ENLACE QUÍMICO

Química 2.º Bach

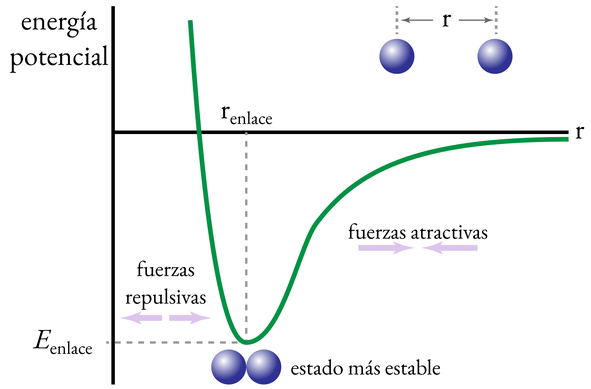
Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa

Regla del octeto

*La **configuración más estable** para cualquier átomo es contar con **ocho electrones** en la **capa exterior**.*

Los elementos tenderán a **unirse** para completar su capa exterior, **intercambiando** (cediendo/captando → enlace **iónico**) o **compartiendo electrones** (enlace **covalente**), y así **ganar estabilidad**.

Parámetros moleculares



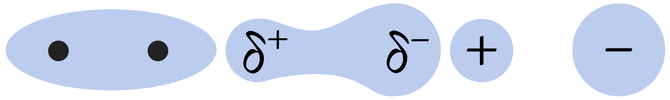
Potencial de Morse: representa la energía frente a la distancia entre átomos. Según estos se van aproximando, se ponen de manifiesto fuerzas atractivas, pero si se acercan demasiado actúan fuerzas repulsivas. Traducida y adaptada de `https://ch301.cm.utexas.edu/section2.php?target=atomic/bonding/covalent-bonding.html`.

Energía de enlace Es la energía desprendida al formar el enlace desde la separación *infinita* hasta alcanzar la longitud de enlace. Es una medida de la FORTALEZA de un ENLACE QUÍMICO (cuanto mayor sea esta energía, más fuerte será el enlace).

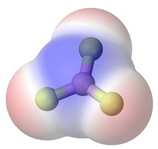
Longitud de enlace Distancia media entre los núcleos de dos átomos enlazados. Se trata de la distancia óptima en la que la atracción es máxima y la repulsión mínima.

Ángulo de enlace Ángulo formado por tres átomos enlazados consecutivamente.

Polaridad de enlace Es la separación de cargas eléctricas a lo largo de un enlace, dando lugar a un MOMENTO DIPOLAR ELÉCTRICO. La diferencia de electronegatividad, $\Delta\chi$, entre los átomos de un enlace permite estimar su POLARIDAD:

	$\Delta\chi \lesssim 0.5$	$0.5 \lesssim \Delta\chi \lesssim 2$	$\Delta\chi \gtrsim 2$
	APOLAR	POLAR	IÓNICO
ENLACE			

Una molécula será polar si el momento dipolar total (suma vectorial) es distinto de cero.



La molécula de BF_3 tiene tres enlaces polares pero debido a su geometría trigonal plana el momento dipolar resultante es nulo.
Fuente: `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boron-trifluoride-elpot-3D-vdW.png`.

Enlace iónico

Es un enlace que involucra la **atracción electrostática** entre **iones** de **signo opuesto**.

El **enlace iónico** suele darse **entre metales** (tienden a ceder electrones, convirtiéndose en cationes) **y no metales** (tienden a captar electrones, convirtiéndose en aniones).

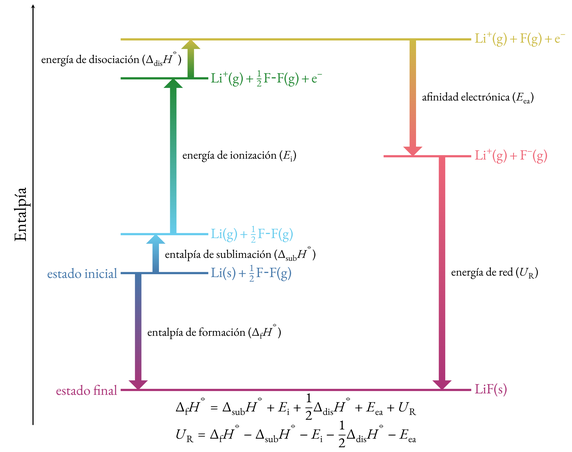
Cada ion tiende a rodearse de un número determinado de iones de signo opuesto (**número de coordinación**). Se forman así **redes cristalinas** compactas y **neutras** con diferentes geometrías según el tipo de iones que las forman.



Energía de red o energía reticular U_R

Es la ENERGÍA LIBERADA (proceso exotérmico) al FORMAR la RED a partir de sus iones en estado gaseoso. Cuanto mayor sea su valor más estable es la red y mayor será el punto de fusión y menor su solubilidad.

Ciclo de Born-Haber Formación de un compuesto iónico a partir de sus elementos.



Ciclo de Born-Haber para la formación de un mol de fluoruro de litio (LiF).
Cada energía tendrá su signo según sea desprendida (< 0) o absorbida (> 0).
Basada en `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Born-haber_cycle_LiF.svg`.

Ecuación de Born-Landé Permite calcular la ENERGÍA DE RED U_R:

$$U_R = -\frac{N_A M z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right) \propto -\frac{z^+ z^-}{r_0},$$

donde $N_A = 6{,}022 \times 10^{23}\ \text{mol}^{-1}$ es la constante de Avogadro; M es la constante de Madelung, relacionada con la geometría del cristal; z^+ y z^- son los números de carga del catión y del anión, respectivamente; $e = 1{,}6 \times 10^{-19}$ C es la carga elemental, $\epsilon_0 = 8{,}85 \times 10^{-12}\ \text{C}^2\ \text{N}^{-1}\ \text{m}^{-2}$ es la permitividad eléctrica del vacío; r_0 es la distancia al ion más cercano; y $5 < n < 12$ es el exponente de Born (experimental).

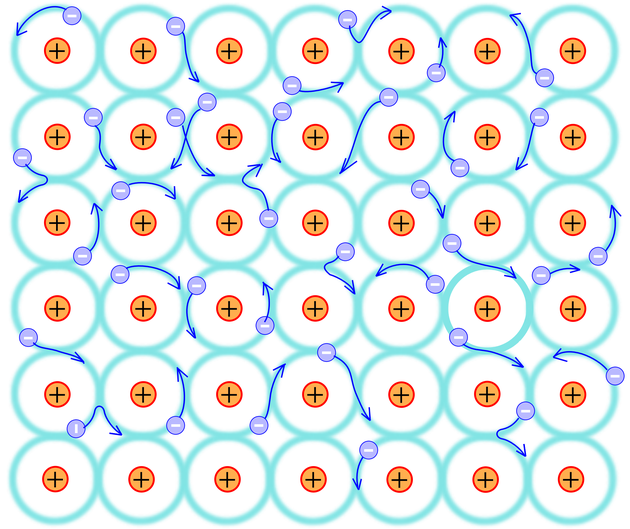
Propiedades de las sustancias iónicas

- Debido a las **intensas fuerzas electrostáticas** entre los iones, suelen tener **temperaturas** de **fusión** y **ebullición** muy **elevadas**, por lo que la mayoría son **sólidos cristalinos** a **temperatura ambiente**.
- Ante **golpes**, el **alineamiento** de los **iones** positivos y negativos **puede perderse**, por lo que son muy **frágiles**, aunque también muy **duros**.
- Son **solubles en disolventes polares** (serán más solubles cuanto menor sea U_R).
- **Fundidos** o en **disolución**, **conducen** la **corriente eléctrica**.

Enlace metálico

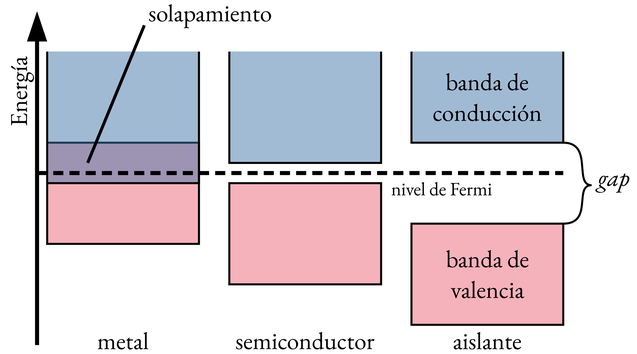
El **enlace metálico** es el enlace químico que **mantiene unidos** a los **átomos** de un **metal** entre sí. Surge de la **atracción electrostática** entre los **electrones** de conducción y los **cationes** metálicos.

Modelo del gas electrónico



Modelo del **gas electrónico**, con los **cationes** en **posiciones fijas** y los **electrones moviéndose libremente** en una ***nube***. Fuente: `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metalic_bond_model.svg`.

Teoría de bandas



Comparación de la **estructura** de **bandas** electrónicas de un **metal**, un **semiconductor** y un **aislante**.
Traducida y adaptada de `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg`.

Propiedades de las sustancias metálicas

- **Apariencia brillante**.
- Son **buenos conductores** del **calor** y de la **electricidad**.
- Forman **aleaciones** con otros metales.
- **Tienden** a **ceder** (perder) **electrones** al reaccionar con otras sustancias.
- La mayoría son **sólidos** a temperatura ambiente (**Hg** es 💧).

Esta obra está bajo una Licencia de Creative Commons Reconocimiento-CompartirIgual 4.0 Internacional.

ENLACE QUÍMICO

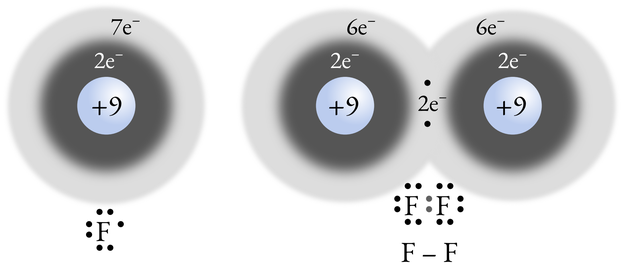
Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa

Enlace covalente

Es un enlace químico que implica la **compartición** de **pares** de **electrones** entre átomos.

El **enlace covalente** suele darse **entre no metales** (tendencia a captar electrones).



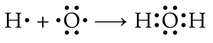
Representación de la **unión covalente** entre dos átomos de **flúor** (F) para formar F_2, con un par de electrones compartidos. Adaptada de `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent_bond_fluorine.svg`.

Estructuras de Lewis

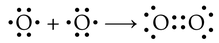
Se trata de **diagramas** que **muestran** la **unión** entre los **átomos** de una **molécula** y los **pares solitarios** de **electrones** que pueden existir en la molécula.

Ejemplos

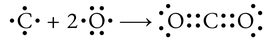
Agua (H_2O)



Oxígeno (O_2)



Dióxido de carbono (CO_2)



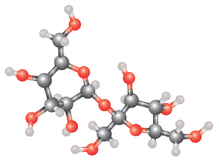
Resonancia

La RESONANCIA es una forma de describir el enlace en ciertas moléculas mediante la combinación de varias ESTRUCTURAS RESONANTES cuyo conjunto se conoce como un HÍBRIDO de RESONANCIA. Es especialmente útil para describir los ELECTRONES DESLOCALIZADOS (enlaces = en distintas posiciones) en ciertas moléculas o iones poliatómicos.



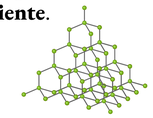
Propiedades de las sustancias covalentes moleculares

- Debido a las **débiles interacciones entre moléculas** covalentes, suelen tener **temperaturas** de **fusión** y **ebullición bajas** (muchos compuestos covalentes son **líquidos** o **gases** a **temperatura ambiente**).
- Son **solubles** en **disolventes polares y apolares**.
- En estado **sólido** son compuestos **blandos** y **frágiles**.
- Son **malos conductores** del **calor** y de la **electricidad**.



Propiedades de las sustancias covalentes cristalinas

- Debido a los f**uertes enlaces covalentes** entre los átomos, suelen tener **temperaturas** de **fusión** y **ebullición altas**, por lo que son **sólidos** a **temperatura ambiente**.
- Son sustancias muy **duras** aunque **frágiles**.
- Son **insolubles**.
- Suelen ser **malos conductores** (no así el grafito o el grafeno).



Geometría molecular

TRPECV

La TEORÍA DE REPULSIÓN DE PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA (TRPECV) se basa en que, como los electrones de valencia se repelen unos a otros, estos tienden a adoptar una disposición espacial que minimiza dicha repulsión.

DENSIDADES ELECTRÓNICAS	NÚMERO DE PARES SOLITARIOS (EN AMARILLO)			
	0	1	2	3
2	 Lineal, 180°			
3	 Trigonal plana, 120°	 Angular, < 120°		
4	 Tetraédrica, 109.5°	 Piramidal trigonal, < 109.5°	 Angular, < 109.5°	 Lineal, 180°
5	 Bipiramidal trigonal	 Balancín	 Forma de T	 Lineal, 180°
6	 Octaédrica	 Piramidal cuadrada	 Cuadrada plana	

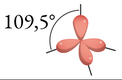
Partiendo de las estructuras de Lewis, se determinan las DENSIDADES ELECTRÓNICAS o direcciones de enlace, teniendo en cuenta que, para ver la repulsión, tanto los enlaces sencillos, dobles y triples así como los pares solitarios afectan como una única densidad electrónica (dirección de enlace).

TEV/Hibridación

Según la TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (TEV) un enlace covalente se forma cuando dos orbitales con electrones desapareados se solapan y comparten un par electrónico.

SOLAPAMIENTO	ENLACE	ORBITALES		
Frontal (orbitales enfrentados)	σ (sencillo)	 s + s	 s + p	 p + p
Lateral (orbitales paralelos)	π (múltiple)	 p + p		

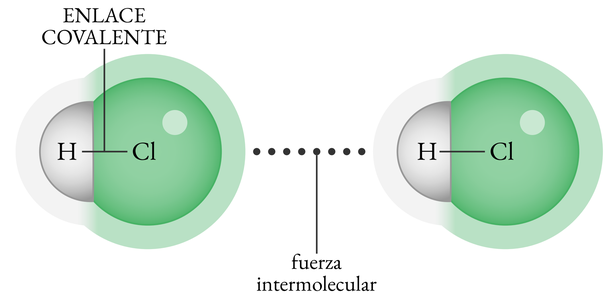
La HIBRIDACIÓN consiste en combinar orbitales atómicos del átomo central para formar ORBITALES HÍBRIDOS energéticamente iguales y orientados en la dirección del enlace.

	HIBRIDACIÓN sp	HIBRIDACIÓN sp^2	HIBRIDACIÓN sp^3
ORBITALES ATÓMICOS	s + p (2)	s + p + p (3)	s + p + p + p (4)
ORBITALES HÍBRIDOS	 180°	 120°	 109,5°
GEOMETRÍA (EJEMPLO)	Lineal ($BeCl_2$)	Trigonal plana (BF_3)	Tetraédrica (CH_4)

Fuerzas intermoleculares

Las **fuerzas intermoleculares** son las **fuerzas** que existen **entre** las **moléculas**, incluyendo las fuerzas de atracción o repulsión que actúan entre las moléculas y otros tipos de partículas vecinas, por ejemplo, átomos o iones. Las fuerzas intermoleculares son **débiles en relación con** las **fuerzas intramoleculares** (las que mantienen unida una molécula). Son además **responsables** del **estado de agregación**, ya que su fortaleza está relacionada con las temperaturas de fusión y ebullición de la sustancia.

Fuerzas de van der Waals



Atracción intermolecular entre moléculas de **cloruro de hidrógeno**, HCl. Traducida y adaptada de `https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/`.

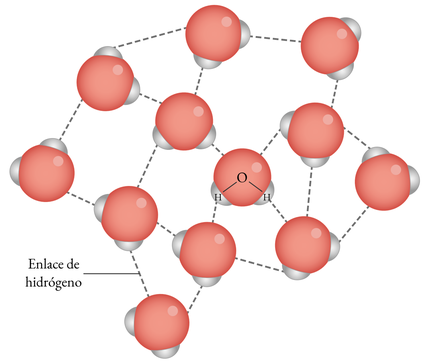
Se pueden dar entre **moléculas polares** (dipolo-dipolo, más fuertes cuanto mayor sea la polaridad de la molécula), y **apolares** (llamadas **fuerzas** de **dispersión** de **London**, más fuertes cuanto más grandes y masivas son las moléculas involucradas).

Enlaces de hidrógeno

Son las **fuerzas** intermoleculares más **intensas**. Se dan entre moléculas que contienen átomos de **hidrógeno** unidos a átomos de **nitrógeno** (N), **oxígeno** (O) o **flúor** (F).

Los **enlaces** de **hidrógeno** son **responsables** de:

- Que el **agua** (H_2O) tenga una **temperatura** de **ebullición anormalmente alta** (100 °C a presión atmosférica).
- La **estructura** de **proteínas** y **ácidos nucleicos**, como la **doble hélice** del **ADN**.
- La **estructura** de **polímeros**.



Enlaces de hidrógeno entre átomos de H y O en moléculas de **agua** (H_2O). Traducida y adaptada de `https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/`.

cristal covalente (grafito)	>	sólido metálico (Ti)	>	cristal iónico (NaCl)	>	enlaces de H (H_2O)	>	dipolo-dipolo (CO)	>	London (Ne)
> 3600 °C		1668 °C		801 °C		0 °C		−205 °C		−248,4 °C

Mayor fortaleza, temperaturas de fusión y ebullición más elevadas

Esta obra está bajo una Licencia de Creative Commons Reconocimiento-CompartirIgual 4.0 Internacional.