

ENLACE QUÍMICO

Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa

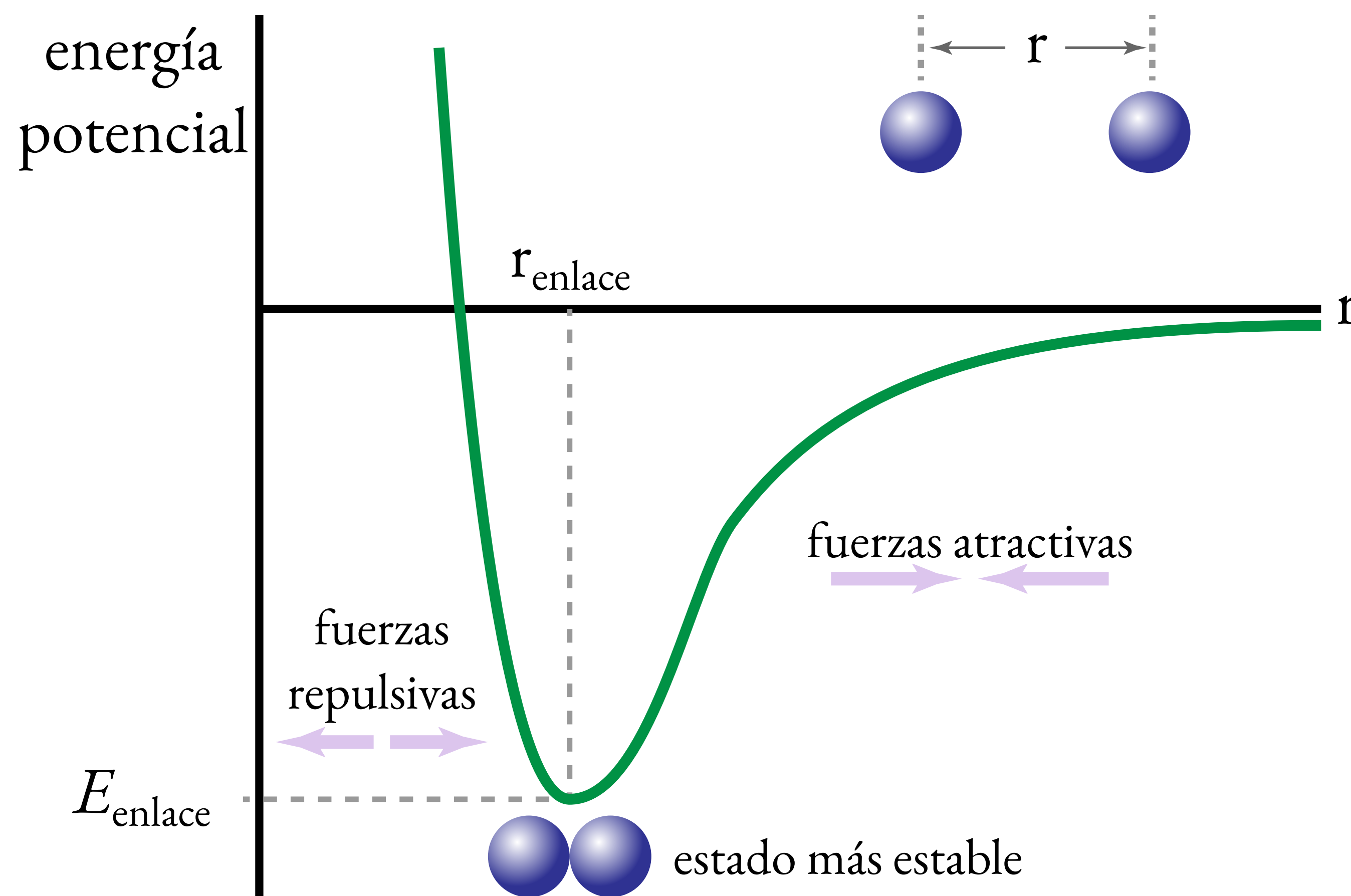


Regla del octeto

La **configuración más estable** para cualquier átomo es contar con **ocho electrones** en la **capa exterior**.

Los elementos tenderán a **unirse** para completar su capa exterior, **intercambiando** (cediendo/captando → enlace **iónico**) o **compartiendo electrones** (enlace **covalente**), y así **ganar estabilidad**.

Parámetros moleculares



Traducida y adaptada de
<https://ch301.cm.utexas.edu/section2.php?target=atomic/bonding/covalent-bonding.html>.

Energía de enlace Es una medida de la FORTALEZA de un ENLACE QUÍMICO.

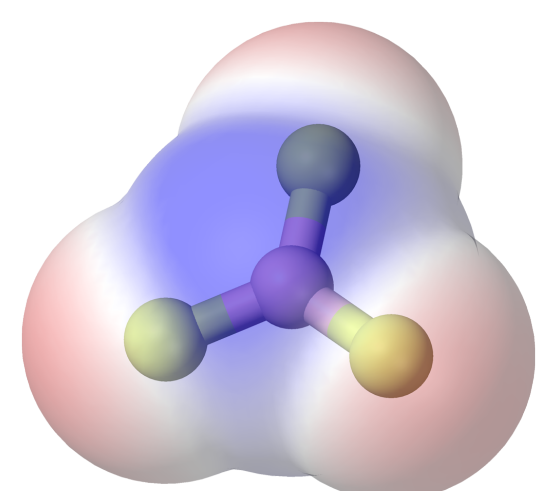
Longitud de enlace Distancia media entre los núcleos de dos átomos enlazados.

Ángulo de enlace Ángulo formado por tres átomos enlazados consecutivamente.

Polaridad de enlace Es la separación de cargas eléctricas a lo largo de un enlace, dando lugar a un MOMENTO DIPOLAR ELÉCTRICO. La diferencia de electronegatividad, $\Delta\chi$, entre los átomos de un enlace determina su polaridad:

	$\Delta\chi \leq 0.5$	$0.5 \leq \Delta\chi \leq 2$	$\Delta\chi \geq 2$
	APOLAR	POLAR	IÓNICO
ENLACE			

Una molécula será polar si el momento dipolar total (suma vectorial) es distinto de cero.



La molécula de BF_3 tiene tres enlaces polares pero debido a su geometría trigonal plana el momento dipolar resultante es nulo.

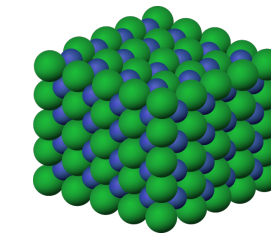
Fuente: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boron-trifluoride-elpot-3D-vdw.png>.

Enlace iónico

Es un enlace que involucra la **atracción electrostática** entre **iones** de **signo opuesto**.

El **enlace iónico** suele darse **entre metales** (tienden a ceder electrones, convirtiéndose en cationes) **y no metales** (tienden a captar electrones, convirtiéndose en aniones).

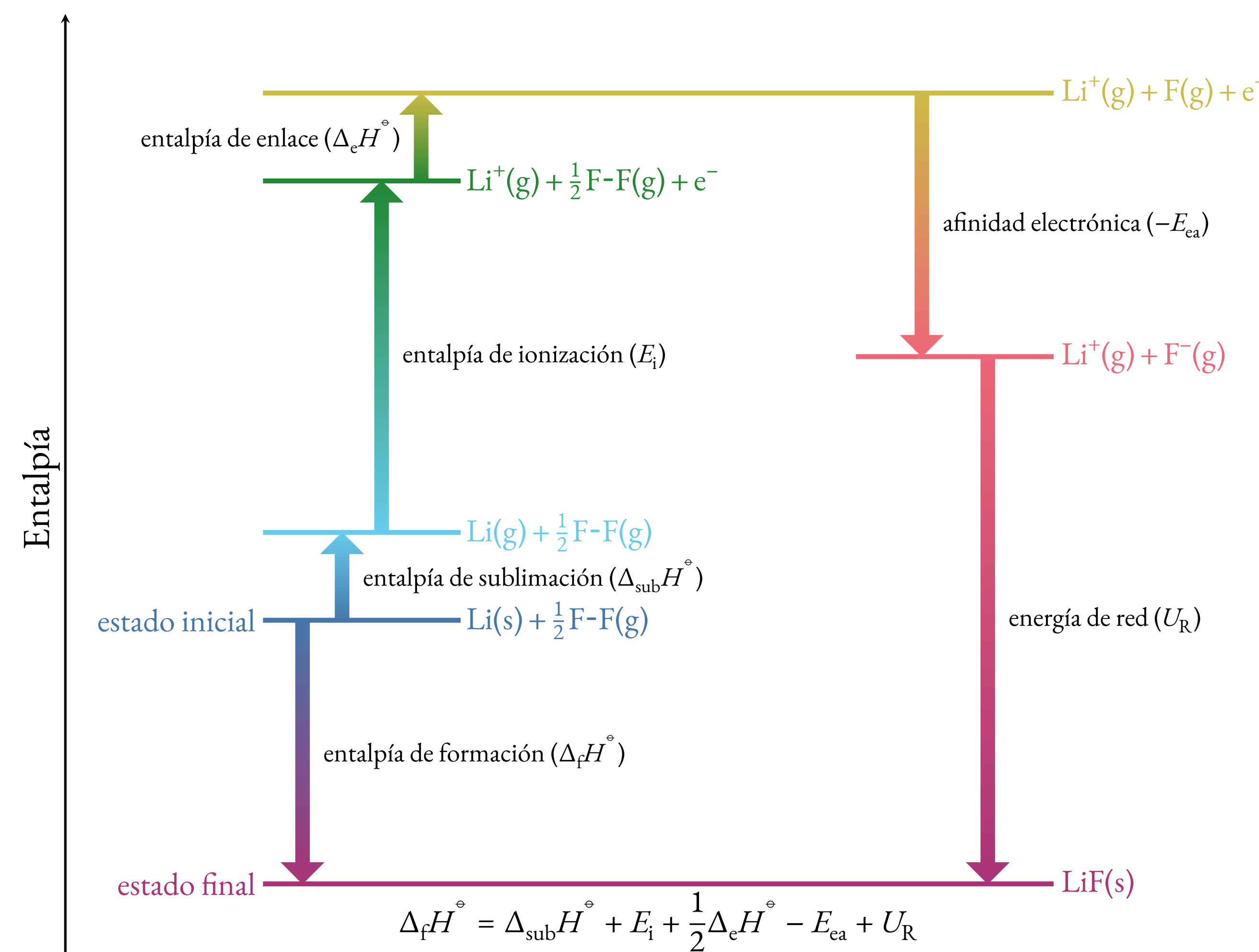
Los compuestos iónicos forman **redes cristalinas** compactas y **neutras** con diferentes geometrías según el tipo de iones que las forman.



Energía de red U_R

Es la **energía liberada** al **formar** la **red** a partir de sus iones en estado gaseoso.

Ciclo de Born-Haber Formación de un compuesto iónico a partir de sus elementos.



Ciclo de Born-Haber para la formación del fluoruro de litio (LiF). Basada en https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Born-haber_cycle_LiF.svg.

Ecuación de Born-Landé Permite calcular la ENERGÍA DE RED U_R :

$$U_R = -\frac{N_A M z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \propto -\frac{z^+ z^-}{r_0},$$

donde $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ es la constante de Avogadro; M es la constante de Madelung, relacionada con la geometría del cristal; z^+ y z^- son los números de carga del catión y del anión, respectivamente; $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ es la carga elemental, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$ es la permitividad eléctrica del vacío; r_0 es la distancia al ion más cercano; y $5 < n < 12$ es el exponente de Born (experimental).

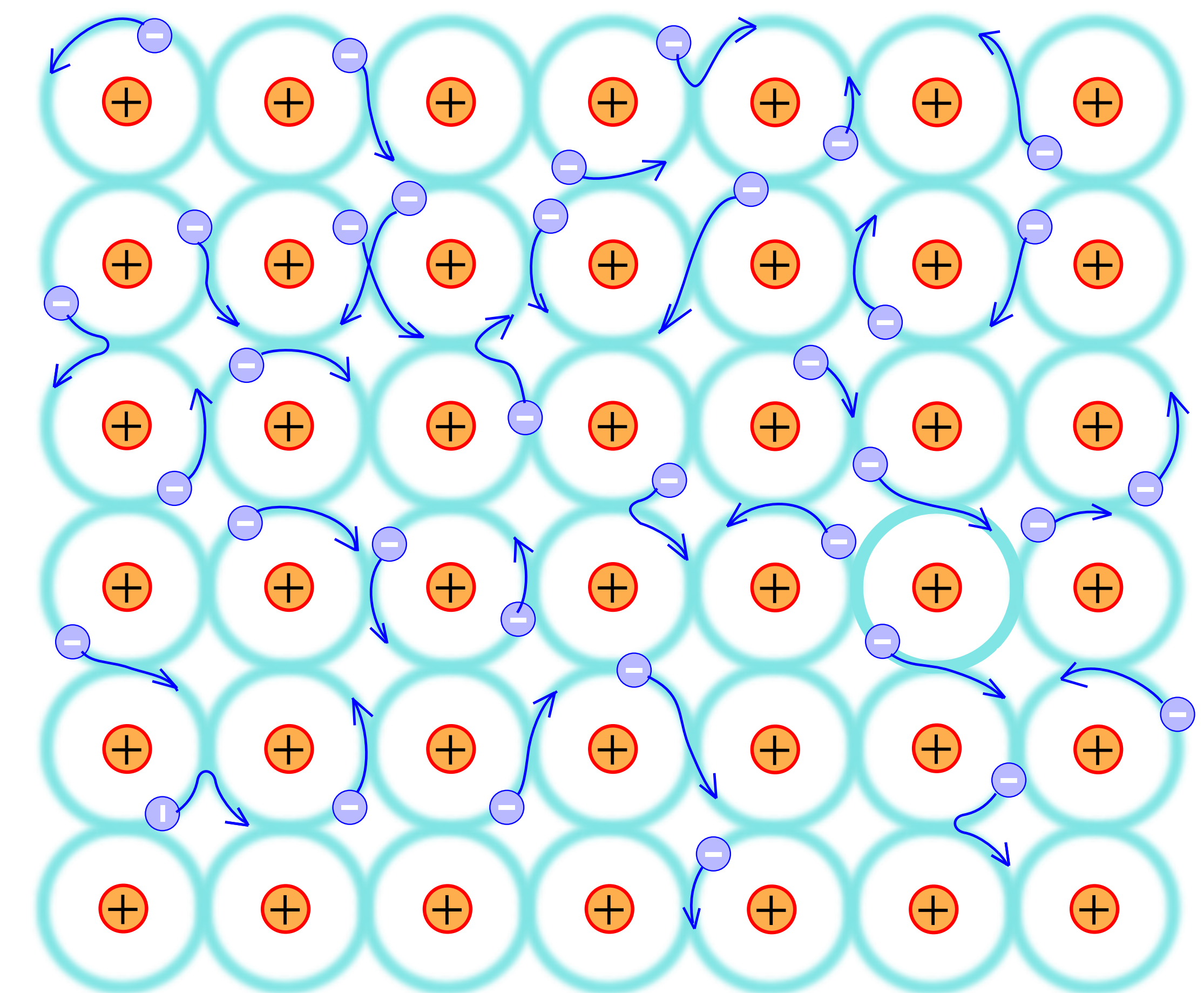
Propiedades de las sustancias iónicas

- Debido a las **intensas fuerzas electrostáticas** entre los iones, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas**, por lo que la mayoría son **sólidos cristalinos a temperatura ambiente**.
- Ante **golpes**, el **alineamiento** de los **iones** positivos y negativos **puede perderse**, por lo que son muy **frágiles**, aunque también muy **duros**.
- Fundidos** o en **disolución**, **conducen** la **corriente eléctrica**.

Enlace metálico

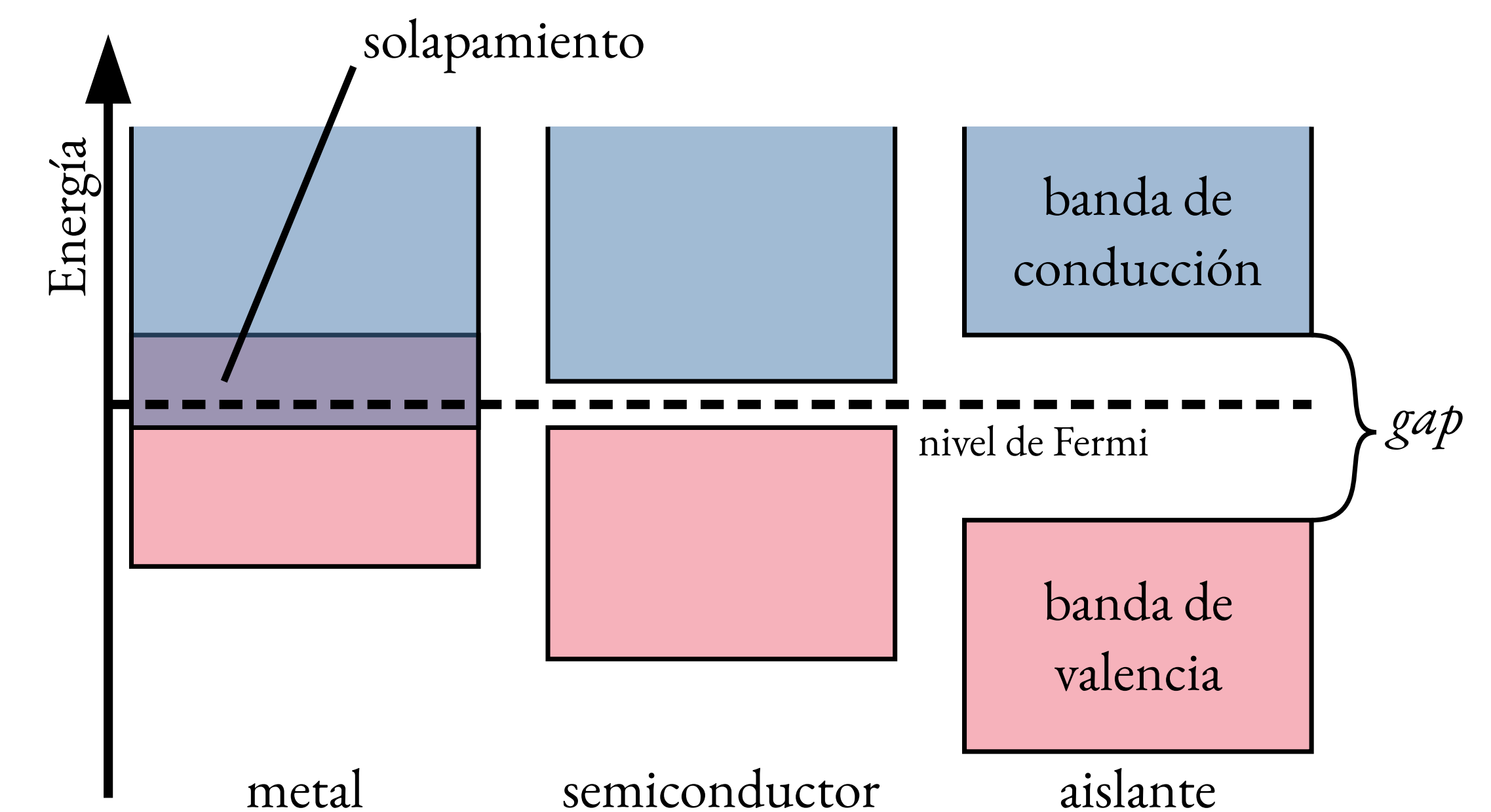
El **enlace metálico** es el enlace químico que **mantiene unidos** a los **átomos** de un **metal** entre sí. Surge de la **atracción electrostática** entre los **electrones** de conducción y los **cationes** metálicos.

Modelo del gas electrónico



Modelo del **gas electrónico**, con los **cationes** en **posiciones fijas** y los **electrones** **moviéndose libremente** en una **nube**. Fuente: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metallic_bond_model.svg.

Teoría de bandas

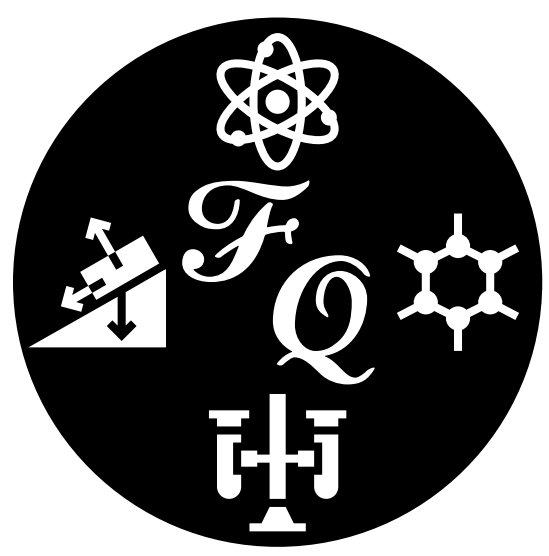


Comparación de la **estructura de bandas** electrónicas de un **metal**, un **semiconductor** y un **aislante**.

Traducida y adaptada de <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg>.

Propiedades de las sustancias metálicas

- Apariencia brillante**.
- Son **buenos conductores** del **calor** y de la **electricidad**.
- Forman **aleaciones** con otros metales.
- Tienden a ceder** (perder) **electrones** al reaccionar con otras sustancias.
- La mayoría son **sólidos** a temperatura ambiente (**Hg** es



ENLACE QUÍMICO

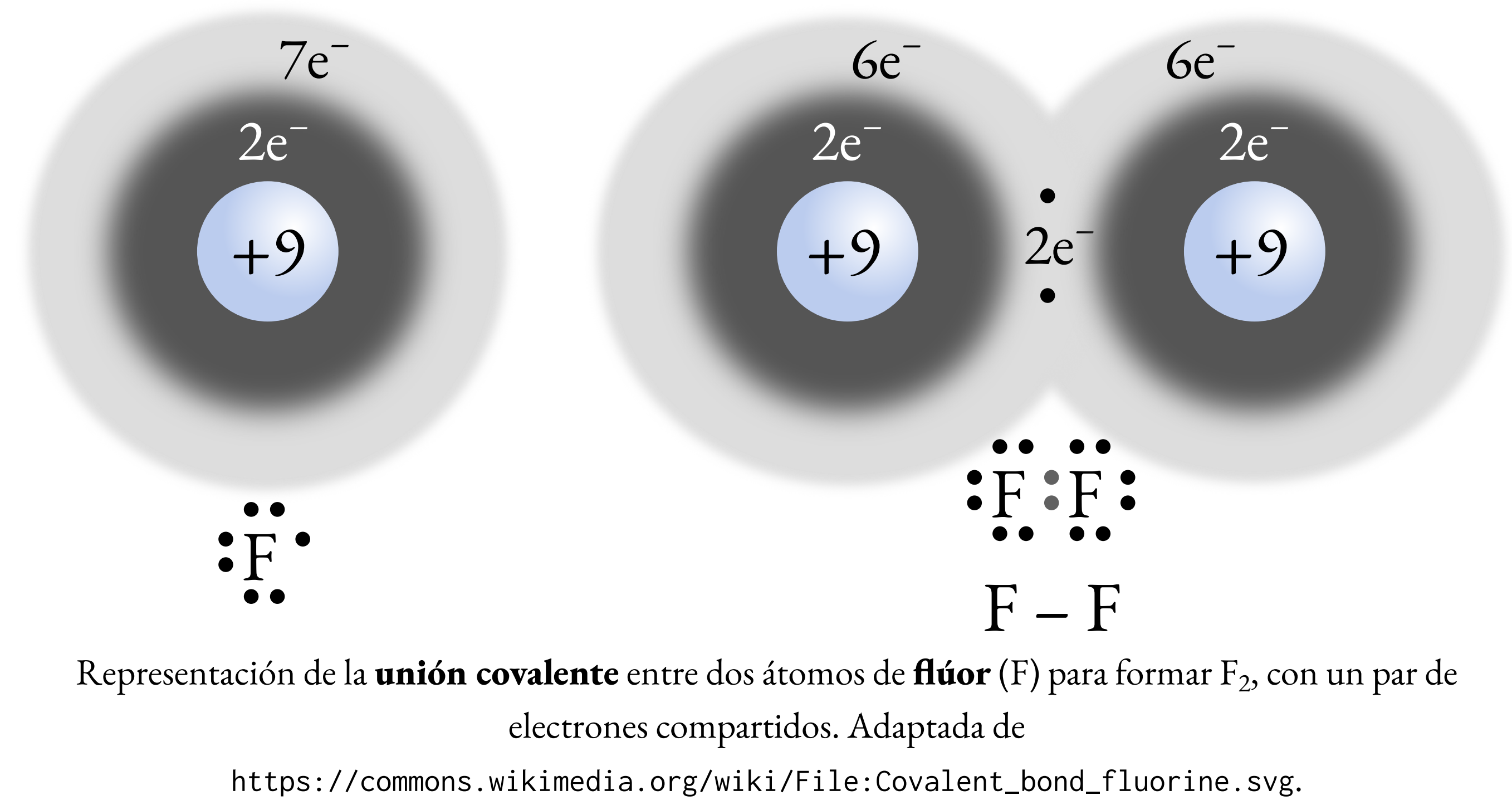
Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa



Enlace covalente

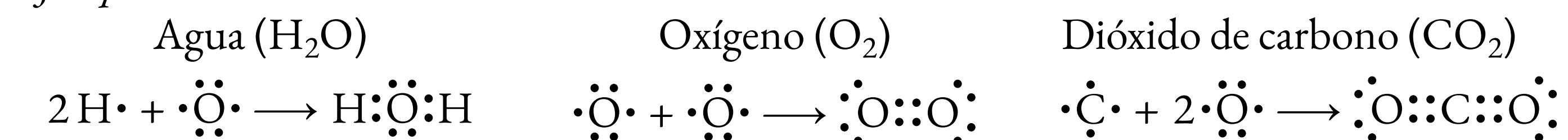
Es un enlace químico que implica la **compartición de pares de electrones** entre átomos. El **enlace covalente** suele darse **entre no metales** (tendencia a captar electrones).



Estructuras de Lewis

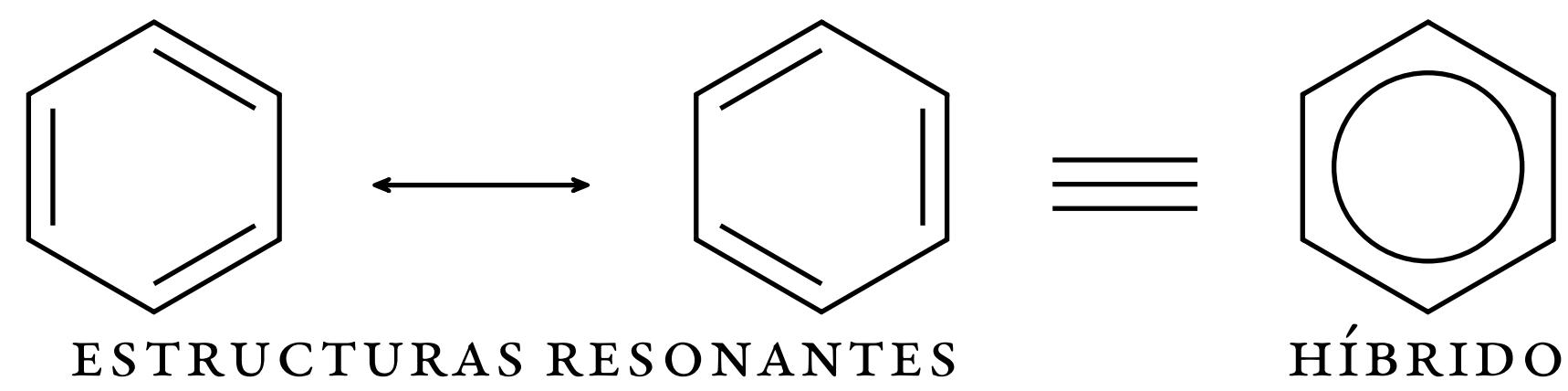
Se trata de **diagramas** que **muestran la unión** entre los **átomos** de una **molécula** y los **pares solitarios de electrones** que pueden existir en la molécula.

Ejemplos



Resonancia

La **RESONANCIA** es una forma de describir el enlace en ciertas moléculas mediante la combinación de varias **ESTRUCTURAS RESONANTES** cuyo conjunto se conoce como un **HÍBRIDO de RESONANCIA**. Es especialmente útil para describir los **ELECTRONES DESLOCALIZADOS** (enlaces = en distintas posiciones) en ciertas moléculas o iones poliatómicos.

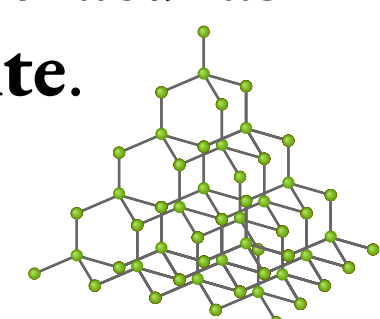
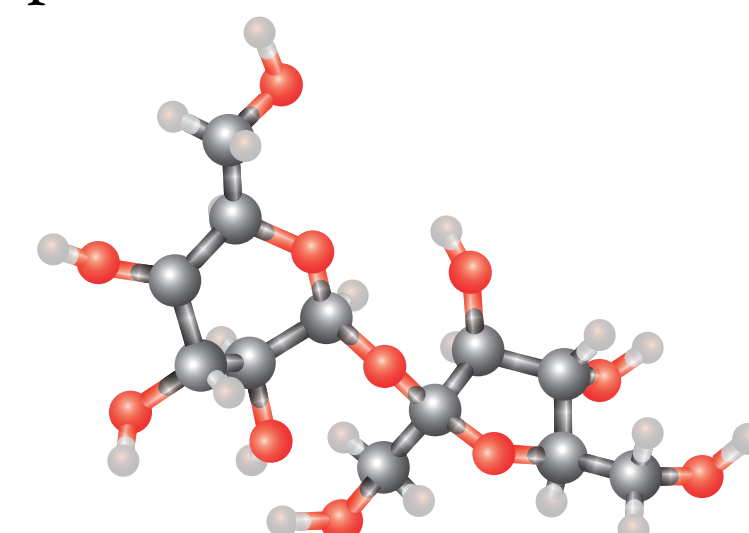


Propiedades de las sustancias covalentes moleculares

- Debido a las **débiles interacciones entre moléculas** covalentes, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición bajas** (muchos compuestos covalentes son **líquidos o gases a temperatura ambiente**).
- En estado sólido son compuestos **blandos y frágiles**.
- Son **malos conductores del calor** y de la **electricidad**.

Propiedades de las sustancias covalentes cristalinas

- Debido a los **fuertes enlaces covalentes** entre los átomos, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición altas**, por lo que son **sólidos a temperatura ambiente**.
- Son sustancias muy **duras** aunque **frágiles**.
- Suelen ser **malos conductores** (no así el grafito o el grafeno).



Geometría molecular

TRPECV

La **TEORÍA DE REPULSIÓN DE PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA** (TRPECV) se basa en que, como los electrones de valencia se repelen unos a otros, éstos tienden a adoptar una disposición espacial que minimiza dicha repulsión.

DENSIDADES ELECTRÓNICAS	NÚMERO DE PARES SOLITARIOS (EN AMARILLO)			
	0	1	2	3
2	Lineal			
3	Trigonal plana	Angular		
4	Tetraédrica	Piramidal trigonal	Angular	Lineal
5	Bipiramidal trigonal	Balancín	Forma de T	Lineal
6	Octaédrica	Piramidal cuadrada	Cuadrada plana	

TEV/Hibridación

La **TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA** (TEV) se basa en que los e⁻ compartidos se encuentran en una zona de **SOLAPAMIENTO ORBITAL**:

SOLAPAMIENTO	ENLACE	ORBITALES		
Frontal (orbitales enfrentados)	σ (sencillo)	s + s	s + p	p + p
Lateral (orbitales paralelos)	π (múltiple)		p + p	

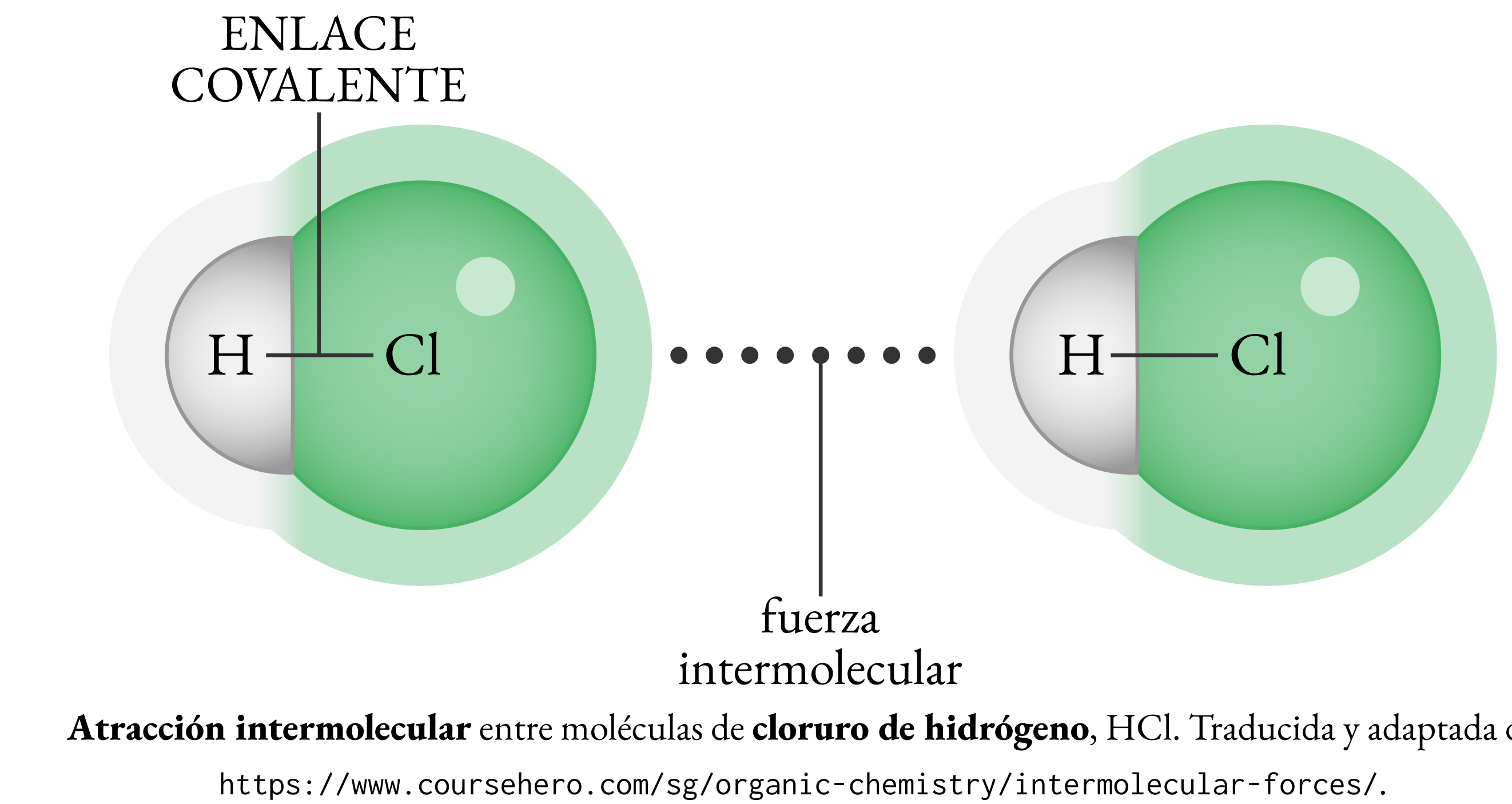
La **HIBRIDACIÓN** consiste en combinar orbitales atómicos del átomo central para formar **ORBITALES HÍBRIDOS** energéticamente iguales y orientados en la dirección del enlace.

	HIBRIDACIÓN sp	HIBRIDACIÓN sp ²	HIBRIDACIÓN sp ³
ORBITALES ATÓMICOS	s + p (2)	s + p + p (3)	s + p + p + p (4)
ORBITALES HÍBRIDOS	180° 	120° 	109,5°
GEOMETRÍA (EJEMPLO)	Lineal (BeCl ₂)	Trigonal plana (BF ₃)	Tetraédrica (CH ₄)

Fuerzas intermoleculares

Las **fuerzas intermoleculares** son las **fuerzas** que existen **entre** las **moléculas**, incluyendo las fuerzas de atracción o repulsión que actúan entre las moléculas y otros tipos de partículas vecinas, por ejemplo, átomos o iones. Las fuerzas intermoleculares son **débiles en relación con las fuerzas intramoleculares** (las que mantienen unida una molécula).

Fuerzas de van der Waals



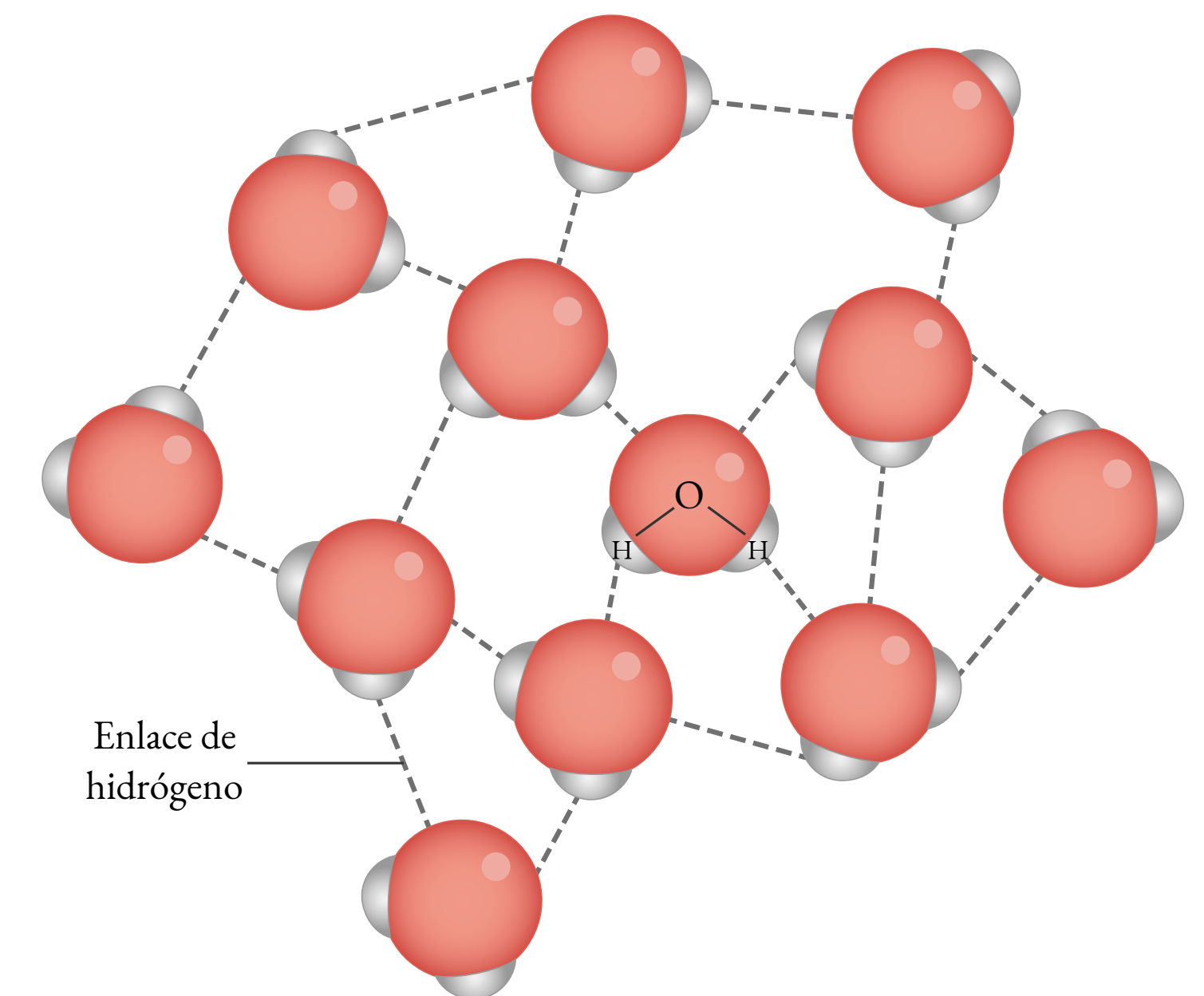
Se pueden dar entre **moléculas polares** (dipolo-dipolo, más fuertes cuanto mayor sea la polaridad de la molécula), y **apolares** (llamadas **fuerzas de dispersión de London**, más fuertes cuanto más grandes y masivas son las moléculas involucradas).

Enlaces de hidrógeno

Son las **fuerzas** intermoleculares más **intensas**. Se dan entre moléculas que contienen átomos de **hidrógeno** unidos a átomos de **nitrógeno** (N), **oxígeno** (O) o **flúor** (F).

Los **enlaces de hidrógeno** son **responsables** de:

- Que el **agua** (H₂O) tenga una **temperatura de ebullición anormalmente alta** (100 °C a presión atmosférica).
- La **estructura de proteínas y ácidos nucleicos**, como la **doble hélice del ADN**.
- La **estructura de polímeros**.



Enlaces de hidrógeno entre átomos de H y O en moléculas de **agua** (H₂O). Traducida y adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/>.

crystal covalent (graphite)	>	solid metallic (Ti)	>	crystal ionic (NaCl)	>	H bonds of H (H ₂ O)	>	dipole-dipole (CO)	>	London (Ne)
> 3600 °C		1668 °C		801 °C		0 °C		-205 °C		-248.4 °C
← Mayor fortaleza, temperaturas de fusión y ebullición más elevadas										