

PRÁCTICA DE QUÍMICA N°4

Alumno: De la Cruz Meza Angel Luis Kallpa

```
!pip install rdkit
```

Pregunta 1:

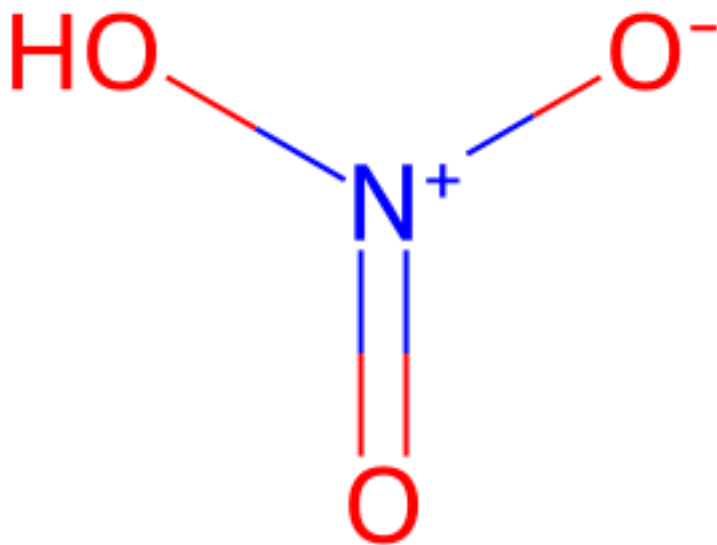
Escriba la estructura de Lewis para el ácido nítrico (HNO₃), donde los tres átomos de O están enlazados al átomo central de N y el átomo de H se enlaza con uno de los átomos de O.

```
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw

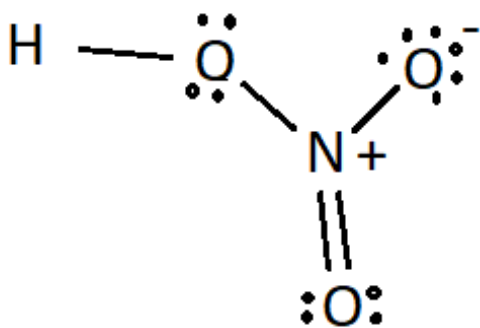
mol = Chem.MolFromSmiles('[N+](=O)([O-])O[H]')

print("Compuesto quimico: NH03")
Draw.MolToImage(mol)

Compuesto quimico: NH03
```



Representación de Lewis:



Pregunta 2:

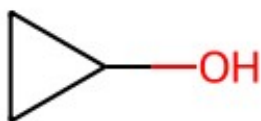
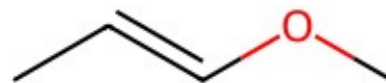
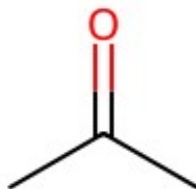
Indique las 4 estructuras isoméricas para el compuesto C₃H₆O empleando la representación de Lewis.

```
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw

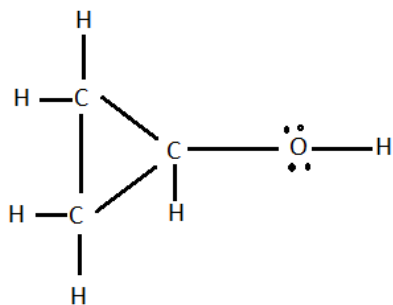
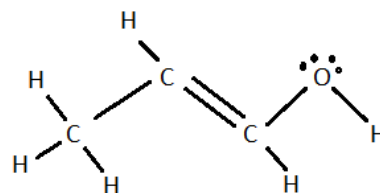
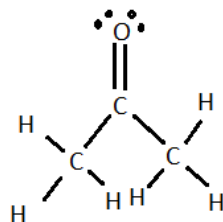
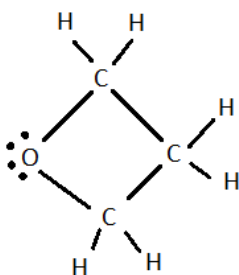
formulas = ['C1COC1', 'CC(C)=O', 'C(=CC)OC', 'C1C(C1)O[H]']
graficos = []

print("Compuesto quimico: C3H6O")
for i in formulas:
    mol = Chem.MolFromSmiles(i)
    graficos.append(mol)
Draw.MolsToGridImage(graficos)

Compuesto quimico: C3H6O
```



Representaciones de Lewis:



Pregunta 3:

Indique la hibridación en los carbonos señalados con flechas:

```

enlaces = ["a","b","c","d","e","f1","f2","g"]
numero_enlaces = [4,4,3,4,3,2,2,3]
print("RESPUESTA:")
print("Hibridacion:")
for i in range(8):
    print(f"Elemento ({enlaces[i]}): sp{numero_enlaces[i]-1}")

```

```

RESPUESTA:
Hibridacion:
Elemento (a): sp3
Elemento (b): sp3
Elemento (c): sp2
Elemento (d): sp3
Elemento (e): sp2
Elemento (f1): sp1
Elemento (f2): sp1
Elemento (g): sp2

```

Pregunta 4:

En la estructura anterior indique cual es el enlace simple más corto de los 4 enlaces señalados con diferentes colores. Justifique empleando el carácter "s".

```

a = ['sp3', 'sp3']
b = ['sp2', 'sp3']
c = ['sp3', 'sp2']
d = ['sp1', 'sp3']
letras = [a,b,c,d]
caracter_s = [0,0,0,0]

for i in range(4):
    for j in range(2):
        if letras[i][j] == 'sp3':
            caracter_s[i] += 25
        elif letras[i][j] == 'sp2':
            caracter_s[i] += 33.33
        else:
            caracter_s[i] += 50

def mayor(caracter_s):
    max = caracter_s[0];
    for x in caracter_s:
        if x >= max:
            max = x
    return max

print("RESPUESTA:")
print(f"Por tener mayor porcentaje de caracter s el enlace (4) con {mayor(caracter_s)}% de caracter s es el enlace simple mas corto")

```

RESPUESTA:

Por tener mayor porcentaje de carácter s el enlace (4) con 75% de carácter s es el enlace simple mas corto

Pregunta 5:

El enlace simple y doble entre nitrógeno y oxígeno tiene una longitud de 136 y 115 pm, respectivamente ¿Por qué la molécula NO₂ tiene una longitud de enlace de 122 pm? Justifique su respuesta empleando estructuras de Lewis.

RESPUESTA:

Debido a que NO₂ presenta estructuras resonantes sus enlaces tienen una longitud media entre 136pm y 115pm.

