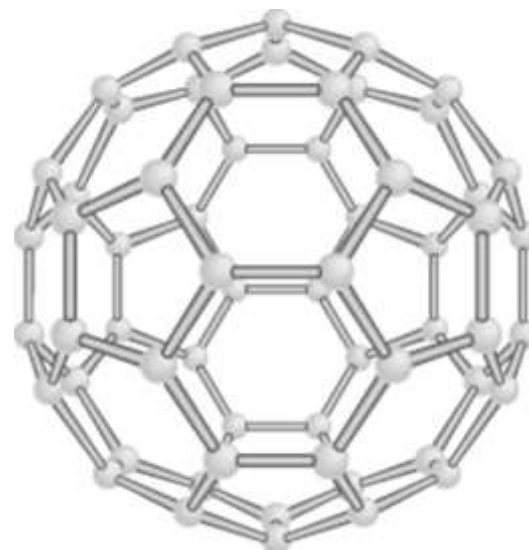
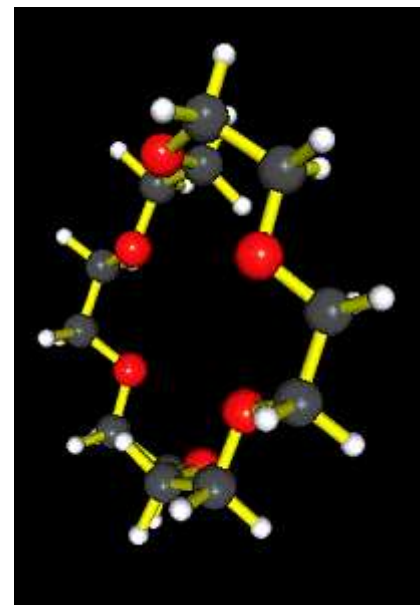


# UNIDAD 3:

## Uniones Químicas



Cap. 9 y 10 del Raymond Chang

## Postulados de la Teoría de Lewis

1. Los electrones ( $e^-$ ) de valencia participan en el enlace químico.
2. En algunos casos se transfieren  $e^-$  de un átomo a otro, formándose iones (+) y (-) que se atraen mediante fuerzas electrostáticas llamadas Enlaces Iónicos.
3. En otros casos se comparten uno o mas pares de  $e^-$  , generando un enlace Covalente.
4. Los  $e^-$  se transfieren o comparten de manera que los átomos adquieren una configuración estable. En general es una configuración de gas noble con 8  $e^-$  de valencia que constituyen un **octeto**.

***Los electrones de valencia*** son los últimos electrones de un orbital en un átomo, que son los causantes de los enlaces químicos.

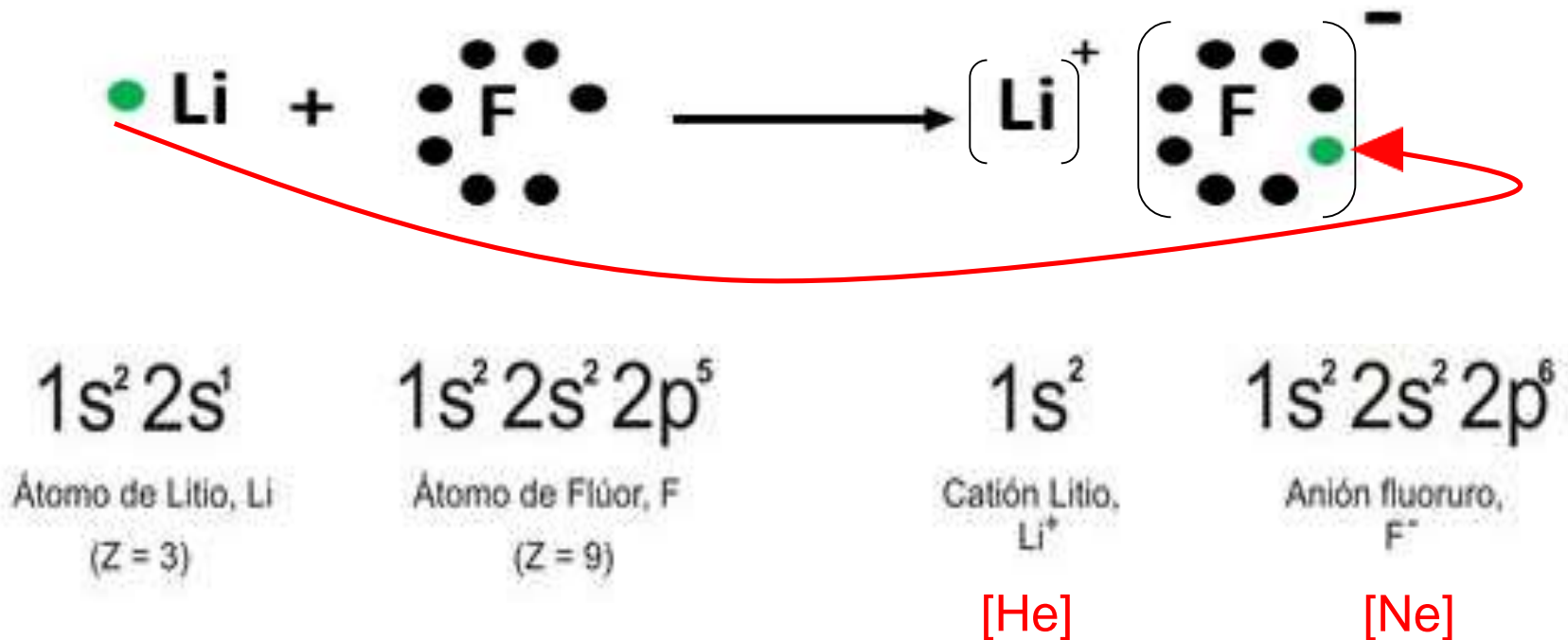
<u>Grupo</u>	<u>e<sup>-</sup> configuración</u>	<u>N° e<sup>-</sup> de valencia</u>
1A	ns <sup>①</sup>	1
2A	ns <sup>②</sup>	2
3A	ns <sup>②</sup> np <sup>①</sup>	3
4A	ns <sup>②</sup> np <sup>②</sup>	4
5A	ns <sup>②</sup> np <sup>③</sup>	5
6A	ns <sup>②</sup> np <sup>④</sup>	6
7A	ns <sup>②</sup> np <sup>⑤</sup>	7

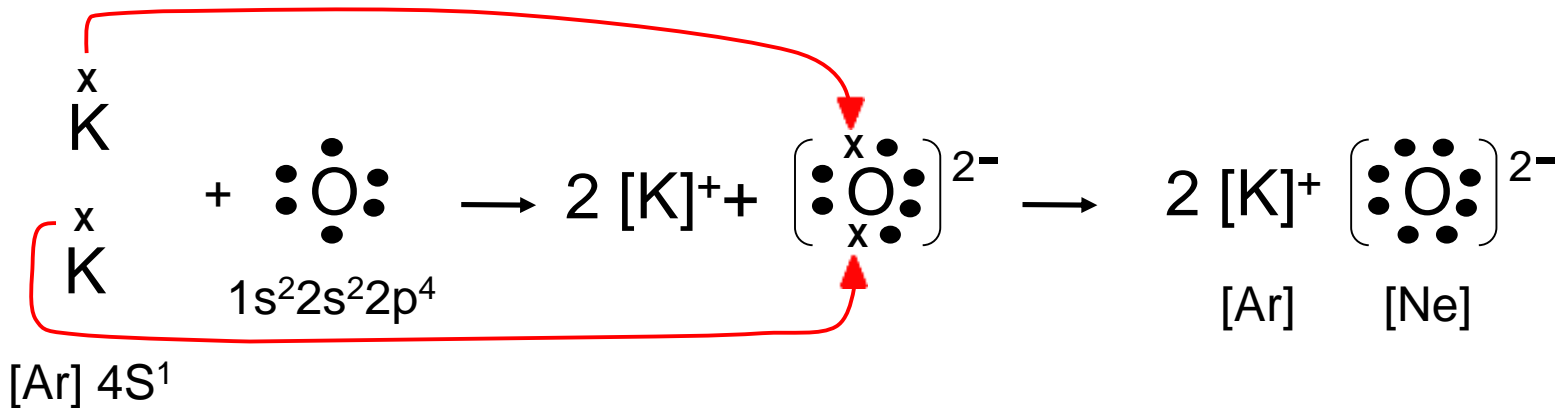
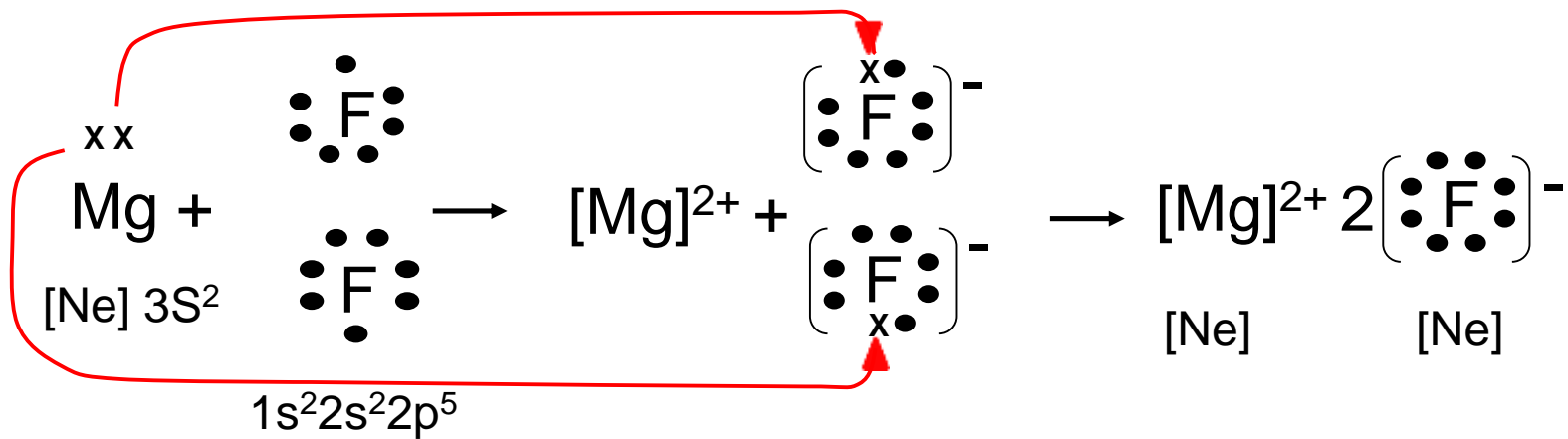
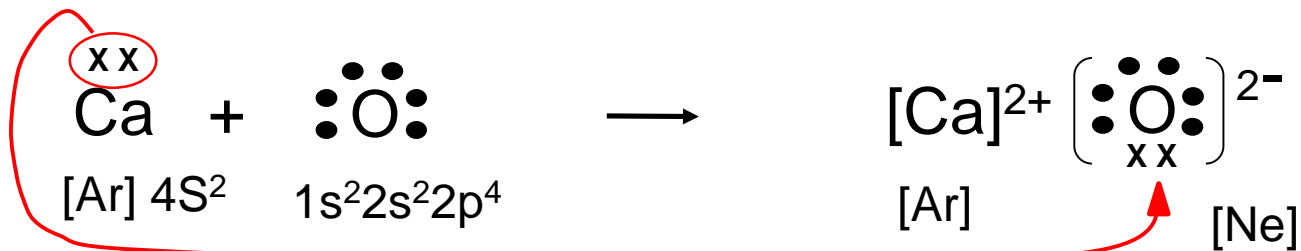
# Estructura de Lewis para los elementos representativos y gases nobles

[illegible]

# ENLACE IÓNICO

Resulta de las interacciones electrostáticas entre iones. Hay una transferencia de electrones de un átomo a otro.





# ¿Cómo evaluamos la estabilidad de un compuesto iónico?

## ENERGÍA RETICULAR

Es la energía que se requiere para separar completamente un mol de un compuesto sólido en sus iones gaseosos.

Energía Potencial (Ley de Coulomb)

$$E = k \frac{Q_+ Q_-}{r}$$

$Q_+$  es la carga del catión

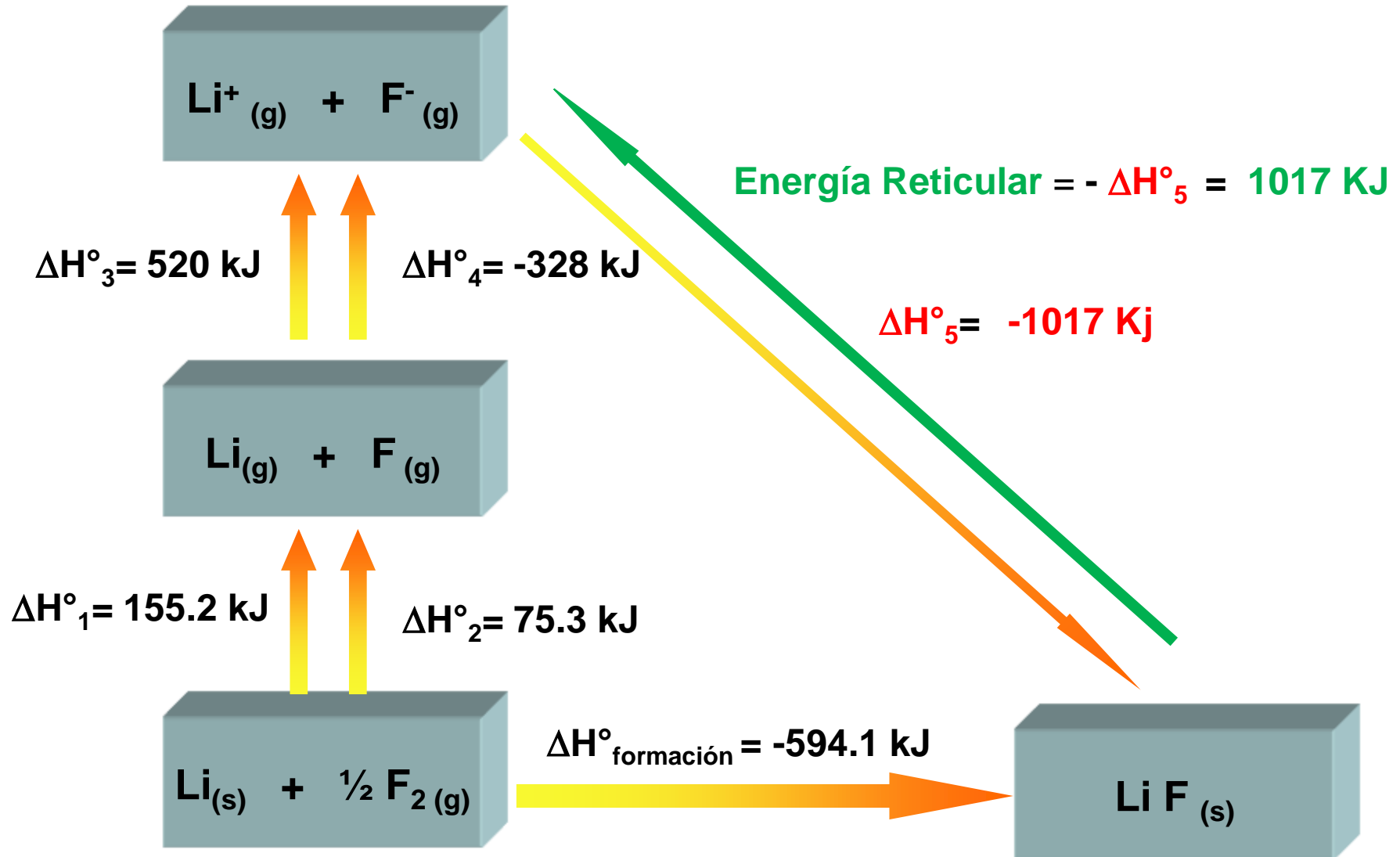
$Q_-$  es la carga del anión

$r$  es la distancia entre ambos

La energía es directamente proporcional a  $Q$ , e inversamente proporcional a  $r$ .

<u>Compuesto</u>	<u>Energía de separación</u>	
MgF <sub>2</sub>	2957	$Q = +2, -1$
MgO	3938	$Q = +2, -2$
LiF	1036	$r \text{ F}^- < r \text{ Cl}^-$
LiCl	853	

# Ciclo de Born-Haber para determinar la energía reticular



$$\Delta H^\circ_{\text{formación}} = \Delta H^\circ_1 + \Delta H^\circ_2 + \Delta H^\circ_3 + \Delta H^\circ_4 + \Delta H^\circ_5$$



Compuestos	Energía reticular (kJ/mol)	Puntos de fusión (°C)
LiF	1017	845
LiCl	828	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgCl <sub>2</sub>	2527	714
Na <sub>2</sub> O	2570	Sub*
MgO	3890	2800

\*Na<sub>2</sub>O sublimes at 1275°C.

# ENLACE COVALENTE

**Enlace covalente:** Resulta de compartir un par de electrones entre dos átomos. Se trata de alcanzar el mismo número de electrones en la capa de valencia que los gases nobles más cercanos a ellos en la tabla periódica (regla del octeto).

## ESTRUCTURAS DE LEWIS

1. Elegir un esqueleto simétrico.
2. Dibuje la estructura del compuesto mostrando qué átomos están conectados con otros. Coloque el elemento menos electronegativo al centro.
3. Los átomos de oxígeno no se enlazan entre sí, salvo en  $O_2$  y  $O_3$ , los peróxidos y superóxidos.
4. El hidrógeno y el fluor ocupan posiciones terminales
5. Calcule el número total de electrones de valencia. Agregue 1 por cada carga negativa y elimine 1 por cada carga positiva.
6. Complete los octetos de electrones para todos los elementos, excepto para el **H** (**2 e<sup>-</sup>**), **Be** (**4 e<sup>-</sup>**), **Al** y **B** (**6 e<sup>-</sup>**) .
7. Forme enlaces dobles o triples en el átomo central cuando sea necesario.

Escriba la estructura de Lewis para el  $\text{CCl}_4$ .

**Paso 1:** El C es el átomo central ya que es menos electronegativo que el Cl.

**Paso 2:** Contar los electrones NECESARIOS (N) para completar el octeto.  
Teniendo en cuenta la excepciones al octeto.

$$\text{C} = 8 \text{ e}^- \text{ y } \text{Cl} = 8 \text{ e}^- \rightarrow \text{N} = 8 + (4 \times 8) = \mathbf{40 \text{ electrones NECESARIOS}}$$

**Paso 3:** Contar los electrones DISPONIBLES (D) de valencia que forman parte de la estructura (agregar o quitar tantas unidades como carga negativas o positivas tenga el compuesto).

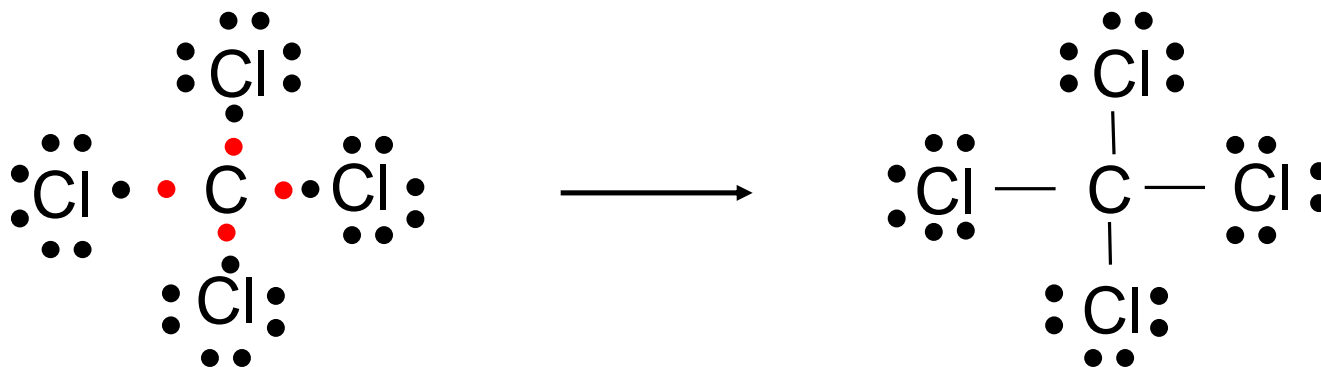
C = 4  $\text{e}^-$  de valencia, conf. externa ( $2s^2 2p^2$ ) y el Cl = 7  $\text{e}^-$  de valencia conf. externa ( $3s^2 3p^5$ )

$$\text{D} = 4 + (4 \times 7) = \mathbf{32 \text{ electrones de valencia = DISPONIBLES}}$$

**Paso 4:** Calcular los  $\text{e}^-$  COMPARTIDOS  $\text{C} = \text{N} - \text{D} = 40 - 32 = 8 \text{ e}^-$  **COMPARTIDOS, 4 enlaces**

**Paso 5:** Dibujar enlaces simples entre los átomos de C y Cl completando los octetos.

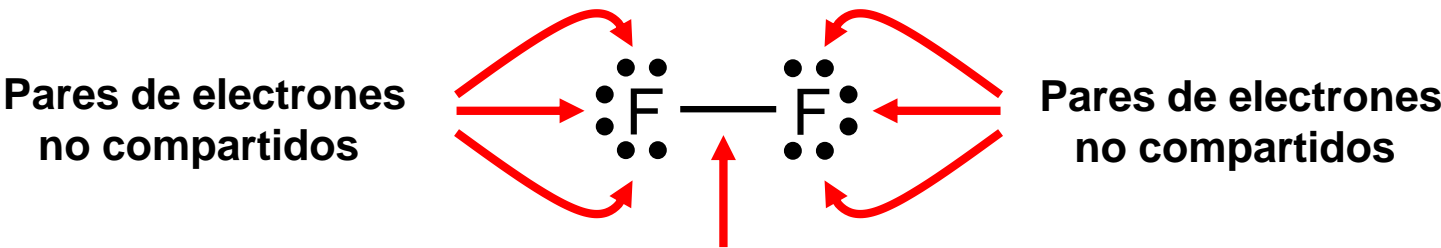
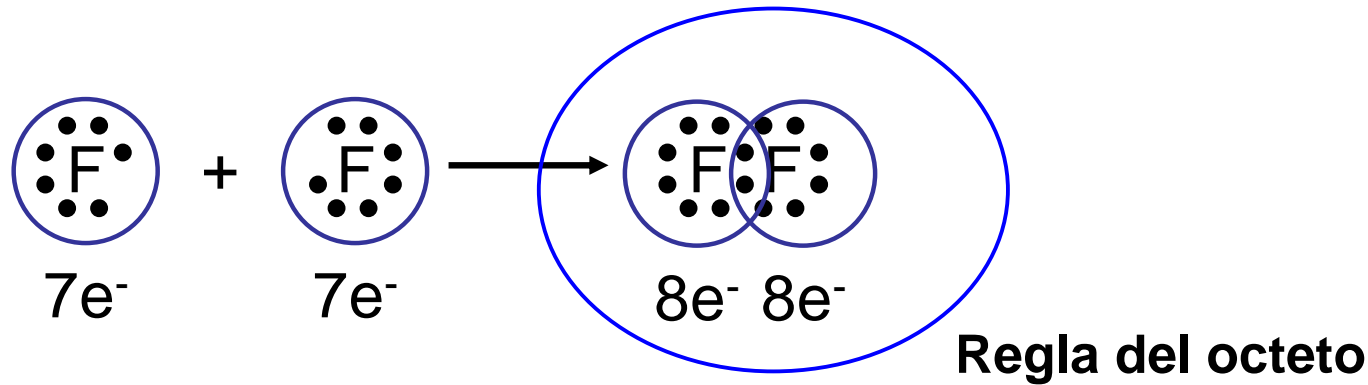
$$\text{C} = \text{N} - \text{D} = (8 + 4 \times 8) - (4 + 7 \times 4) = 40 - 32 = 8 \text{ (8 e}^- \text{ compartidos, por lo tanto 4 enlaces)}$$



# Estructura de Lewis para F<sub>2</sub>

$C = N - D = (8 + 8) - (7 + 7) = 16 - 14 = 2$  (2 e- compartidos, por lo tanto 1 enlace)

14 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

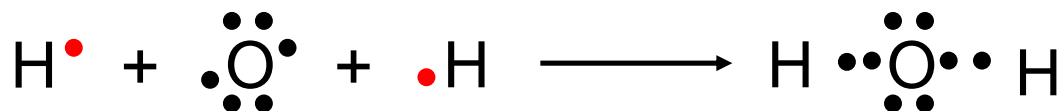


**Enlace Simple:** dos átomos comparten un par de electrones

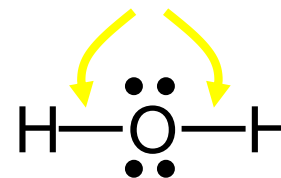
## Estructura de Lewis para el agua H<sub>2</sub>O

$$C = N - \textcircled{D} = (2 \times 2 + 8) - (1 \times 2 + 6) = 12 - \textcircled{8} = 4 \quad (4 \text{ e- compartidos, por lo tanto 2 enlaces})$$

8 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



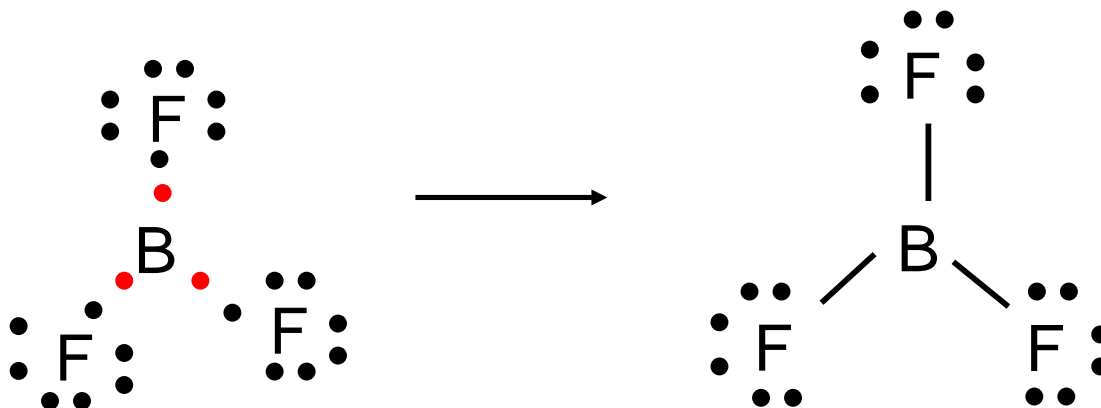
Enlace covalente simple



## Estructura de Lewis para BF<sub>3</sub> (Excepción a la regla del octeto)

$$C = N - \textcircled{D} = (3 \times 8 + 6) - (7 \times 3 + 3) = 30 - \textcircled{24} = 6 \quad (6 \text{ e- compartidos, por lo tanto 3 enlaces})$$

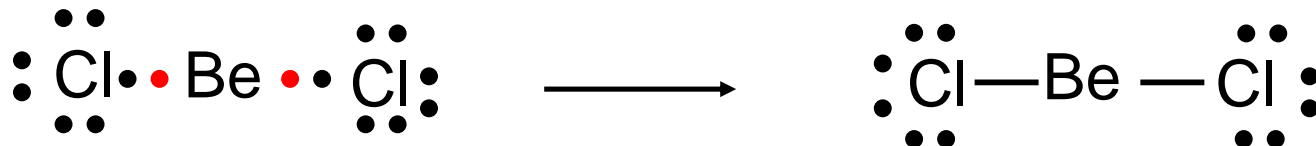
24 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



## Estructura de Lewis para el $\text{BeCl}_2$ (Excepción a la regla del octeto)

$$C = N - \textcircled{D} = (2 \times 8 + 4) - (7 \times 2 + 2) = 20 - \textcircled{16} = 4 \quad (4 \text{ e}^- \text{ compartidos, por lo tanto 2 enlaces})$$

16 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

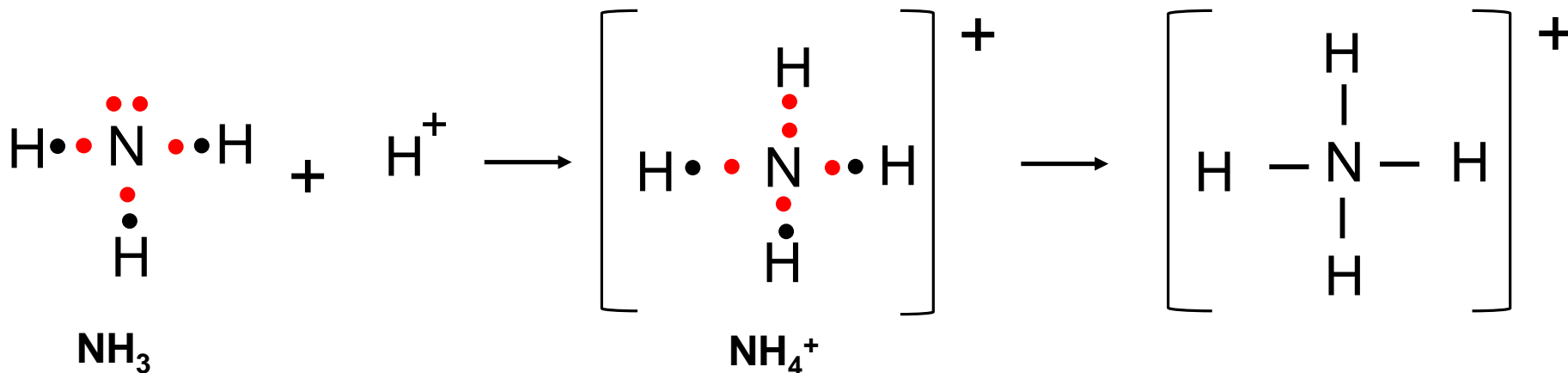


## Estructura de Lewis para el amonio $\text{NH}_4^+$

**Resto** un electrón por cada carga positiva y **Sumo** un electrón por cada carga negativa.

$$C = N - \textcircled{D} = (8 + 4 \times 2) - (5 + 4 \times 1 - \textcircled{1}) = 16 - \textcircled{8} = 8 \quad (8 \text{ e}^- \text{ compartidos, por lo tanto 4 enlaces})$$

8 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

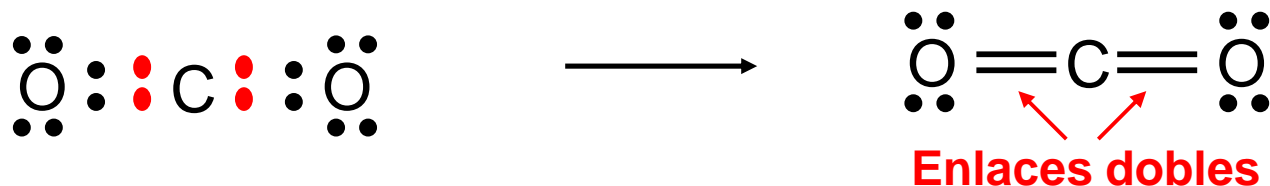


## Estructura de Lewis para CO<sub>2</sub>

**Doble enlace:** dos átomos comparten dos pares de electrones

$$C = N - \textcircled{D} = (8+8 \times 2) - (4+6 \times 2) = 24 - \textcircled{16} = 8 \quad (8 \text{ e- compartidos, por lo tanto 4 enlaces})$$

16 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

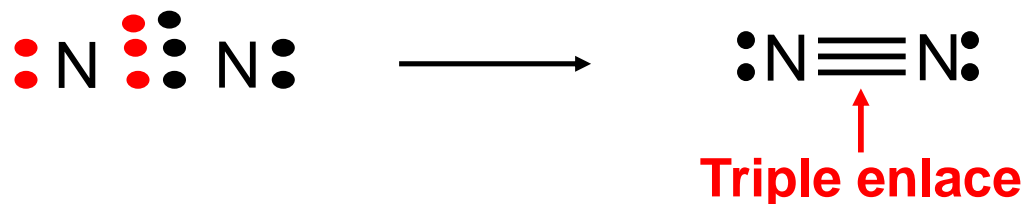


## Estructura de Lewis para N<sub>2</sub>

**Triple enlace:** dos átomos comparten tres pares de electrones

$$C = N - \textcircled{D} = (8 \times 2) - (5 \times 2) = 16 - \textcircled{10} = 6 \quad (6 \text{ e- compartidos, por lo tanto 3 enlaces})$$

10 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

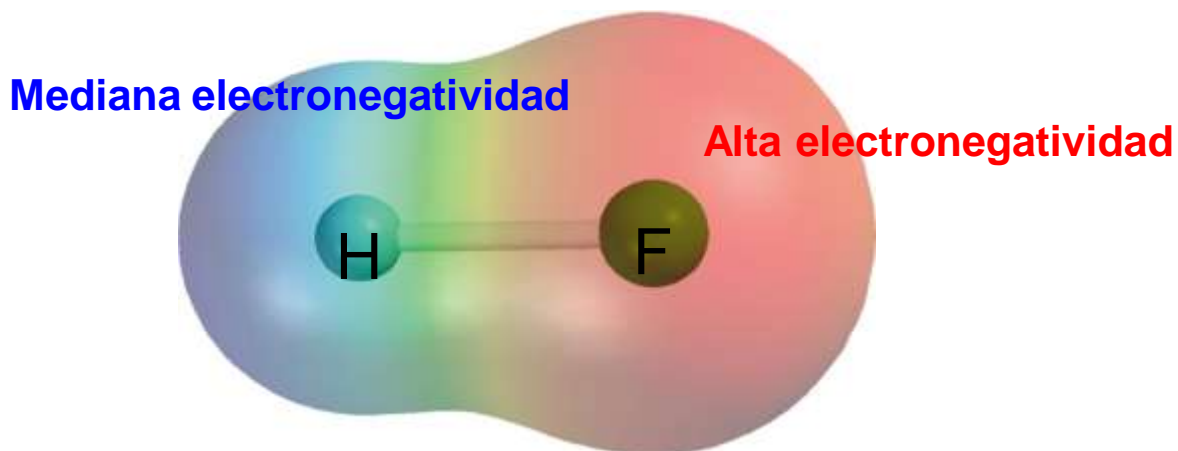
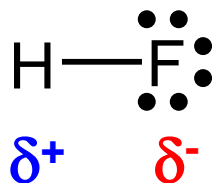


La **electronegatividad** es la capacidad de un átomo para atraer los electrones de otro átomo en un enlace químico.

El tipo de enlace estará dado en relación a la diferencia de electronegatividad entre los átomos que forman el compuesto.

El **enlace polar** es un enlace covalente donde la diferencia de electronegatividad entre los dos átomos no es muy grande (aproximadamente menor a 2)

Distorsión de la nube electrónica entre dos átomos con diferente electronegatividad

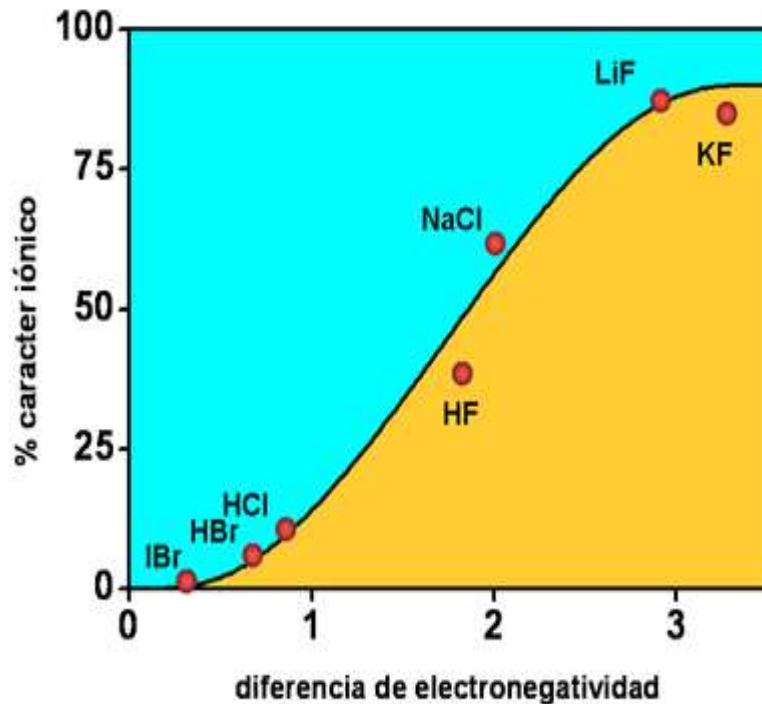


Electronegatividad es **relativa**, F es el más electronegativo que el H



# CLASIFICACIÓN DE LOS ENLACES POR ELECTRONEGATIVIDAD

El tipo de enlace estará dado en relación a la diferencia de electronegatividad entre los átomos que forman el compuesto.



Diferencia

0

$\geq 2$

$0 < y < 2$

Tipo de enlace

Covalente

Iónico

Covalente Polar

- Electronegatividad +

Covalente

Covalente Polar

Iónico

comparte  $e^-$

Transferencia parcial de  $e^-$

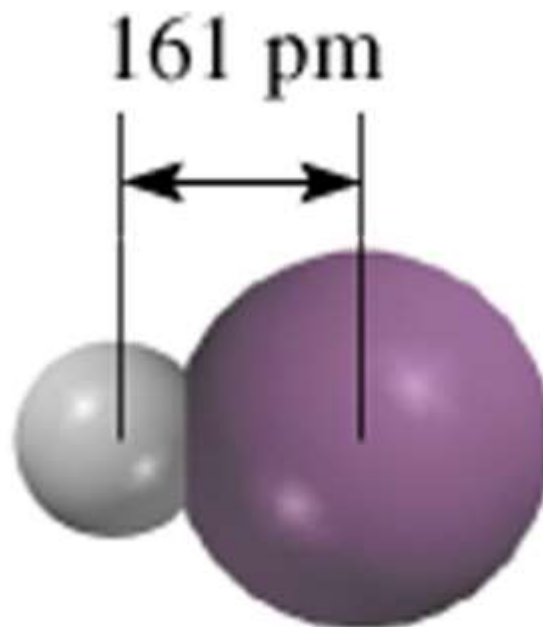
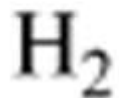
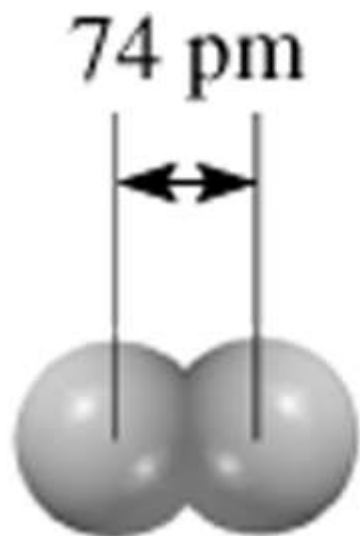
transferencia  $e^-$

# ELECTRONEGATIVIDADES EN LA TABLA PERIODICA

Aumenta

[illegible]

# LONGITUD DE LOS ENLACES COVALENTES



## Comparación de longitudes de enlace

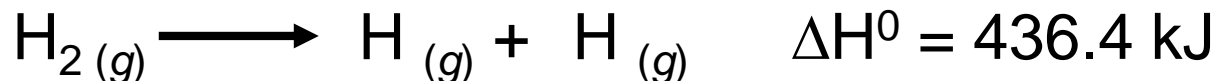
Tipo de enlace	Lon. de enlace (pm)
C—H	107
C—O	143
C=O	121
C—C	154
C=C	133
C≡C	120
C—N	143
C=N	138
C≡N	116
N—O	136
N=O	122
O—H	96

Longitud

Triple enlace < Doble enlace < Enlace simple

Al cambio necesario en la entalpía para romper un enlace de un mol de un compuesto gaseoso se le llama **energía de enlace**.

### Energía de enlace



### Energía de enlace

Enlace Sencillo < Enlace Doble < Enlace Triple

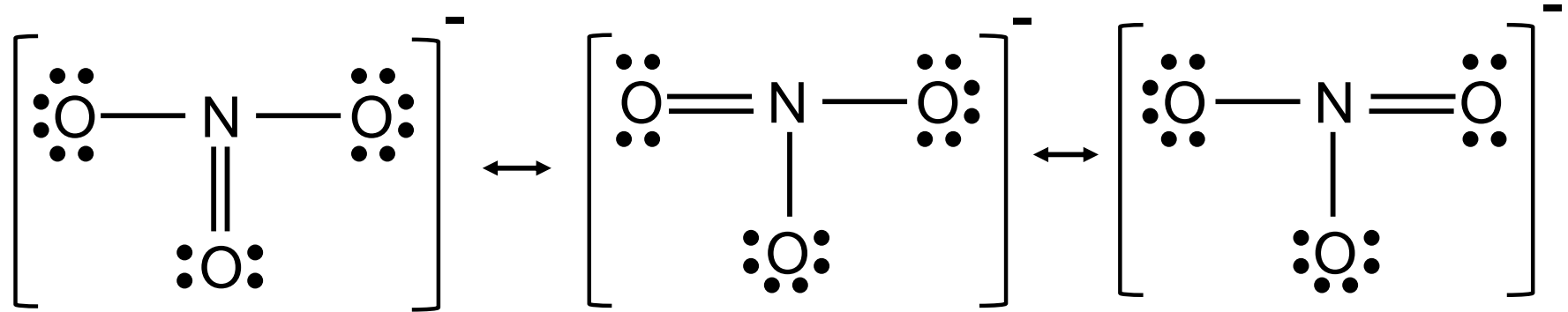
Una **estructura resonante** ocurre cuando dos o más estructuras de Lewis para una misma molécula no pueden ser representadas gráficamente por una sola estructura de Lewis.

**Estructura de Lewis para el anión NO<sub>3</sub><sup>-</sup>**

**Resto** un electrón por cada carga positiva y **Sumo** un electrón por cada carga negativa.

$C = N - D = (8 + 8 \times 3) - (5 + 6 \times 3 + 1) = 32 - 24 = 8$  (8 e- compartidos, por lo tanto 4 enlaces)

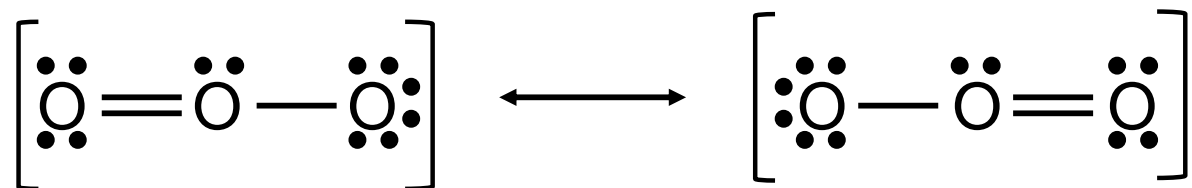
24 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



## Estructura de Lewis para el O<sub>3</sub>

$$C = N - \textcircled{D} = (3 \times 8) - (6 \times 3) = 24 - \textcircled{18} = 6 \quad (6 \text{ e- compartidos, por lo tanto 3 enlaces})$$

18 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.

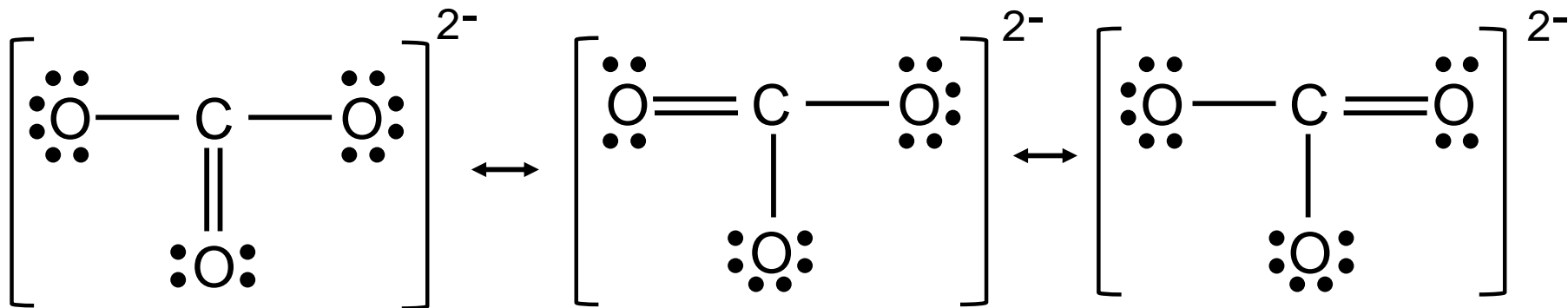


## Estructura de Lewis para el anión CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>

**Sumo** un electrón por cada carga negativa.

$$C = N - \textcircled{D} = (8 + 8 \times 3) - (4 + 6 \times 3 + \textcolor{red}{2}) = 32 - \textcircled{24} = 8 \quad (8 \text{ e- compartidos, por lo tanto 4 enlaces})$$

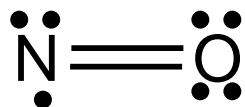
24 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



## Estructuras con electrones impares

$$C = N - D = (2 \times 8) - (5 + 6) = 16 - 11 = 5 \quad (5 \text{ e}^-, 2 \text{ enlaces y } 1 \text{ e}^- \text{ sin compartir})$$

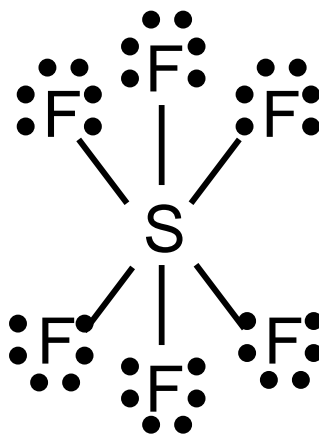
11 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



## El octeto expandido: SF<sub>6</sub> (un átomo central con un número cuántico $n > 2$ )

$$C = N - D = (12 + 6 \times 8) - (6 + 7 \times 6) = 60 - 48 = 12 \quad (6 \text{ enlaces})$$

El S expande su capa de valencia a **12 e<sup>-</sup>** 48 electrones para distribuir en la estructura de Lewis.



# Recordemos

Los **enlaces químicos** son las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en las moléculas de los elementos ( $O_2$  y  $Cl_2$ ); de compuestos ( $CO_2$  y  $H_2O$ ) y de metales.

Los átomos se combinan con el fin de alcanzar **una configuración electrónica más estable**.

La estabilidad máxima se produce cuando un átomo es **isoelectrónico** con un gas noble.

Solo **los electrones externos** de un átomo pueden ser atraídos por otro átomo cercano.

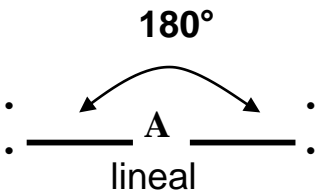
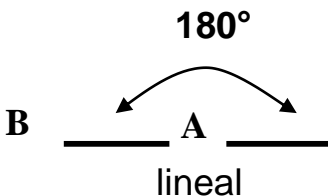
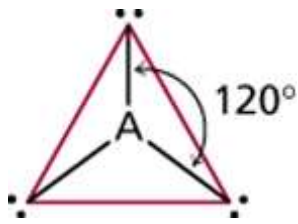
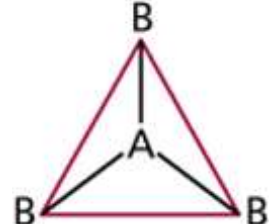
En la formación de enlaces químicos solo intervienen los **electrones de valencia**.

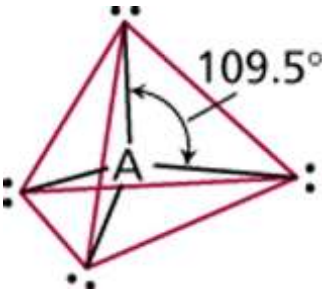
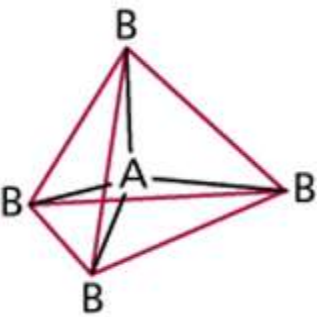
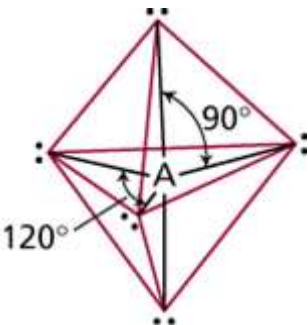
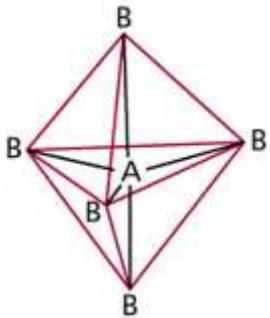
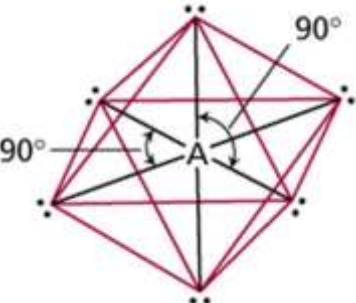
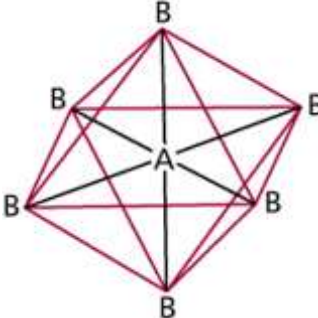


# Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Predicción de la geometría de las moléculas mediante la repulsión electrostática de pares de electrones compartidos y no compartidos.

**Grupo Electrónico:** Enlace simple, doble o triple ó un par de electrones no enlazados.

Clase	N° de grupos Electrónicos del átomo central	Geometría electrónica	Geometría molecular	Ejemplos
$AB_2$	2	 lineal	 lineal	$BeCl_2, CO_2$
$AB_3$	3	 Plana Triangular	 Plana Triangular	$BF_3, BCl_3$

Clase	Nº de grupos Electrónicos del átomo central	Geometría Electrónica	Geometría molecular	Ejemplos
$AB_4$	4	 <p>Tetraédrica</p>	 <p>Tetraédrica</p>	$CH_4, NH_4^+$
$AB_5$	5	 <p>Bipiramidal Trigonal</p>	 <p>Bipiramidal Trigonal</p>	$PCl_5$
$AB_6$	6	 <p>Octaédrica</p>	 <p>Octaédrica</p>	$SF_6$

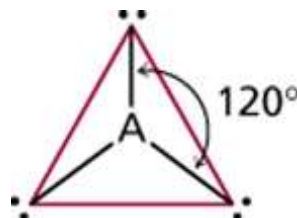
Clase	N° de átomos unidos al átomo central	N° de pares no compartidos	Geometría Electrónica	Geometría molecular	Ejemplos
-------	--	-------------------------------	--------------------------	------------------------	----------

$AB_3$

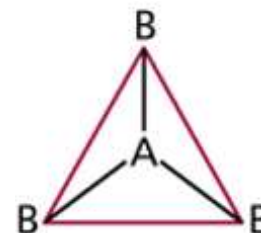
3

0

Plana Trigonal



Plana Trigonal

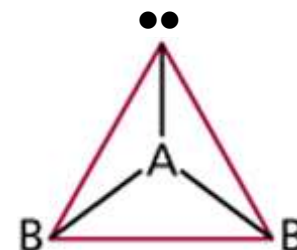


$BF_3, BCl_3$

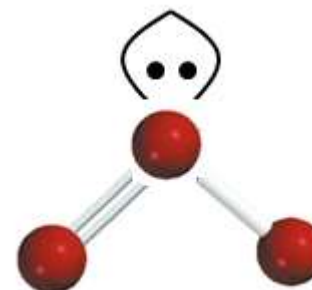
$AB_2E$

2

1

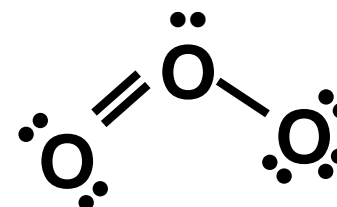


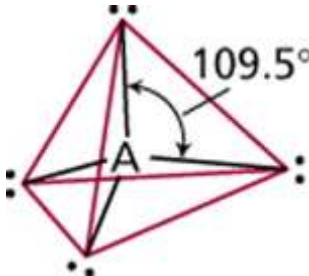
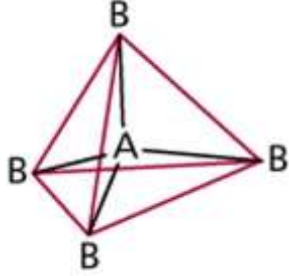
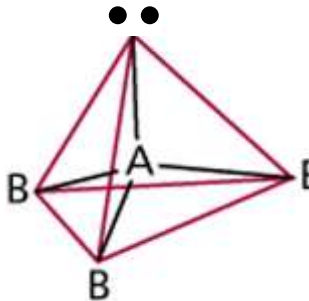
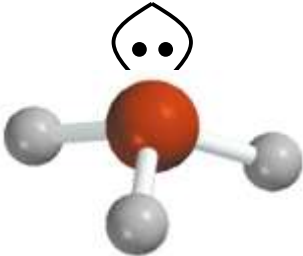
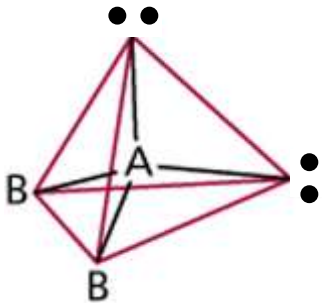
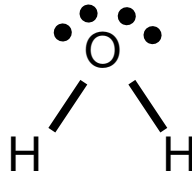
Plana Trigonal



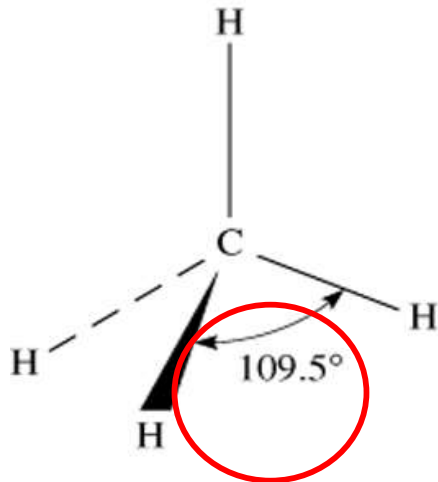
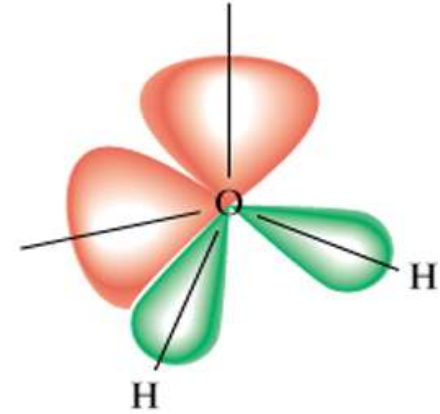
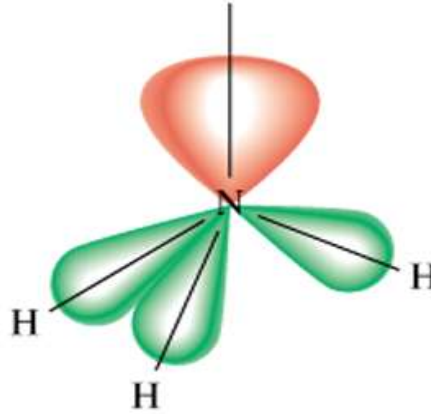
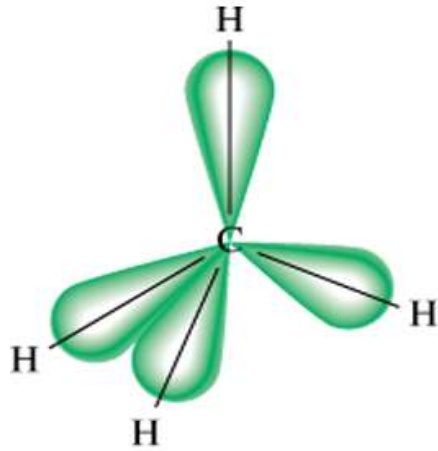
Angular

$O_3$

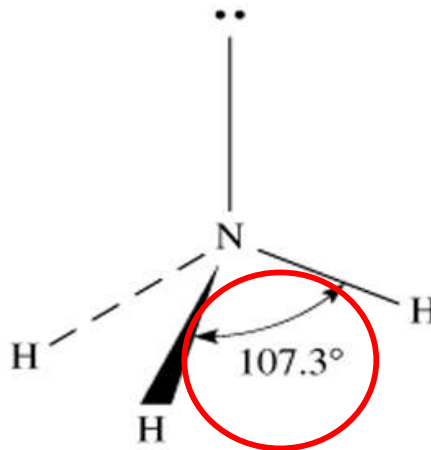


Clase	N° de átomos unidos al átomo central	N° de pares no compartidos	Geometría Electrónica	Geometría molecular	Ejemplos
$AB_4$	4	0	Tetraédrica 	tetraédrica 	$CH_4, NH_4^+$
$AB_3E$	3	1	 Tetraédrica	 Piramidal trigonal	$NH_3$
$AB_2E_2$	2	2	 Tetraédrica	 Angular	$H_2O$

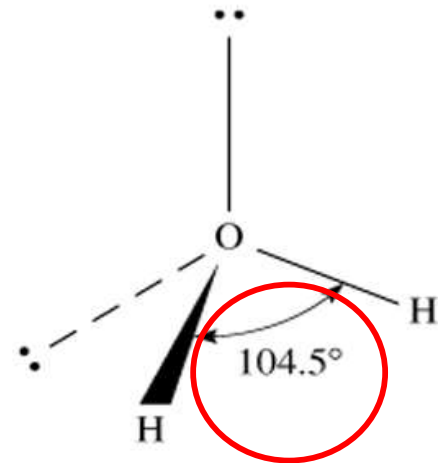
# Repulsión de pares de electrones



**Metano CH<sub>4</sub>**



**Amoníaco NH<sub>3</sub>**



**Agua H<sub>2</sub>O**

pares compartidos vs.  
pares compartidos

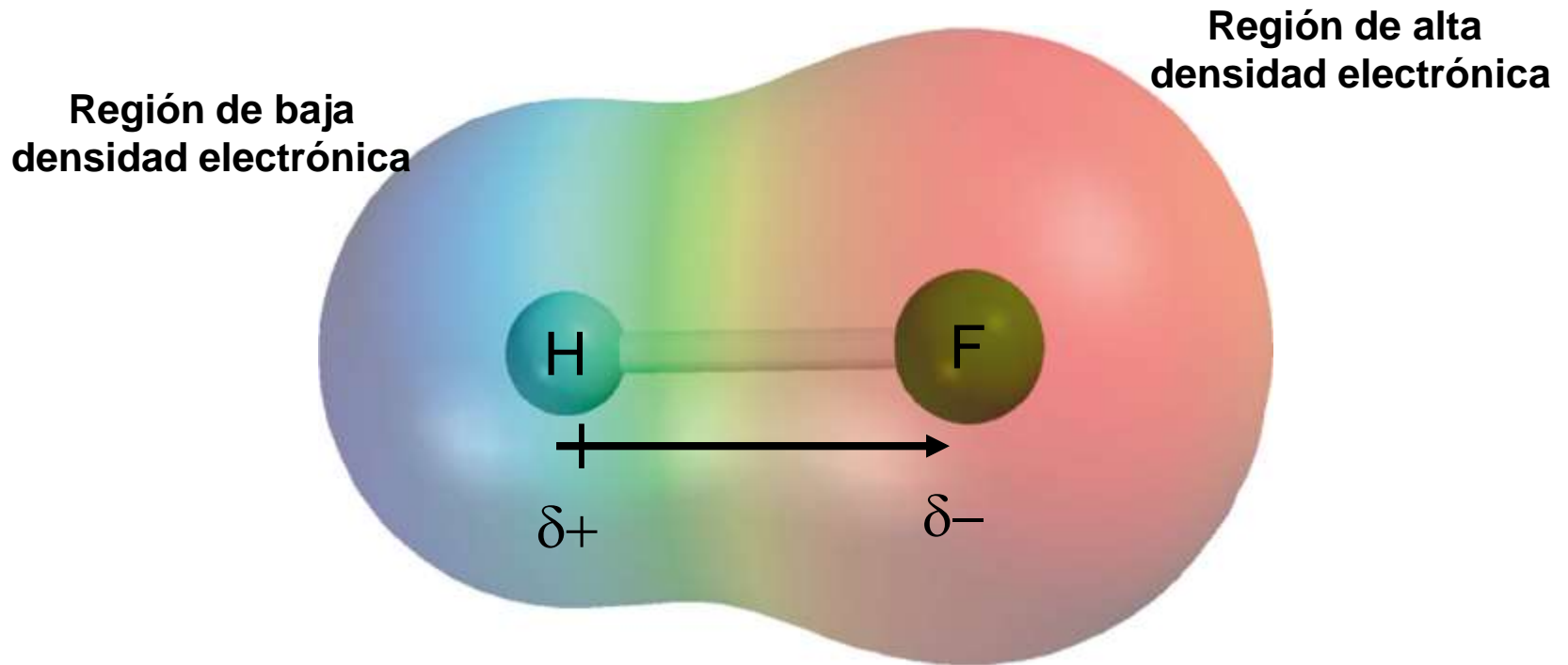


pares No compartidos  
vs. pares compartidos



pares No comp. vs.  
pares No comp.

# MOMENTOS DIPOLARES Y MOLECULAS POLARES



Medida de la polaridad

Producto de la carga (Q) por la distancia (r)

$$\mu = Q \cdot r$$

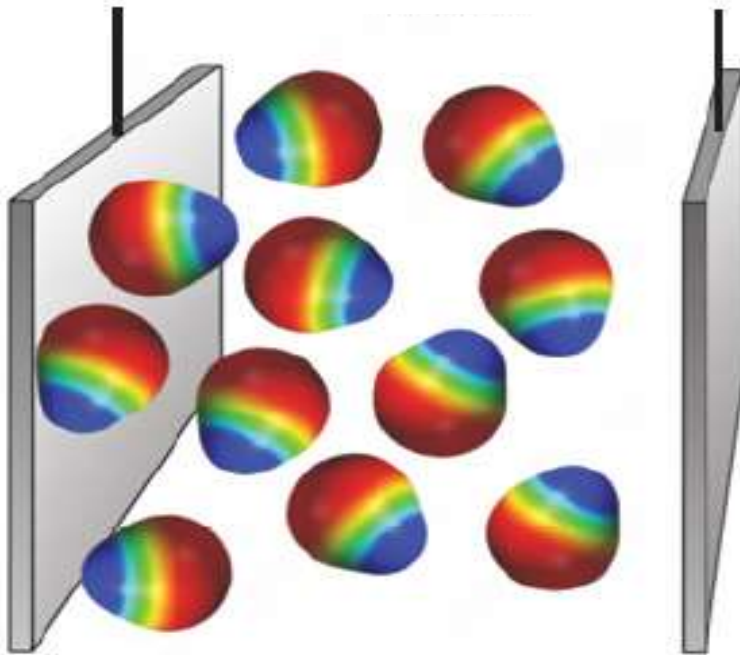
Expresado en Debye (D)

$$1 \text{ D} = 3,36 \times 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}$$

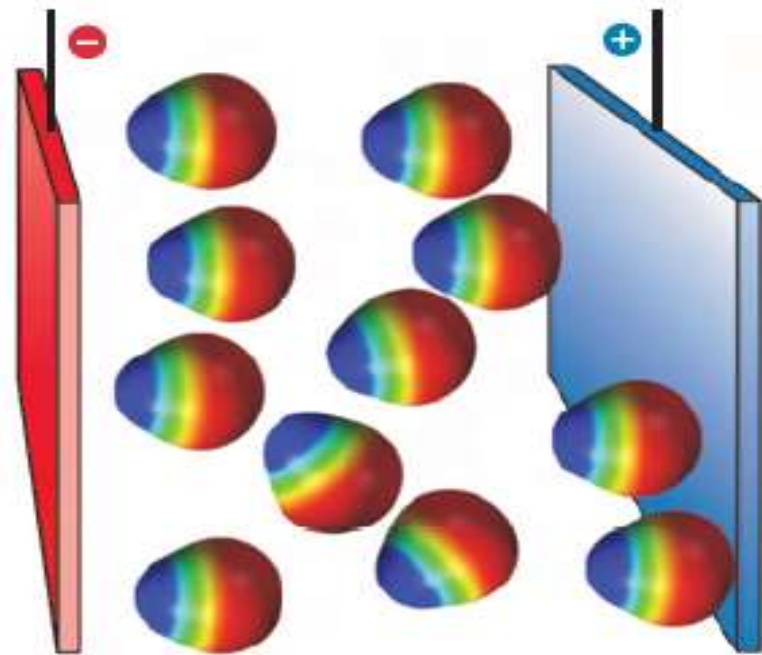
$\mu = 0$  para un molécula no polar


# Comportamiento de moléculas polares

Sin campo eléctrico

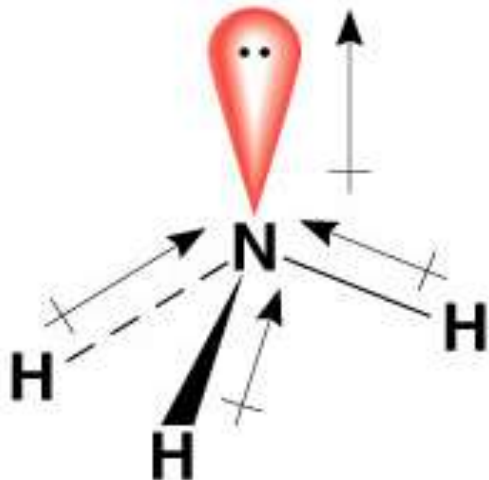


Con campo eléctrico

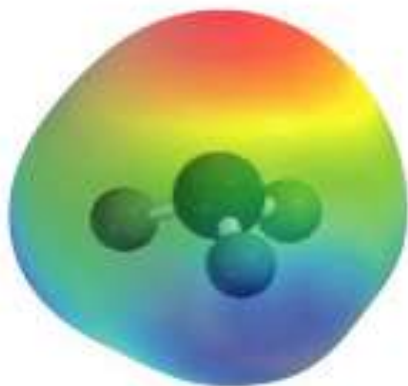


$\delta+$    $\delta-$  = Electrostatic Charge  
Potential surface of HF

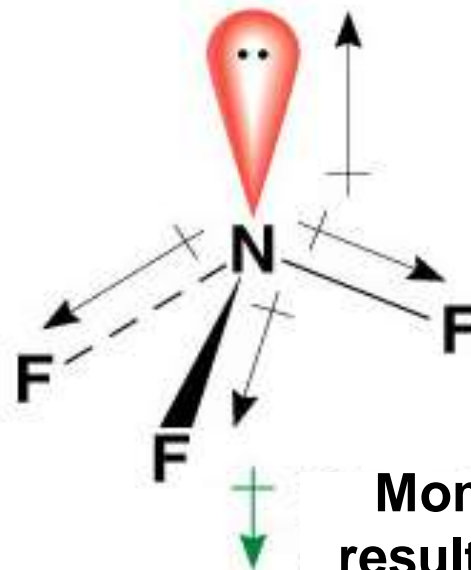
**Momento dipolar  
resultante  $\mu = 1.46D$**



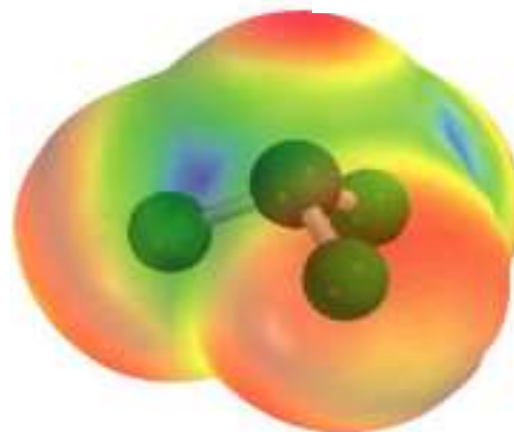
Molécula Polar  
 $\Sigma\mu \neq 0$



Molécula Polar  
 $\Sigma\mu \neq 0$



**Momento dipolar  
resultante  $\mu = 0.24D$**

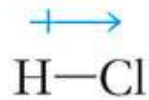
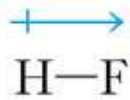
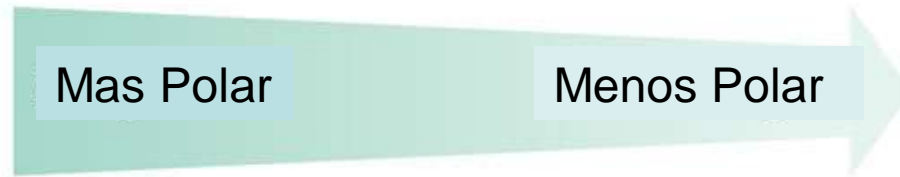


### Moléculas Polares

- El átomo central, en general, tiene pares de electrones no enlazantes.
- Su geometría es asimétrica.



# Momento dipolar ( $\mu$ ) en la serie de halogenuros de hidrógeno

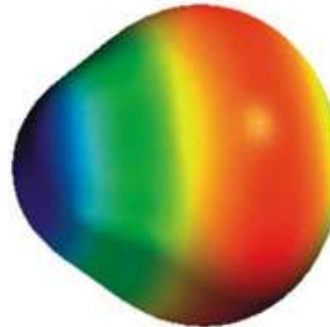


1,91 D

1,03 D

0,79 D

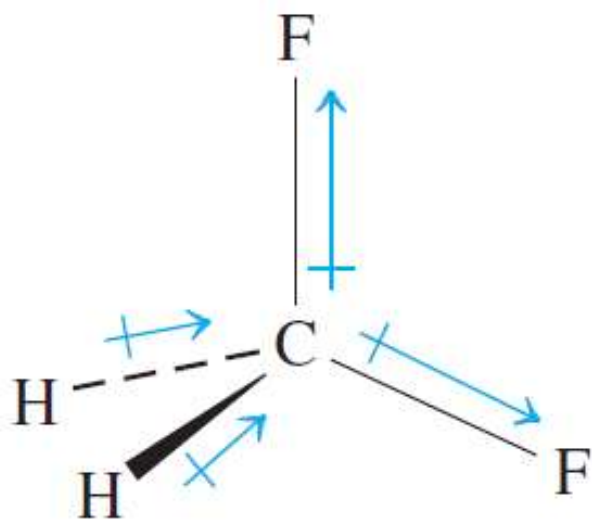
0,38 D



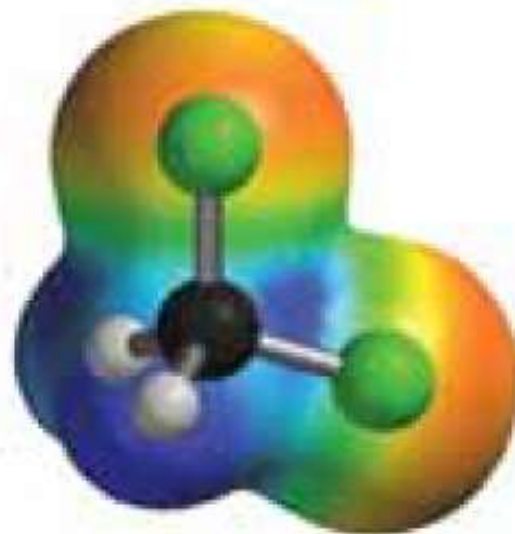
Momento Dipolar  
 $\mu$  [Debye]

## CH2F2 Molécula Polar

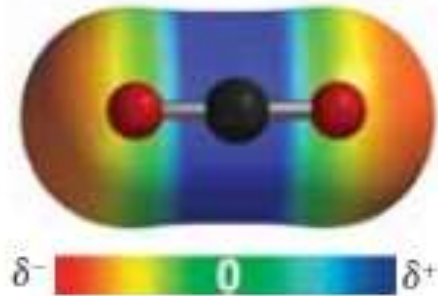
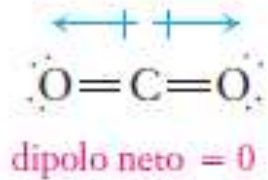
Sumatoria de momentos dipolares  $\Sigma\mu \neq 0$



dipolo molecular  
neto  $> 0$

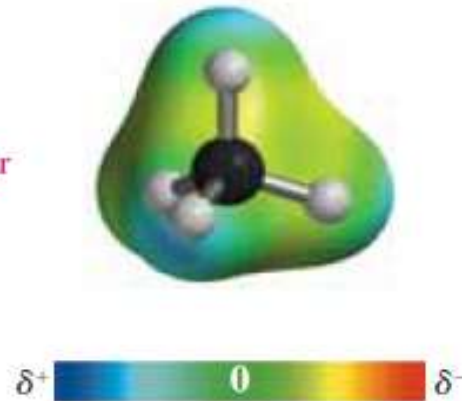
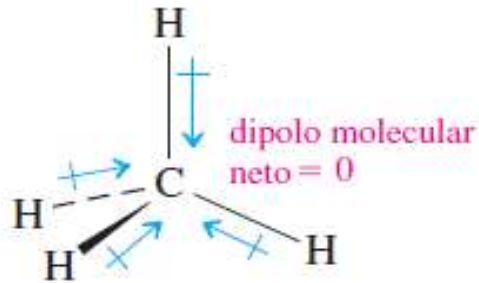


Moléculas **Apolares** tienen un momento dipolar neto igual a Cero.



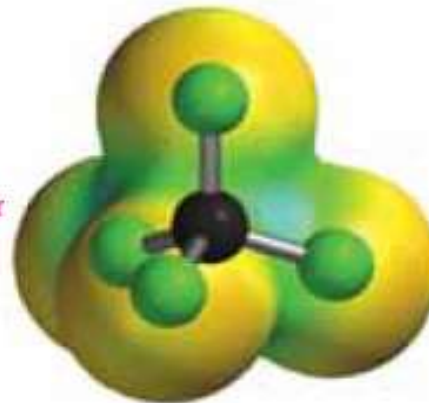
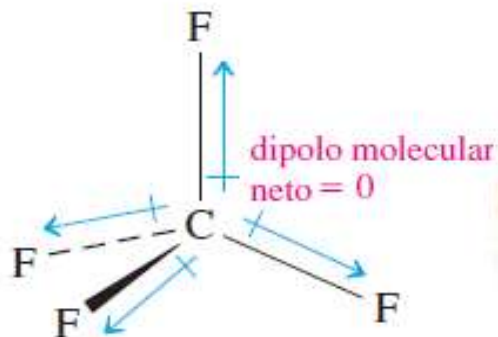
Molécula Apolar  
Sumatoria de  
momentos dipolares  $\Sigma\mu = 0$

CH<sub>4</sub>



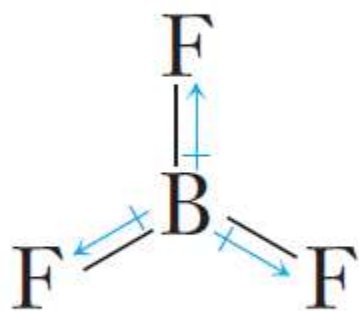
Molécula Apolar  
Sumatoria de  
momentos dipolares  $\Sigma\mu = 0$

CF<sub>4</sub>

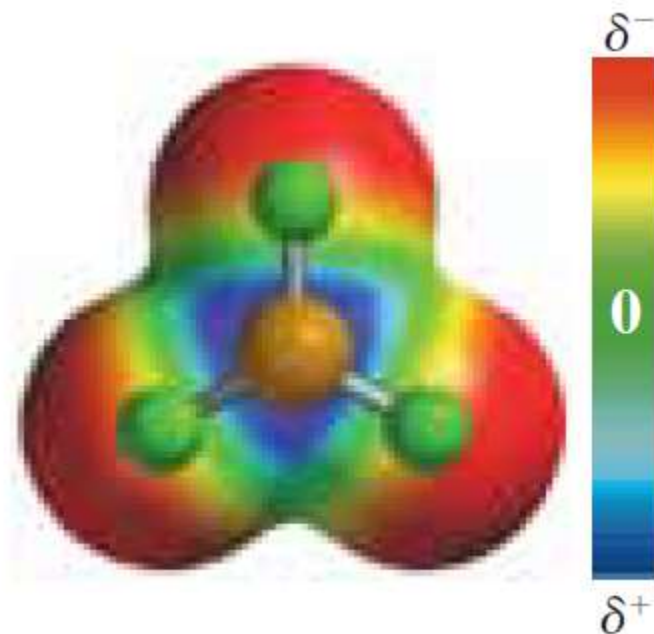


Molécula Apolar  
Sumatoria de  
momentos dipolares  $\Sigma\mu = 0$

Molécula Apolar Sumatoria de momentos dipolares  $\Sigma\mu = 0$



dipolo  
molecular  
neto = 0

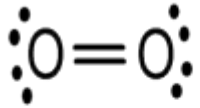


## Enlaces Sigma ( $\sigma$ ) y Pi ( $\pi$ )

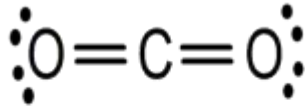
Enlace simple	1 enlace sigma
Enlace doble	1 enlace sigma y 1 enlace pi
Enlace triple	1 enlace sigma y 2 enlaces pi

# Enlaces Múltiples

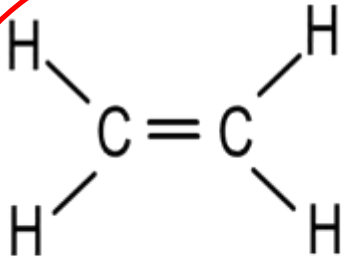
## Dobles



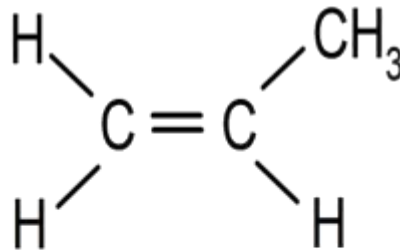
oxígeno molecular



dióxido de carbono

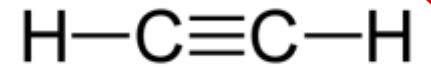


etileno



propileno

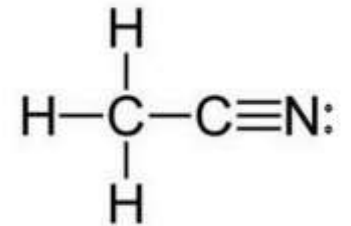
## Triples



Acetileno



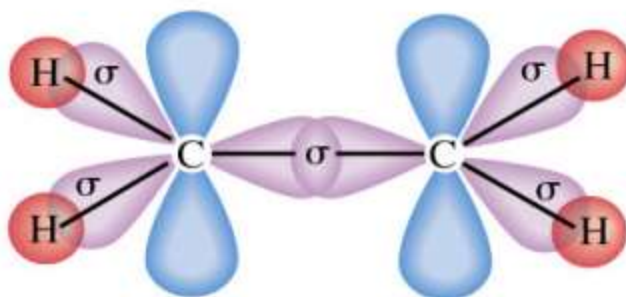
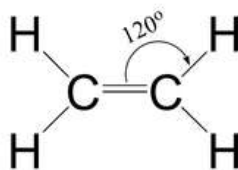
Nitrógeno molecular



Acetonitrilo

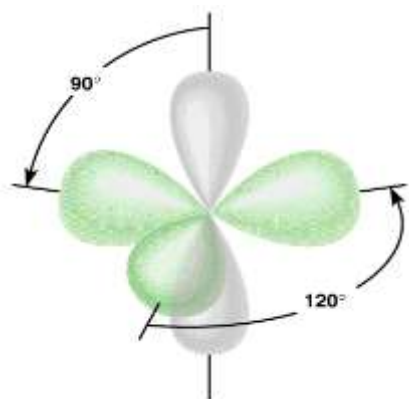
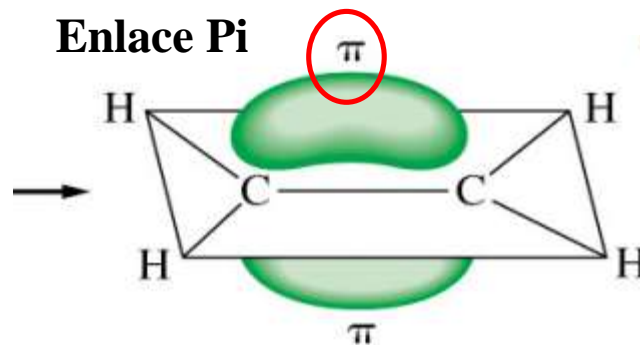
# Etileno $C_2H_4$

Es el compuesto orgánico más utilizado en todo el mundo.  
Casi el 60% de su producción industrial se utiliza para obtener polietileno.

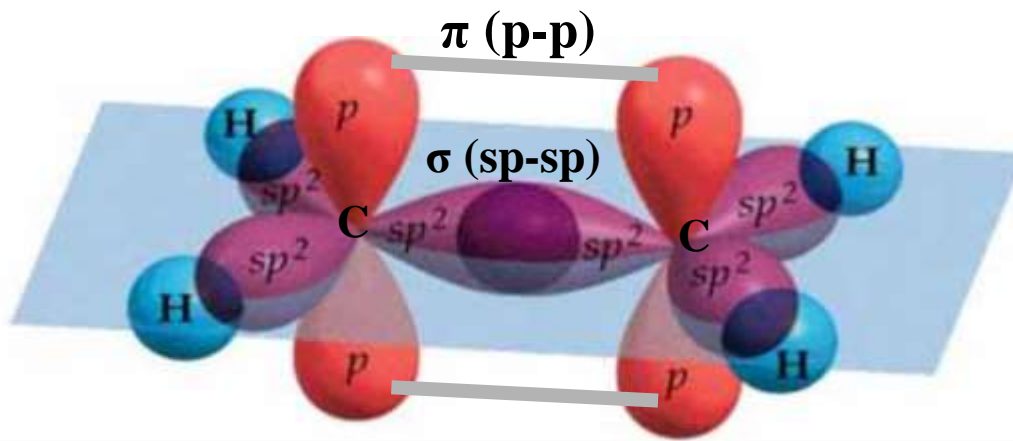


Enlaces Sigma ( $\sigma$ )

Enlace Pi



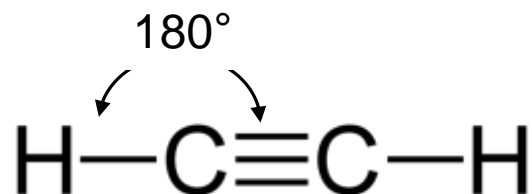
Orbital  $2p_z$   
perpendicular  
al plano  
de los  
orbitales  
híbridos.



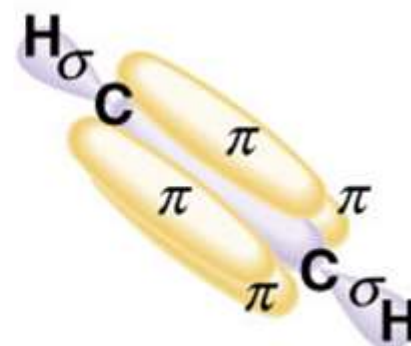
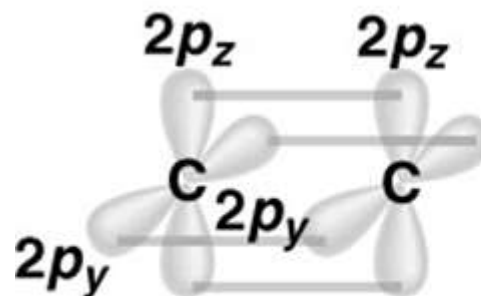


# Acetileno $C_2H_2$

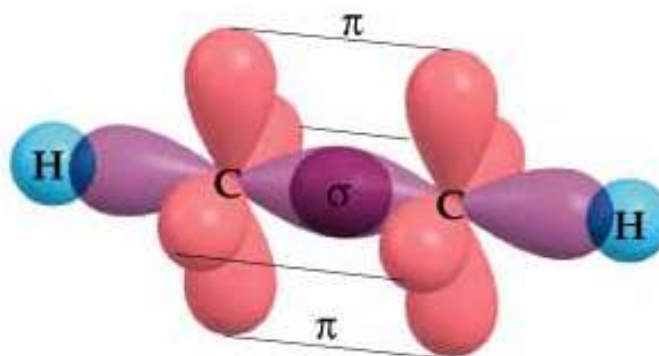
El **acetileno** o **etino** es un gas, altamente inflamable e incoloro. Es utilizado en equipos de soldadura debido a las elevadas temperaturas (hasta  $3000\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) que alcanzan las mezclas de acetileno y oxígeno en su combustión.



Enlaces Sigma ( $\sigma$ )



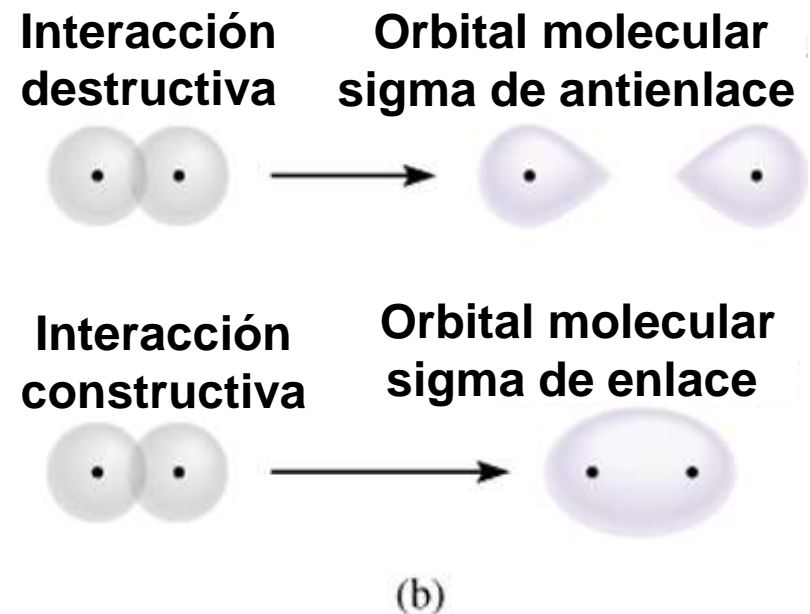
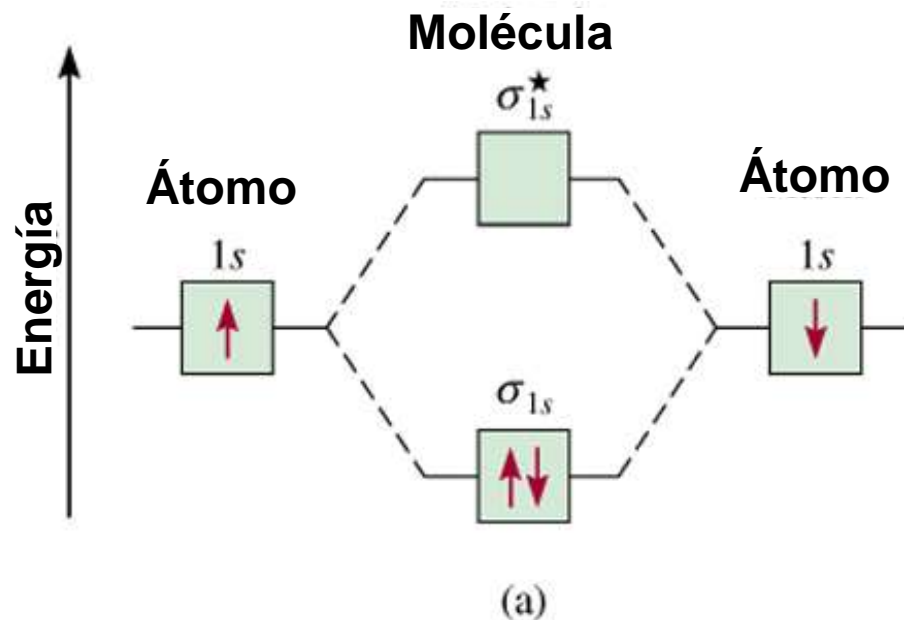
Enlaces Pi ( $\pi$ )





# Teoría de Orbitales Moleculares

Niveles de energía de enlace y de antienlace en el orbital molecular del hidrógeno ( $H_2$ ).

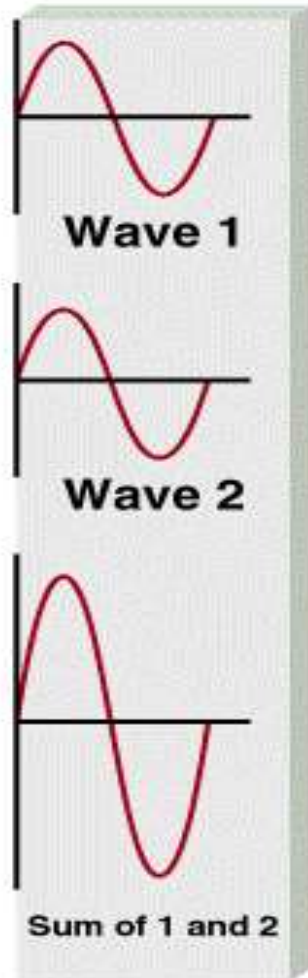


Un **orbital molecular de enlace** tiene menos energía y mayor estabilidad que los orbitales atómicos que lo formaron.

Un **orbital molecular de antienlace** tiene más energía y menor estabilidad que los orbitales atómicos que lo formaron.

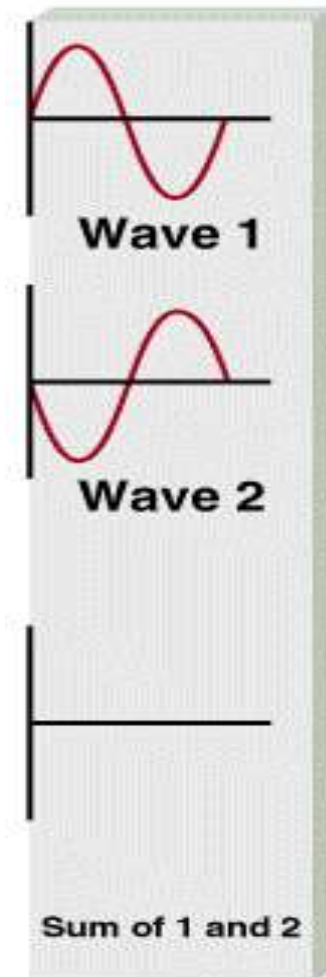
# Interferencia constructiva y destructiva de dos ondas con la misma longitud y amplitud

Interferencia constructiva:



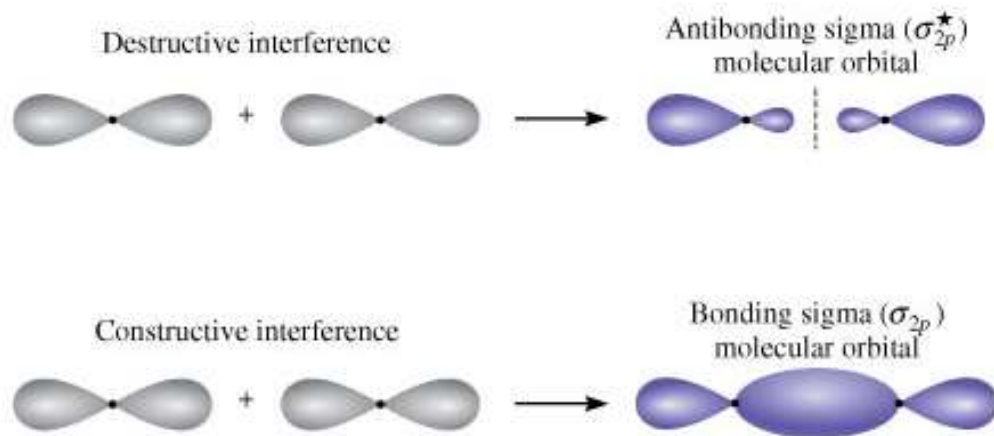
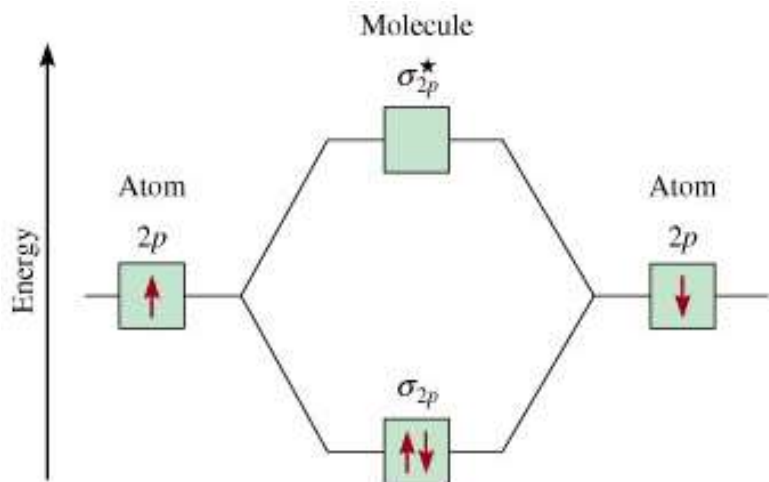
(a)

Interferencia destructiva:

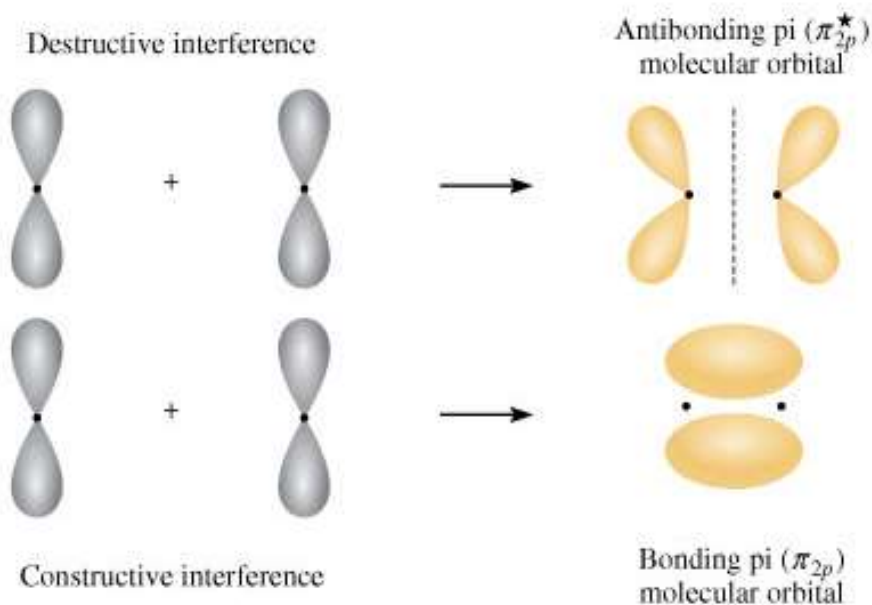
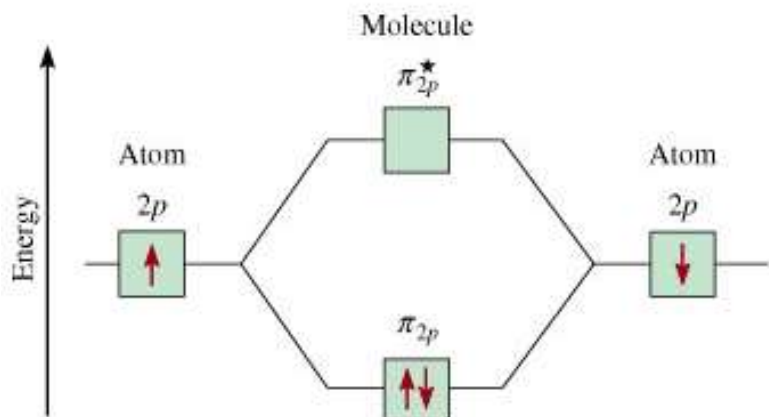


(b)

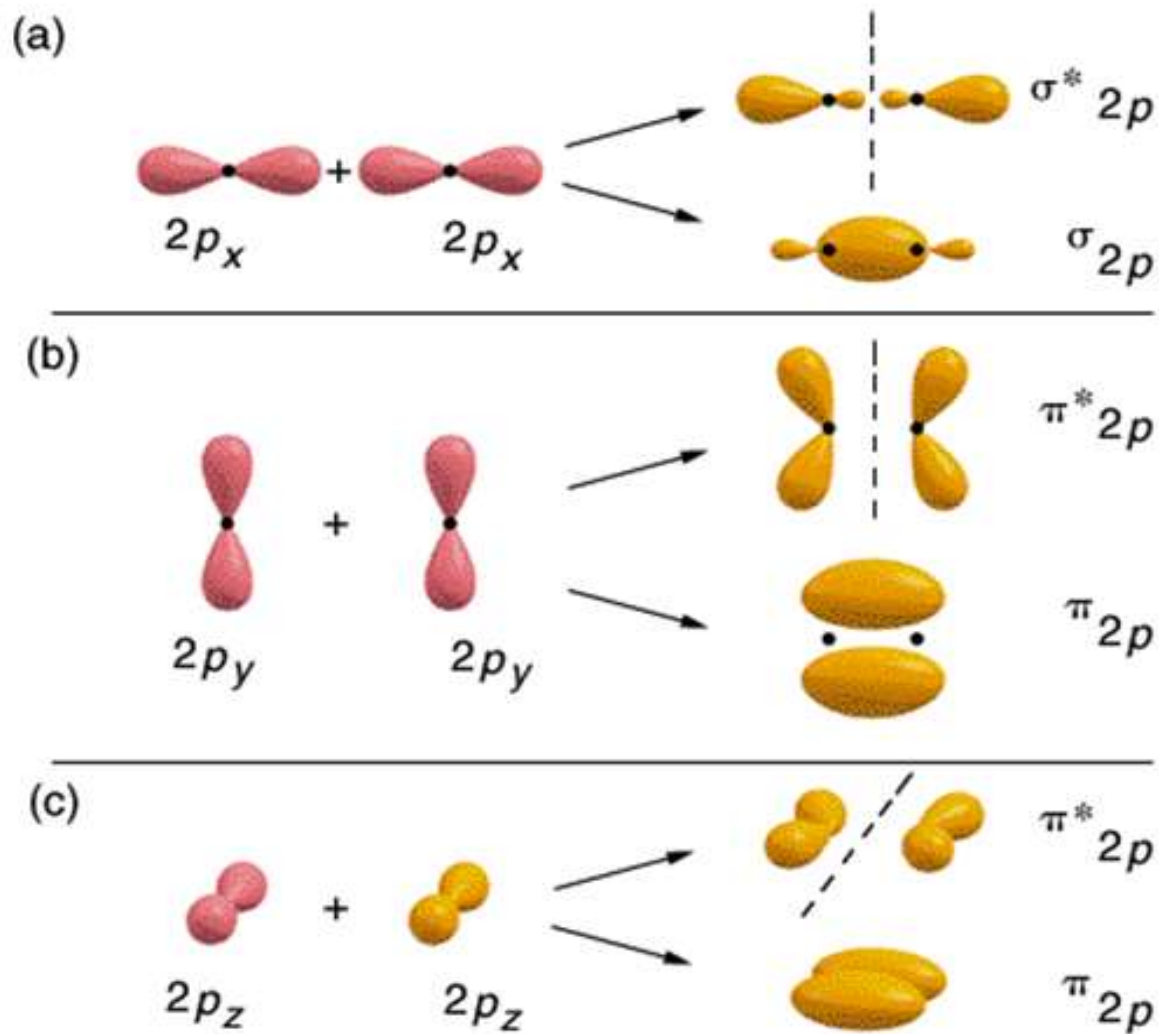
# Interacciones posibles entre dos orbitales equivalentes $p$



(a)



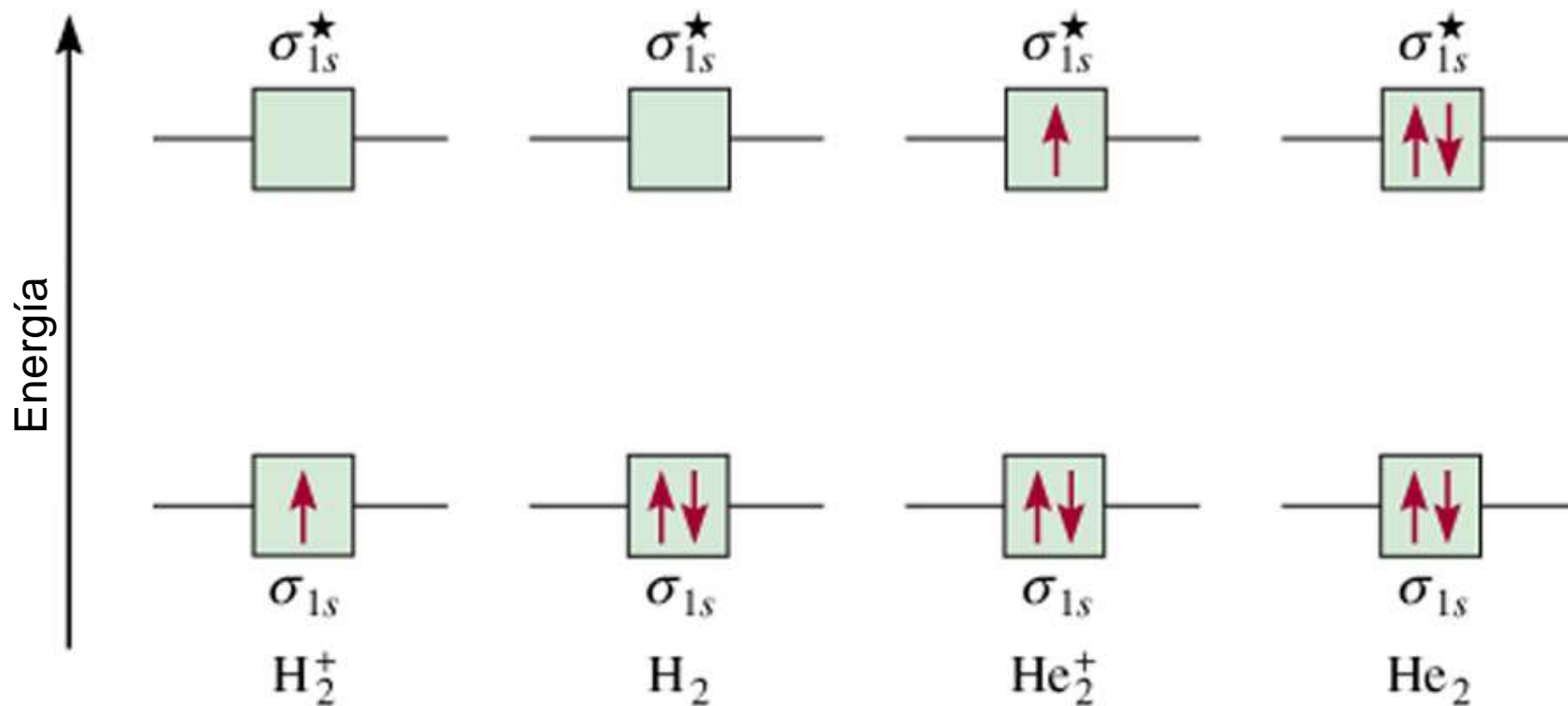
# Interacciones posibles entre dos orbitales equivalentes $p$



## **Configuraciones de orbitales moleculares (OM)**

1. El número de OM que se forma siempre es igual al número de orbitales atómicos que se combinan.
2. Cuanto más estable es el OM de enlace, menos estable es el OM de antienlace correspondiente.
3. Los OM se llenan de acuerdo con su nivel de energía.
4. Cada OM puede tener hasta dos electrones.
5. Se utiliza la regla de Hund cuando se añaden electrones a los OM del mismo nivel de energía.
6. El número de electrones en los OM es igual a la suma de todos los electrones en los átomos unidos.

$$\text{Orden de Enlace} = \frac{1}{2} \left( \begin{array}{c} \text{Número de} \\ \text{electrones en los} \\ \text{OM de enlaces} \end{array} - \begin{array}{c} \text{Número de} \\ \text{electrones en los} \\ \text{OM de antienlaces} \end{array} \right)$$



orden de  
enlace







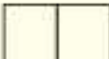
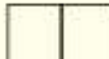

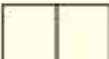

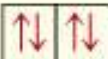






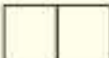


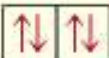














$\frac{1}{2}$

1

$\frac{1}{2}$

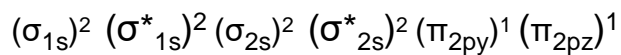
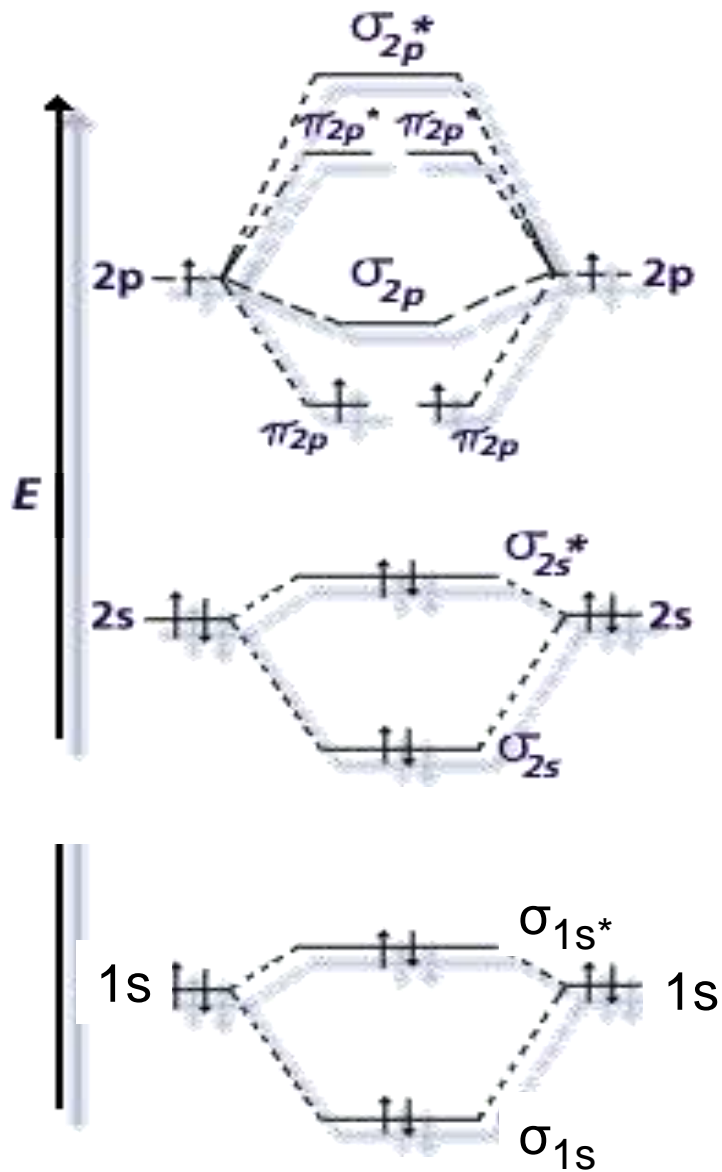
0

# Moléculas diatómicas homonucleares de elementos del segundo período

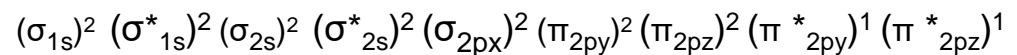
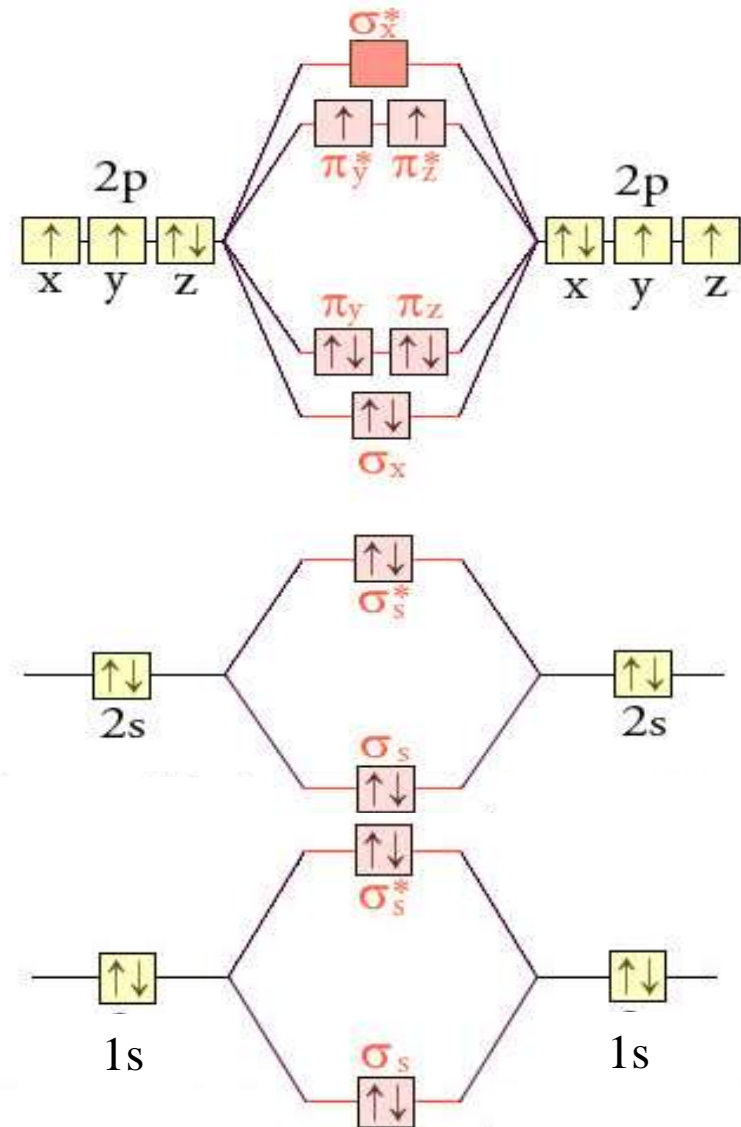
	Li <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	F <sub>2</sub>	
$\sigma_{2p_x}^*$							$\sigma_{2p_x}^*$
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$							$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$
$\sigma_{2p_x}$							$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$
$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$							$\sigma_{2p_x}$
$\sigma_{2s}^*$							$\sigma_{2s}^*$
$\sigma_{2s}$							$\sigma_{2s}$
Bond order	1	1	2	3	2	1	
Bond length (pm)	267	159	131	110	121	142	
Bond enthalpy (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9	
Magnetic properties	Diamagnetic Paramagnetic Diamagnetic Diamagnetic				Paramagnetic Diamagnetic		

\*For simplicity the  $\sigma_{1s}$  and  $\sigma_{1s}^*$  orbitals are omitted. These two orbitals hold a total of four electrons. Remember that for O<sub>2</sub> and F<sub>2</sub>,  $\sigma_{2p_x}$  is lower in energy than  $\pi_{2p_y}$  and  $\pi_{2p_z}$ .

## Molécula B<sub>2</sub>Real

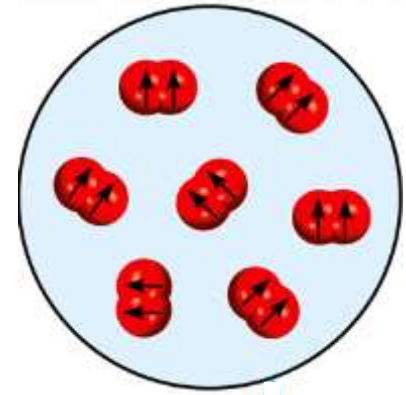
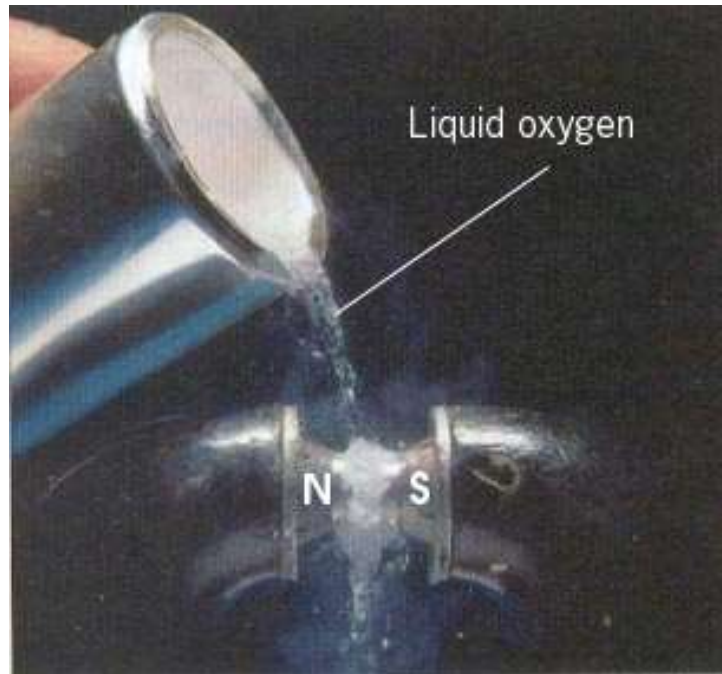


## Molécula de O<sub>2</sub>

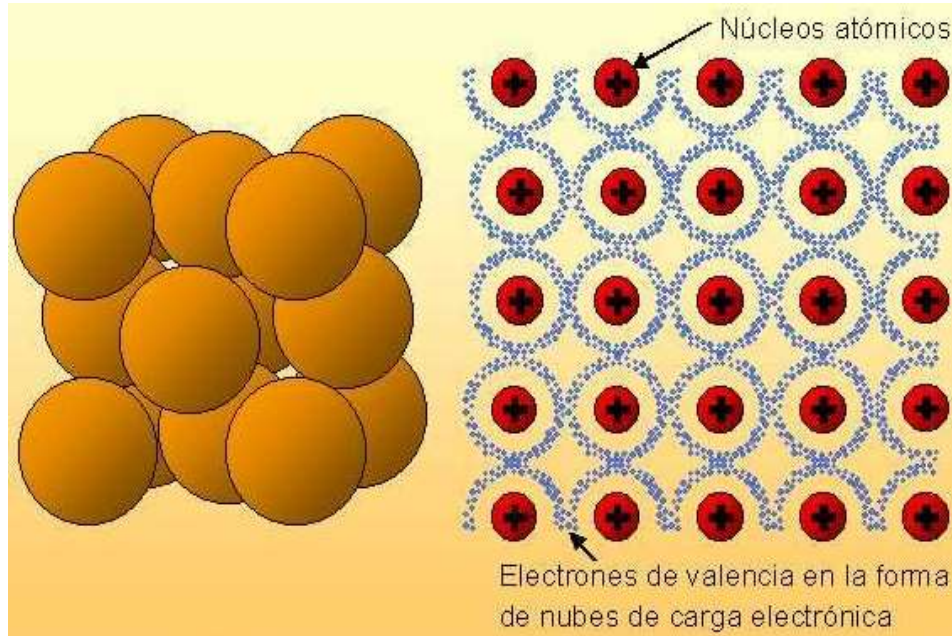




Experimentalmente se observa que el  $O_2$  es paramagnético

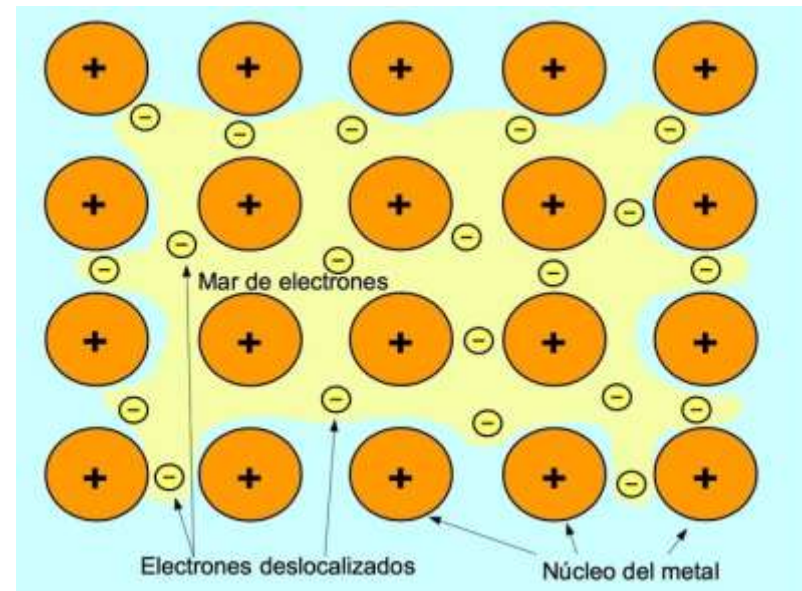


# Enlace metálico

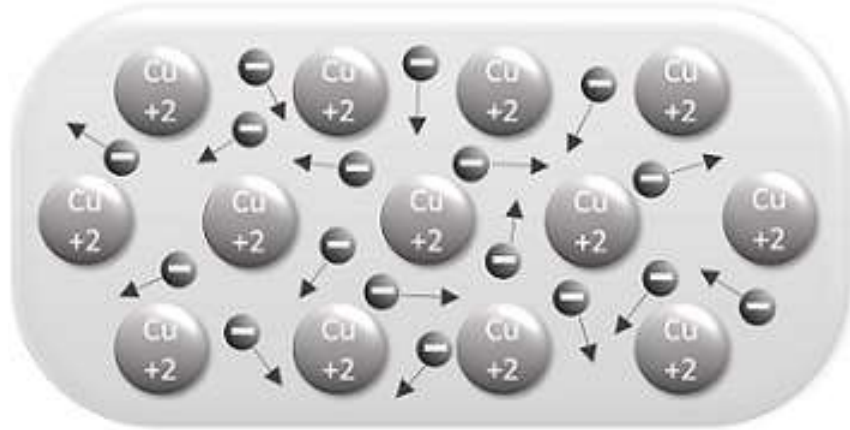


- Elementos metálicos con baja energía de ionización.
- Unión entre núcleos atómicos y electrones de valencia.

➤ Orbitales de valencia vacíos, para que circulen los electrones con facilidad; esto da origen a la teoría de bandas.



# PROPIEDADES



- **Temperaturas de fusión y ebullición:** muy elevadas. Son sólidos a temperatura ambiente (excepto el mercurio que es líquido).
- Insolubles en agua. En estado fundido son muy solubles en otros metales formando aleaciones.

- **Conductividad eléctrica:** 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).  
La conductividad es mayor a bajas temperaturas.

**Ductilidad:** Son dúctiles (facilidad de formar hilos) y maleables (facilidad de formar láminas) al aplicar presión.

• **Dureza:** Son en general duros (resistentes al rayado).

• **Oxidación:** La mayoría se oxida con facilidad



# ATRACCIONES INTERMOLECULARES

Cap. 11 Raymond Chang

# Fuerzas intermoleculares

Las ***fuerzas intermoleculares*** son las fuerzas de atracción que existen **entre** las moléculas.

Las ***fuerzas intramoleculares*** mantienen juntos los átomos de una molécula.

## Fza Intermolecular vs Fza Intramolecular

- 41 kJ para vaporizar 1 mol de agua (**intermolecular**)
- 930 kJ para romper todos los enlaces O-H en 1 mol de agua (**intramolecular**)

## “Medidas” de fuerzas intermoleculares

Generalmente, las fuerzas **intermoleculares** son mucho más débiles que las fuerzas **intramoleculares**.

punto de ebullición

punto de fusión

$$\Delta H_{\text{vap}}$$

$$\Delta H_{\text{fus}}$$

$$\Delta H_{\text{sub}}$$

# Fuerzas Intermoleculares

Fuerzas de Van der Waals

- **Dipolo- Dipolo**
- **Fuerzas de dispersión**
- **Puente de Hidrógeno**

Fuerzas electrostáticas

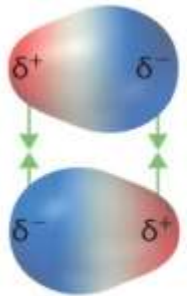
- **Ión-dipolo**

# Fuerza dipolo - dipolo

Existe entre moléculas polares.

$$F = k \frac{Q_1 Q_2}{d^2}$$

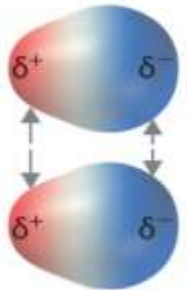
Atracción electrostática de dos moléculas polares



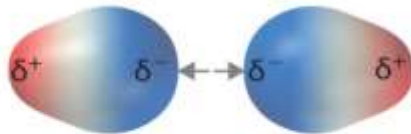
(a) Attraction



(b) Attraction

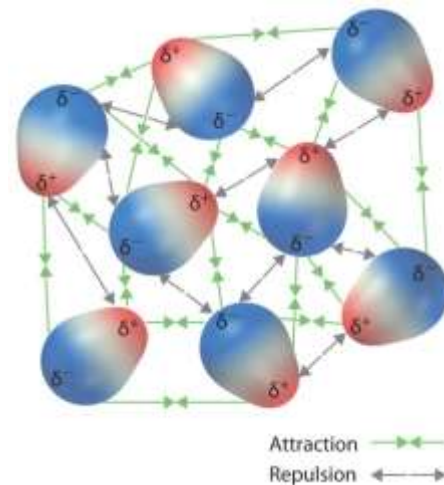


(c) Repulsion



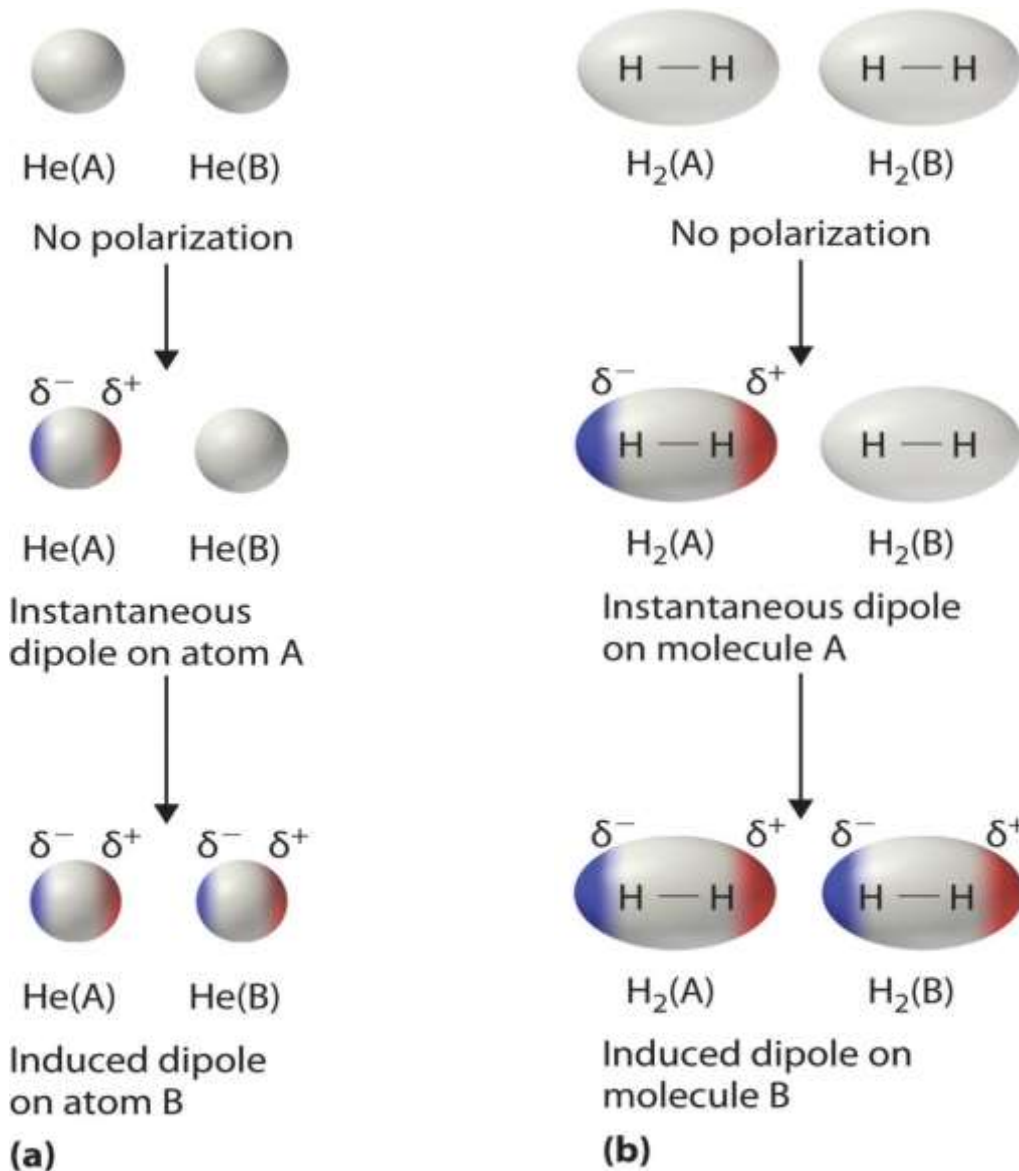
(d) Repulsion

Interacción de muchos dipolos en un estado condensado





# Fuerzas de Dispersión



Fuerzas de atracción que surgen como resultado de dipolos temporales inducidos en átomos o moléculas. Están presentes en todas las moléculas.

El carácter polarizable de los gases que contienen átomos o moléculas no polares, les permite condensarse. Ej : He, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>

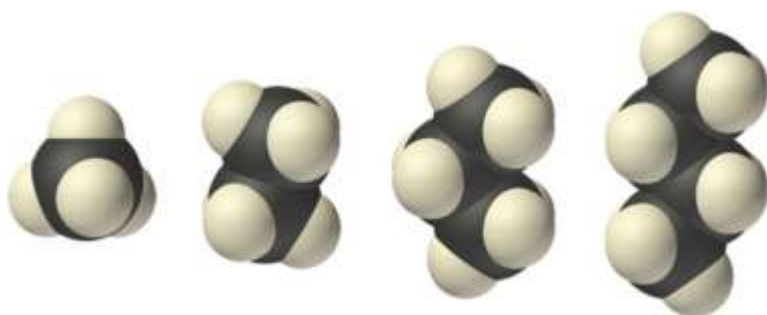


# Fuerzas de Dispersión

**Polarización** es la facilidad de distorsionar la distribución de los electrones en el átomo o molécula.

Puntos de Ebullición de  
compuestos no polares similares

Compuestos	Punto de Ebullición °C
CH <sub>4</sub>	-182.5
CF <sub>4</sub>	-150.0
CCl <sub>4</sub>	-23.0
CBr <sub>4</sub>	90.0
Cl <sub>4</sub>	171.0

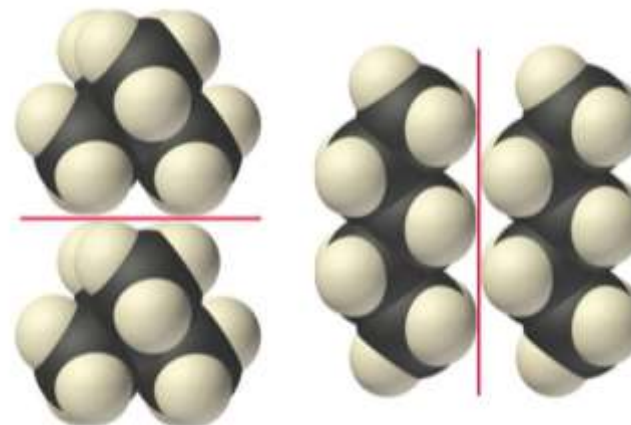


Methane	Ethane	Propane	n-Butane
16 g/mol	30 g/mol	44 g/mol	58 g/mol
-161.5°C	-88.6°C	-42.1°C	-0.5°C

(a) Increasing mass and boiling point

La **polarización** aumenta con:

- Mayor número de electrones, es decir con la masa molar.
- Difusión de más nubes de electrones, es decir con el área superficial de la molécula



2,2-Dimethylpropane (neopentane)	n-Pentane
72 g/mol, 9.5°C	72 g/mol, 36.1°C

(b) Increasing surface area and  
boiling point

# Fuerzas de Dispersión



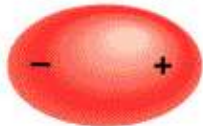
(a)

Átomo de He

Cation



Induced dipole



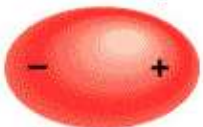
(b)

Interacción de ion – dipolos inducido

Dipole



Induced dipole

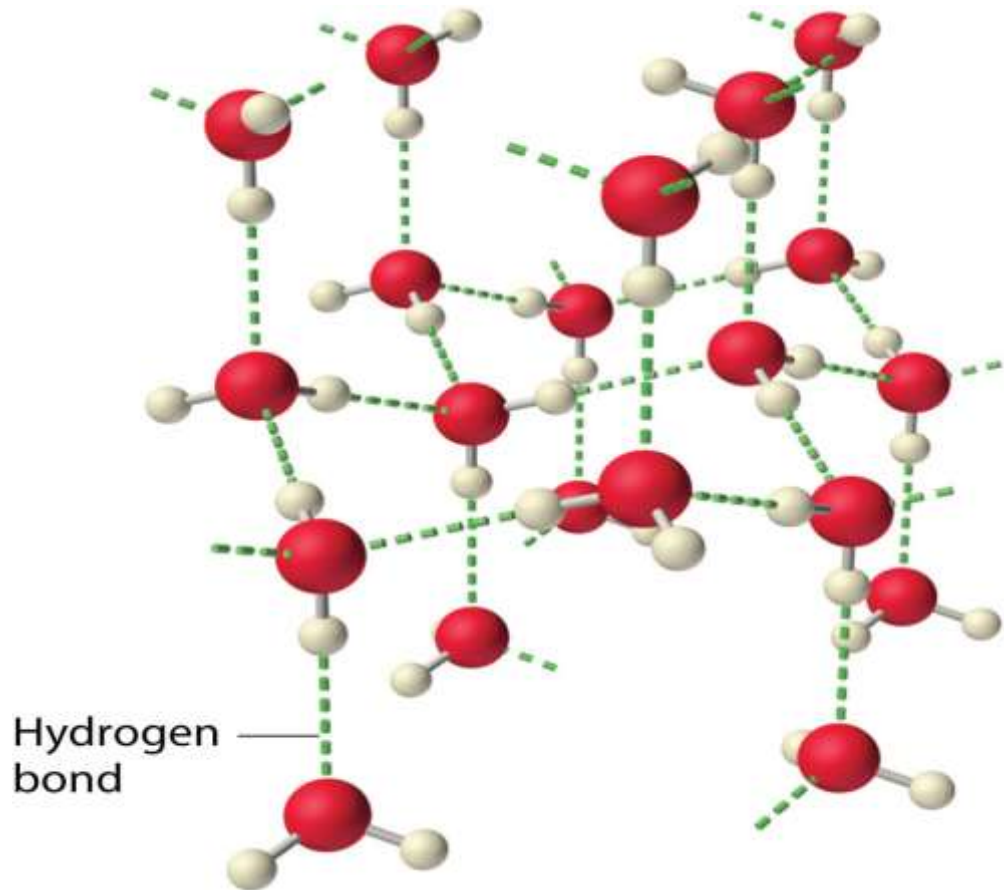
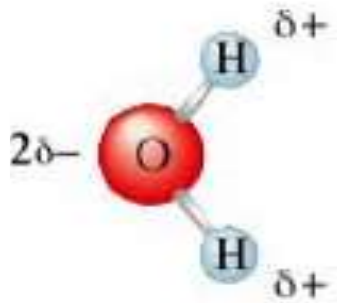


(c)

Interacción de dipolo – dipolo inducido

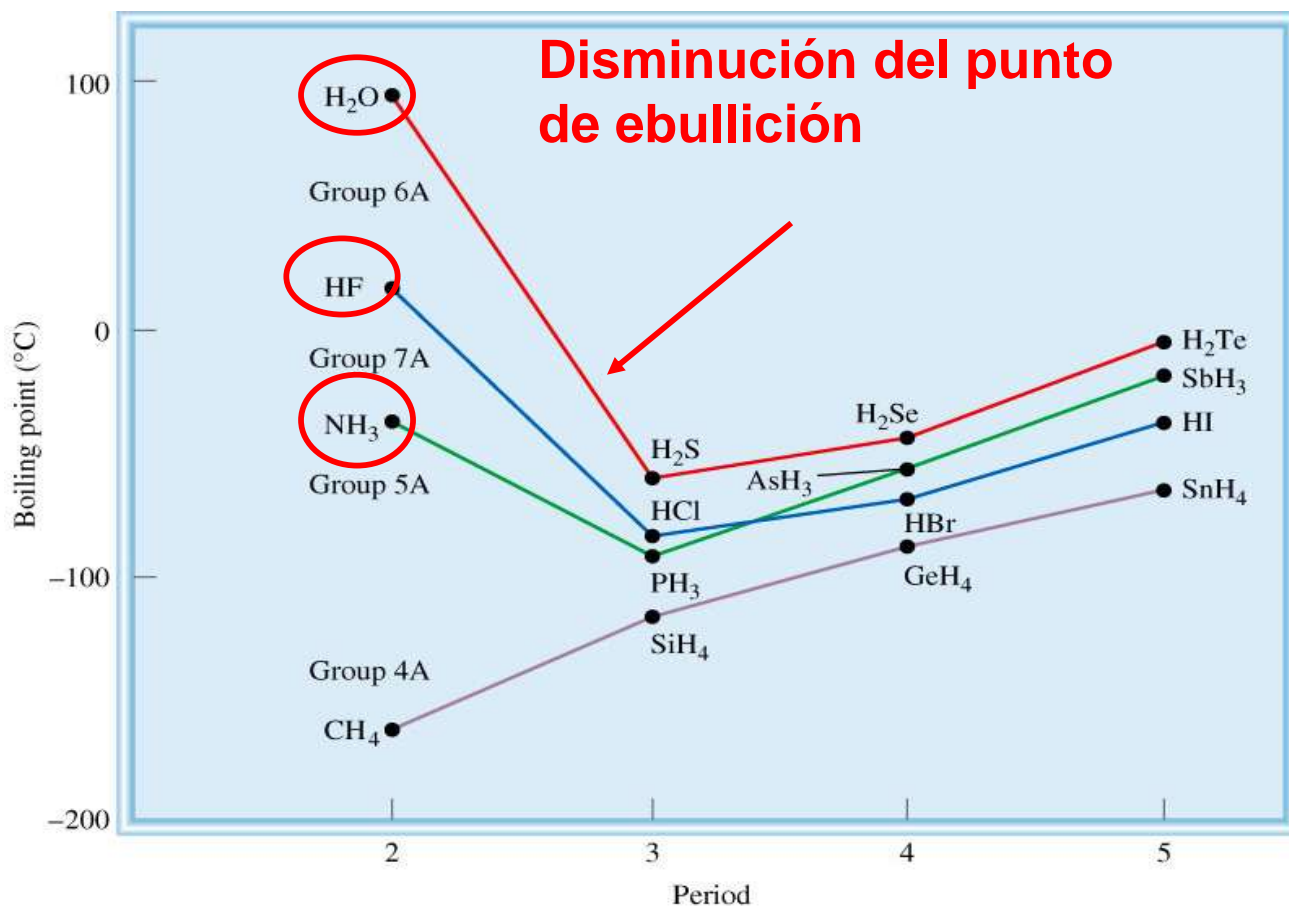
# Puente de Hidrógeno

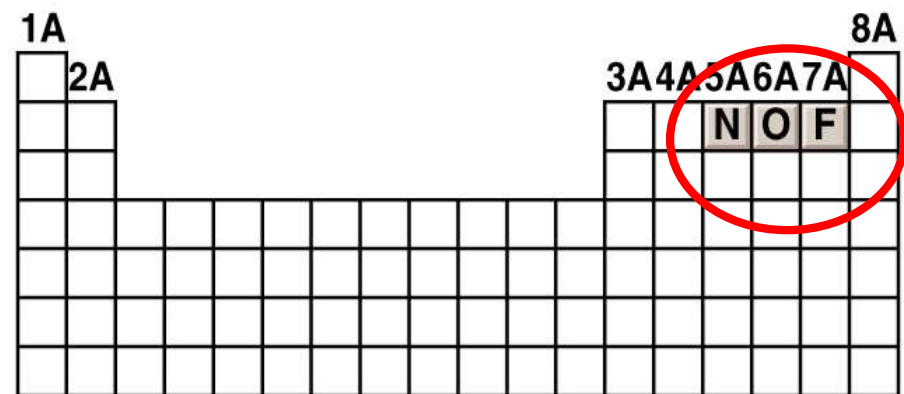
El ***enlace por puente de hidrógeno*** es una interacción dipolo-dipolo especial entre el átomo de hidrógeno en un enlace polar N-H, O-H, o F-H y un átomo electronegativo de O, N o F.



# Puente de Hidrógeno: influencia

- Estructura de proteínas
- Estructura de ácidos nucleicos
- Propiedades anómalas del  $\text{H}_2\text{O}$  (Peb, Pf,  $\delta_{\text{hielo}}$ , propiedades disolventes, etc.)

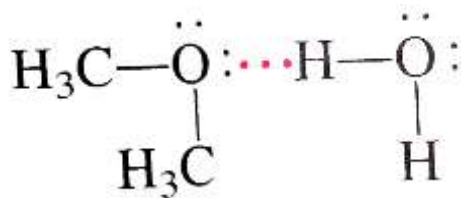




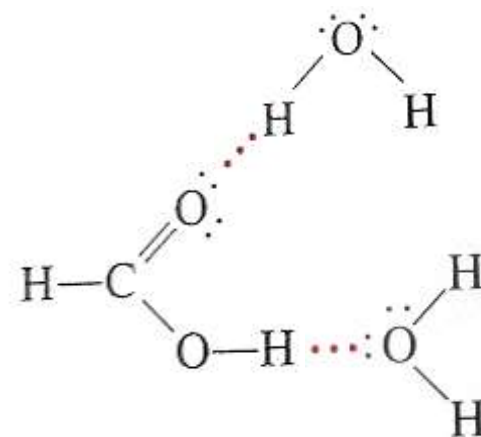
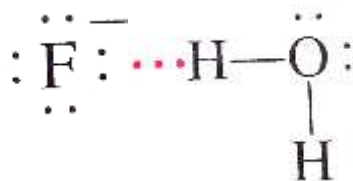
¿Cuál de las siguientes especies puede formar puente hidrógeno con el agua?

$\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ,  ~~$\text{CH}_4$~~ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{HCOOH}$ ,  ~~$\text{Na}^+$~~

Condición: O, N, F, H-(X)



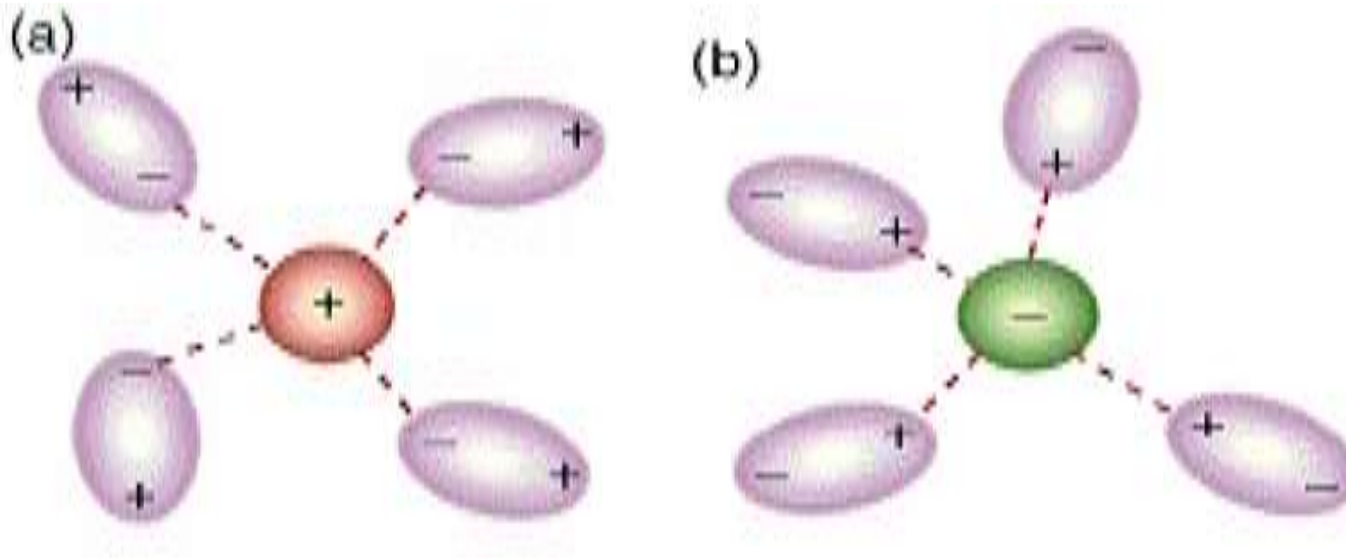
Dimetil Eter



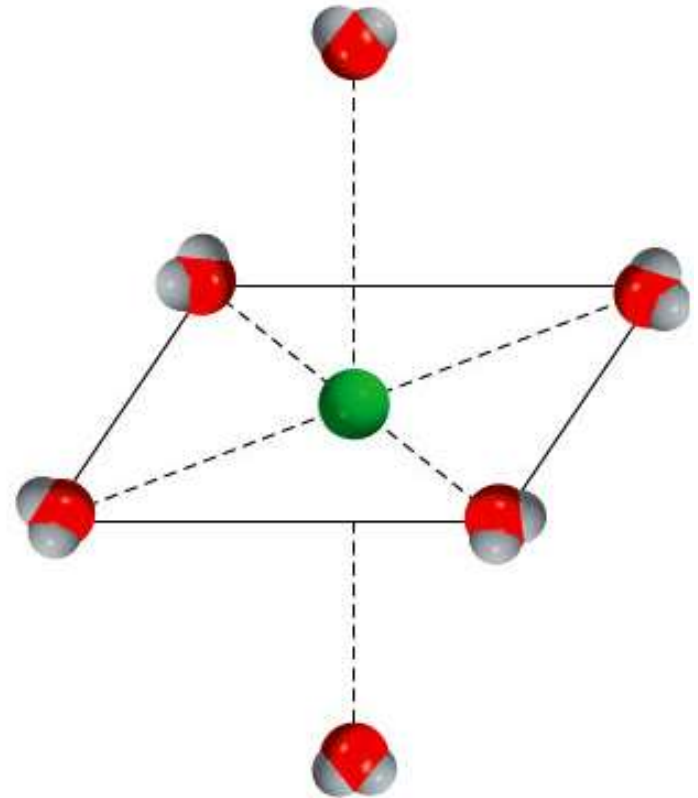
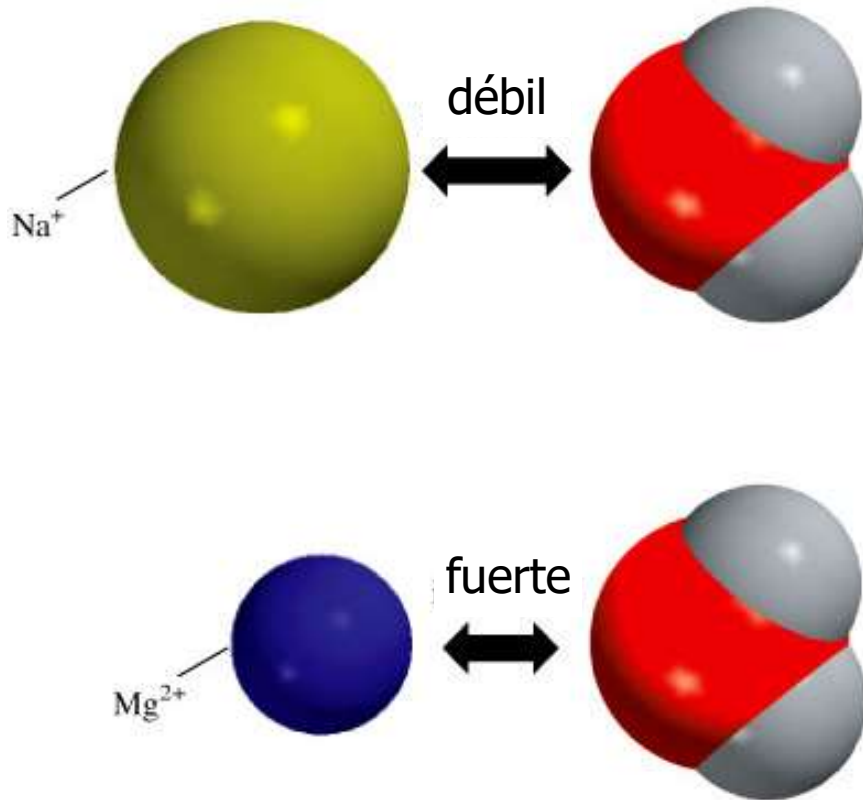
Acido Fórmico

# Interacción Ión-Dipolo.

- Interacción entre un ión y un dipolo (ej.  $\text{Na}^+$  y agua).
- Es función de la carga y tamaño del ión y del momento dipolar y tamaño de la molécula.



# Interacción de una molécula de agua con un ión $\text{Na}^+$ y con un ión $\text{Mg}^{2+}$



$$F = k \frac{Q_1 Q_2}{d^2}$$



Que tipo de fuerzas intermoleculares existen entre los siguientes pares:

a)  $\text{Cl}_2$  y  $\text{CBr}_4$

Dispersión

b)  $\text{HBr}$  y  $\text{H}_2\text{S}$

Dipolo – Dipolo, Dispersión

c)  $\text{I}_2$  y  $\text{NO}_3^-$

Ión - Dipolo Inducido, Dispersión

d)  $\text{NH}_3$  y  $\text{C}_6\text{H}_6$

Dipolo – Dipolo Inducido , Dispersión