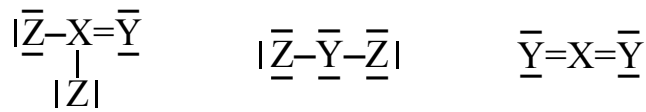

Tema 1. ENLACE QUÍMICO

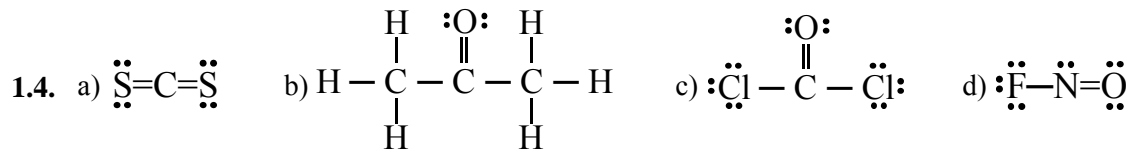
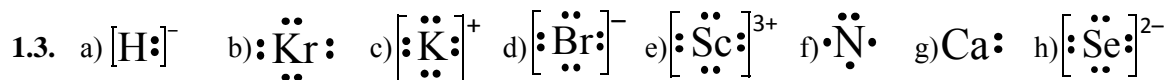
- 1.1. La capa más externa de la configuración electrónica de un elemento químico A es $5s^1$ y la de otro B es $3s^2 3p^5$. ¿Qué tipo de enlace esperas que exista en el compuesto AB?
- 1.2. Ordena los siguientes elementos de mayor a menor electronegatividad: Na, Al, Fr, Cl, F y P.
- 1.3. Escribe los símbolos de Lewis para los siguientes átomos o iones: a) H^- ; b) Kr; c) K^+ ; d) Br^- ; e) Sc^{3+} ; f) N; g) Ca; h) Se^{2-} .
- 1.4. Escribe una estructura de Lewis aceptable para cada una de las siguientes moléculas: a) CS_2 ; b) $(CH_3)_2CO$; c) Cl_2CO ; d) FNO.
- 1.5. ¿Cuáles de las siguientes moléculas esperas que tengan momento dipolar: a) F_2 ; b) NO_2 ; c) BF_3 ; d) HBr; e) H_2CCL_2 ; f) SiF_4 ; g) OCS? Razona la respuesta.
- 1.6. Indica la geometría de las siguientes moléculas y la hibridación del átomo central: a) $BeCl_2$, b) CO_2 , c) BF_3 , d) NO_3^- , e) CH_4 , f) NH_3 , g) SO_4^{2-} , h) PO_4^{3-} , i) H_2O , j) BrF, k) OF_2 , l) PCl_5 , m) SF_4 , n) SF_6 , o) IF_5 , p) $HC\equiv C-BH-CH_3$, q) SO_2 , r) SO_3 .
- 1.7. Considera las tres moléculas siguientes:



- a) Describe razonadamente cuál sería la estructura geométrica de estas moléculas. b) En el caso de que X, Y y Z fueran elementos del segundo periodo y no existieran cargas formales, ¿cuáles serían los elementos X, Y y Z?
- 1.8. Escribe los diagramas de orbitales moleculares para las siguientes especies: a) NO; b) NO^+ ; c) CO; d) CN; e) CN^- ; f) CN^+ . Considera que todas las moléculas se describen con el esquema energético de orbitales moleculares de las moléculas diatómicas homonucleares sin inversiones: $\sigma_{1s} \sigma_{1s}^* \sigma_{2s} \sigma_{2s}^* \sigma_{2p} \pi_{2p} \pi_{2p}^* \sigma_{2p}^* \dots$
- 1.9. Considerando el diagrama de orbitales moleculares del NO^+ obtenido en el ejercicio anterior, calcula el orden de enlace e indica si es paramagnético o diamagnético.
- 1.10. Escribe la estructura de Lewis y el esquema de orbitales moleculares para la molécula de O_2 y compara la interpretación que da cada teoría sobre su carácter paramagnético.
- 1.11. Justifica la resonancia (nube π) de la molécula de benceno a partir del diagrama de orbitales moleculares resultante de combinar los 6 orbitales p_z perpendiculares al plano de la molécula.
-

Soluciones

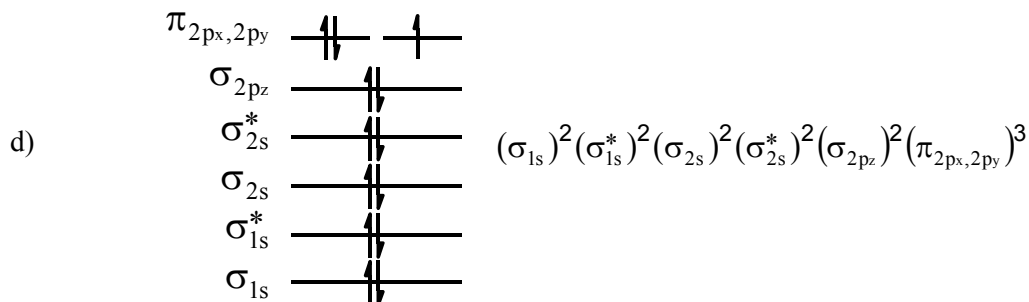
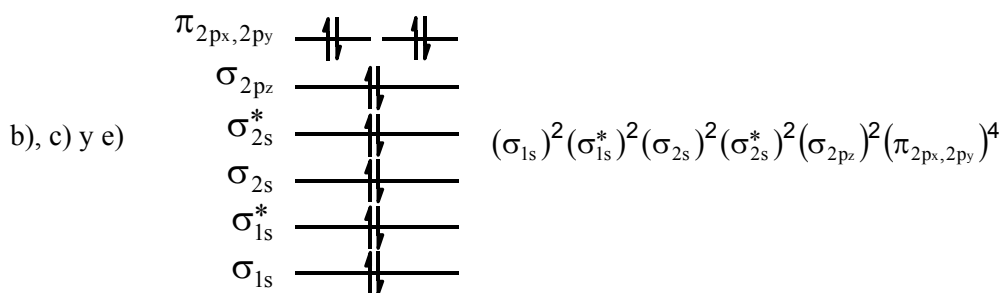
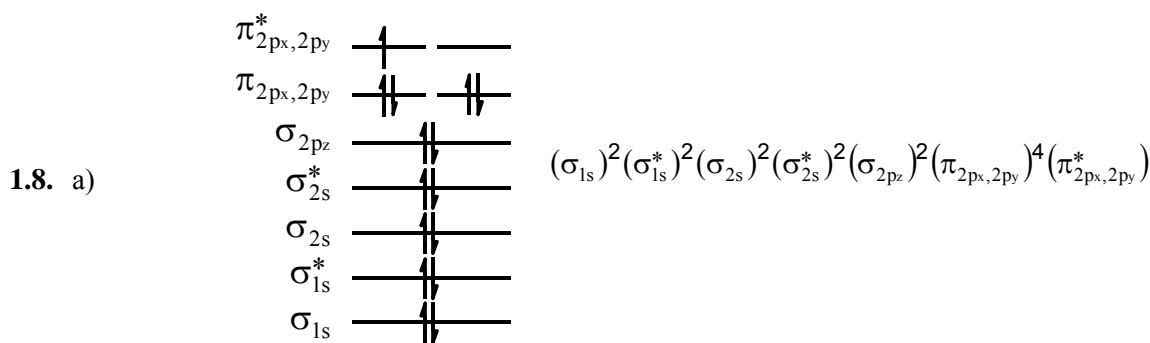
- 1.1. Enlace iónico.
1.2. $F > Cl > P > Al > Na > Fr$.

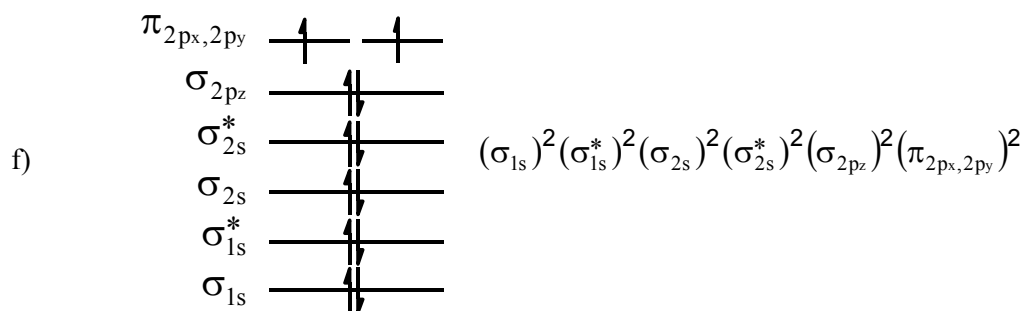


1.5. b), d), e) y g) tienen momento dipolar.

1.6. a) Lineal, sp ; b) lineal, sp ; c) trigonal plana, sp^2 ; d) trigonal plana, sp^2 ; e) tetraédrica, sp^3 ; f) pirámide trigonal, sp^3 ; g) tetraédrica, sp^3 ; h) tetraédrica, sp^3 ; i) angular, sp^3 ; j) lineal, sp^3 ; k) angular, sp^3 ; l) bipirámide trigonal, sp^3d ; m) "balancín" (tetraedro irregular), sp^3d ; n) octaédrica, sp^3d^2 ; o) pirámide cuadrada, sp^3d^2 ; p) los carbonos unidos por enlace triple tienen geometría lineal e hibridación sp , el boro tiene geometría trigonal-plana e hibridación sp^2 y el carbono del grupo metilo tiene geometría tetraédrica e hibridación sp^3 ; q) angular, sp^2 ; r) trigonal-plana, sp^2 .

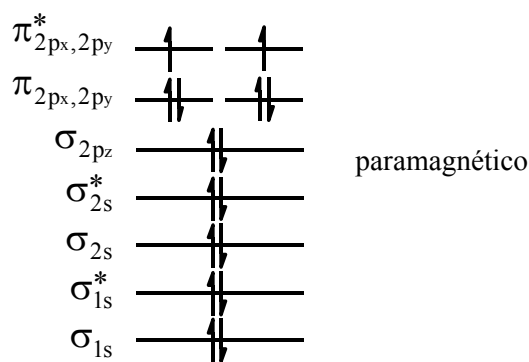
1.7. a) Trigonal-plana, angular y lineal, respectivamente; b) X = C, Y = O, Z = F.



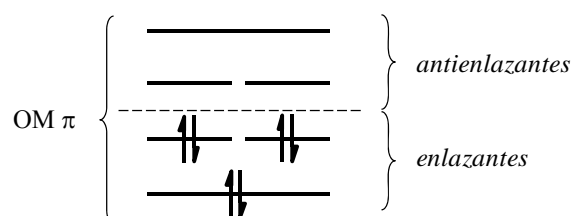


1.9. Orden enlace = 3; diamagnético.

1.10. $\ddot{O} = \ddot{O}$ diamagnético



1.11. El solapamiento lateral de los seis orbitales atómicos $2p_z$ da lugar a 6 orbitales moleculares de tipo π , 3 enlazantes y 3 antienlazantes:



Hay 3 enlaces π , distribuidos entre los 6 átomos de carbono, es decir, deslocalizados en el anillo. El orden de enlace asociado a los orbitales moleculares de tipo π es 3, resultando medio enlace entre cada par de átomos de carbono. Teniendo en cuenta además el esqueleto de enlaces σ , el orden de enlace total para cada enlace carbono-carbono es 1.5.