

QUÍMICA GENERAL

PROBLEMAS RESUELTOS

Dr. D. Pedro A. Cordero Guerrero

EL ENLACE QUÍMICO

EL ENLACE QUÍMICO. CONCEPTOS TEÓRICOS BÁSICOS

El enlace químico es el resultado de la interacción entre dos cuerpos (átomos o moléculas) que conduce a la formación de una agrupación estable.

Enlaces entre átomos: Se forman cuando los átomos ceden, captan o comparten electrones de su último nivel energético para adquirir la estructura electrónica de gas noble (8 electrones: Regla del octeto).

Puede ser de tres tipos:

Enlace iónico: Se forma entre átomos con electronegatividad muy diferente: **METAL - NO METAL**

Enlace covalente: Se forma entre átomos con electronegatividad alta (**NO METALES**). A su vez puede ser:

Enlace covalente puro (o apolar): Se da cuando se unen dos átomos **DEL MISMO NO METAL**

Enlace parcialmente covalente (o polar): Se da cuando se unen átomos **DE NO METALES DIFERENTES**.

Enlace metálico: Se da cuando se unen átomos de **METALES, IGUALES O DIFERENTES**

Enlaces intermoleculares: Son los que se forman entre moléculas ya constituidas. Son característicos de los compuestos covalentes. Son de dos tipos

Enlaces por puente de hidrógeno: Se forma cuando el H forma moléculas con átomos mucho más electronegativos que él. El H está unido por enlace covalente al otro átomo de su molécula y por atracción electrostática al otro átomo de la molécula vecina. Lo dan: HF, HCl, H₂O, alcoholes, fenoles, ácidos carboxílicos, aminas y amidas.

Enlaces por fuerzas de Van der Waals Los que se forman entre las moléculas covalentes apolares se deben a la asimetría eléctrica que puede presentar una molécula en un momento determinado (dipolo instantáneo) que es capaz de provocar la formación de dipolos inducidos en las moléculas vecinas. Mientras que los que se forman entre moléculas polares se deben a la deslocalización de los electrones del enlace, lo cual provoca la aparición de dipolos permanentes que se atraen (fuerzas de dispersión o de London)

RELACIÓN ENTRE EL TIPO DE ENLACE Y LAS PROPIEDADES DEL COMPUESTO FORMADO

		Sólidos iónicos	Sólidos Covalentes moleculares	Sólidos covalentes atómicos	Metales
Partículas que los forman		Aniones y cationes	Moléculas neutras	Átomos	Cationes y electrones deslocalizados
Tipo y fuerza del enlace		IÓNICO (Fuerte)	E. DE HIDRÓGENO o de VAN DER WAALS (Relativam. débiles)	COVALENTE ENTRE TODOS LOS ÁTOMOS (Muy fuerte)	METÁLICO (Fuerza de enlace variable)
P R O P I E D A D E S	Dureza	Duros y frágiles	Muy blandos	Muy duros	Variable
	Estado físico a T ^a ambiente	Sólidos	Gases, líquidos o sólidos	Sólidos	Sólidos en general
	Puntos de fusión	Altos	Bajos	Muy altos	Muy variables
	Punto de ebullición	Altos	Bajos	Muy altos	Muy variables
	Solubilidad en agua	Solubles	Insolubles en general	Insolubles	Insolubles
	Solubilidad en disolv. orgánicos	Insolubles	Solubles en general	Insolubles	Insolubles
Conductividad eléctrica		Sólo disueltos o fundidos	Malos conductores	Muy malos conductores	Muy buenos conductores
Ejemplos		NaCl, CaO, CaCO ₃ , etc	H ₂ ; H ₂ O; CH ₄ ; NH ₃ , Etanol, etc	Diamante, cuarzo, carborundo, etc	Na, Fe, Hg, Ag, Cu, Al, etc

ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS MOLECULARES Proceden de la Teoría de los Orbitales Moleculares para el enlace covalente, la cual supone que los orbitales atómicos de los átomos distintos que se enlazan se combinan entre sí formando **orbitales moleculares** (OM) de manera que los electrones que participan en ellos pertenecen a la molécula considerada como un todo. Pueden ser de dos tipos

Orbitales moleculares enlazantes: Cuando las ondas de los electrones que describen los orbitales atómicos se encuentran en la misma fase. Su energía es menor que las de los orbitales atómicos combinados.

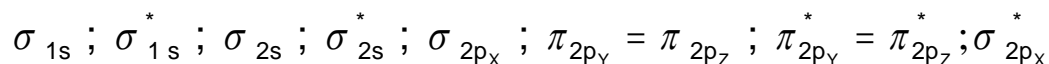
Orbitales atómicos antienlazantes: Cuando las ondas de los electrones que describen los orbitales atómicos se encuentran en oposición de fase. Su energía es mayor que las de los orbitales atómicos combinados.

En cada orbital molecular sólo caben dos electrones, por lo que la superposición de dos orbitales atómicos produce siempre dos orbitales moleculares: uno enlazante y el otro antienlazante

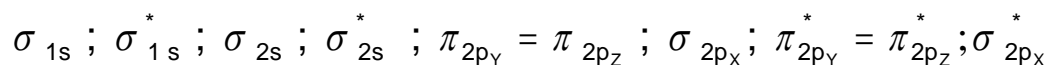
Tipos de enlace Cuando se superponen dos orbitales atómicos la dirección del enlace puede coincidir con el eje del orbital (**Enlace tipo σ**) Aparece cuando se trata de orbitales atómicos de los tipos **s** ó **p_x** , o bien ser perpendicular a él (**Enlace tipo π**), que aparece cuando se trata de orbitales atómicos de los tipos **p_y** ó **p_z**

Orden de llenado de los orbitales moleculares : Los electrones se colocan en los orbitales moleculares con un máximo de dos electrones en cada orbital. Cuando dos orbitales moleculares tienen la misma energía, entra primero un electrón en cada uno de estos orbitales,

Moléculas diatómicas homonucleares: Los orbitales atómicos de los átomos que se unen tienen la misma energía.



Moléculas diatómicas heteronucleares: Los orbitales atómicos del elemento más electronegativo tienen menor energía que los correspondientes al menos electronegativo. Por ello cuanto más cercano en contenido energético se encuentre el orbital molecular a uno de los orbitales atómicos que lo forman mayor será el predominio del carácter de dicho orbital atómico. Debido a ello, el orden de llenado anterior puede no ser correcto para estas moléculas. Así, para el CO y para el NO el orden es:



Orden de enlace: Nos da idea de la estabilidad del enlace. Cuanto mayor sea el orden de enlace en una molécula o ion diatómico, mayor estabilidad tendrá, será más corta su longitud de enlace y mayor su energía de enlace (ésta es la cantidad de energía necesaria para descomponer un mol de enlaces, y mide, por tanto, la fuerza del enlace).

El orden de enlace es el número de enlaces netos después de tener en cuenta la cancelación de enlaces y antienlaces, y viene dado por la expresión:

$$\text{Orden de enlace} = \frac{\text{N}^\circ \text{ electrones enlazantes} - \text{N}^\circ \text{ electrones antienlazantes}}{2}$$

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

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

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

Así, tendremos que para cada átomo:

$$\text{Carga formal} = \text{N}^\circ \text{ electrones de valencia} - \text{N}^\circ \text{ electrones no compartidos} - \frac{1}{2} \text{n}^\circ \text{ de electrones compartidos}$$

AGRUPACIÓN DE LOS PROBLEMAS RESUELTOS: (Algunos de ellos se podrían incluir en varios grupos)

Grupo A: Predicción del tipo de enlace en moléculas

Grupo B: Estructuras de Lewis de moléculas. Formas resonantes

Grupo C: Deducción de las propiedades de las moléculas

Grupo D: Estructuras electrónicas de moléculas. Orden de enlace

ENUNCIADOS DE LOS PROBLEMAS Y CUESTIONES RESUELTAS SOBRE EL ENLACE QUÍMICO

Grupo A: PREDICCIÓN DEL TIPO DE ENLACE EN MOLÉCULAS

- A-01** - Dados los elementos A, B y C de números atómicos 19, 17 y 12, respectivamente, indique, razonando la respuesta: a) Estructura electrónica de sus respectivos estados fundamentales; b) Tipo de enlace formado cuando se unen A y B y cuando se unen entre sí átomos de C.
- A-02** - Indique razonadamente qué tipo de enlace o fuerza de atracción se rompe al:
a) Fundir Bromuro de Litio
b) Disolver bromo molecular en tetracloruro de carbono
c) Evaporar agua
-

Grupo B: ESTRUCTURAS DE LEWIS EN MOLÉCULAS. FORMAS RESONANTES

- B-01** - Representar las estructuras de Lewis y calcular la carga formal en los compuestos: Trióxido de azufre y ácido perclórico (clorotetraoxo de hidrógeno)
- B-02** - Escribir las estructuras de Lewis para las moléculas de tetracloruro de carbono y de tricloruro de boro. ¿Se cumple en ambas la regla del octeto? Justifique la respuesta. Datos: números atómicos: C=6; B=5; Cl=17
- B-03** - Escriba las estructuras de resonancia para el ion NO_2^- e indique el orden del enlace NO. Si las longitudes de enlace para N-O y N=O son, respectivamente 140 y 115 pm ¿Qué sucederá con la longitud del enlace NO en el caso del NO_2
-

Grupo C: DEDUCCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LAS MOLÉCULAS

- C-01** - Indique si las siguientes propiedades del amoníaco son ciertas o falsas, razonando la respuesta en cada caso:
a) Es mal disolvente de compuestos iónicos.
b) Es una base de Brønsted y de Lewis.
c) La molécula de amoníaco es polar.
- C-02** - Responda de modo razonado a las siguientes cuestiones:
a) ¿Qué compuesto será más soluble en agua: óxido de calcio o yoduro de cesio?
b) ¿Quién tendrá un punto de fusión más elevado: Bromuro de potasio o fluoruro de sodio?
c) Justifique por qué, en condiciones estándar, el agua es un líquido y el sulfuro de hidrógeno es un gas.
- C-03** - A) Justifique la polaridad de las siguientes moléculas: H_2O y I_2 y comente la naturaleza de las fuerzas intermoleculares presentes en ellos.
B) Dada la siguiente configuración electrónica: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
¿A qué elemento corresponde?
¿Cuál es su situación en el sistema periódico?
Indique los valores de los cuatro números del electrón diferenciador
-

Grupo D: ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS DE MOLÉCULAS. ORDEN DE ENLACE

- D-01** - Representar la estructura electrónica de los iones y molécula siguientes: O_2 , O_2^+ y O_2^- . Calcular asimismo el orden de enlace en cada caso. ¿Cuál tendrá mayor energía de enlace? ¿Por qué? ¿Cuál/es presenta/n paramagnetismo? ¿Por qué? Dato: número atómico del O = 8.
- D-02** - El cloro y el nitrógeno, únicamente forman un compuesto estable, que es el tricloruro de nitrógeno, en tanto que el cloro y el fósforo pueden formar dos compuestos estables. ¿Cuáles son?. Justifique cual es la causa.
- D-03** - De acuerdo con la Teoría de Hibridación de orbitales atómicos. Representar las estructuras y ángulos de enlace

teóricos para las siguientes moléculas: a) Amoniac b) Fosgeno (Cl_2CO) c) Tetracloruro de etileno (Cl_4C_2)

D-04 - A partir de la teoría de orbitales moleculares escribir la configuración electrónica y calcular el orden de enlace de la molécula de S_2 . Indicar si la molécula es diamagnética o paramagnética. S ($Z=16$)

PROBLEMAS Y CUESTIONES RESUELTAS

Grupo A: PREDICCIÓN DEL TIPO DE ENLACE EN MOLÉCULAS

ENLACE - A-01

3.- Dados los elementos A, B y C de números atómicos 19, 17 y 12, respectivamente, indique, razonando la respuesta:

- Estructura electrónica de sus respectivos estados fundamentales;
- Tipo de enlace formado cuando se unen A y B y cuando se unen entre sí átomos de C.

RESOLUCIÓN

Las respectivas configuraciones electrónicas de estos tres átomos son:

- A:** $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ Se encuentra en el Grupo 1, Periodo 4. Es el POTASIO
B: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ Se encuentra en el Grupo 17, Periodo 3. Es el CLORO
C: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ Se encuentra en el Grupo 2, Periodo 3. Es el MAGNESIO

Cuando se unen A y B el elemento A es un metal cuya electronegatividad es baja por lo que tiende a ceder sus electrones de valencia, mientras que el elemento B es un no metal cuya electronegatividad es alta por lo que tiende a ganar electrones para completar su capa electrónica externa. Por tanto, el elemento A cederá su electrón al elemento B, quedando ambos con las cargas: A^{1+} y B^{1-} , formándose entre ambos un ENLACE IÓNICO.

El elemento B es también un metal, con una electronegatividad baja, por lo que no tiene tendencia a ganar electrones para completar su última capa (necesitará 6 electrones) por lo que cuando se une a otro átomo de ese mismo elemento, entre ambos se formará un enlace metálico.

ENLACES - A-02

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

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

RESOLUCIÓN

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

A) Fundir Bromuro de Litio: El Bromuro de litio (LiBr) es un compuesto iónico por lo que en estado sólido cada uno de los iones: Li^+ ó Br^- se encuentra en su red cristalina rodeado de otros iones de signo contrario que lo hacen permanecer en su posición.

Cuando se funde el cristal, se rompen estos enlaces y los iones pueden ya moverse con cierta libertad (estado líquido), por lo que en este proceso **se rompen los enlaces iónicos existentes entre los iones Litio (Li^+) y Bromuro (Br^-)**

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

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

C) Evaporar agua La evaporación es un proceso en el cual una sustancia pasa de estado líquido a gaseoso a una temperatura inferior a su temperatura de ebullición. En el caso del agua a la presión normal (1 atm) este

fenómeno se produce entre 0°C y 100°C. El agua (H₂O) es un por tanto un compuesto líquido en el cual coexisten dos tipos de enlaces: Los ENLACES INTRAMOLECULARES, entre los dos átomos de Hidrógeno con el de Oxígeno que conforman la molécula, son enlaces covalentes parcialmente iónicos por lo que están polarizados, con los electrones del enlace más próximos al átomo de Oxígeno. Por ello, y debido también a la hibridación sp³ del átomo de Oxígeno, la molécula de agua está polarizada, mientras que los ENLACES INTERMOLECULARES, que mantienen unidas unas moléculas con otras se deben a esta polarización y se forman debido a la atracción del átomo de Oxígeno de una molécula (el cual tiene un exceso de carga negativa) hacia un átomo de Hidrógeno de otra molécula de agua contigua, con la cual formará un enlace intermolecular por Puente de Hidrógeno.

Cuando se produce la evaporación del agua, las moléculas permanecen como tales (H₂O) pero **se romperán sus enlaces por puente de Hidrógeno con otras moléculas vecinas** de manera que el agregado molecular sea más pequeño y pueda existir en estado gaseoso

Grupo B: ESTRUCTURAS DE LEWIS DE MOLÉCULAS. FORMAS RESONANTES

ENLACE - B-01

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

RESOLUCIÓN

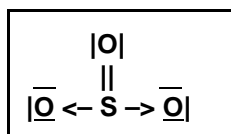
La carga formal se calcula para cada átomo restando al nº de electrones de valencia que tiene el átomo aislado el número de electrones asignados al átomo en la estructura de Lewis.

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

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

Así, tendremos que para cada átomo:

Carga formal = N° electrones de valencia - N° electrones no compartidos - ½ n° de electrones compartidos



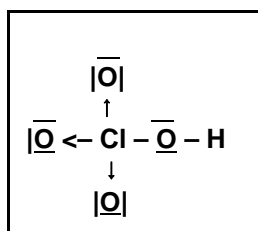
N° de electrones de valencia: **S = 6 ; O = 6**

Cargas formales: **S = 6 - 1/2(8) = 6 - 4 = +2**

O = 6 - 4 - ½ (4) = 6 - 4 - 2 = 0

Los otros dos O son iguales: **O = 6 - 6 - ½ 2 = -1**

O = 6 - 6 - ½ 2 = -1 Carga total: +2 -1 -1 = 0



N° de electrones de valencia: **Cl = 7 ; O = 6 ; H = 1**

Cargas formales: **Cl = 7 - 1/2(8) = 7 - 4 = +3**

O = 6 - 4 - ½ (4) = 6 - 4 - 2 = 0

H = 1 - ½ 2 = 0

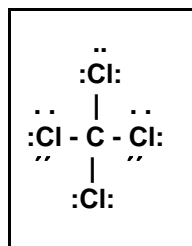
Los otros tres O son iguales: **O = 6 - 6 - ½ 2 = -1**

O = 6 - 6 - ½ 2 = -1

O = 6 - 6 - ½ 2 = -1 Carga total: +3 -1 -1 -1 = 0

ENLACES - B-02

Escribir las estructuras de Lewis para las moléculas de tetracloruro de carbono y de tricloruro de boro. ¿Se cumple en ambas la regla del octeto? Justifique la respuesta. Datos: números atómicos: C=6; B=5; Cl=17

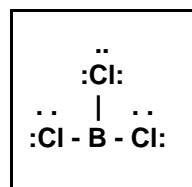


Las configuraciones electrónicas de los dos átomos presentes son

C : $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$

Cl $1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$

El Carbono tiene 8 electrones a su alrededor: los 4 suyos y uno de cada átomo de Cl, por lo que sí tiene completo su octeto. Por su parte, cada átomo de Cloro tiene a su alrededor sus 7 electrones, así el que comparte cada uno con el átomo central de Carbono



Las configuraciones electrónicas de los dos átomos presentes son

B : $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$

Cl $1s^2 2s^1 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$

El Boro tiene 6 electrones a su alrededor: los 3 suyos y uno de cada átomo de Cloro, por lo que el Boro no tiene completo su octeto, Por su parte, cada átomo de Cloro tiene a su alrededor sus 7 electrones, así como otro más: el que comparte cada uno con el átomo central de Boro,

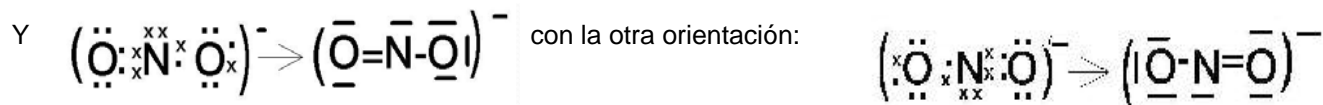
por lo que los tres átomos de cloro sí tienen completos sus octetos

ENLACES - B-03

Escriba las estructuras de resonancia para el ion NO_2^- e indique el orden del enlace NO. Si las longitudes de enlace para N-O y N=O son, respectivamente 140 y 115 pm ¿Qué sucederá con la longitud del enlace NO en el caso del NO_2^-

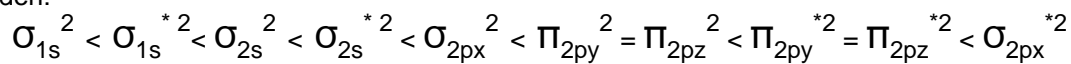
RESOLUCIÓN

a) En el NO_2^- existen dos posibles estructuras resonantes que dependen de la orientación de los enlaces, a saber:



B) Las configuraciones electrónicas del N y del O son: N: $1s^2 2s^2 2p^3$ Y O: $1s^2 2s^2 2p^4$

La distribución electrónica en los orbitales moleculares cuando estos dos átomos se enlazan sigue el orden:



Dado que tenemos que colocar solamente 15 electrones (7 del N y 8 del O), la configuración electrónica molecular será: $\sigma_{1s}^2 < \sigma_{1s}^{*2} < \sigma_{2s}^2 < \sigma_{2s}^{*2} < \sigma_{2px}^2 < \pi_{2py}^2 = \pi_{2pz}^2 < \pi_{2py}^{*1}$

El orden de enlace se calcula a partir de la fórmula:

$$\text{O.E.} = \frac{\text{N}^0 \text{ de } e^- \text{ en orbitales enlazantes} - \text{N}^0 \text{ de } e^- \text{ en orbitales no enlazantes}}{2}$$

por lo que en este caso será: $\text{O.E.} = \frac{2 + 2 + 2 + 2 + 2 - 2 - 2 - 1}{2} = 2,5$

C) Dado que en el NO_2^- hay dos estructuras resonantes, el enlace NO presentará una longitud cuyo valor será intermedio entre la del enlace NO simple y el del enlace doble N=O, es decir, estará comprendida entre 115 y 140 pm

Grupo C: DEDUCCIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LAS MOLÉCULAS

ENLACES -C-01

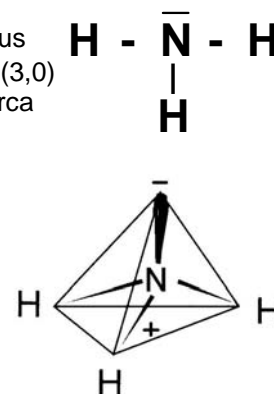
Indique si las siguientes propiedades del amoníaco son ciertas o falsas, razonando la respuesta en cada caso:

- Es mal disolvente de compuestos iónicos.
- Es una base de Brönsted y de Lewis.
- La molécula de amoníaco es polar.

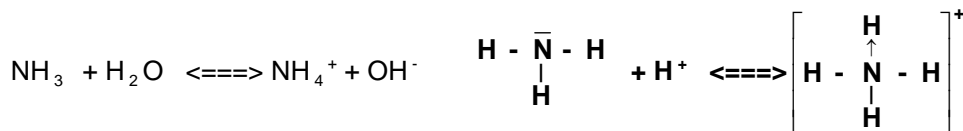
RESOLUCIÓN

a) y c)

Para que un disolvente sea bueno para los compuestos iónicos, debe tener sus moléculas polarizadas. Si tenemos en cuenta las electronegatividades del N (3,0) y del H(2,1) sus enlaces estarán polarizados con un exceso de carga más cerca del N que del H; de esa forma, y dado que, además el N tiene un par de electrones desapareados, la molécula en su conjunto presentará una cierta carga negativa en vértice del orbital lleno, y un exceso de carga positiva en la cara tetraédrica en la que se sitúan los H, por ello, sí disolverá a los compuestos iónicos, aunque menos que el agua



- b) De acuerdo con la teoría de Brönsted, una base es aquella sustancia que sea capaz de aceptar un protón del disolvente. En el caso del amoníaco, es capaz de formar un enlace covalente coordinado con un protón, en el cual los dos electrones del enlace son los del par solitario del N, originando el ion amonio siendo, por tanto, una base de Brönsted:



Según la teoría de Lewis, una base es aquella sustancia, molécula, radical o ion capaz de ceder un par de electrones. En el caso del amoníaco, el N tiene un par de electrones solitarios y por tanto, es capaz de cederlo siendo, por tanto, una base de Lewis.

ENLACES - C-02

Responda de modo razonado a las siguientes cuestiones:

- ¿Qué compuesto será más soluble en agua: óxido de calcio o yoduro de cesio?
- ¿Quién tendrá un punto de fusión más elevado: Bromuro de potasio o fluoruro de sodio?
- Justifique por qué, en condiciones estándar, el agua es un líquido y el sulfuro de hidrógeno es un gas.

RESOLUCIÓN

- A) La proporción de carácter iónico en un enlace entre dos átomos es tanto mayor cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividades entre los átomos enlazados, y sabemos que esta propiedad aumenta en la Tabla periódica de abajo a arriba en los grupos, y de izquierda a derecha en los periodos.

La solubilidad en agua es una propiedad que es mucho más acusada cuanto mayor sea el carácter iónico del enlace. En este caso el yoduro de Cesio tiene una proporción de carácter iónico mayor que el óxido de calcio, por lo que será más soluble en agua

- B) El punto o temperatura de fusión de un determinado compuesto es tanto mayor cuanto mayor sea el carácter iónico del enlace que los une. En el caso de los dos compuestos que nos dan, la mayor diferencia de electronegatividades se da en el caso del Fluoruro de sodio, por lo que será éste el que tiene un punto de fusión más elevado.
- C) En los dos compuestos que nos dan, el enlace intermolecular tiene carácter covalente parcial, estando más polarizado el enlace en el caso del O - H que en el S - H ya que la diferencia de electronegatividades entre O e H es mayor que en el caso del S y el H.

Debido a ello, aparecen enlaces intermoleculares por puente de Hidrógeno entre un átomo de O de una molécula de agua y un H de una molécula vecina, mientras que este enlace por puente de Hidrógeno no aparece en el caso del H₂S.

Como consecuencia de ello, las “agrupaciones moleculares” en el caso del agua son mayores que en el sulfuro de hidrógeno debido a la existencia de enlaces por puente de Hidrógeno, lo que hacen que el estado físico del agua sea líquido, mientras que el sulfuro de hidrógeno es un gas en condiciones estandar.

ÁTOMO - ENLACES - C-03

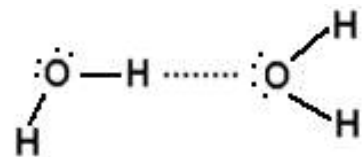
A) Justifique la polaridad de las siguientes moléculas: H₂O y I₂ y comente la naturaleza de las fuerzas intermoleculares presentes en ellos.

B) Dada la siguiente configuración electrónica: 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 3d¹⁰ 4s²

¿A qué elemento corresponde?

¿Cual es su situación en el sistema periódico?

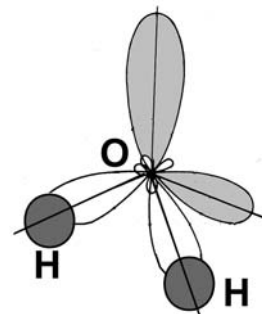
Indique los valores de los cuatro números del electrón diferenciador



RESOLUCIÓN

En el caso de la molécula de agua, se forman enlaces entre el átomo de Oxígeno y los dos de Hidrógeno. Estos enlaces se forman a partir de los orbitales híbridos sp³ del Oxígeno, dos de los cuales contienen dos electrones, y los otros dos, con un electrón cada uno, se unen a los átomos de H, por lo que la estructura del agua es tetraédrica ligeramente distorsionada por la repulsión entre los dos H.

Los dos enlaces entre el átomo de Oxígeno y ambos Hidrógenos están muy polarizados debido a la diferencia de electronegatividad entre ambos átomos. Estos dos enlaces polarizados se refuerzan entre sí haciendo que la molécula posea un dipolo permanente con el polo positivo en la zona ocupada por los H, y el polo negativo en la parte contraria, ocupada por los dos orbitales llenos del Oxígeno.



Esta polarización de los enlaces O-H hace que cada H esté atraído por el O de una molécula vecina, formándose un enlace entre ellas debido a este dipolo permanente, el cual recibe el nombre de enlace de Hidrógeno.

La molécula de yodo (I₂) es una molécula diatómica en la cual los dos átomos enlazados son iguales, por lo que atraerán con idéntica “fuerza” al par de electrones que forman su enlace, y como consecuencia de ello se tratará de una **molécula apolar**. Las fuerzas intermoleculares presentes serán del tipo de Van der Waals de dispersión (llamadas también fuerzas de dispersión de London). Tienen su origen en la asimetría eléctrica que puede presentar la molécula en un momento determinado (**dipolo instantáneo**) y que es capaz de provocar la formación de dipolos inducidos en las moléculas vecinas dando lugar a una atracción entre ellas.

Grupo D: ESTRUCTURAS ELECTRÓNICAS DE MOLÉCULAS. ORDEN DE ENLACE

ENLACES - D-01

Representar la estructura electrónica de los iones y molécula siguientes: O_2 , O_2^+ y O_2^- . Calcular asimismo el orden de enlace en cada caso. ¿Cuál tendrá mayor energía de enlace? ¿Por qué? ¿Cuál/es presenta/n paramagnetismo? ¿Por qué? Dato: número atómico del O = 8.

RESOLUCIÓN

La configuración electrónica del átomo de oxígeno es:

$1s^2 2s^2 2p^4$ por tanto, al unirse dos átomos formarán una molécula con 16 electrones, en el caso del O_2 , 15 electrones en el caso del O_2^+ y 17 electrones en el caso del O_2^- .

El orden de enlace, que es el número de enlaces netos después de tener en cuenta la cancelación de enlaces y antienlaces, viene dado por la expresión:

$$\text{Orden de enlace} = \frac{N^{\circ} \text{ electrones enlazantes} - N^{\circ} \text{ electrones antienlazantes}}{2}$$

La distribución de los mismos en los orbitales moleculares que se forman es, por tanto:

$$O_2: \sigma_{1s}^2; \sigma_{1s}^{*2}; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \pi_{2p_y}^{*1} = \pi_{2p_z}^{*1}; \text{O.E.} = \frac{10-6}{2} = 2$$

$$O_2^+: \sigma_{1s}^2; \sigma_{1s}^{*2}; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \pi_{2p_y}^{*1}; \text{O.E.} = \frac{10-5}{2} = 2,5$$

$$O_2^-: \sigma_{1s}^2; \sigma_{1s}^{*2}; \sigma_{2s}^2; \sigma_{2s}^{*2}; \sigma_{2p_x}^2; \pi_{2p_y}^2 = \pi_{2p_z}^2; \pi_{2p_y}^{*2} = \pi_{2p_z}^{*1}; \text{O.E.} = \frac{10-7}{2} = 1,5$$

La energía de enlace será tanto menor cuanto mayor sea el orden de enlace, por lo que la energía de estas tres moléculas, en orden creciente será: $O_2^+ < O_2 < O_2^-$

El paramagnetismo lo presentarán aquellas moléculas que tengan electrones desapareados, en este caso las tres moléculas lo presentarán pues todas tienen algún electrón desapareado

ENLACE - D-02

El cloro y el nitrógeno, únicamente forman un compuesto estable, que es el tricloruro de nitrógeno, en tanto que el cloro y el fósforo pueden formar dos compuestos estables. ¿Cuales son?. Justifique cual es la causa

RESOLUCIÓN

La configuración electrónica del Nitrógeno es: $1s^2 2s^2 2p^3 \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ dando lugar a la formación de un híbrido sp^3 con un orbital lleno y otros tres orbitales semillenos, con los cuales puede formar enlaces con tres átomos de Cloro.

Por su parte, la configuración electrónica del fósforo es:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$, originando también un híbrido sp^3 con un orbital lleno y otros tres orbitales semillenos, con los cuales puede formar enlaces con tres átomos de Cloro.

En este caso, el compuesto formado es el **TRICLORURO DE FÓSFORO: PCl_3**

No obstante, en el caso del fósforo, en el tercer nivel electrónico existen también orbitales "d", aunque sin electrones (en el caso del Nitrógeno, su capa electrónica más externa, la 2, no tiene orbitales "d"), pero que en

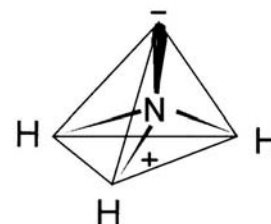
ocasiones sí pueden intervenir en el enlace cuando uno de los dos electrones del orbital 3s salta hasta un orbital 3d, cuya configuración electrónica será: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1 3d^1$ formándose un híbrido sp^3d : con cinco orbitales semillenos y por tanto capaces de formar enlaces con el Cloro. El compuesto formado en este caso será el **PENTACLORURO DE FÓSFORO: $P Cl_5$**

ENLACES - D-03

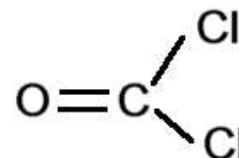
De acuerdo con la Teoría de Hibridación de orbitales atómicos. Representar las estructuras y ángulos de enlace teóricos para las siguientes moléculas: a) Amoniaco b) Fosgeno (Cl_2CO) c) Tetracloruro de etileno (Cl_4C_2)

RESOLUCIÓN

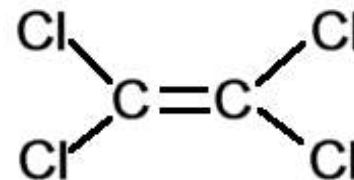
a) **AMONIACO:** El Nitrógeno sufre una hibridación sp^3 con uno de los cuatro orbitales híbridos conteniendo un par de electrones, mientras que con los otros tres orbitales híbridos, que contienen un solo electrón cada uno, forma enlaces tipo σ con los tres H. Su estructura, por tanto es la de un tetraedro, aunque sus ángulos de enlace son algo menores que los correspondientes al tetraedro regular ($109,5^\circ$) debido a que la repulsión del par de electrones solitario ejerce una repulsión mayor sobre los pares de electrones enlazantes que estos entre sí. El ángulo de enlace medido experimentalmente es de 107° .



b) **Fosgeno (Cl_2CO):** En este caso el C también sufre una hibridación, pero del tipo sp^2 , quedándole un orbital atómico sin hibridar. El carbono formará enlaces tipo σ con los dos átomos de Cloro con dos de sus orbitales híbridos, mientras que el tercero formará un enlace tipo σ con el oxígeno y el orbital atómico que no se ha hibridado, formará un enlace tipo π con el oxígeno. Por tanto, el Carbono tendrá enlaces simples con los dos átomos de Cloro y un enlace doble con el átomo de Oxígeno. Son, por tanto, tres enlaces lo cual da lugar a una estructura plana, con los enlaces dirigidos a los vértices de un triángulo equilátero (120°)



c) **Tetracloruro de etileno (Cl_4C_2)** Se trata de un caso semejante al anterior, ya que en este caso los dos átomos de Carbono sufre una hibridación, pero del tipo sp^2 , quedándole un orbital atómico sin hibridar. Cada carbono formará enlaces tipo σ con los dos átomos de Hidrógeno por medio de sus orbitales híbridos, mientras que el tercero formará un enlace tipo σ con el otro átomo de Carbono y el orbital atómico que no se ha hibridado, formará un enlace tipo π con el otro Carbono. Por tanto, el Carbono tendrá enlaces simples con sus dos átomos de Hidrógeno y un enlace doble con el otro átomo de Carbono. Son, por tanto, tres enlaces en cada carbono, lo cual da lugar a una estructura plana, con los enlaces dirigidos a los vértices de un triángulo equilátero (120°)



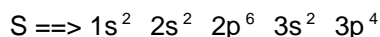
ENLACE - D-04

A partir de la teoría de orbitales moleculares escribir la configuración electrónica y calcular el orden de enlace de la molécula de S_2 . Indicar si la molécula es diamagnética o paramagnética. S ($Z=16$)

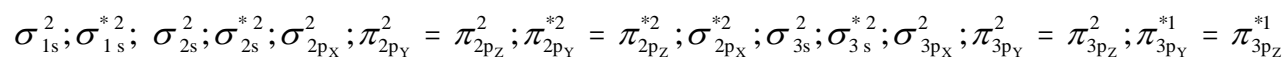
RESOLUCIÓN

Una sustancia es paramagnética cuando en su configuración electrónica tiene electrones desapareados.

En el caso de la molécula de S_2 , hemos de determinar su configuración electrónica, partiendo de la del S, que es:



Por tanto, la configuración electrónica de la molécula de S₂, la cual contiene 32 electrones, será:



donde vemos que hay dos electrones desapareados, por lo que se trata de una sustancia paramagnética.
