



ud. 3 Enlace Químico

1. INTRODUCCIÓN

[En la naturaleza, la mayoría de los elementos químicos, a excepción de los gases nobles, se encuentran combinados con otros elementos o con sí mismo formando cristales o moléculas.

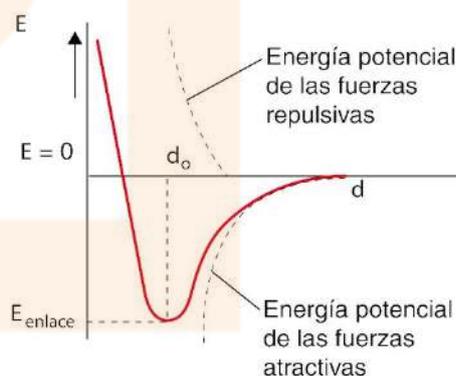
Si consideramos que todo proceso natural tiende a estabilizarse de manera espontánea (tiende a conseguir un estado de mínima energía) podemos deducir que solamente dos o más átomos se van a unir cuando la suma total de la energía de éstos juntos (enlazados) sea menor que la energía que poseen los átomos por separado y, por lo tanto, la estabilidad aumente. Esta unión entre átomos se denomina enlace y se forman mediante la transferencia o compartición de electrones entre ellos].

2. ENLACE Y ESTABILIDAD ENERGÉTICA

Mediante las *curvas de Morse*, se puede visualizar la formación y las características energéticas de los enlaces químicos. En ellas se representa la variación de energía en función de la distancia que separa a dos átomos y de las fuerzas electrostáticas que intervienen:

Cuando los dos átomos están lo suficientemente separados el sistema tiene una energía inicial que puede considerarse nula, puesto que no va a haber interacción entre ellos. Al irse aproximando, aparecen fuerzas atractivas entre el núcleo de un átomo y los electrones del otro y repulsivas entre los núcleos y los electrones de los distintos átomos.

La distancia en la cual la energía del sistema es mínima va a ser la más estable y es a esa distancia donde se produce el enlace.



Distancia de enlace (d_0): distancia a la cual la energía entre dos átomos que se unen es mínima. Esa energía se denomina **energía de enlace**.

Regla del octeto

La elevada estabilidad de los gases nobles, se debe a que tienen la capa electrónica externa llena ($ns^2 np^6$ salvo para el helio, $1s^2$, que es la excepción); por lo que el resto de los elementos químicos tenderán a tener 8 electrones en la última capa para alcanzar una situación de elevada estabilidad, es lo que se conoce como:

Regla del octeto: los átomos cuando se unen a otros mediante un enlace van a ceder, captar o compartir electrones con el fin de tener 8 electrones en la capa de valencia

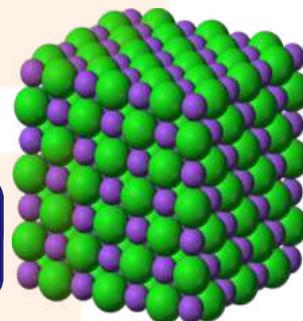
[Es una regla que se cumple, y no siempre, en los átomos de los 3 primeros periodos].

Las limitaciones de esta regla son:

- El **hidrógeno** es estable con solo dos electrones en su capa 1s (config. electrónica del He).
- Octeto expandido: algunos elementos a partir del tercer periodo, al tener orbitales d , pueden rodearse de más de ocho electrones [por ejemplo el P en el PCl_5].
- Octeto incompleto: otros elementos se estabilizan con menos de ocho electrones a su alrededor: el **boro** con 6 electrones y el **berilio** con 4.

3. ENLACE IÓNICO.

Enlace iónico: es la unión entre uno o varios átomos metálicos, con baja electronegatividad, a otro u otros átomos no metálicos, con alta electronegatividad.



Cuando se agrupan una gran cantidad de ambos iones se produce una estructura sólida denominada **red cristalina** en la que cada catión se rodea del mayor número de aniones posibles y viceversa, debido a las atracciones coulombianas entre ellos.

Energía Reticular (U).

Energía reticular: Se define como la energía que se desprende al formarse un mol de un cristal iónico (sólido) a partir de los iones que lo componen en estado gaseoso.

Es una medida de la estabilidad del cristal iónico el cual será más estable cuanto menor sea su energía reticular (mayor energía en valor absoluto).

Se calcula teóricamente mediante la ecuación de Born-Landé:

$$U = - \frac{N_A K Z^+ Z^- e^2 M}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \rightarrow U \propto - \frac{Z^+ Z^-}{d_0}$$

donde: N_A es el número de Avogadro.

K es la constante de Coulomb en el vacío.

Z^+ y Z^- son las cargas de los iones en valor absoluto.

e es el valor absoluto de la carga del electrón.

M es la constante de Madelung (depende del tipo de red cristalina)

d_0 es la distancia de enlace

n es el coeficiente de Born (el factor de compresibilidad del cristal)

De forma cualitativa, se puede deducir la variación de la energía reticular a partir de la carga de los iones y de la distancia de enlace.

Ejemplo 1

Ordena de mayor a menor energía reticular, los siguientes compuestos: MgS; LiBr; LiCl; MgO.

La energía reticular en valor absoluto aumenta con la carga de los iones y disminuye con la distancia internuclear, si consideramos que, para los distintos compuestos, la constante de Madelung y el factor de compresibilidad no varían.

En este caso, el producto $Z^+ Z^-$ valdrá 4 para las sustancias MgS y MgO, mientras que para LiBr y LiCl solo valdrá 1. Es decir, teniendo solo este factor en cuenta, se cuadruplica el valor de U para MgS y MgO, respecto de LiBr y LiCl. El valor de la distancia internuclear será la suma de los radios iónicos. Entre MgS y MgO será mayor para el primero, pues en el mismo grupo el radio aumenta a medida que aumenta Z , y entre LiBr y LiCl también será mayor d_0 para el primero por idéntico motivo.

En todo caso, las distancias internucleares de ambas parejas nunca tendrán valores tan diferentes como para superar el factor 4 debido a la carga de la primera, por lo que el orden decreciente de energía reticular en valores absolutos será: $MgO > MgS > LiCl > LiBr$.

Ciclo de Born-Haber

Muchas veces no es posible realizar el cálculo de la energía reticular porque no se conoce con precisión ni el valor de la constante de Madelung ni el del factor de compresibilidad.

Pero existe una forma alternativa para calcular U que se basa en la *ley de Hess*: “si uno o más reactivos reaccionan para dar uno o varios productos, la energía liberada o absorbida es la misma si la reacción transcurre en una etapa directa o en varias etapas.

Tomando como base esta ley y mediante una serie de reacciones químicas de las que se conoce la energía puesta en juego en cada una de ellas, llegamos al cristal iónico desde los elementos químicos en su estado natural. Este procedimiento se conoce como *ciclo de Born-Haber*.

Ejemplo 2

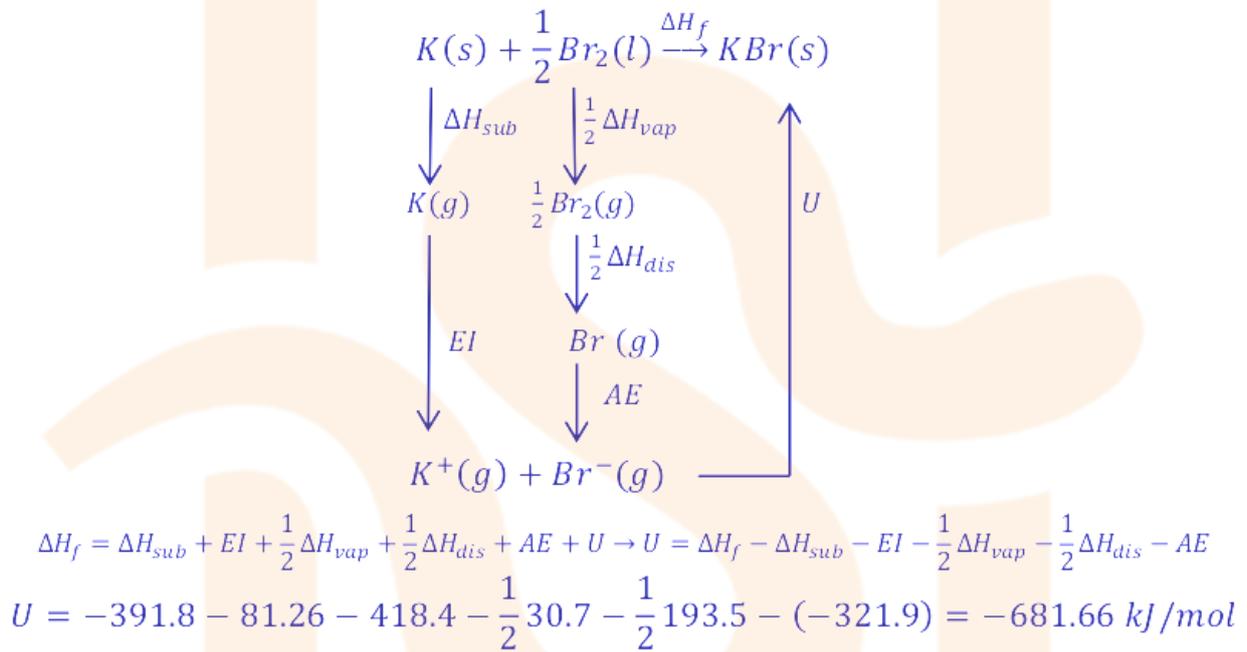
Determine la energía reticular del bromuro de potasio sabiendo que en condiciones estándar el potasio es sólido y el Br_2 es líquido. Escriba todas las reacciones del ciclo de Born Haber.

Datos: $\Delta H_f(\text{bromuro de potasio}) = Q = -391,8 \text{ kJ/mol}$ $\Delta H_{\text{sublimación}}(\text{K}) = 81,26 \text{ kJ/mol}$

$\Delta H_{\text{vaporización}}(\text{Br}_2) = 30,7 \text{ kJ/mol}$ $\Delta H_{\text{disociación}}(\text{Br}_2) = 193,5 \text{ kJ/mol}$

$E_{\text{ionización}}(\text{K}) = 418,4 \text{ kJ/mol}$ $E A(\text{Br}) = -321,9 \text{ kJ/mol}$

Para determinar la energía reticular partimos de la reacción de formación del bromuro de potasio. A partir de ella, tenemos que transformar los reactivos en iones gaseosos, pues es con los iones gaseosos como se define la energía reticular.

**Propiedades de las sustancias iónicas**

- Son sustancias sólidas.
- La dureza (*resistencia que tiene un material a ser rayado*) es bastante grande, ya que para rayarlas hay que romper enlaces electrostáticos que son fuertes.
- Tienen altos puntos de fusión y ebullición por el mismo motivo.
- Su solubilidad es buena en disolventes de tipo polar, como el agua. Las moléculas de este tipo de disolvente rodean a los iones de la red, produciendo interacciones electrostáticas lo suficientemente fuertes como para separarlos del cristal produciendo su disolución.
- La conductividad eléctrica es nula para los sólidos, puesto que aunque los iones poseen carga, no se mueven al estar fijos en la red. En cambio, presentan alta conductividad disueltas o fundidas, debido a la gran movilidad que presentan.

4. ENLACE COVALENTE.

Enlace covalente: es la unión de dos o más átomos con elevada electronegatividad mediante compartición de electrones.

En este tipo de enlace se define también el concepto de

Covalencia como el número de electrones compartidos por cada elemento en un compuesto covalente.

Estructuras de Lewis

En los compuestos covalentes, son las que se emplean para representar esquemáticamente los enlaces entre átomos y los pares de electrones sin compartir.

En estas estructuras cada átomo se indica con su símbolo rodeado de unos puntos que representan los electrones del último nivel. Estos pueden aparecer también como aspas (para diferenciarlos de los del otro átomo) o como rayas (en caso de pares electrónicos).

Los átomos se enlazan uniendo los electrones necesarios mediante líneas, de manera que al final cada átomo esté rodeado de ocho electrones (menos las excepciones a la regla del octeto vistas antes), manteniendo como propios sus electrones de valencia.

Reglas para diseñar las estructuras de Lewis de moléculas complejas:

- Determinar el total de los electrones de la capa externa de cada átomo (E), a este valor le tenemos que sumar o restar los electrones correspondientes a las cargas.
- Calcular el total de electrones que caben en la capa de valencia de cada átomo (V). (considerar las excepciones a la regla del octeto)
- Obtener el total de pares de electrones compartidos -enlaces- (C). $C = \frac{V - E}{2}$
- Calcular los pares de electrones no enlazantes (N). $N = \frac{E}{2} - C$
- Colocar los átomos de la forma más simétrica posible, estableciendo cual es el átomo central (normalmente el que tiene mayor covalencia o el menos electronegativo)
- Unir esos átomos con los enlaces que resultan de calcular C .
- Distribuir N por los átomos hasta que todos tengan el octeto completo (teniendo en cuenta las excepciones).

Ejemplo 3

Obtén la estructura de Lewis para el H_2SO_2 .

Primero calculamos los electrones de valencia y el total de electrones que caben en cada capa para, a partir de esos datos determinar los pares de electrones compartidos y los no enlazantes.

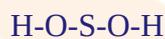
Elemento	Configuración electrónica	e ⁻ de valencia	capacidad c. v.
H	1s ¹	1x2 = 2	2x2=4
O	1s ² 2s ² 2p ⁴	6x2=12	8x2=16
S	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴	6	8
Total		20	28

$$C = \frac{V - E}{2} = \frac{28 - 20}{2} = 4 \quad N = \frac{E}{2} - C = \frac{20}{2} - 4 = 6$$

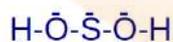
Determinamos el átomo central que en para este compuesto, y siempre que tengamos un oxoácido, será el elemento que no sea O o H, en este caso el S. Además, en los oxoácidos cada H va a estar unido a un O.



Distribuimos los enlaces



y los pares no enlazantes.

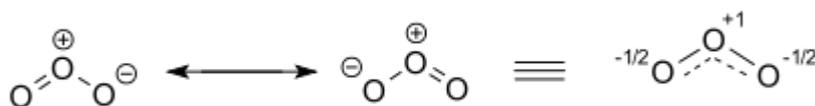


Verificamos la carga de los átomos contando los electrones que posee cada uno en la estructura de Lewis y los que tiene en la capa de valencia. Si la carga de la estructura resultante no coincide con la de la molécula o ion, deberíamos reformular la molécula para que la carga sea la correcta.

Resonancia

Cuando en una molécula existen dobles enlaces hay veces que la colocación de éstos no corresponde a una posición fija, sino que pueden colocarse en varias posiciones diferentes en torno a un mismo átomo. Todas estas posiciones representan las posibles estructuras de Lewis de la molécula y todas contribuyen a la estructura final. Esta estructura final se denomina *híbrido de resonancia*, porque para construirla se tiene en cuenta todas las posibles distribuciones.

Cuando esto ocurre la distancia de enlace no corresponde a la de un enlace simple o a la de un doble, tomando en realidad un valor intermedio entre ambas. Lo mismo ocurre cuando en la molécula aparecen triples enlaces.



La existencia de formas resonantes conlleva un aporte energético negativo denominado **energía de resonancia**, que produce una disminución energética que estabiliza el sistema. Esta será mayor cuantas más sean las estructuras resonantes que se puedan postular para una molécula.

Enlace covalente dativo

A veces ocurre que los 2 electrones implicados en un enlace provienen del mismo átomo, en vez de un electrón de cada uno. En ese caso el enlace se denomina enlace coordinado dativo:

Enlace covalente dativo: enlace en el cual un átomo aporta los 2 electrones del enlace covalente.



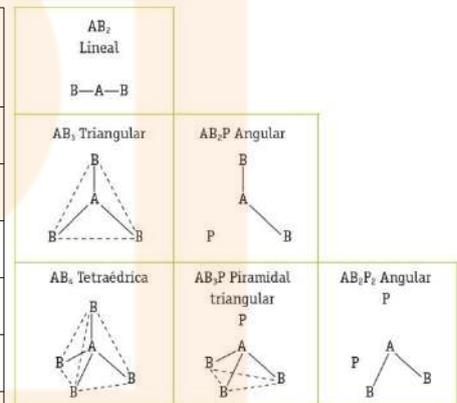
Teoría de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (T.R.P.E.C.V.)

A diferencia del enlace iónico, el enlace covalente es direccional y muchas de las propiedades de las moléculas covalentes se explican por la forma que adquiere la molécula.

Esta teoría complementa la teoría de Lewis para predecir cual va a ser la geometría de una molécula dada siguiendo la siguiente regla: “Los pares electrónicos (pares no enlazantes o enlaces) se repelen unos a otros, por lo que se sitúan espacialmente lo más alejados posible entre sí”.

Teniendo en consideración dicha norma, la geometría de los tipos de moléculas más comunes es la siguiente:

n.º pares de e ⁻	Tipo de molécula	Geometría	Ejemplo
2	AB ₂	Lineal	BeCl ₂
3	AB ₃	Triangular plana (T.P.)	BF ₃
3	AB ₂ P	Angular (distribución T.P.)	SO ₂
4	AB ₄	Tetraédrica (T)	CH ₄
4	AB ₃ P	Pirámide triangular (dist T)	NH ₃
4	AB ₂ P ₂	Angular (distribución T)	H ₂ O



Teoría del enlace de valencia (TEV)

[Como se ha visto, las estructuras electrónicas de Lewis tienen limitaciones: la regla del octeto no siempre se cumple y además, es necesario utilizar la TRPECV para poder explicar la geometría de las estructuras.

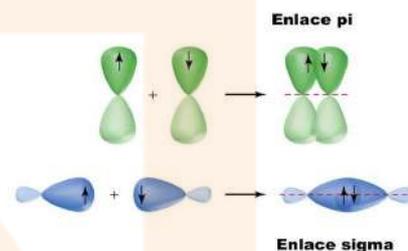
Por esa razón, para explicar el enlace covalente se propone una nueva teoría, llamada teoría de enlace de valencia. La base de esta teoría es el uso de los orbitales atómicos.]

Según esta teoría, el enlace entre 2 átomos se forma al solaparse un orbital atómico con un electrón de un átomo con otro orbital atómico con un electrón de otro átomo distinto. Al superponerse los dos orbitales atómicos se forma un *orbital molecular*, constituido por dos electrones, que es lo que va a producir el enlace entre los átomos.

Si los orbitales que se solapan son *s* o *p*, se pueden considerar dos tipos de enlaces:

Enlace σ . Se forma por solapamiento frontal, de un orbital *s* o *p* de un átomo con un orbital *s* o *p* de otro átomo. Este solapamiento origina enlaces sencillos.

Enlace π . Aparece en una molécula una vez que se ha formado un enlace σ . Se forma por un solapamiento lateral de un orbital *p* de un átomo con un orbital *p* de otro átomo. Cuando sólo se solapa un orbital de cada átomo se forma un enlace doble (1 enlace σ y otro π). Cuando se solapan 2 orbitales *p* de cada átomo entre sí se origina un enlace triple (1 enlace σ y 2 π).



Como el solapamiento es mayor en un enlace σ que en uno π , el enlace σ es más fuerte que el π .

Hibridación de orbitales atómicos.

En muchas moléculas, no se puede explicar su estructura real mediante el solapamiento de orbitales atómicos, porque la orientación espacial de estos orbitales en el átomo central, no coincide con la orientación espacial de los enlaces en la molécula. Para solucionar este problema, la TEV propone que en la formación de un enlace no participan los orbitales atómicos puros del átomo sino una mezcla de ellos, que origina nuevos orbitales que poseen la orientación adecuada para formar el enlace. Esta mezcla de orbitales es lo que se denomina

Hibridación: combinación lineal de orbitales atómicos de un mismo átomo para originar orbitales atómicos híbridos.

En el proceso de hibridación:

- Los orbitales que interactúan pertenecen al mismo átomo y casi siempre son de la capa de valencia, por lo que al tener energía similar ocurre la hibridación.
- El número de orbitales híbridos que se forman es igual al número de orbitales atómicos que interactúan.

- Los orbitales híbridos se designan utilizando las letras correspondientes a los orbitales atómicos que le dieron origen con un superíndice que indica el número de orbitales atómicos de cada tipo que participan en la hibridación.
- La orientación espacial de los orbitales híbridos sigue la *TRPECV* y depende del número de orbitales que se formen: 4 orbitales orientación tetraédrica, 3 triangular plana y 2 lineal.

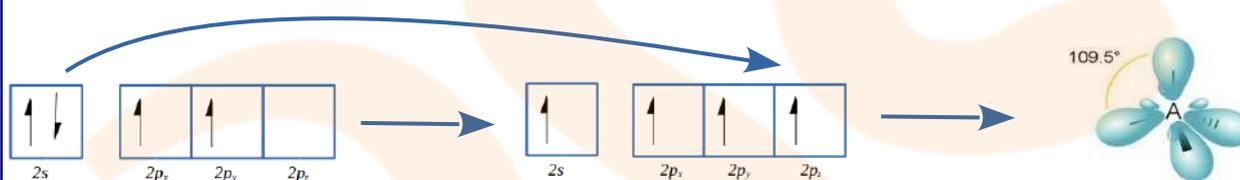
Solo se estudiarán los 3 tipos de hibridaciones más comunes: sp^3 , sp^2 y sp .

Hibridación sp^3 .

Este tipo de hibridación se forma a partir de 1 orbital s y 3 orbitales p del mismo átomo, originando 4 orbitales híbridos sp^3 , los cuales están distribuidos espacialmente lo más alejados entre sí, adquiriendo una geometría tetraédrica.

El ejemplo más representativo de este tipo de hibridación se da en el átomo de carbono: si nos fijamos en su configuración electrónica, sólo presenta 2 electrones desapareados, lo que no explica los compuestos que forma el C con 4 enlaces, como el CH_4 .

La manera de justificar los 4 enlaces es mediante una promoción electrónica: uno de los 2 electrones que están en el orbital $2s$ pasa al $2p$ que está vacío; y la combinación del orbital s y los 3 orbitales p forman 4 orbitales híbridos iguales sp^3 .

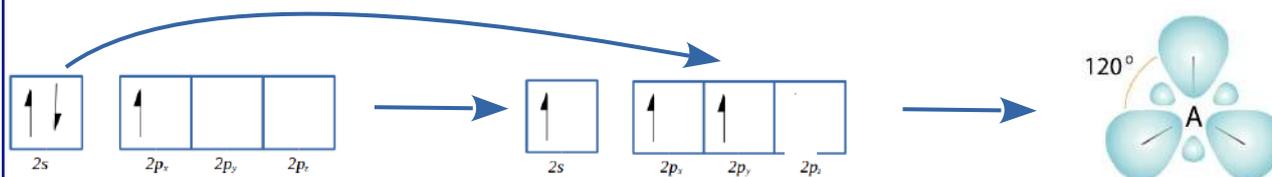


Hibridación sp^2 .

Se forma a partir de 1 orbital s y 2 orbitales p del mismo átomo, originando 3 orbitales híbridos sp^2 , los cuales están distribuidos espacialmente lo más alejados entre sí, adquiriendo una geometría trigonal plana.

Para explicar este tipo de hibridación seguiremos un razonamiento análogo al anterior, pero en este caso con la molécula de BCl_3 .

A tenor de la configuración electrónica del boro, cabría esperar sólo 1 enlace debido al único electrón desapareado, pero no es así, presenta 3 uniones B-Cl formando un ángulo de 120° . La razón de esa distribución es la misma que antes: un electrón del orbital $2s$ promociona a un orbital $2p$ vacío y los 3 orbitales semillenos se combinan entre sí para originar 3 orbitales híbridos iguales sp^2 .

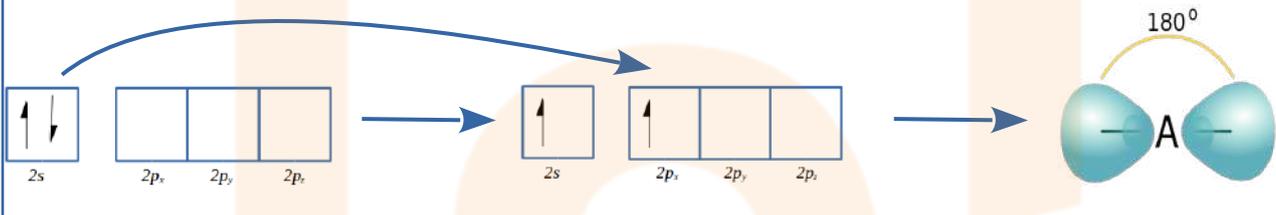


Hibridación sp .

Ahora la hibridación ocurre con 1 orbital s y 1 orbital p del mismo átomo, originando 2 orbitales híbridos sp , los cuales están distribuidos espacialmente formando un ángulo de 180° , adquiriendo una geometría lineal.

La molécula que emplearemos ahora será la del hidruro de berilio BeH_2 .

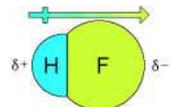
El Be no tiene electrones desapareados, por lo que cabría pensar que no va a formar moléculas. Pero las forma lineales. Para llegar a esa estructura ocurre una promoción de uno de los dos electrones del orbital $2s$ a un orbital $2p$ vacío; esos 2 orbitales se combinan entre sí y originan 2 orbitales híbridos sp .



Polaridad de un enlace

Cuando los átomos que forman un enlace covalente tienen diferente electronegatividad, los electrones que lo forman se van a ver atraídos por el átomo de mayor electronegatividad, lo que va a originar dos zonas con carga (densidad de carga): una positiva y otra negativa. El átomo más electronegativo presentará la densidad de carga negativa (δ^-) y el menos electronegativo la positiva (δ^+). Se crea de esa manera un **dipolo**.

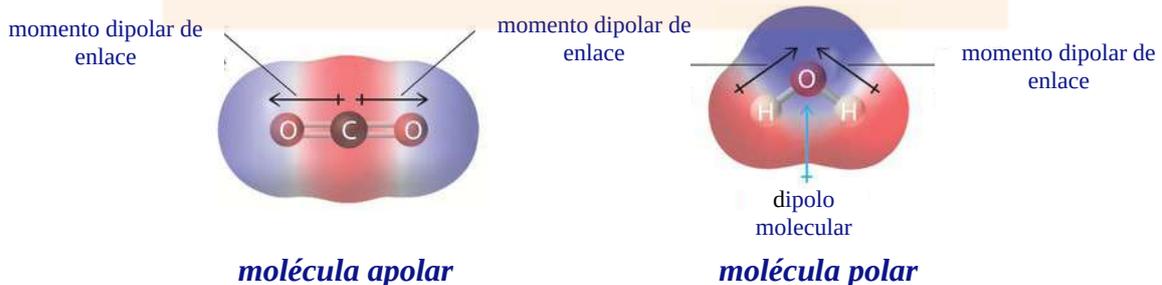
Momento dipolar (μ): es la magnitud que mide la polaridad de una molécula.



Se representa por un vector cuyo origen está en la zona positiva y el final en la negativa.

No solamente podremos hablar de polaridad de enlace, sino también de moléculas polares.

Molécula polar: una molécula es polar cuando la resultante de todos los momentos dipolares de los enlaces de la misma es distinto de 0. En el caso de que esa resultante sea 0, la **molécula es apolar**.



Ejemplo 4

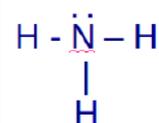
Indique si el amoníaco es polar y cuál es la hibridación del átomo de nitrógeno.

Para determinar si la molécula es polar realizamos primero la estructura de Lewis, después determinamos la geometría de la molécula, vemos si los enlaces son polares y por último determinamos si los momentos dipolares se anulan.

Elemento	Configuración electrónica	e ⁻ de valencia	capacidad c. v.
H	1s ¹	1x3 = 3	2x3=6
N	1s ² 2s ² 2p ³	5x1=5	8x1=8
Total		8	14

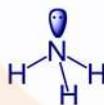
$$C = \frac{V - E}{2} = \frac{14 - 8}{2} = 3$$

$$N = \frac{E}{2} - C = \frac{8}{2} - 3 = 1$$

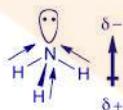


El átomo central es el N. Distribuimos los enlaces y los pares no enlazantes:

Aplicamos la T.R.P.E.C.V. para determinar la geometría: molécula tipo AB₃P por lo que la geometría es de pirámide triangular.



Como la electronegatividad del N es mayor que la del H, los enlaces N-H son polares y los momentos dipolares resultantes no se anulan entre sí, la molécula es polar.



Para ver la hibridación nos fijamos en el número de enlaces y los pares de electrones no enlazantes. Como suman 4, la distribución espacial que mantiene lo más alejados posibles esas 4 densidades electrónicas es la tetraédrica y, la hibridación correspondiente a esa geometría es la sp³.

Propiedades de las sustancias covalentes.

Dentro de los compuestos covalentes nos podemos encontrar con moléculas covalentes (apolares y polares) y con las redes covalentes.

Moléculas covalentes apolares (O₂, N₂, CH₄...):

- No tienen puntos de fusión y ebullición elevados, debido a que las fuerzas intermoleculares (dispersión de London) son débiles en estos casos.
- La solubilidad de estos compuestos es elevada en disolventes apolares.
- No son conductores eléctricos o térmicos.

Moléculas covalentes polares (H_2O , HCl , clorometano...):

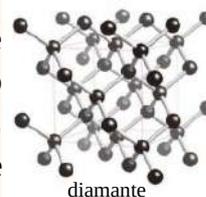
- Tienen altos puntos de fusión y ebullición (más altos cuanto mayor sea su polaridad), debido a la existencia de fuerzas intermoleculares (puentes de hidrógeno o dipolo-dipolo).
- Son muy solubles en disolventes polares.
- Son buenos conductores.

Redes covalentes:

Son sustancias formadas por un número muy elevado de átomos distintos o iguales unidos entre sí mediante enlace covalente.

Las más comunes son las que están formadas a partir de carbono o de silicio.

El primero presenta 2 formas alotrópicas principales: el diamante (átomos de carbono unidos en las tres direcciones del espacio con geometría sp^3) o grafito (átomos de carbono con geometría sp^2 que componen hexágonos unidos en dos direcciones formando láminas), mientras que el segundo lo hace como sílice (SiO_2), que forma minerales como cuarzo, ópalo, etc.



Las redes que forman los sólidos covalentes macromoleculares son:

- Extremadamente rígidas, por lo que tienen altos puntos de fusión y ebullición.
- Duros.
- Malos conductores.
- Normalmente insolubles.

Cuanto más simétrica sea la estructura y, por tanto, más compacta, mayor será la dureza y los puntos de fusión y ebullición.

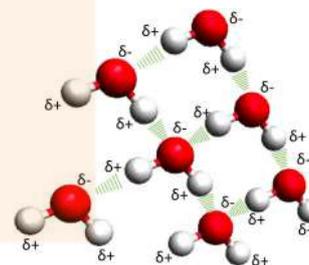
**5. FUERZAS INTERMOLECULARES**

Son interacciones que ocurren entre moléculas covalentes. No se puede hablar de enlace porque la energía puesta en juego es muy pequeña en comparación con la del enlace covalente.

Los dos tipos de fuerzas intermoleculares son: *Puentes de hidrógeno* y *Fuerzas de van der Waals*.

Puentes de hidrógeno

Puente de hidrógeno: interacción electrostática atractiva entre moléculas. Se produce entre aquellas moléculas que tienen un átomo de hidrógeno unido a átomo muy electronegativo y pequeño (F, O, N).



En estos casos, el átomo unido al hidrógeno atrae gran parte de la carga eléctrica del enlace, originando una fuerte densidad de carga positiva sobre el hidrógeno y negativa sobre sí mismo, lo que provoca que las moléculas puedan interactuar entre sí mediante atracción electrostática.

Los compuestos covalentes con enlace de hidrógeno tienen las mismas propiedades que los análogos de su grupo, a excepción del punto de fusión y ebullición que son más altos que los esperados. Esto se explica por la energía adicional que es preciso comunicar a las moléculas para romper sus fuertes asociaciones electrostáticas intermoleculares a fin de hacerlas cambiar de estado.

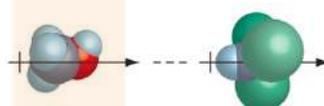
Fuerzas de van der Waals.

[Estas fuerzas son las responsables de muchos fenómenos físicos y químicos como la adhesión, rozamiento, difusión, tensión superficial y viscosidad]

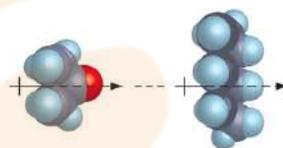
Son interacciones intermoleculares que dependen exclusivamente del tamaño, forma y polaridad de la molécula. Son tan débiles que no se las puede considerar un enlace, sólo se las considera una atracción. Son más débiles que las interacciones por puentes de hidrógeno.

Estas fuerzas se clasifican en:

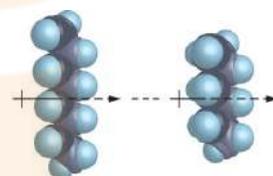
Dipolo-dipolo: se origina entre 2 moléculas polares. Al aproximarse las dos moléculas se produce una atracción entre la zona con densidad de carga positiva de una de ellas con la negativa de la otra. Esta fuerza es más intensa cuanto mayor es la polarización de la molécula.



Dipolo-dipolo inducido: cuando una molécula polar se aproxima a otra no polar, induce en ésta un dipolo transitorio, pudiéndose entonces producir una interacción electrostática entre el dipolo y el dipolo inducido.



Fuerzas de dispersión o de London: Como los electrones están en continuo movimiento, en un momento dado en las moléculas apolares puede ocurrir una cierta asimetría eléctrica, lo que conduce a la formación de dipolos instantáneos. Estos, a su vez, pueden originar dipolos inducidos en las moléculas cercanas.



Estas fuerzas crecen cuanto mayor es el tamaño de la molécula.

6. ENLACE METÁLICO

Enlace metálico: unión de elementos metálicos entre sí.

Las densidades de los metales son bastante elevadas por lo general, debido a que sus átomos se agrupan de forma muy cercana unos con otros, con lo que se producen estructuras muy compactas en forma de redes tridimensionales.

Para explicar este tipo de enlace, se emplean 2 teorías distintas: el *modelo del gas o mar de electrones* y la *teoría de bandas*.

Modelo del gas o mar de electrones

Este modelo se basa en que los metales están formados por la aglomeración de iones positivos bañados por un *mar de electrones*.

En esta situación, los electrones de valencia de cada átomo no pertenecen al propio átomo de forma individual, sino que están deslocalizados por toda la red.

Esto explica la relativa facilidad que tienen los electrones para desplazarse por la estructura metálica, lo que produce las elevadas conductividades y los efectos de emisión electrónica.

Esta teoría también justifica la ductibilidad y maleabilidad de los metales pues, al aplicar una fuerza, se produce un desplazamiento de los cationes que, aunque cambian de posición en la red cristalina, no modifica la estructura ya que pasan a ocupar posiciones similares.

Teoría de bandas.

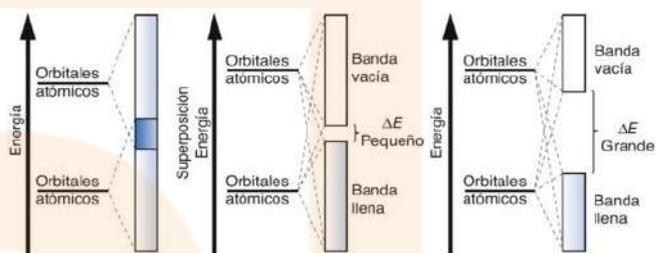
Este modelo supone que, al ser muy compacta la red metálica, los átomos que la forman se encuentran muy cercanos unos a otros, de manera que sus orbitales atómicos de valencia se superponen entre sí, originando 2 bandas, la de valencia y la de conducción.

La primera banda está formada por los orbitales necesarios para alojar todos los electrones de valencia. Está completamente llena y en ella no hay posibilidad de que los electrones se muevan, por lo que no puede haber conducción de la electricidad. La segunda banda está formada por el resto de orbitales vacíos. Ambas bandas están separadas por cierto valor de energía. En función de cual sea, se definen los materiales conductores, semiconductores y aislantes.

En los **conductores**, las dos bandas están solapadas o sin diferencia de energía entre ellas, de tal manera que los electrones que están en la banda de valencia pueden pasar fácilmente a la de conducción, teniendo libertad de movimiento y, por lo tanto, conduciendo la electricidad.

En los **semiconductores** las bandas no se superponen, pero la energía entre ellas es pequeña, de tal manera que aplicando cierto valor de energía al metal se produce el salto electrónico a la banda de conducción y con él, la conducción de electricidad.

Los elementos **aislantes** tienen una energía entre la banda de valencia y la de conducción muy grande, lo que impide el paso de electrones y, por tanto, la conducción de la electricidad mediante la movilidad eléctrica.



Propiedades de los metales

- En general, todos son sólidos a temperatura ambiente, excepto el mercurio.
- Sus puntos de fusión y ebullición varían notablemente.
- Las conductividades térmicas y eléctricas son muy elevadas, lo que se justifica por una estructura con electrones «muy libres», con gran facilidad de movimiento.
- Los metales con sus superficies pulidas no absorben prácticamente nada de la luz que incide sobre ellas sino que la reflejan, de ahí su color plateado; aunque existen unos pocos que sí absorben alguna radiación, por lo que reflejan el color complementario al absorbido.
- Son dúctiles y maleables, por lo que se pueden estirar en hilos o formar láminas.
- Pueden emitir electrones cuando reciben energía en forma de calor o en forma de luz.

RELACIÓN DE PROBLEMAS

Nota: tomar los valores de *Z* que sean necesarios para realizar las estructuras de Lewis

1. Razona cómo varía la energía reticular y los puntos de fusión de NaF , NaCl y NaBr .
2. Atendiendo a los puntos de fusión de los siguientes bromuros alcalinos: LiBr 547°C, NaBr 730°C y KBr 755°C. Razona cómo varía la energía reticular.
3. De los compuestos iónicos MgCl_2 y BeCl_2 , ¿cuál será el más duro y cuál el de mayor temperatura de fusión? ¿Por qué?
4. La reacción de formación del cloruro de sodio es: $\text{Na}(s) + \text{Cl}_2(g) \rightarrow \text{NaCl}(s)$.
Calcula la energía reticular del NaCl a partir de los siguientes datos:
Energía de sublimación del sodio es 108 kJ/mol y su primera energía de ionización es 496 kJ/mol. La energía de disociación del cloro gas es 240 kJ/mol y su afinidad electrónica es -349 kJ/mol. La entalpía de formación del cloruro de sodio sólido es -411 kJ/mol.
5. Determina la afinidad electrónica del cloro (Cl_2) a partir del ciclo de Born-Haber del MgCl_2 .
 $\Delta H_s(\text{Mg})=153,4$ kJ/mol; $E.I._1(\text{Mg})=738$ kJ/mol; $E.I._2(\text{Mg})=1451$ kJ/mol; $\Delta H_{dis}(\text{Cl}_2)=240$ kJ/mol; $\Delta H_f(\text{MgCl}_2)=-641,6$ kJ/mol; $U(\text{MgCl}_2)=-2326$ kJ/mol.
6. Calcula la energía reticular del $\text{Na}_2\text{O}(s)$ a partir de los siguientes datos:
 $E.I.(\text{Na})=494$ kJ/mol; $A.E._1(\text{O}_2)=-141$ kJ/mol; $A.E._2(\text{O}_2)=791$ kJ/mol; $\Delta H_f(\text{Na}_2\text{O})=-415$ kJ/mol; $\Delta H_s(\text{Na})=107$ kJ/mol; $\Delta H_{dis}(\text{O}_2)=498$ kJ/mol
7. ¿Por qué la molécula BH_3 es apolar si los enlaces B—H son polares?
8. Ordena las siguientes moléculas por orden creciente de su polaridad: SO , SeO y TeO .
9. Al comparar dos moléculas similares como el CO_2 y el SO_2 se observa que en la primera el momento dipolar es cero, mientras que en la segunda no. Justifica esto de forma razonada.
10. De las siguientes moléculas: Cl_2 , CO_2 , N_2 , C_2H_4 (etileno), H_2O y NH_3 .
a) ¿Cuáles tienen todos los enlaces simples? b) ¿Dónde existe algún doble enlace? c) ¿y triple?
11. Representa las estructuras de Lewis de las especies químicas: NH_3 , HNO_2 y NO_3^- NH_4^+ .
Justifica también su estructura e indica si el amoníaco es polar.
12. Representa la estructura de Lewis para cada una de las especies que se dan a continuación y luego, utilizando la *T.R.P.E.C.V.*, predice la geometría de las especies: CO_3^{2-} SiH_4 CO_2 H_2O

13. Cite ejemplos de moléculas que contengan: a) un carbono de hibridación sp ; b) boro con hibridación sp^2 ; c) carbono con hibridación sp^3 ; d) nitrógeno con hibridación sp^3
14. Para las siguientes moléculas: agua (H_2O), catión amonio (NH_4^+) y oxonio (H_3O^+), razona cuál presenta un ángulo mayor.
15. Describe la estructura y enlace de las moléculas propuestas indicando la hibridación correspondiente al átomo central: a) CCl_4 ; b) BH_3 ; c) H_2S ; d) BeH_2 .
16. Deduce, aplicando la teoría de hibridación de orbitales, la geometría de las moléculas siguientes: etileno ($CH_2=CH_2$), acetileno ($CH\equiv CH$), benceno (C_6H_6), metanol (CH_3-CH_2-OH) y metanal (CH_3-CHO).
17. ¿Qué clases de enlace hay en el cianuro de sodio, $NaCN$?
18. Explica brevemente por qué el agua disuelve a los compuestos iónicos mientras que el CCl_4 no lo hace.
19. Indica cuáles de los siguientes compuestos pueden formar puente de hidrógeno: a) metanol (CH_3OH), b) metilamina (CH_3NH_2), c) etano (CH_3-CH_3), d) etanona (CH_3-CH_2O).
20. ¿Cuál de las sustancias siguientes tiene las mayores fuerzas intermoleculares de atracción? ¿Porqué? H_2O ; H_2S ; H_2Se ; H_2Te ; H_2 .
21. Explica razonadamente qué tipo de enlace o fuerza intermolecular hay que vencer para fundir: a) Cloruro de potasio (KCl), b) sulfuro de hidrógeno (SH_2), c) Agua, d) hierro.
22. Estudia qué fuerzas deben romperse para fundir el $NaCl$ y el Fe , y para vaporizar el H_2O .
23. Comenta razonadamente la conductividad eléctrica de los siguientes sistemas: un hilo de Cu , un cristal de $Cu(NO_3)_2$ y una disolución de $Cu(NO_3)_2$.
24. Indica qué tipo de enlace predominará en los compuestos: a) F_2 ; b) $NaBr$; c) Al ; d) CH_4 .
25. Explica los siguientes hechos: a) La sal común $NaCl$ funde a $801^\circ C$ sin embargo, el cloro es un gas a $25^\circ C$. b) El diamante no conduce la electricidad, y el Fe sí. c) La molécula de cloro es covalente mientras que el $CsCl$ es iónico.

Problemas Selectividad

- (2011 E)
 - Defina el concepto de fuerzas intermoleculares.
 - b) Explique razonadamente qué tipo de enlace químico debe romperse o qué tipo de fuerza intermolecular hay que vencer para fundir las siguientes especies: 1) cloruro sódico; 2) dióxido de carbono; 3) agua; 4) aluminio.
- (2011 E) b) ¿Por qué la molécula de BF_3 es apolar si los enlaces B-F son polares?
- (2012 O) Considere las siguientes moléculas: H_2O , HF , H_2 , CH_4 y NH_3 . Conteste justificadamente a cada una de las siguientes cuestiones:
 - ¿Cuál o cuáles son apolares?
 - ¿Cuál presenta enlaces más polares?
 - ¿Cuál presenta enlaces menos polares?
 - ¿Cuál o cuáles pueden presentar enlace de hidrógeno?
- (2013 O)
 - Razonar qué hibridación presenta el átomo de Oxígeno ($Z=8$) en la molécula de agua.
 - Explicar la geometría y polaridad de la molécula de agua.
- (2013 E) b) ¿Por qué la molécula de BCl_3 es apolar si los enlaces B-Cl son polares?
- (2013 E)
 - Definir el concepto de fuerzas intermoleculares. Indicar dos tipos de estas estas fuerzas.
 - b) Explicar razonadamente qué tipo de enlace químico debe romperse o qué tipo de fuerza intermolecular hay que vencer para fundir las siguientes especies: 1) cloruro sódico (NaCl); 2) dióxido de silicio (SiO_2); 3) hielo y 4) aluminio.
- (2014 O) Para las moléculas BF_3 y CHF_3 ,
 - Escribir sus estructuras de Lewis;
 - Establecer su geometría molecular, indicando la hibridación del átomo central;
 - Justificar la polaridad de ambas moléculas.Números atómicos (Z): $\text{H}=1$, $\text{B}=5$, $\text{C}=6$, $\text{F}=9$.
- (2014 E)
 - Citar ejemplos de moléculas que contengan: 1) un carbono con hibridación sp ; 2) boro con hibridación sp^2 3) carbono con hibridación sp^3 ; 4) nitrógeno con hibridación sp^3 .
 - b) Explicar brevemente por qué el agua disuelve a los compuestos iónicos mientras el CCl_4 no lo consigue.
- (2015 O)
 - Escribir las estructuras de Lewis correspondientes a las especies químicas: fluorometano (CH_3F), dióxido de carbono (CO_2), tricloruro de boro (BCl_3) y amoníaco (NH_3);
 - b) Indicar, razonadamente, si alguna de ellas presenta polaridad.Números atómicos Z : $\text{H}=1$; $\text{B}=5$; $\text{C}=6$; $\text{N}=7$; $\text{O}=8$; $\text{F}=9$; $\text{Cl}=17$.

- 10.** (2015 E) Dados los elementos de número atómico: A=8; B=16; C=20; D=24.
- Ordenarlos en orden creciente de su radio atómico, razonando la respuesta;
 - Razonar el tipo de enlace formado entre los elementos A y B y entre los elementos B y C; indicando dos propiedades características de cada compuesto resultante.
- 11.** (2016 O) Para la molécula de clorometano o cloruro de metilo, CH₃Cl,
- Representar su estructura de Lewis;
 - Razonar la geometría que presenta;
 - Razonar la hibridación que presenta el átomo central; d) Justificar su polaridad, si la presenta.
- Números atómicos: H=1, C=6, Cl=17.
- 12.** (2016 E) Los elementos A, B, C y D tienen números atómicos 19, 16, 12 y 9, respectivamente.
- Escribir la configuración electrónica de A, B²⁻, C²⁺ y D.
 - Razonar qué compuestos formarán los elementos B y C, y D y A, respectivamente, indicando el tipo de enlace formado.
- 13.** (2016 E) Dadas las siguientes moléculas: H₂S, CCl₄, HF, BF₃.
- Escribir la estructura de Lewis de cada una de ellas.
 - Indicar, razonadamente, qué moléculas presentan polaridad.
- Números atómicos: H=1, B=5, C=6, F=9, S=16, Cl=17.
- 14.** (2017 E) Dada la molécula de BeCl₂, indicar, razonadamente:
- Tipo de hibridación del átomo de berilio.
 - Polaridad de los enlaces y polaridad de la molécula.
 - Indicar dos propiedades de las moléculas covalentes
- Números atómicos: Be=4, Cl=17.
- 15.** (2018 O)
- Mediante la teoría de TRPECV, explicar la geometría de las siguientes moléculas, indicando la hibridación que presentan: 1) CCl₄; 2) BF₃; 3) HC≡CH; 4) H₂O.
 - Razonar cuales de las especies anteriores tienen enlaces por puente de hidrógeno.
- Números atómicos, Z: H=1, B=5, C=6; O=8, F=9, Cl=17.
- 16.** (2018 E) Dadas las moléculas: 1) eteno; 2) etino; 3) trifluoruro de boro y 4) amoníaco;
- Escribir sus estructuras de Lewis;
 - Razonar sus polaridades, si las tienen y
 - Explicar su hibridación según la TRPECV.
- Números atómicos, Z: H=1; B=5; C=6; N=7; F=9

- 17.** (2019 O) Dadas las moléculas BCl_3 y NH_3 .
- Escribir la estructura de Lewis de ambas moléculas e indicar su geometría e hibridación según la Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV).
 - Explicar la polaridad de las moléculas.
 - Justificar, cuál de ellas presenta enlaces por puente de hidrógeno.
- Números atómicos (Z): $H=1$; $B=5$; $N=7$; $Cl=17$
- 18.** (2019 E) Razonar, qué tipo de enlace se puede dar entre Br y Sr. Indica dos propiedades de este tipo de enlace.
- Números atómicos (Z): $Br=35$; $Sr=38$
- 19.** Sabiendo que el $\text{Li}(s)$ reacciona con el $\text{F}_2(g)$ para dar $\text{LiF}(s)$,
- Construir el ciclo de Born-Haber definiendo cada una de sus etapas.
 - Calcular la energía de red (U) por mol de LiF , utilizando los valores de las energías (en $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) de los procesos siguientes: sublimación del litio: 155,2; energía de ionización del litio: 520,0; afinidad electrónica del $\text{F}(g)$: -333,0; disociación de la molécula de $\text{F}_2(g)$: 150,6; calor de formación (ΔH_f°): -594,1
- 20.** Dadas las moléculas: 1) CH_4 ; 2) BCl_3 ; 3) BeH_2 , y 4) NH_3
- Escribir la estructura de Lewis de cada una de ellas.
 - Indicar, razonadamente, la hibridación que presenta cada una de ellas.
 - Justificar si alguna de ellas presenta enlaces por puentes de hidrógeno.
- Números atómicos (Z): $H = 1$; $Be = 4$; $B = 5$; $C = 6$; $N = 7$; $Cl = 17$.