

Polaridad de las moléculas

No hay que confundir un enlace polar con una molécula polar.

Un enlace entre dos átomos puede ser polar o apolar. Se debe a la diferencia de EN

Enlace apolar

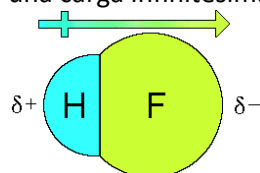
Cuando los dos átomos del enlace son iguales $\Delta EN = 0$:



Se dice que el momento dipolar $\mu = 0$

Enlace polar

Cuando hay una ΔEN , el átomo más electronegativo atrae hacia sí los electrones del enlace, quedando cargado con una carga infinitesimal negativa ($-\delta$) y el otro átomo con una carga infinitesimal positiva ($+\delta$). Como en H-F:



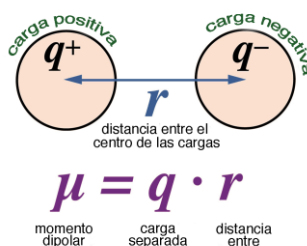
Se dice que hay un momento dipolar distinto de 0. Se forma un dipolo.



Momento dipolar.

La polaridad de un enlace se representa mediante un vector llamado momento dipolar " μ "

- Depende la diferencia de electronegatividad, χ , entre los átomos
- Su dirección es la línea que une ambos átomos y cuyo sentido hacia el más electronegativo
- En los enlaces homooatómicos (H-H), Cl-Cl...) es nulo



Para las moléculas

En el caso de una molécula, la polaridad viene dada por la resultante de todos los momentos dipolares de la molécula (de todos los enlaces). Puede haber moléculas polares con enlaces polares, pero también moléculas apolares con enlaces polares.

SODIUM CHLORIDE STRUCTURE

BYJU'S



Una advertencia: Los compuestos iónicos son totalmente polares, tienen cargas + y -, no pequeñas "carguitas" como en los enlaces covalentes. Y por supuesto todos los iones son ultrapolares.

Profundizando un poco más... Veamos un par de ejemplos.

En el enlace covalente no se forman iones, las moléculas son neutras. Sin embargo puede darse el caso de que la carga no esté repartida por igual en toda la molécula.

H₂ (molécula con átomos del mismo elemento): Comparten un par de electrones. Al ser iguales los núcleos, ambos atraen por igual al par de electrones de enlace, con lo que la carga eléctrica estará repartida por igual entre los dos átomos (la molécula es simétrica). No podemos dividir la molécula en dos partes, una con exceso de carga positiva y otra con exceso de carga negativa. Una sustancia constituida por moléculas de este tipo se dice que es apolar.

H Cl (molécula con átomos de distinto elemento): También comparten un par de electrones, pero, a diferencia del ejemplo anterior, el Cl es más electronegativo (3,0) que el hidrógeno (2,1), por lo que atrae más al par de electrones de enlace. Como consecuencia, habrá una mayor concentración de electrones alrededor del núcleo de Cl. En esa zona de la molécula existirá más carga negativa que positiva. Se habla de que existe una *carga parcial negativa*, (δ^-), que es siempre menor que la carga de un electrón. En la otra zona, en los alrededores del núcleo de H, existe más carga positiva que negativa (*carga parcial positiva*, δ^+). Ambas cargas parciales son iguales en valor absoluto (la molécula

es neutra). Una molécula que presenta esa separación de cargas se denomina dipolo que produce un momento dipolar (μ), que es un vector que va desde la carga positiva a la negativa.

PASOS PARA DEDUCIR LA POLARIDAD DE LAS MOLÉCULAS

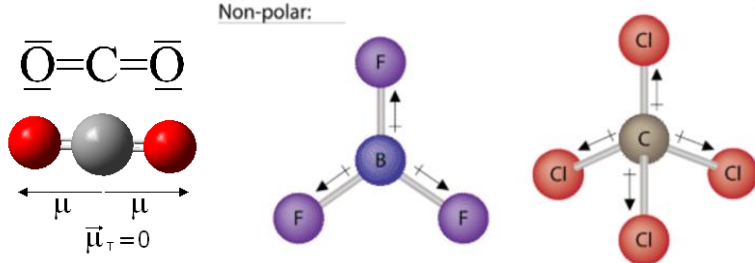
Estructura de Lewis

Geometría

Si tienen o no enlaces polares.

Mirar si hay un momento dipolar resultante $\Sigma\mu$

Ejemplos de moléculas apolares

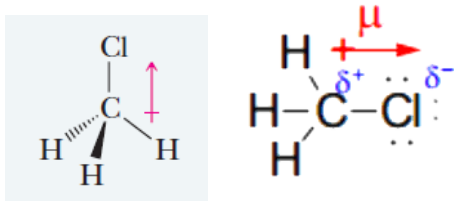


Como vemos, los momentos dipolares se anulan entre sí. Se ve claramente porque todos los átomos que rodean al central son iguales y están en figuras simétricas.

En el CH_4 o CCl_4 , que son apolares, si cambiamos uno de los átomos por otro, por ejemplo CH_3Cl (clorometano), ya no es simétrica y será polar.

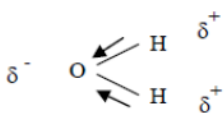
Recuerda que el vector va hacia el átomo más EN. Es útil saberse la EN de algunos elementos:

H	C	N	O	F
2,1	2,5	3	3,5	4

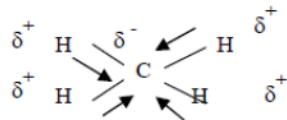


Hay 3 vectores iguales dirigidos del H al C, y hay uno diferente dirigido del C al Cl, que no se compensa con ningún otro.

Molécula polar H_2O



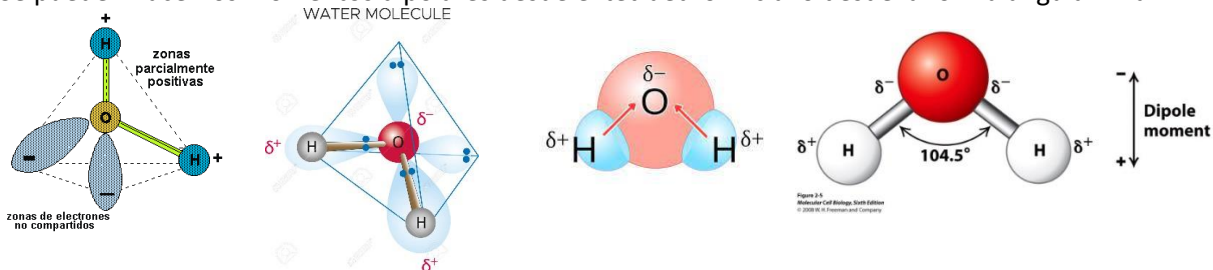
Molécula apolar CH_4



Si la molécula tiene pares solitarios como el H_2O y el NH_3 , el momento dipolar va desde el átomo central hacia el par solitario (No hay nada más negativo que los propios electrones):

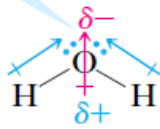
H_2O

Se pueden hacer los momentos dipolares desde el tetraedro inicial o desde la forma angular final.

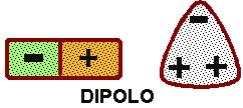


En el tetraedro las 4 posiciones no son iguales, no se anulan los 4 vectores del momento dipolar entre sí, hay 2 vectores que van de los H al O y otros 2 vectores que van del O a los e solitarios.

La suma vectorial (en rojo) de los dipolos de enlace (azul) sitúa el centro de la carga parcial positiva entre los dos hidrógenos.

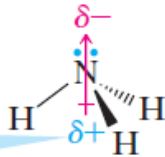


En el ángulo, la parte del O es negativa y la parte de los H es positiva, un dipolo perfecto:



NH₃

El centro de la carga parcial positiva se localiza entre los tres átomos de hidrógeno.



	CO ₂	BCl ₃	H ₂ O	NH ₃
Estructura de Lewis				
Geometría molecular	Lineal O=C=O	Triangular plana 	Angular 	Piramidal triangular
Enlaces polarizados	2 O ^{δ-} -C ^{δ+} -O Los $\vec{\mu}$ se anulan.	3 Los $\vec{\mu}$ se anulan.	2 Hay $\vec{\mu}$ resultante.	3 Hay $\vec{\mu}$ resultante.
Momento dipolar resultante	$\mu_r = 0$ No polarizada	$\mu_r = 0$ No polarizada	$\mu_r = 1,87 \text{ D}$ Dipolo	$\mu_r = 1,46 \text{ D}$ Dipolo

Resumen:

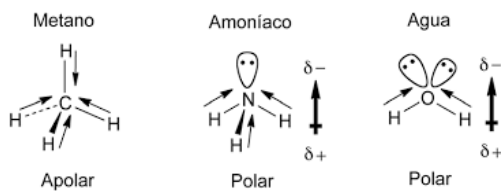


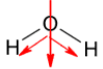
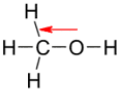
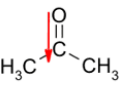
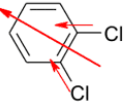
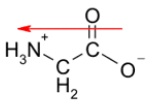
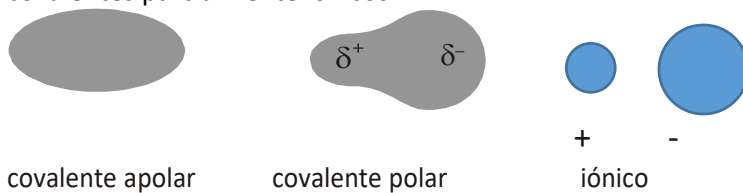


Tabla 1: momentos dipolares de algunas moléculas simples.

Molécula	Estructura	Momento dipolar (D)
Monóxido de carbono		0,12
Dióxido de carbono		0
Agua		1,83
Metanol		1,66
Acetona		2,72
orto-diclorobenceno		2,59
Glicocola (pH 7,0)		16,7

Carácter parcialmente iónico del enlace covalente:

Desde el enlace covalente puro o apolar hasta el enlace totalmente iónico (+/-) hay una transición. Se habla de enlaces covalentes parcialmente iónicos.



Hemos visto que, cuando los átomos que se unen tienen distinta electronegatividad, el más electronegativo atraerá más hacia su núcleo a los electrones de enlace, quedándose con carga parcial negativa. El otro átomo se quedará con carga parcial positiva. Cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad, mayor será la separación de cargas que consigamos.

Esta separación de cargas establece una gradación entre el enlace covalente y el iónico.

-Cuando son dos átomos del mismo elemento (molécula apolar), la diferencia de electronegatividad es nula, y no habrá separación de cargas. Será un enlace covalente puro (0% iónico).

-Si existe diferencia de electronegatividad, habrá separación de cargas. El porcentaje de separación de estas cargas parciales nos indica el porcentaje de carácter iónico del enlace.

-Si la diferencia de electronegatividad es muy grande (ejemplo, entre Cl: 3,0 ; y Na: 1,0), la separación de cargas será total, cada parte tendrá una carga - o + completa, con lo que tendremos dos iones, y el enlace será iónico.

Por lo tanto, se habla de carácter parcialmente iónico, en función del grado de separación de las cargas. Por ejemplo:

Dif. electronegatividad	1,6	1,9
% carácter iónico	47	59

Consecuencias prácticas de la polaridad de las moléculas (MUY IMPORTANTE)

La polaridad afecta, por ejemplo, la solubilidad, las fuerzas intermoleculares, entre otras. La polaridad de las moléculas es una propiedad de alta importancia pues define el comportamiento de estas relacionado con otras propiedades.

En la solubilidad, el carácter polar o apolar de la sustancia influye mucho, ya que, debido a este carácter, la sustancia será más o menos soluble en un disolvente concreto.

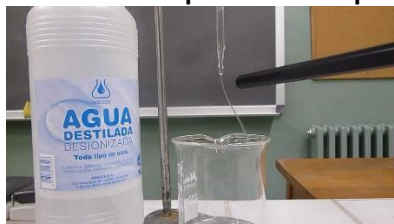
Hay una regla general lo semejante disuelve a lo semejante. Así, las sustancias polares se disuelven en disolventes polares y las sustancias apolares se disuelven en disolventes apolares.

Por ejemplo, sabemos que el agua es una sustancia polar y que en la química orgánica hay muchos disolventes apolares, como la gasolina. Imagínate que te manchas los pies de barro en un caso, y en otro caso, en la playa, te los manchas de alquitrán.

El barro, la tierra húmeda, tiene agua y muchos iones, es una sustancia polar. Por el contrario, aunque no lo sepas, el alquitrán, sustancia densa y pegajosa, de color oscuro y olor fuerte, se obtiene por destilación del petróleo o del carbón vegetal o de otra materia orgánica, es fundamentalmente apolar.

Por eso el barro de los pies (polar) se puede limpiar con agua (polar) y el alquitrán (apolar) se puede limpiar con gasolina o petróleo (apolares). Al contrario no se limpian.

Demostración práctica de la polaridad del agua



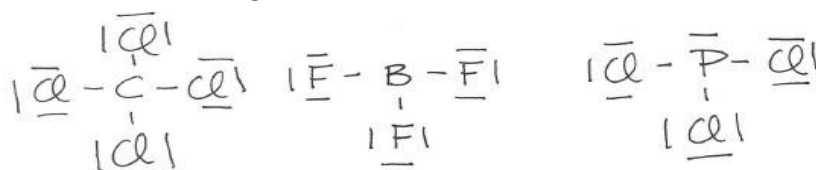
Abre un grifo hasta que salga un hilo fino y continuo de agua, que no sean gotas. Frota bastante contra tu jersey o ropa un boli BIC o un globo, hasta que se electrice. En seguida colócalo a un centímetro más o menos del hilo de agua. Verás cómo se desvía el hilo de agua debido a su polaridad.

Para aclarar las ideas, algunos ejemplos resueltos

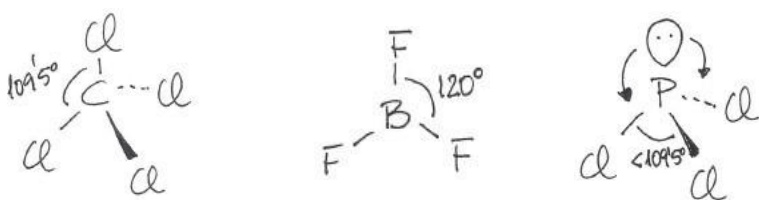
Dadas las siguientes moléculas: CCl_4 , BF_3 y PCl_3 . a) Represente sus estructuras de Lewis. b) Prediga la geometría de cada una de ellas según la Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia. c) Indique la polaridad de cada una de las moléculas. (Busca los Z)

En primer lugar debemos saber el número de electrones de valencia de cada átomo.

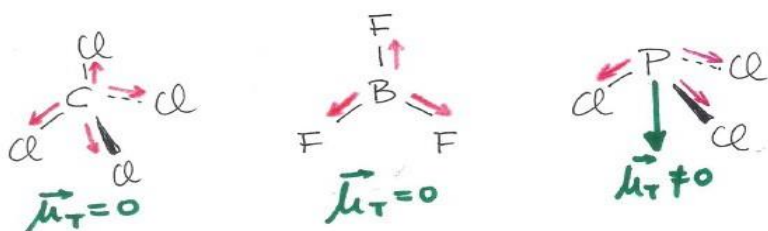
Así pues, las estructuras de Lewis serán las siguientes:



Observar que el átomo de boro alcanza estabilidad rodeándose de 6 electrones en su último nivel de energía (octeto incompleto).



Para saber si cada molécula es polar o apolar, debemos fijarnos en primer lugar en los momentos dipolares de cada enlace, representados en rojo en la figura inferior. Cuando el momento dipolar resultante de todos ellos sea nulo (en color verde), entonces la molécula será apolar:



Observar que el tetracloruro de carbono y el trifluoruro de boro son apolares, mientras que el tricloruro de fósforo sí se trata de una molécula polar al tener un momento dipolar total o resultante distinto de cero.

A partir de los átomos A y B cuyas configuraciones electrónicas son, respectivamente, $1s^2 2s^2 2p^2$ y $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$:

- Explique la posible existencia de las moléculas: AB, B₂ y AB₄.
- Justifique la geometría de la molécula AB₄.
- Discuta la existencia o no de momento dipolar en AB₄.

A: 4 electrones de valencia

B: 7

Por tanto, ambos tienen tendencia a ganar electrones para completar su último nivel de energía, aumentar su estabilidad y poder formar enlace. Se trata, por tanto, de átomos no metálicos que se unen, dando lugar a moléculas covalentes, compartiendo sus electrones de valencia.

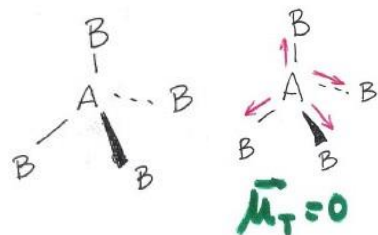
Veamos cada posibilidad de acuerdo con lo que acabamos de decir:

La molécula AB no puede existir, pues un átomo del elemento A necesita 4 electrones, mientras que uno del elemento B necesita solamente 1. Por tanto, la estequiometría de la molécula no permite la transferencia electrónica entre ambos.

La molécula B₂ sí puede existir, pues cada átomo del elemento B necesita un electrón para completarse su último nivel de energía. Así, dos átomos del elemento B compartirán una pareja de electrones dando lugar a la molécula B₂.

La molécula AB₄ sí puede existir, pues cada átomo del elemento B comparte un electrón con el átomo del elemento A; todos completan su último nivel de energía, aumentando su estabilidad, disminuyendo su energía y formando, pues, enlace químico.

La teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia explica la geometría de las moléculas (covalentes) considerando que los pares electrónicos (enlazantes o solitarios) que rodean al átomo central de la molécula se sitúan en el espacio lo más separadamente posible para minimizar la repulsión eléctrica existente entre ellos. El átomo central (A) está rodeado de 4 pares de electrones, todos enlazantes, los cuales se situarán en el espacio orientados hacia los vértices de un tetraedro, siendo de 109°5' el ángulo de enlace.



El momento dipolar total o resultante es nulo, por lo que la molécula AB₄ será apolar.

CUESTIÓN 1.- a) Escribe las estructuras de Lewis para el BF₃, NF₃ y F₂CO.

b) ¿Cuál será la geometría de estas moléculas?

c) ¿Qué enlaces de los que forma el flúor en las moléculas anteriores es más polar?

d) ¿Cuál o cuáles de estas moléculas son polares?

DATOS: Z (B) = 5; Z (C) = 6; Z (N) = 7; Z (O) = 8; Z (F) = 9.

Solución:

a) El enlace covalente entre dos átomos exige la compartición de uno o más pares de electrones desapareados, consiguiendo ambos átomos estructura de gas noble.

El nitrógeno tiene en su último nivel la estructura electrónica $2s^2 2p^3$ y el flúor $2s^2 2p^5$. Para escribir la estructura de Lewis del NF₃ se siguen los siguientes pasos:

- Determinar los electrones de valencia de los cuatro átomos suponiéndoles estructura electrónica de gas noble; $n = 8 (\text{N}) + 3 \cdot 8 (\text{F}) = 32$ electrones:
- Calcular los electrones de valencia de los cuatro átomos; $v = 5 (\text{N}) + 3 \cdot 7 (\text{F}) = 5 + 21 = 26 e^-$:
- Hallar los electrones de enlace; $c = n - v = 32 - 26 = 6$ electrones:
- Calcular los electrones solitarios; $s = v - c = 26 - 6 = 20$ electrones.

La estructura de Lewis es:



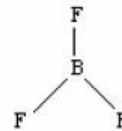
En la molécula BF_3 , la configuración electrónica de la capa de valencia del boro, átomo central, es $2s^2 2p^1$, promocionando un electrón desde el orbital $2s$ al $2p$ para adquirir covalencia 3 (3 electrones desapareados $2s^1 2p^2$); mientras que el flúor, con configuración electrónica en su última capa de valencia $2s^2 2p^5$ presenta covalencia 1 (1 electrón desapareado). La estructura de Lewis para la molécula, teniendo presente que en la molécula de BF_3 el átomo de B posee un octeto electrónico incompleto, 3 pares de electrones en vez de 4, es:



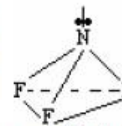
En la molécula F_2CO , el carbono se une por enlace covalente simple a los dos átomos de cloro, y por enlace covalente doble al oxígeno. Su estructura de Lewis es:



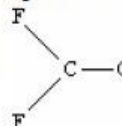
b) Según la teoría de orbitales híbridos, el átomo de boro en la molécula, BF_3 , emplea 3 orbitales híbridos sp^2 para unirse a los 3 átomos de flúor, y como esta hibridación dirige los orbitales híbridos hacia los vértices de un triángulo equilátero, donde se sitúan los pares de electrones compartidos, la geometría de la molécula es plana triangular con el átomo de B en el centro del triángulo.



Para la molécula NF_3 , en la que el átomo de nitrógeno emplea 4 orbitales híbridos sp^3 , dirigidos hacia los vértices de un tetraedro regular, la existencia de un par de electrones no compartidos sobre el N, distorsiona la estructura tetraédrica y la molécula adopta una geometría piramidal trigonal.



En la molécula F_2CO , el átomo de carbono utiliza 3 orbitales híbridos sp^2 para unirse mediante 3 enlaces covalentes tipo σ a los dos átomos de flúor y al oxígeno, y el electrón libre que aún le queda en un orbital atómico $2p$, lo utiliza en formar un enlace covalente, tipo π , al solapar, lateralmente, con un orbital atómico $2p$ del oxígeno, al que queda un electrón desapareado. Al igual que la molécula de BF_3 , con la misma hibridación, la geometría de esta molécula es plana triangular con el átomo de C en el centro del triángulo.



c) El más polar de los enlaces que forma el flúor es el de la molécula BF_3 , pues la diferencia de electronegatividad entre el flúor y el boro es la mayor.

d) La polaridad de una molécula viene dada por el valor, distinto de cero, del momento dipolar resultante de los momentos dipolares de los enlaces. Esto depende de la geometría de la molécula, y por ello, la molécula BF_3 con estructura geométrica simétrica, es apolar por ser cero la suma de los momentos dipolares de sus enlaces.

Por el contrario, las moléculas NF_3 y F_2CO , con geometrías piramidal con un par de electrones no compartidos sobre el átomo de nitrógeno, y plana triangular, presentan un momento dipolar resultante distinto de cero, siendo por ello moléculas polares. (En la molécula F_2CO , la polaridad del enlace $\text{F}-\text{C}$ es, debido a la mayor diferencia de electronegatividad entre los átomos $\text{F}-\text{C}$ que $\text{O}-\text{C}$, más intensa y, por ello, a pesar de ser la molécula plana triangular, el momento dipolar resultante es distinto de cero y la molécula es polar).

CUESTIÓN 2.- Considera las siguientes moléculas CCl_4 , F_2O y NCl_3 . Responde razonadamente a las siguientes cuestiones:

- Dibuja su estructura de Lewis.**
- Describe su forma geométrica.**
- Clasifica las moléculas anteriores como polares o apolares.**

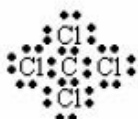
Solución:

a) El átomo de C con 4 electrones en su capa de valencia y configuración electrónica $2s^2 2p^2$, después de promocionar uno de los electrones 2s al orbital vacío 2p, adquiere la configuración electrónica en su capa de valencia $2s^1 2p^3$, pudiendo formar cuatro enlaces covalentes, es decir, obtiene covalencia 4.

El átomo de O con 6 electrones en su capa de valencia y configuración electrónica $2s^2 2p^4$, forma dos enlaces covalentes y queda con dos pares de electrones libres, es decir, presenta covalencia 2.

El átomo de N con 5 electrones en su capa de valencia posee covalencia 3, lo que indica que puede formar 3 enlaces covalente y queda con un par de electrones libres.

De lo puesto se deduce que la estructura de Lewis de cada una de las moléculas es:



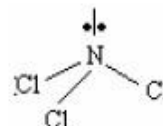
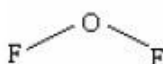
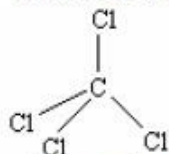
b) Los tres átomos centrales de las moléculas C, O y N por combinación lineal de los orbitales atómicos 2s y 2p, forman cuatro orbitales híbridos sp^3 , equivalentes energéticamente y dirigidos, desde el átomo central hacia los vértices de un tetraedro. Dependiendo de la existencia o no de pares de electrones libres en el átomo central si la geometría de la molécula es tetraédrica o derivada de ella.

En la molécula CCl_4 , los cuatro orbitales híbridos se ocupan por pares de electrones compartidos, cuatro enlaces covalentes, siendo la geometría de la molécula tetraédrica.

En la molécula OF_2 , dos de los orbitales híbridos lo ocupan pares de electrones libres y otros dos por pares de electrones de enlace, siendo la molécula, debido a la repulsión entre los pares de electrones libres y de enlace, angular, con un ángulo de enlace de unos 107° .

La molécula NCl_3 tiene tres orbitales híbridos ocupados por pares de electrones de enlace y uno por un par de electrones libres, siendo la geometría de la molécula, por las repulsiones entre los pares de electrones libres y compartidos, piramidal trigonal.

Estas son las geometrías de las moléculas:



c) La molécula CCl_4 , debido a su geometría regular, presenta un momento dipolar resultante de los momentos dipolares de enlace igual a cero, por lo que es apolar.

En las otras dos moléculas, su geometría y existencia de pares de electrones libres, hace que el momento dipolar resultante de los momentos dipolares de los enlaces sea distinto de cero, lo que indica que las moléculas son polares.

CUESTIÓN 3.- Dadas las especies químicas: OCl_2 , BeH_2 , BF_4^- y PCl_3 , responde razonadamente a las siguientes cuestiones:

a) **Representa su estructura de Lewis.**

b) **Predi su geometría molecular.**

c) **Explica si cada una de estas moléculas tiene o no momento dipolar.**

Solución:

a) Para poder representar las estructuras de Lewis de moléculas complejas, hay que determinar, además de los electrones de la capa de valencia de cada átomo:

F (Z = 9): $2s^2 2p^5$; B (Z = 5): $2s^2 2p^1$; H (Z = 1): $1s^1$; Cl (Z = 17): $3s^2 3p^5$;
O (Z = 8): $2s^2 2p^4$; P (Z = 15): $3s^2 3p^3$; Be (Z = 4): $2s^2$.

los siguientes números:

1º.- Número total de electrones de valencia, n, considerando cada átomo con estructura de gas noble.

2º.- Número total de electrones de valencia, v, de cada átomo.

3º.- Número de electrones compartidos, c, restando v de n: $c = n - v$.

4º.- Número de electrones libres o no compartidos, s, restando c a v: $s = v - c$.

Colocando los pares de electrones compartidos y libres sobre el átomo central y los periféricos, se obtiene la estructura de Lewis.

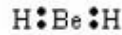
Para la molécula BF_4^- los números n , v , c y s son:

$$\begin{aligned} n &= 8 e^- (1 \text{ B}) + 4 \cdot 8 e^- (4 \text{ F}) + 2 e^- = 42 e^-; & v &= 3 e^- (1 \text{ B}) + 4 \cdot 7 e^- (4 \text{ F}) + 1 e^- = 32 e^-; \\ c &= n - v = 42 e^- - 32 e^- = 10 e^- = 5 \text{ pares } e^-; & s &= v - c = 32 e^- - 10 e^- = 22 e^- = 11 \text{ pares } e^-. \end{aligned}$$

Para la molécula PCl_3 los números n , v , c y s son:

$$\begin{aligned} n &= 8 e^- (1 \text{ P}) + 3 \cdot 8 e^- (3 \text{ Cl}) = 32 \text{ electrones}; & v &= 5 e^- (1 \text{ P}) + 3 \cdot 7 e^- (3 \text{ Cl}) = 26 \text{ electrones}; \\ c &= n - v = 32 e^- - 26 e^- = 6 e^- = 3 \text{ pares de } e^-; & s &= v - c = 26 e^- - 6 e^- = 20 e^- = 10 \text{ pares } e^-. \end{aligned}$$

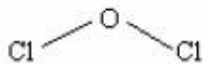
La estructura de Lewis para estas moléculas se determinan colocando alrededor de los átomos, los pares de electrones compartidos y libres:



b) Según la teoría R. P. E. C. V., los pares de electrones compartidos y libres, para conseguir la menor repulsión entre ellos, se orientan alejándose lo más posible entre ellos, dependiendo de dicha orientación la geometría de la molécula.

La geometría de estas moléculas son:

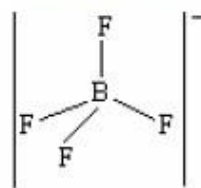
Angular



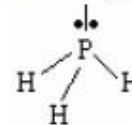
Lineal



Tetraédrica



Piramidal trigonal



c) La molécula BeH_2 es apolar por ser nula la resultante de los momentos dipolares de enlace. A ello contribuye, además de la electronegatividad de los elementos que se enlazan, la geometría molecular.

Las otras moléculas OCl_2 , BF_4^- y PCl_3 , son polares debido, fundamentalmente a la geometría molecular, que hace que el momento dipolar resultante de los momentos dipolares de enlaces sea mayor de cero.

Para la molécula OCl_2 los números n , v , c y s son:

$$\begin{aligned} n &= 8 e^- (1 \text{ O}) + 2 \cdot 8 e^- (2 \text{ Cl}) = 24 \text{ electrones}; & v &= 6 e^- (1 \text{ C}) + 2 \cdot 7 e^- (2 \text{ Cl}) = 20 \text{ electrones}; \\ c &= n - v = 24 e^- - 20 e^- = 4 e^- = 2 \text{ pares de } e^-; & s &= v - c = 20 e^- - 4 e^- = 16 e^- = 8 \text{ pares}. \end{aligned}$$

Para la molécula BeH_2 en la que el Be con sólo 2 electrones y los H un electrón cada uno en su capa de valencia, se observa con claridad que el Be utiliza uno de sus 2 electrones en unirse mediante un enlace covalente a cada uno de los H.