



Problemas Propuestos para trabajar sobre los conceptos básicos de enlace químico y estructura molecular durante los días no lectivos de finales del año 2008 y principios del año 2009.

Capítulo 11 del libro "Química General" de R. H. Perucci et al.

Problemas n°:

15- 16- 18- 19- 27- 41- 43- 59- 67- 69 – 98 - 99- 104- 105-106

Para entregar **el miércoles día 7 de Enero de 2009**

Nota: Para la resolución de muchos de estos problemas necesitareis datos de energías y distancias de enlace. En el libro de referencia podéis encontrarlos. También podréis encontrarlos en las bases de datos accesibles a través de Internet (Web de los elementos)

Enlace

15.

Prediga las formas geométricas de:

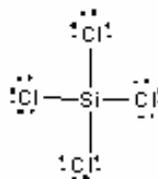
(a) CO

(con solo dos átomos, evidentemente la molécula será lineal, no obstante miraremos como será la distribución geométrica de máxima densidad electrónica)

Estructura de Lewis más representativa: $:\text{C} \equiv \text{O}:$

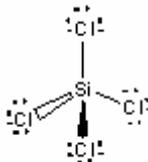
Por tanto es una **distribución lineal**.

(b) SiCl₄



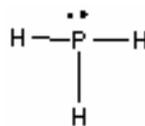
Estructura de Lewis más representativa:

Por tanto en una distribución tetraédrica y la **forma** de la molécula es



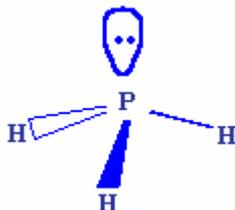
tetraédrica:

(c) PH₃



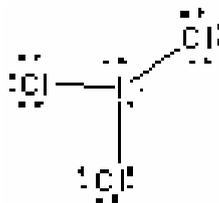
Estructura de Lewis más representativa:

Así que la distribución geométrica de mayor densidad electrónica será la de un **tetraedro**.



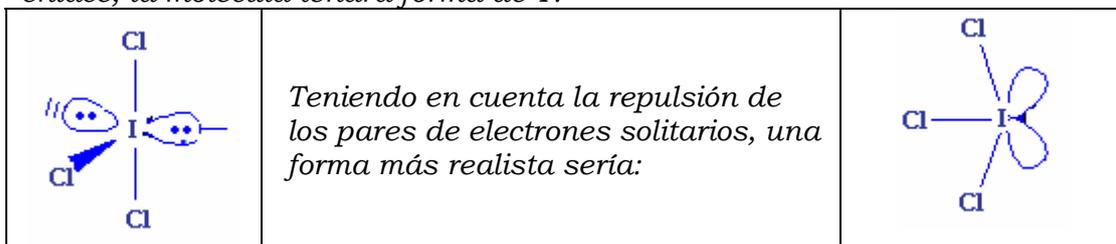
No obstante, teniendo en cuenta que una de las direcciones del tetraedro está ocupada por el par de electrones solitarios, la molécula será por tanto **Piramidal de base triangular**.

(d) ICl_3

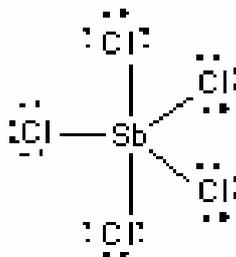


Estructura de Lewis más representativa:

Puesto que el átomo central está rodeado de 5 pares de electrones, la distribución electrónica de enlace molecular será una bipirámide trigonal. No obstante, teniendo en cuenta que los dos de estas direcciones estarán ocupados por pares de electrones solitarios y que dadas las repulsiones electrónicas estos estarán en las direcciones que tengan mayores ángulos de enlace, la molécula tendrá forma de T:

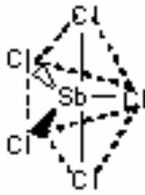


(e) SbCl_5



Estructura de Lewis más representativa:

Puesto que el átomo central está rodeado de 5 pares de electrones, la distribución electrónica de enlace molecular será una bipirámide trigonal.

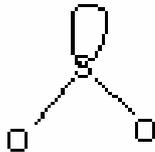


(f) SO₂

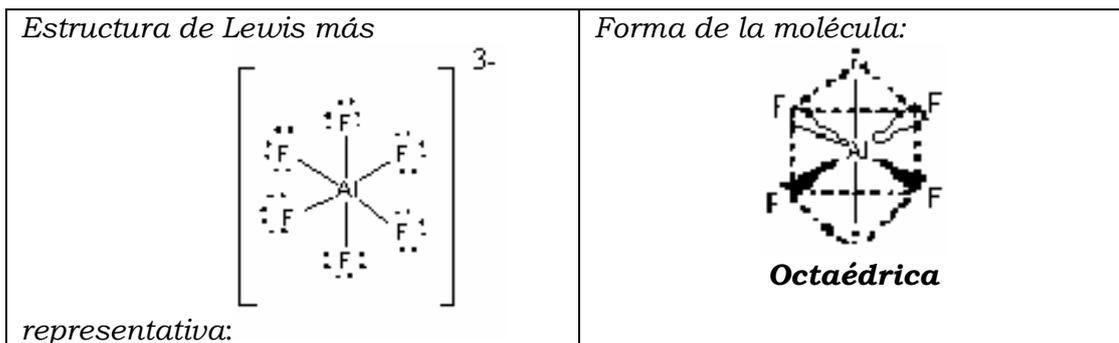


Puesto que el átomo central está rodeado de 3 pares de electrones, la distribución electrónica molecular será un triángulo equilátero.

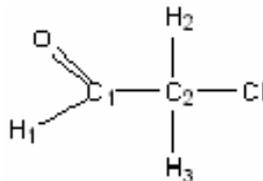
No obstante, teniendo en cuenta que una de las direcciones del triángulo está ocupada por el par de electrones solitario, la molécula será **angular**



(g) AlF₆³⁻



16. Utilice los datos de las tablas para determinar las longitudes de enlace y las energías de enlace de cada una de los enlaces en la estructura siguiente.

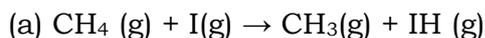


Distancias de enlace (Å)		Energías de enlace (kJ/mol)
C1=O	1,20	736
C ₁ -H; C ₂ -H ₂ ; C ₂ -H ₃	1,10	414
C-C	1,78	339

18. Una reacción que transcurre en la parte alta de la atmósfera y que está implicada en la formación del ozono es: O₂ → 2O. Sin utilizar datos de tablas indique si esta reacción es endotérmica o exotérmica. Razone la respuesta.

La reacción ha de ser necesariamente endotérmica, ya que pasamos el oxígeno molecular con un enlace doble entre los dos átomos de oxígeno a formar átomos separados. Sabemos que la formación de un enlace implica siempre liberar energía del sistema, en tanto que romper un enlace implica aumentar la energía del sistema.

19. Utilice datos de las tablas para, sin hacer cálculos detallados decidir si estas reacciones son endotérmicas o exotérmicas:

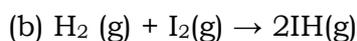


El balance entre el estado final y el inicial es que se ha formado un enlace IH y se ha roto un enlace CH. Si formar un enlace IH es más exotérmico que formar un enlace CH, la reacción será exotérmica, si no, será endotérmica

Los datos de la tabla dicen que:

$$E(\text{H-I}) = 297 \text{ kJ/mol} < E(\text{C-H}) = 414 \text{ kJ/mol}$$

La reacción será **endotérmica**



El balance entre el estado final y el inicial es que se ha formado dos moléculas con un enlace IH (dos enlaces) y se ha roto un enlace HH y otro I-I. Si formar un enlace 2 enlaces IH es más exotérmico que formar un enlace H-H y otro I-I, la reacción será exotérmica, si no, será endotérmica.

Los datos de la tabla dicen que:

$$2.E(\text{H-I}) = 2 \cdot 297 \text{ kJ/mol} = 594 \text{ kJ/mol}$$

$$E(\text{H-H}) = 436 \text{ kJ/mol} ; E(\text{I-I}) = 151 \text{ kJ/mol}$$

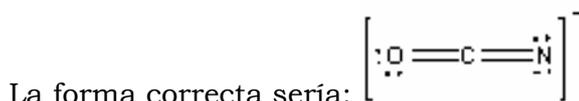
$$E(\text{H-H}) + E(\text{I-I}) = 587 \text{ kJ/mol}$$

La reacción, por tanto es **exotérmica**.

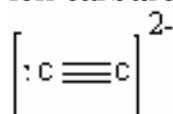
27. Sólo una de las siguientes estructuras es correcta. Indique de cual se trata y los errores que contienen las otras.



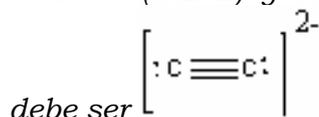
Es evidente que el átomo de C no cumple la regla del octeto, ya que sólo lo rodean seis electrones



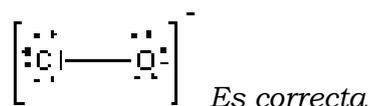
(b) Ión carburo



En esta molécula están representados sólo 8 electrones de valencia ($3 \times 2 + 2$) y sin embargo el anión debe tener 10. La estructura



(c) Ión hipoclorito



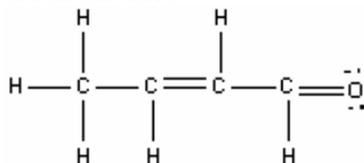
(d) Óxido de nitrógeno (II)

$$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{N} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array} = \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \\ \text{O} \\ \cdot\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$$

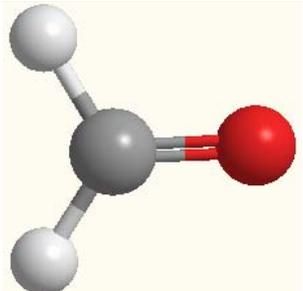
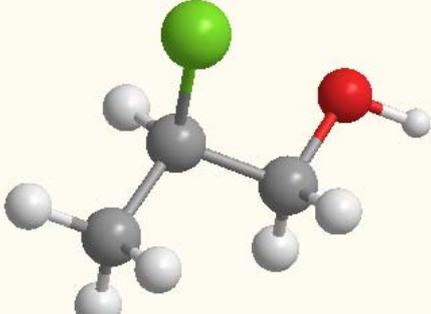
En la estructura hay representados 12 electrones de valencia y la molécula sólo tiene 11 (6+5)

41. Escriba una estructura de Lewis aceptable para el crotonaldehído, $\text{CH}_3\text{CHCHCHO}$, sustancia utilizada en gases lacrimógenos e insecticidas.

Dividimos la molécula por grupos funcionales, dejando en cada caso el átomo de carbono como átomo central. Tenemos en cuenta siempre su tetravalencia y que ha de cumplir la regla del octeto. Para poder satisfacer todas estas condiciones y teniendo en cuenta que el H no puede formar más de un enlace, la estructura de Lewis más representativa ha de ser:



43. Escriba estructuras de Lewis para las moléculas que se representan en modelos moleculares

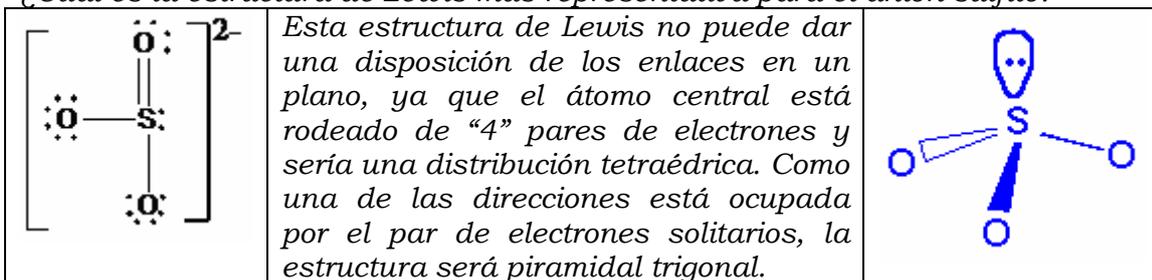
	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} = \ddot{\text{O}} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array}$
	$\begin{array}{ccccccc} & \text{H} & & \cdot\cdot & & \cdot\cdot & \\ & & & \text{Cl} & & \text{O} & \\ & & & & & & \\ \text{H} & - \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} & - \text{H} \\ & & & & & & \\ & \text{H} & & \text{H} & & \text{H} & \end{array}$

59. Uno de los siguientes iones tiene una forma trigonal plana: SO_3^{2-} ; PO_4^{3-} ; PF_6^- ; CO_3^{2-} . ¿De qué ión se trata? Razone la respuesta

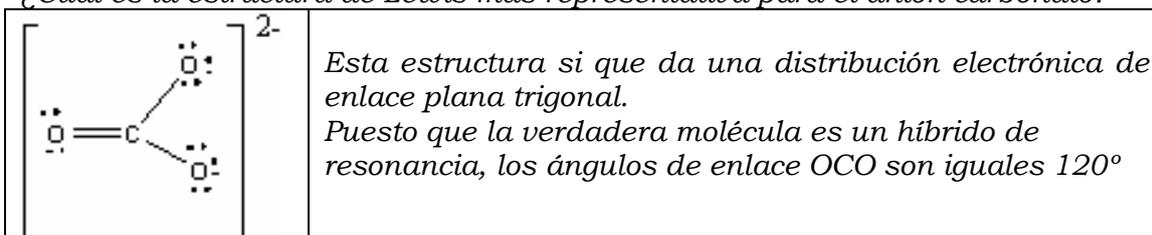
Claramente no se puede tratar del ión fosfato, ni el ya que el átomo central está rodeado de bastantes más de 3 pares de electrones, que son aquellos que dan

una disposición plana trigonal (uno de ellos tiene al menos cuatro enlaces y el otro tiene al menos seis enlaces).

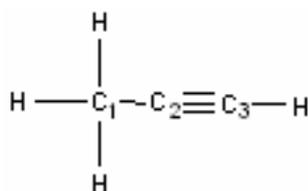
¿Cuál es la estructura de Lewis más representativa para el anión sulfito?



¿Cuál es la estructura de Lewis más representativa para el anión carbonato?

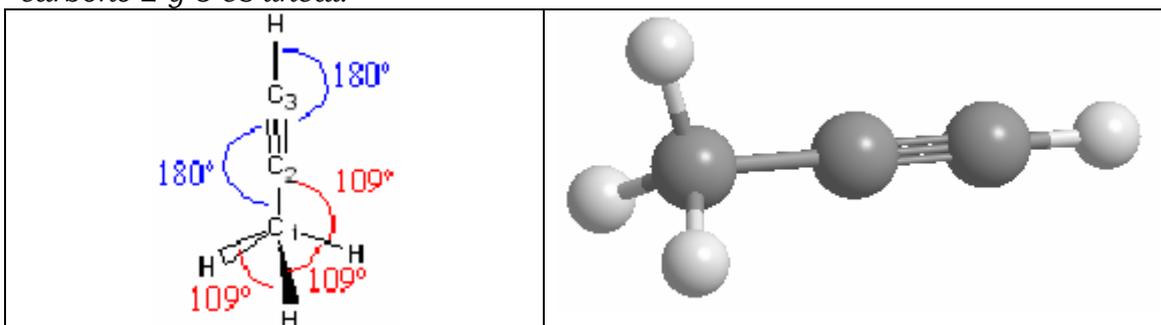


67. Haga un diagrama de la molécula de propino. Indique los ángulos de enlace de esta molécula ¿Cuál es el máximo número de átomos que pueden estar en el mismo plano?



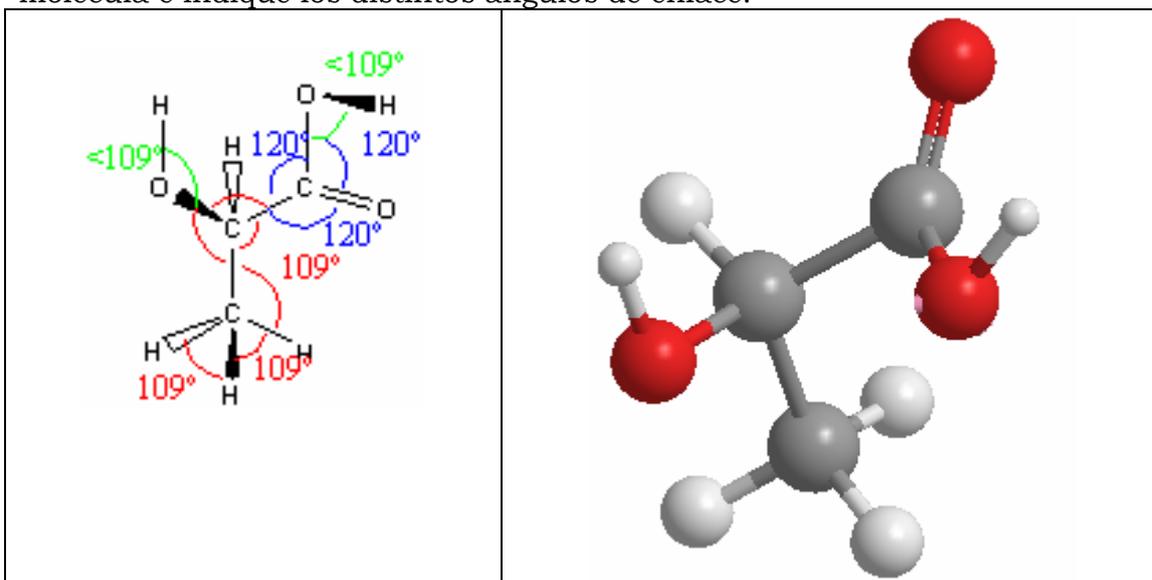
Estructura de Lewis más representativa:

Por tanto, la distribución electrónica alrededor del C1 es tetraédrica y del carbono 2 y 3 es lineal.



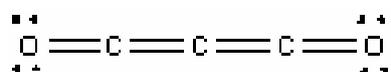
Por tanto, como mucho podrá haber 5 átomos en un plano: HCCCH

69. La fórmula del ácido láctico es $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$. Haga un diagrama de la molécula e indique los distintos ángulos de enlace.



98. El subóxido de carbono tiene la fórmula C_3O_2 . Los enlaces Carbono-carbono tienen una longitud de 130 pm y los enlaces carbono-oxígeno 120 pm. Proponga una estructura de Lewis que sea compatible con estas longitudes de enlace y prediga la forma de la molécula.

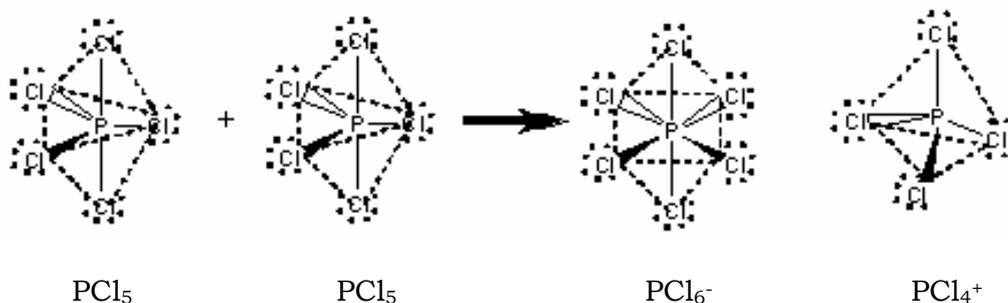
Distancias de enlace C-C de 1,30 Å son características de los dobles enlace C=C, mientras que distancias de 1,20 Å son característicos para los dobles enlaces C=O.



La molécula ha de ser totalmente lineal

99. En algunos disolventes polares el PCl_5 experimenta una reacción de ionización en la que un ión Cl^- abandona una molécula de pentacloruro y se une a otra. Los productos de la reacción son PCl_4^+ y PCl_6^- . Haga un esquema mostrando los cambios en la geometría molecular que ocurre en la reacción de ionización.

Establezcamos primero las estructuras de Lewis de las moléculas y sus formas moleculares. Así sabremos que el pentacloruro de fósforo es una bipirámide trigonal, el anión es un octaedro y el catión es un tetraedro. La reacción sucede según el esquema



104. El momento dipolar (medido en la fase gaseosa)

$$\mu = \delta \cdot d$$

$$\mu (\text{LiBr}) = 7,268 \text{ D} \times 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C.m/D} = 24,28 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$$\delta = 24,28 \cdot 10^{-30} \text{ C.m} / 217 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 1,119 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

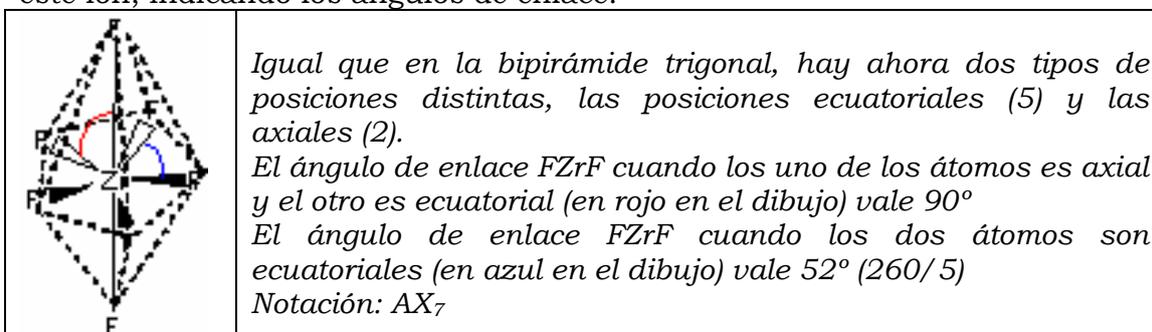
$$\text{Carga de 1 electrón: } 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

El porcentaje del carácter iónico es de un 70% (para la molécula gaseosa para la que se determinó el momento dipolar)

$$\delta = 9,001 \times 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C.m} / 236,1 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 1,273 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

El porcentaje del carácter iónico es de un 79,5% (para la molécula gaseosa para la que se determinó el momento dipolar)

105. Como en el caso del ión $[\text{ZrF}_7]^{3-}$, la geometría de grupos de electrones de siete grupos puede ser bipiramidal-pentagonal. Escriba la notación RPECV de este ión, indicando los ángulos de enlace.



106. El razonamiento de Pauling para establecer su escala de electronegatividades original fue aproximadamente el siguiente: si se supone que el enlace A-B no es polar, su energía de enlace es el valor medio de las energías de los enlaces A-A y B-B. La diferencia entre el valor de la energía de enlace A-B calculado y el valor medido puede atribuirse al carácter parcialmente iónico del enlace y se llama *energía de resonancia iónica* (ERI). Si el valor de ERI se expresa en kilojulios por mol, la relación entre ERI y la diferencia de electronegatividades es $(\Delta\text{EN})^2 = \text{ERI}/96$. Para probar que esta relación es la base de una escala de electronegatividades,

a) Utilice los datos de la tabla 11.3 para determinar ERI del enlace H-Cl

$$E (\text{H-H}) = 436 \text{ kJ/mol} \quad \text{ERI} = 431 - (218 + 121,5) = 91,5 \text{ kJ/mol}$$

$$E (\text{Cl-Cl}) = 243 \text{ kJ/mol}$$

$$E (\text{H-Cl}) = 431 \text{ kJ/mol}$$

b) Determine ΔEN del enlace H-Cl

$$\Delta\text{EN} = (91,5/96)^{1/2} = 0,976$$

c) Establezca aproximadamente el porcentaje de carácter iónico del enlace H-Cl utilizando el resultado del apartado b) y la figura 11.7. Compare el valor con el obtenido en el ejemplo 11.4

Aproximadamente un 20%, como en el problema