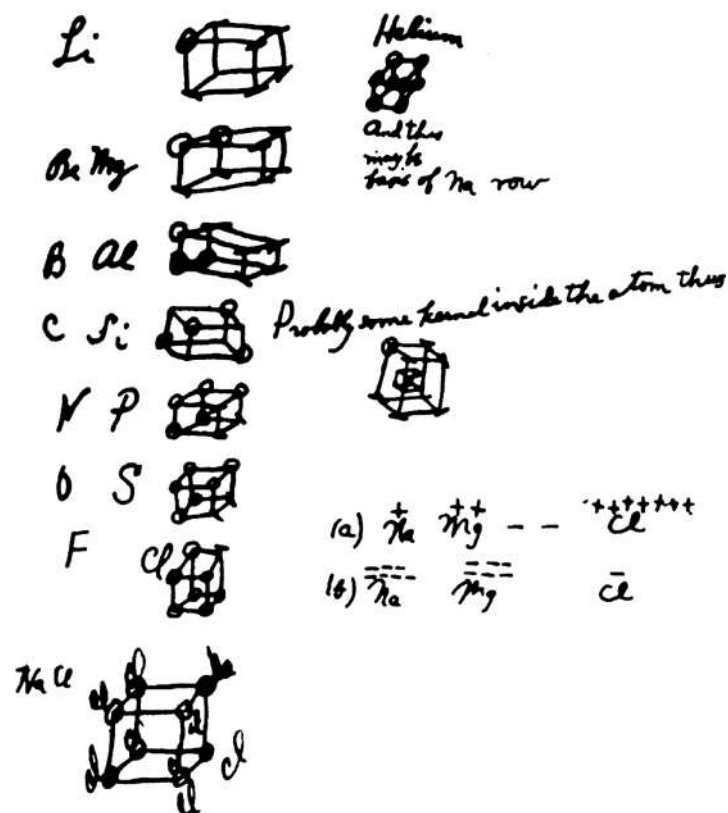


Enlace Químico I: Conceptos Básicos

Capítulo 9



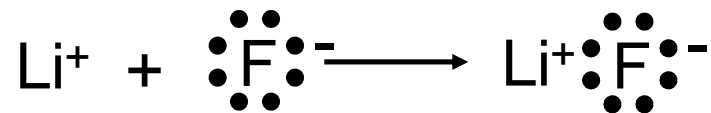
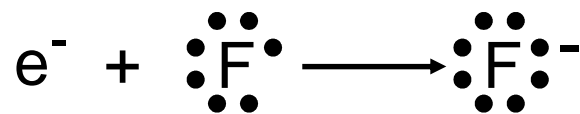
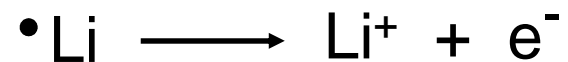
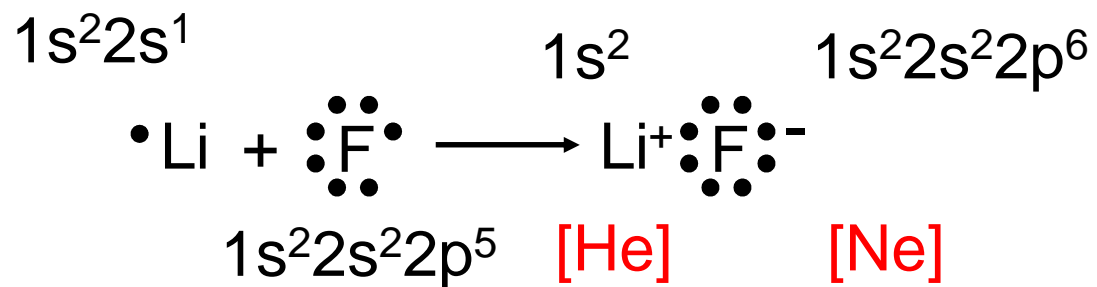
Electrones de valencia son los electrones de capa mas externa de un átomo. Estos participan en formar Enlaces químicos.

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

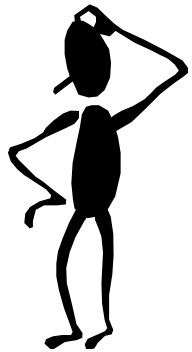
Símbolos de puntos de Lewis para elementos representativos y gases nobles

1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A	
•H																		He:
•Li	•Be•											•B•	•C•	•N•	•O•	:F•	:Ne:	
•Na	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8	9	10	11 1B	12 2B	•Al•	•Si•	•P•	•S•	:Cl•	:Ar:	
•K	•Ca•											•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	:Br•	:Kr:	
•Rb	•Sr•											•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	:I•	:Xe:	
•Cs	•Ba•											•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	:At•	:Rn:	
•Fr	•Ra•																	

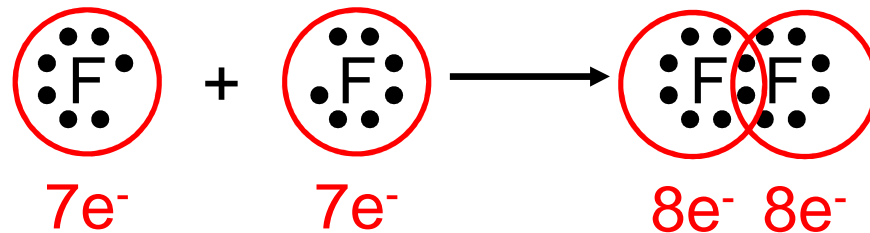
El enlace iónico



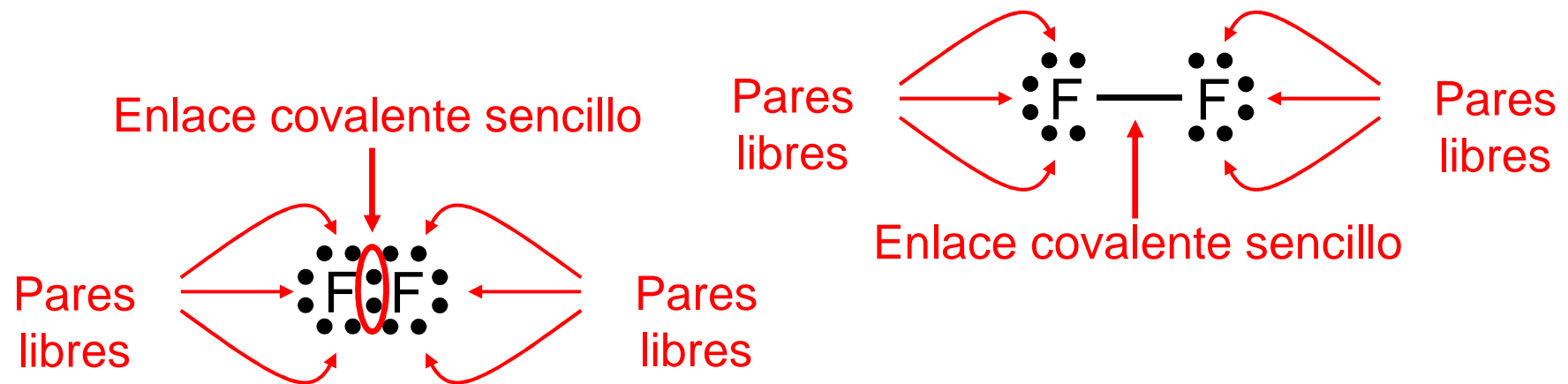
Un **enlace covalente** es en el que dos átomos comparten dos o mas electrones.



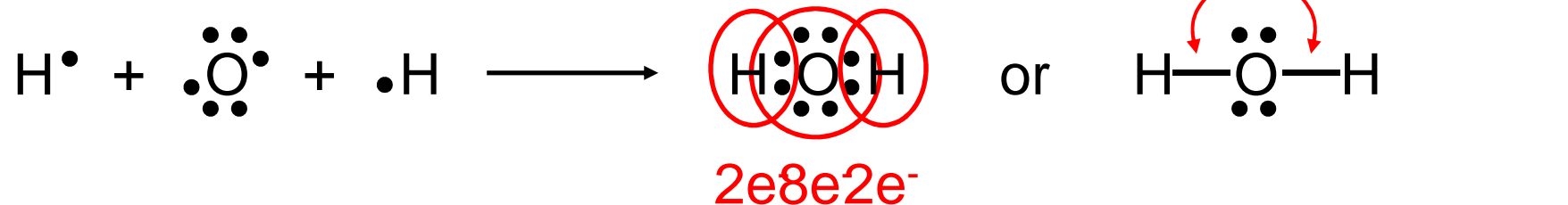
¿Porqué deben compartir electrones?



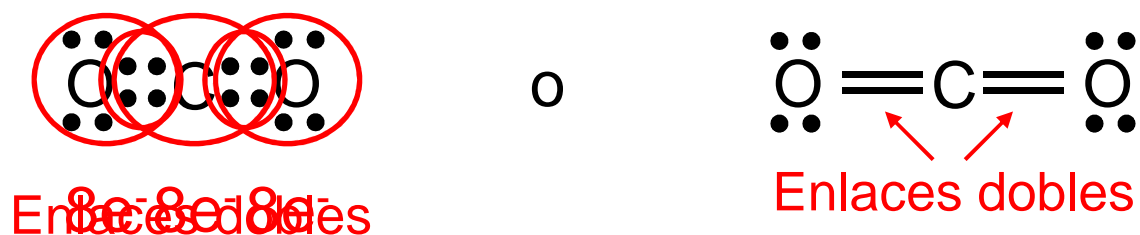
Estructura de Lewis de F_2



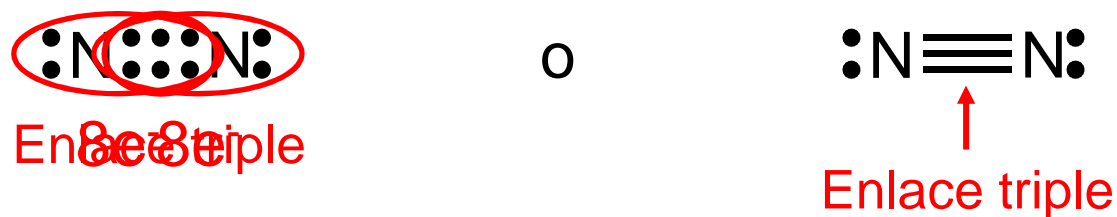
Estructura de Lewis de agua



Enlace doble – dos átomos comparten dos pares de e⁻s



Enlace triple – tds átomos compartes tres pares de e⁻s



Largos de enlace (covalentes)

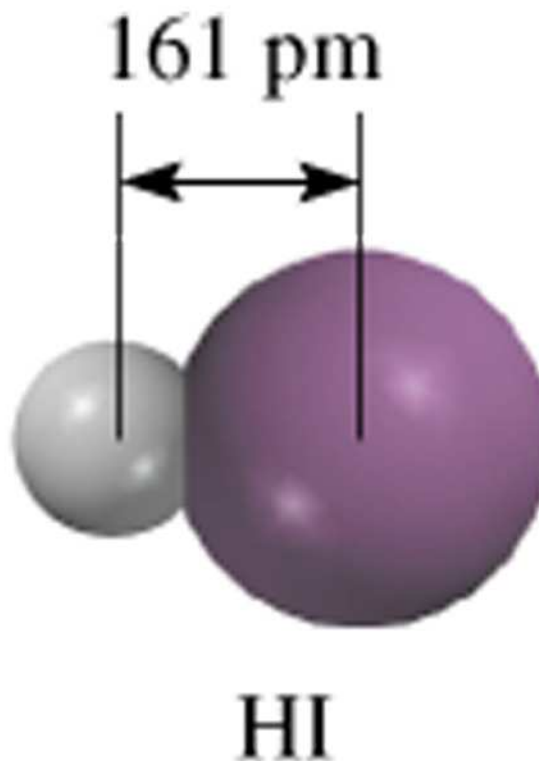


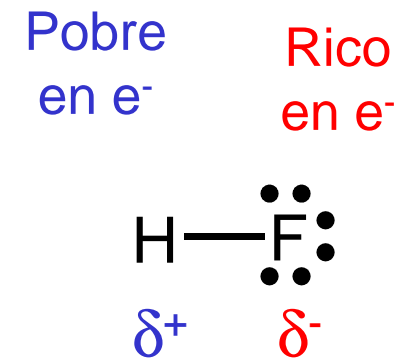
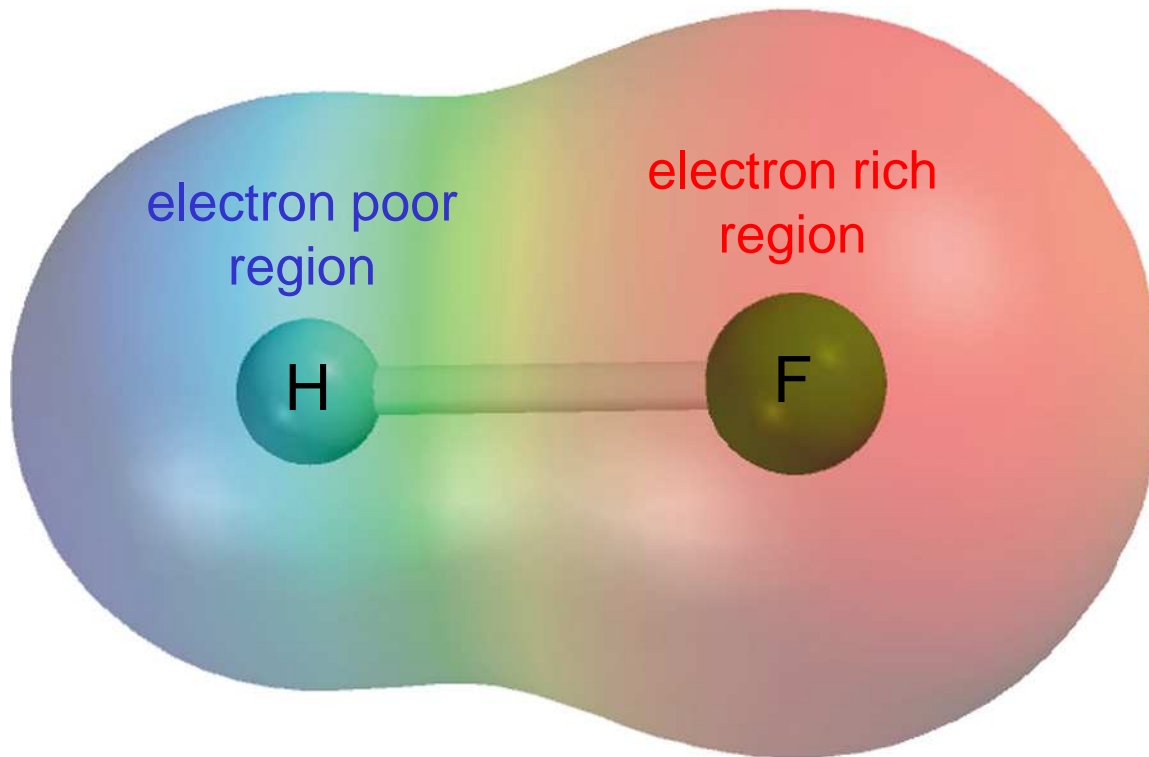
TABLE 9.2

Average Bond Lengths of Some Common Single, Double, and Triple Bonds

Bond Type	Bond Length (pm)
C—H	107
C—O	143
C=O	121
C—C	154
C=C	133
C≡C	120
C—N	143
C=N	138
C≡N	116
N—O	136
N=O	122
O—H	96

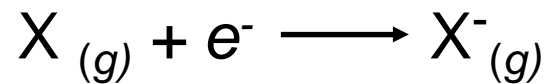
Largos de enlace
triple < doble < sencillo

Enlace covalente polar o ***enlace polar*** es un enlace covalente en el que hay mayor densidad electrónica alrededor de uno de los dos átomos

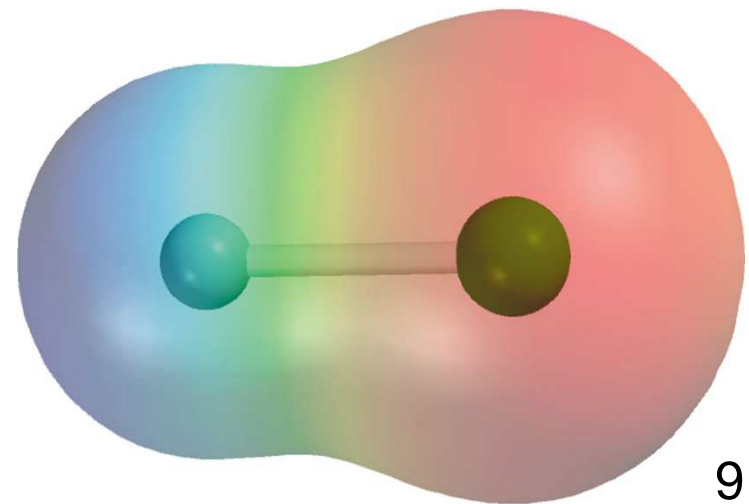


Electronegatividad es la habilidad de atraer los electrones de un enlace químico

Afinidad electrónica - **medible**, Cl tiene la mayor



Electronegatividad - **relativa**, F es el mas alto

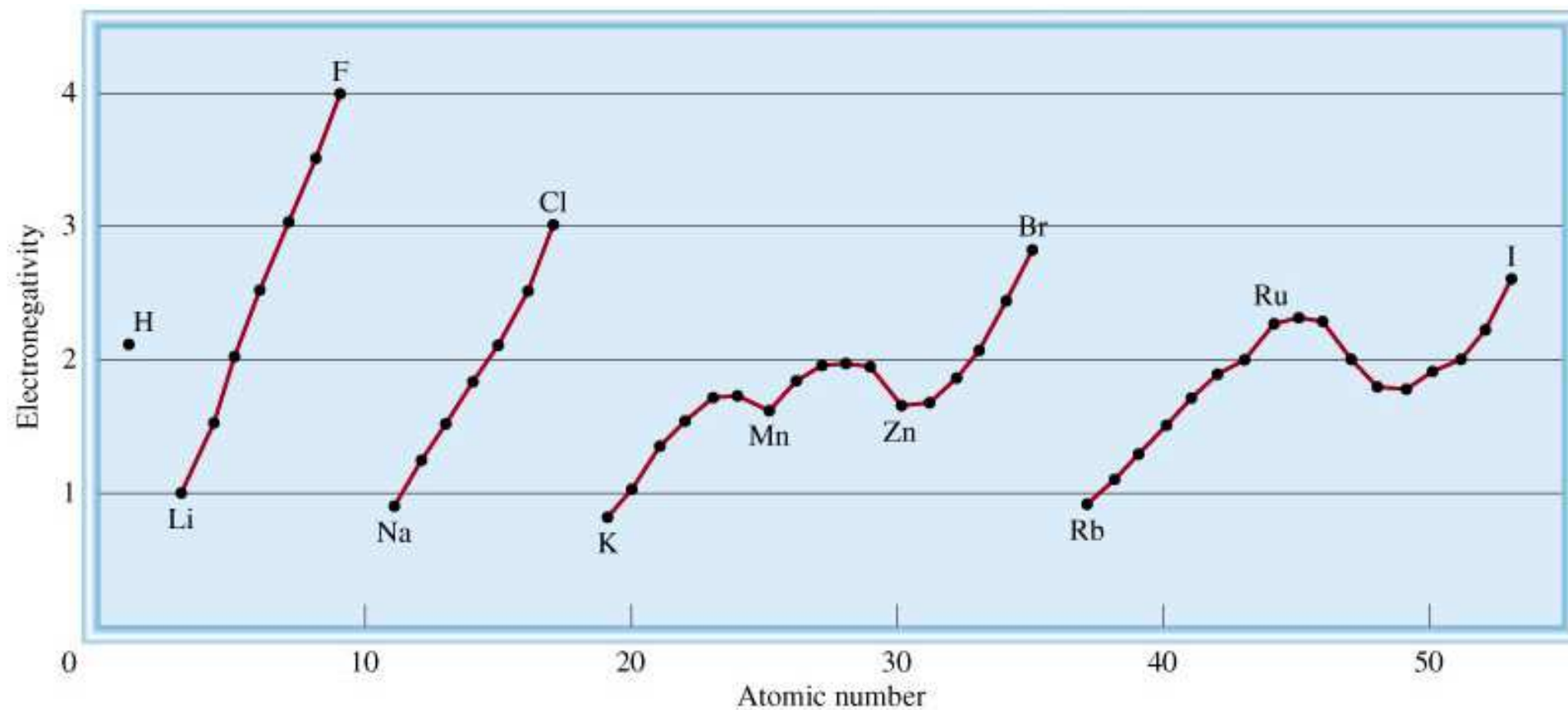


La electronegatividad de los elementos comunes

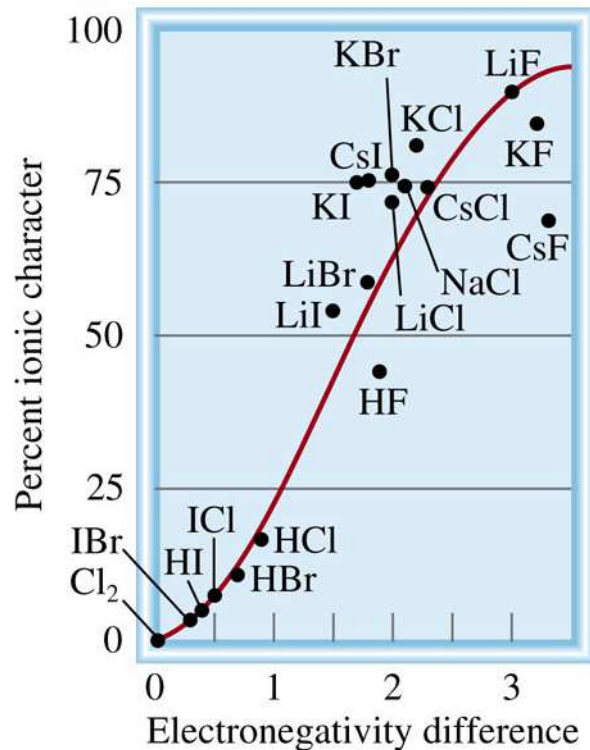
Increasing electronegativity

1A												3A					4A	5A	6A	7A	8A						
H 2.1																											
Li 1.0	Be 1.5												B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0										
Na 0.9	Mg 1.2												Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0										
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 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr 3.0										
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 2.6										
Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.0-1.2	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											
Fr 0.7	Ra 0.9																										

Variación de la electronegatividad con Z



Clasificación de enlaces por diferencia en electronegatividad



Diferencia

Tipo de enlace

0

Covalente no polar

≥ 2

Iónico

$0 < y < 2$

Covalente polar

Aumento de la diferencia en electronegatividad



Covalente

Covalente polar

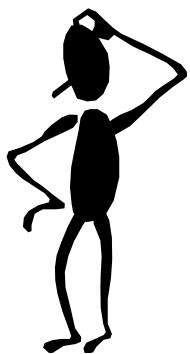
Iónico



compartir e⁻

Transferencia parcial
de e⁻

Transferencia
de e⁻



Clasifique los siguientes enlaces: El enlace de CsCl;
El enlace de H₂S; y el enlace NN en H₂NNH₂.

Cs – 0.7

Cl – 3.0

$$3.0 - 0.7 = 2.3$$

Iónico

H – 2.1

S – 2.5

$$2.5 - 2.1 = 0.4$$

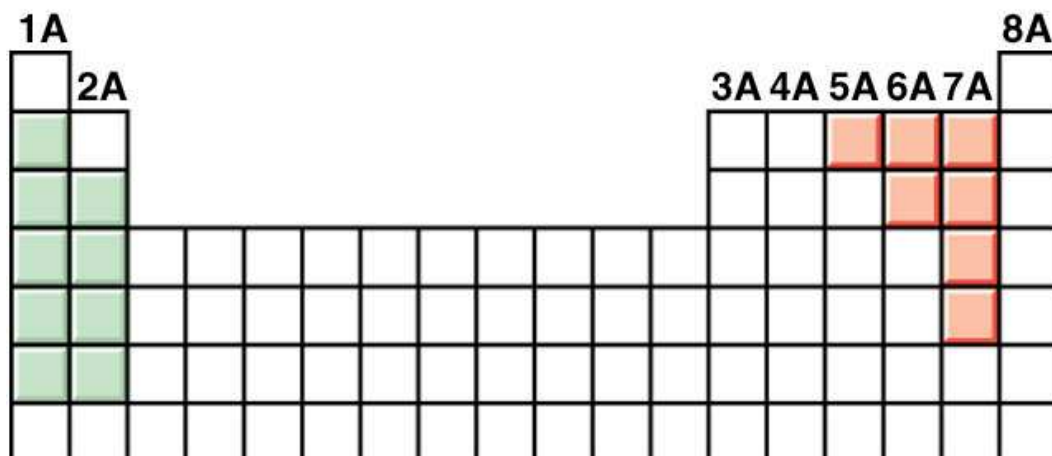
Covalente polar

N – 3.0

N – 3.0

$$3.0 - 3.0 = 0$$

Covalente



¿Cómo escribimos estructuras de Lewis?

1. Dibuje la estructura esquelética mostrando como están unidos los átomos. Coloque al elemento menos electronegativo en el centro.
2. Contabilice los electrones de valencia. Si son iones poliatómicos, añada uno por cada carga negativa y reste uno por cada carga positiva.
3. Complete octeto para todos los átomos comenzando afuera, hacia adentro. Hay algunas excepciones (H, Be, B)
4. De ser necesario hacer enlaces dobles o triples entre átomos, hágalos moviendo electrones.



Escriba la estructura de Lewis de NF_3

Paso 1 – N es menos electronegativo que F, colóquelo en el centro

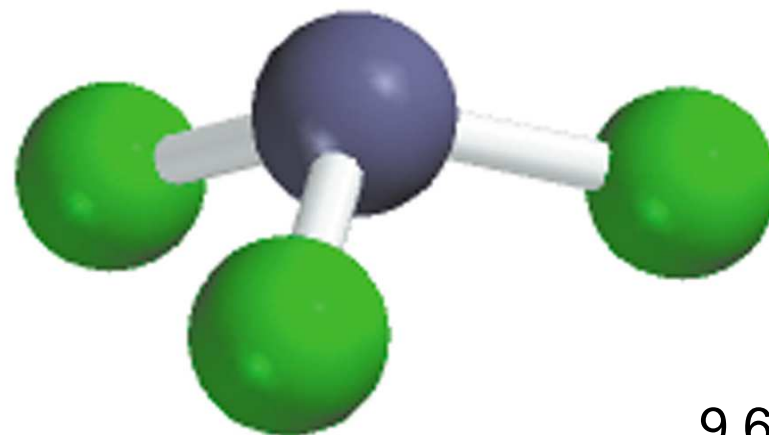
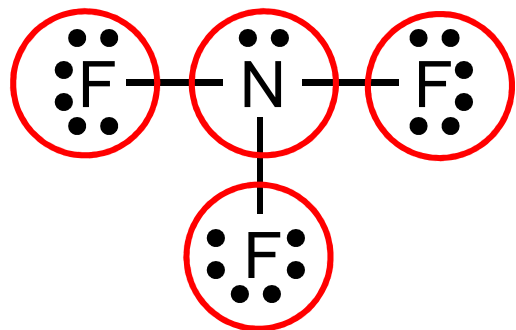
Paso 2 – Cuente los electrones de valencia N - 5 ($2s^2 2p^3$)
y F - 7 ($2s^2 2p^5$)

$$5 + (3 \times 7) = 26 \text{ electrones de valencia}$$

Paso 3 – Dibuje enlaces sencillos y complete octetos de afuera hacia adentro

Paso 4 - Verifique que no colocó electrones de mas ni de menos

$$3 \text{ enlaces sencillos } (3 \times 2) + 10 \text{ pares libres } (10 \times 2) = 26 \text{ e}^- \text{ s valencia}$$





Escriba la estructura de Lewis del ión carbonato (CO_3^{2-})

Paso 1 – C es menos electronegativo que O, colóquelo en el centro

Paso 2 – Cuente los electrones de valencia C - 4 ($2s^2 2p^2$)
y O - 6 ($2s^2 2p^4$) + $2e^-$ por la carga negativa

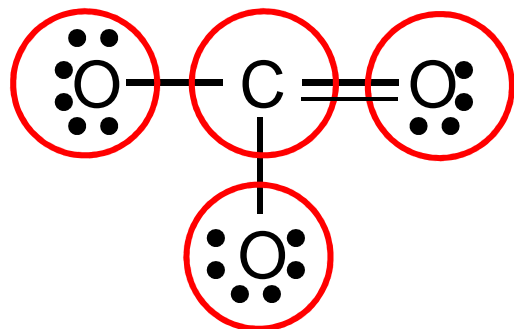
$$4 + (3 \times 6) + 2 = 24 \text{ electrones de valencia}$$

Paso 3 – Dibuje enlaces sencillos y complete octetos de afuera hacia adentro (¿todos los átomos tienen octeto?)

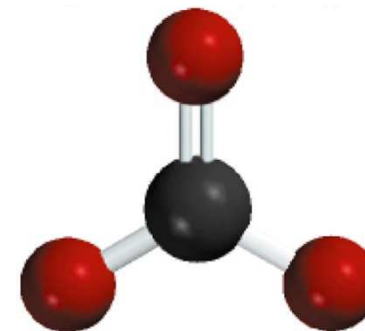
Paso 4 – Verifique que no tenga electrones de mas ni de menos

$$3 \text{ enlaces sencillos } (3 \times 2) + 9 \text{ pares libres } (9 \times 2) = 26 \text{ e}^- \text{ de valencia}$$

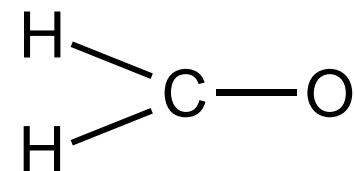
Paso 5 – Carbono necesita electrones, forme un doble enlace



$$\begin{array}{r} 2 \text{ enlaces sencillos } (2 \times 2) = 4 \\ 1 \text{ doble enlace} = 4 \\ 8 \text{ pares libres } (8 \times 2) = 16 \\ \hline \text{Total} = 24 \end{array}$$



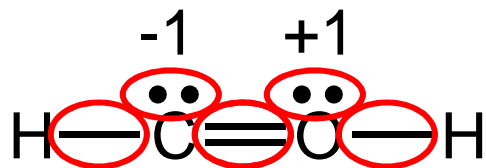
Dos posibles estructuras esqueléticas para formaldehído (CH₂O)



La **carga formal** es la diferencia entre los electrones de valencia de un átomo aislado y el número asignado a este en una estructura de Lewis.

$$\begin{array}{l} \text{Carga formal} \\ \text{de un átomo} \end{array} = \begin{array}{l} \text{e}^- \text{'s de} \\ \text{valencia} \end{array} - \begin{array}{l} \text{electrones no} \\ \text{enlazantes} \end{array} - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{electrones} \\ \text{enlazantes} \end{array} \right)$$

La suma de todas las cargas formales en una molécula neutral tiene que ser cero (y en un ión poliatómico tiene que ser igual a la carga del ión).



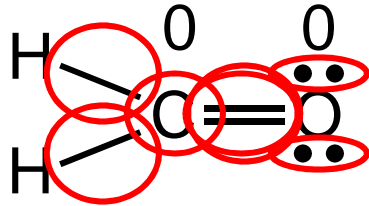
$$\begin{array}{r}
 \text{C} - 4 e^- \\
 \text{O} - 6 e^- \\
 \hline
 2\text{H} - 2 \times 1 e^- \\
 \hline
 12 e^-
 \end{array}$$

$$\begin{array}{r}
 2 \text{ sencillos } (2 \times 2) = 4 \\
 1 \text{ doble enlace} = 4 \\
 \hline
 2 \text{ pares libres } (2 \times 2) = 4 \\
 \hline
 \text{Total} = 12
 \end{array}$$

$$\text{Carga formal} = \text{electrones de valencia} - \text{electrones no enlazantes} - \frac{1}{2} \left(\text{electrones enlazantes} \right)$$

$$\begin{array}{l}
 \text{Carga formal} \\
 \text{de C}
 \end{array}
 = 4 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = -1$$

$$\begin{array}{l}
 \text{Carga formal} \\
 \text{de O}
 \end{array}
 = 6 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = +1$$



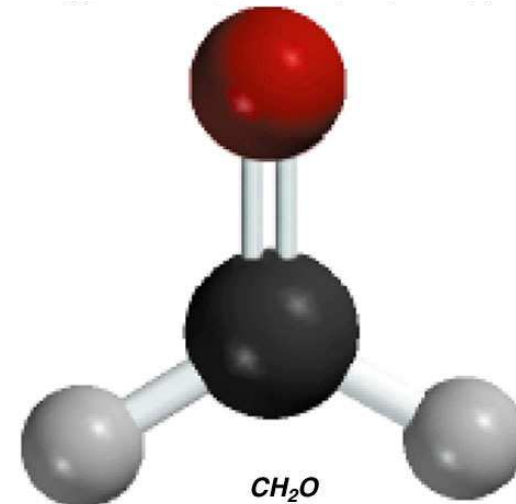
$$\begin{array}{r}
 \text{C} - 4 e^- \\
 \text{O} - 6 e^- \\
 \hline
 2\text{H} - 2 \times 1 e^- \\
 \hline
 12 e^-
 \end{array}$$

$$\begin{array}{r}
 2 \text{ sencillos } (2 \times 2) = 4 \\
 1 \text{ doble enlace} = 4 \\
 \hline
 2 \text{ pares libres } (2 \times 2) = 4 \\
 \hline
 \text{Total} = 12
 \end{array}$$

Carga formal = electrones de valencia - electrones no enlazantes - $\frac{1}{2}$ (electrones enlazantes)

$$\begin{array}{l}
 \text{Carga formal} \\
 \text{de C}
 \end{array}
 = 4 - 0 - \frac{1}{2} \times 8 = 0$$

$$\begin{array}{l}
 \text{Carga formal} \\
 \text{de O}
 \end{array}
 = 6 - 4 - \frac{1}{2} \times 4 = 0$$

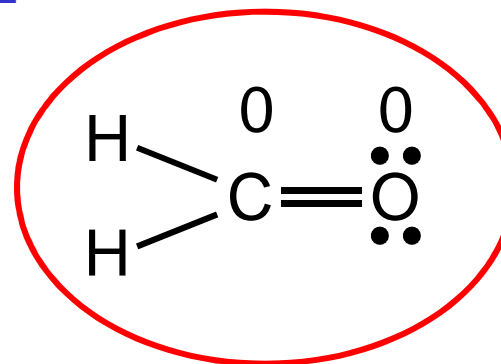
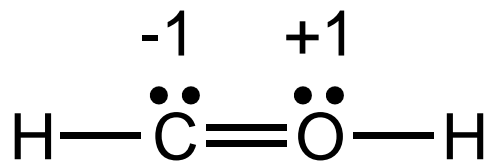


Carga formal y estructuras de Lewis

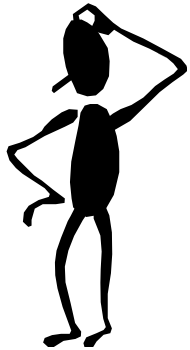
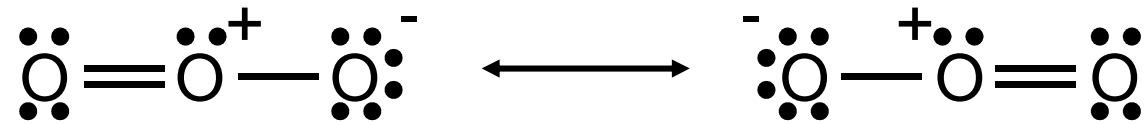
1. Para moléculas neutrales, una estructura de Lewis que tenga cargas formales igual a cero es preferida sobre una en que las cargas no sean cero.
2. Mientras menor el “tamaño” de las cargas formales, mas realista es la molécula.
3. Si hay varias opciones realistas entre las reglas anteriores, escriba la estructura que tenga cargas formales negativas en los elementos mas electronegativos.



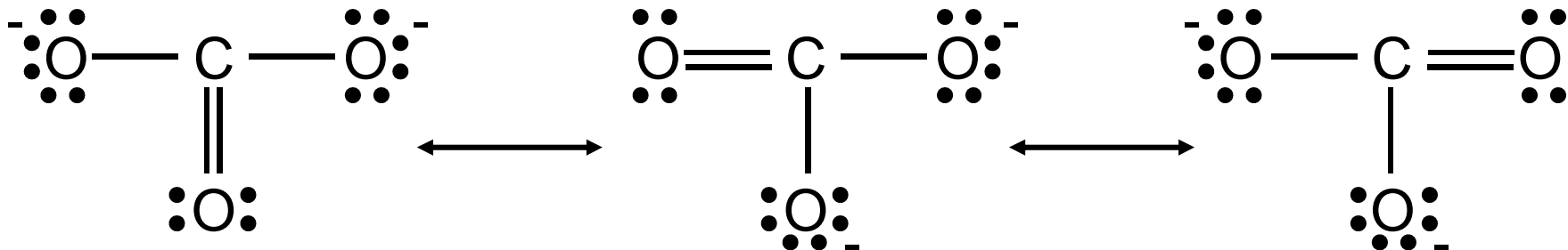
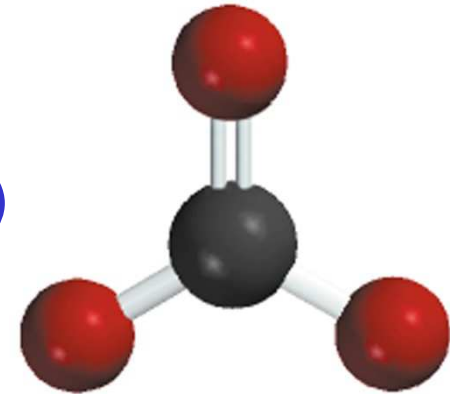
¿Cuál es mas realista para CH₂O?



Una **estructura de resonancia** es una o mas estructuras de Lewis para una sólo molécula que no puede ser representada exactamente con sólo una estructura. (ejemplo: O₃)

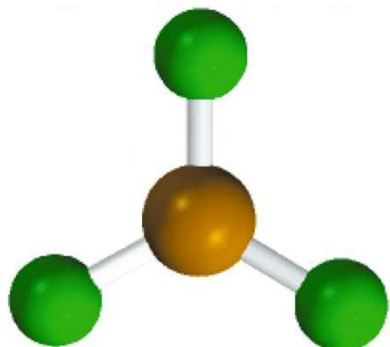
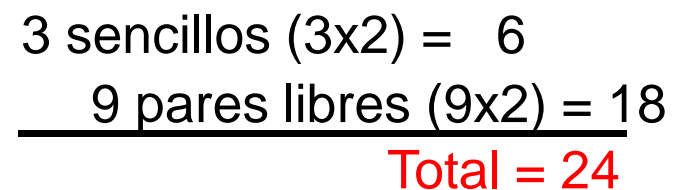
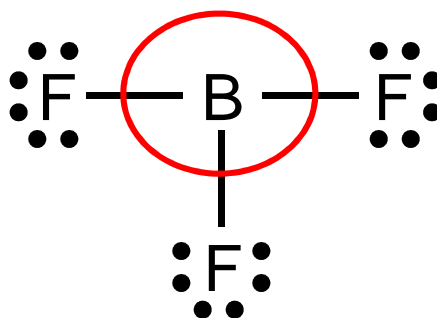
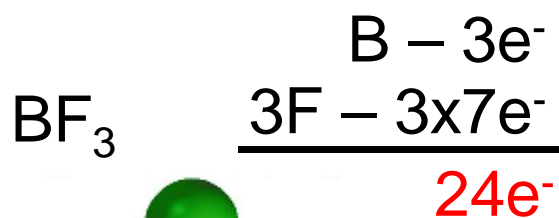
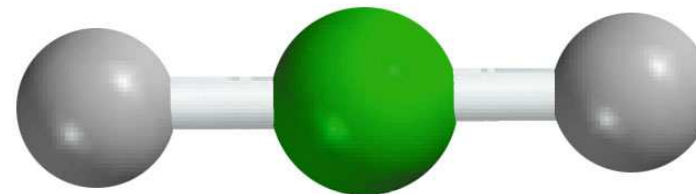
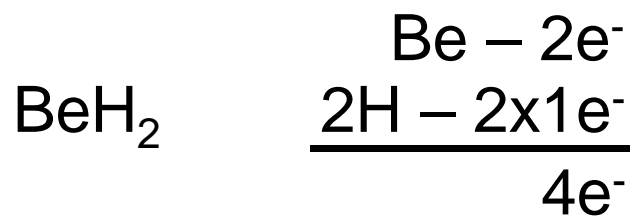


¿Cuáles son las estructuras de Resonancia para el ión carbonato (CO₃²⁻)



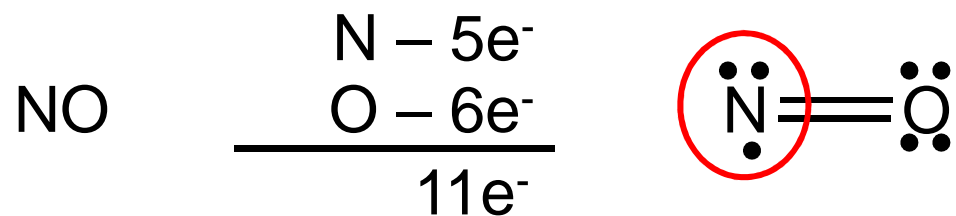
Excepciones a la regla del octeto

El octeto incompleto

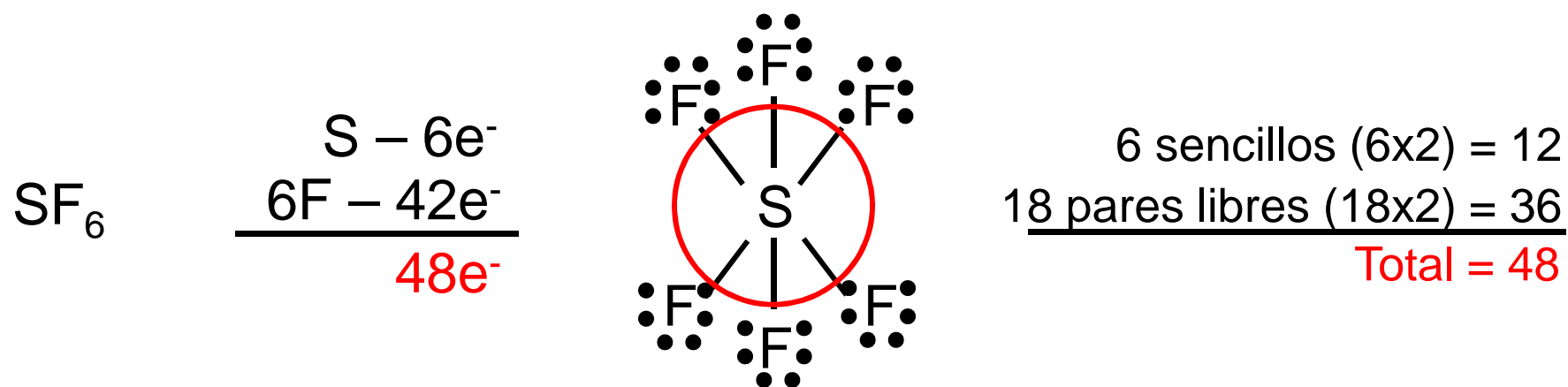


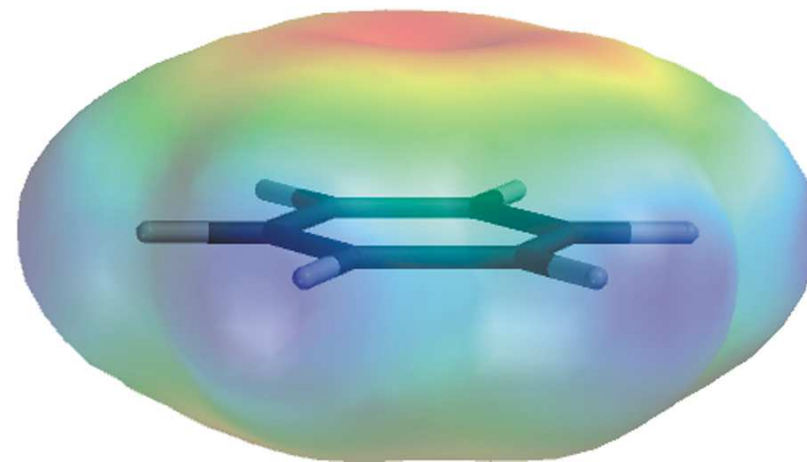
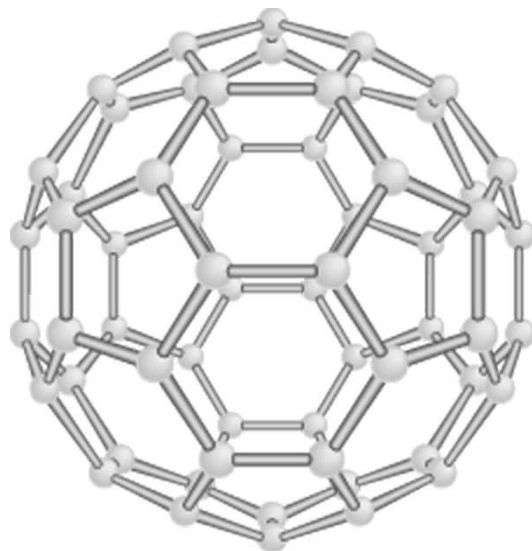
Excepciones a la regla del octeto

Moléculas con número par de electrones



El octeto expandido (número cuántico principal tiene que ser $n > 2$)

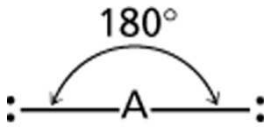
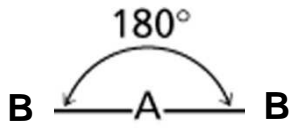




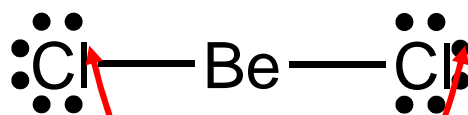
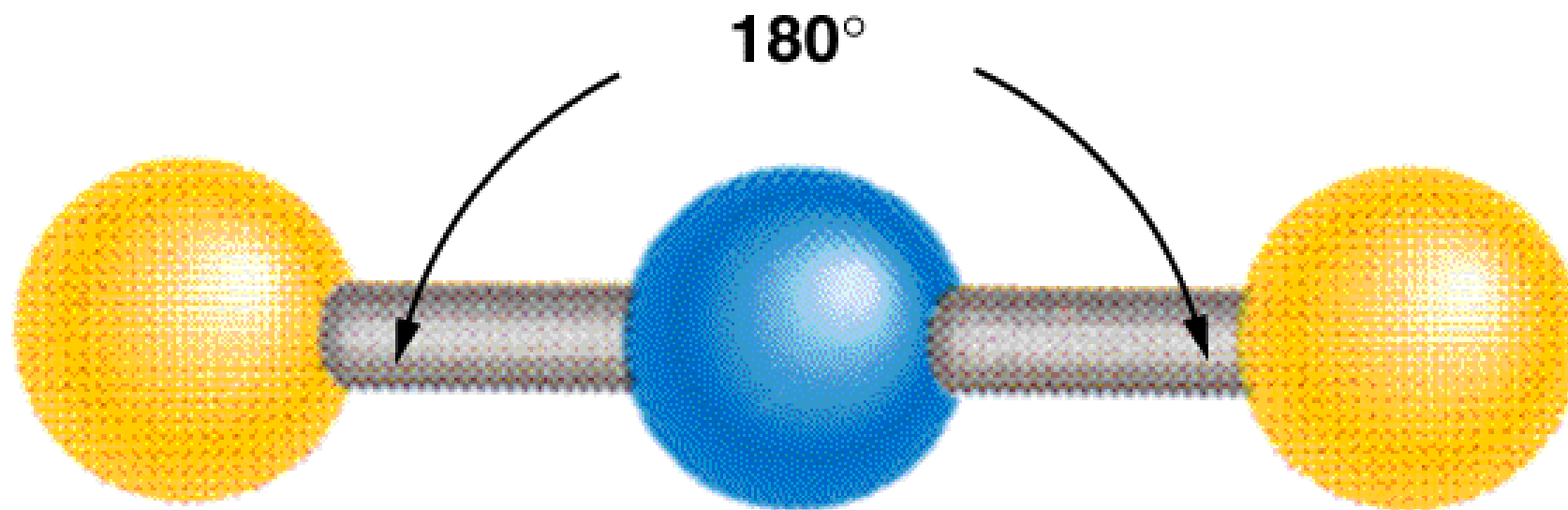
Enlace químico II:
geometría molecular e hibridación
de orbitales atómicos
Capítulo 10

Modelo de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia (RPECV):

Predice la geometría de la molécula a partir de las repulsiones electrostáticas entre las regiones de electrones. Los enlaces múltiples cuentan como una región electrónica, así como los enlaces sencillos y los pares de electrones libres.

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB ₂	2	0	lineal 	lineal 

Cloruro de berilio



2 átomos enlazados al átomo central

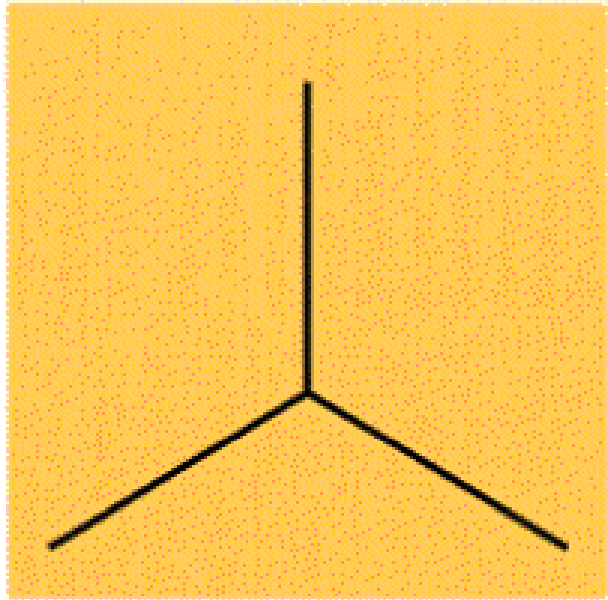
0 pares libres en el átomo central

RPECV

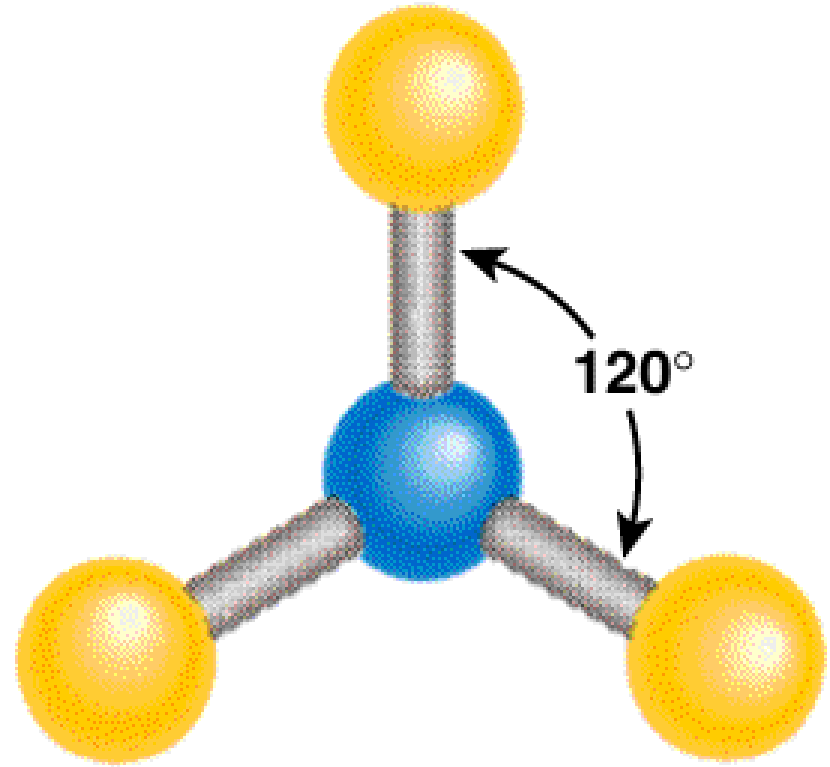
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana

The table includes two diagrams illustrating trigonal planar geometry. The first diagram shows a central atom 'A' bonded to three other atoms, forming a triangle. The top vertex has a lone pair of electrons represented by two dots. An arc between two bonds is labeled 120° . The second diagram shows a central atom 'A' bonded to three 'B' atoms, forming a triangle with 'B' labels at each vertex.

Trifluoruro de boro

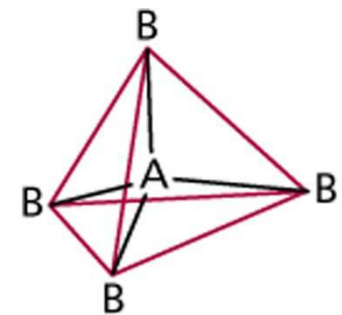
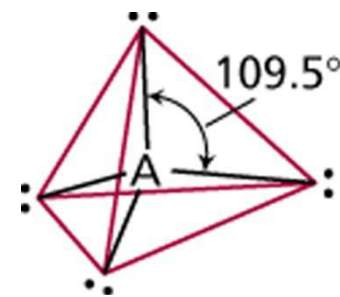


Plana

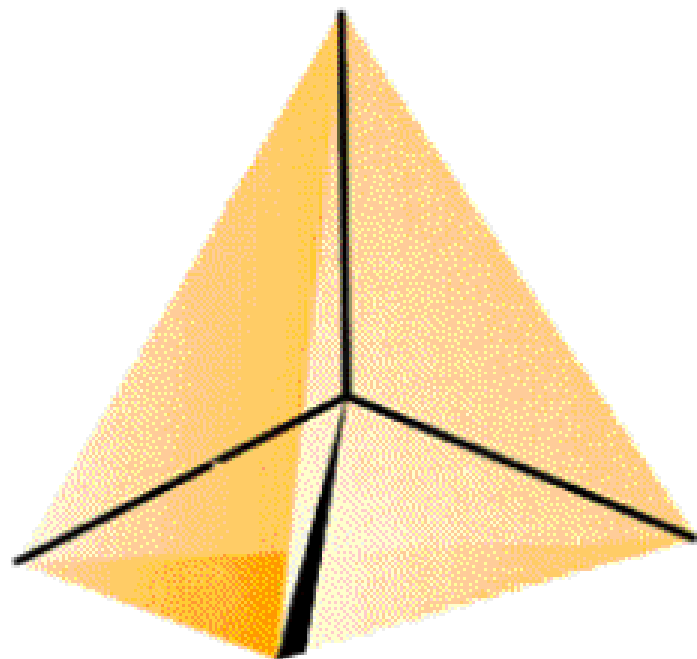


RPECV

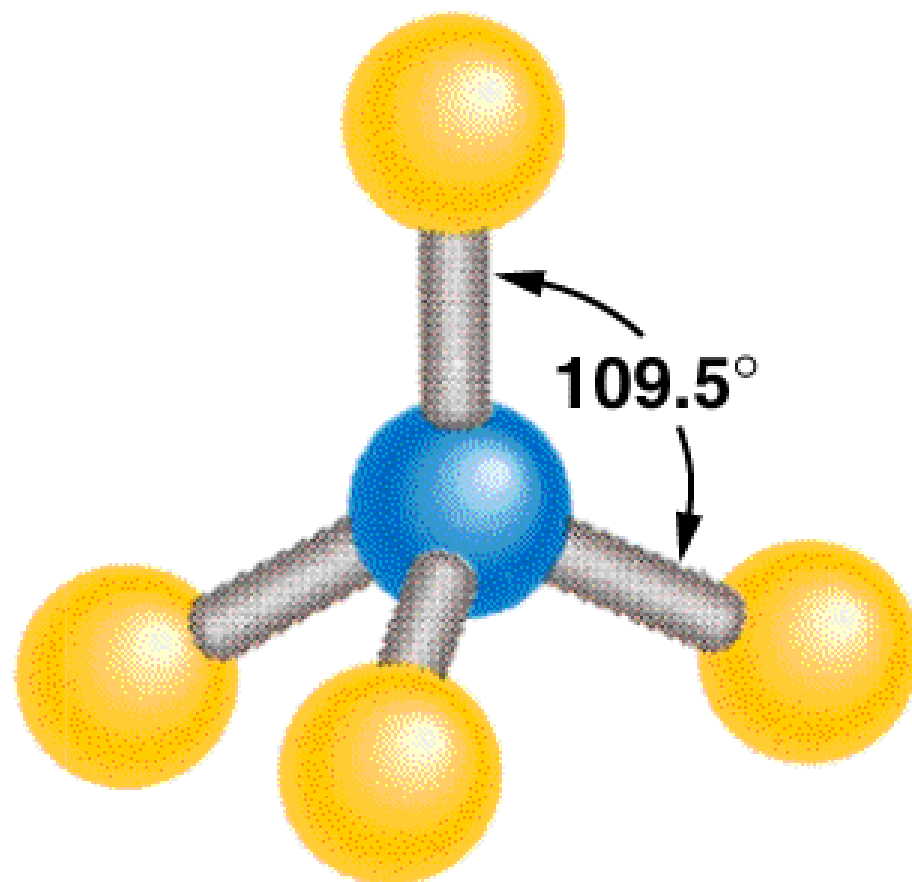
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	linear	linear
AB_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica



Metano

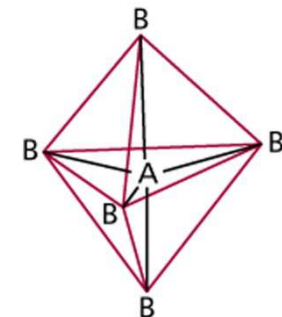
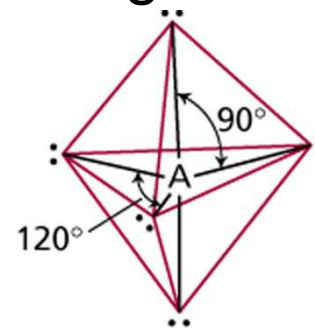


Tetraédrica

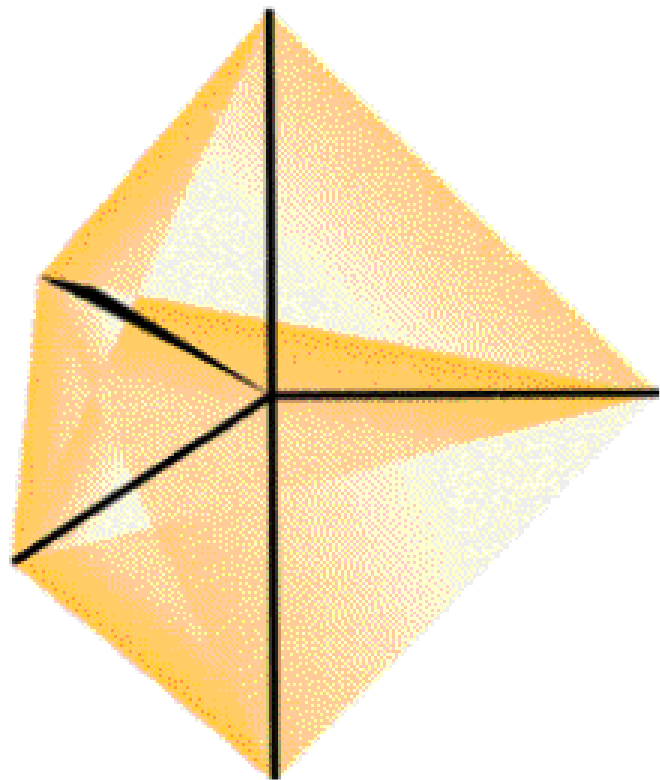


RPECV

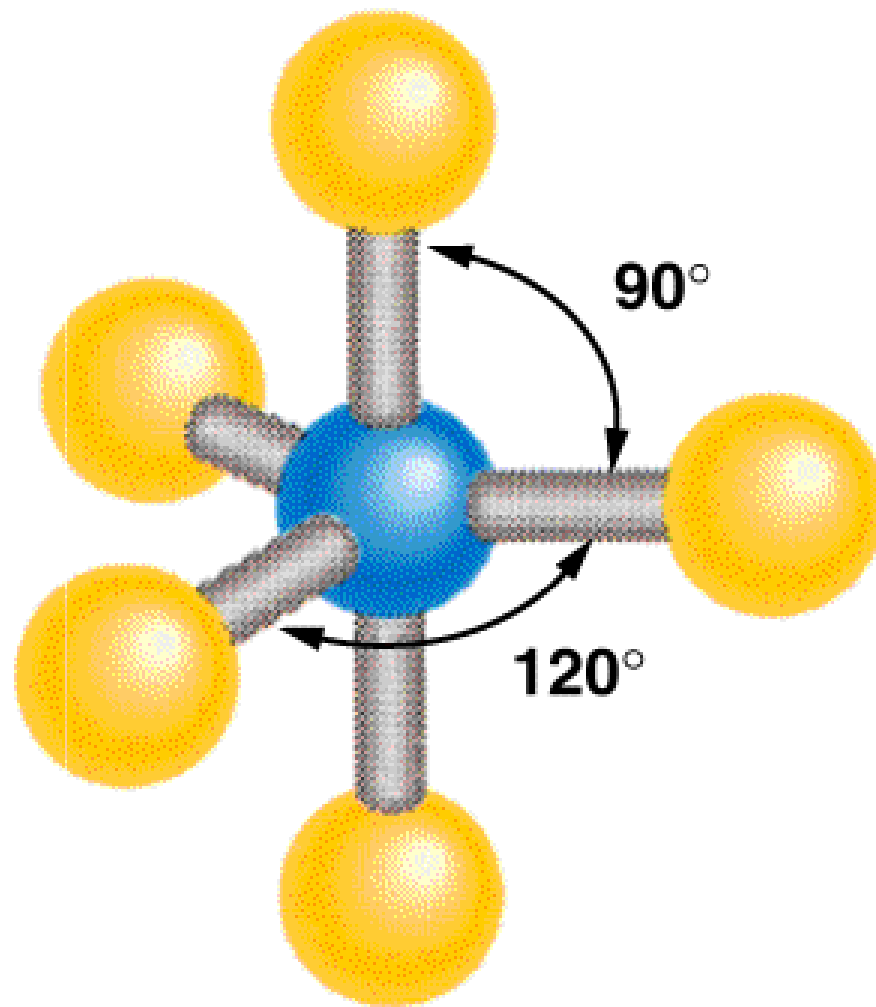
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal



Pentacloruro de fósforo

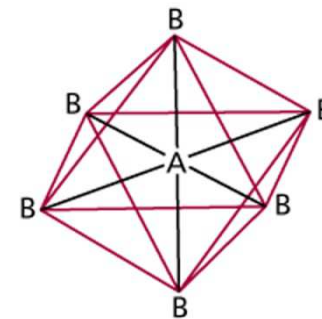
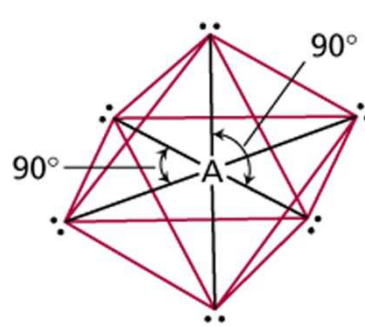


**Bipiramidal
trigonal**

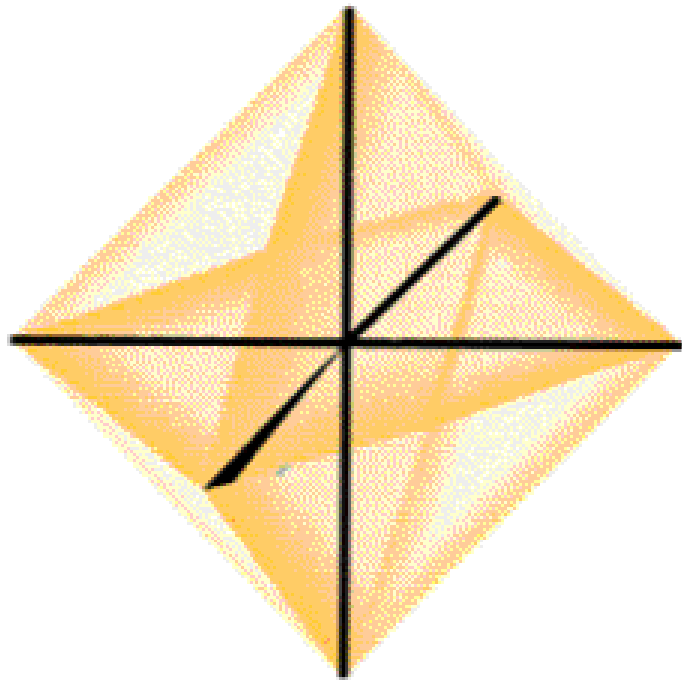


RPECV

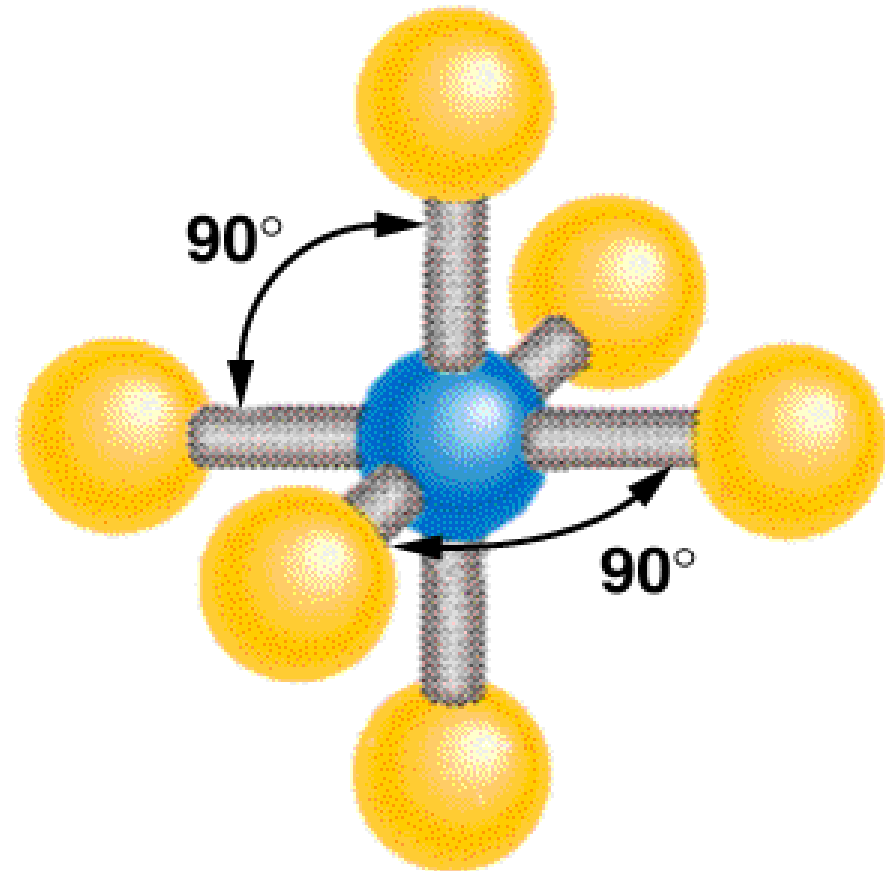
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal
AB_6	6	0	octaédrica	octaédrica



Hexafluoruro de azufre



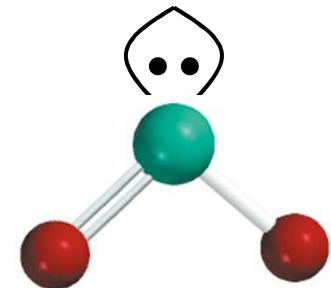
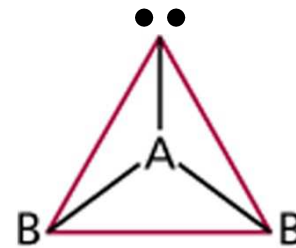
Octaédrica



- No siempre todas las regiones son regiones electrónicas enlazantes.
- En estos casos la geometría electrónica y la geometría molecular NO será igual.

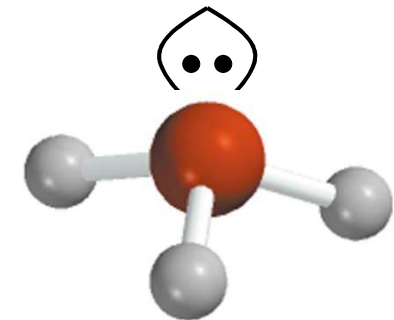
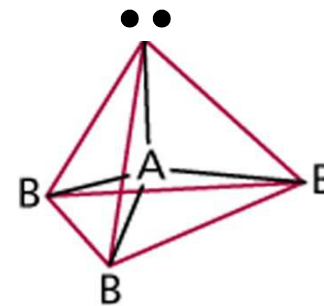
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana
AB_2E	2	1	trigonal plana	angular



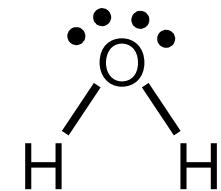
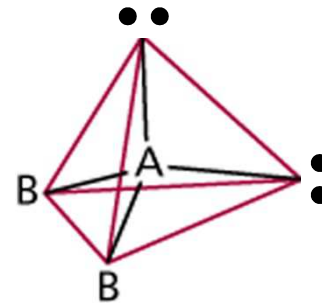
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_3E	3	1	tetraédrica	piramidal trigonal

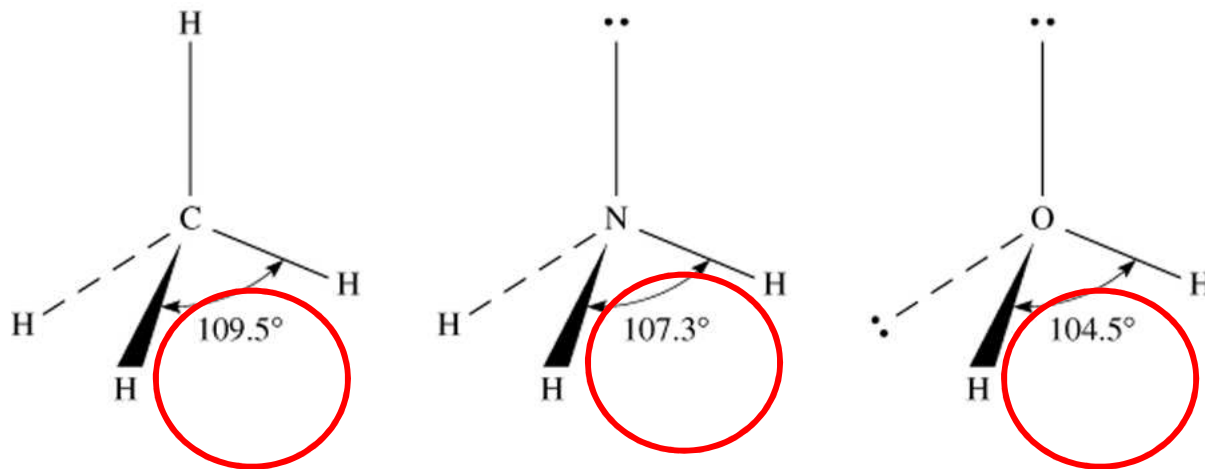
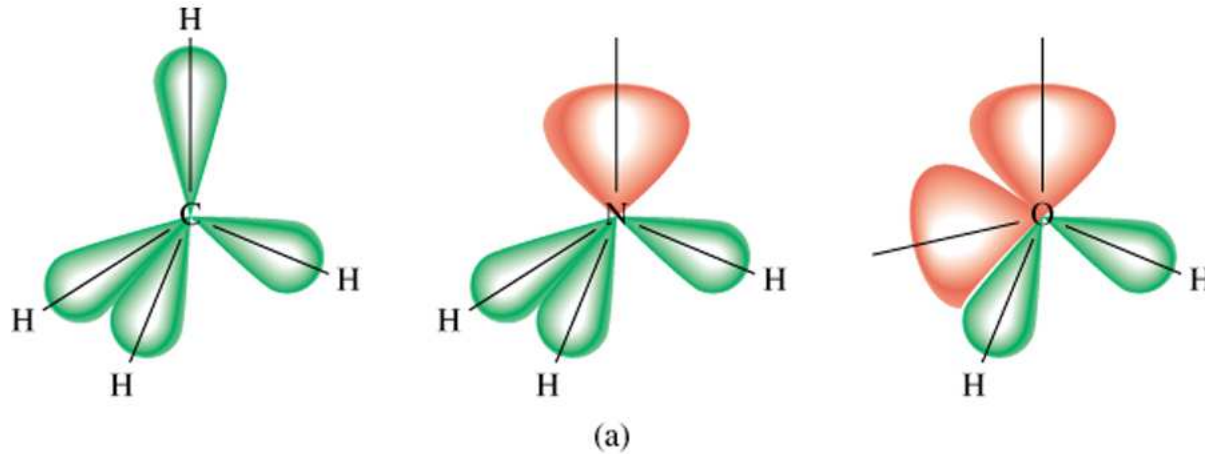


RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_3E	3	1	tetraédrica	piramidal trigonal
AB_2E_2	2	2	tetraédrica	angular



¿Cómo afecta la presencia de un par electrónico libre los ángulos de enlace de la molécula?



Repulsión par libre
contra par libre

>

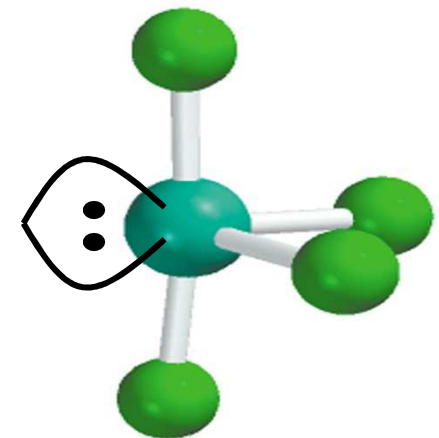
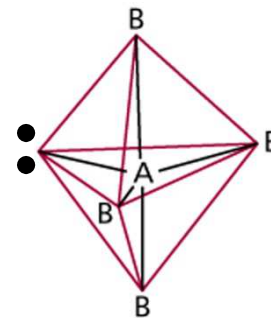
Repulsión par libre
contra par enlazante

>

Repulsión par enlazante
contra par enlazante

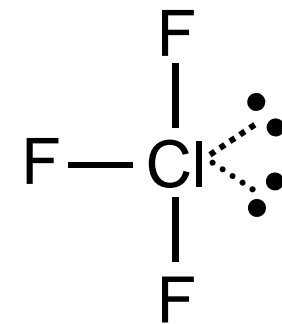
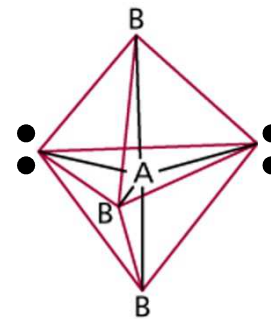
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	bipiramidal trigonal	tetraedro distorcionado



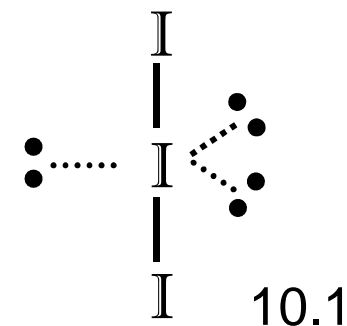
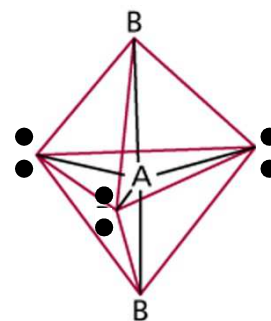
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	bipiramidal trigonal	tetraedro distorcionado
AB_3E_2	3	2	bipiramidal trigonal	forma - T



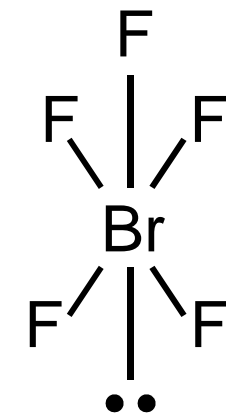
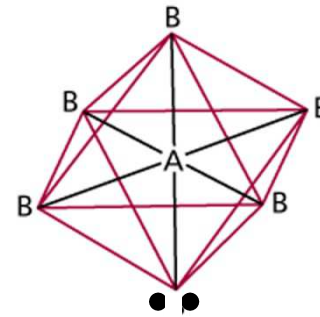
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal
AB_4E	4	1	bipiramidal trigonal	tetraedro distorcionado
AB_3E_2	3	2	bipiramidal trigonal	forma - T
AB_2E_3	2	3	bipiramidal trigonal	lineal



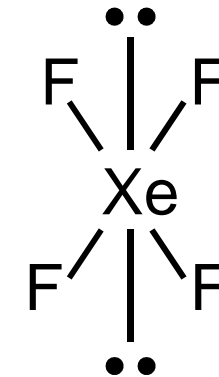
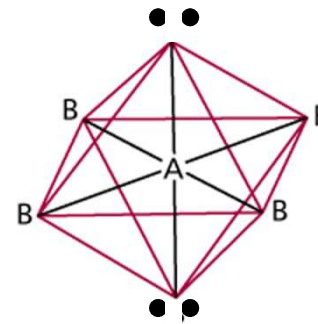
RPECV

<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_6	6	0	octaédrica	octaédrica
AB_5E	5	1	octaédrica	piramidal cuadrada



RPECV

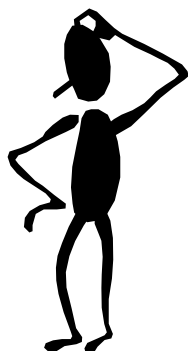
<u>Clase</u>	<u># de átomos enlazados al átomo central</u>	<u>pares libres en átomo central</u>	<u>Geometría electrónica</u>	<u>Geometría molecular</u>
AB_6	6	0	octaédrica	octaédrica
AB_5E	5	1	octaédrica	piramidal cuadrada
AB_4E_2	4	2	octaédrica	cuadrada plana



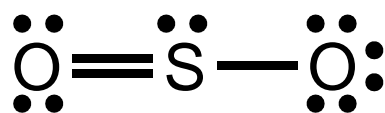
- Las pasadas geometrías electrónicas y moleculares HAY que APRENDERLAS. Las tablas presentes en el libro de texto y en el manual de laboratorio son muy útiles.

Cómo predecir la geometría molecular

1. Dibuje la estructura de Lewis para la molécula.
2. Cuente el número de pares libres en el átomo central y número de átomos enlazados al átomo central.
3. Use RPECV para predecir la geometría de la molécula.

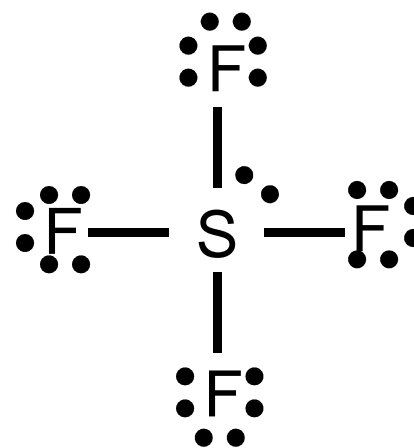


¿Cuáles son las geometrías moleculares de SO_2 y SF_4 ?



AB_2E

angular



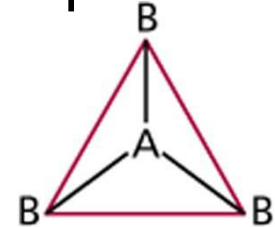
AB_4E

tetraedro
distorcionado

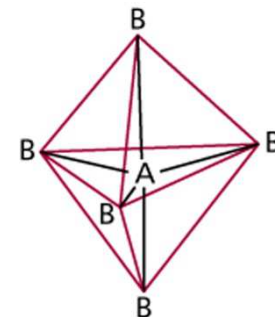
¿Cómo sabemos si una molécula será polar o no polar?

- Las moléculas e iones simples
 - sin pares de electrones libres alrededor del átomo central
 - y con todos los átomos sustituyentes iguales
- serán NO polares
- Todos los enlaces aunque sean polares se cancelarán entre sí.

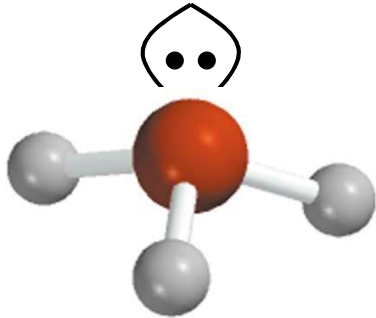
trigonal plana



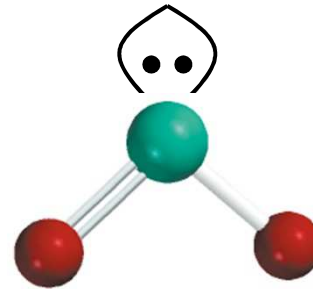
bipiramidal trigonal



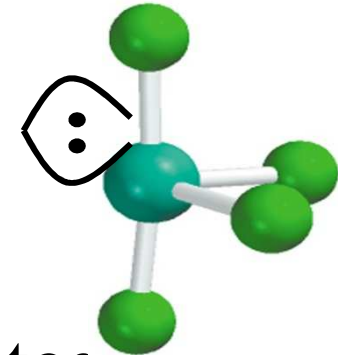
piramidal
trigonal



angular

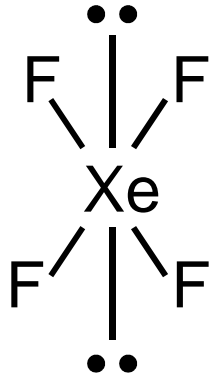


tetraedro
distorciona

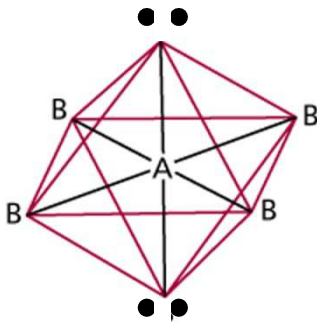


- Las moléculas con sustituyentes diferentes alrededor del átomo central y las moléculas que poseen pares de electrones libres hay que evaluarlas en detalle para saber si son polares o no
- Pero la mayoría serán polares (aunque usted no necesariamente sabrá si es poco polar o muy polar)

cuadrada
plana

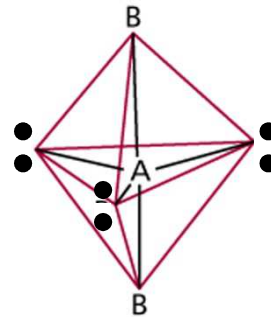


octaédrica

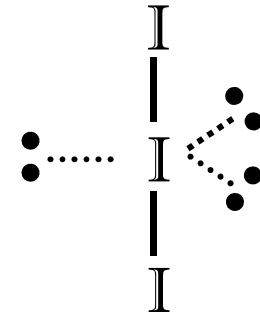


- Cuadrado plano es caso especial
- Lineal (que proviene de trigonal bipyramidal) es otro caso especial
- Si tienen sustituyentes iguales, serán no-polares aunque tengan electrones libres

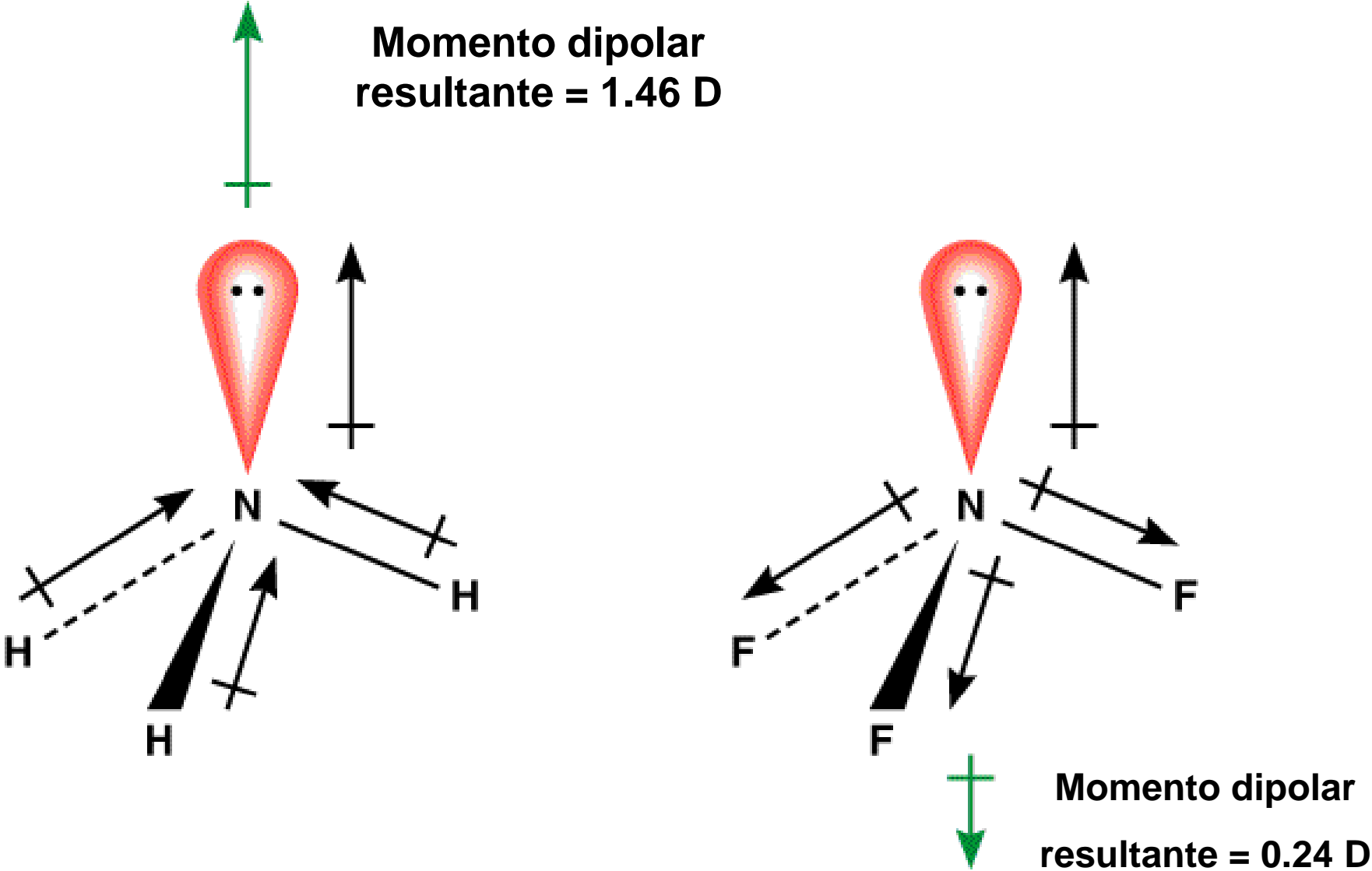
bipiramidal
trigonal

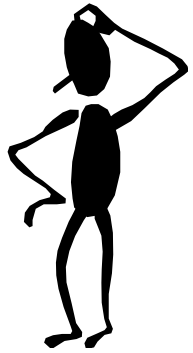


lineal

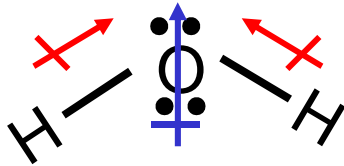


Momentos de enlace y momentos dipolares resultantes

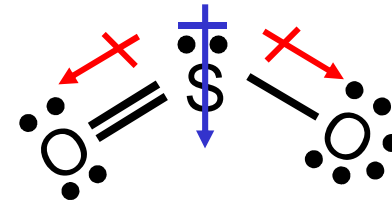




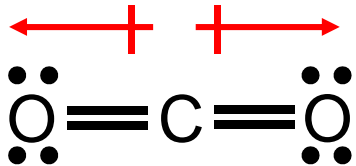
¿Cuál de las moléculas siguientes tiene un momento dipolar? H_2O , CO_2 , SO_2 , y CH_4



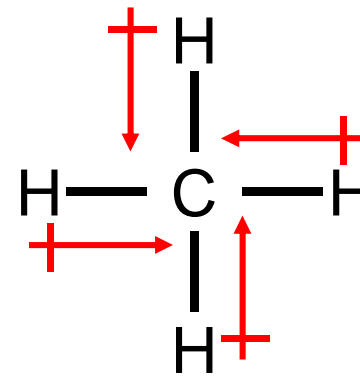
momento dipolar
molécula dipolar



momento dipolar
molécula dipolar



momento no dipolar
molécula no dipolar



Momento no dipolar
Molécula no dipolar