

Tema 10 (I)

Enlace químico

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

1

- 10.1 Tipos de enlace químico
- 10.2 El enlace iónico
- 10.3 El enlace covalente
- 10.4 Polaridad de los enlaces y electronegatividad
- 10.5 Geometría molecular: teoría VSEPR
- 10.6 Teoría de orbitales moleculares
- 10.7 Moléculas poliatómicas: Hibridación
- 10.8 Orbitales moleculares deslocalizados

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

2

10.1.- Tipos de enlace químico

Enlace iónico: entre elementos de muy diferente electronegatividad.

Metales con no metales

Enlace covalente: entre elementos de parecida electronegatividad y ambos muy electronegativos.

No metales entre sí

Enlace metálico: entre elementos de parecida electronegatividad y ambos poco electronegativos.

Metales entre sí

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

3

Los **electrones de la capa más externa** son los que determinan la formación y el **tipo de enlace químico** del compuesto

Los **e⁻** se **comparten o transfieren** de manera que los **átomos adquieren una configuración electrónica** especialmente **estable** (generalmente de gas noble) con **8 e⁻** en la capa externa (octeto)

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

4

En algunos casos **se transfieren electrones** de un átomo a otro formándose iones + y - que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas dando lugar a un **ENLACE IÓNICO**

En otros casos **se comparten** entre los átomos **uno o más pares de e⁻**; esta compartición se llama **ENLACE COVALENTE**

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

5

10.2 El enlace iónico

Pérdida de electrones

Diagram showing the periodic table with arrows indicating the direction of electron loss from metals (left side) to non-metals (right side). The periodic table is labeled with 'periodo' (rows) and 'grupo' (columns). Elements shown include He, Li, Be, B, Na, Mg, Al, K, Ca, Ga, Rb, Sr, In, Sn, Xe, Cs, Ba, Tl, Pb, Fr, Ra.

Ganancia de electrones

Diagram showing the periodic table with arrows indicating the direction of electron gain from non-metals (right side) to metals (left side). The periodic table is labeled with 'periodo' (rows) and 'grupo' (columns). Elements shown include H, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, As, Se, Br, Sb, Te, I, Bi, Po, At.

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10

6

El cloruro sódico, la combinación de un metal y un no metal

Na $[Ne] 3s^1$ → Na⁺ $[Ne]$

Cl $[Ne] 3s^2 3p^5$ → Cl⁻ $[Ne] 3s^2 3p^6$

Poco electronegativo → Muy electronegativo

Sólido iónico: Cristalino, Frágil, Soluble en agua

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 7

ENERGÍA RETICULAR

Una medida cuantitativa de la estabilidad de cualquier sólido iónico es su **energía reticular**, que se define como la **energía requerida para separar completamente un mol de un compuesto iónico sólido en sus iones en estado gaseoso**.

CICLO DE BORN-HABER

La energía reticular se puede calcular si se considera que la formación de un compuesto iónico se efectúa en una serie de pasos conocidos como el ciclo de **Born-Haber**.

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 8

El ciclo de Born Haber relaciona las **energías reticulares** de los compuestos iónicos con las **energías de ionización**, **afinidad electrónica** y otras propiedades **atómicas y moleculares**.

Este ciclo, se basa en la ley de Hess y define las distintas etapas que preceden a la formación de un sólido iónico. La **ley de Hess** es una **aplicación de la ley de conservación de la energía** (1º Principio de la Termodinámica) a un conjunto de reacciones químicas sucesivas.

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 9

Fuerza del enlace iónico

La energía o fuerza de un enlace iónico depende de:

1. La **energía de ionización** del metal
2. La **afinidad electrónica** del no metal
3. La **energía de atomización** de sus componentes
4. La **energía (entalpía) de red**

Diferencia de energía entre los iones infinitamente separados y cuando están formando el sólido cristalino

Depende de los **radios iónicos**, las **cargas** de los iones y el tipo de estructura cristalina

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 10

Ejemplo: Calcular la energía reticular del LiF

Entalpía de formación estándar

$$Li(s) + \frac{1}{2} F_2(g) \rightarrow LiF(s) \quad \Delta H^\circ = -594.1 \text{ kJ}$$

- 1º **Conversión del Li sólido a vapor (sublimación).**
 $Li(s) \rightarrow Li(g) \quad \Delta H_1^\circ = 155.2 \text{ kJ}$
- 2º **Disociación de $\frac{1}{2}$ mol de F_2 gaseoso en átomos de F gaseoso.**
 $\frac{1}{2} F_2(g) \rightarrow F(g) \quad \Delta H_2^\circ = 75.3 \text{ kJ}$
- 3º **Ionización de 1 mol de átomos de Li gaseoso.**
 $Li(g) \rightarrow Li^+(g) \quad \Delta H_3^\circ = 520 \text{ kJ}$

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 11

- 4º **Adición de 1 mol de e^- a 1 mol de átomos de F gaseoso.**
 $F(g) \rightarrow F^-(g) \quad \Delta H_4^\circ = -328 \text{ kJ}$
- 5º **Combinación de 1 mol de Li^+ y 1 mol de F^- gaseosos**
 $Li^+(g) + F^-(g) \rightarrow LiF(s) \quad \Delta H_5^\circ = ? \text{ kJ}$

La reacción inversa del paso 5 define la energía reticular, que será igual a ΔH_5° cambiada de signo.

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 12

$$\begin{aligned}
 \text{Li (s)} &\longrightarrow \text{Li (g)} \quad \Delta H_1^{\circ} = 155.2 \text{ kJ} \\
 \frac{1}{2} \text{F}_2 \text{ (g)} &\longrightarrow \text{F (g)} \quad \Delta H_2^{\circ} = 75.3 \text{ kJ} \\
 \text{Li (g)} &\longrightarrow \text{Li}^+ \text{ (g)} \quad \Delta H_3^{\circ} = 520 \text{ kJ} \\
 \text{F (g)} &\longrightarrow \text{F}^- \text{ (g)} \quad \Delta H_4^{\circ} = -328 \text{ kJ} \\
 \text{Li}^+ \text{ (g)} + \text{F}^- \text{ (g)} &\longrightarrow \text{LiF(s)} \quad \Delta H_5^{\circ} = ? \text{ kJ} \\
 \hline
 \text{Li (s)} + \frac{1}{2} \text{F}_2 \text{ (g)} &\longrightarrow \text{LiF(s)} \quad \Delta H_{\text{total}}^{\circ} = -594.1 \text{ kJ}
 \end{aligned}$$

De acuerdo con la ley de Hess se puede escribir:

$$\Delta H_{\text{total}}^{\circ} = \Delta H_1^{\circ} + \Delta H_2^{\circ} + \Delta H_3^{\circ} + \Delta H_4^{\circ} + \Delta H_5^{\circ}$$

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 13

10.3 El enlace covalente

El enlace covalente se da entre **elementos de similar electronegatividad** y se origina por la **compartición de un par de electrones** entre dos átomos

$\text{H} \cdot + \cdot \text{H} \rightarrow \text{H} : \text{H} \text{ ó } \text{H} - \text{H}$

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 14

TEORÍA DE LEWIS

Es el método más simple de representar el **enlace químico** y **se aplica sobre todo al enlace covalente**

Con ella no hace falta resolver la ecuación de Schrödinger para la correspondiente molécula

Es importante porque **sirve de base** para una teoría simple (la VSEPR) que **predice las geometrías moleculares**

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 15

Una **estructura de Lewis** es una combinación de símbolos que representa la **transferencia o compartición de e^-** en un **enlace químico**

En las estructuras de Lewis **solo aparecen los electrones de valencia**

Los **electrones se representan por un punto (o cruz)** y los **enlaces por una línea**

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 16

Ejemplo: F \rightarrow 7 e^- de valencia

$$\cdot \ddot{\text{F}} \cdot = \begin{array}{c} \times \times \\ \times \text{F} \times \\ \times \times \end{array}$$

ENLACE IÓNICO $\text{Na} \cdot + \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot \rightarrow \text{Na}^+ : \ddot{\text{Cl}}:^-$

(transferencia de e^-) Estructura de Lewis

ENLACE COVALENTE $\text{H} \cdot + \cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot \rightarrow \text{H} : \ddot{\text{Cl}} \cdot$

(compartición de e^-) Estructura de Lewis

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 17

¿Cuántos enlaces covalentes puede formar un átomo?

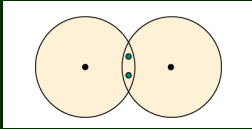
- Una configuración electrónica en la que una capa o subcapa se encuentra **completa** presenta gran estabilidad química. (Tema 9)
- La configuración electrónica de valencia de capa completa para elementos del primer periodo es $1s^2$ ($2 e^-$) mientras que para elementos del segundo periodo es $2s^2 2p^6$ ($8 e^-$).
- Un átomo forma tantos enlaces covalentes como sean necesarios para que se complete su capa de valencia mediante pares compartidos de electrones.

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 18

El **HIDRÓGENO** forma un único enlace porque cada átomo tiende a rodearse de una capa completa de electrones de forma que adopta la configuración $1s^2$

$$H \cdot + \cdot H \rightarrow H \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{H}$$

Gracias a la formación del enlace covalente cada átomo de hidrógeno ha adoptado una **configuración más estable** de capa completa



22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 19

REGLA DEL OCTETO

$$H \cdot + \cdot \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{O} \cdot + \cdot H \longrightarrow H \cdot \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{O} \cdot \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{H}$$

El **átomo de O** en las estructuras de Lewis del H_2O está rodeado por $8 e^-$, contando los electrones del enlace. Al conseguirse estos $8 e^-$, el átomo de O cumple la **REGLA DEL OCTETO**

El **átomo de H** es una **excepción** a esta regla, sólo puede tener $2 e^-$ en la capa de valencia.

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 20

ENLACES COVALENTES SIMPLES

La compartición de un único par de e^- entre átomos enlazados da lugar a un **ENLACE COVALENTE SIMPLE**.

$$\cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{F} \cdot \longrightarrow 1 \text{ enlace}$$

$$\cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{F} \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{F} \cdot \longrightarrow (F_2)$$

Par solitario (pointing to the lone pair on the left F atom)
Par enlazante (pointing to the shared pair between the two F atoms)

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 21

ENLACES COVALENTES MÚLTIPLES

Frecuentemente hace falta compartir más de un par de e^- para alcanzar el octeto.

$$\cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{O} \cdot \longrightarrow 2 \text{ enlaces} \quad \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{O} = \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{O} \quad (O_2)$$

$$\cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{|}}{N} \cdot \longrightarrow 3 \text{ enlaces} \quad \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{N} \equiv \overset{\cdot \cdot}{\underset{\cdot \cdot}{|}}{N} \quad (N_2)$$

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 22

Enlaces simples $C \cdot \cdot C$ $C - C$
 Enlaces dobles $C \cdot \cdot \cdot C$ $C = C$
 Enlaces triples $C \cdot \cdot \cdot \cdot C$ $C \equiv C$

$$\begin{array}{c} H & H \\ | & | \\ H - C - C - H \\ | & | \\ H & H \end{array} \quad \begin{array}{c} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C = C \\ & / & \backslash \\ H & & H \end{array} \quad H - C \equiv C - H$$

Etano Eteno (etileno) Etino (acetileno)

En todos los casos los átomos de carbono están rodeados de 8 electrones

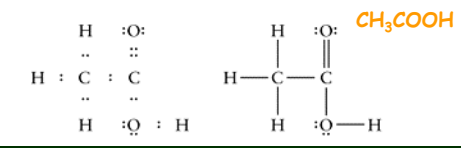
22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 23

EJEMPLO Estructura de Lewis del ácido acético

- Determinar el n° total de e^- de valencia de la estructura


$$4 H + 2 C + 2 O = 4 \times 1 + 2 \times 4 + 2 \times 6 = 24 \text{ electrones}$$

Los átomos de H son siempre átomos terminales.
 Los átomos centrales suelen ser los de menos EN.




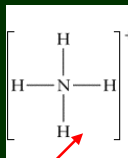
22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 24

EJEMPLOS

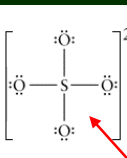
El átomo central suele ser el más electropositivo 

$\text{F} \text{---} \ddot{\text{O}} \text{---} \text{F}$

En los iones poliatómicos se cumple la regla del octeto añadiendo o sustrayendo electrones al conjunto: 



Ión amonio NH_4^+

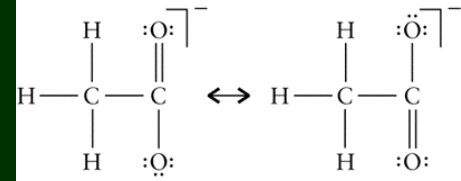


Ión sulfato SO_4^{2-}

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 25

RESONANCIA

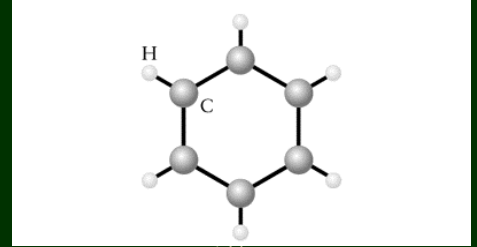
Se produce cuando los enlaces múltiples se pueden escribir en situaciones que son equivalentes:



Ión acetato: CH_3COO^-

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 26

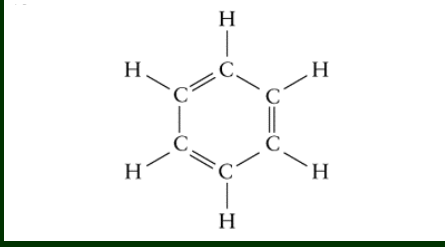
El ejemplo más típico de una ESTRUCTURA RESONANTE es la del BENCENO:



C_6H_6

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 27

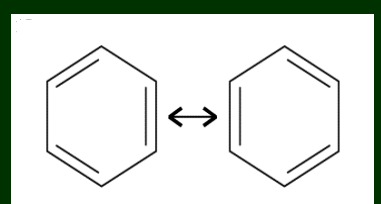
Friedrich Kekulé propuso en 1865 una estructura cíclica con enlaces dobles y sencillos alternados:



C_6H_6

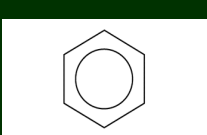
22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 28

Sin embargo se comprueba que todos los enlaces del benceno son equivalentes. El benceno se comporta como si su estructura fuera consecuencia de la resonancia entre dos estructuras equivalentes



22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 29

La ESTRUCTURA RESONANTE del benceno se representa de forma más adecuada así:



El anillo de 6 átomos de carbono del benceno es una estructura muy estable, que da a esta sustancia y sus derivados propiedades características.

A las sustancias que contienen en su estructura anillos bencénicos se las denomina **COMPUESTOS AROMÁTICOS**

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente, Tema 10 30

EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO

RADICALES = moléculas con un número impar de e⁻.
Ej.: OH, CH₃, NO₂, NO...

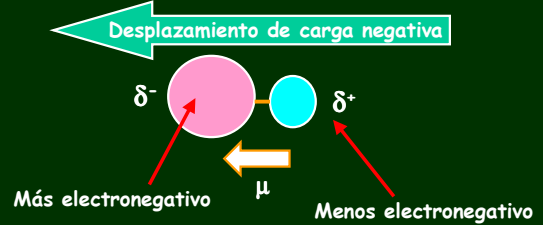


BIRRADICALES= moléculas con electrones desapareados. Ej.: CH₂-CH₂-CH₂, O₂, ...

Tanto los **RADICALES** como los **BIRRADICALES** son muy reactivos porque tienen electrones desapareados susceptibles de formar enlaces.

10.4 Polaridad de los enlaces y electronegatividad

Cuando **dos átomos distintos**, y por tanto de distinta electronegatividad, se unen a través de un **enlace covalente** se origina una **separación de carga** expresada en forma de un **momento dipolar (μ)**.



La **polaridad de un enlace** se mide a partir de la magnitud de su **MOMENTO DIPOLAR**

$$\vec{\mu} = q\vec{r}$$

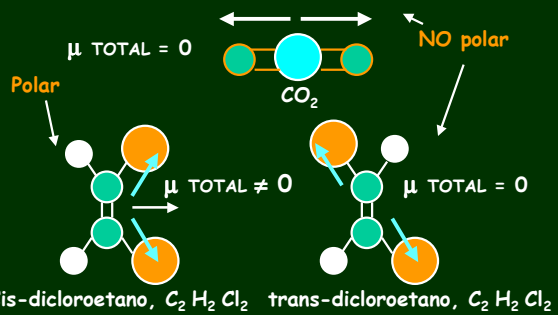
Vector que va de la carga positiva a la negativa

Unidades de momento dipolar:

En S.I. → C m

1 Debye (D) = 3.335x10⁻³⁰ C m

Una **MOLÉCULA POLAR** es aquella que tiene un **MOMENTO DIPOLAR TOTAL** (suma de los momentos de los enlaces) no nulo.



ENLACE IÓNICO FRENTE A ENLACE COVALENTE

Un enlace covalente polarizado es un **caso intermedio** entre un enlace iónico puro y otro covalente puro.



10.5 Geometría molecular: teoría RPECV

"Teoría de la repulsión entre pares de e⁻ de la capa de valencia" (RPECV)

La **teoría RPECV** o **VSEPR** permite deducir a partir de la estructura de Lewis de una molécula, la **GEOMETRÍA ESPACIAL** que adopta.

VSEPR: Valence-Shell Electron Pair Repulsion model

Hipótesis principal del modelo VSEPR

Las regiones de alta concentración de **electrones** (enlaces y pares libres) **se repelen entre sí**.

Los **enlaces y los pares de e⁻** DEL **ÁTOMO CENTRAL** se sitúan de forma que estén lo **más alejados posible entre sí**.

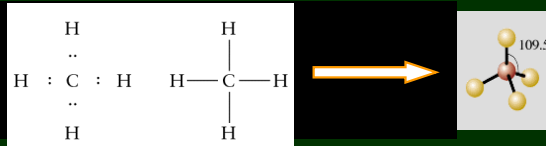
22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

37

Ejemplo:

¿Que forma geométrica tiene la molécula de metano?



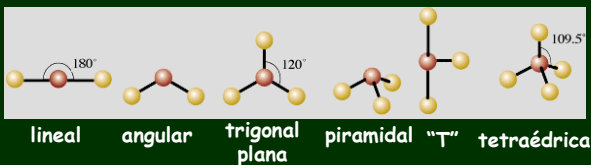
Si distribuimos los enlaces del C sobre los vértices de un **tetraedro regular**, las **repulsiones entre los grupos de e⁻**, alrededor del **átomo central** se harán **mínimas**

22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

38

GEOMETRÍAS PRINCIPALES EN MOLECULAS POLIATÓMICAS

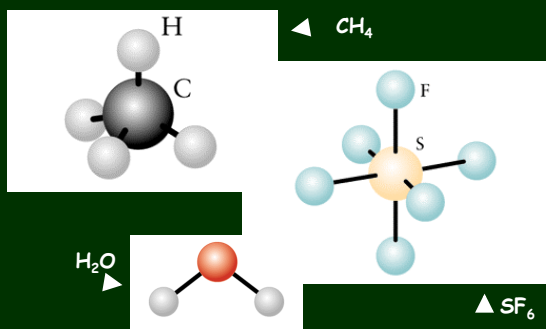


22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

39

Ejemplos:



22/02/2005

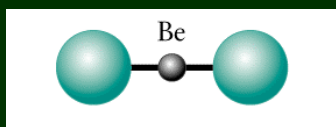
Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

40

Moléculas SIN pares libres en el átomo central



$AX_2 \rightarrow$ lineal



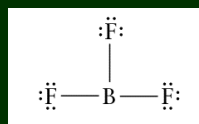
$BeCl_2$

22/02/2005

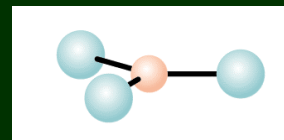
Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

41

$AX_3 \rightarrow$ plana trigonal



BF_3



22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

42

$AX_4 \rightarrow$ Tetraédrica

$$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} : \text{C} : \text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$$

\rightarrow

CH_4

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 43

$AX_5 \rightarrow$ bipirámide trigonal

$$\begin{array}{c} \text{:Cl:} \\ | \\ \text{:Cl:} - \text{P} - \text{:Cl:} \\ | \\ \text{:Cl:} \end{array}$$

\rightarrow

PCl_5

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 44

Los enlaces múltiples se tratan como los sencillos en VSEPR

CO_2

$\ddot{O} = C = \ddot{O}$

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 45

Geometría de iones **poliatómicos**:

$$\left[\begin{array}{c} \text{:O:} \\ | \\ \text{:O:} - \text{S} - \text{:O:} \\ | \\ \text{:O:} \end{array} \right]^{2-}$$

\rightarrow

Ión sulfato SO_4^{2-}

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 46

Moléculas **CON** pares libres en el átomo central

Si una molécula tiene **pares libres en el átomo central**, éstos **modifican la forma de la molécula** debido a la repulsión

Pares solitarios

H_2O

Par solitario o no enlazante

NH_3

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 47

$AX_3E \rightarrow$ pirámide trigonal

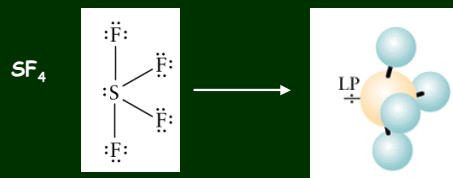
$$\left[\begin{array}{c} \text{:O:} \\ | \\ \text{:O:} - \text{S} - \text{:O:} \\ | \\ \text{:O:} \end{array} \right]^{2-}$$

\rightarrow

Ión sulfito SO_3^{2-}

22/02/2005 Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10 48

Otro ejemplo:



22/02/2005

Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente. Tema 10

49