


ACADEMIA

Accelerating the world's research.

FACULTAD CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES INSTITUTO DE QUÍMICA QUÍMICA II Texto preparado por la profesora María Vic...

Yeraldin Pertuz Berrio

Related papers

[Download a PDF Pack](#) of the best related papers 



[Solidos cristalinos Quimica II](#)

Natalia Lopez

[Coordinadora Verónica Muñoz Ocotero](#)

lesli Marquez

[Materia: Química](#)

Jesus Caamal



**FACULTAD CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
INSTITUTO DE QUÍMICA**

QUÍMICA II

Texto preparado por la profesora
María Victoria Alzate Cano

Profesores de la asignatura: María Victoria Alzate Cano, Luis Fernando Moreno Ariza, Cesar Augusto Pérez Zapata, Cesar Ignacio Restrepo Meneses, Andrea Stephanie Echeverri Cárdenas, Viviana María Ospina Guarín

Medellín
Semestre I, febrero 6 – junio 17 de 2017

CONTENIDO	PÁGINA
1 PRESENTACIÓN	4
2 OBJETIVOS	6
2.1 General	
2.2 De aprendizaje	
2.3 Programación y evaluación	
3 CATEGORÍA MOLECULAR - LENGUAJE QUÍMICO	8
3.1 Qué es y para qué se emplea el lenguaje químico	
3.2 El lenguaje químico para designar sustancias	
3.3 Fórmula química de composición: unidad fórmula y fórmula molecular	
3.4 Fórmula química estructural	
3.5 Valencia química	
3.6 Grupo funcional	
4 MODELOS DE ENLACE QUÍMICO	24
4.1 El enlace químico	
4.2 Modelos de enlace químico intramolecular	
4.3 Modelos de enlace químico intermolecular	
4.4 Características del enlace químico intramolecular	
5 APLIQUE LA LÓGICA DEL LENGUAJE QUÍMICO	30
5.1 Identifique relaciones estructura, formula molecular, propiedades químico-físicas	
5.2 Escribe fórmulas estructurales y ecuaciones químicas	
5.3 Trabaje con la lógica del lenguaje químico	

Preguntas de interés, plantea respuestas a lo largo del tiempo.

Que sea hoy la primera oportunidad

¿Cómo describimos, interpretamos, explicamos y modelamos las sustancias y sus transformaciones químicas en contexto?

¿Cómo describimos a las sustancias y sus transformaciones en una reacción química?

¿Cuáles modelos son más explicativos para la estructura de las sustancias?

¿Cómo relacionamos las propiedades de las sustancias con su estructura y enlace?

1. PRESENTACIÓN

El hombre es el ser que le da sentido a la naturaleza, la transforma y crea nuevos materiales y moléculas para la sociedad y el mundo. (Lazlo, 1993)

La Asignatura Química II trata en lo esencial de la estructura molecular, de moléculas y sus propiedades y de las relaciones entre estas y las sustancias y sus transformaciones químico-físicas, modeladas a su vez por las moléculas. Al tratar con sustancias y sus transformaciones se manipulan moléculas y lenguaje químico, los cuales se modifican en el devenir del tratamiento de problemas, preguntas y cuestionamientos. Los contenidos relativos a dicha esencia se organizan en cuatro unidades: Uno (1), introducción a la estructura molecular (10 clases); Dos (2), estructura atómica (14 clases); Tres (3), estructura molecular y teorías del enlace químico (13 clases); Cuatro (4), estructura molecular y reactividad química (10 clases).

El número de clases antes nombrado se refiere a clases teóricas programadas tres (3) veces a la semana (6 horas), las cuales se integran con tres (3) horas de taller y otras tres (3) de laboratorio, y se llevarán a cabo durante 16 semanas entre el 6 de febrero y el 2 de junio. Es un propósito, lograr durante el desarrollo del semestre, el máximo de integración entre los contenidos de las tres modalidades.

Para el desarrollo de contenidos, en particular de la Unidad I, se ha preparado el presente texto, con la intencionalidad de aportar al dominio significativo del lenguaje químico, de la molécula como entidad conceptual y representacional de la sustancia y de sus comportamientos químico-físicos en contexto, y a la clarificación y comprensión, en primer lugar, de un grupo de conceptos, representaciones moleculares y procedimientos básicos para el aprendizaje de las moléculas en cuanto composición y estructura: fórmula molecular, fórmula estructural y distribución espacial de núcleos y electrones en una dimensión 1D (línea recta en dirección x o y o z), dos dimensiones 2D (polígono, plano xy o xz o yz), tres dimensiones 3D (poliedro x, y, z). La molécula reconocida en términos de composición, estructura y de interacciones entre núcleos y electrones.

A la molécula en cuanto composición cualitativa (clases de átomos combinados), y cuantitativa (cantidad de cada clase de átomos combinados), estructura (número de enlaces de cada átomo en la combinación y su disposición espacial), y geometría molecular (direccionalidad de los enlaces 1D, 2D, 3D: longitud y ángulo de enlace), la caracterizan otras propiedades como la energía del enlace, la polaridad y la masa molecular. La molécula se arma con enlaces químicos dirigidos en el espacio resultado de las interacciones entre núcleos y electrones, enlaces que pueden ser de la clase intramolecular e intermolecular. El enlace químico intramolecular clasificado como: covalente, iónico, metálico y dispersión; y el intermolecular como dipolo-dipolo de la clase enlace de hidrógeno, ión-dipolo y dispersión.

Características de las moléculas y de las sustancias se entrecruzan e integran para construir y reconstruir explicaciones en torno a problemas químicos.

En el desarrollo del módulo se plantean preguntas y tareas para resolver y al final se presenta un capítulo de preguntas y problemas para favorecer el desarrollo de la manipulación de fórmulas estructurales, a fin de potenciar en el estudiante el desarrollo de habilidades respecto a la lectura de

ellas, su dibujo y el reconocimiento de la geometría molecular, así como de la comprensión y la descripción de modo oral y escrito, tanto como representación de entidades moleculares y de estas en un contexto químico-físico, así como casos de disolución acuosa y reacción química.

Finalmente, bienvenidos a la asignatura Química II, toda la disposición propositiva de la enseñanza para favorecer el aprendizaje significativo de los estudiantes. Contamos con su activa participación, tanto en el trabajo individual como colaborativo, y con su compromiso para el aprendizaje de conocimientos conceptuales, procedimentales y actitudinales, en particular de los propuestos para este curso.

Conceptos clave: Lenguaje químico, Molécula, Fórmula Molecular, Fórmula Estructural, Enlace Químico Intramolecular e Intermolecular, Polaridad, Geometría Molecular.

2. OBJETIVOS

2.1 General

Interaccionar con el presente texto a fin de identificar el modelo molecular estructural en términos de fórmulas estructurales y geometría molecular, reconocer sus características y utilizarlos como una representación de segunda aproximación cuando se resuelven problemas químicos.

2.2 De aprendizaje

Deseamos en esta unidad que usted:

- ✓ Reconozca el lenguaje químico como un sistema semiótico para representar sustancias.
- ✓ Describa la relación estequiométrica de moléculas y ecuaciones químicas.
- ✓ Escriba y describa fórmulas moleculares y estructurales de acuerdo con la valencia química.
- ✓ Reconozca enlace químico intramolecular: iónico, covalente, metálico y de dispersión.
- ✓ Identifique enlace químico intermolecular: dipolo-dipolo, enlace de hidrogeno, ión-dipolo, dispersión.
- ✓ Reconozca características del enlace químico intramolecular: longitud, ángulo y energía de enlace.
- ✓ Relacione y diferencie fórmulas estructurales y geometría molecular.
- ✓ Reconozca la polaridad de las moléculas.
- ✓ Lea, escriba y dibuje de modo estético, interpretativo y argumentado, fórmulas estructurales y geometría molecular en contexto: fase (sólida, líquida, gaseosa), solubilidad en medio acuoso, situaciones de reacciones químicas (combinación, descomposición, combustión, ácido-base, precipitación, oxido-reducción).
- ✓ Organice argumentos y explicaciones y los exprese de modo escrito, cuando resuelve preguntas y problemas químicos.
- ✓ Asuma con responsabilidad individual y colaborativa el aprendizaje.

Actitudes a potenciar durante el desarrollo de la signatura

- a. Disposición entusiasta, esfuerzo personal y disciplina para el aprendizaje de la estructura molecular.
- b. Construcción y reconstrucción de tareas.
- c. Decisión para dibujar de modo estético fórmulas estructurales y geometría molecular en contexto para: moléculas discretas, agregados moleculares y redes moleculares.
- d. Disposición para el trabajo colaborativo y autónomo.

Escribe tus aspiraciones y logros a alcanzar en la asignatura Química II

2.3 Programación y evaluación

El siguiente cuadro detalla la organización en el tiempo de las cuatro unidades y de las evaluaciones.

Asignatura Química II Semestre 2017-I Febrero 6 – junio 17				
Contenido	Fechas	Evaluación sumativa	Fecha	Evaluación formativa
Unidad 1	Febrero 6 - 27	Parcial 20%	Febrero 27	Talleres 15%
Unidad 2	Marzo 1 - 31	Parcial 20%	Marzo 31	Laboratorio 15%
Unidad 3	Abril 3 - mayo 10	Parcial acumulativo 20%	Junio 2	Presentación de trabajo escrito individual 10%
Unidad 4	Mayo 12 – junio 2			

3. CATEGORÍA MOLECULAR – LENGUAJE QUÍMICO

La razón de que la química funcione en todo el mundo, ..., es que los químicos han recibido una educación en la que han aprendido el mismo conjunto de signos. (Hoffmann, 1997, 77).

3.1 Qué es y para qué se emplea el lenguaje químico

De acuerdo con Lazlo (1993), Los químicos en el trato íntimo con los materiales (sustancias y mezclas) hemos aprehendido no solo a caracterizar y valorar lo volátil, el calor, los explosivos, los tóxicos y los aromas entre otros, sino también a protegernos y cuidarnos de los desbordamientos energéticos y de las cantidades, a normatizar la seguridad individual y social en las vivencias de la interacción con las sustancias. Sabemos cómo las moléculas forman nuevos enlaces químicos y nuevos grupos funcionales mediante un calentamiento; garabateamos todo el tiempo palabras químicas, fórmulas moleculares, estructurales y geometrías moleculares, figuras estas que además de estéticas, son ficciones y arquitecturas para referirnos a la realidad de las sustancias, de sus cualidades y transformaciones. Ficciones y arquitecturas son lenguaje químico.

El lenguaje químico, como otros lenguajes por ejemplo el español y el inglés, es un sistema semiótico o un sistema de símbolos para representar a las sustancias en términos de composición, estructura y transformación. Símbolos elementales, fórmulas químicas (unidad fórmula y molecular), grupos funcionales, ecuaciones químicas y palabras y proposiciones químicas en lenguaje natural, son los constituyentes del sistema lingüístico químico. Una estructura sintáctica (reglas y principios) y semántica (significado) configura formas y significados para las fórmulas químicas, los grupos funcionales, las ecuaciones y los enunciados químicos, mediante relaciones pertinentes establecidas entre los conceptos: valencia química, número de oxidación, electronegatividad, reacción química, solubilidad, y otros comportamientos de las sustancias como temperaturas de fusión, ebullición y sublimación.

La palabra para conectar la representación con la sustancia es la de molécula, mediante una diversidad de símbolos químicos. Se considera la molécula en primer lugar, como un concepto de raíces lingüísticas, en términos de un lenguaje químico creado por los químicos para representar y modelar las sustancias en términos de fórmulas químicas de composición, unidad fórmula y molecular, y de fórmulas estructurales. En segundo lugar, se plantea a la molécula como geometría molecular con características definidas: longitud, ángulo y energía de enlace, y polaridad (μ m). Fórmulas químicas de composición y moléculas como fórmulas estructurales y geometría molecular son representaciones para las sustancias en contexto.

La molécula como entidad conceptual y representacional, es un objeto dinámico con estructura interna conformada por enlaces químicos intramoleculares (iónico, covalente, metálico, dispersión) entre los átomos que la constituyen y distribuidos en el espacio, ya sea 1D (una dimensión), 2D (dos dimensiones) o 3D (tres dimensiones). Además, al considerar la mol de sustancia (cantidad de entidades elementales, $6,02 \times 10^{23}$ moléculas), la molécula interacciona con otras de su misma clase o de otra clase, creando sistemas dinámicos de enlaces químicos entre ellas, denominados interacciones intermoleculares.

Al considerar las interacciones intermoleculares, una característica molecular, la polaridad μ (mi), desempeña un papel central para definir la molécula como polar (dipolo eléctrico) o no polar, y los enlaces intermoleculares clasificarlos como dipolo-dipolo, ión-dipolo, dispersión.

Molécula, moléculas, enlaces químicos intramoleculares e intermoleculares, están implicados cuando nos referimos a las sustancias y sus comportamientos (propiedades) químico-físicos; de inmediato, según el caso, movilizamos y consideramos otros conceptos como los de: acidez, basicidad, neutralización, oxidación, reducción, oxidante, reductor, medio acuoso-solubilidad en agua, medio no acuoso, metal, no metal, semimetal, elemento, átomo y equilibrio químico; y funciones químicas como sulfato SO_4^{2-} , fosfato PO_4^{3-} , carbonato CO_3^{2-} , nitrato NO_3^- , cloruro Cl^- , óxido O^{2-} , aldehído RCHO , cetona RCOR' , amina RCH_2NH_2 y amida RCONH_2 , entre otras.

Podría usted escribir símbolos químicos, dibujar fórmulas estructurales y escribir que entiende.

- Nombre una sustancia y para ella escribe:
Nombre _____
 - La fórmula molecular y su significado.
 - El símbolo de cada uno de los elementos químicos que la constituyen.
 - El símbolo de cada uno de los átomos que la constituyen.
 - La ecuación química de una transformación química.
 - Dibujar la fórmula estructural.
 - Identificar interacciones intra e intermoleculares.
 - Identificar la molécula como iónica, polar, no polar.

- Escribe de modo breve qué entiendes por:
 - Molécula.
 - Unidad Fórmula.
 - Fórmula molecular.
 - Fórmula estructural.
 - Polaridad.
 - Número de oxidación.
 - Valencia química.
 - Grupo funcional.

3.2 El lenguaje químico para designar sustancias

El primer nivel del lenguaje químico, designar sustancias, se constituye en el núcleo de la lingüística química y consiste en un lenguaje para denotar elementos, sustancias simples y compuestas, sus propiedades y conversiones. En esta perspectiva de considerar los símbolos químicos como un lenguaje, anota Jacob (2001), las siguientes consideraciones acerca de su estructuración:

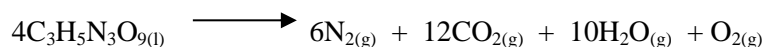
- ❖ Un alfabeto elemental que implica significados particulares para los elementos químicos y consistente de 118 símbolos, anotados en cada casilla de la tabla periódica según el número atómico (Z protones) y escritos para elementos y átomos como se detalla en el cuadro 1.1

Este alfabeto no es limitado, está sujeto a la introducción de nuevos símbolos según el progreso científico acerca del conocimiento de nuevos elementos químicos.

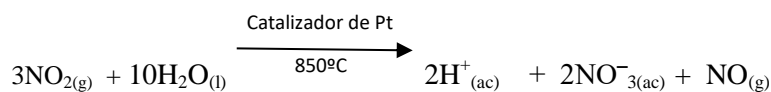
Cuadro 3.1. Símbolos de elementos químicos y de átomos

Número atómico Z (protones en el núcleo) y número másico A (protones y neutrones en el núcleo)		Símbolo y nombre común	Símbolo elemento y nombre químico	Símbolo átomo y nombre químico
1	1	H Hidrógeno	1_1H Hidrógeno-1	${}_1H$ Monohidrógeno
8	16	O oxígeno	${}^{16}_8O$ Oxígeno-16	${}_8O$ Monoxígeno
16	32	S Azufre	${}^{32}_{16}S$ Azufre-32	${}_{16}S$ Monoazufre
11	23	Na Sodio	${}^{23}_{11}Na$ Sodio-23	${}_{11}Na$ Monosodio
24	52	Cr Cromo	${}^{52}_{24}Cr$ Cromo-52	${}_{24}Cr$ Monocromo
105	262	Unp Unnilpentio	${}^{262}_{105}Unp$ Unnilpentio-262	${}_{105}Unp$ Monounnilpentio
Complete las siguientes cuadrículas				
		Sb Antimonio		
		Fe Hierro		
		U Uranio		
Escribe tres nuevos casos				

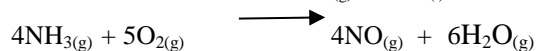
- ❖ Los símbolos elementales son combinados para formar fórmulas químicas. Pueden combinarse símbolos de la misma clase y símbolos de diferente clase. Como cada símbolo elemental representa un elemento o un átomo, combinación de una clase de elemento y combinación de dos o más clases de elemento. Para el primer caso, el símbolo representa la sustancia simple: H_2 Dihidrógeno, S_8 Ciclooctazufre; Na_n Sodio metálico; O_3 Trioxígeno; P_4 Tetrafósforo; y para el segundo, la sustancia compuesta: H_2O Óxido de hidrógeno; Na_2O Óxido de disodio; H_2S Sulfuro de hidrógeno; $C_2H_6O_2$ o $C_2H_4(OH)_2$ 1,2-Etanodiol; C_2H_6O o C_2H_5OH Etanol; C_6H_6 Benceno; $CaCO_3$ Carbonato de calcio.
- ❖ Las fórmulas químicas son utilizadas para plantear ecuaciones químicas, las cuales representan reacciones químicas en contexto. Por ejemplo:



Explosión de la nitroglicerina



Disolución de $\text{NO}_2(\text{g})$ en $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$



Producción de $\text{NO}(\text{g})$ por oxidación catalítica de $\text{NH}_3(\text{g})$

La escritura de fórmulas químicas para representar sustancias obedece a un conjunto de reglas fundamentadas en la valencia química o afinidad química, los números de oxidación y la electronegatividad, conceptos localizados en las teorías químicas. Cada fórmula química tiene un significado en el mundo de las sustancias. La semántica química hace relación al significado de la representación lingüística en relación con la práctica química. El significado de las fórmulas químicas como de las ecuaciones químicas, se construye a la par con el conocimiento químico acerca de las sustancias y sus comportamientos químicos. Las reglas tienen su origen en el mundo de las sustancias y sus transformaciones químico-físicas, son el resultado de una sistemática del conocimiento químico obtenido de las reacciones químicas y del análisis químico cualitativo y cuantitativo. De este modo, una sustancia no es un ente aislado, es una red de relaciones químicas, se inscribe en una clase o varias clases de sustancias identificadas con los grupos funcionales, y se relaciona con otras mediante reacciones químicas y situaciones de solubilidad en uno u otro solvente.

El lenguaje químico como cualesquier otro sistema semiótico y como diría Vergnaud (1990)¹ refiriéndose al lenguaje, es función de comunicación, función de representación y función de ayuda al pensamiento. En esta perspectiva, en el proceso de mediar para el aprendizaje significativo de conocimiento químico, es fundamental, según nuestro objetivo inmediato, considerar el primer nivel del lenguaje químico: Un lenguaje para designar elementos, átomos, sustancias y ecuaciones químicas. Un lenguaje para comunicarse con el texto oral y escrito, con las imágenes de moléculas y situaciones químicas, con las TIC, con la actividad experimental y con otras personas, un lenguaje para la lectura de fenómenos químicos y de las representaciones o modelos, y para facilitar la comprensión y la inferencia en química.

Complete con fórmulas y ecuaciones químicas el cuadro 3.2.

En las siguientes direcciones electrónicas localizas situaciones de reacciones químicas, interacciona con los videos y escribe tu comprensión de cada caso.

<https://www.youtube.com/watch?v=BGUfC3UUBkl>

https://www.youtube.com/watch?v=xK4z_YhtTBM

¹ Vergnaud, G. (1990). La Théorie des Campo Conceptuels, *Recherches en Didactique des Mathématiques*, 10, 23, 133-170.

<https://www.youtube.com/watch?v=-hQW5a5D5aE>

<https://www.youtube.com/watch?v=jTL8ULAmcFE>

Cuadro 3.2. Ejemplos de sustancias y transformaciones

Sustancia		Soluble en H ₂ O _(l)		Reacciona con el agua	
Fórmula química	Nombre	Si	No	Si	No
HCl _(g)					
Na _n					
Na ₂ SO _{4(s)}					
C ₂ H ₅ OH _(l)					
CaO _(s)					

3.3 Fórmula química de composición: unidad fórmula y fórmula molecular

Un símbolo denominado fórmula química y construida desde los símbolos elementales, adquiere en principio dos denotaciones: fórmula química de composición y fórmula estructural.

Una fórmula química de composición denota características cualitativas y cuantitativas. De un modo cualitativo, los símbolos representan la clase de elementos químicos combinados, y de un modo cuantitativo, los subíndices representan la relación de composición de la combinación química, es decir, el número de veces que cada elemento interviene en la combinación química. Ésta relación cuantitativa es relativa o empírica y absoluta o molecular, lo cual corresponde a denominar una fórmula química como unidad fórmula (relativa o empírica) y molecular o absoluta.

Una unidad fórmula tiene el significado de no corresponder de modo exacto con la composición de la respectiva estructura molecular; la composición relativa es un múltiplo entero de la composición molecular. Una fórmula química molecular tiene el significado de corresponder de modo exacto con la composición de una entidad molecular estructural. También puede expresarse una unidad fórmula como el número relativo de los elementos constituyentes de una sustancia y una molecular como el número exacto de los elementos (núcleos, o átomos) constituyentes de la unidad molecular.

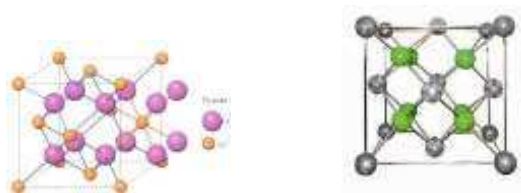
Por ejemplo, Cloruro de sodio representado con el símbolo NaCl corresponde a la unidad fórmula, y Na₄Cl₄ expresa la fórmula molecular para una estructura red molecular de la clase cubica compacta (C.C.) de aniones y los cationes posicionados en los huecos octahedrales. La fórmula molecular Na₄Cl₄ de modo simplificado se escribe NaCl. Nótese que la fórmula NaCl significa un par iónico Na⁺Cl⁻; la relación de proporcionalidad entre NaCl y Na₄Cl₄ es 1:4. Otro caso de fórmula relativa y molecular es: Difluoruro de calcio CaF₂ y Ca₄F₈, red molecular cubica compacta (C.C.) de

cationes y los aniones posicionados en los huecos tetrahedrales. La figura 3.1 representa la red molecular de $\text{NaCl}_{(s)}$ y la figura 3.2 la red molecular de $\text{CaF}_{2(s)}$.

Figura 3.1. Red molecular $\text{NaCl}_{(s)}$

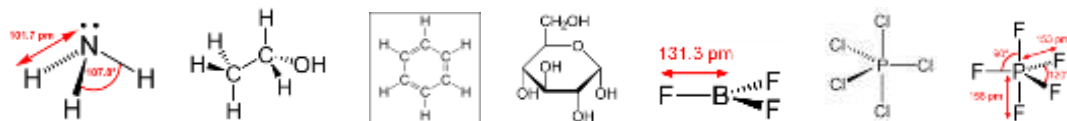


Figura 3.2. Red molecular $\text{CaF}_{2(s)}$



La *fórmula molecular* es el modo de representar la composición elemental absoluta de una sustancia, lo cual en términos moleculares es considerar la fórmula molecular como la composición absoluta correspondiente a una entidad molecular estructural. Por ejemplo, en la figura 3.3 se detallan las formulas estructurales de las moléculas² NH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, BF_3 , PCl_5 , PF_5 . Nótese como la lectura cualitativa y cuantitativa de los elementos (átomos) constituyentes de la unidad molecular permite expresar la fórmula molecular. Es oportuno recordar que la fórmula molecular se escribe de izquierda a derecha del átomo más electropositivo (menor electronegatividad) hacia el más electronegativo (mayor electronegatividad). En el caso de moléculas orgánicas se escribe primero el carbono, luego el hidrógeno y a continuación otros átomos en orden creciente de electronegatividad.

Figura 3.3. Fórmulas estructurales y geometría molecular NH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, C_6H_6 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, BF_3 , PCl_5 , PF_5



Otra lectura, es la fórmula química relativa o molecular, como un modo de representar la composición porcentual en masa de los elementos constituyentes de una sustancia. Composición determinada mediante análisis químico elemental por descomposición de las sustancias simples y

² Las representaciones moleculares expresadas en las figuras 1, 2, 3, recuperadas mayo de 2015 de Internet, Google, wikipedia. Con el nombre de la molécula e imágenes, se localizan las respectivas fórmulas estructurales.

compuestas. Por ejemplo, la composición porcentual del agua es 88.88% en masa de oxígeno y 11.12% en masa de hidrógeno; esto se corresponde para un mol de agua, 18 g – 1 mol de moléculas H₂O, con una composición elemental de dos veces el elemento hidrógeno y una vez el elemento oxígeno.

Otro ejemplo, en el peróxido de hidrógeno hay una parte por masa de hidrógeno y 16 partes por masa de oxígeno, para la fórmula relativa HO, es decir, una vez el elemento H (o un núcleo, o un átomo de H) y una vez el elemento O (o un núcleo, o un átomo de O). La fórmula molecular H₂O₂ corresponde a dos veces el elemento hidrógeno H (o dos núcleos, o dos átomos de H) y dos veces el elemento oxígeno O (o dos núcleos, o dos átomos de O).

Otros ejemplos: para el etilenglicol (1,2-Etanodiol) C₂H₆O₂ C₂H₄(OH)₂, sustancia que se utiliza como componente principal de las soluciones anticongelantes, su composición en masa se expresa 38.7% de C, 9.7% de H, 51.6% de O, lo cual corresponde a una masa molecular de 62.1 uma y a una masa molar de 62.1 g/mol. Para la cafeína, un estimulante que se encuentra en el café C₈H₁₀N₄O₂, su composición en masa se expresa 49.5% de C, 5.15% de H, 28,9 de N, 16.5% de O, lo cual corresponde a una masa molecular de 194.1 uma y a una masa molar de 194.1 g/mol.

El cuadro 3.3 detalla un grupo de símbolos elementales y de fórmulas químicas de composición para elemento, átomo, sustancia simple y sustancia compuesta. Para átomo se detalla la configuración electrónica, la cual denota el número de electrones para el átomo eléctricamente neutro: número de electrones de carga eléctrica negativa debe ser igual al total de cargas eléctricas positivas (protones en el núcleo atómico), para una carga eléctrica neta de cero.

Finalmente se llama la atención a cómo escribir una fórmula molecular o relativa: de izquierda a derecha, del átomo más electropositivo (menor electronegatividad) al más electronegativo. La electronegatividad es una propiedad atómica y se lee en un formato de tabla periódica en la respectiva casilla asignada a cada elemento. En las siguientes fórmulas se puede evidenciar la situación enunciada al realizar la lectura de la electronegatividad: NaCl, Ca₃(PO₄)₂, TiCl₄, NH₄NO₃, C₃H₇Br 2-bromo propano, H₂SO₄, C₅H₅N piridina, [Co(NH₃)₅Br]SO₄ sulfato de pentaaminobromocobalto (III).

Cuadro 3.3. Fórmulas químicas de composición unidad fórmula y fórmula molecular

Elemento Núcleo³ atómico	Átomo Molécula mononuclear	Molécula polinuclear Sustancia simple	Molécula polinuclear Sustancia compuesta
¹⁶ ₈ O Oxígeno-16	O Monoxígeno 1s ² 2s ² 2p ⁴	O ₂ Dioxígeno O ₃ Trioxígeno	CaO Óxido de calcio Fe ₂ O ₃ Óxido de hierro (III) V ₂ O ₅ Óxido de vanadio (V) KO ₂ Superóxido de potasio
³² ₁₆ S	S Monoazufre	S ₈ Octazufre	H ₂ S Sulfuro de dihidrógeno Na ₂ S Sulfuro de disodio

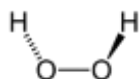
³ Se nombra el isótopo de mayor abundancia.

Azufre-32	$1s^2 2s^2 2p^6$		H_2SO_4 Sulfato de dihidrógeno
$^{14}_7N$ Nitrógeno-14	N Mononitrógeno $1s^2 2s^2 2p^3$	N_2 Dinitrógeno	NH_3 Trihidruo de nitrógeno (amoníaco) NO Monóxido de nitrógeno GaN Nitruro de galio
$^{12}_6C$ Carbono-12	C Monocarbono $1s^2 2s^2 2p^2$	C_n Carbono diamante Carbono grafito	CO_2 Bióxido de carbono CH_4 Tetrahidruo de carbono (metano) CS_2 Bisulfuro de carbono
$^{31}_{15}P$ Fósforo-15	P Monofósforo $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	P_4 Tetrafósforo P_8 Octafósforo	PF_5 Pentafluoruro de fósforo P_3S_4 Tetrasulfuro de trifósforo P_4O_6 Hexaóxido de Tetrafósforo
$^{23}_{11}Na$ Sodio-23	Na Monosodio $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	Na_n sodio metálico	NaCl Cloruro de sodio Na_2SO_4 Sulfato de disodio Na_3PO_4 Fosfato de trisodio
$^{11}_5B$ Boro-11	B Monoboro $1s^2 2s^2 2p^1$	B_{12} Dodecaboro	B_2O_3 Trióxido de diboro B_4H_{10} Tetraborano
$^{79}_{34}Se$ Selenio-79	Se Monoselenio $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	Se_8 Octaselenio	SeO_2 Dióxido de selenio ZnSe Seleniuro de zinc
$^{35}_{17}Cl$ Cloro-35	Cl Monocloro $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	Cl_2 Dicloro	Cl_2O_5 Pentaóxido de dicloro HCl Cloruro de hidrógeno
1_1H Hidrógeno-1	H Monohidrógeno $1s^1$	H_2 Dihidrógeno	H_2O Óxido de dihidrógeno (agua) H_2SO_4 Sulfato de dihidrógeno NaH Hidruo de sodio
$^{131}_{54}Xe$ Xenón -54	Xe Monoxenón $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$	Xe Xenón	XeF_6 Hexafluoruro de xenón XeO_3 Trióxido de Xenón
$^{64}_{29}Cu$	Cu Monocobre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$	Cu_n Cobre metálico	CuS Sulfuro de cobre $Cu(NO_3)_2$ Nitrato de cobre
Escribe tres casos nuevos			

3.4 Fórmula química estructural

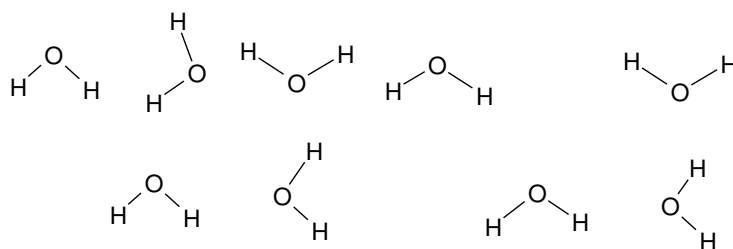
Como representación estructural, una fórmula química estructural es la organización espacial en una dimensión (1D), dos dimensiones (2D) y/o en tres dimensiones (3D) de los elementos combinados (o núcleos, o átomos combinados); elementos combinados son representados en calidad de elementos enlazados mediante una conectiva o segmento de recta denominada enlace químico. Una fórmula estructural denota la clase y número de elementos (o de núcleos, o de átomos) en la molécula. La fórmula estructural del peróxido de hidrógeno H_2O_2 es $H-O-O-H$: cada H enlazado a O y los O enlazados entre sí.

Una fórmula estructural es flexible y multifuncional y es transformada a una estructura rígida denominada geometría molecular. La geometría molecular es específica para contextos definidos e implica identificar las características de la organización de los enlaces químicos en el espacio, a saber: Longitud de enlace, energía de enlace y ángulo de enlace. Estas cualidades son modificadas en calidad de representaciones al ser modificadas las sustancias en contexto. Esto significa que una sustancia posee múltiples representaciones estructurales y la decisión de la validez de una u otra representación está relacionada con el comportamiento de la sustancia en contexto. Para el H_2O_2 la geometría molecular es:

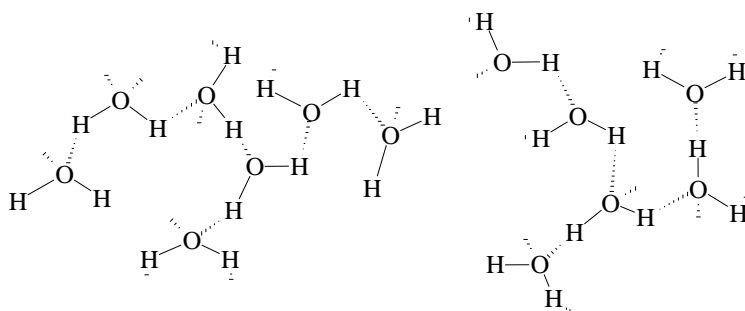


El ángulo de un grupo OH con respecto al otro, ángulo diedro es $111,5^\circ$.
El ángulo $O-O-H$ es aproximadamente 96° .

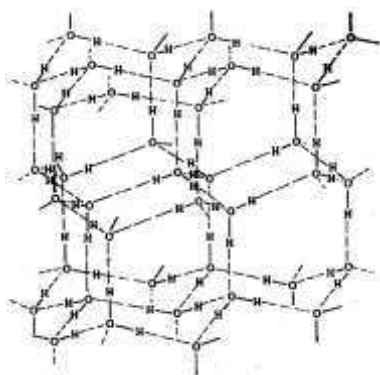
La funcionalidad de las fórmulas químicas puede ser apreciada en las representaciones siguientes sobre el agua en contexto, agua gaseosa $H_2O_{(g)}$, agua líquida $H_2O_{(l)}$ y agua sólida $H_2O_{(s)}$.



Fórmula estructural, Modelo de conectivas – Representación angular $H_2O_{(g)}$ Moléculas discretas



Modelo molecular flotante $\text{H}_2\text{O}_{(l)}$ – Modelo de conectivas $\text{H}_2\text{O}_{(l)}$ Agregado molecular



Modelo molecular red Cristalina hexagonal $\text{H}_2\text{O}_{(s)}$. Cada átomo de oxígeno está enlazado a cuatro de hidrógeno, dos enlaces covalente-polar (—) y dos enlaces de hidrógeno (----)

Consulte, dibuje y escribe, para las sustancias metano y amoníaco, la organización molecular para las fases gaseosa, líquida y sólida.

3.5 Valencia química

Representar una sustancia mediante fórmulas químicas implica el concepto de valencia química. Este concepto, expresado mediante una magnitud identificada según posición del elemento en la tabla periódica, tiene el significado de propiedad química o poder de combinación, o capacidad de un elemento para combinarse con otro u otros elementos. Esta capacidad es de naturaleza cuantitativa y tiene significado dual; por un lado, permite representar la relación de composición de la combinación química, y por otro, da lugar a expresar el número de enlaces de un elemento con otro al combinarse, y facilita de este modo, la representación en términos de fórmula estructural.

La valencia química es un concepto creado a mediados del siglo XIX, que orienta la construcción de la organización espacial de los elementos químicos cuando se combinan para formar una unidad en términos de composición y estructura. Se corresponde con la formación del enlace químico, como expresión de las interacciones químicas y su organización espacial cuando los elementos se combinan en proporciones definidas según la valencia.

La valencia química se clasifica en clásica, de coordinación y no clásica. Es de interés para el curso las valencias clásica y de coordinación. La valencia clásica se lee en un formato de tabla periódica organizado en 16 grupos, ocho grupos de clase A y ocho grupos de clase B, el número de cada grupo se expresa en número romano de I a VIII. La magnitud de la valencia clásica se expresa con el número del grupo. Por ejemplo, el azufre posicionado en el grupo VIA, período 3, tiene como valencia clásica VI; el carbono posicionado en el grupo IVA tiene como valencia clásica IV.

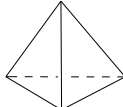

No siempre coincide la valencia clásica con el número del grupo, por ejemplo, al oxígeno posicionado en el grupo VIA, período 2, se le asigna valencia II; al nitrógeno posicionado en el grupo VA, período 2, se le asigna valencia III y V.

El concepto de valencia clásica tiene limitaciones y ha progresado a significados de mayor complejidad como el de valencia de coordinación. En la actualidad, a un elemento se le asignan diversas valencias cuya magnitud es equivalente al valor absoluto del número de oxidación $V = |\text{magnitud número de oxidación}|$. Por ejemplo, para los números de oxidación -1 y +5 del cloro, la valencia química será respectivamente I y V.

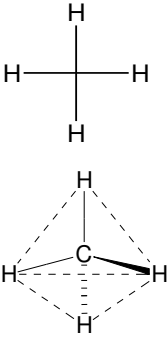
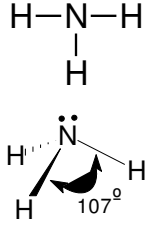
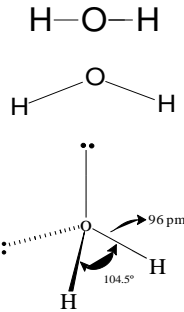
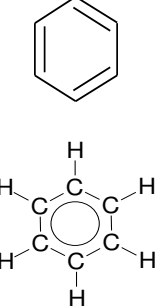
En el estudio de la estructura de los metales y sólidos iónicos se detallará con mayor amplitud el concepto de valencia de coordinación y una variedad de situaciones.

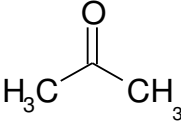
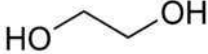
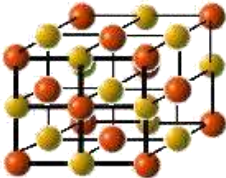
El cuadro 3.4 lista varios casos de fórmulas químicas de composición y las respectivas fórmulas estructurales de acuerdo a la valencia y la geometría de la molécula discreta.

Cuadro 3.4. Fórmula molecular, estructura y geometría molecular⁴

Sustancia	Elemento (valencia)	Fórmula de composición molecular	Fórmula estructural	Geometría
Dihidrógeno	H (I)	H₂	H – H	Lineal
Dioxígeno	O (II)	O₂	O=O	Lineal
Dinitrógeno	N (III)	N₂	N≡N	Lineal
Tetrafósforo	P (III)	P₄		Tetraédrica
Octazufre Ciclooctazufre	S (II)	S₈		Corona de 8 puntas (Octagono)
Dicloro	Cl (I)	Cl₂	Cl – Cl	Lineal

⁴ Las imágenes alusivas a estructuras moleculares presentadas en este cuadro y los siguientes han sido recuperadas: 2013-2014, Google, moléculas.

Tetrahidruro de carbono (metano)	C (IV) H (I)	CH₄		Tetraédrica
Trihidruro de nitrógeno (amoníaco)	N (III) H (I)	NH₃		Pirámide trigonal
Óxido de dihidrógeno	O (II) H (I)	H₂O		Angular
Benceno	C (IV) H (I)	C₆H₆		Anillo hexagono
Bióxido de Carbono	C(IV) O (II)	CO₂	O=C=O	Lineal
Cloruro de hidrógeno	H(I) Cl(I)	HCl	H—Cl	Lineal

Propanona (Acetona)	C(IV) H(I) O(II)	C₃H₆O		Triangular planar
1,2-Etanodiol (etilenglicol)	C(IV) H(I) O(II)	C₂H₆O₂		Dos carbonos tetraedrales enlazados
Fluoruro de Sodio	Na(I) F(I) Na(VI) F (VI)	NaF		C.C. de aniones, cationes en huecos octaedrales
Escribe tres casos nuevos				

Con el conocimiento de la configuración electrónica de los átomos, la valencia clásica crece en complejidad y trasciende al significado de electrones de valencia y da lugar a la creación de valencias nuevas para interpretar situaciones nuevas de combinación química. Se llama electrones de valencia a los electrones del nivel de mayor energía o nivel externo de energía en la expresión de la configuración electrónica de un átomo. La configuración electrónica expresa un orden creciente de energía de los orbitales atómicos (electrones) como se detalla a continuación:

Orden creciente de energía de los orbitales atómicos:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

Número máximo de electrones por niveles en la construcción de la configuración electrónica:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$

La magnitud del número de electrones de valencia, o de electrones liberados o capturados por un átomo en el nivel de valencia, que de otro modo se denomina número de oxidación, se constituye en una valencia química. Al liberar o capturar electrones los átomos de los grupos A tienden a adquirir una configuración electrónica similar a la del átomo del gas noble del período anterior o del final de su respectivo período.

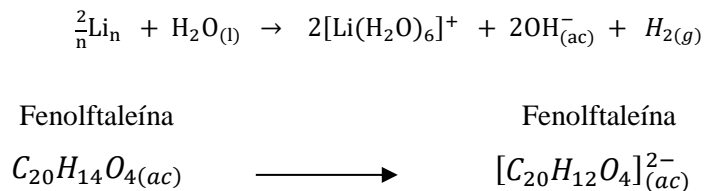
$_{11}\text{Na } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ nivel de valencia 3s con un electrón (1e), Valencia (I). El átomo de sodio Na para formar el catión sodio (1+) Na^+ libera 1e para la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6$.

$_{16}\text{S } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ nivel de valencia 3s 3p con seis electrones (6e), Valencia (VI), los cuales puede liberar para formar el catión S^{6+} . El átomo de azufre S para formar el anión sulfuro S^{2-} captura 2e, valencia (II) para la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. También puede ser la valencia (IV), el átomo de azufre libera 4e, el catión S^{4+} , valencia (IV), para la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$.

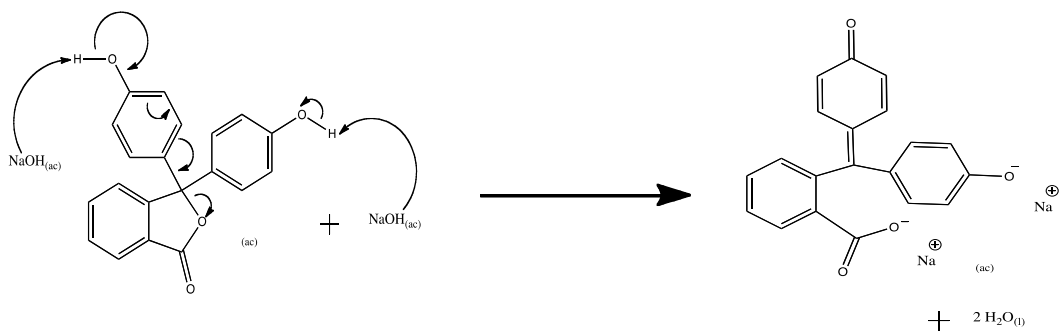
Propone, para los átomos de Nitrógeno, Fósforo y Cloro, los respectivos cationes y/o aniones según la configuración electrónica y el nivel de valencia.

3.6 Grupo funcional

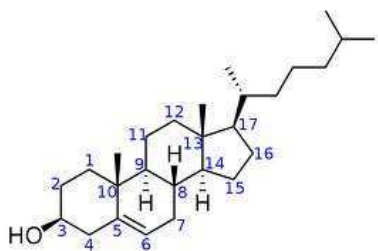
Una fórmula estructural se caracteriza, además de la composición molecular y la conectividad que representa combinación química, por posicionar uno o varios grupos funcionales (función química) que caracterizan la reactividad química de la molécula. Una función química se identifica por un grupo constituido de uno o varios átomos enlazados en una determinada configuración, portadora de un conjunto de propiedades químicas que le son características, y que en apariencia parecen comportarse de modo independiente de la unidad química estructural durante el transcurrir de una reacción química. Por ejemplo, en la reacción de litio metálico con agua líquida en presencia de fenolftaleína, además de la generación de hidrógeno gaseoso y del litio metálico transformarse en hidróxido de litio acuoso, la molécula de fenolftaleína al actuar como indicador ácido-base se modifica, no la molécula como totalidad, sino en las posiciones de la función química hidróxido. Esta descripción se detalla a continuación mediante la representación con ecuación química y fórmulas estructurales⁵.



⁵ Representaciones elaboradas por Luis Fernando Moreno Ariza, marzo de 2014.



Las funciones químicas caracterizan moléculas. Por ejemplo, el colesterol, es una sustancia de la clase esteroles (lípidos), abunda en las grasas de origen animal, se encuentra en los tejidos corporales y en el plasma sanguíneo de los vertebrados; en altas concentraciones se localiza en el hígado, médula espinal, páncreas y cerebro. La fórmula estructural del colesterol se detalla a continuación:



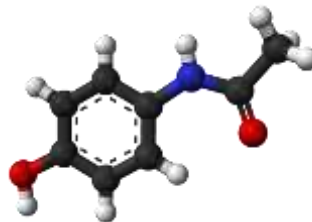
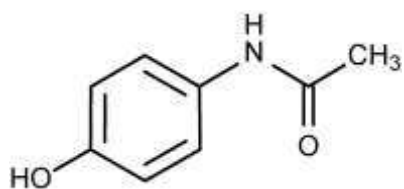
La fórmula molecular del colesterol se representa de dos formas: $C_{27}H_{46}O$ o $C_{27}H_{45}OH$. La fórmula estructural se caracteriza por ser un lípido esteroide, molécula de ciclopentanoperhidrofenantreno (o esterano), constituida por cuatro carbociclos denominados A, B, C y D, que presentan varias sustituciones por la respectiva función química.

- 1) Dos veces el radical metilo CH_3 en las posiciones C-10 y C-13.
- 2) Una cadena alifática ramificada de 8 carbonos en la posición C-17.
- 3) Un grupo hidroxilo en la posición C-3.
- 4) Una insaturación, enlace covalente doble σ , π , entre los carbonos C-5 y C-6.

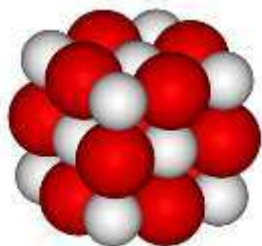
En la molécula de colesterol se puede distinguir una cabeza polar constituida por el grupo hidroxilo y una porción no polar formada por los cuatro carbociclos y los sustituyentes alifáticos. De este modo, el colesterol es una molécula hidrófoba con una solubilidad de 10^{-8} M y, al igual que los otros lípidos, es bastante soluble en disolventes no polares como el cloroformo $CHCl_3$.

Finalmente, se recuerdan algunas funciones químicas como: anión sulfato SO_4^{2-} , catión amonio NH_4^+ , alcohol $R-OH$, éter $R-O-R'$, cianuro CN^- , entre otras.

Lee la siguiente fórmula estructural de la molécula del Paracetamol o acetaminofén, fármaco con propiedades analgésicas y antipiréticas, de solubilidad en agua 12,78 mg/mL a 20°C. Identifica y escribe la fórmula molecular, las formas geométricas y el nombre y símbolo de los grupos funcionales.



Lee la siguiente red molecular de la molécula del óxido de calcio, de solubilidad en agua 1,19 mg/mL a 25°C, reacciona. Identifica el enlace químico y la forma geométrica. Escribe una descripción de la red molecular y ecuaciones químicas para representar las situaciones enunciadas.



Estructura química del óxido de calcio, CaO cristal iónico. En rojo se observa el anión oxígeno O²⁻ y en blanco el catión calcio Ca²⁺, que tiene un radio iónico menor.

Consulta los radios de los iones y anótalos.

4. MODELOS DEL ENLACE QUÍMICO

Es fundamental para los químicos comunicarse información estructural tridimensional. Los medios para esa comunicación son bidimensionales: una hoja de papel, una pantalla. De tal suerte que se enfrenta de inmediato al problema de la representación. (Hoffmann, 1997, 79).

4.1 El enlace químico

La fórmula química estructural, al permitir identificar la conectividad entre elementos (átomos) mediante la valencia química, da lugar a introducir el concepto de enlace químico. El concepto de enlace químico, a pesar de una primera representación ser simple, la conectiva, no puede atribuírsele un significado simplista. La conectiva es una representación que denota interacción entre átomos, de modo más preciso, interacción entre núcleos y electrones de los átomos que se combinan.

El enlace químico es diverso y complejo, varias teorías dan cuenta de ello: la de Lewis, enlace de valencia y orbitales moleculares para el enlace covalente; la de Kossel y el modelo electrostático de fuerza eléctrica para el enlace iónico; la teoría de bandas para el enlace metálico. Para cada clase o modelo de enlace químico se presentan teorías que difieren entre sí y que tienen referentes diferentes para su construcción. Una conectiva no es simplemente un segmento de recta, debe atribuírsele un significado posicionado en una teoría de enlace.

El enlace químico al estar integrado a la estructura química para representar sustancias, también está ligado en su creación a responder por la clase de sustancia cuando esta manifiesta comportamientos en contexto. Se ha expresado con anterioridad que una propiedad no existe en sí misma, que es posible cuando una sustancia interactúa con otra u otras en contexto.

Las clases o modelos de enlace químico tienen el sentido de interpretar propiedades de clases de sustancias. Es por esto que se trata no sólo de entidades estructurales discretas e individuales, es también la consideración de interacciones entre dichas unidades moleculares que responden por diversas situaciones químicas, como por ejemplo los cambios de fase, la presión de vapor y las disoluciones acuosas. Los enlaces en una unidad molecular se denominan intramoleculares y a las interacciones entre unidades moleculares se les denomina enlaces intermoleculares. Los primeros son de la clase iónica, covalente, covalente-iónico o covalente-polar, metálico y de dispersión; y los segundos de la clase: dispersión, dipolo-dipolo, ión dipolo.

Por ejemplo, en contexto, unas sustancias son buenas conductoras de la electricidad como los metales Cu_n , Au_n , Ag_n , el $NaCl_{(l)}$ y el $NaCl_{(ac)}$; otras son de baja conductividad eléctrica como carbono grafito C_n o $C_{grafito}$; otras son no conductoras como $NaCl_{(s)}$ y carbono diamante C_n o $C_{diamante}$. Estos comportamientos tienen interpretación molecular en términos de la clase de enlace químico en las respectivas moléculas.

Cada una de las clases de enlace mencionadas en párrafo anterior, permite interpretar comportamientos de las sustancias. La conductividad eléctrica de los metales se interpreta mediante el enlace metálico en una estructura metálica; la conductividad eléctrica del $NaCl_{(l)}$ por la movilidad de los iones sodio ($1+$) Na^+ y cloruro Cl^- en el agregado molecular $NaCl_{(l)}$; la conductividad

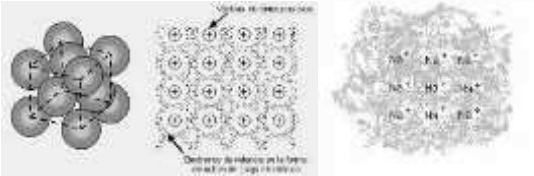
eléctrica del $\text{NaCl}_{(\text{ac})}$ por la movilidad de los iones catión sodio ($1+$) Na^+ y cloruro Cl^- en el medio acuoso; la baja conductividad eléctrica del $\text{C}_{\text{grafito}}$ por los enlaces covalente doble (sigma σ y pi π) en la estructura molecular; la no conductividad eléctrica del $\text{NaCl}_{(\text{s})}$ por la no movilidad de los iones sodio ($1+$) Na^+ y cloruro Cl^- en una estructura molecular iónica de NaCl ; la no conductividad eléctrica de $\text{C}_{\text{diamante}}$ por los enlaces covalente sigma en la estructura molecular de carbono diamante.

4.2 Modelos del enlace químico intramolecular

El cuadro 4.1 detalla las clases de enlace intramolecular, plantea una primera aproximación al concepto y un ejemplo de cada caso.

Cuadro 4.1 Enlace químico intramolecular

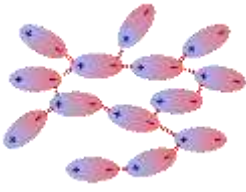
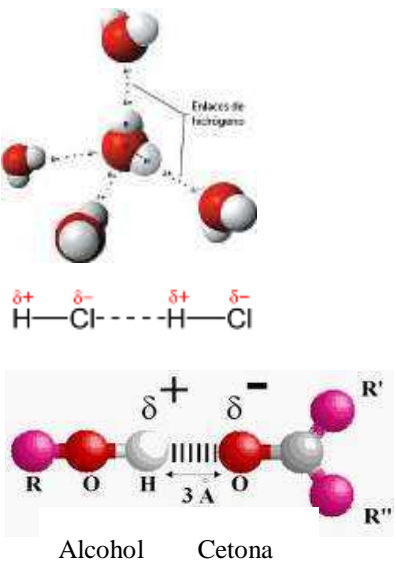
Clase de enlace intramolecular	Concepto de primera aproximación	Ejemplo
Iónico	Interacción eléctrica de atracción entre las cargas eléctricas puntuales de los iones, catión y anión. Modelo electrostático de fuerza eléctrica.	<p>(A) Cristal de NaCl. Modelo de puntos. (B) Cristal de NaCl. Modelo de esferas.</p>
Covalente	Según la teoría de Lewis un enlace covalente expresa compartición de un par electrónico. Es de la clase covalente sigma (σ) o simple y pi (π). El enlace covalente se clasifica simple (σ), doble (σ, π) y triple (σ, π, π).	<p>$\text{H}-\text{H}$ $\text{H}:\text{H}$ $\text{O}=\text{O}$ $\text{O}::\text{O}$ $:\text{O}=\text{O}:$ $\text{N}\equiv\text{N}$ $\text{N}:::\text{N}$ $:\text{N}\equiv\text{N}:$ $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ (ángulo 104.45°) $\text{H}-\text{N}-\text{H}$ $\text{H}-\text{C}-\text{H}$</p>
Covalente – iónico	Compartición de un par electrónico, con desplazamiento del par electrónico hacia el átomo de mayor electronegatividad, dándose una carga eléctrica parcial negativa sobre este átomo y otra parcial positiva sobre el átomo de menor electronegatividad o electropositivo.	<p>Molécula de agua 95.84° 104.45°</p>

<p>Metálico</p>	<p>Interacción eléctrica de atracción entre iones metálicos y electrones deslocalizados y móviles, que pertenecen a la red cristalina como un todo, y compartición de electrones⁶.</p>	
------------------------	---	--

4.3 Modelos del enlace químico intermolecular

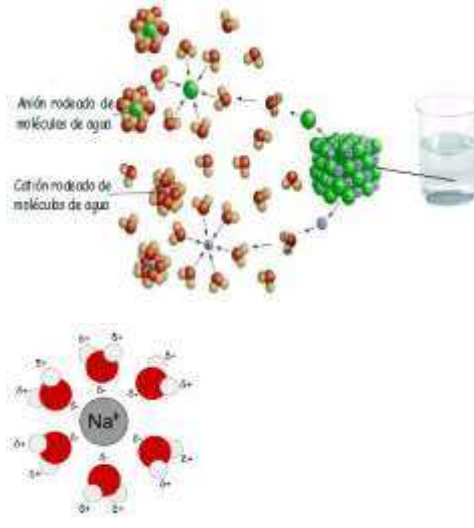
El cuadro 4.2 detalla las clases de enlace intermolecular, plantea una primera aproximación al concepto y un ejemplo de cada caso.

Cuadro 4.2 Enlace químico intermolecular⁷

Clase de enlace intermolecular	Concepto de primera aproximación	Ejemplo
<p>Dipolo-dipolo</p>	<p>Interacción eléctrica de atracción entre moléculas polares, entre los dipolos de dos moléculas: la carga eléctrica positiva del dipolo de una molécula interacciona con la carga eléctrica negativa del dipolo de otra molécula de la misma clase o diferente.</p>	
<p>Enlace de hidrógeno</p>	<p>Es una clase de enlace dipolo-dipolo. De modo general, esta interacción se da cuando moléculas polares presentan en su estructura, átomos de hidrógeno enlazados a un átomo de alta electronegatividad como flúor, oxígeno, nitrógeno y cloro.</p>	
<p>Ión-dipolo</p>	<p>Interacción eléctrica de atracción entre un ión y una molécula polar; el polo de carga eléctrica positiva o negativa de una molécula polar interacciona con la carga</p>	

⁶ Ver: Enlace metálico. Simulación en <http://jcabello.es/documentos/docquimica2/emetalico.swf>. Recuperado agosto 23 de 2011.

⁷ Ver: Fuerzas intermoleculares. Recuperado enero de 2014 <http://www.youtube.com/watch?v=FLXA79ulu5g>

	eléctrica negativa o positiva respectivamente de un ión.	
--	--	--

Retome la molécula del Paracetamol o acetaminofén, identifique además, los enlaces intramoleculares e intermoleculares en medio acuoso. Con base en esta información escribe una descripción de la molécula.

4.4 Características del enlace químico intramolecular

La estructura molecular armada con interacciones entre núcleos y electrones (interacciones entre átomos), denominadas enlace químico intramolecular y representados mediante conectivas en una fórmula estructural, están dirigidos en el espacio tridimensional y se caracterizan por poseer las propiedades longitud de enlace, energía de enlace y ángulo de enlace. Estas características son propias de cada unidad molecular discreta según la combinación de los átomos y los ángulos de enlace definen la geometría molecular de la entidad.

La longitud de enlace se define como una distancia internuclear, distancia a la cual interaccionan dos núcleos atómicos, y de modo aproximado, se considera como la suma de los radios atómicos de los átomos intervinientes en la formación del enlace químico. Si el enlace es covalente de modo principal, se tienen en cuenta los radios covalentes, si es iónico los radios iónicos, si es metálico los radios metálicos y si es de dispersión, los radios de Van der Waals. La magnitud de la longitud de enlace se expresa en nanómetros o picómetros.

La Energía de enlace es considerada como la energía total promedio liberada cuando se forma un mol de enlaces químicos de la misma clase en una unidad molecular referida a la fase gaseosa. También puede afirmarse que es la energía total promedio que se necesita para romper un mol de enlaces de cierta clase en fase gaseosa. Los enlaces más fuertes, o sea los más estables, tienen energías de enlace de magnitud alta. La magnitud de la energía de enlace se expresa en Kilocalorías.

El cuadro 4.1 detalla longitudes y energía de varios enlaces químicos.

El ángulo de enlace es el ángulo conformado entre dos enlaces químicos, y tiene magnitud según la distribución espacial de los enlaces. El conjunto de ángulos de enlace, a su vez conforma la geometría molecular.

Cuadro 4.1 Enlace químico, longitud y energía⁸

Enlace químico	Longitud de enlace (pm)	Energía de enlace (kJ/mol)	Enlace químico	Longitud de Enlace (pm)	Energía de enlace (kJ/mol)
H-H	74	436	N-N	145	170
H-C	109	413	N≡N	110	945
H-N	101	391	O-O	148	145
H-O	96	366	O=O	121	498
H-F	92	568	F-F	142	158
H-Cl	127	432	Cl-Cl	199	243
C-C	154	348	Br-H	141	366
C=C	134	614	Br-Br	228	193
C≡C	120	839	I-H	161	298
C-N	147	308	I-I	267	151
C-O	143	360	C-S	182	272
C-F	135	488	C-I	214	216
C-Cl	177	330	C-S	182	272
C-Br	194	288			

El cuadro 4.2 detalla varias moléculas según la clase de enlace químico y una característica de la respectiva sustancia. Se introduce el concepto de electronegatividad⁹ como una opción desde un punto de vista semi-empírico para clasificar el enlace químico como covalente, iónico (polar) o covalente-polar. Completa los datos solicitados.

Cuadro 4.2 Moléculas y clase de enlace


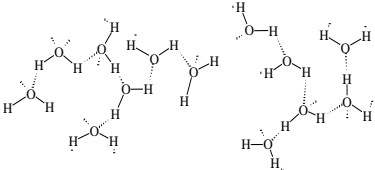
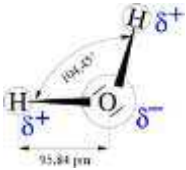
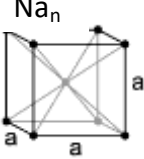
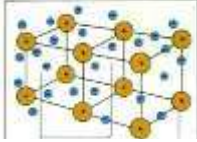

SUSTANCIA MOLÉCULA	PROPIEDAD	CLASE DE ENLACE Y LONGITUD	DIFERENCIA DE ELECTRONEGATIVIDAD
NaCl _(s) (Na ⁺ Cl ⁻) _n	Soluble en agua y solución acuosa ¹⁰ conductora de la electricidad. Vaporiza como par iónico	Iónico Na ⁺ - Cl ⁻	$\epsilon_{\text{Na}}=0,93$ $\epsilon_{\text{Cl}}=3,16$ $\Delta\epsilon=2,26$ Complete el siguiente

⁸ Datos tomados de

⁹ De modo muy general, puede entenderse la electronegatividad, como una forma de cuantificar la capacidad de un átomo de atraer los electrones de otro átomo en una molécula, es decir, la formación de un enlace químico en un ambiente químico específico. Existen diferentes escalas de electronegatividad, la más utilizada en la enseñanza y el aprendizaje es la de Pauling. La diferencia de electronegatividad entre dos átomos se utiliza para caracterizar el carácter covalente y polar (iónico) de una enlace. En un formato de tabla periódica se localizan los respectivos datos y una escala que orienta el porcentaje de carácter covalente y polar de un enlace según la diferencia de electronegatividad.

Nótese que el concepto de electronegatividad es una categoría del nivel eléctrico, es una idea relacionada con la percepción de la molécula como interacción entre núcleos y electrones para la formación de un enlace químico.

¹⁰ Ver video, Disociación del cloruro de sodio en medio acuoso. Recuperado marzo de 2016 de <https://www.youtube.com/watch?v=EBfGcTAJF4o>

 <p>Observa en verde el anión cloruro Cl^-, y en gris el catión Na^+, que tiene un radio iónico menor. Consulta los radios de los iones y anótelas.</p>	<p>Na^+Cl^- No conductor eléctrico</p>	<p>Calcule la longitud de enlace y anótelas:</p>	<p>dato: % de carácter iónico: % de carácter covalente:</p>
<p>$\text{H}_2\text{O}_{(l)} \quad (\text{H}_2\text{O})_x$</p> 	<p>Vaporiza como molécula discreta</p> <p>H_2O</p> 	<p>O—H Covalente polar $\text{H}_2\text{O}\cdots\text{H}_2\text{O}$ Enlace de hidrógeno</p> <p>Calcule la longitud de enlace y anótelas: Ángulo de enlace:</p>	<p>$\epsilon_{\text{H}}=2,2 \quad \epsilon_{\text{O}}=3,44$ $\Delta\epsilon=1,24$</p> <p>Complete el siguiente dato: % de carácter iónico: % de carácter covalente:</p>
<p>Na_n</p> 	<p>Vaporiza como molécula discreta (átomo)</p> <p>${}_{11}\text{Na}$ Conductor eléctrico</p>	<p>Metálico</p> <p>Calcule la longitud de enlace y anótelas:</p> <p>$\cdots\text{Na}-\text{Na}-$ Na -Na</p>  <p>Iones positivos Mar de electrones</p>	
<p>$\text{CH}_4(g)$</p> 	<p>Insoluble en agua No conductor eléctrico</p>	<p>C—H Covalente</p> <p>Calcule la longitud de enlace y anótelas: Ángulo de enlace:</p>	<p>$\epsilon_{\text{C}}=2,55 \quad \epsilon_{\text{O}}=3,44$ $\Delta\epsilon=0,89$</p> <p>Complete el siguiente dato: % de carácter iónico: % de carácter covalente:</p>

5. APLIQUE LA LÓGICA DEL LENGUAJE QUÍMICO

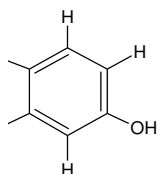
...el trabajo en la disciplina se concentra en cuatro áreas principales: análisis, síntesis, transformación y modelaje. (Talanquer, 2010, 146).

5.1 Identifique relación estructura, cualidad y cantidad

En los siguientes casos se detalla Información para sustancia, cantidad de sustancia (mol) y masa molecular y molar, unidad fórmula, fórmula molecular y estructural. Con la información suministrada y la ayuda de los conceptos composición porcentual en masa de cada elemento, enlace químico, clases de enlace y valencia química, electronegatividad y diferencia de electronegatividad, poliedro y polígono, responde las preguntas planteadas a continuación:

➤ **Acetaminofen** - paracetamol - N-(4-hidroxifenil)etanamida, sustancia componente de la aspirina.

$C_8H_9NO_2$
Fórmula molecular
1 molécula
151,17 uma
1 mol de moléculas
151,17 g/mol

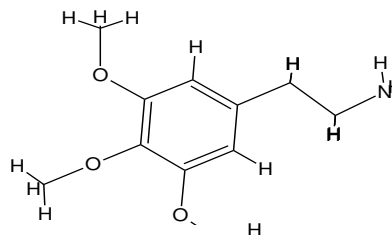


Fórmula estructural

- Determinar el porcentaje en masa de cada elemento en el acetaminofen.
- Determinar el número total de enlaces en la fórmula estructural y asigno la valencia a cada elemento.
- Identificar las clases de enlace y asignar el carácter covalente-polar de cada uno.
- Identificar los grupos funcionales.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.

➤ **Mescalina** - trimetoxifeniletilamina - fenetilamina-3,4,5-trimetoxi - 2-(3,4,5 trimetoxifenil) etanamina. Es una sustancia de la clase alcaloide, extraída del cactus peyota y actúa como psicoactiva y alucinógeno en el cuerpo humano.

$C_{11}H_{17}NO_3$
Fórmula molecular
1 molécula
211,26 uma
1 mol de moléculas
211.26 g/mol



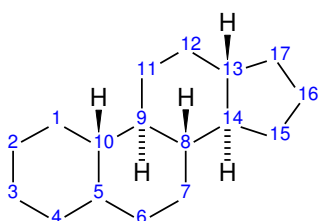
Fórmula estructural

- Determinar el porcentaje en masa de cada elemento en la mescalina.
- Determinar el número total de enlaces en la fórmula estructural y asignar la valencia a cada elemento.
- Identificar los grupos funcionales.

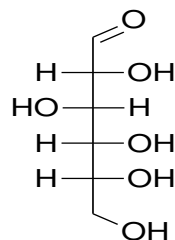
- identificar las clases de enlace y asignar el carácter covalente-polar de cada enlace.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.

➤ **Gonane** es una sustancia de la clase esteroide. Se detalla la fórmula estructural.

- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar el total de enlaces y las clases de enlace.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.



Gonane



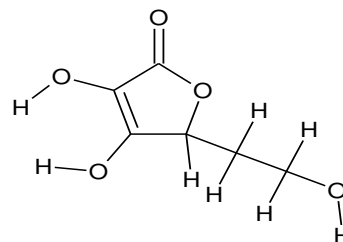
D-Glucosa

➤ **D-glucosa.** Sustancia de la clase carbohidrato. Se detalla la fórmula estructural.

- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar clases de enlace químico y los grupos funcionales.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.

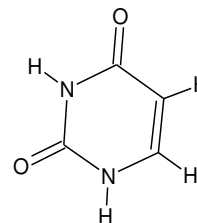
➤ **Vitamina C.** (5S)-3,4-dihydroxy-5-(2-hydroxyethyl)furan-2(5H)-one

- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y el total de enlaces y las clases de enlace.
- Dibujar tres moléculas enlazadas por enlace de hidrógeno.



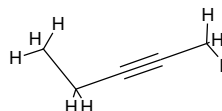
➤ **Uracilo.** Pyrimidine-2,4(1H,3H)-dione Base nitrogenada que forma parte del ARN.

- Determinar la fórmula molecular
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y clases de enlaces.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.



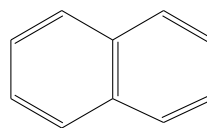
➤ **2- pentino**

- Determinar la fórmula molecular
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar las clases de enlaces
- Asignar el carácter covalente-polar de cada enlace.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.

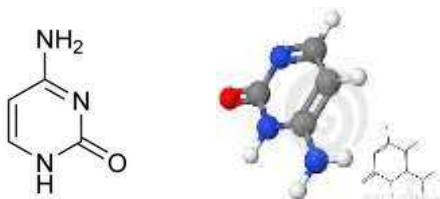


➤ **Naftaleno.** Se utiliza como producto intermedio en la fabricación de: anhídrido ftálico (producción de plastificadores para PVC), aditivos para el hormigón, sustancias humectantes en la industria textil, componentes de solventes para pesticidas (antipolillas), curtientes y colorantes.

- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y clases de enlaces.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.



➤ **Citosina.** Una de las cinco bases nitrogenadas que conforman los ácidos nucleicos ADN y ARN.



- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y clases de enlaces.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.
- Dibujar 3 moléculas enlazadas por enlace de hidrógeno.

➤ **Loratadina.** Una molécula antialérgica utilizada para el tratamiento de alergias dermatológicas y el control de los síntomas de la rinitis y conjuntivitis alérgica.



- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y clases de enlaces.
- Determinar la composición en porcentaje por masa.
- Escribir la fórmula estructural de conectivas.

➤ **Ácido láctico.** Producido principalmente en las células musculares y en los glóbulos rojos. Se sintetiza cuando el cuerpo humano descompone carbohidratos para utilizarlos como energía durante momentos de niveles bajos de oxígeno.

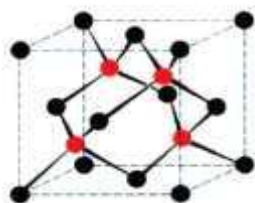


- Determinar la fórmula molecular.
- Identificar las formas geométricas presentes en la estructura.
- Identificar grupos funcionales y clases de enlaces.
- Escribir la fórmula estructural de conectivas.
- Escribir la ecuación química molecular y con estructura para representar la sustancia en medio acuoso.

- La siguiente imagen¹¹ muestra la transformación de la Ciclohexil metil cetona a un Ciclohexil metil dicloruro. A) Identifique los grupos funcionales y formas geométricas en reactivo y producto; B) Escribe la ecuación química molecular y la lectura molar y molecular de la misma.



- La sustancia simple carbono se presenta en varias formas, isómeros¹², algunas naturales como carbono diamante y carbono grafito; otras sintéticas como fullero, nanotubos de carbono y grafeno. Lee con atención las representaciones moleculares y describe composición y características de la estructura.



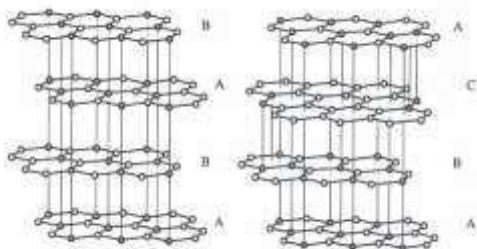
Carbono diamante C_n No conductor eléctrico

C_n red cúbica compacta con la mitad de los huecos tetraedrales ocupados

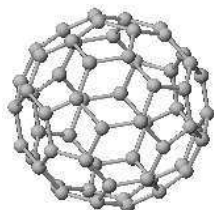
Diamante sp^3
No conductor



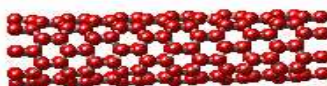
Grafito sp^2
conductor



Carbono grafito C_n Red hexagonal de planos paralelos
Conductor eléctrico



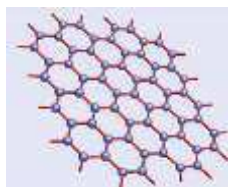
Carbono fullereno C_{60}



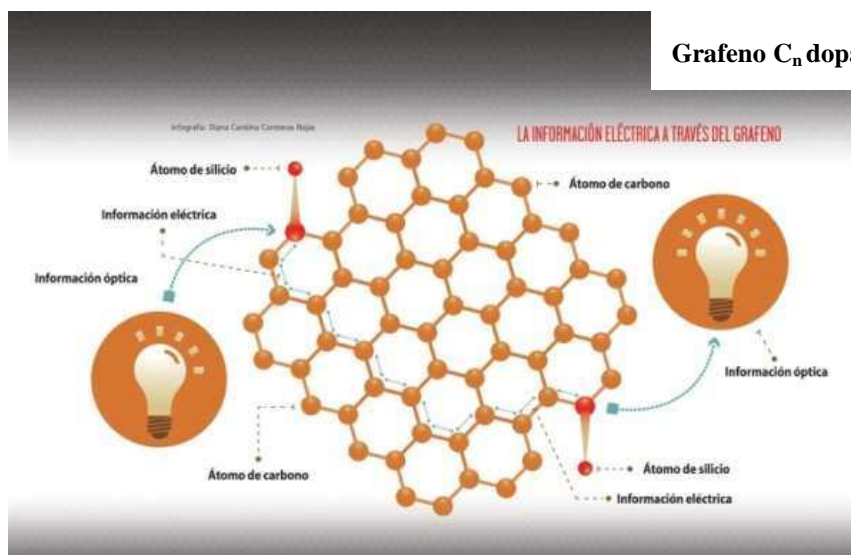
Nanotubo de carbono C_n

¹¹ Imagen recuperada mayo de 2015 de <http://es.wikipedia.org/wiki/Geminal>

¹² Imágenes recuperadas de Internet, Google, julio 26 de 2014.



Nanomaterial Grafeno C_n



Grafeno C_n dopado con átomos de silicio

5.2 Escribe fórmulas estructurales y ecuaciones químicas

A. Dibuje fórmulas estructurales para posibles isómeros estructurales de:

- [Pt(NH₃)₂Cl₂] distribución en un plano cuadrado, metal en el centro.
- [Co(NH₃)₄Cl₂]⁺ distribución octaédrica, metal en el centro del plano cuadrado.
- IrCl₃·3NH₃ distribución octaédrica, metal en el centro del plano cuadrado.
- C₆H₄(OH)₂ cíclica.
- [Pd(NH₃)₂(NO₂)₂] distribución en un plano cuadrado, metal en el centro.

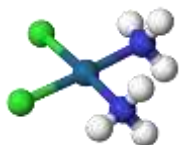
B. Dibuje una fórmula estructural para cada uno de los siguientes casos e identifique las clases de enlace químico:

- Trisulfuro de tetrafósforo P (III) S (II) P₄S₃ Cíclica.
- Decafluoruro de diazufre S (VI) F (I) S₂F₁₀ Cada azufre octaédrico.
- Ciclohexano.
- Cubano C₈H₈ cúbica.
- 1-pentanol; 2-pentanol.
- Butano.
- Heptano.

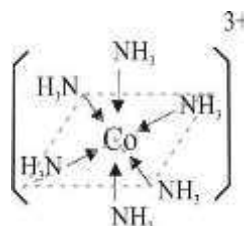
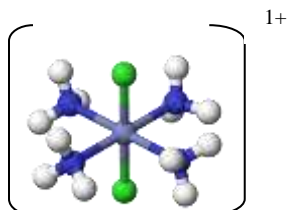
C. El tricloruro de fósforo líquido es una sustancia importante desde el punto de vista comercial y utilizado en la fabricación de pesticidas, aditivos para la gasolina y otros productos. Se obtiene por la combinación directa de la sustancia tetrafósforo sólido y dicloro gaseoso. La reacción se lleva a cabo en un contexto de atmosfera inerte, dado que ambas sustancias son altamente reactivas con el dióxígeno del aire y el agua de la humedad del ambiente.

Represente con ecuación química y fórmulas estructurales los casos enunciados respecto a transformación de sustancias. Escribe la lectura de las ecuaciones en términos de mol y de moléculas.

D. La molécula indicada a continuación, de un complejo de platino, reacciona en el organismo humano enlazándose al ADN celular y causando apoptosis, por lo que se utiliza como agente quimioterápico en el tratamiento de muchos tipos de cáncer. Escribir la fórmula molecular e identificar las geometrías presentes.



E. Para las siguientes representaciones moleculares de iones de Cobalto escribir la fórmula molecular e identificar la geometría molecular.

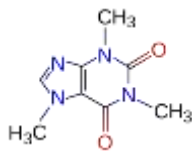


5.3 Trabajo con la lógica del lenguaje químico

- Escribe la fórmula estructural a modo de conectivas del Anión pirofosfato, o anión difosfato, o anión heptaoxodifosfato (V) $P_2O_7^{4-}$; para la representación 3D el fósforo es tetraedral. Escribir, además, la representación estructural para el ácido pirofosfórico, también nombrado ácido difosfórico o heptaoxodifosfato (V) de hidrógeno, el cual es muy soluble en agua y en etanol.
 - Represente estas dos situaciones con ecuación química y fórmulas estructurales,
 - Identifique las interacciones intermoleculares.

- El ácido cítrico es un ácido orgánico tricarbóxico, presente en los frutos cítricos como la naranja y el limón. Se utiliza como aditivo, conservante y antioxidante natural en la industria de alimentos, como en el envasado de vegetales y de otras conservas. Su fórmula molecular es $C_6H_8O_7$ y su nombre Ácido 2-hidroxi-1,2,3-propanotricarbóxico.

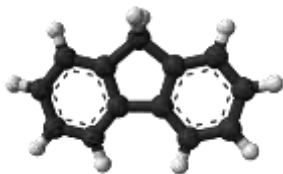
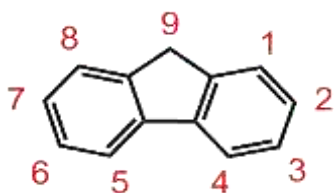
- Escribe ecuaciones químicas y fórmulas estructurales para representar las tres disociaciones del ácido cítrico en medio acuoso.
 - Identifique los enlaces intramoleculares y las interacciones intermoleculares.
- El 1,3-butadieno es el monómero del polímero polibutadieno, utilizado éste en la fabricación de bandas de rodamiento, mangueras y cinturones de automóviles, así como en el recubrimiento de láminas metálicas.
- Represente con fórmulas estructurales el monómero y una unidad polimérica constituida, por ejemplo, al enlazar tres o cuatro o cinco monómeros.
 - Identifique los enlaces intramoleculares y las interacciones intermoleculares.
- El ácido sulfúrico $H_2SO_{4(ac)}$, altamente utilizado en la industria de fertilizantes y del petróleo, es una solución acuosa del sulfato de dihidrógeno $H_2SO_{4(l)}$, sustancia que presenta dos disociaciones en el medio acuoso.
- Represente con ecuación química las dos disociaciones.
 - Represente con ecuación química y fórmulas estructurales las dos disociaciones.
 - Explique el carácter ácido del sulfato de dihidrógeno en medio acuoso.
- El hidróxido de magnesio es una base débil, utilizada en la industria para la producción de antiácidos (regulador de la acidez estomacal). La solubilidad es de 12 mg en 1 L de agua.
- Represente con ecuación química y fórmulas estructurales una solución saturada; indique las cantidades de soluto y de solvente.
 - Represente con ecuación química y fórmulas estructurales una solución insaturada. indique las cantidades de soluto y de solvente.
 - Represente con ecuación química y fórmulas estructurales una mezcla heterogénea. indique las cantidades de soluto y de solvente.
 - Explique las decisiones adoptadas para las anteriores representaciones.
- La cafeína es un alcaloide de la clase de las xantinas, droga psicoactiva y estimulante del sistema nervioso central. Se localiza en cantidades variables en las semillas, las hojas y los frutos de algunas plantas como Café, Cacao, Té y Guaraná, donde actúa como pesticida natural que paraliza y mata ciertos insectos que se alimentan de ellas. Es consumida por los humanos en infusiones extraídas del fruto de la planta del Café y de las hojas del arbusto del Té, así como también en varias bebidas y alimentos. Es un sólido cristalino, blanco y de sabor amargo; su solubilidad en agua es 2,17 g/100ml a 25°C, su momento dipolar calculado es 3,64 D y su constante de acidez pK_a -0.13-1,22. Representar la situación de solubilidad con ecuación química y fórmulas estructurales.



- El Bupropión es un medicamento antidepresivo y empleado también para dejar de fumar. Su composición elemental es: 65.13% de carbono, 7.57% de hidrógeno, 14.79% de cloro, 5.84%

de nitrógeno y 6.67% de oxígeno. Su fórmula relativa y molecular son iguales. Determinar la fórmula molecular; y consultar su fórmula estructural e identificar grupos funcionales, clases de enlace y algunas propiedades químicas y farmacológicas.

- El fluoreno o 9H-fluoreno, es un nanomaterial de la clase hidrocarburo aromático policíclico, sólido de color blanco, combustible y de fluorescencia violeta, insoluble en agua (1,8 mg por L) y soluble en benceno y éter etílico. Es utilizado para la síntesis de polímeros denominados polifluorenos, los cuales son conductores de la electricidad y electroluminiscentes, e investigados para usarse como luminóforos en diodos orgánicos de emisión de luz. La síntesis del polímero se da por la formación del enlace entre el carbono 7 de una unidad molecular y el carbono 2 de otra, con el desplazamiento de dos hidrógenos.



https://es.wikipedia.org/wiki/Fluoreno#/media/File:Fluorene_numbered.png

De Mark Oakley de Wikipedia en inglés – Transferido desde en.wikipedia a Commons por Chojj usando Commons Helper., Dominio público. <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=5830994>

- Escribe la fórmula molecular del 9H-fluoreno.
- Represente con ecuación química y fórmulas estructurales la síntesis de una unidad polimérica conformada por tres unidades moleculares de fluoreno.
- Identifique en la unidad polimérica los enlaces intramoleculares y entre las moléculas de fluoreno.

Preguntas de interés, plantea respuestas a lo largo del tiempo.

Que sea hoy otra oportunidad

¿Cómo describimos, interpretamos, explicamos y modelamos las sustancias y sus transformaciones químicas en contexto?

¿Cómo describimos a las sustancias y sus transformaciones en una reacción química?

¿Cuáles modelos son más explicativos para la estructura de las sustancias?

¿Cómo relacionamos las propiedades de las sustancias con su estructura y enlace?

6. BIBLIOGRAFÍA

Citada

- Hoffmann, R. (1997). La Semiótica de la Química. En *Lo mismo y no lo mismo*. México: Fondo de Cultura Económica.
- Jacob, C. (2001), Analysis and Synthesis, Interdependent Operations in Chemical Language and Practice *HYLE - International for Philosophy of Chemistry*, 7, 1, 31-50.
- Laszlo, P. (1993). *La parole des choses*. Paris: Collection Savoir: Sciences, Hermann Éditeurs des Sciences et des Arts.
- Talanquer, V. (2010). Química Agazapada. En *Historia y filosofía de la química*, aportes para la enseñanza. México: Siglo XXI editores
- Vergnaud, G. (1990). La Théorie des Campo Conceptuels, *Recherches en Didactique des Mathématiques*, 10, 23, 133-170.

Recomendada

- Chang, Raymond. (2007) (Novena Edición). *Química*. México: Editorial MacGraw Hill.
- Petrucci, Harwood, Herring. (2010). *Química General* (Décima Edición). Toronto: Pearson Canadá.
- Whitten, K., Davis, R., Peck, L. Stanley, G.) (2008) (Octava Edición). *Química*. México: CENGAGE Learning.
- Oxtoby, D., Gillis, H. P., Campion. (2010) (Sixth Edition). *Principles of Modern Chemistry*. USA: Thomson, Brooks/Cole.

Cibergrafía

- Chang, Raymond. (2007). *Química* (Séptima Edición). México: Editorial MacGraw Hill. Recuperado septiembre 11 de 2015 de <http://es.slideshare.net/taurus22/quimica-10ma-edicion-raymond-chang-35427000>
- Petrucci, Harwood, Herring. (2011). *Química General* (Décima Edición). Toronto: Pearson Canadá. Recuperado septiembre 11 de 2015 de <http://webdelprofesor.ula.ve/ciencias/bsimon/docs/PE10a.pdf>
- Spencer, J. N., Bodner G. M., Rickard, L. H. Rickard. (2000). Química: Estructura y Dinámica (Primera Edición). México: CECSA. Recuperado septiembre 11 de 2015 de <http://www.qfa.uam.es/fqf/material/l3.pdf>
- Tabla Periódica Dinámica. Recuperada septiembre 11 de 2015 de <http://www.ptable.com/lang>
- Tabla Periódica Dinámica. Recuperado septiembre 11 de 2015 de <http://pse.merck.de/merck.php?lang=ES>