

Problemas de clase

conjunt atóms enllaçats covalentment que formen un sistema estable electricament neutre

1.- (i) ¿Qué es una molécula? (ii) ¿Cuáles son las diferencias fundamentales entre el enlace iónico, enlace covalente y enlace metálico?

metal-metal

metal-no metal
no metal-no metal

2.- Defina el concepto general de valencia y especifique este concepto cuando se aplica a un compuesto covalente y a un compuesto iónico.

capacitat de formar enllaços, relacionat amb els electrons de la última capa

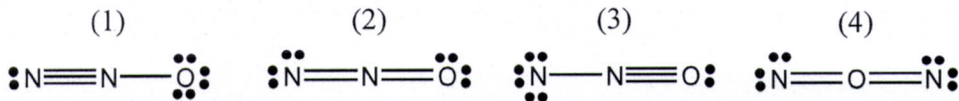
3.- Dibuje y explique la representación de la energía en función de la distancia entre dos átomos que se enlazan formando una molécula.

4.- Explique brevemente el modelo de enlace en moléculas propuesto por Lewis ¿Qué es una estructura de Lewis? Escriba fórmulas puntuales de Lewis y calcule las cargas formales asociadas a los átomos para los siguientes compuestos: H₂O; H₂S; NH₃; ICl₂⁺; PH₃; PH₄⁺; NI₃; N₂H₄; CS₂; CO₃²⁻; SiCl₄; POCl₃; O₃.

5.- ¿Qué es la regla del octeto? ¿Cuáles son sus limitaciones? Cite ejemplos de tres especies a las que no pueda aplicarse esta regla y explique por qué.

6.- a) Dibuja las tres estructuras posibles para el ion cianato, NCO⁻. En base a las cargas formales, decide cuál es la estructura que tiene una distribución de carga más razonable. b) El anión fulminato, CON⁻, se diferencia del anterior en que el nitrógeno está en el centro y en que es muy inestable (el fulminato de mercurio se utiliza como detonante). Da una explicación, en base a las cargas formales, para esta inestabilidad.

7.- El óxido de dinitrógeno (óxido nitroso o "gas hilarante") se utiliza a veces como anestésico. Las longitudes de enlace en la molécula de N₂O son: enlace N-N = 113 pm; enlace N-O = 119 pm. Utilice estos datos para discutir la verosimilitud de las siguientes estructuras de Lewis. ¿Son todas válidas?



8.- Elija el compuesto de cada uno de los pares siguientes que tenga previsiblemente un ángulo de enlace inferior. (a) SF₂ y SO₂ (b) BF₃ y BCl₃ (c) CF₄ y SF₄ (d) NH₃ y H₂O.

9.- Uno de los siguientes iones tiene una forma triangular: SO₃²⁻, PO₄³⁻, PF₆⁻, CO₃²⁻. ¿De qué ion se trata?

triangular

10.- Describa la geometría molecular del H₂O sugerida por cada uno de los siguientes métodos: a) teoría de Lewis; b) método de enlace de valencia utilizando orbitales atómicos simples; c) TRPECV; d) método de enlace de valencia utilizando orbitales atómicos híbridos.

11.- Dibuja las estructuras de Lewis, así como la geometría predicha por la TRPECV para las siguientes moléculas: NO₃⁻; ClNO; N₂O; ClF₃; XeF₄; PCl₄⁻.

teoría de repulsión pares

12.- Calcule la electroafinidad del cloro a partir de los siguientes datos:

Calor de sublimación del potasio	20 kJ/mol
Energía de disociación del cloro	58 kJ/mol
Energía de ionización del potasio	100 kJ/mol
Energía reticular del cloruro de potasio	-168 kJ/mol
Calor de formación del cloruro de potasio	-104 kJ/mol

Resultado: -85 kJ/mol

13.- Calcule la energía reticular de un compuesto hipotético de fórmula MgCl, considerando r(Mg⁺) = 82 pm; r(Cl⁻) = 181 pm; A = 1,7476 y n = 8.

Resultado: U = -808,9 kJ/mol

Formula
$$- \frac{NA}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{r} A \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

factor repulsive

$r_m = 10^{-12} \text{ m}$

(1) [i] una molècula és un conjunt d'àtoms enllaçats covalentment que formen un sistema estable, elèctricament neutre.

- [ii] enllaç iònic : metall - no metall
 enllaç covalent : no metall - no metall
 enllaç metàl·lic : metall - metall

(2) valència és la capacitat d'un àtom de formar enllaços, per compartició (enllaç covalent) o transferència (enllaç iònic). Està relacionat amb els electrons de la última capa.



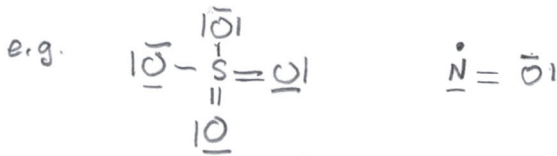
(4) Passos a seguir per a construir una estructura de Lewis:

(i) considereu tots els electrons de la capa de valència (la última de tots els àtoms. Si es tracta d'un ió, cal considerar la seva càrrega,

ex. SO_4^{2-} $6 + 4 \times 6 + 2 = 32$ electrons = 16 parells

NO $5 + 6 = 11 = 5$ parell + 1 electró solt

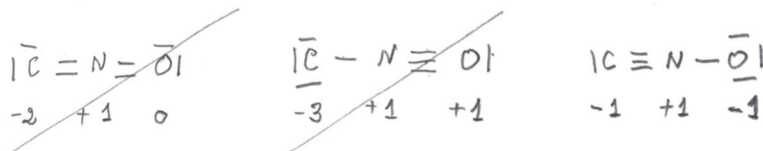
(ii) Organitzeu els àtoms. L'àtom central és casi sempre el menys electronegatiu. Connecteu els àtoms amb parells d'electrons, i obligueu als àtoms perifèrics a complir la regla de l'octet



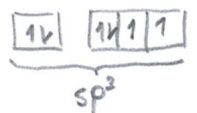
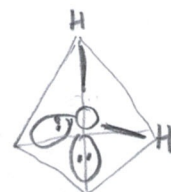
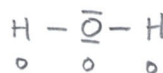
- L'hidrogen un únic parell i és sempre termina
- L'àtom central pot no seguir l'octet per defecte (NO, BF_3) o per excés si pertany al tercer període o superior (PCl_5)

(iii) Si hi han més d'una estructura, triarem la de menors càrregues formals

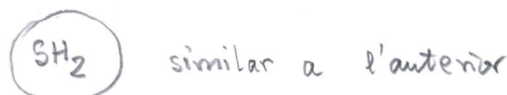
e.g. anió fulminat CNO^- $4 + 5 + 6 + 1 = 16$ electrons = 8 parells



Molècules del prob. [4]

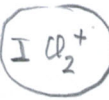
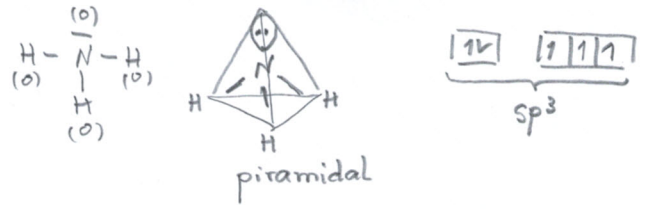


angular





$e^- = 5 + 3 = 8 \equiv 4$ parells



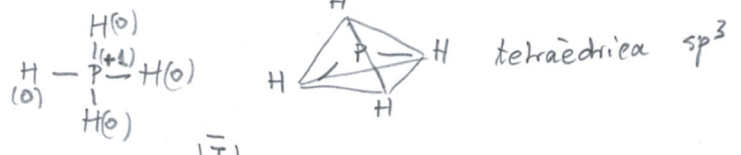
$e^- = 7 \times 3 - 1 = 20 \equiv 10$ parells



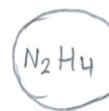
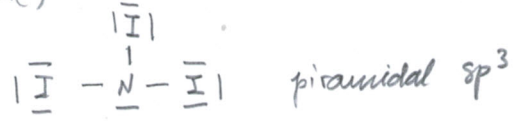
$e^- = 5 + 3 = 8 \equiv 4$ parells



$e^- = 5 + 4 - 1 = 8 \equiv 4$ parells



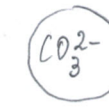
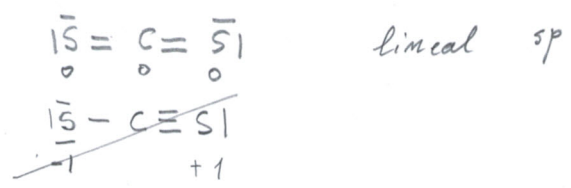
$e^- = 5 + 3 \times 7 = 26 \equiv 13$ parells



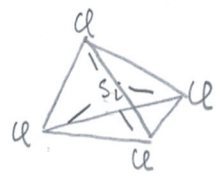
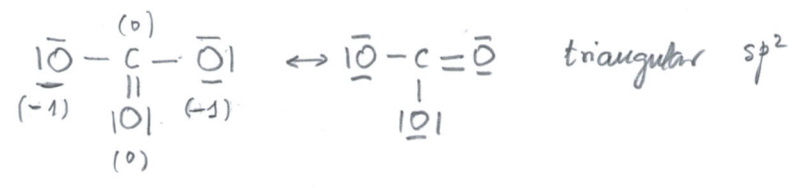
$e^- = 2 \times 5 + 4 = 14 \equiv 7$ parells



$e^- = 4 + 2 \times 6 = 16 \equiv 8$ parells



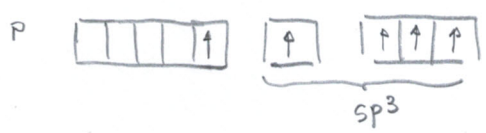
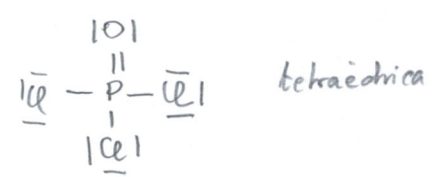
$e^- = 4 + 3 \times 6 + 2 = 24 \equiv 12$ parells



$e^- = 6 \times 3 = 18 \equiv 9$ parells

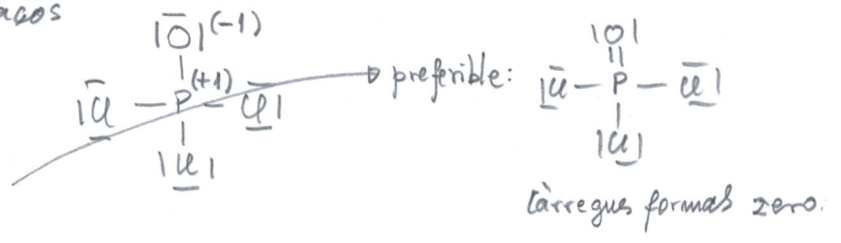


$e^- = 5 + 6 + 3 \times 7 = 32 \equiv 16$ parells

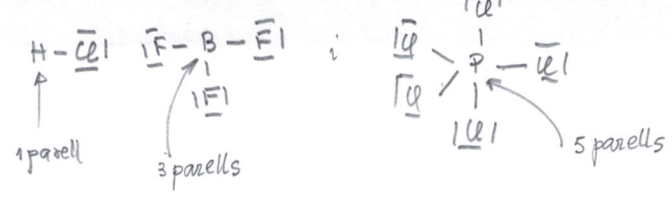


Nota: determinació del mínim nombre d'enllacs = $\text{atom} \times 4 - \text{parells}$ (en el cas de H 1 parell)

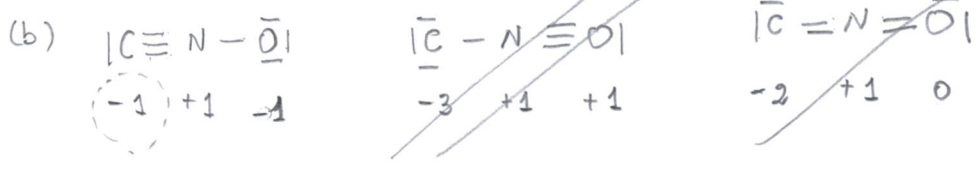
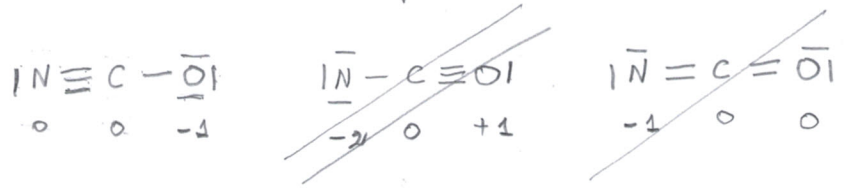
e.g. $POCl_3$: $5 \times 4 - 16 = 4$ enllacs



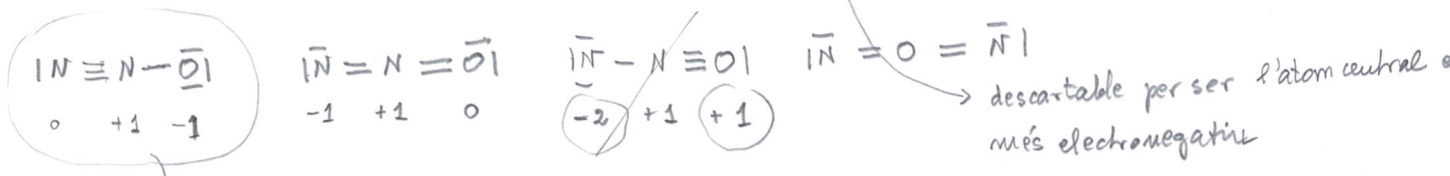
(5) tres exemples no equivalents
 HCl , BF_3 , PO_5



(6) (a) $e^- = 5+4+6+1 = 16 = 8$ parells

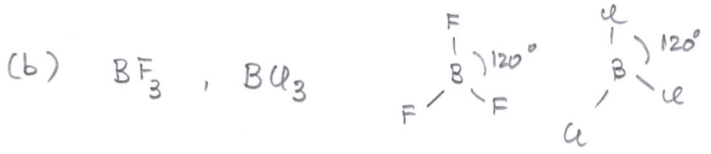
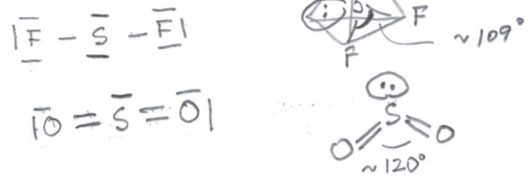


(7) $N \frac{113}{5} N \frac{119}{6} O$ $e^- = 5 \times 2 + 6 = 16 = 8$ parells

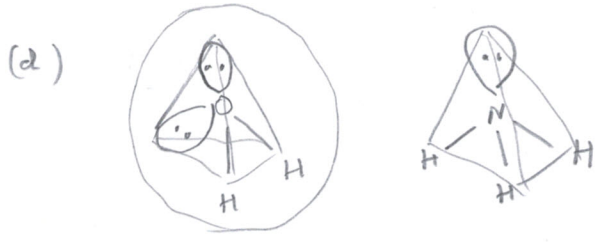
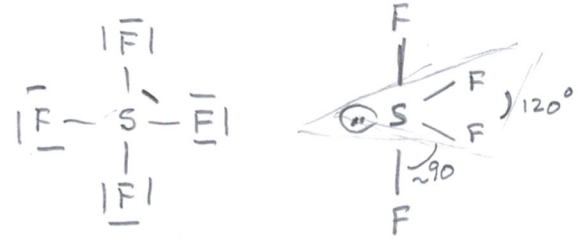


La preferida és acorde amb un enllaç múltiple més curt. (També la segona no seria del tot incompatible)

(8) (a) SF_2 $e^- = 6 + 2 \times 7 = 20 = 10$ parells
 SO_2 $e^- = 6 + 2 \times 6 = 18 = 9$ parells



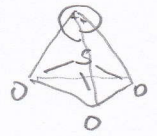
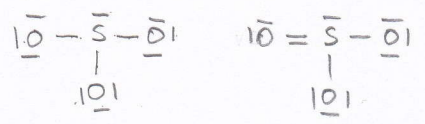
(c) CF_4 → tetraedre $\theta = 109.5^\circ$
 SF_4 : $e^- = 6 + 4 \times 7 = 34 = 17$ parells



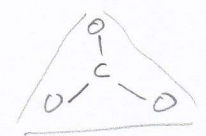
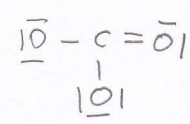
La repulsió de parells solitaris major que la de enllaços

(9) Descartem qui no pot fer triangles PO_4^{3-} i PF_6^-

SO_3^{2-} $e = 6 \times 4 + 2 = 26 \equiv 13$ parells

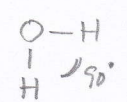
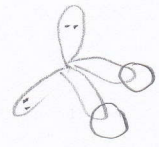
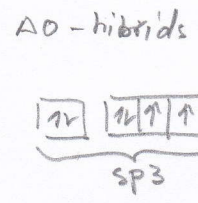
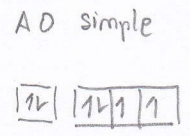
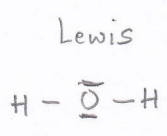


CO_3^{2-} $e = 4 + 6 \times 3 + 2 = 24 \equiv 12$ parells



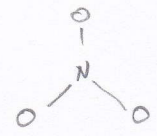
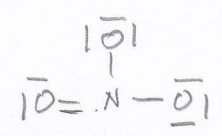
trigonal plana

(10)



(11)

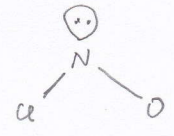
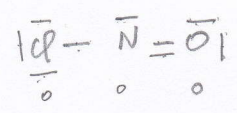
NO_3^- $e = 5 + 6 \times 3 + 1 = 24 \equiv 12$ parells
 (enllaços mínims $16 - 12 = 4$)



trigonal

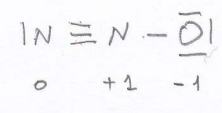
3 estructures resonants

CNO $e = 5 + 6 + 7 = 18 \equiv 9$ parells
 (enllaços mínims = $12 - 9 = 3$)



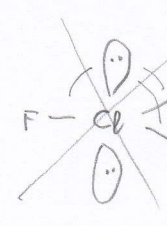
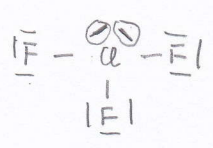
angular

N_2O $e = 5 \times 2 + 6 = 16 \equiv 8p$
 (enllaços mínims = $12 - 8 = 4$)



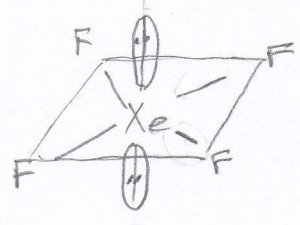
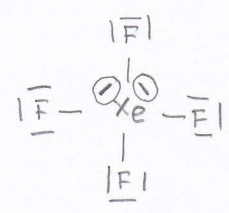
$N - N - O$ lineal

CF_3 $e = 4 \times 7 = 28 \equiv 14p$
 (EM = $16 - 14 = 2$)

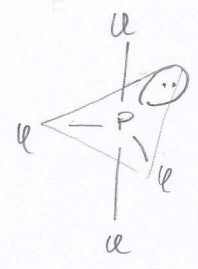
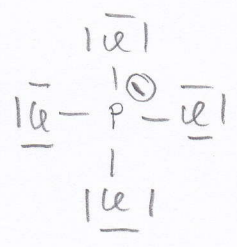


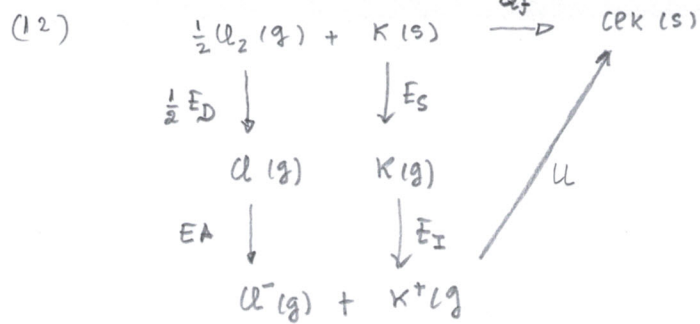
sembla ser preferida [regla "3g"]

XeF_4 $e = 8 + 4 \times 7 = 36 \equiv 18p$



PO_4^- $e = 5 + 4 \times 7 + 1 = 34 = 17p$





$$\frac{1}{2} E_D + E_S + E_A + E_I + U = Q_f$$

$$\frac{58}{2} + 20 + E_A + 100 - 168 = -104$$

$$\rightarrow \boxed{E_A = -85 \text{ KJ/mol}}$$

(12-bis) Calc $Q_f \text{ MgCl}_2(s)$ a partir de los siguientes dados en KJ/mol

$$E_S(\text{Mg}(s)) = 146$$

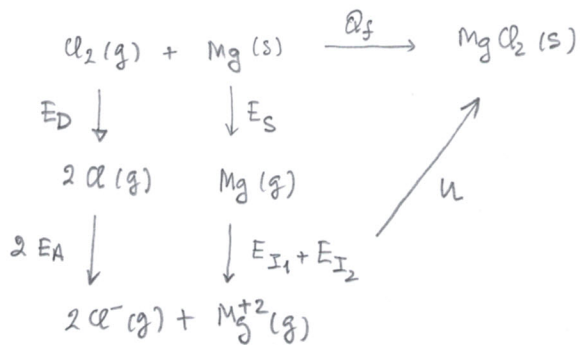
$$E_D(\text{Cl}_2) = 244$$

$$E_{I_1}(\text{Mg}) = 738$$

$$E_{I_2}(\text{Mg}) = 1451$$

$$E_A(\text{Cl}) = -349$$

$$U = -2502$$

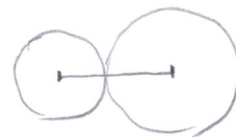


$$E_D + E_S + 2E_A + E_{I_1} + E_{I_2} + U = Q_f$$

$$244 + 146 + 2 \cdot (-349) + 738 + 1451 - 2502 = -621 \text{ KJ/mol}$$

(13)

$$U = - \frac{N_A}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_1 z_2 e^2}{r} A \left(1 - \frac{1}{m}\right) \rightarrow \text{factor repulsiu}$$



$$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

$$U = - \frac{6.023 \cdot 10^{23} \times 1 \times 1 \times (1.6 \cdot 10^{-19})^2}{9 \cdot 10^9 (82 + 181) \cdot 10^{-12}} \cdot 1.7476 \left(1 - \frac{1}{8}\right) = -807 \text{ KJ/mol}$$