

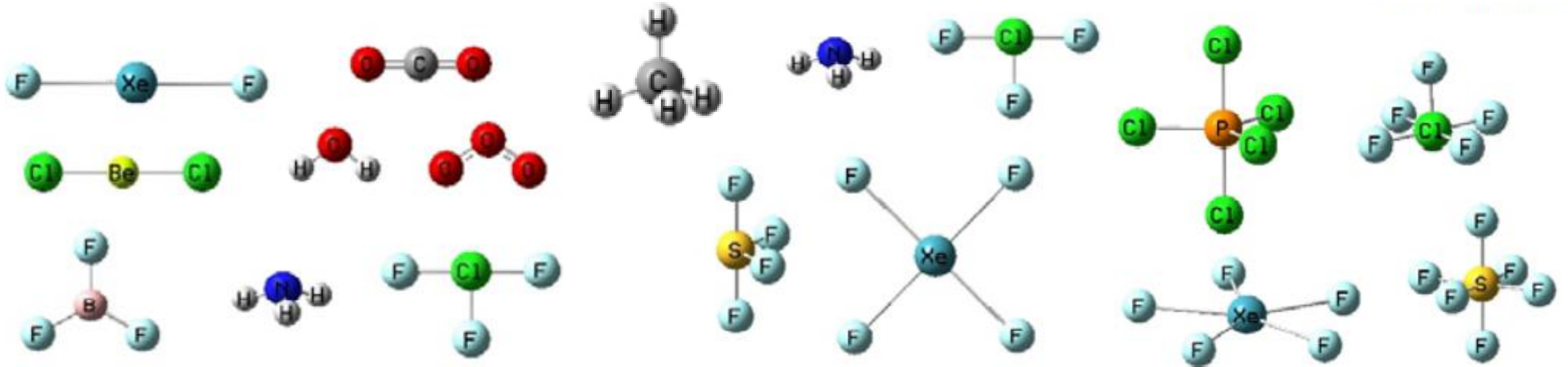
UNIDAD III

ENLACE QUÍMICO

- 3.1 Tipos de enlaces químicos: iónico, covalente y metálico.
- 3.2 Propiedades de compuestos iónicos y covalentes. Electronegatividad.
- 3.3 Enlace iónico. Número de oxidación.
- 3.4 Enlaces covalentes polares y no polares.
- 3.5 Fórmulas de puntos de Lewis de iones poliatómicos y moléculas.
- 3.6 La regla del octeto y sus excepciones.
- 3.7 Concepto de resonancia.
- 3.8 Geometría molecular y momento dipolar.
- 3.9 Fuerzas intermoleculares.
- 3.10 Nomenclatura de compuestos inorgánicos: IUPAC y STOCK.

Geometría molecular

- Es el arreglo, en tres dimensiones, de los átomos que constituyen a una molécula.
- Determina las propiedades de un compuesto como reactividad, polaridad, estado, color, magnetismo, actividad biológica...
- Se puede conocer con métodos espectroscópicos, de difracción, y con programas basados en la Mecánica Cuántica.



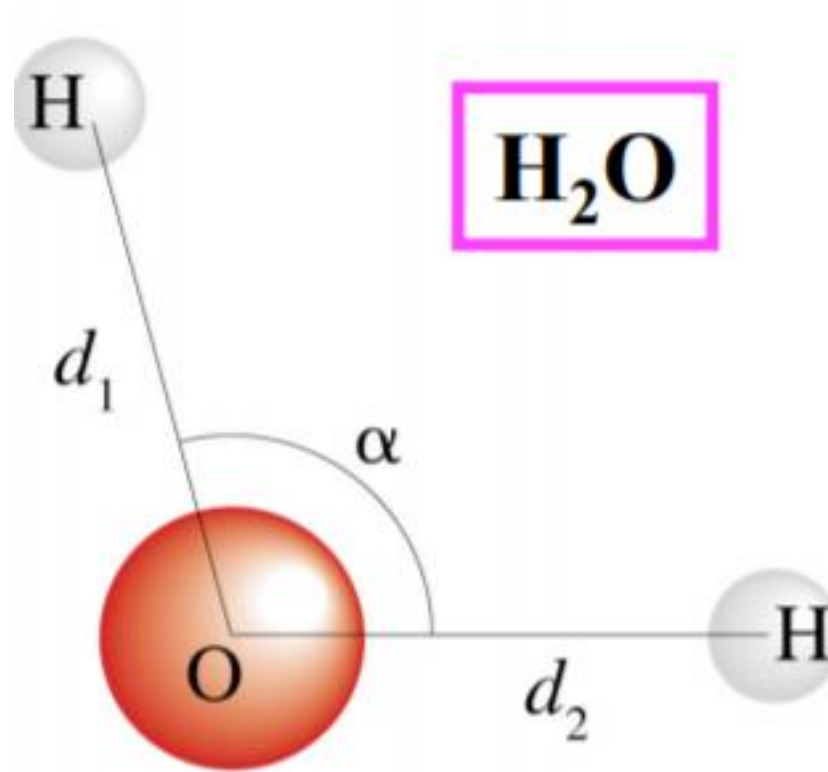
Geometría molecular

- El **modelo de Lewis** no proporciona ninguna información acerca de la geometría de la molécula
- La **teoría de las repulsiones entre los pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV)** intenta explicar la geometría basándose en consideraciones electrostáticas.

Parámetros de enlace:

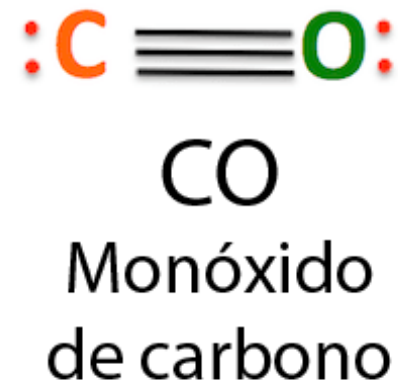
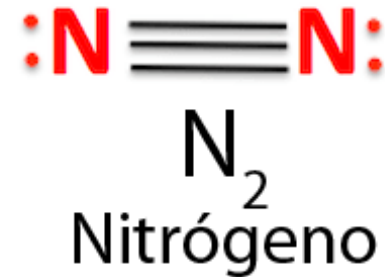
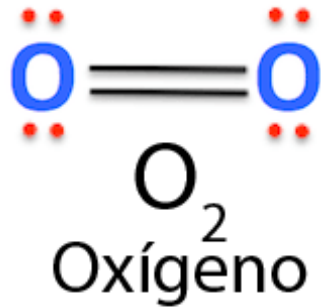
⇒ Longitudes de enlace.

⇒ Ángulos de enlace.



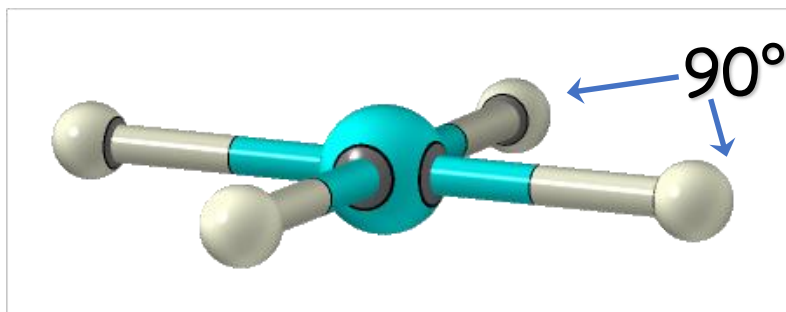
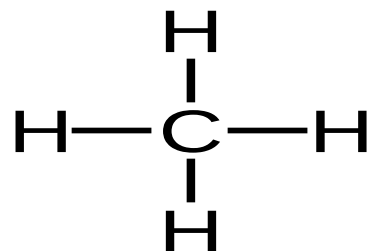
Geometría molecular

- Las moléculas diatómicas tienen geometría lineal.

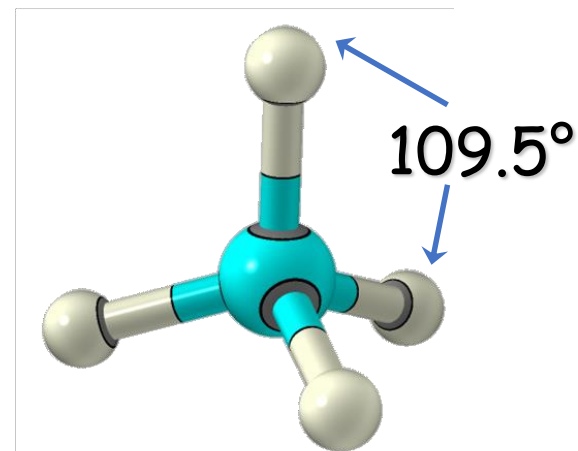


Geometría molecular

Estructura de Lewis del metano:



Forma cuadrada plana



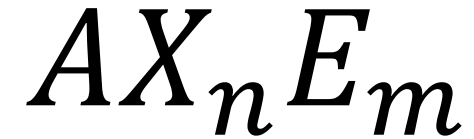
Forma tetraédrica

urtime



Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia

Notación en el modelo RPECV



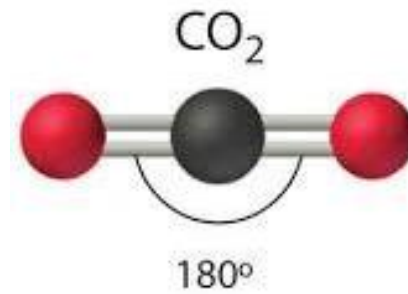
A = *átomo central*

X = *átomos enlazados al átomo central*

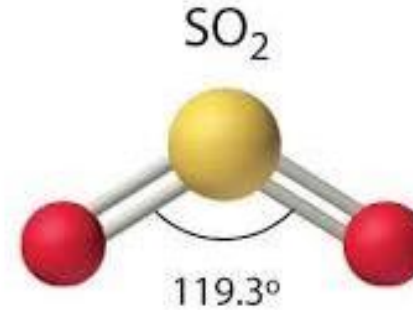
E = *pares solitarios asociados al átomo central*

Moléculas con la misma estequiometría pueden tener diferentes geometrías

AX_2

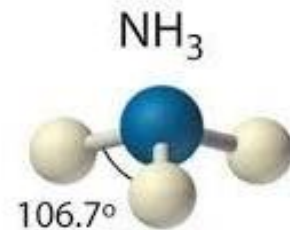


Linear

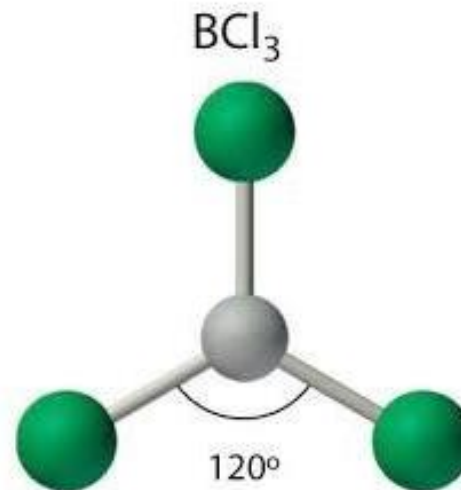


Bent

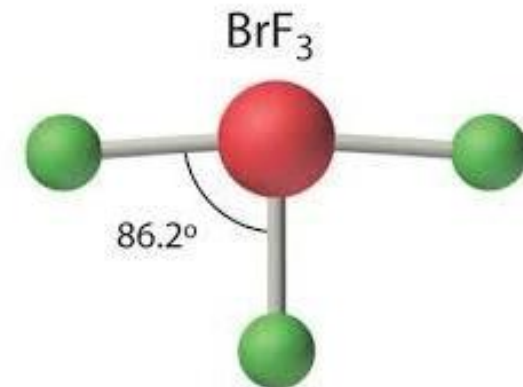
AX_3



Trigonal pyramidal



Trigonal planar



T-shaped

Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia

- Explica de distribución geométrica basándose en la repulsión que ocurre entre los pares electrónicos alrededor del átomo central.
- La disposición espacial de mínima energía es aquella que minimiza las interacciones electrostáticas repulsivas, de manera que determina la mayor separación física entre las cargas eléctricas del mismo signo.



2 pares de e^-



3 pares de e^-



4 pares de e^-



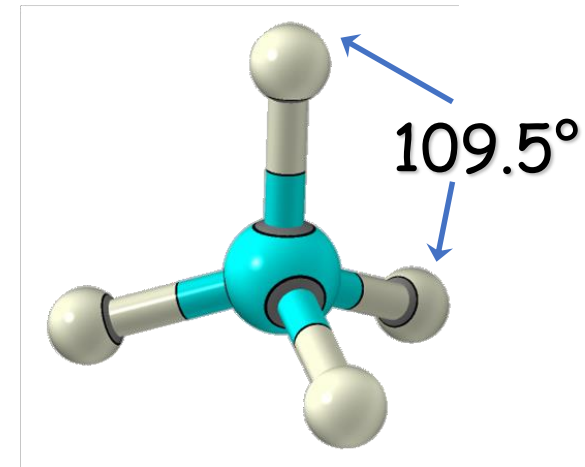
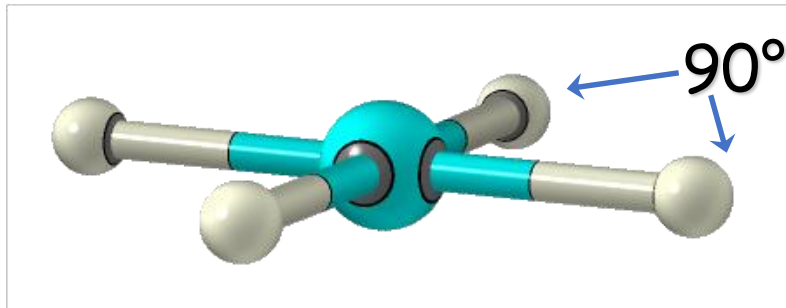
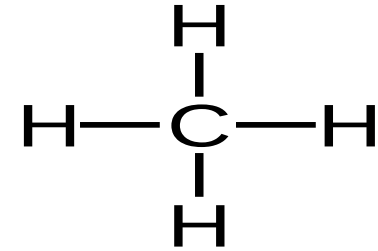
5 pares de e^-



6 pares de e^-

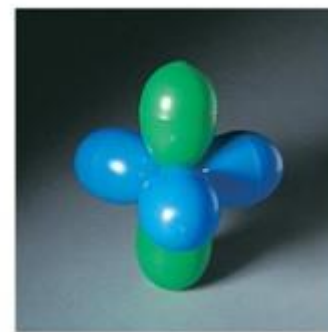
La forma de las moléculas

Estructura de Lewis del metano:



! Menor repulsión !

El mejor acomodo de un número dado de dominios de electrones es el que minimiza las repulsiones entre ellos.



Number
of Pairs

2

3

4

5

6

Arrangement
of Pairs

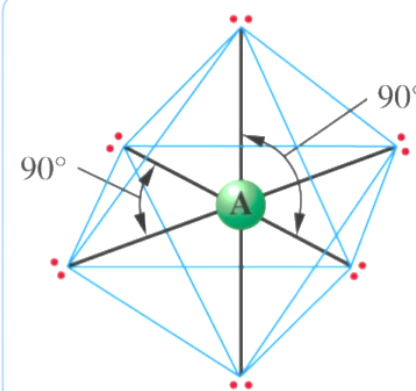
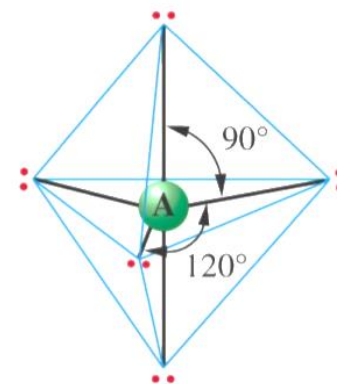
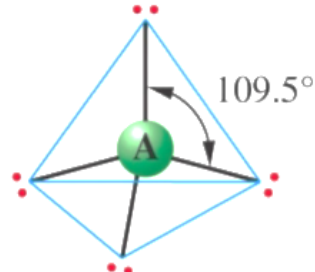
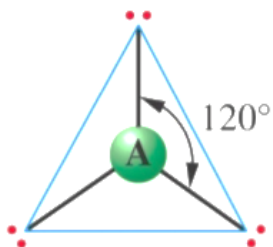
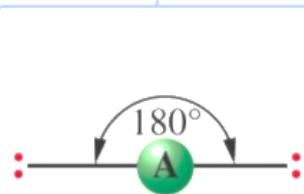
Linear

Trigonal planar

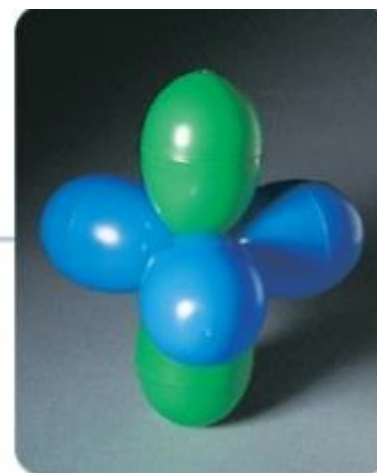
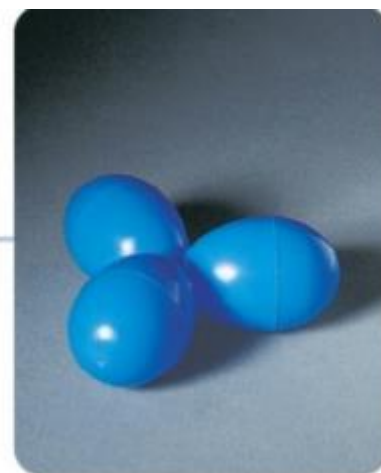
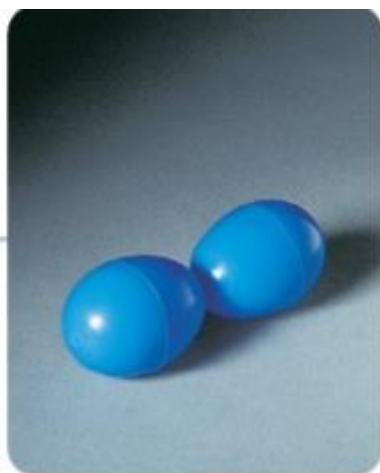
Tetrahedral

Trigonal bipyramidal

Octahedral



Balloon Model



Arrangement of Pairs

Linear

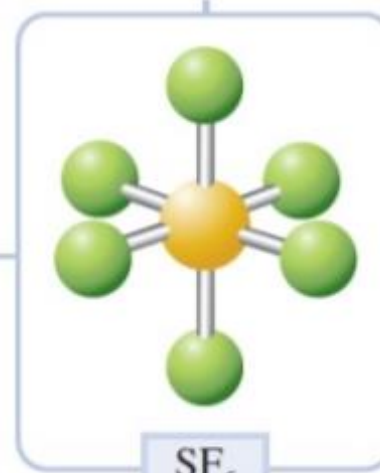
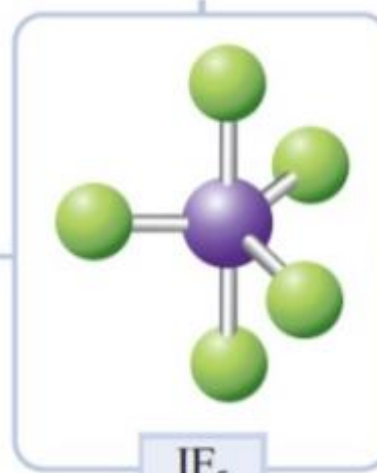
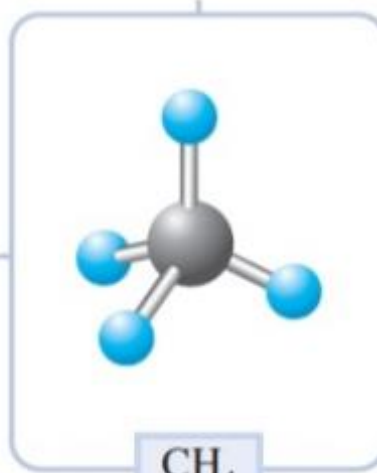
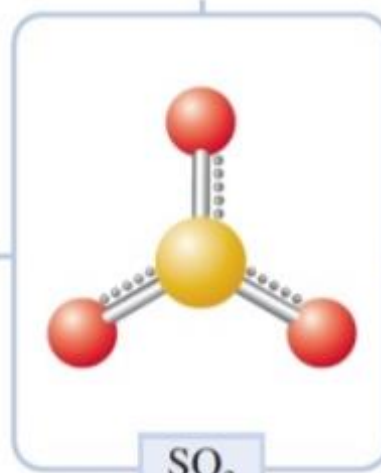
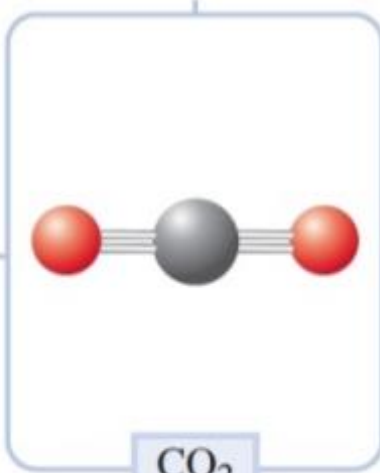
Trigonal planar

Tetrahedral

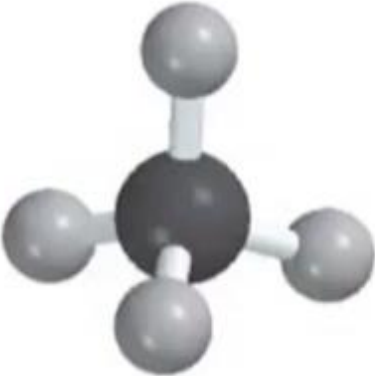
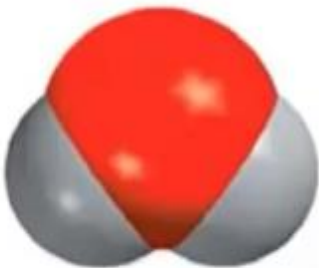
Trigonal bipyramidal

Octahedral

Example

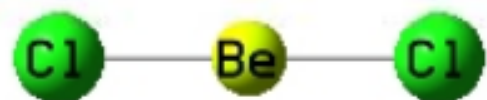


Compuestos Moleculares Formados con enlace(s) covalente(s) entre No Metales

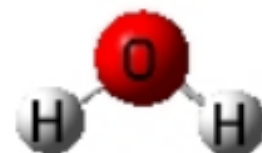
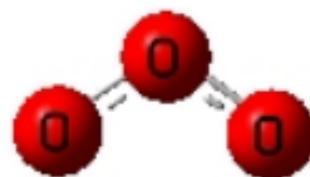
	Hidrógeno	Agua	Amoniaco	Metano
Fórmula molecular	H_2	H_2O	NH_3	CH_4
Fórmula estructural	$H-H$	$H-O-H$	$\begin{array}{c} H-N-H \\ \\ H \end{array}$	$\begin{array}{c} H \\ \\ H-C-H \\ \\ H \end{array}$
Modelo de esferas y barras				
Modelo espacial				

Geometrías moleculares:

Átomo central unido a **dos** átomos:



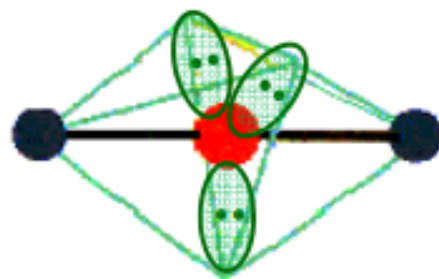
Lineal



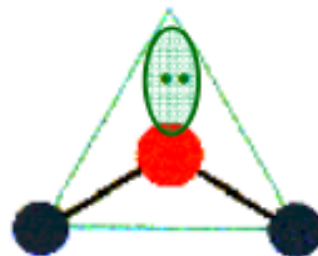
Angular



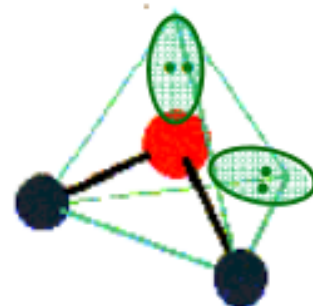
AX_2



AX_2E_3



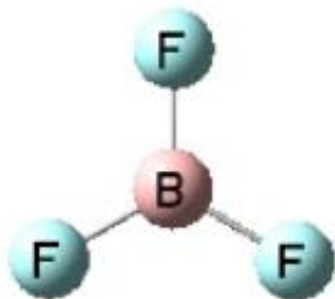
AX_2E



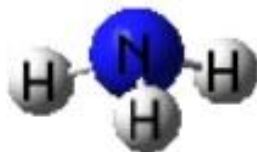
AX_2E_2

Geometrías moleculares:

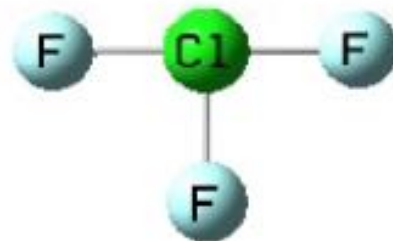
Átomo central unido a **tres** átomos:



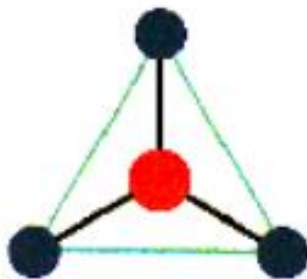
Trigonal plana



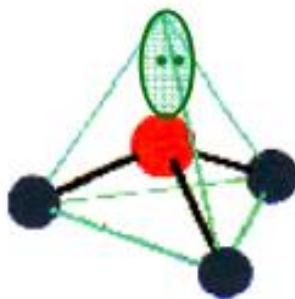
Pirámide trigonal



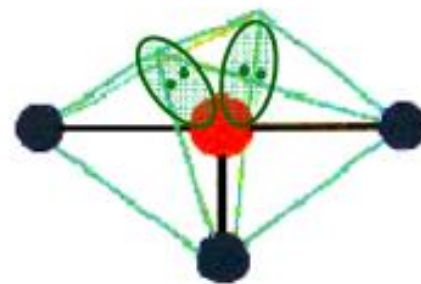
Forma T



AX_3



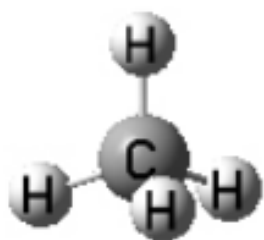
AX_3E



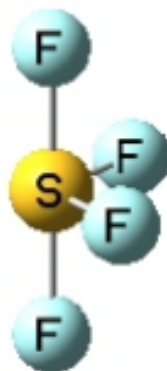
AX_3E_2

Geometrías moleculares:

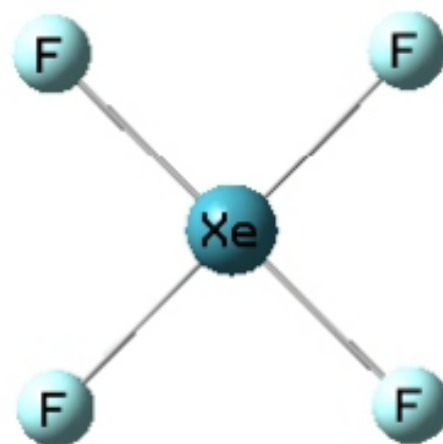
Átomo central unido a **cuatro** átomos:



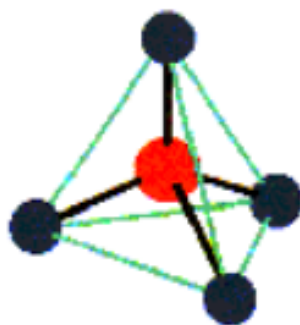
Tetraédrica



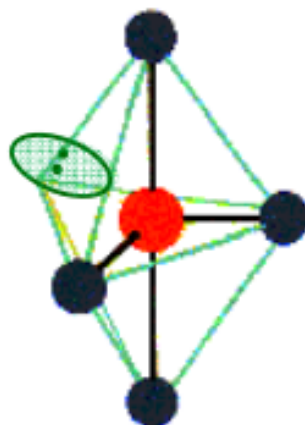
*Balancín
(Tetrahedro distorsionado)*



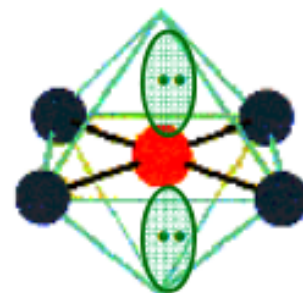
Tetragonal plana



AX_4



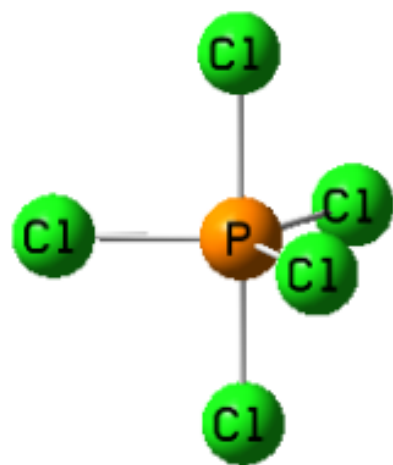
AX_4E



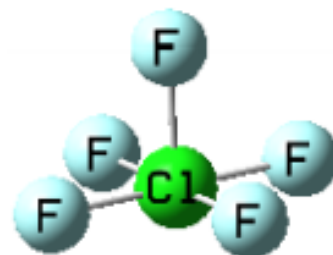
AX_4E_2

Geometrias moleculares:

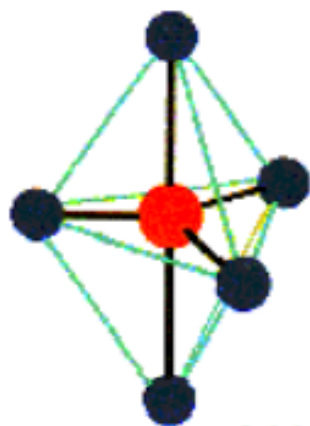
Átomo central unido a **cinco** átomos:



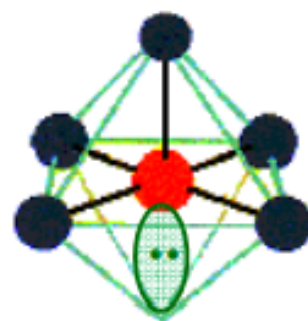
Bipirâmide trigonal



Pirâmide tetragonal

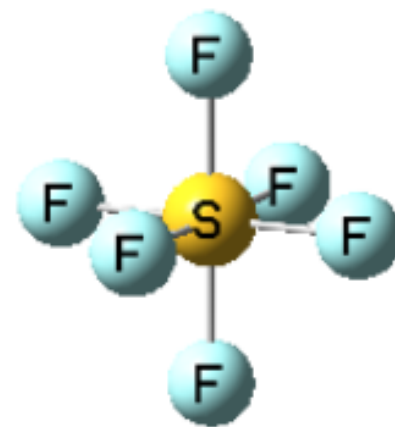


AX_5

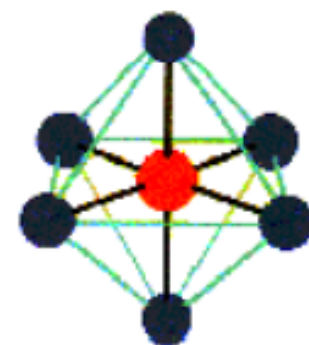


AX_5E

a **seis** átomos:



Octaédrica



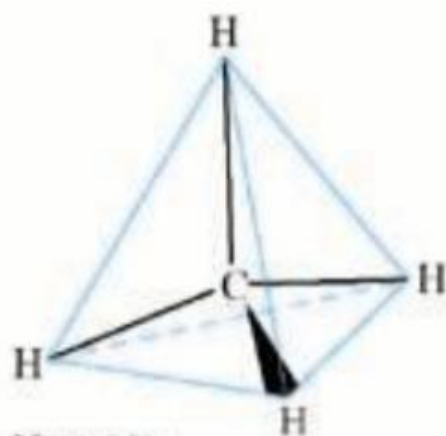
AX_6

Cómo predecir la forma molecular ?

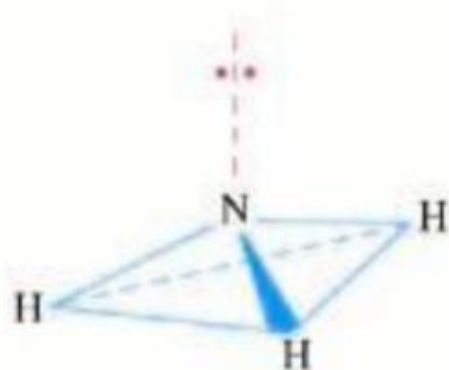
- Plantear la estructura de Lewis para la molécula
- Contar el número de pares enlazados al átomo central (ligandos), representado por **m**
- Contar el número de pares aislados del átomo central, representado por **n**
- Predecir la **geometría** (**m + n**) de la molécula

m + n	geometría
2	lineal
3	triangular
4	tetraédrica
5	bip. trigonal
6	octaédrica

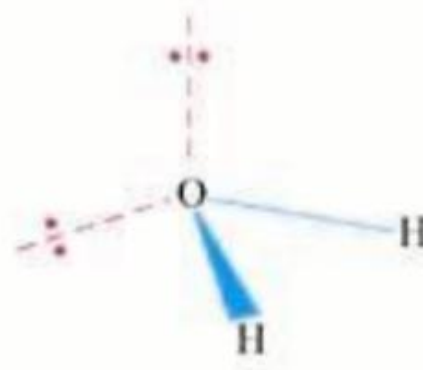
En los tres casos la geometría de los pares estereoactivos es
TETRAÉDRICA:



Notación
RPECV AX_4
(a)



AX_3E
(b)



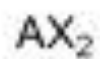
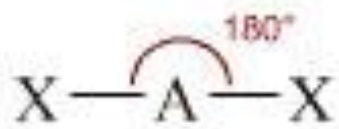
AX_2E_2
(c)

Geometría
molecular:

Tetraédrica

Pirámide trigonal

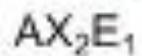
Angular



linear



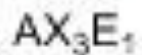
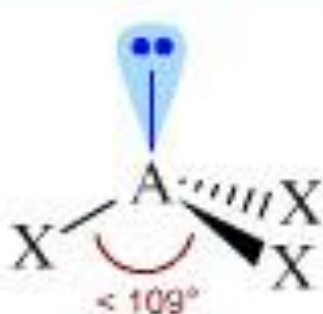
Trigonal planar



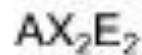
angular



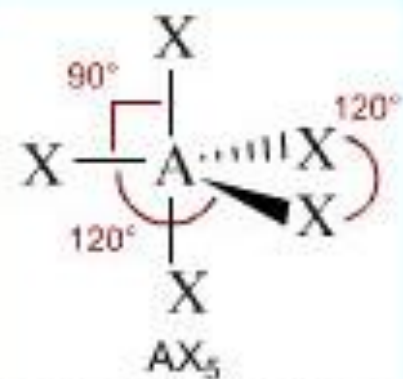
Tetrahedral



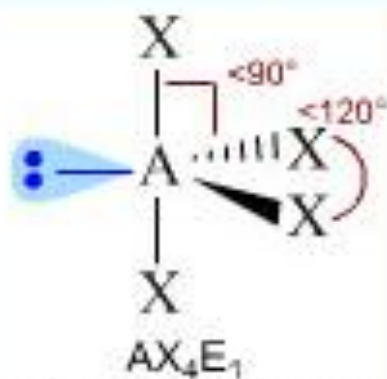
Trigonal pyramidal



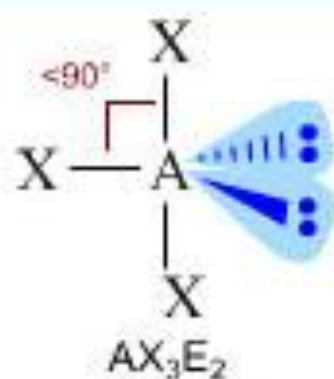
Bent or Angular



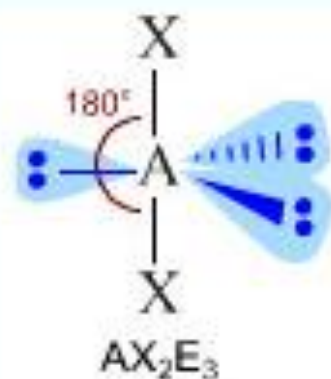
Trigonal bipyramidal



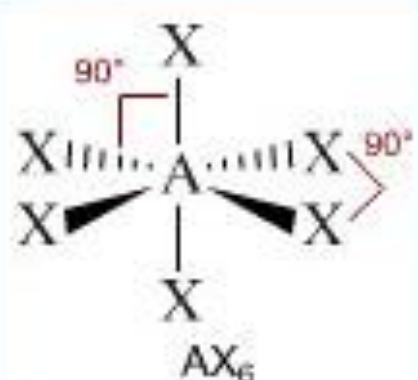
Sawhorse or Seesaw



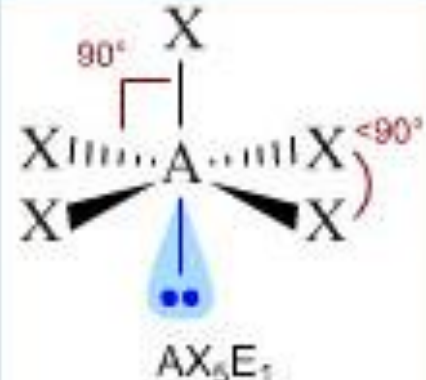
T-shape



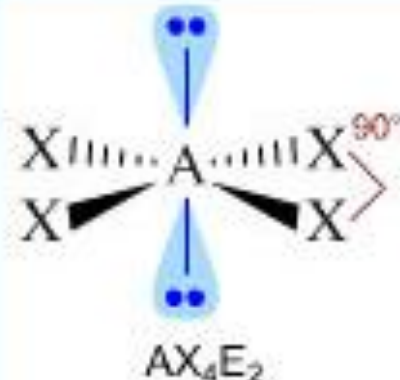
Linear



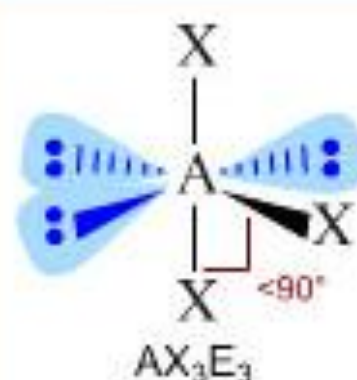
Octahedral



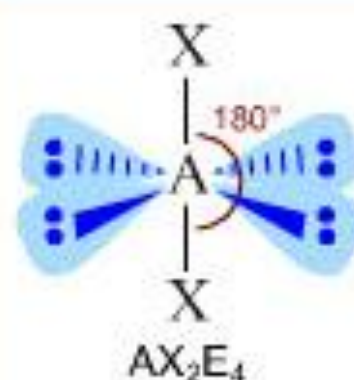
Square pyramidal



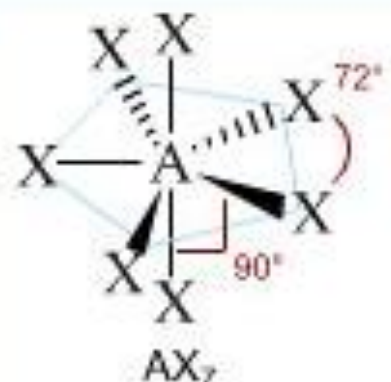
Square planar



T-shape



Linear

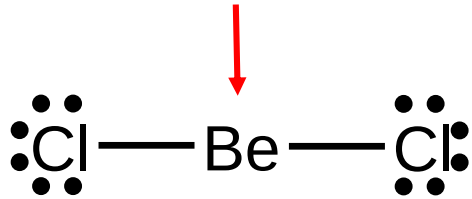


Pentagonal bipyramidal

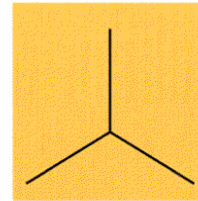
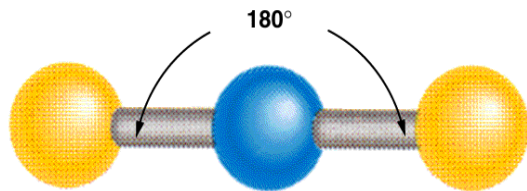
Tipo de molécula	# Pares enlazantes	# Pares libres	Distribución de los pares de electrones	Geometría molecular
AX_2	2	0	lineal	lineal
AX_2E	2	1	trigonal plana	angular
AX_2E_2	2	2	tetraédrica	angular
AX_2E_3	2	3	bipiramidal trigonal	lineal
AX_3	3	0	trigonal plana	trigonal plana
AX_3E	3	1	tetraédrica	piramidal trigonal
AX_3E_2	3	2	bipiramidal trigonal	forma de T
AX_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AX_4E	4	1	bipiramidal trigonal	tetraedro distorsionado
AX_4E_2	4	2	octaédrica	cuadrada plana
AX_5	5	0	bipiramidal trigonal	bipiramidal trigonal
AX_5E	5	1	octaédrica	Bipiramidal cuadrada
AX_6	6	0	octaédrica	octaédrica
AX_7	7	0	bipiramidal pentagonal	bipiramidal pentagonal
AX_7E	7	1	pirámide pentagonal	pirámide pentagonal

Cloruro de berilio (BeCl_2)

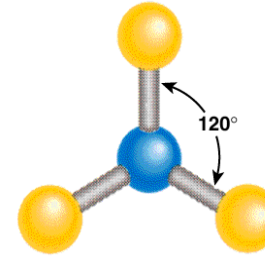
0 pares libres
sobre el átomo central



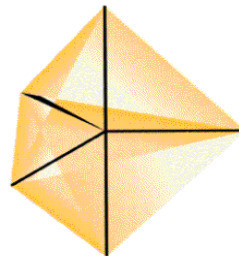
2 átomos enlazados
al átomo central



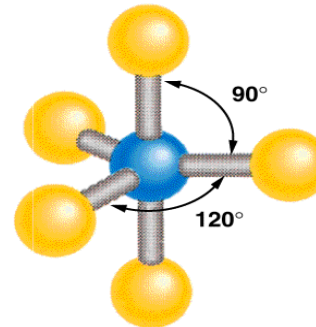
Planar



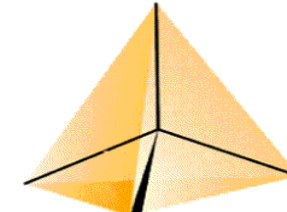
Trifluoruro de boro (BF_3)



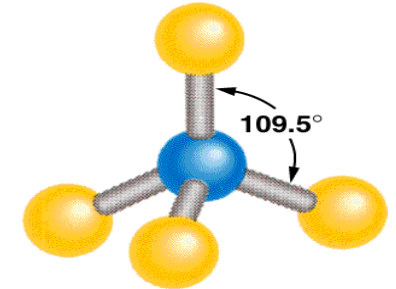
Trigonal
bipyramidal



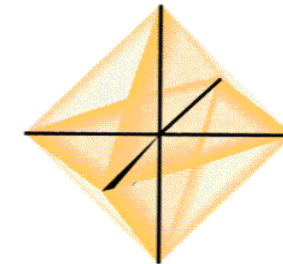
Pentacloruro de fósforo (PCl_5)



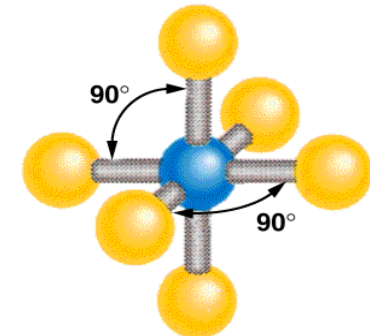
Tetrahedral



Metano (CH_4)



Octahedral

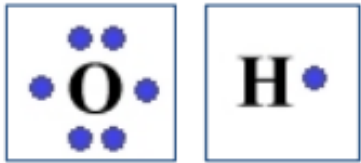


Hexafluoruro de azufre (SF_6)

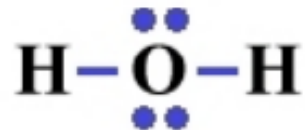
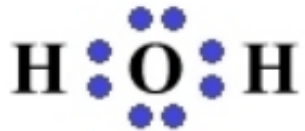
Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Ejemplo:

Átomos libres:



Molécula:

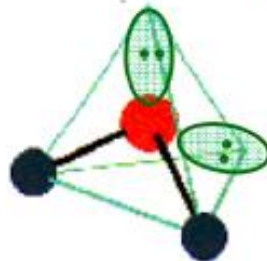


Análisis:

Número de pares enlazantes: **2**

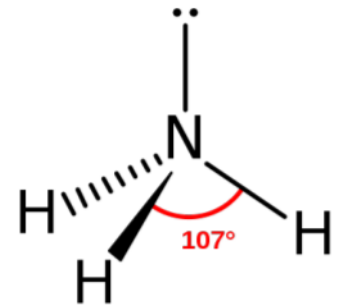
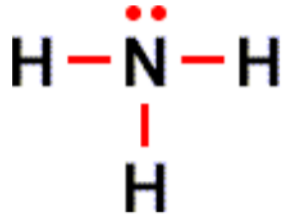
Número de pares libres: **2**

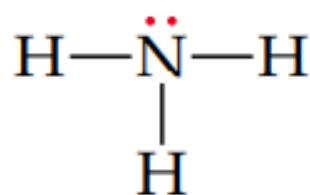
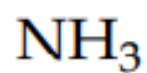
AX₂E₂



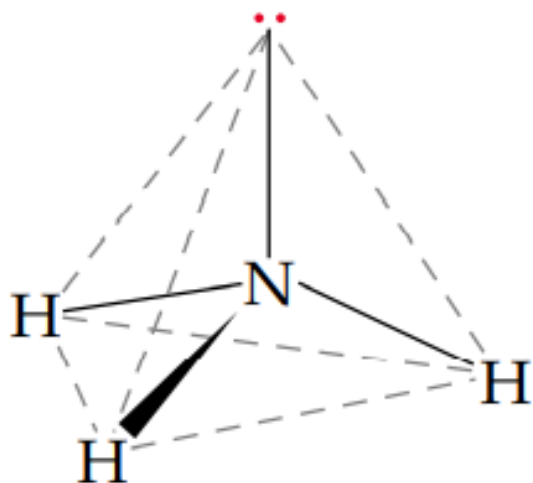
Angular

NH₃

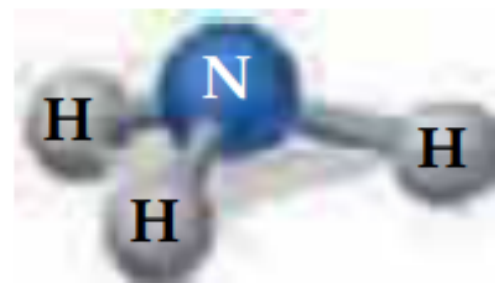




Estructura de Lewis



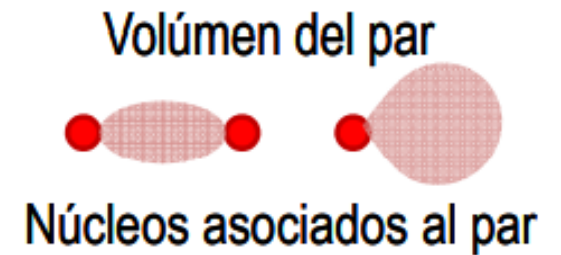
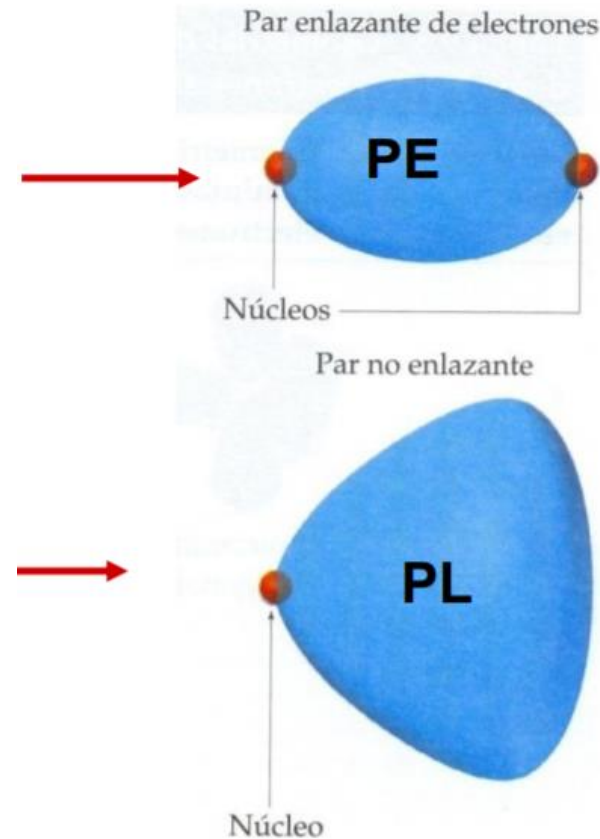
Geometría de dominios de electrones (tetraédrica)



Geometría molecular (pirámide trigonal)

Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

- Los electrones enlazantes están atraídos por dos núcleos, por lo que ocupan menos espacio y originan menor repulsión.
- Los pares libres están atraídos por un único núcleo, por lo que ocupan mayor espacio y originan mayores repulsiones.



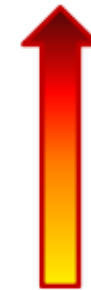
Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Considera tres tipos de interacciones entre los pares electrónicos de una molécula:

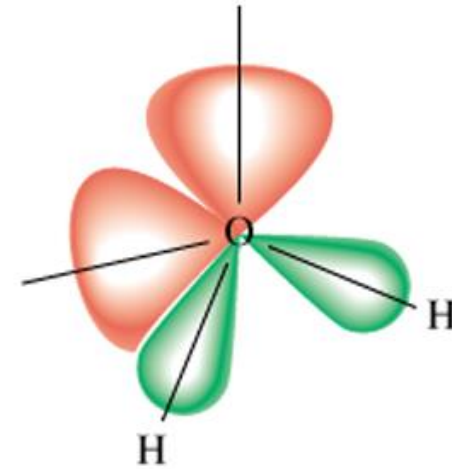
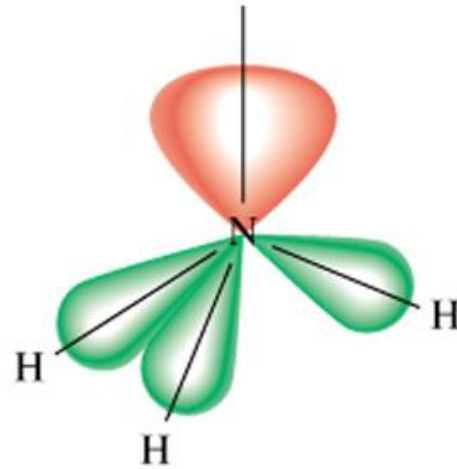
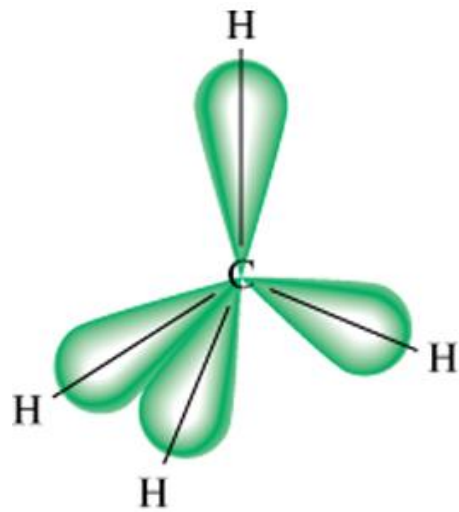
Repulsión par libre - par libre

Repulsión par libre - par enlazante

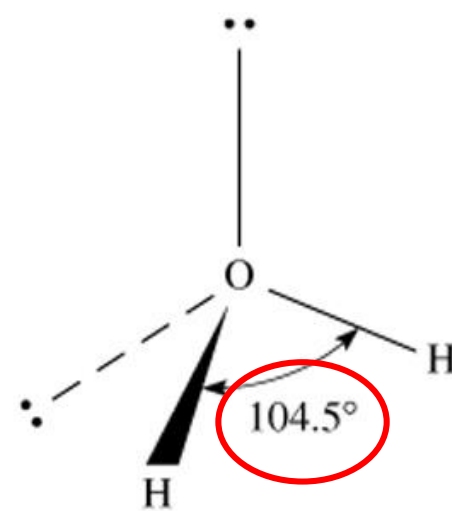
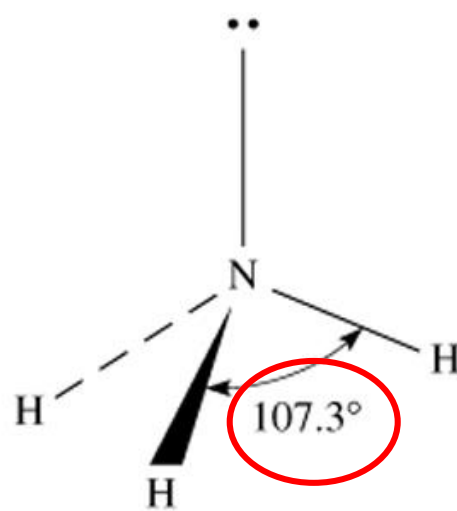
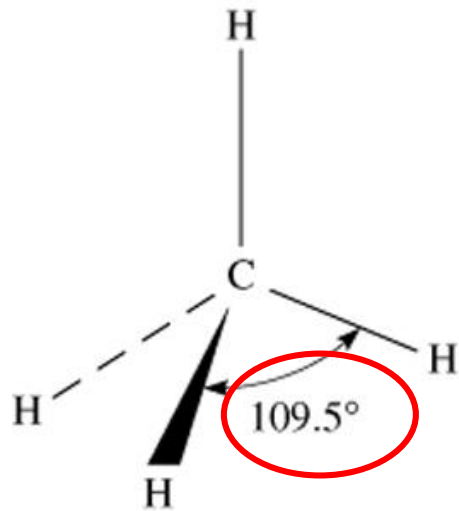
Repulsión par enlazante - par enlazante



Aumenta la
repulsión



(a)



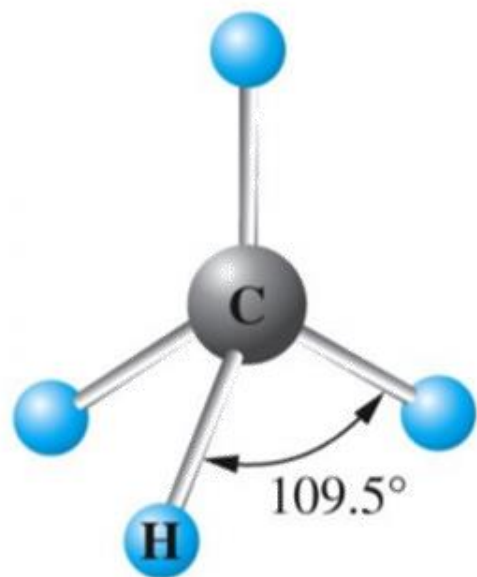
repulsión de par libre
contra par libre

>

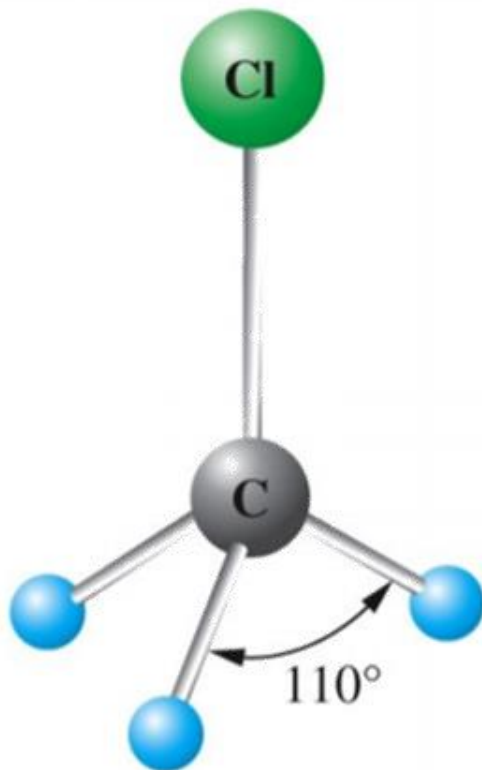
repulsión de par libre
contra par enlazante

>

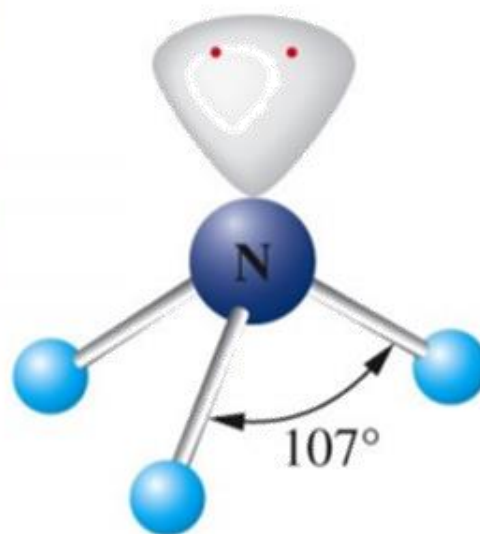
repulsión de par enlazante
contra par enlazante



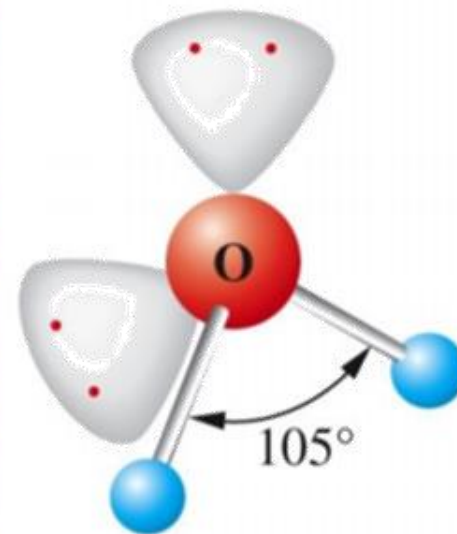
CH₄



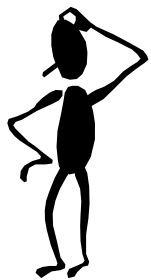
CH₃Cl



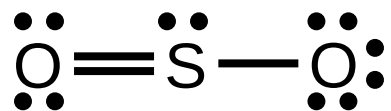
NH₃



H₂O



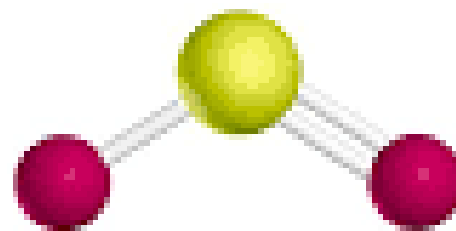
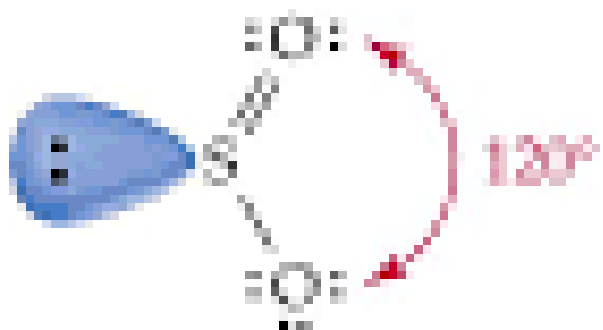
Prediga la geometría de las moléculas SO_2 y SF_4 utilizando el modelo de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV).



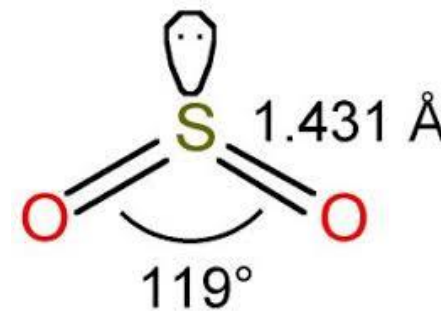
Estructura de Lewis

2 pares enlazantes + 1 par libre

$\text{AX}_2\text{E} \longrightarrow$ angular



Geometría molecular



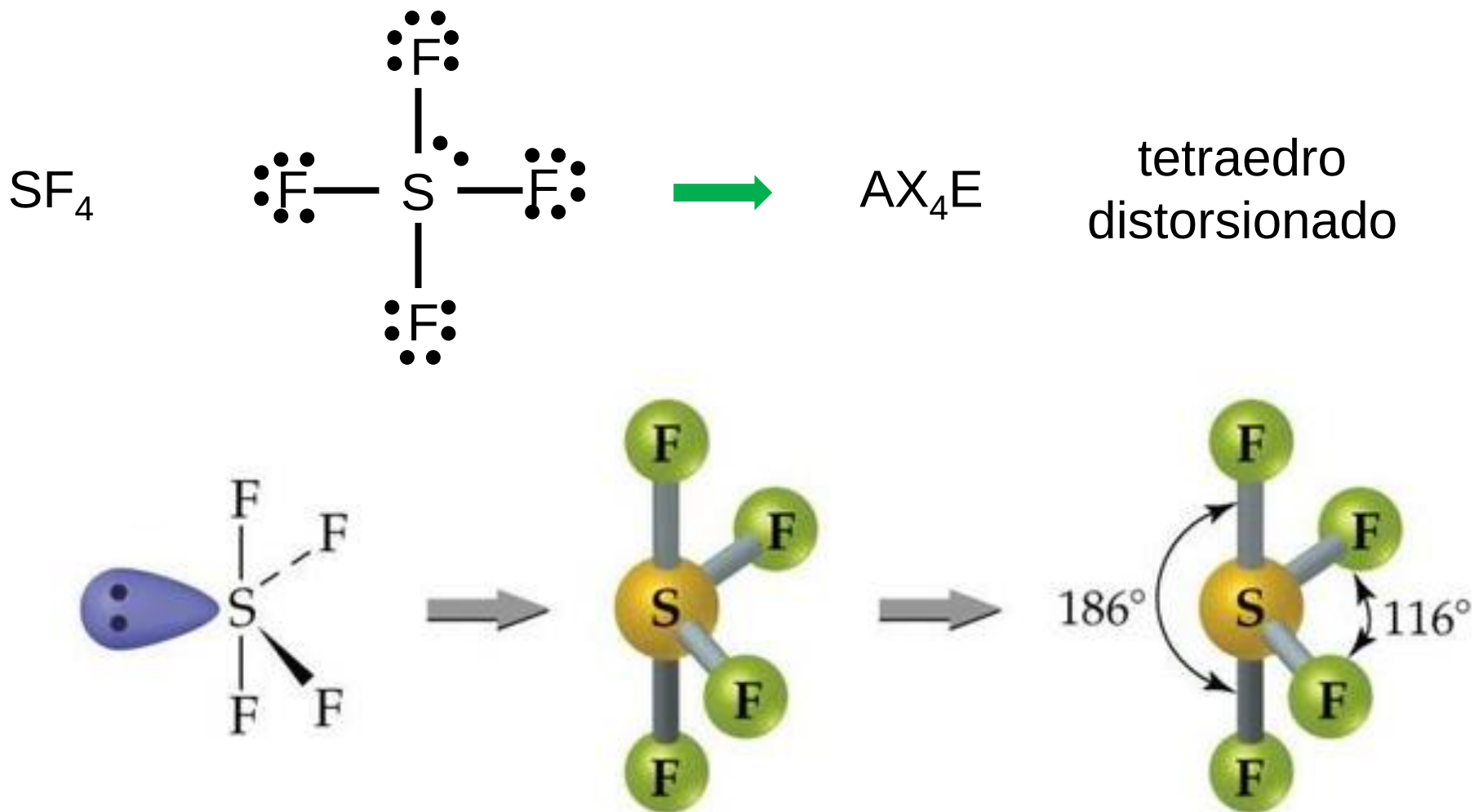
Repulsión PL – PE > Repulsión PE – PE

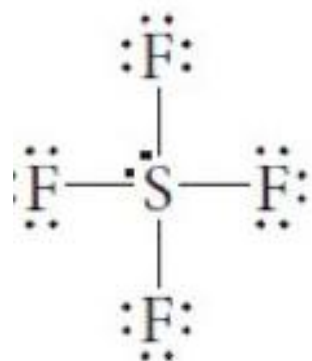


$\angle(\text{OSO})_{\text{exp}} \approx 119.5^\circ$ (120° ideal)

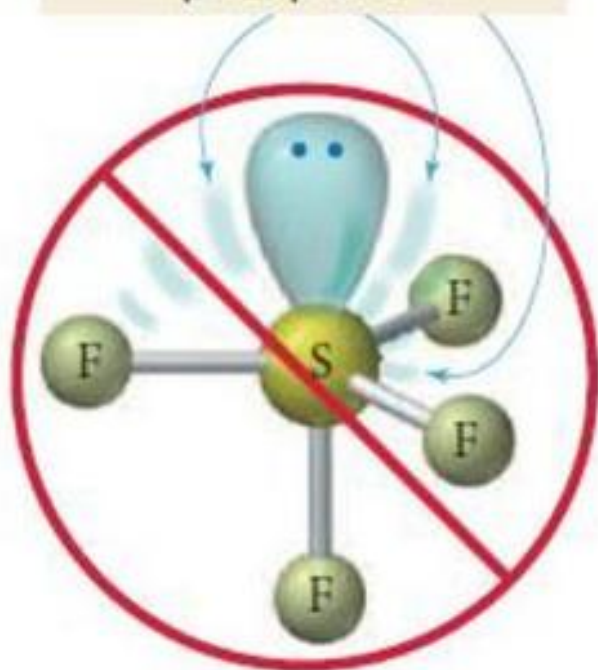
El azufre tiene cinco dominios de electrones a su alrededor: cuatro de los enlaces y uno del par no enlazante. Cada dominio apunta hacia un vértice de una bipirámide trigonal.

El dominio del par no enlazante apuntará hacia una posición ecuatorial. Los cuatro enlaces apuntan hacia las cuatro posiciones restantes para dar una geometría molecular que se describe como con forma de balancín:



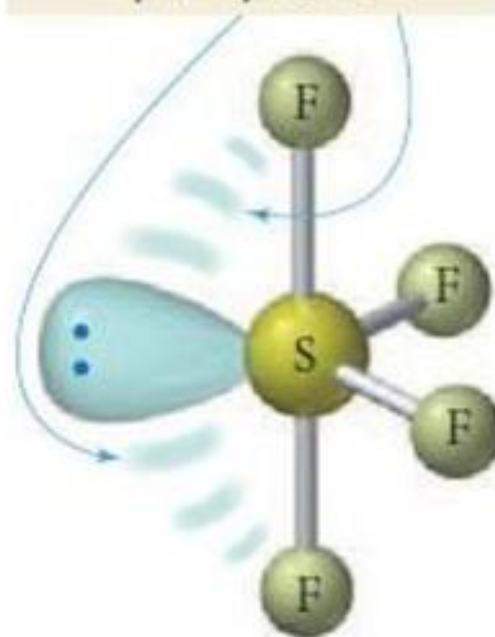


Three 90° lone pair–bonding pair repulsions

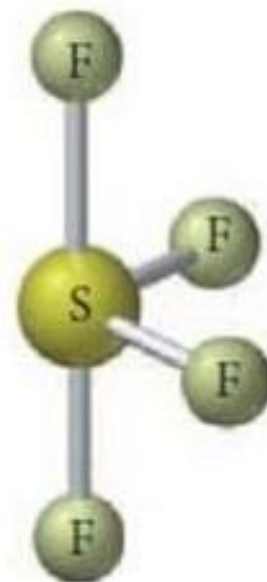


Axial lone pair
Does not occur

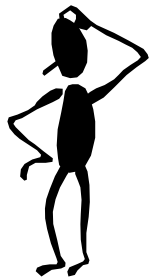
Two 90° lone pair–bonding pair repulsions



Equatorial lone pair



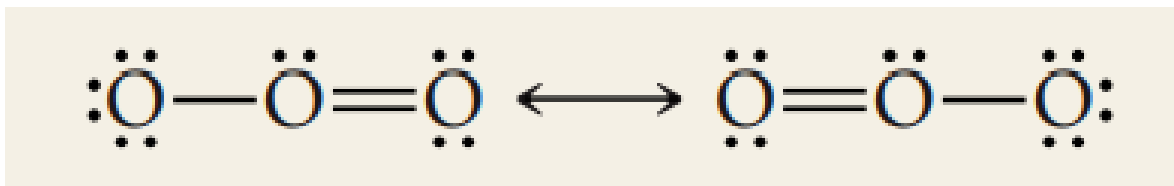
Molecular geometry:
seesaw



Utilice el modelo RPECV para predecir la geometría molecular de: (a) O_3 ; (b) SnCl_3^- .

Estrategia: Para predecir las geometrías moleculares de estas especies, primero dibujamos sus estructuras de Lewis y luego contamos el número de pares de electrones alrededor del átomo central. El número de pares de electrones da la geometría. Luego obtenemos la geometría molecular a partir del acomodo de los electrones de enlace.

Estructuras de resonancia para el O_3 :



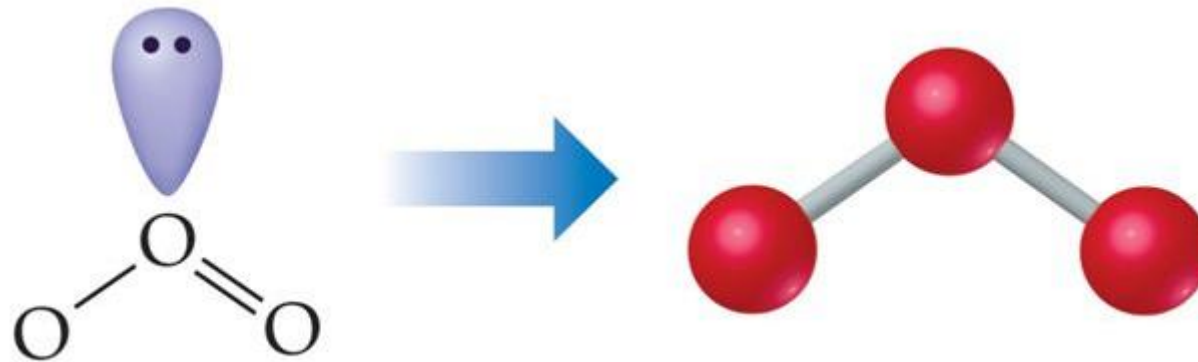


A causa de la resonancia, los enlaces entre el átomo de O central y los átomos de O externos tienen la misma longitud.

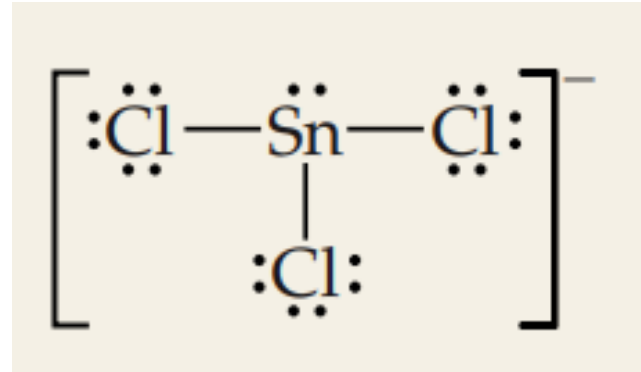
En las dos estructuras de resonancia, el átomo central de O está unido a dos átomos de O exteriores y tiene un par no enlazante. Por tanto, hay tres dominios de electrones en torno al átomo central de O. (Recordemos que un doble enlace cuenta como un solo dominio de electrones.)

Con tres dominios de electrones, el acomodo es trigonal plano.

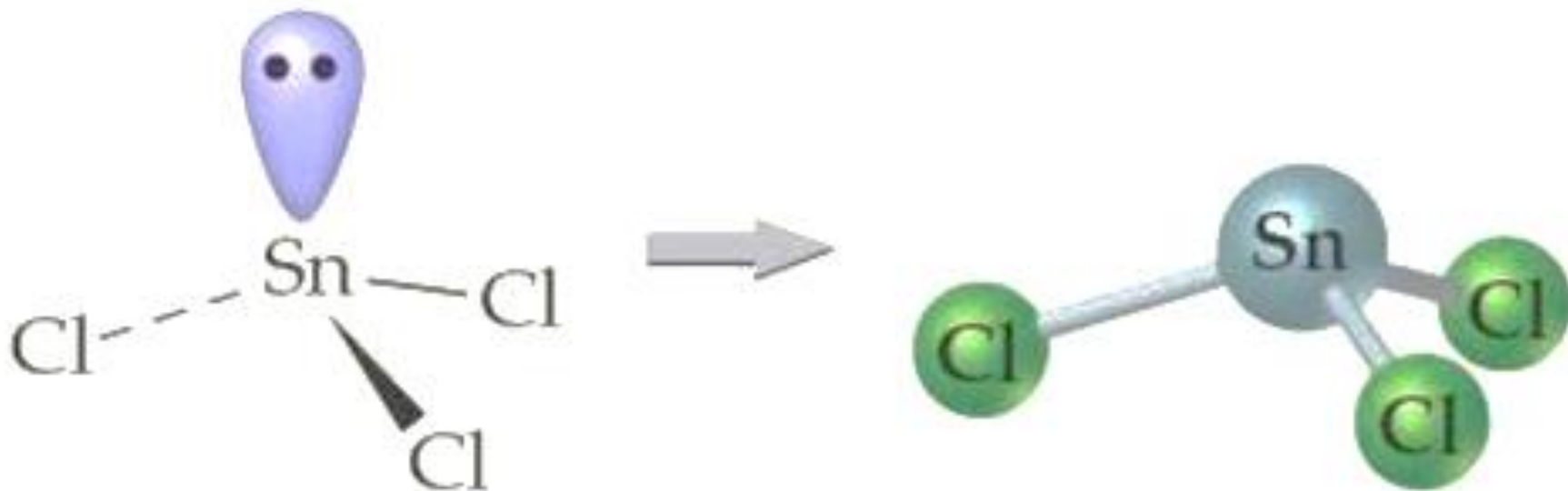
Dos de los dominios son enlazantes y uno es no enlazante, así que la molécula tiene forma angular con un ángulo de enlace ideal de 120° :

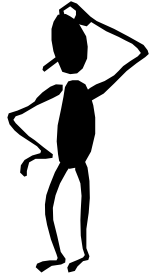


(b) La estructura de Lewis del ion SnCl_3^- es:



El átomo de Sn central está unido a tres átomos de Cl y tiene un par de electrones no enlazante. Por tanto, el átomo de Sn está rodeado por cuatro dominios de electrones y la geometría de dominios de electrones resultante es tetraédrica con uno de los vértices ocupado por un par de electrones no enlazante. Por tanto, la geometría molecular corresponde a una pirámide trigonal:





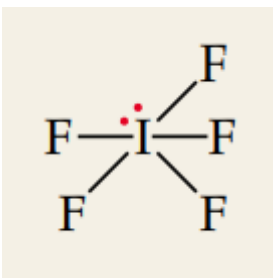
Prediga la geometría de dominios de electrones y la geometría molecular de (a) SeCl_2 ; (b) CO_3^{2-} .

Respuestas: (a) tetraédrica, angular; (b) trigonal plana, trigonal plana



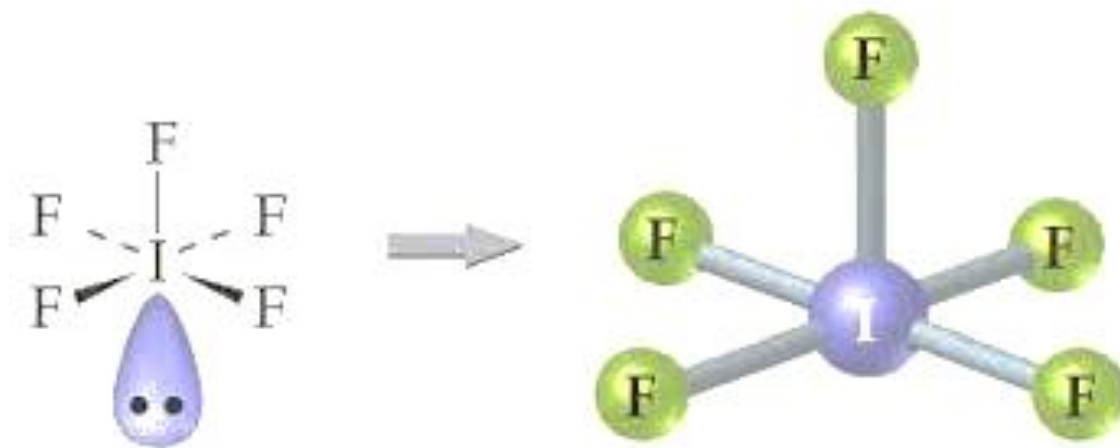
Utilice el modelo RPECV para predecir la geometría molecular de IF_5 .

La estructura de Lewis del IF_5 es:

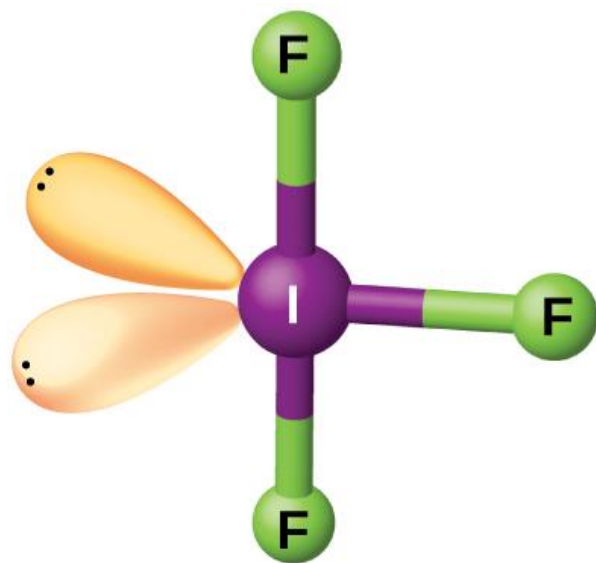
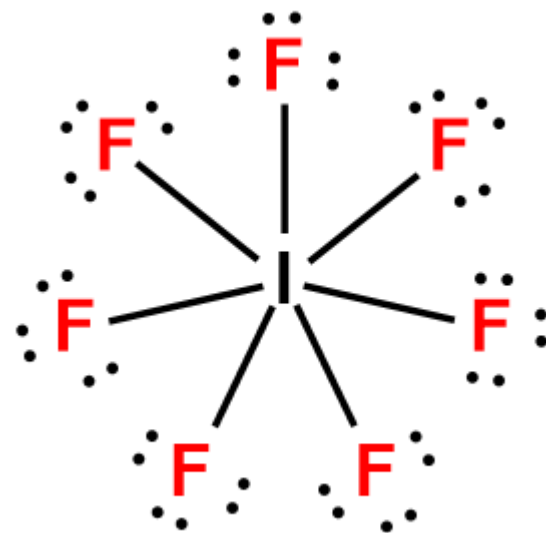
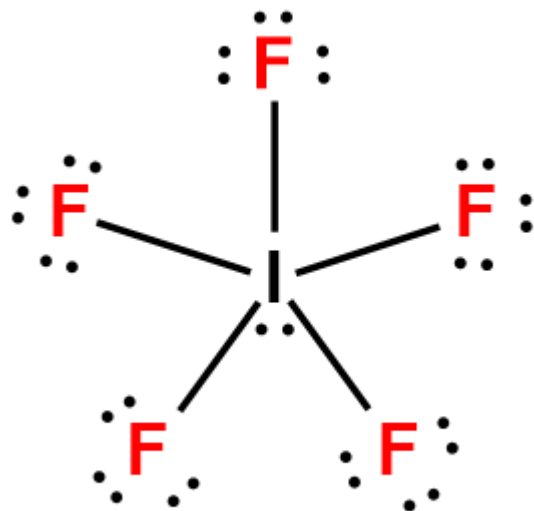
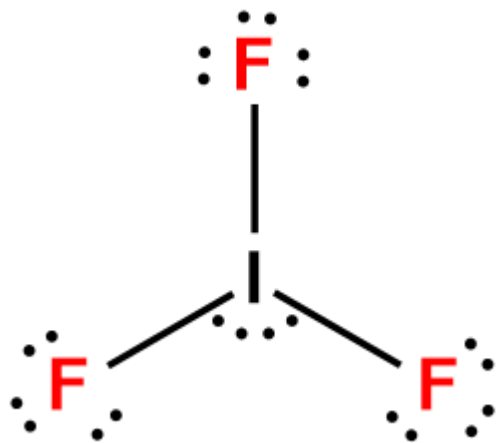
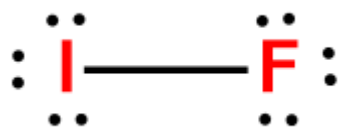


El yodo tiene seis dominios de electrones a su alrededor, y uno de ellos corresponde a un par no enlazante. Por tanto, la geometría de dominios de electrones es octaédrica, con una posición ocupada por el par no enlazante de electrones.

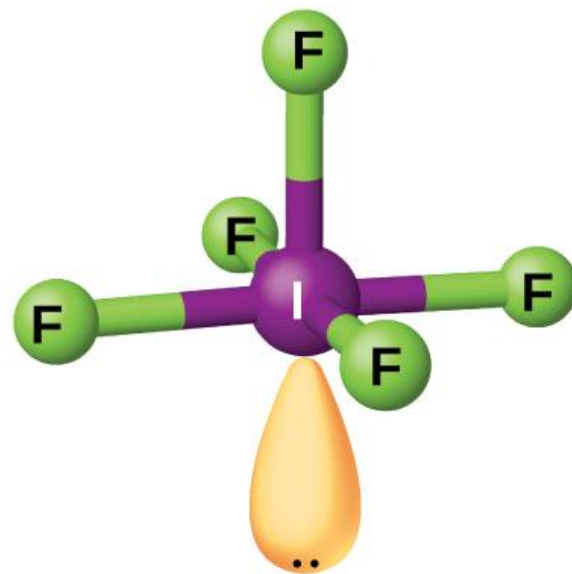
La geometría molecular resultante es piramidal cuadrada:



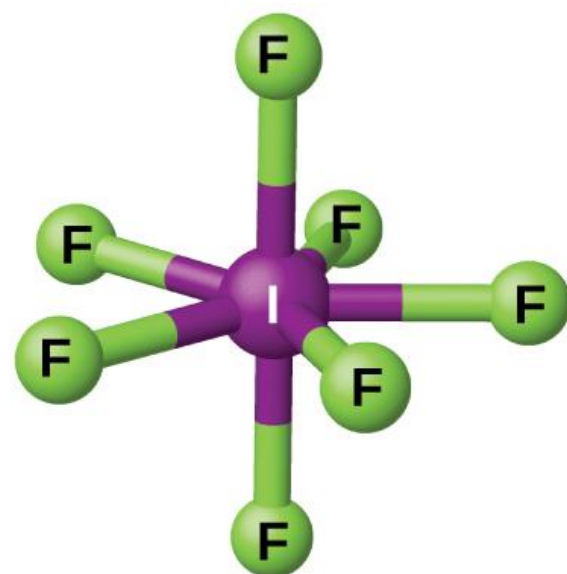
Dado que el dominio del par no enlazante es más grande que los demás dominios, los cuatro átomos de F en la base de la pirámide están inclinados un poco hacia el átomo de F de arriba. Experimentalmente, se observa que el ángulo entre la base y el átomo superior de F es de 82° , menor que el ángulo ideal de 90° del octaedro.



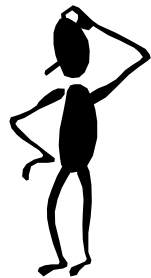
IF_3



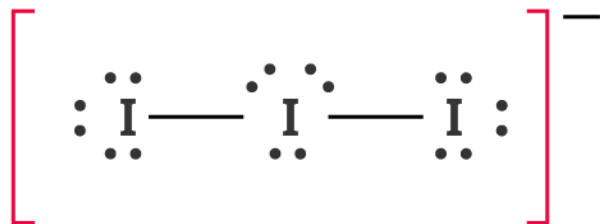
IF_5



IF_7

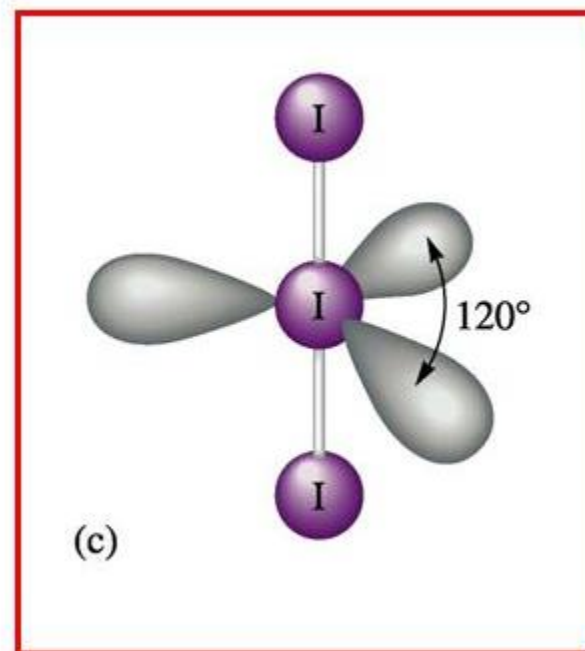
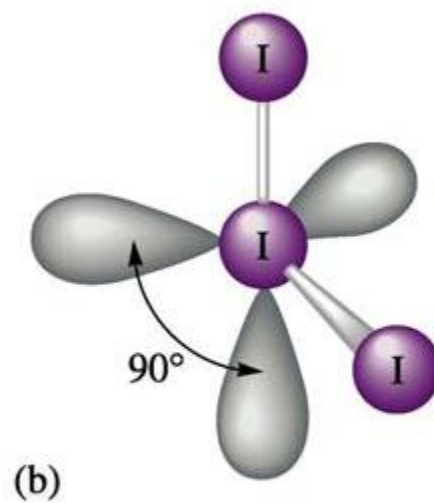
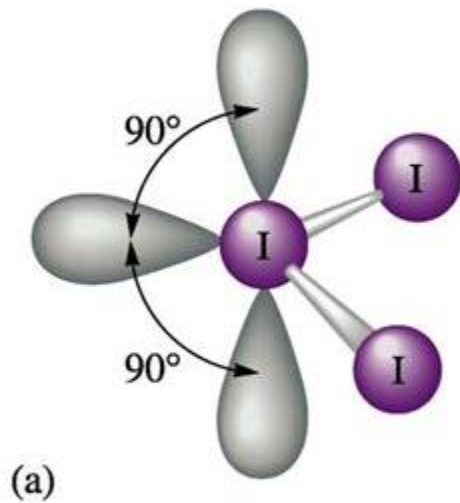


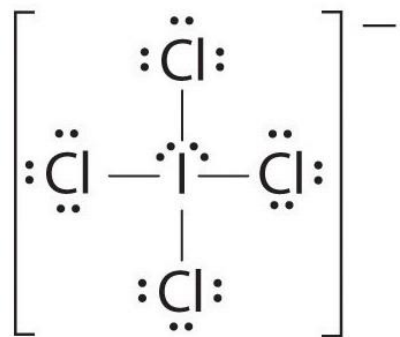
Prediga las geometrías de dominios de electrones y moleculares de
(a) I_3^- (b) ICl_4^- .



Distribución de los pares de e^- :
Geometría molecular:

bipiramidal trigonal
lineal





Distribución de los pares de e^- :

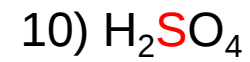
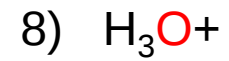
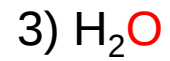
Geometría molecular:

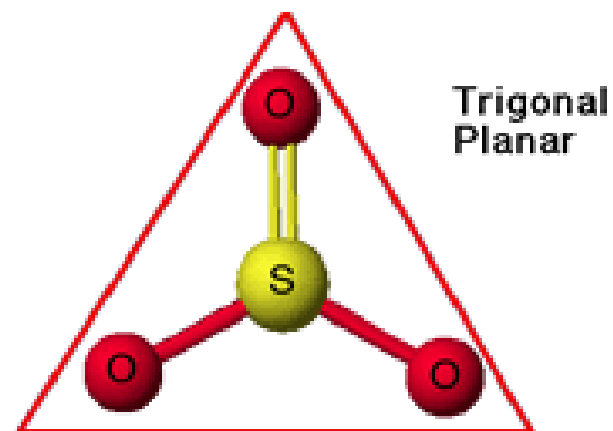
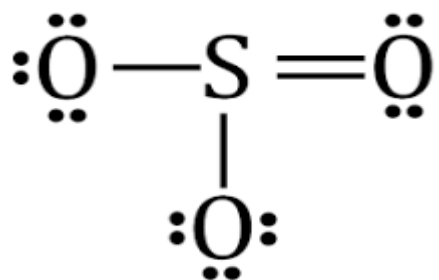
octaédrica

cuadrada plana

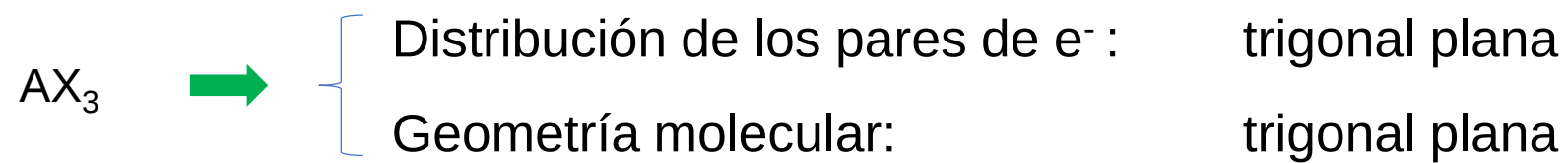
Ejercicios

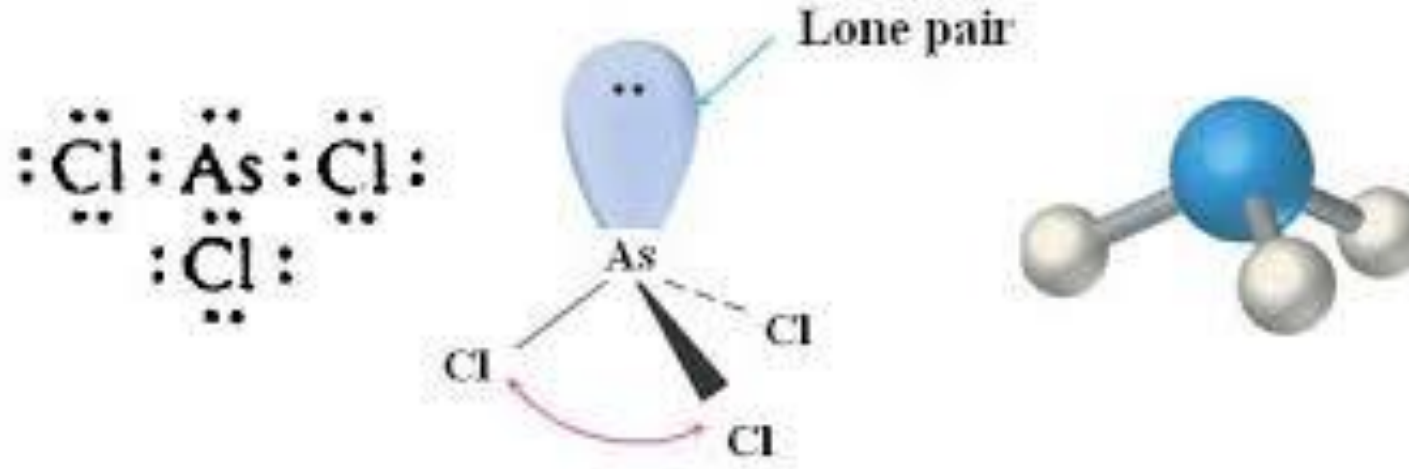
Determinar la estructura molecular empleando el modelo RPECV de:





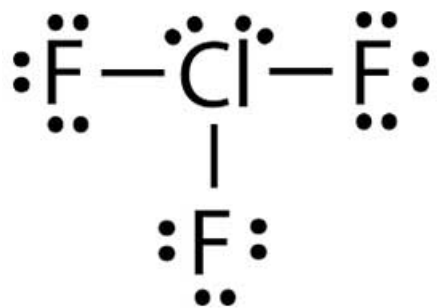
Molecular Geometry





AX_3E
➔
{

 Distribución de los pares de e^- : tetraédrica
 Geometría molecular: piramidal trigonal



AX_3E_2

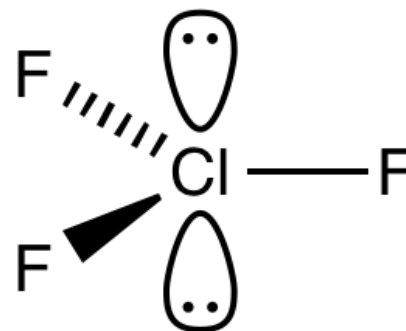
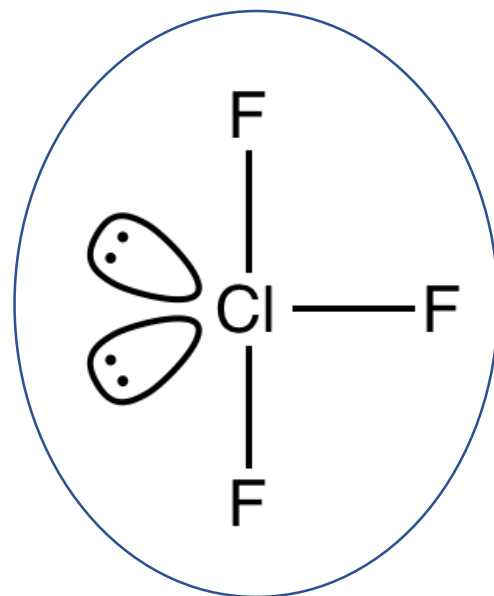


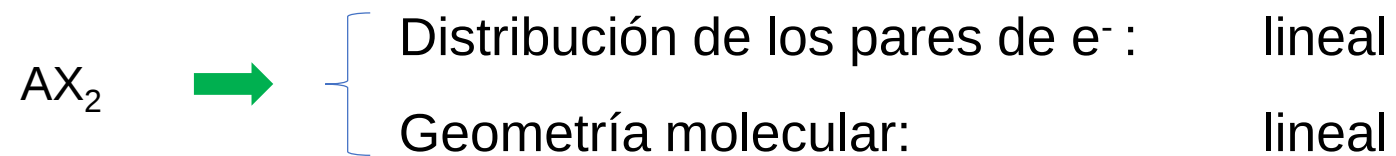
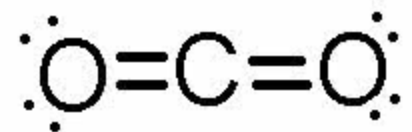
Distribución de los pares de e^- :

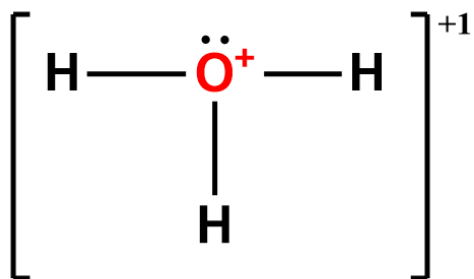
Geometría molecular:

bipiramidal trigonal

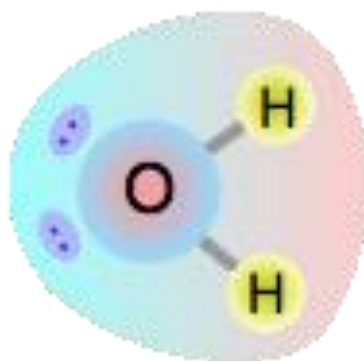
forma de T



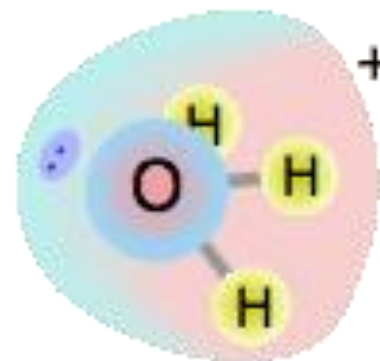




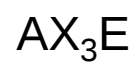
+



water



hydronium ion

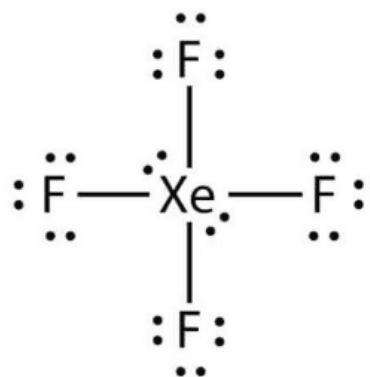


Distribución de los pares de e⁻ :

Geometría molecular:

tetraédrica

piramidal trigonal

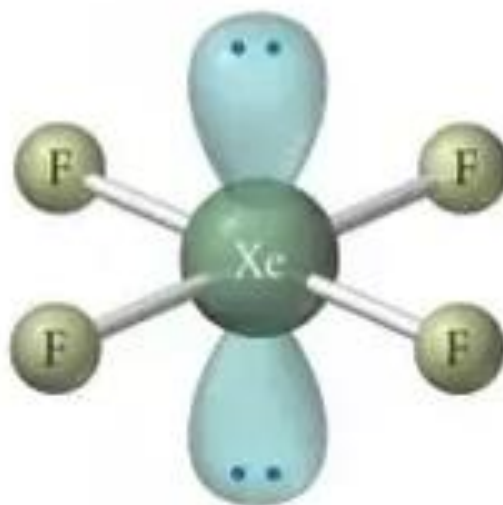


AX_4E_2

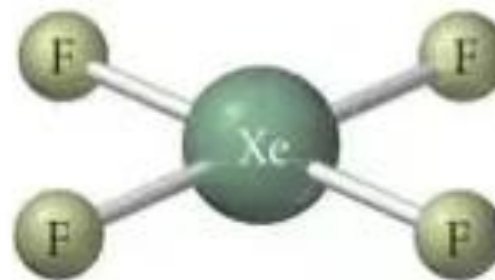


Distribución de los pares de e^- :
Geometría molecular:

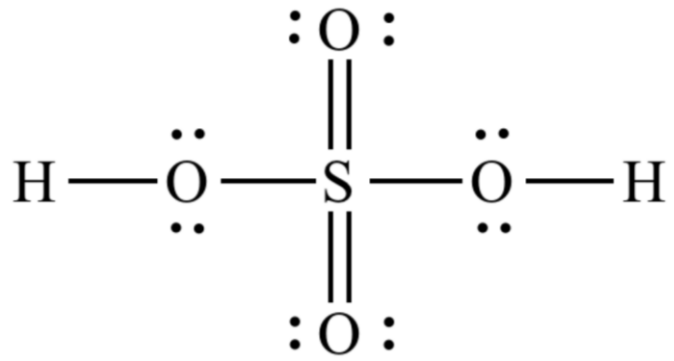
octaédrica
cuadrada plana



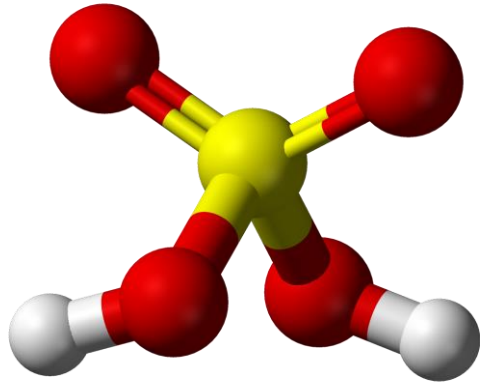
Electron geometry:
octahedral

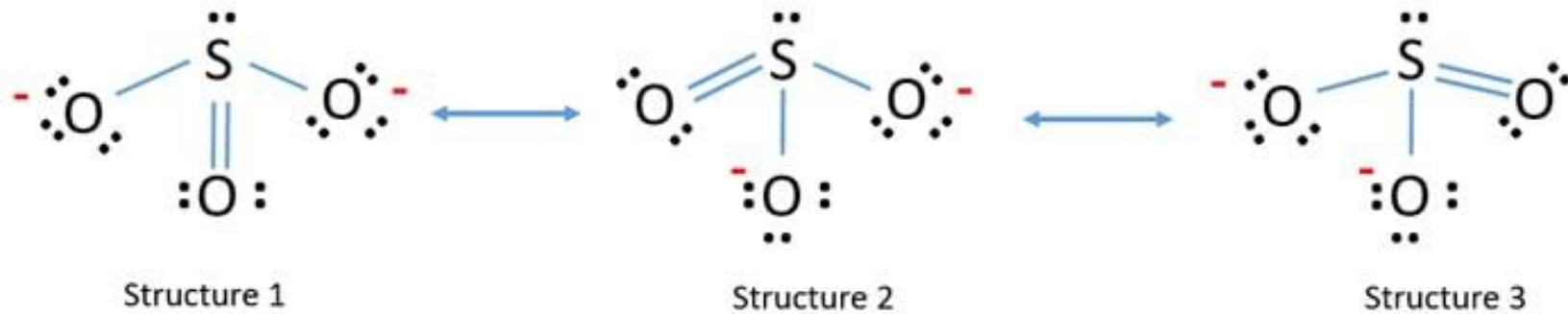


Molecular geometry:
square planar



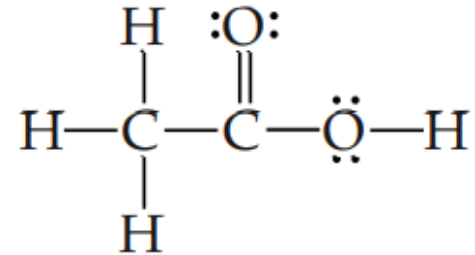
AX_4  tetraédrica



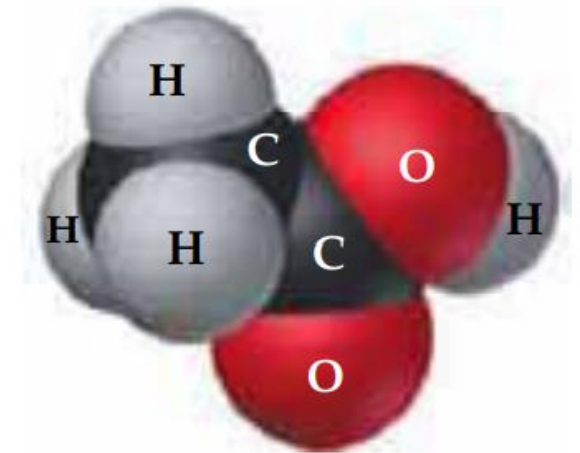
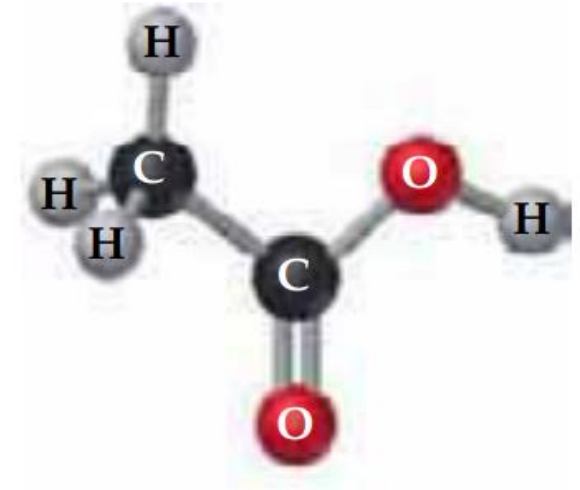


Forma de moléculas más grandes

Consideremos la molécula del ácido acético, cuya estructura de Lewis es

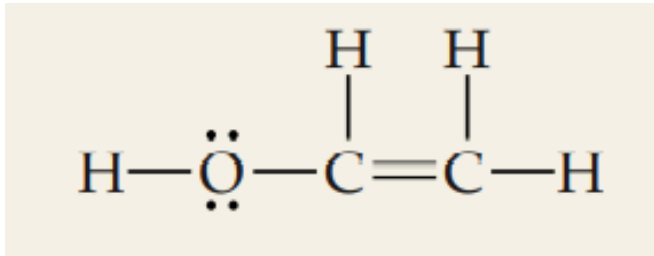


	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}- \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \\ \text{C} \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{O}}-\text{H} \end{array}$
Número de dominios de electrones	4	3	4
Geometría de dominios de electrones	Tetraédrica	Trigonal plana	Tetraédrica
Ángulos de enlace predichos	109.5°	120°	109.5°

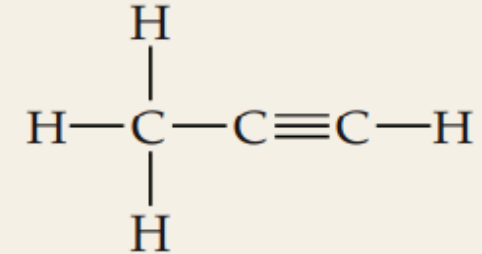




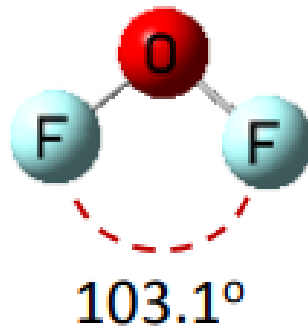
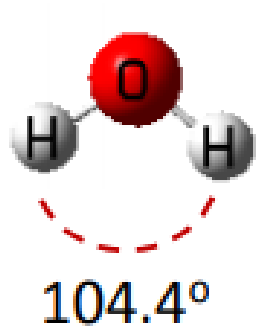
Las gotas para humectar los ojos suelen contener un polímero soluble en agua llamado alcohol polivinílico, derivado de la molécula orgánica estable llamada alcohol vinílico. Prediga los valores aproximados de los ángulos de enlace H-O-C y O-C-C en el alcohol vinílico.



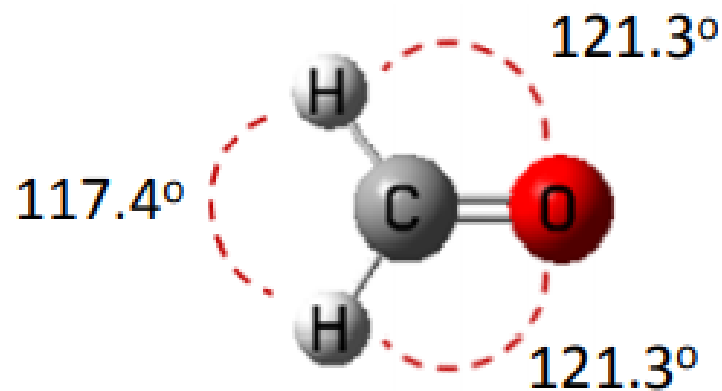
Prediga los ángulos de enlace y en la molécula siguiente, llamada propino:



Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)



La diferente polarización de los enlaces OH y OF hace que los pares enlazantes estén más lejos del átomo central en el OF_2 lo que disminuye las repulsiones y permite un ángulo de enlace más cerrado

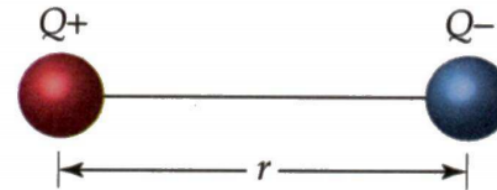


La densidad electrónica de los enlaces múltiples (dobles o triples) ocupa mayor volumen que la de los enlaces sencillos. Por tanto la repulsión entre un enlace múltiple y uno sencillo es siempre mayor que la que hay entre dos enlaces sencillos.

¿Cómo cuantificamos la polaridad de una molécula?

- Siempre que dos cargas eléctricas de igual magnitud, pero de signo opuesto están separadas cierta distancia, se establece un **dipolo**.
- La medida cuantitativa de la magnitud de un dipolo se llama **momento dipolar**, denotado con μ .
- Si dos cargas de igual magnitud Q^+ y Q^- están separadas una distancia r , la magnitud del momento dipolar es:

$$\mu = Q \cdot r$$



q es la carga del sitio positivo

r es la distancia entre los centros de las cargas

El momento dipolar es un vector dirigido de la carga positiva hacia la negativa

Momento dipolar de enlace

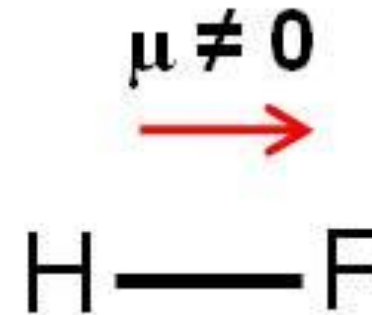
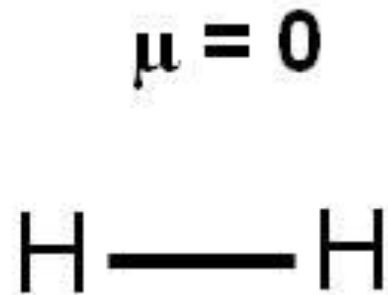
$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{r}$$

El momento dipolar aumenta al incrementarse la magnitud de la carga separada y al aumentar la distancia entre las cargas.

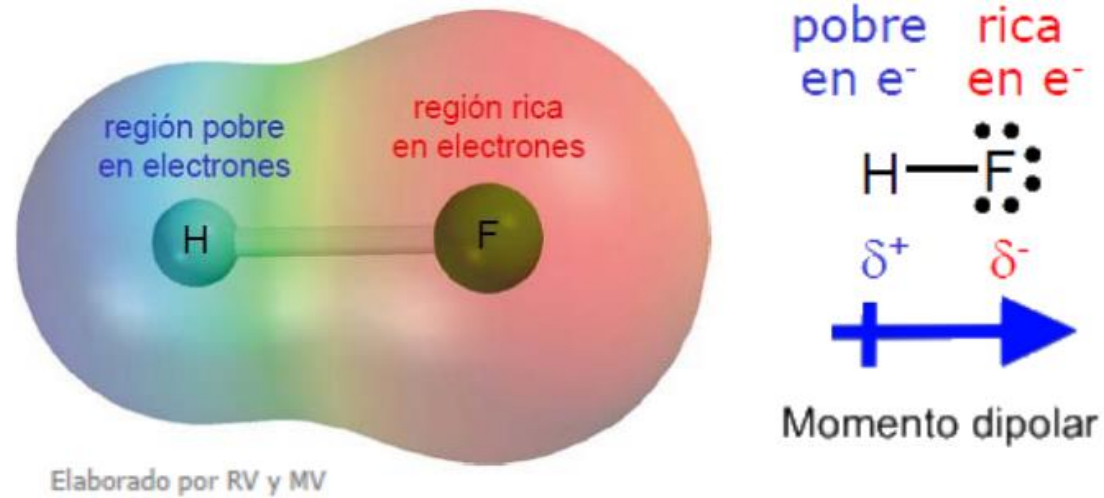
La polaridad del enlace aumenta con la diferencia de electronegatividad. Si esta es muy grande el átomo más electronegativo puede quedarse con el par de electrones quedando cargado negativamente (anión) mientras que el otro átomo queda cargado positivamente (catión). Entonces se habla de **enlace iónico**.

La polaridad de las moléculas depende no sólo de la polaridad de sus enlaces sino también de la geometría molecular.

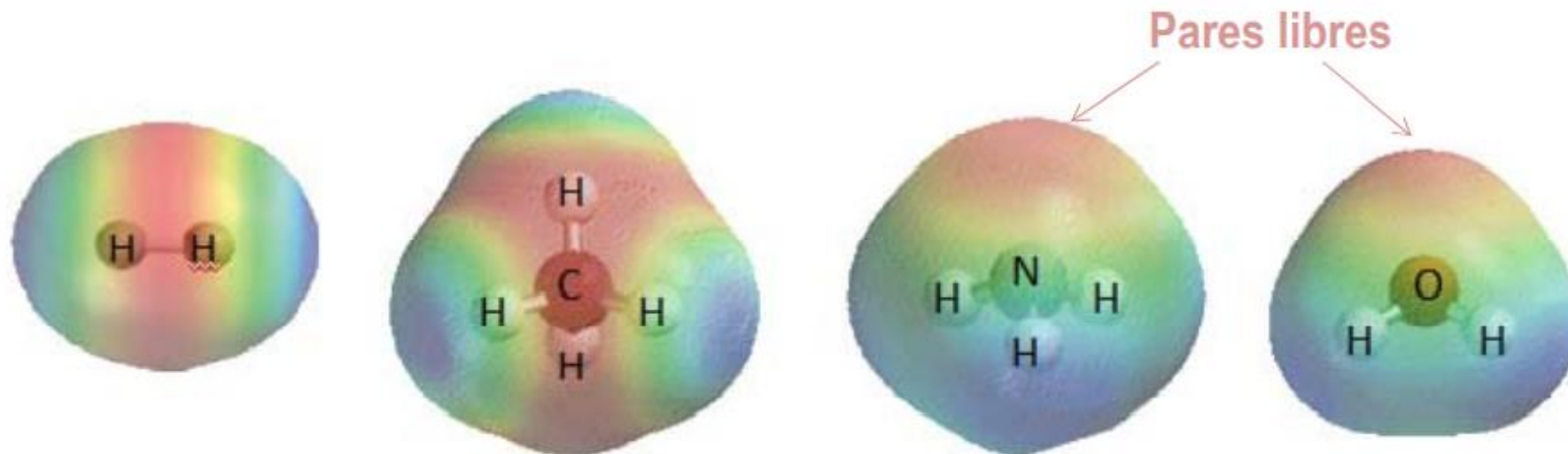
- **Molécula apolar.** La suma vectorial de los momentos dipolares es nula.
- **Molécula polar.** La suma vectorial de los momentos dipolares es distinta a cero



Momento dipolar de moléculas



Los momentos dipolares de las moléculas suelen darse en **debyes** (D), unidad que equivale a $3.34 \cdot 10^{-30}$ coulombs-metro (C-m).



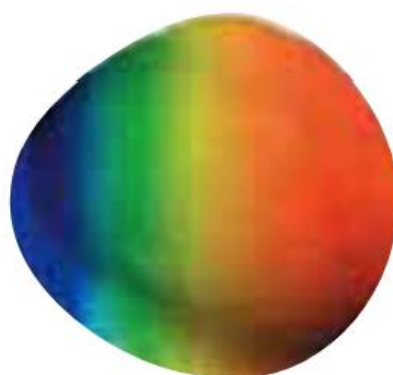
Momento dipolar de moléculas

Longitudes de enlace, diferencias de electronegatividad y momentos dipolares de los halogenuros de hidrógeno

Compuesto	Longitud de enlace (Å)	Diferencia de electronegatividad	Momento dipolar (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44



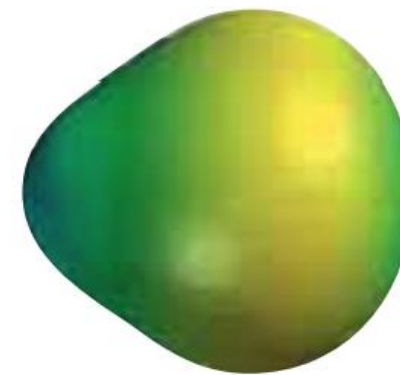
HF



HCl



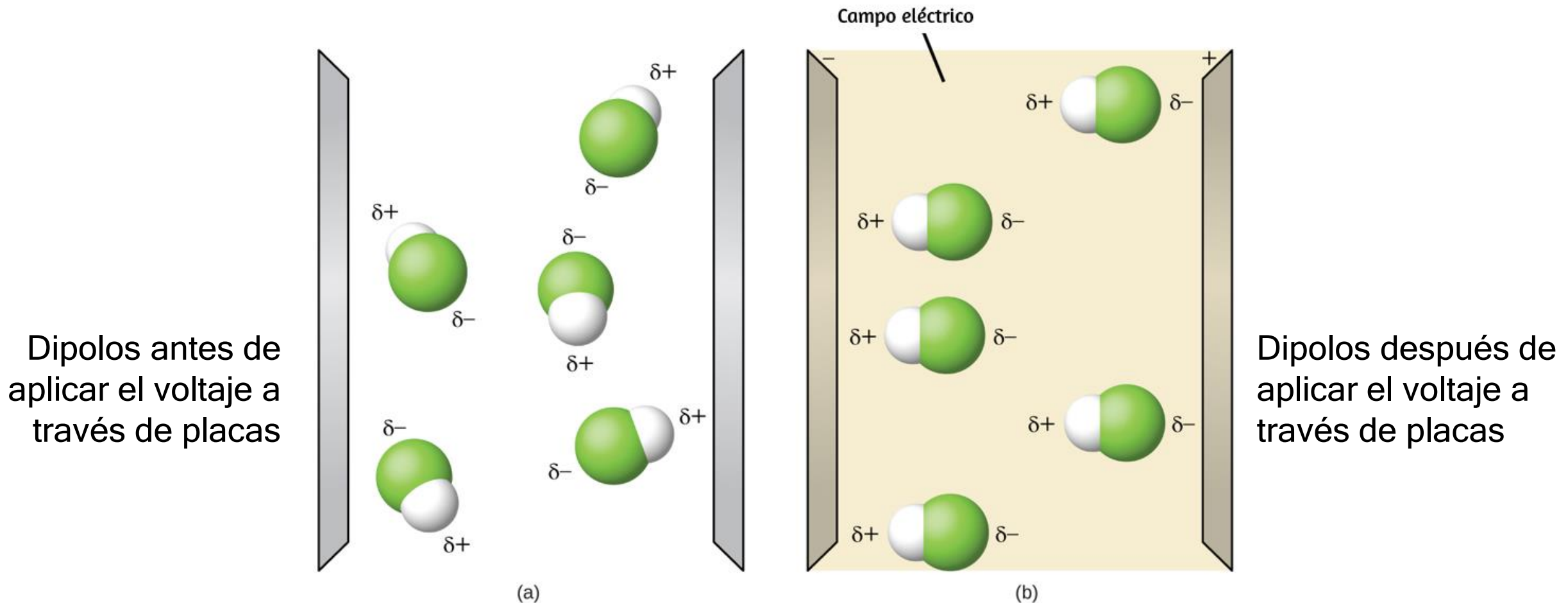
HBr



HI

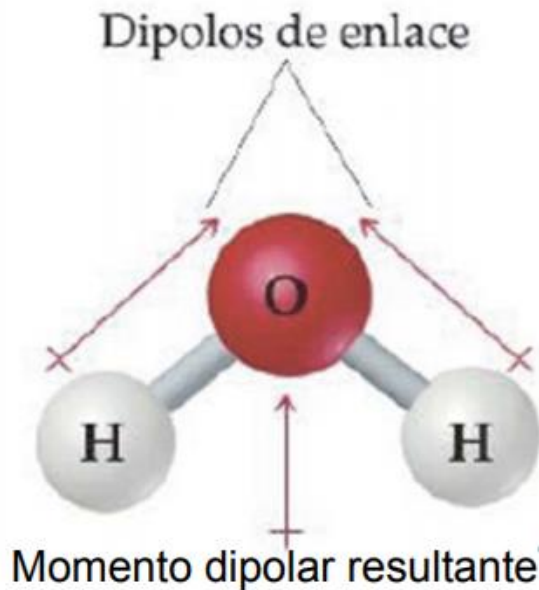
DIPOLOS EN UN CAMPO ELECTRICO

Los dipolos se pueden distinguir experimentalmente de las moléculas no polares por su comportamiento en un campo eléctrico: cuando las moléculas polares se colocan entre un par de placas cargadas eléctricamente, tienden a rotar para alinearse con el campo.



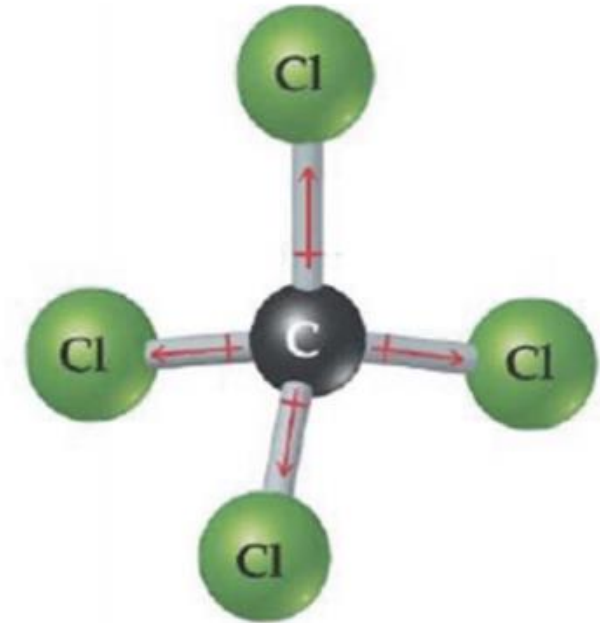
Momento dipolar de moléculas

Es importante distinguir entre la polaridad de un enlace y la polaridad de una molécula. Una molécula formada por enlaces polares puede ser o no polar:



Polar

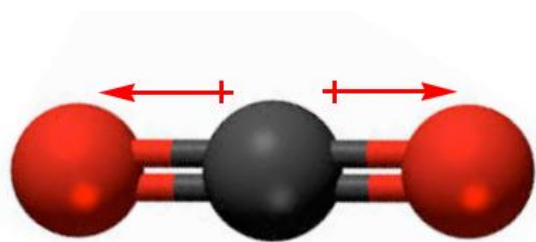
La polaridad del agua determina alguna de sus propiedades como la capacidad de disolver algunas sales



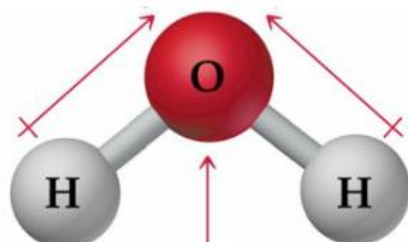
No Polar

Los dipolos de enlace son vectores y para sumarlos hay que tener en cuenta la geometría molecular

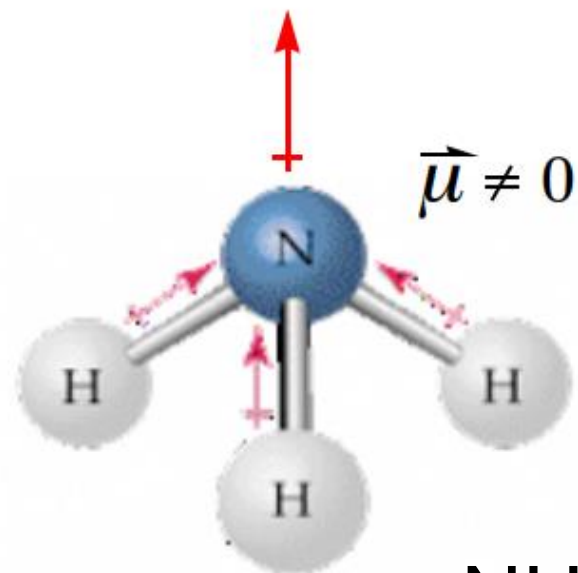
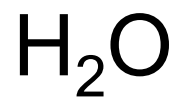
Polaridad de las moléculas



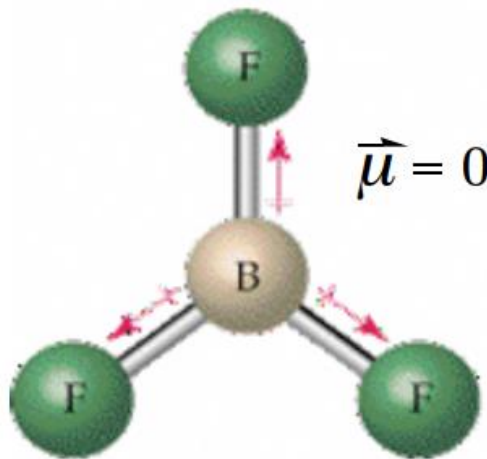
$$\vec{\mu} = 0$$



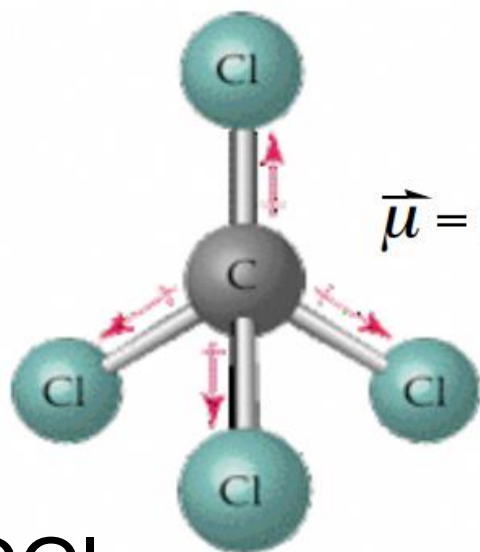
$$\vec{\mu} \neq 0$$



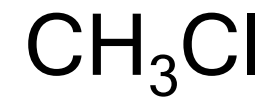
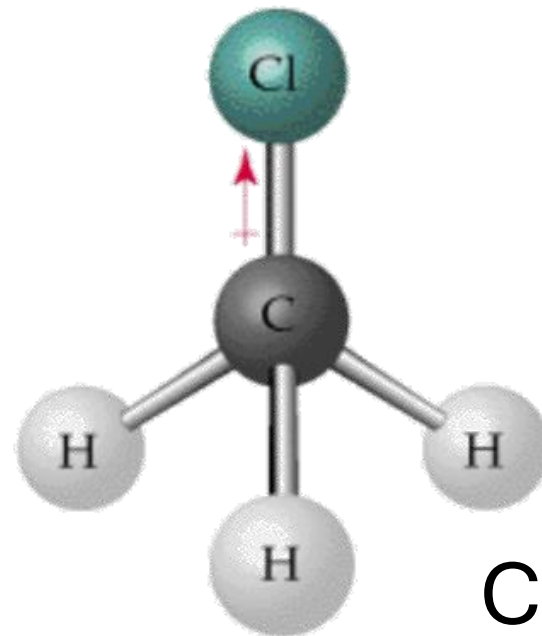
$$\vec{\mu} \neq 0$$



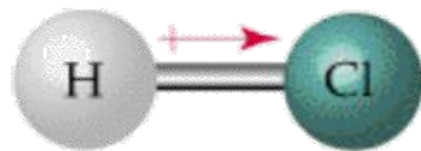
$$\vec{\mu} = 0$$



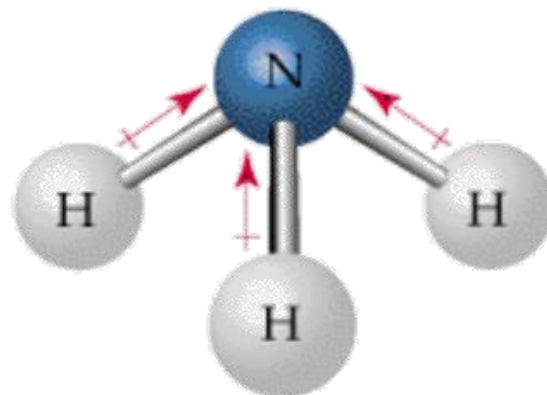
$$\vec{\mu} = 0$$



Polaridad de las moléculas

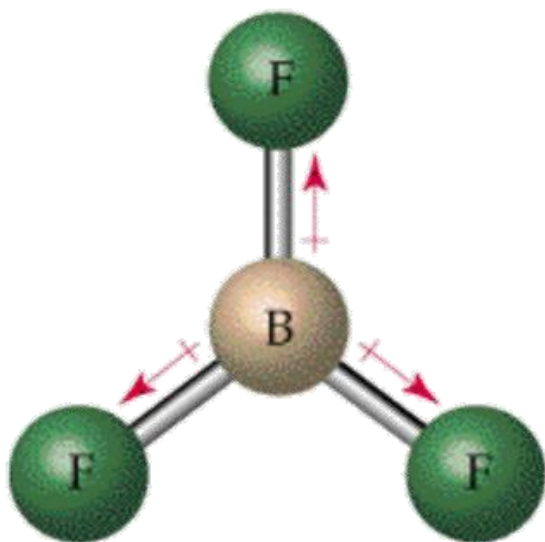


Polar

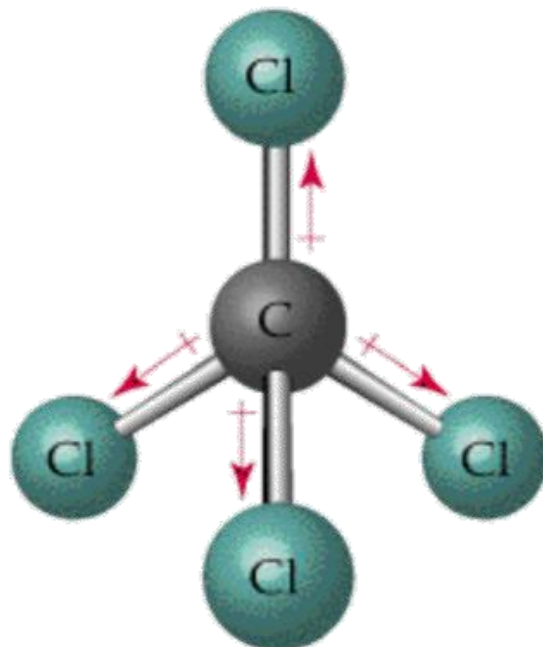


Polar

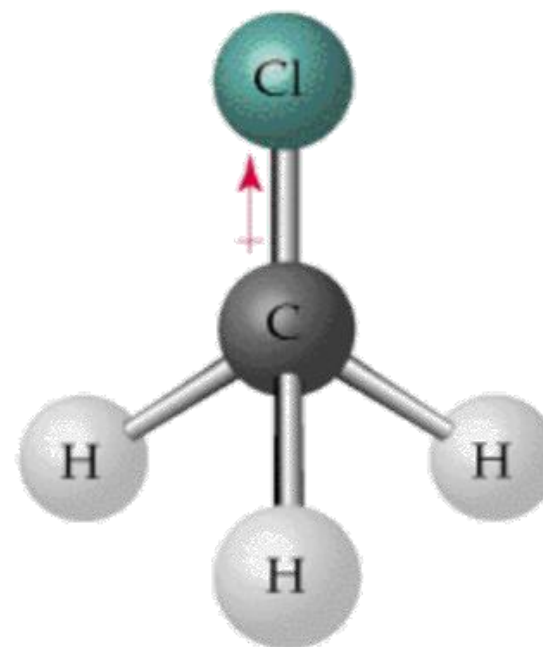
*Si hay pares de no enlace la molécula es **polar**.*



Nonpolar

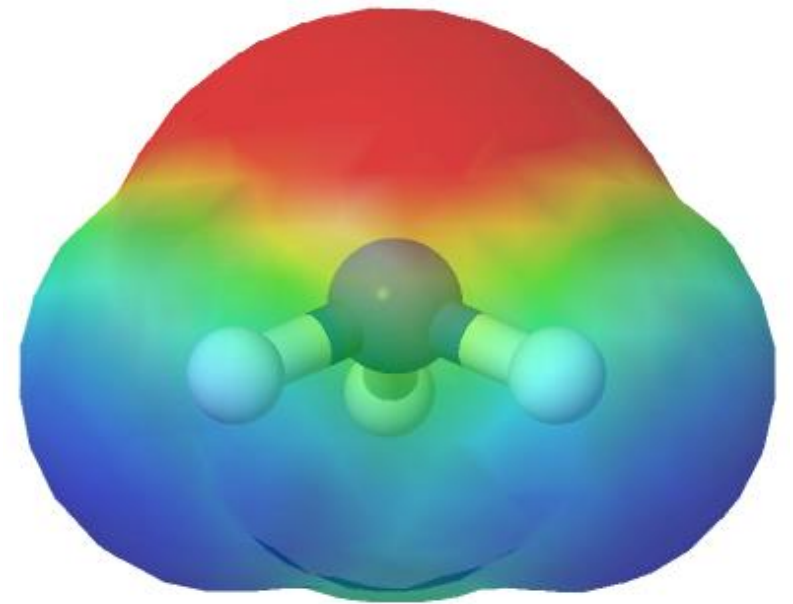
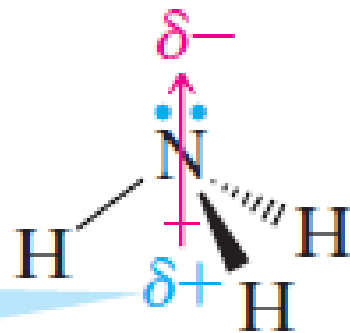


Nonpolar

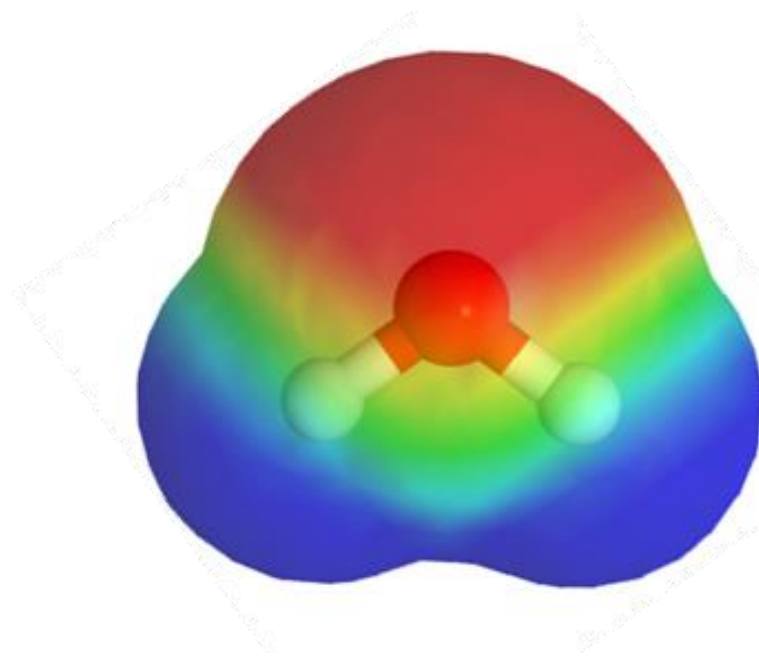
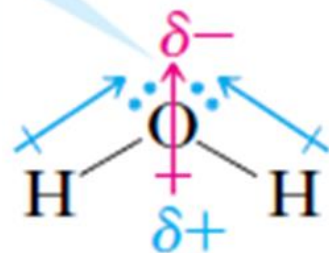


Polar

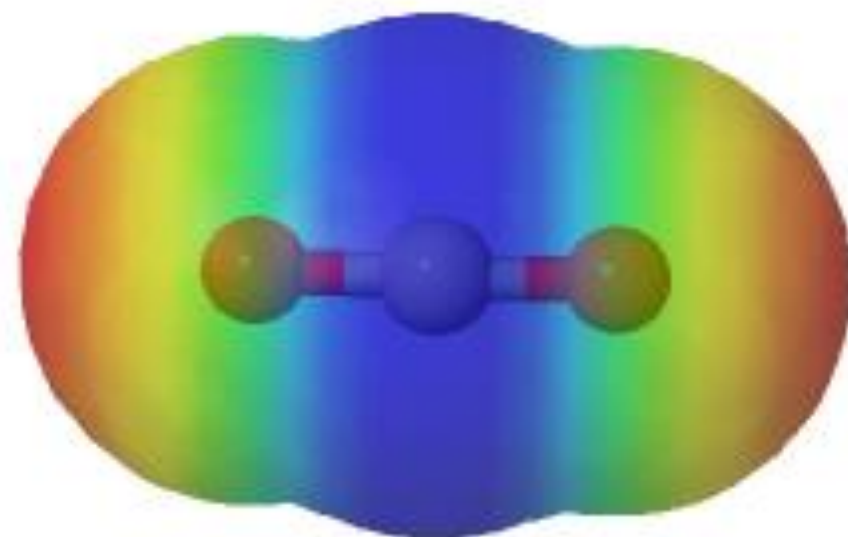
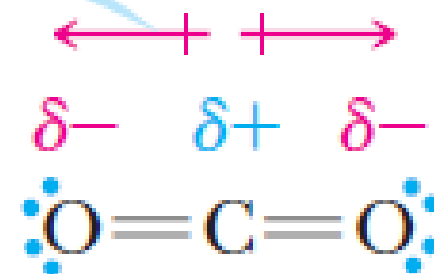
El centro de la carga parcial positiva se localiza entre los tres átomos de hidrógeno.

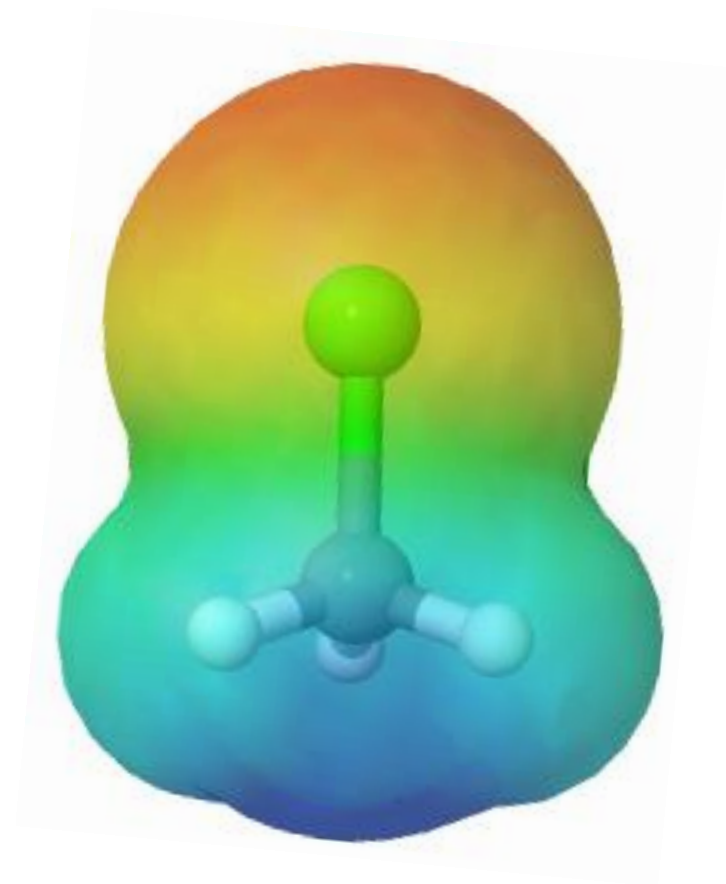
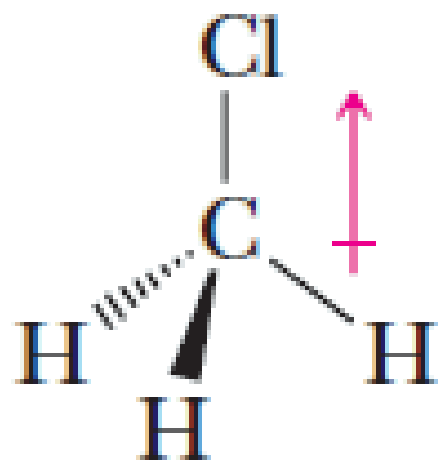


La suma vectorial (en rojo) de los dipolos de enlace (azul) sitúa el centro de la carga parcial positiva entre los dos hidrógenos.

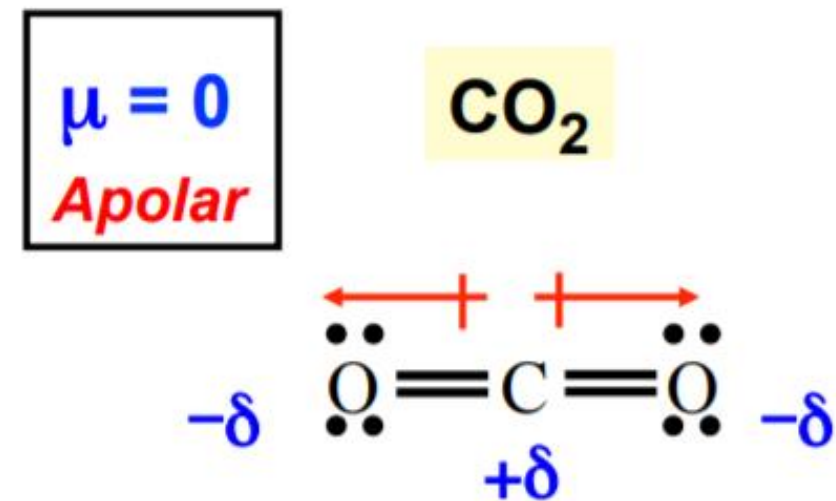
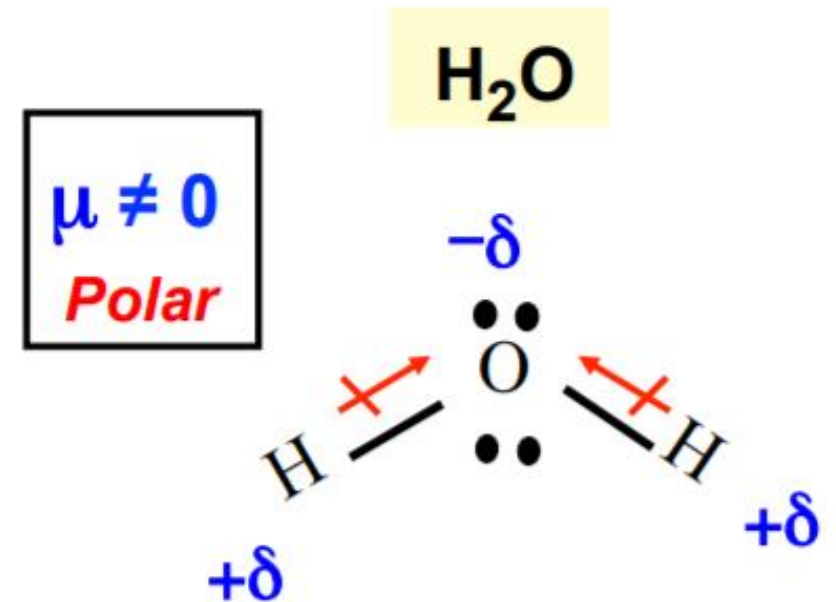
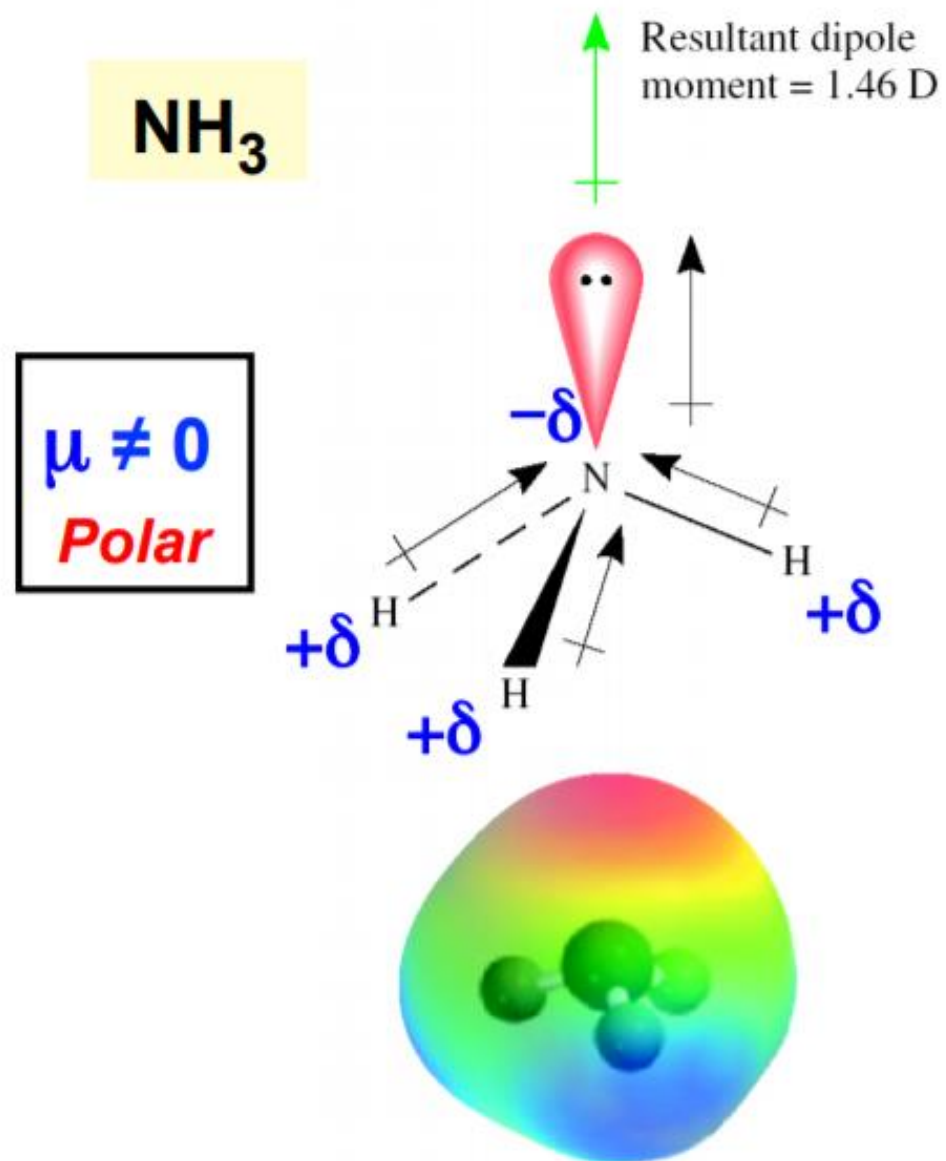


Dos dipolos de igual fuerza se cancelan uno con otro cuando están orientados opuestamente.





Polaridad de las moléculas



- No se debe confundir la polaridad de los enlaces con la polaridad de la molécula
- Un enlace es polar cuando los átomos enlazados tienen diferente electronegatividad
- La polaridad de la molécula depende además de la geometría de la molécula

Enlace
covalente

Polar

Simetría



Molécula apolar

No simetría



Molécula polar

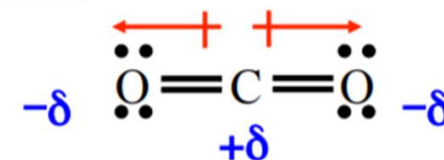
Apolar



Molécula apolar

$\mu = 0$
Apolar

CO₂



$\mu \neq 0$
Polar

H₂O

