

5.3 ENLACES: IÓNICO, COVALENTE Y METÁLICO. (22 Problemas)

1.- Escribir el ciclo de Born-Haber para el sulfuro sódico.

2.- Calcular la afinidad electrónica del cloro, en Kcal / Mol a partir de los siguientes datos:

- Calor de sublimación del calcio = 193 KJ/Mol
- Energías de ionización 1^a y 2^a del Ca: 611 y 1187 KJ/Mol
- Calor de formación y energía de red del cloruro cálcico = 794 KJ/Mol y 540 Kcal/Mol, respectivamente.
- Calor disociación cloro = 54 Kcal / Mol

3.- Calcular la energía reticular del KCl y el calor de formación del mismo, ambos datos en Kcal / Mol, a partir de los siguientes datos:

- Afinidad electrónica del cloro = 3,80 eV
- Energía de disociación de la molécula de Cl₂ = 54 Kcal/Mol
- Calor de sublimación del K = 22 Kcal / Mol
- Energía de atracción de los iones Cl⁻ y K⁺ a la distancia de equilibrio = 110 Kcal / Mol
- Constante de Madelung para la red del NaCl = 1,748
- Energía de ionización del K = 100'1 Kcal / Mol

4.- Calcular la energía de red del cloruro sódico, sabiendo que la distancia de los iones en la red, obtenida de datos de difracción de rayos X, es 2,81Å. El valor de la constante de Madelung para la estructura del NaCl es 1,74.

5.- Interpretar: El LiF y el MgO son isoestructurales y casi isodimensionales, pero un cristal de MgO es mucho más duro que otro de LiF.

6.- Calcular la afinidad electrónica del ion óxido a partir de los siguientes datos. El calor de sublimación del Ca es de 42 Kcal/mol; la energía de disociación del oxígeno es de 108 Kcal/mol y los potenciales de la 1^a y 2^a ionización del Ca son 6,11 y 11,87 eV respectivamente. El calor de formación y la energía cristalina del óxido de calcio son respectivamente: 152 y 835 Kcal/Mol (¿Están expresados estos datos en valores absolutos?)

7.- Cuantos átomos hay por unidad cristalina en un empaquetamiento:

- Cúbico simple de átomos.
- Cúbico centrado en el cuerpo.
- Cúbico centrado en las caras
- Hexagonal compacto

Si tenemos un sólido empaquetado en forma cúbica centrado en las caras donde los átomos de los vértices son del tipo A y los de las caras son del tipo B. ¿Cuál será la fórmula simplificada del compuesto, expresada según A y B?

8.-La estructura del NaCl se puede considerar derivada de un empaquetamiento cúbico compacto de los aniones, con los iones sodio ocupando cierta clase de intersticios. Por medio de difracción de rayos X, se ha determinado el valor de 6 Å para la arista de la celda unidad. El valor de la densidad del cloruro sódico es 2,71 g/cc.

- Teniendo en cuenta el valor de los radios de los iones sodio y cloro 0,95 y 1,81 respectivamente, dar una descripción completa de la estructura mencionada.
- Determinar la mínima distancia entre un ion cloro y un ion sodio.
- ¿Cuántos iones de cada clase existen en la celda unidad?
- Calcular el valor correspondiente al número de Avogadro.

5.3 ENLACES: IÓNICO, COVALENTE Y METÁLICO. (22 Problemas)

9.- Calcular la densidad del CsCl sabiendo que los radios de los iones Cl^- y Cs^+ son respectivamente 2,06 y 1,51 Å.

10.- El momento dipolar calculado para el HF, supuesto que el enlace fuese iónico en un 100 por 100, es de 4,4 Debyes. El momento dipolar observado para el HF es 1,98 Debyes. Calcular el porcentaje de enlace iónico para el HF, la carga neta parcial localizada en cada átomo, y la distancia internuclear en el HF.

11.- Ordenar de mayor a menor polaridad, los enlaces entre los átomos dados: H-F; H-N; I-I; H-B; H-C; F-F.

12.- dadas las siguientes moléculas: H_2S , PCl_3 ; BrF_3 ; CH_3OH ; XeF_4 , predecir.

- La hibridación de orbitales atómicos del átomo central
- La forma y ángulos de enlace de la molécula
- Si serán polares dichas moléculas.
- Qué tipo de fuerzas intermoleculares existirán en los estados condensados de esas sustancias.
- Cuál de ellas supones que debería tener mayores puntos de fusión y ebullición. Justifica la respuesta.

13.- Explicar teniendo en cuenta la configuración electrónica de los átomos, por qué el SF_4 ha sido sintetizado, mientras que el OF_4 nunca ha sido observado. Predecir, de forma razonada, cuáles podrían ser los ángulos de enlace, la forma de la molécula de SF_4 según la teoría del enlace de valencia e indicar si es o no polar la molécula.

14.- Razonar si es correcta o no la siguiente afirmación:
La molécula SF_4 tiene forma de tetraedro regular y la ClO_2 es lineal.

15.- Ordenar, explicando el criterio seguido para establecer el orden, las especies que se indican a continuación, según orden creciente de:

- Punto de ebullición: CO_2 , HF, SO_2 .
- Orden de enlace: CO, Li₂, O_2 .
- Paramagnetismo: O_2 , Na, Co, Fe. (Nº atómico: O=8, Na=11, Co=27, Fe=26)

16.- Indicar según la Teoría de enlace de valencia qué tipo de hibridación adopta el átomo central en cada una de las siguientes moléculas, así como geometría molecular y electrónica y la polaridad: sulfuro de hidrógeno; tetrafluoruro de selenio, hexafluoruro de azufre; eteno, trifloruro de cloro.

17.- Explicar el hecho de que el momento dipolar de la molécula BF_3 sea cero mientras que el del PF_3 sea distinto de cero.

18.- Deducir la configuración electrónica según la Teoría de Orbitales Moleculares, de las siguientes especies químicas indicando de cada par de sustancias, cuál es la que se espera que tenga mayor orden de enlace, mayor energía de enlace y si son diamagnéticas o paramagnéticas:

- N_2 ó N_2^{2-}
- F_2 ó F_2^{2-}
- O_2 ó O_2^{2-}
- C_2 ó C_2^{2-}

19.- Escribir las estructuras de Lewis y las formas resonantes del ion nitrato y del ion carbonato.

5.3 ENLACES: IÓNICO, COVALENTE Y METÁLICO. (22 Problemas)

20.- Explicar:

- a) Por qué el punto de ebullición del ClF es mayor que el de F_2
- b) Por qué en condiciones normales el flúor y el cloro son gases, el bromo es líquido y el yodo es sólido
- c) Por qué el diamante tiene un punto de fusión superior a los 3500°C y el yodo sólo $113,4^\circ\text{C}$, siendo ambas sustancias covalentes.
- d) Por qué el punto de fusión del amoníaco es más elevado que el de la fosfina, siendo la masa molecular de ésta mayor.

21.- La densidad de un metal desconocido es $10,2 \text{ g/cc}$ a 25°C . Se sabe además que cristaliza en un retículo cúbico centrado en el cuerpo y que además la longitud de la arista de la celda unidad es $3,147 \text{ \AA}$. Determinar el peso atómico e identificar el metal.

22.- La celda unidad de la plata metálica es cúbica compacta. La arista del cubo es $4,086 \text{ \AA}$. Calcular:

- a) El radio de un átomo de Ag.
- b) El volumen de un átomo de Ag en cc, suponiéndolo de forma esférica.
- c) El porcentaje de una celda unitaria ocupado por átomos de plata.