



Universitat de les
Illes Balears

Departament de Química

NOMBRE y APELLIDOS

Cuestiones sobre capas y orbitales atómicos (tiempo aproximado: 30 min)

1. (0,5 punto) Escriba la notación de un orbital atómico real que tiene una y sólo una superficie esférica nodal y dos planos nodales. También sabe que para ese orbital las direcciones de máxima probabilidad de encontrar al electrón coinciden con los ejes X e Y, de manera que la función es positiva a lo largo del eje X y negativa a lo largo del eje Y. Justifique brevemente su respuesta.

Solución:

“que tiene dos planos nodales” => orbital d . Sólo los orbitales d tienen 2 planos nodales. Número que coincide con el valor de l del orbital ($l=2$).

“que tiene una y sólo una superficie esférica nodal” => que la capa a la que pertenece esa subcapa d , debe tener un valor de $n=n^{\circ}\text{sup-nodal}+l+1 = 1+2+1=4$. Por tanto estamos hablando de un orbital $4d$.

Sólo hay dos orbitales d con máximo de probabilidad en el plano XY, el orbital d_{xy} , cuyas direcciones de máxima probabilidad son las bisectrices de los ángulos rectos que forman los ejes coordenados XY y el

$d_{x^2-y^2}$ cuyas direcciones de máxima probabilidad coinciden con los ejes.

Es este orbital la función es positiva a lo largo del eje de las X (de ahí x^2) y negativa a lo largo del eje Y (de ahí $-y^2$)

Por tanto, se trata del orbital $4d_{x^2-y^2}$

2. (0,5 punto) Los electrones de valencia de un elemento con configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$, son los electrones $3s^2 3p^6 3d^5$ ¿Es cierto? Justifique su respuesta.

Solución:

Dada la configuración electrónica del átomo, podemos deducir que se trata de un elemento de transición, ya que tiene su subcapa $3d$ incompleta y la subcapa $4s$ llena.

Sabemos que los electrones de valencia de un elemento de transición son los que pertenecientes a la subcapa ns y todos los $(n-1)d$ que haya. En este caso, por tanto **los electrones de valencia son los $3d^5 4s^2$** y no, los que indica el enunciado de la cuestión.

3. (1 punto) En relación a las capas y los orbitales atómicos, Diga si son ciertas o falsas las siguientes afirmaciones y justifique brevemente su respuesta.
- a) Todos los orbitales de una subcapa p tienen la misma función radial
Sí. Todos los orbitales de una subcapa np tienen el mismo valor del número cuántico n y el mismo valor del número cuántico l , 1 en este caso. Como la función radial depende de los números n y l , si estos son iguales la función también lo será.
- b) Todos los orbitales de una subcapa d tienen la misma función angular
No. La función angular, depende de los números cuánticos n y m . En una subcapa d , todos los orbitales tienen el mismo valor de $l=2$, pero distinto valor de m (-2,1,0,1,2), por lo que la función angular de cada uno de los 5 orbitales d de una subcapa es distinta.
- c) Para cualquier valor Z , los orbitales 3d tienen menor energía que los orbitales 4s
No. Cuando $Z=19$ (K) y $Z=20$ (Ca) los orbitales 4s tienen menor energía que los 3d, por eso tienen configuraciones electrónicas con $4s^1$ y $4s^2$ respectivamente y tienen la subcapa 3d vacía. Para cualquier otro valor de Z , la energía de los orbitales 3d siempre es menor.
- d) “Todos los electrones de la capa K de un átomo polielectrónico tienen la misma energía”
Sí. En la capa K ($n=1$) sólo puede haber electrones s. Todos los electrones son iguales.
Puesto que la energía depende de n y de l y ambos electrones tienen el mismo valor de esos números cuánticos => ambos electrones tienen la misma energía
- e) “Todos los electrones de la capa L de un átomo polielectrónico tienen la misma energía”
No. En la capa L ($n=2$) puede haber subcapa 2s ($n=2; l=0$) y subcapa 2p ($n=2; l=1$), cuyos electrones no tendrán la misma energía, por la misma razón que se ha dicho en el apartado d) de este ejercicio.

Cuestiones sobre configuraciones electrónicas y estructura atómica:

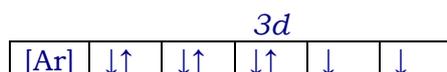
4. (1 punto) En la tabla periódica que aparece en el texto, marque, respectivamente, con la letra a, b, c, d y e:
- a) El halógeno del quinto periodo
b) Un elemento con configuración electrónica de su capa de valencia $6s^26p^1$
c) Un elemento del bloque d que en su configuración electrónica fundamental tenga sólo un electrón 5s
d) El elemento del bloque p con tres electrones desapareados
e) Un elemento del bloque p que sea un metal

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1																		
2															d			
3																		
4																		
5						c											a	
6													b	e				
7																		

5. (1 punto) Escriba las configuraciones electrónicas en la notación spdf con abreviatura de gas noble y con un diagrama de orbitales o notación por cajas, de los siguientes cationes e indique el número de electrones desapareados: Ni^{2+} ; Cu^{2+} ; Cr^{3+} ¿Cuál de los iones presentaría un mayor momento magnético?

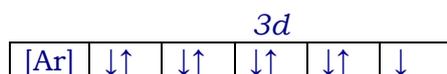
Ni- 4º periodo y Grupo 10 => 10 electrones de valencia, 2 de tipo s y 8 de tipo d. Si se eliminan 2 electrones de su capa de valencia (carga del ión +2) => que se eliminan los $4s^2$ y le quedan 8 electrones 3d. Por tanto

Ni^{2+} ; [Ar] $3d^8$; **Dos** electrones desapareados



Cu- 4º periodo y Grupo 11 => 11 electrones de valencia, deberían ser 2 de tipo s y 9 de tipo d, pero es una excepción de manera que son 1 de tipo s y 10 de tipo d. Si se eliminan 2 electrones de su capa de valencia (carga del ión +2) => que se eliminan los $4s^1$ y uno de los 3d, quedándole 9 electrones 3d. Por tanto

Cu^{2+} ; [Ar] $3d^9$; **Un** electrón desapareado



Cr- 4º periodo y Grupo 6 => 6 electrones de valencia, deberían ser 2 de tipo s y 4 de tipo d, pero es una excepción de manera que son 1 de tipo s y 5 de tipo d. Si se eliminan 3 electrones de su capa de valencia (carga del ión +3) => que se eliminan los $4s^1$ y dos de los 3d, quedándole 3 electrones 3d. Por tanto

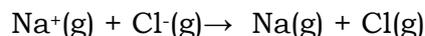
Cr^{3+} ; [Ar] $3d^3$; **Tres** electrón desapareado



Presentarán un momento magnético más intenso cuanto mayor número de electrones desapareados tengan. Por tanto $\mu(\text{Cr}^{3+}) > \mu(\text{Ni}^{2+}) > \mu(\text{Cu}^{2+})$

Cuestiones sobre propiedades atómicas (tiempo aproximado: 30 min)

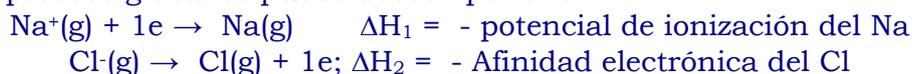
6. (1 punto) Cuando se calienta fuertemente en una llama el cloruro de sodio, la llama toma color amarillo asociado al espectro de emisión de los átomos de sodio. La reacción que tiene lugar en estado gaseoso es:



Calcula el ΔH de la reacción.

Datos: $I(\text{Na}) = 495,0 \text{ kJ/mol}$; $I(\text{Cl}) = 1251,1 \text{ kJ/mol}$; $A(\text{Na}) = -52,9 \text{ kJ/mol}$; $A(\text{Cl}) = -349,0 \text{ kJ/mol}$

El proceso global se puede descomponer en:



$$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 = -495,0 + 349,0 = -146 \text{ kJ/mol}$$

Es decir, la reacción que se favorece energéticamente en el estado gaseoso es tener los átomos neutros, no en forma iónica.

7. (1,5 punto) Las siguientes especies son isoelectrónicas con el Kr: Rb^+ , Y^{3+} , Br^- , Se^{2-} . Ordénelos por orden creciente de su tamaño. Razone la respuesta

Tal como dice el enunciado, si todos los átomos e iones que se indican son isoelectrónicos, en su estado fundamental todos tendrán la misma configuración electrónica:



Podemos, en primera aproximación asumir que el tamaño de un átomo es el tamaño de su orbital más externo. En este caso, el orbital más externo de todos los átomos e iones del enunciado es el $4p$. Así que, el tamaño de todos estos orbitales tienen el mismo valor para su dependencia, tanto con el número cuántico n , como para su dependencia con el número cuántico l . Por otro lado, el tamaño del orbital depende del valor de su carga nuclear efectiva, Z_{ef} , definida como:

$$Z_{\text{ef}} = Z - \sigma$$

Siendo σ la constante de pantalla del orbital. Esta constante de pantalla se obtiene como un sumatorio de lo que cada electrón del átomo contribuye a la pantalla del orbital en cuestión. En el caso que nos ocupa, todos los átomos e iones tienen el mismo número de electrones y la misma configuración electrónica, por tanto **todos tienen la misma constante de pantalla**. La diferencia de constante efectiva, dependerá del valor de Z de cada elemento.

$$Z(\text{Se}^{2-}) = 34; Z(\text{Br}^-) = 35; Z(\text{Kr}) = 36; Z(\text{Rb}^+) = 37; Z(\text{Y}^{3+}) = 39$$

Por tanto

$$Z_{\text{ef}}(\text{Se}^{2-}) < Z_{\text{ef}}(\text{Br}^-) < Z_{\text{ef}}(\text{Kr}) < Z_{\text{ef}}(\text{Rb}^+) < Z_{\text{ef}}(\text{Y}^{3+})$$

El tamaño de los orbitales es inversamente proporcional al valor de Z_{ef} . Por tanto el tamaño irá disminuyendo desde el dianión hasta el tricatión. Así que, **ordenados en el orden creciente de sus tamaños:**



Cuestiones sobre enlace químico (tiempo aproximado: 30 min)

8. (1 puntos) Asigne cargas formales a cada una de las siguientes estructuras:

a) 	b) 	c)
d) 	e) 	

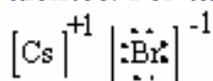
Nota: Aunque para las estructuras anteriores pueda haber híbridos de resonancia, haga el cálculo sólo para la estructura de Lewis que se da en el ejercicio. Justifique su respuesta

	<ul style="list-style-type: none"> • O(1); 6(electrones de valencia) – 6 (electrones de par solitario) – 1(electrón de enlace) = -1 • S; 6(electrones de valencia) – 2 (electrones de par solitario) – 3(electrón de enlace) = +1 • O(2); 6(electrones de valencia) – 4 (electrones de par solitario) – 2(electrón de enlace) = 0
	<ul style="list-style-type: none"> • H; 1(electrones de valencia) – 1(electrón de enlace) = 0 • C(1); 4(electrones de valencia) – 4 (electrón de enlace) = 0 • C(2); 4(electrones de valencia) – 2 (electrones de par solitario) – 3 (electrón de enlace) = -1
	<ul style="list-style-type: none"> • O(1); 6(electrones de valencia) – 6 (electrones de par solitario) – 1(electrón de enlace) = -1 • O(2); 6(electrones de valencia) – 6 (electrones de par solitario) – 1(electrón de enlace) = -1 • O(3); 6(electrones de valencia) – 4 (electrones de par solitario) – 2(electrón de enlace) = 0 • C; 4(electrones de valencia) – 4 (electrón de enlace) = 0
	<ul style="list-style-type: none"> • H (todos son iguales); 1(electrones de valencia) – 1(electrón de enlace) = 0 • C(1) y C(3) 4(electrones de valencia) – 4 (electrón de enlace) = 0 • C(2); 4(electrones de valencia) – 3 (electrón de enlace) = +1 <p>La molécula es un carbocatión.</p>

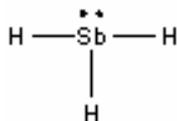
	<ul style="list-style-type: none"> • O(1); 6(electrones de valencia) – 6 (electrones de par solitario) – 1(electrón de enlace) = -1 • N; 5(electrones de valencia) – 1 (electrón solitario) – 3(electrón de enlace) = +1 • O(2); 6(electrones de valencia) – 4 (electrones de par solitario) – 2(electrón de enlace) = 0
--	---

9. (1 punto) Represente mediante estructuras de Lewis los enlaces entre los siguientes pares de elementos. Las estructuras deben mostrar si el carácter es esencialmente iónico o covalente. a) Cs y Br, b) H y Sb, c) B y Cl, d) Cs y Cl, e) Li y O, f) Cl y I.

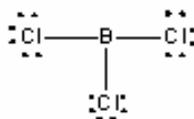
Todos los enlaces metal-no metal son iónicos y los no metal-no metal son covalentes. Por tanto



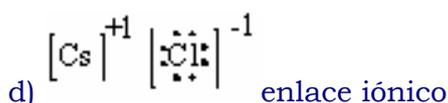
- a) enlace iónico



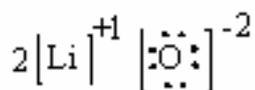
- b) enlace covalente



- c) enlace covalente de un elemento con hipovalencia



- d) enlace iónico



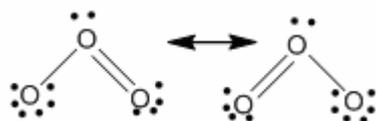
- e) enlace iónico



- f) enlace covalente

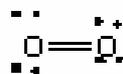
10. (1,5 punto) ¿En cual de las siguientes moléculas cabe esperar un enlace Oxígeno-Oxígeno más corto? Ozono (O_3) oxígeno (O_2), agua oxigenada (H_2O_2) ¿En cual de ellas espera una mayor energía del enlace entre los átomos de oxígeno? Razone las respuestas.

El enlace más corto será aquel que tenga mayor orden de enlace.
Hemos de saber primero cómo es el enlace en estas moléculas.

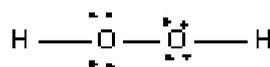


La molécula de **ozono** es un híbrido de resonancia entre las dos estructuras de Lewis que se muestran más arriba.

El orden de enlace entre dos átomos de oxígeno será: $1 + 1/2 = 1,5$



La molécula de **oxígeno** es diatómica el orden de enlace es 2.



En la molécula de **agua oxigenada**: El orden de enlace es sencillo.

Así pues el orden del enlace oxígeno-oxígeno es:

Oxígeno > Ozono > Agua Oxigenada.

En consecuencia el enlace más corto se encontrará en la molécula de oxígeno, después en la de ozono y después en la de agua oxigenada.

Por el mismo motivo, las energías de enlace más fuertes serán las del oxígeno, después las del ozono y después las del agua oxigenada.