

ESTRUCTURA MOLECULAR Y TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

RECUERDA!!!!!!!!!!!!

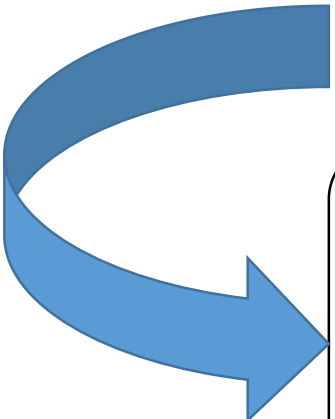
Para antes de empezar con este tema, ya debes tener la capacidad de:

- Describir la forma de los orbitales atómicos y el orden de su energía relativa
- Escribir la configuración electrónica de los elementos
- Relacionar la configuración electrónica de un átomo con su posición en la tabla periódica
- Describir las propiedades periódicas y su variación en un período y en un grupo de la tabla periódica

PERO LO MÁS IMPORTANTE ES QUE PUEDAS RELACIONAR TODOS ESOS CONCEPTOS

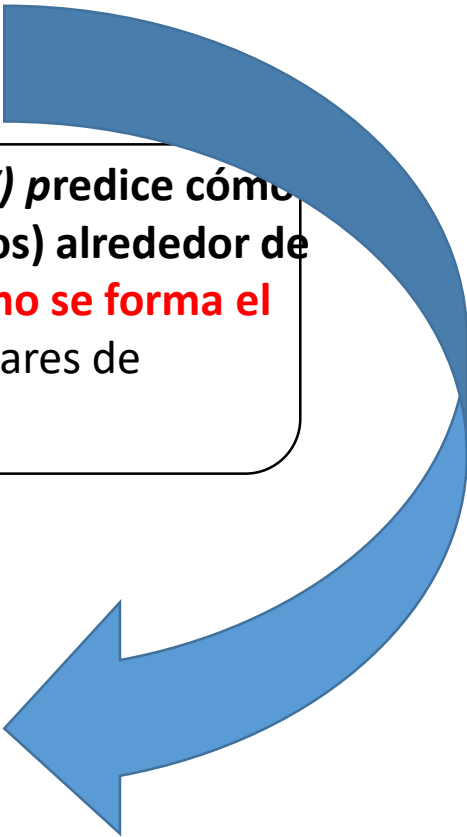
ESTRUCTURA MOLECULAR Y TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

Dos teorías van de la mano en el estudio del enlace covalente y las estudiaremos de manera simultánea



La *teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)* predice cómo se distribuyen los electrones de enlace (compartidos) o no enlace (no compartidos) alrededor de un átomo central, en una molécula o en iones poliatómicos, **pero no explica cómo se forma el enlace**. La teoría predice donde se forma el enlace, y hacia donde se dirigen los pares de electrones compartidos y no compartidos

La *teoría del enlace valencia (EV)* describe cómo se forman los enlaces, en términos de **superposición de orbitales atómicos, además, en esta teoría los orbitales atómicos suelen mezclarse o hibridarse para formar nuevos orbitales con diferente dirección espacial**



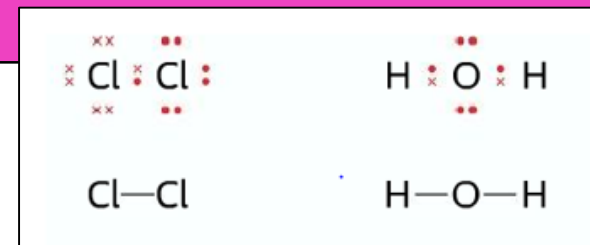
Estas dos teorías vistas de manera conjunta permiten comprender el enlace, las formas moleculares y propiedades de un amplio número de moléculas e iones poliatómicos. Veremos que la polaridad de una molécula depende de su geometría

TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE VALENCIA (RPECV)

- Es fundamental entender que las estructuras de Lewis son una representación de los enlaces, pero en ningún caso reflejan la geometría de las moléculas ni cómo se forman los enlaces.
- Que la geometría de una molécula es el resultado de la distribución tridimensional de sus átomos y viene definida por la disposición espacial de los núcleos atómicos.
- El método de la **RPECV sólo** permite predecir la **geometría electrónica** de una molécula y su **hipótesis central** se basa en:

“ Las nubes electrónicas, grupos electrónicos (región de alta densidad electrónica) formada por los pares de electrones de la capa de valencia que rodean al átomo central se repelen entre sí, adoptando una disposición espacial que minimice la repulsión eléctrica”

o dicho de otra forma



“Los grupos de electrones de la capa de valencia del átomo central se repelen entre sí y se ordenan alrededor del átomo central de manera que la repulsión entre ellos sea mínima, lo que da como resultado una máxima separación de estos grupos electrónicos alrededor del átomo central”
















TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE VALENCIA (RPECV)

Un **átomo central** es todo átomo que está unido a un átomo diferente, así que lo primero que hay que hacer es contar el número de **grupos electrónicos** que rodea al átomo central:

1. En RPECV cada átomo se cuenta *como un solo grupo electrónico*, no importa si el enlace es simple, doble o triple.
2. En RPECV, un par no compartido de los electrones de valencia del átomo central se cuenta *como un solo grupo electrónico*

Fórmula:	CO ₂	NH ₃	CH ₄	NO ₃ ⁻
Fórmula de Lewis de puntos:	$\text{:}\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}\text{:}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{:N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\left[\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{N}}\text{:} \\ / \quad \backslash \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array} \right]^{-}$
Átomo central:	C	N	C	N
Número de átomos unidos al átomo central:	2	3	4	3
Número de pares no compartidos del átomo central:	0	1	0	0
Número total de grupos electrónicos del átomo central:	2	4	4	3

Según la teoría RPECV, la molécula o ión es **más estable** cuando los grupos electrónicos del átomo central están lo **más separados posible**. La distribución de estos *grupos electrónicos* alrededor del átomo central se conoce como **geometría electrónica** del átomo central

Geometría electrónica en función del número de grupos electrónicos del átomo central				
Grupos electrónicos del átomo central	Orientación de los grupos electrónicos	Descripción: ángulos ¹	Dibujo lineal ¹	Modelos de barras y esferas
2		lineal; 180°		
3		plana trigonal; 120°		
4		tetraédrica; 109,5°		
5		bipiramidal trigonal; 90°, 120°, 180°		
6		octaédrica; 90°, 180°		

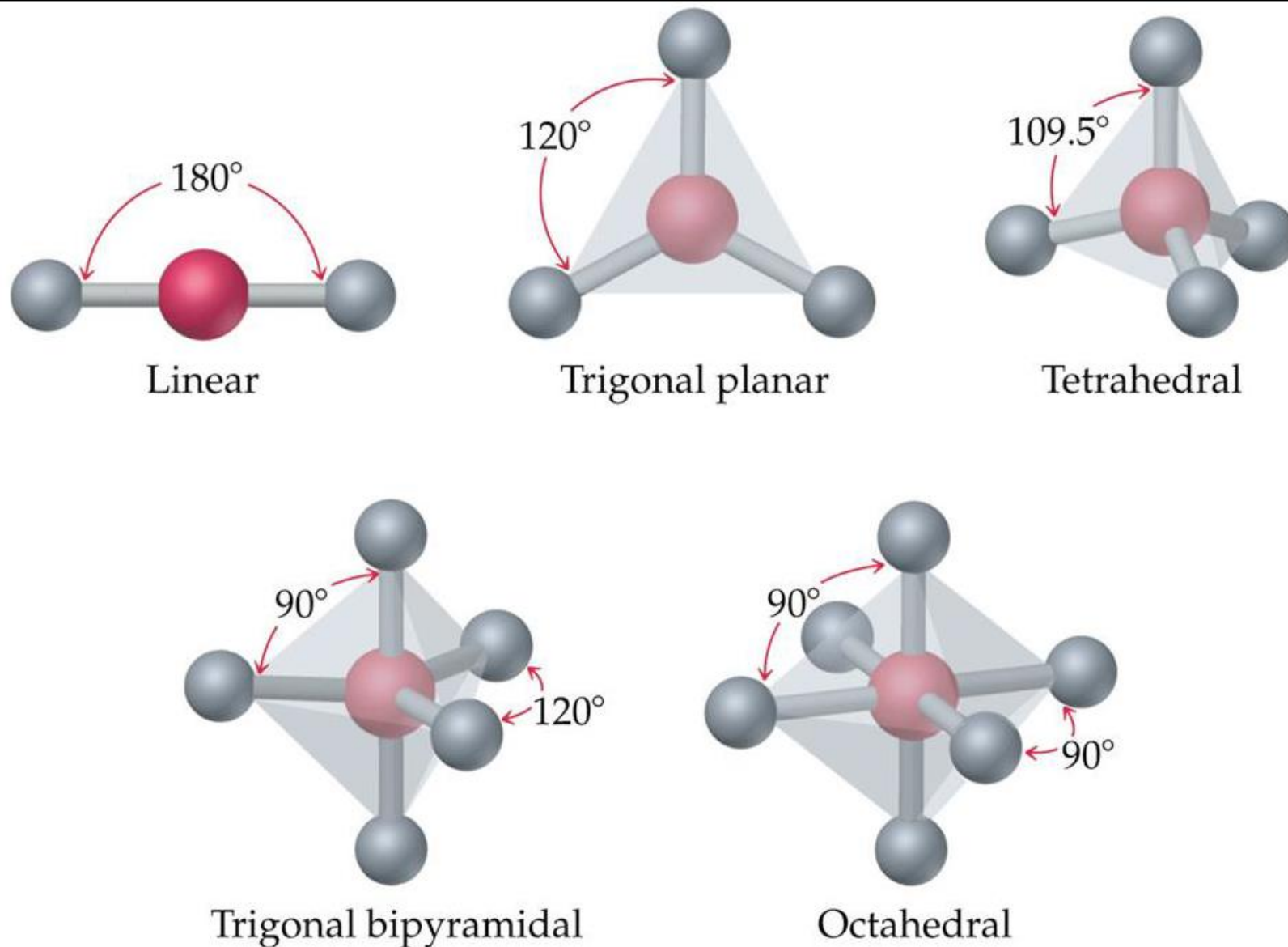
Relación entre los números comunes de grupos electrónicos y sus correspondientes geometrías electrónicas.

MUY IMPORTANTE!!!!!!

Sólo cuando se conoce la **geometría electrónica** se pueden usar los grupos electrónicos enlazantes del átomo central para unir los átomos restantes. Esto permite deducir la *distribución de los átomos* alrededor del *átomo central*, lo cual recibe el nombre de **geometría molecular**

ge = grupos electrónicos

TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE VALENCIA (RPECV)

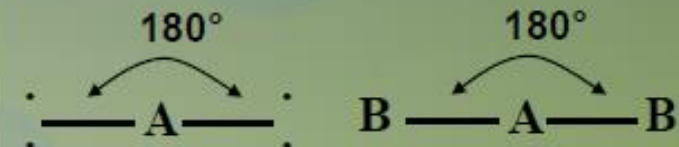
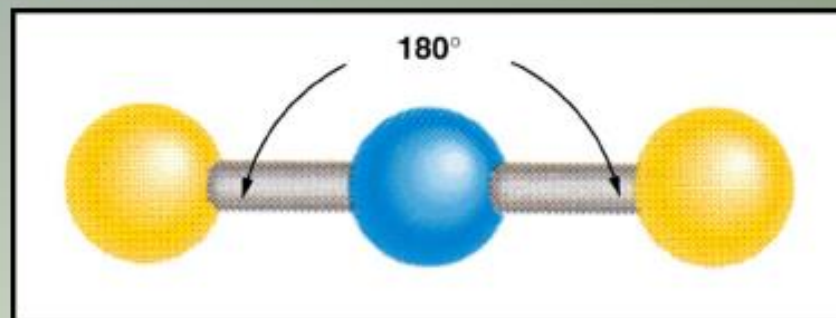


Existen cinco formas fundamentales para el arreglo de electrones alrededor de un átomo central y luego para la geometría de las moléculas

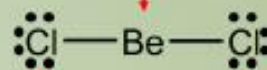
Si el átomo central se rodea de dos grupos de electrones su geometría electrónica será

RPECV

Clase	N° de átomos unidos al átomo central	N° de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal

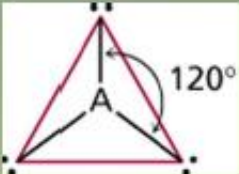
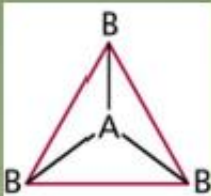


0 pares de electrones libres en el átomo central

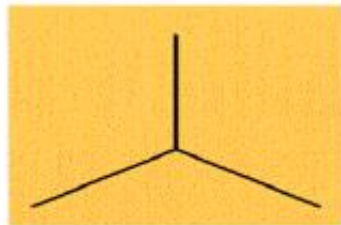


2 átomos enlazados al átomo central

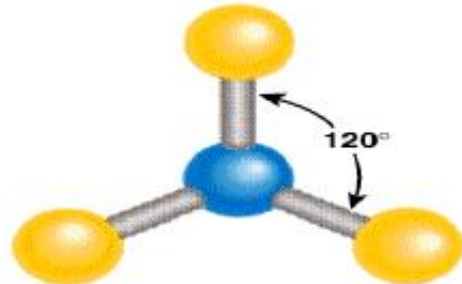
Y si el átomo central se rodea de tres pares electrónicos,
¿cómo será su 'geometría electrónica?

RPECV				
Clase	Nº de átomos unidos al átomo central	Nº de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
				

Boron Trifluoride



Planar



Atomo central rodeado
por cuatro grupos
electrónicos

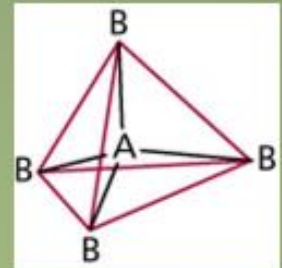
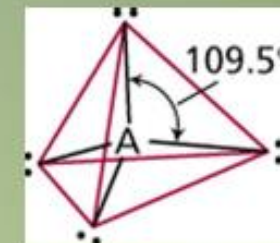
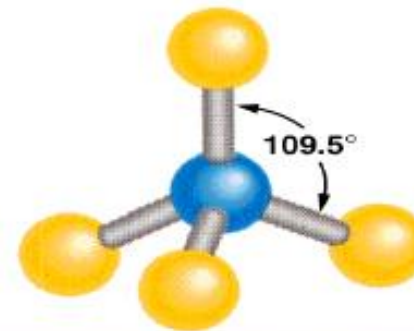
RPECV

Clase	N° de átomos unidos al átomo central	N° de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica



Tetrahedral

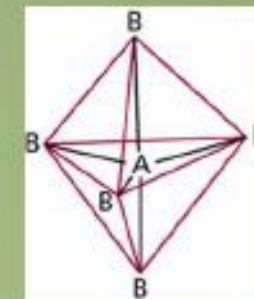
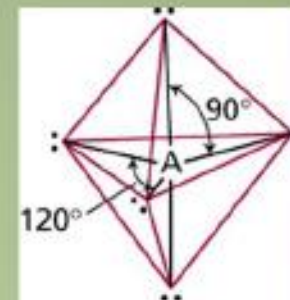
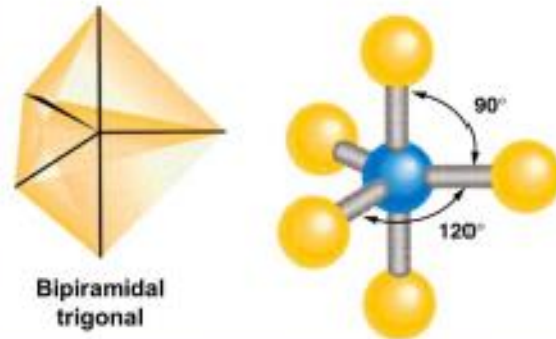
Methane



RPECV

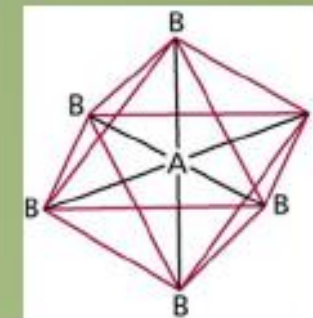
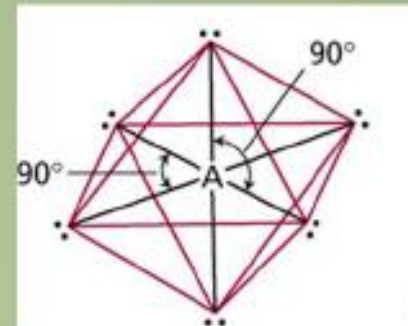
<u>Clase</u>	<u>N° de átomos unidos al átomo central</u>	<u>N° de pares libres en el átomo central</u>	<u>Arreglo de los pares de electrones</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal

Pentacloruro de fósforo

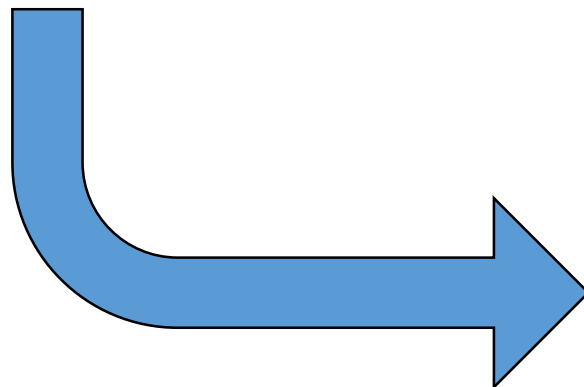


RPECV

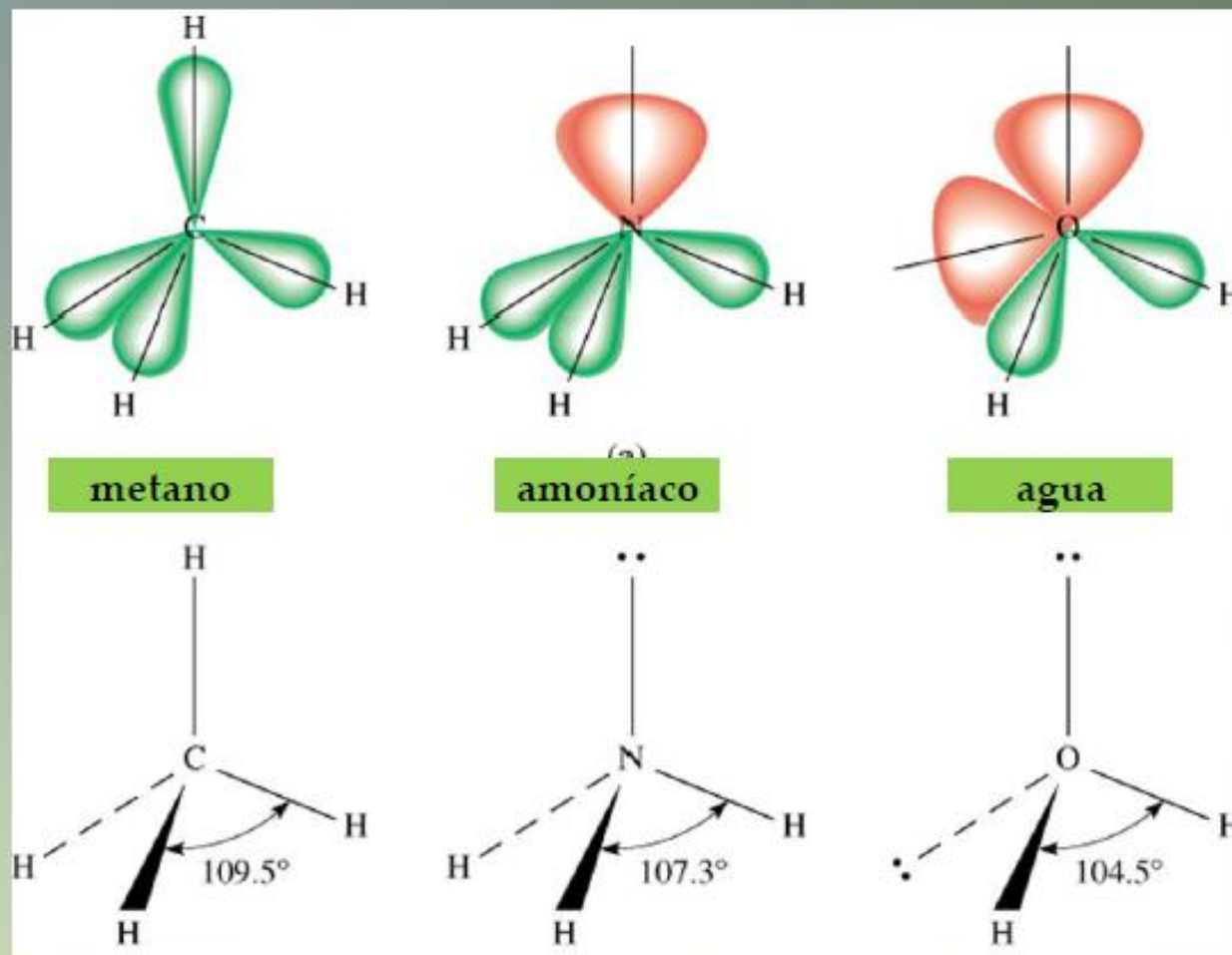
<u>Clase</u>	<u>N° de átomos unidos al átomo central</u>	<u>N° de pares libres en el átomo central</u>	<u>Arreglo de los pares de electrones</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal
AB_6	6	0	octaédrico	octaédrico



¿Qué sucede cuando el átomo central se rodea de pares de electrones que no forman enlace con otros átomos?



INFLUENCIA DE LOS ELECTRONES DE NO ENLACE



pares libres vs.
pares libres

>

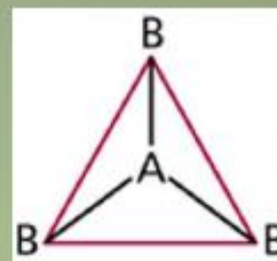
pares libres
vs. pares compartidos

>

pares compartidos vs.
pares compartidos

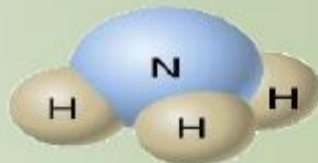
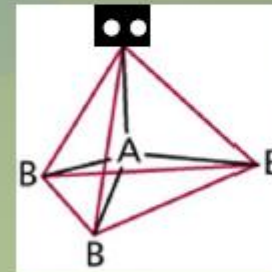
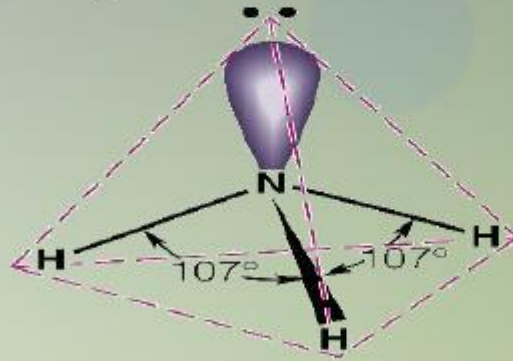
RPECV

Clase	N° de átomos unidos al átomo central	N° de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_3	3	0	lineal	lineal
AB_2E	2	1	triangular plana	angular



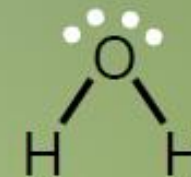
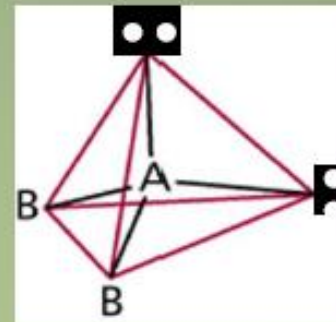
RPECV

Clase	Nº de átomos unidos al átomo central	Nº de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_4	4	0	tetraédrica	
AB_3E	3	1	tetraédrica	Piramidal trigonal



RPECV

Clase	Nº de átomos unidos al átomo central	Nº de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_3E	3	1	tetraédrica	Piramidal trigonal
AB_2E_2	2	2	tetraédrica	angular

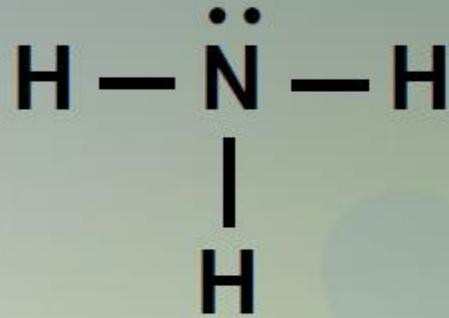


ATENCIÓN!!!!!!!

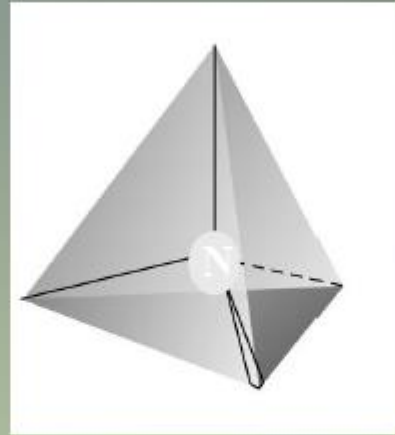
¿QUÉ EXPLICAN O REPRESENTAN CADA UNA DE ESTAS FIGURAS?

¿REPRESENTAN EL MISMO CONCEPTO O DISTINTOS CONCEPTOS?

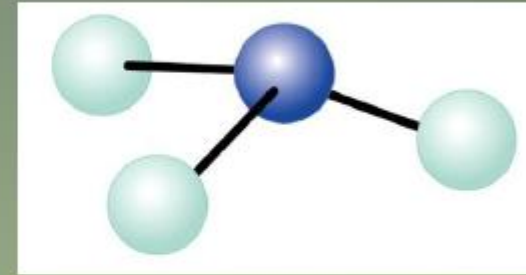
AMONÍACO



Estructura de Lewis



*Geometría
electrónica*



*Geometría
molecular*

IMPORTANTE!!!!

MOMENTO DIPOLAR, μ

La carga eléctrica en los enlaces entre átomos distintos no está distribuida de manera homogénea debido a la diferencia de electronegatividad entre ellos.

El momento dipolar de una molécula es la suma de los momentos dipolares de enlace.

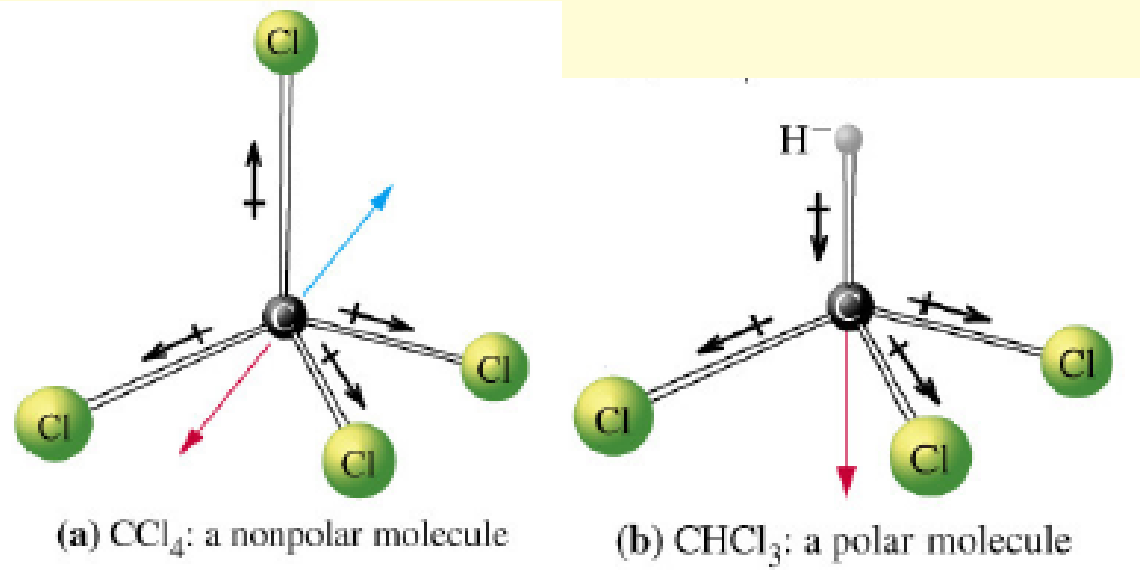
$$\mu = Q \times r$$

Q = carga

r = distancia entre cargas

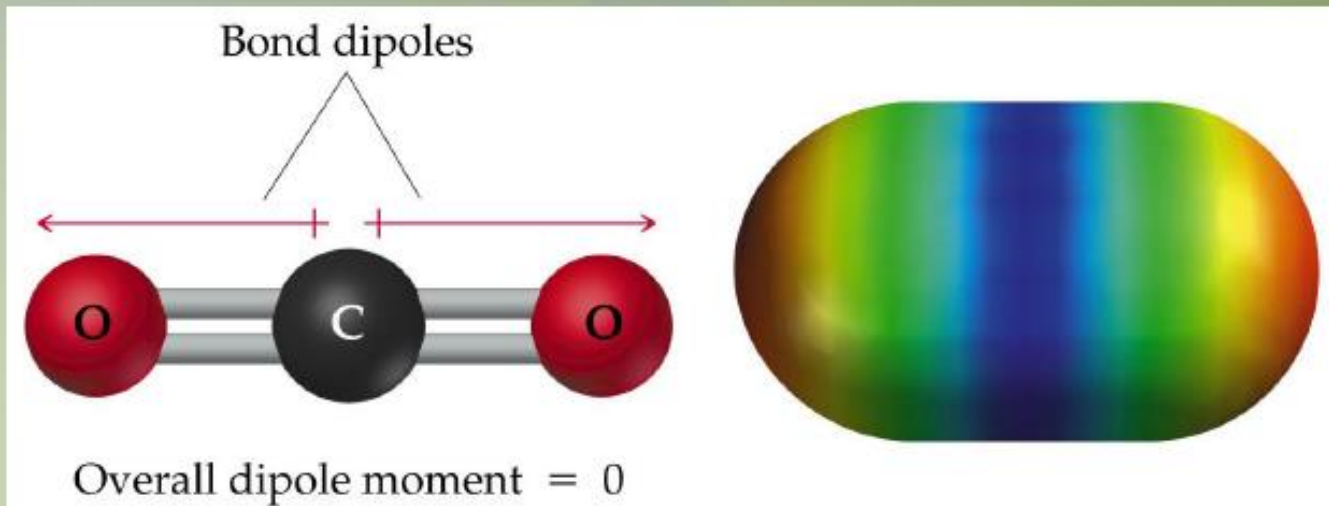
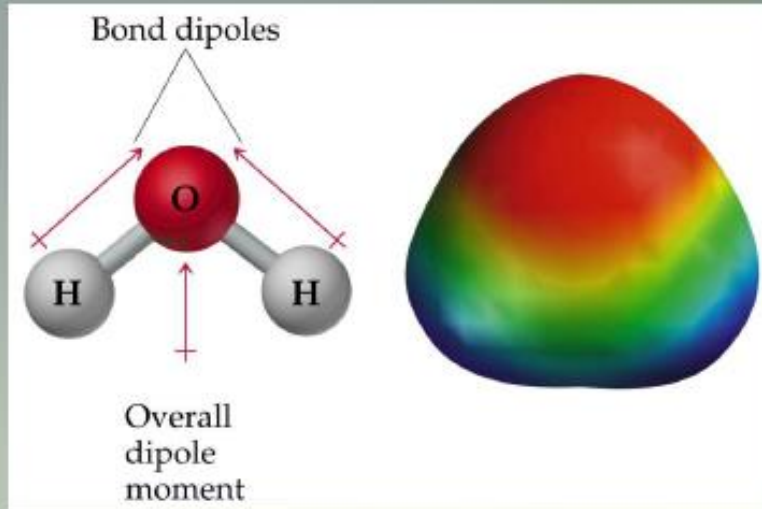
Unidades Debyes, D

$$1D = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

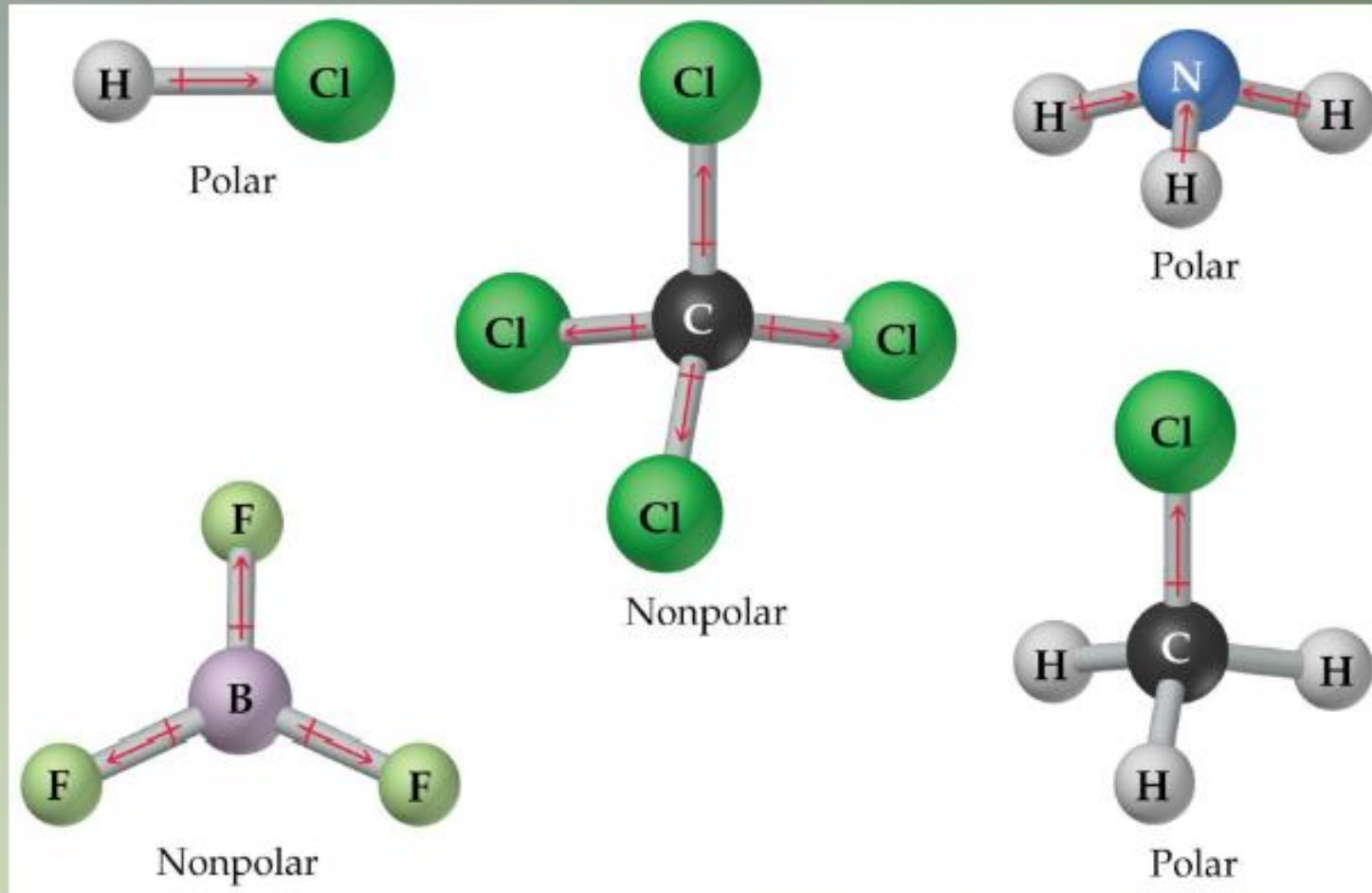


Distinción entre
isómeros

RELACIÓN GEOMETRÍA MOLECULAR Y MOMENTO DIPOLAR



RELACIÓN GEOMETRÍA MOLECULAR Y MOMENTO DIPOLAR



MUY IMPORTANTE!!!!!!!
RECUERDA!!!!!!

JUSTIFICACIÓN DE LA FORMACIÓN DE ENLACES QUÍMICOS

- ✓ Las estructuras de Lewis y la Teoría de la Repulsión de los Electrones de la Capa de Valencia no explican por qué se forman los enlaces.
- ✓ ¿Cómo se puede explicar la geometría molecular en términos de la mecánica cuántica?
- ✓ ¿Cuáles son los orbitales que se involucran en el enlace?

Las respuestas a esas preguntas se pueden explicar desde dos teorías:

- **Teoría del Enlace Valencia**
- **Teoría de los Orbitales Moleculares**

TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

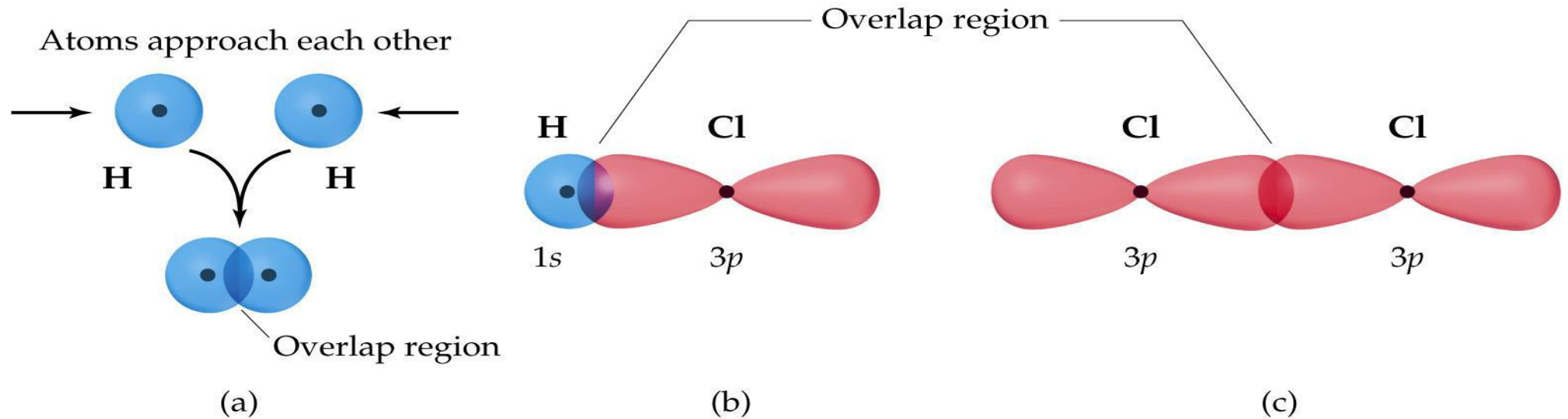
Establece que los **enlaces covalentes** se forman como consecuencia del **solapamiento (compartir un lugar en el espacio) de los orbitales atómicos** (con electrones desapareados y espines opuestos) entre dos o más átomos que se unen para formar un compuesto.

Además supone que los **electrones en la molécula ocupan orbitales atómicos individuales**
Utiliza el concepto de orbitales atómicos híbridos

Explica las diferentes fuerzas de enlace.

Explica las distintas longitudes de enlace

Predice la geometría de las moléculas



¿SABIAS QUE HAY ELEMENTOS QUE TIENE ELECTRONES APAREADOS Y AÚN ASI SE UNEN A OTRO ATOMO FORMANDO UN ENLACE QUÍMICO?

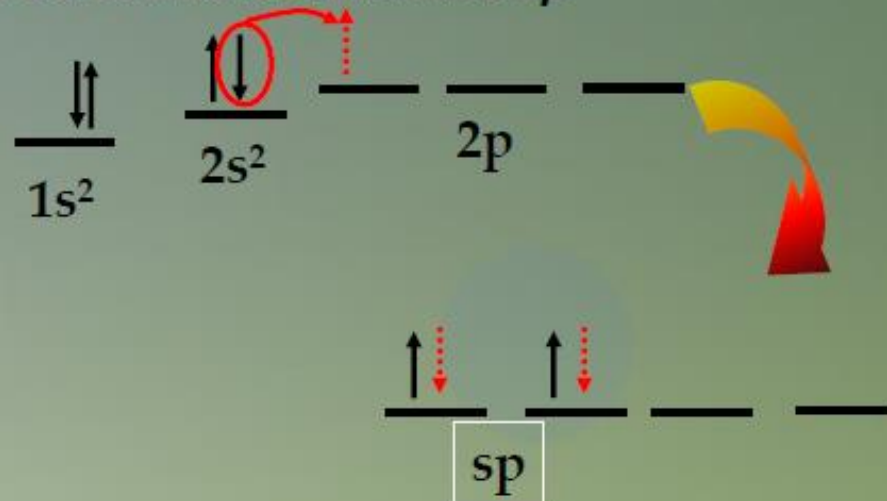
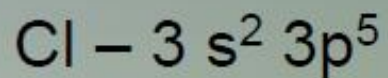
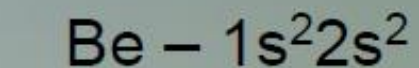
TEORÍA DEL ENLACE VALENCIA

¿Cómo se explican los enlaces en átomos que sus electrones están apareados?

Hibridación – unión de 2 o más **orbitales atómicos** para formar nuevos **orbitales híbridos**

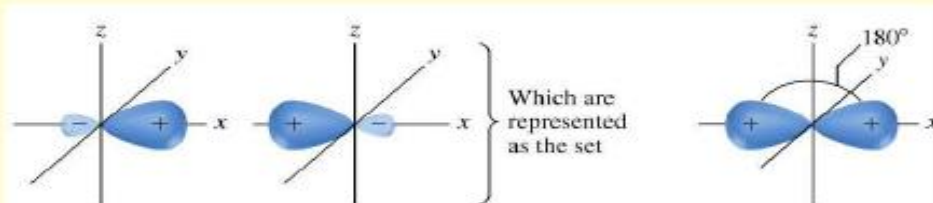
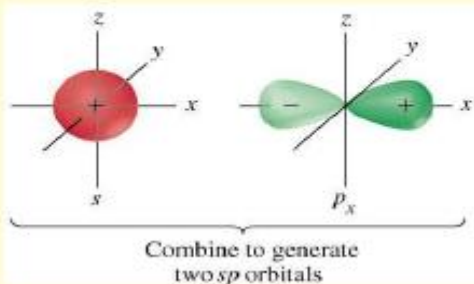
1. Al mezclar al menos 2 orbitales diferentes se forman los orbitales híbridos, los cuales tienen una forma distinta a los originales.
2. El número de orbitales híbridos es igual al número de orbitales puros usados en la hibridación.
3. Los enlaces covalentes pueden ser explicados por:
 - a. La superposición de orbitales híbridos con orbitales atómicos.
 - b. La superposición de orbitales híbridos con orbitales híbridos.

Formación de orbitales híbridos sp

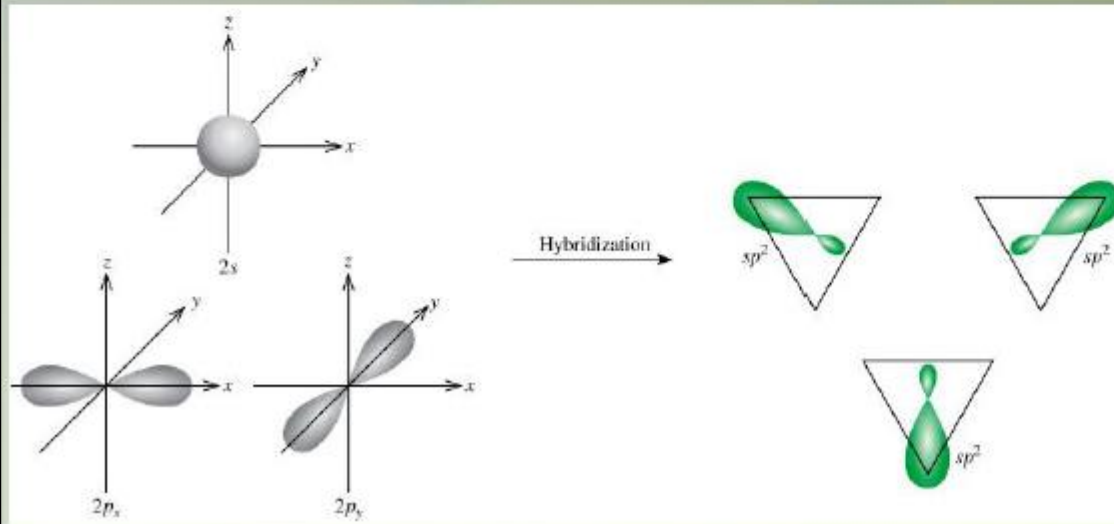
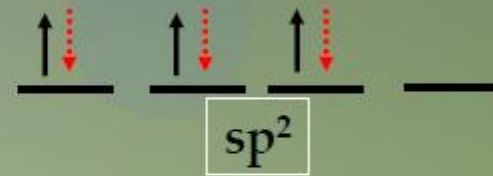
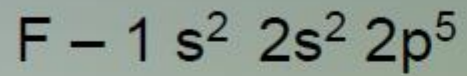
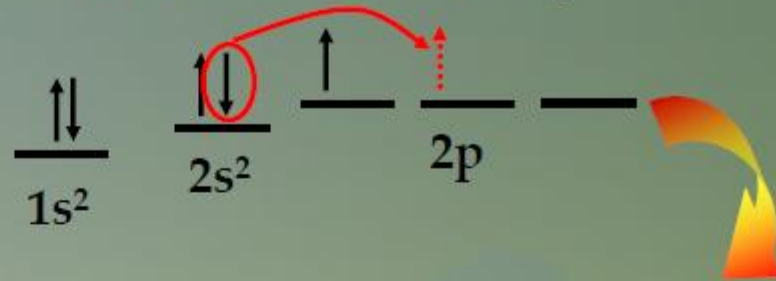
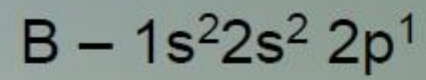


El desprendimiento de energía debido a la formación de enlaces compensa la energía gastada en la excitación.

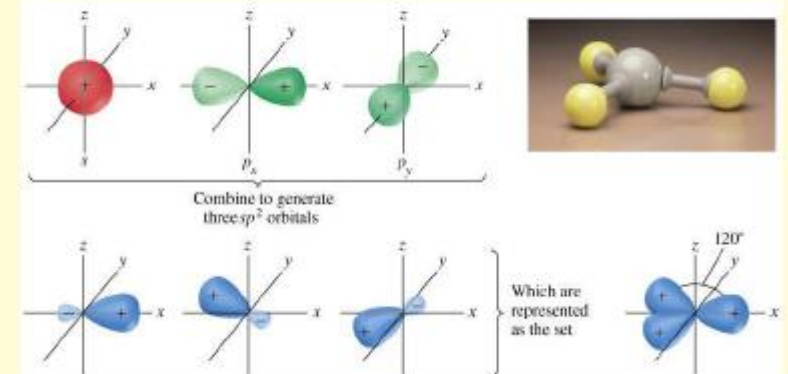
Forma y orientación de los orbitales sp



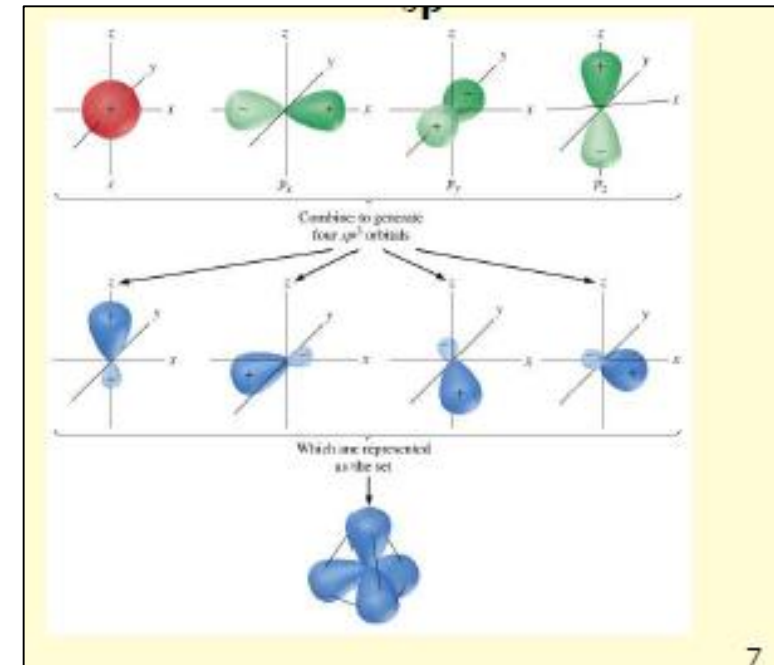
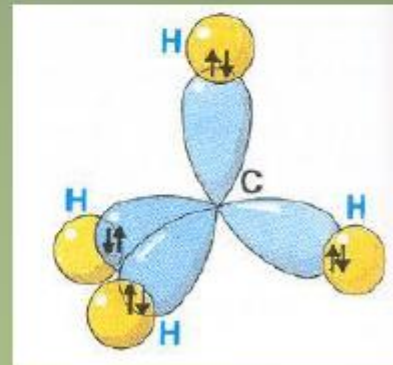
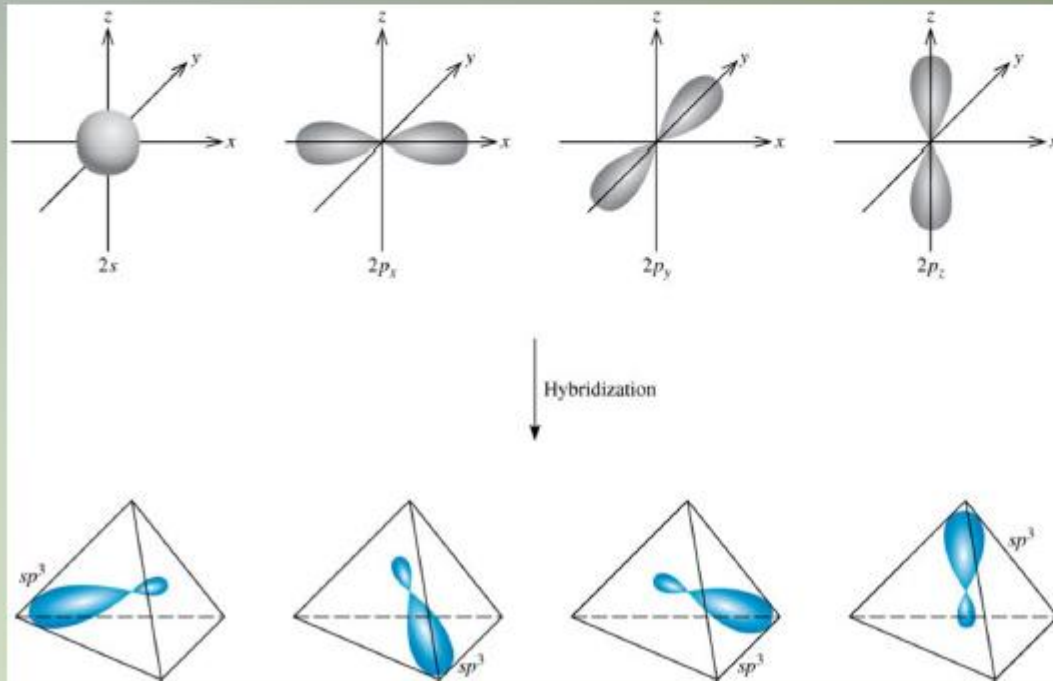
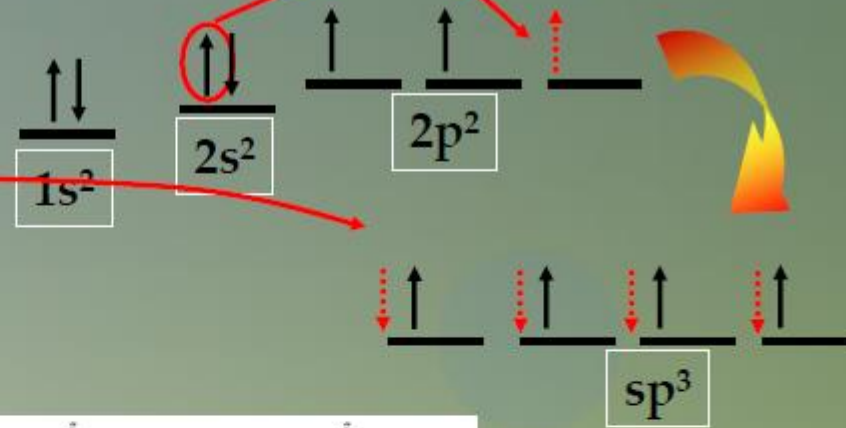
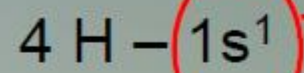
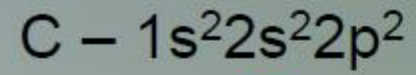
Formación de orbitales híbridos sp^2



Formación de enlaces

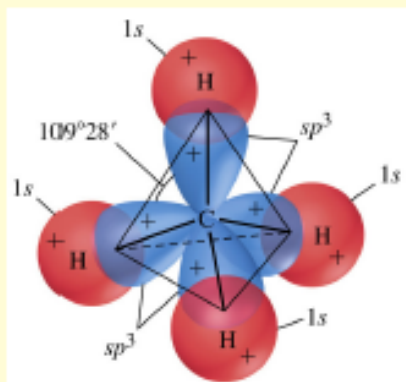


Formación de orbitales híbridos sp^3



Aplicación de la teoría de EV para explicar la formación de enlaces C-H en el **metano**.

Ángulo de enlace H-C-H = $109,5^\circ$

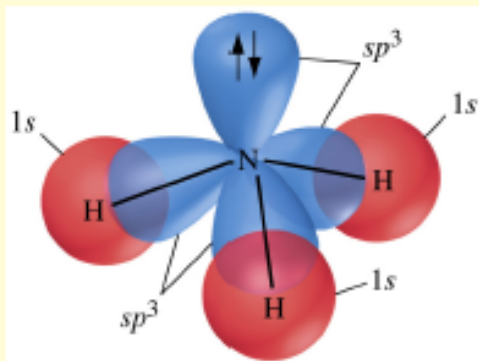


Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

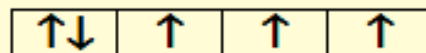
El desprendimiento de energía debido a la formación de enlaces compensa la energía gastada en la excitación.

Amoníaco, NH_3

Diagrama orbital del N



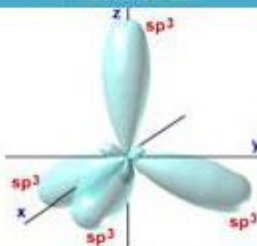
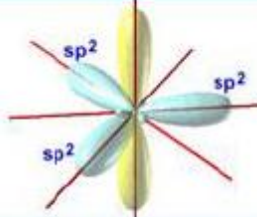
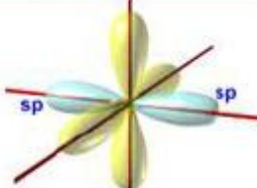
N (estado fundamental)



sp^3

Ángulo de enlace H-N-H = $107,3^\circ$

FORMAS DE ORBITALES ATÓMICOS HÍBRIDOS

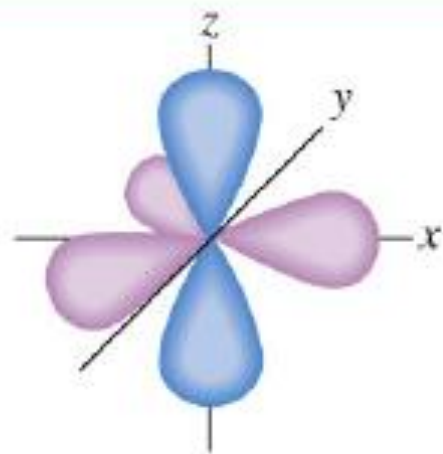
Orbitales s mezclados	Orbitales p mezclados	Tipo de orbitales híbridos	Número de orbitales híbridos	Geometría de los orbitales híbridos	Modelo de los orbitales híbridos formados
1	3	sp^3	4	$109,5^\circ$ tetraédrica	
1	2	sp^2	3	120° triangular plana	
1	1	sp	2	180° lineal	

Conclusión práctica: Si únicamente se pide indicar (no justificar) la hibridación del átomo central, es muy práctico conocer esta pequeña tabla de correspondencia entre nubes electrónicas e hibridación del átomo central:

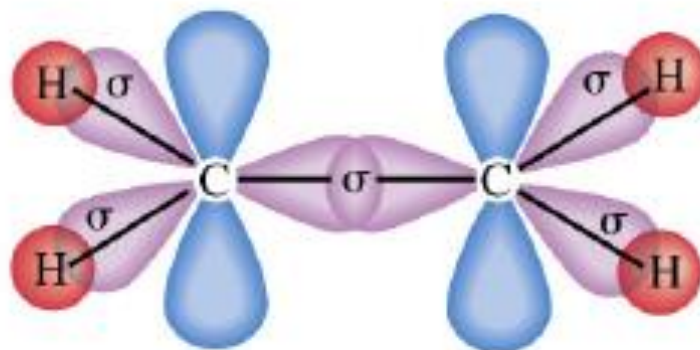
Nubes electrónicas	Hibridación del átomo central
2	sp
3	sp^2
4	sp^3

Hibridación en moléculas formadas por dobles y triples enlaces:

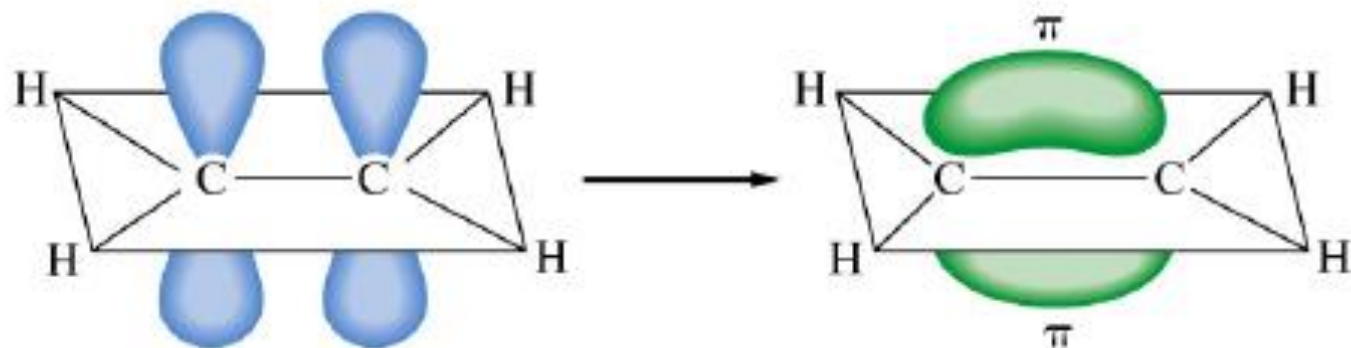
Molécula de etileno, C_2H_4



The set of orbitals $sp^2 + p$

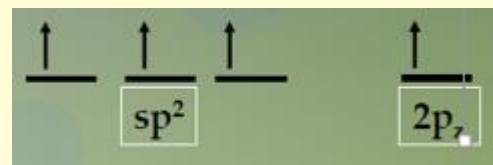
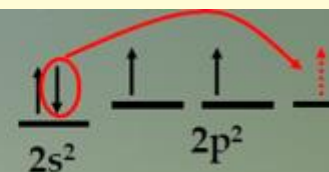
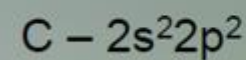


Sigma (σ) bonds

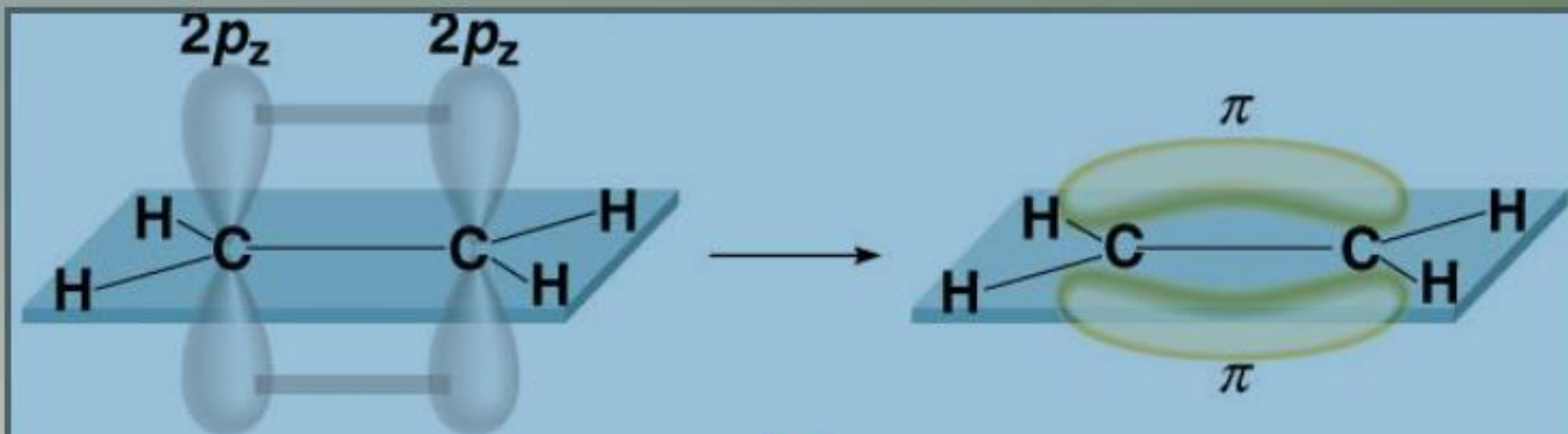


Overlap of p orbitals leading to pi (π) bond

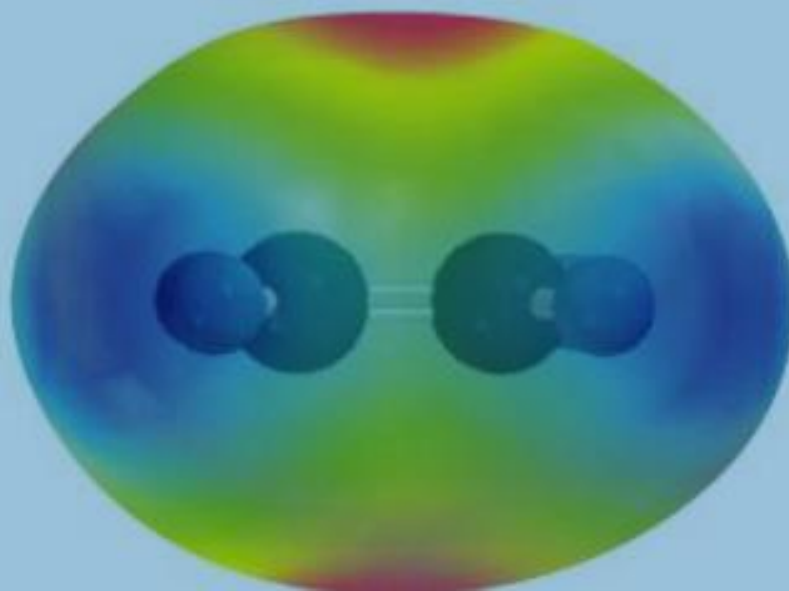
Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci



OTRA FORMA DE PRESENTAR EL ENLACE DEL ETILENO

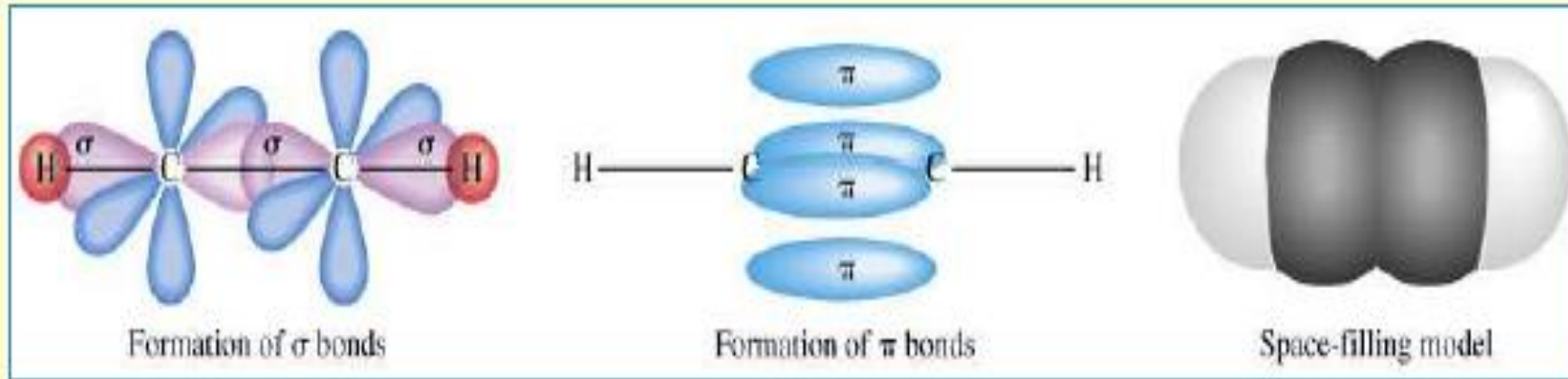


(a)



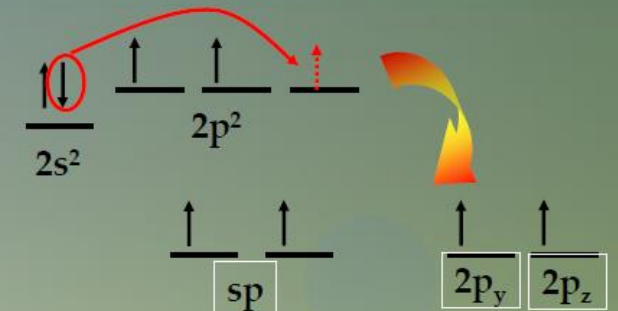
Molécula de acetileno, C_2H_2

El C presenta hibridación sp

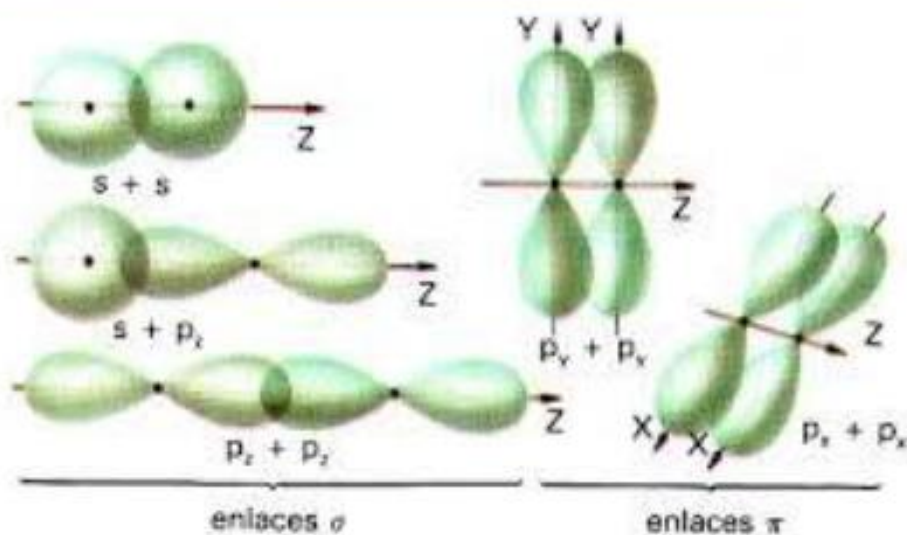
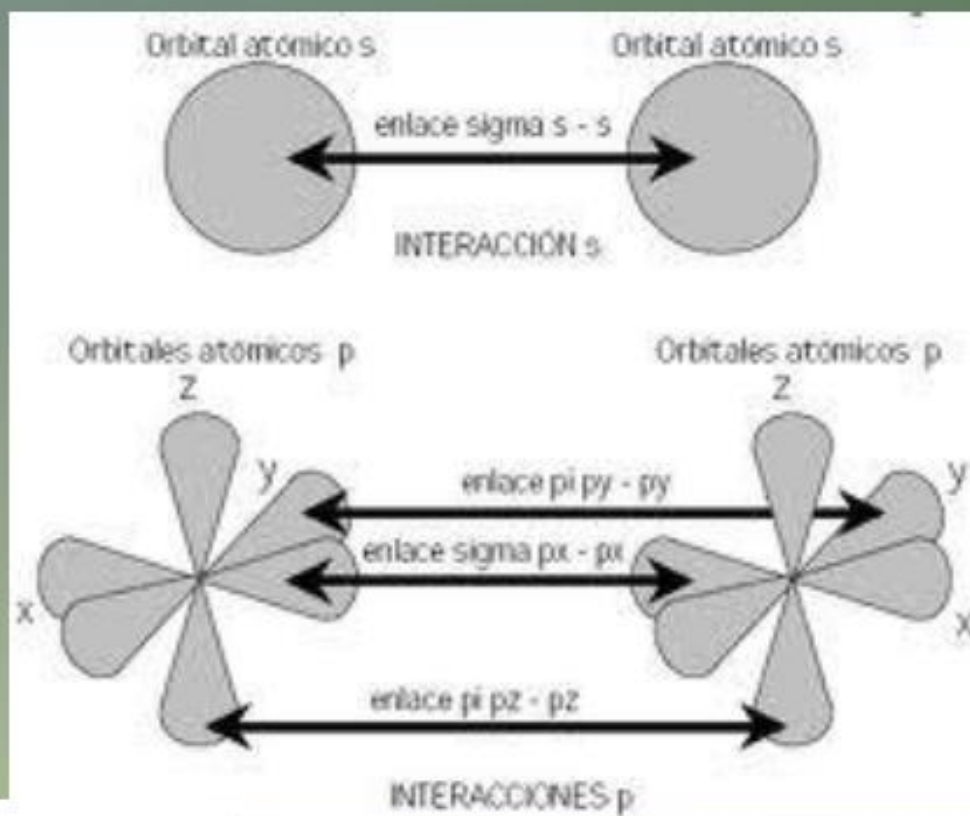


Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

Hibridación C enlace triple - Acetileno



- ✓ Enlace simple: sigma
- ✓ Enlace doble: un sigma, un pi
- ✓ Enlace triple: un sigma, dos pi



8 SENCILLOS PASOS PARA EL ANÁLISIS DE LA FORMA DE LA MOLÉCULA Y EL ENLACE

