

# Complements de Química

## Curs 2020-2021

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



6.1.3. Utilitzant les *regles de Slater* calcula l'increment de la càrrega nuclear efectiva sobre un electró  $2p$  al passar del carboni al nitrogen i del nitrogen a l'oxigen.

a) Compara el resultat amb l'obtingut utilitzant les càrregues nuclears efectives calculades mitjançant mètodes mecanoquàntics (*SCF*). Que és el que no té en compte el mètode aproximat d'*Slater*?

Dades:  $Z_{\text{Li}} = 3$ ,  $Z_{\text{Be}} = 4$ ,  $Z_{\text{B}} = 5$ ,  $Z_{\text{C}} = 6$ ,  $Z_{\text{N}} = 7$ ,  $Z_{\text{O}} = 8$ ;  $Z_{2p_{\text{C}}}^*(\text{SCF}) = 3.14$ ,  $Z_{2p_{\text{N}}}^*(\text{SCF}) = 3.83$ ,  $Z_{2p_{\text{O}}}^*(\text{SCF}) = 4.45$

a) Utilitzant les *regles de Slater* calculem la càrrega nuclear efectiva sobre un electró  $2p$  en el C, N i O:

$$\text{C: } 1s^2 2s^2 2p^2 \rightarrow (1s)^2 (2s 2p)^4: Z_{2p_{\text{C}}}^* = 6 - [(3 \times 0.35) + (2 \times 0.85)] = 3.25$$

$$\text{N: } 1s^2 2s^2 2p^3 \rightarrow (1s)^2 (2s 2p)^5: Z_{2p_{\text{N}}}^* = 7 - [(4 \times 0.35) + (2 \times 0.85)] = 3.90$$

$$\text{O: } 1s^2 2s^2 2p^4 \rightarrow (1s)^2 (2s 2p)^6: Z_{2p_{\text{O}}}^* = 8 - [(5 \times 0.35) + (2 \times 0.85)] = 4.55$$

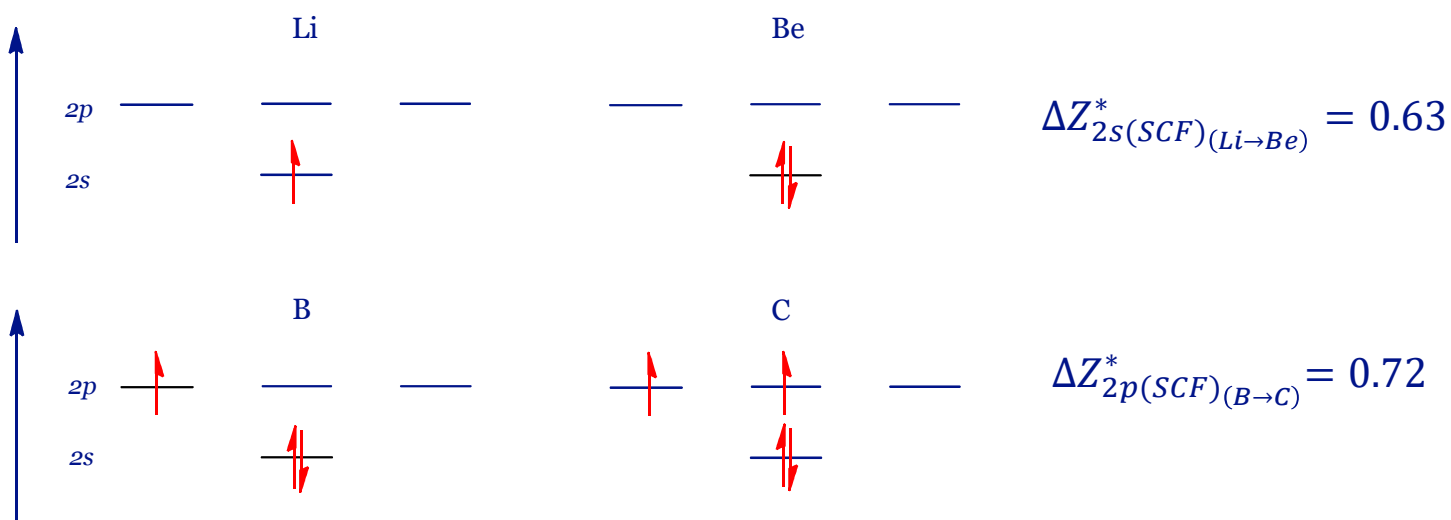
$$\text{Calculem ara les diferències: } \Delta Z_{2p_{(\text{C} \rightarrow \text{N})}}^* = \Delta Z_{2p_{(\text{N} \rightarrow \text{O})}}^* = 0.65$$

Comparem amb les diferències calculades utilitzant les dades *SCF*:

$$\Delta Z_{2p(\text{SCF})_{(\text{C} \rightarrow \text{N})}}^* = 0.69, \Delta Z_{2p(\text{SCF})_{(\text{N} \rightarrow \text{O})}}^* = 0.62$$

6.1.3 b) Segons el resultat de l'apartat anterior, com creus que serà l'increment de la càrrega nuclear efectiva sobre un electró 2p al passar del bor al carboni en comparació amb el produït sobre un electró 2s al passar del liti al beril·li?

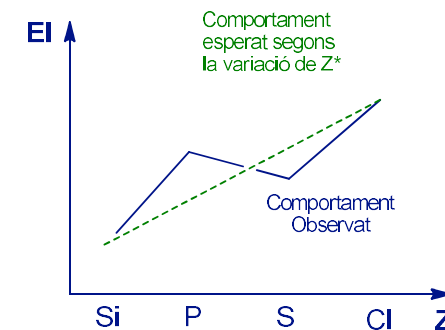
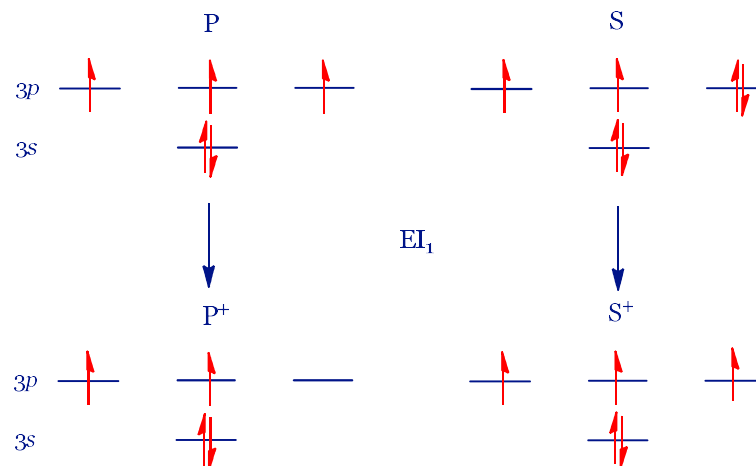
Dades:  $Z_{\text{Li}} = 3$ ,  $Z_{\text{Be}} = 4$ ,  $Z_{\text{B}} = 5$ ,  $Z_{\text{C}} = 6$ ,  $Z_{\text{N}} = 7$ ,  $Z_{\text{O}} = 8$



6.1.5 b) Com serà la variació de la primera energia de ionització entre el fòsfor ( $Z = 15$ ) i el sofre ( $Z = 16$ )? I entre el fluor ( $Z = 9$ ) i el clor ( $Z = 17$ )?

*Les dades necessàries les trobareu als apunts del capítol 2 de l'assignatura.*

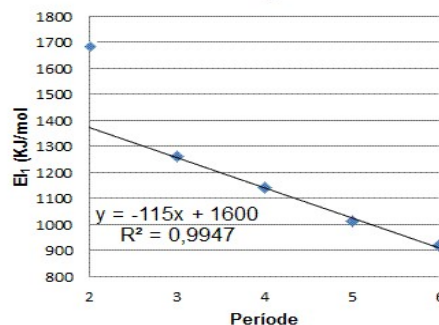
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H 1310	He 2370																
Li 519	Be 900											B 799	C 1090	N 1400	O 1310	F 1680	Ne 2080
Na 494	Mg 736											Al 577	Si 786	P 1060	S 1000	Cl 1260	Ar 1520
K 418	Ca 590	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 652	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 757	Cu 745	Zn 906	Ga 577	Ge 762	As 966	Se 941	Br 1140	Kr 1350
Rb 402	Sr 548	Y 617	Zr 661	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 556	Sn 707	Sb 833	Te 870	I 1010	Xe 1170
Cs 376	Ba 502	La 538	Hf 681	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 920	Rn 1040
Fr 509	Ra 509	Ac 666															



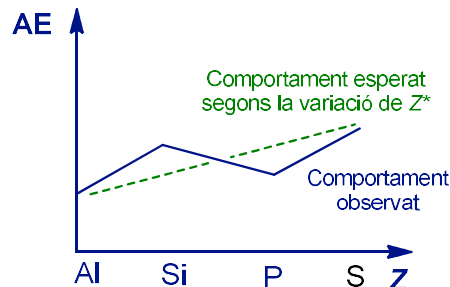
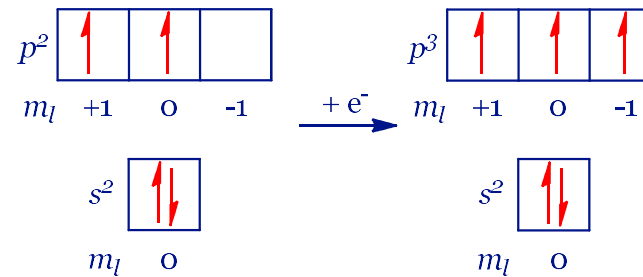
6.1.5 b) Com serà la variació de la primera energia de ionització entre el fòsfor ( $Z = 15$ ) i el sofre ( $Z = 16$ )? I entre el fluor ( $Z = 9$ ) i el clor ( $Z = 17$ )?

1																	18
H 1310																	He 2370
Li 519	Be 900																Ne 2080
Na 494	Mg 736																Ar 1520
1a energia de ionització (KJ/mol)																	
<div> <div>&lt; 400</div> <div>400 a 700</div> <div>700 a 1000</div> <div>1000 a 1500</div> <div>1500 a 2000</div> <div>&gt;2000</div> </div>																	
K 418	Ca 590	Sc 631	Ti 658	V 650	Cr 652	Mn 717	Fe 759	Co 758	Ni 757	Cu 745	Zn 906	Ga 577	Ge 762	As 966	Se 941	Br 1140	Kr 1350
Rb 402	Sr 548	Y 617	Zr 661	Nb 664	Mo 685	Tc 702	Ru 711	Rh 720	Pd 804	Ag 731	Cd 868	In 556	Sn 707	Sb 833	Te 870	I 1010	Xe 1170
Cs 376	Ba 502	La 538	Hf 681	Ta 761	W 770	Re 760	Os 840	Ir 880	Pt 870	Au 890	Hg 1007	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 920	Rn 1040
Fr 509	Ra 509	Ac 666															

Primera energia de ionització  
dels halògens



*Les dades necessàries les trobareu als apunts del capítol 2 de l'assignatura.*

$$\text{P} ([\text{Ne}]3s^23p^3) + 1 \text{ e}^- \rightarrow \text{P}^- ([\text{Ne}]3s^23p^4)$$


6.1.11. Compara la duresa de l'àtom de Na amb la del  $\text{Na}^+$ . Raona la resposta.

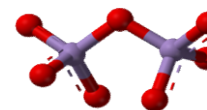
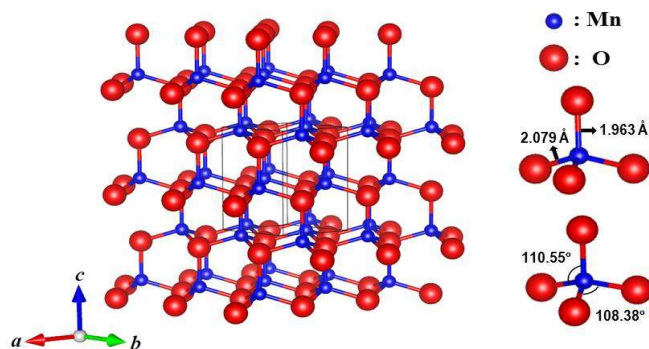
Dades en eV:  $EI_{1(\text{Na})} = 5.14$ ;  $EI_{2(\text{Na})} = 47.29$ ;  $AE_{1(\text{Na})} = 0.548$ .

$$\eta = \frac{1}{2}(EI_1 - AE_1)$$

$$\eta_{\text{Na}} = \frac{1}{2}(EI_{1(\text{Na})} - AE_{1(\text{Na})}) = \frac{1}{2}(5.14 - 0.548) = 2.30 \text{ eV}$$

$$\eta_{\text{Na}^+} = \frac{1}{2}(EI_{1(\text{Na}^+)} - AE_{1(\text{Na}^+)}) = \frac{1}{2}(EI_{2(\text{Na})} - (-EI_{1(\text{Na})})) = \frac{1}{2}(47.29 + 5.14) = 26.22 \text{ eV}$$

6.1.13. L'òxid de manganès (II) té un punt de fusió de 1785 °C, mentre que l'òxid de manganès (VII) és líquid a temperatura ambient. Explica aquesta diferència.



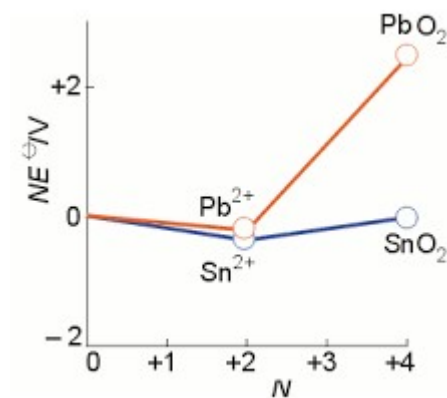


6.1.14. Per la reacció:  $\text{CH}_3\text{Hg}(\text{H}_2\text{O})^+ + \text{B}^- \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{HgB} + \text{H}_2\text{O}$ , s'han obtingut els següents valors d'equilibri:

$\text{B}^-$	$\text{Cl}^-$	$\text{I}^-$	$\text{OH}^-$	$\text{SCN}^-$	$\text{N}_3^-$	$\text{CN}^-$
$\log K_{\text{eq}}$	12.3	18.1	-6.3	6.7	1.3	5.0

Determina l'ordre de duresa de les bases.

6.1.17. Quan es crema estany a l'aire es forma òxid d'estany (IV). Si fem el mateix amb el plom, es forma òxid de plom (II). Tot i que es pot obtenir òxid d'estany (II), aquest s'oxida ràpidament a òxid d'estany (IV). Dóna una explicació raonada a aquesta observació experimental.



6.1.20. Dels següents elements, quins òxids es formaran? Quin caràcter àcid-base tindran? Na, S, C, Al, Ca, P, Pb.

grup	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII	VIII	IX	X	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
Període	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	
* Lantánidos			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
** Actínidos			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

17 Cl óxidos ácidos

24 Cr óxidos anfóteros

3 Li óxidos básicos

10 Ne No forman óxidos

grupo	1	2		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	IA	IIA		IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb		VIIIb		IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
Periodo	1	2																	
1	H																	He	
2	Li	Be												B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca												Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr												In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba												Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra												Pu	U	Np	Pm	Sm	Eu

17	Cl	óxidos ácidos
24	Cr	óxidos anfóteros
3	Li	óxidos básicos
10	Ne	No forman óxidos