

BOLETÍN ENLACE QUÍMICO

ENLACE IÓNICO

1. Considerando o elemento alcalinotérreo do terceiro período e o segundo elemento do grupo dos halóxenos.
 - a) Escribe as súas configuracións electrónicas e os catro números cuánticos posibles para o último electrón de cada elemento.
 - b) Que tipo de enlace corresponde á unión química destes elementos entre si? Escribe a fórmula do composto que forman. Razoa a resposta.

(P.A.U. Xuño 11)

Solución:

a) No sistema periódico vemos que o elemento alcalinotérreo do terceiro período é o magnesio e o segundo elemento do grupo dos halóxenos é o cloro.

Mg: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2$ (3, 0, 0, $+\frac{1}{2}$) ou (3, 0, 0, $-\frac{1}{2}$)

Cl: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^5$ (3, 1, 0, $+\frac{1}{2}$) ou (3, 1, 1, $+\frac{1}{2}$) ou (3, 1, -1, $+\frac{1}{2}$) ou (3, 1, 0, $-\frac{1}{2}$) ou (3, 1, 1, $-\frac{1}{2}$) ou (3, 1, -1, $-\frac{1}{2}$)

b) Iónico. $MgCl_2$

Os metais teñen unha enerxía de ionización relativamente baixa, aínda que no caso do magnesio habería que ter en conta a segunda enerxía de ionización para que a configuración electrónica fose a dun gas nobre.

Os halóxenos teñen unha afinidade electrónica que provoca un desprendemento de enerxía cando gañan un electrón. Esta enerxía non é suficiente para compensar as enerxías de ionización do magnesio, pero tamén se desprende a enerxía de rede que é a enerxía electrostática que mantén unidos aos ións. Neste caso a enerxía de rede é bastante elevada porque é directamente proporcional ás cargas (e a carga do ión magnesio é 2+) e inversamente proporcional á distancia entre os ións que depende dos seus radios. (O ión magnesio ten un radio pequeno e o ión cloruro ten un dos radios máis pequenos dos aniões)

2. Os elementos químicos A e B teñen número atómico 20 e 35, respectivamente. Indica razoadamente:
 - a) Os ións máis estables que formarán cada un deles.
 - b) As propiedades do composto formado por A e B.

(P.A.U. Xuño 09)

Solución:

a) As configuracións electrónicas dos elementos neutros son:

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

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

O elemento A perderá os 2 electróns do cuarto nivel de enerxía para alcanzar a configuración do gas nobre máis próximo. Formará o ión A^{2+} .

O elemento B gañará 1 electrón para completar o cuarto nivel de enerxía e alcanzar a configuración do gas nobre máis próximo. Formará o ión B^- .

b) O composto máis probable entre A e B será o composto iónico AB_2 .

As propiedades dos compostos iónicos son:

Temperaturas de fusión e ebulición elevadas. Están marcadas polo valor da enerxía de rede, que á súa vez dependen das cargas dos ións e dos radios.

Solubilidade en disolventes polares como a auga.

Condutividade eléctrica fase líquida, disolta ou gasosa, pola presenza de ións libres, (pero non en estado sólido ao atoparse os ións fixos nos nós das redes cristalinas)

Elevada dureza (tamén en función da enerxía de rede) e fragilidade.

3. Para cada un dos seguintes pares de elementos, xustifica se o composto binario que forman é iónico ou covalente, indica a fórmula, o nome e dúas propiedades químicas do composto que formarían.

- a) B e F.
b) K e Br.

(P.A.U. Set. 14)

Solución:

a) O boro e o flúor formarían un composto covalente, o trifluoruro de boro BF_3 .

A configuración electrónica do flúor é $[\text{He}] (2s)^2 (2p_x)^2 (2p_y)^2 (2p_z)^1$

O flúor alcanzaría a disposición dun gas nobre gañando un electrón: $[\text{He}] (2s)^2 (2p_x)^2 (2p_y)^2 (2p_z)^2 = [\text{Ne}]$

A configuración electrónica do boro é $[\text{He}] (2s)^2 (2p_x)^1$

O boro tería que perder os tres electróns do segundo nivel de enerxía. A enerxía necesaria para este proceso é demasiado elevada e a enerxía da formación dun hipotético composto iónico $(\text{B}^{3+})(\text{F}^-)_3$ non a compensaría.

É máis rendible compartir cada un dos tres electróns do boro, aínda que tería que gastar enerxía en pasar un electrón do orbital $(2s)$ ao orbital $(2p_y)$, co electrón desapareado de cada un dos tres átomos de flúor.

O composto formado, BF_3 , sería unha excepción á regra do octete xa que o átomo de boro só tería tres pares de electróns. A molécula do BF_3 é plana triangular e apolar.

Os compostos covalentes moleculares teñen baixos puntos de fusión e ebulición, (o BF_3 probablemente sexa gasoso a temperatura ambiente) e non adoitan ser solubles en auga senón en disolventes apolares.

b) O bromo e o potasio formarían un composto iónico, o bromuro de potasio KBr .

A configuración electrónica do bromo é $[\text{Ar}] (4s)^2 (3d)^{10} (4p_x)^2 (4p_y)^2 (4p_z)^1$.

O bromo alcanza a disposición de gas nobre gañando un electrón: $[\text{Ar}] (4s)^2 (3d)^{10} (4p_x)^2 (4p_y)^2 (4p_z)^2 = [\text{Kr}]$

A configuración electrónica do potasio é $[\text{Ar}] (4s)^1$.

O potasio alcanza a disposición de gas nobre perdendo o electrón $(4s)^1$. A enerxía de rede asociada á unión dos ións K^+ e Br^- compensaría con fartura o gasto de sublimación e ionización do potasio e a vaporización e disociación da molécula de bromo.

Os compostos iónicos teñen altos puntos de fusión e ebulición, (o KBr é sólido temperatura ambiente) e adoitan ser solubles en auga (o KBr é bastante soluble en auga xa que a súa enerxía de rede é relativamente baixa)

ENLACE COVALENTE

1. Indica razoadamente se é verdadeira ou falsa a afirmación seguinte:
b) A molécula de auga presenta xeometría lineal.

(P.A.U. Xuño 13)

Solución:

b) Falsa. A molécula de auga é triangular $\text{H} \begin{array}{c} \diagup \\ \text{O} \\ \diagdown \end{array} \text{H}$ cun ángulo de $104,5^\circ$.

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. Supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre estes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible. Unha repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

A configuración electrónica do osíxeno en estado fundamental é: $(1s)^2 (2s)^2 (2p_x)^2 (2p_y)^1 (2p_z)^1$.

O osíxeno, con seis electróns de valencia necesita unirse a dous átomos de hidróxeno (cada un cun electrón de valencia) para completar o octete: $\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$

Este octete está formado por dous pares de enlace e outros dous pares non enlazantes. Os catro pares repélense ata separarse en ángulos de $109,5^\circ$.

Pero o ángulo medido para o osíxeno é de 105° . A teoría de repulsión de pares explica porque os dous pares non enlazantes do osíxeno atópanse máis preto del que os de enlace (posto que non hai ningún átomo alén do enlace que tire deles) e repelerá con máis forza (usando a lei de Coulomb) aos outros dous pares enlazantes que se achegarán a ángulos algo menores que o de $109,5^\circ$, neste caso a $104,5^\circ$.

2. b) Razoa se unha molécula de fórmula AB_2 debe ser sempre lineal.

(P.A.U. Set. 13)

Solución:

b) Non.

A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia é a que dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. Supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre estes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible. Unha repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$.

Hai moléculas de fórmula AB_2 que son lineais, como a de CO_2 ou a de BeI_2 e outras que son triangulares como a de SO_2 ou a de H_2O .

Molécula	CO_2	BeI_2	SO_2	H_2O
Átomo central	C	Be	S	O
Conf. elec. fundamental	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$	$(2s)^2$	$(3s)^2 (3p_x)^2 (3p_y)^1 (3p_z)^1$	$(2s)^2 (2p_x)^2 (2p_y)^1 (2p_z)^1$
Conf. electrón. excitada	$(2s)^1 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$	$(2s)^1 (2p_x)^1$		
Diagrama de Lewis	$:\ddot{O}::C::\ddot{O}:$	$:\ddot{I}:Be:\ddot{I}:$	$:\ddot{O}::\ddot{S}::\ddot{O}:$	$H:\ddot{O}::H$
Pares σ	2	2	2	2
Pares π	2	2	1	0
Pares non enlazantes	0	0	1	2
Pares que se repelen	2	2	3	4
Disposición dos pares	lineal	lineal	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	180°	180°	$<120^\circ$	105°
Forma da molécula	lineal	lineal	angular plana	angular plana
	$O=C=O$	$I-Be-I$	$O \quad S=O$	$H \quad O-H$

3. b) Especifica que orbitais híbridos utiliza o carbono no eteno (C_2H_4), así como o tipo de enlaces que se forman na molécula. Razoa a resposta.

(P.A.U. Xuño 14)

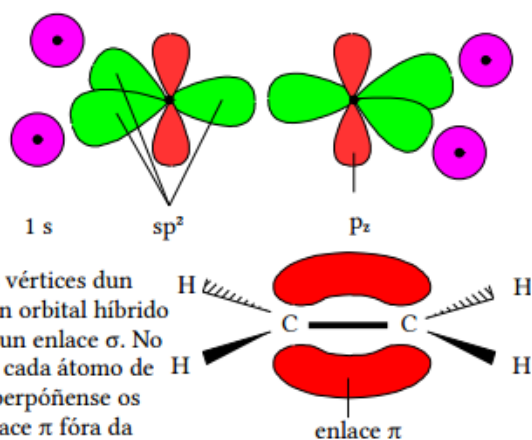
Solución:

b) A configuración fundamental do carbono $Z = 6$ é $(1s)^2 (2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$

Pero, debido a que a formación de dúas enlaces máis compensa a enerxía de excitación, antes de formar enlaces pasa á configuración excitada, $[He] (2s)^1 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$, con catro electróns desapareados que poden formar catro enlaces covalentes.

Prodúcese unha hibridación sp^2 : aparecen tres híbridos sp^2 formados por combinación dun orbital s e dous orbitais p , (p_x e p_y) e queda sen hibridar o orbital p_z .

Haberá un electrón desapareado en cada híbrido e tamén no orbital p_z . Estes híbridos están dirixidos cara aos vértices dun triángulo equilátero. Nos enlaces C - H, superpóñense un orbital híbrido sp^2 do carbono co orbital $1s$ do hidróxeno dando lugar a un enlace σ . No enlace C - C superpóñense dous orbitais híbridos, un de cada átomo de carbono, para dar lugar a outro enlace σ . Pero tamén superpóñense os dous orbitais p_z dos dous carbonos, dando lugar a un enlace π fóra da liña que une os dous átomos de carbono.



4. Indica razoadamente, se son verdadeiras ou falsas as seguintes afirmacións:
- O enlace covalente caracterízase pola transferencia de electróns entre os elementos que forman o enlace. Pon un exemplo.
 - O número de orbitais híbridos que se xeran na hibridación é igual ao número de orbitais atómicos puros que participan en devandito proceso. Utiliza a molécula BeCl_2 para o razoamento.

(P.A.U. Set. 14)

Solución:

a) Falsa.

O enlace covalente caracterízase polo uso compartido de electróns entre os elementos que forman o enlace. Por exemplo, na molécula de flúor, F_2 , cada átomo de flúor ten unha configuración electrónica:

$[\text{He}] (2s)^2 (2p_x)^2 (2p_y)^2 (2p_z)^1$ e fáltalle un electrón para ter a configuración electrónica do gas nobre neon. O balance de enerxía non permitiría que o outro átomo de flúor perda un electrón (e tampouco alcanzaría a configuración de gas nobre), polo que se forma un enlace covalente entre os dous átomos de flúor no que ambos os átomos achegan un electrón e comparten o par formado. O diagrama de Lewis para a molécula de flúor sería: $\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}$

b) Verdadeira.

Ao combinar orbitais (s) e (p) pódense formar tres tipos de orbitais híbridos:

2 orbitais (sp), formados pola hibridación de 1 orbital (s) e 1 orbital (p), que son dous orbitais.

3 orbitais (sp^2), formados pola hibridación de 1 orbital (s) e 2 orbitais (p), que son tres orbitais.

4 orbitais (sp^3), formados pola hibridación de 1 orbital (s) e 3 orbitais (p), que son catro orbitais.

Molécula de BeCl_2

A configuración electrónica do átomo de berilio no estado fundamental é $[\text{He}] (2s)^2$, pero para poder enlazarse ten que separar, («desaparear») os dous electróns, elevando un deles ao orbital (2p) á conta da enerxía dos enlaces que se van formar.

A configuración electrónica do átomo de berilio excitado é $[\text{He}] (2s)^1 (2p_x)^1$

Ao ter dous electróns desapareados, pode formar dous enlaces. Para iso, os dous orbitais (s) e (p_x) híbridanse, dando lugar a dous orbitais híbridos (sp) que se dispoñen linealmente en sentidos opostos.

Ao compartir cada unha dos electróns que ocupan estes orbitais híbridos, cun electrón desapareado dun átomo de cloro, fórmase a molécula de BeCl_2 que é lineal.

O diagrama de Lewis para a molécula de BeCl_2 é: $\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}\text{Be}\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}$

e a súa representación $\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$, cun ángulo de 180° entre os enlaces.

(A molécula de BeCl_2 é unha excepción á regra do octete xa que o átomo de berilio só ten dous pares de electróns no canto dos catro pares que esixe a regra do octete.

5. Xustifica, razoadamente, se é certa a seguinte afirmación:
- A molécula de acetileno (C_2H_2) presenta hibridación sp^2 .

(P.A.U. Set. 08)

Rta.: a) Falso. Cada átomo de carbono está unido a só dous átomos (un C e un H). Para formar dous orbitais híbridos só se combina o orbital s cun orbital p para dar lugar a dous híbridos sp . Os orbitais p que non se hibridan úsanse para formar os dous enlaces π do enlace triplo.

6. Xustifica a xeometría das moléculas de metano (tetraédrica con ángulo de enlace de $109,5^\circ$) e de amoníaco (piramidal con ángulo de enlace de $107,3^\circ$):
- Segundo a teoría de hibridación de orbitais
 - Segundo o modelo de RPECV (modelo de repulsión dos pares de electróns da capa de valencia)
- (P.A.U. Set. 09)

Solución:

a) A configuración electrónica do carbono en estado fundamental é: $(1s)^2 (2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$. Como esta configuración non explica a formación de catro enlaces con catro átomos de hidróxeno, pénsase que a promoción dun electrón (2s) ao orbital ($2p_z$) para dar unha configuración excitada: $(1s)^2 (2s)^1 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$ precisa dunha enerxía non excesivamente elevada que vai ser compensada pola formación de dúas enlaces máis, o que xustifica o proceso. Aínda así, se o átomo de carbono mantivese esa configuración excitada non se xustificarian os ángulos de enlace experimentais de $109,5^\circ$, (por tanto tres enlaces deberían formar ángulos de 90° , ao estar dirixidos nas direccións dos eixes X, Y e Z) o que levou ao desenvolvemento da teoría de hibridación. Nesta teoría, os orbitais s, p_x , p_y e p_z , solucións da ecuación de onda para determinadas condicións rexidas polos números cuánticos n , l e m , poden ser substituídos por certas combinacións lineais delas chamadas orbitais híbridos. A combinación dos orbitais s, p_x , p_y e p_z , dá catro orbitais híbridos chamados sp^3 , nos que a función de probabilidade é máxima nas direccións dos catro vértices dun tetraedro, direccións que forman entre si ángulos de $109,5^\circ$. A superposición de cada un destes orbitais híbridos sp^3 , contendo un electrón, cun orbital 1s, tamén cun electrón, de cada hidróxeno dá un enlace sigma, polo que os catro enlaces sigma están separados por ángulos de $109,5^\circ$.

O caso do nitróxeno do amoníaco é moi similar ao do carbono, só que a configuración excitada é $(1s)^2 (2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$. Formaríanse tamén catro orbitais híbridos sp^3 , tres deles semicupados que poderían formar enlace cos orbitais 1s dos tres hidróxenos e o cuarto cheo que daría un orbital non enlazante. O ángulo debería ser de $109,5^\circ$ e só certos complicadas refinacións da teoría poderían xustificar os ángulos de $107,3^\circ$.

b) A teoría de repulsión de pares de electróns da capa de valencia dá unha xustificación máis sinxela dos ángulos de enlace. Supón que os electróns de valencia, xunto cos dos átomos que forman enlace con el, rodean a un átomo formando parellas, nas que a repulsión entre os electróns de cada parella é pequena, debido a que teñen spin contrario, e só hai que ter en conta a repulsión electrostática clásica entre os pares enlazantes (excepto os π) e entre estes e os pares non enlazantes, de forma que se dispoñan o máis afastados posible. Unha repulsión de dous pares dá unha disposición lineal con ángulos de 180° , tres pares dan unha triangular con ángulos de 120° e catro pares diríxense cara aos vértices dun tetraedro con ángulos de $109,5^\circ$. O que permite explicar os ángulos de enlace do metano sen facer intervir a ecuación de onda e as matemáticas correspondentes. Tamén explica cualitativamente a redución do ángulo de enlace no amoníaco, posto que o par non enlazante do nitróxeno atópase máis preto del que os de enlace (posto que non hai ningún átomo alén do enlace que tire del) e repelerá con máis forza (usando a lei de Coulomb) aos outros tres pares enlazantes que se achegarán a ángulos algo menores que o de $109,5^\circ$, neste caso a $107,3^\circ$.

7. Aplicando a teoría da repulsión dos pares electrónicos da capa de valencia, indica razoadamente, a xeometría das moléculas seguintes:

- a) NF_3
b) BF_3

(P.A.U. Set. 12)

Solución:

A teoría de repulsión dos electróns de valencia di que os pares de enlace σ e os pares non enlazantes dispóñense arredor dun átomo de forma que a repulsión entre eles sexa mínima.

Molécula	BF_3	NF_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	$\begin{array}{c} \text{F} \quad \text{B} \quad \text{F} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{F} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{F} \quad \text{N} \quad \text{F} \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{F} \end{array}$
Pares σ	3	3
Pares π	0	0
Pares non enlazantes	0	1
Pares que se repelen	3	4
Disposición dos pares	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	120°	107°
Forma da molécula	triangular plana	piramidal achatada
	$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F}-\text{B}-\text{F} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{F} \quad \text{N} \quad \text{F} \\ \quad \diagdown \quad \diagup \\ \quad \text{F} \end{array}$

A forma da molécula determínase da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Na molécula de trifluoruro de nitróxeno, está o átomo de nitróxeno no centro do tetraedro e tres átomos de flúor en tres vértices, pero no cuarto está un par non enlazante que non «se ve».

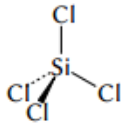
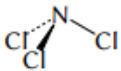
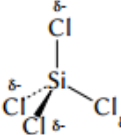
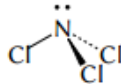
Na molécula de trifluoruro de boro, non existe ese par non enlazante e, por tanto, a molécula é triangular plana.

8. Considera as especies químicas CS_2 , SiCl_4 e NCl_3 e responde razoadamente as seguintes cuestións:
- Xeometría molecular de cada unha das especies químicas.
 - Explica se as moléculas CS_2 e NCl_3 teñen ou non momento dipolar.

(P.A.U. Set. 15)

Solución:

a)

Molécula	CS_2	SiCl_4	NCl_3
Átomo central	C	Si	N
Conf. electrón. fundamental	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$	$(3s)^2 (3p_x)^1 (3p_y)^1$	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$
Conf. electrón. excitada	$(2s)^1 (2p_x)^1 (2p)^1 (2p_z)^1$	$(3s)^1 (3p_x)^1 (3p)^1 (3p_z)^1$	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$
Diagrama de Lewis	$\text{:S:}\ddot{\text{C}}\text{:S:}$	$\begin{array}{c} \text{:Cl:} \\ \text{:Cl:Si:Cl:} \\ \text{:Cl:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:Cl:} \\ \text{:Cl:N:Cl:} \\ \text{:Cl:} \end{array}$
Pares σ	2	4	3
Pares π	2	0	0
Pares non enlazantes	0	0	1
Pares que se repelen	2	4	4
Disposición dos pares	lineal	tetraédrica	tetraédrica
Ángulo de enlace	180°	$109,5^\circ$	107°
Forma da molécula	lineal	tetraédrica	piramidal achatada
	$\text{S} = \text{C} = \text{S}$		
Momento dipolar de enlace	$\text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+}$	$\text{Cl}^{\delta-} \rightarrow \text{Si}^{\delta+}$	Non
Momento dipolar da molécula	$\text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$		
	Non	Non	Si

A forma da molécula determínase da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Na molécula de tricloruro de nitróxeno, está o átomo de nitróxeno no centro do tetraedro e tres átomos de cloro en tres vértices, pero no cuarto vértice está un par non enlazante que non «se ve».

b) A molécula de tetracloruro de silicio non é polar, aínda que os enlaces si o son, porque é simétrica e os momentos dipolares dos enlaces anúlanse.

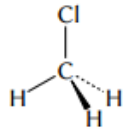
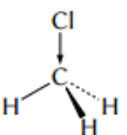
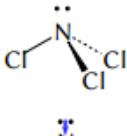
Só a molécula de NCl_3 é polar. As electronegatividades dos átomos de Cl e N son moi similares e os enlaces Cl-N teñen un momento dipolar nulo (ou moi pequeno). Pero o par non enlazante do nitróxeno non se compensa. Como está moi próximo ao átomo de nitróxeno, o momento dipolar será pequeno.

9. Dadas as moléculas CH_3Cl , CS_2 , NCl_3 , responde razoadamente ás seguintes cuestións:
- Escribe a estrutura de Lewis de cada unha delas e predí a súa xeometría molecular.
 - Explica se as moléculas son polares ou apolares.

(P.A.U. Set. 16)

Solución:

a)

Molécula	CH_3Cl	CS_2	NCl_3
Átomo central	C	C	N
Conf. electrón. fundamental	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1$	$(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$
Conf. electrón. 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	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\text{:S:}\ddot{\text{C}}\text{:}\ddot{\text{S}}\text{:}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:}\ddot{\text{N}}\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$
Pares σ	4	2	3
Pares π	0	2	0
Pares non enlazantes	0	0	1
Pares que se repelen	4	2	4
Disposición dos pares	tetraédrica	lineal	tetraédrica
Ángulo de enlace	$<109,5^\circ$	180°	107°
Forma da molécula	piramidal alongada	lineal	piramidal achatada
Momento dipolar de enlace	 $\text{Cl}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+}$	$\text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+}$	Non
Momento dipolar da molécula	 Si	$\text{S}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+} \leftarrow \text{S}^{\delta-}$ Non	 Si

A forma da molécula determínase da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Na molécula de tricloruro de nitróxeno, está o átomo de nitróxeno no centro do tetraedro e tres átomos de cloro en tres vértices, pero no cuarto vértice está un par non enlazante que non se «ve».

Na molécula de clorometano, o átomo de cloro é maior que os de hidróxeno (e que o de carbono). Quizais a descrición podería ser «lineal cun mini-trípode nun extremo»

b) A molécula de sulfuro de carbono non é polar, aínda que os enlaces si o son, porque é simétrica e os momentos dipolares dos enlaces anúlanse.

A molécula de NCl_3 é polar. As electronegatividades dos átomos de Cl e N son moi similares e os enlaces Cl-N teñen un momento dipolar nulo (ou moi pequeno). Pero o par non enlazante do nitróxeno non se compensa. Como está moi próximo ao átomo de nitróxeno, o momento dipolar será pequeno.

A molécula de CH_3Cl tamén é polar. As electronegatividades dos átomos de carbono e hidróxeno son moi similares e os enlaces C-H teñen un momento dipolar moi pequeno. Pero o cloro é moito máis electronegativo que o carbono e o enlace $\text{Cl}^{\delta-} \rightarrow \text{C}^{\delta+}$ é polar.

10. a) Xustifica a polaridade das seguintes moléculas: HCl, I₂ e CH₂Cl₂ e comenta a natureza das forzas intermoleculares presentes.
b) Indica, mediante un exemplo, unha propiedade característica que diferencie un composto iónico sólido dun composto molecular sólido.

(P.A.U. Xuño 04)

Rta.: a) HCl polar, Cl máis electronegativo que H. I₂ apolar: mesma electronegatividade. CH₂Cl₂, polar, forma case tetraédrica, pero asimétrica. HCl e CH₂Cl₂, forzas dipolo-dipolo. I₂, forzas de dispersión (Van der Waals).
b) os compostos iónicos son máis duros e de puntos de fusión máis altos.

11. Das seguintes moléculas: trifluoruro de boro e amoníaco.

a) Indica a xeometría molecular.

b) Polaridade de cada molécula.

Razoa as respostas.

(P.A.U. Set. 07)

Solución:

a) A teoría de repulsión dos pares electrónicos da capa de valencia di que os pares de enlace σ e os pares non enlazantes dispóñense arredor dun átomo de forma que a repulsión entre eles sexa mínima.

Molécula	BF ₃	NH ₃
Átomo central	B	N
Configuración electrónica fundamental	(2s) ² (2p) 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		
Pares σ	3	3
Pares π	0	0
Pares non enlazantes	0	1
Pares que se repelen	3	4
Disposición dos pares	triangular	tetraédrica
Ángulo de enlace	120°	107°
Forma da molécula	triangular	piramidal achatada
Momento dipolar de enlace	$F^{\delta-} \rightarrow B^{\delta+}$	$N^{\delta-} \rightarrow H^{\delta+}$
Momento dipolar da molécula		
	Non	Si

A forma da molécula determínase da posición dos átomos (sen ter en conta os pares non enlazantes). Na molécula de amoníaco, está o átomo de nitróxeno no centro do tetraedro e tres hidróxenos en tres vértices, pero no cuarto está un par non enlazante que non «se ve».

b) Como o flúor é moito máis electronegativo que o boro, o enlace $F^{\delta-} \rightarrow B^{\delta+}$ será polar, pero como a molécula de BF_3 é simétrica, os vectores momento dipolar (de igual valor) contrárréstanse e a molécula será non polar.

O nitróxeno é máis electronegativo que o hidróxeno e o enlace $N^{\delta-} \rightarrow H^{\delta+}$ é polar. Ademais o par non enlazante produce outro vector momento dipolar na mesma dirección e sentido que a resultante dos tres vectores momento dipolar $N \rightarrow H$, polo que a molécula é polar.

12. Pon un exemplo dunha molécula que conteña:

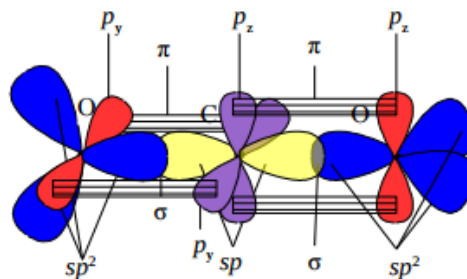
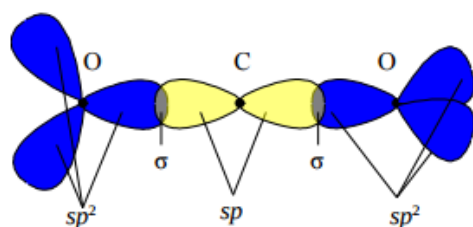
- Un carbono con hibridación sp .
- Un nitróxeno con hibridación sp^3 .

Razoa todas as respostas.

(P.A.U. Set. 12, Xuño 06)

Solución:

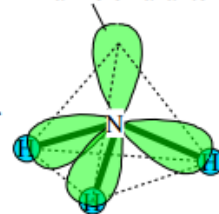
a) A hibridación sp corresponde a un átomo central unido a outros dous átomos. Como o carbono (excitado) pode ter 4 electróns desapareados, en configuración $[He] (2s)^1 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$, iso supón que, polo menos, un dos enlaces, debe ser múltiple. As combinacións posibles son un enlace tripla xunto a un sinxelo como no etino $H-C \equiv C-H$, ou dous enlaces dobres como na molécula de dióxido de carbono $O=C=O$



O átomo de carbono ten dous híbridos sp e dous orbitais atómicos p_y e p_z sen hibridar. Os híbridos sp están dirixidos nunha liña recta en sentidos opostos, dando ángulos de enlace de 180° . O solapamento entre os híbridos sp do carbono e os orbitais sp^2 dos átomos de osíxeno dá lugar a enlaces sigma σ . O orbital p_y sen hibridar do carbono solápanse co orbital p_y sen hibridar

dun dos osíxenos formando un enlace π . O solapamento do outro orbital sen hibridar do carbono p_z co orbital p_z sen hibridar do outro osíxeno forma o outro enlace π .

Par no enlazante



b) A hibridación sp^3 asígnase a un átomo central de nitróxeno cando está unido a outros catro átomos (ión amonio $[NH_4]^+$), ou a tres átomos (molécula de amoníaco NH_3). O átomo de nitróxeno ten unha configuración electrónica, $(2s)^2 (2p_x)^1 (2p_y)^1 (2p_z)^1$, e forma catro híbridos sp^3 , cun electrón desapareado en tres dos híbridos e un par de electróns no cuarto. Estes híbridos están dirixidos cara aos vértices dun tetraedro (no caso do ión amonio), dando ángulos de enlace de $109,5^\circ$ (aínda que no caso do amoníaco os ángulos son algo menores). En cada un dos tres enlaces $N-H$, superpóñense un orbital híbrido sp^3 do carbono co orbital $1s$ do hidróxeno dando lugar a un enlace σ . O par de electróns do cuarto híbrido sp^3 é un par non enlazante.

13. Explica, utilizando orbitais híbridos e razoando as respostas, o tipo de enlace e xeometría das seguintes moléculas:

- Etino ou acetileno
- Amoníaco
- Dióxido de xofre.

(P.A.U. Xuño 05)

ENLACE METÁLICO

1. Indica, de forma razoada, o tipo de enlace que presentan e dúas propiedades para cada unha das substancias seguintes:
 - a) Limaduras de magnesio.
 - b) Cloruro de sodio.

(P.A.U. Xuño 12)

Rta.: a) Metálico porque só hai magnesio que é un metal. Brillo metálico, alta condutividade da calor e da corrente eléctrica.
b) Iónico, pola gran diferenza de electronegatividade entre o cloro e o sodio. Dureza, solubilidade en auga e condutividade nula en estado sólido pero relativamente boa disolto en auga.

FORZAS INTERMOLECULARES

1. Xustifica a polaridade das seguintes moléculas: HCl, I₂ e CH₂Cl₂ e comente a natureza das forzas intermoleculares presentes.

(P.A.U. Xuño 04)

Rta.: a) HCl polar, Cl máis electronegativo que H. I₂ apolar: mesma electronegatividade.
CH₂Cl₂, polar, forma case tetraédrica, pero asimétrica.
HCl e CH₂Cl₂, forzas dipolo-dipolo. I₂, forzas de dispersión (Van der Waals)

2. Xustifica, razoadamente, se é certa a seguinte afirmación:
A auga ten un punto de ebulición anormalmente alto comparado co que presentan os hidruros dos outros elementos do seu grupo, por exemplo o sulfuro de hidróxeno.

(P.A.U. Xuño 16, Set. 08)

Rta.: b) As moléculas de auga están unidas por pontes de hidróxeno que son forzas de maior intensidade que as de dipolo-dipolo (que tamén están presentes na auga) e que as de Van der Waals, xa que a auga contén átomos de hidróxenos unidos a un elemento electronegativo do segundo período (o osíxeno) e a molécula de auga é polar.