

Universitat de València Facultat de Química

Tema 5 Enlace Químico I. Conceptos básicos

Juan José Borrás Almenar Departamento de Química Inorgánica

Asignatura:

12865–Estructura y Enlace de la Materia Licenciatura de Química EJERCICIO 1. La azida de sodio, NaN_3 , es la sustancia utilizada para generar nitrógeno (g) cuando ocurre un impacto en un automóvil (air bag). El NaN_3 es un compuesto iónico que contiene el ión aziduro, N_3^- . Escribe la estructura de Lewis de este anión, indicando las posibles formas resonantes, las cargas formales sobre cada átomo y la contribución relativa de cada una de las formas resonantes.

EJERCICIO 2. El compuesto NO_2F , es un reactivo gaseoso utilizado como propulsor de cohetes. Escribe las estructuras de Lewis para todas sus formas resonantes; indica las cargas formales sobre cada átomo

EJERCICIO 3. El óxido de dinitrógeno, N_2O , ("óxido nitroso" o gas hilarante), se utilizó en ciertos casos como gas anestésico. Escribe las estructuras de Lewis del óxido de dinitrógeno, N_2O , indicando las posibles formas resonantes, las cargas formales sobre cada átomo, y la **contribución relativa** de cada una de las formas resonantes.

EJERCICIO 4. Escribe las estructuras de Lewis del anión carbonato, CO_3^{2-} , indicando las posibles formas resonantes, las cargas formales sobre cada átomo, y la **contribución relativa** de cada una de las formas resonantes. Estima el orden de enlace medio C-O

Estructuras de Lewis

EJERCICIO 5. Escribe la estructura de Lewis de las siguientes especies químicas, e indica, en su caso, las formas resonantes más importantes. Utiliza la tabla siguiente como guía:

Molécula	n_{ev}	n_{eo}	n _{ec}	$n_{e\sigma}$	$n_{e\pi}$	N_{ps}
H ₂ CO						
$H_3^{-}O^+$						
IBr ₄						
CIO ₄						
PO_4^{3-}						
IOF ₅						

EJERCICIO 6. Propón la estructura de Lewis de las moléculas siguientes: a) OF₂, b) PCl₃, c) XeF₂, d) ICl₄⁻.

EJERCICIO 7. Propón la estructura de Lewis de las moléculas siguientes: a) NH_4^+ , b) CCI_4 , c) SiF_6^{2-} , d) SF_5^- .

EJERCICIO 8. Estructura de Lewis del anion nitrito (NO_2^-) . Dibuja las estructuras resonantes y estima el orden de enlace medio N-O.

EJERCICIO 9. Estructura de Lewis del anion NO₃. Dibuja las estructuras resonantes y estima el orden de enlace medio N-O.

EJERCICIO 10. El ion tiocianato, NCS⁻ es lineal con el C como átomo central. Construye todas las estructuras de Lewis posibles para esta especie. Utiliza el concepto de carga formal para dilucidar cual de ellas contribuirá con más peso.

EJERCICIO 11. El BF₃ presenta tres enlaces sencillos y al B como un átomo deficiente en electrones. Utiliza el concepto de carga formal para sugerir por qué una estructura con un doble enlace B=F, que proporcionaría un octeto al B, no está favorecida.

EJERCICIO 12. Escribe la estructura de Lewis para el anión cianato, OCN⁻, indicando las cargas formales asociadas a cada uno de los átomos de dicha molécula.

EJERCICIO 13. Escribe las estructuras de Lewis para el dióxido de dinitrógeno, ONNO, indicando las cargas formales asociadas a cada uno de los átomos de dicha molécula.

EJERCICIO 14. Escribe las estructuras de Lewis para la molécula de cianamida, H₂NCN, indicando las cargas formales asociadas a cada uno de los átomos de dicha molécula.

EJERCICIO 15. Escribe la estructura de Lewis para las moléculas siguientes: a) XeOF₄, b) XeO₃, c) ICI₂⁺, indicando las cargas formales asociadas a cada uno de los átomos.

EJERCICIO 16. Escribe la estructura de Lewis para las moléculas a) SF_4 , b) CIF_3 , c) $POCl_3$, d) XeO_2F_2 , e) $IO_2F_2^-$, f) IF_4^- , indicando las cargas formales asociadas a cada uno de los átomos.

EJERCICIO 17. La molécula de óxido de dinitrógeno tiene el orden atómico NNO en vez de la disposición simétrica NON. Utiliza el argumento de las cargas formales para argumentar la disposición de los átomos en la molécula.

EJERCICIO 18. El ion cianato, OCN⁻, forma sales muy estables, en tanto que las sales del ion isocianato, CNO⁻ suelen ser explosivas. Sugiere una razón. Una tercera disposición posible sería CON⁻ ¿Por qué es poco probable?

EJERCICIO 19. Haz una ordenación de las distancias de enlace C–O en CO, CO_2 y CO_3^{2-}

EJERCICIO 20. Haz una ordenación de las distancias de enlace N–O en NO+, NO $_2$ y NO $_3^-$

Geometría molecular. Modelo RPECV

EJERCICIO 21. Determina la geometría molecular de las entidades señaladas en el ejercicio 6: a) OF₂, b) PCl₃, c) XeF₂, d) ICl₄⁻. Identifica en qué casos hay desviaciones respecto de los ángulos geométricos ideales como consecuencia de la presencia de uno o más pares de electrones no compartidos.

EJERCICIO 22. Determina la geometría molecular de las entidades señaladas en el ejercicio 7: a) NH_4^+ , b) CCl_4 , c) SiF_6^{2-} , d) SF_5^- . Identifica en qué casos hay desviaciones respecto de los ángulos geométricos ideales como consecuencia de la presencia de uno o más pares de electrones no compartidos.

EJERCICIO 23. Propón la geometría de las moléculas señaladas en el ejercicio 16.

EJERCICIO 24. En base al modelo RPECV, predecir la geometría de las moléculas, NO₂F, XeF₂, ICl₃, XeF₄, IF₅, ICl₂⁻, SF₄ y OSF₄, e indicar el sentido de las desviaciones respecto de los ángulos ideales

EJERCICIO 25. Justifica la diferencia en el ángulo de enlace de las moléculas H_2O (104,5°) y de OF_2 (101,5°).

EJERCICIO 26. a) Predecir la geometría de la molécula AsF₃. b) Justifica la diferencia en el ángulo de enlace de las moléculas AsF₃ (96,2°) y de AsCl₃ $(98,5^{\circ}).$

EJERCICIO 27. En base al modelo RPECV predecir la geometría de la molécula SnCl₂.

EJERCICIO 28. En base al modelo RPECV predecir la geometría de las moléculas PCl₆⁻, ICl₂⁺, SF₅Cl, IBr₄⁺, ICl₄⁻, e indicar el sentido de las desviaciones respecto de los ángulos ideales.

EJERCICIO 29. En base al modelo RPECV predecir la geometría de las moléculas NO₂⁺, NO₂, NO₂⁻, e indicar el sentido de las desviaciones respecto de los ángulos ideales.

EJERCICIO 30. Se ha sintetizado el anion CO_2^- . ¿Qué forma y qué ángulos de enlace aproximado esperas que tenga?

EJERCICIO 31. ¿Cuáles de las siguientes moléculas triatómicas esperas que sea lineal y cuáles angulares? Para aquellas angulares, sugiere el ángulo de enlace aproximado: a) CS₂, b) ClO₂, c) SnCl₂ (gas), d) NOCl (el N es el átomo central), d) XeF₂.

EJERCICIO 32. De las siguientes especies triatómicas, ¿cuáles esperarías que fueran lineales y cuáles angulares? Para aquellas angulares, sugiere el ángulo de enlace aproximado: a) BrF₂⁺, b)BrF₂⁻; c) CN₂²

EJERCICIO 33. Escribe la estructura de Lewis de la propanona y, en base al modelo RPECV, predecir su geometría más probable.

Electronegatividad

EJERCICIO 34. Ordena los elementos B, Cl, Br y Al, por orden creciente de electronegatividad.

EJERCICIO 35. Justifica la siguiente variación de la electronegatividad:

Elemento	В	Al	Ga	In	TI
χ	2,0	1,5	1,6	1,7	1,8

Momento dipolar

EJERCICIO 36. Indicar si la siguiente frase es correcta, justificando la respuesta: Las moléculas PF₃ y SiF₄ tienen momento dipolar debido a la gran diferencia de electronegatividades entre P y F y entre Si y F.

EJERCICIO 37. Indica cuáles de las siguientes moléculas tienen momento dipolar: ICI, NH₃, PCI₅, CO₂, NF₃, CH₂CI₂, H₂S.





EJERCICIO 38. Justifica cuáles de las siguientes moléculas tienen momento dipolar: AsCl₃, NO₂, NO₂F, XeF₂, ICl₃, XeF₄, IF₅, SF₄ y OSF₄, XeO₄.

EJERCICIO 39. Para cada una de las moléculas del ejercicio 21 determina si son polares o no polares.

Fuerzas intermoleculares

EJERCICIO 40. Identifica los tipos de fueras intermoleculares que pueden surgir entre moléculas de cada una de las siguientes sustancias: (a) NO_2 , (b) N_2H_2 , (c) HF, (d) CI_4

EJERCICIO 41. Identifica los tipos de fueras intermoleculares que pueden surgir entre moléculas de cada una de las siguientes sustancias: (a) CH₃OH, (b) cis-CHCI=CHCI, (c) trans-CHCI=CHCI, (d) Br₂

EJERCICIO 42. Ubique los siguientes tipos de interacciones moleculares e ionicas en orden de magnitud creciente: a) ión-dipolo b) dipolo inducido-dipolo inducido, c) dipolo-dipolo en fase gaseosa d) ión-ión e) dipolo-dipolo en fase sólida.

EJERCICIO 43. ¿Cuál de los compuesto siguientes esperas que tenga un punto de ebullición más alto: el amoníaco, NH₃ o la fosfina, PH₃? ¿Por qué?

EJERCICIO 44. ¿Cuál de los siguientes compuestos esperarías que tuviera un punto de fusión más alto: el dibromo, Br₂, o el monocloruro de yodo, ICI? Indica la razón

EJERCICIO 45. ¿Cuál esperarías que tuviese un mayor punto de ebullición, el p-diclorobenceno o el o-diclorobenceno?

EJERCICIO 46. Explica la tendencia en los puntos de ebullición de los haluros de hidrógeno: HCl: -85°C; HBr: -67°C; HI: -35°C.

EJERCICIO 47. ¿Cuáles de las siguientes moléculas podrán formar enlaces de hidrógeno? (a) H_2S ; (b) CH_4 ; (c) H_2SO_3 (d) PH_3

EJERCICIO 48. ¿Cuáles de las siguientes moléculas podrán formar enlaces de hidrógeno? (a) CH₃OCH₃; (b) CH₃COOH; (c) CH₃CH₂OH (d) CH₃CHO

EJERCICIO 49. Sugiere, fundamentando la respuesta, que sustancia de cada uno de los siguientes pares tendrá probablemente mayor punto de fusión: a) HCl o NaCl, b) C₂H₅OC₂H₅ o C₄H₉OH, c) CHl₃ o CHF₃, d) H₂O o CH₃OH

EJERCICIO 50. Explica las siguientes observaciones en función del tipo y magnitud de las fuerzas intermoleculares: a) El punto de fusión del xenón sólido es de -112 °C y el del argón sólido es -189 °C. b) La presión de vapor del dietil éter es mayor que la del agua. c) El punto de fusión del pentano es 36,1°C, mientras que el del 2,2-dimetilpropano es 9,5 °C.