# MOLÉCULAS Y FUERZAS INTERMOLECULARES

### SOLUCIONES A LAS ACTIVIDADES DE FINAL DE UNIDAD

#### Método RPECV e hibridación

l. Las nubes electrónicas que se dibujan en torno al átomo central en el método RPECV, ¿son una representación de sus orbitales atómicos? ¿Y moleculares?

No son orbitales, ni atómicos ni moleculares. Representan regiones de presencia electrónica predichos por métodos electrostáticos simples, no mediante el uso de la mecánica cuántica.

2. ¿Puede ser lineal una molécula tetratómica? ¿Se conoce algún caso?

Sí puede ser lineal, aunque no es frecuente. La mayoría de las moléculas tetratómicas en cadena muestran ángulos distintos de 180°; es decir, una conformación en zigzag. Un ejemplo de molécula lineal es el acetileno, C₂H₂, de estructura: H−C≡C−H.

3. Escribe fórmulas de Lewis aceptables para las especies OF<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>Cl, H<sub>2</sub>Cl<sup>+</sup> y CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>. Indica cuántas regiones de alta densidad electrónica existen en torno al átomo central.

4. Clasifica, por medio de la fórmula general AB<sub>n</sub>E<sub>m</sub>, las siguientes especies moleculares: *a*) H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>; *b*) H<sub>2</sub>O; *c*) PH<sub>3</sub>.

a) 
$$H_3O^+$$
:  $AB_3E$  ; b)  $H_2O$ :  $AB_2E_2$  ; c)  $PH_3$ :  $AB_3E$ 

5. Explica, de forma razonada, la validez de la siguiente afirmación: "La forma geométrica de una molécula coincide con la distribución espacial de las nubes electrónicas en torno al átomo central".

Es incorrecto. La forma geométrica coincide con la posición de los núcleos de los átomos que forman la molécula. Las nubes electrónicas condicionan la geometría, pero no son la geometría molecular.

6. ¿Por qué son lineales todas las moléculas diatómicas y no lo son todas las triatómicas?

Dos núcleos siempre están en línea. Tres núcleos pueden estarlo o no.

7. La molécula BF<sub>3</sub> es plana. Cuando el átomo central de boro se une a un ion fluoruro por medio de un enlace covalente dativo, se forma el ion molecular BF<sub>4</sub><sup>-</sup>. Muestra el proceso mediante fórmulas de Lewis y obtén la forma geométrica de dicho ion.

8. Indica la forma geométrica que predice el método RPECV para las moléculas: a) AlCl<sub>3</sub>; b) PCl<sub>3</sub>; c) BCl<sub>3</sub>; d) AsCl<sub>3</sub>.

c) BCl<sub>3</sub>: plana trigonal

d)  $PCl_3$ : pirámide trigonal

9. El ángulo del enlace O-O-O en el ozono vale 117°. Obtén su forma geométrica por el método RPECV. A partir de la repulsión entre nubes electrónicas de distinto tipo, razona por qué dicho ángulo es algo menor que 120°.

El ozono se representa según:

$$\begin{bmatrix} \vdots \ddot{\bigcirc} - \ddot{\bigcirc} = \ddot{\bigcirc} \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \ddot{\bigcirc} = \ddot{\bigcirc} - \ddot{\bigcirc} \vdots \end{bmatrix}$$

El átomo central tiene tres nubes electrónicas a su alrededor.

El ángulo de enlace debería ser de 120°:

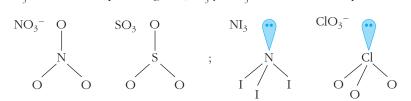


Sin embargo, el par de electrones solitarios ocupa un volumen mayor que los pares enlazados. La estructura se deforma y el ángulo de enlace se cierra:



10. Las siguientes especies presentan una forma geométrica similar tomadas en grupos de dos. Encuentra las parejas con geometría idéntica: *a*) NI<sub>3</sub>; *b*) NO<sub>3</sub><sup>-</sup>; *c*) ClO<sub>3</sub><sup>-</sup>; *d*) SO<sub>3</sub>.

 $NO_3^-$  y  $SO_3^-$  son de forma plana trigonal;  $NI_3^-$  y  $ClO_3^-$  tienen forma de pirámide trigonal:



11. El metanol es el alcohol que tiene la fórmula más simple, CH<sub>3</sub>OH. A partir de su estructura de Lewis, razona si los núcleos de carbono, oxígeno e hidrógeno (el que está unido al O) están en una misma línea recta ¿Qué átomo conviene tomar como central para aplicar el método RPECV?

La estructura de Lewis del metanol es:

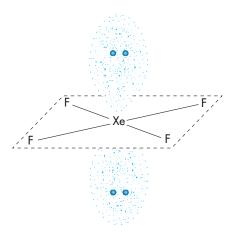
Si tomamos como átomo central el oxígeno, vemos que tiene cuatro regiones de densidad electrónica a su alrededor. Por tanto, la disposición electrónica en torno al oxígeno es tetraédrica, y el ángulo del enlace COH es, aproximadamente, de 109°. No están en línea.

- 12. El compuesto XeF<sub>4</sub> es uno de los pocos conocidos para los gases nobles.
  - a) Escribe la fórmula de Lewis de la molécula (el xenón queda hipervalente) y obtén la geometría molecular con el método RPECV.
  - b) Propón una hibridación adecuada para el átomo central.

a) XeF<sub>4</sub>

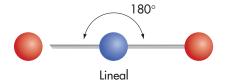


La molécula es plana rectangular:

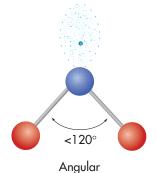


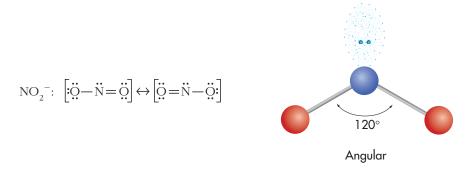
- b) La hibridación adecuada para el xenón es de tipo  $sp^3d^2$ .
- 13. Las especies moleculares  $\mathrm{NO_2}^+$ ,  $\mathrm{NO_2}$  y  $\mathrm{NO_2}^-$  exhiben fórmulas parecidas. Escribe estructuras de Lewis aceptables para ellas y haz una predicción de cómo variará la forma geométrica al pasar de una a otra.

$$NO_2^+$$
:  $\ddot{O} = N = \ddot{O}$ 



$$NO_2: \quad \left[ \vdots \ddot{\bigcirc} - \dot{N} = \ddot{\bigcirc} \right] \leftrightarrow \left[ \ddot{\bigcirc} = \dot{N} - \ddot{\bigcirc} \vdots \right]$$

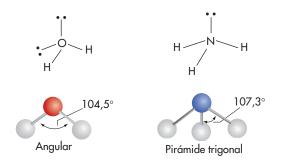




## 14. ¿Por qué la distribución espacial de cinco nubes electrónicas es diferente de los demás? ¿Por qué se habla de posiciones ecuatoriales y axiales solo en este caso y no se hace en el resto?

Es diferente, porque no existe una distribución óptima única. Además, las nubes electrónicas no quedan igual de separadas, ya que no existe un poliedro regular de cinco vértices. La estructura más frecuente es la de bipirámide triangular, en la cual tres posiciones son equivalentes (posiciones ecuatoriales) y diferentes de las otras dos (posiciones axiales). Esta situación no se da en los demás casos.

# 15. En las moléculas H<sub>2</sub>O y NH<sub>3</sub>, la orientación de las nubes electrónicas, de enlace y de no enlace, se dirige hacia los vértices de un tetraedro. Sin embargo, los ángulos de los enlaces son algo menores que los tetraédricos, tal y como muestra la figura:



#### ¿A qué pueden deberse las desviaciones observadas?

Los pares no enlazados, como son atraídos por un solo núcleo, se expanden en el espacio más que los pares enlazados. En consecuencia, los pares no enlazados repelen más eficazmente que los enlazados. De esta forma, se cierran los ángulos de enlace. Este efecto es mayor en el agua que en el amoníaco, porque el agua tiene 2 pares de electrones solitarios (no enlazados).

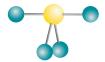
## 16. Indica qué hibridación se asocia a cada una de estas geometrías electrónicas: plana trigonal, tetraédrica y octaédrica.

Plana trigonal: hibridación sp² (tres nubes).

Tetraédrica: hibridación sp³ (cuatro nubes).

Octaédrica: hibridación  $sp^3d^2$  (seis nubes).

17. La molécula SF<sub>4</sub> tiene la poco frecuente forma de balancín o "sube y baja" de parque infantil, tal como muestra la figura:



¿Cómo justifica esta geometría el método RPECV? ¿Qué hibridación se propone para el átomo central de azufre en la TEV?

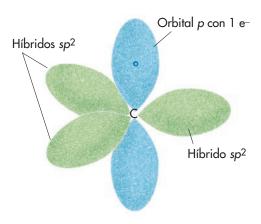
La fórmula de Lewis es:

El átomo central de azufre tiene cinco regiones electrónicas a su alrededor, que se distribuyen según una bipirámide triangular. El par solitario ocupa una posición ecuatorial para reducir las repulsiones electrónicas:

Se propone hibridación  $sp^3d$  para el átomo de azufre.

18. En muchos procesos atmosféricos desempeña un papel importante el radical libre metilo ·CH<sub>3</sub>, que se produce en la combustión incompleta de los hidrocarburos. Propón una hibridación para el átomo central de carbono sabiendo que los ángulos de enlace son de, aproximadamente, 120°. ¿En qué orbital se aloja el electrón solitario?

El átomo de carbono tiene hibridación  $sp^2$ , y el electrón desapareado se aloja en el orbital p atómico sin hibridar, que es perpendicular al plano formado por los híbridos  $sp^2$ .



19. Propón hibridaciones para el átomo central (hipervalente en algunos casos) de: a) IF<sub>4</sub><sup>-</sup>; b) XeF<sub>2</sub>; c) ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>; d) I<sub>3</sub><sup>-</sup>.

a) 
$$\text{IF}_{4}^{-}$$
:  $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$  Hibridación  $sp^{3}d^{2}$  (seis nubes)  $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$   $\vdots$ 

b) 
$$XeF_2$$
:  $\ddot{F} - \dot{X}e - \ddot{F}$ : Hibridación  $sp^3d$  (cinco nubes)

b) 
$$\operatorname{XeF}_2$$
:  $: \ddot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{X}}\dot{\mathbf{e}} \cdot - \ddot{\mathbf{F}}$ : Hibridación  $sp^3d$  (cinco nubes)

 $: \ddot{\mathbf{O}}$ :

 $: \ddot{\mathbf{O}} \cdot - \ddot{\mathbf{O}} \cdot - \ddot{\mathbf{O}} \cdot \ddot{$ 

d) 
$$I_3^-$$
: : $\ddot{I} - \ddot{I} - \ddot{I}$ : Hibridación  $sp^3d$  (cinco nubes)

## Propiedades de las moléculas

20. Clasifica, de forma razonada, las siguientes especies moleculares como diamagnéticas o paramagnéticas: a) NO; b)  $CCl_4$ ; c)  $O_2$ ; d)  $NH_3$ ; e) OH.

- a) NO: paramagnética; tiene un número impar de electrones.
- b) CCl<sub>4</sub>: diamagnética; comportamiento normal.
- c) O<sub>2</sub>: paramagnética; es un caso excepcional.
- d) NH<sub>3</sub>: diamagnética; comportamiento normal.
- e) •OH: paramagnética; es un radical con un número impar de electrones.

21. Indica cuáles de las moléculas siguientes contienen enlaces polares. ¿Son polares dichas moléculas?

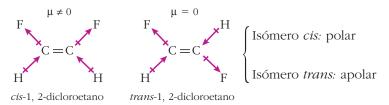
a) IBr; b) 
$$BeF_2$$
; c)  $PCl_2$ ; d)  $XeF_4$ ; e)  $CH_2O$ .

- a) IBr: enlace polar, molécula polar.
- b) BeF<sub>2</sub>: enlaces polares, molécula apolar.
- c) PCl<sub>s</sub>: enlaces polares, molécula apolar.
- d) XeF<sub>4</sub>: enlaces polares, molécula apolar.
- e) CH2O: enlaces polares, molécula polar.

**22**. Indica qué moléculas de la serie CH<sub>4</sub>, CH<sub>2</sub>Cl, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, CHCl<sub>3</sub>, CCl<sub>4</sub> son polares y cuáles apolares.

Polares: 
$$CH_3Cl$$
,  $CH_2Cl_2$  y  $CHCl_3$ 

## 23. Existen dos isómeros estructurales del compuesto 1,2-difluoroeteno. Utilizando las figuras 19 y 20, determina cuál de los isómeros es polar.



#### Fuerzas intermoleculares

## 24. ¿Cuál es la diferencia entre momento dipolar permanente, inducido e instantáneo?

El **momento dipolar permanente** se debe a una separación entre el centro de la carga positiva y el centro de la carga negativa de la molécula, y se mantiene en todo momento.

Si es **inducido**, se debe a un efecto transitorio causado por la presencia de una carga eléctrica externa o por un momento dipolar permanente externo que "induce" una separación de cargas.

El **momento dipolar instantáneo** se debe a una fluctuación espontánea, aleatoria y casi instantánea de la nube electrónica.

### Ordena las siguientes sustancias de menor a mayor punto de ebullición: N<sub>2</sub>, NO, O<sub>2</sub>.

p.e.  $(N_2)$  < p.e.  $(O_2)$  < p.e. (NO).  $N_2$  y  $O_2$  son apolares y se ordenan según su tamaño. El NO es ligeramente polar.

## 26. Busca en la bibliografía el punto de ebullición de las sustancias CH<sub>4</sub>, SiH<sub>4</sub>, GeH<sub>4</sub> y SnH<sub>4</sub>. Representa gráficamente los valores y justifica la tendencia general de la variación.

La representación gráfica se muestra en la figura 26 del texto, donde se observa un aumento continuo y suave del punto de ebullición. Se trata de moléculas apolares, donde solo existen fuerzas de dispersión que aumentan con el tamaño.

## 27. El monóxido de carbono y el gas nitrógeno tienen una masa molecular similar. ¿Cuál posee un punto de ebullición más alto?

El  $N_2$  es apolar y de CO es algo polar. Por tanto, p.e.  $(N_2)$  < p.e. (CO). Conviene destacar que la polaridad de la molécula de CO es pequeña para la diferencia de electronegatividad existente entre el C y el O. Además, el sentido está invertido con respecto a lo previsible; es decir:

$$C \longleftrightarrow O$$
  
 $\delta^- \qquad \delta^+$ 

28. Justifica la razón por la que el amoníaco, NH<sub>3</sub>, es soluble en agua, y, sin embargo, no lo es el metano, CH<sub>4</sub>.

El amoníaco es muy soluble en agua. Las moléculas de NH<sub>3</sub> son muy polares y forman enlaces de hidrógeno con el agua. Las moléculas de metano son apolares y no forman enlaces de hidrógeno.

29. El tetracloruro de carbono, CCl<sub>4</sub>, el agua, H<sub>2</sub>O, y el sulfóxido de dimetilo, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>SO, son tres disolventes muy utilizados. Los momentos dipolares de sus moléculas individuales valen 0 D, 1,86 D y 3,96 D, respectivamente. Escribe sus fórmulas de Lewis y razona cuáles son miscibles con cuáles.

CCl<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>O no son miscibles. El sulfóxido de dimetilo se mezcla bien con ambos; se trata de un excelente disolvente de amplio espectro, muy usado en la industria.

30. Los puntos de fusión de algunos cloruros del segundo período son:

Deduce qué tipo de sólido está presente en cada caso.

Los cloruros de litio y berilio, LiCl y BeCl<sub>2</sub>, tienen carácter de sólidos iónicos. Los cloruros de boro y carbono, BCl<sub>3</sub> y CCl<sub>4</sub>, son sólidos moleculares.

31. El CO<sub>2</sub> y el SiO<sub>2</sub> son dos sustancias de fórmula similar correspondientes a elementos del mismo grupo. ¿Por qué sus propiedades físicas son tan diferentes?

El  ${\rm CO_2}$  es una sustancia molecular que, en condiciones normales, es un gas. El  ${\rm SiO_2}$  no es una sustancia molecular; en condiciones normales, es un sólido o cristal covalente.

32. La acetona, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C=O, y el alcohol etílico, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, son dos importantes sustancias orgánicas. ¿Existen enlaces de hidrógeno entre las moléculas cuando cada sustancia está pura? ¿Y cuándo se mezclan?

En estado puro, el alcohol etílico forma enlaces de hidrógeno, pero la acetona, no, porque no tiene hidrógenos aptos. Cuando se mezclan, la acetona sí puede formar enlaces de hidrógeno:

$$\mathrm{CH_3-CH_2-\ddot{O}-H}{}^{-1}\mathrm{CH_3}\mathrm{CH_3}$$

#### General al enlace químico y fuerzas intermoleculares

33 ¿Cuál de los siguientes compuestos es de esperar que tenga el punto de ebullición más alto: el yoduro de potasio, el fluoruro de hidrógeno o el propano, C,H,? ¿Y el más bajo?

El orden creciente del punto de ebullición es:

p.e. 
$$(C_3H_8) < p.e.$$
 (HF)  $< p.e.$  (KI)

Las dos primeras sustancias, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> y HF, son moleculares. La última, KI, es un compuesto iónico; por eso, su punto de ebullición es muy superior.

En cuanto a las sustancias moleculares, el  $C_3H_8$  es apolar, mientras que el HF presenta enlaces de hidrógeno.

- 34 Entre las siguientes sustancias: *a*) bromuro de potasio, *b*) C (diamante), *c*) fluoruro de hidrógeno, *d*) butano y *e*) potasio, escoge las más representativas de:
  - a) Una sustancia de tipo cristal covalente de elevado punto de fusión.
  - b) Una sustancia con puntos de ebullición y de fusión muy bajos.
  - c) Una sustancia que no es conductora en estado sólido, pero sí en estado fundido.
  - d) Una sustancia con enlaces de hidrógeno.
  - e) Una sustancia muy conductora de la corriente eléctrica.
  - a) Cristal covalente: C (diamante).
  - b) Puntos de fusión y de ebullición muy bajos: butano.
  - c) Conductor en estado fundido, pero no en estado sólido: bromuro de potasio.
  - d) Sustancia con enlace de hidrógeno: HF.
  - e) Muy buen conductor de la corriente: potasio.