

## SEMINARIO DE QUIMICA

### Tema 3. Moléculas y Compuestos Químicos

1. Indicar qué tipo de enlace existe en los siguientes compuestos:

HF, RbBr, AlBr<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>, Na, CaH<sub>2</sub>, CO, Ti, H<sub>2</sub>O, NaCl, TiCl<sub>4</sub>

2. Calcular la energía reticular para el óxido de calcio.

Datos:  $\Delta H_S(\text{Ca}) = 172 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{I(1)}(\text{Ca}) = 6.1 \text{ eV}$ ,  $\Delta H_{I(2)}(\text{Ca}) = 11.9 \text{ eV}$ ,  
 $\Delta H^{\circ}_D(\text{O}_2) = 498 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{AE(1)}(\text{O}) = -141.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{AE(2)}(\text{O}) = 781.4 \text{ kJ mol}^{-1}$   
 $\Delta H^{\circ}_f(\text{CaO}) = -637 \text{ kJ mol}^{-1}$

3. Determinar la afinidad electrónica del flúor a partir de los siguientes datos:

$U_o = -900.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H^{\circ}_D(\text{F}_2) = 160 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_S(\text{Na}) = 101 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  
 $\Delta H^{\circ}_f(\text{NaF}) = -571 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_I(\text{Na}) = 494 \text{ kJ mol}^{-1}$

4. Calcular la energía de ionización de cesio, teniendo en cuenta que yoduro de cesio cristaliza con la estructura tipo CsCl.

Datos:  $A_{\text{CsCl}} = 1.76267$ ,  $r(\text{Cs}^+) = 1.69 \text{ \AA}$ ,  $r(\text{I}^-) = 2.16 \text{ \AA}$ ,  $\Delta H^{\circ}_D(\text{I}_2) = 151 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  
 $\Delta H_S(\text{Cs}) = 66.1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{AE}(\text{I}) = -314 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H^{\circ}_f(\text{CsI}) = -337 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  
 $\Delta H_S(\text{I}_2) = 41.95 \text{ kJ mol}^{-1}$

5. Comentar la diferencia de propiedades de MgO y LiF, teniendo en cuenta que ambas sustancias cristalizan en la misma estructura (tipo NaCl).

	MgO	LiF
P.F.(°C)	2800	842
Dureza (escala Mohs)	6.5	3.3
Solubilidad (g/100 mL H <sub>2</sub> O)	0.062	0.27
d <sub>0</sub> (Å)	2.05	1.96

6. Indicar que compuesto sería más iónico en cada uno de los siguientes pares:

CaCl<sub>2</sub> / MgCl<sub>2</sub>; NaCl / CaCl<sub>2</sub>; NaCl / CuCl; TiCl<sub>3</sub> / TiCl<sub>4</sub>

7. Justificar la variación del punto de fusión en los siguientes compuestos:

NaBr: 755°C; AlBr<sub>3</sub>: 97.3°C.

8. Explicar la variación de propiedades encontradas en los siguientes metales:

	P. fusión (°C)	$\rho$ (g·cm <sup>-3</sup> )	Coef. dil. térmica (K <sup>-1</sup> , x10 <sup>6</sup> )
Li	180.5	0.535	46
Cs	28.4	1.877	98
Na	97.7	0.965	71
Al	660.3	2.7	23.1

9. Escriba estructuras Lewis apropiadas para las siguientes especies. Compruebe si se cumple la regla del octeto y calcule las cargas formales así como el estado de oxidación del átomo central. Indique la geometría molecular y la hibridación del átomo central.

1. SiH <sub>4</sub>	6. ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	11. CO <sub>2</sub>	16. SO <sub>2</sub>
2. Cl <sub>2</sub> O	7. NO <sub>2</sub>	12. ONC <sup>-</sup>	17. PCl <sub>3</sub>
3. ClO <sup>-</sup>	8. NO <sup>+</sup>	13. NCO <sup>-</sup>	18. PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>
4. ClO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	9. COS	14. NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	19. NH <sub>3</sub>
5. ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	10. N <sub>2</sub> O	15. H <sub>2</sub> B-NH <sub>2</sub>	20. NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>

10. Predecir la variación de fuerza de enlace en los oxoaniones de cloro analizados en el ejercicio 9.

11. Indicar la geometría de la molécula de aleno ( $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$ ) así como la hibridación existente en los átomos de carbono. Dibujar un diagrama que muestre la formación de los respectivos enlaces.

12. Indique si las siguientes moléculas son polares o no, teniendo en cuenta la geometría:

(a)  $\text{O}_2$             (b)  $\text{CO}_2$             (c)  $\text{H}_2\text{O}$             (d)  $\text{NH}_3$             (e)  $\text{CHCl}_3$             (f)  $\text{BH}_3$

13. Indique en los compuestos  $\text{CS}_2$ ,  $\text{BaCl}_2$ ,  $\text{HCN}$ ,  $\text{F}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$

- (a) enlace covalente sencillo no polar
- (b) enlace covalente sencillo polar
- (c) enlace covalente múltiple, indicando el orden de enlace
- (d) enlace iónico

14. Algunas de las siguientes afirmaciones referentes a la geometría molecular son siempre verdaderas y otras no. Justificar la razón de ello.

- (a) Las moléculas diatómicas tienen una geometría lineal.
- (b) Las moléculas que tienen cuatro átomos enlazados a un mismo átomo central tienen geometría tetraédrica.
- (c) Las moléculas con geometría plana son triatómicas.
- (d) Las moléculas con un elemento no metálico del segundo período como átomo central no pueden tener geometría octaédrica.
- (e) Las moléculas tetraatómicas son planas.

15. De las siguientes moléculas indicar la que tiene una energía de enlace más alta:  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{Cl}_2$

### Ejercicios de reflexión

1. Calcular la energía reticular del cloruro de magnesio.

Datos:  $\Delta H_S(\text{Mg}) = 150 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{I(1)}(\text{Mg}) = 738 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{I(2)}(\text{Mg}) = 1450 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H^{\circ}_D(\text{Cl}_2) = 243 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H_{AE}(\text{Cl}) = -348 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta H^{\circ}_f(\text{MgCl}_2) = -642 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

2. Las energías reticulares de  $\text{NaF}$  y  $\text{NaBr}$  son  $-914.2$  y  $-728.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ , respectivamente. Teniendo en cuenta que ambos cristalizan en el tipo estructural  $\text{NaCl}$  y que el radio iónico de  $\text{Na}^+$  es  $0.95 \text{ \AA}$ , calcular los radios de los iones haluro.

3. Comentar la variación de las energías reticulares experimentales (en  $\text{kJ mol}^{-1}$ ), obtenidos por ciclo termodinámico, de los haluros de cobre(I). Explicar las diferencias encontradas con los valores calculados suponiendo exclusivamente fuerzas iónicas.

	<b>CuCl</b>	<b>CuBr</b>	<b>CuI</b>
$U_o(\text{exp, ciclo})$	-979	-996	-966
$U_o(\text{cal})$	-921	-879	-835

4. Escriba estructuras Lewis apropiadas para las siguientes especies. Compruebe si se cumple la regla del octeto y calcule las cargas formales así como el estado de oxidación del átomo central. Indique la geometría molecular y la hibridación del átomo central.

- |                                 |                              |
|---------------------------------|------------------------------|
| 21. $\text{PH}_4^+$             | 31. $\text{N}_3^-$           |
| 22. $\text{H}_3\text{O}^+$      | 32. $\text{CH}_3\text{CHO}$  |
| 23. $\text{ICl}_4^+$            | 33. $\text{PF}_5$            |
| 24. $\text{XeF}_4$              | 34. $\text{ClF}_3$           |
| 25. $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ | 35. $\text{SF}_4$            |
| 26. $\text{OF}_2$               | 36. $\text{SF}_6$            |
| 27. $\text{PF}_3$               | 37. $\text{H}_2\text{CCHCl}$ |
| 28. $\text{BF}_4^-$             | 38. Ácido sulfúrico          |
| 29. $\text{ICl}_4^-$            | 39. Ácido perclórico         |
| 30. $\text{IF}_2^-$             | 40. Ácido nítrico            |

5. Indicar el tipo de enlace en los siguientes compuestos:  $\text{CO}_2$  ,  $\text{C}_2\text{H}_4$  ,  $\text{CN}^-$  ,  $\text{CH}_4$