

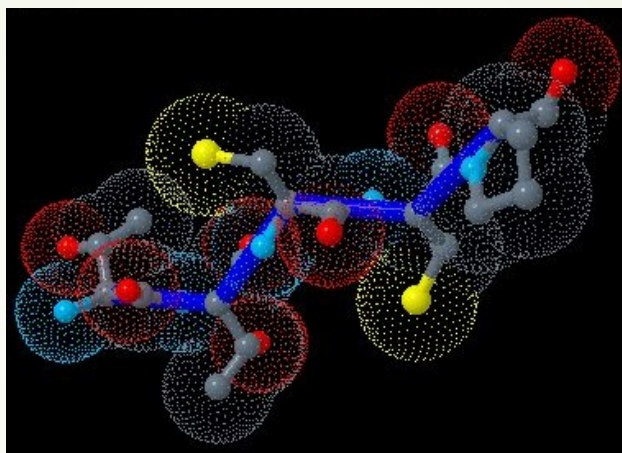


UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



FCEN

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Naturaleza – Ciencia – Humanismo



ENLACE QUÍMICO



SÍNTESIS DE LA PRESENTACIÓN

Enlace Químico

Clasificación

Propiedades

Teoría de Lewis

Formación de enlace iónico

Enlace covalente

Estructuras de Lewis

Resonancia

Carga formal

Teoría de la Repulsión

Teoría del Enlace de Valencia

Aplicación

Bibliografía

ENLACE QUÍMICO

El enlace químico es la unión entre átomos

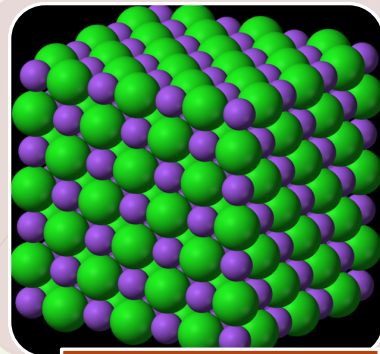
Es un proceso por el cual los átomos ganan, ceden o comparten electrones de la capa de valencia (la capa más externa), hasta conseguir la configuración electrónica propia del gas noble más próximo.



Los cambios energéticos que determinan la formación de los enlaces aparecen cuando los **electrones de valencia** de los átomos, pasan a una nueva ubicación. Por consiguiente, la formación de los enlaces depende de las estructuras electrónicas de los átomos.

UNIÓN QUÍMICA

Es la **unión entre átomos**. Cuando se forma un enlace químico entre dos átomos, la disposición resultante de los dos núcleos y sus electrones tiene una energía menor que la energía total de los átomos separados.

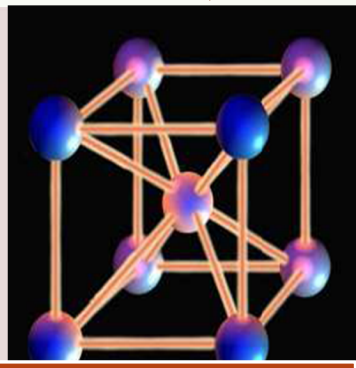


ENLACE IÓNICO

Es la unión que se produce cuando se produce transferencia total de electrones entre dos átomos. Un sólido iónico es un ensamble de cationes y aniones unidos en forma regular por la fuerza de Coulomb.

Elementos con electronegatividades diferentes.

Fe

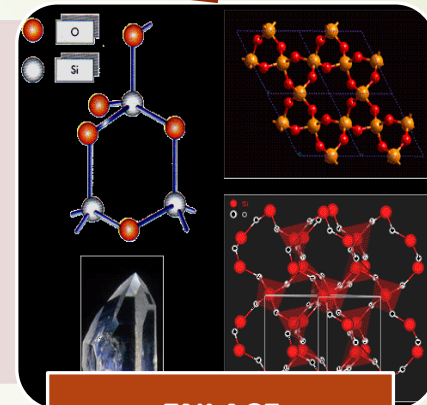


ENLACE METÁLICO

Las sustancias metálicas están formadas por átomos de un mismo elemento metálico.

Se forma un mar de electrones: conjunto de electrones libres, deslocalizados, que no pertenecen a ningún átomo en particular.

Elementos con electronegatividades bajas y similares



ENLACE COVALENTE

Cuando se forma un enlace covalente, los átomos comparten los electrones hasta alcanzar la configuración del gas noble más próximo.

Elementos con electronegatividades altas y similares.

PROPIEDADES

COMPUESTOS IÓNICOS

- Temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
- Sólidos a temperatura ambiente. La red cristalina es muy estable por lo que resulta muy difícil romperla.
- Son duros (resistentes al rayado).
- No conducen la electricidad en estado sólido, los iones en la red cristalina están en posiciones fijas, no quedan partículas libres que puedan conducir la corriente eléctrica.
- En general son solubles en agua, los iones quedan libres al disolverse y pueden conducir la electricidad en solución.
- Al fundirse también los iones se liberan de sus posiciones fijas, pudiendo conducir la electricidad.

Ej.. NaCl

COMPUESTOS METÁLICOS

- Temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
- Son sólidos a temperatura ambiente (excepto el mercurio que es líquido).
- En general son duros (resistentes al rayado).
- Buenos conductores de la electricidad (nube de electrones deslocalizada).
- Buenos conductores del calor (facilidad de movimiento de electrones y de vibración de los restos atómicos positivos).
- Son dúctiles (facilidad de formar hilos) y maleables (facilidad de formar láminas) al aplicar presión.
- La mayoría se oxida con facilidad.

Ej: Fe

COMPUESTOS COVALENTES

Redes covalentes:

- Presentan temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
 - Son sólidos a temperatura ambiente.
 - Son muy duros.
 - No conducen el calor ni la electricidad.
 - Son insolubles en agua.
- EJ.: SiO₂, diamante.

Compuestos moleculares:

- Temperaturas de fusión y ebullición bajas.
 - A temperatura ambiente se encuentran en estado gaseoso, líquido (volátil) o sólido de bajo punto de fusión.
 - No conducen la electricidad en ningún estado físico .
 - Son muy malos conductores del calor.
 - La mayoría son poco solubles en agua.
- Ej. H₂O; I₂; sacarosa.

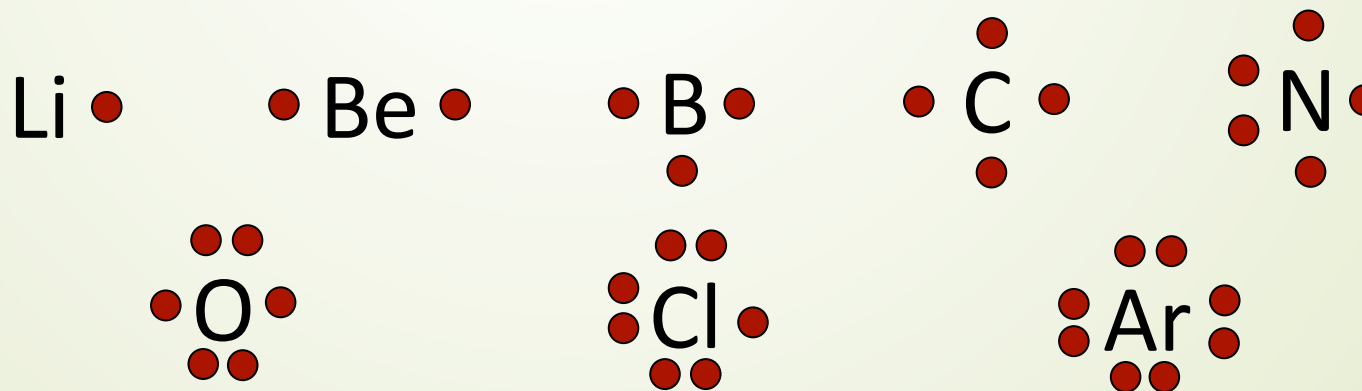
VISIÓN GENERAL DE LA TEORÍA DE LEWIS

1. Los electrones de la capa más externa, de **valencia**, juega un rol fundamental en el enlace químico.
2. En algunos casos los electrones se **transfieren** de un átomo a otro generando iones positivos y negativos que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas dando lugar a la formación de enlaces iónicos.
3. En otros casos se **comparten** entre los átomos uno o más pares de electrones, originando enlaces covalentes.
4. Los electrones se transfieren o se comparten de manera que los átomos adquieren una configuración electrónica especialmente estable.

SÍMBOLOS DE LEWIS

Es la representación de los electrones de valencia de un elemento químico a través de puntos.

EJEMPLOS



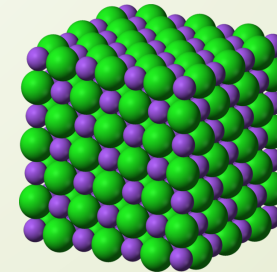
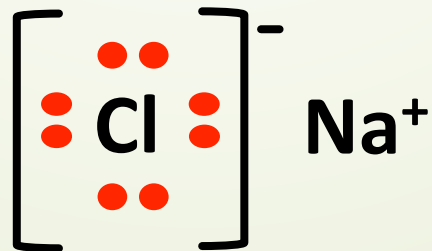
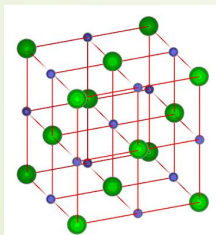
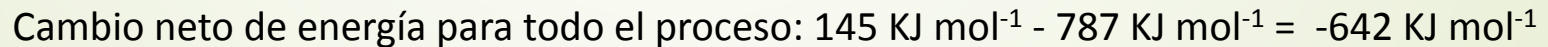
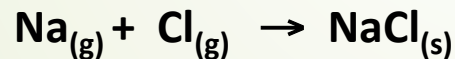
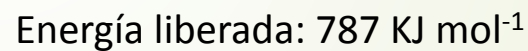
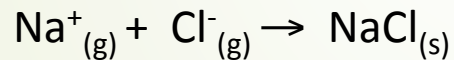
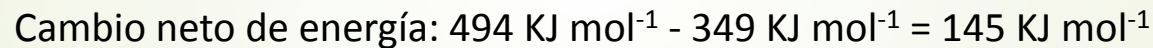
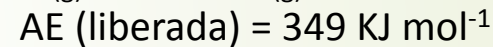
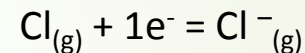
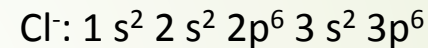
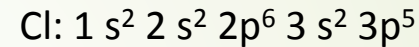
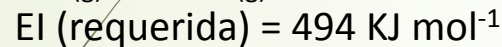
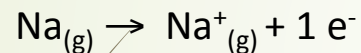
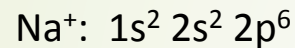
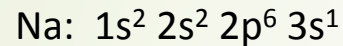
FORMACIÓN DE UN ENLACE IÓNICO

A menudo se analizan procesos complejos separándolos en pasos simples, y que pueden ser hipotéticos, constituyendo modelos simples.

Consideraciones:

- Los metales se encuentran en estado natural como sólidos, mientras que los no metales como gases formando algunas moléculas diatómicas.
- No obstante para que una reacción ocurra fácilmente los reactivos deberían estar en el estado más disperso posible, este es el gaseoso. El modelo se explica con estas consideraciones.

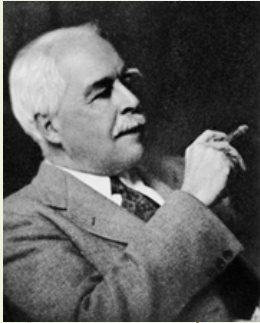
Pasos:



ENLACE COVALENTE

Cuando se forma un enlace covalente, los átomos comparten los electrones hasta alcanzar la configuración del gas noble más próximo.

Lewis en 1916 llamó a esto la **Regla del Octeto**:



“En la formación de enlaces covalentes, los átomos se acercan todo lo posible a completar sus octetos compartiendo pares de electrones”.

Los *gases nobles* presentan gran estabilidad química y existen como moléculas monoatómicas.

<u>Z</u>	<u>Elemento</u>	<u>Electrones por capa</u>
2	Helio	2
10	Neón	2, 8
18	Argón	2, 8, 8
36	Kriptón	2, 8, 18, 8
54	Xenón	2, 8, 18, 18, 8
86	Radón	2, 8, 18, 32, 18, 8

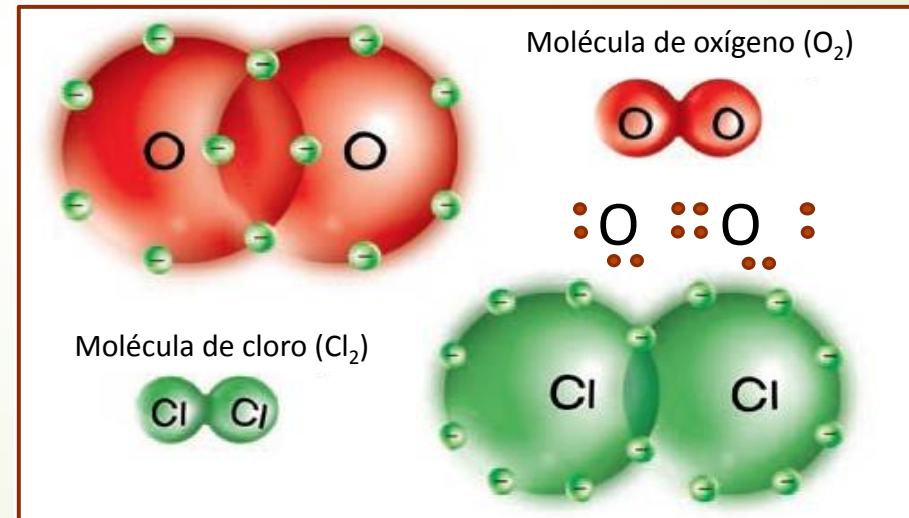
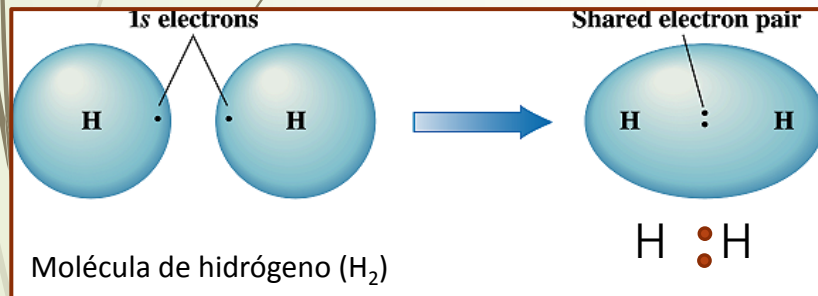
Tipos de pares de electrones:

1- Pares de e- compartidos entre dos átomos (representado con una línea entre los átomos unidos)

- enlaces sencillos
- enlaces dobles
- enlaces triples

2- Pares de e- no compartidos (ó par solitario, ó par aislado)

EJEMPLOS



ESTRUCTURAS DE LEWIS

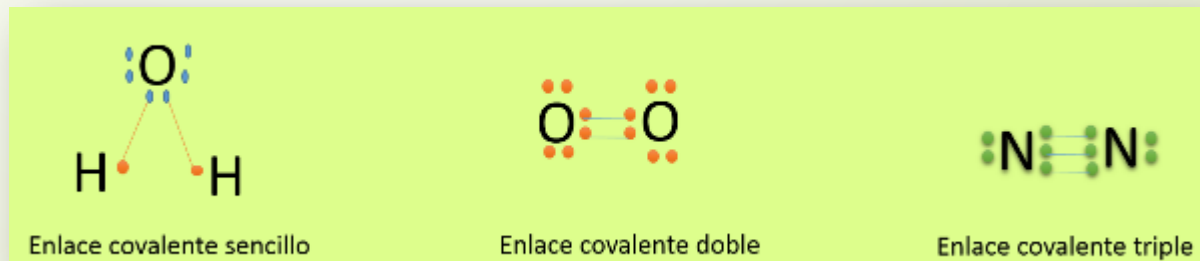
1- Se suman los electrones de valencia de los átomos presentes en la molécula.

En el caso de un anión se añade un electrón por cada carga negativa y, se restan tantos electrones como cargas positivas tenga si se trata de un catión.

2- Se dibuja una estructura esquemática con los símbolos atómicos unidos mediante enlaces sencillos colocando como átomo central al elemento menos electronegativo .

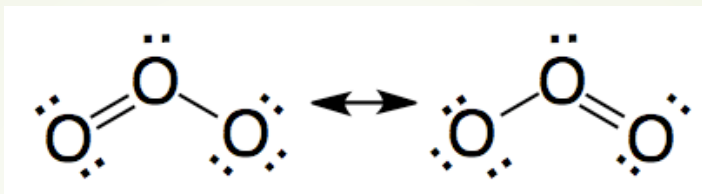
3- Los electrones se disponen de a pares alrededor del átomo central, en el caso de quedar electrones, se colocan, siempre de a pares, alrededor de los vecinos, y si aún quedaran electrones se acomodan sobre el átomo central como electrones libres.

4- Se distribuyen los electrones de forma que se complete un octeto para cada átomo, si es necesario, se desplazan pares de electrones en donde no se alcance el octeto.

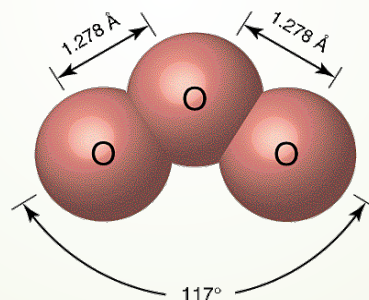


RESONANCIA

Algunas moléculas tienen estructuras que no pueden expresarse correctamente por una única estructura de Lewis.



Esta combinación de estructuras se denomina resonancia y la estructura combinada es un híbrido de resonancia.



La Resonancia es una combinación de estructuras con la misma disposición de átomos, pero diferentes disposiciones de electrones. Distribuye las características de los enlaces múltiples por toda la molécula y da como resultado una energía más baja.

Ejemplos: O_3 , NO_3^- , SO_3 , NO_2 , y benceno (C_6H_6).

CARGA FORMAL

Las estructuras de Lewis no equivalentes en general no contribuyen de la misma manera al híbrido de resonancia.

$$C_f = V - (N + C/2)$$

V= nº de e⁻ de valencia

N= nº de e⁻ no compartidos

C= nº de e⁻ compartidos

La carga formal indica la medida en que cada átomo dispone sus electrones en el proceso de formación del enlace covalente. Las disposiciones de los átomos y las estructuras de Lewis con menores cargas formales probablemente tienen la energía más baja.

Ejemplo:

- I)
 - Para C: $C_f = 4 - (0 + 8/2) = 0$
 - Para O: $C_f = 6 - (4 + 4/2) = 0$
- II)
 - Para C: $C_f = 4 - (2 + 6/2) = -1$
 - Para O: $C_f = 6 - (2 + 6/2) = +1$

← **Correcta**

EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO

Hay tres clases de excepciones a la regla del Octeto:

- **Especies con n° impar de electrones.**

Otros ejemplos: ClO_2 , NO_2

- **Octetos incompletos.**

Los compuestos de boro y aluminio presentan octetos incompletos o átomos de halógenos que forman puentes.

- **Capas de valencia extendidas (Octeto expandido)**

Átomos del período 3 o posteriores.

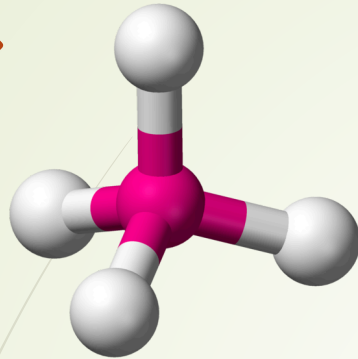


Ejercitación:

Realice las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos:

- BeCl_2
- CH_4
- CO_2
- H_2O
- NH_3
- SO_2
- CaCl_2
- SO_4^{2-}

FORMA Y ESTRUCTURA MOLECULARES



Forma molecular está determinada por:

- **Distancia de enlace** \Rightarrow Distancia en línea recta, entre los núcleos de los dos átomos enlazados.
- **Ángulo de enlace** \Rightarrow Ángulo formado entre dos enlaces que contienen un átomo en común.

Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia

En el modelo de TRPECV, [Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory (VSEPR)], las regiones de alta concentración de electrones adoptan posiciones que maximizan sus separaciones, los pares de electrones en un enlace múltiple se tratan como una unidad simple.

La forma de la molécula se identifica a partir de las localizaciones relativas de sus átomos.

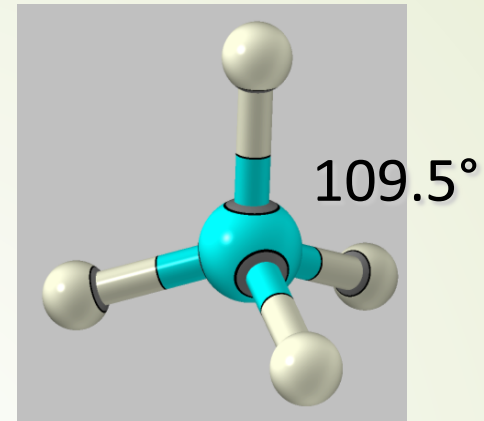
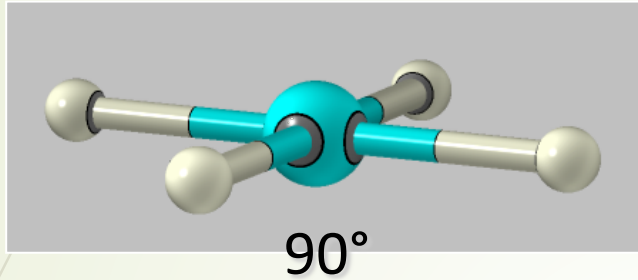
Predicción de la Geometría Molecular

- Se dibuja la estructura de Lewis.
- Se cuenta el nº total de pares de electrones y se colocan alrededor del átomo central de forma que minimicen las repulsiones.
- La geometría molecular final queda determinada en función de la importancia de la repulsión entre los pares de electrones compartidos y no compartidos.

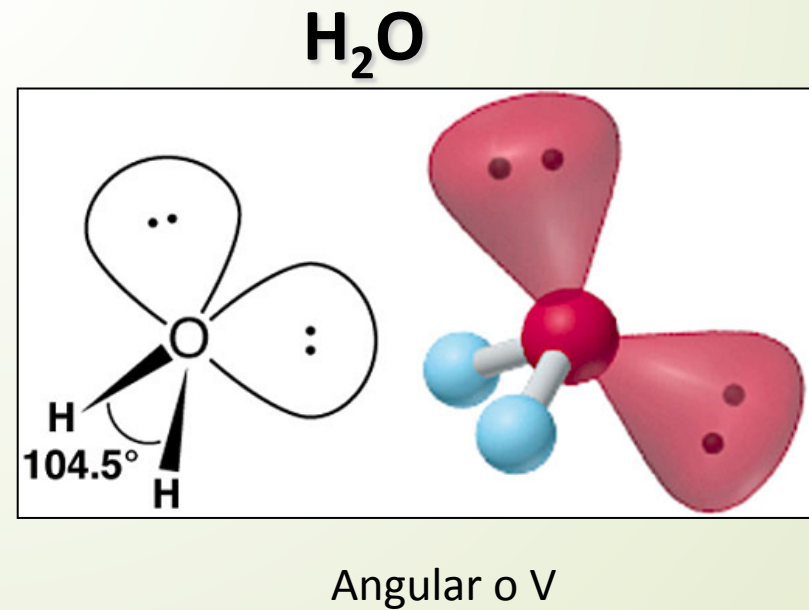
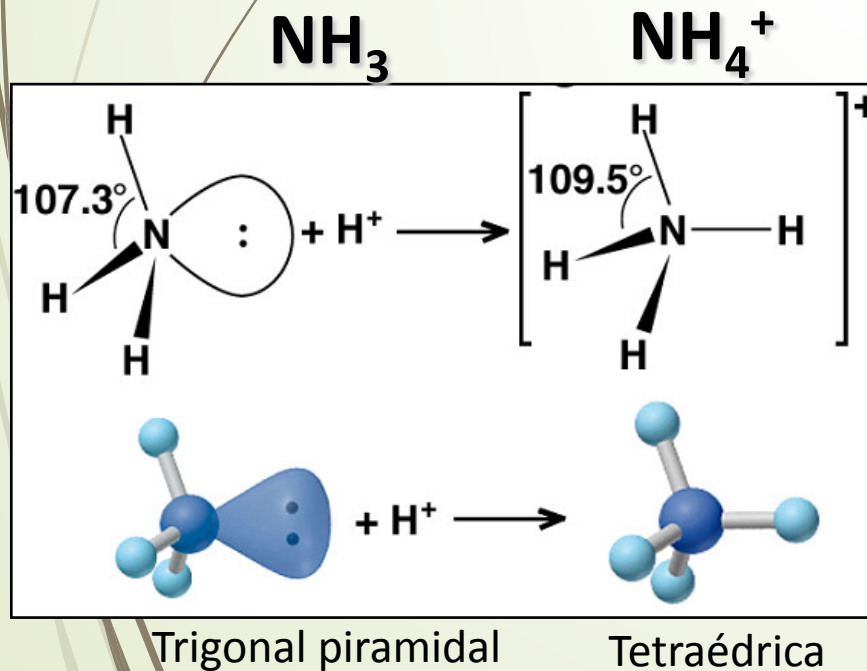


PNC= Par no compartido; PE= Par compartido (enlace)

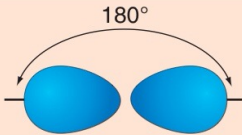
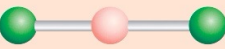
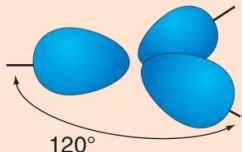
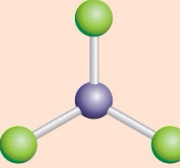
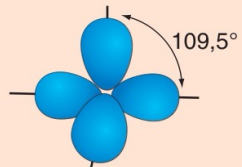
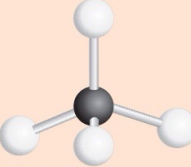
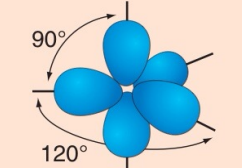
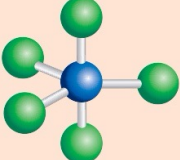
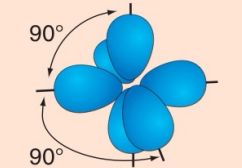
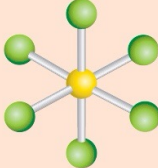
EJEMPLOS DE Geometría Molecular



¡Menor repulsión!
Estructura correcta





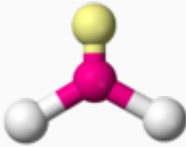

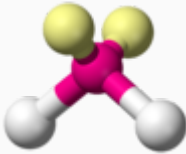

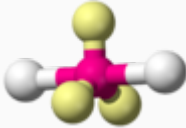



GEOMETRÍA IDEAL

Tipo de molécula	Ejemplo	Estructura de Lewis	Zonas de alta densidad electrónica	Orientación espacial de las nubes electrónicas	Geometría de la molécula	
AM ₂	BeCl ₂	$\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{—Be—}\ddot{\text{Cl}}\text{:}$	2		Cl—Be—Cl	 Lineal
AM ₃	BF ₃	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}}\text{—B—}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \end{array}$	3		$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{B} \\ / \quad \backslash \\ \text{F} \quad \text{F} \end{array}$	 Plana trigonal
AM ₄	CH ₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H—C—H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	4		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	 Tetraédrica
AM ₅	PCl ₅	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{—P—}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$	5		$\begin{array}{c} \text{Cl} \\ \\ \text{Cl—P—Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$	 Pirámide trigonal
AM ₆	SF ₆	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{—S—}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \end{array}$	6		$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F—S—F} \\ \\ \text{F} \end{array}$	 Octaédrica

bipirámide

GEOMETRÍA SEGÚN LA TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

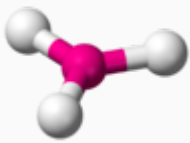
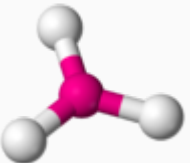
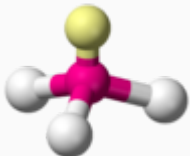
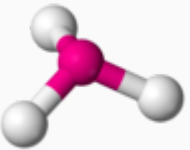
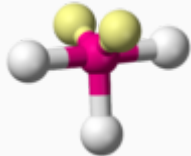
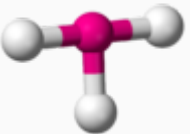
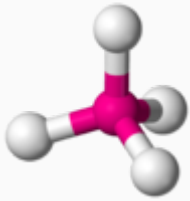
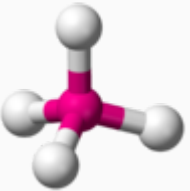
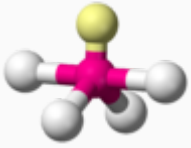
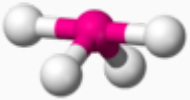
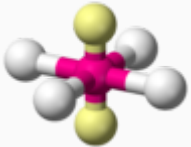
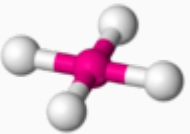
Tipo de molécula	Forma	Geometría electrónica	Geometría Molecular	Ejemplos
AM_1N_0	<u>Molécula diatómica</u>			HF; O ₂
AM_2N_0	<u>Lineal</u>			BeCl ₂ ; HgCl ₂ ; CO ₂
AM_2N_1	<u>Angular</u>			SO ₂ ; O ₃
AM_2N_2	<u>Angular</u>			H ₂ O
AM_2N_3	<u>Lineal</u>			XeF ₂ ; I ₃ ⁻

A: Átomo central

M: Átomo vecino o ligando

N: Par de electrones aislados o no compartidos

GEOMETRÍA SEGÚN LA TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

AM_3N_0	<u>Triangular plana</u>			$BF_3; SO_3; CO_3^{2-}$
AM_3N_1	<u>Pirámide trigonal</u>			$NH_3; PCl_3$
AM_3N_2	<u>Forma de T</u>			$ClF_3; BrF_3$
AM_4N_0	<u>Tetraédrica</u>			$CH_4; PO_4^{-3}; SO_4^{-4}$
AM_4N_1	<u>Balancín</u>			SF_4
AM_4N_2	<u>Cuadrada plana</u>			XeF_4

GEOMETRÍA SEGÚN LA TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA







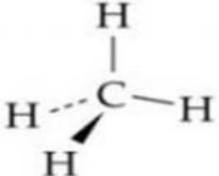

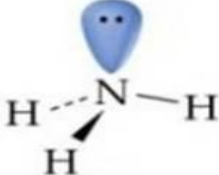
AM_5N_0	<u>Bipirámide trigonal</u>			PCl_5
AM_5N_1	<u>Pirámide cuadrada</u>			$ClF_5; BrF_5$
AM_5N_2	<u>Pentagonal plana</u>			XeF_5
AM_6N_0	<u>Octaédrica</u>			SF_6

A: Átomo central

M: Átomo vecino o ligando

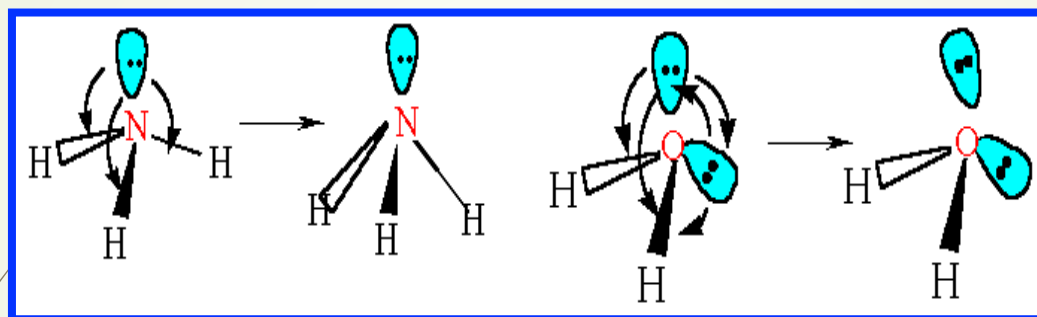
N: Par de electrones aislados o no compartidos

SÍNTESIS DE LAS GEOMETRÍAS MOLECULARES MÁS COMUNES

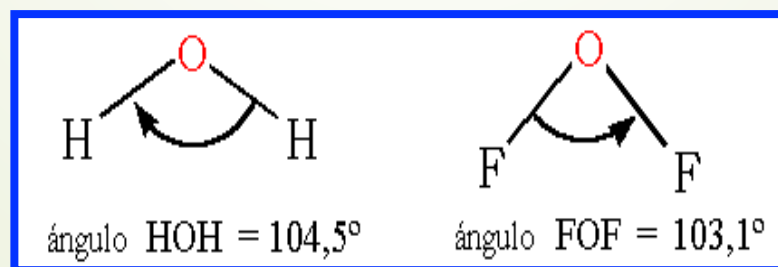
Átomos unidos	Pares libres	N° coordinación/ hibridación	Geometría	Ejemplo
2	0	2	 Lineal	$O=C=O$
3	0	3	 Triangular	
2	1	4	 Tetraédrica	
3	1	4	 Pirámide trigonal	
2	2	4		

Ángulos de enlace y Geometría

Influencia de pares de electrones no enlazantes:



Influencia de átomos de distinta electronegatividad:



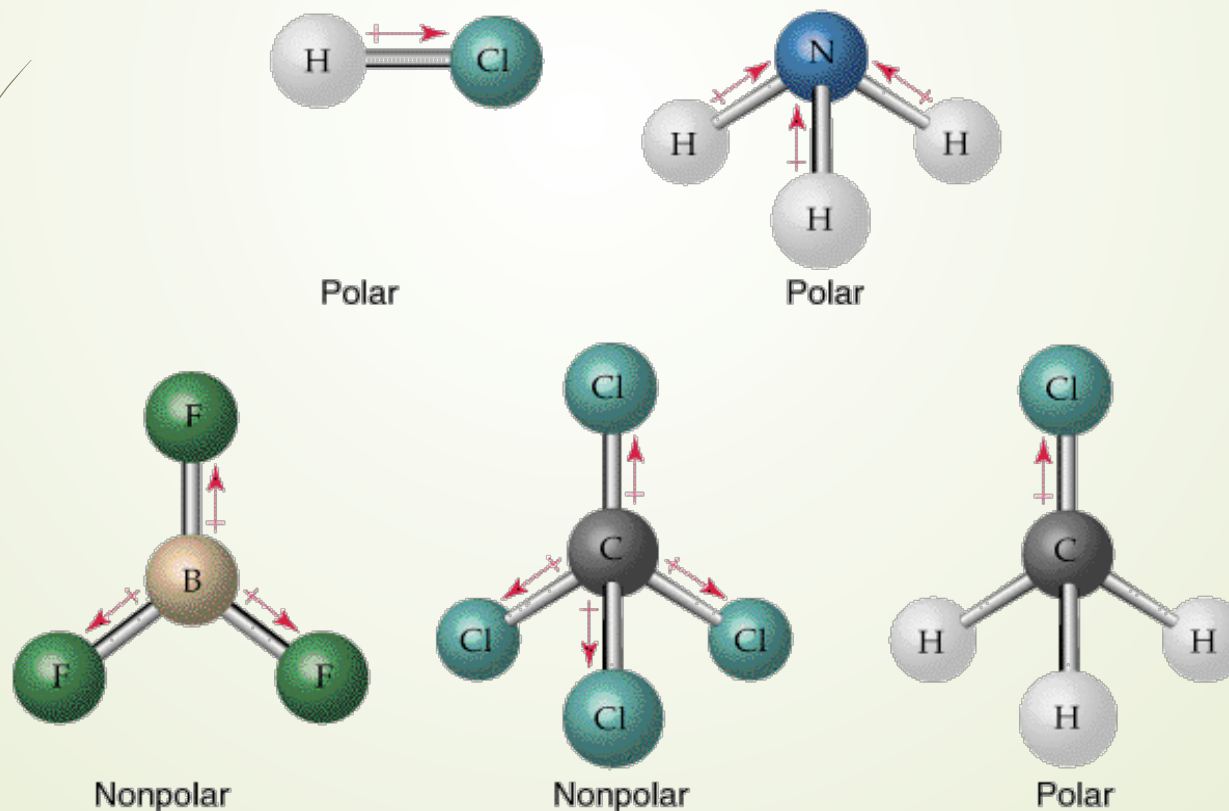
POLARIDAD

La electronegatividad es una medida de la fuerza de atracción de un átomo sobre los electrones de un enlace. Un enlace covalente polar es una unión entre dos átomos con cargas eléctricas parciales que surgen de su diferencia de electronegatividad.

La presencia de cargas parciales da origen a un momento eléctrico dipolar.

Para determinar si una molécula es polar, es necesario conocer dos cosas:

- 1- La polaridad de los enlaces de la molécula.
- 2- La geometría molecular



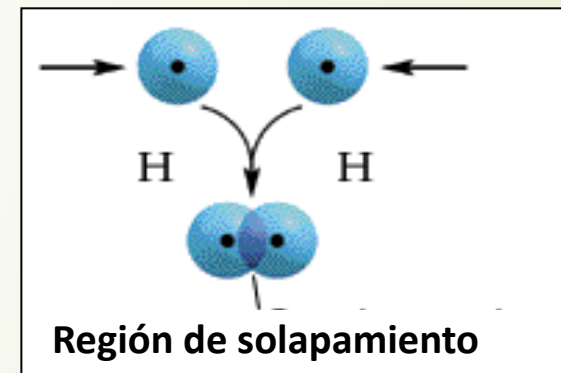
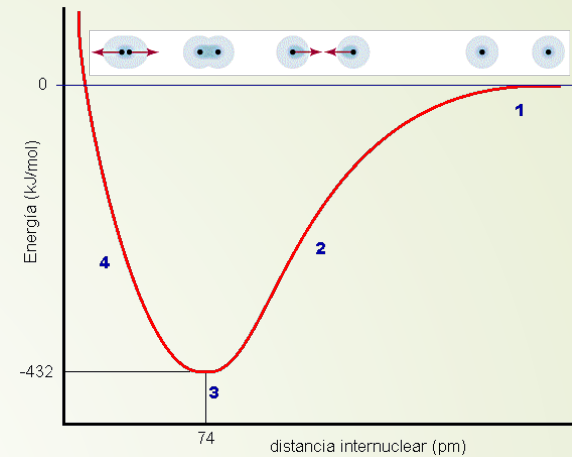
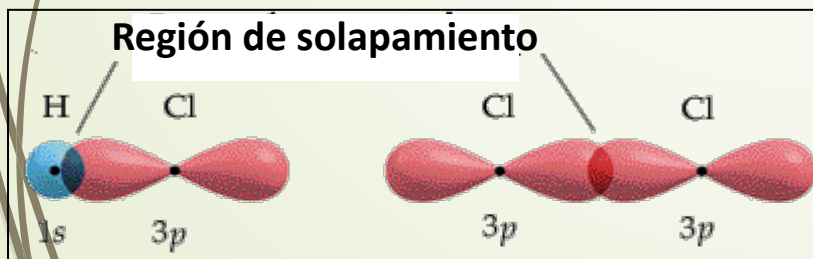
TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

Esta teoría es una descripción de la mecánica cuántica respecto de la **distribución de los electrones en los enlaces**. Proporciona una forma de calcular los valores numéricos de los ángulos y las longitudes del enlace.

Describe la formación del enlace covalente por el solapamiento de orbitales atómicos.

La fusión de los dos orbitales atómicos se conoce como superposición o solapamiento. El enlace se forma cuando se solapan los orbitales atómicos. Los dos electrones se comparten en el orbital solapado.

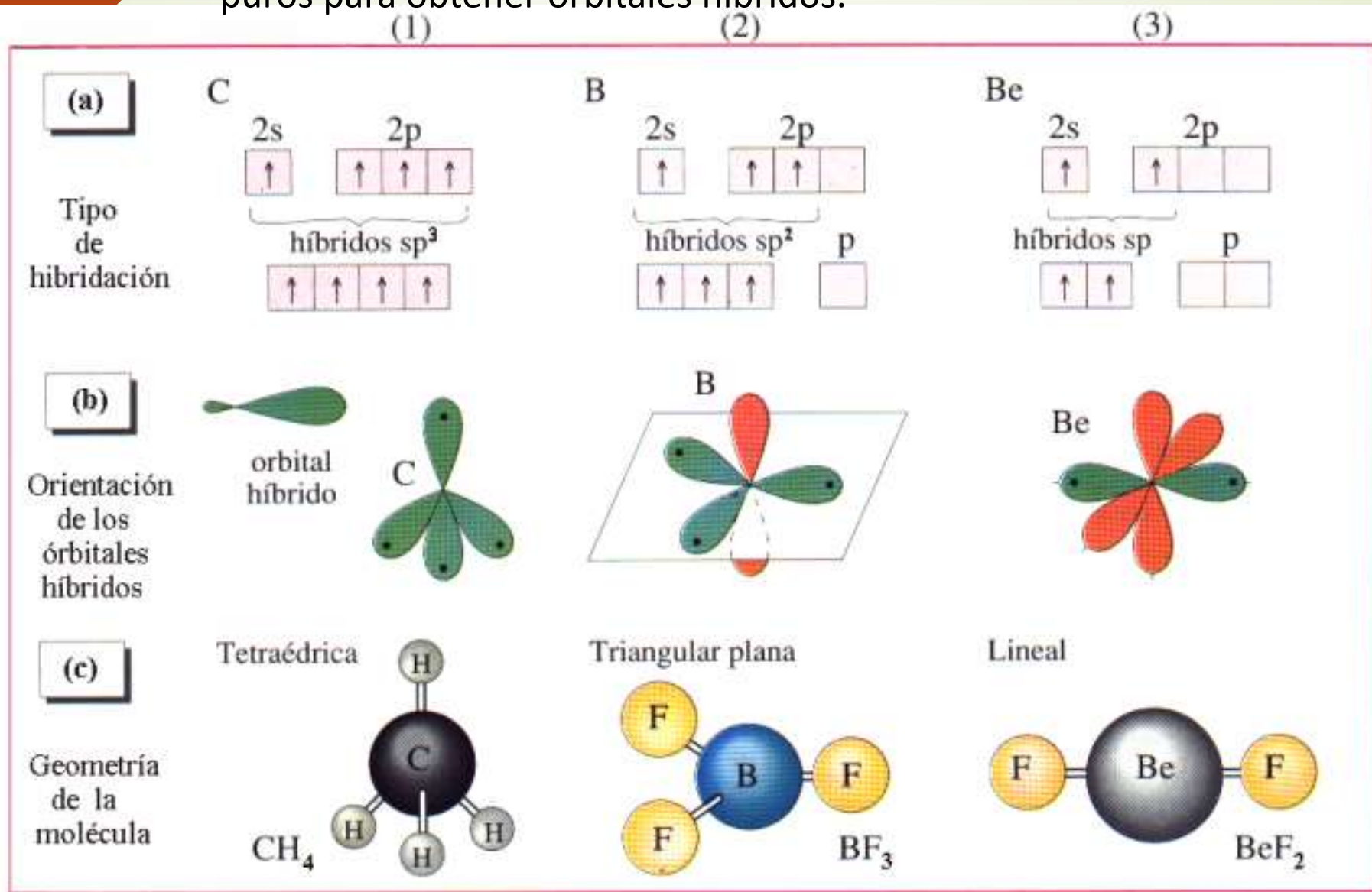
La distribución de electrones resultante de forma de cilindro alargado, con una acumulación de densidad electrónica entre los núcleos, se denomina un **enlace σ** .



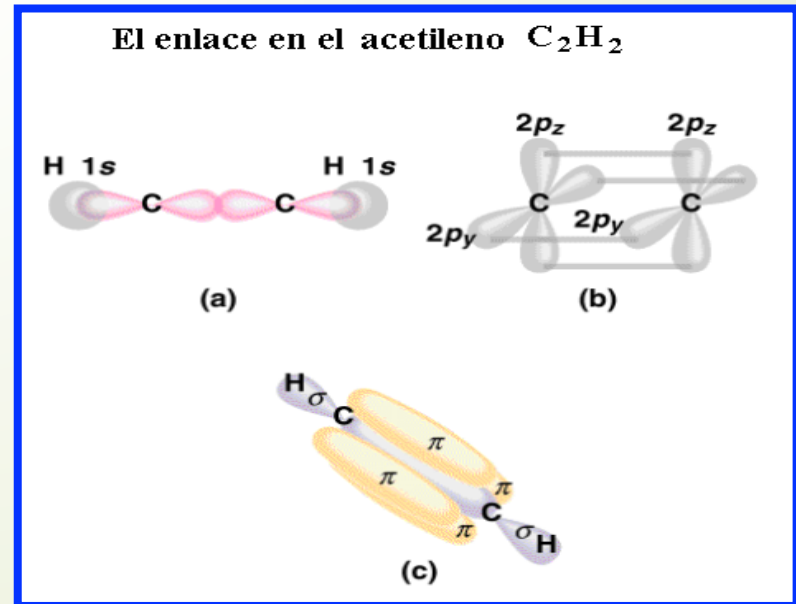
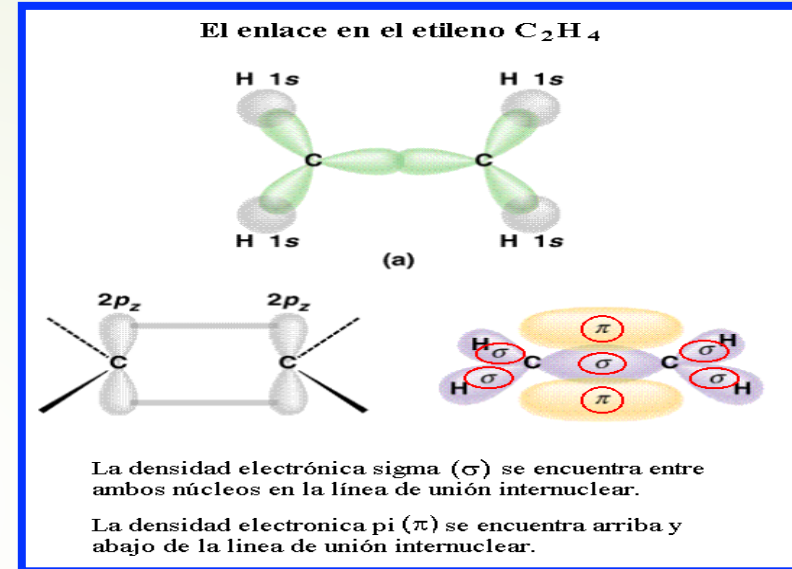
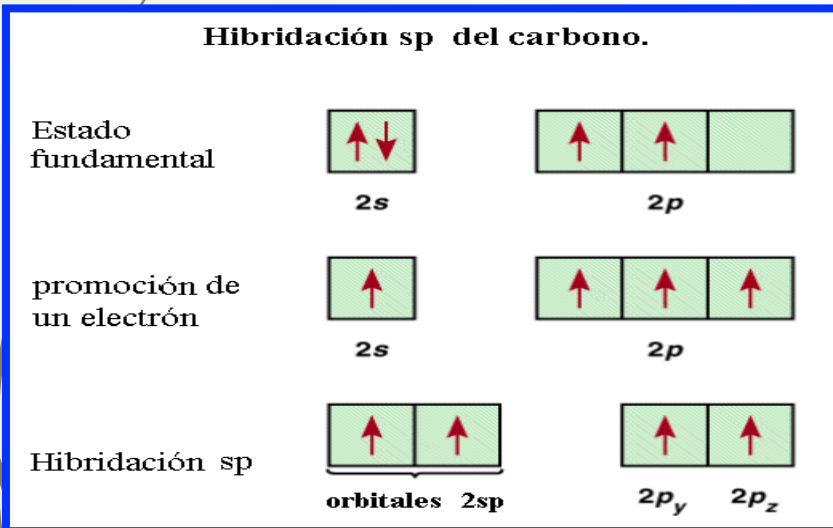
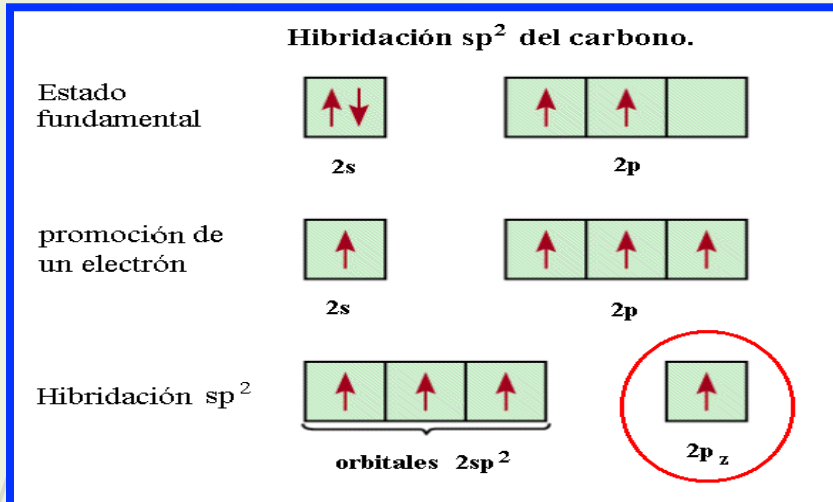
En el caso de la molécula de N_2 , sólo uno de los tres orbitales "p" con un electrón puede superponerse extremo con extremo para formar un enlace σ . Los otros dos orbitales "p" son perpendiculares y por ende sólo podrán interactuar lateralmente originando **enlaces π** (en este caso, dos.)

HIBRIDACIÓN DE ORBITALES

Combinación algebraica de las ecuaciones de onda de orbitales atómicos puros para obtener orbitales híbridos.



Otras hibridaciones posibles para el carbono



Predicción de la hibridación del átomo central (m + n)

1. Escriba la estructura de Lewis de la molécula.
2. Cuente el número de pares de electrones libres y el de átomos unidos al átomo central.

N° de átomos vecinos (m)

+

**N° de pares de
electrones libres (n)**

2

Hibridación

Ejemplos

BeCl₂

3

sp²

BF₃

4

sp³

CH₄, NH₃, H₂O

5

sp³d

PCl₅

6

sp³d²

SF₆



COMPLETE LA SIGUIENTE TABLA

COMPUESTO	TEORÍA DE LEWIS	TRPECV	TEV	RESONANCIA	POLAR
SO_3					
NH_3					



Resolver Ejercicios N° 8, 9, 11 y 12



BIBLIOGRAFÍA

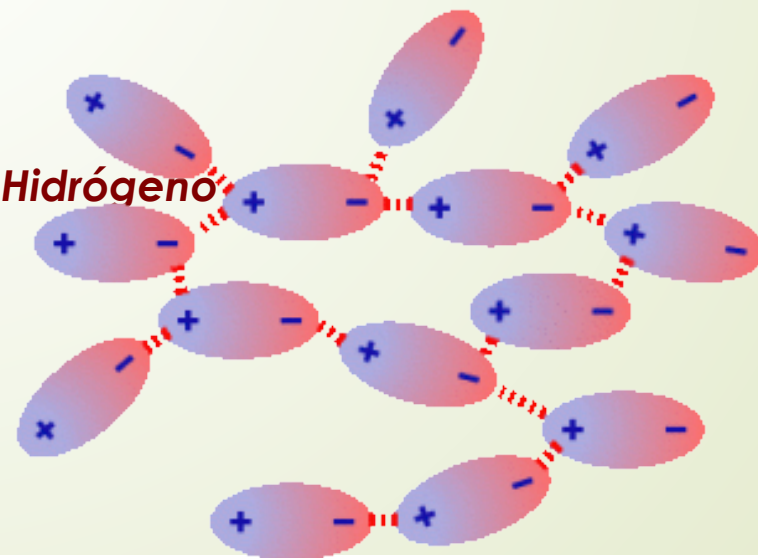
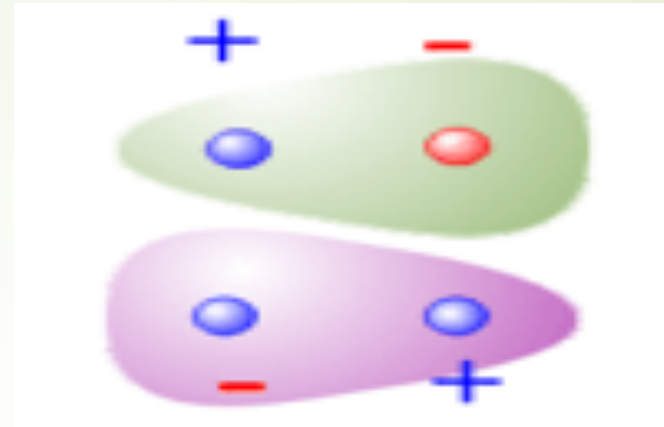
- Atkins, P. Jones, L. 2012. Principios de Química. Quinta edición. Ed. Panamericana.
- Brown, LeMay y Bursten. 1998. Química: La Ciencia Central. Séptima edición. Ed. Prentice Hall
- Chang, R. 1998. Química General. Sexta edición. Ed. Mc Graw Hill.
- Kotz, J. Treichel, M. 2003. Química y reactividad química. Quinta edición. Ed. Thomson.
- Petrucci, R. Harwood, W. Herring F. 2002. Química General. Vol. I y II. Octava edición. Ed. Prentice Hall.
- Whiten, Davis y Peck. 2015. Química General. Octava edición. Ed. Mc Graw Hill.

Fuerzas Intermoleculares

- ▶ Aparecen debido a la interacción entre una molécula/especie/ión con sus vecinos.
 - ▶ Se diferencian de las Fuerzas **Intramoleculares** o **interatómicas**, las cuales describen el enlace químico entre átomos.
- ▶ Permiten explicar el comportamiento macroscópico de la materia.
 - ▶ Existen tanto fuerzas de atracción como de repulsión.
- ▶ Es importante determinar la polarizabilidad:
 - ▶ la facilidad con la cual se puede distorsionar la distribución electrónica de un átomo o molécula neutra para generar un dipolo.

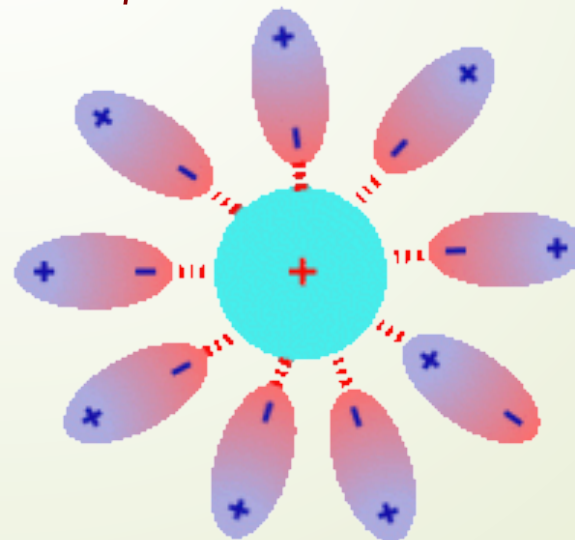
Fuerzas Intermoleculares (electrostáticas)

- ▶ Fuerzas de interacción con iones
 - ▶ Ión - dipolo inducido
 - ▶ Ión - dipolo
 - ▶ Ión - ión
- ▶ Fuerzas de Van der Waals
 - ▶ Dispersión de London (Dipolo inducido-dipolo inducido)
 - ▶ Dipolo - dipolo inducido
 - ▶ Dipolo - dipolo
 - ▶ **Fuerzas o interacciones tipo Puente de Hidrógeno**



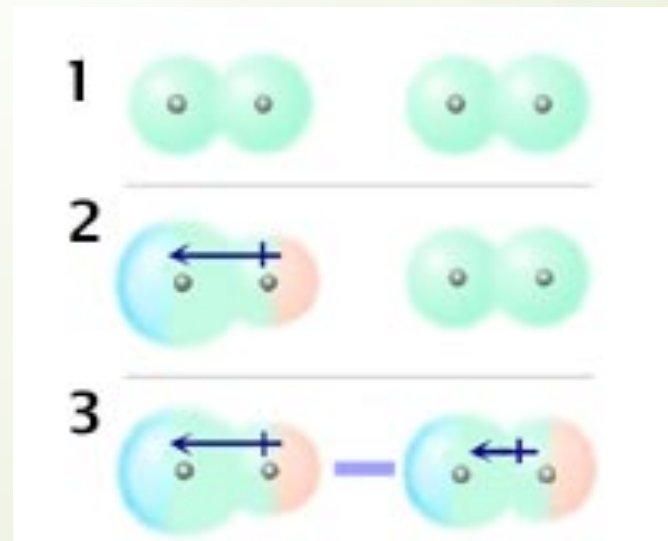
Fuerzas de Interacción con Iones

- ▶ Cuando una carga puntual (ión) interacciona con moléculas neutras, induce un dipolo permanente en la nube electrónica de la molécula.
 - ▶ *Esta interacción es mayor mientras más grande sea la carga neta del anión/catión en cuestión.*
 - ▶ *Este tipo de fuerzas es el que permite explicar la disolución de compuestos iónicos en solventes polares como el agua.*



Fuerzas de Van der Waals

- ▶ Las nubes electrónicas de las moléculas pueden polarizarse generando pequeños dipolos.
 - ▶ Los dipolos instantáneos dan origen a las fuerzas de dispersión de London.
 - ▶ Los dipolos se ordenan de forma tal de maximizar la atracción electrostática.
- ▶ Estas interacciones son las más débiles de todas las fuerzas intermoleculares.



Fuerzas Puente de Hidrógeno

- ▶ Son un tipo de interacción dipolo – dipolo de muy alta intensidad.
 - ▶ Solamente aparecen entre moléculas en las cuales hay un átomo de **H** enlazado covalentemente con un átomo muy electronegativo (**F, O y N**).

