

2

ENLACE QUÍMICO



1

ENLACE QUÍMICO: SUS TIPOS

En la unidad anterior hemos estudiado la estructura interna de los átomos: el núcleo y la corteza electrónica, y sus propiedades cuando están aislados. Pero en la naturaleza los átomos casi nunca se encuentran aislados, sino fuertemente unidos entre sí por medio de enlaces químicos.

Aunque en la naturaleza existen sustancias como los gases nobles y algún metal en estado gaseoso como el mercurio, que están constituidos por moléculas monoatómicas (es decir, por átomos aislados), en general las sustancias se encuentran formadas por agrupaciones de átomos 2, 3, 4, etc., e incluso millones de átomos, por ejemplo, el oxígeno (O_2), el agua (H_2O) o el diamante, formado por una red de millones de átomos de carbono unidos entre sí.

Se llama **enlace químico** a cualquiera de los mecanismos de unión química entre átomos.

Cuando se produce un enlace químico, el sistema formado por los átomos enlazados tiene menor energía potencial que los átomos separados; es decir, que la entidad formada (molécula, cristal...) es más estable que los átomos por separado.

A la capacidad de combinación que tiene un átomo se le llama **valencia**. Así diremos que un átomo es monovalente si sólo forma un enlace, divalente si forma dos, etc.

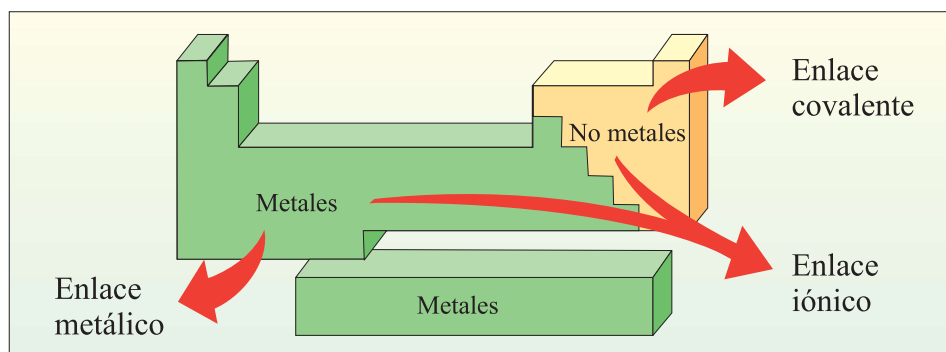
Tipos de enlace químico

Se conocen tres tipos de enlace químico: iónico, covalente y metálico

1. **Enlace iónico.** Es típico de la combinación de metales con no metales. Se produce por transferencia de electrones del metal al no metal, formándose iones que se atraen electrostáticamente. Ejemplos: cloruro de sodio ($NaCl$), yoduro de plomo (PbI_2), etc.

2. **Enlace covalente.** Es característico de las uniones entre elementos no metálicos. La unión entre átomos se produce por compartición de electrones. Ejemplos: oxígeno (O_2), agua (H_2O), metano (CH_4), etc.

3. **Enlace metálico.** Como su nombre indica es típico de los metales, ya sea entre átomos del mismo elemento o entre átomos de elementos diferentes. Se produce por compartición de electrones entre muchos átomos lo que da lugar a electrones deslocalizados. Ejemplos: sodio (Na), hierro (Fe), aluminio (Al), etc.



Naturaleza electrónica del enlace químico

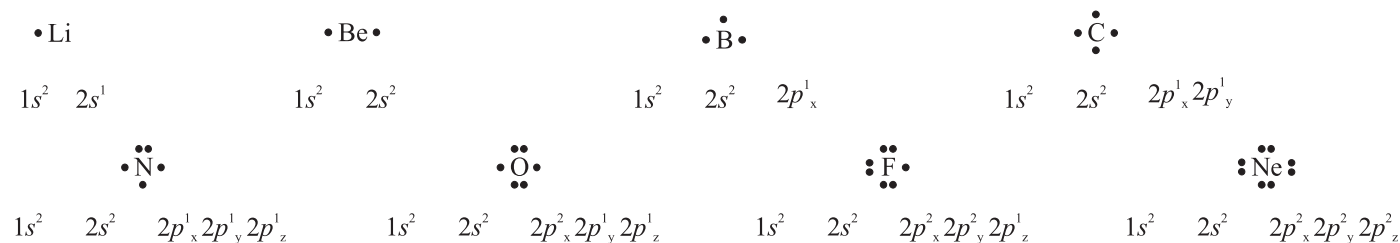
Lewis, Laugmur y Kossel propusieron una naturaleza electrónica para el enlace químico, relacionando la actividad química con la estructura electrónica.

Lewis dividió a los electrones del átomo en dos grupos:

- Electrones internos.
- Electrones de valencia: electrones de la capa más externa del átomo

Sólo los electrones de valencia eran responsables del enlace. Por ello con objeto de destacar los electrones de valencia, se utilizan los llamados diagramas de puntos de Lewis, en los que figura el símbolo del elemento rodeado por tantos puntos como electrones de valencia posea.

El número de electrones de la capa más externa es igual al número de grupo de la Tabla Periódica al que pertenece el elemento, esta regla se cumple para los elementos representativos. Así, por ejemplo, los diagramas de puntos de los elementos del segundo período son:



Los gases nobles presentan una distribución electrónica de máxima estabilidad, con los orbitales s y p de valencia ocupados por completo (s^2p^6); es decir, con 8 electrones (excepto, naturalmente, el He). Los demás elementos poseen incompletos sus niveles de valencia, y de ahí su mayor o menor reactividad.

En general, cuando se unen dos elementos representativos, tienden ambos a alcanzar estructura de gas noble, bien por captación o cesión de electrones (enlace iónico), bien compartiendo uno o varios pares de ellos (enlace covalente). Esta observación, establecida por Kossel y Lewis (1916), se conoce como regla del octeto:

Los átomos tienden a ganar, a perder o a compartir electrones hasta quedar rodeados de ocho electrones de valencia.

Como los átomos del gas noble helio sólo tiene dos electrones con los que completa su capa de valencia, átomos como los de hidrógeno o los de litio tienden a rodearse de dos en lugar de ocho electrones.

La regla del octeto, aunque muy útil, tiene muchas excepciones, como vamos a ver. Se cumple, y no siempre, en los átomos incluidos en los tres primeros períodos.

Las **limitaciones** de esta regla son evidentes:

• **Octeto expandido:** algunos elementos a partir del tercer período, al tener orbitales d , pueden rodearse de más de ocho electrones; por ejemplo, en el PCl_5 el fósforo está unido con cinco átomos de cloro por lo que tendrá diez electrones a su alrededor.

• **Octeto incompleto:** algunos elementos se estabilizan con menos de ocho electrones a su alrededor, por ejemplo el BF_3 en donde el boro está rodeado sólo por seis electrones.

Sean unas u otras configuraciones, la formación espontánea de un enlace es una

manifestación de la tendencia de cada átomo a alcanzar la ordenación electrónica **más estable** posible. Es decir, la molécula formada representa un estado de **menor energía** que los átomos aislados.

A.1.- Tenemos tres elementos cuyo nivel de valencia es: 1) ns^2 ; 2) ns^2p^6 ; 3) ns^2p^4 . Explica la tendencia a captar o perder electrones de cada uno de ellos.

2

ENLACE IÓNICO

Cuando se encuentra un elemento muy electronegativo (p. ej., Cl) con otro de carácter muy poco electronegativo (electropositivo), (p. ej., Na), es decir, dos elementos de **electronegatividad muy diferente**, se forma entre ellos un **enlace iónico**.

Ocurre entre ellos una transferencia de uno o varios electrones del átomo del elemento de baja electronegatividad al de alta, con lo que se forman los iones de los respectivos elementos: el positivo o **cation** y el negativo o **anión**, que quedan unidos por **atracción electrostática**. Se forma así una red cristalina en la que un ion se rodea de otros de signo contrario constituyendo una red ordenada que se extiende indefinidamente por el espacio. En esto consiste el enlace iónico.

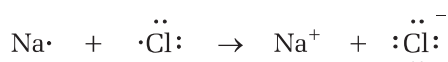
Por ejemplo, veamos cómo se formaría el enlace en el cloruro de sodio (NaCl):

Átomos neutros:

Na ($Z = 11$): $1s^2 2s^2 p^6 3s^1$

Cl ($Z = 17$): $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$

Se produce la transferencia de un electrón del átomo de sodio al átomo de cloro, formándose los iones:



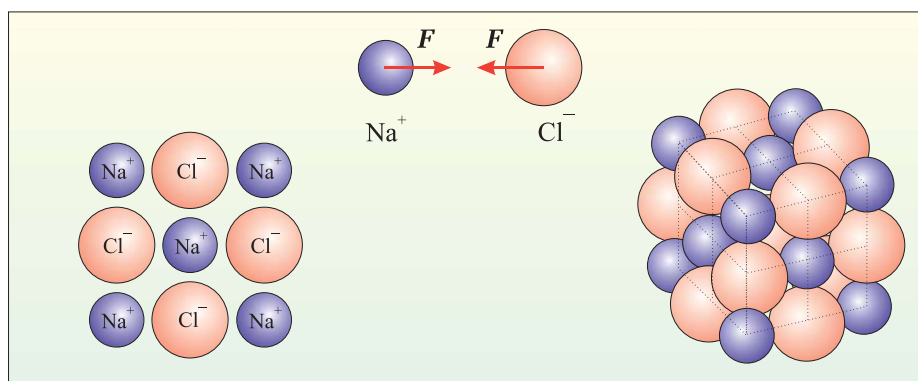
Iones estables formados:

Na^+ ($Z = 11$): $1s^2 2s^2 p^6$; que tiene configuración electrónica de gas noble [Ne]

Cl^- ($Z = 17$): $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$; que tiene configuración electrónica de gas noble [Ar]

Llamamos **electrovalencia** al número de electrones que un átomo gana o pierde para convertirse en un ion.

Un enorme número de cationes y aniones se atraen electrostáticamente, dando lugar a una estructura tridimensional ordenada de iones llamada **cristal iónico**.



Estructura cristalina del NaCl

Cada ion está rodeado de iones de signo contrario y ejerce una atracción sobre ellos, pero al mismo tiempo una repulsión sobre los iones de igual signo. Cuando se forma el enlace se alcanza un equilibrio entre las atracciones y las repulsiones, formándose el compuesto iónico que es más estable que los átomos por separado.

El número de iones que rodea a cada ion de signo contrario se llama **índice de coordinación** de este último, I_c . En el NaCl, para cada ion $I_c = 6$.

El tipo de red depende del tamaño relativo de los iones y del número de cargas de estos. En el caso del NaCl, donde el radio del ion Cl^- es casi el doble del Na^+ , alrededor del Na^+ sólo pueden situarse seis iones Cl^- ; es decir, $I_c(\text{Na}^+) = 6$. Como, además, tiene que haber igual número de iones Na^+ y Cl^- , esto impone también que $I_c(\text{Cl}^-) = 6$.

De todo ello resulta una red en la que cada ion ocupa el centro de un octaedro regular, en cuyos seis vértices se sitúan iones de signo contrario. Esta propiedad geométrica la cumple una red cúbica centrada en las caras.

Finalmente, podemos indicar que los cristales iónicos están formados por un altísimo número de cationes y aniones que se rodean mutuamente atraídos por fuerzas eléctricas y por tanto, en estas sustancias **no podemos hablar de moléculas**, formadas por un conjunto limitado de átomos, ya que, en todo caso, sería todo el cristal una gran macromolécula. Por ello, la fórmula de una sustancia iónica sólo indica la proporción entre cationes y aniones que existe en el cristal iónico.

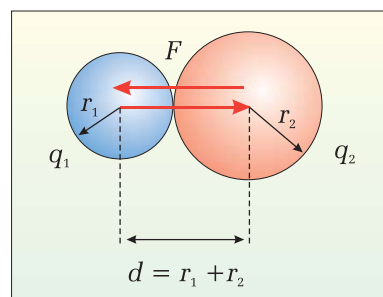
Cuando se forma el cristal a partir de los iones aislados, se libera una gran cantidad de energía, ya que el cristal iónico es mucho más estable que los iones sueltos. A esta energía desprendida se le llama **energía reticular o de red**. La podemos definir como sigue:

La **energía reticular o de red**, E_r , de una sustancia iónica es la energía desprendida en la formación de un mol de compuesto iónico sólido a partir de los correspondientes iones en fase gaseosa.

Como en el enlace iónico los iones se atraen por fuerzas electrostáticas que se pueden calcular mediante la ley de Coulomb:

$$F = K \frac{q_1 \cdot q_2}{d^2}$$

Podemos deducir que estas fuerzas serán tanto mayores cuanto mayor sea la carga de los iones y menor la distancia que los separa. Por tanto, la energía reticular será tanto mayor cuanto más lo sean las cargas de los iones y menor sea su tamaño.



A.2*.- Supongamos que los sólidos cristalinos CsBr, NaBr y KBr cristalizan con el mismo tipo de red.

- Ordénalos de mayor a menor según su energía reticular. Razona la respuesta.
- Justifica cuál de ellos será menos soluble en agua.

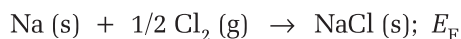
2.1 Ciclo de Born-Haber

El ciclo de Born-Haber es un artificio teórico que se utiliza para calcular la energía reticular o, con más asiduidad, la afinidad electrónica, dado que es difícil medirla por métodos directos.

Cuando realizamos una reacción de formación o síntesis de una sustancia iónica, se desprende energía, que para un mol de compuesto iónico, formado a partir de las sustancias simples que correspondan, denominamos energía de formación. La estu-

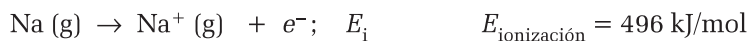
diaremos con más detalle en próximos capítulos.

Vamos a estudiar el caso concreto del NaCl: la reacción de formación será:

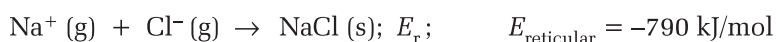


Podemos imaginar que el proceso se realiza en varios pasos:

Para formar los iones Na^+ y Cl^- , el metal habrá de separar sus átomos entre sí (sublimación), y luego perder un electrón cada uno; el no metal, tendrá, primero, que romper la molécula (disociación) y, a continuación, captar un electrón cada átomo. Esto es:



Una vez que tenemos los iones Na^+ (g) y Cl^- (g), su unión dará lugar al compuesto iónico y se liberará la correspondiente energía reticular:



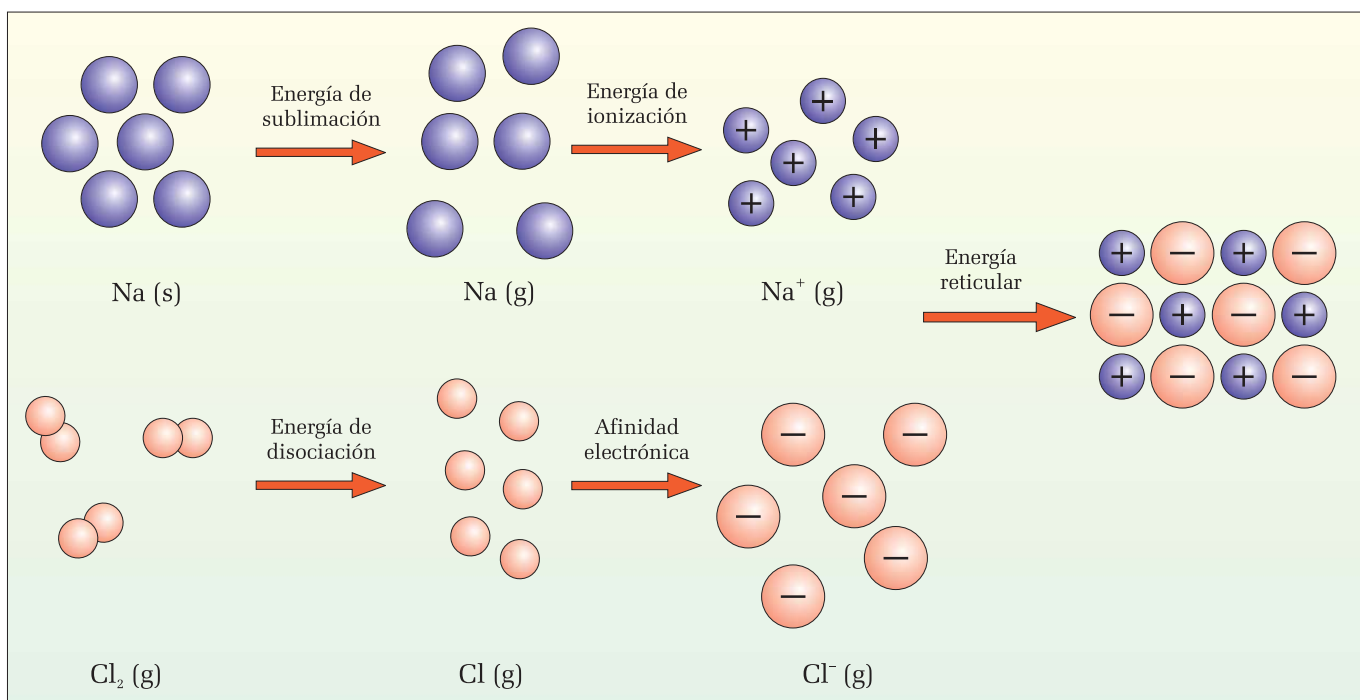
Como partimos de la misma situación: sodio en estado sólido y cloro en estado gaseoso y llegamos al mismo final: el cloruro de sodio sólido, la energía puesta en juego por ambos caminos debe ser la misma según el principio de conservación. Podemos escribir, por tanto, la siguiente ecuación:

$$E_F = E_S + E_i + 1/2 E_d + E_{af} + E_r$$

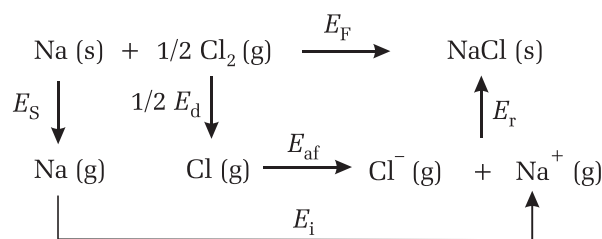
$$E_F = 109 + 496 + 1/2 \cdot 244 + (-348) + (-790) = -411 \text{ kJ}$$

Por lo que la energía de formación del NaCl es: $E_F = -411 \text{ kJ/mol}$

El proceso de formación del NaCl sólido a partir de sus elementos, se puede esquematizar como se muestra en la figura:



El desarrollo que hemos seguido constituye lo que se llama **ciclo de Born-Haber** (más adelante, veremos que es un caso particular de la ley de Hess). La figura muestra un diagrama energético del proceso seguido.

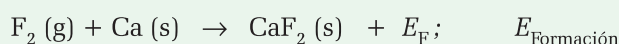


$$E_F = E_S + E_i + \frac{1}{2}E_d + E_{af} + E_r$$

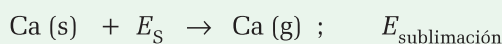
EJEMPLO 1

Indica cómo aplicarías el ciclo de Born-Haber para el cálculo de la energía reticular del fluoruro de calcio.

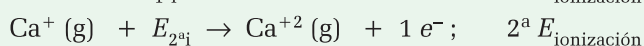
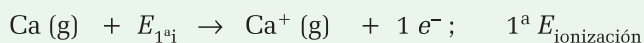
En primer lugar escribimos la reacción macroscópica de formación que tiene lugar:



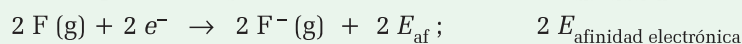
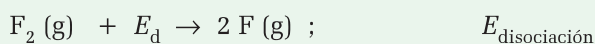
Las sustancias implicadas deben estar en estado gaseoso antes de ganar o perder electrones, por lo que la primera etapa a considerar es la sublimación del calcio:



El calcio cederá dos electrones para quedar con estructura estable s^2p^6 mediante dos etapas de ionización sucesivas, ya que como vimos en el capítulo anterior la energía necesaria para sacar el segundo electrón es mayor que para el primero:



Las siguientes etapas tendrían que ver con la disociación y posterior ionización del flúor:



Por último, la etapa de formación del cristal:



Sumando las ecuaciones anteriores observamos que se obtiene la reacción macroscópica de formación del fluoruro de calcio, por tanto podemos escribir que:

$$E_F = E_S + E_{1^{a_i}} + E_{2^{a_i}} + E_d + 2E_{af} + E_r$$

$$E_r = E_F - E_S - E_{1^{a_i}} - E_{2^{a_i}} - E_d - 2E_{af}$$

A.3.- A partir de los datos que se dan a continuación, calcula la energía reticular del $\text{AlCl}_3 \text{ (s)}$ mediante el ciclo de Born-Haber.

Datos: calor estándar de formación del $\text{AlCl}_3 \text{ (s)} = -704,2 \text{ kJ mol}^{-1}$; calor de sublimación del $\text{Al (s)} = 330 \text{ kJ mol}^{-1}$; energía de disociación del $\text{Cl}_2 \text{ (g)} = 244 \text{ kJ mol}^{-1}$; 1^a energía de ionización del $\text{Al (g)} = 577,6 \text{ kJ mol}^{-1}$; 2^a energía de ionización del $\text{Al (g)} = 1817 \text{ kJ mol}^{-1}$; 3^a energía de ionización del $\text{Al (g)} = 2745 \text{ kJ mol}^{-1}$; afinidad electrónica del $\text{Cl (g)} = -348 \text{ kJ mol}^{-1}$.

2.2 Propiedades de los compuestos iónicos

Puntos de fusión y ebullición y solubilidad

El enlace iónico es un enlace fuerte y se necesita mucha energía para romperlo y separar los iones de la red cristalina. La ruptura de la red se puede producir por:

1. Por calentamiento, el compuesto pasará primero, de sólido a líquido y, si se sigue calentando, de líquido a gas.

2. Por disolución, se produce el fenómeno conocido como solvatación, que consiste en que las moléculas de disolvente rodean a los iones y los separan de la estructura cristalina.

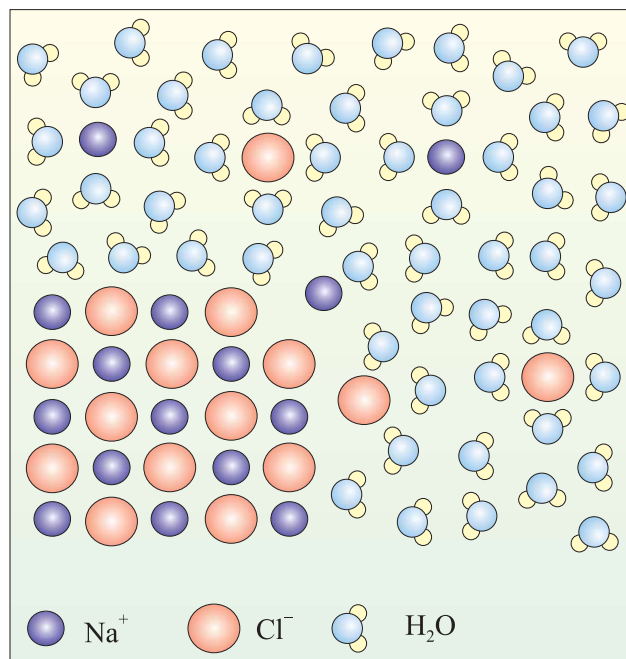
El primer método requiere altas temperaturas por lo que los compuestos iónicos tendrán puntos de fusión y ebullición elevados; el segundo exige disolventes muy polares, como el agua.

En ambos casos, se destruye el cristal iónico y habrá que aportar una gran energía: la energía de red. Por ello, los puntos de fusión y ebullición aumentan y la solubilidad en agua disminuye al aumentar la carga de los iones y al disminuir el radio iónico.

A.4.- Escribe las fórmulas de tres sales iónicas formadas con iones de los grupos 1 y 17 de la Tabla periódica y ordénalas según su solubilidad en agua. Justifica dicho orden.

A.5.- Ordenar las siguientes sustancias iónicas según sus puntos de fusión creciente y justificar dicha ordenación: KCl, CsI, CsCl, BeO.

A.6.- Justifica los valores que aparecen en la tabla de la derecha, respecto a los puntos de fusión de los óxidos de magnesio y calcio.



Solvatación (hidratación) del cloruro de sodio

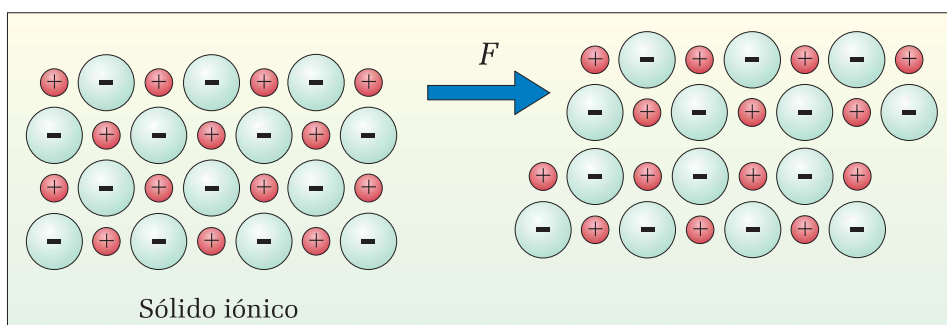
Compuesto	E_r (kJ/mol)	P. F. (°C)
NaF	923	993
NaCl	790	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KF	821	858
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgCl ₂	2326	714
CaCl ₂	2223	782
MgO	3890	2800
CaO	3401	2614

Energías reticulares y puntos de fusión de algunos compuestos iónicos

La dureza es la dificultad que opone una sustancia a ser rayada. Por tanto, rayar una sustancia es romper enlaces. La dureza se mide con la escala de Mohs, que va del 1 al 10. El diamante, valor 10, es la sustancia más dura que hay.

Propiedades mecánicas

Referente a las propiedades mecánicas, los sólidos iónicos son **duros**, lo que revela fuerzas elevadas entre los iones, pero al mismo tiempo **quebradizos (frágiles)**. Esto se debe a que, al ser golpeado y distorsionarse el cristal, se produce una aproximación entre iones del mismo signo, que se repelen entre sí.



Conductividad eléctrica

Los sólidos iónicos son malos conductores, puesto que los electrones están firmemente sujetos por los iones, los cuales permanecen fijos en la red. En cambio, en estado líquido (fundidos), al poder moverse los iones, conducen la corriente eléctrica (conducción electrolítica).

Disueltos en agua también conducen la corriente eléctrica, puesto que los iones han sido separados de la red y también se encuentran libres para moverse. Cualquier sustancia que se comporte así se dice que es un **electrólito**; en caso contrario, es un **no electrólito**.

3

ENLACE COVALENTE

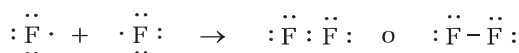
3.1 Teoría de Lewis

La mayoría de las sustancias con las que tratamos cotidianamente (el agua, el oxígeno, el azúcar, la cera, los plásticos) suelen estar formadas por **moléculas**. Aunque el concepto de molécula se remonta al siglo XVII, no fue sino a principios del siglo XX que los químicos entendieron cómo y por qué se forman las moléculas. El primer avance importante surgió con la proposición de **Gilbert Lewis** de que la formación de un enlace químico implica que los átomos compartan electrones. Lewis describió la formación de un enlace químico en el hidrógeno como:



Este tipo de apareamiento de electrones es un ejemplo de enlace covalente, un enlace en el que dos electrones son compartidos por dos átomos. Los compuestos covalentes son aquellos que sólo contienen enlaces covalentes. Para simplificar, el par de electrones compartido se representa a menudo como una sola línea. Así, el enlace covalente de la molécula de hidrógeno se puede escribir como H-H. En el enlace covalente, cada electrón del par compartido es atraído por los núcleos de ambos átomos. Esta atracción mantiene unidos a los dos átomos de H, y es la responsable de la formación de enlaces covalentes en otras moléculas.

En los enlaces covalentes entre átomos polielectrónicos sólo participan los electrones de valencia. Considérese la molécula de flúor, F_2 . La configuración electrónica del F es $1s^2 2s^2 2p^5$. Los electrones 1s son de baja energía y pasan la mayor parte del tiempo cerca de núcleo, por lo que no participan en la formación del enlace. En consecuencia, cada átomo de F tiene siete electrones de valencia (los electrones 2s y 2p). Sólo hay un electrón desapareado en el F, de modo que la formación de la molécula de F_2 se puede representar como:



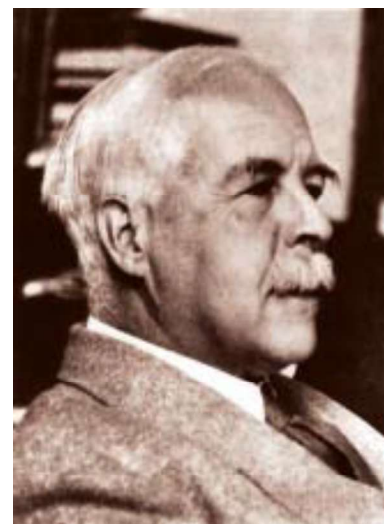
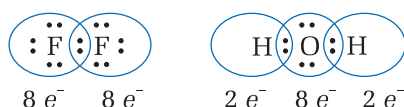
Observa que en la formación de la molécula de diflúor, F_2 , sólo participan dos electrones de valencia. Los demás electrones **no enlazantes** se denominan **pares libres**, es decir, pares de electrones de valencia que no participan en la formación del enlace covalente. Así, cada átomo de flúor en F_2 tiene tres pares libres de electrones.

Consideremos ahora la estructura de Lewis para la molécula de agua. La figura muestra la estructura de Lewis para el oxígeno, con dos electrones desapareados, de modo que se espera que el oxígeno pueda formar dos enlaces covalentes. Como el hidrógeno tiene un solo electrón, sólo puede formar un enlace covalente. De modo que la estructura de Lewis para el agua es:

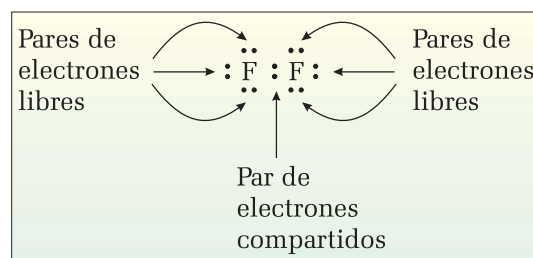


En este caso, el átomo de O tiene dos pares de electrones libres, mientras que el átomo de hidrógeno no tiene pares libres porque usó su único electrón para formar un enlace covalente.

En las moléculas de F_2 y H_2O los átomos de F y O adquieren la configuración de gas noble debido a que comparten electrones:



Gilbert N. Lewis (1875-1946)



La formación de estas moléculas ilustra la **regla del octeto**, formulada por Lewis: un átomo diferente del hidrógeno tiende a formar enlaces hasta que se rodea de ocho electrones de valencia, es decir, un enlace covalente se forma cuando no hay suficientes electrones para que cada átomo individual tenga el octeto completo. Al compartir electrones en un enlace covalente, los átomos individuales pueden completar sus octetos. Para el hidrógeno el requisito es que obtenga la configuración electrónica del helio, o un total de dos electrones.

La regla del octeto funciona principalmente para los elementos del segundo periodo de la tabla periódica. Estos elementos sólo tienen subniveles $2s$ y $2p$, los cuales pueden contener un total de ocho electrones. Cuando un átomo de uno de estos elementos forma un compuesto covalente, puede obtener la configuración electrónica de gas noble [Ne] al compartir electrones con otros átomos del mismo compuesto. Posteriormente se analizarán varias excepciones importantes de la regla del octeto que darán más información acerca de la naturaleza del enlace químico.

Enlaces múltiples

Los átomos pueden formar distintos tipos de enlaces covalentes. En un **enlace sencillo**, dos átomos se unen por medio de un par de electrones. En muchos compuestos se forman enlaces múltiples, es decir, enlaces formados cuando dos átomos comparten dos o más pares de electrones. Si dos átomos comparten dos pares de electrones, el enlace covalente se denomina **enlace doble**. Estos enlaces se encuentran en moléculas como el oxígeno (O_2) y el dióxido de carbono (CO_2):



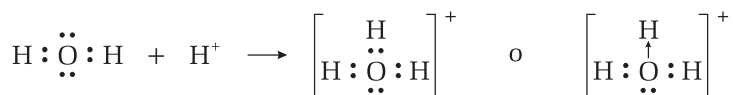
Un triple enlace surge cuando dos átomos comparten tres pares de electrones, como en la molécula de nitrógeno (N_2) y en la de acetileno (C_2H_2):



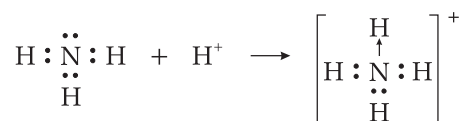
Enlace covalente coordinado o dativo

Puede suceder que el par de electrones sea suministrado por un solo átomo, y el enlace se llama entonces covalente coordinado o dativo (suele representarse por una flechita que sale del átomo donador). Es el caso, por ejemplo, de los iones oxonio y amonio:

Ion oxonio (H_3O^+):



Ion amonio (NH_4^+):



Conviene decir que, una vez establecido, el enlace covalente coordinado es idéntico a los demás. La distinción se lleva a cabo para contabilizar mejor los electrones de valencia y asignar cargas.

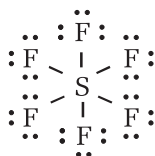
Excepciones a la regla del octeto

Como se mencionó antes, la regla del octeto se aplica, sobre todo, a los elementos del segundo período, pues ya hemos visto que en el primero (H y He) el número máximo de electrones a alcanzar es de dos. Pero incluso en el segundo período, grupos 2A y 3A, se registran excepciones, apareciendo lo que se denomina **octeto incompleto**. Así, la molécula BF_3 es:



donde el átomo de B ($3e^-$ de valencia) se encuentra rodeado de seis electrones.

También se presentan excepciones con los elementos del tercer período, debidas al fenómeno contrario: el **octeto expandido**. Por ejemplo, la molécula SF_6 es:



donde el átomo de S ($6e^-$ de valencia) se encuentra rodeado de 12 electrones.

A.7.- Representa mediante un diagrama de puntos las siguientes moléculas:

a) PCl_3 ; b) CH_3CH_3 ; c) Cl_2 ; d) CaCl_2 ; e) SiO_2 .

Indica si alguna de las tres primeras tiene pares de electrones no enlazantes.

A.8.- Indicar el número de pares de electrones enlazantes y no enlazantes en el entorno del átomo central de las siguientes moléculas: H_2O , PBr_3 , BCl_3 , CO_2 .

A.9.- Explicar, mediante diagramas de puntos o de Lewis, la formación de las siguientes moléculas: PH_3 ; H_2S ; BaS ; MgF_2 ; CH_3COCH_3 .

3.2 Geometría de las moléculas

Tal como acabamos de ver, la teoría de Lewis no indica nada acerca de la geometría de las moléculas. ¿Por qué, por ejemplo, la molécula F_2 es lineal; H_2O , angular; NH_3 , piramidal; CH_4 , tetraédrica; etc.?

La forma de una molécula es consecuencia de la distribución espacial de sus enlaces y de los ángulos de enlace, y estos, lo mismo que las longitudes de los enlaces, se determinan experimentalmente. Es importante conocer la geometría de las moléculas, porque justifica algunas de las propiedades de las sustancias.

Hay un procedimiento sencillo que permite predecir la geometría si se conoce el número de electrones que rodean el átomo central. Es el modelo de las **repulsiones entre pares de electrones de la capa de valencia**, conocido también por sus siglas, RPECV.

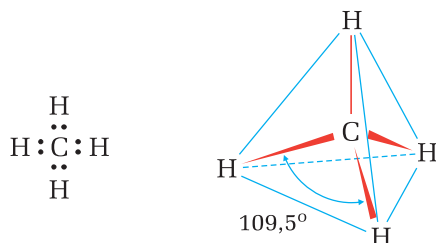
Este modelo, basado en simples ideas electrostáticas, supone que los distintos pares de electrones de valencia que rodean el átomo central de una molécula, sean enlazantes o no enlazantes, se repelen entre sí, y adoptan la distribución más alejada posible en el espacio.

Por ello, lo primero que debe hacerse es representar la molécula que se estudia mediante una estructura de Lewis.

Al aplicar este método pueden presentarse dos situaciones, según que el átomo central tenga o no pares de electrones no enlazantes.

Moléculas cuyo átomo central carece de pares de electrones no enlazantes

Si consideramos la molécula de metano (CH_4), los 4 pares de electrones de valencia que rodean el átomo de C estarán distribuidos en los vértices de un tetraedro, formando cuatro enlaces covalentes con los cuatro átomos de H en dichas posiciones. La molécula, pues, tendrá una geometría **tetraédrica**, tal y como se aprecia en la figura.

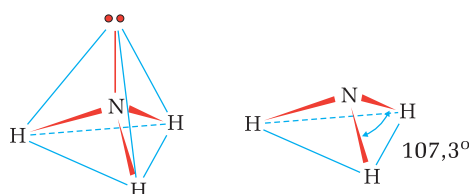


En la tabla 1 se muestran cinco posibles distribuciones de pares electrónicos alrededor del átomo central. Como resultado de la repulsión mutua los pares electrónicos se alejan lo máximo posible entre sí.

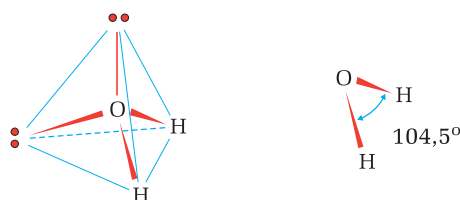
Moléculas cuyo átomo central tiene uno o más pares de electrones no enlazantes

Veamos ahora moléculas en las que el átomo central tiene algún par, no enlazante, como, por ejemplo las moléculas NH_3 y H_2O .

En el NH_3 , de los cuatro pares de electrones que rodean tetraédricamente el N, uno queda sin formar enlace, y los tres restantes forman los tres enlaces de la molécula, que será, pues, **piramidal trigonal** (es como si a la molécula CH_4 le faltara un H). Es decir:



En el H_2O , el O deja dos de los cuatro pares sin formar enlace, y dedica los otros a sus dos enlaces, resultando la molécula **angular** (es como si a la molécula CH_4 le faltaran dos H). Es decir:



En ambos casos, la desviación del ángulo teórico de los enlaces ($109,5^\circ$) se explica considerando que los pares de electrones no enlazantes están más extendidos, y, por tanto, repelen más a los pares vecinos.

Así, la molécula H_2O , que tiene dos, cerrará por repulsión su ángulo más que la de NH_3 , que sólo tiene uno (resultando $104,5^\circ$ y $107,3^\circ$ respectivamente).

En la tabla 2 se muestra la geometría de moléculas sencillas en las que el átomo central tiene uno o más pares de electrones libres o no enlazantes.

Tabla 1. Distribución de los pares electrónicos alrededor de un átomo central que no tiene pares de electrones libres

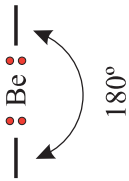
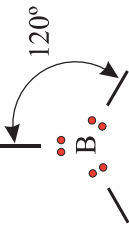
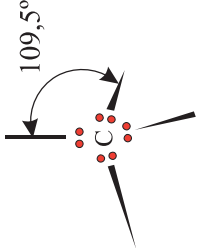
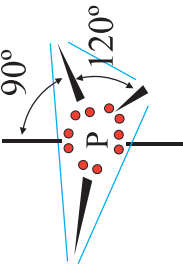
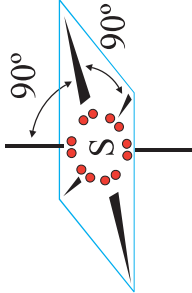
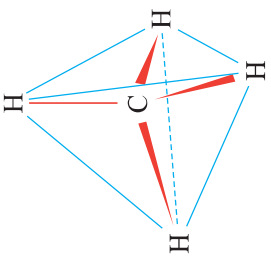
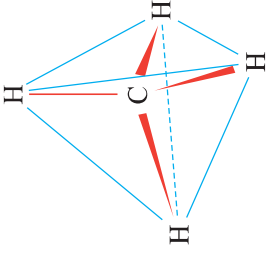
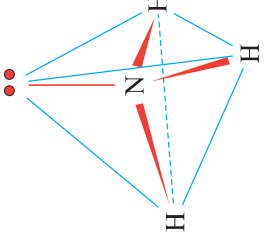
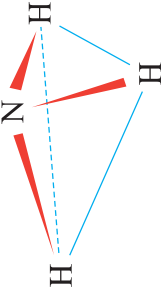
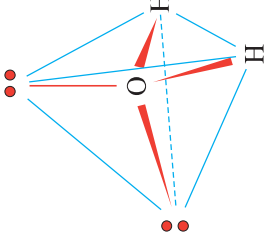
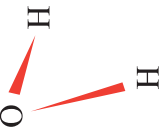
Pares de electrones del átomo central	Electrones de valencia elemento central	Distribución de los pares de electrones	Geometría molecular	Tipo de molécula	Ejemplos
2	Be ••		Lineal	AB ₂	BeCl ₂ , BeH ₂
3	B ••		Triangular plana	AB ₃	BF ₃
4	C ••		Tetraédrica	AB ₄	CH ₄ , CCl ₄
5	P ••		Bipirámide triangular	AB ₅	PCl ₅
6	S ••		Octaédrica	AB ₆	SF ₆

Tabla 2. Distribución de los pares electrónicos alrededor de un átomo central que tiene pares de electrones libres, comparada con la de otro átomo que no tiene

Pares de electrones enlazantes del átomo central	Pares de electrones no enlazantes del átomo central	Distribución de los átomos y de los pares de electrones no enlazantes	Geometría molecular	Tipo de molécula	Ejemplos
4	0		 Tetraédrica	AB ₄	CH ₄ , CCl ₄
3	1		 Piramidal trigonal	AB ₃ E	NH ₃ , H ₃ O ⁺ , PCl ₃ , AsCl ₃
2	2		 Angular	AB ₂ E ₂	H ₂ O, F ₂ O, SCl ₂

Pasemos, por último, a considerar las **moléculas con dobles y triples enlaces**. Para ellas, este modelo supone que los 2 ó 3 pares de electrones del enlace múltiple apuntan a la misma dirección; es decir, trata el enlace múltiple como si fuera sencillo. Lo que explica que una molécula como la de eteno (o etileno) sea **plana** ($\alpha = 120^\circ$ teórico), y la de etino (o acetileno), **lineal**.



En el caso de moléculas como las de CO_2 y SO_2 :



el C del CO_2 distribuye linealmente, 2 a 2, los cuatro pares de electrones, lo que explica que la molécula sea **lineal** en cambio, el S del SO_2 distribuye el par no enlazante y los dos pares de cada enlace en los vértices de un triángulo, dando una molécula **angular**.

A.10.- Deduce la geometría de las siguientes especies por el método RPECV:

- El ion H_3O^+ .
- La molécula de N_2 .
- La molécula de sulfuro de hidrógeno.

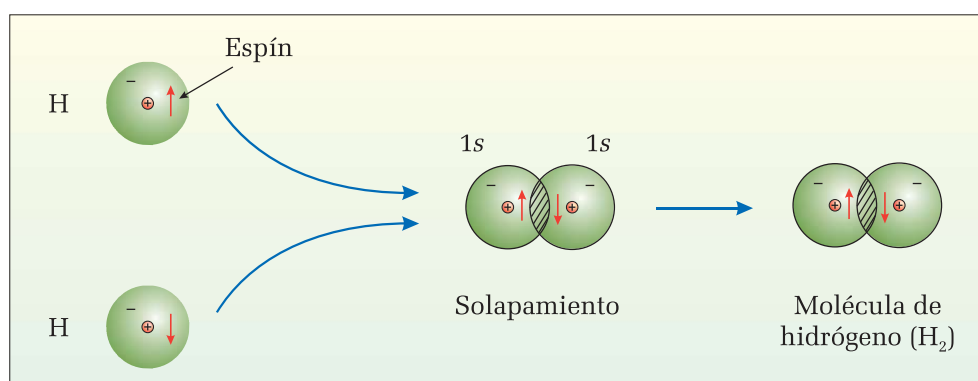
A.11.- Deduce la geometría de las siguientes moléculas por el método RPECV:

HCN , AsCl_3 , SiH_4

3.3 Teoría del enlace de valencia

La mecánica cuántica proporciona una explicación más completa del enlace químico que la teoría de Lewis, justificando el papel del par de electrones en la constitución de los enlaces y, al mismo tiempo, describiendo la geometría de las moléculas formadas. Vamos a exponer aquí la **teoría del enlace de valencia**.

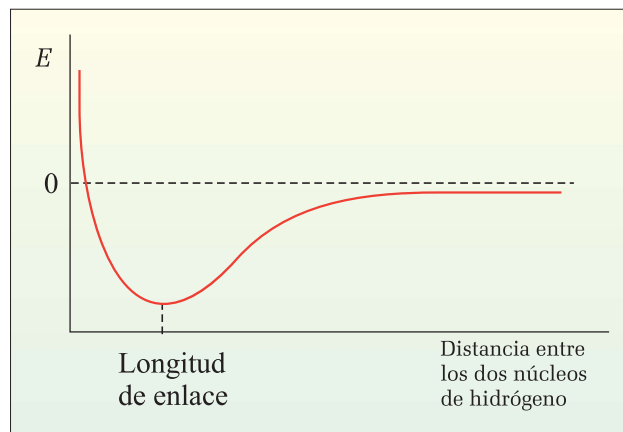
Consideremos la formación de la molécula de hidrógeno, H_2 . Cuando dos átomos de hidrógeno (H) se aproximan, sus núcleos atraen cada vez más las nubes electrónicas del otro átomo. Llega un momento que las nubes se recubren parcialmente, el enlace se forma como consecuencia del solapamiento de los orbitales atómicos 1s de los dos átomos de hidrógeno. Para que el proceso sea favorable los orbitales atómicos que se solapan espacialmente han de tener electrones desapareados y con espines opuestos.



El solapamiento supone que ambos orbitales comparten una región común del espacio entre los dos núcleos, donde podríamos decir que la probabilidad de encontrar los electrones es máxima.

Esta teoría supone que los electrones de la molécula ocupan los orbitales atómicos de los átomos individuales.

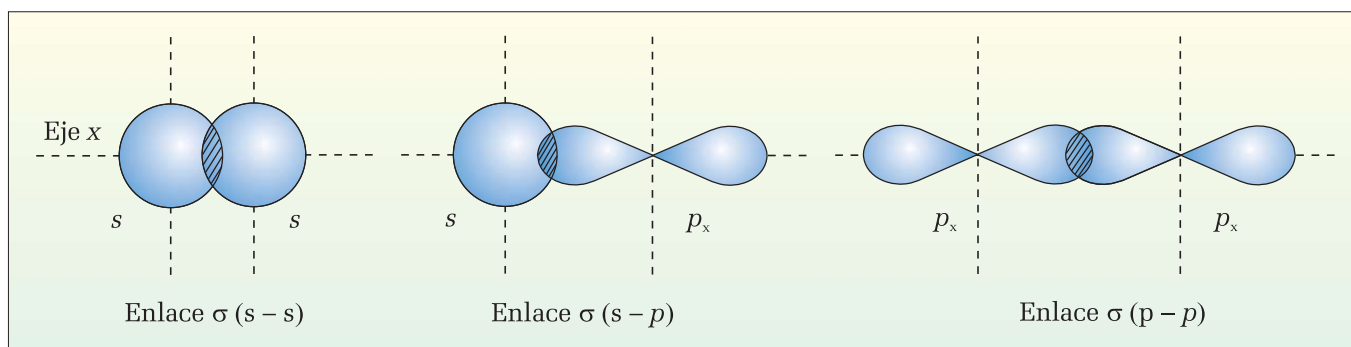
Desde el punto de vista energético la energía de la molécula es menor que la de los dos átomos por separado, produciéndose el mínimo de energía cuando la distancia entre los dos núcleos es precisamente la longitud de enlace de la molécula de hidrógeno (H_2).



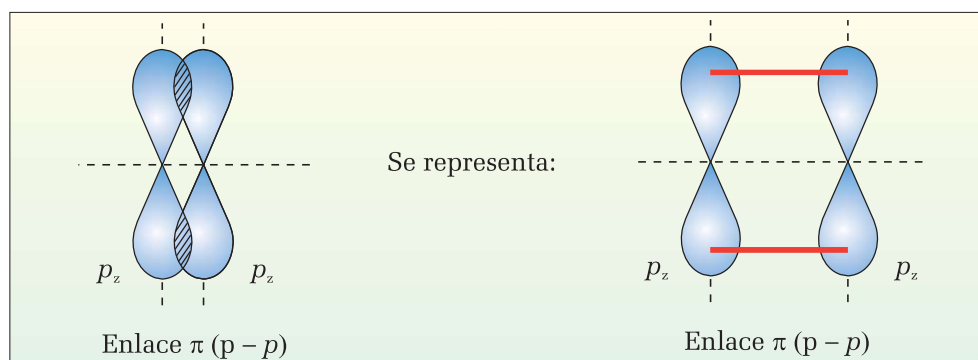
Tipos de enlace

El tipo de enlace que se forma por solapamiento de los orbitales atómicos depende de qué orbitales solapen y en qué forma.

- **Enlace de tipo sigma (σ)**, se produce por solapamiento de dos orbitales atómicos siguiendo la línea que une los núcleos. Los orbitales atómicos solapan frontalmente.



- **Enlace de tipo pi (π)**, se produce cuando los orbitales atómicos tipo p solapan lateralmente.



En general, los enlaces sencillos son de tipo sigma (σ); en los enlaces dobles hay uno sigma (σ) y otro pi (π); y en los triples, uno sigma (σ) y dos pi (π).

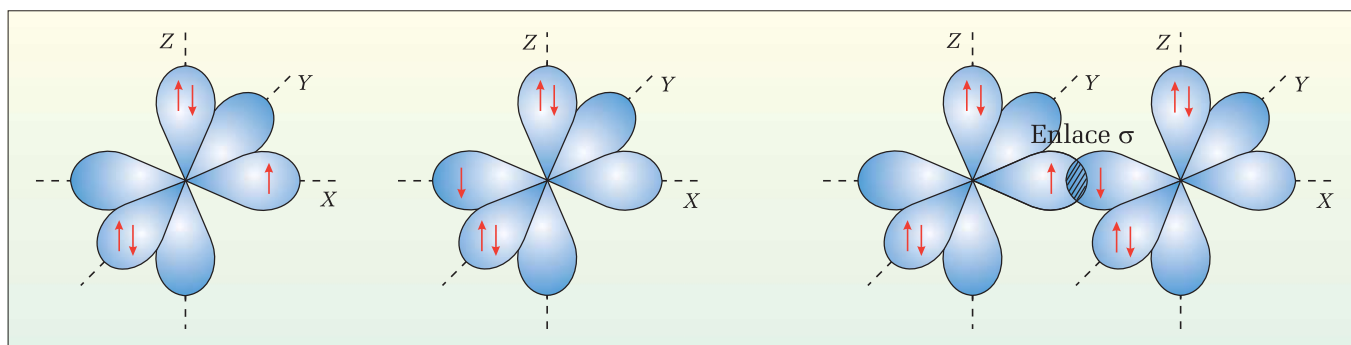
Otra idea que conviene subrayar es que, para formar un enlace covalente, cada uno de los átomos debe poseer un orbital con un electrón desapareado, porque, como se solapan, en la zona común no puede haber más de dos electrones (principio de exclusión de Pauli).

La formación del enlace covalente supone el apareamiento de ese par de electrones, que por ello han de tener, uno y otro, espines contrarios.

Veamos ahora algunos ejemplos de formación de enlaces mediante esta teoría:

a) Molécula Cl_2

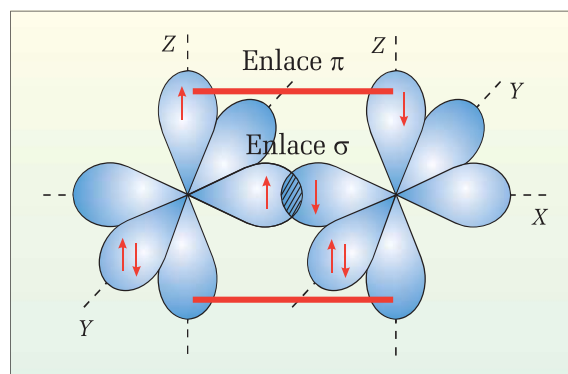
El cloro ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$) tiene $1e^-$ desapareado en un orbital p , de forma que un acercamiento frontal de dos átomos producirá un solapamiento de dichos orbitales lo que da lugar a un enlace simple de tipo σ .



Formación según la TEV de la molécula de Cl_2

b) Molécula O_2

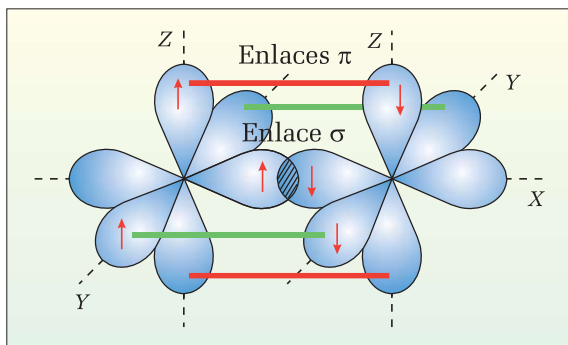
El oxígeno ($1s^2 2s^2 2p^4$) tiene $2e^-$ desapareados en dos orbitales p , de manera que un acercamiento de dos átomos conducirá a un solapamiento frontal, formándose un enlace σ , y a uno lateral formándose un enlace π . El conjunto de estos dos enlaces es un **enlace doble** (su longitud es menor que la del enlace simple y, aunque su energía es mayor, no llega a ser el doble de la de uno simple).



Formación según la TEV de la molécula de O_2

c) Molécula N_2

El nitrógeno ($1s^2 2s^2 2p^3$) tiene $3e^-$ desapareados en los tres orbitales p , por lo que un acercamiento de dos átomos provoca un solapamiento frontal formándose un enlace σ , y dos laterales formándose dos enlaces π . El conjunto de los tres enlaces es un **enlace triple** (su longitud es menor que la de uno doble y su energía no llega a ser el triple de la de uno simple).



Formación según la TEV de la molécula de N_2

Valencia química y promoción

La valencia de un elemento químico es la capacidad que tienen sus átomos para enlazarse con otros. Se han propuesto dos tipos de valencia:

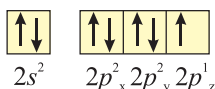
- **Valencia iónica o electrovalencia.** Se llama electrovalencia de un elemento a la carga que portan sus iones, es decir, al número de electrones que ganan o pierden cuando forman sus iones. Tiene signo.

Ejemplos: Na^+ , Fe^{2+} , S^{2-} .

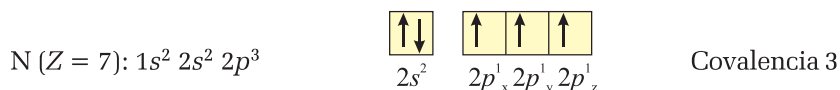
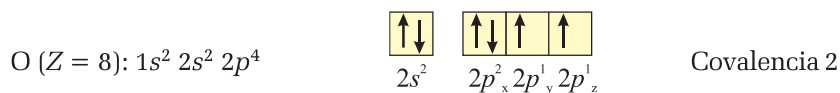
- **Valencia covalente o covalencia.** Indica cuántos pares de electrones comparte un átomo cuando forma enlace covalente. Coincide con el número de electrones desapareados que tiene el átomo antes de enlazarse. No tiene signo.

Ejemplos:

F ($Z = 9$): $1s^2 2s^2 2p^5$



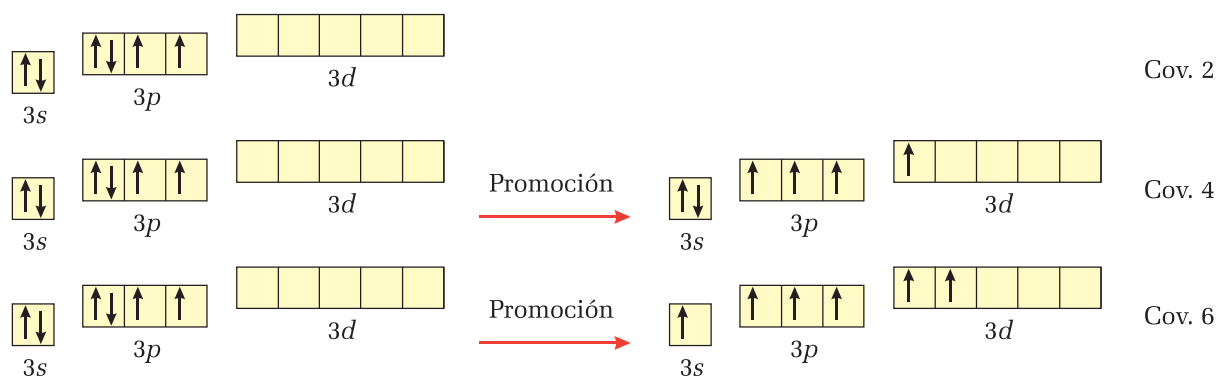
Covalencia 1



Algunos elementos presentan varias covalencias, por ejemplo: C, N, O, S, etc. La teoría del enlace de valencia resuelve esta situación con el concepto de **promoción**.

Un átomo podrá promocionar electrones a un nivel de energía superior si la energía necesaria que debe adquirir no es muy elevada y la «devuelve» cuando se forman los enlaces.

La promoción sólo es posible a orbitales energéticamente próximos (de la misma capa o nivel de energía). Así el azufre, y otros elementos del tercer período y siguientes, poseen átomos que disponen de orbitales d para promocionar electrones, por lo que puede mostrar varias covalencias: S ($Z = 16$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$.



A.12.- a) Describir la configuración electrónica de los átomos de cloro ($Z = 17$) y de fósforo ($Z = 15$) y deducir de ahí su electrovalencia y su covalencia.

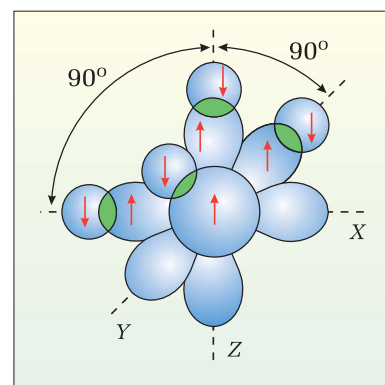
b) De los siguientes compuestos: NCl_5 y PCl_5 , uno de ellos no puede existir. ¿Cuál es y por qué?

3.4 Hibridación de orbitales

La Teoría del Enlace de Valencia completa su descripción del enlace covalente justificando la geometría de las moléculas. Para ello recurre al concepto de hibridación de orbitales.

La teoría de hibridación de funciones orbitales atómicas fue propuesta en 1931 por **Linus Pauling** (1901-1994) como una modificación de la Teoría de Enlaces de Valencia, a fin de hacer frente a las discrepancias halladas en el cálculo teórico de los parámetros moleculares al aplicar dicho modelo, respecto de aquellos valores experimentalmente obtenidos para ellos en bastantes compuestos.

Una de las moléculas más sencillas que manifiesta estas discrepancias es la de metano (CH_4). La configuración de la capa de valencia del carbono en su estado fundamental es $2s^2 2p^2$, por lo que sólo debería formar dos enlaces covalentes, pues tiene dos electrones desapareados. Sin embargo, la experiencia química nos indica que el carbono, en esta molécula, forma cuatro enlaces covalentes iguales y orientados simétricamente con ángulos HCH de $109,5^\circ$ (forma tetraédrica). Incluso suponiendo que los electrones se dispusieran lo más desapareados posible (configuración $2s^1 2p^3$), los enlaces que se formarían por solapamiento con el orbital $1s$ del hidrógeno en ningún caso serían completamente idénticos ni podríamos justificar la geometría espacial de la molécula.



Explicación de la molécula de metano con la TEV

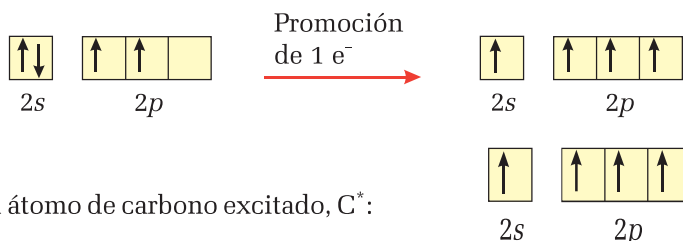
Hibridación sp^3

Para explicar los enlaces en la molécula de metano la TEV utiliza el concepto de hibridación de orbitales, de la siguiente forma:

El átomo de carbono en su estado fundamental tiene una estructura electrónica:

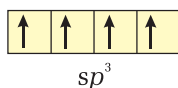
C ($Z = 6$): $1s^2 2s^2 2p^2$

Si se produce la promoción de 1 electrón:



Así queda el átomo de carbono excitado, C^* :

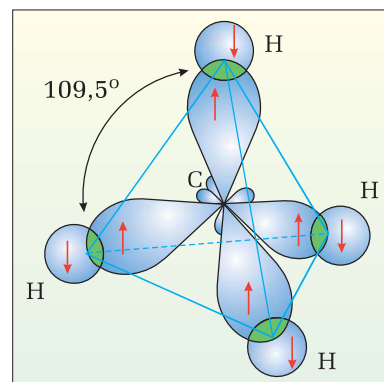
Si combinamos los orbitales atómicos, obtenemos el carbono hibridado:



La explicación dada por Pauling consiste en admitir la **formación de cuatro orbitales atómicos híbridos equivalentes** a partir de la combinación lineal del orbital atómico $2s$ y de los tres orbitales atómicos $2p$ del carbono, que serían por tanto del tipo llamado sp^3 , conteniendo cada uno 1 electrón desapareado, según la regla de Hund. En este tipo de hibridación los orbitales forman ángulos de $109,5^\circ$ y están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro regular. Al solaparse frontalmente con los correspondientes orbitales $1s$ de los hidrógenos, se obtienen cuatro enlaces σ equivalentes orientados según se observa en la figura.

Esta teoría explica no sólo cómo se forman los enlaces, sino que **prevé** además la **estructura espacial** que presentarán las moléculas. Por ello es extremadamente útil, aunque inicialmente fue objeto de controversia. Básicamente consiste en un desarrollo matemático que indica que los orbitales que se solaparán serán una mezcla (o híbrido) de las funciones orbitales atómicas.

Los orbitales híbridos obtenidos serán tantos como orbitales atómicos intervengan en el proceso. Su contenido energético, forma y orientación depende de la cantidad y tipo de orbitales atómicos puros que formen cada híbrido.

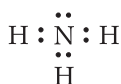


Disposición espacial de los orbitales híbridos en el metano

EJEMPLO 2

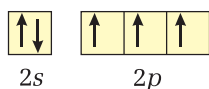
Utilizando la teoría de hibridación de orbitales, explica las estructuras y geometrías de las moléculas de amoníaco y agua.

La estructura de la molécula de amoníaco es:

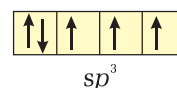


La geometría de la molécula de amoníaco viene determinada por la configuración del átomo de nitrógeno:

N ($Z = 7$): $1s^2 2s^2 2p^3$

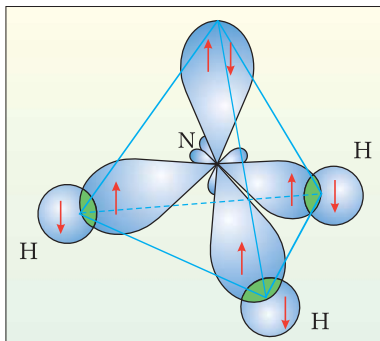


Si combinamos los orbitales atómicos, obtenemos el nitrógeno hibridado:



Por tanto, puede suponerse que el átomo de nitrógeno adquiere una hibridación sp^3 , utilizando tres de los orbitales híbridos para formar enlaces con los átomos de hidrógeno y dejando el cuarto orbital híbrido para albergar el par de electrones no enlazante.

Puesto que los cuatro orbitales híbridos sp^3 se disponen tetraédricamente, la molécula presenta geometría piramidal trigonal.

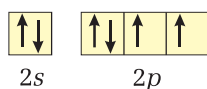


La estructura de la molécula de agua es:

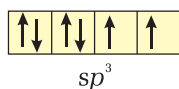


La geometría de la molécula de agua viene determinada por la configuración del átomo de oxígeno:

O ($Z = 8$): $1s^2 2s^2 2p^4$

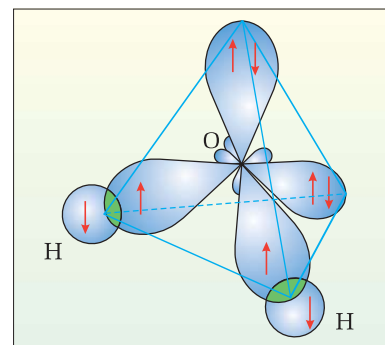


Si combinamos los orbitales atómicos, obtenemos el oxígeno hibridado:



Por tanto, puede suponerse que el átomo de oxígeno adquiere una hibridación sp^3 , utilizando dos de los orbitales híbridos para formar enlaces con los átomos de hidrógeno y dos orbitales híbridos para albergar dos pares de electrones no enlazantes.

Puesto que los cuatro orbitales híbridos sp^3 se disponen tetraédricamente, la molécula presenta geometría angular, con ángulos teóricos de $109,5^\circ$.



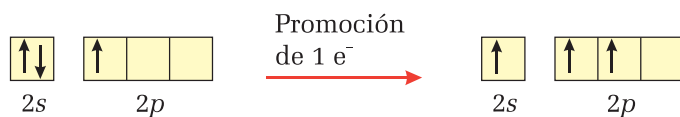
Hibridación sp^2

A continuación se analizará la molécula de BH_3 (trihidruro de boro) sabiendo, con base en el modelo RPECV, que tiene una geometría triangular plana.

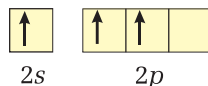
El átomo de boro en su estado fundamental tiene una estructura electrónica:

B ($Z = 5$): $1s^2 2s^2 2p^1$

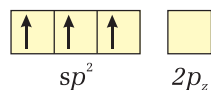
Si se produce la promoción de 1 electrón:



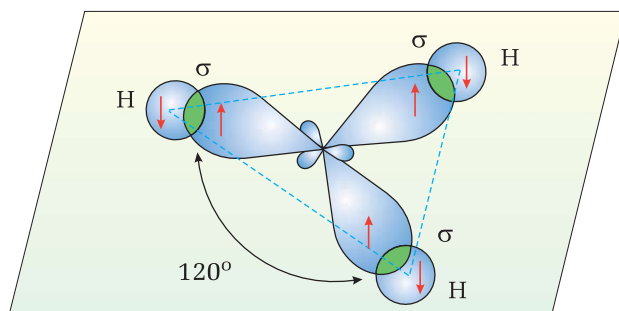
Así queda el átomo de boro excitado, B^* :



Mezclando el orbital $2s$ con los dos orbitales $2p$ se generan tres orbitales híbridos sp^2 , quedando un orbital $2p$ «vacío»:



Estos tres orbitales sp^2 están en el mismo plano, y el ángulo entre cualquier par de ellos es de 120° . Cada uno de los enlaces BH se forma por el solapamiento de un orbital híbrido sp^2 del boro con el orbital $1s$ del hidrógeno. La molécula de BH_3 es plana, con todos los ángulos HBH iguales a 120° . Este resultado concuerda con los datos experimentales y también con las predicciones del modelo de RPECV.

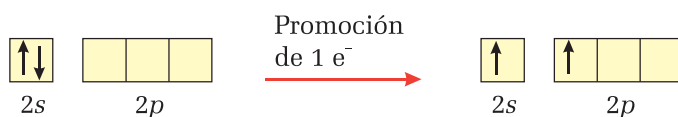


Hibridación sp

El modelo RPECV predice que el hidruro de berilio (BeH_2) es una molécula lineal. El átomo de berilio en su estado fundamental tiene una estructura electrónica:

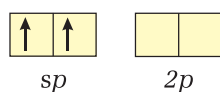
Be ($Z = 4$): $1s^2 2s^2$

Si se produce la promoción de 1 electrón de un orbital $2s$ a un orbital $2p$:

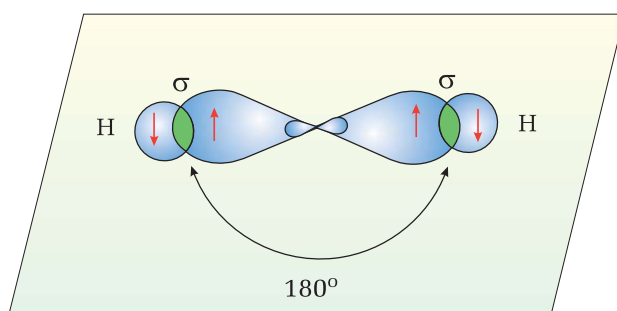


Así queda el átomo de berilio excitado, Be^* :

Mezclando el orbital $2s$ con uno de los orbitales $2p$ se generan dos orbitales híbridos sp , quedando dos orbitales $2p$ «vacíos»:



Estos dos orbitales híbridos se encuentran en la misma línea, el eje x , por lo que el ángulo entre ellos es de 180° . Entonces, cada uno de los enlaces BeH está formado por el solapamiento de un orbital híbrido sp del Be con un orbital $1s$ del H y la molécula de BeH_2 resultante tiene una geometría lineal.



Hibridación de orbitales *s*, *p* y *d*

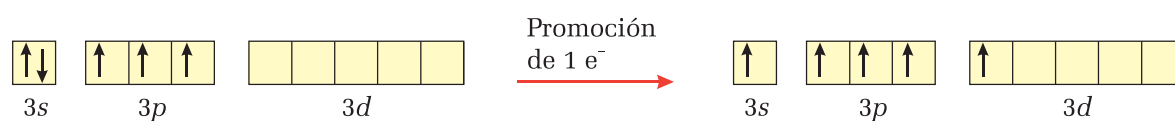
Como se ha visto, la hibridación explica con claridad los enlaces que involucran orbitales *s* y *p*. Sin embargo, para los elementos del tercer periodo en adelante, no siempre se puede explicar la geometría molecular suponiendo sólo la hibridación de los orbitales *s* y *p*. Para comprender la formación de moléculas con geometría de bipirámide triangular y octaédrica, por ejemplo, se deben incluir los orbitales *d* en el concepto de hibridación.

Considérese la molécula de PCl_5 como ejemplo. El modelo RPECV predice que esta molécula tiene una geometría de bipirámide triangular, que es también la distribución de los cinco pares electrónicos.

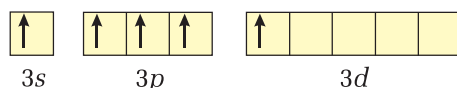
El átomo de fósforo en su estado fundamental tiene una estructura electrónica:

P ($Z = 15$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

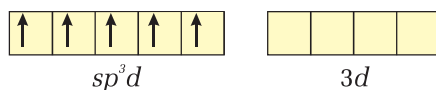
Si se produce la promoción de 1 electrón de un orbital *3s* a un orbital *3d*:



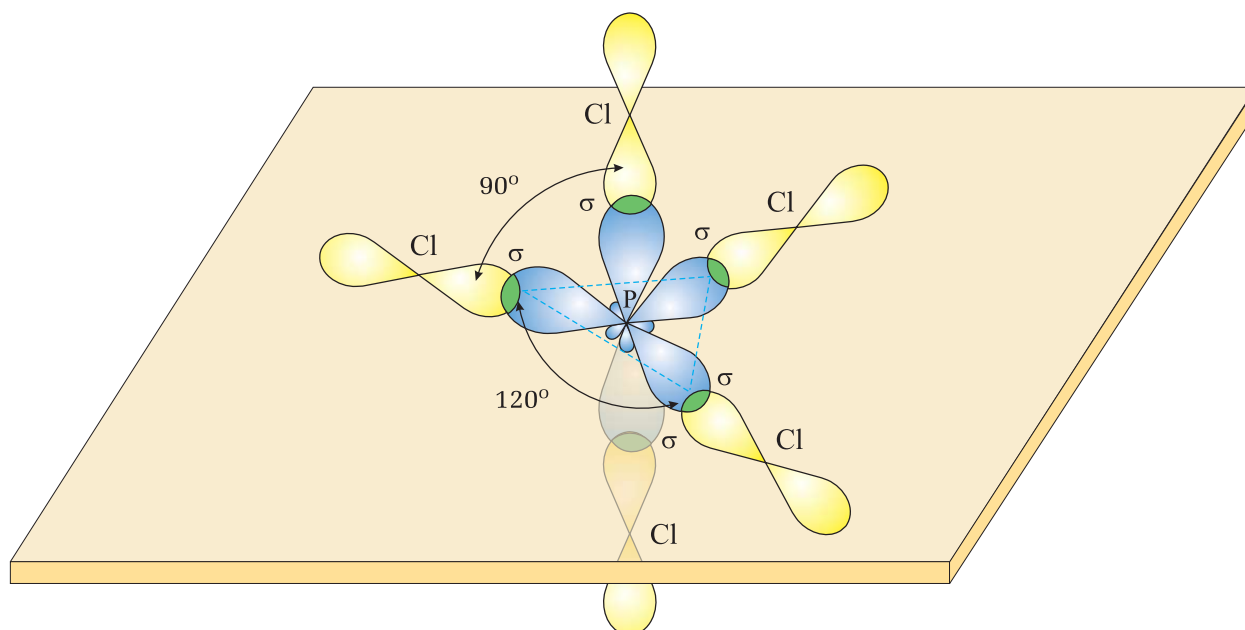
Así queda el átomo de fósforo excitado, P^* :



Al mezclar el orbital *3s*, los tres orbitales *3p* y un orbital *3d*, se generan cinco orbitales híbridos sp^3d , quedando cuatro orbitales *3d* «vacíos»:



Estos orbitales híbridos se solapan con los orbitales *3p* del Cl para formar cinco enlaces covalentes P-Cl. Debido a que no hay pares libres sobre el átomo de P, la geometría del PCl_5 es de bipirámide triangular.



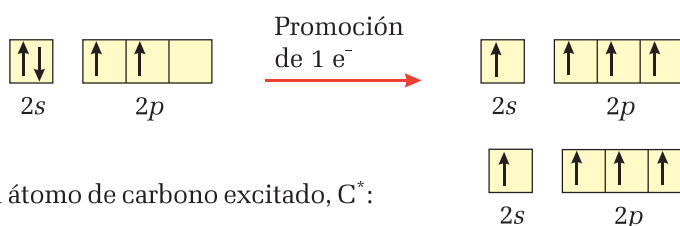
Enlaces múltiples

El concepto de hibridación también es útil para moléculas con dobles y triples enlaces.

Consideremos ahora la molécula de eteno (o etileno), $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$. Como su geometría es **plana**, ello sugiere la formación de orbitales híbridos sp^2 , tal y como muestra siempre el carbono en los dobles enlaces.

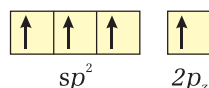
Tendremos:

C ($Z = 6$): $1s^2 2s^2 2p^2$

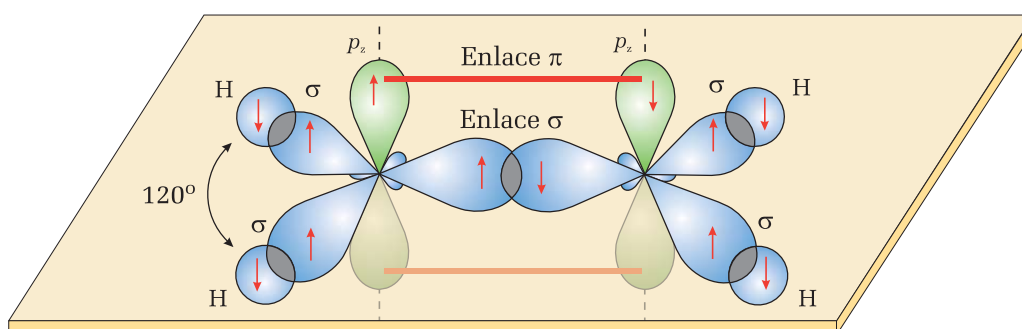


Así queda el átomo de carbono excitado, C^* :

El orbital $2s$ sólo se mezcla con dos orbitales $2p$ para formar tres orbitales híbridos sp^2 equivalentes, quedando un electrón en el orbital $2p_z$ que no participa en la hibridación:



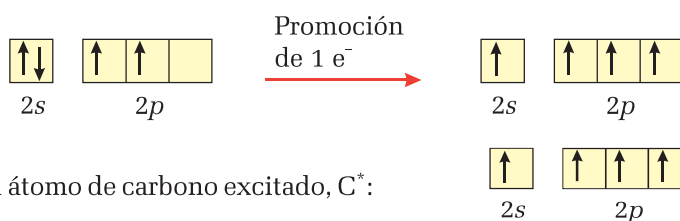
Los dos C de la molécula $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ adoptan esta hibridación sp^2 . Se unen entonces entre sí por un enlace σ ($sp^2 + sp^2$) y un enlace π ($p + p$). Con los H el enlace es σ ($sp^2 + s$).



La molécula de etino (o acetileno), $\text{HC}\equiv\text{CH}$, al ser **lineal**, sugiere una hibridación sp , que es la que muestra siempre el carbono en los triples enlaces.

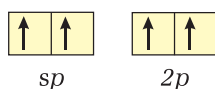
Tendremos:

C ($Z = 6$): $1s^2 2s^2 2p^2$

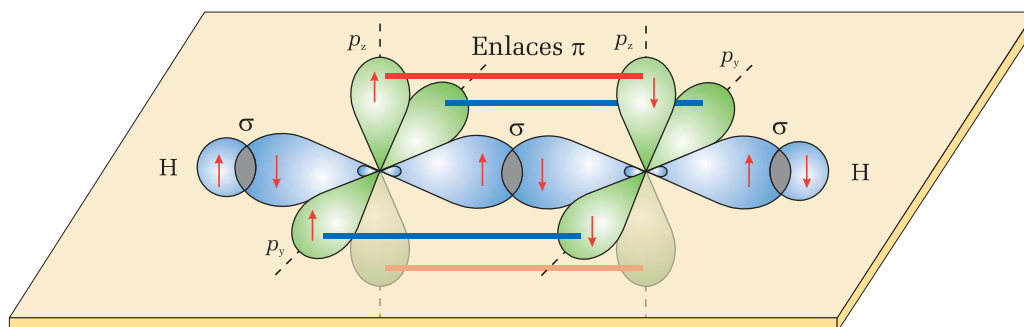


Así queda el átomo de carbono excitado, C^* :

El orbital $2s$ sólo se mezcla con un orbital $2p$ para formar dos orbitales híbridos sp equivalentes, quedando un electrón en cada uno de los orbitales $2p$ (por ejemplo: $2p_y$ y $2p_z$) que no participaron en la hibridación:



Los dos C de la molécula $\text{HC}\equiv\text{CH}$ adoptan la hibridación sp . El triple enlace queda constituido por un enlace σ ($sp + sp$) y dos enlaces π ($p_z + p_z$ y $p_y + p_y$). Los enlaces con los H son σ ($sp + s$).



A.13.- Utilizando la teoría de hibridación de orbitales, explica las estructuras y geometrías de las moléculas de etano y dióxido de carbono.

A.14.- Representar la molécula de dicloruro de azufre:

- Mediante un diagrama de puntos.
- A partir de la teoría del enlace de valencia. ¿Cuál será su geometría?

A.15.- Considerando los compuestos PCl_3 y PCl_5 , indica:

- ¿Cuál de ellos adopta hibridación y de qué tipo?
- La geometría de la molécula de PCl_3 por el método RPECV.

3.5 Polaridad de los enlaces

Se acaban de considerar el enlace iónico y el covalente como dos tipos de enlace diferente, cuando no opuestos. Pero, ¿son realmente tan distintos?

Ya hemos visto que el enlace covalente consiste en compartir un par de electrones, situado preferentemente entre los dos núcleos. Este par de electrones, en el caso de moléculas formadas por dos átomos iguales (H_2 , Cl_2 , etc.), está situado, en promedio, a la mitad de la distancia entre los dos núcleos.

Pero, en los demás casos, que son la mayoría, tiende a distribuirse **más cerca** del núcleo del átomo de mayor electronegatividad. Dicho en términos mecanocuánticos: la nube electrónica será más densa del lado de ese átomo.

Se crea entonces un **dipolo eléctrico**, ya que las cargas negativas están desplazadas hacia un lado de la molécula y su centro no coincide con el centro de las cargas positivas.

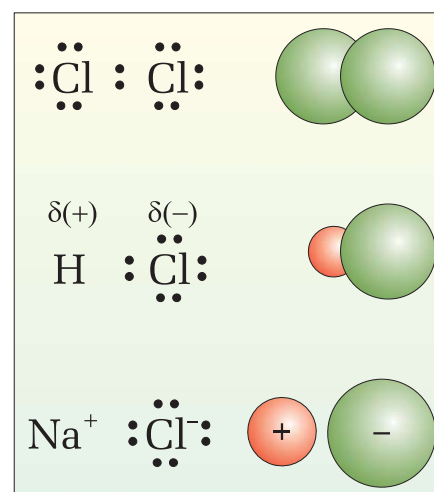
Así, la molécula HCl será **polar**, puesto que el átomo de Cl, más electronegativo que el de H, atrae más hacia sí el par de electrones. Esta situación se suele representar por:



La flecha indica el desplazamiento del par de electrones, y los símbolos $\delta+$ y $\delta-$ indican que no se llega a alcanzar una carga electrónica entera $+$ o $-$; es decir, **no llegan a formarse iones**.

Existe, pues, una gradación entre un enlace covalente no polar (**apolar**) y un enlace iónico.

Muy exageradamente, podemos representar esta gradación tal como se muestra en la figura.



El enlace iónico puede entonces considerarse como un caso límite de enlace covalente de polaridad máxima. A la inversa, como el enlace iónico se forma por el desplazamiento total del par de electrones a uno de los átomos, cuando tiene lugar un desplazamiento parcial podemos considerar el correspondiente enlace covalente polar como de **carácter parcialmente iónico**.

Cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre los elementos que forman el enlace, mayor será la polaridad y, por tanto, mayor el carácter iónico del enlace.

Para cuantificar la polaridad de un enlace se utiliza el momento dipolar, μ , que es el producto de la carga parcial por la longitud de enlace: $\mu = q \cdot d$.

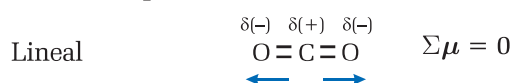
Compuesto	Enlace	Tipo de enlace
LiF	Li-F	Iónico
BeF ₂	Be-F	Carácter iónico decreciente
BF ₃	B-F	
CF ₄	C-F	
NF ₃	N-F	Ligeramente iónico
OF ₂	O-F	
F ₂	F-F	Covalente apolar

Polaridad de las moléculas

Conviene **distinguir entre polaridad de un enlace y polaridad de una molécula**. Aunque lo habitual es que una molécula que tenga enlaces polares sea polar, **hay moléculas que teniendo enlaces polares son apolares** (BF₃, CCl₄, etc.).

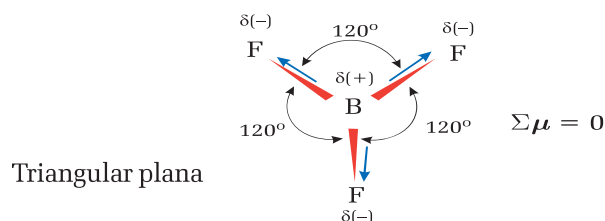
Esto es posible porque, al ser moléculas simétricas, los dipolos de sus enlaces se anulan entre sí (la suma de los vectores momento dipolar es cero); es decir, los centros de las cargas positivas y negativas coinciden para el conjunto de la molécula.

- Molécula de CO₂ :



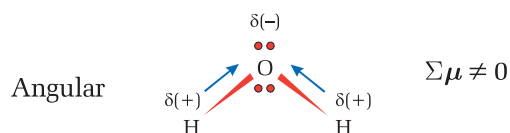
Es apolar porque los dos momentos se anulan por simetría.

- Molécula de BF₃ :



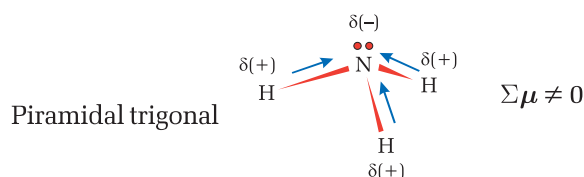
Es apolar, ya que los momentos dipolares se anulan por simetría.

- Molécula de H₂O :



La molécula es polar. Los enlaces son polares y no se anulan por simetría.

- Molécula de NH₃ :



La molécula es polar. Los enlaces son polares y no se anulan por simetría.

Para saber si una molécula es polar o apolar hay que representarla geométricamente, ver qué átomos son más electronegativos y dibujar, para cada enlace, el vector momento dipolar, que irá dirigido desde el átomo con carga parcial positiva hacia el átomo con

Compuesto	Geometría de la molécula	Momento dipolar
HF	Lineal	Polar
HCl	Lineal	Polar
HBr	Lineal	Polar
HI	Lineal	Polar
H ₂	Lineal	Apolar
Cl ₂	Lineal	Apolar
CO	Lineal	Polar
CO ₂	Lineal	Apolar
SO ₂	Angular	Polar
H ₂ O	Angular	Polar
H ₂ S	Angular	Polar
BF ₃	Triangular plana	Apolar
SO ₃	Triangular plana	Apolar
NH ₃	Piramidal trigonal	Polar
PH ₃	Piramidal trigonal	Polar
CH ₄	Tetraédrica	Apolar
CH ₃ Cl	Tetraédrica	Polar
CCl ₄	Tetraédrica	Apolar

Polaridad de algunas moléculas

carga parcial negativa. Las distribuciones muy simétricas tales como la lineal, triangular y tetraédrica suelen originar moléculas apolares.

A.16.- Representa las estructuras de Lewis, indicando la geometría molecular (RPECV) y el momento dipolar ($\mu = 0$ o $\mu \neq 0$) de las siguientes moléculas: SO_2 , CS_2 y HCN .

A.17*.- a) Dibuja las estructuras de Lewis de las especies químicas siguientes: hidruro de berilio, tricloruro de boro, etileno, amoníaco y sulfuro de hidrógeno.

b) Justifica la geometría de estas sustancias e indica si hay alguna que sea polar.

A.18*.- Para las moléculas de fosfina y metano:

a) Indica razonadamente la geometría que presentan.

b) Justifica la polaridad de cada una de ellas.

A.19.- Si la molécula de BI_3 es apolar teniendo enlaces polares, ¿cuál puede ser su geometría?

4 FUERZAS INTERMOLECULARES

Hemos visto que los átomos pueden unirse entre sí formando enlaces covalentes, constituyendo moléculas. ¿Y las moléculas están unidas entre sí por alguna fuerza de enlace? Es evidente que sí, pues en caso contrario cada molécula sería independiente, es decir, las sustancias serían gaseosas a cualquier temperatura. Las moléculas se unen unas con otras mediante lo que se denomina **fuerzas o enlaces intermoleculares**. Las fuerzas intermoleculares son mucho más débiles que los enlaces entre los átomos (covalente, iónico o metálico) denominadas fuerzas intramoleculares.

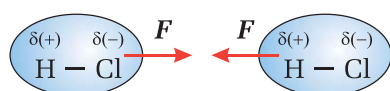
Fuerzas de Van der Waals

En general entre las moléculas existen las llamadas fuerzas de Van der Waals, más o menos intensas según los casos. Su origen es electrostático y se pueden entender en función de la ley de Coulomb. A mayor momento dipolar mayor es la fuerza de atracción.

Hay tres tipos de fuerzas de Van der Waals: de orientación, de inducción y de dispersión.

1.- Fuerzas de orientación.

Son fuerzas de atracción que actúan entre moléculas polares, es decir, entre dipolos permanentes.



2.- Fuerzas de inducción.

Se producen entre un dipolo permanente y un dipolo inducido.

Si se coloca una molécula polar cerca de otra molécula no polar, la distribución electrónica de la molécula no polar se distorsiona por la fuerza que ejerce la molécula polar, lo que ocasiona un **dipolo inducido** en el que la separación de las cargas positiva y negativa de la molécula no polar se debe a la proximidad de una molécula polar.



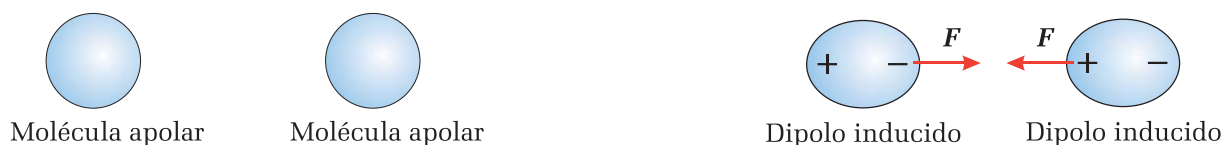
Van der Waals

3.- Fuerzas de dispersión o de London.

Las fuerzas atractivas entre las moléculas también operan en el caso de moléculas no polares y explican que gases monoatómicos (He, Ne, etc.) o moléculas diatómicas apolares (N_2 , por ejemplo) se puedan licuar a temperaturas suficientemente bajas. Según London, la naturaleza de estas fuerzas es debida a la existencia de **momentos dipolares instantáneos**.

El movimiento de los electrones en un átomo o en una molécula puede provocar que el centro de carga negativa de los electrones no coincida con el centro de carga positiva del núcleo. La distribución asimétrica de la carga genera un momento dipolar instantáneo que cambia continuamente de magnitud y dirección con el movimiento de los electrones. El dipolo fluctuante de una molécula afecta a las moléculas contiguas y se forman así dipolos inducidos.

La interacción entre los extremos opuestos de los dipolos inducidos es la responsable de las fuerzas de dispersión o de London.



Las fuerzas de London son significativas cuando los átomos o las moléculas están muy próximas unas de otras, ya que disminuyen muy rápidamente con la distancia.

La intensidad de las fuerzas de Van der Waals está relacionada con la facilidad para desplazar los electrones en una molécula (polarizabilidad) y aumenta con el tamaño de los átomos y de las moléculas.

Podemos destacar dos propiedades de las fuerzas de Van der Waals:

1.- En la mayoría de los casos son fuerzas muy débiles.

Si comparamos las energías de enlace de las fuerzas de Van der Waals con el enlace de hidrógeno y con el enlace covalente:

Fuerzas de Van der Waals	0,1 - 35 kJ/mol
Enlace de hidrógeno	10 - 40 kJ/mol
Enlace covalente	125 - 800 kJ/mol

Romper el enlace covalente supone que la sustancia participe en una reacción química, la molécula se rompe y la sustancia se transforma en otra diferente. Vencer o romper el enlace de Van der Waals es un proceso físico, no hay cambio en la naturaleza de las sustancias, sólo separamos unas moléculas de otras. Esto ocurre, por ejemplo en los cambios de estado: paso de sólido a líquido o de líquido a gas, en los que se rompen los enlaces entre las moléculas, pero la sustancia sigue siendo la misma y la energía que se necesita es menor.

2.- **Estas fuerzas aumentan con el volumen molecular**, en realidad dependen del tamaño de las envolturas electrónicas, que aumentan con la masa molecular; ya que en tales condiciones las capas electrónicas externas se deforman más fácilmente y la molécula es más polarizable. Cuanto más polarizable sea, mayor es la fuerza de Van der Waals.

	P. F. (°C)	P. E. (°C)	Estado (c.n.)
F_2	-223	-188	Gaseoso
Cl_2	-102,4	-34	Gaseoso
Br_2	-7,3	58,8	Líquido
I_2	113,5	184,5	Sólido

Enlace de hidrógeno

Cuando se comparan los puntos de ebullición de los hidruros del grupo del oxígeno se observa un valor excesivamente alto para el del agua, este comportamiento, que también se observa en el caso del NH_3 (grupo 15) y en el HF (grupo 17), no puede justificarse con las interacciones debido a fuerzas de Van der Waals y es debido a la existencia de enlaces de hidrógeno.

El enlace de hidrógeno se produce cuando un átomo de hidrógeno unido por enlace covalente a un átomo muy electronegativo interacciona con un par de electrones no compartido de otro átomo también pequeño y electronegativo. Este tipo de enlace está generalizado en sustancias que contienen enlaces N-H, O-H y F-H.

El enlace de hidrógeno es un enlace de naturaleza electrostática de carácter direccional, ya que se produce entre la parte positiva de una molécula y la parte negativa de otra.

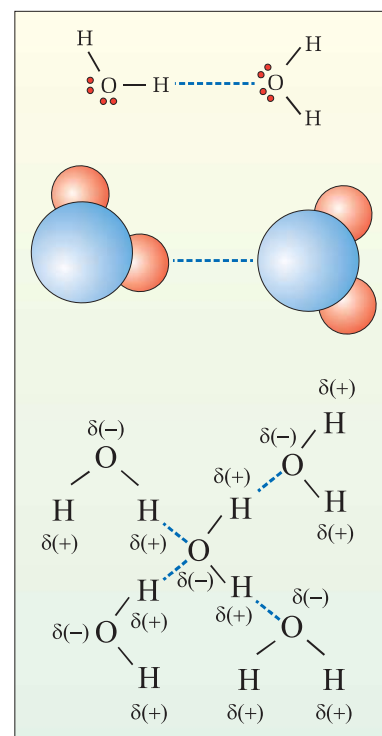
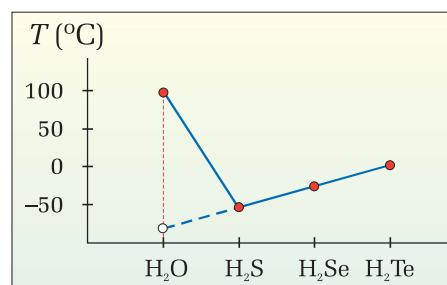
La energía asociada a estas interacciones oscila entre 10 y 40 kJ/mol; es decir, son mucho más intensas que las fuerzas de Van der Waals, aunque menos que un enlace covalente.

La fortaleza del enlace viene determinada por dos factores: la electronegatividad de los átomos que participan en el enlace, y el tamaño de los mismos.

- Cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad, mayores serán las cargas parciales sobre los átomos implicados en el enlace, y la interacción será más intensa.

- Por otra parte, cuanto menor sea el tamaño de los átomos, mayor será la concentración de la carga y más fuerte la interacción.

Por ello, solamente elementos como el flúor, el oxígeno y el nitrógeno (muy electronegativos y con radios atómicos pequeños) forman enlaces de hidrógeno. Átomos como el cloro o el azufre, con electronegatividades similares a la del nitrógeno, no forman enlaces de hidrógeno en compuestos como HCl y H_2S .



A.20.- Elige, de cada uno de los siguientes pares de sustancias, la que tenga mayor punto de ebullición. Explica en cada caso la razón de la elección.

- a) HF o HCl b) Br_2 o ICl c) CH_4 o C_2H_6 d) C_2H_6 o CH_3OH

A.21.- Desarrolla las fórmulas de las siguientes moléculas: HF ; CH_3OH ; HI ; H_2O ; CH_3F ; H_2SO_4 ; NaF ; Cl_2O .

Indica, en cada caso, si se forman o no enlaces de hidrógeno (en caso afirmativo, dibuja un esquema). Señala en cuál de ellas los enlaces de hidrógeno poseen la mayor fortaleza.

A.22.- Considerando los dos compuestos, PCl_3 y PCl_5 , indicar:

- a) Qué tipo de sustancias son.
b)Cuál de ellas tendrá puntos de fusión y ebullición más elevados.

5

PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS COVALENTES

Las sustancias covalentes **no conducen** la electricidad en ningún estado de agregación, ya que los electrones compartidos están localizados en el enlace y no tienen posibilidad de desplazarse. Tampoco poseen iones, como las sustancias iónicas. Por ello, se les llama sustancias **no electrólitos**.

Entre las sustancias con enlaces covalentes podemos distinguir dos tipos, con estructura y propiedades muy diferentes.

a) Sustancias moleculares

Pertenecen a este grupo las sustancias constituidas por moléculas cuyos átomos están unidos por enlace covalente. Entre las moléculas existen fuerzas intermoleculares: fuerzas de Van der Waals, en sustancias apolares (He , H_2 , CH_4 , etc.) y polares (HBr , SO_2 , ClCH_2CH_3 , etcétera), y en algunas de estas últimas, también, enlaces de hidrógeno (H_2O , HF , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, etc.), tanto unas como otras son fuerzas débiles.

- Puntos de fusión y ebullición

Para fundir o vaporizar una sustancia hay que separar las moléculas rompiendo los enlaces intermoleculares (fuerzas de Van der Waals y/o puentes de hidrógeno) que son débiles y, por tanto, los puntos de fusión y ebullición son, en general, bajos; es decir, **en condiciones ordinarias**, la mayoría de estas sustancias son **gaseosas** (He , H_2 , CH_4 , etc.) o **líquidas** (H_2O , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, etc.). Pero, en otros casos, las fuerzas intermoleculares son apreciables, y las sustancias son **sólidas**, como I_2 , $\text{C}_{12}\text{H}_{10}$ (naftaleno), alcanfor, etc.

- Propiedades mecánicas

Las propiedades mecánicas varían en el mismo sentido con las fuerzas intermoleculares. En estado sólido son blandas casi todas.

- Solubilidad

En cuanto a la solubilidad, las no polares (o poco polares) son prácticamente **insolubles en disolventes polares**, como el agua, pero se disuelven **bien en disolventes no polares** (o poco polares) como los disolventes orgánicos: éter, benceno, CCl_4 , etc. Las sustancias polares son solubles en disolventes polares, como el agua, sobre todo, si pueden formar puentes de hidrógeno con ella.

Esto se debe a que la disolución no es posible más que si las fuerzas de atracción que ejercen las moléculas del soluto entre sí, y las moléculas del disolvente entre sí, pueden **intercambiarse**. Ello sólo ocurre si dichas fuerzas son de la misma naturaleza y parecida intensidad. En caso contrario, las moléculas de la sustancia y del disolvente tienden a quedar en grupos distintos; es decir, no hay disolución.

b) Sustancias con red covalente (o reticulares)

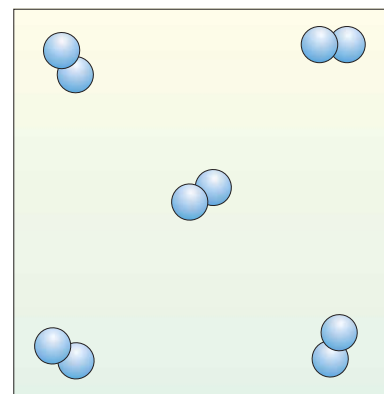
Son sustancias constituidas por átomos unidos entre sí por enlaces covalentes, formando una red cristalina. No hay moléculas individuales, sino que todos los átomos que la constituyen están unidos entre sí por enlaces covalentes. Ejemplos de estas sustancias son: diamante, grafito, dióxido de silicio, etc.

- Puntos de fusión y ebullición

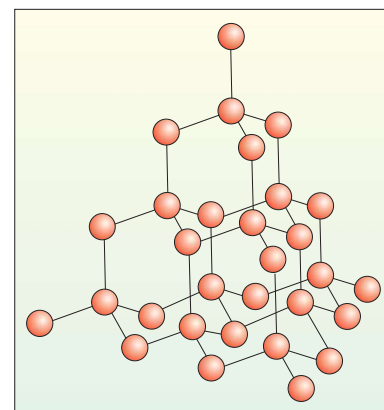
Para fundir o vaporizar una sustancia reticular hay que separar los átomos rompiendo enlaces covalentes, que son muy fuertes, por lo que los puntos de fusión y ebullición serán muy altos. Por lo que las sustancias con red covalente son generalmente sólidas a temperatura ambiente.

- Propiedades mecánicas

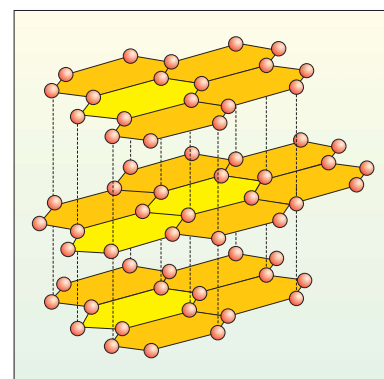
Referente a las propiedades mecánicas, los sólidos con red covalente son **duros**, ya que para separar los átomos de la red, es necesario romper enlaces covalentes, lo que requiere una gran cantidad de energía.



Representación de una sustancia covalente molecular en estado gaseoso



Red covalente del diamante



Red covalente del grafito

- Solubilidad

No son solubles en ningún disolvente.

Suelen presentar estructuras con red covalente los elementos situados en la diagonal: B, C, Si, Ge, As, Sb, etc., de la tabla periódica.

A.23.- Ordenar razonadamente los sólidos siguientes en orden creciente de puntos de fusión: SiO_2 ; I_2 ; NaCl .

A.24.- Dadas las siguientes sustancias: H_2 , NaF , H_2O , C (diamante), CaSO_4

a) Explica el tipo de enlace que presenta cada una.

b) El estado de agregación que se esperaría para ellas en condiciones ordinarias.

6

ENLACE METÁLICO

Los metales constituyen aproximadamente las tres cuartas partes de las sustancias simples conocidas y tienen propiedades físicas y químicas características que les diferencian del resto. Con excepción del mercurio, los metales son sólidos cristalinos a temperatura ambiente; presentan un brillo característico; son opacos, dúctiles, maleables, y buenos conductores del calor y de la electricidad. Estas propiedades de los metales están relacionadas con la estructura de los sólidos metálicos y con la naturaleza de los enlaces entre los átomos.

Los metales presentan estructuras muy compactas que resultan del empaquetamiento regular de los átomos metálicos. En estas estructuras se consigue una ocupación del 74 % del volumen disponible y se alcanzan números de coordinación muy altos: 8 e incluso 12.

Los metales ocupan la parte izquierda y central de la tabla periódica y se caracterizan por tener pocos electrones en su último nivel de energía. En general, los metales tienen bajas energías de ionización y forman iones positivos con facilidad; sin embargo, su tendencia a formar iones negativos es muy limitada y no es lógico esperar una estructura iónica. Por otra parte, como los metales tienen pocos electrones de valencia tampoco cabe esperar que formen enlaces covalentes localizados con sus átomos vecinos. Dadas las características electrónicas que concurren en los metales, ni el modelo de enlace iónico ni el covalente son adecuados para justificar sus propiedades.



Sodio

6.1 Modelos del enlace metálico

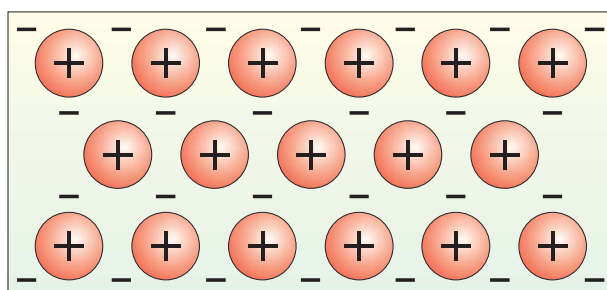
Para justificar las propiedades de los metales y sus estructuras se han propuesto diversos modelos de enlace metálico, de los que estudiaremos dos: el *modelo de nube electrónica* y el *modelo de bandas*.

Modelo de nube electrónica

Si consideramos, por ejemplo, el caso del sodio (Na), en su red cristalina cada átomo se encuentra rodeado de otros ocho, y como su configuración externa es $3s^1$, sólo podría formar enlace covalente con uno de ellos. Entonces, si cada átomo ha de compartir su electrón de valencia con todos sus vecinos, y viceversa, estos electrones $3s$ se

deben mover libremente entre los átomos de sodio.

Un modelo sencillo que explica la estructura metálica es el modelo de la **nube electrónica** (o mar de electrones). Los electrones de valencia se encuentran **deslocalizados**; es decir, se mueven libremente por todo el metal entre los iones positivos, formados al desprenderse los electrones de dichos átomos. Es lo que se llama la nube electrónica de un metal. Ella es la responsable de la unión, por atracción eléctrica, de los iones positivos de la red.



Modelo de nube electrónica

Este tipo de enlace se da exclusivamente en los elementos metálicos y sus aleaciones, es decir, en elementos que reúnen dos condiciones:

1. **Baja energía de ionización**, con lo cual ceden fácilmente electrones (que constituyen la nube electrónica), formando al mismo tiempo iones positivos.
2. **Orbitales de valencia vacíos**, que permiten a los electrones moverse con facilidad.

Modelo de bandas

La aplicación de la mecánica cuántica al modelo de nube electrónica proporcionó un nuevo modelo, el **modelo de bandas**, que interpreta la conductividad eléctrica de los metales de manera interesante.

Supongamos, por ejemplo, un cristal de magnesio que contiene un mol de átomos, es decir N_A átomos, o lo que es lo mismo $6,022 \cdot 10^{23}$ átomos de magnesio.

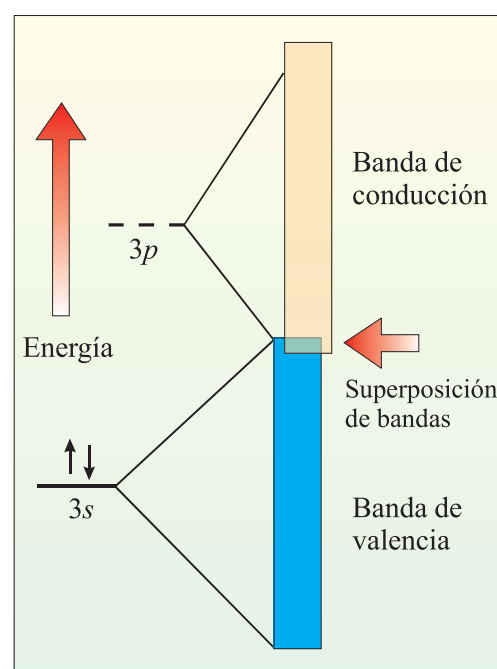
Si interaccionan N_A orbitales 3s, se producirán N_A orbitales moleculares. Éstos tienen valores de energía muy próximos y constituyen una banda de energía, denominada **banda de valencia**. En el caso del magnesio, esta banda está *llena*, ya que el mol de átomos proporcionó $2 \cdot N_A$ electrones de valencia, todos los que puede admitir dicha banda.

Pero los 3 orbitales atómicos 3p, «vacíos», también interaccionan y forman una banda de $3 \cdot N_A$ orbitales moleculares. Como los orbitales atómicos 3s y 3p tienen energías próximas, las bandas formadas, que contienen $4 \cdot N_A$ orbitales y sólo $2 \cdot N_A$ electrones, se *superponen* (ver figura).

Al aplicar un campo eléctrico, los electrones de la banda llena 3s saltan a orbitales vacantes de la banda «vacía» 3p, que se constituye en **banda conductora**.

Así, según el grado de llenado de las bandas de valencia y su diferencia energética, podemos encontrar tres situaciones: *metales conductores*, *metales semiconductores* y *aislantes*.

- **Metales conductores.** Poseen bandas de valencia parcialmente llenas o llenas superpuestas a bandas «vacías». En ambos casos se necesita muy poca energía para que los electrones de orbitales llenos se exciten a orbitales «vacíos» más energéticos. Estos electrones pueden moverse por todo el metal constituyendo la corriente eléctrica. Es el caso, por ejemplo, del magnesio



Modelo de bandas

- **Metales semiconductores.** Tienen bandas de valencia llenas que *no se superponen* a las bandas «vacías». Pero la *diferencia energética* es tan pequeña que basta una mínima elevación de la temperatura para excitar los electrones de más energía a la banda de conducción «vacía». Así sucede, por ejemplo, en el silicio y el germanio.

- **Aislantes.** La *diferencia* de energía entre las bandas de valencia llenas o parcialmente llenas y las «vacías» es grande, por lo que el paso de electrones de una a otra no es posible.

6.2 Propiedades de las sustancias metálicas

- Puntos de fusión y ebullición

Tienen **puntos de fusión** moderados o altos. Esto es debido a que el enlace metálico es muy fuerte y hay que comunicar mucha energía para separar los átomos y pasar el metal de sólido a líquido y de líquido a gas.

En una misma familia, al aumentar el volumen, la unión entre los cationes es más débil, por lo que disminuye su punto de fusión.

En un período corto, al aumentar el número de electrones de valencia, los cationes se encuentran más fuertemente unidos por su tamaño decreciente y por la mayor densidad de la nube electrónica. Debido a esto, aumentarán, en el mismo sentido los puntos de fusión.

- Propiedades mecánicas

a) Dureza.

Varía igual que los puntos de fusión y ebullición. Porque la dureza es la resistencia a ser rayados y eso supone separar átomos al igual que en la fusión y en la ebullición.

b) Ductilidad y maleabilidad.

La ductilidad es la propiedad de los metales que mide su capacidad para formar hilos, mientras que la maleabilidad mide su capacidad para formar láminas.

Son dúctiles y maleables, pues su deformación no implica ni rotura de enlaces ni mayor aproximación de iones de igual carga.

Estas dos propiedades no implican rotura de enlaces, únicamente distinta disposición de los cationes metálicos en la red cristalina.

Su variación en la tabla periódica es el opuesto al de la dureza.

- Conductividad eléctrica y térmica

Los metales son buenos conductores de la corriente eléctrica, tanto en estado sólido como cuando están fundidos, porque los electrones que forman la nube electrónica pueden moverse fácilmente.

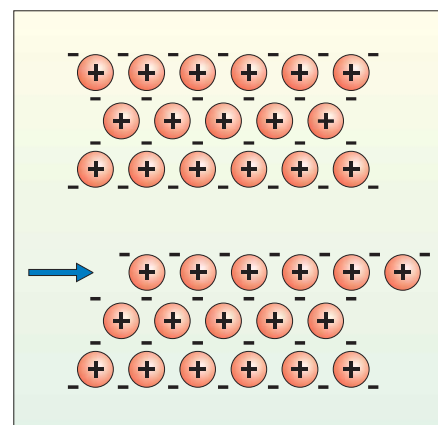
Cuando se les somete a una diferencia de potencial, por ejemplo, se conecta a una pila los electrones son atraídos por el polo positivo, mientras que los cationes ocupan posiciones fijas en la red cristalina.

Cuando se calienta un metal, disminuye la conductividad eléctrica, pues el movimiento térmico de los iones positivos dificulta el desplazamiento de los electrones.

También presentan una alta conductividad térmica. Al aumentar la temperatura, la vibración de los cationes de la red cristalina aumenta y se puede transmitir fácilmente, esa vibración, a través de la red cristalina.

Elemento	P. Fusión (°C)
Li	179
Na	97,5
K	63,5
Rb	39
Cs	28,4

Elemento	P. Fusión (°C)
Na	97,5
Mg	654
Al	660
Si	1420



Desplazamiento de una capa metálica sobre otra

- El **brillo** metálico se explica por el hecho de que los electrones, al estar libres, pueden absorber y emitir luz de todas las frecuencias.

A.25.- Razona qué tipo de sustancias son las siguientes: magnesio, sulfato de litio y etano. Predice sus propiedades en cuanto a:

- a) Estado de agregación en, condiciones ordinarias.
- b) Solubilidad en agua.
- c) Conductividad eléctrica.

A.26.- Entre las siguientes sustancias: a) Litio. b) Diamante. c) Bromuro de cesio. d) Agua.

- 1) ¿Cuál de ellas está formada por moléculas unidas por enlace de hidrógeno?
- 2) ¿Cuál de ellas es muy conductora en su estado natural?
- 3) ¿Cuál de ellas presenta mayor punto de fusión?
- 4) ¿Cuál de ellas es un aislante, pero conduce la corriente al disolverla en agua?

A.27.- Para las especies que a continuación se señalan: sulfuro de hidrógeno, nitrógeno molecular, mercurio, fluoruro de litio. Indica, razonando la respuesta:

- a) Qué tipo de enlace será el que existe entre sus átomos.
- b)Cuál será el estado de agregación a 25 °C y 1 atm de presión.
- c) Cuáles serán solubles en agua.
- d) Cuál será la de menor punto de fusión y cuál la de mayor.

A.28.- Clasificar cada uno de los sólidos siguientes en su tipo correspondiente:

- a) Amalgama de dentista (70 % de Hg y 30 % de Cu).
- b) Bolas de naftalina (naftaleno, $C_{10}H_8$).
- c) Carburo de volframio, WC.
- d) Cloruro de rubidio, RbCl.

Asignar a cada uno de ellos la propiedad siguiente que les cuadre más:

- 1) Duro como el diamante.
- 2) Blando como la cera.
- 3) Punto de fusión por encima de los 2000 K.
- 4) Conductividad eléctrica elevada.
- 5) Maleable.
- 6) Con brillo metálico.
- 7) Cristal que se quiebra fácilmente al golpearlo.
- 8) Soluble en agua, dando una disolución conductora.
- 9) Aislante que se convierte en conductor eléctrico al fundirse.
- 10) Con olor fácilmente detectable.

A.29.- Identificar todos los tipos de enlace que se deben encontrar en un cristal de sulfato de sodio.

A.30.- Describir algunos ensayos sencillos que se podrían hacer con un sólido para averiguar si es molecular, de red covalente, iónico o metálico.

ACTIVIDADES DE RECAPITULACIÓN

1. ¿Cuál será la electrovalencia de los siguientes elementos: Al, K, Br, Ne?

2*. Teniendo en cuenta la energía de red de los compuestos iónicos, contesta, razonadamente, a las siguientes cuestiones:

a) ¿Cuál de los siguientes compuestos tendrá mayor punto de fusión: NaF o KBr?

b) ¿Cuál de los siguientes compuestos será más soluble en agua: MgO o CaS?

3. Calcula la energía de red o reticular del MgO si en la formación a partir de sus elementos se desprenden 602 kJ/mol.

Datos:

$$E_s(\text{Mg}) = 148 \text{ kJ/mol};$$

$$E_i^{1^\circ} + E_i^{2^\circ}(\text{Mg}) = 1450 \text{ kJ/mol};$$

$$E_d(\text{O}_2) = 250 \text{ kJ/mol};$$

$$E_{af}^{1^\circ} + E_{af}^{2^\circ}(\text{O}) = -844 \text{ kJ/mol}.$$

$$\text{Sol.: } -1481 \text{ kJ/mol}.$$

4. Calcula la energía reticular del KCl sabiendo que en la formación a partir de sus elementos se liberan 437 kJ/mol.

Datos:

$$E_s(\text{K}) = 89 \text{ kJ/mol};$$

$$E_i(\text{K}) = 418 \text{ kJ/mol};$$

$$E_d(\text{Cl}_2) = 244 \text{ kJ/mol};$$

$$E_{af}(\text{Cl}) = -348 \text{ kJ/mol}.$$

$$\text{Sol.: } -718 \text{ kJ/mol}.$$

5. A partir de los datos que se dan a continuación, calcula la afinidad electrónica del I (g) mediante el ciclo de Born-Haber.

Datos: calor estándar de formación del KI (s) = -327 kJ mol^{-1} ; calor de sublimación del K (s) = 90 kJ mol^{-1} ; calor de sublimación del I₂ (s) = 62 kJ mol^{-1} ; energía de disociación del I₂ (g) = 149 kJ mol^{-1} ; energía de ionización del K (g) = 418 kJ mol^{-1} ; energía reticular del KI (s) = -633 kJ mol^{-1}

$$E_{af} = -308 \text{ kJ mol}^{-1}$$

6. Dibuja la estructura de Lewis e indicar si las siguientes moléculas tendrán o no enlaces múltiples: HCN; CS₂; CO₂; OF₂; H₂CO

7. a) Escribe las estructuras de Lewis para cada uno de los siguientes iones o moléculas: CHI₃, PCl₃, H₃O⁺ y C₂H₄.

b) Explica la geometría esperada para las moléculas de CHI₃ y de PCl₃.

8. a) Representa las estructuras de Lewis de las moléculas siguientes: Dióxido de carbono. Trióxido de azufre. Peróxido de hidrógeno.

b) Dibuja y justifica la geometría molecular de las cuatro sustancias anteriores de acuerdo con el modelo de repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia.

9. Para las siguientes moléculas en estado gaseoso: agua, dicloruro de berilio y tricloruro de boro, indica, razonadamente:

a) Número de pares de electrones en el entorno del átomo central.

b) Número de pares enlazantes y no enlazantes en cada caso.

c) Geometría molecular.

10. Utilizando la teoría de hibridación de orbitales, explica las estructuras y geometrías de las moléculas de etino, agua y amoníaco.

11. Explica según la teoría del enlace de valencia la existencia de las moléculas de:

a) Nitrógeno.

b) Tricloruro de fósforo.

12. ¿Tiene el SiH_3F momento dipolar? Explicarlo.

13. Explica qué tipo de fuerzas de atracción o enlace químico han de romperse al disolver yodo en alcohol para preparar tintura de yodo.

14. El carburo de silicio (carborundo) se obtiene, junto a monóxido de carbono, al calentar arena con carbón. Escribe la ecuación de la reacción. ¿Cómo puede explicarse que sea una sustancia dura (se emplea como abrasivo) y de alto punto de fusión, en función de su estructura?

15. Predecir el orden creciente de los puntos de fusión de las siguientes sustancias: óxido de dicloro, cloro, cloruro sódico y tetracloruro de carbono. Explicar la razón de dicha predicción.

16. Di cuál(es) de estas propiedades sólo se dan en un sólido iónico:

- a) Temperatura de fusión baja.
- b) Conducen la electricidad en estado sólido.
- c) Se disuelven en agua y producen una disolución que contiene principalmente moléculas.
- d) Cuando se funden, conducen la electricidad.

17. Indica qué tipo de enlace predomina en las siguientes sustancias:

- a) Yodo.
- b) Bromuro de potasio.
- c) Potasio.
- d) Fosfuro de hidrógeno.

18*. Explica qué tipo de enlace químico debe romperse o qué fuerzas de atracción deben vencerse para:

- a) Fundir cloruro de sodio.
- b) Hervir agua.
- c) Fundir hierro.
- d) Evaporar nitrógeno líquido.