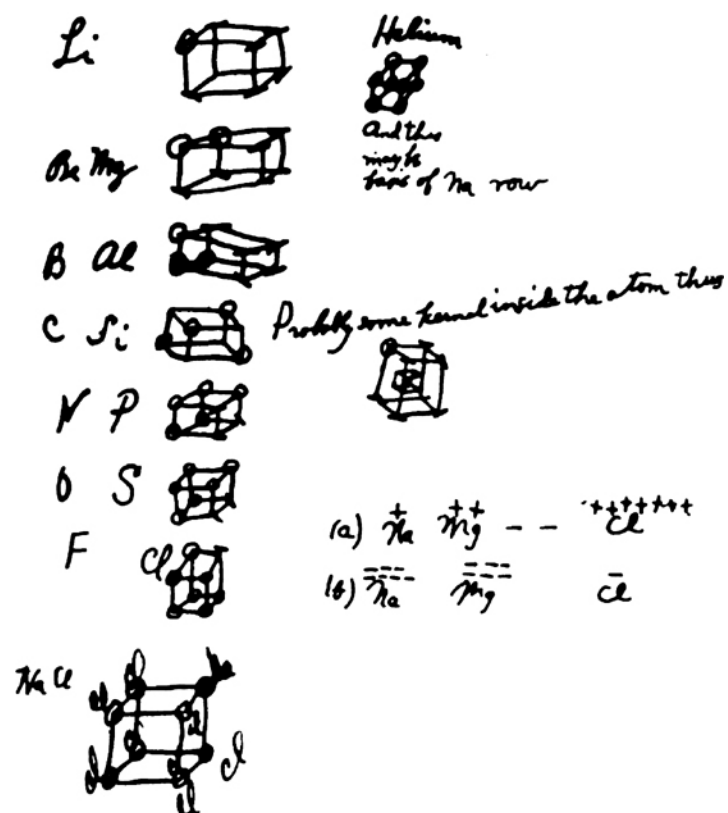


Enlaces químicos I: conceptos básicos

Capítulo 9



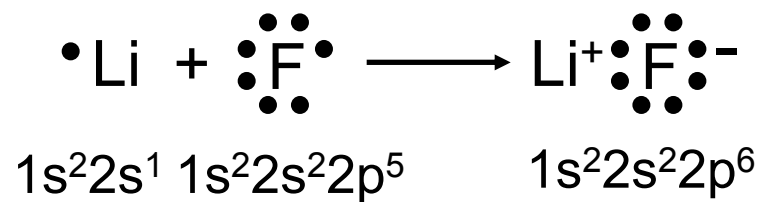
Los electrones de valencia son los últimos electrones de un orbital en un átomo, que son los causantes de los enlaces químicos.

<u>Grupo</u>	<u>e⁻ configuración</u>	<u># de valencia</u>
1A	ns ¹	1
2A	ns ²	2
3A	ns ² np ¹	3
4A	ns ² np ²	4
5A	ns ² np ³	5
6A	ns ² np ⁴	6
7A	ns ² np ⁵	7

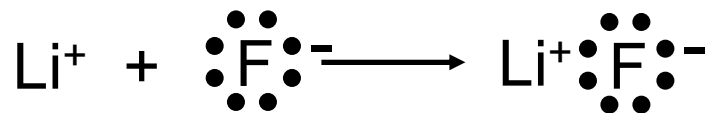
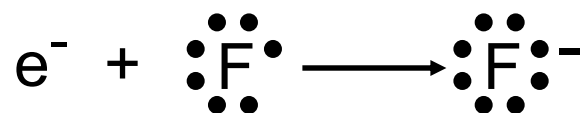
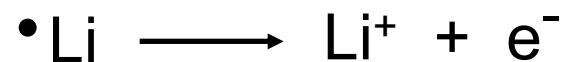
Estructura de Lewis para los elementos representativos y gases nobles

1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
•H												•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	He••
•Li	•Be•											•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ne••
•Na	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar••
•K	•Ca•											•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr••
•Rb	•Sr•											•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe••
•Cs	•Ba•											•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn••
•Fr	•Ra•																

Enlace iónico



[He] [Ne]



Energía electrostática

La **energía electrostática** (E) es la energía que se requiere para separar completamente una mol de un compuesto sólido en iones gaseosos.

$$E = k \frac{Q_+ Q_-}{r}$$

Q_+ es la carga del catión

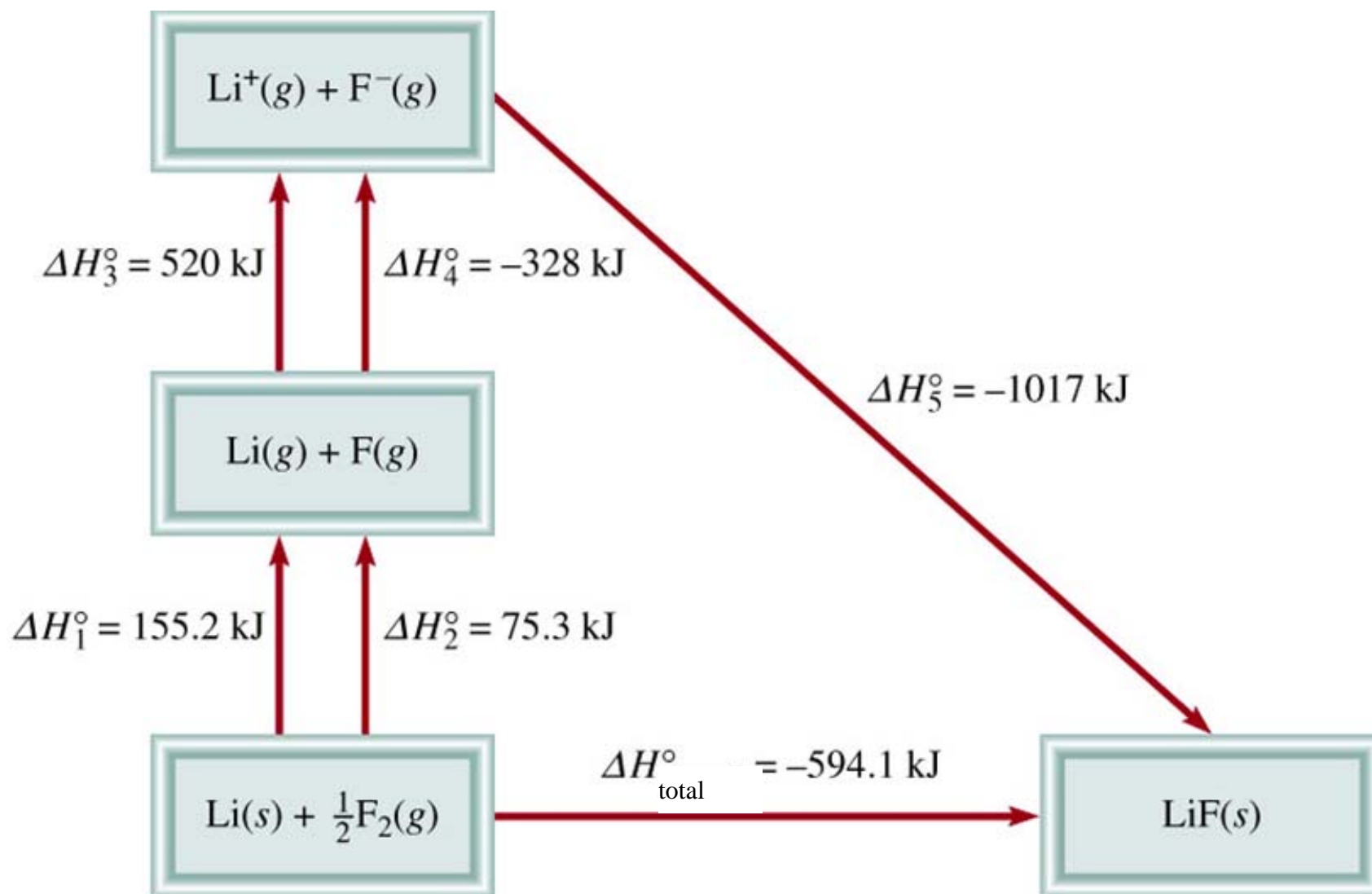
Q_- es la carga del anión

r es la distancia entre ambos

La energía es directamente
proporcional a Q , e
inversamente proporcional a r .

<u>Compuesto</u>	<u>Energía de separación</u>	
MgF ₂	2957	Q= +2,-1
MgO	3938	Q= +2,-2
LiF	1036	$r \text{ F}^- < r \text{ Cl}^-$
LiCl	853	

Ciclo de Born-Haber para determinar la energía electrostática



$$\Delta H_{\text{total}}^\circ = \Delta H_1^\circ + \Delta H_2^\circ + \Delta H_3^\circ + \Delta H_4^\circ + \Delta H_5^\circ$$

TABLE 9.1**Energías reticulares y puntos de fusión de algunos halogenuros y óxidos de metales alcalinos y alcalino-térreos**

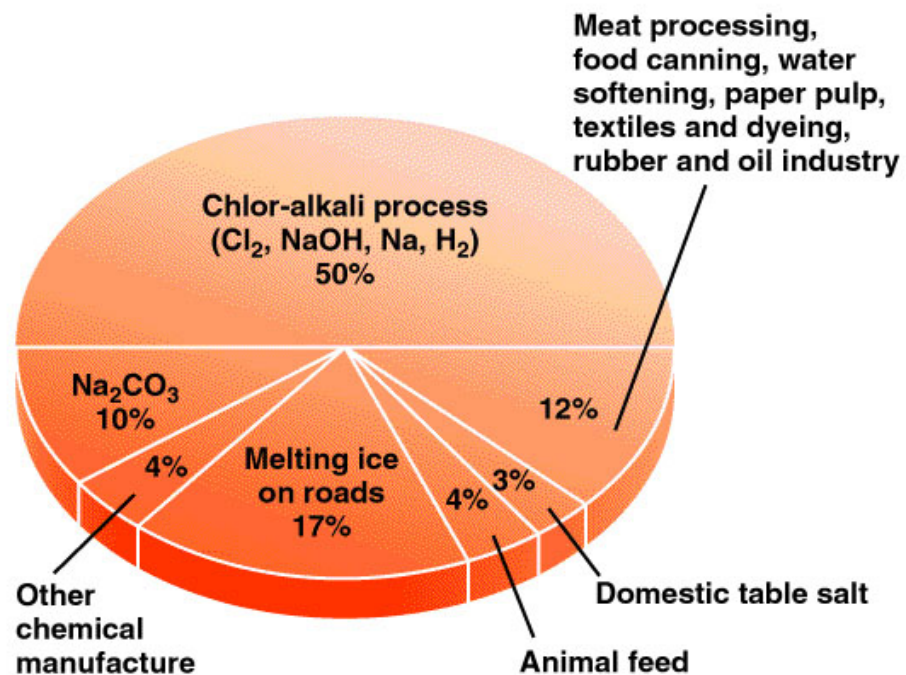
Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Melting Point (°C)
LiF	1017	845
LiCl	828	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgCl ₂	2527	714
Na ₂ O	2570	Sub*
MgO	3890	2800

*Na₂O sublimes at 1275°C.

La Química en acción:

Cloro + Sodio

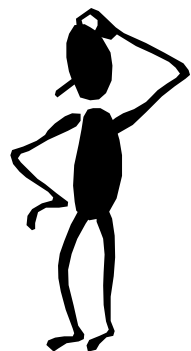
Minas de sal



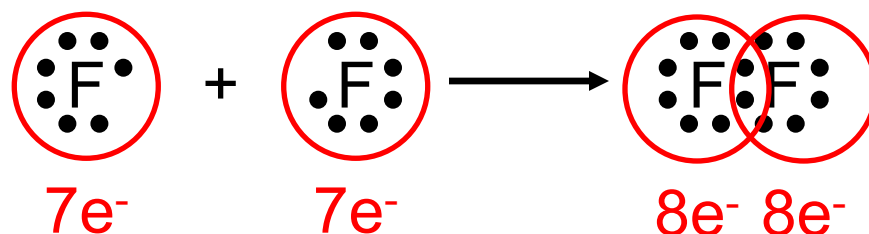
Sal por evaporación



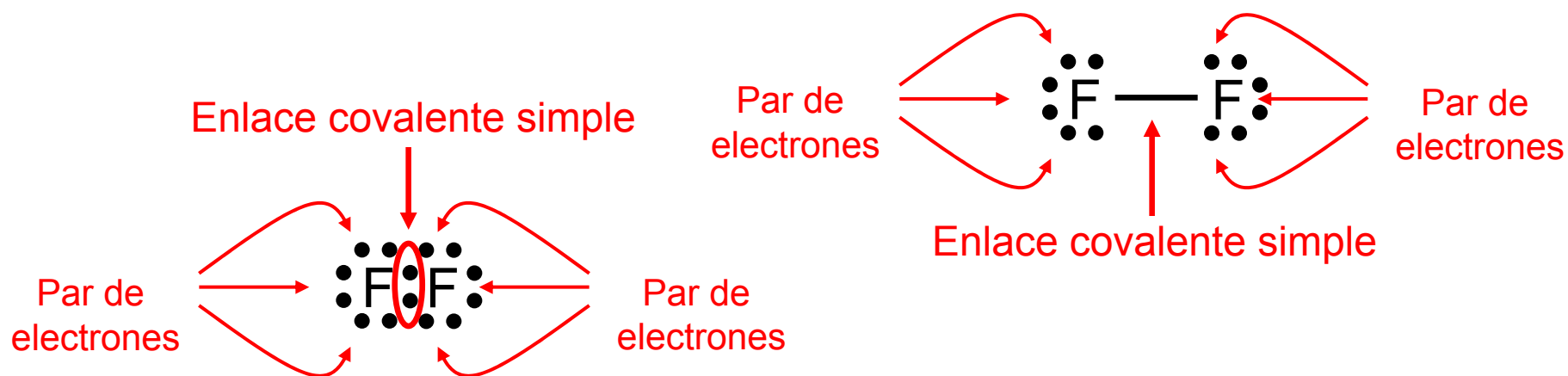
Un enlace covalente ocurre cuando dos o más átomos comparten uno o más pares de electrones.



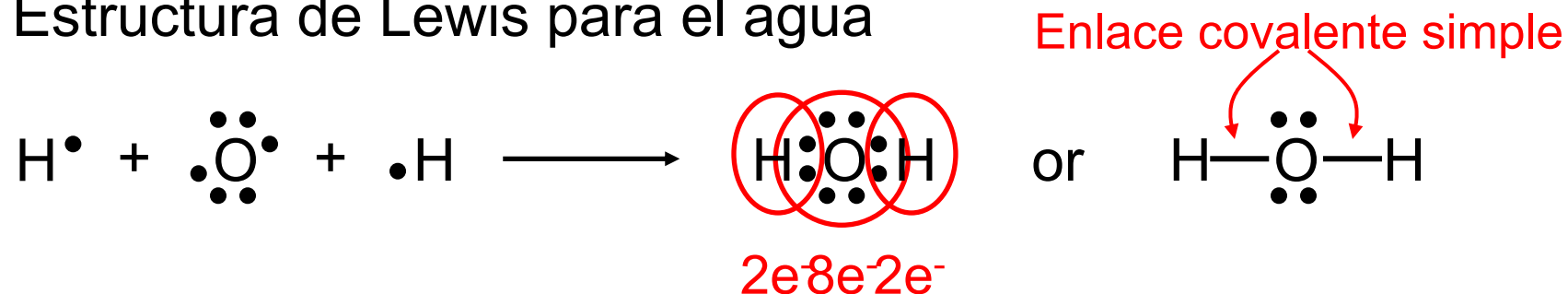
¿Por qué compartirían electrones dos átomos?



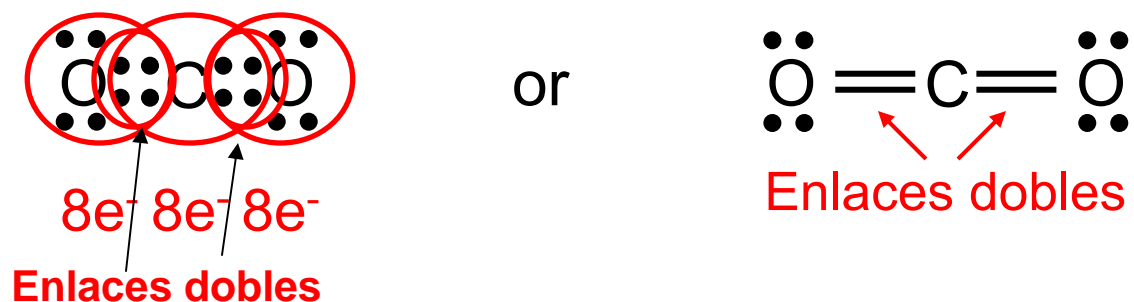
Estructura de Lewis para F_2



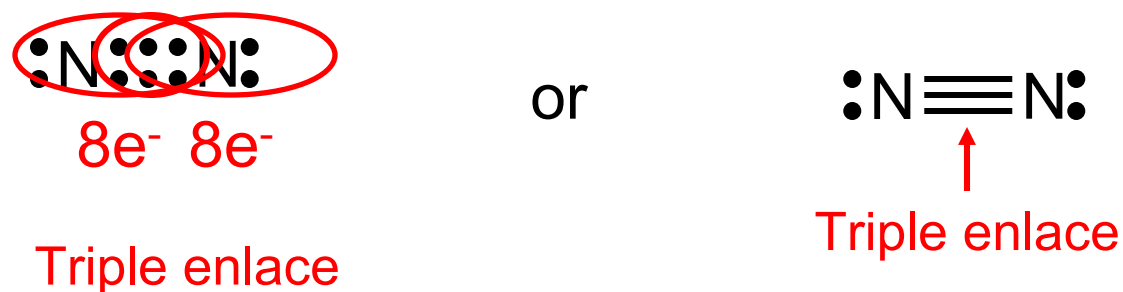
Estructura de Lewis para el agua



Doble enlace – dos átomos comparten dos pares de electrones



Triple enlace – dos átomos comparten tres pares de electrones



Longitud de los enlaces covalentes

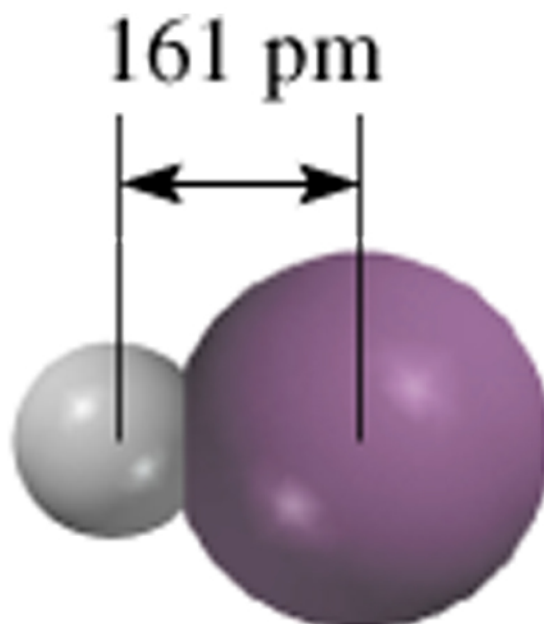
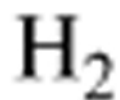
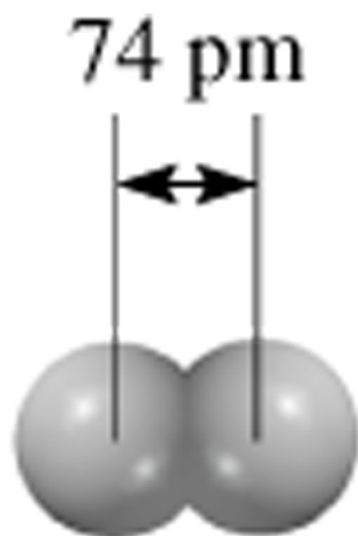


TABLE 9.2

Average Bond Lengths of Some Common Single, Double, and Triple Bonds

Bond Type	Bond Length (pm)
C—H	107
C—O	143
C=O	121
C—C	154
C=C	133
C≡C	120
C—N	143
C=N	138
C≡N	116
N—O	136
N=O	122
O—H	96

Longitud

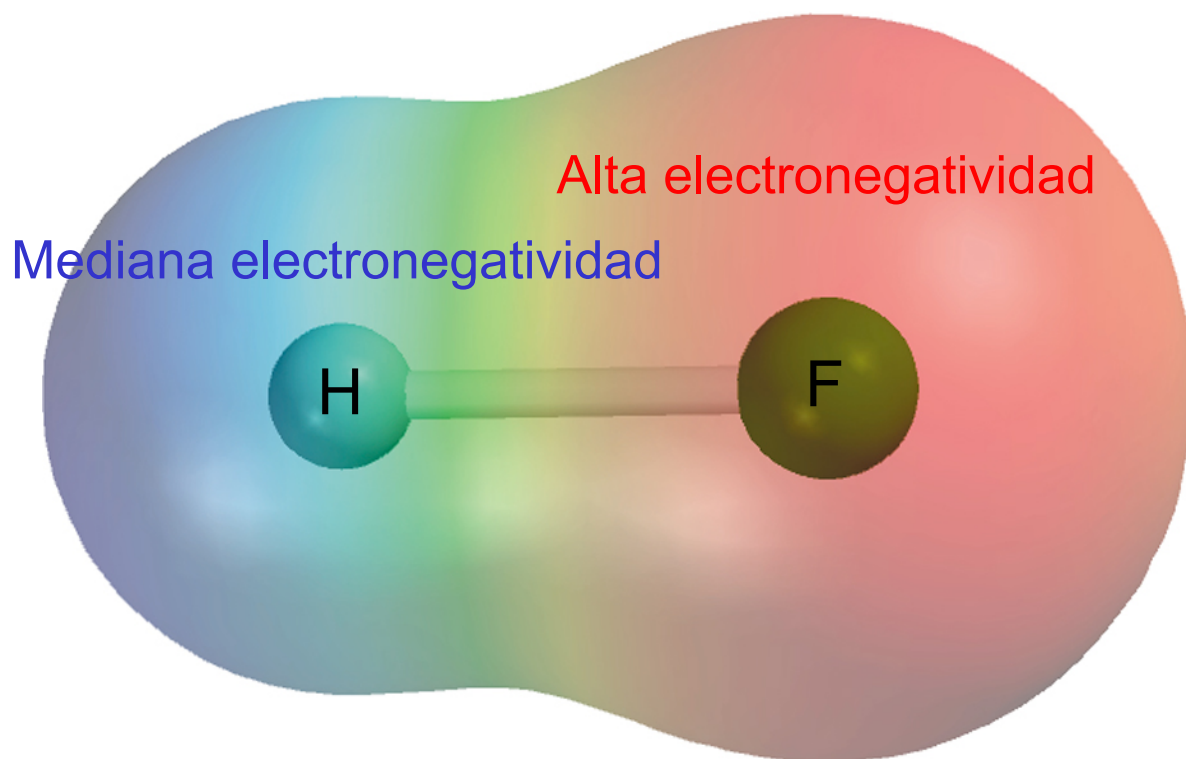
Triple enlace < Doble enlace < Enlace simple

TABLE 9.3**Comparación de algunas propiedades generales de un compuesto iónico y un compuesto covalente**

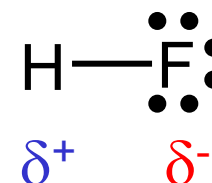
Property	NaCl	CCl₄
Appearance	White solid	Colorless liquid
Melting point (°C)	801	−23
Molar heat of fusion* (kJ/mol)	30.2	2.5
Boiling point (°C)	1413	76.5
Molar heat of vaporization* (kJ/mol)	600	30
Density (g/cm ³)	2.17	1.59
Solubility in water	High	Very low
Electrical conductivity		
Solid	Poor	Poor
Liquid	Good	Poor

*Molar heat of fusion and molar heat of vaporization are the amounts of heat needed to melt 1 mole of the solid and to vaporize 1 mole of the liquid, respectively.

El ***enlace polar*** es un enlace covalente donde la diferencia de electronegatividad entre los dos átomos no es muy grande (aproximadamente 1.7 o un poco mayor)

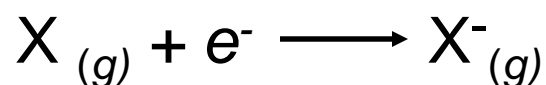


mediana e^- mucha e^-

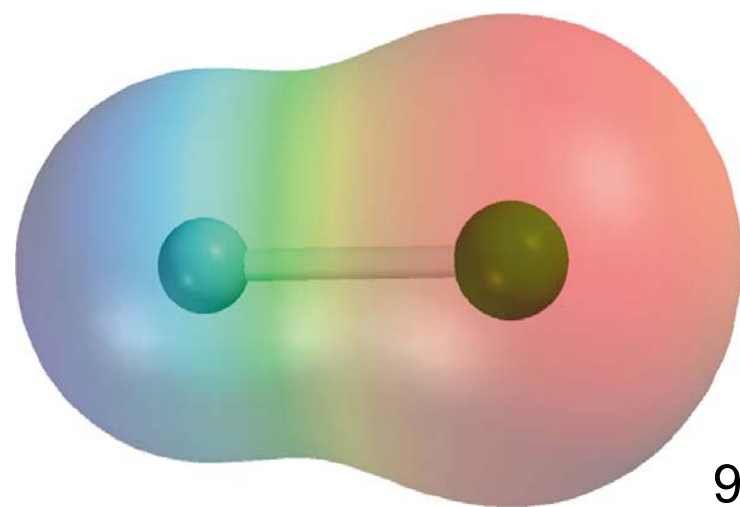


La ***electronegatividad*** es la capacidad de un átomo para atraer los electrones de otro átomo en un enlace químico.

Afinidad de electrones - **calculable**, Cl es el más afín

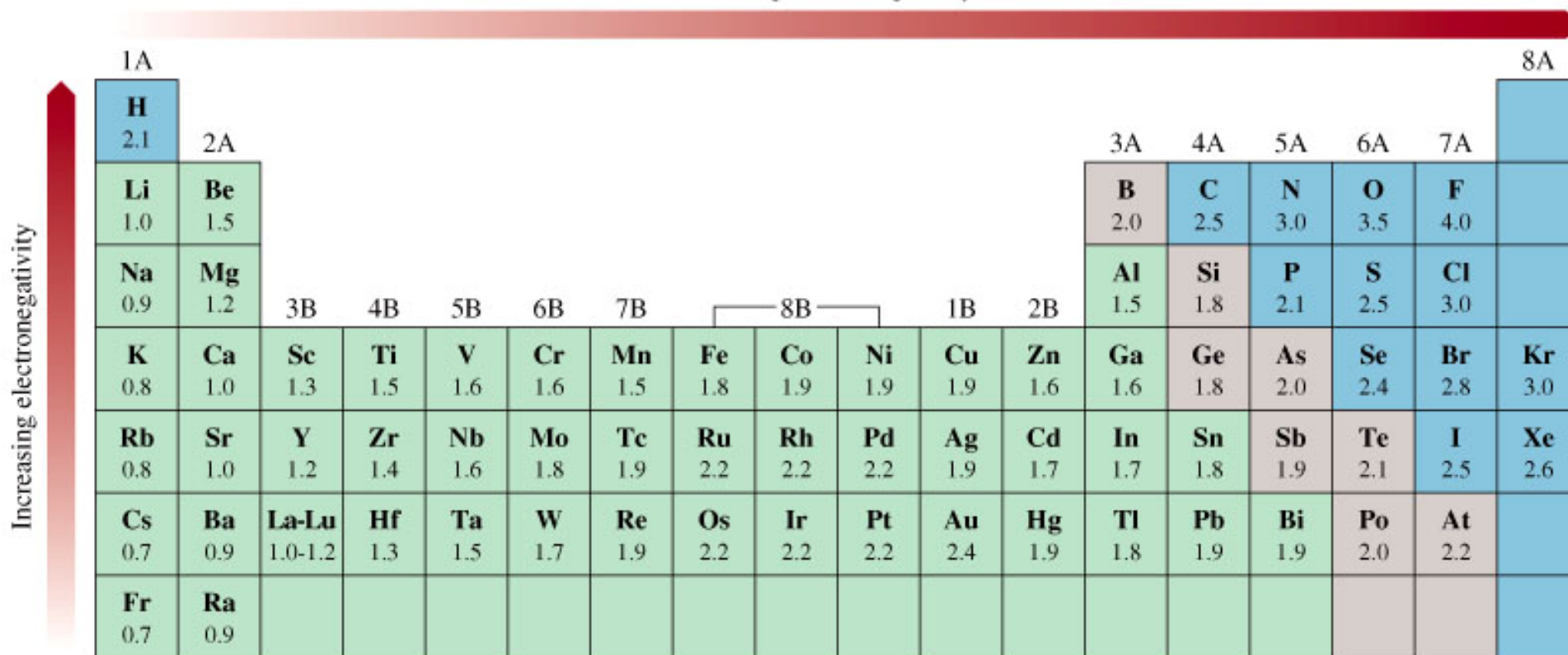


Electronegatividad - **relativa**, F es el más electronegativo



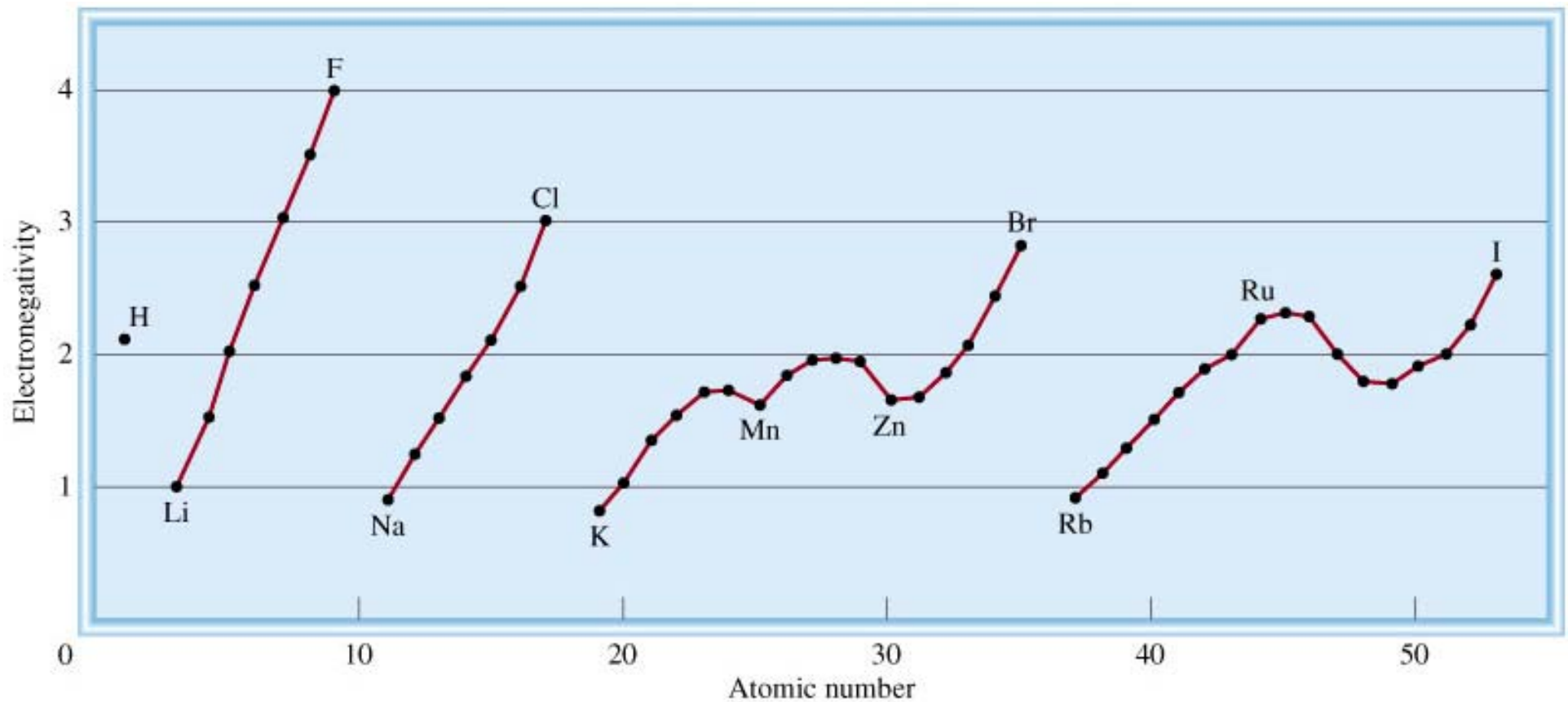
Electronegatividades en la tabla periodica

Increasing electronegativity

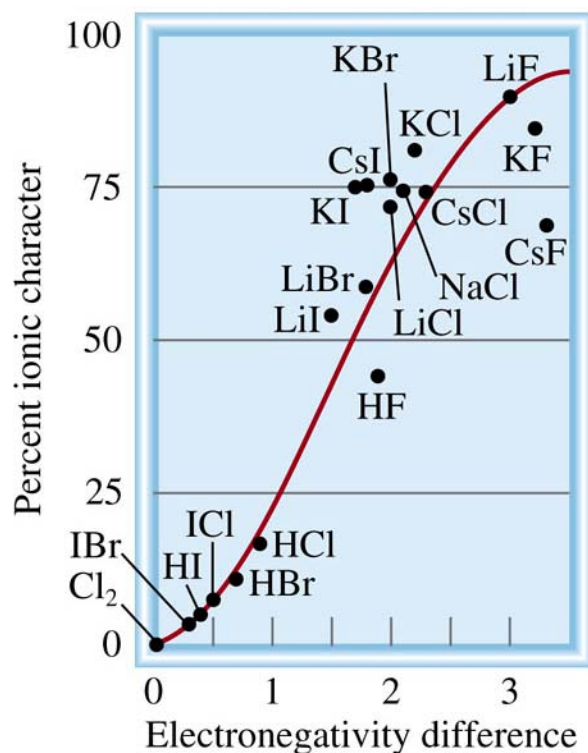


	1A																	8A
	H 2.1	2A											3A	4A	5A	6A	7A	
	Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
	Na 0.9	Mg 1.2	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0		
	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr 3.0
	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe 2.6
	Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.0-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.9	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	
	Fr 0.7	Ra 0.9																

Variación de la electronegatividad con respecto al # atómico



Clasificación de los enlaces por electronegatividad



Diferencia

0

 ≥ 2
$$0 < y < 2$$

Tipo de enlace

Covalente

iónico

Covalente Polar

- Electronegatividad +

Covalente

Covalente Polar

iónico

comparte e-

Transferencia parcial de e⁻

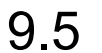
transferencia e-



lónico

Covalente Polar

Covalente



Estructuras de Lewis

1. Dibuje la estructura del compuesto mostrando qué átomos están conectados con otros. Coloque el elemento menos electronegativo al centro.
2. Calcule el número total de electrones. Agregue 1 por cada carga negativa y elimine 1 por cada carga positiva.
3. Complete los octetos de electrones para todos los elementos, excepto para el hidrógeno.
4. Si la estructura tiene demasiados electrones, forme enlaces dobles o triples en el átomo central.



Escriba la estructura de Lewis para el NF_3 .

Paso 1 – N es menos electronegativo que el F, coloquémolo al centro

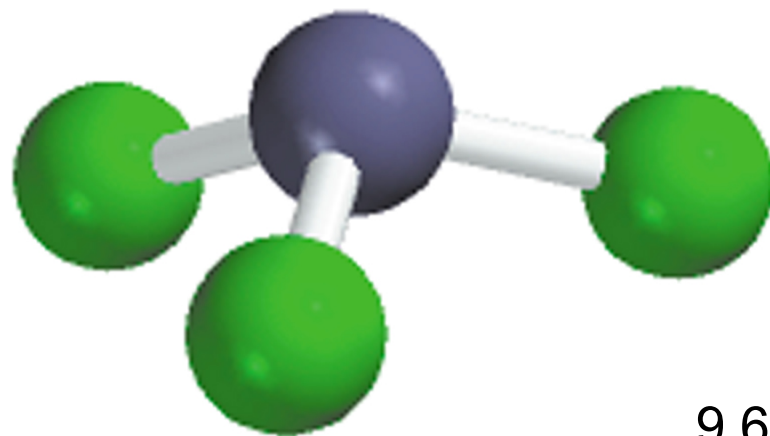
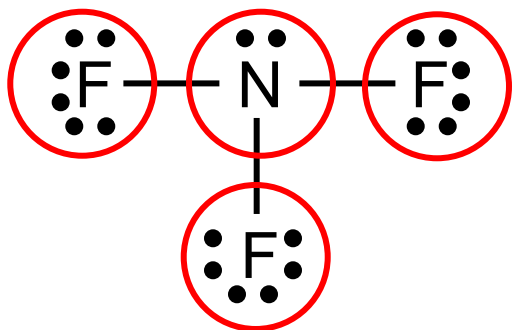
Paso 2 – Contar los electrones de valencia N - 5 ($2s^2 2p^3$) y F - 7 ($2s^2 2p^5$)

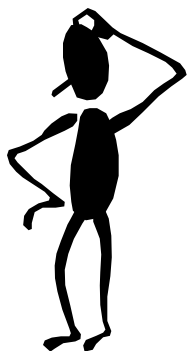
$$5 + (3 \times 7) = 26 \text{ electrones de valencia}$$

Paso 3 – Dibujemos enlaces simples entre los átomos de N y F y completamos los octetos.

Paso 4 - Revise que el número de electrones en la estructura sea igual al número de electrones de valencia

3 enlaces simples (3×2) + 10 pares de iones (10×2) = 26 electrones de valencia





Escriba la estructura de Lewis para el (CO_3^{2-}) .

Paso 1 – El C es menos electronegativo, pongámoslo al centro.

Paso 2 – Contar los e- de valencia C - 4 ($2s^2 2p^2$) y O - 6 ($2s^2 2p^4$)
-2 carga – $2e^-$

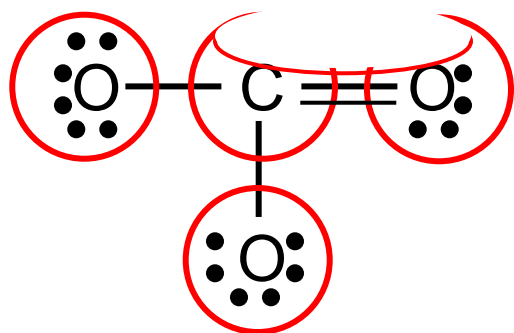
$$4 + (3 \times 6) + 2 = 24 \text{ electrones de valencia}$$

Paso 3 – Dibujemos enlaces simples entre los átomos de C y O y completamos los octetos.

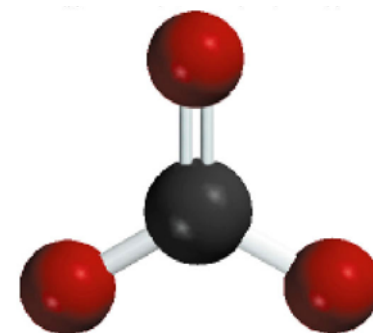
Paso 4 - Revisar que el # de e- sea el mismo que el de valencia

3 enlaces simples (3×2) + 10 pares de iones (10×2) = 26 electrones de valencia

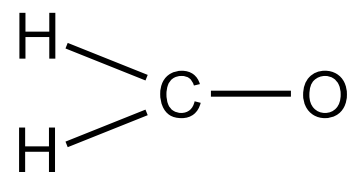
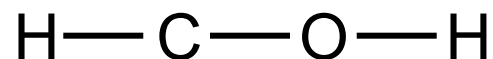
Paso 5 - Demasiados electrones, formemos enlaces dobles:



$$\begin{array}{rcl} 2 \text{ enlaces sencillos } (2 \times 2) & = & 4 \\ 1 \text{ doble enlace} & = & 4 \\ 8 \text{ pares de iones } (8 \times 2) & = & 16 \\ \hline \text{Total} & = & 24 \end{array}$$



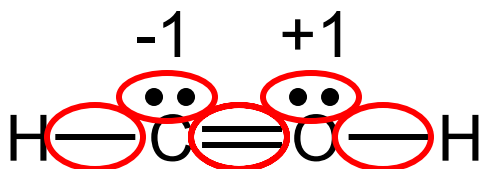
Posibles estructuras para el (CH₂O)



La carga formal de un átomo es la diferencia entre el número de electrones de valencia y un átomo individual y el número de electrones asignados a dicho átomo al utilizar la estructura de Lewis.

$$\begin{array}{l} \text{Carga formal} \\ \text{en la} \\ \text{estructura de} \\ \text{Lewis} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Número de} \\ \text{electrones de} \\ \text{valencia} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Número de} \\ \text{electrones sin} \\ \text{enlaces} \end{array} - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{Número total} \\ \text{de electrones} \\ \text{con enlace} \end{array} \right)$$

La suma de las cargas formales de los átomos de una molécula es igual a la carga de la molécula



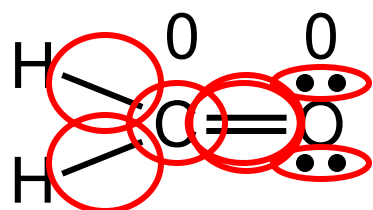
C – 4 e ⁻	2 enlaces simples (2x2) = 4
O – 6 e ⁻	1 enlace doble = 4
2H – 2x1 e ⁻	2 par de iones (2x2) = 4
<hr/>	<hr/>
12 e ⁻	Total = 12

Carga de un átomo en la estructura de Lewis =

$$\text{Número de electrones de valencia libres} - \frac{\text{Número total de electrones sin enlace}}{2} \left(\text{Número total de electrones con enlace} \right)$$

Carga del C = $4 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = -1$

Carga del O = $6 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = +1$



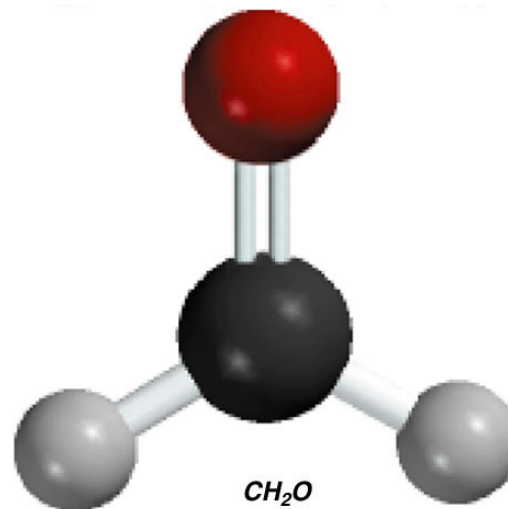
$$\begin{array}{rcl}
 \text{C} - 4 e^- & 2 \text{ enlaces simples } (2 \times 2) = & 4 \\
 \text{O} - 6 e^- & 1 \text{ enlace doble} = & 4 \\
 2\text{H} - 2 \times 1 e^- & 2 \text{ pares de iones } (2 \times 2) = & 4 \\
 \hline
 12 e^- & & \text{Total} = 12
 \end{array}$$

Carga de un átomo en la estructura de Lewis =

$$\begin{array}{l}
 \text{Número de} \\
 \text{electrones de} \\
 \text{valencia libres}
 \end{array}
 - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{Número total} \\ \text{de electrones} \\ \text{sin enlace} \end{array} \right) - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{Número total} \\ \text{de electrones} \\ \text{con enlace} \end{array} \right)$$

Carga del C = $4 - 0 - \frac{1}{2} \times 8 = 0$

Carga del O = $6 - 4 - \frac{1}{2} \times 4 = 0$

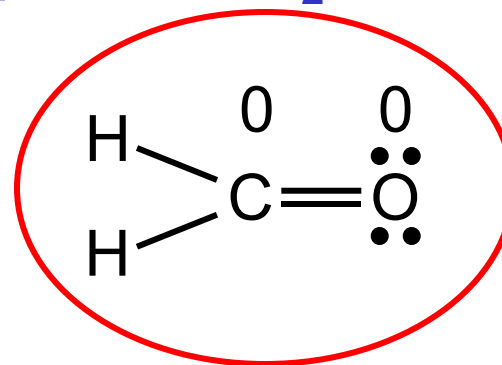
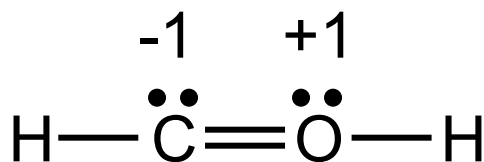


Carga formal y la estructura de Lewis

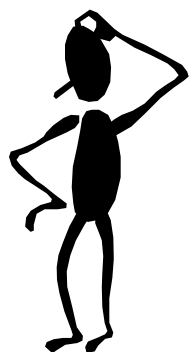
1. Las moléculas neutras en la estructura de Lewis se colocan en la parte central de la estructura.
2. Las estructuras de Lewis con elementos cuya carga es elevada, son menos comunes que aquellas con una carga pequeña.
3. En la estructura de Lewis, los átomos cuya carga es negativa, por lo general se colocan con los elementos más electronegativos.



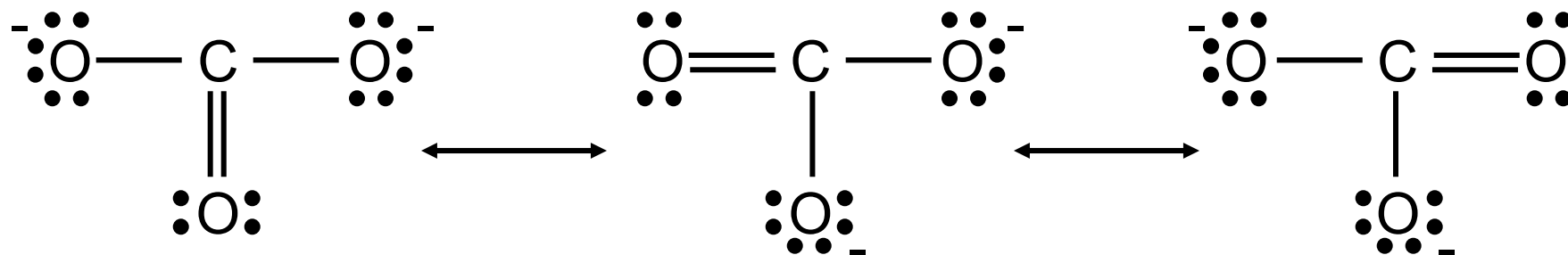
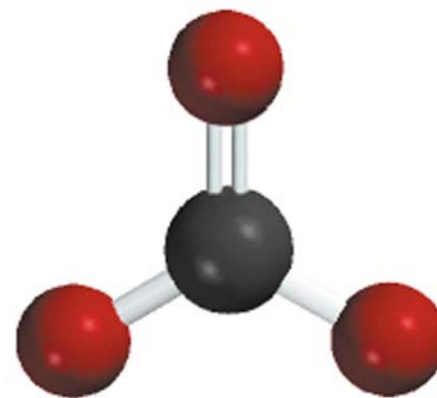
¿Cuál es la estructura correcta para el CH_2O ?



Una **estructura resonante** ocurre cuando dos o más estructuras de Lewis para una misma molécula no pueden ser representadas gráficamente por una sola estructura de Lewis.

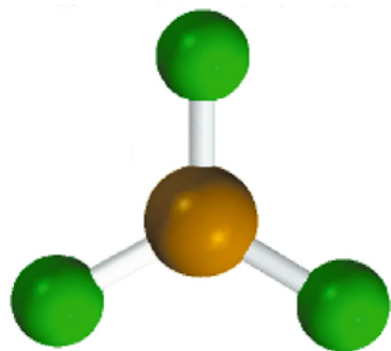
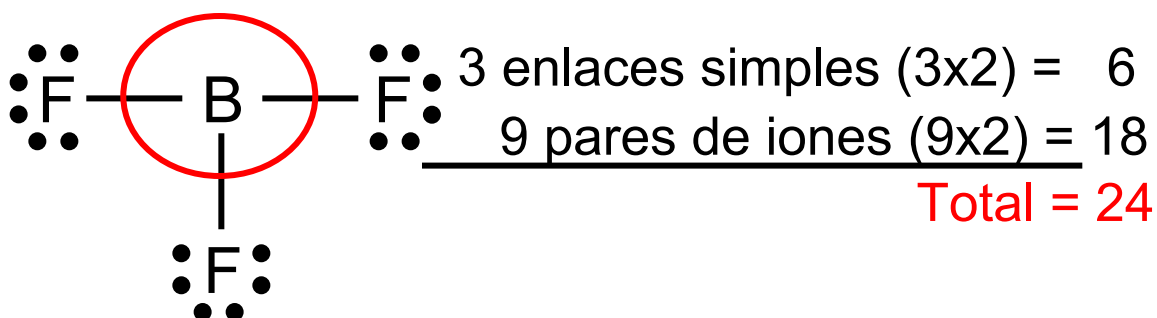
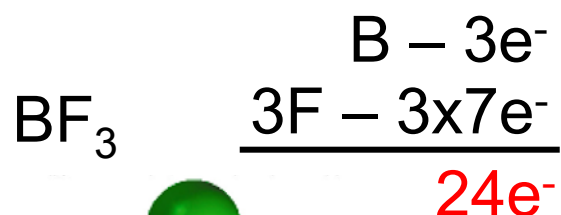
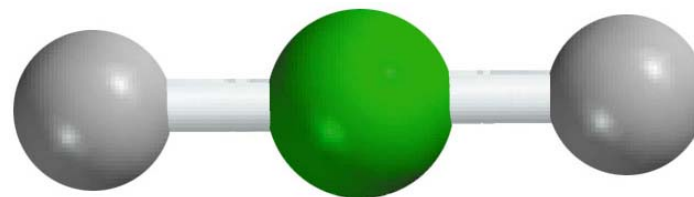
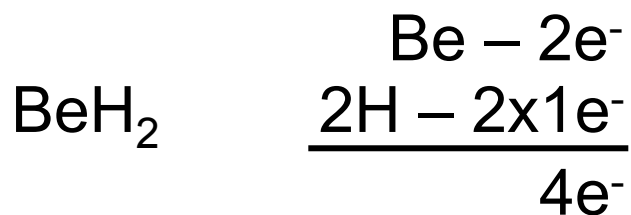


¿Cuáles son las estructuras de resonancia para el ion (CO_3^{2-})?



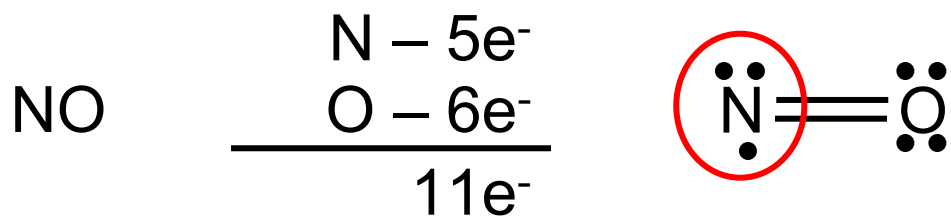
Excepciones a la regla el octeto

Octeto incompleto

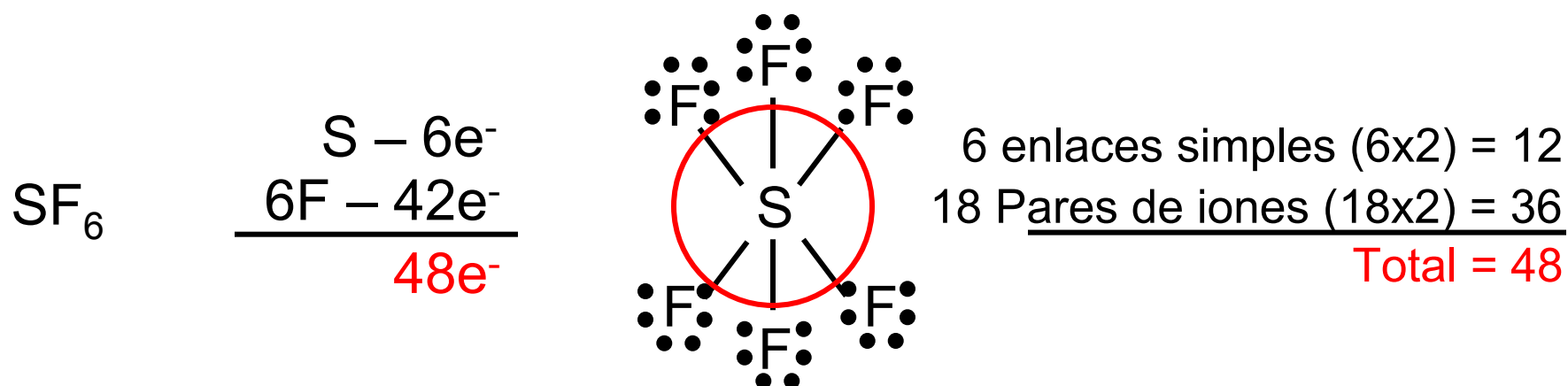


Excepciones de la regla del octeto

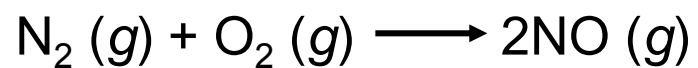
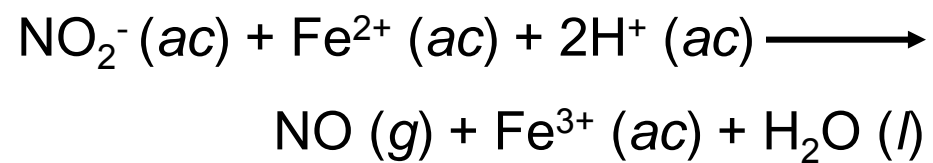
Estructuras con electrones impares



El octeto expandido (un átomo central con un número cuántico $n > 2$)



La Química en acción: Simplemente diga NO



Al cambio necesario en la entalpía para romper un enlace en una mol de un compuesto gaseoso se le llama ***energía de enlace***.

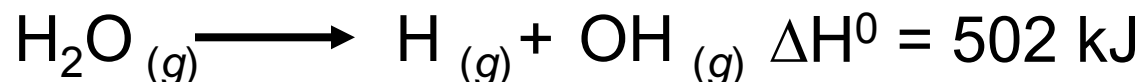
Energía de enlace



Energía de enlace

Enlace Sencillo < Enlace Doble < Enlace Triple

Energía de enlace para moléculas poliatómicas



$$\text{Energía promedio del OH} = \frac{502 + 427}{2} = 464 \text{ kJ}$$

TABLE 9.4

Some Bond Enthalpies of Diatomic Molecules* and Average Bond Enthalpies for Bonds in Polyatomic Molecules

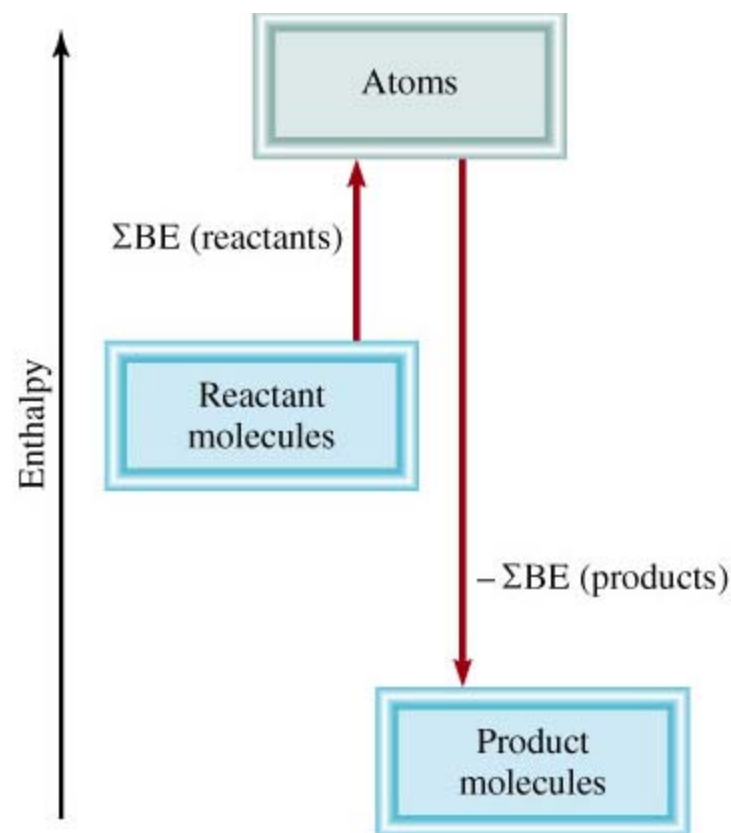
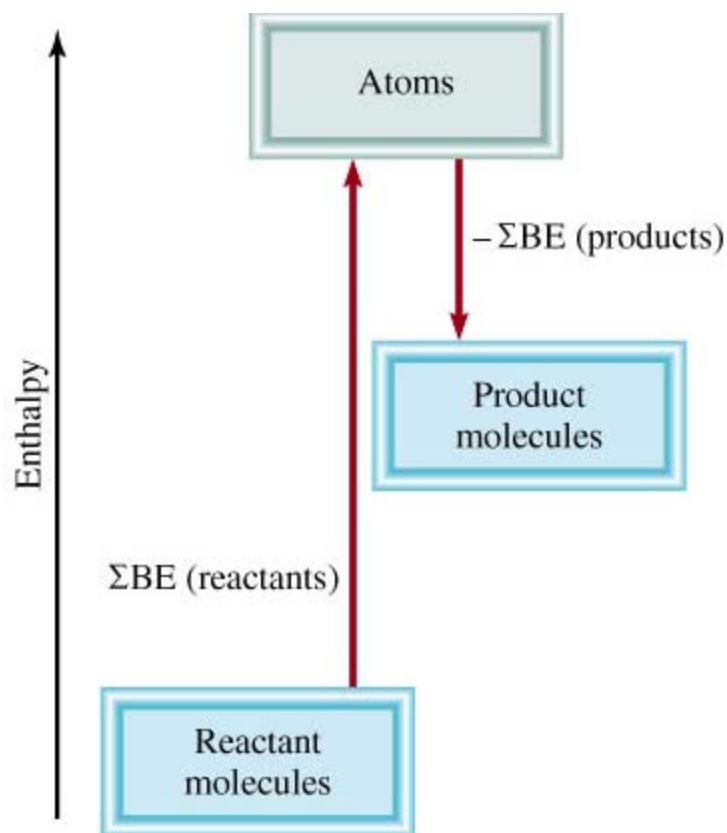
Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)	Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)
H—H	436.4	C—S	255
H—N	393	C=S	477
H—O	460	N—N	193
H—S	368	N=N	418
H—P	326	N≡N	941.4
H—F	568.2	N—O	176
H—Cl	431.9	N=O	607
H—Br	366.1	O—O	142
H—I	298.3	O=O	498.7
C—H	414	O—P	502
C—C	347	O=S	469
C=C	620	P—P	197
C≡C	812	P=P	489
C—N	276	S—S	268
C=N	615	S=S	352
C≡N	891	F—F	156.9
C—O	351	Cl—Cl	242.7
C=O ⁺	745	Br—Br	192.5
C—P	263	I—I	151.0

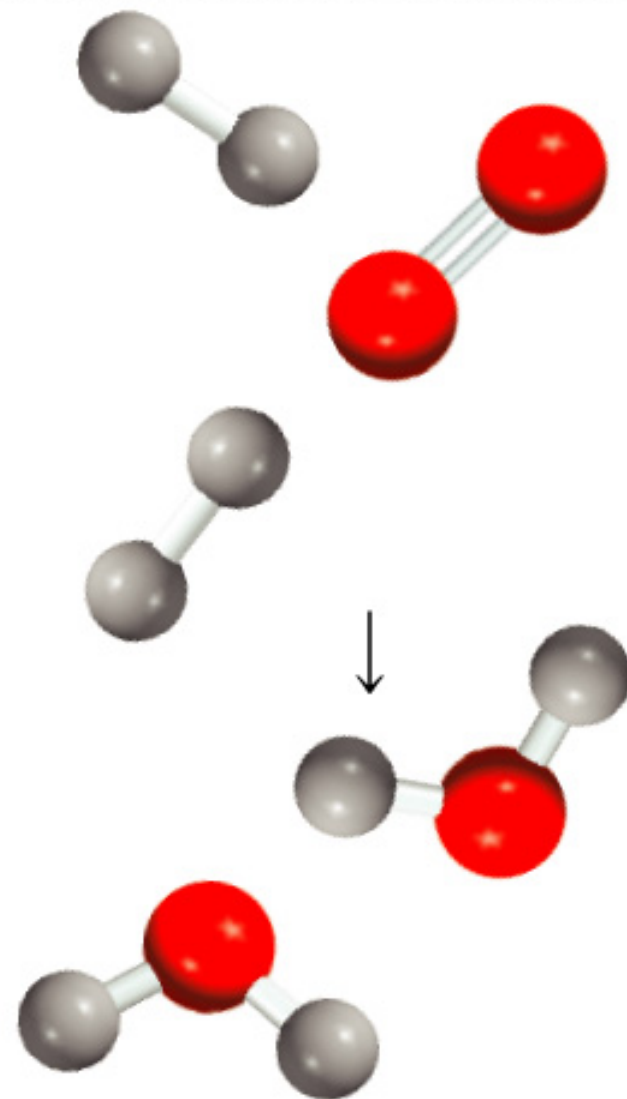
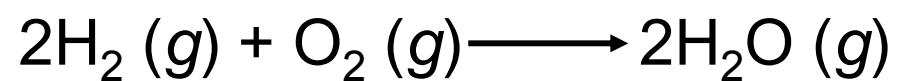
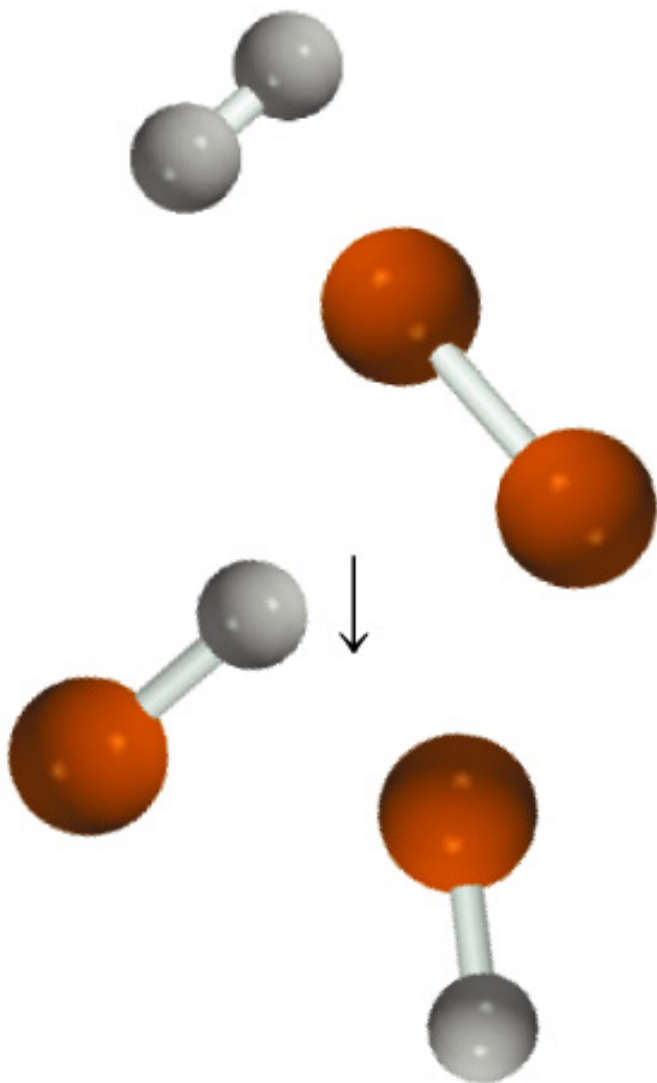
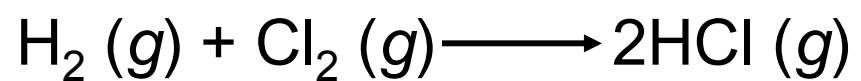
Cambio en la entalpía y energía de enlace

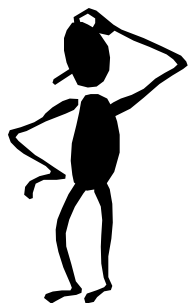


Imagine una reacción que rompa todos los enlaces en los reactantes para poder producir todo tipo de enlaces en los productos.

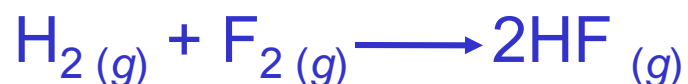
$$\begin{aligned}\Delta H^0 &= \text{Energía de reactivos} - \text{Energía de productos} \\ &= \Sigma \Delta E(\text{reactantes}) - \Sigma \Delta E(\text{productos})\end{aligned}$$







Utilice la energía de enlace para calcular el cambio de entalpía de:



$$\Delta H^0 = \Sigma \Delta E(\text{reactantes}) - \Sigma \Delta E(\text{productos})$$

Tipos de enlaces rotos	Número de enlaces rotos	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio en la energía (kJ)
H — H	1	436.4	436.4
F — F	1	156.9	156.9
Tipos de enlaces formados	Número de enlaces formados	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio en la energía (kJ)
H — F	2	568.2	1136.4

$$\Delta H^0 = 436.4 + 156.9 - 2 \times 568.2 = -543.1 \text{ kJ}$$