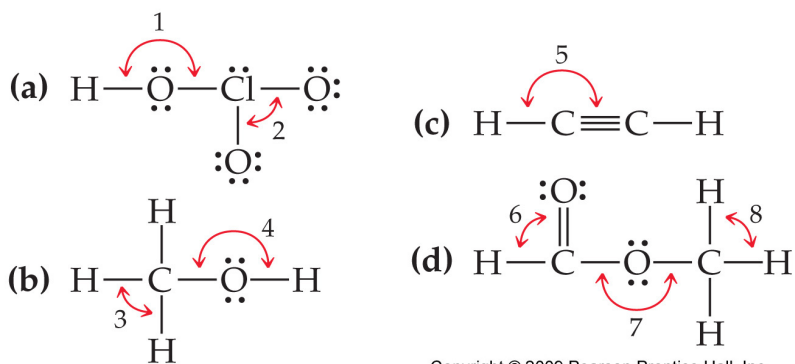


Selección de problemas para la clase P2
Geometría molecular, orbitales híbridos, TOM

Ejercicios seleccionados entre los propuestos
en los listados correspondientes al tema 1.

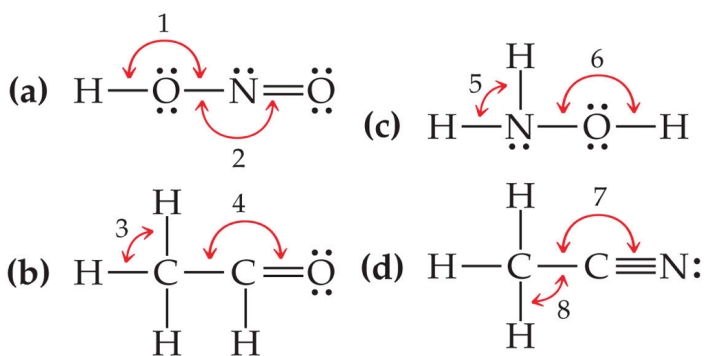
Aspectos geométricos de moléculas orgánicas

(Grupo P1) Ejercicio 1.- Escribe los valores aproximados para los ángulos de enlace indicados en las moléculas siguientes. Cada ángulo está definido por tres átomos X-A-Y. Indica la hibridación que adopta el átomo A en cada uno de los ángulos de enlace indicados.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

(Grupo P2 y P3) Ejercicio 2.- Escribe los valores aproximados para los ángulos de enlace indicados en las moléculas siguientes. Cada ángulo está definido por tres átomos X-A-Y. Indica la hibridación que adopta el átomo A en cada uno de los ángulos de enlace indicados.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

(Grupo P1) Ejercicio 3.- En cual de las siguientes moléculas o iones AF_n hay mas de un ángulo de enlace F-A-F: SiF_4 , PF_5 , SF_4 , AsF_3 .

(Grupo P2) Ejercicio 4.- Explique por qué los siguientes iones tienen diferentes ángulos de enlace: ClO_2^- y NO_2^-

(Grupo P3) Ejercicio 5.- Las especies NH_2^- , NH_3 y NH_4^+ tienen ángulos de enlace H-N-H de 105° , 107° y 109° , respectivamente. Explica esta variación.

Hibridaciones

Ejercicio 6.- Di cuando el solapamiento de los siguientes orbitales situados en átomos vecinos producirá un enlace sigma y cuando π . Considera el eje z como el que une los dos átomos (revisa la forma de los orbitales s, p y d).

a) (1s, 1s), b) (2p_z, 2p_z), c) (2p_x, 2p_x), d) (2s, 2p_z), e) (3d_{z²}, 3d_{z²}).

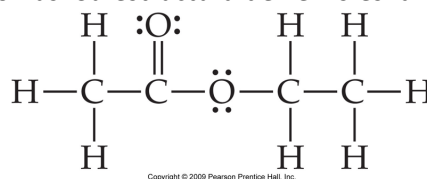
Ejercicio 7.- a) Esquematiza la manera en que los orbitales p de dos átomos diferentes se combinan para formar un enlace sigma. b) Esquematiza un enlace pi construido a partir de los orbitales p. Por lo general, ¿cuál es mas fuerte, un enlace sigma o un enlace pi? c) Pueden dos orbitales s formar un enlace pi?

(Grupo P1) Ejercicio 8.- Señala la hibridación de cada átomo de carbono en las siguientes moléculas: a) CH₃CH₂CH₃, b) CH₂=CH—CH₃, c) CH₃—C≡CH.

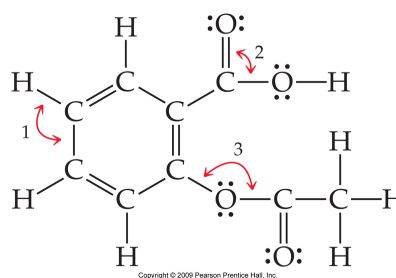
(Grupo P2) Ejercicio 9.- Señala la hibridación de cada átomo de carbono en las siguientes moléculas: a) CH₂=C=C=CH₂, b) HC≡C—C≡CH.

(Grupo P3) Ejercicio 10.- Señala la hibridación de cada átomo de carbono en las siguientes moléculas: a) HCHO (formaldehído), b) C₆H₆(benceno).

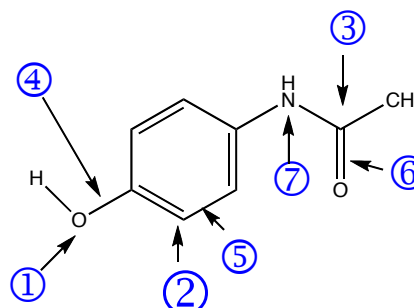
(Grupo P1) Ejercicio 11.- El acetato de etilo, C₄H₈O₂, es una sustancia con un olor característico, utilizada tanto como disolvente como para potenciar los aromas. Su estructura de Lewis es la siguiente. a) ¿Cuál es la hibridación de cada uno de los átomos de carbono de la molécula? b) ¿Cuántos enlaces sigma y pi hay en la molécula? c) ¿Cuál es el ángulo de enlace aproximado C—O—C? d) Define los ángulos de enlace aproximados a lo largo de la cadena carbonada?



(Grupo P2) Ejercicio 12.- El ácido acetilsalicílico (más conocido como aspirina) presenta la siguiente estructura de Lewis. a) ¿Cuáles son los valores aproximados de los ángulos de enlace marcados como 1, 2, y 3? b) ¿Qué orbitales híbridos se utilizan alrededor del átomo central de cada uno de estos ángulos? c) ¿Cuántos enlaces sigma y pi hay en la molécula?



(Grupo P3) Ejercicio 13.- El tylenol es un fármaco analgésico cuya estructura se muestra a continuación. a) ¿Qué tipo de orbitales híbridos son utilizados por los átomos 1, 2 y 3? b) ¿Cuántos enlaces sigma y pi forman los enlaces 4 y 6? c) ¿Cuál es el orden de enlace en los enlaces 4, 5 y 6? d) ¿Cuál es la geometría de los dominios electrónicos en los átomos 1, 2, 3, 7?



Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)

(Grupo P1) Ejercicio **14**.- Explica utilizando para ello la TOM, lo siguiente: a) ¿Por qué el ion peróxido, O_2^{2-} , tiene una longitud de enlace más larga que el superóxido, O_2^- ? b) ¿Por qué el catión O_2^{2+} tiene un enlace O-O más fuerte que el propio O_2 ? c) ¿Por qué el O_2 es una molécula paramagnética? Escribe la configuración electrónica de las especies mencionadas.

(Grupo P2) Ejercicio **15**.- ¿Cuál de las siguientes especies esperas que sea paramagnética: O_2^+ , N_2^{2-} , Li_2^+ , O_2^{2-} . Determina el número de electrones desapareados.

(Grupo P3) Ejercicio **16**.- Representa el diagrama de energías de las entidades siguientes: Be_2^+ , Li_2^+ , N_2^+ , Ne_2^{2+} . Escribe sus configuraciones electrónicas e indica, en cada caso, si la adición de un electrón incrementaría o disminuiría el orden de enlace.

Ejercicio **17** .- Construye el diagrama de OM para la molécula B_2 . ¿Cuál es el orden de enlace? Construye un diagrama de niveles de energía para sus orbitales moleculares. La molécula de B_2 es paramagnética; ¿es congruente con el supuesto que los OM $\pi(2p)$ tienen más baja energía que los $\sigma(2p)$?