

1 Átomos unidos por enlace químico

Página 93

- 1** Dadas las moléculas HCl, KF y CH₂Cl₂, razona el tipo de enlace presente en cada una de ellas utilizando los datos de electronegatividad. Datos: E.N: K = 0,8; H = 2,1; C = 2,5; Cl = 3,0; F = 4,0.

HCl: En este caso, la diferencia de electronegatividad es 0,9, por tanto, el enlace es covalente.

KF: En este caso, la diferencia de electronegatividad es 3,2, por tanto, el enlace es iónico.

CH₂Cl₂: Por un lado, tenemos que la diferencia de electronegatividad entre el C y el H es 0,4 y por otro lado que la diferencia entre el C y el Cl es 0,5. Por tanto, en ambos casos tenemos un enlace covalente.

- 2** Dados los siguientes compuestos: NaH, CH₄, H₂O, CaH₂ y HF, ¿cuáles tienen enlace iónico y cuáles enlace covalente?

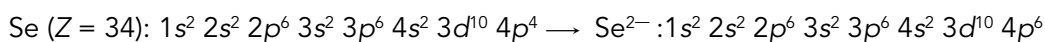
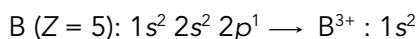
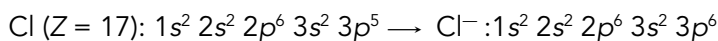
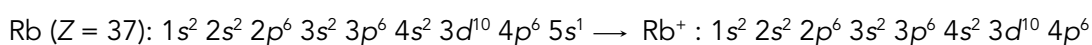
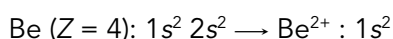
El NaH y CaH₂ tienen enlace iónico. El CH₄, H₂O y HF tienen enlace covalente.

2 Enlace iónico

Página 94

- 1** Justifica a partir de la configuración electrónica en estado fundamental qué iones forman los elementos: berilio, rubidio, cloro, boro y selenio.

Si tenemos en cuenta los números atómicos y la configuración electrónica en su estado fundamental, los iones que forman serán:



- 2** ¿Qué condiciones energéticas han de cumplirse para que se pueda afirmar que se ha formado un enlace?

Se llama enlace químico a cualquiera de las formas de unión química entre átomos.

Un enlace químico se forma entre dos átomos si la disposición resultante de los dos núcleos y sus electrones tiene una energía menor que la energía total de los dos átomos por separado.

Los átomos se combinan con el fin de alcanzar una configuración electrónica más estable, es decir, de menor energía. La estabilidad máxima se consigue cuando un átomo es isoelectrónico con un gas noble.

Esta estabilidad energética se puede lograr mediante:

- 1) La transferencia completa de electrones de un átomo al otro, formándose iones que permanecen unidos por interacciones de tipo electrostático denominadas enlaces iónicos.
- 2) La compartición de electrones entre dos átomos. En este caso, los átomos se unen mediante enlaces covalentes y se forman moléculas individuales.
- 3) La compartición de electrones, de manera colectiva, con otros átomos en el enlace metálico.

Página 96

- 3** Utiliza los siguientes datos para calcular la energía de la red cristalina del cloruro de sodio, NaCl, mediante la ecuación de Born-Landé.

Datos: $A = 1,74756$; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; $Z^+ = 1$; $Z^- = -1$; $e^- = 1,6021 \cdot 10^{-19} \text{ C}$; $K = 9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{C}^2$; $r_0 = 2,81 \cdot 10^{-10} \text{ m}$; $n = 8$

Tenemos la ecuación de Born-Landé para el cálculo de la energía reticular:

$$U_{\text{reticular}} = \left(\frac{K \cdot A \cdot N_A \cdot Z^+ \cdot Z^- \cdot e^2}{r_0} \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{1}{n} \right) \right)$$

Sustituyendo en la expresión, tenemos:

$$U_{\text{reticular}} = \left(\frac{9 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{C}^2 \cdot 1,74756 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \cdot (+1) \cdot (-1) \cdot (1,6021 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2}{2,81 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{1}{8} \right) \right)$$

Así, la energía de la red cristalina del NaCl resulta:

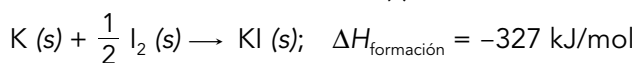
$$U_{\text{reticular}} = -7,57 \cdot 10^5 \text{ J/mol} = -757 \text{ kJ/mol}$$

Página 97

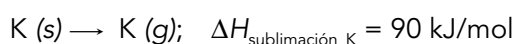
- 4** Calcula la energía reticular del KI (s) y representa en un ciclo de Born-Haber el proceso de formación del KI (s). **Datos:** $\Delta H_f(\text{KI}) = -327 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{sub}} \text{ K (s)} = 90 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{sub}} \text{ I}_2 \text{ (s)} = 62 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{dis.}} \text{ I}_2 \text{ (g)} = 149 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{ionización}} \text{ K (g)} = 418 \text{ kJ/mol}$, A.E. I (g) = -308 kJ/mol

Tenemos los siguientes procesos:

- 1) Reacción de formación del KI (s):



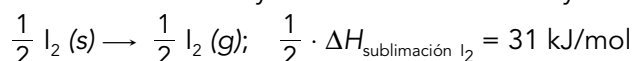
- 2) Transformación del potasio sólido en potasio gaseoso:



- 3) Transformación del potasio gaseoso a potasio gaseoso pero como ion K^+ :



- 4) Transformación del yodo molecular sólido a yodo molecular gaseoso:



- 5) Disociación de la molécula gaseosa de I_2 :



- 6) Formación de I^- gaseoso:



- 7) Formación del sólido a partir de iones gaseosos:

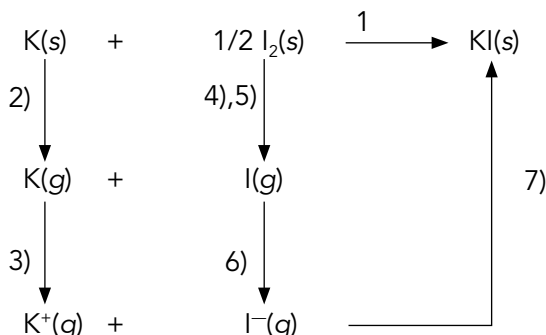


Teniendo en cuenta la ley de Hess, podemos determinar la energía reticular del KI, así:

$$\Delta H_{\text{formación}} = \Delta H_{\text{sublim. K}} + \Delta H_{\text{ionización K}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{sublim. I}_2} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{disoc. I}_2} + \Delta H_{\text{afin.}} + \Delta H_{\text{reticular}}$$

$$-327 \text{ kJ/mol} = 90 \text{ kJ/mol} + 418 \text{ kJ/mol} + 31 \text{ kJ/mol} + 74,5 \text{ kJ/mol} - 308 \text{ kJ/mol} + \Delta H_{\text{reticular}}$$

Obtenemos $\Delta H_{\text{reticular}} = -632,5 \text{ kJ/mol}$



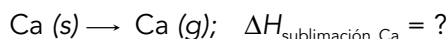
Calcula el calor de sublimación del calcio a partir de los siguientes datos: $\Delta H_f \text{ CaBr}_2(\text{s}) = -675 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{vap}} \text{ Br}_2(\text{l}) = 315 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{dis}} \text{ Br}_2(\text{g}) = 193 \text{ kJ/mol}$, $1^\circ \text{ E.I. Ca(g)} = 590 \text{ kJ/mol}$, $2^\circ \text{ E.I. Ca(g)} = 1143 \text{ kJ/mol}$, $\text{A.E. Br(g)} = -324 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{reticular}} \text{ CaBr}_2(\text{s}) = -2391 \text{ kJ/mol}$

La reacción de formación del bromuro de calcio, CaBr_2 , a partir de sus elementos en su estado estándar, viene descrito por la siguiente ecuación termoquímica:



El ciclo de Born-Haber es un ciclo de reacciones químicas desarrollado por Max Born y Fritz Haber. Mediante él, puede calcularse el valor de la energía reticular (energía que representa, teóricamente, la formación de un compuesto iónico a partir de sus iones gaseosos) de forma indirecta, pues no puede ser calculado experimentalmente.

1) Transformación del calcio sólido en calcio gaseoso:



2) Transformación del calcio gaseoso en calcio gaseoso pero como un Ca^{2+} . El proceso requiere arrancar dos electrones en dos etapas:



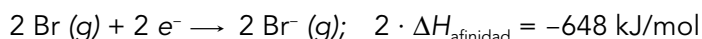
3) Transformación del bromo molecular líquido en bromo molecular gaseoso:



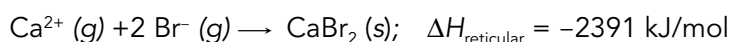
4) Transformación del bromo molecular gaseoso en bromo atómico gaseoso:



5) Transformación del bromo atómico en iones bromuro Br^- :



6) Unión de los respectivos iones en estado gaseoso para formar el compuesto sólido cristalino:



Aplicando la ley de Hess, podemos escribir:

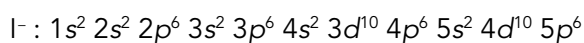
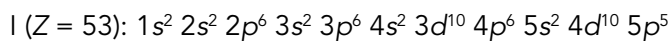
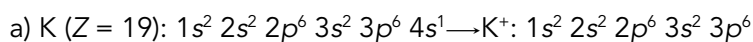
$$\Delta H_{\text{formación CaBr}_2(\text{s})} = \Delta H_{\text{sublim. Ca}} + \Delta H_{\text{ioniz. 1}} + \Delta H_{\text{ioniz. 2}} + \Delta H_{\text{vaporiz. Br}_2(\text{l})} + \Delta H_{\text{disoc.}} + 2 \cdot \Delta H_{\text{afinidad}} + \Delta H_{\text{reticular}}$$

Y, despejando el calor de sublimación del calcio, nos queda:

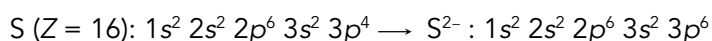
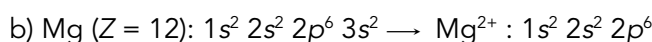
$$\Delta H_{\text{sublimación Ca}} = -675 \text{ kJ/mol} - 590 \text{ kJ/mol} - 1143 \text{ kJ/mol} - 315 \text{ kJ/mol} - 193 \text{ kJ/mol} + 648 \text{ kJ/mol} + 2391 \text{ kJ/mol} = 123 \text{ kJ/mol}$$

Página 98

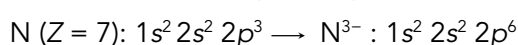
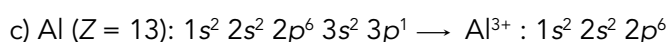
5 Predice la fórmula empírica del compuesto iónico formado por las siguientes parejas de elementos: a) K y I; b) Mg y S; c) Al y N; d) Na y C.



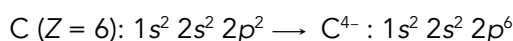
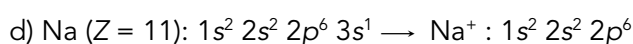
Por tanto la fórmula empírica es KI.



Por tanto la fórmula empírica es MgS.



Por tanto la fórmula empírica es AlN.



Por tanto la fórmula empírica es Na₄C.

6 Para las sales RbI, CsI, KI y NaI, explica justificando la respuesta: a) ¿cuál tendrá mayor energía de red?, b) ¿cuál tendrá mayor punto de fusión?

a) Los cuatro son compuestos iónicos (RbI, CsI, KI y NaI) que tienen en común el anión, I⁻, y se diferencian en el catión.

La energía reticular es la energía liberada en la unión de los iones para formar un mol de sólido iónico en estado cristalino. Cuanto mayor sea la fuerza entre los iones, mayor será la energía reticular y también será mayor el punto de fusión.

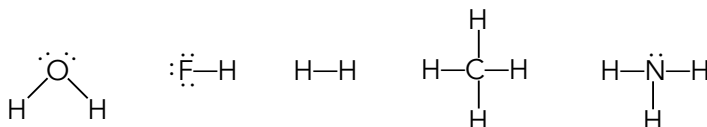
Si tenemos en cuenta el orden creciente de los radios ($Na^+ < K^+ < Rb^+ < Cs^+$), las fuerzas electrostáticas entre los iones de signo contrario más intensas se darán en el NaI. En consecuencia, la energía reticular será mayor en el NaI.

b) Como el punto de fusión también depende de la intensidad de las fuerzas de atracción entre los iones de signo contrario, el mayor punto de fusión también será el correspondiente al NaI.

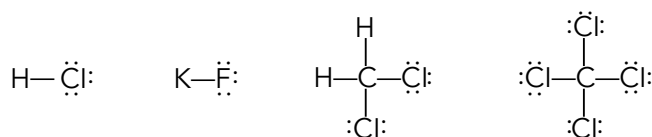
3 Enlace covalente

Página 101

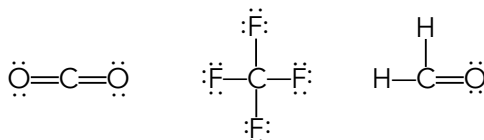
1 Representa mediante estructuras de Lewis las siguientes moléculas: H₂O, HF, H₂, CH₄ y NH₃.



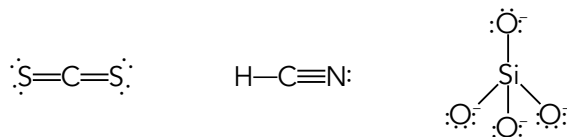
2 Dadas las moléculas HCl, KF, CH₂Cl₂ y CCl₄ escribe la estructura de Lewis.



- 3 Dadas las siguientes sustancias: CO_2 , CF_4 , H_2CO , escribe las estructuras de Lewis de sus moléculas.



- 4 Describe, razonadamente, las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas: S_2C , HCN y SiO_4^{4-}



- 5 Considera las sustancias Br_2 , HF , Al y KI . Contesta, razonadamente, a las siguientes cuestiones:

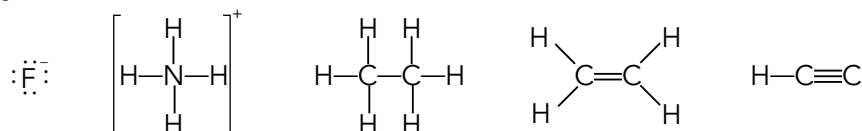
a) Indica el tipo de enlace presente en cada una de ellas.

b) Escribe la estructura de Lewis de aquellas que sean covalentes

a) Br_2 : Enlace covalente; HF : Enlace covalente; Al : Enlace metálico; KI : Enlace iónico.

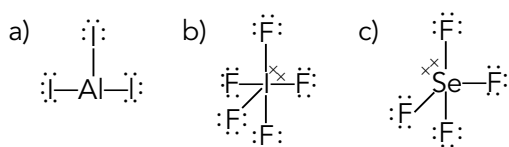
b) $\text{:}\ddot{\text{Br}}\text{---}\ddot{\text{Br}}\text{:}$ $\text{:}\ddot{\text{F}}\text{---H}$

- 6 Escribe las estructuras electrónicas de Lewis de las siguientes sustancias: F^- , NH_4^+ , etano, eteno y etino.



Página 102

- 7 Dibuja las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos: a) AlI_3 , b) IF_5 , c) SeF_4 .



- 8 ¿Qué especies tienen un número impar de electrones : a) Br , b) OH^- , c) PCl_2 , d) PCl_3 ?

Teniendo en cuenta los electrones de la capa de valencia, tenemos:

a) $\text{Br} \rightarrow 7$ electrones \rightarrow Tiene un número impar de electrones

b) $\text{OH}^- \rightarrow 6 + 1 + 1 = 8$ electrones \rightarrow No tiene un número impar de electrones

c) $\text{PCl}_2 \rightarrow 5 + 2 \cdot 7 = 19$ electrones \rightarrow Tiene un número impar de electrones

d) $\text{PCl}_3 \rightarrow 5 + 3 \cdot 7 = 26$ electrones \rightarrow No tiene un número impar de electrones

- 9 ¿Qué especies son deficientes en electrones; a) BeH_2 , b) CH_3^+ , c) CH_4 , d) NH_3 , e) NH_4^+ ?

Tenemos en cuenta los electrones de la capa de valencia de cada uno de los elementos:

BeH_2 : $2 + 2 = 4$ electrones

CH_3^+ : $4 + 3 - 1 = 6$ electrones

CH_4 : $4 + 4 = 8$ electrones

NH_3 : $5 + 3 = 8$ electrones

NH_4^+ : $5 + 4 - 1 = 8$ electrones

Las especies deficientes en electrones son CH_3^+ y BeH_2 .

Página 103

10 ¿Cuál es el origen de la polaridad en los enlaces covalentes? Justifica la polaridad de las moléculas de BCl_3 y NCl_3 .

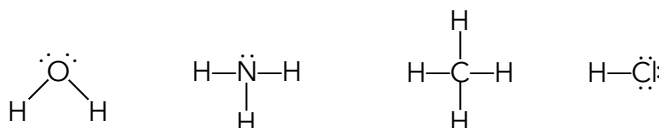
Para que una molécula sea polar, se necesita, en primer lugar, que tenga momentos dipolares y que la suma de estos momentos dipolares no sea nula.

BCl_3 : En esta molécula hay tres momentos dipolares $\text{B}^+\text{---}\text{Cl}$, pero debido a que la molécula presenta una geometría triangular, por razones de simetría, se anulan. Por tanto, la molécula sería **apolar**.

NCl_3 : En la molécula de NCl_3 hay tres momentos dipolares $\text{N}^+\text{---}\text{Cl}$. En este caso, debido a que la molécula presenta una geometría de una pirámide de base triangular, los momentos dipolares no se anulan y la molécula es **polar**.

11 Para las moléculas H_2O , NH_3 , CH_4 y HCl , indica, razonando la respuesta: a) la estructura de Lewis, b) la polaridad.

a) Para determinar las estructuras de Lewis tenemos en cuenta el número de electrones de la capa de valencia de cada uno de los átomos presentes en las moléculas. Así:



b) En este caso, para estudiar la polaridad de cada una de las moléculas, necesitamos conocer la geometría molecular de cada una de ellas.

H_2O : La molécula de agua presenta dos momentos dipolares $\text{H}^+\text{---}\text{O}$. La molécula de agua presenta una geometría angular según la teoría RPECV. Al calcular la resultante de los momentos dipolares presentes en la molécula, esta es no nula. Por tanto, la molécula de H_2O es **polar**.

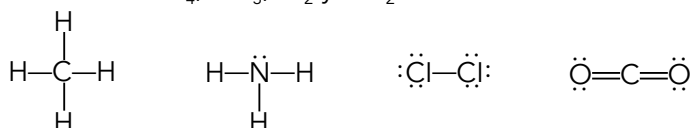
NH_3 : La molécula de amoníaco tiene tres momentos dipolares $\text{H}^+\text{---}\text{N}$. Su geometría según la teoría RPECV será de pirámide trigonal. Al calcular la resultante de los momentos dipolares esta es no nula (los respectivos momentos dipolares no solo no se anulan, sino que además se refuerzan con el par de electrones no enlazantes del átomo de N). Por tanto, la molécula de NH_3 será **polar**.

CH_4 : La molécula de CH_4 presenta una geometría tetraédrica. Por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

HCl : Debido a la diferencia de electronegatividades, la molécula de HCl es una molécula **polar**.

12 Dadas las moléculas de CH_4 , NH_3 , Cl_2 y CO_2 : a) clasifícalas en polares o apolares, b) ¿qué compuesto formará una molécula tetraédrica?

a) Las estructuras de Lewis de CH_4 , NH_3 , Cl_2 y CO_2 son:



Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

CH_4 : El átomo central, de carbono, está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Así, en la molécula, hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno a él que se orientan hacia los vértices de un tetraedro y la molécula presenta geometría tetraédrica. Por razones de simetría, los cuatro momentos dipolares se anulan entre sí, y la molécula es **apolar**.

NH₃: Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. Presenta una geometría de pirámide trigonal. Los tres momentos dipolares $H \rightarrow N$ no se anulan, y la molécula es **polar**.

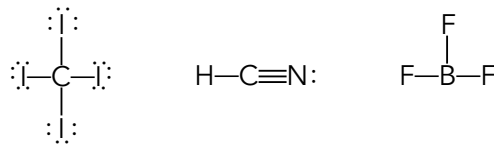
Cl₂: Es **apolar** al estar formada por dos átomos iguales.

CO₂: El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central de carbono está rodeado por dos grupos de electrones de alta densidad electrónica. Presenta una geometría lineal con ángulo de enlace de 180°. Los dos momentos dipolares $C \rightarrow O$ se anulan y la molécula es **apolar**.

b) El compuesto que forma una molécula tetraédrica es el metano, CH₄.

13 Considera las siguientes especies químicas de las que se indica su geometría entre paréntesis: Cl₄ (tetraédrica), HCN (lineal) y BF₃ (trigonal). a) Representa la estructura de Lewis de cada una de dichas especies, b) justifica la polaridad de cada una.

a) Las estructuras de Lewis de Cl₄, HCN y BF₃ son:



En el BF₃, el boro es hipovalente (hay menos de ocho electrones alrededor del átomo central).

b) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

Cl₄: El tetrayoduro de carbono presenta geometría tetraédrica. Presenta cuatro enlaces fuertemente polarizados $C \rightarrow I$, pero por razones de simetría, sus momentos dipolares se anulan entre sí, la molécula es **apolar**.

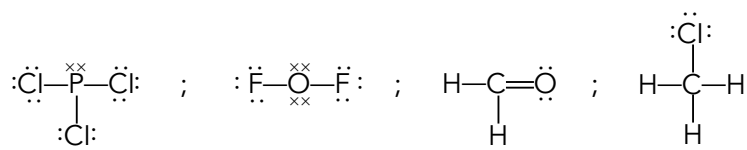
HCN: El ácido cianhídrico presenta geometría lineal con dos zonas de alta densidad electrónica. Tenemos dos enlaces polarizados, uno $H \rightarrow C$, y otro $C \rightarrow N$, que se refuerzan entre sí, la molécula es **polar**.

BF₃: El trifluoruro de boro presenta una geometría plana trigonal. La molécula presenta tres enlaces fuertemente polarizados, $B \rightarrow F$. Por razones de simetría, sus momentos dipolares se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

14 Justifica si las moléculas PCI₃, OF₂, H₂CO y CH₃Cl son polares o apolares.

Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace; por ello, es necesario para determinarlo, conocer la geometría molecular y los ángulos de enlace.

Las estructuras de Lewis de PCI₃, OF₂, H₂CO y CH₃Cl son:



PCI₃: Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. La molécula presenta una geometría de pirámide trigonal. En el PCI₃, tenemos tres enlaces polarizados $P \rightarrow Cl$; los tres momentos dipolares se refuerzan mutuamente entre sí, la molécula es, por tanto, **polar**.

OF₂: Tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierren. Presenta una geometría angular. El OF₂ presenta dos momentos dipolares $O \rightarrow F$ que se refuerzan entre sí (debido a la presencia de electrones solitarios), la molécula es **polar**.

H₂CO: El átomo central carece de pares de electrones solitarios y está rodeado por tres grupos de electrones. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría plana trigonal con ángulos de enlace de 120°. Debido a la geometría molecular y a la presencia de enlaces fuertemente polarizados que dan lugar a un momento dipolar neto no nulo, la molécula es **polar**.

CH₃Cl: El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones; es decir, hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central de carbono que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría tetraédrica. Debido a esta geometría y a la presencia del enlace carbono-cloro, esta molécula presenta un momento dipolar neto no nulo, por lo tanto, la molécula es **polar**.

4 Teoría del enlace de valencia (TEV)

Página 107

1 Responde a las siguientes cuestiones:

a) ¿En qué se basa la teoría del enlace de valencia?

b) ¿En qué se diferencia del concepto de Lewis sobre el enlace químico?

a) Una de las teorías cuánticas más importantes sobre el enlace covalente es la teoría del enlace de valencia (TEV). Fue propuesta por Linus Pauling y J.C. Slater y explica los enlaces covalentes en términos de orbitales atómicos. Supone que los electrones de una molécula ocupan los orbitales atómicos de los átomos individuales y los enlaces se forman como consecuencia del solapamiento de los orbitales atómicos.

En la TEV, un enlace covalente sencillo entre dos átomos se forma por solapamiento de orbitales atómicos que tengan electrones desapareados y con espines antiparalelos.

b) La teoría del enlace covalente de Lewis-Langmuir se basaba en las teorías atómicas clásicas del modelo de Bohr-Sommerfeld, que se introdujeron con anterioridad a la llegada de la mecánica cuántica. Las estructuras de Lewis no proporcionan información acerca de los orbitales que son ocupados por los electrones ni la energía de estos en las moléculas.

2 ¿Cuándo se forman los enlaces tipo sigma (σ)? ¿Y los enlaces tipo pi (π)?

El enlace tipo sigma (σ) se da cuando los orbitales atómicos solapan frontalmente. Se refiere a las superposiciones producidas en el segmento que une los núcleos de los átomos. La región de densidad electrónica máxima rodea al eje internuclear. Se da entre orbitales atómicos $s-s$ (H—H), $s-p$ (H—Cl) y $p-p$ (Cl—Cl).

Los enlaces establecidos son estables y permiten la rotación de los átomos respecto al eje de giro. Todos los enlaces covalentes sencillos se forman por enlace σ . En este tipo de enlace, dos electrones apareados se encuentran entre los dos átomos.

El enlace tipo pi (π) se produce cuando los orbitales atómicos solapan lateralmente. Se da entre orbitales atómicos $p-p$. El enlace π rodea completamente el eje internuclear, y deja una zona de densidad electrónica nula. No puede existir un giro de un átomo con respecto al otro, ya que la zona de solapamiento entre las nubes electrónicas desaparecería y se rompería el enlace.

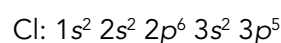
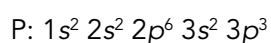
Los enlaces sigma (σ) son más estables que los enlaces pi (π).

3 Explica la existencia de moléculas de N_2 y PCl_5 según la teoría del enlace de valencia (TEV).

La teoría del enlace de valencia fue propuesta por Linus Pauling y J.C. Slater y explica los enlaces covalentes en términos de orbitales atómicos. Supone que los electrones de una molécula ocupan los orbitales atómicos de los átomos individuales y los enlaces se forman como consecuencia del solapamiento de los orbitales atómicos.

N_2 : El nitrógeno tiene configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^3$ con 3 electrones desapareados, por tanto, covalencia tres, y formará enlaces. Uno de ellos, el que se forme por solapamiento de orbitales «p» en la misma dirección será σ y los dos restantes que se forman entre orbitales «p» paralelos serán de tipo π . La molécula es **lineal**.

PCl_5 : Las estructuras electrónicas del fósforo y del cloro son:



El átomo de fósforo presenta hibridación sp^3d con los enlaces P—Cl dirigidos hacia los vértices de una **pirámide trigonal**.

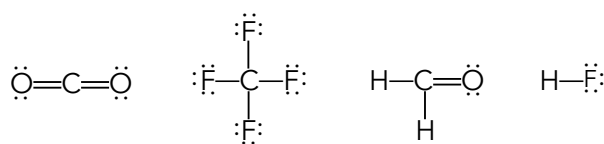
5 Teoría de la hibridación de orbitales atómicos**Página 108****1 Dadas las siguientes sustancias CO_2 , CF_4 , H_2CO y HF:**

a) Escribe las estructuras de Lewis de sus moléculas.

b) Explica sus geometrías utilizando la teoría de hibridación.

Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, O = 8, F = 9.

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas de CO_2 , CF_4 , H_2CO y HF son:



b)

CO_2 : Geometría **lineal**. Esta es la disposición en la que los dos grupos de electrones alrededor del C tienen menor repulsión. El carbono tiene hibridación sp y sus orbitales híbridos se orientan formando entre sí un ángulo de 180° .

CF_4 : Geometría **tetraédrica**. El carbono está rodeado de cuatro grupos de electrones. La disposición en la que tienen menor repulsión es la tetraédrica.

En esta molécula, el carbono tiene hibridación sp^3 , y sus orbitales híbridos se orientan formando entre sí un ángulo de $109,5^\circ$.

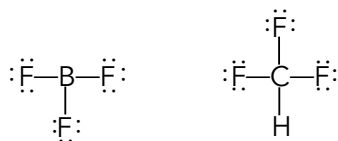
H_2CO : Geometría **plana trigonal**. El carbono está rodeado de tres grupos de electrones. La disposición en la que estos tienen menor repulsión es la trigonal plana.

En esta molécula, el carbono tiene hibridación sp^2 y sus orbitales híbridos se orientan formando entre sí un ángulo de 120° .

HF: Geometría **lineal**. La única posible en una molécula diatómica.

2 Para las moléculas BF_3 y CHF_3 : a) establece sus estructuras de Lewis, b) establece su geometría molecular, indicando la hibridación del átomo central. Datos: Números atómicos: H = 1, B = 5, C = 6, F = 9.

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas de BF_3 y CHF_3 son:



b)

BF_3 : El átomo de boro utiliza la hibridación sp^2 , que es la que proporciona tres orbitales híbridos dirigidos hacia los vértices de un **triángulo equilátero**. Al solaparse frontalmente los orbitales híbridos del boro con un orbital $2p$ semilleno de cada átomo de F, se forman tres enlaces covalentes correspondientes a las tres zonas de alta densidad electrónica que rodean al átomo de boro.

CH_3F : El átomo de carbono está rodeado de cuatro zonas de alta densidad electrónica dirigidas hacia los vértices de un **tetraedro**. El tipo de hibridación es sp^3 .

3 Justifica si son verdaderas o falsas las siguientes afirmaciones: a) una molécula que contenga enlaces polares es necesariamente polar, b) un orbital híbrido sp^2 se obtiene por combinación de dos orbitales s y dos orbitales p , c) los compuestos iónicos en disolución acuosa son conductores de la electricidad.

a) **Falsa:** Aunque la molécula tenga enlaces polares, estos pueden contrarrestar sus efectos por la distribución geométrica de la molécula, obteniéndose una molécula apolar.

b) **Falsa:** Un orbital híbrido sp^2 se obtiene por combinación de un orbital s y dos orbitales p , generando tres orbitales híbridos sp^2 .

c) **Verdadera:** En disolución acuosa, los iones del sólido se separan y se mueven con facilidad en la disolución permitiendo la conductividad eléctrica.

Página 109

4 Explica, razonadamente, si la siguiente afirmación es verdadera: «El BF_3 es un compuesto en el que el átomo de boro presenta hibridación sp^3 ».

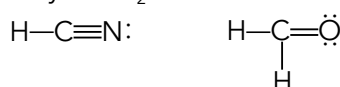
Falso, el trifluoruro de boro presenta hibridación sp^2 .

Un orbital híbrido sp^2 se obtiene por combinación de un orbital s y dos orbitales p , generando tres orbitales híbridos sp^2 .

El átomo de boro utiliza la hibridación sp^2 , que es la que proporciona tres orbitales híbridos dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero. Al solaparse frontalmente los orbitales híbridos del boro con un orbital $2p$ semilleno de cada átomo de F, se forman los tres enlaces covalentes correspondientes a las tres zonas de alta densidad electrónica que rodean al átomo de boro.

5 a) Deduce la estructura de Lewis del ácido cianhídrico (HCN) y del metanal (H_2CO), b) indica, en ambas moléculas, cuál es la hibridación de orbitales atómicos que presenta el átomo de carbono.

a) Las estructuras de Lewis del HCN y del H_2CO son:



b) En el ácido cianhídrico, HCN el triple enlace carbono-nitrógeno se justifica mediante el uso de orbitales híbridos sp por parte del átomo de C que permiten justificar la geometría **lineal** de la molécula.

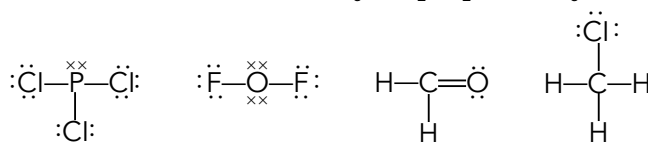
En el caso del metanal, H_2CO , el átomo de carbono utiliza orbitales híbridos sp^2 que permiten justificar la geometría **plana** de la molécula.

6 Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV)

Página 110

- 1 Escribe la estructura de Lewis de cada una de las siguientes moléculas y predice, justificando la respuesta, su geometría molecular: PCl_3 , OF_2 , H_2CO , CH_3Cl . Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, O = 8, F = 9, P = 15, Cl = 17.

Las estructuras de Lewis de las moléculas de PCl_3 , OF_2 , H_2CO , CH_3Cl son:



PCl_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El ángulo de enlace es menor que $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo el ángulo de enlace se cierra un poco. Presenta una geometría molecular de **pirámide trigonal**.

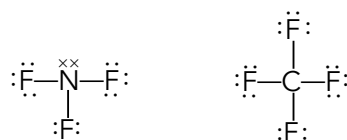
OF_2 : Tenemos cuatro nubes de electrones, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierran y su ángulo de enlace sea menor que $109,5^\circ$. Presenta una geometría molecular **angular**.

H_2CO : El átomo central de carbono está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría molecular **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

CH_3Cl : El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

- 2 a) Escribe la estructura de Lewis para las moléculas NF_3 y CF_4 , b) dibuja la geometría de cada molécula según la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia, c) considerando las geometrías moleculares, razona acerca de la polaridad de ambas moléculas.

a) Las estructuras de Lewis para las moléculas de NF_3 y CF_4 son:



b)

NF_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El ángulo de estas moléculas es menor que $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo el ángulo de enlace se cierra un poco. Presenta una geometría molecular de **pirámide trigonal**.

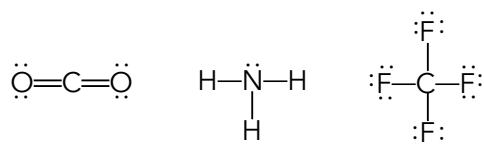
CF_4 : El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría molecular **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

c) Los enlaces N—F y C—F están fuertemente polarizados hacia el átomo de flúor: $N \rightarrow F$ y $C \rightarrow F$. Debido a su geometría molecular, los momentos dipolares individuales de los enlaces C—F se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

En cambio, la molécula de NF_3 es asimétrica y los tres momentos dipolares individuales no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

3 ¿Qué geometría tendrán las moléculas CO_2 , NH_3 y CF_4 ?, ¿cuáles de ellas tienen momento dipolar no nulo?

Las estructuras de Lewis de las moléculas de CO_2 , NH_3 y CF_4 , son:



Vamos a determinar la geometría de las moléculas utilizando la teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV).

CO_2 : El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central de carbono está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica. Presenta una geometría molecular **lineal** con un ángulo de enlace de 180° .

NH_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El tipo de geometría molecular es **pirámide trigonal**.

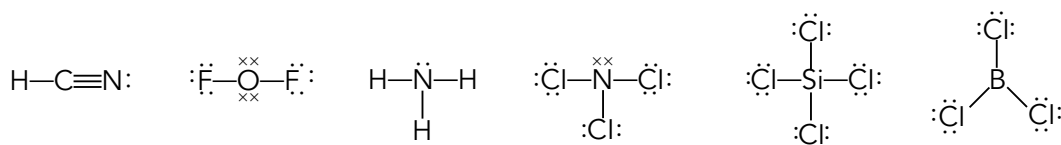
CF_4 : El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría molecular **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

Debido a su geometría molecular, la molécula que tiene un momento dipolar no nulo es el NH_3 . En el resto de moléculas, debido a su geometría molecular y a su simetría, los momentos dipolares de los distintos enlaces se anulan entre sí.

Página 112

4 Dadas las moléculas HCN , F_2O , NH_3 , NCl_3 , $SiCl_4$, BCl_3 , responde razonadamente a las siguientes cuestiones: a) representa la estructura de Lewis de cada una de ellas, b) predice su geometría molecular, c) explica en cada caso si la molécula tiene o no momento dipolar. Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, N = 7, O = 8, F = 9, Si = 14, Cl = 17.

a) Las estructuras de Lewis del HCN , F_2O , NH_3 , NCl_3 , $SiCl_4$, BCl_3 , son:



b) **HCN :** El átomo central de carbono carece de pares de electrones solitarios y está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica. Presenta una geometría molecular **lineal** con un ángulo de enlace de 180° .

F_2O : Tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierran y su ángulo de enlace sea menor que $109,5^\circ$. El tipo de geometría molecular es **angular**.

NH_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. Presenta una geometría molecular de **pirámide trigonal**.

NCl_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones y al igual que en el caso del NH_3 , presenta una geometría molecular de **pirámide trigonal**.

SiCl_4 : El átomo central de silicio está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

BCl_3 : El átomo central de boro está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría molecular **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

c) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

HCN : Como la electronegatividad crece según $\text{H} < \text{C} < \text{N}$, la molécula tiene una región positiva y otra negativa. La molécula es **polar**.

F_2O : Debido a que presenta una geometría molecular angular, el momento dipolar resultante no es nulo, la molécula es polar.

NH_3 : Los tres enlaces $\text{N} \rightarrow \text{H}$, se refuerzan mutuamente entre sí y con el par de electrones no enlazantes del átomo de N; la molécula es **polar**.

NCl_3 : El Cl y el N tienen el mismo valor de electronegatividad en la escala de Pauling (3,0), por tanto, los enlaces $\text{N}-\text{Cl}$ no son polares y la molécula es **apolar**.

SiCl_4 : Tenemos cuatro enlaces polarizados $\text{Si} \rightarrow \text{Cl}$, pero debido a su geometría tetraédrica y a la simetría, los momentos dipolares se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

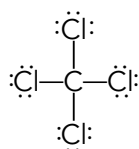
BCl_3 : La molécula tiene tres enlaces polarizados, $\text{B} \rightarrow \text{Cl}$. Debido a que la geometría molecular es plana trigonal, por razones de simetría, sus momentos dipolares se anulan, la molécula es **apolar**.

8 Fuerzas intermoleculares

Página 118

1 Dada la molécula CCl_4 : a) represéntala mediante la estructura de Lewis, b) ¿por qué la molécula es apolar si los enlaces están polarizados?, c) ¿por qué a temperatura ambiente el CCl_4 es líquido y el Cl_4 es sólido?

a) La estructura de Lewis del CCl_4 es:



b) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace; por ello, es necesario para determinarlo, conocer la geometría molecular y los ángulos de enlace.

El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central de carbono que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría molecular **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

Aunque la molécula presenta cuatro enlaces polarizados, $C \rightarrow Cl$, los momentos dipolares se anulan por razones de simetría y la molécula será **apolar**.

- c) El estado de agregación de un compuesto molecular depende de la intensidad de las fuerzas intermoleculares. Tanto el CCl_4 como el Cl_4 son moléculas apolares, las fuerzas intermoleculares en ambos casos son fuerzas de dispersión o de London.

Debido a que el átomo de I es más grande que el átomo de Cl, el tamaño molecular del Cl_4 es mayor que el del CCl_4 y por tanto las fuerzas intermoleculares serán mayores en el Cl_4 y será un sólido.

- 2 El trifluoruro de boro y el amoníaco son compuestos gaseosos en condiciones normales. Explica: a) la forma geométrica de sus moléculas, b) cuál de las dos moléculas es más polar, c) cómo serán los enlaces intermoleculares en cada uno de los compuestos, d) cuál de los dos compuestos tendrá un punto de ebullición más alto. Datos: Números atómicos: H = 1, B = 5, N = 7, F = 9.

- a) Las estructuras de Lewis del BF_3 y NH_3 son:



BF_3 : El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central está rodeado por tres grupos de electrones. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

NH_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El ángulo de enlace de estas moléculas es menor que $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo el ángulo de enlace se cierra un poco. Presenta una geometría molecular de **pirámide trigonal**.

- b) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

BF_3 : La molécula presenta tres enlaces fuertemente polarizados, $B \rightarrow F$. Debido a que la geometría molecular es plana trigonal, por razones de simetría, sus momentos dipolares se anulan entre sí; la molécula es **apolar**.

NH_3 : Los tres enlaces $N \rightarrow H$, se refuerzan mutuamente entre sí y con el par de electrones no enlazantes del átomo de N; la molécula es **polar**.

- c) En la molécula de BF_3 , al ser apolar, las fuerzas intermoleculares son fuerzas de dispersión o de London.

En la molécula de NH_3 , aparecen enlaces por puentes de hidrógeno.

- d) El punto de ebullición depende de la intensidad de las fuerzas que mantienen unidas a las entidades elementales que componen una sustancia dada. Teniendo en cuenta que las fuerzas de dispersión o de London son muy débiles frente a los enlaces por puentes de hidrógeno, el NH_3 tendrá un punto de ebullición más elevado que el BF_3 .

Cultura científica. Nuevos materiales

Página 121

1 Busca información sobre el nitinol y sus aplicaciones.

El nitinol (NiTi) es una aleación de níquel y titanio que tiene una propiedad muy curiosa: «la memoria de forma». Esta aleación con memoria de forma fue descubierta por William Beuhler en 1963. Su contenido en níquel es de alrededor del 55%.

Por encima de su temperatura de transformación, es un material superelástico, capaz de soportar enormes deformaciones, y muy duro, aguantando grandes cargas y retornando a su forma original una vez que cesa la causa que originó la deformación. Por debajo de la temperatura de transformación, se deforma plásticamente y presenta el fenómeno conocido como *memoria de forma*: al irse calentando y superar su temperatura de transformación recupera su forma original, sea cual sea la magnitud de la deformación que haya sufrido.

Esta propiedad se debe a una transición de fase entre una estructura tipo austenita y otra de tipo martensita. Al someterles a una deformación plástica, los átomos en esta fase no están en equilibrio energético. Mediante la aplicación de calor, tensión o presión, los átomos vuelven a recuperar su posición de mínima energía mediante el proceso de difusión. Este tipo de transiciones suelen ser lentas, pero el nitinol la sufre bastante rápido.

Debido a las propiedades de esta aleación, tiene muchas aplicaciones en diversos campos como son la medicina, la aeronáutica o la robótica. Algunos ejemplos en medicina son las sondas, sistemas de reparación ósea, brackets de ortodoncia, monturas de gafas elásticas... En robótica se utiliza para crear robots muy ligeros o en aeronáutica, para reducir el ruido.

Cuando hacemos circular a través de un conductor fabricado con nitinol una corriente, la resistencia que este opone al paso de los electrones provoca un calentamiento de dicho conductor por el efecto Joule. Si ajustamos esta variación de temperatura para que coincida con la etapa de transición de la aleación, tenemos un conductor que se contrae o se estira en función de la intensidad de corriente que lo atraviesa. Basándose en este principio se ha desarrollado un alambre de nitinol, el flexinol, pensado para funcionar como actuador.

2 Define: a) inteligencia, b) material inteligente.

a) El término inteligencia proviene del latín *intelligentia*, que a su vez deriva de *inteligere*. Esta es una palabra compuesta por otros dos términos: *intus* («entre») y *legere* («escoger»). El origen etimológico del concepto de inteligencia hace referencia a quien sabe elegir: la inteligencia posibilita la selección de las alternativas más convenientes para la resolución de un problema. Un individuo es inteligente cuando es capaz de escoger la mejor opción entre las posibilidades que se presentan a su alcance para resolver un problema.

b) Los materiales inteligentes se caracterizan por su capacidad para responder ante estímulos externos. Son materiales que pueden ser diseñados para actuar con cierto efecto conocido pero de forma controlada.

Algunos de los aspectos que hacen a un material inteligente son:

- Compatibilidad con el medio ambiente.
- Generan bajo consumo de energía.
- Mejoran la calidad.
- Prolongan la vida útil del producto.

Algunos ejemplos son:

1. **Metales piezoeléctricos:** Cambian su forma o se deforman ante un impulso eléctrico, y viceversa, ante la presión de deformación, producen un impulso eléctrico.
2. **Polímeros piezoeléctricos:** Análogamente a los metales piezoeléctricos, son materiales que cambian su forma o se deforman ante un impulso eléctrico, y al contrario, ante la presión de deformación, producen un impulso eléctrico.

3. **Metales con efecto memoria:** Tienen la capacidad de cambiar su forma o deformarse de forma controlada al alcanzar cierta temperatura.
4. **Polímeros con efecto memoria:** Son polímeros que tienen la capacidad de cambiar su forma o deformarse de forma controlada al alcanzar cierta temperatura.
5. **Materiales inteligentes (Smart materials):** Nueva generación de materiales derivada de la nanotecnología. Es una de las principales líneas de investigación de la nanociencia con aplicaciones a muchas industrias. Los materiales inteligentes tienen la capacidad de cambiar su color, forma o propiedades electrónicas en respuesta a cambios o alteraciones del medio (luz, sonido, temperatura...).

3 Busca información sobre los fluidos electrorreológicos y sus aplicaciones.

Un fluido electrorreológico es una suspensión de partículas conductoras dispersadas en un fluido aislante. El tamaño de partícula puede variar desde unos pocos nanómetros a varios micrómetros, con una fracción de volumen generalmente de alrededor del 20% al 30%. Este líquido fue descubierto por W.M. Winslow en 1947.

Dependiendo del campo eléctrico aplicado, las propiedades reológicas del fluido cambian significativamente, esto proporciona una «solidificación» incluso del fluido (en milisegundos puede pasar de fluir como el agua a derramarse despacio como la miel o a solidificarse como la gelatina).

Los fluidos electrorreológicos también se consideran materiales inteligentes y consumen poca energía. Se han propuesto aplicaciones en el campo de los automóviles, robótica, etc.

4 Una de las líneas de investigación más importantes sobre materiales inteligentes se refiere a los «metamateriales». Responde a las siguientes preguntas, investigando en Internet: a) ¿cómo funciona un metamaterial?, b) aplicaciones actuales de los metamateriales.

a) Los metamateriales son materiales artificiales electromagnéticos con propiedades que no se pueden encontrar en la naturaleza. En general, se trata de compuestos ordenados cuyas propiedades físicas son distintas a las de sus constituyentes. Por ejemplo, el índice de refracción de un metamaterial puede ser negativo mientras que el índice de refracción de las partes constituyentes es siempre positivo. Su desarrollo está desempeñando un papel fundamental en muchas aplicaciones como en la fabricación de capas de invisibilidad hasta mejoras en la microscopía para desarrollo de componentes electrónicos en el futuro.

Lo que hace tan especial a los metamateriales es la posibilidad de curvar las ondas electromagnéticas. Por este motivo, constituyen la vía que mejor resultado está dando en el camino hacia dispositivos capaces de hacer «invisible» a un objeto. Esta propiedad que pueden tener los metamateriales a través de su estructura tridimensional, es que la luz presenta un índice negativo de refracción al entrar en el material, es decir, curva la luz en dirección contraria respecto a lo que normalmente sucede, con independencia del ángulo de incidencia.

Para que las propiedades funcionen en frecuencias del orden de las ondas electromagnéticas, los componentes estructurales de un metamaterial deberían ser más pequeños que la longitud de onda de la radiación electromagnética con la que interactúa. Para la luz visible, que tiene longitudes de onda inferiores a un micrómetro, las estructuras deberían ser del orden de 280 nanómetros. En frecuencias de microondas, las estructuras solo deben ser del orden de un decímetro.

b) Los metamateriales son de particular importancia en el electromagnetismo (óptica y fónica). Presentan un considerable potencial para una gran variedad de aplicaciones ópticas y de microondas tales como nuevos sistemas moduladores, bandas de filtros de transición, lentes, acopladores de microondas y antenas aleatorias.

Así, por ejemplo, nos ofrecen la posibilidad de un enfoque correcto de la luz reflejada por un objeto en la parte posterior del ojo. El metamaterial debe estar en la capacidad de enfocar la luz proveniente desde muchos ángulos sin importar la polarización que esta tenga.

Las lentes corrientes necesitan un índice de refracción positivo por lo cual son curvas, como en el caso de los telescopios o de los microscopios. Los metamateriales brindan la posibilidad de que estas lentes sean planas y puedan mejorar sus alcances para el caso de los microscopios.

- 5 En el año 2000, los químicos Alan Heeger, Hideki Shirakawa y Alan MacDiarmid recibieron el Premio Nobel de Química por el descubrimiento y desarrollo de polímeros sintéticos conductores de la electricidad. Busca información sobre las aplicaciones de este tipo de polímeros sintéticos.**

Un polímero es una molécula natural o sintética, que consiste esencialmente en unidades estructurales idénticas repetidas. Una de las propiedades más importantes de los polímeros orgánicos clásicos ha sido la capacidad de actuar como excelentes aislantes eléctricos. Sin embargo, existía un gran interés en la posibilidad de producir polímeros que actuaran como conductores eléctricos. A estos nuevos materiales se les ha denominado polímeros conductores y suponen una revolución de la industria eléctrica y electrónica al combinar excelentes propiedades mecánicas (flexibilidad, ligereza y resistencia al impacto) y químicas (resistencia a la corrosión), además de su fácil preparación y bajo coste de fabricación.

A principios de la década de los años 70, un estudiante (Hyung Chick Pyun) de Hideki Shirakawa (en ese momento investigador asociado en el Instituto Tecnológico de Tokio) se encontraba realizando la síntesis de poliacetileno a partir del gas acetileno. En lugar de obtener el esperado polvo oscuro y opaco, obtuvo una película, con apariencia de aluminio y al mismo tiempo flexible, similar al plástico usado en embalaje. Dicho producto presentaba, además, una conductividad inusualmente elevada. Al investigar el origen de estos cambios, resultó que todo había sido originado por un error. Durante el proceso de polimerización, el estudiante agregó por lo menos mil veces más catalizador que el requerido. Aunque la función del catalizador es favorecer la velocidad de la reacción de polimerización, una cantidad excesiva de este reactivo provocó importantes cambios en la estructura del polímero. A partir de ese momento, el estudio de los polímeros conductores se convirtió en objeto de estudio de Shirakawa, así como de otros grupos de investigadores entre los que destacaban Alan G. MacDiarmid y Alan J. Heeger. En el verano de 1977, estos tres científicos dieron a conocer sus descubrimientos en relación con las propiedades conductoras de algunos materiales poliméricos en los que habían centrado sus estudios. Su contribución fue considerada como un gran avance, hasta el punto de que se les concedió el Premio Nobel de Química en el año 2000.

Los polímeros conductores, conducen la electricidad debido principalmente a la presencia de ciertas cantidades de otros productos químicos (dopado), pero también a la presencia de dobles enlaces conjugados que permiten el paso de un flujo de electrones.

Son materiales formados por largas cadenas hidrocarbonadas con dobles enlaces alternos o conjugados. Cuando extraemos un electrón de uno de estos dobles enlaces se genera un radical catión, y al seguir oxidando se puede arrancar un segundo electrón para formar un dicatión (que es muy estable). Esta carga positiva puede desplazarse por la cadena pasando de un doble enlace a otro conduciendo de este modo la electricidad. La extracción de electrones, u oxidación, puede ser continuada formándose más de un catión por cadena. Las familias más comunes de polímeros conductores son derivados de: poliacetileno, polianilina, polipirrol y politiofeno.

La combinación de polímeros y nanopartículas abre el camino a materiales que tienen propiedades eléctricas, ópticas y mecánicas ventajosas. Así se ha observado un incremento importante en el desarrollo de películas delgadas conductoras con transparencia óptica (PTC) debido a sus diversas aplicaciones tecnológicas como las pantallas de cristal líquido, las celdas fotovoltaicas, los escudos de interferencia electromagnética, etc.

Actividades experimentales

Página 122

Estudio de propiedades en distintos compuestos químicos

- 1 Anota tus observaciones derivadas de cada experiencia y las conclusiones que sacas de ellas respecto a la propiedad que estabas estudiando.**

1. Punto de fusión:

En el caso de los compuestos iónicos, los puntos de fusión son elevados debido a que las fuerzas electrostáticas que mantienen unidos a los iones son muy fuertes. La temperatura de fusión del NaCl es de 801 °C.

En el caso de las sustancias con enlace covalente, las sustancias moleculares presentan bajos puntos de fusión debido a que las fuerzas de unión entre moléculas son muy débiles. En cambio las sustancias atómicas presentan puntos de fusión altos. Las temperaturas de fusión son:

Glucosa: 146 °C, Yodo: 113,7 °C, SiO₂ : 1 600 °C

En el caso de los metales, los puntos de fusión son muy variables, aunque la mayoría presentan puntos de fusión altos. En el caso del Cu, el punto de fusión es 1 085 °C.

2. Solubilidad en disolventes polares:

Los compuestos iónicos (NaCl) son solubles en disolventes polares. Un disolvente polar hace más débiles las uniones entre los iones de la red, provocando un desmoronamiento.

En el caso de los compuestos covalentes, los compuestos atómicos son insolubles en cualquier disolvente mientras que en las sustancias moleculares, la sustancia se disolverá si las fuerzas entre sus moléculas y las del disolvente son más intensas que las fuerzas de sus moléculas entre sí. La glucosa es soluble en agua mientras que el yodo y la arena (SiO₂) son insolubles en agua.

El cobre es insoluble en agua.

3. Solubilidad en disolventes apolares:

El NaCl no es soluble en disolventes apolares como el CCl₄.

El yodo es soluble en CCl₄, en cambio la glucosa y la arena son insolubles.

El cobre es insoluble en tetracloruro de carbono.

4. Conductividad en estado sólido:

El NaCl no conduce la corriente eléctrica en estado sólido, ya que es necesario que haya cargas eléctricas libres (electrones e iones) y al ocupar posiciones fijas en la red, los iones no se pueden mover.

En el caso de la glucosa, el yodo y la arena, no conducen la corriente eléctrica. Los electrones compartidos están muy unidos y no pueden desplazarse.

El cobre es conductor en estado sólido. Los metales conducen la electricidad debido a que los electrones se desplazan fácilmente cuando se aplica una diferencia de potencial.

5. Conductividad en disolución:

El NaCl conduce la electricidad cuando se encuentra disuelto en agua porque los iones tienen libertad de movimiento.

En el caso de las sustancias atómicas, siguen siendo malos conductores de la corriente eléctrica al no tener electrones libres.

2 Indica qué enlaces presentan cada una de las sustancias ensayadas.

Glucosa: Enlace covalente

Tetracloruro de carbono: Enlace covalente

Yodo: Enlace covalente

Agua: Enlace covalente

Cloruro de sodio: Enlace iónico

Cobre: Enlace metálico

Arena (SiO_2): Enlace covalente**Página 123****Desnaturalización de proteínas****1 ¿Cómo se manifiesta la desnaturalización de la clara de huevo y la de la leche?**

Las cadenas de proteínas que hay en la clara de huevo (ovoalbúmina) se denominan proteínas globulares y se encuentran enrolladas adoptando la forma de una esfera. Al añadir etanol ocurre lo mismo que cuando se fríe o se cuece un huevo, las cadenas de proteínas se desenrollan y se forman enlaces que unen unas cadenas con otras.

En los huevos frescos, la clara es transparente y líquida, pero al cocinarse se torna opaca y blanca, formando una masa sólida.

En el caso de la leche, el ácido presente en el vinagre (ácido acético) o en el limón (ácido cítrico) es capaz de producir la desnaturalización de la proteína denominada caseína que hay en la leche.

2 ¿Cuál de los agentes utilizados tiene mayor poder de desnaturalización?

El ácido cítrico tiene un pH aproximadamente de 2,4 y el ácido acético (vinagre) tiene un pH en torno a 2,9. Mientras más ácido es el agente utilizado, la proteína se desnaturaliza con mayor velocidad y efectividad.

Si hubiéramos utilizado etanol en el caso de la leche, debido a que el pH del etanol es aproximadamente 6,5, la desnaturalización habría sido más lenta (el precipitado no hubiera sido tan evidente).

3 Tras realizar estas experiencias, ¿cómo podrías saber si una sustancia desconocida es una proteína?

Si en una disolución de proteínas se producen cambios de pH, alteraciones en la concentración, agitación molecular o variaciones bruscas de temperatura, la solubilidad de las proteínas puede reducirse hasta el punto de producirse su precipitación. Esto se debe a que los enlaces que mantienen la conformación globular se rompen y la proteína adopta la conformación filamentosa. Así, la capa de moléculas de agua no recubre totalmente a las moléculas proteicas, las cuales tienden a unirse entre sí dando lugar a grandes partículas que precipitan. Las proteínas que se hallan en ese estado no son funcionales. Esta variación de la conformación de las proteínas se denomina **desnaturalización**.

Para saber si una sustancia desconocida es una proteína se utiliza también el «reactivo de Biuret», este detecta la presencia de proteínas, péptidos cortos y otros compuestos con dos o más enlaces peptídicos en sustancias de composición desconocida.

Páginas 124 y 125

Enlace iónico

- 1** Dadas las energías reticulares de las siguientes sustancias: U (kJ/mol): $\text{NaF} = -914$, $\text{NaCl} = -770$, $\text{NaBr} = -728$. Razona como varían: a) sus puntos de fusión, b) su dureza, c) su solubilidad en agua.

En primer lugar, debemos tener en cuenta que cuanto mayor sea la energía reticular más energía se precisa para separar los iones.

a) La energía reticular y el punto de fusión son magnitudes directamente proporcionales, cuanto mayor sea la energía reticular mayor será el punto de fusión. Así:

$$\text{P.F. (NaBr)} < \text{P.F. (NaCl)} < \text{P.F. (NaF)}$$

b) La dureza es la resistencia que presenta el cristal a ser rayado y está relacionada de manera directamente proporcional con la energía reticular, por tanto, tendremos:

$$\text{Dureza (NaBr)} < \text{Dureza (NaCl)} < \text{Dureza (NaF)}$$

c) La solubilidad aumenta de forma opuesta a como lo hace la energía reticular (para que se disuelva en agua debemos romper la red cristalina). Así:

$$\text{Solubilidad (NaF)} < \text{Solubilidad (NaCl)} < \text{Solubilidad (NaBr)}$$

- 2** En estado sólido los compuestos KF y CaO presentan el mismo tipo de estructura cristalina y distancias interiónicas similares. Sin embargo, los valores de las energías de red son $\Delta H_{\text{red}}(\text{CaO}) = -3461$ kJ/mol, $\Delta H_{\text{red}}(\text{KF}) = -826$ kJ/mol. Indica de manera razonada, el factor o factores que justifican la diferencia existente entre los dos valores de la energía de red.

La energía reticular del sólido iónico depende de la intensidad de las fuerzas electrostáticas de los iones de signo contrario y la distribución de estos iones en el espacio (estructura cristalina).

En el caso estudiado, las estructuras cristalinas del KF y CaO son similares, por tanto, la diferencia en las energías reticulares se debe a la intensidad de las fuerzas electrostáticas entre aniones y cationes.

Al ser las distancias interiónicas similares, la intensidad de las fuerzas de atracción entre los iones dependerá en mayor medida de la carga de los iones. Como los iones O^{2-} y Ca^{2+} tienen carga doble que los iones F^- y K^+ , la interacción entre ellas será mayor.

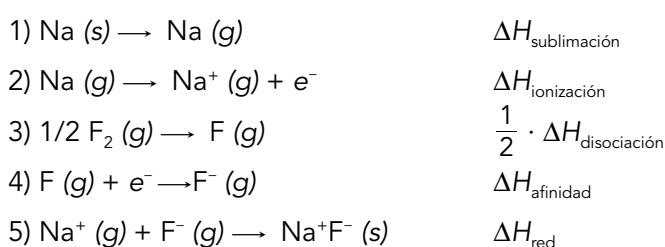
Teniendo en cuenta la ley de Coulomb:

$$F = \frac{K \cdot Q \cdot q}{r^2}$$

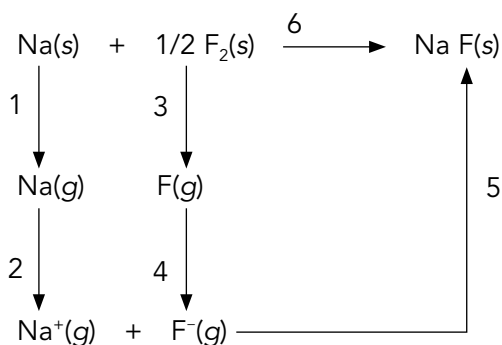
La energía reticular será aproximadamente cuatro veces mayor que la del KF .

- 3** Supongamos que los sólidos cristalinos NaF , KF y LiF cristalizan en el mismo tipo de red: a) Escribe el ciclo de Born-Haber para el NaF , b) razona cómo varía la energía reticular de las sales mencionadas, c) razona cómo varían las temperaturas de fusión de las citadas sales.

a) El ciclo de Born-Haber para el NaF consta de cinco etapas:



$$6) \Delta H_{\text{formación}} = \Delta H_{\text{sublimación}} + \Delta H_{\text{ionización}} + \frac{1}{2} \cdot \Delta H_{\text{disociación}} + \Delta H_{\text{afinidad}} + \Delta H_{\text{red}}$$



b) Una medida de la estabilidad de un sólido iónico es su energía reticular.

La energía reticular se define como la energía requerida para separar un mol de un compuesto iónico sólido en sus iones en estado gaseoso. También se puede definir como la energía desprendida al formarse un cristal iónico a partir de sus iones constituyentes en estado gaseoso.

Los valores de las energías reticulares dependen de las cargas y del tamaño de los iones implicados; así cuanto mayor sea la carga eléctrica del ion y menor su tamaño, mayor será la energía reticular de los compuestos iónicos que forma.

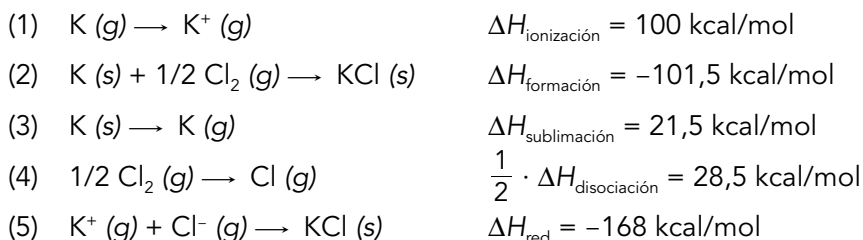
Como el NaF, KF y LiF cristalizan en el mismo tipo de red, este factor no es decisivo. Nos fijaremos en la carga y tamaño de los iones.

El anión es el mismo (ion fluoruro; F⁻) y la carga de los cationes es la misma (+1), por tanto, nos fijaremos en el tamaño de los iones. El tamaño de los iones en orden decreciente es: K⁺ > Na⁺ > Li⁺. Teniendo en cuenta este factor, la energía reticular aumentará en el orden: KF < NaF < LiF

c) La energía reticular de un sólido iónico es una medida de la fuerza de atracción entre los iones de dicho sólido. Cuanto mayor sea la energía reticular, los enlaces iónicos serán más fuertes y, en general, el sólido será más duro y fundirá a mayor temperatura. Por tanto, las temperaturas de fusión aumentarán también en el orden: KF < NaF < LiF

4 a) Escribe los procesos a los que corresponden los siguientes datos: potencial de ionización de potasio = 100 kcal/mol, entalpía de formación del cloruro de potasio = -101,5 kcal/mol, energía de sublimación del potasio = 21,5 kcal/mol, energía de disociación del cloro = 57 kcal/mol, energía de red del cloruro de potasio = -168 kcal/mol, b) a partir de ellos, determina el valor de la afinidad electrónica del cloro, escribiendo para ello el correspondiente ciclo de Born-Haber.

a) Los procesos a los que corresponden los siguientes datos son:



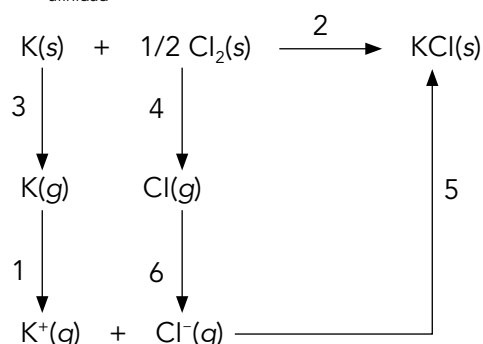
b) El estudio del proceso energético asociado a la reacción de formación de un compuesto iónico nos da una idea de la estabilidad del compuesto frente a sus elementos.

El ciclo de Born-Haber es un ciclo mediante el cual puede calcularse el valor de la energía reticular (energía que representa, teóricamente, la formación de un compuesto iónico a partir de sus iones gaseosos) de forma indirecta, pues no puede ser calculada experimentalmente.

$$\Delta H_{\text{formación}} = \Delta H_{\text{sublimación}} + \Delta H_{\text{ionización}} + \frac{1}{2} \cdot \Delta H_{\text{disociación}} + \Delta H_{\text{afinidad}} + \Delta H_{\text{red}}$$

$$-101,5 \text{ kcal/mol} = 21,5 \text{ kcal/mol} + 100 \text{ kcal/mol} + 28,5 \text{ kcal/mol} + \Delta H_{\text{afinidad}} - 168 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta H_{\text{afinidad}} = -83,5 \text{ kcal/mol}$$



- 5** Las energías de red del LiF y del KF son -1046 kJ/mol y -826 kJ/mol , respectivamente. Justifica la diferencia entre estos valores de las energías de red si ambos compuestos presentan el mismo tipo de estructura cristalina. Indica, de forma razonada, el componente que presentará el valor más elevado del punto de fusión normal.

La energía reticular depende de las fuerzas electrostáticas que unen los aniones y cationes que forman la estructura o red cristalina. Las fuerzas electrostáticas que mantienen unidos a los iones de signo contrario dependen de:

- La carga de los iones.
- La distancia a la que se encuentran los centros de los iones. Esta distancia se toma como la suma de los radios iónicos.

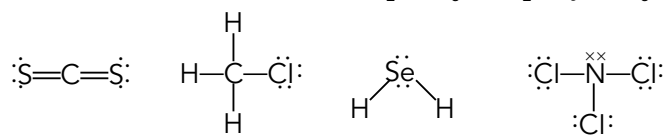
En el caso del LiF y el KF, como ambos tienen el mismo anión, F^- , debemos comparar el tamaño de los iones Li^+ y K^+ .

El ion Li^+ es muy pequeño, porque solo tiene una capa electrónica, mientras que el ion K^+ es mucho mayor. Por este motivo, la distancia entre los iones que forman el LiF será menor que en el KF, y las fuerzas electrostáticas de atracción serán más intensas. En consecuencia, la energía reticular será mayor y el punto de fusión más alto corresponderá al LiF.

Geometría molecular. Polaridad

- 6** Considera las moléculas CS_2 , CH_3Cl , H_2Se y NCl_3 , y responde razonadamente a las siguientes cuestiones: a) representa la estructura de Lewis de cada una de estas moléculas, b) predice su geometría molecular, c) explica en cada caso, si la molécula tiene o no, momento dipolar. Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, N = 7, S = 16, Cl = 17, Se = 34.

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas de CS_2 , CH_3Cl , H_2Se y NCl_3 son:



b) Para determinar la geometría molecular vamos a utilizar la teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia.

CS_2 : El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central de carbono está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica. Presenta una geometría **lineal** con un ángulo de enlace de 180° .

CH₃Cl: El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría **tetraédrica** con ángulos de enlace de 109,5°.

H₂Se: En este caso, tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierren y su ángulo de enlace sea menor que 109,5°. Presenta una geometría **angular**.

NCl₃: Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. La molécula presenta una geometría de **pirámide trigonal**.

c) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

CS₂: La molécula presenta dos enlaces polarizados, C \rightarrow S. Debido a que la geometría es lineal, por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

CH₃Cl: En este caso hay tres enlaces polarizados H \rightarrow C y otro C \rightarrow Cl. Debido a que la geometría es tetraédrica y no hay simetría en los enlaces, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

H₂Se: La molécula presenta dos enlaces polarizados H \rightarrow Se. Presenta una geometría angular, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

NCl₃: En la molécula de NCl₃ hay tres enlaces polarizados N \rightarrow Cl que no se anulan entre sí debido a la geometría molecular que presenta el NCl₃. La molécula de NCl₃ es **polar**.

7 Considerando las moléculas H₂CO (metanal) y Br₂O (óxido de dibromo): a) representa su estructura de Lewis, b) justifica su geometría molecular, c) razona si cada una de estas moléculas tiene o no momento dipolar. Datos: Números atómicos: C = 6, O = 8, H = 1 y Br = 35.

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas de H₂CO y Br₂O son:



b) **H₂CO (metanal):** El átomo central de carbono está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120°.

Br₂O (óxido de dibromo): En este caso, tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierren y el ángulo de enlace sea menor que 109,5°. Presenta una geometría **angular**.

c) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

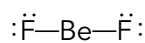
H₂CO: Los tres enlaces de la molécula de H₂CO están polarizados a causa de la diferencia de electronegatividad de los átomos. Los momentos dipolares individuales no se anulan entre sí, la molécula es **polar**.

Br₂O: Presenta dos enlaces polarizados Br \rightarrow O y una geometría molecular angular; los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

- 8 Justifica la geometría de las siguientes moléculas covalentes a partir del modelo de repulsión entre los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV): a) BeF_2 , b) BCl_3 , c) CCl_4 . Datos: Números atómicos: Be = 4, F = 9, B = 5, Cl = 17 y C = 6.

Para explicar la geometría molecular utilizamos la teoría RPECV. Se trata de un modelo puramente electrostático, que considera los electrones como si fuesen cargas puntuales. Según este modelo, todos los electrones alrededor del átomo central, tanto los pares enlazantes como los pares solitarios, se disponen alrededor de él de manera que experimenten la mínima repulsión.

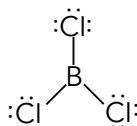
a) La estructura de Lewis del BeF_2 es:



El berilio queda hipovalente (incumple la regla del octeto por defecto).

En este caso, el átomo central está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica y carece de pares de electrones solitarios. Presenta una geometría molecular **lineal** con un ángulo de enlace de 180° .

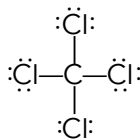
b) La estructura de Lewis del BCl_3 es:



El boro al igual que el berilio también queda hipovalente.

El átomo central está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

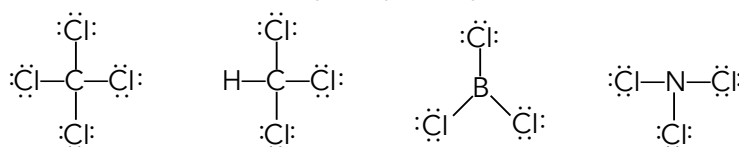
c) La estructura de Lewis del CCl_4 es:



El átomo central está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. Presenta una geometría **tetraédrica** (son moléculas tridimensionales) con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

- 9 Dadas las siguientes parejas de sustancias químicas: CCl_4 y CHCl_3 , BCl_3 y NCl_3 : a) explica razonadamente la geometría de estas moléculas de acuerdo con la teoría de repulsión de pares electrónicos, b) estudia la polaridad de las moléculas en cada pareja.

a) Las estructuras de Lewis de CCl_4 , CHCl_3 , BCl_3 y NCl_3 son:



En este caso, en el BCl_3 , el boro incumple la regla del octeto por defecto, es hipovalente.

CCl_4 : El átomo central está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. El CCl_4 presenta una geometría **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

CHCl_3 : El átomo central está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro.

El CHCl_3 presenta una geometría **tetraédrica**, aunque la geometría no es regular, ya que uno de los enlaces, C—H , es distinto de los otros tres, C—Cl .

BCl_3 : El átomo central está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. El BCl_3 presenta una geometría **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

NCl_3 : En este caso, tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El tipo de geometría es de **pirámide trigonal**. El ángulo de enlace de esta molécula es menor de $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo el ángulo de enlace se cierra un poco.

b) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

CCl_4 : La molécula presenta cuatro enlaces fuertemente polarizados, $\text{C}^+\text{—}\text{Cl}$. Debido a su geometría tetraédrica y por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan, la molécula es **apolar**.

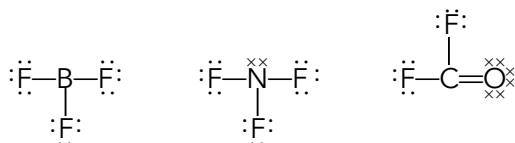
CHCl_3 : La asimetría que presenta en su geometría molecular hace que la resultante de sus momentos dipolares no se anule y la molécula sea **polar**.

BCl_3 : La molécula presenta tres enlaces polarizados, $\text{B}^+\text{—}\text{Cl}$. Debido a su geometría plana trigonal y por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan, la molécula es **apolar**.

NCl_3 : La molécula presenta tres enlaces polarizados, $\text{N}^+\text{—}\text{Cl}$. Debido a su geometría molecular, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

10 a) Escribe las estructuras de Lewis para el BF_3 , NF_3 y F_2CO , b) ¿cuál será la geometría de estas moléculas?, c) ¿qué enlace de los que forman el flúor en las moléculas anteriores es más polar?, d) ¿cuál o cuáles de estas moléculas son polares? Datos: Números atómicos: C = 6, N = 7, O = 8, F = 9.

a) Las estructuras de Lewis para el BF_3 , NF_3 y F_2CO son:



En el caso del BF_3 , el átomo de boro presenta hipovalencia (octeto incompleto por defecto).

b) **BF_3 :** El átomo central está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal** y los ángulos de enlace son de 120° .

NF_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. La molécula presenta una geometría de **pirámide trigonal** y el ángulo de enlace es menor de $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo, el ángulo de enlace se cierra un poco.

F_2CO : El átomo central, C, está rodeado de tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal**.

c) El enlace más polar se da en la molécula de BF_3 debido a que el boro es el elemento menos electronegativo entre los presentes.

d) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

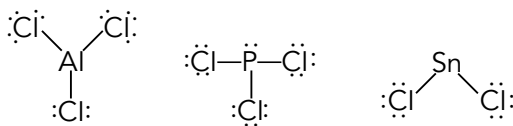
BF_3 : Existen tres enlaces polarizados, $\text{B} \rightarrow \text{F}$. Debido a su geometría molecular y por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan entre sí y la molécula es **apolar**.

NF_3 : Existen tres enlaces polarizados, $\text{N} \rightarrow \text{F}$. Debido a su geometría molecular (pirámide trigonal), los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

F_2CO : En este caso aunque la geometría es plana trigonal, al tener diferentes enlaces, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es **polar**.

11 a) Escribe las estructuras de Lewis de las siguientes especies químicas y predice su geometría molecular: AlCl_3 , PCl_3 y SnCl_2 , b) indica, razonadamente la respuesta, si alguna de las moléculas anteriores es polar. Datos: Números atómicos: $\text{H} = 1$, $\text{Al} = 13$, $\text{P} = 15$, $\text{Cl} = 17$, $\text{Sn} = 50$.

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas AlCl_3 , PCl_3 y SnCl_2 son:



AlCl_3 : El átomo central está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal** con ángulos de enlace de 120° .

PCl_3 : Tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. La molécula presenta una geometría de **pirámide trigonal**. El ángulo de enlace es menor que $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y por este motivo el ángulo de enlace se cierra un poco.

SnCl_2 : En este caso, tenemos tres nubes electrónicas, una de las cuales es un par de electrones solitarios. La molécula presenta una geometría **angular**.

b) AlCl_3 : La molécula tiene tres enlaces polarizados, $\text{Al} \rightarrow \text{Cl}$. Debido a su geometría plana trigonal y por razones de simetría, los momentos dipolares se anulan y la molécula es apolar.

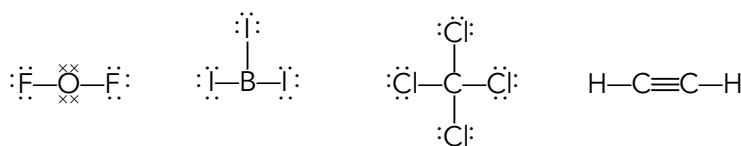
PCl_3 : La molécula tiene tres enlaces polarizados, $\text{P} \rightarrow \text{Cl}$. Debido a su geometría molecular, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es polar.

SnCl_2 : La molécula de SnCl_2 presenta una geometría angular, los momentos dipolares no se anulan entre sí y la molécula es polar.

Por tanto, las moléculas polares son PCl_3 y SnCl_2 .

12 Considera las moléculas OF_2 , BI_3 , CCl_4 , C_2H_2 , a) escribe las representaciones de Lewis, b) indica sus geometrías moleculares utilizando la teoría RPECV, c) justifica cuáles son moléculas polares, d) ¿qué moléculas presentan enlaces múltiples?

a) Las estructuras de Lewis de las moléculas de OF_2 , BI_3 , CCl_4 y C_2H_2 son:



b) OF_2 : Tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierran y su ángulo de enlace sea menor que $109,5^\circ$. El tipo de geometría es **angular**.

BI_3 : El átomo central de boro está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. La geometría molecular es **plana trigonal** con ángulo de enlace de 120° .

CCl_4 : El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. La molécula presenta una geometría **tetraédrica** con ángulos de enlace de $109,5^\circ$.

C_2H_2 : La molécula de C_2H_2 presenta una geometría **lineal**. La repulsión de los pares enlazantes explica el ángulo de enlace de 180° y la simetría de la molécula.

c) La única molécula polar es OF_2 . Por su geometría tiene un momento dipolar resultante distinto de cero.

d) La única molécula con enlaces múltiples es C_2H_2 que presenta un triple enlace.

Fuerzas intermoleculares

13 a) ¿En cuáles de las siguientes sustancias existirán puentes de hidrógeno: NH_3 , CH_4 , CCl_4 ?
b) ¿por qué los metales alcalinos son incapaces de formar enlaces covalentes?, c) ¿por qué las sustancias moleculares no conducen la corriente eléctrica?

a) El enlace por puente de hidrógeno es un tipo especial de interacción intermolecular que existe entre el átomo de hidrógeno de un enlace polar ($\text{H}-\text{F}$, $\text{H}-\text{O}$, $\text{H}-\text{N}$) y un par de electrones no compartidos en un ion o átomo cercano de volumen pequeño y electronegatividad elevada (generalmente un átomo de flúor, oxígeno o nitrógeno de otra molécula).

La aparición de una carga parcial positiva sobre el átomo de hidrógeno y una carga parcial negativa sobre el otro átomo origina el establecimiento de una atracción electrostática entre los hidrógenos de una molécula y los átomos electronegativos de la molécula vecina.

Por tanto, existirán enlaces por puentes de hidrógeno solamente en el NH_3 , pero no en el CH_4 y CCl_4 .

b) Los metales alcalinos son incapaces de formar enlaces covalentes porque para alcanzar la configuración de gas noble, ceden electrones de valencia y no los comparten.

c) Las sustancias moleculares no tienen electrones libres que puedan moverse ante la acción de un campo eléctrico externo. Por ello, no pueden conducir la corriente eléctrica.

14 Indica, razonadamente, cuál o cuáles de las siguientes especies químicas pueden formar enlaces de hidrógeno con el agua: a) cloruro de sodio, b) fluoruro de hidrógeno, c) metano.

El enlace por puente de hidrógeno es un tipo especial de interacción intermolecular que existe entre el átomo de hidrógeno de un enlace polar ($\text{H}-\text{F}$, $\text{H}-\text{O}$, $\text{H}-\text{N}$) y un par de electrones no compartidos en un ion o átomo cercano de volumen pequeño y electronegatividad elevada (generalmente un átomo de flúor, oxígeno o nitrógeno de otra molécula).

- a) El NaCl no forma enlace de hidrógeno con el agua ya que no contiene ninguno de los cuatro átomos citados anteriormente (H, F, O, N).
- b) El HF forma enlace de hidrógeno con el agua, bien entre el F y uno de los H del agua, bien entre el H (del HF) y el O del agua.
- c) El CH₄ no formará enlace de hidrógeno con el H₂O ya que los H están unidos al C y los enlaces C—H no tienen la suficiente polaridad para dar lugar a un enlace de hidrógeno con el oxígeno del agua.

15 a) Razona claramente cuál de las siguientes sustancias presenta fuerzas intermoleculares mayores: NH₃, PH₃, AsH₃, H₂O, H₂.

b) Explica cuáles son las consecuencias de ello.

c) ¿Se pueden licuar y solidificar todas las especies citadas anteriormente? Razona por qué.

Datos: Números atómicos: H = 1, O = 8, N = 7, P = 15, As = 33.

- a) Todas las sustancias dadas NH₃, PH₃, AsH₃, H₂O y H₂ son sustancias moleculares. Teniendo en cuenta las geometrías moleculares podemos determinar que el NH₃, PH₃, AsH₃ y H₂O son moléculas polares mientras que la molécula de H₂ es apolar.

NH₃: Esta sustancia presenta enlace por **punto de hidrógeno**, debido a la presencia de un átomo pequeño y muy electronegativo como es el nitrógeno (enlazado al hidrógeno).

PH₃: Presenta fuerzas intermoleculares **dipolo-dipolo** debido a la atracción de la zona de densidad positiva de una molécula y la zona de densidad negativa de la otra. Esta molécula presenta cargas parciales permanentes, además de las cargas parciales instantáneas, debido a las fluctuaciones de sus nubes electrónicas. La interacción dipolo-dipolo se suma a las **fuerzas de dispersión o de London** que siempre están presentes.

AsH₃: Al igual que el PH₃ presenta fuerzas intermoleculares **dipolo-dipolo** junto con **fuerzas de dispersión o de London**. En este caso debido a que las moléculas de AsH₃ son más grandes, estas fuerzas de dispersión son mayores que en el caso del PH₃.

H₂O: Esta molécula presenta enlace por **punto de hidrógeno** como el NH₃, pero como la electronegatividad del O es mayor que la del N, las fuerzas intermoleculares en el H₂O son mayores que en el NH₃.

H₂: Al ser una molécula apolar, solo presenta **fuerzas de dispersión o de London** que son muy débiles.

El orden será:

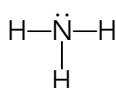


- b) Cuanto más intensas sean las fuerzas intermoleculares, mayores serán los valores de las temperaturas de fusión y de ebullición.
- c) Con las adecuadas condiciones de presión y temperatura, todas estas sustancias se pueden licuar y solidificar.

16 a) Deduce si la molécula de amoníaco presenta momento dipolar.

b) Ordena las sustancias NH₃, CH₄ y H₂O según su temperatura de ebullición basándote en el tipo e intensidad de sus fuerzas intermoleculares. Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, N = 7, O = 8.

a) La estructura de Lewis del NH₃ es:



En la molécula de NH_3 tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El tipo de geometría que corresponde al amoníaco es una pirámide trigonal. El ángulo de enlace de esta molécula es de aproximadamente $107,3^\circ$.

Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. El momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

Los tres momentos dipolares, $\text{H} \rightarrow \text{N}$, no se anulan entre sí debido a la geometría molecular y por tanto la molécula es polar.

- b) La temperatura de ebullición depende de la intensidad de las fuerzas de cohesión entre las entidades elementales que componen las sustancias.

El NH_3 es una molécula polar, entre sus moléculas se producen enlaces por puentes de hidrógeno (ya que el átomo de N es pequeño y contiene un par de electrones no enlazantes).

El CH_4 es una molécula apolar, las fuerzas intermoleculares son fuerzas de dispersión o de London, que son muy débiles.

El H_2O es una molécula polar, entre sus moléculas se producen enlaces por puentes de hidrógeno. Al ser el átomo de oxígeno más electronegativo que el átomo de nitrógeno, las uniones entre las moléculas de agua serán más intensas que entre las moléculas de amoníaco.

El orden creciente según el punto de ebullición de las tres sustancias será:



17 a) Justifica la geometría de las moléculas de CS_2 y H_2S mediante el modelo de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia.

- b) ¿Cuál de las dos moléculas anteriores es soluble en agua? (razona la respuesta).**

- c) ¿Qué fuerzas de atracción hay que romper para evaporar el H_2S (l)?**

- a) Teniendo en cuenta el número de electrones de la capa de valencia para el C, S y H, las estructuras de Lewis para el CS_2 y H_2S son:



En el CS_2 , el átomo de carbono está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica, no hay pares de electrones solitarios (la geometría electrónica coincide con la geometría molecular). La molécula de CS_2 presenta una geometría **lineal** con un ángulo de enlace de 180° .

En el caso del H_2S , el átomo de azufre presenta pares de electrones solitarios. La presencia de pares no enlazantes en la molécula varía el ángulo de enlace por efecto de la repulsión electrónica y, por tanto, modifica la geometría molecular producida por el modelo. En este caso, tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales son dos pares de electrones solitarios. El tipo de geometría que corresponde a estas moléculas es **angular**.

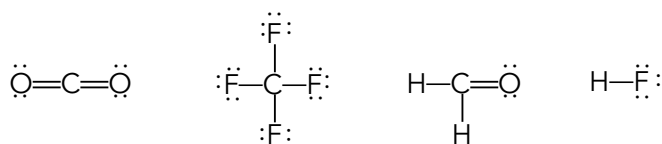
- b) Teniendo en cuenta que el agua es una sustancia polar, será soluble en ella aquella sustancia formada por moléculas polares. El CS_2 es una molécula **apolar** (los momentos dipolares se anulan por razones de simetría) mientras que el H_2S es una molécula **polar** (los momentos dipolares no se anulan debido a su geometría). Por tanto, solo será soluble en agua el sulfuro de hidrógeno, H_2S .
- c) Al ser el H_2S una molécula polar, las fuerzas intermoleculares son del tipo **dipolo-dipolo**. Para evaporar el H_2S (l) es necesario romper este tipo de fuerzas de atracción.

- 18** Se sabe que los puntos de ebullición normales de HF y HBr son, respectivamente, 19,5°C y -67 °C. Explica por qué siendo la masa molecular de HBr mayor que la del HF, su temperatura de ebullición normal es menor.

Debido a que la masa molecular del HBr es mayor que la del HF, las fuerzas de Van der Waals entre las moléculas de HBr son mayores. Sin embargo, el HF es capaz de formar enlaces de hidrógeno entre sus moléculas, que son mucho más intensos que las fuerzas de Van der Waals. Así, el HF presenta un punto de ebullición superior al del HBr.

- 19** Dadas las siguientes sustancias: CO₂, CF₄, H₂CO y HF, a) escribe las estructuras de Lewis de sus moléculas, b) explica sus geometrías por la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia o por la teoría de hibridación, c) justifica cuáles de ellos tienen momento dipolar distinto de cero, d) justifica cuáles de estas sustancias presentan enlace de hidrógeno. Datos: Números atómicos: H = 1, C = 6, O = 8, F = 9, S = 16 y Cl = 17.

a) Las estructuras de Lewis del CO₂, CF₄, H₂CO y HF son:



b) **CO₂**: El átomo central carece de pares de electrones solitarios. El átomo central de carbono está rodeado por dos grupos de electrones o zonas de alta densidad electrónica. La molécula presenta una geometría **lineal** con un ángulo de enlace de 180°.

CF₄: El átomo central de carbono está rodeado por cuatro grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay cuatro zonas de alta densidad electrónica en torno al átomo central que se orientan hacia los vértices de un tetraedro. La molécula presenta una geometría **tetraédrica** y los ángulos de enlace son de 109,5°.

H₂CO: El átomo central de carbono está rodeado por tres grupos de electrones y carece de pares de electrones solitarios. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Presenta una geometría **plana trigonal**, con ángulos de enlace de 120°.

HF: Todas las moléculas diatómicas presentan geometría **lineal**.

c) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. Cuando en una molécula polar hay más de un enlace, el momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace.

CO₂: La molécula de CO₂ presenta dos enlaces polarizados C \rightarrow O; debido a su geometría molecular y por razones de simetría, sus momentos dipolares se anulan. Es una molécula **apolar**.

CF₄: La molécula de CF₄ presenta cuatro enlaces fuertemente polarizados, C \rightarrow F; debido a su geometría y simetría, sus momentos dipolares se anulan. Es una molécula **apolar**.

H₂CO: El enlace CO está fuertemente polarizado hacia el átomo de O. En este caso, aunque presente una geometría plana trigonal, la molécula será **polar**.

HF: En este caso, la molécula presenta un enlace muy polarizado H \rightarrow F, la molécula es **polar**.

d) El enlace por puente de hidrógeno es un tipo especial de interacción intermolecular que existe entre el átomo de hidrógeno de un enlace polar (H—F, H—O, H—N) y un par de electrones no compartidos en un ion o átomo cercano de volumen pequeño y electronegatividad elevada (generalmente un átomo de flúor, oxígeno o nitrógeno de otra molécula). En este caso, la única molécula que presenta enlace de hidrógeno es el HF.

Tipos de enlaces

20 Explica qué tipo de enlace químico debe romperse o qué fuerza de atracción debe vencerse para: a) fundir NaCl, b) hervir agua, c) fundir hierro, d) evaporar nitrógeno líquido.

- a) Como el NaCl es un compuesto iónico, el tipo de enlace que debemos romper es un enlace iónico.
- b) Las moléculas de agua se encuentran unidas entre sí mediante enlaces de hidrógeno y esta será la fuerza intermolecular que debe romperse para hervir agua.
- c) El tipo de enlace químico que hay que romper para fundir hierro es el enlace metálico.
- d) El nitrógeno está formado por moléculas de N_2 unidas entre sí por medio de fuerzas de dispersión o de London. Si además tenemos en cuenta que la molécula de N_2 es apolar dada su geometría, las fuerzas de atracción que debemos vencer para evaporar nitrógeno líquido son las fuerzas de dispersión.

21 Contesta, razonando la respuesta, a las siguientes cuestiones: a) ¿Qué tipo de enlace cabe esperar en cada una de las siguientes sustancias químicas: NaCl, Cl_2 , CH_4 y Fe?, b) ¿cuál será el estado de agregación de cada una de las especies anteriores?, c) ¿cuáles se disolverán en agua?

- a) NaCl: Enlace iónico CH_4 : Enlace covalente
 Cl_2 : Enlace covalente Fe: Enlace metálico

b) El estado de agregación de cada una de las especies depende de las fuerzas de cohesión:

NaCl: En este caso, los iones Na^+ y Cl^- están unidos entre sí por un enlace iónico. Como la fuerza de atracción electrostática entre ellos es intensa, el NaCl se presentará en estado sólido.

Cl_2 : La entidad elemental es la molécula de Cl_2 . Debido a su geometría se trata de una molécula apolar y por tanto las fuerzas que mantienen unidas a las moléculas son fuerzas de Van der Waals (que son poco intensas). Por este motivo, el Cl_2 se presenta en forma de gas.

CH_4 : El metano es una sustancia formada por moléculas apolares (debido a su geometría tetraédrica) y con poco volumen. Igual que en el caso del Cl_2 , las fuerzas de cohesión entre las moléculas serán las fuerzas de Van der Waals (muy débiles) y el CH_4 se presenta como gas.

Fe: Los átomos de hierro se unen mediante enlace metálico, donde las fuerzas de atracción electrostática electrón-catión son intensas. Por este motivo, el hierro se presenta como un sólido.

c) Son solubles en agua el NaCl (compuesto iónico) y muy poco solubles e insolubles, el cloro y el metano.

22 Explica qué tipo de fuerzas de atracción deben vencerse para llevar a cabo los siguientes procesos: a) fundir bromuro de calcio, $CaBr_2$ (s); hervir agua, H_2O (l); evaporar oxígeno, O_2 (l); d) fundir cesio, Cs (s).

- a) **$CaBr_2$ (s):** Se trata de una sustancia iónica, las entidades elementales de este compuesto son los iones Ca^{2+} y Br^- , unidos mediante enlace iónico. Para fundirlo, es necesario vencer las fuerzas de atracción electrostática presentes en el enlace iónico.

- b) **H₂O (l)**: El agua está formada por moléculas polares que se encuentran unidas entre sí por enlaces por puentes de hidrógeno. Para hervir agua (paso de líquido a gas) debemos vencer este tipo de fuerza intermolecular entre sus moléculas.
- c) **O₂ (l)**: El oxígeno molecular, O₂, está formado por moléculas apolares que interactúan entre sí mediante fuerzas de dispersión o de London. Para evaporar oxígeno líquido es necesario vencer estas fuerzas de dispersión.
- d) **Cs (s)**: El Cesio es un metal que está formado por átomos de Cs unidos entre sí mediante enlace metálico, que será la fuerza de atracción que habrá que vencer para fundirlo.

23 Contesta, razonadamente, a las siguientes cuestiones: a) ¿por qué a 25 °C y 1 atm, el agua es líquida y el sulfuro de hidrógeno no?, b) ¿cuál de los compuestos siguientes será más soluble en agua: el óxido de calcio o el cloruro de cesio?, c) ¿qué metal tiene mayor punto de fusión, el sodio o el cobre?, d) ¿quién conduce mejor la corriente eléctrica, un cristal de nitrato de aluminio o una disolución de este?

- a) En el caso del H₂S, las moléculas son polares (geometría angular). Tenemos fuerzas intermoleculares de dispersión o de London (surgen de la atracción entre dos dipolos instantáneos y se originan entre cualquier tipo de moléculas) y fuerzas dipolo-dipolo (este tipo de interacción existe entre las moléculas covalentes polares debido a la atracción de la zona de densidad positiva de una molécula y la zona de densidad negativa de la otra). Por este motivo, el H₂S es un gas a 25 °C y 1 atm, pero con una temperatura de ebullición no muy baja.

En el H₂O, tenemos como fuerzas intermoleculares los enlaces por puentes de hidrógeno entre sus moléculas. Las fuerzas de atracción son mucho más intensas que en el caso de las fuerzas de Van der Waals, siendo las responsables de que a 25 °C y 1 atm, el agua sea líquida (aunque su masa molecular sea menor que la del H₂S).

- b) La solubilidad en agua de los compuestos iónicos depende de la energía reticular del cristal. La energía reticular depende de la atracción electrostática entre aniones y cationes; cuando los iones son pequeños y de carga elevada, la atracción es más intensa; la energía reticular es mayor y por tanto, la disolución en agua, más difícil.

El CaO con iones divalentes y pequeños (Ca²⁺ y O²⁻) es menos soluble en agua que el CsCl, donde los iones son monovalentes y grandes (Cs⁺ y Cl⁻).

- c) En el caso del cobre y el sodio, el tipo de enlace químico es un enlace metálico. El punto de fusión dependerá de la cohesión de los cristales metálicos.

El cobre pertenece a los metales de transición, los cuales (a excepción del mercurio) presentan estructuras muy cohesionadas, de manera que los puntos de fusión suelen ser altos. En cambio, el sodio es un metal alcalino, y los átomos de los metales alcalinos son grandes debidos a la débil unión del electrón más externo (las temperaturas de fusión disminuyen al descender en el grupo); esto hace que las temperaturas de fusión sean bajas.

Por tanto, el cobre tiene mayor temperatura de fusión que el sodio.

- d) El nitrato de aluminio (cristal) no conduce la corriente eléctrica en estado sólido. Es un compuesto iónico donde los iones que forman parte de la red cristalina están fijos y no pueden moverse libremente cuando el cristal se somete a una diferencia de potencial.

Cuando se disuelve en agua, la red cristalina se debilita y se desmorona, y los iones, que estarán solvatados, se moverán libremente en el seno de la disolución. Por este motivo, la disolución de Al(NO₃)₃ es buena conductora de la corriente eléctrica.

24 Explica razonadamente los siguientes hechos: a) el cloruro de sodio tiene un punto de fusión de 801 °C, mientras que el cloro es un gas a temperatura ambiente, b) el cobre y el yodo son sólidos a temperatura ambiente pero el cobre conduce la corriente eléctrica, mientras que el yodo no, c) el etano tiene un punto de ebullición más alto que el metano.

a) El cloruro de sodio, NaCl, es un compuesto iónico, en el que los iones Na^+ y Cl^- están unidos entre sí por fuerzas electrostáticas intensas, por ello es un sólido con alto valor del punto de fusión.

El cloro, Cl_2 , está formado por moléculas apolares unidas entre sí por fuerzas de dispersión o de London (fuerzas de Van der Waals). Al ser estas fuerzas muy débiles, el cloro es un gas a temperatura ambiente.

b) Para que una sustancia sea conductora de la corriente eléctrica debe tener cargas eléctricas que puedan moverse libremente en el interior de la sustancia al aplicar una diferencia de potencial.

El cobre es un metal que contiene cargas móviles libres (mar de electrones) y que conduce, por tanto, la corriente de electrones al aplicar una diferencia de potencial.

En cambio, en el I_2 , no existen cargas eléctricas libres (los electrones forman parte de enlaces covalentes o están sujetos a sus átomos). Por este motivo, el yodo no conduce la corriente eléctrica.

c) El CH_4 y el C_2H_6 están formados por moléculas apolares que se encuentran unidas entre sí por fuerzas de dispersión o de London (muy débiles); por ello, ambas sustancias son gases. Como la intensidad de las fuerzas de London aumenta con la masa y el volumen molecular, la molécula de etano tendrá un punto de ebullición más alto.

25 Indica el tipo de enlace o fuerza intermolecular que es necesario vencer para fundir los siguientes compuestos: a) cloruro de sodio, b) dióxido de nitrógeno, c) hierro.

a) El cloruro de sodio es un compuesto iónico formado por iones Na^+ y Cl^- ordenados en una red cristalina. Para fundir el cloruro de sodio es necesario vencer las fuerzas de atracción electrostática entre aniones y cationes, es decir, el enlace iónico.

b) El dióxido de nitrógeno, NO_2 , es un compuesto molecular. Las moléculas de NO_2 están unidas entre sí por medio de fuerzas de Van der Waals. El NO_2 es un gas, pero cuando se encuentra en estado sólido, para fundirlo debemos, vencer las fuerzas de Van der Waals que existen entre las moléculas.

c) El hierro es un metal formado por cationes Fe^{2+} situados en los vértices de la red cristalina, entre los cuales se mueven libremente los electrones que los mantienen unidos. Para fundir hierro, debemos vencer las fuerzas de atracción electrostática cationes-electrones, es decir, el enlace metálico.

Hibridación

26 Indica, razonadamente, cuántos enlaces π y cuántos σ tienen las siguientes moléculas: a) hidrógeno, b) nitrógeno, c) oxígeno.

a) La configuración electrónica del hidrógeno es $1s^1$. El hidrógeno formará un enlace sencillo, puesto que tiene un electrón desapareado. El enlace es de tipo σ y se consigue por solapamiento frontal de los dos orbitales atómicos semillenos de los dos hidrógenos.

b) La configuración electrónica del nitrógeno es $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. El nitrógeno formará tres enlaces, puesto que tiene tres electrones desapareados. Tenemos un solapamiento frontal entre los orbitales $2p_x$ de cada átomo (enlace σ) y dos solapamientos laterales entre los orbitales $2p_y$ y $2p_z$ de cada uno de los átomos respectivamente (dos enlaces tipo π). En la molécula de N_2 , por tanto, hay un enlace σ y dos enlaces π (dos electrones forman un enlace sigma y otros dos pares forman dos enlaces tipo pi).

c) La configuración electrónica del oxígeno es $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$.

El oxígeno formará dos enlaces, puesto que tiene dos electrones desapareados. El primero será un enlace tipo σ entre los dos orbitales $2p_y$ de cada átomo, pero el segundo tendrá que ser lateral (enlace tipo π) entre los orbitales $2p_z$. Esta superposición lateral es menor, lo que da lugar a enlaces más débiles.

El enlace entre los átomos de oxígeno es doble, pero los dos enlaces no son iguales; el enlace sigma (σ) es más fuerte que el enlace pi (π).

27 El PCl_3 es una molécula polar, mientras que el BCl_3 tiene un momento dipolar nulo.

a) Escribe las estructuras de Lewis para ambas moléculas.

b) Justifica la distinta polaridad que poseen.

c) Indica la hibridación del átomo central.

a) Las estructuras de Lewis para ambas moléculas son:



En el caso del BCl_3 , para el boro tenemos una situación de hipovalencia (incumple la regla del octeto por defecto).

b) En el caso del PCl_3 tenemos cuatro nubes de electrones, una de las cuales es un par de electrones solitarios. El ángulo de enlace de estas moléculas es menor que $109,5^\circ$ porque los pares de electrones no compartidos ejercen una mayor fuerza de repulsión que los pares de electrones enlazantes y el ángulo de enlace se cierra un poco.

El tipo de geometría que corresponde a esta molécula es de **pirámide trigonal** y, consecuencia de ello, los momentos dipolares de los enlaces $\text{P} \rightarrow \text{Cl}$ no se anulan entre sí, por este motivo, es una molécula polar.

La molécula de BCl_3 tiene un átomo central sin pares de electrones solitarios y rodeado por tres grupos de electrones. Hay tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. El tipo de geometría que corresponde a esta molécula es plana trigonal, con ángulos de enlace de 120° . Los momentos dipolares $\text{B} \rightarrow \text{Cl}$ se anulan entre sí debido a la geometría de la molécula. La molécula de BCl_3 es apolar.

c) En el tricloruro de fósforo, la hibridación del átomo central, P, es sp^3 con los cuatro orbitales híbridos dirigidos hacia los vértices de un tetraedro.

En el BCl_3 , la hibridación del átomo central, B, es sp^2 con los tres orbitales híbridos dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero.

28 Indica, razonadamente, cuál es la hibridación que presenta el átomo de carbono en las moléculas $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ y CCl_4 .

H_2CO : En el $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$, el átomo de carbono se encuentra rodeado por tres zonas de alta densidad electrónica dispuestas hacia los vértices de un triángulo equilátero. El tipo de hibridación que proporciona esta geometría es sp^2 .

CCl_4 : En el CCl_4 , el átomo de carbono se encuentra rodeado de cuatro zonas de alta densidad electrónica dispuestas hacia los vértices de un tetraedro. La hibridación que proporciona cuatro orbitales atómicos híbridos es sp^3 .

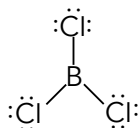
29 a) Deducir la geometría de las moléculas BCl_3 y H_2S aplicando la teoría RPECV.

b) Explica si las moléculas anteriores son polares.

c) Indica la hibridación que presenta el átomo central.

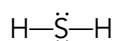
a) Para explicar la geometría molecular, se utiliza la TRPECV. Se trata de un modelo puramente electrostático, que considera los electrones como cargas puntuales. Según este modelo, todos los electrones alrededor del átomo central, tanto los pares enlazantes como los pares solitarios, se disponen alrededor del átomo central de forma que experimenten la mínima repulsión.

En el caso de la molécula de BCl_3 , la estructura de Lewis viene dada por:



El átomo central carece de pares de electrones solitarios, está rodeado por tres zonas de alta densidad electrónica orientadas hacia los vértices de un triángulo equilátero. Por tanto, la molécula de BCl_3 es plana y tiene geometría **plana trigonal** (ángulos de enlace de 120°).

Para el H_2S , la estructura de Lewis viene dada por:



En este caso, el átomo central tiene pares de electrones solitarios. Tenemos cuatro nubes electrónicas, dos de las cuales corresponden a pares solitarios. Los dos pares solitarios producen una mayor repulsión, lo que se traduce en que las nubes enlazantes se cierran y su ángulo de enlace sea aproximadamente de $104,5^\circ$. El tipo de geometría es **angular**.

b) Para que una molécula sea polar, es necesario, pero no suficiente, que contenga enlaces covalentes polarizados. Cuando en una molécula polar hay más de un enlace, el momento dipolar molecular es la suma vectorial de los momentos dipolares de enlace, por ello, es necesario para determinarlo, conocer la geometría molecular y los ángulos de enlace.

En el BCl_3 , la molécula posee tres enlaces fuertemente polarizados, $\text{B}^+ \rightarrow \text{Cl}^-$, pero por simetría se anulan sus momentos dipolares, por tanto, la molécula de BCl_3 es **apolar**.

En el H_2S , la molécula presenta dos enlaces polarizados $\text{H}^+ \rightarrow \text{S}^-$ y el momento dipolar resultante es no nulo, por lo que la molécula es **polar**.

c) En el BCl_3 , el átomo central de boro utilizará hibridación sp^2 , que es la que proporciona tres orbitales atómicos híbridos dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero.

En el H_2S , el átomo central de azufre está rodeado de cuatro zonas de alta densidad electrónica dirigidas hacia los vértices de un tetraedro. El tipo de hibridación que satisface estas condiciones es sp^3 .