



universitarios

ENLACE QUÍMICO



textos

Sabino José Menolasina Monrreal

2

ENLACE QUÍMICO



UNIVERSIDAD
DE LOS ANDES
VENEZUELA



PUBLICACIONES
VICERRECTORADO ACADÉMICO

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
Autoridades universitarias

Rector
Mario Bonucci Rossini

• **Vicerrectora Académica**
Patricia Rosenzweig Levy

• **Vicerrector Administrativo**
Manuel Aranguren Rincón

• **Secretario (E)**
Manuel Joaquín Morocoima

SELLO EDITORIAL PUBLICACIONES
DEL VICERRECTORADO ACADÉMICO

• **Presidenta**
Patricia Rosenzweig Levy

• **Coordinadora**
Marysela Coromoto Morillo Moreno

• **Consejo editorial**
Patricia Rosenzweig Levy
Marysela Coromoto Morillo Moreno
María Teresa Celis
Marlene Bauste
Francisco Grisolfá
Jonás Arturo Montilva
Joan Fernando Chipia L.
María Luisa Lazzaro
Alix Madrid

COLECCIÓN TEXTOS UNIVERSITARIOS:
CIENCIAS NATURALES

Sello Editorial Publicaciones del
Vicerrectorado Académico

Los trabajos publicados en esta colección han sido rigurosamente seleccionados y arbitrados por especialistas en las diferentes disciplinas.

**COLECCIÓN TEXTOS
UNIVERSITARIOS:
CIENCIAS NATURALES**
Sello Editorial Publicaciones
Vicerrectorado Académico

MONOGRAFÍAS DE QUÍMICA BÁSICA Y APLICADA
2 ENLACE QUÍMICO
Primera edición digital, 2023

© Universidad de Los Andes
Sello Editorial Publicaciones del
Vicerrectorado Académico
de la Universidad de Los Andes
© SABINO JOSÉ MENOLASINA MONRREAL

Hecho el depósito de ley
Depósito Legal: ME2023000116

ISBN: 978-980-11-2120-6



Corrección de estilo:
Carlos Perdomo Ramírez

Diagramación:
Sabino José Menolasina Monrreal
Marysela Coromoto Morillo Moreno

Fotografía de la portada:
<https://pixabay.com/es/illustrations/qu%C3%ADmica-mol%C3%A9culas-hidr%C3%B3geno-7030101/>

Universidad de Los Andes
Av. 3 Independencia,
Edificio Central del Rectorado,
Mérida, Venezuela.
publicacionesva@ula.ve
publicacionesva@gmail.com
<http://www2.ula.ve/publicaciones-academico>

Prohibida la reproducción total o parcial de esta obra sin la autorización escrita de los autores y editores.

Editado en la República Bolivariana de Venezuela

COLECCIÓN DE TEXTOS UNIVERSITARIOS

Esta colección contempla la edición de textos académicos que sirven de apoyo docente en las áreas del conocimiento existentes en la Universidad: Ciencias Humanísticas y Sociales, las Ciencias Naturales, la Ingeniería y la Tecnología, la Medicina y las ciencias de la salud y las ciencias agrícolas.

Entre los objetivos específicos de esta colección resaltan:

- Estimular la edición de libros al servicio de la docencia.
- Editar la obra científica de los profesores de nuestra Casa de Estudios.
- Publicar las investigaciones generadas en los centros e institutos de investigación.

Hasta ahora, un número considerable de textos universitarios ha sido publicado por miembros de nuestra planta profesoral, obras de las que se han beneficiado por igual estudiantes y docentes, en la búsqueda del mejoramiento de la calidad de nuestra educación de pre y posgrado.



**UNIVERSIDAD
DE LOS ANDES**



**PUBLICACIONES
VICERRECTORADO ACADÉMICO**

MONOGRAFÍAS DE QUÍMICA BÁSICA Y APLICADA

2

ENLACE QUÍMICO



**PUBLICACIONES
VICERRECTORADO ACADÉMICO**

Universidad de Los Andes
Mérida 2023 - Venezuela

MONOGRAFÍAS DE QUÍMICA BÁSICA Y APLICADA

2

ENLACE QUÍMICO

SABINO JOSÉ MENOLASINA MONRREAL

COLECCIÓN TEXTOS UNIVERSITARIOS:

Ciencias Naturales

**Sello Editorial Publicaciones del Vicerrectorado Académico
Universidad de Los Andes**

ÍNDICE

PRESENTACIÓN	09
PREFACIO	13
CAPÍTULO 1	Naturaleza del enlace químico	15
CAPÍTULO 2	Enlace iónico	41
CAPÍTULO 3	Enlace covalente	63
CAPÍTULO 4	Enlace metálico y enlace vibracional	145
BIBLIOGRAFÍA	165

PRESENTACIÓN

En la actualidad, un gran número de campos científicos y tecnológicos requieren de conocimientos de Química. Sin embargo, nuestra sociedad en general tiene una visión poco favorable de la misma, debido a su desconocimiento y a las formas poco significativas de su aprendizaje que se imparten en bachillerato, lo cual conlleva a ser una de las disciplinas menos elegidas para estudiar en las Universidades.

En bachillerato, la asignatura de Química se enseña inadecuadamente y la forma como se enseña no es atractiva, lo cual origina que los alumnos no la puedan entender.

En las discusiones que se plantean relacionadas con la educación en Química siempre está la necesidad de libros de Química que se adapten a las particularidades de los estudiantes que inician sus estudios universitarios y que los mismos mantengan un buen nivel en el desarrollo de los conceptos básicos.

A pesar de la diversidad de buenos libros de Química General existentes en el mercado, pocos son los que reúnen las cualidades expresadas arriba. Muchos de estos libros no contemplan la preparación integral que tienen los estudiantes, ni las exigencias programáticas de los cursos que se dictan en nuestras Universidades sobre química básica y aplicada.

Debido a la forma en que han sido estructurado muchos de estos libros de química, el proceso de aprendizaje de la Química se ve afectado, dificultándolo y produciendo en el estudiante miedo y rechazo.

La colección: Monografías de Química Básica y Aplicada fue concebida tomando en consideración las inquietudes que han presentado un gran número de estudiantes que han realizado los cursos de química general y aplicada, y los cursos de fisicoquímica impartidos por mi persona durante casi treinta años de docencia en la Universidad de Los Andes, Venezuela, así como en otras Universidades latinoamericanas. Esta obra ha sido diseñada para ser utilizada por estudiantes universitarios, politécnicos y tecnológicos de aquellas carreras, entre cuyo diseño curricular se contemplen cursos de química básica y aplicada.

A diferencia de otros textos convencionales de química, esta obra está constituida por una serie de seis (6) monografías contentivas de uno o más temas relacionados entre sí, distribuidos en capítulos, donde se expone tópicos de interés en el aprendizaje de la Química básica y aplicada.

Al final de cada uno de los capítulos descritos en cada monografía hay una sección con ejercicios resueltos en su mayoría paso a paso y relacionados con los temas explicados con la finalidad de que sirvan de material de evaluación para los estudiantes.

La colección: Monografías de Química Básica y Aplicada está constituida por:

MONOGRAFÍA 1: LA MATERIA, SUS ESTADOS, PROPIEDADES,
COMPOSICIÓN, TEORIAS Y LEYES QUE LA GOBIERNAN.

MONOGRAFÍA 2: ENLACE QUÍMICO

MONOGRAFÍA 3: FORMULAS, ECUACIONES QUÍMICAS Y NOMENCLATURA

MONOGRAFÍA 4: MEZCLAS HETEROGÉNEAS Y DISOLUCIONES

MONOGRAFÍA 5: EQUILIBRIOS QUÍMICOS

MONOGRAFÍA 6: ANALISIS QUÍMICO

Esta colección de monografías consta de más de 550 ejercicios resueltos paso a paso y se espera que su utilización contribuya de una manera fácil en los diferentes programas de química básica y aplicada, para estudiantes interesados en carreras científicas ya sea química, biología, ingeniería, geología y carreras de ciencias de la salud como, medicina, farmacia y bioanálisis; reduciendo el costo de la adquisición de libros que se requieren para cumplir con los programas específicos.

En fin, en esta colección de monografías de química básica y aplicada, se busca que cada una sea explicativa y completa del material necesario para que el proceso de aprendizaje por parte del estudiante se le haga fácil, interesante y amigable.

PREFACIO

Al empezar a comprender que la materia esa que podemos tocar y medir (la materia ordinaria) y que solo representa el 4,5% de la masa total del Universo en que vivimos, está constituida por sustancias, que a su vez están formadas por moléculas que se originan al menos por la unión de dos átomos iguales o diferentes, de inmediato nos surgen una serie de preguntas: ¿Cómo se mantienen juntos los átomos en las moléculas?, ¿Por qué se mantienen juntos?

Si se logra comprender el mecanismo a través del cual se une los átomos en las moléculas (enlace químico), este conocimiento nos permitiría controlar la formación o ruptura de estos enlaces y, por consiguiente, la síntesis de nuevas sustancias, dependiendo siempre de lo que estemos necesitando. Este conocimiento sabiéndolo aplicar correctamente mejoraría la calidad de vida de los seres vivos en equilibrio con el medio ambiente, asegurándonos una infinidad de aplicaciones necesarias para preservar la vida. Sin embargo, su aplicación incorrecta podría conducirnos a la síntesis de sustancias nocivas que se utilizarían luego en guerras que conllevarían a la aniquilación y contaminación de nuestro planeta Tierra.

La estructura didáctica de esta monografía sobre el enlace químico ha sido diseñada para despertar el interés y la curiosidad del estudiante por el tema, y que, con el menor esfuerzo posible, el estudiante adquiera los conocimientos necesarios. Una vez estudiado los conceptos fundamentales presentes en la monografía, el estudiante podrá, resolver fácilmente los problemas y comprobar por sí mismo si ha entendido correctamente lo explicado.

El autor, en esta monografía, ha querido poner al alcance de profesores y alumnos un estudio detallado y actualizado sobre el enlace químico.

En el capítulo 1, se describe la naturaleza del enlace químico, mostrado que gracias al trabajo científico que se ha venido desarrollando desde hace 100 años, relacionado con la teoría atómica, las leyes ponderales, los distintos modelos atómicos propuestos, leyes de Faraday y la teoría de Arrhenius (algunos de estos trabajos explicados en la monografía 1), hoy en día se tiene una idea clara sobre la naturaleza del enlace químico.

En los capítulos 2, 3 y 4, se hace un análisis descriptivo actualizado de lo que conocemos como, enlace iónico, covalente, metálico y vibracional respectivamente. Presentando además, al final de cada capítulo, una serie de ejercicios resueltos para la comprensión por parte del estudiante del tema desarrollado.

Capítulo 1

Naturaleza del enlace químico

Sabino José Menolasina Monrreal

1.1. Introducción

Hasta la presente fecha hay alrededor de 118 elementos catalogados en la tabla periódica, mientras que existen más de un millón de sustancias químicas en la naturaleza. Esto se debe a que los átomos de los diferentes elementos pueden reaccionar unos con otros para formar una gran variedad de sustancias químicas denominadas compuestos. Un compuesto se forma cuando dos o más átomos diferentes se enlazan químicamente. El compuesto que resulta de este enlace es química y físicamente único y diferente de sus átomos originarios, debido a que los átomos enlazados en un compuesto ejercen un efecto profundo sobre las propiedades físicas y químicas de dicho compuesto.

Dependiendo de las características que presentan los elementos presentes en la tabla periódica, estos pueden formar una variedad de compuestos, tales como, las sales, las cuales se forman por la unión de metales y no-metales y se caracterizan por presentar una estructura cristalina, ser duras y presentar altas temperaturas de fusión. Por otro lado, se tienen a los compuestos metálicos que presentan características distintas, tales como, conductividad, brillo, dureza, etc., y finalmente otras sustancias formadas exclusivamente por no-metales que, en general, son gaseosas, se presentan como líquidos volátiles o sólidos frágiles y quebradizos.

Junto al conocimiento de que la materia puede ser transformada físicamente, de que en un proceso químico la materia no se crea o se destruye, sino que se transforma y que, a través de su análisis químico, se sabe que la materia está constituida por moléculas que se originan al menos por la unión de dos átomos iguales o diferentes, surgen una serie de preguntas: ¿Cómo se mantienen juntos los átomos en las moléculas?, ¿Por qué se mantienen juntos?, ¿Qué determina que unos átomos puedan unirse y otros no para formar moléculas?

Para explicar el porqué de estas transformaciones tanto físicas y químicas que experimenta la materia, solo tenemos que estudiar y analizar la estructura molecular que presentan las sustancias, la cual está esencialmente determinada por la carga eléctrica de las moléculas que la conforman.

Con los conocimientos científicos sobre el comportamiento fisicoquímico de diversas sustancias químicas de que se dispone, basados en leyes y teorías, tales como, las leyes de Faraday, la teoría de Arrhenius sobre la disociación electrolítica, así como, el conocimiento de modelos de la estructura atómica y de la distribución de los electrones en los átomos, parece razonable pensar que las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en las moléculas sean de naturaleza eléctrica, y en particular, que la estructura electrónica de los átomos sea la principal responsable de la naturaleza de estas fuerzas.

Estas consideraciones han permitido establecer las bases de lo que se conoce hoy como la Teoría electrónica del enlace químico, que no es más que una forma de explicar las características de las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en las moléculas

En 1916, el químico americano Gilbert Newton Lewis fue quien propuso que el enlace químico se formaba entre dos átomos debido a la interacción de los electrones presentes entre ellos [1a]. Lewis había observado que muchos elementos

eran más estables cuando ellos contenían ocho electrones en su envoltura de valencia. El sugirió que los átomos con menos de ocho valencias de electrones se enlazaban para compartir electrones y completar sus envolturas de valencia. Según Lewis la tendencia que poseen los átomos de lograr estructuras similares a las del gas noble más cercano explica la formación de los enlaces químicos. Esta conclusión es mundialmente conocida como la Regla del Octeto y se enuncia de la siguiente manera [1a]:

“Cuando se forma un enlace químico los átomos reciben, ceden o comparten electrones de tal forma que la capa más externa de cada átomo contenga ocho electrones, y así adquiere la estructura electrónica del gas noble más cercano en el sistema periódico”

No obstante, hay muchas excepciones a esta regla y hasta se han logrado sintetizar algunos compuestos de los gases nobles. Mientras que algunas de las predicciones de Lewis han sido desde entonces probadas como incorrectas, su trabajo estableció la base de lo que se conoce hoy en día sobre los enlaces químicos.

Sabemos que existen tres principales tipos de enlaces químicos: enlaces iónicos, enlaces covalentes y enlaces metálicos. Sin embargo, recientemente, estudios realizados por químicos teóricos de la Universidad Libre de Berlín y la Universidad de Saitama, en Japón, confirmaron la existencia de los enlaces vibracionales [1b], los cuales, aunque sean fugaces, deben añadirse a la lista de los enlaces químicos conocidos.

1.2. Estructuras de Lewis

La estructura o fórmula de Lewis permite ilustrar de manera sencilla los enlaces químicos, en ella, el símbolo del elemento representa el núcleo del átomo más los electrones de los niveles de energía más internos que están llenos y los puntos o pequeñas cruces que rodean al símbolo corresponden al número de electrones presentes en la capa de valencia. Ejemplo:

H•	Estructuras de Lewis						He••
Li•	Be••	•B•	•C•	•N••	•O••	•F••	•Ne••

Las estructuras de Lewis también pueden ser usadas para mostrar el enlace entre átomos. Los electrones que se enlazan se colocan entre los átomos y pueden ser representados por un par de puntos, o un guión (cada guión representa un par de electrones, o un enlace). Ejemplo:

H ₂	H:H	H-H
O ₂	:O: :O:	:O=O:

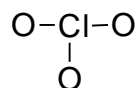
En la representación de una estructura de Lewis se debe considerar:

- Escribir el arreglo espacial correcto de los átomos usando enlaces sencillos.
- Calcular el número total de electrones de valencia disponibles sumando el número de electrones de valencia por cada átomo presente en la molécula. Si la molécula es un anión se suma un electrón por cada carga negativa que presente, si es un catión se resta un electrón por cada positiva que presente el catión.
- Descontar dos electrones de valencia por cada enlace sencillo que se represente.
- Distribuir adecuadamente los electrones restantes de tal manera que cada átomo cumpla con la regla del octeto a excepción del hidrógeno que deberá tener solo 2 electrones para cumplir con la regla del dueto. Si se observa que hay muy pocos electrones por repartir se cambian los enlaces sencillos por enlaces múltiples. La formación de un enlace doble compensa la deficiencia de dos electrones y uno triple la deficiencia de cuatro electrones.

Ejemplo 1: Determine la estructura o fórmula de Lewis para el ión clorato, ClO_3^- .

R:

- Arreglo espacial del ion usando enlaces sencillos:



- Cálculo del número total de electrones de valencia disponibles:

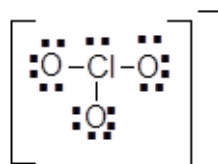
$$\#e_{\text{valencia}}^-(\text{totales}) = \#\text{átomos}_{\text{Cl}} \cdot \#e_{\text{valencia}}^- + \#\text{átomos}_{\text{O}} \cdot \#e_{\text{valencia}}^-$$

$$\#e_{\text{valencia}}^-(\text{totales}) = 1 \cdot 7 + 3 \cdot 6 = 25$$

- La carga negativa aporta 1 e⁻ y los tres enlaces sencillos que se han escrito restan 6 electrones, por lo tanto:

$$\#e_{\text{valencia}}^{-} (\text{disponibles}) = 25 + 1 - 6 = 20$$

- Distribución de los electrones según la regla del octeto:

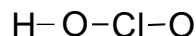


Estructura de Lewis

Ejercicio 2: Determine la estructura o fórmula de Lewis para el ácido cloroso, HClO₂.

R:

- Arreglo espacial del ácido usando enlaces sencillos:



- Cálculo del número total de electrones de valencia disponibles:

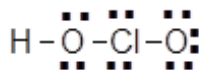
$$\#e_{\text{valencia}}^{-} (\text{totales}) = \# \text{átomos}_{(\text{Cl})} \cdot \#e_{\text{valencia}}^{-} + \# \text{átomos}_{(\text{O})} \cdot \#e_{\text{valencia}}^{-} + \# \text{átomos}_{(\text{H})} \cdot \#e_{\text{valencia}}^{-}$$

$$\#e_{\text{valencia}}^{-} (\text{totales}) = 1 \cdot 7 + 2 \cdot 6 + 1 = 20$$

- Los tres enlaces sencillos que se han escrito restan 6 electrones, por lo tanto:

$$\#e_{\text{valencia}}^{-} (\text{disponibles}) = 20 - 6 = 14$$

- Distribución de los electrones según la regla del octeto:



Estructura de Lewis

Una molécula puede tener varias estructuras de Lewis. El concepto de carga formal nos ayuda a decidir cuál estructura es más correcta (nótese el término “más”: ambas estructuras son correctas, pero una de ellas es más estable que la otra).

La diferencia entre los electrones de valencia de un átomo y el número de electrones asignado en la estructura de Lewis se denomina la carga formal del átomo. La carga formal representa la carga eléctrica que posee un átomo en una determinada molécula.

La carga formal de un determinado átomo se calcula de la siguiente forma:

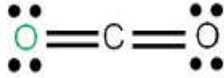
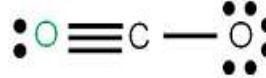
$$\text{Carga formal} = [\text{N}^\circ \text{ electrones de valencia}] - [\text{N}^\circ \text{ electrones no enlazados}] - 1/2 [\text{N}^\circ \text{ electrones enlazados}]$$

La carga formal se calcula para todos los átomos que conforman la molécula (o ión) y la suma de cargas formales debe ser igual a la carga eléctrica de la especie en estudio (si es una molécula neutra, debe ser cero; si es un ión, debe coincidir con la carga de éste). La estructura más estable será aquella que:

1. Tenga a sus átomos con cargas formales igual a cero.
2. Tenga a sus átomos con cargas formales similares y más cercanas a cero.
3. Tenga a los átomos más electronegativos soportando las cargas negativas.

Ejercicio 3. Represente la estructura de Lewis más estable de las siguientes moléculas: A) CO₂ y B) BF₃.

R: A) CO₂

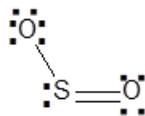
Estructura 1**Estructura 2**

Átomo	Nº e- valencia	Nº e- no enlazados	$1/2(N^{\circ} e^- \text{ enlazados})$	Carga formal
O	6	4	2	0
C	4	0	4	0
O	6	4	2	0

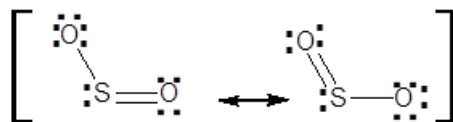
Átomo	Nº e- valencia	Nº e- no enlazados	$1/2(N^{\circ} e^- \text{ enlazados})$	Carga formal
O	6	2	3	+1
C	4	0	4	0
O	6	6	1	-1

En ambos casos se tiene que, la suma de las cargas formales coincide con la carga del compuesto, igual a cero, se trata de un compuesto neutro. Según los criterios enunciados, para determinar cuál es la estructura más estable, se tiene que la estructura más estable es la 1, debido a que todos sus átomos tienen una carga formal cero.

Existen algunas sustancias químicas en donde las estructuras de Lewis no describen adecuadamente las propiedades que estas presentan. Por ejemplo, en la molécula de SO_2 , la estructura de Lewis sería:

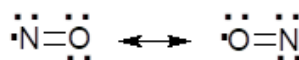


Esta estructura nos dice que existen dos tipos de enlaces diferentes, pero de acuerdo con los experimentos realizados se ha observado que existe solamente un tipo de enlace y que la longitud de dicho enlace es menor que la de un enlace sencillo y mayor que la de un enlace doble, por lo tanto, se considera que este tipo de enlace es un híbrido intermedio entre un enlace sencillo y un enlace doble:



Forma de Resonancia

Existen otras moléculas que contienen un número impar de electrones de valencia:



En este tipo de sustancia (radicales libres) es imposible escribir estructuras de Lewis en que cada átomo obedezca la regla del octeto.

En conclusión, las estructuras de Lewis presentan ciertas limitaciones para describir el enlace químico de ciertas moléculas. El modelo de Lewis del enlace químico asume que cada par de electrones enlazantes están localizados entre los dos átomos enlazados. Sin embargo, eso no es verdad porque no podemos predecir dónde se encuentran los electrones en un átomo.

“Si se logra comprender el mecanismo a través del cual se une los átomos en las moléculas (enlace químico), este conocimiento nos permitirá controlar la formación o ruptura de estos enlaces, por consiguiente, la síntesis de nuevas sustancias, dependiendo siempre de lo que estemos necesitando. Este conocimiento si se aplica correctamente pensando en la Humanidad conduce sin duda a una infinidad de aplicaciones necesarias para preservar la vida. Sin embargo, su aplicación incorrecta podría conducirnos a guerras que conllevarían a la aniquilación y contaminación de nuestro sistema termodinámico, el planeta Tierra”

En esta monografía se hará referencia a los tres modelos de enlace químico: enlace iónico, enlace covalente y enlaces metálicos.

1.3. Ejercicios relacionados con el tema

Algunos ejercicios en esta sección fueron tomados de Irlles et al. 2017 y 2019, [1c, 1d].

1. ¿Cuál de las siguientes moléculas no es una excepción a la regla del octeto según la notación de Lewis?
 - a) SiO_2
 - b) BeCl_2
 - c) BCl_3
 - d) PF_5

R: Las estructuras de Lewis de las cuatro sustancias propuestas son:



La única sustancia que cumple la regla del octeto es SiO_2 . La respuesta correcta es la a.

2. De las siguientes especies químicas hay una que no es posible:
 - a) Dicloruro de berilio
 - b) Tricloruro de fósforo
 - c) Tetracloruro de carbono

d) Pentacloruro de nitrógeno

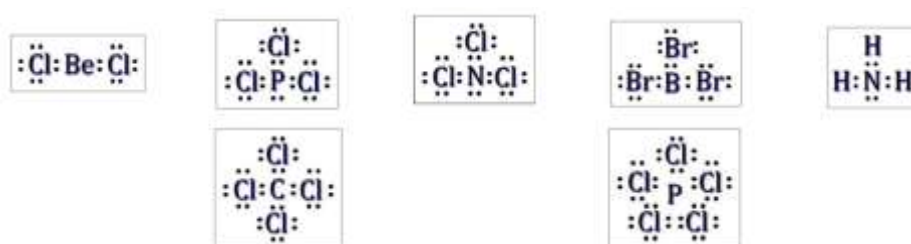
e) BBr_3

f) PCl_5

g) NH_3

h) NCl_3

R: Las estructuras de Lewis de todas sustancias excepto el NCl_5 son:

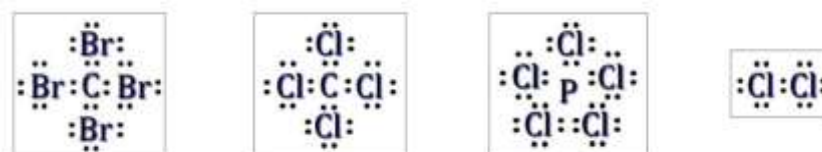


La molécula de NCl_5 no puede existir, ya que el nitrógeno, un elemento del segundo periodo y del grupo 15 del sistema periódico, presenta configuración electrónica externa $2s^2 2p^3$, pero no se puede hibridar, o en otras palabras, “expandir” su capa de valencia y ampliar su octeto, alojando más de ocho electrones en la misma ya que no tiene orbitales d disponibles en su capa de valencia. La respuesta correcta es la d.

3. Diga cual de las siguientes especies no cumple con la regla del octeto:

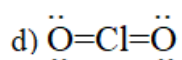
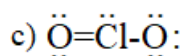
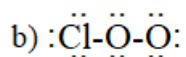
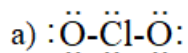
a) CBr_4 ; b) CCl_4 ; c) PCl_5 ; d) Cl_2

R: Las estructuras de Lewis de las sustancias propuestas son:



La única sustancia que no cumple la regla del octeto es PCl_5 .

4. Indica cuál de las estructuras de Lewis que se presentan es la más correcta para el ClO_2 :



e) Ninguna de las anteriores

R: Las configuraciones electrónicas abreviadas del oxígeno y cloro son, respectivamente:

O: $[\text{He}]2s^22p^4$ y Cl: $[\text{Ne}]3s^23p^5$.

De ambas se deduce que estos elementos tienen, respectivamente, 6 y 7 electrones de valencia, por tanto, el número total de electrones de valencia es, $7 + (2 \times 6) = 19$. Ninguna de las estructuras propuestas es correcta como estructura de Lewis del ClO_2 , ya que:

- Las estructuras a) y b) tienen 20 electrones.

- La estructura c) 18 tiene electrones.

- La estructura d) tiene 16 electrones.

La verdadera estructura de Lewis para el ClO_2 es:

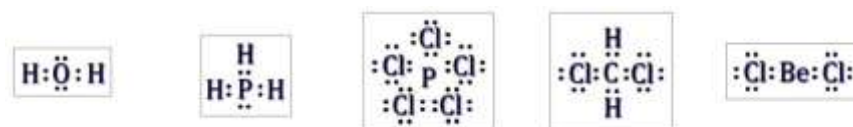
Se trata de una especie paramagnética (con electrones desapareados) que, además, presenta resonancia.

La respuesta correcta es la e.

5. A través de las estructuras de Lewis, identifique: ¿cuál de las siguientes moléculas tiene únicamente un par de electrones no compartido sobre el átomo central?

- a) H_2O
- b) PH_3
- c) PCl_5
- d) CH_2Cl_2
- e) BeCl_2

R: Las estructuras de Lewis de las cinco moléculas propuestas son:



Como se observa en las estructuras de Lewis, la única molécula que tiene un par de electrones solitario sobre el átomo central es la de PH_3 .

6. Señale si alguna de especies siguientes cumple la regla del octeto:

- a) NO_2
- b) NO
- c) SO_4^{2-}
- d) Ninguna de las anteriores

R: Señale si alguna de especies siguientes cumple la regla del octeto:



Ninguna sustancia cumple la regla del octeto.

La respuesta correcta es la e.

7. De las siguientes moléculas o iones que contienen nitrógeno, sólo una de ellas no tiene pares de electrones solitarios sobre este elemento. Identifíquela a través la estructura de Lewis:



R: Las estructuras de Lewis de las cuatro sustancias propuestas son:



La sustancia que no tiene pares de electrones solitarios sobre el átomo de nitrógeno es NH_4^+ .

La respuesta correcta es la b.

8. Determine la estructura o fórmula de Lewis para el ion clorato, ClO_3^- .

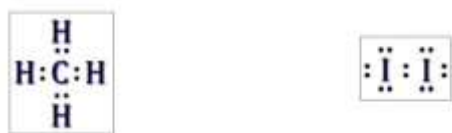
R: Ver sección 3.1 la respuesta.

9. ¿Cuál de los siguientes compuestos se representa por un conjunto de estructuras resonantes?

- a) NaCl
- b) Ca(OH)₂
- c) CH₄
- d) I₂
- e) SO₂.

R: a-b) Falso. Los compuestos NaCl y Ca(OH)₂ presentan enlace predominantemente iónico por lo que no pueden presentar resonancia.

c-d) Falso. Las estructuras de Lewis del CH₄ e I₂ son:



Ambas estructuras no presentan enlaces múltiples por lo que no existe la posibilidad de resonancia en ellas.

e) Verdadero. Como se deduce de la estructura de Lewis del SO₂, sí presenta resonancia:



La respuesta es la e.

10. De los siguientes tríos de moléculas, indique cual es el que contiene las moléculas que tienen sus enlaces sencillos o simples:

- a) F₂, C₂H₄, H₂O

12. ¿En cuál de las siguientes especies químicas el átomo central tiene solamente un par de electrones no enlazantes?

- a) SF₆
- b) H₂O
- c) SF₄
- d) XeF₂
- e) XeF₄

R: Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



a) Falso. SF₆ es una especie que no posee pares de electrones no enlazantes sobre el átomo central.

b-e) Falso. H₂O y XeF₄ son especies que poseen dos pares de electrones no enlazantes sobre el átomo central.

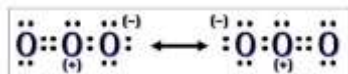
c) Verdadero. SF₄ es una especie que posee un único par de electrones no enlazantes sobre el átomo central.

d) Falso. XeF₂ es una especie que posee tres pares de electrones no enlazantes sobre el átomo central.

La respuesta correcta es la c.

13. Dibuje las estructuras resonantes que representa la mejor estructura de Lewis de la molécula O_3 .

R: La molécula de O_3 se representa mediante las dos estructuras resonantes siguientes:



14. De los siguientes grupos de moléculas, a través de sus estructuras de Lewis, indique en cuál de ellos, todas sus moléculas tienen un doble enlace:

- a) H_2O_2 , C_2H_2
 b) P_2 , SCl_2 , S_2Cl_2
 c) H_2CO , CH_3OH , $HCOOH$
 d) $HCHO$, $HCOOH$
 e) SCl_2 , S_2Cl_2

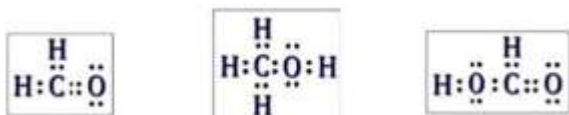
R: a) Falso. Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



b) Falso. Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



c) Falso. Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



d) Verdadero. Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



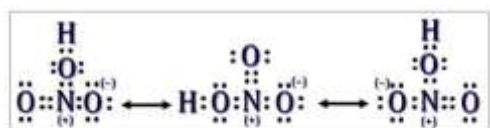
e) Falso. Las estructuras de Lewis de las moléculas propuestas son:



La respuesta correcta es la d.

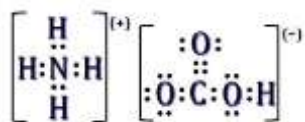
15. Describa las formas resonantes para la molécula de HNO_3 .

R: Las diferentes estructuras de Lewis resonantes de la molécula de ácido nítrico son:



16. Dibuja el diagrama de Lewis de la molécula de NH_4HCO_3 y explica si sigue la regla del octeto.

R: La estructura de Lewis para la molécula NH_4HCO_3 es:



todos los átomos de la molécula cumplen la regla del octeto (es preciso señalar que el átomo de hidrógeno llena su única capa con sólo 2 electrones).

17. Escriba las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas:

a) CS₂

b) CH₃I

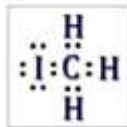
c) AsF₃

R: Las estructuras de Lewis son las siguientes:

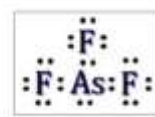
a) CS₂



b) CH₃I

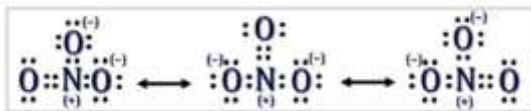


c) AsF₃



18. Escribe las estructuras de Lewis del anión nitrato, indicando las posibles formas resonantes y las cargas formales sobre cada átomo.

R: Como se trata de una especie que presenta resonancia tiene varias estructuras de Lewis que constituyen un “híbrido de resonancia”:



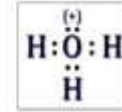
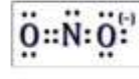
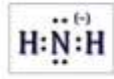
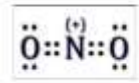
Carga formal = [Nº electrones de valencia] – [Nº electrones no enlazados] – $\frac{1}{2}$ [Nº de electrones enlazados]

Por lo tanto, la carga de los átomos de la especie es:

$c(\text{O}_{\text{O}=\text{O}}) = 6 - 6 - 1/2(2) = -1$; $c(\text{O}_{\text{O}-\text{O}}) = 6 - 4 - 1/2(2) = 0$; $c(\text{N}) = 5 - 0 - 1/2(8) = +1$

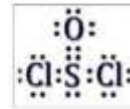
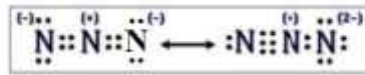
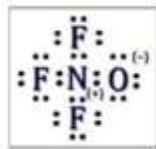
19. Dada las siguientes especies químicas: NO_2^+ , NH_2^- , NO_2^- y H_3O^+ . Escriba sus estructuras de Lewis.

R: Las estructuras de Lewis de las especies propuestas son, respectivamente:



20. Dada las siguientes especies químicas: F_3NO , N_3^- , SOCl_2 y NCS^- :

R: Las estructuras de Lewis de las especies propuestas son, respectivamente:



21. Representa las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas: C_2H_2 , H_2O y CO_2 .

R: Para establecer los diagramas de Lewis de esas moléculas, precisamos conocer la posición en el Sistema Periódico de sus elementos (pues en función de ella ya puede saberse el número de enlaces covalentes que establece cada átomo no metálico, y el número de pares de electrones sin compartir que retiene), o sus números atómicos, que proporcionan la misma información analizando la configuración electrónica más externa.

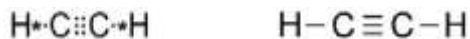
Según esto último, tendríamos: $Z_{\text{O}} = 8$; $1s^2 2s^2 2p^4$; $Z_{\text{C}} = 6$; $1s^2 2s^2 2p^2$

Cada átomo de O tiene en su última capa 6 electrones (que remarcamos en

negrita), por lo que siempre pondrá dos en juego a compartir con otros dos de otro/os átomo/os (formación de dos enlaces covalentes), permaneciendo los otros 4 electrones sin compartir.

Del mismo modo, cada átomo de C tiene 4 electrones en su última capa (también remarcados), y deberá ponerlos todos en juego para compartir con otros átomos (no tendrá, por tanto, ningún electrón sin compartir), formando siempre 4 enlaces covalentes. Por lo tanto, se tiene que las estructuras de Lewis que se piden son:

C₂H₂:



H₂O:



CO₂:



22. A la luz de las teorías de enlace de valencia y Lewis, razone por qué dos átomos de cloro tienden a juntarse para formar una molécula. Indique además dos ejemplos de moléculas que no cumplen la regla del octeto. Datos: número atómico cloro = 17.

R: Según la teoría de Lewis, dos átomos de cloro compartirán un par de electrones para completar el octeto electrónico y conseguir la estabilidad. Con la teoría de enlace de valencia, el razonamiento pasa por ver la configuración electrónica de cada átomo de cloro ([Ne] 3s²3p⁵) y darse

cuenta de que para completar su capa de valencia y conseguir una configuración de gas noble necesita un electrón, que puede compartir con otro átomo de cloro.

Es evidente que en la naturaleza existe el cloro gas en forma diatómica, porque en forma monoatómica sería inestable.

Se podrían citar una molécula con octete incompleto como el BCl_3 , en la que el átomo central de boro tiene tan solo seis electrones, y una molécula con octete expandido como el PBr_5 , en la que el átomo central de fósforo tiene 10 electrones alrededor.

23. Dibuje las estructuras de Lewis de las moléculas de nitrógeno y oxígeno e indique cuál de estas dos moléculas será más reactiva. Razone su respuesta.

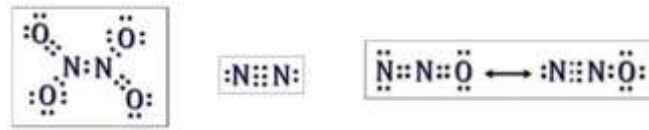
R: Las estructuras de Lewis para las dos moléculas son:



Se puede deducir que la molécula de oxígeno será más reactiva que la de nitrógeno, porque el triple enlace que une a los dos átomos de nitrógeno necesita más energía para romperse que el doble enlace del oxígeno.

24. A partir de estructuras de Lewis, entre las moléculas: N_2O_4 , N_2O y N_2 , según la longitud del enlace NN deduzca cual presenta el enlace mas corto.

R: Las estructuras de Lewis de las moléculas N_2O_4 , N_2O y N_2 son:



Respecto a la longitud del enlace NN, se observa que:

La molécula N_2O_4 presenta un enlace sencillo NN.

La molécula N_2O tiene dos estructuras de resonancia, por lo que la longitud del enlace NN esta comprendida entre la del enlace doble y el triple.

La molécula N_2 presenta un enlace triple NN.

Por lo tanto, la molécula que presenta el enlace más corto NN es la molécula de N_2 , debido al enlace triple que presenta.

25. Representar las estructuras de Lewis y calcular la carga formal en los compuestos: Trióxido de azufre y ácido perclórico (clorotetraoxo de hidrógeno).

R: La carga formal se calcula para cada átomo restando al n° de electrones de valencia que tiene el átomo aislado el número de electrones asignados al átomo en la estructura de Lewis.

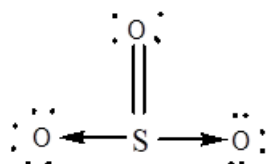
La carga formal de un átomo en una estructura de Lewis es la carga que tendría ese átomo en la molécula si todos los átomos que la componen tuvieran la misma electronegatividad. Para calcularla se aplican las siguientes reglas:

- Los electrones no compartidos se asignan al átomo en el cual se encuentran
- De los electrones enlazantes se asigna la mitad a cada uno de los átomos que los comparten.

Así, tendremos que para cada átomo:

Para el trióxido de azufre:

Nº de electrones de valencia: S = 6; O = 6



Cargas formales:

$$S = 6 - 1/2(8) = 6 - 4 = +2$$

$$O = 6 - 4 - 1/2(4) = 6 - 4 - 2 = 0$$

Los otros dos O son iguales:

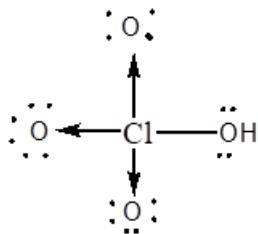
$$O = 6 - 6 - 1/2(2) = -1$$

$$O = 6 - 6 - 1/2(2) = -1$$

$$\text{Carga total: } +2 -1 -1 = 0$$

Para el ácido perclórico:

Nº de electrones de valencia: Cl = 7; O = 6; H = 1



Cargas formales:

$$Cl = 7 - 1/2(8) = 7 - 4 = +3$$

$$O = 6 - 4 - 1/2(4) = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$H = 1 - \frac{1}{2} 2 = 0$$

Los otros tres O son iguales:

$$O = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$

$$O = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$

$$O = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$

$$\text{Carga total: } +3 -1 -1 -1 = 0$$

Capítulo 2

Enlace iónico

Sabino José Menolasina Monrreal

2.1. Introducción

Walther Kossel en 1916, lanzó una teoría similar a la de Lewis, con la diferencia de que su modelo asumía una transferencia completa de electrones entre los átomos, con lo que era un modelo de enlace iónico [2a]. El enlace iónico consiste en la atracción electrostática entre átomos con cargas eléctricas de signo contrario.

Este tipo de enlace se establece entre átomos de elementos poco electronegativos con los de elementos muy electronegativos. Durante este proceso de perder o ganar electrones cargados negativamente, los átomos que reaccionan forman iones. Los iones cargados de manera opuesta se atraen entre ellos a través de fuerzas electrostáticas que son la base del enlace iónico.

Para que formen los iones se requiere de un doble proceso de ionización que permita que uno de los átomos involucrado en el enlace se transforme en ion positivo (catión), por pérdida de electrones y el otro en uno negativo (anión) por ganancia de electrones [2b]. Por lo tanto, para que se establezca un enlace iónico es necesario que uno de los elementos pueda ganar electrones y el otro perderlo.

Por ejemplo, la sal común de mesa, NaCl, es una sustancia en la que sus átomos forman enlace iónico. Cuando los átomos del cloruro sódico se unen para alcanzar la estructura estable, se produce una transferencia de electrones de un átomo a otro y, por tanto, se convierten en iones (cationes y aniones):



Como el sodio es un elemento muy electropositivo y el cloro electronegativo, lo que ocurre es que el átomo de sodio transfiere un electrón al átomo de cloro, para de esta forma obtener ambos la estructura electrónica estable correspondiente a la del gas noble más próximo, en este caso el neón para el sodio y el argón para el cloro.

La tendencia de formación de un enlace iónico está relacionada entonces, con la capacidad de los átomos de ganar o perder electrones y formar iones que presenten ocho electrones en su esfera más externa, tal como se describió anteriormente con la regla del octeto.

Los iones son especies cargadas eléctricamente, que se atraen y repelen de acuerdo con la ley de Coulomb, para formar agregados mucho más estables que el sistema inicial de referencia, formado por los átomos aislados.



En estado sólido, los compuestos iónicos forman redes cristalinas muy estables, ya que las fuerzas de atracción no se limitan únicamente a los iones vecinos, sino que abarcan a todo el sólido. Por ello no se puede hablar de moléculas en estado sólido de compuestos como el cloruro sódico, NaCl, ya que en realidad todo el sólido es como una molécula gigante [2b].

Los compuestos iónicos en estado sólido no están formados por pares iónicos o por agrupaciones pequeñas de iones.

Por efecto de la atracción electrostática cada ion tiende a rodearse de iones de carga opuesta en número que depende de su tamaño y carga. El resultado de esto es la formación de un retículo cristalino en el cual los aniones y los cationes están dispuestos según una geometría determinada.

Estos cristales iónicos, son duros y quebradizos, poseen temperatura de fusión altas. Son solubles en solventes polares y al ser disueltos en agua, son capaces de conducir la electricidad y se les denominan generalmente electrolitos.

Por ejemplo, el cloruro de sodio sólido presenta la siguiente estructura cristalina:

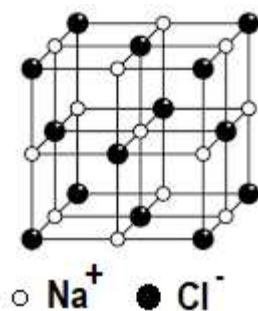


Figura 2.1. Estructura cristalina del cloruro de sodio [3]

Algunos compuestos iónicos presentan estructuras cristalinas sencillas y otras estructuras cristalinas más complicadas, como, por ejemplo: CsCl (estructura sencilla) y CaF₂ (estructura complicada):

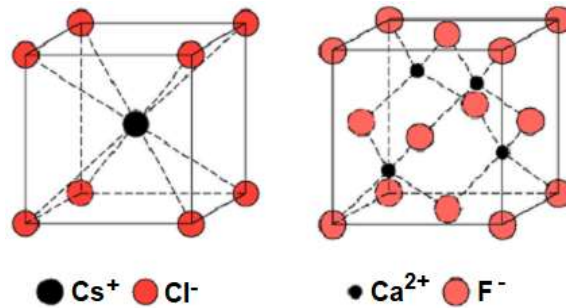


Figura 2.2. Estructuras cristalinas del CsCl y CaF₂ [4a]

Para la comprensión del mecanismo a través del cual se forman estas estructuras cristalinas es necesario conocer en primer lugar como se origina la interacción entre dos iones (par iónico) y luego, como se justifica el retículo cristalino.

2.2. Contenido energético de las redes cristalinas

Las sustancias iónicas están constituidas por iones ordenados en el retículo cristalino; las fuerzas que mantienen esta ordenación son fuerzas de Coulomb, muy intensas. Esto hace que las sustancias iónicas sean sólidos cristalinos con puntos de fusión elevados. En efecto, para fundir un cristal iónico hay que deshacer la red cristalina para separar los iones.

El aporte de energía necesario para la fusión, en forma de energía térmica, ha de igualar al de energía reticular, que es la energía desprendida en la formación de un mol de compuesto iónico sólido a partir de los correspondientes iones en estado gaseoso. Esto hace que haya una relación entre energía reticular y punto de fusión, siendo este tanto más elevado cuanto mayor es el valor de aquella.

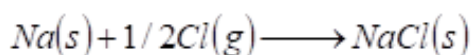
La densidad de los compuestos iónicos varía según el espaciado entre los iones en el enrejado cristalino y también, por supuesto con la masa de los iones que participan en el enlace.

La energía reticular no se obtiene fácilmente por vía experimental, pero puede ser evaluada relacionándola con las otras cantidades o medidas termodinámicas, que intervienen en el proceso de combinación de aniones y cationes gaseosos para formar la molécula del sólido cristalino.

El procedimiento a través del cual se pueden obtener los valores de la energía reticular e conocido como Ciclo de Born-Haber

2.2.1. Ciclo de Born-Haber

Al formar un compuesto iónico a partir de sus elementos se deben tomar en cuenta la energía que se requiere para destruir los enlaces en las moléculas de los elementos que lo forman, así como, la energía requerida para la formación de la red cristalina de dicho compuesto iónico [2b]. Por ejemplo, la reacción de formación del cloruro de sodio:



es un proceso complicado. La energía que se libera cuando ocurre esta reacción, es determinada no solamente por la propiedad del cloruro de sodio en sí, sino también por la fuerza del enlace entre el sodio metálico y el cloro molecular.

Un proceso hipotético para explicar este proceso sería considerar un proceso de tres etapas, tal como se muestra a continuación:

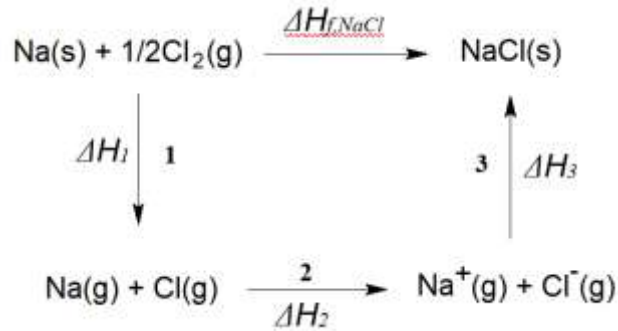


Figura 2.3 Ciclo de Born-Haber [2b]

Donde $\Delta H_{f,\text{NaCl}}$ es la variación de entalpía de formación del cloruro de sodio y es igual a la sumatoria de $\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$, es decir:

$$\Delta H_{f,\text{NaCl}} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 \quad \text{Etapa 1}$$

En la etapa 1, ΔH_1 representa la variación de entalpía que se requiere para la vaporización de un mol de sodio metálico ($\Delta H_{\text{vap,NaCl}}$) y para la disociación del cloro en átomos (E_D):

$$\Delta H_1 = \Delta H_{\text{vap,NaCl}} + 1/2E_D \quad \text{Etapa 2}$$

En la etapa 2, ΔH_2 representa la variación de entalpía que resulta de transformar los átomos gaseosos en iones gaseosos, es decir la energía que se requiere para la ionización del sodio (I_{Na}) y la energía que se libera cuando se forma el ion cloruro (Afinidad electrónica, A_E):

$$\Delta H_2 = I_{\text{Na}} - A_E \quad \text{Etapa 3}$$

Finalmente, en la tercera etapa, ΔH_3 representa la variación de entalpía que resulta cuando los iones gaseosos se condensan a la red cristalina de cloruro de sodio. La energía liberada por el sistema en este paso se llama energía iónica de la red cristalina (E_R) y es una medida directa de la estabilidad

del cristal iónico:

$$\Delta H_3 = E_R$$

Etapa 4

Los requisitos principales para la formación de compuestos iónicos son: energías de ionización relativamente bajas y afinidades electrónicas relativamente grandes, por lo que los compuestos típicamente iónicos son los formados por los elementos ubicados cerca de los extremos opuestos de la tabla periódica de los elementos. Es decir, el enlace se forma cuando la diferencia de electronegatividad entre los 2 átomos es muy grande. El elemento más electronegativo se lleva al electrón y el menos electronegativo lo pierde. Comúnmente uno de ellos suele ser el oxígeno o algún halógeno y el otro es uno de los metales alcalinos (Na, K, Li).

En el caso de la sal común de mesa, NaCl, el átomo de cloro es más electronegativo que el de sodio y se lleva al electrón, quedando con carga negativa. El enlace iónico se representa poniendo la carga positiva y negativa en el átomo que corresponda, por ejemplo:



La regla del octeto predice correctamente las configuraciones electrónicas de los iones monoatómicos que forman entre los elementos de los grupos I y IIA y los elementos no metálicos. Existe una variedad de iones formados por los elementos representativos y de transición metálicos y no metálicos que participan en el enlace iónico. Las **tablas 2.1, 2.2 y 2.3** muestran estos iones.

Tabla 2.1. Iones de no metales [2b]

Grupo IA	Grupo VA	Grupo VIA	Grupo VIIA
H ⁻ , hidruro configuración elec.: 1s ²	N ³⁻ , nitruro configuración elec.: 2s ² 2p ⁶	O ²⁻ , óxido configuración elec.: 2s ² 2p ⁶	F ⁻ , fluoruro configuración elec.: 2s ²
	P ³⁻ , fosfuro configuración elec.: 3s ² 3p ⁶	S ²⁻ , sulfuro configuración elec.: 3s ² 3p ⁶	Cl ⁻ , cloruro configuración elec.: 3s ²
			Br ⁻ , bromuro Configuración elec.: 4s ²
			I ⁻ , yoduro configuración elec.: 5s ²

Tabla 2.2. Iones de los elementos representativos metálicos [2b]

Configuración de un gas noble (2 u 8), ns ² o ns ² np ⁶			Configuración de pseudo gas noble (18), (n-1)s ² p ⁶ d ¹⁰	Configuración 18+2, (n-1)s ² p ⁶ d ¹⁰ ns ²		
IA	IIA	IIIA	IIIA	IIIA	IVA	VA
Li ⁺	Be ²⁺					
Na ⁺	Mg ²⁺	Al ³⁺				
K ⁺	Ca ²⁺		Ga ³⁺	Ga ⁺		
Rb ⁺	Sr ²⁺		In ³⁺	In ⁺	Sn ²⁺	Sb ³⁺
Cs ⁺	Ba ²⁺		Tl ³⁺	Tl ⁺	Pb ²⁺	
Fr ⁺	Ra ²⁺					

Tabla 2.3. Iones de los elementos de transición metálicos [2b]

3s ² 3p ⁶	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹	3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰	4f ⁷ 5s ² 5p ⁶
Sc ³⁺	Cu ⁺	Zn ²⁺	Co ²⁺	Tb ⁴⁺

Los compuestos iónicos comparten muchas características en común:

- Los enlaces iónicos se forman entre metales y no metales.
- Al nombrar compuestos iónicos simples, el metal siempre viene primero, el no metal segundo (por ejemplo, el cloruro de sodio, NaCl).

- Muchos de los compuestos iónicos se disuelven fácilmente en el agua y otros solventes polares.
- En una solución, los compuestos iónicos fácilmente conducen electricidad.
- Los compuestos iónicos tienden a formar sólidos cristalinos con temperaturas muy altas.
- Los sólidos iónicos son pobres conductores de la electricidad ya que los iones se mantienen fijos en sus posiciones.
- Los compuestos iónicos son muy poco compresibles, debido a la aparición de fuerzas repulsivas muy intensas cuando dos iones se aproximan a distancias inferiores a la distancia reticular (distancia en la que quedan en la red dos iones de signo contrario).
- El arreglo geométrico en un compuesto iónico está dado por el tamaño y el número de iones.

En los seres vivos ciertos compuestos iónicos tienen importantes funciones reguladoras, tales como: controlar la presión osmótica celular, evitar los cambios bruscos del pH , intervenir en funciones como la contracción muscular, controlar la entrada y salida del agua de las células y contribuir a mantener el equilibrio hídrico.

2.3. Ejercicios relacionados con el enlace iónico

Algunos ejercicios en esta sección fueron tomados de Problemas y Cuestiones de las Olimpiadas de Química [4b]

1. ¿Cuál afirmación es correcta o falsa? Justifique su respuesta
 - a) Los compuestos iónicos presentan elevados puntos de fusión
 - b) Los compuestos iónicos en estado sólido conducen la corriente eléctrica.
 - c) Los compuestos iónicos presentan el mismo número de aniones y cationes

R: a) Verdadera, ya que las fuerzas electrostáticas que mantienen a los iones ordenados en el retículo cristalino son muy fuertes; b) Falsa, ya que los compuestos iónicos solo conducen la electricidad cuando están fundidos o en solución acuosa; c) Falsa, por ejemplo, el CaF_2 , por cada unidad formula, hay un catión Ca^{2+} y dos aniones F^- .

2. Indique con verdadero (V) o falso (F), justificando la respuesta, si los compuestos iónicos:

a) Se forman por compartición de electrones.

b) Son conductores de la electricidad ya sea como sólidos o en solución acuosa.

c) Se forman entre metales y no metales.

R: a) Falso (F): debido hay transferencia de electrones de un metal a un no metal;

b) Falso (F): los compuestos iónicos son sólidos a temperatura ambiente y en este estado no conducen la electricidad;

c) Verdadero (V): para que se forme un compuesto iónico es necesario que uno de los elementos pueda ganar electrones (no metal) y el otro perderlo (metal).

3. A partir de datos experimentales se encuentra que la energía reticular (ER) del CaO es mayor que la del NaCl ¿Qué razón puede explicar ese resultado?

R: Este resultado se explica considerando que las cargas de los iones en el CaO son mayores que en el NaCl , lo cual indica que la fuerza de atracción entre los iones del retículo cristalino es mayor.

4. ¿Qué razón puede explicar que el NaI funde a menor temperatura que el LiF?

R: La razón se debe a que los iones Na^+ y I^- son más grandes, por lo que la distancia entre ellos es mayor lo que la energía reticular es menor debido a que la fuerza de atracción entre los iones en el retículo cristalino es menor.

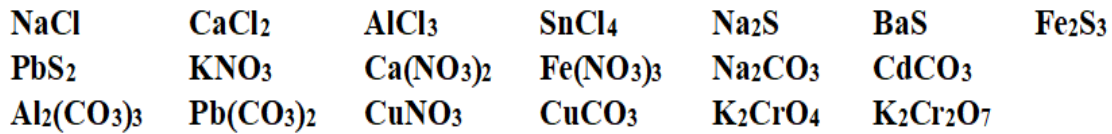
5. ¿Cuál de los siguientes compuestos tendrá el mayor punto de fusión: el fluoruro de sodio o el bromuro de potasio?

R: Ambos compuestos iónicos tienen cargas idénticas, sin embargo, por su situación en el Sistema Periódico, tanto el ión K^+ como el Br^- son de mayor tamaño que el Na^+ y el F^- , por lo que los iones se encontrarán también más alejados en el KBr que en NaF, por lo que resultará más sencillo separarlos en el caso del NaF, donde sus iones se encontrarán unidos con más fuerza, y en consecuencia, el punto de fusión del NaF será más elevado que el del KBr.

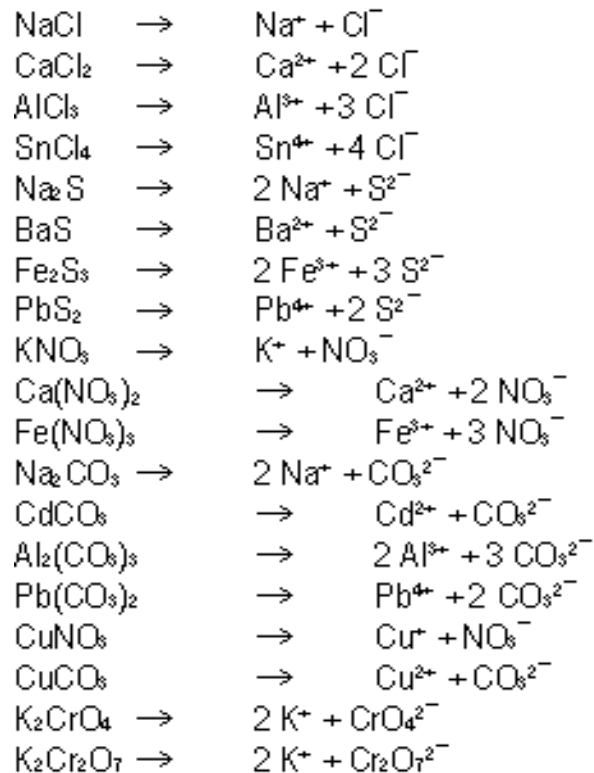
6. ¿Cuál de los siguientes compuestos será más soluble en agua: el óxido de calcio (CaO) o el yoduro de cesio (CsI)?

R: En el CaO los iones están más fuertemente unidos, porque presentan carga $2+/2-$ frente a la carga $+/-$ del CsI. Pero, además en el caso del CaO, el tamaño de sus iones es mucho menor que los del CsI (lo que se deduce de sus posiciones respectivas en el Sistema Periódico), con lo que en este caso tenemos que ambos factores hacen que los iones, en el caso del CaO se encuentren mucho más fuertemente enlazados que en el CsI, y por tanto, se disolverá mucho peor en agua el CaO que el CsI.

7. Disocie los siguientes compuestos iónicos:



R:



8. Indique razonadamente si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas:

- El Ca y el O forman un enlace covalente polar.
- El cloruro de rubidio presenta un mayor carácter iónico que el óxido de magnesio.

R: a) Esta afirmación es falsa. El Ca (metal alcalinotérreo) y el O (no metal del grupo 16) forman un enlace iónico en el que el Ca cede dos electrones al O. Por tanto, no se trata de un enlace covalente polar, sino de un enlace iónico que es polar por su propia naturaleza.

b) Esta afirmación es verdadera. El carácter iónico de un enlace entre dos átomos viene determinado por la diferencia de electronegatividad entre ellos. Como el oxígeno y el cloro presentan electronegatividades parecidas, debemos fijarnos en este caso en los metales rubidio (Rb, alcalino) y magnesio (Mg, alcalinotérreo). Como el Rb está situado en un periodo mayor que el Mg y en un grupo inferior, será menos electronegativo que el Mg. Por tanto, la diferencia de electronegatividad en el RbCl será mayor que en el MgO, presentando mayor carácter iónico.

9. Dada la siguiente configuración s electrónica en estado fundamental para un elemento A: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$. Responde razonadamente:

a) ¿Qué tipo de sólido formará el elemento A cuando se combine con oxígeno y cuál será la fórmula de este compuesto?

R: a) El elemento A es un metal alcalinotérreo, lo que se deduce de su configuración de última capa ($4s^2$), que nos dice que se encuentra en el cuarto periodo en el segundo grupo del bloque s. Si se combina con oxígeno, su fórmula será BO, ya que el elemento B cederá dos electrones de su capa de valencia al oxígeno, dando lugar a un enlace iónico y consiguiendo ambos la estabilidad. Este óxido será un sólido cristalino iónico, que tendrá un punto de fusión alto y será conductor de la electricidad fundido y en disolución acuosa, debido al movimiento de los iones.

10. Explica la formación de los siguientes enlaces iónicos:

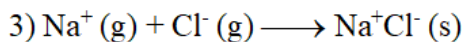
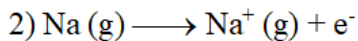
a) El Mg ($Z=12$) con el F ($Z=9$)

b) El K ($Z=19$) con el N ($Z=7$)

R: a) MgF_2 : Para alcanzar los 8 electrones en su capa de valencia (cumplir la regla del octeto) el Mg necesita perder dos electrones que serán captados por dos F, uno cada uno.

b) K_3N : Para alcanzar los 8 electrones en su capa de valencia (cumplir la regla del octeto) el N necesita ganar tres electrones que son cedidos por tres K, uno cada uno

11. La formación de cloruro de sodio es una reacción exotérmica. Tres de las etapas sucesivas de su ciclo de Born-Haber son las siguientes:



¿En cuál o en cuáles se libera energía? a) 1; b) 2; c) 3; d) 1 y 3; e) En todas.

R: La etapa 1 corresponde a la sublimación del sodio, un proceso endotérmico, ya que se debe absorber energía para romper los enlaces que mantienen unidos a los átomos de sodio en la red metálica.

La etapa 2 corresponde a la ionización del sodio, un proceso endotérmico, ya que se debe absorber energía para arrancar el electrón más externo del átomo.

La etapa 3 corresponde a la formación de la red de cloruro de sodio y la energía asociada a la misma es la energía reticular, que es la energía que se desprende cuando se forma un mol de sustancia cristalina iónica a partir de los correspondientes iones en estado gaseoso, por tanto, se trata de un proceso exotérmico.

La respuesta correcta es la c.

12. De las parejas de elementos químicos que se presentan ¿cuál formaría el enlace más iónico? a) B y N
b) H y Cl
c) K y Cl
d) C y O

R: Un compuesto se considera que tiene enlace predominantemente iónico si la diferencia de electronegatividad ($\Delta\chi$) que existe entre los elementos que los forman es superior a 2,0. Aplicando este criterio a las parejas de elementos dadas:

Pareja	$\Delta\chi$	Enlace predominante
B - N	$3,04 - 2,04 = 1,00$	covalente
H - Cl	$3,16 - 2,20 = 0,94$	covalente
K - Cl	$3,16 - 0,82 = 2,34$	iónico
C - O	$3,44 - 2,55 = 0,89$	covalente

La respuesta correcta es la c.

13. Indique cuál de los siguientes compuestos presenta un mayor carácter iónico:
a) CCl_4 ; b) SbCl_3 ; c) CaCl_2 ; d) ZrCl_4

R: c)

14. Una de las siguientes afirmaciones sobre el enlace iónico es falsa, ¿cuál es?

a) Se basa en la transferencia de electrones.

b) Se forma a partir de átomos cuya diferencia de electronegatividad sea pequeña.

c) Se forma con un elemento químico de elevada electroafinidad y otro de bajo potencial de ionización.

d) Es el representante más fuerte de las fuerzas electrostáticas.

R: a) Verdadero. El enlace iónico se da entre elementos con elevada diferencia de electronegatividad, de forma que el que es menos electronegativo le transfiere electrones al más electronegativo.

b) Falso. Según se ha justificado en el apartado anterior.

c) Verdadero. El elemento más electronegativo tiene elevada electroafinidad y el menos electronegativo bajo potencial de ionización.

d) Verdadero. Este enlace tiene lugar entre iones lo que motiva que las fuerzas electrostáticas sean muy intensas.

La respuesta correcta es la b.

15. a) Indica qué tipo de enlace presentan el compuestos NaBr.

R: a) El NaBr es un compuesto que presenta una interacción entre un metal (Na) y un no metal (Br). Para que ambos alcancen la estabilidad, el sodio cede un electrón de su capa de valencia al bromo, y ambos quedan

ambos con una configuración de gas noble. El enlace que los une es, por tanto, iónico.

16. Sólo una de las siguientes afirmaciones es cierta:

- a) Si la afinidad electrónica de un elemento químico es menor que el potencial de ionización de otro elemento químico, entre ellos no se puede formar un sólido iónico.
- b) El enlace iónico, lo mismo que el covalente, es direccional.
- c) Los sólidos iónicos son volátiles.
- d) El elemento químico B ($Z = 5$) tiene más tendencia que el elemento químico C ($Z = 6$) a formar compuestos iónicos, con un determinado halógeno.

R: a) Falso. El enlace iónico se da entre un elemento muy electronegativo con valores altos de la afinidad electrónica y potencial de ionización y otro poco electronegativo que posee bajos valores de la afinidad electrónica y del potencial de ionización.

b) Falso. El enlace iónico no es direccional ya que la atracción entre iones se produce en todas las direcciones del espacio.

c) Falso. Las fuerzas electrostáticas existentes en los sólidos iónicos son muy intensas, por tanto, se requiere una gran cantidad de energía (energía reticular) para convertirlos en iones en estado gaseoso.

d) Verdadero. Las configuraciones electrónicas de los elementos con números atómicos 5 y 6 son, respectivamente, $[\text{He}] 2s^2 2p^1$ y $[\text{He}] 2s^2 2p^2$. Como se observa, B tiene tres electrones de valencia y C cuatro. Por este motivo, la tendencia a formar compuestos iónicos con un halógeno es

mayor por parte del elemento B, aunque esta tendencia sea baja debido a la dificultad que presenta para ceder electrones por tener pocas capas electrónicas.

La respuesta correcta es la d.

17. Solo uno de los siguientes conceptos es falso:

a) Cuando dos iones de signo contrario se aproximan la energía potencial del sistema disminuye; el proceso de agregación continúa hasta formar el sólido iónico, cuando los iones se colocan a distancia mínima la energía potencial alcanzará su valor mínimo y se llama energía reticular.

b) La energía reticular es la energía que se desprende cuando los iones en estado gaseoso se unen para formar un sólido iónico.

c) Índice de coordinación es el número de iones de un signo que rodea a otro ion de signo contrario.

d) Al aumentar la distancia entre iones la energía reticular aumenta.

R: La energía de enlace, reticular en los sólidos iónicos es aquella que se desprende cuando se forma un mol de sustancia a partir de los iones en estado gaseoso. Para que esto ocurra, los iones deben situarse en la red a una distancia mínima llamada distancia de enlace o interiónica, momento en el que se registra un mínimo de energía potencial en el sistema. Existen varios modelos matemáticos para evaluar la energía reticular de una sustancia. Uno de ellos se debe a Born-Meyer:

$$U = -1,39 \cdot 10^{-4} \frac{Q^+ \cdot Q^-}{d} A \left[1 - \frac{d^*}{d} \right] \longrightarrow \begin{cases} U = \text{energía reticular (kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) \\ Q^+ \text{ y } Q^- = \text{cargas del catión y del anión} \\ d = \text{distancia interiónica (catión + anión)} \\ A = \text{constante de Madelung} = 1,747 \\ d^* = \text{parámetro} = 34,5 \text{ pm} \end{cases}$$

En la expresión se puede ver que la energía reticular es directamente proporcional al producto de las cargas de los iones e inversamente proporcional a la distancia interiónica, es decir, al tamaño de estos.

La respuesta correcta es la d.

18. El compuesto AgNO_3 es francamente soluble en:

- a) CS_2
- b) CCl_4
- c) Benceno
- d) Agua
- e) Ninguno de los disolventes propuestos

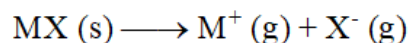
R: El AgNO_3 es una sustancia con enlace predominantemente iónico que se disuelve muy bien en disolventes polares como el H_2O y no se disuelve prácticamente en disolventes no polares como CS_2 , CCl_4 y benceno (C_6H_6).

Se disocia en agua de acuerdo con la siguiente ecuación:



La respuesta correcta es la d.

19. Si se entendiese por energía reticular la correspondiente al proceso endotérmico:



¿En cuál de los siguientes conjuntos de sustancias están los tres compuestos ordenados de menor a mayor energía reticular?

- a) NaF NaCl NaBr
 b) LiCl NaCl KCl
 c) LiI RbBr RbI
 d) CsF CsCl CsBr
 e) LiBr LiCl LiF

R: La energía reticular de un sólido iónico, de acuerdo con la expresión de Born-Meyer, es directamente proporcional al producto de las cargas de los iones e inversamente proporcional a la distancia interiónica, es decir, al tamaño de estos:

$$U = -1,39 \cdot 10^{-4} \frac{Q^+ \cdot Q^-}{d} A \left[1 - \frac{d^*}{d} \right] \longrightarrow \begin{cases} U = \text{energía reticular (kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) \\ Q^+ \text{ y } Q^- = \text{cargas del catión y del anión} \\ d = \text{distancia interiónica (catión + anión)} \\ A = \text{constante de Madelung} = 1,747 \\ d^* = \text{parámetro} = 34,5 \text{ pm} \end{cases}$$

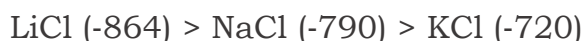
Suponiendo que todos los compuestos dados tienen el mismo valor de las constantes y teniendo en cuenta que todos los iones implicados tienen la misma carga, el valor de la energía reticular sólo depende del valor de d , es decir de los tamaños de iones.

Resumiendo, a menor valor de d , mayor valor de la energía reticular, U .

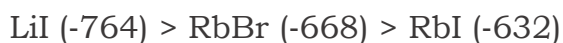
a) Falso. El orden de energías reticulares propuesto: NaF, NaCl, NaBr es decreciente, ya que el ion fluoruro es del menor tamaño (tiene dos capas electrónicas) mientras que el ion bromuro es del mayor tamaño (tiene cuatro capas electrónicas). Los valores obtenidos en la bibliografía (kJ/mol) son:

$$\text{NaF } (-930) > \text{NaCl } (-790) > \text{NaBr } (-754)$$

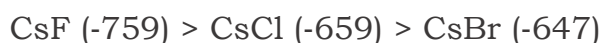
b) Falso. El orden de energías reticulares propuesto: LiCl, NaCl, KCl es decreciente, ya que el ion litio es del menor tamaño (tiene dos capas electrónicas) mientras que el ion potasio es del mayor tamaño (tiene cuatro capas electrónicas). Los valores obtenidos en la bibliografía (kJ/mol) son:



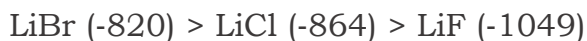
c) Falso. El orden de energías reticulares propuesto: LiI, RbBr, RbI no es creciente, ya que en el caso de las sales de rubidio, ion bromuro es de menor tamaño (tiene cuatro capas electrónicas) que el ion yoduro (tiene cinco capas electrónicas). En el caso de las sales de yodo, ion litio es de menor tamaño (tiene dos capas electrónicas) que el ion rubidio (tiene cinco capas electrónicas). Los valores obtenidos en la bibliografía (kJ/mol) son:



d) Falso. El orden de energías reticulares propuesto: CsF, CsCl, CsBr es decreciente, ya que el ion fluoruro es del menor tamaño (tiene dos capas electrónicas) mientras que el ion bromuro es del mayor tamaño (tiene cuatro capas electrónicas). Los valores obtenidos en la bibliografía (kJ/mol) son:



e) Verdadero. El orden de energías reticulares propuesto: LiBr, LiCl, LiF es creciente, ya que el ion bromuro es del mayor tamaño (tiene cuatro capas electrónicas) mientras que el ion fluoruro es del menor tamaño (tiene dos capas electrónicas). Los valores obtenidos en la bibliografía (kJ/mol) son:



La respuesta correcta es la e.

20. Calcular la afinidad electrónica del yodo a partir de los siguientes datos:

$$E_{\text{R}}(\text{NaI}) = -165,4 \text{ Kcalmol}^{-1}; \Delta H_{\text{sub}}(\text{Na}) = 25,9 \text{ Kcalmol}^{-1}; I(\text{Na}) = 118,4 \text{ Kcalmol}^{-1}$$
$$\Delta H_{\text{fus}}(\text{NaI}) = -64,8 \text{ Kcalmol}^{-1}; \frac{1}{2}(\Delta H_{\text{sub}}(\text{I}_2) + E_{\text{D}}(\text{I}_2)) = 25,5 \text{ Kcalmol}^{-1}.$$

R: A partir de las ecuaciones de la sección 2.2.1 y los datos del ejercicio se tiene que $A(\text{I}_2) = -69,2 \text{ Kcalmol}^{-1}$

Capítulo 3

Enlace covalente

Sabino José Menolasina Monrreal

3.1. Introducción

Existe un gran número de moléculas formadas por la combinación de átomos que tienen la misma tendencia de ganar y perder electrones. Para poder explicar estos hechos hay que pensar en una forma de mantener unidos a los átomos distinta a la atracción electrostática, base del modelo iónico.

La idea de la unión covalente se puede remontar varios años antes hasta Gilbert N. Lewis, quien en 1916 describió el intercambio de pares de electrones entre los átomos [1a]. Sin embargo, fue Irving Langmuir quien utilizó el término covalencia al número de pares de electrones que un determinado átomo comparte con sus vecinos [5].

El enlace covalente se define entonces, como aquel enlace que se origina cuando dos (o más) elementos comparten electrones. El enlace covalente ocurre porque los átomos en el compuesto tienen una tendencia similar hacia los electrones (generalmente para ganar electrones) y así cumplir con la regla del octeto. Esto ocurre comúnmente cuando dos no metales se enlazan.

Esencialmente, el enlace covalente no es más que el resultado de la interacción de nubes de cargas eléctricas entre los núcleos de dos o más átomos, que los mantiene unidos formando moléculas. En otras palabras, es la interacción de los orbitales atómicos a los cuales pertenecen los electrones de enlace.

En un compuesto donde sus átomos forman enlaces covalentes no se forman cargas iónicas. Por consiguiente, no hay fuerzas intermoleculares fuertes en los compuestos covalentes tal como las hay en las moléculas iónicas.

El tipo de enlace que se observa por ejemplo en la molécula de hidrógeno es un enlace covalente. Los átomos de hidrógeno (H) tienen un electrón de valencia en su primera envoltura. Puesto que la capacidad de esta envoltura es de dos electrones, cada átomo hidrógeno 'querrá' recoger un segundo electrón. En un esfuerzo por recoger un segundo electrón, el átomo de hidrógeno reaccionará con átomos H vecinos para formar el compuesto H_2 . Ya que el compuesto de hidrógeno es una combinación de átomos iguales, los átomos compartirán cada uno de sus electrones individuales, formando así un enlace covalente. De esta manera, ambos átomos comparten la estabilidad de una envoltura de valencia.

En el enlace covalente, los dos electrones que lo conforman gastan la mayor parte de su tiempo en el espacio entre los dos átomos contribuyendo con ello a mantener unidos a los dos átomos debido a que cada núcleo parcialmente positivo es atraído hacia la región de mayor densidad electrónica entre ellos.

3.2. Teorías del enlace covalente

Existen dos teorías a través de las cuales se interpreta cuantitativamente, en buena medida, el enlace covalente: la Teoría de Enlace Valencia y la Teoría del Orbital Molecular. Estas teorías surgen como consecuencias de las limitaciones que presentan las estructuras de Lewis (no todas las sustancias químicas cumplen con

la regla del octeto, los enlaces múltiples no son la suma de enlaces sencillos y las estructuras de Lewis son estructuras bidimensionales que no dicen nada acerca de la geometría de la molécula).

En la presente monografía se describirán brevemente estas teorías para una mejor comprensión de las secciones que se desarrollarán posteriormente en este capítulo sobre el enlace covalente. Sin embargo, previamente se describirán ciertos conceptos básicos de estructura atómica y molecular para una mejor comprensión de estas teorías a desarrollar. A continuación, se detallan estos conceptos [2b]:

- Modelo atómico mecánico-ondulatorio. Es un modelo matemático a través del cual se puede cuantificar la energía que posee un electrón en el átomo y se puede mostrar la probabilidad de encontrarlo dentro de una región particular alrededor del núcleo (orbital atómico).
- Números cuánticos de los electrones. Son aquellos que permiten describir al orbital atómico que ocupa un electrón específico en el modelo atómico mecánico-ondulatorio. Es decir, nos permiten entender cómo se distribuyen los electrones en los átomos de los diferentes elementos y como es la interacción entre los átomos en base al arreglo de los orbitales en el espacio. Los números cuánticos son:
 - El número cuántico principal (n). Representa al principal nivel de energía que ocupa el electrón con respecto al núcleo. Mientras mayor sea la energía que posee el electrón mayor será el valor de n . Los valores de n pueden ir desde 1 hasta infinito. Sin embargo, se conocen hasta $n=7$, de acuerdo con la tabla periódica de los elementos.
 - El número cuántico del momento angular (l). Permite describir los diferentes orbitales de energía que existen en cada nivel de energía. El número de orbitales de energía aumenta con el valor de n . Los valores

posibles de l son desde 0 hasta $n-1$. Por ejemplo, para $n = 4$ hay cuatro orbitales de $l = 0, 1, 2$ y 3 . los cuales se representan con las letras s, p, d y f respectivamente. Estos orbitales representan distintas regiones en el espacio.

- El número cuántico magnético (m_l). Permite explicar la orientación de los electrones en un mismo orbital. Los valores permitidos para m_l van desde $-l$ hasta $+l$ pasando por cero. Por ejemplo, los orbitales p tienen un valor de $l = 1$, por lo tanto, los valores de m_l permitidos son: $-1, 0, +1$. Electrones con los mismos valores de n y l , pero diferentes valores de m_l están en el mismo nivel de energía.
- El número cuántico del espín (m_s). Permite orientar el giro de los electrones de dos posibles maneras. Representa el movimiento del electrón alrededor de su propio eje. Los valores posibles de m_s son: $+1/2$ y $-1/2$.
- Principio de exclusión de Pauli. En un orbital atómico solamente pueden existir dos electrones con estados cuánticos diferentes, o sea que en un orbital no pueden existir dos electrones que contengan los cuatro números cuánticos iguales.
- Regla de Hund. Cuando existen orbitales degenerados (con la misma energía), los electrones se acomodan en orbitales atómicos con el mismo espín, mientras no violen el principio de exclusión de Pauli.
- Principio de Aufbau. Los electrones ocupan primero los orbitales disponibles de más baja energía, luego ocupan los orbitales de más alta energía sólo cuando los de más baja energía están llenos.
- Configuración electrónica. Al llenado de los orbitales de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, las reglas de Hund y al principio de

Aufbau se le denomina configuración electrónica.

El siguiente esquema muestra el orden en que se van llenando los subniveles en las configuraciones electrónicas de los átomos.

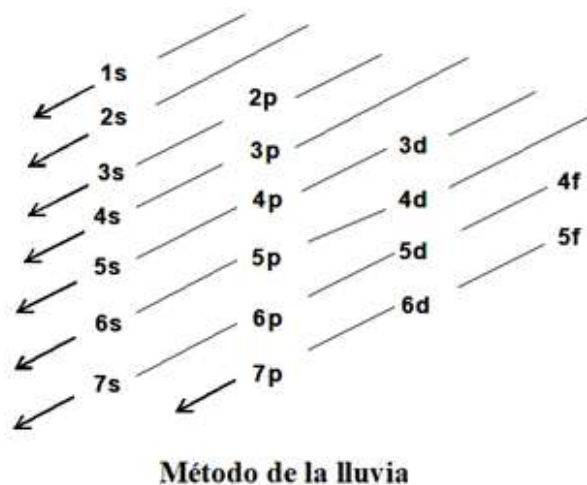


Figura 3.1. Esquema de llenado de los subniveles de energía en las configuraciones electrónicas de los átomos [6]

La **figura 3.2.**, muestra el diagrama de las energías relativas de los orbitales:

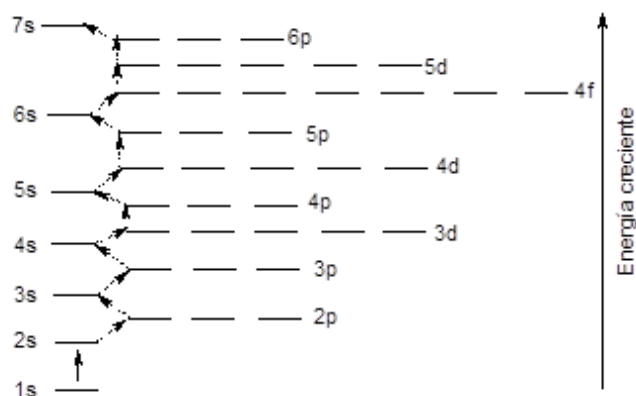


Figura 3.2. Diagrama de las energías relativas de los orbitales en átomos neutros [6]

- Orbital atómico. Es la región del espacio cercana al núcleo en la que es más probable encontrar un electrón con una energía específica [2b]. Un orbital atómico se suele representar a través de una nube electrónica de forma definida:

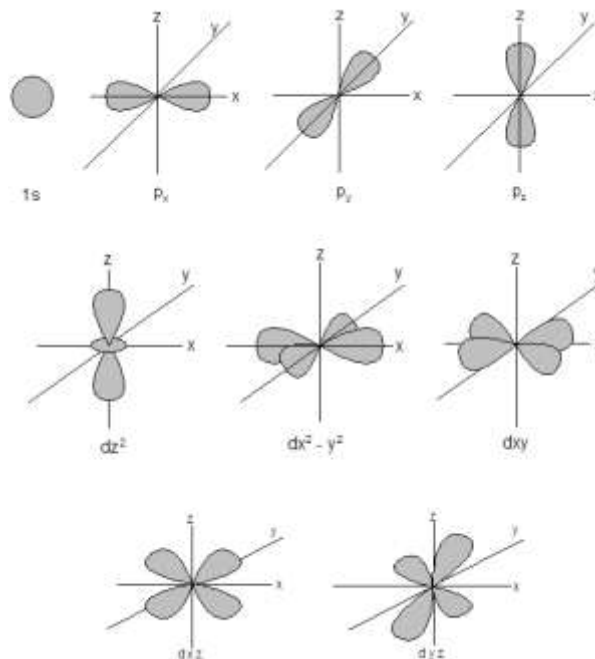


Figura 3.3. Representación esquemática de los orbitales atómicos [2b]

3.2.1 Teoría del enlace-Valencia

La descripción del enlace covalente en términos de los orbitales atómicos se conoce como Teoría del Enlace-Valencia. Esta teoría establece que el enlace covalente se forma por la superposición de orbitales atómicos externos que presentan electrones desapareados entre dos o más átomos. Supone que los electrones de una molécula ocupan orbitales atómicos de los átomos individuales y que el número de enlaces covalente que puede formar un átomo va a depender del

A) Superposición frontal:

Consiste en la superposición de orbitales atómicos a través del mismo eje de enlace, lo cual conducen siempre a la formación de un enlace covalente sencillo de tipo sigma (σ). La superposición frontal puede llevarse a cabo entre diferentes tipos de orbitales atómicos: s con s , s con p y p con p [7].

A1) Superposición frontal s con s

En la molécula de H_2 , la configuración electrónica de cada átomo de H es $1s^1$. Cuando los dos átomos se aproximan se produce el solapamiento de sus orbitales, lo que origina la formación del enlace H-H, **figura 3.3a**. A distancias relativamente grandes la interacción es prácticamente nula, pero cuando los núcleos cargados positivamente son obligados a acercarse a distancias muy próximas, se origina una gran fuerza de repulsión. Entre estos dos extremos hay una distancia internuclear a la cual ocurre la interacción que produce el enlace, **figura 3.3b**, este comportamiento se explica a través de la mecánica cuántica, resolviendo la ecuación de Shrodinger para un sistema de dos electrones y dos protones. Se observa un mínimo de la energía potencial de interacción entre los dos átomos de hidrogeno.

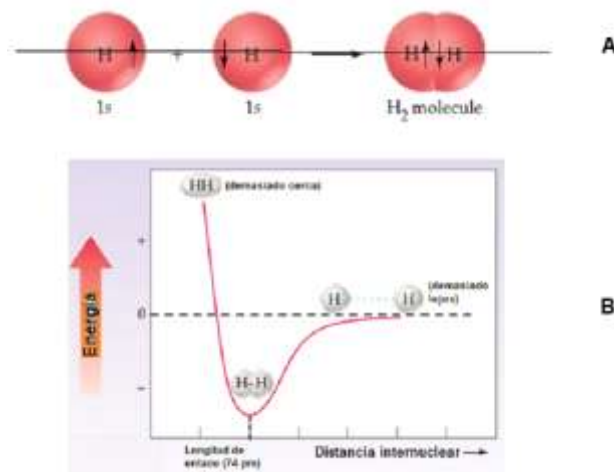
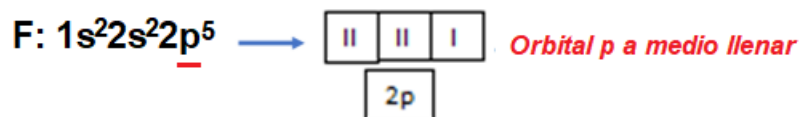


Figura 3.6. a) Solapamiento frontal entre dos orbitales s ; b) Interacción de dos átomos de H vs. La distancia de separación entre ellos [8]

A2) Superposición frontal s con p

En la molécula de HF, la configuración electrónica de sus átomos es:

H: 1s



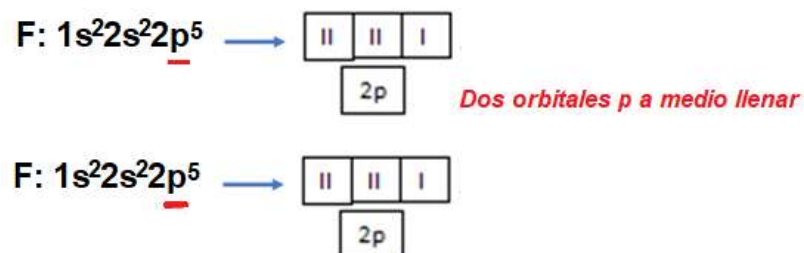
En la formación de la molécula de fluoruro de hidrogeno el orbital s del átomo de hidrogeno se solapa al orbital p a medio llenar del átomo de flúor.



Figura 3.7. Solapamiento frontal entre un orbital s y p [9]

A3) Superposición frontal p con p

En la molécula de F₂, la configuración electrónica de sus átomos es:



En la formación de la molécula de flúor los orbitales p a medio llenar de los

átomos de flúor se solapan entre sí. El solapamiento ocurre entre los lóbulos del mismo signo de cada orbital p .



Figura 3.8. Solapamiento frontal entre dos orbitales p [Del autor]

B) Superposición lateral:

Consiste en la superposición de orbitales atómicos fuera del eje de enlace, lo cual conduce a la formación de enlaces múltiples (dobles y triples), del tipo π .

En la molécula de Oxígeno (O_2), la configuración electrónica de cada uno de sus átomos es: $1s^2 2s^2 2p^4$, cada átomo tiene dos electrones desapareados, lo que significa que se formaran dos enlaces entre ellos. El primero será un enlace sigma debido a la superposición frontal entre los orbitales $2p_x$ de cada átomo, pero el segundo será un enlace que se forma por la superposición lateral entre los orbitales $2p_z$, por lo que será un enlace π .

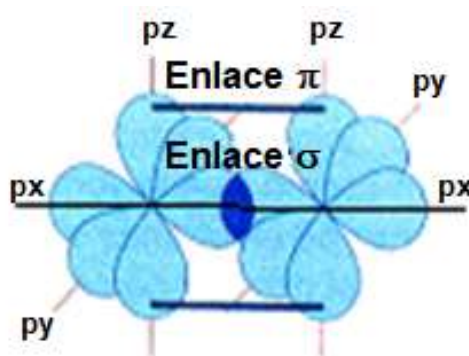


Figura 3.9. Solapamiento frontal y lateral entre orbitales p [Del autor]

3.2.2 Teoría del orbital molecular

No todas las situaciones de enlace ni todas las propiedades moleculares se pueden justificar de forma adecuada mediante los modelos de Estructuras de Lewis y la Teoría del Enlace de Valencia.

Las propiedades de electrones individuales, como es el caso del potencial de ionización o el magnetismo, no se pueden interpretar por las teorías antes mencionadas. Por ejemplo, la molécula de oxígeno es paramagnética (tiene dos electrones desapareados) esta propiedad no puede ser explicada por las teorías antes mencionadas.

Por otro lado, no todas las moléculas pueden describirse con enlaces localizados. Por ejemplo, en la molécula de benceno los tres pares de electrones π se encuentran deslocalizados entre los 6 enlaces C-C.

La Teoría de Orbitales Moleculares (TOM), establece que el enlace covalente se forma por la fusión de orbitales atómicos (OA) dando lugar a la formación de orbitales moleculares (OM) [10,11].

La Teoría de Orbitales Moleculares, describe la situación electrónica de las moléculas en términos de orbitales moleculares cuyo papel en las mismas es similar al que cumplen los orbitales atómicos en los átomos.

La característica fundamental de los orbitales moleculares es que se extienden entre todos los átomos de una molécula y los mantiene unidos. Al igual que en un orbital atómico en un átomo, un orbital molecular es una función de onda que describe a cada uno de los electrones de la molécula.

Si tenemos presente el proceso de asignación de la configuración electrónica de los átomos, recordaremos que los electrones son introducidos uno a uno en los

orbitales atómicos disponibles de más baja energía, tomando en cuenta el Principio de Exclusión de Pauli y la regla máxima de de Multiciplidad de Hund cuando hay varios orbitales disponibles de la misma energía, conocidos como orbitales degenerados. Entonces, en los orbitales moleculares se hace lo mismo, con la única diferencia de que los electrones pasan a pertenecer a la molécula y no al átomo.

La teoría del orbital molecular se basa en:

- Los átomos presentes en las moléculas contribuyen al enlace con los orbitales de valencia.
- Los orbitales atómicos de los diferentes elementos (átomos) que forman la molécula se combinan para generar orbitales moleculares.
- Cada orbital molecular contienen un máximo de dos electrones.

Los orbitales moleculares al igual que los orbitales atómico, describen las regiones o espacios de la molécula donde pueden ser encontrados los electrones.

3.2.2.1. Reglas para la formación y representación de los orbitales moleculares [11]

1. N orbitales atómicos forman N orbitales moleculares, que pueden ser enlazantes (si aportan enlace), antienlazantes (si quitan enlace) o no enlazante (si no aportan ni quitan enlace). En el caso más sencillo, dos orbitales atómicos interaccionan para formar un orbital enlazante más un orbital antienlazante, los cuales pueden acomodar un máximo de cuatro electrones.

2. Un orbital enlazante es aquel que aumenta la densidad electrónica entre los átomos enlazados y, por tanto, su energía es menor que la de los OA de partida. Un orbital antienlazante tiene menos densidad electrónica entre los núcleos y mayor energía que los OA de partida. Se caracterizan por poseer un plano nodal entre los

átomos unidos.

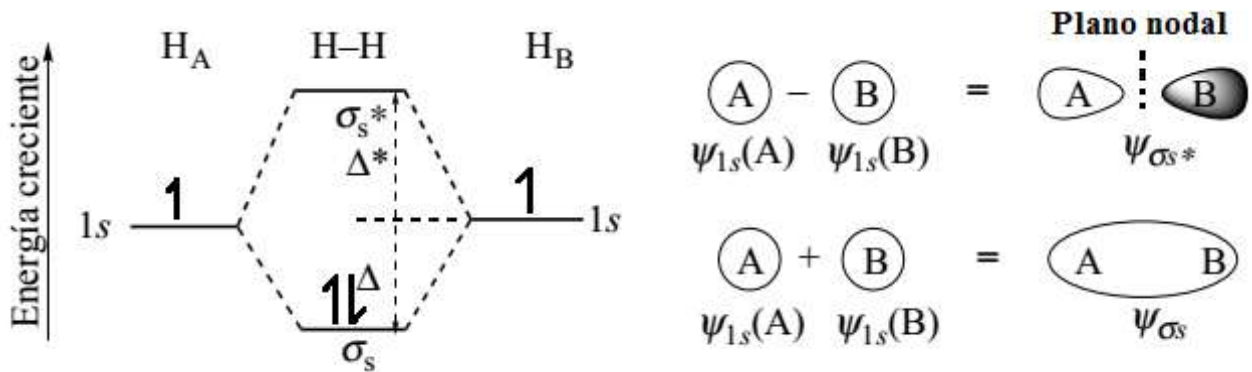


Figura 3.10. Diagrama de orbitales moleculares: enlazante (σ) y antienlazante (σ^*), de la molécula de H_2 [12]

3. La interacción entre dos orbitales atómicos es tanto mayor cuanto mayor es su solapamiento y menor su diferencia de energía.

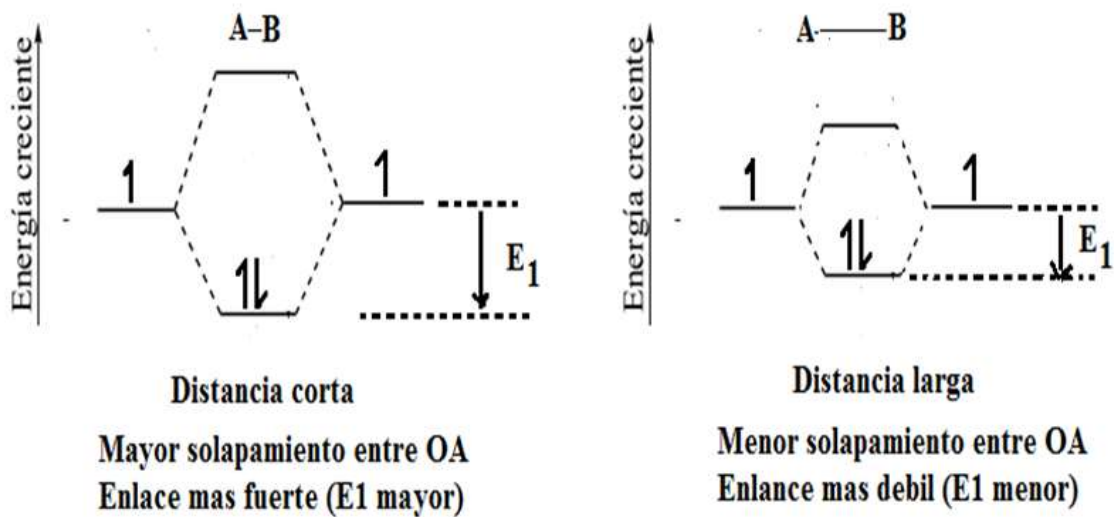


Figura 3.11. Diagrama de interacción en función del solapamiento y distancias de los orbitales atómicos [13]

4. Cuando se combinan orbitales atómicos de distinta energía, participa en mayor proporción en la formación de un orbital molecular dado aquel OA de energía más parecida.

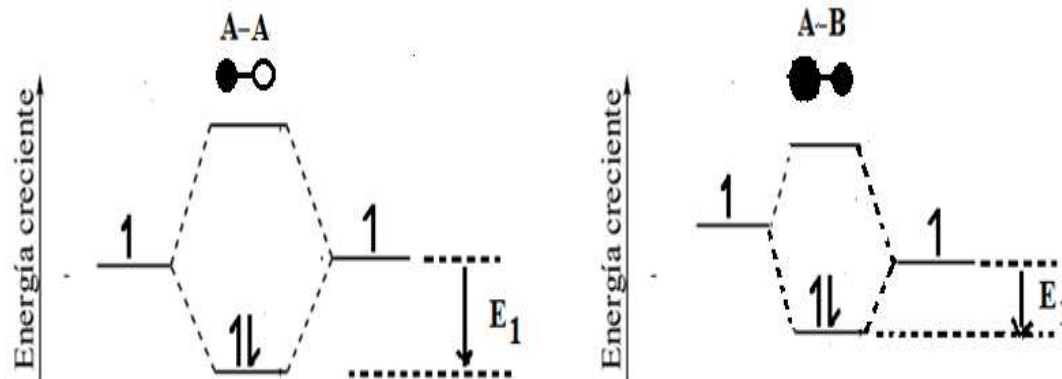


Figura 3.12. Diagrama de interacción entre orbitales atómicos de distinta energía y representación de los orbitales moleculares que se originan [13]

5. El orden de enlace de una molécula se define como la diferencia entre el número de orbitales enlazantes y antienlazantes llenos dividida entre dos. Es un indicador de la cantidad de enlaces presentes en la molécula. Para la molécula de H_2 el orden de enlace es 1, es decir tiene un enlace y para la molécula de He_2 es cero, es decir no hay enlace y los átomos se separan.

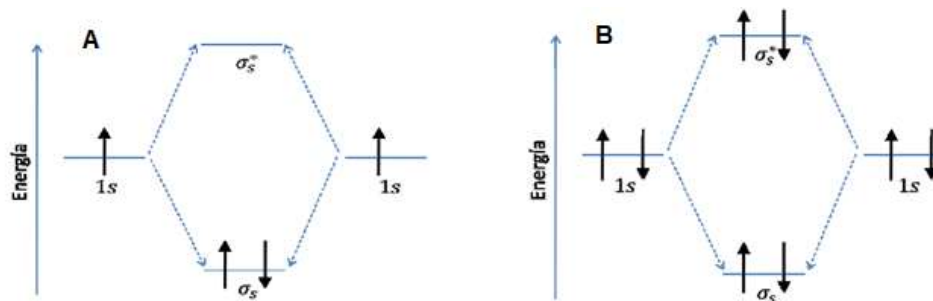


Figura 3.13. Diagrama de orbitales moleculares para: A) Molécula de H_2 y B) Molécula de He_2 [Del autor]

La interacción entre dos orbitales atómicos con dos electrones estabiliza la molécula mientras que la desestabiliza con cuatro electrones.

6. Los orbitales moleculares se llenan por orden de energía, respetando el principio de exclusión de Pauli y aplicando las reglas de Hund y de Aufbau.

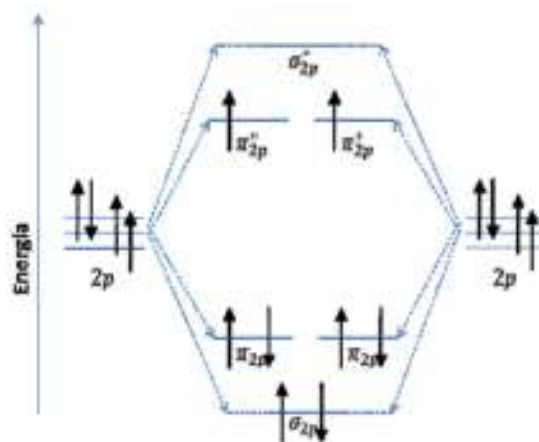


Figura 3.14. Diagrama de orbitales moleculares para la molécula de O₂ el segundo nivel de energías [Del autor]

Se observa que los electrones en los orbitales π se encuentran desapareados. Esto explica por qué el oxígeno sí le afectan los campos magnéticos (molécula paramagnética), fenómeno que la Teoría de Lewis y la Teoría de Enlace-Valencia no pueden explicar si todos los electrones en la molécula están apareados.

7. Para los elementos con $Z \leq 7$, ocurre un reordenamiento de los orbitales enlazantes. Esto sucede por un rechazo entre los electrones presentes en el orbital antienlazante σ_{2s}^* con los electrones presentes en el σ_{2p} , ya que físicamente, estos orbitales se encuentran muy próximos.

Este fenómeno se ilustra en la **figura 3.15a** y ocurre en todas las moléculas homooatómicas y heteroatómicas, como se dijo, que contengan un $Z \leq 7$ (**figuras 3.15b y 3.15c**):

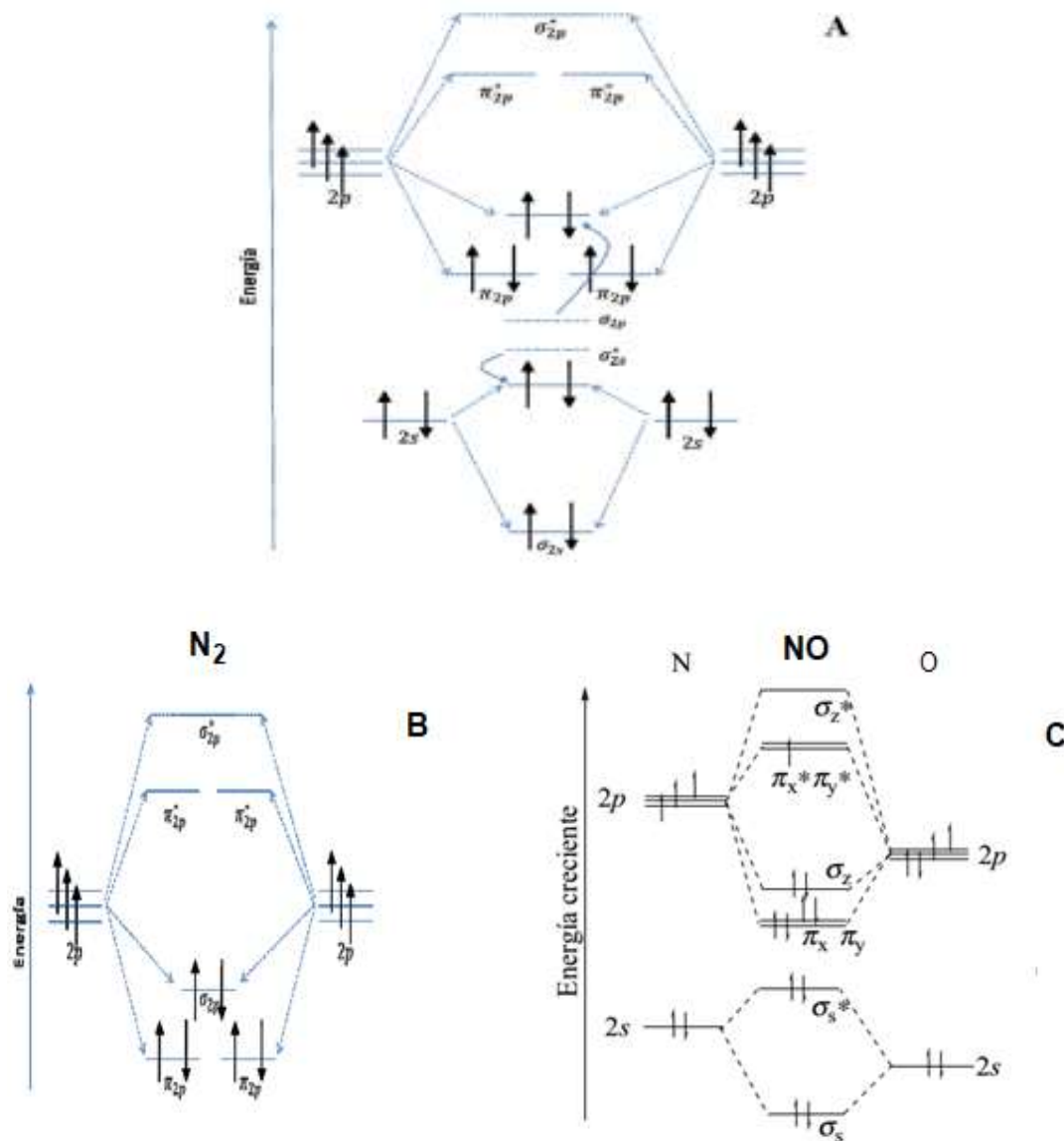


Figura 3.15. A) Representación del rechazo entre orbitales σ del nivel 2 para los elementos con $Z \leq 7$. B) Diagrama de orbitales moleculares para una molécula homodiatómica. C) Diagrama de orbitales moleculares para una molécula heterodiatómica [Del autor]

La **figura 3.16** muestre el diagrama de interacción para moléculas homodiatómicas con átomos con $Z > 7$, ejemplos: O₂, Cl₂.

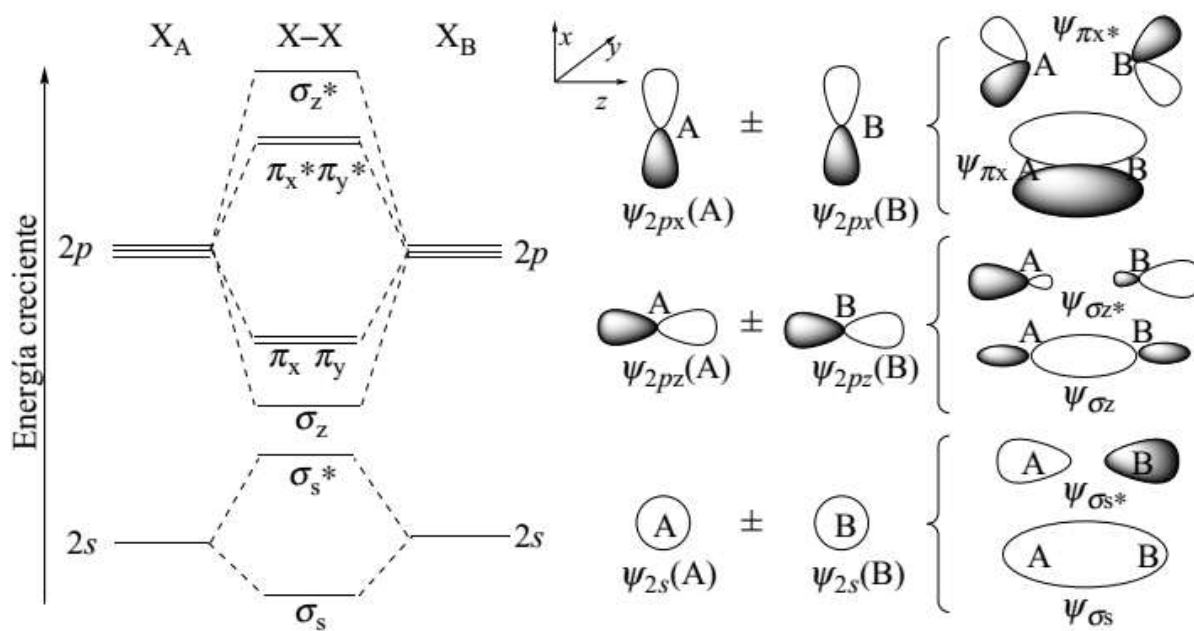


Figura 3.16. Diagrama de orbitales moleculares para moléculas homodiatómicas con átomos con $Z > 7$ [12]

3.3. Tipos de enlace covalente

Existen diferentes tipos de enlace covalente [2b]:

- 3.3.1. Enlace covalente sencillo
- 3.3.2. Enlace covalente múltiple
- 3.3.3. Enlace covalente coordinado
- 3.3.4. Enlace covalente no polar
- 3.3.5. Enlace covalente polar

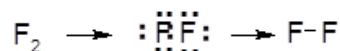
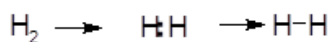
3.3.1. Enlace covalente sencillo

Es el enlace que se origina cuando dos átomos comparten dos electrones entre sí con la finalidad de cumplir en lo posible con la regla del octeto o dueto [2b].

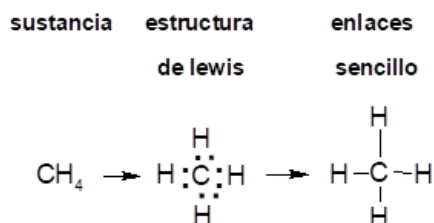
Este tipo de enlace se puede dar entre átomos iguales u átomos diferentes. Por ejemplo: H_2 , F_2 , y CH_4 . En la molécula de H_2 los átomos de hidrogeno forman un enlace sencillo, en el cual los electrones se encuentran principalmente en el espacio entre los núcleos en donde son atraídos de manera simultánea por ambos protones. El aumento de fuerzas de atracción en esta zona provoca la formación de la molécula de H_2 a partir de dos átomos de hidrógeno separados.

La formación de un enlace entre los átomos de hidrógeno implica que la molécula H_2 es más estable por una determinada cantidad de energía, que dos átomos separados (energía de enlace). En esta molécula de H_2 , sus átomos cumplen con la regla del dueto. En cambio, en la molécula de F_2 , sus átomos forman enlace sencillo cumpliendo con la regla del octeto.

sustancia	estructura	enlace
	de Lewis	sencillo



En el caso de la molécula CH_4 , los enlaces entre el carbono y cada uno de los cuatro átomos de hidrogeno son todos enlaces sencillos. En esta molécula, el átomo de carbono ha alcanzado su octeto, mientras que cada átomo de hidrógeno ha alcanzado su dueto.



El átomo de carbono tiene cuatro electrones más que el helio (gas noble anterior en la tabla periódica) y cuatro menos que el neón (gas noble en su misma fila en la tabla periódica). La formación de iones C^{4+} o C^{4-} es energéticamente imposible. La posición del C en la tabla periódica le confiere una electronegatividad intermedia (2,5 en la escala de Pauling) entre las de los elementos metálicos y las de los no metálicos. Por lo tanto, el carbono comparte electrones formando enlaces covalentes para adquirir la configuración de gas noble.

En compuestos covalentes, formados por enlaces sencillos entre sus átomos, el número de enlaces que es capaz de formar un determinado átomo está dado por la valencia de este y a los electrones de valencia que participan en la formación de enlaces se les denominan electrones enlazantes.

Por ejemplo, en los compuestos formados a partir del carbono, como la configuración electrónica del carbono en su estado fundamental es $1s^2 2s^2 2p^2$ se espera entonces que forme cuatro enlaces sencillos cuyas energías de enlace sean diferentes por poseer cuatro electrones de valencia entre los orbitales 2s y 2p. Sin embargo, se sabe que en la molécula CH_4 las energías de los cuatro enlaces C-H son iguales y además se conoce que el carbono puede formar compuestos covalentes con enlaces doble y triples es decir con enlaces múltiples cuyas geometrías son completamente diferentes, ¿cómo se explica este comportamiento?

En los compuestos del carbono formados por enlaces sencillos, como por ejemplo el CH_4 los cuatro enlaces del carbono se orientan simétricamente en el espacio de modo que, considerando su núcleo situado en el centro de un tetraedro,

los enlaces están dirigidos a lo largo de las líneas que unen dicho punto con cada uno de sus vértices.

La formación de enlaces covalentes puede explicarse, recurriendo al modelo atómico de la mecánica cuántica, considerando la superposición de orbitales o nubes electrónicas correspondientes a dos átomos iguales o diferentes.

Así, en la molécula de metano CH_4 (combustible gaseoso que constituye el principal componente del gas natural), los dos electrones internos del átomo de C, en su movimiento en torno al núcleo, dan lugar a una nube esférica que no participa en los fenómenos de enlace; es una nube pasiva. Sin embargo, los cuatro electrones externos de dicho átomo se mueven en el espacio formando una nube activa de cuatro lóbulos principales dirigidos hacia los vértices de un tetraedro y que pueden participar en la formación del enlace químico.

Cuando las nubes electrónicas de los cuatro átomos de hidrógeno se acercan suficientemente al átomo de carbono, se superponen o solapan con los lóbulos componentes de su nube activa, dando lugar a esa situación favorable energéticamente que denominamos enlace.

Todos los enlaces sencillos C-H en el metano tienen la misma longitud $1,06 \text{ \AA}$ ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$) y forman entre, sí ángulos iguales de 109° . Tal situación define la geometría tetraédrica característica de los enlaces del carbono en dicha molécula.

Este comportamiento se explica si se considera la teoría del enlace valencia a través de la cual el enlace covalente se forma por la superposición de los orbitales atómicos externos de dos átomos.

Esta teoría explica la formación del enlace covalente en términos de la compartición de electrones de valencia no pareados, es decir considera que el número de enlaces covalentes que puede formar un átomo con otros es igual al número de orbitales de valencia a medio llenar que el pueda tener.

Esta teoría emplea el término de orbitales híbridos para explicar la formación del enlace covalente.

En los compuestos del carbono, el átomo de carbono, los orbitales 2s y 2p se combinan de cierta manera para dar origen a orbitales híbridos de la misma energía.

En la molécula de CH₄ donde todos sus enlaces son enlaces sencillos, se combinan el orbital 2s y los tres orbitales p (p_x, p_y y p_z) para dar origen a cuatro orbitales híbridos sp³ cada uno de ellos con un electrón (e⁻).

3.3.1.1. Formación de orbitales híbridos sp³ que conducen a la formación de enlaces sencillos

Un orbital híbrido es el resultado de la combinación matemática de las funciones que describen a dos o más orbitales atómicos.

En el caso de la molécula CH₄ donde todos sus enlaces son sencillos, tienen la misma longitud y forman entre sí, ángulos iguales de 109° se tiene que ello es posible debido a que el átomo de carbono una vez que alcanza su estado excitado sufre un proceso de hibridización a través del cual se combinan el orbital 2s y los tres orbitales p (2p_x, 2p_y y 2p_z) dando origen a cuatro orbitales híbridos sp³ los cuales utiliza para formar los cuatros enlaces sencillos al interactuar con los orbitales 1s de los cuatro átomos de hidrógeno [2b].

Configuración electrónica del carbono

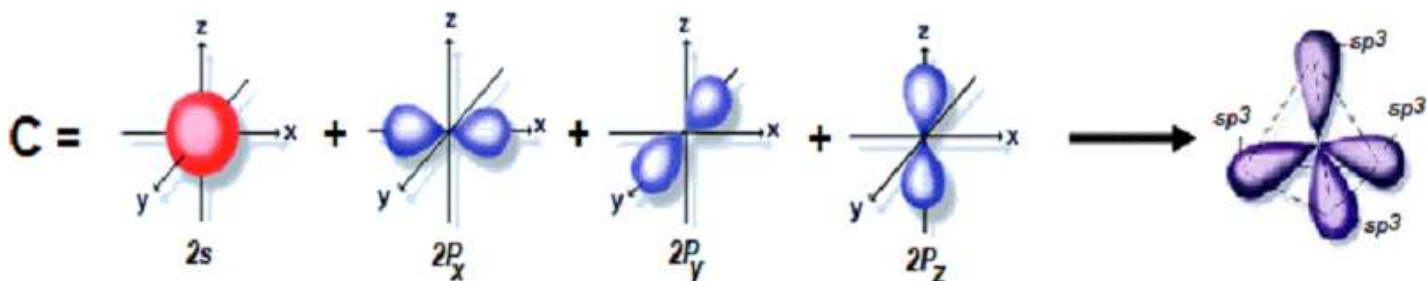


Estado fundamental

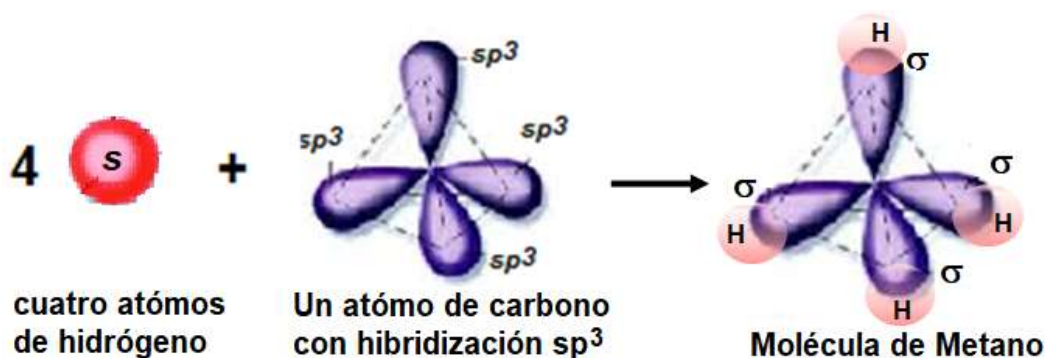


Estado excitado

Hibridización sp^3



3.17. Esquema de la formación de orbitales híbridos sp^3 [Del autor]



3.18. Combinación de cuatro orbitales $1s$ del hidrógeno con cuatro orbitales híbridos sp^3 para la formación de la molécula de metano (cuatro enlaces σ) [Del autor]

3.3.2. Enlaces covalentes múltiples

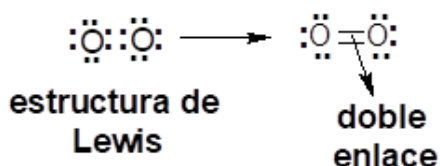
Estos enlaces se forman cuando en una molécula un par de átomos puede compartir más de dos electrones.

3.3.2.1. Enlaces dobles

Cuando el número de electrones que comparten los átomos es de cuatro se forma lo que se conoce como enlace covalente doble. El **enlace covalente doble** se caracteriza por poseer una energía de enlace mayor que la del enlace covalente sencillo y una longitud de enlace menor a la del enlace sencillo [2b].

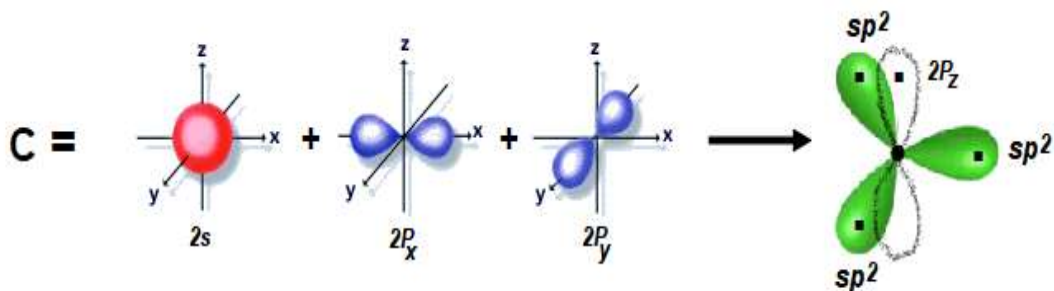
La energía de enlace se define como la energía promedio que se necesita para romper el enlace en cualquier compuesto en el cual existe y la longitud de enlace como la distancia promedio entre los núcleos de dos átomos enlazados. Estos conceptos serán tratados en una sección más adelante, destacando la importancia de estos.

Un enlace covalente doble se puede formar entre átomos iguales u átomos diferentes. Por ejemplo: O_2 y C_2H_4 . En la molécula de O_2 sus átomos cumplen con la regla del octeto formando un enlace doble entre ellos:

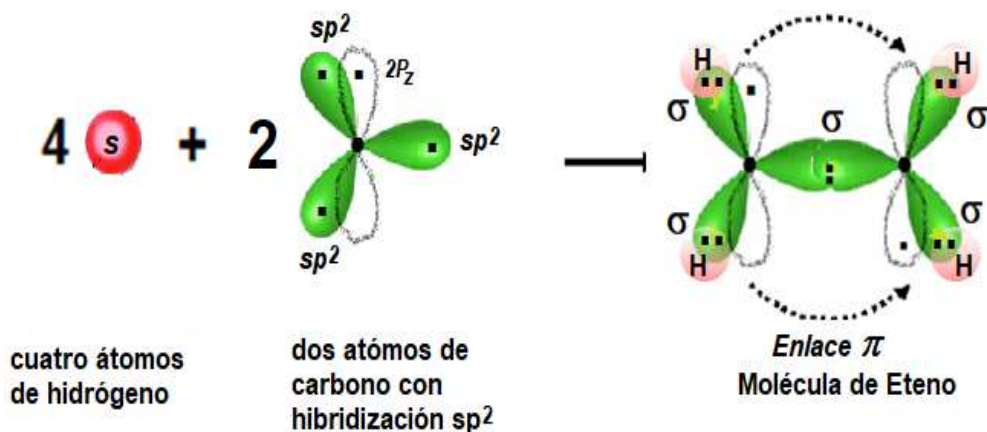


En la molécula de eteno (C_2H_4) la formación del doble enlace se explica considerando que cada átomo de carbón experimenta una hibridización del tipo sp^2 , en la cual se combinan el orbital $2s$ con dos orbitales p dando origen a 3 orbitales sp^2 (3 enlaces σ) y quedando un orbital p sin hibridizarse a través del cual se forma el enlace π .

Hibridación sp^2



3.19. Esquema de la formación de orbitales híbridos sp^2 [Del autor]

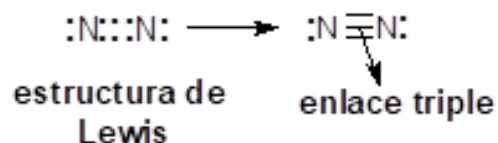


3.20. Combinación de cuatro orbitales $1s$ del hidrógeno con tres orbitales híbridos sp^2 para la formación de la molécula de eteno (cinco enlaces σ y un enlace π) [Del autor]

3.3.2.2. Enlace triple

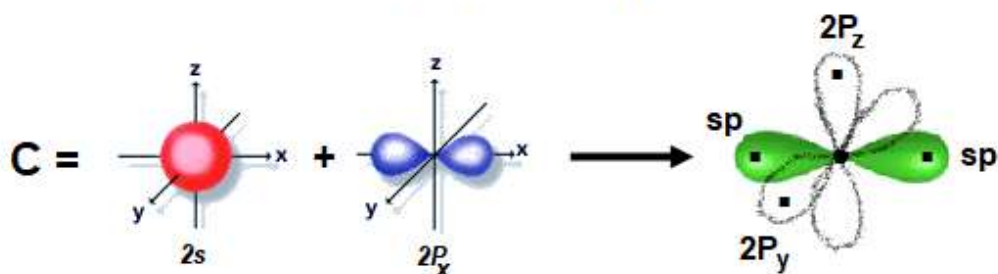
El enlace covalente triple se forma cuando en la molécula dos de sus átomos comparten seis electrones entre sí.

Por ejemplo: N_2 y C_2H_2 . En la molécula de N_2 sus átomos cumplen con la regla del octeto formando un enlace triple entre ellos:

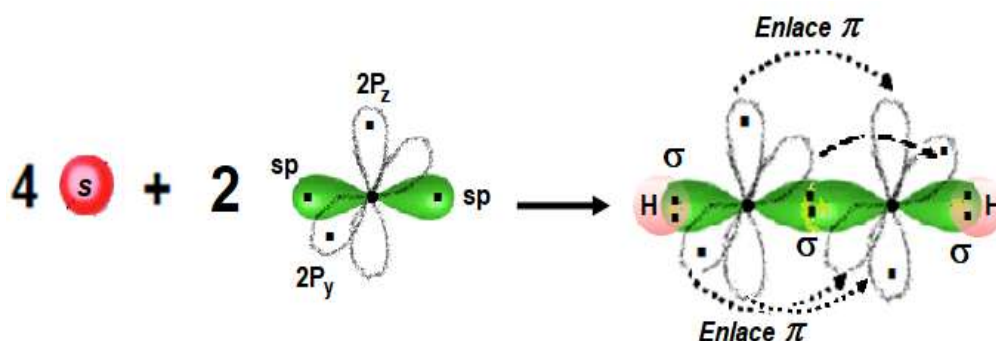


En la molécula de etino (C_2H_2) la formación del triple enlace se explica considerando que cada átomo de carbono experimenta una hibridación del tipo sp , en la cual se combinan el orbital $2s$ con un orbital p dando origen a 2 orbitales sp (2 enlaces σ) y quedando dos orbitales p sin hibridizarse a través de los cuales se forman dos enlaces π .

Hibridación sp^2



3.21. Esquema de la formación de orbitales híbridos sp [Del autor]

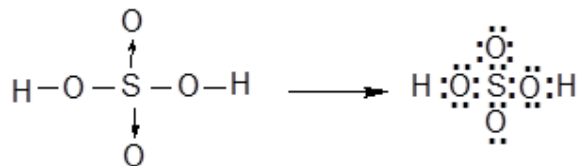


3.22. Combinación de cuatro orbitales $1s$ del hidrógeno dos orbitales híbridos sp para la formación de la molécula de etino (tres enlaces σ y dos enlaces π) [Del autor]

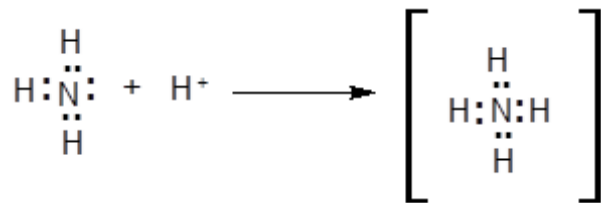
3.3.3. Enlace covalente coordinado

El enlace covalente coordinado es un enlace sencillo en el cual el par de electrones lo aporta sólo uno de los átomos. Generalmente se representa con una flecha desde el átomo que aporta el par de electrones. El átomo que aporta el par de electrones se llama donador y el que los recibe receptor o aceptor. El donador será siempre el elemento menos electronegativo, tal como se muestra en el ejemplo entre el oxígeno y el azufre, en la molécula del ácido sulfúrico.

Este enlace una vez formado no se diferencia para nada del enlace covalente normal. Sin embargo, debido a cómo se origina se le puede denominar enlace covalente dativo o coordinado.



Puede presentarse el caso, de que un ion se una a una molécula, por ejemplo, un ión hidrógeno se puede unir a una molécula de amoníaco para formar un ion amonio mediante enlace covalente coordinado:



En este compuesto los átomos de hidrógenos resultan indistinguibles entre sí.

3.3.4. Enlace covalente no polar

Cuando el enlace covalente tiene lugar entre dos átomos que son idénticos, se dice que el enlace es un enlace no polar. Este enlace es característico en las moléculas homonucleares como H_2 , N_2 , Cl_2 . Los orbitales atómicos se superponen de manera que ambos electrones se encuentran en los orbitales de los dos átomos. Los electrones gastan la mayor parte de su tiempo entre los dos átomos enlazados.

Por ejemplo, el enlace formado entre dos átomos de bromo para formar la molécula diatómica de bromo es un enlace no polar:

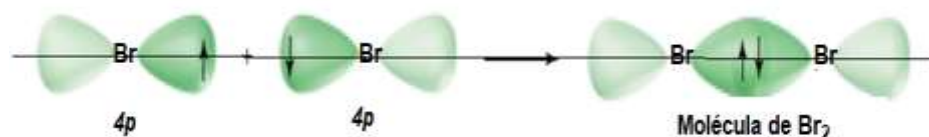


Figura 3.23. Representación esquemática del enlace covalente no polar en la molécula de bromo [Del autor]

3.3.5. Enlace covalente polar

Cuando el enlace covalente tiene lugar entre dos átomos que son diferentes, se dice que el enlace es un enlace polar. En este tipo de enlace, el compartimiento de electrones no es igual, ya que existen diferencias en la capacidad de atracción de electrones debido a que los átomos poseen electronegatividades diferentes [2b].

El término electronegatividad se refiere a la atracción por los electrones que un átomo tiene en un enlace químico. La densidad electrónica será mayor sobre el átomo que sea más electronegativo. Es decir, uno de los átomos que forma parte del enlace covalente polar adquiere una carga parcialmente negativa (δ^-) y el otro átomo adquiere una carga parcialmente positiva (δ^+).

Estas cargas representan una reorientación de la densidad electrónica entre los dos átomos que conforman el enlace. Esta separación de cargas origina un dipolo, por lo que se forma un momento dipolar, que induce a que el enlace sea polar. Sin embargo, la molécula total permanece eléctricamente neutra.

Un ejemplo de una molécula que presenta un enlace covalente polar es la molécula de cloruro de hidrógeno.

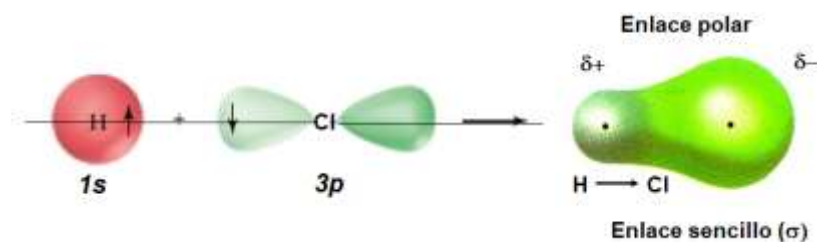


Figura 3.24. Representación esquemática del enlace covalente polar en la molécula de HCl [Del autor]

La mayoría de las sustancias covalentes en estado sólido o líquido se caracterizan por tener puntos de fusión, puntos de ebullición, calores de fusión y de ebullición relativamente bajos, debido a que es la mínima, la energía que se requiere para separar una molécula de otra. Los valores de estas propiedades por lo general aumentan al aumentar la masa molecular de la sustancia covalente.

Sin embargo, existe un pequeño número de sustancias covalentes tales como el diamante, el nitruro de Boro y el carburo de Silicio que se caracterizan por ser muy duros y poseer puntos de fusión muy altos debido a que sus moléculas se encuentran formando enrejados con arreglos tridimensionales. Para estas sustancias la fórmula más sencilla sólo representa la composición estequiométrica al igual que en un compuesto iónico.

Además de la teoría del enlace valencia aplicada en los diferentes ejercicios tratados en este capítulo, se tiene que existe la teoría del orbital molecular la cual considera que el enlace covalente se forma por la superposición de los orbitales atómicos de los átomos y que todos los electrones de ambos átomos pasan a formar parte de la molécula como un todo, es decir considera que todos los orbitales atómicos internos y externos pierden su identidad y que los electrones se distribuyen en la molécula en ciertos niveles de energía llamados orbitales moleculares.

Esta teoría a diferencia de la teoría del enlace valencia permite explicar las propiedades magnéticas que presentan algunas sustancias.

Por otro lado, existen teorías, tales como, la teoría del campo cristalino que permiten explicar de una manera muy apropiada las propiedades fisicoquímicas y la naturaleza del enlace de los complejos metálicos.

3.3.5.1. Polaridad de las moléculas

En la sección anterior, cuando describimos el enlace covalente polar, se dijo que este se formaba por la interacción de elementos con electronegatividades diferentes como, por ejemplo, en la molécula de HCl:

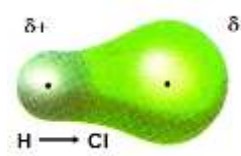


Figura 3.25. Representación esquemática de la formación de un dipolo en una molécula polar [14]

En la **figura 3.25**, se observa que el átomo de cloro atrae los pares de electrones de enlace de manera más fuerte que el átomo de hidrógeno, lo cual produce una asimetría en la distribución de los electrones de enlace dando origen a la formación de un dipolo.

La manera de medir la polaridad de un enlace se logra a través de su momento dipolar (μ), el cual se define como el producto de la magnitud de la carga Q y la distancia r entre las cargas. Sus unidades de medida es el Debye (D). No pertenece al SI ni al Sistema CGS, y es igual a 10^{-18} statcoulomb centímetro o $3,33564 \times 10^{-30}$ culombio metro.

Así, moléculas diatómicas que contienen elementos no-metálicos diferentes, producen moléculas polares.

El momento dipolar de moléculas poliatómicas viene dado tanto por la polaridad de sus enlaces como por su geometría. Por ejemplo, las moléculas de amoníaco (A) y agua (B) son moléculas polares debido a que presentan un momento dipolar neto igual a 1,47 D y 1,85 D respectivamente.

Mientras que la molécula de CO_2 (C), a pesar de que es una molécula poliatómica con enlaces polares, es una molécula no polar debido a que su simetría es lineal y por ende sus momentos dipolares se anulan entre sí.

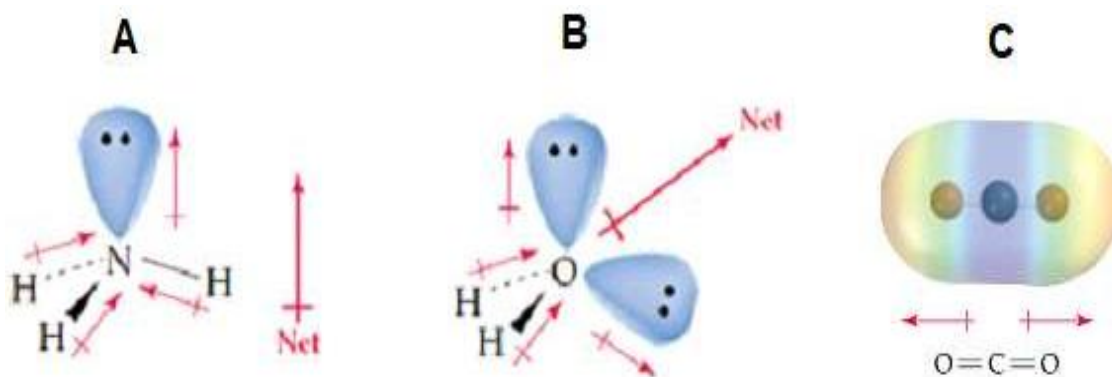


Figura 3.26. Representación de los momentos dipolares en diferentes moléculas [Del autor]

3.4. Fuerzas intermoleculares que se desarrolla cuando se forman soluciones a partir de compuestos iónicos, no polares y compuestos polares

Existen diferentes tipos de fuerzas que se desarrollan entre las moléculas de los compuestos iónicos, no polares y los compuestos polares, cuando estos son disueltos en un determinado solvente. A estas fuerzas intermoleculares se les conoce como fuerzas de Van der Waals [2b].

Cuando un compuesto iónico es disuelto en un solvente polar, las fuerzas intermoleculares de atracción que se originan son fuerzas de interacción ion-dipolo (fuerzas electrostáticas), debido a que el compuesto iónico se disocia en iones tanto positivos como negativos los cuales interactúan con los extremos positivos y negativos que se originan del dipolo que se establece en las moléculas del solvente polar:

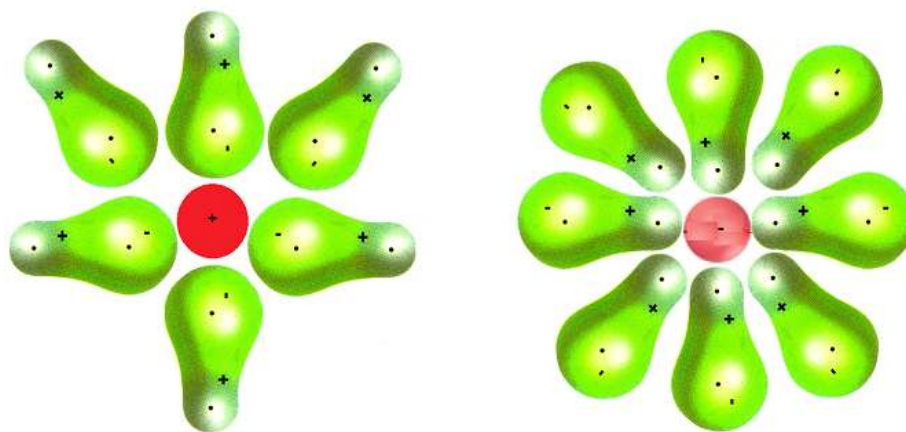


Figura 3.27. Representación esquemática de las fuerzas de interacción ion-dipolo (fuerzas electrostáticas) [Del autor]

Cuando un compuesto no polar se disuelve en un solvente no polar las interacciones que se originan entre las moléculas del soluto y el solvente son fuerzas

de dipolos inducidos (fuerzas de London) debido al desplazamiento instantáneo que se produce de la nube electrónica hacia la región del átomo o molécula en un momento dado, lo que origina que se cree un dipolo instantáneo el cual induce a la formación de otro dipolo en el átomo o molécula vecina:

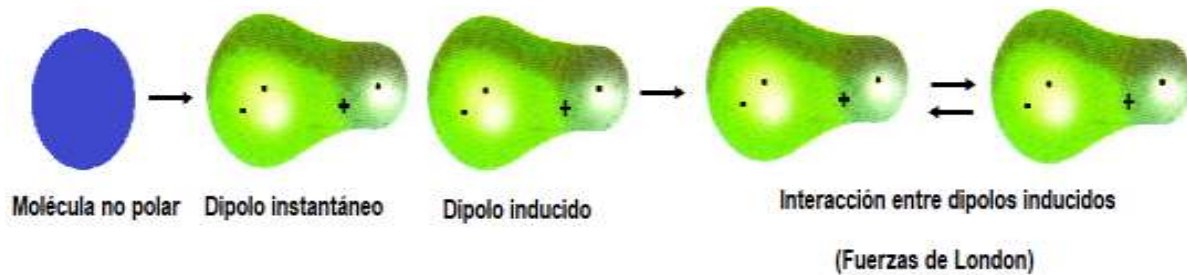


Figura 3.28. Representación esquemática de las fuerzas de entre dipolos inducidos (fuerzas de London) [Del autor]

Cuando un compuesto polar se disuelve en un solvente polar las interacciones que se originan entre las moléculas del soluto y el solvente son fuerzas de atracción dipolos-dipolo debido a la interacción entre el extremo positivo o negativo de una molécula polar con el extremo negativo o positivo de otra molécula polar vecina:

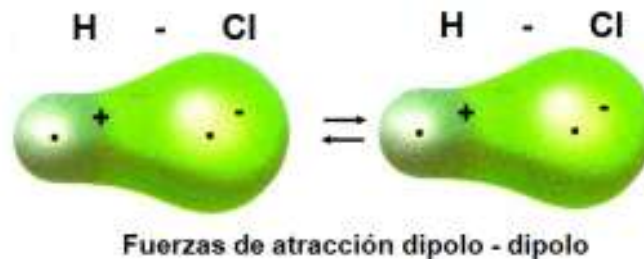


Figura 3.29. Representación esquemática de las fuerzas de interacción dipolo - dipolo [Del autor]

Existe un tipo particular de interacción dipolo-dipolo, llamada puente de hidrógeno, este tipo de interacción es bastante fuerte y ocurre entre los compuestos con hidrógenos que contienen O, N, F:

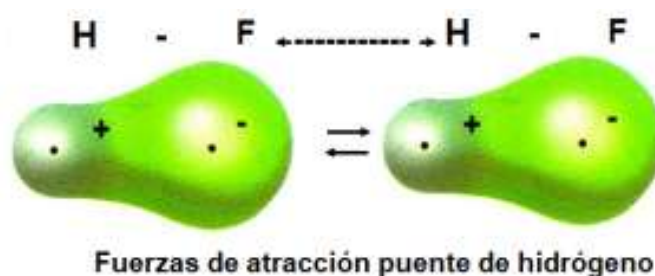


Figura 3.30. Representación esquemática de las fuerzas de atracción puente de hidrógeno [Del autor]

En este tipo de interacción el hidrógeno de una molécula sirve de puente a otra molécula, por un lado, el hidrógeno se encuentra unido al resto de la molécula por un enlace covalente polar y por lado a otra molécula vecina por medio de una interacción electrostática.

3.5. Parámetros moleculares y geometría molecular

Existen un conjunto 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. El parámetro polaridad ya fue descrito en la sección E de este capítulo.

3.5.1. Energía de enlace y longitud de enlace

La relación entre estos dos parámetros y por ende el significado de estos puede ser interpretada a partir de las 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.

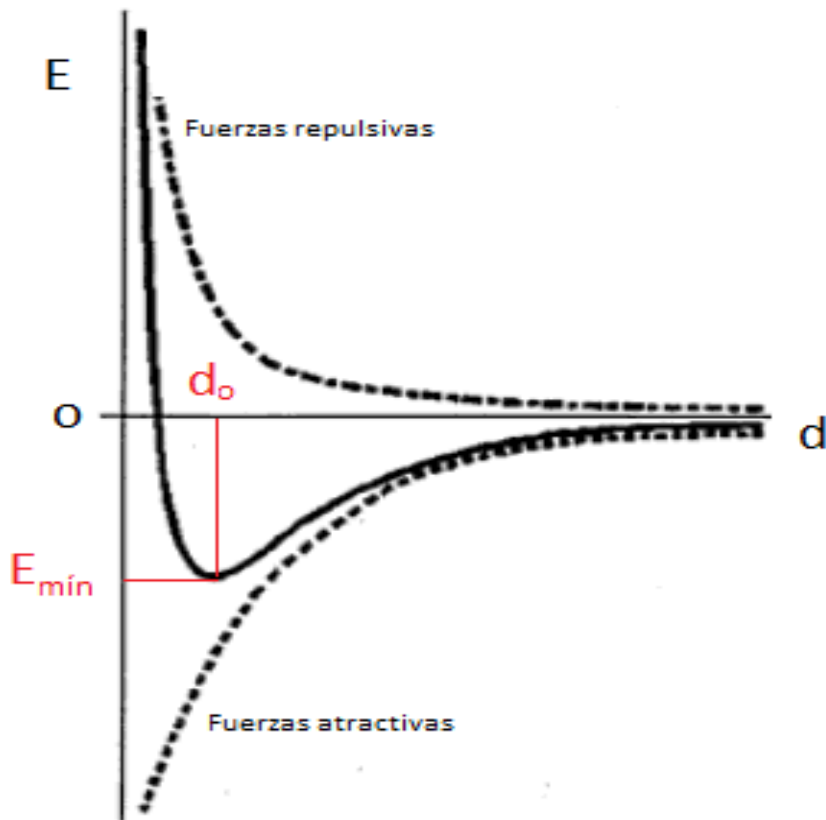


Figura 3.31. Curvas de estabilidad energética del enlace químico o curvas de Morse [15]

En un sistema formado por los átomos, A y B, se considera que inicialmente los átomos están separados por una distancia a la cual no experimentan entre sí ningún tipo de influencia, por lo que su energía inicial es igual a cero.

A medida que A y B comienzan a aproximarse mutuamente, empiezan a surgir unas 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 de este disminuye hasta un valle de mínima energía. No obstante, a medida que A y B siguen acercándose, empiezan a surgir 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 [15].

El resultado conjunto de las fuerzas atractivas y repulsivas que experimenta el sistema conformado por los átomos A y B, se observa en la **figura 3.27**. 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, **do**. 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 [15].

De lo explicado anteriormente se tiene entonces que, la longitud de enlace es la distancia de equilibrio entre los núcleos atómicos que se enlazan cuando se alcanza el mínimo de energía (energía de enlace) en el valle de la curva de estabilidad energética.

Esta distancia internuclear o longitud de enlace dependerá en gran medida, de la naturaleza de los átomos involucrados y es medible experimentalmente por técnicas espectroscópicas o de difracción. De esta manera para moléculas diatómicas formadas por átomos iguales, dividiendo entre dos la distancia internuclear, puede obtenerse el radio del átomo con bastante aproximación.

Es preciso indicar, no obstante, que los valores reportados en las tablas de las longitudes de enlace 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 longitud del enlace.

Tabla 3.1. Longitudes promedio de enlaces covalentes homonucleares [Del autor]

Enlace	Longitud (Å)
H-H	0,74
O=O	1,207
F-F	1,42
Cl-Cl	1,99
Br-Br	2,28
I-I	2,67
C-C	1,54*
C=C	1,33*
C≡C	1,20*

En esta tabla se puede observar (*) que las distancias de enlace entre átomos iguales unidos por enlaces simples, dobles y triples (C-C, C=C, C≡C) varía apreciablemente, siendo menor a medida que aumenta el número de enlaces.

Además, en la serie relacionada con los halógenos (F-F, Cl-Cl, Br-Br, I-I) la distancia aumenta a medida que aumenta en número atómico.

Esta tendencia tiene una explicación cualitativa razonable, si se reconoce que el largo del enlace es la posición de mayor estabilidad, o de mínima energía de un par de átomos.

La disminución de la energía asociada a la formación del enlace tiene su origen en la manera como se comportan los electrones de valencia de los átomos enlazados y es contrarrestada por las repulsiones electrostáticas entre los dos núcleos y entre las capas interiores de los dos átomos.

La fuerza de estas dos fuentes de repulsión aumenta a medida que se acercan los átomos. Ahora bien, a medida que el número atómico aumenta en una columna de la tabla periódica, los electrones de valencia se encuentran a distancias sucesivamente mayores de los núcleos.

Además, la repulsión entre dos núcleos debe aumentar a medida que aumenta sus cargas. En consecuencia, la distancia a la cual la energía de los átomos enlazados es mínima, o la distancia a la cual el enlace es más fuerte, tiende a crecer a medida que aumenta el número atómico (**tabla 3.2**).

Tabla 3.2. Longitudes promedio de enlaces covalentes heteronucleares [Del autor]

Enlace	Longitud (Å)
C-H	1,09
C-N	1,47
C-O	1,42
C-F	1,42
C-Cl	1,77
C-Br	1,91
C-I	2,12
H-O	0,96
H-N	1,01

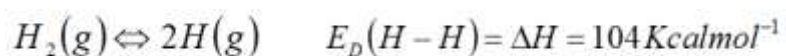
Las variaciones en las longitudes de enlace entre los mismos átomos dependen de la naturaleza de la molécula en donde se encuentre debido a que la densidad electrónica alrededor de un núcleo depende de todos los enlaces en los cuales está involucrado el átomo correspondiente (**tabla 3.3**).

Tabla 3.3. Longitud de los enlaces carbono-carbono de diferente naturaleza [Del autor]

Enlace	Molécula	Longitud de enlace (Å)
C-C	Etano ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$)	1,54
C-C	Metilacetileno ($\text{H}_3\text{C}-\text{C}=\text{CH}$)	1,46
C-C	Dimetilacetileno ($\text{H}_3\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_3$)	1,36
C-C	Propileno ($\text{H}_3\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2$)	1,51
C-C	Etileno ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$)	1,33
C-C	Cloruro de vinilo ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{Cl}$)	1,38

Con respecto a la energía de enlace, para una molécula diatómica, esta se puede definir como la energía de disociación de enlace (E_D) y representa el cambio de entalpía de una reacción en la cual la molécula gaseosa se separa en átomos gaseosos y puede ser medida en unidades de Kcal por mol de enlaces rotos.

Por ejemplo:



En las **tablas 3.4 y 3.5** se muestran unas listas de las energías de disociación de enlace de algunas moléculas diatómicas.

Tabla 3.4. Energías de disociación de algunas moléculas diatómicas homonucleares [De autor]

Molécula	$E_D(\text{Kcal mol}^{-1})$	Molécula	$E_D(\text{Kcal mol}^{-1})$
Li ₂	25	F ₂	37
Na ₂	17	Cl ₂	59
K ₂	12	Br ₂	46,1
Rb ₂	11	N ₂	226
H ₂	104	O ₂	119

Tabla 3.5. Energías de disociación de las moléculas diatómicas de los halogenuros de hidrógeno [Del autor]

Molécula	$E_D(\text{Kcalmol}^{-1})$
HF	135
HCL	103
HBr	87,4
HI	71,4

En las moléculas diatómicas de la serie de los metales alcalinos (**figura 3.4**), la energía de cada miembro de la serie es comparativamente pequeña y disminuye mientras incrementa el número atómico del átomo alcalino.

Entre los halogenuros de hidrógeno (**figura 3.5**), las energías de enlace son comparativamente grandes y asimismo disminuyen a medida que aumenta el número atómico del halógeno.

Las energías de enlace para moléculas poliatómicas se calculan a partir de procesos de fragmentación sucesiva de la molécula en átomos o grupos de átomos (radicales).

Por ejemplo, para la molécula de CH_4 se tiene:

Reacción	$E_D (\text{Kcalmol}^{-1})$
$\text{CH}_4(g) \rightarrow \text{CH}_3(g) + \text{H}(g)$	103
$\text{CH}_3(g) \rightarrow \text{CH}_2(g) + \text{H}(g)$	87
$\text{CH}_2(g) \rightarrow \text{CH}(g) + \text{H}(g)$	125
$\text{CH}(g) \rightarrow \text{C}(g) + \text{H}(g)$	81

Los valores de energía de disociación de los enlaces C-H en estos cuatro pasos son diferentes, lo cual es comprensible por ser diferentes las estructuras de las especies químicas que se están considerando.

Sin embargo, puede obtenerse un valor promedio para la energía del enlace C-H, sumando los cuatro valores de E_D y dividiendo entre cuatro. Es decir, la energía de enlace promedio (ϵ) para romper el enlace C-H es de 99 Kcal mol⁻¹.

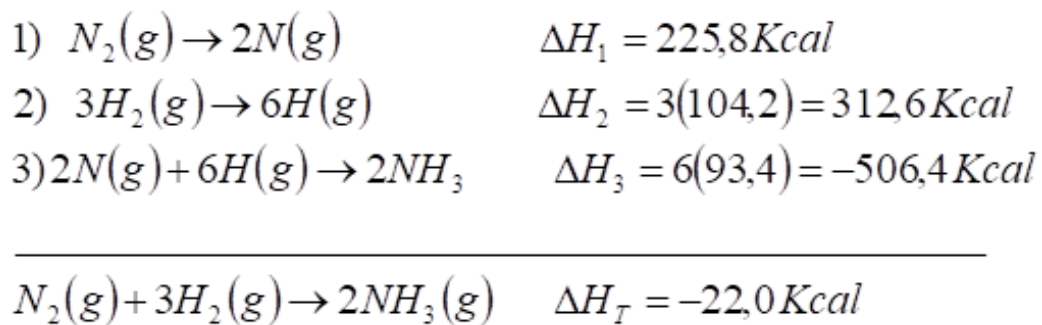
La **tabla 3.6**, muestra una lista de las energías de enlace promedio que requieren para romper un determinado enlace.

Tabla 3.6. Energías de enlace promedio (Kcal/mol) [Del autor]

Enlace	ϵ	Enlace	ϵ
C-H	98,7	C-C	82,6
C-F	110	C=C	145,8
C-Cl	80	C≡C	199,6
C-Br	69	C-O	85
C-I	55	C=O	178
C-N	80	O-H	110,6
N-H	93,4	S-H	83

Los valores de energía de enlace se suelen emplear para calcular los valores de energía de formación de algunas moléculas. Por ejemplo, para la formación del NH₃ a partir de nitrógeno e hidrógeno, es necesario romper enlaces N-N y H-H y formar N-H.

Por convención, se acepta que la rotura de un enlace consume energía y es de signo positivo, mientras que la formación de un enlace desprende energía y es de signo negativo. El balance energético que puede hacerse considerando los valores de energías de enlace, da la medida de la factibilidad del proceso. Entonces a partir de los valores reportados en las **tablas 3.4 y 3.6**, se tiene que:



3.5.2. Ángulo de enlace

El ángulo de enlace (θ) es el ángulo interno de la intersección entre dos enlaces en el centro de un átomo común. Un ejemplo, es la molécula de agua (**Figura 3.32**) :

Los ángulos de enlace se determinan experimentalmente por difracción de rayos X y espectroscopia molecular y sus valores representan un valor promedio determinado por la vibración constante de los átomos que lo forman.

El valor de un ángulo de enlace este asociado con el número de electrones de valencia de sus átomos, particularmente del átomo central y por ende de las propiedades que el presenta.

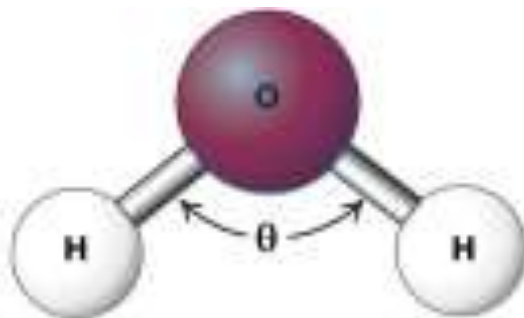


Figura 3.32. Ángulo de enlace en la molécula del agua [Del autor]

Cuando se crean compuestos moleculares, una variedad de ángulos de enlace es posible basada en la orientación de los átomos y los electrones.

Cuando se examinan los ángulos del enlace en los compuestos similares de los miembros sucesivos de un grupo de la tabla periódica, se observan semejanzas notables.

La **tabla 3.7** muestra los ángulos de enlace de los hidruros del Grupo IV, V y VI. Se observa que los hidruros del grupo IV todos presentan ángulos de enlace de $109,5^\circ$, llamado ángulo tetraédrico porque equivale a tener los átomos ubicados en los vértices de un tetraedro regular.

Por otro lado, los hidruros del Grupo V presentan una estructura piramidal trigonal, con ángulos de enlace con respecto al átomo central que van de 107° a 91° .

Mientras que los hidruros del Grupo VI presentan una tendencia en la que disminuye el ángulo de enlace de 104° en el agua hasta 89° en el H₂Te.

Tabla 3.7. Ángulos de enlaces de algunos hidruros [Del autor]

Hidruros del Grupo IV		Hidruros del Grupo V		Hidruros del Grupo VI	
Molécula	θ	Molécula	θ	Molécula	θ
CH ₄	109,5	NH ₃	107,3	H ₂ O	104,5
SiH ₄	109,5	PH ₃	93,3	H ₂ S	92,2
GeH ₄	109,5	AsH ₃	91,8	H ₂ Se	91,0
SnH ₄	109,5	SbH ₃	91,3	H ₂ Te	89,5

La observación de ángulos variables entre los hidruros de los grupos V y VI se considera que es debido a la compresión de los pares de electrones no compartidos. Este comportamiento de los ángulos de enlace en compuestos pertenecientes a distintos grupos de la tabla periódica será analizado en detalle en la sección siguiente relacionada con geometría molecular a partir de la Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.

3.5.3. Geometría Molecular

La geometría de una molécula depende fundamentalmente de los ángulos de enlace, así como, de la relación entre las longitudes de enlace. Se refiere a la organización tridimensional de los átomos en las moléculas.

La idea de establecer una correlación molecular entre la geometría de una molécula y el número de electrones de valencia se presentó por primera vez en 1940 a través de la Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (TRPECV) [16, 17].

Esta teoría se basa en las estructuras de Lewis y el grado de repulsión que se origina entre los pares de electrones de valencia alrededor del átomo central de la molécula y proporciona un método sencillo y directo para predecir geometrías moleculares, pero no explica el carácter íntimo del enlace.

La TRPECV no está basada en la mecánica cuántica y por tanto no se consideran orbitales a las regiones de densidad electrónica, por lo que podrán alojar a más de dos electrones. Al considerar sólo la repulsión de los pares electrónicos, los dobles y triples enlaces se pueden considerar como sencillos [16].

La TRPECV establece que la geometría de una molécula o ion poliatómico, esta acondicionada, por la repulsión coulombica entre los pares de electrones de la capa de valencia alrededor del átomo central.

La geometría predicha es aquella que proporciona a los pares de electrones de la capa de valencia la energía mínima. En realidad, da la casualidad de que cuando una distribución de electrones es la adecuada, coincide con una repulsión interelectrónica mínima.

Los pares de electrones de valencias alrededor del átomo central pueden ser dos tipos [16]:

- Pares de enlace (PE)
- Pares solitarios (PS)

Las fuerzas de repulsión entre los pares de electrones de valencia son de tres tipos:

- PS-PS
- PS-PE
- PE-PE

Siendo **PS-PS >PS-PE >PE-PE**.

Los pares de electrones se repelen entre sí, tanto si se encuentran formando enlaces (PE) como cuando están sin compartir (PS). Los pares de electrones tanto PE y PS se distribuyen alrededor del átomo central de modo que se minimicen las repulsiones entre ellos.

En la aplicación de la TRPECV se considerarán dos tipos de moléculas:

- Moléculas en las que el átomo central no tienen PS.
- Moléculas en las que el átomo central tiene uno o más PS.

Para la aplicación de la TRPECV se considerarán las siguientes reglas [17]:

- Al considerar la repulsión de los pares electrónicos, los dobles y triples enlaces se tratan como enlaces sencillos.
- No hay equivalencia entre par solitario y par enlazante
- Los ángulos de enlace que incluyen un elemento muy electronegativo, que no sea el átomo central, serán menores que los ángulos ideales debido a la atracción del átomo electronegativo sobre el par de electrones de enlace.
- En molécula con PS, la forma de la molécula viene dado por la disposición de los átomos alrededor del átomo central, por lo que los pares solitarios son, desde ese punto de vista, transparentes y provocan mayores repulsiones que los PE debido a su mayor extensión espacial (los PS son atraídos solo por un núcleo mientras que los PE son atraídos por dos)

- Si una molécula tiene dos o más estructuras resonantes, este modelo puede ser aplicado a cualquiera de ellas y las cargas formales no se muestran en el modelo final.

La estrategia por seguir en la representación de la geometría de una molécula consiste en [17]:

- Identificar el átomo central de la molécula
- Dibujar la estructura de Lewis incluyendo dobles o triples enlaces, si es necesario y las posibles estructuras de resonancia.
- Contar los pares totales (PT), PE y PS alrededor del átomo central, considerando los doble y triple enlaces como un PE.
- Predecir la posible geometría de la molécula ordenando los pares de electrones (PE y PS) de manera que estén colocados a la mayor distancia posible para minimizar el efecto de repulsión de cargas, teniendo en cuenta que el espacio que ocupa los PS es mayor que de los PE y que la repulsión entre ellos es mayor, tal como se describió anteriormente.
- Tener en cuenta la electronegatividad de los átomos unidos al átomo central a la hora de representar el ángulo de enlace.

En la **figura 3.33**, se ilustran las geometrías ideales para moléculas, donde todos los pares de electrones alrededor del átomo central son PE.

Molécula	Estructura de Lewis	Pares electrónicos	Geometría Molecular
BeCl ₂		2	lineal
BF ₃		3	triangular plana
CH ₄		4	tetraédrica
PCl ₅		5	bipirámide trigonal
SF ₆		6	octaédrica

Figura 3.33. Geometrías ideales para moléculas del tipo AX_n, donde todos los pares de electrones son PE [Del autor]

En la **figura 3.34**, se ilustran las geometrías para moléculas que presentan pares de electrones alrededor del átomo central PE y PS. Comparando las **figuras 3.33 y 3.34**, se tiene que las moléculas con cuatro PT (estructura tetraédrica), si hay dos PS de electrones estos abrirán más el ángulo entre sí por efecto de repulsión de cargas y por consiguiente tenderán a cerrar el ángulo entre los dos PE (la molécula de agua tiene un ángulo H-O-H de 104,5°, que es menor que el ángulo H-C-H del metano, un tetraedro regular de 109,5°).

La **tabla 3.8** muestra la relación entre el ángulo de enlace y la estructura geométrica de algunos hidruros. Se observa que los hidruros del Grupo IV de la tabla periódica tienen ángulos de 109,5° y presentan estructuras tetraédricas. Los hidruros de los Grupos V y VI presentan angulas variables, debido a la compresión de los pares de electrones no compartidos.

Molécula	Estructura de Lewis	PE	PS	PT	Arreglo ideal	Geometría Molecular
SnCl ₂		2	1	3	triangular plana	angular
NH ₃		3	1	4	tetraédrica	pirámide trigonal
H ₂ O		2	2	4	tetraédrica	angular
SF ₄		4	1	5	bipirámide trigonal	tetraedro deformado o balancín
ClF ₃		3	2	5	bipirámide trigonal	forma de T
I ₃ ⁻		2	3	5	bipirámide trigonal	lineal
BrF ₅		5	1	6	octaédrica	pirámide cuadrada
XeF ₄		4	2	6	octaédrica	plano-cuadrada

Figura 3.34. Geometrías para moléculas que presentan PE y PS alrededor del átomo central de la molécula [Del autor]

Se observa además que si el átomo central es muy electronegativo atraerá hacia sí los pares de electrones de enlace lo cual aumenta la repulsión y abre el ángulo de enlace. Por ejemplo, el NH₃ y el PH₃ (**tabla 3.8**), la mayor electronegatividad del nitrógeno hace que el ángulo de enlace H-N-H sea de 107,3°, mientras que el H-P-H sea de 93,3°.

Tabla 3.8. Relación entre el ángulo de enlace y la estructura geométrica de algunos hidruros [Del autor]

Grupo IV	O	Estructura	Grupo V	O	Estructura	Grupo VI	O	Estructura
CH ₄	109,5	Tetraédrica	NH ₃	107,3	Pirámide Trigonal	H ₂ O	104,5	Angular
SiH ₄	109,5	Tetraédrica	PH ₃	93,3	Pirámide Trigonal	H ₂ S	92,2	Angular
GeH ₄	109,5	Tetraédrica	AsH ₃	91,8	Pirámide Trigonal	H ₂ Se	91,0	Angular
SnH ₄	109,5	Tetraédrica	SbH ₃	91,3	Pirámide Trigonal	H ₂ Te	89,5	Angular

Otro ejemplo, del efecto de repulsión de cargas que ejercen los electrones no enlazantes sobre el ángulo de enlace, lo podemos apreciar en las moléculas de NO₂⁺, NO₂ y NO₂⁻. En el ion NO₂⁺, el nitrógeno no tiene PS, su estructura es lineal y el ángulo de enlace es de 180°. Mientras que, en el NO₂ el nitrógeno presenta un electrón desapareado lo cual origina una disminución del ángulo de enlace a 135° y en el NO₂⁻, el nitrógeno presenta un PS haciendo que ángulo de enlace sea de 115°.

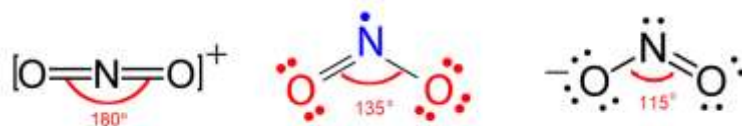


Figura 3.35. Efecto de los electrones no enlazados sobre el ángulo de enlace [Del autor]

3.6. Ejercicios relacionados con el enlace covalente

Algunos ejercicios fueron tomados del trabajo de Ildes et al. publicado en el año 2019 [1d].

1. Explique razonadamente qué tipo de enlace presentan los siguientes compuestos:

a) Cloruro de sodio.

b) Dióxido de carbono.

c) Agua.

R: a) El cloruro de sodio presenta enlace iónico, debido a la elevada diferencia de electronegatividad que existe entre sus átomos.

b) En la molécula de dióxido de carbono, el enlace entre los átomos de C y O es covalente polar, sin embargo, la molécula es apolar, ya que presenta una geometría lineal.

c) En el agua hay un enlace covalente polarizado entre sus átomos, y es una molécula polar debido a la geometría angular que posee.

2. A partir de las configuraciones electrónicas de los átomos de N, O y F, dé las estructuras de Lewis de las especies químicas: NF_3 , NO_2^- y NO_3^- . Justifique también sus estructuras e indique si el trifluoruro de nitrógeno es o no una molécula polar.

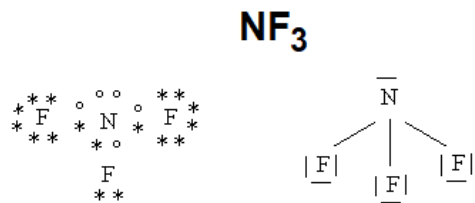
R: Las configuraciones electrónicas de los átomos de N, O y F son:

N: $1s^2 2s^2 2p^3$

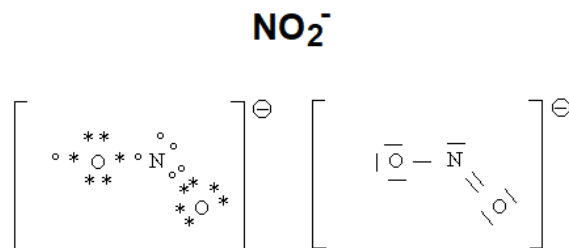
O: $1s^2 2s^2 2p^4$

F: $1s^2 2s^2 2p^5$.

Las estructuras de Lewis para especies químicas NF_3 , NO_2^- y NO_3^- son:

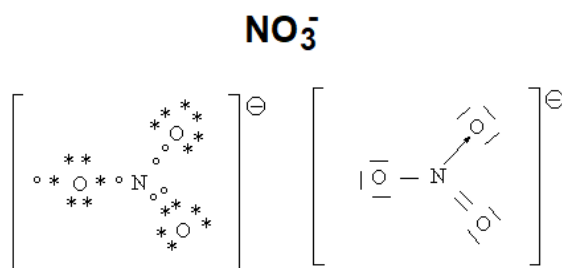


El trifluoruro de nitrógeno, tiene hibridación sp^3 lo que le confiere una geometría piramidal con ángulos ligeramente inferiores a los tetraédricos de $109,5^\circ$ debido a la repulsión del par de electrones no compartidos. Será una molécula polar con la parte positiva en el N y la negativa en el centro de los F.



El ion nitrito presenta una hibridación sp^2 en el N lo que le da una geometría angular de $a < 120^\circ$ por la repulsión del par no compartido.

El ion nitrato tiene el átomo de N con hibridación sp^2 y ángulos de 120° .



Tanto el ion nitrito como el nitrato presentan enlaces π entre orbitales p y

además un enlace dativo o covalente coordinado donde el N aporta los dos electrones de este. Estas dos especies poseen formas resonantes, en las que varían la disposición de esos enlaces.

3. El enlace en el BrF es:
- a) Covalente puro
 - b) Metálico
 - c) Covalente, con cierto carácter iónico
 - d) Iónico

R: La molécula de BrF tiene enlace covalente, ya que tanto el flúor como el bromo tienen siete electrones en su última capa (ns^2np^5) y la única forma de completar el octeto es compartiendo, cada uno de ellos, un electrón.

Como los dos elementos tienen diferente valor de la electronegatividad, χ (Br) = 2,96 y χ (F) = 3,98 el enlace formado es covalente polar, es decir, que tiene un cierto carácter iónico parcial, tanto mayor cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad.

La respuesta correcta es la c.

4. Explique usando orbitales híbridos, la estructura y enlace de la molécula de metano.

R: Ver sección 3.3. la respuesta.

5. Los enlaces o puentes de hidrógeno:

- a) Aparecen siempre que hay un átomo de hidrógeno.
- b) Hacen disminuir, generalmente, las temperaturas de fusión y de ebullición.
- c) Aparecen en moléculas como H_2O , NH_3 y CH_4 .
- d) Son muy fuertes cuando el elemento unido al hidrógeno es muy electronegativo.
- e) Poseen una energía de enlace superior a la de un enlace químico.

R: El enlace de hidrógeno o por puentes de hidrógeno se forma cuando un átomo de hidrógeno que se encuentra unido a un átomo muy electronegativo se ve atraído a la vez por un par de electrones solitario perteneciente a un átomo muy electronegativo y pequeño (N, O o F) de una molécula cercana.

La respuesta correcta es la d.

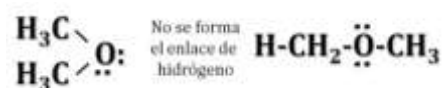
6. ¿Cuál de las siguientes moléculas no puede formar enlaces por puentes de hidrógeno con otras del mismo compuesto?

- a) Éter metílico
- b) Etanol
- c) Agua
- d) Amoníaco

R: El enlace de hidrógeno o por puentes de hidrógeno se forma cuando un átomo de hidrógeno que se encuentra unido a un átomo muy electronegativo se ve atraído a la vez por un par de electrones solitario

perteneciente a un átomo muy electronegativo y pequeño (N, O o F) de una molécula cercana.

Etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$), agua (H_2O) y amoníaco (NH_3) cumplen la condición propuesta anteriormente, mientras que el éter metílico (CH_3OCH_3) no ya que no sus átomos de hidrógeno se encuentran unidos al carbono, un elemento poco electronegativo:



7. ¿Cuál de las sustancias siguientes tiene las mayores fuerzas intermoleculares de atracción? ¿Por qué?

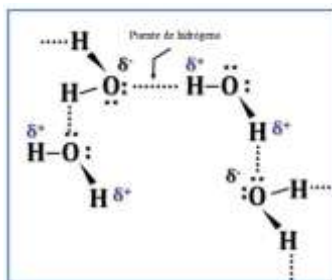
- a) H_2O
- b) H_2S
- c) H_2Se
- d) H_2Te
- e) H_2

R: El agua presenta las mayores fuerzas intermoleculares de atracción pues sus moléculas están unidas por puentes de hidrógeno, al ser el oxígeno un átomo muy electronegativo y de pequeño tamaño.

8. El número máximo de enlaces de hidrógeno en los que puede participar una molécula de agua es:

- a) 1
- b) 2
- c) 3
- d) 4

R: El enlace de hidrógeno o por puentes de hidrógeno se forma cuando un átomo de hidrógeno que se encuentra unido a un átomo muy electronegativo se ve atraído a la vez por un par de electrones solitario perteneciente a un átomo muy electronegativo y pequeño (N, O o F) de una molécula cercana.



La molécula de agua es capaz de formar cuatro enlaces de hidrógeno, dos por medio de los átomos de hidrógeno, y otros dos por medio de los pares solitarios del átomo de oxígeno.

La respuesta correcta es la d.

9. Defina el concepto de fuerzas intermoleculares. Tomando como referencia los hidruros de los elementos halógenos (Grupo 17 del Sistema Periódico), diferencie entre las interacciones predominantes en el compuesto del elemento cabeza del Grupo y en los restantes, indicando la variación de alguna propiedad física dependiente de las fuerzas intermoleculares.

R: Son fuerzas que se manifiestan entre moléculas neutras.

En los hidruros de los halógenos, el hidrógeno se une con elementos más electronegativos (F, Cl, Br, I) y se forman enlaces covalentes polares.

Por ser el átomo de flúor de pequeño tamaño y muy electronegativo, las

moléculas de HF se unen mediante enlaces o puentes de hidrógeno, presentando por ello puntos de fusión anormalmente elevados si se compara con el HCl, HBr y HI.

Las moléculas de los restantes hidruros de los halógenos (HCl, HBr y HI) son dipolos permanentes y existen entre ellas fuerzas intermoleculares de Van der Waals: fuerzas de orientación y de dispersión.

Las fuerzas de dispersión aumentan al aumentar el tamaño de la molécula, al aumentar la masa molecular, por ello los puntos de fusión aumentan en el siguiente orden:



10. Indique razonadamente qué tipo de enlace o fuerza de atracción se rompe al:

- Fundir Bromuro de Litio
- Disolver bromo molecular en tetracloruro de carbono
- Evaporar agua

R: Para determinar qué enlaces se rompen debemos tener en cuenta qué es lo que realmente sucede cuando tienen lugar los procesos indicados:

a) Fundir Bromuro de Litio. El Bromuro de litio (LiBr) es un compuesto iónico por lo que en estado sólido cada uno de los iones: Li^+ ó Br^- se encuentra en su red cristalina rodeado de otros iones de signo contrario que lo hacen permanecer en su posición. Cuando se funde el cristal, se rompen estos enlaces y los iones pueden ya moverse con cierta libertad (estado líquido), por lo que en este proceso se rompen los enlaces iónicos existentes entre los iones Litio (Li^+) y Bromuro (Br^-).

b) Disolver bromo molecular en tetracloruro de carbono. El Bromo molecular (Br_2) es un compuesto líquido en el cual coexisten dos tipos de enlaces: los enlaces intramoleculares, entre los dos átomos de Bromo que conforman la molécula) son enlaces covalentes puros y como tales son enlaces fuertes, mientras que los enlaces intermoleculares, que mantienen unidas unas moléculas con otras son enlaces por fuerzas de Van der Waals, y por tanto débiles.

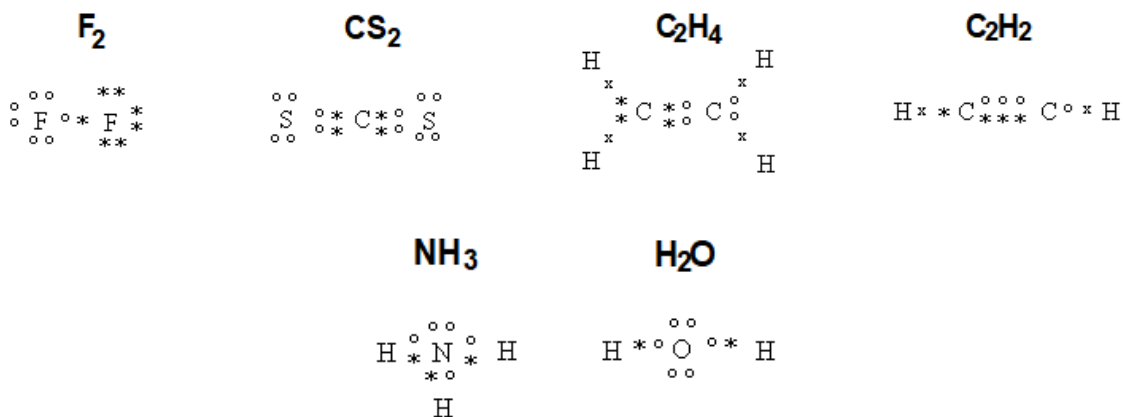
Cuando se produce la disolución en tetracloruro de carbono, que es un disolvente apolar, se rompen los enlaces intermoleculares por fuerzas de Van del Waals, manteniéndose el Bromo molecular como tal en la disolución.

c) Evaporar agua. La evaporación es un proceso en el cual una sustancia pasa de estado líquido a gaseoso a una temperatura inferior a su temperatura de ebullición. En el caso del agua a la presión normal (1 atm) este fenómeno se produce entre $0\text{ }^\circ\text{C}$ y $100\text{ }^\circ\text{C}$. El agua (H_2O) es un por tanto un compuesto líquido en el cual coexisten dos tipos de enlaces: Los enlaces intramoleculares, entre los dos átomos de Hidrógeno con el de Oxígeno que conforman la molécula, son enlaces covalentes parcialmente iónicos por lo que están polarizados, con los electrones del enlace más próximos al átomo de Oxígeno. Por ello, y debido también a la hibridación sp^3 del átomo de oxígeno, la molécula de agua está polarizada, mientras que los enlaces intermoleculares, que mantienen unidas unas moléculas con otras se deben a esta polarización y se forman debido a la atracción del átomo de oxígeno de una molécula (el cual tiene un exceso de carga negativa) hacia un átomo de Hidrógeno de otra molécula de agua contigua, con la cual formará un enlace intermolecular por Puente de Hidrógeno.

Cuando se produce la evaporación del agua, las moléculas permanecen como tales (H_2O) pero se romperán sus enlaces por puente de Hidrógeno con otras moléculas vecinas de manera que el agregado molecular sea más pequeño y pueda existir en estado gaseoso.

11. De las siguientes moléculas: F_2 , CS_2 , C_2H_4 (etileno), C_2H_2 (acetileno), H_2O , C_6H_6 (benceno), NH_3 . a) ¿Cuáles tienen todos los enlaces sencillos o simples? b) ¿Dónde existe algún doble enlace? c) ¿Dónde existe algún triple enlace?

R: De acuerdo con las estructuras de Lewis:



Se tiene que:

- a) Las moléculas que tienen todos los enlaces sencillos son: Flúor, NH_3 y H_2O
- b) En CS_2 y en C_2H_4 existen dobles enlaces
- c) En C_2H_2 existe enlace triple
12. ¿Por qué el agua es un líquido en condiciones normales y el sulfuro de hidrógeno es un gas?

R: Nos encontramos ante dos compuestos con enlaces covalentes clásicos: H_2O y H_2S , resultado de la unión entre átomos de no metales, de características similares. Ambos presentan dos enlaces con hidrógeno, y en ambos casos el átomo central pertenece al mismo grupo del sistema periódico: el oxígeno y el azufre.

Las propiedades físicas de las moléculas derivan del tipo de fuerzas intermoleculares que se establecen entre ellas, y aquí es donde aparece la diferencia entre el agua (líquida) y el sulfuro de hidrógeno (gaseoso). Ambas son moléculas polares, pero el H_2O presenta fuerzas intermoleculares denominadas enlaces de hidrógeno, pues el enlace O–H está altamente polarizado, debido a la gran electronegatividad y pequeño tamaño del oxígeno, en comparación con el azufre. Ello crea unas interacciones tan intensas, que los hidrógenos parecen pasar a establecerse como puentes entre los átomos de oxígeno de moléculas vecinas, por mera atracción electrostática entre las densidades de carga parcial que se crean en cada molécula.

Como resultado de esto, las fuerzas intermoleculares en ambos casos son distintas: H_2O enlaces de hidrógeno, H_2S interacciones Van der Waals de tipo dipolo-dipolo (mucho más débiles). Y a pesar de que un aumento en el tamaño molecular incrementa asimismo la magnitud de las interacciones intermoleculares, en este caso la diferencia de tamaños entre el S y el O no es suficiente como para evitar que el agua, a temperatura ambiente, siga siendo un líquido frente al H_2S .

13. Considere las siguientes moléculas: H_2O , HF , H_2 , CH_4 y NH_4 . Conteste justificadamente a cada una de las siguientes cuestiones:

a) ¿Cuál o cuáles son apolares?

b) ¿Cuál presenta el enlace con mayor contribución iónica?

c) ¿Cuál presenta el enlace con mayor contribución covalente?

R: a) H_2 no lo es por ser su enlace apolar y CH_4 tampoco debido a que los cuatros momentos dipolares de su enlace se compensan (geometría tetraédrica).

b) HF ya que son los dos átomos que presentan mayor diferencia de electronegatividad.

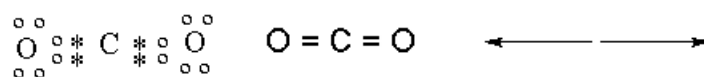
c) H_2 por ser homonuclear y presentar un enlace totalmente covalente.

14. Colocar las siguientes moléculas por orden creciente de su polaridad: HBr , HF , HI y HCl . Justificar brevemente la respuesta.

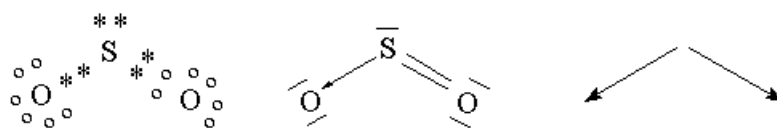
R: Cuando se unen mediante enlace covalente dos átomos de diferente electronegatividad, los pares de electrones no están igualmente compartidos, formando enlaces covalentes polares. Por ejemplo, en el HCl existe una pequeña carga positiva en el H y otra negativa, también pequeña, sobre el Cl , al ser este más electronegativo que el de H . En general la polaridad aumenta al hacerlo la diferencia de electronegatividad entre los átomos unidos. Por tanto, como la electronegatividad sigue en los halógenos el siguiente orden: $\text{I} < \text{Br} < \text{Cl} < \text{F}$, la polaridad de las moléculas será: $\text{HI} < \text{HBr} < \text{HCl} > \text{HF}$.

15. Al comparar dos moléculas muy similares como el CO_2 y el SO_2 se observa que en la primera el momento dipolar es cero, mientras que en la segunda no. Justifique esto de forma razonada.

R: La molécula de CO_2 es lineal, con dobles enlaces en los que el átomo de carbono tiene hibridación sp . Al ser el oxígeno más electronegativo que el carbono, los enlaces serán polares. Sin embargo, los dipolos eléctricos son iguales, pero de sentido contrario y se anulan entre sí, por lo que la molécula será apolar.



La molécula de SO_2 tiene un átomo central de azufre con hibridación trigonal sp^2 , con un par de electrones sin compartir, un doble enlace y un enlace covalente coordinado o dativo que presenta dos estructuras resonantes. El par de electrones sin compartir hará que por repulsión el ángulo de enlace sea inferior al esperado de 120° . El oxígeno es más electronegativo que el azufre y los dipolos ahora no se anulan, por lo que la molécula será polar.



16. Qué tipo de enlace presentan las siguientes sustancias:

- Cloruro de sodio
- Dióxido de carbono
- Agua

R: a) El cloruro de sodio presenta enlace iónico, debido a la elevada

diferencia de electronegatividad que existe entre sus átomos.

b) En la molécula de dióxido de carbono, el enlace entre los átomos de C y O es covalente polar, sin embargo, la molécula es apolar, ya que presenta una geometría lineal.

c) En el agua hay un enlace covalente polarizado entre sus átomos, y es una molécula polar debido a la geometría angular que posee.

17. Indique razonadamente si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas:

a) El Ca y el O forman un enlace covalente polar.

b) El cloruro de rubidio presenta un mayor carácter iónico que el óxido de magnesio.

c) El cloro y el hidrógeno forman un enlace covalente apolar.

d) El K y el F forman un enlace iónico.

R: a) Esta afirmación es falsa. El Ca (metal alcalinotérreo) y el O (no metal del grupo 16) forman un enlace iónico en el que el Ca cede dos electrones al O. Por tanto, no se trata de un enlace covalente polar, sino de un enlace iónico que es polar por su propia naturaleza.

b) Esta afirmación es verdadera. El carácter iónico de un enlace entre dos átomos viene determinado por la diferencia de electronegatividad entre ellos. Como el oxígeno y el cloro presentan electronegatividades parecidas, debemos fijarnos en este caso en los metales rubidio (Rb, alcalino) y magnesio (Mg, alcalinotérreo). Como el Rb está situado en un periodo mayor que el Mg y en un grupo inferior, será menos electronegativo que el Mg. Por tanto, la diferencia de electronegatividad en el RbCl será mayor que

en el MgO, presentando mayor carácter iónico.

c) Esta afirmación es falsa, ya que el cloro y el hidrógeno, al unirse para formar enlace, sí que comparten un par de electrones (enlace covalente) que se encuentra desplazado hacia el átomo más electronegativo (Cl), haciendo que el enlace y la molécula sean polares ($H \rightarrow Cl$).

d) Esta afirmación es verdadera. El K (potasio, alcalino) y el F (flúor, halógeno) forman un enlace en el que el potasio cede un electrón al átomo de F, quedando ambos con configuración electrónica de gas noble y alcanzando la estabilidad. Se unen mediante enlace iónico.

18. Si la molécula de agua es polar, ¿podría tener una estructura lineal en vez de angular como la tiene realmente? ¿Por qué?

R: Para que una molécula sea polar su momento dipolar total debe ser distinto de 0, y esto no podría ocurrir nunca en una molécula lineal con dos enlaces polares iguales (H-O) a ambos lados del átomo central, ya que se anularían los momentos dipolares de cada uno y el momento dipolar total sería 0: H-O-H. Por eso la molécula de agua es angular, con un momento dipolar que apunta hacia el átomo de oxígeno.

19. Para las moléculas: SiH_4 , PH_3 y H_2S , justifique si las siguientes afirmaciones son verdaderas o falsas:

a) En las tres moléculas, el átomo central tiene cuatro pares de electrones en orbitales enlazantes.

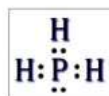
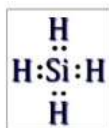
b) El ángulo H-Si-H es menor que el ángulo H-P-H.

c) En los tres casos el átomo central presenta hibridación sp^3 .

d) La única molécula no polar es PH_3 .

e) La única lineal es H_2S .

R: a) Falso. Las estructuras de Lewis de las tres sustancias propuestas son:

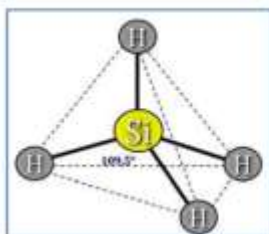


Como se observa, sólo la molécula de SiH_4 tiene cuatro pares de electrones en orbitales enlazantes.

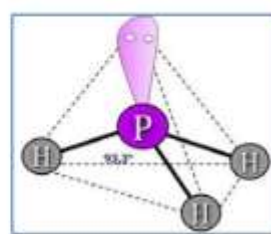
b) Falso. De acuerdo con el modelo RPECV se trata de sustancias cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajustan a las fórmulas AX_3E para el PH_3 , AX_2E_2 para el H_2S y AX_4 para el SiH_4 a las que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que todas presentan una disposición tetraédrica de ligandos y pares de electrones alrededor del átomo central.

Sin embargo, como la molécula de PH_3 tiene un par solitario sobre el fósforo su geometría es piramidal trigonal con ángulos de enlace menores de $109,5^\circ$, mientras que la molécula de SiH_4 que no tiene pares solitarios es tetraédrica con todos los ángulos de enlace de $109,5^\circ$:

AX_4 tetraédrica ($\alpha = 109,5^\circ$)



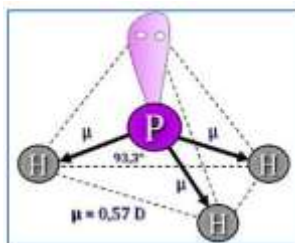
AX_3E piramidal ($\alpha = 93,3^\circ$)



c) Verdadero. De acuerdo con el modelo RPECV se trata de sustancias cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajustan a las fórmulas AX_3E para el PH_3 , AX_2E_2 para el

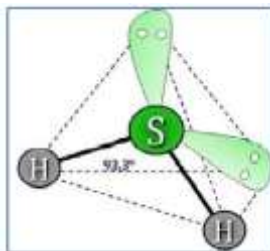
H_2S y AX_4 para el SiH_4 a las que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que el átomo central de todas ellas tiene hibridación sp^3 .

d) Falso. De acuerdo con el modelo RPECV el PH_3 es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_3E a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es piramidal trigonal:



Como el fósforo ($\chi = 2,19$) es ligeramente menos electronegativo que el hidrógeno ($\chi = 2,20$) los enlaces son polares y con esa geometría la resultante de los vectores momento dipolar no es nula ($\mu = 0,574 \text{ D}$) y la molécula es polar.

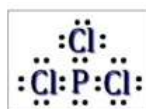
e) Falso. De acuerdo con el modelo RPECV el H_2S es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_2E_2 a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es angular:



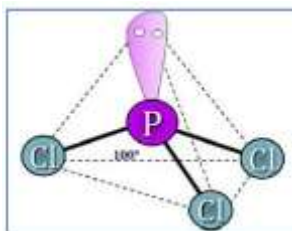
20. La forma geométrica de la molécula PCl_3 es:

- a) Plana triangular
- b) Bipirámide triangular
- c) Pirámide cuadrada
- d) Pirámide triangular
- e) Plana cuadrada

R: La estructura de Lewis del PCl_3 es:



De acuerdo con el modelo RPECV es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_3E a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es de pirámide triangular:



La respuesta correcta es la d.

21. La tabla presenta la electronegatividad de 4 elementos X, J, Y y L:

Elemento	X	J	Y	L
Electronegatividad	4,0	1,5	0,9	1,6

De acuerdo con la información de la tabla, es válido afirmar que el compuesto de mayor carácter covalente es:

- A) LY
- B) JL
- C) YX
- D) YJ

R: La sustancia que presenta la menor diferencia en electronegatividades entre sus elementos es B).

22. Para los siguientes compuestos: H_2O , KI , H_2S , CH_4 , ordénelos por valores decrecientes de puntos de ebullición. Razone su respuesta.

R: La sustancia que presentará mayor punto de ebullición será aquella que presente fuerzas intermoleculares más intensas o forme una red cristalina más fuerte, y por el contrario, el menor punto de ebullición le corresponderá a la sustancia que presente las fuerzas intermoleculares más débiles.

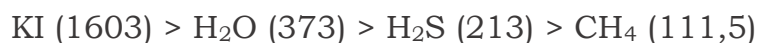
CH_4 : es un compuesto que tiene enlace covalente, pero al ser una sustancia que no presenta momento dipolar permanente, sólo presenta enlaces intermoleculares del tipo fuerzas de dispersión de London. Su punto de ebullición será muy bajo.

H_2O : es un compuesto que tiene enlace covalente, pero se trata de una sustancia polar que puede formar un enlace intermolecular (puentes de

hidrógeno), el más fuerte de todos los enlaces intermoleculares. El enlace de hidrógeno o por puentes de hidrógeno se forma cuando un átomo de hidrógeno que se encuentra unido a un átomo muy electronegativo (en este caso O) se ve atraído a la vez por un par de electrones solitario perteneciente a un átomo muy electronegativo y pequeño (N, O o F) de una molécula cercana. Su punto de ebullición será bastante más alto que el resto de los compuestos binarios que forman los elementos de su grupo con el hidrógeno.

H₂S: es un compuesto que tiene enlace covalente, pero se trata de una sustancia polar pero que a diferencia con el H₂O no puede formar un enlace intermolecular del tipo puente de hidrógeno, ya que el azufre no es tan electronegativo como el oxígeno. Las fuerzas intermoleculares que presenta son del tipo dipolo-dipolo y del tipo fuerzas de dispersión de London. Por este motivo, esta sustancia presenta un punto de ebullición menor que el agua. Estas tres sustancias presentan puntos de ebullición relativamente bajos.

KI: es el compuesto que presenta mayor punto de ebullición de todos, ya que tiene enlace iónico por lo que forma redes cristalinas iónicas, sólidas a temperatura ambiente. Por tanto, los compuestos ordenados por punto de ebullición (K) decreciente son:



23. Diga cuál/cuáles de las siguientes afirmaciones son correctas:

- Se precisa el doble de energía para producir la ruptura de un doble enlace C=C que para uno sencillo C-C.
- El N₂ posee una energía de enlace superior al O₂.
- Añadir un electrón a un átomo neutro siempre requiere aportar energía.

d) El I_2 no se disuelve en agua y el CH_3OH sí.

e) Una molécula será polar siempre que tenga enlaces polares.

R: a) Falso. El enlace sencillo C-C es un enlace σ , mientras que el enlace doble C=C está formado por un enlace σ y un enlace π . Como ambos enlaces σ y π tienen diferente energía, la energía del enlace C=C no es el doble de la energía del enlace C-C.

b) Verdadero. De acuerdo con las estructuras de Lewis de ambas sustancias:

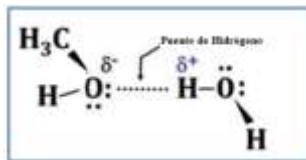


Se tiene que la molécula de O_2 tiene un enlace doble, mientras que la molécula de N_2 tiene un enlace triple. Por tanto, la energía del enlace N_2 es superior.

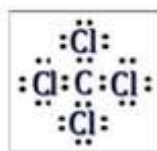
c) Falso. Cuando a un átomo se le añade un electrón este desprende una energía la cual está relacionada con la afinidad electrónica.

d) Verdadero. La molécula de I_2 es no polar y no puede interaccionar con las moléculas de agua, por lo tanto, no puede disolverse en ella.

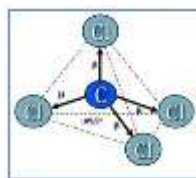
La molécula de CH_3OH sí es soluble en agua ya que es una molécula polar y puede interaccionar con el agua a través de puente de hidrógenos:



e) Falso. La estructura de Lewis del CCl_4 es:



De acuerdo con el modelo RPECV el CCl_4 es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_4 por lo que su disposición y geometría es tetraédrica:



Como el cloro ($\chi = 3,16$) es más electronegativo que el carbono ($\chi = 2,55$) los enlaces son polares y con esa geometría la resultante de los vectores momentos dipolar es nula y la molécula es no polar.

Las afirmaciones correctas son b y d.

24. Indique cuál de las proposiciones siguientes es cierta:

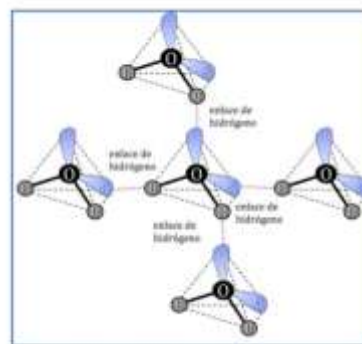
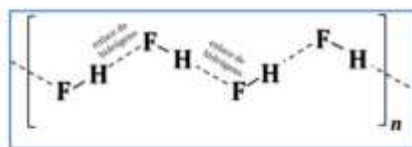
- a) La conductividad del KCl es grande en estado sólido.
- b) Los metales tienen una temperatura de ebullición baja.
- c) El diamante es soluble en disolventes polares.
- d) El $(\text{HF})_n$ tiene una temperatura de ebullición más baja que la del agua.

R: a) Falso. Los sólidos iónicos como KCl no conducen la corriente eléctrica en estado sólido. Sólo presentan conductividad eléctrica cuando se les funde o disuelve en agua, ya que mediante estas dos operaciones se rompe la red cristalina y quedan libres los iones lo que permite el paso de los electrones a través de estos.

b) Falso. En los casi todos los metales los átomos se encuentran unidos mediante fuertes enlaces de forma que se constituye red formada por cationes metálicos rodeados de un mar de electrones. Para separar los átomos y dejarlos en estado gaseoso se necesita gran cantidad de energía lo que hace la temperatura de ebullición sea elevada.

c) Falso. El diamante (C) no es soluble en disolventes polares como el agua ya que al ser un sólido atómico las atracciones entre átomos de carbono no se ven afectadas por las moléculas de agua.

d) Verdadero. HF y H₂O son sustancias que tienen enlace covalente, pero además, se trata de moléculas polares que forman un enlace intermolecular del tipo enlace de hidrógeno, por este motivo, sus temperaturas de ebullición son más altas de lo que deberían ser. A pesar de que el flúor es más electronegativo y pequeño que el oxígeno, y por eso cabría esperar que los enlaces de hidrógeno fueran más intensos e hicieran cambiar más la temperatura de ebullición del HF que la del H₂O, esta anomalía se debe a que una molécula de HF solo forma dos enlaces de hidrógeno, mientras que la de H₂O puede formar cuatro, tal como muestra la siguiente figura:



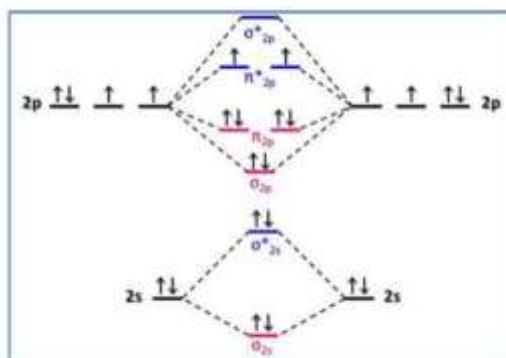
25. Utilice la teoría de orbitales moleculares para predecir cuál de las siguientes especies tiene la mayor energía de enlace.

- a) OF^+
- b) NO^-
- c) CF^+
- d) NF

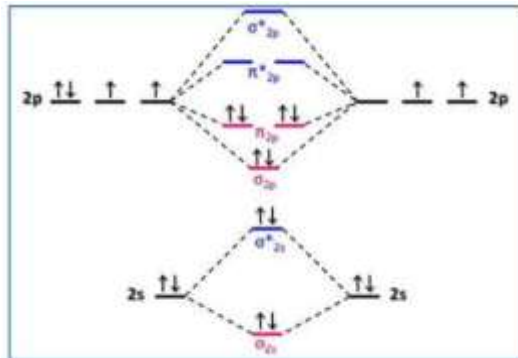
R: A la vista de los diagramas de niveles energía de los orbitales moleculares de las respectivas moléculas se define el orden de enlace de la molécula como: la diferencia entre el número de orbitales enlazantes y antienlazantes llenos dividida entre dos.

Tendrá mayor energía de enlace la especie que presente un mayor orden de enlace.

a-b-d) Falso. Las especies OF^+ , NO^- y NF y son isoelectrónicas, ya que todas poseen 12 electrones de valencia. Sus diagramas de niveles energía de los orbitales moleculares son similares. Como se observa en éste, se forman dos enlaces, uno σ y otro π . Todas las especies tienen orden de enlace 2.



c) Verdadero. La especie CF^+ presenta 10 electrones de valencia. Como se observa en el diagrama de niveles energía de los orbitales moleculares, se forman tres enlaces, uno σ y dos π . El orden de enlace es 3. La presencia de la carga positiva hace disminuir la longitud del enlace, lo que hace aumentar la energía del mismo.

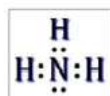


La respuesta correcta es la c.

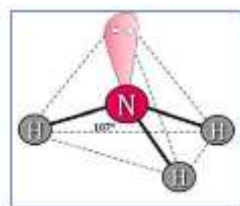
26. ¿Cuál de las siguientes afirmaciones es cierta?

- a) La molécula de amoníaco es plana.
- b) En la molécula de CS_2 hay dos dobles enlaces.
- c) La temperatura de fusión del cloro es mayor que la del cloruro de sodio.
- d) Los compuestos iónicos no conducen la corriente eléctrica en estado líquido.

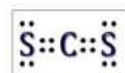
R: a) Falso. La estructura de Lewis del NH_3 es:



Según el modelo RPECV es una especie cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_3E a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es PIRAMIDAL ya que sólo hay tres ligandos unidos al átomo central:



b) Verdadero. La estructura de Lewis del CS_2 muestra que existen dos enlaces dobles entre los átomos de carbono y azufre:



c) Falso. La molécula de cloro tiene enlace covalente y no presenta momento dipolar permanente. Las únicas fuerzas intermoleculares posibles entre ellas son las fuerzas de dispersión de London, que son más intensas en las especies con gran volumen atómico y elevado peso molecular, factores que hacen estas sustancias sean más polarizables. En este caso estas fuerzas son de poca intensidad debido al pequeño tamaño del cloro (99 pm), por tanto, esta sustancia es gaseosa a temperatura ambiente y presenta una baja temperatura de fusión (160 K). El cloruro de sodio es una sustancia que tiene enlace iónico y forma redes cristalinas en las que los iones se mantienen fuertemente unidos mediante fuerzas coulombianas. Por motivo, estas sustancias son sólidas a temperatura ambiente y tienen una elevada temperatura de fusión (1074 K).

d) Falso. Los compuestos iónicos forman redes cristalinas y a temperatura ambiente son sólidos. Esto determina que no conduzcan la corriente eléctrica porque todos sus electrones de valencia están localizados en enlaces iónicos. Una vez rota la red al aumentar la temperatura, los iones quedan libres y permiten el paso de los electrones a través de ellos, luego en estado líquido sí conducen la corriente eléctrica.

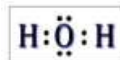
La respuesta correcta es la a.

27. Responda, justificando las respuestas, a las siguientes cuestiones:

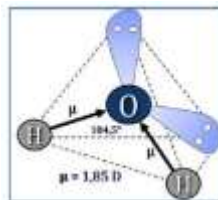
- ¿Es el agua una sustancia polar o apolar?
- Indica cuáles de las siguientes sustancias son polares y cuáles apolares: Cl_2 , HCl , CO_2 , H_2S .
- ¿Cuáles de las sustancias que se indican en el apartado b) son solubles en agua?

R: Para poder determinar si una sustancia es o no polar, es preciso dibujar su estructura de Lewis y aplicando el modelo RPECV se determina su geometría molecular. Conocida esta y teniendo en cuenta las electronegatividades de los elementos enlazados se analiza la existencia de dipolos en la molécula y el momento dipolar resultante:

a) La estructura de Lewis del H_2O es:



De acuerdo con la notación del modelo de RPECV el H_2O es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX_2E_2 a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica.



Al existir dos pares de electrones solitarios sobre el oxígeno, la molécula presenta una geometría molecular Angular con ángulos de enlace teóricos

de $109,5^\circ$ aunque la repulsión que ejercen los dos pares de electrones solitarios hace que este ángulo sea algo menor ($104,5^\circ$ según la bibliografía).

Como el oxígeno ($\chi = 3,44$) es más electronegativo que el hidrógeno ($\chi = 2,20$) existen dos dipolos dirigidos hacia el oxígeno. Con esa geometría la resultante de los vectores momento dipolar no es nula ($\mu = 1,85$ D) y la molécula es polar.

b) Las estructuras de Lewis de las sustancias propuestas son, respectivamente:



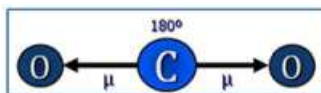
De acuerdo con la notación del modelo de RPECV, el Cl_2 y HCl son moléculas del tipo AXE_3 , con número estérico 2, a las que corresponde una distribución lineal de los ligandos y pares solitarios alrededor del átomo central. Al existir sólo dos átomos unidos presentan una geometría molecular lineal.

En el caso del Cl_2 se trata de dos átomos idénticos y no cabe la existencia de un dipolo, por lo tanto, la molécula es no polar.

En el caso del HCl , al ser el cloro más electronegativo ($\chi = 3,16$) que el hidrógeno ($\chi = 2,20$), la molécula presenta un dipolo dirigido hacia el cloro, por lo tanto, la molécula es Polar (según la bibliografía, $\mu = 1,11$ D).

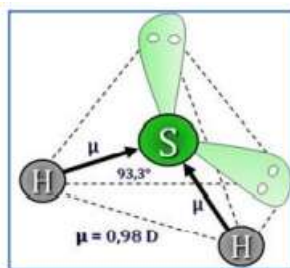
De acuerdo con la notación del modelo de RPECV, el CO_2 es una molécula del tipo AX_2 , con número estérico $(m+n) = 2$, a la que corresponde una distribución lineal de los ligandos y pares solitarios alrededor del átomo central. Al no existir pares de electrones solitarios sobre el carbono, coinciden la distribución y forma de la molécula, por lo tanto, esta presenta

una geometría molecular lineal con ángulos de enlace de 180° :



Al ser el oxígeno más electronegativo ($\chi = 3,44$) que el carbono ($\chi = 2,55$), la molécula presenta dos dipolos dirigidos hacia el oxígeno. Como los dos vectores momento dipolar son iguales y la geometría es lineal, la resultante de ambos es nula, por lo tanto, la molécula es no polar.

De acuerdo con la notación del modelo de RPECV, el H_2S es una molécula del tipo AX_2E_2 , con número estérico $(m+n) = 4$, a la que corresponde una distribución tetraédrica de los ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central. Al existir dos pares de electrones solitarios sobre el oxígeno, la molécula presenta una geometría molecular angular con ángulos de enlace teóricos de $109,5^\circ$ aunque la repulsión que ejercen los dos pares de electrones solitarios hace que este ángulo sea menor ($93,3^\circ$ según la bibliografía).



Al ser el azufre más electronegativo ($\chi = 2,58$) que el hidrógeno ($\chi = 2,20$), la molécula presenta dos dipolos dirigidos hacia el azufre. Como los dos vectores momento dipolar son iguales y la geometría es angular, la resultante de ambos no es nula, por lo tanto, la molécula es polar (según la bibliografía, $\mu = 0,98 \text{ D}$).

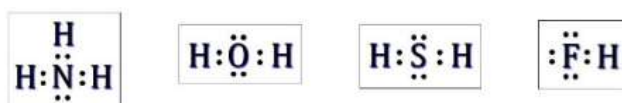
28. A partir de los elementos N, O, F y S:

- Escriba la fórmula de la molécula que cada elemento forma con el hidrógeno.
- Discuta comparativamente la geometría de las moléculas anteriores.
- Ordene las moléculas anteriores por su punto de ebullición creciente.

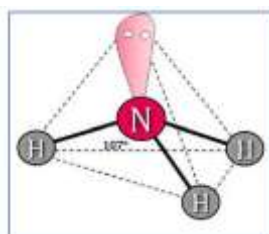
R: Las fórmulas de los compuestos binarios con hidrógeno son:

NH₃, H₂O, HF y H₂S

b) Las estructuras de Lewis de las especies anteriores son:

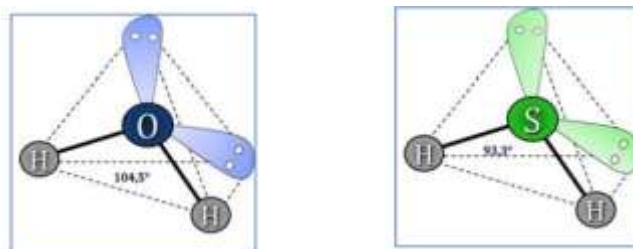


De acuerdo con la notación del modelo de RPECV el NH₃ es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX₃E a la que corresponde un número estérico (m+n) = 4 por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es piramidal con ángulos de enlace inferiores a 109,5° debido a la repulsión que ejerce el par de electrones solitario situado sobre el átomo de nitrógeno.

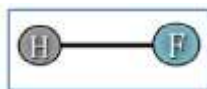


De acuerdo con la notación del modelo de RPECV el H₂O y el H₂S, son sustancias cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AX₂E₂ a las que

corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es ANGULAR con ángulos de enlace inferiores a $109,5^\circ$ debido a la repulsión que ejercen los dos pares de electrones solitarios situado sobre el átomo de central.



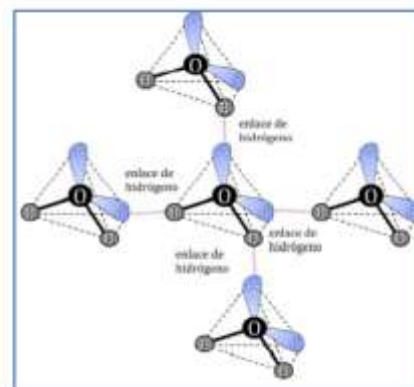
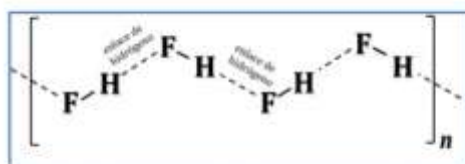
De acuerdo con la notación del modelo de RPECV el HF es una sustancia cuya distribución de ligandos y pares de electrones solitarios alrededor del átomo central se ajusta a la fórmula AXE_3 a la que corresponde un número estérico $(m+n) = 4$ por lo que su disposición es tetraédrica y su geometría es lineal.



c) Presentará mayor punto de ebullición aquella sustancia que tenga fuerzas intermoleculares más intensas o forme una red cristalina más fuerte, y por el contrario, el menor punto de ebullición le corresponderá a la sustancia que tenga las fuerzas intermoleculares más débiles.

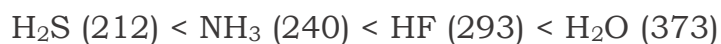
HF, H_2O y NH_3 son sustancias que tienen enlace covalente. Además, las tres presentan enlace de hidrógeno o por puentes de hidrógeno. Este enlace se forma cuando un átomo de hidrógeno que se encuentra unido a un átomo muy electronegativo se ve atraído a la vez por un par de electrones solitario perteneciente a un átomo muy electronegativo y pequeño (N, O o F) de una molécula cercana. Este enlace es más fuerte en el agua que forma cuatro enlaces de este tipo, mientras que en el HF forma solo dos dando

lugar a una estructura cerrada. El enlace o puente de hidrógeno es el responsable de la anomalía en las temperaturas de ebullición.

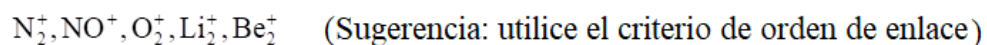


En el caso de H_2S el átomo de hidrógeno se encuentra unido al azufre, un elemento que no es muy electronegativo. Esto determina que su punto de ebullición no sea tan anormalmente elevado como los de las otras sustancias.

Las sustancias ordenadas por temperaturas de ebullición (K) crecientes son:



29. Utilizando la teoría del orbital molecular, ¿cuál de las siguientes especies químicas podrían ser considerada la más estable?



R: NO^+ .

Capítulo 4

Enlace metálico y enlace vibracional

Sabino José Menolasina Monrreal

4.1. Enlace metálico

4.1.1. Introducción al enlace metálico

De los elementos que existen actualmente más de las tres cuartas partes son metales. Se conoce que las energías de ionización de los átomos libres de los elementos metálicos son por lo general pequeñas y que el número de sus electrones de valencia es menor que el número de sus orbitales de valencia [18]. Estas características que presentan los elementos metálicos hacen suponer que cada uno de los átomos que conforman el metal tiene poca atracción por los electrones, debido a que, una energía de ionización baja significa que un átomo tiene relativamente poca atracción por sus electrones de valencia y sugiere que tiene muy poca afinidad por cualesquiera otros electrones adicionales.

Las energías de enlace de las moléculas diatómicas conocidas de los elementos metálicos son todas muy pequeñas. A pesar de toda esta información de que se dispone y que conduce a suponer que la interacción de un átomo metálico con otro átomo único no conduce muchas veces a una disminución importante de energía, es posible conseguir una estabilidad mayor si los electrones de valencia de un átomo se

mueven bajo la influencia de varios otros núcleos debido a que como se dijo anteriormente, estos elementos poseen menos electrones de valencia que orbitales de valencia, lo que hace posible este tipo de interacción.

El nivel cuántico más alto de los metales contiene uno o dos electrones *s* y los niveles más internos están llenos o parcialmente llenos. Por lo tanto, **el enlace metálico** se puede definir como un enlace químico a través del cual los átomos de los metales se encuentran unidos entre sí. Estos átomos se agrupan de forma muy cercana unos a otros, lo que produce estructuras muy compactas (cristales metálicos) [19]. Se trata de redes tridimensionales que adquieren la estructura típica de empaquetamiento compacto de esferas.

Los metales cristalizan esencialmente en tres estructuras: hexagonal, cubica centrada en el cuerpo y cúbica centrada en las caras. En estos empaquetamientos cada átomo se rodea de 8 o 12 átomos vecinos, tal como se muestra en la **figura 4.1**:



Figura 4.1. Estructuras cristalinas más frecuentes de los metales [20]

Estas estructuras han sido utilizadas para explicar algunas de las propiedades de los metales, tales como, la maleabilidad y la ductibilidad, así como la alta densidad que presentan algunos de ellos.

La conducción eléctrica es otra propiedad importante de los metales, así como la diversidad de estructuras estables que pueden presentar en un intervalo de temperatura determinado (polimorfismo).

Para relacionar la naturaleza y fuerzas del enlazamiento con las propiedades de los átomos de los elementos metálicos se suele analizar dos características particulares que estos presentan. En primer lugar, las energías de ionización de los átomos libres de los elementos metálicos y semimetálicos son generalmente pequeñas, casi siempre menores de $220 \text{ Kcal mol}^{-1}$. La segunda característica de un átomo metálico es que el número de sus electrones de valencia es menor que el número de sus orbitales de valencia.

Una energía de ionización baja significa que un átomo tiene relativamente poca atracción por sus electrones de valencia, y sugiere que tiene muy poca afinidad por otros electrones adicionales. Los átomos de los elementos metálicos forman uno con otros enlaces de par de electrón relativamente débiles. La tabla 4.1 muestra esta aseveración. Las energías de enlace de las moléculas diatómicas conocidas de los elementos metálicos son todas muy pequeñas y hay muchas posibles moléculas diatómicas de elementos metálicos que no son conocidas, debido a que ellas no son energéticamente estables.

Tabla 4.1. Energías de disociación de las moléculas de los elementos metálicos [Del autor]

Molécula	E (Kcal mol ⁻¹)	Molécula	E (Kcal mol ⁻¹)
Li ₂	25	Zn ₂	5,7
Na ₂	17	Cd ₂	2,0
K ₂	12	Hg ₂	1,4
Rb ₂	11	Pb ₂	16
Cs ₂	10,4	Bi ₂	39

Aunque la interacción de un átomo metálico con otro átomo único no conduce muchas veces a una disminución importante de energía, es posible que se pueda conseguir una estabilidad mayor si los electrones de valencia de un átomo se mueven bajo la influencia de varios otros núcleos.

La segunda característica de los átomos metálicos, menos electrones de valencia que orbitales de valencia, es lo que hace posible este tipo de interacción. El hecho de que los átomos de los elementos metálicos tienen pocos electrones de valencia significa que, cuando ellos están en la fase condensada, cada átomo puede compartir los electrones de muchos vecinos cercano de una manera que es energéticamente favorable, sin violar el principio de exclusión de Pauli.

Ciertamente, el carácter distintivo de los cristales metálicos es que el número de coordinación de los átomos es alto: 8 en la red cristalina cúbica en cuerpo centrada y 12 en las estructuras hexagonales y cúbicas de compactamiento compacto.

Para explicar estas y otras características generales de los metales, se han desarrollado dos modelos del enlace metálico, uno clásico y el otro cuántico.

4.1.2. Modelo clásico (Modelo de Lorenz-Drude)

A través de este modelo se considera que los átomos se transforman en iones y electrones, donde los electrones en lugar de pasar a un átomo adyacente se desplazan alrededor de muchos iones metálicos (cationes) debido a las fuerzas de atracción que se generan entre ellos [21]. A los electrones en el enlace metálico se les considera libres y que no están limitados a niveles de energía específicos, sino que pueden estar en varios niveles de energía.

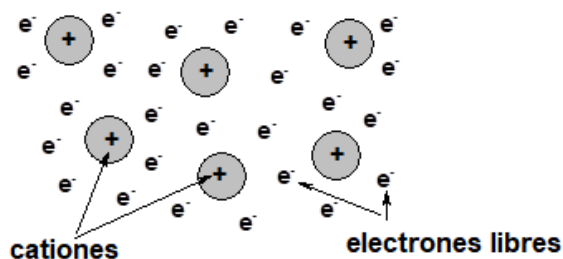


Figura 4.2. Modelo de Lorentz-Drude del enlace metálico

A este modelo de enlace metálico se le conoce como modelo de Drude o modelo de Lorentz-Drude para la conducción eléctrica y fue desarrollado hacia el 1900 por Paul Drude para explicar las propiedades de transporte de electrones en materiales (especialmente en los metales) [21].

De acuerdo con este modelo, los cristales metálicos son más estables que los átomos separados debido a que en el cristal los electrones de valencia atómicos pueden moverse en el campo de varios núcleos. Este modelo permite explicar por qué los metales absorben o reemiten luz de diferentes longitudes de onda, lo que les da el lustre característico de los metales y sus aleaciones. Por otro lado, los altos punto de fusión y calores de vaporización de los metales muestran la dificultad para liberar los iones metálicos de los electrones que los rodean. En general, los puntos de fusión y de ebullición son mayores para los metales con el mayor número de electrones de valencia que para los metales con menor número de electrones de valencia. Tales metales son más duros y densos que aquéllos con menor número de electrones de valencia.

El modelo de Drude proporciona una base de la mecánica clásica para la conductividad de los metales, basada en la aplicación de la teoría cinética a los electrones en un sólido.

Sin embargo, este modelo no explica bien algunas propiedades como el calor específico (que debería ser mayor según este modelo) o el hecho de que, según este modelo, la fuerza del enlace debería aumentar con el número de electrones de valencia y, por tanto, los puntos de fusión.

4.1.3. Modelo cuántico (Teoría de Bandas)

En la actualidad se prefiere utilizar el modelo cuántico basado en la teoría de bandas de conducción para explicar el enlace metálico [22].

La Teoría de Bandas se fundamenta en la formación de orbitales moleculares a partir de los orbitales atómicos de los átomos del metal, en donde los electrones están completamente deslocalizados, es decir, que se encuentran en un gran orbital molecular que abarca la totalidad del cristal metálico.

De acuerdo con la Teoría de Bandas, se considera que los orbitales atómicos de valencia de los N átomos de un elemento metálico 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 se dice que dan lugar a una banda. Se obtienen tantos orbitales moleculares como orbitales atómicos se combinen.

Por ejemplo, si consideramos al litio. Si se unieran N átomos de este elemento en una estructura cúbica centrada en el cuerpo, se combinarán los electrones $2s$ de sus orbitales atómicos y se formarían N orbitales moleculares, con energías relativas muy próximas entre sí que formarían una banda continua de niveles de energía.

Debido a que cada átomo de litio contribuye con un electrón y sabiendo que cada orbital molecular contiene dos electrones, solamente la mitad de los orbitales moleculares formados estarán llenos, es decir solo la mitad de la banda estará llena.

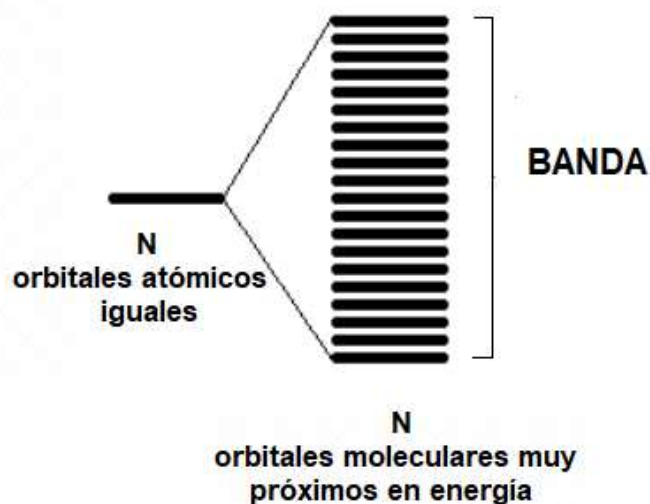


Figura 4.3. Formación de una banda de N orbitales moleculares deslocalizados de mínimas diferencias de energía [23]

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

La banda que contiene los electrones de valencia se llama “*Banda de Valencia*” y la banda vacía, a la cual pueden pasar los electrones, recibe el nombre de “*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 (**figura 4.4**).

Este modelo de enlace metálico permite comprender además las propiedades de la maleabilidad y polimorfismo, puesto que, al desplazar una capa de átomos con respecto a otra, el enlace no es afectado ya que es independiente de los átomos vecinos.

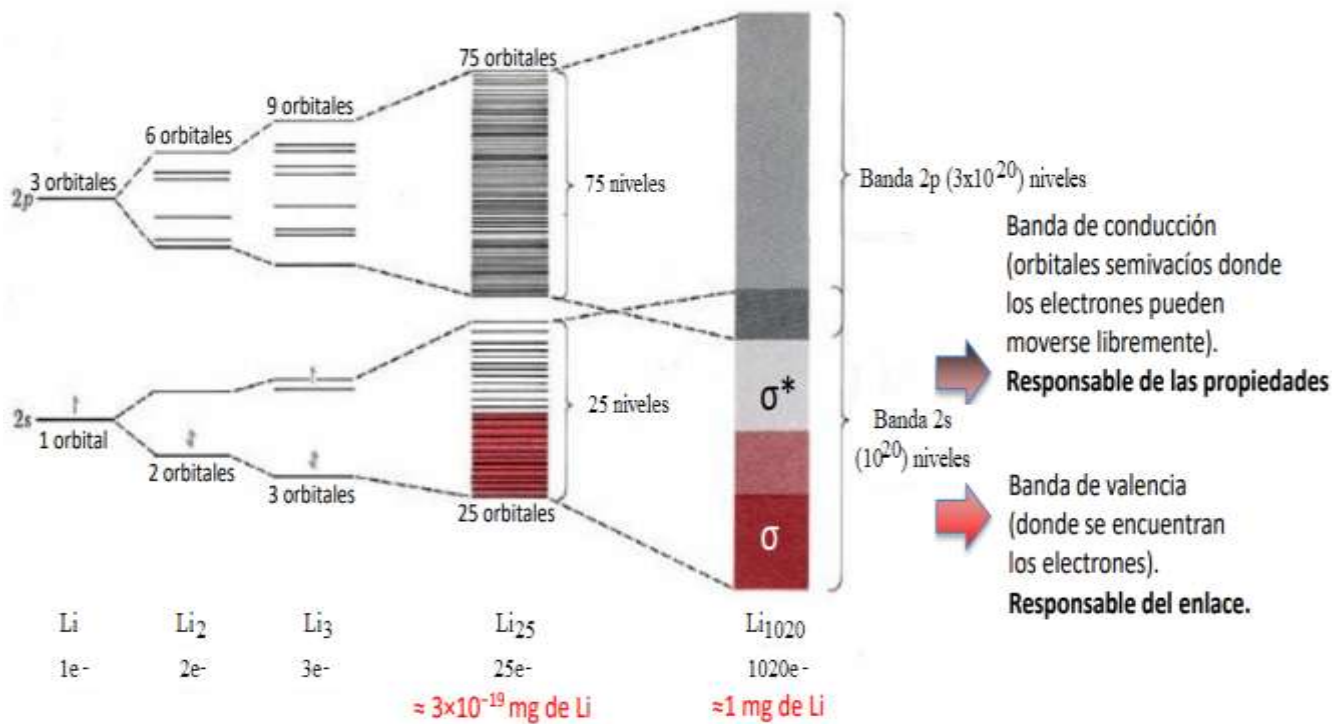


Figura 4.4. Representación esquemática de las bandas de valencia y de conducción en el sólido metálico: Li [22,23]

4.2. Enlace vibracional

4.2.1. Introducción al enlace vibracional

Aunque siempre se clasifican los enlaces dentro de tres tipos principales, iónicos, metálicos y covalentes. Se sabe que existen otros tipos de interacciones muy importantes cuya intensidad no es en absoluto despreciable, como las interacciones puente de hidrógeno gracias a las cuales se sostienen estructuras esenciales para la vida como las proteínas o la doble hélice de ADN. Además, con el avance tecnológico de la ciencia se descubren hoy en día nuevas formas de asociación o de interacción entre los átomos en determinadas condiciones.

Recientemente se ha confirmado un tipo de interacción entre átomos que se sospechaba desde hace 30 años sin que se hubiese logrado obtener evidencia experimental. Al parecer, gracias a la exactitud de los métodos cuánticos actuales, Fleming y colaboradores [24], han hallado al fin evidencias, tanto teóricas como experimentales, de la existencia de lo que consideran un nuevo tipo de enlace que se da cuando hay sustitución isotópica, ya que estos isótopos provocan cambios sustanciales en la naturaleza del enlace.

Una de las leyes de la química establece que la velocidad de una reacción se acelera según aumenta la temperatura. Sin embargo, en 1989, cuando químicos que experimentaban en un acelerador nuclear en Vancouver observaron que una reacción entre bromo y muonio –un isótopo de hidrógeno– se desaceleró cuando aumentaron la temperatura. Este comportamiento inusual fue investigado, considerando que al mezclarse el bromo y muonio podría formarse una estructura intermedia unida por un enlace “vibratorio”, enlace que otros químicos habían planteado como una posibilidad teórica a principios de esa década [25].

En este escenario, el ligero átomo de muonio se movería rápidamente entre dos pesados átomos de bromo, “como una pelota de ping-pong rebotando entre dos bolas de boliche”, de acuerdo con los investigadores. El átomo oscilante sostendría brevemente los dos átomos de bromo juntos en un enlace y reduciría la energía global, y por lo tanto la velocidad de la reacción.

Para confirmar dicha teoría se llevó a cabo de nuevo el experimento en el acelerador nuclear del Laboratorio Rutherford Appleton, en Inglaterra. Basados en los cálculos de ambos experimentos y el trabajo colaborativo de químicos teóricos de la Universidad Libre de Berlín y la Universidad de Saitama, en Japón, concluyeron que el muonio y el bromo efectivamente formaron un nuevo tipo de enlace temporal. Su naturaleza vibratoria bajó la energía total de la estructura intermedia de bromomuonio y, por lo tanto, se disminuyó la velocidad de la reacción a pesar de que la temperatura se elevaba.

Los investigadores dieron a conocer sus resultados en 2015 [24]. El trabajo confirma que los enlaces vibracionales –aunque sean fugaces– deben añadirse a la lista de los enlaces químicos conocidos. Y aunque la reacción de bromo-muonio era un sistema "ideal" para verificar la unión vibracional, los investigadores predicen que el fenómeno también se produce en otras reacciones entre átomos pesados y ligeros.

Este estudio provee evidencia teórica rigurosa sobre el enlace vibracional y sugiere que la sustitución isotópica puede tener un efecto dramático en la capacidad de las moléculas para formar enlaces.

Estudios venideros reforzaran los conocimientos acerca del enlace vibracional

4.3. Ejercicios relacionados con el enlace metálico y enlace vibracional

Algunos ejercicios en esta sección fueron tomados de Problemas y cuestiones de las Olimpiadas de Química [26].

1. Defina:
 - a) Características del enlace metálico.
 - b) Propiedades de los metales

R: a) Los metales son elementos electropositivos con pocos electrones de valencia, que están deslocalizados en la red. Cristalizan en estructuras metálicas de elevado número de coordinación: Red cúbica centrada en el cuerpo con índice de coordinación 8, red cúbica compacta y red hexagonal compacta con índices de coordinación 12.

Según Drude y Lorentz los cationes del metal ocupan los nudos de la red y los electrones de valencia circulan por los intersticios constituyendo el llamado "gas electrónico".

La teoría de Enlace de Valencia explica el enlace metálico mediante un número elevado de formas resonantes, pues no hay electrones de valencia suficientes para la formación de todos los enlaces covalentes para tan elevados índices de coordinación.

En la teoría de Orbitales moleculares, el número de orbitales moleculares formados es igual al de orbitales atómicos combinados. En los metales, al ser muy grande este número, los niveles de energía se suceden de forma casi continua originando bandas de energía. La teoría de las bandas explica la existencia de conductores, semiconductores y aislantes. Los conductores tienen una banda de energía que no está llena o una banda llena se superpone con otra superior vacía, y los electrones pueden ocupar los distintos niveles vacíos de la banda. En los aislantes, la banda llena está

separada de la vacía por una región extensa de energía, zona prohibida, que impide a los electrones ocupar los niveles de la banda vacía. En los semiconductores la situación es intermedia.

b) Como todos los metales tienen estructuras muy semejantes, tienen también propiedades comunes:

- * Son buenos conductores de la electricidad y del calor.
- * Tienen densidades elevadas.
- * Tienen puntos de fusión y de ebullición altos, excepto el mercurio.
- * Presentan color gris, excepto el cobre y el oro, y brillo metálico.
- * Son dúctiles y maleables.
- * Producen el efecto fotoeléctrico y el efecto termoiónico.

2. Comente razonadamente la conductividad eléctrica de los siguientes sistemas: un hilo de Cu, un cristal de $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ y una disolución de $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$.

R: El hilo de cobre conduce la corriente eléctrica por ser un conductor metálico, en el que los electrones de valencia gozan de libertad para moverse por entre los cationes de la red al aplicar un campo eléctrico externo.

El cristal de nitrate de cobre (II) no es conductor pues los iones NO_3^- y Cu^{2+} ocupan posiciones fijas en la red iónica. No pueden desplazarse.

En la disolución de $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ los iones poseen suficiente movilidad para desplazarse dentro de un campo eléctrico, conduciendo la corriente (conductores de segunda especie).

3. Determine el tipo de enlace, si lo hubiese, a partir de los átomos presentes en la sustancia constituida por:

Átomos	Enlace probable
Na y Na	¿?
S y Cl	¿?
Br y Ca	¿?
Fe y Fe	¿?

R:

Átomos	Enlace probable
Na y Na	Metálico
S y Cl	Covalente
Br y Ca	Iónico
Fe y Fe	Metálico

4. Explica cuál es la diferencia entre una banda de conducción y una banda de valencia.

R: La banda de conducción en un material es aquella en la que los electrones tienen gran movilidad, siendo capaces, por tanto, de transportar corriente eléctrica por su interior. Sin embargo, la banda de valencia es la última banda que contiene electrones (atendiendo a la configuración electrónica de los átomos que forman el material) según la teoría de orbitales moleculares aplicada a la explicación del enlace metálico. Puede coincidir o no con la de conducción, pero el concepto es totalmente distinto.

5. ¿Cuál de los siguientes elementos tiene mayor conductividad eléctrica?

- a) Be
- b) Al
- c) K

R: Al, Be y K, en estado sólido, son metales típicos. Según la teoría del enlace metálico más sencilla, la del “mar de electrones”, cuanto mayor sea el número de electrones libres de este “mar”, mayor será la conductividad eléctrica. El Al tiene tres electrones libres por átomo, dos el berilio dos y sólo uno el potasio. La mayor conductividad eléctrica le corresponde al Al. Consultando la bibliografía, los datos de la resistencia específica ($\Omega \cdot m$), que es la inversa de la conductividad, para los tres metales son:

$$K (7,19 \cdot 10^{-8}) > Be (4,00 \cdot 10^{-8}) > Al (2,65 \cdot 10^{-8}).$$

La respuesta correcta es la b.

6. Razone las siguientes afirmaciones indicando si son verdaderas o falsas:

- a) Al aumentar la temperatura aumenta la conductividad de un metal.
- b) Los metales son sólidos cuyos átomos se unen por enlace covalente aportando cada átomo un electrón.

R: a) Falso. Un conductor metálico es aquella sustancia cuya conductividad eléctrica disminuye al aumentar la temperatura.

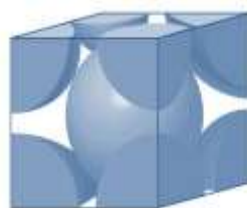
b) Falso. Los metales forman una estructura reticular en la que los nudos de la red están ocupados por cationes rodeados de un “mar de electrones”. Las fuerzas coulombianas existentes entre los cationes y los electrones son las que mantienen unidas a todas las partículas que forman a red.

7. El sodio metálico tiene una celda unidad cúbica centrada en el cuerpo. ¿Cuántos átomos están contenidos en la celda unidad?

- a) 5
- b) 9
- c) 4
- d) 2
- e) 3

R: Una estructura cristalina de red cúbica centrada en el cuerpo contiene:

$$\frac{1}{8} \cdot 8 \text{ átomos (vértice)} + 1 \cdot \text{átomos (centro)} = 2 \text{ átomos}$$



La respuesta correcta es d.

8. El platino cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras (o cúbica de empaquetamiento compacto) y su densidad a 20 °C es 21,50 g cm⁻³.

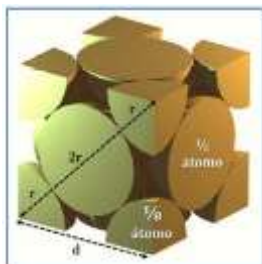
¿Cuál es el radio metálico, en pm, del platino? Datos: PA = 195,1 g/mol

- a) 90,1 pm
- b) 87,3 pm

c) 138,6 pm

d) 110,1 pm

R: A partir de la siguiente figura que representa la estructura cristalina de una red cúbica centrada en las caras:



Esta celda unitaria posee:

$$\frac{1}{8} \cdot 8 \text{ átomos (vértice)} + \frac{1}{2} \cdot 6 \text{ átomos (cara)} = 4 \text{ átomos}$$

Se observa que la diagonal de una cara del cubo, D , está integrada por cuatro radios atómicos. Relacionando masa, átomos y densidad del metal se obtiene volumen de la celda unidad:

$$\frac{195,1 \text{ g}}{\text{mol}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \text{ átomos}} \cdot \frac{4 \text{ átomos}}{\text{cubo}} \cdot \frac{1 \text{ cm}^3}{21,50 \text{ g}} = 6,028 \cdot 10^{-23} \frac{\text{cm}^3}{\text{cubo}}$$

A partir del volumen se puede obtener la arista del cubo d :

$$d = \sqrt[3]{V} = \sqrt[3]{6,028 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3} = 3,921 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \cdot \frac{1 \text{ m}}{10^2 \text{ cm}} \cdot \frac{10^{12} \text{ pm}}{1 \text{ m}} = 392,1 \text{ pm}$$

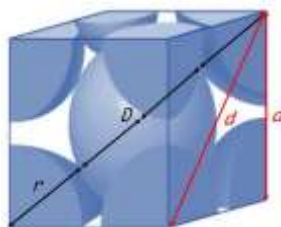
A partir de la arista d se puede obtener el radio del átomo r :

$$(4r)^2 = 2d^2 \rightarrow r = \frac{d\sqrt{2}}{4} = 138,6 \text{ pm}$$

La respuesta correcta es la c.

9. La densidad del potasio a 20° C que tiene una estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC), es 0,855 g cm⁻³. ¿Cuál es el radio del átomo de potasio?
- 1,8844·10⁻⁸ cm
 - 9,4320·10⁻⁹ cm
 - 9,2413·10⁻⁸ cm
 - 2,3103·10⁻⁸ cm

R: La estructura cristalina de red cúbica centrada en el cuerpo contiene:



Relacionando masa molar, densidad, átomos y de la celdilla se obtiene el volumen de la misma:

$$\frac{39,1}{\text{mol}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{6,022 \cdot 10^{23} \text{ átomos}} \cdot \frac{2 \text{ átomos}}{\text{cubo}} \cdot \frac{1 \text{ cm}^3}{0,855 \text{ g}} = 1,520 \cdot 10^{-22} \frac{\text{cm}^3}{\text{cubo}}$$

A partir del volumen de la celda unitaria se obtiene la arista del cubo:

$$a = \sqrt[3]{1,52 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3} = 5,34 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

Como se observa en la figura, a partir de la arista del cubo se obtiene la diagonal (d) de una cara:

$$d = \sqrt{2} \cdot a \rightarrow d = \sqrt{2} \cdot 5,34 \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 7,54 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

A partir de la arista del cubo y la diagonal de una cara se obtiene la diagonal del cubo D:

$$D = \sqrt{a^2 + d^2} = \sqrt{(5,34 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^2 + (7,54 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^2} = 9,24 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

A partir de la diagonal del cubo se obtiene el radio del átomo:

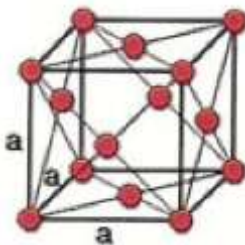
$$r = \frac{9,24 \cdot 10^{-8} \text{ cm}}{4} = 2,31 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

La respuesta es la d.

10. Un metal cristaliza con una estructura cúbica centrada en las caras, y tiene una celda unidad cuya arista mide 408 pm. ¿Cuál es el diámetro de los átomos?

- a) 144 pm
- b) 204 pm
- c) 288 pm
- d) 408 pm
- e) Ninguna de los anteriores

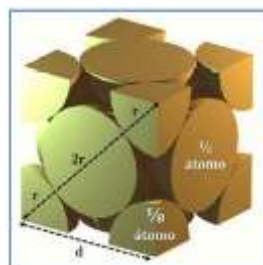
R: Una estructura cristalina cúbico centrada en las caras se representa de la siguiente manera:



Según se observa en la figura, una red cúbica centrada en las caras contiene 4 átomos:

$$\frac{1}{8} \cdot 8 \text{ átomos (vértice)} + \frac{1}{2} \cdot 6 \text{ átomos (cara)} = 4 \text{ átomos}$$

A partir de la siguiente figura que representa una red cúbica centrada en las caras:



se puede observar, que la diagonal de una cara del cubo (D) está integrada por cuatro radios atómicos. A partir de la arista del cubo d se puede obtener el valor de la diagonal de la cara:

$$D = \sqrt{d^2 + d^2} \rightarrow D = d\sqrt{2} \rightarrow D = 577 \text{ pm}$$

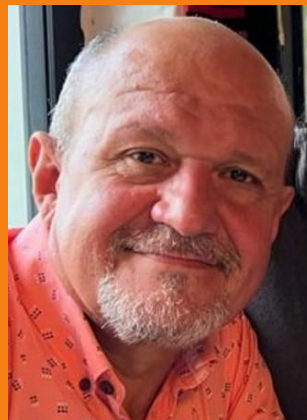
$$2r = \frac{577 \text{ pm}}{2} = 288,5 \text{ pm}$$

La respuesta correcta es la c.

Bibliografía

- 1a. Lewis GN. The atom and the molecule. Journal of the American Chemical Society. 1916; 38 (4): pp. 762-785.
- 1b. Fleming DG. New results for the formation of a muoniated radical in the Mu + Br₂ system: a van der Waals complex or evidence for vibrational bonding in Br-Mu-Br? Phys. Chem. Chem. Phys. 2013; 14: pp. 10953. (DOI: 10.1039/C2CP41366C)
- 1c. <http://www.alquimicos.com/adminDocument/59f76cef0e2c7-7-enlace-2018.pdf>
- 1d. <https://www3.uji.es/~safont/olimpiada/material/q2.pdf>
- 2a. Kossel W. Bemerkung zum Seriencharakter der Röntgenstrahlen, Verh. D. Deutsch. Phys Ges. 1916; 2(18): pp. 339-359.
- 2b. Menolasina SJ. Química general aplicada a las ciencias de la salud. Venezuela: Consejo de Publicaciones ULA; 2009.
3. <https://www.slideshare.net/DrMadhavraoDeore/ceramic-materials-1-67135311>.
- 4a. https://fyqcastillodeluna.files.wordpress.com/2012/04/bloque_i-estructuras_cristalinas.pdf.
- 4b. <https://es.studenta.com/content/86697447/menargues-cuestiones-y-problemas-de-las-olimpiadas-de-quimica-vol-5-enlace-y-pro>
5. Langmuir I. The arrangement of electrons in atoms and molecules. Journal of the American Chemical Society. 1919; 41(6): pp. 868-934. DOI: 10.1021/ja02227a002.
6. Gabriel Bolívar. (27 de octubre de 2018). Diagrama de Moeller: en qué consiste y ejercicios resueltos. Lifeder. Recuperado de <https://www.lifeder.com/diagrama-de-moeller/>.
7. Gillespie RJ, Hargittai I. The VSEPR Model of Molecular Geometry. Dover Books on Chemistry. Editor Courier Corporation, 2013 ISBN: 0486310523, 9780486310527.
8. https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5152853/mod_resource/content/1/Aula2_2020%20Hercilio%20Covalentes.pdf.
9. https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/5152853/mod_resource/content/1/Aula2_2020%20Hercilio%20Covalentes.pdf.

10. https://cesad.ufs.br/ORBI/public/uploadCatalogo/11024317012017Quimica_Inorganica_I_aula_08.pdf.
11. Wade LG, Simek JW. Química orgánica. Pearson; 2017.
12. <https://www.lifeder.com/teoria-del-orbital-molecular/>.
13. <https://www.liceoagb.es/quimiorg/covalente31.html>.
14. <https://www.liceoagb.es/quimigen/enlace9.html>.
15. Barrow GM. Química física VOL. 2. Reverté; 2022.
16. Cascarosa Salillas ME, Fernández-Álvarez FJ, Santiago FJ. Un estudio del uso de modelos moleculares en la didáctica del enlace covalente en bachillerato (No. ART-2018-108252); 2018
17. ATKINS P, JONES L. Principios de Química. Tercera edición. Buenos Aires: Editorial Médica Panamericana; 2006
18. Callister WD. Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales. Volumen I. Reverté; 2020.
19. Brown TL, LeMay HE, Bursten BE, Burdge JR. Chemistry: the central science. Pearson Education; 2002.
20. <https://wp.icmm.csic.es/superconductividad/fisica-cuantica-y-transiciones/fisica-cuantica/solidos-cristalinos/>
21. Tepanecatí Fuentes LA. Acoplamiento de plasmones de superficies entre capas de grafeno distribuidas cuasiperiodicamente. MS thesis. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2016.
22. KREMER C. Las redes metálicas y sus bandas escondidas. Anuario Latinoamericano de Educación Química, XII; 2000. pp. 255 – 259.
23. <https://image.slidesharecdn.com/5-131009104457-phpapp01/95/enlaces-quimicos-25-638.jpg?cb=1381315916>.
24. Fleming DG, et al. New Vibrations. Scientific American. 2015; 312(2): pp. 30. doi:10.1038/scientificamerican0215-30.
25. Miller JL. Chemistry Nobel honors mechanical bonds, molecular machines. Physics today. 2016; 69(12): pp. 18.
26. Irlés SM, David FL, Siurana AG. Problemas y cuestiones de las Olimpiadas de Química de la Comunidad Valenciana. Vol. 10. Universidad de Alicante, 2009.



Nacido en Valera, Estado Trujillo, Venezuela, en el año 1960, el profesor Sabino José Menolasina Monrreal, es Licenciado en Química, 1984, Universidad de Los Andes (ULA), Mérida-Venezuela; Especialista en Química Aplicada: Mención Electroquímica, 1991, (ULA), Mérida-Venezuela; PhD en Química, 1996, University of Bath (Inglaterra).

Profesor Titular de la ULA, Mérida-Venezuela, (1989-2016); Profesor (Docente Ocasional) de la Escuela Superior de Chimborazo (ESPOCH), Ecuador, (2016-2018). Profesor (Postgrado) en la ESPOCH y en la Universidad Técnica de Ambato (UTA), Ecuador, (2019).

Director de varias tesis de postgrado (Doctorado y Maestría) y pregrado en la ULA. Autor de más de 20 publicaciones en revistas científicas nacionales e internacionales. Autor de varios libros: Fundamentos y Aplicaciones de Electroquímica (2004); Físicoquímica en el campo farmacéutico y del bioanálisis (2005); Manual de Prácticas de Laboratorio de Físicoquímica (2006); Química general aplicada a las Ciencias de la Salud (2009).

Autor de capítulos en libros: Capítulo 11: Electroquímica con electrodos, en el libro de Físicoquímica para Ciencias de la Salud (1997); Capítulo 10: Nanotecnología aplicada en el campo de Ciencias de la Salud, en el libro Nanopartículas: Fundamentos y Aplicaciones (2015).

Campo de investigación: Electroquímica aplicada en el campo de la Ingeniería Química y ciencias de la salud. Fue miembro de varias sociedades científicas nacionales e internacionales.

Ha sido galardonado en varios programas de estímulo a la docencia e investigación: Reconocimientos y Estímulos del Reglamento de Evaluación Integral al Desempeño del Personal Académico de la ESPOCH (2017); Programa Estimulo a la Docencia Universitaria (PED) de la ULA (2015); Distinción “Dr. Mariano Picón Salas” en su segunda clase, por sobresaliente trayectoria en docencia universitaria, ULA (2013); Programa de Estímulo al Investigador de la ULA (PEI-ULA) (1998-2015); Reconocimiento por trayectoria como autor de libro en la ULA (2010); Sistema de promoción del Investigador (SPI) Nivel I, Nivel II (1998-2000); Profesor meritario, Nivel III, CONABA (2000); Reconocimiento académico CONADES (1998).