ENLACES

♦ CUESTIONES

Geometría molecular en el enlace covalente

1. En base al modelo de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV), prediga razonadamente para la molécula de AlCl₃ su geometría electrónica sugiriendo el valor aproximado del ángulo de enlace, e indique el tipo de hibridación que emplearía el átomo de aluminio en la molécula para formar los enlaces correspondientes.

(A.B.A.U. extr. 23)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Molécula de cloruro de aluminio: AlCl₃.

El átomo central es el de aluminio, que tiene tres electrones en la capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de aluminio (Z=13) en el estado fundamental es $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^1$, pero para formar tres enlaces tiene que separar («desaparear») los dos electrones 3s, elevando uno de ellos al orbital 3p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar. La configuración electrónica del átomo de aluminio excitado es $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p_x^1$.

Los tres electrones desapareados forman tres enlaces, cada uno con un electrón desapareado de un átomo de cloro, como se ve en el diagrama de puntos de electrones de Lewis:

(La molécula AlCl₃ es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a unirse de modo que cada átomo tiene ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de aluminio solo hay seis (tres pares de) electrones).

Según TRPECV, la geometría electrónica de 3 pares de electrones es plana triangular. La molécula es plana triangular, con un ángulo Cl-Al-Cl de 120°.

En la teoría de la hibridación, los orbitales s, p_x , p_y y p_z , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos n, l es m, pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

• 2 orbitales sp, formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de 180°.

(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces π).

• 3 orbitales sp², formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de 120°.

(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace π).

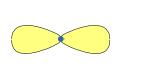
• 4 orbitales sp³, formados por la hibridación del orbital s y os tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de 109,5°.

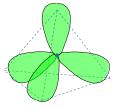
3 híbridos sp²

2 híbridos sp



4 híbridos sp³





La hibridación que presenta el átomo de aluminio en este compuesto es sp², que corresponde a una distribución triangular plana con ángulos de 120°.

- 2. a) Aplicando la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) deduzca razonadamente la geometría electrónica y molecular de la molécula de tricloruro de fósforo, indicando cual sería el valor aproximado del ángulo de enlace.
 - b) Sabiendo que la geometría electrónica en la molécula de SiF₄ es tetraédrica, discuta razonadamente qué tipo de orbitales híbridos emplearía el átomo de silicio para formar los enlaces correspondientes, cómo se forman dichos orbitales híbridos y la distribución de electrones en estos.

(A.B.A.U. ord. 23)

Solución:

a) Molécula de tricloruro de fósforo: PCl₃.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

El átomo central es el de fósforo, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de fósforo (Z = 15) en el estado fundamental es: [Ne] $3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$. Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos per-:CI:P:CI: manecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis: Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de fósforo está en el centro del tetraedro y los tres átomos de cloro se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve». La forma de la molécula del PCl₃ es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de fósforo que los pares enlazantes, la repulsión entre el parno enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de cloro se acerquen un poco. El ángulo de enlace Cl-P-Cl sería algo menor que 109,5°.

(Según la Wikipedia el ángulo en la molécula del PCl₃ es de 100°).

b) Molécula de fluoruro de silicio: SiF₄.

La geometría electrónica de la molécula de SiF₄ es tetraédrica, lo que implica que el átomo de silicio utiliza orbitales híbridos sp³ para formar los enlaces con el flúor.

En la teoría de la hibridación, los orbitales s, p_x , p_y y p_z , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos n, l es m, pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

• 2 orbitales sp, formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de 180°.

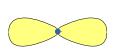
(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces π).

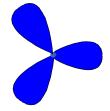
• 3 orbitales sp², formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de 120°.

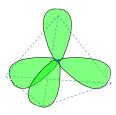
(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace π).

• 4 orbitales sp³, formados por la hibridación del orbital s y os tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de 109,5°.

2 híbridos sp² 4 híbridos sp³







La configuración electrónica del átomo de silicio (Z=14) en el estado fundamental es [Ne] $3s^2 3p_x^1 3p_y^1$, pero tiene la posibilidad de poder unirse con cuatro átomos de flúor. Para ello tiene que separar, («desaparear») los dos electrones 3s, elevando uno de ellos al orbital vacío 3p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de silicio excitado es [Ne] 3s¹ 3px¹ 3px¹ 3px¹ 3px².

Cuando se hibrida, se forman 4 orbitales sp³, cada uno de los cuales contiene un electrón desapareado. Cada uno de estos orbitales híbridos se superpone con un orbital 2p de un átomo de flúor para formar el enlace σ que contendrá dos electrones, uno de cada átomo.

 Aplicando la teoría de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) justifica la geometría electrónica y molecular de las siguientes especies: tetrafluoruro de carbono y tricloruro de arsénico.

(A.B.A.U. extr. 22)

Solución:

Molécula de tetrafluoruro de carbono: CF₄.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar. Los cuatro electrones forman enlaces covalentes σ con los cuatro átomos de flúor, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y los cuatro átomos de flúor en los vértices. El ángulo F–C–F es de 109,5°.

Molécula de tricloruro de arsénico: AsCl₃.

El átomo central es el de arsénico, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. Su configuración electrónica en el estado fundamental es: [Ar] $4s^2$ $4p_x^1$ $4p_y^1$ $4p_z^1$. Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos permanecen como un par so-:CI: As: CI: litario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de arsénico está en el centro del tetraedro y los tres átomos de cloro se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice está un par no enlazante que no «se ve».

La forma de la molécula del AsCl₃ es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de arsénico que los otros pares enlazantes σ , Clarente la repulsión entre el par no enlazante y los pares de enlace σ es mayor que entre los pares σ entre sí, y hará que los átomos de cloro se acerquen un poco. El ángulo de enlace Cl-As-Cl sería algo menor que 109,5°, que es el ángulo entre los vértices de un tetraedro regular.

(Según la Wikipedia el ángulo en la molécula del AsCl₃ es de 98,5°).

 a) Razona la geometría que presentan las moléculas de H₂O y CO₂ según la teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV) e indica el valor previsible del ángulo de enlace.

(A.B.A.U. ord. 22, extr. 20)

Solución:

a) Molécula de agua: H₂O.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

El átomo central es el de oxígeno, que tiene 6 electrones en su capa de valencia. Su configuración electrónica en el estado fundamental es: 1s² 2s² 2p² 2p² 2p². Dos de estos electrones forman enlaces covalentes con los dos átomos de hidrógeno, mientras que los otros cuatro se distribuyen en dos pares no enlazantes, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de oxígeno está en el centro del tetraedro y los dos átomos de hidrógeno se disponen en dos vértices, y en los otros dos están los dos pares no enlazante que no «se ven». La forma de la molécula de H_2O es triangular plana.

es | O ...

Como los pares no enlazantes están más cerca del átomo de oxígeno que los pares enlazantes, la repulsión entre cada par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo es menor de $109,5^{\circ}$. La molécula de H_2O es triángulo con un ángulo H_2O —H de 105° .

Dióxido de carbono: CO₂.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2p_x^2$ $2p_x^1$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Dos de estos electrones forman enlaces covalentes σ con los dos átomos de oxígeno, mientras que los otros dos forman enlaces π con esos mismos átomos, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis: :O::C::O:

Según la TRPECV, los enlaces π no se tienen en cuenta y la geometría electrónica de 2 pares de electrones es lineal. La molécula de CO_2 es lineal con un ángulo O-C-O de 180° .

5. Indica si las moléculas CS₂ y NCl₃ tienen o no momento dipolar.

(A.B.A.U. extr. 21)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Molécula de disulfuro de carbono: CS₂.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2p_x^2$ $2p_x^1$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Dos de estos electrones forman enlaces covalentes σ con los dos átomos de azufre, mientras que los otros dos forman enlaces π con esos mismos átomos, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis: $S^*C^*S^*$:

Según la TRPECV, los enlaces π no se tienen en cuenta y la geometría electrónica de 2 pares de electrones es lineal. La molécula de CS₂ es lineal con un ángulo S–C–S de 180°.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Debido a que el azufre es más electronegativo que el carbono, existe un momento dipolar de enlace $C^{\delta +} \to S^{\delta -}$, que se representa mediante un vector. Pero como ambos enlaces están dirigidos en sentidos opuestos, $S^{\delta -} \leftarrow C^{\delta +} \to S^{\delta -}$, y el valor de cada momento dipolar es el mismo, el momento dipolar de la molécula, que es la resultante de los vectores, es cero. La molécula CS_2 no es polar.

Molécula de tricloruro de nitrógeno: NCl₃.

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de nitrógeno (Z = 7) en el estado fundamental es $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de cloro se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve»:

CI N. CI

la forma de la molécula del NCl₃ es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de cloro se acerquen un poco. El ángulo de enlace Cl-N-Cl sería algo menor que La molécula de NCl₃ es polar. Las electronegatividades de los átomos de Cl y N son muy similares y los enlaces Cl–N tienen un momento dipolar nulo (o muy pequeño). Pero el par no enlazante del nitrógeno no se compensa. Como está muy próximo al átomo de nitrógeno, el momento dipolar será pequeño.

6. Razona qué geometría presenta la molécula de diclorometano (CH₂Cl₂) aplicando la teoría de repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) y discute la polaridad de la molécula.

(A.B.A.U. ord. 21)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto $\log \pi$) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible. Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es 1s² 2s² 2p¹ 2p¹, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones 2s², elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: 1s² 2s¹ 2p¹ 2p¹ 2p¹ 2p¹ 2.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Los cuatro electrones forman enlaces covalentes, dos con los dos átomos de cloro y los otros dos con con

los dos átomos de hidrógeno, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

CITCTH

COMO de

COMOS H

COMOS H

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y dos átomos de cloro en dos vértices y los dos átomos de hidrógeno en los otros dos vértices.

Debido a la repulsión entre los pares no enlazantes de los átomos de cloro vecinos, el ángulo entre los enlaces Cl-C-Cl es mayor que 109,5°, y la forma de molécula es piramidal.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Como el cloro es más electronegativo que el carbono, existe un momento dipolar de enlace $C^{\delta_+} \to Cl^{\delta_-}$, que se representa por un vector. El carbono es más electronegativo que el hidrógeno, por lo que también existe un momento dipolar de enlace $H^{\delta_+} \to C^{\delta_-}$.

La resultante de los momentos dipolares de los enlaces no se anula y la molécula es polar.

7. Empleando la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) razona cuál será la geometría y la polaridad de las moléculas de BeI₂ y CHCl₃.

(A.B.A.U. ord. 20)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Molécula de yoduro de berilio: BeI₂.

El átomo central es el de Be, que tiene dos electrones en la capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de berilio (Z = 4) en el estado fundamental es $1s^2 2s^2$, pero para poder enlazarse tiene que separar («desaparear») los dos electrones, elevando uno de ellos al orbital 2p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de berilio excitado es 1s² 2s¹ 2p_x¹.

Los dos electrones desapareados forman dos enlaces, cada uno de ellos con un electrón desapareado de un átomo de yodo, como se ve en el diagrama electrón punto de Lewis:

(La molécula de BeI₂ es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de berilio solo hay cuatro, (dos pares de) electrones).

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 2 pares de electrones es lineal. La molécula es lineal con un ángulo I–Be–I de 180°.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Como el yodo es más electronegativo que el Be, existe un momento dipolar $Be^{\delta_+} \to I^{\delta_-}$, que se representa por un vector. Pero como ambos enlaces está simétricamente dirigidos en sentidos opuestos,

 $I^{\delta^-} \leftarrow Be^{\delta_+} \rightarrow I^{\delta_-}$, y el valor del momento dipolar es el mismo, el momento dipolar de la molécula es nulo. La molécula de BeI₂ no es polar.

Molécula de triclorometano: CHCl₃.

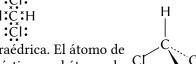
El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2p_x^2$ $2p_x^1$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Los cuatro electrones forman enlaces covalentes, tres con los tres átomos de cloro y el otro con el átomo de

hidrógeno, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:



Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y los tres átomos de cloro en tres vértices y el átomo de hidrógeno en el cuarto vértice.

Debido a la repulsión entre los pares no enlazantes de los átomos de cloro vecinos, el ángulo entre los enlaces C–Cl es mayor que 109,5°, y la forma de molécula es de pirámide achatada. El cloro es más electronegativo que el carbono, por lo que existe un momento dipolar de enlace $C^{\delta_+} \to Cl^{\delta_-}$. El carbono es más electronegativo que el hidrógeno, por lo que existe un momento dipolar de enlace $H^{\delta_+} \to C^{\delta_-}$. La resultante de los momentos dipolares de los enlaces $C^{\delta_+} \to Cl^{\delta_-}$ no se anula, sino que apunta hacia el centro do triángulo formado por los tres cloros, lo que, unido al momento dipolar del enlace $H^{\delta_+} \to C^{\delta_-}$, produce un momento dipolar resultante hacia ese mesmo punto, y la molécula es polar.

- 8. El flúor y el oxígeno reaccionan entre sí formando difluoruro de oxígeno (OF2). Indica razonadamente:
 - a) La estructura de Lewis y el tipo de enlace que existirá en la molécula.
 - b) La disposición de los pares electrónicos, la geometría molecular, el valor previsible del ángulo de enlace y si es polar o apolar.

(A.B.A.U. extr. 19)

Solución:

a) Las configuraciones electrónicas de los átomos son:

F (Z = 9): $1s^2 2s^2 2p^5$ O (Z = 8): $1s^2 2s^2 2p^4$

El átomo central es el de oxígeno, que tiene 6 electrones en su capa de valencia. Dos de estos electrones forman enlaces covalentes con los dos átomos de flúor, mientras que los otros cuatro se distribuyen en dos pares no enlazantes, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

El compuesto tendrá enlace covalente. Cada átomo de flúor comparte su electrón desapareado con uno de los electrones desapareados del oxígeno.

b)

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). En la molécula de difluoruro de oxígeno, el átomo de oxígeno está en el centro del tetraedro y los dos átomos de flúor en dos vértices, y en los otros dos están los pares no enlazan-



tes que no «se ven». La molécula será triangular plana:

Estos pares no enlazantes se encuentran más cerca del átomo de oxígeno que los pares de enlace con los átomos de flúor. Al estar más cerca, se deberían repeler con más fuerza, abriendo el ángulo entre ellos y haciendo más pequeño el ángulo entro los enlaces con los átomos de flúor. Para una molécula simétrica, como el metano, el ángulo de enlace es de 109,5°, por lo que en la molécula de difluoruro de oxígeno debería ser menor. (El ángulo medido experimentalmente es de 103°).

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar. $\Gamma^{-\delta}$

Como el flúor es más electronegativo que el oxígeno, existe un momento dipolar de enlace $O^{\delta_+} \rightarrow F^{\delta_-}$, que se representa por un vector. Como los vectores momento dipolar $O^{\delta_+} \rightarrow F^{\delta_-}$ forman un ángulo de 103°, su suma vectorial no es nula, y la molécula será polar.

Establece la geometría de las moléculas BF₃ y NH₃ mediante la teoría de la repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPEV).

(A.B.A.U. ord. 19)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible. Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y

Molécula de fluoruro de boro: BF₃.

El átomo central es el de boro, que tiene tres electrones en la capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de boro (Z=5) en el estado fundamental es $1s^2\ 2s^2\ 2p^1$, pero para poder formar tres enlaces tiene que separar («desaparear») los dos electrones 2s, elevando uno de ellos al orbital 2p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de boro excitado es 1s² 2s¹ 2p¹ 2p¹.

cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Los tres electrones desapareados forman tres enlaces, cada uno de ellos con un electrón desapareado de un átomo de flúor, como se ve en el diagrama electrón punto de Lewis:

(La molécula de BF_3 es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de boro solo hay seis, (tres pares de) electrones).

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 3 pares de electrones es triangular plana. La molécula es triangular plana, con un ángulo F-B-F de 120°.

Molécula de amoníaco: NH₃.

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de nitrógeno (Z=7) en el estado fundamental es: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares H´ no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de hidrógeno se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve». La forma de la molécula del NH₃ es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo de enlace H-N-H será algo menor que 109,5°.

En la molécula de trifluoruro de boro, no existe ese par no enlazante y, por tanto, la molécula es triangular plana.

10. Deduce la hibridación del átomo central en la molécula de BeF2.

(A.B.A.U. ord. 19)

Solución:

En la teoría de la hibridación, los orbitales s, p_x , p_y y p_z , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos n, l es m, pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

• 2 orbitales sp, formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de 180°.

(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces π).

• 3 orbitales sp², formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de 120°.

(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace π).

• 4 orbitales sp³, formados por la hibridación del orbital s y os tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de 109,5°.



Molécula de fluoruro de berilio: BeF₂.

La configuración electrónica del átomo de berilio (Z=4) en el estado fundamental es 1s² 2s², pero para poder enlazarse tiene que separar, («desaparear») los dos electrones, elevando uno de ellos al orbital 2p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de berilio excitado es 1s² 2s¹ 2p_x¹.

Al tener dos electrones desapareados, puede formar dos enlaces. Para ello, los orbitales s y p_x se hibridan, dando lugar a dos orbitales híbridos sp que se disponen linealmente en sentidos opuestos.

Al compartir cada una de los electrones que ocupan estos orbitales híbridos, con un electrón desapareado de un átomo de flúor, se forma la molécula de BeF₂ que es lineal: F-Be-F.

(La molécula de BeF_2 es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de berilio solo hay cuatro, (dos pares de) electrones).

11. Razona si el siguiente enunciado es verdadero o falso: La molécula de metano es tetraédrica y polar.

(A.B.A.U. extr. 18)

Solución:

Falso (polar) y verdadera (tetraédrica).

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

Molécula de metano: CH₄.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2p_x^2$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Los cuatro electrones forman enlaces covalentes con los cuatro átomos de hidrógeno, como se ve en el dia-

grama electrón-punto de Lewis:

H*C*H

H C H

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y los cuatro átomos de hidrógeno en los vértices.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Debido a que el hidrógeno es algo más electronegativo que el carbono, existe un pequeño momento dipolar de enlace $H^{\delta+} \to C^{\delta-}$, que se representa mediante un vector.

Como la distribución es simétrica, la disposición tetraédrica de los cuatro enlaces hace que el momento dipolar de la molécula sea cero. La molécula de CH₄ no es polar.



12. Explica la hibridación del átomo central en la molécula de BeCI2.

(A.B.A.U. ord. 18)

Solución:

En la teoría de la hibridación, los orbitales s, p_x , p_y y p_z , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos n, l es m, pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

• 2 orbitales sp, formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de 180°.

(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces π).

• 3 orbitales sp², formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de 120°.

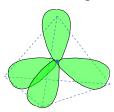
(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace π).

• 4 orbitales sp³, formados por la hibridación del orbital s y os tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de 109,5°.

2 híbridos sp



4 híbridos sp³



Molécula de cloruro de berilio: BeCl₂.

La configuración electrónica del átomo de berilio (Z=4) en el estado fundamental es 1s² 2s², pero para poder enlazarse tiene que separar, («desaparear») los dos electrones, elevando uno de ellos al orbital 2p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar. La configuración electrónica del átomo de berilio excitado es 1s² 2s¹ 2p¹x.

Al tener dos electrones desapareados, puede formar dos enlaces. Para ello, los dos orbitales s y p_x se hibridan, dando lugar a dos orbitales híbridos sp que se disponen linealmente en sentidos opuestos.

Al compartir cada una de los electrones que ocupan estos orbitales híbridos, con un electrón desapareado de un átomo de cloro, se forma la molécula de BeCl₂ que es lineal.

El diagrama de Lewis para la molécula de BeCl₂ es: :Cl*Be*Cl:

La forma de la molécula es lineal, con un ángulo Cl-Be-Cl de 180°.

(La molécula de BeCl₂ es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de berilio solo hay cuatro, (dos pares de) electrones).

- 13. Teniendo en cuenta la estructura y el tipo de enlace, justifica:
 - b) El amoniaco es una molécula polar.
 - c) El SO₂ es una molécula angular, pero el CO₂ es lineal.

(A.B.A.U. extr. 17)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible. Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

b) Molécula de amoníaco: NH₃.

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de nitrógeno (Z = 7) en el estado fundamental es: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de hidrógeno, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares H no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de hidrógeno se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve»: la forma de la molécula del NH₃ es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes H' entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo de enlace H-N-H será algo menor que 109,5°.



La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Debido a que el nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno, existe un momento dipolar de enlace $H^{\delta_+} \to N^{\delta_-}$, que se representa mediante un vector. Los vectores de momento dipolar $H^{\delta+} \rightarrow N^{\delta-}$ dan una resultante hacia el átomo de hidrógeno. Además, el par no enlazante produce otro vector de momento dipolar en la misma dirección y sentido que la resultante de los tres vectores de momento dipolar $H^{\delta +} \rightarrow N^{\delta -}$, por lo que la molécula es polar.

c) La molécula SO₂ es angular.

El átomo central es el azufre, que tiene 6 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de azufre (Z = 17) en el estado fundamental es: [Ne] $3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$. Dos de estos electrones forman enlaces σ covalentes con los dos átomos de oxígeno, otro par de electrones se comparte con uno de los oxígenos formando un enlace π , mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama de electrones de Lewis. diagrama de puntos: El átomo de azufre tiene tres pares de electrones, dos σ y uno no enlazante, que se repelen. (El cuarto par π non se tiene en cuenta). Según la TRPECV, la geometría

electrónica de 3 pares de electrones es triangular con un ángulo de 120°. (En realidad la estructura del SO₂ es resonante entre dos formas en las que el doble enlace «oscila» entre los dos átomos de oxígeno.) Pero como uno de ellos no tiene un átomo enlazado, está más cerca del átomo de azufre y repele con más fuerza a los otros dos, haciendo que el ángulo O–S–O sea menor que 120°.

La molécula CO₂ es lineal.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2s^2$ $2p_x^1$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_y^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Dos de estos electrones forman enlaces covalentes σ con los dos átomos de oxígeno, mientras que los otros dos forman enlaces π con esos mismos átomos, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis: :0::C::Q:

Según la TRPECV, los enlaces π no se tienen en cuenta y la geometría electrónica de 2 pares de electrones es lineal. La molécula de CO_2 es lineal, O=C=O, con un el ángulo O-C-O es de 180°.

14. Escribe la estructura de Lewis y justifica la geometría de la molécula de BeH₂ mediante la teoría de repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia.

(A.B.A.U. extr. 17)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

La configuración electrónica del átomo de berilio (Z=4) en el estado fundamental es 1s² 2s², pero para poder enlazarse tiene que separar, («desaparear») los dos electrones, elevando uno de ellos al orbital 2p. El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de berilio excitado es 1s² 2s¹ 2p_x.

Al tener dos electrones desapareados, puede formar dos enlaces. Para ello, los dos orbitales s y p_x se hibridan, dando lugar a dos orbitales híbridos sp que se disponen linealmente en sentidos opuestos.

Los dos electrones desapareados, que ocupan estos orbitales híbridos, forman dos enlaces, cada uno de ellos con el electrón de un átomo de hidrógeno, como se ve en el diagrama electrón punto de Lewis: H:Be;H Se forma la molécula de BeH₂ que es lineal, con un ángulo H-Be-H de 180°.

(La molécula de BeH_2 es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de berilio solo hay cuatro, (dos pares de) electrones).

 Deduce la geometría del CCl₄ aplicando la teoría de la repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia.

(A.B.A.U. ord. 17)

Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido la que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los π) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan una distribución triangular con ángulos de 120° y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de 109,5°.

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z=6) en el estado fundamental es $1s^2$ $2s^2$ $2p_x^1$ $2p_y^1$, que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones $2s^2$, elevando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: $1s^2$ $2s^1$ $2p_x^1$ $2p_z^1$.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Los cuatro electrones forman enlaces covalentes con los cuatro átomos de cloro, como se ve en el diagrama

electrón-punto de Lewis:

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y los cuatro átomos de cloro en los vértices.

La forma de molécula es tetraédrica, con ángulos Cl-C-Cl de 109,5°.



• Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos

- 1. Explica qué tipo de enlace químico debe romperse o qué fuerza de atracción debe vencerse para:
 - a) Fundir cloruro de potasio.
 - b) Fundir diamante.
 - c) Hervir agua.

(A.B.A.U. extr. 23)

Solución:

a) Cloruro de potasio: KCl. Enlace iónico.

El enlace iónico explica la unión entre átomos de diferente electronegatividad. El cloro es un elemento muy electronegativo, tanto que la captura de un electrón es un proceso exotérmico, favorecido por el hecho de que el ion cloruro consigue la configuración electrónica de un gas noble. El potasio es muy poco electronegativo, y la pérdida de un electrón para tener una configuración estable es un proceso que requiere una cantidad muy pequeña de energía. La energía de red, junto con la afinidad electrónica, compensa los aportes energéticos necesarios para su formación.

Para fundir el cloruro de potasio, debe proporcionarse una energía que supere la energía de red que mantiene unidos a los iones.

b) Diamante: C. Enlace covalente atómico.

Los átomos de carbono en el diamante se mantienen unidos por enlaces covalentes. Cada átomo de carbono está unido a otros cuatro átomos con un enlace covalente, en una red cristalina. La fuerza de los enlaces es muy grande, lo que justifica las altas temperaturas de fusión y la máxima dureza del diamante. Para fundir el diamante se necesita una energía muy alta para poder romper los enlaces entre los átomos de carbono.

c) Agua: H₂O. Fuerzas intermoleculares de puente de hidrógeno.

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

- Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes.
 En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.
- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en uno enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

Las moléculas de agua están unidas por puntes de hidrógeno que son fuerzas de mayor intensidad que las de dipolo-dipolo (que también están presentes en el agua) y que las de Van der Waals, ya que contienen átomos de hidrógeno unidos a un elemento electronegativo del segundo período (el oxígeno) y la molécula de agua es polar.

Razona si la siguiente afirmación es verdadera o falsa:
 El cloruro de potasio en el estado sólido no conduce la electricidad, pero sí es un buen conductor cuando está disuelto en agua.

(A.B.A.U. ord. 23)

Solución:

Verdadera.

El cloruro de potasio (KCl) es un composto iónico. En estado sólido no conduce la electricidad porque sus iones están fijos en la estructura cristalina y no pueden moverse libremente.

Cuando el KCl se disuelve en agua, se disocia en iones potasio (K⁺) y iones cloruro (Cl⁻) que pueden moverse libremente en la disolución. Estos iones son cargas móviles que permiten la conducción de la electricidad, por lo que el KCl disuelto en agua es un bueno conductor eléctrico.

3. Las temperaturas de fusión de los halógenos que se observan experimentalmente son: F_2 , -218 °C, Cl_2 , -101 °C, Br_2 , -7 °C, I_2 , 114 °C. Justifica razonadamente estos valores.

(A.B.A.U. extr. 22)

Solución:

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

- Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes. En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.
- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en uno enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

Ninguno de los elementos presenta fuerzas dipolo-dipolo o enlaces de hidrógeno. Las únicas fuerzas son las de Van der Waals, que se pueden atribuir a la aparición de dipolos instantáneos. El número de dipolos instantáneos aumenta con el número de electrones y, por tanto, con la masa molar. Por eso la temperatura de fusión aumenta con la masa molecular del elemento. Cuanto mayor sea su masa molecular, mayores serán las fuerzas de van der Waals entre las moléculas, y se necesitará más energía y más temperatura para fundir el elemento.

- 4. Dados los elementos A y B con números atómicos 19 y 35, respectivamente:
 - b) Justifica qué tipo de enlace se podría formar entre A y B, qué fórmula empírica le correspondería al compuesto resultante e indica alguna propiedad del compuesto formado.

(A.B.A.U. extr. 22)

Solución:

b) Las configuraciones electrónicas de los elementos neutros son:

A (Z = 19): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

B (Z = 35): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$

El elemento A perderá el electrón del cuarto nivel de energía para alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion A⁺.

El elemento B ganará 1 electrón para completar el cuarto nivel de energía y alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion B⁻.

El compuesto más probable entre A y B será el compuesto iónico AB.

Las propiedades de los compuestos iónicos son:

Temperaturas de fusión y ebullición elevadas. Están marcadas por el valor de la energía de red, que a su vez dependen de las cargas de los iones y de los radios.

Solubilidad en disolventes polares como el agua.

Conductividad eléctrica fase líquida, disuelta o gaseosa, por la presencia de iones libres, (pero no en el estado sólido, al encontrarse los iones fijos en los nudos de las redes cristalinas)

Elevada dureza (también en función de la energía de red) y fragilidad.

5. Justifica, razonadamente, si es cierta la siguiente afirmación: El agua tiene un punto de ebullición anormalmente alto comparado con el que presentan los hidruros de los otros elementos de su grupo, por ejemplo el sulfuro de hidrógeno.

(A.B.A.U. ord. 22, extr. 20, ord. 19)

Solución:

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

- Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes. En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.
- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en uno enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

Las moléculas de agua están unidas por puntes de hidrógeno que son fuerzas de mayor intensidad que las de dipolo-dipolo (que también están presentes en el agua) y que las de Van der Waals, ya que contienen átomos de hidrógeno unidos a un elemento electronegativo del segundo período (el oxígeno) y la molécula de agua es polar.

La molécula de sulfuro de hidrógeno no cumple el requisito para presentar puentes de hidrógeno, porque el azufre tiene un radio atómico más grande y el momento dipolar de la molécula es menor que el del agua porque el azufre es menos electronegativo que el oxígeno. Aunque la masa molar del H_2S es mayor que la del H_2O , el mayor valor de las fuerzas de dispersión no compensa la intensidad de la fuerza de los enlaces de hidrógeno.

Como las fuerzas intermoleculares del agua son mucho más intensas que las del sulfuro de hidrógeno, su temperatura de ebullición es más alta.

Eso permite entender por qué, a 1 atm de presión y 25 $^{\circ}$ C de temperatura, el H_2S es un gas y el H_2O un líquido.

6. b) ¿Por qué la molécula de agua tiene el punto de ebullición más alto y es más polar que la de CO₂?

(A.B.A.U. ord. 22, extr. 20)

Solución:

b) La diferencia está en la forma de las moléculas.

La molécula de CO₂ es lineal con un ángulo O-C-O de 180°.

La molécula de H₂O es un triángulo con un ángulo H-O-H de 105°.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Como el oxígeno es mucho más electronegativo que el carbono, existe un momento dipolar de enlace $C^{\delta_+} \to O^{\delta_-}$. Pero como ambos enlaces están dirigidos en direcciones opuestas, $O^{\delta_-} \leftarrow C^{\delta_+} \to O^{\delta_-}$, y el valor

de cada momento dipolar es el mismo, el momento dipolar de la molécula, que es la resultante de los vectores, es cero. La molécula de CO₂ no es polar.

El oxígeno también es más electronegativo que el hidrógeno, y también hay un momento dipolar de enlace $H^{\delta_+} \to O^{\delta_-}$.

Pero en el agua, al tener una molécula angular, la resultante de los vectores dipolares H^{δ_+} no es nu-

la. La molécula de H₂O es polar.

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

- Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes.
 En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.
- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en uno enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

El agua tiene un punto de ebullición más alto porque sus moléculas están unidas por puentes de hidrógeno que son fuerzas de mayor intensidad que las de Van der Waals, ya que el agua contiene átomos de hidrógenos unidos a un elemento electronegativo del segundo período (el oxígeno) y la molécula de agua es polar.

7. Explica por qué la molécula de cloro es covalente mientras que el CsCl es un compuesto iónico. Indica una propiedad de cada compuesto.

(A.B.A.U. extr. 21)

Solución:

Cloro: Cl₂.

El enlace covalente se emplea para explicar la unión entre átomos de electronegatividad parecida. Los dos átomos de cloro tienen la misma electronegatividad. El enlace se produce por el hecho de compartir electrones desapareados para intentar que cada átomo quede rodeado por ocho electrones (regla del octete). El diagrama de Lewis sería:

El cloro es un gas a la temperatura ambiente, porque las fuerzas intermoleculares entre las moléculas son relativamente pequeñas.

Nos conduce la corriente eléctrica al no disponer de cargas libres.

Cloruro de cesio: CsCl.

El enlace iónico explica la unión entre átomos de diferente electronegatividad. El cloro es un elemento muy electronegativo, tanto que la captura de un electrón es un proceso exotérmico, favorecido por el hecho de que el ion cloruro consigue la configuración electrónica de un gas noble. El cesio es muy poco electronegativo, y la pérdida de un electrón para tener una configuración estable es un proceso que requiere una cantidad muy pequeña de energía. La energía de red, junto con la afinidad electrónica, compensa los aportes energéticos necesarios para su formación.

El cloruro de cesio es un sólido con un punto de fusión relativamente alto. No conduce la corriente eléctrica en el estado sólido pero sí disuelto en agua o fundido.

- 8. Explica razonadamente los siguientes hechos:
 - a) La sal común (NaCl) funde a 801 °C mientras que el cloro es un gas a 25 °C.
 - b) El cloruro de sodio sólido no conduce la electricidad y el hierro sí.

(A.B.A.U. ord. 21)

Solución:

a) La sal común es un compuesto iónico, y su punto de fusión depende directamente de la fuerza del enlace iónico, que a su vez depende de la energía reticular del enlace.

El cloro es un compuesto covalente. Las responsables del estado gaseoso del cloro son las fuerzas intermoleculares que son mucho más débiles. Las moléculas de cloro son apolares y entre ellas solo actúan fuerzas de dispersión (Van der Waals).

b) El cloruro de sodio no conduce la electricidad en el estado sólido, pero se lo hace cuando está en el estado líquido o disuelto en agua. en el estado sólido los iones no pueden desplazarse al ocupar posiciones fijas en la red iónica.

En el hierro, los electrones ocupan la banda de conducción o, se ocupan la banda de valencia, la diferencia de energía entre ella y la banda de conducción es muy pequeña, por lo que al aplicar un campo eléctrico pasan a la banda de conducción y pueden moverse fácilmente.

9. Los elementos A, B, C y D tienen números atómicos 19, 16, 1 y 9, respectivamente. Razona qué compuestos se formarán entre B y C y entre D y A indicando el tipo de enlace.

(A.B.A.U. ord. 20)

Solución:

Las configuraciones electrónicas de los elementos son:

A (Z = 19): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ B (Z = 16): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

C (Z = 1): $1s^{1}$

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

El elemento B tiende a ganar 2 electrones para alcanzar la configuración del gas noble más próximo.

El elemento C tendría que perder o ganar un electrón. Pero el comportamiento energéticamente más favorable es que comparta su electrón con uno de los electrones desapareados del elemento B.

El elemento B compartirá 2 electrones para completar el cuarto nivel de energía.

La fórmula química del compuesto sería BC₂ y será un compuesto covalente.

El elemento D tiende a ganar 1 electrón para alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion D⁻.

El elemento A perderá el electrón del cuarto nivel de energía para alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion A^+ .

La fórmula química del compuesto sería AD y será un compuesto iónico.

10. Razona por qué el valor de la energía reticular (en valor absoluto) para el fluoruro de sodio es mayor que para el cloruro de sodio y cuál de ellos tendrá mayor punto de fusión.

(A.B.A.U. ord. 19)

Solución:

La energía reticular es básicamente una energía electrostática, de expresión

$$U = K \frac{Z^+ Z^- e^2}{d}$$

K es la constante de Coulomb, Z^+ y Z^- son los números de oxidación de los iones positivo y negativo, «e» es la carga del electrón y d es la distancia entre las cargas. Esta distancia está relacionada con la estructura cristalina y los radios iónicos r^+ y r^- . Al no conocer la estructura cristalina tendremos que suponer que:

$$d \approx r^+ + r^-$$

Suponiendo que el cloruro de sodio y el fluoruro de sodio tengan el mismo tipo de red, al ser en ambos casos las mismas cargas positiva (+1) y negativa (-1), el factor determinante es el radio iónico.

Puesto que el radio iónico del ion fluoruro es menor que lo del cloruro (tiene menos niveles energéticos) y el ion sodio es lo mismo se deduce que

$$d(NaF) < d(NaCl) \Rightarrow U(NaF) > U(NaCl)$$

11. Dados los compuestos BaCl₂ y NO₂, nómbralos y razona el tipo de enlace que presenta cada uno. (A.B.A.U. ord. 19)

Solución:

BaCl₂ es cloruro de bario, iónico.

NO₂ es dióxido de nitrógeno, covalente.

El enlace iónico explica la unión entre átomos de diferente electronegatividad. El cloro es un elemento muy electronegativo, tanto que la captura de un electrón es un proceso exotérmico, favorecido por el hecho de que el ion cloruro consigue la configuración electrónica de un gas noble. El bario es muy poco electronegativo, y la pérdida de dos electrones para tener una configuración estable es un proceso que requiere una cantidad de energía que no es excesiva. La energía de red, junto con la afinidad electrónica, compensa los aportes energéticos necesarios para su formación.

El enlace covalente se emplea para explicar la unión entre átomos de electronegatividad parecida. El nitrógeno y el oxígeno son electronegativos. El enlace se produce por el hecho de compartir electrones desapareados para intentar que cada átomo quede rodeado por ocho electrones (regla del octete). El NO_2 es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el NO_2 el número de electrones implicados es impar (6 × 2 del oxígeno + 5 del nitrógeno). La explicación de su existencia covalente requiere de la suposi-

Razona si el siguiente enunciado es verdadero o falso:
 Los metales son buenos conductores de la corriente eléctrica y del calor.

(A.B.A.U. extr. 18)

Solución:

Verdadero.

Los metales son buenos conductores de la corriente eléctrica porque tienen electrones libres que pueden desplazarse al largo de la estructura cristalina del metal.

Son buenos conductores del calor porque el calor se transmite de un átomo al contiguo al vibrar con más energía los átomos.

13. ¿Los sólidos covalentes tienen puntos de fusión y ebullición elevados?

(A.B.A.U. extr. 18)

Solución:

Sí.

En los sólidos covalentes, como el diamante C y el dióxido de silicio SiO₂, los átomos están unidos por enlaces covalentes, que son muy fuertes. Para fundir diamante, la energía que se necesita es muy elevada para poder romper los enlaces entre los átomos de carbono.

14. Dados los compuestos HF y HCl justifica cuál presentará un punto de ebullición más alto.

(A.B.A.U. ord. 18)

Solución:

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes.
 En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.

- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en uno enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

Fluoruro de hidrógeno: HF.

Las moléculas de fluoruro de hidrógeno están unidas por puntes de hidrógeno que son fuerzas de mayor intensidad que las de dipolo-dipolo (que también están presentes en ellas) y que las de Van der Waals, ya que contienen átomos de hidrógeno unidos a un elemento electronegativo del segundo período (el flúor) y presenta momento dipolar.

Cloruro de hidrógeno: HCl.

La molécula de cloruro de hidrógeno no cumple el requisito para presentar puentes de hidrógeno, porque el cloro tiene un radio atómico más grande y el momento dipolar de la molécula es menor porque el cloro es menos electronegativo que el flúor. Aunque la masa molar del HCl es mayor que la del HF, el mayor valor de las fuerzas de dispersión no compensa la intensidad de la fuerza de los enlaces de hidrógeno.

Como las fuerzas intermoleculares del HF son mucho más intensas que las del HCl, su temperatura de ebullición es más alta.

15. Teniendo en cuenta la estructura y el tipo de enlace, justifica: El cloruro de sodio tiene punto de fusión mayor que el bromuro de sodio.

(A.B.A.U. extr. 17)

Solución:

El punto de fusión es una propiedad que depende directamente de la fuerza del enlace iónico, que a su vez depende de la energía reticular del enlace. Esta energía reticular es básicamente una energía electrostática, de expresión

$$U = K \frac{Z^+ Z^- e^2}{d}$$

K es la constante de Coulomb, Z^+ y Z^- son los números de oxidación de los iones positivo y negativo, «e» es la carga del electrón y d es la distancia entre las cargas. Esta distancia está relacionada con la estructura cristalina y los radios iónicos r^+ y r^- . Al no conocer la estructura cristalina tendremos que suponer que:

$$d \approx r^+ + r^-$$

Suponiendo que el cloruro de sodio y el bromuro de sodio tengan el mismo tipo de red, al ser en ambos casos las mismas cargas positiva (+1) y negativa (-1), el factor determinante es el radio iónico. Puesto que el radio iónico del ion cloruro es menor que lo del bromuro (tiene menos niveles energéticos) y el ion sodio es el mismo se deduce que:

$$d(NaCl) < d(NaBr) \Rightarrow U(NaCl) > U(NaBr)$$

Por tanto, el cloruro de sodio tendrá mayor punto de fusión.

- 16. Explica razonadamente si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas:
 - a) El tetracloruro de carbono es mejor disolvente para el cloruro de potasio que el agua.
 - b) El cloruro de sodio en el estado sólido conduce la electricidad.

(A.B.A.U. ord. 17)

Solución:

a) Falso. El cloruro de potasio es un compuesto iónico. El mejor disolvente para los compuestos iónicos es el agua. Las moléculas polares del agua se acercan a los iones de la superficie de la red cristalina del KCl arrancándolos de la estructura y rodeándolos de forma que no puedan volver a ella. Solo los compuestos iónicos de elevada energía de red son poco solubles en agua.

b) Falso. Los iones del NaCl ocupan posiciones fijas en la red cristalina y no pueden desplazarse. Solo lo hacen cuando la estructura se rompe por los procesos de fusión o disolución.

Actualizado: 16/03/24

Cuestiones y problemas de las <u>Pruebas de evaluación de Bachillerato para el acceso a la Universidad</u> (A.B.A.U. y P.A.U.) en Galicia.

Respuestas y composición de Alfonso J. Barbadillo Marán.

Algunos cálculos se hicieron con una hoja de cálculo de LibreOffice del mismo autor.

Algunas ecuaciones y las fórmulas orgánicas se construyeron con la extensión $\underline{\text{CLC09}}$ de Charles Lalanne-Cassou.

La traducción al/desde el gallego se realizó con la ayuda de *traducindote*, de Óscar Hermida López.

Se procuró seguir las <u>recomendaciones</u> del Centro Español de Metrología (CEM).

Se consultó al Copilot de Microsoft Edge y se tuvieron en cuenta algunas de sus respuestas en las cuestiones.

Sumario

CUESTIONES Geometría molecular en el enlace covalente Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos Índico do pruobas A.P. A.U.	1 13
Geometría molecular en el enlace covalente Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos	1 13
Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos	13
Índica da navabas A.P. A.I.I	
Índice de pruebas A.B.A.U.	
2017	
1. (ord.)	12, 20
2. (extr.)11	s., 20
2018	
1. (ord.)	10, 19
2. (extr.)	9, 19
2019	
1. (ord.)8 s.,	
2. (extr.)	7
2020	
1. (ord.)	6, 18
2. (extr.)	
2021	
1. (ord.)	
2. (extr.)	
2022	
1. (ord.)	
2. (extr.)	
2023	
1. (ord.)	