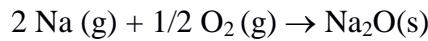


Unidad 1 – Introducción a la Química y la Experimentación

Ejercicio 1)

El sodio gaseoso reacciona de forma completa con oxígeno de acuerdo con la siguiente reacción:



- a) Partiendo de 3 moles de sodio y 2 moles de oxígeno, ¿qué volumen de oxígeno medido en CNPT (0°C y 1 bar) se consumió en la reacción?

Ejercicio 2)

La energía del enlace de la molécula de Cl₂ es de 242 kJ/mol y su longitud de enlace es de 2,01 Angstroms.

- Esquematizá un diagrama de energía potencial *vs* distancia Cl-Cl para el Cl₂, y señalá los parámetros mencionados.
- Explicá, con ayuda de este diagrama, el hecho que Cl₂ no se disocia a 25 °C.

Ejercicio 3)

Cada uno de los siguientes textos breves puede o no contener un error conceptual. Señalá en cuál/es hay un error, y explicá brevemente en qué consiste el error en cada caso:

- a) “La presión de un gas aumenta al aumentar la temperatura debido a que habrá un mayor número de moléculas con temperaturas altas que chocarán más enérgicamente con las paredes del recipiente”.
- b) “Un mol de O₂ ocupando 100 L a 300°C tendrá mayor energía cinética media que 1 mol de H₂ ocupando 100 L a la misma temperatura, ya que la masa molecular del O₂ es mayor a la del H₂”

Algunas fórmulas y algunos datos

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_r}} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad \langle v^2 \rangle = \frac{3RT}{M_r} = \frac{3k_B T}{m} \quad \left(p + \frac{a}{V^2} \right) (\bar{V} - b) = R T$$

$$Ec = \frac{1}{2} mv^2 \quad PV = n RT$$

$$R = 0,08206 \text{ L atm/K mol} = 0,083144 \text{ L bar/ K mol} = 8,3144 \text{ J/K mol}$$

EJEMPLO DE POSIBLE RESOLUCION

Unidad 1 – Introducción a la Química y la Experimentación

UNIDAD 1

1º Parcial Q6 et 1 ①
Posible resolución

EXERCICIO 1

$2 \text{Na}(g) + \frac{1}{2} \text{O}_2(g) \rightarrow \text{Na}_2\text{O}(s)$

Por estigimetría de la reacción:

$\frac{1}{2} \text{mol O}_2$ requiere 2 moles Na

$2 \text{ " } = 4 \cdot \frac{1}{2} = 2 \text{ mol O}_2$ 4.2 moles Na = 8 moles Na.

Hay disponibles 3 moles Na \Rightarrow reactivo limitante

2 moles Na reaccionan con $\frac{1}{2}$ mol O₂

3 moles Na $\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = 0,75 \text{ mol O}_2$

Utilizando g.i.: $pV = nRT \Rightarrow V = \frac{nRT}{P}$

CNPT $\Rightarrow T = 0^\circ\text{C} \approx 273 \text{ K}$

$P = 1 \text{ bar}$ Se consumieron.

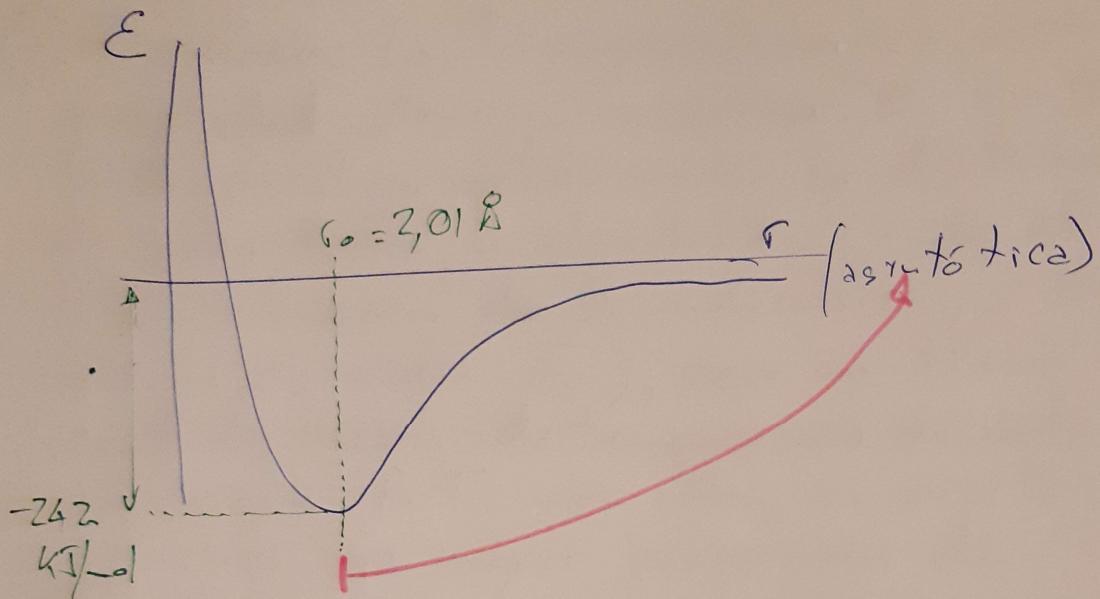
$\therefore V_{\text{O}_2}^{\text{cons}} = \frac{0,75 \text{ mol} \cdot 0,0831 \text{ L bar}^{-1} \text{ K}^{-1} \cdot 273 \text{ K}}{1 \text{ bar}}$

\therefore se consumieron 17 L de O₂ (medidos) a CNPT

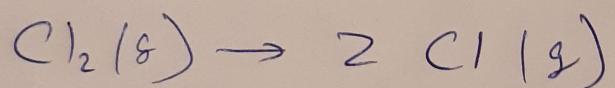
U1

EJERCICIO 2

$f = \text{Parcia} / Q \text{ e}^{-f}$ ②
possible resolution



Disociar Cl_2 significaría:



es decir, separar sus átomos hasta distancias "muy lejanas" (infinitas) de no interacción (proceso señalado en color rosa).

Para ello, el sistema requiere 242 $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ a 25°C , la energía cinética es mucho más baja (ej: $RT = 8,31 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 298 \text{ K} \approx 2,5 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$) y es insuficiente p/ proveer (ej: vía choques intermolec.) esa energía necesaria p/ romper el enlace.

U1

1º Parcial Q6ej-1 ③
Posible resolución

EJERCICIO 3

② Erroneo: La temperatura es una propiedad intensiva colectiva. En un gas, la temperatura determina la distribución de velocidades moleculares (y de allí la distribución de \bar{E}_c moleculares; y de allí la \bar{E}_c media $\bar{\bar{E}}_c$), pero no tiene sentido hablar de temperatura de cada molécula. A T más altas, es cierto que habrá una mayor proporción de moléculas \bar{E}_c más altas (que chocarán + energicamente / prededos), pero no "un mayor número de moléculas / T altas".

③ Erroneo. En el contexto de g.i., $\bar{\bar{E}}_c$ depende exclusivamente de T . Por lo tanto, a la misma T , un mol de cualquier g.i. tendrá la misma $\bar{\bar{E}}_c$ independiente de la naturaleza del gas. Es cierto que, como $M_r^{O_2} > M_r^{H_2}$, a la misma $\bar{\bar{E}}_c$, $\bar{V}_{O_2} < \bar{V}_{H_2}$. Pero $\bar{\bar{E}}_c$ será igual en ambos casos planteados aquí.

Unidad 2 – Estructura electrónica de átomos y moléculas

Ejercicio 1)

Decidí si la siguiente afirmación es correcta o incorrecta.

Si es incorrecta, explicá brevemente (aprox. 5 renglones) por qué.

Si es correcta, elegí cuál de las posibles o aparentes justificaciones que se ofrecen (en azul) resulta apropiada, y explicá brevemente por qué las otras son incorrectas:

Afirmación: Los orbitales 2s y 2p en un átomo polielectrónico son degenerados (tienen la misma energía)

- i) Porque ambos tienen el mismo número cuántico n.
- ii) Porque los orbitales s y p siempre son degenerados.
- iii) Porque las repulsiones entre electrones en orbitales s y p son nulas.

Ejercicio 2)

El fosgeno (COCl_2) posee al C como átomo central.:

- Escribí la estructura de Lewis.
- Utilizá TREPEV para predecir su geometría.
- En el marco de TEV, identificá cada enlace como σ o π , y detallá cuáles orbitales atómicos le dieron origen.

Ejercicio 3)

Uno de los diagramas de OM representados en la figura corresponde al dioxígeno (O_2); el otro, al peróxido (O_2^{2-}). Respondé las siguientes preguntas y justificá brevemente (aprox. 5 renglones) cada respuesta.

a) ¿cuál de los dos diagramas corresponde a la especie con mayor distancia de enlace?

b) ¿corresponde alguno de los diagramas a una especie paramagnética?

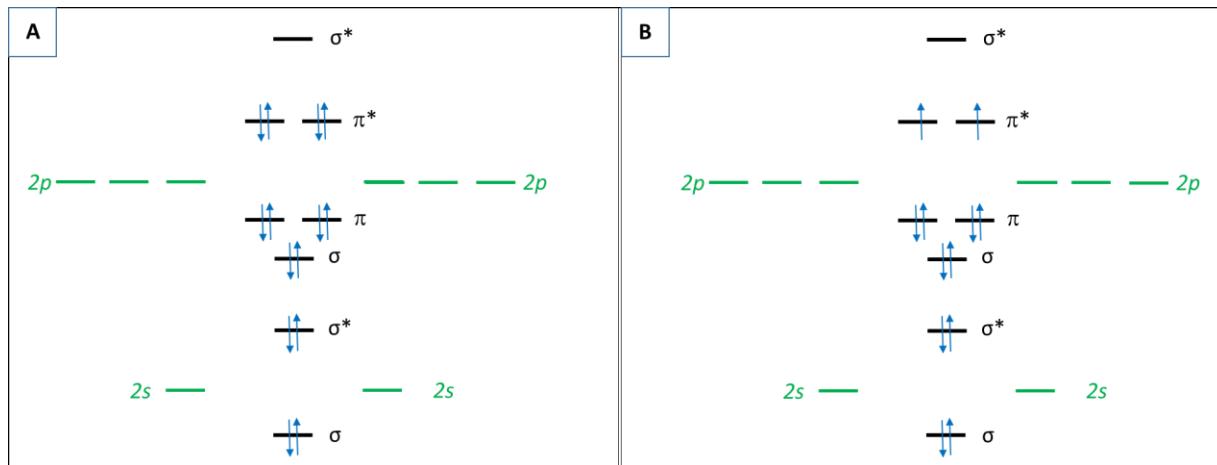


Tabla periódica de los elementos

Notas:

- 1. Ionización = 96.485 eV
- Todos los elementos tienen un estado de oxidación intermedio.
- * Los estados de oxidación de los elementos 109-110.
- 111-120, 124-135, 135-137 y 138-140.
- Los estados de oxidación de los elementos 109-110, 106-107, 108-109, 110-111, 112-113, 114-115, 116-117 y 118 son prediseñados.



Attribution: 2012cc
Edit (Translation to Spanish) by ThePhotographer
Edit (Updated) by EnderMK
Original file: https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=Periodic_table_large-es.svg

Unidad 2 – Estructura electrónica de átomos y moléculas

Ejercicio 1)

Decidí si la siguiente afirmación es correcta o incorrecta.

Si es incorrecta, explicá brevemente (aprox. 5 renglones) por qué.

Si es correcta, elegí cuál de las posibles o aparentes justificaciones que se ofrecen (en azul) resulta apropiada, y explicá brevemente por qué las otras son incorrectas:

Afirmación: Los orbitales 2s y 2p en un átomo polielectrónico son degenerados (tienen la misma energía)

- i) Porque ambos tienen el mismo número cuántico n .
- ii) Porque los orbitales s y p siempre son degenerados.
- iii) Porque las repulsiones entre electrones en orbitales s y p son nulas.

Ejercicio 1)

Decidí si la siguiente afirmación es correcta o incorrecta.

Si es incorrecta, explicá brevemente (aprox. 5 renglones) por qué.

Si es correcta, elegí cuál de las posibles o aparentes justificaciones que se ofrecen (en azul) resulta apropiada, y explicá brevemente por qué las otras son incorrectas:

Afirmación: Los orbitales 2s y 2p en un átomo polielectrónico son degenerados (tienen la misma energía)

- i) Porque ambos tienen el mismo número cuántico n .
- ii) Porque los orbitales s y p siempre son degenerados.
- iii) Porque las repulsiones entre electrones en orbitales s y p son nulas.

La afirmación es **incorrecta**. En los átomos polielectrónicos la energía de cada orbital atómico depende de n y l debido a las repulsiones interelectrónicas. Los orbitales atómicos s son más penetrantes que los p, por lo tanto son menos apantallados y su energía es menor (es más favorable ubicar electrones allí). Por otro lado, los orbitales atómicos p sufren un mayor apantallamiento por ser menos penetrantes, luego su energía es mayor.

Ejercicio 2)

El fosgeno (COCl_2) posee al C como átomo central.:

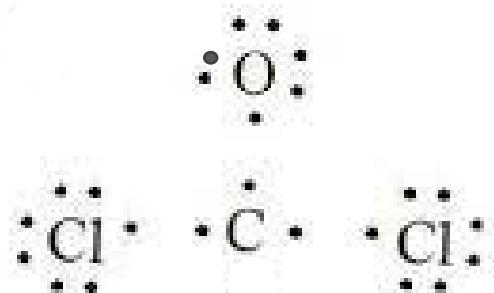
- Escribí la estructura de Lewis.
- Utilizá TREPEV para predecir su geometría.
- En el marco de TEV, identificá cada enlace como σ o π , y detallá cuáles orbitales atómicos le dieron origen.

Estructuras de Lewis - resumen

1. *Definir el átomo central de la molécula.*
2. *Determinar el número de electrones de valencia del sistema.*
3. *Se unen los átomos con el central con enlaces simples.*
4. *Si sobran electrones se agregan como pares libres, respetando la regla del octeto.*
5. *Si no se completa el octeto de algún átomo se forman enlaces dobles o triples.*
6. *Considerar cargas formales. Minimizarlas. Añadir enlaces para expandir octeto (átomos del 3er período para abajo).*
7. *Considerar posibles estructuras de resonancia.*

Estructuras de Lewis - resumen

1. Definir el átomo central de la molécula.
2. Determinar el número de electrones de valencia del sistema.
3. Se unen los átomos con el central con enlaces simples.
4. Si sobran electrones se agregan como pares libres, respetando la regla del octeto.
5. Si no se completa el octeto de algún átomo se forman enlaces dobles o triples.
6. Considerar cargas formales. Minimizarlas. Añadir enlaces para expandir octeto (átomos del 3er período para abajo).
7. Considerar posibles estructuras de resonancia.



Átomo central

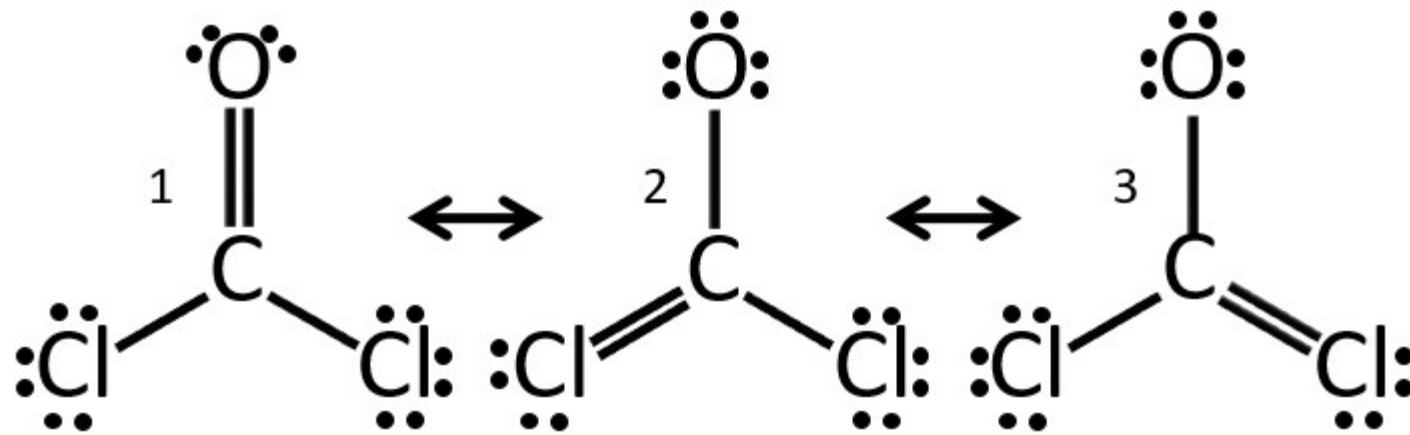
C

Electrones de valencia

24

Electrones sobrantes

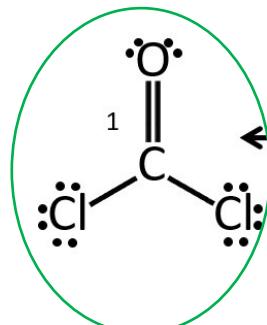
24-6 = 18



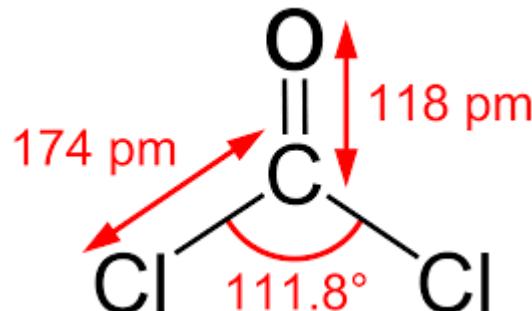
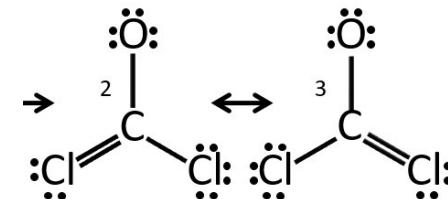
LAS 3 CUMPLEN EL OCTETO

Para saber cual estructura tiene más peso o es predominante CF

$$CF = \#e_{valencia}^- - \#e_{libres}^- - \#enlaces$$



Carga formal C	$4 - 0 - 4 = 0$
Carga formal O	$6 - 4 - 2 = 0$
Carga formal Cl	$7 - 6 - 1 = 0$



Carga formal C	$4 - 0 - 4 = 0$
Carga formal O	$6 - 6 - 1 = -1$
Carga formal Cl1	$7 - 4 - 2 = +1$
Carga formal Cl2	$7 - 6 - 1 = 0$

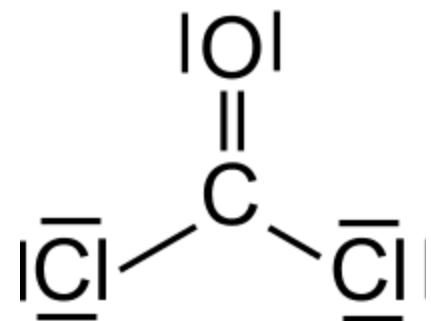
Ejercicio 2)

El fosgeno (COCl_2) posee al C como átomo central.:

- Escribí la estructura de Lewis.
- Utilizá TREPEV para predecir su geometría.

A partir de la estructura de Lewis debemos contar cuantos enlaces y pares de electrones libres hay alrededor del átomo central.

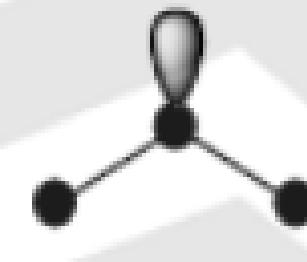
GE Y GM ¿CÓMO SON = O ≠? ¿CUÁNTOS ENLACES TENGO ALREDEDOR DEL C?



plana
trigonal



plana
trigonal (AX_3)



angular (AX_2E)

PLANA TRIGONAL

????

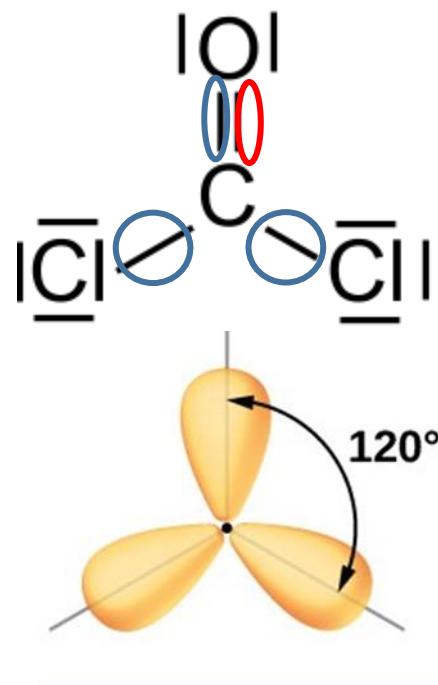
átomo central (C) -- 3 enlaces , par electrónico libre=0, GE Y GM ES IGUAL

Ejercicio 2)

El fosgено (COCl_2) posee al C como átomo central.:

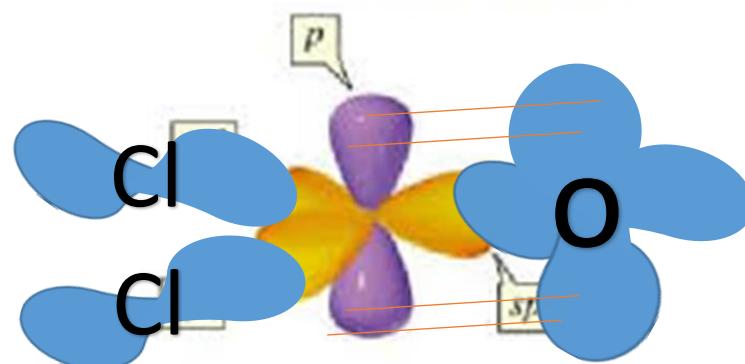
- Escribí la estructura de Lewis.
- Utilizá TREPEV para predecir su geometría.
- En el marco de TEV, identificá cada enlace como σ o π , y detallá cuáles orbitales atómicos le dieron origen.

Como la geometría electrónica es triangular= 3 ALREDEDOR



La hibridización del átomo central es sp^2 .

C --3 enlaces sigma entre los orbitales sp^2 del C y los orbitales p del oxígeno y el cloro.

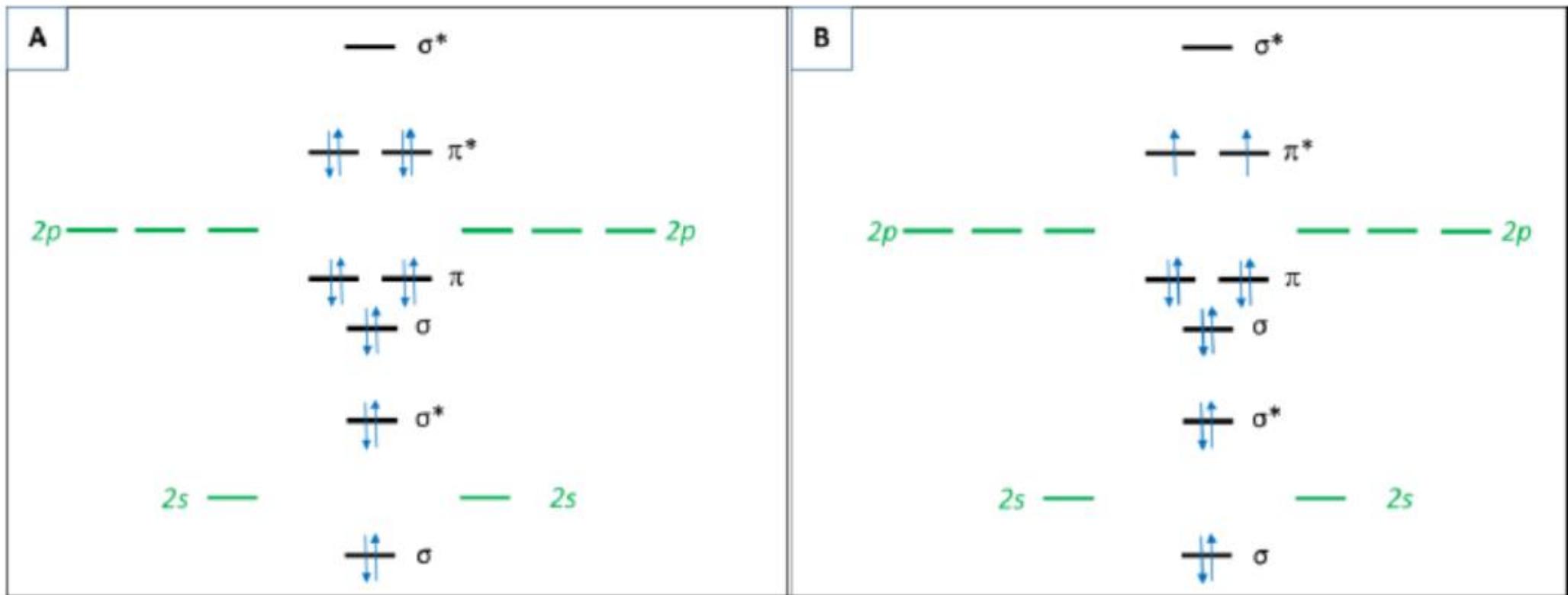


Ejercicio 3)

$$e^- = 6+6$$

Uno de los diagramas de OM representados en la figura corresponde al dioxígeno (O_2); el otro, al peróxido (O_2^{2-}). Respondé las siguientes preguntas y justificá brevemente (aprox. 5 renglones) cada respuesta. $e^- = 6+6+2$

- ¿cuál de los dos diagramas corresponde a la especie con mayor distancia de enlace?
- ¿corresponde alguno de los diagramas a una especie paramagnética?



Ejercicio 3)

Uno de los diagramas de OM representados en la figura corresponde al dioxígeno (O_2); el otro, al peróxido (O_2^{2-}). Respondé las siguientes preguntas y justificá brevemente (aprox. 5 renglones) cada respuesta.

a) ¿cuál de los dos diagramas corresponde a la especie con mayor distancia de enlace?

DE depende del OE (a mayor orden de enlace, menor distancia de enlace).

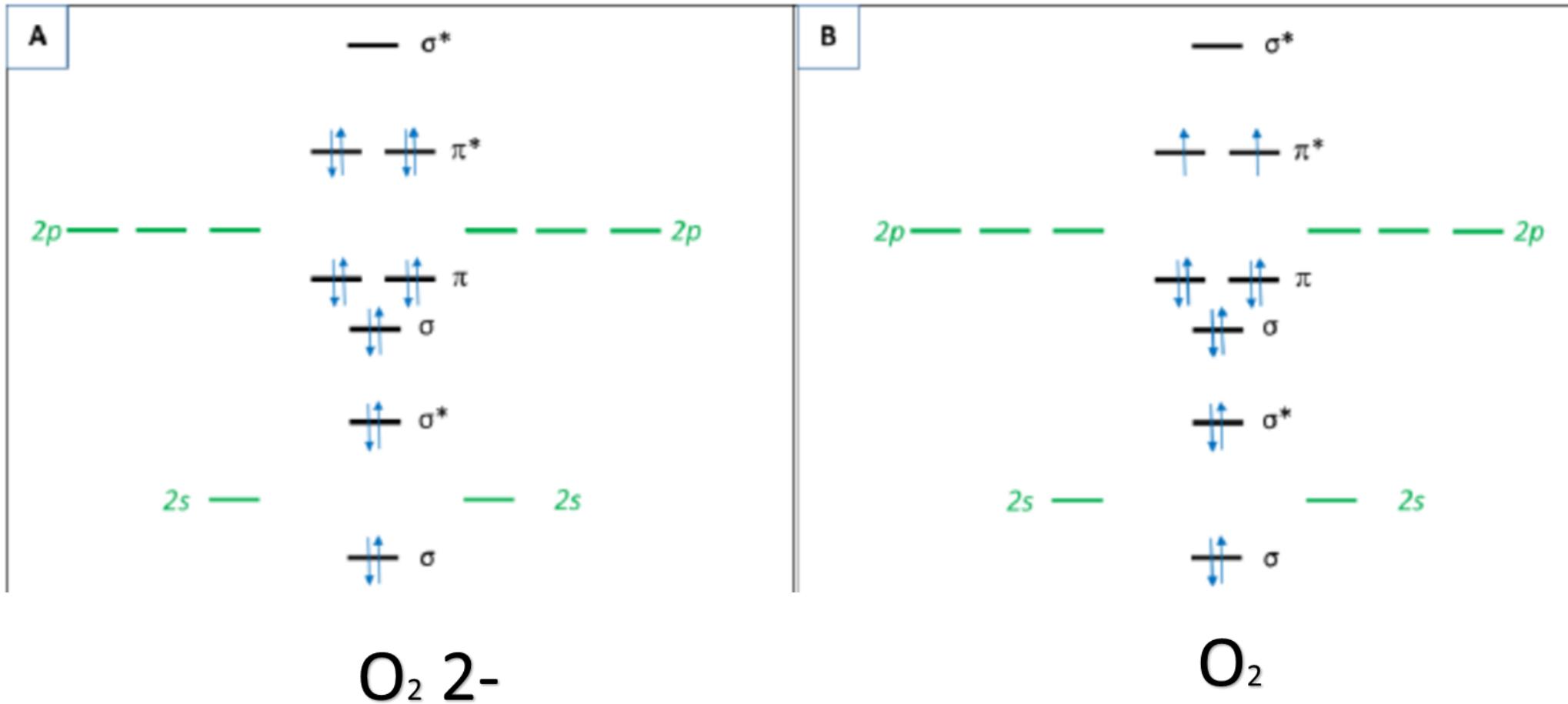
$$O.E. = \frac{1}{2} (n^{\circ} e_{-,enlazantes} - n^{\circ} e_{-,antienlazantes})$$

Compuesto	Orden de enlace
O_2 (diagrama B)	$(6-2)/2= 2$
Peróxido O_2^{2-} (diagrama A)	$(6-4)/2= 1$

O_2 presenta mayor OE , su distancia de enlace es menor.

El peróxido presenta dos electrones antienlazantes mas.

b) ¿corresponde alguno de los diagramas a una especie paramagnética?



Las especies paramagnéticas presentan electrones desapareados

El diagrama B (dioxígeno, O₂) corresponde a una especie paramagnética.

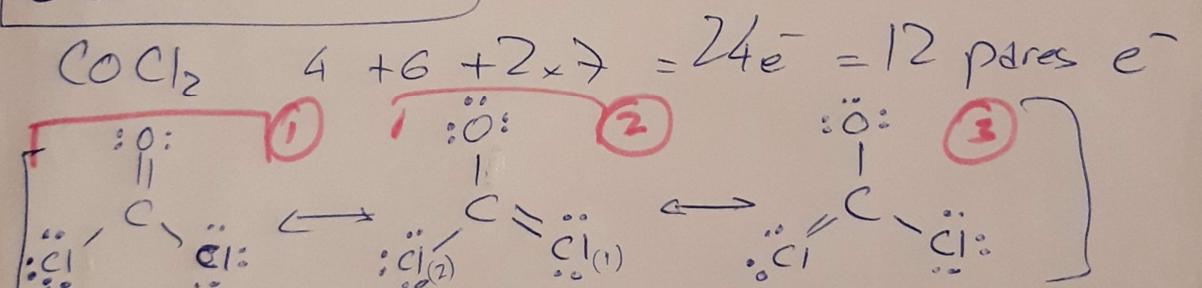
Unidad 2 – Estructura electrónica de átomos y moléculas

EJERCICIO 1

La afirmación es incorrecta.

En los átomos polielectrónicos, la energía de ~~los~~ cada OS depende de n y l , debido a las repulsiones intere. Los OS son "más penetrantes" q/ los P; por lo tanto, son "menos apantallados" x estos \Rightarrow su E es menor (más favorable ubicar e⁻ ahí) y apantalla más a los P (\Rightarrow la E de los P es mayor).

EJERCICIO 2



Para analizar los "pesos relativos" (cuál es más representativa) \rightarrow ver cuál minimiza CF.

$$\text{CF}_C = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$\text{CF}_O = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$\text{CF}_{\text{Cl}} = 7 - 6 - 1 = 0$$

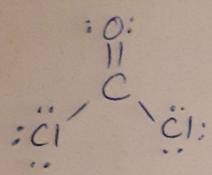
$\therefore \textcircled{1}$ mayor contribución

$$\text{CF}_C = 4 - 0 - 4 = 0$$

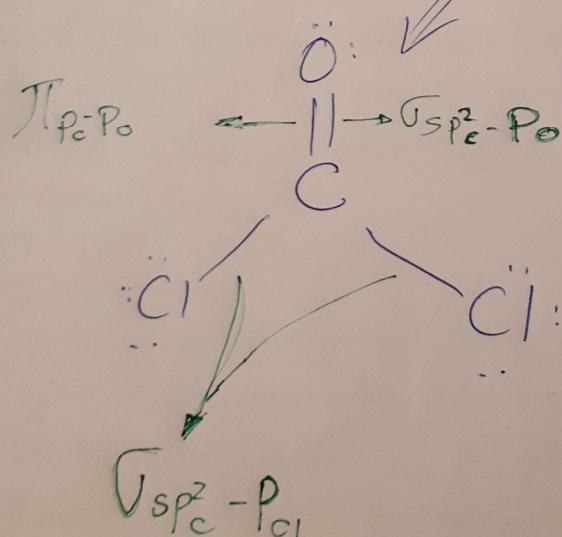
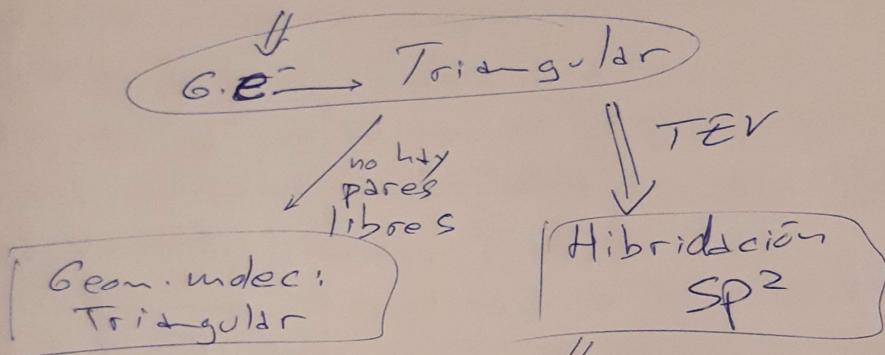
$$\text{CF}_O = 6 - 1 = -1$$

$$\text{CF}_{\text{Cl}} = 7 - 4 - 2 = +1$$

$$\text{CFCl}_2 = 7 - 6 - 1 = 0$$



TREPES: alrededor del at. central
 hay 3 regiones de alta densidad
 (3 "juegues" pares e⁻)



EJERCICIO 3

- a) Dado q) en ambos casos están involucrados átomos de O, la distancia de enlace será mayor en el q) tenga enlace más débil (menor OE)

$$OE_A = \frac{N_e^{\text{O}} - \text{N}_e^{\text{OHAl}} - \text{N}_e^{\text{OHanti}}}{2} = \frac{8-6}{2} = 1 \quad OE_B = \frac{8-4}{2} = 2$$

∴ a) presentará mayor distancia de enlace (O_2^{2-})

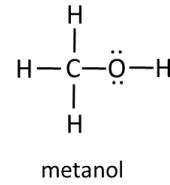
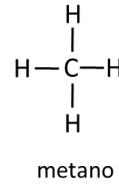
- b) Si: b) posee 2 e⁻ despareados en el HOMO ⇒ paramagnética (O_2^-).

Unidad 3 – Interacciones intermoleculares

Ejercicio 1)

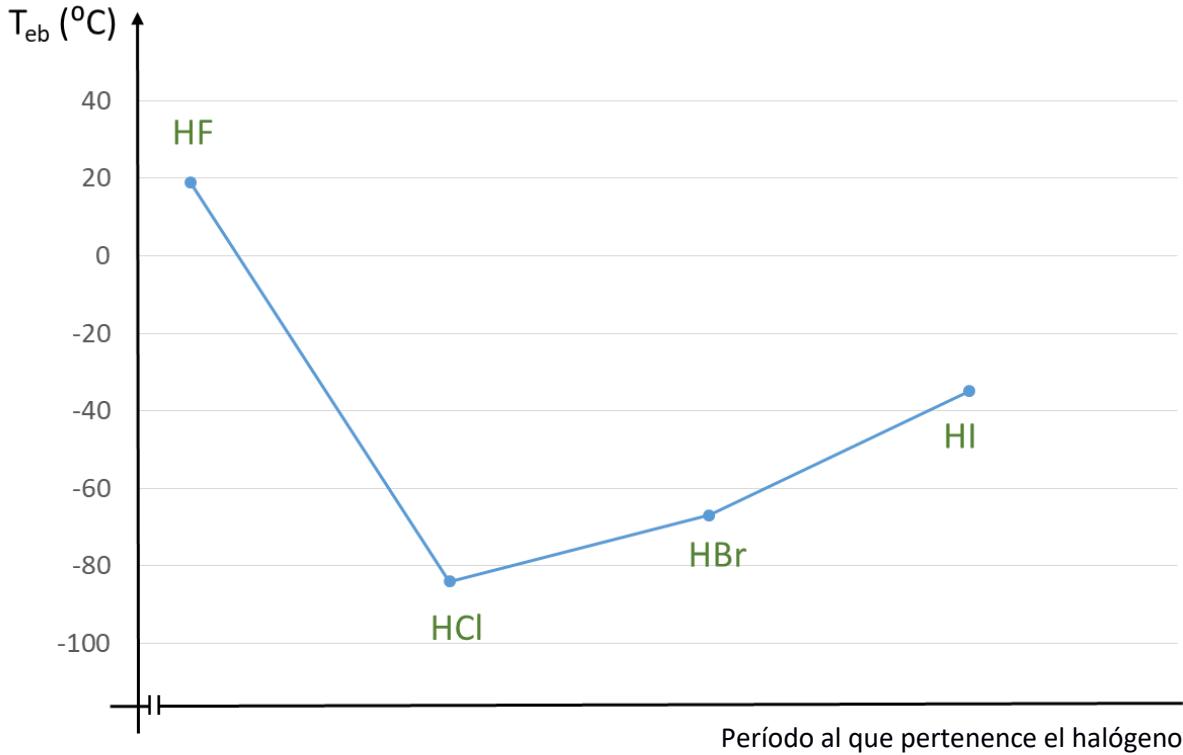
La siguiente tabla contiene los parámetros a y b de van der Waals para dos compuestos. Sabiendo que uno de estos compuestos es metanol y el otro es metano... ¿Cuál es cuál? Justificá tu respuesta, teniendo en cuenta los valores de los 2 coeficientes de van der Waals, en aproximadamente 10 renglones.

	a (L ² bar/mol ²)	b (L/mol)
Compuesto 1	2,283	0,04278
Compuesto 2	9,649	0,06702



Ejercicio 2)

La figura muestra la tendencia en los puntos de ebullición de los haluros de hidrógeno. Describí la tendencia y explicá el origen físico de la misma.



Ejercicio 3)

Explicá en pocos renglones (aprox. 5) a qué se debe que la energía reticular de CaS (aprox. – 3000 kJ/mol) sea mucho más grande, en módulo, que la de NaCl (aprox. – 790 kJ/mol). Ambas sustancias tienen la misma estructura, con $r_0 = 2,84$ Å para CaS y $r_0 = 2,81$ Å para NaCl.

Algunas fórmulas y algunos datos

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_r}} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad \langle v^2 \rangle = \frac{3RT}{M_r} = \frac{3k_B T}{m} \quad \left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = R T$$

$$E_{ret} = - \left(\frac{N_0 |Z_+||Z_-| e^2 A}{r_0 4 \pi \epsilon_0} \right) \cdot \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

$$R = 0,08206 \text{ L atm/K mol} = 0,083144 \text{ L bar/K mol} = 8,3144 \text{ J/K mol}$$

EJERCICIO 1

El parámetro b representa la magnitud de las interacciones repulsivas (volumen excluido). Metanol induce 1 átomo y tiene más g/¹ neto \Rightarrow se espera mayor volumen molecular $\Rightarrow b=0,067$ corresponde CH_3OH .

a representa la magnitud de las interacciones atractivas. x lo anterior: $\text{CH}_3\text{OH} + \text{polarizable g}^1 \text{CH}_4 \Rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ interacc. dispersivas + intensas. Además, presenta interacc. dipolo-dipolo \Rightarrow esperamos a tanto l/netral ($g, 6s$) (pfetil es de corto alcance, no influye mucho sobre a) \Rightarrow

1: CH_4
2: CH_3OH

EJERCICIO 2

De manera general, se observa que el p.eb. aumenta a medida q¹ aumenta el periodo al q¹ pertenece el halógeno, con la excepción notoria de HF: contiene al halógeno + pequeño, pero presenta el ms y cr p.eb.

Posible res.

La tendencia de p.eb. creciente de $\text{HCl} \rightarrow \text{HI}$
 se explica en términos del aumento
 progresivo de la magnitud de las
 interacciones atractivas de dispersión:
 en la secuencia $\text{H-Cl} \rightarrow \text{H-Br} \rightarrow \text{H-I}$ va
 aumentando el $n = e^-$ y el tamaño del
 halógeno, con lo cual va aumentando
 la polarizabilidad. Interacciones atractivas
 + intensas \Rightarrow necesidad de mayor
 energía cinética (T) p/vencerlas.
 (las interacciones dipolo-dipolo varían
 en sentido inverso; el resultado
 experimental muestra q' prevalecen las
 de dispersión). La posición "anómala"
 de HF (x dispersión se esperaría el
 p.eb. + bajo) puede entenderse consideran-
 do q' presenta el mayor $\bar{\mu}_D$ de la serie,
 y q' las interacciones pte H (en portadas
 a las cortas distancias de la fase líquida)
 son significativamente intensas p/ta HF.

Posible res.

DJERCKIO 3

$$E_{\text{ret}} = - \frac{N_{\text{Av.}} |Z_+| |Z_-| e^2 A}{r_0 4\pi \epsilon_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

r_0 casi iguales
 misma estructura \Rightarrow misma at. Madelung A
 factor $\left(1 - \frac{1}{n}\right)$ poco peso
 \therefore La diferencia debe originarse en las
 cargas. En efecto: $\text{CaS}: |+2||-2| = 4$ (caso \Rightarrow
 $\text{NaCl}: |+1||-1| = 1$ (factor q'))