

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

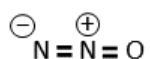
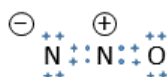
TEMA 6

1. Dibuja las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos: Na₂S, SCl₂, N₂O, NO₂, CO, SO₃, SO₃²⁻, PCl₅, HClO y H₃PO₃

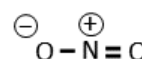
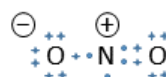
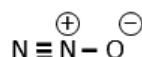
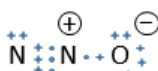
Na₂S y SCl₂



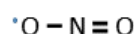
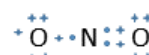
N₂O y NO₂



Y también:



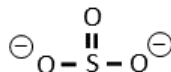
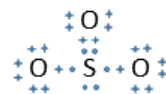
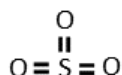
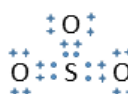
Y también:



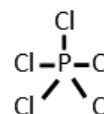
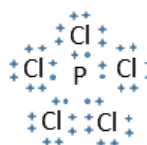
CO



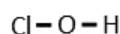
SO₃ y SO₃²⁻



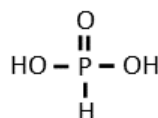
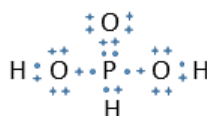
PCl₅



HClO



H₃PO₃ [HPO(OH)₂]



2. ¿Qué tienen en común las estructuras BH₄⁻, CH₄ y NH₄⁺? A la vista de sus estructuras de Lewis, ¿qué corolario puede extraerse?

Son estructuras isoelectrónicas y con el mismo número de átomos alrededor del átomo central, por lo que todas presentan la misma estructura de Lewis (excepción hecha de las cargas formales sobre el átomo central, que son distintas en cada caso). El corolario sería que todas las estructuras isoelectrónicas y con el mismo número de átomos alrededor del átomo central responden a la misma estructura de Lewis.

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

3. Determina si son o no polares las siguientes moléculas: agua, dióxido de carbono, amoniaco, metano, etileno, acetona, cloroformo, metanol, diclorometano, tetrabromuro de carbono, cianuro de hidrógeno, yodo molecular, trióxido de azufre.

Un enlace polar es el que se establece entre elementos de diferente electronegatividad. El agua tiene, por tanto, dos enlaces polares que no se compensan por simetría, por lo que dan lugar a un momento dipolar neto y, por tanto, la molécula será polar. Lo mismo sucede con el amoniaco (pirámide triangular con tres enlaces polares), la acetona (con nueve enlaces polares), el cloroformo y el diclorometano (tetraédricos con cuatro enlaces polares), el metanol (con cinco enlaces polares) y el cianuro de hidrógeno (lineal con dos enlaces polares). Por otro lado, el dióxido de carbono (lineal), metano y tetrabromuro de carbono (tetraédricos), etileno (rectangular plano) y trióxido de azufre (triangular plano) presentan enlaces polares aunque los momentos dipolares asociados a cada enlace se cancelan por simetría dando como resultado moléculas apolares. Finalmente, el yodo molecular está formado por un único enlace apolar (misma electronegatividad de los átomos participantes en el enlace) y la molécula es, por tanto, apolar.

4. Determina la geometría base y la molecular de las siguientes estructuras: a) SnCl_2 ; b) BrF_4^+ ; c) SbCl_5^{2-} ; d) SeBr_2 ; e) XeF_2

a) SnCl_2

Configuración electrónica del átomo central (Sn): s^2p^2

AX_2E

Invierte 2 electrones en enlaces

Queda un par solitario

Geometría base = 2 átomos + 1 par solitario = 3 elementos = triangular plana

Forma molecular = 2 átomos basados en un triángulo = angular con ángulo $< 120^\circ$

b) BrF_4^+

Configuración electrónica del átomo central (Br): s^2p^5

AX_4E

Invierte 4 electrones en enlaces

Hay una carga positiva (un electrón menos en el átomo central)

Queda un par solitario

Geometría base = 4 átomos + 1 par solitario = 5 elementos = bipirámide trigonal

Forma molecular = 4 átomos basados en una bipirámide trigonal = balancín

c) SbCl_5^{2-}

Configuración electrónica del átomo central (Sb): s^2p^3

AX_5E

Invierte 5 electrones en enlaces

Hay dos cargas negativas (dos electrones más en el átomo central)

Queda un par solitario

Geometría base = 5 átomos + 1 par solitario = 6 elementos = octaédrica

Forma molecular = 5 átomos basados en un octaedro = pirámide cuadrada

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

d) SeBr_2

Configuración electrónica del átomo central (Se): s^2p^4

Invierte 2 electrones en enlaces

Quedan dos pares solitarios

Geometría base = 2 átomos + 2 pares solitarios = 4 elementos = tetraédrica

Forma molecular = 2 átomos basados en un tetraedro = angular con un ángulo $< 109.5^\circ$



e) XeF_2

Configuración electrónica del átomo central (Xe): s^2p^6

Invierte 2 electrones en enlaces

Quedan tres pares solitarios

Geometría base = 2 átomos + 3 pares solitarios = 5 elementos = bipirámide trigonal

Forma molecular = 2 átomos basados en una bipirámide trigonal = lineal



5. Calcula la electronegatividad de Pauling del flúor a partir de los siguientes datos:

$\Delta H_d(\text{H}_2) = +104.2 \text{ kcal/mol}$; $\Delta H_d(\text{F}_2) = +36.6 \text{ kcal/mol}$; $\Delta H_d(\text{HF}) = +134.6 \text{ kcal/mol}$; $\chi_{\text{H}} = 2.20$

A partir de la ecuación de Pauling se tiene:

$$\Delta\chi = 0.208 \sqrt{\Delta H_{d(\text{HF})} - \sqrt{\Delta H_{d(\text{F}_2)} \times \Delta H_{d(\text{H}_2)}}$$

Sustituyendo:

$$\Delta\chi = 0.208 \sqrt{134.6 - \sqrt{36.6 \times 104.2}} = 1.77$$

Supuesto que $\chi_{\text{H}} = 2.20$, entonces $\chi_{\text{F}} = 1.77 + 2.20 = 3.97$

6. Determina la electronegatividad del carbono ($r_{\text{cov}} = 0.77 \text{ \AA}$) utilizando la ecuación de Allred-Rochow.

La ecuación de Allred-Rochow utiliza la carga nuclear efectiva de la última capa y el radio covalente:

$$\chi = 0.359 \frac{Z_{\text{eff}}}{r_{\text{cov}}^2} + 0.744$$

Para este caso, la configuración electrónica del C es $1s^2 2s^2 2p^2$, y la Z_{eff} de la última capa se calcula como: $Z_{\text{eff}} = 6 - (3 \times 0.35 + 0.85 \times 2) = 3.25$

$$\chi_{\text{C}} = 0.359 \frac{3.25}{(0.77)^2} + 0.744 = 2.7$$

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

7. Determina la electronegatividad de Mulliken del flúor a partir de los siguientes datos:

$$E_i = +17.418 \text{ eV}; A_e = -3.45 \text{ eV}$$

Usando la fórmula de Mulliken, tendremos:

$$\chi_F = 0.187 (E_i - A_e) + 0.17 = 0.187 (17.418 + 3.45) + 0.17 = 4.07$$

8. Siguiendo las reglas de Fajans, ordena los siguientes cationes por su poder polarizante (entre paréntesis los radios iónicos en pm): $\text{Be}^{2+}(45)$, $\text{Mg}^{2+}(72)$, $\text{Zn}^{2+}(74)$, $\text{Ag}^+(115)$, $\text{Sr}^{2+}(118)$, $\text{K}^+(138)$

Teniendo en cuenta que el poder polarizante aumenta primero con la carga, luego con el radio y finalmente con una configuración d^{10} , podemos escribir:



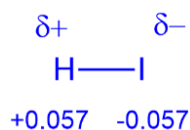
9. Determinar el %CI de la molécula de HI sabiendo que el momento dipolar observado es igual 0,44 D y que la distancia de enlace es de 161 pm. Indica también, sobre cada átomo, la separación de carga debida a la polarización.

$$\%CI = \frac{\mu_{exp}}{\mu_{iónico}} \times 100$$

$$\mu_{iónico} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 1.61 \times 10^{-10} \text{ m} / 3.336 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}\cdot\text{D}^{-1} = 7.73 \text{ D}$$

$$\text{De donde: } \%CI = 0.44/7.73 \times 100 = 5.7\% \text{ (%E}_{cov} = 94.3\%)$$

Dado que la relación de momentos dipolares es igual a la relación de cargas con respecto a la separación total (enlace 100% iónico), al ser la distancia la misma en ambos casos, significa que el carácter iónico (en tanto por uno) es la misma que la separación de cargas debida a la polarización. Por tanto, podemos escribir:



10. Igual que el problema anterior con la ecuación de Pauling:

$$\%CI = (1 - e^{-\left(\frac{\Delta EN}{2}\right)^2}) \times 100$$

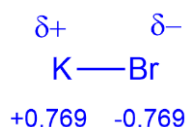
Según esta ecuación, el %CI de la molécula de HI se podría calcular directamente a partir de la diferencia de electronegatividad de los átomos implicados. Como $\chi_I = 2.5$ y $\chi_H = 2.1$, se tiene que el %CI = 3.92.

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

Con este dato no podemos calcular la separación de cargas ya que este carácter iónico no está definido en función del momento dipolar.

11. Lo mismo que los dos problemas anteriores para el KBr, sabiendo que el momento dipolar observado es 10.41 D, la distancia interatómica 282 pm y las electronegatividades, 3.0 para el Br y 0.8 para el K.

$$\%CI = \frac{\mu_{exp}}{\mu_{iónico}} \times 100 = \frac{10.41 \text{ D} \times 3.336 \times 10^{-30} \frac{\text{C} \cdot \text{m}}{\text{D}}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 282 \times 10^{-12} \text{ m}} \times 100 = 76.9\%$$



El carácter iónico de Pauling, en cambio, sería: $\%CI = \left(1 - e^{-\left(\frac{\Delta EN}{2}\right)^2}\right) \times 100 = 70.2\%$

12. ¿Tiene sentido que los puntos de fusión indicados a continuación varíen de la siguiente forma? LiF = 870 °C, LiCl = 613 °C, LiBr = 547 °C, LiI = 446 °C

Sí, ya que el aumento del radio del anión lo hace más polarizable y, por tanto, el enlace que se establece será menos iónico, disminuyendo las propiedades que dependían de la energía reticular, como el punto de fusión.

13. ¿Son más covalentes los compuestos de Li⁺ o Be²⁺ que los correspondientes de Cs⁺ y Ba²⁺?

Sí, porque son, respectivamente, cationes mucho más polarizantes y eso implica mayor densidad electrónica en la región del enlace.

14. Ordena por carácter covalente (de menor a mayor) los siguientes compuestos: HBr, KBr, LiBr, KCl y HF.

Nos basamos en el poder polarizante del catión y la polarizabilidad del anión. De esa forma, el orden sería: (menos covalente) KCl < KBr < LiBr < HF < HBr (más covalente)

15. Ordena por longitud (de menor a mayor) los siguientes enlaces: C-N, C=O, C-C, C-P, C≡N, C-Ge, C≡O, C-O, C=C, C-Si, C≡C y C=N.

Considerando primero el orden de enlace y luego el tamaño de los átomos, podemos establecer el siguiente orden: C≡O < C≡N < C≡C < C=O < C=N < C=C < C-O < C-N < C-C < C-P < C-Si < C-Ge

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

16. ¿Qué hibridación cabe esperar para los átomos centrales de las siguientes moléculas? Agua, amoníaco, metano, hexafluoruro de azufre, pentacloruro de fósforo, diclorocarbano.

Para ello, nos basamos en la TRPECV para establecer el número de pares de electrones (libres y compartidos en enlaces) alrededor del átomo central, para así determinar las necesidades orbitales para cumplir los requerimientos geométricos:

Agua (H₂O): en el átomo de oxígeno del agua hay 4 pares de electrones totales a su alrededor (2 libres y 2 compartidos) según una distribución tetraédrica, por lo que la hibridación del oxígeno compatible con esta situación, a tenor de la configuración electrónica del oxígeno con una capa de valencia s^2p^4 , es sp^3 al involucrar todos los orbitales de la capa de valencia.

Amoníaco (NH₃): en el nitrógeno sucede igual que en el caso anterior, salvo por el hecho de que hay un par libre y tres compartidos. Su configuración electrónica es s^2p^3 , y su hibridación, por tanto, también sp^3 , para dar lugar a una geometría tetraédrica de los pares de electrones.

Hexafluoruro de azufre (SF₆): según la TRPECV, el azufre, con estado de oxidación +6, se rodea de seis pares de electrones (todos compartidos en este caso) que tienen una geometría octaédrica. Para explicar esta geometría en el azufre según la TEV recurrimos a una hibridación sp^3d^2 (seis orbitales totales) ya que el azufre, aún llenando la subcapa 3p, tiene orbitales d vacíos que pueden ponerse a disposición de la mezcla híbrida. El resto de orbitales d no hibridados siguen existiendo, vacíos, como orbitales d puros. Como todos los orbitales d tienen, en principio, la misma energía, es irrelevante los orbitales mezclados, pero dada la geometría octaédrica, aquellos que pueden mezclarse son precisamente el d_{z^2} y $d_{x^2-y^2}$, ya que son los que apuntan a las direcciones atómicas.

Pentacloruro de fósforo (PCl₅): en este caso, el estado de oxidación +5, se rodea de cinco pares de electrones que, según la TRPECV nos lleva a una disposición de bipirámide trigonal. Para explicar esta geometría en el fósforo, según la TEV, recurrimos a una hibridación sp^3d (cinco orbitales totales) ya que el fósforo, como el azufre, tiene orbitales d vacíos que pueden ponerse a disposición del conjunto orbital para hibridarse. El único orbital d que apunta a las direcciones atómicas es el d_{z^2} , por lo que será el que se hibride en este caso para dar lugar a la geometría de bipirámide trigonal.

Diclorocarbano (CCl₂): el carbono, con configuración s^2p^2 , utiliza solo dos electrones de valencia para combinarse, quedando un par libre. De esta forma, la geometría base es triangular plana por lo que ángulo ClCCl será $< 120^\circ$. Para conseguir este tipo de geometría base, la hibridación del carbono ha de ser sp^2 , de forma que se tengan tres pares de electrones alrededor del carbono.

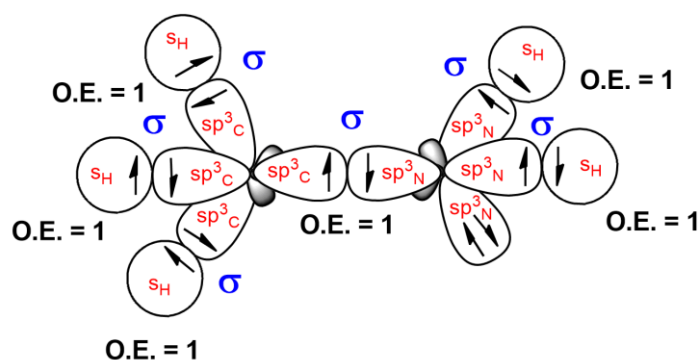
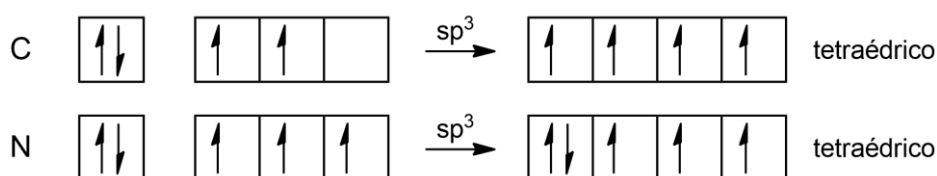
17. Establece la hibridación de cada átomo, la geometría molecular, la simetría de todos los enlaces implicados, el llenado orbital y el orden de enlace de las siguientes moléculas: a) metilamina, b) formaldehído, c) cianuro de hidrógeno, y d) catión monovalente trimetilestaño.

Antes de comentar cada compuesto, decir que los átomos de hidrógeno no presentan ningún tipo de hibridación al tener estos solo un electrón de valencia en un orbital s y no disponer de más orbitales según los números cuánticos posibles para $n = 1$. Para el resto de átomos usamos la TRPECV para poder predecir la geometría base de cada átomo con respecto a los que los rodean y

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

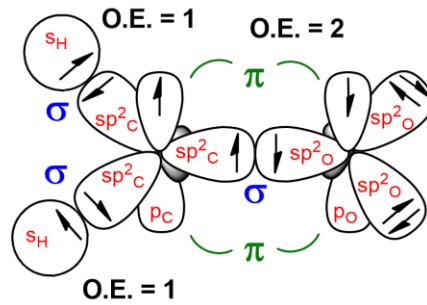
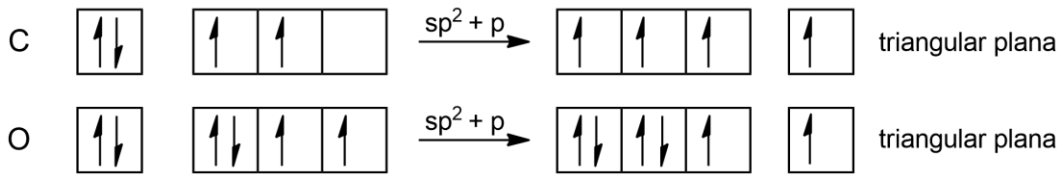
consideramos la hibridación, en el átomo central considerado en cada caso, que sea compatible con dicha geometría base.

a) **Metilamina (CH_3NH_2)**: el carbono está unido a cuatro átomos diferentes, por lo que usa todos sus electrones de valencia y no deja pares libres sin compartir (topología AX_4). Por tanto, la geometría alrededor del carbono ha de ser tetraédrica y de ahí resulta una hibridación sp^3 . Con dicha hibridación se dejan cuatro electrones desapareados, disponibles para generar un enlace sencillo cada uno de ellos. El nitrógeno está unido a solo tres átomos, dejando un par de electrones libre. Esta topología (AX_3E) conlleva también una distribución tetraédrica alrededor del átomo de nitrógeno y, por tanto, también una hibridación sp^3 , resultado de la cual hay tres electrones desapareados disponibles, cada uno de ellos, para formar un enlace sencillo. En este caso, todos los enlaces formados tienen simetría sigma, ya que presentan un solapamiento frontal.

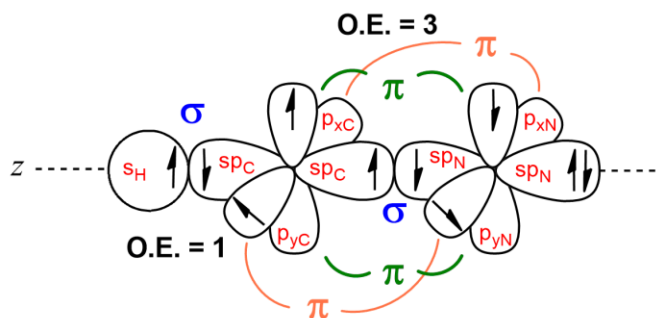
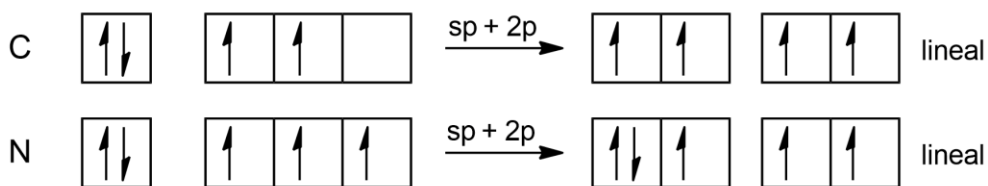


b) **Formaldehído (HCHO)**: en este caso, el carbono está unido a solo tres átomos, sin pares libres, por lo que la hibridación ha de ser sp^2 para así poder tener una disposición triangular plana (según la TRPECV). Esto deja un orbital p puro del carbono, sin hibridar, disponible para enlace al tener este un electrón desapareado (en total 4 electrones desapareados para generar cuatro enlaces con tres átomos \rightarrow uno ha de ser doble). Este orbital, por tanto, es el que forma un doble enlace con el oxígeno y es perpendicular al plano molecular. El átomo de oxígeno, terminal, con una topología AXE_2 , también ha de ser triangular plano, por lo que su hibridación ha de ser también sp^2 , dejando, a su vez, un orbital perpendicular al plano molecular con un electrón desapareado para enlazar con el p puro libre del carbono. De esta manera, tenemos los dos electrones desapareados totales para formar dos enlaces (en este caso, doble enlace con el carbono). Este doble enlace está formado por uno de simetría sigma por solapamiento frontal entre dos híbridos sp^2 (uno por cada átomo), y otro de simetría pi, donde los dos orbitales p puros solapan de forma lateral.

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

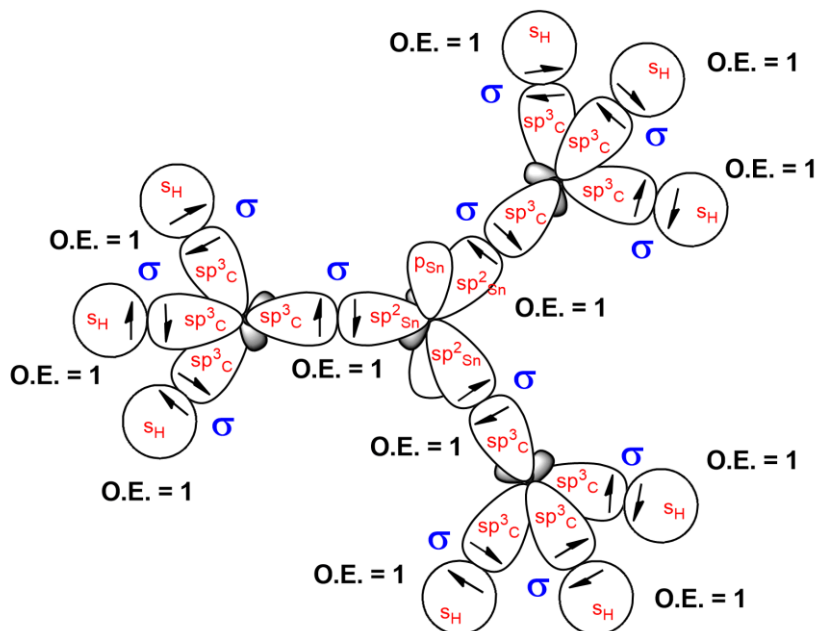
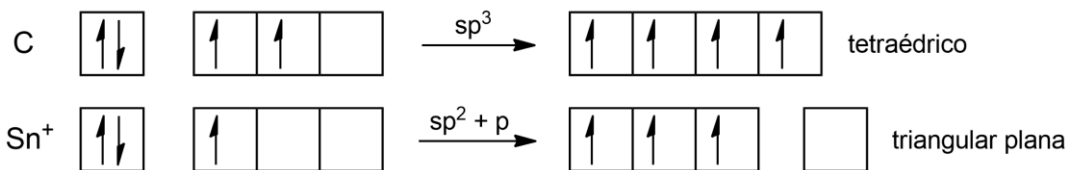


c) Cianuro de hidrógeno (HCN): En este caso, después de hacer la estructura de Lewis y aplicar la TRPECV sobre cada átomo (distinto de hidrógeno) vemos que el carbono ha de ser lineal y no tiene pares de electrones libres (topología AX₂), lo que conduce a una geometría lineal alrededor del carbono. Luego el nitrógeno, con topología AXE, también ha de ser lineal (esta solución es trivial ya que dos átomos, AX, solo pueden mantener entre sí una disposición lineal, por eso esta topología no se incluye en la diferente casuística de la TRPECV). Como quiera que el átomo de carbono tiene cuatro electrones desapareados y uno lo invierte con el hidrógeno, los tres restantes los debe invertir con el nitrógeno, con tres electrones desapareados, por lo que forma un enlace triple con este. Dicho enlace estaría formado por un enlace sigma entre los híbridos sp de cada átomo y los dos orbitales p puros perpendiculares a la dirección del enlace (y relativamente perpendiculares entre sí), dando lugar a sendos enlaces pi.



EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

d) **Catión monovalente trimetilestano** ($[\text{Sn}(\text{CH}_3)_3]^+$): en este caso, la teoría de repulsión de pares nos indica una geometría triangular plana para el estaño ya que la topología es AX_3 (la carga positiva elimina el cuarto electrón desapareado del estaño). Su hibridación, por tanto, será sp^2 , dejando tres electrones desapareados para formar enlaces con cada metilo. El orbital p puro restante queda en la estructura pero vacío. En cada metilo, por otro lado, los átomos de carbono han de presentar hibridación sp^3 para poder unirse a cuatro átomos, por lo que la distribución espacial de los enlaces es tetraédrica (como se deduce también de aplicar la TRPECV). Así pues, en este caso, los tres híbridos sp^2 del estaño se combinan con los correspondientes híbridos sp^3 de los carbonos a través de enlaces sencillos.



18. En 1999 se sintetizó una sal que contenía el catión N_5^+ , en el que los cinco átomos de N forman una cadena no ramificada. Escribe al menos tres formas resonantes (usando la teoría de Lewis) para esta estructura.

Es fácil llegar a tres formas resonantes dada la versatilidad del N para formar cualquier tipo de enlace. Entre otras, se pueden proponer:



i) $\text{N}\equiv\text{N}-\text{N}-\text{N}\equiv\text{N}$; ii) $\text{N}\equiv\text{N}-\text{N}=\text{N}=\text{N}$; iii) $\text{N}=\text{N}=\text{N}=\text{N}=\text{N}$

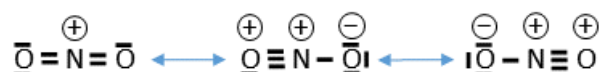
EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

19. Los compuestos $\text{H-C}\equiv\text{N}$ y el $\text{H-N}\equiv\text{C}$, ¿son formas resonantes?

No. Son estructuras isómeras, pero no formas resonantes. En cualesquiera formas resonantes no puede haber cambio en la disposición de los átomos, sino solo de los electrones.

20. Establece las posibles formas resonantes (usando la teoría de Lewis), la geometría (según la TRPECV) y la hibridación del átomo central (según la TEV) de las siguientes especies: NO_2^+ , NO_2 y NO_2^- .

i) NO_2^+ (catión nitronio)



Para esta estructura tenemos una topología AX_2 , por lo que su estructura es, inequívocamente lineal. Por tanto, la hibridación del átomo central será sp , dejando dos orbitales p puros sin hibridar, que son los que permiten el establecimiento de los enlaces múltiples con los átomos de oxígeno.

ii) NO_2 (radical dióxido de nitrógeno)



En este caso, tenemos una topología AX_2E (en el caso de tener un electrón solitario -formas resonantes centrales- se cuenta como un elemento más, como si fuera un par libre, porque ese electrón debe ocupar, en todo caso, un único orbital). Por tanto, la geometría base será triangular plana y la molécula, angular. Compatible con esta situación sería una hibridación sp^2 del átomo de nitrógeno, dejando un orbital p puro sin hibridar, que permitiría el establecimiento del doble enlace con el oxígeno.

iii) NO_2^- (anión nitrito)



Esta estructura es equivalente a la anterior solo que, en lugar de un electrón solitario, tenemos un par de electrones completo en un par libre según una geometría triangular plana. La molécula, por tanto, es angular y la hibridación del átomo central será sp^2 , dejando así un orbital p puro sin hibridar, que permitiría el establecimiento del doble enlace con el oxígeno.

21. Ordenar las especies de cada grupo en *orden decreciente de longitud de enlace*:

(a) CO , CO_2 y CO_3^{2-} ; (b) NO^+ , NO_2^+ , NO_2^- y NO_3^- .

(a) Las estructuras de Lewis sobre cada una de ellas nos lleva a las siguientes conclusiones: el CO se puede interpretar a partir de un triple enlace entre el carbono y el oxígeno. En el CO_2 , dobles enlaces entre los mismos átomos. En el carbonato, habría un doble enlace y dos cargas negativas, pero si tenemos en cuenta la resonancia según la TEV, el doble enlace puede estar en cualquier posición, deslocalizándose el par de electrones pi a lo largo de la estructura. Por tanto, para el CO

EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

tendríamos un orden de enlace (O.E.) igual a 3, mientras que sería 2 para todos los enlaces en el CO_2 . En el carbonato, el orden de enlace sería 1, de la contribución sigma, más $1/3$ para cada oxígeno, de la contribución pi, esto es, $4/3$. Por tanto, la longitud de enlace se ordenaría como sigue:



(b) De igual forma, el NO^+ se puede representar a partir de un triple enlace entre el nitrógeno y el oxígeno, el NO_2^+ , con dobles enlaces (ver problema anterior), el nitrito con un doble enlace resonando entre los dos oxígenos (ver problema anterior) y el nitrato como un doble enlace resonando entre tres oxígenos. Por tanto, los órdenes de enlace serían, respectivamente: 3, 2, $3/2$ y $4/3$, por lo que el orden sería:



22. La energía de enlace Cl–Cl es 242 kJ/mol. ¿Podrá un fotón de luz visible (de 400 a 700 nm) romper este enlace? Datos: $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$ (constante de Planck) y $c = 2,998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ (velocidad de la luz en el vacío).

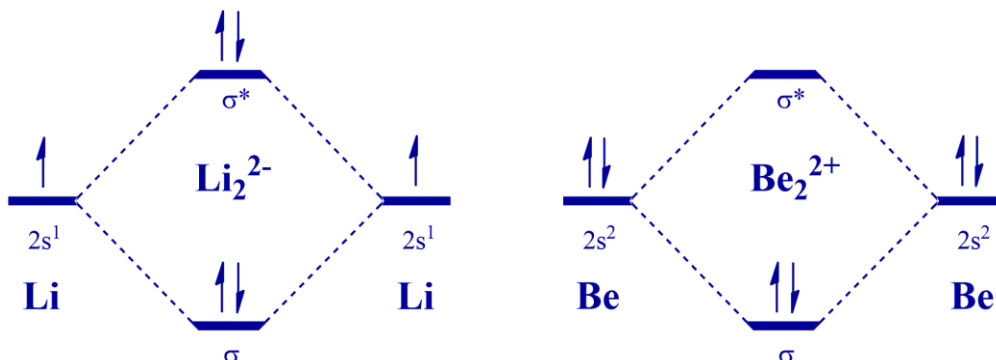
La forma más directa de resolver el problema es calcular la longitud de onda de un fotón de energía 242 kJ/mol, y así ver en qué posición se encuentra con respecto al rango 400-700 nm. Para obtener la longitud de onda de un fotón hemos de hacerlo a partir de la energía de un fotón, por lo que nuestro valor de energía tendremos que dividirlo por N_A (número de Avogadro). De esta forma:

$$E \left(\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot 2.998 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{\frac{242 \times 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}}} = 4.94 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$= 494 \text{ nm}$$

Esto significa que, del rango de 400-700 nm, solo los fotones con una longitud de onda menor o igual a 494 nm (azul verdoso) podrán disociar la molécula de cloro.

23. Describe, a través de la teoría de orbitales moleculares (TOM), si las especies Li_2^{2-} y Be_2^{2+} podrían ser estables.



EJERCICIOS ENLACE COVALENTE

Los diagramas de OOMM anteriores se pueden construir a partir de las configuraciones electrónicas de la capa de valencia. En ambos casos, la interacción de los orbitales 2s dan como resultado un orbital sigma enlazante y otro sigma de antienlace siguiendo el Principio de Conservación de la Energía. Luego procedemos al llenado orbital teniendo en cuenta la carga de la especie en cuestión. En el caso del Li_2^{2-} , se llena tanto el orbital σ como el σ^* , por lo que no habrá tendencia a que ambos átomos se mantengan unidos y no será una situación estable. De hecho, el orden de enlace (O.E.) sería cero ya que $\frac{2-2}{2} = 0$. En cambio, para Be_2^{2+} , solo se llena el orbital σ , por lo que sería una situación estable ($OE = \frac{2-0}{2} = 1$) y podría darse este tipo de estructura.

Nota.- En la TOM el orden de enlace se define así:

$$OE = \frac{n^{\circ} e^{-} \text{ en orbitales enlazantes} - n^{\circ} e^{-} \text{ en orbitales antienlazantes}}{2}$$

24. Describir el enlace en la especie C_2^{2-} a partir de la TOM.

Este anión (acetiluro) forma parte de una de las clases de carburos que se conocen, como por ejemplo el CaC_2 . El diagrama de OOMM, a partir de los orbitales p de cada carbono puede, de forma aproximada, interpretarse como se muestra en la figura siguiente, donde se ve que se ocupan todos los niveles enlazantes. El orden de enlace resulta ser 3 como, efectivamente, se conoce para este tipo de carburos ($-\text{C}^{-1} \equiv \text{C}^{-1}-$).

