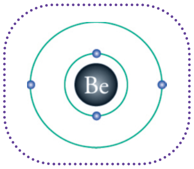
RESOLUCIÓN DE EJERCICIOS

CAPÍTULO 1

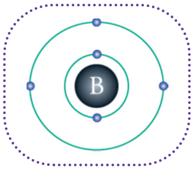
Resolución del ejercicio 1

Usaremos la representación que presentamos a lo largo del capítulo.

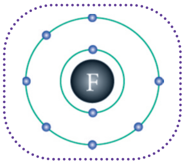
Helio, tiene número atómico 2, por lo tanto, tiene dos protones en su núcleo que le confiere dos cargas positivas que se compensan con dos electrones en la primera carga que se completa, por lo tanto no participan en ningún enlace. Este elemento es el gas noble más liviano.



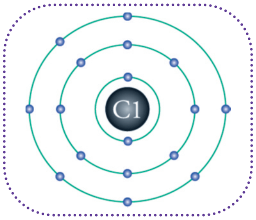
Berilio, su número atómico es 4 por lo tanto las cuatro cargas positivas que le confiere al núcleo los 4 protones se compensan con 4 electrones, dos en la primera capa interna y 2 en la capa externa. Los dos electrones de la capa interna no pueden participar de enlaces.



Boro, tiene un electrón más que el berilio debido a que su número atómico es 5 y lo acomoda en su capa externa. La capa interna tiene dos electrones que no pueden forman parte de ningún enlace.



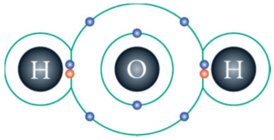
Flúor, como su número atómico es 9, acomoda 2 electrones en la capa interna y 7 en la externa. Es considerado el átomo más electronegativo. Nuevamente los dos electrones de la capa interna son los que no participan de ningún enlace.



Cloro, su número atómico es 17 por lo tanto luego de ocupar sus dos capas internas con 2 y luego 8 electrones, los 7 restantes se acomodan en una tercera capa externa. Esto explica el porqué el cloro tiene propiedades química muy parecidas a las del flúor. Los diez electrones de las capas internas son los que no pueden establecer enlaces.

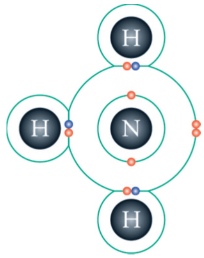
Resolución del ejercicio 2

Agua (H_2O):



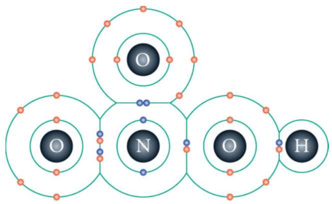
$H-O-H$

Amoníaco (NH_3):



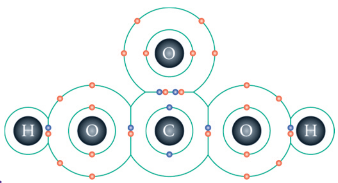
$H-\overset{\overset{H}{|}}{N}-H$

Ácido nítrico (HNO_3):



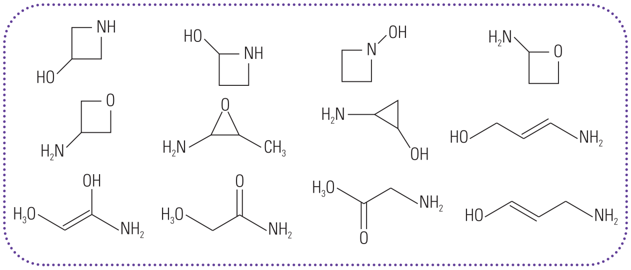
$O=\overset{\overset{O}{\uparrow}}{N}-O-H$

Ácido carbónico (H_2CO_3):



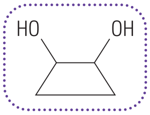
$H-O-\overset{\overset{O}{\|}}{C}-O-H$

Resolución del ejercicio 3



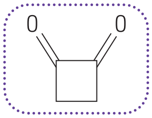
Resolución del ejercicio 4

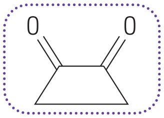
Una posible secuencia de pasos es la siguiente:



1° paso: unimos los carbonos

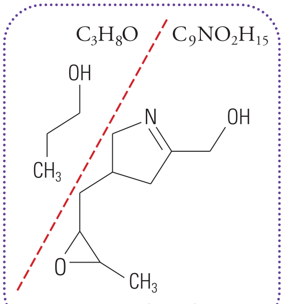
2° paso: agregamos un enlace a cada oxígeno al eliminar los hidrógenos y convertir los dos grupos funcionales alcohol en dos grupos carbonilos



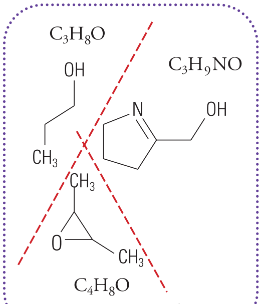


Resolución del ejercicio 5

Una posible secuencia de cortes es la siguiente:

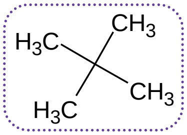


Cortamos dos enlaces



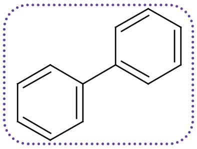
Cortamos un enlaces

Resolución del ejercicio 6



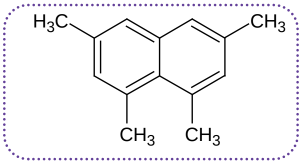
Molécula 1: se trata de una molécula de 5 carbonos. Cada carbono de los extremos se satura con 3 hidrógenos, por lo tanto, como hay 4 tenemos 12 hidrógenos, por lo tanto, C_5H_{12}

Molécula 2: cada estructura de benceno aporta 6 carbonos, cada una de ellas tiene un hidrógeno menos para poder establecer un enlace con su vecina, por lo tanto la cantidad de hidrógenos será:
atomicidad de H = (2 * 6) – 2 = 10
Así la fórmula molecular es $C_{12}H_{10}$



Molécula 3: el núcleo de dos bencenos que comparten un enlace[12] consta de 10 carbonos. Sólo 8 pueden estar unidos a hidrógenos, pero 4 están unidos a metilos, que tienen 3 hidrógenos, por lo tanto la cantidad de hidrógenos es:
Atomicidad de H = Hidrógenos del núcleo + Hidrógenos de los metilos
Atomicidad de H = 8 – 4 + (4 * 3)
Atomicidad de H = 4 + 12
Atomicidad de H = 16

La cantidad de carbonos es la del núcleo (10) más los cuatro metilenos, o sea que la atomicidad del carbono es 14, la fórmula molecular es $C_{14}H_{16}$

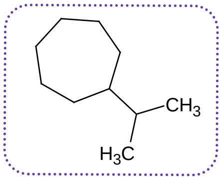


Molécula 4: como se trata de un ciclo saturado, cada miembro es un metileno, es decir un carbono unido a 2 hidrógenos (-CH_2-), uno de ellos se une a una cadena de tres carbonos ramificada, no existe otra forma de conectar un ciclo de siete carbonos a una cadena de tres miembros y se que produzca una ramificación que no sea por el carbono central. Este último está unido, además de al ciclo, a un hidrógeno y dos metilos.
La cantidad de carbonos será, 7 del ciclo más 3 de la cadena, 10 en total.
La cantidad de hidrógenos será:

Atomicidad del H = Hidrógenos del ciclo + Hidrógenos de la cadena
Atomicidad del H = (7 * 2) – 1 + (8 – 1)
Atomicidad del H = 14 – 1 + 7

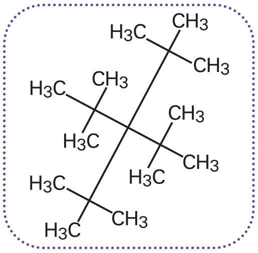
Atomicidad del H = 20

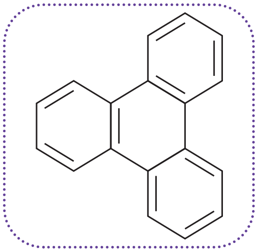
Por lo tanto la fórmula molecular es $C_{10}H_{20}$:



Molécula 5: cada hidrógeno de la molécula 1 es reemplazado por un metilo (-CH_3), por lo tanto la cantidad de hidrógenos la calculamos como 3 por la cantidad de hidrógenos que tenía la molécula 1, o sea 3 * 12 = 36. La cantidad de carbonos será la que tenía más la can-

[12] Esta molécula se llama naftaleno.

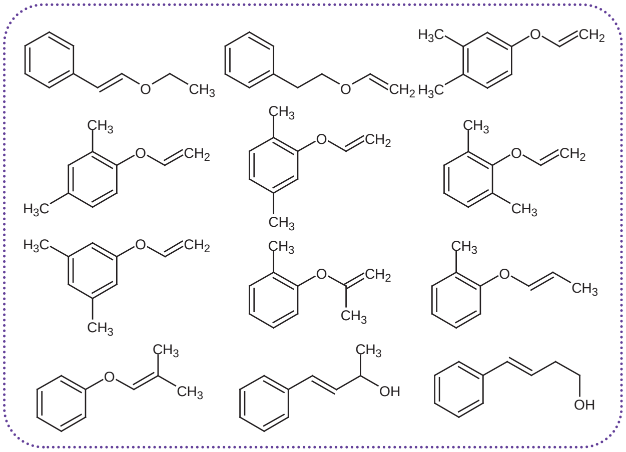




tidad de hidrógenos que tenía la molécula 1, o sea 5 + 12 = 17. Así la fórmula molecular es $C_{17}H_{36}$.

Molécula 6: esta molécula sólo es posible si el núcleo de benceno se ubica entre ambos núcleos de la molécula 2, unido a los carbonos vecinos al enlace entre los núcleos bencénicos preexistentes. La cantidad de carbonos aumenta en seis unidades y se quitan dos hidrógenos de la molécula anterior y dos del núcleo bencénico nuevo, en total cuatro hidrógenos adicionales, así la fórmula molecular queda: $C_{18}H_{12}$ [13].

Resolución del ejercicio 7



CAPÍTULO 2

Resolución del ejercicio 1

Comenzaremos por calcular la cantidad de moléculas que tiene la mezcla.

Cantidad de moléculas de oxígeno:

$n_{Oxígeno}$ = masa $_{Oxígeno}$ * $(M_{Oxígeno})^{-1}$
$n_{Oxígeno}$ = masa $_{Oxígeno}$ * $(32\ g/mol)^{-1}$
$n_{Oxígeno}$ = 10 g * $(32\ g/mol)^{-1}$
$n_{Oxígeno}$ = (10 g /32g) * mol = 0,3125 mol

Cantidad de moléculas de hidrógeno:

$n_{Hidrógeno}$ = masa $_{Hidrógeno}$ * $(M_{Hidrógeno})^{-1}$
$n_{Hidrógeno}$ = masa $_{Hidrógeno}$ * $(2\ g/mol)^{-1}$
$n_{Hidrógeno}$ = 1 g * $(2\ g/mol)^{-1}$
$n_{Hidrógeno}$ = (1 g /2g) * mol = 0,5 mol

Cantidad total de moléculas:

$n_{Total} = n_{Oxígeno} + n_{Hidrógeno}$
n_{Total} = 0,3125 mol + 0,5 mol
n_{Total} = 0,8125 mol

Transformaremos la temperatura:
T = (35 + 273) K = 308 K

Aplicamos la Ecuación General del Gas Ideal:

$P_{Total} * V = n * R * T$
$P_{Total} = (n * R * T) / V$
P_{Total}=(0,8125mol*0.082(dm3*atm/mol*K)*308 K)/10 m3
P_{Total}=(0,8125mol*0,082(dm3*atm/mol*K)*308 K)/10.000 dm3
P_{Total} = 0,00205 atm

Respuesta
La presión generada por la mezcla de gases es de 0,00205 atm

Resolución del ejercicio 2

Debemos calcular la masa molar del etano, sumaremos las masas atómicas de cada uno de los átomos de la molécula. Los valores los obtendremos de la tabla periódica, usaremos sólo la parte entera.

M_{Etano} = 2 * masa atómica de carbono + 6 * masa atómica del hidrógeno
M_{Etano} = 2 * 12 g/mol + 6 * 1 g/mol
M_{Etano} = 24 g/mol + 6 g/mol
M_{Etano} = 30 g/mol

Con este valor podemos calcular la cantidad de partículas que hay en 15 gramos de esta sustancia:

n_{Etano} = masa $_{Etano}$ * $(M_{Etano})^{-1}$
n_{Etano} = masa $_{Etano}$ * $(30\ g/mol)^{-1}$
n_{Etano} = 15 gramos * $(30\ g/mol)^{-1}$
n_{Etano} = 0,5 mol

Transformaremos la temperatura:
T = (15 + 273) K = 288 K

[13] Esta molécula se llama trifenileno.

Aplicamos la Ecuación General del Gas Ideal:

P * V = n * R * T

V = (n * R * T)/P

V = (0,5 mol * 0,082 (dm^3 * atm / mol * K) * 288 K)) / 2 atm

V = (0,5 mol * 0,082 (dm^3 * atm / mol * K) * 288 K)) / 2 atm

V = 5,904 dm^3

V = 0,005904 m^3

Respuesta

El volumen necesario es 0,005904 m^3.

Resolución del ejercicio 3

Calculamos la cantidad de moléculas de nitrógeno presentes en 1 kilogramo.

$n_{Nitrógeno}$ = masa $_{Nitrógeno}$ * $(M_{Nitrógeno})^{-1}$

$n_{Nitrógeno}$ = masa $_{Nitrógeno}$ * (28 g/mol)$^{-1}$

$n_{Nitrógeno}$ = 1 kg * (28 g/mol)$^{-1}$

$n_{Nitrógeno}$ = 1.000 g * (28 g/mol)$^{-1}$

$n_{Nitrógeno}$ = 35,7143 mol

Aplicamos la Ecuación General del Gas Ideal:

P * V = n * R * T

(P * V) / (n * R) = T

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

T = (P * V) / (n * R)

T = (1 atm * 1 m^3) / (35,7143 mol * 0,082 (dm^3 * atm / mol * K))

T = (1 atm * 1.000 dm^3) / (35,7143 mol * 0,082 (dm^3 * atm / mol * K))

T = 341,5 K

Transformamos esta temperatura a °C:

T = (341,5 – 273) °C = 68,5 °C

Respuesta

La temperatura necesaria es 68,5 °C.

Resolución del ejercicio 4

Debemos averiguar la presión inicial para saber cuál debe ser la presión final, la cual será el doble. Para ambas condiciones el volumen y la temperatura son los mismos, 4 m^3 y 0 °C o sea 273 K.

Para averiguar la presión inicial tenemos que conocer la cantidad de moléculas. Se trata de una mezcla de gases: oxígeno, hidrógeno y propano.

Moléculas de oxígeno:

$n_{Oxígeno}$ = masa $_{Oxígeno}$ * $(M_{Oxígeno})^{-1}$

$n_{Oxígeno}$ = masa $_{Oxígeno}$ * (32 g/mol)$^{-1}$

$n_{Oxígeno}$ = 6 g * (32 g/mol)$^{-1}$

$n_{Oxígeno}$ = (6 g /32g) * mol = 0,1875 mol

Moléculas de hidrógeno:

$n_{Hidrógeno}$ = 3 moles

Moléculas de propano que fueron inyectadas desde un contenedor del cual tenemos los datos para calcular la cantidad de moléculas aplicando la Ecuación General del Gas Ideal:

P * V = n * R * T

(P * V) / (R * T) = n

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

n = (P * V) / (R * T)

n = (1 atm * 1 m^3) / (0,082 (dm^3 * atm / mol * K) * (25 + 273) K)

n = (1 atm * 1.000 dm^3) / (0,082 (dm^3 * atm / mol * K) * (25 + 273) K)

n = (1 atm * 1.000 dm^3) / (0,082 (dm^3 * atm / mol * K) * 298 K)

n = 40,9232 mol

Como podemos observar el propano es el componente más importante de la mezcla que tiene 44,1107 moles de moléculas.

Dado que la presión es directamente proporcional a la cantidad de partículas si duplicamos esta cantidad duplicaremos la presión. Así para responder a la consigna debemos duplicar la cantidad de moléculas con 44,1107 moles de moléculas de nitrógeno sin necesidad de calcular la presión inicial.

Para obtener la masa de nitrógeno que representa esta cantidad de moléculas planteamos:

$n_{Nitrógeno}$ = masa $_{Nitrógeno}$ * $(M_{Nitrógeno})^{-1}$

44,1107 mol = masa Nitrógeno * (28 g /mol)$^{-1}$

44,1107 mol / (28 g /mol)$^{-1}$= masa $_{Nitrógeno}$

44,1107 mol * 28 g /mol = masa $_{Nitrógeno}$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

masa $_{Nitrógeno}$ = 44,1107 mol * 28 g /mol

masa $_{Nitrógeno}$ = 1235,0996 g

masa $_{Nitrógeno}$ = 1,235 kg

Respuesta

La masa necesaria de nitrógeno para duplicar la presión inicial es 1235,0996 gramos.

Resolución del ejercicio 5

La reacción descripta indica que por cada molécula de A presente se necesitan dos de B para formar el producto. Así, dada una cantidad de moléculas de A necesitamos el doble de B para convertir a la totalidad de A y B (dos sustancias distintas) en AB_2 (una sustancia única).

De acuerdo a los datos faltan moléculas de B para que reaccionen todas las moléculas de A. Si B es el doble de moléculas A que reaccionan entonces 5 moles es el doble de las moléculas A que reacciones, o sea 2,5 moles. Dado que hay 3 moles de A quedan 0,5 moles sin reaccionar (3 mol – 2,5 mol).

Si volvemos a analizar la reacción vemos que por cada 3 partículas (1 de A y 2 de B) antes de la reacción obtenemos 1 (AB_2). O sea que los 7,5 moles de partículas que van a reaccionar (2,5 moles de A y la totalidad de B -5 moles-) van a convertirse en 2,5 moles de AB_2 (7,5 mol / 3). Estos 2,5 moles de AB_2 se suman a los 0,5 moles de A que no reaccionaron, o sea que quedan 3 moles finales (2,5 mol AB_2 + 0,5 mol A).

La presión final corresponderá a los 3 moles de moléculas en las condiciones del problema: 60 °C en un volumen de 1 m^3. Planteamos la Ecuación General del Gas Ideal:

$P * V = n * R * T$

$P = (n * R * T) / V$

$P = (3 \text{ mol} * 0.082 (dm^3 * atm / mol * K) * (60 + 273) K) / 1 m^3$

$P = (3 \text{ mol} * 0.082 (dm^3 * atm / mol * K) * 333 K) / 1 m^3$

$P = (3 \text{ mol} * 0.082 (dm^3 * atm / mol * K) * 333 K) / 1.000 dm^3$

$P = 0{,}0819 \text{ atm}$

Por la Ley de Dalton esta presión es la suma de la presión que ejercen los 0,5 moles de A más la presión que ejercen los 2,5 moles de AB_2. Si la presión total de 0,0819 atm es el 100% de la presión producida por los 3 moles de moléculas, entonces A (que no reaccionó) produce el 16,67% ((0,5 mol * 100%) / 3 mol) y AB_2 es responsable por el 83,33% restante ((2,5 mol * 100%) / 3 mol).

Respuesta

Luego de transcurrida la reacción quedan 0 moles de B, 0,5 moles de A y 2,5 moles de AB_2. La mezcla final ejerce 0,0819 atm de presión correspondiendo 16,67% de la misma a A y 83,33% a AB_2.

Resolución del ejercicio 6

Debemos comenzar por calcular la cantidad de moléculas de A, planteamos:

$n_A = masa_A * (M_A)^{-1}$

$n_A = masa_A * (79 \text{ g/mol})^{-1}$

$n_A = 5 \text{ g} * (79 \text{ g/mol})^{-1}$

$n_A = (5 \text{ g} / 79 \text{ g}) * \text{mol}$

$n_A = 0{,}0633 * \text{mol}$

Luego de la reacción la cantidad de moléculas se duplica, o sea que son 0,1266 moles (0,0633 moles de B + 0,0633 moles de C).

Como la tapa del cilindro puede moverse, la presión no aumentará mientras que la tapa del cilindró se pueda mover. Si analizamos la Ecuación General del Gas Ideal:

$P * V = n * R * T$

$V = (n * R * T) / P$

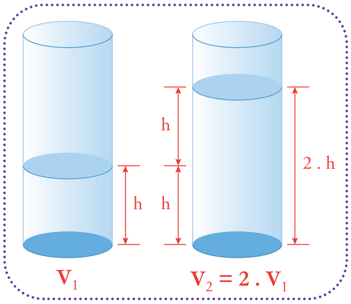
El volumen es directamente proporcional a la cantidad de moléculas, por lo tanto al duplicarse ésta se duplica aquel, es decir que el volumen final es 2 m^3 (2 * 1 m^3)

Así que necesitamos saber a qué distancia teníamos la tapa antes que reaccione A. El volumen de un cilindro se calcula como:

V_{CIL} = Área de la tapa * altura

$1 m^3 = 0{,}25 m^2 * h$

$1 m^3 / 0{,}25 m^2 = h$



Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$h = 1 m^3 / 0{,}25 m^2$

$h = 4 m$

Entonces la tapa ascenderá otros 4 metros luego de la reacción y vuelva a la temperatura inicial de 70 °C.

Respuesta

La tapa ascenderá 4 metros y la cantidad de moléculas luego de la reacción serán 0,1266 moles (0,0633 moles de B + 0,0633 moles de C).

Resolución del ejercicio 7

Si masa molar de B es 44 quiere decir que de los 79 g/mol que correspondían a A, 44 g/mol correspondían a B y 35 g/mol corresponden a C (79 g/mol – 44 g/mol).
Como ya averiguamos los moles que se producen de C podemos calcular la masa de esta sustancia:

$$n_C = masa_C * (M_C)^{-1}$$
$$0{,}0633\ mol = masa_C * (35\ g/mol)^{-1}$$
$$0{,}0633\ mol / (35\ g/mol)^{-1} = masa_C$$
$$0{,}0633\ mol * 35\ g/mol = masa_C$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$masa_C = 0{,}0633\ mol * 35\ g/mol$
$masa_C = 2{,}2155\ g$

Respuesta
La masa de C producida es de 2,2155 gramos.

Resolución del ejercicio 8

El 90% de un kilogramo de madera es celulosa, nuestra molécula de interés, o sea 900 gramos.
En la reacción vemos que la reacción de combustión para una molécula de glucosa es:

$$(H\text{-}C\text{-}OH)_6 + 6\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 6\ H_2O$$

Es decir que se producen 6 moléculas de agua por cada molécula de glucosa, por lo tanto si sabemos la cantidad de moléculas de glucosa presentes en 900 gramos sabremos la cantidad de moléculas de agua que se producen al multiplicarlo por 6.

Planteamos:
$n_{Glucosa} = masa_{Glucosa} * (M_{Glucosa})^{-1}$
$= 900\ g * (180\ g/mol)^{-1}$
$= (900\ g / 180\ g) * mol$
$= 5\ mol$
Obtenemos la cantidad de agua:
$n_{Agua} = n_{Glucosa} * 6$
$= 5\ mol * 6$
$= 30\ mol$

Respuesta
Se obtienen 30 moles de agua en la combustión de 1 kilogramo de madera.

Resolución del ejercicio 9

Aplicaremos la Ecuación General del Gas Ideal directamente, primero averiguamos el volumen de la habitación:
$V = 7m \times 3m \times 2{,}5m$
$V = 52{,}5\ m^3$

Reemplazamos en la ecuación:
$$P * V = n * R * T$$
$$(P * V) / (R * T) = n$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:
$n = (P * V) / (R * T)$
$n = (1\ atm * 52{,}5\ m^3) / (0{,}082\ (dm^3 * atm / mol * K) * (20 + 273)\ K)$
$n = (1\ atm * 52{,}500\ dm^3) / (0{,}082\ (dm^3 * atm / mol * K) * 293\ K)$
$n = 2.185{,}13$ moles

Este valor representa la cantidad de moles totales, de los cuales el 78,08% corresponden a moléculas de nitrógeno, por lo tanto:
$n_{Nitrógeno} = (78{,}08\ \% * 2{,}185{,}13\ moles) / 100\ \%$
$n_{Nitrógeno} = 1{,}706{,}15$ moles

Para averiguar la masa planteamos:
$$n_{Nitrógeno} = masa_{Nitrógeno} * (M_{Nitrógeno})^{-1}$$
$$1{,}706{,}15\ mol = masa_C * (28\ g/mol)^{-1}$$
$$1{,}706{,}15\ mol / (28\ g/mol)\text{-}1 = masa_C$$
$$1{,}706{,}15\ mol * 28\ g/mol = masa_C$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:
$masa_{Nitrógeno} = 1.706{,}15\ mol * 28\ g/mol$
$= 47{,}7722$ gramos

Como esta masa corresponde al estado líquido del nitrógeno, usamos el dato de la densidad para obtener el volumen que ocupa:
0,707 g/ml = masa nitrógeno líquido / volumen nitrógeno líquido
0,707 g/ml = 47,7722 g / volumen nitrógeno líquido
0,707 g/ml * volumen nitrógeno líquido = 47,7722 g

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:
volumen nitrógeno líquido = 47,7722 g / 0,707 g/ml
volumen nitrógeno líquido = 67,5703 ml
volumen nitrógeno líquido = 67,5703

Respuesta
El resultado de condensar el nitrógeno presente en la habitación es de 67,5703 litros de nitrógeno líquido.

Resolución del ejercicio 10

Como tenemos el dato de qué proporción de partículas representa de la mezcla gaseosa que llamamos aire, que es 78,08%. Si quitamos esta cantidad de moléculas entonces la presión disminuirá en igual porcentaje, tal como lo predice la ley de Dalton.
Así la presión final será el 21,92% de la presión inicial (100% - 78,08%). O sea 0,2192 atm, ya que el 100% representa 1 atm.

Respuesta
La presión en la habitación luego de condensar el nitrógeno será de 0,2192 atm.

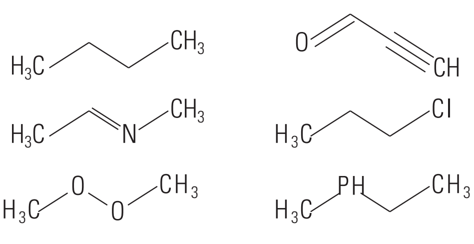
CAPÍTULO 4

Resolución de la consigna I

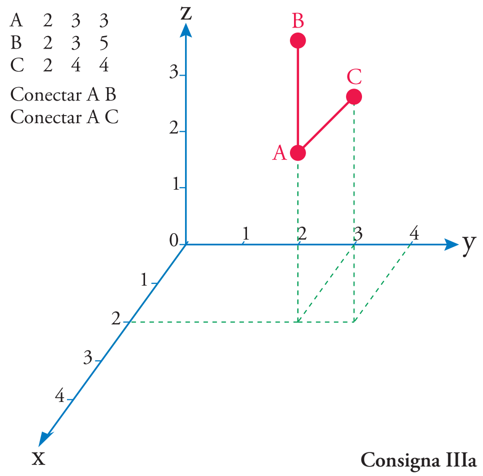
	V	F
1) $x_A > x_B$	X	
2) $y_A > y_D$		X
3) $z_A < z_C$	X	
4) $z_B < z_D$		X
5) $z_B > z_C$		X
6) A se conecta directamente con B.	X	
7) El tercer vecino de A es D.	X	
8) El tercer vecino de D es B.		X
9) Hay dos líneas (enlaces) entre A y C .	X	
10) B, C y D definen un plano que contiene a A.		X
11) La distancia entre A y B es menor que entre C y D.		X
12) Existiría alguna forma de rotar esta representación tal que se vieran tres puntos eclipsados y uno no.		X

Resolución de la consigna II

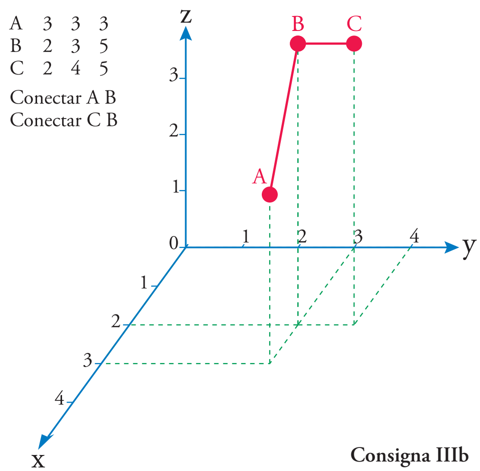
Son ejemplos que cumplen la consigna:



Resolución de la consigna IIIa y IIIb



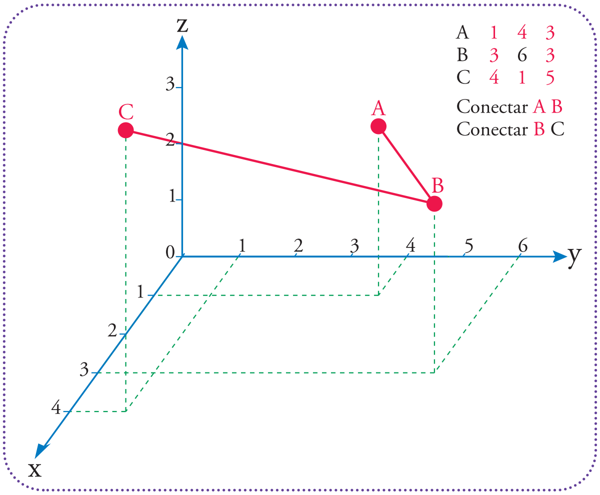
Consigna IIIa



Consigna IIIb

Resolución de la consigna IV

Una forma muy similar a ésta, la de comunicar una estructura, es el código MDL molfile (.mol). Otro código parecido es el código PDB (Protein Data Bank que en castellano quiere decir Banco de Datos de Proteínas) dedicado, especialmente, a representar moléculas protéicas que constan de una gran cantidad de átomos, aunque este código, también, sirve para generar modelos moleculares de pocos átomos.



CAPÍTULO 5

Resolución problema 1

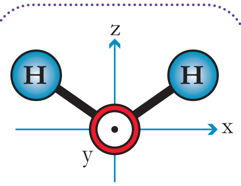


Figura 338.

La molécula de agua está compuesta por tres átomos que definen un plano. Por ello, podemos asignarles a la misma coordenada de todos los átomos el mismo valor, por ejemplo, elegimos la coordenada *y*. Como ya nos informan que la coordenada en *y* del oxígeno vale 0 entonces *y*H1 = *y*H2 = 0 (**Figura 338**).

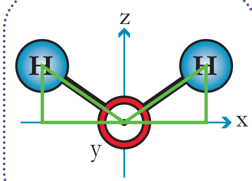


Figura 339.

El problema se ha reducido a tener que hallar las coordenadas en dos ejes (eje *x* y eje *z*) en vez de en tres.
Podemos definir los siguientes triángulos que nos ayudarán a obtener las coordenadas (**Figura 339**).

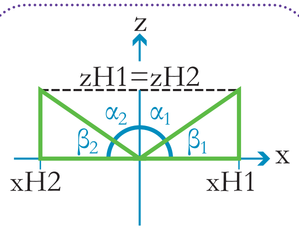


Figura 340.

Podemos ubicar los siguientes ángulos (**Figura 340**):
Podemos observar las siguientes igualdades:

$$104° / 2 = \alpha_1 = \alpha_2$$
$$52° = \alpha_1 = \alpha_2$$

También

$$(180° / 2) - 52° = \beta_1 = \beta_2$$
$$90° - 52° = \beta_1 = \beta_2$$
$$38° = \beta_1 = \beta_2$$

Con respecto a las coordenadas podemos plantear:

$$zH1 = zH2$$
$$xH1 = -xH2$$

Ahora trabajaremos con el triángulo que involucra al hidrógeno H1. Planteemos la función trigonométrica seno al ángulo β_1.

$$\text{sen } (\beta_1) = \text{cateto opuesto / hipotenusa}$$
$$\text{sen } (38°) = (zH1 - 0 \text{ Å}) / 0{,}96 \text{ Å}$$
$$0{,}6157 = (zH1 - 0 \text{ Å}) / 0{,}96 \text{ Å}$$
$$0{,}6157 * 0{,}96 \text{ Å} = zH1 - 0 \text{ Å}$$
$$0{,}6157 * 0{,}96 \text{ Å} + 0 \text{ Å} = zH1$$
$$0{,}5911 \text{ Å} + 0 \text{ Å} = zH1$$
$$0{,}5911 \text{ Å} = zH1$$

Expresamos la variable en el miembro de la derecha para ordenar los resultados
*z*H1 = 0.5911 Å = *z*H2

Para hallar las coordenadas *x*H1 y *x*H2 planteamos la función coseno de β_1:

$$\cos (\beta_1) = \text{cateto adyacente / hipotenusa}$$
$$\cos (38°) = (xH1 - 0 \text{ Å}) / 0{,}96 \text{ Å}$$
$$0{,}7880 = (xH1 - 0 \text{ Å}) / 0{,}96 \text{ Å}$$
$$0{,}7880 * 0{,}96 \text{ Å} = xH1 - 0 \text{ Å}$$
$$0{,}7880 * 0{,}96 \text{ Å} + 0 \text{ Å} = xH1$$
$$0{,}7565 \text{ Å} + 0 \text{ Å} = xH1$$
$$0{,}7565 \text{ Å} = xH1$$

Reemplazamos *x*H1 en la siguiente ecuación para despejar *x*H2

$$xH1 = -xH2$$
$$0{,}7565 \text{ Å} = -xH2$$
$$xH2 = -0{,}7565 \text{ Å}$$

Ya tenemos todos los datos que nos fueron requeridos.
Respuesta

	Coordendas Å		
H_2O	x	y	z
H1	0,7565	0,0000	0,5911
O	0,0000	0,0000	0,0000
H2	0,7565	0,0000	0,5911

Resolución problema 2

Elegimos un sistema de coordenadas, recordemos que éste puede ser levógiro o dextrógiro según lo explicamos anteriormente (**Figura 341**).

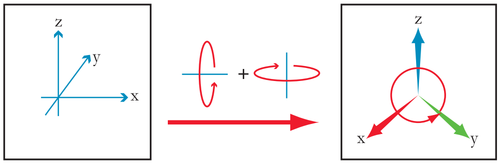


Figura 341.

En este caso el orden de lectura de los ejes (*x*, *y*, *z*) gira en el sentido contrario al de las agujas del reloj, por lo tanto, lo indicaremos como levógiro.
El esquema pedido es el siguiente y podemos definir un triángulo para aplicar el Teorema de Pitágoras y hallar la distancia entre los átomos representados (**Figura 342**).

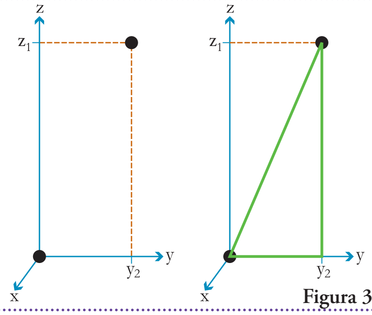


Figura 342.

Planteamos el Teorema de Pitágoras:
$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$

$$D^2 = (z2 - 0\ \text{Å})^2 + (y2 - 0\ \text{Å})^2$$
$$D^2 = (12.0000\ \text{Å} - 0\ \text{Å})^2 + (5.2500\ \text{Å} - 0\ \text{Å})^2$$
$$D^2 = (12.0000\ \text{Å})^2 + (5.2500\ \text{Å})^2$$
$$D^2 = (12.0000)^2\ \text{Å}^2 + (5.2500)^2\ \text{Å}^2$$
$$D^2 = 144.0000\ \text{Å}^2 + 27.5625\ \text{Å}^2$$
$$D^2 = 171.5625\ \text{Å}^2$$
$$D = (171.5625\ \text{Å}^2)^{1/2}$$
$$D = 13.0982\ \text{Å}$$

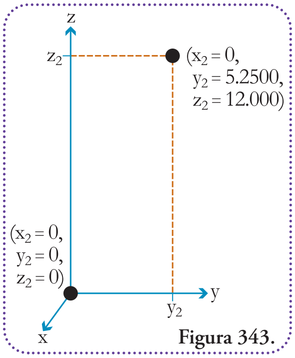


Figura 343.

Repuesta
La distancia (D) entre los átomos es de 13,0982 Å y el esquema pedido es el que se visualiza en la figura 343.

Resolución problema 3

Podemos hacer una tabla con los datos para analizar las relaciones que nos indican y obtener la distancia correspondiente a cada par de átomos (**Tabla 6**).

Pares	Distancia Å		
[2-4]	2	2	2
[4-3]	2	2	2
[2-1]	2 * [2-4]	2 * 2	4
[1-5](radio)	[1-2] / 2	(2 * 2) / 2	2

Tabla 6.

Ahora podemos hacer un esquema en la configuración que se nos pide y ubicar las distancias correspondientes a los pares atómicos indicados (**Figura 344**).

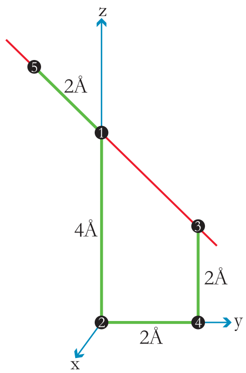


Figura 344.

Podemos observar el triángulo definido por los átomos 5, 2 y 3 (**Figura 345**).
Lo particular de este triángulo es que podemos demostrar que es rectángulo y podemos averiguar las distancias de sus catetos. Podemos trazar dos cuadrados con una longitud de lado de 2 Å y comparten el lado que une el átomo 3 y el punto medio de la distancia que hay entre los átomos 2 y 1, o sea, que divide a ésta en dos tramos de 2 Å cada uno. Podemos calcular las longitudes de las diagonales aplicando el Teorema de Pitágoras para hallar las longitudes de éstas. Además los sectores que determinan cada diagonal y un lado de un cuadrado tienen una amplitud de 45°, por lo tanto, entre dos diagonales que comparte un vértice, en este caso las que tienen por vértice el átomo 3 determinan un ángulo de 90°.

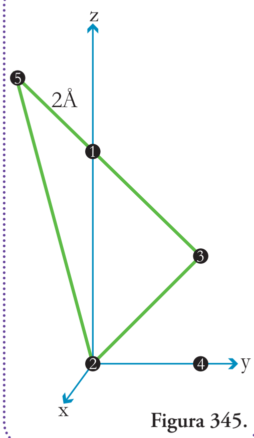


Figura 345.

Determinemos la longitud de cada diagonal usando los datos para una diagonal servirá para todas. Aplicando el Teorema de Pitágoras tenemos:

$(\text{distancia } 2\text{-}3)^2 = (\text{distancia } 2\text{-}4)^2 + (\text{distancia } 4\text{-}3)^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}3)^2 = (2 \text{ Å})^2 + (2 \text{ Å})^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}3)^2 = 4 \text{ Å}^2 + 4 \text{ Å}^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}3)^2 = 8 \text{ Å}^2$
$\text{distancia } 2\text{-}3 = (8 \text{ Å}^2)^{1/2}$
$\text{distancia } 2\text{-}3 = 8^{1/2} (\text{Å}^2)^{1/2}$
$\text{distancia } 2\text{-}3 = 2{,}8284 \text{ Å}$

Como dijimos que el cálculo numérico para una diagonal sirve para obtener las longitudes de todas las diagonales podemos establecer que (**Figura 346**).

$$\text{distancia } 1\text{-}3 = \text{distancia } 2\text{-}3 = 2{,}8284 \text{ Å}$$

Con esto podemos encontrar la distancia pedida entre el átomo 5 y 2 usando, nuevamente, el Teorema de Pitágoras sobre el triángulo formado por los átomos 5, 2 y 3 (**Figura 347**).

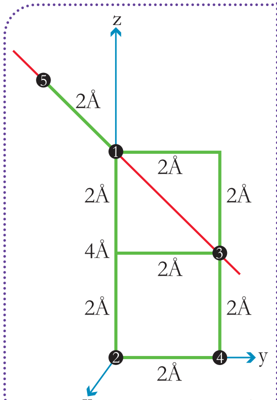


Figura 346.

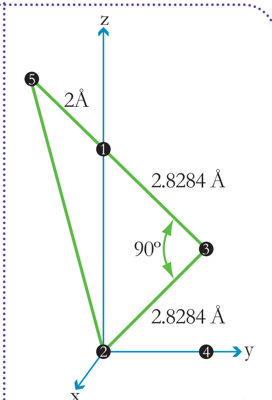


Figura 347.

$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = (\text{distancia } 3\text{-}5)^2 + (\text{distancia } 2\text{-}3)^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = ((\text{distancia } 1\text{-}3) + (\text{distancia } 1\text{-}5))^2 + (\text{distancia } 2\text{-}3)^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = (2{,}8284 \text{ Å} + 2 \text{ Å})^2 + (2{,}8284 \text{ Å})^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = (4{,}8284 \text{ Å})^2 + (2{,}8284 \text{ Å})^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = 4{,}8284^2 \text{ Å}^2 + 2{,}8284^2 \text{ Å}^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = 23{,}3134 \text{ Å}^2 + 7{,}9998 \text{ Å}^2$
$(\text{distancia } 2\text{-}5)^2 = 31{,}3132 \text{ Å}^2$
$\text{distancia } 2\text{-}5 = (31{,}3132 \text{ Å}^2)^{1/2}$
$\text{distancia } 2\text{-}5 = 31{,}3132^{1/2} (\text{Å}^2)^{1/2}$
$\text{distancia } 2\text{-}5 = 5{,}5958 \text{ Å}$

Hemos encontrado la distancia pedida.

Respuesta
La distancia entre los átomos 2 y 5 es de 5,5958 Å cuando este último se encuentra en su máximo alejamiento del átomo 3, en una misma línea con éste ***y*** el átomo 1.

Resolución problema 4

Esta condición se cumple en dos posiciones y podemos definir tres triángulos útiles (**Figuras 348 y 349**).

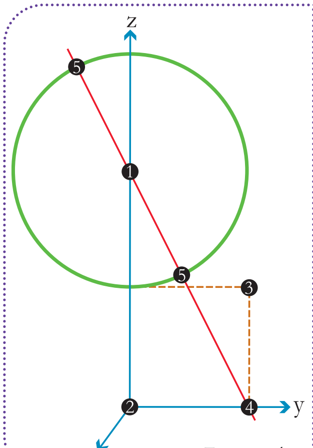


Figura 348.

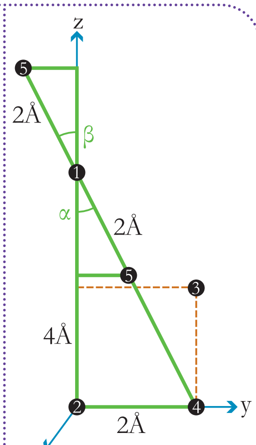


Figura 349.

Si bien podemos observar que necesitamos cinco longitudes y dos ángulos, los catetos de los triángulos pequeños y la hipotenusa del triángulo mayor, y los ángulos α y β. En realidad, las incógnitas se reducen a dos ya que los triángulos pequeños son idénticos, pues tienen la hipotenusa de igual longitud (2 Å) y un ángulo igual, ya que α es opuesto por el vértice a β. Por otra parte, la hipotenusa del triángulo mayor no es necesaria para resolver nuestra consigna.
Procederemos a obtener α utilizando la función tangente y los catetos del triángulo mayor, ya que guarda una relación de equivalencia (tienen los mismos ángulos internos) con los triángulos menores:

$\text{tg } (\alpha) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$
$\alpha = \text{arctg } (\text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente})$
$\alpha = \text{arctg } (2 \text{ Å} / 4 \text{ Å})$
$\alpha = \text{arctg } (0{,}5)$
$\alpha = 25{,}5651°$

Con este ángulo determinado ($\alpha = 25{,}5651°$) podemos obtener los catetos del triángulo pequeño utilizando las funciones seno y coseno. Comenzaremos por calcular el seno que nos dará la longitud del cateto menor:

$$\text{sen}(\alpha) = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$$
$$\text{sen}(25{,}5651°) = \text{cateto menor} / 2\ \text{Å}$$
$$\text{sen}(25{,}5651°) * 2\ \text{Å} = \text{cateto menor}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\text{cateto menor} = \text{sen}(25{,}5651°) * 2\ \text{Å}$$
$$\text{cateto menor} = 0{,}4315 * 2\ \text{Å}$$
$$\text{cateto menor} = 0{,}8630\ \text{Å}$$

Ahora hallaremos el cateto mayor:

$$\cos(\alpha) = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$$
$$\cos(25{,}5651°) = \text{cateto mayor} / 2\ \text{Å}$$
$$\cos(25{,}5651°) * 2\ \text{Å} = \text{cateto mayor}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\text{cateto mayor} = \cos(25{,}5651°) * 2\ \text{Å}$$
$$\text{cateto mayor} = 0{,}9021 * 2\ \text{Å}$$
$$\text{cateto mayor} = 1{,}8042\ \text{Å}$$

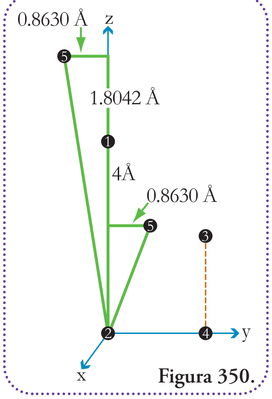


Figura 350.

Ahora, tenemos todos los datos para calcular las distancias entre las dos posiciones del átomo 5 y el átomo 2 (**Figura 350**).

Planteando el Teorema de Pitágoras para la distancia mayor:

$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + ((\text{distancia 1-2}) + 1{,}8042\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + (4\ \text{Å} + 1{,}8042\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + (5{,}8042\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 0{,}8630^2\ \text{Å}^2 + 5{,}8042^2\ \text{Å}^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 0{,}7448\ \text{Å}^2 + 33{,}6887\ \text{Å}^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 34{,}4335\ \text{Å}^2$$
$$\text{distancia mayor 2-5} = (34{,}4335\ \text{Å}^2)^{1/2}$$
$$\text{distancia mayor 2-5} = 34{,}4335^{1/2}\ (\text{Å}^2)^{1/2}$$
$$\text{distancia mayor 2-5} = 5{,}8680\ \text{Å}$$

Ahora, planteamos el Teorema de Pitágoras para la distancia menor:

$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + ((\text{distancia 1-2}) - 1{,}8042\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + (4\ \text{Å} - 1{,}8042\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = (0{,}8630\ \text{Å})^2 + (2{,}1958\ \text{Å})^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 0{,}8630^2\ \text{Å}^2 + 2{,}1958^2\ \text{Å}^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 0{,}7448\ \text{Å}^2 + 4{,}8215\ \text{Å}^2$$
$$(\text{distancia mayor 2-5})^2 = 5{,}5663\ \text{Å}^2$$
$$\text{distancia mayor 2-5} = 5{,}5663^{1/2}\ (\text{Å}^2)^{1/2}$$
$$\text{distancia mayor 2-5} = 2{,}3593\ \text{Å}$$

Hemos concluido con nuestra averiguación.

Respuesta

La distancia del átomo 2 al átomo 5 en sus posiciones más lejana y más cercana al átomo 3 son 5,8680 Å y 2,3593 Å respectivamente.

Resolución problema 5

Para resolver este ejercicio es conveniente, aunque no necesario, ubicar los puntos en un sistema de coordenadas. Del gráfico no podemos distinguir si se trata de un sistema levógiro o dextrógiro, pero no es necesario determinarlo, por lo tanto, elegiremos, arbitrariamente, uno dextrógiro (**Figura 351**).

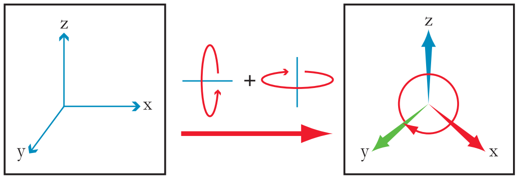


Figura 351.

Ahora podemos hacer un esquema de la ubicación de los puntos que representan a los carbonos en el espacio (**Figura 352**).

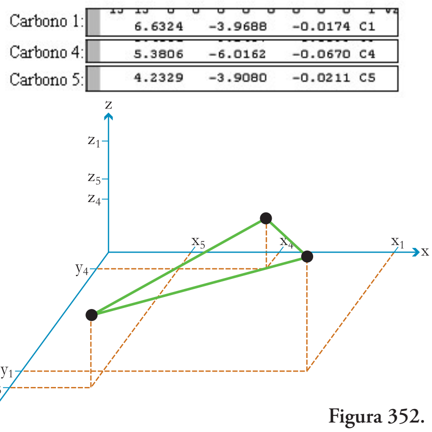


Figura 352.

Para cada enlace podemos definir un paralelepípedo que contiene, en dos de sus vértices las posiciones de los átomos. A partir de las coordenadas de cada átomo podemos conocer las longitudes de las aristas y, por lo tanto, podemos conocer la distancia que une a los átomos aplicando dos veces el Teorema de Pitágoras. Como sabemos, todas las distancias tienen la unidad de longitud Å, por una cuestión de prolijidad no la escribiremos hasta el resultado final.

Para el enlace carbono1-carbono5 (**Figura 353**).

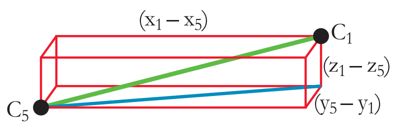


Figura 353.

Primero, calcularemos la diagonal sobre la cara inferior, planteamos:

$$D^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$D^2 = (x_1 - x_5)^2 + (y_5 - y_1)^2$$
$$D = ((x_1 - x_5)^2 + (y_5 - y_1)^2)^{1/2}$$
$$D = ((6{,}6324 - 4{,}2329)^2 + (-3{,}9080 - (-3{,}9688))^2)^{1/2}$$
$$D = (2{,}3995^2 + 0{,}0608^2)^{1/2}$$
$$D = (5{,}7576 + 0{,}0037)^{1/2}$$
$$D = (5{,}7613)^{1/2}$$
$$D = 2{,}4003$$

Ahora, averiguaremos la longitud del enlace:

$$(\text{distancia 1-5})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$(\text{distancia 1-5})^2 = D^2 + (z_1 - z_5)^2$$
$$(\text{distancia 1-5}) = (D^2 + (z_1 - z_5)^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-5}) = (2{,}4003^2 + (-0{,}0174 - (-0{,}0211))^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-5}) = (2{,}4003^2 + 0{,}0037^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-5}) = (5{,}7613 + 0{,}00001)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-5}) = 5{,}76131^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-5}) = 2{,}4003$$

Como la precisión con la que nos informan la distancia es de dos decimales, la distancia calculada concuerda con el valor que deseábamos obtener, ya que, el redondeo en el tercer decimal no altera el cero del segundo decimal:

$$2{,}4003 \equiv 2{,}400 \equiv 2{,}40$$

Así, la distancia entre el carbono 1 y el carbono 5 es 2,40 Å.

Para el enlace carbono1-carbono4 (**Figura 354**).

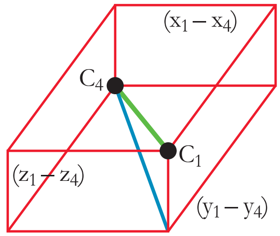


Figura 354.

Primero calcularemos la diagonal sobre la cara inferior, planteamos:

$$D^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$D^2 = (y_1 - y_4)^2 + (x_1 - x_4)^2$$
$$D = ((y_1 - y_4)^2 + (x_1 - x_4)^2)^{1/2}$$
$$D = ((-3{,}9688 - (-6{,}0162))^2 + (6{,}6324 - 5{,}3806)^2)^{1/2}$$
$$D = (2{,}0474^2 + 1{,}2518^2)^{1/2}$$
$$D = (4{,}1918 + 1{,}5670)^{1/2}$$
$$D = (5{,}7588)^{1/2}$$
$$D = 2{,}3997$$

Ahora, averiguaremos la longitud del enlace:

$$(\text{distancia 1-4})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$(\text{distancia 1-4})^2 = D^2 + (z_1 - z_4)^2$$
$$(\text{distancia 1-4}) = (D^2 + (z_1 - z_4)^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-4}) = (2{,}3997^2 + (-0{,}0174 - (-0{,}0670))^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-4}) = (2{,}3997^2 + 0{,}0496^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-4}) = (5{,}7588 + 0{,}0025)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-4}) = 5{,}7613^{1/2}$$
$$(\text{distancia 1-4}) = 2{,}4003$$

Nuevamente, el redondeo en el tercer decimal no altera el cero del segundo decimal:

$$2{,}4003 \equiv 2{,}400 \equiv 2{,}40$$

Así, la distancia entre el carbono 1 y el carbono 4 es 2,40 Å.

Finalmente, repetimos el cálculo para el enlace carbono4-carbono5 (**Figura 355**).

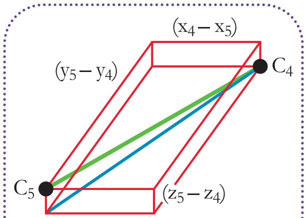


Figura 355.

Primero, calcularemos la diagonal sobre la cara inferior, planteamos:

$$D^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$D^2 = (y_5 - y_4)^2 + (x_4 - x_5)^2$$
$$D = ((y_5 - y_4)^2 + (x_4 - x_5)^2)^{1/2}$$
$$D = ((-3{,}9080 - (-6{,}0162))^2 + (5{,}3806 - 4{,}2329)^2)^{1/2}$$
$$D = (2{,}1082^2 + 1{,}1477^2)^{1/2}$$
$$D = (4{,}4445 + 1{,}3172)^{1/2}$$
$$D = 5{,}7617^{1/2}$$
$$D = 2{,}4004$$

Ahora, averiguaremos la longitud del enlace:

$$(\text{distancia 4-5})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$(\text{distancia 4-5})^2 = D^2 + (z_5 - z_4)^2$$
$$(\text{distancia 4-5}) = (D^2 + (z_5 - z_4)^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 4-5}) = (2{,}4004^2 + (-0{,}0211 - (-0{,}0670))^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 4-5}) = (2{,}4004^2 + 0{,}0459^2)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 4-5}) = (5{,}7617 + 0{,}0021)^{1/2}$$
$$(\text{distancia 4-5}) = 5{,}7638^{1/2}$$
$$(\text{distancia 4-5}) = 2{,}4008$$

Finalmente, como era de esperar el redondeo en el tercer decimal no altera el cero del segundo decimal:

$$2{,}4008 \equiv 2{,}401 \equiv 2{,}40$$

Así, la distancia entre el carbono 4 y el carbono 5 es 2,40 Å. Quedan verificadas las tres distancias indicadas en la consigna.

Resolución problema 6

Podemos esquematizar los datos del enunciado para formarnos una imagen de la molécula y la incógnita que debemos calcular (α), no necesitamos conocer las coordenadas en x o y ya que los tres átomos definen un plano común (**Figura 356**).

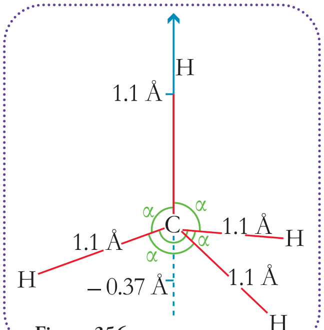


Figura 356.

Definiremos un triángulo útil que nos servirá para describir to- dos los enlaces (**Figura 357**).

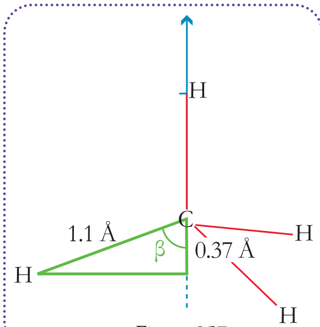


Figura 357.

Se observa que la suma de los ángulos α y β da por resultado un ángulo llano, por lo tanto:

$$\alpha + \beta = 180°$$
$$\alpha = 180° - \beta$$

El ángulo β lo podemos calcular utilizando la función coseno, como se trata de longitudes utilizaremos la coordenada z del hidrógeno como positiva en la definición del triángulo:

$$\cos(\beta) = \text{cateto adyacente / hipotenusa}$$
$$\beta = \text{arcos (cateto adyacente / hipotenusa)}$$
$$\beta = \text{arcos } (0{,}37 \text{ Å} / 1.1 \text{ Å})$$
$$\beta = \text{arcos } (0{,}3364)$$
$$\beta = 70{,}3423°$$

Entonces, podemos despejar α:

$$\alpha = 180° - \beta$$
$$\alpha = 180° - 70{,}3423°$$
$$\alpha = 109{,}65°$$

Dado que los enlaces son equivalentes este resultado es una buena aproximación al valor experimental (109,5°)

Respuesta
De acuerdo a los datos presentados en el enunciado el ángulo entre los enlaces del metano es de 109,65°.

Resolución problema 7

Como estamos tratando con tres átomos, es sencillo asignar, a cualquier coordenada de los tres, un valor arbitrario, ya que dados tres puntos siempre definen un plano que los incluye a todos. Arbitrariamente, elegimos que las coordenadas $z_1 = z_2 = z_3 = -1$.
Como trabajaremos en un plano, es conveniente ubicar a un átomo en el origen de coordenadas, por ejemplo el átomo 2, o sea que las coordenadas $y_2 = z_2 = 0$

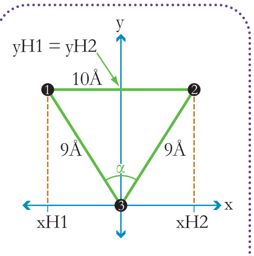


Figura 358.

Gráficamente, tenemos (**Figura 358**). Las coordenadas en el eje ***x*** son la mitad de la distancia entre los átomos 1 y 2, pero debemos colocarles los signos de acuerdo a nuestro sistema de referencias. Como ubicamos la punta de flecha del eje ***x*** apuntando hacia la derecha ése será el sentido en que crezcan los valores. Por lo tanto, podemos plantear:

$$-xH1 = xH2 = 10\ \text{Å}/2 = 5\ \text{Å}$$

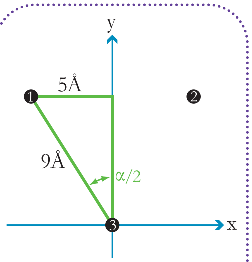


Figura 359.

Para encontrar las coordenadas en el eje, aplicaremos el método de distinguir triángulos útiles que contengan información que nos ayude a despejar nuestra incógnita (**Figura 359**). Ya podemos despejar las coordenadas en el eje ***y*** utilizando el Teorema de Pitágoras.

$$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$(9\ \text{Å})^2 = (5\ \text{Å})^2 + (yH1 - 0\ \text{Å})^2$$
$$(9\ \text{Å})^2 = (5\ \text{Å})^2 + yH1^2$$
$$9^2\ \text{Å}^2 = 5^2\ \text{Å}^2 + yH1^2$$
$$81\ \text{Å}^2 = 25\ \text{Å}^2 + yH1^2$$
$$81\ \text{Å}^2 - 25\ \text{Å}^2 = yH1^2$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$yH1^2 = 81\ \text{Å}^2 - 25\ \text{Å}^2$$
$$yH1^2 = 56\ \text{Å}^2$$
$$yH1 = (56\ \text{Å}^2)^{1/2}$$
$$yH1 = 56^{1/2}\ (\text{Å}^2)^{1/2}$$
$$yH1 = 7{,}4833\ \text{Å}$$

Designamos con la letra β a la mitad del ángulo α, el cual es nuestra verdadera incógnita

$$\beta = \alpha / 2$$

Ahora, planteamos una función trigonométrica que nos permita averiguar su amplitud, podemos elegir cualquiera de las tres, arbitrariamente, elijo el seno, entonces:

$$\text{sen}(\beta) = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$$
$$\text{sen}(\beta) = 5\ \text{Å} / 9\ \text{Å}$$
$$\beta = \text{arcsen}(5\ \text{Å} / 9\ \text{Å})$$
$$\beta = \text{arcsen}(0{,}5556)$$
$$\beta = 56{,}2479°$$

Despejamos a:

$$\beta = \alpha / 2$$
$$\beta * 2 = \alpha$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\alpha = \beta * 2$$
$$\alpha = 56{,}2479° * 2$$
$$\alpha = 112{,}4958°$$

Hemos concluido con la resolución.

Respuesta
Las coordenadas de los tres átomos y el ángulo que forman teniendo como vértice al átomo 3 están presentados en la siguiente tabla

	Coordendas Å		
Átomo	x	y	z
H1	-5,0000	7,4833	-1,0000
H2	5,0000	7,4833	-1,0000
3	0,0000	0,0000	-1,0000
Ángulo H1-3-H2	112,4958º		

Resolución problema 8

Para resolver este problema debemos hacer una operación de traslación de un carbono a la posición del otro y repetir esta operación al oxígeno. Elegimos trasladar el carbono C39 a la posición del carbono C36. Esta operación implica sumar o restar valores a cada coordenada de partida (C39) para obtener las coordenadas de llegada (C36).
La letra griega delta mayúscula (Δ) indica variación, por lo tanto, para señalar un desplazamiento, por ejemplo en el eje ***x***, escribiremos **Δ*x***. Usaremos la siguiente convención para usar estas variables, siempre se planteará la suma de las mismas y, luego, cuando se especifique su valor, se le asignará el signo que tenga tal valor. De esta forma si el valor es positivo la suma no se altera y, si es negativo, la suma se convierte en resta en forma inmediata.

Resumiendo los valores de las coordenadas de los carbonos C36 y C39 (**Tabla 8**).

	Coordendas Å		
	x	y	z
RIGPED C39	7,3410	14,0500	2,9850
VIGDEU C36	4,9920	5,5940	-7,2930

Tabla 8.

Si planteamos la ecuación que debemos resolver para conocer la variación que hay que hacer en la coordenada x del carbono C39 para obtener la coordenada x del carbono C36, tenemos:

$$xC36 = xC39 + \Delta x$$
$$xC36 - xC39 = \Delta x$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\Delta x = xC36 - xC39$$
$$\Delta x = 4{,}992 - 7{,}341$$
$$\Delta x = -2{,}349$$

Hacemos lo mismo para el eje y:

$$yC36 = yC39 + \Delta y$$
$$yC36 - yC39 = \Delta y$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\Delta y = yC36 - yC39$$
$$\Delta y = 5{,}594 - 14{,}050$$
$$\Delta y = -8{,}456$$

Por último repetimos los cálculos para el eje z:

$$zC36 = zC39 + \Delta z$$
$$zC36 - zC39 = \Delta z$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\Delta z = zC36 - zC39$$
$$\Delta z = -7{,}293 - 2{,}985$$
$$\Delta z = -10{,}278$$

Estos resultados los podemos ver gráficamente la siguiente figura (**Figura 360**).

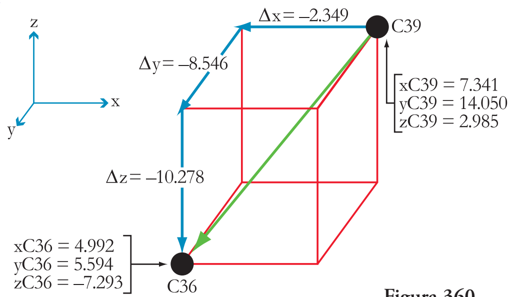


Figura 360.

Esta misma operación de traslación debemos aplicarla a las coordenadas del oxígeno unido al carbono, usaremos la letra f para notar que se trata de las coordenadas finales, luego de la operación, por lo tanto:

$$xO6f = xO6 + \Delta x$$
$$xO6f = 7{,}543 + (-2{,}349)$$
$$xO6f = 7{,}543 - 2{,}349$$
$$xO6f = 5{,}194$$

$$yO6f = yO6 + \Delta y$$
$$yO6f = 14{,}146 + (-8{,}546)$$
$$yO6f = 14{,}146 - 8{,}546$$
$$yO6f = 5{,}600$$
$$zO6f = zO6 + \Delta z$$
$$zO6f = 4{,}326 + (-10{,}278)$$
$$zO6f = 7{,}543 - 10{,}278$$
$$zO6f = -2{,}735$$

Ahora debemos calcular la distancia entre el oxígeno O2, con sus coordenadas originales y el oxígeno O6 con sus coordenadas modificadas. Es calcular la diagonal interna del siguiente paralelepípedo (**Figura 361**).

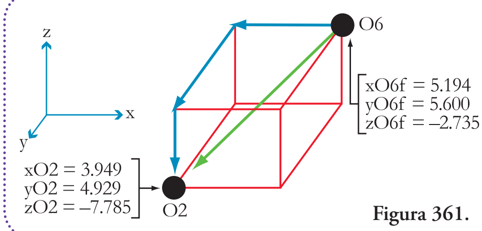


Figura 361.

Comenzaremos planteando el Teorema de Pitágoras para calcular la diagonal de la cara inferior y luego utilizar este resultado en una segunda aplicación del Teorema para obtener la diagonal interna (**Figura 362**).

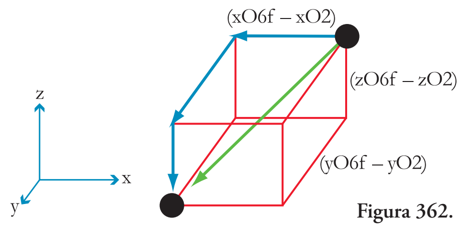


Figura 362.

Para la diagonal de la cara inferior:

$$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$

$$(\text{diagonal cara inferior})^2 = (yO6f - yO2)^2 + (xO6f - xO2)^2$$
$$\text{diagonal cara inferior} = ((yO6f - yO2)^2 + (xO6f - xO2)^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal cara inferior} = ((5{,}600 - 4{,}929)^2 + (5{,}194 - 3{,}949)^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal cara inferior} = (0{,}671^2 + 1{,}245^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal cara inferior} = (0{,}4502 + 1{,}5500)^{1/2}$$
$$\text{diagonal cara inferior} = 2{,}0002^{1/2}$$
$$\text{diagonal cara inferior} = 1{,}4143$$

Para la diagonal interna:

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$

$(\text{diagonal interna})^2 = (\text{diagonal cara inferior})^2 + (zO6f - zO2)^2$

$\text{diagonal interna} = ((\text{diagonal cara inferior})^2 + (zO6f - zO2)^2)^{1/2}$

$\text{diagonal interna} = (1{,}4143^2 + (-2{,}735 - (-7{,}785)^2)^{1/2}$

$\text{diagonal interna} = (1{,}4143^2 + 5{,}050^2)^{1/2}$

$\text{diagonal interna} = (2{,}0002 + 25{,}5025)^{1/2}$

$\text{diagonal interna} = 27{,}5027^{1/2}$

$\text{diagonal interna} = 5{,}2443$

Respuesta

Si superponemos los carbonos C36 de VIGDEU y C39 de RIGPED la distancia entre los oxígenos es de 5,2443 Å.

Resolución problema 9

Dado que la rotación del hidrógeno no atraviesa el plano definido por los ejes x e y comenzaremos por ubicar los átomos hidrógeno y oxígeno en el espacio y definir las longitudes útiles (**Figura 363**).

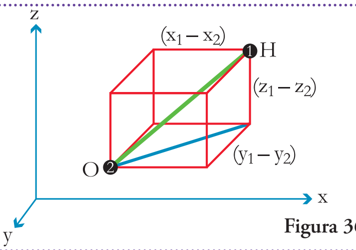


Figura 363.

Calculemos las longitudes de cada arista del paralelepípedo:

$\Delta x = x_1 - x_2 = 6{,}4871 - 5{,}9728 = 0{,}5143$

$\Delta y = y_1 - y_2 = -4{,}6369 - (-5{,}3847) = 0{,}7478$

$\Delta z = z_1 - z_2 = 0{,}4476 - 0{,}0000 = 0{,}4476$

Con estas distancias podemos calcular la distancia de la diagonal de la cara inferior del paralelepípedo utilizando el Teorema de Pitágoras utilizando las aristas paralelas a los ejes x e y.

$(\text{diagonal})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$

$(\text{diagonal})^2 = \Delta x_2 + \Delta y_2$

$\text{diagonal} = (\Delta x_2 + \Delta y_2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = (0{,}5143^2 + 0{,}7478^2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = (0{,}2645 + 0{,}5592)^{1/2}$

$\text{diagonal} = 0{,}8237^{1/2}$

$\text{diagonal} = 0{,}9076$

A continuación podemos definir el siguiente triángulo del cual conocemos el cateto opuesto y adyacente al ángulo α (**Figura 364**).

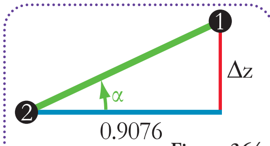


Figura 364.

Utilizando la función tangente podemos obtener el ángulo α:

$\text{tg}(\alpha) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$

$\alpha = \text{arctg}(\Delta z / 0{,}9076)$

$\alpha = \text{arctg}(0{,}4476 / 0{,}9076)$

$\alpha = \text{arctg}(0{,}4932)$

$\alpha = 26{,}2525°$

Planteamos el siguiente esquema que nos permitirá averiguar el ángulo β que necesitaremos para obtener las coordinadas finales en el eje z del hidrógeno (**Figura 365**).

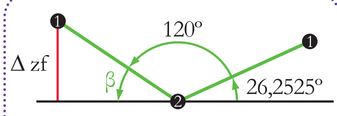


Figura 365.

Como sabemos que el ángulo β complementa a la suma de los otros dos, podemos plantear la siguiente ecuación:

$\beta + 120° + 26{,}2525° = 180°$

$\beta + 146{,}2525° = 180°$

$\beta = 180° - 146{,}2525°$

$\beta = 33{,}7475°$

Podemos calcular la longitud del enlace que representa la hipotenusa del triángulo que contiene al ángulo β. Nuevamente, plantearemos el Teorema de Pitágoras:

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$

$(\text{long. enlace})^2 = (\text{diagonal})^2 + \Delta z_2$

$\text{long. enlace} = ((\text{diagonal})^2 + \Delta z_2)^{1/2}$

$\text{long. enlace} = (0{,}9076^2 + \Delta z_2)^{1/2}$

$\text{long. enlace} = (0{,}9076^2 + 0{,}4476^2)^{1/2}$

$\text{long. enlace} = (0{,}8237 + 0{,}2003)^{1/2}$

$\text{long. enlace} = 1{,}0240^{1/2}$

$\text{long. enlace} = 1{,}0119$

Con este dato y el valor de la amplitud del ángulo β, podemos calcular las longitudes de los catetos del triángulo formado por el enlace oxígeno-hidrógeno, la diagonal de la cara inferior y Δz_f (**Figura 366**).

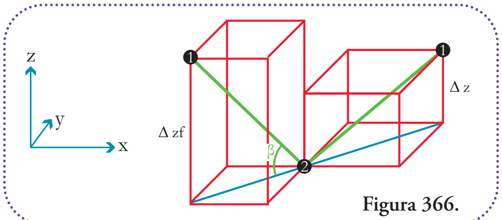


Figura 366.

Plantearemos una función trigonométrica para cada uno de los catetos. Para el cateto opuesto utilizaremos la función seno:

$$\mathrm{sen}\ (\beta) = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$$
$$\mathrm{sen}\ (\beta) = \Delta z_f / \text{long. enlace}$$
$$\mathrm{sen}\ (33{,}7475°) = (z_f - z_2) / 1{,}0119$$
$$\mathrm{sen}\ (33{,}7475°) = (z_f - 0{,}0000) / 1{,}0119$$
$$\mathrm{sen}\ (33{,}7475°) * 1{,}0119 = z_f$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$z_f = \mathrm{sen}\ (33{,}7475°) * 1{,}0119$$
$$z_f = 0{,}5555 * 1{,}0119$$
$$z_f = 0{,}5621$$

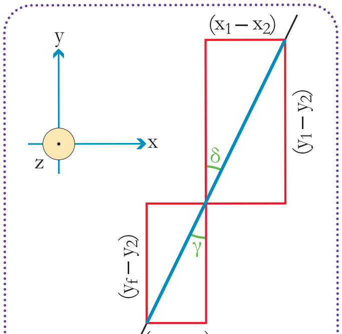


Figura 367.

Para calcular las otras dos coordenadas que nos faltan (x_f e y_f) observemos este esquema de las diagonales de las caras inferiores de los paralelepípedos definidos por las posiciones iniciales y finales del hidrógeno y la posición del oxígeno (**Figura 367**).

Dado que la rotación del hidrógeno es de 180°, la posición final va a estar contenida en el plano definido por la posición inicial, el oxígeno y el carbono. Como consecuencia, las diagonales de las caras inferiores de los paralelepípedos pertenecen a la misma recta y los ángulos γ y δ son opuestos por el vértice, por lo tanto de amplitudes iguales.

Podemos averiguar la amplitud utilizando la función tangente aplicada al ángulo δ:

$$\mathrm{tg}\ (\delta) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$
$$\delta = \mathrm{arctg}\ (\text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente})$$
$$\delta = \mathrm{arctg}\ ((x_1 - x_2) / (y_1 - y_2))$$
$$\delta = \mathrm{arctg}\ (\Delta x / \Delta y)$$
$$\delta = \mathrm{arctg}\ (0{,}5143 / 0{,}7478)$$
$$\delta = \mathrm{arctg}\ (0{,}6878)$$
$$\delta = 34{,}5202°$$

Por lo tanto:

$$\delta = \gamma = 34{,}5202°$$

Ahora todos los datos para encontrar las ecuaciones que nos permitan hallar x_f e y_f.

La primera ecuación que plantearemos será coseno del ángulo β para hallar la diagonal de la cara inferior del paralelepípedo que forman la posición final del hidrógeno y la posición del oxígeno (**Figura 368**).

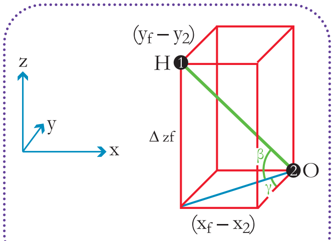


Figura 368.

$$\cos\ (\beta) = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$$
$$\cos\ (\beta) = \text{diagonal} / \text{long. enlace}$$
$$\cos\ (33{,}7475°) = \text{diagonal} / 1{,}0119$$
$$0.8315 = \text{diagonal} / 1{,}0119$$
$$0.8315 * 1{,}0119 = \text{diagonal}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\text{diagonal} = 0{,}8315 * 1{,}0119$$
$$\text{diagonal} = 0{,}8414$$

Ahora debemos tener cuidado al calcular las coordenadas x e y.

Notemos que tal como hemos definido las aristas paralelas a los ejes x e y las diferencias entre coordenadas deben ser negativas ya que el oxígeno se encuentra más hacia la derecha que el hidrógeno, esto es que se encuentra más hacia los valores positivos en el eje x y, por lo tanto, la coordenada $x_2 > x_f$. Podemos ver que se da lo mismo para el caso de las coordenadas en el eje y. Por lo dicho, las diferencias $x_f - x_2$ y $y_f - y_2$ darán por resultado un valor negativo, pero como las funciones trigonométricas están definidas a partir de longitudes de catetos y éstas son valores positivos, debemos considerar la obtención de la coordenada x_f e y_f agregando un signo menos (-) delante de la diferencia de coordenadas en x e y que definen el cateto adyacente y el cateto opuesto del triángulo que contiene al ángulo γ.

Para encontrar la coordenada en el eje x planteamos la función seno aplicada al ángulo γ:

$$\text{sen}\ (\gamma) = \text{cateto opuesto / hipotenusa}$$
$$\text{sen}\ (34{,}5202°) = -(x_f - x_2)\ /\ \text{diagonal}$$
$$\text{sen}\ (34{,}5202°) = -(x_f - 5{,}9728)\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}5667 = -(x_f - 5{,}9728)\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}5667 * 0{,}8414 = -(x_f - 5{,}9728)$$
$$0{,}5667 * 0{,}8414 = -x_f + 5{,}9728$$
$$0{,}4768 = -x_f + 5{,}9728$$
$$0{,}4768 - 5{,}9728 = -x_f$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$-x_f = 0{,}4768 - 5{,}9728$$
$$-x_f = -5{,}4960$$
$$x_f = 5{,}4960$$

También podemos plantear la función coseno aplicada a γ:

$$\cos\ (\gamma) = \text{cateto adyacente / hipotenusa}$$
$$\cos\ (34{,}5202°) = -(y_f - y_2)\ /\ \text{diagonal}$$
$$\cos\ (34{,}5202°) = -(y_f - (-5{,}3847))\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}8239 = -(y_f - (-5{,}3847))\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}8239 = -(y_f + 5{,}3847)\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}8239 = (-y_f - 5{,}3847)\ /\ 0{,}8414$$
$$0{,}8239 * 0{,}8414 = -y_f - 5{,}3847$$
$$0{,}6932 = -\ y_f - 5{,}3847$$
$$0{,}6932 + 5{,}3847 = -y_f$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$-y_f = 0{,}6932 + 5{,}3847$$
$$-y_f = 6{,}0779$$
$$y_f = -6{,}0779$$

Ya logramos nuestro objetivo tenemos los valores de las coordenadas de la posición final del hidrógeno.

Respuesta

Las coordenadas del hidrógeno del oxidrilo del metanol luego de la rotación de 180° a lo largo del eje carbono-oxígeno son:

$$x_f = 5{,}4960;\ y_f = -6{,}0779;\ z_f = 0{,}5621.$$

Resolución problema 10

Comenzaremos ubicando los tres átomos en un marco de referencia para observar cómo es el movimiento de rotación de 180°.

Observemos la relación entre las coordenadas.

Con respecto al eje x:

$$x_1 > x_2 > x_3$$

Con respecto al eje y:

$$y_1 > y_3 > y_2$$

Con respecto al eje z:

$$z_1 > z_2 > z_3$$

Si representamos estos tres átomos en el espacio podremos observar que el plano que delimitan no es perpendicular a ningún plano definido por los ejes del sistema de referencia (**Figura 369**).

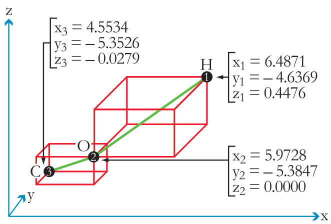


Figura 369.

Aplicaremos la metodología desarrollada en este capítulo que consiste en trazar ejes auxiliares paralelos a los ejes de coordenadas para rotar, adecuadamente, las posiciones de los átomos, así obtendremos triángulos rectángulos útiles para trabajar y averiguar las coordenadas, luego de la rotación pedida (**Figura 370**).

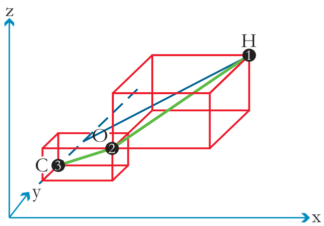


Figura 370.

En trazo grueso azul se puede observar el eje auxiliar paralelo al eje y. Luego trazamos un segmento entre la posición del átomo a rotar y el eje auxiliar. En este caso, el oxígeno y el hidrógeno. Como se puede observar, este segmento, es paralelo a una de las caras del paralelepípedo que es perpendicular al plano definido por los ejes x e y. Quedan definidos, entonces, los siguientes triángulos (**Figura 371**).

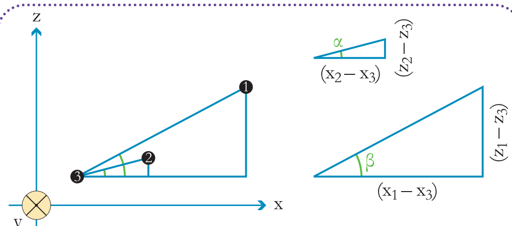


Figura 371.

Podemos calcular los ángulos α y β utilizando la función trigonométrica tangente.

Para el ángulo α:

tg (α) = cateto opuesto / cateto adyacente

$\mathrm{tg}\,(\alpha) = (z_2 - z_3) / (x_2 - x_3)$

$\alpha = \mathrm{arctg}\,((z_2 - z_3) / (x_2 - x_3))$

$\alpha = \mathrm{arctg}\,((0{,}0000 - (-0{,}0279)) / (5{,}9728 - 4{,}5534))$

$\alpha = \mathrm{arctg}\,(0{,}0279 / 1{,}4194)$

$\alpha = \mathrm{arctg}\,(0{,}0197)$

$\alpha = 1{,}1286°$

Para el ángulo β:

tg (β) = cateto opuesto / cateto adyacente

$\mathrm{tg}\,(\beta) = (z_1 - z_3) / (x_1 - x_3)$

$\beta = \mathrm{arctg}\,((z_1 - z_3) / (x_1 - x_3))$

$\beta = \mathrm{arctg}\,((0{,}4476 - (-0{,}0279)) / (6{,}4871 - 4{,}5534))$

$\beta = \mathrm{arctg}\,(0{,}4755 / 1{,}9337)$

$\beta = \mathrm{arctg}\,(0{,}2459)$

$\beta = 13{,}8149°$

La operación que haremos es la de aumentar la amplitud del ángulo α hasta que se convierta en un ángulo recto, o sea, que mida 90°, pero haremos esto incrementando, exactamente, en la misma medida al ángulo β. Por lo tanto, podemos plantear la siguiente ecuación que nos permitirá obtener el ángulo β'. (**Figura 372**).

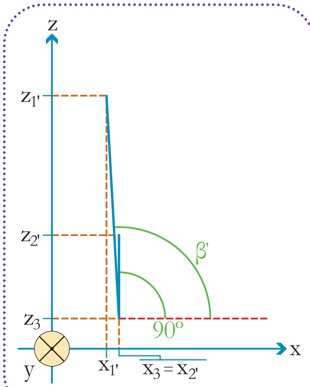


Figura 372.

Planteamos:

$\alpha - 90° = \beta - \beta'$

$\alpha - 90° - \beta = -\beta'$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$-\beta' = \alpha - 90° - \beta$

$\beta' = -\alpha + 90° + \beta$

$\beta' = -1{,}1286° + 90° + 13{,}8149°$

$\beta' = -1{,}1286° + 90° + 13{,}8149°$

$\beta' = 102{,}6863°$

Como la rotación es de 90° la posición con respecto al eje x del átomo de oxígeno es la misma que la del carbono, por lo tanto:

$$x_{2'} = x_3 = 4{,}5534$$

Además, como la rotación no afecta a la longitud de las hipotenusas, podemos calcular la coordenada $x_{1'}$ a partir de plantear el Teorema de Pitágoras del triángulo que contiene el ángulo β:

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$

$(\text{hipotenusa})^2 = (z_1 - z_3)^2 + (x_1 - x_3)^2$

$\text{hipotenusa} = ((z_1 - z_3)^2 + (x_1 - x_3)^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = ((0{,}4476 - (-0{,}0279))^2 + (6{,}4871 - 4{,}5534)^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = (0{,}4755^2 + 1{,}9337^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = (0{,}2261 + 3{,}7392)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = (3{,}9653)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = 1{,}9913$

Esta hipotenusa es de la misma longitud que la hipotenusa del siguiente triángulo (**Figura 373**).

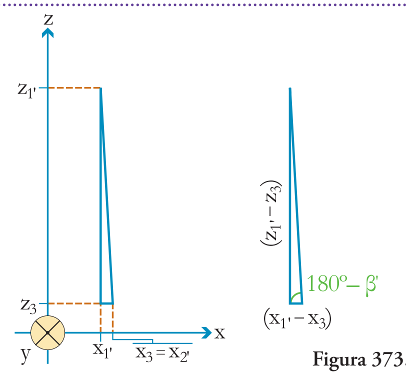


Figura 373.

Con la hipotenusa y el ángulo 180° – β' podemos averiguar los catetos que involucran a las coordenadas que deseamos averiguar.

Podemos plantear la función seno para averiguar la coordenada $z_{1'}$.

$$\text{sen}\ (180° - \beta') = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$$
$$\text{sen}\ (180° - 102{,}6863°) = (z_{1'} - z_3) / 1{,}9913$$
$$\text{sen}\ (77{,}3137°) = (z_{1'} - (-0{,}0279)) / 1{,}9913$$
$$\text{sen}\ (77{,}3137°) * 1{,}9913 = z1' + 0{,}0279$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$z_{1'} + 0{,}0279 = \text{sen}\ (77{,}3137°) * 1{,}9913$$
$$z_{1'} = \text{sen}\ (77{,}3137°) * 1{,}9913 - 0{,}0279$$
$$z_{1'} = 0{,}9756 * 1{,}9913 - 0{,}0279$$
$$z_{1'} = 1{,}9427 - 0{,}0279$$
$$z_{1'} = 1{,}9148$$

Ahora, plantearemos la función coseno para averiguar la coordenada $x_{1'}$.

$$\cos\ (180° - \beta') = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$$
$$\cos\ (180° - 102.6863°) = (x_{1'} - x3) / 1{,}9913$$
$$\cos\ (77{,}3137°) = (x_{1'} - 4{,}5534) / 1{,}9913$$
$$\cos\ (77{,}3137°) * 1{,}9913 = x_{1'} - 4{,}5534$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$x_{1'} - 4{,}5534 = \cos\ (77{,}3137°) * 1{,}9913$$
$$x_{1'} = \cos\ (77{,}3137°) * 1{,}9913 + 4{,}5534$$
$$x_{1'} = 0{,}2196 * 1{,}9913 + 4{,}5534$$
$$x_{1'} = 0{,}4373 + 4{,}5534$$
$$x_{1'} = 4{,}9907$$

Como esta rotación es paralela al plano definido por el eje x y el eje z, las coordenadas en y no se ve alterada por lo tanto:

$$y_{1'} = y_1 = -4{,}6369$$
$$y_{2'} = y_2 = -5{,}3847$$

Finalmente, calculamos la coordenada en z para el átomo de oxígeno, luego de la rotación ($z_{2'}$). Es la hipotenusa del triángulo que contenía al ángulo α sumada la coordenada z_3.

$$z_{2'} = z_3 + \text{hipotenusa}$$
$$z_{2'} = z_3 + ((\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2)^{1/2}$$
$$z_{2'} = z_3 + ((z_2 - z_3)^2 + (x_2 - x_3)^2)^{1/2}$$
$$z_{2'} = -0{,}0279 + ((0{,}0000 - (-0{,}0279))^2 + (5{,}9728 - 4{,}5534)^2)^{1/2}$$
$$z_{2'} = -0{,}0279 + (0{,}0279^2 + 1{,}4194)^2)^{1/2}$$
$$z_{2'} = -0{,}0279 + (0{,}0008 + 2{,}0147)^{1/2}$$
$$z_{2'} = -0{,}0279 + 2{,}0155^{1/2}$$
$$z_{2'} = -0{,}0279 + 1{,}4197$$
$$z_{2'} = 1{,}3918$$

Ahora estamos en la situación similar a la del ejercicio anterior: hay dos planos paralelos, el que contiene al átomo de hidrógeno y el que contiene a los átomos de carbono y oxígeno. Ambos planos son paralelos entre sí y perpendiculares al plano definido por los ejes x e y. (**Figura 374**). Como no hemos afectado al ángulo entre los enlaces carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno éste sigue valiendo 120°. Por lo tanto, luego de la rotación de 180° del hidrógeno alrededor del eje carbono-oxígeno, este ángulo no se alterará y el ángulo entre los enlaces oxígeno-hidrógeno en sus posiciones iniciales y finales será también de 120°.

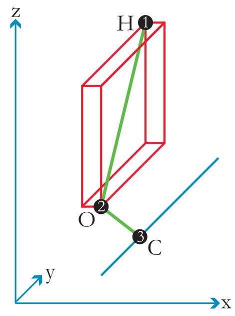


Figura 374.

El primer dato importante que debemos calcular en esta etapa, es el ángulo que forma el enlace hidrógeno-oxígeno con la cara inferior del paralelepípedo que definen, ya que nos indicará, si luego de la rotación, quedará por encima o por debajo del plano de dicha cara. Esto último sucederá si el ángulo (γ) resulta ser >60°.

Si observamos el paralelepípedo que forman las posiciones del hidrógeno y el oxígeno, luego de la rotación, observamos que el ángulo γ está comprendido por el enlace oxígeno-hidrógeno y la diagonal de la cara inferior (**Figura 375**). Por lo tanto, para averiguar γ comenzaremos por averiguar esta diagonal planteando el Teorema de Pitágoras

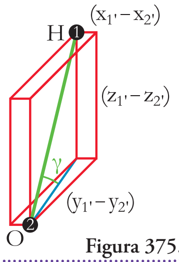


Figura 375.

$$(\text{diagonal})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$
$$\text{diagonal} = ((\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = ((y_{1'} - y_{2'})^2 + (x_{1'} - x_{2'})^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = ((-4{,}6369 - (-5{,}3847))^2 + (4{,}9907 - 4{,}5534)^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = (0{,}7478^2 + 0{,}4373^2)^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = (0{,}5592 + 0{,}1912)^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = 0{,}7504^{1/2}$$
$$\text{diagonal} = 0{,}8663$$

Podemos calcular γ utilizando la función trigonométrica tangente:

$$\text{tg}\ (\gamma) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$
$$\text{tg}\ (\gamma) = (z_{1'} - z_{2'}) / \text{diagonal}$$
$$\gamma = \text{arctg}\ ((z_{1'} - z_{2'}) / \text{diagonal})$$
$$\gamma = \text{arctg}\ ((1{,}9148 - 1{,}3918) / 0{,}8663)$$
$$\gamma = \text{arctg}\ (0{,}5230 / 0{,}8663)$$
$$\gamma = \text{arctg}\ (0{,}6037)$$
$$\gamma = 31{,}1194°$$

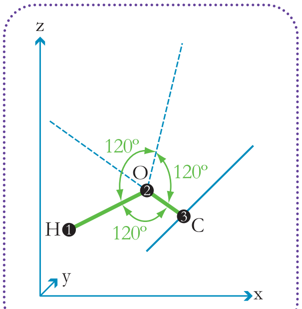


Figura 376.

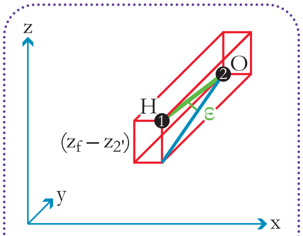


Figura 377.

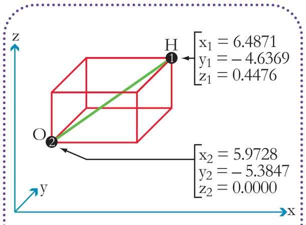


Figura 378.

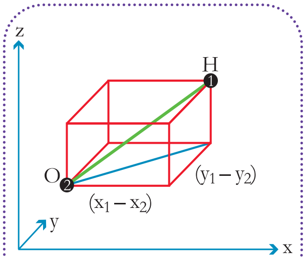


Figura 379.

Dado que $\gamma < 60°$ podemos hacer un esquema como en el caso del ejercicio anterior (**Figura 376**).

La nueva posición del hidrógeno determina un nue-vo paralelepípedo del cual podemos señalar un ángulo importante ε, que nos servirá para averiguar la coordenada $z_{f'}$ (**Figura 377**).

Podemos averiguar el ángulo ε planteando:

$\varepsilon+120°+\gamma=180°$

$\varepsilon=180°–120°–\gamma$

$\varepsilon= 80°–120°–31{,}1194°$

$\varepsilon=28{,}8806°$

Con el ángulo calculado ε y la longitud del enlace podemos obtener las coordenada $z_{f'}$. Calculemos la longitud del enlace oxígeno-hidrógeno a partir de las coordenadas iniciales (**Figura 378**)

Aplicaremos dos veces el Teorema de Pitágoras. Con la primera, averiguaremos la longitud de la diagonal de la cara inferior del paralelepípedo que determinan el hidrógeno y el oxígeno. El resultado lo utilizaremos en la segunda aplicación para averiguar, finalmente, la longitud del enlace. (**Figura 379**).

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$

$\text{hipotenusa} = ((\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = ((x_1 – x_2)^2 + (y_1 – y_2)^2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = ((6{,}4871 – 5{,}9728)^2 + (-4{,}6369 – (-5{,}3847))^2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = (0{,}5143^2 + 0{,}7478^2)^{1/2}$

$\text{diagonal} = (0{,}2645 + 0{,}5592)^{1/2}$

$\text{diagonal} = 0{,}8237^{1/2}$

$\text{diagonal} = 0{,}9076$

Finalmente, calcularemos la longitud del enlace planteando el Teorema de Pitágoras en el triángulo definido por la diagonal de la cara inferior (cateto mayor), la arista vertical que contiene al hidrógeno como uno de sus vértices (cateto menor) y el enlace (hipotenusa) (**Figura 380**).

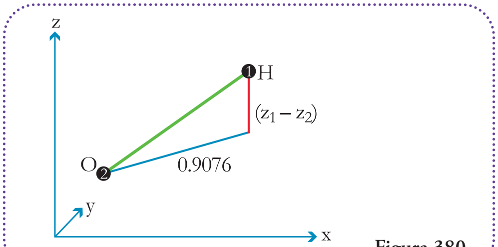


Figura 380.

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$

$\text{hipotenusa} = ((\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2)^{1/2}$

$\text{enlace} = ((z_1 – z_2)^2 + 0{,}9076^2)^{1/2}$

$\text{enlace} = ((0{,}4476 – 0{,}0000)^2 + 0{,}9076^2)^{1/2}$

$\text{enlace} = (0{,}4476^2 + 0{,}9076^2)^{1/2}$

$\text{enlace} = (0{,}2003 + 0{,}8237)^{1/2}$

$\text{enlace} = 1{,}0240^{1/2}$

$\text{enlace} = 1{,}0119$

Ahora que obtuvimos la longitud del enlace, podemos proceder a calcular la coordenada $z_{f'}$ utilizando la función trigonométrica seno aplicada al ángulo ε:

$\text{sen}(\varepsilon) = \text{cateto opuesto/hipotenusa}$

$\text{sen}(\varepsilon) = (z_{f'} – z_{2'})/\text{enlace}$

$\text{sen}(28{,}8806°) = (z_{f'}–1{,}3918)/1{,}0119$

$\text{sen}(28{,}8806°)*1{,}0119+1{,}3918 = z_{f'}$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$z_{f'} = \text{sen }(28{,}8806°) * 1{,}0119 + 1{,}3918$

$z_{f'} = 0{,}4830 * 1{,}0119 + 1{,}3918$

$z_{f'} = 0{,}4887 + 1{,}3918$

$z_{f'} = 1{,}8805$

Para averiguar las otras dos coordenadas recordemos la consideración hecha en el ejercicio anterior. Como la rotación es de 180º la nueva posición del hidrógeno cae dentro del plano que definían el carbono, el oxígeno y en hidrógeno en su posición inicial, por lo tanto podemos hacer el siguiente análisis de las caras inferiores de los paralelepípedos (**Figura 381**).

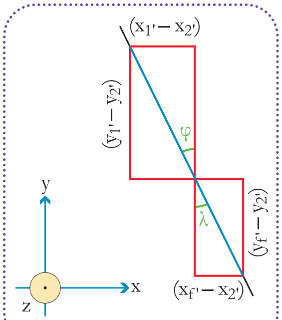


Figura 381.

Las diagonales de las caras inferiores de los paralelepípedos pertenecen a la misma recta; y los ángulos φ y λ son opuestos por el vértice, por lo tanto tienen amplitudes iguales.
Podemos averiguar la amplitud utilizando la función tangente aplicada al ángulo φ:

tg (φ) = cateto opuesto / cateto adyacente

φ = arctg (cateto opuesto / cateto adyacente)

$\varphi = \text{arctg}\,((x_{1'} - x_{2'}) / (y_{1'} - y_{2'}))$

φ = arctg ((4,9907 – 4,5534) / (-4,6369 – (-5,3847))

φ = arctg (0,4373 / 0,7478)

φ = arctg (0,5848)

φ = 30,3191°

Entonces

φ = λ = 30,3191°

Ahora bien, tenemos dos incógnitas que averiguar $x_{f'}$ e $y_{f'}$. En el siguiente triángulo la hipotenusa es la diagonal de la cara inferior del paralelepípedo definido por el oxígeno luego de la rotación y el hidrógeno luego de rotar 180°. Podemos averiguar esta longitud, primeramente, utilizando ε y la función coseno (**Figura 382**).

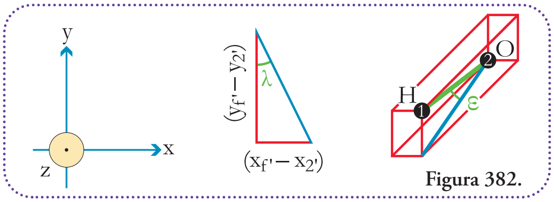


Figura 382.

cos (ε) = cateto adyacente / hipotenusa

cos (ε) = cateto adyacente / enlace

cos (28,8806°) = cateto adyacente / 1,0119

cos (28,8806°) * 1,0119 = cateto adyacente

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

cateto adyacente = cos (28,8806°) * 1,0119

cateto adyacente = 0,8756 * 1,0119

cateto adyacente = 0,8860

Y ahora conociendo la amplitud de λ = 30,3191° y la longitud que recién calculamos y que corresponde a la hipotenusa del triángulo que contiene a λ, planteamos las funciones trigonométricas seno y coseno para averiguar $x_{f'}$ e $y_{f'}$, respectivamente.
Para $x_{f'}$:

sen (λ) = cateto opuesto / hipotenusa

$\text{sen}\,(30{,}3191°) = (x_{f'} - x_{2'}) / 0{,}9341$

$\text{sen}\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 = x_{f'} - x_{2'}$

$\text{sen}\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 = x_{f'} - 4{,}5534$

$\text{sen}\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 + 4{,}5534 = x_{f'}$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$x_{f'} = \text{sen}\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 + 4{,}5534$

$x_{f'} = 0{,}5048 * 0{,}9341 + 4{,}5534$

$x_{f'} = 0{,}4715 + 4{,}5534$

$x_{f'} = 5{,}0249$

Para $y_{f'}$; notemos que las diferencias entre coordenadas $y_{f'}$ e y_2 deben ser negativas ya que el oxígeno se encuentra más hacia arriba que el hidrógeno, esto es que se encuentra más hacia los valores positivos en el eje y y, por lo tanto, la coordenada $y_2 > y_{f'}$. Como las funciones trigonométricas están definidas a partir de longitudes de catetos y éstas son valores positivos, debemos considerar la obtención de la coordenada $y_{f'}$ agregando un signo menos (-) delante de la diferencia coordenadas $y_{f'} - y_2$ para convertirla en un valor positivo que define la longitud del cateto mayor del triángulo que contiene al ángulo γ.
Planteamos la función coseno aplicada al ángulo γ, aplicando la consideración anterior:

cos (λ) = cateto adyacente / hipotenusa

$\cos\,(30{,}3191°) = -(y_{f'} - y_{2'}) / 0{,}9341$

$\cos\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 = -y_{f'} + y_{2'}$

$\cos\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 = -y_{f'} + (-5{,}3847)$

$\cos\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 = -y_{f'} - 5{,}3847)$

$\cos\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 + 5{,}3847 = -y_{f'}$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$-y_{f'} = \cos\,(30{,}3191°) * 0{,}9341 + 5{,}3847$

$-y_{f'} = 0{,}8632 * 0{,}9341 + 5{,}3847$

$-y_{f'} = 0{,}8063 + 5{,}3847$

$-y_{f'} = 6{,}1910$

$y_{f'} = -6{,}1910$

Ya tenemos las coordenadas del hidrógeno luego de rotarlo 180°, pero contenido en este plano perpendicular al plano definido por los ejes x e y:

$x_{f'} = 5{,}0249$

$y_{f'} = -6{,}1910$

$z_{f'} = 1{,}8805$

Debemos volver al hidrógeno y al oxígeno a su posición original revirtiendo la inclinación que le dimos al oxígeno. Observemos el triángulo que nos servirá para revertir la inclinación (**Figura 383**).
Conocemos la longitud de los catetos mayor y menor,

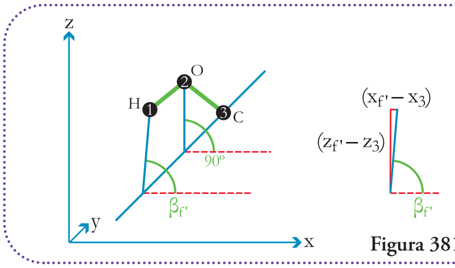


Figura 381.

por lo tanto, podemos calcular la hipotenusa y el ángulo complementario a $\beta_{f'}$.

Planteamos el Teorema de Pitágoras para averiguar la hipotenusa:

$(\text{hipotenusa})^2 = (\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2$

$\text{hipotenusa} = ((\text{cateto menor})^2 + (\text{cateto mayor})^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = ((x_{f'} - x_3)^2 + (z_{f'} - z_3)^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = ((5{,}0249 - 4{,}5534)^2 + (1{,}8805 - (-0{,}0279))^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = (0{,}4715^2 + 1{,}9084^2)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = (0{,}2223 + 3{,}6420)^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = 3{,}8643^{1/2}$

$\text{hipotenusa} = 1{,}9658$

Podemos plantear la función coseno al ángulo complementario a $\beta_{f'}$ y despejaremos la amplitud de $\beta_{f'}$:

$\cos(90º - \beta_{f'}) = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$

$\cos(90º - \beta_{f'}) = (z_{f'} - z_3) / 1{,}9658$

$90º - \beta f' = \arccos((z_{f'} - z_3) / 1{,}9658)$

$-\beta_{f'} = \arccos((z_{f'} - z3) / 1{,}9658) - 90º$

$-\beta_{f'} = \arccos((1{,}8805 - (-0{,}0279)) / 1{,}9658) - 90º$

$-\beta_{f'} = \arccos(1{,}9084 / 1{,}9658) - 90º$

$-\beta_{f'} = \arccos(0{,}9708) - 90º$

$-\beta_{f'} = 13{,}8801º - 90º$

$-\beta_{f'} = -76{,}1199º$

$-\beta_{f'} = 76{,}1199º$

Como deseamos revertir la inclinación que hicimos al oxígeno, debemos volver a inclinar el oxígeno al ángulo inicial α de 1,1286º y, como inclinaremos todo el conjunto de átomos, se debe cumplir la siguiente igualdad:

$\alpha = 90º - \text{ángulo de inclinación}$

$1{,}1286º = 90º - \text{ángulo de inclinación}$

$1{,}1286º = 90º - \text{ángulo de inclinación}$

$1{,}1286º - 90º = -\text{ángulo de inclinación}$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$-\text{ángulo de inclinación} = 1{,}1286º - 90º$

$-\text{ángulo de inclinación} = -88{,}8714º$

$-\text{ángulo de inclinación} = 88{,}8714º$

Este es el ángulo que inclinaremos al hidrógeno hasta su posición final, por lo tanto, la inclinación final será:
$\beta_{f'} - \text{ángulo de inclinación} = \beta_f$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación (**Figura 384**).

$\beta_f = 76{,}1199º - 88{,}8714º$

$\beta_f = -12{,}7515º$

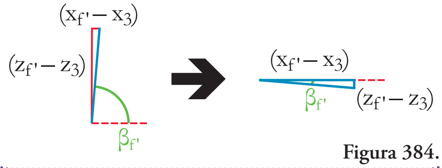


Figura 384.

El signo menos delante del ángulo indica que la apertura está medida desde la horizontal hacia abajo en el sentido de giro de las agujas del reloj.
De este nuevo triángulo tenemos el ángulo β_f y la longitud de su hipotenusa, por lo tanto, podemos conocer la longitud de sus catetos aplicando las funciones trigonométricas seno y coseno.
Aplicaremos la función seno al ángulo β_f sin cambiar su signo ya que se corresponde, perfectamente, con el hecho de que la coordenada z_f es menor que z_3, por lo tanto su resta será < 0.

$\text{sen}(\beta_f) = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$

$\text{sen}(\beta_f) = (z_f - z_3) / \text{hipotenusa}$

$\text{sen}(-12{,}7515º) = (z_f - (-0{,}0279)) / 1{,}9658$

$\text{sen}(-12{,}7515º) * 1{,}9658 = z_f - (-0{,}0279)$

$\text{sen}(-12{,}7515º) * 1{,}9658 = z_f + 0{,}0279)$

$\text{sen}(-12{,}7515º) * 1{,}9658 - 0{,}0279 = z_f$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$z_f = \text{sen}(-12{,}7515º) * 1{,}9658 - 0{,}0279$

$z_f = -0{,}2207 * 1{,}9658 - 0{,}0279$

$z_f = -0{,}4339 - 0{,}0279$

$z_f = -0{,}4618$

Para finalizar, averiguaremos la coordenada x_f planteando la función coseno del ángulo β_f:

$\cos(\beta_f) = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$

$\cos(\beta_f) = (x_f - x_3) / \text{hipotenusa}$

$\cos(-12{,}7515º) = (x_f - 4{,}5534) / 1{,}9658$

$\cos(-12{,}7515º) * 1{,}9658 = x_f - 4{,}5534$

$\cos(-12{,}7515º) * 1{,}9658 + 4{,}5534 = x_f$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$x_f = \cos(-12{,}7515°) * 1{,}9658 + 4{,}5534$$
$$x_f = 0{,}9753 * 1{,}9658 + 4{,}5534$$
$$x_f = 1{,}9172 + 4{,}5534$$
$$x_f = 6{,}4706$$

Como este procedimiento no altera la posición con respecto al eje y, podemos asegurar que:

$$y_f = y_{f'} = -6{,}1910$$

Respuesta:
Las coordenadas del hidrógeno, luego de realizar una rotación de 180° alrededor del eje que define el enlace carbono-oxígeno son:

$$x_f = 6{,}4706$$
$$y_f = -6{,}1910$$
$$z_f = -0{,}4618$$

Como las coordenadas iniciales fueron extraídas de un modelo de metanol creado con ACD/ChemSketch (Freeware) y guardado en formato MDL Molfile (metanol.mol) podemos verificar nuestra solución modificando las coordenadas del hidrógeno y observar el resultado en el programa de visualización DeepView / Swiss PDB-Viewer.
El archivo completo del modelo de metanol es bastante sencillo ya que se trata de una molécula constituida por seis átomos y cinco enlaces. El hidrógeno del oxidrilo está marcado con una línea gris (**Figura 385**).

```
  ACD/Labs12240815203D

  6  5  0  0  0  0  0  0  0  0  1 V2000
    4.5534   -5.3526   -0.0279 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    5.9728   -5.3847    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.2042   -5.3447   -1.0826 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.1529   -6.2515    0.4880 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.1939   -4.4366    0.4880 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.4871   -4.6369    0.4476 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  1  2  1  0  0  0  0
  3  1  1  0  0  0  0
  4  1  1  0  0  0  0
  5  1  1  0  0  0  0
  6  2  1  0  0  0  0
M  END
```

Figura 383.

El archivo modificado será igual a éste, salvo en las coordenadas de la sexta línea (**Figura 386**).

```
  ACD/Labs12240815203D

  6  5  0  0  0  0  0  0  0  0  1 V2000
    4.5534   -5.3526   -0.0279 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    5.9728   -5.3847    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.2042   -5.3447   -1.0826 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.1529   -6.2515    0.4880 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    4.1939   -4.4366    0.4880 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
    6.4706   -6.1910   -0.4618 H   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
  1  2  1  0  0  0  0
  3  1  1  0  0  0  0
  4  1  1  0  0  0  0
  5  1  1  0  0  0  0
  6  2  1  0  0  0  0
M  END
```

Figura 386.

Esta modificación la guardamos con otro nombre (por ejemplo, metanol_ejer.mol). Esta es la visión del primer modelo de metanol en el DeepView / Swiss PDB-Viewer (**Figuras 387 y 388**).

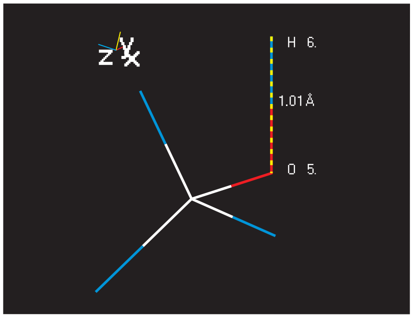


Figura 387.

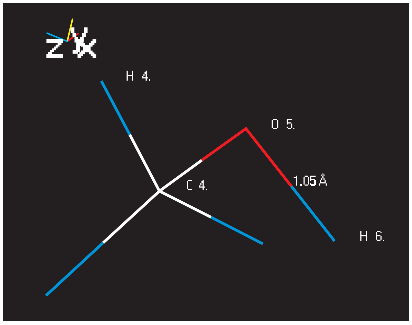


Figura 388.

Se puede observar, claramente, el cambio de posición, si medimos el ángulo diedro formado por el hidrógeno opuesto al hidrógeno del oxidrilo, el carbono, el oxígeno y el hidrógeno del oxidrilo, obtenemos el ángulo resultante con menos de 1 grado de error con la predicción de nuestros cálculos (**Figura 389**).

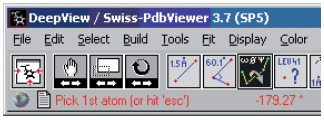


Figura 389.