

## ENLACES

### ◇ CUESTIONES

#### ● Geometría molecular en el enlace covalente

1. Dadas las moléculas  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{NCl}_3$ , responde razonadamente a las siguientes cuestiones:
- Escribe la estructura de Lewis de cada una de ellas y predice su geometría molecular.
  - Explica si las moléculas son polares o apolares.

(P.A.U. sep. 16)

#### Solución:

a)

Molécula	$\text{CH}_3\text{Cl}$	$\text{CS}_2$	$\text{NCl}_3$
Átomo central	C	C	N
Configuración electrónica fundamental	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Configuración electrónica excitada	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Diagrama de Lewis	$\begin{array}{c} \text{:Cl:} \\ \text{H} \times \text{C} \times \text{H} \\ \text{H} \end{array}$	$\text{:S} \times \times \text{C} \times \times \text{S} \text{:}$	$\begin{array}{c} \text{:Cl:} \times \text{N} \times \text{:Cl:} \\ \times \\ \text{:Cl:} \end{array}$
Pares $\sigma$	4	2	3
Pares $\pi$	0	2	0
Pares no enlazantes	0	0	1
Pares que se repelen	4	2	4
Disposición de los pares	tetraédrica	lineal	tetraédrica
Ángulo de enlace	$< 109,5^\circ$	$180^\circ$	$107^\circ$
Forma de la molécula	piramidal alargada	lineal	piramidal achatada
Momento dipolar de enlace	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{H} \end{array} \quad \text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$	$\text{S}=\text{C}=\text{S}$ $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$	$\begin{array}{c} \text{N} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{Cl} \quad \text{Cl} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{Cl} \end{array} \quad \text{No}$
Momento dipolar de la molécula	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{H} \end{array} \quad \text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$	$\text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$	$\begin{array}{c} \text{:} \\ \times \\ \text{Cl} - \text{N} - \text{Cl} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{Cl} \end{array} \quad \text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$ $\begin{array}{c} \text{:} \\ \times \\ \text{Cl} - \text{N} - \text{Cl} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{Cl} \end{array} \quad \text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$
	Sí	No	Sí

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). En la molécula de tricloruro de nitrógeno, está el átomo de nitrógeno en el centro del tetraedro y tres átomos de cloro en tres vértices, pero en el cuarto vértice está un par no enlazante que no «se ve». En la molécula de clorometano, el átomo de cloro es mayor que los de hidrógeno (y que el de carbono). Quizás la descripción podría ser «lineal con un mini-trípode en un extremo»

b) La molécula de sulfuro de carbono no es polar, aunque los enlaces sí lo son, porque es simétrica y los momentos dipolares de los enlaces se anulan.

La molécula de  $\text{NCl}_3$  es polar. Las electronegatividades de los átomos de Cl y N son muy similares y los enlaces Cl–N tienen un momento dipolar nulo (o muy pequeño). Pero el par no enlazante del nitrógeno no se compensa. Como está muy próximo al átomo de nitrógeno, el momento dipolar será pequeño.

La molécula de  $\text{CH}_3\text{Cl}$  también es polar. Las electronegatividades de los átomos de carbono y hidrógeno son muy similares y los enlaces C–H tienen un momento dipolar muy pequeño. Pero el cloro es mucho más electronegativo que el carbono y el enlace  $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$  es polar.

2. Considera las especies químicas  $\text{CS}_2$ ,  $\text{SiCl}_4$  y  $\text{NCl}_3$  y responde razonadamente las siguientes cuestiones:
- Geometría molecular de cada una de las especies químicas.
  - Explica si las moléculas  $\text{CS}_2$  y  $\text{NCl}_3$  tienen o no momento dipolar.

(P.A.U. sep. 15)

### Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

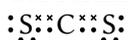
Molécula de disulfuro de carbono:  $\text{CS}_2$ .

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono ( $Z = 6$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ , que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s^2$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  vacío, siendo su configuración excitada:  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Dos de estos electrones forman enlaces covalentes  $\sigma$  con los dos átomos de azufre, mientras que los otros dos forman enlaces  $\pi$  con esos mismos átomos, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:



Según la TRPECV, los enlaces  $\pi$  no se tienen en cuenta y la geometría electrónica de 2 pares de electrones es lineal. La molécula de  $\text{CS}_2$  es lineal con un ángulo S–C–S de  $180^\circ$ .

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Debido a que el azufre es más electronegativo que el carbono, existe un momento dipolar de enlace  $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$ , que se representa mediante un vector. Pero como ambos enlaces están dirigidos en sentidos opuestos,  $\text{S}^{\delta-} \leftarrow \text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{S}^{\delta-}$ , y el valor de cada momento dipolar es el mismo, el momento dipolar de la molécula, que es la resultante de los vectores, es cero. La molécula  $\text{CS}_2$  no es polar.

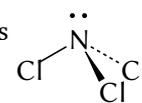
Molécula de tricloruro de nitrógeno:  $\text{NCl}_3$ .

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de nitrógeno ( $Z = 7$ ) en el estado fundamental es  $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ . Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:

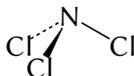


Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de cloro se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve»:

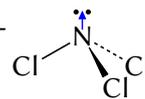


la forma de la molécula del  $\text{NCl}_3$  es piramidal achatada.



Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que

los átomos de cloro se acerquen un poco. El ángulo de enlace Cl-N-Cl sería algo menor que La molécula de  $\text{NCl}_3$  es polar. Las electronegatividades de los átomos de Cl y N son muy similares y los enlaces Cl-N tienen un momento dipolar nulo (o muy pequeño). Pero el par no enlazante del nitrógeno no se compensa. Como está muy próximo al átomo de nitrógeno, el momento dipolar será pequeño.



3. Indica razonadamente, si son verdaderas o falsas las siguientes afirmaciones:

- El enlace covalente se caracteriza por la transferencia de electrones entre los elementos que forman el enlace. Pon un ejemplo.
- El número de orbitales híbridos que se generan en la hibridación es igual al número de orbitales atómicos puros que participan en dicho proceso. Utiliza la molécula  $\text{BeCl}_2$  para el razonamiento.

(P.A.U. sep. 14)

### Solución:

a) Falsa.

El enlace covalente se caracteriza por el uso compartido de electrones entre los elementos que forman el enlace. Por ejemplo, en la molécula de flúor,  $\text{F}_2$ , cada átomo de flúor tiene una configuración electrónica:  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$  y le falta un electrón para tener la configuración electrónica del gas noble neón.

El balance de energía no permitiría que el otro átomo de flúor pierda un electrón (y tampoco alcanzaría la configuración de gas noble), por lo que se forma un enlace covalente entre los dos átomos de flúor en el que ambos átomos aportan un electrón y comparten el par formado. El diagrama de Lewis para la molécula de flúor sería:  $:\ddot{\text{F}}:\ddot{\text{F}}:$

b) Verdadera.

### Solución:

En la teoría de la hibridación, los orbitales s,  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos  $n$ ,  $l$  es  $m$ , pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

- 2 orbitales  $sp$ , formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de  $180^\circ$ .

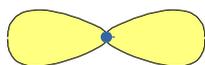
(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces  $\pi$ ).

- 3 orbitales  $sp^2$ , formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de  $120^\circ$ .

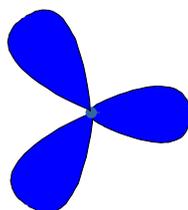
(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace  $\pi$ ).

- 4 orbitales  $sp^3$ , formados por la hibridación del orbital s y los tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de  $109,5^\circ$ .

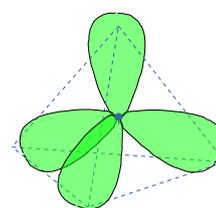
2 híbridos  $sp$



3 híbridos  $sp^2$



4 híbridos  $sp^3$



Molécula de cloruro de berilio:  $\text{BeCl}_2$ .

La configuración electrónica del átomo de berilio ( $Z = 4$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2$ , pero para poder enlazarse tiene que separar, («desaparear») los dos electrones, elevando uno de ellos al orbital  $2p$ . El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

La configuración electrónica del átomo de berilio excitado es  $1s^2 2s^1 2p^1$ .

Al tener dos electrones desapareados, puede formar dos enlaces. Para ello, los dos orbitales s y  $p_x$  se hibridan, dando lugar a dos orbitales híbridos  $sp$  que se disponen linealmente en sentidos opuestos.

En cada uno de los orbitales híbridos se encuentra un electrón desapareado que puede compartir con un electrón desapareado de un átomo de cloro, formando enlaces sigma dirigidos linealmente en sentidos contrarios. El diagrama de Lewis para la molécula de  $\text{BeCl}_2$  es:  $:\ddot{\text{Cl}}:\text{Be}:\ddot{\text{Cl}}:$

La forma de la molécula es lineal, con un ángulo  $\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$  de  $180^\circ$ .

(La molécula de  $\text{BeCl}_2$  es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de berilio de la molécula de  $\text{BeCl}_2$  solo hay cuatro, (dos pares de) electrones).

4. Especifica qué orbitales híbridos utiliza el carbono en el eteno ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ), así como el tipo de enlaces que se forman en la molécula. Razona la respuesta.

(P.A.U. jun. 14)

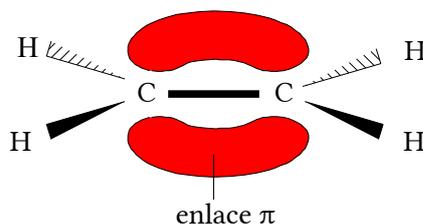
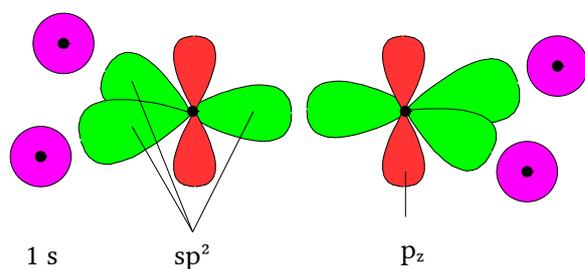
**Solución:**

La configuración fundamental del carbono  $Z = 6$  es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$

Pero, debido a que la formación de dos enlaces más compensa la energía de excitación, antes de formar enlaces, pasa a la configuración excitada,  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ , con cuatro electrones desapareados que pueden formar cuatro enlaces covalentes.

Se produce una hibridación  $sp^2$ : aparecen tres híbridos  $sp^2$  formados por combinación del orbital  $s$  y dos orbitales  $p$ , ( $p_x$  y  $p_y$ ) y queda sin hibridar el orbital  $p_z$ .

Habrà un electrón desapareado en cada híbrido y también en el orbital  $p_z$ . Estos híbridos están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero. En los enlaces  $\text{C}-\text{H}$ , se superponen un orbital híbrido  $sp^2$  del carbono con el orbital  $1s$  del hidrógeno dando lugar a un enlace  $\sigma$ . En el enlace  $\text{C}-\text{C}$  se superponen dos orbitales híbridos, uno de cada átomo de carbono, para dar lugar a otro enlace  $\sigma$ . Pero también se superponen los dos orbitales  $p_z$  de los dos carbonos, dando lugar a un enlace  $\pi$  fuera de la línea que une los dos átomos de carbono.



5. Razona si una molécula de fórmula  $\text{AB}_2$  debe ser siempre lineal.

(P.A.U. sep. 13)

**Solución:**

No.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

Si la suma de pares  $\sigma$  y pares no enlazantes es igual a 2, las moléculas son lineales, como la de  $\text{CO}_2$  o la de  $\text{BeI}_2$ , pero si la suma da un número mayor, como la de  $\text{SO}_2$  o la de  $\text{H}_2\text{O}$ , serán triangulares. La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). Dos enlaces en una disposición de pares de electrones triangular o tetraédrica formarán ángulos distintos a  $180^\circ$ .

<b>Molécula</b>	$\text{CO}_2$	$\text{BeI}_2$	$\text{SO}_2$	$\text{H}_2\text{O}$
<b>Átomo central</b>	C	Be	S	O

<b>Configuración electrónica fundamental</b>	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2$	$3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$	$2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
<b>Configuración electrónica excitada</b>	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	$2s^1 2p_x^1$		
<b>Diagrama de Lewis</b>	$:\ddot{O}::C::\ddot{O}:$	$:\ddot{I}::Be::\ddot{I}:$	$:\ddot{O}::\ddot{S}::\ddot{O}:$	$H::\ddot{O}::H$
<b>Pares <math>\sigma</math></b>	2	2	2	2
<b>Pares <math>\pi</math></b>	2	2	1	0
<b>Pares no enlazantes</b>	0	0	1	2
<b>Pares que se repelen</b>	2	2	3	4
<b>Disposición de los pares</b>	lineal	lineal	triangular	tetraédrica
<b>Ángulo de enlace</b>	$180^\circ$	$180^\circ$	$<120^\circ$	$105^\circ$
<b>Forma de la molécula</b>	lineal	lineal	angular plana	angular plana
	O=C=O	I-Be-I	$\begin{array}{c} O \\ \diagdown \\ S=O \end{array}$	$\begin{array}{c} H \\ \diagdown \\ O-H \end{array}$

6. Indica razonadamente si es verdadera o falsa la afirmación siguiente:  
La molécula de agua presenta geometría lineal.

(P.A.U. jun. 13)

**Solución:**

Falsa. La molécula de agua es triangular  $\begin{array}{c} H \\ \diagdown \\ O-H \end{array}$  con un ángulo de  $104,5^\circ$ .

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

La configuración electrónica del oxígeno en estado fundamental es:  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$ .

El átomo central es el de oxígeno, que tiene 6 electrones en su capa de valencia. Dos de estos electrones forman enlaces covalentes con los dos átomos de hidrógeno, cada uno con un electrón de valencia, mientras que los otros cuatro se sitúan en dos pares no enlazantes, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:  $H::\ddot{O}::H$

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. Los cuatro pares se repelen hasta separarse en ángulos de  $109,5^\circ$ .

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de oxígeno está en el centro del tetraedro y los dos átomos de hidrógeno se disponen en dos vértices, y en los otros dos están los dos pares no enlazantes que no «se ven». La forma de la molécula de  $H_2O$  es triangular plana.

Como los pares no enlazantes están más cerca del átomo de oxígeno que los pares enlazantes, la repulsión entre cada par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo es menor de  $109,5^\circ$ . La molécula de  $H_2O$  es triángulo con un ángulo H-O-H de  $104,5^\circ$ .

7. Aplicando la teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia, indica razonadamente, la geometría de las moléculas siguientes:
- $NF_3$
  - $BF_3$

(P.A.U. sep. 12)

**Solución:**

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

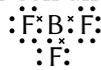
Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

Molécula de fluoruro de boro:  $\text{BF}_3$ .

El átomo central es el de boro, que tiene tres electrones en la capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de boro ( $Z = 5$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p^1$ , pero para poder formar tres enlaces tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$ . El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

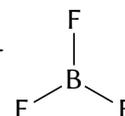
La configuración electrónica del átomo de boro excitado es  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$ .

Los tres electrones desapareados forman tres enlaces, cada uno de ellos con un electrón desapareado de un átomo de flúor, como se ve en el diagrama electrón punto de Lewis:



(La molécula de  $\text{BF}_3$  es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de boro solo hay seis, (tres pares de) electrones).

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 3 pares de electrones es triangular plana. La molécula es triangular plana, con un ángulo  $\text{F}-\text{B}-\text{F}$  de  $120^\circ$ .



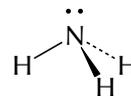
Molécula de amoníaco:  $\text{NH}_3$ .

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de nitrógeno ( $Z = 7$ ) en el estado fundamental es:  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ . Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de hidrógeno, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:



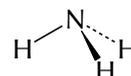
Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de hidrógeno se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve».



La forma de la molécula del  $\text{NH}_3$  es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo de enlace  $\text{H}-\text{N}-\text{H}$  será algo menor que  $109,5^\circ$ .



En la molécula de trifluoruro de boro, no existe ese par no enlazante y, por tanto, la molécula es triangular plana.

8. Pon un ejemplo de una molécula que contenga:

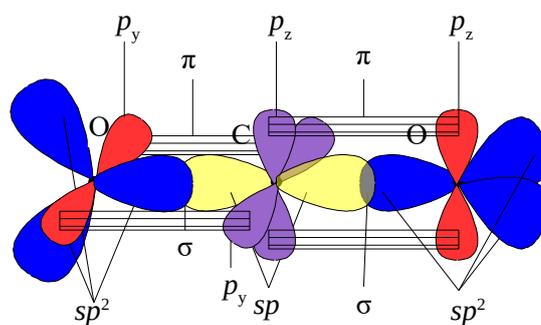
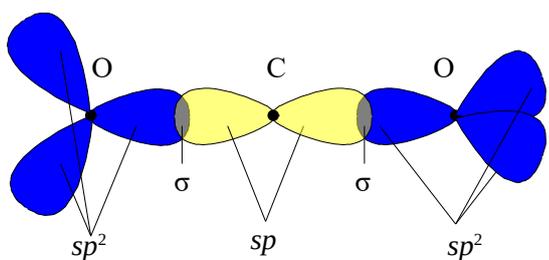
- Un carbono con hibridación  $sp$ .
- Un nitrógeno con hibridación  $sp^3$ .

Razona todas las respuestas.

(P.A.U. sep. 12, jun. 06)

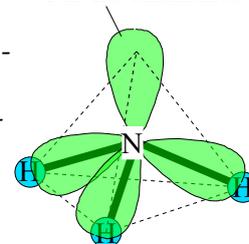
**Solución:**

a) La hibridación  $sp$  corresponde a un átomo central unido a otros dos átomos. Como el carbono (excitado) puede tener 4 electrones desapareados, en configuración  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ , eso supone que, al menos, uno de los enlaces, debe ser múltiple. Las combinaciones posibles son un enlace triple junto a uno sencillo como en el [etino](#)  $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ , o dos enlaces dobles como en la molécula de dióxido de carbono  $\text{O}=\text{C}=\text{O}$



El átomo de carbono tiene dos híbridos  $sp$  y dos orbitales atómicos  $p_y$  y  $p_z$  sin hibridar. Los híbridos  $sp$  están dirigidos en una línea recta en sentidos opuestos, dando ángulos de enlace de  $180^\circ$ . El solapamiento entre los híbridos  $sp$  del carbono y los orbitales  $sp^2$  de los átomos de oxígeno da lugar a enlaces  $\sigma$ . El orbital  $p_y$  sin hibridar del carbono se solapa con el orbital  $p_y$  sin hibridar de uno de los oxígenos formando un enlace  $\pi$ . El solapamiento del otro orbital sin hibridar del carbono  $p_z$  con el orbital  $p_z$  sin hibridar del otro oxígeno forma el otro enlace  $\pi$ .

Par no enlazante



b) La hibridación  $sp^3$  se asigna a un átomo central de nitrógeno cuando está unido a otros cuatro átomos (ion amonio  $[\text{NH}_4]^+$ ), o a tres átomos (molécula de amoníaco  $\text{NH}_3$ ). El átomo de nitrógeno tiene una configuración electrónica,  $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ , y forma cuatro híbridos  $sp^3$ , con un electrón desapareado en tres de los híbridos y un par de electrones en el cuarto. Estos híbridos están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro (en el caso del ion amonio), dando ángulos de enlace de  $109,5^\circ$  (aunque en el caso del amoníaco los ángulos son algo menores). En cada uno de los tres enlaces N-H, se superponen un orbital híbrido  $sp^3$  del carbono con el orbital  $1s$  del hidrógeno dando lugar a un enlace  $\sigma$ . El par de electrones del cuarto híbrido  $sp^3$  es un par no enlazante.

9. Justifica la geometría de las moléculas de metano (tetraédrica con ángulo de enlace de  $109,5^\circ$ ) y de amoníaco (piramidal con ángulo de enlace de  $107,3^\circ$ ):
- Según la teoría de hibridación de orbitales
  - Según el modelo de RPECV (modelo de repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia) (P.A.U. sep. 09)

### Solución:

a) Molécula de metano  $\text{CH}_4$ .

La configuración electrónica del átomo de carbono ( $Z = 6$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ , que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s^2$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  vacío, siendo su configuración excitada:  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Aun así, si el átomo de carbono mantuviese esa configuración excitada, no se justificarían los ángulos de enlace experimentales, (porque los enlaces deberían formar ángulos de  $90^\circ$ , al estar dirigidos en las direcciones de los ejes  $X$ ,  $Y$  o  $Z$ ) lo que llevó al desarrollo de la teoría de hibridación.

En la teoría de la hibridación, los orbitales  $s$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos  $n$ ,  $l$  e  $m$ , pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales  $s$  y  $p$  se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

- 2 orbitales  $sp$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y un orbital  $p$ . Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de  $180^\circ$ .

(Quedan dos orbitales  $p$  sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces  $\pi$ ).

- 3 orbitales  $sp^2$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y dos orbitales  $p$ . Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de  $120^\circ$ .

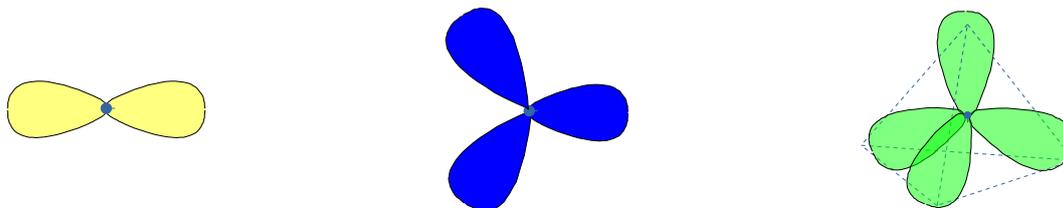
(Queda un orbital  $p$  sin hibridar que podría ser parte de un enlace  $\pi$ ).

- 4 orbitales  $sp^3$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y los tres orbitales  $p$ . Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de  $109,5^\circ$ .

2 híbridos  $sp$

3 híbridos  $sp^2$

4 híbridos  $sp^3$



Molécula de amoníaco  $\text{NH}_3$ .

El caso del nitrógeno del amoníaco es muy similar al del carbono, solo que la configuración fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ . Se formarían también cuatro orbitales híbridos  $sp^3$ , tres de ellos semiocupados que podrían formar enlace con los orbitales  $1s$  de los tres hidrógenos y el cuarto lleno que daría un orbital no enlazante. El ángulo debería ser de  $109,5^\circ$  y únicamente ciertos complicados refinamientos de la teoría podrían justificar los ángulos de  $107,3^\circ$ .

b)

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

Lo que permite explicar los ángulos de enlace del metano sin hacer intervenir la ecuación de onda y las matemáticas correspondientes. También explica cualitativamente la reducción del ángulo de enlace en el amoníaco, puesto que el par no enlazante del nitrógeno se encuentra más cerca de él que los de enlace (puesto que no hay ningún átomo al otro lado del enlace que tire de él) y repelerá con más fuerza a los otros tres pares enlazantes que se acercarán a ángulos algo menores que el de  $109,5^\circ$ , en este caso a  $107,3^\circ$ .

10. Justifica, razonadamente, si es cierta la siguiente afirmación:  
La molécula de acetileno ( $\text{C}_2\text{H}_2$ ) presenta hibridación  $sp^2$ .

(P.A.U. sep. 08)

**Solución:**

Falso. La hibridación es  $sp$ .

La configuración electrónica del átomo de carbono ( $Z = 6$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ , que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s^2$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  vacío, siendo su configuración excitada:  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Aun así, si el átomo de carbono mantuviese esa configuración excitada, no se justificarían los ángulos de enlace experimentales, (porque los enlaces deberían formar ángulos de  $90^\circ$ , al estar dirigidos en las direcciones de los ejes  $X$ ,  $Y$  o  $Z$ ) lo que llevó al desarrollo de la teoría de hibridación.

En la teoría de la hibridación, los orbitales  $s$ ,  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ , soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos  $n$ ,  $l$  e  $m$ , pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales  $s$  y  $p$  se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

- 2 orbitales  $sp$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y un orbital  $p$ . Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de  $180^\circ$ .

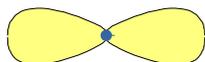
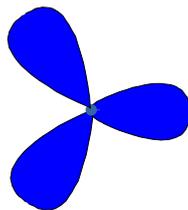
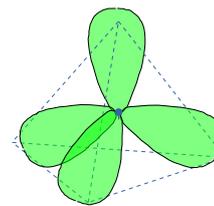
(Quedan dos orbitales  $p$  sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces  $\pi$ ).

- 3 orbitales  $sp^2$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y dos orbitales  $p$ . Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de  $120^\circ$ .

(Queda un orbital  $p$  sin hibridar que podría ser parte de un enlace  $\pi$ ).

- 4 orbitales  $sp^3$ , formados por la hibridación del orbital  $s$  y los tres orbitales  $p$ . Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de  $109,5^\circ$ .

2 híbridos sp

3 híbridos sp<sup>2</sup>4 híbridos sp<sup>3</sup>

El diagrama de Lewis es:  $\text{H} \times \text{C} \times : : \times \text{C} \times \text{H}$

Cada átomo de carbono está unido solo a dos átomos (el otro C y un H). No necesita más que dos orbitales híbridos sp. Para formar cada uno de ellos se combina el orbital s con un orbital p. Los orbitales p que no se hibridan se usan para formar los dos enlaces  $\pi$  del enlace triple.

11. Indica, justificando la respuesta, si la siguiente afirmación es cierta o falsa:  
La molécula  $\text{CCl}_4$  es apolar.

(P.A.U. jun. 08)

**Solución:**

Cierta.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

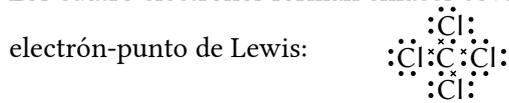
Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono ( $Z = 6$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ , que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s^2$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  vacío, siendo su configuración excitada:  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

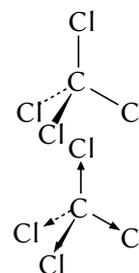
Los cuatro electrones forman enlaces covalentes con los cuatro átomos de cloro, como se ve en el diagrama



Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y los cuatro átomos de cloro en los vértices.

La forma de molécula es tetraédrica, con los ángulos Cl-C-Cl de  $109,5^\circ$ .

El cloro es más electronegativo que el carbono, por lo que existe un momento dipolar de enlace  $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$ . La resultante de los momentos dipolares de los enlaces  $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$  se anula, debido a la simetría de la molécula. Es una molécula apolar.



12. De las siguientes moléculas: trifluoruro de boro y amoníaco.  
a) Indica la geometría molecular.  
b) Polaridad de cada molécula.  
Razona las respuestas.

(P.A.U. sep. 07)

**Solución:**

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

a) Molécula de fluoruro de boro:  $\text{BF}_3$ .

El átomo central es el de boro, que tiene tres electrones en la capa de valencia. La configuración electrónica del átomo de boro en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p^1$ , pero para poder formar tres enlaces tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  a cuenta de la energía de los enlaces que se van a formar, siendo su configuración excitada  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1$ .

Los tres electrones desapareados forman tres enlaces, cada uno de ellos con un electrón desapareado de un átomo de flúor, como se ve en el diagrama electrón punto de Lewis:



(La molécula de  $\text{BF}_3$  es una excepción a la regla del octete, que establece que los átomos tienden a formar enlaces de manera que cada átomo tenga ocho electrones en su capa de valencia. En el átomo de boro solo hay seis, (tres pares de) electrones).

Según la TRPECV, la geometría electrónica de 3 pares de electrones es triangular plana. La molécula es triangular plana, con un ángulo  $\text{F-B-F}$  de  $120^\circ$ .

Molécula de amoníaco:  $\text{NH}_3$ .

El átomo central es el de nitrógeno, que tiene 5 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica fundamental del átomo de nitrógeno es:  $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

Tres de estos electrones forman enlaces covalentes con los tres átomos de cloro, mientras que los otros dos permanecen como un par solitario no enlazante, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:



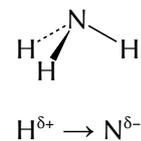
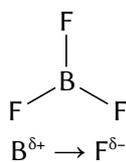
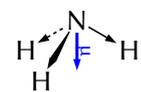
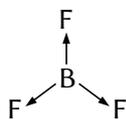
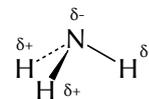
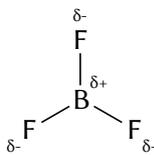
Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica.

La forma de la molécula se determina de la posición de los átomos (sin tener en cuenta los pares no enlazantes). El átomo de nitrógeno está en el centro del tetraedro y los tres átomos de hidrógeno se disponen en tres vértices, pero en el cuarto vértice hay un par no enlazante que no «se ve»: la forma de la molécula del  $\text{NH}_3$  es piramidal achatada.

Como el par no enlazante está más cerca del átomo de nitrógeno que los pares enlazantes, la repulsión entre el par no enlazante y los pares enlazantes es mayor que entre los pares enlazantes entre sí, y hará que los átomos de hidrógeno se acerquen un poco. El ángulo de enlace  $\text{H-N-H}$  será algo menor que  $109,5^\circ$ .

En la molécula de trifluoruro de boro, no existe ese par no enlazante y, por tanto, la molécula es triangular plana.

Molécula	$\text{BF}_3$	$\text{NH}_3$
Átomo central	B	N
Configuración electrónica fundamental	$2s^2 2p_x^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Configuración electrónica excitada	$2s^1 2p_x^1 2p_y^1$	$2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
Diagrama de Lewis	$\begin{array}{c} \cdot\ddot{\text{F}}\cdot\text{B}\cdot\ddot{\text{F}}\cdot \\ \cdot\ddot{\text{F}}\cdot \\ \cdot\ddot{\text{F}}\cdot \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H}\cdot\ddot{\text{N}}\cdot\text{H} \\ \cdot\ddot{\text{N}}\cdot \\ \text{H} \end{array}$
Pares $\sigma$	3	3
Pares $\pi$	0	0
Pares no enlazantes	0	1
Pares que se repelen	3	4
Disposición de los pares	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	$120^\circ$	$107^\circ$
Forma de la molécula	triangular	piramidal achatada

**Momento dipolar de enlace****Momento dipolar de la molécula**

No

Sí

b) Como el flúor es mucho más electronegativo que el boro, el enlace  $B^{\delta+} \rightarrow F^{\delta-}$  será polar, pero como la molécula de  $BF_3$  es simétrica, los vectores momento dipolar (de igual valor) se contrarrestan y la molécula será no polar.

El nitrógeno es más electronegativo que el hidrógeno y el enlace  $H^{\delta+} \rightarrow N^{\delta-}$  es polar. Además, el par no enlazante produce otro vector momento dipolar en la misma dirección y sentido que la resultante de los tres vectores momento dipolar  $H^{\delta+} \rightarrow N^{\delta-}$ , por lo que la molécula es polar.

13. Al comparar dos moléculas muy similares:  $CO_2$  y  $H_2O$  se observa que en la primera el momento dipolar es cero, mientras que en la segunda no lo es. Justifícalo de forma razonada.

(P.A.U. jun. 07)

**Solución:**

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar. El elemento más electronegativo es el flúor y después el oxígeno.

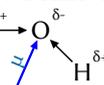
Como el oxígeno es mucho más electronegativo que el carbono y que el hidrógeno, tanto el enlace  $C^{\delta+} \rightarrow O^{\delta-}$  como el  $H^{\delta+} \rightarrow O^{\delta-}$  serán polares. La diferencia está en la forma de las moléculas.

La molécula de  $CO_2$  es lineal. La TRPECV lo explica porque el átomo central de carbono solo está unido a dos átomos de oxígeno y no tiene pares electrónicos no enlazantes, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:  $:\ddot{O}::C::\ddot{O}:$

La repulsión entre los electrones de los enlaces explica una disposición lineal con ángulo de  $180^\circ$ . Como el momento dipolar se puede representar por un vector, la resultante de los vectores dipolares  $O^{\delta-} \leftarrow C^{\delta+} \rightarrow O^{\delta-}$  de igual valor y sentidos opuestos es nula. La molécula de  $CO_2$  es apolar.

La molécula de  $H_2O$  es angular con un ángulo de  $105^\circ$ . La TRPECV lo explica porque el átomo central de oxígeno está unido a dos átomos de hidrógeno y tiene dos pares electrónicos no enlazantes, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:  $H:\ddot{O}:H$

La repulsión entre los electrones de los enlaces y los de los pares no enlazantes explica una disposición casi tetraédrica entre los pares de electrones con un ángulo H–O–H algo menor de  $109,5^\circ$ . Como el momento dipolar se puede representar por un vector, la resultante de los vectores dipolares  $H^{\delta+} \rightarrow O^{\delta-}$  no es nula.



La molécula de  $H_2O$  es polar.

14. Explica, utilizando orbitales híbridos y razonando las respuestas, el tipo de enlace y geometría de las siguientes moléculas:
- Etino o acetileno
  - Amoníaco
  - Dióxido de azufre.

(P.A.U. jun. 05)

**Solución:**

En la teoría de la hibridación, los orbitales s, p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub> y p<sub>z</sub>, soluciones de la ecuación de onda para determinadas condiciones regidas por los números cuánticos **n**, **l** es **m**, pueden ser sustituidos por ciertas combinaciones lineales de ellas llamadas orbitales híbridos.

Combinando los orbitales s y p se pueden formar tres tipos de orbitales híbridos:

- 2 orbitales sp, formados por la hibridación del orbital s y un orbital p. Están dirigidos en sentidos opuestos de una línea recta, formando un ángulo de 180°.

(Quedan dos orbitales p sin hibridar, que podrían formar parte de los enlaces π).

- 3 orbitales sp<sup>2</sup>, formados por la hibridación del orbital s y dos orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero, formando ángulos de 120°.

(Queda un orbital p sin hibridar que podría ser parte de un enlace π).

- 4 orbitales sp<sup>3</sup>, formados por la hibridación del orbital s y los tres orbitales p. Están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro, formando ángulos de 109,5°.

Molécula de etino (acetileno): C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.

La configuración electrónica del átomo de carbono (Z = 6) en el estado fundamental es 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sub>x</sub><sup>1</sup> 2p<sub>y</sub><sup>1</sup>, que solo tiene dos electrones desapareados y solo puede formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que **separar** «desaparear» los dos electrones **desapareados** formando uno de ellos al orbital 2p vacío, siendo su configuración excitada: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>1</sup> 2p<sub>x</sub><sup>1</sup> 2p<sub>y</sub><sup>1</sup> 2p<sub>z</sub><sup>1</sup>.

El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

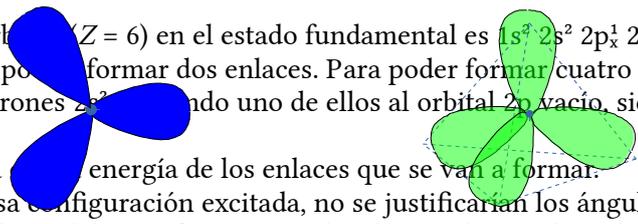
Aun así, si el átomo de carbono mantuviese esa configuración excitada, no se justificarían los ángulos de enlace experimentales de 180°, (porque los enlaces deberían formar ángulos de 90°, al estar dirigidos en las direcciones de los ejes X, Y o Z) lo que llevó al desarrollo de la teoría de hibridación.

La combinación del orbital s con uno de los orbitales p, da dos orbitales híbridos sp, en los que la función de probabilidad es máxima en los sentidos opuestos de una recta, formando un ángulo de 180°.

La hibridación sp corresponde a un átomo central unido a otros dos átomos. Como cada uno de los carbonos (excitado) puede tener 4 electrones desapareados, en configuración 1s<sup>2</sup> 2s<sup>1</sup> 2p<sub>x</sub><sup>1</sup> 2p<sub>y</sub><sup>1</sup> 2p<sub>z</sub><sup>1</sup>, eso supone que, al menos, uno de los enlaces, debe ser múltiple. En el etino es un enlace triple con el otro carbono y un enlace sencillo con el hidrógeno: H - C ≡ C - H.

El diagrama de Lewis es: H:C:::C:H

La forma de la molécula es lineal, con un ángulo de 180° entre los enlaces.



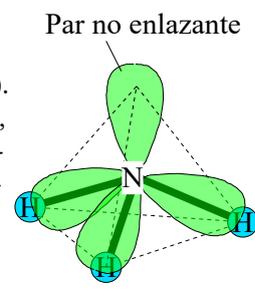
Molécula de amoníaco: NH<sub>3</sub>.

La configuración electrónica del nitrógeno en estado fundamental es: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sub>x</sub><sup>1</sup> 2p<sub>y</sub><sup>1</sup> 2p<sub>z</sub><sup>1</sup>, que no justificaría los ángulos de enlace experimentales de 107°. (Tres enlaces deberían formar ángulos de 90°, al estar dirigidos en las direcciones de los ejes X, Y y Z).

La combinación de los orbitales s, p<sub>x</sub>, p<sub>y</sub> y p<sub>z</sub>, da cuatro orbitales híbridos llamados sp<sup>3</sup>, en los que la función de probabilidad es máxima en las direcciones de los cuatro vértices de un tetraedro, direcciones que forman entre sí ángulos de 109,5°. Los tres orbitales híbridos semiocupados podrían formar enlaces con los orbitales 1s de los tres hidrógenos y el cuarto, lleno, daría un orbital no enlazante. El ángulo debería ser de 109,5° es solo ciertas complicadas refinaciones de la teoría podrían justificar los ángulos de 107,3°.

El diagrama de Lewis es:  $\begin{matrix} \text{H} & \text{:}\ddot{\text{N}}\text{:} & \text{H} \\ & | & \\ & \text{H} & \end{matrix}$

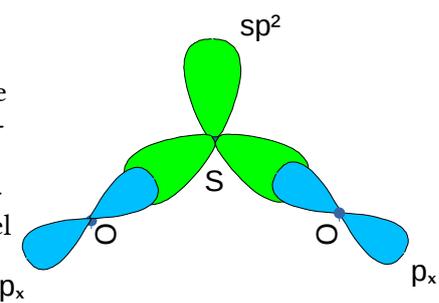
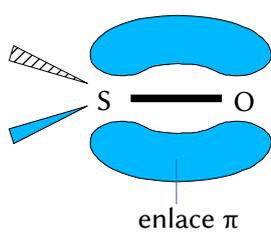
En cada uno de los tres enlaces N-H, se superponen un orbital híbrido sp<sup>3</sup> del nitrógeno con el orbital 1s del hidrógeno dando lugar a un enlace σ. El par de electrones del cuarto híbrido sp<sup>3</sup> es un par no enlazante.



Molécula de dióxido de azufre: SO<sub>2</sub>.

La configuración electrónica del azufre en estado fundamental es: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3s<sup>2</sup> 3p<sub>x</sub><sup>1</sup> 3p<sub>y</sub><sup>1</sup> 3p<sub>z</sub><sup>1</sup>, que no justificaría los ángulos de enlace experimentales de algo menos de 120°. (Dos enlaces deberían formar ángulos de 90°, al estar dirigidos en las direcciones de los ejes X, Y o Z). La combinación del orbital s con dos de los orbitales p, da tres orbitales híbridos sp<sup>2</sup>, en los que la función de probabilidad es máxima en las direcciones de los tres vértices de un triángulo equilátero, direcciones que forman entre sí ángulos de 120°.

Los dos orbitales híbridos semiocupados podrían formar enlaces σ con los or-



bitales 2p semioocupados de los oxígenos, y el orbital p del azufre sin hibridar daría un enlace  $\pi$  con otro orbital p de uno de los oxígenos. El ángulo debería ser de  $120^\circ$  aunque en realidad es menor.

En realidad, la estructura de la molécula de  $\text{SO}_2$  es una forma resonante entre dos estructuras:  $\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$  es  $\ddot{\text{O}}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$ , que también pueden representarse como:  $\text{|\ddot{O}-S}^{\ominus}\text{=}\overset{\oplus}{\text{O}}$  y  $\text{|\ddot{O}=S}^{\ominus}\text{=}\overset{\oplus}{\text{O}}$

15. a) Justifica la polaridad de las siguientes moléculas:  $\text{HCl}$ ,  $\text{I}_2$  y  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  y comenta la naturaleza de las fuerzas intermoleculares presentes.  
b) Indica, mediante un ejemplo, una propiedad característica que diferencie un compuesto iónico sólido de un compuesto molecular sólido.

(P.A.U. jun. 04)

a) Molécula de diclorometano:  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ .

### Solución:

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) supone que los electrones de valencia, junto con los de los átomos que forman enlace con él, rodean a un átomo formando parejas, en las que la repulsión entre los electrones de cada pareja es pequeña, debido a que tienen spin contrario, y solo hay que tener en cuenta a repulsión electrostática clásica entre los pares enlazantes (excepto los  $\pi$ ) y entre los pares enlazantes y los pares no enlazantes, de forma que se dispongan lo más lejos posible.

Esta teoría es la que da una justificación más sencilla de los ángulos de enlace. La repulsión de dos pares da una disposición lineal con ángulos de  $180^\circ$ , tres pares dan una distribución triangular con ángulos de  $120^\circ$  y cuatro pares se dirigen hacia los vértices de un tetraedro con ángulos de  $109,5^\circ$ .

El átomo central es el de carbono, que tiene 4 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de carbono ( $Z = 6$ ) en el estado fundamental es  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ , que solo tiene dos electrones desapareados y solo podría formar dos enlaces. Para poder formar cuatro enlaces, tiene que separar («desaparear») los dos electrones  $2s^2$ , elevando uno de ellos al orbital  $2p$  vacío, siendo su configuración excitada:  $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

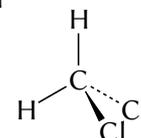
El coste de energía de excitación se compensa con la energía de los enlaces que se van a formar.

Los cuatro electrones forman enlaces covalentes, dos con los dos átomos de cloro y los otros dos con con

los dos átomos de hidrógeno, como se ve en el diagrama electrón-punto de Lewis:



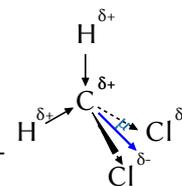
Según la TRPECV, la geometría electrónica de 4 pares de electrones es tetraédrica. El átomo de carbono está en el centro del tetraedro y dos átomos de cloro en dos vértices y los dos átomos de hidrógeno en los otros dos vértices.



Debido a la repulsión entre los pares no enlazantes de los átomos de cloro vecinos, el ángulo entre los enlaces  $\text{Cl}-\text{C}-\text{Cl}$  es mayor que  $109,5^\circ$ , y la forma de molécula es piramidal.

La electronegatividad mide la tendencia que tiene un átomo a atraer hacia sí el par de electrones del enlace y la resistencia a dejarlos marchar.

Como el cloro es más electronegativo que el carbono, existe un momento dipolar de enlace  $\text{C}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$ , que se representa por un vector. El carbono es más electronegativo que el hidrógeno, por lo que también existe un momento dipolar de enlace  $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{C}^{\delta-}$ .



La resultante de los momentos dipolares de los enlaces no se anula y la molécula es polar.

Molécula de cloruro de hidrógeno:  $\text{HCl}$ .

El átomo de cloro tiene 7 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de cloro ( $Z = 17$ ) en el estado fundamental es  $[\text{Ne}] 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$ .

Se une al átomo de hidrógeno compartiendo su electrón desapareado con el electrón del átomo de hidrógeno. La molécula tiene una forma lineal. Cl es más electronegativo que H, por lo que atrae los electrones de enlace hacia sí mismo con más fuerza, produciendo un momento dipolar  $\text{H}^{\delta+} \rightarrow \text{Cl}^{\delta-}$ , y la molécula de  $\text{HCl}$  es polar.

Molécula de yodo:  $\text{I}_2$ .

El átomo de yodo tiene 7 electrones en su capa de valencia.

La configuración electrónica del átomo de cloro ( $Z = 53$ ) en el estado fundamental es  $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p_x^2 5p_y^2 5p_z^1$ .

Los dos átomos de yodo se unen entre sí compartiendo su electrón desapareado. Como los dos átomos de yodo tienen la misma electronegatividad, atraen del mismo modo al par de electrones enlazantes y la molécula es apolar.

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

- Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes. En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.
- Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en un enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los vectores momento dipolar de los enlaces no se anulen.
- Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

HCl y  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , presentan fuerzas dipolo-dipolo, además de las de dispersión.

$\text{I}_2$ , solo tiene fuerzas de dispersión (Van der Waals).

b) Los compuestos iónicos son más duros.

Por ejemplo, el cloruro de sodio (NaCl), un compuesto iónico, es duro y quebradizo, mientras que la cera de parafina, un compuesto molecular, es blanda y maleable.

Los compuestos iónicos generalmente tienen puntos de fusión más altos que los compuestos moleculares.

Esto se debe a que la energía requerida para romper las fuerzas intermoleculares entre las moléculas es mucho menor que la energía requerida para romper los enlaces iónicos en un compuesto iónico cristalino.

Por ejemplo, el cloruro de sodio (NaCl), un compuesto iónico, se funde a 801 °C. En comparación, el agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), un compuesto molecular, se funde a 0 °C.

## ● Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos

1. Justifica, razonadamente, si es cierta la siguiente afirmación: El agua tiene un punto de ebullición anormalmente alto comparado con el que presentan los hidruros de los otros elementos de su grupo, por ejemplo el sulfuro de hidrógeno.

(P.A.U. jun. 16, sep. 08)

### **Solución:**

Se consideran tres tipos de fuerzas intermoleculares: de dispersión, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

Las fuerzas de dispersión o de Van der Waals están presentes en todos los compuestos covalentes. En principio son las más débiles, pero aumentan considerablemente con la masa molecular del compuesto.

Las siguientes en intensidad son las fuerzas dipolo-dipolo. Aparecen en compuestos que tengan moléculas con momento dipolar. Para que haya momento dipolar en un enlace debe haber una diferencia de electronegatividad entre los átomos que une. Además, las moléculas deben tener una asimetría que permita que los momentos dipolares de los enlaces no se anulen.

Las de mayor intensidad son los llamados puentes de hidrógeno o enlaces de hidrógeno. Las presentan moléculas que contienen átomos pequeños (del segundo período) muy electronegativos (N, O y F) unidos a átomos de hidrógeno.

Las moléculas de agua están unidas por puentes de hidrógeno que son fuerzas de mayor intensidad que las de dipolo-dipolo (que también están presentes en ellas) y que las de Van der Waals, ya que contienen átomos de hidrógeno unidos a un elemento electronegativo del segundo período (el oxígeno) y la molécula de agua es polar.

La molécula de sulfuro de hidrógeno no cumple el requisito para presentar puentes de hidrógeno, porque el azufre tiene un radio atómico más grande y el momento dipolar de la molécula es menor porque el azufre es menos electronegativo que el oxígeno. Aunque la masa molar del  $\text{H}_2\text{S}$  es mayor que la del  $\text{H}_2\text{O}$ , el mayor valor de las fuerzas de dispersión no compensa la intensidad de la fuerza de los enlaces de hidrógeno.

Como las fuerzas intermoleculares del agua son mucho más intensas que las del  $\text{H}_2\text{S}$ , su temperatura de ebullición es más alta.

Eso permite entender por qué a 1 atm de presión y 25 °C de temperatura, el H<sub>2</sub>S es un gas y el H<sub>2</sub>O un líquido.

2. Para cada uno de los siguientes pares de elementos, justifica si el compuesto binario que forman es iónico o covalente, indica la fórmula, el nombre y dos propiedades químicas del compuesto que formarían.
- B y F.
  - K y Br.

(P.A.U. sep. 14)

**Solución:**

a) El boro y el flúor formarán un compuesto covalente, el trifluoruro de boro BF<sub>3</sub>.

La configuración electrónica del flúor es  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$

El flúor alcanzaría la disposición de un gas noble ganando un electrón:  $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 = [\text{Ne}]$

La configuración electrónica del boro es  $1s^2 2s^2 2p_x^1$

El boro tendría que perder los tres electrones del segundo nivel de energía. La energía necesaria para este proceso es demasiado elevada y la energía de la formación del un hipotético compuesto iónico (B<sup>3+</sup>)(F<sup>-</sup>)<sub>3</sub> no la compensaría.

Es más rentable compartir cada uno de los tres electrones del boro, aunque tendría que gastar energía en pasar un electrón del orbital 2s al orbital 2p<sub>y</sub>, con el electrón desapareado de cada uno de los tres átomos de flúor.

El compuesto formado, BF<sub>3</sub>, sería una excepción a la regla del octete, ya que el átomo de boro solo tendría tres pares de electrones. La molécula del BF<sub>3</sub> es plana triangular y apolar.

Los compuestos covalentes moleculares tienen bajos puntos de fusión y ebullición, (el BF<sub>3</sub> probablemente sea gaseoso a temperatura ambiente) y no suelen ser solubles en agua sino en disolventes apolares.

b) El bromo y el potasio formarán un compuesto iónico, el bromuro de potasio KBr.

La configuración electrónica del bromo es  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p_x^2 4p_y^2 4p_z^1$ .

El bromo alcanza la disposición de gas noble ganando un electrón:  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p_x^2 4p_y^2 4p_z^2 = [\text{Kr}]$

La configuración electrónica del potasio es  $[\text{Ar}] 4s^1$

El potasio alcanza la disposición de gas noble perdiendo el electrón 4s<sup>1</sup>. La energía de red asociada a la unión de los iones K<sup>+</sup> y Br<sup>-</sup> compensaría con creces el gasto de sublimación y ionización del potasio y la vaporización y disociación de la molécula de bromo.

Los compuestos iónicos tienen altos puntos de fusión y ebullición, (el KBr es sólido a temperatura ambiente) y suelen ser solubles en agua (el KBr es bastante soluble en agua, ya que su energía de red es relativamente baja)

3. Indica, de forma razonada, el tipo de enlace que presentan y dos propiedades para cada una de las sustancias siguientes:
- Limaduras de magnesio.
  - Cloruro de sodio.

(P.A.U. jun. 12)

**Solución:**

a) Metálico porque solo hay magnesio que es un metal. Brillo metálico, alta conductividad del calor y de la corriente eléctrica.

b) Iónico, por la gran diferencia de electronegatividad entre el cloro y el sodio. Dureza, solubilidad en agua y conductividad nula en estado sólido pero relativamente buena disuelto en agua.

4. Considerando el elemento alcalinotérreo del tercer período y el segundo elemento del grupo de los halógenos, ¿qué tipo de enlace corresponde a la unión química de estos elementos entre sí? Escribe la fórmula del compuesto que forman. Razona la respuesta.

(P.A.U. jun. 11)

**Solución:**Iónico.  $\text{MgCl}_2$ 

Los metales tienen una energía de ionización relativamente baja, aunque en el caso del magnesio habría que tener en cuenta a segunda energía de ionización para que la configuración electrónica fuera la de un gas noble.

Los halógenos tienen una afinidad electrónica que provoca un desprendimiento de energía cuando ganan un electrón. Esta energía no es suficiente para compensar las energías de ionización del magnesio, pero también se desprende la energía de red que es la energía electrostática que mantiene unidos a los iones. En este caso la energía de red es bastante elevada porque es directamente proporcional a las cargas (y la carga del ion magnesio es  $2+$ ) es inversamente proporcional a la distancia entre los iones que depende de sus radios. (El ion magnesio tiene un radio pequeño y el ion cloruro tiene uno de los radios más pequeños de los aniones)

5. Los elementos químicos A y B tienen número atómico 20 y 35, respectivamente. Indica razonadamente:
- Los iones más estables que formarán cada uno de ellos.
  - Las propiedades del compuesto formado por A y B.

(P.A.U. jun. 09)

**Solución:**

a) Las configuraciones electrónicas de los elementos neutros son:

A ( $Z = 20$ ):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

B ( $Z = 35$ ):  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$

El elemento A perderá los 2 electrones del cuarto nivel de energía para alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion  $A^{2+}$ .

El elemento B ganará 1 electrón para completar el cuarto nivel de energía y alcanzar la configuración del gas noble más próximo. Formará el ion  $B^-$ .

b) El compuesto más probable entre A y B será el compuesto iónico  $AB_2$ .

Las propiedades de los compuestos iónicos son:

Temperaturas de fusión y ebullición elevadas. Están marcadas por el valor de la energía de red, que a su vez dependen de las cargas de los iones y de los radios.

Solubilidad en disolventes polares como el agua.

Conductividad eléctrica fase líquida, disuelta o gaseosa, por la presencia de iones libres, (pero no en estado sólido al encontrarse los iones fijos en los nudos de las redes cristalinas)

Elevada dureza (también en función de la energía de red) y fragilidad.

Actualizado: 17/07/24

Cuestiones y problemas de las [Pruebas de evaluación de Bachillerato para el acceso a la Universidad](#) (A.B.A.U. y P.A.U.) en Galicia.

[Respuestas](#) y composición de [Alfonso J. Barbadillo Marán](#).

Algunos cálculos se hicieron con una [hoja de cálculo](#) de [LibreOffice](#) del mismo autor.

Algunas ecuaciones y las fórmulas orgánicas se construyeron con la extensión [CLC09](#) de Charles Lalanne-Cassou.

La traducción al/desde el gallego se realizó con la ayuda de [traducindote](#), y del [traductor de la CIXUG](#).

Se procuró seguir las [recomendaciones](#) del Centro Español de Metrología (CEM).

Se consultó al Copilot de Microsoft Edge y se tuvieron en cuenta algunas de sus respuestas en las cuestiones.

## Sumario

---

### ENLACES

<u>CUESTIONES</u> .....	1
<u>Geometría molecular en el enlace covalente</u> .....	1
<u>Fuerzas intermoleculares, tipos de enlace y propiedades de los compuestos</u> .....	14

## Índice de pruebas P.A.U.

---

2004.....	
1. (jun.).....	13
2005.....	
1. (jun.).....	11
2006.....	
1. (jun.).....	6
2007.....	
1. (jun.).....	11
2. (sep.).....	9
2008.....	
1. (jun.).....	9
2. (sep.).....	8, 14
2009.....	
1. (jun.).....	16
2. (sep.).....	7
2011.....	
1. (jun.).....	16
2012.....	
1. (jun.).....	15
2. (sep.).....	5 s.
2013.....	
1. (jun.).....	5
2. (sep.).....	4
2014.....	
1. (jun.).....	4
2. (sep.).....	3, 15
2015.....	
2. (sep.).....	2
2016.....	
1. (jun.).....	14
2. (sep.).....	1