

# Enlace Químico

llerici@frc.utn.edu.ar

# Tipos de enlace

Enlace: fuerza de atracción que mantiene unido a los átomos en los compuestos.

## Tipos de enlace

- Iónico
- Covalente
- Metálico

# Representaciones de puntos de Lewis

En el enlace químico sólo participan los electrones de valencia, que suelen ser los electrones de las capas más externas ocupadas.

La representación de Lewis consta del símbolo del elemento y un punto por cada electrón de valencia de un átomo del elemento.

						18 8A
	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	He:
	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Ne·
12 2B	·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	·Ar·
	·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	·Kr·

# Enlace Iónico

Se da por la transferencia de uno o más electrones de un átomo a otro. Se forman cationes y aniones.

## Ejemplo 9.1

Utilice los símbolos de puntos de Lewis para explicar la formación del óxido de aluminio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ).

# Enlace Covalente

Los átomos enlazados comparten los electrones.

# Estructura de Lewis de compuestos covalentes

- Elegir un esqueleto lo mas simétrico posible. Tener en cuenta:
  - Elemento menos negativo en el centro. Excepto el H.
  - El oxigeno no se enlaza consigo mismo. Excepto  $O_2$  y  $O_3$ .
  - En los oxácidos el H se enlaza al O.
  - H y F van en posiciones terminales.
- Calcular el número total de electrones de valencia. Agregar  $1 e^-$  por cada carga negativa y eliminar  $1 e^-$  por cada carga positiva.
- Completar octetos de  $e^-$  para todos los elementos, salvo excepciones H (2), Be (4), B y Al (6).
- Si la estructura tiene demasiados  $e^-$ , forme enlaces dobles o triples con el átomo central.

# Estructura de Lewis de compuestos covalentes

- Calcular
  - **N: e<sup>-</sup> necesarios** para que todos los átomos que se enlazan completen su octeto (tener en cuenta excepciones).
  - **D: e<sup>-</sup> disponibles** en la capa de valencia (los más externos) de cada uno de los átomos que se enlazan (nº de grupo).
  - **C: e<sup>-</sup> compartidos** para que cada uno de los átomos que se enlazan completen su octeto (tener en cuenta excepciones).



# Estructura de Lewis

## Ejemplo 1: $\text{HNO}_3$

1. Elegir un esqueleto lo más simétrico posible.

Los tres átomos de O están enlazados al átomo central de N y el átomo de H que se ioniza se enlaza con uno de los átomos de O.



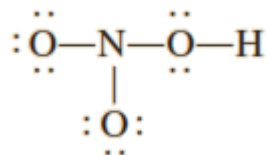
2. Los electrones **disponibles** de valencia (de las capas externas) son:

N	O	H	Total
5	6*3	1	<b>24</b>

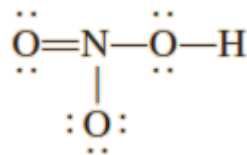


# Estructura de Lewis

3. Dibujamos un enlace covalente sencillo entre el N y cada uno de los tres átomos de O y entre uno de estos átomos y el átomo de H. Enseguida lo llenamos con los electrones necesarios para satisfacer la regla del octeto para los átomos de O:



4. Observamos que esta estructura satisface la regla del octeto para todos los átomos de O pero no para el átomo N, que sólo tiene seis electrones. Por lo tanto, movemos un par libre de electrones de uno de los átomos de O de los extremos para formar otro enlace con el N. Así, la regla del octeto también se cumple para este átomo:

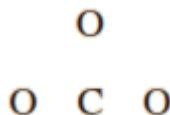


Debe asegurarse de que todos los átomos (excepto el H) cumplan con la regla del octeto. Cuente los electrones de valencia en el  $\text{HNO}_3$  (en los enlaces y en los pares libres). El resultado es 24, el mismo que el número total de electrones de valencia de tres átomos de O ( $3 \times 6 = 18$ ), un átomo de N (5), y un átomo de H (1).

# Estructura de Lewis

Ejemplo 2: ion carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ )

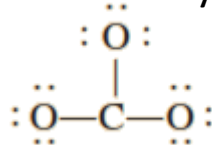
1. Elegir un esqueleto lo mas simétrico posible: C es menos electronegativo que el O, por lo tanto, es más probable que ocupe la posición central, como sigue:



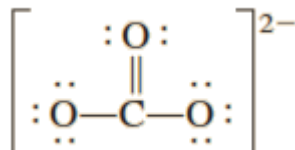
2. Los electrones de valencia (de las capas externas) son:

C	O	Carga anión	Total
4	$6 * 3$	2	24

3. Dibujamos un enlace covalente sencillo entre el C y cada O y se cumple con la regla del octeto para los átomos de O:

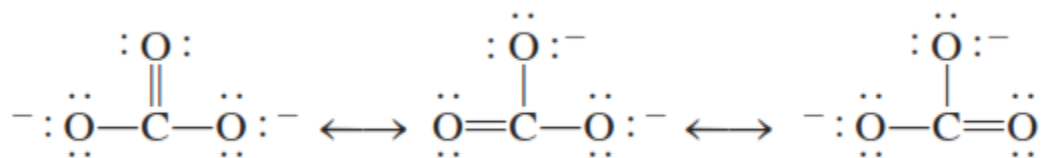


Esta estructura muestra los 24  $e^-$  pero la regla del octeto no se satisface para el carbono. Por lo tanto, debemos mover un par libre de uno de los átomos de O para formar otro enlace con C. Así, la regla del octeto también se satisface para el átomo de C.



# Resonancia

El término resonancia ya sugiere que se utilizan dos o más estructuras de Lewis para representar una molécula particular.



# Excepciones a la regla del octeto

## 1. Octeto incompleto

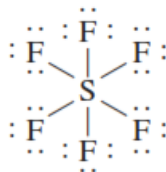
El número de electrones que rodean el átomo central de una molécula estable es inferior a ocho. Por ejemplo, el berilio, boro, aluminio y galio.

## 2. Número impar de electrones

Algunas moléculas contienen un número *impar de electrones* . Entre ellas se encuentra el óxido nítrico (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>)

## 3. Octeto expandido

Los elementos del tercer periodo de la tabla periódica en adelante forman algunos compuestos en los que hay más de ocho electrones alrededor del átomo central. Ej. SF<sub>6</sub>



## 2. Número impar de electrones

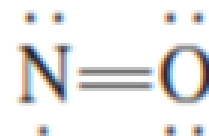
Puesto que requerimos un número par de electrones para completar ocho, la regla del octeto no puede cumplirse para todos los átomos en cualquiera de estas moléculas.

### Ejemplo: Monóxido de nitrógeno (NO)

$$N=8 \times 2=16$$

$$D=5+6=11$$

$$C=16-11=5 \text{ e}^-$$



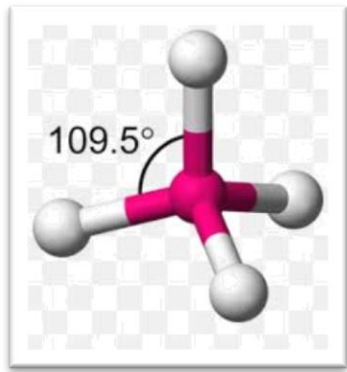
### Ejemplo: Dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>)

$$N=8 \times 3=24$$

$$D=5+6 \times 2=17$$

$$C=24-17=7 \text{ e}^-$$

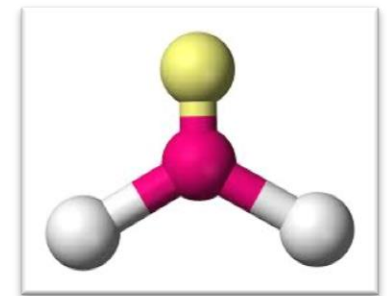




# Enlace químico: Teorías

- Teoría de repulsión de pares electrónicos de valencia (RPECV)
- Teoría del enlace de valencia (EV). Hibridación

Tanto la teoría de la **RPECV** como la de **EV** son complementarias para explicar como se produce el enlace y la geometría molecular.



# RPECV

1. Cada átomo enlazado se cuenta como un solo grupo de electrones, no importa si el enlace es sencillo, doble o triple.
2. Un par no compartido de los electrones de valencia del átomo central se cuenta como un solo grupo de electrones.

En moléculas con mas de un átomo central, se determina la distribución alrededor de cada átomo central, uno a la vez, con el fin de tener una imagen de la forma general de toda la molécula o ion.

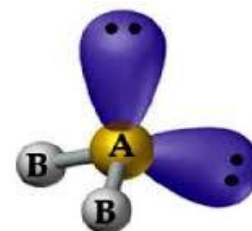
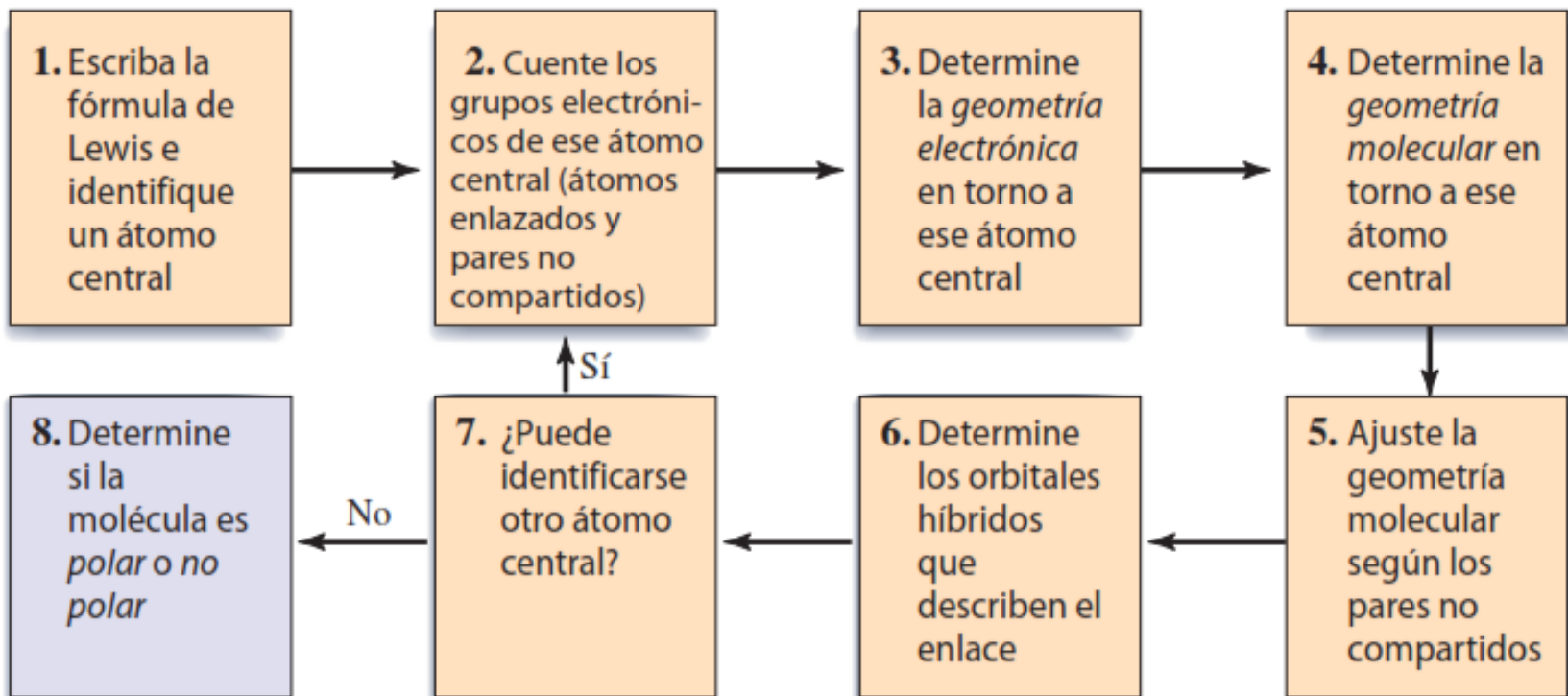
# EV

## **Hibridación:**

Mezcla de los orbitales atómicos de un átomo para formar nuevos orbitales híbridos con la misma capacidad electrónica y con propiedades y energías intermedias entre aquellos de los orbitales sin hibridar originales.



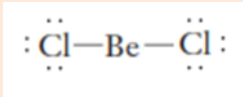
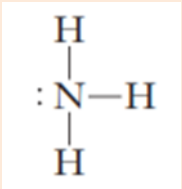
# Procedimiento para determinar la geometría electrónica y molecular



1. Escriba la fórmula de Lewis e identifique un átomo central

2. Cunte los grupos electrónicos de ese átomo central (átomos enlazados y pares no compartidos)

# Procedimiento: Paso 1 y 2

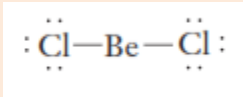
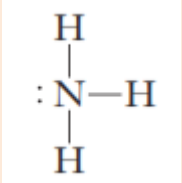
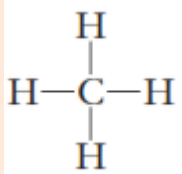
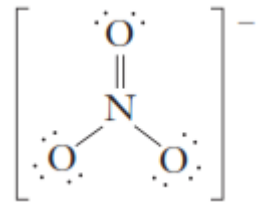
Fórmula	BeCl <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>
Estructura de Lewis				
Átomo central	Be	N		
Número de átomos enlazados al átomo central	2	3		
Número de pares <b>no enlazados</b> en el <i>átomo central</i>	0	1		
Número total de grupo de electrones en el átomo central	2	4		

1. Escriba la fórmula de Lewis e identifique un átomo central



2. Cuente los grupos electrónicos de ese átomo central (átomos enlazados y pares no compartidos)

# Procedimiento: Paso 1 y 2

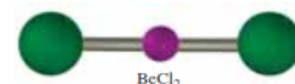
Fórmula	BeCl <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>
Estructura de Lewis				
Átomo central	Be	N	C	N
Número de átomos enlazados al átomo central	2	3	4	3
Número de pares <b>no enlazados</b> en el <i>átomo central</i>	0	1	0	0
Número total de grupo de electrones en el átomo central	2	4	4	3

3. Determine la *geometría electrónica* en torno a ese átomo central

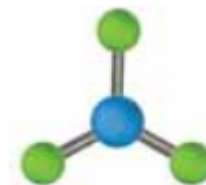
# Procedimiento: Paso 3

Los grupos de electrones se repelen entre sí y se ordenan alrededor del **átomo central** de manera que la repulsión entre ellos sea lo más pequeña posible.

Ejemplo! Dos grupos de electrones son más estables si se encuentran en lados opuestos del átomo central donde se repelen entre sí lo menos posible.



Tres grupos de electrones son más estables cuando ocupan los vértices de un triángulo equilátero.







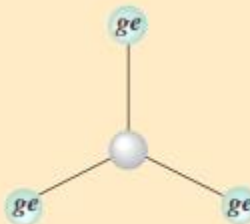
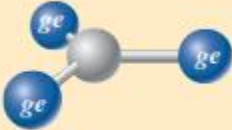

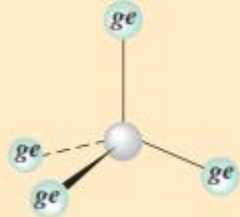

## Tener en cuenta!!

- ✿ Cada átomo enlazado se cuenta como un solo grupo de electrones, no importa si el enlace es sencillo, doble o triple.
- ✿ Un par no compartido de los electrones de valencia del átomo central se cuenta como un solo grupo de electrones.

3. Determine la *geometría electrónica* en torno a ese átomo central

# Procedimiento: Paso 3


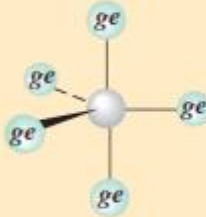
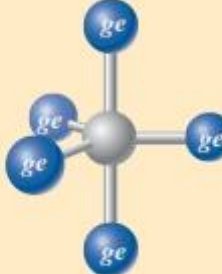


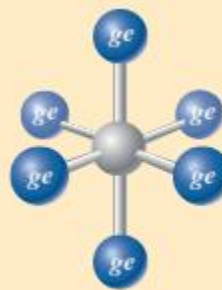
Tabla 8.1: Geometría eléctrica en función del número de grupos de electrones de electrones del átomo central

Grupos de electrones del átomo central	Geometría electrónica*			Modelos de barras y esferas
	Orientación de los grupos de electrones	Descripción; ángulos†	Dibujo lineal‡	
2		lineal; 180°		
3		trigonal plana; 120°		
4		tetraédrica; 109.5°		

3. Determine la *geometría electrónica* en torno a ese átomo central

# Procedimiento: Paso 3

Tabla 8.1: Geometría electrónica en función del número de grupos de electrones de electrones del átomo central

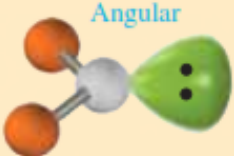


Grupos de electrones del átomo central	Geometría electrónica*			Modelos de barras y esferas
	Orientación de los grupos de electrones	Descripción; ángulos†	Dibujo lineal‡	
5		bipiramidal trigonal; 90°, 120°, 180°		
6		octaédrica; 90°, 180°		

4. Determine la geometría molecular en torno a ese átomo central

5. Ajuste la geometría molecular según los pares no compartidos

## Procedimiento: Paso 4 y 5

Tabla 8.3 Geometría molecular de especies con pares no compartidos (U) en el átomo central


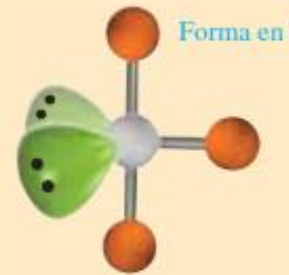

Fórmula general	Grupos de electrones <sup>a</sup>	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central	Pares no compartidos	Geometría molecular	Ejemplos
$AB_2U$	3	trigonal plana	$sp^2$	1		$O_3$ , $NO_2^-$ , $SO_2$
$AB_3U$	4	tetraédrica	$sp^3$	1		$NH_3$ , $SO_3^{2-}$
$AB_2U_2$	4	tetraédrica	$sp^3$	2		$H_2O$ , $NH_2^-$

4. Determine la geometría molecular en torno a ese átomo central

5. Ajuste la geometría molecular según los pares no compartidos

## Procedimiento: Paso 4 y 5

Tabla 8.3 Geometría molecular de especies con pares no compartidos (U) en el átomo central

Fórmula general	Grupos de electrones <sup>a</sup>	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central	Pares no compartidos	Geometría molecular	Ejemplos
AB <sub>4</sub> U	5	bipiramidal trigonal	$sp^3d$	1		SF <sub>4</sub>
AB <sub>3</sub> U <sub>2</sub>	5	bipiramidal trigonal	$sp^3d$	2		ICl <sub>3</sub> , ClF <sub>3</sub>
AB <sub>2</sub> U <sub>3</sub>	5	bipiramidal trigonal	$sp^3d$	3		XeF <sub>2</sub> , I <sub>3</sub> <sup>-</sup>

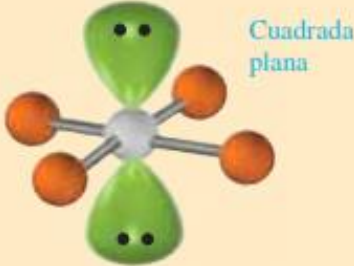


4. Determine la geometría molecular en torno a ese átomo central

5. Ajuste la geometría molecular según los pares no compartidos

## Procedimiento: Paso 4 y 5

**Tabla 8.3 Geometría molecular de especies con pares no compartidos (U) en el átomo central**

Fórmula general	Grupos de electrones <sup>a</sup>	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central	Pares no compartidos	Geometría molecular	Ejemplos
$AB_4U_2$	6	octaédrica	$sp^3d^2$	2	 Cuadrada plana	$XeF_4$ , $IF_4^-$

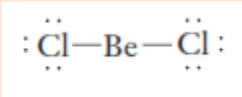
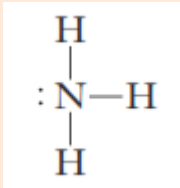
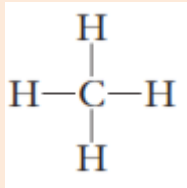
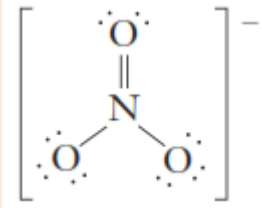
A: Átomo central

B: Átomos unidos al átomo central

U: Pares no compartidos

3. Determine la *geometría electrónica* en torno a ese átomo central

# Procedimiento: Paso 3, 4 y 5

Fórmula	BeCl <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>
Estructura de Lewis				
Geometría electrónica (paso 3)	lineal	tetraedrica		
Geometría molecular (paso 4 y 5)	lineal	Piramidal trigonal		

6. Determine los orbitales híbridos que describen el enlace

## Procedimiento: Paso 6

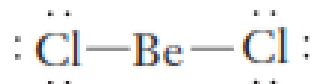
Un átomo puede combinar sus orbitales de la capa de valencia para formar una nueva serie de orbitales cuya energía total sea más baja que la que tendrían sus orbitales atómicos puros. Este proceso recibe el nombre de **hibridación**.

Grupos de electrones del átomo central	Geometría electrónica	Orbitales atómicos de la capa de valencia del átomo central que se mezclan	Hibridación
2	lineal	un $s$ , un $p$	$sp$
3	trigonal plana	un $s$ , dos $p$	$sp^2$
4	tetraédrica	un $s$ , tres $p$	$sp^3$
5	bipiramidal trigonal	un $s$ , tres $p$ , un $d$	$sp^3d$
6	octaédrica	un $s$ , tres $p$ , dos $d$	$sp^3d^2$

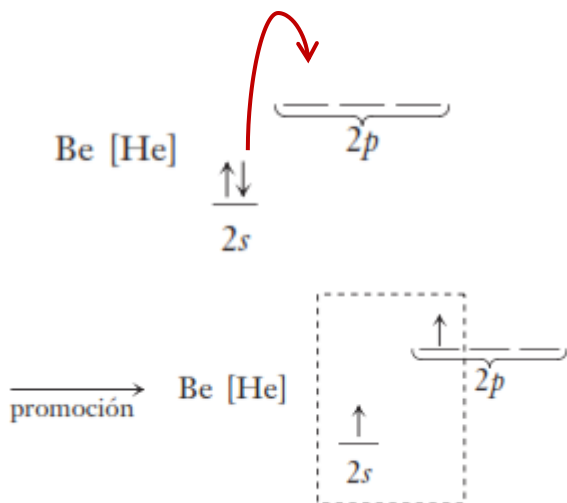
6. Determine los orbitales híbridos que describen el enlace

## Procedimiento: Paso 6

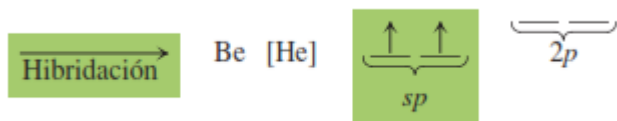
Ejemplo:  $\text{BeCl}_2$



El átomo de Be debe hacer algo para tener disponible un orbital por cada electrón enlazante del Cl.



El átomo de Be “promueve” a uno de los electrones apareados 2s a uno de los orbitales 2p, los orbitales cercanos de mayor energía.



Para que los dos orbitales del Be se vuelvan equivalentes, deben hibridarse para dar dos orbitales nuevos que reciben el nombre de **orbitales híbridos sp**.

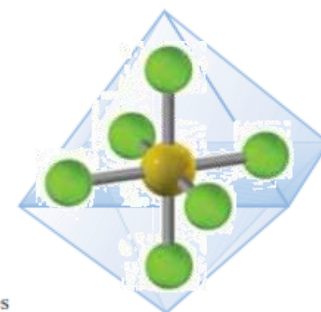
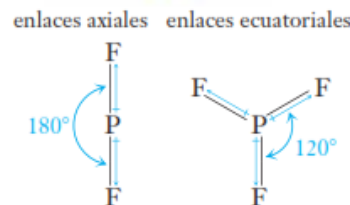
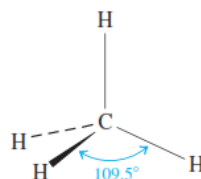
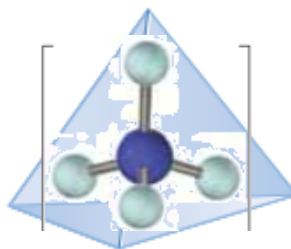
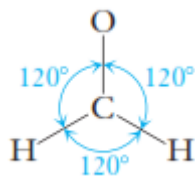
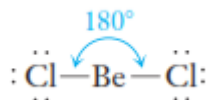
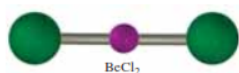
Los orbitales híbridos **sp** se describen como orbitales lineales y se dice que el Be tiene geometría electrónica lineal.

6. Determine los orbitales híbridos que describen el enlace

## Procedimiento: Paso 6

Los orbitales híbridos **sp** se describen como orbitales lineales y se dice que el Be tiene geometría electrónica lineal.

Siempre que haya **dos grupos de electrones** en torno al átomo central, la hibridación de éste siempre será **sp**. Las moléculas y iones **AB sin pares compartidos** en el átomo central tienen **geometría electrónica lineal, geometría molecular lineal**.

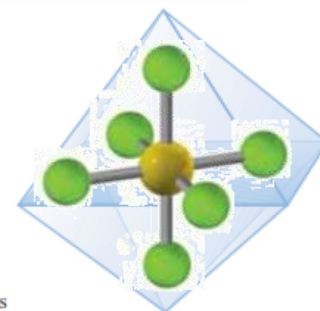
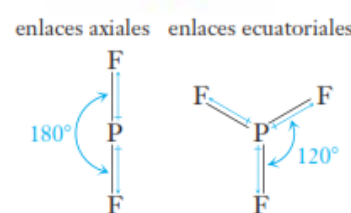
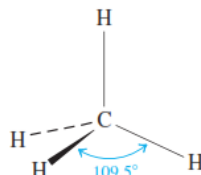
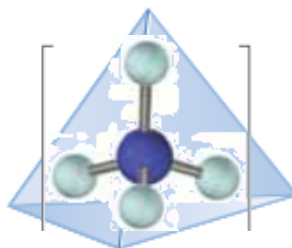
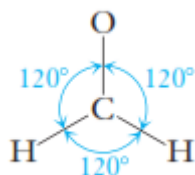
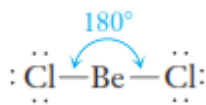
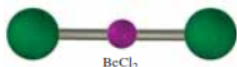


6. Determine los orbitales híbridos que describen el enlace



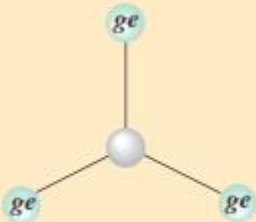

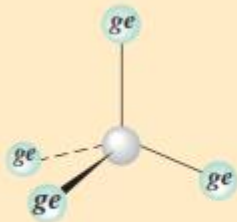

# Paso 6 Teoría del enlace de valencia (EV). Hibridación

Tabla 8.2 Relación entre geometría electrónica e hibridación

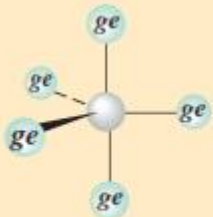

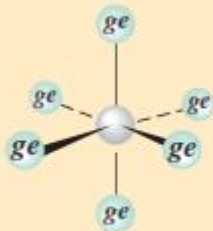

Grupos de electrones del átomo central	Geometría electrónica	Orbitales atómicos de la capa de valencia del átomo central que se mezclan	Hibridación
2	lineal	un $s$ , un $p$	$sp$
3	trigonal plana	un $s$ , dos $p$	$sp^2$
4	tetraédrica	un $s$ , tres $p$	$sp^3$
5	bipiramidal trigonal	un $s$ , tres $p$ , un $d$	$sp^3d$
6	octaédrica	un $s$ , tres $p$ , dos $d$	$sp^3d^2$



# Tabla 8.4 Resumen de las geometrías electrónica y molecular de moléculas y iones poliatómicos

Grupos de electrones ( $ge$ ) <sup>a</sup>	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central (ángulos)	Orientación del orbital híbrido	Ejemplos	Geometría molecular
2	 lineal	$sp$ (180°)		BeCl <sub>2</sub> HgBr <sub>2</sub> CdI <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> <sup>b</sup> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> <sup>c</sup>	lineal lineal lineal lineal lineal
3	 trigonal plana	$sp^2$ (120°)		BF <sub>3</sub> BCl <sub>3</sub> NO <sub>3</sub> <sup>-e</sup> SO <sub>2</sub> <sup>d,e</sup> NO <sub>2</sub> <sup>-d,e</sup> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> <sup>f</sup>	trigonal plana trigonal plana trigonal plana angular (AB <sub>2</sub> U) angular (AB <sub>2</sub> U) plana (trigonal plana en cada C)
4	 tetraédrica	$sp^3$ (109.5°)		CH <sub>4</sub> CCl <sub>4</sub> NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> SO <sub>4</sub> <sup>2--</sup> CHCl <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> <sup>d</sup> SO <sub>3</sub> <sup>2--d</sup> H <sub>3</sub> O <sup>++d</sup> H <sub>2</sub> O <sup>d</sup>	tetraédrica tetraédrica tetraédrica tetraédrica distorsionada tetraédrica piramidal (AB <sub>3</sub> U) piramidal (AB <sub>3</sub> U) piramidal (AB <sub>3</sub> U) angular (AB <sub>2</sub> U <sub>2</sub> )

# Tabla 8.4 Resumen de las geometrías electrónica y molecular de moléculas y iones poliatómicos

Grupos de electrones ( $ge$ ) <sup>a</sup>	Geometría electrónica	Hibridación del átomo central (ángulos)	Orientación del orbital híbrido	Ejemplos	Geometría molecular
5	 <p>bipiramidal trigonal</p>	$sp^3 d$ $(90^\circ, 120^\circ, 180^\circ)$		$PF_5$ $SbCl_5$ $SF_4^d$ $ClF_3^d$ $XeF_2^d$ $I_3^-^d$	bipiramidal trigonal bipiramidal trigonal sube y baja ( $AB_4U$ ) forma en T ( $AB_3U_2$ ) lineal ( $AB_2U_3$ ) lineal ( $AB_2U_3$ )
6	 <p>octaédrica</p>	$sp^3 d^2$ $(90^\circ, 180^\circ)$		$SF_6$ $SeF_6$ $PF_6^-^d$ $BrF_5^d$ $XeF_4^d$	octaédrica octaédrica octaédrica piramidal cuadrada ( $AB_5U$ ) cuadrada plana ( $AB_4U_2$ )



8. Determine  
si la  
molécula es  
*polar o no*  
*polar*

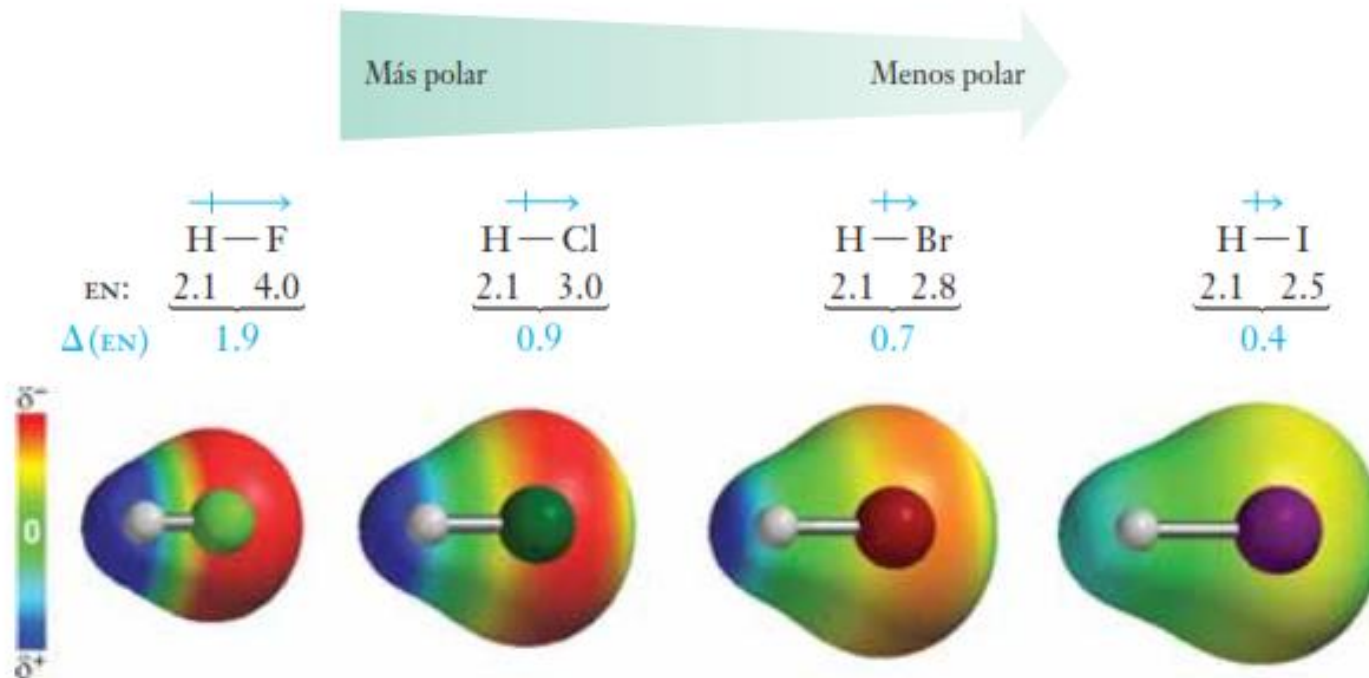
## Paso 8: Polaridad de la molécula

- Polaridad del enlace
- Distribución de los grupos electrónicos

# Polaridad del enlace

Enlace covalente no polar	Enlace covalente polar
Se da entre átomos idénticos (misma electronegatividad).	Se da entre átomos distintos (distinta electronegatividad).
Los electrones que comparten son atraídos por igual hacia ambos núcleos y, por lo tanto, pasan la misma cantidad de tiempo cerca de cada núcleo.	Los pares electrónicos se comparten de manera desigual.
La densidad electrónica es simétrica alrededor del plano perpendicular a la línea entre los dos núcleos.	La densidad electrónica experimenta distorsión en dirección del átomo más electronegativo, dejando ligeramente positivo al átomo de menor electronegatividad. Sobre el átomo más electronegativo se genera una “carga parcial negativa”, que se indica con $\delta^-$ , mientras que el otro extremo se coloca el $\delta^+$ .

# Polaridad del enlace: Enlaces covalente polares



La flecha más larga indica el dipolo más grande, o la mayor separación de la densidad electrónica de la molécula (consulte la tabla 7.5). A modo de comparación, los valores de  $\Delta(\text{EN})$  de algunos compuestos iónicos típicos 1:1 son RbCl, 2.1; NaF, 3.0; y KCl, 2.1.

# Distribución de los grupos electrónicos

Cuando una molécula tiene más de dos átomos unidos por enlaces polares, también debemos tomar en cuenta la *distribución* de los dipolos de enlace resultantes para decidir si la molécula es o no polar; por lo que en este caso utilizaremos la teoría rpecv para deducir la geometría molecular.

Si los dipolos de enlace están distribuidos en forma tal que se cancelan, la molécula resultante es **no polar**

Si los *dipolos* de enlace están distribuidos en forma tal que **NO** se cancelan, la molécula resultante es **polar**.

