

## Tema 4: Estructura molecular

1. Exprese la configuración electrónica fundamental, dibuje los diagramas de energía y calcule el orden de enlace de:  
a)  $H_2^-$                       b)  $N_2$                       c)  $O_2$                       d)  $ClF$
2. La función  $\Psi = x(x-1)$  para  $0 \leq x \leq 1$  cumple las restricciones establecidas para describir el movimiento de una partícula en una caja unidimensional. Utilícela como función de prueba variacional y obtenga una expresión para la energía. Compárela con la expresión exacta.
3. A partir de  $H \Psi_{\text{sist } \pi} = E \Psi_{\text{sist } \pi}$  y haciendo uso de la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de la aproximación de Hückel, obtenga la expresión de la energía para una molécula A-B. Considere  $\alpha_A = \alpha_B = \alpha$
4. Considerando la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de Hückel resuelva para la molécula de formaldehído ( $H_2C=O$ ):
  - a) las energías de los orbitales moleculares en términos de  $\alpha$  y  $\beta$
  - b) la energía de deslocalización  $\pi$
  - c) las funciones de onda moleculares
  - d) los órdenes de enlace
  - e) los índices de valencia libres,
  - f) la distribución de cargas de cada átomo.NOTA:  $h_O = 1,063$  y  $k_{C-O} = 2,17$ .
5. Considerando la aproximación CLOA-OM, del principio variacional y de Hückel resuelva para el radical alilo ( $CH_2=CH-CH_2^*$ ):
  - a) las energías de los orbitales moleculares en términos de  $\alpha$  y  $\beta$
  - b) la energía de deslocalización  $\pi$
  - c) las funciones de onda moleculares
  - d) los órdenes de enlace
  - e) los índices de valencia libres,
  - f) la distribución de cargas de cada átomo.
6. Plantee el determinante secular para clorobenceno considerando  $h_{Cl} = 2$  y  $k_{C-Cl} = 0,8$ .
7. Considerando el sistema electrónico  $\pi$  del butadieno, calcule:
  - a) las energías de los orbitales moleculares en términos de  $\alpha$  y  $\beta$
  - b) la energía de deslocalización  $\pi$
  - c) las funciones de onda moleculares
  - d) los órdenes de enlace
  - e) los índices de valencia libres,
  - f) la distribución de cargas de cada átomo.NOTA: Las raíces que se obtienen de la ecuación  $x^4 - 3x^2 + 1 = 0$  son:  $x_1 = -1,618$ ;  $x_2 = -0,618$ ;  $x_3 = 1,618$ ;  $x_4 = 0,618$ .
8. Compare la energía de deslocalización  $\pi$  del butadieno con la energía de dos enlaces dobles no conjugados.