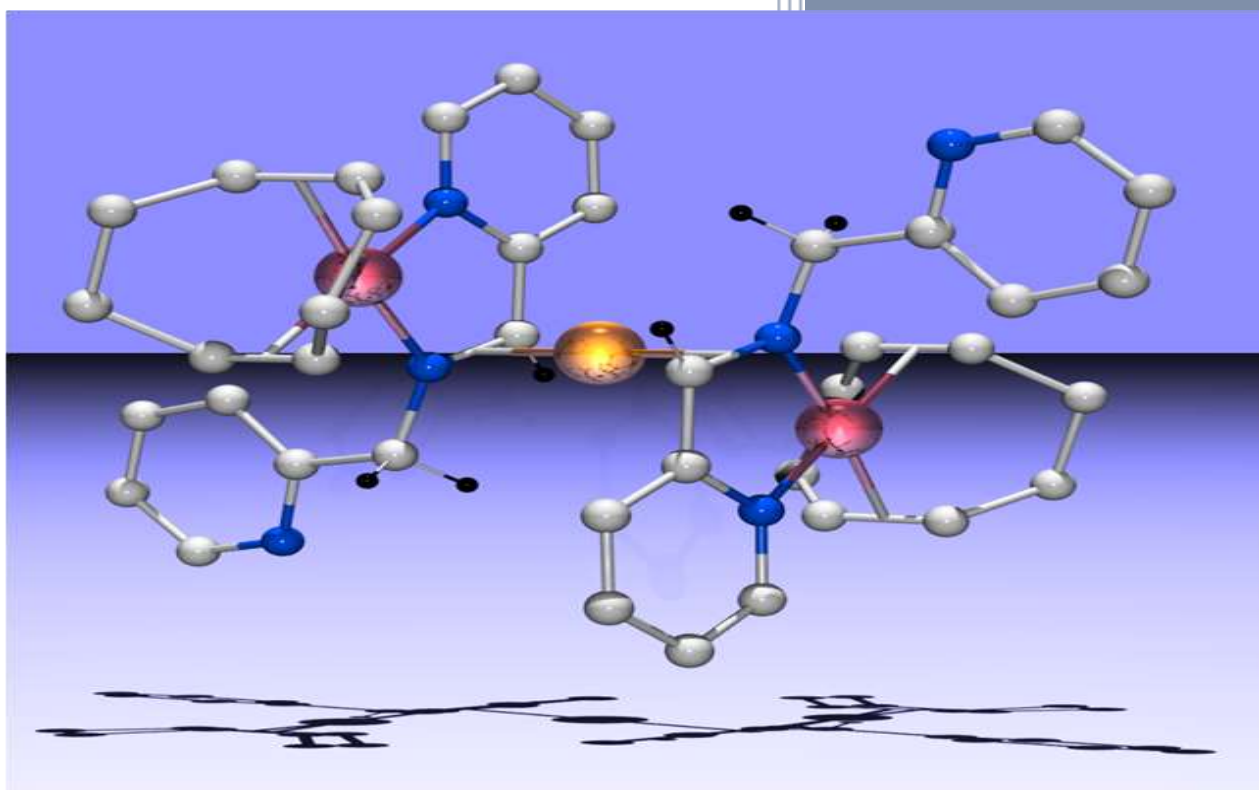




Teoría del Enlace Químico



Prof. Leopoldo Simoza L.

Tabla de contenido

1.- Introducción.	5
1.1.- Electrones enlazantes y regla del octeto	8
1.2.- Estructuras de Lewis	11
2.- Clasificación de los Enlaces Químicos.	12
2.1.- Enlaces Interatómicos.	12
2.1.1.- Enlace iónico.	12
2.1.2.- Características de los compuestos con enlace iónico	15
2.2.- Enlaces covalentes.....	16
2.2.1.- Enlace covalente no polar	17
2.2.1.1.- Enlace covalente no polar simple	17
2.2.1.2.- Enlace covalente no polar doble	18
2.2.1.3.- Enlace covalente no polar triple.	18
2.2.1.4.- Enlace covalente polar.	20
2.2.1.5.- Enlace covalente coordinado.....	22
2.3.- Propiedades de las sustancias con enlace covalente.	23
3.- Hibridación.....	24
Hibridación sp	24
Hibridación sp ²	25
Hibridación sp ³	25
4.- Enlace metálico.....	27
5.- Enlaces Intermoleculares.	29
5.1.- Enlaces por puente de hidrógeno	29
5.2.- Enlaces por fuerzas de van der Waals	30
6.- Análisis estructural en moléculas orgánicas	31

6.1.- Enlace Covalente.....	32
6.2.- Teoría de Enlace – Valencia.....	32
6.3.- El enlace covalente según la Teoría de Orbitales Moleculares.	33
6.5.- Orbitales híbridos y el enlace covalente.	35
6.6.- Orbitales híbridos.....	35
6.8.- Geometría de Orbitales Moleculares	36
6.9.- Generación de orbitales híbridos.	37
6.10.- Formación de enlaces covalentes en los compuestos orgánicos.	39
Ejercicios.....	43
7.- Geometría molecular: hibridación, TEV, TRPEV	55
7.1.1.- Orbitales híbridos sp.....	56
7.1.2.- Orbitales híbridos sp^2 y sp^3	56
7.1.3.- Orbitales híbridos sp^3d y sp^3d^2	59
7.2.- Enlaces pi (π) o sigma (σ).....	60
8.- La geometría molecular y el modelo de las repulsiones de pares electrónicos (RPECV).....	64
BIBLIOGRAFIA	81

1.- Introducción.

La materia con la que interactuamos diariamente, está formada por agrupaciones de átomos o compuestos químicos.

Los compuestos químicos son conjuntos de átomos de diferentes elementos que interactúan a nivel de los electrones de su última órbita.

Walther Kossel y Gilbert N. Lewis, desarrollaron en 1916 la Teoría de los enlaces químicos. Al analizar los elementos de la tabla periódica y sus compuestos observaron que los gases nobles existen en forma atómica sin combinar y son estables, propusieron que los átomos se combinan por que tratan de completar en su último nivel de energía 8 electrones o la configuración del gas noble más próximo.

En 1924, K. Fajans al estudiar la relación entre tipo de enlace, tamaño del átomo, carga iónica y configuración electrónica dedujo que un enlace es iónico cuando:

- Los iones formados son eléctricamente estables.
- Las cargas iónicas son pequeñas.
- El catión es grande y el anión pequeño.

Los electrones, especialmente los que están en la capa más externa o de valencia, juegan un papel fundamental en el enlace químico.

En algunos casos se transfieren electrones de un átomo a otro, formándose iones positivos y negativos que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas denominadas enlaces iónicos.

En otros casos se comparten entre los átomos uno o más pares de electrones; en lo que denomina enlace covalente. El término covalente fue introducido por Irving Langmuir.

Las ideas de estos químicos, muy simples y cualitativas, fueron desarrolladas antes del advenimiento de la mecánica cuántica. En 1927, un año después de 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 la ecuación de Schrödinger no puede resolverse exactamente para sistemas de más de un electrón, surgieron dos métodos aproximados generales para tratar el enlace químico. El primero de ellos, el de los electrones de valencia, introducido por W. Heitler y F. London en 1927 sirvió para que calcular la fuerza del enlace en la molécula del hidrógeno. Posteriormente Linus Pauling y J. C. Slater extendieron sus ideas hasta elaborar la teoría general del enlace químico, conocida como teoría del enlace de valencia o teoría HLSP, en honor a Heitler, London, Slater y Pauling. En 1928 apareció el método de los orbitales moleculares de Robert Sanderson Mulliken, F. Hund y J. F. Lenard-Jones.

En cualquier caso, estos dos métodos pueden considerarse complementarios, pues cada uno falla donde el otro alcanza sus mejores resultados. No obstante, la mayor parte de los cálculos moleculares cuantitativos se hacen en la actualidad empleando el método de orbitales moleculares, ya que, a efectos de cálculo, es más sencillo que el método de enlace de valencia, y el uso de ordenadores digitales ha hecho posible el cálculo de funciones orbitales moleculares muy precisos y permitiendo abordar el estudio de estructuras moleculares muy complicadas.

Por otro lado, el descubrimiento de la difracción de rayos X de los cristales por el alemán Laue en 1912 y el subsiguiente desarrollo de la determinación de estructuras cristalinas por la familia Braag, condujo a una teoría muy satisfactoria del enlace en compuestos iónicos o electrovalentes, en base a interacciones electrostáticas entre iones cargados. En 1918 Max Born y Alfred Landé dedujeron una expresión para calcular teóricamente las energías de red en la formación de los compuestos iónicos, y al año siguiente Born y Fritz Haber, propusieron el ciclo que lleva el nombre de ambos para calcular energías de red o, alternativamente, electroafinidades.

Los trabajos de Peter Debye (1884-1966) sobre momentos dipolares y la teoría de la resonancia de Linus Pauling han contribuido, junto a

otras aportaciones menos relevantes de otros científicos, a establecer la existencia de enlaces intermedios y a aclarar su naturaleza.

En general, los electrones se transfieren o se comparten de manera que los átomos adquieren una configuración electrónica especialmente estable.

La química como ciencia de la materia estudia a los átomos y a los conglomerados atómicos estables; es en estos conglomerados donde ocurren las interacciones materia – energía, una de esas interacciones la constituyen los enlaces químicos.

Las propiedades químicas de los átomos dependen esencialmente del comportamiento de los electrones del último nivel, es decir, de su capacidad de combinación o valencia.

En la naturaleza es muy raro encontrar los átomos aislados. Solamente los gases nobles y metales en estado de vapor se presentan como átomos aislados, el resto de las sustancias se presentan formando agrupaciones de átomos.

La pregunta clave es: ¿POR QUE SE UNEN LOS ÁTOMOS?

Para entender esta cuestión se debe tener presente un principio general en el comportamiento de la materia:

"Todo tiende a evolucionar hasta llegar a una forma de máxima estabilidad".

Los átomos, cuando se aproximan unos a otros, "chocan" su última capa entre sí (de ahí la importancia de conocer cuántos electrones tiene un átomo en su última capa). En estos choques ceden, atrapan o comparten electrones (esto constituye una reacción química), se dará la opción más favorable, de tal forma que en su última capa se queden con la estructura de máxima estabilidad, que es la que corresponde a los gases inertes $s^2 p^6$ ($8e^-$ excepto el He, s^2), por eso estos átomos no reaccionan.

1.1.- Electrones enlazantes y regla del octeto

Los enlaces químicos son las fuerzas de atracción entre átomos que los mantienen unidos en las moléculas.

Se considera que los átomos se unen tratando de adquirir en su último nivel de energía una configuración electrónica estable, similar a la de los gases nobles. A los electrones del último nivel de un átomo se les llama “**electrones de enlace**” o “**electrones de valencia**”.

La tendencia de los átomos para adquirir en su último nivel de energía 8 electrones se llama “**regla de octeto**”.

En un enlace químico es obvio que predominan las fuerzas de atracción sobre las de repulsión, esto se explica considerando que los electrones enlazantes se acomodan de manera que puedan ser atraídos por ambos núcleos, haciendo que aminore la repulsión entre ellos por el efecto de pantalla (los electrones internos obstruyen o tapan a los electrones del exterior de manera que la influencia electrostática sea menor).

Los electrones enlazantes pueden estar en cualquiera de los siguientes casos:

- Localizados más cerca de un núcleo que de otro.
- Situados a igual distancia de los dos núcleos.
- Deslocalizados y distribuidos en un conjunto de más de dos núcleos.

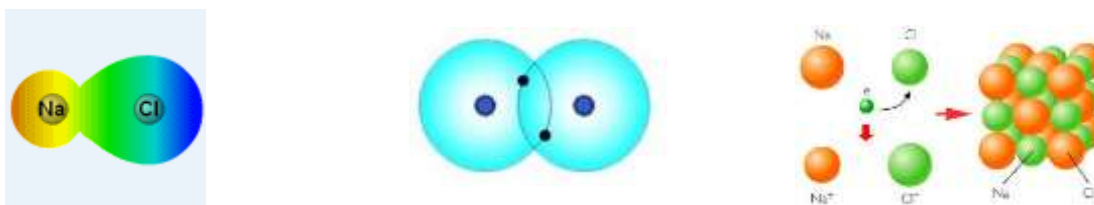


Fig. 1: Localización de los electrones respecto a los núcleos de los átomos en un enlace químico

De las propiedades de los átomos podemos considerar dos de ellas para explicar los tipos de enlace y son: radio atómico y electronegatividad.

Pauling determinó las electronegatividades a partir de los calores de formación de los elementos y los expresó en una escala arbitraria de 0.7 a 4.0, su unidad es el “Pauling”. Los valores de electronegatividad aparecen en la figura siguiente.

H 2.1																			He
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0			Ne
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0			Ar
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8			Kr
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5			Xe
Cs 0.7	Ba 0.9	Lu	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.9	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2			Rn
Fr 0.7	Ra 0.9	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo		

Fig 2: Tabla de Electronegatividades de Pauling.

La electronegatividad es una medida de la capacidad de los átomos para atraer electrones hacia sí, durante la formación de los enlaces químicos.

El radio atómico lo podemos considerar como la distancia entre el centro del núcleo y el último electrón, la figura siguiente muestra los radios atómicos de los elementos. Es lógico pensar que entre más lejano se encuentre un electrón de su núcleo menor, es la fuerza de atracción, por lo tanto, ese electrón puede ser atraído por un elemento de menor tamaño y con elevada electronegatividad.

Radio atómico en Angstroms	Nombre	Símbolo	Radio atómico en Angstroms	Nombre	Símbolo
0.49	Helio	He	1.89	Rutenio	Ru
0.51	Neón	Ne	1.92	Vanadio	V
0.57	Fluor	F	1.92	Osmio	Os
0.65	Oxígeno	O	1.95	Tecnecio	Tc
0.75	Nitrógeno	N	1.97	Renio	Re
0.79	Hidrógeno	H	2.0	Titanio	Ti
0.88	Argón	Ar	2.0	Indio	In
0.91	Carbono	C	2.01	Molibdeno	Mo
0.97	Cloro	Cl	2.02	Wolframio	W
1.03	Kriptón	Kr	2.05	Litio	Li
1.09	Azufre	S	2.08	Niobio	Nb
1.12	Bromo	Br	2.08	Talio	Tl
1.17	Boro	B	2.09	Escandio	Sc
1.22	Selenio	Se	2.09	Tantalio	Ta
1.23	Fósforo	P	2.16	Hafnio	Hf
1.24	Xenón	Xe	2.16	Circonio	Zr
1.32	Iodo	I	2.23	Calcio	Ca
1.33	Arsénico	As	2.23	Sodio	Na
1.34	Radón	Rn	2.25	Lutecio	Lu
1.4	Berilio	Be	1.85	Cromo	Cr
1.42	Teluro	Te	1.87	Iridio	Ir
1.43	Astato	At	1.89	Rutenio	Ru
1.46	Sílice	Si	1.92	Vanadio	V
1.52	Germanio	Ge	1.92	Osmio	Os
1.53	Zinc	Zn	1.95	Tecnecio	Tc
1.53	Antimonio	Sb	1.97	Renio	Re
1.53	Polonio	Po	2.0	Titanio	Ti
1.57	Cobre	Cu	2.0	Indio	In
1.62	Níquel	Ni	2.01	Molibdeno	Mo
1.63	Bismuto	Bi	2.02	Wolframio	W
1.67	Cobalto	Co	2.05	Litio	Li
1.71	Cadmio	Cd	2.08	Niobio	Nb
1.72	Hierro	Fe	2.08	Talio	Tl
1.72	Estaño	Sn	2.09	Escandio	Sc
1.72	Magnesio	Mg	2.09	Tantalio	Ta
1.75	Plata	Ag	2.16	Hafnio	Hf
1.76	Mercurio	Hg	2.16	Circonio	Zr
1.79	Oro	Au	2.23	Calcio	Ca
1.79	Manganeso	Mn	2.23	Sodio	Na
1.79	Paladio	Pd	2.25	Lutecio	Lu
1.81	Galio	Ga	2.27	Itrio	Y
1.81	Plomo	Pb	2.4	Itterbio	Yb
1.82	Aluminio	Al	2.42	Tulio	Tm
1.83	Platino	Pt	2.45	Erbio	Er
1.83	Rodio	Rh	2.45	Estroncio	Sr
1.85	Cromo	Cr	2.47	Holmio	Ho
1.87	Iridio	Ir	2.49	Disproseo	Dy

2.54	Gadolinio	Gd	2.98	Rubidio	Rb
2.56	Europio	Eu	3.34	Cesio	Cs
2.59	Samario	Sm	2.74	Lantano	La
2.62	Promecio	Pm	2.77	Potasio	K
2.64	Neodimio	Nd	2.78	Bario	Ba
2.67	Praseodimio	Pr	2.98	Rubidio	Rb
2.7	Cerio	Ce	3.34	Cesio	Cs
2.74	Lantano	La	2.78	Bario	Ba
2.77	Potasio	K			
2.78	Bario	Ba			

Fig. 3: Radios Atómicos. (La unidad de medida del radio atómico es el Angstrom. 1 Angstrom = 1.0×10^{-10} metros)

<http://www.lenntech.es/tabla-peiodica/radio-atomico.htm#ixzz3DIC409KB>

1.2.- Estructuras de Lewis

Las estructuras de Lewis, son representaciones de los átomos con el símbolo del elemento y los electrones alrededor como líneas o puntos. A estas estructuras también se les llama diagramas de puntos. En la figura siguiente se representan estas estructuras para algunos elementos representativos.

GRUPO # electrones de Valencia	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
	1	2	3	4	5	6	7	8
E L E M E N T O S	H [•]	Be ^{••}	B ^{•••}	C ^{••••}	N ^{•••••}	O ^{••••••}	F ^{•••••••}	Ne ^{••••••••}
	Li [•]	Mg ^{••}	Al ^{•••}	Si ^{••••}	P ^{•••••}	S ^{••••••}	Cl ^{•••••••}	Ar ^{••••••••}
	Na [•]	Ca ^{••}	Ga ^{•••}	Ge ^{••••}	As ^{•••••}	Se ^{••••••}	Br ^{•••••••}	Kr ^{••••••••}
	K [•]	Sr ^{••}	In ^{•••}	Sn ^{••••}	Sb ^{•••••}	Te ^{••••••}	I ^{•••••••}	Xe ^{••••~•••••}
	Rb [•]	Ba ^{••}	Ta ^{•••}	Pb ^{••••}	Bi ^{•••••}	Po ^{••~•••••}	At ^{•••••••}	Rn ^{••••~•••••}

Fig. 4: Estructuras de Lewis de elementos representativos.

2.- Clasificación de los Enlaces Químicos.

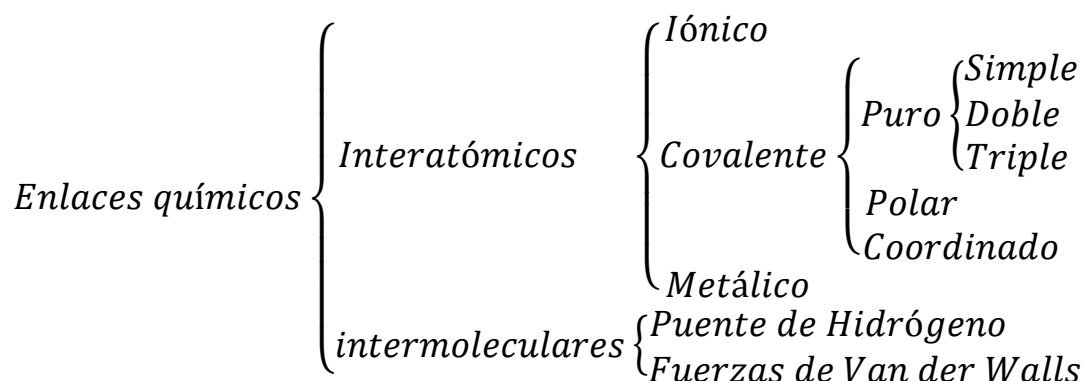


Fig. 5: Clasificación de los Enlaces Químicos.

2.1.- Enlaces Interatómicos.

La diferencia de electronegatividad entre los átomos que integran un enlace, permite hacer una estimación del carácter iónico o covalente de un enlace químico. De acuerdo a estas diferencias, un compuesto es esencialmente iónico o esencialmente covalente. Puede establecerse que 1,7 es el límite o el promedio para diferenciar un enlace de otro. A continuación se muestra el carácter iónico o covalente de un enlace considerando su diferencia de electronegatividades (Δ E.N.).

Carácter Iónico o Covalente aproximado de un enlace

Diferencia de electronegatividades (A-B)	0	0,2	0,6	1	1,2	1,4	1,7	1,9	2,2	2,6	3,3
% de Carácter iónico del enlace	0	1	7	18	30	40	50	60	70	80	90
% del carácter Covalente del enlace	100	99	93	82	70	60	50	40	30	20	10

Fig. 6: Carácter Iónico o Covalente aproximado de un Enlace Químico según su diferencia de Electronegatividad (Δ EA).

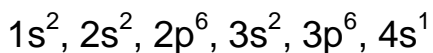
2.1.1.- Enlace iónico.

Un enlace es iónico aquel que se establece por transferencia de electrones entre átomos con diferencia de electronegatividad mayor a

1.7; el elemento más electronegativo acepta los electrones del menos electronegativo para completar su octeto.

El enlace iónico es común entre metales de los grupos I y IIA con los no metales de los grupos VIA y VIIA, lo podemos representar con configuraciones electrónicas, modelos de Bohr o estructura de cargas. 1.- Ejemplo: El Fluoruro Potásico, KF

El Potasio, K (Z=19), tiene la siguiente distribución electrónica:



El Flúor, F (Z=9):

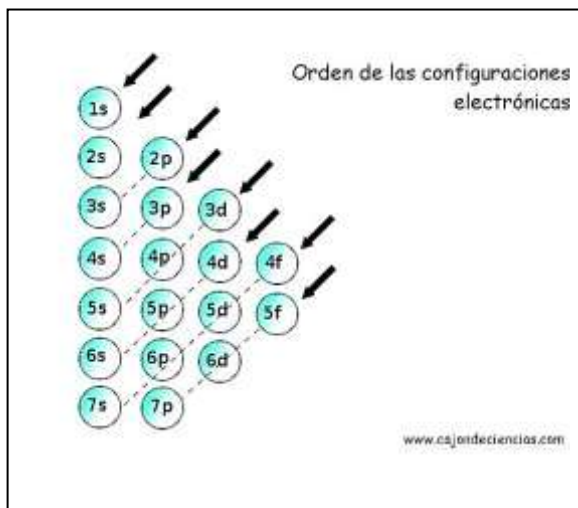
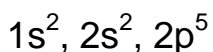
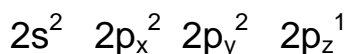


Fig. 7: Diagrama de Moeller

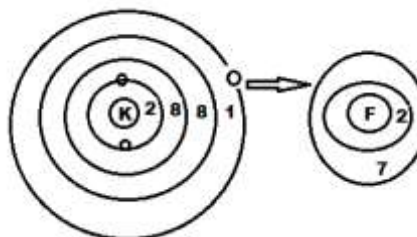
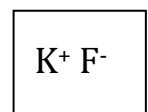
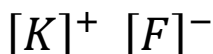
La diferencia de electronegatividad es $= 4.0 - 0.8 = 3.2 > 1.7$ por lo tanto, habrá enlace iónico. Los datos de las electronegatividades los hemos obtenido de la “Tabla de Pauling”, (Fig.2), mostrada en la página 9.

El K cede 1 electrón al F, quedan ambos iones con 8 electrones en el último nivel.

La representación con configuraciones electrónicas:

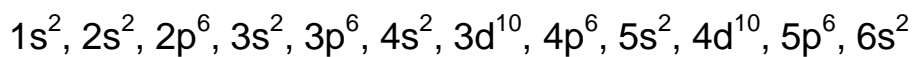


La representación con el Modelo de Bohr:



2.- Ejemplo: El cloruro de Bario, BaCl_2 :

El Ba ($Z=56$), su distribución electrónica:

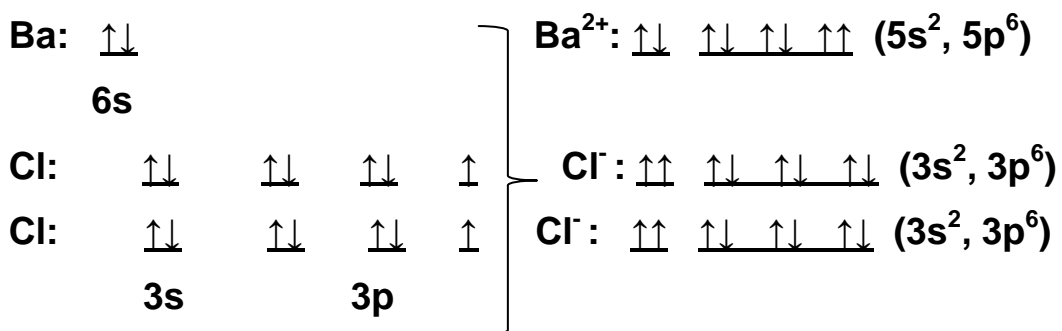


El Cl ($Z=17$): $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$

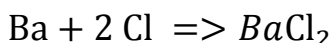
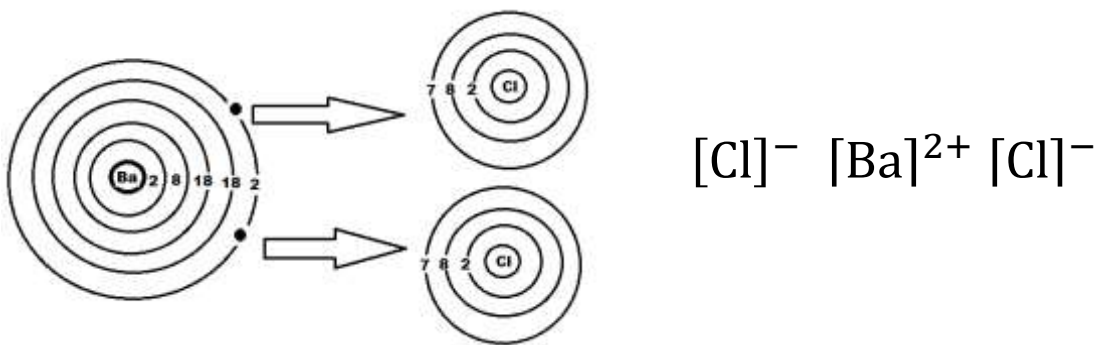
La diferencia de electronegatividad: $3,0 - 0,9 = 2,1 > 1,7$

El enlace es iónico. El Bario cede sus 2 electrones del subnivel 6s y cada átomo de cloro capta 1, respectivamente, con lo que cada átomo completa su último nivel con ocho electrones, logrando su estabilidad.

La representación con configuraciones electrónicas:



La representación de Bohr:



La pérdida de electrones es más fácil si se elimina un electrón suficientemente alejado del núcleo y la ganancia de electrones es susceptible en átomos pequeños donde la atracción nuclear es considerable.

Algunos compuestos iónicos son:

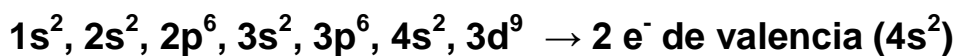
Metal (catión)	No metal (anión)	Fórmula	Nombre
K^+	O^{-2}	K_2O	Óxido de Potasio
Ca^{+2}	Cl^-	$CaCl_2$	Cloruro Cálxico
Na^+	N^{-3}	Na_3N	Nitruro de Sodio
Mg^{+2}	F^{-1}	MgF_2	Fluoruro de Magnesio

2.1.2.- Características de los compuestos con enlace iónico

- Están formados por iones (+) y (-); metales y no metales.
- Son sólidos, la mayoría con estructura ordenada o en forma de cristales.
- Poseen elevado punto de fusión y ebullición
- Son duros, frágiles y buenos conductores de calor y electricidad.
- En estado de fusión o disueltos en agua, son buenos conductores de la electricidad.
- Solubles en agua y en disolventes polares.

Los metales de transición al combinarse pueden generar más de un ión positivo (+) por lo tanto, no se puede predecir a partir de subgrupo en la tabla una carga iónica única; en muchos casos los metales se hibridan para poder combinarse. La hibridación es el reacomodo de electrones en su mismo nivel atómico, lo que implica la mezcla de orbitales puros de diferente energía para dar origen a otros de la misma energía. Este fenómeno explica las valencias variables de algunos átomos, metales y no metales.

3.- Ejemplo: Valencia variable del Cobre, Cu (Z=29)



4s **3d**



Estado Híbrido

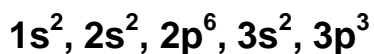


cede 1 electrón ($4s$) Cu^+



cede 2 electrones Cu^{+2}

4.- Valencias variables del Fósforo (Z=15)



Estado Basal

3s **3p**



Acepta 3 electrones (P^{-3})

3s **3p**



Cede 3 electrones (P^{+3})

3s **3p**



Cede 5 electrones (P^{+5})

3s **3p**



Acepta 5 electrones (Híbrido sp^3d)

3s **3p** **3d**

2.2.- Enlaces covalentes

Son las fuerzas generadas entre átomos por compartición de pares de electrones, esto se debe a una deformación de los orbitales externos, la diferencia de electronegatividades (ΔEN) entre ellos es menor o igual a 1.7, son comunes entre no metales. Por la forma en que puede darse la covalencia los enlaces se clasifican en:

No polares $\Delta EN=0$.

Polares, $0 < \Delta EN < 1.7$

Coordenados, $0 < EN < 1.7$

2.2.1.- Enlace covalente no polar

Este enlace ocurre entre átomos cuya diferencia de electronegatividad es igual a cero, en este caso la tendencia de los átomos para atraer electrones hacia su núcleo es igual, por lo tanto, el momento dipolar es cero. Por la cantidad de electrones de valencia de los átomos y su tendencia para completar 8 electrones estos pueden compartir 1, 2 o 3 pares de electrones generando los llamados enlaces simples, dobles y triples.

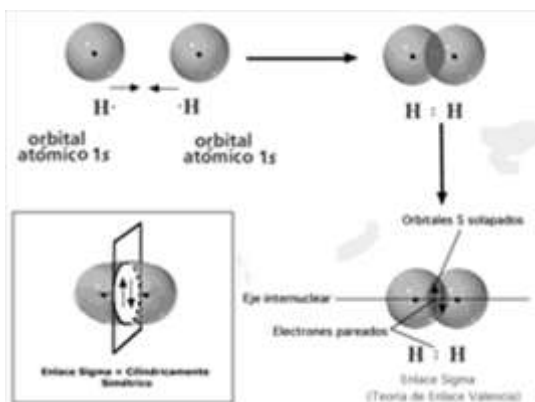


Fig. 8: Enlace Covalente del Hidrógeno

2.2.1.1.- Enlace covalente no polar simple

Este enlace se lleva a cabo en átomos que requieren de 1 e- para completar su octeto por ejemplo hidrógeno (H_2), flúor (F_2), cloro (Cl_2), yodo (I_2) y bromo (Br_2).



Fig. 9: Enlace Covalente No-Polar

Los enlaces covalentes se representan mediante configuraciones electrónicas y con modelos o estructuras de Lewis. Los enlaces covalentes también se suelen representar mediante diagramas de orbitales moleculares, éstos se forman por la combinación de orbitales s, p, d, puros o híbridos, los cuales se detallan más adelante.

Entre dos átomos que presentan más de un enlace covalente, el primero de ellos es un enlace frontal de mayor energía y se llama enlace sigma (σ); los demás son enlaces perpendiculares o laterales, de menor energía y se llaman enlaces pi (π).

2.2.1.2.- Enlace covalente no polar doble

Representación del enlace covalente no polar doble en la molécula de oxígeno con estructuras de Lewis y diagrama de orbitales, en éste último se observan los enlaces sigma (σ) y pi (π).



Fig. 10: Enlace Covalente No Polar doble

Elementos que presentan Enlace Covalente No-Polar Doble

Nombre	Fórmula
Oxígeno	O_2
Selenio	Se_2
Azufre	S_2
Teluro	Te_2

2.2.1.3.- Enlace covalente no polar triple.

Los elementos que pueden presentar este enlace son los del grupo V - A, los cuales para completar su octeto necesitan compartir tres electrones. También ocurre entre átomos de carbono (C), en los compuestos llamados alquinos. El ejemplo típico es el N, para que complete ocho electrones, un átomo comparte con otro 3 pares de electrones formando un enlace sigma (σ) y 2 enlaces (π) es decir, un enlace covalente triple.

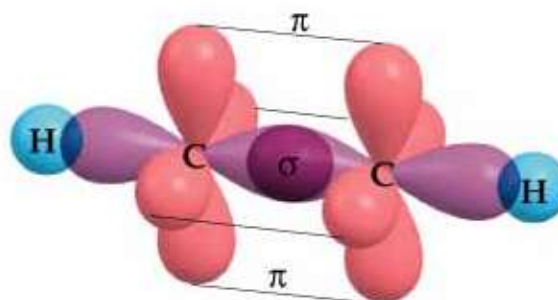
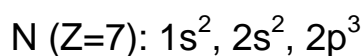
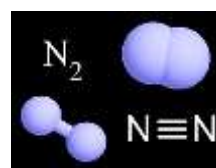
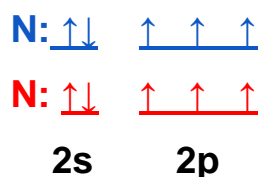


Fig. 11: Enlace Covalente No Polar Triple

5.- Ejemplo:



Comparten 3 pares de electrones así:



Representado con diagramas de puntos o estructuras de Lewis:

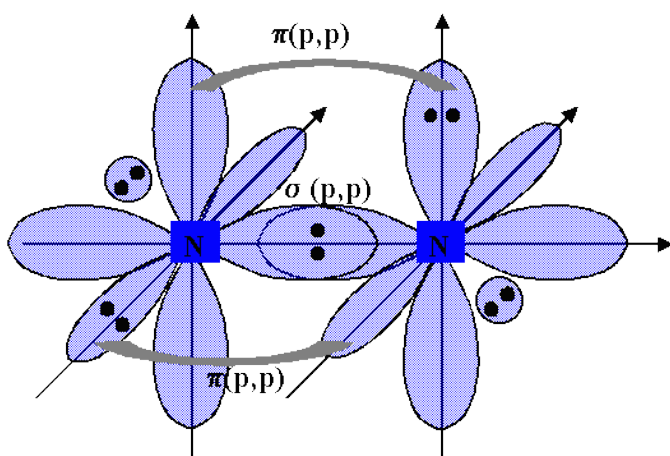


Fig. 12: Enlace Covalente No Polar Triple del Nitrógeno

2.2.1.4.- Enlace covalente polar.

Se presenta cuando los átomos tienen $0 < \Delta \text{EN} < 1,7$ en este caso, el momento dipolar (“**Momento dipolar: vector que actúa en la dirección del enlace molecular asimétrico. Las moléculas polares tienen momento dipolar permanente**”) ya no es cero ($\mu \neq 0$), pues el átomo más electronegativo atraerá el par de electrones enlazantes con más fuerza, esto significa que ese par girará durante más tiempo alrededor del núcleo más electronegativo, polarizando parcialmente la molécula.

La medición de los momentos dipolares proporciona evidencia experimental de la existencia de desplazamiento electrónico en los enlaces y distribución asimétrica de electrones en las moléculas. La magnitud del momento dipolar depende de la electronegatividad.

Algunos científicos consideran que un enlace es covalente cuando la $\Delta \text{EN} < 1,9$ debido al enlace entre H y F, ya que estos son dos elementos no metálicos.

Ejemplos de enlaces covalentes polares se presentan mediante las moléculas de la figura siguiente:

Nombre	Fórmula
Amoníaco	NH_3
Agua	H_2O
Ácido Fluorhídrico	HF
Ácido Clorhídrico	HCl
Tricloruro de Fósforo	PCl_3
Ácido Sulfúrico	H_2SO_4

Fig. 13: Compuestos con enlace covalente polar

5.- Ejemplo: Representación del enlace covalente polar en la molécula de agua.

La Electronegatividad: O: 3,5

H: 2,1

1,4 \leq 1,7 (enlace covalente polar)

$$0 < 1,4 < 1,7$$

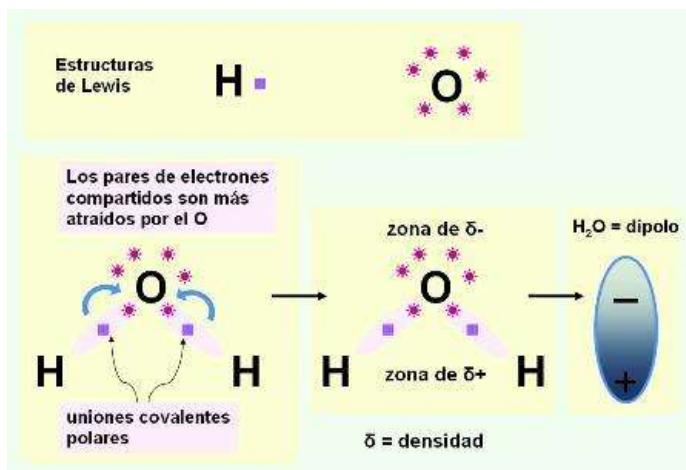
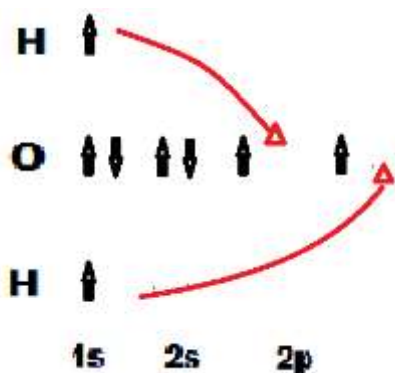
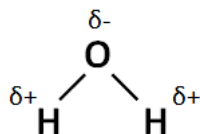


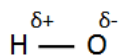
Fig. 14: Enlace Covalente Polar de la Molécula de Agua



El oxígeno requiere de 2 electrones para completar su octeto por lo que necesitará de 2 átomos de hidrógeno con los cuales compartir sus electrones desapareados.



En el enlace:



$$\text{EN} = (2.1) \quad (3.5)$$

$$\Delta\text{EN} = 1.4$$

La compartición de la carga no es simétrica, se distribuye de manera que las moléculas se polarizan como se indica en el diagrama. Otros ejemplos de moléculas polares son: CH_3Cl , HCN , CH_2F_2 .

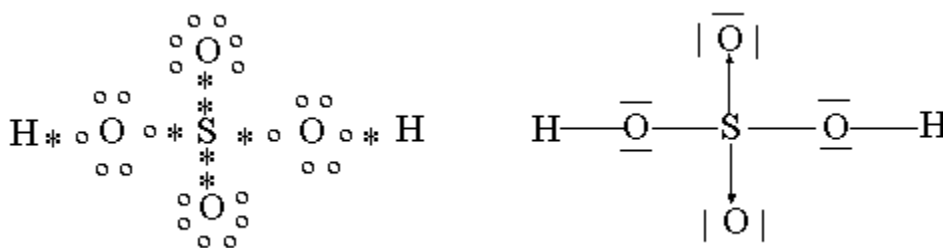
La polaridad de las moléculas le confiere importantes cambios en sus propiedades físicas y químicas; sus puntos de fusión y ebullición son anormalmente elevados, su reactividad química también se ve alterada.

2.2.1.5.- Enlace covalente coordinado.

Este enlace se presenta cuando solo uno de los átomos cede el par de electrones que comparten entre dos, el otro átomo sólo aporta su orbital vacío para acomodarlos. Ejemplos de sustancias con este tipo de enlace se muestran en el cuadro siguiente:

Nombre	Fórmula
Ión hidronio	H_3O^+
Ión Amonio	NH_4^+
Ácido Sulfúrico	H_2SO_4
Ácido Clórico	HClO_3
Ácido Nítrico	HNO_3

En el caso del ácido sulfúrico, se supone que 2 átomos de oxígeno sufren una redistribución de electrones de valencia de manera que queden con un orbital vacío en el cual acomodar 2 electrones procedentes del azufre. La imagen siguiente muestra este tipo de enlace.



2.3.- Propiedades de las sustancias con enlace covalente.

- Tienen gran variedad de puntos de fusión y ebullición.
- Son aislantes térmicos y eléctricos.
- Algunos son antiadherentes.
- Sus moléculas tienen forma geométrica definida.
- Existen en los tres estados de agregación: sólidos, líquidos y gaseosos.
- Algunos tienen actividad química media y otros elevada.
- Los polares son solubles en disolventes polares, los no polares son solubles en compuestos no polares.

Las sustancias polares se disuelven mutuamente porque sus moléculas se atraen y son relativamente poco volátiles. Se requiere de mayor energía para vencer las atracciones intermoleculares. El valor del momento dipolar así como los pares de electrones enlazantes y solitarios ayudan a estimar la forma geométrica de las moléculas.

Los iones de una sal se atraen entre sí con una fuerza 80 veces mayor en el aire que en el agua, por lo que ceden a la atracción del dipolo del agua y entonces se dice que están “solvatadas” como se muestra en la figura siguiente:

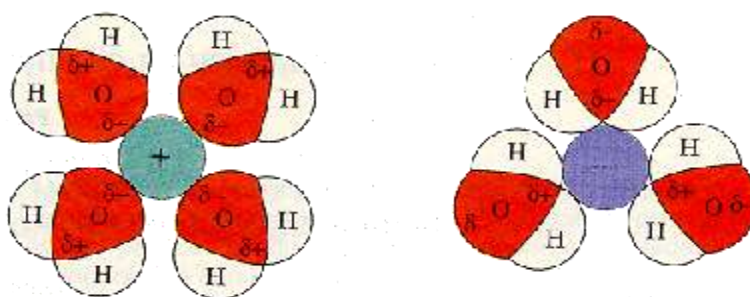


Fig. 15: Solvatación de iones por moléculas de agua orientadas

Si las fuerzas que unen al cristal son menores que las de atracción entre los iones y las moléculas del disolvente, la sal se disolverá.

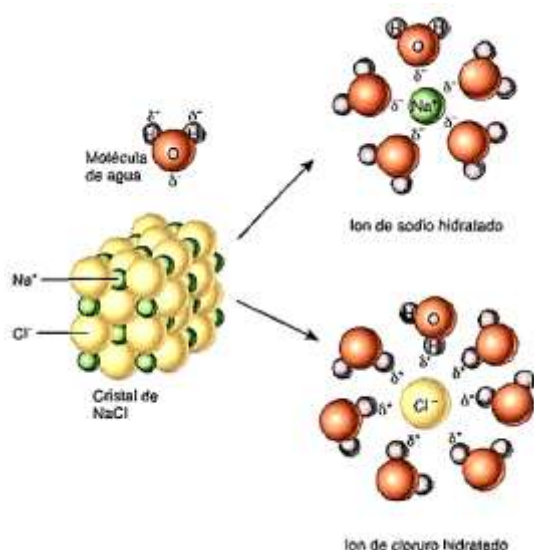


Fig. 16: Solvatación de una solución de cloruro de sodio

3.- Hibridación.

La explicación de la variación en la valencia de algunos elementos, la energía de los enlaces, la geometría molecular y el hecho de que no se cumpla en muchas moléculas con la regla del octeto, se explica en parte mediante el concepto de hibridación. Pauling, Slater, Mulliken y otros científicos, han demostrado basados en la mecánica cuántica, que en algunos átomos sus orbitales se hibridan o hibridizan. Los electrones de un orbital comparten su energía con los de otro orbital del mismo nivel atómico, originando orbitales combinados u orbitales deformados.

La hibridación es la combinación de orbitales puros de diferente energía en un mismo nivel atómico para generar orbitales híbridos de la misma energía.

Existen distintos tipos de hibridación, los tipos y características de cada uno se muestran a continuación y explica cómo se forman algunos orbitales híbridos.

Hibridación sp, ocurre cuando se combina un orbital s con un orbital p, generando 2 orbitales híbridos sp que se orientan a lo largo de una línea formando entre si ángulos de 180°.

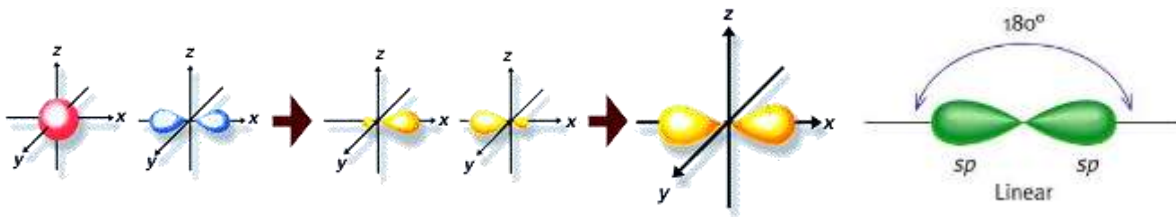


Fig. 17: Orbitales Híbridos sp

Hibridación sp^2 , se presenta al combinarse la energía de un orbital s con dos orbitales p, originando 3 orbitales híbridos sp^2 , éstos se dirigen hacia los vértices de un triángulo formando entre sí ángulos de 120° .

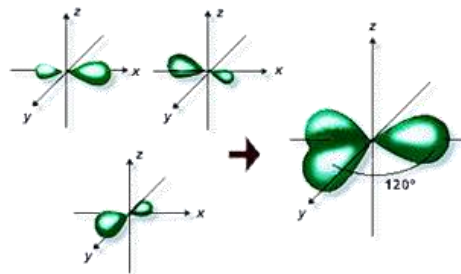


Fig. 18: Orbitales híbridos sp^2

Hibridación sp^3 , consiste en la combinación de un orbital s con tres orbitales p, dando origen a 4 orbitales híbridos sp^3 , éstos se orientan hacia los vértices de un tetraedro y forman entre sí ángulos de 109.5°

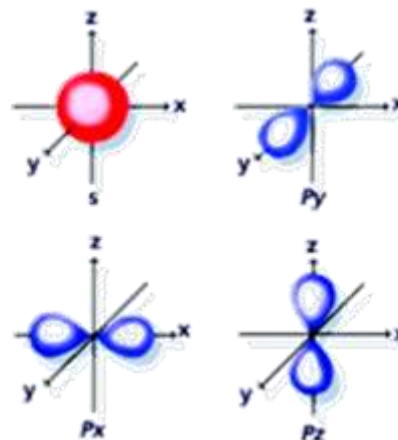


Fig. 19: Orbitales híbridos sp^3 .

Hibridación y sus características

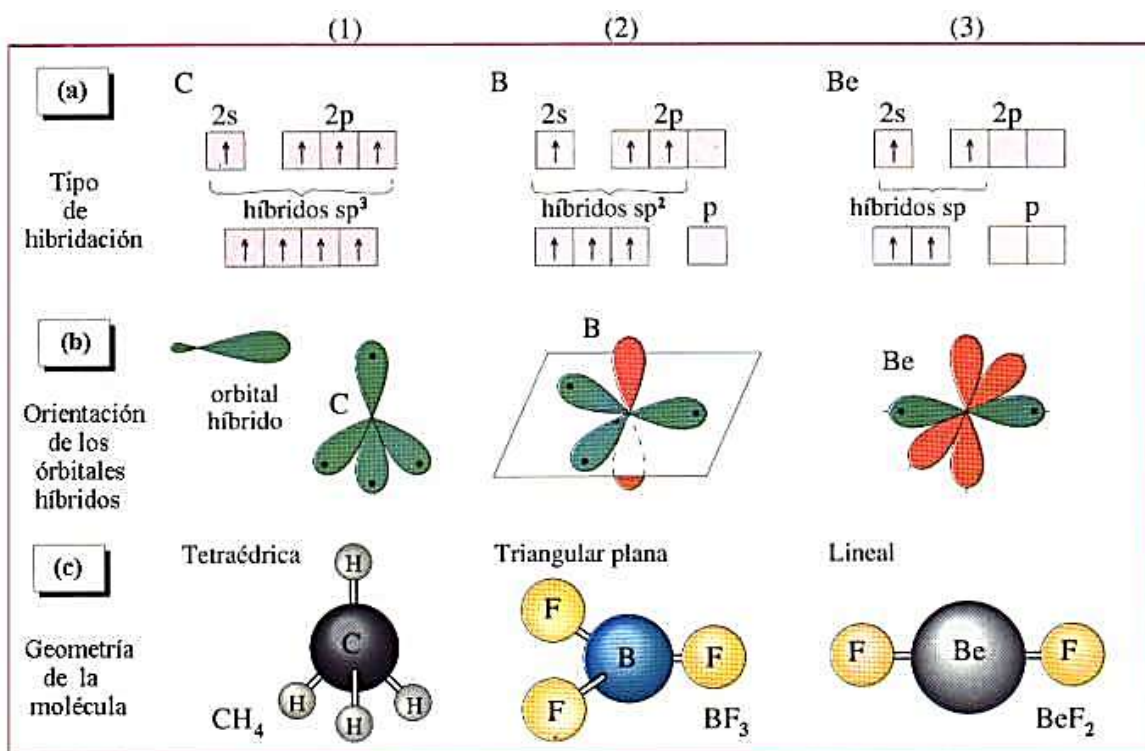


Fig. 20: Características de los orbitales híbridos sp , sp^2 y sp^3

Orbitales s mezclados	Orbitales p mezclados	Tipo de orbitales híbridos	Número de orbitales híbridos	Geometría de los orbitales híbridos	Modelo de los orbitales híbridos formados
1	3	sp^3	4	109,5° tetraédrica	
1	2	sp^2	3	120° triangular plana	
1	1	sp	2	180° lineal	

Fig. 21: Geometría de orbitales híbridos

Un elemento particularmente importante que presenta tres tipos de hibridación es el carbono. En compuestos con enlaces covalentes simples o alcanos, la hibridación del carbono es sp^3 ; en alquenos con carbonos que tienen enlace covalente doble, su tipo de hibridación es sp^2 y en alquinos, donde el carbono tiene enlace covalente triple la hibridación es sp .

Las diferentes hibridaciones que presenta el carbono son


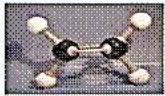

Hibridación	Formada por	Forma en el espacio	Ángulos	Tipos de enlaces C-C	Grupo representativo
sp^3	un orbital "s" y tres orbitales "p"	Tetraédrica 	109°	sencillos	alcanos
sp^2	un orbital "s" y dos orbitales "p"	Trigonal-planar 	120°	dobles	alquenos
sp	un orbital "s" y un orbital "p"	Lineal 	180°	triples	alquinos

Fig. 22: Hibridaciones del átomo de carbono

4.- Enlace metálico

Los metales sólidos poseen estructuras atómicas cristalinas bien definidas. Estos conglomerados atómicos están unidos químicamente por un tipo de unión llamado enlace metálico.

Las características físicas de los metales, como su elevada conductividad térmica y eléctrica, maleabilidad, ductilidad, brillo y tenacidad, los diferencian del resto de los elementos y compuestos. En una estructura metálica sólo pueden existir iones positivos (+) y

una nube de electrones de valencia sin posición definida, que viajan por todo el conglomerado atómico.

Los electrones se hallan deslocalizados formando una “red” única que pertenece a todos los cationes del cristal metálico. La movilidad extrema de los electrones (e^-), confiere al metal sus propiedades. El enlace entre metales se considera una interacción de gran número de núcleos atómicos incluidos sus electrones internos, con los electrones de valencia en constante migración. Los electrones de valencia se encuentran deslocalizados como se muestra en la figura:

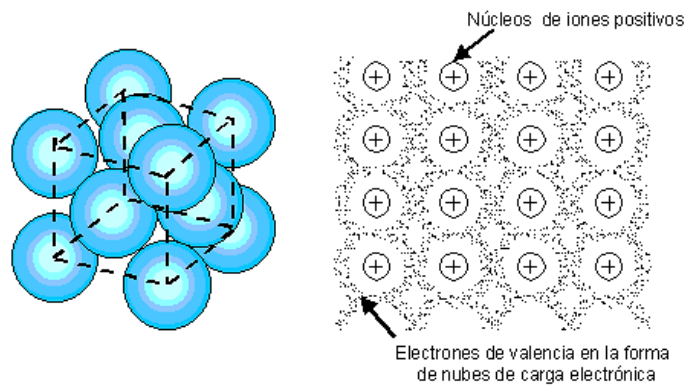


Fig. 23: Enlace Metálico

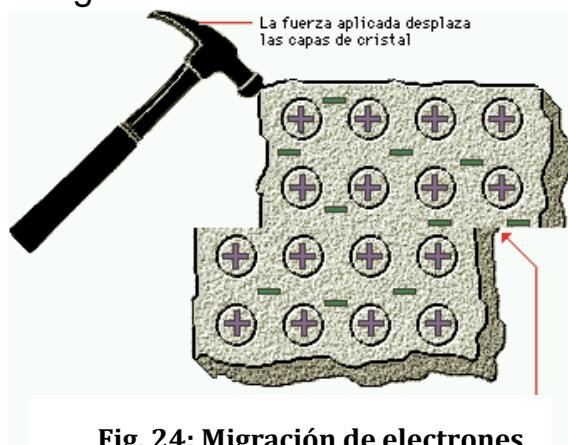


Fig. 24: Migración de electrones de la red del enlace metálico frente a impactos externos.

Los electrones deslocalizados y en constante movilidad hacen que los metales conduzcan con facilidad el calor y la electricidad, ya que ambos, son fenómenos asociados al movimiento de los electrones.

Si un metal es sometido a un golpeteo o presión externa, la capa de electrones (e^-) libres actúa como un lubricante, haciendo que los cationes resbalen o se deslicen unos sobre otros modificando la forma de la pieza sin romperla; esto explica su maleabilidad y ductilidad, como se muestra en la figura.

Los metales suelen tener un arreglo ordenado de sus átomos, su empaquetamiento atómico está perfectamente definido según los diferentes sistemas cristalinos.

Los metales en forma pura se obtienen mediante procedimientos fisicoquímicos bastante refinados, la mayoría de metales utilizados por el hombre son mezclas homogéneas de dos o más; a estas mezclas también se les llama disoluciones sólidas o aleaciones.

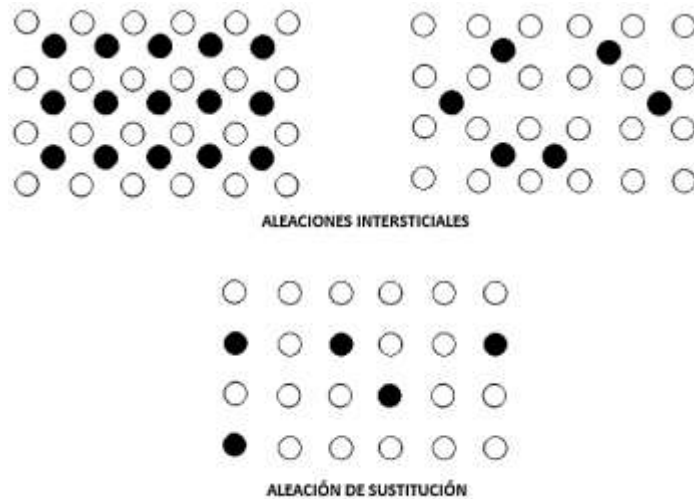


Fig. 25: Tipos de aleaciones

Si los átomos de una aleación tienen diámetros similares, se forman aleaciones por sustitución; si son de diámetro diferente se conocen como aleaciones intersticiales, debido a que los átomos pequeños llenan los intersticios entre los átomos de mayor tamaño.

5.- Enlaces Intermoleculares.

Las atracciones electrostáticas generadas entre los átomos de una molécula con los átomos de otra se llaman enlaces intermoleculares. Las fuerzas de atracción pueden recibir distintos nombres, dos de los enlaces entre moléculas más frecuentes son: enlaces por puente de hidrógeno y enlaces por fuerzas de Van der Waals.

5.1.- Enlaces por puente de hidrógeno

Estas fuerzas de atracción se generan entre el hidrógeno de una molécula y un elemento muy electronegativo de otra.

En estas moléculas, las cargas eléctricas se distribuyen de manera asimétrica, generando dipolos moleculares, por lo tanto, el extremo parcialmente positivo (δ^+) hidrógeno, se atraerá con el extremo parcialmente negativo (δ^-), esas fuerzas de atracción se llaman enlaces por puente de hidrógeno. Algunos compuestos se representan en la tabla siguiente:

Agua	H ₂ O
Amoníaco	NH ₃
Ácido Fluorhídrico	HF
Ácido Clórico	HClO ₃
Proteínas	-NH ₂ -COOH
Ácidos Nucleicos	-NH-

El enlace por puente de hidrógeno es importante en los componentes de los seres vivos; carbohidratos, lípidos, proteínas y ácidos nucleicos. Observar la figura siguiente.

Los compuestos con este enlace difieren en muchas propiedades comparados con compuestos de estructura similar que no presentan dicho enlace, por ejemplo, requieren de mayor cantidad de energía para que sus moléculas se separen en los procesos de evaporación, es decir, su punto de ebullición es más elevado debido a que la cantidad de fuerzas de atracción a vencer es mayor. En la figura se puede apreciar la variación.

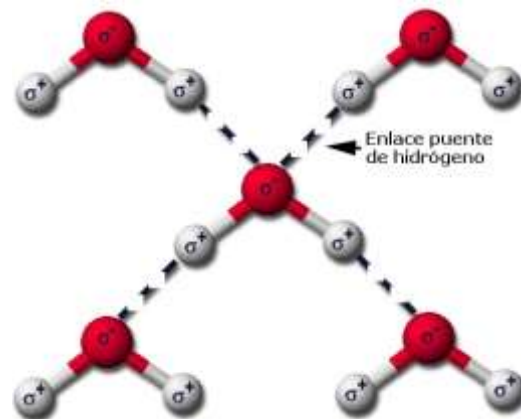
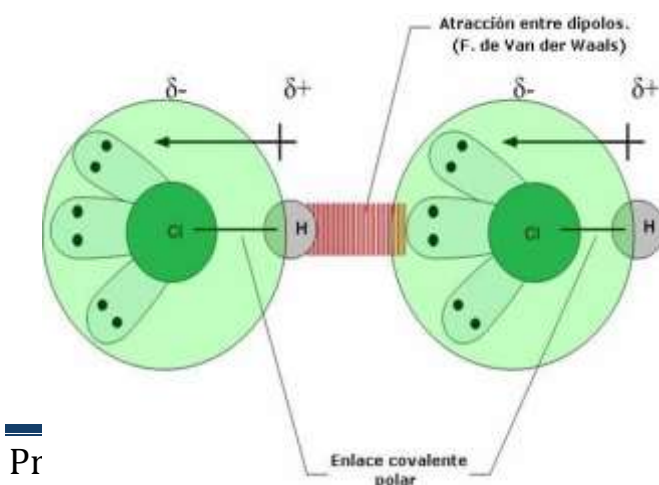


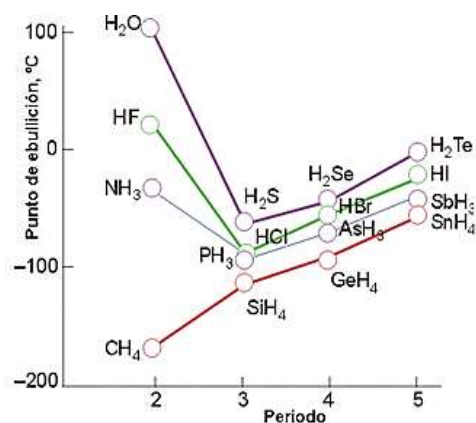
Fig. 26: Enlaces por puentes de hidrógeno

5.2.- Enlaces por fuerzas de van der Waals

Este tipo de interacción molecular ocurre en moléculas simétricas, en



Pr



éstas la distribución de electrones es homogénea, sin embargo, debido a que

Fig. 27: Enlaces por Fuerzas de Van der Waals

los electrones están en constante movimiento y los núcleos en permanente vibración, la simetría es temporal, los movimientos desbalancean las cargas generando dipolos instantáneos que distorsionan la simetría de las moléculas, éstas inducen a otras moléculas cercanas a la formación de nuevos dipolos, de tal manera que entre ellas se originan débiles fuerzas de atracción entre los polos opuestos.

Las fuerzas de Van der Waals explican por qué gases como el aire, oxígeno (O₂), nitrógeno (N₂), cloro (Cl₂) y otros, pueden licuarse por disminución de la temperatura y aumento en la presión. Este tipo de fuerzas es mayor a medida que aumenta el número de electrones externos y su movilidad.

La teoría de los enlaces químicos basada en la mecánica cuántica, intenta explicar fenómenos relacionados con las interacciones atómicas, difíciles de entender, por ejemplo: la superconducción y la semi-conducción de electricidad, además, permite considerar a los enlaces como atracciones entre cargas positivas (+) o núcleos y cargas negativas (-) o electrones, borrando la diferenciación que entre ellos se hace de iónico, covalente, metálico, puente de hidrógeno y fuerzas de Van der Waals.

Podemos mencionar que las diversas manifestaciones de la materia son el resultado de las interacciones atómicas y moleculares entre cargas positivas (+) y negativas (-), esto es, son una consecuencia de las fuerzas de atracción o enlaces químicos.

6.- Análisis estructural en moléculas orgánicas

La compleja estructura de los compuestos orgánicos implica conocer su geometría molecular y sus diferentes tipos de enlaces covalentes. Estos dos aspectos se conocen, a su vez, por medio de los conceptos de orbitales: atómicos, híbridos y moleculares. Esta información permite explicar tanto la forma de las moléculas como sus propiedades.

6.1.- Enlace Covalente.

El enlace típico de los compuestos orgánicos es el enlace covalente. Como ya hemos visto, el enlace covalente es el resultado del compartimiento de uno o más pares electrónicos por parte de los átomos involucrados en la formación del enlace.

Hay tres tipos de enlaces covalentes:

- enlace sencillo: se comparte sólo un par electrónico
- enlace doble: se comparten dos pares electrónicos
- enlace triple: se comparten tres pares electrónicos

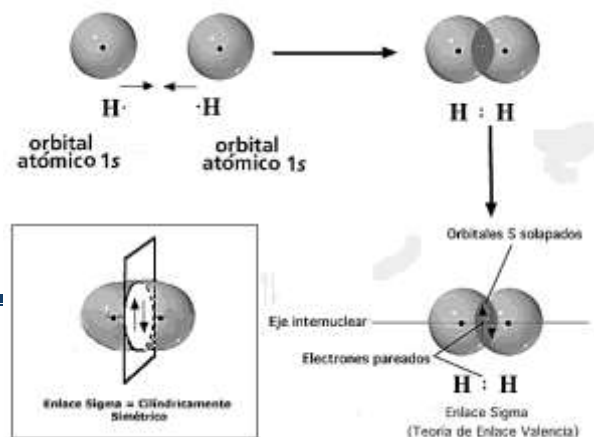
En la formación de estos enlaces, los átomos tienden cumplir la ley del octeto.

La explicación teórica de la formación de un enlace covalente puede hacerse tanto desde el punto de vista de la teoría de enlace-valencia como por la de los orbitales moleculares.

6.2.- Teoría de Enlace – Valencia.

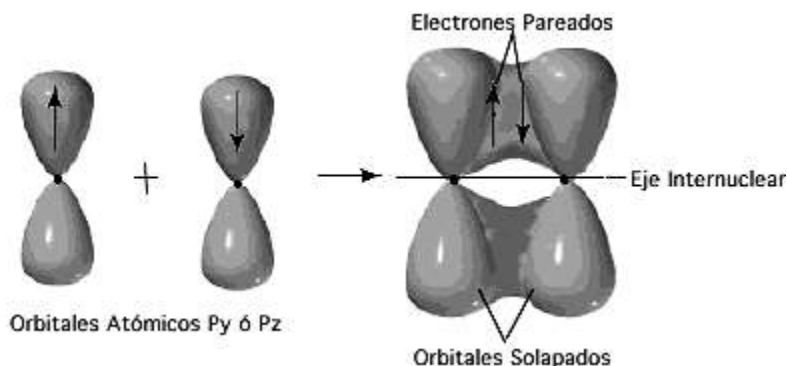
Esta teoría considera el enlace entre átomos adyacentes como aquél formado por el solapamiento (sobre posición) de los distintos orbitales atómicos de valencia, uno en cada átomo, y ambos conteniendo un electrón con giros opuestos. Cada átomo enlazado mantiene sus propios orbitales atómicos pero el par electrónico en los orbitales solapados son compartidos por ambos átomos. A mayor solapamiento, mayor la fortaleza del enlace.

A la luz de esta teoría, un enlace sencillo es el resultado del solapamiento de orbitales a lo largo del eje inter-nuclear (línea imaginaria que une los dos núcleos). Este enlace se conoce como enlace sigma, y se obtiene del apareamiento de electrones debido al solapamiento de dos orbitales "s", o de un orbital "s" con un orbital Px, o de dos orbitales Px, o de cualesquiera

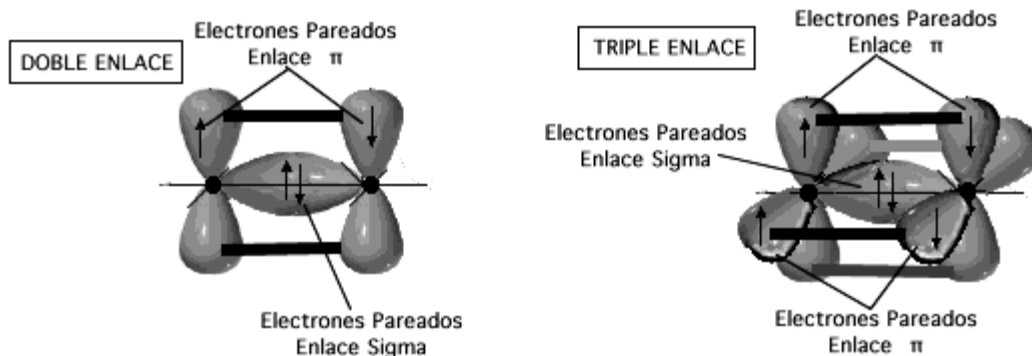


dos orbitales atómicos que se solapen a lo largo del eje inter nuclear (eje de X). El enlace sigma es cilíndricamente simétrico:

En un enlace pi (π), se requiere del solapamiento de orbitales que interactúen fuera del eje inter nuclear, específicamente orbitales “Py” y/o “Pz”, que quedan perpendiculares al eje inter nuclear (eje de X).



En un doble y triple enlace, además del enlace sigma, se requiere de uno o dos enlaces pi (π), respectivamente:

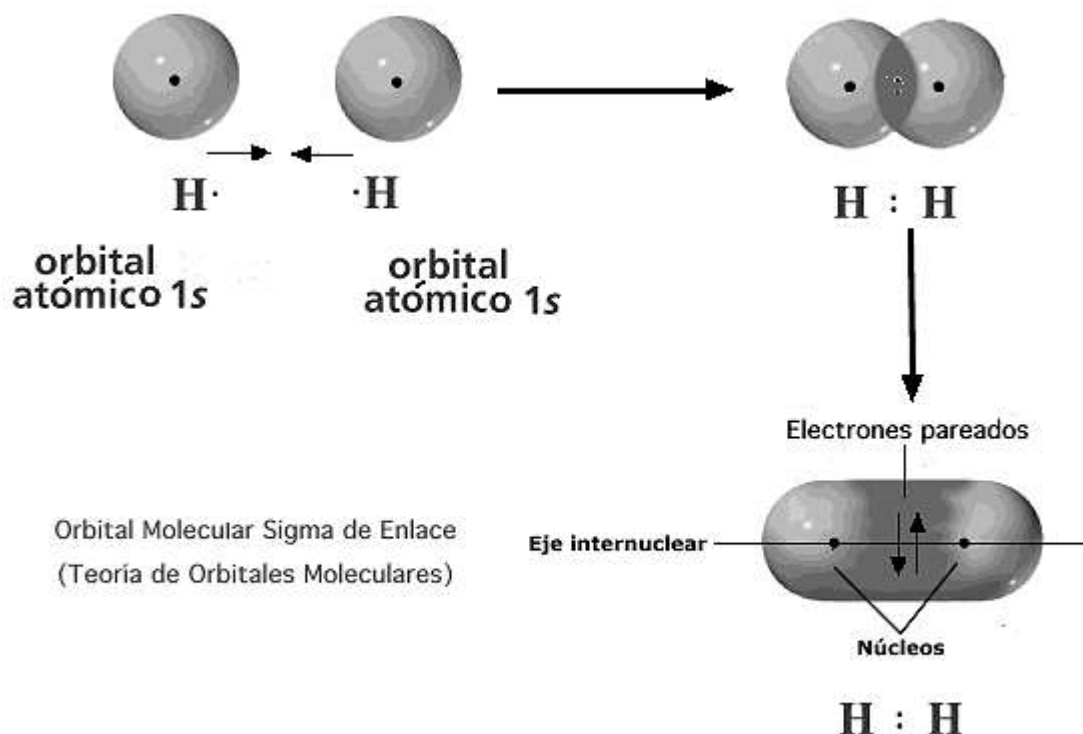


6.3.- El enlace covalente según la Teoría de Orbitales Moleculares.

En el caso de los orbitales moleculares, el enlace covalente se visualiza como uno entre átomos enlazados a una distancia de equilibrio, con los electrones colocados uno a uno en orbitales que abarcan toda la molécula. Se producen tantos orbitales moleculares como el número de orbitales atómicos combinados. La combinación de cualesquiera dos orbitales atómicos genera siempre dos orbitales moleculares: uno de enlace y otro de anti-enlace.

6.4.- Los enlaces sencillos, dobles y triples según la Teoría de los Orbitales Moleculares.

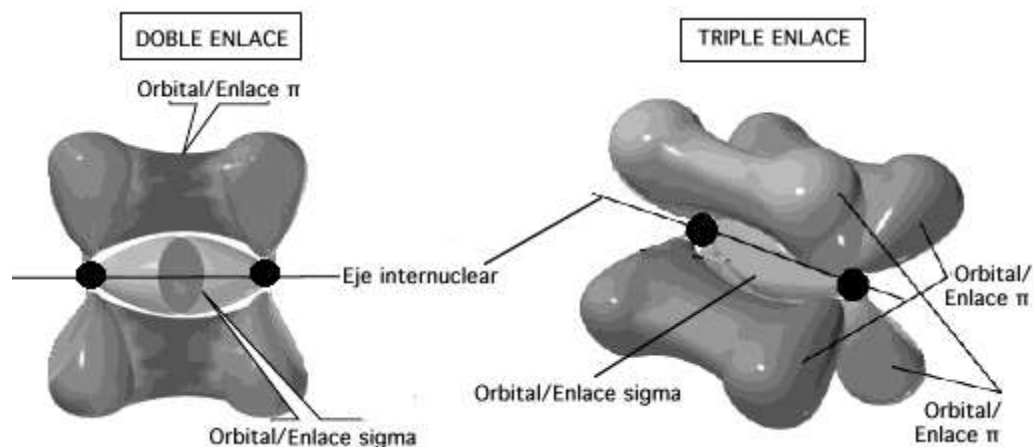
Según la teoría de orbitales moleculares se entiende que el solapamiento de los orbitales a lo largo del eje inter nuclear genera un orbital de enlace llamado sigma, (σ). Por lo tanto, todo enlace sigma implica un enlace sencillo y viceversa. En cada enlace sigma hay dos electrones pareados. Su densidad electrónica es cilíndricamente simétrica alrededor del eje inter nuclear.



Para el caso de enlaces dobles o triples, la teoría de orbitales moleculares especifica la formación de un orbital sigma y un orbital "pi" para un doble enlace y de un orbital sigma y dos orbitales "pi" para el triple enlace.

Un orbital "pi" se genera por el solapamiento de los orbitales que interaccionan fuera del eje inter nuclear: por lo general, orbitales atómicos "p". Su densidad electrónica se ubica sobre y debajo de este

eje. Cada orbital posee un par de electrones apareados: en este caso se produce un enlace pi.



(Sólo se indican los orbitales de enlace; por conveniencia los orbitales de anti enlace no se ilustran. Los dos lóbulos que constituyen el orbital molecular pi de enlace forman un sólo enlace).

La teoría de orbitales moleculares es muy conveniente para explicar el fenómeno de la deslocalización de electrones: electrones que pueden enlazar más de dos átomos a la vez debido a que se encuentran en orbitales moleculares deslocalizados, es decir, solapados y abarcando varios átomos.

6.5.- Orbitales híbridos y el enlace covalente.

El concepto de orbital híbrido sirve para explicar la estructura geométrica de una molécula. El acercamiento de dos orbitales híbridos de diferentes átomos para producir un enlace covalente localizado puede describirse, también, con la teoría de enlace-valencia o de los orbitales moleculares.

6.6.- Orbitales híbridos

Cuando los orbitales de un mismo átomo interaccionan entre sí, producen lo que se conoce como Orbitales Atómicos Híbridos, que definen la estructura geométrica de un compuesto. Los orbitales híbridos son combinaciones matemáticas de orbitales atómicos que, por poseer las propiedades direccionales necesarias sirven para

explicar la estructura geométrica de una molécula poliatómica. La hibridación de orbitales atómicos es la mezcla teórica, en un mismo átomo, de dos o más orbitales atómicos de energía similar, para producir un mismo número de nuevos orbitales.

Cada orbital híbrido posee algo de las características de los orbitales de los cuales se originan. Los orbitales híbridos resultantes tienen carácter direccional, por lo que se espera un enlace más favorable con otros átomos.

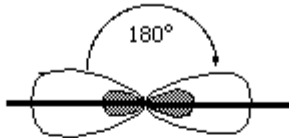
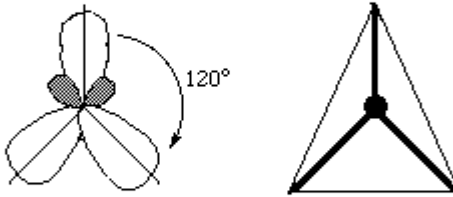
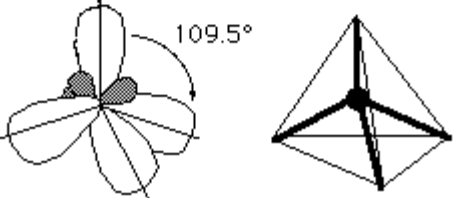
6.7.- Orbitales híbridos más comunes en los compuestos orgánicos.

Los orbitales más comunes en los compuestos orgánicos son: sp , sp^2 y sp^3 . Su origen y el total de orbitales que se generan por la combinación de los diferentes orbitales atómicos se reseñan a continuación:

Orbitales Atómicos	Orbitales Híbridos
1 orbital s + 1 orbital p	2 orbitales híbridos sp
1 orbital s + 2 orbitales p	3 orbitales híbridos sp^2
1 orbital s + 3 orbitales p	4 orbitales híbridos sp^3

6.8.- Geometría de Orbitales Moleculares

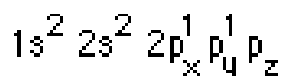
Los orbitales híbridos tienen carácter direccional por lo que cada uno describe una estructura geométrica definida una vez ocupados por electrones. Esta geometría es la siguiente:

Orbital	Geometría	Figura
sp	Lineal	
sp ²	Trigonal Planar	
sp ³	Tetrahedral	

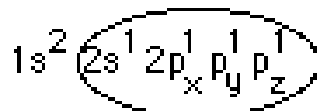
6.9.- Generación de orbitales híbridos.

El número atómico de Carbono es 6. Por lo tanto, contiene un total de 6 electrones, cuya configuración es la siguiente: $1s^2 2s^2 2p^2$

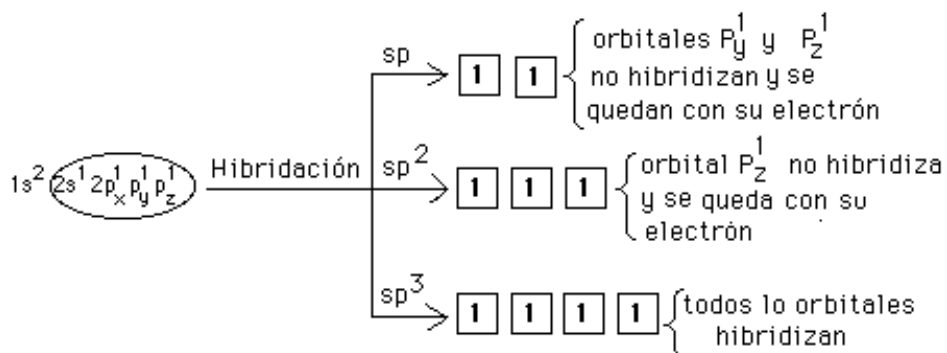
Aplicando la regla de Hund la distribución será:



Para el proceso de hibridación se requiere que el electrón del orbital 2s se desplace hacia al orbital vacante p de ese mismo nivel energético. Al culminar la excitación electrónica, todos los orbitales del nivel 2 poseen un electrón.



Esto permite la combinación lineal de los orbitales atómicos s y p del nivel 2, o sea, su hibridación.



Para predecir la hibridación de orbitales y los ángulos de enlace se utiliza el siguiente método:

- 1- Dibuje la estructura de Lewis.
- 2- Cuento los enlaces sigma alrededor de cada átomo central. El total de enlaces sigma será igual al número de orbitales híbridos en ese átomo. (Enlaces múltiples -dobles; triples- se consideran como sencillos.)
- 3- Determine la geometría, hibridación, ángulo de enlace usando la siguiente tabla.

Enlaces Sigma	Orbitales Híbridos	Hibridación	Ángulo
2	2	sp	180 °
3	3	sp ²	120 °
4	4	Sp ³	109,5 °

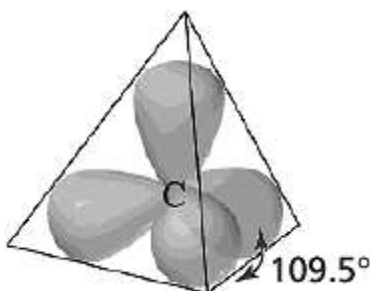
4- Si el átomo central tiene pares solitarios el total de orbitales híbridos será la suma de enlaces sigma + total de pares solitarios. La presencia de pares solitarios afecta la geometría y el ángulo de enlace:

Enlaces Sigma	Pares solitarios	Orbitales Híbridos	Hibridación	Geometría	Ángulo
3	1	4	sp ³	Trigonal piramidal	< 109,5 °
2	2	4	sp ³	Angular	< 109,5 °
2	1	3	sp ²	Angular	120 °

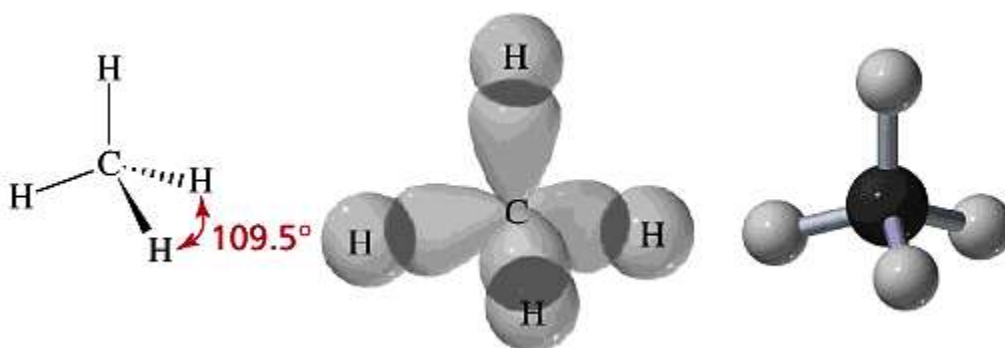
6.10.- Formación de enlaces covalentes en los compuestos orgánicos.

El átomo principal en los compuestos orgánicos es el Carbono. Los ángulos de enlace en estos compuestos están generalmente cercanos a 109.5° , 120° o 180° , que corresponden al ángulo formado por los orbitales híbridos sp^3 , sp^2 y sp , respectivamente.

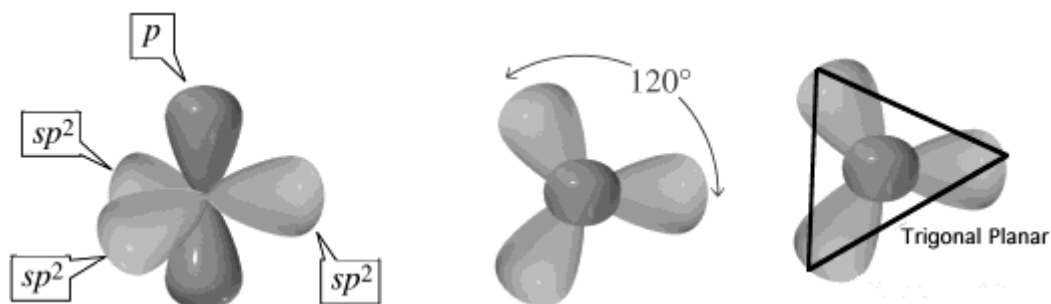
Cuando un átomo de carbono forma cuatro enlaces covalentes sencillos es que hibridiza produciendo cuatro orbitales híbridos sp^3 , orientados hacia los ápices (puntas) de un tetraedro regular, con ángulos cercanos a 109.5° .



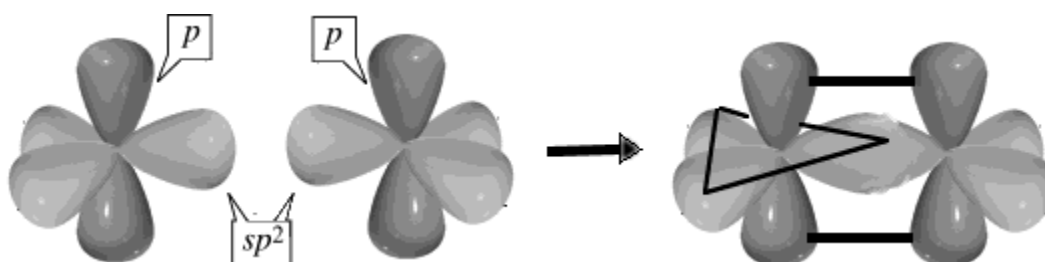
Los enlaces sencillos se producen por el solapamiento de cada orbital sp^3 con el orbital correspondiente del otro átomo. Por ejemplo, Metano, CH_4 :



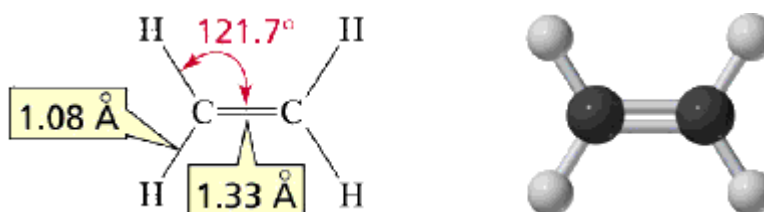
Si se produce un doble enlace, entonces el carbono hibridiza produciendo tres orbitales híbridos sp^2 (ángulos cercanos a los 120° , geometría trigonal plana) manteniendo sin hibridizar un orbital atómico "p" con un electrón.



El solapamiento de los orbitales sp y los orbitales "p" puros de los dos átomos a enlazarse, produce el doble enlace.

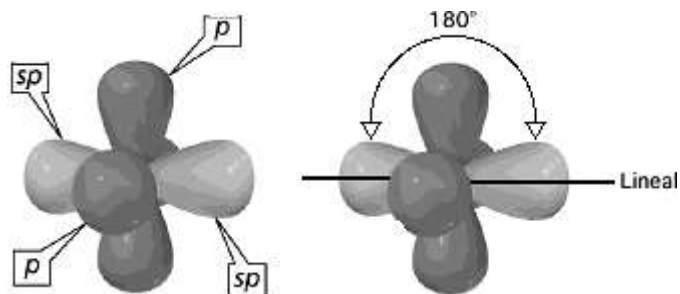


Para el compuesto Eteno, C_2H_4 , la estructura geométrica sería la siguiente:

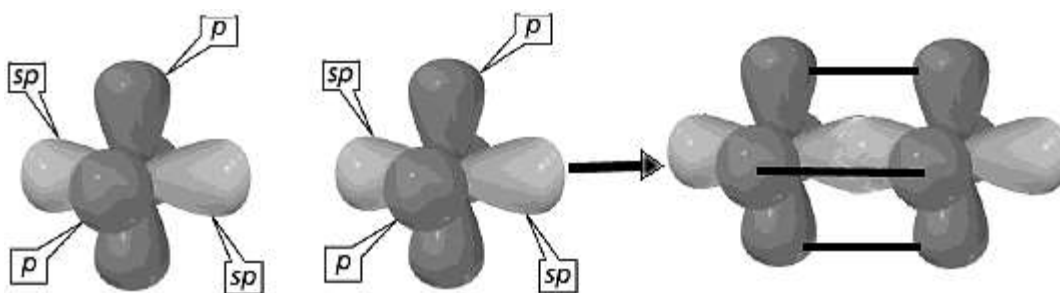


El enlace H-C-H es de aproximadamente 120° y describe un triángulo plano. El solapamiento de los orbitales sp^2 a lo largo del eje que une los dos carbonos genera un enlace sigma; el solapamiento de los orbitales "p" puros genera, a su vez, un enlace pi. Entre los dos se obtiene el doble enlace carbono-carbono. También se generan enlaces sigma entre los hidrógenos y el carbono.

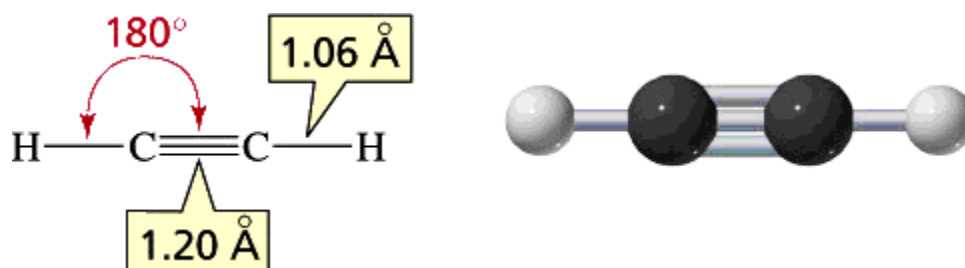
En el caso de un triple enlace, el carbono hibridiza generando dos orbitales sp , separados a 180° uno del otro, dejando en estado puro dos orbitales atómicos "p".



El solapamiento de los orbitales sp y los dos orbitales "p" puros de los dos átomos a enlazarse son los que producen el triple enlace:



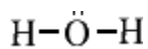
Este es el caso, por ejemplo, de Acetileno, C_2H_2 , que se ilustra en la siguiente figura:



El triple enlace consta, pues, de un enlace sigma y dos enlaces pi entre los carbonos. El ángulo de enlace H-C-H es de 180° y la molécula posee una geometría lineal. El enlace C-H es sigma.

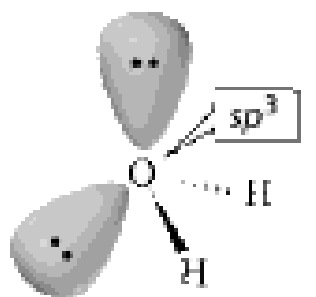
Ejemplo:

Agua - H_2O - Estructura de Lewis:



Dos enlaces Sigma y dos pares solitarios = 4 orbitales híbridos sp^3 en el oxígeno. La geometría es angular; cada enlace OH es un enlace sigma y los dos pares solitarios están, cada uno, en orbitales sp^3 . No hay enlaces pi. El ángulo de enlace es menor a 109.5°

-Estructura geométrica:



Ejercicios

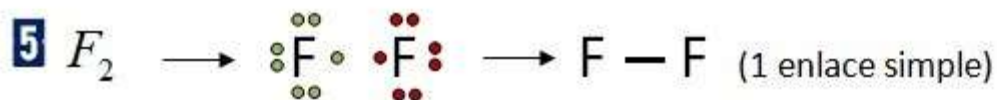
1.- Dado los siguientes compuestos, agrupar de acuerdo a si tienen enlace covalentes simples, dobles o triples.

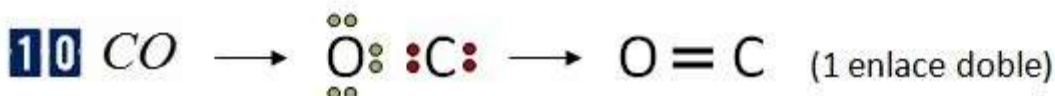
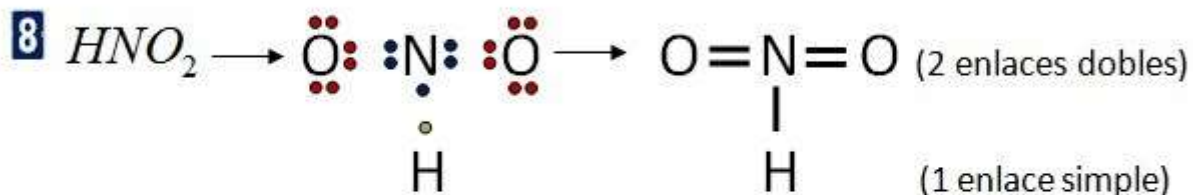
1. H_2	2. Cl_2	3. O_2	4. N_2	5. F_2
6. CO_2	7. H_2O	8. HNO_2	9. HCl	10. CO

Solución:

Vamos a ayudarnos haciendo la estructura de Lewis:

GRUPO	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Valencia	1	2	3	4	5	6	7
Electrones en la capa de valencia	1	2	3	4	5	6	7
Estructura de Lewis	$\cdot Li$	$\cdot Mg \cdot$	$\cdot Al \cdot$	$\cdot C \cdot$	$\cdot P \cdot$	$\cdot O \cdot$	$\cdot Br \cdot$





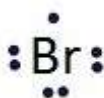
2. ¿Cuál es la estructura de Lewis del bromo?

Solución:

El bromo pertenece al grupo A (VIIA), para el grupo A hay una regla práctica.

GRUPO	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
Valencia	1	2	3	4	5	6	7
Electrones en la capa de valencia	1	2	3	4	5	6	7
Estructura de Lewis	$\cdot Li$	$\cdot Mg \cdot$	$\cdot Al \cdot$	$\cdot C \cdot$	$\cdot P \cdot$	$\cdot S \cdot$	$\cdot Br \cdot$

Entonces la estructura de Lewis del bromo es:



3. ¿Cuál es la estructura de Lewis del Mg?

El magnesio pertenece al grupo IIA, entonces:



4. ¿Cuál es la estructura de Lewis del P?

Solución:

El fósforo pertenece al grupo VA, entonces:



5. ¿Cuál es la estructura de Lewis del S?

Solución:

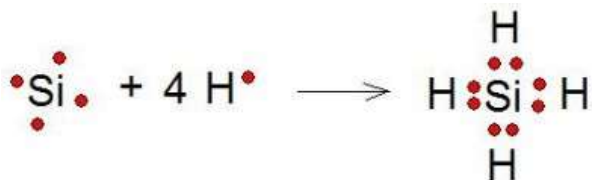
El azufre pertenece al grupo _____, entonces:

6. ¿Cuál es la estructura de Lewis del Si?

Solución:

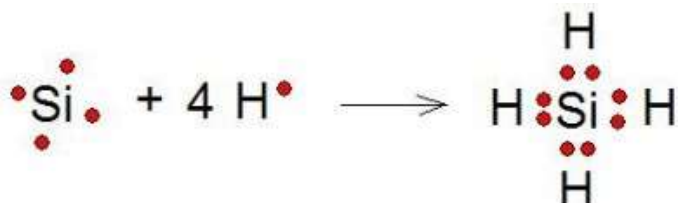
El silicio pertenece al grupo _____, entonces:

7. ¿Cómo se forma el SiH₄ a partir de sus átomos utilizando las estructuras de Lewis? Elija la alternativa correcta:



Solución:

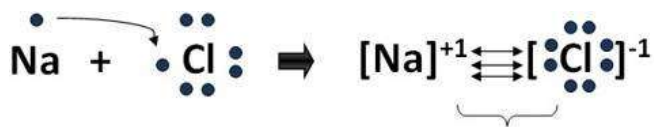
Ya que es la unión de un no metal y un no metal es un enlace covalente, es decir que existe la compartición de electrones. Además, la diferencia de electronegatividades, $\Delta EN = 2,1 - 1,8 = 1,3 < 1,7$ confirma que el enlace es covalente.



8. ¿Cómo se representa el NaCl utilizando la estructura de Lewis?

Solución:

Ya que es la unión de un metal y un no metal es un enlace iónico, es decir que existe la transferencia de electrones. ($\Delta EN = 3 - 0,9 = 2,1 > 1,7$; por tanto el enlace es iónico).



Enlace Iónico (Fuerza Electroestática)

9. ¿Cómo se representa el SCl₂ utilizando la estructura de Lewis?

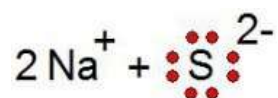
Solución:

Ya que es la unión de un no metal y un no metal es un enlace covalente, es decir que existe la compartición de electrones.

($\Delta EN = 3,0 - 2,5 = 0,5 < 1,7$; E. Covalente)



10. ¿Cómo se representa el Na₂S utilizando la estructura de Lewis?

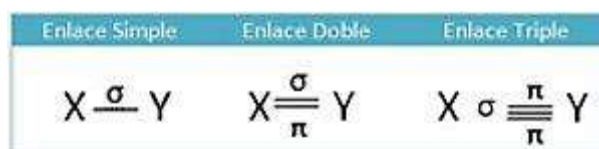


Cálculo de enlaces sigma (σ) y pi (π)

Del ejercicio anterior, calcular el número de enlaces sigma (σ) y enlaces pi (π).

Solución:

Para calcular los enlaces sigma y pi, usamos esta regla práctica



11. H₂ → 1 enlace sigma
12. Cl₂ → 1 enlace sigma
13. O₂ → 1 enlace sigma y 1 enlace pi
14. N₂ → 1 enlace sigma y 2 enlace pi
15. F₂ → 1 enlace sigma
16. CO₂ → 2 enlace sigma y 2 enlace pi
17. H₂O → 2 enlace sigma
18. HNO₂ → 3 enlace sigma y 2 enlace pi
19. HCl → 1 enlace sigma
20. CO → 1 enlace sigma y 1 enlace pi

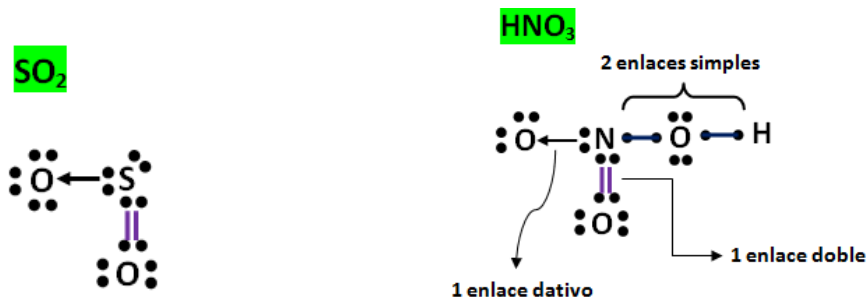
Ejercicios sobre enlaces dativos

En lugar de aportar un electrón cada átomo del enlace, los dos electrones son aportados por el mismo átomo. Este tipo de enlace recibe el nombre de enlace covalente coordinado o enlace covalente dativo.

Realizar el esquema para los siguientes compuestos, e indicar el número de enlaces simples, dobles, dativos.

21. SO_2 22. NH_3

Solución:



Enlace covalente Polar y Apolar

Regla practica:

- Apolar: **Se cumple que la diferencia de electronegatividades es cero: $\Delta\text{EN} = 0$** , se da entre elementos iguales o aquellos que presenten geometría lineal y simétrica. **Ejemplo: F_2 , Cl_2 , Br_2**
- Polar: **Se cumple que la diferencia de electronegatividades es diferente de cero: $\Delta\text{EN} \neq 0$** , se da entre elementos diferentes. **Ejemplo: CO , SO_2**

Indicar si los siguientes enlaces son molecular polar o apolar:

23. H_2 → molécula apolar

24. Cl_2 → molécula apolar

25. O_2 → molécula apolar

26. N_2 → molécula apolar

27. F_2 → molécula apolar

28. CO_2 → molécula apolar (geometría lineal y simétrica)

29. H_2O → molécula polar (presenta ángulo de enlace)

30. HNO_2 → molécula polar

31. HCl → molécula polar

32. CO → molécula polar

33. Lea el siguiente enunciado e indique el tipo de enlace que se forma (justifique su respuesta):

Un compuesto R se formó cuando un elemento con gran radio se unió con un elemento poco denso, pero muy electro-afino.

R: Se produce un Enlace Iónico, debido a que un elemento con gran radio (ya sea iónico o atómico) debiese ubicarse al costado izquierdo de la tabla periódica (por eso mismo posee una baja electronegatividad), mientras que si un elemento es electro afino, también es electronegativo (ambas propiedades crecen hacia el mismo sentido). La unión de un elemento electronegativo, con uno con baja electronegatividad generará muy posiblemente un enlace iónico.

34. Indique cuál de las siguientes afirmaciones es verdadera o falsa. Justifique **todas** sus respuestas:

- a) Un enlace Covalente Polar se da entre elementos con una gran diferencia de electronegatividad.
- b) En un enlace Iónico ocurre una transferencia de electrones de un elemento a otro.
- c) Para que un enlace Covalente Dativo se produzca, es necesario la presencia de dos iones de distinto signo.

R: a) Falso: Porque un enlace covalente polar se da cuando dos elementos con electronegatividades similares se unen entre sí.
b) Verdadero: Un enlace iónico se da cuando un elemento poco electronegativo cede uno o más electrones a un elemento que lo es más.
c) Falso: Para que se produzca un enlace Dativo, es necesario un

elemento con un par electrónico libre y otro que sea deficiente en electrones, también es necesario que el que tiene el par electrónico sea lo suficientemente electronegativo como para no perder los electrones a compartir.

35. Si un elemento del grupo I-A se une con un elemento del grupo VI-A, ¿qué tipo de enlace se forma? ¿Por qué?

R: Un enlace iónico, mayormente, porque las diferencias de electronegatividad entre ambos grupos es lo suficientemente alta como para que se produzca este tipo de enlace.

36. Indique las características que deben poseer dos átomos para formar un enlace Covalente Apolar.

R: Para que se produzca un enlace Covalente Apolar, es necesario que los elementos que se enlazan tengan la misma electronegatividad (por ende, deben ser iguales).

37. Indique el tipo de enlace formado en las siguientes moléculas:

- a) KBr
- b) CO
- c) Ión Amonio
- d) O₂

**R: a) Iónico
b) Covalente Polar
c) Covalente Polar y Covalente Coordinado (o Dativo)
d) Covalente Apolar**

38. Indique dos características de las moléculas que presenten enlaces Covalente Polares.

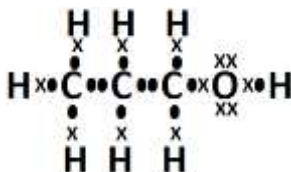
R: Las moléculas con enlaces Covalentes Polares por lo general son asimétricas, tienen momento dipolar distinto de 0, son solubles en solventes polares (como agua o alcohol), entre otras características.

39. Dibuje la Estructura de Lewis del óxido de di-cloro. (Cl_2O).

R:



40. Dibuje la Estructura de Lewis del n-Propanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$)



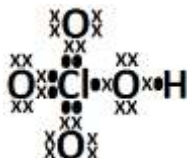
41. Dibuje la Estructura de Lewis del Di-nitrógeno (N_2).

R:



42. Dibuje la estructura de Lewis del Ácido perclórico (HClO_4)

R:

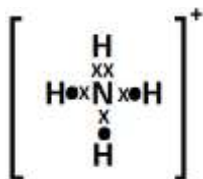


43. Dibuje la Estructura de Lewis del Ácido Cianhídrico (HCN).
R:



44. Dibuje la Estructura de Lewis del Ión Amonio.

R:



Excepciones a la regla del octeto

Algunos de los compuestos que no cumplen la regla del octeto son los siguientes:

- H_2
- BeH_2
- BH_3
- BF_3
- PCl_5
- SF_6
- AlCl_3

45.- Indicar Verdadero (V) o Falso (F)

1. La regla del octeto se cumple en los tres tipos de enlace (iónico, covalente, metálico), indefectiblemente
2. Todos los elementos químicos cumplen la regla del octeto.
3. Un buen número de compuestos no cumplen la regla del octeto.
4. Los elementos que cumplen la regla del octeto, adoptan una configuración electrónica tipo “gas noble”

Solución:

1. (F) La regla del octeto solo se puede aplicar a los elementos representativos (grupo A), pero aún en ellos hay excepciones.

2. (F) Existen elementos que en sus compuestos no cumplen la regla del octeto.

Ejemplo: BeH_2 , BH_3

3. (F) Solo algunos compuestos no cumplen la regla del octeto

4. (V) Cuando un elemento al enlazarse adquiere su octeto electrónico, entonces ha adoptado la configuración electrónica de un gas noble (grupo 8A, 8 electrones de valencia en su última capa)

46. Dado los siguientes elementos

a) AlCl_3

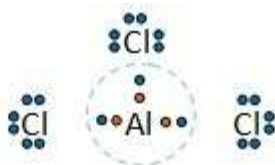
b) BF_3

c) N_2O_4

¿Cuáles cumplen la regla del octeto como elemento representativo y elemento central?

Solución:

a) AlCl_3



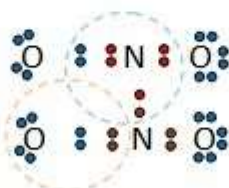
El aluminio al enlazar, solo tiene $6e^-$,
no cumple la regla del octeto

b) BF_3



El boro al enlazar solo tiene $6e^-$,
no cumple la regla del octeto

c) N_2O_4



Los Nitrógeno al enlazar tienen $8e^-$,
cumple la regla del octeto

Los oxígenos al enlazar tienen $8e^-$,
cumple la regla del octeto

47.- Indicar Verdadero (V) o Falso (F)

1. Cuando 2 átomos de elementos representativos se enlazan, generalmente completa 8 electrones en su nivel de valencia.
2. Todos los elementos representativos, al formar compuestos, cumplen con la regla del octeto.

3. Los elementos representativos que cumple la regla del octeto, adquieren una distribución electrónica de gas noble, con excepción del helio.

Solución:

1. (V) Generalmente un enlace entre dos elementos representativos (grupo A) completa sus 8 e⁻ en su capa de valencia (regla del octeto)

2. (F) No todos los elementos representativos al enlazarse cumplen la regla del octeto.

3. (V) El octeto se verifica al adquirir la configuración electrónica de un gas noble (excepto el helio que solo tiene dos electrones en su última capa)

7.- Geometría molecular: hibridación, TEV, TRPEV

7.1.- Teoría del enlace de valencia. Orbitales híbridos sp, sp² y sp³.

Entre los años 1927 a 1931, los científicos Heitler, London, Pauling y Slater señalaron que: “cuando dos átomos se aproximan, sus orbitales atómicos se solapan (“superponen”) entre sí, produciéndose un enlace, siempre que los electrones de cada orbital tengan espines opuestos.

Esta teoría permite comprender y explicar la existencia del enlace covalente, que significa “apareamiento de electrones de espines opuestos”, a partir de los orbitales híbridos, que son una mezcla de orbitales atómicos, producida por el acercamiento de átomos para formar enlaces, cuando la diferencia de electronegatividad es insuficiente para producir intercambio de electrones. Luego, mientras mayor sea el grado de solapamiento que exista, mayor fuerza tendrá el enlace.

La aplicación de esta teoría de enlace a moléculas poli-atómicas, permite explicar la formación de enlaces de pares de valencia, así como también las geometrías moleculares.

7.1.1.- Orbitales híbridos sp

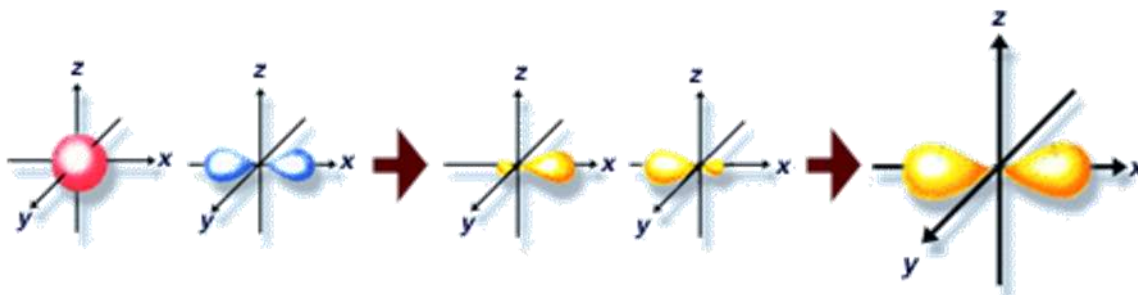
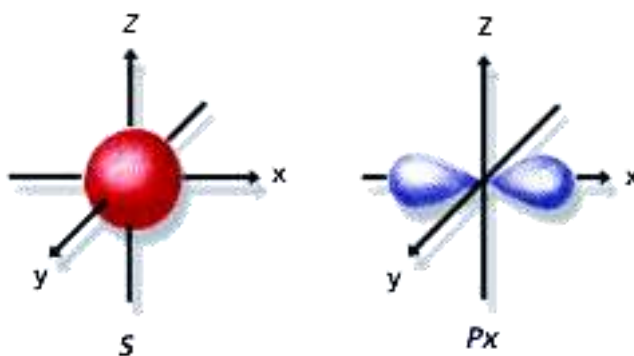


Figura. Orbital s y orbital p hibridan, formando 2 orbitales híbridos sp equivalentes.

Observe que los lóbulos grandes apuntan en direcciones opuestas, obteniéndose una separación de 180° . Ejemplo: BeF_2 .

7.1.2.- Orbitales híbridos sp^2 y sp^3

La combinación de un número dado de orbitales atómicos generará el mismo número de orbitales híbridos. Así, la combinación de un orbital “ s ” con dos orbitales “ p ”, generará 3 orbitales híbridos sp^2 .



Se ve que se generan tres orbitales híbridos en el plano xy , dirigidos a 120° entre sí como se muestra a continuación.

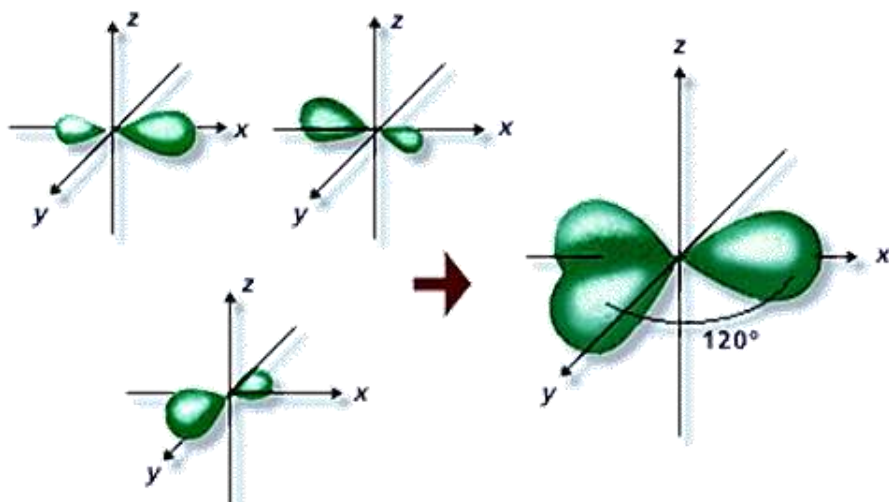
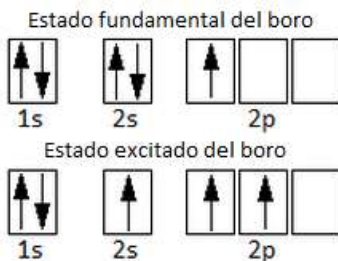
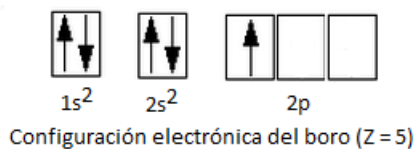
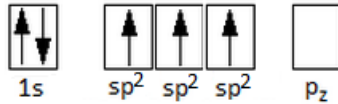


Figura: 1 orbital s y 2 orbitales p hibridan para formar 3 orbitales sp equivalentes.

En este caso, los 3 orbitales están en el mismo plano, generando un triángulo equilátero, con ángulos de separación de 120° . Ejemplo: BF_3 .

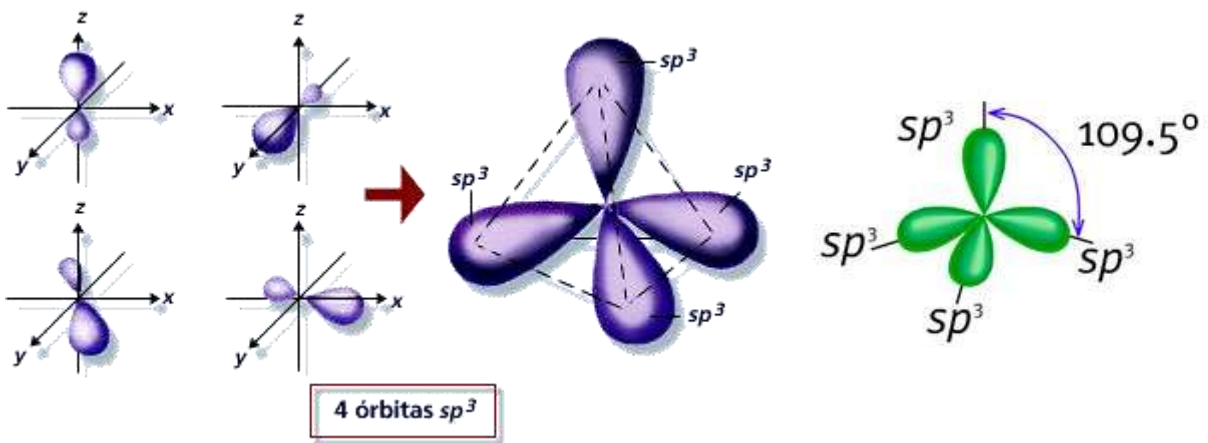
Otra forma de comprender los orbitales moleculares, puede ser a través de la “promoción de electrones”. Por ejemplo, en el caso de BF_3 , hibridan los orbitales de B ($Z=5$) de la forma que se representa en la figura





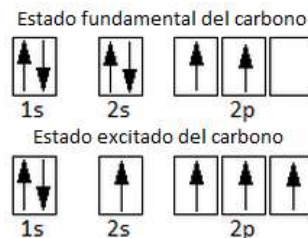
Estado excitado del boro con los orbitales 2s y los 2 orbitales p_x y p_z hibridados para dar 3 híbridos sp^2

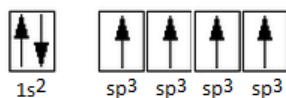
La formación de orbitales híbridos del tipo sp^3 se explica mediante el esquema de la figura.



Los orbitales híbridos, además de permitir la formación de enlaces covalentes, pueden alojar pares electrónicos no compartidos (pares de electrones solitarios), que no forman enlaces. Estos últimos también son conocidos como “electrones no apareados”.

En este caso, como un ejemplo para comprender los orbitales híbridos a través de la promoción de sus electrones, se tiene el caso de CCl_4 , donde hibridan los orbitales de C ($Z=6$), de la forma que se representa en la figura.



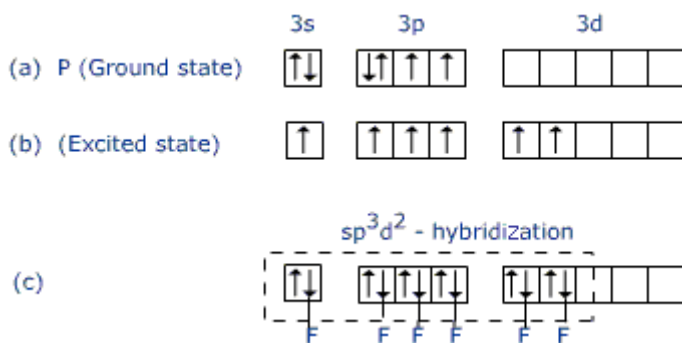
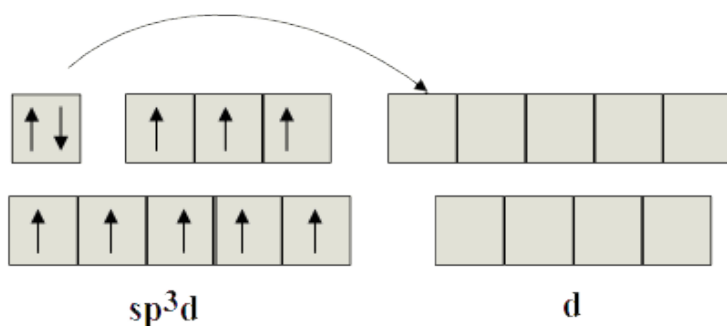


Estado excitado del átomo de carbono con el orbital 2s y los 3 orbitales 2p hibridados para dar 4 orbitales híbridos sp³

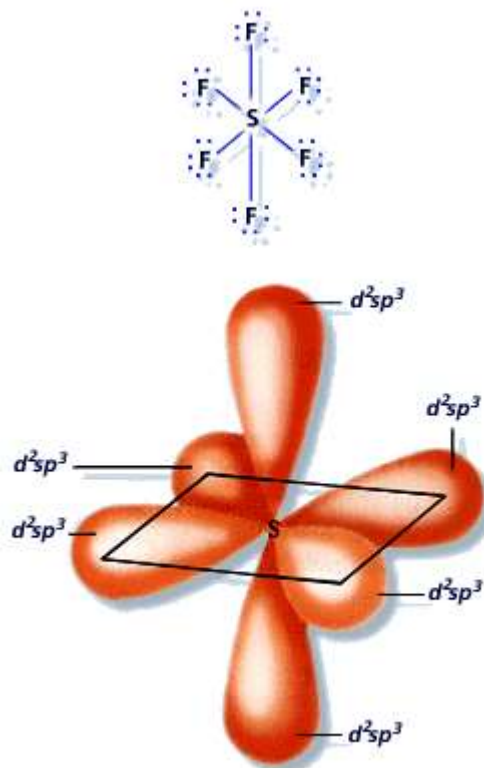
7.1.3.- Orbitales híbridos sp³d y sp³d²

A partir del tercer Período de la Tabla Periódica, los átomos presentan orbitales “d” lo que permite su hibridación con orbitales s y p para producir orbitales “sp³d” y “sp³d²”.

Algunos ejemplos clásicos de moléculas que presentan estos tipos de hibridación son PF₅ y SF₆, como se muestra en las figuras siguientes:



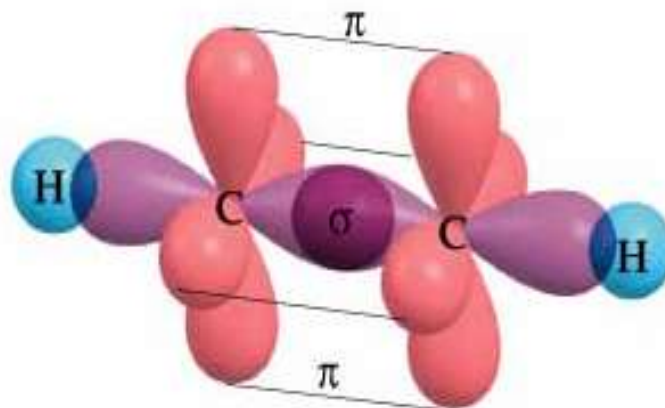
La molécula del hexa-fluoruro de azufre SF₆, cuya estructura de octetos señala que hay seis pares de electrones alrededor del azufre (S), lo cual exige que se agrupen octaédricamente requiriendo para ello orbitales atómicos que los alojen apuntando a los vértices de un octaedro, lo cual se logra con una hibridación sp^3d^2 en el átomo central (S) formándose los seis orbitales híbridos, cada uno unido a un átomo de flúor. Además, cada flúor posee cuatro pares de electrones a su alrededor, por lo que este átomo existe en la forma sp^3 . En general, cualquier molécula que contenga un átomo central rodeado de seis pares de electrones debe agrupar octaédricamente a los átomos a su alrededor, lo cual requiere de una hibridación sp^3d^2 :



7.2.- Enlaces pi (π) o sigma (σ)

Se habla de enlace covalente sigma, σ , cuando el par de electrones compartido se encuentra en el espacio generado por el “solapamiento” de dos orbitales en un mismo eje cartesiano (enfrentamiento frontal de orbitales a lo largo del mismo eje), tal como se observa con los orbitales sp^2 en la molécula de etileno, C₂H₄

En cambio, se habla de enlace covalente “pi”, π , cuando el solapamiento se produce entre orbitales de



ejes paralelos como también se observa en la molécula de etileno con los orbitales p, sin hibridar, C₂H₄.

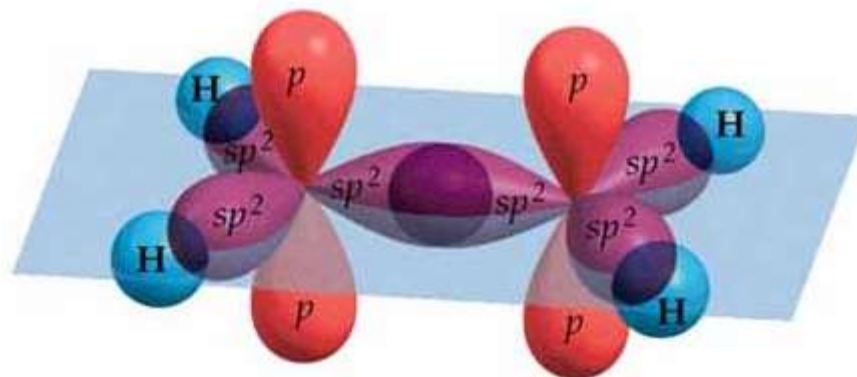
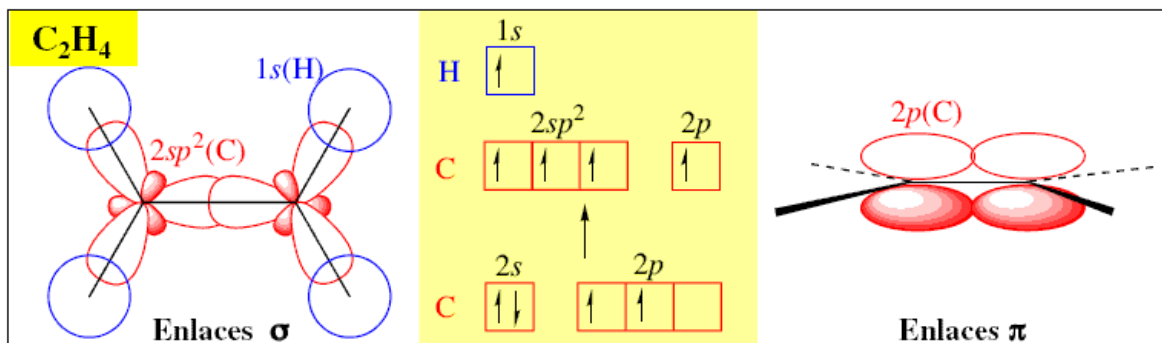


Figura: Molécula del eteno o acetileno. Imagen procedente de <http://wps.prenhall.com>



En las especies o compuestos químicos, la existencia de electrones enlazantes y solitarios o no apareados, en los orbitales de valencia de cada átomo central, son los que determinan la hibridación y, con ello, la geometría de la molécula respectiva. Así:

- 2 pares de electrones: lineal.
- 3 pares de electrones: trigonal.
- 4 pares de electrones: tetraédrica.
- 5 pares de electrones: bi-piramidal trigonal.
- 6 pares de electrones: octaédrica.

Los tipos de orbitales híbridos se presentan en la tabla siguiente (nótese la respectiva geometría y ángulos de separación entre las zonas del espacio que los constituyen).

Ejemplos de moléculas cuyo átomo central presenta hibridación de cada uno de estos tipos:

- Orbitales híbridos sp : BeF_2 .
- Orbitales híbridos sp^2 : BF_3 .
- Orbitales híbridos sp^3 : CH_4 .
- Orbitales híbridos sp^3d : PF_5 .
- Orbitales híbridos sp^3d^2 : SF_6 .

La geometría molecular se refiere a la disposición tridimensional de los átomos de una molécula. La geometría de una molécula afecta a sus propiedades físicas y químicas como, por ejemplo, el punto de fusión, el punto de ebullición, la densidad, el tipo de reacciones y el ángulo de los enlaces se deben determinar en forma experimental. Sin embargo existe un procedimiento sencillo que permite predecir la geometría de las moléculas o iones con bastante éxito, si se conoce el número de electrones que rodean al átomo central, según su estructura de Lewis.


La capa de valencia es la capa externa ocupada por electrones en un átomo; contiene los electrones que generalmente están involucrados en el enlace. La geometría que finalmente adopta la molécula (definida por la posición de todos los átomos) es aquella en la que la repulsión es mínima. Este enfoque para estudiar la geometría molecular se llama Modelo de La Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (RPECV), ya que explica la distribución geométrica de los pares electrónicos que rodean al átomo central en términos de la repulsión electrostática entre dichos pares.

Dos reglas generales para la aplicación del modelo RPECV son:

1. Al considerar la repulsión de los pares electrónicos, los dobles y los triples enlaces se pueden tratar como si fueran enlaces sencillos. Se debe observar que, en realidad, los enlaces múltiples son "mayores" (dimensionalmente hablando) que los

enlaces sencillos; es decir, como hay dos o tres enlaces entre dos átomos, la densidad electrónica ocupa mayor espacio.

- Si la molécula tiene dos o más estructuras resonantes, es posible aplicar el modelo RPEVC a cualquiera de ellas. Por lo general las cargas formales no se muestran.

Nº de pares de e-	Geometría	Angulo de enlace	
2 (AX ₂)	Lineal	180°	
3 (AX ₃)	Trigonal Plana	120°	
4 (AX ₄)	Tetraédrica	109.5°	
5 (AX ₅)	Trigonal Bipiramidal	90° / 120°	
6 (AX ₆)	Octaédrica	90°	

La estructura del Lewis del cloruro de Berilio en estado gaseoso es:



Debido a que los pares enlazantes se repelen entre sí, deben estar en los extremos opuestos de una línea recta para estar tan alejados como sea posible. Así, es posible predecir que el ángulo Cl-Be-Cl es de 180° y la molécula es lineal.

AB₃ - Trifluoruro de boro (BF₃)

AB₄ - Metano (CH₄)

AB₅ - Pentacloruro de fósforo (PCl₅)

AB₆ – Hexa-fluoruro de azufre (SF₆).

(http://rodas.us.es/file/dc3b91ee-0f7c-2f88-4176-5d95b43de30f/1/tema9_word_SCORM.zip/page_14.htm)

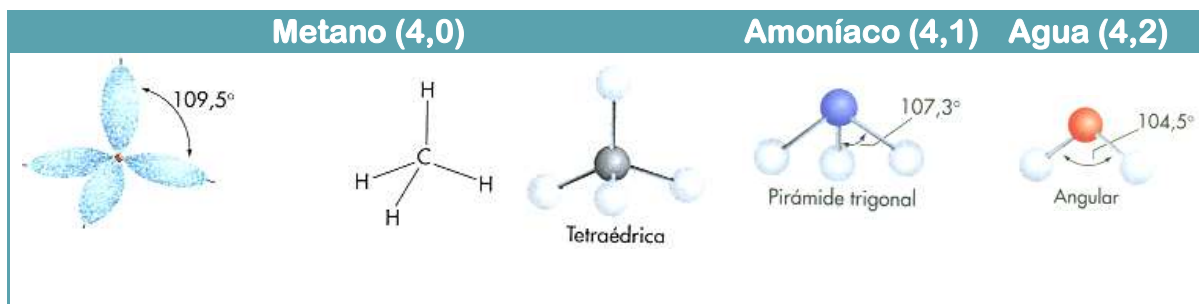
8.- La geometría molecular y el modelo de las repulsiones de pares electrónicos (RPECV)

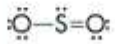


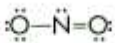
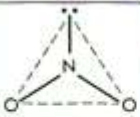

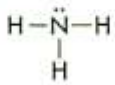
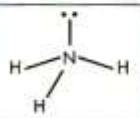

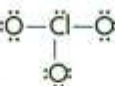
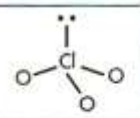


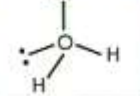

Las propiedades de las sustancias moleculares están determinadas no solo por los átomos que forman sus moléculas, sino también por la forma en que estos átomos se distribuyen en el espacio. El número de átomos que componen una molécula dada y su distribución espacial le otorgan a la misma una geometría molecular determinada.

Resulta posible predecir y explicar la forma geométrica de muchas moléculas simples mediante el modelo, ideado en 1940 por Sidwick y Powell, utilizando las parejas de electrones no enlazantes o solitarios. Este modelo fue mejorado sustancialmente a partir de 1957 por "**Ronald J Gillespie**", conocido como modelo de las repulsiones de los pares electrónicos de la capa de valencia (VSPR; Valence Shell Electronic Pair Repulsión, RPECV, en español). Se trata de un modelo puramente electroestático, que considera los electrones como si fueran cargas puntuales.

Según el modelo RPECV, los pares de electrones de enlace y solitarios se disponen alrededor del átomo central de forma que experimenten la mínima repulsión. Esta repulsión se minimiza por la adopción de un ordenamiento espacial que mantenga a las pares electrónicos tan alejados entre sí como sea posible. La geometría molecular viene determinada por los pares de electrones enlazantes y solitarios. El modelo de Gillespie también explica de forma sencilla las desviaciones del ángulo de enlace teórico de las geometrías básicas al establecer que la repulsión entre pares de electrones no es equivalente siendo superior la existente entre pares solitarios.

El modelo de Gillespie establece que la repulsión entre pares de electrones no es equivalente y señala la siguiente gradación entre las repulsiones entre pares solitarios (PS) y pares de enlace (PE):
PS-PS > PS-PE > PE-PE



Tipo de molécula	Ejemplo	Estructura de Lewis	Nubes enlazantes	Pares solidarios	N.º total de nubes	Orientación de las nubes electrónicas	Geometría de la molécula
AB ₂ E	SO ₂		2	1	3		
	NO ₂		2	1	3		
AB ₃ E	NH ₃		3	1	4		
	ClO ₃		3	1	4		
AB ₂ E ₂	H ₂ O		2	2	4		

Este modelo explica cómo pueden distribuirse en el espacio los distintos átomos alrededor del átomo central de la molécula, obteniéndose su configuración espacial y geometría a partir de una serie de reglas. Básicamente se consideran todos los electrones en torno al átomo central y se clasifican en electrones compartidos (enlazantes) y no compartidos (no enlazantes). El número de pares de cada clase indica la distribución espacial de los átomos, teniendo en cuenta además, las repulsiones que se establecen entre los distintos pares según una secuencia de intensidades de repulsión.

Nº total de pares de electrones	Fórmula	Tipo de molécula	Nº de pares solitarios	Geometría o Forma de la molécula	Ejemplos
2	AB₂	AB₂	0	Lineal (180°)	BeCl ₂ ; HgCl ₂ ;
3	AB₃	AB₃	0	Triangular plana (120°)	BCl ₃ ; BF ₃ ;
3	AB₂	AB₂E	1	Angular (Forma de V)	SnCl ₂ ; PbI ₂ ; PbCl ₂
4	AB₄	AB₄	0	Tetraédrica (109, 5°)	CCl ₄ ; CH ₄ ; SiCl ₄ ; TiCl ₄
4	AB₃	AB₃E	1	Piramidal triangular	NH ₃ ; PCl ₃ ; AsCl ₃ ; NF ₃
4	AB₂	AB₂E₂	2	Angular (Forma de V)	H ₂ O; OF ₂ ; SCl ₂ ; OCl ₂
5	AB₅	AB₅	0	Bipirámide Triangular	PF ₅ ; PCl ₅
5	AB₄	AB₄E	1	Tetraedro irregular	SF ₄ ; SeCl ₄ ; TeCl ₄
5	AB₃	AB₃E₂	2	Forma de T	ClF ₃ ; BrF ₃ ;
5	AB₂	AB₂E₃	3	Lineal	XeF ₂ ; ICl ₂ ⁻
6	AB₆	AB₆	0	Octaédrica (90°)	SF ₆ ; SeF ₆ ; PCl ₆ ⁻
6	AB₅	AB₅E	1	Piramidal Cuadrada	ClF ₅ ; BrF ₅ ; IF ₅
6	AB₄	AB₄E₂	2	Cuadrada Plana	XeF ₄ ; ICl ₄ ⁻
7	AB₇	AB₇	0	Bipirámide pentagonal	IF ₇
7	AB₆	AB₆E	1	Octaedro distorsionado	XeF ₆

Nota: E= Nº de pares de electrones solitarios

La geometría de las moléculas viene determinada por una pareja de números: el número total de los pares de electrones y el número de parejas de electrones solitarios.

El número total de pares de electrones se obtiene sumando el número de electrones del átomo central y un electrón por cada uno de los átomos ligados al átomo central y dividiendo por dos. El número de pares solitarios se obtiene restando al número total de pares de

electrones los pares de electrones enlazantes, una pareja por cada átomo enlazado ligando.

Polaridad de un enlace. Cuando la electronegatividad de los átomos que se enlazan es distinta, el enlace es polar, aparece una distribución desigual del par de electrones compartido, que se encuentra más próximo al átomo más electronegativo.

La magnitud que mide la polaridad se denomina el momento dipolar (m), es igual al producto de la carga de uno de los polos (q) por la distancia que hay entre los núcleos que se unen (d):

$$m = q \cdot d$$

Es una magnitud vectorial, orientada del polo positivo al negativo del enlace. Se puede determinar la polaridad de una molécula al estudiar su comportamiento en un campo eléctrico (entre las placas de un condensador).

Un enlace puede ser polar y, sin embargo, la molécula que lo contiene ser apolar, ya que el momento dipolar de una molécula es la suma vectorial de los momentos dipolares de los enlaces presentes. Esta suma vectorial necesariamente debe tener en cuenta la geometría de la molécula. Por tanto, el momento dipolar total de una molécula es un indicador de su geometría. Así el momento dipolar del CO_2 es cero siendo sus enlaces polares, aunque la molécula es lineal, totalmente simétrica y, en consecuencia, apolar. El momento dipolar del SO_2 o del agua son distintos de cero, ya que las moléculas son polares porque su geometría es angular.






El trifluoruro de boro BF_3 es una molécula apolar, con momento dipolar cero. Los enlaces B-F son polares, pero se anulan al ser sumados vectorialmente entre sí, dando un momento dipolar total nulo, lo que indica una geometría triangular plana.

El metano CH_4 o el CF_4 son moléculas apolares, aunque sus enlaces C-H o C-F son polares, pero se anulan entre sí al ser la geometría tetraédrica.

Todas las moléculas sin pares de electrones solitarios o anti-enlazantes [(2,0) lineales; (3,0) triangulares planas; (4,0) tetraédricas; (5,0) bipirámide triangular; (6,0) octaédrica] son apolares por simetría de sus moléculas siempre que el átomo central este unido a átomos iguales (moléculas con simetría total).

Enlaces polares	Angulo	Geometría	Polaridad molecular	Molécula
2	180	Lineal	Apolar	CO ₂
2	<180	Angular	Polar	H ₂ O
3	120	Triangular	Apolar	BF ₃
3	<120	Pirámide trigonal	Polar	NH ₃
4	109,5	Tetraédrica	Apolar	CCl ₄

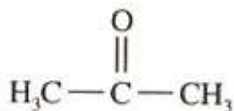
Geometría molecular a partir de la TRPEV.

Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Estructura	Geometría	Modelo molecular
BeCl ₂	$\text{Cl} \text{---} \text{Be} \text{---} \text{Cl}$	2	0	$\text{Cl} \text{---} \text{Be} \text{---} \text{Cl}$	Lineal	
BF ₃	$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F} \text{---} \text{B} \text{---} \text{F} \end{array}$	3	0	$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F} \text{---} \text{B} \text{---} \text{F} \\ \angle 120^\circ \end{array}$	Triangular	
CH ₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	4	0	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} \text{---} \text{C} \text{---} \text{H} \\ \\ \text{H} \\ \angle 109,5^\circ \end{array}$	Tetraédrica	
NH ₃	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} \text{---} \text{N} \text{---} \text{H} \\ \\ \cdot\cdot \end{array}$	3	1	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \\ \text{H} \text{---} \text{N} \text{---} \text{H} \\ \\ \text{H} \\ \angle < 109,5^\circ \end{array}$	Pirámide trigonal	
H ₂ O	$\text{H} \text{---} \ddot{\text{O}} \text{---} \text{H}$	2	2	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \\ \text{H} \text{---} \text{O} \text{---} \text{H} \\ \\ \cdot\cdot \\ \angle < 109,5^\circ \end{array}$	Angular	

EJERCICIOS:

1. Para cada átomo central en cada uno de los siguientes compuestos, prediga la geometría de pares de electrones de los átomos, indicando los ángulos de enlace y los orbitales correspondientes a los enlaces interatómicos:

a.-



b.- CO_2

c.- CH_3NH_2

d.- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

R:

a) Trigonal plana, 120° , sp^2 .

b) Lineal, 180° , sp .

c) Tetraédrica, $109,5^\circ$, sp^3 (átomo central: carbono).

d) Tetraédrica, $109,5^\circ$, sp^3 (átomo central: carbono unido a oxígeno).

2. Indique cuáles son los orbitales atómicos que participan en los enlaces interatómicos de las siguientes moléculas y señale el orbital molecular de enlace: SnH_4 ; BCl_3 ; $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$; $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$; $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_3$.

R:

SnH_4 (Sn: sp^3 ; H: s); BCl_3 (B: sp^2); $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$ (N: sp^3 ; H: s); $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ (C: sp^2 ; O: sp^2 ; H: s); $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_3$ (N: sp^3 ; C: sp^3 ; H: s).

3. En los siguientes compuestos moleculares: BeBr_2 ; BF_3 ; SnI_4 ; TeF_4 ; PbCl_2 ; PCl_3 , identifique cuál de las especies forma los siguientes ángulos entre el átomo central y los no centrales:

90° ; 107° ; $109,5^\circ$; $< 120^\circ$; 180° .

R: BeBr_2 (180°); BF_3 (120°), SnI_4 ($109,5^\circ$); TeF_4 ($>109,5^\circ$); PbCl_2 ($>180^\circ$); PCl_3 ($>109,5^\circ$).

4. Considere las moléculas NH_3 ; BH_3 y CHCl_3 :

a) Para cada una de ellas, indique la hibridación del átomo central y los ángulos de enlace entre este y cada uno de los átomos a su alrededor.

b) Indique la geometría molecular de cada una de ellas.

R:

a) NH_3 : sp^3 ; $>109,5^\circ$.

BH_3 : sp^2 ; 120° .

CHCl_3 : sp^3 ; $109,5^\circ$.

b) NH_3 : pirámide de base triangular.

BH_3 : trigonal plana.

CHCl_3 : tetraédrica.

5. Considere las siguientes especies:

i. SCl_2 .

ii. ii) CH_3CHO ($\text{C}_{(1)}\text{H}_3\text{C}_{(2)}\text{HO}$).

iii. BaCl_2 .

iv. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$.

v. $[\text{ICl}_2]^-$

a) Para el compuesto molecular (ii), CH_3CHO :

a.1) escriba la estructura de Lewis.

a.2) Indique la hibridación de los átomos centrales $\text{C}_{(1)}$ y $\text{C}_{(2)}$

a.3) Indique la geometría molecular alrededor de cada átomo de carbono (átomos centrales), señalando los ángulos entre cada uno de ellos y los átomos que lo rodean.

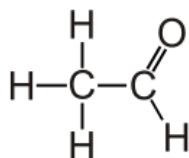
b) Indique los orbitales del átomo de S que participan en los enlaces del compuesto (i), SCl_2 .

c) Indique la geometría molecular de cada átomo central en las especies (iii) a (v), señalando los ángulos entre cada uno de ellos y los átomos que los rodean.

R:

a) Para el compuesto molecular (ii), CH₃CHO:

a.1)



a.2) C₍₁₎: sp³; C₍₂₎: sp².

a.3) C₍₁₎: tetraédrica, 109,5°; C₍₂₎: trigonal plana, 120°.

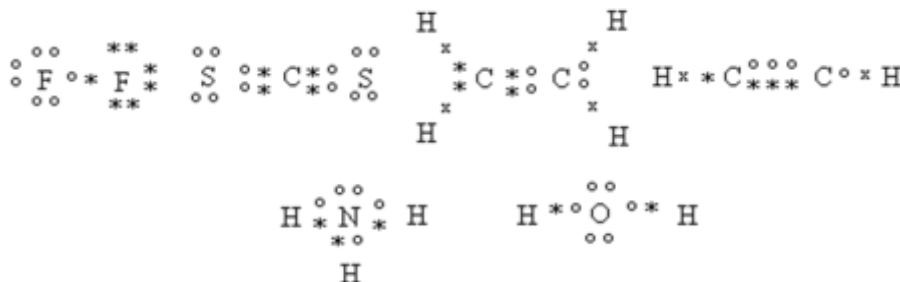
b) sp³.

c) (iii) lineal, 180°; (iv) todos son tetraédricos, 109,5°; (v) lineal, 180°.

6.- Represente las estructuras de Lewis indicando geometría molecular y momento dipolar de las siguientes moléculas: CO₂, H₂S y O₂.



7.- De las siguientes moléculas: F₂, CS₂, C₂H₄ (etileno), C₂H₂ (acetileno), H₂O, C₆H₆ (benceno), NH₃. A) ¿Cuáles tienen todos los enlaces sencillos o simples? B) ¿Dónde existe algún doble enlace? C) ¿Dónde existe algún triple enlace?



8.- Describa la estructura y enlace de las moléculas propuestas indicando la hibridación correspondiente al átomo central: (a) CCl₄; (b) BCl₃; (c) SCl₂; (d) BeH₂.

R:

- a. El C tiene sp^3 y la molécula es tetraédrica.**
- b. El B tiene sp^2 y la molécula es triangular plana.**
- c. el S tiene hibridación sp^3 y la molécula es angular.**

9.- Deduzca, aplicando la teoría de hibridación de orbitales, la geometría de las moléculas siguientes: etileno, acetileno, benceno, metanol y metanal.

R:

- a. Etileno: C con sp^2 molécula plana.**
- b. Acetileno: C con sp , molécula lineal.**
- c. Benceno: C con sp^2 molécula hexagonal plana.**
- d. Metanol: C con sp^3 , molécula tetraédrica.**
- e. Metanal: C con sp^2 , molécula plana.**

10.- De los compuestos iónicos KBr y NaBr, ¿cuál será el más duro y cuál el de mayor temperatura de fusión? ¿Por qué?

R:

El catión mayor es el de potasio con lo que la distancia entre él y el anión bromuro es mayor. La fuerza entre ellos será menor y también lo será el punto de fusión comparado con el del NaBr.

11.- Indique qué tipo de enlace predominará en los siguientes compuestos: (a) Cl_2 ; (b) KBr; (c) Na; (d) NH_3 .

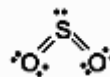
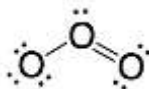
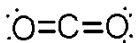
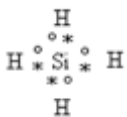
R:

- a. Covalente interatómico y de Van der Waals intermolecular.**
- b. Iónico.**
- c. metálico.**
- d. Covalente interatómico y de Van der Waals intermolecular.**

12.- Para las moléculas SiH_4 , CO_2 , O_3 y SO_2 , se pide: (a) Escribir las estructuras de Lewis. (b) Discuta su geometría. (c) Indique qué moléculas son isoelectrónicas (similar distribución electrónica) entre sí.

R:

a.-



b.- La molécula de ozono posee la misma configuración de Lewis que la de dióxido de azufre. En ellas existe enlace covalente doble por un lado y dativo por otro. La hibridación del átomo central es sp^2 y la geometría de la molécula es angular. Las distancias de enlace son idénticas al existir dos formas resonantes extremas. Por otro lado la molécula de silano es tetraédrica ya que el Si tiene hibridación sp^3 . En el caso del CO_2 la geometría es lineal y el C presenta sp .

13.- Explique la diferencia entre las propiedades físicas del cobre, del dióxido de carbono y del fluoruro de cesio a partir de los enlaces de cada uno.

R:

Cu: enlace metálico. CO_2 : enlaces covalente entre átomos y de Van der Waals entre moléculas. CsF: enlace iónico.

14.- Justifique la estructura y geometría del agua. ¿Por qué a temperatura ambiente el agua es líquida, mientras que el sulfuro de hidrógeno, de mayor masa molecular, es gaseoso? Razone la respuesta.

R:

La diferencia de propiedades estriba en la presencia de enlace por puentes de hidrógeno en el agua que son más fuertes que los de Van der Waals que posee el sulfuro de hidrógeno.

15.- Explique brevemente por qué el agua disuelve a los compuestos iónicos mientras que el CCl_4 no lo hace.

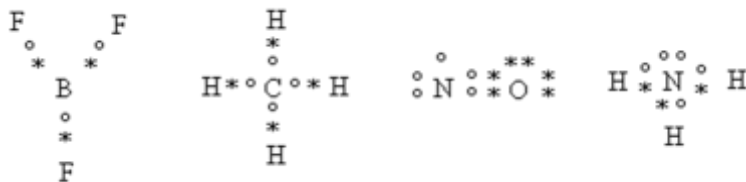
R: Los disolventes polares disuelven bien a las sustancias iónicas.

16.- Indique cuáles de los siguientes compuestos pueden formar enlace de hidrógeno: (a) metanol, (b) etilamina, (c) etano, (d) propanona.

R: Metanol y etilamina, siendo más fuertes los del primero. Para que exista enlace de hidrógeno debe haber un enlace F-H, O-H o bien N-H. Cuanto más electronegativo sea al átomo unido al hidrógeno, más fuerte será el enlace, ya que así el hidrógeno queda más cargado positivamente y así se une por una atracción electrostática más fuerte a la molécula vecina.

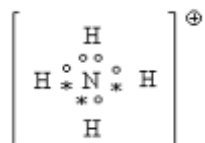
17.- Alguna o algunas de las siguientes moléculas: NH_3 , NO , CH_4 , BF_3 , no cumplen la regla de octeto, pudiéndose considerar excepciones a la mencionada regla. Indique razonadamente: (a) Las premisas básicas que establece la mencionada regla. (b) Las estructuras puntuales de Lewis para estas moléculas. (c) Señala qué moléculas cumplen la regla del octeto y cuáles no lo hacen.

R: No cumplen la regla el NO y el BF_3 .



18.- Dibuje mediante un diagrama de Lewis la estructura resultante al unirse el ion hidrógeno a la molécula de amoniaco. ¿Qué tipo de enlace se ha formado? Compruebe que haciendo un recuento total de electrones la estructura resultante tiene una carga positiva (ion amonio).

R: El enlace formado entre los hidrógenos y el nitrógeno es covalente y en el caso del N y el ión H^+ es covalente coordinado o dativo.

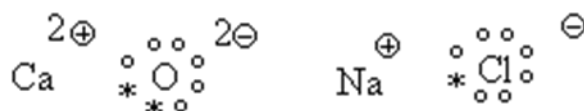


19.- ¿Por qué la molécula BI_3 es apolar si los enlaces B—I son polares?

R: La forma de la molécula es la de un triángulo equilátero y de ahí que su momento dipolar resultante sea cero. La forma es idéntica a la dibujada para el BF_3 en el ejercicio nº 17.

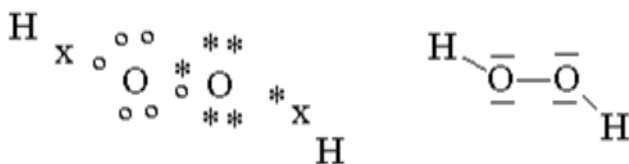
20.- Demuestre que los compuestos NaCl y CaO tienen la misma estructura electrónica según Lewis.

R:



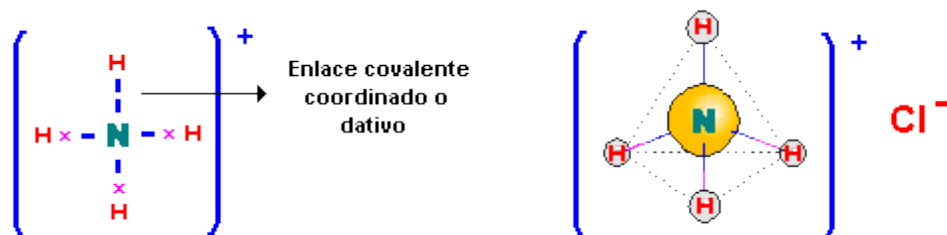
21.- Dibuje mediante un diagrama de puntos la molécula de peróxido de hidrógeno o agua oxigenada, H_2O_2 . ¿Cuál será su geometría sabiendo que tiene un momento dipolar moderado?

R:



22.- ¿Qué clases de enlace hay en el cloruro amónico, NH_4Cl ?

R: Existen tres: entre el anión Cl^- y el catión NH_4^+ es uno electrostático. Entre el nitrógeno y los hidrógenos es covalente y por último entre el nitrógeno y el protón H^+ es dativo.



23.- ¿Qué condiciones energéticas han de cumplirse para que se pueda afirmar que se ha formado un enlace?

R: Que exista un desprendimiento de energía al formarse ese enlace. Cuanto mayor sea la energía liberada mayor será la estabilidad del enlace.

24.- Explique los siguientes hechos:

(a) La sal común NaCl funde a 801 °C sin embargo, el cloro es un gas a 25 °C.

(b) El diamante no conduce la electricidad, y el Fe sí.

(c) La molécula de cloro es covalente mientras que el CsCl es iónico.

R:

a) Las fuerzas de unión entre el Na⁺ y el Cl⁻ son elevadas, mientras que las fuerzas intermoleculares entre las moléculas de cloro son muy débiles.

b) Los electrones de la capa de valencia de los átomos de C en el diamante están compartidos dos a dos entre átomos vecinos. En el hierro los electrones de valencia están deslocalizados en una nube electrónica en la que tienen un grado mayor de libertad.

c) En el Cloro diatómico las moléculas se forman por compartición de electrones al tener los dos átomos que forman el enlace la misma electronegatividad. Sin embargo en el CsCl la diferencia de electronegatividad es tan elevada entre los dos átomos que lo que se forma es un enlace iónico por atracción electrostática entre el Cs⁺ y el Cl⁻.

25.- ¿Qué significa que una molécula sea polar? ¿Qué molécula es más polar la de metano o la de amoníaco?

R: La densidad electrónica de la molécula está más desplazada hacia el átomo más electronegativo. En el caso del metano la geometría tetraédrica de la molécula hace que se anulen entre sí los momentos dipolares, sin embargo en el caso del amoníaco la geometría es de pirámide trigonal con el N en un vértice y por tanto existe un momento dipolar resultante. El dipolo del

amoníaco tiene su lado negativo en el vértice de la pirámide (N) y el positivo en el centro de la base donde se hallan los tres hidrógenos.

26.- ¿Qué tipo más probable de ion formarán los siguientes elementos: S, Mg, Cl, Rb, P, Sn, Ag, Cd, O?

R: S^{2-} , Mg^{2+} , Cl^- , Rb^+ , P^{3-} , Sn^{2+} , Ag^+ , Cd^{2+} y O^{2-} .

27.- Escriba las configuraciones completas y abreviadas de Al^{3+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cl^- , O^{2-} , P^{3-} .

R:

Ion	Configuración completa	C. abreviada
Al^{3+}	$1s^2 2s^2 p^6$	[Ne]
Cu^{2+}	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^9$	[Ar] $3d^9$
Zn^{2+}	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6 d^{10}$	[Ar] $3d^{10}$
Cl^-	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$	[Ar]
O^{2-}	$1s^2 2s^2 p^6$	[Ne]
P^{3-}	$1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$	[Ar]

28.- Ordene los siguientes compuestos según sus puntos de fusión crecientes y justifica dicha ordenación: KF, RbI, BrF y CaF_2 .

R: Cuanto menor es la distancia entre los iones y mayor es la carga, mayor es el punto de fusión. El orden es entonces:

$RbI < RbF < KF < CaF_2$

29.- El % de carácter iónico del HCl y HI es de 17 y 4 respectivamente. ¿Cuál de ellos tendrá un momento dipolar menor?

R: El % de carácter iónico está directamente relacionado con la diferencia de electronegatividades, por tanto el momento dipolar será menor en el yoduro de hidrógeno.

30.- Predecir el orden creciente de los puntos de fusión de las siguientes sustancias: trióxido de di-cloro, cloro, cloruro de litio y tetracloruro de carbono.

R: $\text{Cl}_2 < \text{CCl}_4 < \text{Cl}_2\text{O}_3 < \text{LiCl}$

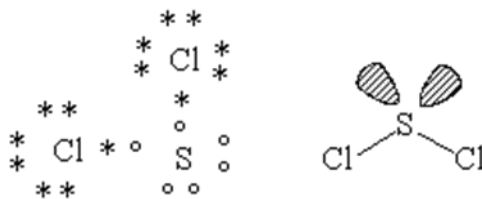
El cloro es una molécula con un único enlace apolar por ser los dos átomos iguales. Entonces la molécula es apolar.

El cloruro de litio es una molécula con enlace casi totalmente iónico dada la elevada diferencia de electronegatividad que hay entre sus átomos.

El tetracloruro de carbono y el trióxido de cloro son moléculas que poseen enlaces covalentes entre sus átomos de diferente electronegatividad. Estos enlaces son pues algo polares. Entonces es la geometría de la molécula la que determina la polaridad de la misma. En el tetracloruro hay 4 pares de electrones compartidos rodeando al átomo central. Su distribución alrededor de éste es tetraédrica y dada la simetría que existe se anulan los momentos dipolares de los enlaces y la molécula es apolar. Sin embargo esta distribución totalmente simétrica no se da en el trióxido de di-cloro y esto la hace una molécula polar.

31.- Represente la molécula de di-cloruro de azufre: (a) mediante un diagrama de puntos; (b) a partir de la teoría de enlace de valencia. ¿Cómo será su geometría?

R: Se trata de una molécula angular, en la que al igual que la de agua, la hibridación del átomo central es sp^3 , tetraédrica y la repulsión de los pares de electrones no compartidos cierra el ángulo teórico de 109° .

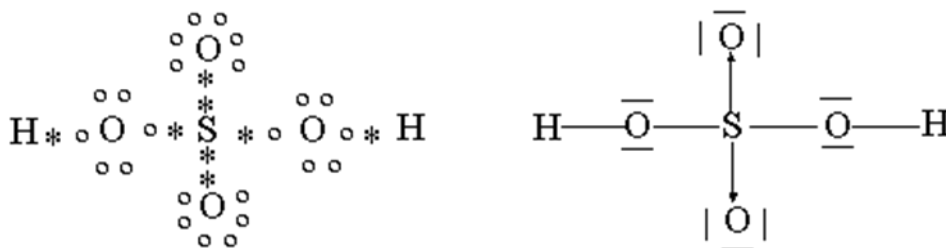


32.- ¿Cuál de los siguientes compuestos no puede existir? ¿Por qué?:
 NCl_5 , PCl_3 y PCl_5 .

R: No puede existir el NCl_5 porque en la estructura externa ($2s^2 2p^3$) no tiene orbitales “d” vacíos, y además el átomo de nitrógeno es muy pequeño para albergar alrededor de él a 5 átomos de cloro.

33.- ¿Qué tipos de enlace posee el ácido sulfúrico?

R: Hay enlace cuatro enlaces covalentes entre S y O, de los que dos son dativos, en los que el S aporta los dos electrones. El enlace también es covalente entre el O y el H. Entre unas moléculas y otras hay enlaces por puentes de hidrógeno dado que la molécula posee enlaces O-H.



Entre O e H el enlace covalente está tan polarizado que tiende a romperse muy fácilmente para dar aniones SO_4^{2-} e iones H^+ que se unirán con enlace dativo al disolvente en el que se halle el ácido sulfúrico.

El ácido sulfúrico es una sustancia líquida por lo que no participa de las características generales del enlace iónico.

34.- Indique qué fuerzas deben romperse para fundir el NaCl y el Fe , y para vaporizar el H_2O .

R: Para fundir el NaCl hay que vencer fuerzas electrostáticas de un enlace iónico. Para fundir el hierro hay que romper un enlace metálico que surge de la atracción entre una nube de electrones de valencia deslocalizados y los cationes de hierro que ocupan los nudos de la red cristalina. Para vaporizar el agua hay que romper enlaces por puentes de hidrógeno.

35.- Cite ejemplos de moléculas que contengan: a) un carbono de hibridación sp ; b) boro con hibridación sp^2 ; c) carbono con hibridación sp^3 ; d) nitrógeno con hibridación sp^3 .

R: a) CO_2 b) BCl_3 c) CH_4 d) NH_3 .

BIBLIOGRAFIA

Modern Inorganic Chemistry W.L. Jolly [ISBN 0-07-032760-2](#)

Química. La Ciencia Central Brown, T. et al., 9na Edición, México, Editorial Pearson Prentice Hall, 2004.

Química Chang, R. , 6ª Edición, México, Editorial Mc. Graw Hill, 2003.

<http://www.fullquimica.com/2011/04/enlace-covalente.html>

<http://www.fullquimica.com/2011/04/enlace-quimico.html>

<http://quimica2bac.wordpress.com/2010/11/28/la-teoria-del-enlace-de-valencia-6-hibridacio/>

<http://usuarios.lycos.es/ptro2/>

http://www.paleontologia.co.uk/paleopag/sections_frame.php?area=ch&page=chemist_tema4.htm

<http://www.google.es/search?hl=es&q=Mol%C3%A9culas+Hibridaci%C3%B3n&meta>

http://bilbo.edu.uy/~dec/ecampos/catedra_inorganica/general1/geometria/tabla.html

<http://www.uc.cl/quimica/agua/estructura.htm>

http://platea.pntic.mec.es/~jrodri5/fuerzas_intermolec_tabla.htm

http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_01.html