

Química

2.º Bachillerato

Antonio Pozas Magariños
Rafael Martín Sánchez
Ángel Rodríguez Cardona
Antonio Ruiz Sáenz de Miera
Antonio José Vasco

QUÍMICA

2

**Antonio Pozas Magariños
Rafael Martín Sánchez
Ángel Rodríguez Cardona
Antonio Ruiz Sáenz de Miera
Antonio José Vasco Merino**



MADRID – BOGOTÁ – BUENOS AIRES – CARACAS – GUATEMALA – MÉXICO

NUEVA YORK – PANAMÁ – SAN JUAN – SANTIAGO – SÃO PAULO

AUCKLAND – HAMBURGO – LONDRES – MILÁN – MONTREAL – NUEVA DELHI – PARÍS

SAN FRANCISCO – SYDNEY – SINGAPUR – ST. LOUIS – TOKIO – TORONTO

BLOQUE I**Unidad 1. Estructura de la materia**

1. Introducción	7
2. Radiación electromagnética	7
3. Orígenes de la teoría cuántica. Hipótesis de Planck	9
4. Espectros atómicos	12
5. Modelo atómico de Bohr para el hidrógeno	14
6. La Mecánica Cuántica moderna y su incidencia en el desarrollo de la Química	19
7. Breve descripción del modelo mecanocuántico	21
8. Orbitales atómicos	22
9. Estructura electrónica de los átomos	24
10. Clasificación periódica de los elementos	26
11. Configuración electrónica externa y tabla periódica	29
12. Variación periódica de las propiedades de los elementos	31
Partículas elementales	34
Cuestiones y problemas	35
Conceptos básicos	37

Unidad 2. El enlace químico

1. Introducción	39
2. Enlace químico y estabilidad energética	39
3. Enlace de tipo iónico	41
4. Enlace de tipo covalente	46
5. Enlace de tipo metálico	60
6. Fuerzas intermoleculares	62
Superconductividad	64
Cuestiones y problemas	65
Conceptos básicos	67

BLOQUE II**Unidad 3. Cinética química**

1. Introducción	69
2. Aspecto dinámico de las reacciones químicas	69
3. Ecuaciones cinéticas	72
4. Relación entre las concentraciones de los reactivos y el tiempo	74
5. Mecanismos de reacción y molecularidad	77
6. Teorías de las reacciones químicas	79

7. Factores que influyen en la velocidad de reacción. Estudio cualitativo	81
8. Utilización de catalizadores en procesos industriales	86
Química, tecnología y sociedad. Los nanocatalizadores..	88
Cuestiones y problemas	89
Conceptos básicos	93
Práctica de laboratorio. Influencia de un catalizador y de la temperatura en la velocidad de reacción: oxidación catalítica del MnSO_4	94

Unidad 4. Equilibrio químico

1. Introducción	97
2. Constante de equilibrio	97
3. Relación entre las formas de expresar la constante de equilibrio	103
4. Relación entre las constantes de equilibrio y el grado de disociación	104
5. Factores que modifican el equilibrio. Ley de Le Chatelier	106
6. Equilibrios heterogéneos sólido-líquido	109
7. Factores que afectan a la solubilidad de precipitados. Aplicaciones analíticas	114
8. Estudio termodinámico del equilibrio químico	116
Química, tecnología y sociedad. Los problemas de la cal y sus soluciones	118
Cuestiones y problemas	119
Conceptos básicos	123
Práctica de laboratorio. Desplazamiento del equilibrio cro- mato/dicromato: separación de cationes por precipitación selectiva	124

BLOQUE III**Unidad 5. Reacciones de transferencia de protones.
Ácidos y bases**

1. Introducción	127
2. Revisión histórica de los conceptos de ácido y base	127
3. Teoría de Arrhenius de los electrolitos	128
4. Teoría ácido-base de Brønsted-Lowry	129
5. Fuerza relativa de los ácidos y las bases	131
6. Constantes de disociación de los ácidos y las bases débiles K_a y K_b	134
7. Producto iónico del agua	136
8. Relación entre K_a y K_b	138
9. Concepto de pH	140

10. Estudio cualitativo de la hidrólisis	144
11. Resumen de la hidrólisis de sales	145
12. Neutralización	147
13. Estequiometría y pH del punto de equivalencia ..	149
14. Volumetrías de neutralización	151
15. Indicadores ácido-base	152
16. Algunos ácidos y bases de interés industrial y en la vida cotidiana	153
La contaminación atmosférica y la lluvia ácida	155
Cuestiones y problemas	156
Conceptos básicos	159
Práctica de laboratorio. Neutralización: valoración de una disolución de NaOH, de concentración desconocida, con HCl 0,1 M	160

Unidad 6. Reacciones de transferencia de electrones.

Oxidación-reducción

1. Introducción	163
2. Concepto tradicional de oxidación-reducción ...	163
3. Concepto electrónico de oxidación-reducción ...	164
4. Número de oxidación o estado de oxidación ...	165
5. Ajustes de reacciones de oxidación-reducción ...	167
6. Estequiometría de las reacciones redox	172
7. Electroquímica	174
8. Celdas galvánicas o pilas galvánicas	175
9. Electrodo de gases	179
10. Potencial de electrodo	180
11. Espontaneidad de las reacciones redox	187
12. Electrolisis	190
13. La corrosión de los metales	196
¿Cómo quiere las pilas: normales o alcalinas?	200
Cuestiones y problemas	201
Conceptos básicos	205
Práctica de laboratorio. Valoración redox: valoración de permanganato de potasio con oxalato de sodio....	206

BLOQUE IV

Unidad 7. Química del carbono

1. Introducción	209
2. Características de los compuestos del carbono	210
3. Nomenclatura y formulación de los compuestos orgánicos	216
4. Isomería de los compuestos orgánicos	225

5. Reactividad de los compuestos orgánicos	228
6. Principales tipos de reacciones orgánicas	231
7. Otras reacciones orgánicas	239
8. Medicamentos y Química Orgánica	242
Química industrial y Química de laboratorio	243
Cuestiones y problemas	244
Conceptos básicos	247

Unidad 8. Polímeros y macromoléculas

1. Polímeros. Clasificación y propiedades	249
2. El proceso de polimerización	251
3. Algunos polímeros de interés industrial	253
4. Macromoléculas de origen natural	257
Una nueva aplicación para los polímeros. Las pantallas OLED	260
Cuestiones y problemas	261
Conceptos básicos	263

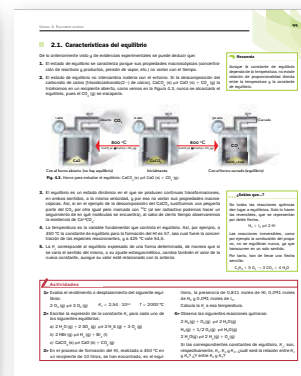
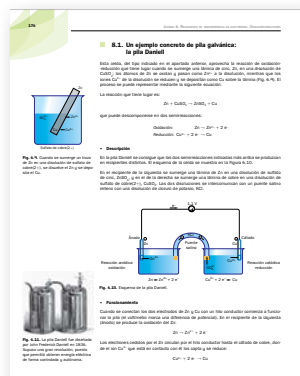
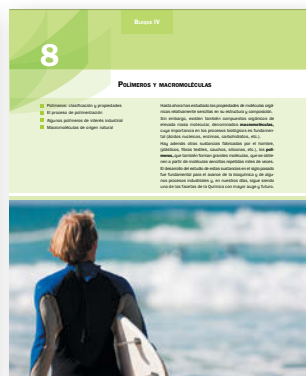
Anexo I. Química inorgánica

1. Introducción	265
2. Estudio de los grupos representativos	265
3. Hidrógeno	272
4. Principales compuestos de hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre	273
5. La industria química y el medio ambiente	281

Anexo II. Nomenclatura y formulación basada en las normas IUPAC 2005

1. Introducción	283
2. Nombres aceptados que no se ajustan a las normas sistemáticas	283
3. Nomenclatura sistemática	284
4. Nomenclatura de hidrógeno	291
Tabla periódica de los elementos. Propiedades periódicas	295

CÓMO SE UTILIZA ESTE PROYECTO

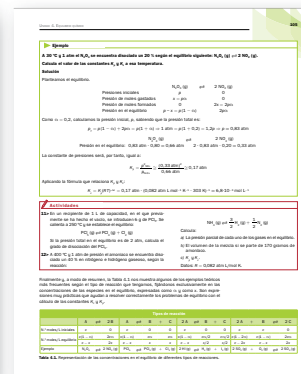
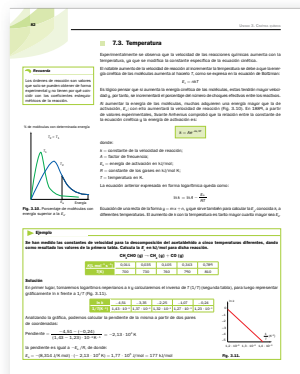
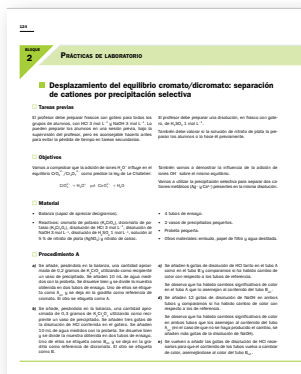


Portada

La portada incluye un índice de contenidos de la unidad, un texto introductorio y una fotografía motivante que relaciona el contenido visualmente con la unidad.

Contenidos de la unidad


Los contenidos se organizan de una manera ordenada para que cada nuevo concepto se base en lo aprendido anteriormente. El libro incluye gran cantidad de fotografías, dibujos y gráficas para facilitar el aprendizaje.



Nuevos contenidos LOMCE

El presente libro incluye los contenidos actualizados de 2º de Bachillerato de acuerdo al currículo de Bachillerato LOMCE.

Actividades y ejemplos resueltos

Todas las unidades presentan una completa colección de **ejemplos resueltos** que ilustran todos los conceptos esenciales, y **actividades**, acompañadas de la respuesta numérica redondeada al número correcto de cifras significativas. Mediante el símbolo  se indican actividades que han formado parte de pruebas de final de etapa en años anteriores.

Una nueva aplicación para los polímeros. Las pantallas OLED

Las pantallas OLED son un tipo de pantalla que emite luz por sí misma, a diferencia de las pantallas LCD que necesitan una luz de fondo. Esto permite que sean más delgadas y consuman menos energía. Se utilizan en dispositivos como teléfonos móviles, televisores y pantallas de ordenador.

Fig. 10.1 Pantalla OLED.

Las pantallas OLED están compuestas por una capa de polímeros orgánicos que emiten luz cuando se les aplica una corriente eléctrica. Este tipo de pantallas son más eficientes y tienen una vida útil más larga que las pantallas LCD.

Fig. 10.2 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

Fig. 10.3 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

Fig. 10.4 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

21. Conceptos básicos

21.1. Conceptos básicos

Las pantallas OLED son un tipo de pantalla que emite luz por sí misma, a diferencia de las pantallas LCD que necesitan una luz de fondo. Esto permite que sean más delgadas y consuman menos energía. Se utilizan en dispositivos como teléfonos móviles, televisores y pantallas de ordenador.

Fig. 10.1 Pantalla OLED.

Las pantallas OLED están compuestas por una capa de polímeros orgánicos que emiten luz cuando se les aplica una corriente eléctrica. Este tipo de pantallas son más eficientes y tienen una vida útil más larga que las pantallas LCD.

Fig. 10.2 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

Fig. 10.3 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

Fig. 10.4 Estructura de una pantalla OLED.

La estructura de una pantalla OLED incluye una capa de ánodo, una capa de polímero emisor de luz, una capa de cátodo y una capa de sustrato.

Prácticas de laboratorio

2. Influencia de un catalizador y de la temperatura en la velocidad de reacción: oxidación catalítica del MnO_2

Objetivos

Comprobar que un catalizador acelera la velocidad de una reacción química sin consumirse en el proceso. Estudiar la influencia de la temperatura en la velocidad de una reacción química.

Material

• H_2O_2 (peróxido de hidrógeno)

• MnO_2 (óxido de manganeso(IV))

• $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ (dicromato de potasio)

Procedimiento

1. Se prepara una solución de H_2O_2 en agua destilada.

2. Se mide el tiempo que tarda en liberarse el oxígeno cuando se añade MnO_2 como catalizador.

3. Se repite el experimento con $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ como catalizador.

4. Se estudia la influencia de la temperatura en la velocidad de la reacción.

Prácticas de laboratorio

3. Estudio de la cinética de la reacción de oxidación del Fe^{2+} por el Ce^{4+} en medio ácido

Objetivos

Estudiar la cinética de la reacción de oxidación del Fe^{2+} por el Ce^{4+} en medio ácido. Determinar la ley de velocidad y el orden de la reacción.

Material

• $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (sulfato ferroso heptahidratado)

• $\text{Ce(SO}_4)_2$ (sulfato de cerio(IV))

• H_2SO_4 (ácido sulfúrico)

Procedimiento

1. Se prepara una solución de $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ en agua destilada.

2. Se prepara una solución de $\text{Ce(SO}_4)_2$ en agua destilada.

3. Se mide el tiempo que tarda en liberarse el Ce^{4+} cuando se añaden las soluciones de Fe^{2+} y Ce^{4+} .

4. Se estudia la influencia de la concentración de Fe^{2+} y Ce^{4+} en la velocidad de la reacción.

□ Lectura y problemas finales

Las página finales de cada unidad comienzan con una **lectura divulgativa** relacionada con lo estudiado en la unidad, así como una colección de **problemas** clasificados de acuerdo a su contenido principal. Todos los problemas incluyen la respuesta numérica, adecuadamente redondeada.

□ Prácticas de laboratorio

Se han elaborado interesantes **prácticas de laboratorio** que cierran las unidades que así lo requieren, para que el alumnado ponga en práctica lo aprendido experimentando por sí mismo.

Conceptos básicos

2.6. Antígenos: grupo 16 de la tabla periódica

Este grupo de elementos se encuentra en el grupo 16 de la tabla periódica. Incluye a los gases nobles: Ne , Ar , Kr , Xe y Rn .

Fig. 2.6.1 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.2 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.3 Grupo 16 de la tabla periódica.

Conceptos básicos

2.6. Antígenos: grupo 16 de la tabla periódica

Este grupo de elementos se encuentra en el grupo 16 de la tabla periódica. Incluye a los gases nobles: Ne , Ar , Kr , Xe y Rn .

Fig. 2.6.1 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.2 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.3 Grupo 16 de la tabla periódica.

2.6. Antígenos: grupo 16 de la tabla periódica

Este grupo de elementos se encuentra en el grupo 16 de la tabla periódica. Incluye a los gases nobles: Ne , Ar , Kr , Xe y Rn .

Fig. 2.6.1 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.2 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.3 Grupo 16 de la tabla periódica.

2.6. Antígenos: grupo 16 de la tabla periódica

Este grupo de elementos se encuentra en el grupo 16 de la tabla periódica. Incluye a los gases nobles: Ne , Ar , Kr , Xe y Rn .

Fig. 2.6.1 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.2 Grupo 16 de la tabla periódica.

Fig. 2.6.3 Grupo 16 de la tabla periódica.

□ Conceptos básicos

La última página de cada unidad es un resumen con las principales definiciones y fórmulas aprendidas en la unidad. Este resumen es muy útil para el alumno a la hora del estudio y para realizar los ejercicios planteados.

□ Anexos: Química Inorgánica Descriptiva y Nomenclatura y formulación IUPAC

El anexo de **Química Inorgánica Descriptiva** permite que el alumno vea de forma global el comportamiento de los distintos elementos de la tabla periódica y de los compuestos basados en ellos. El anexo de **Formulación y nomenclatura inorgánicas** pretende desarrollar la formulación y la nomenclatura de la IUPAC del año 2005.

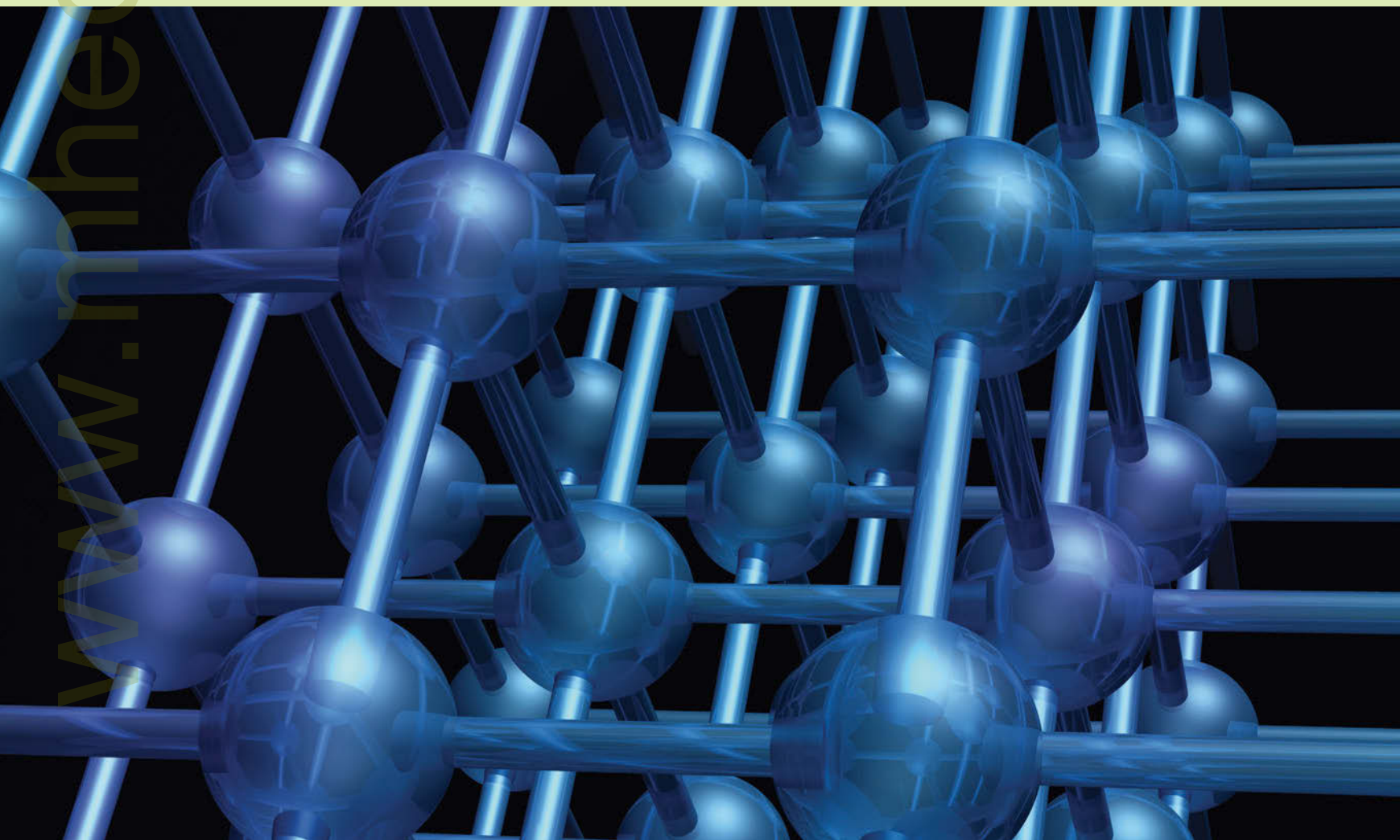
EL ENLACE QUÍMICO

- Introducción
- Enlace químico y estabilidad energética
- Enlace de tipo iónico
- Enlace de tipo covalente
- Enlace de tipo metálico
- Fuerzas intermoleculares

Nada existiría de no ser por las uniones que los átomos realizan entre sí para formar sustancias más complejas. La Tierra y todo lo que contiene dependen de que se produzcan esas uniones interatómicas a las que llamamos enlaces.

Ni todos los átomos tienen la misma tendencia a unirse con otros, ni todas las combinaciones entre ellos son posibles; por eso, no basta con imaginar un compuesto para que exista, puesto que solo se darán aquellas uniones que conduzcan a sustancias estables energéticamente.

En realidad, son los movimientos electrónicos los que con sus acercamientos a otros átomos y la búsqueda de la estabilidad del conjunto núcleos-electrones permiten la formación de las especies químicas que conforman la materia.



1. Introducción

Las sustancias químicas están formadas por átomos enlazados; solo los gases nobles se presentan en la naturaleza como átomos aislados.

Para formar estas sustancias, los átomos ponen en juego una serie de fuerzas, globalmente atractivas, que posibilitan la unión estable de unos con otros. A esa unión estable la llamamos **enlace químico**.

Todo proceso natural tiende a **estabilizarse** de manera espontánea o, lo que es lo mismo, tiende a conseguir un **estado de mínima energía**. En general, podemos afirmar que los átomos se unen formando sustancias para disminuir la energía interna que poseen y, por tanto, aumentar su estabilidad. Consideramos que se ha formado un enlace químico entre dos átomos si la disminución energética observada en el sistema es superior a unos 125 kJ/mol.

Estructuralmente, los enlaces se forman mediante la **transferencia total o parcial de electrones** entre los átomos. Esta transferencia permite que los átomos implicados en el enlace posean una configuración electrónica externa, en la mayoría de los casos, similar a la de los gases nobles, que es mucho más estable que las configuraciones electrónicas iniciales.

Los científicos postulan modelos para explicar cómo se produce **el enlace químico**. Estos modelos deben explicar tres aspectos fundamentales del mismo:

- La **estequiometría molecular** en que los átomos se hallan en cada sustancia y el número total de átomos en ella.
- La **geometría espacial** de las moléculas. Por ejemplo, el CH_4 espacialmente es un tetraedro.
- La **energía del enlace** que mantiene ligados los átomos entre sí.

En esta unidad describiremos y analizaremos las diferentes formas en que aparecen unidos los átomos en la naturaleza, utilizando las más modernas teorías sobre el enlace, lo que nos permitirá interpretar las principales propiedades físicas y químicas de las sustancias estudiadas.

2. Enlace químico y estabilidad energética

Como hemos dicho, los átomos se unen entre sí formando especies químicas más complejas para estabilizarse.

Una forma adecuada para visualizar la formación y las características energéticas de los enlaces químicos son las llamadas **curvas de Morse**, que pueden obtenerse de forma experimental y que muestran la variación de energía que experimenta un sistema formado por dos átomos en función de la distancia que los separa y de las fuerzas de interacción que surgen entre ellos.

- Si dos átomos están lo suficientemente separados podemos suponer que no ejercen entre sí ninguna influencia mutua y el sistema tiene una energía inicial que puede considerarse nula.
- Si ambos átomos se aproximan empieza a ponerse de manifiesto la existencia de **fuerzas atractivas** (que son de largo alcance) de unos núcleos sobre las nubes electrónicas de los otros, lo que produce una disminución energética que estabiliza el sistema.
- A medida que disminuye la distancia interatómica, esa situación continúa acentuándose, hasta que comienzan a interaccionar las nubes electrónicas entre sí mediante **fuerzas repulsivas**, cuyo efecto es más destacado en distancias cortas. Entonces, el sistema se desestabiliza progresivamente al aumentar su energía asintóticamente hacia un valor infinito positivo para una distancia nula.

SIGLO XX

1902

P. Drude: teoría del gas de electrones para metales.

1916

G. Lewis y W. Kossel: regla del octeto y formación de enlaces.

1923

H. Lorentz: conductividad de los metales mediante la deslocalización de electrones.

1927

W. Heitler y F. London: teoría del enlace de valencia para compuestos covalentes.

1931

L. Pauling: teoría de la hibridación de orbitales atómicos para enlaces covalentes.

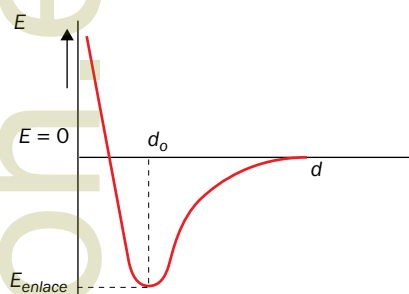


Fig. 2.1. Curva de estabilidad para la formación del enlace.

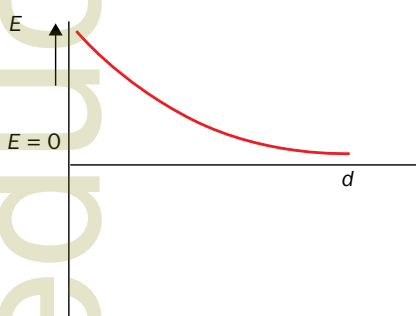


Fig. 2.2. Curva de inestabilidad.

Se obtiene la llamada **curva de estabilidad energética** mediante la representación gráfica del resultado conjunto de las dos interacciones, como muestra la Figura 2.1. En ella se observa que existe una determinada distancia internuclear para la que el sistema es más estable, pues son máximas las fuerzas atractivas y mínimas las repulsivas, denominada **distancia de enlace** (d_0). Esta distancia tiene un valor energético mínimo que corresponde a la energía que se desprende en la formación de dicho enlace, denominada **energía de enlace** (E_{enlace}) (Tabla 2.1).

Cuanto más profundo es el mínimo en la gráfica, mayor es la energía desprendida al formarse el enlace y, por tanto, mayor es la estabilidad de la molécula formada.

La **energía de disociación** es la energía necesaria para romper un enlace previamente formado. Si comunicamos a los átomos enlazados una energía igual o mayor que la E_{enlace} , conseguiremos separarlos totalmente hasta una distancia tal que no ejerzan interacciones entre sí; diremos entonces que se ha roto el enlace químico.

A parte del caso anterior, no siempre al aproximar dos átomos se forma una región de estabilidad.

Existen casos en los que se observa la formación de una **curva de Morse de inestabilidad**, que indica que las características de dichos átomos son tales que no llegan a unirse formando una molécula estable, sino que tienden a separarse de forma espontánea (Fig. 2.2). Este es el motivo por el que no existen todas las sustancias que podamos imaginar mediante la mera combinación de los átomos existentes.

□ **Regla del octeto** ← **Nota maquetista:**
Unifico Nivel 3

Existen diferentes modelos para explicar los enlaces presentes en las sustancias. Los estudios de Bohr sobre el átomo de hidrógeno y el desarrollo de la hipótesis cuántica abrieron el camino hacia el establecimiento de teorías para el enlace químico basadas en las interacciones entre los electrones de valencia.

En 1916, **Walter Kossel** (1888-1956) explicaba la formación de los enlaces iónicos, mientras que **Gilbert Lewis** (1875-1946) abordaba la de los enlaces de tipo covalente.

Ambos autores suponen que los átomos tienen una capa electrónica externa que puede contener hasta ocho electrones ($ns^2 np^6$); este **octeto de electrones representa una disposición electrónica especialmente estable**, ya que corresponde a la estructura de mínima energía (equivalente a la del gas noble más próximo en la TP).

Siguiendo este criterio, sugieren que cuando los átomos se unen por medio de enlaces ceden, captan o comparten electrones con el fin de alcanzar estos ocho electrones en sus capas externas, ya que esto supone la máxima estabilidad. Es lo que se denomina **Regla del octeto**.

Se trata de una regla útil para interpretar algunos enlaces, aunque no siempre se cumple. Podemos considerar que es válida para los átomos de los tres primeros periodos.

Las **limitaciones** de la regla del octeto son evidentes:

- **El hidrógeno** es estable con solo dos electrones en su capa 1s (capa más externa). Lo mismo sucede para el litio y el berilio.
- **Octeto expandido:** algunos elementos a partir del tercer periodo, al tener orbitales d, pueden rodearse de más de ocho electrones; por ejemplo, en el PCl_5 el fósforo está unido con cinco átomos de cloro, por lo que tendrá diez electrones a su alrededor.
- **Octeto incompleto:** algunos otros elementos se estabilizan con menos de ocho electrones a su alrededor; por ejemplo, el BF_3 , en el que el boro solo está rodeado por seis electrones.

Según sea el tipo de transferencia electrónica entre los átomos implicados, se distinguen varios tipos de enlace que estudiaremos a continuación.

Molécula	E_{enlace} (kJ mol^{-1})	d_0 (Å)
H_2	432,1	0,74
N_2	941,6	1,10
O_2	493,6	1,21
F_2	154,6	1,41
Cl_2	239,2	1,99
Br_2	190,1	2,28
I_2	148,8	2,67
HF	566,3	0,92
HCl	427,8	1,28
CO	745,0	1,23

Tabla 2.1. Energías de enlace y distancias de enlace de equilibrio para moléculas diatómicas.

3. Enlace de tipo iónico

La formación de iones se produce cuando un elemento muy electropositivo se encuentra en las proximidades de uno muy electronegativo, es decir, uno situado a la izquierda de la tabla periódica con otro situado a la derecha. El elemento no metálico capta uno o más electrones del otro, formando un ion cargado negativamente (anión), mientras que el metálico cede los electrones transformándose en un ion positivo (catión).

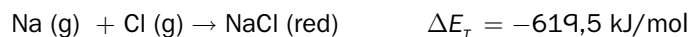
La existencia de una gran cantidad de estos iones hace que se produzca una posterior estructuración sólida en forma de red cristalina de cationes y aniones, al producirse una atracción de tipo culombiana entre ellos.

La existencia de redes cristalinas en lugar de moléculas se justifica energéticamente comprobando cómo se desarrolla este proceso de formación del enlace: considerando las **etapas de transferencia electrónica**, observamos que energéticamente el sistema no se estabiliza, sino todo lo contrario. Veamos el caso de la formación del cloruro de sodio:



Se observa que, si el proceso fuera solo este, el sistema aumentaría su energía, lo cual no puede contribuir a su estabilización.

Sin embargo, si la sustancia obtenida no se encuentra en estado gaseoso (en este caso un ion de cada elemento), sino que se encuentra en estado sólido formando una red cristalina, donde los iones se estructuran de forma que los cationes se rodean de aniones y viceversa, observamos que se libera la llamada **energía de red**, que posteriormente estudiaremos, y que en nuestro ejemplo sería de $-765,0 \text{ kJ/mol}$. Así, queda:



El proceso global ahora planteado sí que da lugar a un balance energético negativo para todo el proceso. De este modo, el sistema se estabiliza, pues su energía disminuye de forma apreciable, lo que posibilita este tipo de unión interatómica.

3.1. Redes cristalinas

Un cristal iónico está formado por iones de signo opuesto, de forma que cada uno crea a su alrededor un campo eléctrico que posibilita que se rodee de iones de signo contrario.

Los sólidos cristalinos mantienen sus iones casi en contacto mutuo, lo que explica que sean prácticamente incompresibles. Estos iones no pueden moverse libremente, pues se hallan dispuestos en posiciones fijas distribuidas ordenadamente en el espacio formando **retículos cristalinos** o **redes espaciales**.

Uno de los parámetros básicos de todo cristal es el llamado **número de coordinación**, que se define como el número de iones de un signo que rodea a un ion de signo opuesto. Podrán existir, según los casos, índices diferentes para el catión y el anión, pero siempre en la relación inversa a la que presentan esos átomos o iones en la fórmula de la sustancia.

a **b** **c** Vocabulario

Se denomina **electrovalencia** o **valencia iónica** al número de electrones intercambiados por cada elemento en un enlace iónico.

Date cuenta

El enlace iónico no se produce en el «robo» de electrones entre elementos químicos. Eso solo produce iones. Es la atracción culombiana entre los iones formados la que da lugar al enlace.

No hay una unión específica entre el átomo que ha captado el electrón y el que lo ha cedido.

Solo hay atracciones entre **todos** los iones de un signo y **todos** los del otro, y repulsiones entre todos los del mismo signo.

! Importante

Un enlace se considera iónico cuando la diferencia de electronegatividades entre los elementos que se unen es mayor que 1,8.

El número de coordinación, así como el tipo de estructura geométrica en que cristalice un compuesto iónico, depende de dos factores:

- **Tamaño de los iones.** El valor del radio de los iones marcará las distancias de equilibrio a las que estos se situarán entre sí simplemente por el espacio que ocupan en la red.
- **Carga de los iones.** Los iones se agruparán en la red de forma que se mantenga la electro-neutralidad del cristal.

Volviendo al ejemplo anterior del cloruro de sodio (Fig. 2.3), vemos que la relación de cargas anión-cation es 1:1.

Teniendo en cuenta que el ion más pequeño de los dos es el Na^+ , observamos que alrededor de cada ion Na^+ solo caben 6 iones Cl^- . El tamaño del ion más pequeño será el que limite el número de iones de un signo que rodearán a cada uno de los iones del otro ($N. C. = 6$). Así, se formará una estructura de **red cúbica centrada** en las **caras** cuya fórmula debería ser Na_6Cl_6 y que, por simplicidad, se escribe NaCl .

@ **En Internet**

<http://goo.gl/JGI1SG>

Visualización de la formación de una red iónica de cloruro de sodio.

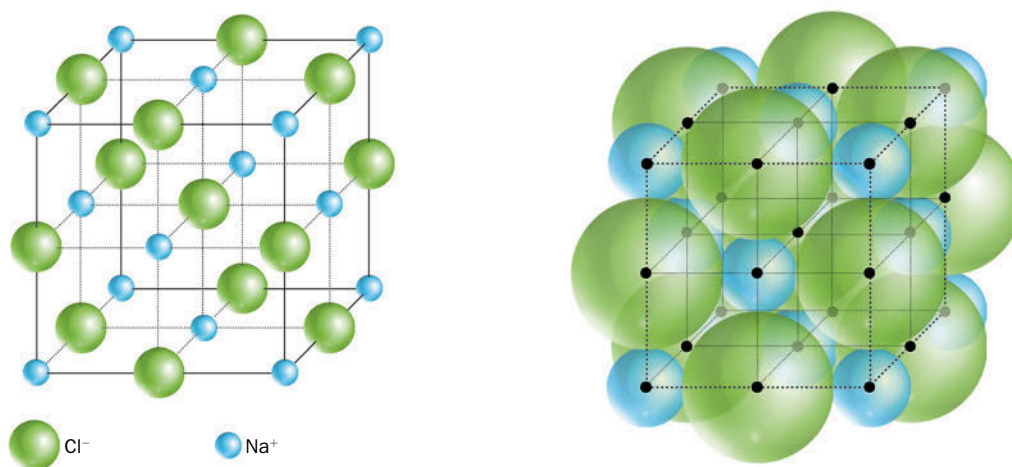


Fig. 2.3. Estructura cristalina del cloruro de sodio: geometría de la red y empaquetamiento real.



Fig. 2.5. En algunos casos la estructura interna de los cristales iónicos se puede observar en la forma externa que presentan en la naturaleza.

Otro ejemplo podría ser la red del cloruro de cesio (Fig. 2.4): su relación de cargas es también 1:1 y su número de coordinación es 8, puesto que estos iones son de tamaño más parecido y, por tanto, cada uno permite que le rodeen ocho iones de signo opuesto; por ello, se formará una **red cúbica centrada en el cuerpo** cuya fórmula proporcional sería Cs_8Cl_8 y que estequiométricamente formularemos como CsCl .

El número de iones existentes en la red cristalina es indefinido, de manera que la fórmula con que caracterizamos una sustancia iónica solo indica la cantidad relativa (proporción) de iones de uno u otro signo que deben existir en el cristal para mantener la neutralidad eléctrica.

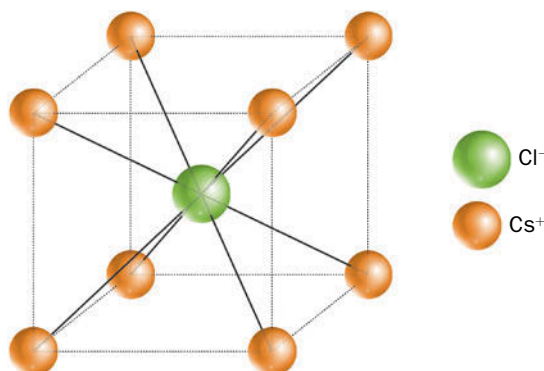


Fig. 2.4. Geometría de la red del cloruro de cesio.

3.2. Energía reticular

Cuando hemos realizado el balance energético del proceso de formación del enlace iónico nos hemos referido a la **energía reticular** U , que vamos a analizar a continuación más detenidamente.

La **energía reticular** es la energía que se desprende al formarse un mol de cristal iónico a partir de sus iones componentes en estado gaseoso. Un cristal iónico será, por tanto, más estable cuanto mayor sea su energía reticular.

El cálculo de dicha energía reticular se puede hacer con ayuda de la ecuación de Born-Landé:

$$U = -\frac{KZ_1Z_2e^2N_A\mathfrak{M}}{d_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

donde K es la constante de Coulomb en el vacío; Z_1 y Z_2 son las cargas de los iones; e es el valor absoluto de la carga del electrón; N_A el número de Avogadro; d_0 la distancia internuclear; \mathfrak{M} es la constante de Madelung, que depende del tipo de red cristalina, y n es el llamado factor de compresibilidad del cristal o coeficiente de Born (Tabla 2.2). Si los dos iones que se unen en el cristal son de distinto tipo, el coeficiente de Born es la media entre los valores de cada uno. Por ejemplo: $n_{\text{NaCl}} = 8$.

Como podemos ver, la energía reticular desprendida —de ahí el signo negativo de la fórmula— aumenta al hacerlo la carga de los iones y al disminuir el radio de los mismos.

► Ejemplo PAU

Se supone que los sólidos cristalinos NaF, KF y LiF cristalizan en el mismo tipo de red.

- Razona cómo varía la energía reticular de las sales mencionadas.
- Razona cómo varían las temperaturas de fusión de las citadas sales.

Solución

- a) De la expresión de la energía reticular se deduce que su valor depende, además de la constante de Madelung y del factor de compresibilidad, de las cargas de los iones y de la distancia que separa a sus núcleos; es decir, que el valor absoluto de la energía reticular aumenta con la carga de los iones y disminuye con la distancia entre sus núcleos.

En este caso, al cristalizar en el mismo tipo de red suponemos que los valores de la constante de Madelung y del factor de compresibilidad son muy similares para los tres, y no influyen en nuestros cálculos.

Al aumentar el tamaño de los metales alcalinos en el orden litio < sodio < potasio, puesto que bajamos en un grupo de la tabla periódica, y poseen los tres la misma carga, es claro que el valor absoluto de la energía reticular $|U|$ se hace menor al ir bajando en el grupo de los elementos alcalinos, es decir:

$$|U(\text{LiF})| > |U(\text{NaF})| > |U(\text{KF})|$$

- b) Fundir un cristal iónico es romper su estructura cristalina, es decir, vencer la energía reticular de la sal que mantiene unidos a los iones en el cristal y, como esta disminuye al bajar en el grupo de los alcalinos, en ese sentido disminuye la estabilidad térmica de las sales, o lo que es lo mismo, disminuye el punto de fusión (P.F) de las sales, es decir:

$$\text{P.F. (KF)} < \text{P.F. (NaF)} < \text{P.F. (LiF)}$$

Sustancia	\mathfrak{M}
NaCl, KCl, KBr	1,7456
CsCl, CsBr, CsI	1,7627
CaCl ₂	2,365
CaF ₂	2,5194
MgF ₂	2,381
Cu ₂ O	2,2212
ZnO	1,4985
ZnS (blenda)	1,6381
TiO ₂	2,408
SiO ₂	2,2197

Tipo de ion	n
He: Li ⁺	5
Ne: Na ⁺ , F ⁻ , O ²⁻	7
Ar: K ⁺ , Cu ⁺ , Zn ²⁺ , Cl ⁻	9
Kr: Rb ⁺ , Ag ⁺ , Br ⁻	10
Xe: Cs ⁺ , Au ⁺ , I ⁻	12

Tabla 2.2. Constantes de Madelung y coeficientes de Born de algunos cristales iónicos.

3.3. Ciclo de Born-Haber y energía reticular

Con frecuencia no se conoce con precisión el valor de la constante de Madelung ni el del factor de compresibilidad, por lo que el cálculo de los valores de U resulta inexacto. Por ello, se suele recurrir a un método indirecto basado en la realización de un balance energético, conocido con el nombre de **ciclo de Born-Haber**.

Este método se basa en considerar que todo proceso puede producirse en una etapa de combinación química directa con su correspondiente calor de reacción, o mediante una serie de procesos parciales, relacionados entre sí, cada uno con su variación energética propia.

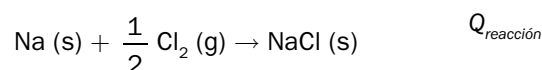
La totalidad de dichas variaciones energéticas deberá coincidir con el calor de la reacción química directa, si el conjunto de los procesos parciales implicados coincide con ella (ley de Hess).

Como ejemplo, vamos a aplicar este método al cálculo de la energía reticular del cloruro de sodio (Fig. 2.6):

! Importante

Ten en cuenta el signo que corresponde a cada energía implicada en el proceso. Recuerda que las energías desprendidas en el proceso son negativas, mientras que las absorbidas son positivas.

Reacción química



Procesos parciales implicados

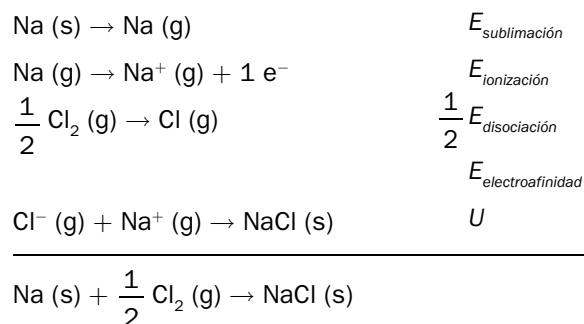
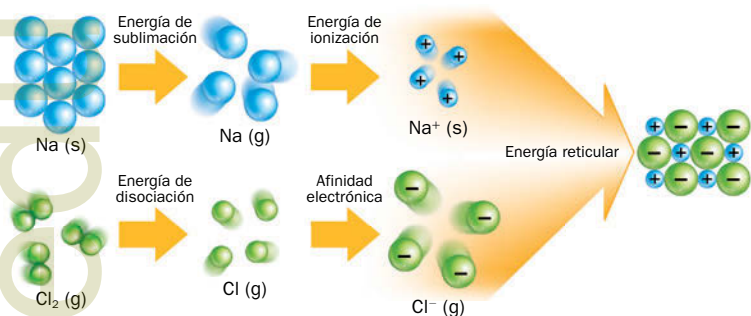


Fig. 2.6. Proceso de formación del cristal de NaCl.

La suma de los procesos parciales coincide con el proceso de combinación química directo, como puede observarse. Por ello, podemos concluir que la suma de sus variaciones energéticas coincidirá con la de la reacción química, es decir:

$$Q_{\text{reacción}} = E_{\text{sublimación}} + E_{\text{ionización}} + \frac{1}{2} E_{\text{disociación}} + E_{\text{electroafinidad}} + U$$

finalmente,

$$U = Q_{\text{reacción}} - E_{\text{sublimación}} - E_{\text{ionización}} - \frac{1}{2} E_{\text{disociación}} - E_{\text{electroafinidad}}$$

Todas las variables energéticas que aparecen en la ecuación final son fáciles de obtener (habitualmente están tabuladas), y de esta forma podremos calcular con mayor comodidad y exactitud el valor de la energía reticular del cristal.

Resumiendo, el esquema del ciclo de Born-Haber para este proceso sería el que se muestra en la Figura 2.7.

En general, los procesos parciales que pueden estar implicados son:

- Sublimación del metal.
- Disociación de las moléculas del no metal.
- Ionización del metal.
- Sublimación o vaporización del no metal.
- Ionización del no metal.
- Formación de la red cristalina.

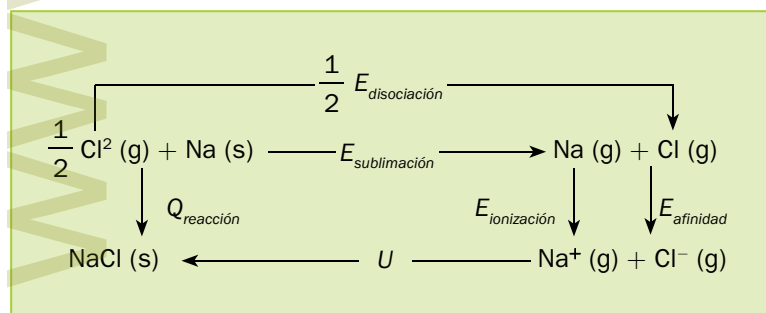


Fig. 2.7. Esquema del ciclo de Born-Haber para el NaCl.

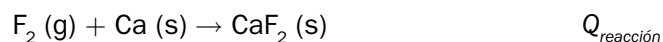
Debemos indicar que no todos los procesos mencionados han de tener lugar siempre, y que cada uno de ellos debe multiplicarse por el factor necesario para el correcto ajuste estequiométrico de la reacción global.

► Ejemplo

Indica cómo aplicarías el ciclo de Born-Haber para el cálculo de la energía reticular del fluoruro de calcio.

Solución

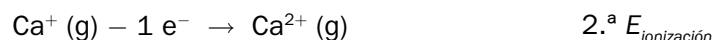
En primer lugar escribimos la reacción macroscópica de formación que tiene lugar:



Las sustancias implicadas deben estar en estado gaseoso antes de ganar o perder electrones, por lo que la primera etapa que se ha de considerar es la sublimación del calcio:



El calcio cederá dos electrones para quedar con estructura estable s^2p^6 mediante dos etapas de ionización sucesivas, ya que como vimos en la unidad anterior la energía necesaria para sacar el segundo electrón es mayor que para el primero:



Las siguientes etapas tendrían que ver con la disociación y la posterior ionización del flúor:



Por último, la etapa de formación del cristal: $2 \text{F}^- + \text{Ca}^{2+} \rightarrow \text{CaF}_2(\text{s}) \quad U$

Sumando las ecuaciones anteriores observamos que se obtiene la reacción macroscópica de formación del fluoruro de calcio, por lo cual podemos escribir que: $Q_{\text{reacción}} = E_{\text{sublimación}} + 1.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} + 2.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} + E_{\text{disociación}} + 2 \cdot E_{\text{electroafinidad}} + U$

Despejando queda: $U = Q_{\text{reacción}} - E_{\text{sublimación}} - 1.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - 2.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - E_{\text{disociación}} - 2 \cdot E_{\text{afinidad}}$

Compuesto	R (Å)	Z Z'	Calculado	Experimental
NaCl	2,76	1	767	767
NaF	2,31	1	898	898
LiF	1,96	1	1020	1007
KCl	3,14	1	702	698
BeO	1,75	4	4523	4483

Tabla 2.3. Energías reticulares calculadas y experimentales de algunos compuestos iónicos

Actividades

1> Con ayuda bibliográfica busca los valores energéticos que te permitan calcular la energía reticular del fluoruro de calcio a partir de la ecuación obtenida en el ejemplo anterior, y compárala con el valor que obtendrías si hubieses aplicado la fórmula directa de cálculo.

2> Ordena en forma creciente de sus puntos de fusión los siguientes compuestos iónicos: fluoruro de sodio, cloruro de sodio, bromuro de sodio y yoduro de sodio. ¿Cuál de ellos será el más duro?

3> Elabora un archivo Excel que te permita calcular el porcentaje de carácter iónico o covalente de un compuesto quí-

mico (a partir de las electronegatividades de los elementos que lo forman), utilizando dos fórmulas teóricas. Compáralas:

$$\% \text{ iónico} = 16 \cdot (\Delta\chi)^2 + 3,5 \cdot \Delta\chi$$

$$\% \text{ iónico} = 100 \cdot \left(1 - e^{-\frac{\chi^2}{4}} \right)$$

donde $\Delta\chi$ es la diferencia entre las electronegatividades de ambos elementos constituyentes.

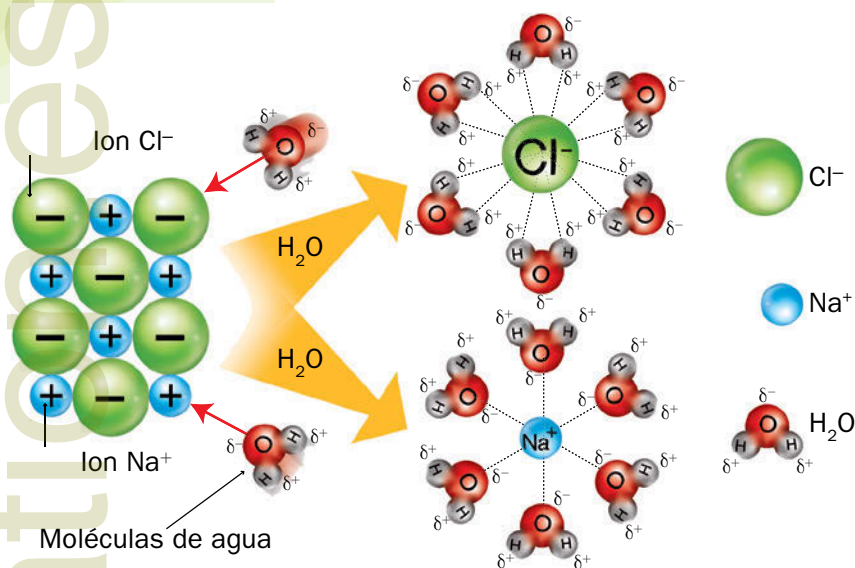


Fig. 2.8. Esquema del proceso disolución/solvatación de un compuesto iónico.

3.4. Propiedades de las sustancias iónicas

- Dado que su estructura natural es la de red cristalina, se trata de sustancias **sólidas**.
- La **dureza** se mide por la resistencia que tiene un material a ser rayado. En este caso es bastante grande, ya que para rayarlas hay que romper un cierto número de enlaces que, como hemos visto, son de tipo electrostático, es decir, fuertes.
- Por el mismo motivo tendrán **altos puntos de fusión y ebullición**.
- Su **solubilidad** es buena en disolventes de tipo polar, como el agua, ya que las moléculas de estos rodean a los iones de la red, produciendo interacciones de tipo electrostático lo suficientemente fuertes como para separarlos del cristal produciendo su desmoronamiento y, por tanto, su disolución.

- La **solvatación** es el proceso simultáneo a la disolución por el que las moléculas polares del disolvente rodean al ion ya separado del cristal (Fig. 2.8). Las sustancias apolares no son capaces de disolver los cristales iónicos.
- La **conductividad eléctrica** será nula para las sustancias iónicas sólidas, pues sus iones carecen de movilidad al estar fijos en la red. En cambio, cuando están disueltas o fundidas, la conductividad es muy grande por la gran facilidad que presentan para desplazarse influenciadas por un campo eléctrico.

4. Enlace de tipo covalente

El **enlace covalente** se produce al unirse elementos no metálicos entre sí o con el hidrógeno, es decir, entre átomos de electronegatividades semejantes y altas en general, que como sabes están situados a la derecha de la tabla periódica.

Este enlace se debe esencialmente a la compartición de electrones entre los distintos átomos, de manera que la energía del sistema disminuye respecto de la que tenían los átomos separados.

4.1. Estructura de Lewis

Antes de explicar cómo se produce el enlace covalente recordaremos que en el curso anterior estudiaste las notaciones abreviadas propuestas por Lewis, aplicables a cada molécula, que facilitan y ayudan a visualizar las uniones atómicas covalentes. Se les denomina **diagramas** o **estructuras de Lewis**.

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 aspás (para distinguirlos 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, si sigue la regla del octeto, manteniendo como propios sus electrones de valencia, por ejemplo:



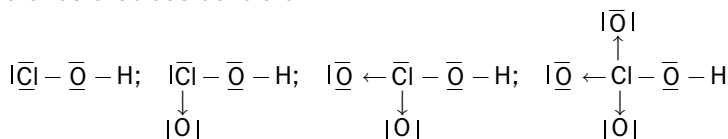
En algunas moléculas puede darse la situación de que los dos electrones con los que se forma el enlace sean aportados por el mismo átomo; se trata de un **enlace** covalente denominado **coordinado** o **dativo**, que fue formulado en 1921 por Perkins. En este enlace, el átomo

! Importante

Se denomina **covalencia** al número de electrones compartidos por cada elemento en un compuesto covalente.

que pone a disposición el par electrónico se denomina **dador**, y el que lo toma es el **aceptor**. No se representa mediante la raya habitual, sino con una flecha que sale del átomo **dador**.

Por ejemplo, para los oxácidos del cloro:



Recordemos ahora las reglas que ya vimos el año pasado y que te ayudarán a diseñar fácilmente las estructuras de moléculas más complejas:

1. Coloca los átomos de la molécula de la forma más simétrica posible.
2. Determina los electrones disponibles en la capa externa de cada uno de los átomos (A).
3. Calcula el total de electrones que caben en la capa de valencia de todos los átomos (N).
4. El número total de electrones compartidos (S) se obtiene al restar los disponibles de los que caben, es decir (N - A).
5. Coloca el resultado anterior, es decir, los pares electrónicos compartidos, enlazando los átomos.
6. Coloca el resto de los electrones (A - S) como pares no compartidos para completar el octeto de todos los átomos.

◆◆◆ ¿Sabías que...?

La aparición del enlace dativo resulta como consecuencia de ajustar los electrones propios que debe tener cada átomo tras escribir su estructura de Lewis.

Date cuenta

En el planteamiento que hacemos en el Ejemplo, y en cualquier otra molécula, contamos como electrones alrededor de un átomo los que se encuentran en las «rayas» que tiene cada átomo cerca de él, tanto si le corresponden solo a él como si están entre él y otro átomo.

Sin embargo contamos como propios los que le pertenecen sólo a él: dos por cada par no compartido y uno de cada par enlazante.

► Ejemplo

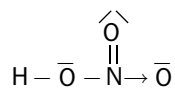
Escribe la estructura de Lewis del HNO_3 :

Solución

Elemento	Estructura electrónica	Electrones de valencia	Capacidad de la capa de valencia
N	$1s^2 2s^2 2p^3$	5	8
O	$1s^2 2s^2 2p^4$	6	8
H	$1s^1$	1	2

Tabla 2.4.

- Electrones de valencia disponibles: $A = 5 + 6 \cdot 3 + 1 = 24$
- Capacidad total de la capa de valencia: $N = 8 + 8 \cdot 3 + 2 = 34$
- Electrones compartidos: $S = N - A = 34 - 24 = 10$ (cinco enlaces)
- Electrones solitarios: $A - S = 24 - 10 = 14$ (siete pares)



Ahora distribuiremos los electrones adecuadamente sobre los átomos. Observa que alrededor de cada átomo hay ocho electrones y en el hidrógeno, dos. Como propios se mantienen los seis iniciales de dos de los oxígenos y el del hidrógeno, pero también aparecen como propios siete electrones sobre el otro oxígeno y solo cuatro alrededor del nitrógeno. La solución viene dada en este caso por el enlace dativo, al suponer que el nitrógeno es el *dador* y el oxígeno el *aceptor*.

Podemos resumir todo lo que hemos hecho en una tabla que contenga toda la información que hemos obtenido:

	e ⁻ (valencia)	e ⁻ (capa)	Totales	
H (1)	1	2	1	2
N (1)	5	8	5	8
O (3)	6	8	18	24
Electrones			24	34
Pares			12	17
Pares entre átomos			$17 - 12 = 5$	
Pares monoatómicos			$12 - 5 = 7$	

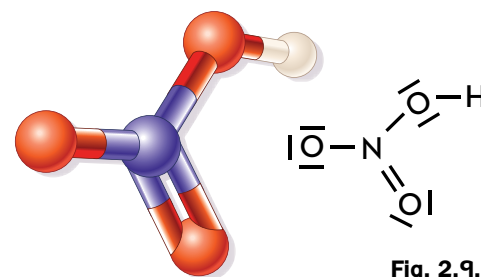


Fig. 2.9.

Tabla 2.5.

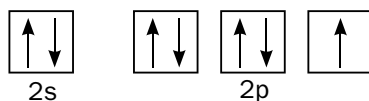
Ejemplo

Utilizando la notación de cajas, escribe la estructura electrónica de la última capa de los elementos **F, Cl, N, O, P** y explica qué covalencias pueden presentar.

Solución

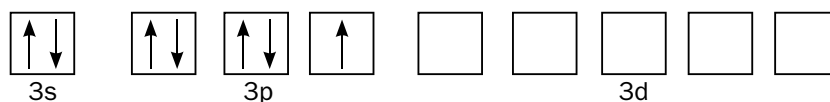
La notación de cajas intenta representar simbólicamente los orbitales por cajas y los electrones por flechas. Cada caja puede contener hasta dos electrones, uno con spin $+1/2$ (flecha hacia arriba) y otro con spin $-1/2$ (flecha hacia abajo). Los electrones solitarios se colocan desapareados y sus flechas indican el mismo sentido.

La estructura electrónica de la capa de valencia del flúor mediante la notación de cajas es:

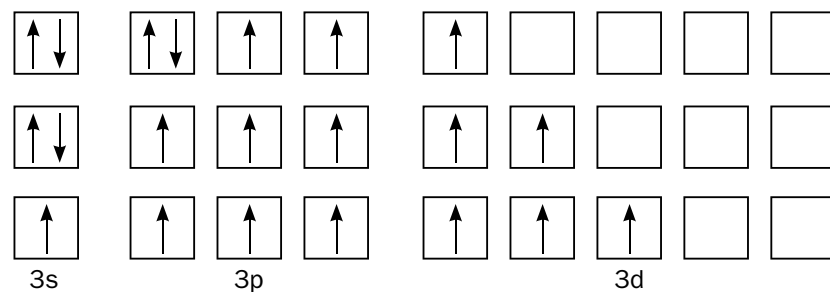


por lo que al tener un electrón desapareado su covalencia es 1.

Para el caso del cloro su estructura de capa de valencia es:

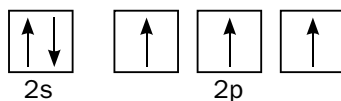


Aunque en el estado fundamental únicamente tiene un electrón desapareado, la presencia de los orbitales 3d vacíos hace que sea posible con muy poca energía promocionar 1, 2 y hasta 3 electrones a estos orbitales, para dar las siguientes configuraciones electrónicas:



con lo que las covalencias pasan a ser de 1, 3, 5 y 7 según los electrones que hayan promocionado.

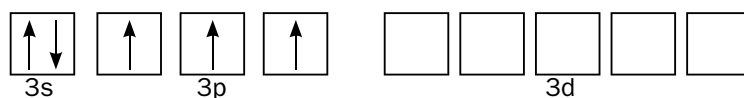
Para el caso del nitrógeno, la estructura de su capa de valencia es:



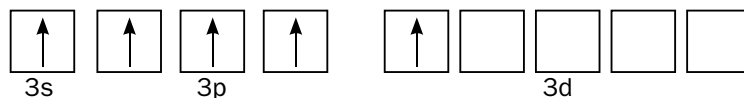
por lo que al tener tres electrones desapareados, su covalencia es 3.

El caso del oxígeno es similar, observándose que como sus electrones desapareados son dos, su covalencia debe ser 2.

Por último, el fósforo tiene una estructura de la última capa:



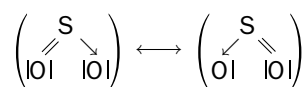
Aunque en el estado fundamental tiene tres electrones desapareados (lo que corresponde a una covalencia 3), la presencia de los orbitales 3d vacíos hace que sea posible, con muy poca energía, promocionar a ellos un electrón del orbital s, para dar la configuración electrónica:



por lo que al tener cinco electrones desapareados, su covalencia es 5.

Resonancia

La naturaleza de los enlaces de algunas moléculas no queda descrita de forma adecuada con un determinado diagrama de Lewis, sino que es posible escribir otros igualmente válidos, desde el punto de vista electrónico, con los átomos colocados en la misma posición. Por ejemplo, el dióxido de azufre (SO_2) se puede representar por las fórmulas:



en ambos casos se observa que un oxígeno estará ligado al azufre por un enlace doble y el otro por uno simple.

También podemos comprobar que el dióxido de azufre presenta una estructura angular con los dos oxígenos unidos al azufre situado en el vértice del ángulo por el mismo tipo de enlace. Y, además, este enlace tiene características intermedias entre uno simple y uno doble.

Pauling propuso el concepto de **resonancia**: la estructura real de la molécula es una estructura **híbrida** que es la mezcla de todas la formas estructurales propuestas, llamada **formas resonantes o canónicas**.

Esta situación ocurre en moléculas con enlaces dobles, especialmente conjugados —alternados—, ya que presentan diferentes formas resonantes obtenidas por la mera migración de los electrones que intervienen en sus enlaces.

Las formas resonantes que contribuyan eficazmente a la estructura verdadera deben tener el mismo número de electrones desapareados y los átomos han de ocupar las mismas posiciones relativas.

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. El ejemplo más característico de las sustancias resonantes es el benceno, que tiene los seis átomos de carbono formando un hexágono regular, con los seis hidrógenos situándose hacia fuera de cada carbono. El híbrido presenta los enlaces deslocalizados alrededor y dentro del anillo bencénico.

! Importante

Las **formas resonantes** son diferentes porque los dobles enlaces impiden el giro de los átomos en la molécula.

@ En Internet

<http://goo.gl/VDqZFb>

En el apartado **Resonancia del benceno**, de esta página, encontrarás un enlace en la palabra «híbrida». Si pinchas en él verás cómo resuena la estructura del benceno y cómo se representa.

Actividades

4> Si se representa mediante A al elemento de número atómico 11 y mediante B al de número atómico 16, explica si el compuesto formado por estos dos elementos será:

- Covalente AB .
- Iónico AB_2 .
- Covalente AB_2 .
- Iónico A_2B .

5> Se tienen tres elementos cuyas configuraciones electrónicas para la capa de valencia son:
A: $3s^2 3p^3$; B: $3s^2 3p^5$; C: $3s^1$. Indica razonadamente:

- La fórmula del compuesto B–C y la de uno de los posibles compuestos A–B.

b) El tipo de enlace en cada uno de estos compuestos.

6> Escribe las estructuras de Lewis para las siguientes especies químicas: HCN , H_2SO_3 y $(\text{SiO}_4)^{4-}$.

7> Cuatro elementos se designan arbitrariamente como A, B, C y D. Sus electronegatividades se muestran en la tabla siguiente:

Elemento	A	B	C	D
Electronegatividad	3,0	2,8	2,5	2,1

Si se forman las moléculas AB, AC, AD y BD, clasifícalas en orden creciente por su carácter covalente. Justifica la respuesta.

¿Sabías que...?

Los parámetros moleculares se determinan experimentalmente.

! Importante

A medida que aumenta la multiplicidad del enlace, disminuye la distancia interatómica porque el solapamiento entre los átomos es mayor.

4.2. Parámetros moleculares

Existe una serie de parámetros que caracterizan los enlaces y que, por ello, aportan una valiosa información para identificar las moléculas covalentes.

□ Energía de enlace

La **energía de enlace** es aquella que se desprende cuando se forma un enlace entre dos átomos en estado gaseoso y fundamental.

Experimentalmente se obtiene a partir de la **energía de disociación** implicada en el proceso inverso a la formación y cuyos valores son, por tanto, positivos. Cuanto mayores sean en valor absoluto las energías de enlace, tanto más estable será este.

Enlace simple	Energía de enlace	Enlace doble	Energía de enlace	Enlace triple	Energía de enlace
C–C	346,1	C=C	611,1	C≡C	818,4
C–N	292,6	C=N	614,0	C≡N	888,7
C–O	350,3	C=O	745,0	—	—
C–S	258,3	C=S	476,1	—	—
N–N	158,8	N=N	417,2	N≡N	941,6
N–O	221,5	N=O	606,1	—	—
O–O	137,9	O=O	493,6	—	—
S–O	346,5	S=O	497,4	—	—

Tabla 2.6. Energías de enlace (kJ/mol) entre algunos elementos.

□ Longitud de enlace

La **longitud de enlace** es la distancia de equilibrio entre los núcleos atómicos correspondiente al valor de la energía de enlace en la curva de Morse. Se denomina también **distancia internuclear**.

Sus valores reflejados en las tablas son solo **promedios** pues, como es sabido, los átomos enlazados no permanecen fijos, sino que giran y vibran, de manera que la distancia entre ellos varía, se alarga y acorta rápida y alternativamente. Además, también influye la presencia de otros átomos enlazados a ellos, ya que afectan notablemente a la forma y la distribución de sus nubes electrónicas.

A partir de los datos de las Tablas 2.1 y 2.7, observamos que si se trata de enlaces entre átomos iguales las distancias internucleares coinciden con la suma de radios atómicos.

Cuando los enlaces son heteronucleares, se observa que la longitud de enlace es menor que la suma de dichos radios. Esto se debe a la existencia de un cierto carácter iónico en ellos, relacionado con la diferencia de electronegatividades, tal y como comentaremos más adelante, que intensifica la atracción entre los átomos, acortando así la distancia entre ellos.

También podemos indicar que los **enlaces múltiples** entre átomos no solo aumentan sus energías de enlace, sino que disminuyen sus distancias internucleares. Por ejemplo, las distancias internucleares de C–C, C=C, y C≡C son 1,54 Å, 1,33 Å y 1,20 Å, respectivamente.

Átomo	Enlace simple	Enlace doble	Enlace triple	Átomo	Enlace simple	Enlace doble
H	0,37			O	0,66	0,55
B	0,88			S	1,04	0,94
C	0,77	0,67	0,60	Se	1,17	1,07
Si	1,17	1,07		Te	1,37	1,27
Sn	1,40	1,30		F	0,64	
N	0,70	0,60	0,55	Cl	0,99	
P	1,10	1,00		Br	1,11	
As	1,21	1,11		I	1,33	

Tabla 2.7. Radios (Å) de algunos elementos en los enlaces covalentes.

□ Ángulo de enlace

Ángulo de enlace es el ángulo hipotético formado entre el núcleo del átomo central y los núcleos de los átomos enlazados a él.

Se trata también de un valor promedio, por las mismas causas antes expuestas, pero como su valor no varía al hacerlo el tipo de átomos que se enlazan con el átomo central, nos indica que depende de dicho átomo central y no de los que se hallan unidos a él (Fig. 2.10).

□ Polaridad de los enlaces

El **enlace polar** se produce cuando se enlazan dos átomos de distinta electronegatividad (se considera que se produce para diferencias de electronegatividades de Pauling mayores de 0,4); el más electronegativo atrae hacia sí la nube electrónica responsable del enlace, creando con ello un desequilibrio electrostático, de forma que sobre él aparece un cierto exceso —densidad— de carga negativa y, sobre el otro, una positiva equivalente. Se crean así dos polos —el dipolo—.

Se puede interpretar este fenómeno como si se diera una cierta existencia de enlace iónico en un compuesto covalente. En realidad, podemos considerar a los enlaces teóricamente puros, tanto iónicos como covalentes, como casos extremos de un **único enlace generalizado de tipo iónico-covalente** (Fig. 2.11).

Se puede conocer el porcentaje de ionicidad de un enlace covalente mediante el cálculo de la carga (q) sobre cada átomo, lo que se denomina densidad de carga (δ). Este dato se obtiene a partir de la longitud de enlace (d_o) y de su momento dipolar ($\vec{\mu}$), según la ecuación: $\vec{\mu} = q d_o$.

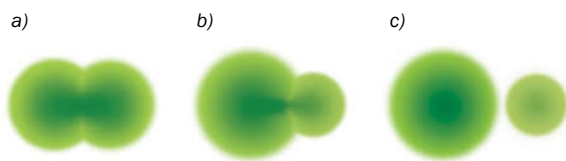


Fig. 2.11. Distribución de las nubes de carga eléctrica en: a) un enlace covalente puro (apolar); b) un enlace covalente polarizado (dipolar); c) un enlace iónico.

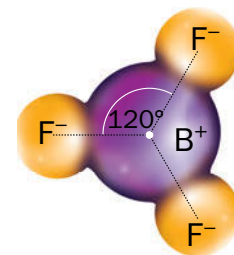


Fig. 2.10. Ángulo de enlace de los átomos de una molécula.

! Importante

En todo enlace covalente polar se da una participación de enlace iónico, que será mayor cuanto mayor sea la densidad electrónica de carga sobre cada átomo.

► Ejemplo

Calcula el porcentaje de carácter iónico que tiene el enlace H—Cl sabiendo que su momento dipolar es 1,07 D y que su longitud de enlace es 1,27 Å. Datos: 1 D = 3,33 · 10⁻³⁰ C m.

Solución

Vamos a calcular, en primer lugar, cuál es la carga responsable del dipolo a partir de: $\vec{\mu} = q d_o$, pues conocemos el momento dipolar y la longitud de enlace.

La unidad del momento dipolar en el SI es el Debye (D). La carga sobre cada átomo valdrá:

$$q = 1,07 \text{ D} \cdot 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C m D}^{-1} / 1,27 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2,81 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

En caso de que el enlace fuera 100% iónico, la carga que existiría sobre cada átomo sería la del electrón, por lo que podemos decir:

$$\% \text{ de carácter iónico} = \frac{\text{Carga observada en el dipolo}}{\text{Carga del electrón}} \cdot 100 \% = \frac{2,81 \cdot 10^{-20} \text{ C}}{1,60 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \cdot 100 \% = 17,6 \%$$

Es decir, este enlace es 17,6% iónico y 82,4% covalente.

+ Más datos

Este método fue desarrollado en 1957 por **Ronald Gillespie** y **Ronald Sydney Nyholm**, pero lo explicamos aquí para facilitar la comprensión de las teorías de enlace de valencia (TEV) e hibridación que veremos después.

! Importante

En la notación AX_mE_n , A representa el átomo central, X los átomos que se unen a él y E los pares electrónicos de A completos que no le enlazan con ningún átomo.

4.3. Método de repulsión de pares electrónicos en las capas de valencia (RPECV)

Se trata de un método para predecir la geometría de moléculas o iones. Básicamente supone que los pares de electrones de la capa de valencia del átomo central del compuesto se encuentran ordenados de tal manera que existe una repulsión mínima y, por tanto una separación máxima, entre ellos, determinando así la ordenación de los otros átomos en torno a ese átomo central, es decir, la geometría de la molécula.

El método **RPECV** tan solo nos indica las **direcciones de las regiones de alta densidad electrónica**, en tanto que la teoría de **EV**, que veremos después, nos muestra los **tipos de orbitales que se solaparán** para producir las geometrías moleculares previstas; son teorías complementarias entre sí.

Veamos a continuación cómo se aplica este método a los tipos moleculares más habituales (Tabla 2.8).

Tipo de fórmula			
Tipo de fórmula	Pares de electrones compartidos	Disposición de los átomos	Estructuras
AX_2E_0	2	Lineal (180°)	$X-A-X$
AX_3E_0	3	Trigonal plana (120°)	
AX_4E_0	4	Tetraédrica ($109,5^\circ$)	

Tabla 2.8. Estructuras moleculares espaciales previstas por el método de RPECV.

AX_2E_0 Lineal $X-A-X$		
AX_3E_0 Trigonal 	AX_2E_1 Angular 	
AX_4E_0 Tetraédrica 	AX_3E_1 Piramidal trigonal E 	AX_2E_2 Angular E

Fig. 2.12. Estructuras espaciales previstas para moléculas con pares electrónicos libres por el método de RPECV.

□ Molécula tipo AX_2E_0

La lineal es la distribución ideal que hace mínimas las repulsiones entre pares de electrones que forman el enlace entre los átomos A y X en esta molécula. Ej.: BCl_2 , CO_2 .

□ Molécula tipo AX_3E_0

En este caso, la trigonal plana es la distribución ideal que hace mínimas las repulsiones entre pares de electrones que forman el enlace entre los átomos A y X. Ej.: BF_3 , SO_3 .

□ Molécula tipo AX_4E_0

Aquí, la tetraédrica es la distribución ideal que hace mínimas las repulsiones entre pares de electrones que forman el enlace entre los átomos A y X. Ej.: CH_4 , SO_4^{2-} .

Veamos ahora lo que sucede cuando el átomo A tiene uno o más pares de electrones libres (no enlazados). La forma general de la molécula es aquella en la que el lugar ocupado por los electrones del enlace está ocupado por el par libre (E) (Fig. 2.12).

□ Molécula tipo AX_2E_1

En este caso, se trata de una molécula angular cuyo ángulo \widehat{XAX} está más cerrado de lo habitual (120°) por la repulsión del par electrónico sobre los pares de electrones que participan en los enlaces. Ej.: SO_2 , O_3 .

□ Molécula tipo AX_3E_1

Aquí, el par de electrones libres del átomo A se comporta como en el caso anterior, provocando que los pares enlazados A—X estén más juntos y apretados, disminuyendo el ángulo \widehat{XAX} de $109,5^\circ$ esperado. Ej.: NH_3 , PCl_3 .

□ Molécula tipo AX_2E_2

En esta molécula los dos pares de electrones libres provocan una mayor repulsión de los pares enlazados A—X por encontrarse más cercanos a ellos debido a la propia repulsión que ejercen aquellos entre sí, por lo que el ángulo de enlace \widehat{XAX} disminuye aún más que en el caso anterior. Ej.: H_2O , OF_2 .

4.4. Teoría del enlace de valencia (TEV)

La formación de enlaces covalentes se puede explicar mediante los conceptos cuánticos vistos en la unidad anterior. Existen varias teorías que intentan hacerlo; una de las más sencillas y adecuadas es la teoría del enlace de valencia (TEV).

Fue desarrollada en 1927 por **Walter Heitler** (1904-1981) y **Fritz London** (1900-1954), y supone que tras el acercamiento de los orbitales atómicos y su posterior superposición o *solapamiento* se produce el apareamiento de los espines electrónicos, lo que provoca el aumento de la densidad de carga electrónica en el espacio entre los núcleos, hecho identificable con la formación del enlace covalente.

En algunos casos, los electrones que están inicialmente apareados pueden desaparecer para participar en el enlace si existen orbitales vacíos en la misma capa. Así se explican las **valencias anómalas** en algunos elementos que estarían relacionadas con ese desapareamiento de electrones, que pasan a ocupar orbitales d de la misma capa. Ello supone un pequeño aumento de energía que se compensa con la disminución energética extra producida por la formación de un mayor número de enlaces.

Si los orbitales que se solapan son los más sencillos, tipos s y p, se pueden considerar dos tipos de enlaces:

- **Enlace σ** . Se forma por solapamiento —acercamiento y superposición— frontal, esto es, sobre el mismo eje, tanto de orbitales s como de orbitales p con ellos mismos o entre sí.
- **Enlace π** . Se forma por solapamiento lateral, es decir, sobre ejes paralelos, de los orbitales p.

El enlace σ es más fuerte que el π , puesto que su interpenetración es mayor.

Veamos ahora algunos ejemplos de formación de enlaces mediante esta teoría:

a. Molécula Cl_2

El cloro ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$) tiene 1 e^- desapareado en un orbital p, de forma que un acercamiento frontal de dos átomos producirá un solapamiento de dichos orbitales, lo que da lugar a un **enlace simple** de tipo σ (Fig. 2.13).

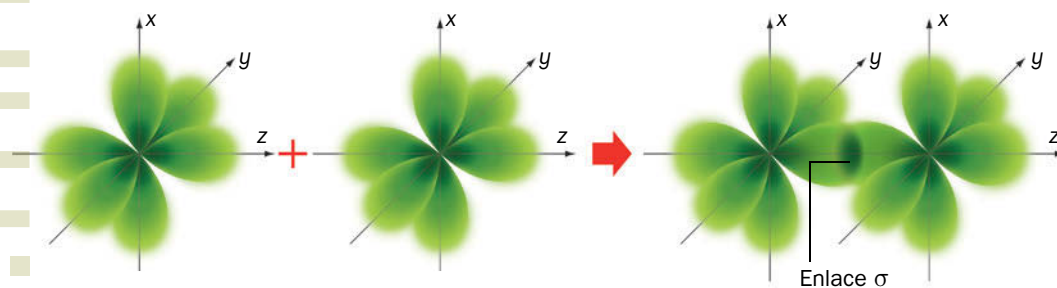


Fig. 2.13. Formación según la TEV de la molécula de Cl_2 .

b. Molécula O_2

El oxígeno ($1s^2 2s^2 2p^4$) tiene 2 e^- desapareados en dos orbitales p, de manera que el acercamiento de dos átomos conducirá a dos solapamientos, uno frontal, formándose un enlace σ , y otro lateral, formándose un enlace π . Se trata de un **enlace doble** (su longitud es menor que la del enlace simple y, aunque su energía es mayor, no llega a ser el doble de la de uno simple) (Fig. 2.14).

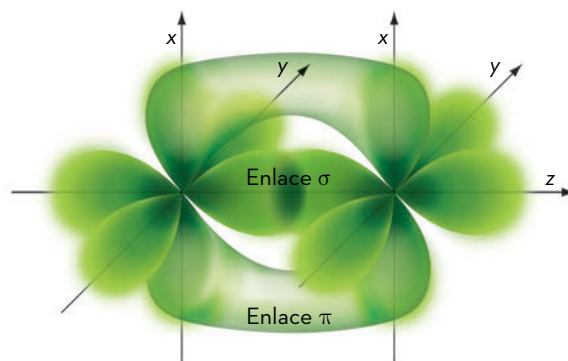


Fig. 2.14. Formación según la TEV de la molécula de O_2 .

+ Más datos

Los orbitales que no se solapan permanecen inalterados; tal y como eran cuando el átomo estaba sin enlazar.

Recuerda

Se forma un enlace por cada par de electrones que se aparean, por lo que habrá tantos enlaces como electrones desapareados tenga cada átomo.

! Importante

La molécula de H_2 presenta solapamiento frontal de los orbitales s de cada átomo, cada uno con un electrón; mientras que la **molécula de HF** se produce mediante el solapamiento del orbital s del hidrógeno con uno de los orbitales p del flúor. En ambos casos se forman enlaces simples tipo σ , como comentamos anteriormente.

Date cuenta

Según la **TEV**, los electrones en la molécula continúan ocupando los orbitales atómicos de los átomos individuales, y los implicados en el enlace se mueven no solo por sus orbitales, sino también por las zonas de solapamiento.

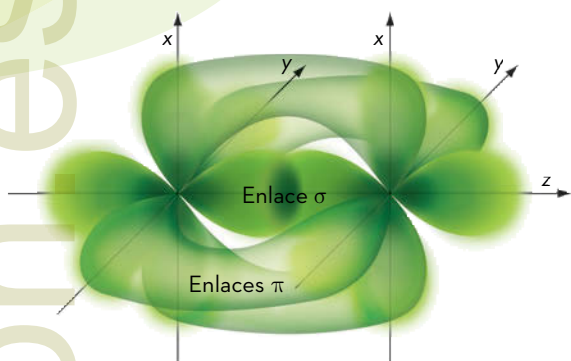


Fig. 2.15. Formación según la TEV de la molécula de N_2 .

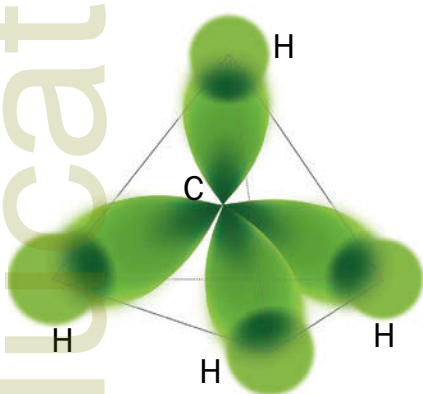


Fig. 2.16. Geometría espacial tetraédrica para los orbitales híbridos de tipo sp^3 del átomo de carbono en el metano.

c. Molécula N_2

El nitrógeno ($1s^2 2s^2 2p^3$) tiene 3 e^- desapareados en tres orbitales p, por lo que el acercamiento de dos átomos provoca un solapamiento frontal, formándose un enlace σ , y dos laterales que dan lugar a dos enlaces π . Se trata de un **enlace triple** (su longitud es menor que la de uno doble y su energía no llega a ser el triple de la de uno simple) (Fig. 2.15).

□ Hibridación de orbitales atómicos

La teoría de hibridación de funciones orbitales atómicas fue propuesta en 1931 por **Linus Pauling** (1901-1994) como una modificación de la teoría de enlaces de valencia, a fin de hacer frente a las discrepancias halladas en el cálculo teórico de los parámetros moleculares al aplicar dicho modelo, respecto de aquellos valores obtenidos experimentalmente para ellos en bastantes compuestos.

Una de las moléculas más sencillas que manifiesta estas discrepancias es la de metano (CH_4): la configuración de la capa de valencia del carbono en su estado fundamental es $2s^2 2p^2$, por lo que solo debería formar dos enlaces covalentes, pues tiene dos electrones desapareados.

Sin embargo, la experiencia química nos indica que el carbono en esta molécula forma cuatro enlaces covalentes iguales y orientados simétricamente con ángulos \widehat{HCH} de $109,5^\circ$ (forma tetraédrica).

La explicación dada por Pauling consiste en admitir la **formación de cuatro orbitales atómicos híbridos equivalentes** a partir del orbital $2s$ y de los tres orbitales $2p$ del carbono, que serían, por tanto, del tipo llamado sp^3 , conteniendo cada uno 1 electrón desapareado, según la regla de Hund. En esta hibridación los orbitales forman ángulos de $109,5^\circ$. Al solaparse frontalmente con los correspondientes orbitales $1s$ de los hidrógenos, se obtienen cuatro enlaces σ equivalentes orientados de la forma esperada (Fig. 2.16).

Esta teoría explica no solo cómo se forman los enlaces, sino que además **prevé la estructura espacial** que presentarán las moléculas. Por ello es extremadamente útil, aunque no representa una situación real, sino que consiste en un desarrollo matemático que indica que los orbitales que se solaparán serán una mezcla (o híbrido) de las funciones orbitales atómicas (Fig. 2.17).

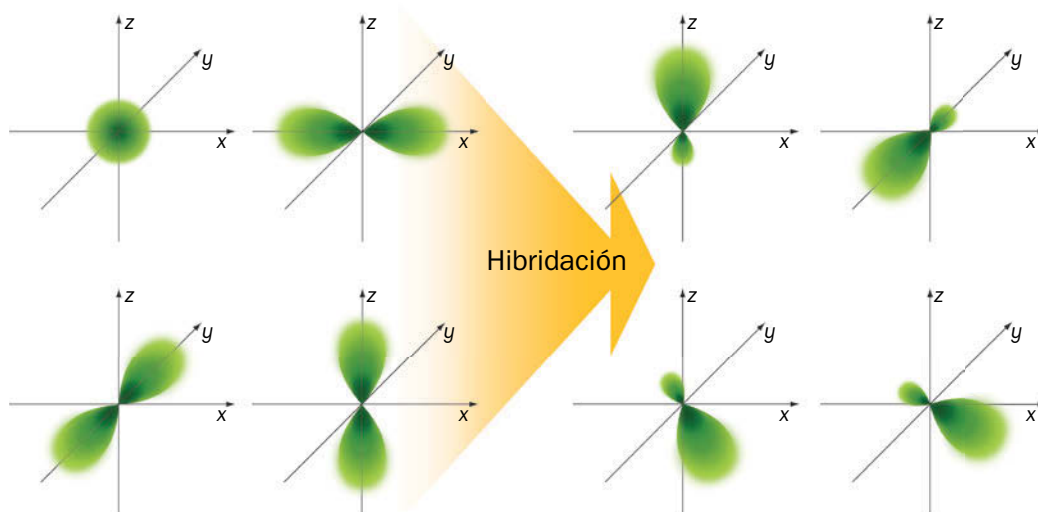


Fig. 2.17. Formación de orbitales híbridos sp^3 a partir de un orbital atómico s y tres orbitales atómicos p.

Los orbitales híbridos obtenidos serán tantos como orbitales atómicos intervengan en el proceso. Su contenido energético, forma y orientación dependen de la cantidad y el tipo de orbitales atómicos puros que formen cada híbrido.

+ Más datos

Los orbitales atómicos híbridos tienen un aspecto más o menos redondeado determinado por la cantidad de orbitales s y p que intervienen en su formación.

Su forma es bilobulada, con uno de los dos lóbulos más pequeño que el otro.

Puedes ver una representación de ellos (y más información) en:

<http://goo.gl/gQJlww>

También se formarán **orbitales híbridos de otros tipos**. Los principales son: los formados por un orbital s y dos orbitales p que se llaman sp^2 y que se disponen formando ángulos de 120° en el plano (cuando haya solo tres electrones en la capa de valencia o «reservemos» un electrón p para obtener un doble enlace), y los formados por un orbital s y un orbital p que son de tipo sp y se disponen en ángulos de 180° en una línea (cuando haya dos electrones en la capa de valencia o «reservemos» dos electrones p para un triple enlace o dos dobles).

Hibridación	Geometría electrónica	Ángulos	Ejemplos
sp	Lineal	180°	CO_2 , $CH \equiv CH$, $BeCl_2$, CdI_2
sp^2	Trigonal plana	120°	SO_2 , $CH_2 = CH_2$, AlF_3
sp^3	Tetraédrica	$109,5^\circ$	CH_4 , H_2O , H_2S , NH_3 , NH_4^+

Tabla 2.9. Principales tipos de hibridaciones.

A continuación, vamos a explicar mediante la hibridación cómo se forman los **enlaces del carbono en los compuestos orgánicos**, en los que están presentes los tres tipos de hibridación que hemos comentado.

Los **enlaces simples** (C–C) se observan, por ejemplo, en la molécula de **etano** (CH_3-CH_3): en ella existen cuatro enlaces σ para cada carbono, tres por solapamiento entre orbitales híbridos sp^3 del carbono y puros $1s$ del hidrógeno, y el cuarto entre híbridos sp^3 de ambos carbonos (Fig. 2.18).

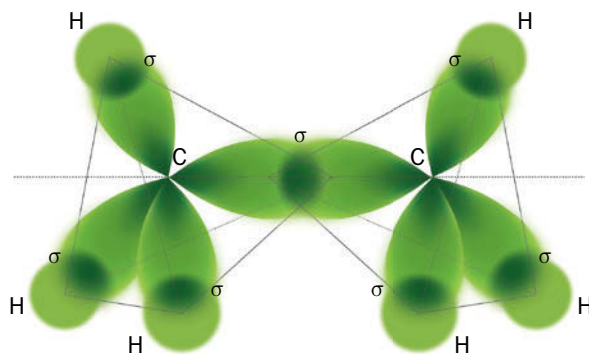


Fig. 2.18. Disposición espacial de los orbitales híbridos del etano.

En los compuestos con **doble enlace** —etilénicos— (enlace C=C) se presenta hibridación sp^2 por la unión de dos orbitales p y uno s, manteniendo un orbital atómico p puro, para poder crear el doble enlace. Cada uno de ellos tiene $1 e^-$ desapareado y la orientación espacial esperada es la plana trigonal (ángulos de 120°).

Veamos el caso del **eteno** (C_2H_4), cuyos carbonos presentarán cada uno un enlace σ por solapamiento frontal entre dos orbitales sp^2 de ambos, así como otros dos enlaces σ , por solapamiento con los orbitales $1s$ de los hidrógenos correspondientes; los orbitales p puros —sin hibridar— de los carbonos mantendrán un solapamiento lateral, produciéndose un enlace π que, junto con el σ anterior, conforman el característico doble enlace etilénico (Fig. 2.20).

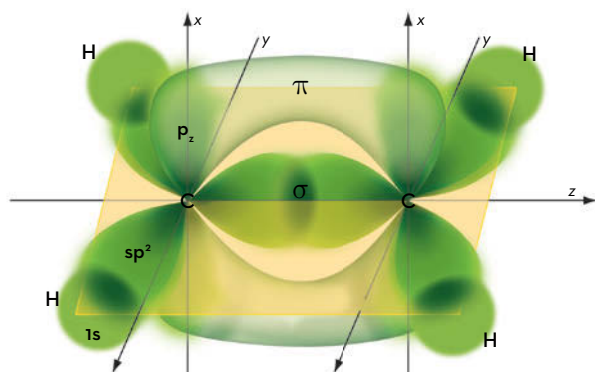


Fig. 2.20. Disposición espacial de los orbitales híbridos del eteno.

+ Más datos

En los solapamientos entre orbitales, cuando se forman los enlaces, pueden intervenir tanto los orbitales atómicos híbridos como los orbitales atómicos puros que quedaron sin hibridar.

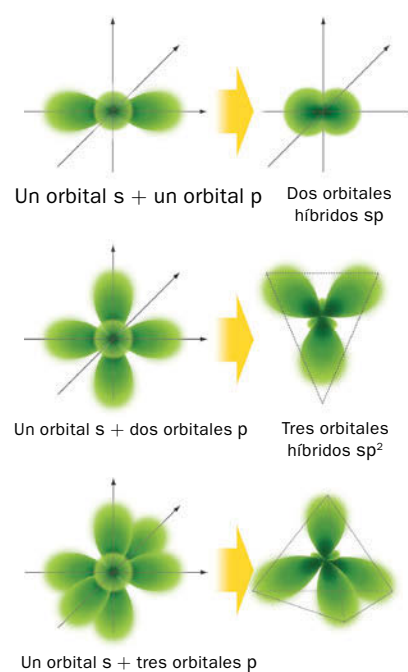


Fig. 2.19. Obtención de los orbitales híbridos sp , sp^2 y sp^3 a partir de sus correspondientes orbitales atómicos.

En los **compuestos acetilénicos** (con enlace $C \equiv C$) cada carbono presenta hibridación sp , manteniendo dos orbitales p sin hibridar, cada uno con $1 e^-$ desapareado, para crear el triple enlace. La orientación espacial será la lineal (ángulos de 180°).

Como ejemplo, veamos el **acetileno** (C_2H_2), cuyos carbonos presentarán cada uno un enlace σ por solapamiento frontal entre los orbitales sp de ambos, así como otro enlace σ cada uno por solapamiento con los orbitales $1s$ de los hidrógenos correspondientes; los dos orbitales p puros —que no sufrieron hibridación— de cada carbono constituirán sendos solapamientos laterales perpendiculares entre sí, produciéndose dos enlaces π que, junto con el σ anterior, conforman el característico triple enlace acetilénico, como comprobamos en la Figura 2.21.

! Importante

A partir de ahora, para facilitar la expresión de cuál es la geometría de una molécula llamaremos **estructura** de una molécula a su geometría electrónica (ya que es la base de la estructura de la molécula) y **forma** a la geometría molecular (que es la apariencia externa de la molécula).

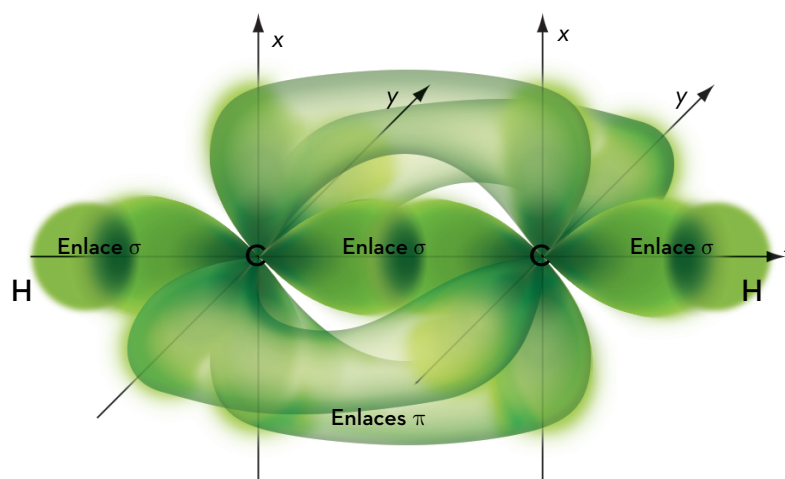


Fig. 2.21. Disposición espacial de los orbitales híbridos del acetileno.

La geometría espacial o electrónica no coincide con la molecular en las sustancias cuyos átomos contienen pares electrónicos solitarios, pues estos, aun no interviniendo en la formación de enlaces, pueden ocupar también orbitales híbridos, como verás a continuación.

Si estudiamos por ejemplo la **molécula de agua**, H_2O (del tipo tipo AX_2E_2 según la RPECV), que tiene dos pares electrónicos libres procedentes del átomo de oxígeno, podemos observar que tendrá dos de los orbitales híbridos sp^3 para solapar con los orbitales $1s$ de los átomos de H, y otros dos para albergar los pares de electrones libres. En este caso se dice que son orbitales híbridos de tipo sp^3 no enlazante.

Además, la geometría molecular del H_2O no presenta ángulos de enlace \widehat{HOH} de $109,5^\circ$, sino un poco menores. Así, el ángulo anómalo de $104,5^\circ$ observado es debido a la repulsión interelectrónica entre los pares libres, que fuerza el cierre del ángulo de los enlaces entre átomos (Fig. 2.22).

Observa que, a pesar del tipo de hibridación indicado, la geometría molecular (forma) será de tipo angular, en lugar de la tetraédrica electrónica, pues solo hay dos átomos —los hidrógenos— unidos al átomo central de oxígeno.

Otro caso parecido es el de la **molécula de amoníaco**, NH_3 (del tipo tipo AX_3E_1 según la RPECV), que presenta hibridación sp^3 con ángulos de enlace $\widehat{H\!-\!N\!-\!H}$ de $107,8^\circ$, puesto que uno de sus cuatro orbitales híbridos no es equivalente a los otros tres, al estar ocupado por un par electrónico libre; esto provoca repulsión sobre los enlaces cercanos y, por ello, el cierre angular observado. La forma será piramidal trigonal, similar a un tetraedro truncado (Fig. 2.23). Se observa también que la existencia de grupos voluminosos unidos al átomo central modifica el ángulo de enlace esperado, simplemente por mera cuestión del tamaño que ocupan estos átomos; es lo que se llama **efecto estérico**.

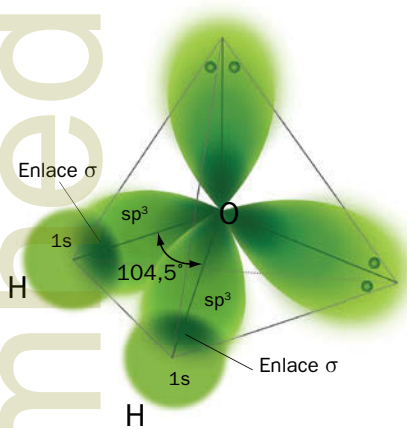


Fig. 2.22. Estructura de la molécula del agua.

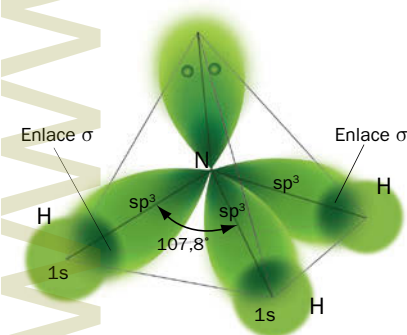


Fig. 2.23. Estructura de la molécula de amoníaco.

Ejemplo

Para las moléculas BF_3 y CHF_3 :

a) Escribe las estructuras de Lewis.

b) Determina la geometría molecular utilizando la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia.

Solución

a) Molécula BF_3

	Electrones de valencia	Capacidad de la capa de valencia	Electrones totales	
F	7	8	21	24
B	3	6	3	6
Electrones			24	30
Pares			12	15
Pares entre átomos			$15 - 12 = 3$	
Pares monoatómicos			$12 - 3 = 9$	

Tabla 2.10.

Estructura y forma trigonal plana (RPECV: AX_3E_0) [$\alpha_{\text{F-B-F}} = 120^\circ$].

b) Molécula CHF_3

	Electrones de valencia	Capacidad de la capa de valencia	Electrones totales	
H	1	2	1	2
C	4	8	4	8
F	7	8	21	24
Electrones			26	34
Pares			13	17
Pares entre átomos			$17 - 13 = 4$	
Pares monoatómicos			$13 - 4 = 9$	

Tabla 2.11.

Estructura y forma tetraédrica (RPECV: AX_4E_0). Como la molécula no es simétrica respecto del átomo central, los ángulos varían un poco con relación a los del tetraedro.

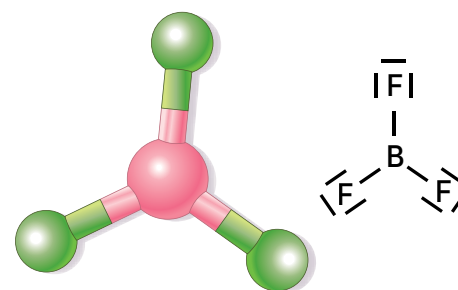


Fig. 2.24.

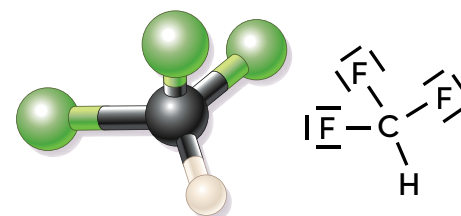


Fig. 2.25.

Actividades

8> Para las moléculas H_2S y PH_3 :

- Representa mediante diagramas de Lewis su estructura electrónica.
- ¿Qué tipo de hibridación, si la hay, presentan sus átomos centrales?
- ¿Qué valor aproximado tienen sus ángulos de enlace?

d) ¿Qué forma geométrica presenta cada molécula?

9> Dadas las moléculas CCl_4 , BF_3 y PCl_3 :

- Representa sus estructuras de Lewis.
- Predice la geometría de cada una de ellas según la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia.

□ Polaridad de las moléculas

Dado que las moléculas pueden tener más de un enlace, el momento dipolar —la polaridad— de la molécula no siempre coincide con la del enlace.

Solo en el caso de moléculas diatómicas su polaridad coincide con la del enlace, pues solo tienen uno.

En los demás casos es preciso conocer la **polaridad total** de la molécula, que se obtiene calculando el **momento dipolar resultante** de combinar vectorialmente los momentos dipolares o dipolos de los correspondientes enlaces de acuerdo con la geometría de la molécula que estamos analizando (Fig. 2.26) (Tabla 2.12), basándonos en las teorías ya comentadas.

Debido a ello ocurre que, aun teniendo la molécula enlaces polares, el resultado global puede ser de apolaridad si se anulan entre sí los momentos dipolares existentes. Esto último, por ejemplo, le ocurre a la molécula de metano (CH_4), que es apolar a pesar de que los enlaces C–H no lo son. Esto es debido a que sus cuatro momentos dipolares de enlace son iguales y están orientados en las direcciones que van desde los vértices de un tetraedro al centro de este, con lo que se anulan entre sí.

Como hemos dicho, para determinar si una molécula es o no polar es necesario conocer la disposición espacial de sus átomos, a fin de determinar el momento dipolar resultante de combinar vectorialmente sus momentos dipolares de enlace (Fig. 2.26).

Molécula	Forma	Momento dipolar (D)
HCl	Lineal	1,03
HBr	Lineal	0,79
H_2O	Angular	1,84
H_2S	Angular	0,92
SO_2	Angular	1,63
NO_2	Angular	0,39
CS_2	Lineal	0
HCN	Lineal	2,95
BF_3	Plana trigonal	0
SO_3	Plana trigonal	0
NH_3	Piramidal trigonal	1,47
CF_4	Tetraédrica	0
CCl_4	Tetraédrica	0

Tabla 2.12. Formas y momentos dipolares de algunas moléculas.

+ Más datos

Los vectores que representan los momentos dipolares se orientan de los polos negativos hacia los positivos, por convenio.

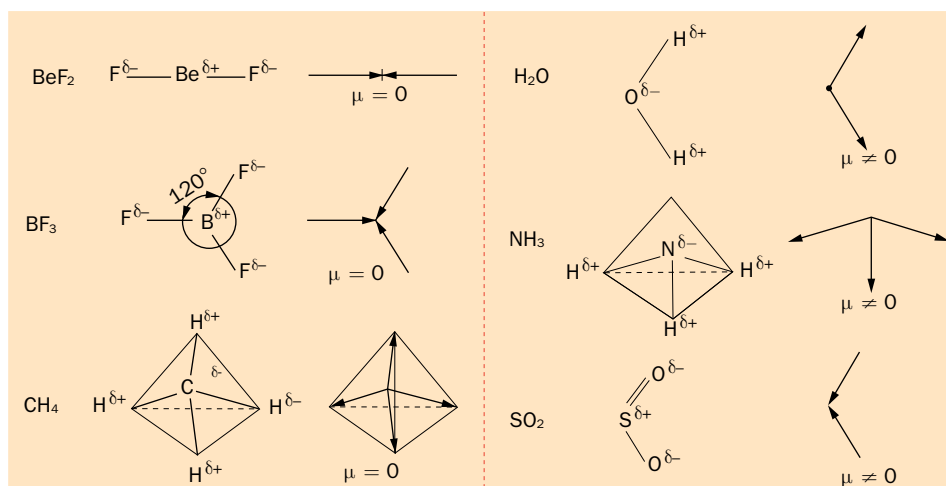


Fig. 2.26. Momentos dipolares de enlace y de molécula.

Actividades

10> Empleando la tabla de electronegatividades de la unidad anterior, ordena, según su polaridad, los enlaces siguientes:

- | | |
|-----|------|
| H–F | C–O |
| H–S | C–Cl |
| H–O | Cl–F |
| H–N | N–O |
| H–C | |

11> Se dan las siguientes sustancias: Br_2 , NaCl, HBr, BaO, HNO_3 , MgF_2 . Indica cuáles presentan:

- enlaces covalentes puros;
- enlaces covalentes polares;
- enlace iónico;
- enlaces covalentes no polares.

4.5. Propiedades de las sustancias covalentes

Los compuestos covalentes pueden presentarse en forma molecular (cuando se unen pocos átomos entre sí) y como redes cristalinas (cuando se unen entre sí cantidades de orden muy superior a trillones de átomos); por tanto, sus propiedades serán muy diferentes entre sí.

Las **sustancias moleculares** son aquellas en las que los átomos están asociados constituyendo moléculas que a temperatura ambiente pueden estar en forma gaseosa (O_2 , H_2 , N_2 , CH_4 , NH_3 , HCl , SO_2 , NO_2 , etc.), líquida (H_2O , Br_2 , CH_3-CH_2OH , CH_3-COOH , etc.) o sólida (I_2 , naftaleno, glucosa, etc.).

Las moléculas pueden ser apolares o polares. Cuando se trata de **moléculas apolares**, sus puntos de fusión y ebullición no son elevados, debido a que en estos casos las fuerzas intermoleculares —que estudiaremos a continuación— suelen ser débiles. La **solubilidad** de estos compuestos es elevada en disolventes apolares y nula su capacidad conductora.

Por el contrario, en las **moléculas polares** cuanto mayor sea su polaridad más altos serán sus puntos de fusión y ebullición —pues las fuerzas intermoleculares serán apreciables—, así como su solubilidad en disolventes polares y la conductividad eléctrica que presenten.

Aunque son mucho menos frecuentes, también existen las **redes covalentes**, que son sustancias formadas por un número muy elevado de átomos iguales o distintos unidos entre sí. Se trata de cristales cuyos átomos se enlazan covalentemente.

En general, están formadas a partir de carbono o de silicio. El primero se presenta en forma de **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) (Fig. 2.27), mientras que el segundo lo hace como **sílice** (SiO_2), que forma minerales como cuarzo, ópalo, etc., e incluso la arena de las playas. Su estructura es tetraédrica, con el silicio como átomo central.

Las redes que forman los sólidos covalentes macromoleculares son extremadamente rígidas, por lo que tienen altos puntos de fusión y ebullición; estos son duros, malos conductores y, habitualmente, insolubles. Cuanto más simétrica sea la estructura y, por tanto, más compacta, mayor será la dureza y los puntos de fusión y ebullición.

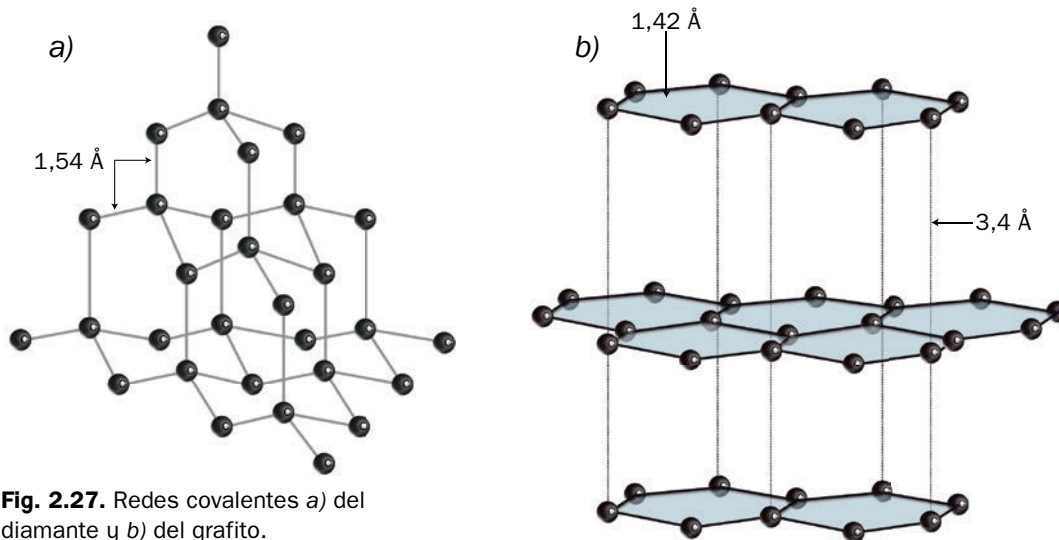


Fig. 2.27. Redes covalentes a) del diamante y b) del grafito.

+ Más datos

Las moléculas de menor masa molecular se presentan libres en estado gaseoso, mientras que a medida que dicha masa aumenta también lo hace el conjunto de las fuerzas intermoleculares que las mantiene unidas. A temperatura ambiente se encuentran en estado líquido o sólido, ya que necesitan que se les comunique mucha más energía calórica a fin de aumentar su energía cinética y poder liberarse de las moléculas que las rodean.

◆◆ ¿Sabías que...?

El diamante es la sustancia química más dura. Ninguna otra es capaz de rayarlo.

✍ Actividades

12> El carbono (diamante) y el yodo son sólidos a las temperaturas y presiones habituales.

Razona por qué el carbono (diamante) tiene una temperatura de fusión de 3823 K, mientras que el yodo es un sólido que se sublima con facilidad.

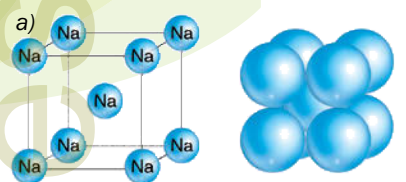
13> Considerando las sustancias Br_2 , SiO_2 y CaF_2 , justifica en función de sus enlaces:

- Si son o no solubles en agua.
- Si conducen la corriente eléctrica a temperatura ambiente.

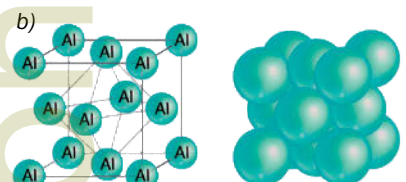
c) ¿Cuál es la más dura de ellas?

14> Teniendo en cuenta la estructura y el tipo de enlace, justifica:

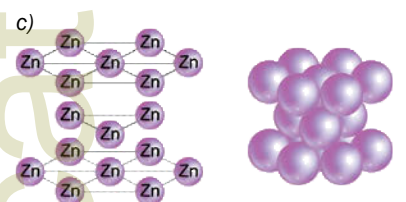
- El cloruro de sodio tiene punto de fusión mayor que el bromuro de sodio.
- El carbono en forma de diamante es un sólido muy duro.
- El nitrógeno molecular presenta gran estabilidad química.
- El amoníaco es una sustancia polar.



N.C. = 8 (Li, Na, K,...)



N.C. = 12 (Ca, Sr, Al,...)



N.C. = 12 (Be, Mg, Zn,...)

Fig. 2.28. Redes de los metales:
a) cúbica centrada en el cuerpo;
b) cúbica centrada en las caras;
c) hexagonal compacta.

! Importante

Las sustancias se presentan como redes cristalinas; las covalentes, además, en forma de moléculas.

5. Enlace de tipo metálico

El **enlace metálico** se produce al unirse átomos del mismo elemento o de varios elementos metálicos entre sí. Las densidades de los metales son bastante elevadas por lo general, debido a que sus átomos se agrupan unos con otros de forma muy cercana, con lo que se producen estructuras muy compactas en forma de redes tridimensionales.

Estas redes son de tres tipos, principalmente (Fig. 2.28):

- Cúbica centrada en el cuerpo (N. C = 8) (p. ej.: metales alcalinos).
- Cúbica centrada en las caras (N. C = 12) (p. ej.: calcio, estroncio, aluminio, cobre, plata, etc).
- Hexagonal compacta (N. C = 12) (p. ej.: berilio, magnesio, cinc, cadmio, etc.).

Sabemos que las sustancias metálicas tienen propiedades muy peculiares, como la gran conductividad eléctrica y el brillo metálico. Por ello, deducimos que las características estructurales del enlace metálico deben ser completamente diferentes a las estudiadas hasta ahora. **Los electrones implicados en él deben poseer una gran libertad y facilidad de movimiento**, aun con pequeños aportes energéticos.

Así, los elementos unidos por este enlace deberán reunir estas condiciones: **baja energía de ionización**, a fin de que los electrones puedan liberarse de los átomos fácilmente, y **orbitales de valencia vacíos**, para que los electrones puedan moverse con facilidad; ambas condiciones implican necesariamente conductividad.

A fin de poder explicar las propiedades específicas de los metales se postulan, para este tipo de enlace, dos modelos que describiremos a continuación:

5.1. Modelo del gas electrónico o del mar de electrones

Consideraciones derivadas del estudio de las propiedades metálicas llevaron en 1900 a Paul Drude (1863-1906), y posteriormente en 1923 a Hendrik Lorentz (1853-1928), a proponer este modelo, basado en la estimación de que los metales están formados por la aglomeración de iones positivos bañados por un mar de electrones o sumergidos en un gas electrónico.

En esta situación, **los electrones de valencia** no pertenecen a los átomos individuales, sino que todos ellos son comunes al conjunto de los átomos que forman la red; es decir, **están deslocalizados**. Esto explicaría su relativa facilidad para desplazarse por la estructura metálica, lo que produce las elevadas conductividades halladas y los efectos de emisión electrónica.

Esta teoría también justifica las especiales características de modelo que tienen los metales pues, al aplicar una fuerza, se produce un desplazamiento de las capas iónicas en las estructuras que no ocasiona una variación importante en las mismas, por lo que no se rompen (Fig. 2.29.a). En cambio, en el caso de los cristales iónicos se observa una gran inestabilidad de tipo electrostático por estos desplazamientos (Fig. 2.29.b).

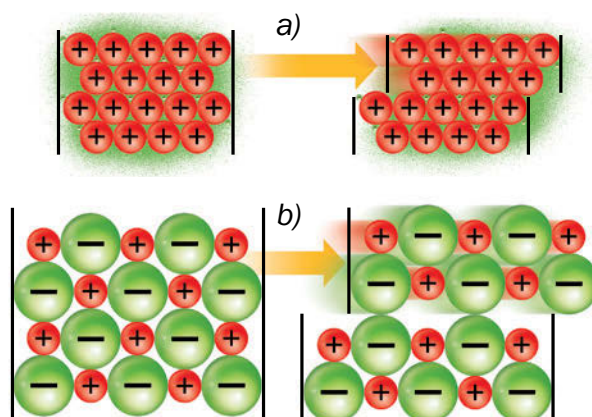


Fig. 2.29. Efectos de una fuerza lateral sobre los cristales: a) metálico y b) iónico.

5.2. Modelo de bandas

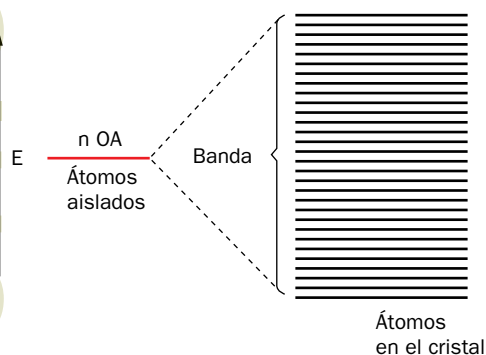


Fig. 2.30. Formación de una banda de niveles energéticos en un metal a partir de los orbitales atómicos de los átomos aislados.

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, dando lugar a un conjunto de orbitales de energías muy parecidas que constituyen lo que se denomina **banda de niveles energéticos** (Fig. 2.30).

Este modelo explica el **fenómeno de conductividad** tan característico de estos elementos: los metales, con 1 e⁻ en el orbital s, como el litio por ejemplo, tendrán una banda formada por la combinación de todos los orbitales s de los átomos metálicos. Estará semillena, pues contendrá la mitad de electrones que caben en ella; será la **banda de valencia**. Los electrones se situarían en la parte baja de la banda, que es donde hay menor energía. La aportación de una mínima cantidad de energía a dicha banda provocaría una fácil y rápida movilidad de sus electrones, lo que explicaría su gran conductividad.

Lo mismo ocurrirá con el resto de los metales que tienen orbitales d sin rellenar completamente: la movilidad de los electrones por banda d formada será grande y, por tanto, la conductividad también.

En el caso de elementos con el orbital s lleno, la banda de valencia también lo estará, pero la banda superior formada por los orbitales p vacíos, llamada **banda de conducción**, aparece con energía similar, por lo que se solapa con aquella, creándose un gran espacio de libre movilidad electrónica a poca energía que se les comunique (Fig. 2.31.a).

En los **semiconductores** las bandas no se superponen, pero el ΔE entre ellas es pequeño, y así el salto de electrones, aunque no tan fácil, será posible según sea la cantidad de energía comunicada (Fig. 2.31.b).

Los elementos **aislantes** tienen un ΔE entre la banda de valencia y la de conducción muy grande; es como una *zona prohibida* que impide el paso de electrones y, por tanto, no existe movilidad electrónica (Fig. 2.31.c).

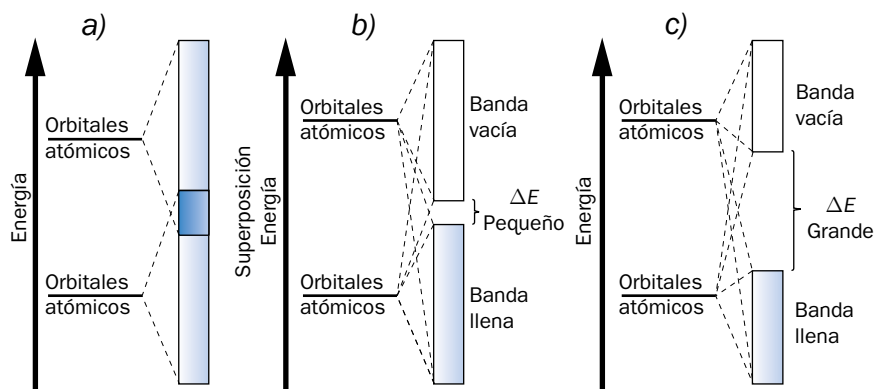


Fig. 2.31. Modelo de bandas para a) metales, b) semiconductores y c) aislantes.

5.3. Propiedades de las sustancias metálicas

Como hemos dicho anteriormente, las propiedades físicas de los metales son muy diferentes de las de los demás compuestos; de ahí la dificultad para encontrar una teoría de enlace que las justifique adecuadamente.

Estado natural

Aunque en general todos son sólidos a temperatura ambiente, excepto el mercurio, sus puntos de fusión y ebullición varían notablemente (por ejemplo, el galio funde a 29 °C y el wolframio a 3380 °C).

□ Conductividad

Las conductividades térmicas y eléctricas son muy elevadas, lo que sugiere una estructura con electrones «muy libres», con gran facilidad de movimiento.

□ Brillo metálico

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.

□ Ductilidad y maleabilidad

Se pueden estirar en hilos o formar láminas, lo que no ocurre con los sólidos no metálicos.

□ Emisión de electrones

Pueden emitir electrones cuando reciben energía en forma de calor (efecto termoiónico) o en forma de luz (efecto fotoeléctrico).

■ 6. Fuerzas intermoleculares

Los enlaces estudiados hasta ahora son **intramoleculares** por producirse en el interior de las moléculas; pero también existen interacciones entre las propias moléculas, que por ello los llamamos **intermoleculares**.

Como su rango energético es inferior a 40 kJ/mol, por lo general no se considera propiamente que existen enlaces, sino solo fuerzas de atracción. Se trata pues, de fuerzas que se producen entre moléculas y que afectan a sus propiedades físico-químicas.

Los enlaces **intermoleculares** se dan entre moléculas; se trata más bien de fuerzas de atracción entre ellas. Los enlaces **intramoleculares** son los que hemos visto hasta ahora: los que unen los átomos para formar los compuestos.

Básicamente, las fuerzas intermoleculares son interacciones de dos tipos: *enlace de hidrógeno* y *fuerzas de Van der Waals*.

■ 6.1. Enlace de hidrógeno

También llamado **punto de hidrógeno**, se produce entre aquellas moléculas que contienen un enlace entre el hidrógeno y un átomo muy electronegativo y pequeño (F, O, N). En estos casos, el elemento unido al hidrógeno atrae gran parte de la carga del enlace que los mantiene unidos, dejando una fuerte densidad de carga positiva sobre el hidrógeno y negativa sobre sí mismo, lo que posibilita que las moléculas puedan unirse entre sí por mera atracción electrostática que, sin ser muy grande, al menos sí es apreciable.

La energía de los enlaces intramoleculares puede oscilar entre 125 y 1100 kJ/mol, mientras que los enlaces por *punto de hidrógeno* lo hacen entre 8 y 40 kJ/mol, por lo que tan solo se les considera como asociaciones intermoleculares y no como enlaces propiamente dichos, como ya hemos indicado antes.

Los compuestos que experimentan estas interacciones presentan como principal **anomalía** los valores relativamente altos de sus puntos de fusión y ebullición y, por tanto, **su estado físico** a temperatura ambiente.

Un ejemplo característico es el del H_2O (Fig. 2.32). Es sabido que los puntos de fusión y ebullición de las sustancias disminuyen al hacerlo la masa molecular, pues es preciso comunicarles menos energía para que cambien de estado. Si nos fijamos en los puntos de ebullición de los compuestos que

! Importante

Las **fuerzas intermoleculares** solo se dan entre moléculas de compuestos covalentes.

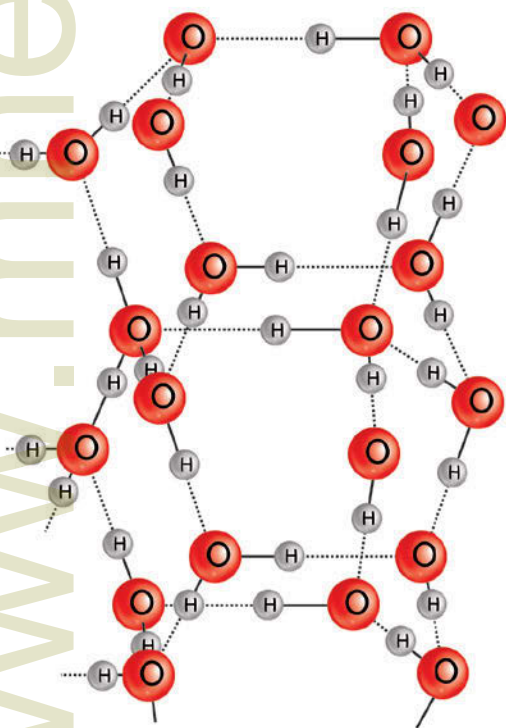


Fig. 2.32. Los puentes de hidrógeno en el agua forman una estructura hexagonal con mucho espacio libre. Eso hace que el hielo sea menos denso que el agua y, por tanto, flote sobre ella.

forman los anfígenos con el hidrógeno: H_2Te (p. e. $-1,8\text{ }^\circ\text{C}$), H_2Se (p. e. $-42\text{ }^\circ\text{C}$), H_2S (p. e. $-59,6\text{ }^\circ\text{C}$) y H_2O (p. e. $100\text{ }^\circ\text{C}$), observamos que lo dicho anteriormente se cumple para todos excepto para el agua que, aunque tiene la menor masa molecular, tiene la mayor temperatura de ebullición.

Esto solo es explicable por la energía adicional que es preciso comunicar a las moléculas de agua para romper sus fuertes asociaciones electrostáticas intermoleculares de puente de hidrógeno, a fin de hacerlas pasar al estado gaseoso. Lo mismo se observa para los puntos de fusión.

También existen enlaces de este tipo en compuestos orgánicos tales como alcoholes, fenoles, ácidos, aminas y amidas.

Algunas macromoléculas, como las proteínas o los ácidos nucleicos, también presentan puentes de hidrógeno. En particular, en el ADN los enlaces de este tipo son lo suficientemente fuertes como para mantener las dos cadenas unidas formando la característica doble hélice.

6.2. Fuerzas de Van der Waals

Son fuerzas de tipo electrostático que unen a las moléculas tanto polares como apolares. Su valor, expresado en forma de energía potencial, oscila entre 1 y 7 kJ/mol. En las primeras, los dipolos existentes pueden interactuar entre sí, produciéndose débiles uniones entre ellos (Fig. 2.33). Esto también modifica, aunque menos acentuadamente que en el caso de los puentes de hidrógeno, los puntos de fusión y ebullición de estas sustancias, aumentándolos.

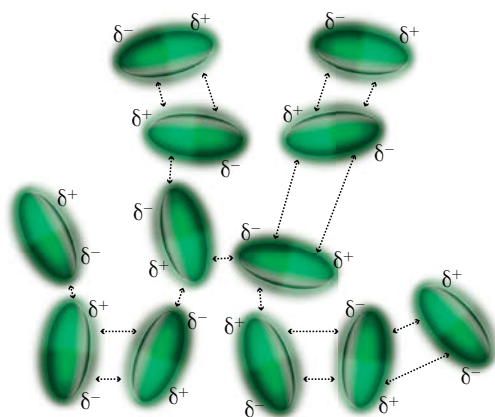


Fig. 2.33. Interacciones dipolo-dipolo.

En las moléculas apolares, la movilidad de las nubes electrónicas puede provocar una cierta asimetría eléctrica al desplazarse, lo que conduce a la formación de dipolos instantáneos en ellas. Estos, a su vez, pueden originar dipolos inducidos en las moléculas cercanas, produciéndose las consiguientes atracciones entre ellos. En este caso se les llama también fuerzas de dispersión o de London.

Actividades

15> Razona cuál de las siguientes sustancias presenta unas fuerzas intermoleculares mayores y explica cuáles son las consecuencias de ello.



16> Los valores de los puntos de ebullición de los halogenuros de hidrógeno son: HF ($19,5\text{ }^\circ\text{C}$), HCl ($-85\text{ }^\circ\text{C}$), HBr ($-67\text{ }^\circ\text{C}$), HI ($-35\text{ }^\circ\text{C}$). Explica la variación de estos valores en relación con la naturaleza de estas sustancias y la existencia de fuerzas intermoleculares de cohesión.

+ Más datos

Algunas moléculas se agrupan formando **crisales** merced a las fuerzas intermoleculares. Se les llama crisales moleculares, y en ellos los puntos reticulares los ocupan las moléculas. Algunos ejemplos son: hielo (H_2O) y las formas naturales de yodo (I_2), fósforo (P_4) y azufre (S_8).



Fig. 2.34. Las fuerzas intermoleculares, aun siendo débiles, son capaces de crear estructuras cristalinas como la del hielo.

Superconductividad

Sabemos que el transporte de energía eléctrica, aun utilizando buenos conductores como el cobre o el aluminio, conlleva pérdidas en forma de calor que incluso pueden alcanzar el 20 % y que dependen de la resistencia de los materiales que la transmiten.

¿Es una utopía encontrar materiales que carezcan de resistencia eléctrica? La búsqueda de nuevos materiales que tengan determinadas propiedades es una constante de la Química desde sus orígenes.

Es conocido el experimento que en el año 1911 realizó H. Kamerlingh Onnes: enfrió mercurio, usando helio líquido, hasta una temperatura de 4,2 K ($-269\text{ }^{\circ}\text{C}$) —punto de ebullición del helio—, y observó que a esa temperatura el mercurio transmitía la electricidad sin pérdida alguna; había perdido su resistencia al flujo eléctrico.

No solo el mercurio presenta esa propiedad de *superconductividad*; les ocurre lo mismo a bastantes metales y aleaciones. Sin embargo, el coste de mantenimiento de dichos sistemas hiperfríos excedía con mucho el ahorro logrado en la transmisión eléctrica.

Pero una vez realizado con éxito un ensayo básico, los científicos empujados por la demanda de la sociedad, que busca una mejor calidad de vida, han continuado sus avances en este campo a fin de dotar al campo tecnológico de materiales realmente útiles.

La explicación científica de la superconductividad les valió el Premio Nobel de 1972 a Bardeen, Cooper y Schrieffer. Curiosamente, tiene que ver con el mar electrónico que hemos estudiado en el tema. Demostraron que la existencia de esa nube de electrones y partículas en movimiento es la que crea la resistencia del metal, debido a los choques y repulsiones entre ellos. Al enfriar a temperaturas cercanas al cero absoluto, el mar de electrones prácticamente no se mueve, por lo que los electrones de la corriente eléctrica que atraviesan el metal no encuentran ninguna oposición a su movimiento y, así, dicha corriente tiene lugar de forma continua y con resistencia nula. Date cuenta de que el mar de electrones no es una propiedad de los metales, sino de los metales a una cierta temperatura.

Ya en 1986, Bednorz y Müller prepararon un material que se volvía superconductor a 30 K. Esta temperatura era aún muy baja y muy costosa de conseguir, pero originó mucho interés y un gran número de proyectos de investigación en la comunidad científica. Por este descubrimiento obtuvieron el Premio Nobel en 1987.

Pronto se consiguieron compuestos superconductores a 93 K, lográndose esta temperatura con baños de nitrógeno líquido que —a diferencia del helio— es una sustancia abundante y barata. Se trataba de materiales cerámicos cuya composición era la de

un óxido mixto de itrio, bario y cobre, de fórmula $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ (donde $x = 6$ o 7).

En la actualidad, el récord de temperaturas lo ostenta un óxido de cobre, calcio, bario y mercurio que adquiere propiedades superconductoras a 134 K y que, comprimiéndolo, las mantiene hasta 164 K.

¿Podría haber superconductividad a temperatura ambiente? Ciertas pruebas esporádicas sin confirmar sugieren que puede producirse incluso a 250 K ($-23\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Un superconductor de alta temperatura iniciaría otra revolución industrial. Se podrían fabricar microchips superconductores que fuesen la base de superordenadores. Se podría llevar corriente a varios miles de kilómetros sin que se produjesen pérdidas, con el consiguiente ahorro energético y monetario. Como los imanes levitan por encima de los superconductores se podrían construir trenes magnéticos que se desplazarían a velocidades de vértigo en ausencia de fricción, ya que no tocarían las vías. Los aparatos de resonancia magnética que se utilizan en centros médicos para obtener imágenes de órganos y tejidos internos del cuerpo humano serían más baratos y eficaces y, por lo tanto, más accesibles a la sociedad. Los reactores de fusión nuclear que ahora se están desarrollando precisan elevados campos magnéticos para su funcionamiento óptimo, que podrían obtenerse de este tipo de materiales.

Debemos estar atentos a las noticias que día a día surgen en este campo, pues se están llevando a cabo muchos experimentos que quizás en pocos años cambien la visión que tenemos del mundo que nos rodea.



Fig. 2.35. Efecto Meissner. Una de las propiedades de los superconductores es que sobre ellos levitan los imanes.

Cuestiones

- 1> Busca en Internet los dos tipos de superconductividad que existen. Basándote en ello, contesta si los superconductores del futuro serán los metales o los materiales cerámicos.

Cuestiones y problemas

Enlace iónico

1> El potasio tiene de número atómico 19 y puede formar un compuesto con otro elemento cuya configuración electrónica es: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$.

- Formula el compuesto que es más probable que se forme. ¿Qué enlace presenta?
- Explica, a partir de las configuraciones electrónicas, cómo se forma el compuesto con esa estequiometría.

2> Responde, razonadamente, las siguientes cuestiones:

- Explica la relación que existe entre el porcentaje de carácter iónico de un compuesto y la diferencia de electronegatividades entre los elementos que lo forman.
- En base a lo anterior, ordena los siguientes óxidos de menor a mayor carácter iónico: SnO, SrO y TeO.
- Comparando el hidruro de potasio y el hidruro de calcio, ¿cuál sería el más iónico?

3> Calcula la energía reticular del cloruro de sodio sabiendo que el valor para la constante de Madelung para este compuesto vale 1,748 y la distancia interiónica es 282 pm. Busca en Internet el resto de los datos que necesites utilizar.

4> Coloca razonadamente las sustancias dadas en cada apartado en orden creciente de la propiedad que se indica:

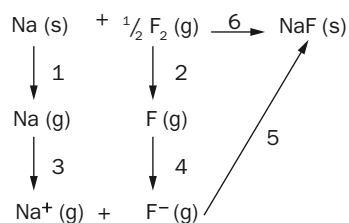
- Energía de red de CaO, SrO y MgO.
- Punto de fusión de LiCl, LiI y LiBr.

5> Define el concepto de energía de red y ordena, justificando la respuesta, los compuestos iónicos NaF, KBr y MgO según los siguientes criterios:

- Energía de red creciente; b) Punto de fusión creciente.

6> A partir del esquema del ciclo de Born-Haber para el fluoruro de sodio:

- Nombra las energías implicadas en los procesos 1, 2 y 3.
- Nombra las energías implicadas en los procesos 4, 5 y 6.
- Justifica si son positivas o negativas las energías implicadas en los procesos 1, 2, 3, 4 y 5.
- En función del tamaño de los iones, justifica si la energía reticular del fluoruro de sodio será mayor o menor, en valor absoluto, que la del cloruro de sodio.



7> Calcula la energía reticular del MgO sabiendo que:

- Q formación del MgO = $-602,0 \text{ kJ mol}^{-1}$
 E sublimación del Mg = $146,1 \text{ kJ mol}^{-1}$
 E disociación del O_2 = $498,2 \text{ kJ mol}^{-1}$

E primera ionización del Mg = $736,3 \text{ kJ mol}^{-1}$

E segunda ionización del Mg = $1\,447,9 \text{ kJ mol}^{-1}$

E electroafinidad primera del O = $-141,2 \text{ kJ mol}^{-1}$

E electroafinidad segunda del O = $-791,0 \text{ kJ mol}^{-1}$

S: $-2\,249,2 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Enlace covalente

8> Coloca los siguientes compuestos: bromuro de magnesio, bromuro de aluminio, bromuro de silicio y tribromuro de fósforo, por orden decreciente del carácter iónico de sus enlaces entre el bromo y el otro elemento. Razona la respuesta.

Datos: electronegatividades: Br = 2,8; Si = 1,8; Mg = 1,2; Al = 1,5; P = 2,1.

9> Escribe la estructura de Lewis, predice la geometría y razona la polaridad de la molécula CH_3Cl .

Datos: electronegatividades: C = 2,5; H = 2,1; Cl = 3,0.

10> Dados los siguientes compuestos: NaH, CH_4 , H_2O , CaH_2 y HF, contesta razonadamente:

- ¿Cuáles tienen enlace iónico y cuáles enlace covalente?
- ¿Cuáles de las moléculas covalentes son polares y cuáles no polares?

11> Se han medido las distancias entre el nitrógeno y los oxígenos del ion nitrito (NO_2^-), observándose que son iguales. ¿Qué estructura de Lewis describe adecuadamente este ion?

12> Dibuja las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas: NO_2 , SO_2 y SO_3 . Escribe las diferentes formas posibles para las moléculas en las que se dé el fenómeno de resonancia.

13> Dadas las siguientes moléculas: SiH_4 , NH_3 y BeH_2 :

- Representa sus estructuras de Lewis.
- Predice la geometría de cada una de ellas según la teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia.
- Indica la hibridación del átomo central.

14> Sabiendo que el HF y el HCl poseen, respectivamente, un 41,3% y un 17,5% de carácter iónico, explica cuál de ellos tendrá menor momento dipolar.

15> Justifica la geometría de las siguientes moléculas covalentes a partir del modelo de repulsión entre los pares de electrones de la capa de valencia (RPECV):

- BeF_2 ; b) BCl_3 ; c) CCl_4

16> Considerando las moléculas H_2CO (metanal) y Br_2O (óxido de dibromo):

- Representa su estructura de Lewis.
- Justifica su geometría molecular.
- Razona si cada una de estas moléculas tiene o no momento dipolar.

17> Dadas las moléculas CH_4 , NH_3 , Cl_2 y CO_2 , responde razonadamente a las siguientes cuestiones:

- Clasifica estas moléculas como polares o apolares.
- ¿Qué compuesto forma una molécula tetraédrica?

18> Indica razonadamente para la molécula de etino:

- La hibridación que presentan los átomos de carbono.
- El número de orbitales híbridos de cada átomo.
- La geometría molecular.
- Los enlaces σ y π existentes.

19> Considera las moléculas OF_2 , BI_3 , CBr_4 y C_2H_2 :

- Escribe sus representaciones de Lewis.
- Indica razonadamente sus geometrías moleculares utilizando la teoría de hibridación de orbitales, o bien la teoría de repulsión de pares electrónicos.
- Justifica cuáles son moléculas polares.

Fuerzas intermoleculares

20> Explica cuál puede ser la razón de la diferencia en los puntos de ebullición de las siguientes sustancias:

Sustancia	Masa molecular	Punto de ebullición
CH_2O	30	-21 °C
C_2H_6	30	-89 °C

21> Los puntos de ebullición del etano ($\text{CH}_3 - \text{CH}_3$), del metoximetano ($\text{CH}_3 - \text{O} - \text{CH}_3$) y del etanol ($\text{CH}_3 - \text{CH}_2\text{OH}$) son, respectivamente, -88 °C, -25 °C y 78 °C. Explica estas diferencias.

22> Las temperaturas de fusión del aluminio, del diamante, del agua y del nitrógeno, son: -196 °C, 0 °C, 650 °C y 3550 °C, aunque no en este orden. Asigna razonadamente a cada sustancia una temperatura de fusión, justificando el tipo de enlace y/o fuerza intermolecular que está presente en cada una de ellas.

Generales

23> Indica, justificándolo, si son ciertas o falsas:

- En las moléculas de BH_3 y NH_3 los ángulos de enlace son iguales.
- El NaCl presenta mayor carácter iónico que el NaI .
- En una red de un sólido metálico puede haber tanto cationes como aniones.

24> ¿Qué tipo de enlace debe romperse para: disolver cloruro de calcio en agua, fundir aluminio, vaporizar bromo, fundir oro, disolver sal en agua y vaporizar agua?

25> Considera las siguientes moléculas: H_2O , HF , H_2 , CH_4 y NH_3 , y contesta justificadamente las siguientes cuestiones:

- ¿Cuál o cuáles son polares?
- ¿Cuál presenta el enlace con mayor contribución iónica?
- ¿Cuál presenta el enlace con mayor contribución covalente?
- ¿Cuál o cuáles pueden presentar enlace de hidrógeno?

26> Indica, justificando brevemente la respuesta, qué especie química (átomo, molécula o ion) ocupa los nudos de las redes de las siguientes sustancias en estado sólido: óxido de magnesio, grafito y agua.

27> Considera las sustancias: cloruro de potasio, agua, cloro y sodio.

- Indica el tipo de enlace que presenta cada una de ellas.
- Justifica la polaridad del enlace en las que son covalentes.
- Justifica la geometría y el momento dipolar de la molécula de agua.

28> Considera las siguientes especies químicas: N_2O , NO_2^+ , NO_2^- , NO_3^- , y responde a las siguientes cuestiones:

- Representa la estructura de Lewis de cada una de las especies químicas propuestas; b) Indica la geometría que tendrá cada una de estas especies químicas.

29> Dados los siguientes compuestos NaF , CH_4 y CH_3OH :

- Indica el tipo de enlace.
- Ordena de mayor a menor según su punto de ebullición. Razona la respuesta.
- Justifica la solubilidad o no en agua.

30> Dadas las siguientes sustancias: cloruro de potasio, agua, cloro, sodio, amoníaco y dióxido de carbono, explica:

- Tipo de enlace que presenta cada una.
- ¿Cuáles formarán moléculas y cuáles cristales?
- ¿Cuáles presentarán momentos dipolares de enlace, cuáles de molécula y cuáles fuerzas intermoleculares?

31> Explica las siguientes observaciones utilizando las diferentes teorías de enlace químico:

- La longitud del enlace carbono-carbono en el C_2H_4 es 0,134 nm, mientras que el enlace carbono-carbono en el C_2H_6 es 0,154 nm.
- El NH_3 es una molécula piramidal pero el BH_3 es plana.
- El cloro molecular es un gas a temperatura ambiente, mientras que el bromo es un líquido a la misma temperatura.
- La temperatura de ebullición del H_2O es 373 K, mientras que la del H_2S es 212 K.

32> Dadas las siguientes moléculas, PH_3 , H_2S y CH_3OH :

- Escribe sus estructuras de Lewis.
- Razona si forman o no enlaces de hidrógeno.
- Explica si estas moléculas son polares o apolares.

33> Razona la veracidad o no de las siguientes afirmaciones:

- La molécula de BF_3 es apolar aunque sus enlaces están polarizados.
- El cloruro de sodio tiene menor punto de fusión que el cloruro de cesio.
- El cloruro de sodio sólido no conduce la corriente eléctrica y el cobre sí.

Conceptos básicos

- Todos los elementos químicos que **se enlazan** entre sí lo hacen para obtener la máxima estabilidad, lo que consiguen ganando, perdiendo o compartiendo electrones para alcanzar la configuración electrónica del gas noble más cercano. Para ello, los átomos se acercan hasta una distancia, llamada distancia de **enlace**, en la que consiguen tener una **energía mínima**.
- **Enlace iónico.** Unión de un elemento metálico muy electropositivo con otro no metálico muy electronegativo. El metal cede electrones, transformándose en un ion positivo, al no metal, que los toma y se transforma en un ion negativo, lo que provoca una atracción eléctrica entre ambos. El enlace es estable cuando muchos iones se unen formando una red cristalina.
- **Energía reticular (U).** Energía que se desprende cuando se forma un mol de cristal iónico a partir de los iones que lo componen.
- **Enlace covalente.** Unión de elementos no metálicos entre sí o con el hidrógeno, mediante compartición de electrones.
- **Covalencia.** Número de electrones compartidos por un elemento en un compuesto covalente.
- **Resonancia.** Se produce al existir varias estructuras de Lewis para una misma molécula por migración de sus enlaces o pares electrónicos. Se trata de un factor estabilizador.
- **Polaridad de un enlace covalente.** Surge cuando los dos átomos implicados tienen distinta electronegatividad, esto es, atraen a los electrones del enlace con distinta fuerza. Entonces, dado que la distribución de cargas en el enlace no es simétrica, se forma un centro de carga positiva diferenciado del de carga negativa, lo que genera un **dipolo** ($\vec{\mu} = qd_0$).
- **Método de repulsión de pares electrónicos en las capas de valencia (RPECV).** Los pares de electrones de la capa de valencia del átomo central de un compuesto se colocan espacialmente para conseguir una separación máxima y, por tanto, una repulsión mínima entre ellos, determinando así la geometría de la molécula.
- **Teoría del enlace de valencia (TEV).** El enlace covalente se forma mediante el acercamiento de los orbitales atómicos y su posterior superposición o solapamiento; el apareamiento de los espines electrónicos provoca el aumento de la densidad de carga electrónica en el espacio entre los núcleos y, por tanto, la estabilidad que deriva en un enlace.
- **Hibridación de orbitales atómicos.** En algunas moléculas se supone que los orbitales atómicos se mezclan —hibridan— antes de solaparse con los de los átomos enlazantes mediante diferentes combinaciones (sp , sp^2 , sp^3) que, además, determinan la estructura espacial de la molécula.
- **Polaridad de una molécula.** Se obtiene calculando el **momento dipolar resultante** de combinar vectorialmente los momentos dipolares o dipolos de los correspondientes enlaces de acuerdo con la geometría de la molécula.
- **Enlace metálico.** Se produce al unirse átomos de elementos metálicos entre sí. Estos forman redes compactas donde los iones positivos del metal se encuentran en los nudos, y alrededor hay una nube de electrones desprendidos por los átomos.
- **Fuerzas intermoleculares.** Unión de varias moléculas debida a la polaridad de sus enlaces que implican fuerzas atractivas. Son de dos tipos: enlace **punto de hidrógeno** (moléculas con hidrógeno y, al menos, un átomo de F, O o N) y **fuerzas de Van der Waals**. Esta situación provoca alteraciones en las propiedades físicas esperadas para las moléculas.

	Iónico	Covalente apolar	Covalente polar	Sólidos covalentes	Metálico
P. fusión	Alto	Muy bajo	Bajo	Muy altos	Alto
P. ebullición	Alto	Muy bajo	Bajo	Muy altos	Alto
Dureza	Alta	Muy baja	Baja	Alta (en función de la simetría)	Media (dúctiles y maleables)
Dilatación	Baja			Baja	Alta
Conductividad	Nula (sólidos) Alta (fundidos o disueltos)	Nula	Muy baja	Nula o casi nula	Muy alta
Solubilidad (polares/apolares)	Alta/baja	Baja/alta	Alta/baja	Nula o casi nula	Muy baja

Tabla 2.13. Propiedades de los compuestos según su tipo de enlace.

Publicaciones personalizadas a tu medida



¡Elige el contenido y crea el manual que mejor se adapta a tus necesidades!

Create permite crear una obra personalizada a través de un proceso fácil e intuitivo seleccionando material del catálogo de McGraw-Hill. Además, se puede adaptar a las necesidades de cada docente ¡añadiendo material propio!

El deseo de todos los profesores ha sido siempre tener el libro que refleje fielmente los temas del curso y con el que los alumnos dispongan de todo el material que necesitan para seguir la clase y superar la asignatura. McGraw-Hill Education fiel a su misión de ayudar a los docentes y enseñar a los estudiantes, pone a disposición de cualquier profesor su oferta editorial y la diversidad de las soluciones de aprendizaje de las que dispone para lograr este objetivo.

Entra en nuestra web:

 <http://create.mheducation.com>

**¡Accede a todo el catálogo!
y crea tu libro a medida en 3 sencillos pasos**

Centro de Enseñanza Online (CEO)

www.mhe.es

El Centro de Enseñanza Online (CEO) es un espacio donde encontrará información práctica y todos los recursos didácticos necesarios para el desarrollo de cada disciplina. Este espacio es de gran utilidad para el alumnado y el profesorado, y una herramienta imprescindible para afrontar los retos que exige el mercado laboral, cada vez más competitivo y especializado.

Organizado en tres partes:

Centro de información

El centro de información ofrece información práctica del contenido de la obra: presentación, tabla de contenido, etc. Consulte los diferentes apartados dependiendo de la información que necesite.

Centro del estudiante

El centro del estudiante está especialmente creado para que los alumnos accedan a información práctica que pueden utilizar para afianzar conocimientos y auto-evaluarse en cada disciplina.

Centro del profesor

El centro del profesor pone a su disposición material de apoyo que puede utilizar en sus clases. Rellene el formulario de registro y solicite la clave de acceso para poder consultar todos los apartados.





Una nueva forma de leer...
Una nueva forma de aprender

¿Te imaginas un libro de texto adaptado a las necesidades individuales de cada estudiante?



SmartBook®, ganador del Premio SIMO Educación al MEJOR RECURSO DIGITAL DE CREACIÓN EDITORIAL en la modalidad Tecnologías y recursos para el aula.

SmartBook® es la primera y única experiencia de lectura y aprendizaje adaptativo diseñada para cambiar la forma en la que los estudiantes leen y aprenden, rompiendo con el camino lineal de los libros de texto tradicionales y adaptándose a las necesidades y al ritmo de cada estudiante.

¿Qué es?

SmartBook® es una herramienta de aprendizaje adaptativo que combina una revolucionaria tecnología desarrollada por McGraw-Hill Education con un libro digital interactivo. **SmartBook®** analiza la forma en la que lee y aprende el estudiante y, en función de sus respuestas a preguntas sobre lo estudiado y la seguridad sobre sus conocimientos, le va guiando a través de los contenidos del libro, de una manera personalizada y adaptada a su propio ritmo de aprendizaje, para que cada minuto que pasa el alumno estudiando sea lo más efectivo posible.

¿Cómo funciona?

SmartBook® consta de varias fases:



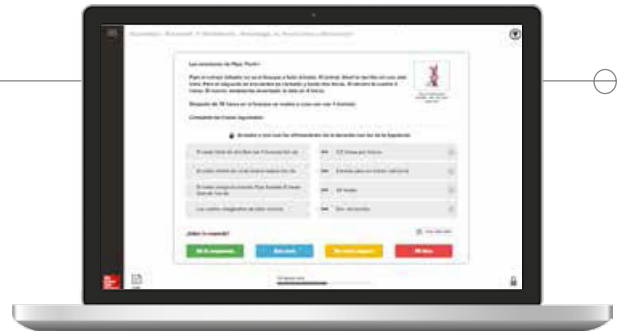
Lee

En la fase de lectura, el estudiante es guiado a través del texto para que lea de una manera adaptada a sus necesidades. En **SmartBook®** el estudiante tiene acceso al texto completo, pero se le mostrarán áreas resaltadas en **amarillo** que indican el contenido en el que debería centrar su estudio en ese momento concreto. Las áreas resaltadas del texto van variando en función de sus respuestas en la parte práctica, subrayando nuevos temas y conceptos de más nivel, una vez que el estudiante ha demostrado el dominio de los conceptos esenciales del tema.





Practica



En la fase de práctica, los estudiantes afianzan lo aprendido hasta el momento realizando una serie de actividades de diversa tipología.

Antes de responder, se pedirá al estudiante que evalúe el grado de seguridad sobre sus conocimientos:

Sé la respuesta

Eso creo

No estoy seguro

Ni idea

En función de las respuestas a esas preguntas, el grado de seguridad que establezcan y otros datos que va recogiendo el sistema mientras los estudiantes trabajan, **SmartBook®** irá ajustando el camino de aprendizaje de cada estudiante adaptándolo a su ritmo y necesidades y determinando cuál será la siguiente pregunta.



Lee



Practica

De vuelta en la fase **Lee**, el estudiante se encontrará con nuevas partes del texto resaltadas en **amarillo**, que indican el nuevo contenido a estudiar, y otras resaltadas en **verde**, que son los temas o conceptos que el estudiante ha demostrado que domina al responder correctamente a las preguntas en la fase de práctica.

Subrayado amarillo: muestra el contenido que es importante para el estudiante en este momento.

Subrayado verde: muestra el contenido que el estudiante ha demostrado que domina realizando preguntas en la fase de práctica.

La mejor manera de estudiar con **SmartBook®** es ir pasando de una fase a otra hasta completar la unidad. La propia herramienta ayudará al estudiante a identificar cuándo ha llegado el momento de cambiar de fase.



Repasa

Para asegurar el dominio de los temas y la retención a largo plazo de los conceptos aprendidos, en esta fase el estudiante repasa en forma de actividades el contenido importante que el sistema ha identificado que es más probable que olvide.



Informes completos sobre el progreso del curso



Profesor

Los informes del profesor le permiten conocer en tiempo real las fortalezas y las debilidades de sus alumnos de manera individual y a nivel global, y adaptar así sus clases y tutorías.

Estudiante

Los informes del estudiante proporcionan detalles sobre su progreso, sobre los temas que domina y los que necesita estudiar más, para que pueda maximizar su tiempo de estudio.



Beneficios

Todo son ventajas

Para el profesor:

- Mejora la calidad y la productividad de las clases.
- Facilita la adaptación de las clases al nivel y necesidades de los alumnos.
- Ayuda a prevenir el posible fracaso escolar y a remediarlo antes de que ocurra.
- Mejora el rendimiento de los alumnos y su nivel de notas.

Para el estudiante:

- Ofrece el contenido adecuado para cada estudiante en el momento preciso para maximizar el tiempo de estudio.
- Excelente preparación para clase y para los exámenes.
- Ayuda a retener conceptos clave a largo plazo.
- Ayuda a conseguir mejores notas.
- Herramienta *online*: sin descargas, sin necesidad de grabar el progreso.
- Acceso en cualquier momento a través de una conexión a Internet y desde múltiples dispositivos.
- Interfaz intuitiva y atractiva.
- Es divertido, porque permite competir con otros usuarios.



La mejor manera de sacar el máximo provecho a las ventajas de **SmartBook®** es crear una clase a la que se apuntarán tus alumnos. Los estudiantes pueden trabajar independientemente o asociados a tu clase, pero la experiencia es mucho más positiva y productiva si se integra **SmartBook®** como una parte más de la asignatura. Te damos algunas opciones o ideas:



SMARTBOOK® ...

... antes de ir a clase

Puedes decir a tus alumnos que estudien con **SmartBook®** antes de ir a clase. Así, podrás basar tus clases en los datos que obtengas con la herramienta.

... como deberes

Puedes presentar el contenido en clase y después, a modo de deberes, decirles que estudien el tema con **SmartBook®**. Posteriormente, en función de los datos que obtengas sobre el progreso, las fortalezas y las debilidades de tus alumnos, podrás reforzar ciertos contenidos y hacer un seguimiento general e individual de lo que realmente se ha aprendido.

... antes del examen

Puedes dar la unidad completa y recomendar a tus alumnos que utilicen **SmartBook®** para preparar el examen. Si tienen examen de final de curso, recuerda a tus alumnos que utilicen regularmente la fase **Repasa** para estar preparados cuando llegue el gran día.

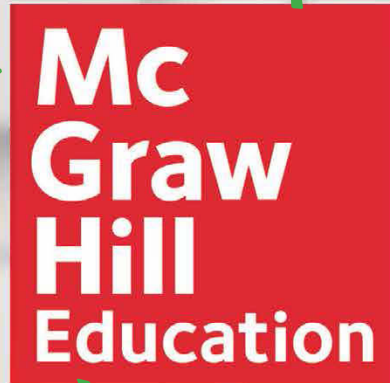


Si tus alumnos tienen dificultades para acceder a Internet, una buena solución puede ser dedicar periódicamente tiempo de clase a **SmartBook®** en el aula de informática.

McGraw-Hill Education

una editorial global a tu servicio

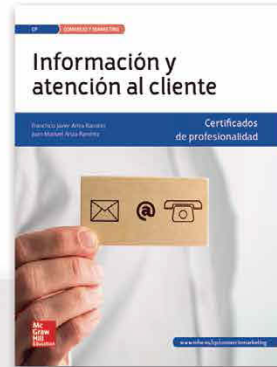
www.mheducation.es



CICLOS
FORMATIVOS



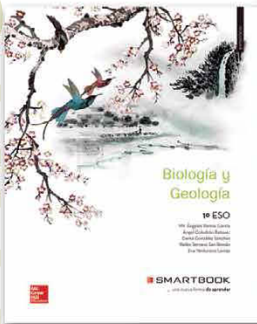
FORMACIÓN
PROFESIONAL
CERTIFICADOS



UNIVERSIDAD



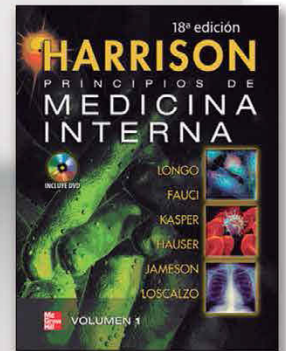
BACHILLERATO



SECUNDARIA



PRIMARIA



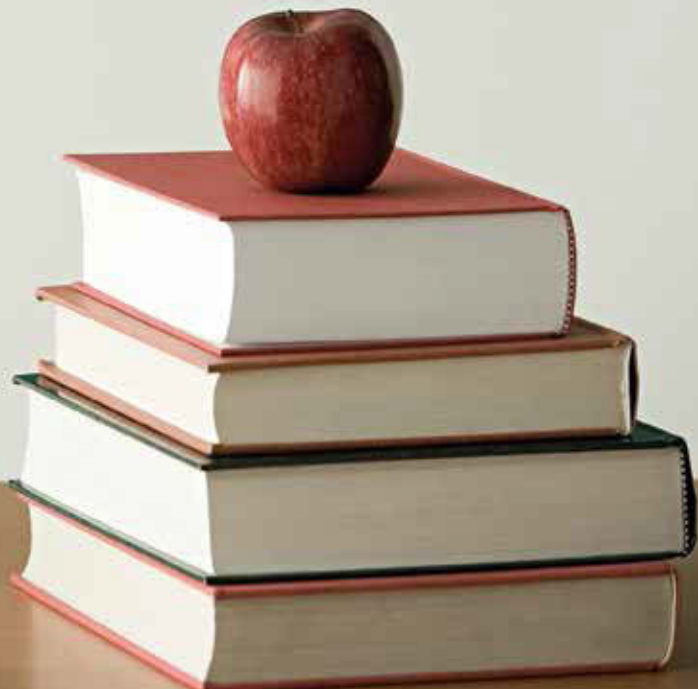
MEDICINA



PROFESIONAL

Para más información: Tel. 902 289 888
educador@mheducation.com
www.mheducation.es / www.mhe.es

La tienda de **McGraw-Hill Education** te ofrece las **mejores ventajas**



Envío GRATIS

a partir
de 25€



Consigue tus Gastos de Envío GRATIS

Ahora en McGraw-Hill Education te regalamos los gastos de envío. Si el importe de tu pedido es superior a 25€, los gastos de envío valorados en 5€ serán descontados de tu compra.

Tus libros de texto
con un
**20% de
descuento**



¡Ahórrate un 20% en los libros de tus hijos cada curso!

Compra cualquiera de nuestros títulos para Primaria y ESO y disfruta de un **descuento inmediato** del 20% en el precio de tus libros.

**5% de descuento
en todo nuestro
fondo
editorial**



5% de descuento en todo nuestro fondo editorial

Todos los productos McGraw-Hill Education más económicos en nuestra tienda online. Selecciona tu producto y benefíciate de un **5% de descuento** comprando cualquiera de nuestros títulos.

Nuestro proceso de compra es muy sencillo



- 1 Localiza todos nuestros productos en el apartado **TIENDA** en el menú principal.
- 2 Encuentra tu producto navegando por nuestro catálogo o en el buscador.
- 3 Añade a la **CESTA** lo que quieres adquirir e inicia el proceso de compra, pinchando en **REALIZAR PEDIDO**.

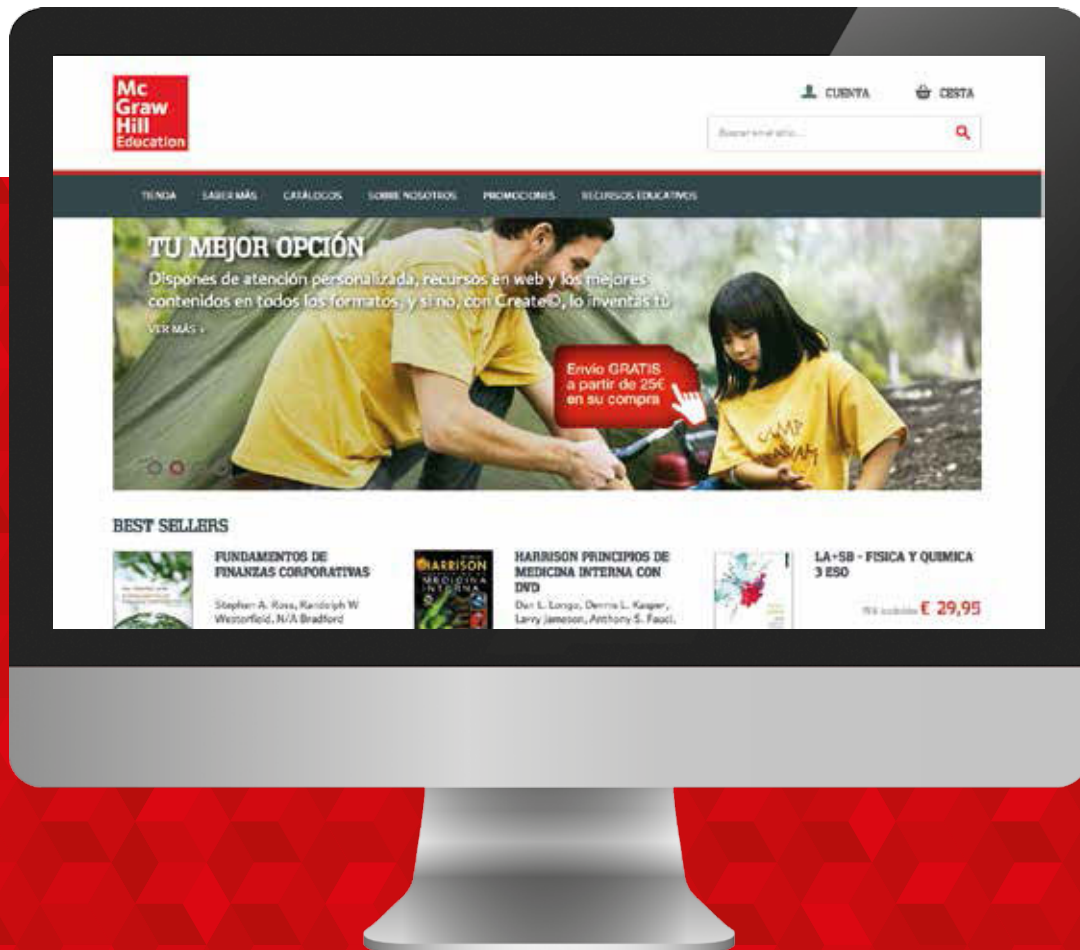
Regístrate como cliente y visualiza siempre que quieras el contenido de tu cesta o las compras realizadas

**¡Todo el fondo de McGraw-Hill Education
en papel o formato digital ahora más fácil y económico!**

www.mheducation.es

 Porque el aprendizaje lo cambia todo

Porque el aprendizaje lo cambia todo



¡La tienda *online* de McGraw-Hill Education!

www.mheducation.es

Toda la información | Todos los productos | Sencillo y rápido



Atención al profesorado:

902 929 008 • 902 289 888
educador@mheducation.com

McGraw-Hill Education
Basauri, 17 - Edificio Valrealty - Planta 1ª
28023 Aravaca (Madrid)
Teléfono: 91 180 30 00 • Fax: 91 180 31 00
www.mheducation.es