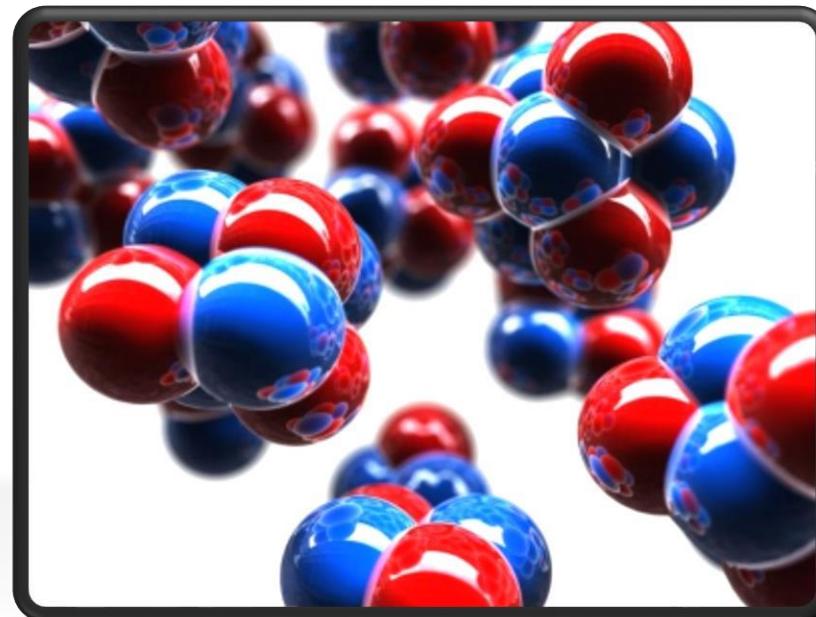
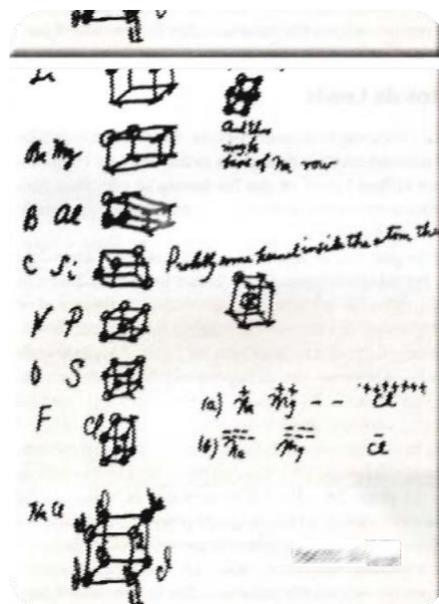
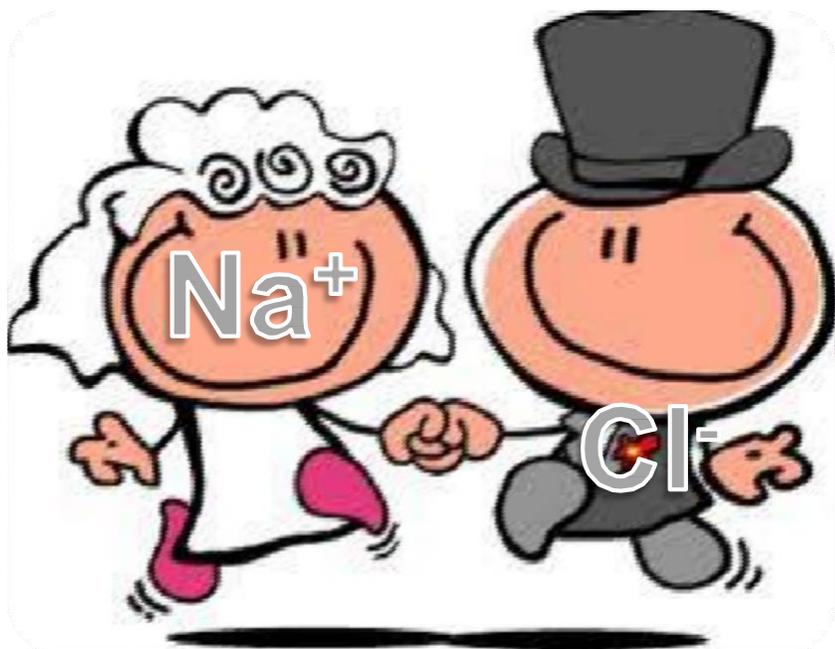


ENLACE QUÍMICO

LA FORMA DE LAS MOLÉCULAS



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

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*

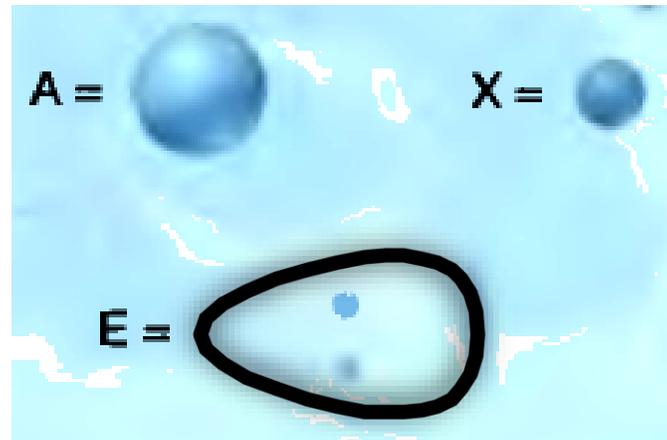


m y n enteros

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



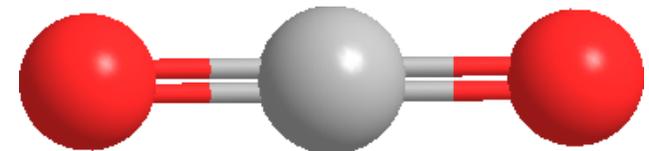
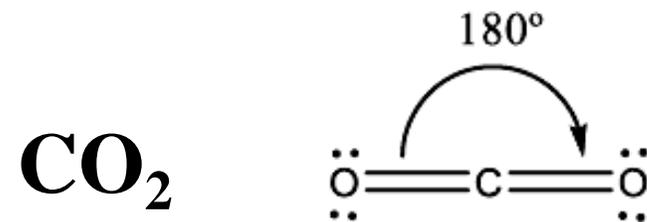
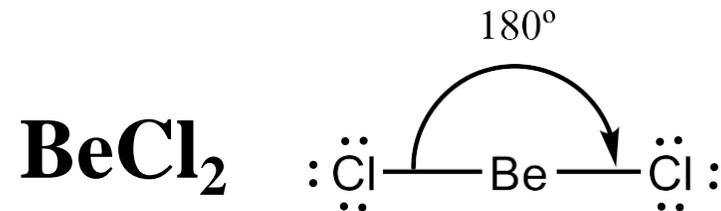
RPECV



1) AX_2

dos grupos de electrones – **GPE = GM: ARREGLO LINEAL**

- Los átomos se dirigen hacia direcciones opuestas
- Ángulo de enlace = 180°

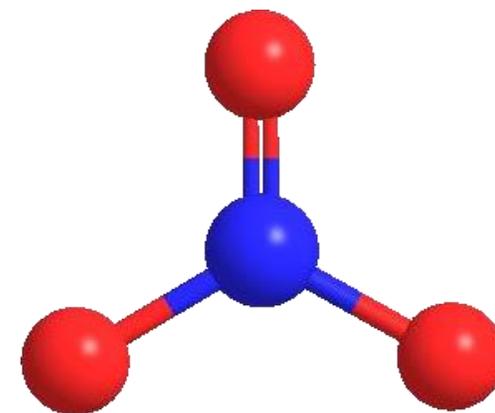
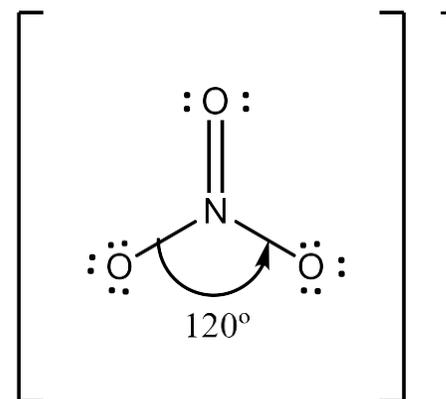
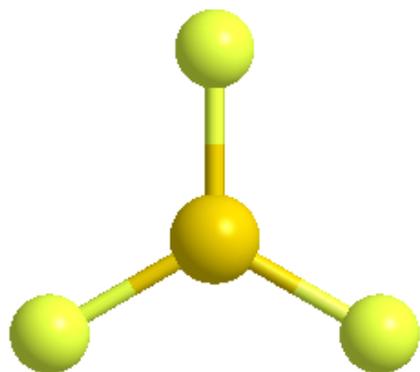
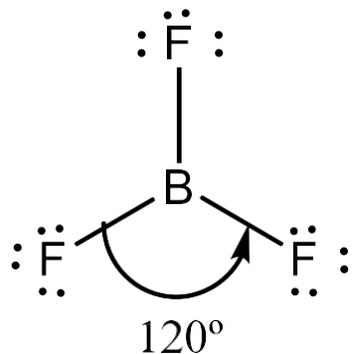
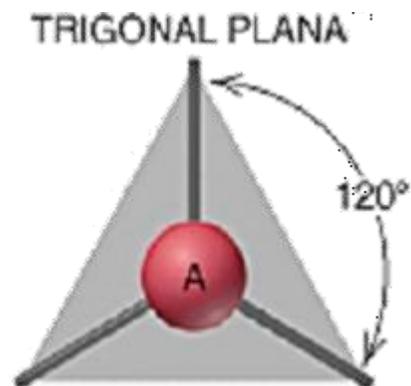


RPECV

2) AX_3 ó AX_2E

tres grupos de electrones – **GPE: TRIGONAL**
GM: TRIGONAL o ANGULAR

- Los grupos de electrones se dirigen hacia los vértices de un triángulo equilátero
- Ángulo de enlace (*teórico*) = 120°



Geometría Molecular
TRIGONAL

RPECV

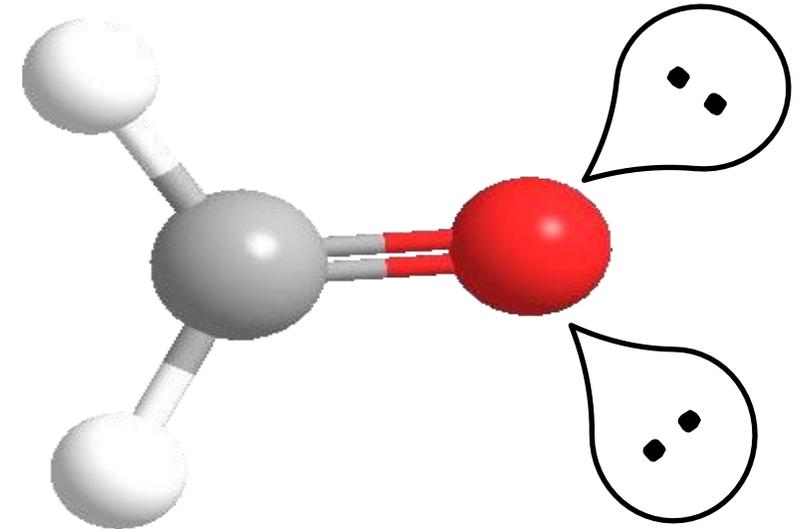
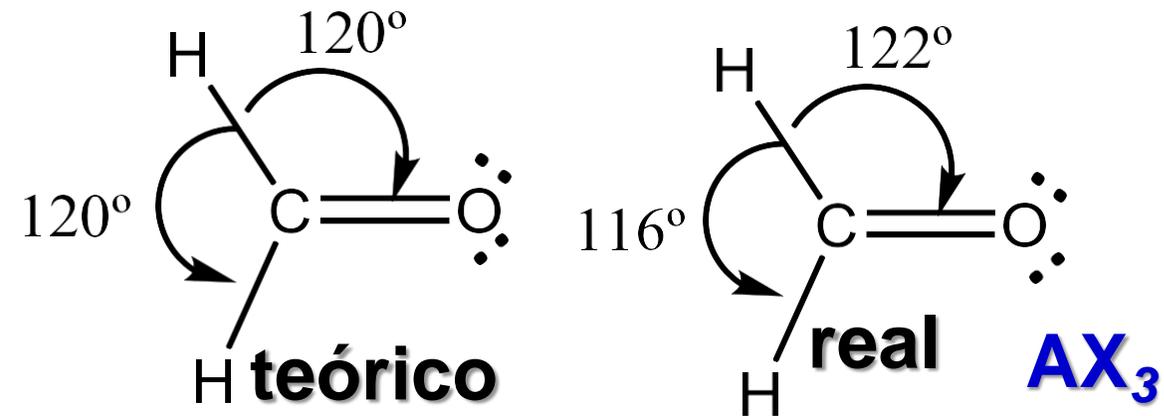
2) AX_3 ó AX_2E

- Cuando las entidades (átomos o electrones no enlazados) no son idénticos se **observan desviaciones en el ángulo** teórico inter-enlace

- Ejemplo: formaldehído (CH_2O)

ángulos de enlace H-C-O: 122°

ángulo de enlace H-C-H: 116°

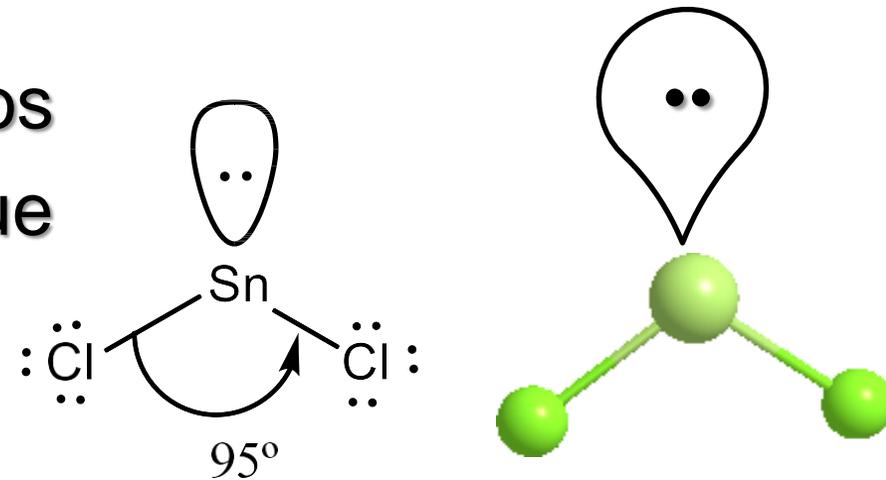


**Geometría Molecular
TRIGONAL**

RPECV

2) AX_3 ó AX_2E

- Cuando existe un par de *electrones no enlazados* la distribución espacial teórica también es trigonal
- Sin embargo, ese par de electrones promueve una desviación más importante que en el caso anterior, adoptando una GM diferente
- Los pares de electrones no enlazados producen una repulsión más importante que la repulsión entre los pares enlazados



AX_2E Geometría Molecular
ANGULAR (INCLINADA o en FORMA V)

$SnCl_2$

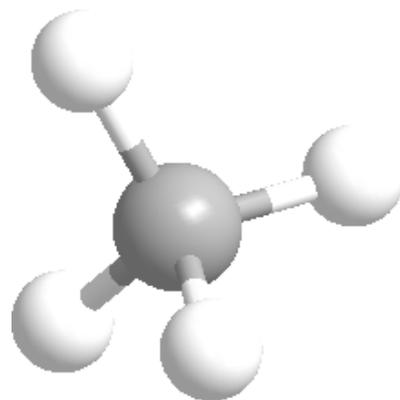
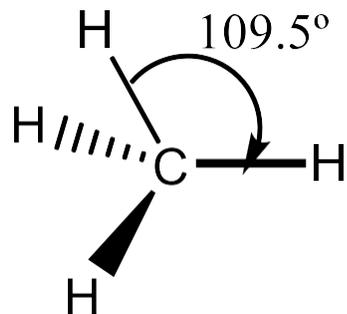
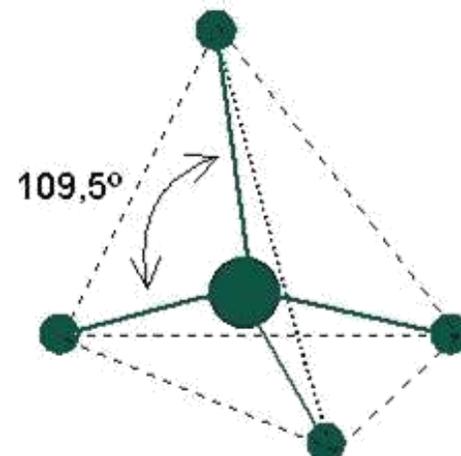
RPECV

3) AX_4 ó AX_3E ó AX_2E_2

cuatro grupos de electrones – **GPE: TETRAÉDRICA REGULAR**

GM: TETRAÉDRICA o PIRÁMIDE TRIGONAL o ANGULAR

- Tetraedro regular: pirámide de caras triángulos equiláteros
- Ángulo de enlace (*teórico*) = $109^\circ 28'$ (109.5°)



**Geometría Molecular
TETRAÉDRICA**

... cuando hay electrones no enlazados (E) existirá desviación de los ángulos interenlaces ...

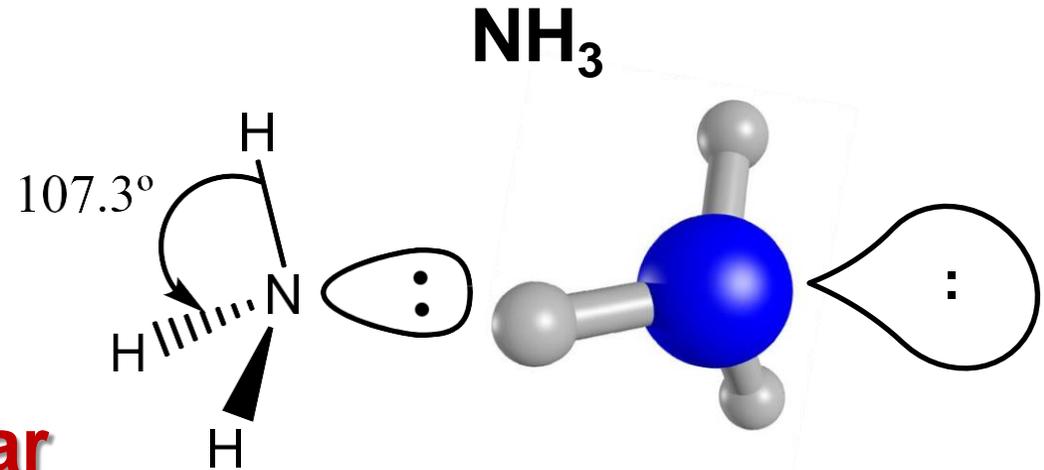
RPECV

3) AX_4 ó AX_3E ó AX_2E_2

- con un E

- Ángulos de enlace ligeramente menores

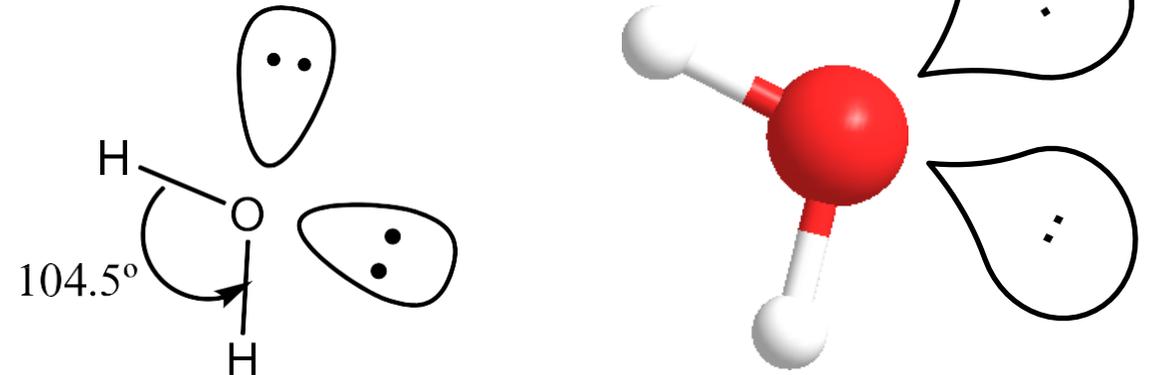
**Geometría Molecular
PIRÁMIDE TRIGONAL**



- con dos E

H₂O (OH₂)

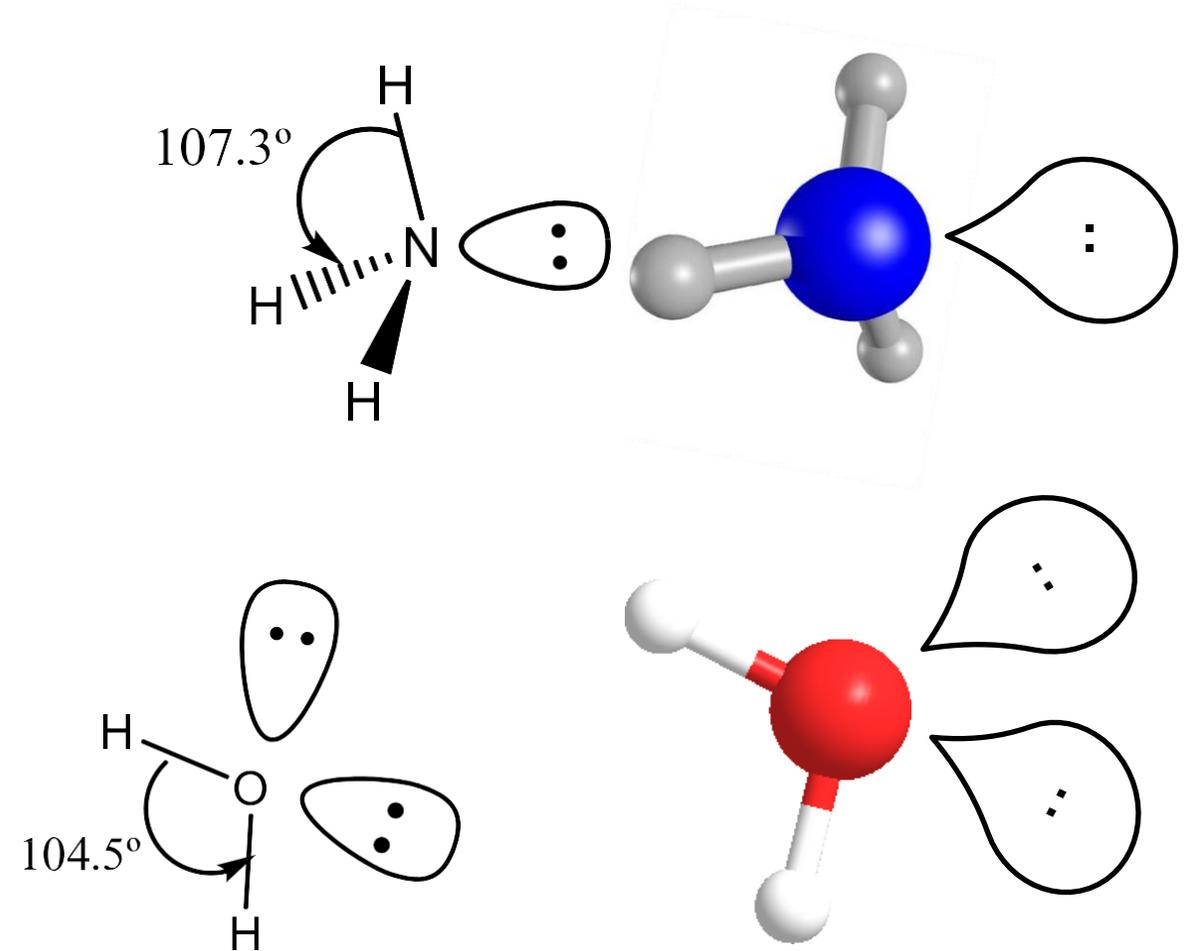
**Geometría Molecular
ANGULAR (FORMA V o INCLINADA)**



RPECV

3) AX_4 ó AX_3E ó AX_2E_2

Las *repulsiones* de los **pares electrónicos** causan desviaciones de los ángulos, entre los enlace, siguiendo la desviación el siguiente orden de relevancia:



MAYOR DESVIACIÓN

MENOR DESVIACIÓN

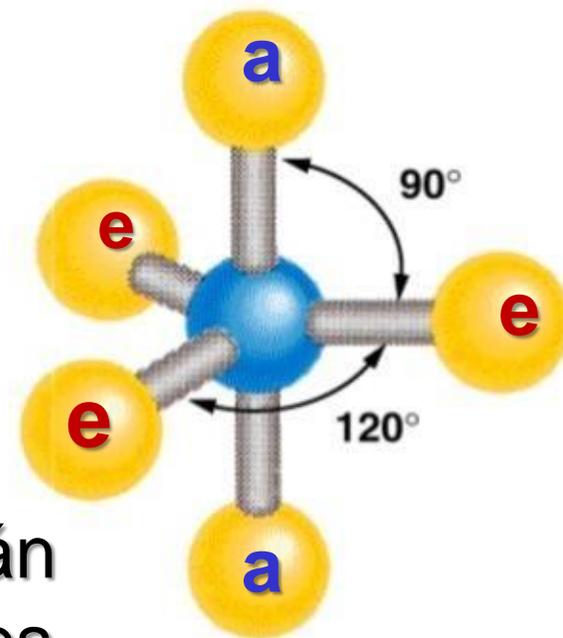
par solitario-par solitario > par solitario-par enlazante > par enlazante-par enlazante

RPECV

4) AX_5 ó AX_4E ó AX_3E_2 ó AX_2E_3

cinco grupos de electrones – **GPE: BIPIRÁMIDE TRIGONAL**

- Habrá dos grupos de posiciones: *ecuatoriales* y *axiales*
- Habrá tres ángulos de enlace (*teóricos*)
 - 180° (entre grupos axiales)
 - 120° (entre grupos ecuatoriales)
 - 90° (entre un grupo axial y un grupo ecuatorial)
- Cuando existan electrones no enlazados (E) se ubicarán en las **posiciones ecuatoriales** ya que son las posiciones con ángulos mayores y por ende ... *cuando haya E existirán desviación de los ángulos interenlaces y por ende diferentes GM ...*

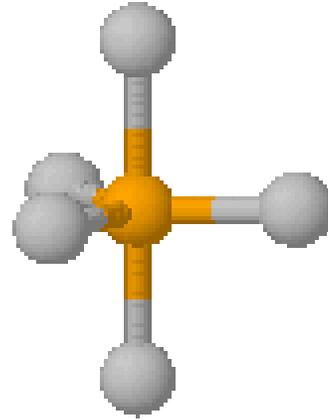
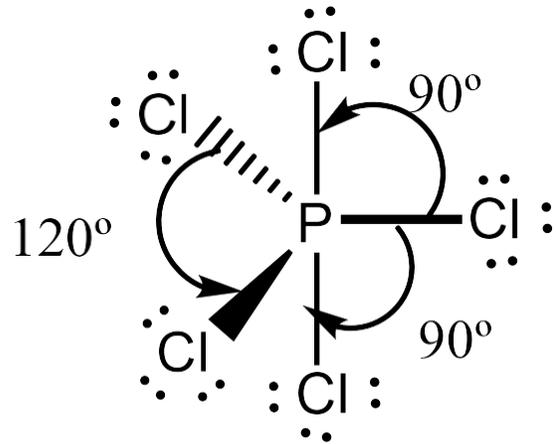


RPECV

4) AX₅ ó AX₄E ó AX₃E₂ ó AX₂E₃

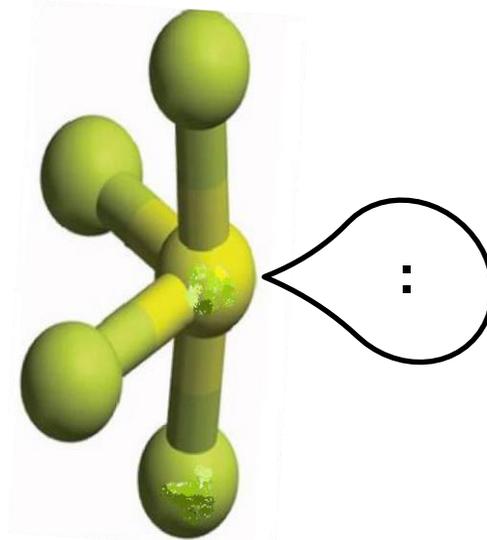
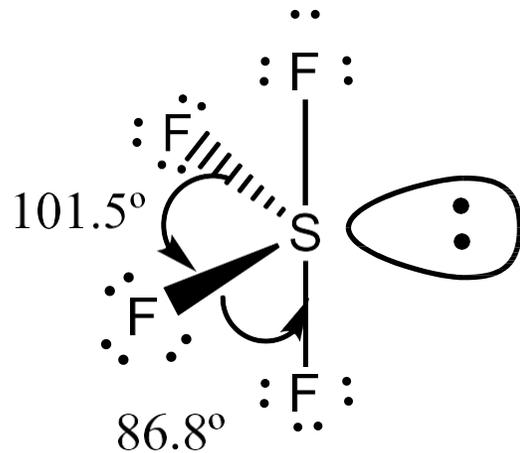
Geometría Molecular

PCl₅



**BIPIRÁMIDE
TRIGONAL**

SF₄



**TETRAÉDRO
DISTORSIONADO
(DISFEROIDAL)**

RPECV

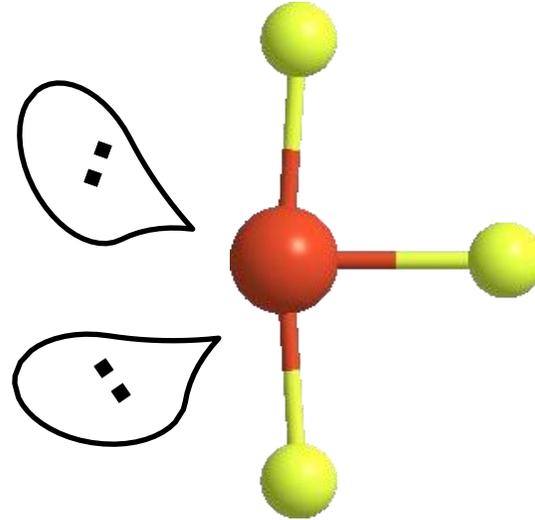
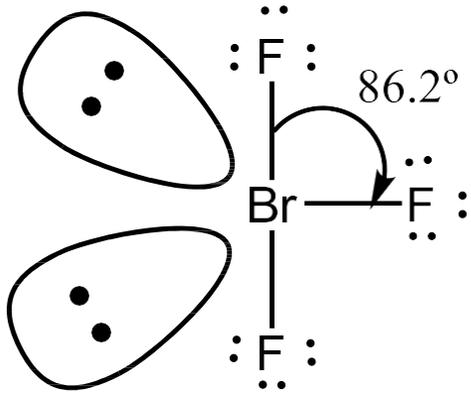
4) AX₅ ó AX₄E ó AX₃E₂ ó AX₂E₃

Geometría Molecular

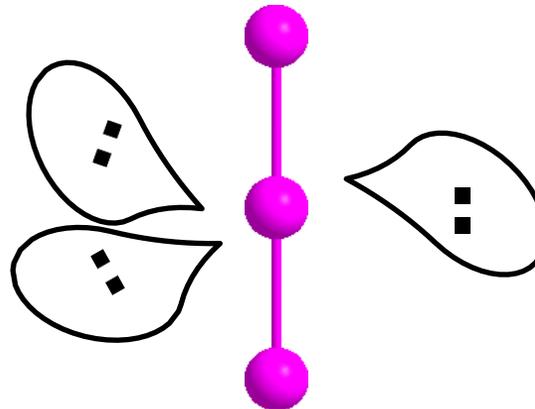
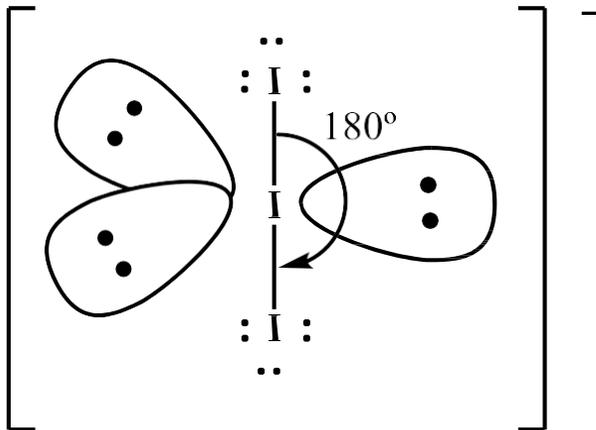
FORMA DE T

LINEAL

BrF₃



I₃⁻



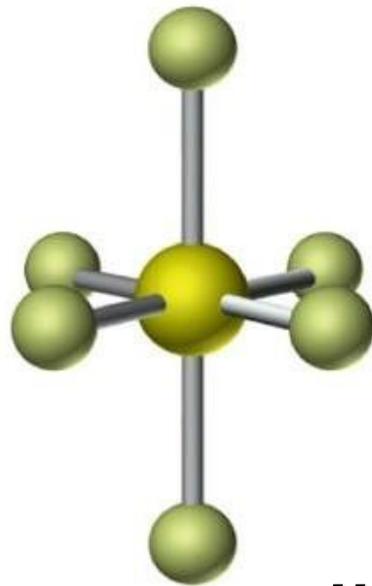
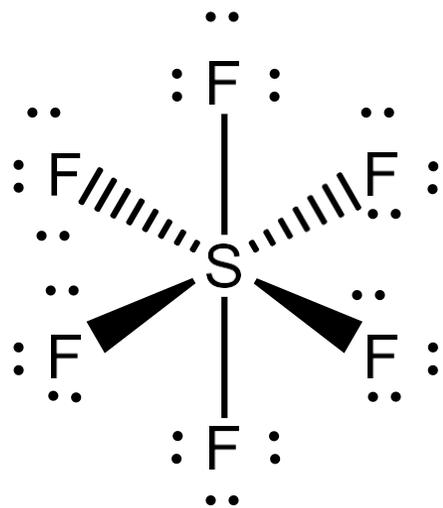
RPECV

5) AX_6 ó AX_5E ó AX_4E_2

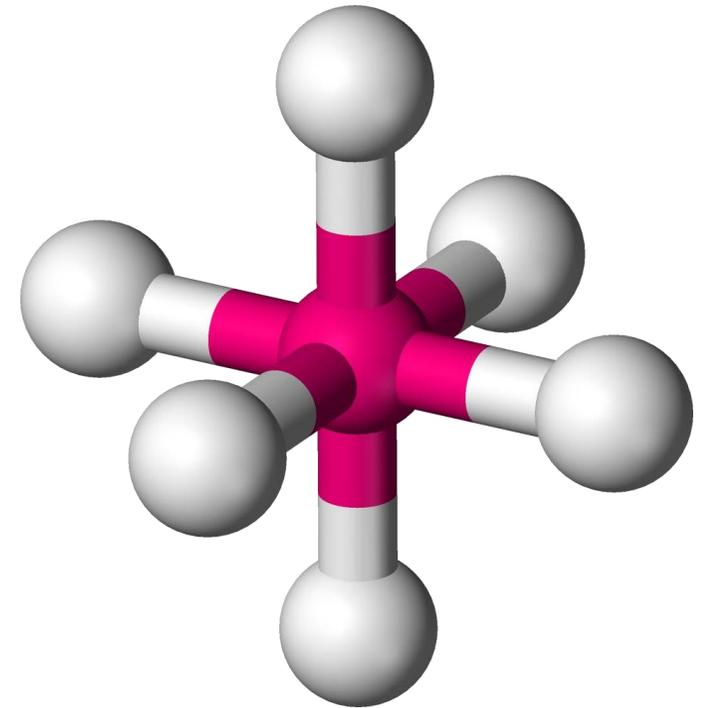
seis grupos de electrones – **GPE: OCTAEDRO**

- Ángulo de enlace (*teórico*) = 90°

SF₆



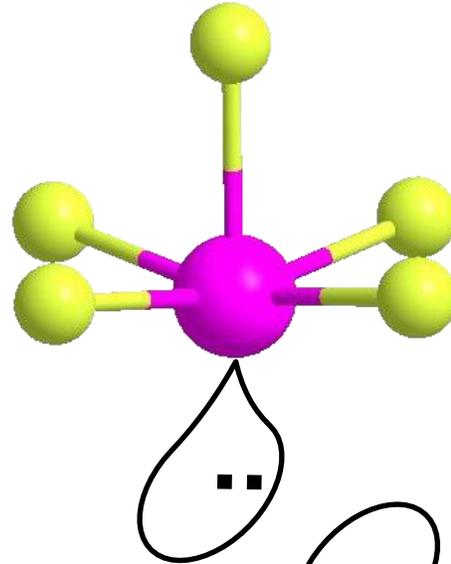
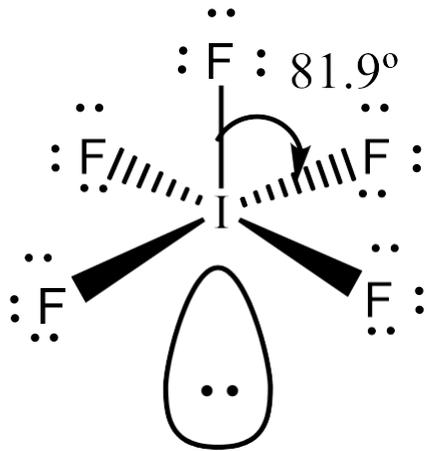
**Geometría Molecular
OCTAÉDRICA**



*... cuando haya E existirán desviación de los ángulos interenlaces y por ende otras **GM** ...*

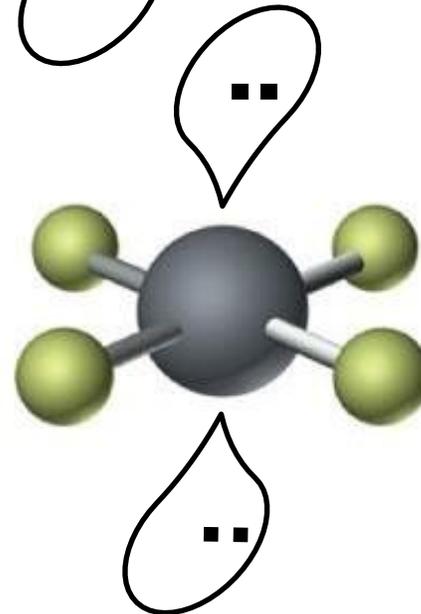
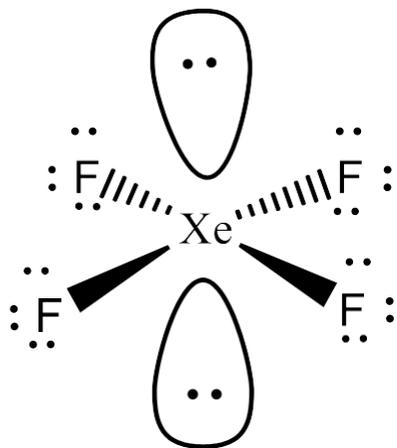
RPECV

5) AX_6 ó AX_5E ó AX_4E_2



Geometría Molecular

**PIRÁMIDE
DE BASE CUADRADA**



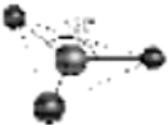
CUADRADA

RESUMEN

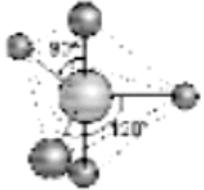
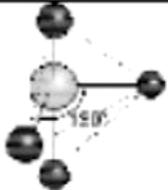
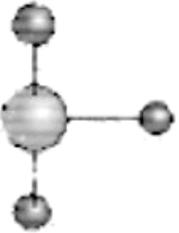
USO DE LA TEORÍA DE RPECV PARA DETERMINAR LA FORMA MOLECULAR

- 1) Escribir la estructura de Lewis para la fórmula molecular, evidenciando la colocación relativa de átomos y el número de grupos de electrones
- 2) Asignar un arreglo del grupo de electrones por conteo de todos los grupos de electrones alrededor del átomo central, enlazados más los no enlazados
- 3) Predecir el ángulo de enlace ideal a partir del arreglo de los grupos de electrones y la dirección de cualquier desviación causada por los pares solitarios o enlaces dobles
- 4) Formular y nombrar la forma molecular por conteo de los grupos enlazados y no enlazados separadamente

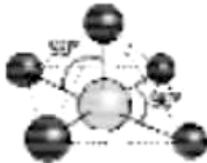
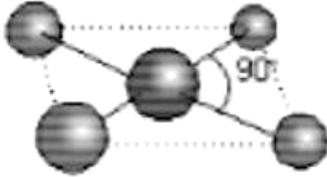
RESUMEN

Hibridación	RPECV	Pares de e ⁻	Pares e ⁻ enlazados (B)	Pares e ⁻ libres (E)	Ejemplo	Forma	
sp	AB ₂	2	2	0	BeCl ₂	Lineal(180°)	
sp ²	AB ₃	3	3	0	BF ₃	Trigonal(120°)	
	AB ₂ E		2	1	SO ₂	Angular	
sp ³	AB ₄	4	4	0	CH ₄	Tetraédrica(109,5°)	
	AB ₃ E		3	1	NH ₃	Pirámide trigonal(107°)	
	AB ₂ E ₂		2	2	H ₂ O	Angular (104°)	

RESUMEN

Hibridación	RPECV	Pares de e ⁻	Pares e ⁻ enlazados (B)	Pares e ⁻ libres (E)	Ejemplo	Forma	
sp ³ d	AB ₅	5	5	0	PCl ₅	Bipirámide trigonal	
	AB ₄ E		4	1	SF ₄	Tetraédro distorsionado	
	AB ₃ E ₂		3	2	ClF ₃	Forma de T	

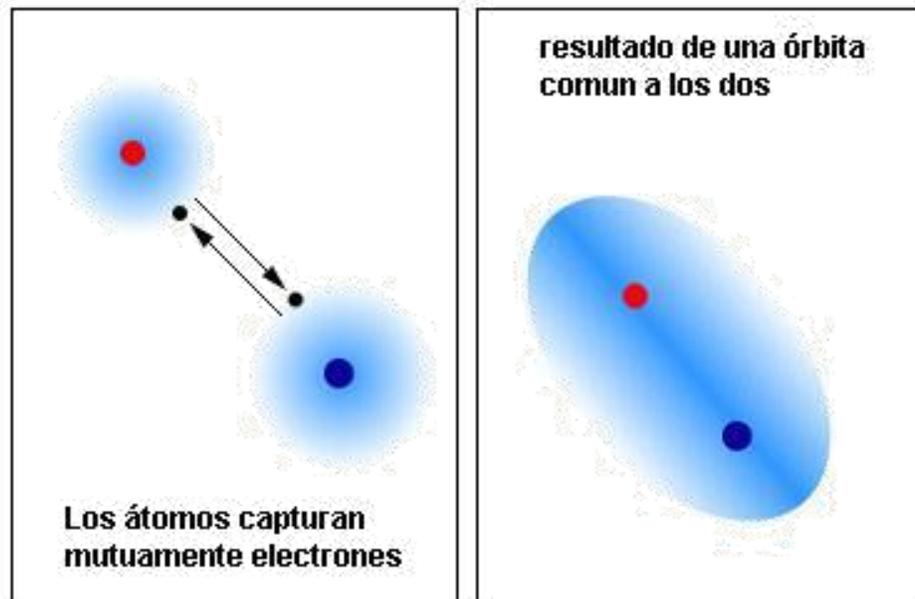
RESUMEN

Hibridación	RPECV	Pares de e ⁻	Pares e ⁻ enlazados (B)	Pares e ⁻ libres (E)	Ejemplo	Forma	
sp^3d^2	AB_6	6	6	0	SF_6	Octaédro	
	AB_5E		5	1	BrF_5	Pirámide cuadrada	
	AB_4E_2		4	2	XeF_4	Plana cuadrada	

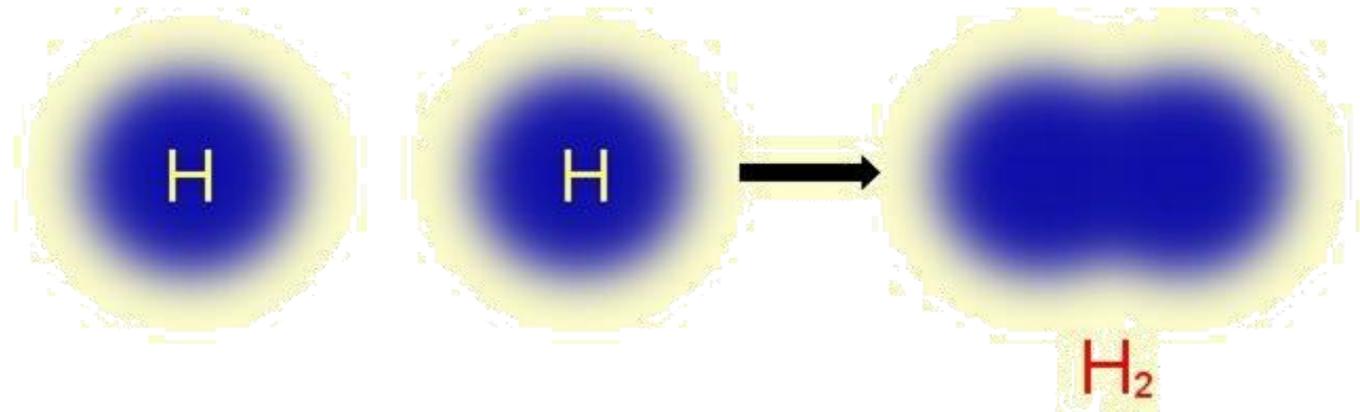
ENLACE COVALENTE

Un átomo puede adquirir la configuración electrónica de un gas noble compartiendo electrones con otros átomos

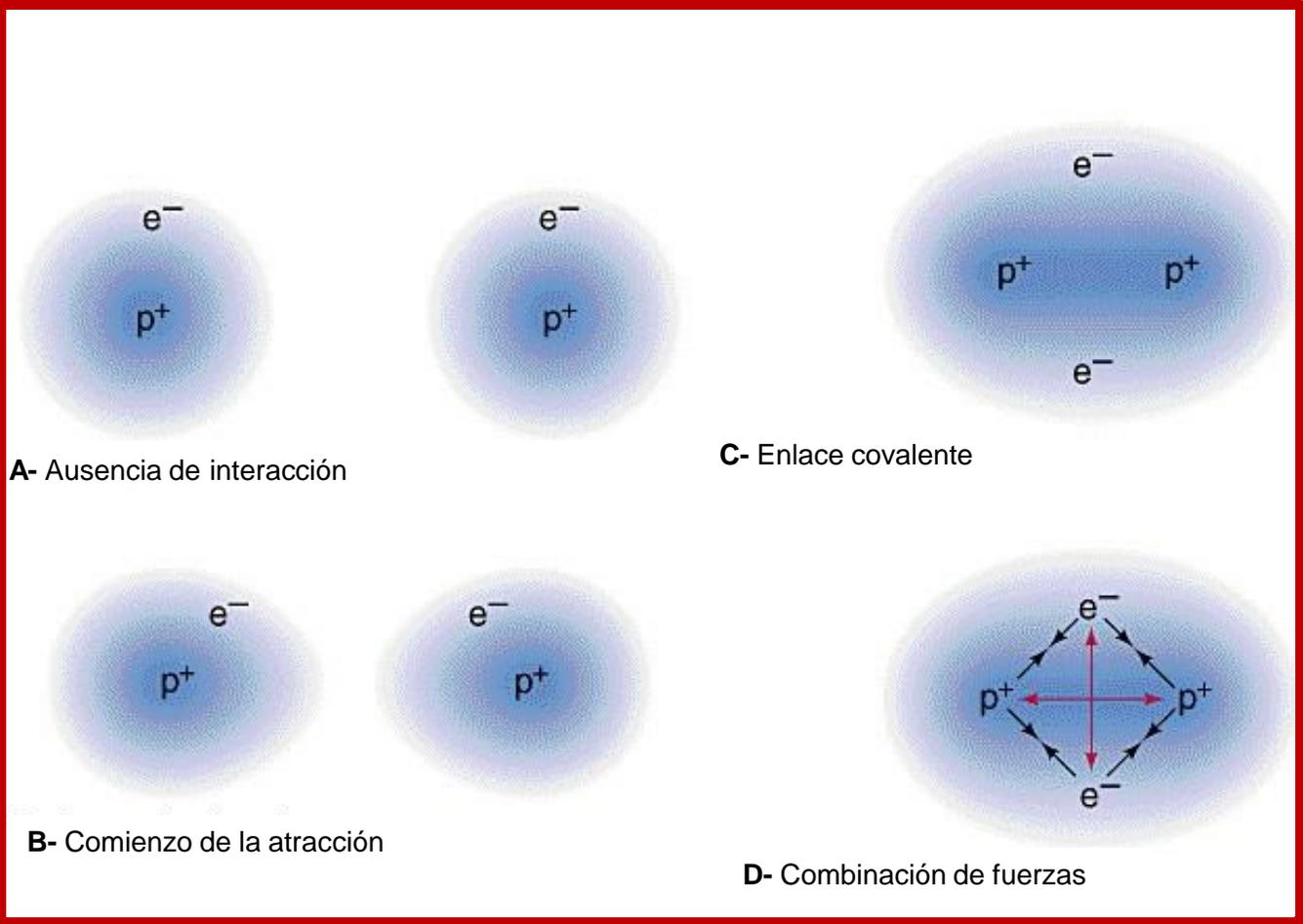
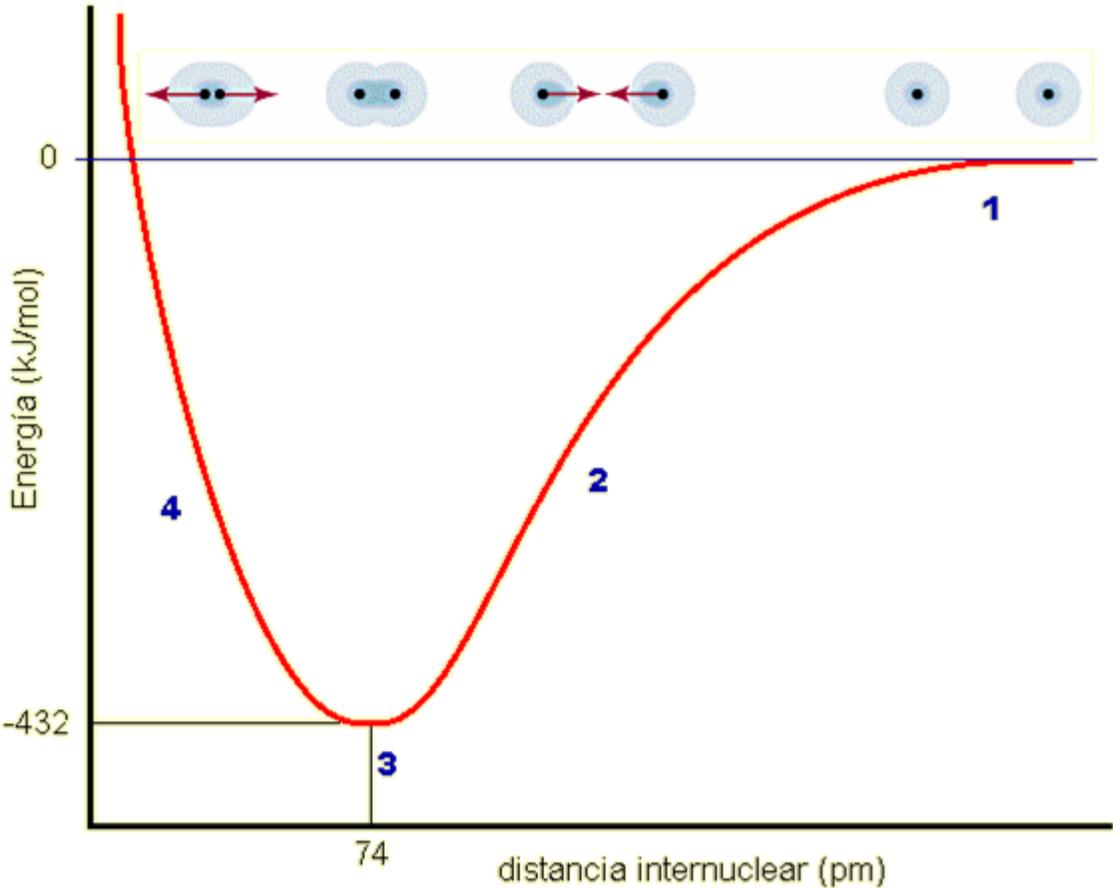
Un enlace químico, formado al compartir un par de electrones, se denomina ***enlace covalente***



ENLACE COVALENTE



ENLACE COVALENTE



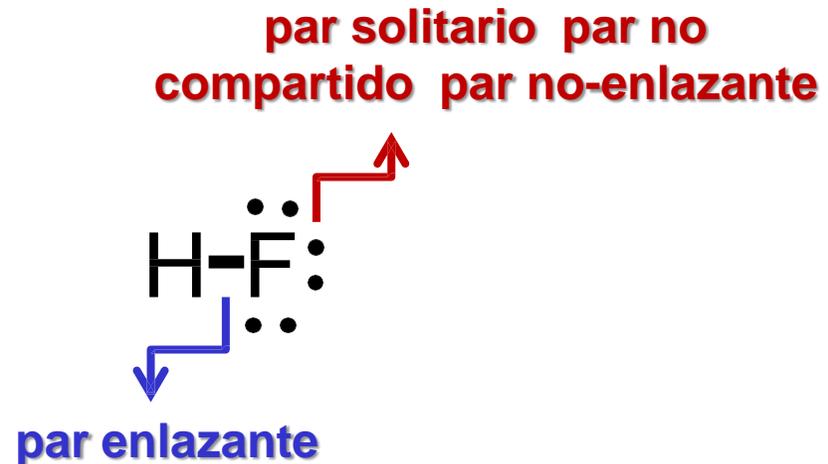
ENLACE COVALENTE

El par de electrones compartidos llena *simultáneamente* el nivel externo de ambos átomos

Este par de electrones recibe el nombre de **par compartido** o **par enlazante**



Un par de electrones que es parte de la capa de valencia de uno de los átomos involucrados en el enlace, pero que *no* está implicado en el mismo, se denomina **par solitario** o **par no compartido**



ENLACE COVALENTE

ORDEN DE ENLACE

El orden de enlace es el número de *pares* de electrones compartidos entre dos átomos

- enlace sencillo: un par de electrones enlazantes
orden de enlace: 1

- enlace múltiple: hay más de un par de electrones enlazantes entre los dos átomos

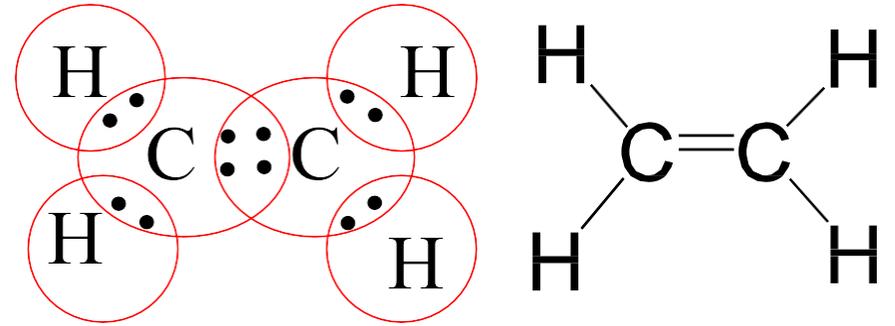
ENLACE COVALENTE

ORDEN DE ENLACE

- enlace doble: dos pares de electrones enlazantes, cuatro electrones compartidos

orden de enlace: 2

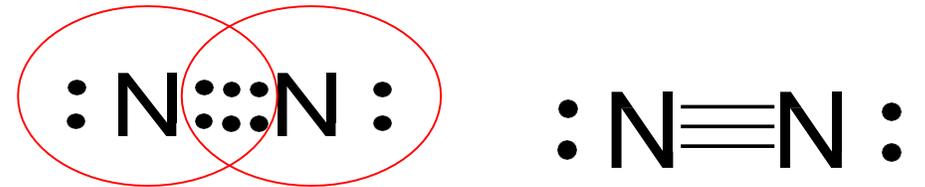
etileno (C₂H₄)



- enlace triple: tres pares de electrones enlazantes, seis electrones compartidos

orden de enlace: 3

nitrógeno gas (N₂)

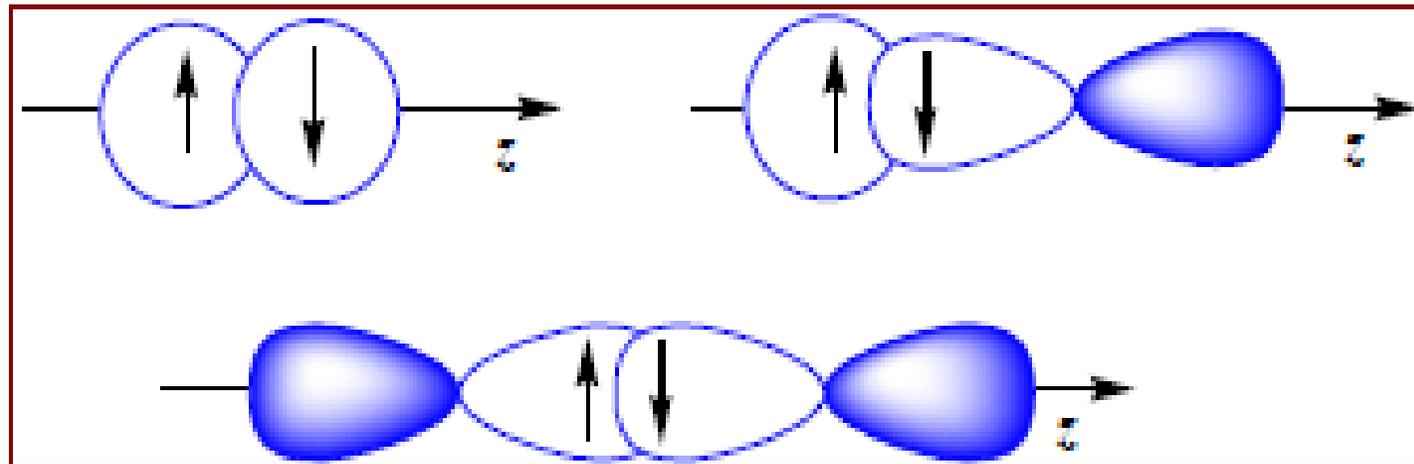


TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

El enlace covalente se forma cuando los orbitales de dos átomos se **traslapan** (o fusionan) y son ocupados por un par de electrones que tendrán la mayor probabilidad de localizarse entre los núcleos

La región de traslape es favorable para que los electrones residan, porque son atraídos simultáneamente por los dos núcleos con carga positiva



TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

1. Espines opuestos de los pares de electrones. El espacio formado por el traslape de orbitales tiene una capacidad máxima para 2 electrones que tendrán espines opuestos

2. Máximo traslape de los orbitales enlazados. Mientras mayor es el traslape de orbitales, más fuerte (más estable) es el enlace

La extensión del traslape depende de la forma y dirección de los orbitales implicados

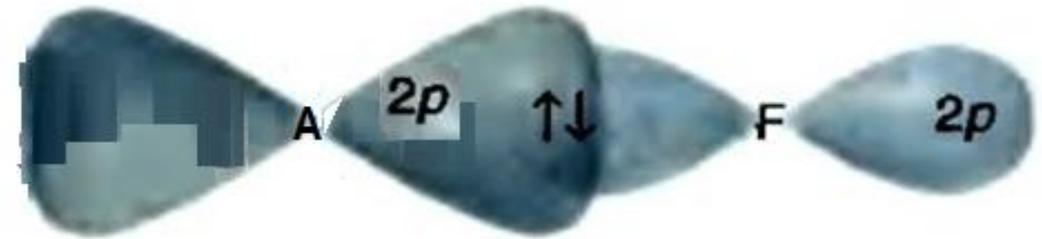
- Los orbitales **s** son esféricos tienen una única forma de traslapar
- Pero los componentes de los orbitales **p** y **d** tienen mayor densidad electrónica en una dirección que en otra (lobulares), de forma que un enlace que involucre orbitales **p** o **d** deben orientarse en la dirección que maximice el traslape

TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

2.1. traslape extremo a extremo: enlace sigma (σ)

- mayor densidad electrónica a lo largo del eje del enlace
- tiene la forma de una elipse que se ha rotado alrededor de su eje mayor
- todos los enlaces sencillos son enlaces σ



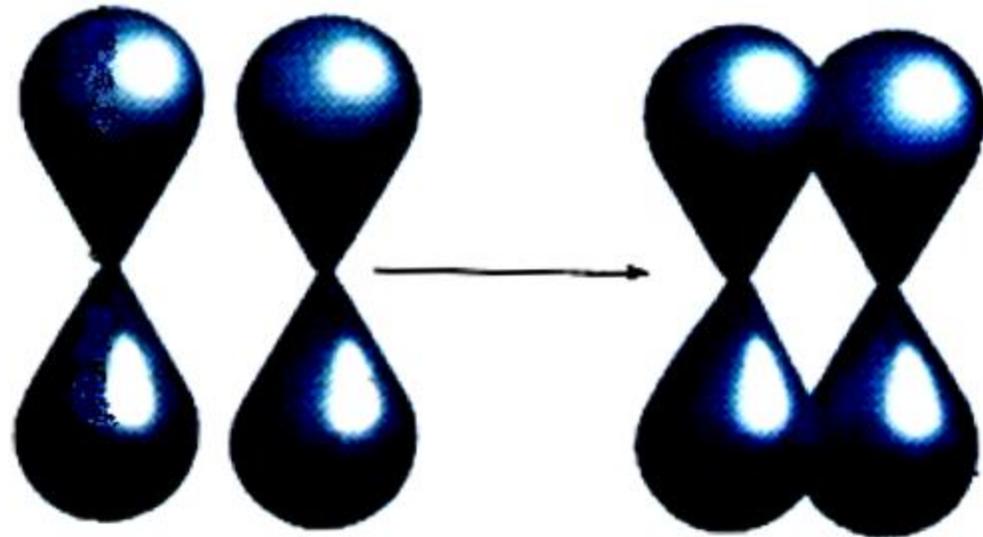
- Pero los componentes de los orbitales p y d tienen mayor densidad electrónica en una dirección que en otra (lobulares), de forma que un enlace que involucre orbitales p o d deben orientarse en la dirección que maximice el traslape

TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

2.2. traslape lado a lado: enlace pi (π)

- dos regiones de densidad electrónica, una por arriba y otra por debajo



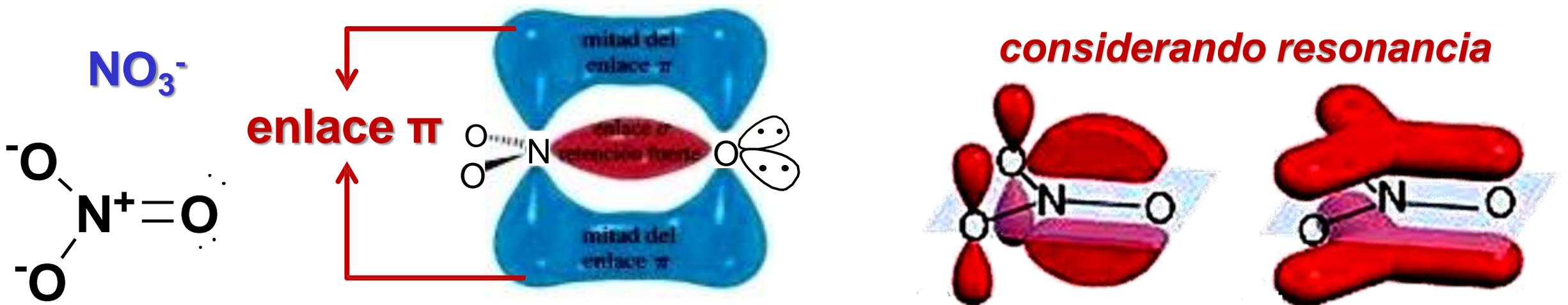
- Pero los componentes de los orbitales p y d tienen mayor densidad electrónica en una dirección que en otra (lobulares), de forma que un enlace que involucre orbitales p o d deben orientarse en la dirección que maximice el traslape

TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

2.2. traslape lado a lado: enlace pi (π)

- dos regiones de densidad electrónica, una por arriba y otra por debajo
- los electrones se pueden localizar en ambas regiones del enlace
- los enlaces múltiples (***dobles*** y ***triples***) tienen enlaces π
- un enlace doble consiste siempre en un enlace σ y un enlace π



TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

1) TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA (EV)

2.2. traslape lado a lado: enlace pi (π)

- dos regiones de densidad electrónica, una por arriba y otra por debajo
- los electrones se pueden localizar en ambas regiones del enlace
- los enlaces múltiples (*dobles* y *triples*) tienen enlaces π
- un enlace doble consiste siempre en un enlace σ y un enlace π
- un enlace triple consiste en un enlace σ y dos enlaces π



Tarea 3

Comienza 07/05

20:00 h

