



1. Representación de Lewis del enlace.
2. Enlace covalente
 - 2.1. Método de repulsión de electrones de capa de valencia
 - 2.2. Teoría de enlace valencia
 - 2.3. Teoría de hibridación
 - 2.4. Teoría de orbitales moleculares (TOM).
3. Enlace iónico
4. Enlace metálico
5. Fuerzas intermoleculares.
6. Sólidos covalentes.
7. Propiedades de las sustancias en base a su enlace.

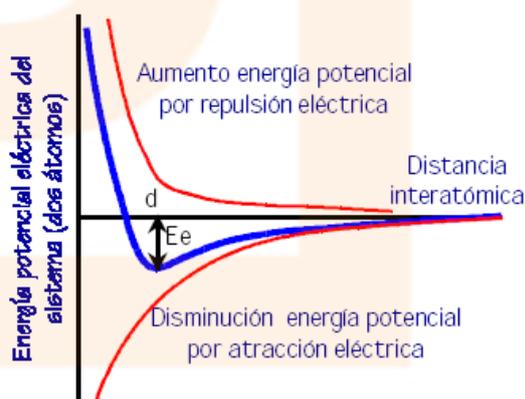
Ya sabemos que los cuerpos en la naturaleza, tienden a la mínima energía potencial; dicho de otra forma, tienden a la máxima estabilidad. Los átomos constituyentes de la materia no son una excepción. Salvo algunas excepciones los átomos consiguen su máxima estabilidad adquiriendo la configuración electrónica de gas noble (ns^2p^6). Lo que se conoce como regla del OCTETO. Y con este fin se unen formando agregados superiores (moléculas y cristales).

En los casos de átomos que poseen pocos electrones (H, Li), la estabilidad se consigue alcanzando la estructura de gas noble, Helio ($1s^2$). Cuando "n" átomos se unen entre sí es porque la energía potencial de esos "n" átomos unidos es menor que la E_p de esos "n" átomos por separado.

Cuando dos átomos se aproximan, desde el punto de vista energético existen dos posibilidades:

1.-Al aproximarse dos átomos las nubes electrónicas de ambos se ejercen influencias mutuas, que conducen a un crecimiento de la repulsión recíproca, a medida que la distancia entre ellos disminuye. Con ello la energía potencial del sistema aumenta y la estabilidad por tanto disminuye. En este caso los electrones permanecerán separados y no se unirán. Ej: dos gases nobles. (curva a)

2.-Puede ocurrir que al aproximarse dos átomos, se ejercen una serie de interacciones entre las nubes electrónicas (atracciones) y la energía potencial disminuye cuando disminuye la distancia. Al disminuir más la distancia, sigue disminuyendo la energía potencial, hasta que las repulsiones (protón-protón; electrón-electrón) son mayores que las atracciones empezando a aumentar la energía potencial del sistema.



Los átomos por tanto quedan enlazados a aquella distancia para la cual la disminución de la energía potencial del sistema ha sido máxima. Los átomos quedan enlazados a aquella distancia para la cual la energía potencial es mínima. A esa distancia se le denomina DISTANCIA DE ENLACE.

A la diferencia de energía entre la E_p del sistema formado por los dos átomos separados, y la energía potencial formada por los dos átomos unidos se le denomina



ENERGÍA DE ENLACE. Los átomos podrán unirse de modo general de tres formas diferentes, dando lugar a los tres tipos de enlace generales:

ENLACE IÓNICO: Se forma por la atracción electrostática de iones de signo opuesto. Se forma por la transferencia de electrones de elementos electropositivos a la nube electrónica de elementos electronegativos.

ENLACE COVALENTE: Característico de uniones de elementos no metálicos.(de la derecha del sistema periódico). Formado por compartición de pares de electrones entre los átomos que se unen.

ENLACE METÁLICO: Se caracteriza por la movilidad de los electrones de los átomos implicados en la red metálica.

La capacidad que tiene un átomo para combinarse con otros átomos se denomina valencia. La valencia de un átomo viene determinada por el número de electrones que el átomo es capaz de perder (electrovalencia positiva), ganar (electrovalencia negativa) o compartir (covalencia) con el fin de adquirir una estructura estable (gas noble generalmente).

1.REPRESENTACIÓN DE LEWIS DEL ENLACE .-

En 1916 se estableció un método para explicar de forma sencilla y esquemática el enlace en función de la compartición de los electrones en la capa de valencia. Este método es utilizado para explicar de forma muy sencilla el enlace de tipo covalente que estudiaremos a continuación. Como ya sabemos los átomos tienden a rodearse de ocho electrones en su capa más externas cumpliendo la regla del octeto. En concreto las estructuras de Lewis se basan en representar a los átomos rodeados por los electrones por los que están rodeados en su capa más externa.

No todos los compuestos se pueden explicar por esta teoría como veremos a continuación. En rigor la teoría de Lewis solo la cumplen prácticamente los elementos del segundo periodo .Hay por tanto notables excepciones que iremos comentando. Para la representación de las estructuras de Lewis se siguen los siguientes pasos:

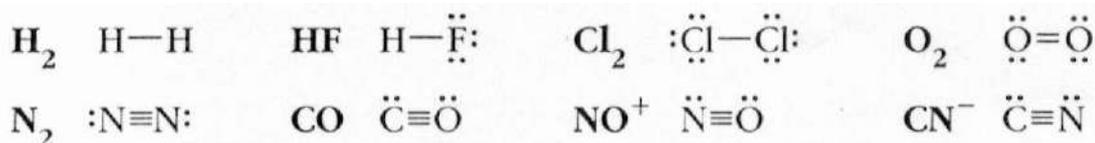
1º.Se calcula el total de los electrones de valencia implicados en la molécula. Todos aparecerán en la estructura final, bien formando pares de enlace o pares solitarios. Se añaden o quitan electrones a este balance sumando o restando la carga, si es que la especie está cargada.

2º .Se elige como átomo central el que posea mayor de valencia excepto que se trate del hidrógeno. En cuyo caso se escoge el de mayor volumen.

3º. Se disponen los electrones alrededor de cada átomo de acuerdo con la regla del octeto.

4º.Si se precisan enlaces múltiples, estos se asignan al átomo central.

5º. El hidrógeno siempre ocupa una posición terminal .al igual que el oxígeno, excepto en las uniones O-H, que es el hidrógeno.





- Cada enlace representa dos electrones .Uno aportado por cada átomo.
- Para el cálculo de el número de electrones de enlace utilizamos la siguiente expresión:

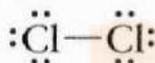
$$\text{Nº de e-enlazados} = \text{nº átomos} \times 8 + \text{nº átomos(H)} \times 2 - \text{e-totales de valencia}$$

- El número de enlaces lo calculamos a partir de la expresión:

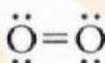
$$\text{Nº de enlaces} = \text{Nº de e-enlazados} / 2$$

Ejemplos :

molécula	Nº electrones de valencia	Nº electrones enlazados	Nº electrones libres	Nº enlaces
Cl ₂	14	2	12	1
O ₂	12	4	8	2
N ₂	10	6	4	3
H ₂ O	8	4	4	2
N ₂ O	16	8	8	4
NO ₂ ⁺	17-1(+)=16	8	8	4
H ₂ S	8	4	4	2
NOCl	18	6	12	3
N ₃ ⁻	15+1(-)=16	8	8	4



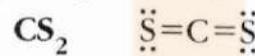
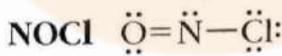
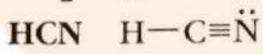
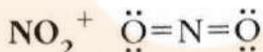
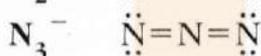
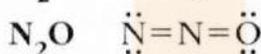
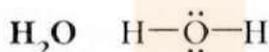
Enlace sencillo



Enlace doble



Enlace triple



Polianiones :

Hay que tener en cuenta que el átomo central no será el oxígeno aunque este sea el de mayor valencia.

Ej. 2 CO ₃ ⁻²	carbono, grupo 14 : 4 electrones de valencia	1C x 4 e- = 4
	Oxígeno, grupo 16 : 6 electrones de valencia ,	3O x 6 e- = 18
	carga negativa : 2 electrones	2
	por lo tanto :	Total = 24e-

Ej. 3 NH_4^{+1} nitrógeno, grupo 15 : 5 electrones de valencia

$$1\text{N} \times 5 \text{e}^- = 5$$

hidrógeno : 1 electrón de valencia ,

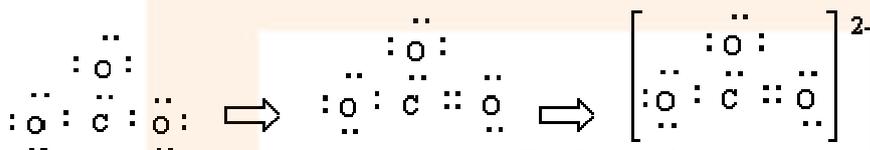
$$4\text{H} \times 1 \text{e}^- = 4$$

carga positiva : 1 electrón menos

$$- 1$$

por lo tanto :

$$\text{Total} = 8\text{e}^-$$

 CO_3^{2-} Total = 24e^- 

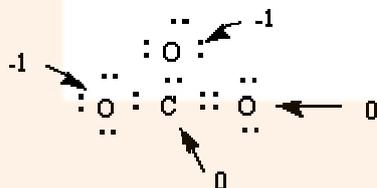
Estructura de Lewis

 NH_4^{+1} Total = 8e^- 

Estructura de Lewis

La diferencia entre los electrones de valencia de un átomo y el número de electrones asignado en la estructura de **Lewis** se denomina como la **carga formal** del átomo. La carga formal esta dada por la siguiente ecuación:

$$\text{CF} = (\text{n}^\circ \text{ de e}^- \text{ de valencia del átomo}) - (\text{n}^\circ \text{ total de e}^- \text{ no enlazantes del átomo}) - 1/2 (\text{n}^\circ \text{ de e}^- \text{ enlazantes del átomo})$$

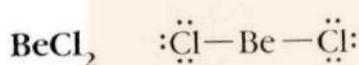
Carga formal para los átomos en CO_3^{2-} .

- Para moléculas neutras la suma de cargas formales debe ser cero.
- Para cationes la suma de cargas formales debe ser igual a la carga positiva.
- Para aniones la suma de cargas formales debe ser igual a la carga negativa.

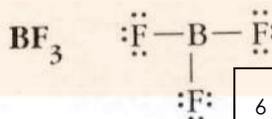
Utilizaremos casi siempre el cálculo de la carga formal para los casos en los que no se cumple la regla del octeto (elementos del periodo 3º,4º,5º...), la carga formal del átomo central ha de ser cero.

**HIPOVALENCIA**

En los siguientes casos no se cumple la regla del octeto y lo mejor es aplicar la regla de igualar la carga formal del átomo central a cero.



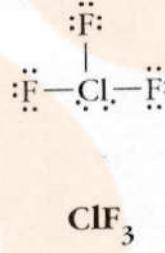
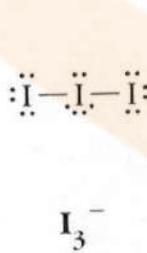
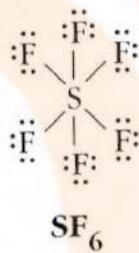
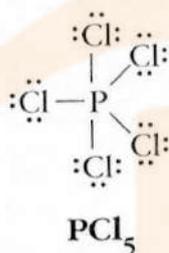
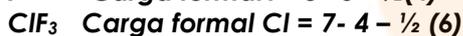
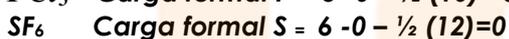
4 e- enlazados para igualar la CF



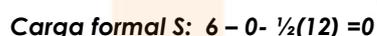
6 e- enlazados para igualar la

HIPERVALENCIA:

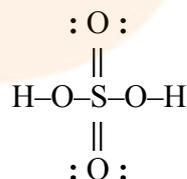
Aplicaremos los criterios de igualar la carga formal a 0.



Ejemplo H_2SO_4 :



El azufre así comparte sus 6 electrones



La posibilidad de formar más enlaces de lo que permite la regla del OCTETO se da en elementos del tercer periodo y posteriores. A partir del tercer periodo aparecen los orbitales de tipo d, de energía parecida a los de tipo s y p del mismo nivel, y cuando un átomo utiliza los orbitales 3d de su capa de valencia, puede albergar más de 8 electrones, que son los que podría colocar en sus orbitales 3s y 3p.

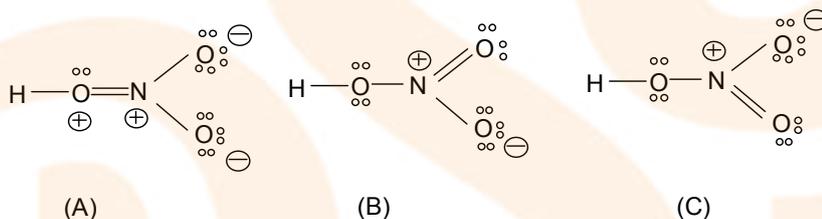
Además existen átomos, como el B, en el caso del BF_3 , que no alcanzan la configuración de gas noble cuando forman una molécula, porque los electrones de su capa de valencia no le permiten crear más enlaces.

**Concepto de RESONANCIA**

Algunas moléculas pueden ser representadas por más de una estructura de Lewis. Las propiedades de la molécula deben describirse entonces como una combinación de varias estructuras de enlace valencia. Por ejemplo, en la molécula de SO_2 se sabe que ambos enlaces $\text{S}=\text{O}$ tienen la misma longitud y la densidad de carga sobre ambos oxígenos también es la misma. La molécula puede representarse por dos estructuras de Lewis, en ambas, los oxígenos están enlazados de forma diferente al azufre.



La molécula real no corresponde a ninguna de las dos estructuras sino que se la representa como un **híbrido** entre ambas. Se dice que la molécula **resuena** entre ambas estructuras y en promedio, lo que se observa es una simetría de carga y distancia de enlaces. En la teoría del orbital molecular, en la que los electrones no están en principio localizados sino que se distribuyen por toda la molécula, esta característica resulta como una consecuencia natural. En esta nomenclatura diríamos que el enlace $\text{S}=\text{O}$ es de **orden 1.5**



Debemos descartar la estructura (A) puesto que hay átomos adyacentes con la misma carga formal. Las estructuras (B) y (C) son equivalentes y se denominan **estructuras resonantes**



2. ENLACE COVALENTE

En el enlace químico **covalente**, los electrones de **enlace** son compartidos por ambos átomos.

Si consideramos dos átomos de hidrógeno, a medida que se aproximan entre sí, se van haciendo notar las fuerzas que atraen a cada electrón al núcleo del otro átomo, hasta que dichas fuerzas de atracción se llegan a compensar con la repulsión que los electrones sienten entre sí. En ese punto, la molécula presenta la configuración más estable. Lo que ha sucedido es que los orbitales de ambos electrones se han solapado, de modo que ahora es imposible distinguir a qué átomo pertenece cada uno de los electrones.

Si embargo, cuando los átomos son distintos, los electrones compartidos no serán atraídos por igual, de modo que éstos tenderán a aproximarse hacia el átomo más electronegativo, es decir, aquél que tenga una mayor apetencia de electrones. Este fenómeno se denomina **polaridad**, y resulta en un desplazamiento de las cargas dentro de la molécula.

Se podría decir que al átomo más electronegativo no le gusta mucho compartir sus electrones con los demás átomos, y en el caso más extremo, deseará que el electrón le sea cedido sin condiciones formándose entonces un **enlace** iónico, de ahí que se afirme que los enlaces covalentes polares tiene, en alguna medida, carácter iónico .

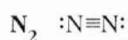
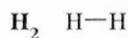
- Dos átomos unidos mediante enlace covalente tienen menos energía que los dos átomos aislados.
- Al igual que en el enlace iónico la formación de un enlace covalente va acompañada de un desprendimiento de energía.
- Se llama **energía de enlace** a la energía necesaria para romper 1 mol de un determinado tipo de enlace.
- La energía de enlace es siempre endotérmica (positiva).
- Ejemplo: para romper 1 mol de $H_2(g)$ en 2 moles de $H(g)$ se precisan 436 kJ, $\Rightarrow E_{\text{enlace}}(H-H) = + 436 \text{ kJ}$
- La distancia a la que se consigue mayor estabilidad se llama "**distancia de enlace**".

Tipos de enlace covalente:

Atendiendo a los pares de electrones compartidos, el enlace covalente se puede clasificar en:

- a) Enlace covalente: Este tipo de enlace cada átomo enlazado aporta un electrón a cada par compartido.
- b) Enlace covalente dativo o coordinado: Uno de los átomos enlazado es el que aporta el par de electrones que se comparten.

a) **Dentro del enlace covalente**, podemos clasificar al enlace en COVALENTE PURO ó APOLAR, formado por la unión de dos átomos iguales . Con lo cual la densidad de carga no se verá desplazada, sino que quedará centrada o igualmente repartida entre los dos átomos.



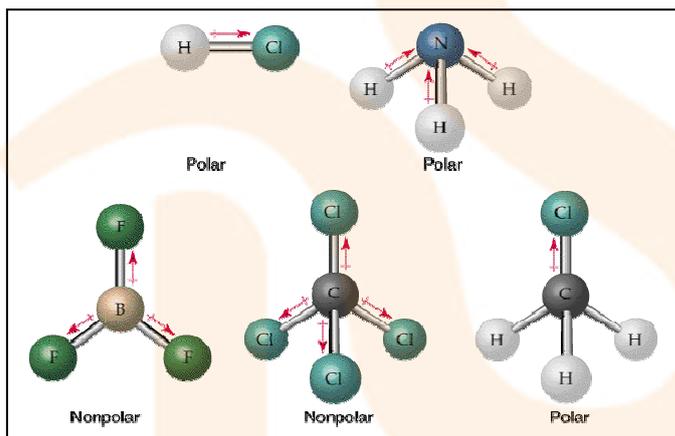
Y si los átomos que se unen no son iguales los electrones no se comparten de forma equilibrada. La nube electrónica se deforma, es asimétrica, aparecen polos eléctricos (molécula POLAR). El átomo que más atrae hacia sí a la nube electrónica es el más electronegativo y queda con mayor densidad de carga negativa.

La polaridad se mide por medio del momento dipolar. Es una magnitud vectorial cuyo módulo depende del valor de cada carga. Y de la distancia de separación entre ellas. Su valor es mayor a medida que aumenta la diferencia de electronegatividad entre los átomos implicados en el enlace.

$$\mu = q \cdot d \quad (\text{unidad : Debye ; } 1 \text{ D} = 3,3310^{-30} \text{ C.m})$$

En las moléculas apolares $\mu = 0$

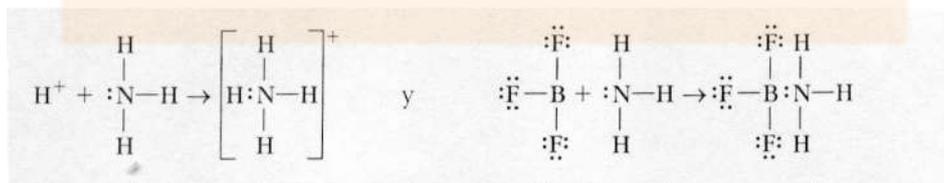
En moléculas muy polares (cercanas al carácter iónico) valores de μ altos.
 $\mu(\text{CsCl}) = 10,42\text{D}$



-Si los pares de e^- son de enlace, la molécula es apolar cuando los pares están distribuidos simétricamente alrededor del átomo central. Los momentos dipolares se contrarrestan.

-Si hay pares de no enlace en el átomo central la molécula es polar generalmente.

b) **Enlace covalente coordinado o dativo**, en el que un átomo aporta el par de electrones al enlace. En el ejemplo del NH_4^+ , la especie H^+ no posee electrones y por tanto los electrones los aporta el átomo de N, la carga positiva estará situada sobre el nitrógeno ya que este le cede un electrón de más al hidrógeno y se queda con defecto de carga negativa. El H^+ elimina ese defecto de carga negativa.





2.1. MÉTODO DE REPLUSIÓN DE LOS ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA (RPECV).-

Es un artificio que permite la predicción bastante exacta de la geometría molecular, realmente no es una teoría de enlace. Basado en la teoría de Lewis predice geometrías pero no explica la formación del enlace ni las distancias de enlace. Las nubes electrónicas de los pares de electrones de la capa de valencia que rodean al átomo central se repelen entre sí, adoptando una disposición espacial que minimiza la repulsión eléctrica.

El método RPECV no está basado en la mecánica cuántica y por tanto no se consideran orbitales a las regiones de densidad electrónica, por lo que podrán alojar a más de dos electrones. **Al considerar sólo la repulsión de los pares electrónicos, los dobles y triples enlaces se pueden considerar como sencillos.**

Para predecir la estructura molecular se sigue el siguiente orden de actuación:

1º Se obtiene la estructura óptima de Lewis. Teniendo en cuenta la regla del octeto y los casos de hipo e hipervalencia.

2º Se cuenta el número de regiones de alta densidad, sin tener en cuenta pares enlazados o de no enlace (e^- de valencia del átomo central + e^- desapareados de átomos ligados).

3º Se representan gráficamente las orientaciones espaciales de mínima repulsión teniendo en cuenta la tabla adjunta.

4º Se colocan los átomos que rodean al átomo central en los extremos de algunas o todas las nubes electrónicas, según los casos.

Este método permite saber como moléculas de fórmula similar (BF_3 ; NF_3 ; ClF_3) presentan geometría muy diferente.

-Moléculas sin pares solitarios: Estructura AB_n

La geometría coincide con estructuras geométricas definidas (Ver tabla). Son las posiciones de los enlaces con menos repulsión de las nubes electrónicas. El átomo central es el de mayor valencia, generalmente coincide con el menos electronegativo.

-Moléculas con pares de electrones solitarios:

La geometría molecular no coincidirá con la distribución de las nubes electrónicas. Existen ahora tres tipos de fuerzas de repulsión: Entre pares enlazantes, entre pares enlazantes y solitarios y entre pares solitarios.

Se suele utilizar la letra E para representar los pares de no enlace. La fórmula general de este tipo de moléculas será: AB_nE_m .

- La repulsión de éstos pares de e^- sin compartir es mayor que entre pares de e^- de enlace.
 - NH_3 : El N tiene 3 pares de e^- compartidos y 1 sin compartir \Rightarrow Ang. enl. = $107'3^\circ < 109'4^\circ$ (tetraédrico)
 - H_2O : El O tiene 2 pares de e^- compartidos y 2 sin compartir \Rightarrow Ang. enl. = $104'5^\circ < 109'5^\circ$ (tetraédrico)



TABLA TRPEV

RPECV	Pares de e ⁻	Pares e ⁻ enlazados (B)	Pares e ⁻ libres (E)	Ejemplo	Forma	
AB ₂	2	2	0	BeCl ₂	Lineal(180°)	
AB ₃	3	3	0	BF ₃	Trigonal(120°)	
AB ₂ E		2	1	SO ₂	Angular	
AB ₄	4	4	0	CH ₄	Tetraédrica(109,5°)	
AB ₃ E		3	1	NH ₃	Pirámide trigonal(107°)	
AB ₂ E ₂		2	2	H ₂ O	Angular (104°)	
AB ₅	5	5	0	PCl ₅	Bipirámide trigonal	
AB ₄ E		4	1	SF ₄	Tetraédro distorsionado	
AB ₃ E ₂		3	2	ClF ₃	Forma de T	
AB ₆	6	6	0	SF ₆	Octaédro	
AB ₅ E		5	1	BrF ₅	Pirámide cuadrada	
AB ₄ E ₂		4	2	XeF ₄	Plana cuadrada	

*Estructura AB₂E₃ no se encuentra en la tabla, sería lineal (I₃⁻; XeF₂)



HECHOS A EXPLICAR EN LA TEORIA DE ENLACE:

La teoría de enlace y el modelo a parte de las geometrías moleculares ha de responder a preguntas sobre la formación del propio enlace, energía molecular y propiedades físicas y químicas.

El modelo RPECV basado en la teoría de Lewis proporciona un método sencillo y directo para predecir geometrías moleculares, pero no explica el carácter íntimo del enlace. No justifica el carácter intermedio de las longitudes de enlace en determinadas moléculas, no permite razonar las características físicas y químicas de las sustancias. En esencia la teoría de Lewis explica de la misma forma el enlace H-H, que el enlace F-F, sin embargo son diferentes en cuanto a formación y tipo de unión, distancias y energías de enlace.

Para justificar todo lo anterior se desarrollaron dos métodos mecano-cuánticos:

Teoría de ENLACE –VALENCIA

Teoría de ORBITALES MOLECULARES.

2.2. TEORÍA DE ENLACE VALENCIA

En esta teoría se consideran solo los electrones de valencia, manteniendo los átomos su identidad y formándose enlace cuando los átomos están a la distancia óptima de enlace. (Recordemos que la teoría de Lewis analiza los enlaces covalentes de igual forma y no ofrece diferencias en como se forman los distintos enlaces covalentes, al solaparse orbitales diferentes).

La disminución de la energía en el acercamiento de las nubes electrónicas y por tanto en el enlace se produce por el APAREAMIENTO DE DOS ELECTRONES DE VALENCIA QUE TIENE QUE ESTAR SEPARADOS EN SUS RESPECTIVOS ORBITALES ATÓMICOS. Dando lugar en el apareamiento a la aparición de un orbital molecular.

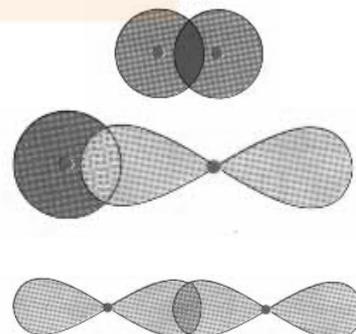
Aunque los electrones del enlace pertenecen en principio al átomo que los aporta, estos oscilan constantemente, resonando el electrón entre los distintos átomos enlazados produciéndose así el rebajamiento de la energía del sistema. En esta teoría ese rebajamiento energético recibe el nombre de Energía de resonancia. Cuando la probabilidad de encontrar el par de electrones sobre un mismo átomo es grande el enlace covalente ya no será puro y se dice que hay participación de formas iónicas (heteropolar) o también que existe resonancia entre las formas covalentes y las formas iónicas posibles, siendo la estructura real intermedia entre las dos formas.

La simetría de los OM formados depende de los propios orbitales atómicos y de la forma y dirección en que solapen.

Existen dos posibilidades:

Enlace tipo sigma : Por solapamiento frontal de orbitales .

Union de orbitales OA(s)-OA(s) , OA(s)-OA(p) ,OA (p)-OA(p)



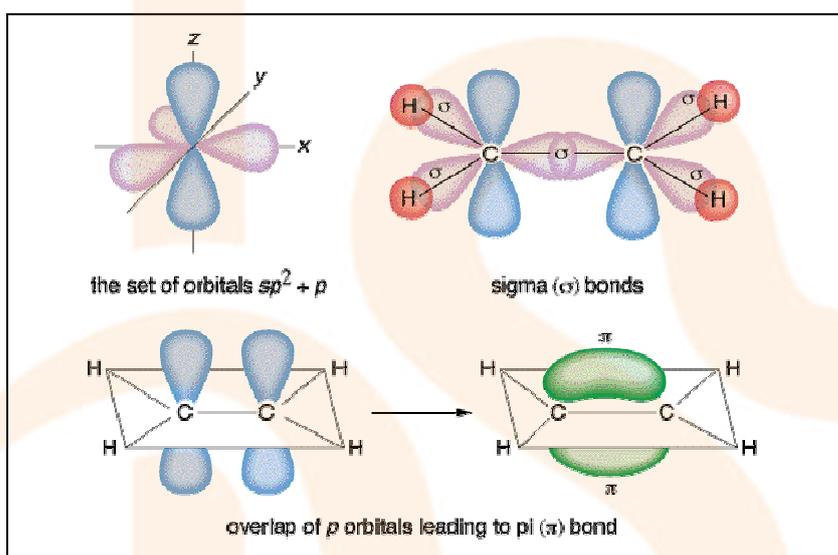
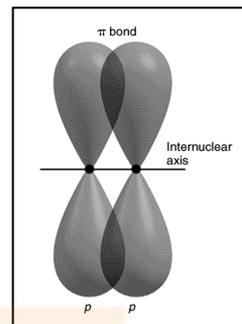


Enlace tipo pi : Ocurre por solapamiento lateral

Unión lateral OA(p)-OA(p)

Para la formación de enlaces múltiples es necesario que varios orbitales atómicos solapen simultáneamente. Pero no es posible más de un solo solapamiento frontal.

Por tanto los responsables de los enlaces múltiples serán los enlaces de tipo pi(π) o laterales. El primer par se aloja en el OM tipo sigma σ , pero los siguientes lo harán en el orbital tipo π .



2.2.1 Concepto de covalencia

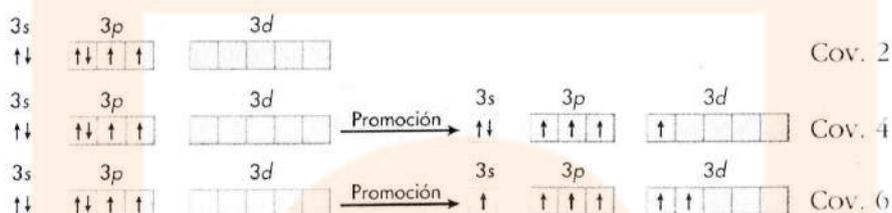
La COVALENCIA o valencia covalente indica los enlaces covalentes que puede formar un elemento. Esta valencia coincide con el número de electrones desapareados.

F (Z = 9): [He] 2s ² p ⁵	1s	2s	2p	Covalencia 1
	↑↓	↑↓	↑↓↑	
O (Z = 8): [He] 2s ² p ⁴	1s	2s	2p	Covalencia 2
	↑↓	↑↓	↑↑↑	
N (Z = 7): [He] 2s ² p ³	1s	2s	2p	Covalencia 3
	↑↓	↑↓	↑↑↑	

Para otros casos como el berilio, el carbono, en que se observan valencias diferentes a las reales, según su configuración, se establece el concepto de **promoción** de electrones a orbitales un poco superiores energéticamente.



Para el caso del Azufre $3s^2 3p^4$; por el criterio de promoción aparecen las valencias restantes conocidas. Sin este criterio la única valencia posible para el azufre sería 2.



Según esta la TEV el enlace se formará en la dirección en la que marcan los OA que poseen los electrones desapareados. Las posibles orientaciones de los enlaces serán por tanto en las direcciones definidas por los ejes espaciales ($p_x, p_y, p_z, d_{xy}, d_{yz}, \dots$)

Experimentalmente se demuestra que los enlaces forman ángulos diferentes a los marcados por dichos ejes (90°). El agua por ejemplo tiene un ángulo de enlace aproximado de 104° entre sus dos enlaces. Para ello hay que hacer algunas modificaciones en la teoría que permitan explicar las geometrías moleculares correctas de las moléculas.

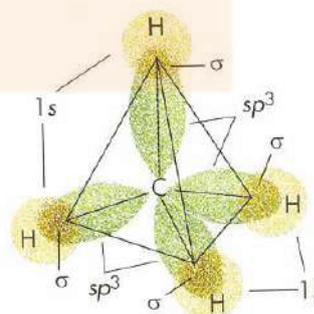
2.3. TEORÍA DE HIBRIDACIÓN.-

Complementaria a la TEV y **basada en ésta misma**. Permite determinar ciertas geometrías de enlace que eran imposibles con la TEV, y que sólo eran explicadas por el modelo anterior, modelo de RPECV. Ahora trataremos de explicar la geometría en base a como se forman de enlaces. Nos basamos en el solapamiento de orbitales atómicos pero que esta vez se encontraran modificados, "hibridados".

Introducimos el concepto de orbital híbrido. Es una combinación de orbitales s, p que permiten un solapamiento total de orbitales con la geometría correcta según marcan los hechos experimentales.

Hibridación sp^3

Para la molécula CH_4 , la dirección que marcan los OA atómicos s, p_x, p_y, p_z daría lugar a una orientación anómala de los enlaces, formarían 90° (en la TEV). Realmente se sabe que estos forman un ángulo aprox. de 109° . Ocurre que los orbitales s ascienden en energía y los p bajan formándose orbitales híbridos sp^3 . Los orbitales siguen las direcciones de un **tetraedro regular, 109°** .



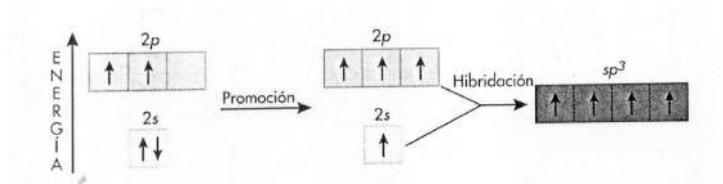


Fig. 12. Formación de orbitales híbridos sp^3 a partir de orbitales atómicos.

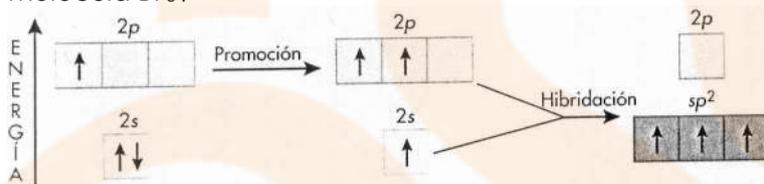
Según se observa en la figura anterior ahora los 4 orbitales híbridos sp^3 se pueden enlazar con los orbitales atómicos vacíos del hidrógeno.

- **sp^3**

- 4 enlaces sencillos. Ej: CH_4
- 3 enlaces sencillos + 1 par e^- sin compartir. Ej: NH_3
- 2 enlaces sencillos + 2 par e^- sin compartir. Ej: H_2O

Hibridación sp^2

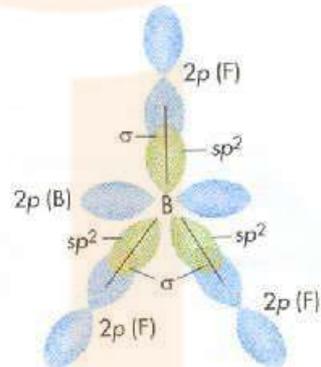
Como ejemplo de hibridación sp^2 lo tenemos en el átomo de boro cuando forma la molécula BF_3 .



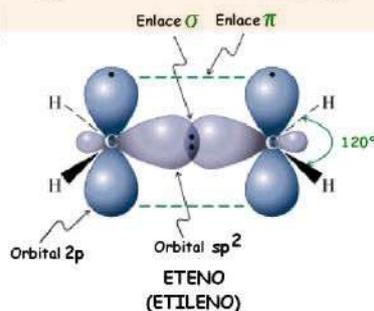
La geometría resultante es PLANA-TRIGONAL.

- **sp^2**

- 3 enlaces sencillos. Ejemplo: BF_3



1 enlace doble y 2 sencillos. Ejemplo: $H_2C=CH_2$

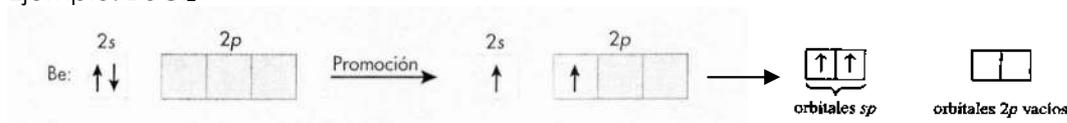




Hibridación sp

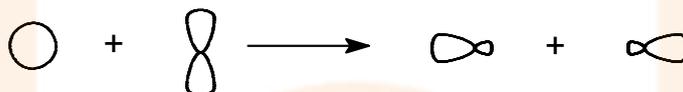
Cuando se combina un orbital s y otro p se forma el híbrido sp.

Ejemplo: BeCl₂



El Be no tiene e- desapareados disponible para el enlace ($1s^2 2s^2$) \Rightarrow Se puede promover un e- desde el orbital 2s al 2p para conseguir 2 e- desapareados disponibles para el enlace con el F.

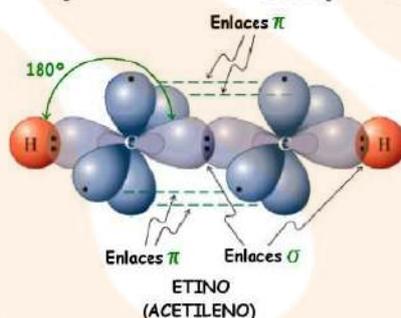
Un orbital atómico s + un orbital atómico p = Dos Orbitales híbridos sp



La geometría es LINEAL.

- **sp**

- 2 enlaces sencillos. Ejemplo: BeF₂
- 2 enlaces dobles. Ejemplo: CO₂
- 1 enlace triple y 1 sencillo. Ejemplo: Etino.



Los elementos del tercer periodo y siguientes disponen, también de los orbitales d para la formación de enlaces, porque la promoción de electrones a estos resulta accesible. Ejemplos:

El cloro (covalencia 5, cinco orbitales).

El azufre (covalencia 6, seis orbitales).

Estos orbitales pueden emplearse en la formación de híbridos, lo que da origen a nuevos tipos de hibridación sp^3d (BIPIRAMIDE TRIANGULAR) y sp^3d^2 (OCTAÉDRICA).



TABLA: TEORIA HIBRIDACIÓN – TRPEV.

Hibridación	RPECV	Pares de e ⁻	Pares e ⁻ enlazados (B)	Pares e ⁻ libres (E)	Ejemplo	Forma	
sp	AB ₂	2	2	0	BeCl ₂	Lineal(180°)	
sp ²	AB ₃	3	3	0	BF ₃	Trigonal(120°)	
	AB ₂ E		2	1	SO ₂	Angular	
sp ³	AB ₄	4	4	0	CH ₄	Tetraédrica(109,5°)	
	AB ₃ E		3	1	NH ₃	Pirámide trigonal(107°)	
	AB ₂ E ₂		2	2	H ₂ O	Angular (104°)	
sp ³ d	AB ₅	5	5	0	PCl ₅	Bipirámide trigonal	
	AB ₄ E		4	1	SF ₄	Tetraédro distorsionado	
	AB ₃ E ₂		3	2	ClF ₃	Forma de T	
sp ³ d ²	AB ₆	6	6	0	SF ₆	Octaédro	
	AB ₅ E		5	1	BrF ₅	Pirámide cuadrada	
	AB ₄ E ₂		4	2	XeF ₄	Plana cuadrada	



Para asignar una hibridación conveniente al átomo central de la molécula hay que tener cierta idea precisa de su geometría. Los pasos a dar:

- 1- Se representa la estructura de Lewis correcta.
- 2- Se predice la distribución general de los pares electrónicos de enlace y no enlace.
- 3- Se deduce la hibridación del átomo central relacionando la distribución de los pares electrónicos.

Ejemplo: Determinar la geometría de las moléculas HgCl_2 , AlI_3 y PF_3 a partir del modelo RPECV y de la teoría de hibridación.

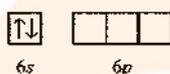
HgCl_2

Su estructura de Lewis es: $\text{Cl} \text{---} \text{Hg} \text{---} \text{Cl}$

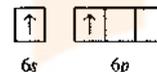
- No hay pares libres en el Hg ($6s^2 5d^{10}$) de modo que es **lineal (AB_2)**
- De la tabla anterior determinamos que la hibridación es sp.



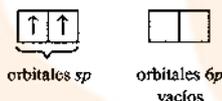
1º Orbitales del Hg:



2º Promover un electrón del estado fundamental al excitado:



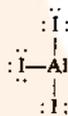
3º Se hibridan los 6s con los 6p:



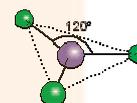
Los dos enlaces Hg-Cl se obtienen por solapamiento tipo σ de los orbitales sp del Hg con los 3p de los átomos de Cl.

AlI_3

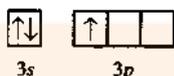
Su estructura de Lewis es:



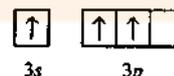
- Hay tres pares de enlace y no hay electrones libres para el aluminio, luego: **plana trigonal AB_3 (120°)**
- De la tabla deducimos la hibridación sp^2 .



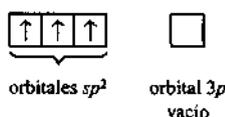
1º Orbitales del Al:



2º Promoción del electrón, para obtener tres desapareados para formación de enlace:



3º Se hibridan los orbitales:



Los orbitales híbridos sp^2 del Al se solapan frontalmente (enlace tipo σ) con los 5p del I. Se forman tres enlaces con estructura plana trigonal para la molécula.



PF₃

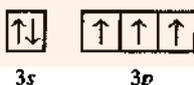
Su estructura de Lewis es:



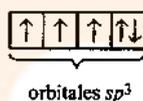
- Hay tres pares de enlace y un par libre para el átomo de fósforo, **luego AB₃E, pirámide trigonal 107°**
- De la tabla deducimos hibridación sp³



1º Orbitales del P:

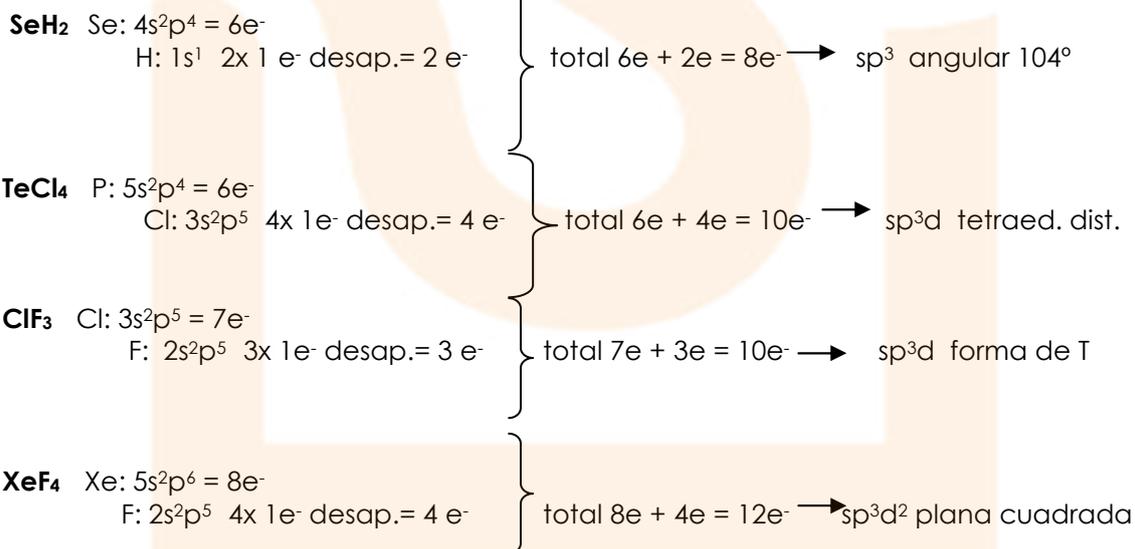


2º No puede promocionar el electrón al orbital 3p pues no están vacíos, se hibridan directamente, quedando un par de electrones no enlazantes:



Al igual que ocurre en el amoniaco, queda un par libre alojado en el orbital sp³, el resto formará enlace σ con los 2p del F. Se predice una geometría tetraédrica, en la que el par libre ocupa un vértice, por tanto la geometría pasa a ser pirámide trigonal con un ángulo ligeramente menor de 109°.

Ejemplos:





2.4. TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES (TOM).

La teoría de los electrones de valencia, complementada con la formación de orbitales híbridos y la teoría de RPECV, permite explicar de forma adecuada la estructura de la mayoría de las sustancias químicas.

Pero presenta ciertas limitaciones:

- No explica la formación de ciertas sustancias: ¿por qué se puede formar la especie Na_2 y no Be_2 ? ¿Cuál es la estructura de la molécula NO ?
- No explica el paramagnetismo de moléculas como O_2 (las sustancias paramagnéticas se orientan en un campo magnético, lo que refleja la existencia de electrones desapareados en su estructura).

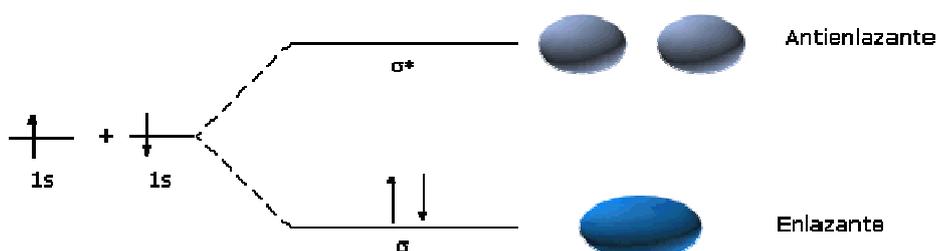
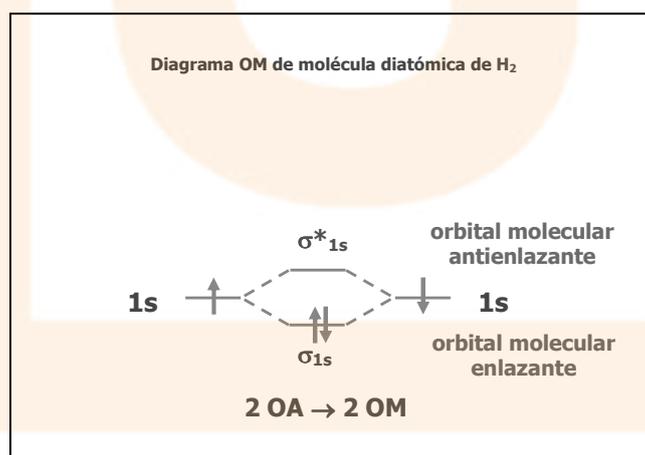
El modelo de ORBITALES MOLECULARES intenta dar explicación a estos fenómenos.

En este modelo se considera que cuando interaccionan dos átomos, no sólo interaccionan los electrones desapareados, sino **todos los electrones de la capa de valencia**.

- Permite explicar todas las moléculas existentes.
- Consiste en fijar unos niveles energéticos para los orbitales moleculares y considerarlos “combinación lineal de orbitales atómicos” (C.L.O.A.).
- Hay tantos orbitales moleculares como atómicos y ocuparían distintas zonas espaciales.
- La mitad de ellos tendrían menor energía que la de los orbitales atómicos de los que proceden y por tanto, serían más estables (orbitales enlazantes).
- La otra mitad tendrían mayor energía que los orbitales atómicos de los que proceden y serían más inestables (orbitales antienlazantes).
- Se denomina “orden de enlace” (O.E.) a:

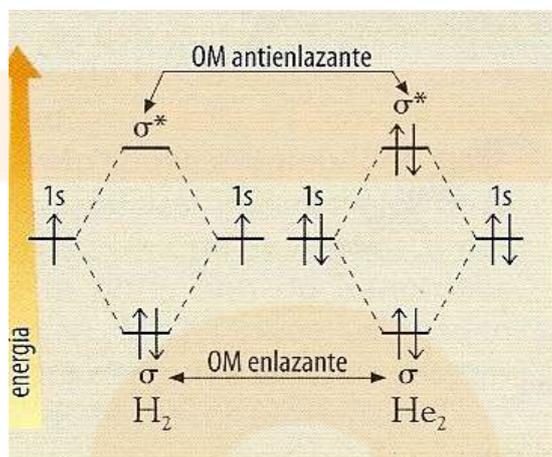
$$\text{O.E.} = \frac{n^{\circ} e^{-} (\text{OM enlazantes}) - n^{\circ} e^{-} (\text{OM antienlazantes})}{2}$$

- El O.E. puede ser fraccionario si combinan orbitales apareados y desapareados.





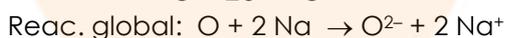
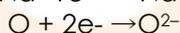
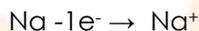
- H_2 : Se tiene un electrón por átomo. Estos dos electrones ocuparán el orbital molecular enlazante σ_{1s} (orden de enlace 1) y con electrones apareados σ_{1s}^2 .
- H_2^+ : σ_{1s}^1 (índice de enlace 0,5).
- He_2 : $\sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2}$ (índice de enlace 0, no se forma la molécula He_2).



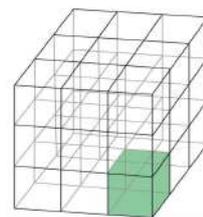
Para más información: http://rabfis15.uco.es/weiqo/Tutorial_weiqo/

3. ENLACE IÓNICO.

- Se da entre un metal que pierde uno o varios electrones y un no metal que los captura.
- Resultan iones positivos y negativos que se mantienen unidos por atracciones electrostáticas, formando redes cristalinas.
- Las reacciones de pérdida o ganancia de e^- se llaman **reacciones de ionización**:



- Fórmula del compuesto (empírica): **Na_2O**
- Por tanto mediante la teoría de Lewis habría que explicar el enlace como una transferencia total (no hay compartición) del electrón de el elemento más electropositivo al más electronegativo, quedando ambos cargados eléctricamente.
- Los iones en los compuestos iónicos se ordenan regularmente en el espacio de la manera más compacta posible.
- Cada ion se rodea de iones de signo contrario dando lugar a celdas o unidades que se repiten en las tres direcciones del espacio.
- Los cristales tienen formas geométricas definidas debido a que los átomos o iones, están ordenados según un patrón tridimensional definido.
- Mediante la técnica de difracción de Rayos X, podemos obtener información básica sobre las dimensiones y la forma geométrica de la *celda unidad*, la unidad estructural más pequeña, que repetida en las tres dimensiones del espacio nos genera el cristal.



**Energía reticular (de red) de los compuestos iónicos:**

- Es la energía desprendida en la formación de un compuesto iónico sólido a partir de sus iones en estado gaseoso.
- **Ejemplo:** En el caso de la formación de NaCl la E reticular corresponde a la reacción:
- $\text{Na}^+(\text{g}) + \text{Cl}^-(\text{g}) \rightarrow \text{NaCl}(\text{s}) + E_{\text{ret}}$ ($E_{\text{ret}} < 0$)
- Es difícil de calcular por lo que se recurre a métodos indirectos aplicando la ley de Hess. Es lo que se conoce como ciclo de Born y Haber. (Veremos más adelante en el tema de TERMOQUÍMICA).
- Lo que permite que los procesos de formación de cristales a partir de los elementos que lo componen en estado natural, sea un proceso favorable, es el valor de su energía reticular.

Factores de los que depende la energía reticular(U)(en valor absoluto):

- A mayor carga de los iones mayor "U".

Ejemplo: Así el CaO (Ca^{2+} y O^{2-}) tendrá "U" mayor que el NaCl (Na^+ y Cl^-).

- A menor tamaño de los iones mayor "U".

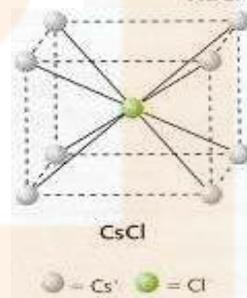
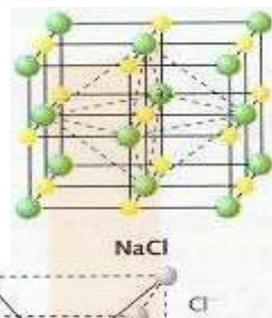
Ejemplo: Así el NaCl (Na^+ y Cl^-) tendrá "U" mayor que el KBr (K^+ y Br^-).

$$U = N_a k \frac{Q_a \cdot Q_c}{r_e} A \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

$N_a = \text{cte. Avogador}$
 $r_e = r_{\text{anión}} + r_{\text{catión}}$
 Q : cargas anión y catión
 $A = \text{cte de Madelung.}$
 $N = \text{factor de compresibilidad}$

Indice de coordinación

- "Es el número de iones de signo opuesto que rodean a un ion dado".
- Cuanto mayor es un ion con respecto al otro mayor es su índice de coordinación.
- NaCl (cúbica centrada en las caras para ambos iones)
 - Índice de coord. para ambos iones = 6
- CsCl (cúbica para ambos iones)
 - Índice de coord. para ambos iones = 8
- CaF_2 (cúbica centrada en las caras para el Ca^{2+} y tetraédrica para el F^-)
 - Índice de coord. para el F^- = 4
 - Índice de coord. para el Ca^{2+} = 8



La complejidad de las redes cristalinas aumenta si el índice de coordinación del anión y del catión es diferente. Los índices de coordinación dependerán de las relaciones de tamaños catión-anión, y de su estequiometría.



4. ENLACE METÁLICO.-

Las propiedades de los metales hay que explicarlas en base a modelos diferentes a los anteriores. El modelo ha de explicar propiedades de los metales como son:

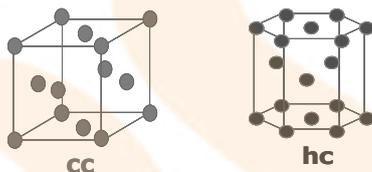
- Conductividad
- Brillo
- Temperaturas de fusión y ebullición.
- Propiedades mecánicas en general.

El metal se caracteriza por que sus átomos tienen baja electronegatividad. El carácter metálico está asociado a la estructura electrónica, con pocos electrones de valencia. La característica fundamental es:

- Tienen bajos potenciales de ionización y por tanto ceden fácilmente los electrones de valencia, formando restos positivos típicos de las redes metálicas.
- Tienen que tener orbitales de valencia vacíos que permitan a los electrones moverse con facilidad.

Se han desarrollado dos modelos para explicar estas uniones atómicas, en forma de redes, denominadas redes metálicas. Son redes altamente compactas que caracterizan a los diferentes metales.

- 1- Modelo del gas de electrones o mar de electrones.
- 2- Teoría de bandas.



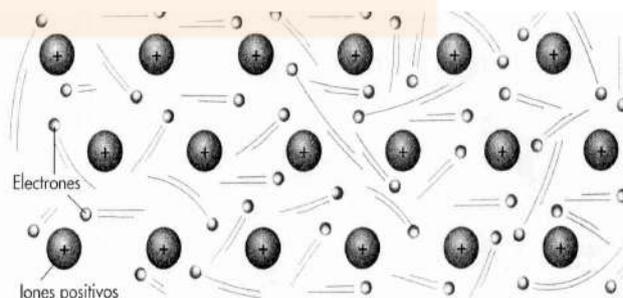
4. 1.-Modelo del mar de electrones

Es un modelo sencillo no basado en la mecánica cuántica, modelo anterior incluso a la teoría de Lewis para explicar propiedades de los metales.

Se basa en:

- Los átomos han perdido los electrones de valencia y se han transformado en especies cargadas positivamente.
- Los cationes forman una red de esferas tridimensionales ordenada y compacta, que crea un campo eléctrico uniforme. Son estructuras típicas la red hexagonal compacta y cúbica compacta.
- Los electrones de valencia ya no están asociados a cada átomo, sino al cristal entero. Se comportan como un gas de electrones alrededor de los restos positivos.
- Los electrones se mueven libremente pero sin poder liberarse del todo debido a la atracción por los restos positivos.

Este método permite explicar propiedades de los metales como, su conductividad, la baja energía de ionización y el brillo metálico. Sin embargo tiene ciertas limitaciones que resulten los modelos cuánticos. Por ejemplo, no justifica el comportamiento de los semiconductores.





4.2. Teoría de bandas.-

Modelo cuántico, que procede de la TOM. Se considera el enlace metálico como un caso extremo del enlace covalente. Los electrones de valencia de todos los átomos del metal son compartidos conjuntamente. Se forman orbitales moleculares de energía tan próxima que todos en conjunto ocupan una franja o Banda de energía.

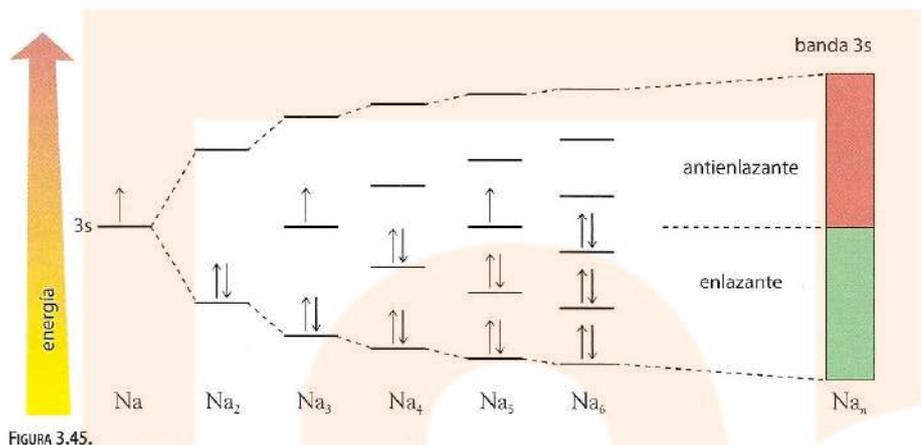
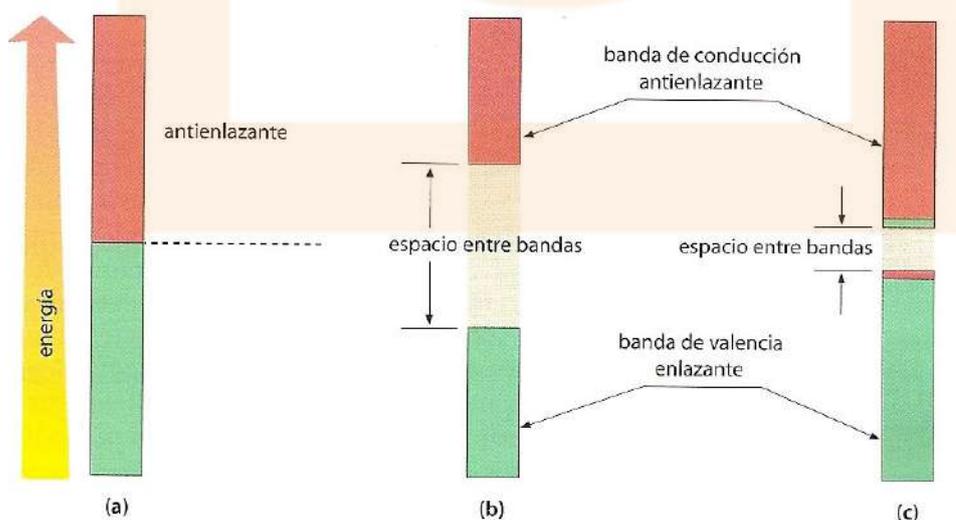


FIGURA 3.45.

La banda se llena de electrones empezando por los niveles más bajos. La banda de energía formada con los OA de valencia se llama banda de valencia. La banda formada por los OA vacíos se llama banda de conducción. A veces estas bandas solapan energéticamente.

En los metales conductores la banda de valencia puede estar o bien semillena (Na) o llena pero solapando con la banda de conducción (Mg).

En los semiconductores y aislantes, la banda de valencia está llena y la de conducción vacía pero no solapan. Hay una zona intermedia llamada zona prohibida o GAP donde no se alojan electrones. En los semiconductores esta banda prohibida no es muy grande y los electrones pueden promocionar de la banda de valencia a la banda de conducción con algún tipo de estimulación (eléctrica o calorífica).





5.-FUERZAS INTERMOLECULARES O FUERZAS DE VAN DER WALLS.

Los compuestos iónicos forman redes gigantes, las cuales dan lugar a las sustancias que vemos (NaCl, CaCl₂, NaOH, CsCl, CuSO₄, etc.)

Los compuestos covalentes están formados por moléculas (salvo unos casos concretos como la sílice y el diamante, que se verán más adelante). Estas moléculas están aisladas en los gases, pero ¿cómo se unen para formar líquidos y sólidos?

Las **fuerzas** que tienden a unir las moléculas de estos compuestos se denominan **FUERZAS INTERMOLECULARES**. Como las moléculas covalentes pueden ser polares y apolares a estas **fuerzas** se las clasifica de la siguiente forma:

5.1.-FUERZAS DE VAN DER WAALS.

La clasificación de las fuerzas intermoleculares son las siguientes:

5.1.1.-Fuerzas de dispersión o de London.-

- Presente en todas las moléculas, sean polares o no polares.
- En las moléculas apolares (que originan habitualmente gases) si se las aproxima lo suficiente, se puede generar un desplazamiento de la carga electrónica que provoque la formación de dipolos instantáneos, los cuales posibilitan la atracción y la unión entre las moléculas.
- Estos dipolos instantáneos inducen en las otras moléculas la aparición de otros dipolos (dipolos inducidos).
- El parámetro que mide la intensidad de estas fuerzas es la polarizabilidad, que indica la facilidad con la que las moléculas se polarizan.
- Estas **fuerzas** aumentan con el volumen molecular y el número de electrones, ya que si los volúmenes son grandes las moléculas son más fácilmente deformables (polarizables).

Molécula	Punto de ebullición	Estado físico (1 atm)
F ₂	-188°C	gas
Cl ₂	-34°C	gas
Br ₂	58,8°C	líquido
I ₂	184,5°C	sólido

- Dipolos instantáneos.
 - El movimiento de los electrones en el orbital producen polarización no permanente.
- Dipolos inducidos.
 - Los electrones se mueven produciendo un dipolo en la molécula debido a una fuerza exterior.

(a) (b) (c)

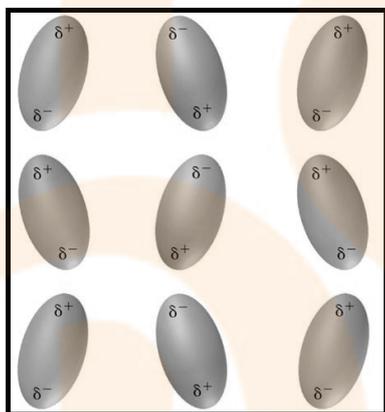


5.1.2 Fuerzas entre dipolos permanentes:

- En moléculas polares.(con dipolos permanentes)
- Las fuerzas de dispersión siempre presentes, tienden a ordenar los dipolos. Se orientan ordenadamente.
- Será mayor cuanto más polar sea la molécula, y hace que la sustancia siga siendo líquida o sólida a T° superior de las que cabría esperar por su tamaño.
- Ej: HBr es gas a temperatura ambiente mientras que el Kriptón , con igual número de electrones y masa ligeramente superior es gaseosa desde temperaturas mucho más bajas (punto de ebullición de ésta última mucho mas bajo).
- Como regla destacamos que:

-En moléculas de masa similar la presencia de dipolos permanentes origina diferencias en puntos de fusión y ebullición.

-En moléculas de muy diferente tamaño y masa, las fuerzas anteriores (London) predominan sobre estas.(Ej HBr: gas – Br₂: líquido)



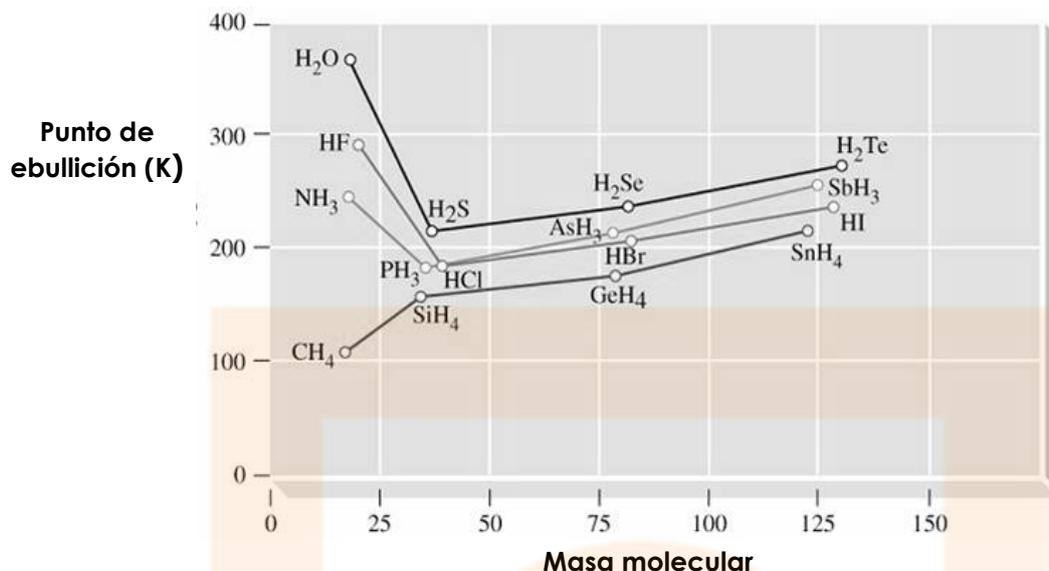
5.1.3 Fuerzas entre dipolo permanente –dipolo inducido.-

- Entre molécula apolar y polar.
- La presencia de moléculas polares induce a la molécula apolar a la aparición de dipolos, denominados dipolos inducidos . Justifica la pequeñísima solubilidad de agua en disolventes apolares .

5.2.- ENLACE POR PUENTE DE HIDRÓGENO.-

De fuerza intermedia entre las covalentes intramoleculares y las intermoleculares de Van der Waals.

- Es un caso especial de las fuerzas dipolo-dipolo.
- Son fuerzas intermoleculares muy fuertes.
- El enlace de hidrógeno requiere que el H este unido (enlazado) a un elemento electronegativo de pequeño tamaño, y con pares de electrones no enlazantes. Estas fuerzas de enlace de hidrógeno se hacen más importantes entre compuestos con F, O y N.



Al aumentar el valor de las fuerzas debidas a los enlaces por puentes de hidrógeno, aumenta el punto de ebullición.

La energía del enlace de hidrógeno 15-40 KJ/mol son intermedias entre las de Van der Waals (<2 KJ/mol) y las de enlaces covalentes intramoleculares (150KJ/mol)

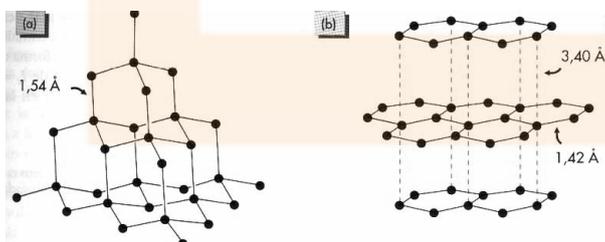
Este enlace le confiere a la sustancia:

- Elevados puntos de fusión y ebullición.
- Elevada Energía de vaporización
- Elevada capacidad de termorregulación.

6. SÓLIDOS COVALENTES.

Son compuestos formados por la unión de átomos que comparten electrones, pero que se distribuyen en redes tridimensionales lo que le confiere a estos altos puntos de fusión y ebullición. Son los compuestos que presentan mayores puntos de fusión (1000 - 3500°C) y ebullición.

Se trata además de los compuestos que presentan mayor dureza de todos los conocidos. Siendo el diamante el más duro de todos con un valor de 10 en la escala de Mohs.



- Carbono diamante (red de uniones tetraédricas).
- Carbono grafito (red de láminas hexagonales).

Otro ejemplo interesante es la sílice SiO₂, que es un material muy duro formado por átomos de silicio con una estructura tetraédrica, en cada extremo hay un átomo de oxígeno. Los tetraédricos están unidos por sus vértices, de tal manera que entre cada átomo de silicio hay un átomo de O. Ejemplo de este tipo de sustancias son los cuarzos y las arenas.



7. PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS EN BASE A SU ENLACE.

La mayoría de las sustancias que son gases o líquidos son moleculares a 1 atm y 25°C, pero hay tres tipos de sólidos no moleculares como son sólidos covalentes, iónicos y metales).

Tipos de sustancias:

- 1- Sustancias moleculares
- 2- Sólidos de red covalentes
- 3- Sólidos iónicos
- 4- Metales

7.1. Características de las sustancias moleculares (COVALENTES MOLECULARES):

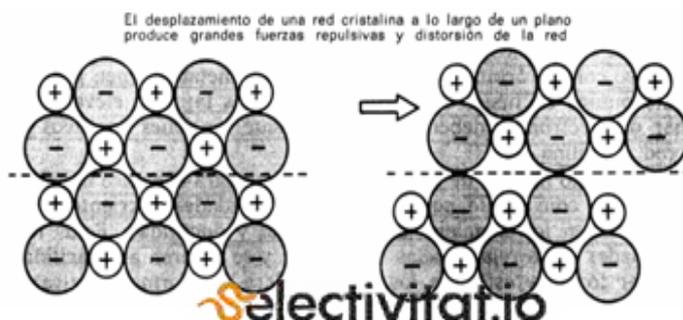
- Existen como entidades moleculares independientes. (H_2 , CO_2 , I_2 , CH_4 , Br_2 , hidrocarburos, NH_3 , HCl , etc.)
- No conductoras de la electricidad en estado puro.
- Puntos de ebullición y de fusión bajos (Las fuerzas intermoleculares son débiles), por lo que la mayoría son líquidos o gases a temperatura ambiente.
- Las sustancias polares son solubles en disolventes polares y tienen mayores puntos de Fusión y de Ebullición.
- Las no polares serán solubles en disolventes no polares (semejante disuelve a semejante)
- Malos conductores en general. Aquellos que presentan enlaces tipo π que poseen electrones deslocalizados si conducirán la corriente eléctrica.

7.2.-Características de los sólidos de red covalente (SÓLIDOS COVALENTES):

- Los átomos están unidos por una red continua de enlaces covalentes.
- Malos conductores eléctricos. El grafito si lo es por su enlace tipo π entre láminas.
- Insolubles en todos los disolventes comunes.
- Son muy rígidos. Sometidos a grandes tensiones se fracturan.
- Puntos de fusión muy elevados ($>1000^\circ C$), más que los iónicos.
- Ejemplos comunes: C (grafito/diamante) $P_f = 3500^\circ C$; Cuarzo (Silicatos: SiO_2 , SiO_3^{2-} , $Si_4O_{10}^{4-}$,...)

7.3.-Características de los sólidos iónicos:

- Se mantienen unidos por fuerzas electrostáticas intensas entre iones contiguos con cargas opuestas. ($NaCl$, MgO , Na_2CO_3 ,...)
- Muchos compuestos iónicos son solubles en agua y disolventes polares. (Son insolubles en disolventes apolares).
- No conducen la electricidad, puesto que los iones tienen posiciones fijas en la estructura sólida. Sin embargo son buenos conductores cuando están fundidos o disueltos en agua, ya que los electrones ganan movilidad.
- No son volátiles y tienen un punto de fusión alto.
- Son duros, pero quebradizos. La fragilidad es debida al desplazamiento de los planos iónicos provocando repulsiones electroestáticas.





7.4.-Características de los sólidos metálicos

- Conductividad eléctrica elevada (electrones libres).
- Conductividad térmica alta.
- Dúctiles (cables) y maleables (láminas).
- Brillo (reflejan la luz).
- Densidad variable, los elementos de más a la izquierda son menos densos que los del centro-derecha, ya que los primeros forman menos enlaces y menos compactados (mayor radio).
- Puntos de fusión muy variados desde -39°C (Hg) hasta 3419°C (W).
- Insolubles en agua y otros disolventes comunes. El único metal líquido es el Hg, que disuelve a otros metales formando disoluciones llamadas amalgamas.



8. TABLA EJEMPLO DE PROPIEDADES DE SUSTANCIAS JUSTIFICADAS EN BASE A SU ENLACE

COMPUESTO	ENLACE	MOMENTO DIPOLAR(μ)	ENLACE INTERMOLEC.	Tº FUS Y EB.	ESTADO AGREG.	SOLUBILIDAD EN AGUA	SOLUB. EN DTS APOLARES
F ₂	Cov. puro.	0	London	Bajas	gas	no	si
Cl ₂	Cov. puro.	0	London	Bajas	gas	no	si
ClF	Cov.polar	≠0	Dipolo-dipolo	bajas	gas	si	No?
NaCl	Iónico	≠0	No molecular	Altas	sólido	si	no
HF	Cov. polar	≠0	Pte. de hidrógeno	Medias	Líquido	si	no
C(diamante).	Sólido cov	0	No molecular	Muy altas	sólido	no	no
SiH ₄	Cov. polar.	0	London	Bajas	gas	no	si
PH ₃	Cov.polar	≠0	Dipolo-dipolo	Bajas	gas	si	no
Zn	Metálico	0	No molecular	Altas	sólido	no	no

- El hidrógeno siempre forma enlaces covalentes excepto en los hidruros metálicos
- Las sustancias con enlace por puente de hidrógeno se consideran con puntos de fusión y ebullición medios
- Las temperaturas de fusión y ebullición dependen del volumen molecular (ver fuerzas intermoleculares.)
- Se consideran bajas las T^{rs} de fus. y ebull. por debajo de 0°C. Medias de 0º a 300º .Altas > 300°C.

**Ejercicios resueltos****Ejemplo 1.- Para el eteno (CH₂=CH₂) indique:**

- a) La hibridación que presentan los orbitales de los átomos de carbono.
b) La geometría de la molécula.
c) Escriba la reacción de combustión ajustada de este compuesto.
(Selectividad 2005)

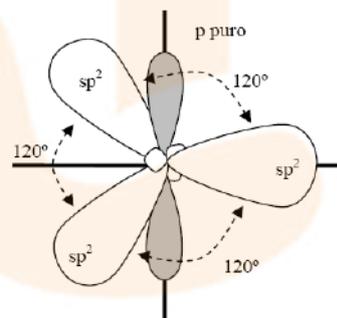
a. Cuando un C forma parte de un doble enlace, presenta hibridación sp².
El C tiene cuatro electrones en su última capa.

C (Z=6) : 1s²2s²2p²

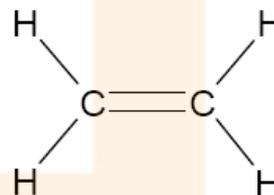
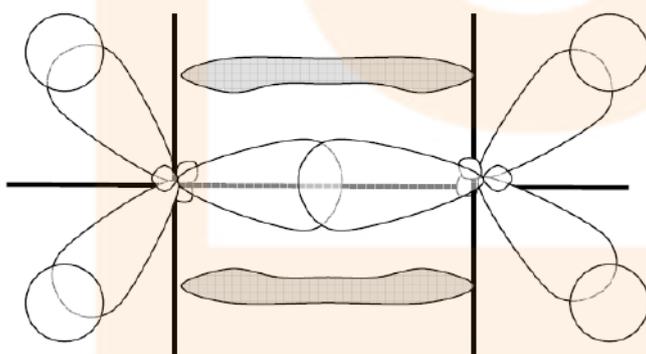
2s	2p		
	P _x	P _y	P _z
↑↓	↑	↑	

Se produce una hibridación entre el orbital 2s y dos orbitales p, resultando tres orbitales híbridos sp² y quedando un orbital p puro. Los cuatro orbitales se encuentran semiocupados (tienen 1 electrón cada uno).

Los tres orbitales híbridos se encuentran en el mismo plano, siendo el ángulo entre ellos de 120°. El orbital p puro es perpendicular a los tres híbridos.



b. El enlace entre los átomos de C es un enlace doble, resultado de un solapamiento entre dos orbitales p puros (enlace π) y dos orbitales híbridos (enlace σ).
Cada átomo de C se enlaza con dos átomos de H utilizando dos orbitales híbridos.



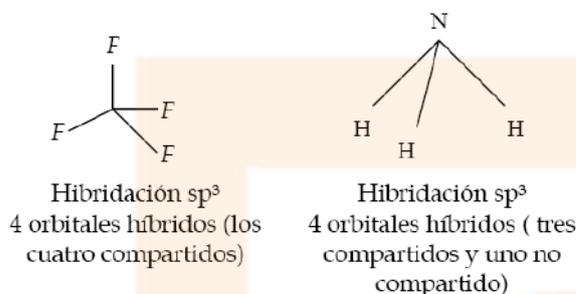
Si representamos cada enlace mediante una línea, vemos que todos los átomos (C e H) y los enlaces se encuentran en el mismo plano. Se trata por tanto de una molécula plana.



b. En el CF_4 el átomo central (C) posee 4 pares de electrones compartidos y ninguno no compartido. Geometría AB_4 TETRAÉDRICA 109°

En el NH_3 el átomo central (N) posee 3 pares de electrones compartidos y 1 par no compartido. AB_3E , PIRÁMIDE TRIGONAL. 107°

c.



Ejemplo 4. Indique razonadamente cuántos enlaces p y cuánto s tienen la siguientes moléculas:

a. Hidrógeno.

b. Nitrógeno.

c. Oxígeno.

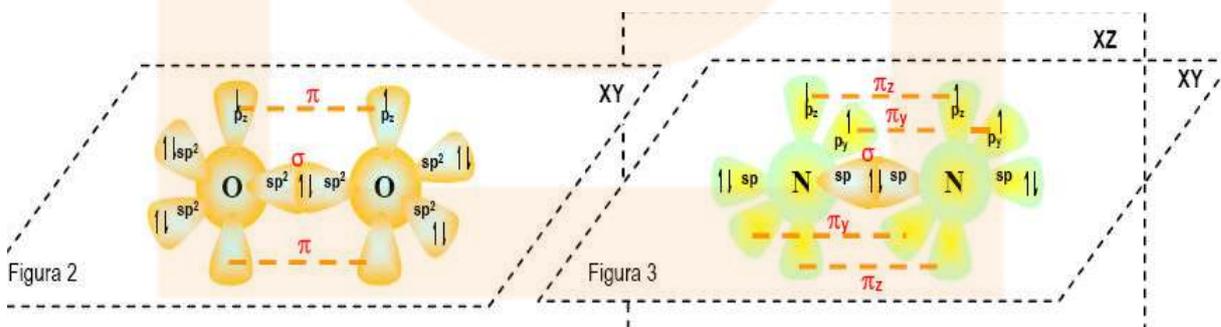
(Selectividad 2008)

a. En la molécula de hidrógeno, cada átomo comparte su único electrón del orbital $1s$ produciéndose entre ellos un solapamiento frontal que da lugar a un enlace s (figura 1)



b. En la de oxígeno ($1s^2 2s^2 2p^4$) cada átomo se une al otro mediante un solapamiento frontal que da lugar a un enlace s y otro lateral entre el orbital p de cada átomo que queda sin hibridar dando lugar a un enlace de tipo p (figura 2).

c. En la de nitrógeno son dos los orbitales p de cada átomo que quedan sin hibridar y se formará un enlace de tipo s y dos de tipo p (figura 3).



Ejemplo 5.- Dadas las moléculas BF_3 y PF_3 :

a) ¿Son polares los enlaces boro-flúor y fósforo-flúor? Razone su respuesta.

b) Prediga su geometría a partir de la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.

c) ¿Son polares esas moléculas? Justifique su respuesta. (Junio2008).



a. Los enlaces boro-flúor y fósforo-flúor son uniones covalentes entre átomos diferentes, el más electronegativo atrae con más intensidad a los electrones comunes del enlace. El desplazamiento de la carga negativa hacia el átomo más electronegativo forma un dipolo permanente en cada enlace.

b. Por su posición en la tabla periódica conocemos el número de electrones que tiene cada átomo en su capa de valencia:

F: 7 electrones de valencia.

P: 5 electrones de valencia.

B: 3 electrones de valencia



En el BF_3 el átomo central (B) posee 3 pares de electrones compartidos y ninguno no compartido.

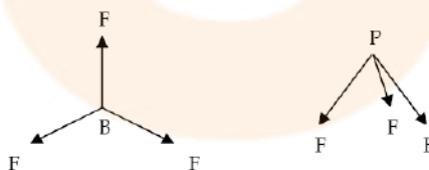
En el PF_4 el átomo central (P) posee 3 pares de electrones compartidos y uno no compartido.

El método de la repulsión entre pares de electrones de la capa de valencia (RPECV) se basa en la repulsión entre pares de electrones que rodean al átomo central. Dichos pares (compartidos y no compartidos) se repelen entre si, separándose para minimizar la energía del sistema de forma que sea lo mas estable posible.

AUMENTO REPULSIÓN →		
Par compartido Par compartido	Par compartido Par no compartido	Par no compartido Par no compartido

Las geometrías más estables son:

c) En el BF_3 los tres enlaces presentan idéntica polaridad. Si representamos los momentos bipolares mediante vectores y trazamos la resultante el resultado es nulo (los cuatro átomos se encuentran situados en el mismo plano). En consecuencia la molécula de BF_3 es APOLAR.



En el PF_3 los tres enlaces presentan idéntica polaridad. Si representamos los momentos bipolares mediante vectores y trazamos la resultante el resultado no es nulo (los tres átomos de flúor se encuentran situados en el mismo plano, mientras que el fósforo se sitúa por encima). En consecuencia la molécula de BF_3 es POLAR.

Ejemplo 6. Justifica la geometría de las moléculas covalentes: BeF_2 , BCl_3 , CCl_4 , H_2O , NH_3 , a partir del modelo de repulsión de pares electrónicos.

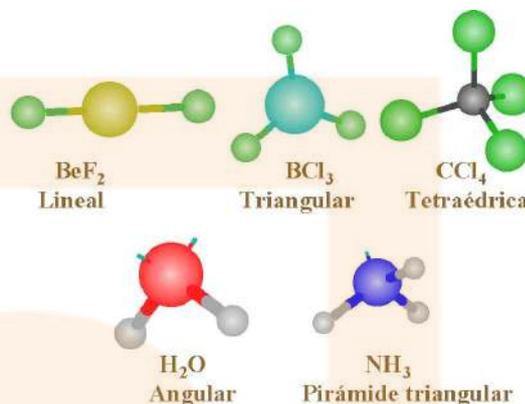
En el BeF_2 el átomo de Be forma únicamente dos pares electrónicos de enlace con átomos de F, por lo que según la teoría de repulsión de pares electrónicos, éstos se situarán lo más alejados posible entres sí, es decir, formando un ángulo de 180° , con lo que la geometría de la molécula será lineal.



En el BCl_3 en B forma tres pares electrónicos de enlace que se situarán con un ángulo de 120° con lo que la molécula será triangular plana con el átomo de B en el centro y los de Cl en los vértices.

En la de CCl_4 el C forma cuatro pares electrónicos con otros tantos átomos de Cl; la manera más alejada posible de situar dichas nubes electrónicas es hacia los vértices de un tetraedro, que es don se situarán los átomos de Cl, mientras que el de C se situará en el centro del mismo.

En el H_2O el O forma dos pares electrónicos de enlace con sendos átomos de H y posee además otros dos pares electrónicos sin compartir. La geometría será por tanto angular al situar los átomos de H en dos vértices de un tetraedro y los pares electrónicos sin compartir en los otros dos; sin embargo, al ser la repulsión de los pares de e^- sin compartir mayor que la de los pares de e^- de enlace, el ángulo H–O–H será algo inferior a los $109,4$ tetraédrico.



Lo mismo sucede en la molécula de NH_3 en dos existen por parte del N tres pares de e^- de enlace y un par de e^- sin compartir, con lo que los tres H se situarán en tres vértices del tetraedro y el par de e^- sin compartir en el cuatro lo que da un geometría de pirámide triangular en la cual el N ocuparía el vértice de dicha pirámide.

Ejemplo 7. Los puntos de ebullición del $\text{CH}_3\text{--CH}_3$ y $\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--OH}$ son respectivamente, -88°C , y 78°C . Explica razonadamente estas diferencias.

El etano es una molécula apolar debido a la pequeña diferencia de electronegatividad entre C y H y por su geometría que anula los pequeños momento dipolares de cada enlace C–H; por ello, su punto de ebullición es el menor pues al no existir cargas las fuerzas intermoleculares son muy débiles.

En el caso del etanol el enlace C–O también está polarizado y a diferencia con el éter está unido al O también un H formando también un enlace muy polarizado. Cuando el H está unido a elementos muy electronegativos se forman puentes de H que son las fuerzas intermoleculares de mayor fuerza lo que explica el mayor punto de ebullición de todos.

Ejemplo 8. Considerándolas sustancias Br_2 , SiO_2 , Fe, HF y NaBr, justifique en función de sus enlaces: a) Explica su solubilidad; b) Si conducen la corriente eléctrica a temperatura ambiente.

a. El Br_2 será soluble en disolventes apolares, el SiO_2 será insoluble en todo tipo de disolventes, el Fe será soluble sólo en otros metales como el mercurio, mientras que el HF y el NaBr serán solubles en disolventes polares como el agua.

b. A temperatura ambiente solo el Fe conducirá la corriente eléctrica debido al enlace metálico. El bromo es totalmente apolar y por tanto incapaz de conducir la corriente en cualquier estado, la sílice es un sólido molecular y tampoco podrá transportar la corriente al estar sus electrones formando enlaces covalentes. El HF podrá conducir la electricidad en estado disuelto o fundido pero no en estado gaseoso. El bromuro de sodio a temperatura ambiente como todos los compuestos iónicos se encuentran en estado sólido y por tanto no puede conducir a electricidad.



Ejercicios propuestos de ENLACE QUÍMICO Y GEOMETRÍA MOLECULAR.

1. Represente las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas y especies químicas: COF_2 , ClO_3^- , SbBr_3 , N_3^- , BCl_3 , BeBr_2 , XeF_2 , IF_5 , SO_2 , SO_3 , PCl_3 , O_3
2. Determine las estructuras de Lewis, la geometría molecular según la TRPECV, y la polaridad de las siguientes moléculas: XeF_4 , BeF_2 , CH_4 , H_2O , BF_3 , SeCl_2 , NH_3 , BF_4^- .
3. Determine la geometría e hibridación de las siguientes especies químicas: OF_2 , SnBr_2 , CH_3Cl , CCl_4 , BCl_3 , CO_2 .
4. De las siguientes sustancias: CaF_2 , Al , C_2H_2 , HF . a) Indique el tipo de enlace predominante en cada una de ellas. b) Ordénelas en orden creciente de puntos de ebullición. Justifique las respuestas.
5. Comente razonadamente la conductividad eléctrica de las siguientes sustancias: Un hilo de plata, un cristal de nitrato de plata, una disolución de nitrato de plata.
6. Dadas las moléculas BF_3 y PF_3 :
 - a) ¿Son polares los enlaces boro-flúor y fósforo-flúor? Razone su respuesta.
 - b) Prediga su geometría a partir de la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
 - c) ¿Son polares esas moléculas? Justifique su respuesta.
7. Indique el tipo de enlace o fuerza de unión que hay que romper para:
 - A) Fundir carbono diamante.
 - B) disolver cloruro de sodio.
 - C) Sublimar yodo.
 - D) Fundir cromo.
 - E) Disociar nitrógeno.
 - F) Evaporar alcohol etílico.
 - G) Fundir fluoruro de litio.
 - H) Disolver bromo en tetracloruro de carbono
 - I) Fundir óxido de calcio.
 - J) Electrólisis del agua.
8. Para las siguientes sustancias: O_2 , Cl_2O , F_2 , HF , Cl_2
 - a) Indique el tipo de enlace de cada una
 - b) Ordénelas por orden creciente de puntos de fusión, justificando la respuesta.
9. Para las siguientes moléculas: Agua, bicloruro de berilio y metano:
 - a) Represente la estructura de Lewis
 - b) Geometría molecular.
 - c) Polaridad
 - d) Explique la hibridación del átomo central.
- 10.-De los siguientes compuestos con estructura y geometría similar: NH_3 , PH_3 . Razone cuál de los dos presentará mayores puntos de fusión y ebullición.
11. Dadas las energías reticulares de las siguientes sustancias:
 - a) Sus puntos de fusión
 - b) Su dureza.
 - c) Su solubilidad en agua.

U (kJ/mol)	
NaF	- 914
NaCl	- 770
NaBr	- 728



Ejercicios de SELECTIVIDAD: ENLACE QUÍMICO Y GEOMETRÍA MOLECULAR.

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 04

1. A partir de los átomos A y B cuyas configuraciones electrónicas son, respectivamente, $1s^2 2s^2 2p^2$ y $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

- Explique la posible existencia de las moléculas: AB, B₂ y AB₄.
- Justifique la geometría de la molécula AB₄.
- Discuta la existencia o no de momento dipolar en AB₄.

2. En los siguientes compuestos: BCl₃, SiF₄ y BeCl₂.

- Justifique la geometría de estas moléculas mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- ¿Qué orbitales híbridos presenta el átomo central?

3. Dadas las especies: H₂O, NH₄⁺ y PH₃

- Representélas mediante estructuras de Lewis.
- Justifique su geometría mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 05

4. Dadas las siguientes especies químicas: CH₃OH, CH₄ y NH₃

- Indique el tipo de enlace que existe dentro de cada una.
- Ordénelas, justificando la respuesta, de menor a mayor punto de fusión.
- Razone si serán solubles en agua.

5. Dadas las especies químicas Cl₂, HCl y CCl₄:

- Indique el tipo de enlace que existirá en cada una.
- Justifique si los enlaces están polarizados.
- Razone si dichas moléculas serán polares o apolares.

6. Dadas las moléculas CF₄ y NH₃:

- Representélas mediante estructuras de Lewis.
- Justifique su geometría mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- Indique la hibridación del átomo central.

7. Teniendo en cuenta la energía reticular de los compuestos iónicos, conteste razonadamente:

- ¿Cuál de los siguientes compuestos tendrá mayor dureza: LiF o KBr?
- ¿Cuál de los siguientes compuestos será más soluble en agua: MgO o CaS?

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 06

8.- Dadas las moléculas BF₃ y PF₃:

- ¿Son polares los enlaces boro-flúor y fósforo-flúor? Razone su respuesta.
- Prediga su geometría a partir de la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- ¿Son polares esas moléculas? Justifique su respuesta.

9.- Dadas las moléculas de BCl₃ y H₂O:



- a) Deduzca la geometría de cada una mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- b) Justifique la polaridad de las mismas.

10.- Para las moléculas BCl_3 , NH_3 y BeH_2 , indique:

- a) El número de pares de electrones sin compartir de cada átomo.
- b) La geometría de cada molécula utilizando la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- c) La hibridación del átomo central.

11. Supongamos que los sólidos cristalinos CsBr , NaBr y KBr cristalizan con el mismo tipo de red.

- a) Ordénelos de mayor a menor según su energía reticular. Razone la respuesta.
- b) Justifique cuál de ellos será menos soluble.

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 07

12. Dadas las moléculas de BF_3 y H_2O :

- a) Determine la geometría de cada una mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- b) Razone si los enlaces son polares.
- c) Justifique si las moléculas son polares.

13. Explique:

- a) Por qué el cloruro de hidrógeno disuelto en agua conduce la corriente eléctrica.
- b) La poca reactividad de los gases nobles.
- c) La geometría molecular del tricloruro de boro.

14. Para las moléculas CCl_4 , NH_3 y BeCl_2 :

- a) Determine su geometría mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- b) ¿Qué tipo de hibridación presenta el átomo central?
- c) Razone si esas moléculas son polares.

15. Dadas las siguientes moléculas: F_2 , CS_2 , C_2H_4 , C_2H_2 , H_2O y NH_3 . Indique en cuál o cuales:

- a) Todos los enlaces son simples.
- b) Existe algún doble enlace.
- c) Existe algún triple enlace.

16. a) Represente la estructura de la molécula de agua mediante el diagrama de Lewis.

- b) Deduzca la geometría de la molécula de agua mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- c) ¿Por qué a temperatura ambiente el agua es líquida mientras que el sulfuro de hidrógeno, de mayor masa molecular, es gaseoso?

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 08

17. Indique razonadamente cuántos enlaces p y cuánto s tienen las siguientes moléculas:

- a. Hidrógeno.
- b. Nitrógeno.
- c. Oxígeno.



18.- Razone si son verdaderas o falsas las siguientes afirmaciones:

- Algunas moléculas covalentes son polares.
- Los compuestos iónicos, cuando están fundidos o en disolución, son buenos conductores de la electricidad.
- El agua tiene el punto de ebullición más elevado que el resto de los hidruros de los elementos del grupo 16.

19.- Indique qué tipo de enlace hay que romper para:

- Fundir cloruro de sodio.
- Vaporizar agua.
- Vaporizar n-hexano.

20.- Para las moléculas de tetracloruro de carbono y agua:

- Prediga su geometría mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- Indique la hibridación del átomo central.
- Justifique si esas moléculas son polares o apolares.

21.- Deduzca, según la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia, la geometría de las siguientes moléculas e indique la polaridad de las mismas:

- Amoniaco.
- Tricloruro de boro.
- Metano.

EJERCICIOS DE SELECTIVIDAD 09

22.- Dada la molécula de CCl_4 :

- Represéntela mediante estructura de Lewis.
- ¿Por qué la molécula es apolar si los enlaces están polarizados?
- ¿Por qué a temperatura ambiente el CCl_4 es líquido y el Cl_4 es sólido?

23.- Para la molécula GeH_4 :

- Establezca su geometría mediante la teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia.
- Indique la hibridación del átomo central.
- Ordene, de forma razonada, de menor a mayor punto de fusión los compuestos CH_4 y GeH_4 .