

# 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

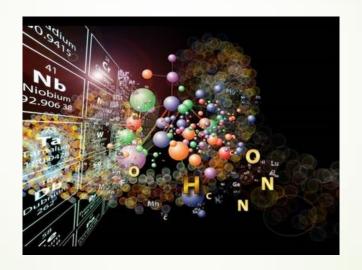
**Aplicación** 

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.

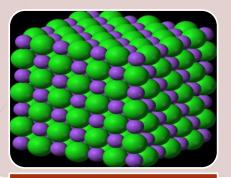
# **ENLACE QUÍMICO**

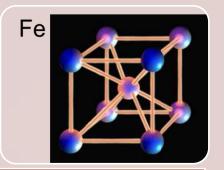
**Es la unión entre átomos.** Cuando se forma un enlace químico entre dos átomos, la disposición resultante de los dos núcleos y sus electrones tiene una energía menor que la energía total de los átomos separados.

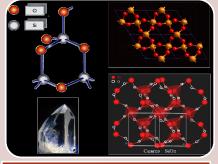












#### **ENLACE IÓNICO**

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.

#### **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 dicha situación.
- Al fundirse también se liberan de sus posiciones fijas los iones, pudiendo conducir la electricidad.

#### COMPUESTOS METÁLICOS

- Temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
- Son sólidos a temperatura ambiente (excepto el mercurio que es líquido).
- Buenos conductores de la electricidad (nube de electrones deslocalizada) y 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.
- En general son duros (resistentes al rayado).
- La mayoría se oxida con facilidad.

#### **COMPUESTOS COVALENTES**

#### **Redes covalentes**

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

#### **Compuestos moleculares**

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

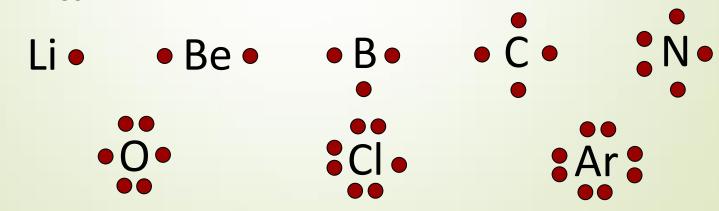
#### VISIÓN GENERAL DE LA TEORÍA DE LEWIS

- 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 algunos 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:

Na:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 

Na<sup>+</sup>: 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup>

 $Na_{(g)} \rightarrow Na_{(g)}^+ + 1 e^-$ 

El (requerida) = 494 KJ mol<sup>-1</sup>

Cl:  $1 s^2 2 s^2 2p^6 3 s^2 3p^5$ 

 $Cl^{-}$ : 1 s<sup>2</sup> 2 s<sup>2</sup> 2p<sup>6</sup> 3 s<sup>2</sup> 3p<sup>6</sup>

 $Cl_{(g)} + 1e^{-} = Cl_{(g)}^{-}$ 

AE (liberada) =  $349 \text{ KJ mol}^{-1}$ 

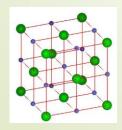
Cambio neto de energía:  $494 \text{ KJ mol}^{-1} - 349 \text{ KJ mol}^{-1} = 145 \text{ KJ mol}^{-1}$ 

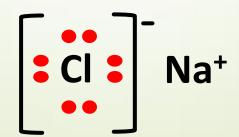
 $Na^+_{(g)} + Cl^-_{(g)} \rightarrow NaCl_{(s)}$ 

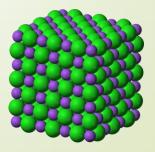
Energía liberada: 787 KJ mol<sup>-1</sup>

$$Na_{(g)} + Cl_{(g)} \rightarrow NaCl_{(s)}$$

Cambio neto de energía para todo el proceso: 145 KJ mol<sup>-1</sup> - 787 KJ mol<sup>-1</sup> = -642 KJ mol<sup>-1</sup>







# **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".

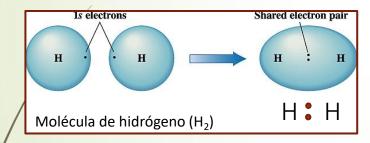
Los gases nobles presentan gran estabilidad química y existen como moléculas monoatómicas.

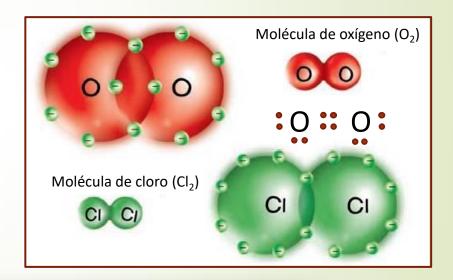
| <u>Z</u> | <u>Elemento</u> | Electrones por capa          |
|----------|-----------------|------------------------------|
| 2        | Helio           | 2                            |
| 10       | Neón            | 2, 8                         |
| 18       | Argón           | 2, 8, 8                      |
| 36       | Kriptón         | 2, 8, 18, 8                  |
| 54       | Xenón           | 2, 8, 18, 18, <mark>8</mark> |
| 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 át. unidos)
  - · enlaces sencillos
  - · enlaces dobles
  - · enlaces triples
- 2- Pares de e- no compartidos (ó par solitario)

#### **EJEMPLOS**





H<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>



### **ESTRUCTURAS DE LEWIS**

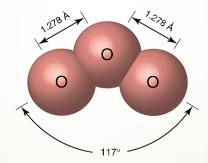
- 1- Se suman los electrones de valencia de los átomos presentes en la molécula. En el caso de un anión se añade un electrón por cada carga negativa y, se restan tantos electrones como cargas positivas tenga si se trata de un catión.
- 2- Se dibuja una estructura esquemática con los símbolos atómicos 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.

Desarrollar ejemplo: NaCl, CaF<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>

#### **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  $(C_6H_6)$ .

#### **EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO**

Hay tres clases de excepciones a la regla del Octeto:

Especies con n° impar de electrones.

Octetos incompletos.

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

Capas de valencia extendidas (Octeto expandido)

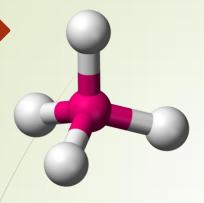
Átomos del período 3 o posteriores.

# Ejercitación:

Realice las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos:

- BeCl<sub>2</sub>
- CH<sub>4</sub>
   CO<sub>2</sub>
- H<sub>2</sub>O
- NH<sub>3</sub>
- · SO<sub>2</sub>
- · CaCl<sub>2</sub>
- · SO<sub>4</sub><sup>2</sup>-

### FORMA Y ESTRUCTURA MOLECULARES



Forma molecular está determinada por:

- Distancia de enlace ⇒ Distancia en línea recta, entre los núcleos de los dos átomos enlazados.
- Ángulo de enlace ⇒ 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.

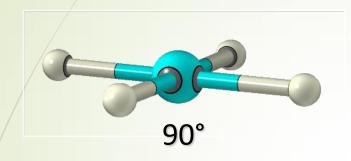
PNC-PNC > PNC-PE > PE-PE

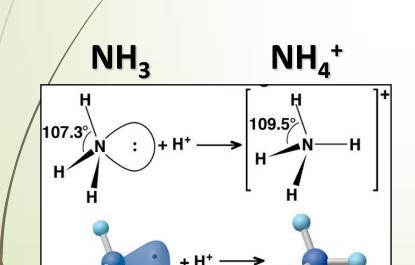
PNC= Par no compartido; PE= Par compartido (enlace)

https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes\_es.html

#### **EJEMPLOS**

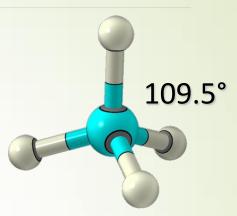
CH<sub>4</sub>





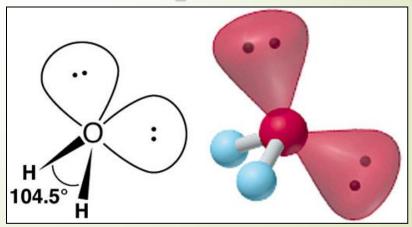
Trigonal piramidal

Tetrahédrica



¡Menor repulsión! Estructura correcta

H<sub>2</sub>O



Angular o V

# **GEOMETRÍA IDEAL**

| Tipo de<br>molécula | Ejemplo           | Estructura<br>de Lewis                    | Zonas de alta<br>densidad<br>electrónica | Orientación espacial<br>de las nubes<br>electrónicas | Geometría de la molécula |                   |
|---------------------|-------------------|---|--|--|--------------------------|-------------------|
| AM <sub>2</sub>     | BeCl <sub>2</sub> | :Cİ—Be—Cİ:                                | 2  | 180°   | CI — Be — CI             | Lineal            |
| AM <sub>3</sub>     | BF <sub>3</sub>   | : <u>Ë</u> —B— <u>Ë</u> :<br>: <u>E</u> : | 3  | 120°   | F B                      | Plana trigonal    |
| AM <sub>4</sub>     | CH₄               | H<br> <br>H—C—H<br> <br>H                 | 4  | 109,5°   | H C H                    | Tetraédrica       |
| AM <sub>5</sub>     | PCl <sub>5</sub>  | :Cl: ::::::::::::::::::::::::::::::::::   | 5  | 90°  | CI P CI CI               | Pirámide trigonal |
| AM <sub>6</sub>     | SF <sub>6</sub>   | :Ë :Ë:<br>S<br>:E :E:                     | 6  | 900  | F F F                    | Octaédrica        |

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

| Tipo de<br>molécula            | Forma                 | Geometría<br>electrónica | Geometría<br>Molecular | Ejemplos  |
|--------------------------------|-----------------------|--------------------------|------------------------|---|
| $AM_1N_0$                      | Molécula<br>diatómica |                          |                        | HF; O <sub>2</sub>                                      |
| $AM_2N_0$                      | <u>Lineal</u>         |                          |                        | BeCl <sub>2</sub> ; HgCl <sub>2</sub> ; CO <sub>2</sub> |
| AM <sub>2</sub> N <sub>1</sub> | <u>Angular</u>        |                          |                        | SO <sub>2</sub> ; O <sub>3</sub>                        |
| AM <sub>2</sub> N <sub>2</sub> | <u>Angular</u>        |                          |                        | H <sub>2</sub> O  |
| AM <sub>2</sub> N <sub>3</sub> | Lineal                |                          |                        | XeF <sub>2</sub> ; I <sub>3</sub> -                     |

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

| AM <sub>3</sub> N <sub>0</sub> | Triangular plana                   |  | BF <sub>3</sub> ; SO <sub>3</sub> ; CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> |
|--------------------------------|------------------------------------|--|---|
| $AM_3N_1$                      | <u>Pirámide</u><br><u>trigonal</u> |  | NH <sub>3</sub> ; PCl <sub>3</sub>                                |
| AM <sub>3</sub> N <sub>2</sub> | <u>Forma de T</u>                  |  | ClF <sub>3</sub> ; BrF <sub>3</sub>                               |
| $AM_4N_0$                      | <u>Tetraédrica</u>                 |  | CH <sub>4</sub> ; PO <sub>4</sub> -3; SO <sub>4</sub> -4          |
| AM <sub>4</sub> N <sub>1</sub> | <u>Balancín</u>                    |  | SF <sub>4</sub>   |
| AM <sub>4</sub> N <sub>2</sub> | <u>Cuadrada plana</u>              |  | XeF <sub>4</sub>  |

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

| AM <sub>5</sub> N <sub>0</sub> | <u>Bipirámide</u><br><u>trigonal</u> |   | PCI <sub>5</sub>                    |
|--------------------------------|--------------------------------------|---|-------------------------------------|
| AM <sub>5</sub> N <sub>1</sub> | <u>Pirámide</u><br><u>cuadrada</u>   |   | ClF <sub>5</sub> ; BrF <sub>5</sub> |
| AM <sub>5</sub> N <sub>2</sub> | Pentagonal<br>plana                  | - | XeF <sub>5</sub>                    |
| AM <sub>6</sub> N <sub>0</sub> | <u>Octaédrica</u>                    |   | SF <sub>6</sub>                     |

A: Átomo central

M: Átomo vecino o ligando

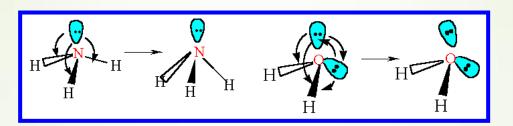
N: Par de electrones aislados o no compartidos

## SÍNTESIS DE LAS GEOMETRÍAS MÁS COMUNES

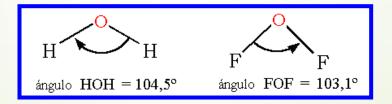
| Átomos<br>unidos | Pares<br>libres | N°<br>coordinación/<br>hibridación | Geometría            | Ejemplo       |
|------------------|-----------------|------------------------------------|----------------------|---------------|
| 2                | 0               | 2                                  | • Lineal             | o=c=o         |
| Гз               | о               |                                    | <b>S</b> Triangular  | H > C = O     |
| 2                | 1               | 3                                  | <b>\$</b> Angular    | 0.s           |
| 4                | О               |                                    | Tetraédrica          | H<br>H<br>C—H |
| 3                | 1               | 4                                  | Pirámide<br>trigonal | H N H         |
| _2               | 2               |                                    | Angular              | H             |

# Ángulos de enlace y Geometría

Influencia de pares de electrones no enlazantes:



Influencia de átomos de distinta electronegatividad:



#### **POLARIDAD**

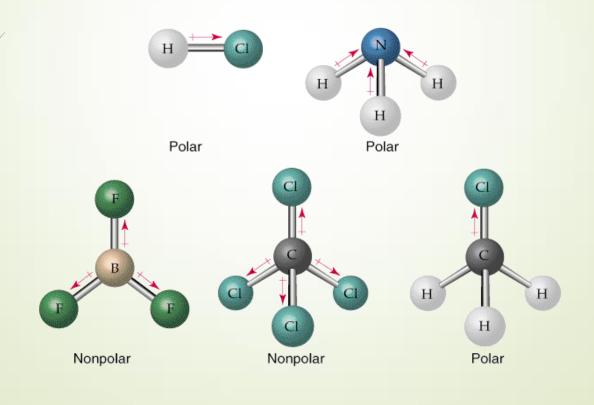
La **electronegatividad** es una medida de la fuerza de atracción de un átomo sobre los electrones de un enlace.

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



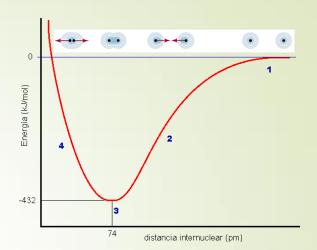
#### TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

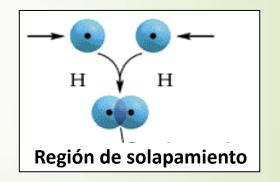
Esta teoría es una descripción de la mecánica cuántica respecto de la distribución de los electrones en los enlaces. Proporciona una forma de calcular los valores numéricos de los ángulos y las longitudes del enlace.

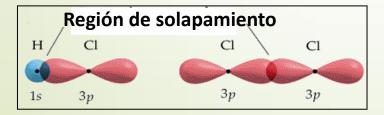
Describe la formación del enlace covalente por el solapamiento de orbitales atómicos.

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  $\sigma$ .



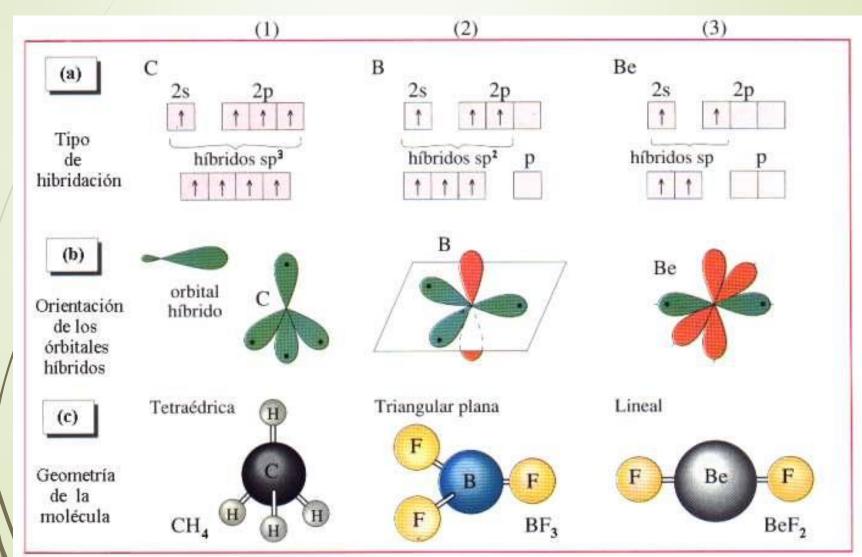




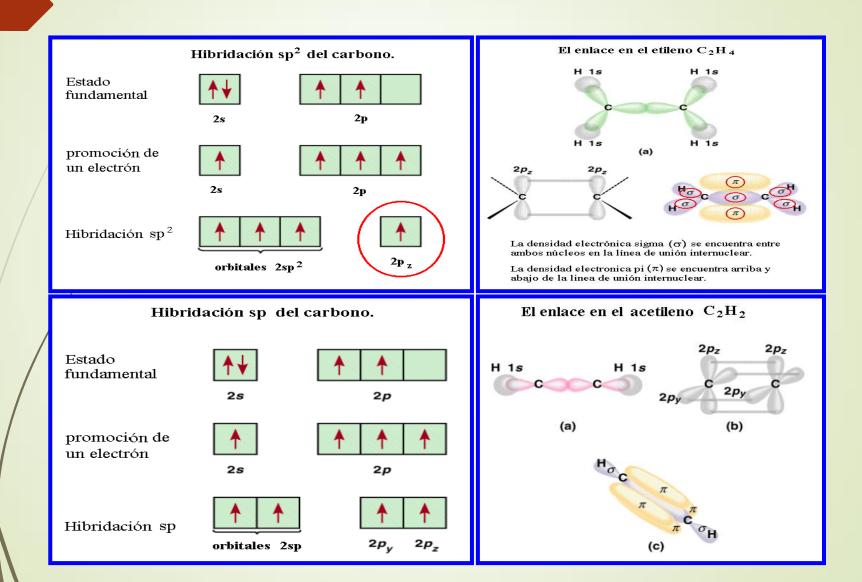
En el caso de la molécula de  $N_2$ , sólo uno de los tres orbitales "p" con un electrón puede superponerse extremo con extremo para formar un enlace  $\sigma$ . Los otros dos orbitales "p" son perpendiculares y por ende sólo podrán interactuar lateralmente originando enlaces  $\pi$  (en este caso, dos.)

#### 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.
- Cuente el número de pares de electrones libres y el de átomos unidos al átomo central.

#### N° de átomos vecinos (m)

| +<br>N° de pares de<br>electrones libres (n) | <u>Hibridación</u>             | <u>Ejemplos</u>                                      |
|--|--------------------------------|--|
| 2  | sp                             | BeCl <sub>2</sub>                                    |
| 3  | sp <sup>2</sup>                | BF <sub>3</sub>                                      |
| 4  | sp <sup>3</sup>                | CH <sub>4</sub> , NH <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> O |
| 5  | sp³d                           | PCI <sub>5</sub>                                     |
| 6  | sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup> | SF <sub>6</sub>                                      |

#### COMPLETE LA SIGUIENTE TABLA

|   | COMPUESTO       | TEORÍA DE<br>LEWIS | TRPECV | TEV | RESONANCIA | POLAR |
|---|-----------------|--------------------|--------|-----|------------|-------|
|   | SO <sub>3</sub> |                    |        |     |            |       |
| / | NH <sub>3</sub> |                    |        |     |            |       |

# **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 neutro para generar un *dipolo*.

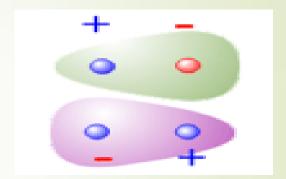
# Fuerzas Intermoleculares (electrostáticas)

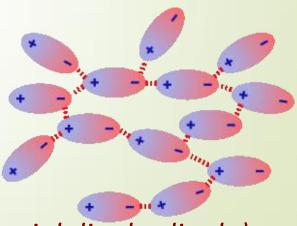
#### Fuerzas de interacción con iones

- Ión dipolo inducido
- Ión dipolo

### Fuerzas de Van der Waals

- Dispersión de London (Dipolo
- inducido-dipolo inducido)
- Dipolo dipolo inducido
- Dipolo dipolo
- Fuerzas Puente de Hidrógeno (caso especial dipolo-dipolo)





# Fuerzas de Interacción con lones

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 mas 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.

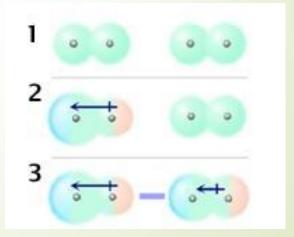
# Fuerzas de Van der Waals

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.

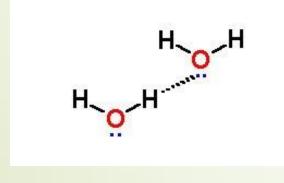
Estas interacciones son las más débiles de todas las fuerzas intermoleculares.

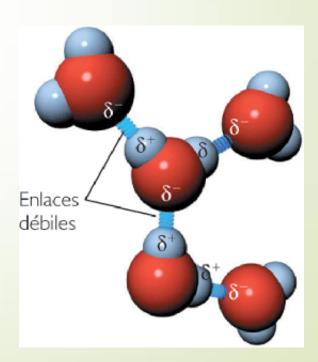


# Fuerzas Puente de Hidrógeno

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).





# **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 edigión. Ed. Thomson.
- Petrucci, R. Harwood, W. Herring F. 2002. Química General. Vol. I y J. Octava edición. Ed. Prentice Hall.
- Whiten, Davis y Peck. 2015. Química General. Octava edición. Ed. Mc Graw Hill.