

Enlace Químico

2º Bachillerato

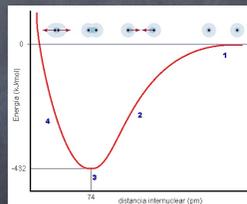
Introducción

Los elementos se presentan agrupados:

- Moleculares
- Cristalinas

Un enlace se forma cuando se aproximan los átomos que van a formarlo.

A determinada distancia aparece un mínimo de energía potencial.



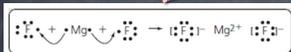
Teoría de Lewis

Los enlaces químicos pueden explicarse por las estructuras electrónicas de los átomos.

El primero en proponer una teoría sobre enlace químico fue LEWIS (1923).

Lewis aseguró que los átomos, mediante los enlaces químicos, perdían, ganaban o compartían electrones hasta adquirir la configuración electrónica de un GAS NOBLE (Regla del Octeto)

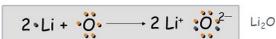
Teoría de Lewis sobre el enlace iónico. Ejemplos



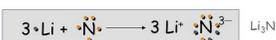
En los casos en los que la estequiometría no sea 1:1 hay que escribir todos los iones



CaO



Li₂O



Li₃N

ACTIVIDADES: Dibuja la estructura de Lewis de los siguientes compuestos IÓNICOS según el ejemplo:

- LiF
- LiCl
- LiBr
- LiI
- NaCl
- NaBr
- NaI
- KCl
- Na₂O

- KBr
- KI
- MgCl₂
- Na₂O
- MgO

El carácter iónico de un enlace está favorecido por:

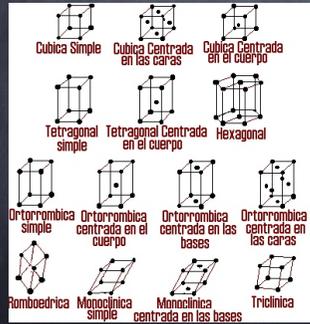
- Gran diferencia de electronegatividad entre los átomos que lo forman.
- Carga pequeña de los iones. Que minimice el gasto energético de formar el ion.
- Tamaño de los iones. Aniones pequeños y cationes grandes.

Redes Iónicas

Un compuesto iónico no forma moléculas aisladas sino conjuntos tridimensionales de átomos que consisten en la repetición periódica y en las tres dimensiones del espacio de una unidad básica llamada

CELDA UNIDAD.

Tipos de Redes



- Equilibrio de cargas
- Disposición en torno al ion central
- Estructuras compactas
- Relación de tamaños

←
REDES de Bravais

Ecuación de Born-Landé

La ecuación es una forma de calcular la energía de red de un compuesto cristalino. Es proporcional a las cargas de los iones e inversamente proporcional al radio iónico.

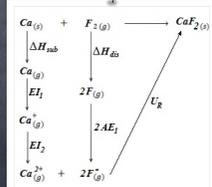
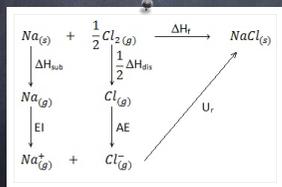
Balance energético de la formación de un cristal. Ciclo de Born-Haber

La Energía Reticular ($E_r/U_r/H_r$) es la energía necesaria para separar totalmente los iones que forman la red. Es también la energía liberada al formarse esta red. Se mide en J/mol.

Balance energético de la formación de un cristal. Ciclo de Born-Haber

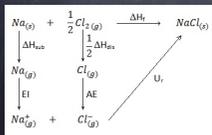
El ciclo de Born-Haber es un planteamiento teórico que muestra todas las energías implicadas en la formación de un cristal iónico y que permite, a partir de planteamientos básicos termodinámicos, calcular la energía reticular para un cristal.

Balance energético de la formación de un cristal. Ciclo de Born-Haber (Ejemplos)



Balance energético de la formación de un cristal. Ciclo de Born-Haber (Expresión Matemática)

A partir de los ciclos anteriores y aplicando la Ley de Hess se obtiene...



$$\Delta H_f = \Delta H_{sub} + EI + \frac{1}{2} \Delta H_{dis} + AE + U_r$$

Propiedades de los compuestos iónicos

Las propiedades de los compuestos iónicos aparecen en la página 17 y 18 (aprox) de los apuntes. Quedan a estudio del alumnado.

Ejercicios de Ciclos de Born-Haber

Los ejercicios sobre ciclo de Born-Haber se pueden descargar de la página de ampliación en el sitio:

pedrocallealta.weebly.com

Teoría de Lewis sobre el Enlace Covalente

Cuando los elementos no pueden cumplir la regla del octeto ganando o perdiendo electrones, lo podrán hacer compartiéndolos.

Se produce entre elementos de electronegatividades altas y parecidas.

Las especies covalentes forman, por lo general, moléculas.

Lewis estableció que se podían compartir 2, 4 o 6 electrones, aunque no encontró la forma de explicar por qué.

Las Estructuras de Lewis

Son representaciones bidimensionales en las que aparece la conectividad entre los átomos que forman una molécula.

En ellas se representa la distribución de los electrones de valencia que forman parte de los enlaces (electrones enlazantes) y de los que no forman parte de los mismos (no enlazantes)

Las Estructuras de Lewis

Mediante estas estructuras, diagramas o fórmulas, Lewis explica el enlace covalente mediante compartición de electrones



Reglas para obtener la estructura de Lewis

1. Elegir el átomo central.
 - Generalmente el menos electronegativo.
 - Nunca el H y casi nunca el F.
 - En los compuestos orgánicos, siempre el C, excepto en éteres.

Reglas para obtener la estructura de Lewis

2. Colocar alrededor el resto de átomos
 - De la forma más simétrica posible.
 - En los oxoácidos el H se une al O.
 - En CO y NO, el C y el N son centrales

Reglas para obtener la estructura de Lewis

3. Calcular el número total de electrones de valencia.

- ◉ De todos los átomos, central y ligandos.
- ◉ Sumar la carga - si es un anión.
- ◉ Restar la carga + si es un catión.

Reglas para obtener la estructura de Lewis

4. Dibujamos los enlaces sencillos.

- ◉ Unimos el átomo central con cada ligando mediante una línea.
- ◉ Por cada línea (enlace) restamos 2 e⁻ del cómputo anterior.

Reglas para obtener la estructura de Lewis

5. Distribuir el resto de los electrones de valencia.

- ◉ Colocar los e⁻ de 2 en 2 hasta cerrar capa.
- ◉ Empezar por los ligandos.
- ◉ Una vez comenzada la asignación a un átomo no se termina con él hasta cerrar capa.
- ◉ El H cierra con 2 e⁻, el Be con 4 y el B con 6.

Si fuera necesario colocar un electrón desapareado se colocará sobre el átomo central (molécula paramagnética)

Reglas para obtener la estructura de Lewis

6. Cálculo de la carga formal de cada átomo.

Es la carga hipotética que tiene cada átomo en la estructura. Para cada átomo se calcula como...

$$q_f = n^\circ e^-_{\text{valencia}} - n^\circ e^-_{\text{no enlace}} - n^\circ \text{enlaces}$$

Reglas para obtener la estructura de Lewis

Si la carga formal del átomo central es igual a la carga neta de la especie o si es negativa, la estructura es correcta, en caso contrario...

7. Sustituir enlaces sencillos por enlaces dobles.

- En torno al átomo central.
- Desplazando un par de electrones no enlazante desde un ligando negativo.
- Recalcular la carga formal.

Reglas para obtener la estructura de Lewis

8. Repetir este proceso hasta que...

- El átomo central, si es del 2º periodo, cierre capa (8 e⁻) o, si el número de electrones es impar, cierre con un e⁻ de menos.
- El átomo central, si es del periodo 3 o superior, tenga carga formal nula o se hayan formado dos dobles enlaces.

Reglas para obtener la estructura de Lewis

9. Se prefiere...

- ⊙ Estructuras sin cargas o con la mínima carga formal o el menor número de átomos con carga formal.
- ⊙ Estructuras con átomos adyacentes que no tengan cargas formales del mismo signo.
- ⊙ Estructuras con la carga formal negativa sobre el átomo más electronegativo

Estructuras de Lewis Resonantes

Aparece el fenómeno de resonancia cuando se pueden escribir estructuras de Lewis equivalentes para una molécula.

La estructura real es un híbrido de resonancia con dobles enlaces deslocalizados



Estructuras de Lewis. Excepciones

Octetos ampliados. Octetos incompletos.

Cuando los átomos sobrepasan los 8 electrones en su capa de valencia. Esto ocurre con elementos no metálicos del tercer periodo en adelante. Es muy frecuente para el Azufre y el Fósforo.

Cuando los átomos no completan una capa con 8 electrones. Esto ocurre con el Litio (2), Berilio (4), Magnesio (4), Boro (6) y el Aluminio (6)

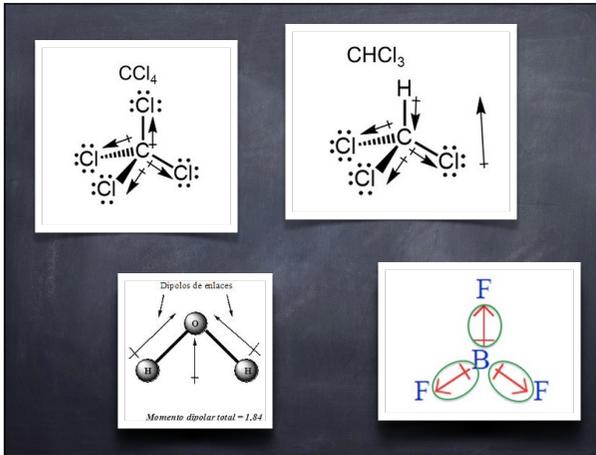
Polaridad de los enlaces covalentes.

- Enlaces formados por átomos iguales.
- Enlaces formados por átomos diferentes

Moléculas polares y apolares.

- Momentos dipolares
- Geometría de la molécula
- Propiedades que dependen de la polaridad (punto de ebullición, disolventes...)





Actualmente estas estructuras siguen permitiendo predecir muchos comportamientos físicos y químicos de las moléculas.

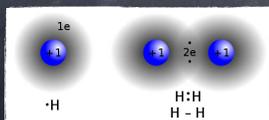
Pero no se tardó mucho en comprobar que la teoría de Lewis era insuficiente para explicar algunos aspectos de algunos enlaces.

Aparecen entonces nuevas teorías:

- Enlace de valencia
- Orbitales moleculares

Teoría del Enlace de Valencia

La Teoría del Enlace de Valencia (TEV) trata la formación de un enlace como una intersección o solapamiento entre los orbitales atómicos de los átomos que forman el enlace.



Según la forma de solapar, los enlaces, según esta teoría, pueden ser de dos tipos.



Superposición de orbitales s



Superposición de orbitales s y p



Superposición de orbitales p y p



Superposición de orbitales p

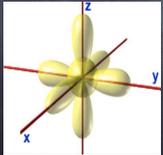
Tipo SIGMA

Tipo PI

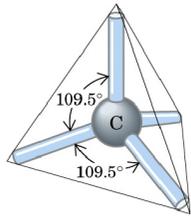
- La TEV sólo toma en consideración los electrones de la capa de valencia.
- Los enlaces PI son más débiles que los SIGMA.
- Un enlace sencillo siempre será SIGMA.
- En un enlace doble o triple hay uno que será SIGMA.
- Solapan dos orbitales que tengan, cada uno, un solo electrón.
- También un orbital lleno con otro vacío.
- La direccionalidad de los enlaces según la TEV explica la geometría de las moléculas.

Hibridación de Orbitales Atómicos

En algunos compuestos, la geometría de la molécula no es la esperada.



• CH₄



Para explicar este hecho se propone que:

Antes de que se produzca el solapamiento de los orbitales atómicos, se produce una mezcla de los estos orbitales en uno o en varios de los átomos que intervienen en el enlace.

En este proceso de "mezcla" entre orbitales atómicos...

- Desaparecen los OA primitivos.
- Aparecen tantos OAH como OA participaron en la hibridación.
- Todos los OAH formados tienen la misma forma y energía.
- Los OAH tienen distinta distribución espacial que los OA.

Según los OA que participen en la hibridación se pueden formar los siguientes OAH.

Tipo	Orbitales implicados	Geometría	Orbitales híbridos	Ángulos (suponiendo todos los enlaces iguales)	Ejemplos
sp	1 orb s + 1 orb p	Lineal (digonal)		180°	BeCl ₂ , CO, CO ₂
sp ²	1 orb s + 2 orb p	Triangular (trigonal)		120°	BF ₃ , HCHO
sp ³	1 orb s + 3 orb p	Tetraédrica (tetragonal)		109,5°	H ₂ O, NH ₃ , CH ₄ , CCl ₄
sp ³ d	1 orb s + 3 orb p + 1 orb d	Bipirámide trigonal		90°, 120°	PF ₅
sp ³ d ²	1 orb s + 3 orb p + 2 orb d	Octaédrica		90°	SF ₆

¿Cómo predecir la hibridación del átomo central en una molécula?

- Escribir la estructura de Lewis para la molécula en cuestión.
- Contar el número de pares de electrones libres y sumarlo al número de átomos unidos al átomo central.
- Aplicar la siguiente tabla.

Pares e ⁻ libres + Átomos	Tipo de Hibridación	Ejemplos
2	sp	BeCl ₂ - CO ₂ - CO
3	sp ²	BF ₃ - HCHO
4	sp ³	CH ₄ - H ₂ O - NH ₃ - CCl ₄

¿Cómo es la hibridación en el átomo de carbono?

- Los carbonos unidos a cuatro átomos con enlaces sencillos presentan una hibridación sp³.
- Los carbonos unidos a otro carbono mediante un doble enlace presenta hibridación sp².
- Los carbonos unidos a otro carbono mediante un enlace triple presenta hibridación sp.

Propiedades de las sustancias covalentes

Ver página 26 (aprox) de los apuntes o estas otras.

Propiedades de los compuestos covalentes

Sólidos covalentes:

- Los enlaces se dan a lo largo de todo el cristal.
- Gran dureza y P.F alto.
- Son sólidos.
- Insolubles en todo tipo de disolvente.
- Malos conductores.
- El grafito que forma estructura por capas le hace más blando y conductor.

Sust. moleculares:

- Están formados por moléculas aisladas.
- P.F. y P. E. bajos (gases).
- Son blandos.
- Solubles en disolventes moleculares.
- Malos conductores.
- Las sustancias polares son solubles en disolventes polares y tienen mayores P.F y P.E.

Fuerzas Intermoleculares

- Son enlaces entre moléculas o puntos distantes de macromoléculas.
- Tienen carácter electrostático.
- Son relativamente débiles

Aunque sean uniones débiles, determinan: el estado de agregación de determinadas sustancias, los puntos de ebullición...

Son de diferentes tipos.

Fuerzas Intermoleculares Puente de Hidrógeno

Se produce entre moléculas en las que hay átomos de hidrógeno unidos a átomos mucho más electronegativos que él (O, F, N).

El enlace está muy polarizado y da lugar a la atracción entre los dipolos.



Fuerzas Intermoleculares

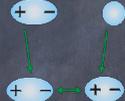
Fuerzas de Van der Waals

Se debe a la presencia de enlaces covalentes polarizados.

Pueden distinguirse tres casos distintos



Dipolo-Dipolo



Dipolo-Dipolo Inducido



Dipolo Instantáneo
Dipolo Inducido

La presencia de cargas aisladas también pueden inducir dipolos y atracción electrostática.

EL ENLACE METÁLICO

Las propiedades de los metales no pueden explicarse con los modelos descritos hasta ahora.

- Los elementos metálicos tienen pocos electrones de valencia como para aplicar la teoría de Lewis.
- La TEV conduciría a moléculas diatómicas (ns^2)
- El enlace iónico no explica la conductividad en estado sólido de los metales.

EL ENLACE METÁLICO

Se establece cuando se combinan átomos de elementos con electronegatividades parecidas y bajas.

Suelen estar formadas por átomos de un mismo elemento.

Hay dos modelos para explicar el enlace metálico:

El del **Mar de Electrones** o Nube Electrónica.

-
La **Teoría de Bandas**

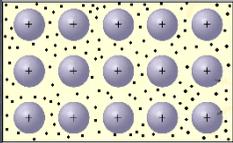
El Enlace Metálico

Modelo del Mar de Electrones

Este modelo supone que los átomos que forman la materia metálica se han liberado de sus electrones de valencia formando estos un "mar" en el que se sitúan los iones positivos resultantes que adoptan una distribución espacial característica de una estructura cristalina.

El Enlace Metálico

Modelo del Mar de Electrones



Este modelo explica el brillo, la conductividad... pero no así, por ejemplo, las propiedades de las sustancias semiconductoras.

El Enlace Metálico

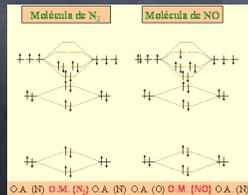
Teoría de Bandas

Este modelo se basa en el de Orbitales Moleculares (TOM).

La TOM supone que los orbitales atómicos de los átomos que van a formar un enlace se combinan para formar orbitales moleculares. Estos orbitales moleculares pueden ser enlazantes y antienlazantes.

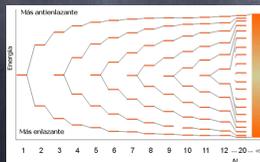
El Enlace Metálico Teoría de Bandas

Los orbitales moleculares pertenecen a toda la molécula.



El Enlace Metálico Teoría de Bandas

Como un bloque de cualquier metal está formado por muchísimos átomos, se originarán numerosos orbitales moleculares que tendrán una energía muy parecida.



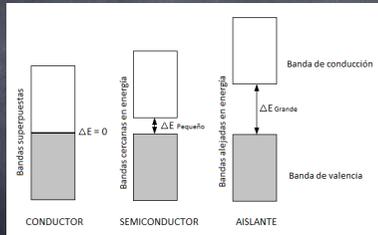
El Enlace Metálico Teoría de Bandas

Entonces el grupo de Orbitales Enlazantes puede llegar a superponerse con los Antienlazantes existiendo una BANDA de Orbitales Moleculares por la que se podrán mover los electrones.

Hay sustancias en las que estas BANDAS no se superponen y otras en las que sin superponerse, sí quedan muy próximas.

El Enlace Metálico

Teoría de Bandas



Sodio Galio Manganeso*

Propiedades de los metales

Pueden estudiarse de cualquier texto, básicamente...

- Tienen un PF medio/alto
- Tienen un PE alto
- Maleabilidad/Ductilidad
- Conductores de la electricidad
- Conductores del calor
- Insolubles

КОНЕЦ
