

CAPITULO II

ENLACE QUÍMICO

**EXISTEN 118 ELEMENTOS QUIMICOS
HASTA AHORA CONOCIDOS Y
SIN EMBARGO A PARTIR DE ELLOS SE
PUEDEN GENERAR MILLONES DE
COMPUESTOS .**

**CADA ELEMENTO QUIMICO Y CADA
COMPUESTO TIENEN SUS
PROPIEDADES INHERENTES.**

DEFINICION

Fuerza que mantiene unidos a átomos para generar compuestos.

TEORIA DE LEWIS – LANGMUIR

Al formarse un enlace químico , los átomos ganan, pierden ó comparten electrones hasta alcanzar la configuración electrónica externa de un gas inerte ó raro ahora llamados gases nobles.

EL TIPO DE ENLACE QUIMICO DEPENDERÁ SI LOS ELECTRONES SON TRANSFERIDOS ó COMPARTIDOS.

Existen muchas excepciones a la llamada " Regla de Octeto".

TEORIA MODERNA DEL ENLACE QUÍMICO

a) Muestra porque los compuestos tienen fórmulas químicas particulares :

Existe una relación entre las fórmulas químicas y las estructuras electrónicas externas de los átomos.

Son los electrones de valencia los que participan en los enlazamientos químicos.

Los *electrones de valencia* son los electrones de la configuración electrónica externa de un átomo y los que participan en el enlace químico.

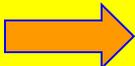
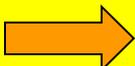
<u>Grupo</u>	<u>Configuración</u>	<u># de e⁻ valencia</u>
1A	ns^1	1
2A	ns^2	2
3A	ns^2np^1	3
4A	ns^2np^2	4
5A	ns^2np^3	5
6A	ns^2np^4	6
7A	ns^2np^5	7
8A	ns^2np^6	8

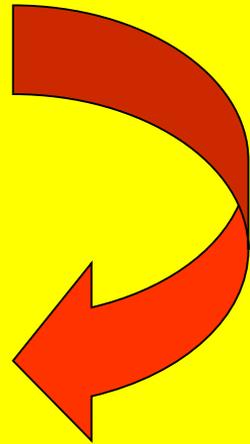
b) Los átomos siguen la tendencia general y universal de todos los sistemas mecánicos que es el alcanzar *UN ESTADO DE MENOR ENERGIA.*

c) Las moléculas ó compuestos presentan geometrías definidas.

TIPOS DE ENLACES QUÍMICOS

ENLACES INTERATOMICOS :

Enlace Iónico		forman CRISTALES
Enlace Covalente		forman MOLECULAS
Enlace Metálico		forman CRISTALES



ENLACES INTERMOLECULARES :

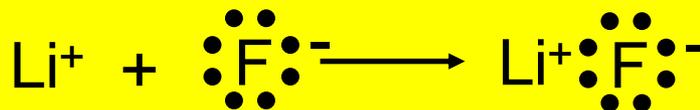
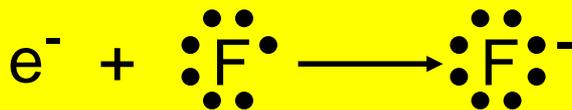
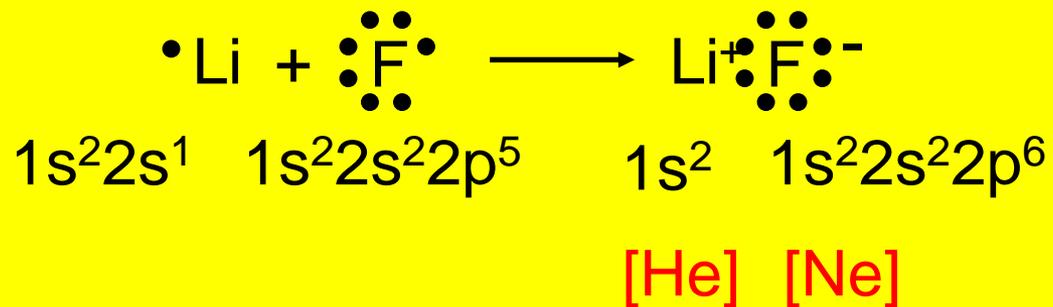
- Enlace Dipolo – Dipolo.**
- Enlace Puente de Hidrógeno.**
- Enlace de Van Der Waals.**

ENLACE IONICO

Es una fuerza de tipo electrostática debido a la formación de iones de cargas opuestas.

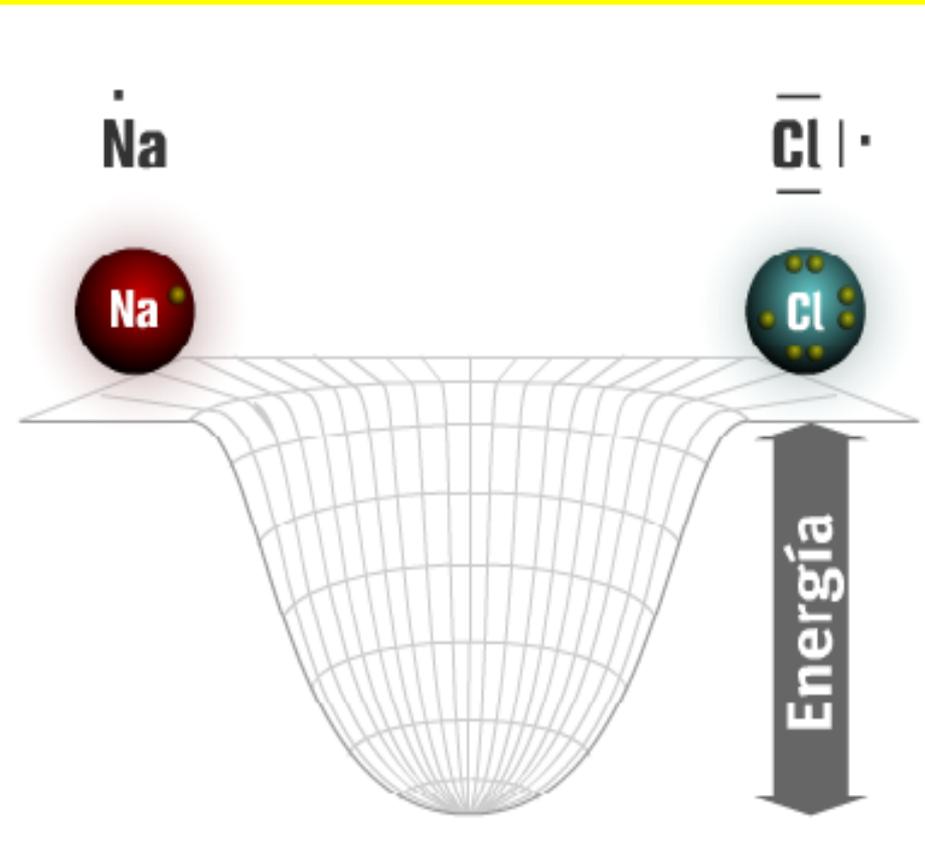
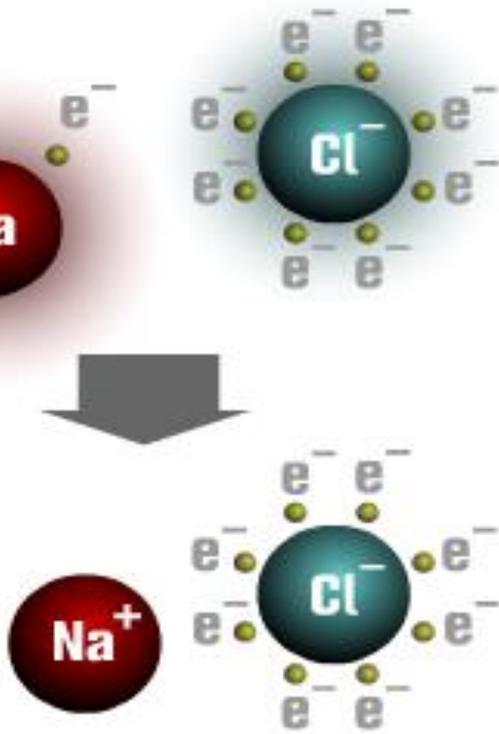
Existe transferencia de electrones del elemento de Bajo Potencial de Ionización (Grupos : IA, IIA, Parte del IIIA y algunos metales de transición) **al elemento de Alta Afinidad electrónica** (Grupos : VIIA, VIA y el nitrógeno).

Ejemplo de un ENLACE IONICO

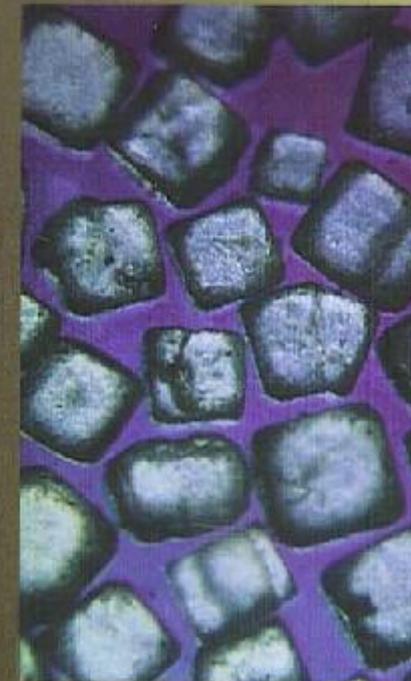
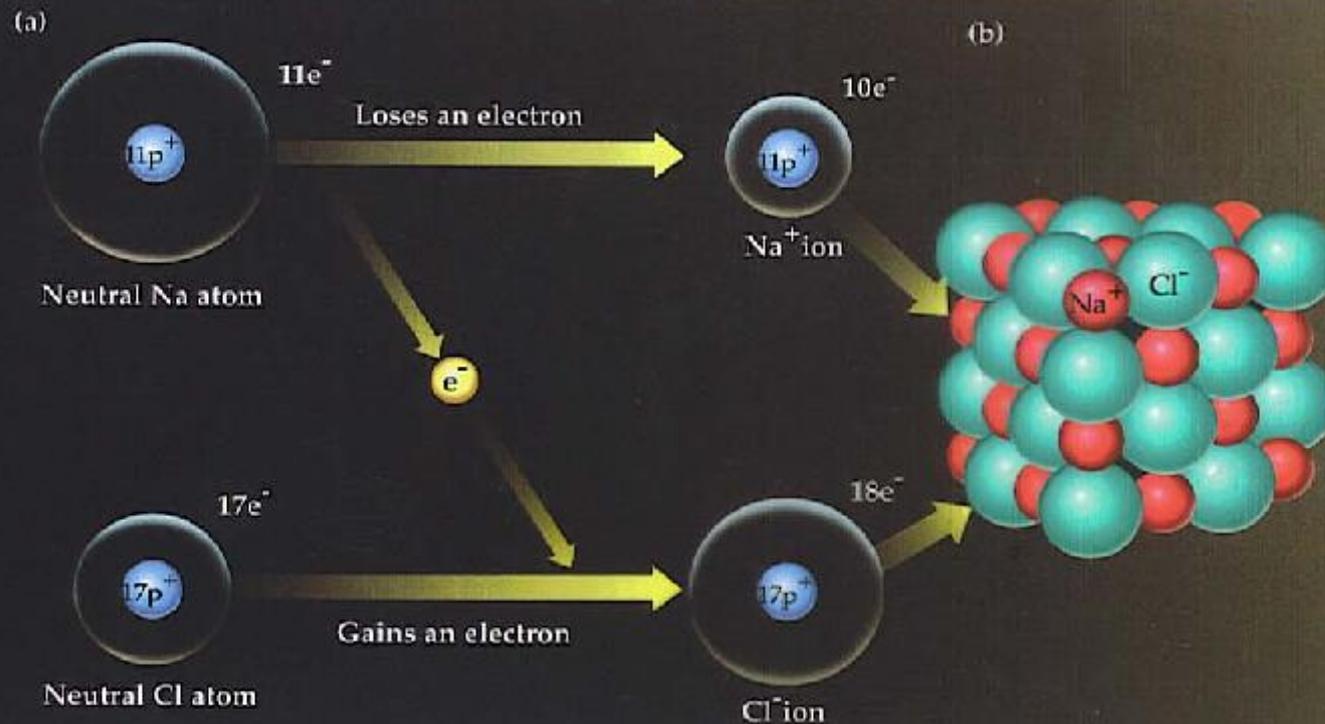


FORMACION DEL CLORURO DE SODIO

NaCl
Cristal de cloruro sódico



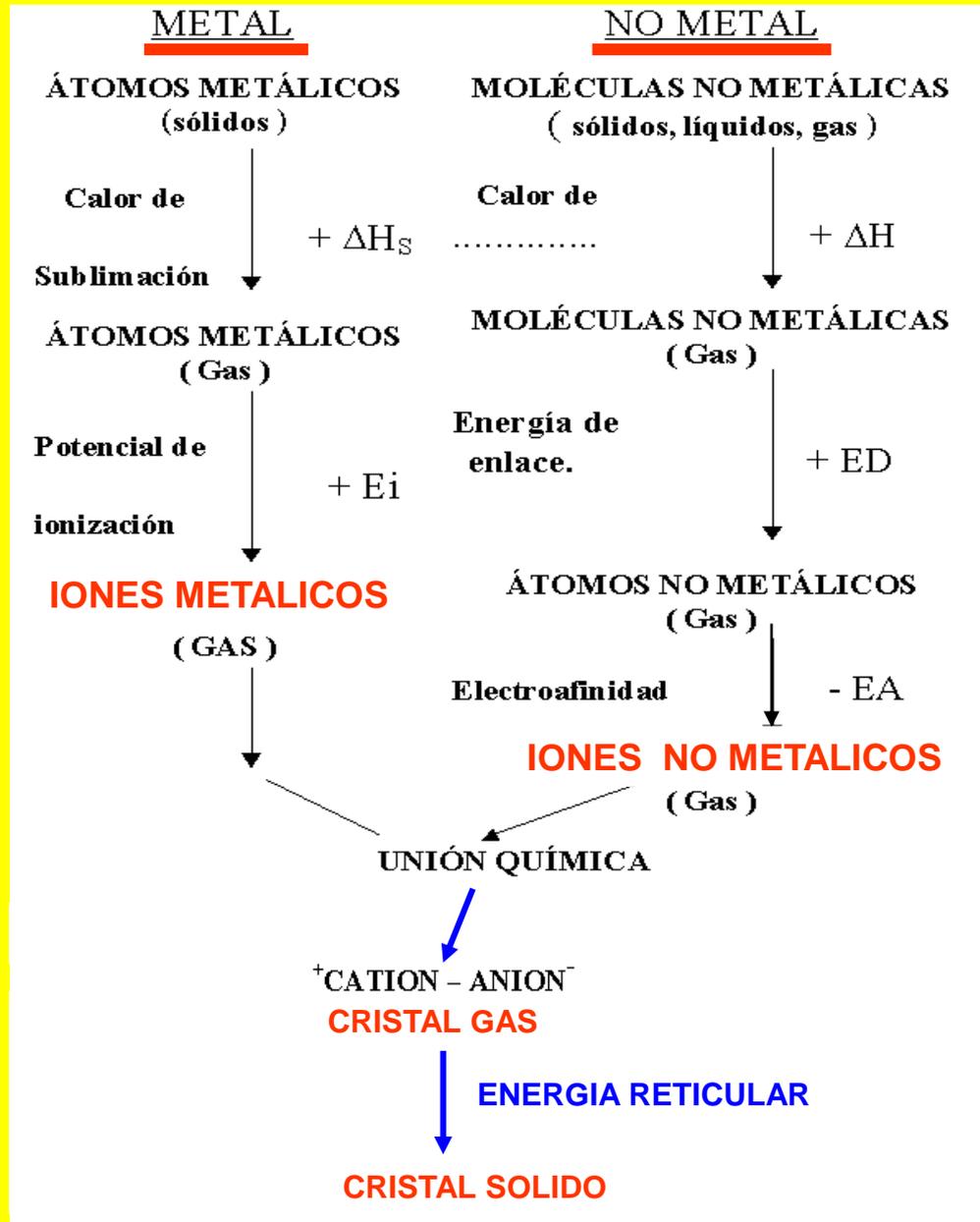
FORMACION DEL CLORURO DE SODIO



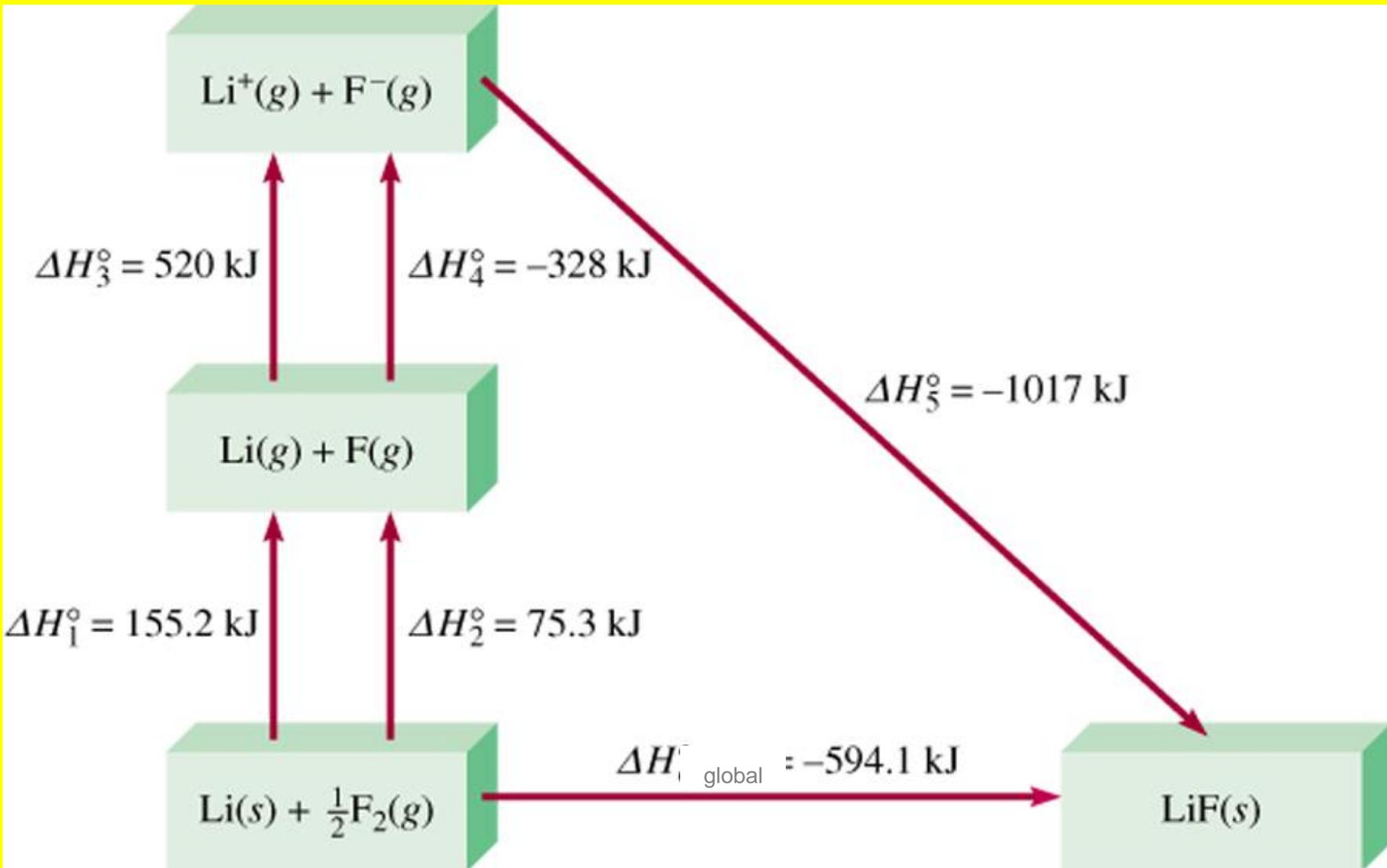
CICLO DE BORN – HABERN

Permite calcular la energía involucrada en la formación de un compuesto iónico o par iónico a partir de sus elementos METAL y NO METAL.

CICLO DE BORN – HABERN



CICLO DE BORN-HABER para determinar energías reticulares



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

ENERGÍA ELECTROSTÁTICA O RETICULAR

Energía reticular (E) es la energía requerida para separar completamente en iones gaseosos un mol de un compuesto iónico sólido.

$$E = k \frac{Q_+ Q_-}{r}$$

Q_+ es la carga en el catión

Q_- es la carga en el anión

r es la distancia entre los iones

La Energía reticular **aumenta** con el **aumento** de Q y **disminuye** con el **aumento** de r .

<u>Ejm</u>	<u>Energ.reticular (KJ)</u>	
MgF ₂	2957	Q= +2,-1
MgO	3938	Q= +2,-2
LiF	1036	$r F < r Cl$
LiCl	853	

ENERGIAS RETICULARES DE ALGUNOS COMPUESTOS IONICOS

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Compound	Lattice Energy (kJ/mol)
LiF	1030	MgCl ₂	2326
LiCl	834	SrCl ₂	2127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3795
NaCl	788	CaO	3414
NaBr	732	SrO	3217
NaI	682		
KF	808	ScN	7547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

PROPIEDADES GENERALES DE LOS COMPUESTOS IÓNICOS

- **Altos de fusión y ebullición**
- **Alta conductividad térmica y eléctrica**
- **Son solubles en agua**
- **Conducen la electricidad en solución acuosa y en la fase líquida.**
- **Son duros, frágiles y quebradizos.**

Son pocos abundantes en la naturaleza.

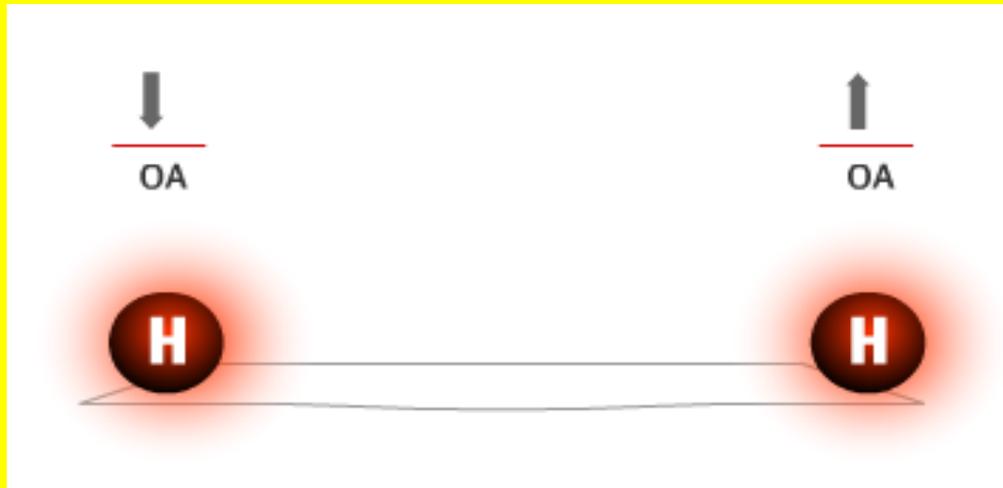
Forman cristales iónicos con número definido de iones. Las fuerzas electrostáticas actúan en todas las direcciones y a grandes distancias

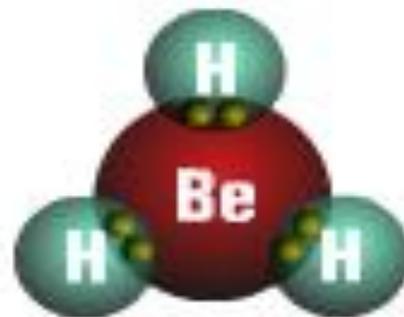
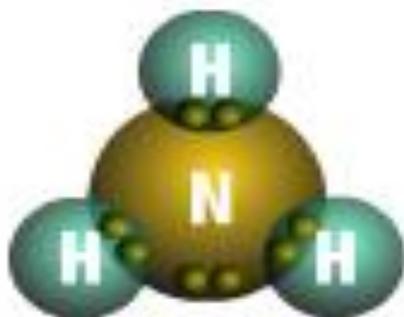
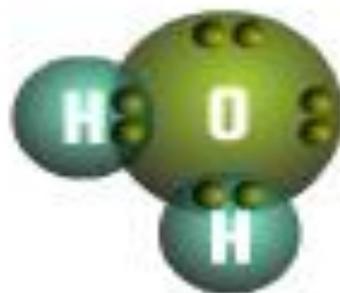
Sí se comparan cristales que tienen igual empaquetamiento cristalino e igual carga iónica; se puede afirmar que a mayor distancia inter – iónica :

- * Disminuye el punto de fusión y ebullición.**
- * Aumenta la dilatación térmica.**
- * Aumenta la compresibilidad.**
- * Disminuye la dureza.**

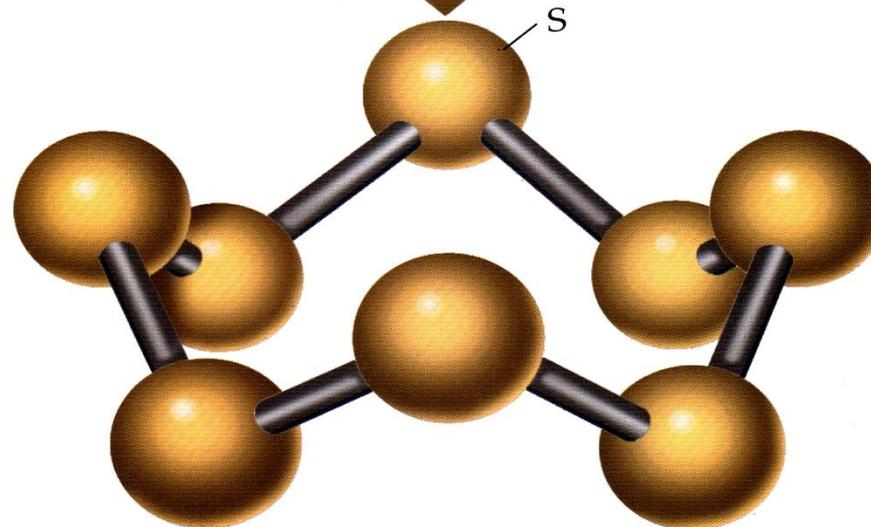
ENLACE COVALENTE

Unión química debido a la formación de orbitales moleculares, donde los átomos unidos comparten electrones. Pueden compartir dos, cuatro ó seis electrones

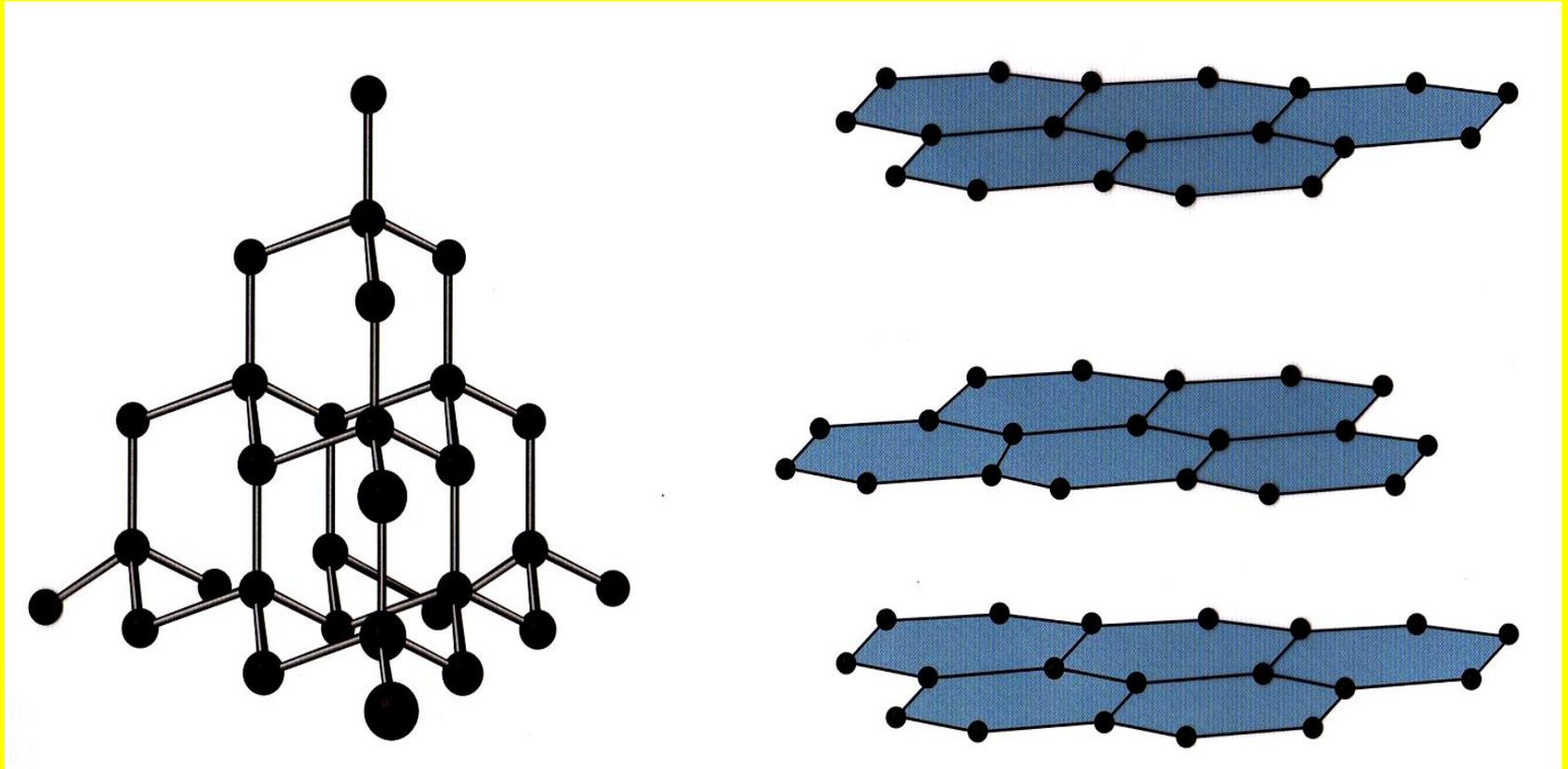




ESTRUCTURA DEL AZUFRE



ESTRUCTURA DE DIAMANTE Y GRAFITO



DIAMANTE

GRAFITO

CLASIFICACIÓN:

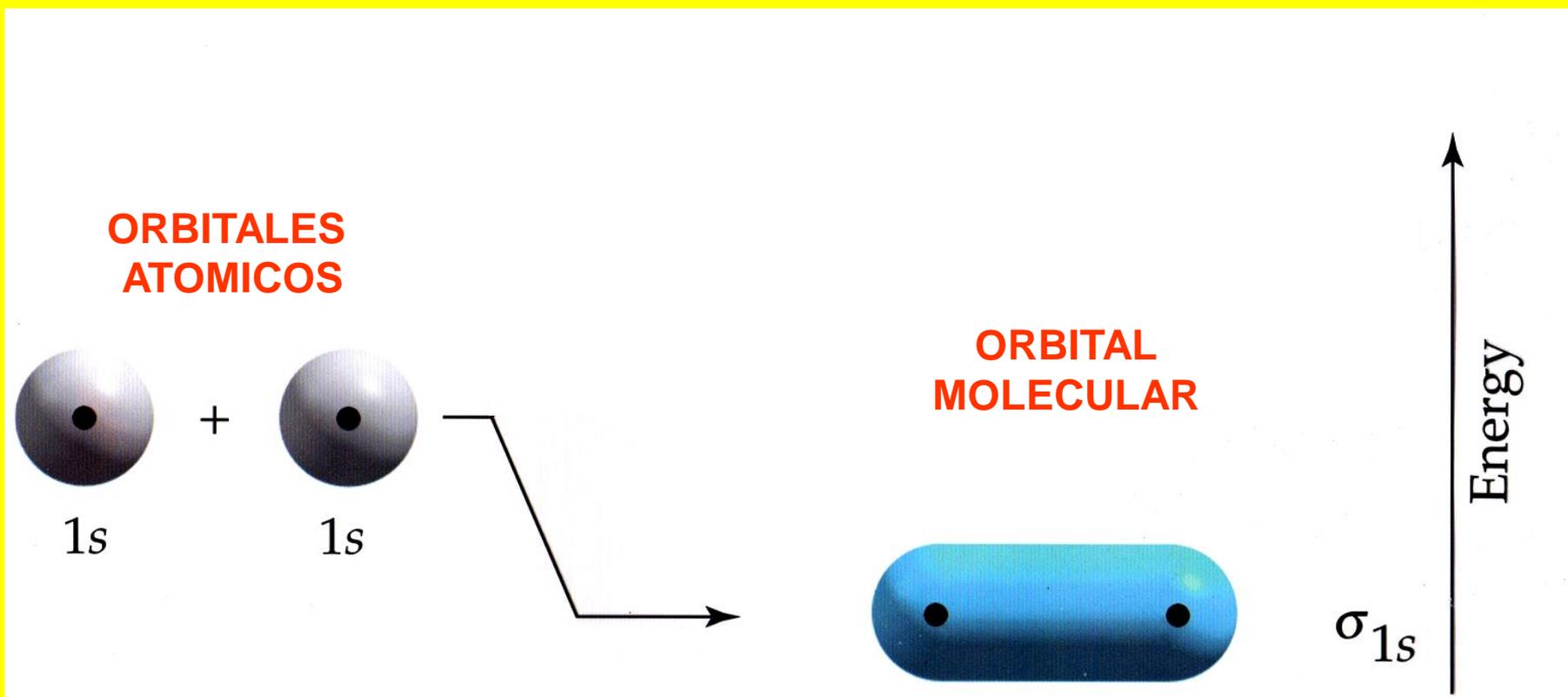
DE ACUERDO A LA CONTRIBUCIÓN DE ELECTRONES AL ENLACE :

- **Enlace Covalente propiamente dicho.**
- **Enlace Covalente coordinado ó dativo.**

DE ACUERDO A LA CANTIDAD DE ELECTRONES COMPARTIDOS

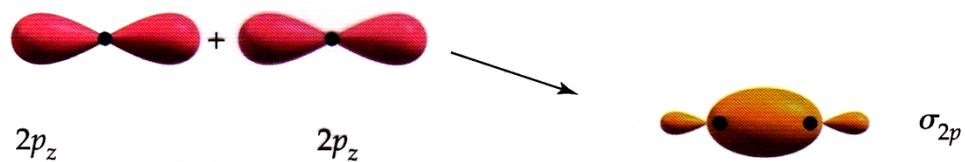
- **Enlace Covalente Simple.**
- **Enlace Covalente Doble.**
- **Enlace Covalente Triple.**

ORBITAL MOLECULAR DE HIDROGENO

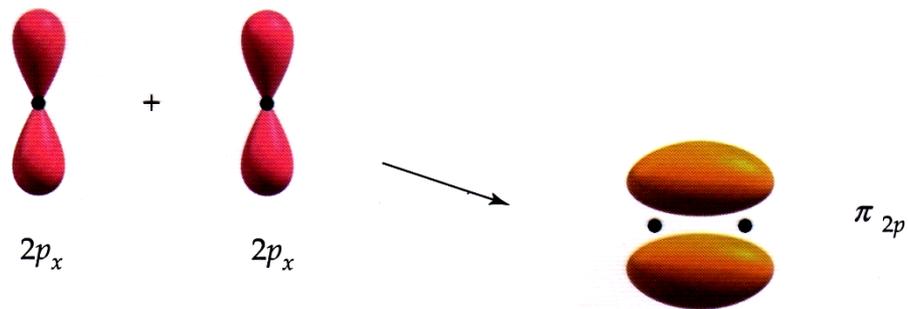


ORBITALES MOLECULARES SIGMA FORMADOS POR ORBITALES ATOMICOS 2P

(a)



(b)



(c)

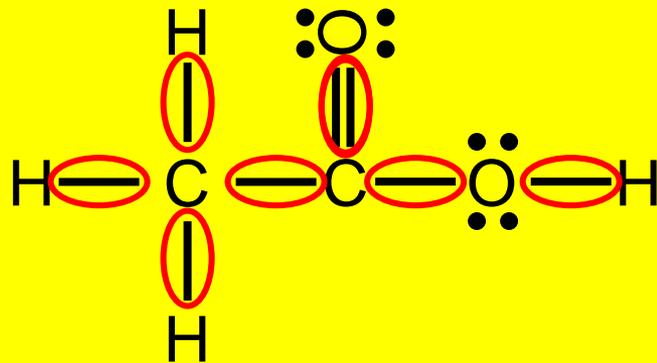


ENLACES SIGMA (σ) y PI (π)

Enlace sencillo	1 enlace sigma
Enlace doble	1 enlace sigma y 1 enlace pi
Enlace triple	1 enlace sigma y 2 enlaces pi



¿Cuántos enlaces σ y π están en la molécula de ácido acético (vinagre) CH_3COOH ?



$$\sigma \text{ enlaces} = 6 + 1 = 7$$

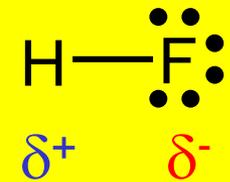
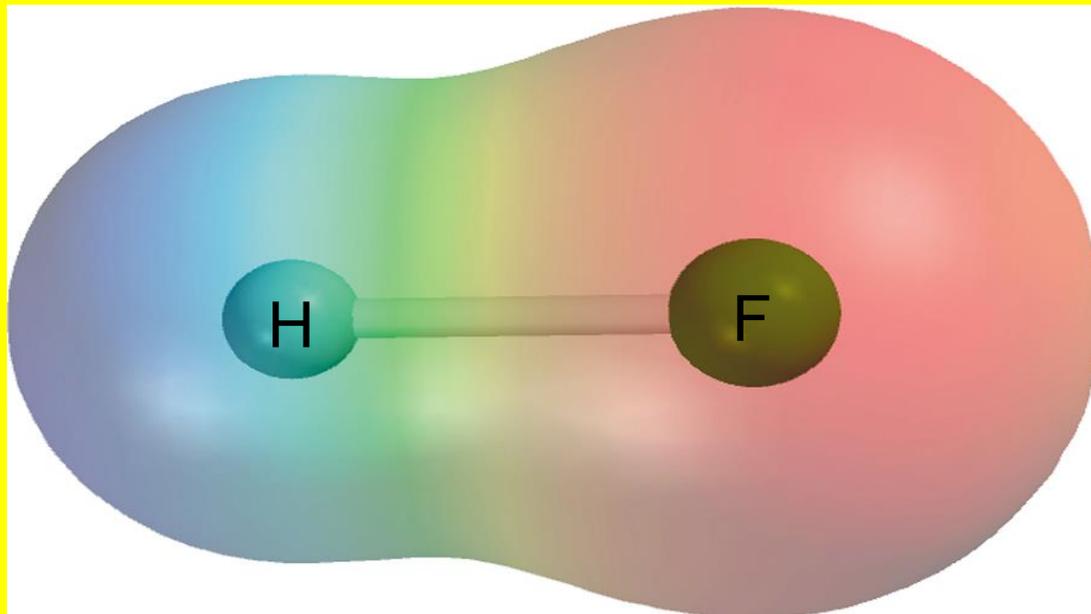
$$\pi \text{ enlaces} = 1$$

DE ACUERDO A LA POLARIDAD DEL ENLACE

- Enlace Covalente homopolar o Apolar .
- Enlace Covalente Heteropolar o Polar .

región pobre
del electrón

región rica
del electrón



PARAMETROS DE ENLACE

1. ENERGIA DE ENLACE
2. LONGITUD DE ENLACE
3. ANGULO DE ENLACE

ENERGIA DE ENLACE

Es la energía involucrada en la disociación de un enlace en el estado gaseoso dando como resultado los átomos que lo formaban también en el estado de gaseoso.



ENERGIA DE ENLACE (kJ/Mol)

Single Bonds

C—H	413	N—H	391	O—H	463	F—F	155
C—C	348	N—N	163	O—O	146		
C—N	293	N—O	201	O—F	190	Cl—F	253
C—O	358	N—F	272	O—Cl	203	Cl—Cl	242
C—F	485	N—Cl	200	O—I	234		
C—Cl	328	N—Br	243			Br—F	237
C—Br	276			S—H	339	Br—Cl	218
C—I	240	H—H	436	S—F	327	Br—Br	193
C—S	259	H—F	567	S—Cl	253		
		H—Cl	431	S—Br	218	I—Cl	208
Si—H	323	H—Br	366	S—S	266	I—Br	175
Si—Si	226	H—I	299			I—I	151
Si—C	301						
Si—O	368						

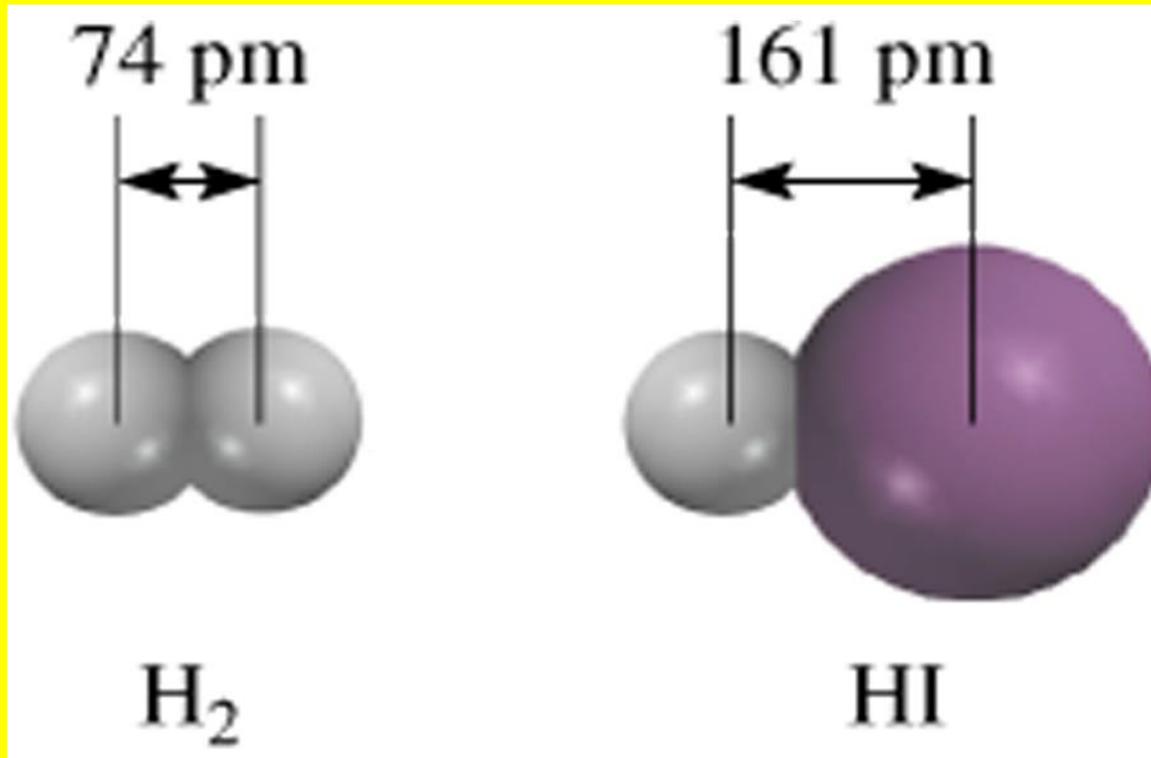
Multiple Bonds

C=C	614	N=N	418	O ₂	495
C≡C	839	N≡N	941		
C=N	615			S=O	523
C≡N	891			S=S	418
C=O	799				
C≡O	1072				

LONGITUD DEL ENLACE

Es la distancia promedio entre los núcleos de dos átomos enlazados.

LONGITUD DE ENLACE COVALENTE



Tipo de enlace	Longitud de enlace (pm)
C-C	154
C=C	133
C≡C	120
C-N	143
C=N	138
C≡N	116

LONGITUDES DE ENLACE

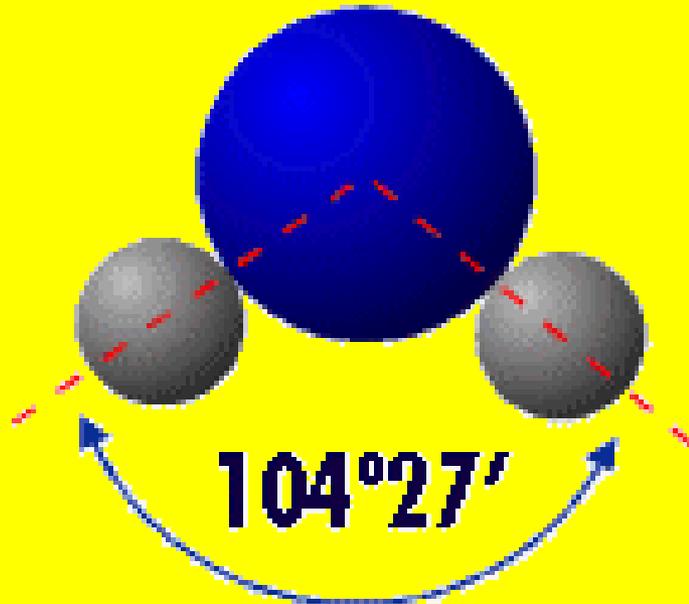
Triple enlace < Doble enlace < Enlace simple

LONGITUD DE ENLACE

Bond	Bond Length (Å)	Bond	Bond Length (Å)
C—C	1.54	N—N	1.47
C=C	1.34	N=N	1.24
C≡C	1.20	N≡N	1.10
C—N	1.43	N—O	1.36
C=N	1.38	N=O	1.22
C≡N	1.16	O—O	1.48
C—O	1.43	O=O	1.21
C=O	1.23		
C≡O	1.13		

ÁNGULO DEL ENLACE

Es el ángulo de intersección entre 2 líneas que se unen en el núcleo de un átomo y que salen de los Núcleos de 2 átomos unidos al primero.



ANGULO DE ENLACE

MOLÉCULA	ÁNGULO DE ENLACE
H_2O	$104,5^\circ$
CO_2	$180,0^\circ$
CH_3OH	$109,5^\circ$
BF_3	$120,0^\circ$

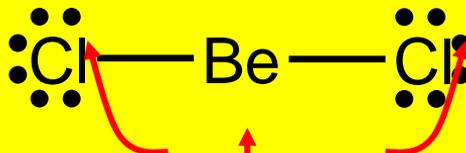
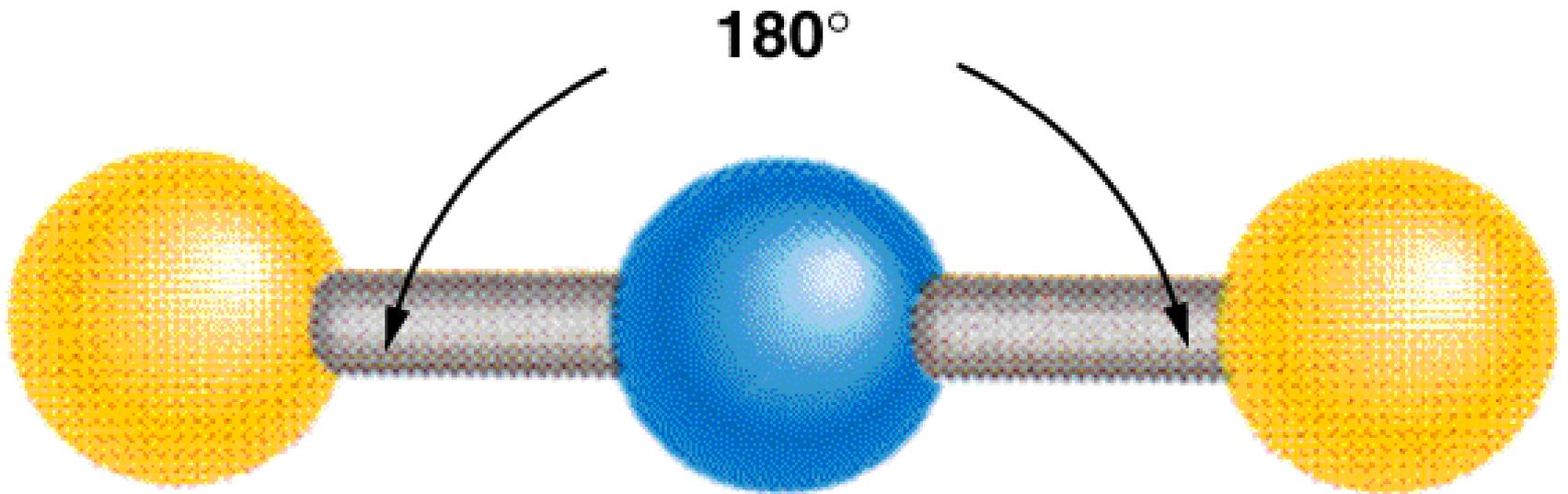
REGLAS DE HELFERICH

Son reglas empíricas útiles en la determinación de la geometría de las moléculas.

1º MOLÉCULAS Ó IONES DEL TIPO AX₂

- **Son lineales**, si el átomo central carece de electrones no compartidos.
- **Son angulares**, si el átomo central tiene uno ó más pares de electrones no compartidos.

CLORURO DE BERILIO



2 átomos enlazados al átomo central

0 pares libres en el átomo central

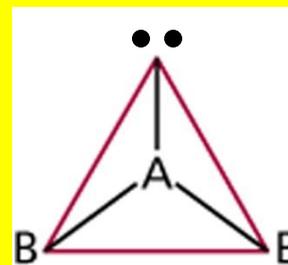
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u># de pares libres en átomo central</u>	<u>Distribución de pares de electrones</u>	<u>Geometría molecular</u>
--------------	---	---	--	--------------------------------

AX_2

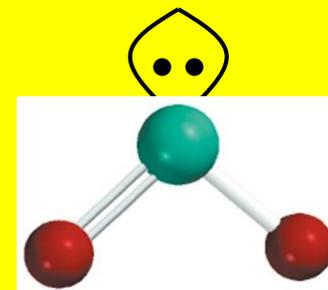
2

1

trigonal
planar



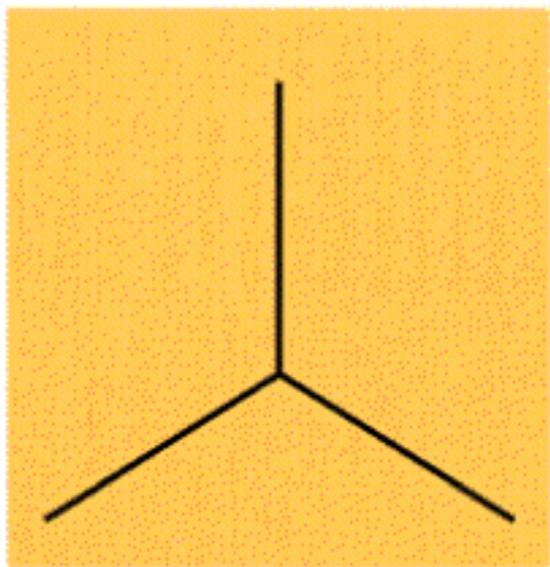
angular



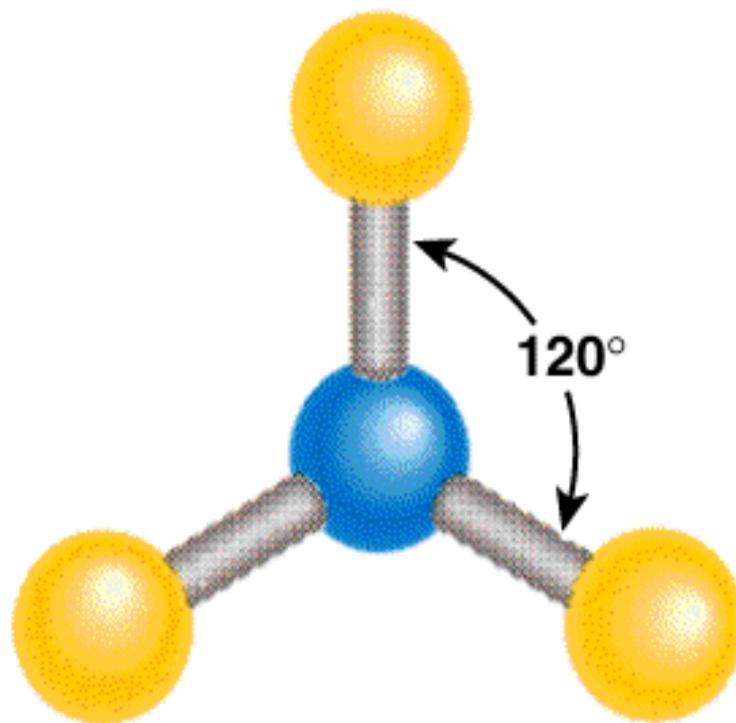
2º MOLÉCULAS Ó IONES DEL TIPO AX₃

- **Son trigonal planar** si el átomo central carece de electrones no compartidos.
- **Son piramidales** si el átomo central tiene un par de electrones no compartidos.

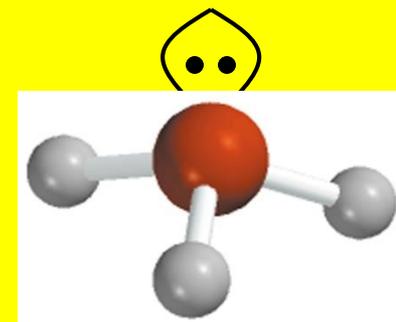
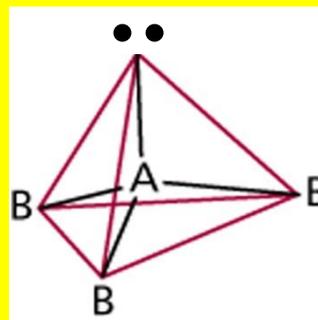
TRIFLUORURO DE BORO



Planar



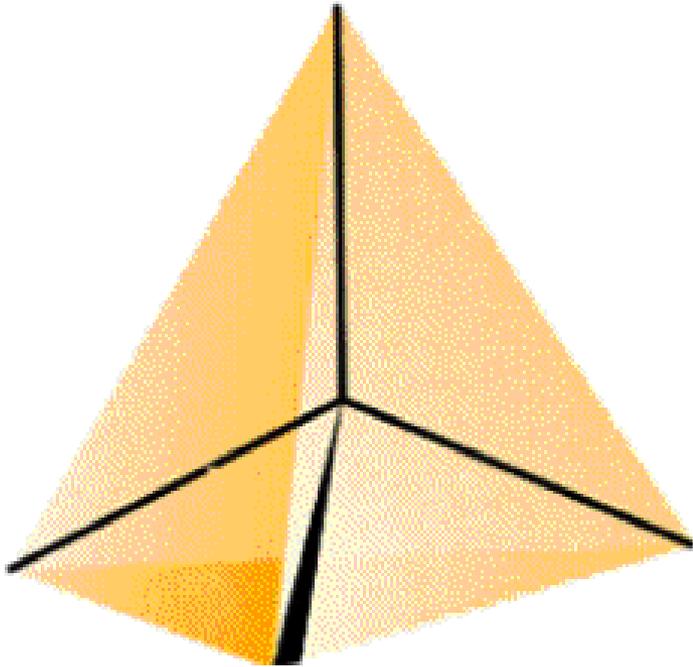
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u># de pares libres en átomo central</u>	<u>Distribución de pares de electrones</u>	<u>Geometría molecular</u>
AX_3	3	1	tetraédrica	piramidal trigonal



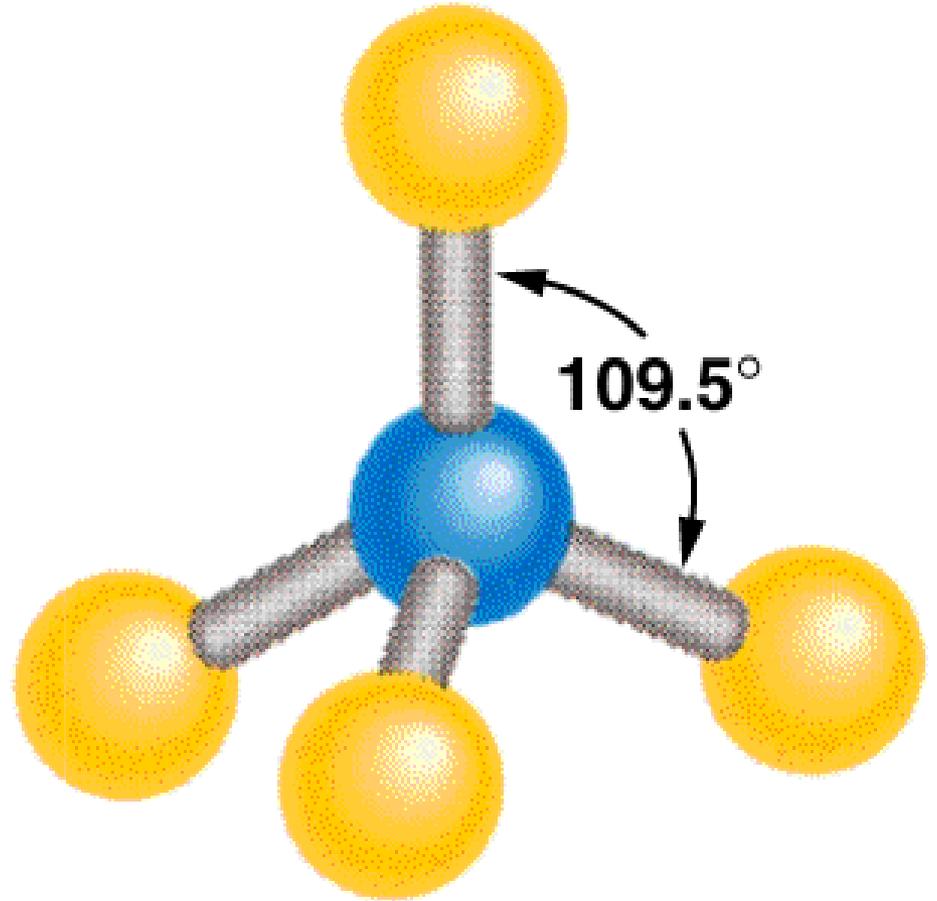
3º MOLÉCULAS Ó IONES DEL TIPO AX₄

- **Son tetraédricas** si el átomo central carece electrones no compartidos y su capa exterior es de gas noble.
- **Son cuadradas planares** si la capa exterior no es del tipo de gas noble.

METANO



Tetraédrica



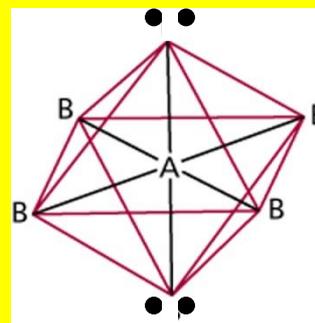
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u># de pares libres en átomo central</u>	<u>Distribución de pares de electrones</u>	<u>Geometría molecular</u>
--------------	---	---	--	--------------------------------

AX_4

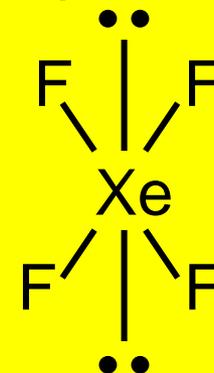
4

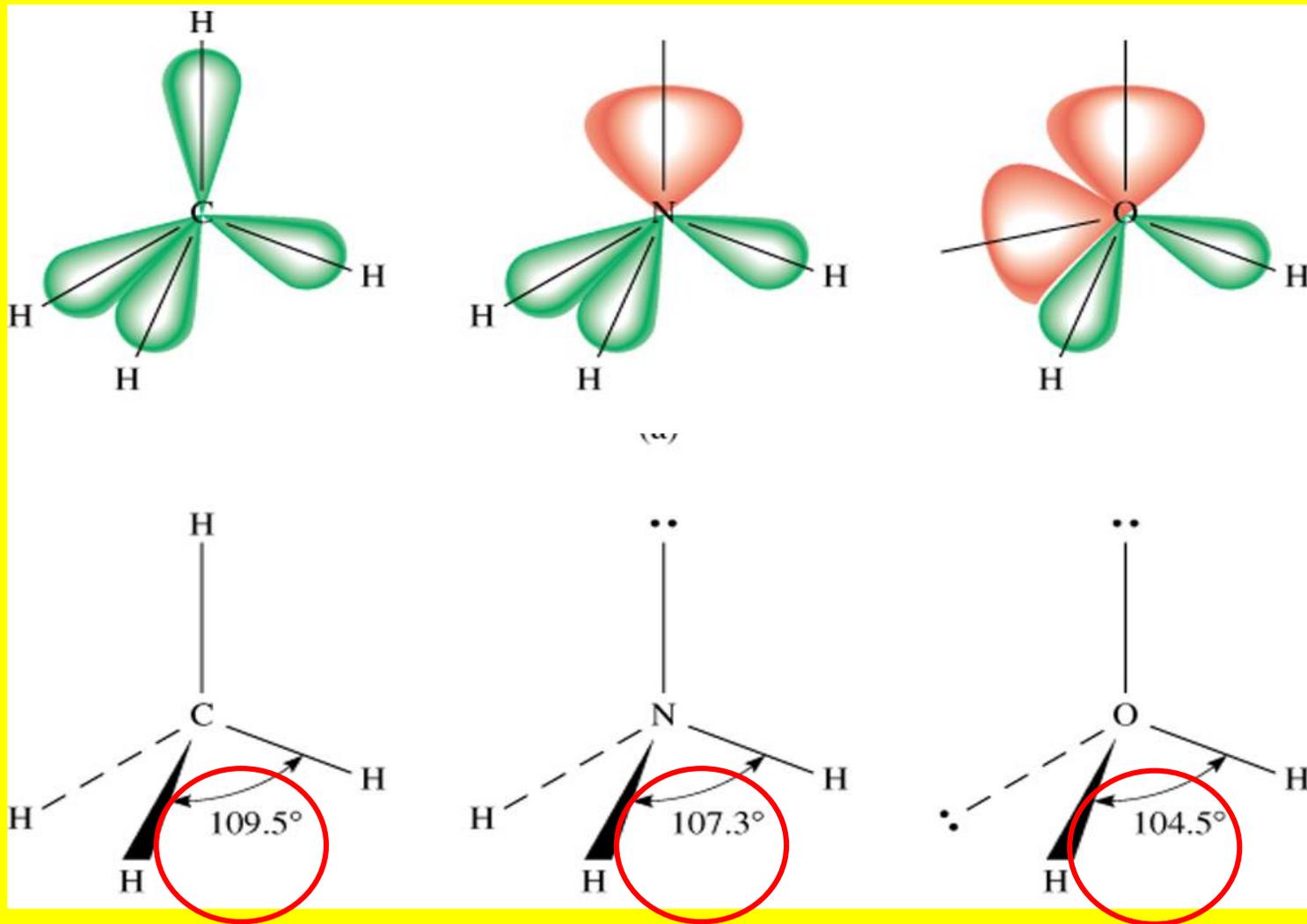
2

octaédrica



cuadrada
plana





pares libres contra
repulsión
de pares libres

>

Pares libres contra
Repulsión par enlazante

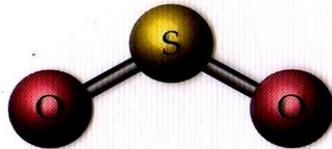
>

Par enlazante contra
Repulsión par enlazante

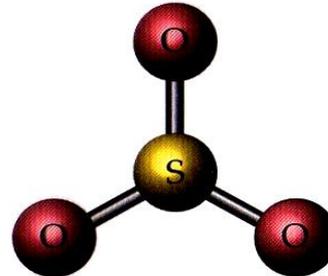
GEOMETRÍA DE ALGUNAS MOLÉCULAS SIMPLES



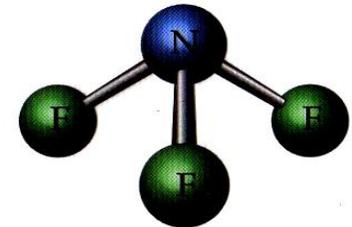
Linear



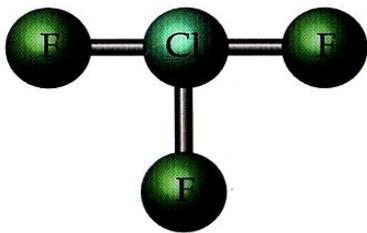
Bent



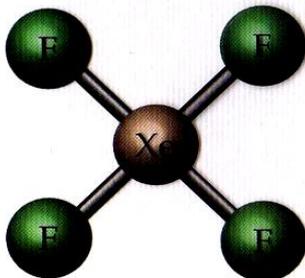
Trigonal planar



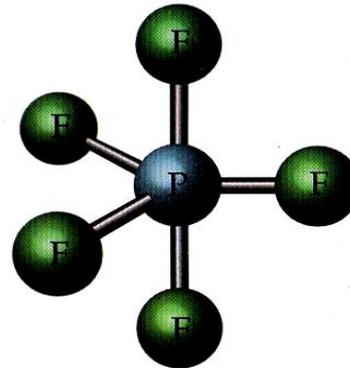
Trigonal pyramidal



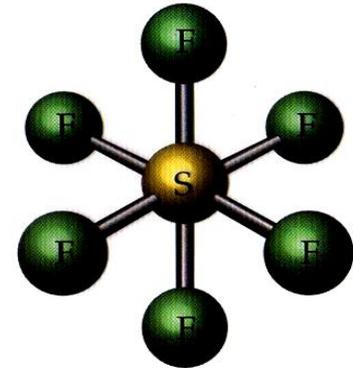
T-shaped



Square planar



Trigonal bipyramidal



Octahedral

POLARIDAD DE LAS MOLÉCULAS

MOMENTO DIPOLAR (μ)

$$\mu_T = Q \times d$$

Q = Carga del electrón = $4,8 \times 10^{-10}$ ues

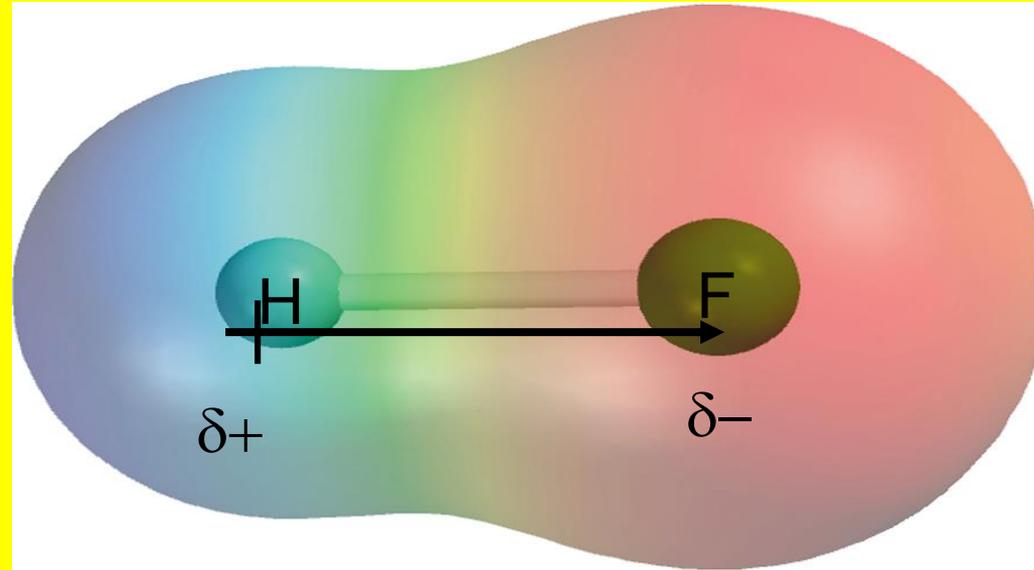
d = Longitud del enlace.

1 DEBYE = 10^{-18} ues x cm.

MOMENTOS DIPOLARES Y MOLÉCULAS POLARES

Región pobre del
electrón

Región rica del
electrón



$\mu = Q \times d$; unidad de medida en **debyes**

Q es la carga del electrón ; $4,8 \times 10^{-10}$ ues

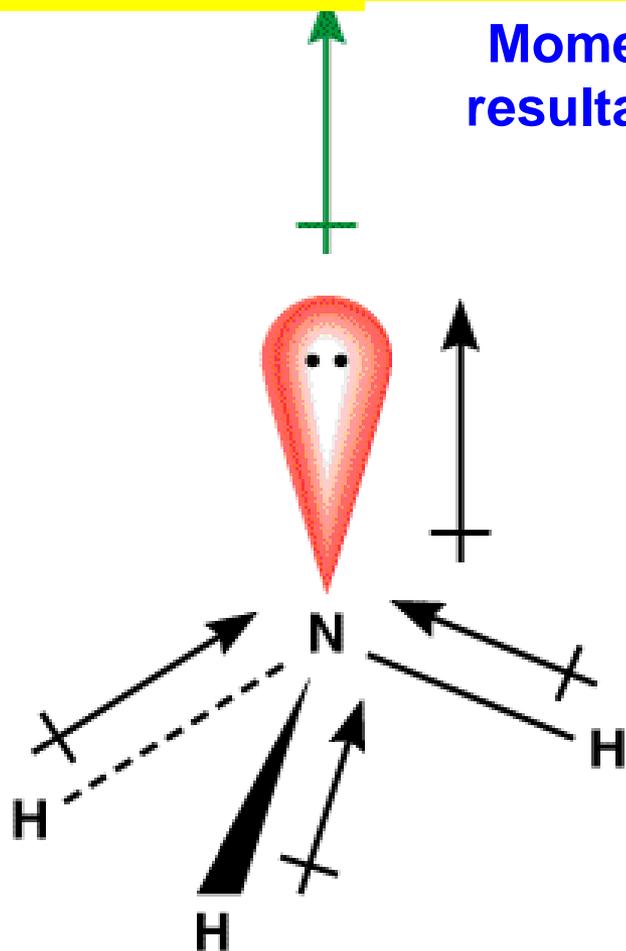
d es la longitud del enlace

1 Debye = 10^{-18} ues x cm

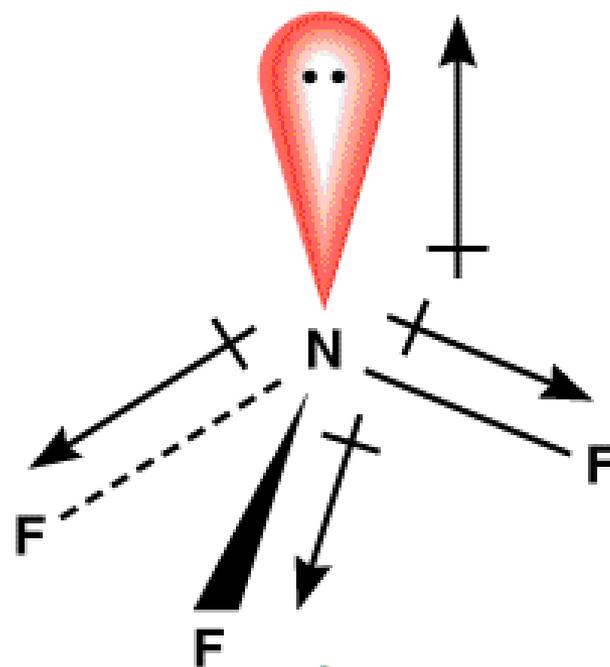
PARA MOLÉCULAS POLIATÓMICAS

- 1º Los enlaces deben ser polares, por tanto tendrán un momento dipolar individual.
- 2º Los momentos dipolares individuales tienen una orientación en el espacio.
- 3º El momento dipolar de la molécula es la suma vectorial de los momentos dipolares individuales.

MOMENTOS DE ENLACE Y MOMENTOS DIPOLARES RESULTANTES



Momento dipolar resultante = 1.46 D



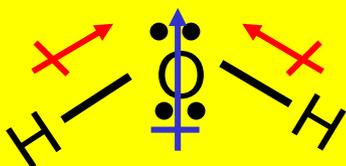
Momento dipolar resultante = 0.24 D

MOMENTOS DIPOLARES DE ALGUNAS MOLÉCULAS POLARES

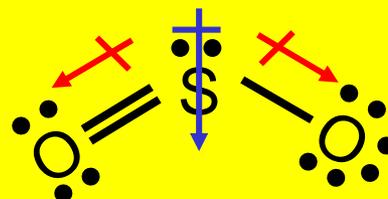
• Molécula	Geometría	Momento dipolar
• HF	lineal	1,92
• HCl	líneal	1,08
• HBr	líneal	0,78
• HI	Lineal	0,38
• H ₂ O	angular	1,87
• H ₂ S	angular	1,10
• NH ₃	piramidal	1,46
• SO ₂	angular	1,60



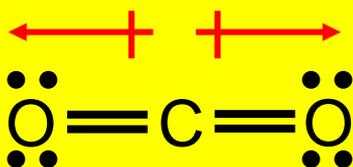
¿Cuál de las moléculas siguientes tiene un momento dipolar? H_2O , CO_2 , SO_2 , y CH_4



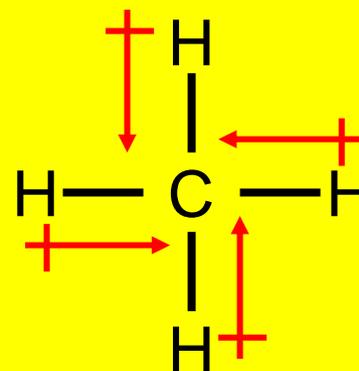
momento dipolar
molécula dipolar



momento dipolar
molécula dipolar



momento no dipolar
molécula no dipolar



Momento no dipolar
Molécula no dipolar

CLASIFICACIÓN DE ENLACES POR DIFERENCIA EN ELECTRONEGATIVIDAD

Diferencia

Tipo de enlace

$\geq 1,7$

Iónico

$0,4 \leq y < 1,7$

Covalente polar

$y < 0,4$

Covalente apolar

Aumento en la diferencia de electronegatividad



**Covalente
Apolar**

Covalente polar

Iónico

comparte e^-

transferencia parcial
de e^-

transferencia e^-



PORCENTAJE DE CARÁCTER IÓNICO (%CI)

- **% CI** = (μ experimental/ μ teórico) x 100
- **%CI** = $100 (1 - e^{-((X_A - X_B)/2)^2})$ **Ec. de PAULING**
- **%CI** = $16(X_A - X_B) + 3,5(X_A - X_B)^2$ **Ec. de H.SMITH**

donde X_A y X_B son las electronegatividades de A y de B, respectivamente.

$$\text{Carga parcial} = \delta = \%CI / 100$$

%Caracter iónico + %Caracter covalente = 100%

$\geq 50\%$

sustancia iónica

$< 50\%$, $6\% \geq$

sustancia covalente polar

$< 6\%$

sustancia es NO polar

RESONANCIA

Estructuras que representan una misma molécula, siendo imposible indicar cual es la verdadera.

Las estructuras deben tener:

- a) La misma energía.
- b) La misma posición relativa de los núcleos.
- c) El mismo número de e^- que no forman enlaces.

d) Las cargas formales de los vecinos no deben ser iguales y las cargas desiguales no deben estar muy separadas.

$$\text{Cf} = \# e^- \text{ valencia} - \# e^- \text{ no enlazados} - \# \text{ de enlaces.}$$

Las cargas formales de los átomos enlazados deben estar acorde con sus electronegatividades.

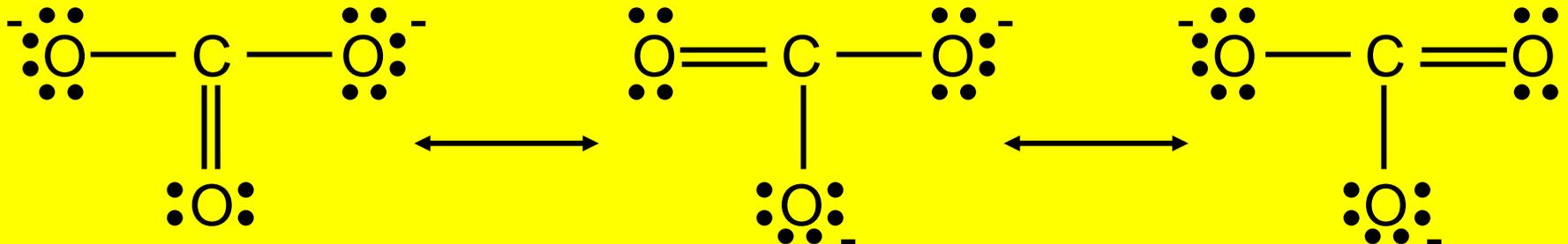
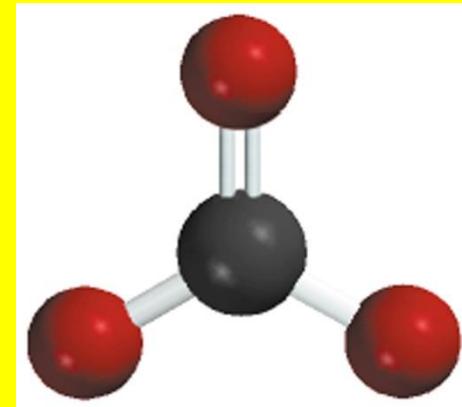
La sumatoria de las cargas formales de los átomos que forman la molécula debe ser cero e igual a la carga del ión en el caso de iones.

e) A mayor estructuras más estable es la sustancia, puesto que se aproxima a lo real.

Una *estructura de resonancia* es una de dos o más estructuras de Lewis para una sola molécula que no se puede representar exactamente con una sola estructura de Lewis.



¿Cuáles son las estructuras de resonancia del ion carbonato (CO_3^{2-})?



ENERGÍA DE ENLACE Y CAMBIO DE ENERGÍA EN LA REACCIÓN QUÍMICA

Considere que la reacción química procede, rompiéndose todos los enlaces en los reactivos y dejando en libertad a los átomos gaseosos para formar todos los enlaces en los productos.

$\Delta H^0 =$ energía total proporcionada – energía total liberada

$$\Delta H^0 = \Sigma\Delta(\text{reactivos}) - \Sigma\Delta(\text{productos})$$



Use la energía de enlaces para calcular el cambio de energía para: $\text{H}_2(g) + \text{F}_2(g) \longrightarrow 2\text{HF}(g)$

$$\Delta H^0 = \Sigma\Delta(\text{reactivos}) - \Sigma\Delta(\text{productos})$$

Tipo de enlaces que se rompen	Número de enlaces que se rompen	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio de energía (kJ)
H—H	1	436.4	436.4
F—F	1	156.9	156.9
Tipo de enlaces formados	Número de enlaces formados	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio de energía(kJ)
H—F	2	568.2	1136.4

$$\Delta H^0 = 436.4 + 156.9 - 2 \times 568.2 = - 543.1 \text{ kJ}$$

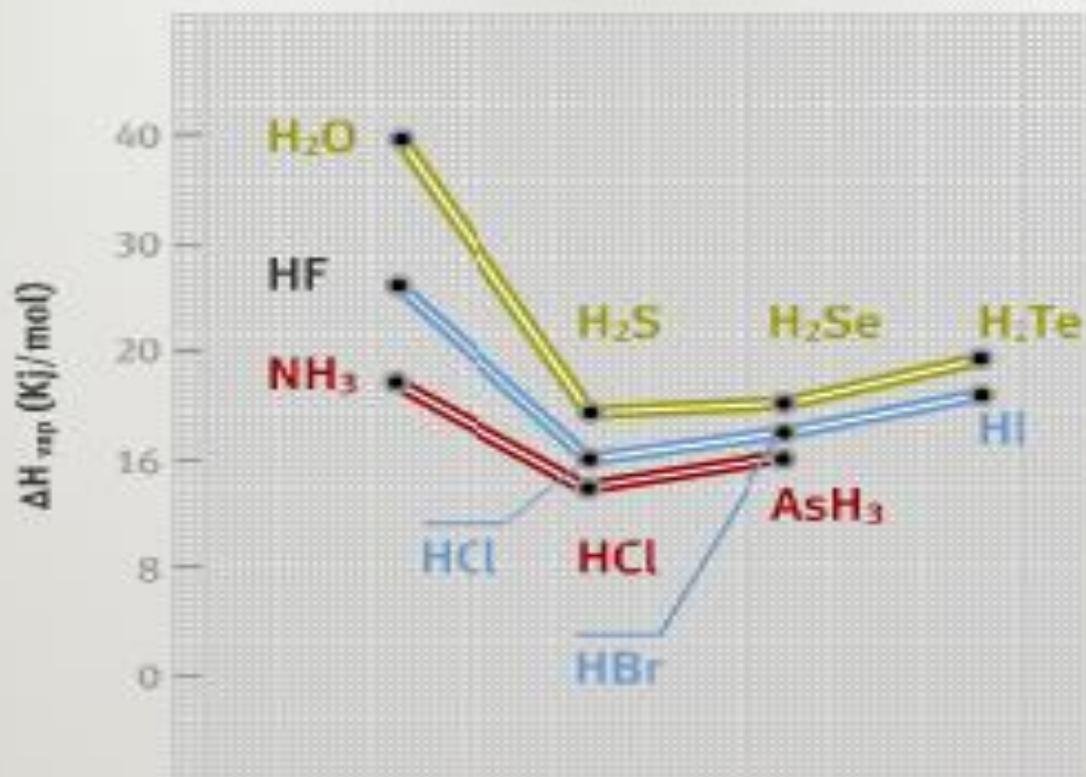
ENERGIA DE FORMACIÓN ESTANDAR DE SUSTANCIAS COVALENTES

Substance	Formula	ΔH_f° (kJ/mol)	Substance	Formula	ΔH_f° (kJ/mol)
Acetylene	$C_2H_2(g)$	226.7	Hydrogen chloride	$HCl(g)$	-92.30
Ammonia	$NH_3(g)$	-46.19	Hydrogen fluoride	$HF(g)$	-268.6
Benzene	$C_6H_6(l)$	49.04	Hydrogen iodide	$HI(g)$	25.9
Calcium carbonate	$CaCO_3(s)$	-1207.1	Methane	$CH_4(g)$	-74.85
Calcium oxide	$CaO(s)$	-635.5	Methanol	$CH_3OH(l)$	-238.6
Carbon dioxide	$CO_2(g)$	-393.5	Propane	$C_3H_8(g)$	-103.85
Carbon monoxide	$CO(g)$	-110.5	Silver chloride	$AgCl(s)$	-127.0
Diamond	$C(s)$	1.88	Sodium bicarbonate	$NaHCO_3(s)$	-947.7
Ethane	$C_2H_6(g)$	-84.68	Sodium carbonate	$Na_2CO_3(s)$	-1130.9
Ethanol	$C_2H_5OH(l)$	-277.7	Sodium chloride	$NaCl(s)$	-411.0
Ethylene	$C_2H_4(g)$	52.30	Sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}(s)$	-2221
Glucose	$C_6H_{12}O_6(s)$	-1260	Water	$H_2O(l)$	-285.8
Hydrogen bromide	$HBr(g)$	-36.23	Water vapor	$H_2O(g)$	-241.8

PROPIEDADES GENERALES DE LAS SUSTANCIAS COVALENTES

- **Son malos conductores de la corriente eléctrica, solo las soluciones de sustancias covalentes polares conducen la corriente eléctrica**
- **Son relativamente volátiles**
- **La mayoría de ellas se encuentran en fase gaseosa o líquida o sólida**
- **Tiene presión de vapor apreciable**
- **Tienen puntos de fusión y de ebullición mucho más bajo que las sustancias iónicas, aunque aumenta los valores con la masa molecular.**

Energía de evaporación



ENLACE METALICO

El tratar de explicar las propiedades de los metales dá origen al modelo del mar de electrones.

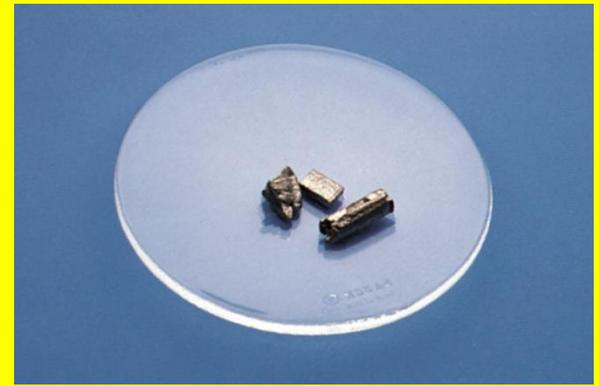
Propiedades de los metales:

- 1. Alta conductividad eléctrica**
- 2. Alta conductividad térmica**
- 3. Brillo**
- 4. Ductibilidad y maleabilidad**
- 5. Emisión de electrones**
- 6. Formación de iones positivos en reacciones químicas**

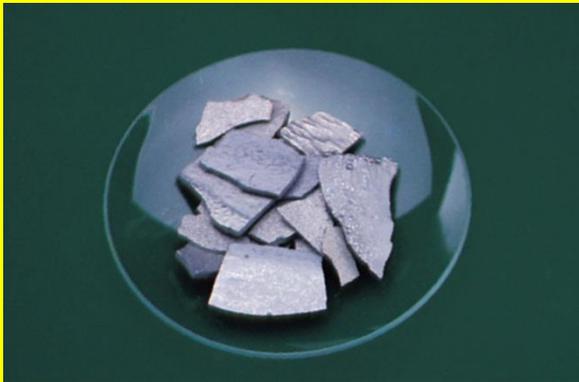
METALES



TITANIO



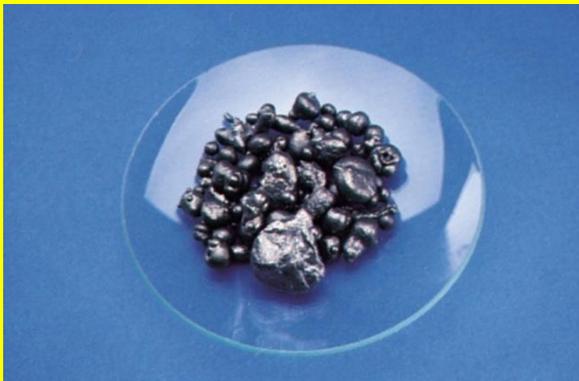
VANADIO



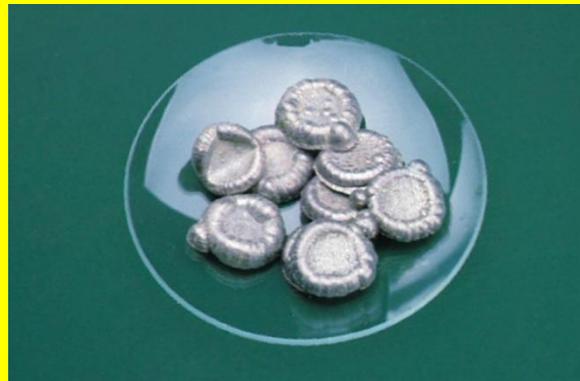
CROMO



HIERRO



COBALTO



NIQUEL



COBRE

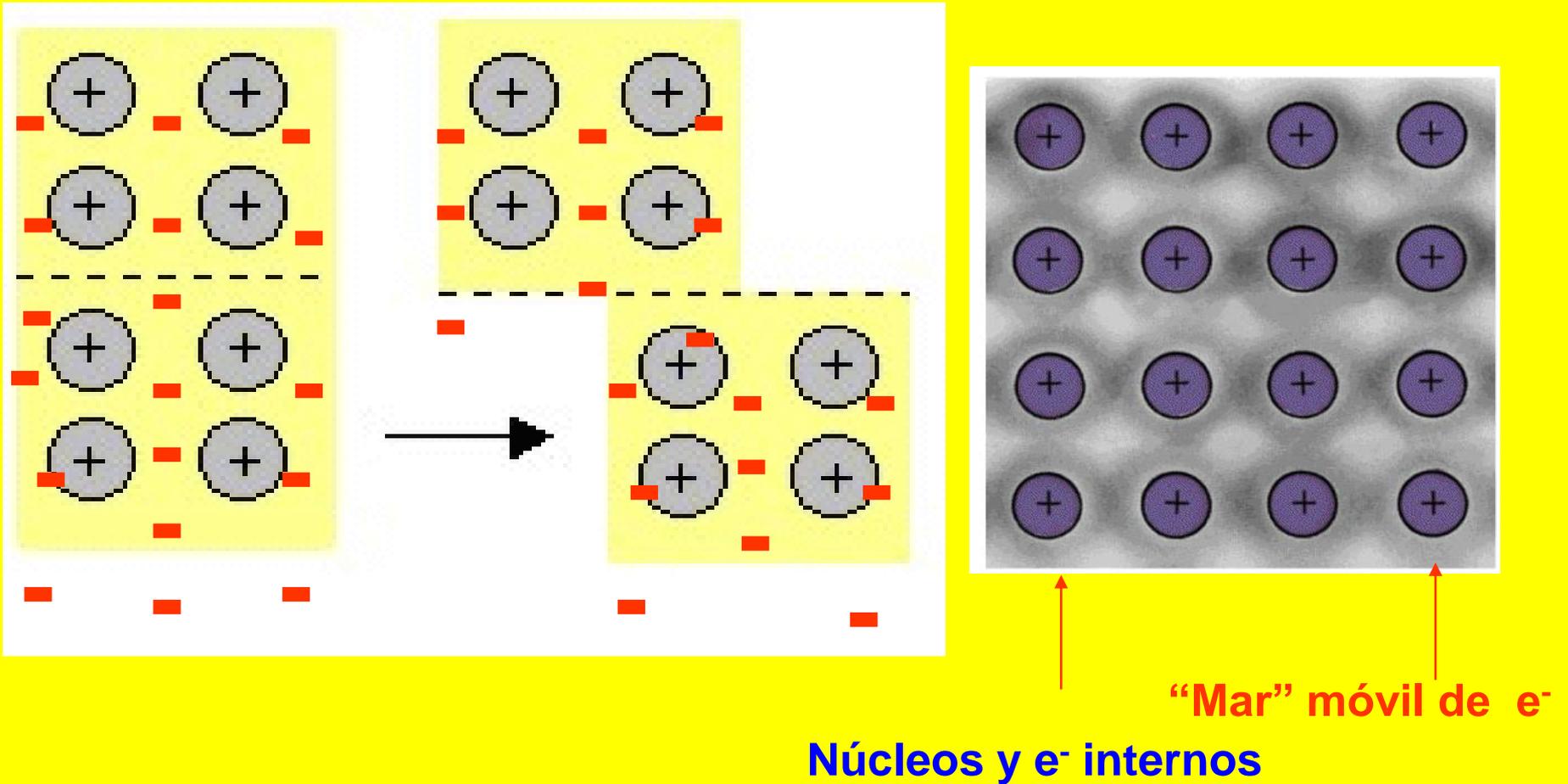
MODELO DEL MAR DE ELECTRONES

Los e^- de enlace no están sujetos a un par particular de átomos, como sucede en el enlace covalente, ni tampoco la posibilidad de transferencia de e^- ya que todos los átomos son iguales, ninguno cedería e^- a otro, sino están extendidos sobre una región relativamente amplia.

La red metálica está constituida por una ordenación regular de **iones positivos** anclados en su lugar como boyas sonoras en un **“mar móvil de electrones”**.

Los iones metálicos se mantienen unidos por una especie de “pegamento electrónico” compuesto de los electrones de valencia.

ENLACE METALICO

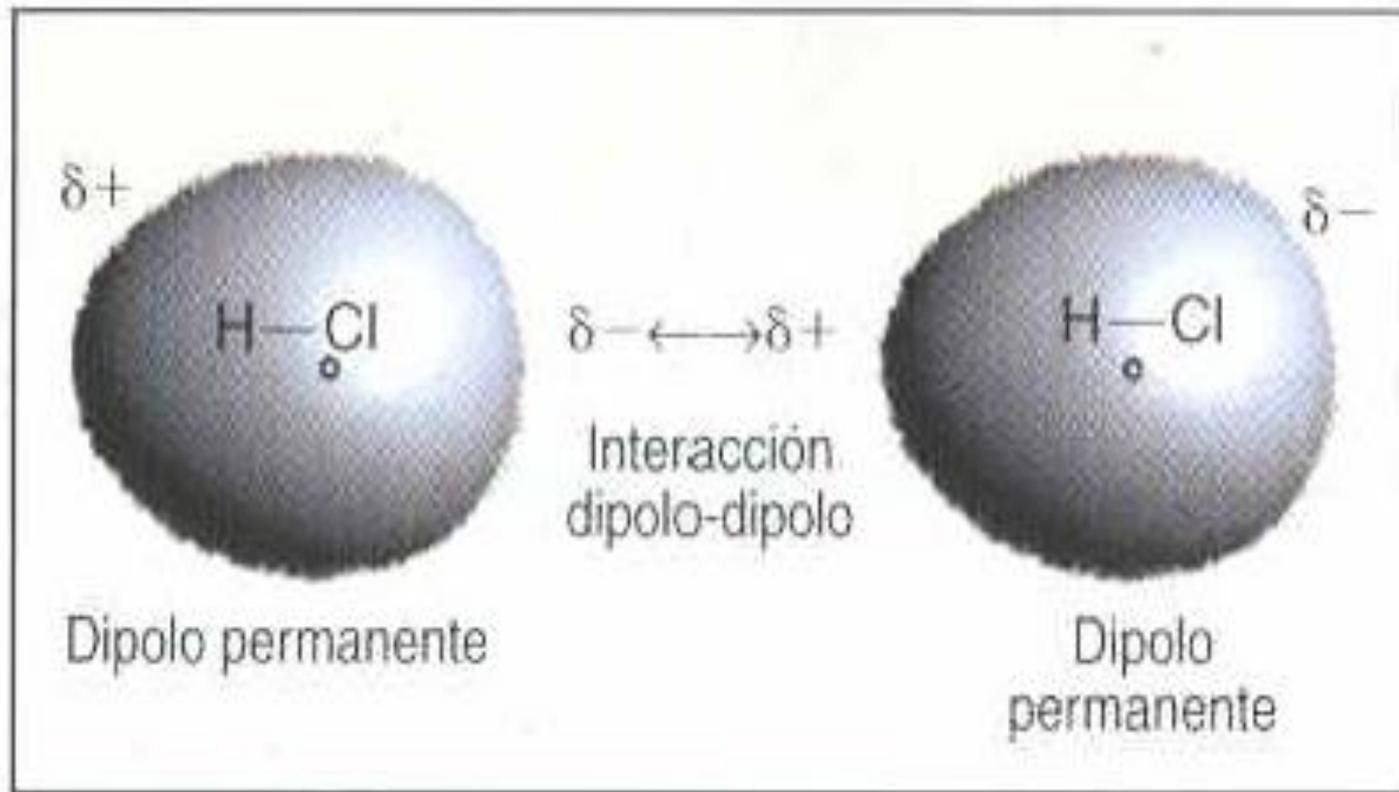


ENLACES INTERMOLECULARES

1. FUERZAS DIPOLO – DIPOLO

Las moléculas polares se alinean en un campo eléctrico. La atracción electrostática es similar al enlace iónico pero en orden de magnitud más pequeña debido a la cargas parciales.

FUERZA DIPOLO - DIPOLO



2. ENLACES PUENTE DE HIDRÓGENO

Para moléculas polares las fuerzas intermoleculares son excepcionalmente fuerte y ocurre entre el **ÁTOMO DE HIDRÓGENO** y el átomo de **FLUOR, OXÍGENO** o **NITRÓGENO** .

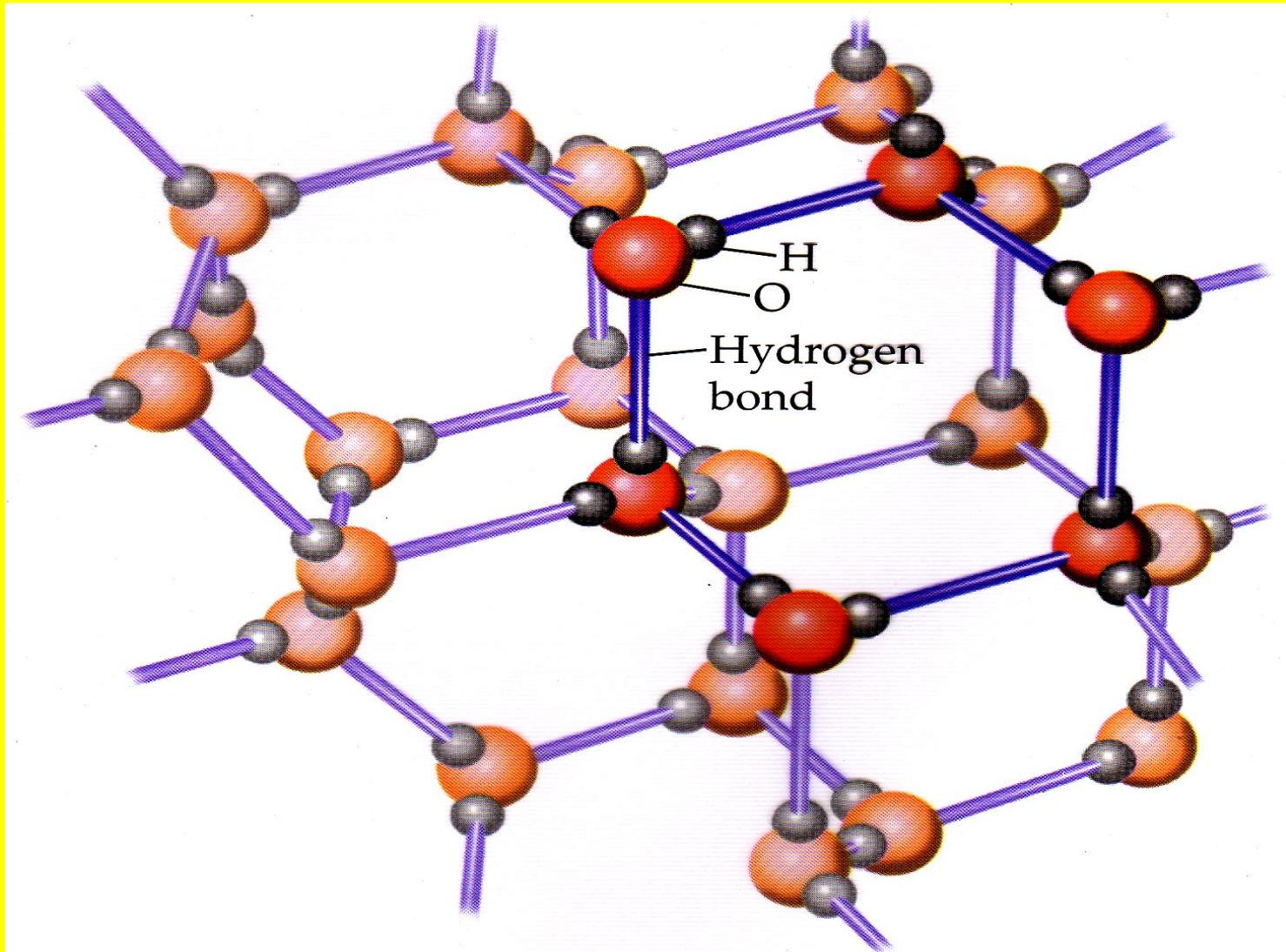
La justificación de que la fuerza es excepcionalmente fuerte es:

a) La diferencia de electronegatividad entre el H (2,1) y el F (4,0), O (3,5) ó N (3,0) es lo bastante grande para hacer que los e⁻ de enlace en HF, H₂O y NH₃ se desplacen de manera señalada del hidrógeno. Por consiguiente, los átomos de hidrógeno en estas moléculas se comportan casi como protones desnudos.

b) El pequeño tamaño del hidrógeno permite al átomo de F, O, N de una molécula determinada acercarse mucho al átomo de hidrógeno de otra molécula.

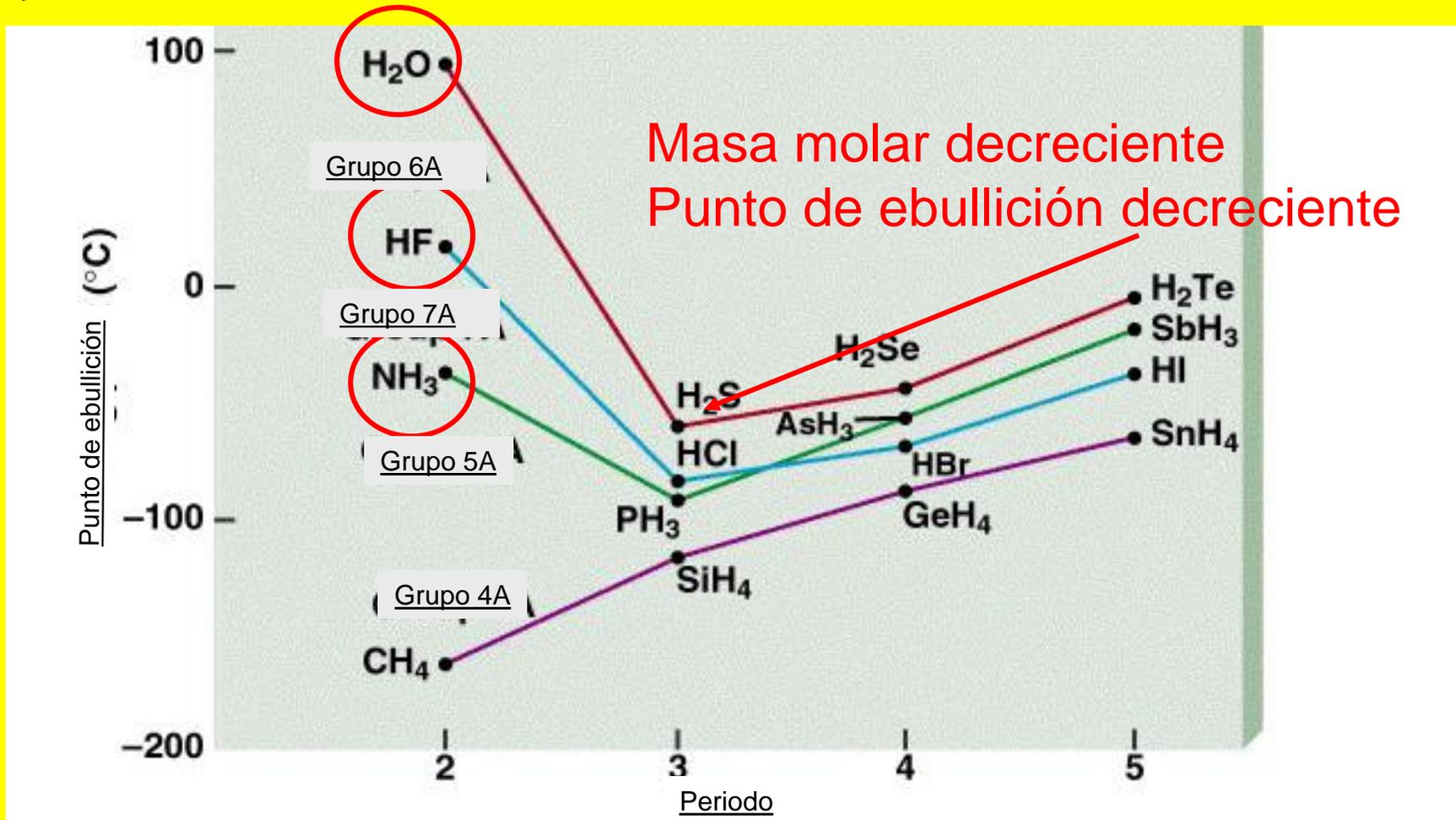
Muchas de las propiedades del H₂O son consecuencia de este tipo de enlace, tales como su alta tensión superficial y su viscosidad, la capacidad calorífica está ligada directamente con el poder de estas fuerzas intermoleculares.

ENLACES PUENTE DE HIDROGENO EN LA MOLECULA DE AGUA





¿Por qué el enlace puente de hidrógeno se considera una interacción “especial” dipolo-dipolo?



3. FUERZAS DE VAN DER WAALS

Los dos tipos de fuerzas intermoleculares anteriores solo existen entre moléculas polares.

Para moléculas no polares. Los puntos de fusión y ebullición tienden a aumentar con el aumento del peso molecular, se puede deducir que la magnitud de esta fuerza aumenta con la masa ó el tamaño de la molécula.

El hecho de que la volatilidad, tanto de sustancias polares como de las no polares disminuye al aumentar el peso molecular, sugiere que este tercer tipo de fuerza intermolecular es común a todas las sustancias moleculares.

Las fuerzas de Van Der Waals se deben a la separación de cargas instantáneas o temporales.

FUERZAS DE VAN DER WAALS

