

A decorative graphic on the left side of the slide features several thin, curved black lines that appear to be part of a plant or abstract design. A grey arrow-shaped graphic points to the right, partially overlapping the lines.

Enlace químico

ELECTRONEGATIVIDAD

ELECTRONES DE VALENCIA

ESTRUCTURAS DE LEWIS

GEOMETRÍA DE PAR DE ELECTRONES

GEOMETRÍA MOLECULAR

TEORÍA DE ENLACE DE VALENCIA

MOMENTO DIPOLAR

Enlace químico

Fuerza que resulta de la interacción a nivel microscópico entre dos o más átomos, y los mantiene unidos.

Tipos de enlace más importantes:

- Iónico
- Covalente
- Metálico

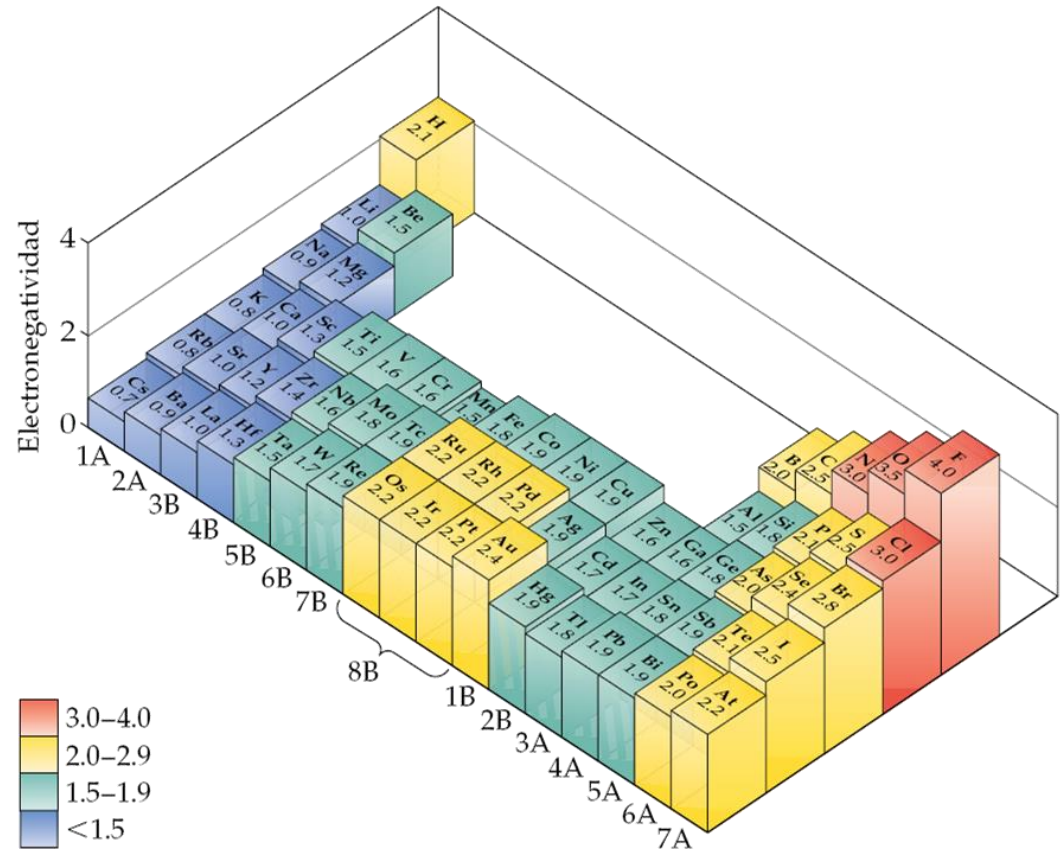
Longitud de enlace: es la distancia entre los núcleos de dos átomos enlazados.

Ángulo de enlace: es el ángulo formado entre dos núcleos unidos a un tercero.

Propiedades periódicas: electronegatividad

Es una medida de con cuánta fuerza un átomo atrae hacia sí los electrones compartidos en un enlace. Sirve para estimar si ese enlace será covalente polar, no polar, o iónico.

En general, aumenta hacia la derecha en un período, y disminuye al bajar en un grupo.



Electrones de valencia

Son los electrones “externos”, que exceden la configuración electrónica del anterior gas noble. Para el caso del H, éste tiene 1 electrón de valencia.

Ej.:

Cl: $[\text{Ne}]3s^23p^5$ → 7 electrones de valencia

El número de e de valencia coincide con el grupo de la tabla periódica.

Octeto

Los gases nobles (a excepción del He) tienen 8 e de valencia; se dice que tienen el octeto completo, y es la configuración más estable. El resto de los elementos “buscan” completar el octeto enlazándose con otros átomos. Mediante enlace covalente, se comparte un par de electrones (enlace simple), dos pares (enlace doble), etc.

A tener en cuenta:

- H busca completar el dueto (2 e).
- C, N, O y F siempre deben completar el octeto.
- Los elementos de número atómico menor al C pueden no completar el octeto.
- Los elementos de número atómico mayor al F pueden expandir el octeto, es decir, encontrarse enlazados a más de cuatro átomos.

Símbolos de Lewis

Al símbolo del elemento se le colocan alrededor, en forma de puntos, la cantidad de e de valencia que tiene:



Estructuras de Lewis

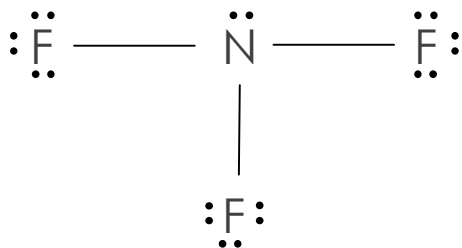
Son un primer paso para definir la geometría molecular de una sustancia.

1. Se cuenta el total de e de valencia, sumando los de cada átomo, y considerando su multiplicidad. Si la molécula tiene carga, se suman o restan electrones, según corresponda.
2. Se une el átomo central a los átomos periféricos por un enlace simple (se utiliza un par de e para cada enlace).
3. Los e restantes se colocan sobre los átomos periféricos hasta completar el octeto de los mismos. En caso de sobrar, se agregan sobre el átomo central.
4. Se buscan estructuras resonantes (son estructuras alternativas que pueden existir o no; en caso de existir, veremos reglas para elegir la más estable o contribuyente).

Ej.:



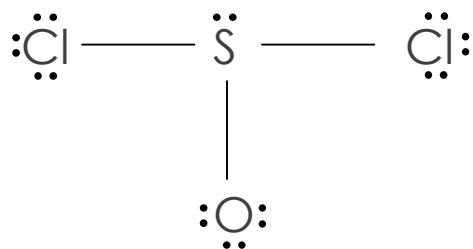
e valencia totales = 26



No existen estructuras resonantes, ya que la adición de un doble o triple enlace significaría una expansión de octeto, no habilitada para N ni para F.

Los pares de e que no participan en el enlace se llaman *par de electrones no enlazantes*.

Ej.: SOCl_2 , con el S como átomo central
 26 e de valencia en total



¿Qué otras estructuras pueden darse?

Estructura más contribuyente

Carga formal:

Es un método de conteo que da una idea acerca de la densidad electrónica sobre determinado átomo. La suma de las cargas formales de todos los átomos debe ser igual a la carga neta de la molécula.

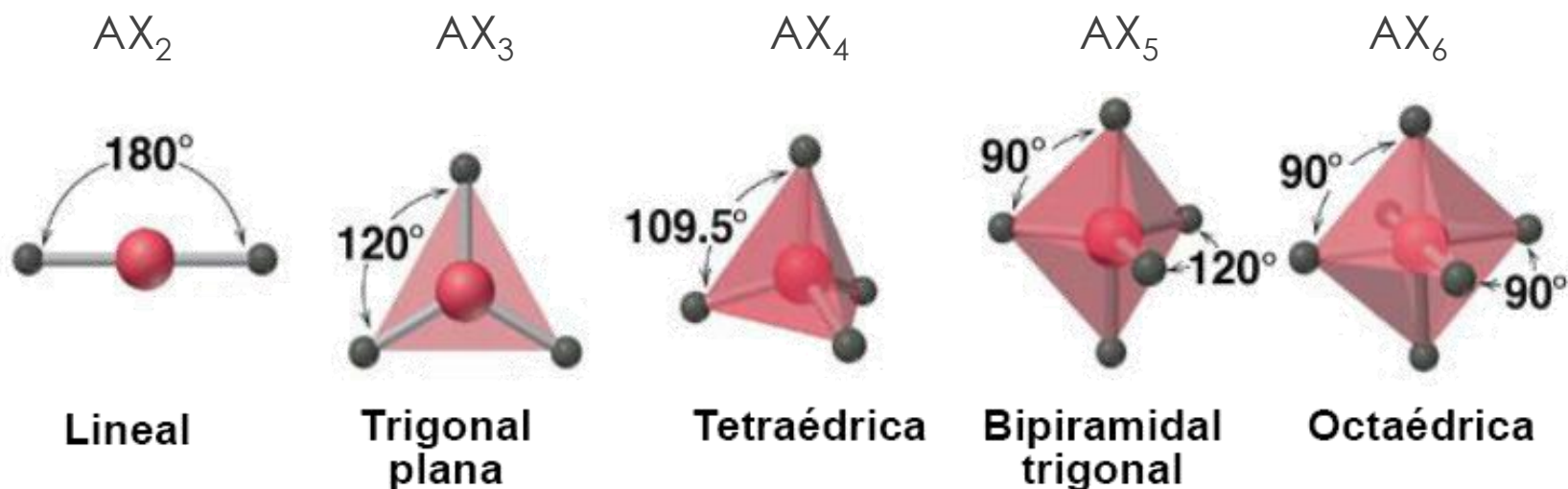
$$CF = e_{\text{valencia}} - n^{\circ} \text{ de enlaces} - e_{\text{no enlazantes}}$$

Para hallar la estructura más contribuyente:

1. Los octetos de C, N, O y F deben estar completos.
2. Deben minimizarse las cargas formales (en lo posible que todas sean cero).
3. En caso de existir CF distintas de cero, las negativas deben localizarse sobre los átomos más electronegativos y viceversa.

Forma molecular

De forma general, una molécula puede anotarse como AX_mE_n , donde A es el átomo central, X los átomos periféricos y E los pares de electrones no enlazantes. Cuando $n = 0$, existen 6 estructuras principales que la molécula puede adoptar:



Geometría de par de electrones



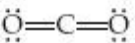

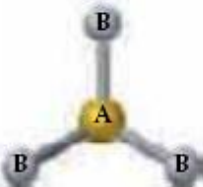
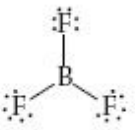
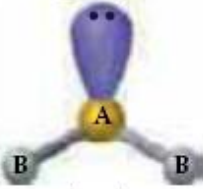
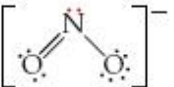

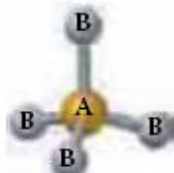
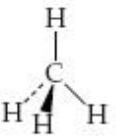
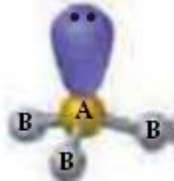
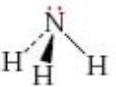
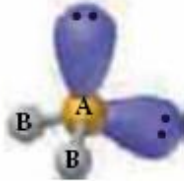

Conociendo la estructura de Lewis más contribuyente, conozco la fórmula AX_mE_n .


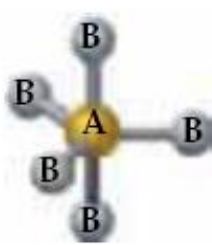
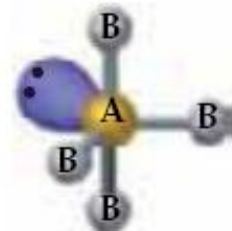
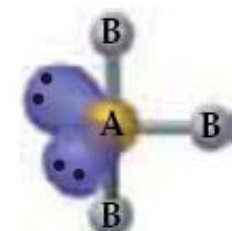
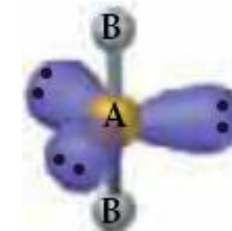
Para determinar la geometría de par de electrones (GPE) simplemente considero a los pares de electrones no enlazantes que pudiera tener el átomo central, como si fuesen átomos periféricos. De esta forma, la fórmula general se convierte en AX_{m+n} , y por tanto ésta será la GPE (lineal, trigonal plana, tetraédrica, etc.)

Geometría molecular

Esta geometría tiene en cuenta la fórmula general AX_mE_n , y se basa en la Teoría de Repulsión del Par de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV). Plantea que un par de electrones no enlazantes sobre el átomo central ejercerá una repulsión sobre los átomos periféricos, modificando la estructura “ideal” (disminuye los ángulos de enlace).

En las siguientes imágenes puede apreciarse cómo varía la geometría molecular.

Total de dominios de electrones	Geometría de dominios de electrones	Dominios enlazantes	Dominios no enlazantes	Geometría molecular	Ejemplo
2	 Lineal	2	0	 Lineal	
3	 Trigonal plana	3	0	 Trigonal plana	
		2	1	 Angular	
4	 Tetraédrica	4	0	 Tetraédrica	
		3	1	 Pirámide trigonal	
		2	2	 Angular	

Total de dominios de electrones	Geometría de dominios de electrones	Dominios enlazantes	Dominios no enlazantes	Geometría molecular	Ejemplo
5	 <p>Bipirámide trigonal</p>	5	0	 <p>Bipirámide trigonal</p>	PCl ₅
		4	1	 <p>Balancín</p>	SF ₄
		3	2	 <p>Forma de T</p>	ClF ₃
		2	3	 <p>Lineal</p>	XeF ₂

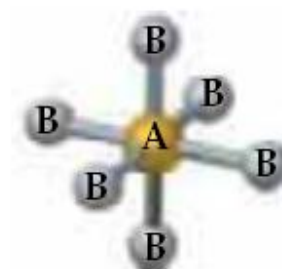
6



Octaédrica

6

0

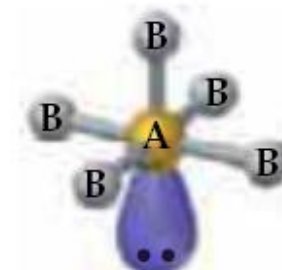


Octaédrica

SF_6

5

1

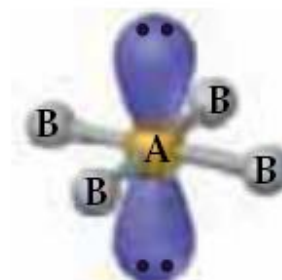


Pirámide cuadrada

BrF_5

4

2



Cuadrada plana

XeF_4

Teoría del enlace de valencia

La geometría molecular satisface en gran medida la estructura real de las moléculas, sin embargo, ese ordenamiento espacial no puede ser explicado mediante los orbitales atómicos (a modo de ejemplo, los orbitales p sólo pueden orientarse en direcciones x, y y z, nunca podrían dar una forma tetraédrica).

Se plantea entonces que los orbitales atómicos del átomo central de la molécula se rearreglan para dar “orbitales híbridos”. Por ejemplo, un orbital s y un p dan como resultado dos orbitales híbridos llamados “sp”; un orbital s, tres orbitales p y un orbital d dan como resultado 5 orbitales híbridos llamados “sp³d”.

Conociendo la fórmula general AX_mE_n , la cantidad de orbitales híbridos que el átomo central debe generar es igual a $m+n$. Es decir, el átomo central genera un orbital híbrido para cada elemento al que se une (sea un átomo periférico o un par de electrones no enlazantes), de forma de satisfacer la geometría molecular.

Momento dipolar de enlace y molecular

El momento dipolar de un enlace nos indica hacia cuál de los átomos participantes está más desplazado el par de electrones compartidos. Cualitativamente, el momento dipolar de enlace estará dirigido hacia el átomo más electronegativo.

$\text{H} \overset{+}{\text{-----}} \text{F}$
 La punta de la flecha indica hacia dónde está densidad electrónica.

El momento dipolar molecular es la suma vectorial de todos los momentos dipolares de enlace. Puede dar distinto de cero (molécula polar) o igual a cero (molécula apolar).

Al ser el resultado de una suma vectorial, es de especial interés considerar la geometría molecular.

Ejercicios de exámenes

4) (0.5 puntos) Indique, la opción correcta que muestre una molécula cuyo momento dipolar molecular (μ) sea diferente de cero:

	Opción correcta
Cl ₂	
BF ₃	
NH ₃	
CCl ₄	
Ninguna de las moléculas anteriores posee μ diferente de cero	

Ejercicios de exámenes

7) (3 puntos) Para el tetracloruro de selenio (SeCl_4):

a) Prediga la estructura del mismo según Lewis.

b) Determine la geometría de pares de electrones del mismo y representala espacialmente.

c) ¿Qué tipo de hibridación, según la teoría de enlace de valencia, adopta el átomo de Se en dicho compuesto?

Ejercicios de exámenes

3) (2 puntos) Clasifique las siguientes afirmaciones como verdaderas o falsas:

Afirmaciones
El átomo de azufre de la molécula de SO_2 posee una hibridación sp^2
La molécula de NF_3 tiene una geometría molecular trigonal
La molécula de BeCl_2 tiene una geometría lineal
La molécula de CH_4 tiene un momento dipolar distinto de cero

Ejercicios de exámenes

7) (3 puntos) Dada la molécula hipotética H_2SO , dihidrógenosulfóxido, donde el azufre actúa como átomo central:

a) Represente las estructuras de Lewis e indique la más contribuyente. Justifique.

b) Indique:

b.1) La geometría de pares de electrones.

b.2) La geometría molecular.

c) ¿La molécula tiene momento dipolar molecular distinto de cero? Justifique claramente su respuesta.

Ejercicios de exámenes

6) a) (0.5 puntos) Indique, marcando con una cruz, la afirmación correcta para el átomo central silicio, Si, en las siguientes moléculas: tetraclorosilano SiCl_4 y diclorosilano SiH_2Cl_2

	Opción correcta
El Si presenta una hibridación sp^2	<input type="checkbox"/>
El Si presenta una hibridación sp^3	<input type="checkbox"/>
El Si presenta una hibridación sp^3d	<input type="checkbox"/>
El Si presenta una hibridación sp^3d^2	<input type="checkbox"/>

b) (0.5 puntos) Indique, marcando con una cruz, la afirmación correcta referida al momento dipolar molecular de dichas moléculas

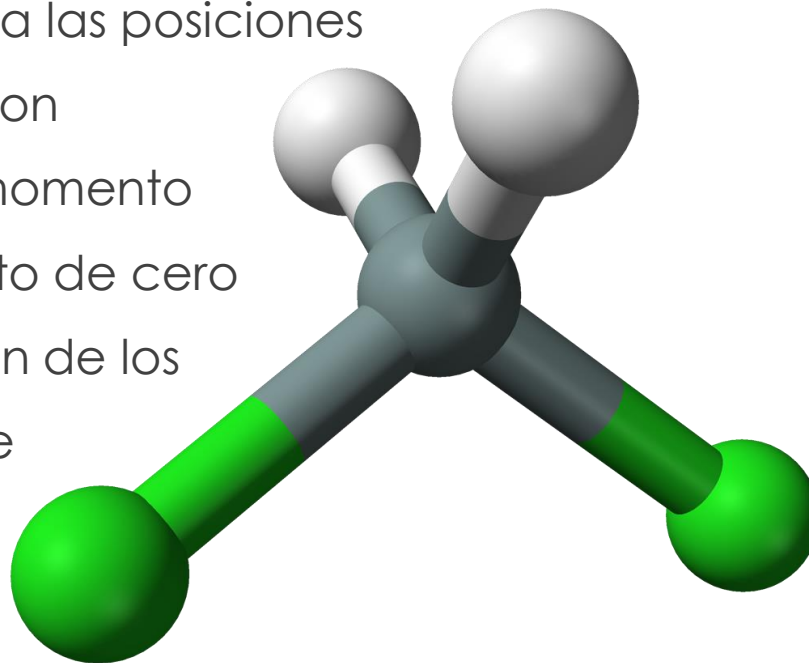
	Opción correcta
Ambas poseen un μ molecular igual a cero	<input type="checkbox"/>
Ambas poseen un μ molecular distinto de cero	<input type="checkbox"/>
Solamente el μ molecular de SiH_2Cl_2 es igual a cero	<input type="checkbox"/>
Solamente el μ molecular de SiCl_4 es igual a cero	<input type="checkbox"/>

Diclorosilano

GM: tetraédrica

momento dipolar molecular distinto de cero (se ve?)

En la geometría tetraédrica las posiciones de los átomos periféricos son equivalentes (léase, si el momento dipolar molecular es distinto de cero para determinada posición de los átomos, independiente de los cambios de posición que realice, éste seguirá siendo distinto de cero).



Ejercicios de exámenes

5) (3 puntos) El dióxido de monoclora (ClO_2) es un radical libre, o sea posee en uno de sus orbitales un solo electrón desapareado. Para el mismo indique:

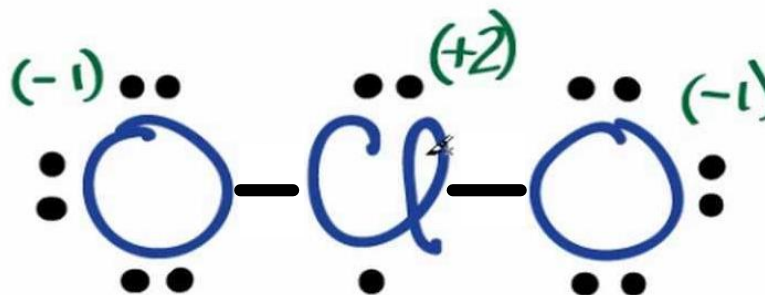
- a)** La estructura de Lewis más contribuyente:
- b)** Geometría de pares de electrones y geometría molecular según teoría de repulsión de pares de electrones de capa de valencia:
- c)** Hibridación del átomo de cloro según la teoría de enlace de valencia:
- d)** Indique si el momento dipolar de éste óxido será igual o distinto de cero:

OJO, es un radical libre, la molécula es neutra. Verificar estructuras, plantear resonantes y elegir la más contribuyente.

El radical cuenta como si fuese “otro grupo” unido al átomo central (tener en cuenta para GM e hibridación).



Chlorine Dioxide



Ejercicios de exámenes

6) (3 puntos) En la estructura de Lewis del anión ortofosfito, HPO_3^{2-} , el átomo central es el átomo de fósforo, enlazado al átomo de hidrógeno y a los átomos de oxígeno. Indique:

- a)** La estructura de Lewis más contribuyente.
- b)** Geometría de pares de electrones y geometría molecular según teoría de repulsión de pares de electrones de capa de valencia.
- c)** La hibridación del átomo de fósforo según la teoría de enlace de valencia.