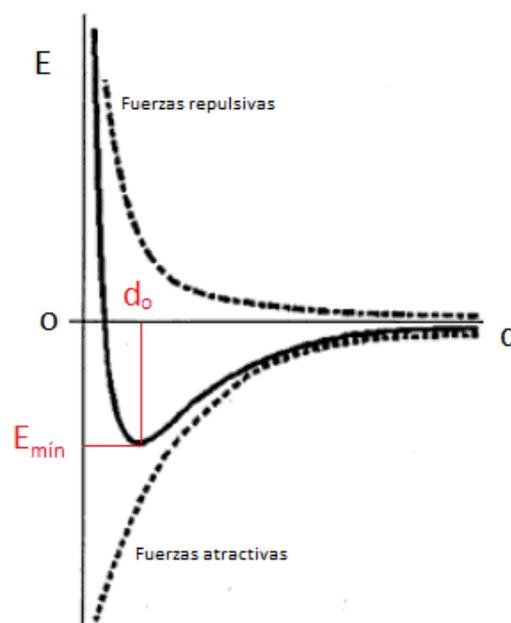


1	¿Por qué se unen los átomos?.....	2
1.1	Regla del octeto.....	2
1.2	Tipos de enlaces	3
2	Enlace iónico.....	3
2.1	Formación del enlace iónico.....	3
2.2	Redes iónicas:	4
2.2.1	Principales tipos de estructura cristalina	5
2.3	Energía reticular	6
2.4	Ciclo de Born-Haber:.....	7
2.5	Propiedades de los compuestos iónicos.....	9
3	Enlace covalente.....	10
3.1	Teoría de Lewis.....	10
3.2	Parámetros del enlace covalente:	12
3.2.1	Energía de enlace.....	12
3.2.2	Longitud de enlace	12
3.2.3	Angulo de enlace	13
3.2.4	Polaridad en moléculas covalentes. Momento dipolar.....	13
3.3	Polaridad de las moléculas:	13
3.4	Modelo de repulsión de pares electrónicos de las capas de valencia (RPECV).....	15
3.5	Teoría del enlace de valencia (T.E.V.).....	16
3.5.1	Enlace covalente simple.	17
3.5.2	Enlace covalente múltiple.....	17
3.5.3	Hibridación de orbitales atómicos.....	18
3.6	Tipos de hibridación	19
3.7	Resonancia.....	21
3.8	Propiedades de los compuestos covalentes.....	24
3.8.1	Sólidos covalentes:	24
3.8.2	Sustancias moleculares:.....	24
4	Fuerzas intermoleculares.	25
4.1	Enlace o puente de Hidrógeno.	25
4.2	Fuerzas de Van der Waals.	26
5	Enlace metálico.....	27
5.1	Modelo del mar de electrones:	27
5.2	Modelo de bandas:.....	27
5.3	Propiedades de los compuestos metálicos.	28
	EJERCICIOS DE LA PAU CYL 2007-14.....	29

1 ¿Por qué se unen los átomos?

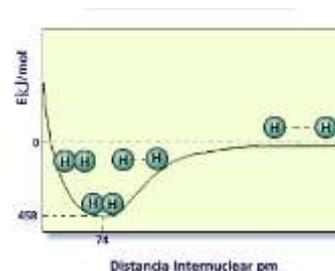
Los átomos se unen formando sustancias compuestas a fin de rebajar su energía interna y, por tanto, aumentar su estabilidad. Una forma adecuada para visualizar la formación y las características energéticas de los enlaces químicos son las llamadas **curvas de Morse**, que pueden obtenerse de forma experimental y que muestran la variación de energía que experimenta un sistema formado por dos átomos en función de la distancia que los separa y de las fuerzas de interacción que surgen entre ellos.

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



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

Cuanto más profundo es el mínimo en la gráfica, mayor es la energía desprendida al formarse el enlace y, por tanto, mayor es la estabilidad de la molécula formada. **La energía de disociación** es la necesaria para romper un enlace formado. Si comunicamos a los átomos enlazados una energía igual o mayor que la E_{entace} conseguiremos separarlos totalmente hasta una distancia tal que no ejerzan interacciones entre sí; diremos entonces que se ha roto el enlace químico. En la imagen lateral puede apreciarse tanto la energía de enlace (en kJ/mol) como la distancia de enlace (en picómetros, $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$) del H_2 .



1.1 Regla del octeto

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

Ambos autores suponen que los átomos tienen una capa electrónica externa que puede contener hasta ocho electrones (hoy decimos configuración $ns^2 np^6$); este **octeto de electrones representa una disposición electrónica especialmente estable, ya que corresponde a la estructura de gas noble**: es lo que se denomina regla del octeto.

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

Se trata de una regla útil para interpretar algunos enlaces, pero que en muchos casos no se cumple. Se cumple, y no siempre, en los átomos incluidos en los tres primeros periodos.

Las limitaciones de la regla del octeto son evidentes:

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

1.2 Tipos de enlaces

- **Iónico (entre iones. Cesión de electrones).**
- **Covalente (entre átomos. Compartición de electrones).**
- **Fuerzas Intermoleculares:**
 - **Fuerzas de Van de Waals**
 - **Enlaces de hidrógeno.**
- **Metálico (entre cationes metálicos unidos por e^-).**

2 Enlace iónico

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

La existencia de una gran cantidad de estos iones hace que se produzca una posterior estructuración sólida en forma de red cristalina de cationes y aniones, al producirse una atracción de tipo coulombiana entre ellos. Las reacciones de pérdida o ganancia de e^- se llaman **reacciones de ionización**.

2.1 Formación del enlace iónico

Este agrupamiento de iones, formando la denominada red cristalina, en lugar de moléculas aisladas, es el que justifica energéticamente la formación de este enlace. Si sólo se formará una molécula de compuesto iónico, podemos comprobar que energéticamente el sistema no se estabiliza, sino todo lo contrario. Veamos el caso de formación del cloruro de sodio:



Vemos que si el proceso fuera solo este, el sistema aumentaría su energía (había que aportársela para formar el enlace), lo cual nos lleva a que este tipo de enlace es en realidad energéticamente favorable por la formación de la **red cristalina**.

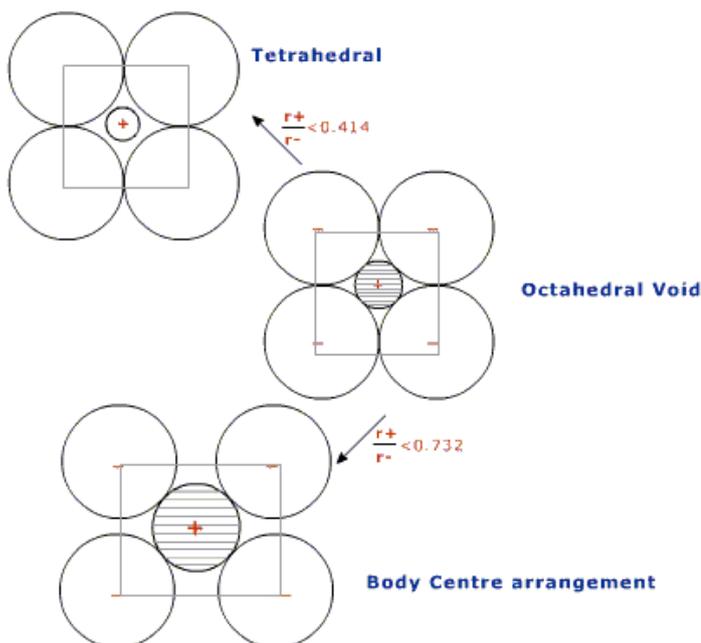
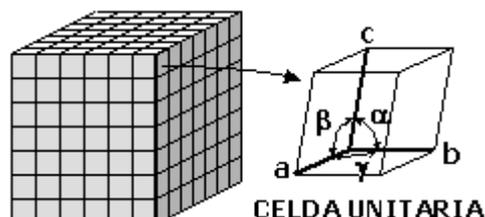
Por ese motivo, los compuestos iónicos mantienen un determinado número de átomos en forma de red. Si contabilizamos la energía de la etapa de **formación del cristal** por atracción electrostática entre los iones, observamos que se libera la llamada **energía de red**, que posteriormente estudiaremos, y que en nuestro ejemplo es de -765,0 kJ/mol. Así, queda:



Vemos que **ambas etapas conducen a un balance energético negativo** para todo el proceso. De este modo, el sistema se estabiliza, pues su energía disminuye de forma apreciable, lo que posibilita este tipo de unión interatómica.

2.2 Redes iónicas:

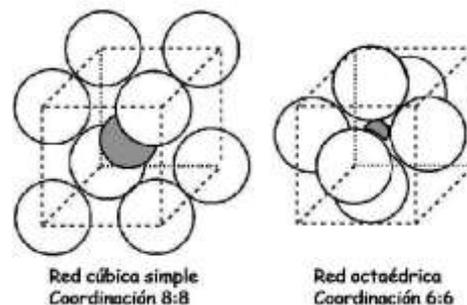
En los compuestos **iónicos**, cada ion se rodea del **mayor número posible** de aniones y viceversa, formando una estructura gigante electricamente neutra denominada **red** o **cristal iónico**.



Están formadas por iones. Cationes rodeados de aniones en todas direcciones y aniones rodeados de cationes. Los sólidos cristalinos mantienen sus iones casi en contacto mutuo, lo que explica que sean prácticamente incompresibles. Estos iones no pueden moverse libremente, pues se hallan dispuestos en posiciones fijas distribuidas ordenadamente en el espacio formando **retículos cristalinos** o redes espaciales.

El número de iones que rodea a otro ion de signo contrario depende del tamaño del catión y del anión, mas concretamente de la relación entre sus radios. El siguiente dibujo bidimensional intenta reflejar 3 posibles situaciones extremas.

El número de iones de un signo que rodean al de otro signo se llama **ÍNDICE DE COORDINACIÓN (I.C.)**. Podrán existir, según los casos, índices diferentes para el catión y el anión, pero siempre en la relación inversa a la que presentan esos átomos o iones en la fórmula de la sustancia. Es decir, en un compuesto de tipo AB_2 , si el I.C. del A, el número de iones que le rodea, es 6, por ejemplo, el de B debe ser $I.C.=3$, ya que hay doble número de iones de B que de A.



El valor de los índices de coordinación depende del tamaño relativo de los iones y de la carga de los mismos (el compuesto debe ser neutro).

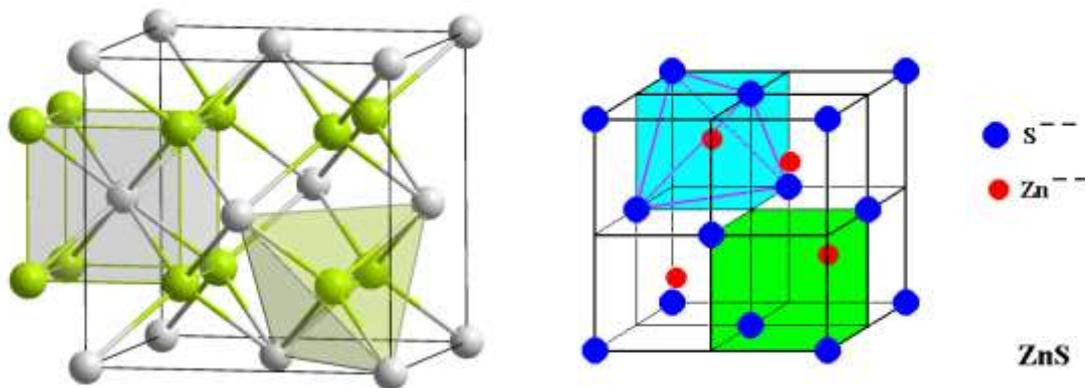
- **El tamaño de los iones:** el valor del radio de los iones marcará las distancias de equilibrio a las que estos se situarán entre sí por simple cuestión del espacio que ocupan en la red.
- **La estequiometría:** que viene dada por la carga de los iones de forma que el cristal sea neutro.

Se denomina **celda unidad o unitaria** a la mínima proporción de átomos que, llevada en las tres direcciones del espacio, nos permite generar la red completa. En función de los parámetros de red, es decir, de las longitudes de los lados o ejes del paralelepípedo elemental y de los ángulos que forman, se distinguen 7 sistemas cristalinos (se pueden consultar en la wikipedia: http://es.wikipedia.org/wiki/Sistema_cristalino) y en función de las posibles localizaciones de los átomos en la celda unitaria se establecen 14 estructuras cristalinas básicas, las denominadas redes de Bravais (http://es.wikipedia.org/wiki/Redes_de_Bravais)

2.2.1 Principales tipos de estructura cristalina

- **Red cúbica centrada en el cuerpo.** Cada ión se rodea de ocho iones de signo contrario. El índice de coordinación, tanto del catión como del anión, es 8, de ahí que se indique como 8:8. El mejor ejemplo es el **CsCl**. Su relación de cargas es también 1:1 y su índice de coordinación es 8, puesto que estos iones son de tamaño más parecido y, por tanto, cada uno permite que le rodeen ocho iones de signo opuesto; por ello, se formará una **red cúbica centrada en el cuerpo** cuya fórmula proporcional sería Cs_8Cl_8 y que formularemos como CsCl.
- **Red cúbica centrada en las caras.** Cada ión se rodea de seis iones de signo contrario. El I.C. es, para los 2 iones, 6, lo que se indica como 6:6. El ejemplo mejor es el del **NaCl**. La relación de cargas anión-catión es 1:1. El ion Cl^- , al ser más grande, podría rodearse de 12 iones Na^+ , pero como alrededor de cada ion Na^+ solo caben 6 iones Cl^- (porque el Na^+ es muy pequeño y los Cl^- se "tocan" y no caben más de esos 6). Este valor mínimo será el que limite el número de iones de un signo que rodearán a cada uno de los iones del otro (por la electroneutralidad del compuesto). Por tanto, el I.C. de ambos es 6. Así, se formará una estructura de **red cúbica centrada en las caras** cuya fórmula podría ser Na_6Cl_6 y que, por simplicidad, se escribe NaCl.
- **Red tetraédrica.** Cada ion se rodea de 4 de signo contrario, 4:4. Ambos I.C. son 4. El mejor ejemplo es la red de la Blenda, ZnS.

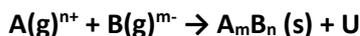
- **Red de la fluorita, CaF₂** (cúbica centrada en las caras para el Ca²⁺ y tetraédrica para el F⁻). El índice de coordinación para el F⁻ = 4 y para el Ca²⁺ = 8. Sería una red 8:4.



2.3 Energía reticular

Como veíamos antes, la formación de los iones es un proceso endotérmico y, por tanto, desfavorable. Lo que convierte todo el proceso en favorable es la formación de una gran red cristalina, que se cuantifica en la denominada **ENERGÍA RETICULAR U**. Se puede definir la **energía reticular U** como la **energía desprendida en la formación de un mol de compuesto iónico sólido a partir de sus iones en estado gaseoso**. Su unidad es el S.I. es el J·mol⁻¹ o kJ·mol⁻¹.

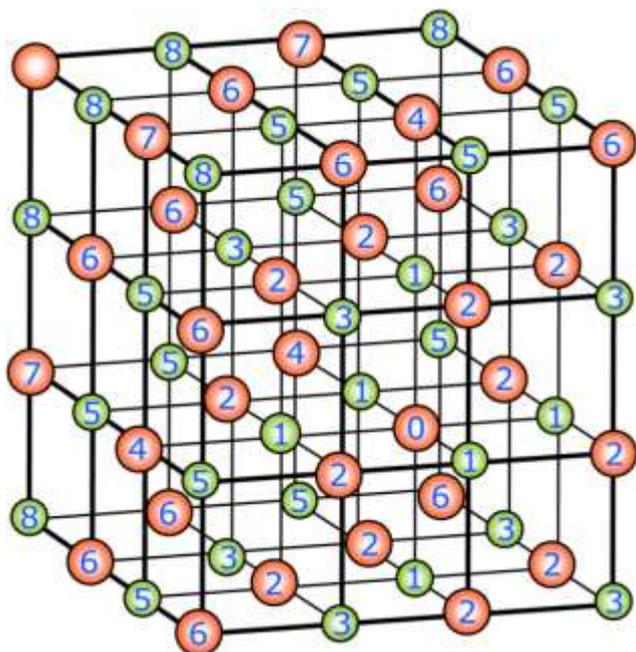
Un cristal iónico será, por tanto, más estable cuanto mayor sea su energía reticular.



U es prácticamente imposible de medir desde un punto de vista experimental y se determina por métodos indirectos que se verán posteriormente (Ciclo de Born-Haber) y en el tema de Termoquímica. Pero también se puede hallar desde un punto de vista teórico.

Ese cálculo lo hicieron Born y Landé, estudiando la suma de todas las posibles energías potenciales eléctricas de cada una de las posibles parejas de iones. La E_{potencial eléctrica} viene dada por $kq q' / d$, siendo q y q' las cargas de los iones y d la distancia que los separa = r_{cación} + r_{anión}. Según el signo de las cargas, puede ser negativa (signos contrarios de las cargas, tracción) o positiva (signo iguales de las cargas, repulsión).

Quando estudiamos la red de, por ejemplo, el NaCl, alrededor de un cation Na⁺ (en el dibujo el etiquetado como 0) habrá 6 aniones a una distancia d (los ①), 12 cationes a una distancia $\sqrt{2}d$ (los etiquetados como ②), 8 aniones a una distancia $\sqrt{3}d$ (los etiquetados como ③), 6 cationes a 2d (los etiquetados como ④), de los cuales solo se ven 3), etc. Su energía potencial eléctrica sería:



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

$$E = -\frac{q^2}{d} \left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \dots \right)$$

La suma de esa serie se **denomina constante de Madelung, A**, y depende únicamente de factores geométricos, como hemos visto para el NaCl. Para esta red la suma de esa serie vale $A=1,748$ (adimensional). Puede verse detalles de este cálculo en http://en.wikipedia.org/wiki/Madelung_constant

Además se introduce otro término que da cuenta de las repulsiones entre las nubes electrónicas de iones próximos, denominado **factor de Landé, n**.

El resultado de ambas contribuciones es la conocida como **ecuación de Born-Landé**, que nos permite obtener valores aproximados de U:

$$U = -\frac{K_e Z_1 Z_2 e^2 N_A A}{d_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

donde:

- **A**: constante de Madelung (depende de la forma de la red)
- **N_A**: número de Avogadro= $6,022 \cdot 10^{23}$
- **Z⁺ y Z⁻**: cargas iónicas
- **e**: carga del electrón= $1,602 \cdot 10^{-19}$ C
- **K_e**: cte. eléctrica de la ley de Coulomb= $9 \cdot 10^9$ N·m²/C²
- **d₀**: distancia entre iones.
- **n**: Factor de Landé, que depende de la sustancia (exponentes de Born)

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

Los factores de los que depende la energía reticular (al ser siempre negativa consideraremos siempre valores absolutos) vienen marcados por la ley de Coulomb y son:

- **A mayor carga de los iones mayor U**. Así el CaO (Ca²⁺ y O²⁻) tendrá "U" mayor que el NaCl (Na⁺ y Cl⁻).
- **A menor tamaño de los iones mayor U**. Así el NaCl (Na⁺ y Cl⁻) tendrá "U" mayor que el KBr (K⁺ y Br⁻).

Cuanto mayor valor de U mas estable es el sólido iónico. Teniendo en cuenta estopodemos comparar las temperaturas de fusión y ebullición de un sólido iónico (mayor cuanto mayor sea U), la dureza (mayor cuanto mayor sea U) y la solubilidad (más difícil de disolver cuanto mayor U)

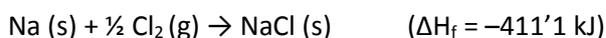
2.4 Ciclo de Born-Haber:

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

Este método se basa en la hipótesis de que todo proceso puede producirse en una etapa de combinación química directa con su correspondiente calor de reacción, o mediante una serie de procesos parciales ligados al transcurso que hemos supuesto a nivel atómico para el proceso global cada uno con su variación energética propia.

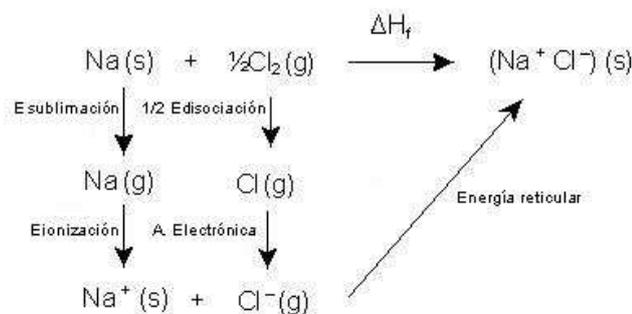
La totalidad de dichas variaciones energéticas deberá coincidir con el calor de la reacción química directa, si el conjunto de los procesos parciales implicados coincide con ella (**ley de Hess**). Como ejemplo, vamos a aplicar este método a fin de calcular la energía reticular del cloruro de sodio

La reacción global de formación de NaCl es:



que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:

- $\text{Na (s)} \rightarrow \text{Na (g)}$ ($E_{\text{sublimación}} = +107,8 \text{ kJ}$)
- $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{Cl (g)}$ ($\frac{1}{2}E_{\text{disociación}} = +121,3 \text{ kJ}$)
- $\text{Cl (g)} \rightarrow \text{Cl}^- \text{(g)}$ ($E_{\text{afinidad E.}} = \text{A.E.} = -348,8 \text{ kJ}$)
- $\text{Na (g)} \rightarrow \text{Na}^+ \text{(g)}$ ($E_{\text{ionización}} = \text{E.I.} = +495,4 \text{ kJ}$)
- $\text{Na}^+ \text{(g)} + \text{Cl}^- \text{(g)} \rightarrow \text{NaCl (s)}$ ($U = ?$)

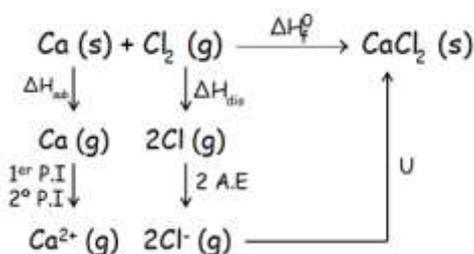


De donde puede deducirse que:

$$\Delta H_f = E_{\text{sublimación}} + \frac{1}{2} E_{\text{disociación}} + \text{E.I.} + \text{A.E.} + U$$

$$U = \Delta H_f - E_{\text{sublimación}} - \frac{1}{2} E_{\text{disociación}} - \text{E.I.} - \text{A.E.} = -411,1 \text{ kJ} - (107,8 \text{ kJ} + 121,3 \text{ kJ} - 348,8 \text{ kJ} + 495,4 \text{ kJ}) = -786,8 \text{ kJ}$$

Otro ejemplo:



$$\Delta H_f = E_{\text{sublimación}} + 1^{\text{a}} E_{\text{ionización}} + 2^{\text{a}} E_{\text{ionización}} + E_{\text{disociación}} + 2 \cdot E_{\text{afinidad electrónica}} + U$$

$$U = -\Delta H_f - E_{\text{sublimación}} - 1^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - 2^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - E_{\text{disociación}} - 2 \cdot E_{\text{afinidad electrónica}}$$

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

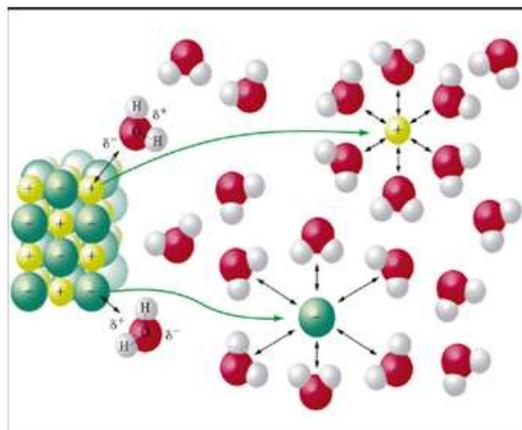
- Sublimación del metal.
- Disociación de las moléculas del no metal
- Ionización del metal.
- Sublimación o vaporización del no metal.
- Ionización del no metal.
- Formación de la red cristalina.

Es **importante darse cuenta** de que no todos estos procesos han de darse siempre, y que cada uno de ellos debe multiplicarse por el factor necesario para el correcto ajuste estequiométrico de la reacción global.

2.5 Propiedades de los compuestos iónicos.

Puntos de fusión y ebullición elevados (tanto más cuanto mayor energía reticular), ya que para fundirlos es necesario romper la red cristalina tan estable por la cantidad de uniones atracciones electrostáticas entre iones de distinto signo. Por ello, los compuestos iónicos son sólidos a temperatura ambiente.

Gran dureza por la misma razón, ya que para rayar un cristal es necesario romper su estructura cristalina.



- **Solubilidad en disolventes polares** (tanto más cuanto menor U) puesto que dichos disolventes al presentar cargas son capaces de introducirse en la estructura cristalina y estabilizar los iones por atracción ión-dipolo. Por la misma razón, presentan insolubilidad en disolventes apolares. La **solvatación** es el proceso simultáneo a la disolución por el que las moléculas polares del disolvente rodean al ión ya separado del cristal. Las sustancias apolares no son capaces de disolver los cristales iónicos.
- **Conductividad eléctrica** en estado disuelto o fundido ya en dichos estados los iones presentan movilidad y son atraídos hacia los electrodos de signo contrario. Sin embargo, en **estado sólido**, al estar los iones fijos dentro de la estructura cristalina **no conducen** la electricidad.
- **Fragilidad**, pues al golpear ligeramente el cristal produciendo el desplazamiento de tan sólo un átomo, todas las fuerzas que eran atractivas se convierten en repulsivas al enfrentarse dos capas de iones del mismo signo.



1. **(34-S08)** Para los compuestos iónicos:
 - a) Defina el concepto de energía de red. (0,5 puntos)
 - b) Establezca un ciclo de Born-Haber para la obtención de NaCl(s) a partir de Na(s) y $\text{Cl}_2(\text{g})$ y, sabiendo que la ΔH^0 del cloruro sódico sólido es -411 kJ/mol , calcule la energía de red, ΔH^0_{red} . (1,5 puntos)
 Datos: $\Delta H^0_1 = \Delta H^0_{\text{sublimación sodio}} = 107 \text{ kJ/mol}$ de átomos $\Delta H^0_2 = \Delta H^0_{\text{disociación cloro}} = 244 \text{ kJ/mol}$
 $\Delta H^0_3 =$ Primera energía de ionización de sodio = 496 kJ/mol de átomos
 $\Delta H^0_4 =$ Afinidad electrónica de cloro = -349 kJ/mol de átomos
S: $\Delta H^0_{\text{red}} = -787 \text{ kJ/mol}$
2. **(84-S10)** Haga un esquema del ciclo de Born-Haber para el CaCl_2 y calcule la variación entálpica de formación del CaCl_2 , sabiendo: (2,0 puntos).
 Entalpía de sublimación de Ca(s) = $178,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 Primera energía de ionización de Ca(g) = $590 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 Segunda energía de ionización de Ca(g) = $1145 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 Entalpía de disociación de $\text{Cl}_2(\text{g})$ = $244 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 Afinidad electrónica del Cl(g) = $-349 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 Energía de red del CaCl_2 = $-2223 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
S: $\Delta H_f = -763,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
3. **(111-S11)** El mismo que el 84, de septiembre-2010
- 4.- **(MGE1)** Ordena de mayor a menor energía reticular, sin tener en cuenta la constante de Madelung ni el factor de compresibilidad, los siguientes compuestos: MgS ; LiBr ; LiCl ; MgO .
S: $\text{LiBr} < \text{LiCl} < \text{MgS} < \text{MgO}$.
- 5.- **(MGE2)** Indica cómo aplicarías el ciclo de Born-Haber para el cálculo de la energía reticular del fluoruro de calcio.
S: $U = Q_{\text{reacción}} - E_{\text{sublimación}} - 1.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - 2.^{\text{a}} E_{\text{ionización}} - E_{\text{disociación}} - 2 \cdot E_{\text{afinidad}}$
- 6.- **(MGA1)** Con ayuda bibliográfica, busca los valores energéticos que te permitan calcular la energía reticular del fluoruro de calcio a partir de la ecuación obtenida en el ejemplo anterior, y compárala con el valor que obtendrías si hubieses aplicado la fórmula directa de cálculo.
S: $-2603,1 \text{ kJ mol}^{-1}$

7.- (MGA2) Empleando la fórmula de la energía reticular, explica cuál de los compuestos CaS y CaO sería más duro y cuál tendría mayor temperatura de fusión.

S: el más duro y, por tanto, con mayor temperatura de fusión sería el CaO.

3 Enlace covalente.

El **enlace covalente** se produce al **unirse elementos no metálicos entre sí**, es decir, entre **átomos de electronegatividades semejantes y altas en general**, que como sabes están situados a la derecha del sistema periódico. Dos átomos unidos mediante enlace covalente tienen menos energía que los dos átomos aislados. Al igual que en el enlace iónico la formación de un enlace covalente va acompañada de un desprendimiento de energía.

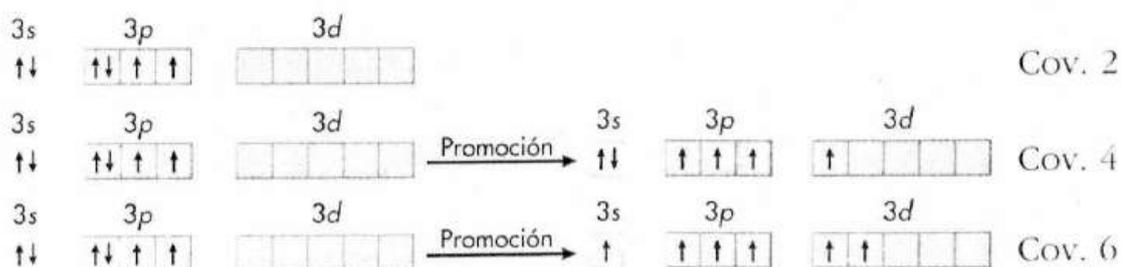
Se llama **energía de enlace** a la energía necesaria para romper 1 mol de un determinado tipo de enlace. Es siempre endotérmica (positiva) pues siempre es necesario aportar energía para romper un enlace.

Por ejemplo, para romper 1 mol de H₂ (g) en 2 moles de H (g) se precisan 436 kJ, por lo que $E_{\text{enlace}}(\text{H}-\text{H}) = \Delta H_{\text{dis}}(\text{H}_2) = + 436 \text{ kJ}$

La distancia a la que se consigue mayor estabilidad se llama **"distancia de enlace"**.

3.1 Teoría de Lewis

- Los átomos para conseguir **8 e⁻** en su última capa comparten tantos electrones como le faltan para completar su capa (regla del octeto).
- **Cada pareja de e⁻ compartidos forma un enlace.** En estas estructuras cada átomo se indica con su símbolo rodeado de unos puntos que representan los electrones del último nivel. Estos pueden aparecer también como aspas (para diferenciarlos de los del otro átomo) o como rayas (en caso de pares electrónicos, bien de un átomo o bien del enlace). Como para formar un enlace hacen falta 2 electrones, uno de cada átomo, la capacidad de enlace de un átomo, su **valencia covalente**, coincidirá con el nº de **electrones desapareados**. Esta idea la podemos extender fuera del octeto y entender las valencias 3,5 y 7 de los halógenos por promoción de electrones 3p a orbitales 3d vacíos (El F no puede) o la valencia 4 del C, por promoción del electrón 2s² al nivel 2p. O las valencias 4 y 6 del azufre, imposibles para el O:



Así, representaremos a cada átomo:

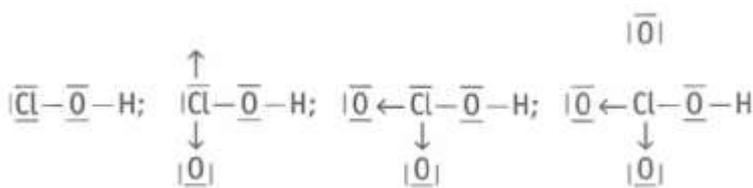
1 1A	2 2A																	18 8A
•H																		He:
•Li	•Be•																	•B•
•Na	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B							•C•
•K	•Ca•																	•N•
•Rb	•Sr•																	•O•
•Cs	•Ba•																	•F•
•Fr	•Ra•																	•Ar•
																		•Ne•
																		•Al•
																		•Si•
																		•P•
																		•S•
																		•Cl•
																		•Ar•
																		•Ga•
																		•Ge•
																		•As•
																		•Se•
																		•Br•
																		•Kr•
																		•In•
																		•Sn•
																		•Sb•
																		•Te•
																		•I•
																		•Xe•
																		•Tl•
																		•Pb•
																		•Bi•
																		•Po•
																		•At•
																		•Rn•

- Se pueden formar **enlaces sencillos, dobles y triples**, según se compartan con el otro átomo uno, dos o tres electrones. Ej: O=O; N≡N, O=C=O
- En algunas moléculas puede darse la situación de que los dos electrones con los que se forma el enlace sean aportados por el mismo átomo; se trata de un enlace covalente denominado **coordinado o dativo**, que fue formulado en 1921 por Perkins. En este enlace, el átomo que pone a disposición el par electrónico se denomina dador, y el que los toma es el aceptor. No se representa mediante la raya habitual, sino con una flecha que sale del átomo dador. Ej: NH₄⁺

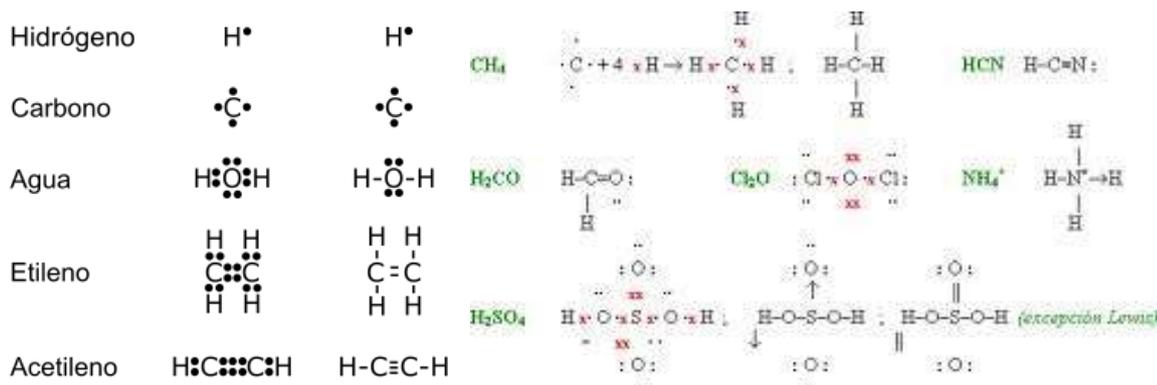
Excepciones a la teoría de Lewis

- Moléculas tipo NO y NO₂ que tienen un número impar de electrones.
- Moléculas tipo BeCl₂ o BF₃ con marcado carácter covalente en las cuales el átomo de Be o de B no llegan a tener 8 electrones.
- Moléculas tipo PCl₅ o SF₆ en las que el átomo central puede tener 5 o 6 enlaces (10 o 12 e⁻). Sólo puede ocurrir en el caso de que el no-metal no esté en el segundo periodo, pues a partir del tercero existen orbitales "d" y puede haber más de cuatro enlaces.

Por ejemplo, para los oxácidos del cloro:



Otros ejemplos:



- 8.- **(MGE3)** Obtén la estructura de Lewis para el H_2SO_3 .
- 9.- **(MGE4)** Utilizando la notación de cajas, escribe la estructura electrónica de última capa de los elementos: F, Cl, N, O, P y explica qué covalencias pueden presentar.
- 10.- **(MGA3)** Indica la covalencia de los átomos de las siguientes moléculas: Br_2 , CO_2 , SO_3 , H_2SO_4 , HClO .
- 11.- **(MGA4)** Escribe las estructuras de Lewis de las siguientes especies: CHF_3 , NH_3 y CH_3OH .

3.2 Parámetros del enlace covalente:

3.2.1 Energía de enlace

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

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

Enlace	Energía (kJ/mol)	Enlace	Energía (kJ/mol)
H – H	436	C = C	610
C – H	415	C = N	615
N – H	390	C = O	730
O – H	460	N = N	418
C – C	347	O = O	494
C – N	285	C ≡ C	830
C – O	352	C ≡ N	887
N – N	159	N ≡ N	946

3.2.2 Longitud de enlace

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

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

A partir de los datos de la tabla, observamos que las **distancias internucleares** coinciden con la suma de radios atómicos si se trata de enlaces entre átomos iguales. Cuando los enlaces son **heteronucleares**, se observa que la longitud de enlace es menor que la suma de dichos radios. Esto se debe a la existencia de un cierto carácter iónico en ellos, relacionado con la diferencia de electronegatividades, tal y como comentaremos más adelante, que intensifica la atracción entre los átomos acortando así la distancia entre los átomos.

Longitudes medias de enlaces simples y múltiples en ångströms ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)

H–H	0,74	F–F	1,28	Cl–Cl	2,00	Br–Br	2,28	I–I	2,66		
H–F	0,92	H–Cl	1,27	H–Br	1,42	H–I	1,61	O–H	0,94	N–H	0,98
O–O	1,32	N–N	1,40	C–C	1,54	N–O	1,36	C–O	1,43	C–N	1,47
				C=C	1,34	N=O	1,15	C=O	1,22	C=N	1,27
				C≡C	1,21	N≡O	1,08	C≡O	1,13	C≡N	1,15
										C–H	1,10

También se observa en la tabla anterior que los enlaces múltiples entre átomos no solo aumentan sus energías de enlace, sino que disminuyen sus distancias internucleares. Por ejemplo, las distancias internucleares de C–C, C=C, y C≡C son $1,54 \text{ \AA}$, $1,33 \text{ \AA}$ y $1,20 \text{ \AA}$, respectivamente.

3.2.3 Ángulo de enlace

Es el ángulo hipotético formado entre el núcleo del átomo central y los núcleos de los átomos enlazados a él. Se trata también de un valor promedio, por las mismas causas antes expuestas, pero como su valor no varía al hacerlo el tipo de átomos que se enlazan con el átomo central, eso nos indica que depende de dicho átomo central y no de los que se hallan unidos a él

3.2.4 Polaridad en moléculas covalentes. Momento dipolar.

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

El valor del dipolo se mide por el denominado **momento dipolar μ** , que es un vector cuyo módulo es el producto de la carga (sin signo) por la distancia, $q \cdot d_0$, su dirección la del enlace y su sentido que es de la **carga negativa (el más E.N.) a la positiva (el menos E.N.)**. Su unidad es el Debye(D), definida como $1 \text{ \AA} \cdot 1 \text{ UEE}$ (Unidad Electrostática de Carga, unidad de carga en el antiguo sistema cegesimal. Equivale a $3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.) Los excesos y defectos de carga atómicos se representa por δ^- y δ^+ .

3.3 Polaridad de las moléculas:

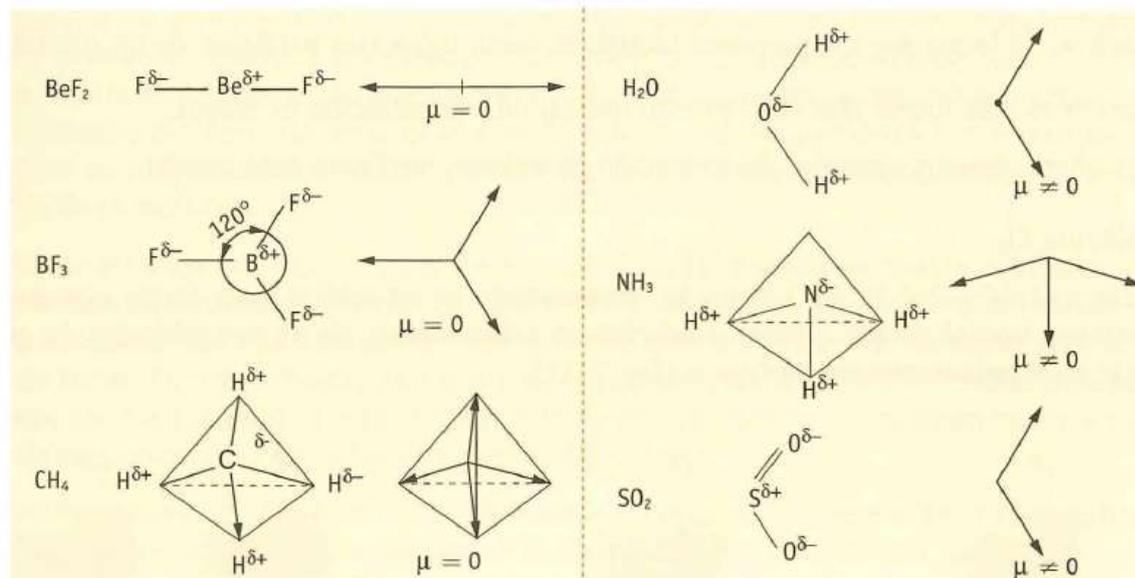
Dado que las moléculas pueden tener más de un enlace, el **momento dipolar molecular** -la polaridad de la molécula no siempre coincide con la del enlace. Solo en el caso de moléculas diatómicas su polaridad coincide con la del enlace, pues solo tienen uno de ellos.

En los demás casos es preciso conocer la polaridad total de la molécula, que se obtiene calculando el momento dipolar resultante de **combinar vectorialmente** los momentos dipolares o dipolos de los correspondientes enlaces de acuerdo con la geometría de la molécula que estamos analizando

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

Enlace	(D)	Enlace	(D)
H-C	0.40	C-Cl	1.46
H-N	1.31	C-Br	1.38
H-O	1.51	C-I	1.19
C-N	0.22	C=O	2.38
C-O	0.74	C≡N	3.50
C-F	1.41		

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


Ejemplo (Selectividad. Madrid Junio 1997).

a) Ordene según la polaridad creciente, basándose en los valores de electronegatividades de la tabla adjunta, los enlaces siguientes: H-F, H-O, H-N, H-C, C-O y C-Cl. b) la polaridad de la molécula de CH_4 ¿será igual o distinta de la de CCl_4 ?

Elemento	F	O	Cl	N	C	S	H
Electronegat.	4,0	3,5	3,0	3,0	2,5	2,5	2,1

a) $\text{H-C} < \text{C-Cl} < \text{H-N} < \text{C-O} < \text{H-O} < \text{H-F}$

b) El CH_4 es globalmente apolar ($\mu = 0$) pues la suma vectorial de los dipolos de cada enlace (dirigidos hacia el exterior) se anula debido a su geometría tetraédrica. El CCl_4 es igualmente apolar por la misma razón; sin embargo los dipolos de los enlaces están en esta ocasión dirigidos hacia el centro.



12.- (MGA5) Empleando la tabla de electronegatividades de la Unidad anterior, indica cuáles de los siguientes enlaces se consideran iónicos y cuáles covalentes: Li - Cl; C - I; Ba - F; Al - Br; S - O; K - Cl; C - H.

13.- (MGA6) Se tienen tres elementos A, B y C situados en el mismo periodo. Su estructura de valencia es de 1, 5 y 7 electrones, respectivamente. Indica las fórmulas y justifica el tipo predominante de los posibles compuestos que pueden formarse cuando se combinan las siguientes parejas:

- A y C.
- B y C.
- C y C.

14.- (MGE5) Calcula el porcentaje de carácter iónico que tiene el enlace H -Cl sabiendo que su momento dipolar es 1,07 D y que su longitud de enlace es 1,27 Å. (1 D = $3,33 \cdot 10^{-30}$ C·m)

S: 17,6% iónico y 82,4% covalente.

15.- (MGA7) A partir de los datos de la tabla, si se forman las moléculas AB, AC, AD y BD:

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

- Clasifícalas en orden creciente por su carácter covalente. Justifica la respuesta.
- ¿Cuál será la molécula más polar? Razona tu respuesta.

16.- (MGA8) Se dan las siguientes sustancias: Br_2 , NaCl, HBr, BaO, HNO_3 , MgF_2 . Indica cuáles presentan: a) enlaces covalentes puros; b) enlaces covalentes polares; c) enlace iónico; d) enlaces covalentes no polares.

3.4 Modelo de repulsión de pares electrónicos de las capas de valencia (RPECV).

Teoría presentada en 1940 por Nevil Sidgwick y Herbert Powell y desarrollada en 1957 por Ronald Gillespie y Ronald Sydney Nyholm. En la wikipedia: <http://es.wikipedia.org/wiki/RPECV>. Otro enlace interesante, en inglés: <http://www.southalabama.edu/chemistry/randrews/Chapter9.pdf#search='hibridization'>

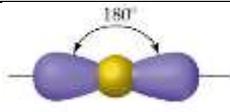
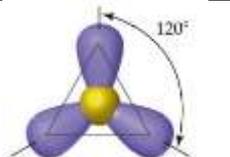
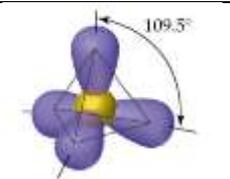
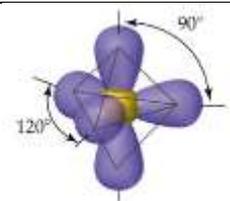
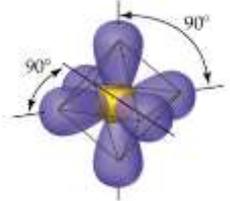
Los enlaces covalentes tienen una dirección determinada y las distancias de enlace y los ángulos entre los mismos pueden medirse aplicando técnicas de difracción de rayos X. La geometría viene dada por la repulsión de los pares de e^- del átomo central teniendo en cuenta que las parejas de e^- se sitúan lo más alejadas posibles.

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

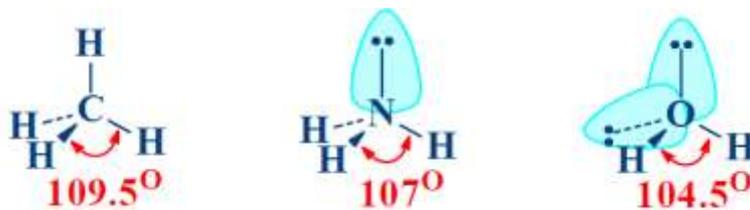
En esencia viene a decir que la geometría de la molécula va a depender de las repulsiones existentes entre los pares de electrones de valencia que rodean al átomo central, de manera que dichos pares tienden a colocarse lo más separado posible (mínima energía de repulsión).

Los aspectos esenciales de esta teoría son:

- Los pares de electrones del nivel de valencia que rodean al átomo central tienden a estar lo más separados posible (repulsiones mínimas, es decir, energía mínima). Las disposiciones espaciales de los electrones de valencia dependerá del número de ellos.

Fórmula	Pares de e^- compartidos	Estructura	Disposición de los átomos
AB_2	2		Lineal (180°)
AB_3	3		Plana triangular (120°)
AB_4	4		Tetraédrica ($109,5^\circ$)
AB_5	5		Bipirámide trigonal. 120° en los del plano central y 90° con el superior e inferior
AB_6	6		Bipirámide cuadrada u octaedro. Todos 90°

- b) No todos los pares interaccionan de la misma manera: un par de electrones no compartidos (PNC) ejercerá **mayor repulsión** que un par de electrones compartidos (PC). Por tanto, la repulsión PNC-PNC será mayor que la repulsión PNC-PC y ésta mayor que la repulsión PC-PC y estas diferencias provocarán diferencias en los ángulos de enlaces.



Número de pares de electrones	Geometría electrónica	Tipo	Pares enlazados	Pares solitarios	Geometría molecular	Ejemplo	Otros
2		AB ₂	2	0		$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$	BeF ₂
3		AB ₃	3	0		$\begin{array}{c} \text{:F:} \\ \diagdown \\ \text{B} \\ \diagup \\ \text{:F:} \\ \\ \text{:F:} \end{array}$	CO ₃ ²⁻ NO ₃ ⁻
		AB ₂ P	2	1		$\left[\begin{array}{c} \text{N} \\ // \quad \backslash \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array} \right]^{-}$	SO ₂
4		AB ₄	4	0		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	NH ₄ ⁺ SO ₄ ²⁻
		AB ₃ P	3	1		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{N} \\ / \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	SO ₃ ²⁻
		AB ₂ P ₂	2	2		$\begin{array}{c} \text{O} \\ // \\ \text{Cl} \end{array}$	ClO ₂ ⁻

- c) Los electrones en enlaces dobles o triples también producen una repulsión más intensa que un enlace sencillo.



3.5 Teoría del enlace de valencia (T.E.V.)

Fue desarrollada en 1927 por **Walter Heitler** (1904-1981) y **Fritz London** (1900-1954), y se basa en la suposición de que los enlaces covalentes se producen por **solapamiento de los orbitales atómicos de distintos átomos y emparejamiento de los e⁻ con spines contrarios de orbitales semicupados formando un único orbital molecular**.

Así, 2 átomos de H ($1s^1$) tienen cada uno 1 e^- desapareado en un orbital "s" y formarían un orbital molecular en donde alojarían los 2 e^- .

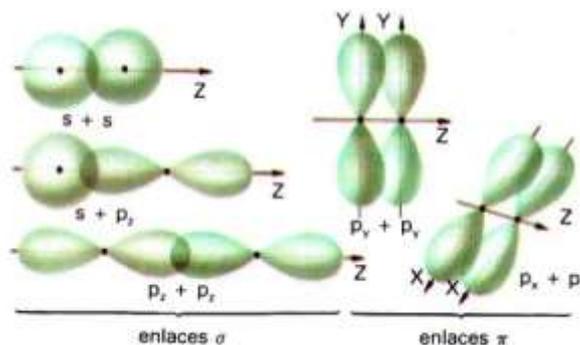
Se llama **covalencia** al nº de e^- desapareados y por tanto al nº de enlaces que un átomo puede formar.

3.5.1 Enlace covalente simple.

Se produce un único solapamiento de orbitales atómicos. **Es frontal y se llama "σ"** (sigma).

Puede ser:

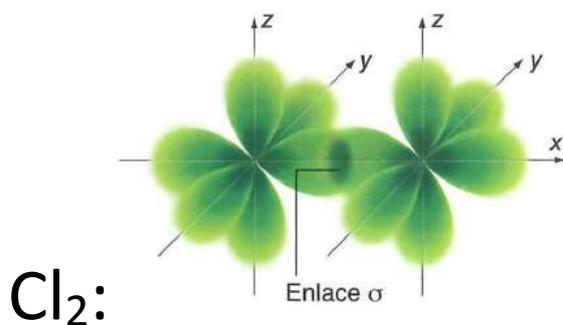
- Entre dos orbitales "s"
- Entre un orbital "s" y uno "p"
- Entre dos orbitales "p".



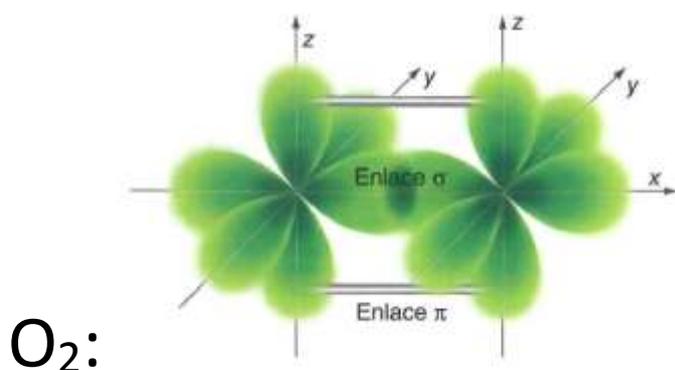
3.5.2 Enlace covalente múltiple.

Se producen en el $C=C$ o $C\equiv C$, dos o tres solapamientos de orbitales atómicos entre dos átomos. Siempre hay un enlace frontal "σ" (sólo 1); si el enlace es doble, el segundo solapamiento es lateral "π" (π); si el enlace es triple, existe un solapamiento "σ" y dos "π". Los enlaces "π" más conocidos se producen a partir de orbitales atómicos "p".

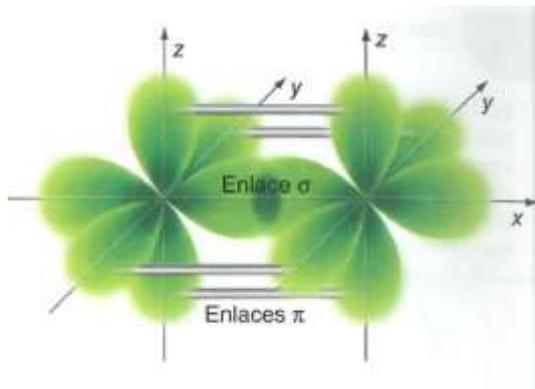
ejemplos de ambas situaciones:



Cl-Cl: El cloro tiene 1 e^- desapareado en un orbital p, de forma que un acercamiento frontal de dos átomos producirá un solapamiento de dichos orbitales, lo que da lugar a un enlace simple de tipo "σ". Del mismo tipo sería el solapamiento entre un orbital 1s, con 1 e^- , del H, y un orbital 2p, con 1 e^- desapareado, del Cl, para formar el HCl.



O=O. El oxígeno tiene 2 e^- desapareados en dos orbitales p, de manera que el acercamiento de dos átomos conducirá a dos solapamientos, uno frontal, formándose un **enlace σ**, y otro lateral, formándose un **enlace π**. Se trata de un enlace doble (su longitud es menor que la del enlace)



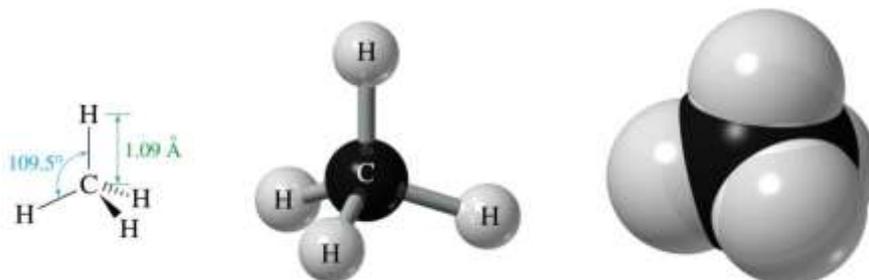
N_2 :

$N \equiv N$. El nitrógeno tiene $3e^-$ desapareados en tres orbitales p, por lo que el acercamiento de dos átomos provoca un solapamiento frontal, formándose un enlace σ , y dos laterales que dan lugar a dos enlaces π . Se trata de un enlace triple (su longitud es menor que la de uno doble)

3.5.3 Hibridación de orbitales atómicos.

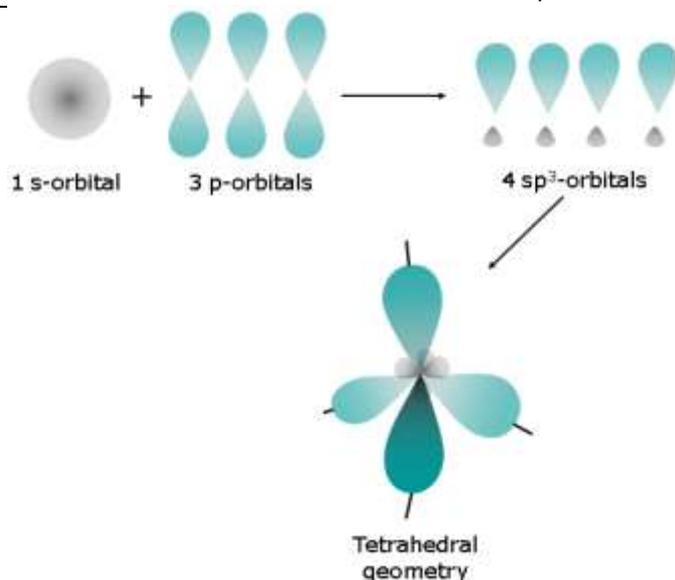
Para explicar la **geometría de la moléculas** (ángulos y distancia) y la covalencia de ciertos átomos se formuló la “**teoría de la hibridación**” (Linus Puling, 1931), que se basa en que los **orbitales atómicos de distinto tipo de un mismo átomo pueden combinarse entre sí para formar orbitales híbridos de igual energía entre sí, que se sitúan en el espacio de manera que la repulsión sea mínima**, cuando los átomos van a formar un enlace.

Así, por ejemplo, el carbono **C forma cuatro enlaces en compuestos como el CH_4** y en la mayoría de compuestos que forma (para ello precisa promocionar el e^- del orbital 2s al 2p y a continuación formar 4 orbitales de igual energía a partir del 2s y de los 3 orb. 2p). **Experimentalmente se comprueba que el carbono en esa molécula forma cuatro enlaces covalentes iguales y orientados simétricamente con ángulos HCH de $109,5^\circ$** (forma tetraédrica). Incluso suponiendo que los electrones se dispusieran lo más desapareados posible (**configuración $2s^1 2p^3$**), los enlaces que se formarían por solapamiento con el orbital 1s del hidrógeno en ningún caso serían completamente idénticos ni podríamos justificar la geometría espacial de la molécula (serían 90° entre los enlaces σ p-s, que es el ángulo que forman los orbitales p, y otros 90° son el σ s-s, para minimizar la repulsión interelectrónica).



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

Así, se supone que el átomo de C combina su orbital s y sus 3 orbitales p para dar lugar a 1+3=4 orbitales híbridos. A cada uno de ellos se les denomina sp^3 , por los orbitales de procedencia, y al proceso global de hibridación **hibridación sp^3** . Esos 4 orbitales híbridos tienen como forma una mezcla de orbital s y p, tienen 2 lóbulos como los orbitales p, pero uno mayor y otro menor y se disponen, para minimizar las repulsiones interelectrónicas, en las direcciones de los vértices de un tetraedro, tal y como puede verse en la figura lateral.



No todos los orbitales de un mismo átomo pueden hibridarse. Para que la **hibridación** tenga lugar es necesario que bien se trate de:

- Orbitales atómicos con 1 e^- desapareado que vayan a formar enlaces " σ ".
- Orbitales atómicos con parejas de e^- sin compartir.

Por el contrario, **no se hibridan**:

- Los orbitales atómicos que van a formar el segundo o tercer enlace (π).
- Los orbitales atómicos vacíos.

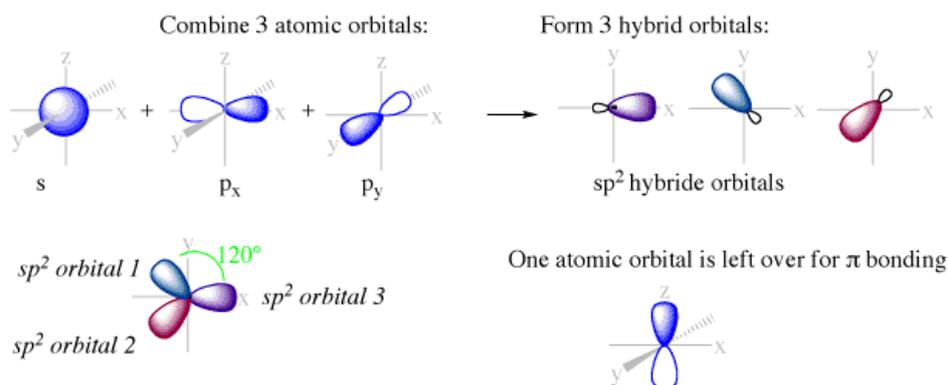
3.6 Tipos de hibridación

Los principales tipos de hibridación son los siguientes:

Hibridación sp^3 . Se hibridan un orbital "s" y tres orbitales "p". Se forman cuatro orbitales con orientación dirigida hacia los vértices de un tetraedro.

- 4 enlaces sencillos. Ejemplo: metano
- 3 enlaces sencillos + 1 par e^- sin compartir. Ejemplo: NH_3
- 2 enlaces sencillos + 2 par e^- sin compartir. Ejemplo: H_2O

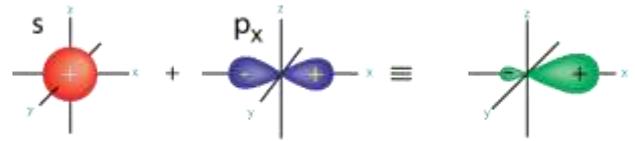
Hibridación sp^2 . Se hibridan un orbital "s" y dos orbitales "p". Se forman tres orbitales dirigidos hacia los vértices de un triángulo equilátero. El otro orbital p queda sin hibridar y podrá formar o no un enlace si tiene electrones desapareados.



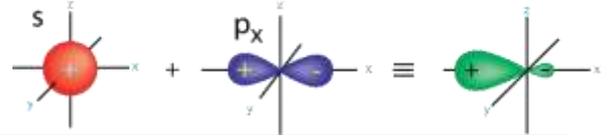
- 3 enlaces sencillos.
- 1 enlace doble y 2 sencillos.

Ejemplo: BF_3
Ejemplo: eteno

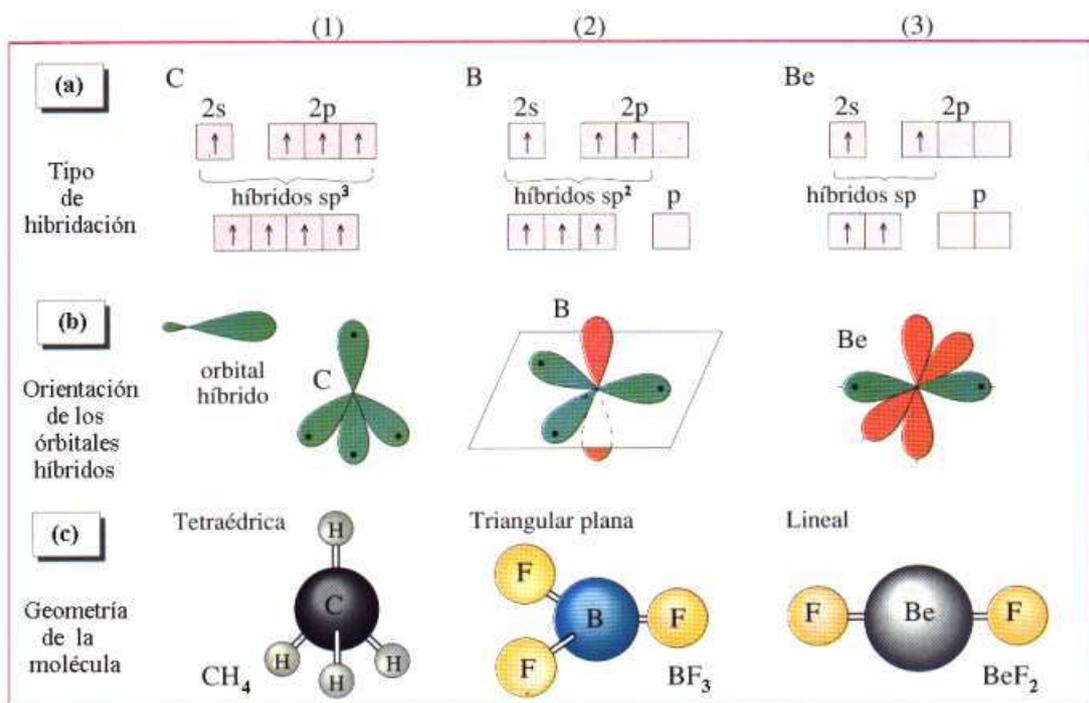
Hibridación sp Se hibridan un orbital "s" y un orbital "p". Se forman dos orbitales que forman entre sí un ángulo de 180° .



- 2 enlaces sencillos. Ejemplo: BeF_2
- 2 enlaces dobles. Ejemplo: CO_2
- 1 enlace triple y 1 sencillo. Ejemplo: etino



Tipo de hibridación	Orbitales puros que se combinan/sin combinar	Orbitales híbridos que se forman	Ángulo interorbital	Geometría molecular	Tipo de enlace	Ejemplo
sp ³	4 (1s y 3p) ninguno sin combinar	4 orbitales sp ³	$109^\circ 28'$	Tetraédrica	Sencillo	
sp ²	3 (1s y 2p) 1 p sin combinar	3 orbitales sp ²	120°	Trigonal plana	Doble	
sp	2 (1s y 1p) 2 p sin combinar	2 orbitales sp	180°	Lineal	Triple	



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

Si estudiamos por ejemplo la molécula de **agua (H₂O)**, que tiene dos pares electrónicos libres procedentes del átomo de oxígeno, podemos observar que tendrá dos de los orbitales híbridos sp³ para solapar con los orbitales 1s de los átomos de H, y otros dos para albergar los pares de electrones libres. En este caso se dice que son orbitales híbridos de tipo sp³ no equivalentes. Además, la geometría molecular del H₂O no presenta ángulos de enlace HOH de 109,5°, sino un poco menores. Así, el ángulo anómalo observado de 104° es debido a la **repulsión interelectrónica entre los pares libres** que fuerza el cierre del ángulo de los enlaces entre átomos. Observa que, a pesar del tipo de hibridación indicado, la estructura molecular será de tipo angular, en lugar de la tetraédrica electrónica, pues solo hay dos átomos, los hidrógenos unidos al átomo central de oxígeno.

Otro caso parecido es el de la molécula de **amoníaco (NH₃)**, que presenta hibridación sp³ con ángulos de enlace HNH de 106,5°, puesto que uno de sus cuatro orbitales híbridos no es equivalente a los otros tres al estar ocupado por un par electrónico libre; esto provoca **repulsión sobre los enlaces** cercanos y, por ello, el cierre angular observado. La estructura molecular será piramidal triangular, similar a un tetraedro truncado.



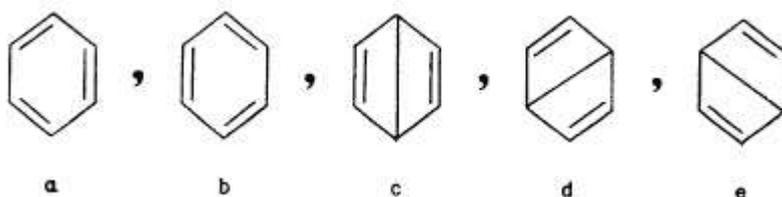
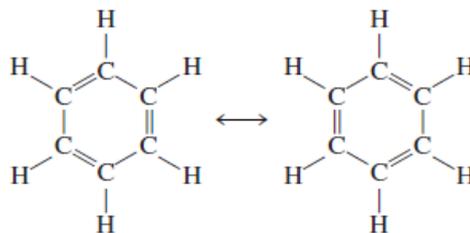
17. **(4-J07)** Defina y ponga un ejemplo en cada caso:
 - a) Enlace polar. (0,7 puntos)
 - b) Molécula polar. (0,6 puntos)
 - c) Molécula apolar con enlaces polares. (0,7 puntos)
18. **(42-J09)** Para las siguientes moléculas: H₂O, NH₃, CH₄ y HCl indique, razonando la respuesta:
 - a. Estructura electrónica de Lewis. (0,8 puntos)
 - b. Geometría. (0,6 puntos)
 - c. Polaridad. (0,6 puntos)
19. **(116-S11)** En relación con las especies BF₃ y BF₄⁻
 - a. Represente una estructura de Lewis para cada una de ellas. (0,8 puntos)
 - b. Determine el número de oxidación del B en ambos compuestos. (0,4 puntos)
 - c. Utilice la teoría de RPECV para predecir sus formas geométricas. (0,8 puntos)
20. **(131-S12)** Responda razonadamente a las siguientes cuestiones:
 - a) Explique la geometría de las siguientes moléculas: CH₃Cl, NH₃, BeCl₂ y PCl₅ (1,0 puntos)
 - b) Indique la polaridad de las mismas. (1,0 puntos)
21. **(141-J13)** Responda a las siguientes cuestiones:
 - a) Escriba las estructuras de Lewis para las siguientes moléculas: CH₄, NH₃, SO₂, H₂CO (0,8 puntos)
 - b) ¿Qué geometría cabe esperar para cada una de ellas utilizando el modelo de repulsión entre pares de electrones de la capa de valencia? (0,8 puntos)
 - c) Nombre las moléculas del apartado a) (0,4 puntos)
22. **(156-S13)** Dados los siguientes compuestos: CCl₄, H₂O y H₂S.
 - a. Escriba las estructuras de Lewis y prediga la geometría molecular. (0,9 puntos)
 - b. Ordénelos por orden creciente de su momento dipolar. (0,6 puntos)
 - c. Explique la hibridación del átomo de O en el H₂O. (0,5 puntos)

3.7 Resonancia.

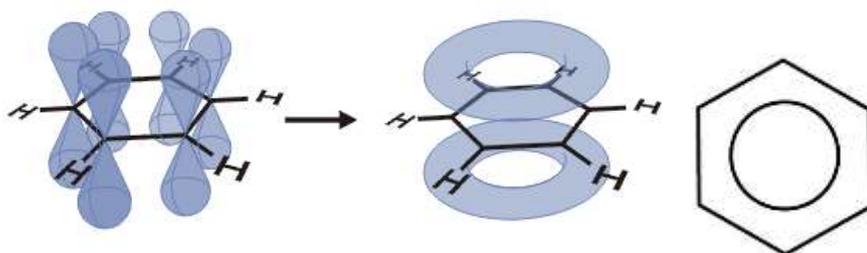
En las moléculas descritas anteriormente cada par de electrones que forman el enlace estaban **localizados** entre los 2 núcleos a los que enlazaban. Sin embargo, existen moléculas donde estos pares de electrones de enlace se encuentran **deslocalizados** a lo largo de una buena parte o la totalidad de la molécula. Este fenómeno es conocido como **resonancia**.

Un ejemplo de esta situación se produce en la molécula de benceno (C₆H₆):

Si las estructuras laterales representasen al benceno, su molécula sería un hexágono irregular en el que alternarían enlaces dobles con sencillos y habría dos longitudes de enlace diferentes entre los átomos de C adyacentes: una sería característica de un enlace sencillo y la otra tendría la longitud de un enlace doble. La molécula sería un hexágono irregular. Y sin embargo los datos experimentales demuestran que es un hexágono perfectamente regular, siendo la longitud entre todos los átomos de C adyacentes en el benceno 1,40 Å, un valor que está entre la longitud de un enlace C–C (1,54 Å) y de un enlace C=C (1,33 Å). La representación de los tres dobles enlaces se debe a Friedrich Kekulé, quien además fue el descubridor de la estructura anular de dicho compuesto y el primero que lo representó de esa manera (solo se representan los enlaces C-C, no los átomos de C, que serían los vértices y no se representan tampoco los H). Se habla de que la molécula real es una combinación o promedio de todas las estructuras con enlaces localizados que se puedan proponer. A estas distintas formas moleculares se las denomina **formas canónicas** o **estructuras resonantes**. Para el benceno se proponen las siguientes formas canónicas, la a) y la b), propuestas por Kekulé, y la c), la d) y la e) por Dewar.



La explicación más correcta del tipo de enlace del benceno (y, por analogía, del resto de moléculas resonantes) la dio el Premio Nobel de Química, Linus Pauling. Según Pauling, cada carbono presenta en el benceno hibridación sp^2 . Estos híbridos se usarán tanto para formar los enlaces entre carbonos como los enlaces entre los carbonos y los hidrógenos. Cada carbono presenta además un orbital p_z adicional perpendicular al plano molecular y con un electrón alojado en su interior, que se usará para formar enlaces π a lo largo de toda la molécula. Es esta nube π lo que se quiere representar cuando se usa la escritura habitual de la molécula de benceno

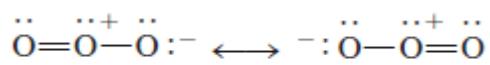


Se trata de híbridos de resonancia. Esta situación ocurre en moléculas con enlaces dobles, especialmente conjugados -alternados-, ya que presentan diferentes formas resonantes obtenidas por la mera migración de los electrones que intervienen en sus enlaces. Las formas resonantes que contribuyan eficazmente a la estructura verdadera deben tener los átomos en las mismas posiciones relativas. La existencia de formas resonantes conlleva un aporte energético negativo –**denominado energía de resonancia**–, que produce una disminución energética que estabiliza el sistema. Esta será mayor cuantas más sean las estructuras resonantes que se puedan postular para una molécula.

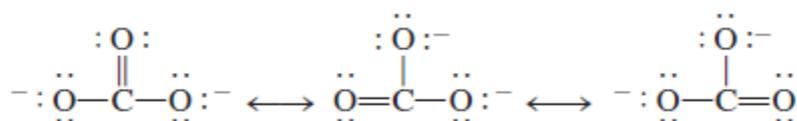
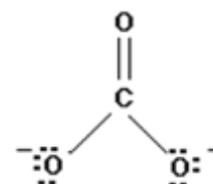
Al dibujar la estructura de Lewis del ozono (O_3) satisfacemos la regla del octeto para el átomo central porque colocamos un enlace doble entre este átomo y uno de los dos átomos de O externos. De hecho, el enlace doble lo podemos colocar en cualquier extremo de la molécula, como se muestra en estas dos estructuras de Lewis equivalentes:



Sin embargo, ninguna de estas dos estructuras de Lewis explica las longitudes de enlace conocidas en el O_3 . Esperaríamos que el enlace O–O en el O_3 fuera más largo que el enlace O=O debido a que se sabe que los enlaces dobles son más cortos que los sencillos. No obstante, los resultados experimentales indican que los dos enlaces oxígeno-oxígeno tienen la misma longitud (128 pm). Para resolver esta discrepancia escribimos *ambas* estructuras de Lewis para representar la molécula de ozono:



Otro ejemplo típico es el ion carbonato CO_3^{2-} , que debería tener una estructura en la que el átomo central, el carbono en este caso, formara un doble enlace con uno de los átomos de oxígeno y sendos enlaces sencillos con los átomos de oxígeno que soportan la carga negativa tal y como se ve en dibujo de la izquierda. Sin embargo, esto conllevaría a que las distancias C–O y C=O deberían ser distintas, y tal y como se verá a continuación, los ángulos de enlace, también deberían ser distintos. Por difracción de rayos X se sabe que las **distancias entre el átomo de carbono y cada átomo de oxígeno son iguales**, así como los ángulos O–C–O. Para explicar tales datos, se supone que los e^- de enlace así como los pares electrónicos sin compartir, pueden desplazarse a lo largo de la molécula o ion, pudiendo formar más de una estructura de Lewis distinta. En el caso del ion CO_3^{2-} , se podrían formar tres estructuras de Lewis en las que el doble enlace se formara con cada uno de los átomos de oxígeno, siendo las tres válidas. Cada una de estas formas contribuye por igual a la estructura del ion CO_3^{2-} , siendo la verdadera estructura una mezcla de las tres.



Además de utilizar el símbolo \leftrightarrow entre las distintas formas resonantes, también se utiliza una única forma mezcla de todas, en el que aparecen el signo “ \equiv ” que indica enlace intermedio entre sencillo y doble y las fracciones de carga con “ δ ”.

Otro ejemplo fácil de entender es el del dióxido de azufre SO_2 :



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

3.8 Propiedades de los compuestos covalentes

3.8.1 Sólidos covalentes:

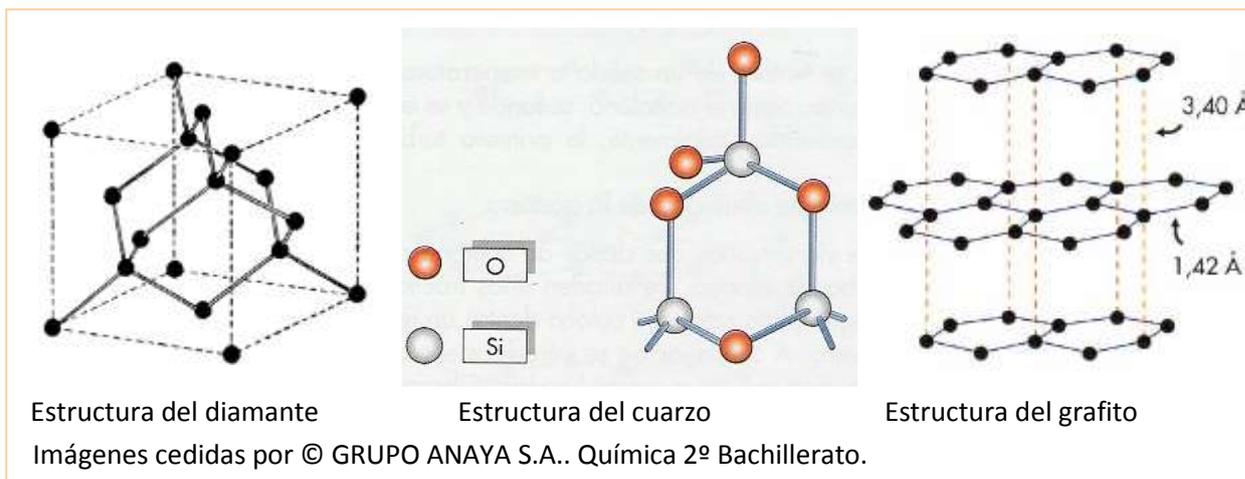
Todos los átomos de un cristal están unidos por enlaces covalente, pudiendo considerar éste como una molécula gigantesca. Por ello y dada la fortaleza de este enlace los sólidos covalentes tienen:

En general, están formadas a partir de carbono o de silicio. El primero se presenta en forma de diamante (átomos de carbono unidos en las tres direcciones del espacio con geometría sp^3) o **grafito** (átomos de carbono con geometría sp^2 que componen hexágonos unidos en dos direcciones formando láminas), mientras que el segundo lo hace como **silice** (SiO_2), que forma minerales como cuarzo, ópalo, etc., e incluso la arena de las playas. Su estructura es tetraédrica con el silicio como átomo central.

Gran dureza.

- Puntos de fusión y ebullición muy altos por lo que son sólidos a temperatura ambiente.
- Son insolubles en todo tipo de disolvente.
- Son malos conductores pues no tienen electrones libres.

Una excepción a estas propiedades lo constituye el grafito que forma estructura por capas le hace más blando y al aportar cada átomo de carbono un e^- a un macroenlace muy deslocalizado es también conductor.



3.8.2 Sustancias moleculares:

Están formados por moléculas aisladas. A temperatura ambiente pueden estar en forma gaseosa ($O_2, H_2, N_2, CH_4, NH_3, HCl, SO_2, NO_2$, etc.), líquida ($H_2O, Br_2, CH_3 - CH_2OH, CH_3 - COOH$, etc.) o sólida (I_2 , naftaleno, glucosa, etc.).

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

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

En resumen:

- Puntos de fusión y ebullición bajos. Generalmente son gases a temperatura ambiente.
- Son blandos.
- Son solubles en disolventes moleculares que estabilizan las moléculas con fuerzas de Van der Waals.
- Son malos conductores pues no tienen cargas libres, aunque las moléculas polares poseen parcial conductibilidad.
- Las sustancias polares son solubles en disolventes polares que las estabilizan por fuerzas de atracción dipolo-dipolo y tienen mayores puntos de fusión y ebullición al existir atracción electrostática entre las mismas.

4 Fuerzas intermoleculares.

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

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

Las principales son:

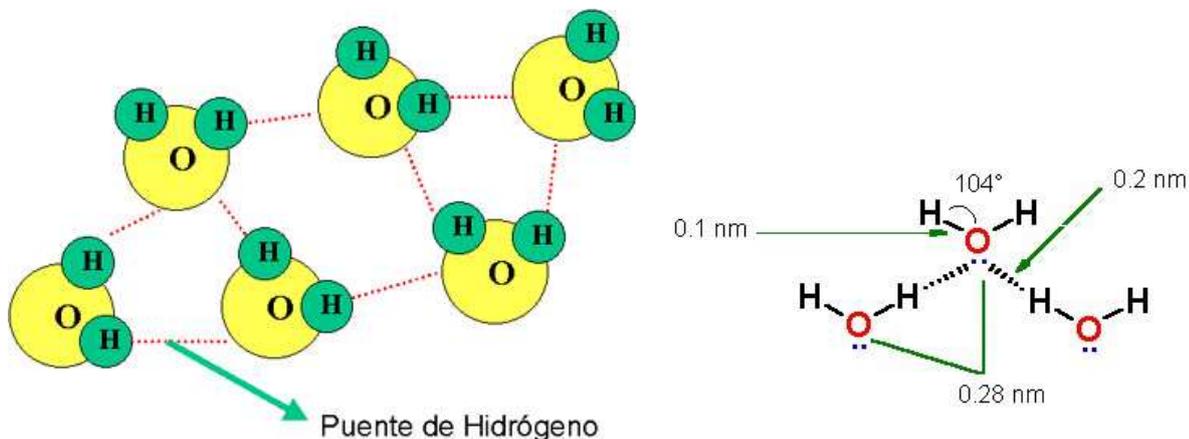
- Enlace o puente de Hidrógeno.
- Fuerzas de Van der Waals.

4.1 Enlace o puente de Hidrógeno.

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

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

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



Un ejemplo característico es el del H_2O . Es sabido que los puntos de fusión y ebullición de las sustancias disminuyen al hacerlo la masa molecular, pues es preciso comunicarles menos energía para que cambien de estado.

Si nos fijamos en los puntos de ebullición de los compuestos que forman los anfígenos con el hidrógeno: H_2Te (p. e. $-1,8^\circ\text{C}$), H_2Se (p. e. -42°C), H_2S (p. e. $-59,6^\circ\text{C}$) y H_2O (p.e. 100°C), observamos que lo dicho anteriormente se cumple para todos excepto para el agua que, aunque tiene la menor masa molecular, tiene la mayor temperatura de ebullición. Esto solo es explicable por la energía adicional que es preciso comunicar a las moléculas de agua para romper sus fuertes asociaciones electrostáticas intermoleculares de puente de hidrógeno, a fin de hacerlas pasar al estado gaseoso. Lo mismo se observa para los puntos de fusión.

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

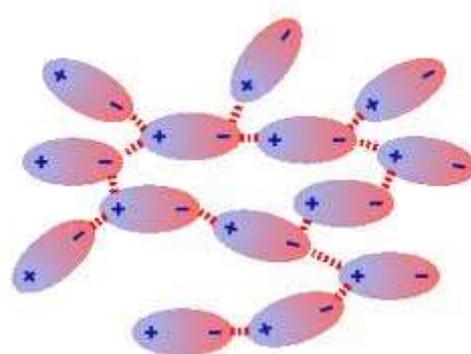
Algunas macromoléculas, como las proteínas o los ácidos nucleicos, también presentan puentes de hidrógeno. En particular, en el ADN los enlaces de este tipo son lo suficientemente fuertes como para mantener las dos cadenas unidas formando la característica doble hélice.

Más información: http://es.wikipedia.org/wiki/Enlace_por_puente_de_hidrógeno

4.2 Fuerzas de Van der Waals.

Las fuerzas de Van der Waals (o interacciones de Van der Waals), denominadas así en honor al científico neerlandés Johannes Diderik **van der Waals**, son fuerzas mucho más débiles que pueden darse entre:

- Entre dipolos permanentes (moléculas polares). Son débiles. Un modelo podría ser el ilustrado en la figura. Las partes negativizadas de una molécula polar atraen a las positivizadas de la molécula de al lado. Similares a los puentes de hidrógeno, se diferencian de estos en el valor de la interacción, bastante menor (entre 1 y 7 kJ/mol) y el hecho de que no sea necesario que participe el H. A veces se dice que los puentes de hidrógeno son un caso particular de este tipo de fuerzas dipolo permanente-dipolo permanente.
- En las moléculas apolares, la movilidad de las nubes electrónicas puede provocar una cierta asimetría eléctrica al desplazarse, lo que conduce a la formación de dipolos instantáneos en ellas. Estos, a su vez, pueden originar dipolos inducidos en las moléculas cercanas, produciéndose las con-



siguientes atracciones entre ellos. A estas últimas se les denomina fuerzas de dispersión o de London.

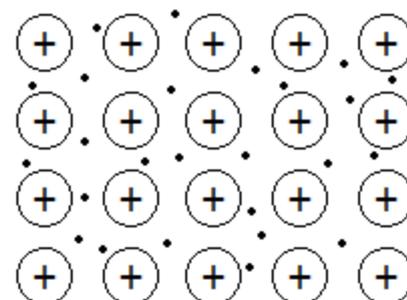
5 Enlace metálico.

Es el que forman los metales. Es un enlace bastante fuerte. Los átomos de los metales se caracterizan por tener pocos electrones en su última capa y no forman enlaces covalentes, ya que compartiendo electrones no adquieren la estructura de gas noble. Forman, pues un enlace metálico, en el que consiguen la estabilidad, compartiendo los electrones de valencia de manera colectiva, formando una nube electrónica que rodea a todo el conjunto de iones positivos, empaquetados ordenadamente, formando una estructura cristalina de alto índice de coordinación.

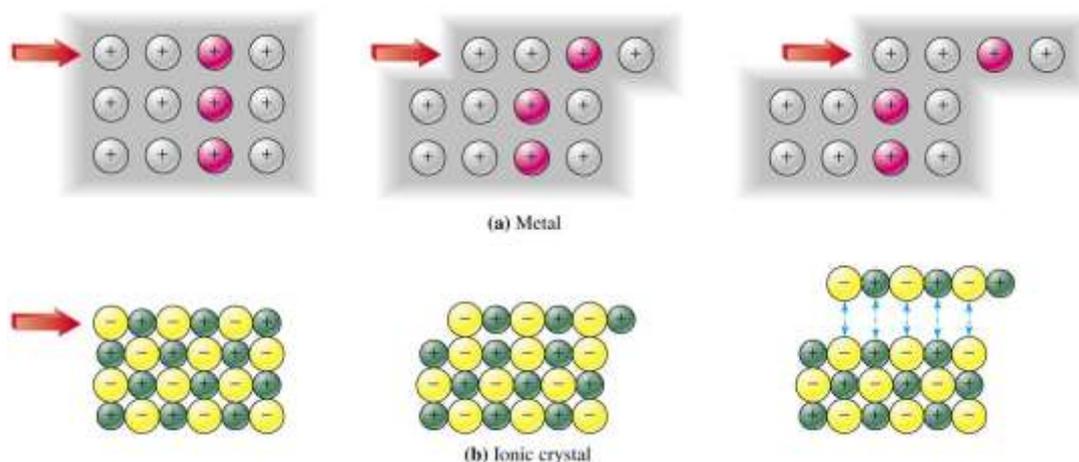
Existen dos modelos que lo explican:

5.1 Modelo del mar de electrones:

Cada átomo de metal aporta sus e^- de valencia a una especie de fondo común con lo que se produce una deslocalización de los mismos. La estructura del metal podría considerarse como cationes formando los nodos de la estructura cristalina estabilizados por un "mar de electrones" que evita la repulsión entre los mismos.



Esta teoría también justifica las especiales características de modelo que tienen los metales pues, al aplicar una fuerza, se produce un desplazamiento de las capas iónicas en las estructuras que no produce una variación importante en las mismas, por lo que no se rompen. En cambio, en el caso de cristales iónicos, al desplazar una capa sobre otra enfrentamos a iones del mismo signo, observándose una gran inestabilidad de tipo electrostático.

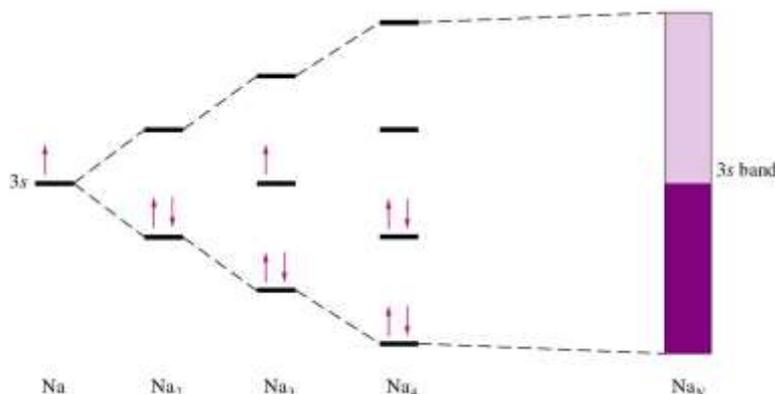


5.2 Modelo de bandas:

Este modelo supone que, al ser muy compacta la red metálica, los átomos que la forman se encuentran muy cercanos unos a otros, de manera que sus **orbitales atómicos de valencia se superponen** entre sí, dando lugar a un conjunto de orbitales de energías muy parecidas que constituyen lo que se denomina **banda de niveles energéticos**.

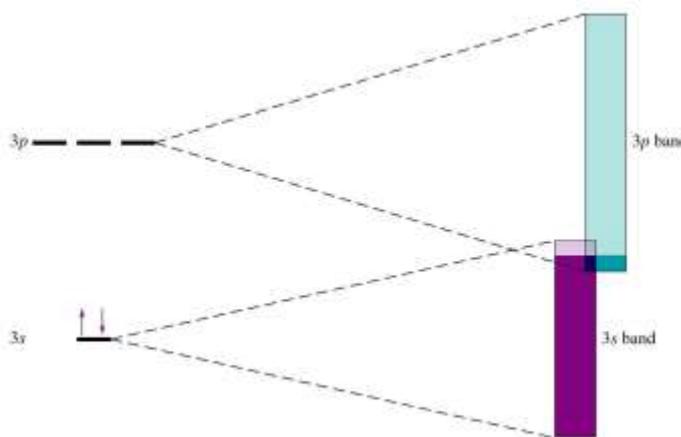


Este modelo explica el fenómeno de conductividad tan característico de estos elementos: los metales, con $1 e^-$ en el orbital s, como el litio por ejemplo, tendrán una banda formada por la combinación de todos los orbitales s de los átomos metálicos. Estará semillena, pues contendrá la mitad de electrones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



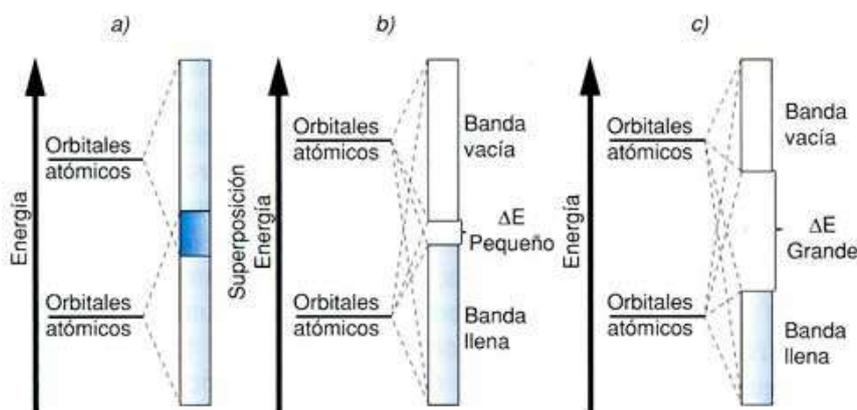
Lo mismo ocurrirá con el resto de los metales que tienen orbitales d sin rellenar completamente, la movilidad de los electrones por banda d formada será grande y, por tanto, la conductividad también.

En el caso de elementos con el orbital s lleno, como el Mg ($3s^2$) la banda de valencia también lo estará, pero la banda superior formada por los orbitales p vacíos, llamada banda de conducción, aparece con energía similar, por lo **que se solapa con aquella** creándose un gran espacio de libre movilidad electrónica a poca energía que se les comunique.



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

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



5.3 Propiedades de los compuestos metálicos.

- Son **dúctiles y maleables** debido a que no existen enlaces con una dirección determinada. Si se distorsiona la estructura los e^- vuelven a estabilizarla interponiéndose entre los cationes.

- Son **buenos conductores** debido a la deslocalización de los e^- . Si se aplica el modelo de bandas, puede suponerse que la banda vacía (de conducción está muy próxima a la banda en donde se encuentran los e^- de forma que con una mínima energía éstos saltan y se encuentran con una banda de conducción libre.
- **Conducen el calor** debido a la compacidad de los átomos que hace que las vibraciones en unos se transmitan con facilidad a los de al lado.
- Tienen, en general, **altos puntos de fusión y ebullición** dependiendo de la estructura de la red. La mayoría son sólidos.
- Tienen un **brillo** característico debido a la gran cantidad de niveles muy próximos de energía que hace que prácticamente absorban energía de cualquier longitud de onda, que inmediatamente emiten (reflejo y brillo).



- 23.- **(MGA11)** Explica las siguientes observaciones:
 a) El Cl_2 hierve a $-34\text{ }^\circ\text{C}$, mientras que el Br_2 lo hace a $58\text{ }^\circ\text{C}$.
 b) El SO_2 es una molécula angular, pero el CO_2 es lineal.
- 24.- **(MGA12)** La variación de las energías de enlace para cloro, bromo y yodo sigue el orden $Cl_2 > Br_2 > I_2$, mientras que para los puntos de fusión es $I_2 > Br_2 > Cl_2$. Razona este comportamiento.
- 25.- **(MGA13)** Teniendo en cuenta la estructura y el tipo de enlace, justifica:
 a) El cloruro de sodio tiene punto de fusión mayor que el bromuro de sodio.
 b) El carbono en forma de diamante es un sólido muy duro.
 c) El nitrógeno molecular presenta gran estabilidad química.
 d) El amoníaco es una sustancia polar.
- 26.- **(MGA14)** Indica qué tipo de fuerzas intermoleculares hay que vencer para conseguir: a) vaporizar agua; b) licuar azufre; c) vaporizar bromo.
- 27.- **(MGA15)** ¿Cuáles de los siguientes compuestos presentan puente de hidrógeno y cuáles fuerzas de Van der Waals?: NH_3 , CH_4 , HF , CH_3-COOH , H_2S .

S: Puente de hidrógeno: NH_3 , HF . Van der Waals: CH_4 , H_2S . Ambas: CH_3-COOH

EJERCICIOS DE LA PAU CYL 2007-14

CLASIFICACION Y PROPIEDADES DE LOS ENLACES:

- 28.- **(22-J08)** Dadas las siguientes sustancias químicas: I_2 , BaO , HCl y Fe , indique razonando las respuestas:
 a) Tipo de enlace que tienen dichas sustancias. (1,0 puntos)
 b) Estado físico que presentará cada una de las sustancias a temperatura ambiente. (1,0 puntos)
29. **(66-J10)** Razone si los siguientes enunciados son verdaderos o falsos:
 a) Los metales son buenos conductores de la corriente eléctrica y del calor. (0,5 puntos).
 b) Los sólidos covalentes moleculares tienen puntos de fusión y ebullición elevados. (0,5 puntos).
 c) Todos los compuestos iónicos, disueltos en agua, son buenos conductores de la corriente eléctrica. (0,5 puntos).
 d) Los compuestos covalentes polares son solubles en disolventes polares. (0,5 puntos).
30. **(78-JE10)** Responda razonadamente a las siguientes cuestiones:
 a) Enumere 4 propiedades generales de los compuestos iónicos, de los compuestos covalentes y de los metales. (1,2 puntos).
 b) Mediante un diagrama de Lewis, represente las moléculas: $HC-Cl_3$ y $Cl-HC=CH-Cl$. (0,8 puntos).
31. **(83-S10)** Formule o nombre los siguientes compuestos: (0,2 puntos cada uno).
- | | |
|-------------------------|----------|
| Perclorato potásico | PH_3 |
| Tetrafluoruro de estaño | B_2O_3 |
| Permanganato de litio | $HBrO_3$ |

Ácido cloroso HgSO_3

Óxido de cinc CaO

- 32. (89-S10)** Responda a las siguientes cuestiones:
- Indique el tipo de enlace que predomina (iónico, covalente o metálico) en las siguientes especies químicas: hierro, trifluoruro de boro, sulfuro de hidrógeno y cloruro sódico. (1,0 puntos).
 - En el caso de que predomine el enlace covalente, justifique la geometría de la molécula y su polaridad. (1,0 puntos).
- 33. (100-SE10)** En función del tipo de enlace explicar por qué:
- El agua, H_2O , es líquida en condiciones normales y el H_2S es un gas. (0,6 puntos).
 - El NaCl es sólido y el Cl_2 es un gas. (0,7 puntos).
 - El KCl es soluble en agua y el gas metano, CH_4 , es insoluble. (0,7 puntos).
- 34. (106-J11)** Conteste, razonando la respuesta, a las siguientes cuestiones:
- ¿Qué tipo de enlace cabe esperar en cada una de las siguientes especies químicas? NaCl , Cl_2 , CH_4 y Fe . (0,8 puntos)
 - ¿Cuál será el estado de agregación de cada una de las especies anteriores? (0,6 puntos)
 - ¿Cuáles se disolverán en agua? (0,6 puntos)
- 35. (122-J12)** Defina los siguientes conceptos:
- Enlace covalente, enlace iónico y enlace metálico. (1,0 puntos)
 - Principio de máxima multiplicidad de Hund y Principio de exclusión de Pauli. (1,0 puntos)
- 36. (169-J14)** Explique razonadamente los siguientes hechos:
- El cloruro de sodio tiene un punto de fusión de 801°C , mientras que el cloro es un gas a temperatura ambiente. (0,7 puntos)
 - El cobre y el yodo son sólidos a temperatura ambiente; pero el cobre conduce la corriente eléctrica, mientras que el yodo no. (0,7 puntos)
 - El etano tiene un punto de ebullición más alto que el metano. (Hasta 0,6 puntos)
- 37. (161-J14)** Responda las siguientes cuestiones:
- Defina afinidad electrónica de un elemento. (0,8 puntos)
 - ¿Cómo varía en el sistema periódico? Razónelo. (0,6 puntos)
 - Explique si podemos esperar, en función del tipo de enlace químico que existe entre sus partículas, que el flúor (F_2), el fluoruro de calcio (CaF_2) y el calcio (Ca), sean solubles en agua. (0,6 puntos)
- 38. (176-S14)** Indique si las siguientes propuestas son verdaderas o falsas y justifique sus respuestas:
- Los halógenos tienen primeras energías de ionización y afinidades electrónicas altas. (0,5 puntos)
 - El carácter metálico de los elementos de un grupo disminuye al aumentar Z . (0,5 puntos)
 - El elemento más electronegativo es el flúor. (0,5 puntos)
 - El H_2O tendrá menor punto de ebullición que el H_2S . (0,5 puntos)