

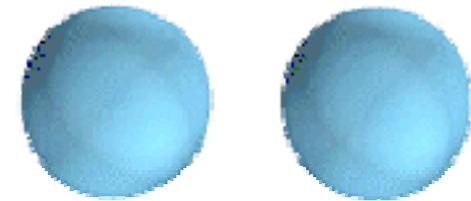
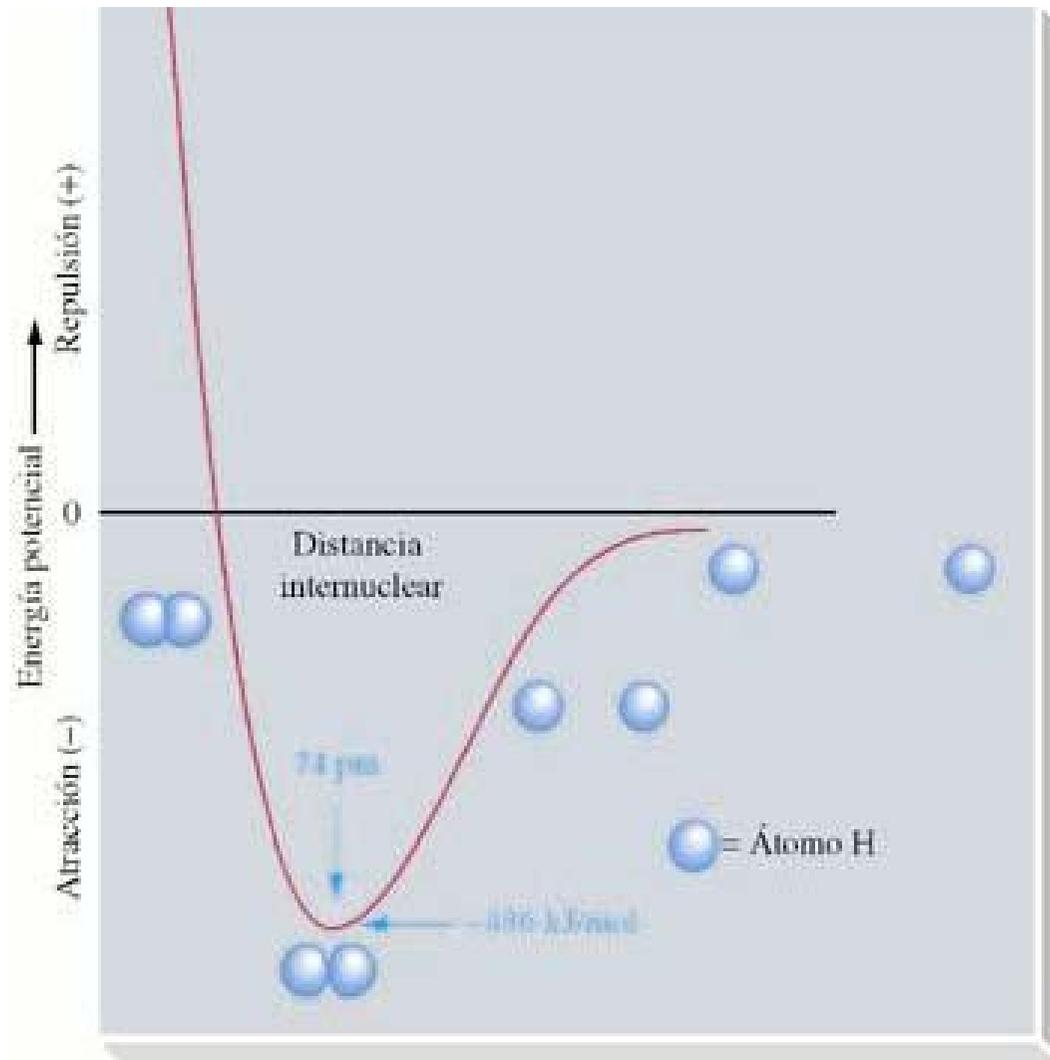
Tema 3

Enlace Molecular

Tema 3: Enlace Molecular

1. Estructuras de Lewis
2. Enlace iónico y covalente
3. Enlaces covalentes polares y no polares
4. Momento dipolar
5. Par electrónico
6. Teoría del enlace: TRPECV y TEV
7. Hibridación
8. Orbitales moleculares
9. Orden y estabilidad de enlace

Energía Potencial



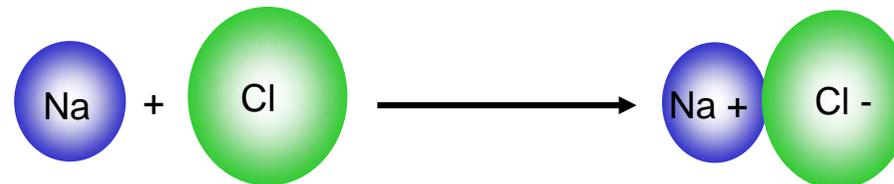
Representación de la energía potencial en función de la distancia entre los núcleos atómicos:

Enlace Molecular

Enlace iónico.- Se forman por la transferencia de uno o más electrones de un átomo o grupo de átomos a otros.

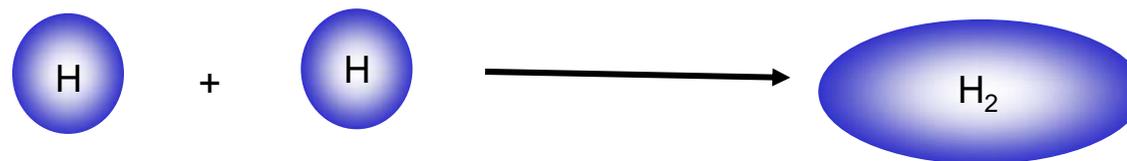
Tiene lugar con mayor facilidad cuando reaccionan elementos de energía de ionización pequeña (**metales**) con elementos de elevada electronegatividad y afinidad electrónica (**no metales**)

Ej : NaCl, Li₂O, CaO, etc.



Enlace Covalente.- Este tipo de enlace se forma por solapamiento de dos orbitales atómicos, cada uno de los cuales contiene un solo electrón .

Los electrones son compartidos por los átomos. Ej: H₂ ; N₂ ; etc



Características del enlace

Enlace Iónico

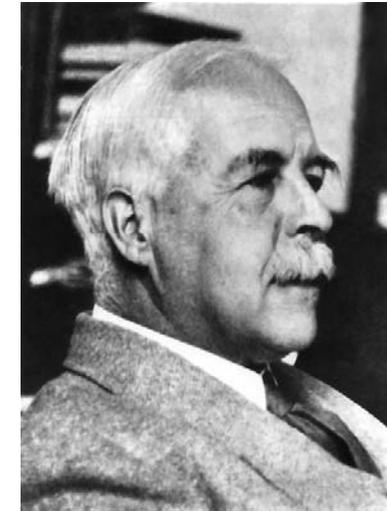
- ✓ Sólidos de elevado punto de fusión
- ✓ La mayoría son solubles en disolventes polares
- ✓ Insolubles en disolventes apolares
- ✓ Los compuestos fundidos conducen la electricidad
- ✓ Las disoluciones acuosas conducen la electricidad

Enlace Covalente

- ✓ Gases, Líquidos o Sólidos de bajo punto de fusión
- ✓ La mayoría son insolubles en disolventes polares
- ✓ Solubles en disolventes apolares
- ✓ Los Líquidos y Sólidos fundidos no conducen la electricidad
- ✓ Las disoluciones acuosas son malas conductoras de la electricidad

Visión general de la Teoría de Lewis

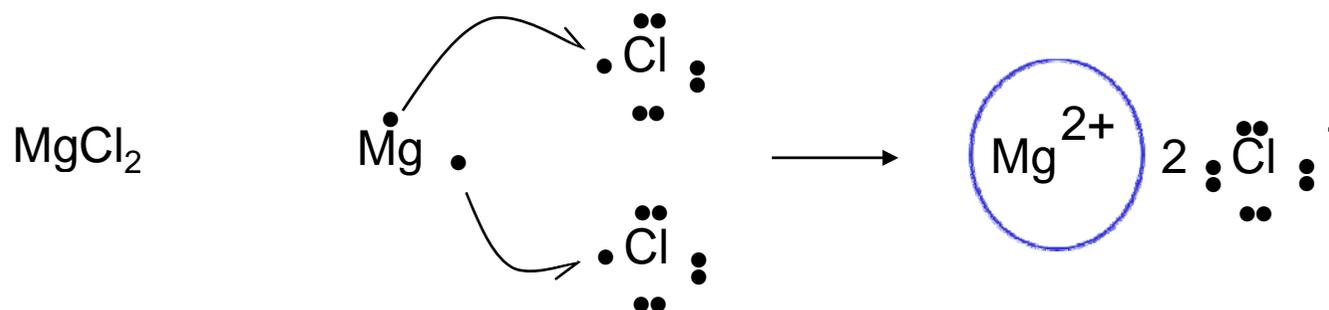
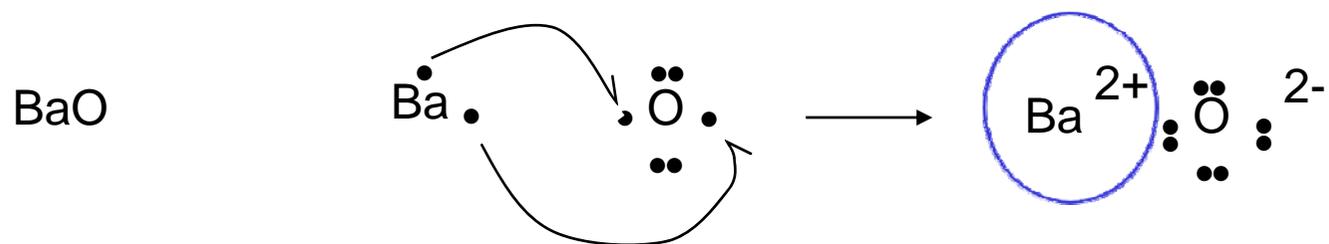
- Los electrones de valencia juegan un papel fundamental en el enlace químico.
- La transferencia de *electrones* conduce a los *enlaces iónicos*.
- La compartición de *electrones* lleva a los *enlaces covalentes*.
- Los *electrones* se transfieren o se comparten de manera que los átomos adquieren una configuración de gas noble:
 - **El octeto.**



X.X. Lewis

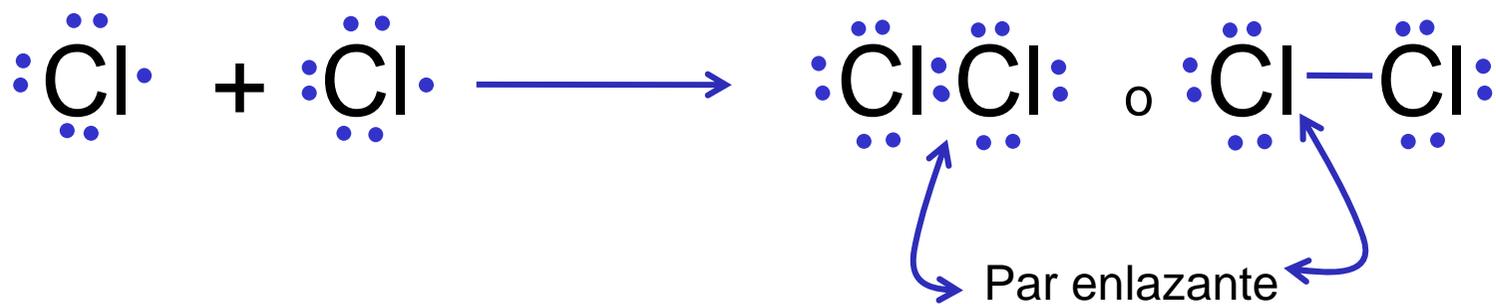
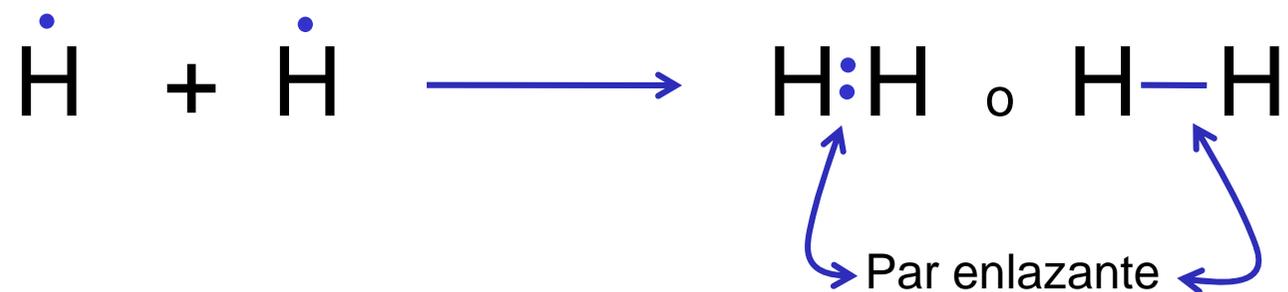
Estructuras de Lewis

compuestos iónicos



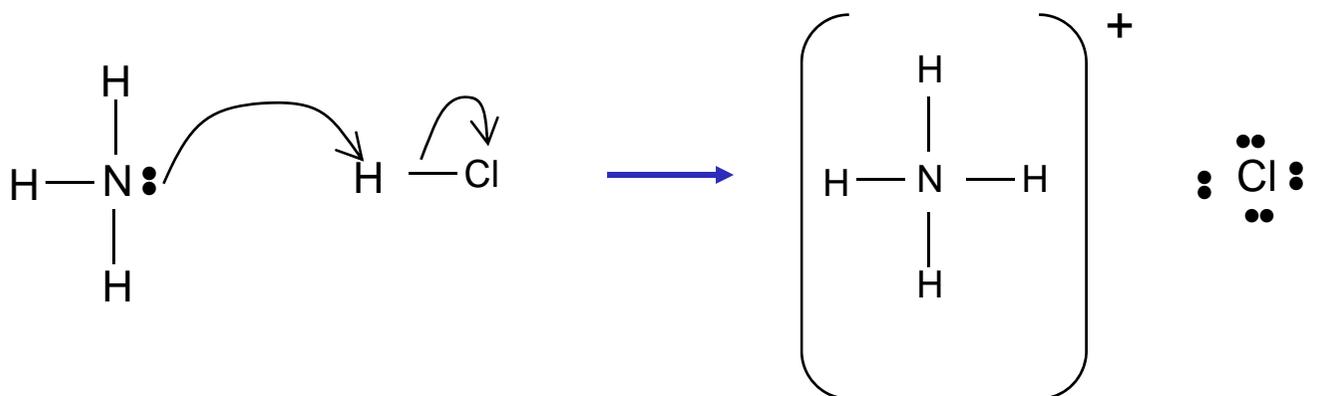
Estructuras de Lewis

compuestos Covalentes



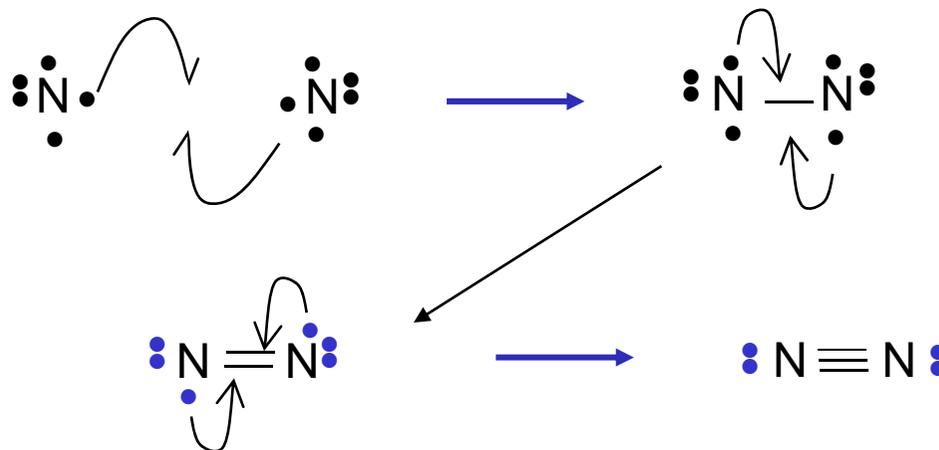
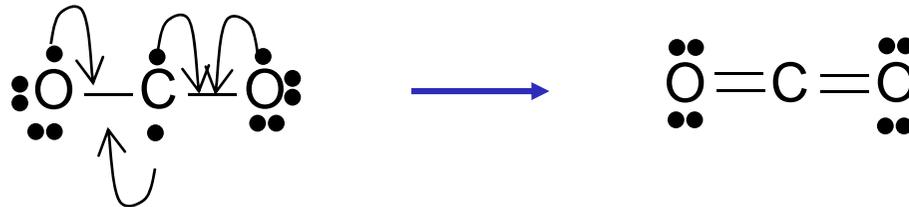
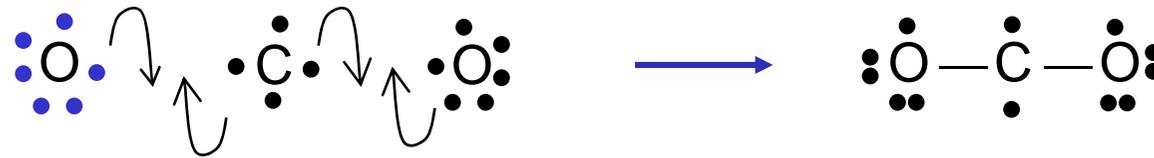
Estructuras de Lewis

Compuestos Covalentes Coordinados



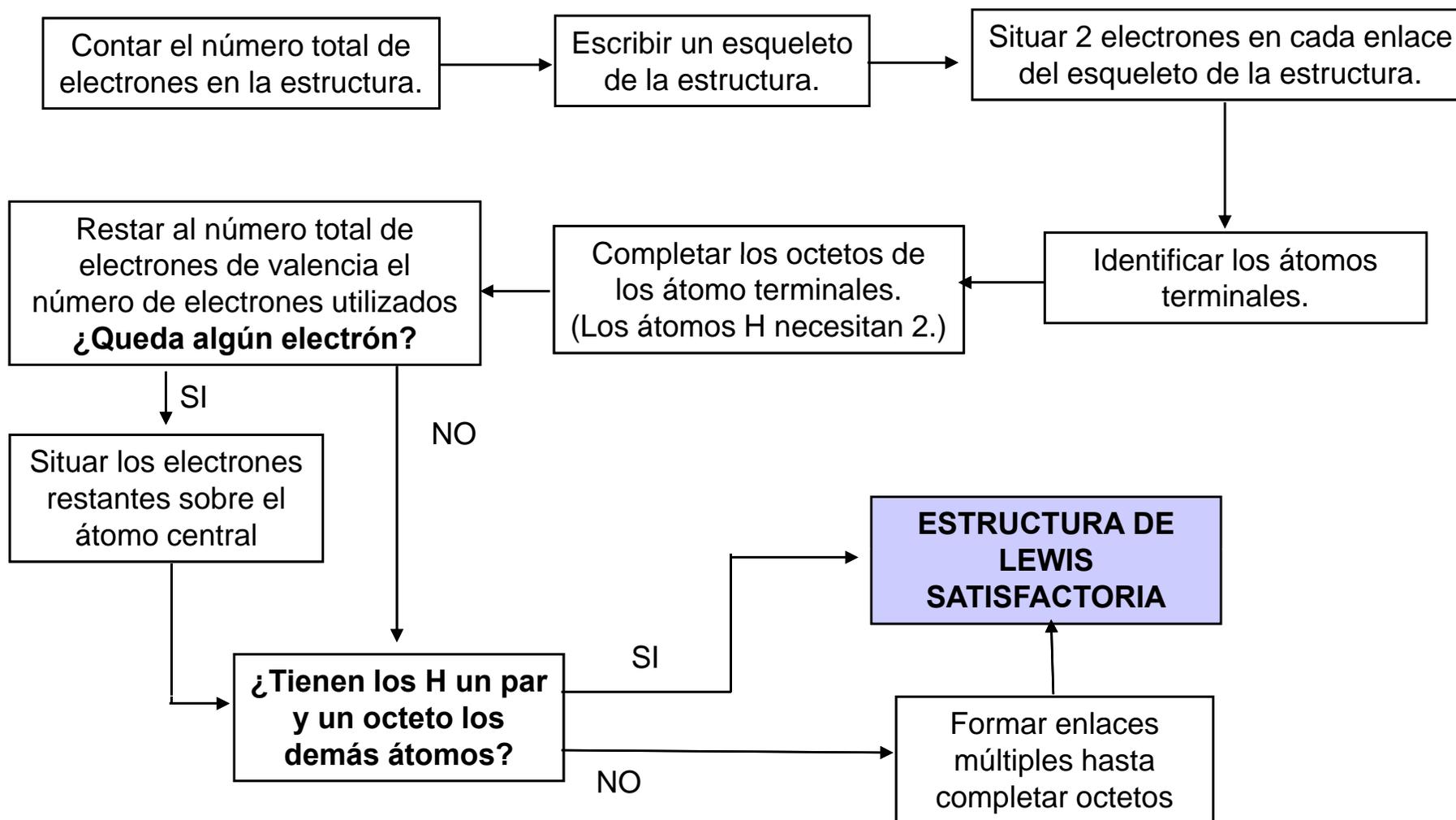
Estructuras de Lewis

Enlace Covalente Múltiple

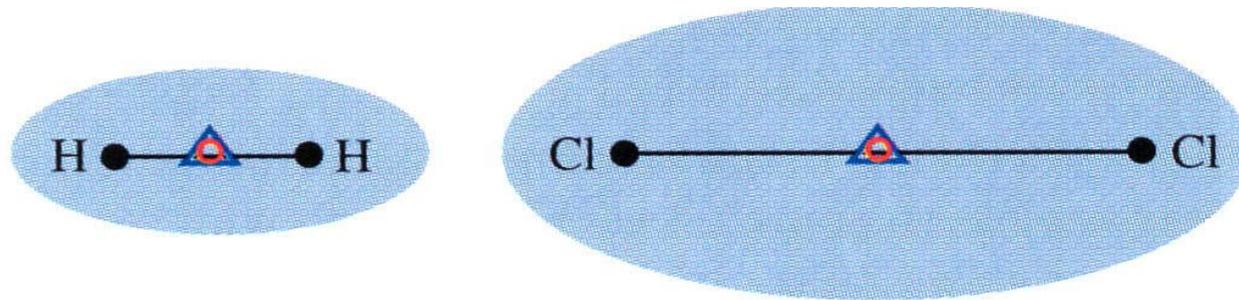


Estructuras de Lewis

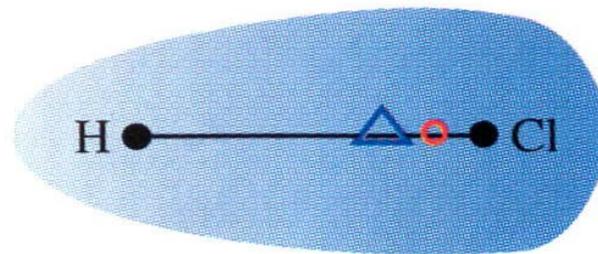
Esquema - Resumen



Enlaces Covalentes Polares



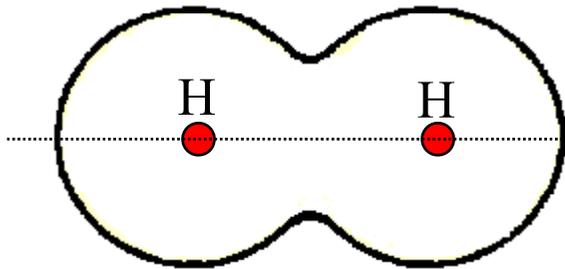
(a) Distancias covalentes no polares



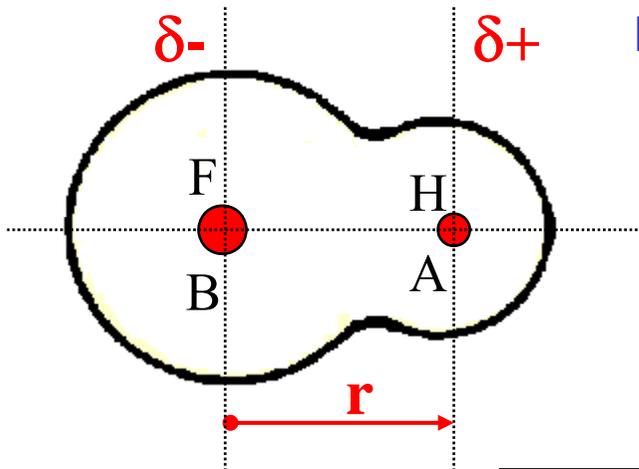
(b) Distancias covalentes polares

- = Núcleo de los átomos
- △ = Centro de carga positiva
- = Centro de carga negativa

Momento Dipolar



En las moléculas diatómicas **homonucleares** la carga está distribuída simétricamente respecto del plano perpendicular al eje internuclear.



En las moléculas diatómicas **heteronucleares** la carga está distribuída asimétricamente respecto del plano perpendicular al eje internuclear.

La carga del enlace se desplaza hacia el átomo más electronegativo: $\chi_A < \chi_B$.

$$\vec{\mu} = \delta \cdot \vec{r}$$

Moléc.	HF	HCl	HBr	HI	F ₂	CO	ICl	FCI	KF
μ (D)	1.91	1.07	0.79	0.38	0	0.12	0.65	0.88	8.60

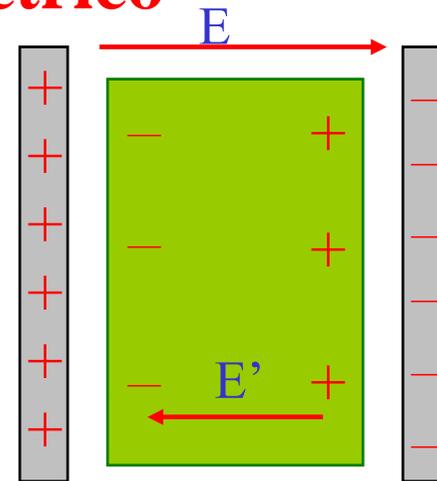
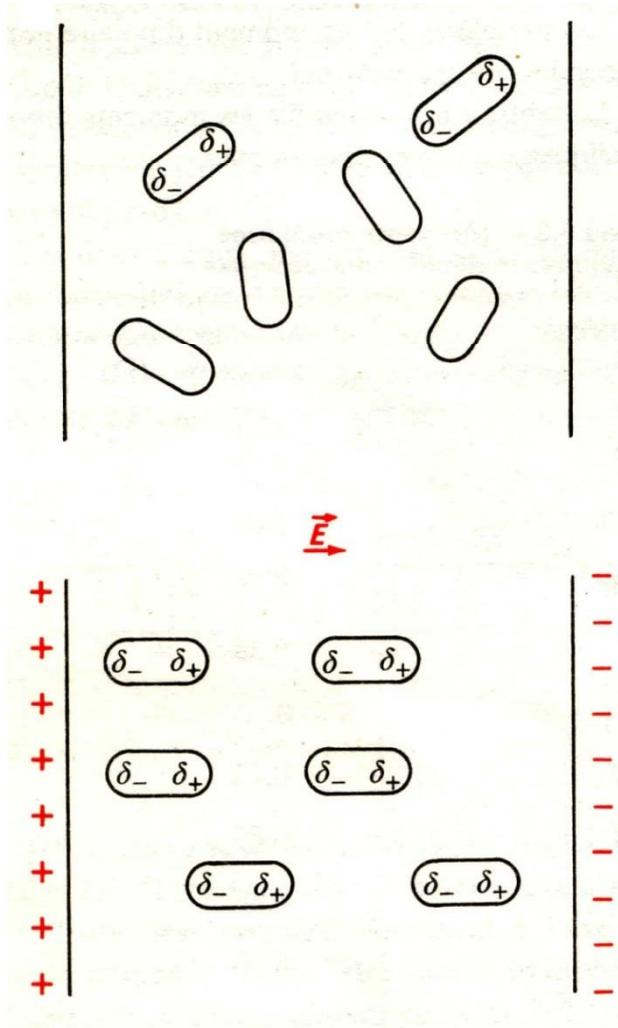
♦ El momento dipolar es proporcional a $|\chi_A - \chi_B|$

Electronegatividad

1												13	14	15	16	17	
H 2,1													B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Li 1,0	Be 1,5												Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
Na 0,9	Mg 1,2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12						
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 1,8	Ni 1,8	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	
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	
Cs 0,8	Ba 0,9	La* 1,1	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,4	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,2	
Fr 0,7	Ra 0,9	Ac† 1,1	* Lantánidos: 1,1-1,3 † Actínidos: 1,3-1,5														

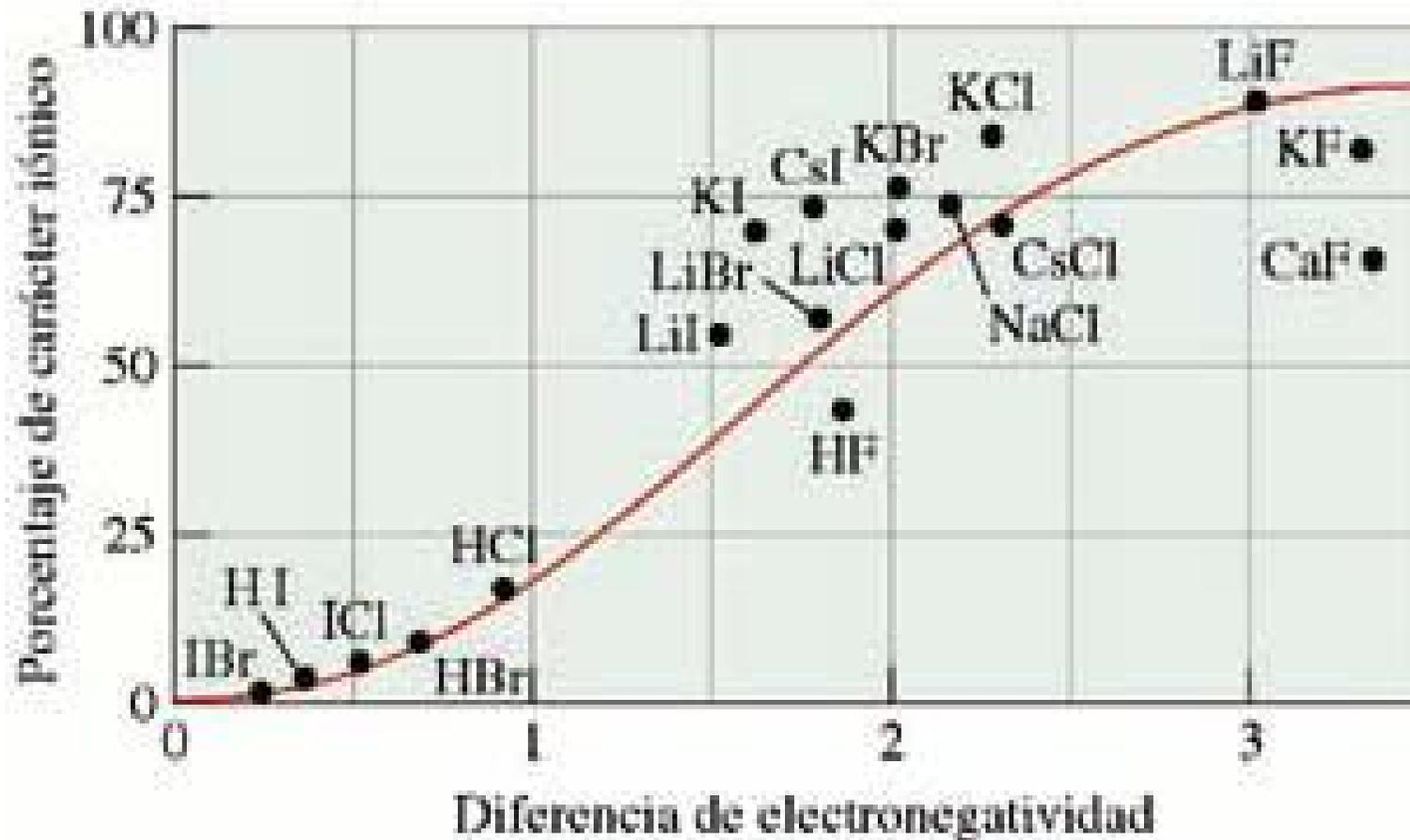
Momento Dipolar

Interacción con el campo eléctrico



- ♦ La orientación de dipolos genera dentro del dieléctrico un campo E' opuesto al de polarización.
- ♦ Dentro del dieléctrico el campo efectivo ($E-E'$) es inferior al campo polarizante.

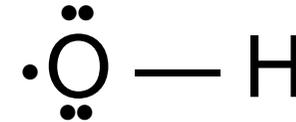
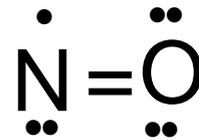
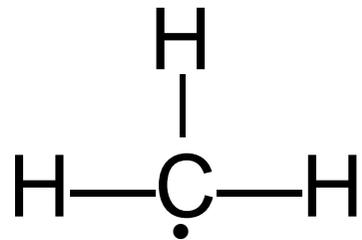
Porcentaje Iónico



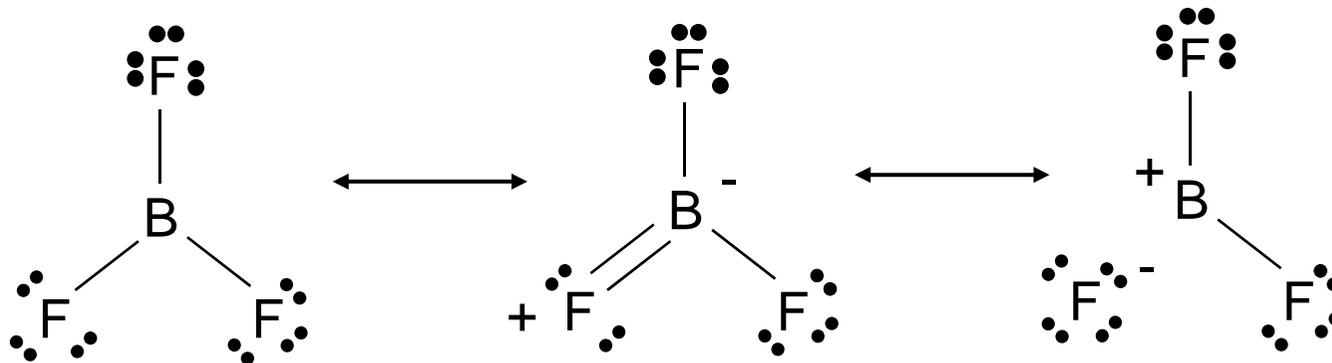
El enlace iónico se puede considerar como el límite de un covalente polar (transferencia total del e^-)

Excepciones a la regla del Octeto

- Especies con número impar de electrones:

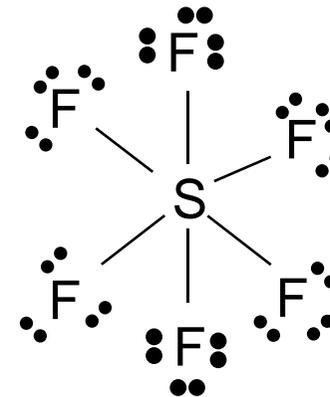
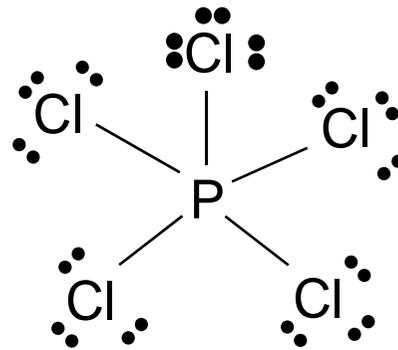
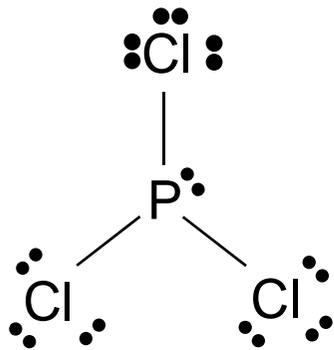


- Octetos incompletos:



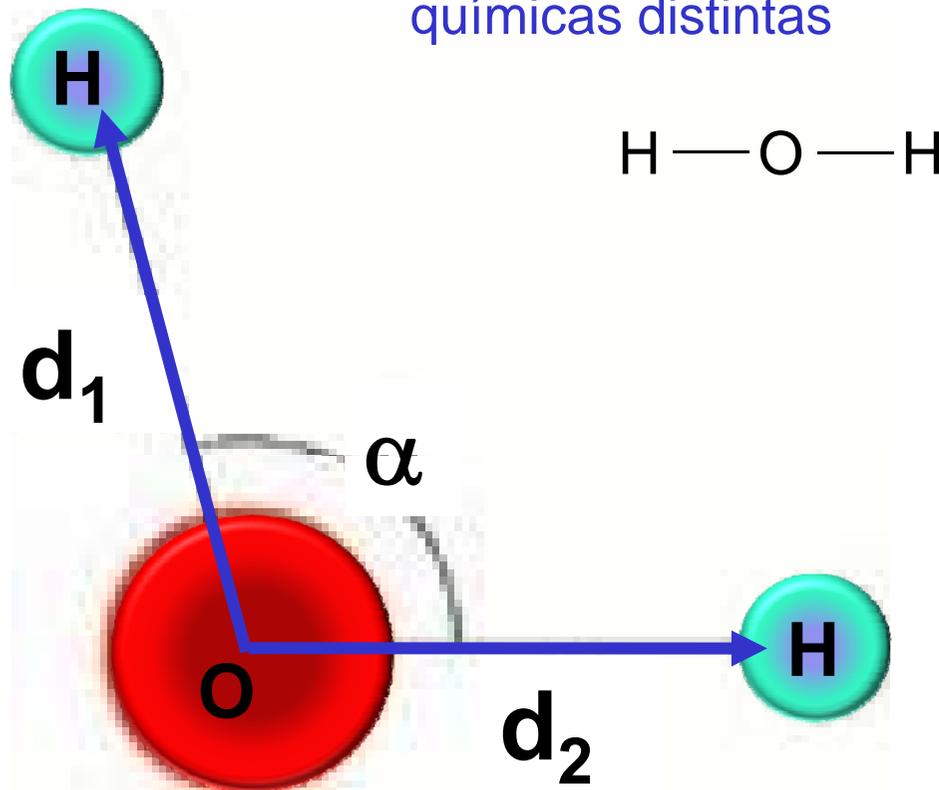
Excepciones a la regla del Octeto

- Octetos expandidos:



La Forma de las Moléculas

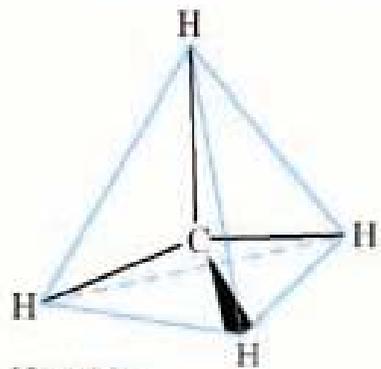
Según su forma y geometría las moléculas experimentarán propiedades físicas y químicas distintas



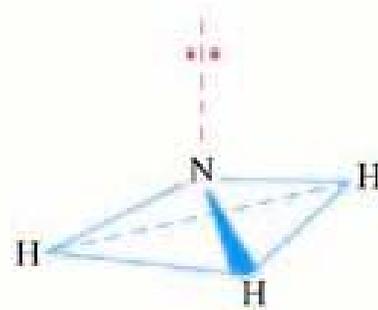
Teoría RPECV

- **Teoría de la Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia:**
 - Los pares de electrones se repelen entre sí, tanto si están en enlaces químicos (**pares enlazantes**) como si no están compartidos (**pares solitarios**). Los pares de electrones se disponen alrededor de un átomo con orientaciones que minimicen las repulsiones.
- **Geometría de grupos de electrones:** distribución de los pares de electrones.
- **Geometría molecular:** distribución de los núcleos.

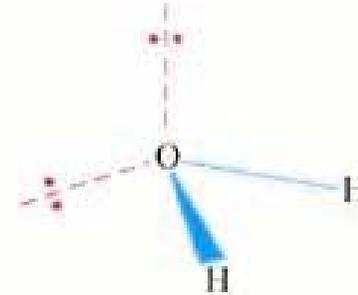
Metano, amoniac y agua



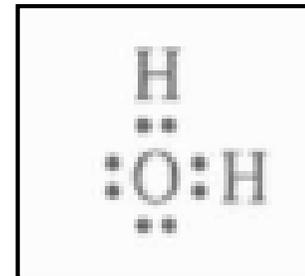
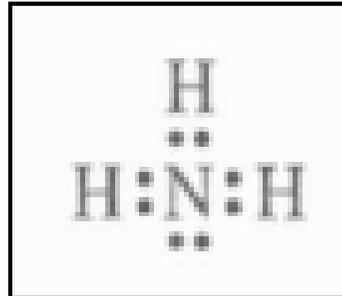
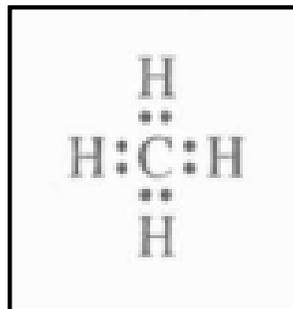
Notación
RPECV AX_4
(a)



AX_3E
(b)



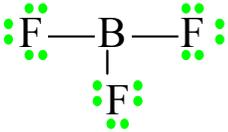
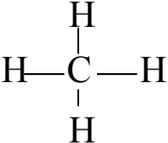
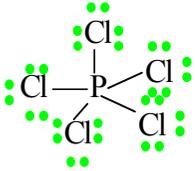
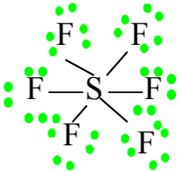
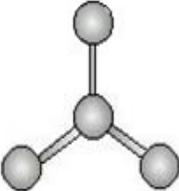
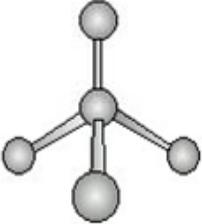
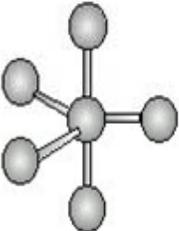
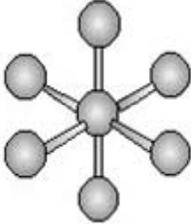
AX_2E_2
(c)



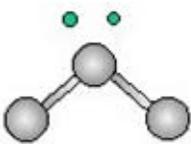
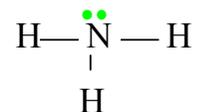
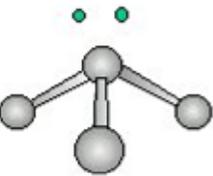
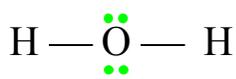
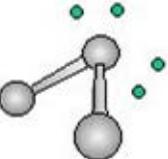
Aplicación de la Teoría RPECV

- ✓ Escribir una estructura de Lewis aceptable.
- ✓ Determinar el número de grupos de electrones y establezca si son grupos *enlazantes* o pares *solitarios*.
- ✓ Establecer la geometría de grupos de electrones.
- ✓ Determinar la geometría molecular.

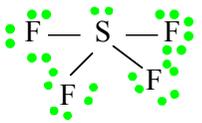
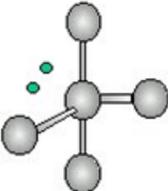
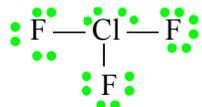
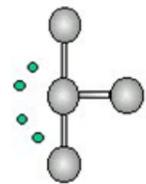
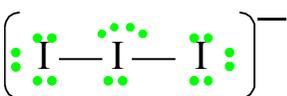
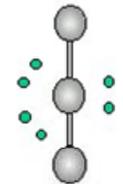
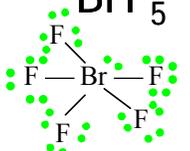
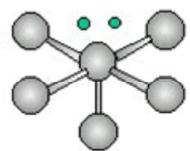
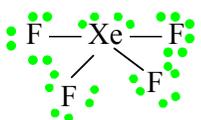
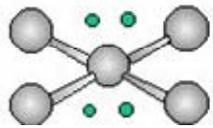
Aplicación de la Teoría RPECV

BeCl_2	BF_3	CH_4	PCl_5	SF_6
				
2 pares de e- de enlace	3 pares de e- de enlace	4 pares de e- de enlace	5 pares de e- de enlace	6 pares de e- de enlace
180°	120°	109.5°	90 y 120°	90°
				
Lineal	Triangular plana	Tetraédrica	Bipirámide trigonal	Octaédrica

Aplicación de la Teoría RPECV

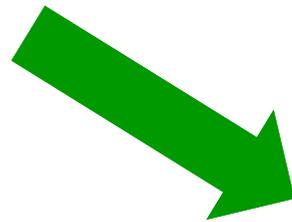
SnCl_2 	PE=2 PL=1	Triangular plana		Angular ángulo menor 120°
NH_3 	PE=3 PL=1	tetraédrica		Pirámide trigonal 107°
H_2O 	PE=2 PL=2	tetraédrica		Angular 105°

Aplicación de la Teoría RPECV

SF_4 	PE=4 PL=1	Bipirámide trigonal		Balancín
ClF_3 	PE=3 PL=2	Bipirámide trigonal		Forma de T
I_3^- 	PE=2 PL=3	Bipirámide trigonal		Lineal
BrF_5 	PE=5 PL=1	Octaédrica		Pirámide cuadrada
XeF_4 	PE=4 PL=2	Octaédrica		Plano cuadrada

Método de Enlace de Valencia

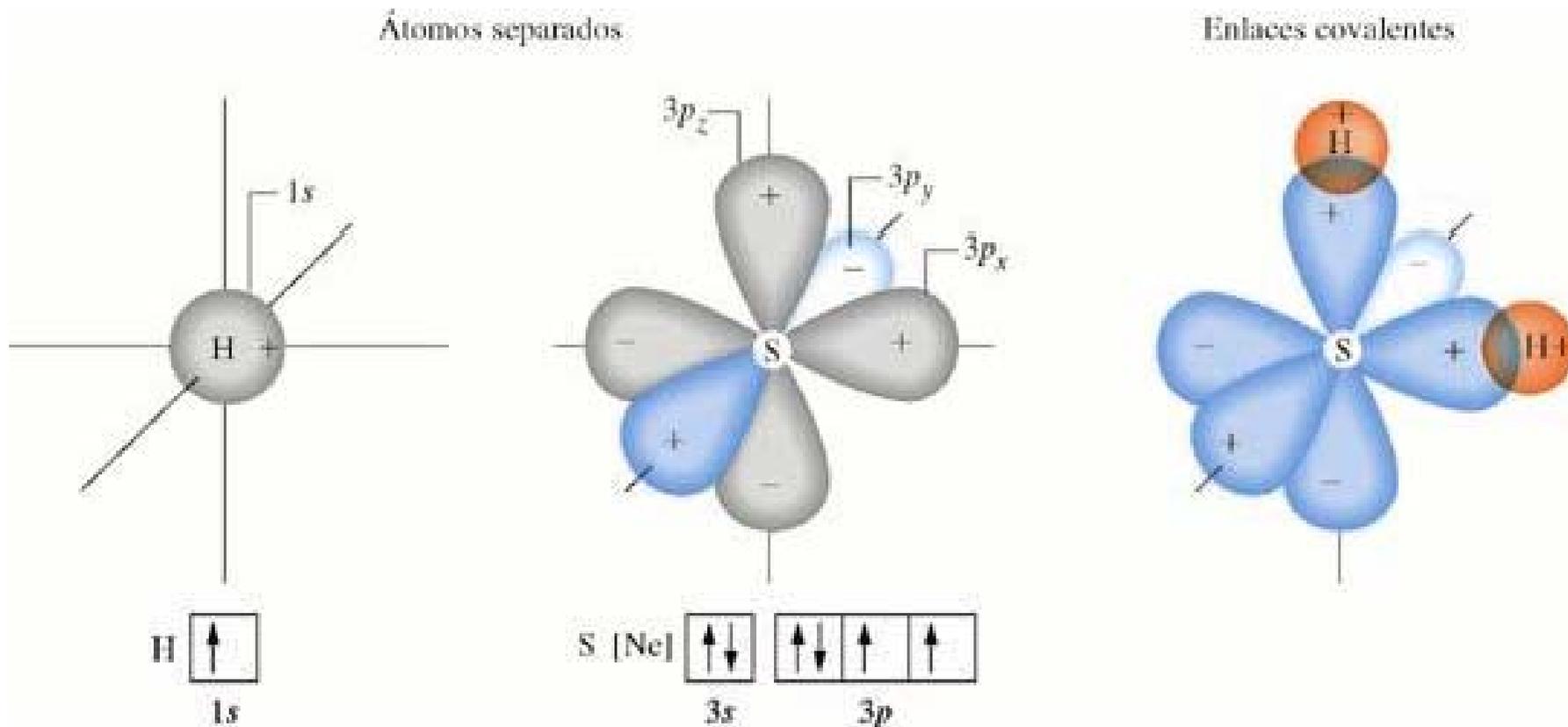
- El solapamiento de orbitales atómicos describe el enlace covalente.
- El área de solapamiento de los orbitales está *en fase*.
- Un modelo de enlace *localizado*.



HIBRIDACIÓN

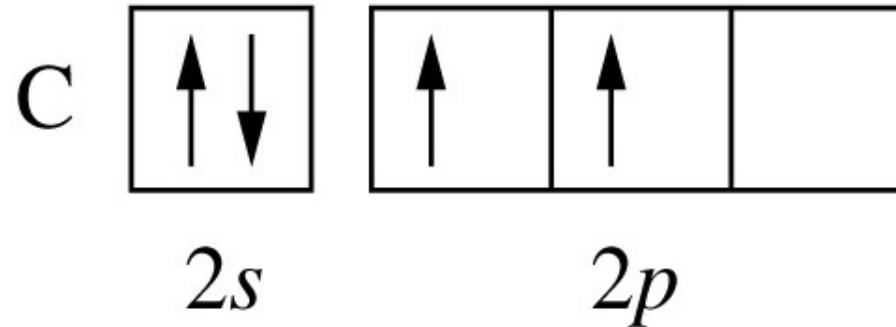
Formación de nuevos orbitales moleculares direccionales y degenerados

El enlace de la molécula H_2S

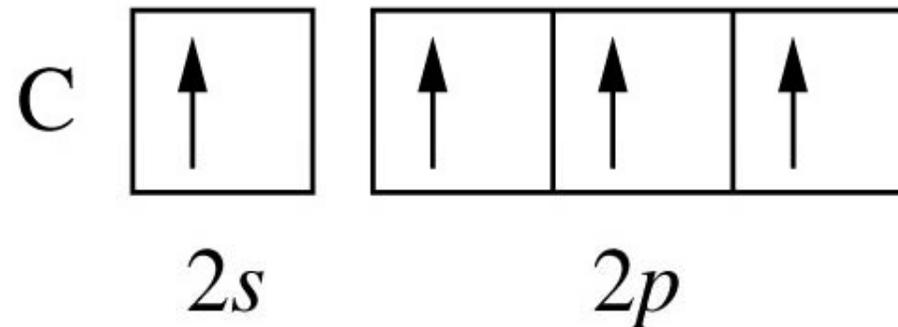


Hibridación de orbitales atómicos

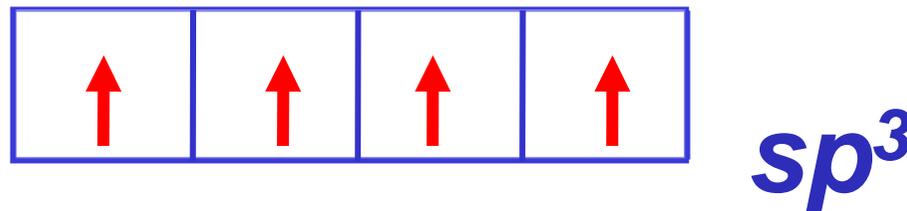
Estado fundamental



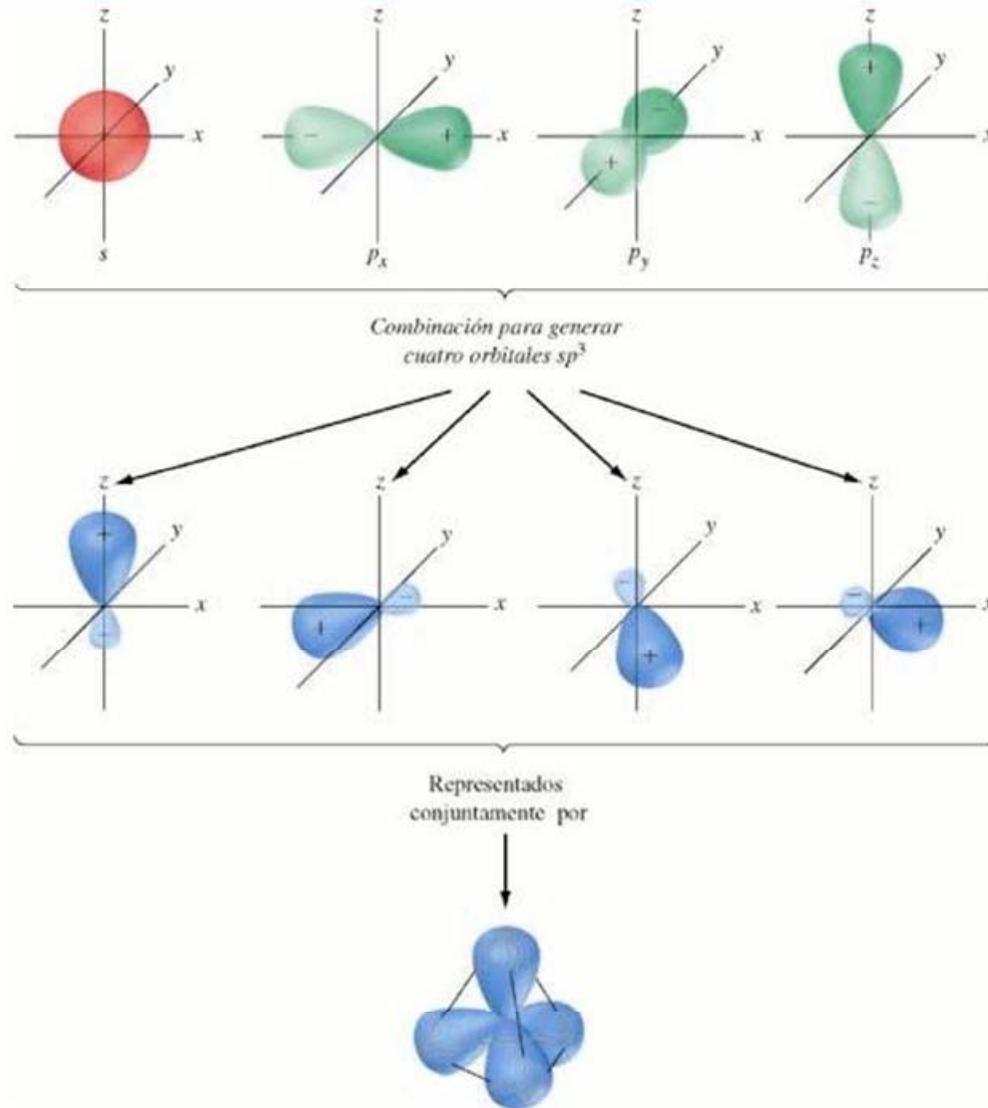
Estado excitado



Hibridación

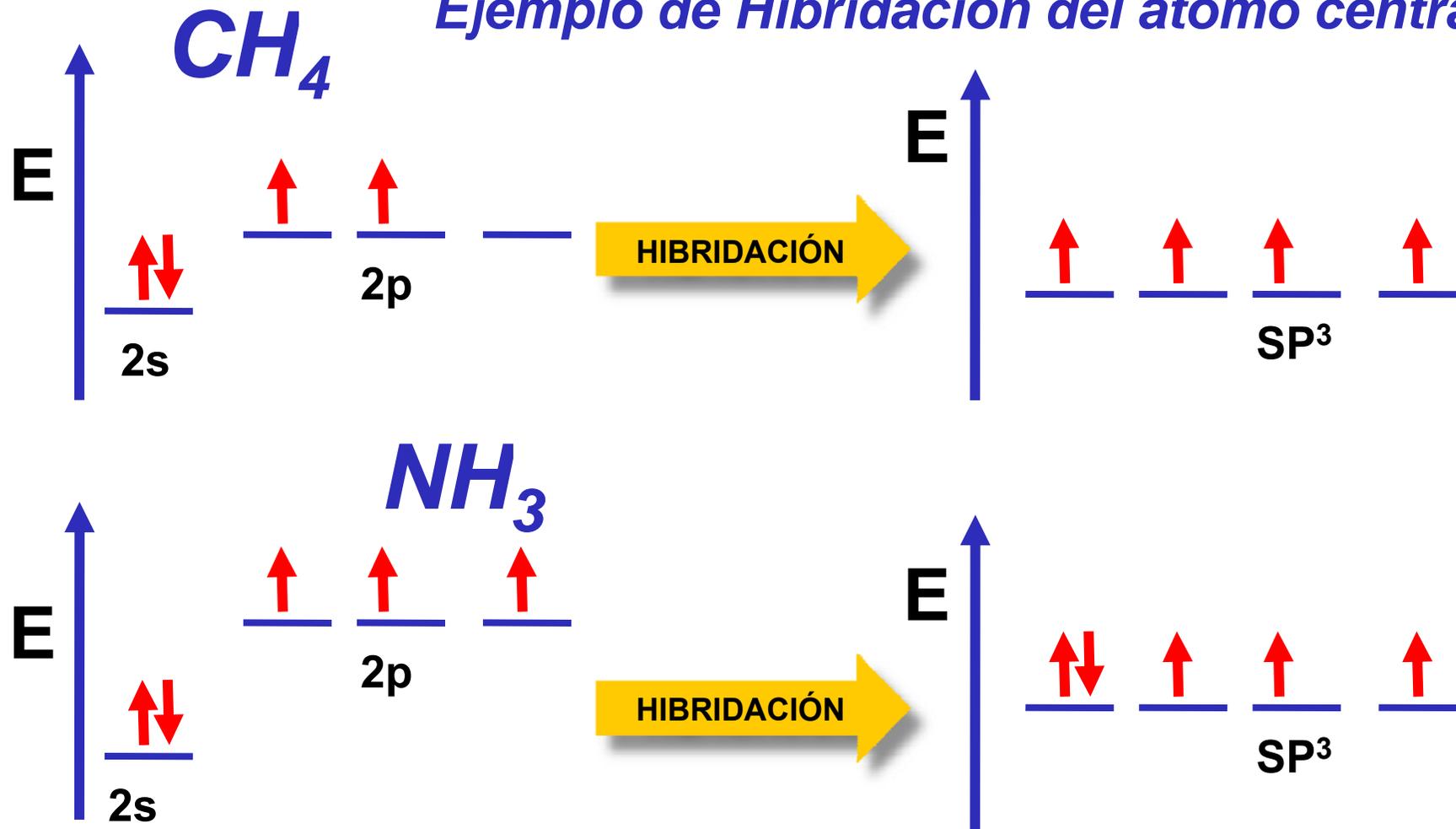


Hibridación sp^3

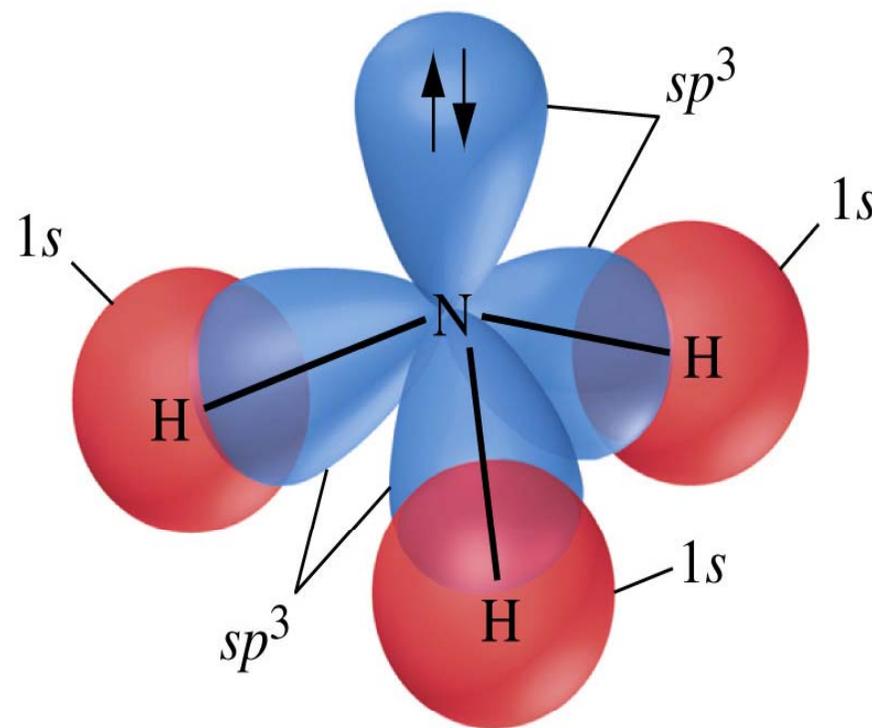
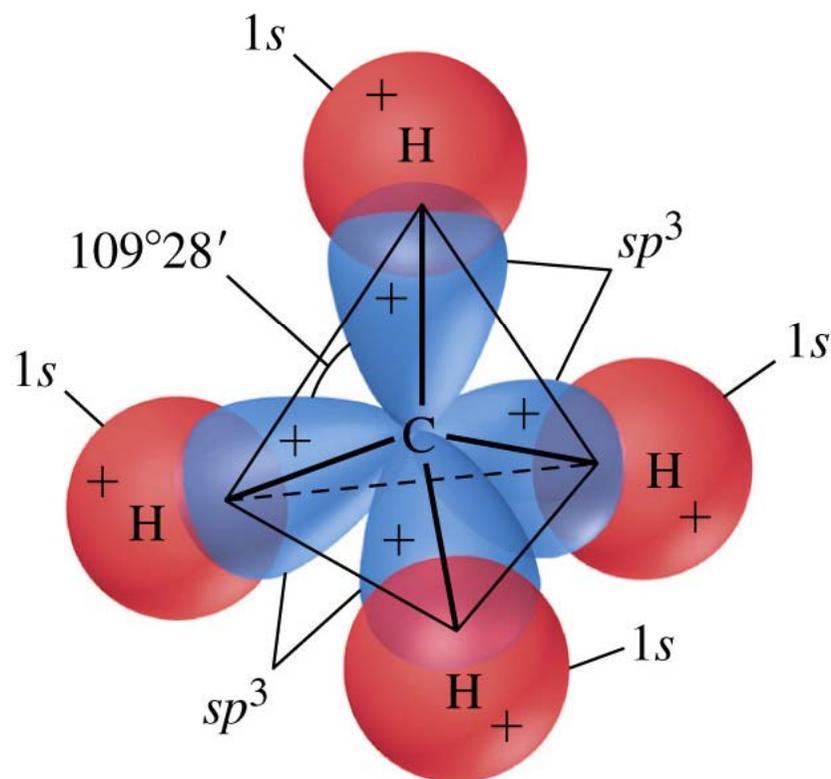


Hibridación de tipo SP^3

Ejemplo de Hibridación del átomo central.



Enlace y Estructura

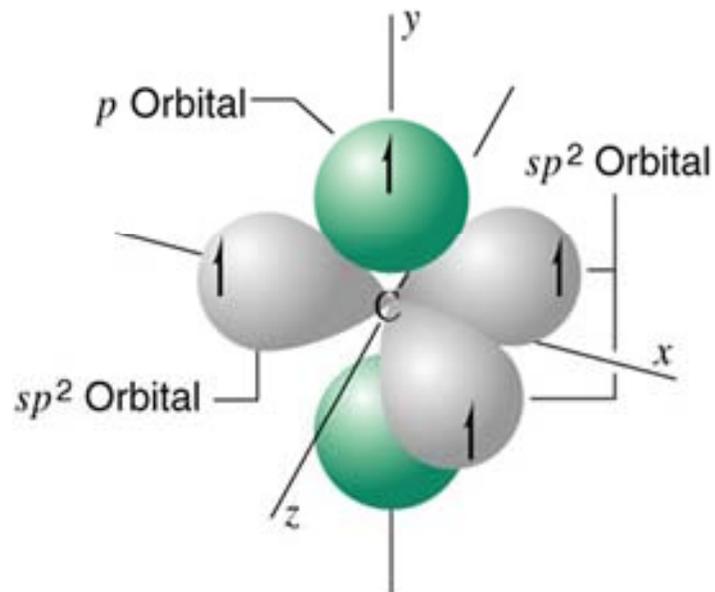


Hibridación de tipo SP^2

*Ejemplo de Hibridación
del átomo central.*

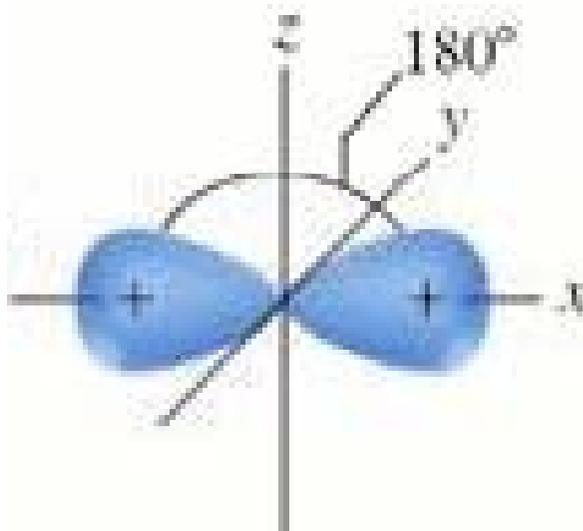


BF_3

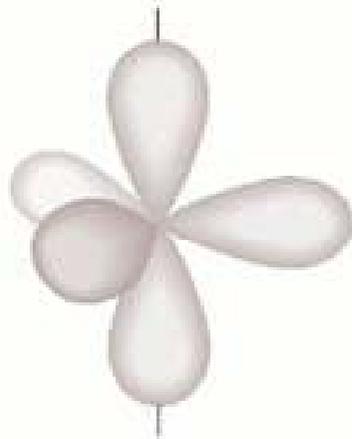


Hibridación de tipo SP

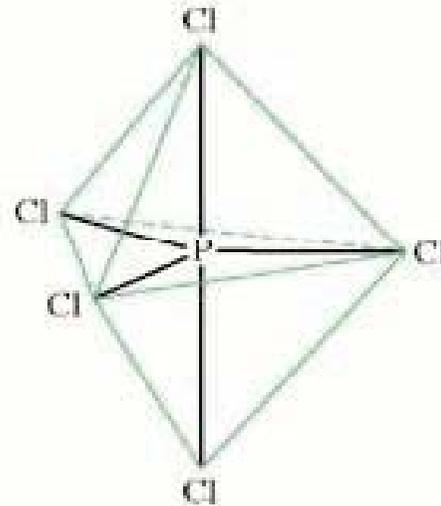
Ejemplo de Hibridación del átomo central.



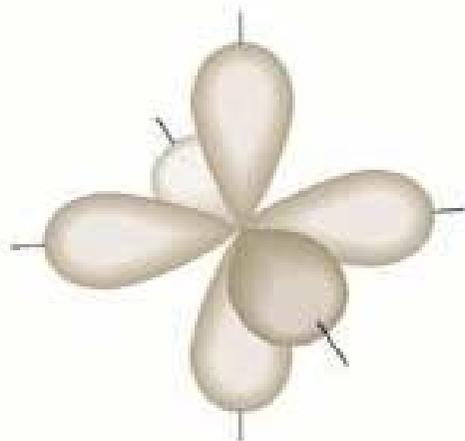
Hibridación de tipo SP^3d , SP^3d^2



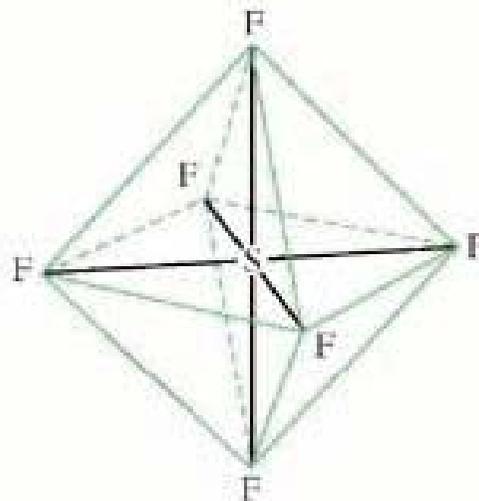
(a) Orbitales sp^3d



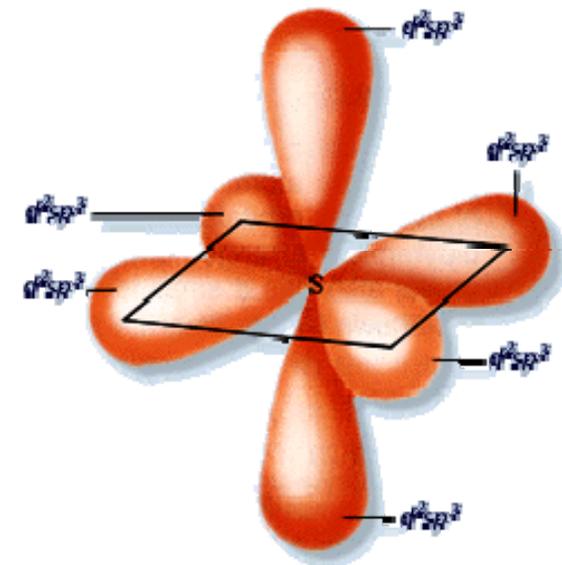
Estructura de bipirámide trigonal



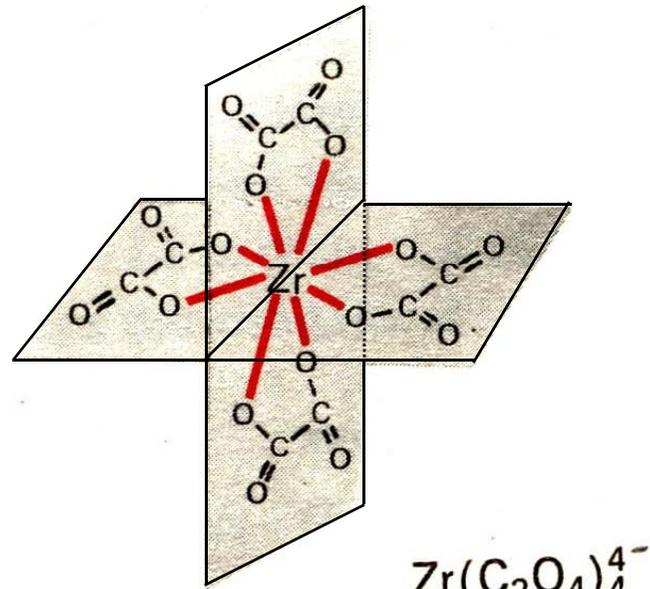
(b) Orbitales sp^3d^2



Estructura octaédrica

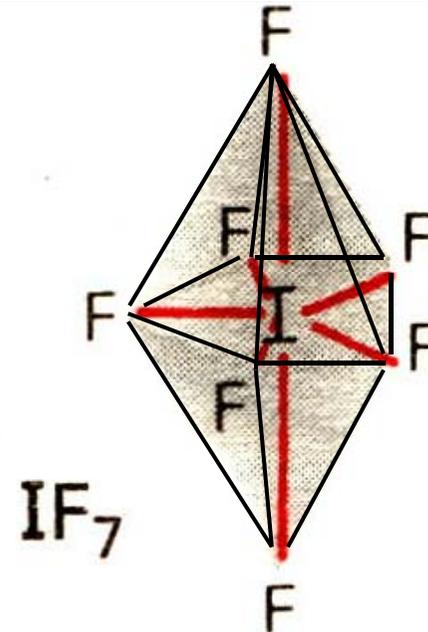


Otras geometrías moleculares



Coordinación 8

sp^3d^4

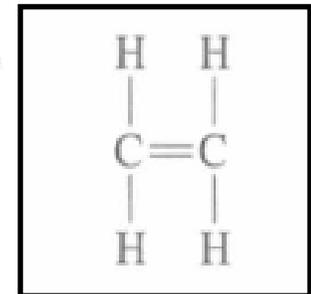


Coordinación 7: bp de
base pentagonal

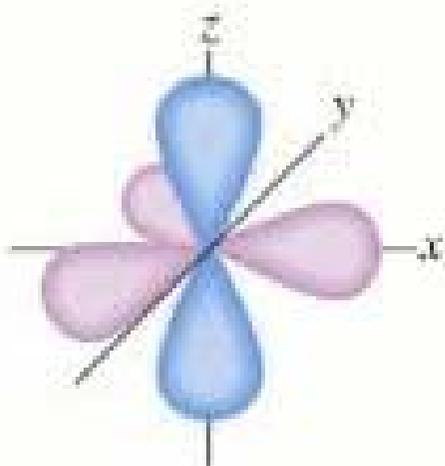
sp^3d^3

Enlaces covalentes múltiples

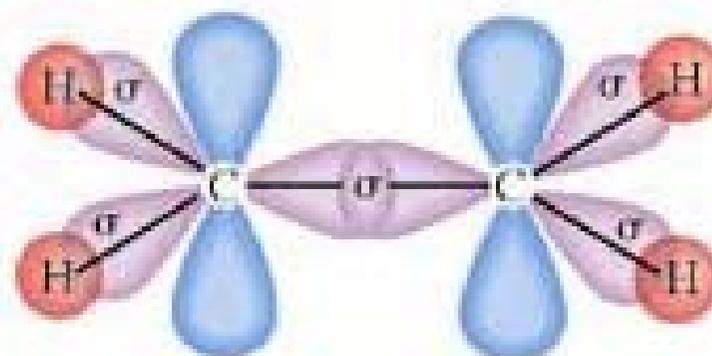
- El etileno tiene un enlace doble carbono-carbono en su estructura de Lewis.
- La teoría RPECV trata cada átomo de C como si estuviera rodeado por tres grupos de electrones en una ordenación trigonal-plana.



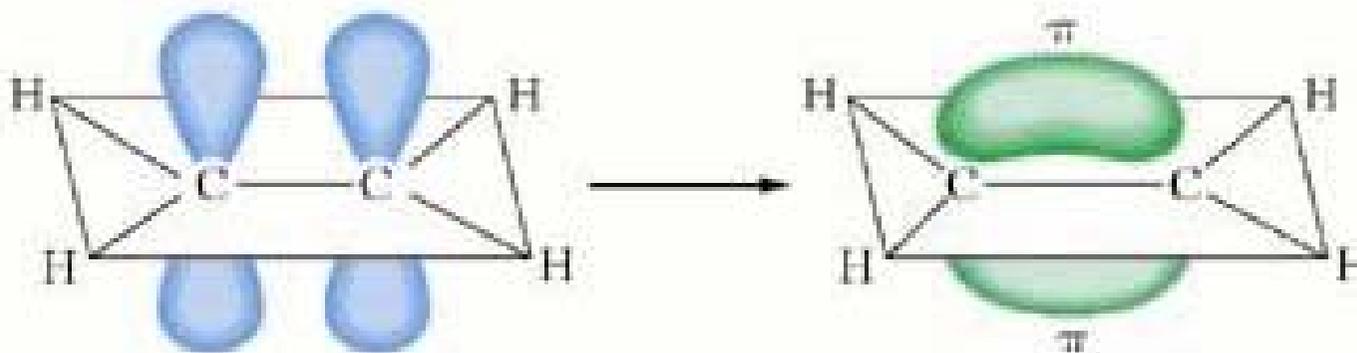
Etileno



El conjunto de orbitales $sp^2 + p$



Enlaces sigma (σ)



Solapamiento de orbitales p que conducen al enlace pi (π)

Teoría de orbitales moleculares



OM (Orbital molecular enlazante): La carga ahí tiende a estabilizar el enlace



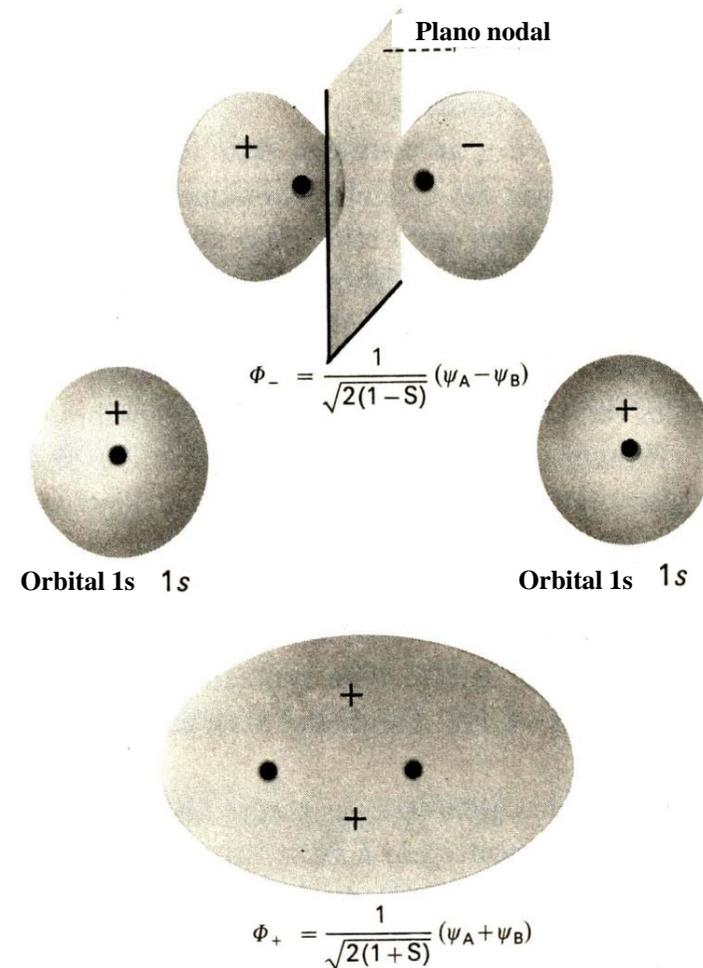
OM* (Orbital molecular antienlazante): La carga ahí tiende a desestabilizar el enlace

Teoría de orbitales moleculares

- Los orbitales moleculares abarcan dos o más átomos y son la combinación lineal de orbitales atómicos:

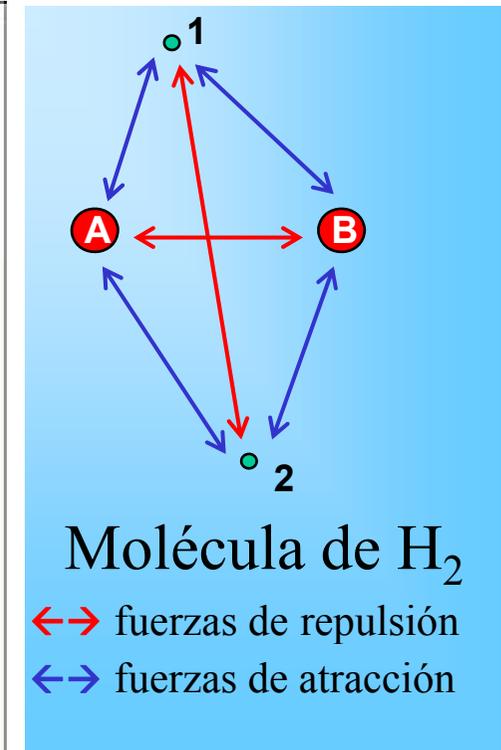
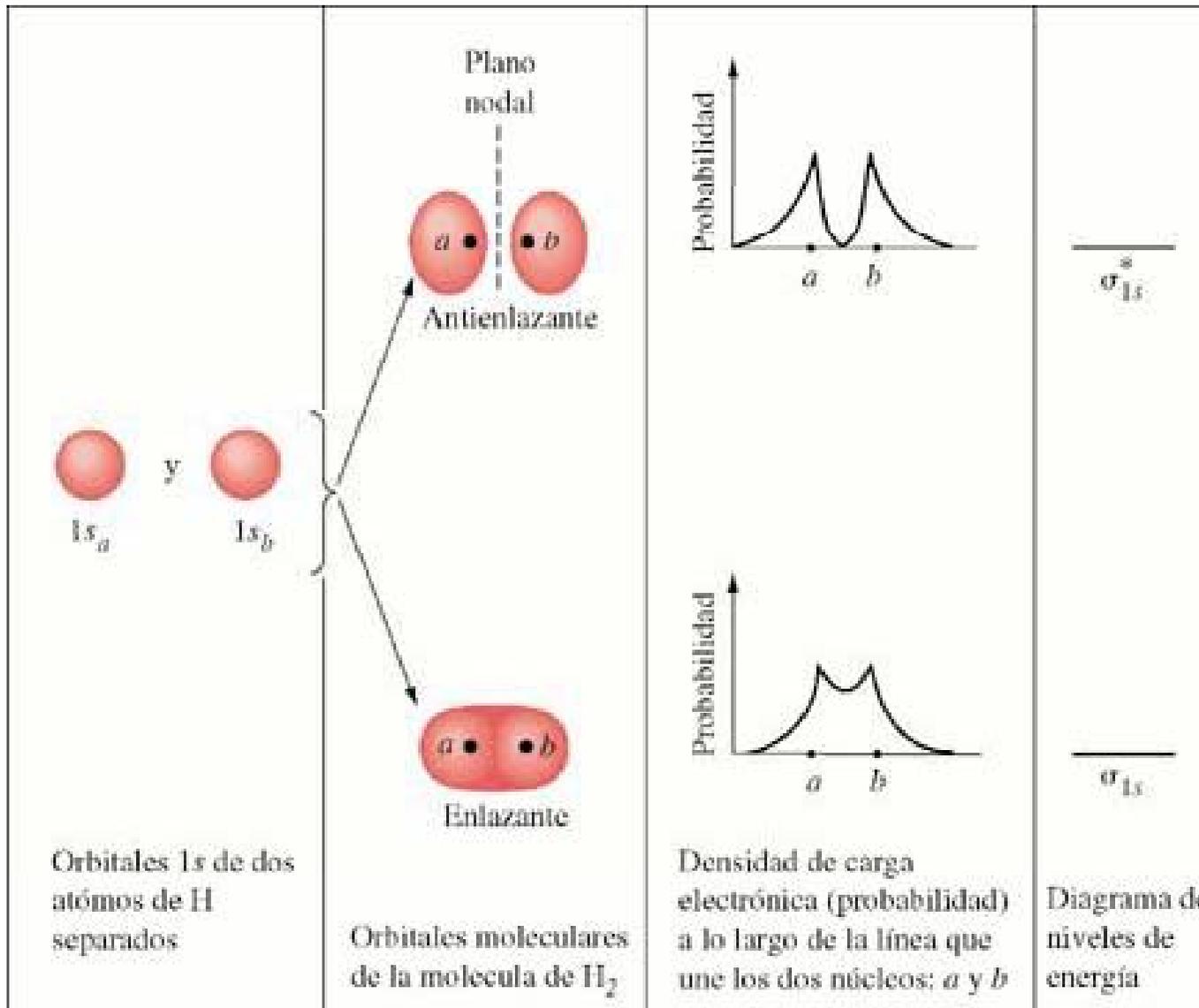
$$\Psi_1 = \varphi_1 + \varphi_2$$

$$\Psi_2 = \varphi_1 - \varphi_2$$



Representación en coordenadas esféricas de la parte angular de los orbitales enlazante y antienlazante.

Orbitales moleculares del Hidrogeno



Ideas básicas en relación con los orbitales moleculares

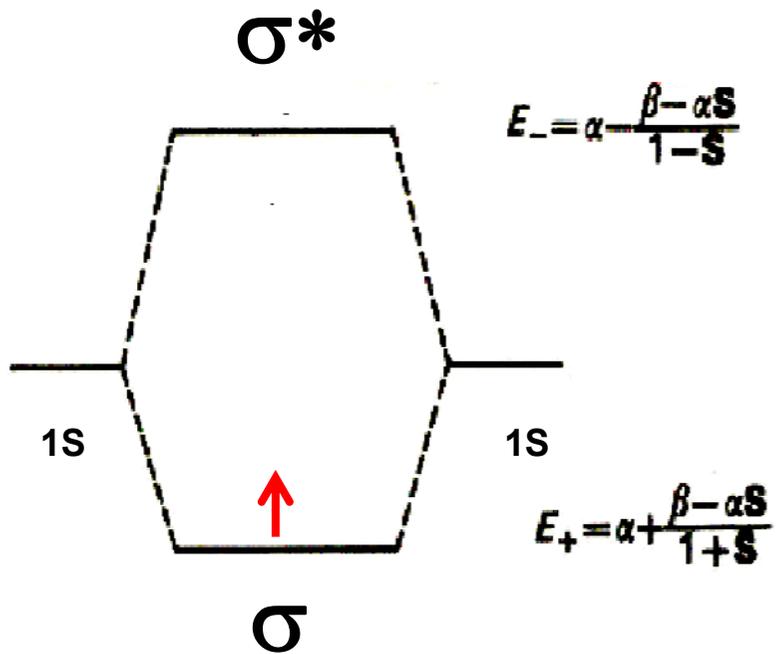
- ✓ Número de orbitales moleculares (OM) = número de orbitales atómicos.
- ✓ Se forman O.M. **enlazantes** y **antienlazantes** a partir de orbitales atómicos.
- ✓ Los electrones se colocan en los OM disponibles de energía más baja.
- ✓ Se cumple el principio de exclusión de Pauli.
- ✓ Se sigue la regla de Hund.

Orden de enlace

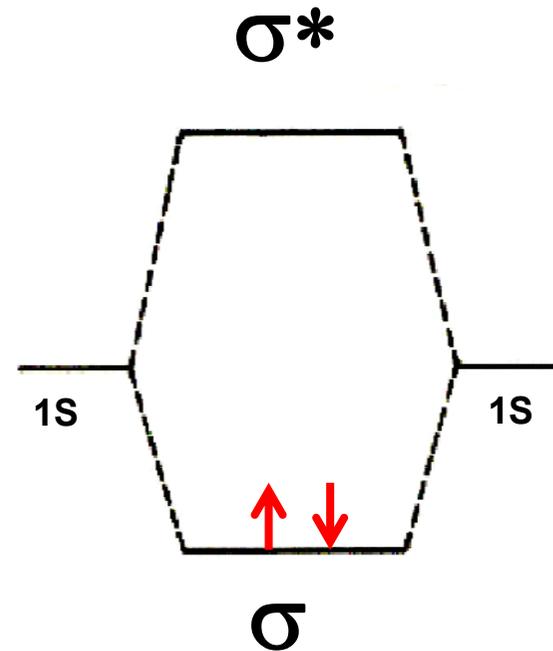
- Las especies estables tienen más electrones en los orbitales enlazantes que en los antienlazantes.

$$\text{Orden de enlace} = \frac{\text{n.º de } e^- \text{ en OM enlazantes} - \text{n.º de } e^- \text{ en OM antienlazantes}}{2}$$

Orbitales moleculares del Hidrogeno

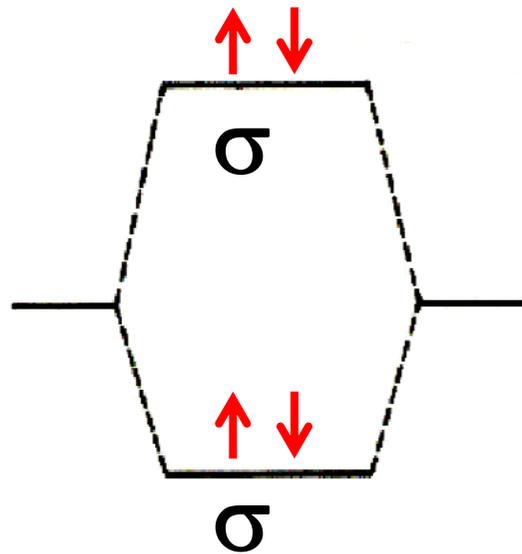


Niveles energéticos de los OM y OM* del H_2^+



Niveles energéticos de los OM y OM* del H_2

Moléculas Diatómicas



He^{+2}

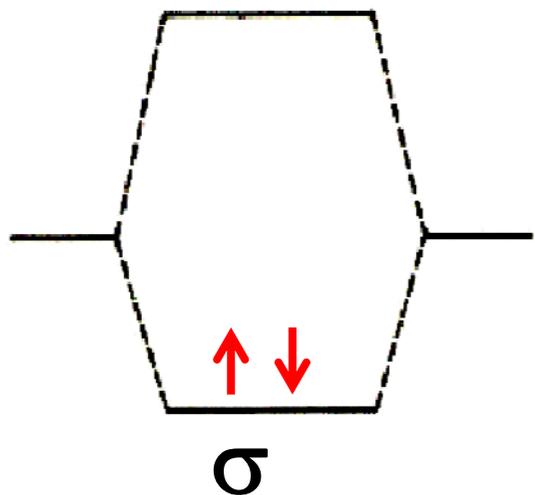
$$\text{O.E.} = (n^{\circ} e^{-}_{\text{enlazante}} - n^{\circ} e^{-}_{\text{antienlazante}}) / 2$$

$$\text{OE}_{\text{H}_2^{\equiv+}} = (1 - 0) / 2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{OE}_{\text{H}_2^{=+}} = (2 - 0) / 2 = 1$$

$$\text{OE}_{\text{He}_2^{\equiv+}} = (2 - 1) / 2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{OE}_{\text{He}_2^{=+}} = (2 - 2) / 2 = 0$$



He

Combinación de orbitales p

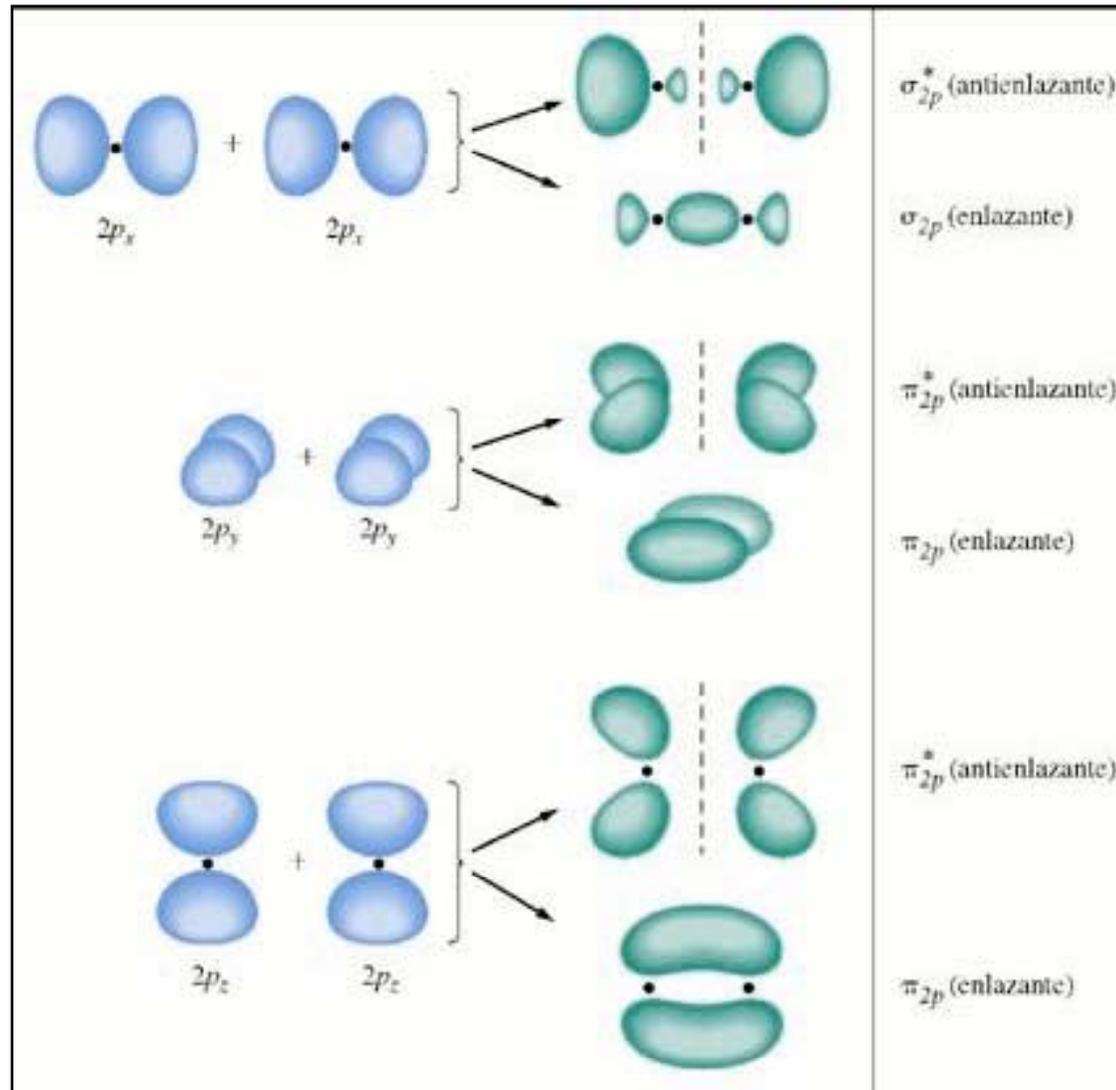


Diagrama de OM esperado del C₂

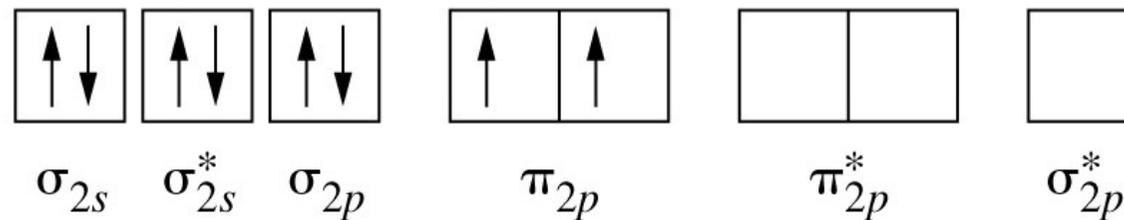
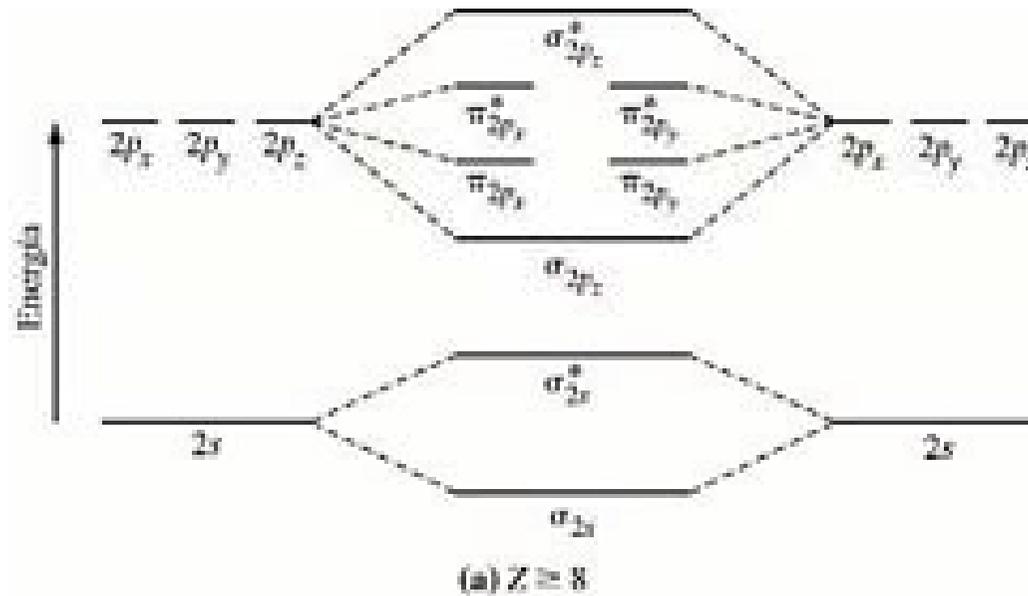
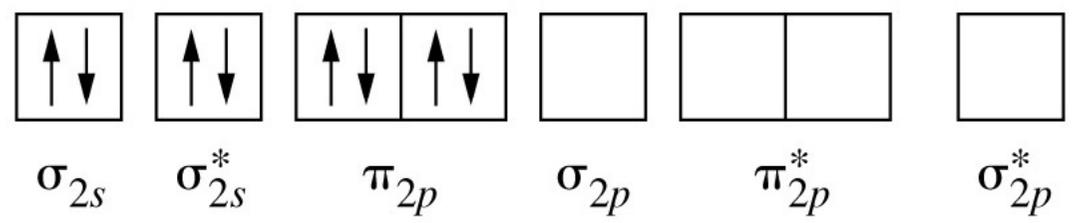
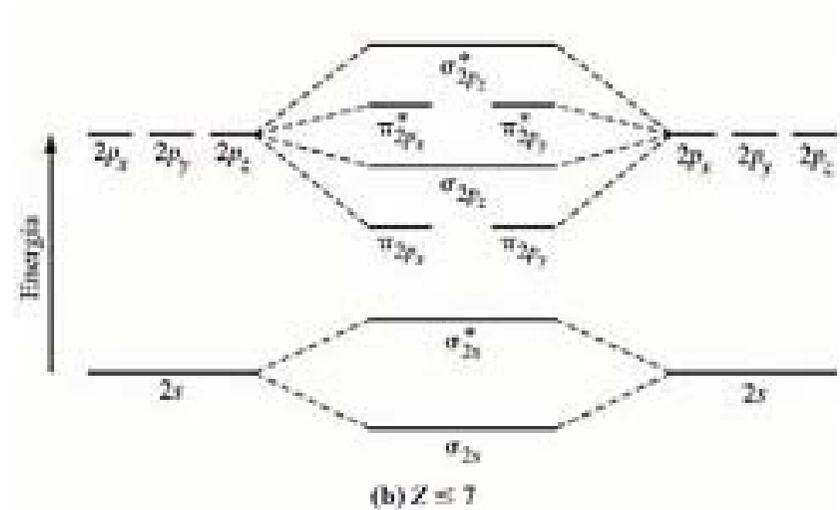
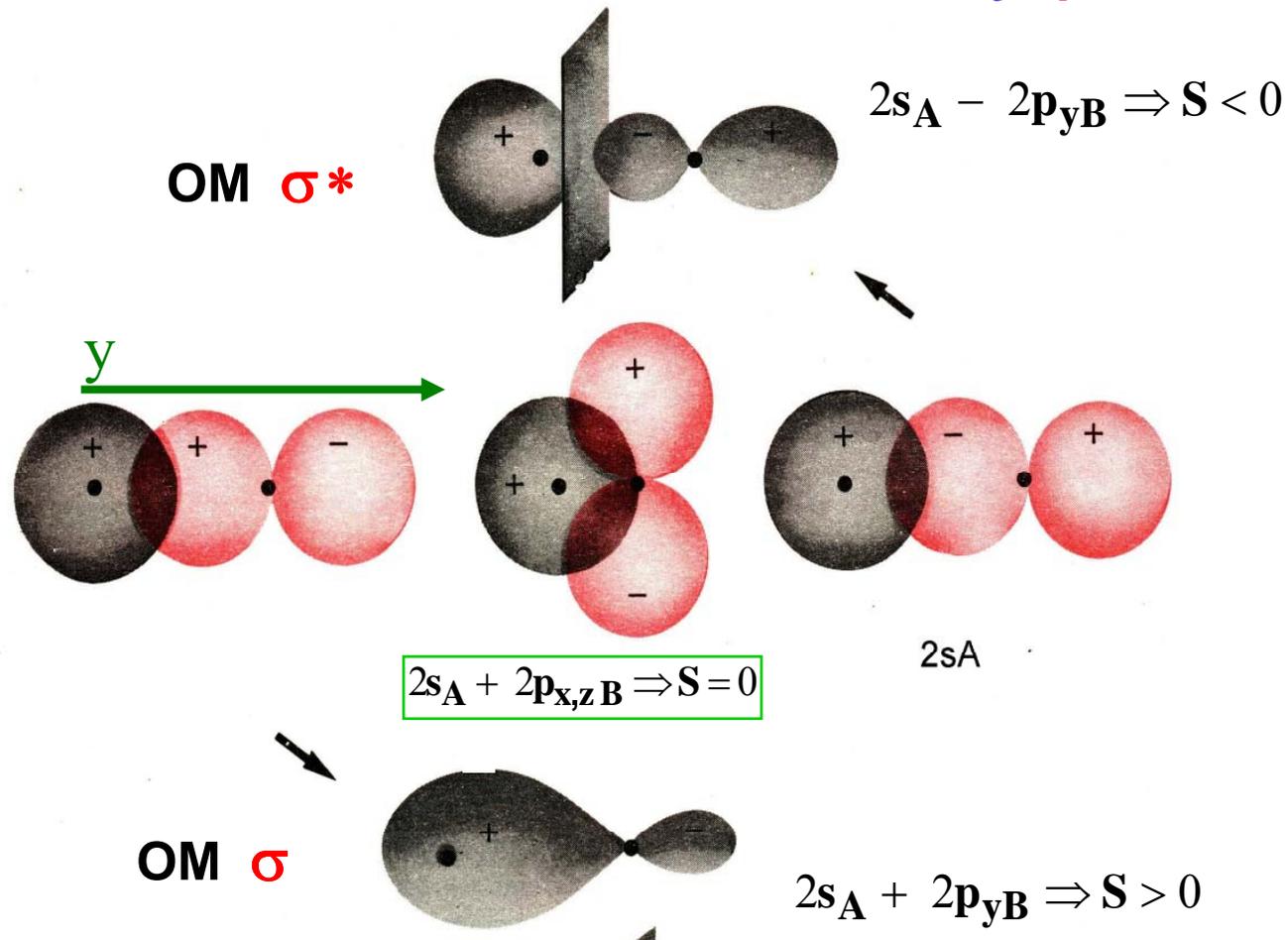


Diagrama de OM modificado del C₂



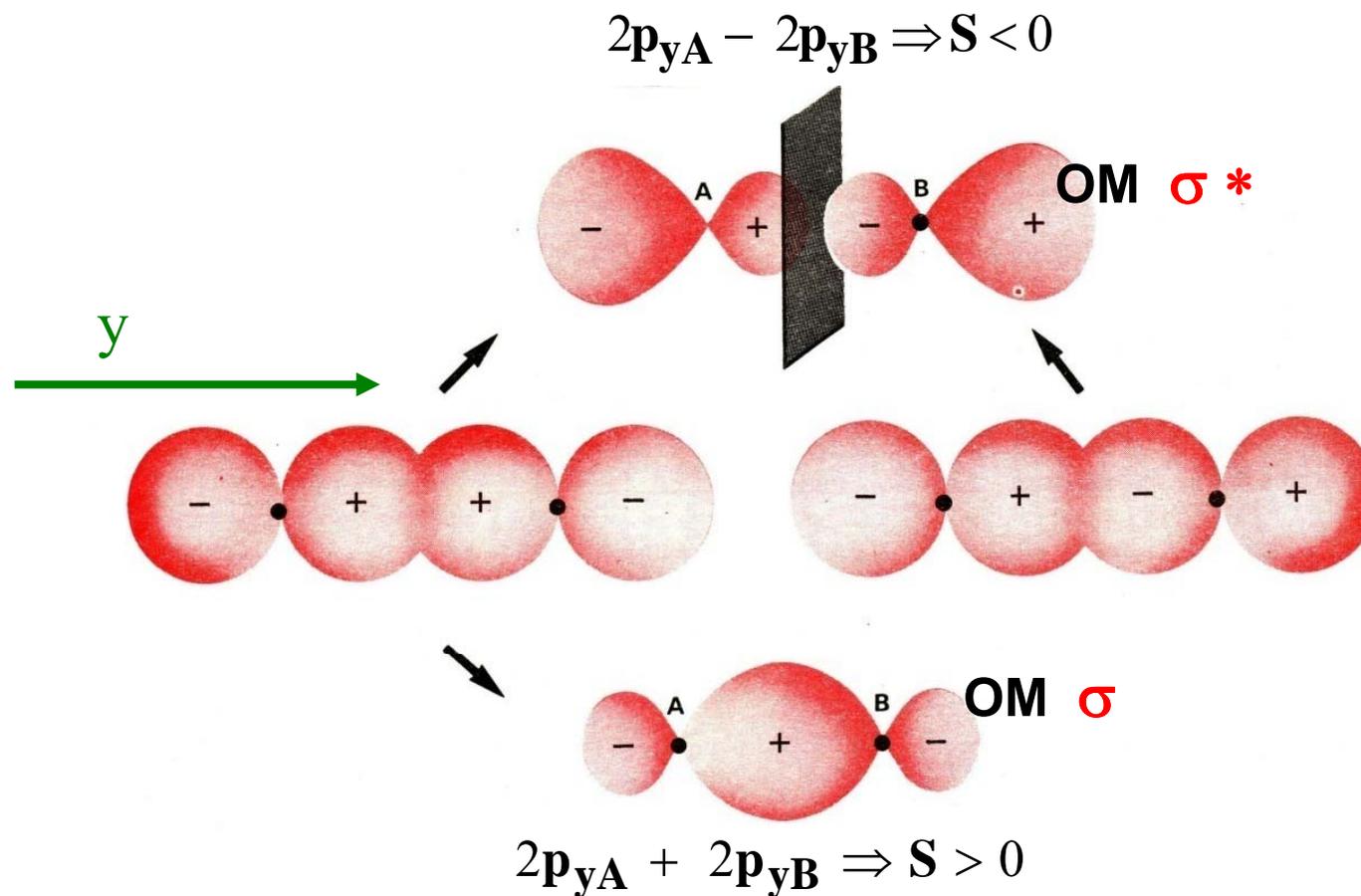
Orbitales Moleculares σ, π

Interacción σ entre funciones **s** y **p**



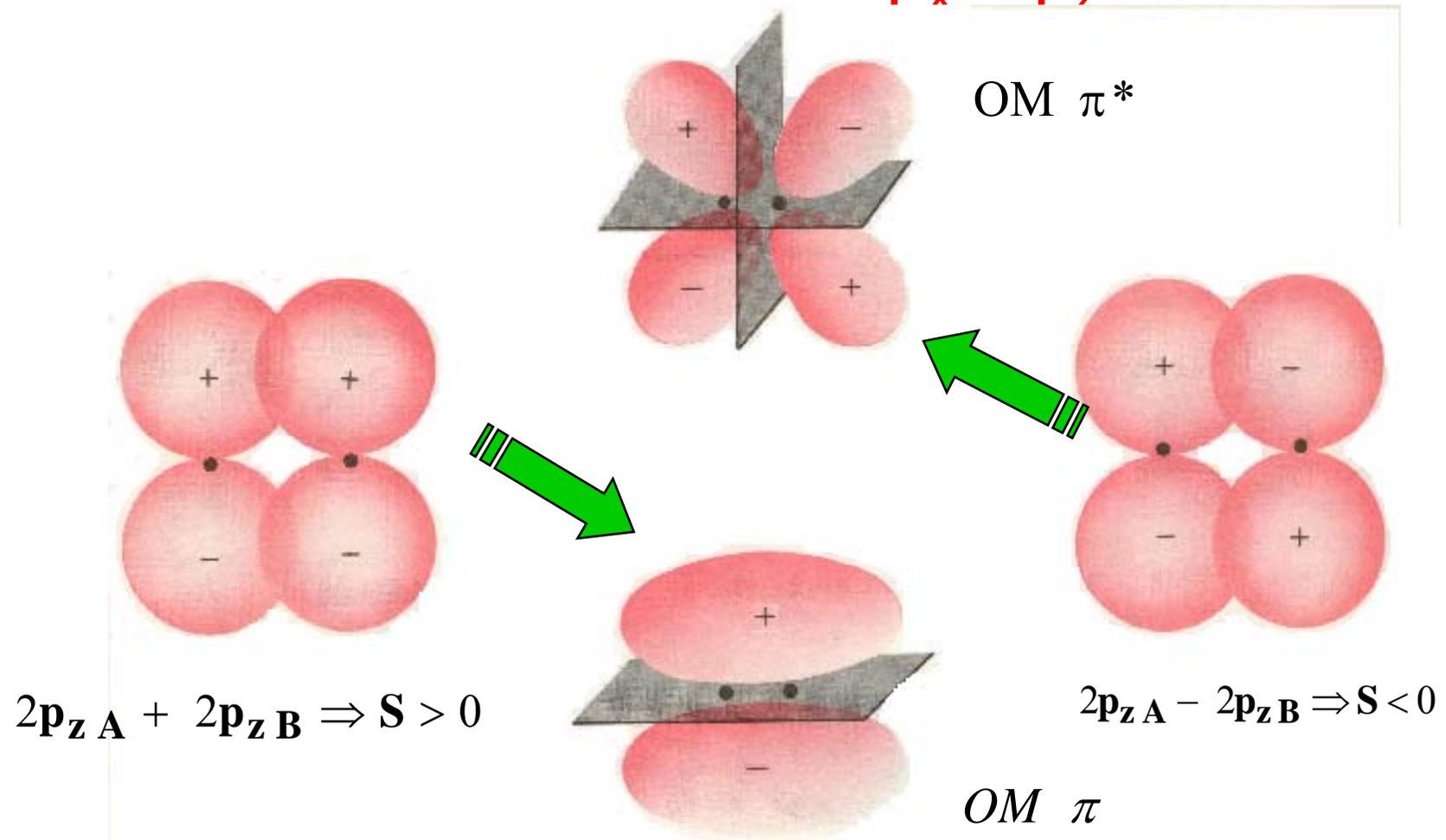
Orbitales Moleculares σ, π

Interacción σ entre funciones p



Orbitales Moleculares π

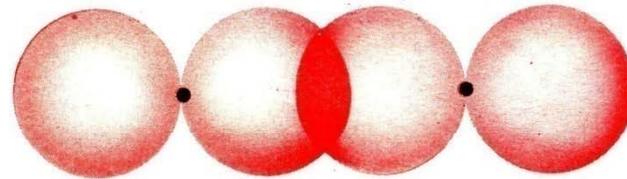
Interacción π entre funciones p_x o p_y



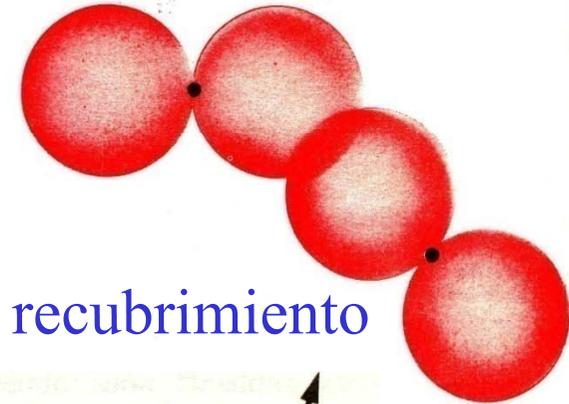
Orbitales Moleculares: Simetría σ , π

Direccionalidad del enlace

Interacción σ_{p-p}

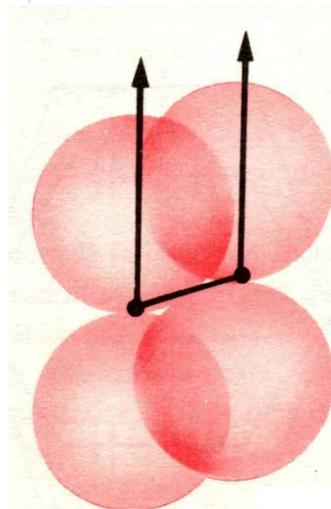


Buen recubrimiento

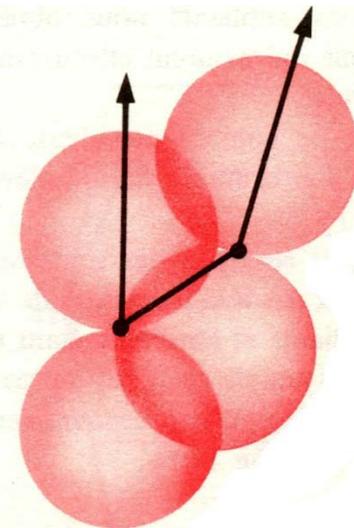


Mal recubrimiento

Interacción π_{p-p}

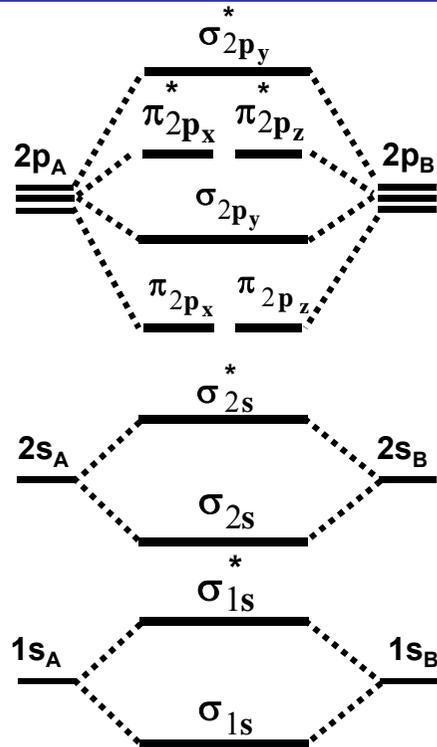


Buen recubrimiento

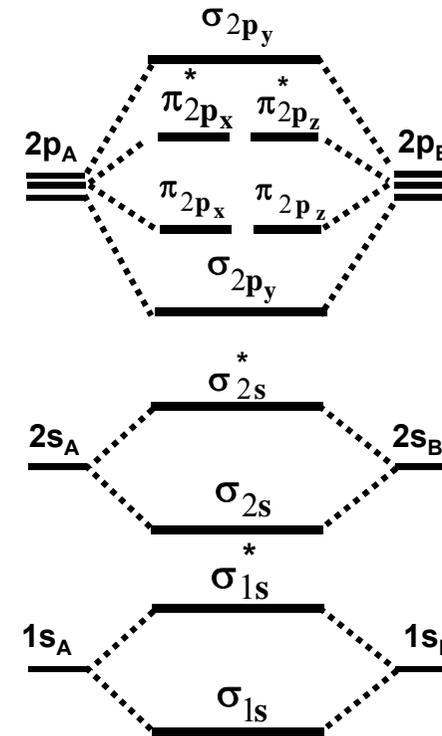


Mal recubrimiento

Diagrama de Orbitales Moleculares



Demás moléculas diatómicas



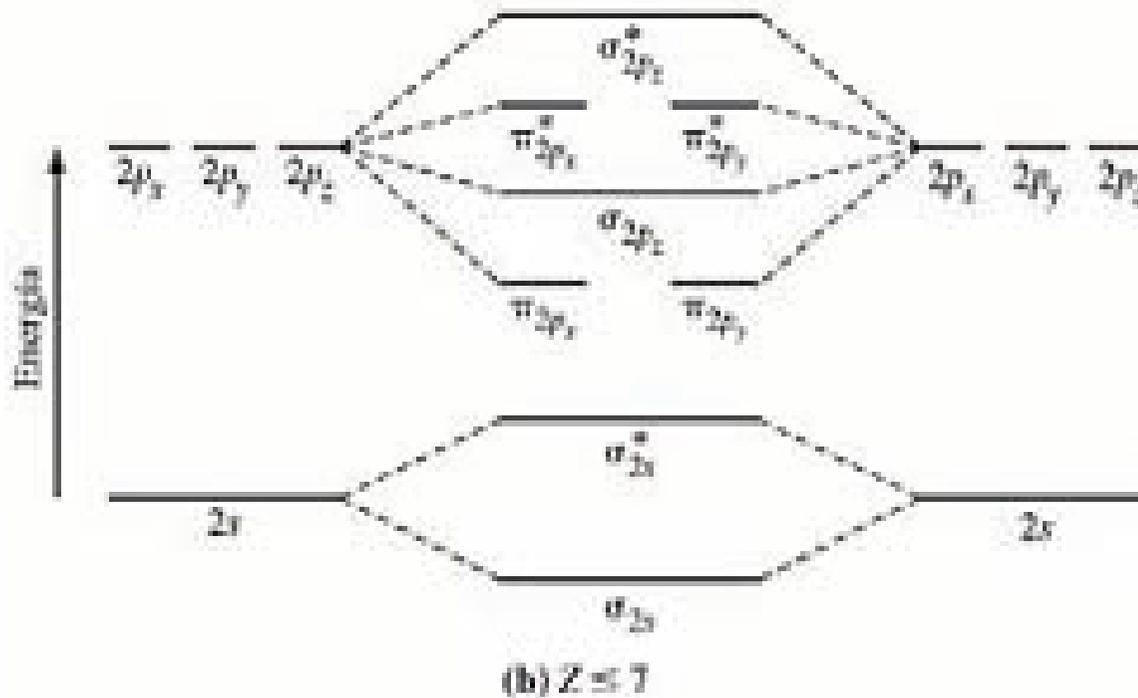
O_2, F_2, Ne_2

$$\text{Orden de enlace (OE)} = \frac{1}{2} \cdot (e^- \text{ en OM} - e^- \text{ en OM}^*)$$

- Los subniveles totalmente ocupados (OE=0) no contribuyen a la estabilización.

Especie estable \Leftrightarrow OE > 0.

Diagrama de O.M. del C₂



~~He~~₂ ⇒ OE = 0

~~Be~~₂ ⇒ OE = 0

O₂⁺ ⇒ OE = 2.5

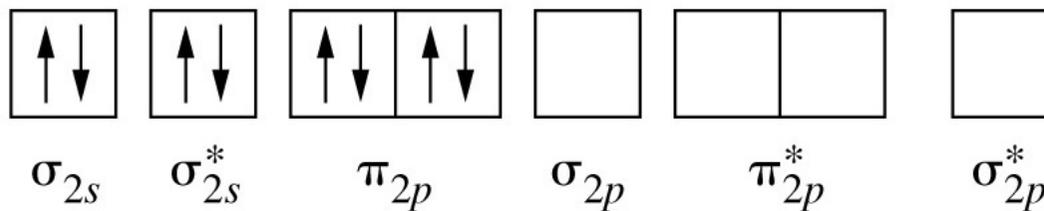
O₂ ⇒ OE = 2

O₂⁻ ⇒ OE = 1.5

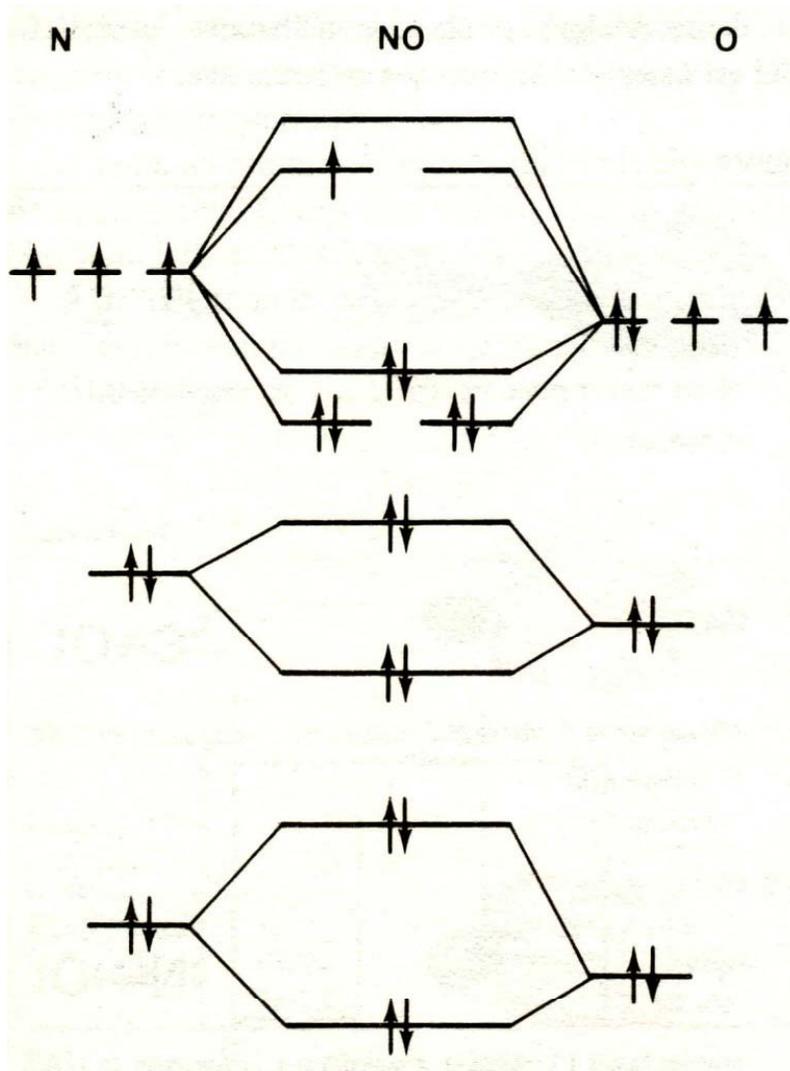
O₂²⁻ ⇒ OE = 1

N₂⁺ ⇒ OE = 2.5

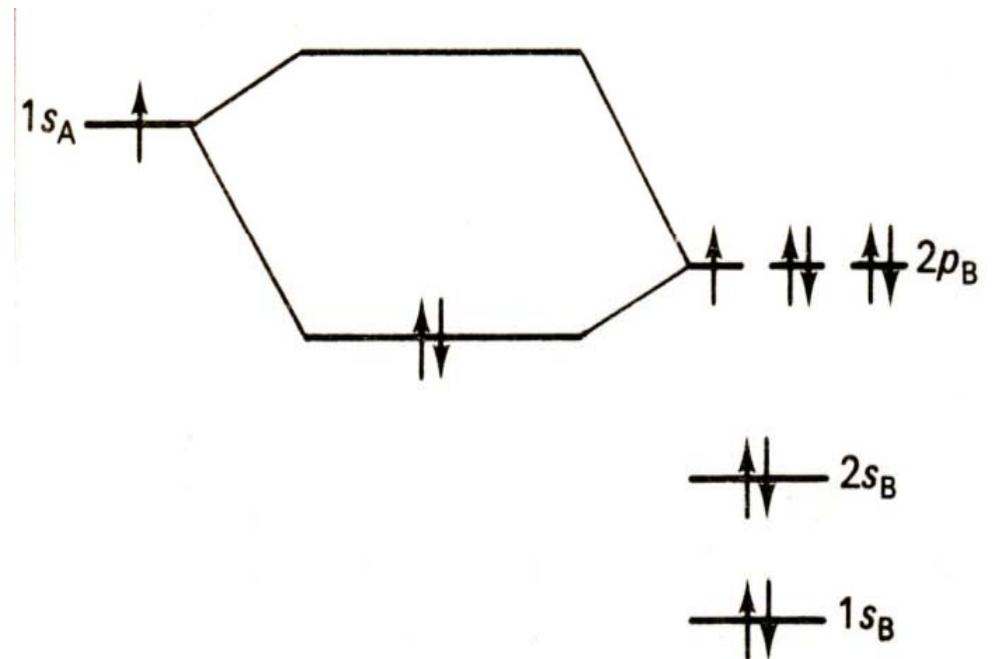
N₂ ⇒ OE = 3



Moléculas diatómicas heteronucleares

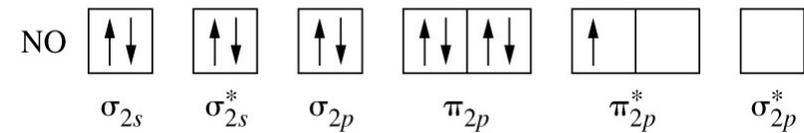
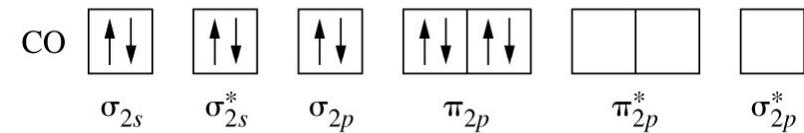
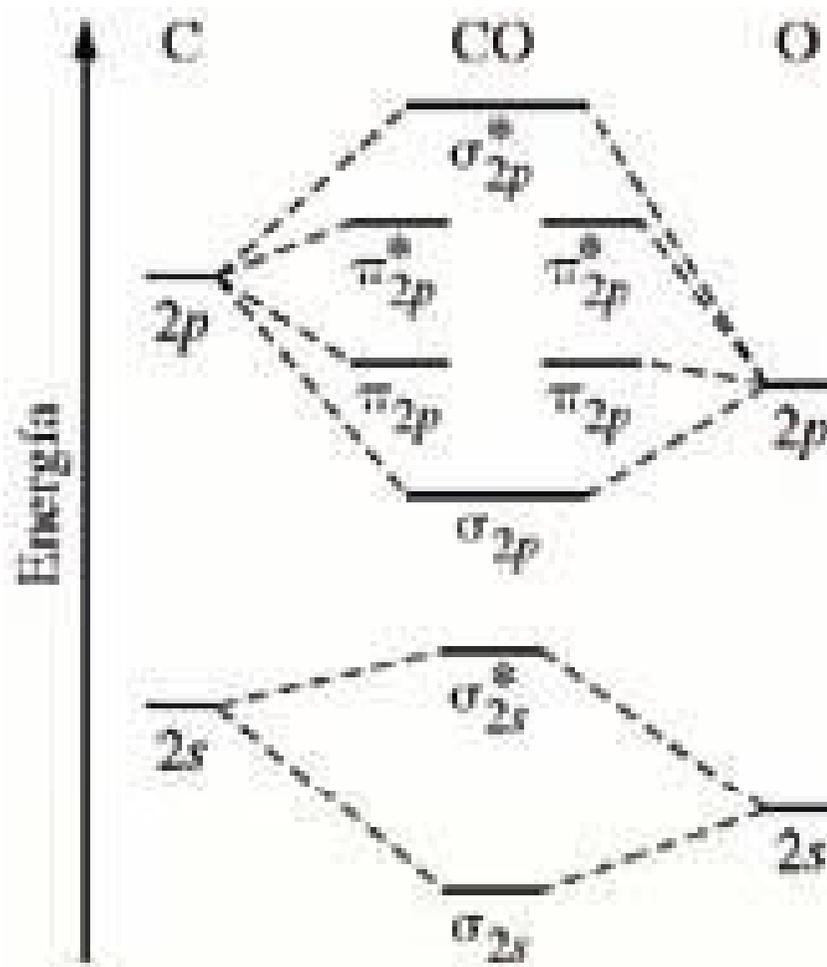


Descripción de la molécula NO

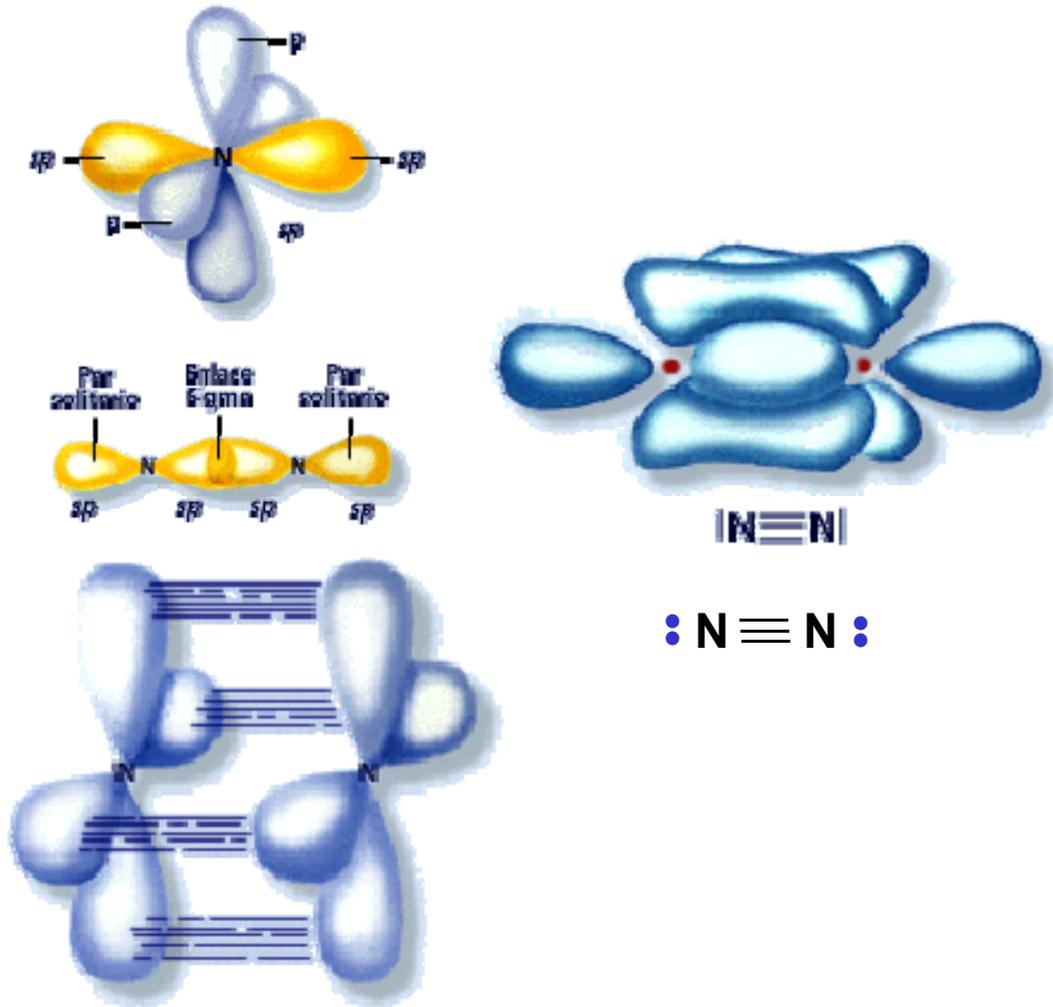


Description de la molécule HF

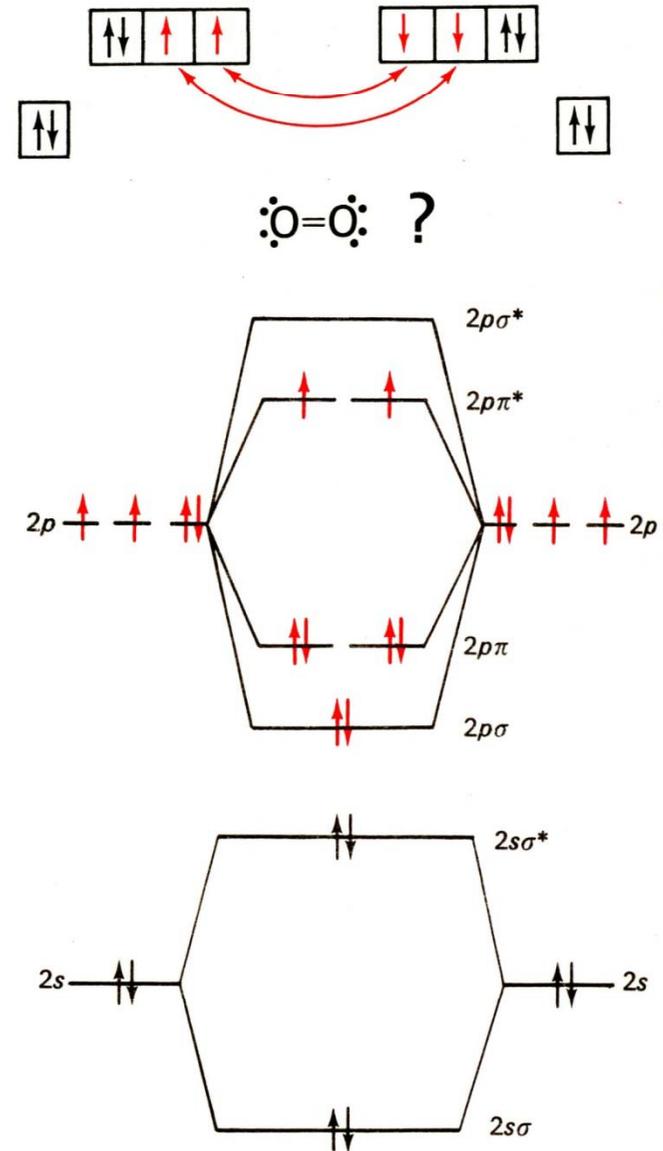
Moléculas diatómicas heteronucleares



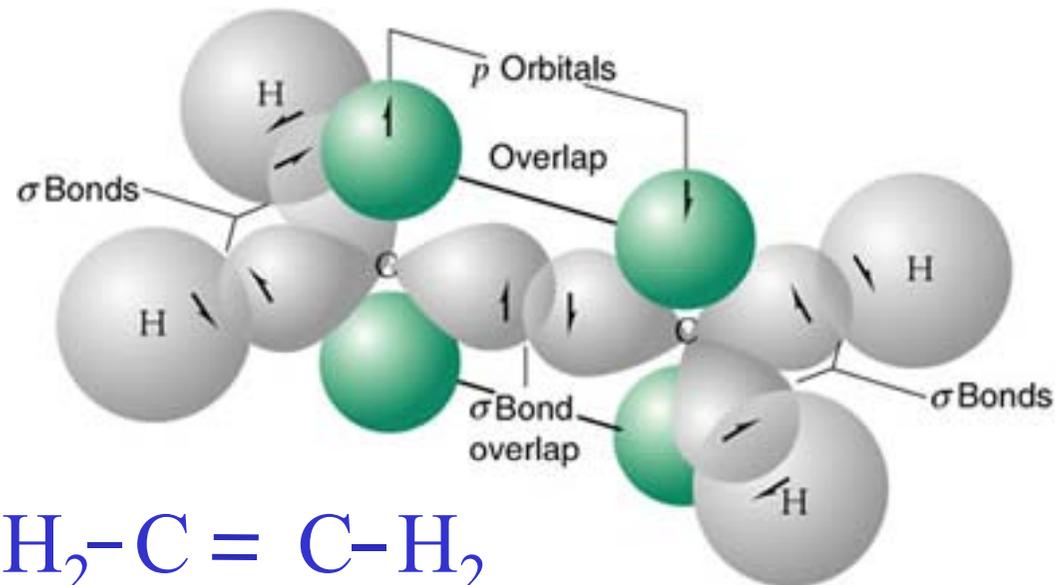
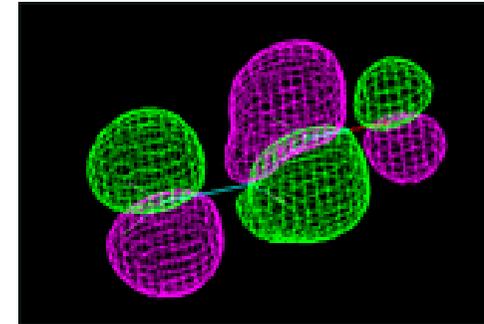
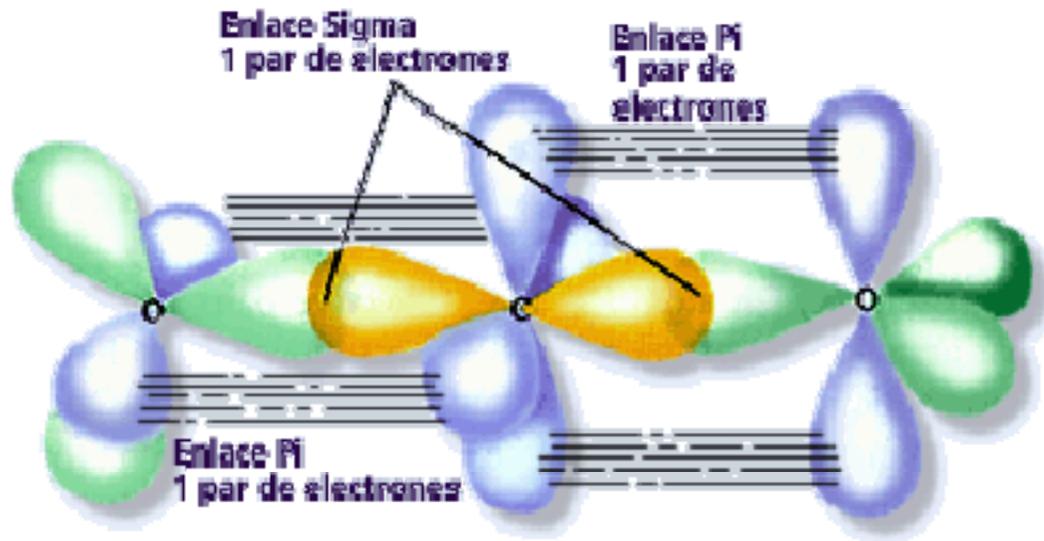
Moléculas con dobles y triples enlaces



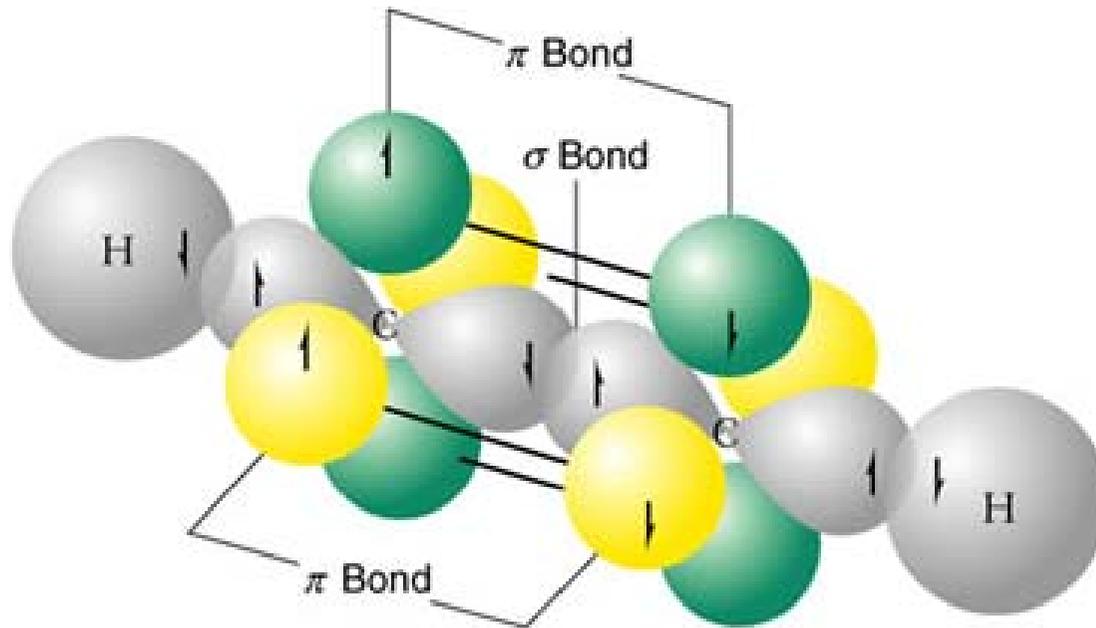
Representación de la molécula N_2



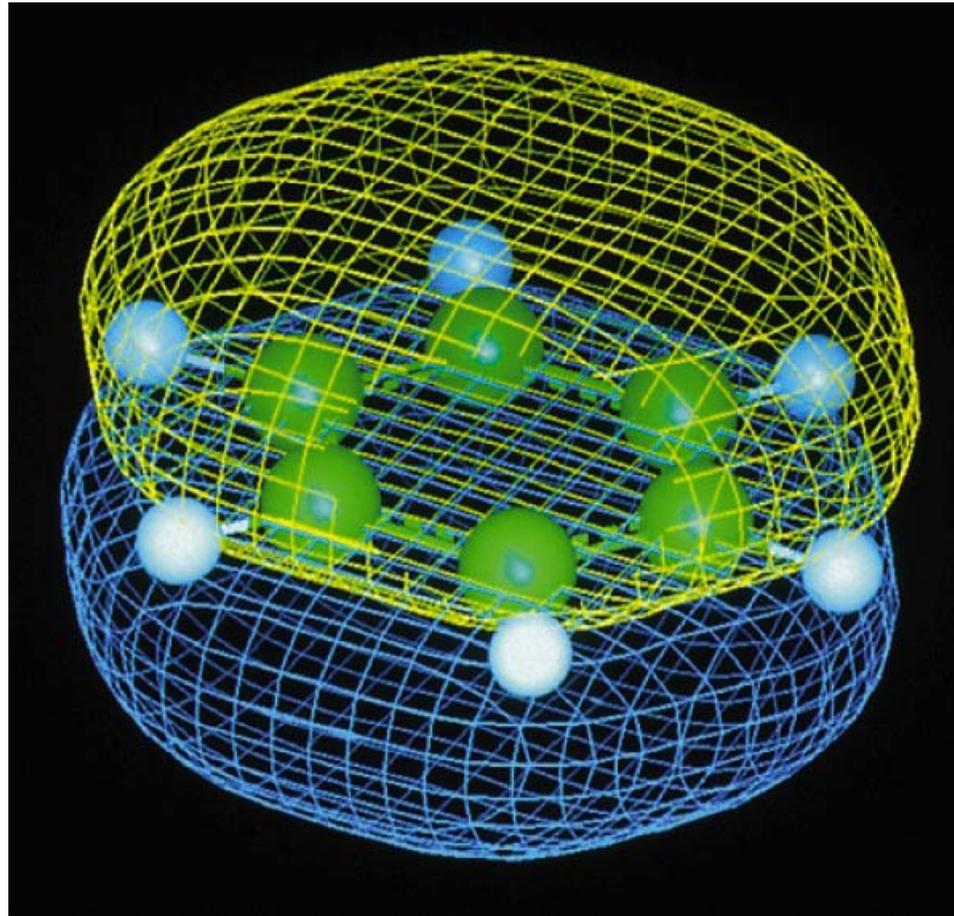
Moléculas con dobles enlaces



Moléculas con triples enlaces



Representación de la molécula acetileno



Fin de Capítulo