

## Resolución de ejercicios PRÁCTICO 4

1)

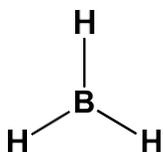
a)



Observando la estructura de Lewis de la molécula  $\text{BeH}_2$  podemos decir que el átomo de Be se une a dos átomos de H mediante dos enlaces simples.

Una hibridación de un orbital  $s$  y un  $p$  del átomo de Be, resulta en dos orbitales híbridos  $sp$  dispuestos a  $180^\circ$ , permitiendo el solapamiento con el orbital  $s$  del H, formando un enlace **sigma**. El ángulo de enlace resultante es de  $180^\circ$ .

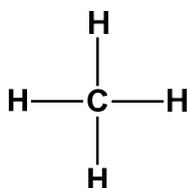
b)



El boro forma un enlace sencillo con cada uno de los tres átomos de hidrógeno.

La hibridación de un orbital  $s$  con dos orbitales  $p$  da lugar a tres orbitales híbridos  $sp^2$ , con ángulos de enlace de  $120^\circ$ . El solapamiento **sigma** de los orbitales  $sp^2$  del B, con los orbitales  $s$  del hidrógeno da lugar a una molécula plana trigonal con ángulos de enlace de  $120^\circ$ .

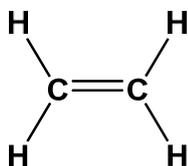
c)



El carbono forma un enlace sencillo con cada uno de los cuatro átomos de hidrógeno.

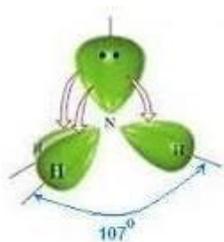
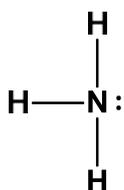
La hibridación de un orbital  $s$  con tres orbitales  $p$  da lugar a cuatro orbitales híbridos  $sp^3$ , que adoptan una disposición tetraédrica. El solapamiento **sigma** de los orbitales  $sp^3$  del C, con los orbitales  $s$  del hidrógeno da lugar a una molécula tetraédrica que separa estos enlaces con el mayor ángulo posible,  **$109^\circ 28'$** .

d)



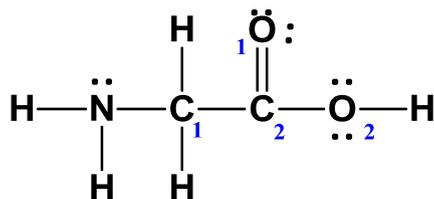
Observando la molécula  $\text{C}_2\text{H}_4$  vemos que cada C está rodeado por un octeto de electrones y hay un doble enlace entre los átomos de carbono. Cada C está enlazado a 3 átomos (3 enlaces sigma) y no hay pares de electrones solitarios. Entonces podemos predecir que cada C tiene hibridación  $sp^2$  y los ángulos de enlace son de  $120^\circ$ . El doble enlace entre los C está formado de un enlace sigma entre los orbitales  $sp^2$ , más un enlace **pi** ( $\pi$ ) formado por el solapamiento de los orbitales  $p$  sin hibridizar de los átomo de C.

2)



En la estructura del  $\text{NH}_3$  hay tres enlaces sigma y un par de electrones no enlazantes. La hibridación del N depende del número de enlaces sigma y los pares de electrones solitarios, por lo que se requieren 4 orbitales híbridos  $sp^3$  con geometría tetraédrica ( $109.5^\circ$ ). Debido a que uno de los orbitales está ocupado con dos electrones no enlazantes y éstos ocupan más espacio se genera un desviación del ángulo de enlace a  $107.3^\circ$

3) a)



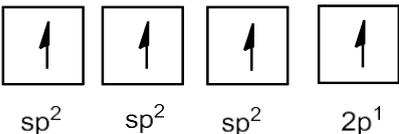
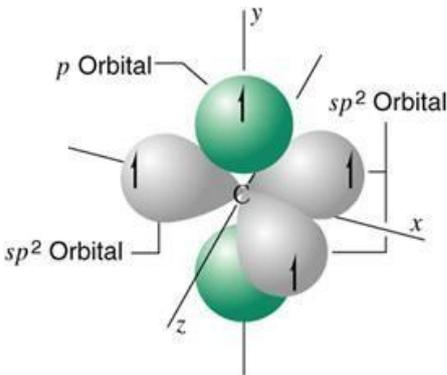
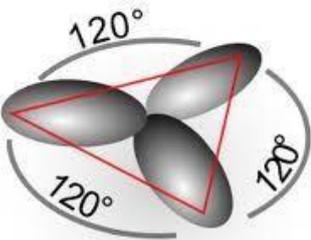
**C<sub>1</sub>**

T EV	<p>C: [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup></p> <p>Átomo de C aislado</p> <p>C hibridado</p> <p>Se combinan un orbital 2s y tres 2p del C, para dar 4 O.H.<sup>1</sup> sp<sup>3</sup></p>
Geometría del <b>C<sub>1</sub></b>	<p>Geometría tetraédrica, por lo tanto los ángulos de enlace serán de 109.5°</p>

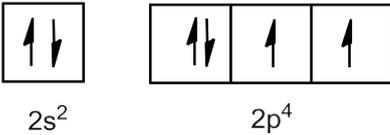
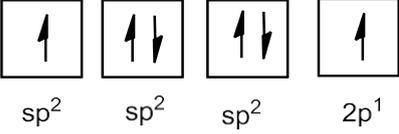
**C<sub>2</sub>**

T EV	<p>C: [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup></p> <p>Átomo de C aislado</p>
------	--

<sup>1</sup> O.H. orbitales híbridos

	<div style="text-align: center;">  <p>sp<sup>2</sup>   sp<sup>2</sup>   sp<sup>2</sup>   2p<sup>1</sup></p> </div> <p>C hibridado</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>Se combinan un orbital 2s y dos 2p del C, para dar 3 O.H. sp<sup>2</sup></p>
<p>Geometría de <b>C<sub>2</sub></b></p>	<div style="text-align: center;">  </div> <p>Geometría Trigonal Plana, ángulos de enlace serán próximos a 120°</p>

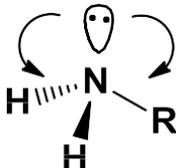
b) **O<sub>1</sub>**

<p>T EV</p>	<p>O: [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup></p> <div style="text-align: center;">  <p>[He] 2s<sup>2</sup>                      2p<sup>4</sup></p> </div> <p>Átomo de O aislado</p> <div style="text-align: center;">  <p>sp<sup>2</sup>   sp<sup>2</sup>   sp<sup>2</sup>   2p<sup>1</sup></p> </div> <p>O hibridado</p> <p>Se combinan un orbital 2s y dos 2p del O, para dar 3 O.H. sp<sup>2</sup></p>
-------------	---

O<sub>2</sub>

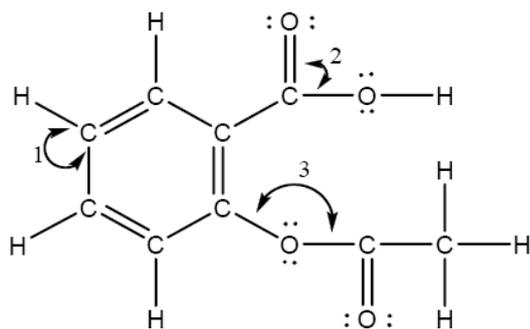
T EV	<p>O: [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup></p>  <p style="text-align: center;">[He]    2s<sup>2</sup>                      2p<sup>4</sup></p> <p>Átomo de O aislado</p>  <p style="text-align: center;">sp<sup>3</sup>    sp<sup>3</sup>            sp<sup>3</sup>            sp<sup>3</sup></p> <p>O hibridado</p> <p>Se combinan un orbital 2s y tres 2p del O, para dar 4 O.H. sp<sup>3</sup></p>
------	--

N

T EV	<p>N: [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>3</sup></p>  <p style="text-align: center;">[He]    2s<sup>2</sup>                      2p<sup>3</sup></p> <p>Átomo de N aislado</p>  <p style="text-align: center;">sp<sup>3</sup>    sp<sup>3</sup>            sp<sup>3</sup>            sp<sup>3</sup></p> <p>N hibridado</p> <p>Se combinan un orbital 2s y dos 2p del N, para dar 4 O.H. sp<sup>3</sup> parcialmente llenos y un sp<sup>3</sup> con dos electrones apareados. Los ángulos de enlace corresponden a los de una geometría tetraédrica, con el efecto de repulsión del par de electrones solitarios. Ángulos menores a 109.5°</p> 
------	--

- c) Todos los enlaces sencillos son enlaces de tipo  $\sigma$  (sigma), porque el enlace resulta del traslape extremo a extremo de los orbitales. Mientras que un enlace  $\pi$  (pi) está formado por el traslape lado a lado de un orbital  $p$  sin hibridar y parcialmente lleno. Entonces podemos decir que la glicina presenta 9 enlaces  $\sigma$  y un  $\pi$ .

4)



Aspirina®

a)

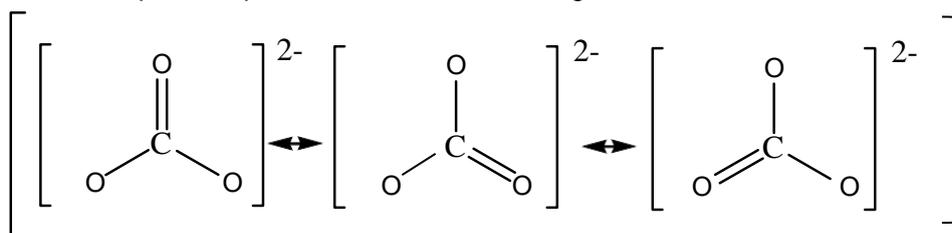
Ángulo de enlace 1	Ángulo de enlace 2	Ángulo de enlace 3
120°	> 120°	< 109.5°

b)

Ángulo de enlace - 1	Ángulo de enlace - 2	Ángulo de enlace - 3
Hibridación $sp^2$ , los 3 O.H. $sp^2$ forman enlaces sigma y el $2p$ sin hibridar participa en la formación del enlace pi	Hibridación $sp^2$ , los 3 O.H. $sp^2$ forman enlaces sigma y el $2p$ sin hibridar participa en la formación del enlace pi	Hibridación $sp^3$ , 2 O.H. $sp^3$ participan en la formación de enlaces sigma, mientras que los otros dos están ocupados con un par de electrones solitarios cada uno

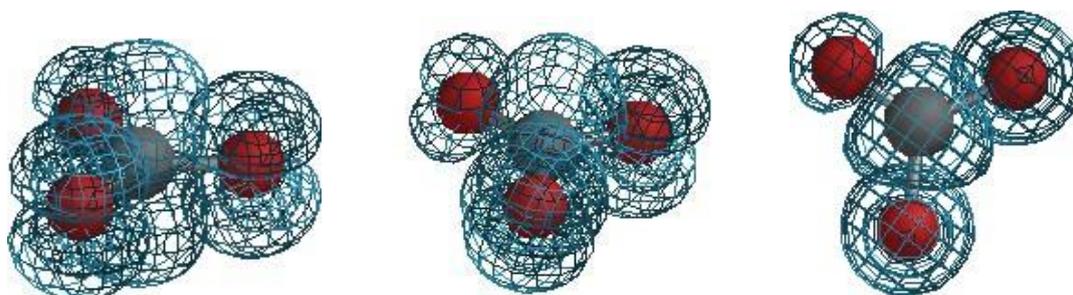
c) En la molécula hay 21 enlaces  $\sigma$ .

5) El ión  $\text{CO}_3^{2-}$  puede representarse mediante las siguientes estructuras resonantes.



Las estructuras planteadas nos permiten predecir una hibridación  $sp^2$  del C. La unión entre cada oxígeno y carbono se efectúa por un enlace sigma, además existe un enlace  $\pi$ ; que surge del traslape lado a lado de los orbitales  $p$ . Debido a el  $\text{CO}_3^{2-}$  presenta estructuras resonantes no podemos establecer entre que átomos C-O se encuentra dicho doble enlace, entonces en aquellas moléculas o iones que presentan resonancia hablamos de un enlace  $\pi$  deslocalizado, donde la densidad electrónica se extiende a todos los átomos que aportan orbitales  $p$  al enlace.

En la siguiente representación, en gris el átomo de carbono, en rojo cada uno de los átomos de oxígeno, como tubos los enlaces  $\sigma$  y en cuadrículado los enlaces  $\pi$ , se muestran diferentes vistas de las deslocalizaciones de los enlaces  $\pi$ .



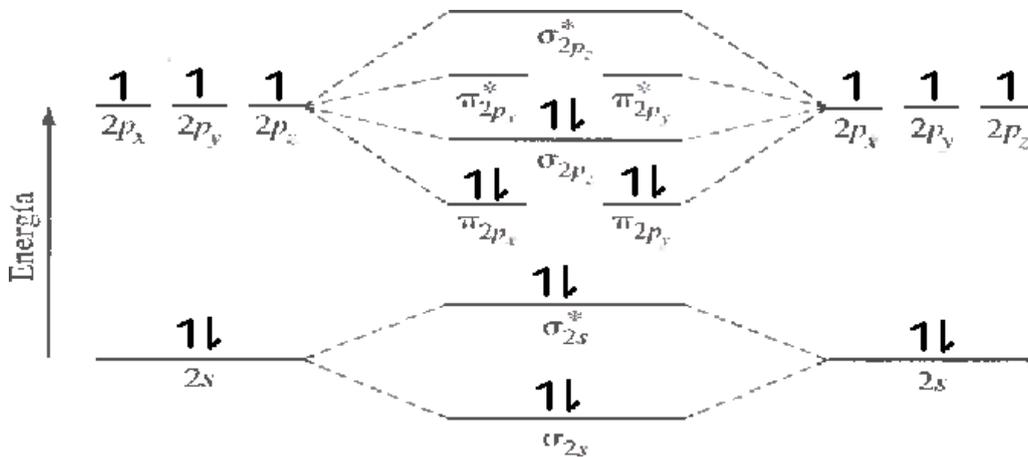
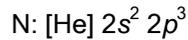
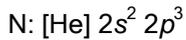
**Curso de Química I, Química General y Química  
Enlace Químico**

6) Los OM surgen de la adición o sustracción matemática de los orbitales atómicos (funciones de onda atómicas) de los átomos cercanos.

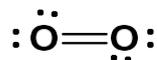
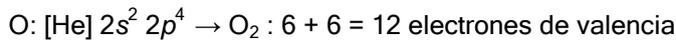
Sumar las funciones de ondas entre sí, forma **OM de enlace** con una región de alta densidad electrónica entre los núcleos. Mientras que sustraer las funciones de ondas entre sí, forma **OM de antienlace** con una región de densidad electrónica cero (nodo) entre los núcleos.

Un electrón ubicado en un OM enlazante puede distribuir su carga en un volumen mayor respecto del que es posible en su OA, las fuerzas repulsivas electrón-electrón se reducen por lo que el OM enlazante tiene menor energía que los OA aislados. En contraste en los **OM de antienlace** presenta un nodo entre los núcleos por lo que la mayor parte de la densidad electrónica no se encuentra en la región internuclear y los electrones no protegen un núcleo del otro, las fuerzas repulsivas núcleo-núcleo son mayores, por lo que el **OM de antienlace** tiene mayor energía que los OA aislados.

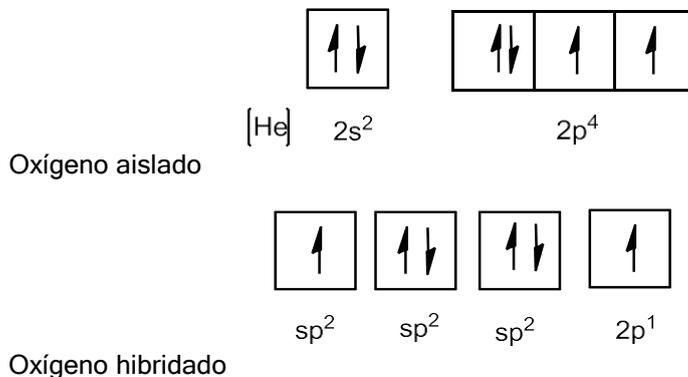
7)



8) a)



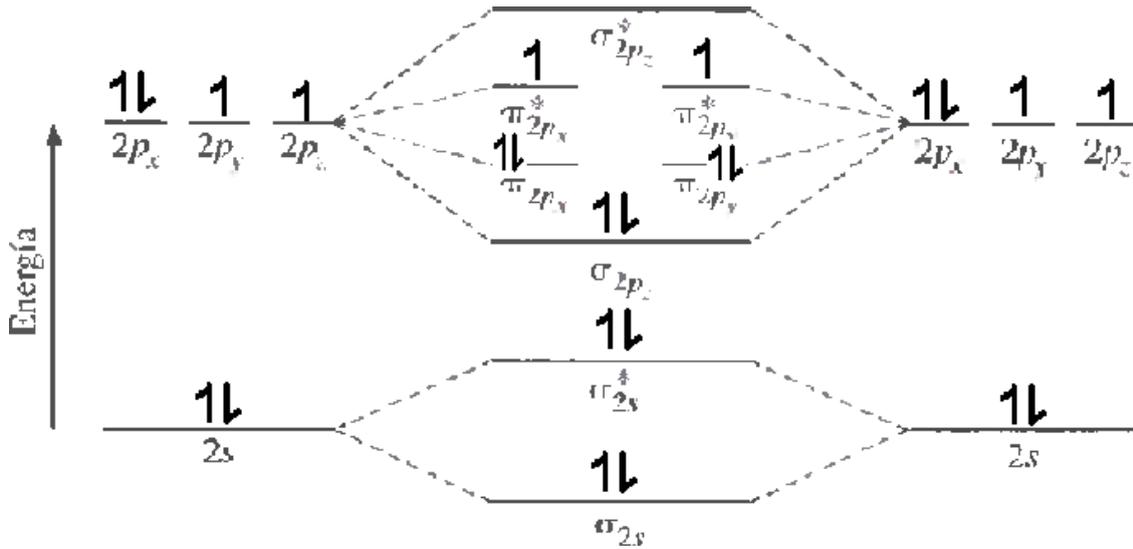
b) Según la estructura de Lewis planteada la geometría de pares de electrones para cada oxígeno es trigonal, lo que en la teoría de enlace de valencia corresponde a una hibridación  $sp^2$ . El electrón desapareado del orbital híbrido  $sp$  de uno de los oxígenos, forma un enlace sigma con el otro, mientras que los orbitales  $2p$  parcialmente llenos se solapan de lado para formar el enlace pi.



**Curso de Química I, Química General y Química Enlace Químico**

- c) OM -CLOA, ya que permite visualizar si la molécula presenta electrones desapareados. Permite probar el paramagnetismo del O<sub>2</sub>.
- d) Para ver la longitud de enlace y las energías de enlace correspondientes se determina el orden de enlace (la semi-resta de los electrones en orbitales enlazantes menos electrones en orbitales antienlazantes)

O<sub>2</sub>

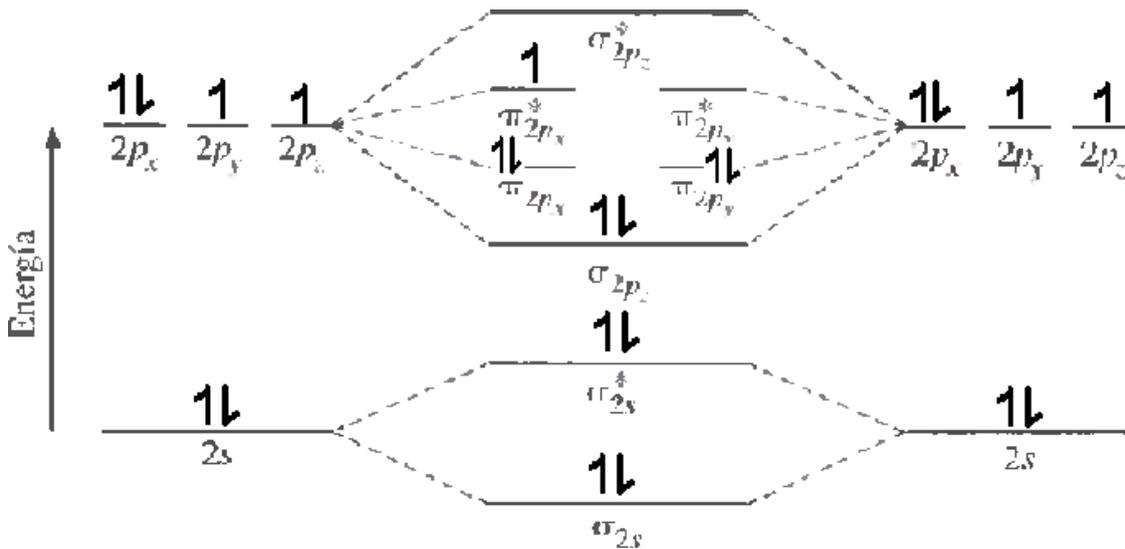


Orden de enlace:  $\frac{1}{2} (8 - 4) = 2$

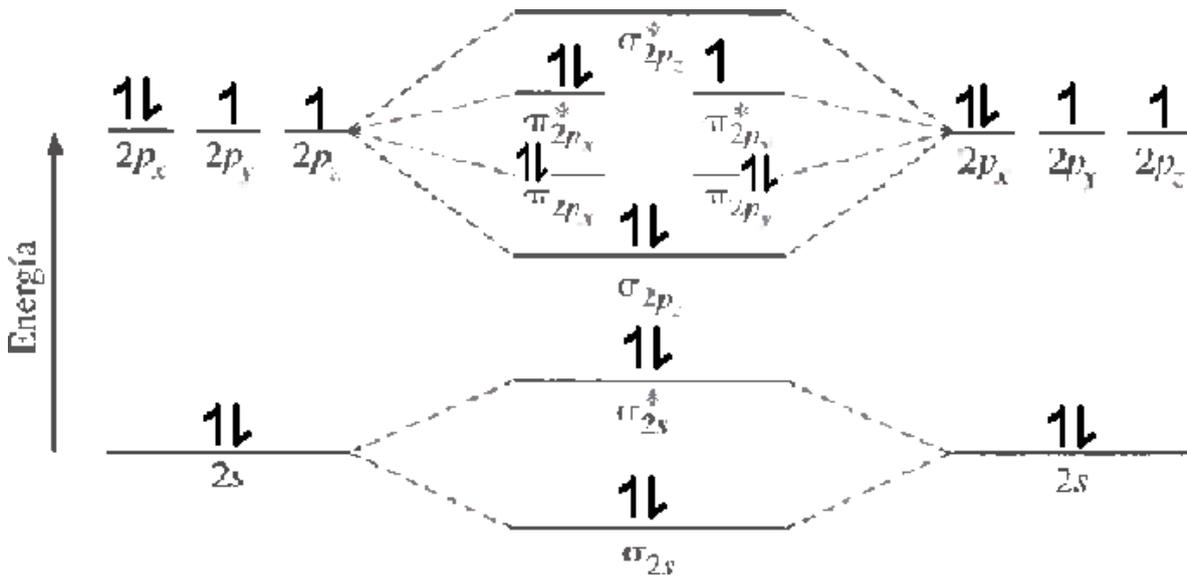
Observe también que se evidencian las propiedades paramagnéticas del O<sub>2</sub>, ya que la molécula tiene 2 electrones desapareados (en los orbitales de antienlace  $\pi_{2p}$ )

O<sub>2</sub><sup>+</sup>

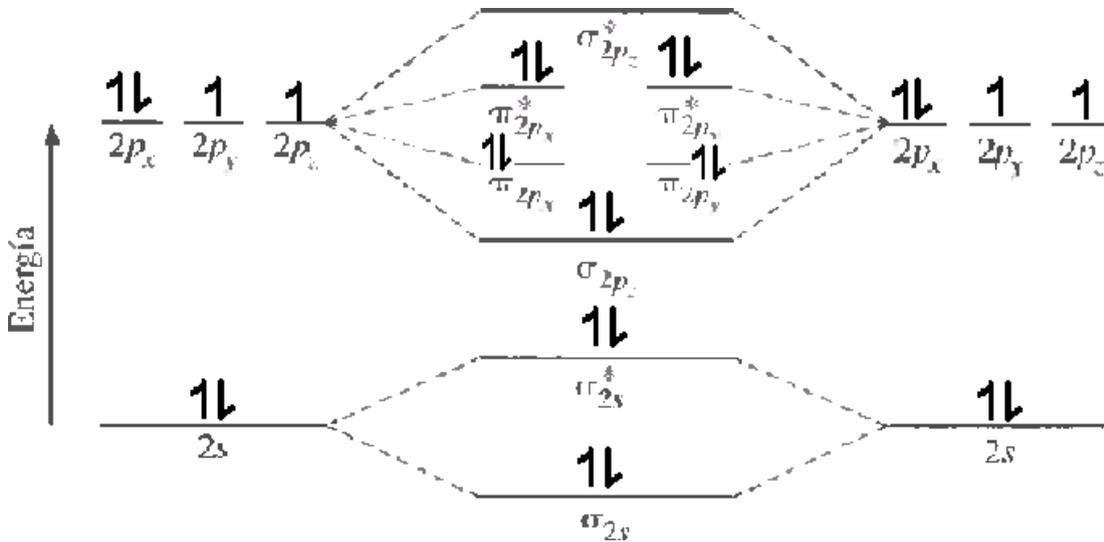
El ion O<sub>2</sub><sup>+</sup> tiene 11 electrones de valencia (6 electrones de valencia por cada oxígeno, o sea 12, menos 1 por tratarse de un mono-catión), entonces para hacer el diagrama de orbitales moleculares quitaremos un electrón del orbital  $\pi^*_{2p}$  mostrado anteriormente



Orden de enlace:  $\frac{1}{2} (8 - 3) = 2.5$



Orden de enlace:  $\frac{1}{2} (8 - 5) = 3/2 = 1.5$



Orden de enlace:  $\frac{1}{2} (8 - 6) = 1$

Ordenando por longitud enlace:  $O_2^+ < O_2 < O_2^- < O_2^{2-}$   
Energías de enlace:  $O_2^+ > O_2 > O_2^- > O_2^{2-}$

- 9) a) Las variaciones en el tamaño atómico e iónico son el resultado de la influencia del nivel  $n$  y de la carga nuclear efectiva ( $Z_{ef}$ ).

$I^-$  >  
Z = 53  
Electrones = 54

I >  
Z = 53  
Electrones = 53

$I^+$   
Z = 53  
Electrones = 52

El anión  $I^-$  es más grande en comparación con el I, ya que cuando se forma el anión el electrón se añade en el último nivel. El incremento en las repulsiones electrónicas causa que los electrones ocupen más espacio aumentando el radio del ión y la carga nuclear efectiva es la misma que en los otros casos por lo que el electrón extra se siente menos atraído por la componente positiva nuclear.

**Curso de Química I, Química General y Química  
Enlace Químico**

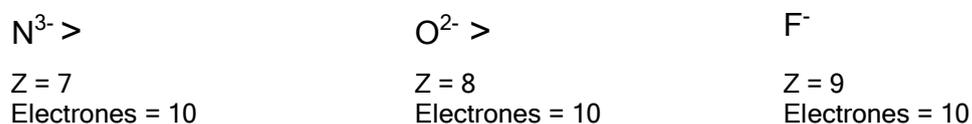
El catión  $I^+$  es más pequeño que el átomo original, el electrón removido se extrae del nivel exterior, la disminución de las repulsiones electrónicas permite que la carga nuclear atraiga los electrones restantes más cerca del núcleo disminuyendo el radio del ión.

b)



Aquí es posible visualizar que el tamaño iónico aumenta al bajar en un grupo, porque el nivel de energía se incrementa y la región de probabilidad de localizar a los electrones externos está más alejada del núcleo, de modo que los átomos son más grandes y por ende los iones di-catiónicos de este caso.

c)  $N^{3-} > O^{2-} > F^-$



En este caso, los aniones que se comparan son isoelectrónicos, sin embargo el  $F^-$  tiene mayor carga nuclear efectiva respecto del  $O^{2-}$  y este último respecto del  $N^{3-}$ . Por lo que el tamaño iónico decrece cuando comparamos aniones a lo largo de un período.

10)

Elemento	$I_1$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	$I_2$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )
Sodio	496	4563
Magnesio	738	1450

Para explicar las diferencias de energías de ionización de dichos metales, primero se debe recordar que ambos pertenecen al tercer periodo ( $n=3$ ), que el Na se encuentra en el grupo 1, mientras que el Mg en el grupo 2.

La diferencia en la  $I_1$  para ambos átomos podemos explicarla por la carga nuclear que experimentan los electrones situados en el orbital 3s. En este caso el Mg ejerce una mayor fuerza nuclear ( $Z=12$ ) respecto que la que presenta el Na ( $Z=11$ ), por lo tanto la  $I_1$  es de 738 kJ.mol<sup>-1</sup> en el Mg y de 496 kJ.mol<sup>-1</sup> para el Na.

Es importante notar que el Na luego de su primera ionización, adquiere la configuración electrónica del gas noble anterior (Ne), situación favorable desde el punto de vista energético.

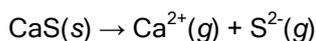
Cuando observamos los valores de  $I_2$ , se hace evidente que ionizar el  $Na^+$  requiere un gran aporte de energía, significa extraer un nuevo electrón de un nivel de energía que está completo electrónicamente. Mientras que ionizar el  $Mg^+$  con una configuración [Ne] 3s<sup>1</sup> requiere menor energía en comparación con la  $I_2$  del Na. Note también que es en la segunda ionización que el Mg adquiere configuración electrónica de gas noble anterior (Ne).

11) a) CaS > KCl

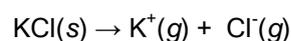
Una forma de calcular la energía de red o energía reticular de un sólido iónico es a través de la ecuación de Kapustinskii.

$$U = \frac{1070 \cdot z^+ \cdot z^- \cdot v}{r^+ + r^-}$$

Entonces se debe evaluar la contribución de las cargas y los radios de los iones gaseosos



$$U = \frac{1070 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$

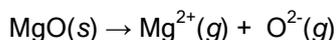


$$U = \frac{1070 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$

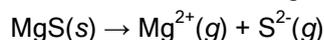
Para estos cristales iónicos, las cargas de los iones tienen mayor contribución que los radios, porque en este caso los radios de  $\text{S}^{2-}$  y  $\text{Cl}^-$  son similares (1.84 y 1.81 Å, respectivamente), así como el de  $\text{Ca}^{2+}$  y  $\text{K}^+$  (0.99 y 1.33 Å, respectivamente). Entonces la  $U_{\text{CaS}}$  es mayor que la  $U_{\text{KCl}}$  (ya que el producto de  $z^+$  y  $z^-$  en CaS es 4 veces el producto en KCl).

b)  $\text{MgO} > \text{MgS}$

Nuevamente se debe evaluar la contribución de las cargas y los radios de los iones gaseosos.



$$U = \frac{1070 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$



$$U = \frac{1070 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$

Si se observa la contribución de las cargas en la expresión de Kapustinskii, se ve que es la misma tanto para el MgO o el MgS. Por lo tanto el efecto que define la diferencia en U debe ser el radio iónico. Con respecto a los radios iónicos del  $\text{O}^{2-}$  es menor que el  $\text{S}^{2-}$ . Entonces cuando se calcula U para el MgS, se divide por un radio mayor y el valor de U disminuye.

## EJERCICIOS COMPLEMENTARIOS

- 12) a)  $\text{AX}_3$   
b)  $\text{AX}_2$   
c)  $\text{XA}_4$   
**d)  $\text{AX}_4$**   
e)  $\text{AX}$

Si el átomo central tiene hibridación  $sp^3$  entonces, hay 4 orbitales híbridos  $sp^3$  disponibles para enlazarse con 4 átomos de X.

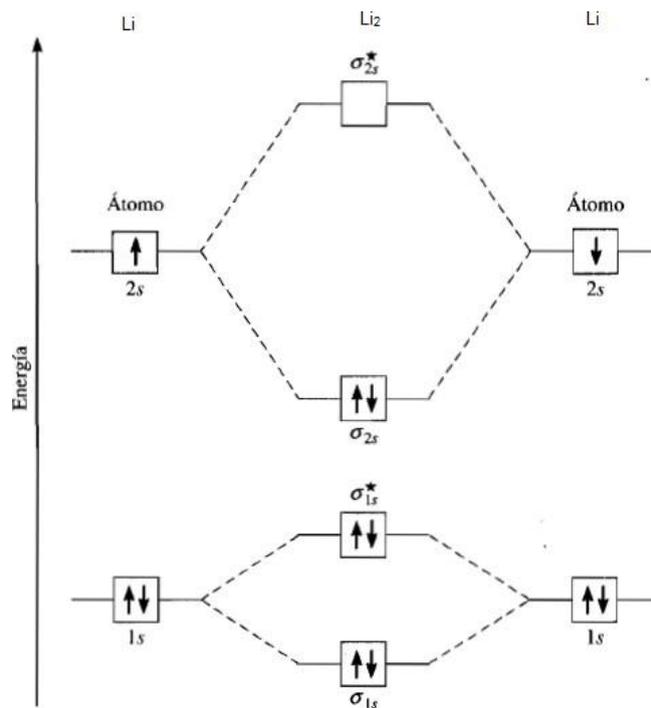
**Opción d) es la respuesta correcta.**

El ángulo de XAX en la molécula del ejercicio es:

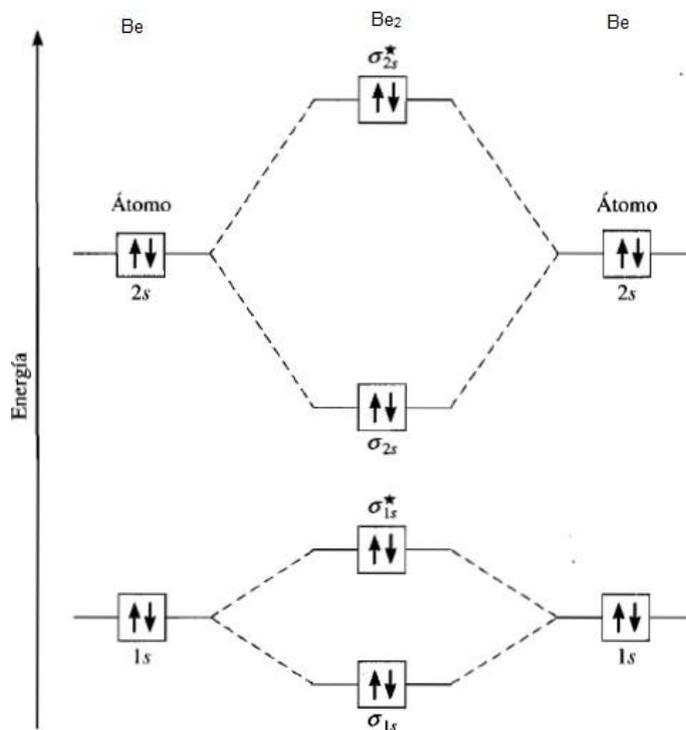
- a) 120  
b) 180  
c)  $<109.5$   
**d) 109.5**  
e)  $>109.5$

En una hibridación  $sp^3$  los cuatro orbitales híbridos apuntan hacia los vértices de un tetraedro, y como no tiene electrones solitarios el ángulo de enlace será de  $109.5^\circ$ . **Opción d) es la respuesta correcta.**

13)  $\text{Li}_2$

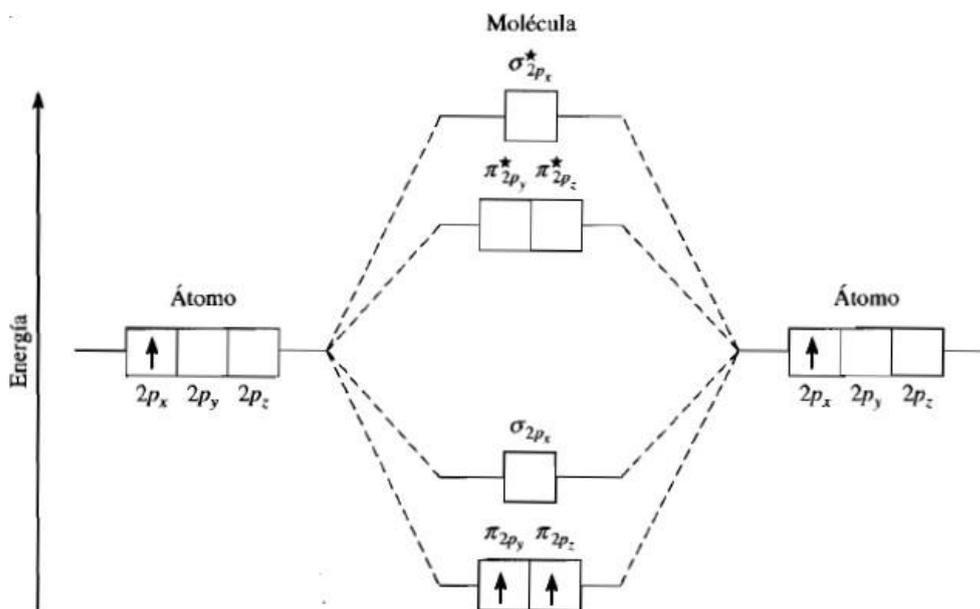


$\text{Be}_2$

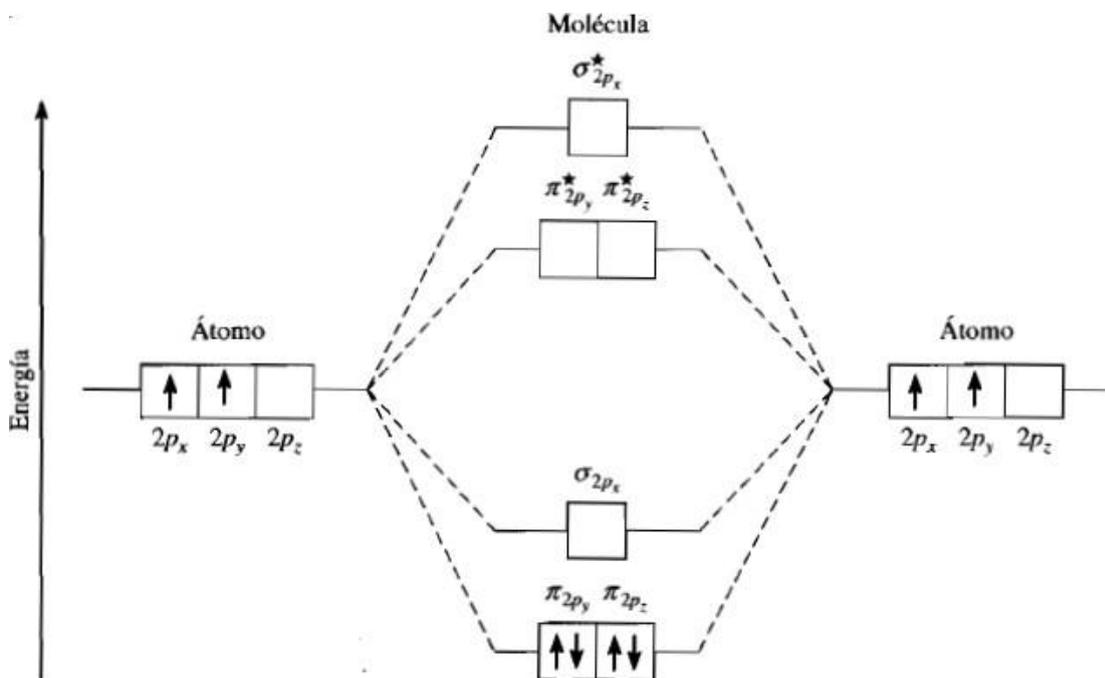


**Curso de Química I, Química General y Química Enlace Químico**

$B_2$ , B tiene configuración  $1s^2 2s^2 2p^1$  (en el diagrama de orbitales para simplificar se han omitido los orbitales  $\sigma_{1s}$  y  $\sigma_{2s}$ )



$C_2$ , C tiene configuración  $1s^2 2s^2 2p^2$  (en el diagrama de orbitales para simplificar se han omitido los orbitales  $\sigma_{1s}$  y  $\sigma_{2s}$ )



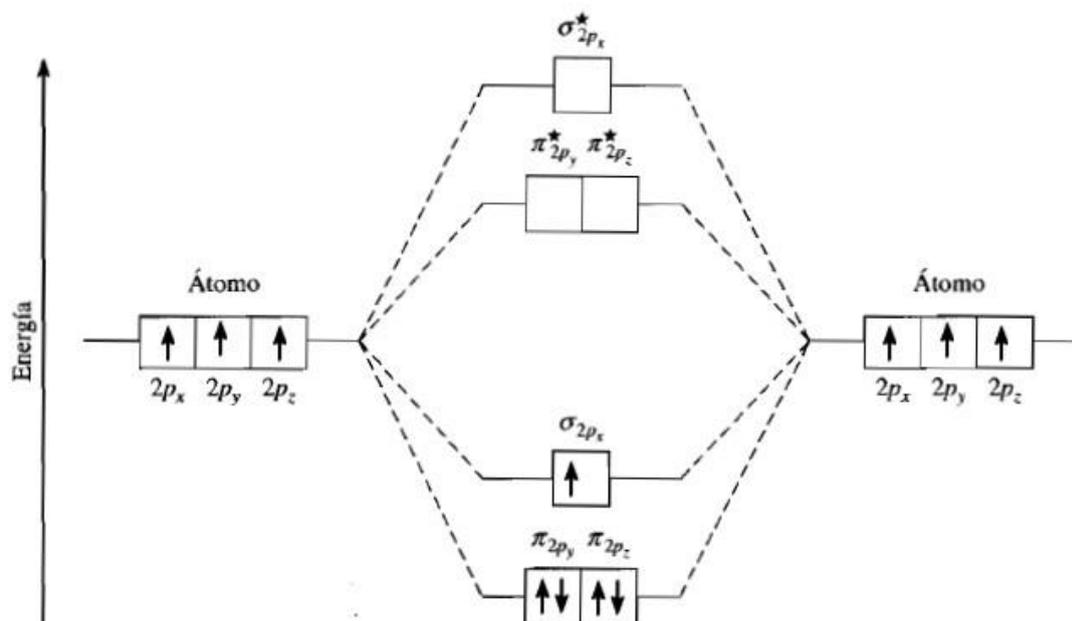
- En la molécula de  $Li_2$  el orbital molecular antienlazante  $\sigma_{1s}^*$  es superior en energía al orbital molecular  $\sigma_{2s}$ . **Incorrecto**
- En el  $Be_2$  todos los electrones se encuentran apareados. **Correcto**
- El oxígeno es una molécula diamagnética. **Incorrecto**, la molécula de  $O_2$  es paramagnética porque contiene 2 electrones desapareados.
- en el  $B_2$ , los orbitales moleculares  $\pi_{2p}^*$  son inferiores en energía al orbital molecular  $\sigma_{2p}^*$ . **Correcto**
- En la molécula de C los orbitales  $\sigma_{2s}^*$  son superiores en energía que los orbitales  $\pi_{2p}$ . **Incorrecto**

**Curso de Química I, Química General y Química Enlace Químico**

14) Se debe ordenar los miembros de la siguiente serie en longitud de enlace:  $N_2^+$ ,  $N_2$  y  $N_2^-$ .

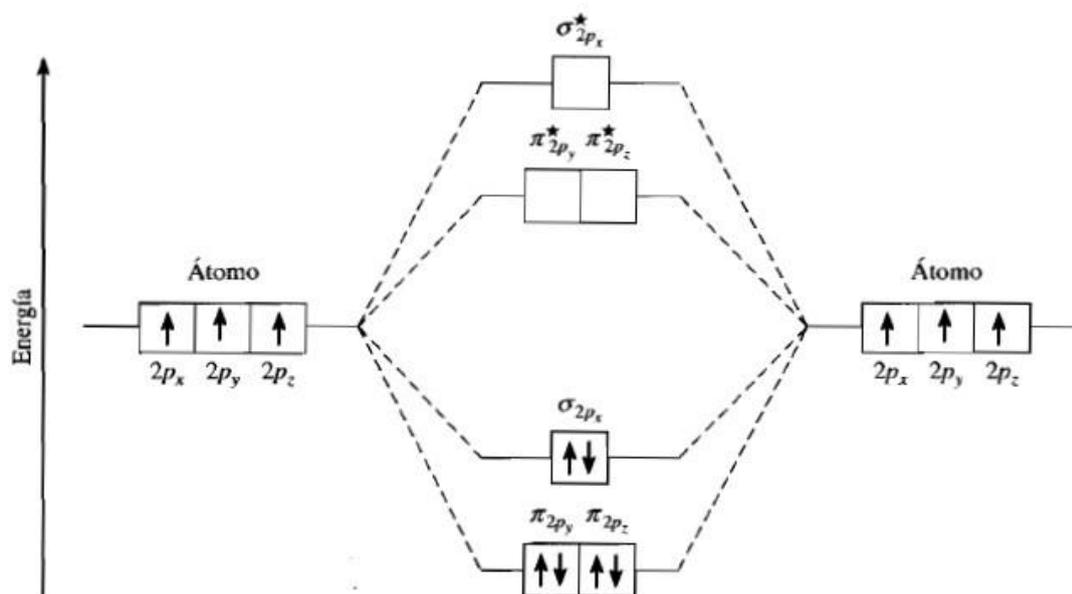
Para ello se determina el orden de enlace por la teoría de OM-CLOA (sólo se consideran los electrones de valencia):

$N_2^+$



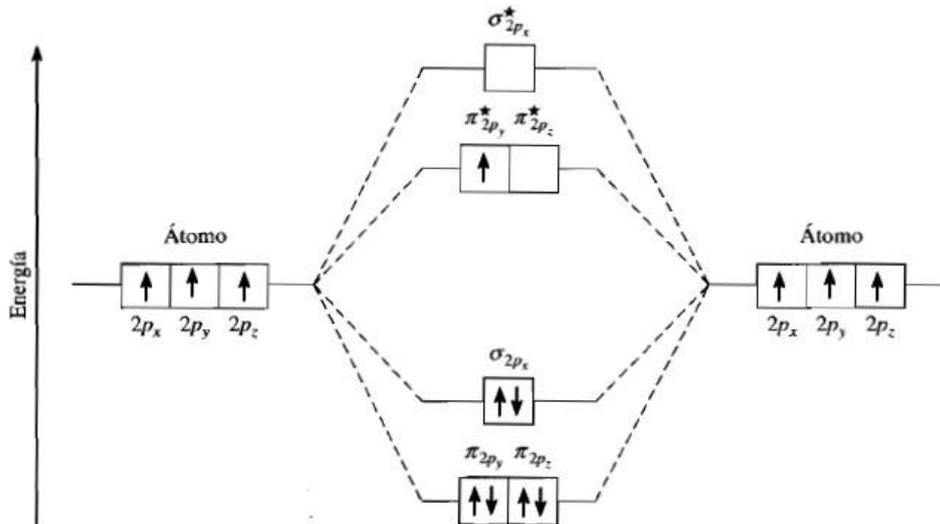
Orden de enlace  $N_2^+ = \frac{1}{2} (5 - 0) = 2.5$

$N_2$



Orden de enlace  $N_2 = \frac{1}{2} (6 - 0) = 3$

$N_2^-$



Orden de enlace  $N_2^- = \frac{1}{2}(6 - 1) = 2.5$

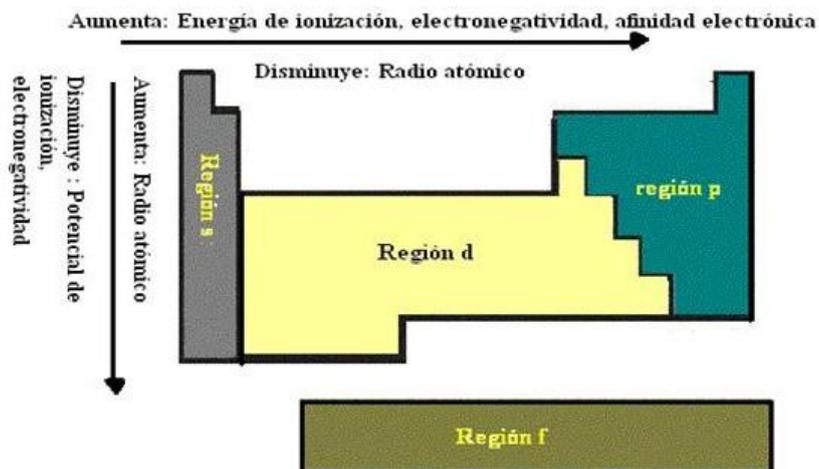
- a)  $N_2^- < N_2 < N_2^+$
- b)  $N_2^- = N_2 = N_2^+$
- c)  $N_2 < N_2^+ = N_2^-$
- d)  $N_2^+ = N_2^- < N_2$
- e)  $N_2^+ < N_2 < N_2^-$

La longitud del enlace es menor para el  $N_2$  por presentar un orden de enlace 3. **Opción c) es la respuesta correcta**

15) La electronegatividad aumenta a medida que se va de izquierda a derecha en un período de la tabla periódica y al ascender en un grupo.

La energía de ionización aumenta a medida que se va de izquierda a derecha en un período de la tabla periódica y al ascender en un grupo.

La tendencia a aceptar electrones aumenta al moverse de izquierda a derecha lo largo de un periodo.

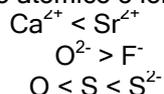


16)  $Br^- > Kr > Rb^+$

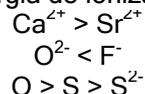
El anión  $Br^-$  y el  $Kr$  son isoelectrónicos, sin embargo la carga nuclear efectiva es mayor en el caso de  $Kr$  por lo que mantiene a los electrones más cerca del núcleo y el radio disminuye. El  $Rb^+$  y el  $Kr$  también tienen igual número de electrónes, al aumentar la carga nuclear efectiva en el catión entonces disminuye el radio respecto del  $Kr$ .

17)

Radio atómico o iónico



Energía de ionización



18) a)

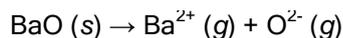
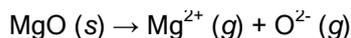


$$U = \frac{1070 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 2}{(r^+ + r^-)} \quad >$$

$$U = \frac{1070 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$

Cuando se compara la energía de red para estos dos cristales iónicos, se observa que la contribución de las cargas en la expresión de Kapustinskii, es la misma tanto para el LiF o CsBr. Sin embargo, con respecto a los radios el radio iónico (denominador en dichas expresiones) del  $\text{Cs}^+$  y  $\text{Br}^-$  son mayores que el del  $\text{Li}^+$  y  $\text{F}^-$ . Entonces cuando se calcula U para el CsBr, se divide por una suma de radios mayor en CsBr y el valor de U disminuye

b)

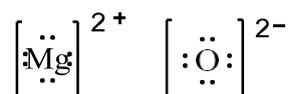
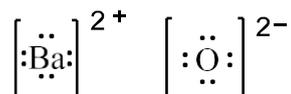


$$U = \frac{1070 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2}{(r^+ + r^-)} \quad >$$

$$U = \frac{1070 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2}{(r^+ + r^-)}$$

En estos ejemplos la diferencia en la expresión de Kapustinskii también queda determinada por el tamaño de los radios. El  $\text{Ba}^{2+}$  tiene mayor radio iónico que el  $\text{Mg}^{2+}$ , entonces la U es menor.

c)



19) Si se observan los valores de U de los distintos cristales iónicos, se ve que siguen la tendencia que se esperaría si se aplica la expresión de Kapustinskii, ya que en la medida que aumenta el radio iónico de los aniones ( $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$  y  $\text{I}^-$ ), disminuye U.