

1. EL ENLACE QUÍMICO

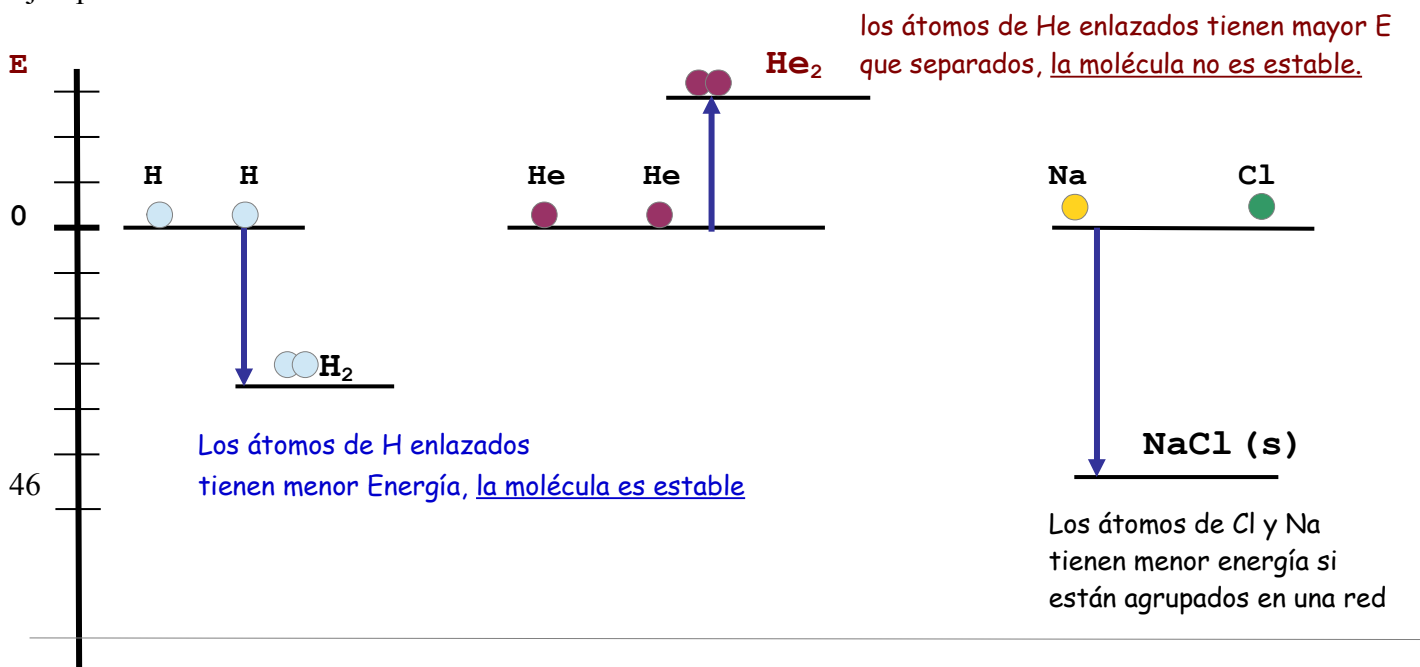
Aspecto energético del enlace químico

Se llama enlace a las **fuerzas que mantienen unidos a los átomos entre sí** para formar agrupaciones: moléculas o cristales (redes).

- Dichas fuerzas son de tipo eléctrico.
- Al formarse un enlace se desprende energía.
- La distancia a la que se colocan los átomos es aquella a la que se desprende mayor energía produciéndose la máxima estabilidad.

Los átomos se unen pues, porque así tienen una menor energía (mayor estabilidad) que por separado:

Ejemplos:



¿Por que se desprende Energía al formar un enlace?

Los átomos están constituidos por partículas : neutrones, protones y electrones, las dos ultimas tienen carga eléctrica : las fuerzas entre cargas vienen determinadas por la Ley de Coulomb, y la Energía potencial por

$$F = K \frac{q_1 \cdot q_2}{r_{12}^2}$$

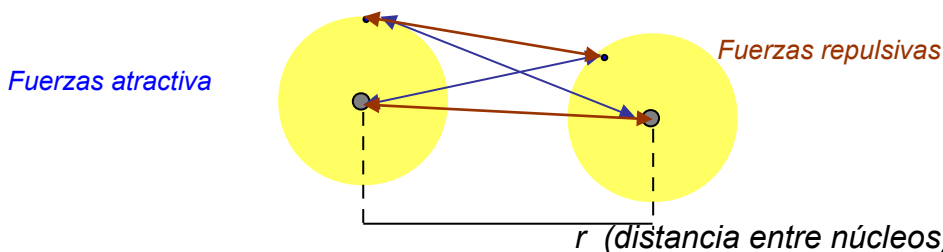
Fuerza entre dos cargas separadas una distancia r_{12}

$$E_p = K \frac{q_1 \cdot q_2}{r_{12}}$$

Ep de dos cargas separadas una distancia r_{12}

Analicemos la situación cuando dos átomos de hidrogeno se encuentran “próximos”: se establecen

- **Fuerzas repulsivas** entre los núcleos (ambos con carga +) y entre los e- (ambos-) (**Son positivas**)
- **Fuerzas atractivas** entre un e- de un átomo y el núcleo del otro y viceversa. (**Son negativas**)



Se puede calcular la energía potencial de este sistema formado por los dos átomos de hidrogeno:

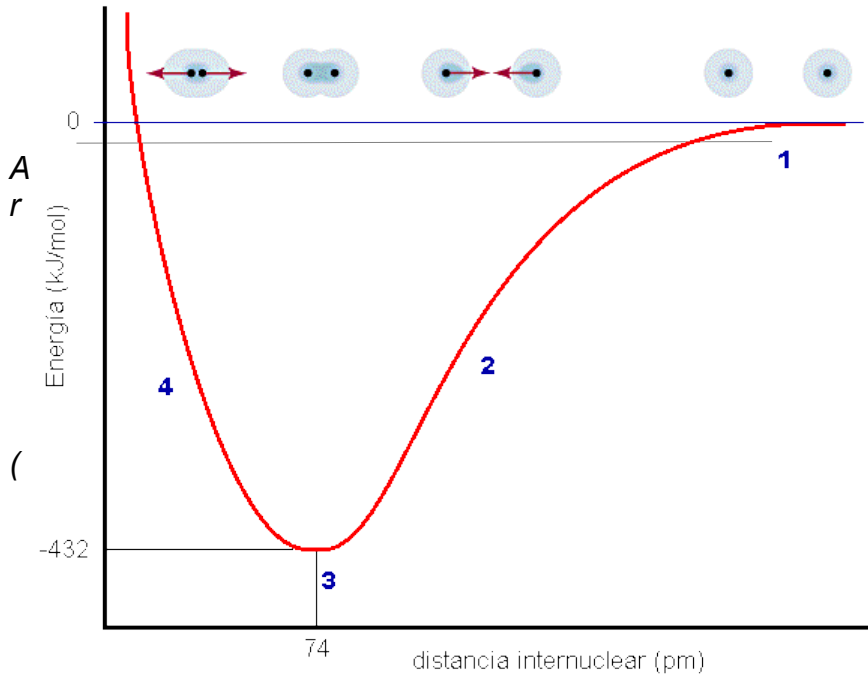
$$E_p = E_p \text{ debida a las } F \text{ atractivas} + E_p \text{ debida a las } F \text{ repulsivas.}$$

Signo -

Signo +

La E_p depende del valor de las cargas (que no cambia) y de la distancia r : si r varía la E_p cambia. Si se calcula para distintas distancias y se representa E frente a r se obtiene:

Variación de la Energía Potencial de dos átomos de hidrogeno que se aproximan.



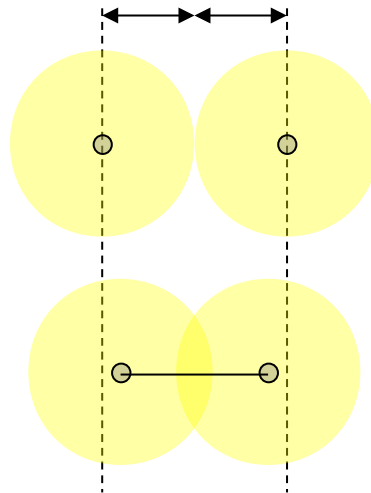
A medida que los átomos se acercan, disminuye, la E potencial total disminuye, las atracciones superan a las repulsiones hasta que la E_p alcanza el valor mínimo, **situación de enlace**, si los átomos se aproximaran mas las repulsiones aumentarían mucho desestabilizando el sistema zona donde la energía es positiva).

mínimo es la **energía de enlace**

La distancia a la que se produce el mínimo es la **distancia o longitud de enlace**.

Se comprueba que esa distancia es menor que la suma de los radios atómicos, es decir, los átomos no son tangentes como podría esperarse sino que **las nubes electrónicas se solapan**, y la densidad electrónica entre los núcleos es mayor.

situación de átomos tangentes
 $d = r_H + r_H$



La densidad electrónica entre núcleos es baja

Distancia de enlace, $d < r_H + r_H$

La densidad electrónica entre núcleos es muy alta

PARÁMETROS DEL ENLACE

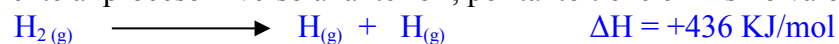
Propiedades características de los enlaces que dependen de los átomos que se unen

Distancia de enlace: se mide entre los núcleos de los átomos enlazados. Depende del tamaño de los átomos que se unen y del orden de enlace.

Energía de enlace.

- Energía de formación del enlace: **energía que se desprende** cuando a partir de los átomos aislados se forma el enlace

$$H_{(g)} + H_{(g)} \longrightarrow H_2(g) \quad \Delta H = -436 \text{ KJ/mol}$$
- Energía de disociación: **energía que hay que aportar** para romper un enlace y separar sus átomos. Es la energía correspondiente al proceso inverso al anterior, por tanto tiene el mismo valor numérico.



(En las tablas suele darse sin signo)

- Momento dipolar:** $\mu = q \cdot D$ (consultar el punto 6. Polaridad)

Al final del tema figuran tablas con valores de estos parámetros

2. TIPOS DE ENLACE

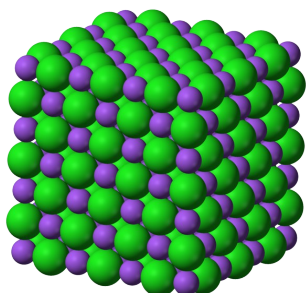
Los átomos se unen entre si mediante tres mecanismos distintos según los valores de las electronegatividades (EN) de los mismos:

ENLACE IONICO

Se establece si los átomos que se unen A y B tienen electronegatividades muy diferentes, $\Delta EN >$, es decir , entre un **METAL Y UN NO METAL**

Átomo A	Átomo B	Mecanismo de unión	Energía KJ/mol	Estructura	Sustancia		Ejemplos
Alta A.E Alta E.I. Alta EN No metal	Baja A E Baja E.I. Baja EN Metal	Atracción Electrostática entre iones de $\neq$ signo	800	Red tridimensional de iones + y -	A $\neq$ B	Compuesto iónico	NaCl_(s) MgO CaF₂ PbS FeCl₃
Δ EN >2							
Cl	Na						

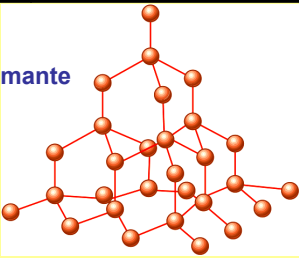
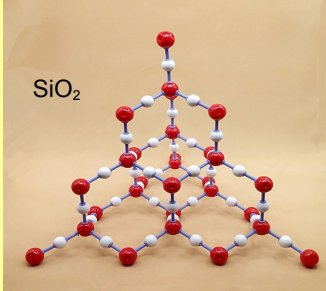
NaCl



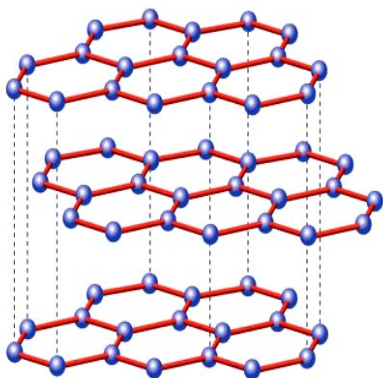
CaF₂

ENLACE COVALENTE

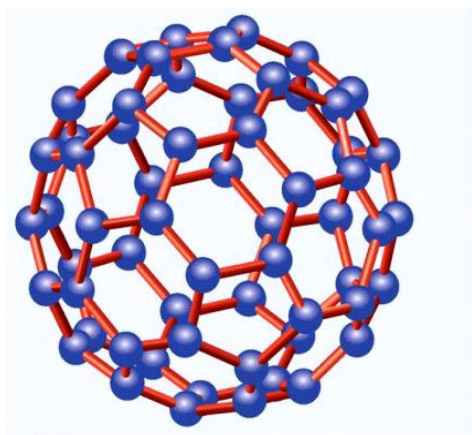
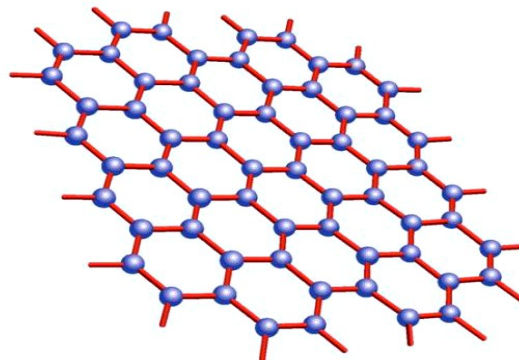
Se establece si los átomos que se unen A y B tienen electronegatividades ALTAS , $\Delta EN >$, es decir entre un **NO METAL Y UN NO METAL**

Átomo A	Átomo B	Mecanismo de unión	Energía KJ/mol	Estructura	Sustancia	Ejemplo
Alta A.E Alta E.I. Alta EN No metal	Alta A.E Alta E.I. Alta EN No metal	Compartición de pares de electrones		Red de átomos	A = B	C 
					A ≠ B	 SiO₂ WC
			500	Moléculas	A = B Homoatómicas	H₂ Cl₂ P₄
					A ≠ B Heteroatómicas	NO POLARES CO₂ BF₃ CH₄
						POLARES HCl NH₃ CH₃Cl
ΔEN<2						
Cl	H					

Grafito

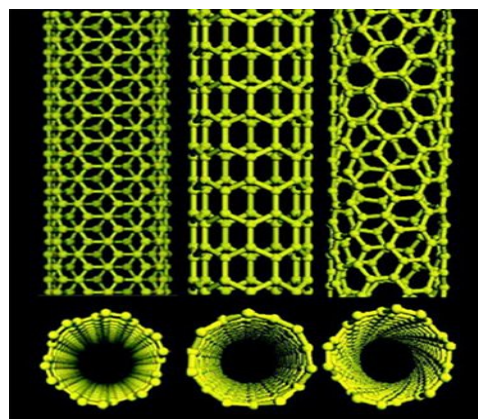


Grafeno



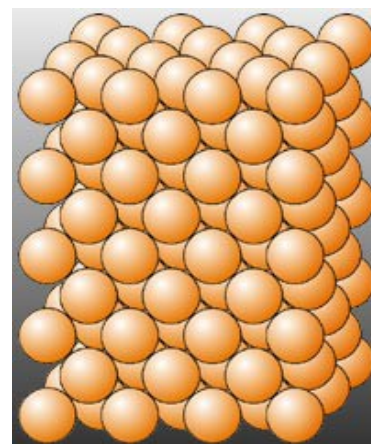
Fullereno

C_{60}



Nanotubos de carbono

Cristal metalico



ENLACE METALICO

Se establece si los átomos que se unen A y B tienen electronegatividades BAJAS , $\Delta EN < 2$, es decir entre **METAL Y METAL**

Átomo A	Átomo B	Mecanismo de unión	Energía KJ/mol	Estructura	Sustancia		Ejemplo
Baja AE Baja E.I. Metal	Baja AE Baja E.I. Metal	Nube de electrones compartidos por los iones	400	Red iones +	A = B	Elementos metálicos	Na_(s) Fe Ca
					A ≠ B	Aleaciones	Bronce (CuSn)
Na	Na						

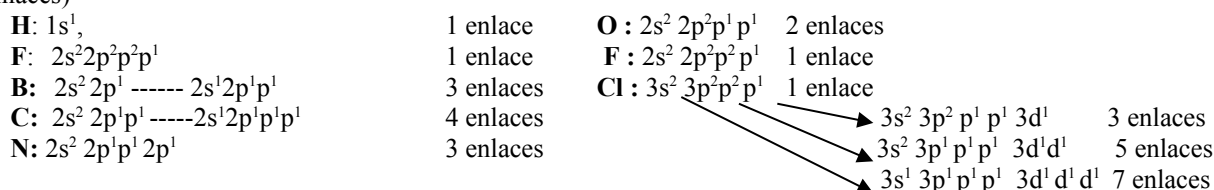
3. ESTRUCTURAS DE LEWIS.

Teoría del enlace de Lewis

- Los G.N. tienen una configuración electrónica singular: su última capa está completa, ns^2np^6 (**octeto**) además son poco reactivos y no aparecen combinados con otros átomos. Por tanto dicha configuración debe ser muy estable.
- Los demás elementos* tienden también a completar su última capa y conseguir una configuración de G.N. (**8 electrones en su última capa: regla del octeto**) mediante tres mecanismos: ganancia, pérdida o compartición de electrones con otros átomos y de esta manera establecen uniones con ellos siempre de naturaleza eléctrica.
 - Si los átomos que se unen tienen afinidades electrónicas altas comparten electrones. Y dan lugar a un enlace covalente.
 - Si los átomos que se unen tienen A.E. muy diferentes uno de ellos pierde e- (el de baja AE) y el otro gana e- (el de alta AE). Dan lugar a un enlace iónico.
 - Si los átomos tienen baja AE pierden electrones que son compartidos por todos los átomos y establecen un enlace metálico.
- En el enlace solo participan los electrones de la última capa, llamados *electrones de valencia*. La estructura de Lewis de un átomo representa dichos electrones mediante puntos o aspas en torno al símbolo del elemento. Y agrupando en pares los que se encuentren ocupando el mismo orbital.

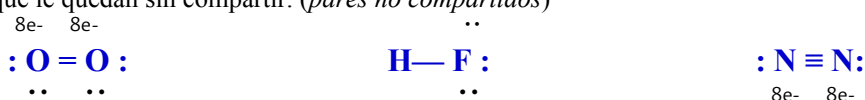


- Cada átomo forma tantos enlaces como electrones desapareados posea (o pueda desaparecer pasando electrones a orbitales vacíos y próximos es decir, del mismo n ya que esta energía gastada se compensa con la energía desprendida en la formación de más enlaces)



Este proceso es favorable para átomos del 3º, 4º período, que poseen orbitales **d** vacíos y próximos energéticamente a los **s** o **p** y además son átomos grandes que pueden albergar a su alrededor varios átomos. F y O no forman varios enlaces como sus vecinos S y el resto de los halógenos pues los siguientes orbitales vacíos se encuentran en un $n=3$ por lo que se necesitaría mucha energía para excitarlos además no cabrían en torno a ellos 4, 5 o 6 átomos.

- Cada par de electrones compartidos por dos átomos se denomina **enlace** y se representa por -. Cada uno de los e- de un enlace dejan de pertenecer al átomo de procedencia para distribuirse por igual entre ambos núcleos. (Si los dos átomos son iguales, en caso contrario la distribución de densidad electrónica, o de carga, no es simétrica sino que la probabilidad de encontrar al electrón es mayor cerca del átomo mas electronegativo, este tipo de enlace es **polar**, ya que esta situación conlleva a la aparición de un dipolo eléctrico)
 - Si dos átomos comparten 1 par de e- el enlace es **simple o sencillo** : -
 - Si dos átomos comparten 2 pares de e- el enlace es **doble** : =
 - Si comparten 3 pares de e- el enlace es **triple** : $\equiv$ No existen enlaces de orden superior.
- Para obtener la estructura de Lewis de una molécula se escriben las estructuras de cada átomo y se comparten los e- necesarios para que cada uno tenga un total de 8 (**regla del octeto**, exceptuando el H que solo puede tener 2) contando los electrones del enlace y los que le quedan sin compartir. (*pares no compartidos*)



Para moléculas poliatómicas se dibuja el esqueleto de la molécula uniendo los átomos por enlaces simples.

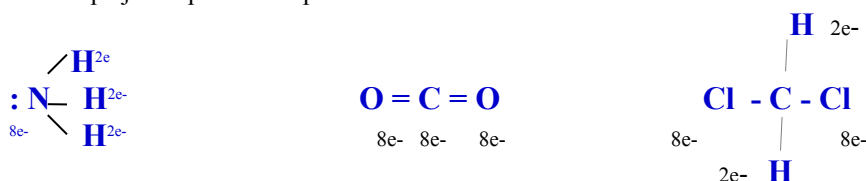
- Si es diatómica no hay mas que una ordenación: A-B. (**H-Cl**)
- Si es triatómica suele ser lineal o angular: A-B-C (No son estables las disposiciones en triángulo:)

$\text{O}=\text{C}=\text{O}$
 $\text{H}-\text{O}$
 H

$\text{A}-\text{B}$
 $\diagdown \quad \diagup$
 C
- Si tiene mas de 3 átomos suele haber uno central al que están unidos los demás y que por lo dicho en el punto 4. suele ser un átomo que pueda dar lugar a varios enlaces: B, C, N, S, P, Cl, Br, I

$\text{Cl}-\text{P}-\text{Cl}$
 Cl

Para moléculas mas complejas es preciso disponer de información adicional de su estructura: Ácido metanoico: $\text{H}-\text{C}(\text{OH})=\text{O}$



- Este método de tanteo es efectivo para moléculas de 2,3 o 4 átomos y pocos electrones pero para moléculas mayores, iones poliatómicos o compuestos con resonancia puede ser difícil encontrar la estructura de Lewis que cumpla la regla del octeto. En esos casos es mas eficaz el siguiente método

1. Se cuenta el **nº total de electrones de valencia** de la molécula que es igual a la suma de los e- de valencia de cada átomo de la misma. Dichos electrones forman parte de la molécula (dejan de ser electrones propios de cada átomo)

Si se trata de un ion poliatómico hay que sumar tantos electrones como la carga en los aniones. Y restar tantos electrones como la carga en los cationes.

Ejemplos: CO_2

C: 4 e-

O: 6 e-

O: 6 e-

Total : 16 e-

HNO_2

H: 1 e-

N: 5 e-

O: 6 e-

O: 6 e-

Total: 18 e-

PH_4^+

P: 5 e-

4 H: $4 \times 1 = 4\text{e-}$

Total : $9\text{e-} - 1 = 8\text{e-}$.

2. Se escribe el esqueleto uniendo los átomos por enlaces simples

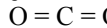
3. Si el nº de electrones gastados en el paso 2. Es inferior al total de e- de la molécula, se dibujan enlaces dobles o triples para que el átomo (o átomos) central complete el octeto y los restantes se van distribuyendo por pares de e- no compartidos sobre los átomos exteriores.

Esqueleto



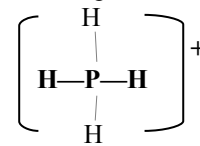
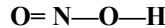
(4 e-)

hay que añadir 12 e-



(6 e-)

hay que añadir 12 e-



8e-: estructura finalizada

Añadir

enlaces dobles

Añadir pares

no compartidos



Para llegar a una estructura de Lewis correcta deben tenerse en cuenta además los siguientes aspectos:

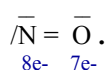
- Los átomos laterales (no centrales) siempre cumplen la regla del octeto
- C, N, O y S** suelen formar enlaces múltiples
- Los átomos del 2º periodo nunca sobrepasan el octeto. Los átomos del 3º periodo o mayor pueden sobrepasar el octeto
- Los átomos **H y F** solo forman como máximo 1 enlace (ver punto 4)
- C** siempre 4 enlaces (salvo raras excepciones: CH_3^-), **O** siempre máximo de 2 enlaces (excepto H_3O^+)
- N forma 3 enlaces en muchos compuestos pero también puede formar 4** (NO_3^- , N_2O , ...)

Obsérvese que podría haberse escrito la siguiente estructura que cumple la regla del octeto: $:\ddot{\text{O}} - \ddot{\text{N}} = \ddot{\text{O}} - \text{H}$ pero en ella uno de los átomos de O forma 3 enlaces.

EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO.

Aún aplicando las normas anteriores cuidadosamente se encuentran moléculas que no cumplen la regla del octeto, es decir, no es posible encontrar una distribución de e- en que cada átomo tenga 8 a su alrededor. Las excepciones más importantes son.

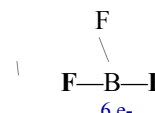
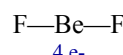
1. Moléculas con nº impar de e- (NO [11 e-] y NO₂ [17 e-])



2. Moléculas con “defecto” de e- (El átomo central tiene menos de 8 e-). Octeto

BeF₂ y **BF₃**. Se sabe experimentalmente que tienen enlaces simples,

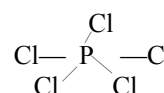
luego sus estructuras deben ser:



3. Moléculas con “exceso” de electrones (El átomo central tiene más de 8 e-) **Octeto expandido**

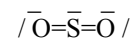
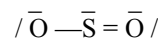
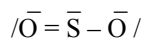
PCl₅ y **SF₆**. Como el átomo de P debe estar unido al menos mediante 1 enlace (2 e-)

a cada átomo de Cl estará rodeado de 10e-:



RESONANCIA O MESOMERÍA. Para algunas moléculas es posible escribir varias estructuras de Lewis correctas pero ninguna de ellas describe adecuadamente las propiedades de la molécula:

Por ejemplo la molécula de SO₂ puede escribirse:



Lo que implica que hay dos tipos distintos de enlace S-O, uno doble y otro simple, sin embargo los datos experimentales dicen que ambos son iguales y con un valor de la distancia intermedio entre un enlace simple y uno doble.

En estos casos ninguna de las estructuras de Lewis representa a la molécula real sino que ésta es intermedia entre ambas que se llaman **formas resonantes**. (**formas canónicas, o límites**) Este fenómeno es frecuente y lo presentan numerosas moléculas: SO₃, benceno y compuestos aromáticos, y iones poliatómicos: carbonato, sulfato, nitrato, etc.

* La resonancia se presenta cuando una molécula tiene varias **configuraciones electrónicas distintas**, es decir que sobre el mismo esqueleto de átomos los electrones se distribuyen de formas diferentes.

* La molécula que presenta resonancia es real y única (no hay varios tipos de SO₂ por ejemplo), el “defecto” está en la Teoría de Lewis que es muy simple y no puede dar cuenta de estos casos, **la verdadera configuración de la molécula es intermedia entre todas las formas** (incluso aquellas que no tienen 8 e- en torno a cada átomo y que probablemente presentan una pequeña contribución a la forma final) y se llama híbrido de resonancia

* La diferencia entre las distintas formas resonantes no está en la disposición espacial de los átomos, que tiene que ser la misma, sino que suele radicar solamente en la situación de 1 o varios enlaces dobles que no tienen una localización fija, si se observan las estructuras del SO₂ puede verse como **1 enlace doble oscila entre las dos posiciones, se dice que está deslocalizado**.

Ejercicio: Escribir las estructuras de Lewis de las siguientes moléculas o iones: I₂, H₂S, CH₃Cl, S₂C, HCN, etano, eteno, etino, metanol, metanal, PCl₅, NO₂⁺, H₃O⁺, HClO, dicloroetano, CO₃²⁻, O₃ y H₂SO₄. ¿Cuáles presentan resonancia?

4. Determinación de la geometría molecular mediante la TRPECV

Geometría molecular

Se entiende por geometría de una molécula la disposición espacial de los átomos de la misma

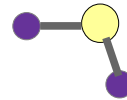
- Moléculas diatómicas . No presentan mas que una disposición . Dos puntos determinan una recta 
- Moléculas poliatómicas (3 o mas átomos) pueden adoptar distintas disposiciones, tantas mas cuanto mayor sea el numero de átomos

- Triatómicas

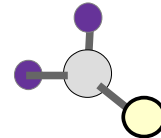
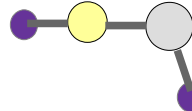
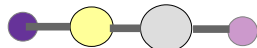
3 átomos en linea recta



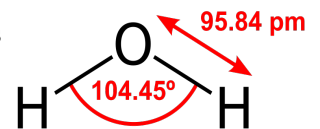
3 átomos en otra disposición (angular)



- Tetraatómicas: 4 átomos (son posibles mas formas, y además no tienen porque estar todos los átomos en un mismo plano) Ejemplos:

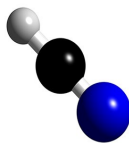


angulo de enlace, α : es el que forman las rectas imaginarias que pasan por los núcleos de los átomos unidos mediante enlace, y es un parámetro que se puede determinar experimentalmente. Por ejemplo



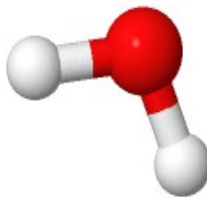
Para moléculas pequeñas (de hasta 4 átomos unidos al átomo central) las geometrías mas frecuentes son las siguientes (o pequeñas variaciones con ángulos ligeramente distintos)

lineal



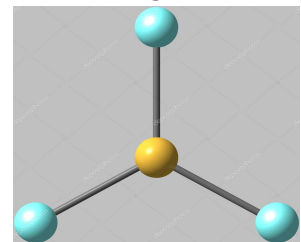
$$\alpha = 180^\circ$$

angular



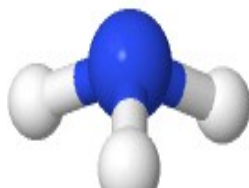
$$\alpha < 180^\circ$$

triangular



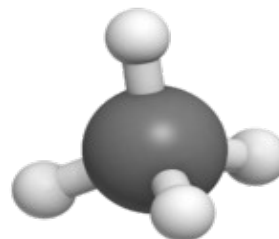
$$\alpha = 120^\circ$$

piramidal



$$\alpha < 109,5^\circ$$

tetraédrica



$$\alpha = 109,5^\circ$$

Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia: TRPECV

Permite predecir de forma sencilla la geometría de una molécula. Se basa en que los pares de electrones de un átomo **se repelen entre si, y por tanto van a situarse en el espacio lo mas alejados posibles.**

Pautas para determinar la geometría:

1. Se escribe la estructura de Lewis
2. Se determina el numero de pares de electrones del átomo central, tanto los **pares compartidos (o enlazantes, E)**, como los **pares no compartidos (no enlazantes o solitarios, S)**, cada para se sitúa de forma que esté lo mas separado posible de los demás, es decir si el atomo central tiene:
 - 2 pares se disponen **opuestos, en linea** ($\alpha = 180^\circ$)
 - 3 pares se disponen formando un **triangulo equilátero** ($\alpha = 120^\circ$)
 - 4 pares se disponen formando un **tetraedro** ($\alpha = 109,5^\circ$)
 - 5 pares se sitúan formando una **bipirámide trigonal** ($\alpha = 120^\circ$ y 90°)

- 6 pares en forma de **octaedro** ($\alpha = 90^\circ$)

3. La forma de la molécula viene determinada por la distribución de pares señalada y por el número de átomos unidos al central:

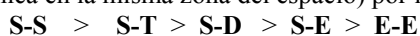
- Si éste tiene todos sus pares compartidos (o enlazantes, E) la geometría (forma) de la molécula coincide con la geometría de los pares (caso de BeCl_2 , BF_3 , CH_4 , PCl_5 y SF_6 en el cuadro)
- Si hay pares no compartidos, no enlazantes, S, dichos pares no se “ven”, forman parte del átomo central, la geometría de la molécula no coincide con la de los pares: *por ejemplo el oxígeno del agua tiene 4 pares que se disponen tetraédricamente pero solo está unido a 2 átomos de H luego es una molécula angular, no tetraédrica (al tetraedro le faltan dos vértices)*

Molécula	Estructura de Lewis	Pares electrónicos	Geometría molecular	Representación 3D (haz clic sobre la figura para ma
BeCl_2		2	lineal $\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$	
BF_3		3	triangular plana 	
CH_4		4	tetraédrica 	
PCl_5		5	bipirámide trigonal 	
SF_6		6	octaédrica 	

Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlace	Pares solitarios	Geometría molecular	Representación 3D (haz clic sobre la figura para mani
NH_3		3	1	pirámide trigonal 	
H_2O		2	2	angular 	

4. Si el átomo central presenta enlaces dobles (D) o triples (T) estos cuentan como un solo par en cuanto a la distribución geométrica ya que los e- de un enlace doble o triple están localizados entre los dos átomos enlazados y comparten la misma región del espacio (no pueden apuntar en direcciones distintas). Así en CO_2 , $\text{O}=\text{C}=\text{O}$, el carbono tiene 4 pares enlazantes pero agrupados en dos pares dobles que se disponen opuestos, la molécula es lineal.

5. No todos los pares se repelen por igual: los pares no compartidos, S, ocupan un espacio mayor que los compartidos, E, ya que estos están atraídos por dos átomos y ocupan menos volumen. Los pares dobles y triples ocupan aun un volumen mayor (mayor densidad electrónica en la misma zona del espacio) por lo que el orden de repulsiones es el siguiente:



Esto explica porque el ángulo en la molécula de NH_3 es 107° y no $109,5^\circ$ (ángulo tetraédrico) ya que el par solitario del N repele a los pares de enlace con mas intensidad que estos entre sí por lo que el ángulo se cierra ligeramente. Lo mismo pero mas acusado pasa en el agua pues hay dos pares solitarios sobre el oxígeno

La teoría de Lewis y la de TRPECV explican el enlace químico desde un punto de vista simple y cualitativo pero ninguno de ellos proporciona información sobre la energía o sobre la distancia de enlace. Tras la publicación de la ecuación de Schrödinger se aplicó ésta a los electrones implicados en la formación de enlaces covalentes para buscar las estructuras electrónicas de energía mínima. Como dicha ecuación no puede resolverse exactamente para sistemas de más de un electrón, surgieron dos métodos aproximados generales para tratar el enlace químico:

- TEV: la teoría de enlace de valencia (Heitler, London, Slater y Pauling, 1927)

5. TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (TEV, 1927)

Describe el enlace covalente como un **solapamiento (intersección) de orbitales** atómicos (OA) que mantienen su identidad.

La existencia y magnitud del enlace está ligada precisamente a la situación de solapamiento, que **aumenta la densidad electrónica entre los núcleos** y estabiliza el sistema, la energía de los átomos enlazados es menor.

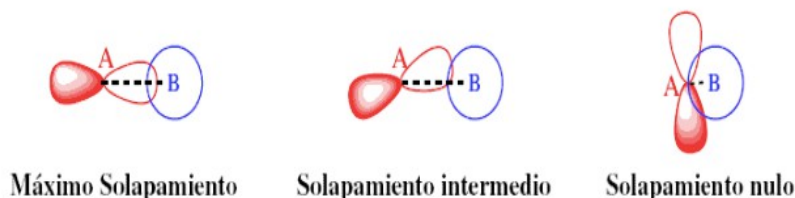
Al aproximarse dos átomos puede producirse o no solapamiento y por tanto enlace, según el signo de las funciones de onda de los orbitales atómicos

Átomo A	Átomo B			
			solapamiento = 0	No enlace Energía no varía
			solapamiento > 0	Enlace E disminuye, estable
			solapamiento < 0	Antienlace E aumenta, inestable

El solapamiento solo da lugar a enlace si es **efectivo, si $s > 0$** . Para ello debe cumplirse las siguientes condiciones:

- Los orbitales que participan deben estar semiocupados con e- de spin opuesto (Principio de Pauli)
- Las funciones de onda deben tener el mismo signo
- La energía y el tamaño de los orbitales deben ser similares
- La orientación debe ser la adecuada

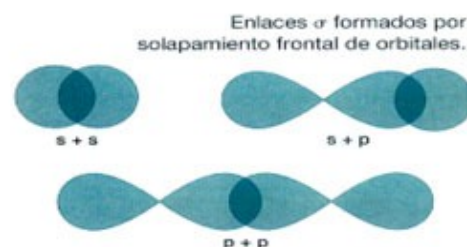
Cuanto mayor sea el solapamiento mayor será la intensidad del enlace formado



TIPOS DE SOLAPAMIENTO efectivo :

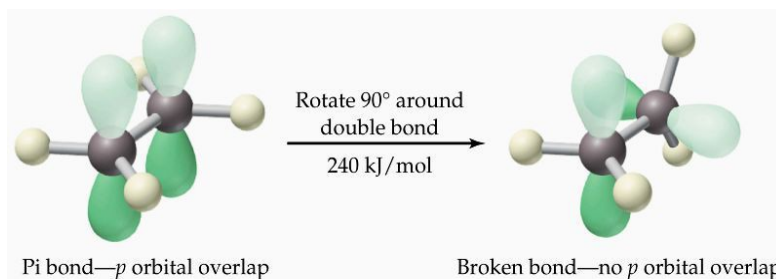
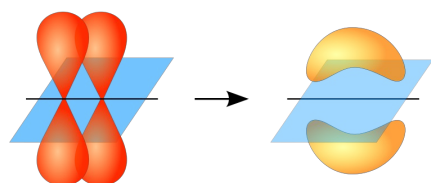
1.) Frontal σ (sigma): Se produce cuando el eje que une los núcleos atraviesa la zona de solapamiento. Es el más efectivo, el que crea un enlace más fuerte.

- Se produce una única zona de solapamiento
- Tiene un eje de simetría con respecto a la línea que une los dos núcleos. Una rotación con respecto a dicho eje no produce ningún cambio.
- La máxima probabilidad de encontrar a los electrones en este tipo de orbitales, se concentra entre los dos núcleos fundamentalmente.



2) Lateral o Π (pi): Cuando la línea que une los núcleos no atraviesa la zona de solapamiento de los OA

- Los orbitales atómicos se solapan lateralmente y se produce dos (o más) zonas de solapamiento de las respectivas nubes electrónicas.
- La máxima probabilidad de encontrar a los electrones en el orbital molecular formado no se concentra entre los núcleos:
- Si hay un giro respecto al eje del enlace el solapamiento se reduce y desaparece, se rompería el enlace. **No hay simetría de giro respecto al eje internuclear**



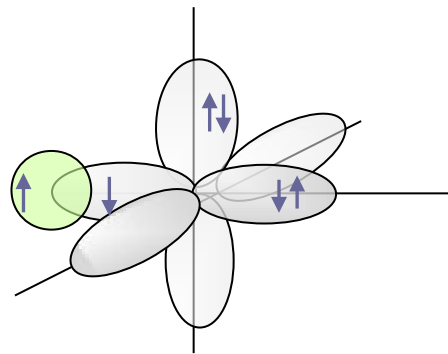
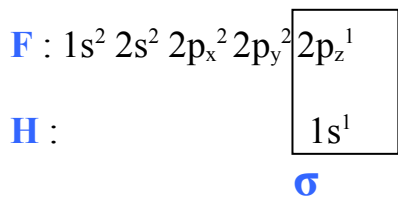
TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (ejemplos)

Átomos

Molécula

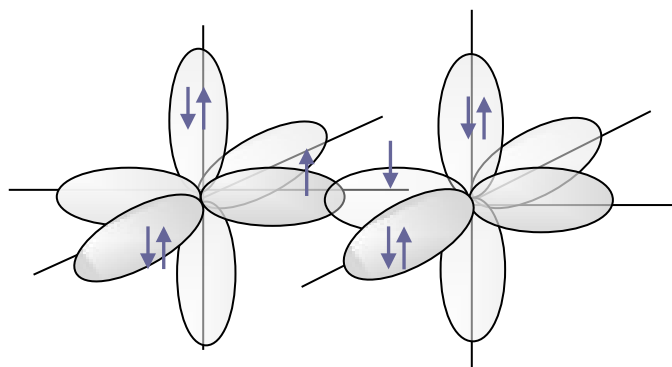
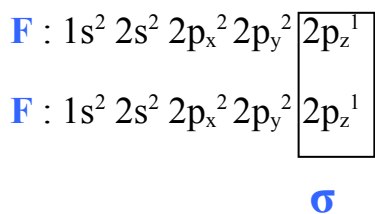
Diagrama de orbitales

H-F



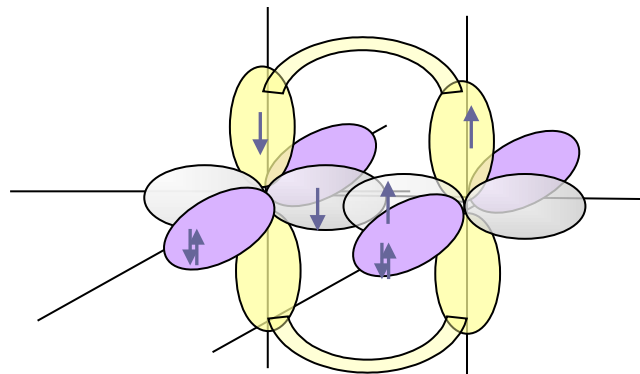
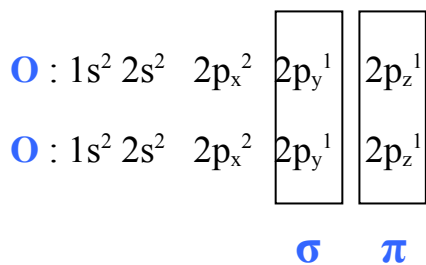
F-F

(Enlace simple)



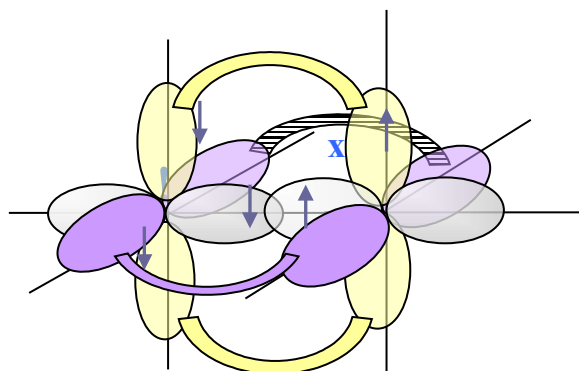
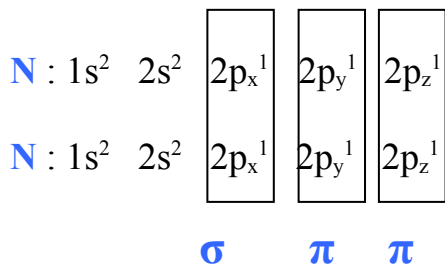
O = O

(Enlace doble)



N ≡ N

(enlace triple)



TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA : HIBRIDACION

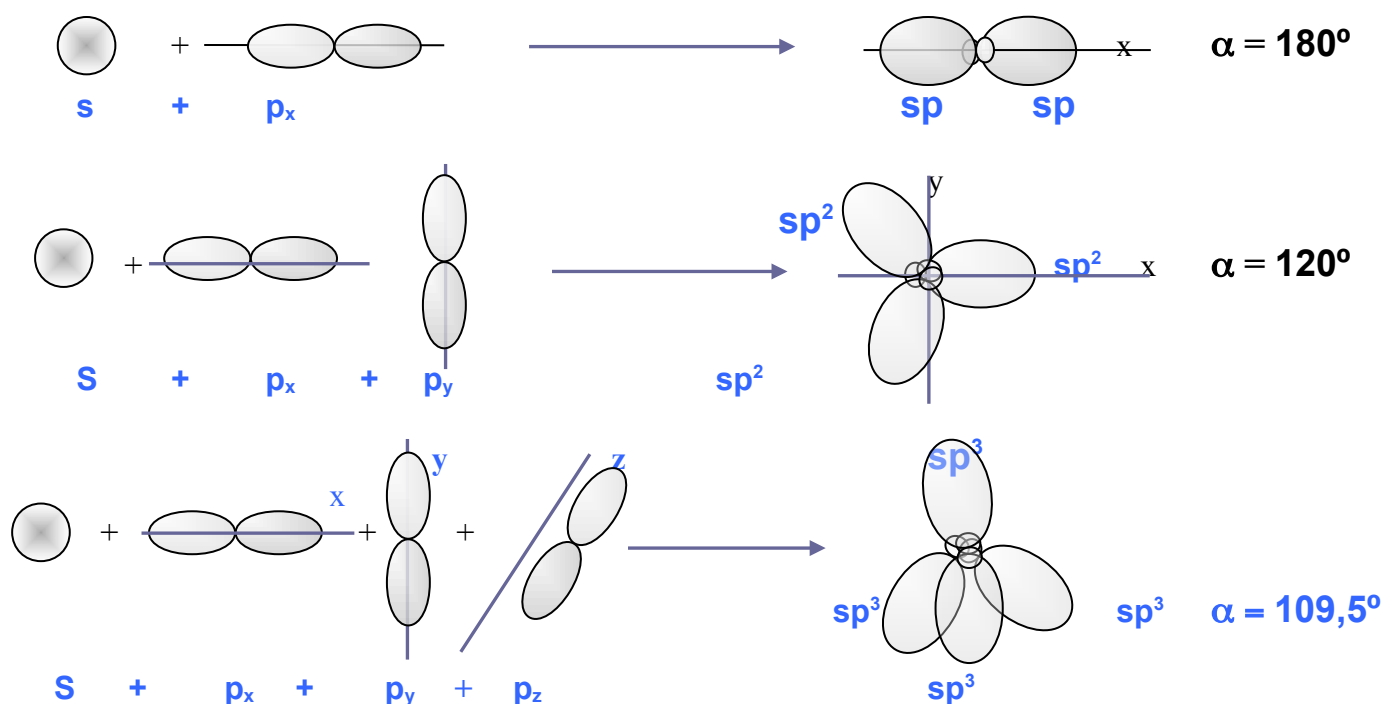
Mediante la TEV no se obtiene una explicación satisfactoria de los ángulos de enlace de muchas moléculas por lo que se supone que en lugar de utilizar los OA (orbitales atómicos) habituales (s, p, d, etc) pueden utilizarse también otros orbitales obtenidos por combinación lineal de los mismos y que por tanto también satisfacen la ecuación de ondas

LOS ORBITALES atómicos híbridos (OAH) obtenidos tienen las siguientes características:

- Los OA que se combinan deben tener energía y tamaño similar y se obtienen tantos OAH como orbitales de partida se combinan
- Todos los orbitales obtenidos son degenerados tienen por tanto igual energía igual forma y tamaño y distinta orientación
- Se orientan en el espacio de forma que queden lo mas alejados posibles

ORBITALES ATÓMICOS

ORBITALES ATÓMICOS HÍBRIDOS



La ventaja del uso de OAH no es solamente el dar cuenta de los ángulos de enlace sino que dada la forma de los mismos permite un solapamiento mnucho mayor que el obtenido en otros casos , lo que confiere mayor estabilidad al enlace.

¿Cuándo se deben utilizar los OAH?

En moléculas diatómicas no se necesita

En moléculas poliatómicas se hibrida el átomo central si el ángulo de enlace experimental (o calculado mediante la TRPCV) es distinto de 90°

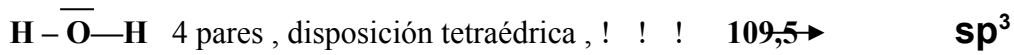
$\alpha = 180^\circ$	sp
$\alpha = 120^\circ$	sp ²
$\alpha = 109,5^\circ$	sp ³

- Si hay enlaces dobles o triples estos se forman siempre entre los orbitales **p** no hibridados por aproximación lateral (π)

Ejemplos de HIBRIDACIÓN

AGUA

1) Se determina el ángulo mediante TRPCV y se elige el tipo de híbrido :



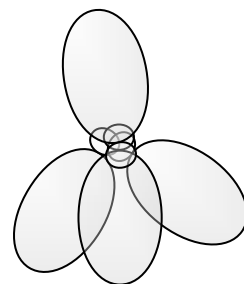
2) Se escribe la configuración del átomo central $\text{O} : 1s^2 \ 2s^2 \ 2p_x^1 \ 2p_y^1 \ 2p_z^1$

3) Si no hay suficientes e- desapareados se recurre a un estado excitado.

4) Se escribe la configuración hibridada $\text{O} : 1s^2 \ 2(\text{sp}^3)^2 (\text{sp}^3)^2 (\text{sp}^3)^1 (\text{sp}^3)^1$

5) Se establecen los enlaces:

6) Se dibuja el diagrama

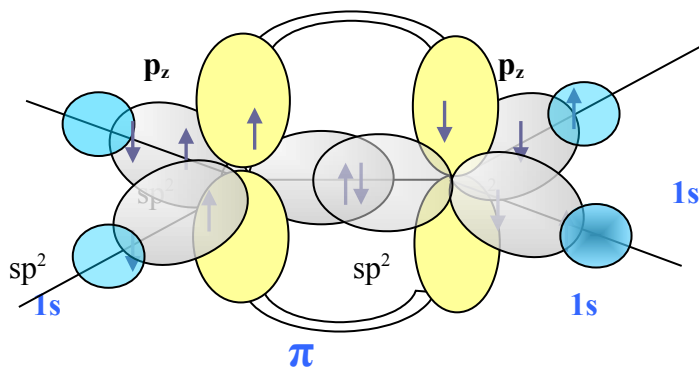
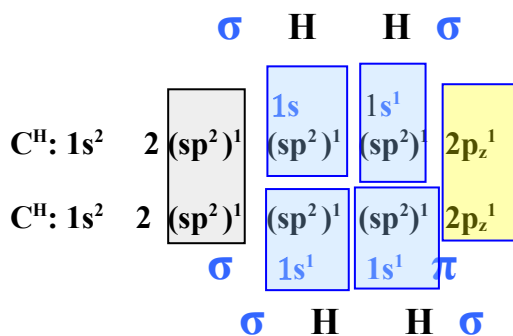
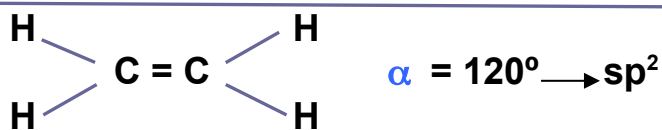


ETENO

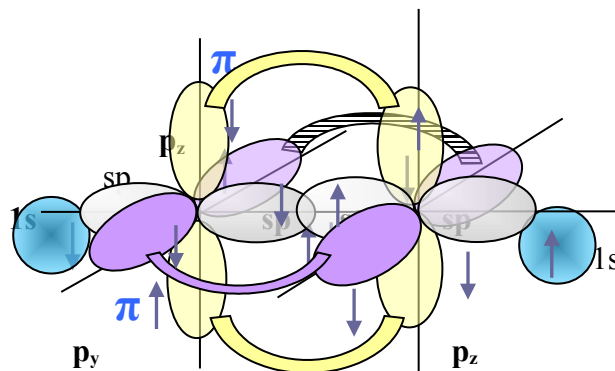
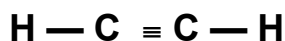
C: $1s^2 \ 2s^2 \ 2p^1 \ 2p^1 \ 2p^1$

C*: $1s^2 \ 2s^1 \ 2p^1 \ 2p^1 \ 2p_z^1$

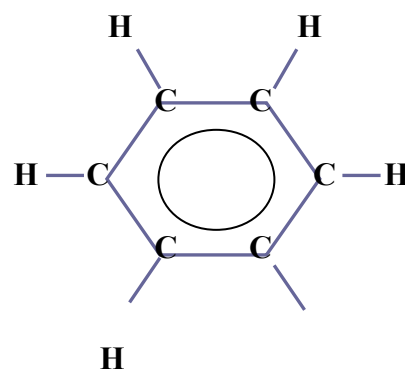
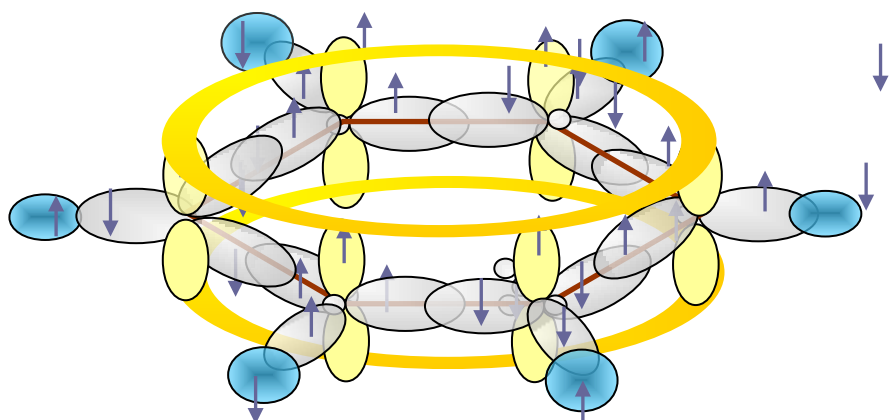
C^H: $1s^2 \ 2(\text{sp}^2)^1 (\text{sp}^2)^1 (\text{sp}^2)^1 \ 2p_z^1$



ETINO



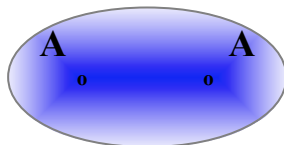
BENCENO



6. POLARIDAD

1. Polaridad del enlace

Cuando se unen dos **átomos iguales (A-A)** mediante un enlace covalente, los electrones compartidos que constituyen el enlace se encuentran a igual distancia de cada átomo y por tanto la distribución de cargas es simétrica, el centro de las cargas negativas y positivas coincide., el enlace se denomina **homopolar**.



Por el contrario cuando **los átomos que se unen son diferentes (A-B)** (por tanto tienen distinta electronegatividad), la distribución de cargas ya no es simétrica pues el átomo mas electronegativo desplaza el par de electrones compartidos atrayéndolos y adquiriendo una cierta carga negativa, $-!$, es decir la densidad electrónica es mayor en torno al átomo mas electronegativo y por tanto menor en el otro átomo que adquiere una carga positiva, $+!$, (estas cargas no son totales, su valor es siempre menor que la carga del e^-), se origina entonces una situación denominada **dipolo eléctrico**, (existencia de dos cargas del mismo valor pero opuestas separadas una distancia)

A B

Se dice que el enlace es **polar**. (B es mas electronegativo que A



La polaridad de un enlace covalente se mide mediante la magnitud fisica llamada **momento dipolar**, $\vec{\mu}$, de carácter vectorial

su dirección es la línea que une los núcleos,

el sentido: de la carga positiva a la negativa, y

el valor numérico se calcula como el producto del valor de la carga por la distancia que las separa (distancia de enlace).

$$\mu = q \cdot d \quad (\text{C} \cdot \text{m})$$

Como la carga del electrón es muy pequeña ($1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ uee}$) y la distancia de enlace también (del orden del Amstrong, $A = 10^{-8} \text{ cm}$) se suele usar la uee para medir la carga del e^- y la distancia en A y se define el **Debye (D)** como el momento dipolar correspondiente a cargas de 10^{-10} uee separadas una distancia de 1 A

$$1\text{D} = 10^{-10} \text{ u.e.e. } 1 \text{ A} = 3,3 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

Si la diferencia de electronegatividades entre los dos átomos que se unen es muy alta (mayor que 2,1) la transferencia de carga entre los dos átomos sería completa, el mas electronegativo le arrancaría al otro su electrón, formándose un ion negativo, B^- y un ion positivo, A^+ , estaríamos ante un enlace iónico, el momento dipolar en este caso extremo valdría: $4,8 \text{ D} = \mu \text{ máximo}$.

Comparando el μ experimental de un enlace con el valor máximo podemos determinar el % de carga transferida de un átomo a otro o lo que es lo mismo el % de carácter iónico de ese enlace

Diferencia de electronegatividad	Tipo de enlace	Ejemplos
0	Covalente no polar	H ₂ N ₂
De 0,1 a 1,9	Covalente polar	HCl CO
>2	Iónico	KF CaS
De 0 a 1,9 (ambos átomos de baja electronegatividad)	Metálico	Na CuZn Sn

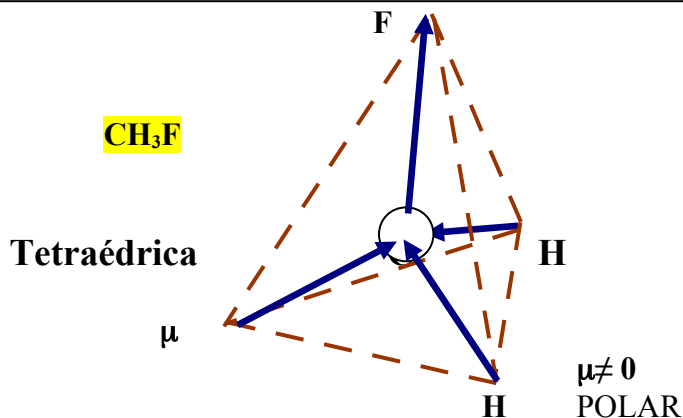
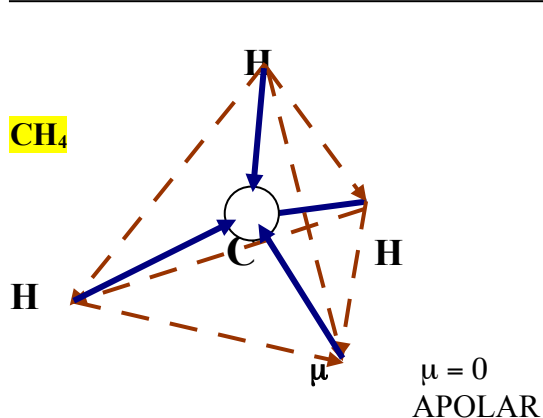
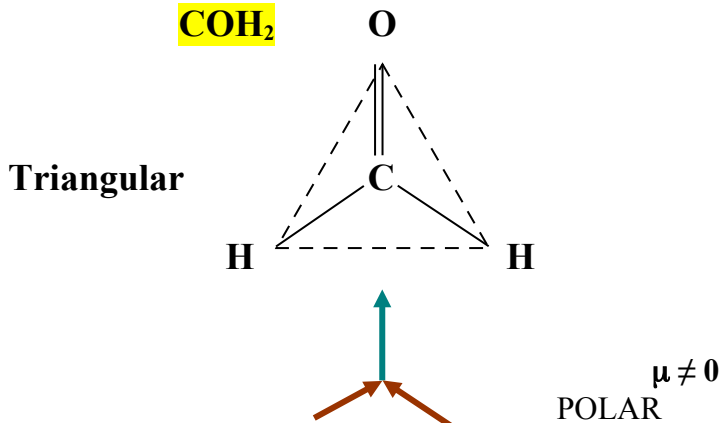
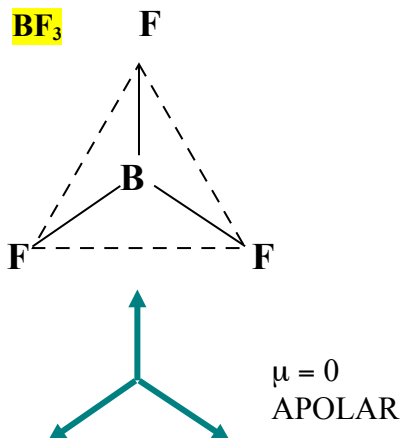
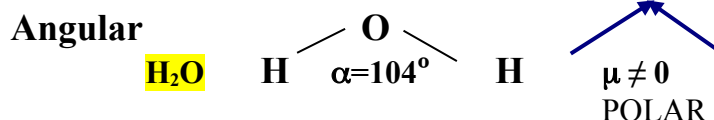
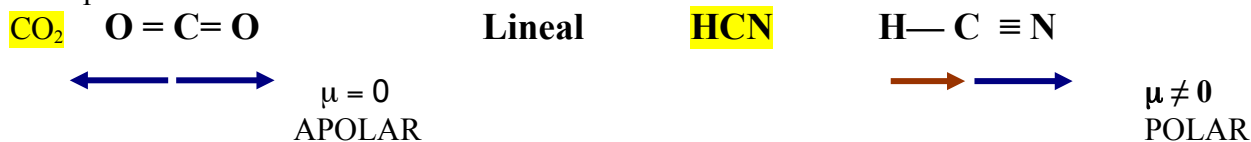
Así para la serie:

Enlace	$X_A - X_B$	$\mu(D)$	$d_{A-B} (A)$	% de carácter iónico	
H - H	0	0	0,74	0 %	Covalente no polar
H - I	0,4	0,38	1,61	5 %	Covalente polar
H - Br	0,7	0,79	1,41	12 %	Covalente polar
H - Cl	0,9	1,03	1,27	17 %	Covalente polar
H - F	1,9	1,98	0,92	45 %	Covalente polar
Ge - F	2,2			52 %	Iónico
Al - F	2,5			62 %	Iónico
Na - F	3,1			83 %	Iónico

2. Polaridad de las moléculas

Moléculas diatómicas: la polaridad de la molécula viene determinada por la del único enlace que posee: así H_2 es apolar y $H-Br$ es polar.

Moléculas poliatómicas: como hay más de 1 enlace la molécula será polar si el momento dipolar total es distinto de 0, si por el contrario la disposición de los enlaces es tal que los momentos se anulan la molécula será apolar. Así



Distancias y energías de enlace

1 Amstrong = 10^{-10} m

1 Debye = $3,3 \cdot 10^{-30}$ C. m

	d (Å)	E (KJ/mol)		d (Å)	E (KJ/mol)			d (Å)	E (KJ/mol)	P (D)		d (Å)	E (KJ/mol)	P (D)
H - H	0,74	436	C = C	1,34	614									
C - C	1,54	348	C ≡ C	1,20	839		H - C	1,09	413	0,40	C - C	1,54	348	
N - N	1,45	170	N = N	1,10	945		H - N	1,01	391	1,31	C - N	1,47	308	0,22
O - O	1,48	145	O = O	1,21	498		H - O	0,96	463	1,51	C - O	1,43	360	0,74
F - F	1,42	158	C = O	1,16	805		H - F	0,92	568	1,98	C - F	1,35	488	
Cl-Cl	1,99	243	N = O	1,14	587		H - Cl	1,27	432	1,03	C - Cl	1,77	330	
Br-Br	2,28	193	C = N	1,30	615		H - Br	1,41	366	0,79	C - Br	1,94	288	
I - I	2,67	151	C ≡ N	1,16	887		H - I	1,61	298	0,38	C - I	2,14	216	
							H - S	1,34	364	0,68	C - S	1,82	272	
							H - P	1,44	321	0,36				
							H - Si	1,48	318					

PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS

Compuestos iónicos

Energías de red (KJ/mol) y T^a de fusión

BA +1 -1			BA ₂ +2 -1			BA +2 -2		
Ur	Tf					Ur	Tf	
NaF	899,6	993°C				MgO	3934,2	2852°C
NaCl	754,8	801°C				MgS	3256,4	2000°C
NaBr	718,7	740°C	CaF ₂		1423°C	CaO	3524,2	2570°C
NaI	672,8	660°C	CaCl ₂	2268	782°C	CaS	3020,0	2500°C

Sustancias covalentes

Redes atómicas

	C _(diamante)	C _(grafito)	SiO ₂ (cuarzo)	WC
Tf	3823°C	3925°C	1883°C	3143°C

Sustancias moleculares

Halógenos	F ₂	Cl ₂	Br ₂	I ₂
M (g/mol)	38	71	160	254
Tf (°C)	-220	-101	-7	114
Teb (°C)	-188	-34	59	184

Alcanos	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄	C ₈ H ₁₈
M (g/mol)	16	30	44	58	72	86	114
Tf(°C)	-184°	-172°	188	-135	-130	-94	-56
Teb (°C)	-162	-88	-42	0	36	69	126

Sustancias apolares, polares y con enlace de hidrógeno

		Hidruros de los grupos IV, V y VI				
Apolares	N ₂	CH ₄	SiH ₄	GeH ₄	SnH ₄	Br ₂
M (g/mol)	28	16	32	77	122,7	160
Teb (°C)	-196	-162	-112	-90	-52	59
Polares	CO	NH ₃	PH ₃	AsH ₃	SbH ₃	ICI
M (g/mol)	28	17	34	78	125	162
Teb (°C)	-192	-33	-85	-55	-17	97
Polares		H ₂ O	SH ₂	SeH ₂	TeH ₂	
M (g/mol)		18	34	91	130	
Teb (°C)		100	-61	-41,5	-2	
		CH ₃ OH	CH ₃ CH ₂ OH	CH ₃ OCH ₃	CH ₃ COCH ₃	
M (g/mol)		32	46	46	58	
Teb (°C)		65	79	-25	56	