

*Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y
Agrimensura
Universidad Nacional del Nordeste*



QUÍMICA GENERAL

**Carreras: Licenciatura en Ciencias Químicas,
Profesorado en Ciencias Químicas y del Ambiente,
Bioquímica**

UNIDAD III

1

ENLACE QUÍMICO

Es la fuerza que mantiene unido a los átomos en: i) las moléculas de los elementos (O_2 , N_2 , F_2 , Cl_2 , etc); ii) en los compuestos (CO_2 , H_2O , $NaCl$); y iii) en los metales. Los átomos se combinan con el fin de alcanzar una configuración electrónica más estable. La estabilidad máxima se alcanza cuando un átomo es isoelectrónico con un gas noble (regla del dueto y octeto).

Las uniones químicas se clasifican:

- **Enlace Iónico o Electrovalente**
- **Enlace Covalente**
 - **Covalente no polar**
 - **Covalente polar**
 - **Covalente dativo o coordinado**

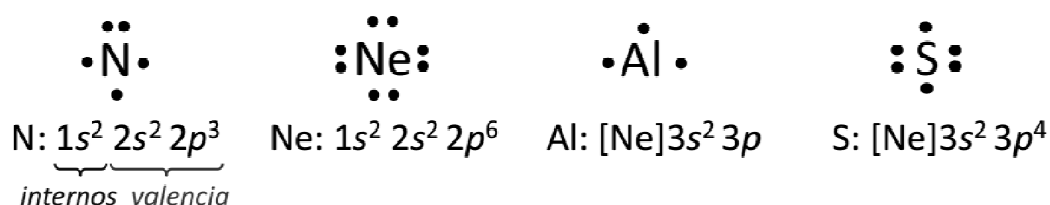
2

Electrones de Valencia

Son los electrones que se encuentran en los niveles mas elevados de energía del átomo, siendo estos los responsables de la interacción entre átomos de la misma o distinta especie. Es decir, los electrones de valencia son los responsables de la unión química entre los átomos.

Símbolos de Lewis (Elementos Representativos)

Es una forma útil de mostrar los electrones de valencia de los átomos y de seguirles la pista durante la formación de enlaces. Para representar a los átomos por medio de estos símbolos: Colocamos puntos en los lados del símbolo hasta un máximo de 4 y después emparejamos puntos hasta alcanzar un octeto.



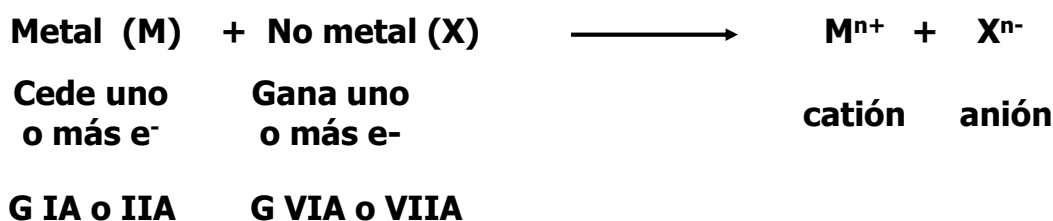
3

	1A 1	2A 2						7A 17	8A 18
1	H·								He:
2	Li·	Be·		·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Ne·
3	Na·	Mg·		·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	·Ar·
4	K·	Ca·		·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	·Kr·
5	Rb·	Sr·		·In·	·Sn·	·Sb·	·Te·	·I·	·Xe·
6	Cs·	Ba·		·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po·		·Rn·

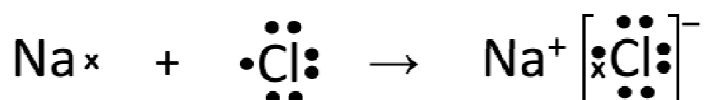
4

Enlace Iónico

El **enlace iónico** se produce cuando se combinan un metal (comúnmente de los grupos IA o IIA) y un no metal (comúnmente de los grupos VIA y VIIA). El metal alcanza la configuración electrónica de gas noble perdiendo electrones (convirtiéndose en **catión**) y el no metal gana electrones (convirtiéndose en un **anión**).



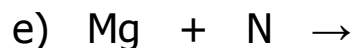
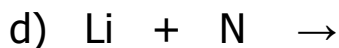
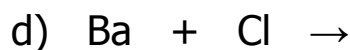
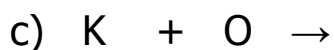
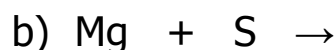
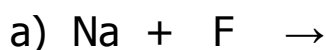
Ejemplo



5

Ejercicios

Escriba los símbolos de Lewis de los siguientes átomos, complete la ecuación y escriba la estructura de Lewis del compuesto iónico que se forma.



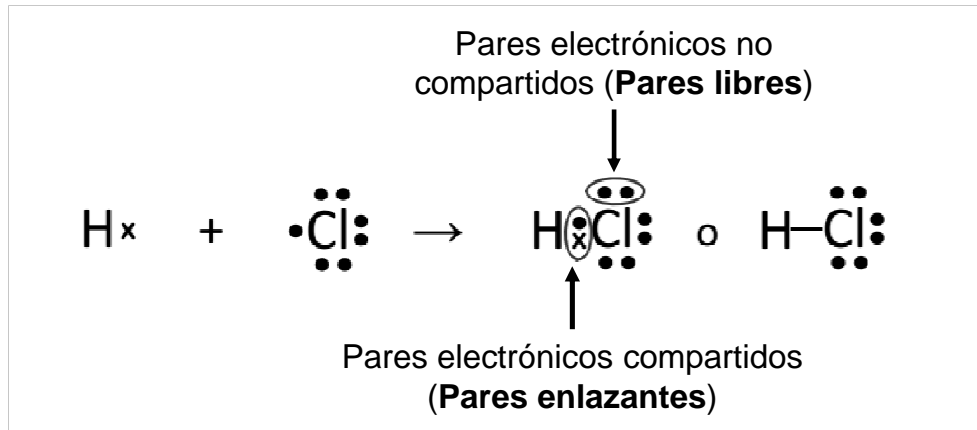
Propiedades de Los Compuestos Iónicos

- Los compuestos iónicos son sólidos en condiciones ordinarias de presión y temperatura.
- Los sólidos iónicos son enormes agregados de cationes y aniones que tienen una disposición espacial determinada.
- Tienen puntos de fusión altos (por lo general $> 400^{\circ}\text{C}$)
- Muchos son solubles en agua.
- La mayoría son insolubles en disolventes orgánicos.
- Al estado sólido son malos conductores de la corriente eléctrica.
- Los compuestos fundidos y las soluciones acuosas conducen la corriente eléctrica.

Enlace Covalente

La formación de un enlace covalente resulta de la compartición de pares electrónicos entre los átomos interactuantes.

Los pares de electrones que forman parte de un enlace se denominan pares enlazantes y los pares electrónicos que no intervienen en el enlace se llaman pares libres.

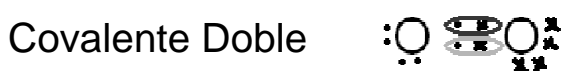


Electronegatividad (χ): Es una medida de la capacidad que tienen los átomos de atraer hacia si los electrones del enlace.

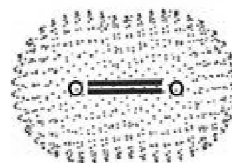
7

Clasificación del Enlace Covalente

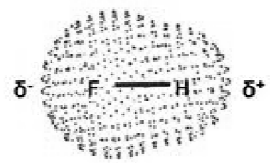
Según número de electrones que participan en el enlace



Según la diferencia de electronegatividad



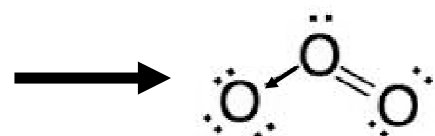
Enlace Covalente Apolar $\Delta\chi = 0$



Enlace covalente Polar $\Delta\chi > 0$

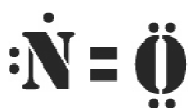
Enlace covalente coordinado o dativo:

El par electrónico compartido proviene de uno de los átomos enlazados.

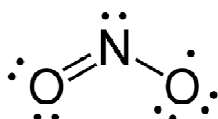


Excepciones a la Regla del Octeto

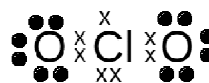
a) Moléculas con número impar de electrones



NO (15 e⁻)



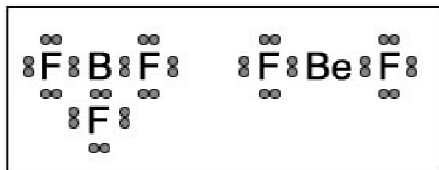
NO₂ (23 e⁻)



ClO₂ (33 e⁻)

Radicales: Son especies *muy reactivas*, porque pueden utilizar el electrón desapareado para formar un nuevo enlace.

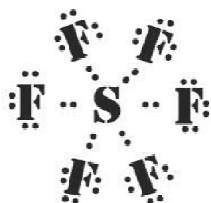
b) Moléculas en las que un átomo tiene menos de 8 electrones



BF₃: el B tiene 6 e⁻

BeF₂: el Be tiene 4 e⁻

b) Moléculas en las que un átomo tiene mas de 8 electrones



SF₆: el S tiene 12 e⁻

Octeto expandido

9

Propiedades de los Compuestos Covalentes

Los compuestos covalentes pueden ser:

a) Moleculares

- Se caracterizan por existir como moléculas independientes
- Se presentan en estado gaseoso (Ej.: Cl₂), líquido (Ej.: Br₂), Sólido (Ej.: I₂)
- Sus moléculas pueden ser polares o no polares.
- Son poco solubles en agua.
- No conducen la corriente eléctrica.

b) Macromoleculares

- ✓ Son grandes agregados de átomos, que se hallan unidos por enlaces covalentes (Ej.: diamante, grafito, cuarzo).
- ✓ Poseen elevado punto de fusión.
- ✓ Son poco volátiles.
- ✓ No conducen la corriente eléctrica con excepción del grafito

10

Pasos a seguir para dibujar las estructuras de Lewis de moléculas e iones poliatómicos

- a) Escribir un “**esqueleto simétrico**” para la molécula o ión poliatómico. Se elige como átomo central, el átomo con menor energía de ionización (I) o menor electronegatividad (χ). El hidrógeno y el flúor por lo general ocupan posiciones terminales.
- b) Distribuir simétricamente los átomos alrededor del átomo central.
- c) En los oxoácidos **por lo general** los átomos de H se enlazan a los átomos de oxígeno, y estos son los que están unidos al átomo central.
- d) Un átomo de halógeno terminal siempre presenta un enlace simple y tres pares libres de electrones.
- e) Aplicar el **Método de Cálculo**.

11

Método de Cálculo

1) Electrones Necesarios (EN): número de electrones necesarios para que todos los átomos de la molécula o ion tengan ocho electrones en la última capa, excepto el hidrógeno que necesita dos electrones.

2) Electrones de Valencia (EV): es el número total de electrones, que se calcula en base a los electrones que tiene cada átomo en su última capa.

- Para iones cargados negativamente, *sumar* al total, el número de electrones igual a la carga del anión.
- Para iones cargados positivamente, *restar* al total, el número de electrones igual a la carga del catión.

3) Electrones Compartidos (EC): el número total de electrones compartidos en la molécula o ión, se calcula usando la relación:

$$EC = EN - EV$$

4) Electrones No Compartidos (ENC): Se calcula por la relación:

$$ENC = EV - EC$$

Ejercicios:

Aplique el Método de Cálculo y dibuje las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas. a) Cl_2 ; b) O_2 ; c) N_2 ; d) HCl ; e) H_2O ; NH_3 ; f) HNO_3 ; f) SO_3 ; g) H_2SO_4 ; h) H_2CO_3 ; i) NO_3^- ; j) SO_3^{2-} .

Polaridad de las moléculas - momento dipolar

- La polaridad de una molécula viene dada en términos de su **momento dipolar**, que es una medida de la magnitud del desplazamiento de la carga en un enlace covalente polar:

$$\boxed{\mu = \delta d} \quad \begin{cases} \mu \rightarrow \text{momento dipolar} \\ \delta \rightarrow \text{carga parcial} \\ d \rightarrow \text{distancia} \end{cases}$$

- El momento dipolar de las moléculas habitualmente se expresa en Debye (D): $1 \text{ D} = 3.33564 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$
- Si el momento dipolar de una molécula es nulo, la molécula es **apolar**; en caso contrario, es **polar**.

13

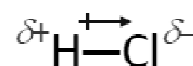
Polaridad de las moléculas - momento dipolar

- En las **moléculas diatómicas**, el momento dipolar de la molécula se puede identificar con el momento dipolar de enlace.

Ejemplos:

Molécula	ΔEN	μ
HF	1.9	1.91 D
HCl	0.9	1.03 D
HBr	0.7	0.79 D
HI	0.4	0.38 D
H ₂	0	0 D

$\Delta \text{EN} = \Delta \chi = \text{Diferencia de electronegatividad}$

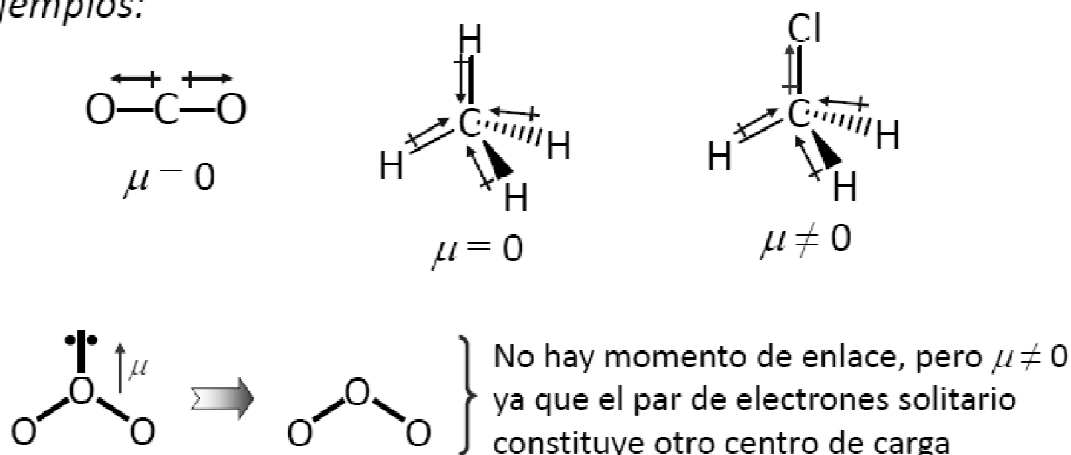


14

Polaridad de las moléculas - momento dipolar

- El momento dipolar de las **moléculas poliatómicas** depende de la geometría de grupos de electrones.

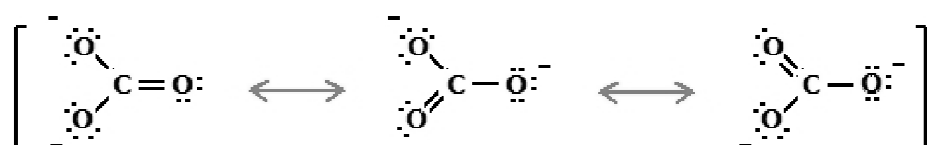
■ *Ejemplos:*



15

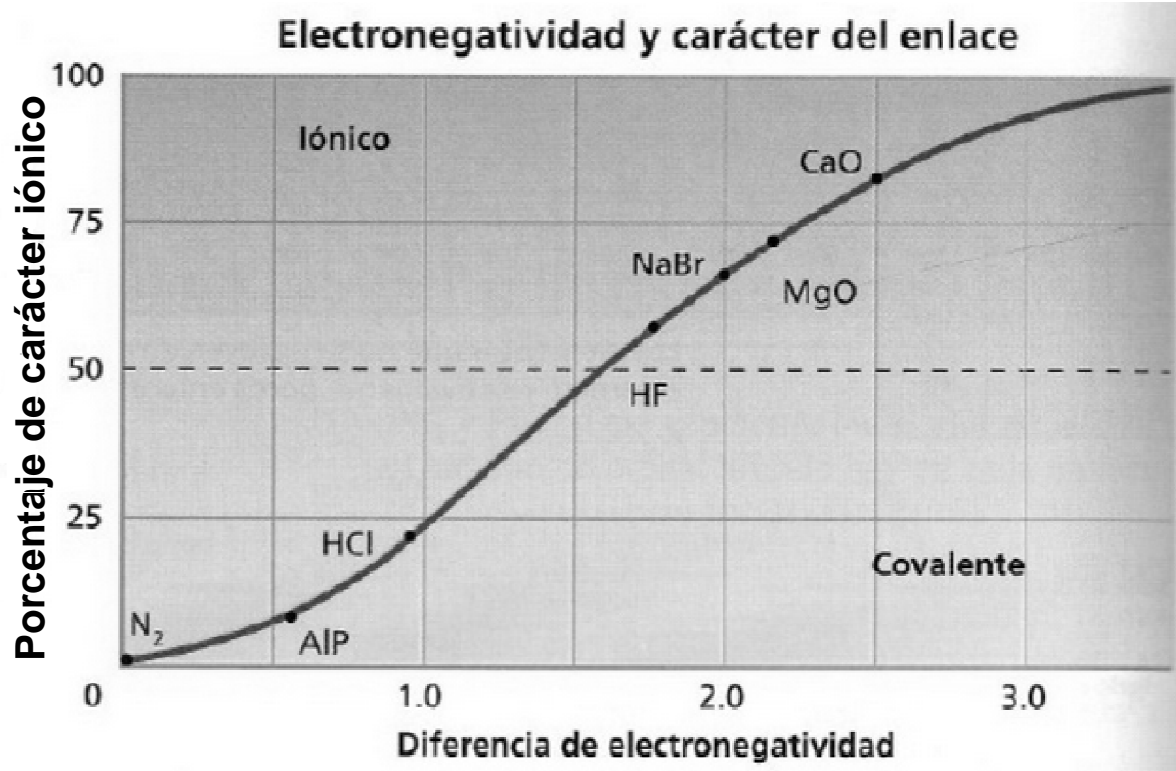
Estructuras Resonantes

La resonancia es una manera de expresar la idea de que un compuesto puede tener dos o más estructuras de Lewis.



Mediciones físicas demuestran que ninguna de estas tres estructuras describe exactamente el ion carbonato real. En cada estructura, por ejemplo, se observan dos tipos de enlaces entre el carbono y el oxígeno (uno simple y uno doble), sin embargo experimentalmente se observa que los tres enlaces que forma el carbono con el oxígeno tienen la misma longitud de enlace (que es de 1,31 Angstrom). La longitud entre el carbono y el oxígeno tendría que ser 1.41 Angstrom para el enlace simple y de 1,20 la del enlace doble. Se puede concluir que la estructura “real” del ion carbonato es una estructura híbrida de las tres estructuras límites; es un híbrido de resonancia.

Ejercicios. Dibuje las estructuras resonantes de las especies químicas. a) O_3 , b) SO_2 , c) NO_3^- .



Ejercicios. Para cada par de compuestos, determine cuál tiene enlaces con mayor carácter iónico. a) HCl o HI, b) PH_3 o NH_3 , c) SO_2 o NO_2 , d) CH_4 o CF_4 .

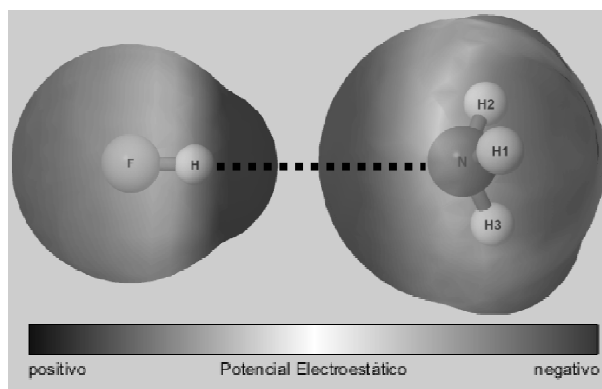
17

Para Pensar. Hay enlaces 100% covalentes? y 100% iónicos?

Potencial electrostático Molecular

Es un mapa tridimensional molecular que muestra por medio de un código de colores las regiones de la molécula que tienen exceso y deficiencia de carga electrónica.

Permite predecir: La reactividad Química, Direccionalidad de las interacciones moleculares, comportamiento ácido base, etc, etc.



18

Interacciones Moleculares

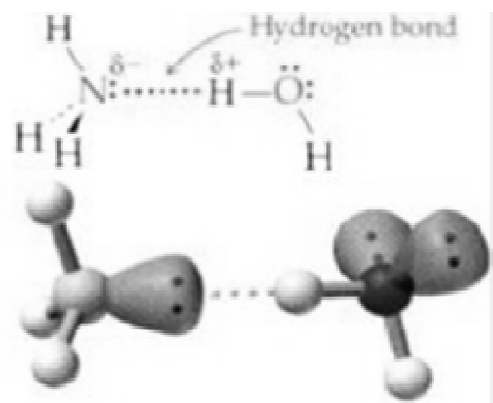
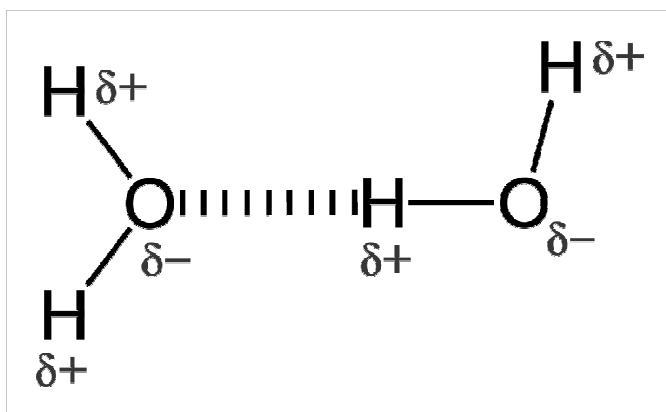
Son interacciones atractivas entre moléculas, cuyas energías de enlace son menores que las correspondientes a la energías de los enlaces iónicos, covalentes o metálicos. Existen varios tipos:

- Enlace de hidrógeno
- Enlace de halógeno
- Enlace de berilio
- Interacciones pi stacking
- etc, etc

19

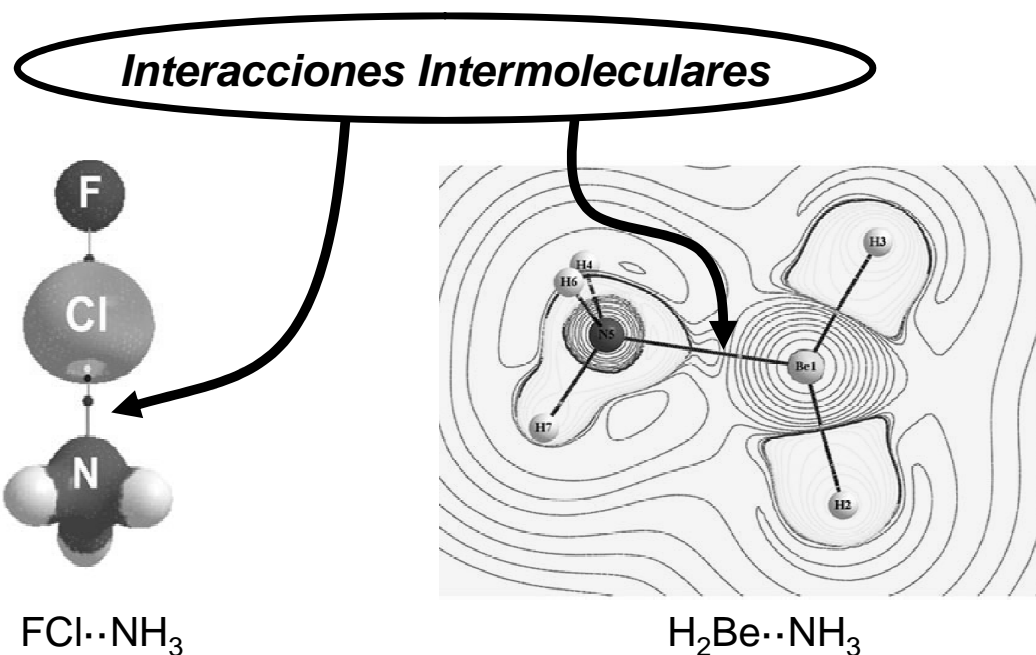
Enlace de Hidrógeno

Es una interacción atractiva entre un átomo de hidrógeno unido covalentemente a otro átomo (normalmente electronegativo) y un átomo o grupo de átomos capaz de proveer densidad electrónica.



20

Otras Interacciones



Enlace de halógeno

Duarte, Darío JR; Peruchena, NM
J Mol Model **2013**, 19:2035–2041

Enlace de berilio

K. Eskandari J Mol Model **2012**, 18:3481–3487

Bibliografía:

- Atkins, P. y Jones, L. “Principios de Química. Los caminos del descubrimiento”. Editorial Medica Panamericana. 2012.
- Chang, R. “Química”. McGraw-Hill Interamericana de México, S.A. de C. V. México. 2006.
- Whitten, K., Davis, R., Peck, M. Química General. McGraw-Hill/Interamericana de España S.A.U. 1998
- Atkins, P. y Jones, L. “Química. Moléculas. Materia. Cambio”. Ediciones Omega S.A. Barcelona. España. 1998
- Brown, T., LeMay, H., Bursten, B. “Química la Ciencia Central”. Prentice Hall Hispanoamericana S.A. México. 1998.
- Burns. “Fundamentos de Química”. Prentice Hall. 1996.