

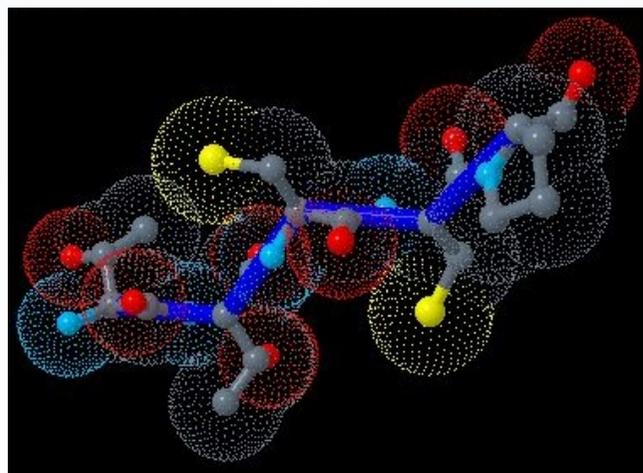


UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



FCEN

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
Naturaleza – Ciencia - Humanismo



UNIONES QUÍMICAS

2019



SÍNTESIS DE LA PRESENTACIÓN

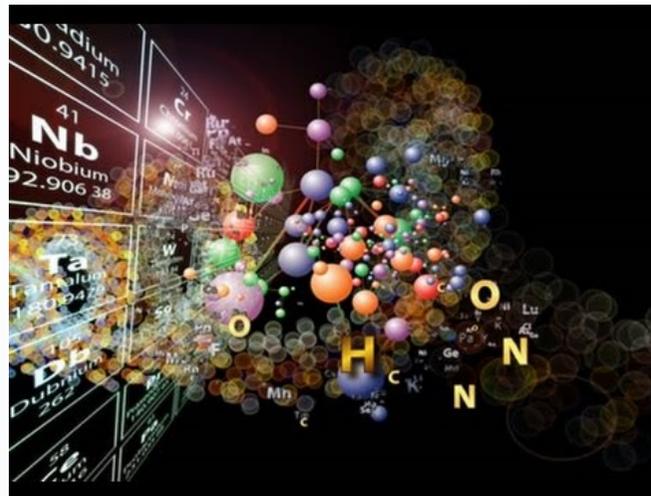


Enlace Químico
Clasificación
Propiedades
Teoría de Lewis
Formación de enlace iónico
Enlace covalente
Estructuras de Lewis
Resonancia
Carga formal
Teoría de la Repulsión
Teoría del Enlace de Valencia
Aplicación
Bibliografía

ENLACE QUÍMICO

El enlace químico es la unión entre átomos

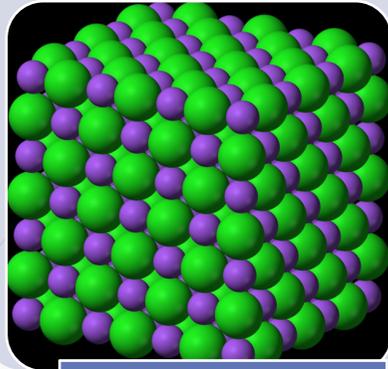
Es un proceso por el cual los átomos ganan, ceden o comparten electrones de la capa de valencia (la capa más externa), hasta conseguir la configuración electrónica propia del gas noble más próximo.



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.

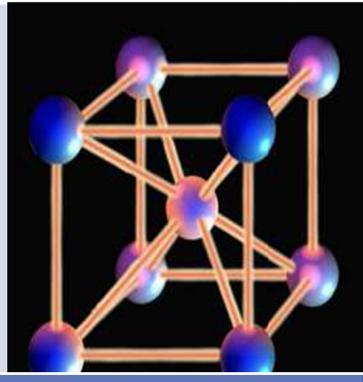


ENLACE IÓNICO

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

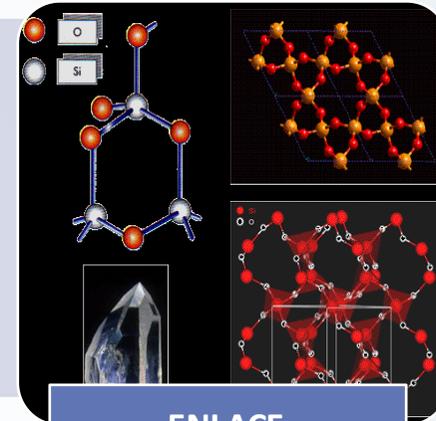


ENLACE METÁLICO

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.

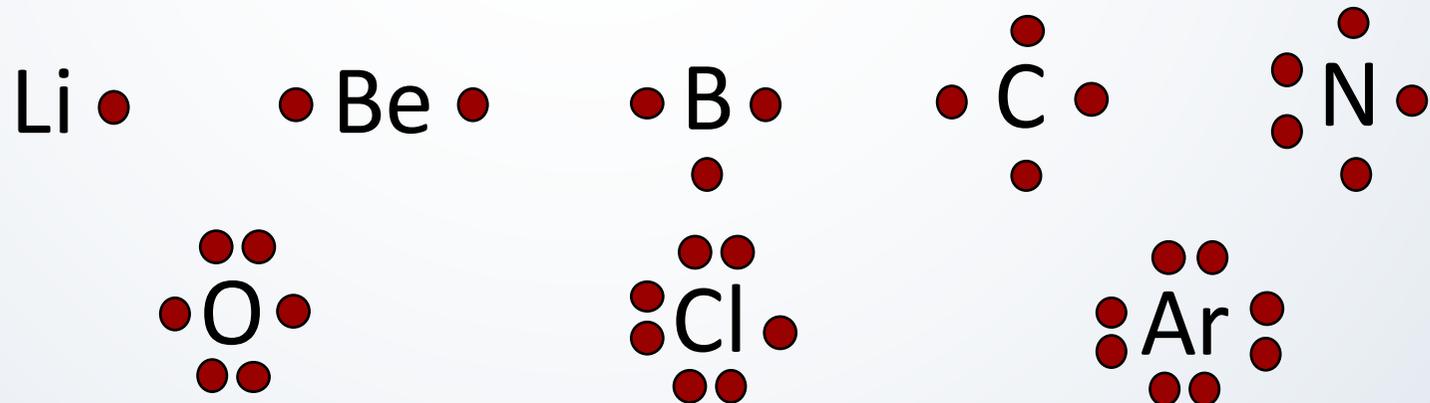
VISIÓN GENERAL DE LA TEORÍA DE LEWIS

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



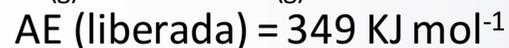
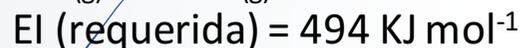
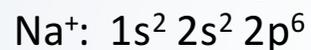
FORMACIÓN DE UN ENLACE IÓNICO

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

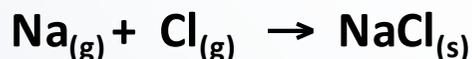
Consideraciones:

- 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.

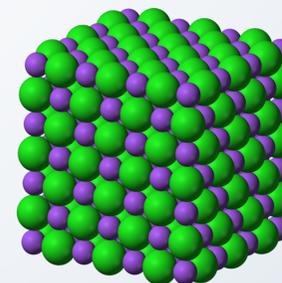
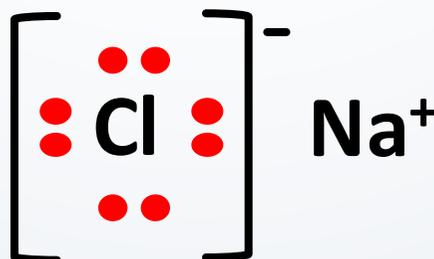
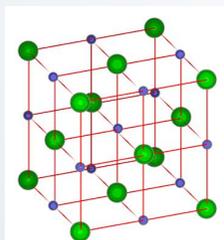
Pasos:



$$\text{Cambio neto de energía: } 494 \text{ KJ mol}^{-1} - 349 \text{ KJ mol}^{-1} = 145 \text{ KJ mol}^{-1}$$



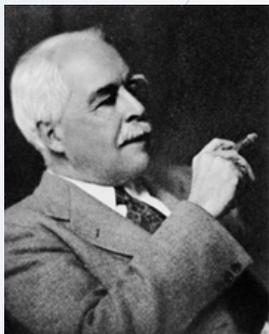
$$\text{Cambio neto de energía para todo el proceso: } 145 \text{ KJ mol}^{-1} - 787 \text{ KJ mol}^{-1} = -642 \text{ KJ mol}^{-1}$$



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

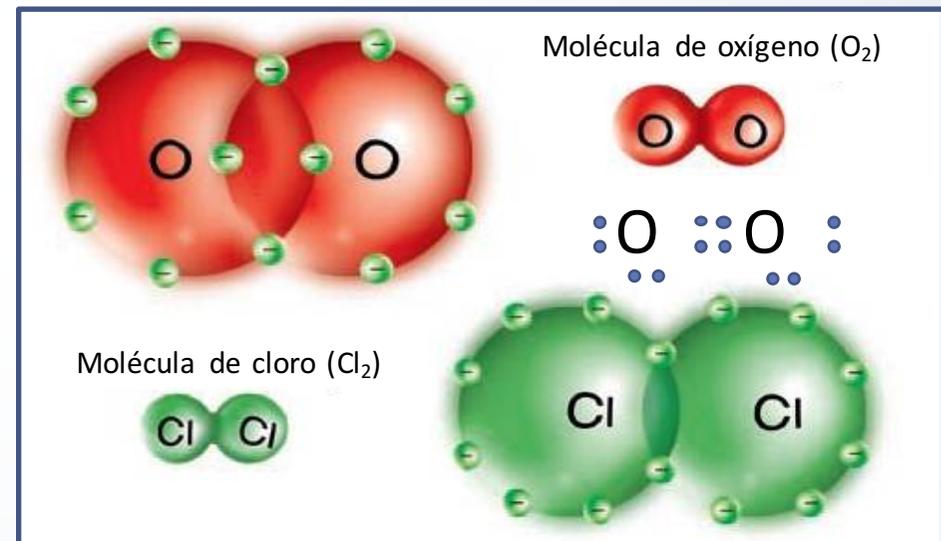
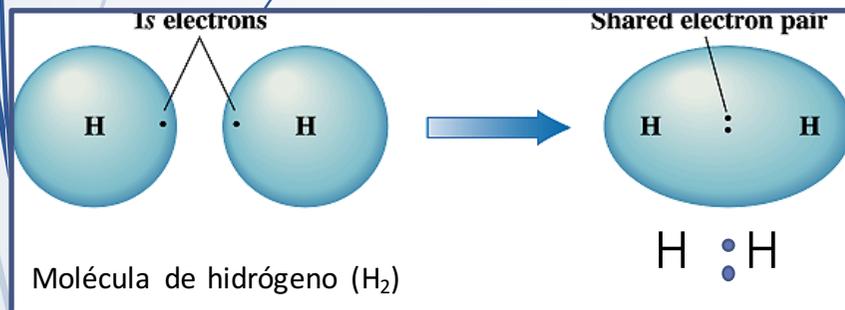
Tipos de pares de electrones:

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

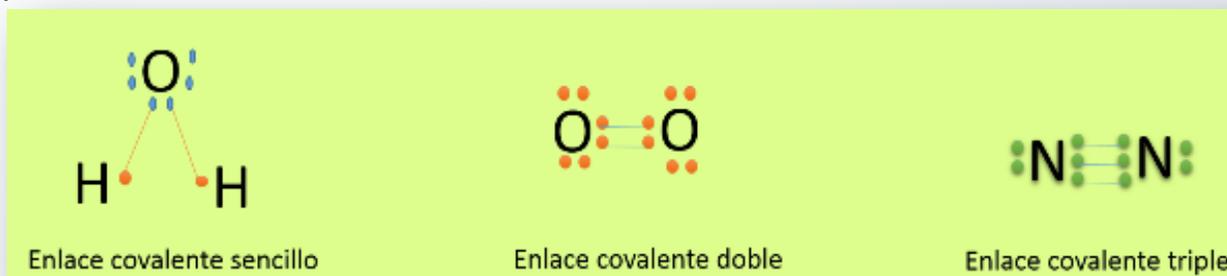
1- Se suman los electrones de valencia de los átomos presentes en la molécula.

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 .

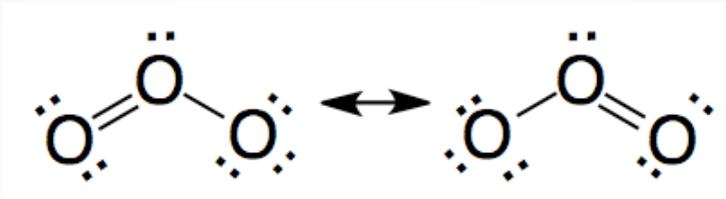
3- Los electrones se disponen de a pares alrededor del átomo central, en el caso de quedar electrones, se colocan, siempre de a pares, alrededor de los vecinos, y si aún quedaran electrones se acomodan sobre el átomo central como electrones libres.

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.

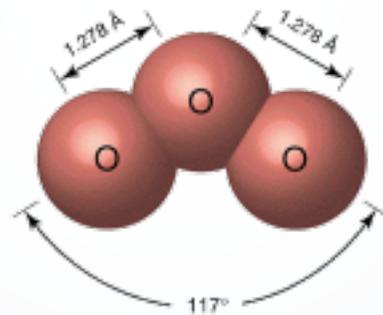


RESONANCIA

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.

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

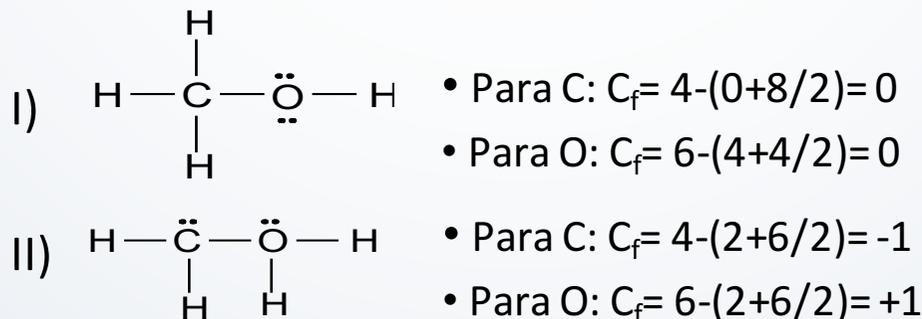
V= n° de e⁻ de valencia

N= n° de e⁻ no compartidos

C= n° 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:

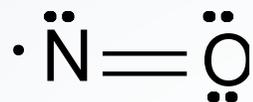


← **Correcta**

EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO

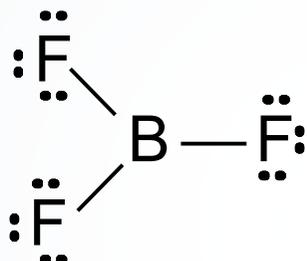
Hay tres clases de excepciones a la regla del Octeto:

- Especies con n° impar de electrones.



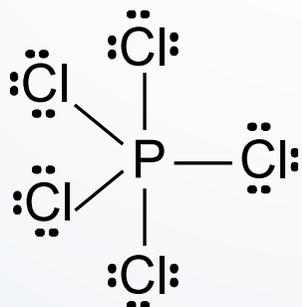
Otros ejemplos: ClO_2 , NO_2

- 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.

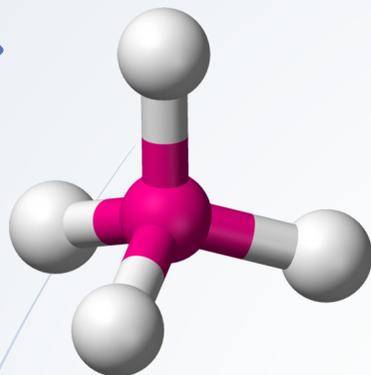


Ejercitación:

Realice las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos:

- BeCl_2
- CO_2
- BF_3
- CH_4
- H_2O
- NH_3
- SO_2
- SO_3
- PCl_5
- 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.

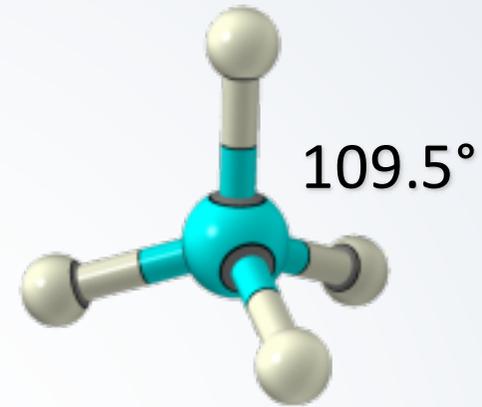
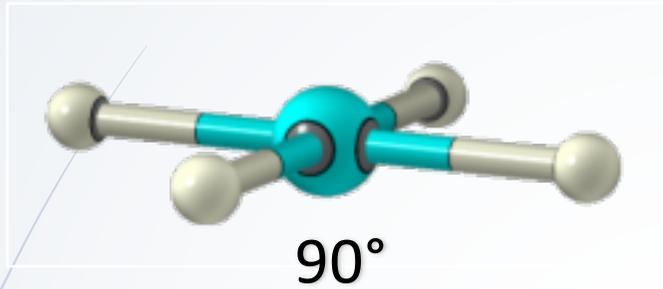
Predicción de la Geometría Molecular

- 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.

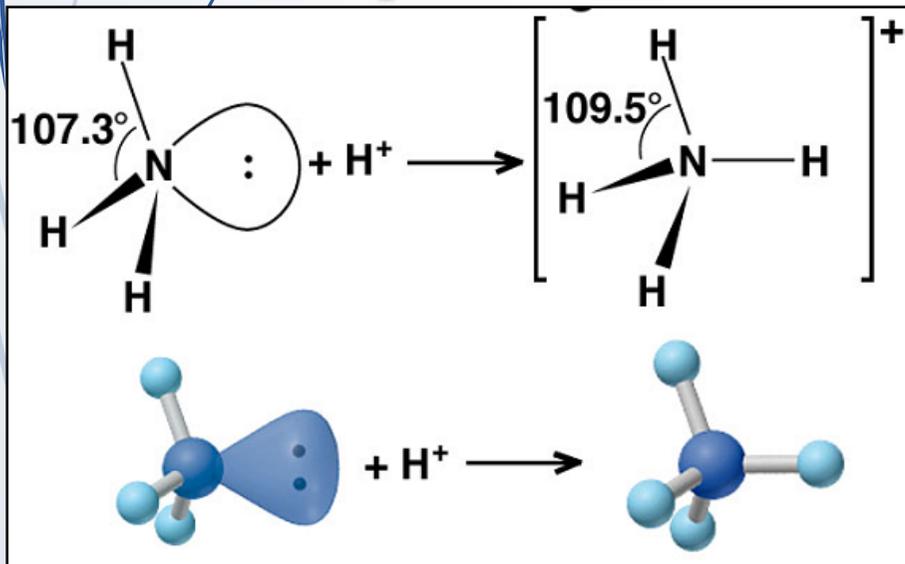


PNC= Par no compartido; PE= Par compartido (enlace)

EJEMPLOS DE Geometría Molecular

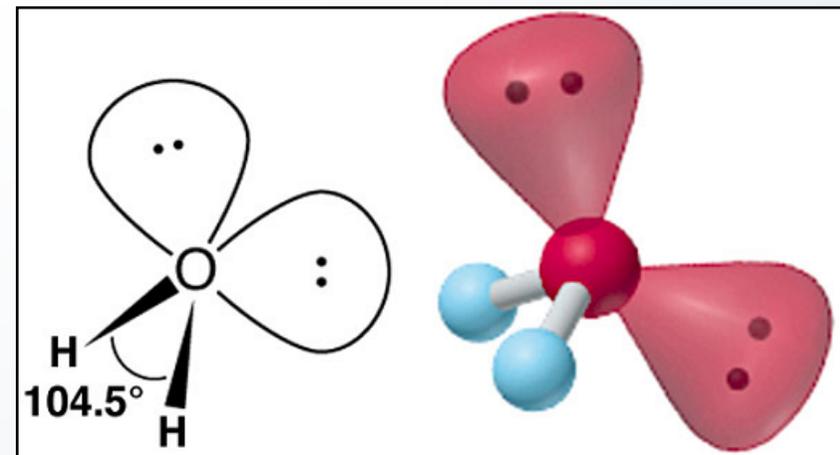


¡Menor repulsión!
Estructura correcta



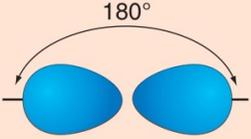
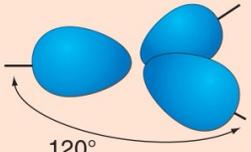
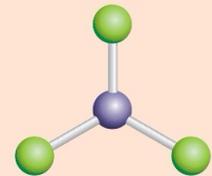
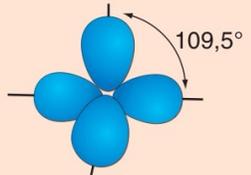
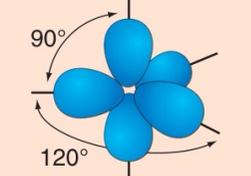
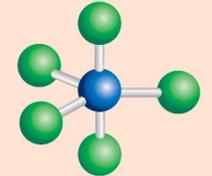
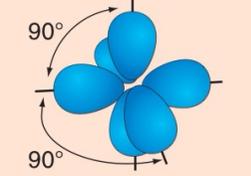
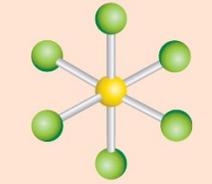
Trigonal piramidal

Tetraédrica



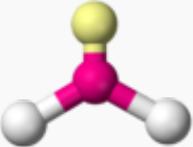
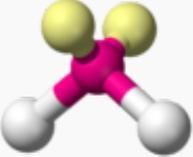
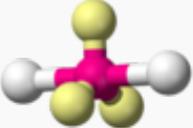
Angular o V

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		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	 Tetraédrica
AM ₅	PCl ₅	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \quad \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{—P—}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \quad \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$	5		$\begin{array}{c} \text{Cl} \\ \\ \text{Cl—P—Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$	 Pirámide trigonal
AM ₆	SF ₆	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \quad \quad \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{—S—}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \quad \quad \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \end{array}$	6		$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F—S—F} \\ / \quad \backslash \\ \text{F} \quad \text{F} \end{array}$	 Octaédrica

bipirámide

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

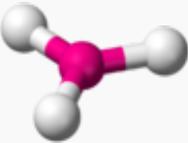
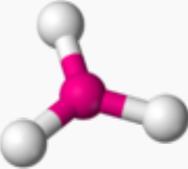
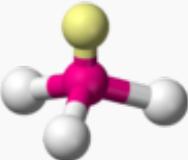
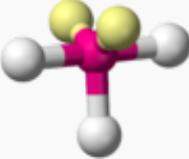
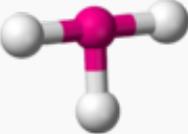
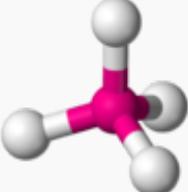
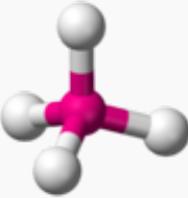
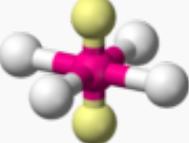
Tipo de molécula	Forma	Geometría electrónica	Geometría Molecular	Ejemplos
AM_1N_0	Molécula diatómica			HF; O ₂
AM_2N_0	Lineal			BeCl ₂ ; HgCl ₂ ; CO ₂
AM_2N_1	Angular			SO ₂ ; O ₃
AM_2N_2	Angular			H ₂ O
AM_2N_3	Lineal			XeF ₂ ; I ₃ ⁻

A: Átomo central

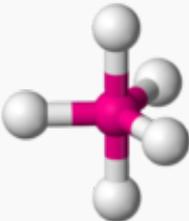
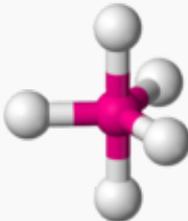
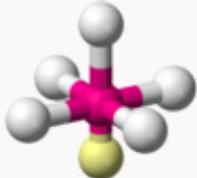
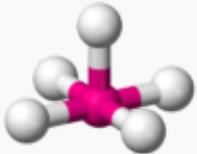
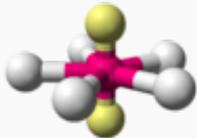
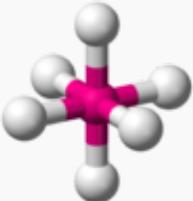
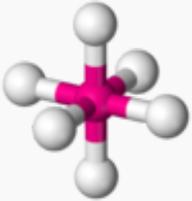
M: Átomo vecino o ligando

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

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

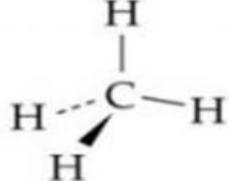
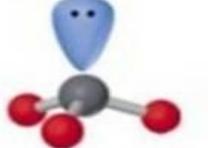
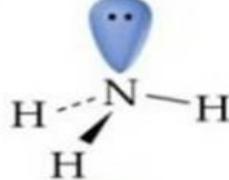
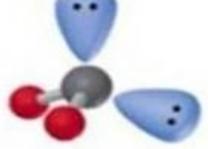
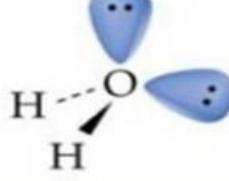
AM_5N_0	Bipirámide trigonal			PCl_5
AM_5N_1	Pirámide cuadrada			$ClF_5; BrF_5$
AM_5N_2	Pentagonal plana			XeF_5
AM_6N_0	Octaédrica			SF_6

A: Átomo central

M: Átomo vecino o ligando

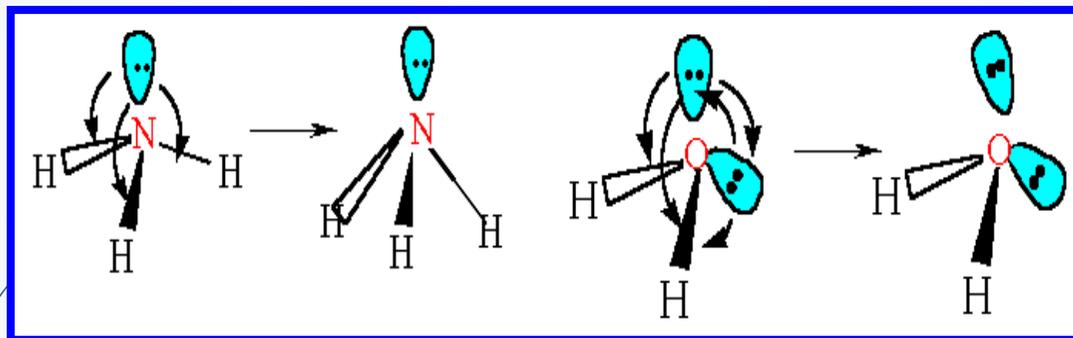
N: Par de electrones aislados o no compartidos

SÍNTESIS DE LAS GEOMETRÍAS MOLECULARES MÁS COMUNES

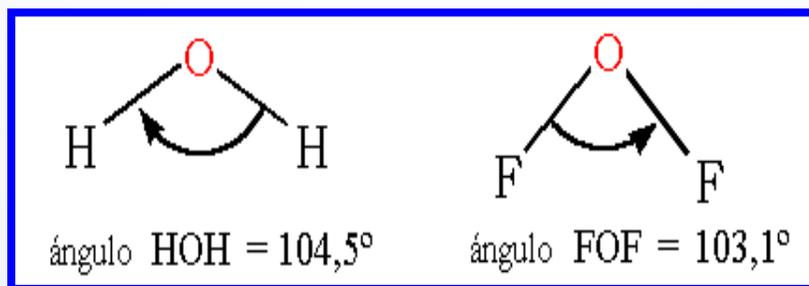
Átomos unidos	Pares libres	Nº coordinación/hibridación	Geometría	Ejemplo
2	0	2	 Lineal	<chem>O=C=O</chem>
<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="font-size: 3em; margin-right: 10px;">[</div> <div style="text-align: center;"> 3 2 </div> <div style="font-size: 3em; margin-left: 10px;">]</div> </div>	0	3	 Triangular	
	1		 Angular	
<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="font-size: 3em; margin-right: 10px;">[</div> <div style="text-align: center;"> 4 3 2 </div> <div style="font-size: 3em; margin-left: 10px;">]</div> </div>	0	4	 Tetraédrica	
	1		 Pirámide trigonal	
	2		 Angular	

Ángulos de enlace y Geometría

Influencia de pares de electrones no enlazantes:



Influencia de átomos de distinta electronegatividad:



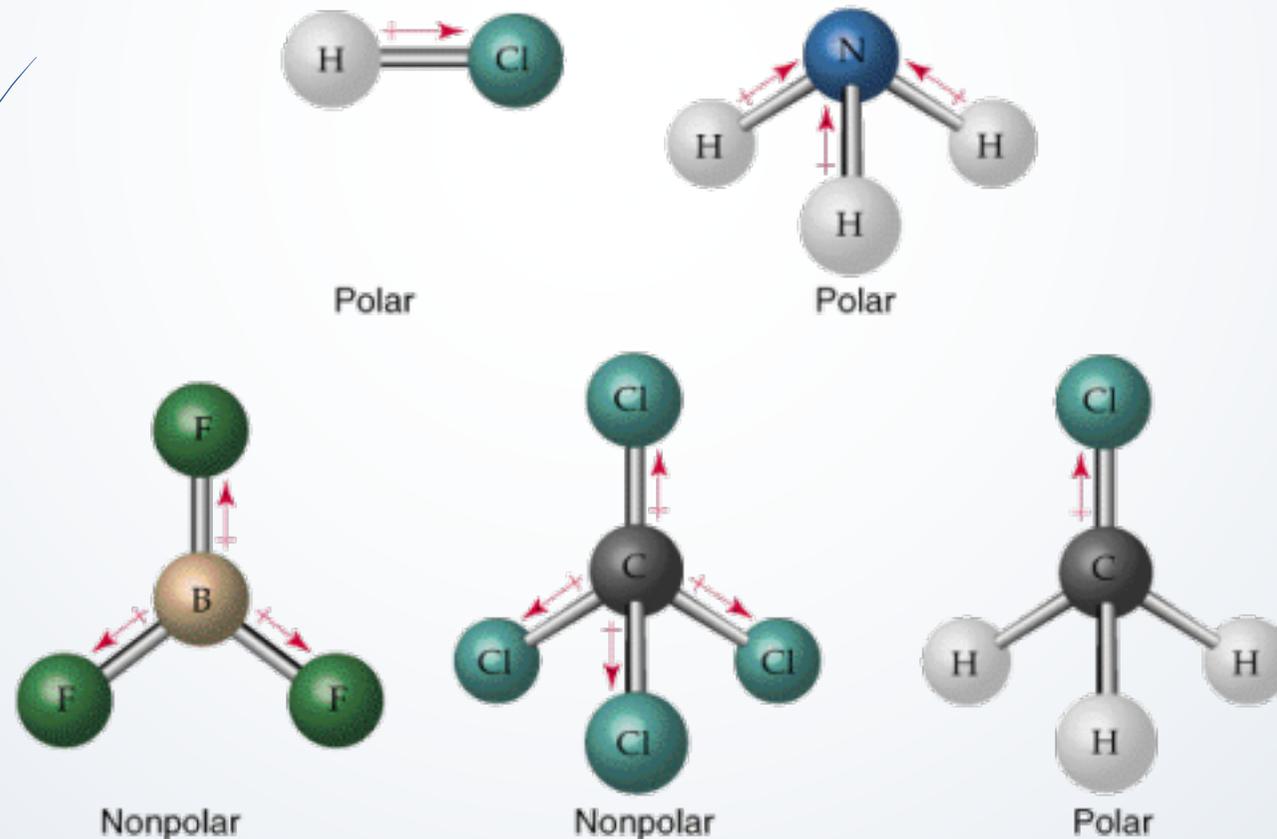
POLARIDAD

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

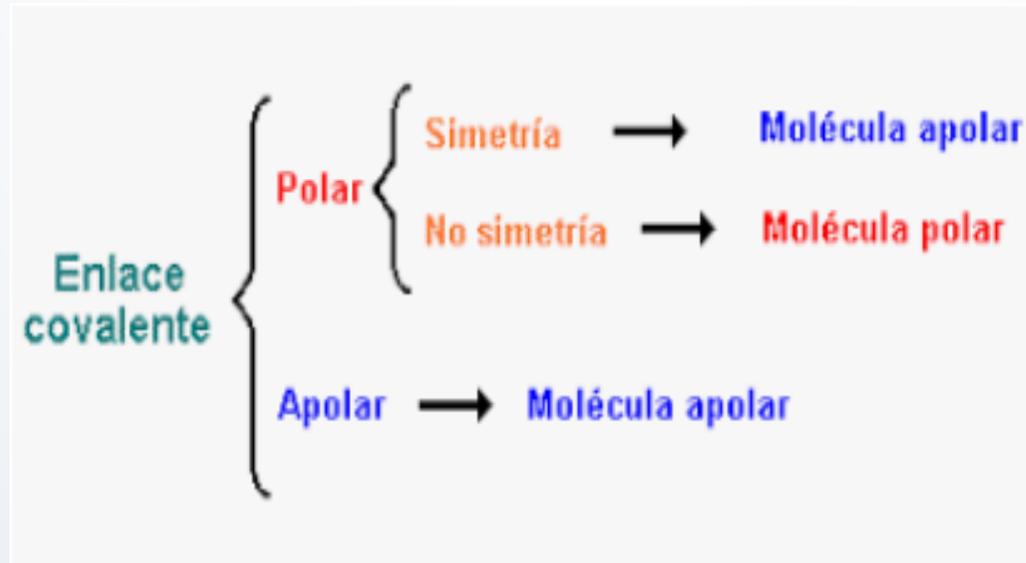


¿Cómo determinar si una molécula es polar o no polar?

1-Mirar el tipo de átomos que componen la molécula y sus enlaces. Cada enlace compuesto por átomos diferentes genera un vector dipolo, el cual apunta hacia el átomo más electronegativo.

2-Una **molécula** tendrá tantos vectores como enlaces covalentes tenga.

Si los vectores no se anulan, entonces la **molécula** será **polar**. De ahí que es importante ver la geometría de la molécula



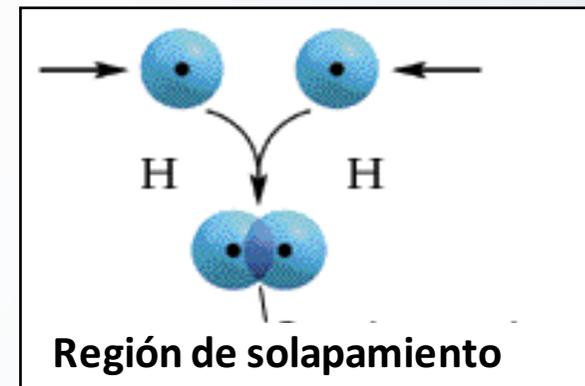
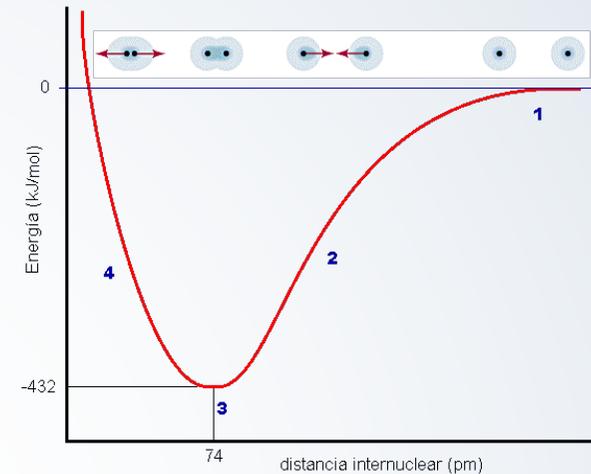
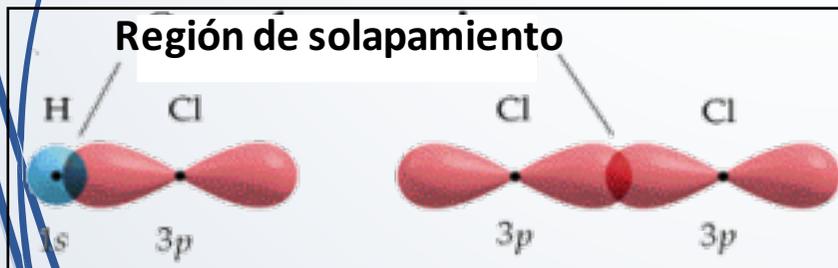
TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

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.

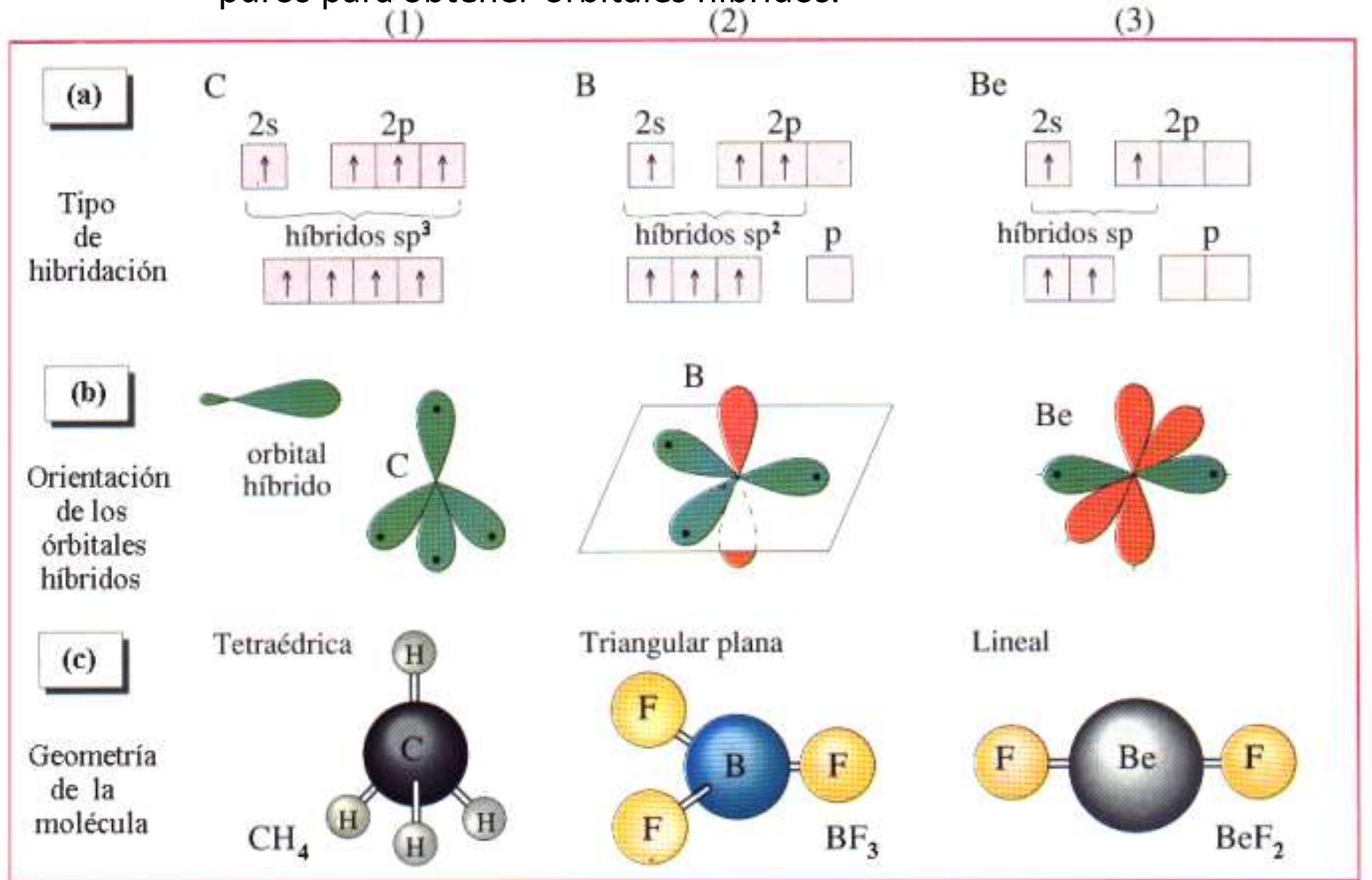
La distribución de electrones resultante de forma de cilindro alargado, con una acumulación de densidad electrónica entre los núcleos, se denomina un **enlace σ** .



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.)

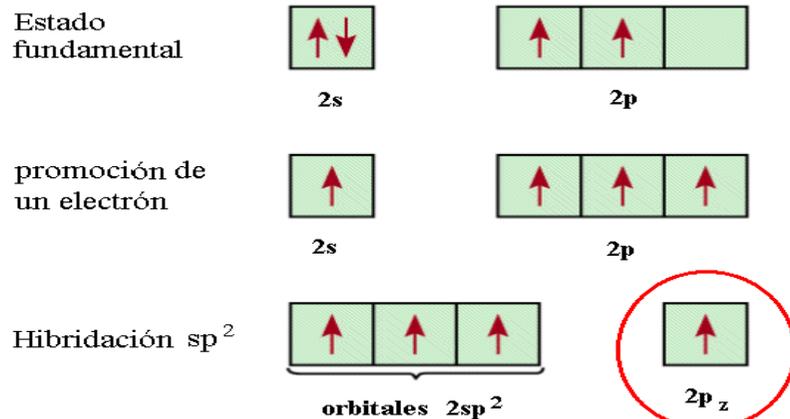
HIBRIDACIÓN DE ORBITALES

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

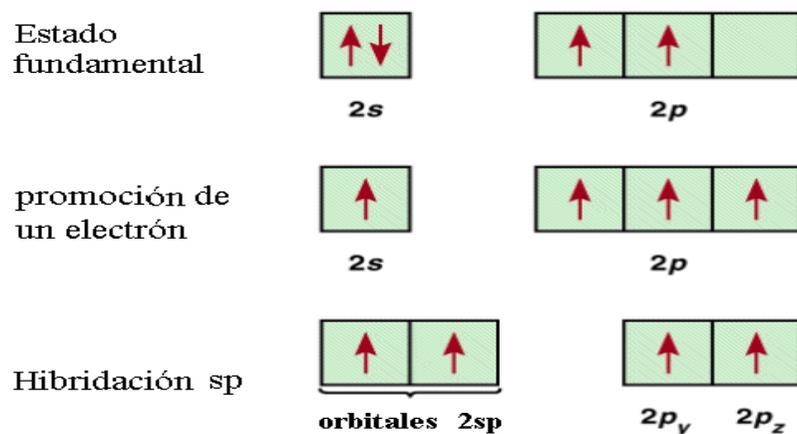


Otras hibridaciones posibles para el carbono

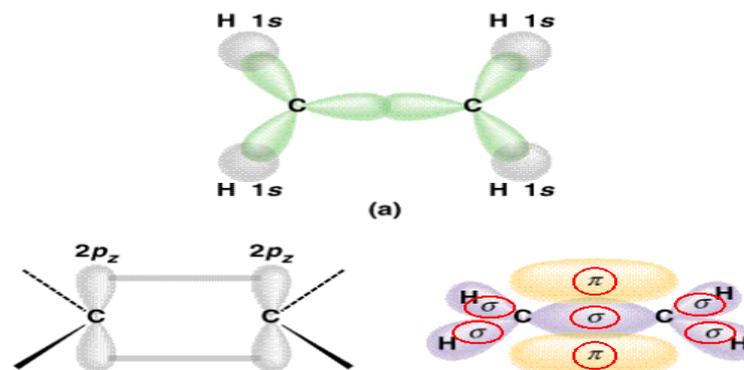
Hibridación sp^2 del carbono.



Hibridación sp del carbono.



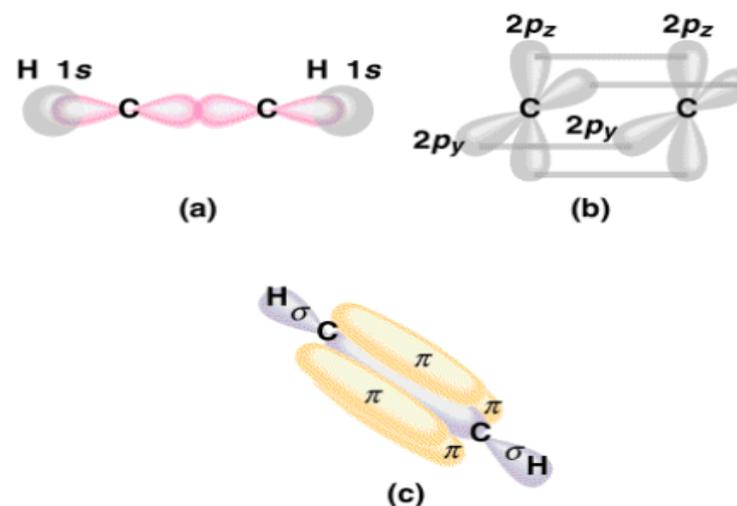
El enlace en el etileno C_2H_4



La densidad electrónica sigma (σ) se encuentra entre ambos núcleos en la línea de unión internuclear.

La densidad electrónica pi (π) se encuentra arriba y abajo de la línea de unión internuclear.

El enlace en el acetileno C_2H_2



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

sp

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
O_3					
NH_3					

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.