

ENLACE QUÍMICO,
ESTRUCTURAS DE
LEWIS, HÍBRIDOS DE
RESONANCIA,
HIBRIDACIÓN DE
ORBITALES, ECUACIÓN
DE BORN-LANDÉ,
CICLO DE BORN-
HABER, FUERZAS
INTERMOLECULARES

*Teoría mas
Ejercicios resueltos
y explicados*

Tabla de contenido

1.- Introducción al enlace químico	4
2.- Enlace Covalente. Regla del Octeto y Estructuras de Lewis.	10
3.- Enlace Covalente Coordinado o Dativo.	11
4.- Excepciones de la Regla del Octeto.	12
5.- Concepto de Resonancia o Mesomería.	19
6.- Curvas de estabilidad energética o curvas de Morse	32
7.- Enlace covalente: polaridad de enlace y polaridad molecular	39
8.- Parámetros Moleculares: Energía de Enlace, Longitud de enlace y Angulo de Enlace	42
8.1.- Energía de enlace.....	42
8.2.- Longitud de enlace o distancia inter-nuclear.....	43
8.3.- Ángulo de enlace.....	43
9.- Geometría Molecular: Modelo de Repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)	44
10.- Modelo del Enlace de Valencia.	48
10.1.- Enlace sigma	49
Enlace sigma en la molécula de H ₂ , solapamiento frontal de dos orbitales s	49
Enlace sigma en la molécula de Cl ₂ , solapamiento frontal de dos orbitales p	50
Enlace sigma en la molécula de HCl, solapamiento frontal de un orbital s y un p.....	50
Enlace pi	51
11.- Introducción a la Hibridación de Orbitales Atómicos	51
11.1.- Hibridación sp	52
11.2.- Hibridación sp ²	52
11.3.- Hibridación sp ³	52
12.- Hibridación sp sin enlaces múltiples: Ejemplo del BeCl ₂	53

13.- Hibridación sp ² con enlaces simples: BF ₃	55
14.- Hibridación sp ³ en el Metano y el Etano.....	58
14.1.- Hibridación sp ³ para la molécula de metano, CH ₄	58
14.2.- Hibridación sp ³ para la molécula de etano, CH ₃ CH ₃	60
15.- Hibridación SP ³ del Nitrógeno en el Amoníaco.....	61
16.- Hibridación sp ³ del Agua.....	63
17.- Hibridación sp ² con enlaces dobles Carbono-Carbono: Eteno.....	65
18.- Hibridación sp con enlaces triples Carbono-Carbono: Etino	68
19.- Hibridación sp ² con enlaces pi deslocalizados: Benceno.	70
20.- Introducción al enlace metálico: modelo del mar de electrones o del gas electrónico.....	78
20.1- Teoría del gas electrónico para el enlace metálico	79
20.2.- Enlace metálico: teoría de bandas.....	80
21.- Propiedades de los Compuestos Metálicos.....	83
22.- Fundamentos del enlace iónico y tipos de redes cristalinas	89
23.- Cálculo de la energía reticular a partir de la ecuación de Born Landé.....	93
24.- Ciclo de Born Haber para el cálculo de la energía reticular	101
25.- Propiedades de los compuestos iónicos.....	115
26.- Introducción a las propiedades de los compuestos covalentes	117
27.- Propiedades de las sustancias covalentes moleculares	119
28.- Propiedades de las redes covalentes: estructuras del diamante y del grafito.....	121
28.1.- Estructura del grafito y propiedades	122
28.2.- Estructura del diamante y propiedades.....	124
29.- Introducción a las fuerzas intermoleculares	124
30.- Fuerzas de London o de dispersión: dipolo instantáneo – dipolo inducido.....	126
31.- Enlaces de hidrógeno y fuerzas de van der Waals.....	129

1.- Introducción al enlace químico

En la naturaleza, salvo los gases inertes que existen como gases monoatómicos, el resto de elementos químicos se hallan enlazados a otros átomos formando **moléculas**. Podemos tener **moléculas sencillas**, como los gases diatómicos del oxígeno, O_2 , nitrógeno, N_2 , hidrógeno, H_2 , cloro, Cl_2 ... o **moléculas complejas**, como el benceno, la glucosa o las macromoléculas biológicas (lípidos, proteínas, glúcidos, ácidos nucleicos).

Los átomos se unen entre sí debido, esencialmente, a razones energéticas. La energía de la molécula es menor que la suma de energías de los átomos aislados y los procesos naturales tienden a la mínima energía, ya que los sistemas con menor energía son más estables. Por tanto, los átomos se unen entre sí mediante **enlaces químicos** en procura de esa mayor estabilidad.

En la **formación de un enlace químico** siempre se produce un cambio en la **configuración electrónica** respecto a la de los átomos aislados. Esta modificación en la **configuración electrónica** como consecuencia de la formación de un **enlace químico** dio lugar al establecimiento de una **teoría electrónica de valencia para el enlace químico**. Las bases de esta teoría fueron establecidas en 1916 por Kossel y Lewis de forma independiente. Kossel, para el **enlace iónico**; Lewis, para el **enlace covalente**.

Ambos autores consideran que los átomos tienen una capa electrónica externa que puede contener hasta 8 electrones (2 en un orbital s y 6 en los orbitales p), que se conoce como “**Regla del octeto**” y es una **configuración electrónica** especialmente estable, pues representa la **configuración electrónica** de un gas noble. Por ello, ambos autores sugirieron que los átomos se enlazan intentando alcanzar estos 8 electrones en la última capa, por cesión, captación o compartición. Aunque esta regla es útil en muchos casos, existen numerosas excepciones.

Esencialmente, existen 3 **tipos de enlaces químicos** que vamos a estudiar en profundidad: el **enlace covalente**, el **enlace iónico** y el **enlace metálico**.

Ejercicio 1

1.-: Determinación del tipo de enlace entre dos elementos a partir de sus configuraciones electrónicas

“Dados los elementos A ($Z = 19$), B ($Z = 35$) y C ($Z = 12$) determinar el tipo de enlace químico y la estequiometría del compuesto formado por A con B, A con C y B con C”.

Es importante tener en mente que:

Metal + Metal = Enlace metálico

Metal + No Metal = Enlace iónico

No Metal + No Metal = Enlace covalente

Los **elementos de carácter metálico** poseen pocos electrones en la capa de valencia, de forma que muestran tendencia a perderlos para quedar como cationes y poder establecer después un mayor número de enlaces (desprendiendo más energía) y alcanzando con esta pérdida electrónica la configuración de gas noble.

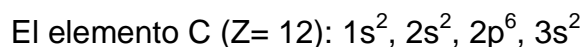
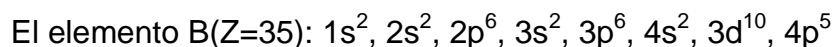
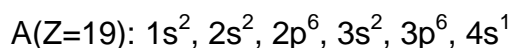
En el caso de los **elementos con carácter no metálico**, les falta pocos electrones para completar la capa de valencia (que será de 8 electrones si estamos ante un elemento del segundo periodo), por lo que no tienen tendencia a perderlos, sino a ganarlos, quedando como aniones, o bien a compartirlos, formando enlace covalente y adquiriendo por estos medios la estructura electrónica de un gas noble.

Para determinar las configuraciones electrónicas de los elementos indicados en el enunciado, hagamos uso del Diagrama de Moeller:

Así, el elemento A de número atómico $Z=19$, tendrá la

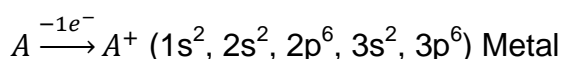


siguiente configuración electrónica:

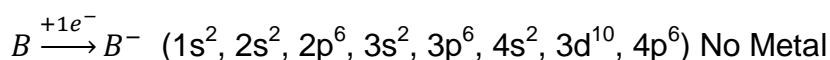


Una vez hecho esto, debemos determinar qué tipo de elemento es cada uno de ellos.

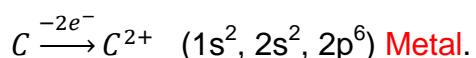
Si analizamos las distribuciones electrónicas de cada elemento, observamos que el elemento “A” posee un electrón en su nivel más externo ($4s^1$), superando en 1, el número de electrones del gas noble más cercano a él, por lo que al ceder este electrón, adquiere una configuración más estable. Luego, el elemento “A” ha de ser un metal, así:



El elemento B, posee 7 electrones en su última capa, luego lo lógico sería que capte un electrón para alcanzar la configuración electrónica de un gas noble, lo que lo convierte en un No-Metal:



El elemento C posee 2 electrones en su última capa por lo que tendrá tendencia a perderlos para alcanzar la configuración de un gas noble, luego, se trata de un metal:

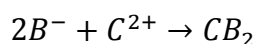


Cuando reacciona A + B, estaremos frente a la reacción de un Metal con un no metal, por lo que el producto de la reacción tendrá un enlace “IONICO” y la estequiometría será:



Cuando reaccionan A con C, estaremos frente a la reacción de dos metales entre sí por lo que el enlace resultante sería un “**Enlace Metálico**” (una aleación de dos metales)

En el caso de la combinación de B con C, se trata de la combinación de un Metal con un No-Metal y obtendremos nuevamente un enlace iónico. La diferencia estará en su estequiometría, pues:



Ejercicio 2

Determinación del tipo de enlace de dos elementos con configuraciones Z+1 y Z-1, siendo Z argón

“Los números atómicos de tres elementos, A, B y C son, respectivamente, Z-1, Z y Z+1. Sabiendo que el elemento B es el argón, ¿cuál será el enlace químico establecido entre A y C?”

Del enunciado del ejercicio sabemos:

$$A = Z - 1$$

B = Z; Argón y al ser éste un gas noble, tendrá una configuración electrónica así:
 ns^2, np^6

$$C = Z + 1$$

Partiendo de estos datos, podemos deducir que la configuración electrónica del elemento A, por tener un electrón menos (Z-1), será: ns^2, np^5 y que por disponer de siete electrones en su última capa se tratará de un No-Metal.

En el caso del elemento C, observamos que ha de tener un electrón más que el elemento B y que ese electrón se debe colocar en un nivel energético que será el inmediato superior a “n”, que es el que muestra B, luego, su configuración electrónica será: $ns^2, np^6, (n+1) s^1$ y esta configuración electrónica corresponde a la de un elemento Metálico.

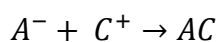
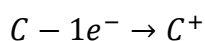
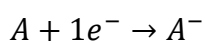
En resumen, tenemos:

A (Z-1): ns^2, np^5 (No Metal)

B (Z): ns^2, np^6 (gas noble)

C (Z+1): $ns^2, np^6, (n+1) s^1$ (Metal)

Luego, el enlace establecido entre A y C (No-Metal + Metal) será un enlace iónico y su estequiometría será:



Ejercicio 3

Determinación del tipo de enlace a partir de los números cuánticos n y l del último electrón

“Los números cuánticos n y l del último electrón que completa la configuración electrónica, en su estado fundamental, de los elementos A, B y C son, respectivamente, (3, 0), (3, 1) y (5, 1). Determinar el tipo de enlace establecido entre los átomos de A, entre los átomos de B y entre los átomos de A con los de C.”

Lo que nos dice el enunciado es que los números cuánticos “n” y “l” para el último electrón de los elementos A, B y C son, respectivamente:

A (3,0)

B (3,1)

C (5,1)

A partir del valor de “n”, conocemos el nivel de energía del último electrón y el valor de “l” nos indica el tipo de orbital que ocupa ese electrón, de esta manera, podemos inferir que el elemento A solo muestra dos posibilidades de configuración, pues su último electrón se ubica en un orbital “s” el cuál solo puede alojar dos electrones.

A (3,0): $n=3$ (nivel 3) y el orbital: $3s^1$ y $3s^2$

En cualquiera de estos casos es fácil visualizar que se tratará de un elemento Metálico, por lo que las combinaciones entre los elementos A arrojarán enlaces Metálicos o Aleaciones.

El elemento B muestra mayores posibilidades. El último electrón está alojado en un orbital p, luego:

B (3,1): $n=3$ y los orbitales posibles: $3p^1$, $3p^2$, $3p^3$, $3p^4$, $3p^5$, $3p^6$

Y en elemento C:

C (5,1): $n=5$ y los orbitales serán $5p^1$, $5p^2$, $5p^3$, $5p^4$, $5p^5$, $5p^6$

En primer lugar vamos a obviar las configuraciones $3p^6$ y $5p^6$ pues estas corresponderían a los gases nobles que al ser muy estables no formarán ningún tipo de enlace.

En el caso de las combinaciones de B con B

Si se trata de la configuración $3p^1$, la tabla periódica nos muestra al Aluminio con esa configuración por lo que tendremos un enlace metálico. En la medida que transcurren las configuraciones desde $3p^2$ hasta $3p^5$, aumenta la electronegatividad de los compuestos con lo que se incrementaría su carácter covalente hasta llegar al Cloro que es claramente no metálico pero aquellas configuraciones entre el aluminio y el cloro ($3p^2$, $3p^3$ y $3p^4$), tendrán un carácter intermedio con tendencia hacia los no metales.

En el caso de los elementos $5p^1$, $5p^2$ y $5p^3$ la tabla periódica nos dice que son metales y $5p^4$, $5p^5$ son no metales con lo que se combina un metal con no metal y el enlace será iónico.

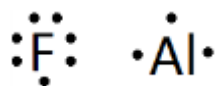
2.- Enlace Covalente. Regla del Octeto y Estructuras de Lewis.

A principios del siglo XX, Lewis sugirió la llamada **regla del octeto**, deducida a raíz de la elevada estabilidad que presentan los átomos de los gases nobles, con ocho electrones en su última capa (**capa de valencia**). Así, Lewis sugirió que los átomos que no son gases nobles se enlazan para alcanzar 8 electrones en su capa de valencia y alcanzar, por tanto, una **configuración electrónica** muy estable (a excepción del átomo de hidrógeno, cuya última capa estará completa con tan sólo 2 electrones, alcanzando la configuración electrónica del helio, $1s^2$).

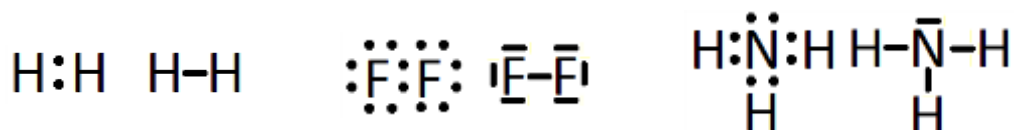
Una de las formas en que los átomos pueden alcanzar ocho electrones en su última capa es por **compartición de electrones** con otros átomos. Esta **compartición de un par de electrones** (un electrón procedente del átomo A y otro del átomo B) constituye el **enlace covalente**. Si se comparte únicamente un par de electrones, hablamos de **enlace simple**. Si se comparten (entre los mismos átomos) dos pares de electrones, hablamos de **enlace doble**; si se comparten tres pares de electrones, hablamos de **enlace triple**.

Para la representación del enlace covalente de moléculas sencillas, resulta muy útil utilizar las llamadas **estructuras de Lewis** o **diagramas de Lewis**. En dichos

diagramas, los **electrones de valencia** de un elemento químico se dibujan en torno a él como puntos o cruces.



Esto sería en cuanto a elementos químicos independientes. A continuación se muestran algunas **estructuras de Lewis** para moléculas sencillas, como la molécula de hidrogeno, H_2 , la de flúor, F_2 , o la de amoníaco, NH_3 .



Las líneas que se observan representan, cada una de ellas, un par de electrones, ya sea un par que forma **enlace covalente** (recibe el nombre de **par enlazante**) o un par libre o solitario (**par no enlazante**) como los que se observan en torno a los átomos de flúor.

3.- Enlace Covalente Coordinado o Dativo.

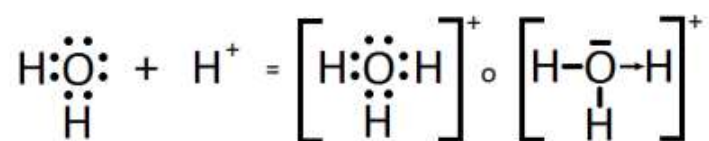
Existe un tipo especial de **enlace covalente** en el cual, en lugar de aportar un electrón cada átomo del enlace, los dos electrones son aportados por un mismo átomo. Este tipo de enlace recibe el nombre de **enlace covalente coordinado** o **enlace covalente dativo**.

También se puede representar el **enlace covalente coordinado** con los **diagramas o estructuras de Lewis**, aunque es habitual hallarlo, adicionalmente, encerrado entre corchetes, dado que habitualmente se trata de iones poliatómicos.

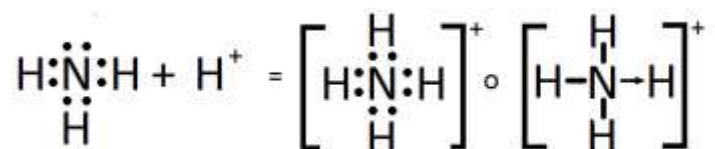
Dos ejemplos de iones habituales que presentan **enlace covalente coordinado** son el ion hidronio o hidrogenión (H_3O^+ , el que se forma cuando un ácido cede su protón, H^+ , en agua) y el catión amonio, NH_4^+ (que es responsable del comportamiento básico del amoníaco al captar un H^+).

Evidentemente, si a un átomo de H, cuya configuración electrónica es $1s^1$, le quitamos el único electrón que tiene para dar el ion hidrógeno o protón, H^+ , no le quedan electrones con los que formar **enlace covalente simple**, por lo que la única opción que le queda es formar un enlace covalente coordinado en el cual los dos electrones sean aportados por otra especie. De este modo, esta otra especie debe, necesariamente, disponer de **pares de electrones libres o no enlazantes**.

Así, el **ion oxonio o hidronio, como también se le conoce**, H_3O^+ , resulta de la adición de un H^+ a una molécula de agua, H_2O . La **estructura de Lewis del ion hidronio** es:



Mientras que el **ion amonio**, NH_4^+ , resulta de la adición de un H^+ a una molécula de amoníaco, NH_3 . La **estructura de Lewis del ion amonio** es:

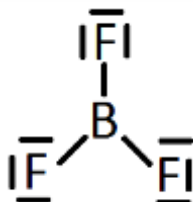


4.- Excepciones de la Regla del Octeto.

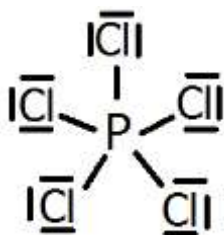
Si bien la **regla del octeto** es muy útil para la determinación de la **estructura de Lewis** de algunas moléculas sencillas, en especial aquellas que están formadas por átomos no metálicos del segundo período (por ejemplo oxígeno, carbono, nitrógeno...), lo cierto es que existen excepciones a la misma. Estas excepciones pueden ser por defecto y por exceso.

Las excepciones por defecto implican que puede haber átomos enlazados covalentemente que se rodeen de menos de ocho electrones. Por ejemplo, el

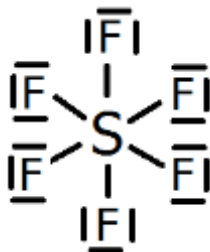
boro, típicamente, se rodea de **seis electrones** en compuestos como el **Trifluoruro de boro**, BF_3 , o el **Tricloruro de boro**, BCl_3 . La **estructura de Lewis del Trifluoruro de boro** será:



Por otra parte, en el caso de las excepciones por exceso, cuando los átomos que se enlazan son elementos no metálicos del tercer período (capa de valencia $n=3$), como el fósforo o el azufre, puede suceder que se rodeen de más de ocho electrones. Esto es debido al hecho de que se hallan disponibles (energéticamente accesibles) los orbitales 3d de estos átomos, y por ello pueden albergar más de 8 electrones en su capa de valencia. Así, el **fósforo** puede formar hasta **5 enlaces covalentes**, como ocurre en el **Pentacloruro de fósforo**, PCl_5 . La **estructura de Lewis del Pentacloruro de fósforo** es:



Y el **azufre** puede formar hasta **6 enlaces covalentes**, como ocurre en el **Hexafluoruro de azufre**, SF_6 . La **estructura de Lewis del Hexafluoruro de azufre** es:



Ejercicio 4

Estructuras de Lewis de algunas moléculas covalentes sencillas (sin resonancia)

Determine la estructura de Lewis de las siguientes moléculas covalentes sencillas: H_2O , NH_3 , CO , H_2S , N_2 , BF_3 , HCN , ICl_3 , PCl_3 , SF_6 y BeCl_2 .

En aquellos casos en los que se cumpla la regla del octeto en el átomo central se aplicarán las siguientes reglas:

1. Determinar el número total de electrones de valencia de todos los átomos que forman parte de la molécula (A)
2. Determinar el número total de electrones de valencia que serían necesarios para que todos los átomos tengan su última capa completa. Para el hidrógeno contaremos 2 electrones y para el resto de átomos contaremos 8 (B)
3. Determinar el número total de electrones enlazantes, restando $B - A = C$
4. El resto de electrones de valencia de la molécula serán no enlazantes, por lo que si a estos, A, les restamos los enlazantes, C, obtendremos los electrones no enlazantes.
5. Una vez que sabemos los pares enlazantes y no enlazantes, colocaremos el átomo central rodeado de los átomos periféricos y pondremos los pares electrónicos de la forma adecuada para que cada átomo quede con su última capa completa.

Si tenemos átomos que incumplan la regla del octeto, tanto por defecto (boro, berilio) como por exceso (azufre, yodo, fósforo) no aplicaremos las normas de esta forma estricta, aunque sí que contaremos el número total de electrones de valencia para asegurar que colocamos la totalidad de los electrones reales en la estructura de Lewis final.

Asimismo, cabe destacar otras normas adicionales. Cuando se pueden proponer distintas fórmulas de Lewis para la misma molécula, se prefieren aquellas en las que las cargas formales de los átomos son cero. Si han de sustentar cargas

formales, se prefieren las estructuras de Lewis en las que los átomos más electronegativos sustentan las cargas formales negativas; por último, las estructuras menos probables serán aquellas en las que cargas formales del mismo signo se hallen sustentadas por átomos adyacentes.

a.- Molécula de agua (H₂O):

Pasos:

- 1.- Determinar electrones de Valencia.
- 2.- Determinar los electrones necesarios para completar todos los átomos.
- 3.- Determinar pares electrónicos enlazantes y no-enlazantes.
- 4.- Dibujar estructura de Lewis

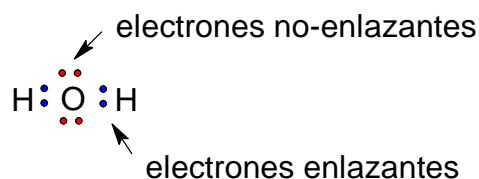
En el caso de la molécula de agua: H₂O

1.- Electrones de valencia: $\left\{ \begin{array}{l} H \ 1 e^- \times 2 \text{ átomos} \\ O \ 6 e^- \times 1 \text{ átomo} \end{array} \right\} \{8 e^-\}$

2.- Electrones para completar las capas de valencia: $\left\{ \begin{array}{l} H: 2 e^- \times 2 = 4 \\ O: 8 e^- \times 1 = 8 \end{array} \right\} \{12\}$

3.- $12 - 8 = 4$ (2 pares e⁻ enlazantes)

$8 - 4 = 4$ (2 pares e⁻ no-enlazantes)



b.- Molécula de amoníaco (NH₃):

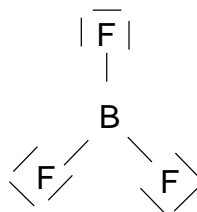
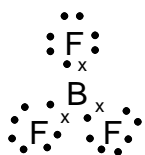
1.- $\left\{ \begin{array}{l} H \ 1 e^- \times 3 \text{ átomos} \\ N \ 5 e^- \times 1 \text{ átomo} \end{array} \right\} \{8 e^-\}$

2.- $\left\{ \begin{array}{l} H: 2 e^- \times 3 = 6 \\ N: 8 e^- \times 1 = 8 \end{array} \right\} \{14\}$

3.- $14 - 8 = 6$ (3 pares de electrones enlazantes)

$8 - 6 = 2$ (par no enlazante)

3.- $32 - 24 = 8$ enlazantes (4 pares); pero esto es imposible pues implicaría un doble enlace Boro-Flúor y esto no es factible, luego esta regla no se cumple para esta estructura. La solución debe buscarse por tanteo. Primero asignamos los tres electrones del Boro a su alrededor y los acompañamos de un electrón aportado por el flúor para finalmente completar los electrones de este último hasta completar sus siete electrones:



De esta manera cada átomo de Flúor queda rodeado por ocho electrones de valencia mientras que el Boro solo muestra 3 pares enlazantes, lo que constituye una excepción a la regla del octeto, por defecto.

g.- Ácido Cianhídrico (HCN):

$$1.- \begin{cases} \text{H: } 1e^- \\ \text{C: } 4e^- \{10 e^-\} \\ \text{N: } 5e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} \text{H: } 2e^- \\ \text{C: } 8e^- \{18\} \\ \text{N: } 8e^- \end{cases}$$

3.- $18 - 10 = 8$ electrones enlazantes (4 pares);

4.- $10 - 8 = 2$ electrones no enlazantes (1 par)



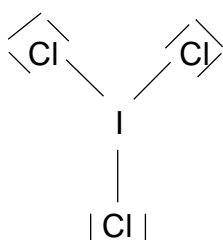
Con esta distribución, el Hidrógeno completa sus dos electrones de valencia, el Carbono ocho y el Nitrógeno ocho, con lo que se cumple la Regla del octeto.

h.- Tricloruro de Yodo (ICl_3):

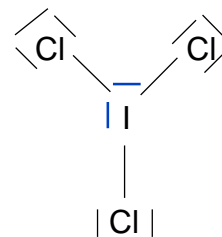
$$1.- \begin{cases} \text{I } 7 e^- \times 1 \text{ átomo} \\ \text{F } 7 e^- \times 3 \text{ átomos} \end{cases} \{28 e^-\} \quad 2.- \begin{cases} \text{I: } 8 e^- \times 1 = 8 \\ \text{F: } 8 e^- \times 3 = 24 \end{cases} \{32\} \quad 3.- 32 - 28 = 4$$

Como el Yodo pertenece al tercer período, incumple con la regla del octeto, luego por tanteo plantearemos la estructura del Yodo rodeado por los tres átomos de Cloro, y le asignamos los electrones disponibles:

En esta estructura tenemos 12 pares electrónicos (24 electrones) rodeando los

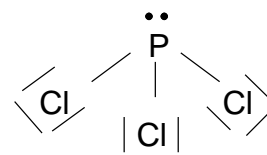


átomos de cloro pero debemos tener, en la estructura total, 28 electrones. Así, los cuatro electrones faltantes (2 pares no enlazantes) los asignamos al átomo central. Con ello, los átomos de cloro cumplen con la regla del



octeto, sin embargo el Yodo resulta, en esta estructura, con 5 pares de electrones (10 electrones), 3 pares enlazantes y 2 pares no enlazantes con lo que incumple con la regla del octeto por exceso.

i.- Pentacloruro de Fósforo (PCl_5)



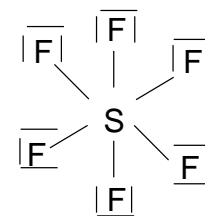
$$1.- \begin{cases} P: 5 e^- \times 1 \text{ átomo} \\ Cl: 7 e^- \times 3 \text{ átomos} \end{cases} \quad \{26 e^-\}$$

Planteamos la estructura de la siguiente manera: el átomo de fosforo rodeado de tres átomos de cloro, cada cloro con sus 4 pares de valencia (24 electrones) y los dos restantes, los ubicamos sobre el átomo central.

El fosforo en esta ocasión si cumple con la regla del octeto a pesar de pertenecer al tercer período de la tabla periódica, aunque es posible que no lo haga, como sería en el caso del PCl_5 .

j.- Hexafluoruro de Azufre (SF_6)

$$1.- \begin{cases} S: 6 e^- \times 1 \text{ átomo} \\ F: 7 e^- \times 6 \text{ átomos} \end{cases} \quad \{48 e^-\}$$



Al igual que en el caso anterior, planteamos la estructura en la que el azufre está rodeado de 6 átomos de Flúor los cuales cumplen con la regla del octeto, sin embargo, el Azufre la incumple por exceso.

k.- Dicloruro de Berilio (BeCl_2)

$$1.- \begin{cases} Be: 2 e^- \times 1 \text{ átomo} \\ Cl: 7 e^- \times 2 \text{ átomos} \end{cases} \quad \{16 e^-\}$$

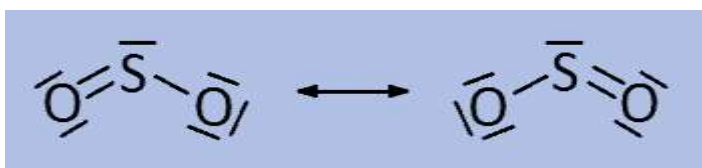
Planteamos la estructura así:

Aquí los átomos de Cloro $\left[\overline{\text{Cl}} - \text{Be} - \overline{\text{Cl}} \right]$ cumplen con la regla del octeto pero el Berilio la incumple por defecto.

5.- Concepto de Resonancia o Mesomería.

Existen algunas moléculas que presentan lo que llamamos **mesomería** o **resonancia**, lo cual implica que no son satisfactoriamente representadas mediante una única **estructura de Lewis** que sea consistente con sus propiedades reales.

Por ejemplo, si tomamos en consideración la molécula de dióxido de azufre, SO_2 , son posibles dos **estructuras de Lewis** distintas:



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

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

Así, hay moléculas o iones, la estructura de los cuales no se puede asignar a una única distribución electrónica que explique sus propiedades de forma satisfactoria. Cada una de las representaciones recibe el nombre de fórmula límite, estas fórmulas límite no tienen existencia real, la molécula real es un estado intermedio que se denomina híbrido de resonancia o forma mesómera. Así, SO_2 es un híbrido de resonancia entre estas dos fórmulas límite, lo cual se representa con una doble flecha.

Ejercicio 5

Estructuras de Lewis de algunas moléculas con resonancia: O_3 , CO_2 , N_2O , NO y NO_2

Determine la estructura de Lewis de algunas moléculas covalentes que presentan resonancia, como el ozono, O_3 , el dióxido de carbono, CO_2 , y tres óxidos de nitrógeno, el óxido nitroso, N_2O , el monóxido de nitrógeno, NO , y el dióxido de nitrógeno, NO_2 .

Que presenten resonancia significa que no se representan satisfactoriamente con una única estructura de Lewis, o que una única estructura no es consistente con sus propiedades reales. Estas moléculas tienen estructuras intermedias entre las distintas estructuras representadas. Cada una de las representaciones recibe el nombre de fórmula límite, estas fórmulas límite no tienen existencia real, la molécula real es un estado intermedio que se denomina **híbrido de resonancia** o **forma mesómera**. Para representar el híbrido de resonancia, las dos fórmulas límite se representan unidas por una doble flecha.

Además, de estas estructuras destaca el caso de dos de los óxidos de nitrógeno, NO y NO_2 , que presentan un electrón desapareado, lo cual las hace especies inestables y reactivas (los electrones desapareados, como los de los radicales, tienen tendencia a reaccionar para formar enlace covalente).

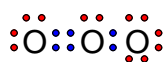
Veamos la estructura del Ozono. El Oxígeno pertenece al segundo período, luego apliquemos las reglas que hemos aprendido con anterioridad:

$$1.- \{O: 6 e^- \times 3 \text{ átomos} \{18 e^-\} \quad 2.- \{O: 8 e^- \times 3 \{24\}$$

$$3.- 24 - 18 = 6 \text{ (3 pares enlazantes);}$$

$$4.- 18 - 6 = 12 \text{ electrones (6 pares no enlazantes)}$$

Podemos entonces representar nuestra estructura así:

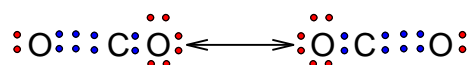


Sin embargo, también podemos plantear:

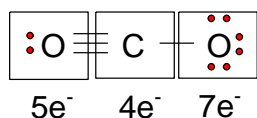


Como los electrones coinciden con el número de oxidación de cada átomo, las cargas formales de cada uno de ellos en esta estructura es cero, porque coincide la repartición de los electrones en los enlaces covalentes con los números de electrones de valencia.

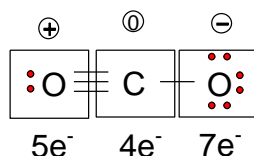
También podríamos plantear, en teoría, el siguiente híbrido de resonancia:



Esta forma pareciera estructuralmente correcta ya que cada átomo cumple con la regla del octeto, sin embargo, observemos las cargas formales:



El oxígeno de la derecha tiene un electrón en exceso respecto a su número de valencia, por lo que tendrá una carga formal negativa y el de la izquierda, tiene un electrón menos, por lo que su carga formal será positiva y el carbono, al coincidir el número de electrones con su número de valencia tendrá carga formal cero:

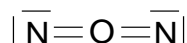


Esta estructura de Lewis no es incorrecta, sin embargo es improbable pues, en a la izquierda muestra una carga formal positiva sobre un átomo muy electronegativo como lo es el oxígeno en contraste con la primera, que tiene carga formal cero. Así, la primera con carga cero será la “**Estructura prioritaria**” y la última, será una “**Estructura no-probable**”.

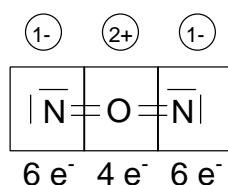
Molécula de Óxido de di Nitrógeno (N_2O):

$$1.- \begin{cases} N: 5 e^- \times 2 \text{ átomo} = 10 \\ O: 6 e^- \times 1 \text{ átomos} = 6 \end{cases} \{16 e^-\} \quad 2.- \begin{cases} N: 8 e^- \times 1 = 8 \\ O: 8 e^- \times 2 = 16 \end{cases} \{24\}$$

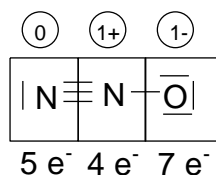
$$3.- 24 - 16 = 8 \text{ (4 pares enlazantes);} \quad 4.- 16 - 8 = 8 \text{ (4 pares no enlazantes)}$$



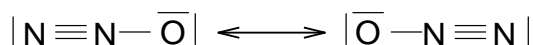
Si estudiamos las cargas formales tendremos:



Siendo el oxígeno muy electronegativo no es muy congruente que tenga una carga formal positiva, debemos entonces plantear alguna otra estructura. Por ejemplo:



Esta estructura es mucho más factible que la anterior, luego:



Molécula del Dióxido de Nitrógeno (NO_2):

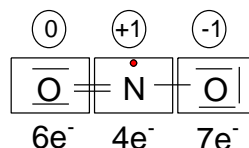
$$1.- \begin{cases} N: 5 e^- \times 1 \text{ átomo} = 5 \\ O: 6 e^- \times 2 \text{ átomos} = 12 \end{cases} \{17 e^-\} \quad 2.- \begin{cases} N: 8 e^- \times 1 = 8 \\ O: 8 e^- \times 2 = 16 \end{cases} \{24\}$$

$$3.- 24 - 17 = 7 \text{ (3 pares enlazantes + 1 electrón libre);}$$

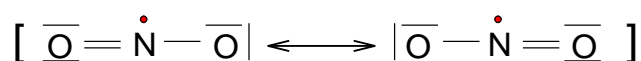
$$4.- 17 - 7 = 10 \text{ (5 pares no enlazantes)}$$

Podemos plantear la siguiente estructura: $\overline{\text{O}}=\overset{\cdot}{\text{N}}-\overline{\text{O}}$

El estudio de las cargas formales arroja:



Luego la estructura definitiva será:



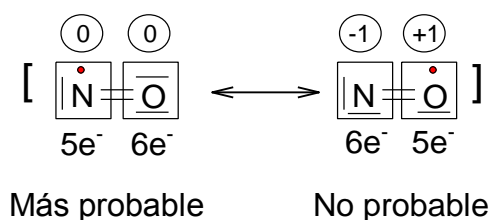
Molécula del Monóxido de Nitrógeno (NO):

$$1.- \begin{cases} N: 5 e^- \times 1 \text{ átomo} = 5 \\ O: 6 e^- \times 1 \text{ átomos} = 6 \end{cases} \{11 e^-\}$$

$$2.- \begin{cases} N: 8 e^- \times 1 = 8 \\ O: 8 e^- \times 1 = 8 \end{cases} \{16\}$$

$$3.- 16 - 11 = 5 (2 \text{ pares enlazantes} + 1 \text{ electrón libre});$$

$$4.- 11 - 5 = 6 (3 \text{ pares no enlazantes})$$



El análisis de las cargas formales nos indica que la molécula de la izquierda es más estable y por tanto, más probable.

Ejercicio 6

Estructuras de Lewis de los oxo-ácidos del cloro

Determine la estructura de Lewis de los distintos oxo-ácidos del cloro. Recordemos que un oxo-ácido es la combinación de un óxido con agua. En el caso del cloro, que tiene covalencias 1,3,5 y 7, los oxo-ácidos correspondientes que podrá formar son:

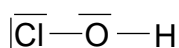
- Ácido hipocloroso (1): óxido hipocloroso, $\text{ClO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HClO}$

- Ácido cloroso (3): óxido cloroso, $\text{Cl}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HClO}_2$
- Ácido clórico (5): óxido clórico, $\text{Cl}_2\text{O}_5 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HClO}_3$
- Ácido perclórico (7): óxido perclórico, $\text{Cl}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HClO}_4$

Ácido Hipocloroso (HClO):

$$1.- \begin{cases} H: 1 e^- \times 1 atm = 1 \\ Cl: 7 e^- \times 1 atm = 7 \{14\} \\ O: 6 e^- \times 1 atm = 6 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} H: 2 \times 1 atm. = 2 \\ Cl: 8 \times 1 atm = 8 \{18\} \\ O: 8 \times 1 atm = 8 \end{cases}$$

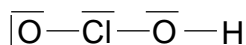
$$3.- 18 - 14 = 4 \text{ (2 pares enlazantes)} \quad 4.- 14 - 4 = 10 \text{ (5 pares no enlazantes)}$$



Ácido Cloroso (HClO_2):

$$1.- \begin{cases} H: 1 e^- \times 1 atm = 1 \\ Cl: 7 e^- \times 1 atm = 7 \{20\} \\ O: 6 e^- \times 2 atm = 12 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} H: 2 \times 1 atm. = 2 \\ Cl: 8 \times 1 atm = 8 \{26\} \\ O: 8 \times 2 atm = 16 \end{cases}$$

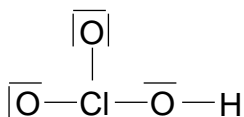
$$3.- 26 - 20 = 6 \text{ (3 pares enlazantes)} \quad 4.- 20 - 6 = 14 \text{ (7 pares no enlazantes)}$$



Ácido Clórico (HClO_3):

$$1.- \begin{cases} H: 1 e^- \times 1 atm = 1 \\ Cl: 7 e^- \times 1 atm = 7 \{26\} \\ O: 6 e^- \times 3 atm = 18 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} H: 2 \times 1 atm. = 2 \\ Cl: 8 \times 1 atm = 8 \{34\} \\ O: 8 \times 3 atm = 24 \end{cases}$$

$$3.- 34 - 26 = 8 \text{ (4 pares enlazantes)} \quad 4.- 26 - 8 = 18 \text{ (9 pares no enlazantes)}$$

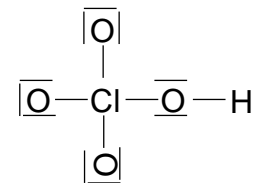


Ácido perclórico (HClO_4):

$$1.- \begin{cases} H: 1 e^- \times 1 atm = 1 \\ Cl: 7 e^- \times 1 atm = 7 \{32\} \\ O: 6 e^- \times 4 atm = 24 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} H: 2 \times 1 atm. = 2 \\ Cl: 8 \times 1 atm = 8 \{42\} \\ O: 8 \times 4 atm = 32 \end{cases}$$

$$3.- 42 - 32 = 10 \text{ (5 pares enlazantes)}$$

$$4.- 32 - 10 = 22 \text{ (11 pares no enlazantes)}$$



Ejercicio 7

Estructuras de Lewis de aniones hipocloroso, nitrito, nitrato, sulfito, carbonato y sulfato

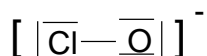
Escribir las estructuras de Lewis de algunos aniones, la mayoría de los cuales presentan resonancia. Se trata del anión hipocloroso, ClO^- , el anión silicato, SiO_4^{4-} , el anión nitrito, NO_2^- , el anión nitrato, NO_3^- , el anión sulfito, SO_3^{2-} , el anión carbonato, CO_3^{2-} y el anión sulfato, SO_4^{2-} .

Anión Hipocloroso (ClO^-):

$$1.- \begin{cases} Cl: 7 e^- \times 1 atm = 7 \\ O: 6 e^- \times 1 atm = 6 \{14\} \\ + 1 e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} Cl: 8 e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8 e^- \times 1 atm = 8 \{16\} \end{cases}$$

$$3.- 16 - 14 = 2 \text{ (1 par enlazantes)}$$

$$4.- 14 - 2 = 12 \text{ (6 pares no enlazantes)}$$

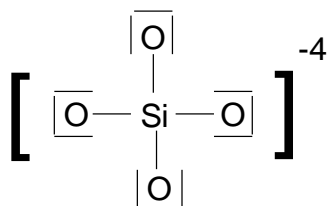


Anión Silicato (SiO_4^{4-}):

$$1.- \begin{cases} Si: 4 e^- \times 1 atm = 4 \\ O: 6 e^- \times 4 atm = 24 \{32\} \\ + 4 e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} Si: 8 e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8 e^- \times 4 atm = 32 \{40\} \end{cases}$$

$$3.- 40 - 32 = 8 \text{ (4 pares enlazantes)}$$

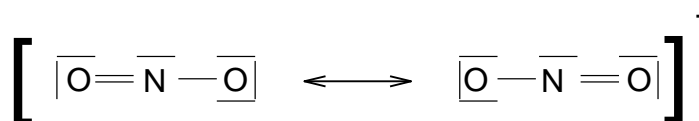
$$4.- 32 - 8 = 24 \text{ (12 pares no enlazantes)}$$



Anión Nitrito (NO_2^-):

$$1.- \begin{cases} N: 5e^- \times 1 atm = 5 \\ O: 6e^- \times 2 atm = 12 \{18\} \\ + 1e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} N: 8e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8e^- \times 2 atm = 16 \{24\} \end{cases}$$

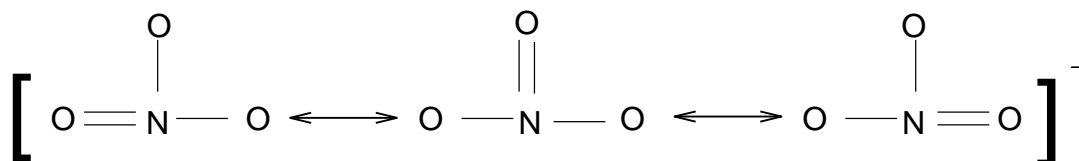
$$3.- 24 - 18 = 6 \text{ (3 pares enlazante)} \quad 4.- 18 - 6 = 12 \text{ (6 pares no enlazantes)}$$



Anión Nitrato (NO_3^-):

$$1.- \begin{cases} N: 5e^- \times 1 atm = 5 \\ O: 6e^- \times 3 atm = 18 \{24\} \\ + 1e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} N: 8e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8e^- \times 3 atm = 24 \{32\} \end{cases}$$

$$3.- 32 - 24 = 8 \text{ (4 pares enlazantes)} \quad 4.- 24 - 8 = 16 \text{ (8 pares no enlazantes)}$$

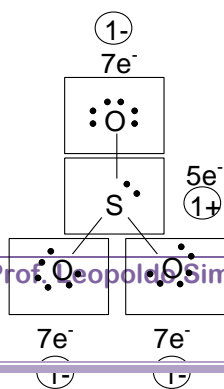


Anión Sulfito (SO_3^-):

$$1.- \begin{cases} S: 6e^- \times 1 atm = 6 \\ O: 6e^- \times 3 atm = 18 \{26\} \\ + 2e^- \end{cases}$$

Pero recordemos que el Azufre es un elemento del tercer período y las normas utilizadas hasta ahora, no aplican.

Si hacemos una primera distribución y un análisis de cargas formales tendremos:

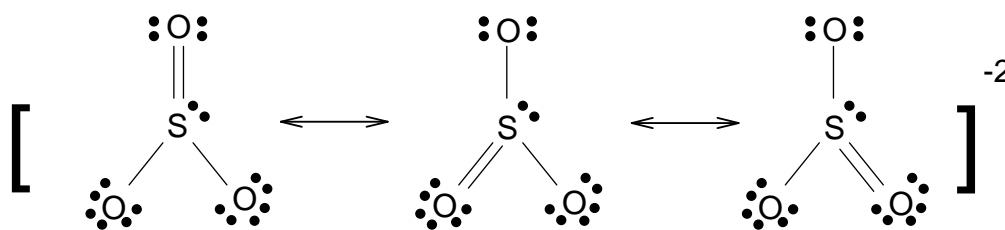
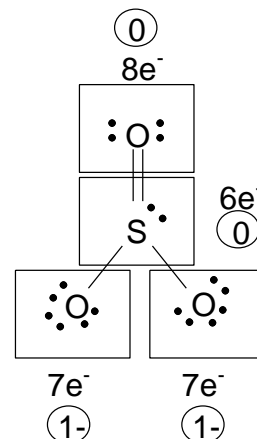


El Azufre es un elemento muy electronegativo, por lo que una carga formal positiva no plantea una estructura muy estable.

Así que debemos plantear una alternativa a esta primera propuesta.

Una segunda propuesta consistiría en incluir un doble enlace y redistribuir los electrones para que los oxígenos cumplan con la regla del octeto y haciendo un análisis de cargas formales descubrimos que ahora el Azufre queda con una carga formal de cero, al coincidir los electrones disponibles con su número de valencia, haciendo de esta, una estructura mucho más estable.

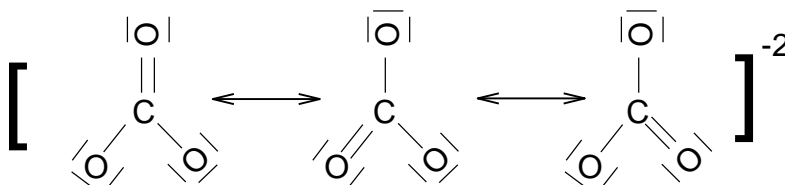
De esta manera, podemos entonces plantear tres estructuras Resonantes, como sigue:



Anión Carbonato (CO_3^{2-}):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 1 atm = 4 \\ O: 6e^- \times 3 atm = 18 \{24\} \\ + 2e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} N: 8e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8e^- \times 3 atm = 8 \{32\} \end{cases}$$

$$3.- 32 - 24 = 8 \text{ (4 pares enlazantes)} \quad 4.- 24 - 8 = 16 \text{ (8 pares no enlazantes)}$$



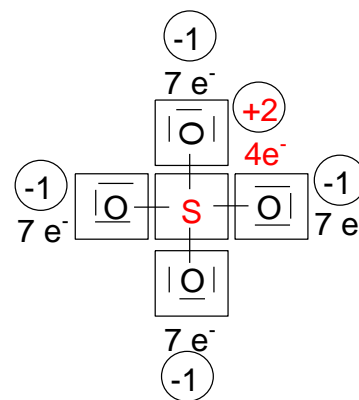
Anión Sulfato (SO_4^{2-}):

$$1.- \begin{cases} S: 6e^- \times 1 atm = 6 \\ O: 6e^- \times 4 atm = 24 \{32\} \\ + 2e^- \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} S: 8e^- \times 1 atm = 8 \\ O: 8e^- \times 4 atm = 32 \{40\} \end{cases}$$

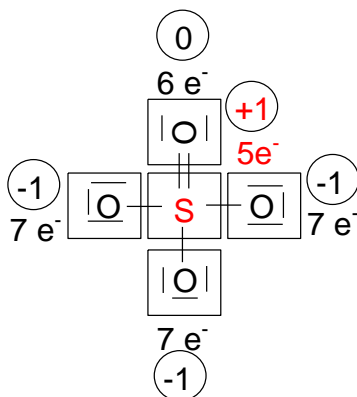
$$3.- 40 - 32 = 8 \text{ (4 pares enlazantes)} \quad 4.- 32 - 8 = 24 \text{ (12 pares no enlazantes)}$$

Una vez más, el Azufre pertenece al tercer período, luego, no se aplican las reglas:

Podemos plantear una estructura como esta, pero un análisis de cargas formales nos arrojaría un átomo de Azufre con carga formal positiva, siendo muy electronegativo. Por este motivo, debemos plantear una estructura más estable que la anterior. Para ello, introduzcamos un doble enlace en el átomo central y hagamos un nuevo análisis de cargas formales:

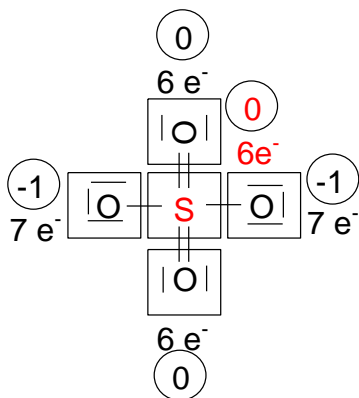


Esta nueva estructura Azufre en posición formal +1, lo que lo hace estructura anterior pero inestable.



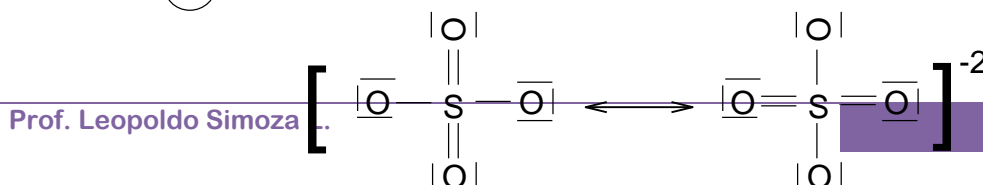
nos muestra un átomo de central con una carga más estable que la aun así, continúa siendo

De manera que una ser la siguiente:



nueva propuesta puede

Ahora hemos logrado una estructura mucho más coherente. El átomo de Azufre presenta ahora una carga formal cero, lo que hace que la estructura sea mucho más estable, lo que hace de esta la estructura probable. Ahora, podemos plantear las siguientes estructuras Mesómeras:



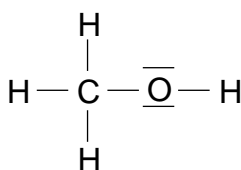
Estructuras de Lewis especies orgánicas (metanol, etanol, benceno, acetato, acetona)

Determinar las estructuras de Lewis de las siguientes especies orgánicas: metanol, CH_3OH , benceno, C_6H_6 , ión acetato, CH_3COO^- , etanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ y acetona, CH_3COCH_3 .

Molécula de Metanol (CH_3OH):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 1 \text{ atm} = 4 \\ O: 6e^- \times 1 \text{ atm} = 6 \{14\} \\ H: 1e^- \times 4 \text{ atm} = 4 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} C: 8e^- \times 1 \text{ atm} = 8 \\ O: 8e^- \times 1 \text{ atm} = 8 \{24\} \\ H: 2e^- \times 4 \text{ atms} = 8 \end{cases}$$

$$3.- 24 - 14 = 10 \text{ (5 pares enlazantes)} \quad 4.- 14 - 10 = 4 \text{ (2 pares no enlazantes)}$$

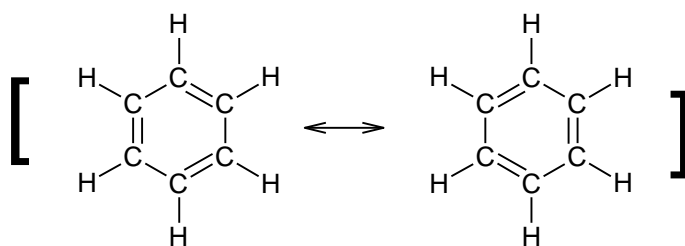
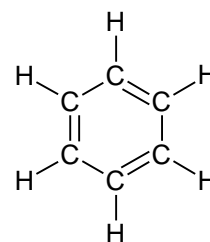


Molécula de Benceno (C_6H_6):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 6 \text{ atms} : 24 \{30\} \\ H: 1e^- \times 6 \text{ atms} : 6 \end{cases} \quad 2.- \begin{cases} C: 8e^- \times 6 \text{ atms} : 48 \{60\} \\ H: 2e^- \times 6 \text{ atms} : 12 \end{cases}$$

$$3.- 60 - 30 = 30 \text{ (15 pares enlazantes)}$$

$$4.- 30 - 30 = 0 \text{ (0 pares no enlazantes)}$$

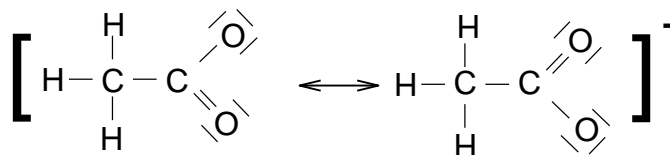


Anión Acetato (CH_3COO^-):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 2 \text{ atms} : 8 \\ H: 1e^- \times 3 \text{ atms} : 3 \\ O: 6e^- \times 2 \text{ atms} : 12 \\ + 1 \text{ electrón} \end{cases} \{24\} \quad 2.- \begin{cases} C: 8e^- \times 2 \text{ atms} : 16 \\ H: 2e^- \times 3 \text{ atms} : 6 \\ O: 8e^- \times 2 \text{ atms} : 16 \end{cases} \{38\}$$

3.- $38 - 24 = 14$ (7 pares enlazantes)

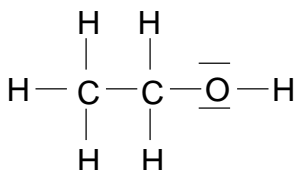
4.- $24 - 14 = 10$ (5 pares no enlazantes)



Molécula de Etanol (CH_3CH_2OH):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 2 \text{ atms} : 8 \\ H: 1e^- \times 6 \text{ atms} : 6 \\ O: 6e^- \times 1 \text{ atms} : 6 \end{cases} \{20\} \quad 2.- \begin{cases} C: 8e^- \times 2 \text{ atms} : 16 \\ H: 2e^- \times 6 \text{ atms} : 12 \\ O: 8e^- \times 1 \text{ atms} : 8 \end{cases} \{36\}$$

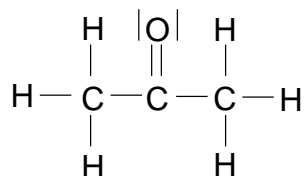
3.- $36 - 20 = 16$ (8 pares enlazantes) 4.- $20 - 16 = 4$ (2 pares no enlazantes)



Molécula de Acetona (CH_3COCH_3):

$$1.- \begin{cases} C: 4e^- \times 3 \text{ atoms} : 12 \\ H: 1e^- \times 6 \text{ atoms} : 6 \\ O: 6e^- \times 1 \text{ atom} : 6 \end{cases} \{24\} \quad 2.- \begin{cases} C: 8e^- \times 3 \text{ atoms} : 24 \\ H: 2e^- \times 6 \text{ atoms} : 12 \\ O: 8e^- \times 1 \text{ atom} : 8 \end{cases} \{44\}$$

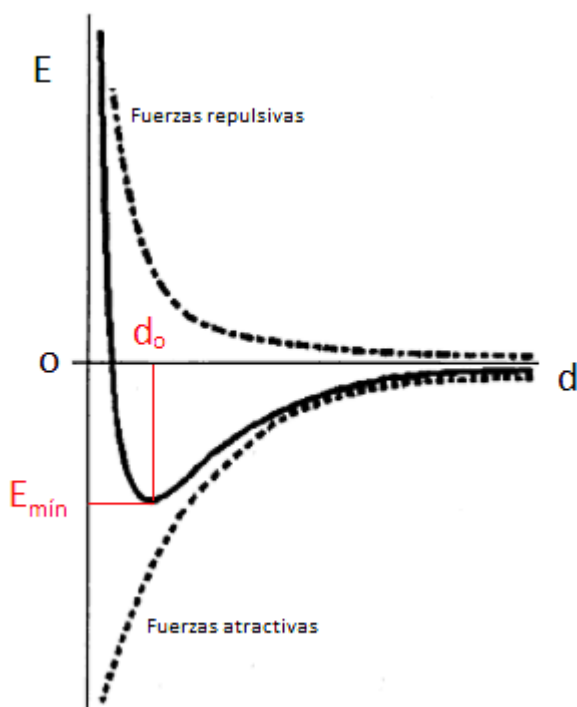
$$3.- 44 - 24 = 20 \text{ (10 pares enlazantes)} \quad 4.- 24 - 20 = 4 \text{ (2 pares no enlazantes)}$$



6.- Curvas de estabilidad energética o curvas de Morse

Un modo de visualizar las características energéticas de los **enlaces químicos** es a partir de las llamadas **curvas de estabilidad energética** o **curvas de Morse**. Estas curvas se pueden hallar experimentalmente y representan la **variación de energía** de un sistema formado por dos átomos A y B, en función de la **distancia** “d” que los separa. Como podemos ver en el diagrama siguiente, en el eje “y” se

representa la energía y en el eje “x” se representa la distancia.



- Curvas de Morse

Si consideramos un sistema formado por dos átomos, A y B, inicialmente tan separados que no ejercen entre sí ningún tipo de influencia, el sistema tiene una energía inicial cero. A medida que A y B se empiezan a aproximar mutuamente, empiezan a notarse las **fuerzas atractivas**, que son de largo alcance. ¿Qué fuerzas

atractivas? Pues la del núcleo de A sobre la nube electrónica de B y viceversa, la del núcleo de B sobre la nube electrónica de A. Puesto que esto estabiliza el sistema, la energía del mismo disminuye hasta un punto de mínima energía. No obstante, a medida que A y B siguen acercándose, empiezan a dejarse notar las **fuerzas repulsivas** (de corto alcance) de una nube electrónica sobre la otra, lo cual desestabiliza el sistema y la energía aumenta hasta alcanzar, incluso, valores positivos.

El resultado conjunto de las **fuerzas atractivas y repulsivas** permite dibujar la **curva de estabilidad energética del enlace químico o curva de Morse**. En ella se puede observar que existe una **distancia de enlace** entre A y B para la cual el sistema es más estable, pues en ese punto, las **fuerzas atractivas** son máximas y las **repulsivas** mínimas. Esta es la llamada **distancia de enlace**, “ d_0 ”. A dicha distancia le corresponde un valor de energía mínimo que identificamos con la **energía de enlace**, es decir, la energía que se desprende cuando se forma el enlace químico entre A y B. Cuando mayor es el valor de la energía desprendida al formarse el enlace, más estable será el enlace y, por tanto, más estable será la molécula A-B. Para romper dicha molécula será necesario aportar una energía igual o superior a la energía de enlace, lo cual implica separar A y B desde do a una distancia a la cual ya no ejerzan ningún tipo de interacción mutua.

Ejercicio 9

Cálculo del porcentaje de carácter iónico con el momento dipolar y la distancia de enlace

En este ejercicio calcularemos el porcentaje de carácter iónico de algunas moléculas covalentes en función de dos parámetros: el momento dipolar y la distancia inter-nuclear o distancia de enlace. Para ello debemos tener en cuenta la siguiente fórmula: $\mu = q \cdot d$

Donde “ μ ” es el momento dipolar, “ q ” es el desplazamiento de carga del enlace en cuestión y “ d ” la distancia de enlace. Consideraremos que, si el enlace fuese 100% iónico, el desplazamiento de carga sería el equivalente a la carga neta de

un electrón, es decir, $1,60 \cdot 10^{-19}$ Coulombs, y calculando la carga desplazada real podremos determinar qué porcentaje de carácter iónico tiene el enlace.

El enunciado completo es:

Calcular el tanto por ciento de carácter iónico de los siguientes compuestos a partir del momento dipolar en “debyes” (D) y la distancia de enlace:

	HCl	HI	HBr	CO
Momento Dipolar	1.07	0.79	0.38	0.12
Longitud de Enlace	1.274	1.400	1.608	1.182

Datos: 1 D (debyes) = $3,33 \times 10^{-30}$ Coulombs x metro

$q = 1,60 \times 10^{-19}$ Coulombs

Existen otras formas de calcular el tanto por ciento de carácter iónico, como la fórmula empírica de Linus Pauling que utilizaremos más adelante.

Utilizamos la fórmula: $\mu = q \cdot d$, convirtiendo las unidades dadas:

HCl:

$$\mu = 1,07 D \times \frac{3.33 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m}}{D} = 3,563 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m}$$

$$3,563 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m} = q \times 1.274 \times 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow q = 2,797 \times 10^{-20} \text{ Coul}$$

Esta “q” que hemos calculado es la carga que está desplazada en esta molécula,

$$\text{luego: } \% C_i \text{HCl} = \frac{2,797 \times 10^{-20} \text{ Coul}}{1,60 \times 10^{-19} \text{ Coul}} \times 100 = 17,50 \%$$

HBr:

$$\mu = 0,79 D \times \frac{3.33 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m}}{D} = 2,631 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m}$$

$$2,631 \times 10^{-30} \text{ Coul} \times \text{m} = q \times 1.400 \times 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow q = 1,879 \times 10^{-20} \text{ Coul}$$

$$\% C_i \text{HBr} = \frac{1,879 \times 10^{-20} \text{ Coul}}{1,60 \times 10^{-19} \text{ Coul}} \times 100 = 11,70 \%$$

HI:

$$\mu = 0,38 D x \frac{3.33 x 10^{-30} \text{ Coul} x m t}{D} = 1,265 x 10^{-30} \text{ Coul} x m t$$

$$1,265 x 10^{-30} \text{ Coul} x m = q x 1.608 x 10^{-10} m \Rightarrow q = 7,869 x 10^{-21} \text{ Coul}$$

$$\% C_i HBr = \frac{7,869 x 10^{-21} \text{ Coul}}{1,60 x 10^{-19} \text{ Coul}} x 100 = 4,9 \%$$

CO:

$$\mu = 0,12 D x \frac{3.33 x 10^{-30} \text{ Coul} x m t}{D} = 3,996 x 10^{-30} \text{ Coul} x m t$$

$$3,996 x 10^{-30} \text{ Coul} x m = q x 1.182 x 10^{-10} m \Rightarrow q = 3,381 x 10^{-21} \text{ Coul}$$

$$\% C_i HBr = \frac{3,381 x 10^{-21} \text{ Coul}}{1,60 x 10^{-19} \text{ Coul}} x 100 = 2,1 \%$$

Así; $HCl > HBr > HI > CO$ en lo que respecta a su carácter iónico.

Ejercicio 10

Cálculo del porcentaje de carácter iónico con la diferencia de electronegatividades

En este ejercicio calcularemos el porcentaje de carácter iónico de algunos compuestos a partir de la electronegatividad de los átomos que forman el enlace, utilizando para ello la relación matemática empírica que propuso Linus Pauling, es decir:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 x [1 - e^{-1/4 x (\Delta EN)^2}]$$

Según esta fórmula, el compuesto que presentará un valor de carácter iónico del 50%, será aquel cuya diferencia de electronegatividades sea 1,7. Así:

- $\Delta EN = 1,7$ Carácter iónico 50%
- $\Delta EN > 1,7$ Enlace iónico, carácter iónico $> 50\%$
- $\Delta EN < 1,7$ Enlace covalente, carácter iónico $< 50\%$

Debemos recordar, no obstante, que se trata de cálculos aproximados que sirven esencialmente de forma comparativa para valores de tanto por ciento de carácter iónico calculados todos ellos con la misma fórmula.

El enunciado completo es el siguiente:

“Determinar el tanto por ciento de carácter iónico según el criterio de Pauling en función de la electronegatividad, para los compuestos HF, CO, NO, SrO y MgO (Datos, electronegatividades: Sr = 1,0, Mg = 1,2, H = 2,1, C = 2,5, O = 3,5, F = 4,0, N = 3,0).”

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2}]$$

HF:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2}]$$

$$\Delta EN_{HF} = 4,0 - 2,1 = 1,9$$

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (1,9)^2}] = 59,44 \%$$

CO:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2}]$$

$$\Delta EN_{CO} = 3,5 - 2,5 = 1,0$$

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (1,0)^2}] = 22,12 \%$$

NO:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2}]$$

$$\Delta EN_{NO} = 3,5 - 3,0 = 0,5$$

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (0,5)^2}] = 6,06 \%$$

SrO:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times [1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2}]$$

$$\Delta EN_{HF} = 3,5 - 1,0 = 2,5$$

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times \left[1 - e^{-1/4 \times (2,5)^2} \right] = 79,04 \%$$

MgO:

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times \left[1 - e^{-1/4 \times (\Delta EN)^2} \right]$$

$$\Delta EN_{HF} = 3,5 - 1,2 = 2,3$$

$$\% \text{ carácter iónico} = 100 \times \left[1 - e^{-1/4 \times (2,3)^2} \right] = 73,35 \%$$

Ejercicio 11

Determinación de la covalencia de flúor, cloro, nitrógeno y fósforo

En este ejercicio determinaremos las posibles covalencias de cuatro elementos químicos, el flúor, el cloro, el nitrógeno y el fósforo. Para ello, a partir de los números atómicos, consideraremos las configuraciones electrónicas y el número de electrones desapareados, así como la posibilidad de que un electrón promocióne a un nivel superior energéticamente accesible para que queden un mayor número de electrones desapareados, modificando la covalencia y pudiendo formar un mayor número de enlaces covalentes. La promoción electrónica requerirá un aporte energético inicial, que se verá compensado por el hecho de poder formar un número mayor de enlaces covalentes, en cuya formación se desprenderá una considerable cantidad de energía (los enlaces covalentes suelen ser muy fuertes, lo que significa que se desprende una gran cantidad de energía cuando se forman).

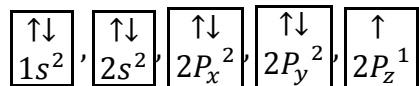
Para que un electrón pueda promocionar, es necesario que haya orbitales superiores vacíos y energéticamente accesibles como los 3d en el caso de elementos cuya última capa es del tercer periodo (por ejemplo, cloro y fósforo). En el caso de los elementos del segundo período, como flúor y nitrógeno, no podrán promocionar electrones porque los siguientes orbitales vacíos, los 3s, están lejanos energéticamente hablando.

El enunciado es:

“En base a las configuraciones electrónicas, ¿qué covalencias podrán presentar los elementos flúor ($Z = 9$), cloro ($Z = 17$), nitrógeno ($Z = 7$) y fósforo ($Z = 15$)?”

Veamos las distribuciones electrónicas:

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

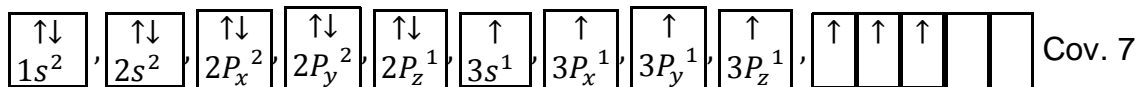
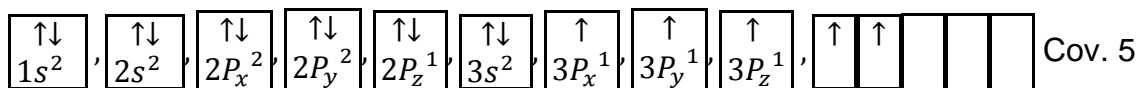
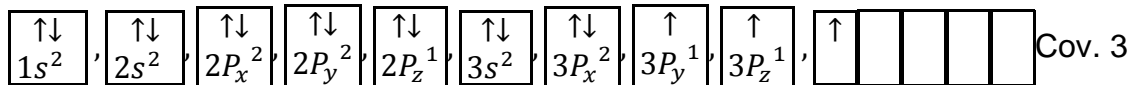
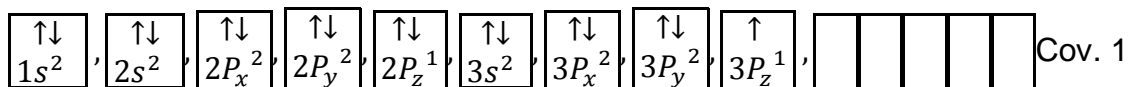


Como vemos, no existen orbitales “d” disponibles para la promoción de un electrón y por ello es que el Flúor solo presenta Covalencia 1.

Cl ($Z=17$): El Cloro pertenece al tercer período y posee orbitales “d” disponibles.

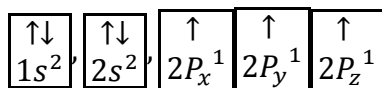
Estado fundamental:

$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5, 3d^0$



La promoción de un electrón, en cada caso, da lugar a 3, 5 y 7 orbitales desapareados y por tanto, con posibilidades de formar un enlace covalente, en adición al estado fundamental que presenta covalencia 1.

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



delta (+), (δ^+). Delta (-) y delta (+) son iguales y de signo contrario.

Electronegatividades:

Br: 2,8

H: 2,1

Así, en este enlace se genera lo que llamamos un **dipolo eléctrico**, porque tiene dos polos de signo contrario. Un **dipolo eléctrico** se caracteriza por el llamado **momento dipolar** (representado por la letra griega mu, μ) que es el producto de delta (densidad de carga) por la distancia que separa los núcleos atómicos de los dos átomos del enlace, es decir:

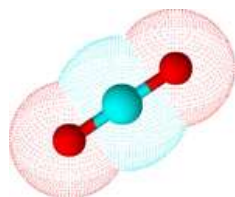
$$\vec{\mu} = \delta \cdot \vec{d}$$

“d” representa la distancia inter-nuclear. En este caso, la distancia entre el núcleo del átomo de bromo y el núcleo del átomo de hidrógeno.

Este **momento dipolar** se puede medir experimentalmente. De hecho, fue el estudio del momento dipolar de distintas moléculas lo que permitió al Dr. Linus Pauling confeccionar su **escala de electronegatividades**.

Existen moléculas cuyos enlaces son polares y, sin embargo, globalmente son apolares por una cuestión de **geometría**. Es decir, debido a la geometría, los momentos dipolares de los enlaces individuales pueden anularse y globalmente, la molécula será apolar.

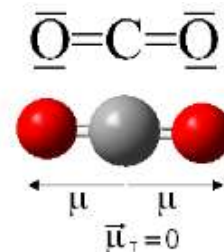
Esto es lo que ocurre, por ejemplo, en el caso del **dióxido de carbono**, cuyos enlaces son polares porque existe una **diferencia de electronegatividad** entre el oxígeno y el carbono (electronegatividad del oxígeno 3,5; electronegatividad del carbono 2,5). Sin embargo, a pesar de la polaridad de los enlaces, puesto que se trata de dos momentos dipolares del mismo módulo pero distinto sentido, la molécula tiene un momento dipolar global nulo (ya que presenta **geometría lineal**), tal y como se representa a continuación:



Electronegatividades:

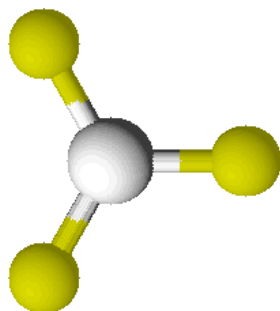
O: 3,5

C: 2,5



Aquí tenemos enlaces polares pero la molécula en general y debido a su geometría, es apolar.

Esto mismo sucede con otras moléculas de distinta geometría que presentan enlaces equivalentes. Por ejemplo, la **geometría trigonal plana** de la molécula de **Trifluoruro de boro, BF_3** o la **geometría tetraédrica** del **metano, CH_4** .



BF_3

Trifluoruro de Boro

Molécula de Geometría Trigonal plana

Enlaces B-F polares

Molécula Globalmente Apolar

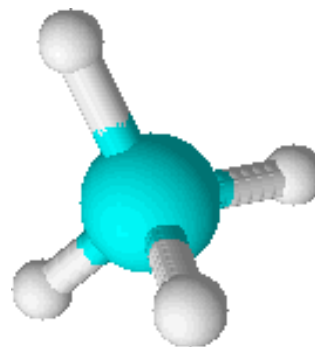
CH_4

Metano

Molécula de Geometría Tetraédrica

Enlaces C-H polares

Molécula Globalmente Apolar



Nota: las imágenes moleculares aquí representadas han sido realizadas haciendo uso del programa "ChemSketch"

8.- Parámetros Moleculares: Energía de Enlace, Longitud de enlace y Angulo de Enlace

Existen una serie de **parámetros moleculares** que caracterizan un **enlace** y que aportan una valiosa información a la hora de describir una **molécula covalente**. Entre estos **parámetros moleculares** hallamos: la **energía de enlace**, la **longitud de enlace** (o **distancia de enlace**), el **ángulo de enlace** y la **polaridad**.

La relación existente entre la **energía de enlace** y la **distancia inter-nuclear** entre dos átomos A y B ya la hemos considerado en el punto anterior (**curvas de estabilidad energética o curvas de Morse**).

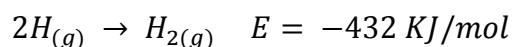
A continuación definiremos cada parámetro molecular con mayor profundidad.

8.1.- Energía de enlace

Cuando se forma un **enlace químico** se desprende energía. Por el contrario, si deseamos romper el enlace formado, debemos aportar externamente esa misma cantidad de energía. Así, se define la **energía de enlace** como la *energía liberada cuando se forma un mol de enlaces a partir de los átomos en estado gaseoso y fundamental*. A estas energías de enlace se las llama también **entalpías de enlace**.

Cabe destacar que cuanto mayor es la energía desprendida en la formación de un enlace más energía se requiere para romperlo y, por tanto, más estable es el enlace.

Por ejemplo, en el caso del Hidrógeno, la Energía de Enlace para la molécula de H_2 , la energía que se desprende cuando se forma un mol de enlaces H-H, a partir de los átomos de Hidrógeno en estado fundamental y gaseoso, es de 432 KJ/mol, lo que se expresa así:



La tabla siguiente muestra las energías de enlace para algunos elementos representativos:

Elemento	E (KJ/mol)	$d_0(\text{Å})$
H ₂	432	0,74
N ₂	942	1,10
O ₂	494	1,21
F ₂	155	1,41
Cl ₂	239	1,99

8.2.- Longitud de enlace o distancia inter-nuclear

La **longitud de enlace** es la distancia de equilibrio entre los núcleos atómicos, el valor del mínimo en la curva de estabilidad energética. Esta **distancia inter-nuclear** es medible experimentalmente por técnicas espectroscópicas o de difracción.

Es preciso indicar, no obstante, que los valores de las tablas solo son promedios, ya que los átomos no permanecen fijos en el espacio, sino que se hallan vibrando en torno a una posición de equilibrio. Cabe añadir, además, que si tenemos enlaces múltiples, aumenta la **energía de enlace** y disminuye la **distancia de enlace**. Estas distancias de enlace son útiles para calcular los radios covalentes de las moléculas. Por ejemplo, en el caso de los elementos indicados en la tabla anterior, podemos considerar como radios covalentes, la mitad de la distancia indicada en la tabla. Así, para la molécula de Hidrógeno, podemos considerar como radio covalente 0,37 Å.

También debemos indicar que las longitudes de los enlaces simples, dobles y triples presentan valores decrecientes:

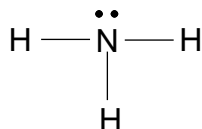
Enlace	E (KJ/mol)	$d_0(\text{Å})$
C – C	348	1,5
C = C	608	1,3
C ≡ C	837	1,2

8.3.- Ángulo de enlace

El **ángulo de enlace** sólo tiene sentido cuando consideramos 3 átomos, y es el ángulo formado por los ejes imaginarios que unen el núcleo del átomo central con los núcleos de los átomos unidos a él.

9.- Geometría Molecular: Modelo de Repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Ya hemos descrito las **estructuras de Lewis** de algunas **moléculas covalentes** sencillas. Sin embargo, dichas **estructuras de Lewis**, aunque nos aportan información de cómo se enlazan los átomos, no nos aportan información de la distribución espacial de estos enlaces en el espacio, es decir, la **geometría molecular**. Así, por ejemplo, si observamos la **estructura de Lewis del amoníaco**:



Resulta imposible discernir si su geometría es trigonal plana o de pirámide trigonal, o con enlaces que formen 90° entre sí... Es por este motivo que, para predecir la **geometría de las moléculas covalentes**, hacemos uso de dos modelos: el **modelo del enlace de valencia**, dentro del cual consideraremos la **hibridación de orbitales atómicos** y el **modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia**, abreviado con las siglas **RPECV**.

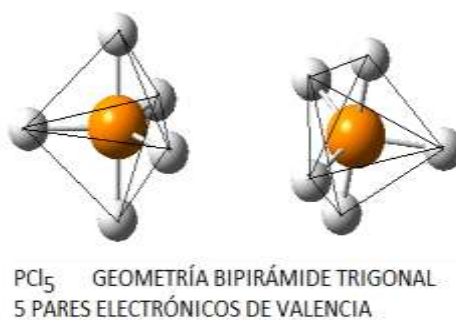
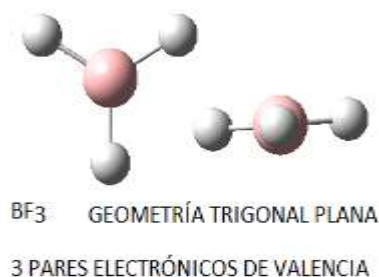
Este último, a pesar de la aparatosidad del nombre, es el más sencillo. El **modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia** parte de una idea intuitiva y sencilla: dado que los electrones son cargas negativas y se repelen entre sí, la geometría de la especie química considerada será aquella que permita **minimizar las repulsiones entre los pares electrónicos** que se hallan en torno al átomo central, es decir, los electrones de la capa de valencia del átomo central. Estos pares electrónicos pueden ser tanto pares pertenecientes a un enlace químico con otro átomo (**pares enlazantes**) como pares libres (**pares no**

enlazantes). Así, estos pares electrónicos en torno al átomo central se colocarán lo más separado posible para que la repulsión entre ellos sea mínima.

Cabe destacar, no obstante, que los **pares no enlazantes** causan mayores repulsiones a lo pares vecinos que los **pares enlazantes**, motivo por el cual algunas moléculas con pares libres en torno al átomo central, como el amoniaco o el agua, presentan ligeras variaciones en el ángulo de enlace esperado. Puesto que nos basamos en la capa de valencia del átomo central, el modelo **RPECV** es útil únicamente para la predicción de la **geometría de moléculas covalentes sencillas**, formadas por un átomo central enlazado a algunos átomos periféricos.

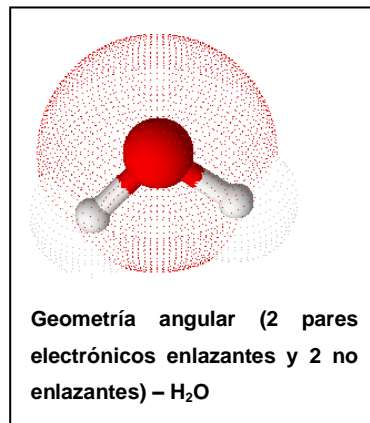
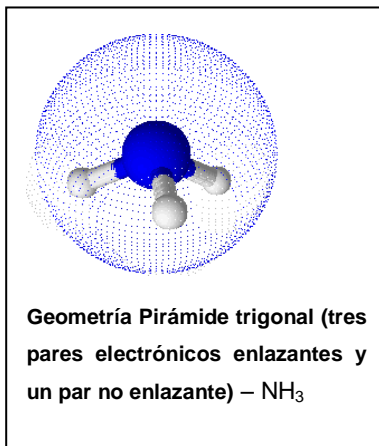
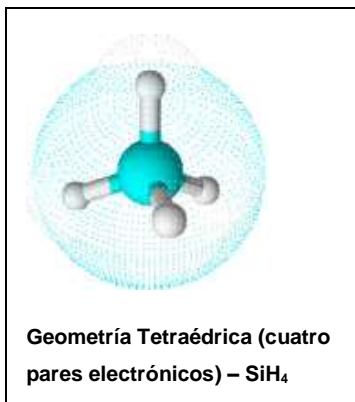
En función del número de **pares de electrones (enlazantes o no enlazantes)** en torno al átomo central, estos pares se dispondrán de la forma siguiente:

Numero de pares de electrones de valencia	Disposición de los pares electrónicos
2	Lineal
3	Trigonal plana
4	Tetraédrica
5	Bipirámide trigonal
6	Octaedro



No obstante, si las moléculas presentan pares libres, lo cual sucede principalmente (al menos en los ejemplos que consideraremos) en moléculas cuyo átomo central tiene 4 pares electrónicos, la disposición no coincide con la geometría molecular final. Así, el **amoníaco**, NH_3 , en el cual el nitrógeno tiene 4 pares de electrones de valencia, uno no enlazante y tres enlazantes, tendrá **geometría de pirámide trigonal**, a pesar de que los pares electrónicos se dispondrán de forma tetraédrica por ser 4; del mismo modo, en el caso del **agua**, el oxígeno tendrá en torno a sí 4 pares electrónicos, 2 enlazantes y 2 no enlazantes, que se dispondrán tetraédricamente, pero la **geometría final de la molécula de agua será angular**. Así, en la siguiente tabla se puede ver la geometría correspondiente para algunas moléculas con 4 pares electrónicos en torno al átomo central, en función de la relación existente entre **pares enlazantes** y **pares no enlazantes**:

Pares enlazantes y no enlazantes	Geometría	Moléculas de ejemplo
4 pares enlazantes	Tetraédrica	CH_4 ; SiH_4
3 pares enlazantes + 1 par no enlazante	Pirámide trigonal	NH_3 ; PH_3
2 pares enlazantes + 2 pares no enlazantes	Angular	H_2O ; H_2S



Ejercicio 12:

Geometría de algunas moléculas por RPECV e hibridación

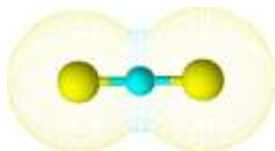
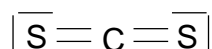
“Representa la estructura de Lewis de CS_2 , CHCl_3 , OCl_2 y PH_3 y su geometría por RPECV:

- ¿Qué moléculas serán polares?
- ¿Qué hibridación presentarán los átomos centrales de las moléculas CHCl_3 y PH_3 ?

Molécula de Sulfuro de carbono (CS_2):

$$1.- \begin{cases} \text{C: } 4e^- \times 1 \text{ átomo} = 4 \\ \text{S: } 6e^- \times 2 \text{ átomos} = 12 \end{cases} \{16\} \quad 2.- \begin{cases} \text{C: } 8 \text{ electrones} \times 1 \text{ atm} = 8 \\ \text{S: } 8 \text{ electrones} \times 2 \text{ atm} = 16 \end{cases} \{24\}$$

$$3.- 24 - 16 = 8 e^- \text{ apareados (4 pares);} \quad 4.- 16 - 8 = 8 e^- \text{ no apareados (4 pares)}$$

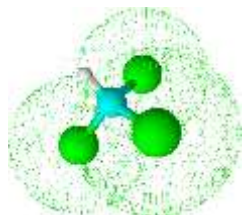
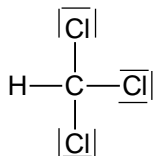


ángulo 180° ; $\vec{\mu} = 0$
Molécula Apolar
Geometría Lineal

Molécula de Tricloruro de metano (CHCl_3):

$$1.- \begin{cases} \text{C: } 4e^- \times 1 \text{ átomo} = 4 \\ \text{Cl: } 7 \times 3 \text{ átomos} = 21 \\ \text{H: } 1e^- \times 1 \text{ átomo} = 1 \end{cases} \{26\} \quad 2.- \begin{cases} \text{C: } 8 \text{ electrones} \times 1 \text{ atm} = 8 \\ \text{Cl: } 8 \text{ electrones} \times 3 \text{ atm} = 24 \\ \text{H: } 2 \text{ electrones} \times 1 \text{ atm} = 2 \end{cases} \{34\}$$

$$3.- 34 - 26 = 8 e^- \text{ apareados (4 pares);} \quad 4.- 26 - 8 = 18 e^- \text{ no apareados (9 pares)}$$

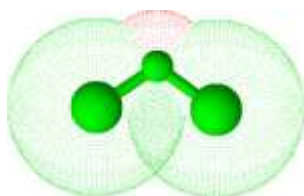
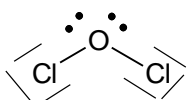


Ángulos de $109,5^\circ$
Molécula polar
Geometría Tetraédrica
Hibridación sp^3

Molécula de Anhídrido hipocloroso (OCl_2):

$$1.- \begin{cases} \text{O}: 6e^- \times 1 \text{ atm} = 6 \\ \text{Cl}: 7e^- \times 2 \text{ atms} = 14 \end{cases} \{20\} \quad 2.- \begin{cases} \text{O}: 8e^- \times 1 \text{ atm} = 8 \\ \text{Cl}: 8e^- \times 2 \text{ atms} = 16 \end{cases} \{24\}$$

$$3.- 24 - 20 = 4 e^- \text{ apareados (2 pares); } \quad 4.- 20 - 4 = 16 e^- \text{ no apareados (8 pares)}$$

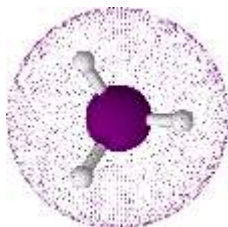
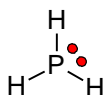


Ángulos de $107,5^\circ$
Molécula Polar
Geometría Angular

Molécula de Fosfina (PH_3):

$$1.- \begin{cases} \text{P}: 5e^- \times 1 \text{ atm} = 5 \\ \text{H}: 1 \times 3 \text{ atms} = 3 \end{cases} \{8\} \quad 2.- \begin{cases} \text{P}: 8e^- \times 1 \text{ atm} = 8 \\ \text{H}: 2 \times 3 \text{ atms} = 6 \end{cases} \{14\}$$

$$3.- 14 - 8 = 6 e^- \text{ apareados (3 pares); } \quad 4.- 8 - 6 = 2 e^- \text{ no apareados (1 par)}$$



Ángulos de $107,5^\circ$
Molécula Polar
Geometría Pirámide trigonal
Hibridación sp^3

10.- Modelo del Enlace de Valencia.

La **geometría molecular** y el estudio del **enlace químico** son muy importantes a la hora de comprender y describir las **propiedades macroscópicas** de los **compuestos covalentes** (puntos de fusión y ebullición, por ejemplo). Así, uno de los modelos empleados para la descripción del **enlace covalente** es el llamado

Modelo del Enlace de Valencia, el cual fue desarrollado por Heitler y London en 1927. Este modelo se basa en suponer que la formación del **enlace covalente** se da cuando dos **orbitales atómicos semiocupados**, es decir, cada uno ocupado por un único electrón, penetran entre sí y los espines electrónicos de ambos electrones se aparean. Cuando mayor es esta **interpenetración o solapamiento**, más fuerte es el **enlace covalente** formado.

El solapamiento se puede dar de dos formas: **solapamiento frontal** o **solapamiento lateral**. Si el **solapamiento de los orbitales atómicos** es frontal, tendremos un **enlace de tipo sigma**, correspondiente a un enlace simple; si el **solapamiento es lateral**, tendremos un **enlace de tipo pi**, correspondiente a un enlace doble o triple.

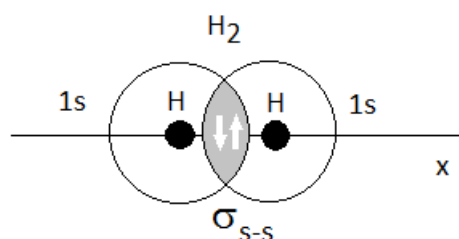
10.1.- Enlace sigma

En este enlace el **solapamiento es frontal**, es decir, los **orbitales atómicos** se hallan situados sobre el mismo eje del enlace. Se da entre dos orbitales s, dos orbitales p, un orbital s y un p o también entre orbitales híbridos (sp, sp², sp³). Puesto que el solapamiento de los dos orbitales es grande (gran interpenetración) los **enlaces de tipo sigma** son enlaces fuertes que desprenden mucha energía al formarse y, por tanto, requieren mucha energía para romperse.

Veamos algunos ejemplos de solapamiento orbital:

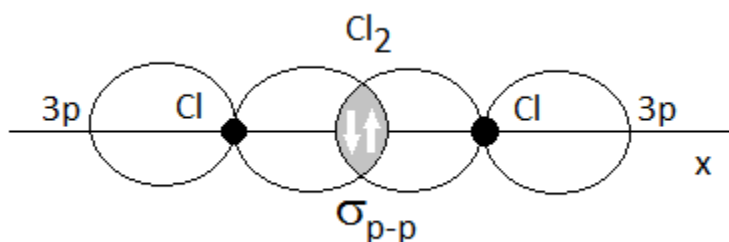
Enlace sigma en la molécula de H₂, solapamiento frontal de dos orbitales s

Aquí vemos el modelo del enlace de valencia para la molécula de hidrógeno, H₂. Se puede observar que se forma un enlace simple sigma, de solapamiento frontal (ambos orbitales atómicos sobre el eje x) entre los dos orbitales atómicos 1s de cada uno de los átomos de hidrógeno. Los electrones del enlace se aparean.



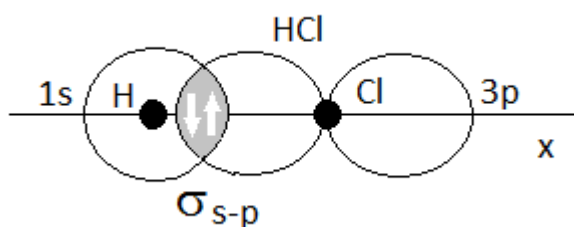
Enlace sigma en la molécula de Cl_2 , solapamiento frontal de dos orbitales p

Aquí vemos el modelo del enlace de valencia para la molécula de cloro, Cl_2 . El solapamiento se da de forma frontal entre los dos orbitales 3p de cada átomo de cloro, ambos con un electrón desapareado capaz de formar enlace covalente. Como se trata de un solapamiento frontal, sobre el mismo eje del enlace, es un enlace simple de tipo sigma entre dos orbitales p.



Enlace sigma en la molécula de HCl, solapamiento frontal de un orbital s y un p

Aquí vemos el modelo del enlace de valencia para la molécula de cloruro de hidrógeno, HCl. Se puede observar que se produce el solapamiento frontal (en el eje x, mismo eje del enlace) de dos orbitales semicupados, con un único electrón, el 1s del hidrógeno y el 3p del cloro. La realidad es que el orbital 3p del cloro es de mucho mayor tamaño que el 1s, pero se ha representado así por razones de simplificación. El enlace formado es un enlace simple de tipo sigma s-p.



Enlace pi

En el **enlace de tipo pi** se produce un **solapamiento lateral de dos orbitales p semiocupados** (siempre p-p, es la única posibilidad en este caso) que se hallan en ejes paralelos entre sí y perpendiculares al eje del enlace. Para que se pueda dar un enlace pi debe haber previamente un enlace sigma, simple, entre los dos átomos que se enlazan. La interpenetración o solapamiento de los dos orbitales atómicos es menor que en el caso del solapamiento frontal, motivo por el cual el enlace pi es más débil y fácil de romper. Veremos en la explicación dos moléculas, una con enlace doble (1 sigma y 1 pi), la molécula de O₂, y otra con enlace triple (1 sigma y 2 pi), de N₂.

11.- Introducción a la Hibridación de Orbitales Atómicos

La **Hibridación de orbitales atómicos** fue postulada por Pauling en el 1931 para poder explicar la geometría experimental determinada para algunas moléculas. Considera que los **orbitales atómicos** se pueden **combinar** entre ellos para dar lugar a unos orbitales resultado de dicha combinación (“mezclas”) que llamamos **orbitales híbridos**. Se obtienen tantos **orbitales híbridos** como **orbitales atómicos** se combinen (si se combinan 3 **orbitales atómicos**, se obtienen 3 **orbitales híbridos**).

Cabe destacar que el átomo que se hibrida es el átomo central. Los otros átomos enlazados a éste se enlazarán, generalmente, con su orbital atómico correspondiente sin hibridar, salvo en el caso de los enlaces carbono-carbono.

Así, en función de los **orbitales atómicos** que se combinen, tendremos distintos **tipos de hibridación** que vamos a continuación:

11.1.- Hibridación sp

Combinación de un orbital s y de un orbital p para dar dos orbitales híbridos que reciben el nombre de “**híbridos sp** ” y se disponen de forma lineal. Dentro de la misma vamos a estudiar dos casos:

- **Hibridación sp con enlaces simples.** Veremos la geometría de la molécula de cloruro de berilio, $BeCl_2$.
- **Hibridación sp con enlaces triples carbono-carbono:** el caso de los alquinos, hidrocarburos con triples enlaces; en concreto vamos a ver la geometría de la molécula de etino.

11.2.- Hibridación sp^2

Combinación de un orbital s y de 2 orbitales p para dar tres orbitales híbridos que reciben el nombre de “**híbridos sp^2** ” y se disponen de forma trigonal plana.

- **Hibridación sp^2 con enlaces simples.** BF_3 .
- **Hibridación sp^2 con enlaces dobles carbono-carbono:** el caso de los alquenos, hidrocarburos con dobles enlaces; en concreto, vamos a ver la geometría de la molécula de eteno.

11.3.- Hibridación sp^3

Combinación de un orbital s y de 3 orbitales p para dar cuatro orbitales híbridos que reciben el nombre de “**híbridos sp^3** ” y se disponen de forma tetraédrica. Los compuestos cuyo átomo central presenta hibridación sp^3 central sólo pueden formar enlaces simples dado que no tiene orbitales p libres que puedan formar un enlace π de solapamiento lateral. Así, sólo vamos a ver un tipo de esta hibridación:

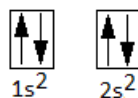
- **Hibridación sp^3 (siempre enlaces simples):** el caso de los alcanos, hidrocarburos con enlaces simples carbono-carbono, como el metano, CH_4 (un único carbono) o el etano, CH_3-CH_3 , y otras moléculas corrientes como el agua o el amoníaco.

12.- Hibridación sp sin enlaces múltiples: Ejemplo del $BeCl_2$

Hemos predicho a partir del **Modelo de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, RPECV**, que **la molécula de cloruro de berilio es lineal**, es decir, los dos enlaces berilio-cloro forman un ángulo de 180° .



Experimentalmente se sabe, en efecto, que su **geometría es lineal**, así como que los dos enlaces berilio-cloro son idénticos. Sin embargo, si consideramos la configuración electrónica del berilio, que tiene un número atómico 4 ($Z = 4$):

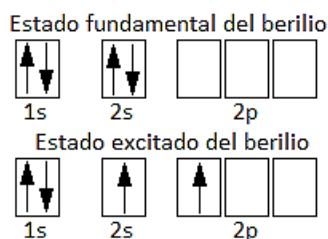


Configuración electrónica del Be ($Z = 4$)

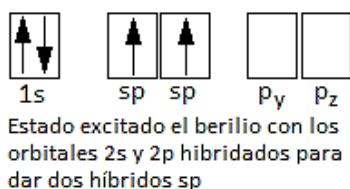
Vemos que no tiene electrones desapareados, pues su capa de valencia, $n=2$, está formada por un orbital $2s$ que está completo. Así pues, cabe preguntarse: ¿cómo es posible que el berilio forme dos **enlaces covalentes** si, según el **Modelo del enlace de valencia (MEV)**, los orbitales que forman **enlace covalente** deben estar semiocupados? Para justificar esto se acepta que **un electrón del orbital $2s$ promociona** a un orbital $2p$ vacío, que es relativamente accesible. Este hecho se justifica porque, aunque hay que aportar energía para que se produzca esta promoción, este aporte energético es compensado por la

formación posterior de dos **enlaces covalentes**, en cuya formación se desprende mayor cantidad de energía.

Por tanto, el berilio pasa de un **estado fundamental** a un **estado excitado**:

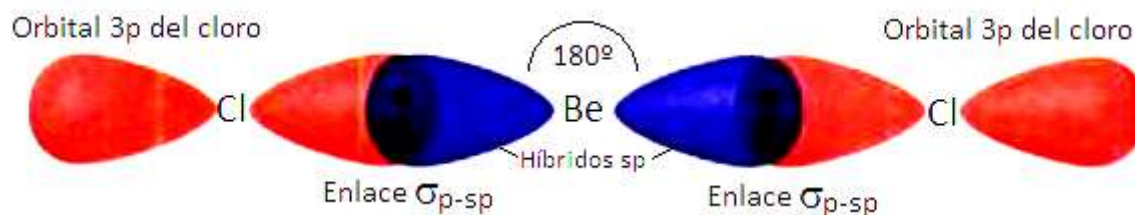


Esto explicaría que se formen dos **enlaces covalentes**, pero no que sean idénticos. Si los **orbitales atómicos** que se enlazan ahora son el 2s y el 2p con los orbitales p del cloro, estos enlaces serán distintos. Por ello, Pauling propuso el concepto de **Hibridación de orbitales atómicos**. El orbital 2s y el orbital 2p del berilio se hibridan (se mezclan) para dar dos orbitales iguales que llamamos **híbridos sp**. Los 2 **híbridos sp** son **equivalentes en forma y energía**, y tienen propiedades intermedias entre un orbital s y un orbital p (50% de contribución de cada uno de ellos). Una vez producida la **hibridación**, podemos escribir la configuración del berilio como:



Una vez que se han hibridado los orbitales 2s y 2p para dar dos **híbridos sp**, estos se colocarán lo más separados posible para minimizar la repulsión entre ellos, es decir, 180°, disposición lineal (como se sabe experimentalmente que es el cloruro de berilio). Cada uno de estos **híbridos** tendrá ahora un electrón desapareado con el cual se podrá solapar con un orbital p del cloro. Este **solapamiento** es **frontal** (en el mismo eje del enlace) por lo que se trata de un

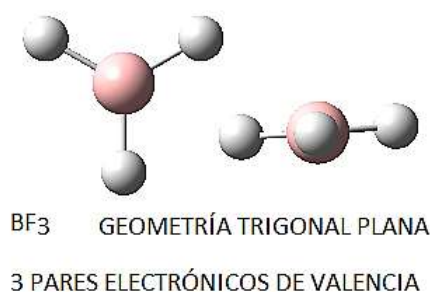
enlace simple de tipo sigma (σ), fuerte por la elevada interpenetración. El diagrama para dicha molécula será:



13.- Hibridación sp^2 con enlaces simples: BF_3

Para el caso de la **hibridación sp^2** sin formación de enlaces múltiples, vamos a considerar como ejemplo la molécula de **Trifluoruro de boro, BF_3** (gas incoloro tóxico). La explicación de la hibridación sp^2 para esta molécula es también aplicable a moléculas análogas, como el Trihidruro de boro, **BH_3 (borano)**, compuesto de existencia muy fugaz por su alta reactividad) o el **Tricloruro de boro, BCl_3** .

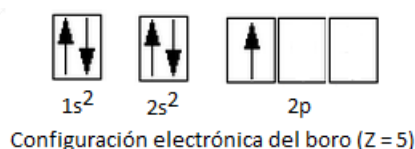
Ya hemos predicho a partir del **Modelo de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, RPECV**, que el **BF_3** tiene una **geometría trigonal plana**, es decir, que los 3 enlaces B-F se hallan en el mismo plano, formando entre sí ángulos de 120° . Esta **geometría molecular** para el **Trifluoruro de boro** coincide con la determinada experimentalmente. Además, según estos datos experimentales, se sabe que los tres enlaces B-F son idénticos (distancia de enlace, energía de enlace).



Por tanto, aunque se puede predecir de forma sencilla la **geometría molecular** a partir del modelo **RPECV**, un estudio más profundo del enlace químico requiere considerar la promoción de un electrón así como la hibridación de orbitales atómicos.

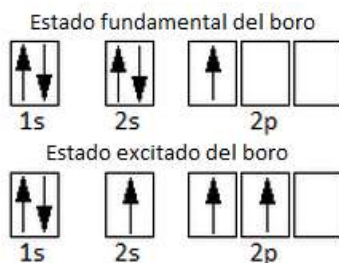
Veamos por qué.

En primer lugar, consideremos la **configuración electrónica del boro**, que tiene un número atómico $Z = 5$, es decir, 5 electrones. Así:



Como vemos, el boro tiene únicamente un electrón desapareado en el orbital 2p. Según esto, únicamente podría formar un **enlace covalente**, ya que el **Modelo del Enlace de Valencia** establece que los orbitales atómicos deben estar semillenos (un único electrón) para poder solapar con los orbitales atómicos de los otros átomos y formar el enlace covalente.

Para explicar por qué el boro forma tres enlaces covalentes, debemos admitir la **promoción de un electrón desde el orbital 2s a un orbital 2p vacío**; pasará, por tanto, de un **estado fundamental** a un **estado excitado**, según vemos:



Aunque esta **promoción del electrón** desde el orbital 2s a un 2p vacío requiere un aporte de energía adicional, se verá compensado por la posterior formación de

3 enlaces boro-flúor en lugar de un único enlace, que es el que podría formar el boro en estado fundamental.

Una vez considerada la **promoción del electrón**, podemos justificar la formación de 3 enlaces, pero no el hecho de que estos sean exactamente iguales. No obstante, es un hecho experimental que los 3 **enlaces covalentes boro-flúor** son idénticos. Para justificar esto, se recurre al concepto de **hibridación de orbitales atómicos**. Así, los tres orbitales atómicos semiocupados, el s y los 2 orbitales p, se hibridan o combinan entre sí para dar 3 **orbitales híbridos sp^2** , equivalentes entre sí en forma y en energía.



Estado excitado del boro con los orbitales 2s y los 2 orbitales px y pz hibridados para dar 3 híbridos sp^2

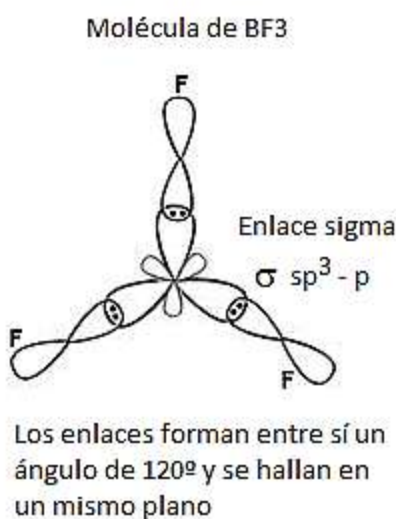
Cada **híbrido Sp^2** tendrá un electrón desapareado con el que podrá formar un **enlace covalente** por solapamiento con un orbital p del flúor. Los 3 **híbridos sp^2** se dirigen siempre a los vértices de un hipotético triángulo equilátero. Se hallen en un mismo plano, formando entre ellos un **ángulo de 120°** .

La forma aproximada de un **orbital híbrido sp^2** será de dos lóbulos desiguales:



Puesto que un **orbital híbrido sp^2** tendrá una contribución de 1/3 de orbital s, decimos que tiene un 33% de carácter s, y una contribución de 2/3 de orbitales p, decimos que tiene un 66% de carácter p.

Finalmente, el lóbulo mayor de cada **híbrido sp^2** solapa frontalmente (en el mismo eje del enlace, se trata, por tanto, de un **enlace simple de tipo sigma, σ**) con el orbital 2p semilleno de un átomo de flúor, dando lugar a un **enlace σ (sp^2-p)**.



14.- Hibridación sp^3 en el Metano y el Etano

Para explicar la **hibridación sp^3** tomaremos como ejemplo diversas moléculas; en este primer vídeo nos centraremos, en concreto, en la **hibridación sp^3 del átomo de carbono** en los alcanos sencillos como **metano** (CH_4) y **etano** (CH_3CH_3).

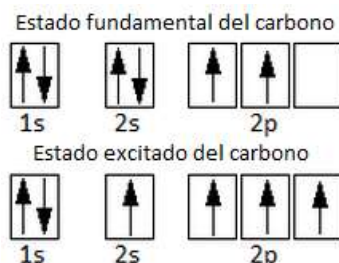
14.1.- Hibridación sp^3 para la molécula de metano, CH_4

Según datos experimentales, la **molécula de metano**, CH_4 , es **apolar** y presenta **geometría tetraédrica** (ángulos de $109,5^\circ$), formando 4 enlaces C-H que son idénticos entre sí. Ya hemos predicho, además, dicha geometría mediante el **Modelo de Repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia, RPECV**, pero si estudiamos el enlace en mayor profundidad, para explicar que los cuatro enlaces C-H sean idénticos, debemos recurrir a la **hibridación de orbitales atómicos**.

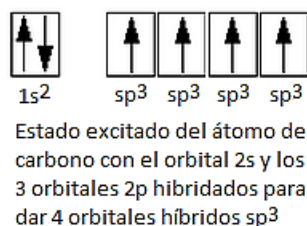
Consideremos en primer lugar la **configuración electrónica del carbono**:



Según esta configuración, el compuesto que el C y el H deberían formar sería de estequiometría CH_2 y no CH_4 , ya que el carbono únicamente presenta dos orbitales semiocupados que pueden formar enlace covalente. Como en el caso de la hibridación sp del cloruro de berilio, $BeCl_2$, y de la hibridación sp^2 del Trifluoruro de boro, BF_3 , se acepta que un electrón del orbital $2s$ promociona al orbital $2p$ vacío. Es decir, el átomo de carbono pasa de un **estado fundamental** a un **estado excitado**, ya que el salto electrónico requiere un aporte de energía:

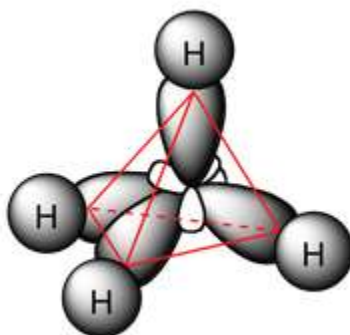


En **estado excitado** el carbono podrá formar 4 enlaces C-H, pues ya tiene 4 electrones desapareados. Sin embargo, estos 4 enlaces no serían equivalentes, porque estarían formados por orbitales distintos (1 orbital s y 3 orbitales p , y los 3 enlaces p forman entre sí un ángulo de 90° , son perpendiculares). Los 4 orbitales atómicos se hibridan (se combinan) para dar 4 **orbitales híbridos sp^3** .



Se les llama **híbridos sp^3** porque proceden de la combinación de 1 orbital s y 3 orbitales p, por lo que tienen un 25% de contribución o de carácter de orbital s y un 75% de contribución o carácter de orbital p. Los 4 híbridos sp^3 son equivalentes en forma y en energía, y se dirigen a los vértices de un hipotético tetraedro. Ahora estos 4 híbridos sp^3 pueden solapar cada uno de ellos con el orbital 1s del átomo de hidrógeno, para dar los 4 enlaces sigma (σ) simples (solapamiento frontal). El ángulo de enlace del tetraedro es, en efecto, $109,5^\circ$, tal y como se determina de forma experimental para el carbono.

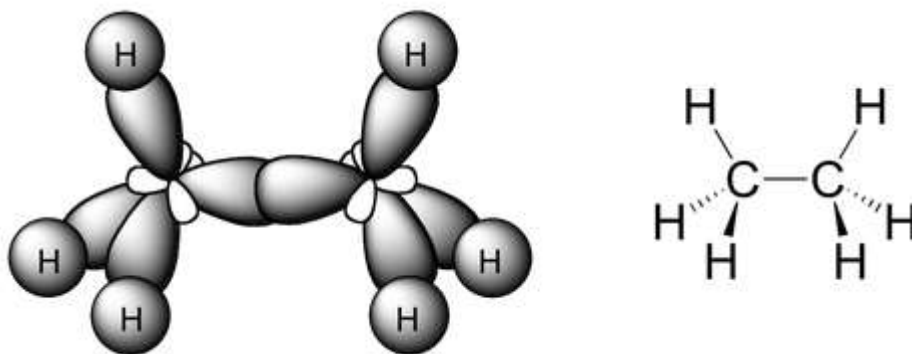
La **geometría de la molécula de metano** la podemos dibujar, por tanto:



Molécula de metano procedente de <http://chemwiki.ucdavis.edu>

14.2.- Hibridación sp^3 para la molécula de etano, CH_3CH_3

En el caso de la molécula de etano, cada uno de los átomos de carbono presentará una **hibridación sp^3** y, como tal, los 4 **híbridos sp^3** formados se dirigirán hacia los vértices de un tetraedro. Por tanto, ambos átomos de carbono tendrán **geometría tetraédrica**, y se enlazarán entre sí con un enlace simple de tipo sigma, σ , que surge del solapamiento frontal entre dos orbitales sp^3 . Los restantes orbitales, 3 para cada carbono, forman enlace frontal sigma con los orbitales 1s de los hidrógeno. Así, la geometría del etano se puede representar como:



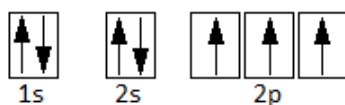
Molécula de etano procedente de <http://chemwiki.ucdavis.edu>

15.- Hibridación SP^3 del Nitrógeno en el Amoníaco.

Aunque hemos visto como ejemplo de **hibridación sp^3** la **molécula de metano y la de etano**, en las cuales los 4 orbitales híbridos formaban enlace químico, no siempre es así. Un orbital híbrido también puede albergar pares libres, como ocurre con la molécula de amoníaco o con la molécula de agua; esto se debe a que también se pueden hibridar orbitales que se hallan totalmente ocupados.

Veamos el caso del **amoníaco**.

La **configuración electrónica del nitrógeno** es:



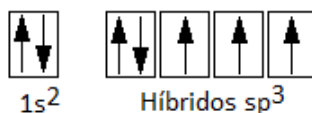
Configuración electrónica del nitrógeno ($Z = 7$)

Como vemos, el nitrógeno no requiere la promoción de ningún electrón para formar tres enlaces covalentes y dar la molécula de NH_3 , pues ya tiene 3 electrones desapareados. Sin embargo, si formase dichos enlaces con los orbitales p, puesto que dichos orbitales forman entre sí ángulos de 90° (cada

orbital p se halla situado sobre un eje cartesiano), los ángulos formados por los enlaces N-H también serían de 90° .

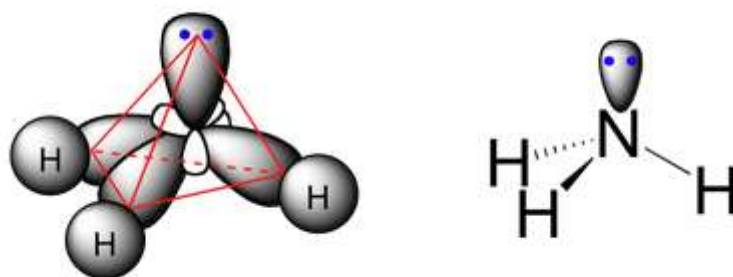
No obstante, se sabe por datos experimentales que la molécula de NH_3 tiene **geometría de pirámide trigonal** y que los ángulos entre N-H son de $107,3^\circ$, no de 90° . Es decir, presenta unos ángulos muy cercanos a los de un tetraedro regular, que son $109,5^\circ$. Esto se explica recurriendo a la **hibridación sp^3** del orbital 2s y los 3 orbitales 2p del nitrógeno, a pesar de que el orbital 2s está completo. Así, esta hibridación dará lugar a 4 **orbitales híbridos sp^3** equivalentes y dirigidos hacia los vértices de un tetraedro. Como en total tenemos cinco electrones, uno de los **híbridos sp^3** albergará un par de electrones libre, y los otros tres un electrón solitario. Serán estos **orbitales híbridos sp^3** con un único electrón los que formarán enlace covalente solapando cada uno de ellos con el orbital 1s de un átomo de hidrógeno.

Así, la geometría del amoníaco según la **hibridación sp^3** de sus orbitales será:



Configuración electrónica del nitrógeno con orbitales híbridos sp^3

Como hemos dicho, por tanto, los 4 híbridos se dirigen a los vértices de un tetraedro, lo cual no significa que la geometría de la molécula sea tetraédrica, sino que es de **pirámide trigonal** (el par de electrones libre no se tiene en cuenta a la hora de considerar la geometría molecular, únicamente los enlaces N-H). La geometría de la molécula se puede representar como:



El hecho de que el ángulo de enlace sea ligeramente menor del esperado para un tetraedro regular, de $107,3^\circ$ en lugar de $109,5^\circ$, se debe a que el par de electrones libre ejerce una mayor repulsión sobre los pares electrónicos enlazantes, cerrando un poco el ángulo. Este efecto es aún más acusado en la molécula de agua, que presenta 2 pares libres.

16.- Hibridación sp^3 del Agua.

Experimentalmente se sabe que la **molécula de agua** tiene **geometría angular**; en concreto, forma un ángulo de $104,5^\circ$. Aunque esta geometría la hemos predicho también de forma sencilla mediante el **Modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia, RPECV**, para que la geometría sea consistente con el enlace químico que presenta debemos profundizar un poco más y recurrir a la hibridación.

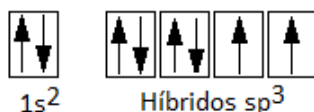
La **configuración electrónica del oxígeno** es:



Configuración electrónica del oxígeno ($Z = 8$)

Así, vemos que no es necesario, como ocurría en el caso del átomo de carbono, la promoción de un electrón, pues el oxígeno ya presenta dos electrones desapareados con los que puede formar enlace covalente.

No obstante, si formase enlace con los dos orbitales p, que forman entre sí un ángulo de 90° , la molécula de agua también formaría un enlace de 90° . Como hemos dicho, se sabe que no es así. De hecho, el ángulo de la molécula de agua, $104,5^\circ$, es un ángulo cercano al de un tetraedro regular, $109,5^\circ$, aunque levemente distorsionado. Es por este motivo que debemos recurrir a una **hibridación sp^3** en la que intervendrán, por tanto, el orbital 2s y los 3 orbitales p. Se hibridarán el orbital 2s y el 2p_x a pesar de estar completos, dando lugar a 2 **orbitales híbridos Sp^3** con un par de electrones libre y otros dos **orbitales híbridos Sp^3** con un electrón desapareado, es decir:



Configuración electrónica del oxígeno con híbridos sp^3

De esta forma, el oxígeno formará enlace covalente por solapamiento de los dos **híbridos sp^3** semillenos con los orbitales 1s de los oxígenos. Puesto que se tratará de un solapamiento frontal, se trata de enlaces de tipo sigma, σ (sp^3-s). El ángulo no será de $109,5^\circ$ porque los pares libres o no enlazantes ejercen una repulsión mayor sobre los pares enlazantes y distorsionan este ángulo levemente. La **geometría del agua según la hibridación sp^3** se puede representar como:

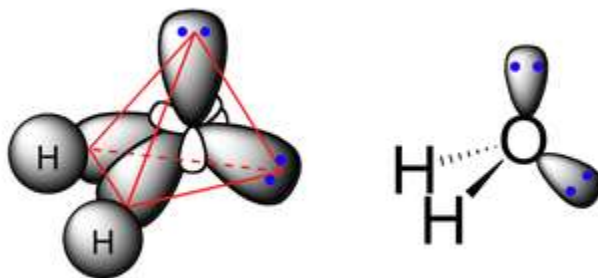
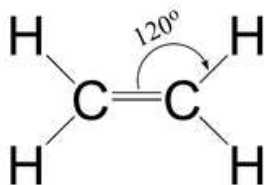


Imagen procedente de <http://chemwiki.ucdavis.edu/>

17.- Hibridación sp^2 con enlaces dobles Carbono-Carbono: Eteno

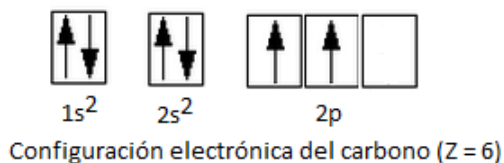
Según datos experimentales, se sabe que la **molécula de eteno** (o etileno) es totalmente plana y que sus enlaces forman ángulos de 120° . Además, la molécula presenta un **enlace doble carbono-carbono**, siendo el ejemplo más sencillo de los hidrocarburos lineales conocidos como alquenos. Su estructura de Lewis se puede representar como:



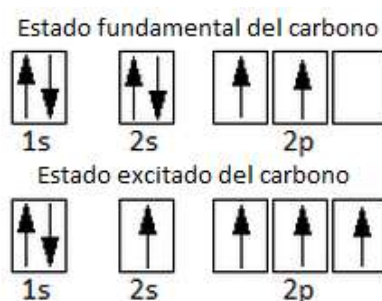
Como vimos para el caso de la molécula de oxígeno en la explicación del **Modelo del Enlace de Valencia**, un doble enlace se formará por dos tipos de enlaces: por una parte, un **enlace de tipo sigma, σ** , que corresponde a un solapamiento frontal de dos orbitales atómicos que pueden ser iguales o distintos (orbitales s, p, híbridos...); por otra parte, un **enlace de tipo pi, π** , que corresponde al solapamiento lateral de 2 orbitales atómicos de tipo p (siempre de tipo p, sin hibridar ni modificar).

Esto implica que para que un átomo de carbono pueda formar un doble enlace con otro átomo de carbono, tiene que presentar, necesariamente, un orbital p puro, sin hibridar. Es por este motivo que la hibridación de un carbono con enlace doble no es sp^3 , como en el caso del carbono con enlace simple, sino **hibridación sp^2** (se hibrida el orbital 2s y 2 de los orbitales p, y el tercer orbital p queda sin hibridar).

Consideremos primeramente la **configuración electrónica del carbono**:



Como vemos y ya hemos estudiado para el caso de la **hibridación sp^3 del metano y el etano**, esta configuración electrónica sólo presenta 2 electrones desapareados, motivo por el cual sólo permitiría la formación de 2 enlaces covalentes. No obstante, el carbono forma 4 enlaces covalentes. Por ello, aceptamos que un electrón del orbital 2s promociona la orbital 2p vacío, pasando por tanto a un estado excitado con 4 electrones desapareados. El aumento energético requerido para esta promoción electrónica se verá compensado por la formación posterior de 4 enlaces en lugar de 2.



Ahora, considerando que la molécula de eteno es plana y forma ángulos de 120° , esto es congruente con la **hibridación sp^2** . Recordemos que en efecto la **hibridación sp^2 de la molécula de BF_3** , que en efecto tiene ángulos de 120° y enlaces en un mismo plano. Como hemos dicho, para formar doble enlace el carbono necesita tener un orbital p sin hibridar. Por esto, se hibridarán el orbital 2s y 2 de los orbitales p:



Los tres **orbitales híbridos sp^2** se dirigen hacia los vértices de un triángulo equilátero hipotético, mientras que el orbital p sin hibridar queda perpendicular al plano de los híbridos, con un lóbulo por encima y otro por debajo del plano de los

mismos. Esta hibridación la presentarán ambos carbonos que forman el enlace doble del eteno y explica por qué la geometría de la molécula es plana.

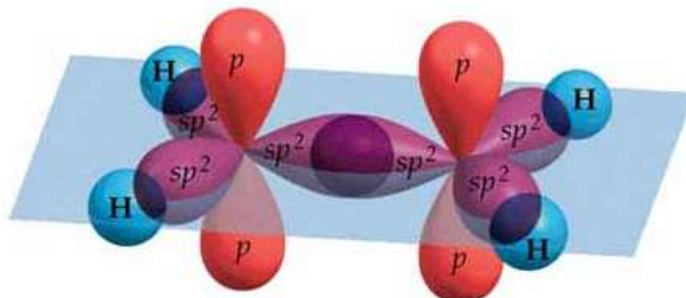
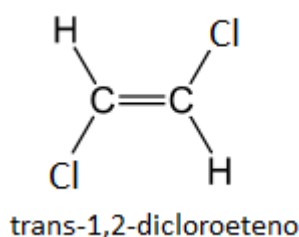
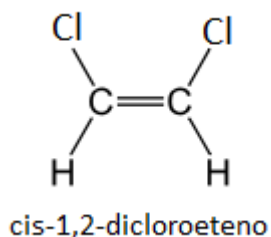


Imagen procedente de <http://wps.prenhall.com>

Asimismo, cabe destacar que como ahora los enlaces que unen a los dos carbonos son 2, un enlace de tipo sigma, σ , y un enlace de tipo pi, π , estarán más estrechamente unidos que en el caso del enlace simple y se hallarán más cercanos entre sí. Mientras que la distancia de un enlace simple carbono-carbono es de 0,154 nm, en un enlace doble carbono-carbono es de 0,134 nm.

Además, mientras que un enlace simple carbono-carbono tiene una cierta libertad de rotación sobre sí mismo (en el eje que une ambos carbonos), no sucede así con el enlace doble. **El enlace doble es rígido**, porque los orbitales p solapan lateralmente, con un ángulo muy preciso. Si rotase, se rompería el enlace π porque los orbitales p dejarían de solapar. Esta rigidez hace también que si hay un sustituyente distinto del hidrógeno en cada carbono, por ejemplo en el caso del 1,2-dicloroeteno, las propiedades de la molécula varíen según la posición de dichos sustituyentes, dando lugar a los llamados **isómeros geométricos**.



Esto se diferencia con los prefijos *cis* y *trans*. Si los dos sustituyentes están en el mismo lado del doble enlace, recibe el nombre de *cis*, y si están en lados opuestos, de *trans*.

18.- Hibridación *sp* con enlaces triples Carbono-Carbono: Etino

El **etino** o **acetileno** es el alquino (hidrocarburos con triple enlace carbono-carbono) más sencillo. Su estructura de Lewis es:



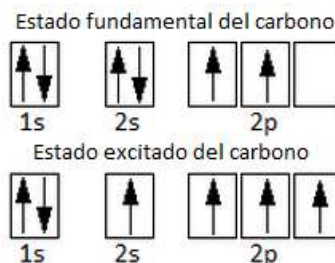
Se sabe experimentalmente que es una molécula lineal.

Del mismo modo que vimos en el **Modelo del Enlace de Valencia** para la molécula de nitrógeno, N_2 , la existencia de un **triple enlace** implica un enlace de solapamiento frontal, de tipo sigma, σ , y dos enlaces de solapamiento lateral, de tipo pi, π . Es decir, el enlace triple carbono-carbono estará formado por:

- Un **enlace de tipo σ** entre un orbital híbrido *sp* de un carbono y un orbital híbrido *sp* del otro carbono, con solapamiento frontal.
- Dos **enlaces de tipo π** entre los orbitales *py* y *pz* de cada uno de los carbonos, con solapamiento lateral.

Por tanto, para poder formar dos enlaces π , cada átomo de carbono del **etino** requerirá 2 orbitales atómicos *p* sin hibridar, que puedan formar enlace múltiple. Es por este motivo que los carbonos que presentan triple enlace tendrán 2 orbitales *p* que no se modifican, y sólo se hibridarán, por tanto, el orbital 2*s* y uno de los orbitales 2*p*. Así, el etino y todos los compuestos con triple enlace carbono-carbono, tendrán **hibridación *sp*, lineal**.

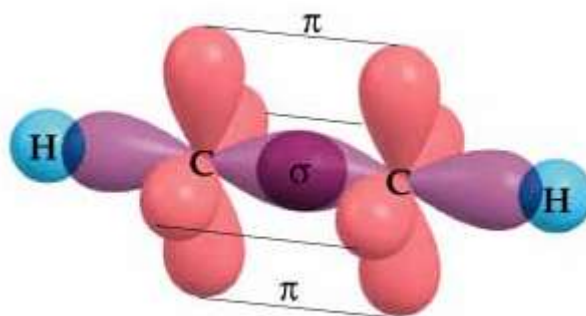
Recordemos primero que, para que el carbono forme 4 enlaces covalentes, debe hallarse en estado excitado. Un electrón del orbital 2*s* de la configuración electrónica del estado fundamental debe promocionar al orbital 2*p* vacío:



Ahora, como hemos dicho, únicamente se hibridan el orbital 2s y el 2p, porque deben quedar 2 orbitales p puros, con los que formar el enlace múltiple:



Los **orbitales híbridos sp** se disponen de forma **lineal**, formando 180° entre sí. Los orbitales p sin hibridar quedan perpendiculares a los ejes de los híbridos. Así, la **geometría del etino** se podrá dibujar como:

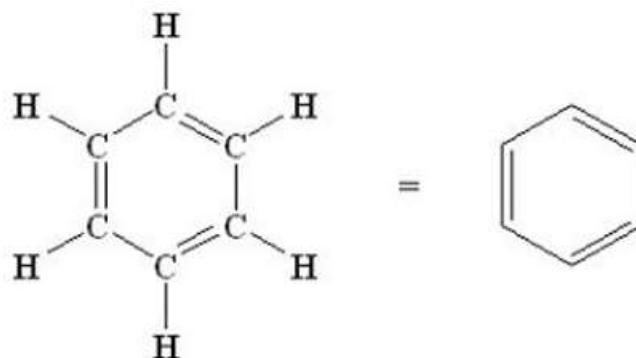


El enlace triple es aún más fuerte que el enlace doble, y la distancia C-C es menor. Así, la longitud del enlace simple C-C es de 0,154 nm, la del doble, 0,134 nm y la del triple, 0,120 nm.

Si bien el enlace triple, como el doble, es rígido, como únicamente tiene 1 sustituyente cada carbono no da lugar a isomería geométrica.

19.- Hibridación sp^2 con enlaces π deslocalizados: Benceno.

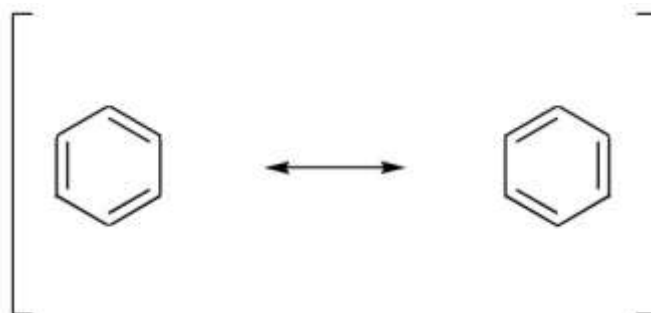
La molécula de **benceno**, de fórmula C_6H_6 , es una molécula cíclica plana cuya **estructura de Lewis** se puede representar como:



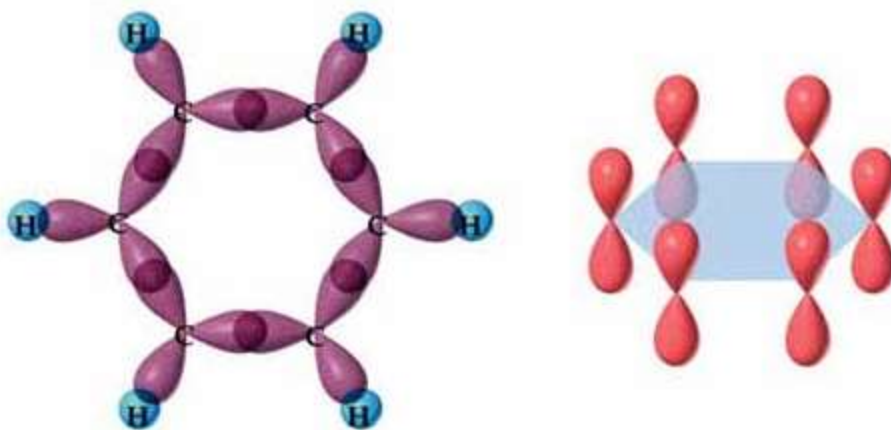
Como vemos, según esta representación, tendría 3 enlaces dobles carbono-carbono y tres enlaces simples. No obstante, experimentalmente se sabe que, en efecto, la molécula de **benceno** es plana, los ángulos son de 120° y los 6 enlaces carbono-carbono son idénticos y presentan propiedades intermedias entre un enlace doble y un enlace simple, siendo la distancia de enlace de 0,142 nm (la de un enlace simple es de 0,152 nm y la de un enlace doble de 0,134 nm). Por este motivo, el **benceno** se suele representar como:



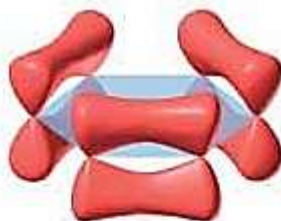
Omitiendo, además, los átomos de hidrógeno. Esto indica que es un **híbrido de resonancia**, una “mezcla” entre dos estructuras posibles:



El **benceno** presenta unas características propias distintas a los alcanos y alquenos, y que recibe el nombre de **carácter aromático** o **aromaticidad**. El hecho de que la molécula sea plana, los ángulos de 120° y todos los enlaces iguales, se puede justificar considerando una **hibridación sp^2** de los 6 átomos de carbono, pero con **enlaces π deslocalizados**. Es decir:



Como se puede observar, cada átomo de carbono tiene 3 **orbitales híbridos sp^2** colocados en un plano y dirigidos a los vértices de un triángulo equilátero, y un orbital p sin hibridar, semi-ocupado, perpendicular al plano de los híbridos. En total la molécula tiene 6 orbitales p que solaparán entre sí lateralmente, formando un sistema de enlaces π deslocalizados, es decir, la densidad electrónica se distribuye de forma simétrica por encima y por debajo del plano:



(a) Localized π bonds



(b) Localized π bonds



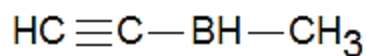
(c) Delocalized π bonds

En la imagen de pueden ver lo que serían los enlaces localizados, tal y como se podía plantear en las dos estructuras resonantes del benceno, y la realidad, en la que se trata de 6 enlaces intermedios simple-doble, los llamados **enlaces pi deslocalizados**.

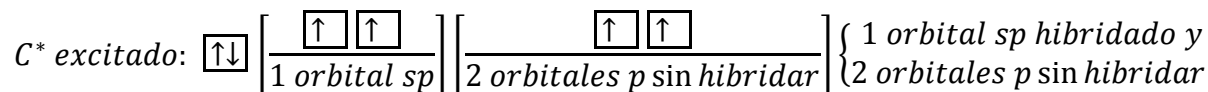
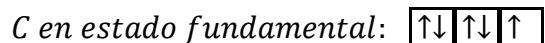
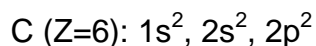
Ejercicio 13

Tipo de hibridación de los átomos de una molécula orgánica

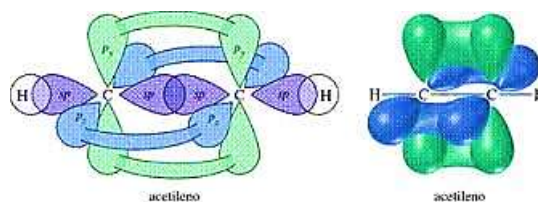
Indicar el tipo de hibridación de los átomos de la molécula siguiente, sabiendo que el número atómico del carbono es 6 y el del boro 5:



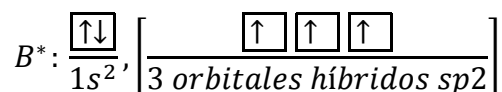
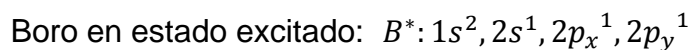
Veamos la distribución electrónica del átomo de Carbono:



Lo que implica un enlace de solapamiento frontal, de tipo sigma, σ , y dos enlaces de solapamiento lateral, de tipo pi, π . El ángulo del enlace C-C es de 180° por lo que la Geometría resultante será LINEAL.

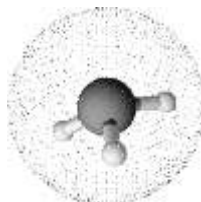


En el caso del Boro tenemos:

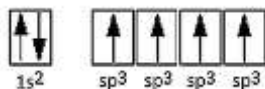


Hibridación sp^2 ; tres enlaces sigma " (σ) "

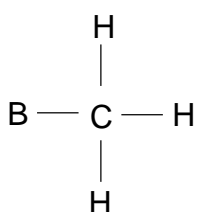
Geometría Trigonal Plana:



Finalmente,

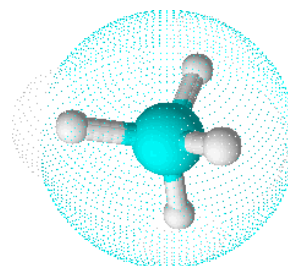


Estado excitado del átomo de carbono con el orbital $2s$ y los 3 orbitales $2p$ hibridados para dar 4 orbitales híbridos sp^3



Hibridación sp^3 , con 4 enlaces σ

Geometría Tetraédrica



Ángulos de enlace de $109,5^\circ$

Ejercicio 14:

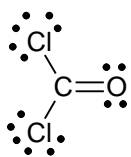
Hibridación y parámetros de enlace del fosgeno, COCl_2

El fosgeno, COCl_2 , es un gas tóxico usado en múltiples aplicaciones industriales, que también se usó como arma química en la Primera Guerra Mundial. ¿Qué hibridación presentará el átomo central y qué geometría? ¿Serán las distancias y ángulos de enlace iguales en todos los casos?

Vamos a determinar la estructura de Lewis:

$$1.- \begin{cases} \text{C}: 4e^- \times 1 \text{ atm} = 4 \\ \text{O}: 6e^- \times 1 \text{ atm} = 6 \\ \text{Cl}: 7e^- \times 2 \text{ atm} = 14 \end{cases} \{24\} \quad 2.- \begin{cases} \text{C}: 8e^- \times 1 = 8 \\ \text{O}: 8e^- \times 1 = 8 \\ \text{Cl}: 8e^- \times 2 = 16 \end{cases} \{32\}$$

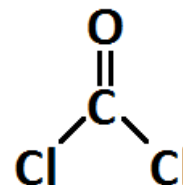
$$3.- 32 - 24 = 8 \text{ (4 pares de } e^- \text{ enlazantes); } 4.- 24 - 8 = 16 \text{ (8 pares no enlazantes)}$$



La existencia de un doble enlace nos indica la presencia de hibridación sp^2 en el átomo central y Geometría Trigonal plana

En el caso de las **distancias de enlace**, serán

distintas porque un enlace doble será más corto, en general, que un enlace simple. Además, el oxígeno es un átomo menos voluminoso que el cloro, por lo que incluso el enlace simple C-O será más corto que el enlace C-Cl, cuando más el doble enlace C=O.



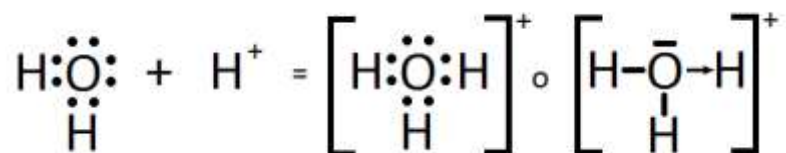
En cuanto a los **ángulos de enlace**, la densidad electrónica del doble enlace C=O es mayor que la de los enlaces C-Cl, esto hará que ejerza una mayor repulsión este enlace sobre los vecinos, por lo que dichos enlaces C-Cl se cerrarán más y este ángulo, en lugar de los 120° esperables por la hibridación sp² del carbono y la geometría plana trigonal, es de 112° (Cl-Cl).

Ejercicio 15:

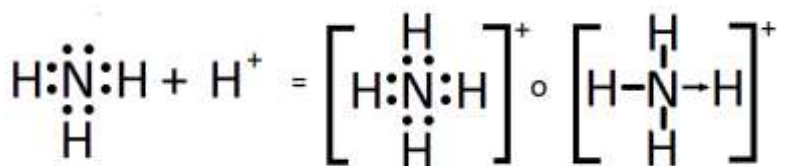
Determinación de la geometría y la hibridación del ión oxonio, H₃O⁺, y del amonio, NH₄⁺

Determinar la estructura de Lewis de los iones oxonio, H₃O⁺, y del ion amonio, NH₄⁺, así como indicar la hibridación del átomo central en cada uno de ellos y la geometría esperable.

Estructura de Lewis del ión hidronio u oxonio, H₃O⁺



Estructura de Lewis del ión amonio, NH₄⁺



Puesto que ambos iones presentan un átomo central rodeado por 4 pares electrónicos, la disposición de dichos pares será tetraédrica, y la hibridación tanto del oxígeno en el ion oxonio como del nitrógeno en el ion amonio, será hibridación tetraédrica o sp³. No obstante, puesto que el ion oxonio presenta un par de electrones libre, su geometría final no será tetraédrica, ya que el par de electrones no enlazantes no se tiene en cuenta para determinar la geometría. Así, el ión

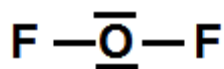
oxonio tendrá geometría de pirámide trigonal, mientras que el ion amonio tendrá geometría tetraédrica (los cuatro pares son enlazantes).

Ejercicio 16:

Hibridación y parámetros de enlace del di-fluoruro de oxígeno, F₂O

“El flúor (Z = 9) y el oxígeno (Z = 8) pueden reaccionar entre ellos en determinadas condiciones para dar el Difluoruro de oxígeno. Razonar el tipo de enlace que se dará entre ellos, la geometría de la molécula, el valor esperado del ángulo de enlace y la polaridad global.”

Puesto que la diferencia de electronegatividad entre el flúor (EN= 4,0) y el oxígeno (EN= 3,5) es pequeña, se tratará de un enlace covalente (recordemos que según la fórmula empírica determinada por Linus Pauling, un enlace tendrá más de un 50% de carácter covalente cuando su diferencia de electronegatividades sea menor de 1,7). Asimismo, veremos en la explicación cómo determinar su estructura de Lewis, que será:



Como el oxígeno será el átomo central y tendrá en torno a él 4 pares electrónicos (2 enlazantes y 2 no enlazantes) estos pares se distribuirán de forma tetraédrica (hibridación sp³), pero no se tendrán en cuenta a la hora de determinar la geometría, por lo que se tratará de una geometría angular. En cuanto al ángulo de enlace, aunque para un tetraedro sabemos que es de 109°, habrá variación del mismo por el hecho de que el oxígeno presente pares libres. Los pares libres ejercen una mayor repulsión que los enlazantes F-O, y por tanto estos se aproximarán mutuamente, dando lugar a un ángulo de enlace inferior al de 109°.

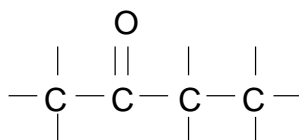
La molécula será levemente polar ya que, aunque la diferencia de electronegatividad es pequeña, la geometría angular hará que unas de las componentes de los momentos dipolares se sumen, dando lugar a un momento dipolar total distinto de cero.

Ejercicio 17:

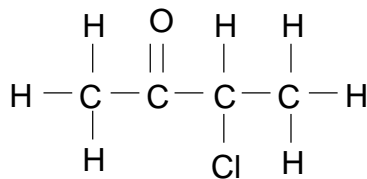
Determinar la polaridad de los enlaces de la 3-cloro-2-butanona

“Formular la molécula de 3-cloro-2-butanona (Cloro-3-butan-2-ona) e indicar los enlaces polarizados que posee, especificando la densidad de carga de cada átomo del enlace (δ^- , δ^+).”

Butanona es una cetona de cuatro átomos de carbono, luego, escribimos cuatro carbonos y ubicamos el oxígeno doblemente enlazado en posición 2:

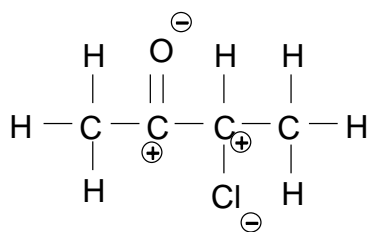


Ahora resta ubicar el sustituyente halogenado (cloro en posición 3) y completar los átomos de hidrógeno:



Los enlaces polarizados son, obviamente el enlace C=O y en enlace C-Cl.

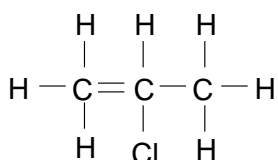
Como el oxígeno y el cloro son más electronegativos que en carbono, la polaridad negativa del dipolo se orienta hacia estos elementos:



Ejercicio 18:

Enlaces polarizados y densidad de carga del 2-cloropropeno

“Escribir la fórmula química del 2-cloropropeno indicando los enlaces polarizados con la densidad de carga de cada átomo, y un enlace pi. ¿Qué enlace, σ o π , requiere más energía para ser disociado? ¿Por qué?”



El enlace σ C-C es más fuerte y requiere más energía para su disociación que el enlace π C-C porque el solapamiento frontal hace que sea mayor la interpenetración de los orbitales y, por tanto, más difíciles de separar que el π , donde los orbitales p solapan lateralmente.

20.- Introducción al enlace metálico: modelo del mar de electrones o del gas electrónico

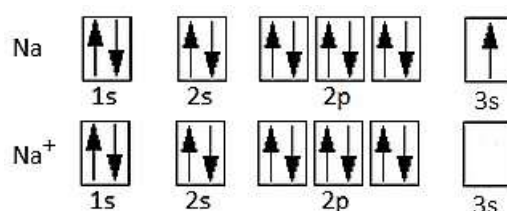
El **enlace metálico** es muy distinto a los dos tipos de enlaces que hemos visto hasta ahora: el enlace covalente y el enlace iónico. En los **compuestos metálicos** los átomos están muy próximos los unos a los otros y forman estructuras compactas. Además, presentan unas características propias, entre las que destaca la **elevada conductividad eléctrica**. Esta propiedad, la de la conductividad, requiere para ser explicada que los **electrones implicados en el enlace metálico tengan libertad y facilidad de movimiento**. Es por este motivo que, para que los metales tengan electrones móviles, requieren 2 características a nivel atómico: la primera, una **energía de ionización baja** (recordemos que la energía de ionización es la energía necesaria para arrancar un electrón de la capa de valencia) y la segunda, que posean **orbitales de valencia vacíos y accesibles** que permitan a los electrones moverse con facilidad.

Cualquier teoría sobre el enlace metálico debe dar explicación a esta libertad de movimiento electrónico y a las restantes propiedades de los metales. Estas son

dos: la llamada **teoría del gas electrónico o del mar de electrones** y la **teoría de bandas**.

20.1- Teoría del gas electrónico para el enlace metálico

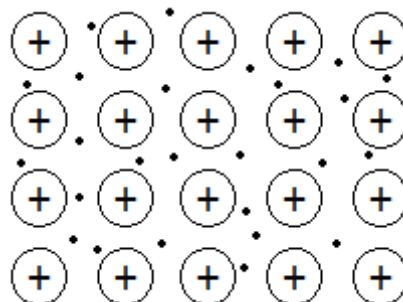
En la **teoría del gas electrónico** (también llamada del **mar de electrones o de la nube electrónica**), los **átomos metálicos pierden sus electrones de valencia** y forman una **red compacta de cationes**. Por ejemplo, en el caso del sodio, cuya configuración electrónica es:



Los cationes Na⁺, formados por los núcleos atómicos y los electrones de las capas internas, se empaquetan y los electrones de valencia se mueven con libertad. Estos electrones no pertenecen ya a los átomos individuales, sino que son comunes a todos los átomos que forman la red. Se dice que **los electrones están deslocalizados**.

Dependiendo del número de electrones de valencia que tenga el metal, habrá tantos electrones deslocalizados como átomos o más. Por ejemplo, en el sodio, que pierde un electrón, habrá tantos electrones como átomos de sodio, pero en el magnesio, que tiene 2 electrones de valencia y los pierde ambos, por lo que habrá el doble de electrones que de núcleos de Mg⁽²⁺⁾.

Así, los cationes se disponen formando un **retículo cristalino compacto o empaquetamiento metálico** y cada catión se rodea del número máximo de cationes vecinos. Los electrones de valencia se mueven libremente por los intersticios de la red, formando el **gas electrónico** y actuando, además, como un colchón que evita la repulsión entre los distintos cationes.



Dada la **libertad de movimiento de los electrones de valencia**, esta **teoría para el enlace metálico** explica muy bien muchas de las propiedades metálicas, tales como la **elevada conductividad eléctrica y térmica**. También explica la **ductilidad** y la **maleabilidad** o la **resistencia a la deformación**, porque las capas de cationes pueden deslizarse unas sobre las otras, manteniendo el tipo de estructura y la fortaleza del enlace.

20.2.- Enlace metálico: teoría de bandas

En función de su **conductividad eléctrica**, los sólidos se pueden clasificar en tres grupos: **aislantes, conductores y semiconductores**. Esta última propiedad, la **semiconductividad**, no puede ser explicada a partir del modelo del mar de electrones. Se requiere una teoría más profunda que es la **teoría de bandas** la cual, además de explicar la **semiconductividad**, explica también por qué los metales son muy buenos conductores de la electricidad.

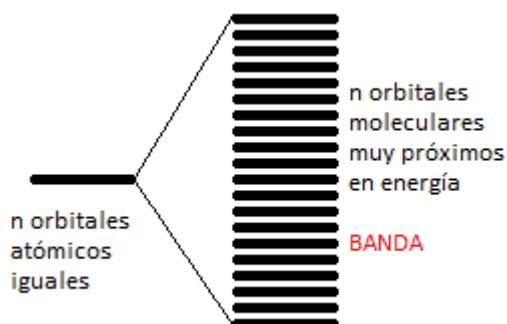
Consideremos el **metal litio**, cuya **configuración electrónica** es:



Configuración electrónica del litio ($Z = 3$)

Vemos que un átomo de litio presenta un orbital 1s lleno (con 2 electrones) y un orbital 2s semilleno (con 1 electrón). También podemos considerar a efectos prácticos los orbitales 2p, que estarán en la capa de valencia del litio, aunque vacíos.

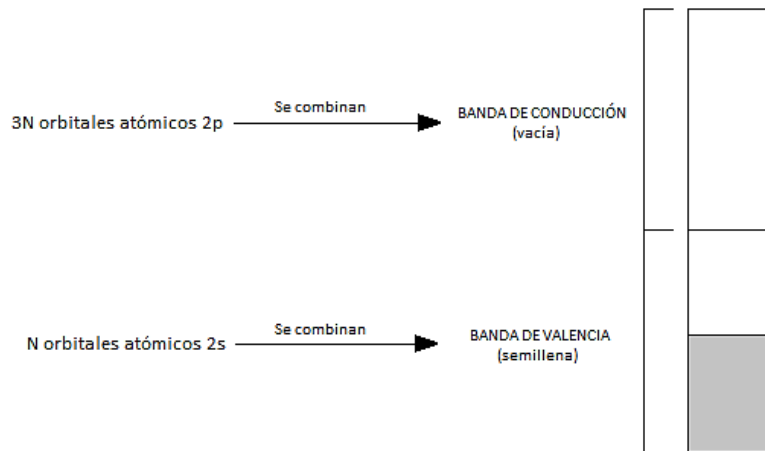
Pues bien, la **Teoría de bandas** considera que los **orbitales atómicos de valencia de los N átomos** del litio que estarán formando enlace metálico, **se combinan entre sí para dar unos orbitales moleculares**, pertenecientes a todo el cristal y con energías muy semejantes entre sí. Tan cercanos se hallan energéticamente estos **orbitales moleculares** formados, que decimos que dan lugar a una **banda**. **Se obtienen tantos orbitales moleculares como orbitales atómicos se combinen.**



(Nota: estrictamente no es del todo correcto, o al menos no es la terminología más precisa, hablar de orbitales moleculares en compuestos sólidos. No obstante, en este curso lo trataremos de este modo por ser sencillo y más intuitivo que el solo concepto de “banda de energía”).

Así, si tenemos N átomos de litio, tendremos N orbitales atómicos 2s que darán lugar a N orbitales moleculares que podemos llamar también 2s por facilidad de comprensión. Estos orbitales estarán muy próximos en energía y darán una banda 2s. Lo mismo sucederá con los orbitales 3N 2p de los N átomos de litio (cada átomo de litio tendrá 3 orbitales 2p, p_x , p_y y p_z), aunque estén vacíos, dando lugar también a una banda 2p.

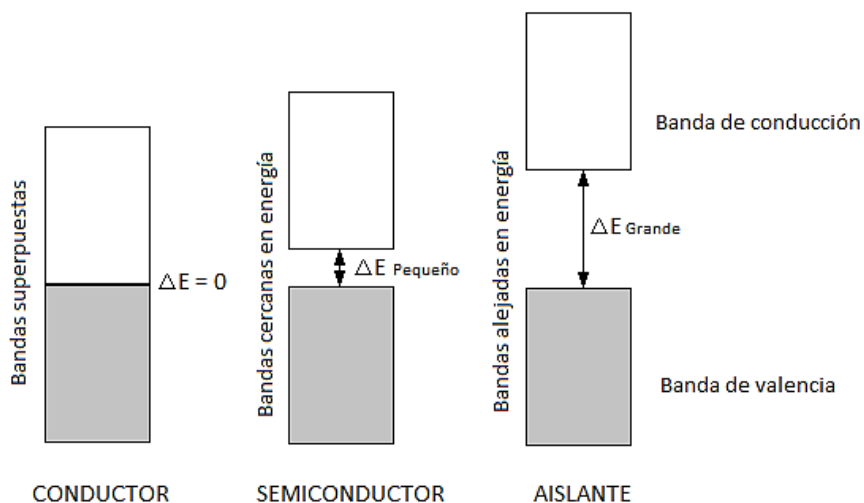
A la **banda formada por los orbitales 2s semillenos** se le llama **banda de valencia**. A la **banda vacía formada por los orbitales 2p**, se la llama **banda de conducción**.



Por tanto, en los metales, hay **bandas de valencia**, que son bandas en las que se hallan los electrones de valencia y pueden estar llenas o semillenas, dependiendo de la configuración electrónica del metal, y **bandas de conducción**, que pueden hallarse vacías o parcialmente vacías y facilitan la conducción porque son energéticamente accesibles. De hecho, **los metales son conductores porque las bandas de valencia y de conducción se superponen**, y esto hace que los electrones se muevan con libertad de una a otra.

En el caso de los **semiconductores**, las **bandas de valencia y de conducción no se superponen**, pero la **diferencia energética entre ambas es pequeña**, por lo que una pequeña aportación energética hará que puedan promocionar electrones a la **banda de conducción** y, por tanto, conducir la corriente eléctrica.

En los **aislantes**, por su parte, las dos bandas están tan alejadas que **la banda de conducción es inaccesible**, motivo por el cual son incapaces de conducir la corriente:

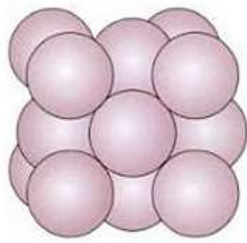


21.- Propiedades de los Compuestos Metálicos.

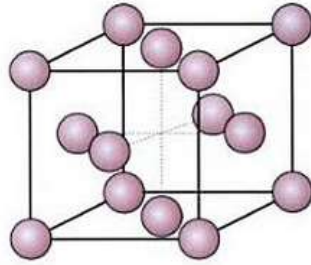
Las principales **propiedades de los metales** son las que enumeramos a continuación:

1. Forman redes cristalinas metálicas, en las cuales los cationes se hallan perfectamente ordenados en el espacio. Los **empaquetamientos** que presentan, esencialmente, son 3:

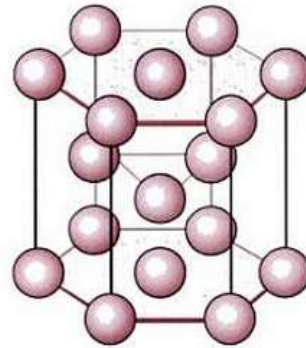
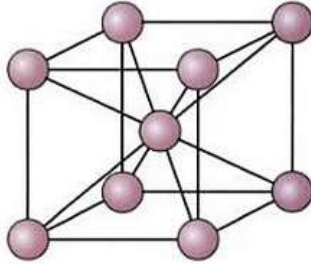
- **Estructura cúbica centrada en las caras (Ejemplos: Cu; Ag; Au)**
- **Estructura cúbica centrada en el cuerpo (la mayoría de los Metales alcalinos y el Bario que es un Alcalino Terreo)**
- **Estructura hexagonal (algunos como Zn, Be, Mg).**



Celda unidad de la estructura cúbica centrada en las caras



Celda unidad de la estructura cúbica centrada en el cuerpo



Celda unidad de la estructura hexagonal compacta

Aunque se trate de **empaquetamientos compactos**, motivo por el cual los metales suelen presentar **dureza**, el empaquetamiento cúbico centrado en el cuerpo es el menos compacto de los tres. Esto hace que los metales que lo presentan sean más blandos comparativamente que los otros metales, por ejemplo, el sodio y el litio son tan blandos que se pueden cortar con un cuchillo.

2. Presentan una **elevada densidad** (masa por unidad de volumen) debido, precisamente, al empaquetamiento metálico de los cationes.

3. **Elevadas conductividades térmica y eléctrica**, debido a la **gran movilidad de los electrones de valencia**, que hemos visto ya en el modelo del gas de electrones y también en la teoría de bandas.

4. **Gran deformabilidad**, porque las capas de cationes se pueden desplazar entre sí sin alterar la estructura. Por ello se pueden estirar en hilos, como el cobre (propiedad que recibe el nombre de **ductilidad**) y también en láminas, como el aluminio (**maleabilidad**).



5. En general, **altos puntos de fusión y ebullición**, lo cual implica que hace falta una gran cantidad de energía para separar los átomos que forman el retículo cristalino. No obstante, **sus puntos de fusión varían notablemente dentro de un intervalo muy amplio**: el mercurio es líquido a temperatura ambiente, el galio funde a 29°C y el wolframio a 3380°C .

6. **Brillo metálico**. La mayoría de los metales pulidos no absorbe ninguna radiación luminosa incidente, sino que la refleja en su totalidad. De ahí que los vemos brillar con un brillo plateado en su mayoría.

7. **Emisión de electrones**. Ya vimos en la explicación del efecto fotoeléctrico que los metales pueden emitir electrones al ser irradiados con una radiación de la frecuencia adecuada. Del mismo modo, esto también puede suceder por calor, lo que recibe el nombre de efecto termoiónico.

Ejercicio 20:

Conductividad eléctrica del sodio y el berilio por teoría de bandas

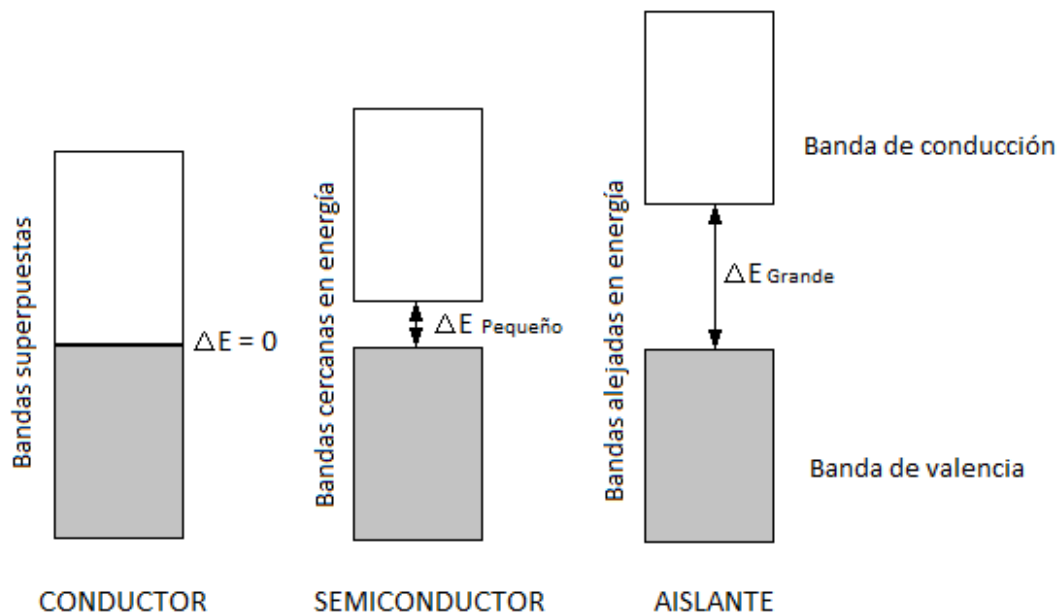
“En base a la teoría de bandas, explicar la conductividad eléctrica del sodio. ¿Por qué el berilio, que tiene el orbital 2s completo, es un buen conductor de la electricidad?”

Recordemos que los orbitales atómicos de los metales forman un conjunto de orbitales moleculares que pertenecen a la totalidad de la red metálica y que, al

estar muy próximos entre ellos en energía, reciben el nombre de banda, tal y como vemos a continuación:



Esta banda se forma tanto con los orbitales atómicos de valencia, dando lugar a la llamada **banda de valencia**, como con los sucesivos orbitales vacíos o semilenos (normalmente orbitales p), dando lugar a la llamada **banda de conducción**. Cuando las bandas de valencia y de conducción solapan, estamos ante un elemento conductor de la corriente eléctrica, porque los electrones tienen cierta libertad para promocionar de una banda a otra:



La configuración electrónica del Sodio ($Z = 11$), será: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$, lo que implica un orbital $3s$ semilleno. Esto en lo referente a un átomo de sodio, pero si se tiene un red de sodio con “ n ” átomos de sodio, tendremos entonces, “ n ” orbitales atómicos $3s$ de sodio. Estos orbitales atómicos $3s$ de sodio se traducen en orbitales moleculares que por estar tan próximos entre sí, constituyen una Banda energética que a su vez, por estar formada por orbitales $3s$, denominaremos “Banda de Valencia” (semillena). Adicionalmente, debemos considerar que el sodio, perteneciente al tercer período de la tabla periódica, también posee orbitales $3p$ vacíos ($3p_x, 3p_y$ y $3p_z$), por lo que si tenemos “ n ” átomos de sodio en la red, tendremos n orbitales p_x , n orbitales p_y y n orbitales p_z respectivamente; en resumen, tendremos $3n$ orbitales p , que también pueden formar orbitales moleculares que serán de la totalidad del cristal pero que por no tener electrones van a formar una Banda de Conducción, que es una Banda vacía. Ambas Bandas, la de Valencia y la de Conducción, están tan cercanas entre sí que se solapan y ello posibilita que los electrones de la Banda de Valencia semillena, se muevan a través de las Bandas de Valencia y de Conducción vacías, lo que permite justificar que el sodio sea un muy buen conductor de la corriente eléctrica.

En el caso del Berilio ($Z= 4$): $1s^2, 2s^2$. Tiene su orbital $2s$ completo, es decir, n orbitales atómicos $2s$ van a dar lugar a n orbitales moleculares $2s$ que serán la Banda $2s$ pero que estará completa, sin embargo, al pertenecer al período 2, posee orbitales $2p$ vacíos, luego, el Berilio posee su Banda de Conducción vacía que solapa su Banda de Valencia, lo que permite el libre tránsito de los electrones de esta Banda $2s$, haciendo de este elemento, un Metal muy buen conductor de la electricidad.

Ejercicio 21:

Cuestiones de verdadero falso sobre el enlace metálico

Razonar si son ciertas o falsas las siguientes afirmaciones referentes a los metales:

- a) *La red cristalina de los metales está formada por iones positivos y negativos.*
- b) *Los electrones de valencia de los metales están situados en orbitales deslocalizados.*
- c) *La red cristalina de los metales está formada sólo por iones positivos.*
- d) *La dureza de los metales y sus puntos de fusión relativamente elevados se explican suponiendo que los átomos metálicos se encuentran unidos por enlaces covalentes.*
- e) *Algunos metales sólidos son amorfos.*
-

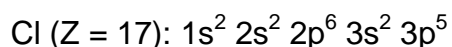
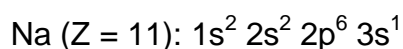
- a.- FALSO: La red metálica está formada por cationes, que son iones cargados positivamente que forman un determinado empaquetamiento cristalino.
- b.- VERDADERO: Todos los electrones pertenecen a la totalidad del cristal. Los orbitales atómicos de valencia de los que proceden están deslocalizados formando orbitales moleculares que pertenecen a la totalidad de la red cristalina.
- c.- VERDADERO: ver respuesta "a".
- d.- FALSO: En los enlaces metálicos no hay enlaces covalentes. La dureza y puntos de fusión relativamente elevados de los metales se deben a la estabilidad de la red cristalina lo que dificulta la ruptura de esos enlaces.
- e.- FALSA: Los metales en estado sólido están formando una red cristalina, es decir, son estructuras (cúbica centrada en las caras, cúbica centrada en el cuerpo o Hexagonal) en las que se va repitiendo los cationes en forma y ordenada y en una secuencia concreta.

22.- Fundamentos del enlace iónico y tipos de redes cristalinas

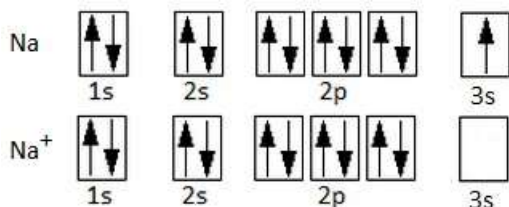
El enlace iónico se da entre **elementos metálicos (electropositivos)** y **elementos no metálicos (electronegativos)**. Por ejemplo, las combinaciones de metales alcalinos y alcalinotérreos (los dos primeros grupos de la tabla periódica) y los halógenos (F, Cl, Br...) forman compuestos típicamente iónicos. Como su propio nombre indica, un **compuesto iónico** presenta un enlace que se da por atracción electrostática entre iones: entre **cationes** procedentes del metal, de carga positiva, y **aniones** procedentes del no metal, de carga negativa.

Los metales tienen cierta tendencia a ceder electrones y los no metales tienen tendencia a captarlos. Aunque, es necesario aportar energía para formar los iones, éste aumento energético se verá compensado por la posterior formación de una red cristalina.

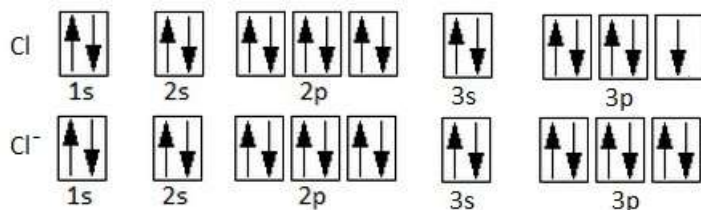
Consideremos el cloruro sódico, NaCl, la sal común (sal de cocina). El sodio es un metal alcalino que tiene, por tanto, un electrón en la capa de valencia. El cloro es un halógeno que tiene 7 electrones en la capa de valencia. Así, sus respectivas configuraciones electrónicas son:



Como vemos, si el sodio pierde un electrón, quedará como catión sodio, Na^+ , y adquirirá la configuración electrónica del gas noble anterior, el neón. Por su parte, el cloro, muy electronegativo, tiene 7 electrones en la última capa. No tiene sentido pensar que pierda 7 electrones, sino que capta uno (el electrón que cede el sodio) para dar el anión cloruro y quedar, también, con una configuración electrónica de gas noble, en este caso la del argón. Recordemos que la configuración electrónica de un gas noble, con 8 electrones en la última capa, es muy estable, por lo que el Na^+ y el Cl^- también son muy estables. Tendremos, por tanto:



Configuración electrónica del sodio y del catión sodio (ha perdido el electrón 3s).

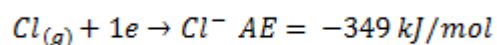
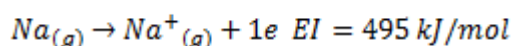


Configuración electrónica del cloro y del anión cloruro (ha ganado un electrón en un orbital 3p).

Al número de electrones que un metal cede o un no metal capta en la formación de un **compuesto iónico** se le llama valencia iónica o electrovalencia.

Por tanto, en la formación de un compuesto iónico el metal cede electrones, quedando como un catión, y el no metal capta electrones, quedando como un anión. Los cationes y aniones formados se mantienen después unidos entre sí por atracción electrostática, formando una **red cristalina** altamente ordenada.

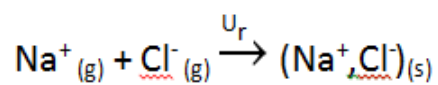
En realidad, el paso de Na a Na⁺ y de Cl a Cl⁻ es un proceso globalmente desfavorable (endotérmico) según vemos en los siguientes valores de energía:



A pesar de que hemos dicho que los metales tienen tendencia a ceder electrones y los no metales a captarlos, se puede observar en los datos previos que para

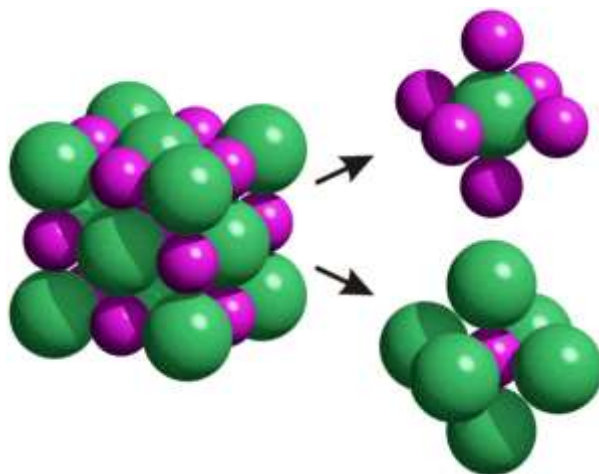
obtener un mol de Na^+ y un mol de Cl^- hay que aportar una energía global de 146 kJ /mol (495 – 349). Este aporte energético inicial se ve compensado por la posterior formación de un compuesto en forma de red, que constituye el **compuesto iónico**. En la formación del **compuesto iónico** se desprende una cantidad muy grande de energía, que recibe el nombre de **energía reticular**.

Así, la **energía reticular**, representada como U_r , se define como la energía desprendida cuando se forma un mol de compuesto iónico a partir de los iones en estado gaseoso:



Una red cristalina significa que es una estructura sólida altamente ordenada, formada por cationes y aniones siempre en la misma proporción (la proporción estequiométrica para mantener la neutralidad eléctrica) y en las mismas posiciones fijas. Las posiciones fijas establecidas para los cationes y los aniones dependen del tipo de **red iónica** que tengamos. No todas las redes iónicas son iguales, tenemos distintos tipos de estructuras.

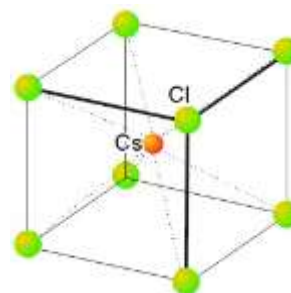
Como cada ion genera a su alrededor un campo eléctrico que es igual en las tres direcciones del espacio, cada uno de ellos tiende a rodearse de un número fijo de iones de signo contrario. Este número recibe el nombre de **índice de coordinación** o **número de coordinación**. El **índice de coordinación** varía según el tipo de red. Por ejemplo, en el caso del NaCl, cada sodio se rodea de 6 cloruros y cada cloruro se rodea de 6 sodios. El número de coordinación para ambos iones es 6, es una estructura (6,6), que recibe el nombre de “estructura cúbica centrada en las caras”:



Estructura cristalina del cloruro sódico, NaCl. Los cloruros aparecen en verde y los sodios en morado. Se puede observar que cada sodio se rodea de 6 cloruros (índice de coordinación) porque no hay espacio para más.

El **índice de coordinación** del catión y del anión en una red cristalina depende, esencialmente, de dos factores:

- **Tamaño de los iones.** El valor del radio de los iones marcará la distancia a la que se pueden situar por una simple cuestión de espacio. Por ejemplo, el sodio catiónico, Na^+ , tiene un radio de 0,95Å, y el cloruro de 1,81Å. Esta diferencia de tamaños hace que cada sodio sólo se pueda rodear de 6 cloruros. En el caso de redes cuyos tamaños iónicos son más semejantes, como por ejemplo el cloruro de cesio, CsCl (Cs^+ 1,70Å y Cl^- 1,81Å), los iones se pueden rodear de un mayor número de iones de carga opuesta, y esta red iónica presenta coordinación (8,8), que es la llamada cúbica centrada en el cuerpo. Cada ion cesio se rodea de 8 cloruros, y cada cloruro de 8 cesios.
- **Carga de los iones.** Como el cristal es eléctricamente neutro, si los iones tienen carga distinta esto condicionará la estequiometría y, por tanto, la estructura y el índice de coordinación. Por ejemplo, en el caso de la fluorita,



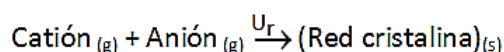
que es el fluoruro de calcio, CaF_2 , vemos que como la valencia iónica del calcio es +2, porque es un metal alcalinotérreo que puede perder dos electrones de la última capa, y el F tiene una valencia iónica de -1, habrá 2 aniones F^- por cada catión Ca^{2+} . Esto hace que, en este compuesto, el calcio se rodee de 8 fluoruros y el fluoruro de 4 calcio, presentando una coordinación (8,4). A este tipo de estructura, por analogía con la fluorita, se la denomina estructura tipo fluorita.

A continuación hallamos una tabla con algunos tipos de estructuras cristalinas iónicas, con sus correspondientes números de coordinación y algunos compuestos representativos.

Tipo de red cristalina	Coordinación (catión, anión)	Compuestos iónicos representativos
Cúbica centrada en las caras	(6,6)	NaCl, LiCl
Cúbica centrada en el cuerpo	(8,8)	CsCl, CsBr
Tetraédrica	(4,4)	ZnS, BeO
Tipo Fluorita (CaF_2)	(8,4)	CaF_2 , BaCl_2
Tipo Rutilo (TiO_2)	(6,3)	TiO_2 , SrO_2

23.- Cálculo de la energía reticular a partir de la ecuación de Born Landé

Cuando se forma un **compuesto iónico** a partir de los sus iones, se desprende una gran cantidad de energía. Esta energía recibe el nombre de **energía reticular**. En concreto, se puede definir la **energía reticular** como la energía liberada cuando se forma un mol de **compuesto iónico** a partir de sus iones en estado gaseoso:



Cuanto mayor sea la energía liberada en el proceso, más estable será la red cristalina en cuestión. Por ejemplo, los siguientes compuestos iónicos están dispuestos en orden creciente de estabilidad:

Energía reticular del cloruro sódico, NaCl = -767 kJ/mol

Energía reticular del fluoruro potásico, KF = -802 kJ/mol

Energía reticular del fluoruro de litio, LiF = -1007 kJ/mol

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

$$U_r = -\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot N_A \cdot A}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Z_1 y Z_2 : cargas del catión y del anión en valor absoluto

e : carga del electrón

N_A : número de Avogadro

A : constante de Madelung

n : coeficiente de Born o factor de compresibilidad

Algunos de estos parámetros, como la constante de Madelung o el coeficiente de Born, no son fáciles de determinar con precisión. Por esto motivo, esta ecuación es más útil si lo que deseamos es únicamente realizar un estudio comparativo de la estabilidad de 2 **compuestos iónicos**, de forma cualitativa. Así, basta que observemos en la **relación carga-radio**, que son los parámetros más determinantes en el valor de la **energía reticular**. De esta forma, la **energía reticular** es directamente proporcional al producto de carga de los iones e inversamente proporcional a la distancia que los separa:

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

- **Efecto de la distancia internuclear.** Cuanto más grande sea la distancia entre los iones, menor será la **energía reticular** y menos estable será el cristal iónico formado. Por el contrario, cuanto más pequeños sean los iones y, por tanto, más se aproximen, mayor será la energía reticular. Por ejemplo, si comparamos la energía reticular para dos compuestos en los que sólo cambia el tamaño del anión, tenemos:

Energía reticular del cloruro sódico, NaCl = -767 kJ/mol

Energía reticular del fluoruro sódico, NaF = -910 kJ/mol

Vemos que el fluoruro sódico, cuyos iones están más próximos entre sí porque el fluoruro es más pequeño que el cloruro (puedes revisar si quieres la variación periódica del radio atómico) tiene una **energía reticular** mayor que el cloruro sódico (desprende más energía al formarse) y por tanto es más estable.

- **Efecto del producto de cargas.** Cuanto mayor es el producto de cargas, mayor es la **energía reticular** desprendida y mayor la estabilidad de la red. Si comparamos dos compuestos en los que cambia la carga del catión, tendremos:

Energía reticular del cloruro sódico, NaCl (producto de cargas 1) = -767 kJ/mol

Energía reticular del cloruro de magnesio, MgCl₂ (producto de cargas 2) = -2326 kJ/mol

Por tanto, cuanto mayor es la carga de los iones, más grande es la fuerza de atracción electrostática entre los mismos y por ello es mayor la energía reticular.

A mayor **energía reticular** de un compuesto, más difícil será fundirlo, evaporarlo o rayarlo.

Así, cuando debemos comparar la estabilidad relativa de varios compuestos iónicos, como veremos en los ejercicios, lo haremos considerando este hecho, que la energía reticular es proporcional al producto de cargas e inversamente proporcional a la distancia internuclear.

Ejercicio 22:

Cálculo de la energía reticular de AB por la ecuación de Born-Landé

En este ejercicio vamos a determinar la energía reticular desprendida cuando se forma un mol de compuesto AB a partir de sus iones A^{2+} y B^{2-} en estado gaseoso, a partir de la ecuación de Born-Landé. El enunciado completo es:

Calcular la energía reticular de un compuesto AB, de iones divalentes, sabiendo que la distancia interiónica es de 2,59Å; la constante de Madelung, 1,7476, y el coeficiente de Born, 9.

En este ejercicio será muy importante tener en cuenta las unidades en las que se deben poner todos los parámetros indicados en la ecuación de Born-Landé, por lo que incluiremos en la ecuación expresada a continuación, la constante de Coulomb, k.

$$U_r = -\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot N_A \cdot A}{d_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Z_1 y Z_2 : cargas del catión y del anión en valor absoluto

e: carga del electrón

N_A : número de Avogadro

A: constante de Madelung

n: coeficiente de Born o factor de compresibilidad

$$U_R = -\frac{k \cdot Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot N_A \cdot A}{r} \times \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{New} \cdot \text{m}^2}{\text{C}^2} \\ A = \text{Constante de Madelung} \\ B = \text{Coeficiente de Born o factor de compresibilidad} \\ e = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{Coulomb} \\ r = \text{distancia interionica en m} \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} A + B &\rightarrow A^{2+} + B^{2-} \\ r &= 2,59A = 2,59 \cdot 10^{-10} \text{m} \\ A &= 1,7476 \\ n &= 9 \end{aligned}$$

$$U_R = - \frac{9 \cdot 10^9 \frac{\text{New} \cdot \text{m}^2}{\text{Coul}} \times (4) \times (1,60 \cdot 10^{-19} \text{Coul})^2 \times \frac{6,02 \cdot 10^{23}}{\text{mol}} \times 1,7476}{2,59 \cdot 10^{-10} \text{m}} \times \left(1 - \frac{1}{9}\right)$$

$$3329 \text{ KJ/mol}$$

Ejercicio 23:

Comparación de la dureza de dos compuestos iónicos por la ecuación Born-Landé

En este ejercicio de enlace químico vamos a aplicar de forma cualitativa la ecuación de Born-Landé para determinar cuál de dos compuestos iónicos presentará una mayor dureza. El enunciado es el siguiente:

“¿Qué compuesto tendrá mayor dureza, el KBr o el NaBr?”

Para ello debemos recordar que cuanto mayor sea la energía reticular de un compuesto iónico, mayor será la dureza del mismo. Asimismo, la energía reticular es inversamente proporcional a la distancia interiónica (cuanto mayor sea la distancia menor será la energía reticular) mientras que es directamente proporcional a la carga de los iones. En este caso concreto, al ser la carga de los iones la misma (cationes K^+ y Na^+ , anión Br^-) el factor diferencial entre el bromuro potásico, KBr, y el bromuro sódico, NaBr, es la distancia interiónica. Puesto que el catión potasio tiene un radio mayor que el catión sodio, la distancia interiónica del

KBr será mayor y, por tanto, menor su energía reticular. Si el KBr tiene una menor energía reticular, éste será el compuesto de menor dureza y el NaBr el de mayor dureza.

Cuanto mayor sea la energía reticular, nos vamos a encontrar también que generalmente, menor será la solubilidad porque las moléculas de agua que tienen que rodear los iones y solbatarlos les va a costar más arrancar esos iones e irlos solbatando y también, por la misma razón, mayor será el punto de fusión.

En los compuestos indicados en el enunciado, KBr y NaBr, podemos deducir que la única diferencia entre ellos está en el radio atómico de los cationes ya que el anión es el mismo y ambos son, además, monovalentes.

Si consideramos la ecuación:

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

Inferimos que mientras mayor sea el radio atómico, menor será U_R , luego, como el radio del catión potasio es mayor que el radio del catión sodio, el sodio tendrá mayor U_R y por tanto, mayor dureza tendrá el Bromuro sódico.

Ejercicio 24:

Determinar cómo afectan ciertas variaciones a la energía reticular de AB con Born-Landé

Determinar cómo afectarán las siguientes variaciones a la energía reticular de una red cristalina formada por A^+, B^- :

- Duplicar el radio de A^+ y de B^-*
- Duplicar la carga de A^+*
- Duplicar las cargas de A^+ y B^-*

d) Disminuir a la mitad los radios de A^+ y B^-

En la ecuación:

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

a.- Al duplicar los radios de los cationes A y B es fácil inferir que se duplicará el denominador de la expresión por lo que el valor de U_r se reducirá a la mitad.

b.- Al duplicar la carga de A^+ , se duplicará el valor de U_r .

c.- Al duplicar las cargas de ambos cationes, se cuadruplicará el valor de U_r .

Ejercicio 25:

Energía reticular y punto de fusión de NaF, KF, LiF y NaF, NaCl, NaBr

El enunciado completo es:

Supongamos que los sólidos cristalinos siguientes, en cada uno de los grupos, cristalizan en el mismo tipo de red: grupo 1, NaF, KF, LiF, grupo 2, NaF, NaCl, NaBr. Determinar : (Razona tus respuestas)

a) *Los compuestos con más energía de red de cada grupo.*

b) *Los compuestos con menor punto de fusión en cada grupo.*

Empleando la ecuación:

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

Grupo I: NaF, KF, LiF (se diferencian en el catión, concretamente en el radio iónico). El $Li < Na < K$; luego: $U_r LiF > U_r NaF > U_r KF$

KF tendrá el menor punto de fusión por tener menor U_r

Grupo 2: NaF, NaCl, NaBr (se diferencian en el anión)

Con relación a los radios atómicos: $F < Cl < Br$; luego, con relación a la energía reticular: $NaF > NaCl > NaBr$ el NaBr tendrá el menor punto de fusión

Cabe tener en cuenta que la relación entre el punto de fusión y la energía reticular es directamente proporcional, es decir, cuanto mayor es la energía reticular de un compuesto, mayor es su punto de fusión, ya que debemos aportar mayor cantidad de energía para lograr separar los iones entre sí (si la energía reticular del compuesto en valor absoluto es muy grande, significa que los iones están unidos muy fuertemente). Por tanto, los compuestos con menor punto de fusión, que es lo que nos piden en el apartado b del ejercicio, serán aquellos que tengan una menor energía reticular.

Ejercicio 26:

Ordenar de mayor a menor energía reticular KI, CaS, KF y CaO sin tener en cuenta la constante de Madelung ni el factor de compresibilidad.

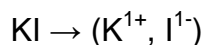
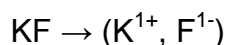
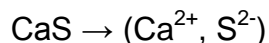
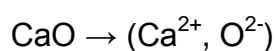
En este ejercicio de enlace químico vamos a **ordenar de mayor a menor energía reticular cuatro compuestos iónicos** que difieren en sus cationes y en sus aniones. Son: **sulfuro de calcio, CaS, óxido de calcio, CaO, yoduro potásico, KI, y fluoruro potásico, KF.**

Para poder realizar esta ordenación debemos recordar la relación existente entre la energía reticular de un compuesto iónico y dos parámetros: por una parte, las cargas de los iones que forman la red cristalina, Z_1 y Z_2 y, por otra, la distancia interiónica. Así, cuanto mayor es el producto de cargas de los iones, mayor es la energía reticular (directamente proporcional) mientras que cuanto mayor es el tamaño de los iones menor es la energía reticular (inversamente proporcional). Esto hará que los compuestos de calcio tengan una energía reticular muy superior

a los compuestos de potasio, ya que en el CaS y en el CaO, el producto de cargas es 4, mientras que en KI y KF, el producto de cargas es 1.

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

La conformación iónica de estos compuestos es la siguiente:



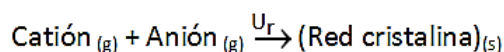
El producto de las cargas de los iones del óxido de calcio es mayor que el producto de las cargas de los iones del sulfuro de calcio, además el radio de óxido es menor que el del sulfuro de calcio. Luego $U_r: \text{CaO} > U_r \text{CaS}$

El radio molecular del KF es menor que el radio molecular del KI, luego $U_r \text{KF} > \text{KI}$

La respuesta definitiva a este ejercicio será entonces: $U_r: \text{CaO} > \text{CaS} > \text{KF} > \text{KI}$

24.- Ciclo de Born Haber para el cálculo de la energía reticular

Cuando se forma un **compuesto iónico** a partir de los sus iones, se desprende una gran cantidad de energía. Esta energía recibe el nombre de **energía reticular**. En concreto, se puede definir la **energía reticular** como la energía liberada cuando se forma un mol de **compuesto iónico** a partir de sus iones en estado gaseoso:



Cuanto mayor sea la energía liberada en el proceso, más estable será la red cristalina en cuestión.

Además de experimentalmente, dicha **energía reticular** se puede calcular a partir de la llamada **ecuación de Born-Landé**:

$$U_r = -\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot N_A \cdot A}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Z_1 y Z_2 : cargas del catión y del anión en valor absoluto

e : carga del electrón

N_A : número de Avogadro

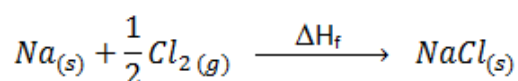
A : constante de Madelung

n : coeficiente de Born o factor de compresibilidad

No obstante, esta ecuación depende de algunas constantes, como la constante de Madelung, “A”, o “n”, el coeficiente de compresibilidad, cuyos valores no siempre se conocen con precisión. Por este motivo, se puede recurrir para la determinación de la energía reticular, a un ciclo termodinámico que recibe el nombre de **Ciclo de Born-Haber**.

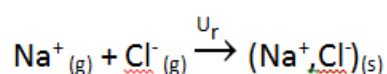
Este ciclo se basa, por así decirlo, en desglosar el proceso global en un conjunto de procesos parciales.

La reacción química global que tendrá lugar para la formación del compuesto iónico, será aquella en la que se parte de las sustancias más estables en la naturaleza (a temperatura ambiente) para los elementos que forman la red cristalina. Siguiendo con el ejemplo del cloruro sódico, la forma más estable del sodio puro en la naturaleza es el sodio metálico, sólido, $\text{Na}_{(s)}$. Para el cloro, la forma más estable es el cloro gaseoso diatómico, $\text{Cl}_{2(g)}$. La reacción será:

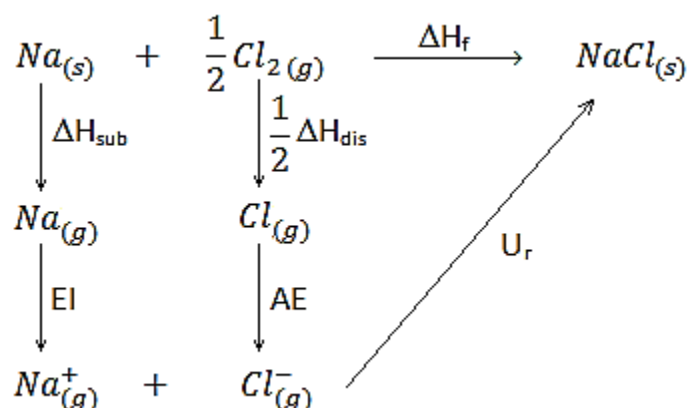


En esta reacción se desprende cierta cantidad de energía, debido a que el NaCl es más estable que el Na_(s) y el Cl_{2(g)} por separado. A esta energía que se desprende, la llamamos variación de entalpía de formación.

Por otra parte, también hemos definido la energía reticular de la **red iónica**, que es generalmente lo que deseamos calcular mediante este **Ciclo de Born-Haber**, como la energía desprendida cuando se forma un **compuesto iónico** a partir de los iones en estado gaseoso:



La combinación de ambas ecuaciones mediante pasos intermedios constituye el **Ciclo de Born-Haber** que, para este caso, se puede escribir como:



Veamos qué significan algunos de los parámetros que aparecen en este ciclo y aún no hemos comentado:

ΔH_{sub} : entalpía de sublimación del sodio. Como inicialmente tenemos el sodio en estado sólido, y en la ecuación de la energía reticular aparece en estado gaseoso y catiónico, debemos aportar dicha energía de sublimación para pasarlo de sólido a gas.

EI: energía de ionización del sodio. Una vez que se halla en estado vapor, el sodio debe ionizarse, lo cual implica perder un electrón para quedar como catión sodio.

ΔH_{dis} : entalpía de disociación del cloro. Puesto que el cloro se halla en forma gaseosa pero diatómica, deben romperse las moléculas de Cl_2 para tener átomos gaseosos independientes. Puesto que tenemos $1/2$ mol de Cl_2 , debemos poner también $1/2$ delante de dicha entalpía (sólo necesitaremos la mitad, ya que esta energía vendrá dada en kJ/mol).

AE: afinidad electrónica del cloro. Una vez que el cloro se ha disociado y se halla como átomos individuales, pero neutros, deben captar un electrón para quedar como aniones cloro, desprendiendo una energía que conocemos como afinidad electrónica.

Todas estas variables energéticas que aparecen en esta ecuación final son fáciles de obtener y suelen estar tabuladas, por lo que podremos calcular la U_r del cristal más fácilmente que con la ecuación de Born-Landé.

Así, finalmente, a partir del Ciclo de Born-Haber podemos plantear una ecuación, ya que la energía del proceso global, ΔH_f , es igual a la suma de las energías de todos los procesos parciales implicados:

$$\Delta H_f = U_r + \Delta H_{\text{sub}} + EI + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} + AE$$

$$U_r = \Delta H_f - \Delta H_{\text{sub}} - EI - \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} - AE$$

Ejercicio 27:

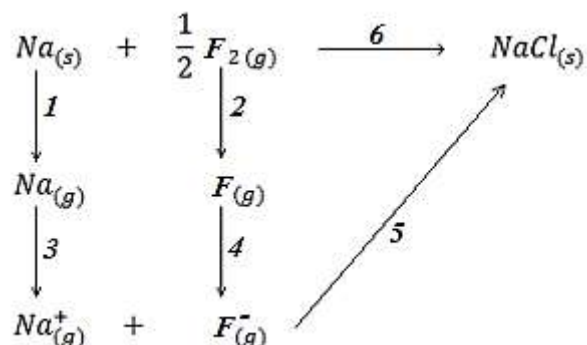
Ciclo de Born Haber para el fluoruro sódico, NaF

A partir del esquema del Ciclo de Born-Haber para el fluoruro de sodio:

a) Indique el nombre de las energías implicadas en los distintos procesos.

b) Justificar si son negativas o positivas las energías implicadas en los procesos 1,2, 3, 4 y 5.

c) En función del tamaño de los iones, justifique si la energía reticular del fluoruro de sodio es mayor o menor, en valor absoluto, que la del cloruro sódico.



a. Nombre de las Energías implicadas:

- 1: Paso del sodio metálico (sólido) al estado gaseoso (sublimación):
Entalpía de Sublimación ($\Delta H_{\text{sub Na}}$).
- 2.- Paso del Flúor diatómico a Flúor monoatómico (disociación):
Entalpía de Disociación del Flúor ($\Delta H_{\text{dis F}}$).
- 3.- Paso del sodio gaseoso a sodio catiónico (ionización):
Energía de Ionización del sodio ($E_{\text{I Na}}$).
- 4.- Paso del Flúor gaseoso a Flúor aniónico (captación de 1 e⁻):
Afinidad Electrónica (AE_{F}).
- 5.- Energía Reticular del compuesto o Energía de Red del NaCl:
Energía Reticular ($U_{\text{r NaCl}}$).
- 6.- Formación del Cloruro de Sodio en condiciones estándar:
Entalpía de Formación ($\Delta H^{\circ}_{\text{f NaCl}}$).

b.- Signo de las energías:

1.- Aporte de Energía: +

2.- Aporte de Energía: +

3.- Aporte de Energía: +

4.- Desprendimiento de energía: -

5.- Desprendimiento de energía: -

6.- Desprendimiento de energía: -

c.- NaF y NaCl para comparar ambos compuestos utilizamos la ecuación:

$$U_r \propto \frac{Z_1 \cdot Z_2}{d_0}$$

Ambos compuestos se diferencian por el anión. El Cloruro tiene mayor radio que el Fluoruro, luego $r_{Cl^-} > r_{F^-}$, de esta forma el NaCl tendrá **menor** energía reticular, $U_{r NaF} > U_{r NaCl}$.

Ejercicio 28:

Cálculo de la energía reticular del fluoruro de calcio, CaF₂ por Born Haber y Born Landé

A partir de los datos expuestos, calcular la energía reticular del fluoruro cálcico a partir del ciclo de Born-Haber y de la ecuación de Born-Landé.

$\Delta H_{sub-(Ca)} = 193 \text{ kJ/mol}$: (Entalpía de sublimación del calcio, es decir, energía necesaria para pasar el calcio de sólido a vapor).

$E_{I1}(\text{Ca}) = 540 \text{ kJ/mol}$: (Primera energía de ionización del calcio, es decir, energía necesaria para abstraer un electrón de valencia del calcio gaseoso, quedando el catión Ca^+ también en estado gaseoso).

$E_{I2}(\text{Ca}) = 1150 \text{ kJ/mol}$: (Segunda energía de ionización del calcio, es decir, energía necesaria para abstraer el segundo electrón de valencia del catión Ca^+ , quedando como catión Ca^{2+} , en estado gaseoso).

$\Delta H_{\text{dis}}(\text{F}_2) = 158 \text{ kJ/mol}$: (Entalpía de disociación del flúor, energía necesaria para disociar la molécula diatómica F_2 a átomos individuales, $\text{F}_{(\text{g})}$).

$AE(\text{F}) = -333 \text{ kJ/mol}$: (afinidad electrónica del flúor, energía desprendida cuando un átomo de flúor capta un electrón para quedar como anión fluoruro, F^-).

$\Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{CaF}_2) = -1214,6 \text{ kJ/mol}$: (Entalpía de formación del fluoruro de calcio, energía desprendida cuando se forma un mol del compuesto sólido a partir de sus elementos en estado natural, es decir, calcio metálico sólido y flúor diatómico y gaseoso).

Distancia interiónica = 2,35 Å

Cte de Madelung = 2,5194

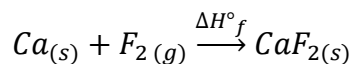
Coefficiente de Born o factor de compresibilidad = 8

K (constante de Coulomb) = $9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{C}^2$

$e = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

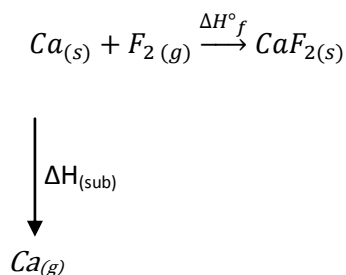
El primer paso consiste en plantear la reacción de formación del Fluoruro de Calcio a partir de sus elementos constituyentes en estado elemental, indicando el proceso energético que se verifica en la reacción (Entalpía estándar de formación).

Luego:

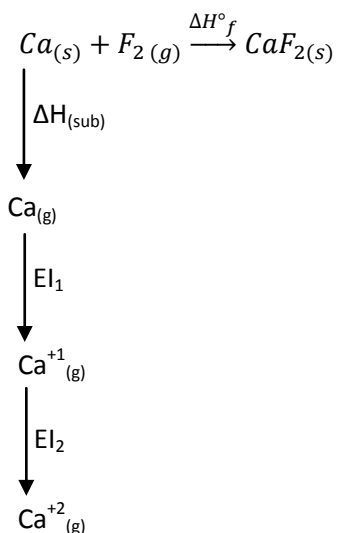


Una vez planteada la reacción general, comenzamos a construir el ciclo de Born-Haber como sigue:

El siguiente paso es el paso del Calcio del estado elemental al estado gaseoso (sublimación) y el cambio energético corresponde a una variación en la Entalpía de sublimación:

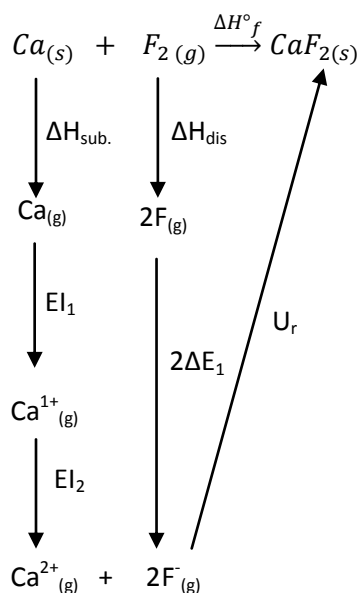


A continuación, el calcio sufre dos procesos de ionización. En el primero, pasa de Ca gaseoso ($\text{Ca}_{(g)}$) a Calcio catiónico ($\text{Ca}^{+1}_{(g)}$) al perder un electrón y el segundo electrón, en un segundo paso:



El Flúor por su parte, sufre un proceso de disociación al pasar de Flúor diatómico a Flúor monoatómico. El cambio energético es una Variación en la Entalpía de disociación.

El ciclo de Born-Haber para este compuesto se representa del siguiente modo:



Haciendo el balance energético nos queda:

$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{sub}} + EI_1 + EI_2 + 2\Delta E_1 + U_r \Rightarrow$$

$$U_r = \Delta H_f^\circ - \Delta H_{\text{sub}} - EI_1 - EI_2 - 2\Delta E_1 \Rightarrow$$

$$U_r = -1214,6 - 193 - 540 - 1150 - 158 - 2 \times (-333) = 2589 \text{KJ/mol}$$

El cálculo a partir de la ecuación de Born-Landé será:

$$U_R = -\frac{k \cdot Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot N_A \cdot A}{r} \times \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$U_r = - \frac{9 \cdot 10^9 \frac{\text{New.m}^2}{\text{Coul}^2} \times 2 \times 1,69 \cdot 10^{-19} \times 6,02 \cdot 10^{23} \frac{\text{partículas}}{\text{mol}} \times 2,5194}{2,35 \cdot 10^{-10} \text{m}} \times \left(1 - \frac{1}{8}\right)$$

$$= 2603100 \frac{\text{Joul}}{\text{mol}} = 2603,1 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}}$$

Hemos obtenido una diferencia pequeña entre ambos sistemas de cálculo.

Ejercicio 29:

Cálculo de la energía reticular del bromuro potásico, KBr, por el Ciclo de Born Haber

Calcular la energía reticular del bromuro potásico, KBr, a partir del ciclo de Born Haber, utilizando para ello los datos siguientes:

ΔH_f (KBr) = -391,8 kJ/mol (entalpía de formación del bromuro potásico, energía desprendida cuando se forma un mol de bromuro potásico a partir de sus elementos en estado natural, es decir, potasio sólido metálico y bromo diatómico líquido)

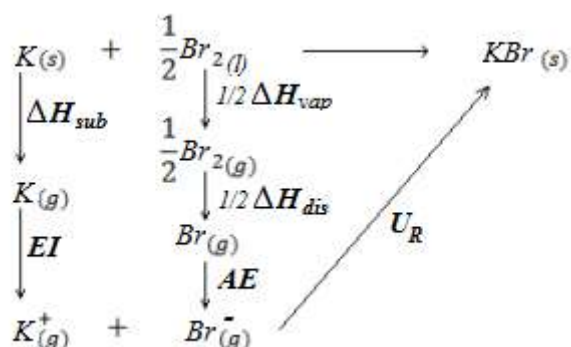
ΔH_{vap} (Br₂) = 30,7 kJ/mol (entalpía de vaporización del bromo, es decir, energía necesaria para pasar de líquido a vapor).

ΔH_{dis} (Br₂) = 193,5 kJ/mol (entalpía de disociación del bromo, es decir, energía necesaria para pasar de molécula diatómica gaseosa a átomos individuales gaseosos, Br₂(g) → 2Br(g)).

ΔH_{sub} (K) = 81,3 kJ/mol (entalpía de sublimación del potasio, energía necesaria para pasar de potasio sólido a potasio gaseoso).

EI (K) = 418,4 kJ/mol (energía de ionización del potasio, energía necesaria para ionizar el potasio, abstrayendo el electrón de valencia y pasando a catión potasio, K⁺).

AE Br = -321,9 kJ/mol (afinidad electrónica del bromo, energía desprendida cuando un átomo de bromo en estado gaseoso capta un electrón para pasar a anión bromuro, Br⁻).



$$\Delta H^{\circ}_f = \Delta H_{sub} + EI + \frac{1}{2} \Delta H_{vap} + \frac{1}{2} \Delta H_{dis} + AE + U_r \Rightarrow$$

$$U_r = \Delta H^{\circ}_f - EI - \frac{1}{2} \Delta H_{vap} - \frac{1}{2} \Delta H_{dis} - AE$$

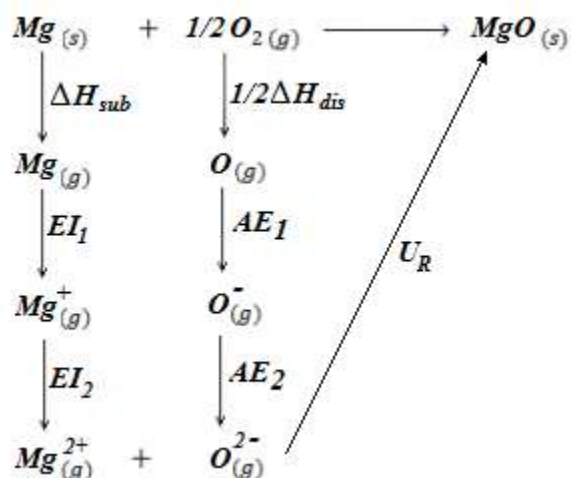
$$U_r = -81,3 \frac{KJ}{mol} - 418,4 \frac{KJ}{mol} - \frac{30,7}{2} \frac{KJ}{mol} - \frac{193,5}{2} \frac{KJ}{mol} - \left(-321,9 \frac{KJ}{mol} \right) = -681,7 \frac{KJ}{mol}$$

Ejercicio 30:

Cálculo de la energía reticular del óxido de magnesio, MgO, por el Ciclo de Born Haber

En este ejercicio vamos a determinar la energía reticular del óxido de magnesio, MgO. La diferencia con respecto a los ejercicios del Ciclo de Born Haber realizados previamente se halla en el hecho de que el anión oxígeno presenta una carga neta de -2, por lo que debemos considerar dos valores de afinidad electrónica, un primer valor para pasar de O(g) a O⁽⁻⁾(g), y un segundo valor para pasar de O⁽⁻⁾(g) a O⁽⁻²⁾(g). Del mismo modo, para el magnesio debemos considerar dos valores de energía de ionización, un primer valor para pasar de Mg(g) a

$\text{Mg}^{(+)}$ (g), y un segundo valor para pasar de $\text{Mg}^{(+)}$ (g) a $\text{Mg}^{(2+)}$ (g), tal y como se puede apreciar en el esquema del ciclo de Born Haber.



Los datos de que disponemos para realizar el cálculo de la energía reticular del óxido de magnesio son:

ΔH_f° (MgO) = -602,0 kJ/mol: (entalpía de formación del óxido de magnesio, energía desprendida cuando se forma un mol del compuesto sólido a partir de sus elementos en estado natural, es decir, magnesio metálico, sólido, y oxígeno como gas diatómico).

ΔH_{sub} (Mg) = 146,1 kJ/mol: (entalpía de sublimación del magnesio, es decir, energía necesaria para que el magnesio metálico en estado sólido pase a magnesio vapor).

ΔH_{dis} (O₂) = 498,2 kJ/mol: (entalpía de disociación del oxígeno, energía necesaria para pasar de oxígeno diatómico gaseoso a átomos individuales de oxígeno en estado gaseoso).

EI_1 (Mg) = 736,3 kJ/mol: (primera energía de ionización del magnesio, energía necesaria para abstraer un primer electrón de valencia y pasar de $\text{Mg}_{(g)}$ a $\text{Mg}^{(+)}$ (g)).

$EI_2 \text{ Mg} = 1447,9 \text{ kJ/mol}$: (segunda energía de ionización del magnesio, energía necesaria para abstraer el segundo electrón de valencia y pasar de $\text{Mg}^{(+)}_{(g)}$ a $\text{Mg}^{(2+)}_{(g)}$).

$AE_1 \text{ (O)} = -141,2 \text{ kJ/mol}$: (primera afinidad electrónica del oxígeno, energía necesaria para pasar de $\text{O}_{(g)}$ a $\text{O}^{(-)}_{(g)}$).

$AE_2 \text{ (O)} = -791,0 \text{ kJ/mol}$: (segunda afinidad electrónica del oxígeno, energía necesaria para pasar de $\text{O}^{(-)}_{(g)}$ a $\text{O}^{(2-)}_{(g)}$).

Una vez obtenido el diagrama de Born-Haber, realizamos los cálculos:

$$\Delta H^\circ_f = \Delta H_{sub \text{ Mg}} + EI_{1 \text{ Mg}} + EI_{2 \text{ Mg}} + \frac{1}{2} \Delta H_{dis \text{ O}} + AE_{1 \text{ O}} + AE_{2 \text{ O}} + U_r \Rightarrow$$

$$U_r = \Delta H^\circ_f - \Delta H_{sub \text{ Mg}} - EI_{1 \text{ Mg}} - EI_{2 \text{ Mg}} - \frac{1}{2} \Delta H_{dis \text{ O}_2} - AE_{1 \text{ O}} - AE_{2 \text{ O}} =$$

$$U_r = -602,0 - 146,1 - 736,3 - 1447,9 - \frac{1}{2} \cdot 498,2 - (-141,2) - (-791,0) =$$

$$-2249,2 \text{ KJ/mol}$$

Ejercicio 31:

Cálculo de la afinidad electrónica del cloro por el Ciclo de Born Haber

Calcular la afinidad electrónica del cloro con los datos que se muestran a continuación:

$U_r \text{ (NaCl)} = -769,0 \text{ kJ/mol}$

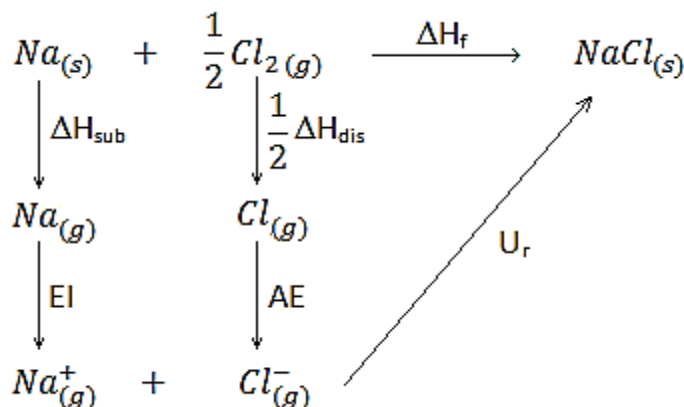
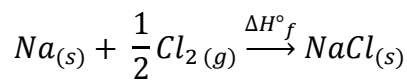
$EI \text{ (Na)} = 493,7 \text{ kJ/mol}$

$\Delta H_f \text{ NaCl} = -411,0 \text{ kJ/mol}$

$\Delta H_{dis} \text{ Cl}_2 = 242,6 \text{ kJ/mol}$

$\Delta H_{sub} \text{ Na} = 107,5 \text{ kJ/mol}$

El primer paso es plantear la ecuación general y el ciclo de Bon-Haber:



$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{sub Na} + EI_{Na} + \frac{1}{2} \Delta H_{dis} + AE_{Cl} + U_r \Rightarrow$$

$$AE_{Cl_2} = \Delta H_f^\circ - \Delta H_{sub Na} - EI_{Na} - \frac{1}{2} \Delta H_{dis Cl} - U_r \Rightarrow$$

$$-411 - 107,5 - 493,7 - \frac{242,6}{2} - (-769,0) = -364,5 \text{ KJ/mol}$$

Ejercicio 32:

Demostrar la inexistencia del compuesto NaO con el Ciclo de Born Haber

Justificar, mediante el Ciclo de Born-Haber y los datos aquí indicados, la inexistencia del compuesto NaO ($\text{Na}^{(+2)}$, $\text{O}^{(-2)}$), suponiendo que su energía reticular fuese del orden de la del óxido de calcio, CaO, -3525 kJ/mol.

$$EI_1 \text{ Na} = 494 \text{ kJ/mol}$$

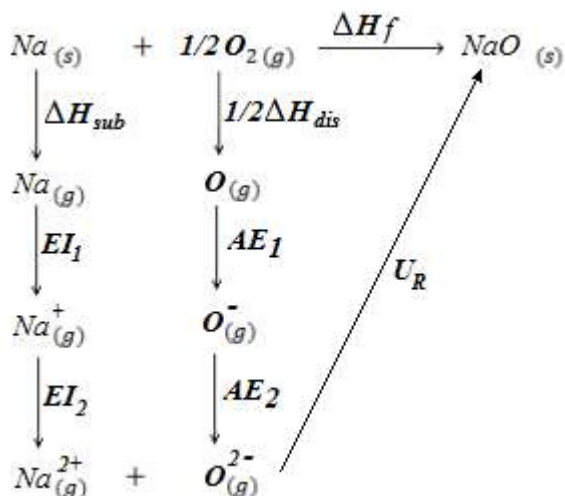
$$EI_2 \text{ Na} = 4561 \text{ kJ/mol}$$

$$AE_1 \text{ O} = -142 \text{ kJ/mol}$$

$$AE_2 \text{ O} = -791 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{sub}} \text{ Na} = 107 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{dis}} \text{ O}_2 = 498 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta H_f^\circ = \Delta H_{\text{sub}} + EI_1 + EI_2 + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} + AE_1 + AE_2 + U_r \Rightarrow$$

$$\Delta H_f^\circ = 107 + 494 + 4561 + \frac{498}{2} + (-142) + (-791) - 3525 = 953 \text{ KJ/mol}$$

El hecho que la Entalpía estándar de formación calculada para el presunto compuesto NaO tenga un valor tan positivo, hace improbable su existencia.

25.- Propiedades de los compuestos iónicos

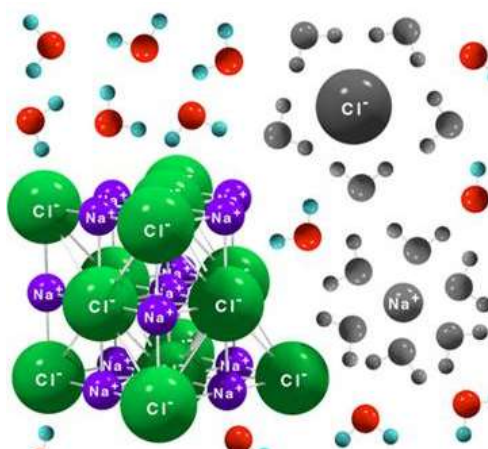
Cuando hablamos de propiedades de un compuesto, principalmente nos referimos a: estado de agregación a temperatura ambiente (puntos de fusión y de ebullición), conductividad eléctrica, dureza y solubilidad en disolventes polares y apolares. Varias de estas propiedades dependen de la fuerza del enlace químico implicado. En el caso del enlace iónico, los iones se hallan unidos fuertemente entre sí, porque las atracciones electrostáticas entre iones de signo opuesto, son intensas. Así, para fundir o evaporar un compuesto iónico, habrá que aportar una gran

cantidad de energía, porque será necesario romper las interacciones catión-anión. Esto hace que se requieran temperaturas elevadas.

De forma general, las propiedades de los compuestos iónicos son:

- **Sólidos a temperatura ambiente.** Las fuerzas que mantienen unidos los iones son fuertes, y por este motivo a temperatura ambiente el compuesto se halla en estado sólido.
- **Forman redes cristalinas altamente ordenadas.** Los aniones y cationes tienen posiciones definidas en el espacio, en función del tipo de red cristalina.
- **Puntos de fusión y ebullición elevados.** Debido a que, como hemos dicho, las fuerzas electrostáticas que mantienen unidos los iones son fuertes, es costoso separarlos. Por este motivo, hay que aportar elevadas temperaturas para fundirlos y para evaporarlos.
- **Elevada dureza.** También se debe a la fortaleza del enlace, ya que para rayar la superficie del compuesto hay que romper enlaces de los iones superficiales. Sin embargo, podrán ser rayados por compuestos de mayor dureza, como por ejemplo el diamante (el compuesto de mayor dureza, con un 10 en la escala de Mohs).
- **Fragilidad.** A pesar de su dureza, son frágiles frente a los golpes. ¿Por qué? Porque un impacto puede hacer resbalar unas capas sobre otras y que, de pronto, se vean enfrentados entre sí iones del mismo signo. La repulsión electrostática entre iones del mismo signo fragmenta el cristal.
- **No conductores de la corriente en estado sólido.** En estado sólido los iones están colocados en posiciones fijas de la red y no presentan movilidad alguna. La falta de movilidad eléctrica hace que no sean conductores.
- **Conductores de la corriente eléctrica en estado fundido o disuelto.** Puesto que en estado fundido o disuelto los iones ya sí presentan movilidad, a diferencia de lo que ocurre en estado sólido, en estos estados pueden conducir la corriente.

- **Insolubles en disolventes apolares.**
- **Solubles en disolventes polares.** Son solubles en disolventes polares como el amoníaco líquido o el agua, pues las moléculas de agua son capaces de rodear los iones y atraerlos electrostáticamente hasta separarlos de la red iónica, fenómeno que se conoce como solvatación. Recordemos que la molécula de agua es un dipolo. Cuanto más estable sea la red, es decir, mayor sea su energía reticular, más difícil será disolverlo porque se requerirá mayor energía. Por ello, aunque en general digamos que los compuestos iónicos son solubles en agua, algunos de ellos no lo son.



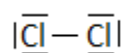
Disolución del cloruro sódico en agua: vía chemeleon.blogspot.com

26.- Introducción a las propiedades de los compuestos covalentes

Los **compuestos covalentes** son un grupo muy amplio, y en ellos hallamos 2 grupos de compuestos bien diferenciados, que presentan, además, propiedades prácticamente opuestas.

Por una parte, tenemos las **sustancias covalentes moleculares**, lo cual implica que están formadas por moléculas independientes. Por ejemplo, si consideramos el cloro gaseoso, diatómico, Cl_2 , los dos cloros están unidos entre sí por un enlace

covalente fuerte (enlace intramolecular, dentro de la propia molécula). La estructura de Lewis para la molécula es:



No obstante, si tenemos un recipiente con una cierta cantidad de cloro gaseoso, tendremos moléculas individuales que no forman enlace químico. Entre ellas únicamente se establecerán unas fuerzas de carácter débil, llamadas **fuerzas intermoleculares**, que veremos en profundidad en un posterior apartado.



Cabe destacar que, aunque estas **sustancias covalentes moleculares** se unan entre sí por **fuerzas intermoleculares** de carácter débil, existen a temperatura ambiente en los tres estados de agregación: gaseosas (F_2 , N_2 , O_2 ...), líquidas (agua, Br_2 ...) y sólidas (glucosa, I_2 ...).

Por otra parte, tenemos otro tipo de sustancias covalentes, que no están formadas por moléculas individuales sino que son macromoléculas, es decir, grandes redes cristalinas formadas por una infinidad de átomos unidos fuertemente entre sí mediante enlace covalente. Éstas son las **redes covalentes** o **cristales covalentes**. La estructura es generalmente ordenada y muy definida, y en ellas hallamos ejemplos naturales como son el grafito y el diamante (dos formas alotrópicas del carbono puro) o la sílice (SiO_2). Dada la fortaleza de los enlaces que establecen la **redes covalentes**, siempre son sólidas a temperatura ambiente y, de hecho, presentan puntos de fusión y ebullición elevadísimos.

A continuación exponemos un breve esquema de los **tipos de compuestos covalentes**:

- **Sustancias covalentes moleculares.** Formadas por moléculas individuales.
 - Gaseosas a temperatura ambiente: F_2 , N_2 , O_2 , Cl_2 , CH_4 ...
 - Líquidas a temperatura ambiente: H_2O , CH_3CH_2OH (etanol), CH_3COOH (ácido acético), Br_2 ...
 - Sólidas a temperatura ambiente: I_2 , glucosa, naftaleno...
- **Cristales covalentes o redes covalentes.** Sólidos formados por n átomos.
 - Formadas por el mismo elemento: diamante, grafito...
 - Formadas por varios elementos: sílice (SiO_2), carburo de silicio o carborúndum, SiC ...

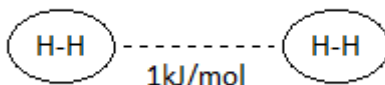
27.- Propiedades de las sustancias covalentes moleculares

Como hemos visto en la **introducción a las propiedades de las sustancias covalentes**, las **sustancias moleculares** se componen de **moléculas individuales**, entre las cuales se establecen **fuerzas intermoleculares**, es decir, **fuerzas de carácter débil**, muchísimo más débiles que los propios **enlaces covalentes intramoleculares**.

Por ejemplo, si consideramos la molécula de hidrógeno, H_2 , **el enlace intramolecular es un enlace covalente**, muy fuerte, en el que cada hidrógeno comparte su único electrón, y cuya **estructura de Lewis** será, sencillamente, $H - H$.

Este enlace tiene una energía de 435 kJ/mol. No obstante, entre las distintas moléculas de H_2 , se establecen **fuerzas intermoleculares** que, aunque se dan, **son muy débiles**, en este caso de 1 kJ/mol (más de 400 veces más débiles que el enlace covalente). Estas fuerzas, como veremos en profundidad en otro apartado,

reciben el nombre de **fuerzas intermoleculares dipolo instantáneo-dipolo inducido**, o también **fuerzas de London** o de **dispersión**.



El hecho de que estas **fuerzas intermoleculares sean débiles** hace que, en general, las **sustancias moleculares covalentes** sean **gaseosas a temperatura ambiente**, porque hay que aportar poca energía para separar unas moléculas de otras y, por tanto, para fundirlas y evaporarlas. No obstante, existen factores que pueden hacer que estas fuerzas intermoleculares aumenten y que, por tanto, algunas **sustancias covalentes moleculares** sean **sólidas o líquidas a temperatura ambiente**, a pesar de estar formadas por moléculas independientes. Estos factores son, esencialmente, dos: **la masa molecular** y **la polaridad global de la molécula**.

- **Masa molecular.** A **mayor masa molecular, mayores son las fuerzas intermoleculares**, aunque se trate de moléculas muy semejantes en cuanto a su estructura. Por ejemplo, en el grupo de los halógenos, el flúor y el cloro son gases, el bromo es líquido y el yodo, sólido.
- **Polaridad molecular.** Si las **moléculas covalentes son polares, se unirán las unas a las otras más fuertemente que si son apolares**. Esto se debe a que establecerán entre ellas **fuerzas electrostáticas**, y por tanto será más difícil separarlas y habrá que aportar más energía (mayores temperaturas de fusión y de ebullición).

Recordemos que **las moléculas covalentes pueden ser polares** cuando sus enlaces presentan **momentos dipolares permanentes** que no se anulan por geometría, y que un **enlace es polar** si existe una **diferencia de electronegatividad** entre sus átomos.

También de la polaridad molecular dependerá la **solubilidad**, es decir, del tipo de disolventes en los cuales es soluble la sustancia. Los compuestos covalentes polares son solubles en disolventes polares (agua, etanol...) y los compuestos covalentes apolares serán solubles en disolventes apolares.

Así, resumiendo, las **propiedades físicas de las sustancias covalentes moleculares** son:

1. **Están formadas por moléculas independientes** unidas entre sí por fuerzas débiles llamadas **fuerzas intermoleculares**.
2. Hallamos **sustancias covalentes moleculares** que a temperatura ambiente se hallan en **estado gaseoso**, otras en **estado líquido** y otras en **estado sólido**, dependiendo de la fortaleza de dichas **fuerzas intermoleculares**. No obstante, en general, presentan **puntos de fusión y ebullición bajos**, menores de 300° en todo caso.
3. **Solubilidad dependiente de su polaridad**. Los polares son solubles en disolventes polares como agua o etanol, los apolares en disolventes apolares como benceno o hexano.
4. **No conducen la corriente eléctrica** o son muy malos conductores de la misma, porque los electrones se hallan muy localizados, y son moléculas independientes. Únicamente la conducen los compuestos covalentes muy polares en disolución acuosa que se puedan disociar como electrolitos, como el HCl, cloruro de hidrógeno, que disuelto en agua se disocia como H^+ y Cl^- y recibe el nombre de ácido clorhídrico (porque libera protones, H^+).

28.- Propiedades de las redes covalentes: estructuras del diamante y del grafito

Las **redes covalentes son sustancias macromoleculares**, formadas por un **número muy elevado de átomos iguales o distintos**, unidos entre sí por **enlaces covalentes**, es decir, **enlaces muy fuertes**. En la naturaleza existen diversas **redes covalentes**, de las cuales consideraremos **dos formas**

alotrópicas del carbono (grafito y diamante) y la sílice, óxido de silicio (SiO_2). Puesto que son redes con gran cantidad de átomos unidos muy fuertemente, son **sólidos** a temperatura ambiente y, además, **sus puntos de fusión y de ebullición son altísimos**. Vemos los puntos de fusión para las tres redes covalentes comentadas:

- C (diamante) = 3823 K
- C (grafito) = 3800 K
- Sílice (SiO_2) = 1986 K

Estos puntos de fusión y ebullición son muy altos, porque para fundirlos es necesario romper la **red cristalina de enlaces covalentes**.

Además son **compuestos** en general **muy duros** (el diamante es el compuesto más duro que se conoce, con una dureza de 10 en la escala de Mohs) a excepción del grafito, que tiene una dureza de 1-2 por su peculiar estructura en capas. Por el mismo motivo, su estructura en capas, el grafito es el único capaz de conducir la corriente eléctrica.

Todos ellos son **insolubles en prácticamente cualquier disolvente**.

A continuación veremos con mayor detalle las estructuras del **grafito** y del **diamante**.

28.1.- Estructura del grafito y propiedades

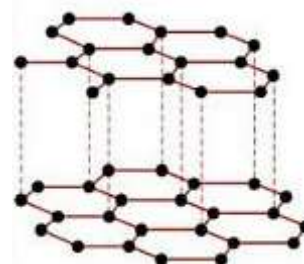
Aunque **el grafito está formado por carbono**, igual que el **diamante** (son dos **formas alotrópicas** del mismo elemento, es decir, con distinta estructura), la diferencia en la forma en que se enlazan dichos átomos de carbono en ambas estructuras les confiere propiedades totalmente distintas (de hecho, sabemos que el grafito, la mina de lápiz, es un material barato, mientras que el diamante es muy costoso).

La **estructura del grafito** está formada por **capas planas de átomos de carbono con hibridación sp^2** , formando **hexágonos**, en los que cada átomo de carbono está en el centro de un triángulo equilátero y unido a otros tres átomos de carbono, que serían los vértices del triángulo. Estos enlaces son C-C de tipo sigma, σ , entre un orbital sp^2 de un carbono y el orbital sp^2 del carbono vecino, y su distancia es de 0,142 nm. Esta distancia es el valor intermedio entre un enlace simple y un enlace doble, debido a que hay una **serie de enlaces pi deslocalizados** por encima y por debajo del plano de hexágonos.

¿A qué se deben estos enlaces pi deslocalizados? Puesto que tenemos **hibridación sp^2** para los átomos de carbono, esto implica que cada uno de ellos tendrá un **orbital p sin hibridar**, que albergará un electrón desapareado. La configuración electrónica de un carbono sp^2 es:



Como hemos dicho, este orbital p es perpendicular al plano de los hexágonos, y se superpone lateralmente con los 3 orbitales 2p de los átomos de carbono vecinos, de forma que la densidad electrónica se distribuye por encima y por debajo de las capas de hexágonos. Después, estas **capas se apilan** las unas sobre las otras, pero se trata de **enlaces débiles**, y por este motivo es un compuesto blando. La distancia entre capas es muy grande, de 0,35 nm.

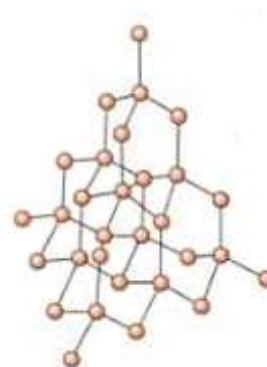


Puesto que las capas, como decimos, se unen débilmente entre sí, **el grafito es exfoliable** y untuoso al tacto. La exfoliación es lo que permite que el grafito se use para dibujar como mina de lápiz, ya que al frotar la mina sobre el papel se van desprendiendo capas. Además, por esta capacidad exfoliante, se usa como lubricante en seco.

Cabe añadir, finalmente, que **el grafito es conductor de la electricidad** y, como vimos en el tema de oxidación-reducción, se puede usar como **electrodo inerte** en pilas galvánicas o en celdas electrolíticas.

28.2.- Estructura del diamante y propiedades

El **diamante** es otra **forma natural de carbono puro**, pero en este caso está constituida por una **red de átomos de carbono con hibridación sp^3** . Estos átomos de carbono se unen entre sí por enlaces de tipo sigma, σ , cuya distancia es de 0,154 nm (correspondiente a un enlace simple C-C). Los átomos de carbono presentan **geometría tetraédrica**, de forma que cada átomo de carbono se une a otros cuatro átomos situados en los vértices de un hipotético tetraedro, y así sucesivamente en las tres dimensiones. Cada carbono de estos vértices es, a su vez, el átomo central de otro tetraedro. Por tanto, todo el cristal se puede considerar como una **molécula gigante o macromolécula**.



Puesto que los **enlaces sigma carbono-carbono son muy fuertes**, el **diamante** se caracteriza por su **gran dureza** y por sus **elevados puntos de fusión y ebullición**, además de **no conducir la corriente eléctrica** y **ser insoluble**.

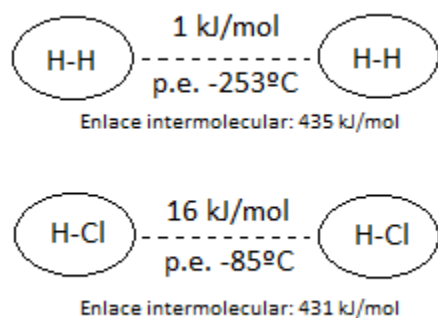
Otro compuesto de estructura semejante al diamante y también de elevada dureza es el **carburo de silicio**, SiC, llamado también industrialmente **carborundo**, con disposición tetraédrica tanto de los átomos de silicio como de los átomos de carbono.

29.- Introducción a las fuerzas intermoleculares

Ya hemos visto que existen un tipo de **sustancias covalentes que son de naturaleza molecular**, es decir, que están formadas por moléculas independientes unidas entre sí por fuerzas débiles. Estas fuerzas débiles se

denominan **fuerzas intermoleculares** y existen, incluso, entre átomos individuales que no forman enlace, como es el caso de los gases nobles.

Consideremos la energía de las **fuerzas intramoleculares** (dentro de la propia molécula, enlace covalente) e **intermoleculares** (entre distintas moléculas) del cloruro de hidrógeno, HCl, y del hidrógeno, H₂.



Cuanto más intensa es la **fuerza intermolecular** que une las moléculas **mayor será el punto de fusión y ebullición**, porque son éstas las fuerzas que debemos vencer para separarlas. En efecto, como vemos en los dos casos anteriores, el HCl, que forma fuerzas intermoleculares mucho más intensas, tiene un punto de ebullición 167°C más elevado que el del hidrógeno.

Así pues, las **moléculas covalentes** pueden unirse entre sí mediante **fuerzas intermoleculares**, pero estas últimas no siempre tienen la misma intensidad. ¿De qué depende la **mayor o menor intensidad de las fuerzas intermoleculares**? Esencialmente, de la **polaridad de la molécula**. Es en base a este criterio, el de la polaridad, que estableceremos una clasificación de las fuerzas intermoleculares. Así, tendremos:

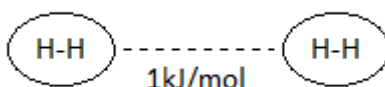
- **Fuerzas intermoleculares entre moléculas apolares.** Reciben el nombre de **fuerzas dipolo instantáneo – dipolo inducido**, o también **fuerzas de dispersión o fuerzas de London**. En este caso, la mayor intensidad de

este tipo de fuerzas **dependerá de la masa**. A mayor masa molecular, **mayores fuerzas de dispersión** y, por tanto, mayores puntos de fusión y de ebullición. No obstante, en general son fuerzas de carácter muy débil, como veremos en un próximo apartado; de hecho son las más débiles de todas las fuerzas intermoleculares.

- **Fuerzas intermoleculares entre moléculas polares.** En este caso tenemos dos tipos:
 - **Fuerzas dipolo – dipolo o fuerzas de Van der Waals.** Se trata de fuerzas entre **dipolos permanentes** (por diferencia de electronegatividad entre los átomos en moléculas cuyos dipolos no se anulan por geometría).
 - **Enlaces de hidrógeno.** Se presenta cuando la molécula tiene enlaces formados por un átomo de hidrógeno y un átomo pequeño y muy electronegativo, como flúor, nitrógeno u oxígeno.

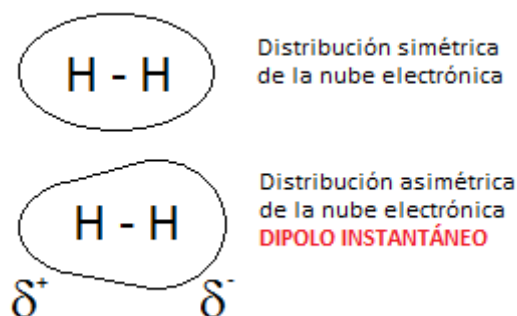
30.- Fuerzas de London o de dispersión: dipolo instantáneo – dipolo inducido

Las fuerzas dipolo instantáneo – dipolo inducido se dan entre moléculas covalentes apolares, e incluso entre átomos no enlazados, como es el caso de los gases nobles. Ya hemos visto previamente, en el caso del hidrógeno diatómico, H₂, que las moléculas de hidrógeno se unen entre sí por una fuerza de 1 kJ/mol.

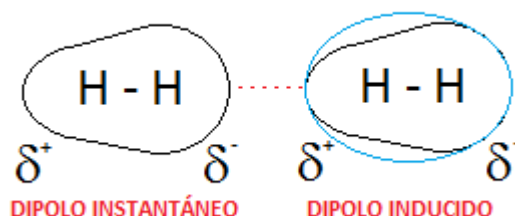


No obstante, cabe preguntarse, ¿cómo es posible que estas moléculas, totalmente apolares por estar formadas por dos átomos idénticos, establezcan entre sí una unión, por débil que sea? Se comprende que haya fuerzas de carácter electrostático entre moléculas covalentes polares pero... ¿entre las apolares?

Veamos, pues, la naturaleza de estas fuerzas. En las moléculas covalentes apolares, puede suceder que la nube electrónica, que estará en movimiento constante en torno a los núcleos atómicos, se halle más desplazada hacia un lado de la molécula durante un brevísimo lapso de tiempo.



Así, la especie que es normalmente apolar, se puede volver fugazmente polar y formar un dipolo instantáneo. Además, por un proceso de inducción, este dipolo instantáneo puede provocar, a su vez, el desplazamiento de la nube electrónica de las nubes vecinas, formando lo que se conoce como un “dipolo inducido”.



Estos dipolos sienten una cierta atracción mutua, de carácter débil (son dipolos con un desplazamiento de carga leve), que reciben el nombre de fuerzas dipolo instantáneo – dipolo inducido, o también fuerzas de London o fuerzas de dispersión.

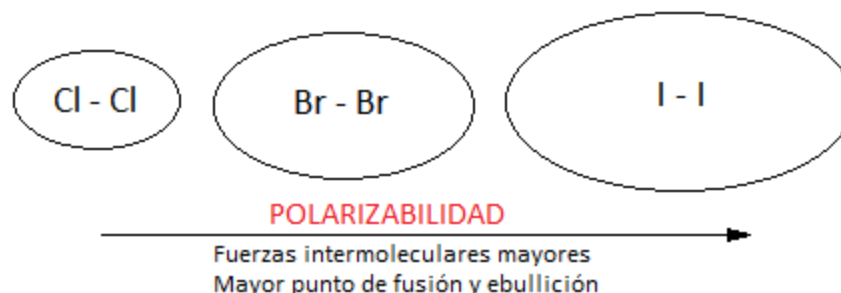
Una vez considera, por tanto, la naturaleza de estas fuerzas de London, cabe destacar que aumentan con el tamaño de la molécula y, por tanto, con la masa

molecular. Esto es debido a que cuanto más grande es la molécula, más electrones tendrá, más grande será la nube electrónica y más alejada se hallará ésta del núcleo. Esto hace que, en las moléculas grandes, sea más fácil la formación de dipolos instantáneos. Se dice que estas moléculas son polarizables.

Por ejemplo, si consideramos las moléculas diatómicas de los halógenos cloro, bromo y yodo, Cl_2 , Br_2 e I_2 , sus puntos de fusión y ebullición y su estado de agregación a temperatura ambiente se pueden ver en la tabla siguiente:

	Punto de Fusión	Punto de Ebullición	Estado a T ambiente
Cl_2	-102 °C	-34 °C	Gas
Br_2	-7 °C	59 °C	Líquido
I_2	83 °C	184 °C	Sólido

De forma esquemática, podemos representar la nube electrónica de cada una de estas moléculas cada vez más grande y, por tanto, más polarizable, tal y como podemos ver en la siguiente figura:



A pesar de esto, se cumple que las fuerzas de London o de dispersión son las más débiles de todas las fuerzas intermoleculares, por lo que, en general, las moléculas covalentes apolares presentarán bajos puntos de fusión y ebullición, aumentando en un mismo grupo con el tamaño atómico. Lo mismo ocurre con los gases nobles, que son átomos que no forman enlace, en los cuales el punto de ebullición superior corresponde, en efecto, al más grande de la serie, el radón, por ser el más grande de la serie. Como podemos ver, los puntos de ebullición crecen de menor a mayor:

- Helio: -269 °C
- Neón: -246 °C
- Argón: -186 °C
- Criptón: -152 °C
- Xenón: -108 °C
- Radón: -62 °C

31.- Enlaces de hidrógeno y fuerzas de van der Waals

Cuando tenemos **moléculas covalentes polares**, éstas forman un **dipolo permanente** que establecerá **fuerzas electrostáticas con los dipolos de las moléculas vecinas**.



DIPOLOS PERMANENTES
(Moléculas covalentes polares)

Aunque la **polaridad del enlace covalente y de las moléculas covalentes** lo hemos trata en profundidad en un apartado previo (podéis ir a través del enlace) vamos a repasar brevemente qué tiene que ocurrir para que una molécula covalente sea polar:

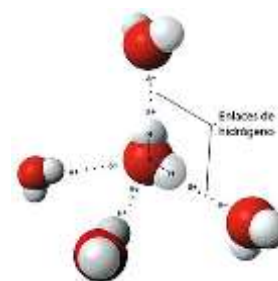
1. **Que algunos de sus enlaces o todos ellos sean polares**, por estar formados por átomos con **distinta electronegatividad**, es decir, enlace intramoleculares con un **momento dipolar permanente** (distribución asimétrica de la carga). El átomo más electronegativo atrae hacia sí los electrones del enlace.
2. **Que los momentos dipolares de los distintos enlaces de la molécula no se anulen entre sí por geometría**, de forma que la molécula presente un **momento dipolar total neto distinto de cero**.

Por tanto, existen **moléculas covalentes polares en función de la diferencia de electronegatividad de sus átomos y de su geometría**, por lo que **formarán dipolos permanentes que se atraerán entre sí por fuerzas electrostáticas**.

Aunque la naturaleza de este tipo de fuerzas intermoleculares siempre es la misma, la formación de dipolos permanentes, se clasifican en dos tipos de fuerzas distintas:

- **Enlaces de hidrógeno**. Cuando la molécula polar presenta **enlaces formados por un átomo de hidrógeno y un átomo pequeño y electronegativo (nitrógeno, oxígeno o flúor; N,O,F)**. Dentro de los dos tipos de fuerzas intermoleculares entre moléculas polares son los más intensos, y oscilan, generalmente, entre 8 y 40 kJ/mol.
- **Fuerzas de van der Waals**. Clasificaremos las fuerzas intermoleculares dentro de este grupo cuando tengamos **el resto de combinaciones posibles**, es decir, cualquier enlace polar que no esté formado por hidrógeno enlazado a N,O,F. Suelen oscilar de 0,1 a 30 kJ/mol (este último valor tan elevado, en casos particulares)

En primer lugar, para tratar en mayor profundidad los **enlaces de hidrógeno** (también llamados **puentes de hidrógeno**), consideraremos la **molécula de agua**, que es una **molécula covalente polar**. Dado que los enlaces de esta molécula son O-H, se clasificarán como “enlaces de hidrógeno”, que podemos representar como:



Fuente: <http://www.asturnatura.com>

Puesto que los **enlaces de hidrógeno** presentan en general una intensidad mayor que las fuerzas de Van der Waals, las moléculas que los forman presentan unos **puntos de fusión y ebullición anormalmente elevados**, en comparación con los compuestos análogos de su mismo grupo. En el caso del grupo de los anfígenos: H_2O , H_2S , H_2Se y H_2Te , los puntos de ebullición son:

H₂O: 100°C

H₂S: -59,6°C

H₂Se: -42°C

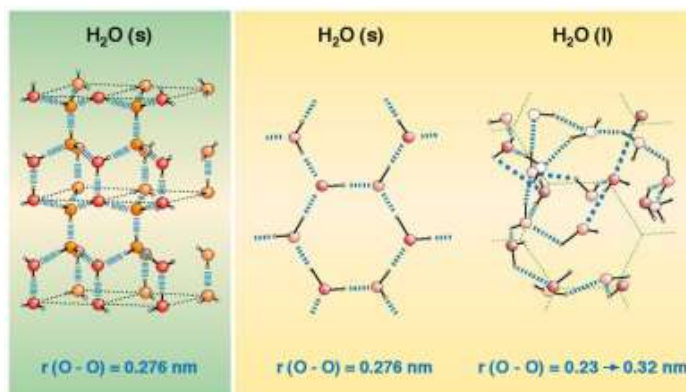
H₂Te: -1,8°C

El **punto de ebullición del agua**, por ser el de menor masa molecular, debería ser el menor de todos ellos, dado que sabemos que, en general, a mayor masa molecular de una sustancia mayor punto de ebullición. Sin embargo vemos que **es el mayor de la serie** y con una diferencia muy considerable. Esto es debido que, puesto que **en las moléculas de agua se forman enlaces de hidrógeno**, costará más separarlas, habrá que aportar una mayor cantidad de energía y, por tanto, mayor temperatura. De hecho, **es la formación de enlaces de hidrógeno lo que le confiere sus peculiares propiedades físicas** que la hacen un compuesto indispensable para el desarrollo de la vida y la química de los seres vivos, pues la inmensa mayoría de reacciones que se dan en las células tiene lugar en disolución.

Además, la **formación de puentes de hidrógeno** es también la causa de la **estructura altamente ordenada del hielo**. En la siguiente imagen podemos ver ambas estructuras, la del agua líquida y la del agua sólida:

Estructura del agua líquida y del agua sólida

Fuente: <http://old.iupac.org/didac/>



Otras moléculas de la serie, como H₂S y H₂Se, serán levemente polares (electronegatividad del S: 2,5; electronegatividad del Se: 2,4; electronegatividad

del H: 2,1). Pero, dado que las diferencias de electronegatividad son pequeñas, la magnitud de los dipolos permanentes formados será muy inferior a la de las moléculas de agua y, por este motivo, también será menor la magnitud de las fuerzas intermoleculares formadas (que en este caso serán **Fuerzas de Van der Waals o dipolo-dipolo**, por no cumplir las condiciones para ser designadas como enlaces de hidrógeno). Por este motivo, costará menos separar las moléculas y sus puntos de ebullición son muy inferiores a los del agua, a pesar de tener mayor masa molecular.

Asimismo, en el vídeo hablaremos de algunos ejemplos de **moléculas que presentan puentes de hidrógeno** (amoníaco, fluoruro de hidrógeno, compuestos orgánicos como alcoholes, aminas, ácidos carboxílicos...) y de **moléculas que presentan fuerzas de van der Waals o dipolo-dipolo** (clorometano, cloruro de hidrógeno...).

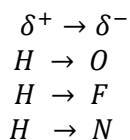
Ejercicio 33:

Determinar qué compuestos del grupo presentan enlace de hidrógeno

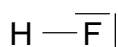
Determinar en cuáles de los compuestos siguientes se darán enlaces de hidrógeno: HF (fluoruro de hidrogeno), H₂O (agua), CH₃CH₂OH (etanol), CH₃NH₂ (metilamina), H₂O₂ (peróxido de hidrógeno o agua oxigenada), NH₃ (amoníaco), CH₃OCH₃ (dimetiléter o metoximetano), PH₃ (fosfina) y CH₃COOH (ácido acético).

Para poder realizar este ejercicio debemos escribir las estructuras de Lewis de cada uno de los compuestos y recordar cuándo se dará un enlace de hidrógeno. Se dará cuando una molécula covalente presente un enlace entre un átomo de hidrógeno y un átomo pequeño y electronegativo como nitrógeno, flúor u oxígeno. Así, las moléculas que presentarán enlace de hidrógeno de la serie indicada serán: HF, H₂O, CH₃CH₂OH, CH₃NH₂, H₂O₂, NH₃ y CH₃COOH, y no lo presentarán ni PH₃ ni CH₃OCH₃.

Formarán enlaces puente de hidrógeno:

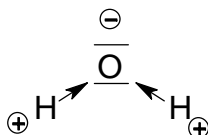


Veamos el primer compuesto, el Fluoruro de Hidrógeno. Su estructura de Lewis será:



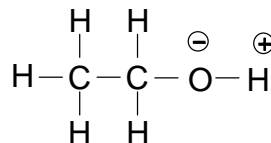
Vemos que existe un enlace H-F y por tanto formará enlaces puente de hidrógeno.

El Agua:



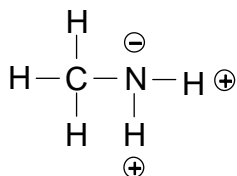
También se cumple la condición y tendremos un par de enlaces polarizados tipo puente de hidrógeno.

El alcohol etílico: aquí observamos una densidad de carga negativa sobre el oxígeno y una densidad de carga positiva sobre el hidrógeno y por tanto, podrá formar enlaces de



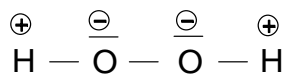
puente de hidrógeno.

La Metilamina:



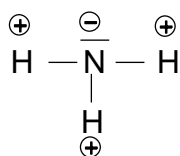
Por tanto, también tendremos enlaces puente de hidrógeno entre los dos hidrógenos y el nitrógeno.

En el caso del peróxido de hidrógeno:



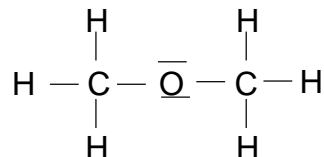
También tenemos aquí enlaces de hidrógeno.

El amoníaco:



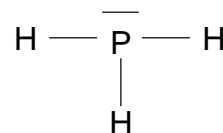
Tenemos aquí tres enlaces polarizados N – H y por lo tanto se cumple la condición para que existan enlaces puente de hidrógeno.

El éter dimetílico:



Aquí observamos que no existen enlaces puente de hidrógeno en este compuesto y por esta razón el Dimetileter muestra puntos de fusión y de ebullición mucho más bajos que otros compuestos como por ejemplo, el alcohol etílico que debido a estas fuerzas intermoleculares hacen necesario mayor cantidad de energía para romper los enlaces de hidrógeno.

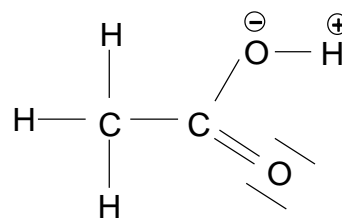
Fosfina (PH₃): Este compuesto ni siquiera presenta enlaces H – O, H – F o H – N, indispensables para la formación de



puentes de hidrógeno.

Ácido Acético:

Aquí observamos un enlace H – O con densidades electrónicas marcadas lo que caracteriza los enlaces de puente de hidrógeno.



Ejercicio 34:

Determinar la polaridad, contribución iónica y enlace de hidrógeno de H₂O, HF, H₂, CH₄ y NH₃

Considerando las moléculas: H₂O, HF, H₂, CH₄ y NH₃:

a) *¿Cuáles son polares?*

b) *¿Cuál presenta el enlace con más contribución iónica?*

c) *¿Cuál presenta el enlace con más contribución covalente?*

d) *¿Cuáles pueden formar enlace de hidrógeno?*

Para determinar la polaridad o apolaridad de las moléculas covalentes debemos tener en cuenta tanto la diferencia de electronegatividad de los enlaces como la geometría, para determinar si los momentos dipolares se anulan o no se anulan por la disposición geométrica de los enlaces (por ejemplo, en el agua, que es angular, los momentos dipolares no se anularán y la molécula será polar, pero en el metano, que es tetraédrico, se anularán por dicha geometría y será globalmente apolar). También la diferencia de electronegatividad será el parámetro que utilizaremos para determinar cuál de estos compuestos es el que presenta un mayor carácter iónico o un mayor carácter covalente, tal y como hemos hecho en algunos ejercicios previos sobre contribución iónica y covalente de los enlaces. Para ello, según Pauling, el 50% de carácter iónico corresponde a una diferencia de electronegatividad de 1,7, en general:

- $\Delta EN = 1,7$ Carácter iónico 50%
- $\Delta EN > 1,7$ Enlace iónico, carácter iónico $> 50\%$
- $\Delta EN < 1,7$ Enlace covalente, carácter iónico $< 50\%$

En cuanto a la formación de enlaces de hidrógeno debemos observar si la molécula, además de ser polar, presenta enlaces entre hidrógeno y un átomo pequeño y electronegativo como flúor, nitrógeno y oxígeno.

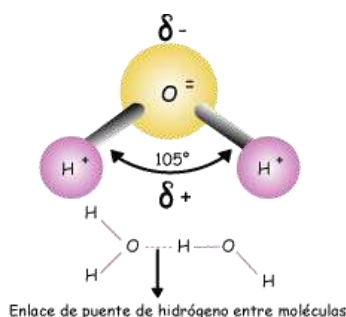
En primer lugar, obtenemos los valores de las electronegatividades en una tabla periódica los cuales mostramos en el cuadro adjunto:

O = 3,5
F = 4,0
N = 3
C = 2,5
H = 2,1

Mediante estructuras de Lewis determinamos la geometría de cada

molécula.

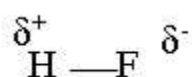
Agua (H₂O): Esta es una molécula de geometría angular



$$\Delta EN = 3,5 - 2,1 = 1,4$$

Los enlaces O – H presentan $\mu \neq 0$, por lo que son polares y puesto que los momentos dipolares no se anulan entre ellos y al ser el momento dipolar total distinto de cero ($\vec{\mu} \neq 0$), la molécula será globalmente polar.

Fluoruro de Hidrógeno (H – F): La Geometría es lineal.



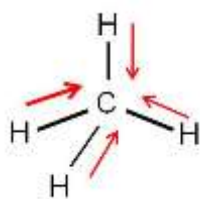
$$\Delta EN = 4,0 - 2,1 = 1,9$$

Siendo el flúor el átomo más electronegativo de la tabla periódica, por lo tanto es un enlace polar hacia el átomo de fluor y la molécula es polar.

Hidrógeno (H₂): Su estructura de Lewis es H – H, es una molécula lineal.

$\Delta EN = 2,1 - 2,1 = 0$ lo que la hace una molécula totalmente apolar.

Metano (CH₄):

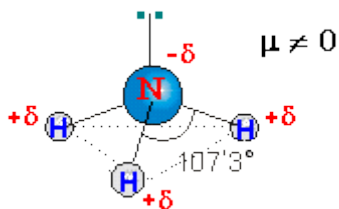


Geometría tetraédrica

$\Delta EN = 2,5 - 2,1 = 0,4$. Aunque los enlaces C – H son ligeramente polares ($\mu \neq 0$), por geometría, el momento dipolar total es igual a cero ($\vec{\mu} = 0$) y por tanto la molécula es apolar (la

suma vectorial de los cuatro momentos dipolares es cero)

Amoníaco (NH₃):



La Geometría de la molécula es de Pirámide Trigonal.

$\Delta EN = 3,0 - 2,1 = 0,9$, lo que hace los enlaces y momentos dipolares dirigidos hacia el nitrógeno. Los momentos dipolares no se anulan por geometría y la molécula será entonces, polar.

b.- Enlace con más contribución iónica: El Fluoruro de Hidrógeno presenta un $\Delta EN = 1,9$, lo que hace de esta molécula la de mayor carácter iónico.

c. Enlace con más contribución covalente: La molécula de hidrógeno presenta mayor carácter covalente ($\Delta EN = 0$).

d.- Puentes de Hidrógeno: Agua, Fluoruro de Hidrógeno y amoníaco.

Ejercicio 35:

Determinar las fuerzas intermoleculares que hay que vencer para fundir hielo, sublimar yodo y vaporizar NH₃

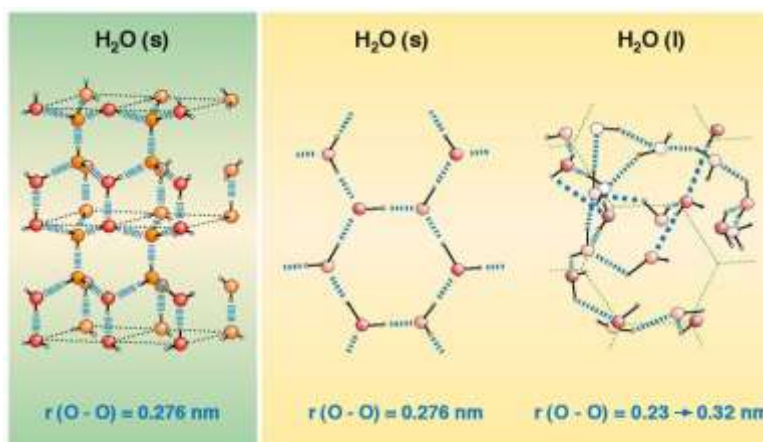
En este ejercicio vamos a determinar qué fuerzas intermoleculares es necesario vencer o romper para producir una serie de cambios físicos, es decir, ciertos cambios de estado de las sustancias que no implican cambio químico, no hay reacción química. El enunciado completo es:

Indica qué tipo de fuerzas intermoleculares hay que vencer para:

- Fundir el hielo*
- Sublimar yodo*
- Vaporizara amoníaco*

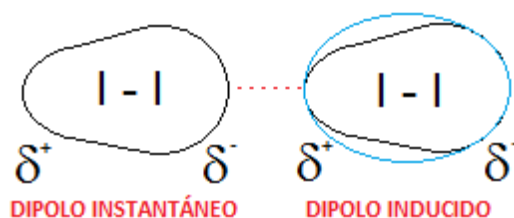
Para la fusión del hielo se debe romper la precisa **estructura de enlaces de hidrógeno** que mantiene la estructura cristalina formada, tal y como se muestra en la siguiente figura:

Vemos que en el agua líquida, una vez fundido el hielo, seguirán existiendo enlaces de hidrógeno que mantienen las moléculas de agua unidas en estado líquido, pero se trata de enlaces de hidrógeno con una disposición caótica y dinámica y no precisos y estructurados como en el hielo.



En cuanto al yodo, puesto que se trata de una molécula diatómica I_2 , formada por dos átomos idénticos, la **diferencia de electronegatividad** en el enlace I-I es nula y será totalmente apolar. Por ello, la única posibilidad que presenta esta molécula para formar dipolos es la

formación de **dipolos instantáneos**, momento dado, se desplace



dipolos es la **dipolos** es decir, que en un la nube electrónica más hacia un lado

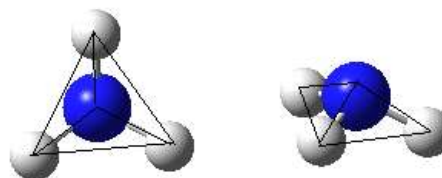
de la molécula provocando una distribución asimétrica de la carga (densidad de carga positiva, δ^+ , y negativa, δ^-), ya que se trata de **átomos grandes con una nube electrónica grande y polarizable**. Así dará lugar a un **dipolo instantáneo** durante un breve instante de tiempo, que puede inducir dipolos en moléculas vecinas, dando lugar a **dipolos inducidos**.

Las fuerzas que se establecerán entre moléculas de yodo serán **dipolo instantáneo – dipolo inducido**, que reciben el nombre de **fuerzas de dispersión o fuerzas de London**. Aunque se trata de fuerzas débiles, el hecho de que la

molécula de I_2 tenga una masa considerable hará que sea sólido a temperatura ambiente y que haya que romper estas fuerzas aumentando la temperatura para lograr sublimar el compuesto. Es decir, la intensidad de estas fuerzas intermoleculares depende de la masa del compuesto, como vemos en el siguiente esquema:



Por último, en el caso del amoníaco, dado que la **geometría de la molécula es de pirámide trigonal**, tal y como podemos predecir en base a la teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia y como vemos en la siguiente figura:



NH_3 GEOMETRÍA PIRÁMIDE TRIGONAL
 4 PARES ELECTRÓNICOS:
 3 PARES ENLAZANTES + 1 PAR NO ENLAZANTE

Y puesto que los enlaces N-H son polares (electronegatividad del nitrógeno de 3,0 y del hidrógeno de 2,1) esto hará que la molécula sea globalmente polar y que establezca interacciones **dipolo permanente – dipolo permanente**. Además, puesto que se trata de un enlace combinación de un átomo de hidrógeno y un átomo pequeño y electronegativo del grupo N,F u O, estas fuerzas estarán clasificadas como enlaces de hidrógeno. Por este motivo, son estas las fuerzas, es decir, los enlaces de hidrógeno, las que habrá que vencer para que el amoníaco líquido pase a estado gaseoso.

Ejercicio 36:

Fundir cloruro potásico, hervir agua y disolver yodo en benceno

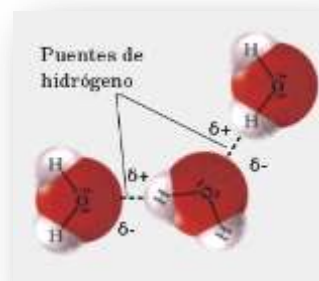
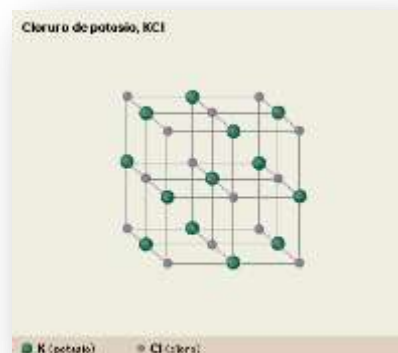
Indicar qué tipo de interacción o enlace hay que romper para:

a) Fundir cloruro potásico

b) Hervir agua

c) Disolver yodo en benceno

- El **cloruro potásico, KCl**, es un compuesto formado por un metal alcalino, el potasio, que es por tanto muy poco electronegativo (electronegatividad del potasio 0,8) y un no metal, en concreto un halógeno, el cloro, muy electronegativo (electronegatividad del cloro 3,0). Así, formará una red cristalina cuyos componentes serán los cationes K^+ y los aniones Cl^- . Será esta interacción no direccional y de tipo fuerte entre iones la que debe romperse para fundir el compuesto (Energía Reticular), motivo por el cual los compuestos iónicos suelen tener puntos de fusión elevados.
- Para **hervir agua** hay que romper los enlaces de hidrógeno que se dan en el agua líquida. A diferencia de la fusión, el paso de hielo a líquido, en la que no se rompen la totalidad de los enlaces de hidrógeno, en el agua líquida sí deben romperse la totalidad de ellos para que las moléculas sean independientes las unas de las otras, es decir, estén en fase gas. Por esto, el punto de ebullición del agua es inusualmente elevado, porque los enlaces de hidrógeno son fuerzas de una magnitud considerable.
- Puesto que el **yodo** es un compuesto apolar, será **soluble en disolventes apolares**, como es el caso del **benceno**, porque ambos compuestos podrán establecer entre ellos interacciones que permiten al soluto permanecer disuelto en el seno del disolvente. Al ser el yodo apolar, las

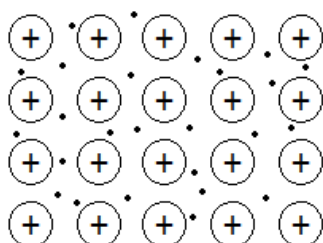


fuerzas que mantienen unidas las distintas moléculas serán fuerzas de dispersión o de London (también llamadas fuerzas dipolo instantáneo – dipolo inducido), y serán las que habrá que romper para lograr que el benceno disuelva el sólido.

Ejercicio 37:

Propiedades físicas del cobre, el dióxido de carbono y el fluoruro de cesio

El cobre es un sólido metálico y, como tal, está formado por una red cristalina de cationes cobre y presenta electrones deslocalizados, que pueden moverse con



libertad por toda la red cristalina.

Por este motivo tendrá elevada conductividad eléctrica y térmica.

Además, al ser una red cristalina, es un compuesto duro y compacto, aunque es dúctil y maleable, como



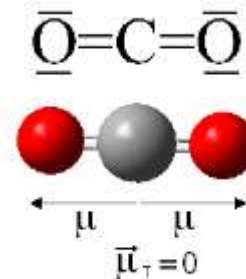
son en general los metales, porque la movilidad de unas capas catiónicas sobre otras no provocan la ruptura del sólido. Además, sus puntos de fusión y ebullición serán elevados, como consecuencia de la fortaleza del enlace metálico. No es soluble en agua.

En cuanto al dióxido de carbono, se trata de una molécula covalente lineal. Aunque sus enlaces son polares (la electronegatividad del oxígeno es de 3,5 y la del carbono 2,5, por lo que la diferencia es de 1,0) será globalmente apolar por



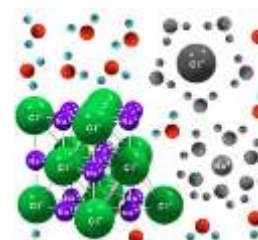
geometría. Por este motivo, el CO₂ es un gas a temperatura ambiente y en general presenta puntos de fusión y de ebullición muy bajos, ya que las únicas fuerzas intermoleculares que podrán presentar entre

sí distintas moléculas de CO₂ serán fuerzas de dispersión o de London, por formación de dipolos instantáneos. No será conductor de la corriente eléctrica, ya que está formado por moléculas aisladas, y los electrones no tienen libertad de



movimiento en un enlace covalente. Además, tampoco será soluble en agua.

Finalmente, el fluoruro de cesio es un compuesto iónico, ya que está formado por un átomo muy electronegativo, el flúor (electronegatividad del flúor = 4,0) y un átomo muy poco electronegativo, el cesio (electronegatividad del cesio = 0,7), por lo que la unión de ambos dará lugar a una red cristalina formada por cationes Cs^+ y por aniones F^- , que tendrá elevada dureza, aunque será frágil. También presentará elevados puntos de fusión y de ebullición, porque habrá que vencer las fuerzas de atracción electrostática para separar los iones y fundir o evaporar el compuesto. Además, será soluble en agua porque la molécula de H_2O forma dipolos permanentes capaces de solvatar los iones. No conducirá la corriente eléctrica en estado sólido, pero sí lo hará en estado disuelto o fundido por la capacidad de movilidad de los iones.



A continuación vemos un ejemplo de la disolución de un compuesto iónico en el agua, el NaCl , cloruro de sodio, que es análoga a la disolución del fluoruro de cesio en agua:

Ejercicio 38:

Razonar ciertos hechos experimentales, Cl_2 y KCl , NaF y F_2 , Ag y AgCl en función del tipo de enlace y las fuerzas intermoleculares.

En este ejercicio de enlace químico debemos explicar razonadamente ciertos hechos experimentales, que son:

a) *El cloro, Cl_2 , es un gas a temperatura ambiente, mientras que el cloruro potásico, KCl , funde a 776°C .*

El cloro es una sustancia formada por moléculas covalentes diatómicas que únicamente pueden formar entre sí fuerzas de dispersión o de London (dipolo instantáneo – dipolo inducido), que son muy débiles y no logran mantener unidas a las moléculas muy fuertes entre sí, y por este motivo es un gas a temperatura ambiente. El KCl , en cambio, está formado por un elemento muy electronegativo,

el cloro, y uno muy poco electronegativo, el potasio. Esta combinación de elementos dará lugar a una red iónica formada por aniones Cl^- y cationes K^+ , unidos fuertemente por atracción electrostática. Por este motivo, la temperatura requerida para separar los iones es muy alta y funde a 776°C .

b) El fluoruro sódico, NaF , es un cristal iónico mientras que el flúor, F_2 , está formado por moléculas.

Aunque es similar al caso anterior, la respuesta es un tanto distinta, ya que lo que debemos responder es por qué el fluoruro sódico es un cristal iónico y por qué el flúor es molecular. El fluoruro sódico es un cristal iónico porque está formado por combinación de un elemento metálico, electropositivo, el sodio, y un elemento muy electronegativo, no metálico, el flúor. Esta combinación dará siempre lugar a un enlace de tipo iónico. En el caso de F_2 , los átomos son iguales y por este motivo la diferencia de electronegatividad del enlace es cero, por lo que formará un enlace covalente puro flúor-flúor que no puede dar lugar a ningún tipo de red, únicamente a moléculas aisladas.

c) La plata, Ag , conduce la corriente eléctrica y el cloruro de plata, AgCl , no.

La plata es un metal, que forma un empaquetamiento de cationes, mientras que los electrones tienen libertad y movilidad por todo el cristal, puesto que los orbitales atómicos de valencia de la plata dan lugar a orbitales “moleculares” pertenecientes a la totalidad del cristal, lo que se conoce como bandas. Esto hace que la plata pueda conducir la electricidad. En cambio, el AgCl es un compuesto iónico, formado por cationes Ag^+ y Cl^- . Los electrones se hallan localizados sobre los iones y no presentan movilidad, por lo que la red cristalina no puede conducir la electricidad en absoluto.

Ejercicio 39:

Solubilidad de yodo y cloruro potásico en agua y tetracloruro de carbono

¿En qué disolvente serán solubles los compuestos yodo y cloruro potásico? ¿En agua o en tetracloruro de carbono?

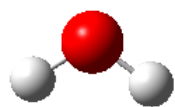
Para determinar la solubilidad vamos a recurrir a la siguiente regla nemotécnica: “**Semejante disuelve a semejante**“. Esto significa que:

– **Los disolventes polares disuelven bien a los solutos polares o cargados (iónicos).**

– **Los disolventes apolares disuelven bien a los solutos apolares.**

Así, lo que debemos hacer en primer lugar debemos determinar el tipo de enlace o de fuerzas intermoleculares que mantienen unidos entre sí los distintos compuestos, tanto solutos como disolventes:

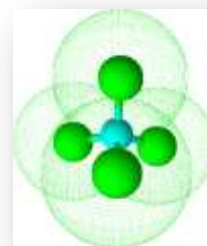
– **Agua.** Como hemos visto reiteradamente, el agua es una molécula de geometría angular, con enlaces polares, que es globalmente polar (los dipolos de sus enlaces H-O no se anulan por geometría) por lo que forma dipolos permanentes que se unen entre ellos por enlaces de hidrógeno. **POLAR.**



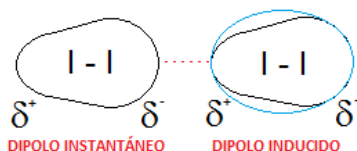
H₂O GEOMETRÍA ANGULAR
4 PARES ELECTRÓNICOS
2 PARES ENLAZANTES +
2 PARES NO ENLAZANTES

cuatro enlaces se anularán entre sí, por lo que se trata de una molécula globalmente apolar por geometría. **APOLAR.**

– **Tetracloruro de carbono, CCl₄.** Aunque los enlaces C-Cl serán polares, ya que el cloro es más electronegativo que el carbono, la molécula tendrá una geometría tetraédrica (un átomo central rodeado de cuatro pares enlazantes), y los momentos dipolares de los



– **Yodo.** También hemos visto en múltiples ejercicios previos el caso del yodo, que está formado por moléculas diatómicas de I₂, totalmente apolares, ya que se trata



de dos átomos idénticos. Esto hará que las únicas fuerzas intermoleculares que se puedan dar entre distintas moléculas de yodo sean dipolo instantáneo-dipolo inducido, es decir, fuerzas de

dispersión o de London. **APOLAR.**

– **Cloruro potásico**. Puesto que está formado por la unión de un elemento muy electronegativo, el cloro, y de un elemento muy poco electronegativo, el potasio, esta unión dará lugar a un compuesto iónico, formado por cationes K^+ y por aniones Cl^- . Es, por tanto, una red cristalina formada por **IONES** (especies cargadas).

Una vez establecida dicha clasificación se puede deducir fácilmente, tal y como se explica en el tutorial, que el yodo será soluble en tetracloruro de carbono y no en agua, mientras que, por el contrario, el cloruro potásico será soluble en agua y no en tetracloruro de carbono.

Ejercicio 40:

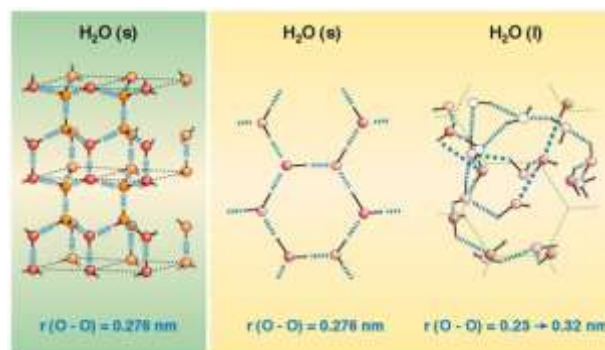
Propiedades de las redes cristalinas $BaCl_2$, H_2O , Diamante e I_2

A la temperatura de $0^\circ C$, el cloruro de bario, el agua, el diamante y el yodo son sólidos, pero la naturaleza de sus redes cristalinas es muy distinta. ¿Qué tipos de redes forma cada uno de ellos?

Para determinar el tipo de enlace que se da entre los átomos de estos compuestos y a partir de esto el tipo de fuerzas intermoleculares debemos, como siempre, observar la diferencia de electronegatividad.

– **Cloruro de bario**. Se tratará de un compuesto iónico, ya que la diferencia de electronegatividad entre el bario y el cloro es mayor de 1,7. Así, tendremos una red cristalina formada por iones bario, $Ba^{(2+)}$, e iones cloruro, Cl^- , en forma totalmente ordenada.

– **Hielo**. A $0^\circ C$ el agua es un sólido, el hielo. Se trata, como hemos visto reiteradamente, de una sustancia covalente polar, ya que la diferencia de electronegatividad del oxígeno y el hidrógeno es de 1,4, y esto hace que

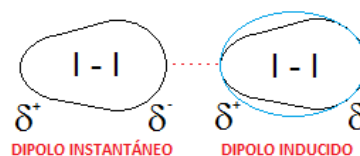


los enlaces sean muy polares. Además, dado que la geometría de la molécula de agua es angular, se tratará de una molécula globalmente muy polar porque los momentos dipolares de ambos enlaces H-O no se anulan por geometría. Esto hace que las moléculas de agua se unan entre sí por enlaces de hidrógeno, de forma ordenada y cristalina.

– **Diamante**. Se trata de una red covalente pura, formada únicamente por átomos de carbono. Se unirán, por tanto, a través de enlaces covalentes. En el diamante los carbonos presentan hibridación sp^3 , de forma que la disposición de los 4 pares electrónicos enlazantes en torno a cada carbono es tetraédrica. Así ocurre de forma sucesiva. Los enlaces covalentes son enlaces muy fuertes, y esto hace que el compuesto presente una gran dureza.



– **Yodo**. Hemos visto también en múltiples ejercicios previos el caso del yodo, que está formado por moléculas diatómicas de I_2 , totalmente apolares, ya que se trata de dos átomos idénticos.



Esto hará que las únicas fuerzas intermoleculares que se puedan dar entre distintas moléculas de yodo sean dipolo instantáneo-dipolo inducido, es decir, fuerzas de dispersión o de London.

Ejercicio 41:

Asignación de redes cristalinas: metal, compuesto iónico, red covalente o sólido molecular

Teniendo en cuenta las propiedades que se indican, explica, razonándolo, el tipo de enlace en las redes cristalinas de las sustancias siguientes:

Sustancia A: *Es conductora de la electricidad tanto en estado sólido como fundido.*

Sustancia B: *Sólido de elevado punto de fusión. Conduce la corriente eléctrica fundido y en disolución acuosa, pero no en estado sólido.*

Sustancia C: *Sólido de punto de fusión muy elevado. No conduce la corriente eléctrica ni en estado sólido ni fundido.*

Sustancia D: *Su punto de fusión es muy bajo.*

Sustancia A: Solo puede ser un enlace metálico, pues por tratarse de una red cristalina, los electrones se desplazan libremente a través de los cationes.

Sustancia B: No puede ser un metal pues no conduce la electricidad en estado sólido, tenemos entonces un enlace iónico, ya que estos son capaces de conducir la corriente eléctrica en estado fundido o en disolución y sus puntos de fusión son elevados.

Sustancia C: Tenemos una red muy fuerte, sin movilidad. Ha de tratarse de un compuesto con enlace covalente que tienen alto punto de fusión y no conduce la electricidad y en concreto una red covalente tridimensional como la Sílice, el diamante o el carborundum.

Sustancia D: Se trata de un enlace covalente de tipo molecular. Son moléculas unidas por fuerzas moleculares o de London o también, por Fuerzas de Van der Wals o enlaces de hidrógeno que es cuando se tienen dipolos permanentes.

Ejercicio 42:

Deducir de qué sustancia se trata en base a las propiedades

De las sustancias siguientes: fluoruro de hidrógeno, sílice, metano, yodo, cloruro sódico, sodio y agua, asignar a cada una de las descripciones, alguna de dichas sustancias:

- *Sustancia soluble en agua que no conduce la corriente eléctrica en estado sólido.*
- *Sustancia que presenta enlaces de hidrógeno y funde por debajo de la temperatura ambiente.*
- *Sustancia molecular que presenta enlaces de hidrógeno, pero cuyos enlaces tienen más de un 50% de carácter iónico.*
- *Sustancia de elevada conductividad eléctrica que funde a una temperatura en torno a los 100°C.*

- *Red covalente de elevado punto de fusión.*
 - *Compuesto soluble en tetracloruro de carbono, CCl_4 , sólido a temperatura ambiente.*
 - *Gas covalente formado por moléculas tetraédricas, CH_4 .*
-

Para realizar el ejercicio, es importante recordar las propiedades de los compuestos iónicos, las propiedades de los metales, las propiedades de las redes covalentes y las propiedades de las sustancias covalentes moleculares.

- ***Sustancia soluble en agua que no conduce la corriente eléctrica en estado sólido:*** En principio, pensamos en el cloruro sódico, NaCl (soluble en agua y no conduce electricidad en estado sólido).
- ***Sustancia que presenta enlaces de hidrógeno y funde por debajo de la temperatura ambiente: En el enunciado solo tenemos dos sustancias que presentan enlaces de hidrógeno, a saber, el fluoruro de hidrógeno y el agua. El fluoruro de hidrógeno funde a alrededor de $-35\text{ }^\circ\text{C}$ y el agua a $0\text{ }^\circ\text{C}$. En principio elegimos ambas sustancias: H_2O y HF***
- ***Sustancia molecular que presenta enlaces de hidrógeno, pero cuyos enlaces tienen más de un 50% de carácter iónico: Una vez más, sustancias que presentan enlaces de hidrogeno son H_2O y HF . ($\Delta EN_{\text{HF}} = 3,98 - 2,2 = 1,78$; $\Delta EN_{\text{H}_2\text{O}} = 3,44 - 2,3 = 1,14$). El HF tiene un mayor carácter iónico por lo tanto, elegimos este compuesto aquí y lo eliminamos de la respuesta anterior.***
- ***Sustancia de elevada conductividad eléctrica que funde a una temperatura en torno a los 100°C : Nos queda por elegir del enunciado, cuatro sustancias, a saber, sílice, metano, yodo y sodio. De estos cuatro, el yodo y el metano no son conductores el I_2 y CH_4 son moléculas covalentes y por tanto no conductoras de la electricidad y la sílice, a pesar de ser una red cristalina, se trata de una red covalente, no conductora. Por tanto elegimos al Sodio que es un metal, por tanto, buen conductor eléctrico y funde a elevada temperatura.***
- ***Red covalente de elevado punto de fusión: la única opción posible es la sílice, SiO_2 .***
- ***Compuesto soluble en tetracloruro de carbono, CCl_4 , sólido a temperatura ambiente: A temperatura ambiente el I_2 es sólido y el metano un gas.***

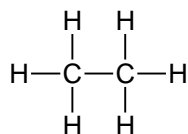
- **Gas Covalente formado por estructura tetraédrica:** Obviamente, la respuesta es el Metano

Ejercicio 43:

Justificar los puntos de ebullición del etano, dimetiléter y etanol

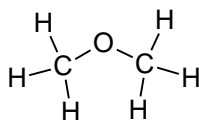
Los puntos de ebullición del etano, del dimetiléter y del etanol son, respectivamente, -88°C , -25°C y 78°C . Explica las razones de estas diferencias.

Para poder justificar las diferencias entre dichos puntos de ebullición debemos estudiar las estructuras de dichas moléculas y, a partir de ellas, determinar si existen o no enlaces polarizados y a qué tipo de fuerza intermolecular pueden dar lugar. Los puntos de ebullición más elevados, como el del etanol, corresponden a compuestos que pueden formar enlaces de hidrógeno.



Pto. Ebull.: -88°C Etano; Geometría Tetraédrica; Molécula Apolar; por tener hibridación sp^3 , se establece entre las moléculas, fuerzas de dispersión o de London,

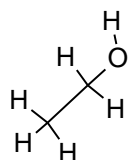
que por tratarse de fuerzas bastante débiles, su punto de ebullición es bastante bajo.



Pto. Ebull.: -25°C Metoximetano o dimetiléter; Disposición Tetraédrica; los carbonos se unen al

oxígeno en cierto ángulo que por existir una importante diferencia de electronegatividades entre el oxígeno y el carbono, se establecerá un cierto momento dipolar importante por lo que en el enlace $\text{C}-\text{O}$ habrá $\vec{\mu} \neq 0$ y además, los carbonos de los extremos presentan hibridación sp^3 , con disposición tetraédrica y por tanto, apolar. Luego se trata de una molécula polar que va a presentar una cierta densidad de carga negativa sobre el átomo más electronegativo (el oxígeno) y una cierta densidad de carga positiva sobre cada

uno de los otros dos átomos (carbono). Así, tendremos un dipolo de tipo permanente; se trata de una molécula covalente polar en las cuales se pueden establecer dos tipos de fuerzas: por una parte pueden formarse enlaces de hidrógeno y por la otra, fuerzas de Van der Waals. Los enlaces de hidrógenos se descartan pues no tenemos un enlace donde intervenga el hidrógeno en los enlaces polarizados O – C. De esta forma se trata de únicamente de Fuerzas de Van der Waals, que aunque no son muy intensas, lo son más que las fuerzas de dispersión o de London, lo que hace que su punto de ebullición sea más elevado que el del etano.



Pto. Ebull.: 78 °C Etanol o Alcohol etílico. En esta molécula, específicamente en el enlace O – H vamos a

tener una polarización apreciable o un momento dipolar hacia el oxígeno, por tanto tenemos una molécula polar que forma dipolos permanentes y tendremos como fuerza intermolecular, enlaces de hidrógeno. Estos últimos son los más fuertes entre las fuerzas intermoleculares y por ello el punto de ebullición es más elevado.

Ejercicio 44:

Puntos de ebullición de los compuestos de hidrógeno de halógenos y anfígenos

Los valores de lo **puntos de ebullición** de la combinación de hidrógeno con los halógenos y los anfígenos se muestra en la tabla siguiente:

$HF = 19,5^{\circ}C$; $HCl = -85^{\circ}C$; $HBr = -67^{\circ}C$; $HI = -35^{\circ}C$

$H_2O = 100^{\circ}C$; $H_2S = -60^{\circ}C$; $H_2Se = -41^{\circ}C$; $H_2Te = -1^{\circ}C$

Explicar las razones de estas diferencias.

El hecho de que los dos compuestos más ligeros de cada serie, el fluoruro de hidrógeno, HF, y el agua, H₂O, sean los que presentan los mayores puntos de ebullición, cuando en principio deberían ser los que tuviesen menor punto de ebullición por tener la menor masa molecular, se



debe a su capacidad para formar enlaces de hidrógeno. Recordemos que el enlace de hidrógeno se da cuando tenemos enlaces polarizados en moléculas covalentes polares (que no se anulan por geometría) y estos enlaces están formados por hidrógeno y un átomo pequeño y electronegativo, como flúor, nitrógeno u oxígeno. Los restantes compuestos de la serie sí que siguen la tendencia de aumentar el punto de ebullición a medida que aumenta la masa molecular, ya que las fuerzas intermoleculares que estos presentan son fuerzas dipolo permanente – dipolo permanente o fuerzas de van der Waals.

Ejercicio 45:

Ordenar por puntos de ebullición etanol, butano, agua y metano

Considerando la naturaleza de los enlaces intermoleculares que se establecen en cada caso, indicar cuál será el orden correcto, de mayor a menor, de los compuestos siguientes:

- a) *Etanol, H₂O, metano, butano*
- b) *H₂O, etanol, butano, metano*
- c) *Metano, H₂O, butano, etanol*
- d) *Metano, etanol, butano, H₂O*

Justificar la respuesta.

Atendiendo a las fuerzas intermoleculares, las opciones c y d se pueden descartar. Esto se debe a que el punto de ebullición del metano será el menor de todos los compuestos indicados, ya que se trata de una molécula tetraédrica apolar (se puede considerar que sus enlaces son levemente polares pero se anulan por

geometría). Además, la masa molecular del metano es pequeña, y las fuerzas intermoleculares entre distintas moléculas de metano sólo podrán ser dipolo instantáneo – dipolo inducido o fuerzas de London. Estas serán las mismas fuerzas intermoleculares presentes entre distintas moléculas de butano, pero dado que éste tiene una mayor masa molecular, también será mayor su punto de ebullición. Eso nos hace descartar también la opción a, ya que en ésta se indica que el punto de ebullición del metano es superior al del butano, y acabamos de deducir que esto no es cierto. La única opción posible es la b, ya que en el etanol y en el agua, ambas moléculas polares con enlaces O-H, se darán enlaces de hidrógeno que harán que los puntos de ebullición de estas moléculas sean elevados, mucho más que en el caso del metano y del butano. Así, el orden de puntos de ebullición será:

Agua > Etanol > Butano > Metano

Ejercicio 46:

Asignar puntos de fusión a nitrógeno, aluminio, diamante y tricloruro de boro

Asigne los puntos de fusión siguientes: 3550 °C, 650 °C, -107 °C y -196 °C a los compuestos: nitrógeno, aluminio, diamante y tricloruro de boro; justifique el tipo de enlaces o fuerzas intermoleculares que presenta cada uno de estos compuestos en estado sólido.

Para ello debemos recordar que los compuestos con mayor punto de fusión de la naturaleza son las redes covalentes (como el diamante) y, tras ellos, de forma general, las redes metálicas (como el aluminio), mientras que las sustancias que presentan únicamente fuerzas intermoleculares de dispersión o de London son las sustancias con menores puntos de fusión existentes (como el nitrógeno y el tricloruro de boro).

Nitrógeno: (N_2): $\Delta\text{EN} = 0$; Molécula apolar. Solo son posibles fuerzas intermoleculares de dispersión o London

Aluminio: Metal (enlace metálico); Puntos de ebullición elevado

Diamante: Forma alotrópica del carbono; Red de enlaces covalentes formada por átomos de carbono con hibridación sp^3 ; enlaces muy fuertes y por tanto será un compuesto con un punto de fusión muy elevado. El mayor de todos ellos. ($3550\text{ }^\circ\text{C}$)

Tricloruro de Boro: Con una geometría trigonal plana con un momento dipolar total igual a cero ($\vec{\mu} = 0$); por lo tanto, las fuerzas intermoleculares posibles sean aquellas debidas al establecimiento de dipolos instantáneo (Fuerzas de dispersión o London). Como la masa del nitrógeno es menor a la del BCl_3 , y el N_2 tendrá el menor punto de ebullición y fusión. Luego:

$\text{C}_{(\text{diamante})}$: $3550\text{ }^\circ\text{C}$

$\text{Al}_{(\text{s})}$: $650\text{ }^\circ\text{C}$

BCl_3 : $-196\text{ }^\circ\text{C}$

$\text{N}_2_{(\text{g})}$: $-107\text{ }^\circ\text{C}$

Bibliografía:

.- <http://www.quimitube.com/videoscategory/enlace-quimico>

.- *Modern Inorganic Chemistry* W.L. Jolly ISBN 0-07-032760-2

.- *Química. La Ciencia Central* Brown, T. et al., 9na Edición, México, Editorial Pearson Prentice Hall, 2004.

.- *Química* Chang, R. , 6ª Edición, México, Editorial Mc. Graw Hill, 2003.

<http://www.fullquimica.com/2011/04/enlace-covalente.html>

<http://www.fullquimica.com/2011/04/enlace-quimico.html>

<http://quimica2bac.wordpress.com/2010/11/28/la-teoria-del-enlace-de-valencia-6-hibridacio/>

<http://usuarios.lycos.es/ptro2/>

http://www.paleontologia.co.uk/paleopag/sections_frame.php?area=ch&page=chemist_tema4.htm

<http://www.google.es/search?hl=es&q=Mol%C3%A9culas+Hibridaci%C3%B3n&meta>

http://bilbo.edu.uy/~dec/ecampos/catedra_inorganica/general1/geometria/tabla.html

<http://www.uc.cl/quimica/agua/estructura.htm>

http://platea.pntic.mec.es/~jrodri5/fuerzas_intermolec_tabla.htm

http://www.xtal.igfr.csic.es/Cristalografia/parte_01.html

