+4}$ ,  $\text{O}^{+6}$  y  $\text{O}^{+6}$ , y la menor repulsión entre ellos se produce en la disposición  $\text{O}-\text{C}-\text{O}$ , no en la  $\text{O}-\text{O}-\text{C}$  ni en la  $\text{C}-\text{O}-\text{O}$  (Véase el cuadro adjunto). En caso de similares repulsiones entre cargas, se dispondrá como átomo central el de mayor volumen ya que así al aumentar las distancias, las repulsiones serán menores. Esta disposición deberá mantenerse fija.

Disposic	F.Repulsiva proporcional a $q^2$
C-O-O	$(+4.+6)+(6.+6)=+60$
O-C-O	$(+4.+6)+(4.+6)=+48$
O-O-C	$(+6.+6)+(4.+6)=+60$

2ª. El número total de electrones de valencia deberá compartirse de forma que cada uno tenga 8 (octeto). De esa forma los pares compartidos se determinarán por la diferencia entre los electrones ideales ( $8 \times 3 = 24$ , en el caso del  $\text{CO}_2$ ) y los 16 teóricos, dividido por dos (se trata de pares).



Así entre el C y los O deberán compartirse 8 electrones que forman 4 pares, que podrán disponerse 3 y 1, 2 y 2 y 1 y 3.

3ª. Se dispone la carga formal sobre cada átomo

Así las posibles formas resonantes se describen reciben el nombre de canónicas que son las posiciones extremas.

Cuanto mayor número de formas existan, mas deslocalizados estarán los electrones, la energía del sistema será menor, y por lo tanto más estable, y la energía de resonancia será menor. Conjuntamente las tres formas representarán a la molécula de  $\text{CO}_2$ . Contribuirá menos la forma molecular que corresponda a una estructura en la que las cargas formales sean muy grandes, o con cargas formales positivas sobre átomos electronegativos. Por lo tanto sólo son correctas las respuestas b y c

26\*. Las moléculas resonantes se caracterizan por poseer propiedades diferentes de las derivadas de sus aparentes configuraciones electrónicas teóricas. Muchas veces a una molécula resonante se la compara con ejemplos faunísticos de un animal híbrido real hipotéticamente obtenido a partir de formas irreales, ya que realmente no existen. Así Huehey la asemeja a un halcón, posible híbrido mitológico del dios egipcio Ra (el sol), con cabeza de halcón, con una arpía (cara de mujer y garras de ave de rapiña). Estos símiles se hacen porque:

- Las fórmulas de moléculas resonantes no existen como moléculas independientes
- No se pueden formular sino en conjunto
- Son todas ellas las que indicarían el comportamiento real de la molécula
- No se pueden formular

SOLUCIÓN:

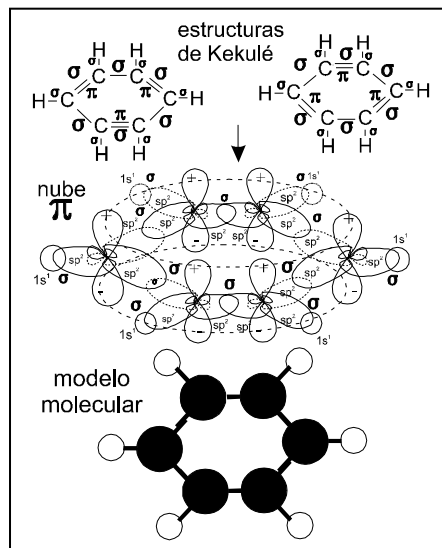
Por lo dicho anteriormente son correctas las soluciones b y c

27. Aunque en muchos libros de texto leerás que el benceno deriva del griego, no es así, sino que procede del árabe lubenyawi, por pérdida del prefijo. La palabra venía a significar "incienso de java" pues extraído de resina era empleado por los malayos para venerar sus dioses. Esa especial aromaticidad tiene su origen en otra aromaticidad, con significado especial químico, característica de compuestos bencénicos y derivados. Esta aromaticidad se basa en:
- El olor de los compuestos
  - La posibilidad de que formen moléculas resonantes
  - La deslocalización molecular en un anillo
  - La formación de nuevos enlaces

**SOLUCIÓN:**

La hibridación de los OA de los carbonos en la molécula de benceno  $C_6H_6$  permitirá no solo justificar su geometría plana hexagonal, sino su deslocalización electrónica total de los electrones p en anillo (aromaticidad).

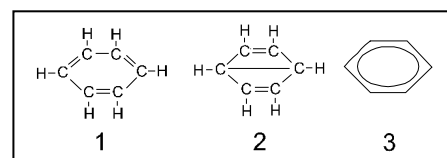
Las fórmulas de Kekulé con 3 dobles enlaces alternados sobre el anillo hexagonal, implican que todos los C hibridan en  $sp^2$  sus OA, dejando un OA p sin hibridar perpendicular al plano de los híbridos. La estructura del benceno será plana. Los ángulos de enlace de  $120^\circ$ , corresponden a los interiores del hexágono, con lo que la superposición  $\sigma$  entre los  $sp^2$  de los carbonos, será óptima; así se formarán 6 enlaces  $\sigma$  C-C, y otros 6  $\sigma$  C-H, en el plano molecular. Los OA p de cada carbono superpondrán entre sí formando una nube  $\pi$  a ambos lados del plano molecular, con lo cual la deslocalización de estos electrones se efectúa aularmente en toda la molécula anular tal como se indica en el dibujo. Esta situación se conoce como aromaticidad, surgiendo sólo el nombre, del peculiar aroma del benceno y sus derivados. Se da en todas aquellas moléculas con anillos, cuyos electrones en OA p sean  $4n+2$  (Regla de Hückel), e introdujo toda una terminología química de los derivados del benceno, cuya química especial recibe el nombre de "aromática". Por lo tanto la solución correcta es la c.



28. Wheland, conocido químico físico orgánico, profesor de la universidad de Chicago, ponía como ejemplo de una molécula resonante, el caso de la mula, híbrido del caballo y de la burra, sin parecerse a ninguno de los dos, posee propiedades de ambos.

A partir de aquí se empleó la expresión de híbrido de resonancia y el concepto de hibridación en química. Aunque este ejemplo no es muy correcto, permite recordar lo que es una molécula resonante y posiblemente hasta qué son sus formas canónicas. De las fórmulas dadas en la figura adjunta para el benceno, la más representativa es la:

- 1
- 2
- 3
- Ninguna de ellas



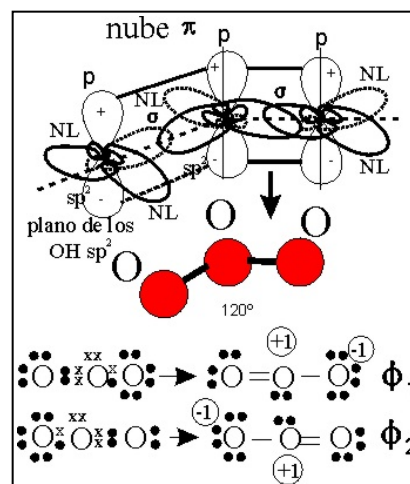
**SOLUCIÓN:**

La deslocalización a toda la molécula de la nube pi, viene representada mejor por la fórmula 3, propuesta por Robinson en el año 1928, que se explica perfectamente en la cuestión anterior

29. El ozono es una forma alotrópica del oxígeno que se llama así por producir un olor característico que se puede apreciar en el ambiente después de una tormenta, con descargas eléctricas, ya que se puede formar así a partir del oxígeno. Sin embargo mientras que la molécula de éste tiene un doble enlace y no tiene resonancia, no ocurre lo mismo con el ozono que:
- Tiene una geometría lineal
  - Presenta formas resonantes con 2 estructuras contribuyentes
  - No cumple la ley del octeto
  - Los átomos de oxígeno están en una hibridación  $sp^3$

**SOLUCIÓN:**

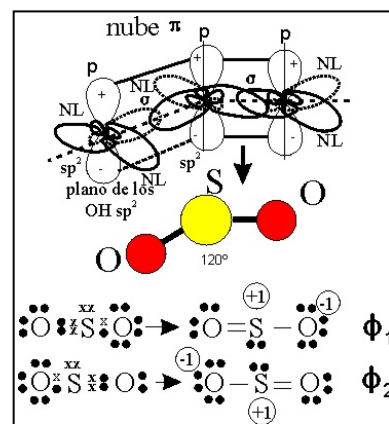
En el ozono,  $O_3$ , dado que  $O(s^2p^4)$ , los 3 O, disponen de 18 electrones externos, y como según la teoría del octeto, deberían tener 24, por lo tanto tendrán que compartir 6 electrones, que disponen en tres pares. Ello hace que aparezcan dos formas simétricas, según la posición del doble enlace. Como se aprecia en la figura (teoría de Lewis). En el reparto electrónico el O central tendrá carga formal  $QF+1$  (presenta 5 electrones de los 6 iniciales) mientras que otro O, con 7 electrones, la tendrá  $-1$ . Por la razón expuesta el  $O_3$ , se podrá representar por la contribución a partes iguales de dos formas  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{M}$ . Al representar un doble enlace, el oxígeno central deberá estar en un hibridación  $sp^2$ , disponiendo el OA p perpendicularmente, de esta forma hay una deslocalización electrónica formando una nube pi, como se observa en la figura superior. Esta forma de expresión resume las dos híbridos de resonancia con estructuras de Lewis. Es correcta la b.



30. Cuando humea un volcán, el aire a su alrededor se hace sofocante, ello es debido a la formación de dióxido de azufre. Sin embargo hace 2000 años, se consideraría un proceso de culto divino, en el que Hafaistos (Vulcano de los romanos), sepultado por Zeus (Júpiter), en la Tierra, ofrecía sus presentes a los dioses del olimpo. Por eso el azufre o zufre, deriva no del árabe, sino del griego zeion, que lo hace de Zeus. Este óxido presenta gran estabilidad, de su estructura electrónica podrá asegurar que:
- Tiene una geometría lineal
  - Presenta formas resonantes con 2 estructuras contribuyentes
  - Presenta dos dobles enlaces
  - El átomo de azufre está en una hibridación  $sp^3$

**SOLUCIÓN:**

En el  $SO_2$ , dado que  $S(s^2p^4)$ , los 3 S, disponen de 18 electrones externos, y como según la teoría del octeto, deberían tener 24, por lo tanto deberán compartir 6 electrones, que disponen en tres pares. Ello hace que aparezcan dos formas simétricas, según la posición del doble enlace. Como se aprecia en la figura (teoría de Lewis). En el reparto electrónico el S central tendrá carga formal  $QF+1$  (presenta 5 electrones de los 6 iniciales) mientras que un O, con 7 electrones, la tendrá  $-1$ . Por la razón expuesta el  $SO_2$ , se podrá representar por la contribución a partes iguales de dos formas  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{M}$ . Al representar un doble enlace, el azufre central deberá estar en un hibridación  $sp^2$ , (geometría angular), disponiendo el OA p perpendicularmente, de esta forma hay una deslocalización electrónica formando una nube pi, como se observa en la figura superior. Esta forma de expresión resume las dos híbridos de resonancia con estructuras de Lewis, pero no podría presentar dos dobles enlaces  $O=S=O$ . La molécula tiene momento dipolar, y esta disposición no la presentaría por ser lineal y anularse los momentos dipolares de enlace. Por eso la única respuesta correcta es la b.



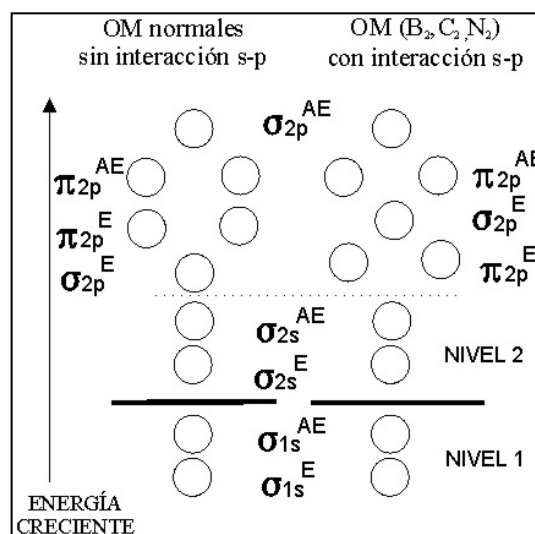


33. Un estudiante de química conoce a Hund al emplear sus leyes espectroscopicas para rellenar de electrones los orbitales atómicos. Sin embargo lo que no suele saberse es que en 1928, fue el primero en desarrollar la teoría de orbitales moleculares (T.O.M.) años antes que Lennart y Mulliken, teoría que se basaba en la combinación lineal de las funciones de onda atómica (C.L.O.A.). Su suma producía un OM enlazante y su resta el antienlazante, con diferente energía, de tal forma que los electrones de toda la molécula debería rellenar estos OM, tal como los atómicos, o sea de menor a mayor energía, siendo el HOMO, el orbital molecular ocupado de mayor energía y el LUMO, el vacío de menor energía y el orden de enlace, el n° de electrones en OM enlazantes- n° de electrones antienlazantes dividido entre dos. Según eso y si ha estudiado dicha teoría podrá asegurar que:

- Sus nombres derivan del tipo de superposición orbital al realizar la CLOA
  - El HOMO de una molécula diatómica homonuclear con 14 electrones es un OM pi 2p
  - El LUMO de una molécula diatómica homonuclear con 10 electrones es un OM sigma 2p
  - El orden energético de los OM varía según el número atómico de cada elemento
- Indica lo que no sea

**SOLUCIÓN:**

Se parte del orden energético para  $14e(N_2)$  y  $10e(B_2)$ , que corresponden a la gráfica de la derecha. Como en cada OM, de distinta energía se sitúan 2 electrones con espines contrarios el HOMO para 14 electrones es un sigma 2p enlazante, mientras que el LUMO para 10 electrones es el sigma 2p enlazante, puesto que los 2 OM pi enlazante, se llenan individualmente siguiendo las leyes de Hund, por lo tanto el siguiente OM vacío de menor energía es un sigma 2p. Como se aprecia en la gráfica, el orden energético depende del número atómico de los elementos que combinan sus OA. Por lo tanto la propuesta incorrecta es la b.

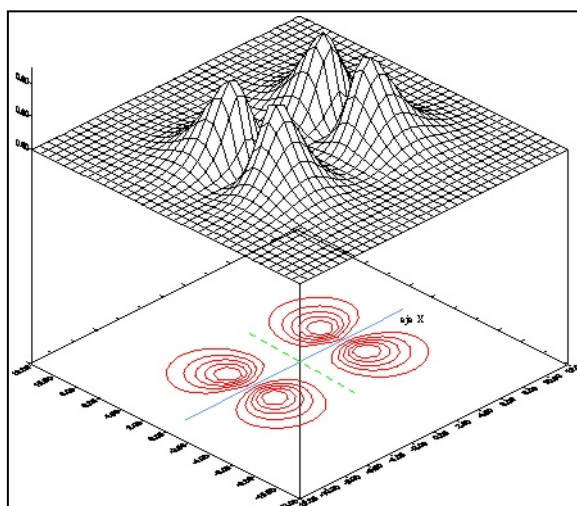


34. El dibujo que te dan corresponde a la imagen computorizada de un orbital molecular, que suele dibujarse por la proyección sobre el plano. Analizada dicha imagen se podría asegurar que :

- Se dibuja un OM sigma
- Se dibuja un OM pi
- Tiene un plano nodal
- tiene 2 planos nodales

**SOLUCIÓN**

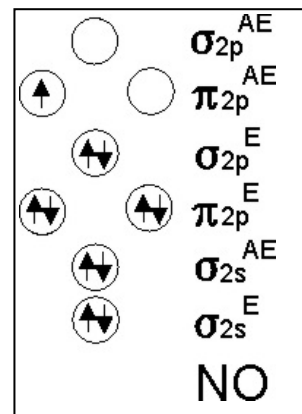
El dibujo nos dice que hay un plano nodal entre las posiciones de los núcleos de los dos átomos lo que implica un OM antienlazante, pero a su vez aparece otro plano nodal, en el eje de enlace, lo cual es característico de los OA p, por lo tanto se trata de un OM pi antienlazante, con dos planos nodales.





35. Lewis consideró impropio el nombre de enlace covalente, propuesto por Langmuir en 1919, denominándolo homopolar, en oposición al heteropolar aplicado por Kossel a los compuestos iónicos, sin embargo aplicó un curioso nombre a las moléculas en las que no se cumplía exactamente la regla del octeto, como la del óxido nítrico NO. La teoría de OM, justifica plenamente su estructura ya que el electrón número 15, semillena un OM:

- a) Sigma 2p enlazante      b) Sigma 2s antienlazante  
c) Pi 2p enlazante      d) Pi 2p antienlazante



SOLUCIÓN:

Se parte del diagrama energético anterior, comprobándose que el HOMO de esta molécula es un pi 2p antienlazante, teniendo gran movilidad ya que hay dos OM de la misma energía en los que se puede disponer, en cambio el LUMO, sería el sigma 2p antienlazante. Por lo tanto sólo es correcta la propuesta d.

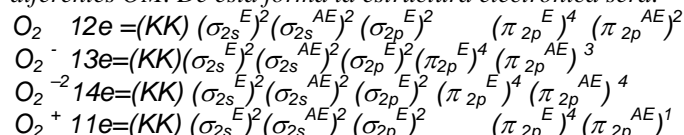
36. Aunque no lo crea, el oxígeno es el elemento químico que mas nombres ha tenido en la historia, su descubrimiento se lo atribuyen científicos de tres países diferentes (Inglaterra, Francia y Suecia) y su molécula que es paramagética, en estado líquido, es azul. La molécula O<sub>2</sub>, puede ganar y perder electrones, formando estructuras O<sub>2</sub><sup>-</sup>, O<sub>2</sub><sup>-2</sup>, y O<sub>2</sub><sup>+1</sup>. De todas ellas la mas estable dirá que es la:

- a) O<sub>2</sub>      b) O<sub>2</sub><sup>-</sup>      c) O<sub>2</sub><sup>+</sup>      d) O<sub>2</sub><sup>-2</sup>  
mientras que la más paramagnética será la:  
a) O<sub>2</sub>      b) O<sub>2</sub><sup>-</sup>      c) O<sub>2</sub><sup>+</sup>      d) O<sub>2</sub><sup>-2</sup>

SOLUCIÓN:

Se parte del diagrama de energías aplicado al oxígeno (el de la izquierda del la solución 32) O 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup> pone en juego seis electrones, y la molécula O<sub>2</sub>, por lo tanto las diferentes formas iónicas implicarán 13, 14 y 11 electrones, que rellenarían por orden energético los diferentes OM. De esta forma la estructura electrónica será:

X <sub>2</sub>	O.E.	EE(kJ/mol)	L.E.(pm)
O <sub>2</sub>	2	493,14	121
O <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1,5	392,31	126
O <sub>2</sub> <sup>-2</sup>	1		149
O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2,5	642,15	112



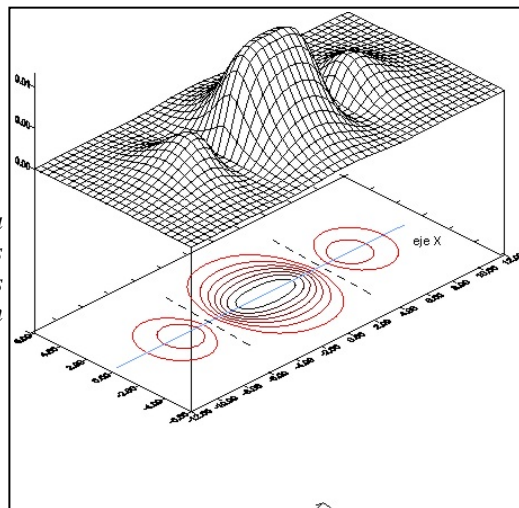
La más paramagnética será la que dispone de 2 electrones en los OM π<sub>2p</sub><sup>AE</sup> o sea la O<sub>2</sub> ya que siguiendo la ley de Hund entrarán con los espines desaparejados y la menos la O<sub>2</sub><sup>-2</sup> con todos sus espines desaparejados. La longitud de enlaces es inversa al orden de enlace, mientras que la estabilidad es directamente proporcional, por lo tanto la de mayor longitud de enlace será la O<sub>2</sub><sup>-2</sup>, y la más estable la O<sub>2</sub><sup>+</sup>.

37. Si le dan el dibujo de la formación de un OM, podrá asegurar que se trata de un OM:

- a) Del tipo pi  
b) Antienlazante  
c) Formado por la CLOA de 2OA px  
d) Formado por la CLOA de 2OA s

SOLUCIÓN

Del dibujo se saca la conclusión que se han superpuesto para hacer la CLOA, dos OA px, para formar un OM sigma. Los planos nodales que aparecen, son debidos a los planos nodales de origen atómico, de los OA px. Por lo tanto la única solución correcta es la c



38. Las moléculas de los halógenos presentan diferente color, desde la de cloro que es verdoso (cloro significa verde en griego), hasta la de bromo que es rojiza y la de yodo, violeta (yodo significa violeta en griego), y el color depende de la diferencia energética entre el HOMO y el LUMO, de dichas moléculas que en dichas moléculas:

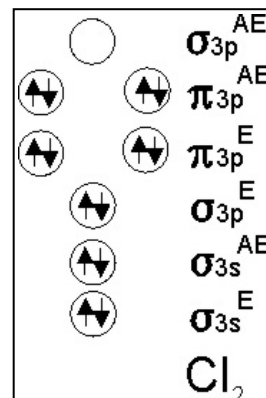
a) El HOMO es un pi 3p enlazante                      b) El LUMO es un OMpi3p antienlazante

c) La separación entre ambos aumenta con el número atómico

d) La separación entre ambos disminuye con el número atómico

SOLUCIÓN

Por la gráfica dada del orden energético se aprecia que el HOMO es un OM pi3p antienlazante, mientras que el LUMO, es un sigma3p antienlazante. Dado que el color se debe a la absorción energética, y los electrones saltan mediante esta absorción del HOMO al LUMO, el color violeta del yodo implica una absorción de cerca de  $18000\text{cm}^{-1}$ , mientras que el verde, es de  $14000\text{cm}^{-1}$ , (véase la gráfica) por lo que al aumentar el número atómico aumenta la separación energética entre HOMO y LUMO, o sea que la respuesta correcta es la c



Radiación absorbida	UV	Violeta	Indigo	Azul	Azul verdoso	Verde	Amarillo limón	Amarillo	Naranja	Rojo	Púrpura
$\lambda$ (nm)	<400	410	430	480	500	530	560	580	610	680	720
Energía ( $\text{cm}^{-1}$ )	25000	24400	23200	20800	20000	18900	17900	17300	16400	14700	13900
Color del compuesto	Incoloro	Amarillo limón	Amarillo	Naranja	Rojo	Púrpura	Violeta	Indigo	Azul	Azul verdoso	Verde

39. El cloro es un elemento muy electronegativo como debe saber, y por lo tanto con capacidad para atraer electrones, sin embargo la molécula de cloro tiene una energía de enlace de 237 kJ/mol, pero si pierde electrones, su energía de enlace es de 420,8 kJ/mol. Este hecho aparentemente contradictorio es debido a:

a) El orden de enlace aumenta

b) El orden de enlace disminuye

c) El HOMO varía de uno a otro

d) El LUMO varía de uno a otro

SOLUCIÓN

La mejor forma de hacer estos problemas, es a partir de la TOM, determinando el orden de enlace, ya que cuando mayor sea la energía de enlace también lo será. Cada Cl  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ , pone en juego los electrones de valencia y La ordenación del  $\text{Cl}_2$  presupone acomodar 14 electrones en los OM del nivel 3:

$$(KK), (LL)(\sigma_{3s}^E)^2(\sigma_{3s}^{AE})^2(\sigma_{3p}^E)^2(\pi_{3p}^E)^4(\pi_{3p}^{AE})^4,$$

siendo el orden de enlace =  $(8-6)/2=1$  y la molécula diamagnética.

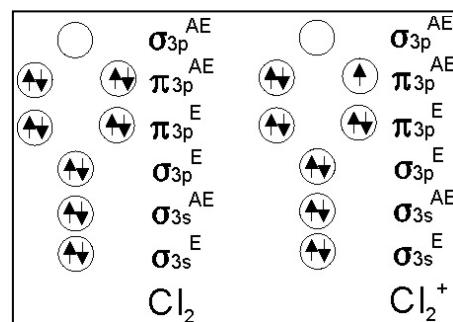
Si se extrae un electrón la distribución electrónica para 13 electrones será:

$$(KK), (LL)(\sigma_{3s}^E)^2(\sigma_{3s}^{AE})^2(\sigma_{3p}^E)^2(\pi_{3p}^E)^4(\pi_{3p}^{AE})^3,$$

la molécula ion será paramagnética, y el orden de enlace  $(8-5)/2=1,5$ .

Al ser mayor éste, la energía de enlace también lo será. Véase la figura.

Sin embargo ni el HOMO ni el LUMO varían de una forma a otra. Por lo tanto sólo es correcta la propuesta a.





40. El estudiante de enseñanzas medias, asocia el nombre de Rutherford, al descubrimiento del núcleo atómico, el modelo atómico planetario, e incluso ala radiactividad y las reacciones nucleares. Sin embargo siglo y medio antes, vivió otro Rutherford, este inglés, que descubrió uno de los elementos indirectamente vitales para el hombre: el nitrógeno, que es el componente más abundante de la atmósfera. De las formas que te dan para la molécula de nitrógeno:  $N_2, N_2^-, N_2^+,$  y  $N_2^{-2}$ . De todas ellas la más estable dirá que es la:

- a)  $N_2$                       b)  $N_2^-$                       c)  $N_2^+$                       d)  $N_2^{-2}$

mientras que la más paramagnética será la:

- a)  $N_2$                       b)  $N_2^-$                       c)  $N_2^+$                       d)  $N_2^{-2}$

**SOLUCIÓN**

Operando como en el test 34, en este caso el  $N 1s^2 2s^2 2p^3$  pone en juego cinco electrones, y la molécula 10, por lo tanto las diferentes formas iónicas implicarán 11, 12 y 9 electrones, produciéndose una modificación en los niveles energéticos para OM. De esta forma la estructura electrónica será:

$N_2$	$10e = (KK) (\sigma_{2s}^E)^2 (\sigma_{2s}^{AE})^2 (\pi_{2p}^E)^4 (\sigma_{2p}^E)^2$	OE=3
$N_2^-$	$11e = (KK) (\sigma_{2s}^E)^2 (\sigma_{2s}^{AE})^2 (\sigma_{2p}^E)^2 (\pi_{2p}^E)^4 (\pi_{2p}^{AE})^1$	OE=2,5
$N_2^+$	$9e = (KK) (\sigma_{2s}^E)^2 (\sigma_{2s}^{AE})^2 (\pi_{2p}^E)^4 (\sigma_{2p}^E)^1$	OE=2,5
$N_2^{-2}$	$12e = (KK) (\sigma_{2s}^E)^2 (\sigma_{2s}^{AE})^2 (\sigma_{2p}^E)^2 (\sigma_{2p}^E)^2 (\pi_{2p}^E)^4 (\pi_{2p}^{AE})^2$	OE=2

La más paramagnética será la que dispone de 2 electrones en los OM  $\pi_{2p}^{AE}$  ya que siguiendo la ley de Hund entrarán con los espines desaparejados. Cederá mejor sus pares de electrones aquellos que se estabilicen cuando lo hagan, o sea que aumenten el orden de enlace en este caso también la  $N_2^{-2}$

41. Aunque posiblemente no te lo creas, la segunda molécula más abundante en el universo, después de la de hidrógeno, es la de un veneno nato para el hombre, el monóxido de carbono, responsable de la emisión de radiación interestelar en la banda de 11 metros. De su molécula tratada por OM, podrás asegurar que:

- a) Forma un doble enlace                      b) Su HOMO es un OM sigma 2p  
c) Su LUMO es un OM pi enlazante                      d) Es una molécula paramagnética

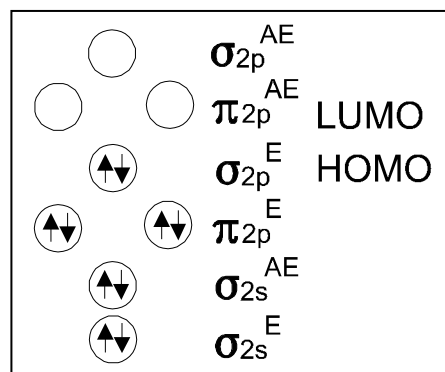
**SOLUCIÓN:**

Para operar como en ejemplos anteriores y elegir previamente el ordenamiento energético apropiado habrá que tener en cuenta la electronegatividad de los átomos que la forman. La energía de los OME, se parece más a la del OA del elemento más electronegativo (O) mientras que la de los OMAE, se asemeja a la del menos electronegativo (C) provocando interacciones s-p. Por lo tanto la distribución electrónica de los (4+6) electrones de valencia de ambos átomos, se hará conforme a modelo con interacciones

La configuración será:  $:(KK) (\sigma_{2s}^E)^2 (\sigma_{2s}^{AE})^2 (\pi_{2p}^E)^4 (\sigma_{2p}^E)^2$

El orden de enlace será 3, lo cual se confirma experimentalmente, tal como el diamagnetismo de la molécula. El HOMO y el LUMO, se indican en la figura. Por lo tanto sólo es correcta la respuesta b.

Esta molécula es isoelectrónica del  $N_2$ , del  $NO^+$  y del  $CN$ , cuyas configuraciones electrónicas por OM serían las mismas (en el  $NO$ , se volvería al orden normal).



42. El monóxido de carbono, fue denominado por Priestley, en 1772, gas silvestre, porque difería del gas inflamable común (hidrógeno), y ardía con una llama azul. La distancia de enlace entre sus átomos es de 124pm, que se encuentra mas cerca a la del triple enlace entre el C y el oxígeno, 120pm que a la del doble enlace, 134pm, lo cual se explicaba por resonancia. Sin embargo la teoría de OM:

- a) Solo tendría dobles enlaces                      b) Sólo tendría triples enlaces  
c) No tendría ni dobles ni triples enlaces

**SOLUCIÓN:**

La solución está en el test anterior, ya que el orden de enlace sería  $(8-2)/2 = 3$ , por lo tanto por OM sólo tendría un triple enlace, por lo que la respuesta correcta sería la b.

