

Cuestiones generales

- 1.- Explica poniendo algún ejemplo en qué consiste el modelo del orbital molecular.
- 2.- Hibridación. Tipos. Ejemplos.
- 3.- Tomando como referencia los compuestos: NH_3 , CH_3Cl , y BeF_2 **a)** ¿qué hibridación presenta el átomo central; **b)** señala si alguna de las moléculas será polar (razona las respuestas).

Ciclo de Born-Haber

- 4.- Indica el ciclo de Born y Haber para el cálculo de la energía reticular de la fluorita (fluoruro de calcio).
- 5.- **a)** Diseña un ciclo de Born-Haber para el cloruro de magnesio; **b)** Define al menos cuatro de los siguientes conceptos: energía de ionización, energía de disociación, afinidad electrónica, energía reticular, calor de formación y calor de sublimación.
- 6.- Sabiendo que el potasio es sólido y el Br_2 es líquido en condiciones estándar, calcula la energía reticular del bromuro de potasio. **Datos:** $\Delta H_f(\text{KBr}) = -391,8 \text{ kJ/mol}$, $\Delta H_{\text{sublim.}}(\text{K}) = 81,26 \text{ kJ/mol}$, $\Delta H_{\text{vaporización}}(\text{Br}_2) = 30,7 \text{ kJ/mol}$, $\Delta H_{\text{dis.}}(\text{Br}_2) = 193,5 \text{ kJ/mol}$, $E_{\text{ioniz.}}(\text{K}) = 418,4 \text{ kJ/mol}$, $E_A(\text{Br}) = -321,9 \text{ kJ/mol}$.
- 7.- Calcular la energía reticular del fluoruro de litio conociendo los siguientes datos: calor de formación del fluoruro de litio = $-594,1 \text{ kJ/mol}$; calor de sublimación del litio = $155,2 \text{ kJ/mol}$; calor de disociación del flúor $150,6 \text{ kJ/mol}$; energía de ionización del litio = 520 kJ/mol ; afinidad electrónica del flúor -333 kJ/mol . Escribe todas las reacciones del ciclo de Born y Haber.

Enlace covalente y geometría.

- 8.- Contesta razonadamente: a) los enlaces flúor-boro y nitrógeno-hidrogeno, ¿son polares o no polares? b) Las moléculas BF_3 y NH_3 ¿son polares o no polares?
- 9.- Explica la geometría de la butinona ($\text{CH}_3\text{-CO-C}\equiv\text{CH}$) basándote bien en modelo de repulsión de pares de electrones o bien en la Teoría de la hibridación.
- 10.- Indica las razones que justifican la estabilidad del enlace covalente A-H (A = elemento de un grupo principal) en una molécula AH_n y la formación de enlaces múltiples en moléculas A_2 .
- 11.- Indica basándote en modelo de repulsión de pares de electrones o en la teoría de la hibridación la geometría del butadieno ($\text{CH}_2=\text{CH-CH}=\text{CH}_2$).
- 12.- Indica basándote en modelo de repulsión de pares de electrones o en la teoría de la hibridación la geometría del 2-metil-propeno-nitrilo ($\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{-C}\equiv\text{N}$).
- 13.- Para las moléculas CH_4 , C_2H_4 y C_2H_2 , justificar: **a)** su geometría **b)** Los enlaces sigma y pi que se presentan en estas moléculas, indicando qué átomos y qué orbitales de cada uno de ellos son los que intervienen.
- 14.- Justifica la geometría de las moléculas covalentes: BeF_2 , BCl_3 , CCl_4 , H_2O , NH_3 , a partir del modelo de repulsión de pares electrónicos.
- 15.- Dibuja indicando ángulos y justifica la geometría de las moléculas covalentes: eteno, propino, propanona, H_2S , BH_3 , a partir del modelo de repulsión de pares electrónicos.

Tipos de enlace y propiedades de las sustancias.

- 16.- Los puntos de ebullición del $\text{CH}_3\text{—CH}_3$, $\text{CH}_3\text{—O—CH}_3$, y $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—OH}$ son, respectivamente, -88°C , -25°C y 78°C . Explica razonadamente estas diferencias.
- 17.- Indica qué tipo de enlace o fuerza intermolecular presentarán las sustancias que tienen las siguientes propiedades: **a)** no conducen la corriente eléctrica en estado sólido, pero sí la conducen fundidos o disueltos en agua **b)** No son solubles en agua, tienen gran dureza y alto punto de fusión.
- 18.- Dados los elementos A, B y C de números atómicos 19, 17 y 12, respectivamente, indica razonando las respuestas: **a)** Estructura electrónica de sus respectivos estados fundamentales y el grupo de la tabla periódica al que pertenece cada uno de ellos; **b)** Tipo de enlace formado cuando se unen A y B y cuando se unen entre sí átomos de C.
- 19.- El elemento de n° atómico 20 se combina con facilidad con el elemento de n° atómico 17. **a)** Indica el nombre, la configuración electrónica de los dos elementos en su estado fundamental y el grupo de la tabla periódica al que pertenece cada uno de ellos; **b)** Explica el tipo de enlace y las propiedades del compuesto que forman.
- 20.- Considerándolas sustancias Br_2 , SiO_2 , Fe, HF y NaBr, justifique en función de sus enlaces: **a)** si son o no solubles; **b)** Si conducen la corriente eléctrica a temperatura ambiente.
- 21.- Dados los siguientes elementos: flúor, helio, sodio, calcio y oxígeno. **a)** Justifique en función de los posibles enlaces entre átomos, cuales forman moléculas homonucleares y cuáles no, así como su estado de agregación en condiciones normales de presión y temperatura; **b)** Formule cuatro de los compuestos que puedan formar entre sí, indicando la naturaleza del enlace formado.
- 22.- Explica los siguientes hechos: **a)** El agua es líquida a temperatura ambiente mientras que el sulfuro de hidrógeno es gas; **b)** El bromuro sódico se disuelve en agua fácilmente, mientras que el bromo es prácticamente insoluble.
- 23.- Dados tres elementos del sistema periódico A, B y C de números atómicos 8, 16 y 19 respectivamente: a) Escribe su configuración electrónica; b) Indica el elemento cuyo primer potencial de ionización sea mayor; c) Indica tipo de enlace y dos propiedades características de los compuestos formados por los elementos A y B. Razónalo.

SOLUCIONES (ENLACE QUÍMICO)

1.-

Los orbitales atómicos que van a formar un enlace se combinan linealmente para formar un orbital molecular enlazante, de menor energía que los orbitales atómicos y un orbital antienlazante de mayor energía que los orbitales atómicos. Al formarse la molécula de flúor, cada átomo tiene una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^5$. Los orbitales “s” y dos de los orbitales “p” tienen dos electrones y por tanto al enlazarse se colocan $2 e^-$ en cada orbital enlazante y $2 e^-$ en cada orbital antienlazante, con lo que no se produce una variación energética. Sin embargo, los electrones desapareados del tercer orbital “p” de cada átomo van a parar al orbital enlazante con los que se produce un descenso energético, quedando en este caso el orbital antienlazante vacío.

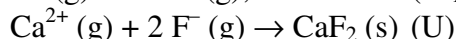
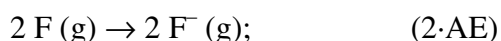
3.-

- a) En el NH_3 el N forma 3 enlaces “ σ ” con los tres átomos de hidrógeno y tiene $2 e^-$ en un orbital. La hibridación es pues sp^3 . En el CH_3Cl el C forma 4 enlaces “ σ ” con los tres átomos de hidrógeno y con el de Cl. La hibridación es pues sp^3 . En el BeF_2 el Be forma 2 enlaces “ σ ” con los dos átomos de flúor y ya no tiene más e^- en la última capa, por lo que la hibridación es sp .
- b) Los tres enlaces N–H del NH_3 son polares y al estar dirigidos hacia los vértices de un tetraedro el momento dipolar no se anula y la molécula es polar. Los cuatro enlaces “ σ ” del CH_3Cl son polares pero al ser uno de ellos distinto el momento dipolar no se anula y la molécula también es polar. Sin embargo, los dos enlaces Be–F del BeF_2 son polares pero al estar dirigidos en sentidos opuestos, los momentos dipolares se anularán y la molécula será apolar.

4.-

Reacción global: $\text{Ca (s)} + \text{F}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{CaF}_2 \text{ (s)}$; (ΔH_f)

que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:

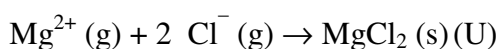
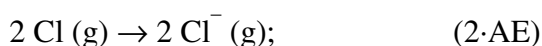
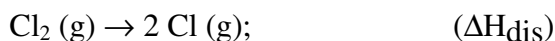


Con lo que: $U = \Delta H_f - \Delta H_{\text{subl}}(\text{Ca}) - \Delta H_{\text{dis}}(\text{F}_2) - 2 \cdot \text{AE}(\text{F}) - (\text{EI}_1 + \text{EI}_2)(\text{Ca})$

5.-

a) Reacción global: $\text{Mg (s)} + \text{Cl}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{MgCl}_2 \text{ (s)}$; (ΔH_f)

que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:



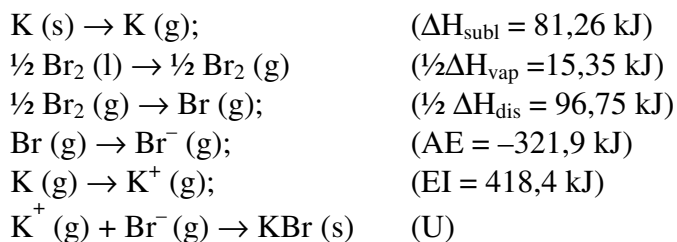
Con lo que:

$$U = \Delta H_f - \Delta H_{\text{subl}}(\text{Mg}) - \Delta H_{\text{dis}}(\text{Cl}_2) - 2 \cdot \text{AE}(\text{Cl}) - (\text{EI}_1 + \text{EI}_2)(\text{Mg})$$

b) Ver Teoría.

6.-

Reacción global: $\text{K (s)} + \frac{1}{2} \text{Br}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{KBr (s)}$; ($\Delta H_f = -391,8 \text{ kJ}$) que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:

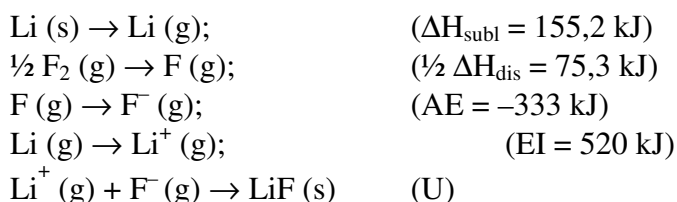


$$U = \Delta H_f - \Delta H_{\text{subl}}(\text{K}) - \frac{1}{2} \Delta H_{\text{vap}}(\text{Br}_2) - \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}}(\text{Br}_2) - \text{AE}(\text{Br}) - \text{EI}(\text{K}) = (-391,8 - 81,26 - 15,35 - 96,75 + 321,9 - 418,4) \text{ kJ};$$

$$U = -681,9 \text{ kJ}$$

7.-

Reacción global: $\text{Li (s)} + \frac{1}{2} \text{F}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{LiF (s)}$; ($\Delta H_f = -594,1 \text{ kJ}$) que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:



$$U = \Delta H_f - \Delta H_{\text{subl}}(\text{Li}) - \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}}(\text{F}_2) - \text{AE}(\text{F}) - \text{EI}(\text{Li}) = (-594,1 - 155,2 - 75,3 + 333 - 520) \text{ kJ} = -1012 \text{ kJ}$$

8.-

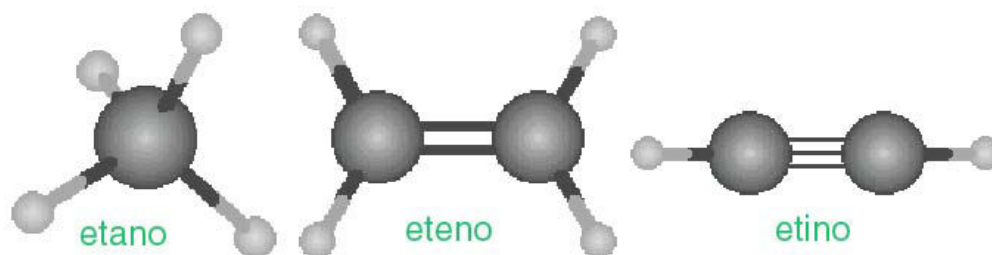
- a) Los enlaces son polares en ambos casos, debido a la diferencia de electronegatividad entre el B y el F en el primer caso y entre el N y el H en el segundo.
- b) El átomo de B en el BF_3 forma tres enlaces sencillos con tres átomos de F lo que da una geometría triangular plana según el modelo de repulsión de pares electrónicos (o hibridación sp^2 según la teoría de la hibridación). Sin embargo, el N en el NH_3 forma también tres enlaces sencillos con los átomos de H pero le queda un par de e^- en la última capa; al haber 4 pares electrónicos, éstos debe estar situados hacia los vértices de un tetraedro (hibridación sp^3) lo que da una geometría piramidal, ya que uno de los vértices de dicho tetraedro no se sitúa ningún átomo sino un par de e^- .

9.-

El carbono 1 está unido a cuatro átomos (3 de H y 1 de C) por lo que dichos enlaces estarán dirigidos hacia los vértices de un tetraedro (hibridación sp^3). El carbono 2 sólo está unido a tres átomos (al C-1 y al C-3 y con un doble enlace al O) lo que nos proporciona una geometría triangular plana (hibridación sp^2). El carbono 3 sólo está unido a dos átomos (al C-2 y al C-4 con un triple enlace) lo que nos proporciona una geometría lineal (hibridación sp). El carbono 4 también está unido sólo a dos átomos (al C-3 con un triple enlace y al H) lo que nos proporciona igualmente una geometría lineal (hibridación sp).



Con todo ello, podemos ver que todos los átomos están en un mismo plano a excepción de los 3 átomos de H del C-1.

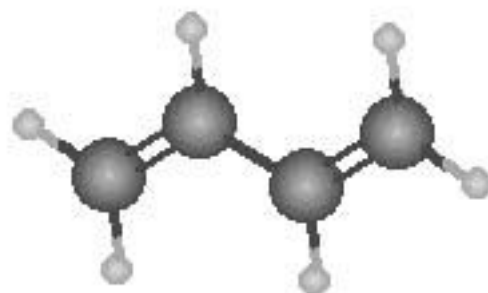


10.-

El átomo A forma tantos enlaces covalentes con átomos de H como e^- le faltan para completar su capa de valencia con lo que tanto el H como A adquieren la configuración electrónica de gas noble. En el caso de que A no sea halógeno sino N u O se producen enlaces doble o triples pues cada átomo comparte tantos e^- y por tanto forma tantos enlaces como e^- le faltan para completar su capa de valencia. Estos enlaces múltiples son especialmente fuertes si bien sólo se dan en elementos del segundo periodo.

11.-

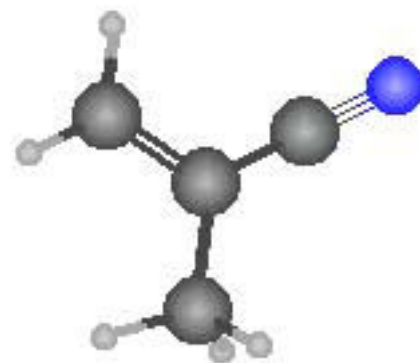
Los cuatro átomos de carbono están unidos a tres átomos cada uno por lo que tendrán una geometría triangular plana (hibridación sp^2). El C-1 está unido a 2 H y al C-2 con un doble enlace; el C-2 al C-1 con doble enlace y a 1 H y al C-3 con enlaces sencillos; el C-3 y a 1 H con enlaces sencillos y al C-4 con doble enlace; el C-4 está unido a 2 H y al C-3 con un doble enlace.



Con todo ello, podemos ver que todos los átomos están en un mismo plano, pues aunque el enlace entre C-2 y C-3 podría en principio girar, no lo hace por tener participación de doble enlace.

12.-

El carbono 1 está unido al N por triple enlace y al C-2 por lo que nos proporciona una geometría lineal (hibridación sp). El carbono 2 sólo está unido a tres átomos (al C-1 y al C-3 y con un doble enlace al C del grupo metilo) lo que nos proporciona una geometría triangular plana (hibridación sp^2). El carbono 3 está unido igualmente a tres átomos (al C-2 con doble enlace y a 2 H con enlace sencillo) lo que proporciona también una geometría triangular plana (hibridación sp^2).



Con todo ello, podemos ver que todos los átomos están en un mismo plano a excepción de los 3 átomos de H del grupo metilo.

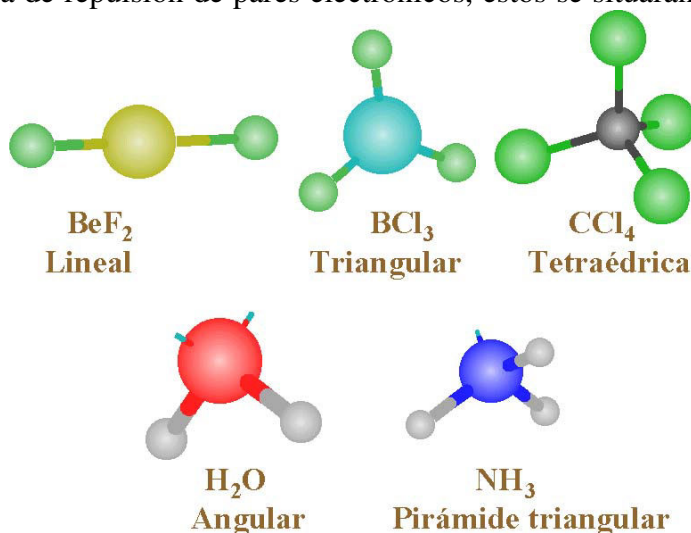
13.-

- a) El CH_4 es una molécula tetraédrica con el C situado en el centro y los H en los vértices del tetraedro. Ello es debido a que el C forma 4 pares electrónicos con cuatro átomos distintos y según la teoría de repulsión de pares electrónicos ésta es la manera en que se sitúan 4 pares de e^- lo más alejados posibles. En el C_2H_4 los átomos de C se unen a dos H y al otro C por lo que la geometría será triangular plana. En el caso del C_2H_2 cada carbono forma un enlace sencillo con el H y otro triple con el otro carbono por lo que la geometría será lineal.
- b) En el etano los cuatro enlaces son " σ " formados por el orbital "s" de cada H y cada uno de los cuatro orbitales sp^3 del C. En el eteno, los cuatro enlaces C-H son " σ " formados por orbitales "s" de cada H y por dos de los tres orbitales sp^2 de cada átomo de carbono. El tercer orbital sp^2 forma un enlace también " σ " con el otro C. Queda en cada carbono un orbital "p" sin hibridar que es el

que va a formar el enlace “ π ” entre los dos carbonos. En el etino, los dos orbitales sp de cada C se unen a un H y al otro C, y quedan dos orbitales “p” en cada carbono sin hibridar que van a dar lugar a sendos orbitales moleculares “ π ”, que junto al “ σ ” anteriormente indicado forman el triple enlace.

14.-

En el BeF_2 el átomo de Be forma únicamente dos pares electrónicos de enlace con átomos de F, por lo que según la teoría de repulsión de pares electrónicos, éstos se situarán lo más alejados posible entres



sí, es decir, formando un ángulo de 180° , con lo que la geometría de la molécula será lineal.

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

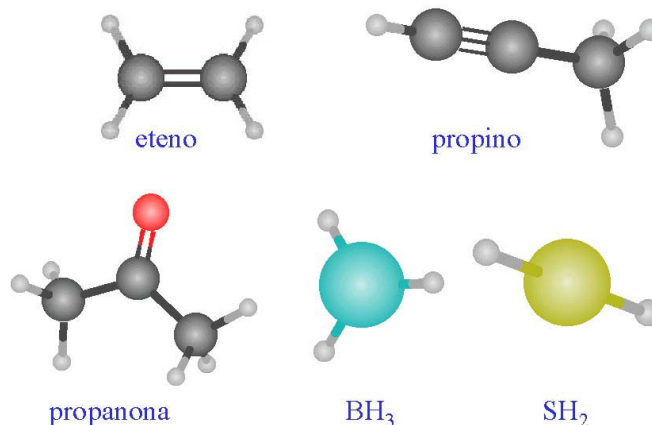
En la de CCl_4 el C forma cuatro pares electrónicos con otros tantos átomos de Cl; la manera más alejada posible de situar dichas nubes electrónicas es hacia los vértices de un tetraedro, que es don se situarán los átomos de Cl, mientras que el de C se situará en el centro del mismo.

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

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

15.-

En el C_2H_4 los átomos de C se unen a dos H y al otro C por lo que la geometría será triangular plana.



En el propino el C-1 se une a un H y al C-2 con un triple enlace; igualmente, el C-2 se une al C-1 con triple enlace y al C-3 con enlace sencillo; como ambos átomos únicamente poseen dos nubes electrónicas su geometría será lineal; en cambio el C-3 se une a 3 H y al C-2 y su geometría será tetraédrica.

En la propanona el C-1 y el C-3 se unen a tres H y al C-2 por lo que tienen geometría tetraédrica mientras que el C-2 se une además de los otros dos carbonos a un átomo de O con doble enlace por lo que la geometría será triangular.

En el H₂S el S forma dos pares electrónicos de enlace con sendos átomos de H y posee además otros dos pares electrónicos sin compartir. La geometría será por tanto angular al situar los átomos de H en dos vértices de un tetraedro y los pares electrónicos sin compartir en los otros dos; sin embargo, al ser la repulsión de los pares de e⁻ sin compartir mayor que la de los pares de e⁻ de enlace, el ángulo H-S-H será algo inferior a los 109,4 tetraédrico.

En el BH₃ en B forma tres pares electrónicos de enlace que se situarán con un ángulo de 120° con lo que la molécula será triangular plana con el átomo de B en el centro y los de H en los vértices.

16.-

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

En el caso del éter metílico, los enlaces C-O producen momentos dipolares, y al estar dirigidos hacia los vértices de un tetraedro la molécula es polar lo que produce una fuerza intermolecular dipolo-dipolo más fuerte, lo que explica su mayor punto de ebullición.

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

17.-

- a) Enlace iónico, pues al conducir la corriente se debe a la existencia de cargas con libertad de movimiento (iones en este caso); por eso en estado sólido en donde existe una estructura cristalina, las cargas no se pueden mover y el sólido no conduce la electricidad.
- b) Sólidos covalentes, ya que si fueran iónicos se disolverían en agua. El enlace covalente a través de toda una estructura tridimensional es más fuerte que ninguna otra fuerza intermolecular lo que explica que dichos compuestos sean tan duros y tengan tan altos puntos de fusión y ebullición.

18.-

- a) A (Z=19) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^1$. Grupo 1 (alcalinos) K.
B (Z=17) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$. Grupo 17 (halógenos) Cl.
C (Z=12) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2$. Grupo 2 (alcalino-térreos) Mg.
- b) A y B forman enlace iónico pues A cede un e⁻ a B y ambos completan su última capa. La estequiometría de dicho compuesto será: AB.

Al ser C un metal, al unirse entre sí se formará un enlace metálico en donde los cationes C²⁺ formarán una estructura cristalina.

19.-

- a) A ($Z=20$) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^2$. Grupo 2 (alcalino-térreos) Ca.
 B ($Z=17$) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$. Grupo 17 (halógenos) Cl.
- b) Forman enlace iónico pues A cede $2 e^-$ a sendos átomos de B de manera que todos los átomos completan su última capa. La estequiometría de dicho compuesto será: $CaCl_2$.

En cuanto a las propiedades de dicho compuesto serán: alta dureza y puntos de fusión y ebullición elevados, alta solubilidad en disolventes polares como el agua, mucha fragilidad, y conducción de la electricidad en estado disuelto o fundido ya que no en estado sólido al estar los iones atrapados en una estructura cristalina.

20.-

- a) El Br_2 será soluble en disolventes apolares, el SiO_2 será insoluble en todo tipo de disolventes, el Fe será soluble sólo en otros metales como el mercurio, mientras que el HF y el NaBr serán solubles en disolventes polares como el agua.
- b) A temperatura ambiente solo el Fe conducirá la corriente eléctrica debido al enlace metálico. El bromo es totalmente apolar y por tanto incapaz de conducir la corriente en cualquier estado, la sílice es un sólido molecular y tampoco podrá transportar la corriente al estar sus electrones formando enlaces covalentes. El HF podrá conducir la electricidad en estado disuelto o fundido pero no en estado gaseoso. El bromuro de sodio a temperatura ambiente como todos los compuestos iónicos se encuentran en estado sólido y por tanto no puede conducir a electricidad.

21.-

- a) El flúor y el oxígeno formarán moléculas biatómicas con enlace covalente sencillo y doble respectivamente. El He formará moléculas monoatómicas ya que al ser gas noble no precisa unirse a ningún otro átomo para tener la capa de valencia completa. El sodio y el calcio se unen formando enlace metálico que no forma moléculas propiamente dichas y son sólidos a temperatura ambiente.
- b) NaF: iónico; OF_2 : covalente; CaO: iónico; Na_2O : iónico.

22.-

El agua es líquida porque el enlace intermolecular es el enlace de hidrógeno que sólo se forma cuando uno de los elementos es muy electronegativo lo que sí sucede en el O pero no en el S. El SH_2 es gas pues la fuerza intermolecular es la atracción dipolo-dipolo mucha más débil que el enlace de hidrógeno.

- c) El bromuro de sodio es un compuesto iónico formado por cationes y aniones fácilmente atacable por un disolvente polar como es el agua, mientras que el bromo es un compuesto covalente molecular totalmente apolar y por tanto insoluble en disolventes polares como el agua.

23.-

- a) A ($Z=8$) $1s^2 2s^2 p^4$. Grupo 16 (anfígenos) O.
 B ($Z=16$) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^4$. Grupo 16 (anfígenos) S.
 C ($Z=19$) $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 4s^1$. Grupo 1 (alcalinos) K.
- b) El A (O).
- c) A y B forman enlace covalente pues cada uno comparte dos pares de e^- con el otro. La estequiometría de dicho compuesto será: AB (SO), si bien sabemos que existen el SO_2 y el SO_3 al formarse enlaces covalentes coordinados con los otros pares de e^- del S.
 El SO tienen bajo punto de fusión y ebullición debido a que se trata de moléculas poco polares y las fuerzas intermoleculares son muy débiles. Igualmente, es una sustancia poco conductora de la electricidad.