

ENLACE QUÍMICO

JULIA SALVADOR
C. E. LUIS VIVES

1. CONCEPTO DE ENLACE QUÍMICO

2. TIPOS DE ENLACE

ENLACE IONICO

ENLACE METÁLICO

ENLACE COVALENTE

FUERZAS INTERMOLECULARES:

- Fuerzas de Van der Waals
- Puentes de Hidrógeno



CONCEPTO DE ENLACE QUÍMICO

Las fuerzas que mantienen unidos los átomos en las distintas sustancias se llaman **ENLACES QUÍMICOS**

- Los átomos se unen para poder adquirir una forma más estable que cuando están separados.
- La unión se produce usando los electrones del último nivel de energía: nivel de valencia
- La forma más estable de un átomo es la que adquiere cuando es isoelectrónico con un gas noble



Regla del octeto

Los átomos tienden a ceder, ganar o compartir electrones hasta que el número de éstos sea igual a 8 en su nivel de valencia.

GRUPO	1	2	16	17	18



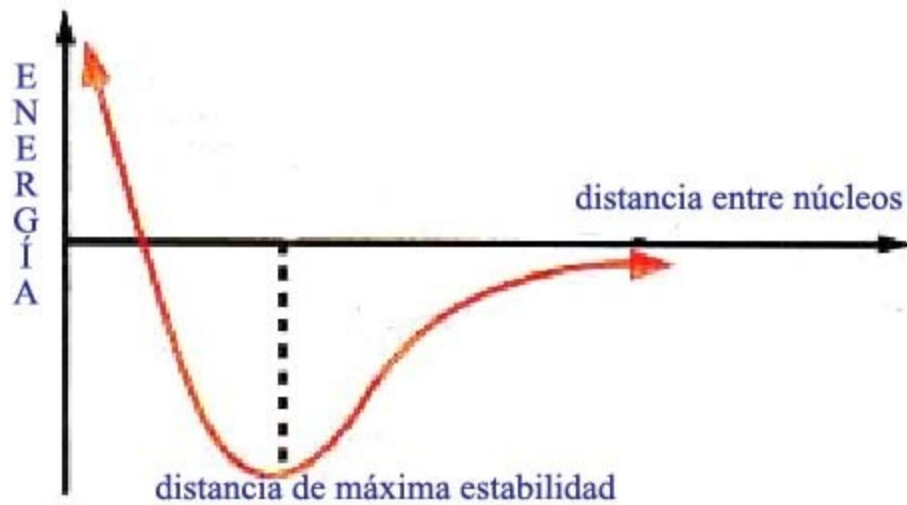
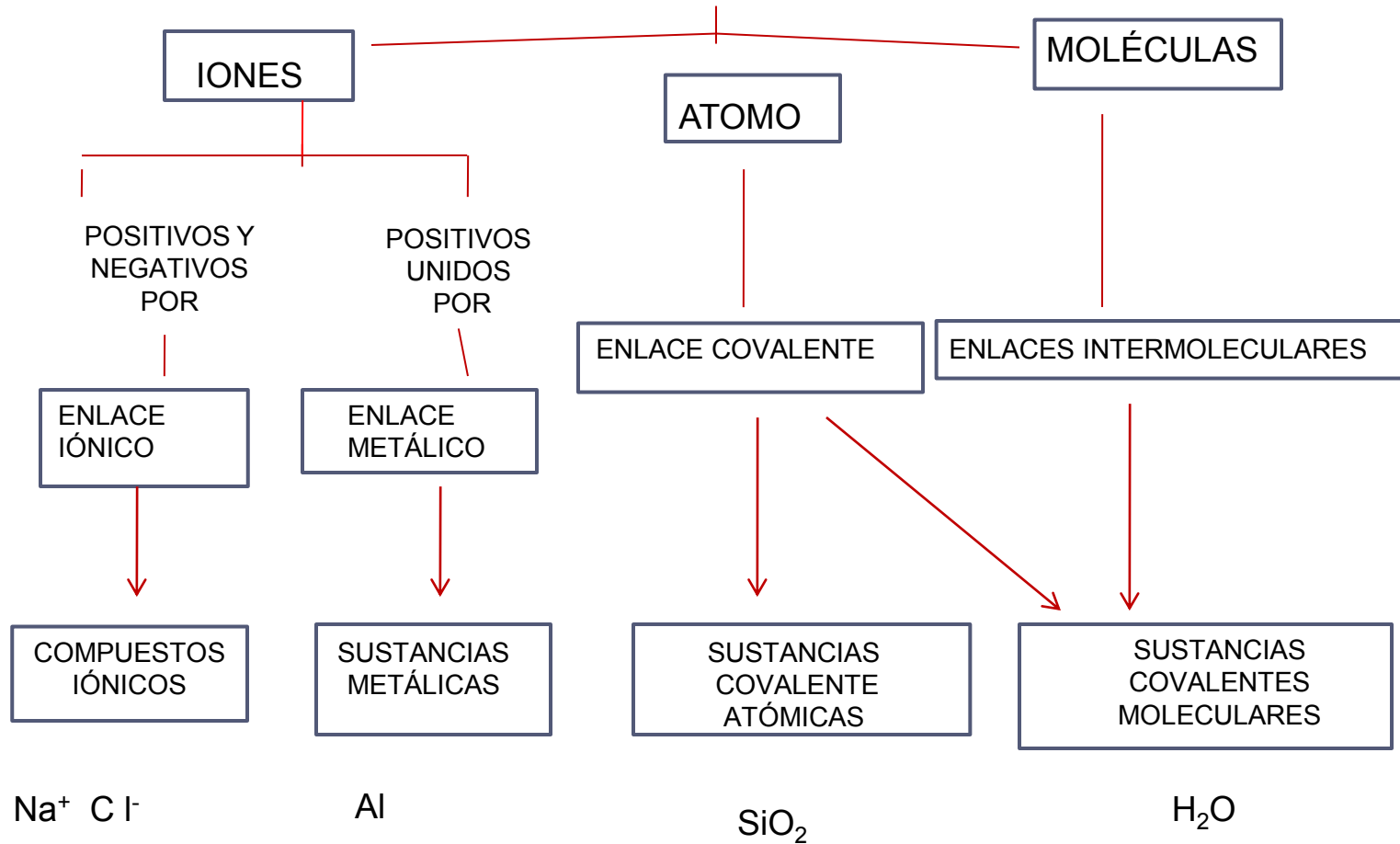


Diagrama de energía frente a distancia interatómica

Cuando se forma un enlace, el producto tiene menos energía que los reactivos por separado, cuando más disminuye la energía, mayor es la estabilidad del enlace y el sistema creado



UNIDADES ESTRUCTURAS DE LAS SUSTANCIAS



ENLACE IÓNICO

Se produce enlace iónico entre elementos que tienen una electronegatividad muy diferente entre sí.

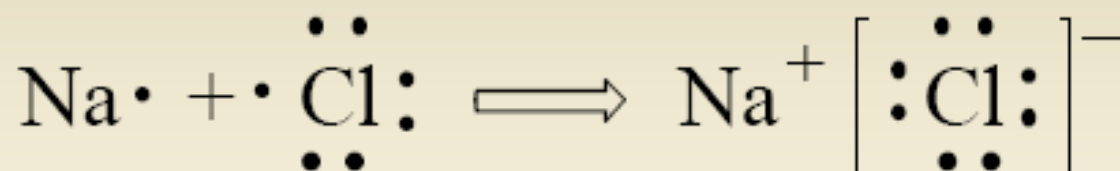
Se produce una transferencia de electrones de un átomo a otro formando iones positivos o negativos que se unen mediante fuerzas electroestáticas.

Los compuestos iónicos se forman entre metales y no metales

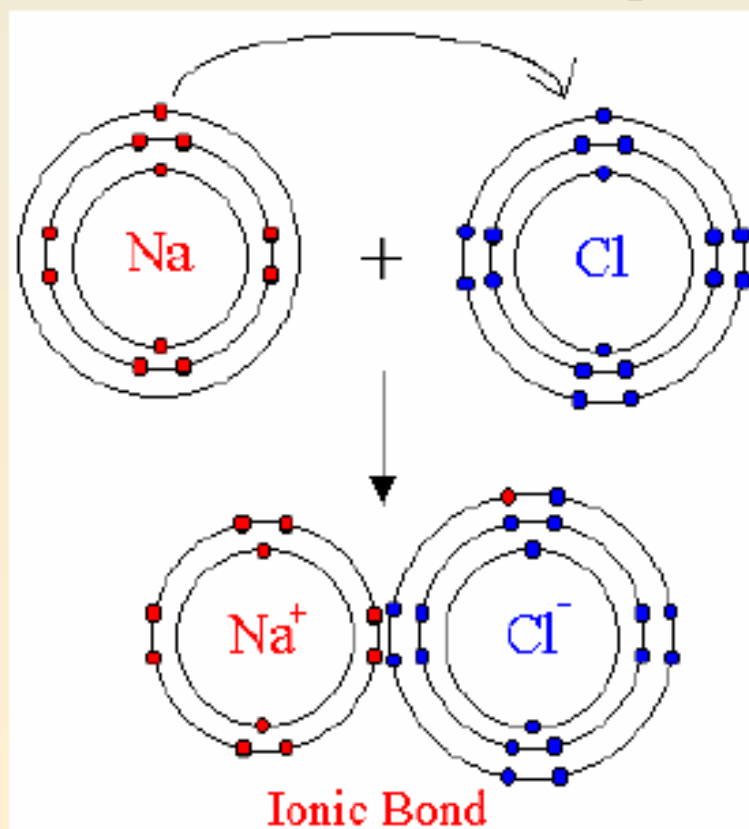
Los metales pierden electrones formando cationes

Los no metales ganan electrones formando aniones





NaCl sólido blanco
p.f = 801°C



La unión de los iones se forma por las fuerzas de Coulomb

$$F = K \frac{q \cdot q'}{r^2}$$

F = fuerza de Coulomb

K = constante de proporcionalidad

q y q' = son cargas iónicas

r = distancia interiónica



Energía reticular

La energía del proceso de formación de un mol de cristal iónico sólido a partir de sus correspondientes iones en estado gaseoso, cuando entre ellos no existe interacción alguna.

Número de Avogadro
(6.02×10^{23})

Constante
de Madelung

$$U = - \left(\frac{NAz^+z^-e^2}{4\pi\epsilon_0r_0} \right) \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Carga del catión y
del anión

Distancia
interiónica

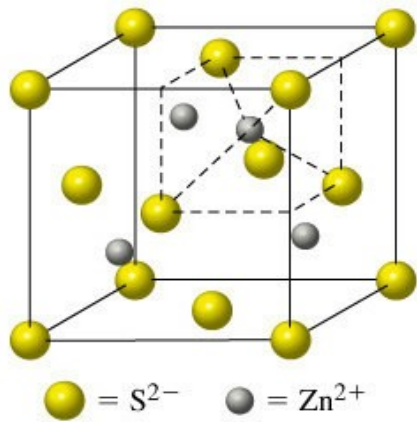
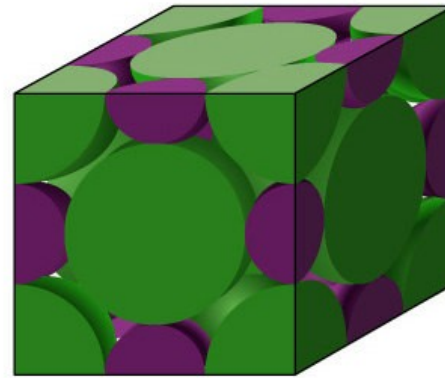
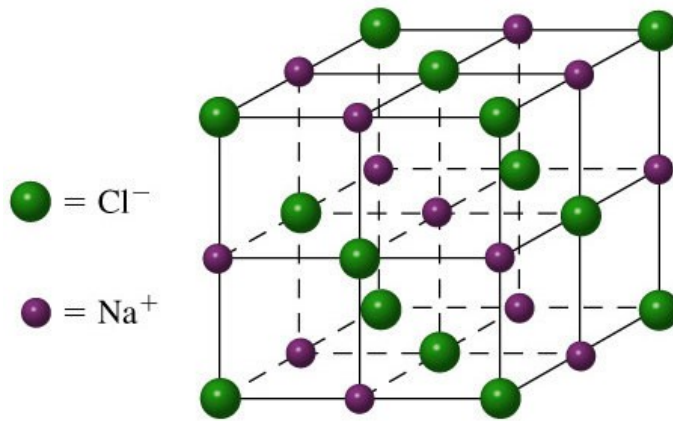
Coefficiente
de Born

Redes cristalinas

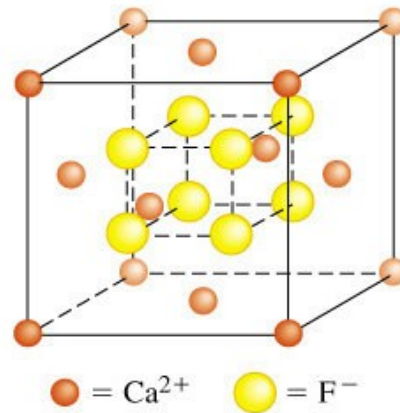
Al unirse elementos de muy distinta electronegatividad, cada ion positivo se rodea del mayor número posibles de iones negativos o al revés, para alcanzar el equilibrio entre las fuerzas atractivas y repulsivas.

Esto hace que el enlace iónico forme **cristales**.

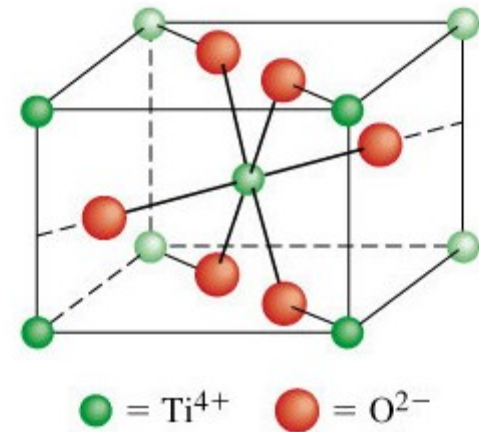




(a) Unit cell of ZnS, the zinc blend structure



(b) Unit cell of CaF₂, the fluorite structure



(c) Unit cell of TiO₂, the rutile structure



Ciclo de Born-Haber

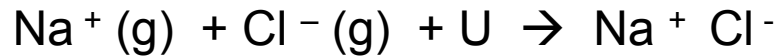
Se utiliza para determinar la energía reticular de los compuestos iónicos basándose en las características termodinámicas del proceso y separando el proceso total en procesos parciales.

NaCl

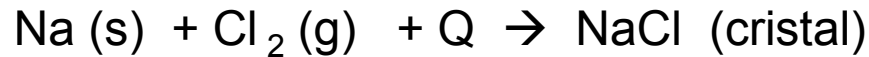
1. Energía de disociación del Cl (D): $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 (\text{g}) + \frac{1}{2} \text{D} \rightarrow \text{Cl} (\text{g})$
 2. Energía de sublimación del Na (S): $\text{Na} (\text{s}) + \text{S} \rightarrow \text{Na} (\text{g})$
 3. Energía de ionización del metal (EI):
 $\text{Na} (\text{g}) + \text{EI} \rightarrow \text{Na}^+ (\text{g}) + \text{e}^-$
 4. Electroafinidad electrónica (AE):
 $\text{Cl} (\text{g}) + \text{e}^- + \text{AE} \rightarrow \text{Cl}^- (\text{g})$
-



5. Energía reticular (U):

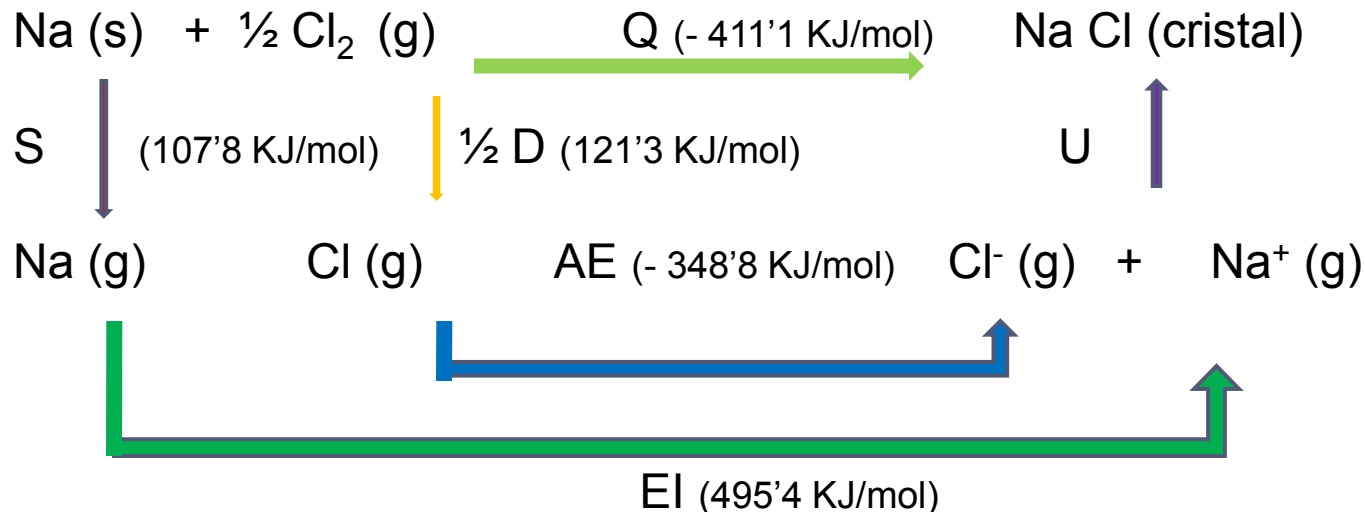


6. Se incluye el paso de los elementos al compuesto:



$$Q = S + \frac{1}{2} D + EI + AE + U$$

$$U = Q - S - \frac{1}{2} D - EI - AE = - 786'8 \text{ KJ/mol}$$



PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS IÓNICOS

- Los compuestos iónicos son sólidos a temperatura ambiente
- Presentan elevadas temperaturas de fusión y de ebullición. Esta propiedad crece a la vez que la energía reticular, mientras que el coeficiente de dilatación disminuye
- Son compuestos duros
- Se disuelven en disoluciones muy polares como el agua, debido a la existencia de atracciones dipolo – dipolo; e insolubles en disolventes apolares.



ENLACE METÁLICO

Se produce cuando se combinan entre sí los elementos metálicos; es decir, elementos de electronegatividades bajas y que se diferencien poco.

Los metales forman unas redes metálicas compactas; con elevado índice de coordinación, por lo que suelen tener altas densidades.

Suelen ser compuestos formados por el mismo elemento, cuando se unen elementos distintos se denominan aleaciones

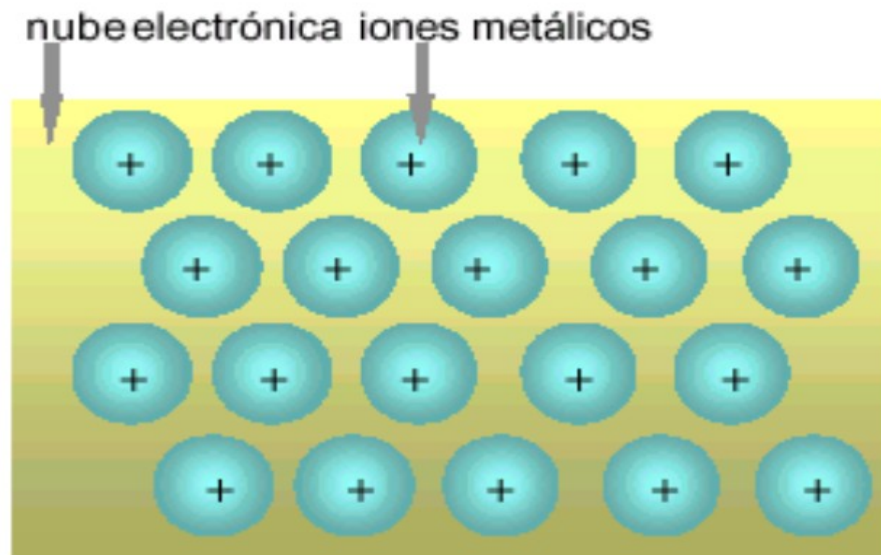
Teorías que explican el enlace metálico:

- Modelo de la nube de electrones
- Teoría de las bandas



Modelo de la nube de electrones

Cada átomo deja en libertad algunos de sus electrones que circulan por la red cristalina formando un **GAS O NUBE ELECTRÓNICA**.



Teoría de las bandas

Se basa en la teoría de los orbitales moleculares. Nos dice que cuando dos átomos enlazan, los orbitales de la capa de valencia se combinan para formar dos orbitales nuevos que pertenecen a toda la molécula:

ENLAZANTE (de menor energía)

ANTIENLAZANTE (de mayor energía).

En general, cuando se combinan N orbitales, de otros tantos átomos, se obtienen N orbitales moleculares de energía muy próxima entre sí, constituyendo lo que se llama una "banda":

banda de valencia: donde se encuentran los electrones de la capa de valencia

banda de conducción: la primera capa vacía

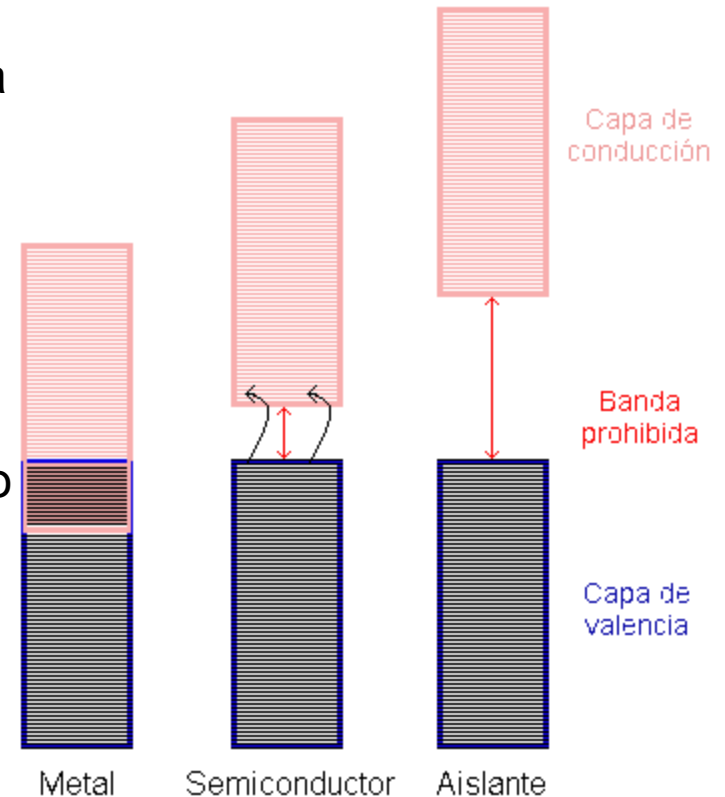


Dependiendo del contenido en electrones de las bandas, los metales son:

Conductor: tiene la banda de valencia llena o semillena . La energía de las dos bandas es similar, y por eso están solapadas.

Semiconductor: con banda de valencia llena.
Las bandas no se superponen pero los electrones pasan de una a otra con facilidad.

Aislante: la banda de valencia está llena y la de conductividad vacía, pero su energía es tan diferente que no pasan los electrones de una banda a otra.



Propiedades de los compuestos metálicos:

- Son sólidos a temperatura ambiente
- Sus puntos de fusión son muy variables, aunque generalmente altos.
- Son buenos conductores de la electricidad y del calor.
- Son brillantes
- Son dúctiles y maleables.
- Presentan el llamado “efecto fotoeléctrico”: emiten electrones cuando son sometidos a una radiación de energía determinada.
- Se suelen disolver unos en otros formando aleaciones.



ENLACE COVALENTE

Se produce enlace covalente cuando se comparten un par (o más) de electrones por dos o más átomos.

Dos átomos unidos mediante enlace covalente tienen menos energía que los dos átomos aislados.


La distancia a la que se consigue mayor estabilidad (menor energía) se llama “**distancia de enlace**”.

Al formarse un enlace covalente se produce desprendimiento de energía que explica que una molécula sea más estable que los átomos por separado.



MODELO DE LEWIS

- Cuando los átomos forman enlaces covalentes, tienden a compartir electrones para conseguir 8 e⁻ en su última capa (regla del octeto).
- Cada par de e⁻ compartidos forma un enlace.
- Se pueden formar enlaces sencillos, dobles y triples con el mismo átomo.
- Símbolos de Lewis:



IA	IIA						VIIIA
H•							•He•
Li•	•Be•						••Ne••
Na•	•Mg•						••Ar••
K•	•Ca•						

III A IV A V A VI A VII A

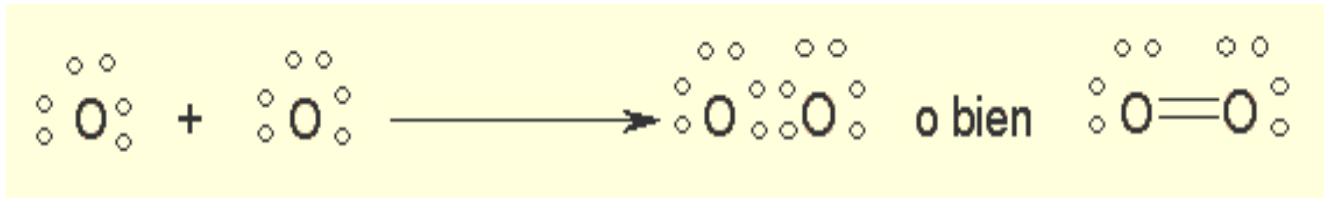
•B•	•C•	•N•	•O•	•F•
•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•

Representative elements Noble gases

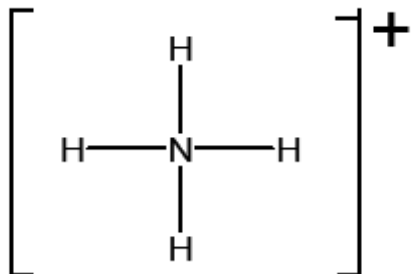
Enlaces covalentes simples:



Enlace covalente múltiple (doble o triple):



Enlace coordinado: los electrones son aportados por uno de los átomos



Carga sobre el N: $5 - 4 = +1$

Carga sobre el H: $1 - 1 = 0$



Cálculo para establecer estructuras de Lewis

1.- EN (nº de electrones necesarios) = $2 e^- \times n^\circ \text{ de H} + 8 e^- \times n^\circ \text{ átomos distinto al H}$

2.- ED (nº electrones disponibles) = suma de e^- de valencia disponible para todos los átomos.

Si son aniones se suman las cargas negativas y son cationes se restan las cargas positivas

3.- EC (nº de electrones compartidos) = $EN - ED$. El resultado se divide entre 2 y sale el nº de enlaces compartidos

4.- ENC (nº de electrones no compartidos) = $ED - EC$

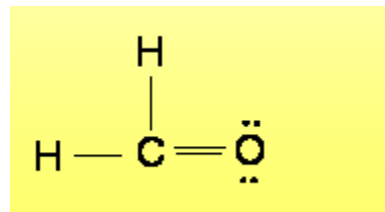
CH_2O

$$EN = 2 \cdot 2 + 8 \cdot 1 + 8 \cdot 1 = 20$$

$$ED = 4 e^- \text{ C} + 2 e^- \text{ H} + 6 e^- \text{ O} = 12$$

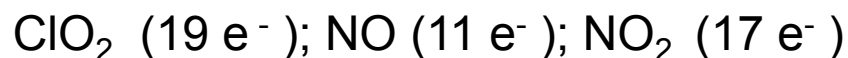
$$EC = 20 - 12 = 8 \rightarrow 8 : 2 = 4$$

$$ENC = 12 - 8 = 4$$



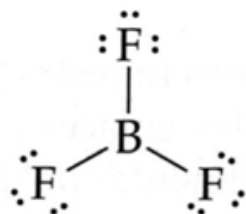
Excepciones a la teoría de Lewis

- ❑ Moléculas de n° impar de electrones:



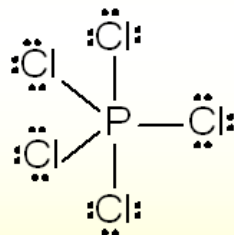
- ❑ Moléculas en las que un átomo tiene menos de un octeto (elementos del grupo 13) como el Be, B y Al

Ej.: BF_3



- ❑ Moléculas en las que un átomo tiene más de un octeto (elementos a partir del período 3 que tienen orbitales de tipo d y pueden tener más de 4 enlaces)

PCl_5

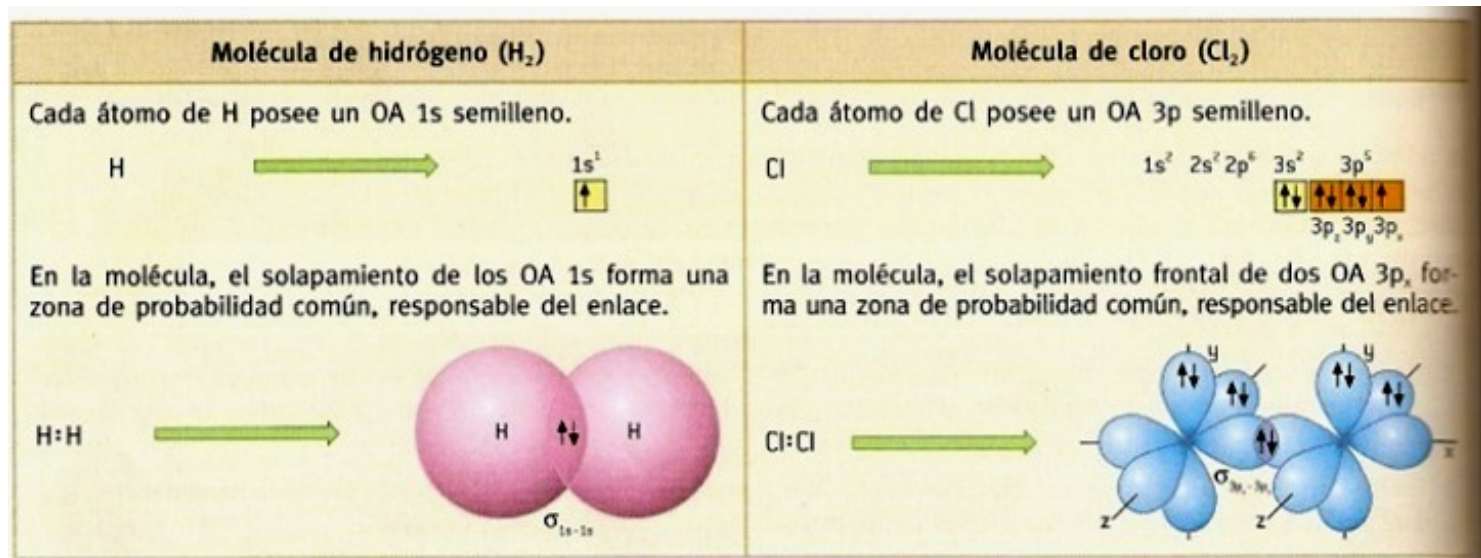


TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

Se produce cuando los OA que forman el enlace se solapan formando una zona de alta densidad electrónica.

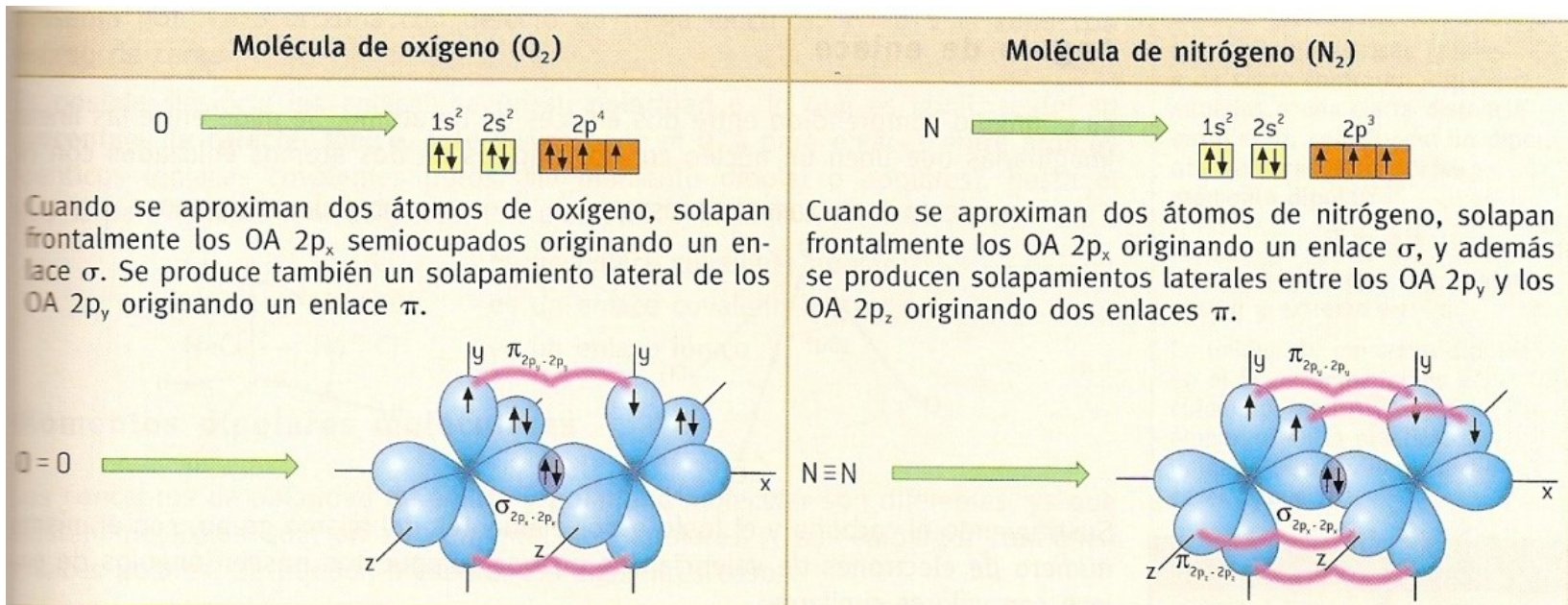
Solapamiento **frontal simple**: origina los enlaces σ (sigma)

- entre dos orbitales “s”
- entre un orbital “s” y otro “p”
- entre dos orbitales “p”



Solapamiento múltiple

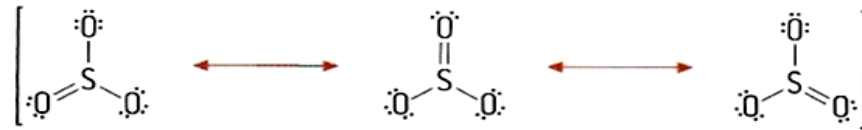
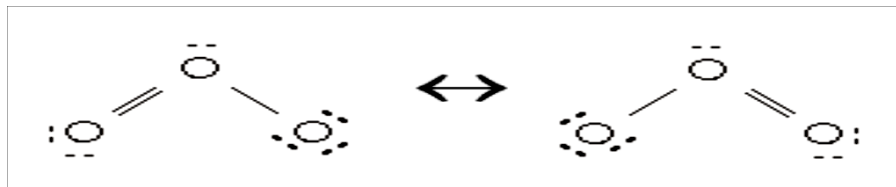
- Se producen dos o tres solapamientos de OA
- Siempre hay un enlace frontal σ
- Si el enlace que se forma es doble se produce un solapamiento lateral que origina **enlaces π (pi)**
- Si es un enlace triple se produce un enlace σ y dos enlaces π



Híbridos de resonancia:

Una sola estructura no vale para representar a una molécula.

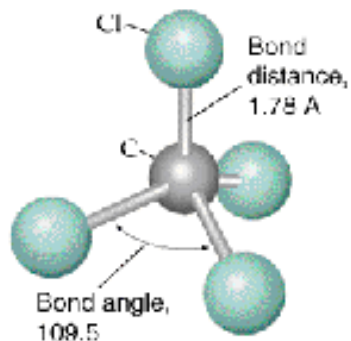
Los electrones se extienden por toda la molécula.



GEOMETRÍA MOLECULAR

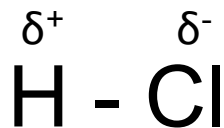
Para determinar la geometría de una molécula tendremos en cuenta:

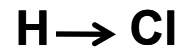
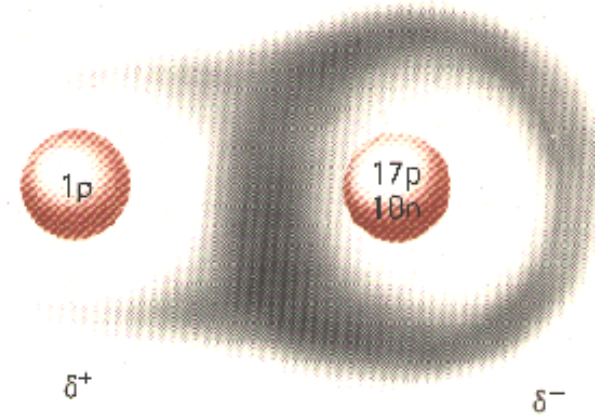
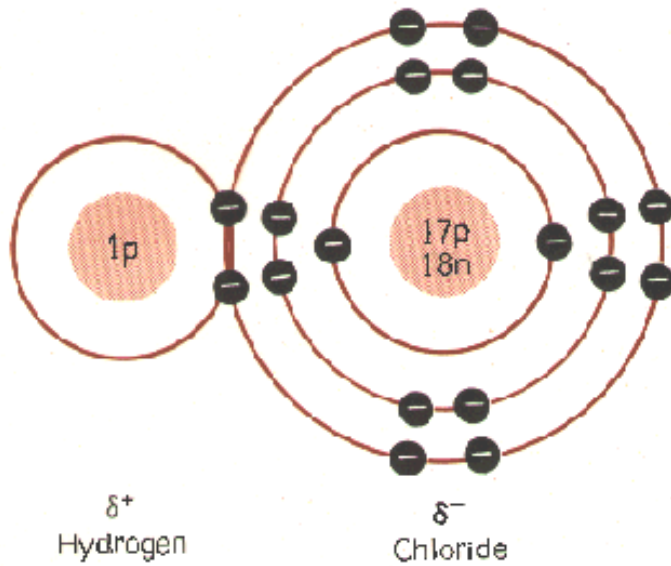
- Longitud de enlace
- Angulo de enlace
- Polaridad



Polaridad

- La electronegatividad de los átomos determina la polaridad de la molécula.
- El átomo más electronegativo tiene carga parcial negativa δ^- y el menos electronegativo carga positiva δ^+





**Carga postiva pequeña
Menor electronegatividad**

**Carga negativa pequeña
Mayor electronegatividad**

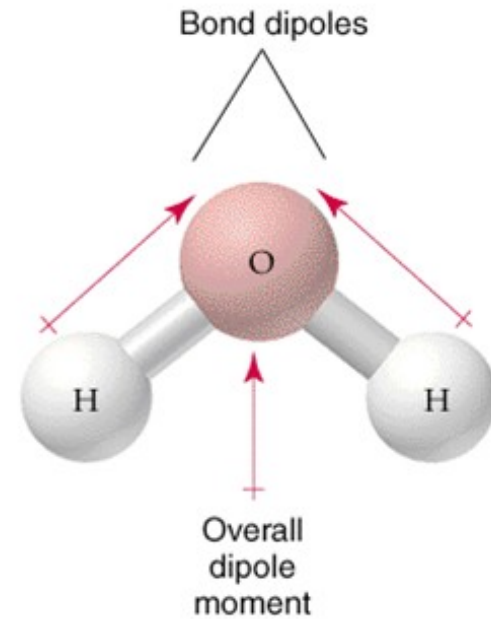


- Momento dipolar: magnitud vectorial $\mu = d \cdot Q$

Dependiendo del $\sum \mu$ las moléculas resultantes pueden ser:

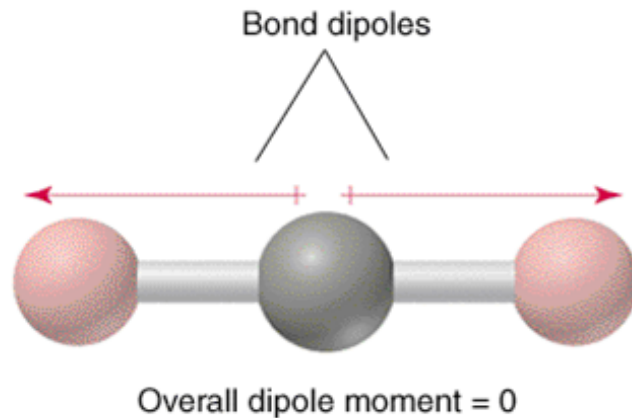
Moléculas polares: Tienen \sum no nulo.

- Moléculas con un solo enlace, ej.: HCl
- Moléculas angulares, piramidales ... , eje.: H_2O



Moléculas no polares: Tienen \sum nulo

Eje.: CO₂



Modelo de Repulsión de la capa de valencia (RPECV)

La geometría molecular puede predecirse basándonos en la repulsión entre pares electrónicos. Los pares de e- alrededor de un átomo se repelen entre sí, por ello, los orbitales que contienen estos pares de e-, se orientan de forma que queden lo más alejados que puedan unos de otros.

Predicción de la geometría molecular:


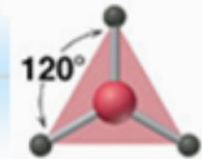

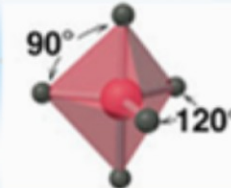
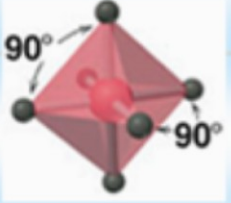
- 1.- Se dibuja la estructura de Lewis.
- 2.- Se cuenta el nº de pares de e- de enlace y de no enlace alrededor del átomo central y se colocan de forma que las repulsiones sean mínimas.
- 3.- La geometría molecular final vendrá determinada en función de la importancia de la repulsión entre los pares de e- de enlace y de no enlace.

PNC-PNC > PNC-PE > PE-PE

PNC= Par de no enlace; PE= Par de enlace

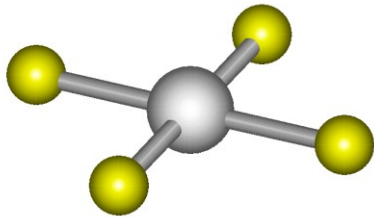
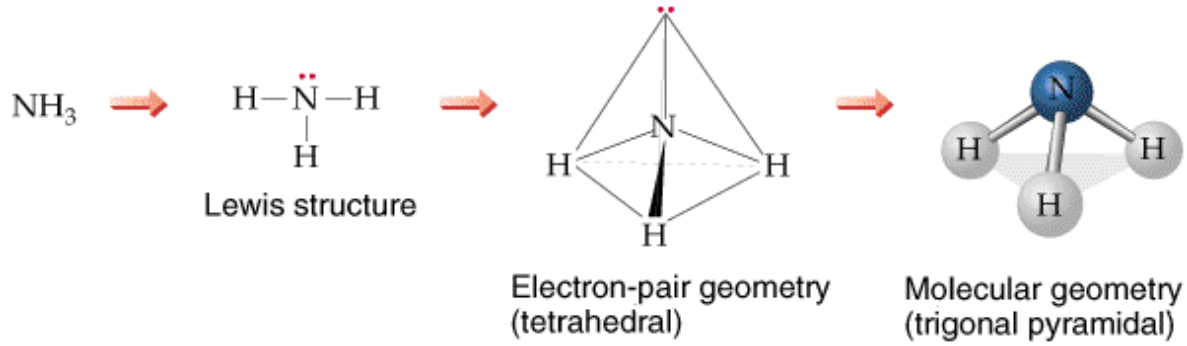


Geometrías más favorables según el número de pares electrónicos

Nº de pares de e-	Geometría	Angulo de enlace	
2 (AX ₂)	Linear	180°	
3 (AX ₃)	Trigonal Planar	120°	
4 (AX ₄)	Tetrahedral	109.5°	
5 (AX ₅)	Trigonal Bipyramidal	90° / 120°	
6 (AX ₆)	Octahedral	90°	

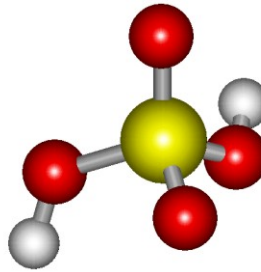


Ejemplos:



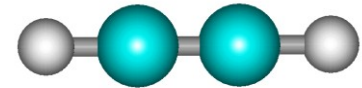
XeF_4

cuadrado plano



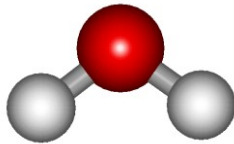
H_2SO_4

tetraedrica



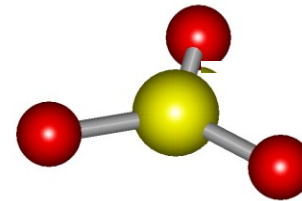
C_2H_2

lineal



H_2O

angular



SO_3

trigonal plana



Modelo de la hipótesis de la hibridación

Se hibridan:

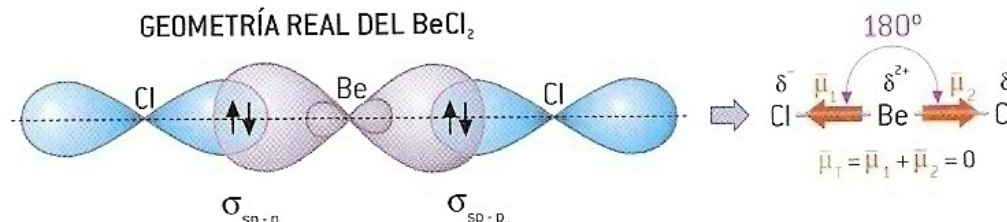
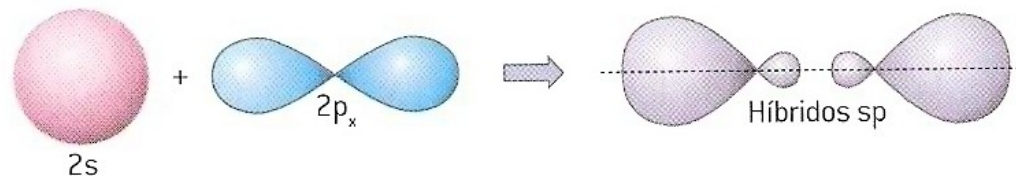
Los orbitales atómicos que van a formar enlaces “ σ ”

Las parejas de e^- sin compartir.

No se hibridan:

Los orbitales atómicos que van a formar el segundo o tercer enlace.

Los orbitales atómicos vacíos.



Tipos de hibridación

sp³

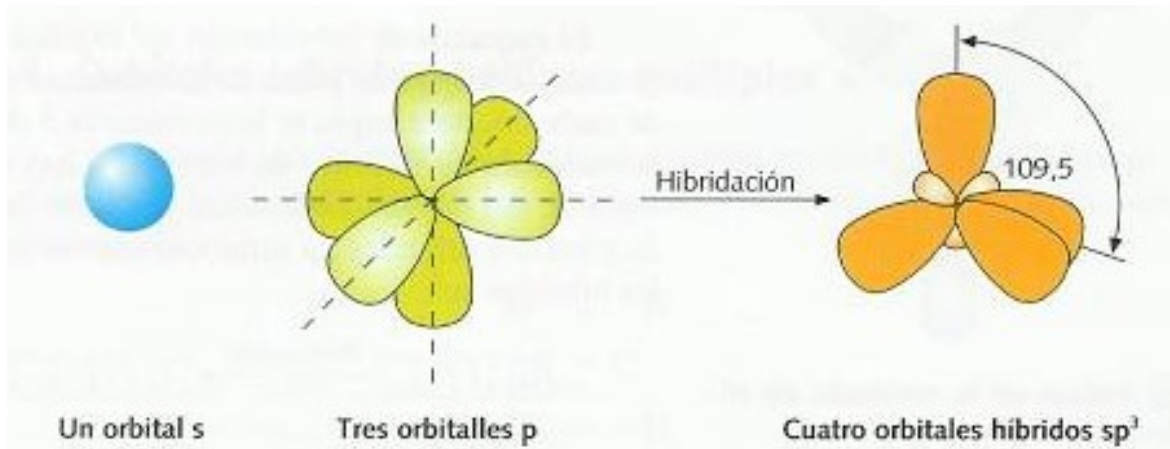
4 enlaces sencillos.

Ejemplo: metano

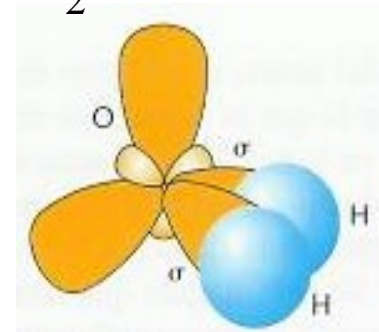
3 enlaces sencillos + 1 par

e⁻ sin compartir. Ej: NH₃

2 enlaces sencillos + 2 par e⁻ sin compartir. Ej: H₂O



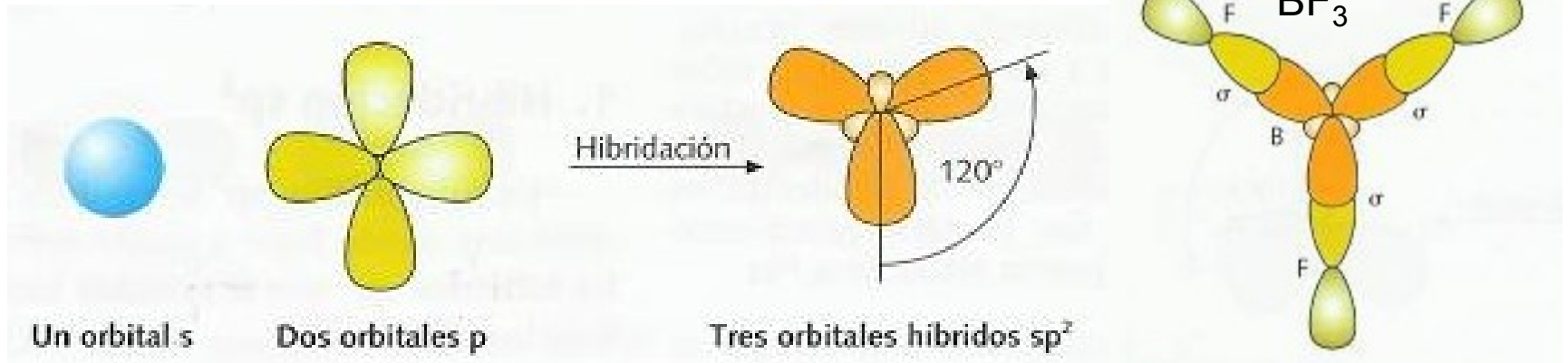
H₂O



sp^2

3 enlaces sencillos. Ejemplo: BF_3

1 enlace doble y 2 sencillos . Ejemplo: eteno



sp

2 enlaces sencillos. Ejemplo: BeF_2

2 enlaces dobles. Ejemplo: CO_2

1 enlace triple y 1 sencillo. Ejemplo: etino



FUERZAS INTERMOLECULARES

Son las fuerzas de atracción existentes entre las moléculas de las sustancias covalentes.

