

# GUÍA N°3

## UNIONES QUÍMICAS

R. GARCÍA y J. REUIL

### Objetivos

-A partir del establecimiento de la teoría atómica, la química puede definirse como la ciencia natural de la formación y ruptura de uniones entre átomos, por lo que se establecen estos objetivos mínimos para el desarrollo de la unidad:

-Proveer un modelo de unión química derivado del modelo atómico desarrollado en la unidad anterior.

-Predecir tipos de uniones y formas de moléculas sencillas.

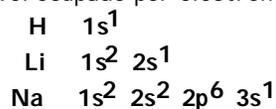
### Dirección de Internet interesante para esta guía:

<http://esq-www.mit.edu:8001/esgbio/chem/chemdir.html>

Se puede utilizar para un curso breve de uniones químicas (en inglés), ver Links en la página de Química General en [www.unlu.edu.ar](http://www.unlu.edu.ar)

En esta parte de la unidad usaremos la teoría atómica estudiada en la anterior, para darnos una explicación del por qué algunos elementos se unen entre sí para dar compuestos, y otros no.

Si ya resolvió los problemas de la guía anterior, habrá visto que algunos elementos que son reconocidos como pertenecientes a una misma familia química, tienen igual configuración en la capa más externa de electrones (último nivel ocupado por electrones).



A<sub>1</sub>: Tome una tabla periódica de los elementos, y observe que estos están ordenados por número atómico (z) creciente de izquierda a derecha, arriba abajo, de modo que los elementos que muestren propiedades químicas semejantes queden encolumnados de acuerdo a la ingeniosa idea de D. Mendeleev.

A<sub>2</sub>: Aquí le ofrecemos una tabla periódica a medio armar: Complétela con el símbolo del elemento correspondiente y la denominación de los orbitales de la capa más externa.

**G 3- 1 -**

1 H 1s <sup>1</sup>							2
3 Li 2s <sup>1</sup>	4	5	6 C 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	7	8	9	10
11 Na 3s <sup>1</sup>	12	13	14	15	16	17 Cl 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18

En la Guía anterior adelantábamos que de toda la teoría atómica para la química sólo resultaban interesantes dos aspectos:

- La masa del núcleo, que justifica en el modelo el cumplimiento experimentalmente comprobado de las leyes gravimétricas.
- La cantidad de protones del núcleo, que determina la cantidad de electrones, y la distribución de estos en el espacio, justificando en el modelo atómico las propiedades químicas.

G.N. Lewis, trabajando con el modelo atómico de Bohr, descubrió algunas curiosas regularidades de las estructuras electrónicas de los átomos.

Los elementos llamados nobles (He, Ar, Ne,...) en razón de su baja reactividad química, tienen completa la capa más externa de electrones.

Repensemos como Lewis algunos compuestos químicos simples, el NaCl por ejemplo.

A3: Escriba aquí las configuraciones de las capas electrónicas más externas

Na° (sodio "cero")

Cl° (cloro "cero")

Na<sup>+</sup>

Cl<sup>-</sup>

¿No le parece tentadora la idea de manejar el modelo atómico en estos términos? *'En un compuesto estable, los átomos tienen la configuración electrónica de los gases nobles'*  
Naturalmente, un ejemplo sólo no basta.

A4: Escriba aquí las configuraciones de las capas electrónicas más externas.

H° (hidrógeno cero)

O° (oxígeno cero)

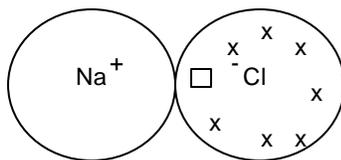
¿Cómo quedarían el H y el O en el agua (H<sub>2</sub>O) si se comportaran como el Na y el Cl en el NaCl?

¿Qué son los "orbitales de valencia"?

### ESTRUCTURAS DE LEWIS:

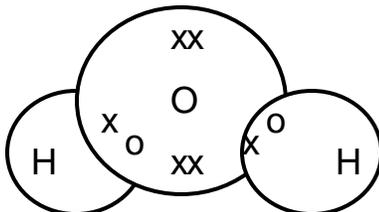
Esperamos que haya llegado a la misma conclusión que Lewis cuando enunció, en 1916, la regla empírica que pasó a la historia con el nombre de "Regla del octeto". Consulte el tema en algún libro. Las estructuras de Lewis para el NaCl y el H<sub>2</sub>O son:

El sodio (como ion Na<sup>+</sup>) tiene su capa más externa vacía, y por lo tanto la inmediata anterior completa; el cloro (como ion Cl<sup>-</sup>) tiene su capa más externa completa.



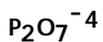
(Distinguimos los electrones del sodio de los del cloro sólo a los fines de la explicación, no se puede diferenciar un electrón de otro).

El oxígeno y los hidrógenos comparten los electrones formando en las uniones, pares que estabilizan las mismas.



Los electrones señalados con "x" y "o" son los compartidos entre el oxígeno y el hidrógeno. En la figura el hecho de haberlos dibujado como perteneciendo al oxígeno o al hidrógeno no significa que se lo deba tomar así.

A5: Escriba las estructuras de Lewis (puede necesitar la ayuda de un libro para eso) de



UNIONES COVALENTE E IÓNICA

Lewis pensó que las uniones químicas consisten en la formación de un par electrónico (par de electrones, o electrones apareados). Esta idea fue ampliada, años más tarde, por L. Pauling

B<sub>1</sub>: Discuta el postulado de Pauling: una unión química un par de electrones.

B<sub>2</sub>: ¿Dónde están los pares de electrones en las moléculas de Cl<sub>2</sub>?

¿Y en el H<sub>2</sub>O?

¿Y en el NaCl?

Entonces: si bien toda unión química involucra la formación de un par electrónico, en algunos casos éste se forma con el aporte de un electrón por cada átomo (**covalente simple**), y otras veces un solo átomo el que aporta los dos electrones.

A este último tipo de unión se lo suele llamar **covalente dativa** o **coordinado**, y se lo indica como una flecha (que parte del donante) en las estructuras de Lewis.

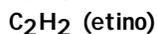
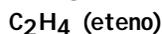


B<sub>3</sub>: Señale los enlaces covalentes dativos en



También puede ocurrir que se formen **uniones covalentes dobles y triples**.

Realice las estructuras del:



En el caso del par formado por el aporte de ambos átomos, digamos que este puede permanecer compartido o bien ser cedido a uno de ellos.

A este último tipo de unión, en el que los átomos, convertidos en iones por esta cesión del par electrónico, quedan unidos electrostáticamente, se lo llama **iónica** o electrovalente.

Cuando el par permanece compartido, hablamos de unión **covalente**, y lo indicamos con una raya en las estructuras de Lewis

B<sub>4</sub>: Señale los enlaces iónicos y covalentes en



En realidad, la unión covalente pura (donde el par es compartido equitativamente) y la electrovalente pura (donde el par es retenido por uno de los átomos, con formación de iones) son sólo dos casos extremos de un mismo fenómeno.

Pauling definió (1932) una nueva propiedad de los átomos: la **electronegatividad**. Estudiando la naturaleza de una gran cantidad de uniones entre átomos distintos, pudo asignar un valor a la

tendencia que deberían mostrar los átomos de cada elemento, a retener los pares de electrones formados en las uniones.

Defina el concepto de **ELECTRONEGATIVIDAD**

El cálculo matemático más sencillo para conocer el valor de la electronegatividad de un elemento (propuesto por Mulliken) se puede realizar así:

$$\text{Electronegatividad (EN)} = \frac{E_i + A_e}{2}$$

Donde  $E_i$  es la energía de la primera ionización y  $A_e$  la afinidad electrónica (para ambos busque sus definiciones y tendencias a lo largo de la tabla periódica.).

B<sub>5</sub>: Busque los datos que faltan, y complete esta porción de tabla periódica escribiendo los símbolos y valores de electronegatividad.

1 H 2,1							2
3	4	5	6	7	8 O 3,5	9	10
11	12	13	14	15	16	17	18

### POLARIDAD DE LOS ENLACES

En una unión química, el par electrónico que la define queda (hablando en términos estadísticos, naturalmente) más cerca del átomo de mayor electronegatividad. Cuando los dos átomos de la unión son del mismo elemento, puesto que ambos presentan igual electronegatividad, el par electrónico será compartido de verdad (unión covalente pura).

Si la diferencia de electronegatividades entre los átomos de la unión (en algunas tablas periódicas encontrará detallado el "porcentaje de carácter iónico de una unión interatómica simple" como función de esta diferencia) supera el **valor 1,7** el par electrónico se hallará sobre el átomo más electronegativo, con formación de iones (unión iónica).

En los casos intermedios tendremos uniones covalentes polarizadas, que se suelen indicar así → en las estructuras de Lewis.

B<sub>6</sub>: Revise la tabla de electronegatividades, e indique los tipos de unión en



Ahora observe:

Los átomos en Cl-Cl y en Cl-H están unidos compartiendo un par electrónico: esta es una unión fuerte que lleva a la formación de una molécula.

Los átomos en Cl<sup>-</sup> Na<sup>+</sup> se hallan en forma de iones unidos por atracción electrostática: éste es un tipo de unión relativamente débil que puede ser rota fácilmente, y por lo tanto no podemos en estos casos hablar de moléculas.

B<sub>7</sub>: Complete esta tabla

**G 3- 5 -**

PAR	DIFERENCIA DE ELECTRO-NEGATIVIDAD	UNIÓN ELECTRO-VALENTE	UNIÓN COVALENTE	DISTRIBUCIÓN DE CARGAS
Cl H	3,1 - 2,1=1,4	..... ..	Sí	Cl-H
Na Cl	3,5 - 9=2,6	Sí	..... .....	Cl <sup>-</sup> Na <sup>+</sup>
F Fr				
Cl I				
O-S O				
H <sub>3</sub> C H				
O-C O				

### UNIONES s (SIGMA) y p (PI)

Hasta aquí hemos estado formando pares de electrones en nuestros modelos atómicos para la unión química como si nos hubiéramos olvidado de las razones que nos llevaron a aceptar, en la guía anterior, que los electrones no podían estar en cualquier lado sino sólo -estadísticamente hablando- donde lo permitieran las soluciones de las ecuaciones de onda (orbitales).

Supondremos que en una unión covalente el par electrónico "recorre" los orbitales antes incompletos de ambos átomos, para lo que estos orbitales deben estar en contacto.

En el caso del H<sub>2</sub> cada átomo aporta un electrón de su orbital incompleto, luego, en la molécula ambos átomos deberán estar dispuestos de modo que sus orbitales 1s se toquen (se solapen, en la jerga usual).

En el caso del HCl, el H aporta un electrón de su orbital incompleto 1s y el Cl uno su orbital incompleto 2p: para que ambos orbitales queden completos con la unión covalente, el par electrónico formado debe poder recorrerlos a ambos, y así éstos deben estar solapados.

C<sub>1</sub>: Busque en la bibliografía mas detalles y ejemplos acerca de la unión sigma ( $\sigma$ ).

C<sub>2</sub>: Dibuje los orbitales de las capas más externas de los átomos involucrados en las uniones en



La unión  $\sigma$  generada por solapado de dos orbitales incompletos s-s, s-p y p-p, no es la única posible.

**G 3 - 6 -**

Veamos el caso del  $C_2H_4$  (eteno)  
 el C tiene dos orbitales 2 p incompletos  
 el H tiene un orbital 1 s incompleto

Recuerde que los tres orbitales p de cada subnivel están distribuidos a  $90^\circ$  uno del otro.  
 ¿Cómo pueden solaparse los orbitales p?

Un orbital p de cada uno de los átomos se solapa formando una unión sigma y los otros dos, pueden, lateralmente solaparse formando una unión  $\pi$  (pi). En el caso del eteno sólo lo hace un orbital p atómico.

C3: Busque en la bibliografía más detalles y ejemplos acerca de la unión  $\pi$

C4: Dibuje los orbitales de las capas más externas, y las uniones  $\sigma$  y  $\pi$  en

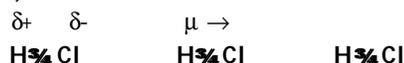


C5: Haga lo mismo con el  $NH_3$  (amoníaco). ¿Qué forma esperaría para ésta molécula?

¿Y para el  $H_2S$ ?

Volvamos un poco atrás: vimos (B6) que la molécula del HCl estaba formada por una unión covalente polarizada entre el Cl y el H.

Esta separación, aunque parcial de cargas en la molécula, nos obliga a pensar que deberá comportarse eléctricamente como un dipolo (que se señala como un vector, desde el "sector" positivo al "sector" negativo  $\rightarrow$ )



D1: Indique cuáles de las moléculas del ejercicio B7 son polares (pueden comportarse eléctricamente como dipolos) y cuáles no. Recuerde que solo consideramos que dos átomos están unidos químicamente en una molécula a aquellos que comparten un par electrónico.

Vamos a desarrollar el concepto de **MOMENTO DIPOLAR DE UN ENLACE Y DE UNA MOLÉCULA** (ya que debe entenderse que si *cada enlace contribuye con un cierto momento dipolar y este tiene carácter vectorial, el MOMENTO DIPOLAR RESULTANTE DE LA MOLÉCULA EN CUESTIÓN SERÁ LA SUMA DE TODOS LOS MOMENTOS (piense en una composición de fuerzas)*.

Dos cargas iguales y opuestas (q) separadas por una cierta distancia (d) generan un momento dipolar según la siguiente ecuación:

$$\mu = q \cdot d$$

Veamos con qué "números" nos podemos manejar:

Cuando se produce un dipolo en una unión química es obvio que lo que "gana" de carga un átomo lo "pierde" el otro. Por ello las cargas son iguales pero de signo opuesto, y esas cargas son del orden de magnitud de la carga electrónica, o sea,  $10^{-10}$  u.e.s. (ver nota más abajo) y la distancia (d) es aproximadamente la distancia entre centros atómicos, o sea, alrededor de  $10^{-8}$  cm. Luego se debe esperar que los momentos dipolares tengan valores del orden de  $10^{-18}$  u.e.s.\*cm.

Y ahora hagamos un ejemplo más concreto:

Dos cargas del orden de  $5.0 \cdot 10^{-10}$  u.e.s. separadas por  $1,8 \text{ \AA}$  tienen un momento dipolar de:

$$\mu = 5,0 \cdot 10^{-10} \text{ u.e.s.} \cdot 1,8 \cdot 10^{-8} \text{ cm} =$$

**G 3 - 7 -**

$$9,0 \cdot 10^{-18} \text{ u.e.s.} \cdot \text{cm.}$$

Como " $10^{-18}$ " es una potencia de 10 que aparece frecuentemente se pensó en USARLO COMO UNIDAD DE MOMENTO DIPOLAR. LUEGO:

$1 \cdot 10^{-18} = 1 \text{ DEBYE}$  (en honor al fisicoquímico del mismo apellido).

Nuestro momento dipolar calculado más arriba se transforma en:

$$\mu = 9,0 \text{ D}$$

NOTA: u.e.s. es la unidad electrostática de carga. Se define como una magnitud tal que la fuerza de atracción entre una u.e.s. de carga de electricidad positiva y otra igual negativa, separadas por 1 cm. valga una dina.

Veamos algunos ejemplos de momentos dipolares y distancias interatómicas en halogenuros de hidrógeno:

Halogenuros	Distancia de equilibrio	Momento dipolar observado
HF	0,92 Å	1,98 D
HCl	1,28 Å	1,03 D
HBr	1,43 Å	0,79 D
HI	1,62 Å	0,38 D

De estos valores podemos sacar algunas conclusiones interesantes:

Recordamos que  $\mu = q \cdot d$  y por lo tanto  $q = \mu / d$

Luego si tomamos como ejemplo lo que ocurre con el HBr tendremos:

$$q = 0,79 / 1,43 = 0,55 \cdot 10^{-10} \text{ u.e.s.}$$

Quiere decir que en el caso del HBr las dos cargas que se oponen (obviamente una con "carácter positivo" y otra con "carácter negativo") tienen éste valor que lo podemos relacionar con la carga del ELECTRÓN (¿está pensando que la carga del electrón es la unidad de carga o al menos la "carga máxima posible"?):

Carga del electrón ( $e^{-1}$ ) =  $4,8 \cdot 10^{-10}$  u.e.s.

(Si quiere puede buscar en la bibliografía cómo se ha calculado esta carga del electrón mediante experimentos muy interesantes).

Luego:

$$\mu(+)\text{ o } \mu(-) = 0,55 \cdot 10^{-10} / 4,8 \cdot 10^{-10} = 0,11$$

Esta es la fracción de una carga elemental completa, que se ubica en cada uno de los átomos que componen la molécula y por supuesto la unión química, debiendo quedar claro que *NO SE HA TRANSFERIDO UN ELECTRÓN COMPLETO DEL HIDROGENO AL BROMO, SINO QUE (Y EN TODO CASO) SOLO LO HA HECHO UN 11% DE LA CARGA UNIDAD* ( $4,8 \cdot 10^{-10}$  u.e.s.).

D<sub>2</sub>: a) Le proponemos que calcule en similares términos lo que ocurre para el HF y el HCl. ¿Qué conclusiones puede sacar?

b) Indique la distribución de cargas en la molécula de NH<sub>3</sub>. ¿Se trata de una molécula polar?

### ORBITALES HÍBRIDOS

Agreguemos aquí algunos detalles de la teoría orbital que voluntariamente omitimos mencionar: los orbitales vistos no son las únicas soluciones posibles para la ecuación de onda,

también lo son algunas de las combinaciones de las soluciones vistas, llamadas ORBITALES HÍBRIDOS.

D<sub>3</sub>: Busque en la bibliografía explicación y ejemplos sobre los orbitales híbridos  $sp$ ,  $sp^2$  y  $sp^3$ , y conteste:

-¿cuántos electrones son necesarios para llenarlos?

-¿qué forma (distribución espacial de mayor probabilidad) tienen?

-¿cuáles serán los ángulos formados por dos uniones  $\sigma$  entre dos átomos de "X" y uno de "Y", según éste último presente hibridación del tipo?:

Es útil definir aquí la Regla de London: **los electrones pueden desaparecer al máximo, siempre que no cambien de nivel energético**, es decir, mientras su "n" (número cuántico principal) no varíe.

Hibridación	$sp$	$sp^2$	$sp^3$
ángulo X-Y-X			

El átomo de carbono es el caballito de batalla en el tema de la hibridación de orbitales y como Ud. ya dibujó distintos compuestos en los que participaba el C lo invitamos a rever las siguientes moléculas e indicar cómo se hibridiza el C (o los átomos de C en cada una de ella:

a.-  $CH_4$

b.-  $C_2H_6$

c.-  $C_2H_4$

d.-  $C_2H_2$

e.-  $[CH_3]_2NH$

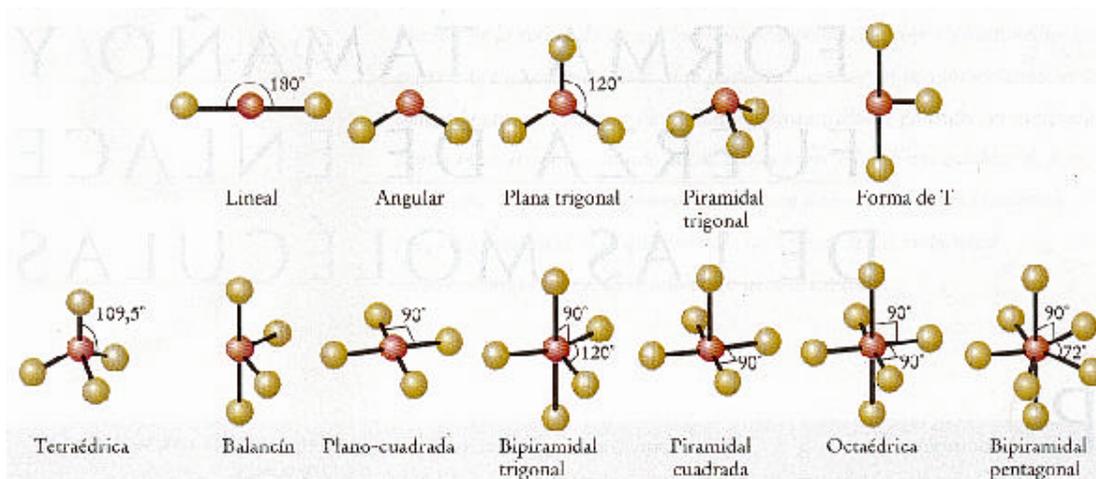
f.-  $[CH_3]_3N$

Nota: en dos últimos incisos tenga cuidado ya que se hibridizan tanto los carbonos como los nitrógenos.

### GEOMETRÍA MOLECULAR

Debe entenderse por GEOMETRÍA MOLECULAR, a la figura espacial que los átomos unidos y constituyendo una molécula, forman en el espacio.

Las disposiciones geométricas que se conocen son varias, pero no tantas como para que un alumno, con algún esfuerzo, las pueda manejar en poco tiempo.



D4: En el agua el oxígeno está hibridizado  $sp^3$ . Puesto que tiene 6 electrones en su capa más externa (electrones de valencia) dos de los cuatro lóbulos del orbital híbrido estarán completos, y otros dos incompletos. Escriba la disposición espacial del O y los H en la molécula de agua. ¿Están polarizadas las uniones H-O? ¿Es la del agua una molécula polar?

Hemos visto que la teoría orbital predice una naturaleza polar para algunas moléculas, como por ejemplo HCl,  $H_2O$  y  $NH_3$  mientras para otras, como el caso del  $H_2$  y  $Cl_2$  predice que no debe esperarse que se comporten como dipolos.

¿Cómo darnos cuenta?, Esto es, ¿qué propiedades macroscópicas confirman la naturaleza polar o no polar de las moléculas?: es tema de la unidad siguiente, pero antes de terminar hagamos unas consideraciones más:

Los pares electrónicos en una unión covalente polarizada están estadísticamente más cerca de uno de los átomos, (el más electronegativo), pero recorre los orbitales de ambos átomos, de modo que podemos imaginar una molécula de HCl, por ejemplo, como de a ratos neutra, a veces  $H^+Cl^-$  y otras, muy pocas,  $H^-Cl^+$  según donde esté el par electrónico.

No nos dedicaremos aquí a los detalles de la ley de Coulomb, que predice las magnitudes de las fuerzas de atracción electrostática entre cuerpos cargados eléctricamente, según sean las características del medio en que estos se encuentren. Pero adelantemos que si bien la unión H—Cl, para seguir con el mismo ejemplo, no es iónica, sino covalente polarizada, cuando se disuelve HCl en agua aparecen las especies iónicas  $H^+$  y  $Cl^-$ .

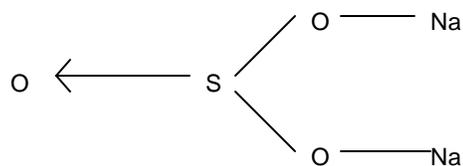
Esto podemos explicarlo así: el medio acuoso hace más débil la fuerza de atracción entre cargas eléctricas opuestas, entonces cuando una molécula está momentáneamente como  $H^+Cl^-$  los iones pueden separarse y no volver a reencontrarse para formar la unión covalente por un tiempo.

A esta aparición de especies iónicas en solución se la llama disociación y será objeto de estudio más adelante.

D6: ¿Cómo varía la facilidad para dar iones en solución con la diferencia de electronegatividad, en una unión covalente?

Discuta cuáles de las uniones podrían disociarse en solución en las siguientes estructuras:

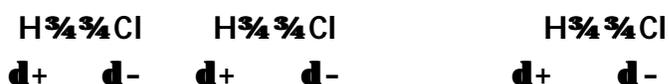




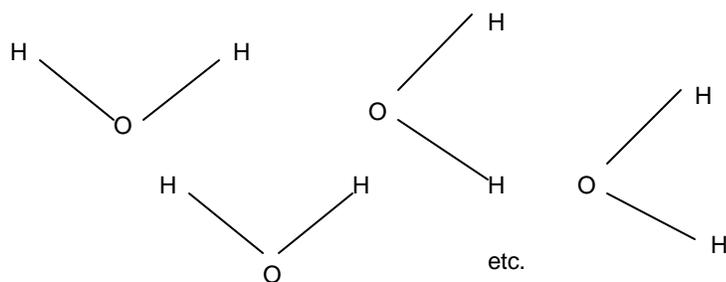
Sugerencia: escriba sobre cada unión la magnitud de la diferencia de las electronegatividades de los átomos intervinientes.

Los dipolos eléctricos tienden a atraerse entre sí: el polo positivo de uno se atrae con el negativo del otro y viceversa. Cabe esperar que las moléculas polares se atraigan entre sí.

Los ejemplos en el plano (sin volumen) son engañosos, pero las moléculas de HCl, por ejemplo, se ordenarán de modo que los polos opuestos queden lo más próximos que sea posible

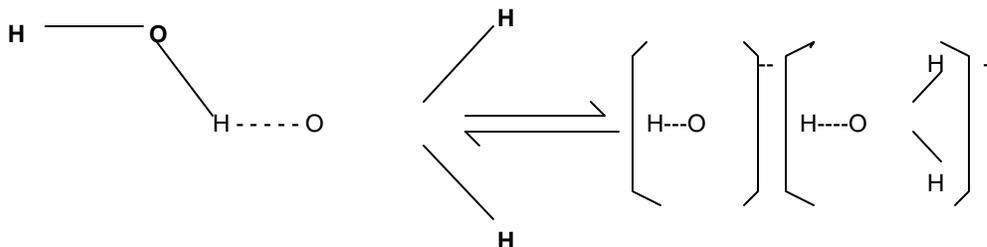


y otro tanto pasará con el agua:



Esta atracción entre moléculas polares no es tan fuerte como para ser considerada una unión química (en las polarizaciones no hay separación neta de carga, de modo que en estas las fuerzas de atracción deben ser aún más débiles que en las uniones iónicas) pero veremos que tienen gran influencia en las propiedades físicas de las sustancias.

D7: Discuta la posibilidad de que pueda ocurrir algo así

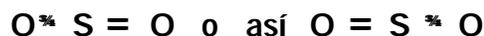


### UNIÓN POR PUENTE DE HIDRÓGENO

Consulte en un libro la naturaleza de las uniones por puente de hidrógeno (de todos modos en próximos capítulos, se estudiarán más en detalle).

### RESONANCIA

Agreguemos un último aspecto: al resolver un problema anterior seguramente habrá escrito algo así:



Cuántos más pares de electrones compartan dos átomos, más próximos quedan sus núcleos Si el S estuviera unido a un O por una unión doble y al otro por una covalente simple, las dos distancias S - O deberían ser distintas. Sin embargo, no se observa experimentalmente que lo sean.

Este caso (y varios otros que puede consultar en los libros) llevó a la idea de que la molécula de SO<sub>2</sub> en realidad alterna entre dos estructuras.

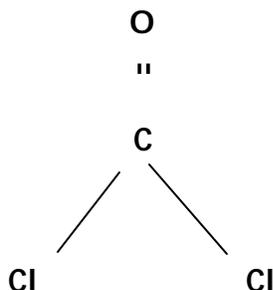


sin cambiar las posiciones relativas de los núcleos, son sólo los electrones los que cambian de configuración. A esta propiedad de algunas moléculas e iones se la llama RESONANCIA.

E1: Consulte el tema en la bibliografía, y plantee las estructuras resonantes para: **SO<sub>3</sub>**

Así las moléculas se estabilizan por resonancia (**o al menos esa es la mejor explicación, con los elementos que proporciona la Teoría del enlace de valencia, que es el tratamiento que estamos realizando**).

¿Y en ésta molécula qué ocurrirá? :



CUIDADO: No se apresure.

**LA ESTABILIZACIÓN POR RESONANCIA SÓLO SE DA CUANDO LOS ÁTOMOS SON IGUALES, O CUANDO SUS ELECTRONES DE VALENCIA ESTÁN EN EL MISMO NIVEL DE ENERGÍA.**



Esta guía intenta ayudarlo en la predicción de la forma de las moléculas merced a los conocimientos que Ud. posee. Es aplicable para moléculas sencillas.

1. -Escriba la estructura de Lewis de la molécula problema.
2. -Determine el número total de pares de electrones no compartidos (aislados) y el número de uniones  $\sigma$  (sigma).

**TOTAL DE PARES= SUMATORIA DE LAS UNIONES  $\sigma$  + PARES AISLADOS**

3. - Use el total de pares para predecir la hibridización y la forma, asumiendo que los pares se orientarán tan simétricamente como sea posible.

4. - Para describir la forma molecular, relacione la posición espacial de los átomos con una figura geométrica.

EJEMPLO: prediga la forma del  $\text{NO}_2^-$

1. - Estructura de Lewis:

2. -  $\sigma = 2$  ; Pares aislados = 1    SUMA = 3

3. -  $\text{sp}^2$

4. - ES ANGULAR

Una acotación: en general un átomo involucrado en uniones múltiples puede ser imaginado como híbrido. Los orbitales  $\pi$  en muchos casos son provenientes de orbitales atómicos no híbridos. Ejs.  $\text{C}_2\text{H}_4$  ,  $\text{H}_2\text{CO}$ .

## EJERCICIOS DE APLICACIÓN

3.1. - Cuatro elementos distintos tienen las siguientes configuraciones:

A:  $1s^2 2s^2 2p^2$

B:  $1s^2 2s^2 2p^5$

C:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

D:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

¿Cuáles son las fórmulas de los compuestos que B puede formar con todos los demás?

3.2. - X e Y son átomos del segundo período de la tabla, y Z es el halógeno del mismo período, cuya energía de primera ionización es 1680,36 kJ/mol. Los datos que conocemos de X e Y son:

	$r$ (Å)	$E_i$ (kJ/mol)
X	1,55	518,32
Y	0,91	1404,48

donde  $r$  es el radio atómico y  $E_i$  la energía de ionización. Con estos datos ¿qué deducciones puede hacer en cuanto a la electronegatividad de ambos y al carácter iónico de las uniones Y-Z y X-Z?

3.3. - Una de las siguientes moléculas, en que X e Y son elementos hipotéticos, ha de ser necesariamente polar: XY, X<sub>2</sub>, X<sub>2</sub>Y e Y<sub>2</sub>.

¿Cuál y por qué? ¿Por qué rechaza las demás?

3.4. - Realice las estructuras de Lewis de las siguientes especies:

a.- NH<sub>3</sub>

b.- Cl<sub>3</sub>N

c.- PCl<sub>3</sub>

d.- PCl<sub>5</sub>

e.- Cl<sub>5</sub>N

Cuidado: una de ellas no existe. ¿Pueden desaparecer electrones en diferentes niveles de energía?

3.5. - El ion BH<sub>4</sub><sup>-</sup> tiene sus cuatro enlaces iguales. ¿Cuál será la hibridización del boro y la geometría molecular?

3.6. - La molécula siguiente es el formaldehído, H<sub>2</sub>C=O. ¿Cuál será la hibridización del carbono y la geometría molecular?

3.7. - El compuesto XCl<sub>3</sub> no tiene momento dipolar. Proponemos cuatro elementos capaces de unirse al cloro: Al, N, P y Mg

¿Cuál de ellos generará la molécula sin momento dipolar? Recuerde que para que ello suceda no deben existir pares libres o solitarios.

3.8. - Dibuje la molécula de ICl<sub>3</sub> indicando la hibridización del átomo central.

3.9. - I dem para la molécula de HgCl<sub>2</sub>.

3.10. - De la molécula  $\text{XCl}_3$  (no confundir con un problema anterior) se tienen los siguientes datos: a) es polar b) tiene un ángulo de enlace Cl-X-Cl de  $180^\circ$  y dos ángulos de enlace Cl-X-Cl de  $90^\circ$ . Proponga la hibridización del átomo central y la geometría molecular.

3.11. - Se comparan dos moléculas muy semejantes,  $\text{CO}_2$  y  $\text{SO}_2$ . Se observa que en la primera el momento dipolar es nulo y en la segunda no lo es. ¿Cuál será la causa?

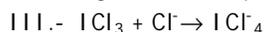
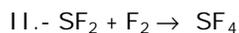
3.12. -Una de las siguientes especies no cumple la regla del octeto. Señale cuál de ellas y por qué:

- a.-  $\text{CBr}_4$
- b.-  $\text{CCl}_4$
- c.-  $\text{PCl}_5$
- d.-  $\text{Cl}_2$
- e.-  $\text{Cl}_3\text{N}$

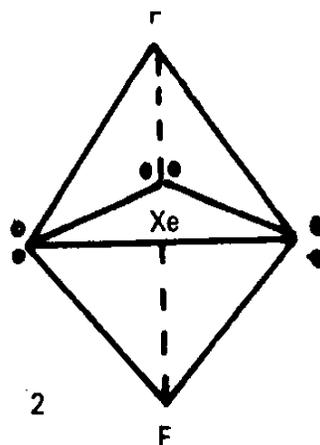
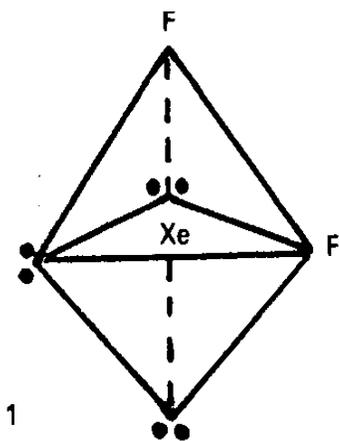
3.13. -Dibuje la molécula  $\text{ICl}_4^-$  indicando la hibridización del átomo central.

3.14. -Las especies  $\text{IF}_4^-$ ,  $\text{BrF}_5$ ,  $\text{SF}_6$ , y  $\text{PF}_6^-$ , presentan una característica en común. ¿Cuál es esa característica? Para responder debe considerar la geometría e hibridización de las cuatro moléculas.

3.15. -¿En cuál de estas reacciones químicas se puede predecir que la geometría molecular cambia de trigonal plana a tetraédrica?



3.16. -De las dos estructuras siguientes ¿cuál es la más estable?



3.17. -¿Cuál es la hibridización y la geometría molecular de las siguientes moléculas? :

- a.-  $\text{TeCl}_4$
- b.-  $\text{SbCl}_5$
- c.-  $\text{SOCl}_2$
- d.-  $\text{SCl}_2$

e.-  $\text{BF}_3$

3.18. - Las longitudes de enlace encontradas en las tablas para los enlaces nitrógeno-nitrógeno y nitrógeno-oxígeno son:

<b>N=N</b>	<b>1,19 Å</b>	<b>N•N</b>	<b>1,06 Å</b>
<b>N-O</b>	<b>1,36 Å</b>	<b>N=O</b>	<b>1,15 Å</b>

En la molécula de  $\text{N}_2\text{O}$ , el enlace nitrógeno-nitrógeno tiene 1,13 Å y el nitrógeno-oxígeno, 1,19 Å. Con estos valores experimentales, ¿cuál será la estructura de la molécula? Piense en resonancia y, además, tenga en cuenta que el enlace es N..N..O (las líneas de puntos son al sólo efecto de indicar la posición de los átomos).

3.19. - Las longitudes de enlace en el ácido fórmico  $\text{HCO}_2\text{H}$  son para la unión C=O 0,123 nm y para la unión C-O 0,136 nm. Cuando al actuar como ácido pierde el H unido al oxígeno las longitudes de enlace pasan a ser 0,127 nm. Explique este cambio.

3.20. -En los siguientes ejemplos indique el ángulo de las uniones(o al menos su valor estimado):

- a.-  $\text{BeH}_2$
- b.-  $\text{BF}_3$
- c.-  $\text{Br}_4\text{C}$
- d.-  $\text{NH}_3$
- e.-  $\text{PH}_3$

(Una ayuda: cuanto menor electronegatividad del átomo central mayor interacción entre los pares de electrones no compartidos y los enlaces)

3.21. - De las especies  $\text{PI}_3$ ,  $\text{PCl}_3$ ,  $\text{PBr}_3$ ,  $\text{PF}_3$ , compare los ángulos entre cada una de ellas.

(Una ayuda: a mayor electronegatividad la nube se concentra más y se repele mucho con el par solitario. A menor electronegatividad la nube se expande más y se repele menos.)

3.22. -Sólo una de las siguientes comparaciones por parejas es falsa. Justifique su elección:

- a.- el ángulo del  $\text{H}_2\text{O}$  es mayor que el del  $\text{H}_2\text{S}$
- b.- el ángulo que posee la molécula  $\text{PH}_3$  es mayor que el que presenta el  $\text{AsH}_3$
- c.- el  $\mu$  del HF es mayor que el  $\mu$  del HBr
- d.- el  $\mu$  del HCl es mayor que el  $\mu$  del HI.
- e.- el  $\mu$  del  $\text{S}_2\text{C}$  es mayor que el  $\mu$  del  $\text{SO}_2$ .

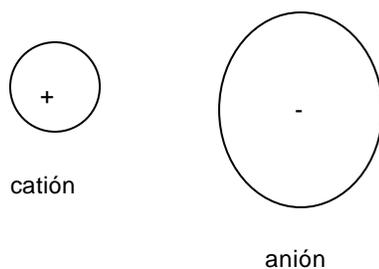
3.23. -Sólo una de las siguientes afirmaciones es cierta:

- a.- la molécula  $\text{NaCl}$  es 100 % iónica.
- b.- el catión  $\text{Na}^+$  polariza más al  $\text{Cl}^-$  que el  $\text{Be}^{2+}$
- c.- entre dos compuestos semejantes el de mayor grado de polarización posee mayor porcentaje de carácter iónico.
- d.- en general entre dos compuestos semejantes al aumentar el porcentaje de carácter covalente disminuyen los puntos de fusión.
- e.- cuanto menor es el radio de un anión más se polariza por el efecto de un catión determinado.

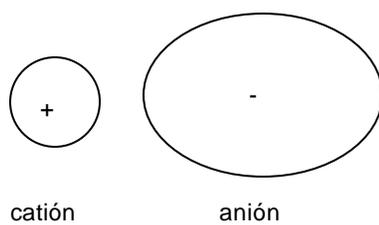
Una ayuda: debe pensar en el Efecto polarizante de los iones: relación carga/radio.

**G 3- 17 -**

También tenga en cuenta que a mayor polarización mayor carácter covalente de la unión.  
Situación antes de la "polarización".



Situación después de producido el efecto polarizante



## ITEMS DE COMPLETACIÓN

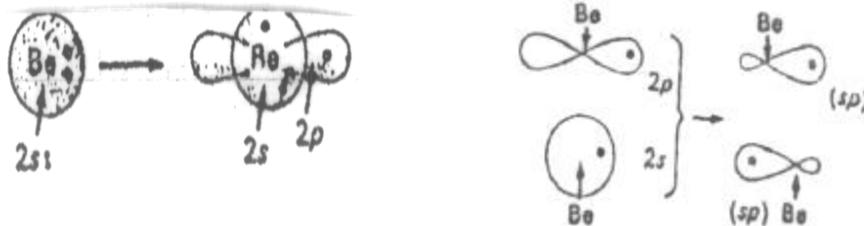
M. RAMOS y R. GARCÍA

### PREDICCIÓN DE ÁNGULOS E HIBRIDIZACIÓN DE MOLÉCULAS SENCILLAS

Cuando el alumno haya concluido esta guía será capaz de dibujar diagramas que dan información sobre la disposición de los átomos y las posiciones más probables de los electrones en muchas moléculas. También podrá predecir ángulos entre enlaces y el tipo de hibridización en moléculas sencillas. Será capaz, por ejemplo, de predecir que la molécula de amoníaco tiene forma de pirámide con ángulos H-N-H menores de  $109.5^\circ$  y que el nitrógeno presenta hibridización  $sp^3$ .

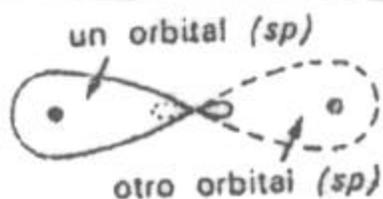
El alumno debe leer cada párrafo y completar los espacios libres con la respuesta adecuada.

1. -La configuración electrónica para el estado fundamental del átomo de **berilio** es \_\_\_\_\_ y pertenece al grupo de los \_\_\_\_\_.
2. -Además de formar compuestos iónicos, algunos metales alcalinotérreos forman compuestos, tales como el **hidruro de berilio**, los cuales no son iónicos, y su estructura de Lewis es \_\_\_\_\_.
3. -Los enlaces **Be-H** son \_\_\_\_\_ en cuanto a su longitud y también en cuanto a su \_\_\_\_\_.
4. -Para explicar el hecho de que los dos enlaces en el **BeH<sub>2</sub>** sean experimentalmente equivalentes, se supone, como se indica abajo que los orbitales s y p se mezclan o hibridizan. Cada nuevo orbital **sp híbrido** contiene \_\_\_\_\_ electrón(es).



5. - Se dijo que el compuesto **BeH<sub>2</sub>** tiene dos enlaces covalentes equivalentes. Sin embargo, la configuración electrónica  $1s^2 2s^2$  no sugiere enlaces covalentes ya que los electrones están apareados. Si un electrón es promocionado al orbital 2p para dar la configuración \_\_\_\_\_ y entonces son hibridizados los orbitales s y p, se obtiene el diagrama:

**G 3- 19 -**



6. - Los dos orbitales híbridos ( $sp$ ) están colocados linealmente como en la figura. El esquema de las uniones para el  $\text{BeH}_2$  es \_\_\_\_\_, y se predice que la forma de la molécula será \_\_\_\_\_.



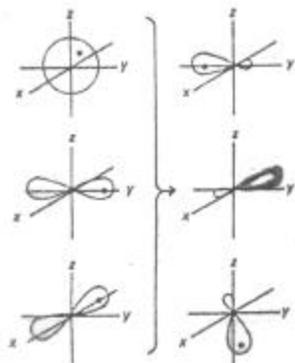
7.- Los ángulos esperados para  $\text{BeH}_2$  son de \_\_\_\_\_ °.

8. - Se encuentra experimentalmente que, en efecto, el  $\text{BeH}_2$  es lineal como en la molécula del  $\text{BeCl}_2$ . El esquema de las uniones para el  $\text{BeCl}_2$  es:

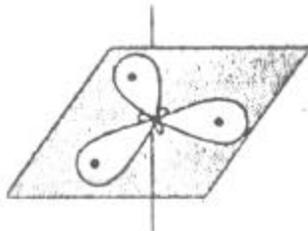
9. - La configuración electrónica del estado fundamental del boro es: \_\_\_\_\_.

10. - Puesto que el boro forma tres enlaces covalentes equivalentes en compuestos tales como el trifluoruro de boro, uno de los electrones  $2s$  debe ser promovido al orbital  $2p$  dando la configuración: \_\_\_\_\_.

11. - De nuevo, la hibridización, como se indica en la figura, es necesaria para explicar el hecho de que los tres enlaces son: \_\_\_\_\_.



12. - El diagrama compuesto de la figura muestra que los **tres orbitales híbridos** ( $sp^2$ ) se encuentran en un plano. El ángulo entre dos cualesquiera de ellos debe esperarse sea \_\_\_\_°.



13. - La molécula **BH<sub>3</sub>** puede existir a temperaturas elevadas. La compartición de los tres electrones externos del boro con los electrones de los tres átomos de hidrógeno puede representarse por el esquema de las uniones:

<--- DIBUJO

14. - El esquema de las uniones para la molécula **BF<sub>3</sub>** es:

<--- DIBUJO

15. - Sobre las bases del esquema de la cuestión precedente, el **BF<sub>3</sub>** se predice será una molécula \_\_\_\_\_ con ángulos entre los enlaces **F-B-F** de \_\_\_\_\_.

16. - La configuración electrónica del estado fundamental del **carbono** es:.....

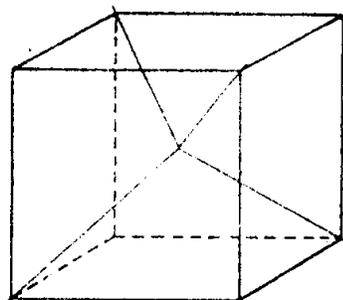
17. - Para explicar la equivalencia de los cuatro enlaces que se presentan en moléculas tales como **CH<sub>4</sub>**, se dice que un electrón debe ser \_\_\_\_\_ desde el orbital 2s a uno 2p para dar la configuración \_\_\_\_\_.

18. - Los cuatro orbitales **2s, 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, y 2p<sub>z</sub>** pueden mezclarse, o más propiamente para dar cuatro orbitales equivalentes.

19. - Los nuevos **orbitales híbridos** ( $sp^3$ ), tienen la misma forma general que los orbitales ( $sp$ ) o ( $sp^2$ ), esto es, pueden representarse por la figura:

20. - Los cuatro **orbitales híbridos ( $sp^3$ )** se proyectan en ángulos de  **$109.5^\circ$**  que pueden ser dibujados como la figura.  
Dibujar orbitales ( $sp^3$ ) según estas direcciones.

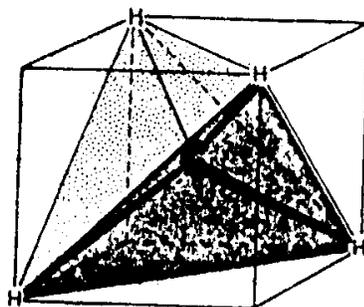
⇒ "



21. - En el átomo de **carbono** hay \_\_\_\_\_ electrones externos. Si el enlace puede ser considerado por orbitales híbridos ( $sp^3$ ), habrá \_\_\_\_\_ enlaces a ángulos de  **$109.5^\circ$**

22. - Dibujar un esquema de uniones para una molécula de **metano ( $CH_4$ )**:

23. - El sólido sombreado en la figura es un tetraedro. En lugar de decir que los ángulos en el  $CH_4$  son de \_\_\_\_\_ se puede decir que esta (u otra similar) también es tetraédrica.



24. - Añadir orbitales y símbolos de los átomos a las líneas de la figura para conseguir el esquema de uniones del **etano**.



25. - Describa el enlace del **agua** usando cuatro orbitales híbridos ( $sp^3$ ) para los seis electrones externos del átomo de oxígeno. Dibujar el esquema de uniones:

26. - El ángulo predicho para la molécula del **agua** por la descripción de orbitales ( $sp^3$ ) es de \_\_\_\_\_. El ángulo que se puede predecir basándose en los orbitales  $s$ ,  $p_x$ ,  $p_y$ , y  $p_z$  sino hubiera hibridización sería \_\_\_\_\_. El ángulo observado es **105°**

27. - La deformación del ángulo en la molécula de **agua** se debe a la \_\_\_\_\_ entre los pares de electrones de las uniones y los pares libres.

28. - La configuración electrónica del estado fundamental del **silicio** es \_\_\_\_\_. El esquema de las uniones en la molécula de **SiH<sub>4</sub>** es:

Y los ángulos **H-Si-H** son de \_\_\_\_\_.

29. - Cuando un átomo de **carbono** se liga a otros tres átomos (por ej. en el caso del eteno), son utilizados tres orbitales ( $sp^2$ ) para formar tres enlaces sigma. Los orbitales ( $sp^2$ ) en el carbono (como en el **boro**), se encuentran en un \_\_\_\_\_ y tienen un ángulo de: \_\_\_\_\_ entre sí.

30. - Dibuje un esquema de la molécula de **eteno**:

31. - La doble ligadura es un solapamiento entre orbitales \_\_\_\_\_ y la probabilidad de hallar los pares de la unión se encuentran: \_\_\_\_\_ de la línea imaginaria que une ambos núcleos de **carbono**.

32. - Dibuje un esquema de la molécula de **etino (acetileno)**:

33. - La hibridización de los átomos de carbono en el **etino** es: \_\_\_\_\_ y por lo tanto los orbitales \_\_\_\_\_ que no se hibridizan quedan en "estado atómico" con un ángulo entre sí de \_\_\_\_\_.

34. - Esos orbitales atómicos \_\_\_\_\_ de cada uno de los **carbonos** se solapan para generar \_\_\_\_\_ uniones de.

35. - Se ha encontrado experimentalmente que la molécula de **NH<sub>3</sub>** es piramidal con ángulos **H-N-H** de 108°. Esto se debe a que la hibridización es del tipo \_\_\_\_\_ y que hay una \_\_\_\_\_ entre los pares de electrones del enlace y el par de \_\_\_\_\_ libres.

36. - En la molécula de **dimetilamina** el nitrógeno se hibridiza \_\_\_\_\_ y cada carbono se hibridiza \_\_\_\_\_.

37. - La molécula de **dimetilamina** tendrá la siguiente forma en el espacio:

38. - En la molécula de **trimetilamina** se verifica que el nitrógeno tendrá una hibridización \_\_\_\_\_ y que los carbonos tendrán una hibridización \_\_\_\_\_.

Ahora coteje sus respuestas con las indicadas en la plantilla para corrección.

Si contestó bien más del 80%, Ud. maneja muy bien el tema

Si contestó bien entre el 60 y 80% es aceptable.

Si contestó bien menos del 60% sería prudente que vuelva a repasar el tema.

## **GLOSARIO DE TÉRMINOS**

Como en las anteriores unidades, Ud. puede encontrar las palabras o grupos de palabras para completar el glosario.

Como es usual, no se encuentran por orden alfabético.

## **UNIONES QUÍMICAS**

- I.- Enlace o molécula formada por el mismo elemento.
- II.- Enlace covalente en el que se comparten dos electrones (1 par) entre dos átomos.
- III.- Electrones externos de un átomo que participan en una unión química.
- IV.- Fuerzas que actúan entre moléculas polares.
- V.- Interacción dipolo-dipolo en la que participa hidrógeno y oxígeno o flúor o nitrógeno.
- VI.- Carga que tendría un átomo en una unión si le otorgan los electrones por la electronegatividad.
- VII.- Fuerzas que actúan entre un ion y un dipolo.
- VIII.- Representación de los enlaces covalentes que usa los símbolos de Lewis.
- IX.- Representación de moléculas o iones con los símbolos atómicos y los electrones externos.
- X.- Orbital que resulta de la interacción de dos orbitales atómicos de los átomos que se unen.
- XI.- Enlace en el que dos átomos comparten un par de electrones.
- XII.- Un átomo (diferente del hidrógeno) tiende a formar enlaces hasta que se vea rodeado por ocho o más electrones.
- XIII.- Dos o más átomos unidos mediante fuerzas especiales.

- XIV.- Fuerza electrostática que permite unir a los iones en compuestos iónicos.
- XV.- Aquella molécula constituida por más de dos átomos (iguales o no).
- XVI.- Todas las fuerzas intermoleculares excluyendo a las uniones por puente de hidrógeno.
- XVII.- Capacidad de un átomo para atraer electrones hacia él en una unión química.
- XVIII.- Uniones generadas por la acción de dipolos-instantáneos y dipolos-inducidos.
- XIX.- Aquella molécula constituida por dos átomos (iguales o no).
- XX.- Enlace por solapamiento lateral de orbitales atómicos.
- XXI.- Unidad que se usa para el momento dipolar.
- XXII.- Ordenamiento con un átomo central y tres en los vértices de un triángulo equilátero.
- XXIII.- Medida de la polaridad de un enlace o molécula (se expresa en Debye).
- XXIV.- Enlace covalente en el cual no se observa un dipolo.
- XXV.- Compuestos que tienen uniones predominantemente iónicos.
- XXVI.- Teoría en la que los enlaces se forman por superposición de orbitales y compartición de electrones.
- XXVII.- Dos o más fórmulas de Lewis equivalentes para la misma molécula, necesarias para describirla.
- XXVIII.- Átomo de una molécula o ion poliatómico que está unido a más de un átomo adicional.
- XXIX.- Separación de cargas entre dos átomos unidos con diferente electronegatividad.

- XXX.- Par de electrones (externos) de un átomo que no están unidos a otros átomos.
- XXXI.- Ordenamiento de moléculas o iones con un átomo central y seis átomos en los vértices de un octaedro.
- XXXII.- Ordenamiento que tiene un átomo en el centro y cinco en los vértices de una bipirámide.
- XXXIII.- Enlace covalente en el que hay distribución asimétrica de densidad electrónica.
- XXXIV.- Enlace covalente que se forma al compartir cuatro electrones (dos pares) entre dos átomos.
- XXXV.- Geometría que surge del ordenamiento de los átomos (no de los pares libres) alrededor del central.
- XXXVI.- Electrones de enlace que están distribuidos entre más de dos átomos unidos entre sí.
- XXXVII.- Ordenamiento que tiene un átomo en el centro y cuatro en los vértices de un cuadrado.
- XXXVIII.- Mezcla de orbitales atómicos para generar otros con energía intermedia.
- XXXIX.- Geometría que surge del ordenamiento de pares compartidos y no compartidos en torno al átomo central.
- XL.- Par de electrones de un enlace covalente.
- XLI.- Ordenamiento que tiene átomo en el centro y cuatro en los vértices de un tetraedro.