

## ■ Polaridad de las moléculas

¿Qué es? La polaridad consiste en la capacidad de una molécula para ejercer interacciones intermoleculares de naturaleza electrostática, debidas a una distribución asimétrica de las cargas eléctricas entre sus átomos. El origen de la polaridad está en la *diferencia de electronegatividad* de sus átomos. La **electronegatividad** ( $X$ ) es una propiedad periódica que consiste en la capacidad de los átomos de un elemento para atraer hacia sí a los electrones de los enlaces en que participa. Existen varias escalas para medir la electronegatividad, pero la más conocida y usada es la de Pauling. Usando las electronegatividades de Pauling, si la diferencia de electronegatividad entre los átomos enlazados es pequeña o nula ( $\Delta X < 0,4$ ) los enlaces se consideran *covalentes puros* o covalentes **apolares** (como en el  $\text{CH}_4$ , el  $\text{H}_2$  o el  $\text{Cl}_2$ ). Estas moléculas no ejercen fuerzas intermoleculares eléctricas, y por ello tienen **bajos puntos de fusión y ebullición** (es decir, que son *volátiles*: pasan fácilmente a la fase de vapor, precisamente porque las únicas fuerzas intermoleculares que experimentan son las débiles *fuerzas de Van der Waals*). En cambio, cuando la diferencia de electronegatividad es moderada ( $0,4 < \Delta X < 1,7$ ) (como en el  $\text{NH}_3$  o el  $\text{H}_2\text{O}$ ) los enlaces covalentes presentan una distribución asimétrica de la densidad electrónica, ya que el átomo más electronegativo atrae a los electrones del enlace más fuertemente que el otro átomo, y ello da lugar a que los enlaces presenten **polaridad**, es decir, diferente densidad electrónica entre los átomos enlazados: uno tiene exceso de densidad electrónica (exceso de carga negativa o *carga parcial negativa*  $\delta^-$ ), y el otro defecto de densidad electrónica (exceso de carga positiva o *carga parcial positiva*  $\delta^+$ ). Si la diferencia de electronegatividad es grande ( $\Delta X > 1,7$ ), los electrones no se comparten, porque el átomo más electronegativo arranca los electrones al átomo menos electronegativo, quedando ambos con cargas eléctricas de distinto signo y dando lugar al **enlace iónico**. Las sustancias apolares generalmente son volátiles e insolubles en agua, ya que no pueden formar interacciones polares con ésta (ni fuerzas dipolo-dipolo ni puentes H), mientras que las sustancias polares, que sí ejercen interacciones de tipo electrostático tanto entre sí como con el agua u otras moléculas polares, son generalmente hidrosolubles y menos volátiles.

La tabla siguiente recoge los valores de la **electronegatividad de Pauling** de todos los elementos. Para los gases nobles He, Ne y Ar no se muestra ningún valor porque no forman ningún compuesto covalente.

H																	He																																																								
2,20																	-																																																								
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																																																								
0,98	1,57											2,04	2,55	3,04	3,44	3,98	-																																																								
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																																																								
0,93	1,31											1,61	1,90	2,19	2,58	3,16	-																																																								
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																																																								
0,82	1,00	1,36	1,54	1,63	1,66	1,55	1,83	1,88	1,91	1,90	1,65	1,81	2,01	2,18	2,55	2,96	3,00																																																								
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																																																								
0,82	0,95	1,22	1,33	1,6	2,16	1,9	2,2	2,28	2,20	1,93	1,69	1,78	1,8	2,05	2,1	2,66	2,60																																																								
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																																																								
0,79	0,89	1,1	1,3	1,5	2,36	1,9	2,2	2,2	2,28	2,54	2,00	1,62	2,33	2,02	2,0	2,2	2,2																																																								
Fr	Ra	Ac																																																																							
0,70	0,9	1,1																																																																							
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>Ce</td> <td>Pr</td> <td>Nd</td> <td>Pm</td> <td>Sm</td> <td>Eu</td> <td>Gd</td> <td>Tb</td> <td>Dy</td> <td>Ho</td> <td>Er</td> <td>Tm</td> <td>Yb</td> <td>Lu</td> </tr> <tr> <td>1,12</td> <td>1,13</td> <td>1,14</td> <td>1,13</td> <td>1,17</td> <td>1,2</td> <td>1,2</td> <td>1,1</td> <td>1,22</td> <td>1,23</td> <td>1,24</td> <td>1,25</td> <td>1,1</td> <td>1,27</td> </tr> <tr> <td>Th</td> <td>Pa</td> <td>U</td> <td>Np</td> <td>Pu</td> <td>Am</td> <td>Cm</td> <td>Bk</td> <td>Cf</td> <td>Es</td> <td>Fm</td> <td>Md</td> <td>No</td> <td>Lr</td> </tr> <tr> <td>1,3</td> <td>1,5</td> <td>1,38</td> <td>1,36</td> <td>1,28</td> <td>1,13</td> <td>1,28</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> <td>1,3</td> </tr> </tbody> </table>																		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	1,12	1,13	1,14	1,13	1,17	1,2	1,2	1,1	1,22	1,23	1,24	1,25	1,1	1,27	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	1,3	1,5	1,38	1,36	1,28	1,13	1,28	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																																												
1,12	1,13	1,14	1,13	1,17	1,2	1,2	1,1	1,22	1,23	1,24	1,25	1,1	1,27																																																												
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																																												
1,3	1,5	1,38	1,36	1,28	1,13	1,28	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3																																																												
<table border="1"> <tbody> <tr> <td>0,7</td> <td>1,01</td> <td>1,41</td> <td>1,81</td> <td>2,20</td> <td>2,61</td> <td>3,00</td> <td>4</td> </tr> <tr> <td>a</td> <td>a</td> <td>a</td> <td>a</td> <td>a</td> <td>a</td> <td>a</td> <td></td> </tr> <tr> <td>1,00</td> <td>1,40</td> <td>1,80</td> <td>2,19</td> <td>2,60</td> <td>2,99</td> <td>3,5</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>																		0,7	1,01	1,41	1,81	2,20	2,61	3,00	4	a	a	a	a	a	a	a		1,00	1,40	1,80	2,19	2,60	2,99	3,5																																	
0,7	1,01	1,41	1,81	2,20	2,61	3,00	4																																																																		
a	a	a	a	a	a	a																																																																			
1,00	1,40	1,80	2,19	2,60	2,99	3,5																																																																			

código de colores:

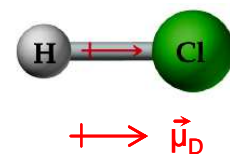
¿Cómo se mide la polaridad? La manera de cuantificar la polaridad de las moléculas es mediante el **momento dipolar**,  $\mu_D$ , que es el producto de la magnitud de las cargas parciales  $\delta^+$  que se separan por el vector desplazamiento que experimentan las cargas. Cada enlace presenta un momento dipolar *parcial* del enlace, y el momento dipolar *total* de la molécula es la **suma vectorial** de todos los momentos dipolares de sus enlaces. Por ejemplo, los enlaces C–H, Si–H, P–H, C–S, son apolares, porque tienen una  $\Delta X$  pequeña. Por tanto las moléculas CH<sub>4</sub>, los hidrocarburos en general, el SiH<sub>4</sub>, la PH<sub>3</sub> y el CS<sub>2</sub> son apolares, volátiles y poco solubles en agua, ya que no pueden formar enlaces de H con ella. Los enlaces N–H, O–H, C–O, C–N, S–H, F–H, Cl–H, etc, son enlaces covalentes polares, porque tienen una  $\Delta X$  mediana; las moléculas con estos enlaces, como el NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, alcoholes de cadena corta como el CH<sub>3</sub>OH o el CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, polialcoholes como los azúcares, el H<sub>2</sub>S, HF, HCl, HBr, etc., son covalentes polares, y tienden a formar puentes H y fuerzas dipolo-dipolo con el agua, lo que les confiere una alta solubilidad acuosa. Los enlaces Na–Cl, K–Cl, K–Br, Li–O, Na–F, Ca–O, Ca–F, etc, tienen una  $\Delta X$  muy grande, así que no son enlaces covalentes sino iónicos. Los compuestos iónicos son muy polares, ya que están formados por millones y millones de partículas con carga eléctrica. No están formados por moléculas, sino por redes iónicas, y en general son compuestos muy poco volátiles (ya que las fuerzas eléctricas entre los iones son muy numerosas e intensas): tienen altísimos puntos de fusión y ebullición, y generalmente son solubles en agua (aunque hay bastantes excepciones), porque al pasar los iones a la disolución, aunque pierden las interacciones con los demás iones de la red iónica, forman unas interacciones nuevas ion-dipolo con las moléculas de agua, que compensa la pérdida de estabilidad del compuesto iónico sólido: la disolución se ve favorecida por las numerosas e intensas fuerzas ion dipolo que se forman cuando los iones al pasar a la disolución se rodean de moléculas de agua que orientar su momento dipolar conforme a la carga del ion (fenómeno conocido como **solvatación**).

Puede suceder que, a pesar de que los enlaces de una molécula sean polares, la molécula resulte **apolar debido a la simetría**, si al sumarse vectorialmente los dipolos parciales de cada enlace el momento total resultante es cero. Es lo que sucede por ejemplo con el CO<sub>2</sub>, el BF<sub>3</sub>, el CCl<sub>4</sub>, el SF<sub>6</sub>, etc.

### Ejemplos de moléculas polares:

#### ■ HCl:

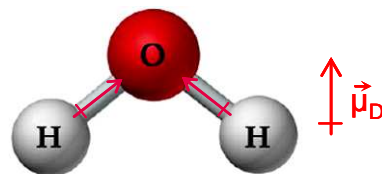
Enlace Cl–H: polar,  $\mu$  no-nulo.



#### ■ H<sub>2</sub>O:

Enlaces O–H: polares,  $\mu$  parciales no-nulos.

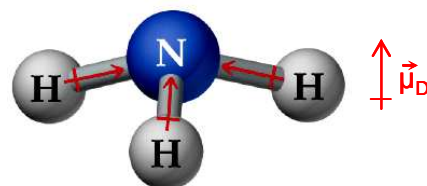
Geometría: angular con ángulo tetraédrico, los  $\mu$  parciales de enlaces se suman. **Molécula polar.**



#### ■ NH<sub>3</sub>:

Enlaces N–H: polares,  $\mu$  parciales no-nulos.

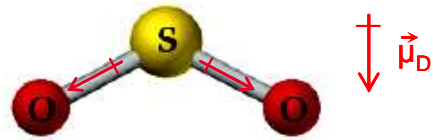
Geometría: piramidal trigonal con ángulo tetraédrico, los  $\mu$  parciales de enlaces se suman. **Molécula polar.**



### ■ SO<sub>2</sub>:

Enlaces S–O: polares,  $\mu$  parciales  $\neq 0$ .

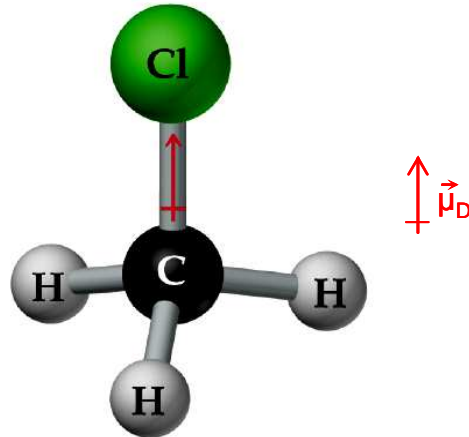
Geometría: angular con ángulo trigonal, los  $\mu$  parciales de enlaces se suman. **Molécula polar.**



### ■ CH<sub>3</sub>Cl:

Enlaces C–H: apolares,  $\mu=0$ . Enlace C–Cl: polar,  $\mu \neq 0$ .

Geometría: piramidal trigonal con ángulo tetraédrico,  $\mu_D = \mu_{C-Cl}$ , molécula de **polaridad moderada.**

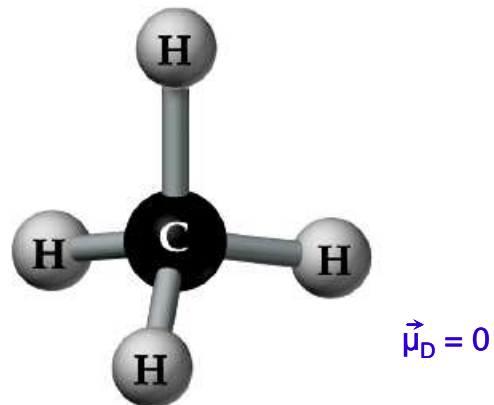


Ejemplos de moléculas apolares:

### ■ CH<sub>4</sub>:

Enlaces C–H: apolares,  $\mu=0$ .

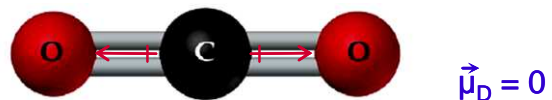
Geometría: tetraédrica (aunque no importa cuál sea la geometría molecular si los enlaces son apolares). **Molécula apolar.**



### ■ CO<sub>2</sub>:

Enlaces C–O: polares,  $\mu \neq 0$ .

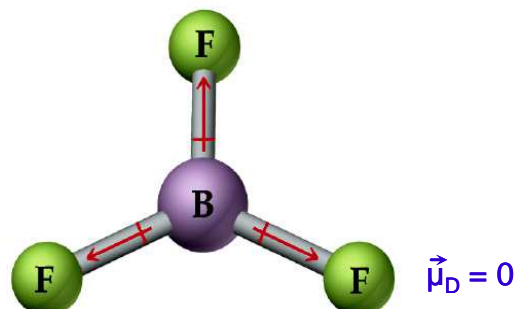
Geometría: lineal, los  $\mu$  parciales se contrarrestan entre sí: **molécula apolar.**



### ■ BF<sub>3</sub>:

Enlaces B–F: polares,  $\mu \neq 0$ .

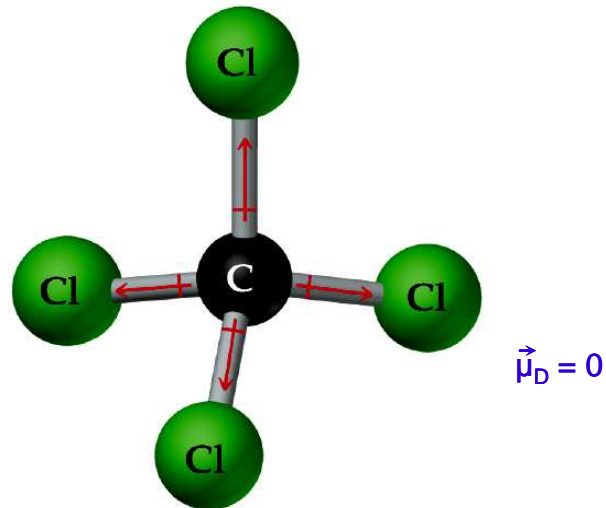
Geometría: trigonal plana, los  $\mu$  parciales se contrarrestan entre sí: molécula **apolar por simetría.**



■  $\text{CCl}_4$ :

Enlaces C–Cl: polares,  $\mu \neq 0$ .

Geometría: tetraédrica, los  $\mu$  parciales se contrarrestan entre sí: **molécula apolar por simetría**.

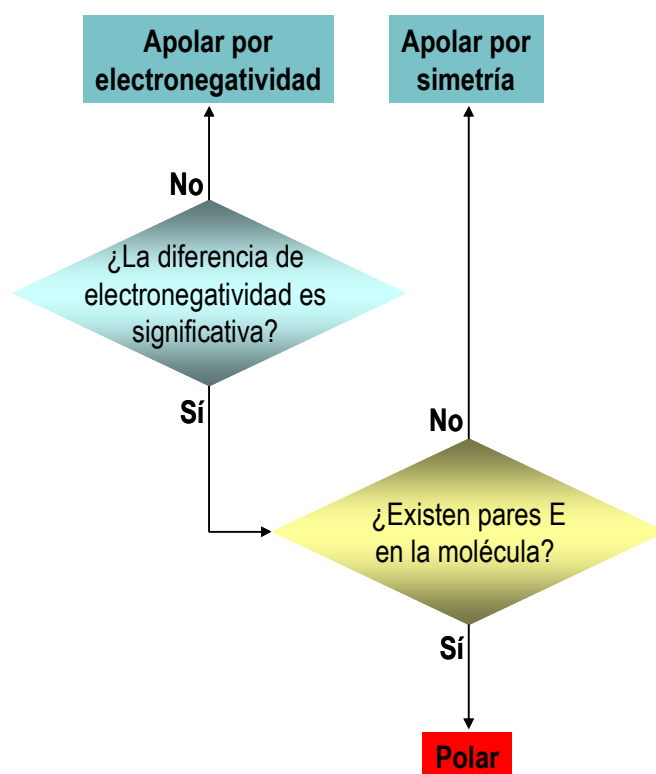


## ¿Cómo se puede predecir la polaridad de una molécula?

Como puede comprobarse en estos ejemplos, una molécula puede ser apolar por dos razones: a) porque sus enlaces sean apolares, como sucede con las moléculas de los hidrocarburos (los enlaces C–C y C–H son apolares, así que la suma de todos los  $\mu_D$  parciales de los enlaces sumarán  $\mu_D=0$  para la molécula); y b) porque aunque los enlaces sean polares, la simetría molecular haga que los  $\mu_D$  parciales de los enlaces se anulen entre sí. Esto sucederá para moléculas altamente simétricas, generalmente aquellas que no tengan pares de electrones no-compartidos. Cualquier estructura molecular en que todas las posiciones alrededor del átomo central sean equivalentes (todos enlaces  $\sigma$ , como en el  $\text{CH}_4$ , el  $\text{BF}_3$ , el  $\text{CCl}_4$ , el  $\text{BeH}_2$ , etc., o todas enlaces dobles como el  $\text{CO}_2$ ), dará lugar a una molécula **apolar por simetría**. Y cualquier estructura molecular formada por átomos con electronegatividades muy parecidas será **apolar por electronegatividad** (como sucede con las moléculas homodiatómicas como  $\text{H}_2$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{O}_2$ , etc., o con los hidrocarburos como  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ , etc., entre otras como el  $\text{PH}_3$ ,  $\text{CS}_2$ , etc).

En cambio, la presencia de **pares de electrones no-compartidos** (lo que en el modelo de VSEPR hemos llamado *pares E*) rompe con la simetría molecular, haciendo que cualquier molécula con cierta diferencia de electronegatividad entre sus elementos componentes sea **polar**, como es el caso del  $\text{H}_2\text{O}$ , el  $\text{SO}_2$ , el  $\text{NH}_3$ , etc.

Este diagrama describe este sencillísimo algoritmo para deducir si la molécula es polar o apolar. A continuación se muestran algunos ejemplos de aplicación a moléculas ejemplo descritas en este documento y en el del Enlace Covalente.



### Ejemplos:

#### ■ HCl:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,4$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: tetraédrica  $ABE_3$ ).

Molécula: **polar**.

#### ■ H<sub>2</sub>O:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,3$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: tetraédrica  $AB_2E_2$ ).

Molécula: **polar**.

#### ■ NH<sub>3</sub>:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,84$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: tetraédrica  $AB_3E$ ).

Molécula: **polar**.

#### ■ SO<sub>2</sub>:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,86$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: trigonal  $AB_2E$ ).

Molécula: **polar**.

#### ■ CH<sub>3</sub>Cl:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X_{C-H}=0,35$ ;  $\Delta X_{C-Cl}=0,61$ ) (e. apolares y polares).

Pares E: no pero átomos diferentes (geometría: tetraédrica  $ABC_3$ , no totalmente simétrica).

Molécula: **moderadamente polar**.

#### ■ CH<sub>4</sub>:

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0,35$ ) (enlaces apolares).

Pares E: no (geometría VSEPR: tetraédrica  $AB_4$ , totalmente simétrica).

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

#### ■ CO<sub>2</sub>:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,89$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: lineal  $AB_2$ ).

Molécula: **apolar por simetría**.

#### ■ BCl<sub>3</sub>:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,12$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: trigonal  $AB_3$ ).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **CCl<sub>4</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,61$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: tetraédrica AB<sub>4</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0,35$ ) (enlaces apolares).

Pares E: no (geometría VSEPR: lineal AAB<sub>2</sub> en cada C).

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

■ **O<sub>2</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0$ ) (enlaces apolares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: lineal ABE<sub>2</sub> en cada O), pero da igual.

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

■ **C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0,35$ ) (enlaces apolares).

Pares E: no (geometría VSEPR: lineal AAB en cada C).

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

■ **N<sub>2</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0$ ) (enlaces apolares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: lineal AAE<sub>2</sub> en cada C), pero da igual.

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

■ **BeH<sub>2</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,63$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: lineal AB<sub>2</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **AlCl<sub>3</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,55$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: trigonal AB<sub>3</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **H<sub>2</sub>S:**

Diferencia de electronegatividad significativa: regular ( $\Delta X=0,38$ ) (enlaces poco polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: tetraédrica AB<sub>2</sub>E<sub>2</sub>).

Molécula: **poco polar**.

■ **PCl<sub>3</sub>:**

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,97$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: tetraédrica AB<sub>3</sub>E).

Molécula: **polar**.

■ **PCl<sub>5</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,97$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: bipirámide trigonal AB<sub>5</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: no ( $\Delta X=0,35$ ) (enlaces apolares).

Pares E: no (geometría VSEPR: lineal AB<sub>2</sub> en cada C).

Molécula: **apolar por electronegatividad**.

■ **SF<sub>4</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,40$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: bipirámide trigonal AB<sub>4</sub>E).

Molécula: **polar**.

■ **ClF<sub>3</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=0,82$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: bipirámide trigonal AB<sub>3</sub>E<sub>2</sub>).

Molécula: **polar**.

■ **SF<sub>6</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,40$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: octaédrica AB<sub>6</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.

■ **IF<sub>5</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,32$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: octaédrica AB<sub>5</sub>E).

Molécula: **polar**.

■ **XeF<sub>4</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,38$ ) (enlaces polares).

Pares E: sí (geometría VSEPR: bipirámide trigonal AB<sub>4</sub>E<sub>2</sub>), **¡pero distribuidos simétricamente!**

Molécula: Excepcionalmente, **apolar por simetría**, a pesar de tener pares no-compartidos.

■ **IF<sub>7</sub>**:

Diferencia de electronegatividad significativa: sí ( $\Delta X=1,32$ ) (enlaces polares).

Pares E: no (geometría VSEPR: bipirámide pentagonal AB<sub>7</sub>).

Molécula: **apolar por simetría**.