

Continguts i Pautes

Sessió de teoria del 27/05/2021

Contingut

De: 6.2.2.1 Estats d'oxidació. Tercera regla de *Fajans*
Fins: 6.2.4 Nombre de coordinació i geometria dels
compostos de coordinació (fins nombre de
coordinació = 5)

Pautes

De: exercici 6.12
Fins: exercici 6.13

Alfonso Polo Ortiz
Departament de Química (Química Inorgànica)
Universitat de Girona



© Alfonso Polo Ortiz [Nom del titular dels drets d'explotació], 2021
Els continguts d'aquest document (excepte textos i imatges no creats per l'autor)
estan subjectes a la llicència de Creative Commons: [Reconeixement-
NoComercial-CompartirIgual 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

Exercici 6.12. Per als fosfats de Ca(II) i Cd(II):

- Utilitzant les regles d'Slater, calcula el *nombre atòmic efectiu* dels cations.
- Raona quin d'ells presentarà una major característica covalent
- Es poden relacionar aquests resultats amb la fragilitat òssia observada a la malaltia "itai-itai" causada per una intoxicació amb Cadmi?

Dades: $Z_{\text{Ca}} = 20$, $Z_{\text{Cd}} = 48$, $r_{\text{Ca}^{2+}} = 100 \text{ pm}$, $r_{\text{Cd}^{2+}} = 95 \text{ pm}$

Resposta: $Z^*_{\text{Ca}} = 3.16$, $Z^*_{\text{Cd}} = 4.70$

a)

Ca^{2+} : $Z = 20$; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$;

$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p)^8$

$Z^*_{(4s4p)} = 20 - [(8 \times 0.85) + (10 \times 1)] = 3.16$

Cd^{2+} : $Z = 48$; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^0 4d^{10}$;

$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p)^8 (3d)^{10} (4s4p)^8 (4d)^{10} (4f)^0 (5s5p)^0$

$Z^*_{(5s5p)} = 48 - [(18 \times 0.85) + (28 \times 1)] = 4.70$

Exercici 6.12. Per als fosfats de Ca(II) i Cd(II):

- Utilitzant les regles d'Slater, calcula el *nombre atòmic efectiu* dels cations.
- Raona quin d'ells presentarà una major característica covalent
- Es poden relacionar aquests resultats amb la fragilitat òssia observada a la malaltia "itai-itai" causada per una intoxicació amb Cadmi?

Dades: $Z_{\text{Ca}} = 20$, $Z_{\text{Cd}} = 48$, $r_{\text{Ca}^{2+}} = 100 \text{ pm}$, $r_{\text{Cd}^{2+}} = 95 \text{ pm}$

Resposta: $Z^*_{\text{Ca}} = 3.16$, $Z^*_{\text{Cd}} = 4.70$

b) 1a regla de Fajans $\Rightarrow \uparrow$ Covalència $\Leftarrow \uparrow \phi_{M^{n+}} = Z^+/r_{M^{n+}}$ $\phi_{\text{Ca}^{2+}} \approx \phi_{\text{Cd}^{2+}}$
 3a regla de Fajans $\Rightarrow \text{Ca}^{2+}: [\text{Ar}] \Leftrightarrow \text{Cd}^{2+}: [\text{Kr}]4d^{10}$
 Més covalent: $\text{Cd}_3(\text{PO}_4)_2$

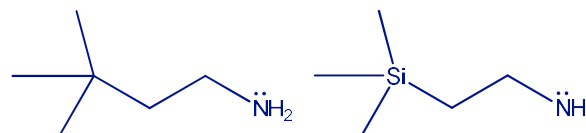
c) No \Rightarrow Punt fusió \nleftrightarrow Fragilitat $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2: 1670^\circ\text{C}$
 $\text{Cd}_3(\text{PO}_4)_2 \approx 1500^\circ\text{C}$

Exercici 6.13. Organitza raonadament els següents lligands en monodentats, polidentats ambidentats.

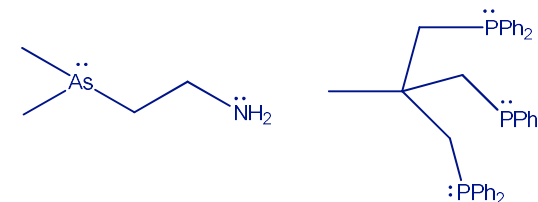
- a) $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$.
- b) $(\text{CH}_3)_3\text{SiCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$.
- c) $(\text{CH}_3)_2\text{AsCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$.
- d) NO_2^- .
- e) $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_2\text{PPh}_2)_3$.

Resposta: mono, mono, poli (bi), ambi, poli (tri).

Lligands monodentats: 1 sol àtom donador: a) i b)



Lligands polidentats: > 1 àtom donador i poden quelatar: c) i e)



Lligands ambidentats: bidentats que no poden quelatar a l'àtom metàl·lic, perquè els dos àtoms donadors estan molt prop entre ells i habitualment es troben relacionats per un sistema π :

