

ENLACE QUÍMICO

ENLACE IÓNICO

Los compuestos iónicos resultan normalmente de la reacción de un metal de bajo potencial de ionización, con un no metal. Los electrones se transfieren del metal al no metal, dando lugar a cationes y aniones, respectivamente. Estos se mantienen unidos por fuerzas electrostáticas fuertes llamadas enlaces iónicos.

NATURALEZA DEL ENLACE COVALENTE

El enlace de tipo covalente se produce entre elementos no metálicos, o no metálicos con el hidrógeno, es decir entre átomos de electronegatividades semejantes y altas en general. Se debe generalmente a la compartición de electrones entre los distintos átomos. En algunos casos puede darse un **enlace covalente coordinado o dativo**, en el que uno sólo de los átomos cede los dos electrones con que se forma el enlace.

ESTRUCTURAS DE LEWIS, REGLA DEL OCTETO.

Lewis fue uno de los primeros en intentar proponer una teoría para explicar el enlace covalente, por ello creo notaciones abreviadas para una descripción más fácil de las uniones atómicas, que fueron las estructuras de Lewis.

Regla del octeto: Cuando se forma un enlace químico los átomos reciben, ceden o comparten electrones de tal forma que **la capa más externa de cada átomo contenga ocho electrones**, y así adquiere la estructura electrónica del gas noble más cercano en el sistema periódico.

PROPIEDADES DE LOS ENLACES.

- Propiedades de las sustancias iónicas:
 - Las sustancias iónicas se encuentran en la naturaleza formando redes cristalinas, por tanto son sólidas.
 - Su dureza es bastante grande, y tienen por lo tanto puntos de fusión y ebullición altos.
 - Son solubles en disolventes polares como el agua.
 - Cuando se tratan de sustancias disueltas tienen una conductividad alta.
- Propiedades de los compuestos covalentes.
 - ◆ Los compuestos covalentes suelen presentarse en estado líquido o gaseoso aunque también pueden ser sólidos. Por lo tanto sus puntos de fusión y ebullición no son elevados.
 - ◆ La solubilidad de estos compuestos es elevada en disolventes polares, y nula su capacidad conductora.
 - ◆ Los sólidos covalentes macromoleculares, tienen altos puntos de fusión y ebullición, son duros, malos conductores y en general insolubles.
- ◆ Los enlaces metálicos:
 - ◇ Suelen ser sólidos a temperatura ambiente, excepto el mercurio, y sus puntos de fusión y ebullición varían notablemente.
 - ◇ Las conductividades térmicas y eléctricas son muy elevadas.
 - ◇ Presentan brillo metálico.
 - ◇ Son dúctiles y maleables.
 - ◇ Pueden emitir electrones cuando reciben energía en forma de calor.

ENLACE METÁLICO.

El enlace metálico es el que mantiene unido a los átomos de los metales entre sí. Estos átomos se agrupan de forma muy cercana unos a otros, lo que produce estructuras muy compactas. Se trata de redes tridimensionales muy compactas.

RESUMEN.

Los tres tipos de enlaces más frecuentes en las moléculas, son:

- ◇ Enlace iónico: que se suele dar entre un metal y un no metal. Y que da lugar a estructura de redes cristalinas.
- ◇ El enlace metálico, que se da entre dos metales.
- ◇ Y el enlace covalente, que se da entre dos no metales o no metal e hidrógeno. Este se suele representar a través de estructuras de Lewis, que cumplen la regla del octeto, aunque puede haber alguna excepción a dicha regla.

Teoría de Lewis.

Ideas básicas:

- ◇ Los electrones, especialmente los que están en la capa más externa (capa de valencia), juegan un papel fundamental en el enlace químico.
- ◇ En algunos casos se *transfieren* electrones de un átomo a otro, formándose iones positivos y negativos que se atraen entre sí mediante fuerzas electrostáticas denominadas **enlaces iónicos**.
- ◇ En otros casos se *comparten* entre los átomos uno o más pares de electrones, esta compartición de electrones se denomina **enlace covalente**.
- ◇ Los electrones se transfieren o se comparten de manera que los átomos adquieren una configuración electrónica especialmente estable. Generalmente se trata de una configuración de gas noble con ocho electrones más externos que constituyen un **octeto**.

Símbolos de Lewis y estructuras de Lewis.

Un **símbolo de Lewis** consiste de un símbolo químico que representa el núcleo y los electrones internos de un átomo, junto con puntos situados alrededor del símbolo representando a los electrones más externos (electrones de la capa de valencia). Así el símbolo de Lewis para el silicio que tiene la configuración $[\text{Ne}]3s^23p^2$ es:



para escribir los símbolos de Lewis se sitúan puntos solitarios en los lados del símbolo hasta un máximo de cuatro y luego se van pareando hasta formar un octeto. Los símbolos de Lewis se escriben habitualmente para los elementos de los grupos principales y en raras ocasiones para los elementos de transición.

Ejemplo1. Escritura de los símbolos de Lewis.

Escriba símbolos de Lewis para los siguientes elementos: a) N, P, As, Sb, Bi b) Al, I, Se, Ar.

Solución:	
◊ Éstos son elementos del grupo VA (15). Sus átomos tienen todos cinco electrones de valencia (ns^2np^3). Los símbolos de Lewis tienen cinco puntos:	$\cdot \ddot{\text{N}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{P}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{As}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{Sb}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{Bi}} \cdot$
◊ El Al está en el grupo IIIA (13); el I en el VIIA(17); el Se en el VIA(16) ; el Ar en el VIIIA (18)	$\cdot \text{Al} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{I}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{Se}} \cdot$ $\cdot \ddot{\text{Ar}} \cdot$

Para los elementos de los grupos principales el número de electrones de valencia y por ende el número de puntos que aparecen en un símbolo de Lewis es igual al número del grupo en la tabla periódica.

Una **Estructura de Lewis** es una combinación de símbolos de Lewis que representa la transferencia o compartición de electrones en un enlace químico.

Consideraciones al momento de escribir estructuras de Lewis.

- Generalmente todos los electrones de una estructura de Lewis están apareados.
- Generalmente cada átomo adquiere como estructura externa un octeto de electrones. Sin embargo, el hidrógeno se limita a una capa externa de dos electrones(dueto)
- Algunas veces son necesarios enlaces covalentes dobles o triples. Los átomos C, N, O, P y S son los que más fácilmente forman enlaces covalentes múltiples.
- Determinar el esqueleto de una estructura, para ello considerar que: Los átomos de Hidrógeno son siempre átomos terminales y los átomos de carbono son casi siempre centrales.

Método para escribir estructuras de Lewis:

1.– Determine el número total de electrones de valencia para la molécula, sumando el número de electrones de valencia (igual al número de grupo) para cada átomo. Si escribe la fórmula para de Lewis de un anión poliatómico, *adicione* el número de cargas negativas a este total.(Para CO_3^{2-} adicione dos porque la carga $2-$ indica que hay dos electrones más de los electrones proporcionados por los átomos neutros). Para un catión poliatómico, *reste* el número de cargas positivas del total.(Para NH_4^+ se resta 1).

2.– Identifique el átomo o átomos centrales. Suele tratarse del átomo con la menor electronegatividad. El Hidrógeno, sin embargo, nunca es un átomo central.

3.– Escriba el esqueleto de la estructura básica y una los átomos mediante enlaces covalentes simples.

4.- Por cada enlace simple formado, reste dos electrones del número total de electrones de valencia.

5.- Con los electrones de valencia restantes complete primero los octetos de los átomos terminales y después complete, en la medida posible, los octetos del átomo o átomos centrales.

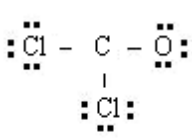
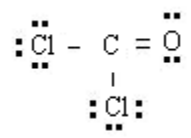
6.- Si al átomo o átomos centrales les falta un octeto, formar enlaces covalentes múltiples transformando electrones de pares no enlazados de los átomos adyacentes en pares de electrones enlazantes.

Ejemplo2. Aplicación del método general para escribir una estructura de Lewis.

El cloruro de carbonilo o fosgeno, COCl_2 , es un gas sumamente tóxico empleado como materia prima para la preparación de plásticos de poliuretano. ¿Cuál es la fórmula de Lejía para el COCl_2 ?

Solución:

El número de electrones de valencia de un átomo es igual al número de grupo: 4 para C, 6 para O y 7 para cada Cl, se tiene un total de 24 electrones. Se espera que la estructura básica tenga el C como átomo central, (es el menos electronegativo de los tres átomos), con los átomos de O y Cl (más electronegativos) enlazados a él. Después de unir los átomos por pares de electrones y distribuir los electrones entre los átomos exteriores, se tiene

	La estructura tiene los 24 electrones de valencia, pero, deja al carbono con 6 electrones solamente, y este no cumple octeto. Si mueve un par de electrones del átomo de O para dar un doble enlace carbono oxígeno, la estructura de Lewis del COCl_2 es	
		Cada átomo tiene octeto

Ejemplo3. Escritura de la fórmula de Lewis de una especie iónica. *Obtenga la estructura de Lewis del ion BF_4^- .*

Solución:

El total de electrones de valencia proporcionados por el boro y cuatro átomos de flúor es $3 + (4 \times 7) = 31$. Como el enión tiene una carga 1^- , tiene un electrón más que los proporcionados por los átomos neutros.. Así, el número total de electrones de valencia de valencia es 32 (o 16 pares de electrones). Como el boro es el elemento menos electronegativo, es el átomo central, con los átomos de F enlazados a él. Después de conectar el B y los átomos de F por pares de electrones, y luego completar los octetos de cada átomo de F con los electrones restantes se tiene:

$\left[\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{F}}-\text{B}-\ddot{\text{F}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \end{array} \right]^{-}$	La carga del ion, se indica por el signo menos como superíndice del paréntesis cuadrado que encierra la estructura de Lewis.
--	--

Ejemplo 4. Escritura de las estructuras de Lewis de compuestos iónicos.

Escriba la estructura de Lewis para el óxido de bario, BaO.

Solución: Escriba el símbolo de Lewis y determine cuántos electrones debe ganar o perder cada átomo para adquirir la configuración de un gas noble. El Ba ([Xe] 6s ²) pierde los dos electrones 6s y el O ([He] 2s ² 2p ⁴) gana dos electrones quedando con configuración [He] 2s ² 2p ⁶ .	
Símbolos de Lewis Estructura de Lewis	Símbolos de Lewis Estructura de Lewis El cloruro de sodio (la sal de mesa) es un ejemplo de enlace iónico: en él se combinan sodio, Na ([Ne] 3s ¹) y cloro, Cl ([Ne] 3s ² 3p ⁵), perdiendo el primero un electrón que es capturado por el segundo: NaCl Na ⁺ Cl ⁻ . La diferencia entre las cargas de los iones provoca entonces la fuerza de atracción electrostática que los mantiene unidos.

En solución, los enlaces iónicos pueden romperse y se considera entonces que los iones están disociados. Es por eso que una solución fisiológica de cloruro de sodio y agua se marca como "Na⁺ + Cl⁻" mientras que los cristales de cloruro de sodio se marcan "Na⁺Cl⁻" o simplemente "NaCl".

Con excepción de pares iónicos como (Na + Cl⁻) que pueden encontrarse en fase gaseosa, las unidades fórmula de los compuestos iónicos no existen como entidades separadas, sino que cada catión está rodeado por aniones y cada anión por cationes. Estos iones, en número muy grande, se disponen en redes ordenadas denominadas *cristales iónicos*.

Enlace covalente simple, doble y triple

La compartición de un par de electrones entre átomos enlazados da lugar a un enlace covalente simple.	Par enlazante $\text{H}\cdot + \cdot\text{H} \longrightarrow \text{H}:\text{H}$ Formación de una molécula de H ₂
--	--

La compartición de dos pares de electrones entre átomos enlazados da lugar a un enlace covalente enlace covalente doble.	Dos pares enlazantes ! $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ :\ddot{\text{O}}\cdot \\ \cdot \end{array} + \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\ddot{\text{O}}: \\ \cdot \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ :\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}: \\ \cdot\cdot \end{array}$ Formación de una molécula de O₂
---	--

Cada átomo de O tiene 6 electrones, la única manera de que cada átomo cumpla octeto es que cada átomo comparta dos pares de electrones con el otro átomo, lo que da origen a un enlace covalente doble.

La compartición de tres pares de electrones entre átomos enlazados da lugar a un enlace covalente triple.	Tres pares enlazantes ! $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\ddot{\text{N}}\cdot \\ \cdot \end{array} + \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\ddot{\text{N}}\cdot \\ \cdot \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \text{N}:::\text{N} \\ \cdot\cdot \end{array}$ Formación de una molécula de N₂ El enlace covalente triple del N₂ es un enlace muy fuerte, difícil de romper en una reacción química. La excepcional fuerza de este enlace hace que el N₂ (g) sea bastante inerte. Debido a ello, el N₂ (g) coexiste con el O₂ en la atmósfera y solamente se forman óxidos de nitrógeno en cantidades de trazas a altas temperaturas. La falta de reactividad del N₂ hacia el O₂ es una condición esencial para la vida en la tierra.
--	--

Enlace covalente polar: enlace covalente en el que dos átomos no comparten por igual los electrones. En estos enlaces los electrones se desplazan hacia el elemento más electronegativo, generándose una separación de carga parcial, quedando el átomo más electronegativo con una carga parcial negativa(–) y el menos electronegativo con una carga parcial positiva (+).

A partir de los valores de electronegatividad, EN, se puede describir la polaridad de un enlace covalente. Para ello se utiliza la **diferencia de electronegatividad, EN**, que es el valor absoluto de la diferencia de los valores de EN en los átomos enlazados. Si el valor de EN de los dos átomos es muy pequeño, el enlace entre ellos es *esencialmente covalente*. Si EN, es grande, el enlace es *esencialmente iónico*. Para valores intermedios de EN, el enlace se considera covalente polar.

Ejemplo 5: Estimación de las diferencias de electronegatividad y de la polaridad de los enlaces.

¿Qué enlace es más polar, H –Cl o H –O?

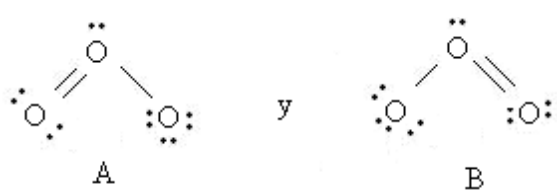
Solución:

$$\text{ENH} = 2,1 \quad \text{ENCl} = 3,0 \quad \text{ENO} = 3,5$$

$\text{ENH}-\text{Cl} = 3 - 2,1 = 0,9$ $\text{ENH}-\text{O} = 3,5 - 2,1 = 1,4$ El enlace H - O es más polar, porque existe una mayor diferencia de electronegatividad entre los átomos que comparten el par electrónico.

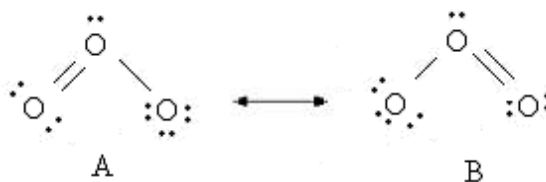
Enlace covalente coordinado: El par electrónico compartido es aportado sólo por uno de los átomos. El átomo que aporta el par electrónico se denomina dador y el que lo recibe aceptor.	Formación del ion amonio
--	--------------------------

RESONANCIA.

Hasta el momento hemos considerado que los pares de electrones enlazantes se localizan entre los dos átomos. Para algunas moléculas, los datos experimentales referidos a longitudes de enlace, no se ajustan a la estructura de Lewis escrita. Por ejemplo, para la molécula de ozono, O_3 , podemos escribir las siguientes estructuras de Lewis.	
--	---

En la fórmula A, el enlace oxígeno-oxígeno a la izquierda es un doble enlace y en la unión oxígeno-oxígeno a la derecha es un enlace simple. En la estructura B, la situación es exactamente la opuesta.

Pero experimentalmente se encuentra que en el O_3 , las distancias oxígeno - oxígeno son idénticas, y corresponden a una longitud de enlace de 127,8 pm; la cual es menor a la de un enlace simple y mayor a la de un enlace doble. Los enlaces en el ozono son enlaces intermedios entre un enlace simple y un enlace doble. La estructura de Lewis para el O_3 , es un *híbrido de resonancia* de las posibles estructuras contribuyentes. Las estructuras aceptables que contribuyen al híbrido de resonancia deben tener todas el mismo esqueleto, solamente pueden diferir en la distribución de los electrones dentro de la estructura, así la estructura de Lewis para el O_3 , queda representada por



Donde la flecha , indica que la estructura real de la molécula está compuesta de estas fórmulas de resonancia.

Excepciones a la regla del octeto

Algunas moléculas como el NO, tienen un número impar de electrones, y no se puede satisfacer la regla del octeto. Otras excepciones caen en dos grupos: a) moléculas con un átomo que tiene menos de ocho electrones (octeto incompleto) alrededor de él y b) moléculas en que un átomo tiene más de ocho electrones a su alrededor (octeto expandido).

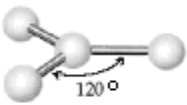
a) Las moléculas con octeto incompleto contienen principalmente átomos del grupo IIA, BeCl_2 y IIIA, BF_3 .

◊ Las moléculas que presentan como átomo central a elementos del tercer período en adelante, pueden presentar octetos expandidos, porque además de los orbitales ns, np, disponen de orbitales nd que no están llenos, los cuales pueden usar para enlazarse. Por ejemplo el fósforo, P, tiene una configuración de capa de valencia $3s^2 3p^3$. Al usar sólo estos orbitales 3s y 3p, el átomo de fósforo puede aceptar solamente 3 electrones adicionales, y formar tres enlaces covalentes, como en el PF_3 . Sin embargo, se pueden formar más enlaces si se utilizan los orbitales 3d vacíos del átomo, como el PCl_5 .

Geometría molecular y teoría del enlace químico

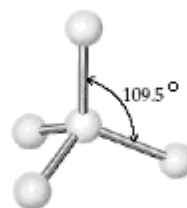
La geometría molecular es la forma de una molécula determinada por las posiciones relativas de los núcleos atómicos.

Teoría de la repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (RPCV) *predice las formas de las moléculas y los iones en los cuales los pares de electrones en la capa de valencia están acomodados alrededor del átomo , de modo que los pares electrónicos se conservan tan lejos como pueden uno del otro, minimizando así las repulsiones entre ellos.*

Por ejemplo, si hay solo dos pares de electrones en la capa de valencia de un átomo, estos pares tienden a estar en los lados opuestos del núcleo , así se minimiza la repulsión. Esto da una <i>disposición lineal</i> de los pares electrónicos ; es decir los pares electrónicos ocupan principalmente regiones del espacio a un ángulo de 180° uno del otro.	
Si hay tres pares electrónicos en la capa de valencia de un átomo, tienden a estar acomodados en un plano, dirigidos hacia los vértices de un triángulo de lados iguales(triángulo equilátero). Esta acomodación es <i>plana trigonal</i>, en la cual las regiones del espacio ocupadas por pares electrónicos están dirigidas en	

ángulos de 120° uno respecto del otro.

Cuatro pares electrónicos en la capa de valencia de un átomo tienden a tener una disposición *tetraédrica*. Esto es, si se imagina al átomo en el centro de un tetraedro regular, cada región del espacio en el cual queda principalmente un par de electrones se extiende a los vértices del tetraedro, quedando cada par electrónico uno respecto a otro a 109,5°.



Para predecir las posiciones relativas de los átomos alrededor de un átomo dado, empleando la teoría RPCV, primero se debe considerar la acomodación de los pares electrónicos de la capa de valencia alrededor del átomo central. Alguno de estos pares electrónicos son pares enlazantes y otros, pares no enlazados. La dirección en el espacio de los pares enlazantes *da* la geometría a la molecular.

Pares de electrones			Notación RPCV	Geometría molecular	Ángulos de enlace	Ejemplo	
Total	De enlace	Solitarios					
2	2	0	AX2	X __A __X Lineal	180°	BeCl2 Cl _Be_Cl	
3	3	0	AX3	 Plana trigonal	120°	BF3 	
		2	1	AX2E	 Angular	120°	SO2
	4	4	0	AX4	 tetraédrica	109,5°	CH4
		3	1	AX3E	 	107°	NH3

					Piramidal trigonal		
		2	2	AX2E2	 Angular	105°	 H2O

Ejemplo: Predicción de la geometría de una molécula con enlace múltiple. A partir de la teoría RPECV. :**Prediga la geometría molecular del formaldehído, H₂CO, compuesto utilizado para preparar polímeros como las resinas de melamina.**

Solución:

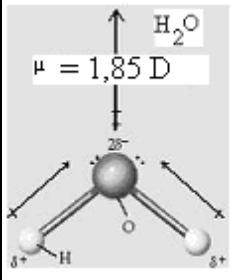
La estructura de Lewis tiene un total de 12 electrones de valencia y un átomo central de C. Uniendo los átomos de hidrógeno y oxígeno al átomo central y verificando que carbono y oxígeno cumplan octeto (el hidrógeno cumple dueto) se tiene	
---	--

Hay tres grupos de electrones en torno al átomo de C, dos grupos en los enlaces simples carbono – hidrógeno y el tercero en el enlace doble carbono – oxígeno. La geometría de grupos de electrones para tres grupos de electrones es *trigonal plana*. Como todos los grupos de electrones participan en enlaces, la notación RPECV para esta molécula es AX3. La geometría molecular es también trigonal plana.

Momento dipolar y geometría molecular

El momento dipolar es una medida cuantitativa del grado de separación de cargas en una molécula. La polaridad de un enlace, por ejemplo en HCl, se caracteriza por una separación de cargas eléctricas. Esto se puede representar indicando las cargas parciales + y - en los átomos.	
Cualquier molécula que tiene una separación neta de carga, como el HCl, tiene un momento dipolar distinto de cero y por lo tanto es una molécula polar.	

Se puede relacionar la presencia o ausencia de un momento dipolar en una molécula con su geometría molecular. Por ejemplo, la molécula de CO ₂ . Cada enlace carbono – oxígeno, tiene una polaridad en la cual el átomo de oxígeno más electronegativo tiene una carga negativa parcial.	
Se representa la contribución al momento dipolar de cada enlace (enlace dipolo) por una flecha con un signo positivo en un extremo , $\rightarrow$, . La flecha del momento dipolar apunta desde la carga parcial positiva hacia la carga	
	Cada enlace dipolo, como una fuerza, es una cantidad vectorial; esto es, tiene magnitud y dirección. Como las fuerzas, dos enlaces dipolo de magnitud igual pero de dirección opuesta se cancelan

parcial negativa. Así, se puede describir la fórmula para el CO ₂ como	entre sí. Debido a que los dos enlaces carbono – oxígeno en CO ₂ son iguales, pero en direcciones opuestas, dan un momento dipolar neto de cero para la molécula.
	La molécula de H₂O es una molécula polar, tiene un momento dipolar distinto de cero. El hecho de que la molécula de agua tenga un momento dipolar distinto de cero es una evidencia experimental excelente para la geometría angular. Si la molécula de H₂O fuera lineal, el momento dipolar sería cero.
Aquellas moléculas AX_n (donde todos los átomos X son idénticos, como en el CCl₄) en cuyas geometrías los enlaces A – X están dirigidos simétricamente alrededor del átomo central (por ejemplo, lineal, plana trigonal y tetraédrica) dan moléculas de momento dipolar cero; esto es, las moléculas <i>son no polares</i>.	