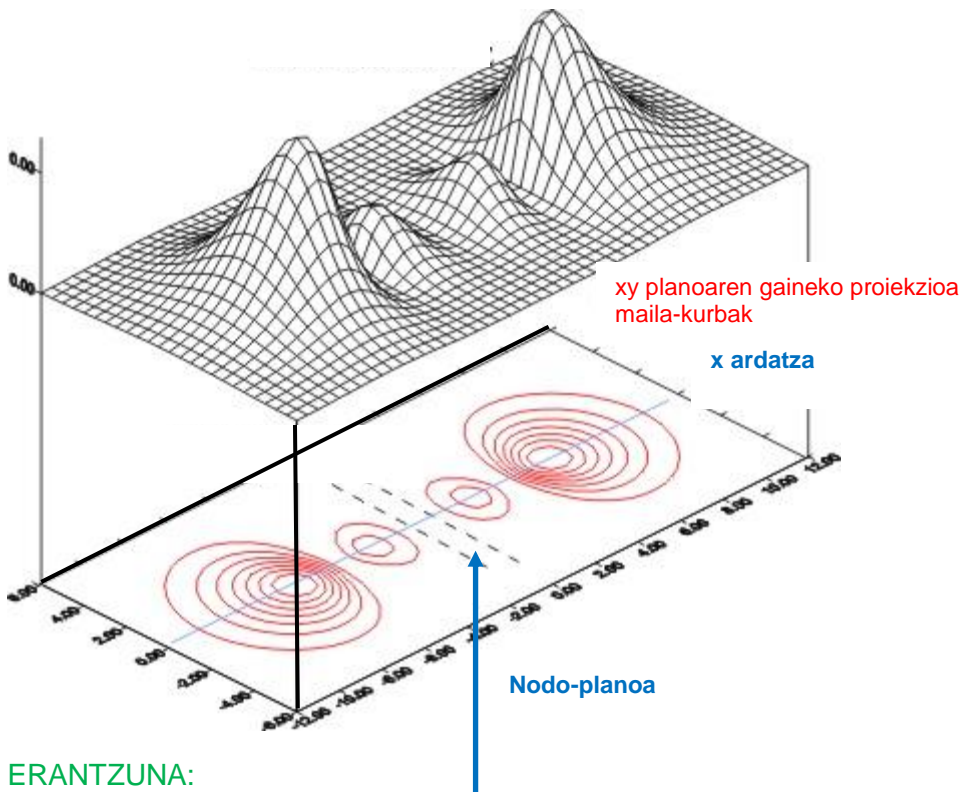


# Orbital molekularrak



Lan hau Creative Commons-en Nazioarteko 3.0 lizentziaren mendeko Azterketa-Ez komertzial-Partekatu lizentziaren mende dago. Lizentzia horren kopia ikusteko, sartu <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/es/> helbidean.

1. Ondorengo orbitala zelakoa da lotzailea edo antolotzailea?



ERANTZUNA:

Antilotzailea da, nodo-plano bat duelako bi atomoen artean.

2. Ondoko orbital molekularren diagraman oinarrituz  $\text{CN}^+$ ,  $\text{CN}$  eta  $\text{CN}^-$  espezieen konfigurazio elektronikoa idatzi. Lotura ordena kalkulatu, eta portaera magnetikoa azaldu.

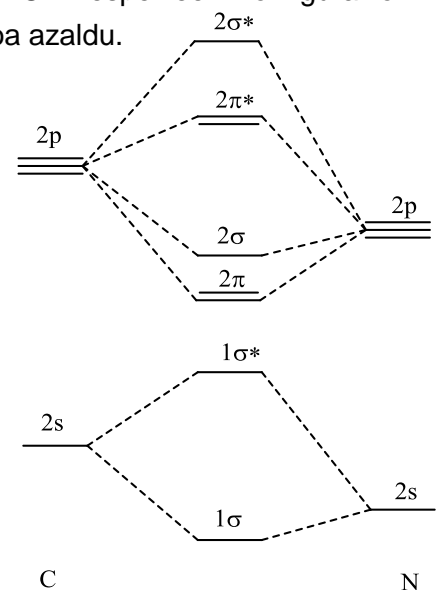
ERANTZUNA:

$\text{CN}^+$  (8 elektroio):  $1\sigma^2 1\sigma^* 2\pi^4$  ( $l_o = (6-2)/2 = 2$ , diamagnetikoa)

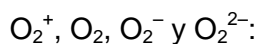
$\text{CN}$  (9 elektroio):  $1\sigma^2 1\sigma^* 2\pi^4 2\sigma^1$  ( $l_o = (7-2)/2 = 2.5$ , paramagnetikoa)

$\text{CN}^-$  (10 elektroio):  $1\sigma^2 1\sigma^* 2\pi^4 2\sigma^2$  ( $l_o = (8-2)/2 = 3$ , diamagnetikoa)

Konposatu paramagnetikoeak parekatu gabeko elektroioak dauzkate; diamagnetikoeak, ordea, ez.



3. Aldameneko orbital molekularren diagraman oinarrituz, idatzi ondoko espezieen konfigurazioa elektronikoa:

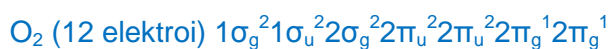


ERANTZUNA:

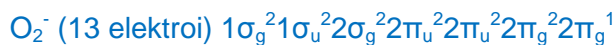
Lotura-ordena kalkulatu eta esan zein den portaera magnetikoa kasu bakoitzean.



$$LO = \frac{8-3}{2} = 2,5 \text{ paramagnetikoa}$$



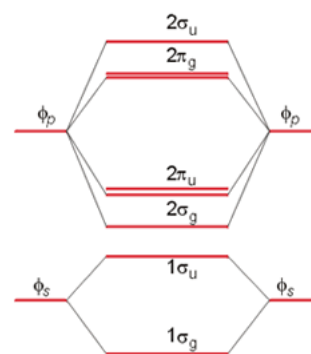
$$LO = \frac{8-4}{2} = 2 \text{ paramagnetikoa}$$



$$LO = \frac{8-5}{2} = 1,5 \text{ paramagn.}$$



Paramagnetikoez dituzte parekatu gabeko elektroiak; diamagnetikoez, ez.



4. Aurreko ariketan kalkulaturako lotura-ordenaren balioak kontuan hartuz, ondoko taula bete:

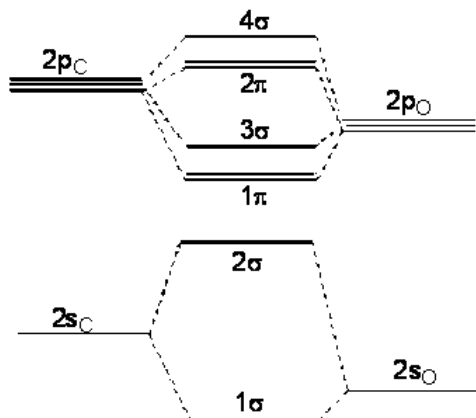
Espeziea	Lotura-distantzia (Å)
	1,12
	1,21
	1,26
	1,49

ERANTZUNA:

Espeziea	Lotura-distantzia (Å)
$\text{O}_2^+$	1,12
$\text{O}_2$	1,21
$\text{O}_2^-$	1,26
$\text{O}_2^{2-}$	1,49

Lotura-ordena zenbat eta altuagoa, lotura-distantzia orduan eta txikiagoa.

5. Ondorengo diagrama erabiliz,  $\text{CO}^+$ ,  $\text{CO}$  eta  $\text{CO}^-$  espezieen konfigurazio elektronikoa idatzi. Halaber, lotura-ordena kalkulatu, eta portaera magnetikoa aurreikusi (hau da, espeziea diamagnetikoa edo paramagnetikoa izango den determinatu).



### ERANTZUNA:

$\text{CO}^+$  (4+6-1)=9 elektroi:  $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^1$ ; lotura-ordena:  $(7-2)/2=2.5$ : paramagnetikoa

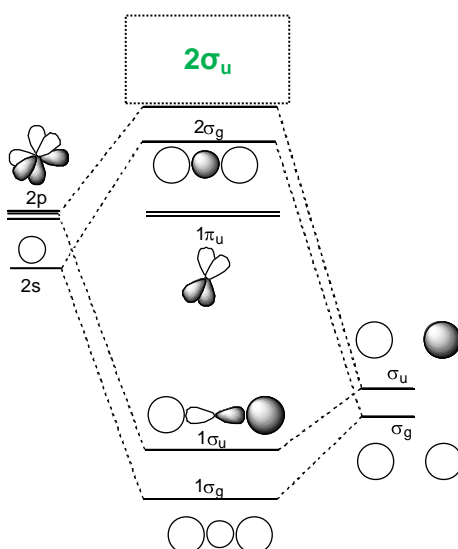
$\text{CO}$  (4+6)=10 elektroi:  $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^2$ ; lotura-ordena:  $(8-2)/2=3$ : diamagnetikoa

$\text{CO}^-$  (4+6)=11 elektroi:  $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^2 2\pi^1$ ; lotura-ordena:  $(8-3)/2=2.5$ : paramagnetikoa

6. Ondorengo orbital molekularren diagrama  $\text{BeH}_2$  molekularrena da.

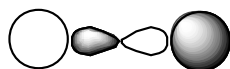
Bertan  $2\sigma_u$  orbitalaren itxura izkutatuta dago, zelakoa da orbital horren itxura?

Bestalde, zelako izaera du  $1\pi_u$  orbitalak?



## ERANTZUNA:

$2\sigma_u$  orbitalak antilotzailea da, eta  $1\sigma_u$  orbitalarekin harremanean dago, beraz bere itxura hau da:



$1\pi_u$  orbitala ez-lotzailea da, orbital atomikoen energia duelako