

UNIDAD III

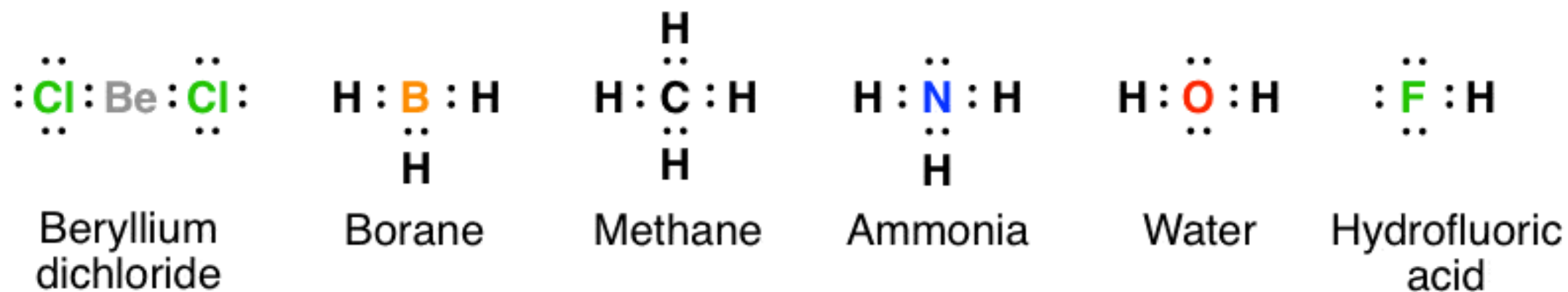
ENLACE QUÍMICO

- 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.

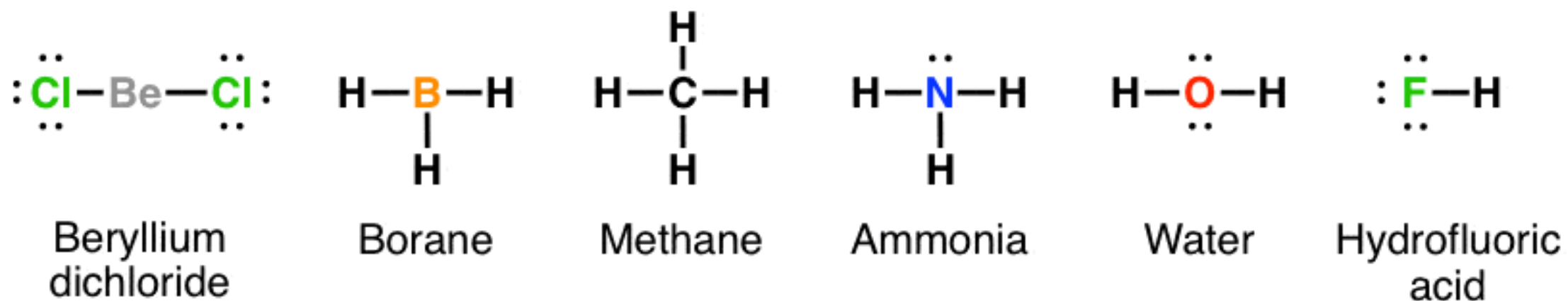
Como dibujar estructuras de Lewis

1. Escribe la estructura del compuesto mediante símbolos químicos mostrando que átomos están unidos entre sí. El átomo menos electronegativo ocupa la posición central, con excepción del H que ocupa siempre las posiciones terminales.
2. Cuenta el número total de electrones de valencia presentes. En los aniones poliatómicos suma el número de cargas negativas. En los cationes poliatómicos resta el número de cargas positivas.
3. Dibuja un enlace covalente sencillo entre el átomo central y cada uno de los átomos que lo rodean. Completa los octetos de los átomos enlazados al átomo central y del átomo central.
4. Si no se cumple la regla del octeto para el átomo central, agrega dobles o triples enlaces entre este átomo y los que lo rodean usando los pares libres.

The Full Lewis



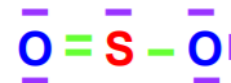
The "Half-Lewis"



Ejemplo 1: SO_2

1. Esqueleto: $\text{O} - \text{S} - \text{O}$

2. Número de electrones de valencia:



3. Número de enlaces covalentes:

Cada átomo tiende a completar su octeto:

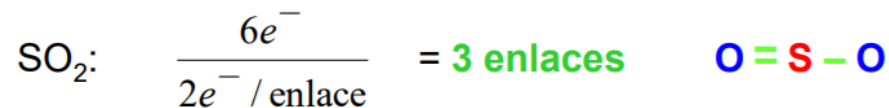
$n^\circ e^-$ para los octetos = $2 e^- \times n^\circ$ de átomos H + $8 e^- \times n^\circ$ átomos restantes

SO_2 : $2 e^- \times 0 + 8 e^- \times 3 = 24 e^-$ de octeto

$n^\circ e^-$ de enlace (compartidos) = $n^\circ e^-$ octetos - $n^\circ e^-$ de valencia

SO_2 : $24 e^- - 18 e^- = 6 e^-$ de enlace

$N^\circ \text{ enlaces} = \frac{1}{2} n^\circ e^- \text{ enlace}$ (cada enlace se forma con un par de e^-)



4) Número de electrones sin compartir

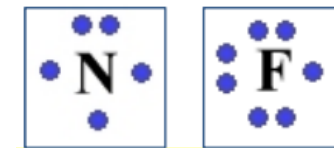
$N^\circ e^- \text{ sin compartir} = n^\circ \text{ de } e^- \text{ de valencia} - n^\circ \text{ de } e^- \text{ de enlace}$

SO_2 : $18 e^- - 6 e^- = 12 e^-$ sin compartir (6 pares)



Problema

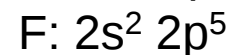
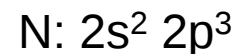
Escribe la estructura de Lewis para el trifluoruro de nitrógeno (NF₃).



3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98

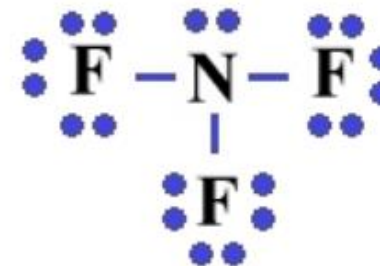
Paso 1. Colocamos N e el centro (es menos electronegativo que F).

Paso 2. Contamos los e⁻ de valencia:



$$5 + 3(7) = 26 \text{ e}^- \text{ de valencia}$$

Paso 3. Dibujamos un enlace sencillo entre el N y cada F. Completamos los octetos para los átomos de N y F con pares libres y enlaces múltiples.

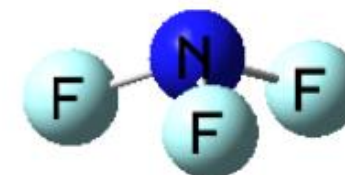


Paso 4. Para confirmar, ¿el # de e⁻ en la estructura es igual al # de e⁻ de valencia?

$$3 \text{ enlaces sencillos } (3 \times 2e^-)$$

$$10 \text{ pares libres } (10 \times 2e^-)$$

$$= 26 \text{ e}^- \text{ de valencia}$$



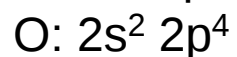
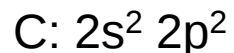


Problema

Escribe la estructura de Lewis para el dióxido de carbono (CO_2).

Paso 1. Colocamos C en el centro (es menos electronegativo que O).

Paso 2. Contamos los e⁻ de valencia:



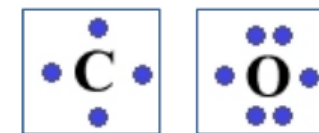
$$4 + 2(6) = 16 \text{ e}^- \text{ de valencia}$$

Paso 3. Dibujamos un enlace sencillo entre el C y cada O. Completamos los octetos para los átomos de C y O con pares libres y enlaces múltiples.

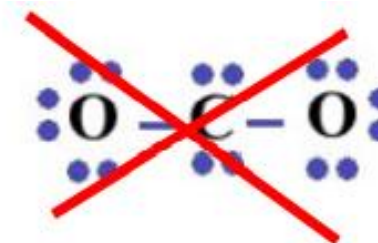
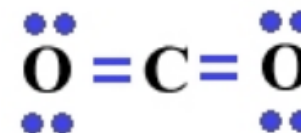
Paso 4. Para confirmar, ¿el # de e⁻ en la estructura es igual al # de e⁻ de valencia?



$$= 16 \text{ e}^- \text{ de valencia}$$



3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98



¿cómo saber que los enlaces son dobles y no sencillos?

2 enlaces sencillos (2×2) + 8 pares libres (8×2)
= $20 \neq 16$ demasiados electrones de valencia

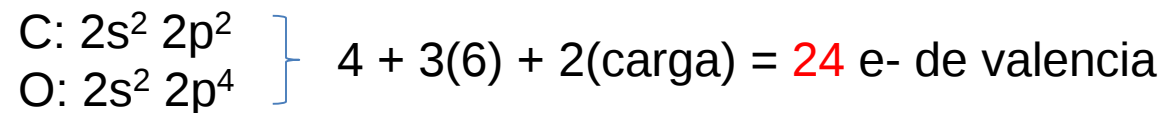


Problema

Escribe la estructura de Lewis para el ión carbonato (CO_3^{2-}).

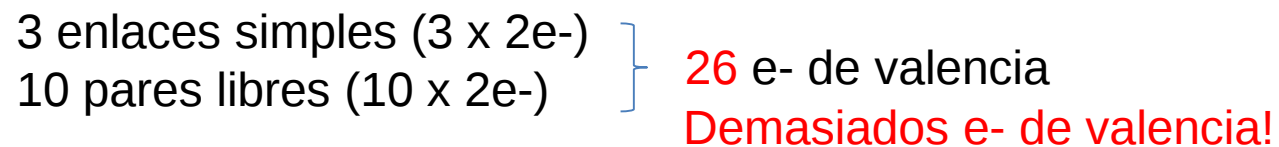
Paso 1. Colocamos C en el centro (es menos electronegativo que O).

Paso 2. Contamos los e- de valencia:

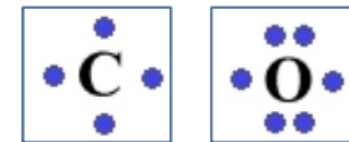
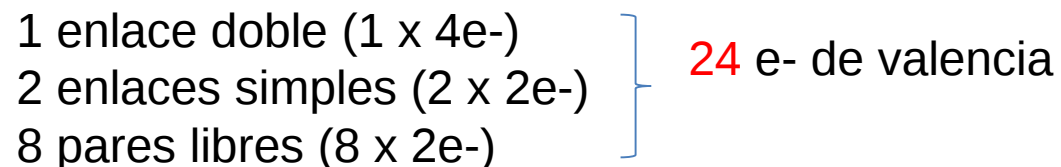


Paso 3. Dibujamos un enlace sencillo entre el C y cada O.
Completamos los octetos para los átomos de C y O con pares libres y múltiples.

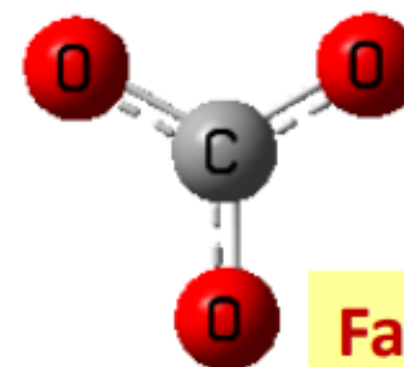
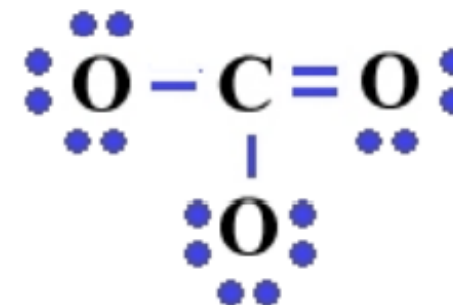
Paso 4. Confirmar si el # de e- en la estructura es igual al # de e- de valencia?



Paso 5. Formar enlaces dobles (de 1 en 1 y checar)

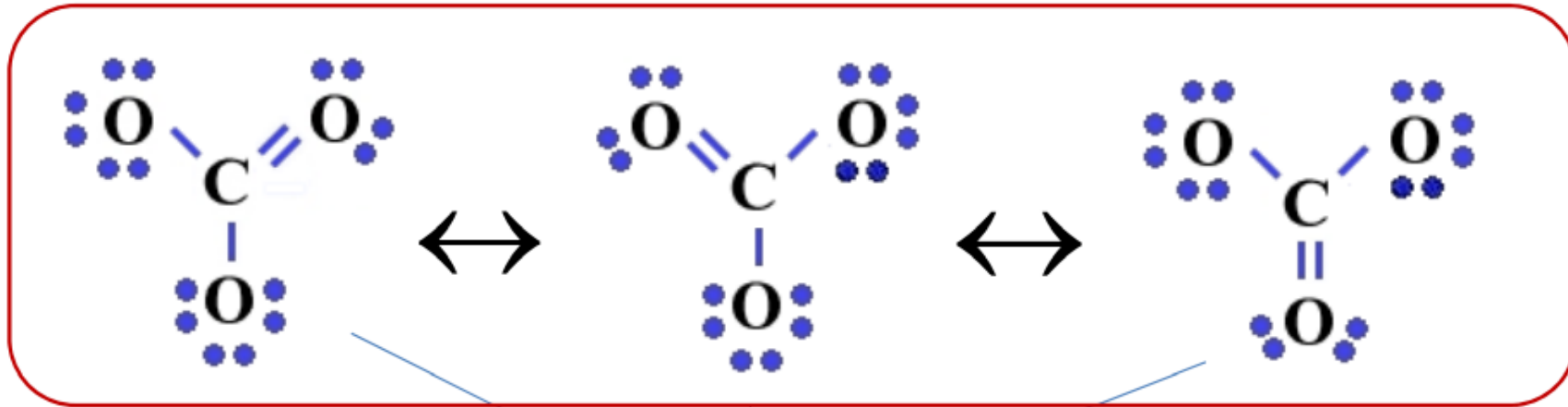
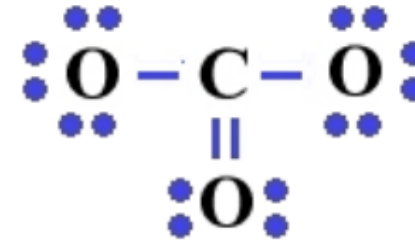
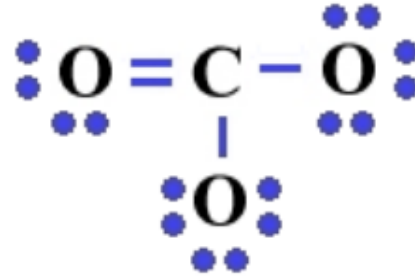
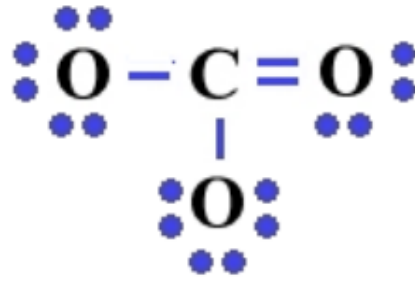


3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98



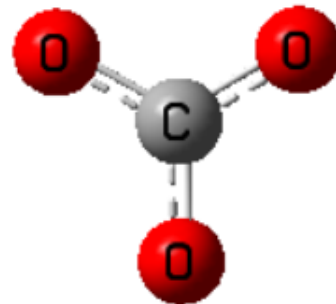
Falla

Estructuras Resonantes:



**Estructuras
resonantes**

Las estructuras de Lewis no
explican los ángulos

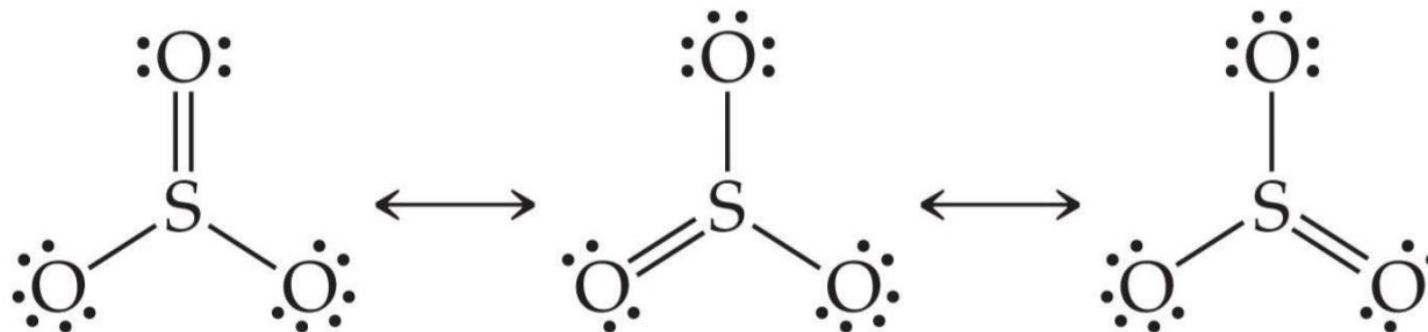
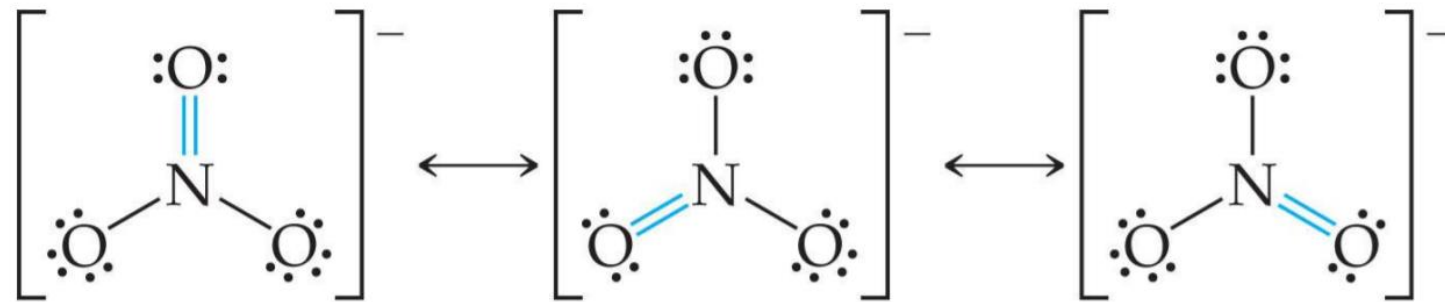


Estructura observada:

Los 3 átomos de O son idénticos
Las 3 distancias de enlace (CO)
son idénticas

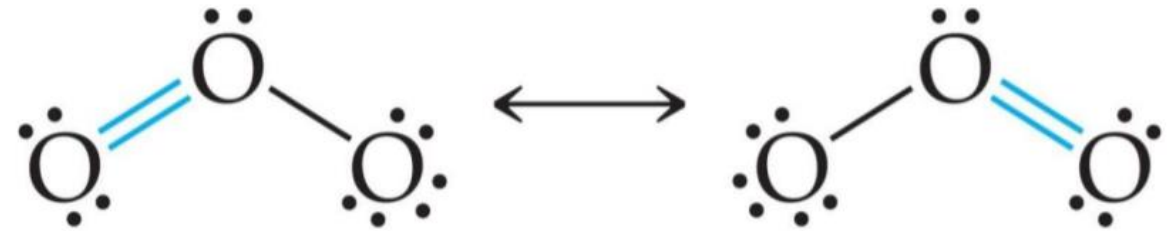
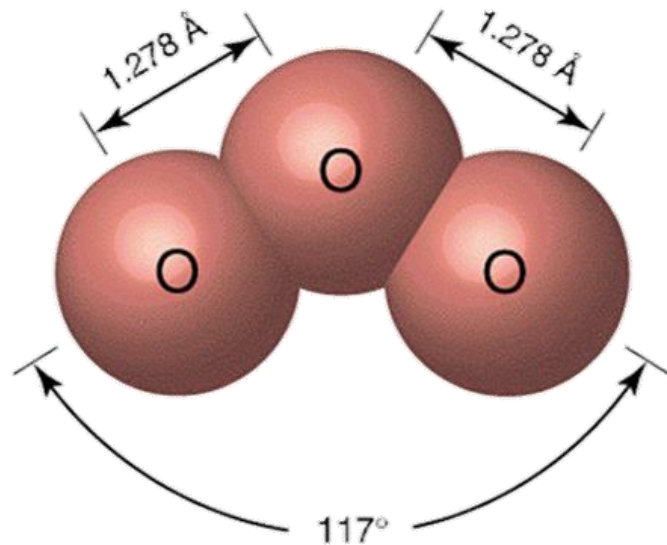
RESONANCIA

- En muchos compuestos, la representación de las moléculas con una sola estructura de Lewis es inadecuada, ya que ninguna de las posibles estructuras representa al compuesto y sus propiedades en su totalidad. Estos casos se justifican con el concepto de resonancia, según el cual, la estructura correcta es intermedia entre todas las posibles.

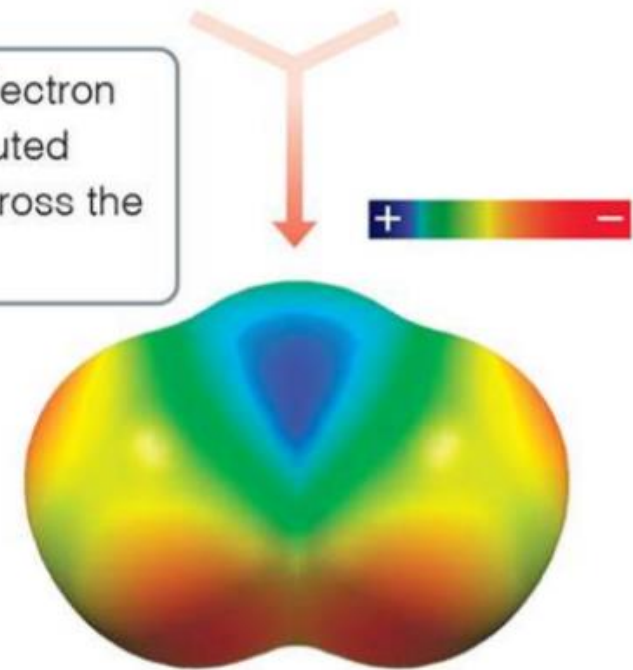


Ozono O_3

Experimentalmente el ozono tiene 2 enlaces idénticos mientras que en la estructura de Lewis aparecen 1 doble (más corto) y 1 sencillo (más largo)



Notice that the electron density is distributed symmetrically across the molecule.



Ozone molecule

- La carga formal de un átomo (QF^{at}) en una estructura de Lewis es igual al número total de electrones de valencia en el átomo libre (e^{val}) **menos** el número total de electrones no enlazados (e^{no-enl}) **menos** el número de enlaces en los que participa ($\frac{1}{2} e^{enl}$):

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \text{enl} \rightarrow \text{Número de enlaces}$$

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2} e^{enl} \rightarrow \text{Número de electrones en enlaces}$$

- El concepto de carga formal ayuda a decidir entre estructuras de Lewis alternas.
- Las cargas formales no representan cargas reales de los átomos.**

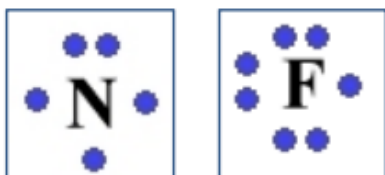
Carga formal

- La suma de las cargas formales de todos los átomos que forman una molécula neutra debe ser igual a cero.
- La suma de las cargas formales de todos los átomos que forman un ión debe ser igual a la carga del ión.

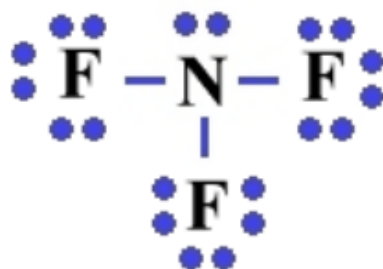
$$QF^{at} = e^{val} - e^{no-enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$$

Trifluoruro de nitrógeno (NF₃)

Átomos libres:



Molécula:



$$QF^N = 5 - 2 - 3 = 0$$

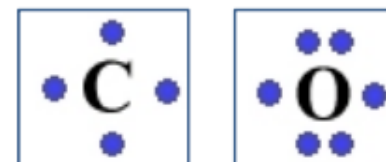
$$QF^F = 7 - 6 - 1 = 0$$

$$QF^{TOTAL} = QF^N + 3QF^F = 0$$

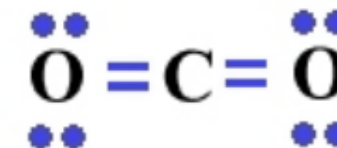
Molécula neutra

Dióxido de carbono (CO₂)

Átomos libres:



Molécula:



$$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$$

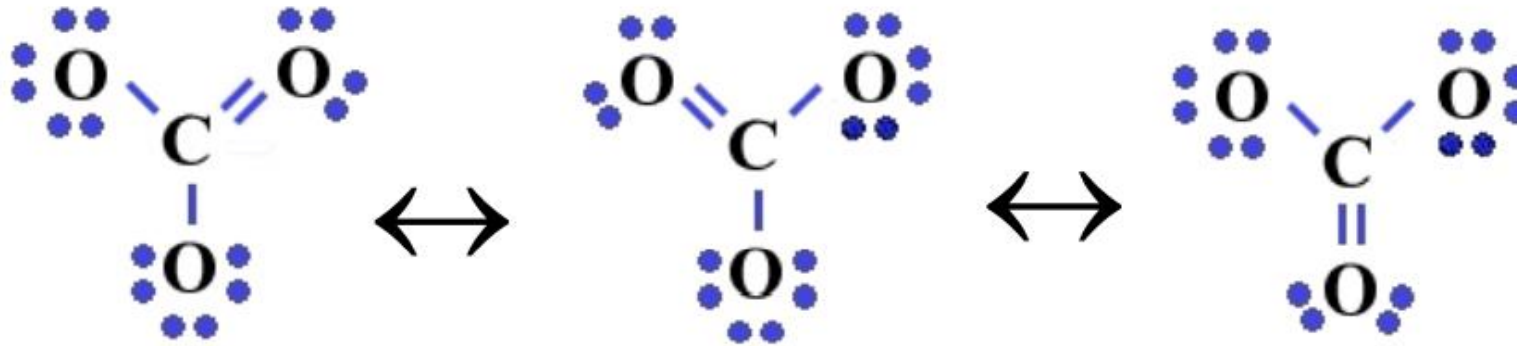
$$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$QF^{TOTAL} = QF^C + 2QF^O = 0$$

Molécula neutra

Ion carbonato (CO_3^{2-})

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$$



$$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$QF^{O\ sencillo} = 6 - 6 - 1 = -1$$

$$QF^{O\ doble} = 6 - 4 - 2 = 0$$

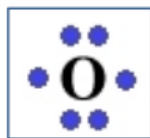
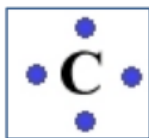
$$QF^{TOTAL} = QF^C + 2QF^{O\ sencillo} + QF^{O\ doble} = 0 + 2(-1) + 0 = -2$$

Anión (carga = -2)

- Cuando dibujamos una estructura de Lewis, estamos describiendo la forma en que los electrones se distribuyen en una molécula (o ion).
- En algunos casos, es posible dibujar varias estructuras de Lewis distintas que obedezcan la regla del octeto. ¿Cómo decidimos cuál es la más razonable?

Formaldehido (CH₂O)

Átomos libres:



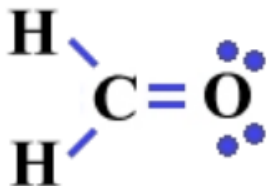
e- de valencia:

$$\text{C}(4) 2s^2 2p^2 \quad \text{H}(1) 1s^1 \quad \text{y} \quad \text{O}(6) 2s^2 2p^4 \\ = 4 + 2(1) + 6 = \mathbf{12}$$

Estructuras posibles:

Confirmando:

1 enlace doble (1x4) + 2 enlaces
simples (2x2) + 2 pares libres (2x2)
= **12** electrones de valencia



$$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$$

Molécula neutra ☒



1 enlace doble (1x4) + 2 enlaces
simples (2x2) + 2 pares libres (2x2)
= **12** electrones de valencia

$$QF^C = 4 - 2 - 3 = -1$$

$$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$QF^O = 6 - 2 - 3 = +1$$

$$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$$

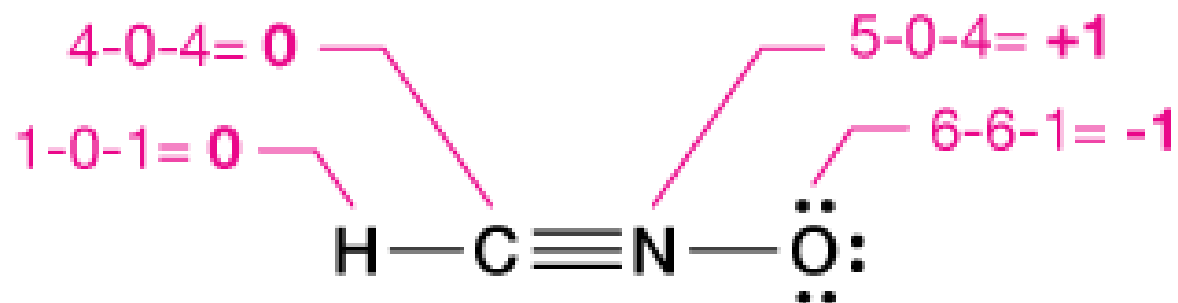
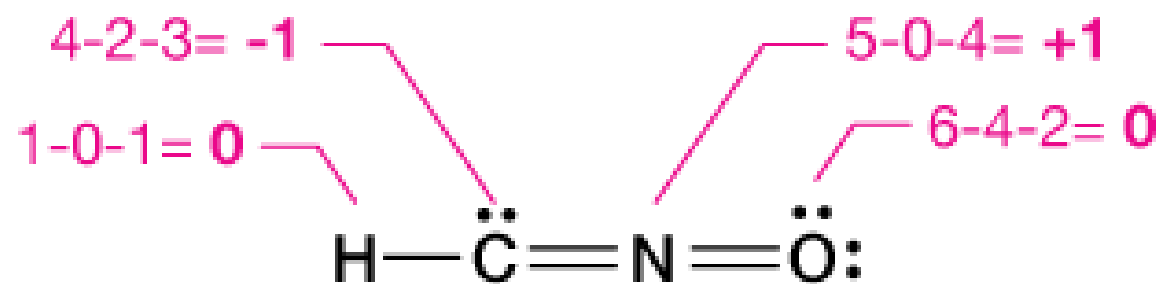
Molécula neutra ☒

Formaldehído (CH₂O)



- Para moléculas neutras, es preferible la estructura de Lewis que no tenga cargas formales en vez de aquella en la que haya cargas formales.
- Las estructuras de Lewis con cargas formales grandes (+2, +3, -2, -3 ó más) son menos probables que las que tienen cargas formales pequeñas.
- Cuando existen varias estructuras de Lewis con la misma distribución de cargas formales, la estructura más razonable es la que lleve las cargas formales negativas en los átomos más electronegativos.

Possible structures of fulminic acid (HCNO)



Excepciones a la Regla del Octeto

1

El octeto incompleto

- Cuando el átomo central tiene menos de 8 e⁻ (átomos hipovalentes)



2

El octeto expandido

- Cuando el átomo central tiene más de 8 e⁻ (átomos hipervalentes)
- Se presenta cuando los e⁻ de valencia del átomo central tiene $n > 2$
- Es la excepción más común



3

Moléculas con número impar de electrones

- Hay e⁻ no apareados

1

El octeto incompleto

Hidruro de Berilio (BeH_2)

Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{Be}(2) 2s^2 \text{ y } \text{H}(1) 1s^1 = 2+2(1) = \mathbf{4}$$



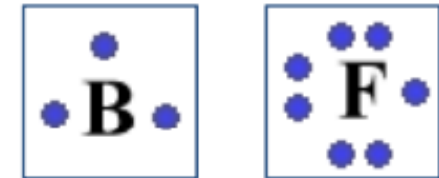
Confirmando:

2 enlaces simples (2×2) = $\mathbf{4}$ electrones de valencia

El Be no cumple con
la REGLA DEL OCTETO

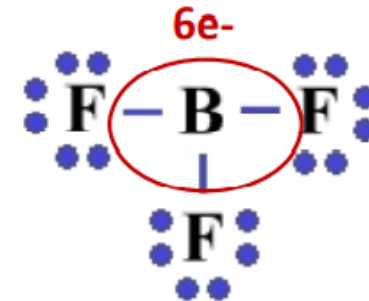
Trifluoruro de Boro (BF_3)

Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{B}(3) 2s^2 2p^1 \text{ y } \text{F}(7) 2s^2 2p^5 = 3+3(7) = \mathbf{24}$$



Confirmando:

3 enlaces simples (3×2) + 9 pares libres (9×2)
= $\mathbf{24}$ electrones de valencia

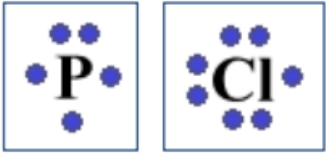
El B no cumple con
la REGLA DEL OCTETO

2

El octeto expandido

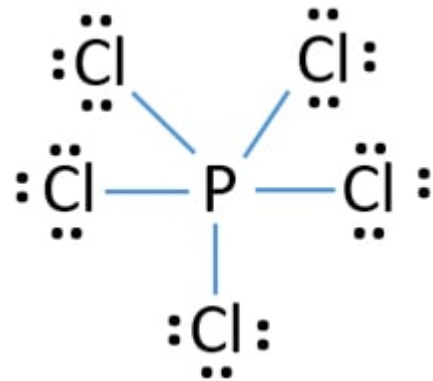
Pentacloruro de fósforo (PCl_5)

Átomos libres



e- de valencia:
 $\text{P}: 3s^2 3p^3 \rightarrow 5 \text{ e-}$
 $\text{Cl}: 3s^2 3p^5 \rightarrow 7 \text{ e-}$
 $5 + 5(7) = 40 \text{ e-}$

Molécula

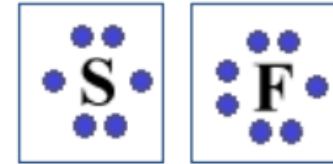


Confirmado:
 5 enlaces simples (5×2)
 15 pares libres (15×2)
 40 e- de valencia

**El P no cumple con la
REGLA DEL OCTETO**

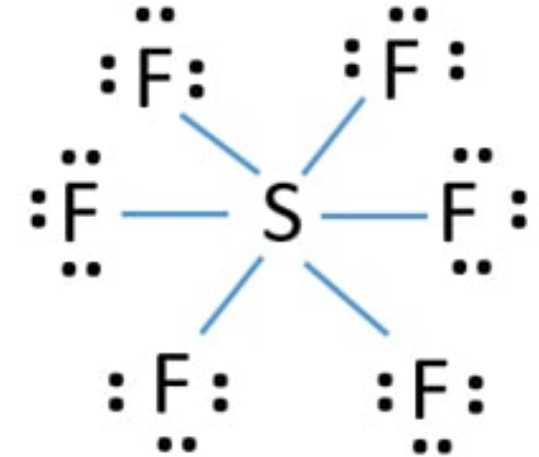
Hexafluoruro de azufre (SF_6)

Átomos libres



e- de valencia:
 $\text{S}: 3s^2 3p^4 \rightarrow 6 \text{ e-}$
 $\text{F}: 2s^2 2p^5 \rightarrow 7 \text{ e-}$
 $6 + 6(7) = 48 \text{ e-}$

Molécula



Confirmado:
 6 enlaces simples (6×2)
 18 pares libres (18×2)
 48 e- de valencia

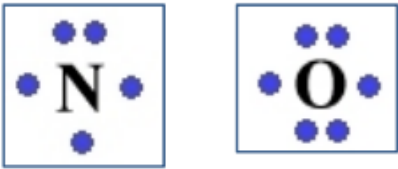
**El S no cumple con la
REGLA DEL OCTETO**

3

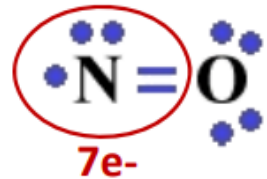
Moléculas con número impar de electrones

Monóxido de nitrógeno (NO)

Átomos libres



Molécula



e- de valencia:

$$\text{N}(5) 2s^2 2p^3 \text{ y } \text{O}(6) 2s^2 2p^4 = 5+6 = \mathbf{11}$$

Confirmando:

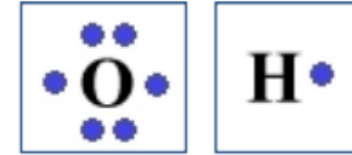
$$1 \text{ enlace doble } (1 \times 4) + 3 \text{ pares libres } (3 \times 2) - 1e^- \text{ libre} = \mathbf{11} \text{ electrones de valencia}$$

El N no cumple con la regla del octeto

1 e- libre: radical libre

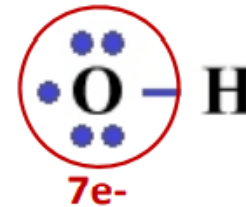
Radical hidroxilo (OH)

Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{O}(6) 2s^2 2p^4 \text{ y } \text{H}(1) 1s^1 = 5+1 = \mathbf{7}$$



Confirmando:

$$1 \text{ enlace simple } (1 \times 2) + 2 \text{ pares libres } (2 \times 2) - 1e^- \text{ libre} = \mathbf{7} \text{ electrones de valencia}$$

El O no cumple con la regla del octeto

1 e- libre: radical libre

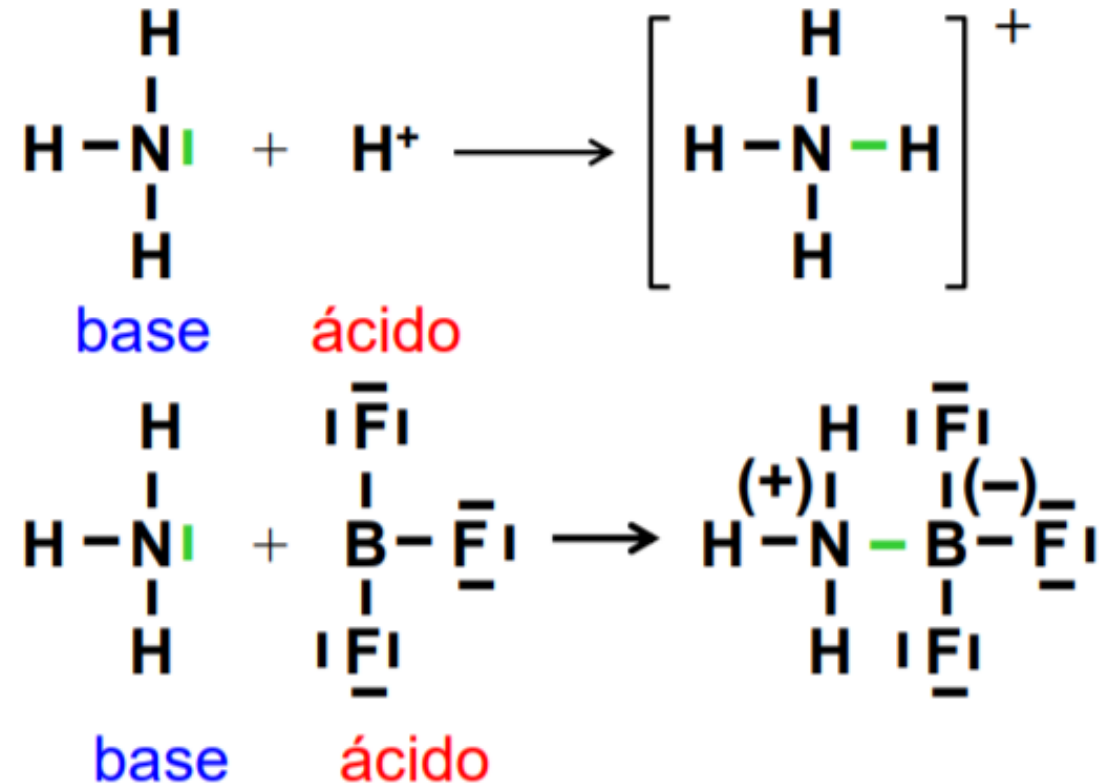
1

Teoría sencilla e intuitiva que, unida al concepto RPECV (Repulsión de Pares Electrónicos de la Capa de Valencia), permite explicar el enlace y predecir la geometría de muchas moléculas.

2

Generalización del concepto de ácidos y bases:

- Moléculas con uno o más **pares solitarios** son **bases**.
- Moléculas en las que algún átomo central tenga **octeto incompleto** son **ácidos**.



3

Incumplimiento de la Regla del Octeto.

- Especies con número impar de electrones
- Octeto deficiente en Be, B, Al
- Octeto expandido en elementos más pesados

4

Casos inexplicables.

- La molécula C_2 debería tener enlace cuádruple, pero no lo tiene:
- Energía enlaces: $O_2 < O_2^+$; pero $N_2 > N_2^+$ ¿Por qué?
- Existe la molécula H_2^+ . ¿Cómo es posible? (solo hay un electrón)
- La molécula de O_2 debe tener e- desapareados que expliquen su paramagnetismo.

