

## ESTRUCTURA DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

Cynthia Fernandez  
[cyntuche@hotmail.com](mailto:cyntuche@hotmail.com)

### I. Parte Computacional

#### **Objetivos:**

- Calcular energías de ionización para átomos del segundo período
- Calcular y analizar la energía de uniones químicas y la curva de energía potencial para distintas moléculas
- Visualizar geometría y orbitales moleculares

#### **A. Átomos. Energías de ionización.**

Elemento	Átomo			Ion			E. I. calc.	E. I. tab.*
	Multi- plicidad	Carga	Energía	Multi- plicidad	Carga	Energía		
Li	2	0	-4631,97	1	+1	-4509,97	122,00	124,27
Be	1	0	-9090,62	2	+1	-8904,34	186,28	214,86
B	2	0	-15304,81	1	+1	-15120,71	184,10	191,26
C	3	0	-23519,73	2	+1	-23269,50	250,23	259,53
N	4	0	-33951,65	3	+1	-33629,03	322,62	335,00
O	3	0	-46682,73	2	+1	-46294,44	388,29	313,88
F	2	0	-62026,18	1	+1	-61573,53	452,65	401,58

Las energías están expresadas en kcal / mol.

\* Moeller, T.; "Inorganic Chemistry", Wiley, New York, 1982.

#### Análisis de la tendencia observada:

"La primera energía de ionización es la energía mínima necesaria para quitar un electrón de un átomo en estado gaseoso, en sus estado fundamental" <sup>1</sup>. Entendemos entonces que, a mayor energía de ionización, mayor es la dificultad para quitar un electrón.

Salvo por dos excepciones<sup>2</sup>, la primera energía de ionización aumenta a medida que aumenta el número atómico en un mismo período. Esto se debe a que, al desplazarse "hacia la derecha" en la tabla periódica, disminuye el radio atómico y en consecuencia aumenta la carga nuclear efectiva. Los núcleos de los átomos de mayor número atómico atraen con mayor intensidad a los electrones que los rodean puesto que éstos se encuentran más cerca de aquellos.

---

<sup>1</sup> Chang, R; "Química", Mc Graw-Hill Interamericana Editores, S.A. de C.V., Colombia, 2002

<sup>2</sup> Cabe aclarar que para analizar el caso del Oxígeno tuvimos en cuenta el dato obtenido de la tabla ya que la energía de ionización calculada por nosotros no coincide, por motivos que desconocemos, con los esperado.

La primera energía de ionización del Litio es muy baja. Esto se debe a que es un metal alcalino que, al perder un electrón, adquiere la configuración electrónica del gas noble anterior (Helio) y sabemos que este último grupo de elementos se caracteriza por la estabilidad de los átomos que lo conforman. Luego, al pasar al Berilio, la primera energía de ionización aumenta, tal como lo habíamos adelantado en los párrafos anteriores. Pero al llegar al Boro se produce la primera excepción a la tendencia: la primera energía de ionización disminuye. De todos modos podemos explicar lo que ocurre: la configuración electrónica externa del Berilio es  $2s^2$  y la del Boro es  $2s^2 2p^1$ . Quitarle un electrón al Boro es más fácil puesto que tiene un solo electrón en el orbital p a diferencia del Berilio que tiene el orbital s lleno. Luego, al pasar al Carbono y al Nitrógeno, observamos que se respeta la tendencia. Pero al llegar al Oxígeno nos encontramos con la segunda irregularidad que puede ser entendida nuevamente si tenemos en cuenta la configuración electrónica. La C.E.E. del Nitrógeno es  $2s^2 2p^3$  y la del Oxígeno es  $2s^2 2p^4$ . Los electrones del N se encuentran en tres orbitales p diferentes de acuerdo con la regla de Hund, conformando una capa semillena, relativamente estable. En cambio, el O posee un electrón adicional que debe estar apareado con uno de los tres electrones que antes estaban solos en los orbitales p. La proximidad entre estos dos electrones en el mismo orbital produce cierta repulsión, facilitando así la ionización del átomo. Por último, al pasar al Flúor, observamos que la 1<sup>era</sup> energía de ionización aumenta.

## B. Moléculas

### B.1. Energías de unión

Sistema	$2 E_{\text{át}}$	$E_{\text{moléc}}$	$E_{\text{unión calc.}}$	$E_{\text{unión tab.}}^*$
N <sub>2</sub>	-9335,46	-9550,3068847	-214,85	-225,83
O <sub>2</sub> Triplete	-14579,16	-14726,02	-146,86	
O <sub>2</sub> Singlete	-14579,16	-14697,57	-118,41	-119,05
F <sub>2</sub>	-22244,23	-22304,48	-60,25	-37,93

Las energías están expresadas en kcal/mol

\* Lide, David R.; "Handbook of Chemistry And Physics", 78<sup>th</sup> Edition.

#### Análisis de la tendencia observada:

Como observamos en la tabla de datos, la energía de unión (en valor absoluto) es mayor para el N<sub>2</sub>, luego para el O<sub>2</sub> triplete, el O<sub>2</sub> singlete y por último en orden viene el F<sub>2</sub>. La diferencia de energía entre las moléculas de nitrógeno, oxígeno y flúor está directamente relacionada con el tipo de unión entre los átomos que componen cada uno de estos compuestos. Los átomos de N se unen mediante un triple enlace, los de O mediante uno doble y finalmente los de F se unen por medio de un simple enlace. Visto de otra manera, el orden de enlace del N<sub>2</sub> es mayor que el del O<sub>2</sub> que a su vez es mayor que el de F<sub>2</sub>.

Por otro lado observamos que hay una diferencia entre el oxígeno triplete y el singlete. La energía de unión del O<sub>2</sub> triplete es mayor que la del O<sub>2</sub> singlete porque posee dos electrones desapareados en los últimos orbitales mientras que el O<sub>2</sub> singlete posee esos dos electrones compartiendo un orbital. Esto hace al O<sub>2</sub> singlete energéticamente superior y por ende menos estable.

Sistema	$E_{\text{monómero}}$	$E_{\text{dímero}}$	$E_{\text{unión calc.}}$	$E_{\text{unión tab.}}$
H <sub>2</sub> O*				
Citosina	-35082,99	-----	-----	-----
Guanina	-47543,73	-----	-----	-----

Cit - Gua	-----	-82638,30	-11,58	-----
-----------	-------	-----------	--------	-------

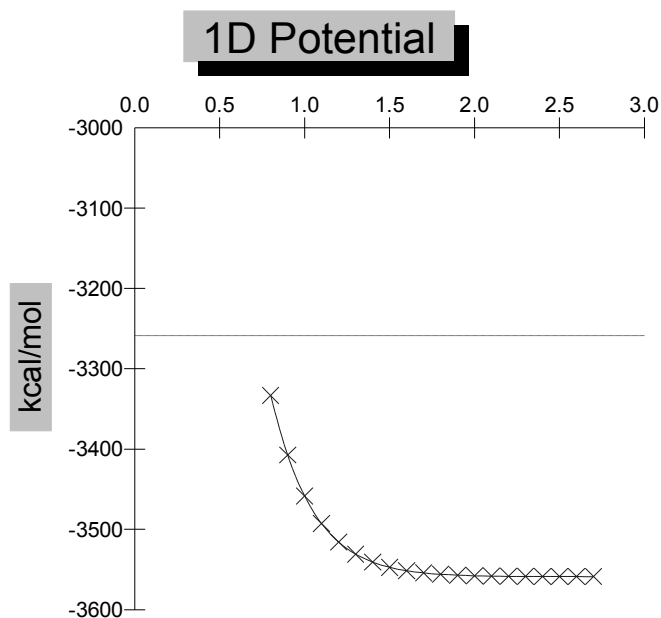
\* No fue realizado en clase.

Análisis de la magnitud de las energías de unión:

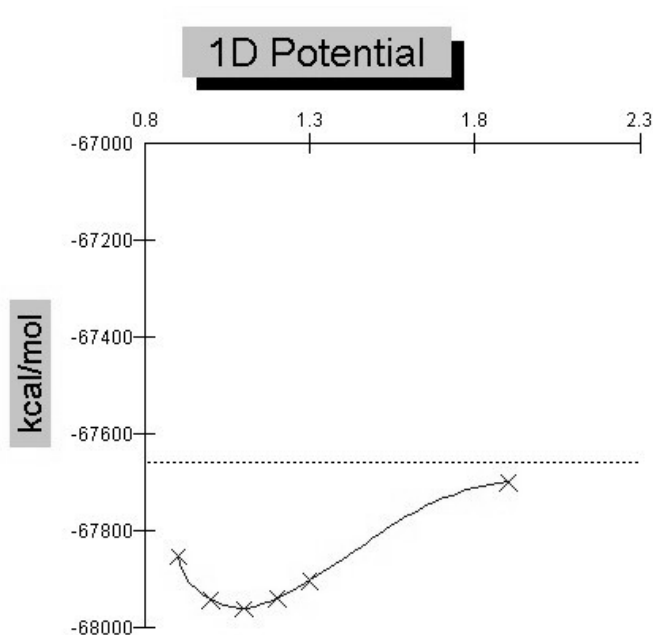
Sabemos que el tipo de unión entre la citosina y la guanina es un enlace puente hidrógeno. Esta clase de unión es un tipo especial de interacción dipolo – dipolo pero su energía promedio es demasiado grande para una interacción de ese tipo. Es por ello que esta unión tiene una gran influencia en la estructura de muchos compuestos y en algunas propiedades como por ejemplo el punto de ebullición. Sin embargo, comparando con los datos obtenidos para las uniones moleculares, concluimos en que el nivel energético de esta clase de interacción es menor que el de un enlace covalente.

**B.2. Curva de energía potencial**

*Gráfico de energía potencial en función de la distancia para una molécula de He<sub>2</sub>*



*Gráfico de energía potencial en función de la distancia para una molécula de N<sub>2</sub>*



Analizando el gráfico realizado para la molécula de  $N_2$ , observamos que, a medida que la distancia entre los átomos disminuye, la energía disminuye, es decir, aumenta la fuerza atractiva. Esto sucede hasta un punto en el que la distancia entre los átomos es la ideal para la formación de la molécula. Luego, si se acercan más, la energía aumenta pues comienza a prevalecer la repulsión electrostática.

En cambio, en el gráfico de la molécula de  $He_2$ , observamos que en todo momento gobierna la fuerza repulsiva. La energía es alta para todas las distancias, aumentando a medida que se acercan los átomos. Esto se debe a que la molécula de  $He_2$  no existe en la naturaleza ya que el He, por ser un gas noble y como tal muy estable, se presenta como un átomo libre.

### B.3. Geometría molecular.

Sistema	Distancias calculadas	Distancias tabuladas*	Ángulos calculados	Ángulos TRePEV	Ángulos Tabulados*
$NH_3$	1,010	1,012	109,471	< 109,5	106
$CH_4$	1,090	1,1199	109,471	109,5	109
$PCl_5$	1,971	2,020	90,000	90	90
	2,075	2,124	120,001	120	120
	4,150	2,040	180,000	180	180
$SF_6$	1,540	1,561	89,999	90	90
	2,178		90,000	90	90
$CO_3^{2-}$	1,297	1.56	120,000	120	119°58'

Las distancias están expresadas en Å y los ángulos en °C.

\* Lide, David R.; "Handbook of Chemistry And Physics", 78<sup>th</sup> Edition.

### C. Conclusiones

A partir de los datos obtenidos, concluimos que la Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia (TRePEV) predice con gran exactitud los ángulos formados por los átomos en todas las moléculas estudiadas (incluso en algunos casos con mayor exactitud que las tablas). Además, el conocimiento de los átomos que componen cada molécula, los ángulos

formados por éstos y los pares de electrones libres nos permiten conocer la geometría que presenta cada compuesto en el espacio, siendo éstas:

NH<sub>3</sub>: piramidal

CH<sub>4</sub>: tetraédrica

PCl<sub>5</sub>: bipiramidal trigonal

SF<sub>6</sub>: octaédrica

CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>: plana triangular.

Por último, observamos que las distancias de enlace calculadas se aproximan bastante a las tabuladas.

## II. Parte experimental

### A. Átomos. Espectros de emisión a la llama.

#### Objetivos:

- Visualizar los espectros de emisión de diferentes átomos

#### Función de la llama:

- Evaporar el agua de la solución
- Disociar las sales
- Atomizar los iones
- Excitar a los átomos

Solución	Color de la(s) línea(s) más intensa(s)	Longitud de onda de la(s) transición(es) $\lambda$ (nm.)*	Energía de la(s) transición(es) (KJ/mol)
CuCl <sub>2</sub>	Azul, verde, amarillo, rojo	450, 520, 590, 650	$4,42 \cdot 10^{-19}$ , $3,82 \cdot 10^{-19}$ , $3,37 \cdot 10^{-19}$ , $3,06 \cdot 10^{-19}$
LiCl	Rojo	670	$2,97 \cdot 10^{-19}$
CuSO <sub>4</sub>	Azul, verde, Amarillo, rojo	450, 520, 590, 650	$4,42 \cdot 10^{-19}$ , $3,82 \cdot 10^{-19}$ , $3,37 \cdot 10^{-19}$ , $3,06 \cdot 10^{-19}$
KCl	Violeta	410	$4,85 \cdot 10^{-19}$
KNO <sub>3</sub>	Violeta	410	$4,85 \cdot 10^{-19}$
SrCl <sub>2</sub>	Rojo	670	$2,97 \cdot 10^{-19}$
CaCl <sub>2</sub>	Verde, rojo	490, 645	$4,06 \cdot 10^{-19}$ , $3,08 \cdot 10^{-19}$
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Amarillo	588	$3,38 \cdot 10^{-19}$
NaCl	Amarillo	588	$3,38 \cdot 10^{-19}$
Pb(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Azul claro	460	$4,42 \cdot 10^{-19}$

\* Lange's handbook of chemistry, Revised Tenth Edition

Chang, R; "Química", Mc Graw-Hill Interamericana Editores, S.A. de C.V., Colombia, 2002

### B. Moléculas

#### Objetivos:

- Determinar los espectros de absorción de algunas soluciones en el intervalo de 340 a 570 nm.
- Analizar la variación de la absorbancia en función de la concentración (verificar la Ley de Lambert – Beer)

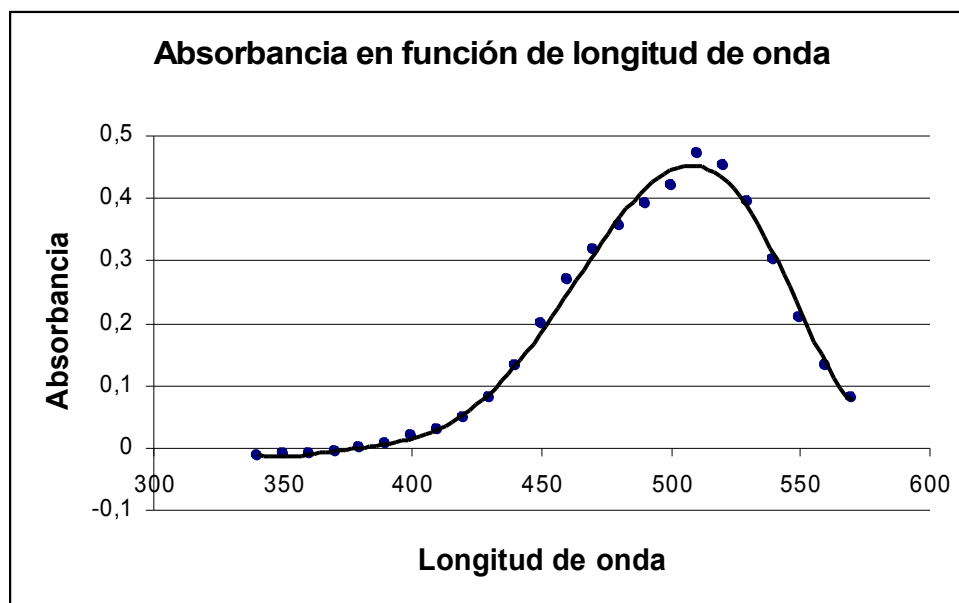
#### B.1. Determinación de espectros de absorción

Solución empleada: CoSO<sub>4</sub>

Concentración (M): 0,1

l (cm.): 1

$\lambda$ (nm.)	A	%T	$\lambda$ (nm.)	A	%T	$\lambda$ (nm.)	A	%T
340	-0,012	102,80	420	0,047	89,74	500	0,421	37,93
350	-0,011	102,57	430	0,081	82,99	510	0,471	33,81
360	-0,011	102,57	440	0,132	73,79	520	0,453	35,24
370	-0,006	101,39	450	0,200	63,10	530	0,394	40,36
380	0,001	99,77	460	0,269	53,83	540	0,300	50,12
390	0,007	98,40	470	0,316	48,31	550	0,207	62,09
400	0,018	95,94	480	0,357	43,95	560	0,132	73,79
410	0,028	93,76	490	0,392	40,55	570	0,079	83,37



## B.2. Variación de la absorbancia con la concentración.

### B.2.a. Verificación de la Ley de Lambert – Beer

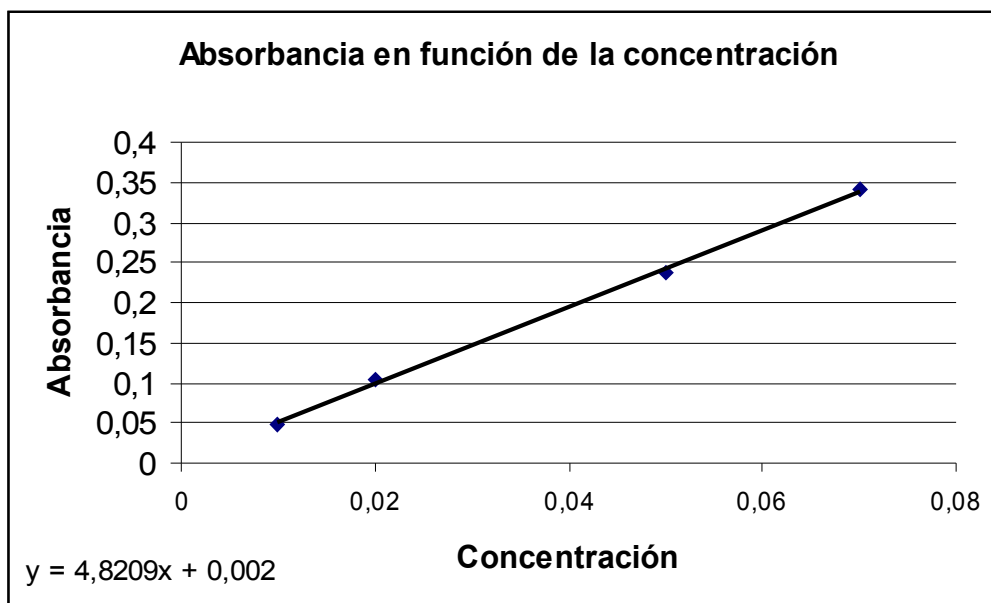
Solución:  $\text{CoSO}_4$

$\lambda$  del máximo (nm.): 510

$l$  (cm.): 1

Concentración (M)	A
$1 \cdot 10^{-2}$	0,048
$2 \cdot 10^{-2}$	0,103
$5 \cdot 10^{-2}$	0,238
$7 \cdot 10^{-2}$	0,342

$$\epsilon_{\lambda} = 4,8209 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$$



### B.2.b. Determinación de la concentración de una muestra de concentración incógnita

Dilución empleada: solución de  $\text{CoSO}_4$

Absorbancia medida: 0,152

Concentración determinada:  $3,15 \cdot 10^{-2} \text{ M}$

### C. Conclusiones

En la parte de átomos pudimos comprobar que aquellos absorben energía (en este caso calórica) para luego liberarla producto de su desexcitación. Además, verificamos que los átomos de distintos elementos emiten también en diferentes longitudes de onda que le son características y que se manifestaron en este caso en el color tomado por la llama y en las líneas que observamos con el espectrofotómetro. Por último, observamos mediante este experimento que las especies que emiten son los cationes metálicos por lo que concluimos que es más fácil excitar a estos últimos que a los aniones.

En la parte de moléculas comenzamos analizando el espectro de absorbancia del  $\text{CoSO}_4$ . Observamos que al ir aumentando la longitud de onda, la absorbancia fue aumentando hasta llegar a un máximo y luego caer nuevamente.

En una segunda parte, analizamos la absorbancia en función de la concentración, dejando una longitud de onda fija (sacada del máximo del gráfico de la parte anterior) y verificamos la Ley de Lambert – Beer: efectivamente, a mayor concentración, mayor absorbancia (pues son magnitudes directamente proporcionales)

Para finalizar, logramos calcular exitosamente la concentración de una muestra de concentración desconocida interpolando en el gráfico de  $A = f(C)$ .

#### Apéndice:

*Cálculo de energía de la transición (emisión)*

$$E = h \cdot c / \lambda$$

*Cálculo del porcentaje de transmitancia*

$$A = -\log(T)$$

$$-A = \log(T)$$

$$T = 10^{-A}$$
$$\%T = (10^{-A}) \cdot 100$$

*Cálculo de la concentración de la muestra incógnita*

$$A(\lambda) = \varepsilon(\lambda) \cdot l \cdot C$$
$$C = A(\lambda) / \varepsilon(\lambda) \cdot l$$
$$C = 0,152 / 4,8209 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot 1 \text{ cm}$$
$$C = 3,15 \cdot 10^{-2}$$