

25: La función de onda del orbital 1s de los átomos hidrogenoides es:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$$

donde  $Z$  es la carga del núcleo en múltiplos de la carga elemental y  $a_0$  es la constante de Bohr=52.9 pm.

¿Cuál es la unidad de la función de onda? Estimar la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia comprendida entre 25 y 26 pm para el  $\text{Li}^{2+}$ .

Calcular a qué distancia es más probable encontrar el electrón para el  $\text{Li}^{2+}$ .

Sol: unidad:  $\text{m}^{-3/2}$  o  $\text{pm}^{-3/2}$

probabilidad  $\approx 2.68\%$  (basado en el valor en  $r=25$  pm)

$f(r) = 4\pi r^2 \psi^2(r)$  es máxima, lo que quiere decir que la derivada de esta función se anula:

$$\frac{df}{dr} = 0. \text{ Después de unos pasos, se obtiene:}$$

$$\frac{df}{dr} = 8 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 r \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) \left[ 1 - \frac{Z}{a_0} r \right].$$

Para que esta expresión se anule, salvo el caso  $r=0$  que corresponde a un mínimo de encontrar el electrón, es necesario que el término entre corchetes sea cero. De ahí que:

$$r = \frac{a_0}{Z}$$

26. Determinar la entalpía de red del cloruro potásico a partir de los siguientes datos:

$$\Delta H_{\text{at}}(\text{K(s)}) = 89 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{at}}(\text{Cl}_2(\text{g})) = 244 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{EI}(\text{K}) = 418 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{AE}(\text{Cl}) = 349 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f(\text{KCl(s)}) = -437 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{(Resultado: } \Delta H_r(\text{KCl}) = -717 \text{ kJ/mol)}$$

27a. Ordénense los siguientes átomos en orden creciente de electronegatividades: H, Cs, F, Br, Na.

Sol:  $\text{Cs} < \text{Na} < \text{H} < \text{Br} < \text{F}$

27b. Basándose en los resultados obtenidos en el problema anterior, ordena en orden creciente de polaridad las siguientes moléculas: CsH, CsF, HF, HNa.

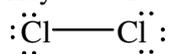
Sol:  $\text{NaH} < \text{CsH} < \text{HF} < \text{CsF}$

1.83D 7.88 D

28. Escribir las fórmulas de Lewis de las siguientes especies:  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{N}_2$ , HF,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CHCl}_3$ , HCN.

Caso de  $\text{Cl}_2$ :  $[\text{Cl}] = [\text{Ne}] 3s^2 3p^5 \Rightarrow 7 e^-$  de valencia

Hay  $7+7=14 e^-$  de valencia a repartir en  $\text{Cl}_2$ .



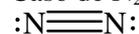
Podemos comprobar que: en cada cloro, hay 6  $e^-$  en pares localizados, 2  $e^-$  en el enlace. Al haber 8 electrones alrededor de cada Cl, se cumple la regla del octeto para este compuesto.

Cargas formales:  $e^-$  de valencia -  $e^-$  localizados -  $e^-$  enlace/2

Carga formal:  $7-6-1=0$

En las estructuras de Lewis, se tiende a minimizar el número de cargas formales.

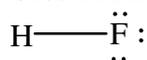
Caso de  $\text{N}_2$ :  $[\text{N}] = [\text{He}] 2s^2 2p^3 \Rightarrow 5 e^-$  de valencia



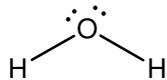
2  $e^-$  localizados y 6  $e^-$  en enlaces, se cumple la regla del octeto.

Carga formal:  $5-2-6/2=0$

Caso de HF:



Caso de H<sub>2</sub>O: [O]=[He] 2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup> ⇒ 6 e<sup>-</sup> de valencia



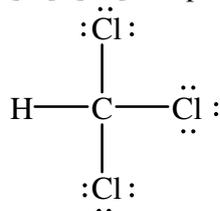
En el O: 4 e<sup>-</sup> localizados, 4 e<sup>-</sup> en enlaces; carga formal=6-4-4/2=0

En el H: 2 e<sup>-</sup> en enlaces, no se espera que cumpla la regla del octeto; carga formal=1-2/2=0

Caso de CHCl<sub>3</sub>("cloroformo"): [C]=[He] 2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup> ⇒ 4 e<sup>-</sup> de valencia

[H]=1s<sup>1</sup> ⇒ 1 e<sup>-</sup> de valencia

[Cl]=[Ne] 3s<sup>2</sup>3p<sup>5</sup> ⇒ 7 e<sup>-</sup> de valencia



El carbono SIEMPRE forma 4 enlaces en las moléculas orgánicas

Se cumplen regla del octeto en C y Cl y cargas formales en todos.

Caso de HCN (ácido cianhídrico):

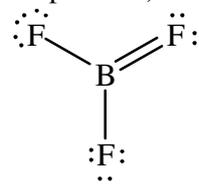


Se cumplen regla del octeto en C y N y cargas formales en todos.

29. Escribir las fórmulas de Lewis de las siguientes especies: BF<sub>3</sub>, BeCl<sub>2</sub>, PCl<sub>5</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, O<sub>3</sub>.

Caso de BF<sub>3</sub>:

Propuesta 1)



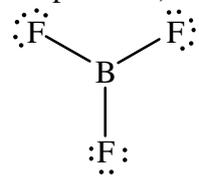
En este caso, en el que se considera que el F del doble enlace vuelca uno de sus pares libres en el enlace, se cumple la regla del octeto.

Cargas formales del B=3-0-8/2=-1

Del F del doble enlace=7-4-4/2=1

De los otros F=7-6-2/2=0

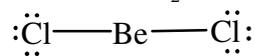
Propuesta 2)



En este caso las cargas formales son 0 en todos los átomos, pero no se cumple la regla del octeto en el B (ningún e<sup>-</sup> localizado+ 6 e<sup>-</sup> en enlaces).

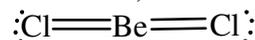
Para evitar cargas formales, se prefiere la propuesta 2.

Caso de BeCl<sub>2</sub>:



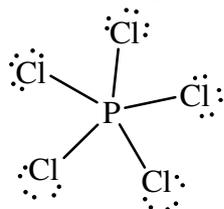
ningún e<sup>-</sup> localizado+4 e<sup>-</sup> en enlaces: no se cumple regla del octeto pero cargas formales 0.

En cambio,



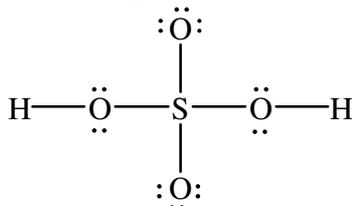
tiene cargas formales.

Caso de  $\text{PCl}_5$ :

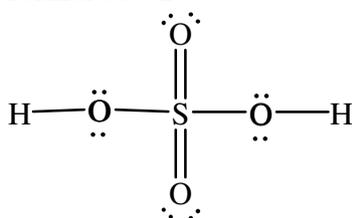


Para poder formar 5 enlaces no se cumple la regla del octeto.

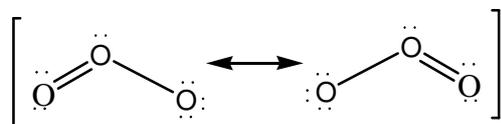
Caso de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ :



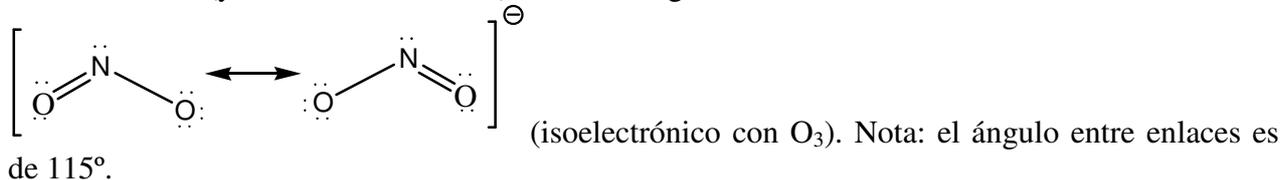
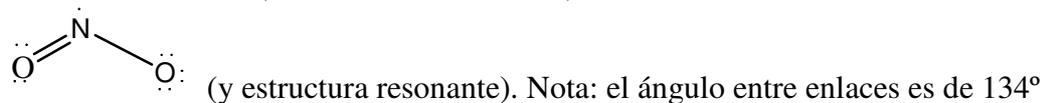
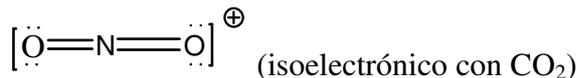
Con esta representación, el azufre cumpliría formalmente la regla del octeto, pero tendría carga formal de +2.



Con esta representación, la carga formal es 1 en el átomo central y un total de 1 en los extremos.



30. Escribir las fórmulas de Lewis de las siguientes especies:  $\text{NO}_2^+$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_2^-$  y  $\text{N}_2\text{O}_4$ . Dar sus estructuras tridimensionales.



$\text{N}_2\text{O}_4$  es 2 veces  $\text{NO}_2$  (los radicales se recombinan para formar un enlace).

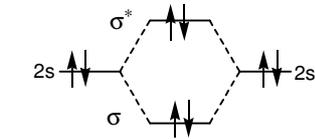
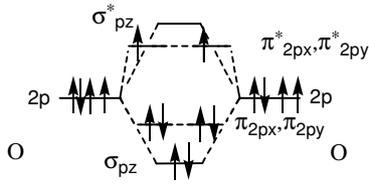
31.-Ramón y Cajal utilizó con frecuencia  $\text{OsO}_4$  para las tinciones celulares. El Os se encuentra en la misma columna que el Fe en el sistema periódico. Escriba la configuración electrónica del Fe y a partir de ella la configuración electrónica del Os. ¿Cuál es el número de oxidación del osmio en el compuesto  $\text{OsO}_4$ ? ¿Y su carga formal? ¿Qué valencias espera que tenga el Os?

R:  $\text{OsO}_4$  Carga total=0. Por definición cada oxígeno tiene un número de oxidación de -2 (salvo el caso de los peróxidos). El Os tiene entonces un número de oxidación de:  $4 \cdot 2 = 8$  (VIII).  $[\text{Fe}] \alpha [\text{Ar}] 4s^2 3d^6$  El Os esta

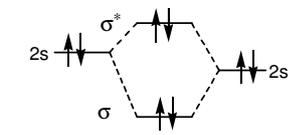
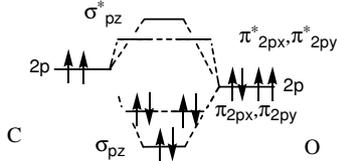


Fundamentos de Química Hoja 3  
 Área de Química-Física. Universidad Pablo de Olavide

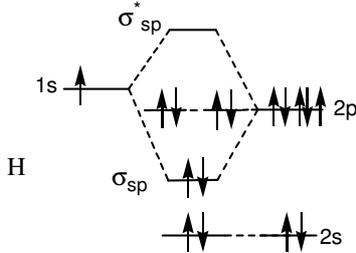
$O_2$  es menos estable que  $O_2^+$   
 Tiene electrones no apareados,  
 con lo cual es paramagnética.



OE=2

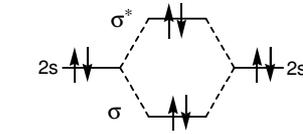
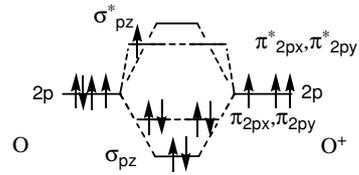


OE=3

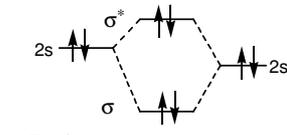
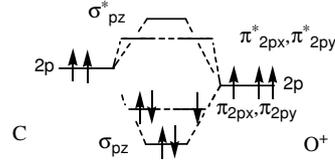


OE=1

CO es más estable que  $CO^+$

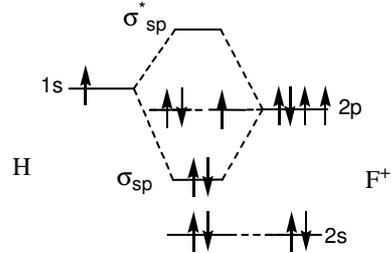


OE=2.5



OE=2.5

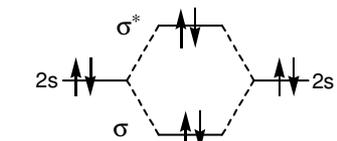
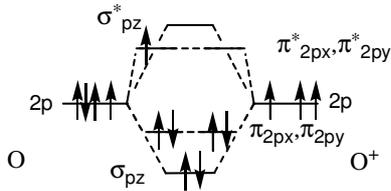
Hay que ver si el 1s del H  
 enlaza con el 2s del F. El F es  
 muy electronegativo, por esto  
 las energías más parecidas son  
 1s(H) con 2p(F). Para F, 1s,  
 2s, 2px, 2py son no enlazantes.  
 No participan en la molécula.  
 El orden de enlace no se ve  
 modificado.



OE=1

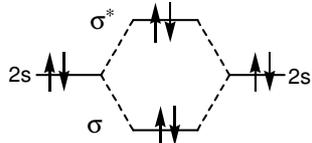
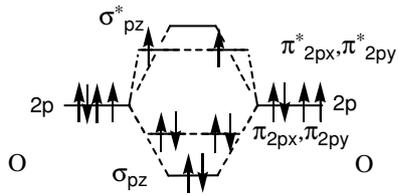
34. Escribe el diagrama de orbitales moleculares de las siguientes especies:  $O_2^+$ ,  $O_2$ ,  $O_2^-$ ,  $N_2^+$ ,  $N_2$  y dé el orden de enlace de cada una de ellas. De todas estas moléculas ¿cuál espera que tenga una mayor energía de disociación y cuál la que la tenga menor?

Diagrama de  $O_2^+$ :



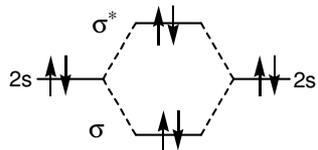
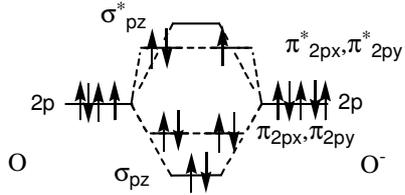
Orden de Enlace:  $(8-3)/2=2.5$

Diagrama de  $O_2$ :



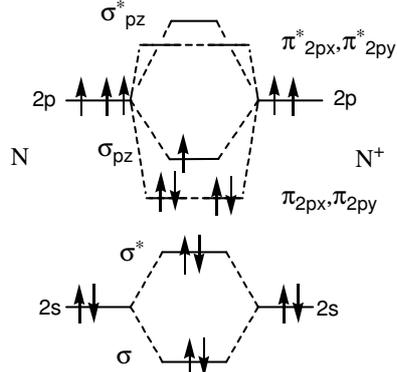
Orden de Enlace:  $(8-4)/2=2$

Diagrama de  $O_2^-$ :



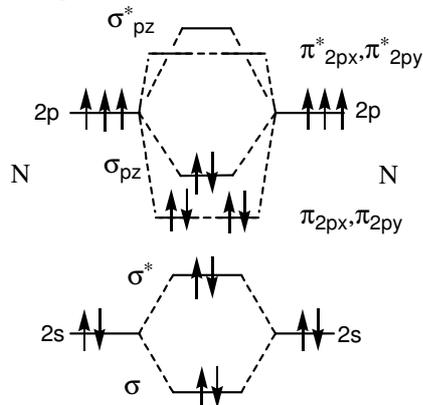
Orden de Enlace:  $(8-5)/2=1.5$

Diagrama de  $N_2^+$ :



Orden de Enlace:  $(7-2)/2=2.5$

Diagrama de  $N_2$ :

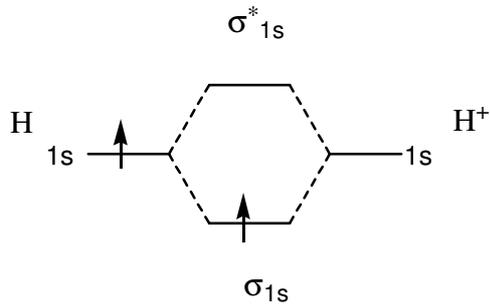


Orden de Enlace:  $(8-2)/2=3$

Cuánto mayor es el orden de enlace, mayor es la energía de disociación. Cabe esperar que la mayor energía de disociación corresponde al  $N_2$  y la más baja al  $O_2^-$ .

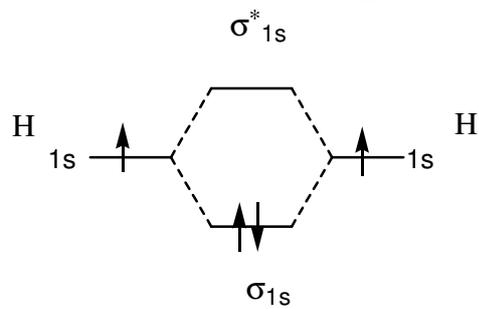
35. Escribe el diagrama de orbitales moleculares de las siguientes especies:  $H_2^+$ ,  $H_2$ ,  $H_2^-$  y da el orden de enlace de cada una de ellas.

Diagrama de  $H_2^+$ :



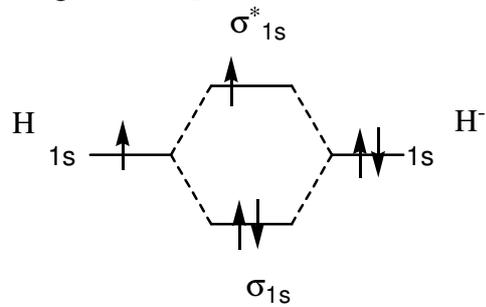
Orden de Enlace:  $(1-0)/2=0.5$

Diagrama de  $H_2$ :



Orden de Enlace:  $(2-0)/2=1$

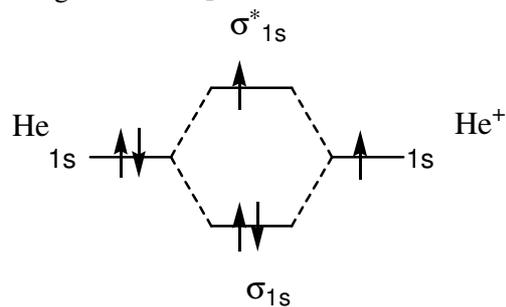
Diagrama de  $H_2^-$ :



Orden de Enlace:  $(2-1)/2=0.5$

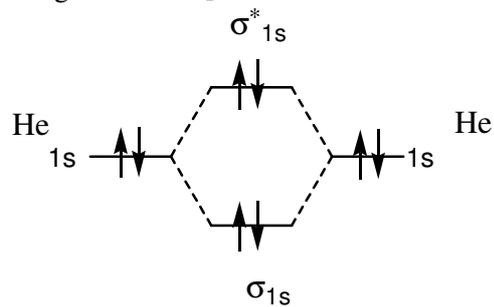
36. Escribe el diagrama de orbitales moleculares de las siguientes especies:  $He_2^+$ ,  $He_2$  y da el orden de enlace de cada una de ellas.

Diagrama de  $He_2^+$ :



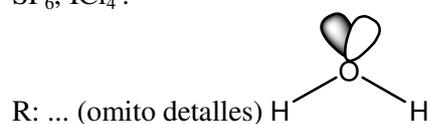
Orden de Enlace:  $(2-1)/2=0.5$

Diagrama de  $He_2$ :



Orden de Enlace:  $(2-2)/2=0$

37. Utilizar la teoría RPECV para predecir la geometría de las siguientes moléculas  $H_2O$ ,  $BeCl_2$ ,  $BF_3$ ,  $SF_4$ ,  $SF_6$ ,  $ICl_4^-$ .



$H_2O$ : angular,  
 $BeCl_2$ : lineal,

BF<sub>3</sub>: triangular,  
 SF<sub>4</sub>: columpio,  
 SF<sub>6</sub>: octaédrico,  
 ICl<sub>4</sub><sup>-</sup>: plano cuadrado

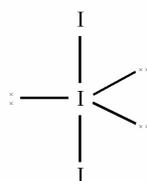
38. Determinar qué hibridación tienen los átomos que aparecen en **negrita** en cada una de las siguientes moléculas: **Se**F<sub>6</sub>, **Be**Cl<sub>2</sub>, **CCl**<sub>4</sub>.

R: **Se**F<sub>6</sub>: sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>, **Be**Cl<sub>2</sub>: sp, **CCl**<sub>4</sub>: sp<sup>3</sup>

39. Determinar qué hibridación tienen los átomos que aparecen en **negrita** en cada una de las siguientes moléculas: **PCl**<sub>5</sub>, **BF**<sub>3</sub>, **CH≡CH**.

R: **PCl**<sub>5</sub>: sp<sup>3</sup>d, **BF**<sub>3</sub>: sp<sup>2</sup>, **CH≡CH** : sp<sup>2</sup>.

40. Predecir la forma de las siguientes moléculas o iones aplicando la teoría RPECV: a) I<sub>3</sub><sup>-</sup>, b) IF<sub>3</sub>, c) IO<sub>4</sub><sup>-</sup>, d) SeF<sub>6</sub>. Explique a partir de la teoría RPECV por qué si la molécula de HgCl<sub>2</sub> es lineal la molécula de SeCl<sub>2</sub> es angular.

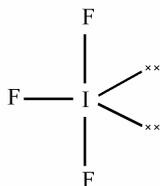


R: a)

La geometría es lineal.

b) IF<sub>3</sub>:

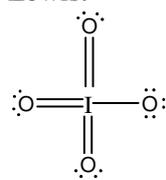
carga del I central: 7-4-6/2=0



La estructura que forma la molécula de IF<sub>3</sub> es una estructura en T.

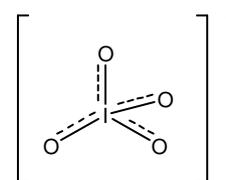
c) IO<sub>4</sub><sup>-</sup>

Lewis:



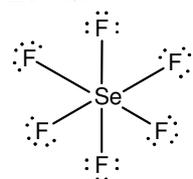
Hay 4 estructuras equivalentes (resonantes) porque los 4 oxígenos juegan el mismo papel.

VSEPR



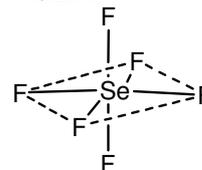
d) SeF<sub>6</sub>

Lewis:



El Se tiene sus 6 electrones en tantos enlaces con F. La estructura VSEPR es octaédrica.

VSEPR



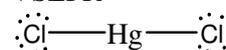
HgCl<sub>2</sub> y SeCl<sub>2</sub>:

Lewis:

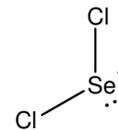


El Hg, situado debajo del Zn, posee los orbitales 5d llenos pero dos electrones del 6s susceptibles de formar enlaces.

VSEPR



El Se, al igual que el O, tiene 6 electrones de valencia, por lo tanto forma dos pares libres y dos enlaces: la estructura es tetraédrica.



41. Decir cuántos enlaces  $\sigma$  y cuántos enlaces  $\pi$  hay en cada una de las siguientes moléculas orgánicas:

$\text{CH}\equiv\text{CH}$ ;  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_3-\text{CN}$ ,  $\text{CH}_3-\text{COOH}$ .

R:  $\text{CH}\equiv\text{CH}$ : 3 enlaces  $\sigma$ , 2 enlaces  $\pi$ ;  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$ : 8 enlaces  $\sigma$ , 1 enlace  $\pi$ ;  $\text{CH}_3-\text{CN}$ : 5 enlaces  $\sigma$ , 2 enlaces  $\pi$ ;  $\text{CH}_3-\text{COOH}$ : 7 enlaces  $\sigma$ , 1 enlace  $\pi$ .