

# Problemas Química General

## Enlace químico

1. Estime la participación iónica (expresada como cociente entre la carga parcial del dipolo y la carga de un electrón) en los enlaces de las siguientes moléculas ( $1 \text{ D} = 3.34 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ ):

	Momento dipolar (D)	Distancia de enlace (Å)
HF	1.82	0.92
HCl	1.08	1.28
BrF	1.29	1.76

*Solución: HF 41 %, HCl 17.6 %, BrF 15.3 %.*

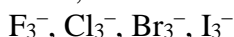
2. La molécula de  $\text{H}_2\text{O}$  presenta un ángulo de enlace de  $104^\circ$  y un momento dipolar de 1.84 D. Calcule el valor del dipolo de cada enlace H–O.

*Solución: 1.49 D.*

3. De las siguientes especies: HF, NaCl,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CS}_2$ , HCN,  $\text{F}_2$  y  $\text{CH}_4$ , indique razonadamente:

- Las que presentan enlaces covalentes puros.
- Las que presentan enlaces predominantemente iónicos.
- Las moléculas polares.
- Las que tienen enlaces múltiples

4. Indique, en base a las estructuras de Lewis, cuál de los siguientes iones no puede existir:

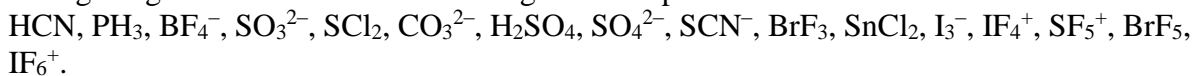


5. Decida, en función de las cargas formales, cuál es la estructura más probable:

- $\text{H}_2\text{NOH}$  o  $\text{H}_2\text{ONH}$
- SCS o CSS
- NON o NNO
- $\text{SCN}^-$ ,  $\text{CSN}^-$  o  $\text{CNS}^-$

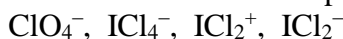
6. Un compuesto líquido apolar presenta la siguiente composición: C, 14.5 %; Cl, 85.5 %. Escriba la estructura de Lewis de la molécula más pequeña que cumpla los requisitos anteriores.

7. Prediga la geometría molecular de las siguientes especies:



8. En  $\text{BrF}_5$  hay cuatro distancias Br–F de 1.78 Å y una Br–F' de 1.68 Å. Dibuje la estructura de dicha molécula y justifique el valor encontrado,  $85^\circ$ , para el ángulo F–Br–F'.

9. Aplique la Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia a las especies

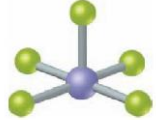



y determine en cada caso:

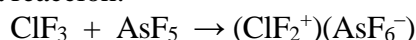
- La estructura de Lewis.
- La geometría de los pares de electrones en torno al átomo central.
- La forma molecular y el valor aproximado de los ángulos de enlace.
- La hibridación que presenta el átomo central.
- La polaridad de la molécula.

10. El ion  $\text{F}_2\text{Cl}^-$  es lineal pero el ion  $\text{F}_2\text{Cl}^+$  es angular. Explique estas diferencias y describa los esquemas de hibridación del átomo central consistentes con estas estructuras.

11. Una molécula neutra tiene de fórmula  $EICl_3$ . Indique el grupo del Sistema Periódico a que pertenece el elemento desconocido si:
- la molécula es apolar.
  - la molécula presenta momento dipolar.
12. Ordene, de mayor a menor, los ángulos de enlace en la molécula  $SO_2F_2$ .
13. Justifique la geometría e hibridación de las siguientes moléculas  $ClF_3$ ,  $AlF_3$  y  $IF_5$ , rellenando los datos de la tabla siguiente:

Molécula	Geometría de los grupos de electrones	Geometría de la molécula	Notación TRPECV ( $AX_nE_m$ )	Hibridación del átomo central	¿Momento dipolar? Si/no
					
$AlF_3$					
					

14. La reacción entre  $ClF_3$  y  $AsF_5$  tiene lugar mediante transferencia de un ion fluoruro y formación de una especie iónica, según la reacción:



Indique, para cada molécula de reactivo y cada ion del producto, la geometría molecular y el cambio producido en la hibridación del átomo central

15. En la siguiente figura se muestran tres posibles geometrías para el fluoruro de un elemento A, de fórmula general  $AF_3$ :



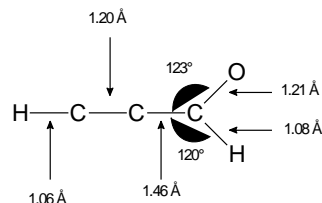
- Aplique la teoría de RPECV e indique la geometría de los pares de electrones que explicaría la forma de cada una de las moléculas. Indique el número de pares de electrones sin compartir y la hibridación que adoptaría el átomo central en cada molécula. Determine la polaridad de las moléculas.
  - ¿Cuál de los siguientes elementos daría lugar a una molécula de fórmula  $AF_3$  y con la forma del centro: Li, B, N, Al, P, Cl?
  - Indique un elemento A que daría lugar a una molécula con la estructura de la derecha. Justifique su respuesta.
16. Para cada uno de los siguientes compuestos,  $SF_4$ ,  $ClF_3$ ,  $CH_2O$ :
- Escriba la estructura de Lewis más aceptable.
  - Prediga la geometría electrónica y la molecular de acuerdo a la teoría de RPECV.
  - Seleccione el esquema de hibridación más adecuado para el átomo central.
  - Justifique si la molécula es polar.
17. Describa, utilizando orbitales híbridos, el enlace en las especies:

- $CHCl_3$
- $ONCl$
- $HONO$
- $C_6H_6$
- $C_2O_4^{2-}$

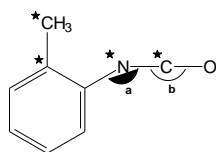
18. Indique los orbitales híbridos que usan los átomos de azufre en las siguientes especies:  
 $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$  (= S-SO<sub>3</sub>),  $\text{S}_2\text{O}_7^{2-}$  (= O<sub>3</sub>S-O-SO<sub>3</sub>),  $\text{SF}_2$ ,  $\text{SF}_4$ ,  $\text{SF}_6$ ,  $\text{FS-SF}_3$ .

19. Indique la hibridación de los átomos en la molécula:  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\underset{\text{NH}_2}{\text{CH}}-\text{COOH}$   
 Dibuje la estructura molecular, el esquema de enlaces  $\sigma$  y  $\pi$  y justifique los valores de los ángulos de enlace esperados.

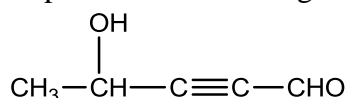
20. Indique, de manera justificada, el orden de cada uno de los enlaces del propinal que esté en consonancia con las distancias de enlace experimentales:



21. Describa la hibridación esperada para los átomos marcados con asterisco en el 2,4-diisocianatotolueno. Prediga el valor de los ángulos  $a$  y  $b$ .



22. Indique la hibridación de cada átomo, describa los enlaces  $\sigma$  y  $\pi$  formados, localice los pares de electrones sin compartir y el valor aproximado de los ángulos de enlace en la molécula:



23. El nitrato de metilo,  $\text{CH}_3\text{ONO}_2$ , es utilizado como combustible en cohetes. Esta molécula presenta un ángulo de enlace C-O-N de  $105^\circ$  y un ángulo O-N-O de  $125^\circ$ . Las distancias N-O tienen valores de 1.26 y 1.36 Å y la distancia C-O de 1.44 Å.

Describa el enlace en esta molécula y justifique los valores de distancias y ángulos de enlace en base a los enlaces formados.

24. Isómeros son moléculas con la misma fórmula empírica pero distintas fórmulas desarrolladas.

- Indique la estructura de Lewis y describa el enlace en dos isómeros de fórmula  $\text{C}_3\text{H}_4$ .
- Describa el enlace en los dos isómeros de  $\text{FNNF}$ .

25. La dicianoamida,  $\text{NCNC}(\text{NH}_2)_2$ , presenta tres distancias de enlace carbono-nitrógeno diferentes. Describa la geometría molecular, la hibridación de cada átomo y los enlaces  $\sigma$  y  $\pi$  en dicha molécula.

26. Según la teoría de orbitales moleculares, cuáles de las siguientes especies no serán estables:

- $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2^-$ ,  $\text{H}_2^{2-}$ .
- $\text{He}_2^{2+}$ ,  $\text{He}_2^+$ ,  $\text{He}_2$ .
- $\text{Li}_2$ ,  $\text{Be}_2$ ,  $\text{B}_2$ .

27. Describa el enlace de los siguientes iones, aplicando la teoría de orbitales moleculares:  $\text{B}_2^+$ ,  $\text{Li}_2^+$ ,  $\text{N}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$ . Indique cómo afectaría al orden de enlace y a las características magnéticas, en cada caso, la adición de un electrón.

28. Calcule el orden de enlace y prediga las propiedades magnéticas de las siguientes moléculas o iones. Justifique qué especie de cada par tiene un enlace más fuerte:

- $\text{C}_2$  o  $\text{C}_2^+$
- $\text{B}_2$  o  $\text{B}_2^+$
- $\text{F}_2$  o  $\text{F}_2^+$
- $\text{O}_2$  u  $\text{O}_2^+$

29. Justifique, aplicando la teoría de orbitales moleculares, cuál de las siguientes especies tiene mayor energía de ionización:
- La molécula de nitrógeno o el nitrógeno atómico.
  - La molécula de flúor o el átomo de flúor.
30. La molécula diatómica OH existe en las capas altas de la atmósfera. Suponiendo que situamos el enlace molecular a lo largo del eje z de coordenadas, conteste las siguientes cuestiones:
- Dibuje el diagrama de orbitales moleculares de esta especie.
  - Indique qué orbital atómico participa más en cada uno de los orbitales moleculares de esta especie.
  - Dibuje cómo serían los orbitales enlazante y antienlazante de esta especie.
  - Prediga cómo variará el orden de enlace en las especies: OH, OH<sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>.
  - ¿Dónde se sitúa la mayor parte de la densidad electrónica en esta molécula?
31. ¿Cuántos niveles de energía se encuentran en la banda formada por los orbitales 3s de un cristal de sodio que pesa 26.8 mg? ¿Cuántos electrones ocupan dicha banda?  
Solución:  $7.02 \cdot 10^{20}$ .
32. Una célula solar de silicio es efectiva en todo el rango de la luz visible (380 a 780 nm). Estime el valor máximo de la energía de separación de las bandas de valencia y de conducción. ¿Por qué esta célula solar puede trabajar en un amplio rango de longitudes de onda en lugar de hacerlo a una longitud determinada?  
Solución:  $1.59 \text{ eV}$ .
33. En los siguientes pares de sustancias iónicas elija la de mayor energía reticular:
- NaCl, KCl.
  - LiF, LiCl.
  - Mg(OH)<sub>2</sub>, MgO.
  - Fe(OH)<sub>2</sub>, Fe(OH)<sub>3</sub>.
  - MgO, BaS.
34. El cloruro de sodio funde a 801 °C, el bromuro de sodio a 747 °C, y el yoduro de sodio a 661 °C.
- Sugiera una explicación de la tendencia observada en los puntos de fusión de los halógenos de sodio.
  - Ordene de menor a mayor los valores de los puntos de fusión de los cloruros de potasio, sodio y rubidio.
35. Calcule la energía reticular del cloruro de bario a partir de los siguientes datos:  
Radio iónico del Ba<sup>2+</sup>: 1.34 Å; radio iónico del Cl<sup>-</sup>: 1.81 Å; constante de Madelung del BaCl<sub>2</sub>: 2.408; coeficiente de Born para el BaCl<sub>2</sub>: 10.5.  
Solución:  $-1923 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .
36. Las energías reticulares de los óxidos y cloruros de hierro(II) y hierro(III) son -2631, -3865, -5359 y -14774 kJ·mol<sup>-1</sup>. Relacione cada energía con el compuesto correspondiente y justifique dicha asignación.
37. A partir de los siguientes datos (en kJ·mol<sup>-1</sup>) calcule la energía reticular del óxido de sodio:
- |   |   |      |
|---|---|------|
| $\Delta H_{\text{Vaporización}}(\text{Na})$                 | = | 108  |
| $\Delta H_{\text{Ionización}}(\text{Na})$                   | = | 496  |
| $\Delta H_{\text{Disociación}}(\text{O}_2)$                 | = | 493  |
| $\Delta H_{1^\circ \text{ Afinidad Electrónica}}(\text{O})$ | = | -141 |
| $\Delta H_{2^\circ \text{ Afinidad Electrónica}}(\text{O})$ | = | 878  |
| $\Delta H_{\text{Formación}}(\text{Na}_2\text{O})$          | = | -416 |
- Solución:  $-2607 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

38. Calcule la energía reticular del  $\text{CuCl}_2$  a partir de los siguientes datos (en  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ), y represente el correspondiente ciclo de Born-Haber.

$\Delta H_{\text{Vaporización}}(\text{Cu})$	=	338
$\Delta H_{1^\circ \text{ Ionización}}(\text{Cu})$	=	746
$\Delta H_{2^\circ \text{ Ionización}}(\text{Cu})$	=	1958
$\Delta H_{\text{Disociación}}(\text{Cl}_2)$	=	243
$\Delta H_{\text{Afinidad Electrónica}}(\text{Cl})$	=	-349
$\Delta H_{\text{Formación}}(\text{CuCl}_2)$	=	-186

Solución:  $-2773 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

39. Comente las diferencias en las propiedades de  $\text{MgO}$  y  $\text{LiF}$ , sabiendo que ambas sustancias cristalizan con la misma estructura:

	MgO	LiF
p.f.(°C)	2800	842
dureza (escala Mohs)	6.5	3.3
densidad ( $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ )	3.58	2.63
solubilidad (g/100 mL $\text{H}_2\text{O}$ )	0.062	0.27
distancia anión-cation (Å)	2.05	1.96

40. El talio y el oxígeno forman dos compuestos con las siguientes características:

	Compuesto A	Compuesto B
% en masa de Tl	89.5	96.2
p.f. (°C)	717	300

Determine las fórmulas de ambos compuestos y justifique el diferente carácter iónico del enlace en función de los correspondientes puntos de fusión.