

SOLUCIONES A LOS PROBLEMAS PROPUESTOS DE ENLACE QUÍMICO

PROBLEMA 1

a)

El amoníaco a temperatura ambiente es un gas incoloro con fuerte olor, por lo que no puede ser el que está contenido en el frasco.

El trióxido de azufre es un compuesto covalente cuya temperatura de fusión es moderadamente baja, por lo que tampoco puede ser.

El único compuesto que puede tener esa temperatura de fusión es el cloruro de calcio, compuesto con enlace iónico (que se da cuando la diferencia entre las electronegatividades entre dos átomos, en este caso, Ca y Cl, es alta). Los compuestos iónicos tienen estructura cristalina y, es necesaria mucha temperatura para romper los enlaces de dicha red.

Por tanto, el compuesto contenido en el frasco será cloruro de calcio.

b)

Será conductor disuelto en agua y fundido, pero nunca en estado sólido debido a su enlace entre iones.

PROBLEMA 2

a)

El cloruro sódico, NaCl, presenta enlace iónico (que se da cuando la diferencia entre las electronegatividades entre dos átomos, en este caso, Ca y Cl, es alta), en el que los iones están fuertemente ligados a la red cristalina, resultando en consecuencia que los puntos de fusión de estos compuestos son elevados.

El dicloro, en cambio, es una molécula con enlace covalente en el que solamente actúan fuerzas London (fuerzas intermoleculares entre moléculas no polares con dipolos instantáneos), muy débiles, por lo que su punto de fusión es muy bajo.

b)

El cobre es un metal (presenta enlace metálico) que conduce la corriente eléctrica en estado sólido y en estado líquido o fundido.

El amoníaco es un compuesto cuyo enlace entre átomos es covalente (al ser átomos de distinta electronegatividad).



El enlace N – H presenta fuerzas de unión por puente de hidrógeno entre sus moléculas.

El enlace covalente hace que el amoníaco no conduzca la corriente eléctrica en ningún estado de agregación, ya que los electrones están compartidos y ligados a la estructura atómica de cada átomo del enlace.

PROBLEMA 3

Figura entre paréntesis al lado de cada elemento su electronegatividad según la escala de Pauling.

a) FALSA.

El calcio (1) y el oxígeno (3,44) están alejados en la tabla periódica, lo que hace que la diferencia entre sus electronegatividades sea elevada, por lo que el enlace que presentan es iónico y no covalente como se afirma.

b) VERDADERA.

El cloro (3,16), es un elemento muy electronegativo por lo que el enlace con el rubidio que es muy electropositivo (0,82) tendrá un fuerte carácter iónico, mientras que el oxígeno y el magnesio del óxido de magnesio presentarán también enlace iónico, pero no tan marcado como el Cl – Rb, debido a que el oxígeno (3,44) y el magnesio (1,31) no están tan alejados en la tabla periódica.

c) FALSA.

El enlace que forman el cloro y el hidrógeno es covalente pero polar, debido a que el cloro es un elemento muy electronegativo.

d) VERDADERA.

El potasio (0,82) es un elemento electropositivo y el flúor (3,98) es el más electronegativo de la tabla periódica, por lo que el enlace que formarán será fuertemente iónico.

PROBLEMA 4

a)

En el enlace iónico un átomo A toma un electrón de otro átomo B convirtiéndose en anión B^- , mientras que su compañero se vuelve positivo, generando un catión A^+ .

Los dos átomos, entonces, se mantienen unidos por sus cargas opuestas.

Por el contrario, en un enlace covalente, dos átomos comparten un par de electrones al menos. Si se da el caso de que un átomo tiene una mayor atracción, respecto al otro



átomo, por esos electrones de enlace (elemento muy electronegativo), se convertirá parcialmente en negativo y el enlace se dice entonces que es *parcialmente iónico*. Es posible hallar el porcentaje del carácter iónico de un enlace considerando la diferencia entre los valores de las electronegatividades de los dos átomos en cualquiera de las partes implicadas ΔEN , gracias a una relación empírica, propuesta por Linus Pauling.

$$\text{Porcentaje de carácter iónico} = 100 \cdot \left[1 - e^{-\frac{1}{4}(\Delta EN)^2} \right]$$

Entendiendo que el complementario de este porcentaje será la parte debida al enlace covalente.

Según la fórmula, el compuesto que presentará un valor de carácter iónico del 50% será aquél cuya diferencia de electronegatividades sea 1,7, resultando:

- Si $\Delta EN = 1,7$ Carácter iónico al 50%.
- Si $\Delta EN > 1,7$ Carácter iónico $> 50\%$, dándose el enlace iónico.
- Si $\Delta EN < 1,7$ Carácter iónico $< 50\%$, dándose el enlace covalente.

b)

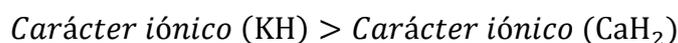
Para responder a la cuestión deben evaluarse las electronegatividades de los átomos. El estroncio es un metal alcalinotérreo por lo que la diferencia de electronegatividad con el oxígeno es la más elevada; resultando que el carácter iónico del enlace será el predominante.

En el caso del estaño y del telurio que están muy cercanos en la tabla periódica, la diferencia de electronegatividad con el oxígeno es bastante pequeña, menor aún en el caso del telurio, que se aproxima más al oxígeno que el estaño. El mayor carácter iónico será el del óxido de estaño(II) y por último el del óxido de telurio(II).



c)

El calcio es más electronegativo que el potasio por ser un metal alcalinotérreo frente a otro alcalino, respectivamente. Luego, la diferencia de electronegatividades con el hidrógeno será menor el caso del hidruro de calcio que en el del hidruro de potasio. Por lo tanto,



PROBLEMA 5

La fuerza del enlace por puente de hidrógeno entre moléculas depende, en gran parte, de la electronegatividad del átomo enlazado al hidrógeno.

Los enlaces por puente de hidrógeno, representados por A – H son más fuertes cuando A es flúor, después siguen los que se forman cuando A es oxígeno y por último los correspondientes a cuando A es nitrógeno.

La fuerza de los enlaces por puente de hidrógeno aumenta a medida que aumenta la electronegatividad del átomo A.

PROBLEMA 6

a)

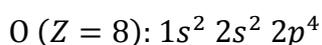
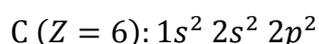
La proximidad de los valores de la electronegatividad de los átomos de carbono y oxígeno hace que el enlace del dióxido de carbono sea predominantemente covalente.

b)

Para hallar la forma geométrica de una molécula es necesario averiguar primeramente su estructura de Lewis.

CO₂ tiene una estructura lineal con ángulos de 180°. Para hallar esta estructura geométrica es necesario realizar los pasos siguientes:

Paso 1- Hallar la estructura de Lewis de ambos átomos:



Paso 2- Evaluar el número de electrones disponibles para el enlace y el número total de acuerdo con la regla del octeto:

Nº de electrones de valencia de la molécula = $6 \cdot 2 + 4 = 16$ electrones

Nº de electrones según la regla del octeto = $8 \cdot 2 + 8 = 24$ electrones

Nº de electrones enlazantes = $24 - 16 = 8$; $8 / 2 = 4$ pares de electrones enlazantes

Nº de electrones no enlazantes = $16 - 8 = 8$; $8 / 2 = 4$ pares de electrones no enlazantes

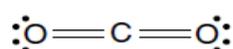


3- Estudio de la posible geometría.

Los cuatro pares de electrones enlazantes para 3 átomos indica que deben existir dobles enlaces.

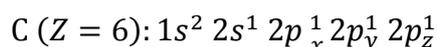
Para hallar la estructura de Lewis, los dobles enlaces no se tienen en cuenta, equivale a un solo enlace, es decir, 1 par de electrones enlazante por cada doble enlace, así, tenemos dos direcciones del espacio alrededor del átomo central, lo que indica una estructura lineal.

Por otro lado, la molécula está constituida por un átomo central, C, el menos electronegativo entre los dos, que no tiene pares de electrones no enlazantes, por lo que no alteran su estructura lineal, según la Teoría de Repulsión de los Electrones de la Capa de Valencia, TRPECV.



4- Geometría según la Teoría de hibridación de orbitales.

Para lograr esta estructura de doble enlace el carbono debe promocionar un electrón del orbital $2s$ al $2p$, siendo la distribución electrónica del carbono excitado:

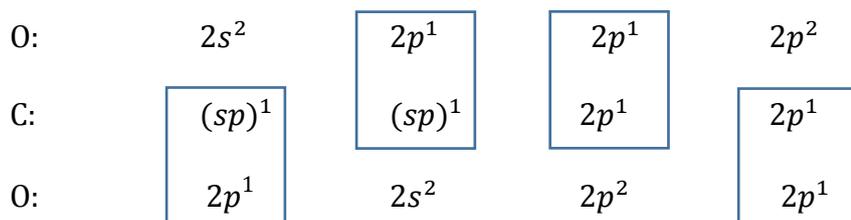
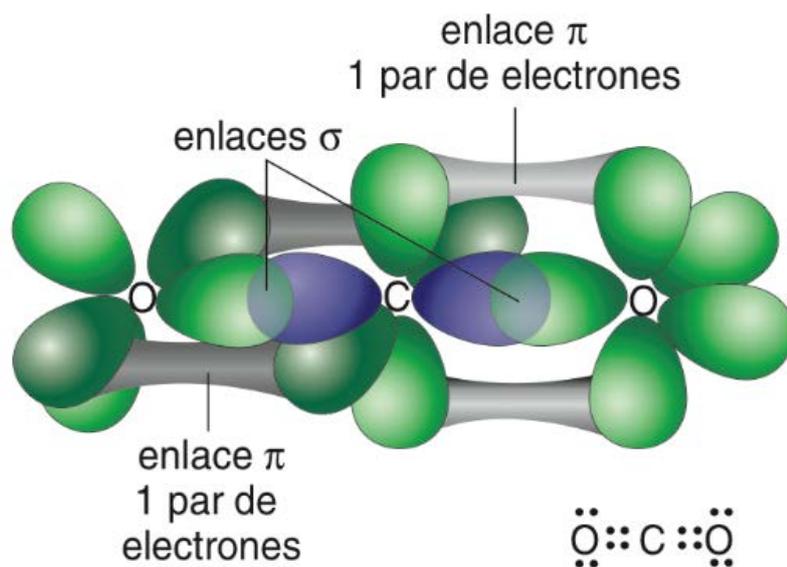


Esto permitirá hibridar un orbital s y uno p en un orbital híbrido nuevo sp , que será utilizado en el enlace junto a un orbital p del oxígeno con un electrón desapareado, para dar lugar a un enlace sigma, σ .

Uno de los orbitales p del carbono, no hibridados, formará con el otro orbital p del oxígeno con un electrón desapareado un enlace pi, π . Lo mismo ocurrirá con el otro átomo de oxígeno, formándose así dos enlaces sigma, σ y dos enlaces π , en total.

En resumen, se forman dos orbitales híbridos sp en el átomo de carbono con un electrón desapareado cada uno, quedando sin hibridar dos orbitales p con un electrón desapareado. Los orbitales híbridos se enlazan con ambos oxígenos a través de un enlace sigma. Los orbitales p del oxígeno y sin hibridar del carbono forman enlaces pi.

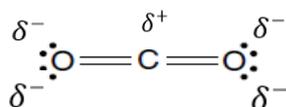




Se formarían dos enlaces $\sigma (sp)_C^1 - (2p^1)_O$ y dos enlaces $\pi (2p^1)_C - (2p^1)_O$.

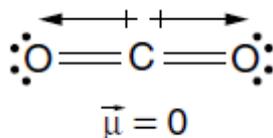
c)

Al ser más electronegativo el oxígeno que el carbono, atraerá más hacia sí el par de electrones compartidos, generando sobre sí mismo una carga negativa, un dipolo negativo, mientras que sobre el carbono se genera una carga positiva, un dipolo positivo.



d)

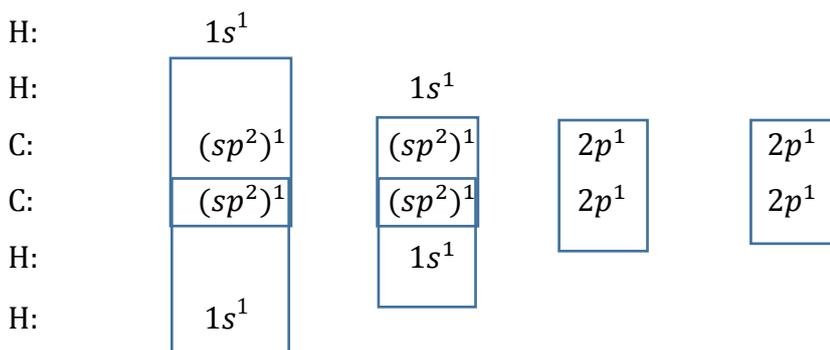
Debido a que las electronegatividades del oxígeno y del carbono son parecidas pero no iguales se formarán enlaces polares, según se ha visto en el apartado anterior, sin embargo, al ser la molécula lineal, los dos momentos dipolares generados se anulan, resultando el CO_2 una molécula apolar.



PROBLEMA 7

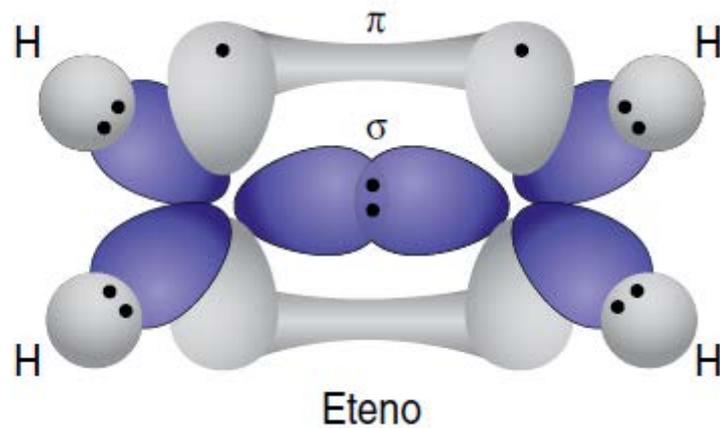
a)

En la molécula de eteno cada carbono utiliza tres orbitales híbridos sp^2 con un electrón cada uno, quedando un orbital $2p$ sin hibridar, y con un electrón desapareado. Uno de estos orbitales sp^2 lo emplea cada átomo de carbono para unirse entre sí frontalmente mediante un enlace tipo σ , con el otro átomo de carbono, y los otros dos orbitales híbridos que quedan a cada carbono los emplea para unirse a los átomos de hidrógeno. Por solapamiento lateral de los orbitales $2p$ de cada átomo de carbono se forma el enlace tipo π .



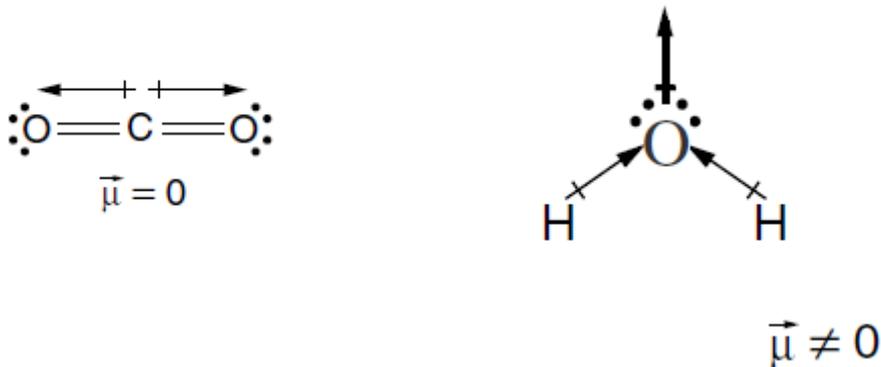
Se forman dos enlaces cuatro enlaces σ $(sp^2)_C - (1s^1)_H$, un enlace σ $(sp^2)_C - (sp^2)_C$ y un enlace π $(2p^1)_C - (2p^1)_C$.





b)

La molécula de **CO₂** de geometría lineal es apolar por compensarse los momentos dipolares de sus enlaces, mientras que la molécula **H₂O** tiene geometría angular debido al par de electrones no enlazantes del oxígeno, por lo que es polar.



PROBLEMA 8

El carbono en su formato de diamante es un sólido covalente, macromolécula con una red cristalina de las más duras existentes, en consecuencia, la temperatura de fusión es muy elevada, 3 550°C.

El bromuro de potasio, es un compuesto que presenta enlace iónico que tiene un punto de fusión moderadamente alto, es decir, 734°C.

Por último, el amoníaco es una molécula covalente polar, por lo que la temperatura de fusión será baja, -33°C.

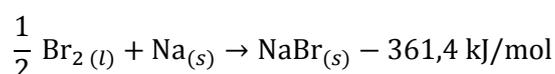
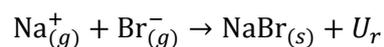
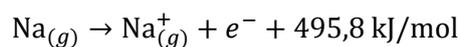
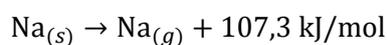
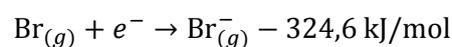
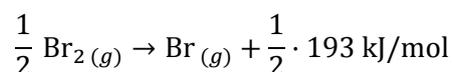
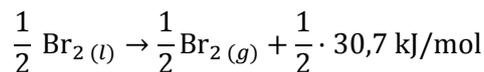
El sólido A es el diamante, el sólido B es el bromuro de potasio y el C es el amoníaco.



PROBLEMA 9

Existen dos formas de resolver este problema, la primera a través de la ley de Hess y la segunda utilizando el diagrama de Born-Haber. Ambas permiten obtener la energía de red. Veámoslas separadamente.

A través de la ley de Hess:



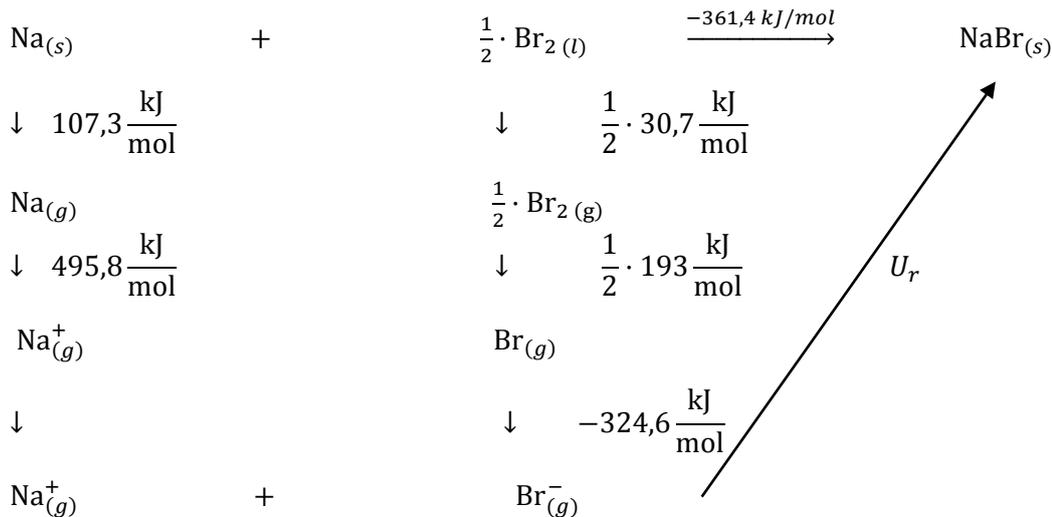
Sumando todas las ecuaciones químicas se obtiene la reacción de formación del bromuro de sodio, de donde se despeja la energía de red.

$$\frac{1}{2} \cdot 30,7 + \frac{1}{2} \cdot 193 - 324,6 + 107,3 + 495,8 + U_r \left(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = -361,4$$

$$U_r = -751,75 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

La segunda forma de cálculo de esta energía es a través del esquema de Born-Haber:





$$\frac{1}{2} \cdot 30,7 + \frac{1}{2} \cdot 193 - 324,6 + 107,3 + 495,8 + U_r \left(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = -361,4$$

$$U_r = -751,75 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

PROBLEMA 10

KCl

El potasio se sitúa en la tabla en la parte izquierda, y el cloro, en la parte derecha de electronegatividad más elevada. Al ser de electronegatividades muy distintas el enlace que va a predominar es de tipo iónico.

Las temperaturas de fusión son altas o muy altas dependiendo de la red cristalina formada. Es un compuesto soluble en agua y conduce la corriente eléctrica disuelto o fundido.

Cu

Es un metal y por lo tanto presenta un enlace metálico. Tiene temperatura de fusión moderadamente alta y es insoluble en agua. Conduce la corriente eléctrica en cualquier estado de agregación.

SO₂

La posición de estos átomos, azufre y oxígeno, en la tabla periódica es cercana, con electronegatividades similares y altas. Por tanto, el enlace predominante será covalente.

La temperatura de fusión es baja (a temperatura ambiente es un gas) y no conduce la corriente eléctrica.



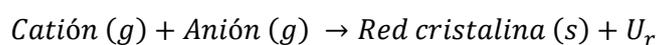
En cuanto a la solubilidad en agua, el compuesto SO_2 es muy soluble, formándose un gas hidratado: $\text{SO}_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, que presenta un grave problema de contaminación ambiental debido a sus características ácidas.

PROBLEMA 11

El enlace que predominará entre el cloro y el magnesio, calcio y bario será el enlace iónico, dadas las diferentes electronegatividades de estos elementos con la del cloro. Para hallar la relación entre sus temperaturas de fusión habrá que analizar la energía reticular del cristal iónico formado entre el cloro y cada uno de los metales indicados. A mayor energía reticular, mayor será el punto de fusión, ya que será necesaria más energía para romper la red.

Aunque la energía reticular se puede determinar experimentalmente, también se puede calcular a partir de una relación matemática, denominada la *ecuación de Born-Landé*, que tiene en cuenta una serie de parámetros cristalinos.

La ecuación química correspondiente a la obtención de una red cristalina procedente de un enlace iónico, se puede representar como:



Al formar, el catión y el anión, una red cristalina se desprende la energía de red U_r (por ello tiene un signo menos la fórmula).

La ecuación para calcular la energía de red U_r , por mol, se debe a Born-Landé:

$$U_r = -N_A \cdot k \cdot \frac{Q_{A^-} \cdot Q_{C^+} \cdot A}{d_0} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Q_{A^-} , Q_{C^+} , las cargas del anión y del catión en valor absoluto; N_A , el número de Avogadro; A , la constante de Madelung propia de la red cristalina; n , el coeficiente de Born o factor de compresibilidad que también depende de al red del cristal; d_0 , distancia internuclear y k , constante de Coulomb.

Algunos de estos parámetros, como la constante de Madelung o el coeficiente de Born no son fáciles de determinar con precisión, por este motivo esta ecuación es más útil simplificada: la energía reticular es directamente proporcional al producto de la carga de los iones e inversamente proporcional a la distancia que los separa.

$$U_r \cong \frac{Q_{A^-} \cdot Q_{C^+}}{d_0}$$



Cuanto mayor sea la carga de los iones más fuertemente se van a unir porque crece la energía reticular. Por otro lado si el radio es pequeño, la distancia d_0 es pequeña y crece la energía reticular.

En este caso, las sustancias descompuestas en sus iones son:

$MgCl_2$	$CaCl_2$	$BaCl_2$
Mg^{2+}	Ca^{2+}	Ba^{2+}
Cl^-	Cl^-	Cl^-

Las moléculas se diferencian en el tamaño del catión. La carga de catión y del anión no es un elemento diferencial ya que todos los iones tienen la misma carga.

El radio atómico en un periodo disminuye al crecer el número atómico y en un grupo aumenta hacia abajo.

Al comparar los radios se obtiene el valor de la energía reticular:

$$r(Mg) < r(Ca) < r(Ba) \Rightarrow U_{BaCl_2} < U_{CaCl_2} < U_{MgCl_2}$$

La ordenación de los puntos de fusión va en función de la energía de red:

$$Punto\ de\ Fusión(BaCl_2) < Punto\ de\ Fusión(CaCl_2) < Punto\ de\ Fusión(MgCl_2)$$

PROBLEMA 12

a)

El elemento A es el litio, Li, el elemento B es el boro, B, y el C es el cloro, Cl.

El más electropositivo es el que ocupa la esquina superior izquierda de la tabla periódica, es decir, el Li.

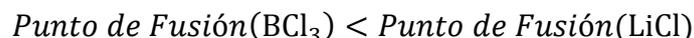
b)

Compuesto AC: LiCl, *cloruro de litio*. Es la unión de dos elementos con muy distinta electronegatividad. En enlace predominante será el iónico, por lo tanto, tendrá un punto de fusión muy elevado.

Compuesto BC: BCl₃, *tricloruro de boro*. Los átomos tienen poca diferencia entre sus electronegatividades, por lo que la molécula tendrá enlaces covalentes,

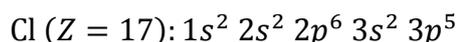
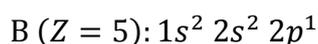


predominantemente. Su punto de fusión será elevado, pero bastante menor que el del cloruro de litio.



c)

Para obtener la geometría molecular se hallará en primer lugar la estructura de Lewis de la molécula tricloruro de boro.



Número de electrones totales en la molécula: $3 + (7 \cdot 3) = 24$

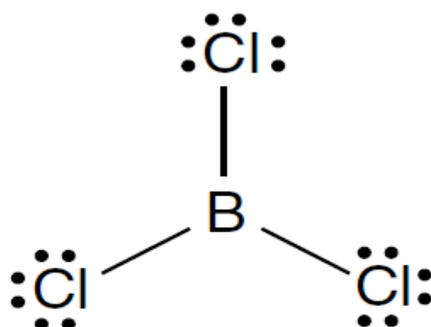
Número de electrones según la regla del octeto: $6 + (8 \cdot 3) = 30$

(el boro es una excepción a la regla del octeto llenando su capa de valencia con 6 electrones en lugar de 8)

Número de pares enlazantes: 3 pares ($30 - 24 = 6$ electrones; $6/2 = 3$)

Número de pares no enlazantes: 9 pares ($24 - 6 = 18$ electrones; $18/2 = 9$)

Tres pares enlazantes equivalen a tres direcciones del espacio, por lo que tiene una *geometría triangular plana* con ángulos de 120° . No hay pares de electrones no enlazantes alrededor del boro que, al ser menos electronegativo que el cloro, ocupará el centro de la molécula.



La hibridación que tiene lugar es la siguiente:

El boro promociona un electrón del orbital s a uno de los p , formándose 3 orbitales híbridos sp^2 , $1s^2 2(sp^2)_x^1 2(sp^2)_y^1 2(sp^2)_z^1$. El boro utiliza estos orbitales híbridos para enlazarse con el cloro, que utiliza orbitales $3p$. Se crean así 3 enlaces sigma, mediante solapamiento frontal $\sigma(sp^2)_B - (3p)_{Cl}$.



Como cada átomo de cloro tendrá un orbital $3p$ con un electrón, serán necesarios 3 átomos de cloro para formar la molécula BCl_3 .

La geometría es trigonal plana con el boro en el centro y se ajusta el ángulo encontrado experimentalmente $\text{Cl} - \text{B} - \text{Cl}$, 120° .

PROBLEMA 13

a)

(I) *El cloruro de manganeso(II), MnCl_2 , tiene un punto de fusión elevado, es soluble en agua, características de los compuestos de con enlace iónico, y la molécula será polar porque se disuelve en compuestos polares.*

(II) *El cloruro de arsénico(III), AsCl_3 , tiene un punto de fusión muy bajo, no es soluble en agua, por lo que el enlace será covalente y la molécula será apolar porque se disuelve en compuestos apolares.*

b)

El cloruro de calcio, CaCl_2 , tiene enlace iónico debido a la diferencia de electronegatividades de los átomos que componen la molécula, por lo que su punto de fusión estará más próximo al del MnCl_2 que al del AsCl_3 , que es el más bajo de los tres. En comparación con el punto de fusión del MnCl_2 será mayor porque la diferencia de electronegatividades entre el cloro y el calcio es mayor que entre el cloro y el manganeso (debido a su ubicación en la tabla periódica).

El punto de fusión depende de la fuerza de unión de la red cristalina. Dada la diferencia de electronegatividades, la fuerza con la que se atraen los iones en el compuesto CaCl_2 es mayor que en el caso del MnCl_2 haciendo que, para romper la red del CaCl_2 , se necesite más energía.

El CaCl_2 tendrá el punto de fusión más elevado.

Será soluble en agua, por ser un enlace iónico. Como su punto de fusión es elevado será sólido a temperatura ambiente.

PROBLEMA 14

a)

A mayor energía reticular, mayor será el punto de fusión, ya que hay emplear más energía en romper la red cristalina. Por lo que, vistos la ordenación dada de los puntos de fusión, el orden de la energía reticular será:

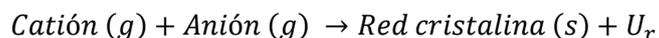


$$U_{\text{NaF}} > U_{\text{NaCl}} > U_{\text{NaBr}} > U_{\text{NaI}}$$

b)

A mayor energía reticular, mayor será el punto de fusión.

La ecuación química correspondiente a la obtención de una red cristalina procedente de un enlace iónico, se puede representar como:



Al formar, el catión y el anión, una red cristalina se desprende la energía de red U_r (por ello tiene un signo menos la fórmula).

La ecuación para calcular la energía de red U_r , por mol, se debe a Born-Landé:

$$U_r = -N_A \cdot k \cdot \frac{Q_{A^-} \cdot Q_{C^+} \cdot A}{d_0} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Q_{A^-} , Q_{C^+} , las cargas del anión y del catión en valor absoluto; N_A , el número de Avogadro; A , la constante de Madelung propia de la red cristalina; n , el coeficiente de Born o factor de compresibilidad que también depende de al red del cristal; d_0 , distancia internuclear y k , constante de Coulomb.

Algunos de estos parámetros, como la constante de Madelung o el coeficiente de Born no son fáciles de determinar con precisión, por este motivo esta ecuación es más útil simplificada: la energía reticular es directamente proporcional al producto de la carga de los iones e inversamente proporcional a la distancia que los separa.

$$U_r \cong \frac{Q_{A^-} \cdot Q_{C^+}}{d_0}$$

Cuanto mayor sea la carga de los iones más fuertemente se van a unir porque crece la energía reticular. Por otro lado si el radio es pequeño, la distancia d_0 es pequeña y crece la energía reticular.

En el caso propuesto, los iones que forman cada molécula son:

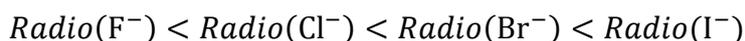
NaF	NaCl	NaBr	NaI
Na ⁺	Na ⁺	Na ⁺	Na ⁺
F ⁻	Cl ⁻	Br ⁻	I ⁻



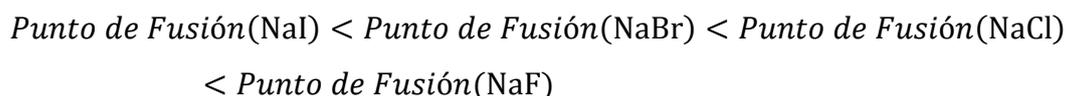
Las moléculas se diferencian en el tamaño del anión, porque su carga no es diferencial (todas son -1).

El radio disminuye en un periodo al avanzar de izquierda a derecha y en un grupo, aumenta si se avanza hacia abajo.

Los distintos aniones son los elementos del grupo halógeno que, tal como se ha dicho, el radio aumenta al avanzar en un grupo, por lo que:



La temperatura de fusión está directamente relacionada con la energía que se debe emplear para romper los enlaces, por lo que esta temperatura será tanto mayor cuanto mayor cuando la energía reticular que, al ser inversamente proporcional, resultara que la temperatura de fusión será mayor cuanto menor sea el radio:



PROBLEMA 15

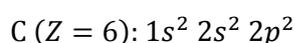
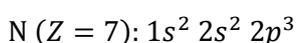
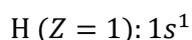
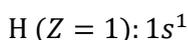
a)

El amoníaco tiene una estructura de pirámide trigonal con el átomo de nitrógeno en el vértice superior y tres átomos de hidrógeno en las esquinas de un triángulo en un plano inferior, con ángulo de enlace de $107,3^\circ$.

Según datos experimentales, la molécula de metano es apolar y presenta geometría tetraédrica (ángulos de $109,5^\circ$), formando 4 enlaces C – H que son idénticos entre sí.

Ambas geometrías se predicen a través de la Teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, pero al estudiar con más profundidad el ángulo de los enlaces hay que recurrir a la hibridación de orbitales atómicos, en ambos casos.

Para realizar un estudio completo de ambas moléculas es necesario comenzar por determinar la configuración electrónica de los átomos constituyentes de la molécula en su estado fundamental:



A continuación, evaluamos el número de electrones disponibles para el enlace y, el número total de acuerdo con la regla del octeto:

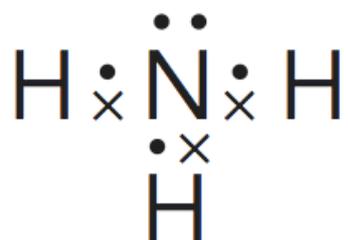
	NH ₃	CH ₄
Nº de electrones de valencia de la molécula	1·3 + 5 = 8	1·4 + 4 = 8
Nº de electrones según la regla del octeto	2·3 + 8 = 14 *	2·4 + 8 = 16
Nº de pares de electrones enlazantes	14 – 8 = 6, 6/2= 3 pares	16 – 8 = 8, 8/2=4 pares
Nº de pares de electrones no enlazantes	8 – 6 = 2, 2/2=1 par	8 – 8 = 0, 0 pares

* El hidrógeno es una excepción a la regla del octeto ya que llena su última capa con 2 electrones.

Determinación de la posible geometría de la molécula según la TRPECV (Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia):



La estructura de Lewis será la siguiente:



Al tener 3 pares de electrones enlazantes que se dirigirán a las 3 direcciones del espacio por lo que geometría sea de pirámide trigonal.

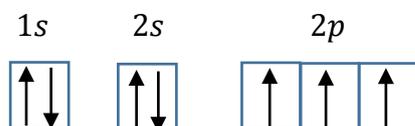
Sin embargo, el átomo de nitrógeno tiene un par no enlazante lo que, según la Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia, produce una alteración sobre los pares enlazantes, de acuerdo con la relación indicada por esta teoría: la Repulsión entre par no enlazante y par no enlazante > Repulsión entre par no enlazante y par de enlace > Repulsión entre par de enlace y par de enlace.

Por otro lado, según se observa en la configuración de Lewis del átomo de nitrógeno, los electrones desapareados ocupan orbitales *p*, que, si formaran enlaces, los ángulos de enlace serían de 90° (cada orbital *p* se halla situado sobre un eje cartesiano) y, los ángulos formados por los enlaces N – H también serían de 90°, que no es el caso,



según resultados experimentales, por lo que hay que recurrir a la Teoría de hibridación de orbitales atómicos.

La configuración electrónica del nitrógeno en estado fundamental es:



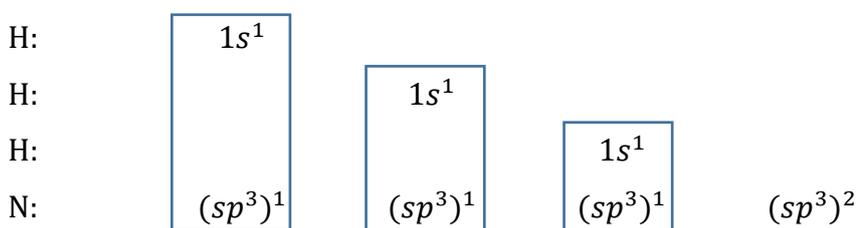
Se observa que el nitrógeno no requiere la promoción de ningún electrón para formar tres enlaces covalentes y generar la molécula de amoníaco, ya que tiene 3 electrones desapareados.

Se sabe por datos experimentales que la molécula de amoníaco tiene geometría de pirámide trigonal y que los ángulos entre el N – H son de $107,3^\circ$, y no de 90° . Es decir, presenta unos ángulos muy cercanos a los de los de un tetraedro regular, que son de $109,5^\circ$.

Esto se explica recurriendo a la hibridación sp^3 , de un orbital $2s$ y de los tres orbitales $2p$ del nitrógeno, a pesar de que el orbital $2s$ está completo.

Así, la hibridación dará lugar a 4 orbitales híbridos sp^3 equivalentes entre sí, que estarán dirigidos hacia los vértices de un tetraedro.

El nitrógeno tiene en los orbitales origen de la hibridación 5 electrones, que, posteriormente, se situarán en uno de los orbitales híbridos sp^3 un par de electrones libre (el par no enlazante), y en cada uno de los otros tres orbitales híbridos un electrón desapareado, que darán lugar al enlace covalente con el orbital $1s$ del hidrógeno (3 pares enlazantes). Esquemáticamente:



Se formarán 3 enlaces σ : $(sp^3)_N^1 - (1s^1)_H$.

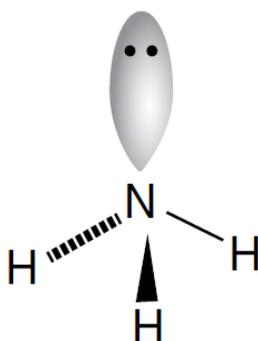
Los 4 orbitales híbridos generados en el nitrógeno se dirigen a los 4 vértices de un tetraedro, lo cual no significa que la geometría de la molécula sea tetraédrica, solamente la del átomo de nitrógeno. La geometría de la molécula es de pirámide



trigonal (el par de electrones libre no se tiene en cuenta a la hora de considerar la geometría molecular, únicamente los enlaces N – H).

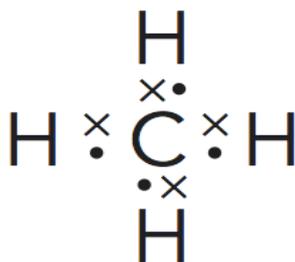
El hecho de que el ángulo de enlace sea ligeramente menor que el esperado para un tetraedro regular, de $107,3^\circ$ en lugar de $109,5^\circ$, se debe a que el par de electrones no enlazante ejerce una mayor repulsión sobre los pares electrónicos enlazantes, tal como se ha visto anteriormente, cerrando un poco el ángulo.

La geometría de la molécula se puede representar como:



CH₄

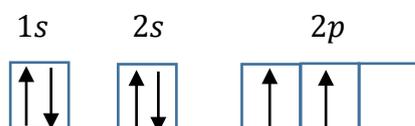
La estructura de Lewis es:



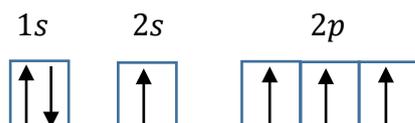
Cuatro pares de electrones enlazantes ocupan las 4 direcciones del espacio, es decir, la geometría es tetraédrica y como no hay pares de electrones no enlazantes, el tetraedro es regular, es decir, con ángulos de $109,5^\circ$. Sin embargo, si no se recurre a la Teoría de hibridación de orbitales atómicos, esta geometría no sería posible porque el carbono solamente tiene 2 orbitales *p* libres, lo que haría del todo imposible esta molécula.

Explicación de los ángulos de enlace con la Teoría de hibridación de orbitales atómicos.

La configuración del estado fundamental del carbono es:



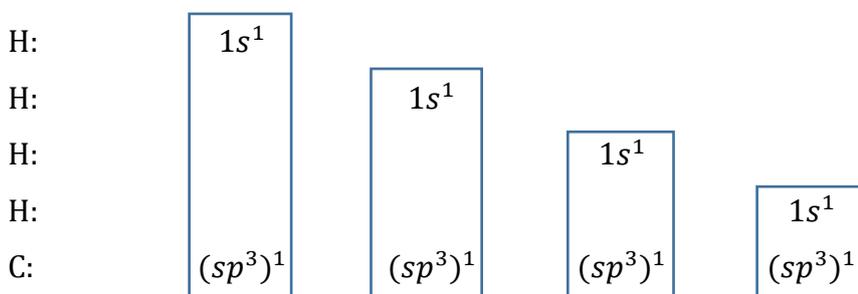
Según esta configuración se podría formar CH_2 , y no CH_4 , ya que solo presenta dos orbitales semillenos, que podrían dar lugar al enlace covalente con el hidrógeno, pero en este caso la molécula de metano no podría tener lugar si no se aplica la Teoría de hibridación de orbitales: un electrón pasa del orbital $2s$ al $2p$ vacío, es decir, pasa al estado excitado, lo que requiere un aporte de energía, obteniéndose:



En este estado excitado, el carbono podrá formar 4 enlaces $\text{C} - \text{H}$, pues ya tiene 4 electrones desapareados. Sin embargo, estos 4 enlaces no serían equivalentes, porque estarían formados por orbitales distintos (1 orbital s y 3 orbitales p y los 3 enlaces formarían entre sí un ángulo de 90°).

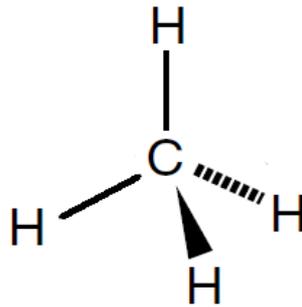
Para que formen ángulos iguales a $109,5^\circ$ la solución es que los 4 orbitales atómicos hibriden, formando una combinación de orbitales s y p , 4 orbitales híbridos iguales sp^3 . Se les llama híbridos sp^3 porque proceden de la combinación de 1 orbital s y 3 orbitales p , por lo que tienen un 25% de contribución o carácter de orbital s y un 75% de contribución o carácter de orbital p . Los 4 híbridos son equivalentes en forma y energía, y se dirigen a los vértices de un hipotético tetraedro. Ahora cada uno de estos orbitales puede solaparse con cada uno de los orbitales $1s$ del hidrógeno, para dar 4 enlaces sigma, solapamientos frontales con el orbital de hidrógeno.

De forma esquemática:



Se formarán 4 enlaces σ : $(sp^3)_C^1 - (1s^1)_H$.





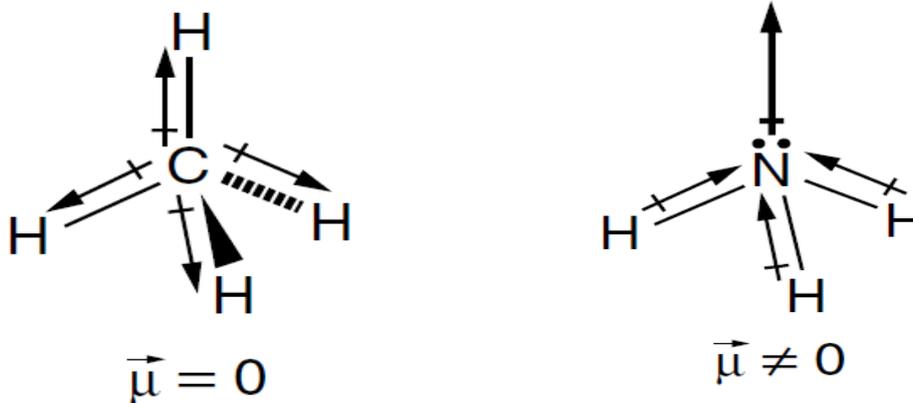
b)

En el caso del amoníaco los enlaces son polares debido a la diferencia de electronegatividades entre el nitrógeno y el hidrógeno. Los vectores momentos dipolar están dirigidos al átomo de nitrógeno que es el más electronegativo.

Como los ángulos no son de $109,5^\circ$, sino que algo más cerrados, los momentos dipolares no se compensan, por lo que la molécula es polar.

Tal como se ha dicho en el caso del metano, los enlaces están formando un tetraedro regular, los enlaces C – H son polares (debido a la distinta electronegatividad de los átomos que lo forman), pero se compensan y resulta una molécula apolar.

La molécula polar es la de amoníaco.



c)

Al ser el metano una molécula con enlace covalente, la temperatura de fusión es muy baja a moderada, por lo que a temperatura ambiente el estado de agregación del metano será gaseoso. Se disolverá solamente en compuestos apolares, no en agua. Y no conducirá la corriente eléctrica.

Estado de agregación del metano a temperatura ambiente: gas.



PROBLEMA 16

El elemento A, con número atómico 11, es el *sodio*, Na, metal alcalino.

El elemento B, con número atómico 16, es el *azufre*, S, anfígeno.

El posible compuesto será Na_2S con enlace iónico, debido a sus electronegatividades muy distintas.

Respuesta correcta d).

Debido las características de los compuestos iónicos, el compuesto Na_2S será *sólido a temperatura ambiente, será soluble en agua y conducirá la corriente eléctrica disuelto o fundido.*

PROBLEMA 17

a)

En el enlace C – F es más electronegativo el F: $\text{C}^{\delta+} - \text{F}^{\delta-}$

En el enlace O – S es más electronegativo el O: $\text{S}^{\delta+} - \text{O}^{\delta-}$

En el enlace P – Cl es más electronegativo el Cl: $\text{P}^{\delta+} - \text{Cl}^{\delta-}$

En el enlace C – N es más electronegativo el N: $\text{C}^{\delta+} - \text{N}^{\delta-}$

b)

El más polar de los enlaces será el que presente una mayor diferencia de electronegatividad de los elementos que lo forman, y esto ocurre en el enlace C – F, debido a que el elemento flúor tiene la mayor electronegatividad de entre los propuestos y el carbono la menor.

PROBLEMA 18

a)

La configuración de la capa de valencia $2s^2 2p^1$ corresponde al elemento *boro*, B.

La configuración de la capa de valencia $3s^2 3p^5$ corresponde al elemento *cloro*, Cl.

b)

Debido a la electronegatividad similar de ambos átomos el enlace que tendrá lugar será predominantemente *covalente*.

c)

La fórmula del compuesto es BCl_3 , *tricloruro de boro*.



d)

El boro es una excepción a la regla del octeto completando su última capa con 6 electrones. Según la estructura de Lewis, su *geometría será trigonal plana*.

En efecto:

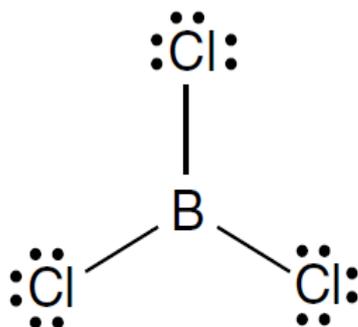
Nº de electrones de valencia de la molécula = $7 \cdot 3 + 3 = 24$ electrones.

Nº de electrones según la regla del octeto = $8 \cdot 3 + 6 = 30$ electrones (el boro es una excepción a la regla del octeto ya que llena su última capa con 6 electrones).

Nº de electrones enlazantes = $30 - 24 = 6$, 3 pares de electrones enlazantes.

Nº de electrones no enlazantes = $24 - 6 = 18$, 9 pares de electrones no enlazantes.

Los electrones no enlazantes no están sobre el átomo central por lo tanto no producen efecto en la geometría de la molécula. Son 3 pares de electrones enlazantes y en consecuencia, 3 direcciones de enlace, luego la geometría es triangular plana.



PROBLEMA 19

Una molécula es polar cuando el momento dipolar resultante de los momentos dipolares de los enlaces es mayor que cero.

Las moléculas SO₂ y NO₂ formadas por 3 átomos cada una, uno central (S y N) y dos átomos de oxígeno, son polares, lo que indica una geometría angular. Esta geometría suele darse cuando hay electrones no enlazantes (estos producen repulsión a los pares enlazantes haciendo que la molécula no sea lineal (TRPECV)).

SO₂

S ($Z = 16$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

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



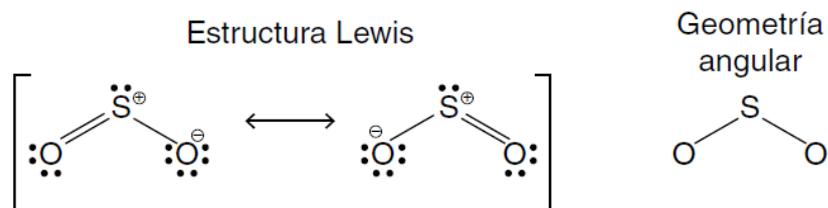
Nº de electrones de valencia de la molécula = $6 \cdot 2 + 6 = 18$ electrones.

Nº de electrones según la regla del octeto = $8 \cdot 2 + 8 = 24$ electrones.

Nº de electrones enlazantes = $24 - 18 = 6$, 3 pares de electrones enlazantes.

Nº de electrones no enlazantes = $18 - 6 = 12$, 6 pares de electrones no enlazantes.

Existen algunas moléculas que presentan lo que llamamos mesomería o resonancia, lo cual implica que no son satisfactoriamente representadas mediante una única estructura de Lewis que sea consistente con sus propiedades reales. Para la molécula de dióxido de azufre, SO_2 , son posibles dos estructura de Lewis distintas:



En ambas, el átomo de azufre se une con un enlace simple al oxígeno y con un enlace doble al otro oxígeno. El enlace doble teóricamente es más corto que el simple y, sin embargo, se sabe por determinación experimental, que ambos enlaces azufre-oxígeno en la molécula de SO_2 son idénticos y equivalentes, con una longitud intermedia entre el enlace simple azufre-oxígeno y el enlace doble.

Por ello, la molécula de SO_2 tiene características intermedias entre las dos estructuras representadas. No existen dos posible tipos de moléculas de SO_2 en la realidad, sólo una, lo que sucede es que la representación de esta molécula según las estructuras de Lewis es deficiente.

Así, hay moléculas o iones, cuya estructura no se puede asignar a una única distribución electrónica que explique sus propiedades de forma satisfactoria.

Cada una de las representaciones recibe el nombre de fórmula límite, estas fórmulas límite no tienen existencia real, la molécula real es un estado intermedio que se denomina híbrido de resonancia o forma mesómera.

Así, el SO_2 es un híbrido de resonancia entre estas dos fórmulas límite, lo cual se representa con una doble flecha entre las dos configuraciones posibles.

En todo caso es una estructura angular que hace que la molécula de dióxido de azufre sea polar.



Algunas moléculas covalentes que presentan resonancia: el ozono, O_3 , el dióxido de carbono CO_2 , tres óxidos de nitrógeno, el óxido nitroso, N_2O , el monóxido de nitrógeno, NO , y el dióxido de nitrógeno, NO_2 , etc.

Que presenten resonancia significa que no se representan satisfactoriamente con una única estructura de Lewis, o que una única estructura no es consistente con sus propiedades reales.

En este caso está, además de la molécula de SO_2 , la estructura de la molécula de NO_2 .

NO_2

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

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

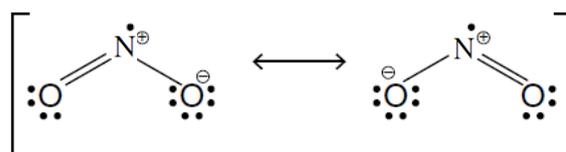
Nº de electrones de valencia de la molécula = $6 \cdot 2 + 5 = 17$ electrones.

Nº de electrones según la regla del octeto = $8 \cdot 2 + 8 = 24$ electrones.

Nº de electrones enlazantes = $24 - 17 = 7$, 3 pares de electrones enlazantes + 1 electrón libre.

Nº de electrones no enlazantes = $17 - 7 = 10$, 5 pares de electrones no enlazantes.

Estructura Lewis



Esta es una molécula con geometría angular y por lo tanto es polar.

CO_2

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

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

Nº de electrones de valencia de la molécula = $6 \cdot 2 + 4 = 16$ electrones.

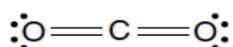
Nº de electrones según la regla del octeto = $8 \cdot 2 + 8 = 24$ electrones.

Nº de electrones enlazantes = $24 - 16 = 8$, 4 pares de electrones enlazantes.

Nº de electrones no enlazantes = $16 - 8 = 8$, 4 pares de electrones no enlazantes.



Esta estructura con 4 pares de electrones enlazantes suponen dobles enlaces y como los pares no enlazantes están sobre los oxígenos, no sobre la molécula central, carbono, lo que hace que la estructura sea lineal, los momentos dipolares se compensan y hacen que la molécula sea apolar.



PROBLEMA 20

Las moléculas de etanol ($\text{CH}_3 - \text{CH}_2\text{OH}$) y ácido etanoico ($\text{CH}_3 - \text{COOH}$) están unidas mediante enlaces por puente de hidrógeno, debido a la presencia del grupo OH^- , más intensos en los ácidos que en los alcoholes; en cambio, las moléculas de etano ($\text{CH}_3 - \text{CH}_3$) no pueden formar enlaces de hidrógeno.

PROBLEMA 21

No es correcto. Las sustancias moleculares, formadas por moléculas individuales unidas por débiles fuerzas de Van der Waals, sí presentan puntos de fusión y ebullición bajos o moderadamente altos. Pero los sólidos covalentes, formados por redes macromoleculares de átomos unidos por enlaces covalentes fuertes, tienen puntos de fusión y ebullición muy elevados.

