

ENLACES

◇ CUESTIÓNS

● Xeometría molecular no enlace covalente

1. Dadas as moléculas CH_3Cl , CS_2 , NCl_3 , responde razoadamente ás seguintes cuestións:
- Escribe a estrutura de Lewis de cada unha delas e predí a súa xeometría molecular.
 - Explica se as moléculas son polares ou apolares.

(P.A.U. set. 16)

Solución:

a)

Molécula	CH_3Cl	CS_2	NCl_3
Átomo central	C	C	N
Configuración electrónica fundamental	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Configuración electrónica excitada	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Diagrama de Lewis			
Pares σ	4	2	3
Pares π	0	2	0
Pares non enlazantes	0	0	1
Pares que se repelen	4	2	4
Disposición dos pares	tetraédrica	lineal	tetraédrica
Ángulo de enlace	$<109,5^\circ$	180°	107°
Forma da molécula	piramidal alargada	lineal	piramidal achatada
		$\text{S}=\text{C}=\text{S}$	
Momento dipolar de enlace	$\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$	$\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$	Non
Momento dipolar da molécula		$\text{S}^{\delta-} \leftarrow \text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$	
	Si	Non	Si

A forma da molécula determínase da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Na molécula de triclouro de nitróxeno, está o átomo de nitróxeno no centro do tetraedro e tres átomos de cloro en tres vértices, pero no cuarto vértice está un par non enlazante que non se «ve».

Na molécula de clorometano, o átomo de cloro é maior que os de hidróxeno (e que o de carbono). Quizais a descrición podería ser «lineal cun mini-trípode nun extremo».

- b) A molécula de sulfuro de carbono non é polar, aínda que os enlaces si o son, porque é simétrica e os momentos dipolares dos enlaces anúlanse.

A molécula de NCl_3 é polar. As electronegatividades dos átomos de Cl e N son moi similares e os enlaces Cl–N teñen un momento dipolar nulo (ou moi pequeno). Pero o par non enlazante do nitróxeno non se compensa. Como está moi próximo ao átomo de nitróxeno, o momento dipolar será pequeno.

A molécula de CH_3Cl tamén é polar. As electronegatividades dos átomos de carbono e hidróxeno son moi similares e os enlaces C–H teñen un momento dipolar moi pequeno. Pero o cloro é moito máis electronegativo que o carbono e o enlace $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$ é polar.

2. Considera as especies químicas CS_2 , SiCl_4 e NCl_3 e responde razoadamente as seguintes cuestións:

- Xeometría molecular de cada unha das especies químicas.
- Explica se as moléculas CS_2 e NCl_3 teñen ou non momento dipolar.

(P.A.U. set. 15)

Solución:

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

Molécula de disulfuro de carbono: CS_2 .

O átomo central é o carbono, que ten 4 electróns na súa capa de valencia.

A configuración electrónica do átomo de carbono ($Z = 6$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que só ten dous electróns desapareados e só podería formar dous enlaces. Para poder formar catro enlaces, ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s^2$, elevando un deles ao orbital $2p$ baleiro. A configuración electrónica do átomo de carbono excitado é $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía de os enlaces que se van a formar.

Dous destes electróns forman enlaces covalentes σ cos dous átomos de xofre, mentres que os outros dous forman enlaces π con eses mesmos átomos, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis: $:\ddot{\text{S}}::\text{C}::\ddot{\text{S}}:$

Segundo a TRPECV, os enlaces π non se teñen en conta e a xeometría electrónica de 2 pares de electróns é lineal. A molécula de CS_2 é lineal cun ángulo S–C–S de 180° .

A electronegatividade mide a tendencia que ten un átomo a atraer cara á si o par de electróns do enlace e a resistencia a deixalos marchar.

Como o xofre é máis electronegativo que o carbono, existe un momento dipolar de enlace $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$, que se representa por un vector. Pero como ambos enlaces están dirixidos en sentidos opostos, $\text{S}^{\delta-} \leftarrow \text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$, e o valor de cada momento dipolar é o mesmo, o momento dipolar da molécula, que é a resultante dos vectores, é nulo. A molécula de CS_2 non é polar.

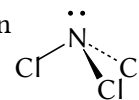
Molécula de tricloruro de nitróxeno: NCl_3 .

O átomo central é o nitróxeno, que ten 5 electróns na súa capa de valencia. A configuración electrónica do átomo de nitróxeno ($Z = 7$) no estado fundamental é: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Tres destes electróns forman enlaces covalentes cos tres átomos de cloro, mentres que os outros dous permanecen como un par solitario non enlazante, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis:

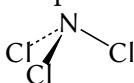


Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 4 pares de electróns é tetraédrica.

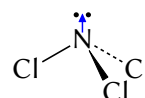
A forma da molécula determínase a partir da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). O átomo de nitróxeno está no centro do tetraedro e os tres átomos de cloro están dispostos en tres vértices, pero no cuarto vértice hai un par non enlazante que non se «ve».



A forma da molécula de NCl_3 é piramidal achatada.



Dado que o par non enlazante está máis preto do átomo de nitróxeno que os pares de enlace, a repulsión entre o par non enlazante e os pares de enlace é maior que entre os pares de enlace e entre si, e fará que os átomos de cloro se acheguen un pouco máis. O ángulo de enlace Cl–N–Cl sería algo inferior a $109,5^\circ$. A molécula de NCl_3 é polar. As electronegatividades dos átomos de Cl e N son moi similares e os enlaces Cl–N teñen un momento dipolar de enlace nulo (ou moi pequeno). Pero o par non



enlazante do nitróxeno non se compensa. Como está moi próximo ao átomo de nitróxeno, o momento dipolar será pequeno.

3. Indica razoadamente, se son verdadeiras ou falsas as seguintes afirmacións:

- O enlace covalente caracterízase pola transferencia de electróns entre os elementos que forman o enlace. Pon un exemplo.
- O número de orbitais híbridos que se xeran na hibridación é igual ao número de orbitais atómicos puros que participan en devandito proceso. Utiliza a molécula BeCl_2 para o razoamento.

(P.A.U. set. 14)

Solución:

a) Falsa.

O enlace covalente caracterízase polo uso compartido de electróns entre os elementos que forman o enlace. Por exemplo, na molécula de flúor, F_2 , cada átomo de flúor ten unha configuración electrónica:

$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$ e fáltalle un electrón para ter a configuración electrónica do gas nobre neon.

O balance de enerxía non permitiría que o outro átomo de flúor perda un electrón (e tampouco alcanzaría a configuración de gas nobre), polo que se forma un enlace covalente entre os dous átomos de flúor no que ambos os átomos achegan un electrón e comparten o par formado. O diagrama de Lewis para a molécula de flúor sería: $\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}$

b) Verdadeira.

Solución:

Na teoría da hibridación, os orbitais s , p_x , p_y e p_z , solucións da ecuación de onda para certas condicións rexidas polos números cuánticos n , l e m , poden substituírse por certas combinacións lineais deles chamadas orbitais híbridos.

Combinando os orbitais s e p pódense formar tres tipos de orbitais híbridos:

- 2 orbitais sp , formados pola hibridación do orbital s e un orbital p . Están dirixidos en sentidos opostos dunha liña recta, formando un ángulo de 180° .

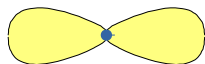
(Quedan dous orbitais p sen hibridar, que poderían formar parte de enlaces π).

- 3 orbitais sp^2 , formados pola hibridación do orbital s e dous orbitais p . Están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero, formando ángulos de 120° .

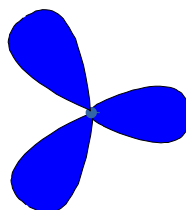
(Queda un orbital p sen hibridar que podería ser parte dun enlace π).

- 4 orbitais sp^3 , formados pola hibridación do orbital s e os tres orbitais p . Están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro, formando ángulos de $109,5^\circ$.

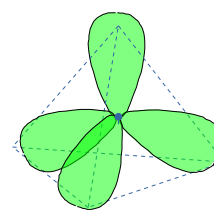
2 híbridos sp



3 híbridos sp^2



4 híbridos sp^3



Molécula de cloruro de berilio: BeCl_2 .

A configuración electrónica do átomo de berilio ($Z = 4$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2$, pero para poder enlazarse ten que separar, («desaparear») os dous electróns, elevando un deles ao orbital $2p$. O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía dos enlaces que se van a formar.

A configuración electrónica do átomo de berilio excitado é $1s^2 2s^1 2p_x^1$.

Ao ter dous electróns desapareados, pode formar dous enlaces. Para iso, os dous orbitais s e p_x híbridanse, dando lugar a dous orbitais híbridos sp que se dispoñen linealmente en sentidos opostos.

Ao compartir cada unha dos electróns que ocupan estes orbitais híbridos, cun electrón desapareado dun átomo de cloro, fórmase a molécula de BeCl_2 que é lineal.

O diagrama de Lewis para a molécula de BeCl_2 é: $\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}\text{Be}\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}$

A forma da molécula é lineal, cun ángulo Cl–Be–Cl de 180° .

(A molécula de BeCl_2 é unha excepción á regra do octete, que afirma que os átomos tenden a formar enlaces de tal forma que cada átomo teña oito electróns na súa capa de valencia. No átomo de berilio só hai catro (dous pares de) electróns).

4. Especifica que orbitais híbridos utiliza o carbono no eteno (C_2H_4), así como o tipo de enlaces que se forman na molécula. Razoa a resposta.

(P.A.U. xuño 14)

Solución:

A configuración fundamental do carbono $Z = 6$ é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

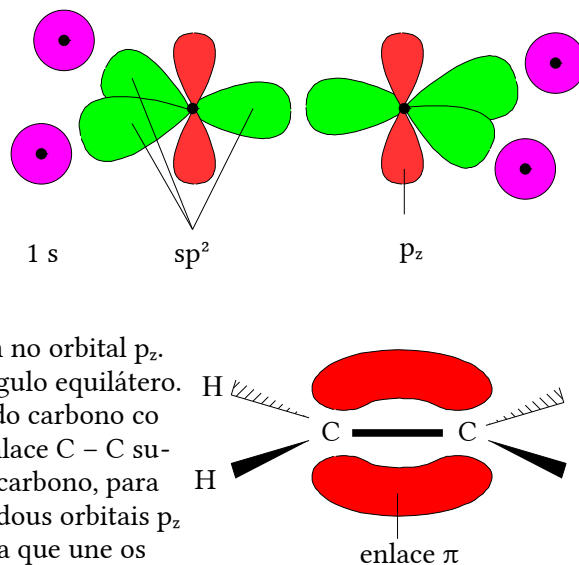
Pero, debido a que a formación de dúas enlaces máis compensa a enerxía de excitación, antes de formar enlaces pasa á configuración excitada, $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, con catro electróns desapareados que poden formar catro enlaces covalentes.

Prodúcese unha hibridación sp^2 : aparecen tres híbridos sp^2 formados por combinación dun orbital s e dous orbitais p, (p_x e p_y) e queda sen hibridar o orbital p_z .

Haberá un electrón desapareado en cada híbrido e tamén no orbital p_z .

Estes híbridos están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero.

Nos enlaces C – H, superpóñense un orbital híbrido sp^2 do carbono co orbital 1s do hidróxeno dando lugar a un enlace σ . No enlace C – C superpóñense dous orbitais híbridos, un de cada átomo de carbono, para dar lugar a outro enlace σ . Pero tamén superpóñense os dous orbitais p_z dos dous carbonos, dando lugar a un enlace π fóra da liña que une os dous átomos de carbono.



5. Razoa se unha molécula de fórmula AB_2 debe ser sempre lineal.

(P.A.U. set. 13)

Solución:

Non.

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

Se a suma de pares σ e pares non enlazantes é igual a 2, as moléculas son lineais, como a de CO_2 ou a de BeI_2 , pero se a suma dá un número maior, como na de SO_2 ou a de H_2O , serán triangulares. A forma da molécula determínase a partir da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Dous enlaces nunha disposición de pares de electróns triangular ou tetraédrico formarán ángulos distintos de 180° .

Molécula	CO_2	BeI_2	SO_2	H_2O
Átomo central	C	Be	S	O
Configuración electrónica fundamental	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2$	$3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$	$2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
Configuración electrónica excitada	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^1 2p_x^1$		
Diagrama de Lewis	$:\ddot{\text{O}}::\text{C}::\ddot{\text{O}}:$	$:\ddot{\text{I}}::\text{Be}::\ddot{\text{I}}:$	$:\ddot{\text{O}}::\text{S}::\ddot{\text{O}}:$	$\text{H}::\ddot{\text{O}}::\text{H}$

Pares σ	2	2	2	2
Pares π	2	2	1	0
Pares non enlazantes	0	0	1	2
Pares que se repelen	2	2	3	4
Disposición dos pares	lineal	lineal	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	180°	180°	<120°	105°
Forma da molécula	lineal	lineal	angular plana	angular plana
	O=C=O	I-Be-I	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{S}=\text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ \text{O}-\text{H} \end{array}$

6. Indica razoadamente se é verdadeira ou falsa a afirmación seguinte:
A molécula de auga presenta xeometría lineal.

(P.A.U. xuño 13)

Solución:

Falsa. A molécula de auga é triangular $\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ \text{O}-\text{H} \end{array}$ cun ángulo de 104,5°.

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180°, tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de 109,5°.

A configuración electrónica do osíxeno en estado fundamental é: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$.

O átomo central é o osíxeno, que ten 6 electróns na súa capa de valencia. Dous destes electróns forman enlaces covalentes cos dous átomos de hidróxeno, cada un cun electrón de valencia, mentres que os outros catro están en dous pares non enlazantes, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis: $\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$. Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 4 pares de electróns é tetraédrica. Os catro pares repártense ata que se separan en ángulos de 109,5°.

A forma da molécula determínase a partir da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). O átomo de osíxeno está no centro do tetraedro e os dous átomos de hidróxeno están dispostos en dous vértices, e nos outros dous están os dous pares non enlazantes que non se «ve». A forma da molécula de H_2O é triangular plana.

Dado que os pares non enlazantes están máis preto do átomo de osíxeno que os pares de enlace, a repulsión entre cada par non enlazante e os pares de enlace é maior que entre os pares de enlace entre si, e fará que os átomos de hidróxeno se acheguen un pouco máis. O ángulo é inferior a 109,5°. A molécula de H_2O é un triángulo cun ángulo H-O-H de 104,5°.

7. Aplicando a teoría da repulsión dos pares electrónicos da capa de valencia, indica razoadamente, a xeometría das moléculas seguintes:
- NF_3
 - BF_3

(P.A.U. set. 12)

Solución:

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

Molécula de fluoruro de boro: BF_3 .

O átomo central é o boro, que ten tres electróns na capa de valencia. A configuración electrónica do átomo de boro ($Z = 5$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^1$, pero para formar tres enlaces ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s$, elevando un deles ao orbital $2p$. O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía dos enlaces que se van a formar.

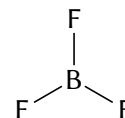
A configuración electrónica do átomo de boro excitado é $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$.

Os tres electróns desapareados forman tres enlaces, cada un cun electrón desapareado dun átomo de flúor, como se ve no diagrama de puntos de electróns de Lewis:



(A molécula BF_3 é unha excepción á regra do octete, que establece que os átomos tenden a unirse de xeito que cada átomo teña oito electróns na súa capa de valencia. No átomo de boro só hai seis (tres pares de) electróns).

Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 3 pares de electróns é triangular plana. A molécula é triangular plana, cun ángulo F-B-F de 120° .



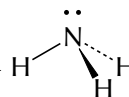
Molécula de amoníaco: NH_3 .

O átomo central é o nitróxeno, que ten 5 electróns na súa capa de valencia. A configuración electrónica do átomo de nitróxeno ($Z = 7$) no estado fundamental é: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Tres destes electróns forman enlaces covalentes cos tres átomos de cloro, mentres que os outros dous permanecen como un par solitario non enlazante, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis:



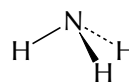
Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 4 pares de electróns é tetraédrica.

A forma da molécula determínase a partir da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). O átomo de nitróxeno está no centro do tetraedro e os tres átomos de hidróxeno están dispostos en tres vértices, pero no cuarto vértice hai un par non enlazante que non se «ve».



A forma da molécula de NH_3 é piramidal achatada.

Dado que o par non enlazante está máis preto do átomo de nitróxeno que os pares de enlace, a repulsión entre o par non enlazante e os pares de enlace é maior que entre os pares de enlace e entre si, e fará que os átomos de hidróxeno se acheguen un pouco máis. O ángulo de enlace H-N-H será algo inferior a $109,5^\circ$.



Na molécula de trifluoruro de boro, non existe ese par non enlazante e, por tanto, a molécula é triangular plana.

8. Pon un exemplo dunha molécula que conteña:

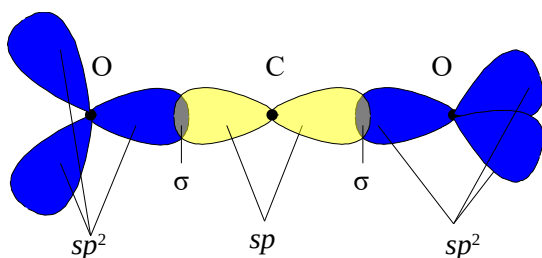
- Un carbono con hibridación sp .
- Un nitróxeno con hibridación sp^3 .

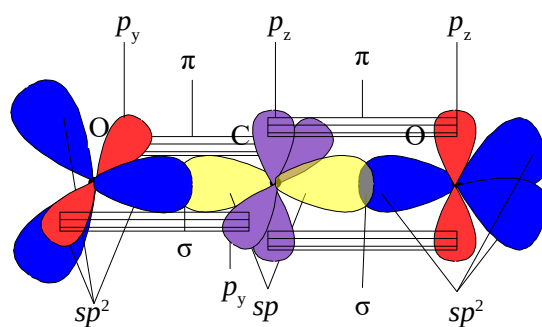
Razoa todas as respostas.

(P.A.U. set. 12, xuño 06)

Solución:

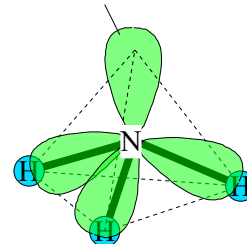
a) A hibridación sp corresponde a un átomo central unido a outros dous átomos. Como o carbono (excitado) pode ter 4 electróns desapareados, en configuración $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, iso supón que, polo menos, un dos enlaces, debe ser múltiple. As combinacións posibles son un enlace triplo xunto a un sinxelo como no etino $\text{H-C}\equiv\text{C-H}$, ou dous enlaces dobres como na molécula de dióxido de carbono $\text{O}=\text{C}=\text{O}$.





O átomo de carbono ten dous híbridos sp e dous orbitais atómicos p_y e p_z sen hibridar. Os híbridos sp están dirixidos nunha liña recta en sentidos opostos, dando ángulos de enlace de 180° . O solapamento entre os híbridos sp do carbono e os orbitais sp^2 dos átomos de osíxeno dá lugar a enlaces σ . O orbital p_y sen hibridar do carbono solábase co orbital p_y sen hibridar dun dos osíxenos formando un enlace π . O solapamento do outro orbital sen hibridar do carbono p_z co orbital p_z sen hibridar do outro osíxeno forma o outro enlace π .

Par non enlazante



b) A hibridación sp^3 asígnase a un átomo central de nitróxeno cando está unido a outros catro átomos (ión amonio $[NH_4]^+$), ou a tres átomos (molécula de amoníaco NH_3). O átomo de nitróxeno ten unha configuración electrónica, $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, e forma catro híbridos sp^3 , cun electrón desapareado en tres dos híbridos e un par de electróns no cuarto. Estes híbridos están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro (no caso do ión amonio), dando ángulos de enlace de $109,5^\circ$ (aínda que no caso do amoníaco os ángulos son algo menores). En cada un dos tres enlaces N–H, superpóñense un orbital híbrido sp^3 do nitróxeno co orbital $1s$ do hidróxeno dando lugar a un enlace σ . O par de electróns do cuarto híbrido sp^3 é un par non enlazante.

9. Xustifica a xeometría das moléculas de metano (tetraédrica con ángulo de enlace de $109,5^\circ$) e de amoníaco (piramidal con ángulo de enlace de $107,3^\circ$):
- Segundo a teoría de hibridación de orbitais.
 - Segundo o modelo de RPECV (modelo de repulsión dos pares de electróns da capa de valencia)
- (P.A.U. set. 09)

Solución:

a) Molécula de metano CH_4 .

A configuración electrónica do átomo de carbono ($Z = 6$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que só ten dous electróns desapareados e só podería formar dous enlaces. Para poder formar catro enlaces, ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s^2$, elevando un deles ao orbital $2p$ baleiro, sendo a súa configuración excitada: $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía de os enlaces que se van a formar.

Aínda así, se o átomo de carbono mantívese esa configuración excitada, non se xustificarian os ángulos de enlace experimentais, (por que os enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos en las direccións dos eixes X, Y ou Z) o que levou ao desenvolvemento da teoría de hibridación.

Os orbitais híbridos son o resultado de combinar orbitais atómicos para formar novos orbitais con formas e enerxías equivalentes.

Combinando os orbitais s e p pódense formar tres tipos de orbitais híbridos:

- 2 orbitais sp , formados pola hibridación do orbital s e un orbital p. Están dirixidos en sentidos opostos dunha liña recta, formando un ángulo de 180° .

(Quedan dous orbitais p sen hibridar, que poderían formar parte de enlaces π).

- 3 orbitais sp^2 , formados pola hibridación do orbital s e dous orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero, formando ángulos de 120° .

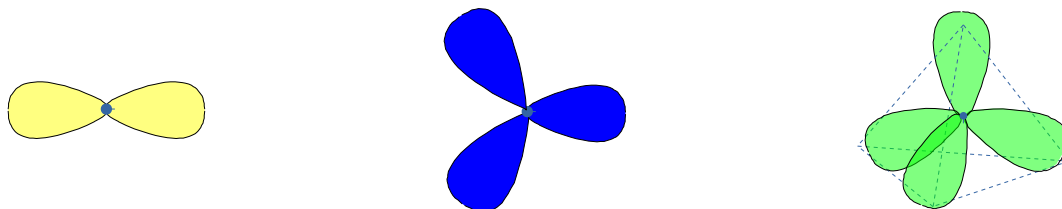
(Queda un orbital p sen hibridar que podería ser parte dun enlace π).

- 4 orbitais sp^3 , formados pola hibridación do orbital s e os tres orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro, formando ángulos de $109,5^\circ$.

2 híbridos sp

3 híbridos sp^2

4 híbridos sp^3



Molécula de amoníaco NH_3 .

O caso do nitróxeno do amoníaco é moi similar ao do carbono, só que a configuración fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Formaríanse tamén catro orbitais híbridos sp^3 , tres deles semicupados que poderían formar enlace cos orbitais $1s$ dos tres hidróxenos e o cuarto cheo que daría un orbital non enlazante. O ángulo debería ser de $109,5^\circ$ e só certas complicadas refinacións da teoría poderían xustificar os ángulos de $107,3^\circ$.

b)

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

O que permite explicar os ángulos de enlace do metano sen facer intervir a ecuación de onda e as matemáticas correspondentes. Tamén explica de xeito cualitativo a redución do ángulo de enlace no amoníaco, posto que o par non enlazante do nitróxeno atópase máis preto del que os de enlace (posto que non hai ningún átomo alén do enlace que tire del) e repelerá con máis forza (usando a lei de Coulomb) aos outros tres pares enlazantes que se achegarán a ángulos algo menores que o de $109,5^\circ$, neste caso a $107,3^\circ$.

10. Xustifica, razoadamente, se é certa a seguinte afirmación:

A molécula de acetileno (C_2H_2) presenta hibridación sp^2 .

(P.A.U. set. 08)

Solución:

Falso. A hibridación é sp .

A configuración electrónica do átomo de carbono ($Z = 6$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que só ten dous electróns desapareados e só podería formar dous enlaces. Para poder formar catro enlaces, ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s^2$, elevando un deles ao orbital $2p$ baleiro, sendo a súa configuración excitada: $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía de os enlaces que se van a formar.

Aínda así, se o átomo de carbono mantivese esa configuración excitada, non se xustificarían os ángulos de enlace experimentais, (por que os enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos en las direccións dos eixes X, Y ou Z) o que levou ao desenvolvemento da teoría de hibridación.

Os orbitais híbridos son o resultado de combinar orbitais atómicos para formar novos orbitais con formas e enerxías equivalentes.

Combinando os orbitais s e p pódense formar tres tipos de orbitais híbridos:

- 2 orbitais sp , formados pola hibridación do orbital s e un orbital p. Están dirixidos en sentidos opostos dunha liña recta, formando un ángulo de 180° .

(Quedan dous orbitais p sen hibridar, que poderían formar parte de enlaces π).

- 3 orbitais sp^2 , formados pola hibridación do orbital s e dous orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero, formando ángulos de 120° .

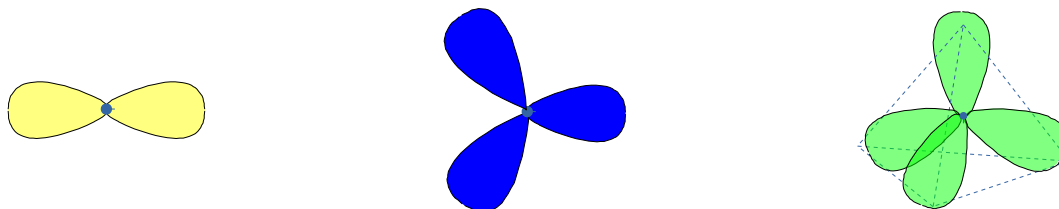
(Queda un orbital p sen hibridar que podería ser parte dun enlace π).

- 4 orbitais sp^3 , formados pola hibridación do orbital s e os tres orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro, formando ángulos de $109,5^\circ$.

2 híbridos sp

3 híbridos sp^2

4 híbridos sp^3



O diagrama de Lewis é: $\text{H} \times \text{C} \times : : \times \text{C} \times \text{H}$

Cada átomo de carbono está unido a só dous átomos (o outro C e un H). Non necesita máis que dous orbitais híbridos sp. Para formar cada un deles só se combina o orbital s cun orbital p. Os orbitais p que non se hibridan úsanse para formar os dous enlaces π do enlace tripo.

11. Indica, xustificando a resposta, se a seguinte afirmación é certa ou falsa:
A molécula CCl_4 é apolar.

(P.A.U. xuño 08)

Solución:

Certa.

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. Supón que os electróns de valencia, xunto cos compartidos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible. Unha repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

A estrutura de Lewis é:

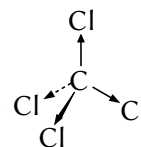
$$\begin{array}{c} :\ddot{\text{Cl}}: \\ :\ddot{\text{Cl}}:\text{C}:\ddot{\text{Cl}}: \\ :\ddot{\text{Cl}}: \end{array}$$

O átomo de carbono participa en catro enlaces σ e ningún π . Hai catro pares que se repelen, o que produce

unha disposición tetraédrica con ángulos de $109,5^\circ$.

A forma de molécula é tetraédrica.

O cloro é máis electronegativo que o carbono, polo que existe un momento dipolar de enlace $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$. A resultante dos momentos dipolares dos enlaces C – Cl anúlase, debido á simetría da molécula. É unha molécula apolar.



12. Das seguintes moléculas: trifluoruro de boro e amoníaco.
a) Indica a xeometría molecular.
b) Polaridade de cada molécula.
Razoa as respostas.

(P.A.U. set. 07)

Solución:

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

a) Molécula de fluoruro de boro: BF_3 .

O átomo central é o de boro, que ten tres electróns na capa de valencia. A configuración electrónica do átomo de boro no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p^1$, pero para formar tres enlaces ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s$, elevando un deles ao orbital $2p$ debido á enerxía dos enlaces a formar, sendo a súa configuración excitada $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$.

Os tres electróns desapareados forman tres enlaces, cada un cun electrón desapareado dun átomo de flúor, como se ve no diagrama de puntos de electróns de Lewis:



(A molécula BF_3 é unha excepción á regra do octeto, que establece que os átomos tenden a unirse de xeito que cada átomo teña oito electróns na súa capa de valencia. No átomo de boro só hai seis (tres pares de) electróns).

Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 3 pares de electróns é triangular plana. A molécula é un triangular plano, cun ángulo F-B-F de 120° .

Molécula de amoníaco: NH_3 .

O átomo central é o nitróxeno, que ten 5 electróns na súa capa de valencia.

A configuración electrónica fundamental do átomo de nitróxeno é: $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

Tres destes electróns forman enlaces covalentes cos tres átomos de cloro, mentres que os outros dous permanecen como un par solitario non enlazante, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis:



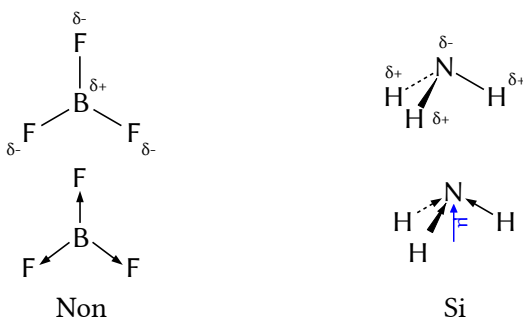
Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 4 pares de electróns é tetraédrica.

A forma da molécula determínase a partir da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). O átomo de nitróxeno está no centro do tetraedro e os tres átomos de hidróxeno están dispostos en tres vértices, pero no cuarto vértice hai un par non enlazante que non se «ve»: a forma da molécula de NH_3 é piramidal achatada.

Dado que o par non enlazante está máis preto do átomo de nitróxeno que os pares de enlace, a repulsión entre o par non enlazante e os pares de enlace é maior que entre os pares de enlace entre si, e fará que os átomos de hidróxeno se acheguen un pouco máis. O ángulo de enlace H-N-H será algo inferior a $109,5^\circ$.

Na molécula de trifluoruro de boro, non existe ese par non enlazante e, por tanto, a molécula é triangular plana.

Molécula	BF_3	NH_3
Átomo central	B	N
Configuración electrónica fundamental	$2s^2 2p_x^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Configuración electrónica excitada	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Diagrama de Lewis	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:B}\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Pares σ	3	3
Pares π	0	0
Pares non enlazantes	0	1
Pares que se repelen	3	4
Disposición dos pares	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	120°	107°
Forma da molécula	triangular	piramidal achatada
Momento dipolar de enlace	$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F}-\text{B}-\text{F} \end{array}$ $\text{B}^{\delta+} \rightarrow \text{F}^{\delta-}$	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{N} \quad \text{H} \\ \quad \diagup \quad \diagdown \\ \quad \text{H} \end{array}$ $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{N}^{\delta-}$

Momento dipolar da molécula

b) Como o flúor é moito máis electronegativo que o boro, o enlace $\text{B}^{\delta+} \rightarrow \text{F}^{\delta-}$ será polar, pero como a molécula de BF_3 é simétrica, os vectores momento dipolar (de igual valor) contrarréstanse e a molécula será non polar.

O nitróxeno é máis electronegativo que o hidróxeno e o enlace $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{N}^{\delta-}$ é polar. Ademais o par non enlazante produce outro vector momento dipolar na mesma dirección e sentido que a resultante dos tres vectores momento dipolar $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{N}^{\delta-}$, polo que a molécula é polar.

13. Ao comparar dúas moléculas moi similares: CO_2 e H_2O obsérvase que na primeira o momento dipolar é cero, mentres que na segunda non o é. Xustifícao de forma razoada.

(P.A.U. xuño 07)

Solución:

A electronegatividade mide a tendencia que ten un átomo a atraer cara á si o par de electróns do enlace e a resistencia a deixalos marchar. O elemento máis electronegativo é o flúor e despois o osíxeno.

Como o osíxeno é moito máis electronegativo que o carbono e que o hidróxeno, tanto o enlace $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{O}^{\delta-}$ como o $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{O}^{\delta-}$ serán polares. A diferenza está na forma das moléculas.

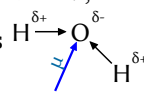
A molécula de CO_2 é lineal. A TRPECV explica porque o átomo central de carbono só está unido a dous átomos de osíxeno e non ten pares electrónicos non enlazantes, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis: $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\text{C}\text{:}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$

A repulsión entre os electróns dos enlaces explica unha disposición lineal con ángulo de 180° . Como o momento dipolar pódese representar por un vector, a resultante dos vectores dipolares $\text{O}^{\delta-} \leftarrow \text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{O}^{\delta-}$ de igual valor e sentidos opostos é nula. A molécula de CO_2 é apolar.

A molécula de H_2O é angular cun ángulo de 105° . A TRPECV explica porque o átomo central de osíxeno está unido a dous átomos de hidróxeno e ten dous pares electrónicos non enlazantes, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis: $\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$

A repulsión entre os electróns dos enlaces e os dos pares non enlazantes explica unha disposición case tetraédrica entre os pares de electróns cun ángulo $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ algo menor de $109,5^\circ$. Como o momento dipolar pódese representar por un vector, a resultante dos vectores dipolares $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{O}^{\delta-}$ non é nula. A molécula

de H_2O é polar.



14. Explica, utilizando orbitais híbridos e razoando as respostas, o tipo de enlace e xeometría das seguintes moléculas:

- Etino ou acetileno
- Amoníaco
- Dióxido de xofre.

(P.A.U. xuño 05)

Solución:

Na teoría da hibridación, os orbitais s , p_x , p_y e p_z , solucións da ecuación de onda para certas condicións re-xidas polos números cuánticos n , l e m , poden substituírse por certas combinacións lineais deles chamadas orbitais híbridos.

Combinando os orbitais s e p pódense formar tres tipos de orbitais híbridos:

- 2 orbitais sp, formados pola hibridación do orbital s e un orbital p. Están dirixidos en sentidos opostos dunha liña recta, formando un ángulo de 180° .

(Quedan dous orbitais p sen hibridar, que poderían formar parte de enlaces π).

- 3 orbitais sp^2 , formados pola hibridación do orbital s e dous orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero, formando ángulos de 120° .

(Queda un orbital p sen hibridar que podería ser parte dun enlace π).

- 4 orbitais sp^3 , formados pola hibridación do orbital s e os tres orbitais p. Están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro, formando ángulos de $109,5^\circ$.

Molécula de etino (acetileno): C_2H_2 .

A configuración electrónica do átomo de carbono ($Z = 6$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que só ten dous electróns desapareados e só podería formar dous enlaces. Para poder formar catro enlaces, ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s^2$, elevandoos a orbitais $2p$ baleiros. A configuración electrónica do átomo de carbono excitado é $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía de os enlaces que se van a formar.

Aínda así, se o átomo de carbono mantivese esa configuración excitada non se xustificarian os ángulos de enlace experimentais de 180° , (porque os enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos nas direccións dos eixes X, Y ou Z) o que levou ao desenvolvemento da teoría de hibridación.

A combinación do orbital s con un dos orbitais p, dá dous orbitais híbridos sp, nos que a función de probabilidade é máxima nos sentidos opostos dunha recta, formando un ángulo de 180° .

A hibridación sp corresponde a un átomo central unido a outros dous átomos. Como cada un dos carbonos (excitado) pode ter 4 electróns desapareados, en configuración $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, iso supón que, polo menos, un dos enlaces, debe ser múltiple. No etino é un enlace triplo co outro carbono e un enlace sinxelo co hidróxeno: $H - C \equiv C - H$.

O diagrama de Lewis é: $H:C:::C:H$

A forma da molécula é lineal, cun ángulo de 180° entre os enlaces.

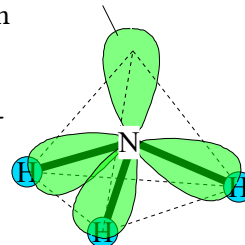
Molécula de amoníaco.

A configuración electrónica do nitróxeno en estado fundamental é: $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$, que non xustificaría os ángulos de enlace experimentais de 107° . (Tres enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos nas direccións dos eixes X, Y e Z). A combinación dos orbitais s, p_x , p_y e p_z , dá catro orbitais híbridos chamados sp^3 , nos que a función de probabilidade é máxima nas direccións dos catro vértices dun tetraedro, direccións que forman entre si ángulos de $109,5^\circ$. Os tres orbitais híbridos semiocupados poderían formar enlace cos orbitais 1s dos tres hidróxenos e o cuarto, cheo, daría un orbital non enlazante. O ángulo debería ser de $109,5^\circ$ e só certas complicadas refinacións da teoría poderían xustificar os ángulos de $107,3^\circ$.

O diagrama de Lewis é: $\begin{array}{c} H:\ddot{N}:H \\ | \\ H \end{array}$

En cada un dos tres enlaces N-H, superpóñense un orbital híbrido sp^3 do nitróxeno co orbital 1s do hidróxeno dando lugar a un enlace σ . O par de electróns do cuarto híbrido sp^3 é un par non enlazante.

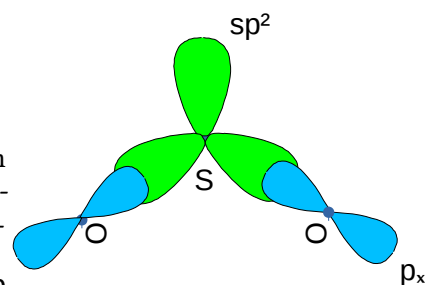
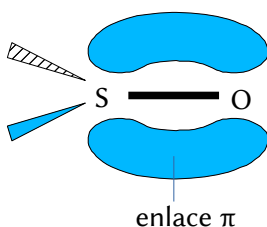
Par non enlazante



Molécula de SO_2 .

A configuración electrónica do xofre en estado fundamental é: $1s^2 2s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$, que non xustificaría os ángulos de enlace experimentais de algo menos de 120° . (Dous enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos nas direccións dos eixes X, Y ou Z). A combinación do orbital s con dous dos orbitais p, dá tres orbitais híbridos sp^2 , nos que a función de probabilidade

é máxima nas direccións dos tres vértices dun triángulo equilátero, direccións que forman entre si ángulos de 120° . Os dous orbitais híbridos semiocupados poderían formar enlaces σ cos orbitais 2p semiocupados dos osíxenos, e o orbital p do xofre sen hibridar daría un enlace π con outro orbital p dun dos osíxenos. O ángulo debería ser de 120° aínda que en realidade é menor.



En realidade, a estrutura da molécula de SO_2 é unha forma resonante entre dúas estruturas: $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$ e $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$, que tamén poden representarse como: $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$ e $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$

15. a) Xustifica a polaridade das seguintes moléculas: HCl , I_2 e CH_2Cl_2 e comenta a natureza das forzas intermoleculares presentes.
b) Indica, mediante un exemplo, unha propiedade característica que diferencie un composto iónico sólido dun composto molecular sólido.

(P.A.U. xuño 04)

Solución:

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre os pares enlazantes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible.

Esta teoría é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. A repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha distribución triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

O átomo central é o carbono, que ten 4 electróns na súa capa de valencia.

A configuración electrónica do átomo de carbono ($Z = 6$) no estado fundamental é $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$, que só ten dous electróns desapareados e só podería formar dous enlaces. Para poder formar catro enlaces, ten que separar («desaparear») os dous electróns $2s^2$, elevando un deles ao orbital $2p$ baleiro. A configuración electrónica do átomo de carbono excitado é $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$.

O custo de enerxía de excitación compénsase coa enerxía de os enlaces que se van a formar.

Os catro electróns forman enlaces covalentes, dous cos dous átomos de cloro e os outros dous cos dous áto-

mos de hidrógeno, como se ve no diagrama electrón-punto de Lewis:

$$\begin{array}{c} \text{H} \\ \times \\ :\ddot{\text{Cl}}:\ddot{\text{C}}:\text{H} \\ \times \\ :\ddot{\text{Cl}}: \end{array}$$

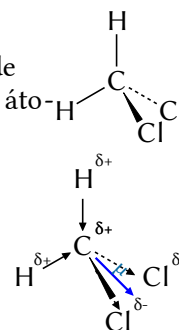
Segundo a TRPECV, a xeometría electrónica de 4 pares de electróns é tetraédrica. O átomo de carbono está no centro do tetraedro e dous átomos de cloro están en dous vértices e os dous átomos de hidróxeno están nos outros dous vértices.

Debido á repulsión entre os pares non enlazantes dos átomos de cloro veciños, o ángulo entre os enlaces Cl-C-Cl é maior que $109,5^\circ$, e a forma da molécula é piramidal.

A electronegatividade mide a tendencia que ten un átomo de atrair os electróns do enlace e a resistencia a deixalos marchar.

Como o cloro é máis electronegativo que o carbono, existe un momento dipolar de enlace $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$, que se representa por un vector. O carbono é máis electronegativo que o hidróxeno, polo que tamén existe un momento dipolar de enlace $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{C}^{\delta-}$.

A resultante dos vectores momento dipolar dos enlaces non se anula e a molécula é polar.



Molécula de cloruro de hidrógeno: HCl .

O átomo de cloro ten 7 electróns na súa capa de valencia.

A configuración electrónica do átomo de cloro ($Z = 17$) no estado fundamental é $[\text{Ne}] 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$.

Enlázasse co átomo de hidróxeno compartindo o seu electrón desapareado co electrón do átomo de hidróxeno. A molécula ten forma lineal. O Cl é máis electronegativo que o H, polo que tira cara a si con máis forza dos electróns de enlace, produción un momento dipolar $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$, e a molécula de HCl é polar

Molécula de iodo: I_2 .

O átomo de iodo ten 7 electróns na súa capa de valencia.

A configuración electrónica do átomo de cloro ($Z = 33$) no estado fundamental é $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p_x^2 5p_y^2 5p_z^1$.

Os dous átomos de iodo enlázanse entre se compartindo o seu electrón desapareado. Como os dous átomos de iodo teñen a mesma electronegatividade, tiran coa mesma forma do par de electrón de enlace e a molécula é apolar.

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo e pontes de hidrógeno.

- As forzas de dispersión ou de Van der Waals están presentes en todos os compostos covalentes. En principio son as máis débiles, pero aumentan considerablemente coa masa molecular do composto.
- As seguintes en intensidade son as forzas dipolo-dipolo. Aparecen en compostos que teñan moléculas con momento dipolar. Para que haxa momento dipolar nun enlace debe haber unha diferenza de electronegatividade entre os átomos que une. Ademais, as moléculas deben ter unha asimetría que permita que os vectores momento dipolar dos enlaces non se anulen.
- As de maior intensidade son os chamados pontes de hidróxeno ou enlaces de hidróxeno. As presentan moléculas que conteñen átomos pequenos (do segundo período) moi electronegativos (N, O e F) unidos a átomos de hidróxeno.

HCl e CH_2Cl_2 , presentan forzas dipolo-dipolo, por enriba das de dispersión.

I_2 , só ten forzas de dispersión (Van der Waals).

b) Os compostos iónicos son máis duros.

Por exemplo, o cloruro de sodio (NaCl), un composto iónico, é duro e fráxil, mentres que a cera de parafina, un composto molecular, é branda e maleable.

Os compostos iónicos xeralmente teñen puntos de fusión máis altos que os compostos moleculares. Isto débese a que a enerxía necesaria para romper as forzas intermoleculares entre as moléculas é moito menor que a enerxía necesaria para romper os enlaces iónicos nun composto iónico cristalino.

Por exemplo, o cloruro de sodio (NaCl), un composto iónico, funde a 801 °C. En comparación, a auga (H_2O), un composto molecular, funde a 0 °C.

● Forzas intermoleculares, tipos de enlace e propiedades dos compostos

1. Xustifica, razoadamente, se é certa a seguinte afirmación: A auga ten un punto de ebulición anormalmente alto comparado co que presentan os hidruros dos outros elementos do seu grupo, por exemplo o sulfuro de hidróxeno.

(P.A.U. xuño 16, set. 08)

Solución:

Considéranse tres tipos de forzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo e pontes de hidróxeno.

As forzas de dispersión ou de Van der Waals están presentes en todos os compostos covalentes. En principio son as máis débiles, pero aumentan considerablemente coa masa molecular do composto.

As seguintes en intensidade son as forzas dipolo-dipolo. Aparecen en compostos que teñan moléculas con momento dipolar. Para que haxa momento dipolar nun enlace debe haber unha diferenza de electronegatividade entre os átomos que une. Ademais as moléculas deber ter unha asimetría que permita que os momentos dipolares dos enlaces non se anulen.

As de maior intensidade son os chamados pontes de hidróxeno ou enlaces de hidróxeno. As presentan moléculas que conteñen átomos pequenos (do segundo período) moi electronegativos (N, O e F) unidos a átomos de hidróxeno.

As moléculas de auga están unidas por pontes de hidróxeno que son forzas de maior intensidade que as de dipolo-dipolo (que tamén están presentes na auga) e que as de Van der Waals, xa que conteñen átomos de hidróxeno unidos a un elemento electronegativo do segundo período (o osíxeno) e a molécula de auga é polar.

A molécula de sulfuro de hidróxeno non cumpre o requisito para presentar pontes de hidróxeno, porque o xofre ten un raio atómico máis grande e o momento dipolar da molécula é menor que a da auga porque o xofre é menos electronegativo que o osíxeno. Aínda que a masa molar do H_2S é maior que a da auga, o maior valor das forzas de dispersión non compensa a intensidade da forza dos enlaces de hidróxeno.

Como as forzas intermoleculares da auga son moito máis intensas que as do sulfuro de hidróxeno, a súa temperatura de ebulición é moito maior.

Isto permite entender por que a 1 atm de presión e 25 °C de temperatura, o H_2S é un gas e o H_2O un líquido.

2. Para cada un dos seguintes pares de elementos, xustifica se o composto binario que forman é iónico ou covalente, indica a fórmula, o nome e dúas propiedades químicas do composto que formarían.
a) B e F.

b) K e Br.

(P.A.U. set. 14)

Solución:

a) O boro e o flúor formarán un composto covalente, o trifluoruro de boro BF_3 .

A configuración electrónica do flúor é $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$

O flúor alcanzaría a disposición dun gas nobre gañando un electrón: $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 = [\text{Ne}]$

A configuración electrónica do boro é $1s^2 2s^2 2p_x^1$

O boro tería que perder os tres electróns do segundo nivel de enerxía. A enerxía necesaria para este proceso é demasiado elevada e a enerxía da formación dun hipotético composto iónico $(\text{B}^{3+})(\text{F}^-)_3$ non a compensaría.

É máis rendible compartir cada un dos tres electróns do boro, aínda que tería que gastar enerxía en pasar un electrón do orbital 2s ao orbital 2p_y, co electrón desapareado de cada un dos tres átomos de flúor.

O composto formado, BF_3 , sería unha excepción á regra do octete xa que o átomo de boro só tería tres pares de electróns. A molécula do BF_3 é plana triangular e apolar.

Os compostos covalentes moleculares teñen baixos puntos de fusión e ebulición, (o BF_3 probablemente sexa gasoso á temperatura ambiente) e non adoitan ser solubles en auga senón en disolventes apolares.

b) O bromo e o potasio formarán un composto iónico, o bromuro de potasio KBr.

A configuración electrónica do bromo é $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p_x^2 4p_y^2 4p_z^1$.

O bromo alcanza a disposición de gas nobre gañando un electrón: $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p_x^2 4p_y^2 4p_z^2 = [\text{Kr}]$

A configuración electrónica do potasio é $[\text{Ar}] 4s^1$.

O potasio alcanza a disposición de gas nobre perdendo o electrón 4s¹. A enerxía de rede asociada á unión dos ións K^+ e Br^- compensaría con fartura o gasto de sublimación e ionización do potasio e a vaporización e disociación da molécula de bromo.

Os compostos iónicos teñen altos puntos de fusión e ebulición, (o KBr é sólido á temperatura ambiente) e adoitan ser solubles en auga (o KBr é bastante soluble en auga xa que a súa enerxía de rede é relativamente baixa)

3. Indica, de forma razoada, o tipo de enlace que presentan e dúas propiedades para cada unha das sustancias seguintes:

a) Limaduras de magnesio.

b) Cloruro de sodio.

(P.A.U. xuño 12)

Solución:

a) Metálico porque só hai magnesio que é un metal. Brillo metálico, alta condutividade da calor e da corrente eléctrica.

b) Iónico, pola gran diferenza de electronegatividade entre o cloro e o sodio. Dureza, solubilidade en auga e condutividade nula en estado sólido pero relativamente boa disolto en auga.

4. Considerando o elemento alcalinotérreo do terceiro período e o segundo elemento do grupo dos halóxenos, que tipo de enlace corresponde á unión química destes elementos entre si? Escribe a fórmula do composto que forman. Razona a resposta.

(P.A.U. xuño 11)

Solución:

Iónico. MgCl_2

Os metais teñen unha enerxía de ionización relativamente baixa, aínda que no caso do magnesio habería que ter en conta a segunda enerxía de ionización para que a configuración electrónica fose a dun gas nobre.

Os halóxenos teñen unha afinidade electrónica que provoca un desprendemento de enerxía cando gañan un electrón. Esta enerxía non é suficiente para compensar as enerxías de ionización do magnesio, pero ta-

mén se desprende a enerxía de rede que é a enerxía electrostática que mantén unidos aos ións. Neste caso a enerxía de rede é bastante elevada porque é directamente proporcional ás cargas (e a carga do ión magnesio é 2+) e inversamente proporcional á distancia entre os ións que depende dos seus radios. (O ión magnesio ten un radio pequeno e o ión cloruro ten un dos radios máis pequenos dos anións)

5. Os elementos químicos A e B teñen número atómico 20 e 35, respectivamente. Indica razoadamente:
- Os ións máis estables que formarán cada un deles.
 - As propiedades do composto formado por A e B.

(P.A.U. xuño 09)

Solución:

a) As configuracións electrónicas dos elementos neutros son:

A ($Z = 20$): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

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

O elemento A perderá os 2 electróns do cuarto nivel de enerxía para alcanzar a configuración do gas nobre máis próximo. Formará o ión A^{2+} .

O elemento B gañará 1 electrón para completar o cuarto nivel de enerxía e alcanzar a configuración do gas nobre máis próximo. Formará o ión B^- .

b) O composto máis probable entre A e B será o composto iónico AB_2 .

As propiedades dos compostos iónicos son:

Temperaturas de fusión e ebulición elevadas. Están marcadas polo valor da enerxía de rede, que á súa vez dependen das cargas dos ións e dos radios.

Solubilidade en disolventes polares como a auga.

Condutividade eléctrica fase líquida, disolta ou gasosa, pola presenza de ións libres, (pero non en estado sólido, ao atoparse os ións fixos nos nós das redes cristalinas)

Elevada dureza (tamén en función da enerxía de rede) e fragilidade.

Actualizado: 15/03/24

Cuestións e problemas das [Probos de avaliación de Bacharelato para o acceso á Universidade](#) (A.B.A.U. e P.A.U.) en Galiza.

[Respostas](#) e composición de [Alfonso J. Barbadillo Marán](#).

Alguns cálculos fixéronse cunha [folla de cálculo](#) de [LibreOffice](#) do mesmo autor.

Algunhas ecuacións e as fórmulas orgánicas construíronse coa extensión [CLC09](#) de Charles Lalanne-Cassou.

A tradución ao/desde o galego realizouse coa axuda de [traducindote](#), de Óscar Hermida López.

Procurouse seguir as [recomendacións](#) do Centro Español de Metrología (CEM).

Consultouse ao Copilot de Microsoft Edge e tivéronse en conta algunhas das súas respostas nas cuestións.

Sumario

[ENLACES](#)

CUESTIÓN	1
Xeometría molecular no enlace covalente	1
Forzas intermoleculares, tipos de enlace e propiedades dos compostos	14

Índice de probas P.A.U.

2004.....	
1. (xuño).....	13
2005.....	
1. (xuño).....	11
2006.....	
1. (xuño).....	6
2007.....	
1. (xuño).....	11
2. (set.).....	9
2008.....	
1. (xuño).....	9
2. (set.).....	8, 14
2009.....	
1. (xuño).....	16
2. (set.).....	7
2011.....	
1. (xuño).....	15
2012.....	
1. (xuño).....	15
2. (set.).....	5 s.
2013.....	
1. (xuño).....	5
2. (set.).....	4
2014.....	
1. (xuño).....	4
2. (set.).....	3, 15
2015.....	
2. (set.).....	2
2016.....	
1. (xuño).....	14
2. (set.).....	1