Teoría de Orbitales Moleculares

Nombre: _____

Fecha: _____

Puntaje: _____

1.

¿Qué describe mejor a un **orbital molecular enlazante**?

1. Una región formada por combinación destructiva que aumenta la energía y genera un nodo entre núcleos
2. Una región formada por combinación constructiva que concentra densidad electrónica entre los núcleos y disminuye la energía
3. Un orbital atómico sin modificación energética al formar la molécula
4. Una región exclusiva de moléculas heteronucleares sin relación con la simetría

Respuesta correcta:
B.

Una región formada por combinación constructiva que concentra densidad electrónica entre los núcleos y disminuye la energía

2.

En la aproximación LCAO, ¿cuál es una condición necesaria para que dos orbitales atómicos se combinen de manera apreciable?

1. Que tengan energías semejantes y simetría compatible respecto del eje internuclear
2. Que pertenezcan siempre al mismo número cuántico principal
3. Que ambos estén completamente llenos
4. Que uno sea enlazante y el otro antienlazante

Respuesta correcta:
A.

Que tengan energías semejantes y simetría compatible respecto del eje internuclear

3.

Si dos orbitales atómicos se superponen **frontalmente** a lo largo del eje internuclear, el tipo de orbital molecular que se forma es principalmente:

1. π
2. δ
3. σ

Respuesta correcta:
C.

σ

4.

¿Qué característica distingue a un orbital molecular antienlazante σ* o π*?

1. Tiene menor energía que el orbital enlazante correspondiente
2. Presenta un nodo adicional entre los núcleos y desestabiliza la molécula al ocuparse
3. Solo puede contener un electrón
4. No participa en el cálculo del orden de enlace

Respuesta correcta:
B.

Presenta un nodo adicional entre los núcleos y desestabiliza la molécula al ocuparse

5.

Para las moléculas diatómicas homonucleares del segundo período como B_2, C_2 y N_2, el orden energético correcto de los orbitales $2p$ es:

1. $\sigma 2p < \pi 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$
2. $\pi 2p < \sigma 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$
3. $\pi 2p^* < \sigma 2p < \pi 2p < \sigma 2p^*$
4. $\sigma 2p < \pi 2p^* < \pi 2p < \sigma 2p^*$

Respuesta correcta:
B.

$\pi 2p < \sigma 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$

6.

En O_2 y F_2, el orden energético usual de los orbitales $2p$ cambia respecto de B_2 a N_2. ¿Cuál secuencia es la correcta?

1. $\pi 2p < \sigma 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$
2. $\sigma 2p < \pi 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$
3. $\sigma 2p^* < \pi 2p^* < \pi 2p < \sigma 2p$
4. $\pi 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p < \sigma 2p^*$

Respuesta correcta:
B.

$\sigma 2p < \pi 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$

7.

Usando orden de enlace=Ne(enlazantes)-Ne(antienlazantes)2, ¿cuál es el orden de enlace de H2?

1. 0
2. 2
3. 12
4. 1

Respuesta correcta:
D.

1

8.

¿Cuál de las siguientes especies tiene **orden de enlace cero** según la teoría de orbitales moleculares?

1. He2
2. H2
3. N2
4. O2

Respuesta correcta:
A.

He2

9.

¿Cuál afirmación sobre $B2$ es correcta según su diagrama de orbitales moleculares?

1. Es diamagnética porque todos sus electrones están apareados
2. Tiene orden de enlace 3
3. Es paramagnética por la presencia de dos electrones desapareados en orbitales $\pi 2p$
4. No posee electrones en orbitales $2p$

Respuesta correcta:
C.

Es paramagnética por la presencia de dos electrones desapareados en orbitales $\pi 2p$

10.

En $C2$, el orden de enlace predicho por teoría de orbitales moleculares es:

1. 1
2. 2
3. 3
4. 32

Respuesta correcta:
B.

2

11.

¿Cuál es la configuración que explica mejor el **paramagnetismo** de O_2?

1. Todos los electrones están apareados en orbitales enlazantes
2. Hay dos electrones desapareados en los orbitales degenerados $\pi 2p^*$
3. Existe un electrón desapareado en $\sigma 2s$
4. Los orbitales $\pi 2p$ están vacíos

Respuesta correcta:
B.

Hay dos electrones desapareados en los orbitales degenerados $\pi 2p^*$

12.

Al pasar de O_2 a O_2^+, ¿qué ocurre con el orden de enlace?

1. Disminuye de 2 a 32
2. No cambia y permanece en 2
3. Aumenta de 2 a 52
4. Aumenta de 1 a 2

Respuesta correcta:
C.

Aumenta de 2 a 52

13.

¿Qué especie presenta el **mayor orden de enlace**?

1. O_2^-
2. O_2
3. O_2^+
4. F_2

Respuesta correcta:
C.

O_2^+

14.

En una molécula diatómica heteronuclear, ¿qué afirmación es correcta sobre los orbitales moleculares?

1. Siempre están distribuidos simétricamente entre ambos núcleos
2. Los orbitales moleculares se localizan por completo en el átomo más electronegativo
3. La contribución de cada orbital atómico puede ser desigual debido a diferencias de energía entre los átomos
4. No existen orbitales antienlazantes en moléculas heteronucleares

Respuesta correcta:
C.

La contribución de cada orbital atómico puede ser desigual debido a diferencias de energía entre los átomos

15.

Si en una especie diatómica se agregan dos electrones a orbitales antienlazantes y no cambia la ocupación de orbitales enlazantes, el orden de enlace:

1. Aumenta en 1
2. Disminuye en 1
3. Disminuye en 2
4. No cambia

Respuesta correcta:
B.

Disminuye en 1

16.

¿Qué conjunto de orientación favorece la formación de un orbital π a partir de orbitales p?

1. Dos orbitales p alineados con el eje internuclear y superposición frontal
2. Dos orbitales s con superposición lateral
3. Dos orbitales p paralelos entre sí y perpendiculares al eje internuclear, con superposición lateral
4. Un orbital s y uno p siempre, sin importar la orientación

Respuesta correcta:
C.

Dos orbitales p paralelos entre sí y perpendiculares al eje internuclear, con superposición lateral

17.

Considera la serie N_2, N_2^+ y N_2^-. ¿Cuál ordena correctamente sus longitudes de enlace de menor a mayor?

1. $N_2^- < N_2 < N_2^+$
2. $N_2 < N_2^+ < N_2^-$
3. $N_2^+ < N_2^- < N_2$
4. $N_2^+ < N_2 < N_2^-$

Respuesta correcta:
D.

$N_2^+ < N_2 < N_2^-$

18.

¿Cuál afirmación compara correctamente la teoría de orbitales moleculares con la teoría de enlace de valencia?

1. La teoría de orbitales moleculares describe electrones deslocalizados sobre toda la molécula, mientras la de enlace de valencia enfatiza superposición localizada entre átomos
2. Ambas teorías prohíben explicar el paramagnetismo
3. La teoría de enlace de valencia elimina la necesidad de orbitales atómicos
4. La teoría de orbitales moleculares solo sirve para moléculas monoatómicas

Respuesta correcta:
A.

La teoría de orbitales moleculares describe electrones deslocalizados sobre toda la molécula, mientras la de enlace de valencia enfatiza superposición localizada entre átomos

19.

Una especie diatómica tiene configuración de valencia

$(\sigma 2s)2(\sigma 2s^*)2(\sigma 2p)2(\pi 2p)4(\pi 2p^*)2$

¿Cuál combinación de propiedades es correcta?

1. Orden de enlace 1 y diamagnética
2. Orden de enlace 2 y paramagnética
3. Orden de enlace 3 y diamagnética
4. Orden de enlace 2 y diamagnética

Respuesta correcta:
B.

Orden de enlace 2 y paramagnética

20.

Se comparan dos especies diatómicas: X tiene orden de enlace 12 y Y tiene orden de enlace 2. ¿Qué conclusión es la más razonable?

1. X debe ser más corta y más fuerte que Y
2. Y debe ser más larga y menos estable que X
3. Y debe presentar, en general, un enlace más corto y más fuerte que X
4. Ambas deben tener la misma energía de enlace porque el orden de enlace no se relaciona con la estabilidad

Respuesta correcta:
C.

Y debe presentar, en general, un enlace más corto y más fuerte que X

Respuestas

1. **B.**

   Una región formada por combinación constructiva que concentra densidad electrónica entre los núcleos y disminuye la energía

2. **A.**

   Que tengan energías semejantes y simetría compatible respecto del eje internuclear

3. **C.**

   σ

4. **B.**

   Presenta un nodo adicional entre los núcleos y desestabiliza la molécula al ocuparse

5. **B.**

   $\pi 2p < \sigma 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$

6. **B.**

   $\sigma 2p < \pi 2p < \pi 2p^* < \sigma 2p^*$

7. **D.**

   1

8. **A.**

   He_2

9. **C.**

   Es paramagnética por la presencia de dos electrones desapareados en orbitales $\pi 2p$

10. **B.**

    2

11. **B.**

    Hay dos electrones desapareados en los orbitales degenerados $\pi 2p^*$

12. **C.**

    Aumenta de 2 a 52

13. **C.**

    O_2^+

14. **C.**

    La contribución de cada orbital atómico puede ser desigual debido a diferencias de energía entre los átomos

15. **B.**

    Disminuye en 1

16. **C.**

    Dos orbitales p paralelos entre sí y perpendiculares al eje internuclear, con superposición lateral

17. **D.**

    $N_2^+ < N_2 < N_2^-$

18. **A.**

    La teoría de orbitales moleculares describe electrones deslocalizados sobre toda la molécula, mientras la de enlace de valencia enfatiza superposición localizada entre átomos

19. **B.**

    Orden de enlace 2 y paramagnética

20. **C.**

    Y debe presentar, en general, un enlace más corto y más fuerte que X