

Temario

2.1. Modelos del enlace químico. Enlace Químico: definición de unión química. Tipos de enlace.

Energía de enlace.

Enlace covalente: definición. Concepto de carga formal.

Concepto de resonancia en las

estructuras de Lewis. Interpretación del enlace mediante la superposición de orbitales atómicos.

Hibridación

Enlace iónico: definición. Modelo iónico ideal. Evidencias de la existencia de iones. Energía de

red. Ciclo de Born-Haber

Electronegatividad. Concepto de polarización. Enlace de transito. Carácter iónico parcial.

Enlace metálico

Enlace de coordinación

2.2. Enlaces de baja energía. Clasificación de los enlaces de baja energía. Características

generales de los mismos. Enlaces de van der Waals (dipolo-dipolo, dipolo-dipolo inducido, dipolo

instantáneo-dipolo inducido). Enlaces de hidrógeno

3. Las formas de las moléculas. Estructura de Lewis. Longitud de enlace. Ángulo de enlace.

Geometría molecular

Temario

2.1. Modelos del enlace químico. Enlace Químico: definición de unión química. Tipos de enlace.

Energía de enlace.

Enlace covalente: definición. Concepto de carga formal.

Concepto de resonancia en las

estructuras de Lewis. Interpretación del enlace mediante la superposición de orbitales atómicos.

Hibridación

Enlace iónico: definición. Modelo iónico ideal. Evidencias de la existencia de iones. Energía de

red. Ciclo de Born-Haber

Electronegatividad. Concepto de polarización. Enlace de transito. Carácter iónico parcial.

Enlace metálico

Enlace de coordinación

2.2. Enlaces de baja energía. Clasificación de los enlaces de baja energía. Características

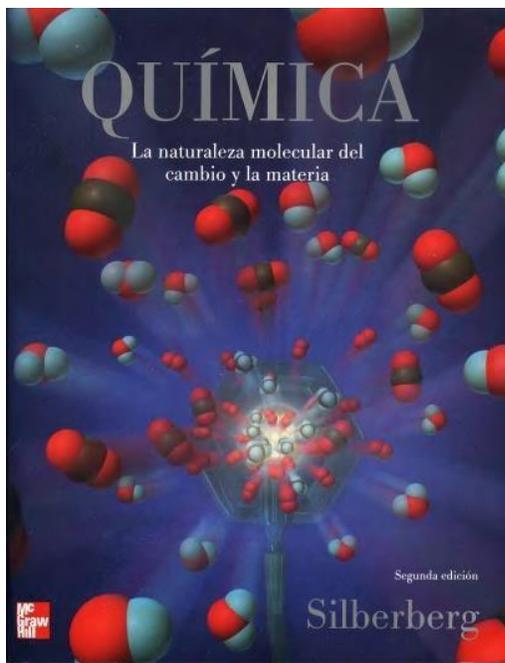
generales de los mismos. Enlaces de van der Waals (dipolo-dipolo, dipolo-dipolo inducido, dipolo

instantáneo-dipolo inducido). Enlaces de hidrógeno

3. Las formas de las moléculas. Estructura de Lewis. Longitud de enlace. Ángulo de enlace.

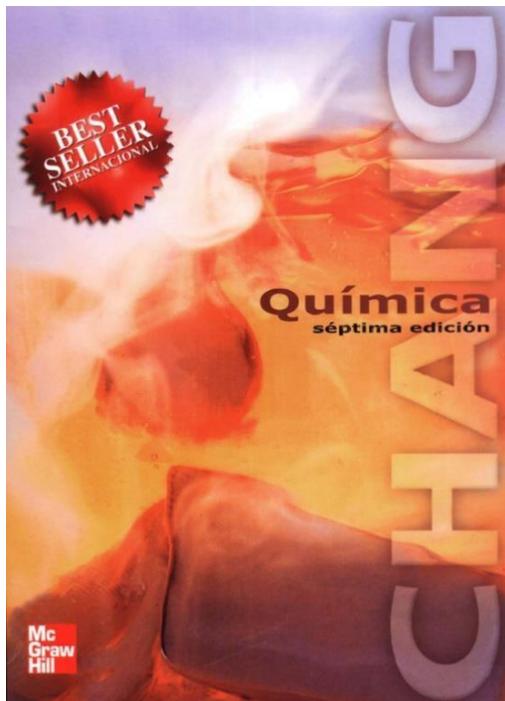
Geometría molecular

ESTA SEMANA



9 Modelos del enlace químico

337



CAPÍTULO 9

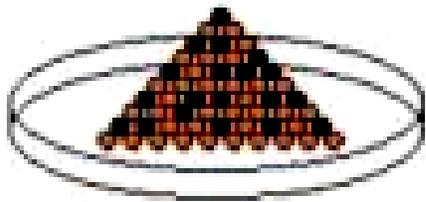
Enlace químico I: conceptos básicos 329

CAPÍTULO 10

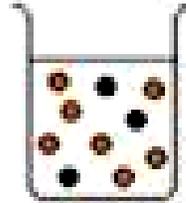
Enlace químico II: geometría molecular e hibridación de orbitales atómicos 367

Bibliografía

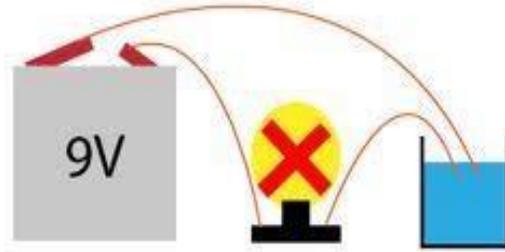
HECHOS Y PREGUNTAS ...



FASE SOLIDA



FASE LIQUIDA



Comportamiento de las disoluciones

¿Porqué la sal de mesa (NaCl) produce disoluciones que conducen la corriente?

¿Porqué el azúcar (sacarosa) produce disoluciones que no conducen la corriente?

HECHOS Y PREGUNTAS ...

Metales

¿Porqué tienen brillo?

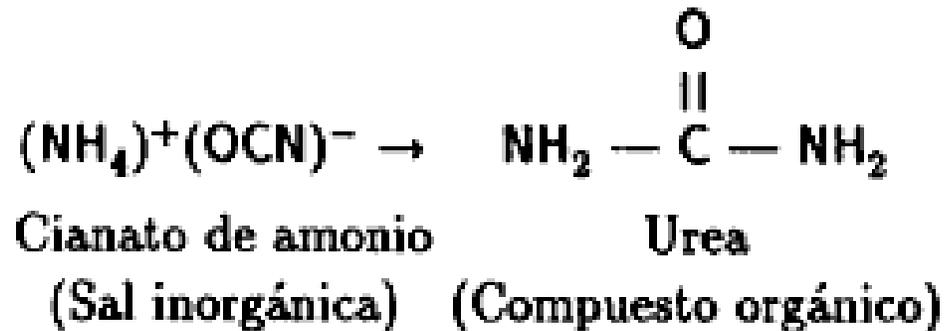
¿Porqué no aíslan térmicamente?



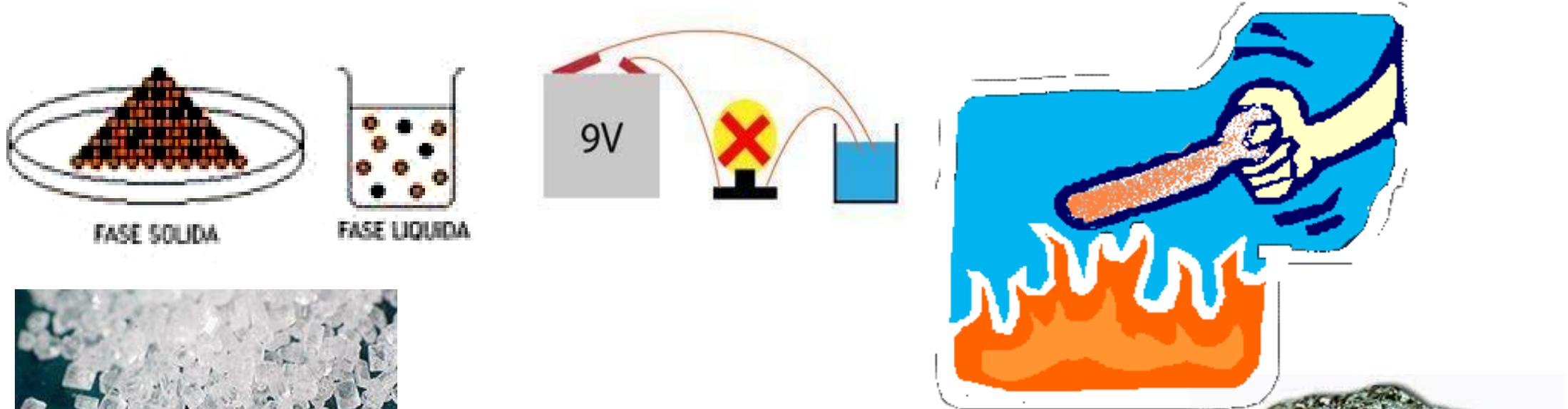
HECHOS Y PREGUNTAS ...

Sustancias con igual fórmula molecular

¿Porqué tienen diferentes propiedades fisicoquímicas?



HECHOS Y RESPUESTAS ...



FASE SOLIDA

FASE LIQUIDA

9V

$(\text{NH}_4)^+(\text{OCN})^- \rightarrow \text{NH}_2 - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{NH}_2$

Cianato de amonio (Sal inorgánica)

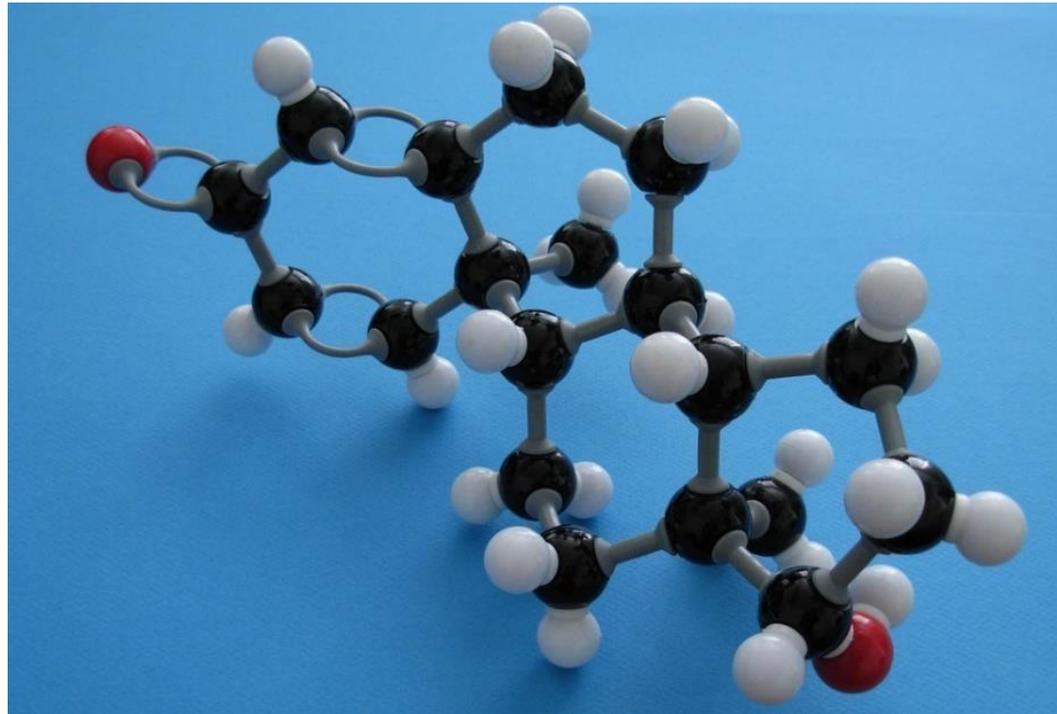
Urea (Compuesto orgánico)



.. las respuestas se encuentran en el **tipo de enlace** entre los átomos de las **moléculas** que conforman la sustancia ..

MOLÉCULA

Es un agregado de por lo menos, dos átomos que se mantienen unidos químicamente, a través de un **enlace químico**, en una estructura definida y que se comporta como unidad independiente



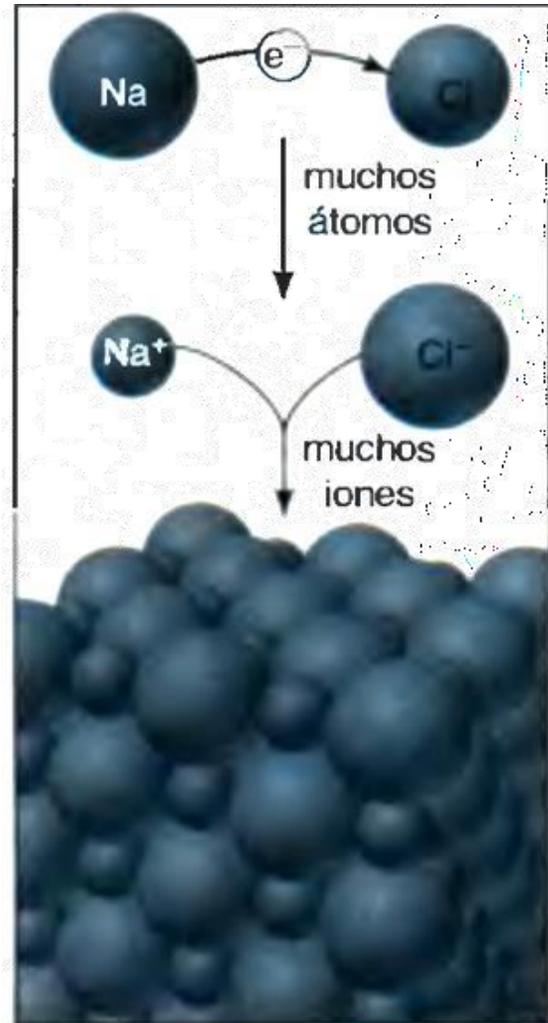
ENLACE QUÍMICO

DEFINICIÓN

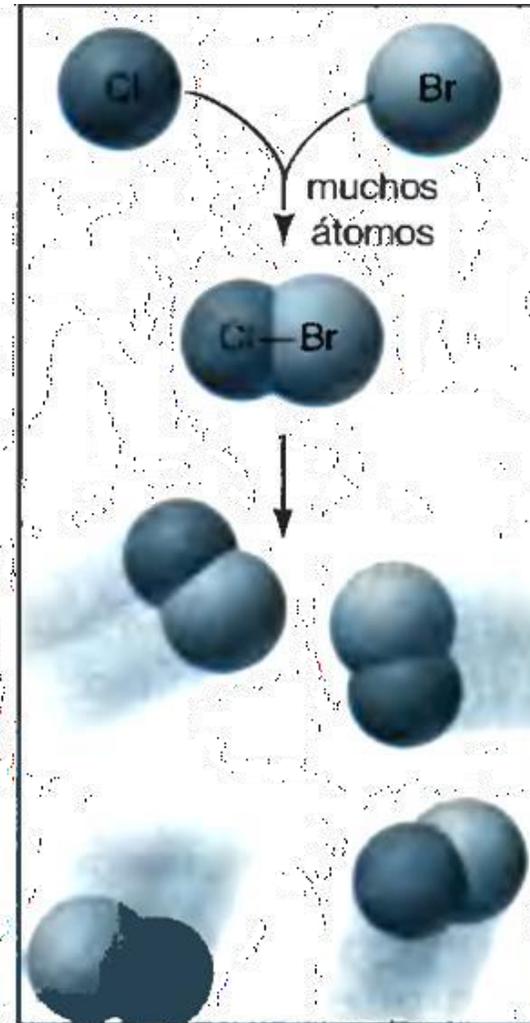
- Fuerza de unión que existe entre dos átomos, cualquiera que sea su naturaleza, debido a la transferencia total o parcial de electrones para adquirir ambos la configuración electrónica estable correspondiente a los gases inertes y formar moléculas estables
- El ***enlace químico*** es entonces la fuerza neta resultante de las interacciones a nivel microscópico que mantiene juntos a los átomos y hace que éstos funcionen como unidades estables que a nivel macroscópico se manifiestan como sustancias puras de composición y propiedades definidas

ENLACE QUÍMICO

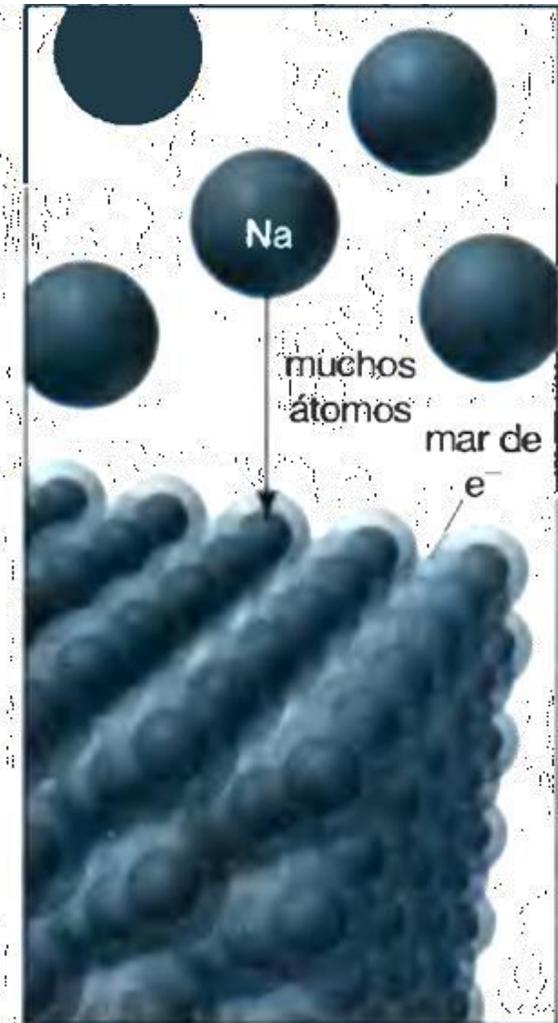
DEFINICIÓN



A Enlace iónico.



B Enlace covalente



C Enlace metálico

MODELOS DE ENLACE

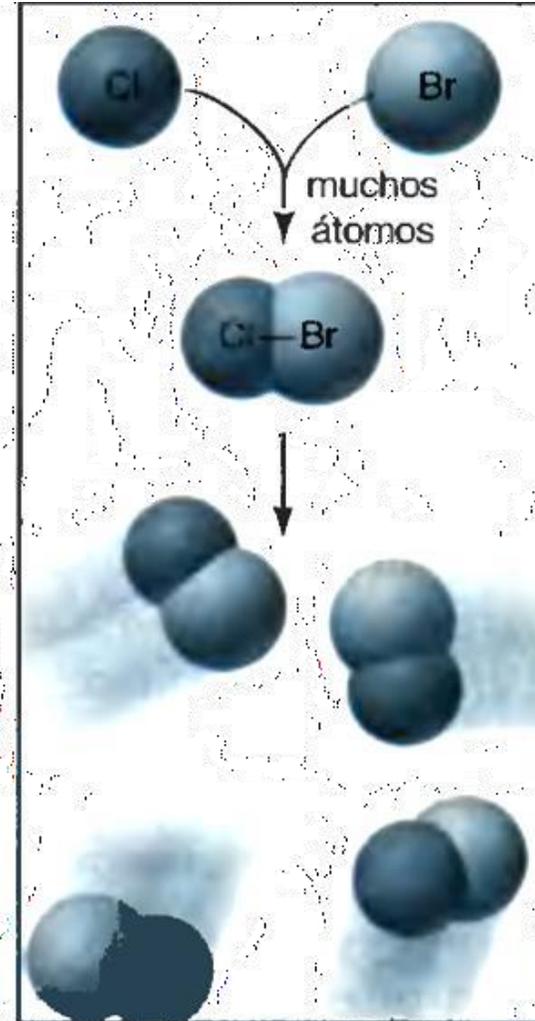
1. Enlace iónico
2. Enlace covalente
3. Enlace metálico

ENLACE QUÍMICO

ENLACE COVALENTE



A Enlace iónico.



B Enlace covalente



C Enlace metálico

PRIMERA PROPUESTA DE ENLACE COVALENTE

- La idea de enlace covalente fue sugerida en 1916 por Gilbert Lewis
- Los gases nobles presentan gran estabilidad química y existen como moléculas mono-atómicas (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, Og)
- Su configuración electrónica es muy estable y contiene 8 e⁻ en la capa de valencia (excepto el He que posee 2 e⁻)
- Por lo que Lewis propone que:



Los átomos pueden adquirir estructura de gas noble compartiendo electrones para formar un enlace de pares de electrones

PRIMERA PROPUESTA DE ENLACE COVALENTE

- **G. Lewis** es quien planteó que los átomos se combinan para alcanzar la configuración electrónica de un *gas noble* (para ser isoelectrónico con el gas noble)
- Cuando los átomos interactúan para formar el enlace químico sólo entran en contacto sus regiones más externas:
participan los ***electrones de valencia***
- Para reconocer los ***electrones de valencia*** y asegurarse que el número total de electrones no cambia durante una reacción se utiliza el sistema de **puntos** desarrollado por Lewis

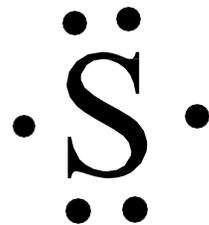
SURGEN LAS ESTRUCTURAS DE LEWIS PARA REPRESENTAR ÁTOMOS (Y MOLÉCULAS)

ESTRUCTURA DE LEWIS: SÍMBOLO DE PUNTOS

- **Símbolos de Lewis electrón-punto:** cada electrón será representado con un punto
- El símbolo del elemento representará al núcleo atómico y a los electrones internos, mientras que los puntos que lo rodean representan a los electrones de valencia

Cada punto representa un único electrón de valencia

- Así, por ejemplo, para el azufre ($_{16}\text{S}$), que tiene configuración electrónica $[\text{Ne}]3s^23p^4$, la estructura de Lewis correspondiente es:



ESTRUCTURA DE LEWIS: SÍMBOLO DE PUNTOS

4) La colocación específica de los puntos NO ES IMPORTANTE



5) El número y el apareamiento de los puntos proporcionan información sobre el comportamiento del elemento al formar enlaces

6) Al formarse un enlace el átomo

6.1) Si es metálico: el número de puntos es el número de electrones que pierde para formar un catión

6.2) Si es no-metálico: los puntos-electrones no apareados se aparean, por ganancia o compartición



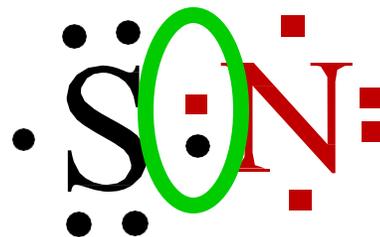
ESTRUCTURA DE LEWIS: SÍMBOLO DE PUNTOS

7) Cuando aparece un **enlace covalente**, cada par de electrones que se aparea para dar dicho enlace se representa con una línea de trazo entero



enlaces covalentes

8) Los electrones que no forman enlaces se representan como tales asociados al átomo que los sustenta (*electrones de no-enlace*)



enlace covalente

PROPONIENDO ENLACES COVALENTES ENTRE ÁTOMOS: REGLA DEL OCTETO (ELEMENTOS DEL SEGUNDO PERÍODO)

Los átomos se unen compartiendo electrones hasta conseguir completar la última capa con 8 e⁻ (4 pares de e⁻)

Es decir, el átomo alcanzará la configuración electrónica del gas noble: s^2p^6

3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	2 He 4.003
13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	10 Ne 20.18
31 Ga 69.72	32 Ge 72.61	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	18 Ar 39.95
49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	36 Kr 83.80
81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po (209)	85 At (210)	54 Xe 131.3
					86 Rn (222)

REGLA DEL OCTETO

EXCEPCIONES

1) Primeros elementos del segundo período, especialmente Be y B

Para explicar estas aparentes excepciones se puede recurrir a un concepto que se verá más adelante (*resonancia*)

2) Ciertas especies con un número impar de electrones (radicales libres)

3) Los elementos del tercer período de la Tabla Periódica en adelante

Se justifica por el hecho de la presencia de orbitales *d*, además de los *s* y *p*, que también permiten formar enlaces (superando el octeto)

Ejemplos: **S, P, Cl, Br, I**

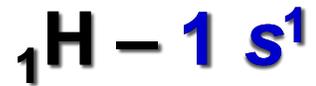
3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
					2 He 4.003
5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
31 Ga 69.72	32 Ge 72.61	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80
49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3
81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)

¿CÓMO SE FORMULAN MOLÉCULAS USANDO ESTRUCTURAS DE LEWIS?

- 1) Se suman los e^- de valencia de todos los átomos presentes en la molécula. Para un anión se le añade un e^- más por cada carga negativa y para un catión se resta un e^- por cada carga positiva
- 2) Se formula una estructura esquemática, ubicando en el centro al **átomo menos electronegativo** (H suele no ocupar posiciones centrales) (átomo central), con los símbolos atómicos unidos mediante enlaces sencillos (un línea que significa dos electrones compartidos)
- 3) Se calcula el número de e^- de valencia que quedan disponibles
- 4) Se distribuyen los e^- disponibles de forma que se complete el octeto para cada átomo, empezando por los átomos enlazados al central

¿CÓMO SE FORMULAN MOLÉCULAS USANDO ESTRUCTURAS DE LEWIS?

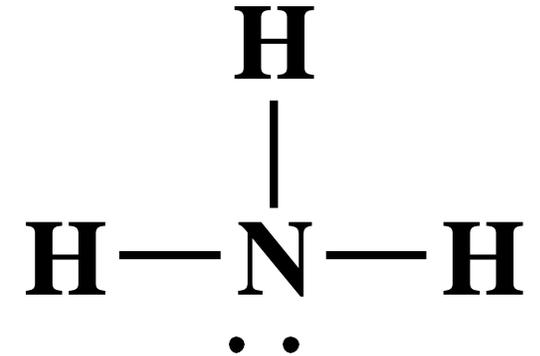
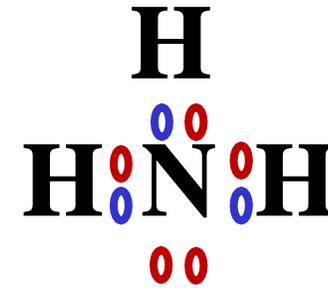
EJEMPLOS



$$(3 \times 1 e^-)$$

$$5 e^-$$

$$8 e^-$$



Recordar que

- para **enlaces covalentes**, cada par de electrones que se *aparean* para dar un *enlace* se representan con una línea de trazo entero
- los electrones que no forman enlaces se representan como tales asociados al átomo que los sustenta

ALGUNAS DEFINICIONES RELACIONADAS CON LA GEOMETRÍA DE LOS ENLACES

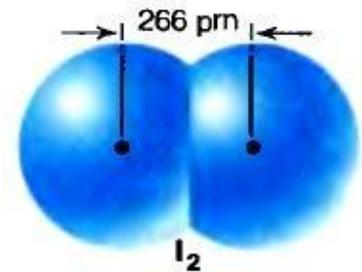
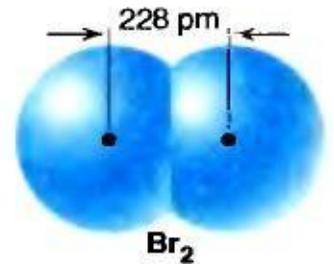
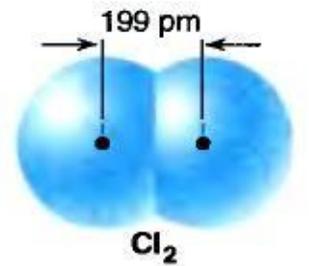
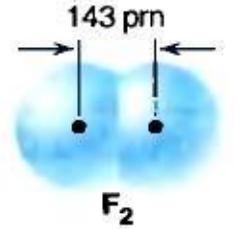
Energía de enlace (también llamada fuerza de enlace): es la energía requerida para vencer la atracción neta entre dos átomos. Es el calor requerido (ΔH) para romper el enlace en 1 mol de moléculas gaseosas en condiciones estándar (298 K, 1 atm)

Longitud de enlace: es la distancia entre los núcleos de dos átomos enlazados

Enlace	Energía de enlace (kJ/mol)
N-N	193
N=N	418
N≡N	941,4
O-O	142
O=O	498,7

Tipo de enlace	Longitud de enlace (pm)
C—O	143
C=O	121
C—C	154
C=C	133
C≡C	120
C—N	143
C=N	138
C≡N	116
N—O	136
N=O	122

Distancia internuclear (longitud de enlace)



$pm = 10^{-12} m$

¿CÓMO SE FORMULAN MOLÉCULAS USANDO ESTRUCTURAS DE LEWIS?

EJEMPLOS

anión cianato, NCO⁻

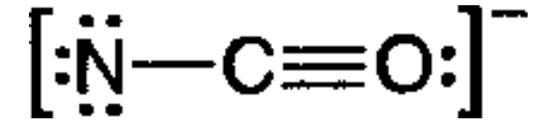


por ser un monoanión
(una carga negativa)

1 e⁻

16 e⁻

Estructura de Lewis



... pero también se podrían haber planteado las siguientes estructuras de Lewis

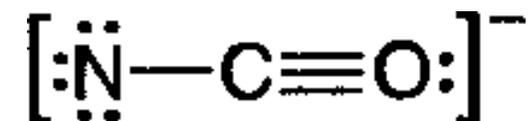


RESONANCIA: DESLOCALIZACIÓN DE ELECTRONES DE ENLACE

Las tres estructuras representan adecuadamente al anión y, según los datos experimentales (longitudes de enlaces por ejemplo), ninguna por si sola lo representa completamente

Como se necesita de las tres formas para representarlo se dice que los electrones **resuenan** entre más de un átomo y que estas estructuras de Lewis son **formas resonantes**

Estructura de Lewis

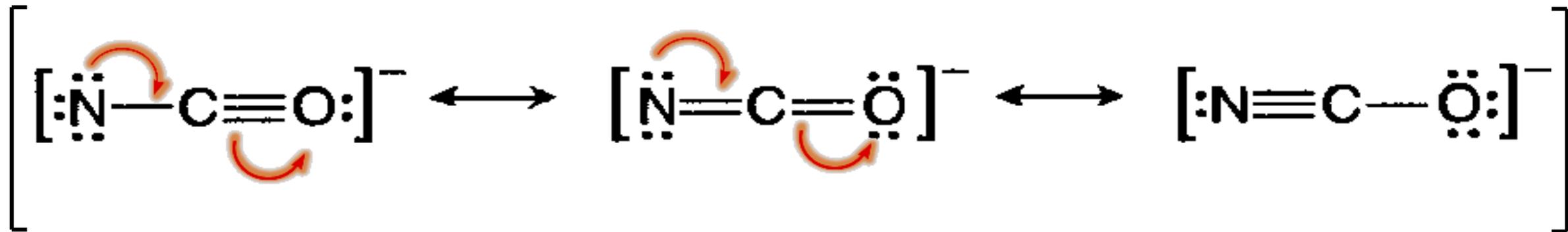


... pero también se podrían haber planteado las siguientes estructuras de Lewis



RESONANCIA: DESLOCALIZACIÓN DE ELECTRONES DE ENLACE

La forma de representar adecuadamente a la entidad es a través de las formas resonantes



Las formas resonantes se interconectan con flechas de resonancia (**flechas de dos punta**) y se encierran entre **paréntesis rectos** porque todas son responsables de representar a la entidad y ninguna de ellas por sí sola lo hace adecuadamente

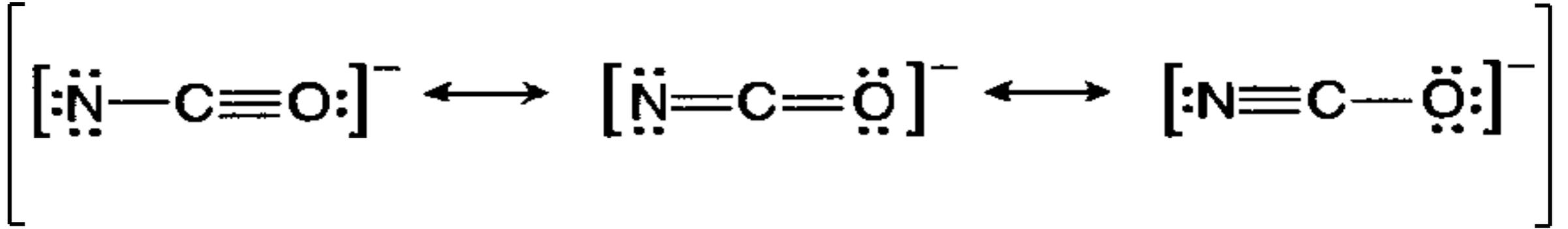
Además se deben utilizar **flechas** que muestran el movimiento de los electrones de enlace que pasan de una forma resonante a la otra

¿Todas las formas resonantes son iguales en su estabilidad?

ELECCIÓN DE LA FORMA RESONANTE MÁS CONTRIBUYENTE

CARGA FORMAL

Puede ocurrir que no todas las formas resonantes contribuyan de igual manera a la estructura de la entidad



Para saber cuál es la más contribuyente se puede determinar la **carga formal** sobre cada uno de los átomos en cada una de las formas resonantes

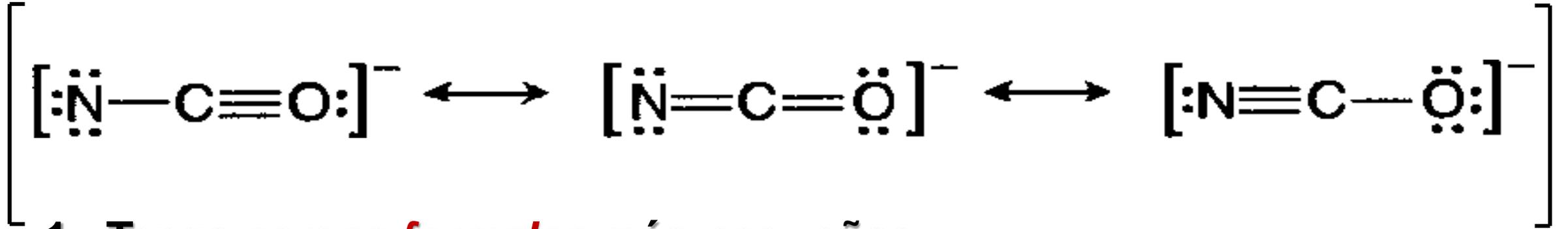
Carga formal de un átomo =

nº de e⁻ de valencia – (nº de e⁻ no enlazados + nº de enlaces)

¿Todas las formas resonantes son iguales en su estabilidad?

ELECCIÓN DE LA FORMA RESONANTE MÁS CONTRIBUYENTE

CARGA FORMAL La forma resonante más contribuyente será aquella que



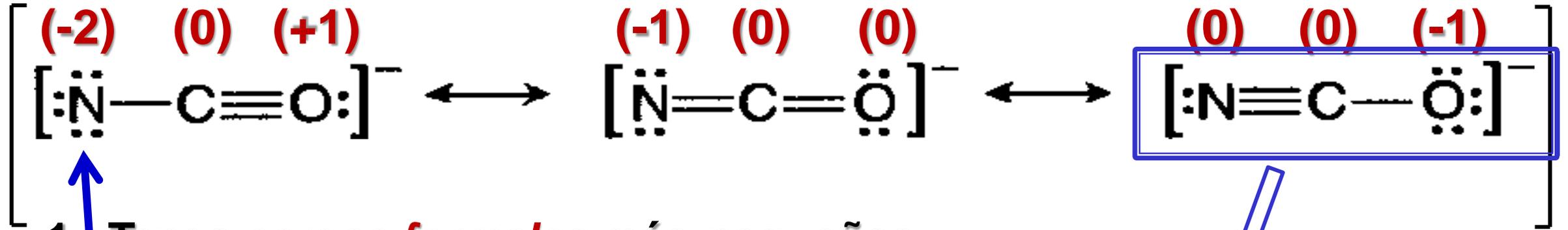
1. Tenga **cargas formales** más pequeñas
2. No tenga **cargas formales** iguales en átomos vecinos
3. Que tenga **cargas formales** (-) sobre átomos más electronegativos

Carga formal de un átomo =

nº de e⁻ de valencia – (nº de e⁻ no enlazados + nº de enlaces)

ELECCIÓN DE LA FORMA RESONANTE MÁS CONTRIBUYENTE

CARGA FORMAL La forma resonante más contribuyente será aquella que



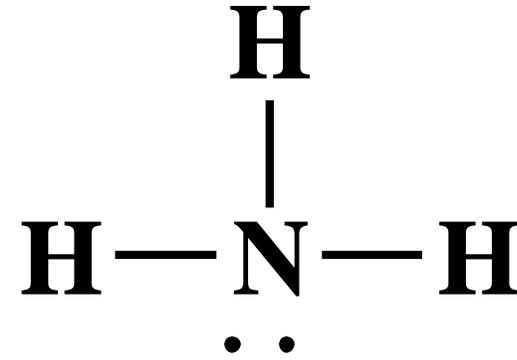
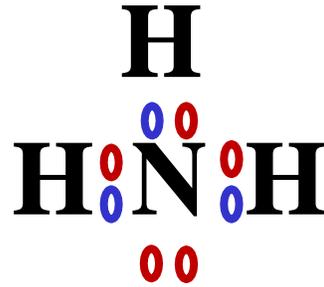
1. Tenga **cargas formales** más pequeñas
2. No tenga **cargas formales** iguales e
3. Que tenga **cargas formales** (-) sobr

$$\text{CF} = 5 - (6 + 1) = -2$$

**Forma resonante
más
contribuyente**

**LA SUMA DE LAS CARGAS FORMALES DEBE SER SIEMPRE
IGUAL A LA CARGA NETA (TOTAL) DE LA ESPECIE**

LIMITACIONES DE LAS ESTRUCTURAS DE LEWIS



Las estructuras de Lewis son útiles pero deben interpretarse con cuidado

En general desatienden la verdadera **geometría** (espacial, tridimensional) de la molécula

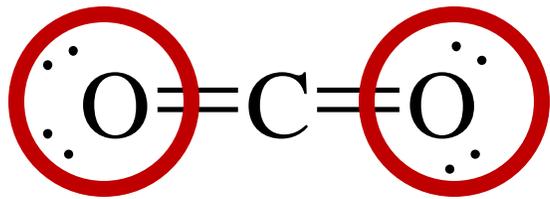


Veremos algunas teorías que describen las geometrías de las moléculas

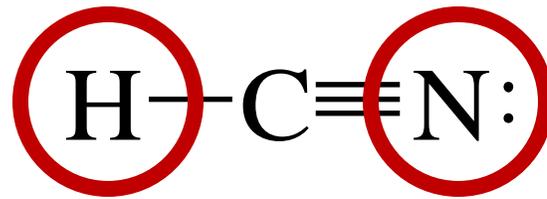
TEORÍA DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA (**RPECV**)

Permite construir la forma molecular tridimensional *a partir de la estructura de Lewis*

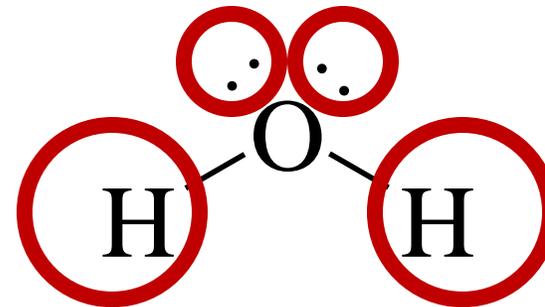
- **Grupo de electrones:** cualquier número de electrones que ocupen una región localizada alrededor de un átomo (enlace sencillo, doble o triple, par solitario, un electrón solo)



DOS GRUPOS



DOS GRUPOS



CUATRO GRUPOS



Veremos algunas teorías que describen las geometrías de las moléculas

TEORÍA DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA (RPECV)

Permite construir la forma molecular tridimensional ***a partir de la estructura de Lewis***

- **Grupo de electrones:** cualquier número de electrones que ocupen una región localizada alrededor de un átomo (enlace sencillo, doble o triple, par solitario, un electrón solo)
- Cada grupo de *electrones de valencia* alrededor del átomo central **estará** ubicado lo más lejos posible de los otros a fin de minimizar las repulsiones
- Cada uno de estos grupos que repele a otros grupos maximiza los ángulos entre grupos y ocupa tanto espacio como sea posible alrededor del átomo central



Veremos algunas teorías que describen las geometrías de las moléculas

TEORÍA DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA (**RPECV**)

Cuando 2, 3, 4, 5 ó 6 objetos unidos a un punto central maximizan el espacio entre cada uno de ellos se obtienen CINCO patrones tridimensionales diferentes

Los objetos en la teoría RPECV son *electrones de valencia enlazados* y *no enlazados*

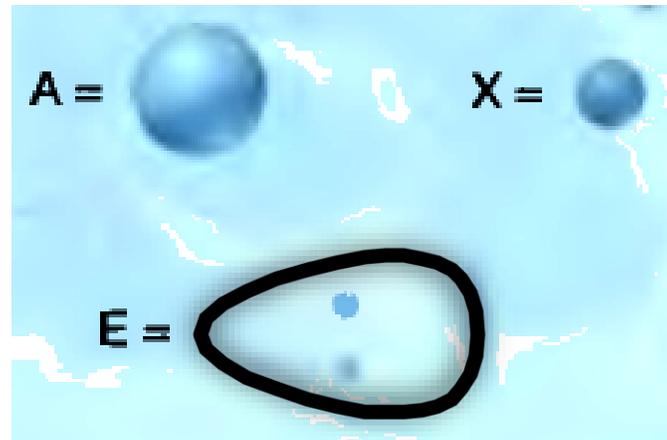


m y n enteros

A = átomo central

X = átomo circundante

E = grupo de electrones no enlazado



TEORÍA DE REPULSIÓN DEL PAR ELECTRÓNICO DE LA CAPA DE VALENCIA (RPECV)

Geometría de pares de electrones (GPM)

Disposición espacial que tomarían los electrones si no existiesen otros tipos de interacciones (en general repulsivas)

Geometría molecular (GM)

Disposición espacial final que tomarán núcleos atómicos como resultado de las interacciones repulsivas entre los grupos de electrones

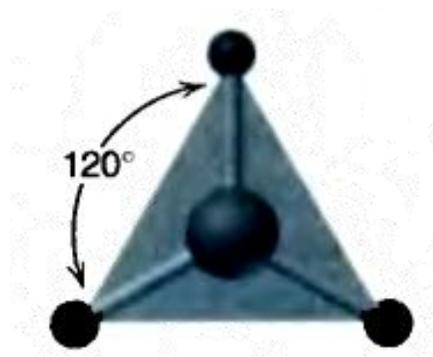


COMPLETEMOS DEFINICIONES RELACIONADAS CON LA GEOMETRÍA DE LOS ENLACES

Energía de enlace: también llamada fuerza de enlace es la energía requerida para vencer la atracción neta. Es el calor requerido (ΔH) para romper el enlace en 1 mol de moléculas gaseosas en condiciones estándar (298 K, 1 atm)

Longitud de enlace: es la distancia entre los núcleos de dos átomos enlazados

Ángulo inter-enlaces (*de enlace*): es el ángulo formado por los núcleos de dos átomos unidos a un átomo central (vértice del ángulo)



Distancia internuclear (longitud de enlace)

