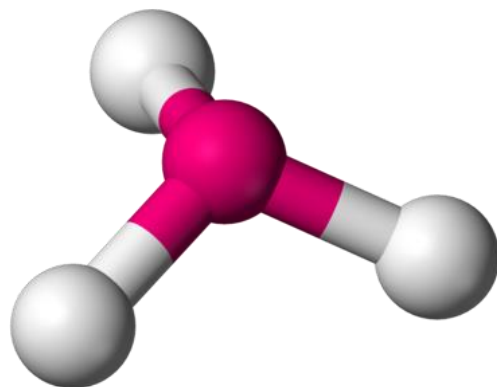


Enlace químico II (geometría molecular)



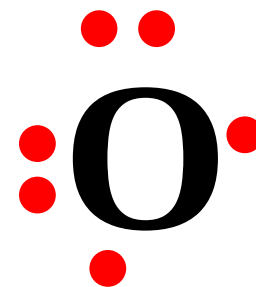
Marco Galleguillos Caamaño
B.Q. Mg. en BQ

${}_8\text{O}$

$Z = 8$

$1s^2$

$2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$



**Capa de
valencia**



**Estructura de
Lewis**



Fórmulas de Lewis

(Símbolos de puntos de Lewis)



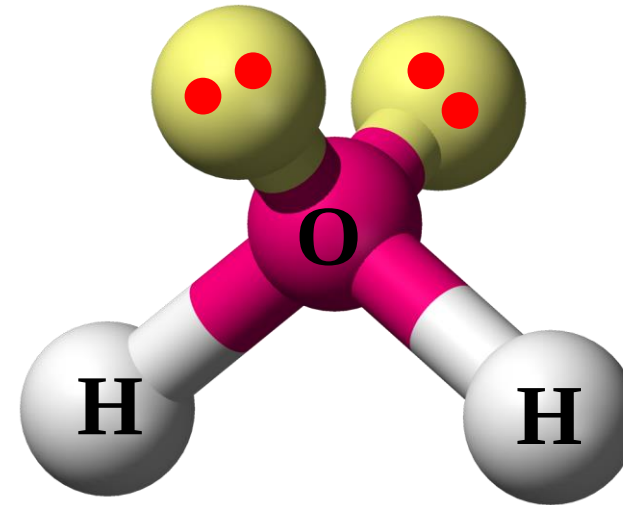
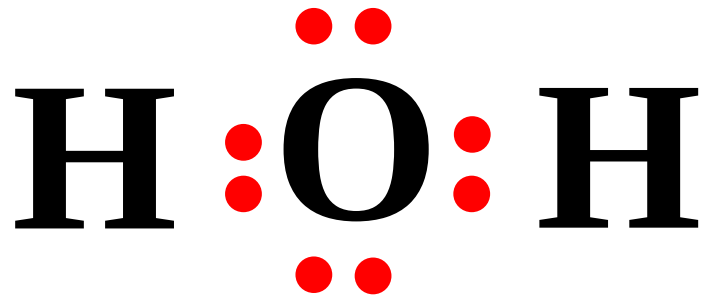
Fórmulas de Lewis

(Símbolos de puntos de Lewis)

1. El símbolo del elemento representa al núcleo y a los electrones de niveles internos 
2. Los electrones del último nivel se indican con puntos, y no se distinguen entre electrones s y electrones p. Sólo se distingue entre electrones apareados y desapareados. 
3. Este sistema se aplica generalmente a elementos del primer y segundo periodo de la tabla periódica. 
4. La unión (para formar el enlace) se hace con los electrones desapareados de cada elemento. 
5. Los elementos al unirse completan octetos alrededor de ellos (dueto en el H). * Hay excepciones con menos y más de 8 electrones. 

Modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Explica la distribución geométrica de los pares electrónicos que rodean el átomo central en términos de la repulsión electrostática entre dichos pares

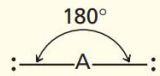
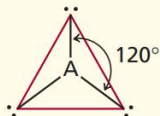
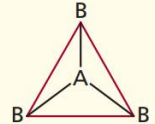
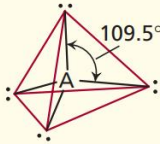
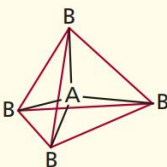
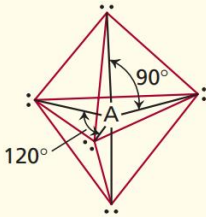
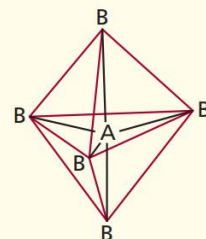
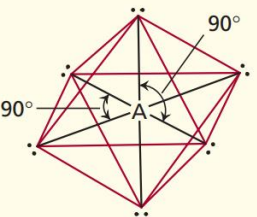
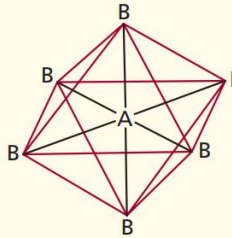


Reglas generales del modelo RPECV:

- Al considerar la repulsión de los pares electrónicos, los enlaces dobles y triples se pueden tratar como si fueran sencillos.
- Si una molécula tiene dos o más estructuras resonantes, podemos aplicar el modelo RPECV a cualquiera de ellas

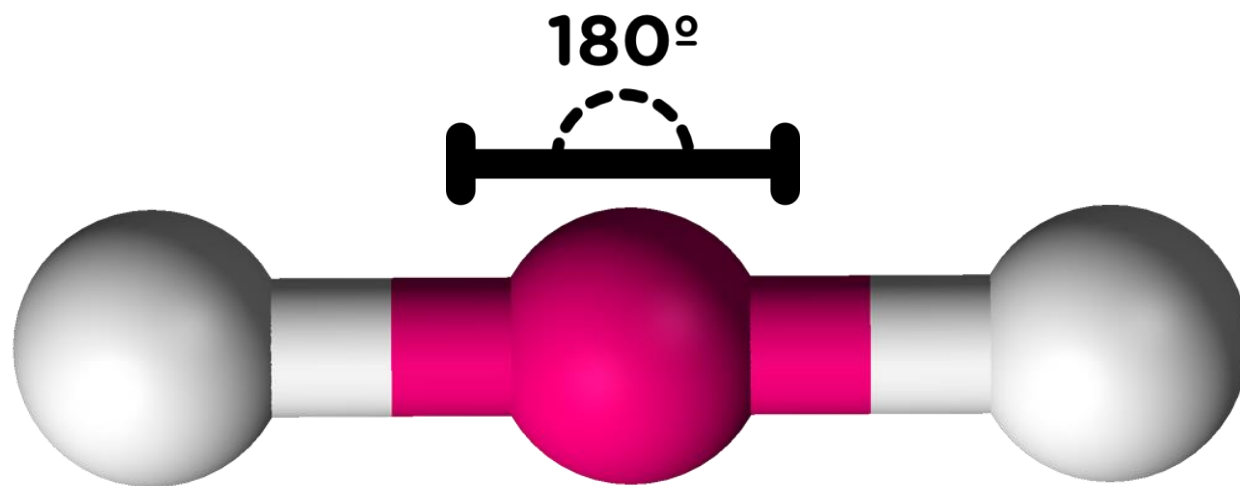
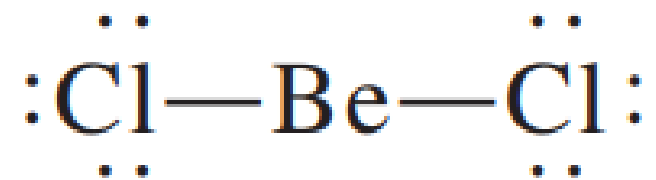
TABLA 10.1

central (A) en una molécula y geometría de algunas moléculas y iones sencillos en los que el átomo central no tiene pares libres

Número de pares de electrones	Distribución de los pares de electrones*	Geometría molecular*	Ejemplos
2	 Lineal	$B - A - B$ Lineal	$BeCl_2$, $HgCl_2$
3	 Plana trigonal	 Plana trigonal	BF_3
4	 Tetraédrica	 Tetraédrica	CH_4 , NH_4^+
5	 Bipiramidal trigonal	 Bipiramidal trigonal	PCl_5
6	 Octaédrica	 Octaédrica	SF_6

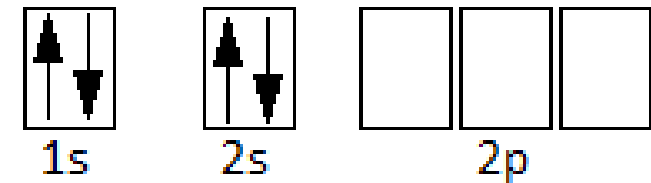
AB_2 : cloruro de berilio ($BeCl_2$)

La estructura de Lewis del cloruro de berilio en estado gaseoso es

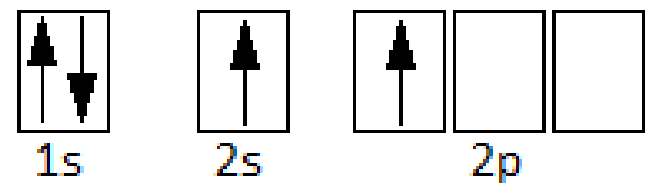


Lineal

Estado fundamental del berilio

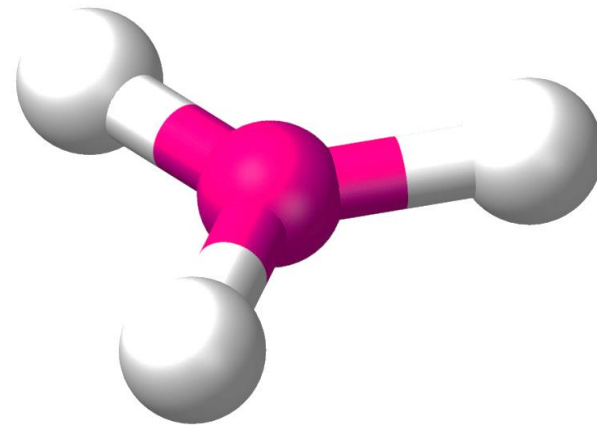
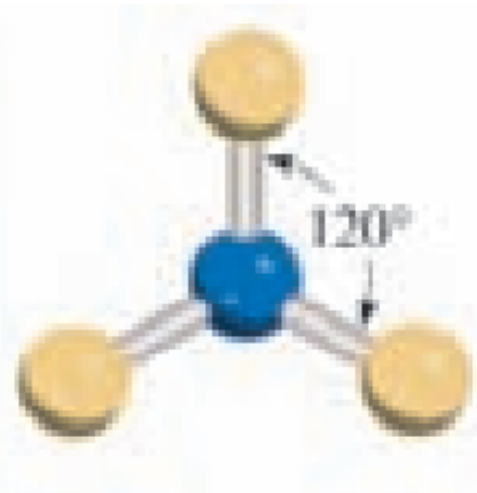
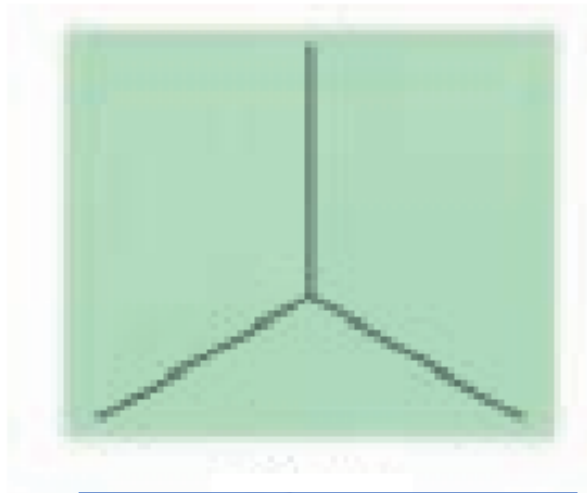
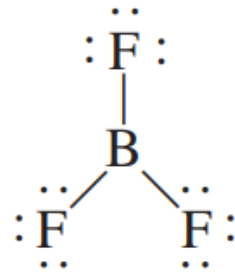


Estado excitado del berilio



AB₃: trifluoruro de boro (BF₃)

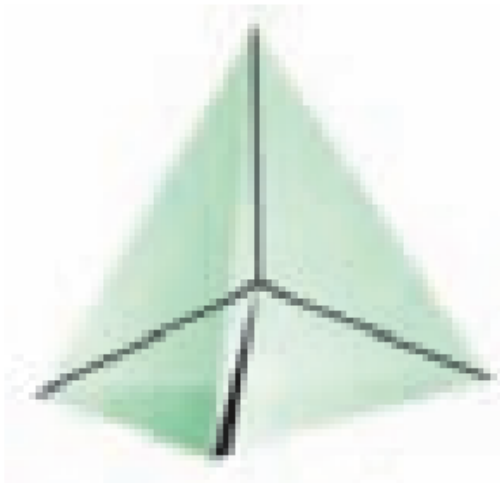
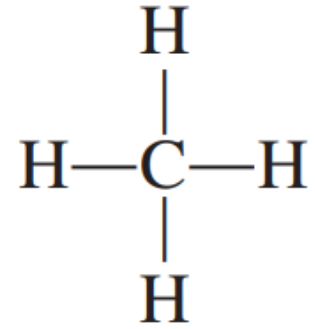
El trifluoruro de boro contiene tres enlaces covalentes, o pares enlazantes. En la distribución más estable, los tres enlaces BF apuntan hacia los vértices de un triángulo equilátero con el B en el centro del mismo:



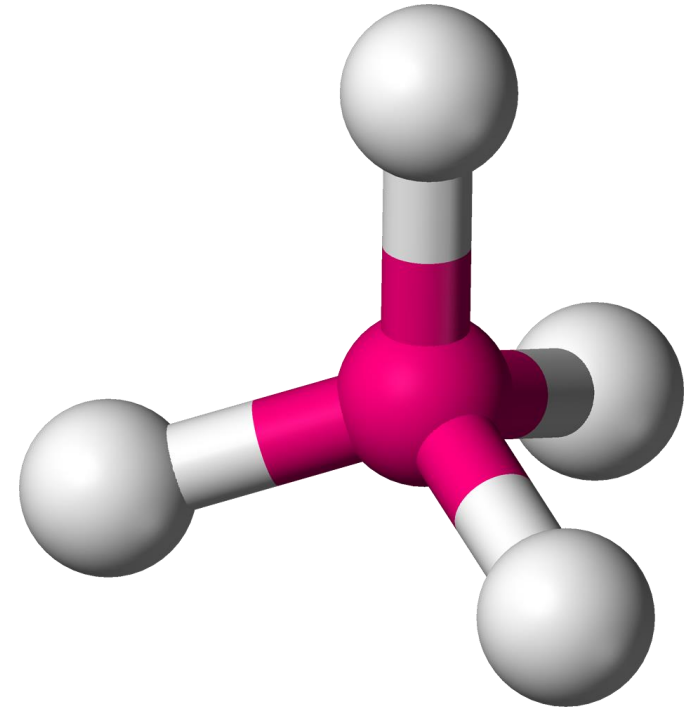
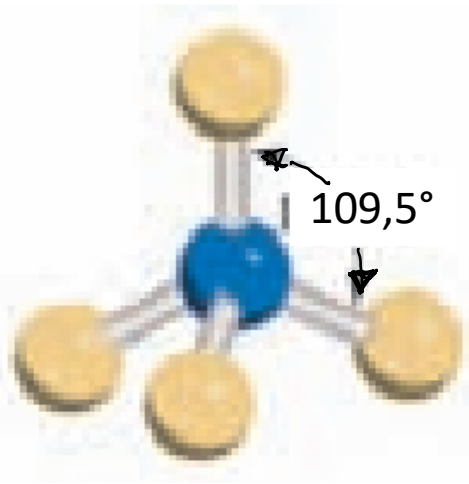
Plana trigonal

AB_4 : metano (CH_4)

La estructura de Lewis del metano es:

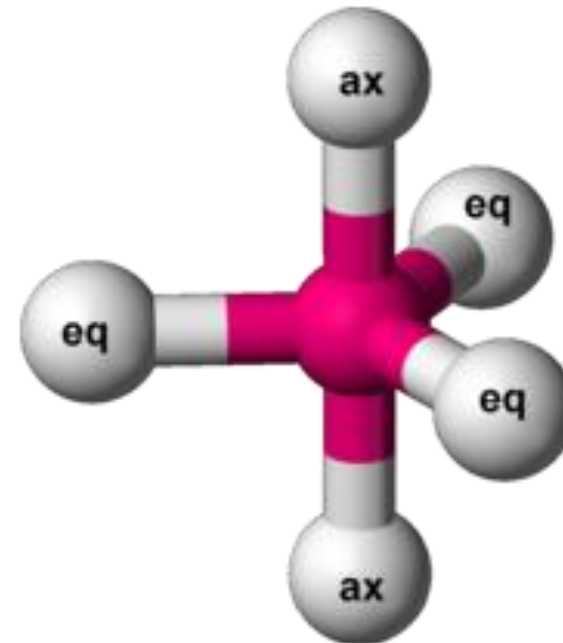
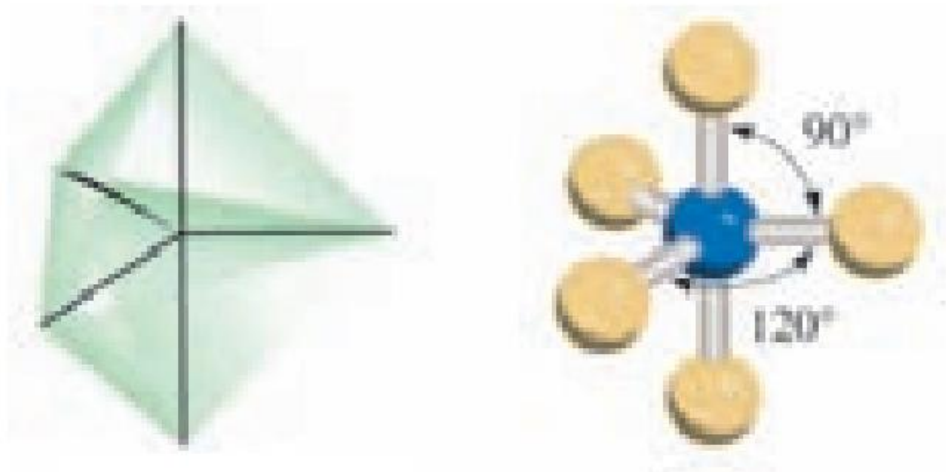
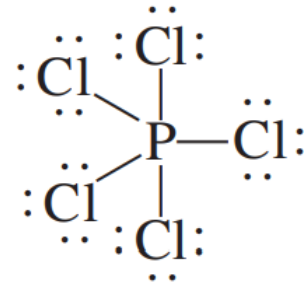


Tetraédrica



AB₅: pentacloruro de fósforo (PCl₅)

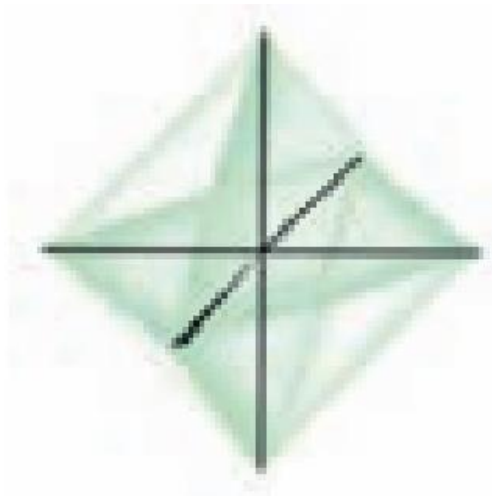
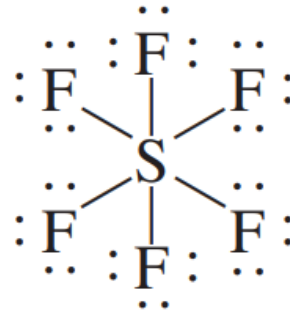
La estructura de Lewis del pentacloruro de fósforo (en la fase gaseosa) es



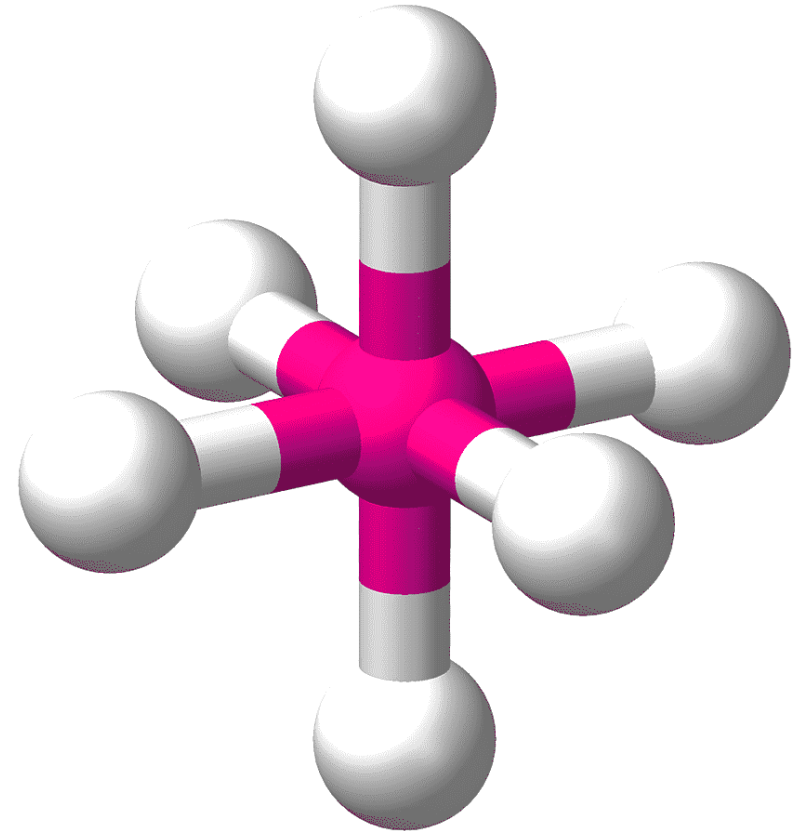
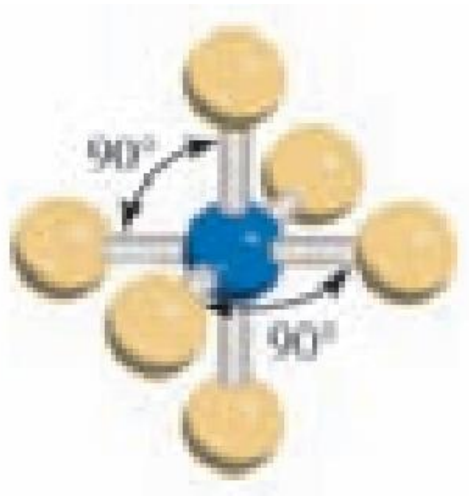
Bipiramidal trigonal

AB₆: hexafluoruro de azufre (SF₆)

La estructura de Lewis del hexafluoruro de azufre es



Octaédrica



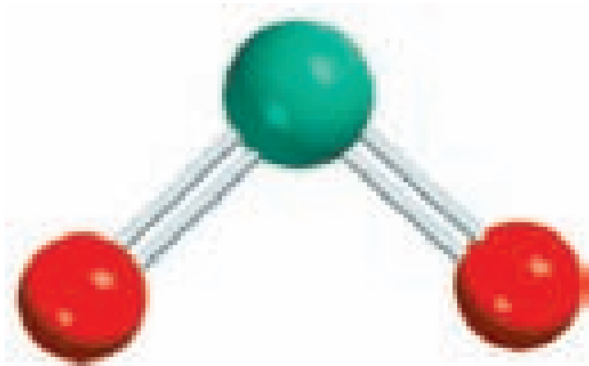
Moléculas en las que el elemento central tiene uno o más pares de electrones no compartidos

Las fuerzas de repulsión disminuyen de acuerdo al siguiente orden:

repulsión de par libre vs. par libre $>$ repulsión de par libre vs. par enlazante $>$ repulsión de par enlazante vs. par enlazante

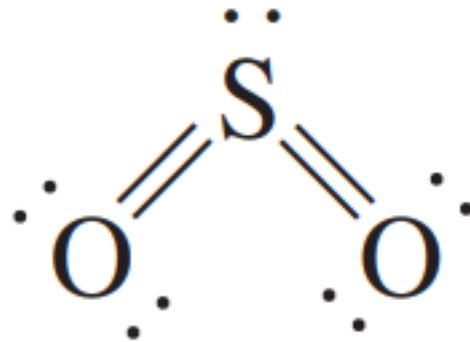
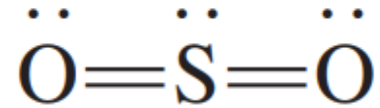
AB₂E: dióxido de azufre (SO₂)

La estructura de Lewis del dióxido de azufre es



SO₂

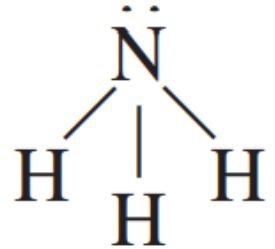
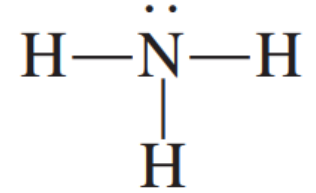
Angular



**El ángulo OSO es menor a 120°
debido a la mayor repulsión del
par de electrones no enlazante**

AB₃E: amoniac (NH₃)

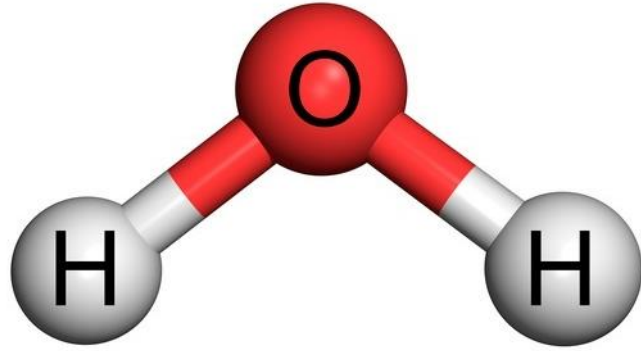
La molécula de amoniac contiene tres pares enlazantes y un par no enlazante:



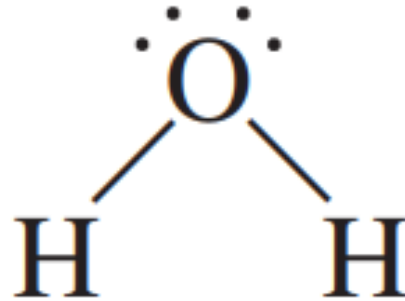
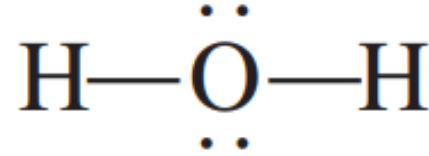
Piramidal trigonal

AB₂E₂: agua (H₂O)

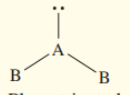
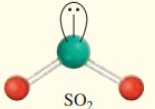
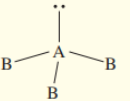
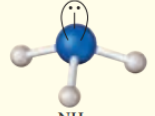
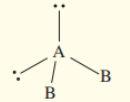
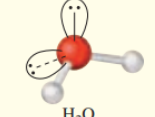
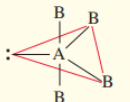
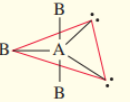
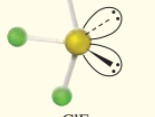
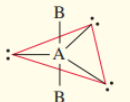
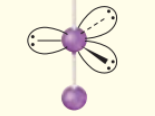
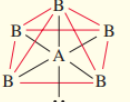
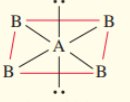
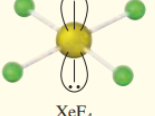
Una molécula de agua contiene dos pares enlazantes y dos pares libres:



Angular



104,5°

TABLA 10.2 Geometría de moléculas y iones sencillos en los cuales el átomo central tiene uno o más pares libres						
Clase de molécula	Número total de pares de electrones	Número de pares enlazantes	Número de pares libres	Distribución de los pares de electrones	Geometría de la molécula o ion	Ejemplos
AB_2E	3	2	1	 Plana trigonal	Angular	 SO_2
AB_3E	4	3	1	 Tetraédrica	Piramidal trigonal	 NH_3
AB_2E_2	4	2	2	 Tetraédrica	Angular	 H_2O
AB_4E	5	4	1	 Bipiramidal trigonal	Tetraédrica distorsionada (o de "sube y baja")	 SF_4
AB_3E_2	5	3	2	 Bipiramidal trigonal	Con forma de T	 ClF_3
AB_2E_3	5	2	3	 Bipiramidal trigonal	Lineal	 I_3^-
AB_5E	6	5	1	 Octaédrica	Piramide cuadrada	 BrF_5
AB_4E_2	6	4	2	 Octaédrica	Plana cuadrada	 XeF_4

* Las líneas a color se utilizan sólo para mostrar la forma global: no representan enlaces.

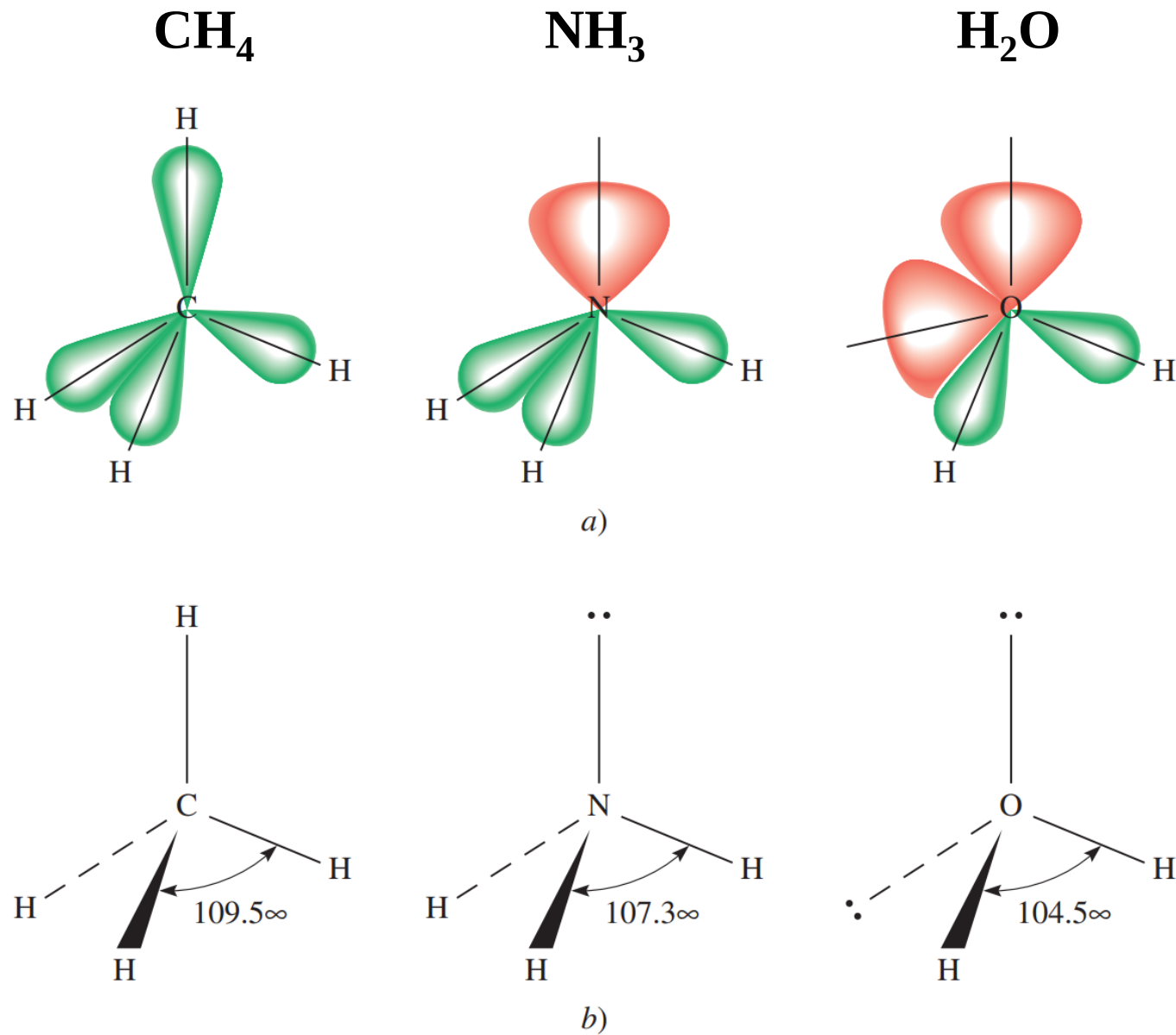
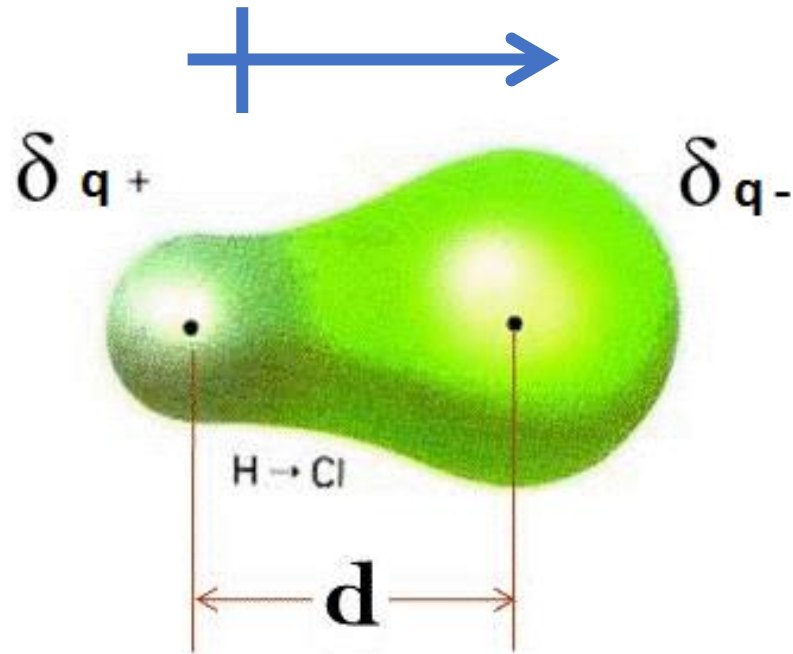


Figura 10.1 *a)* Tamaños relativos de los pares de enlace y los pares libres en CH₄, NH₃ y H₂O. *b)* Los ángulos de enlace en CH₄, NH₃ y H₂O. Observe que las líneas punteadas representan los ejes de los enlaces por detrás del plano del papel, las líneas como cuñas representan los ejes de los enlaces ubicados por delante del plano del papel, y las líneas delgadas representan enlaces en el plano del papel.

Cuando dos átomos diferentes forman un enlace covalente se puede desplazar la nube electrónica hacia el átomo más electronegativo (enlace covalente polar). Una medida cuantitativa de la polaridad de un enlace es el **Momento dipolar (μ)**. Se expresa en unidades Debye (D).

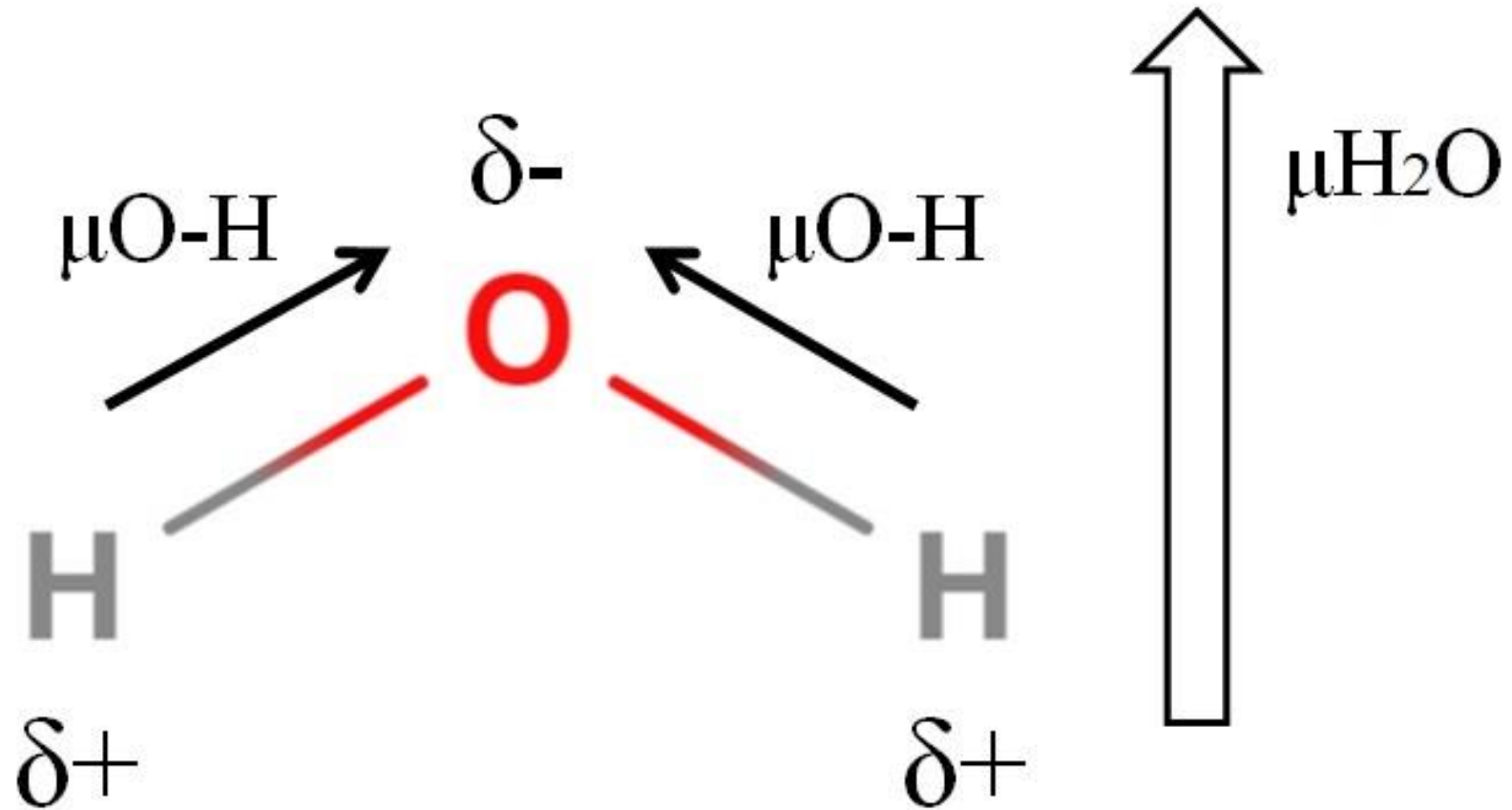


$$\mu = d \cdot q$$

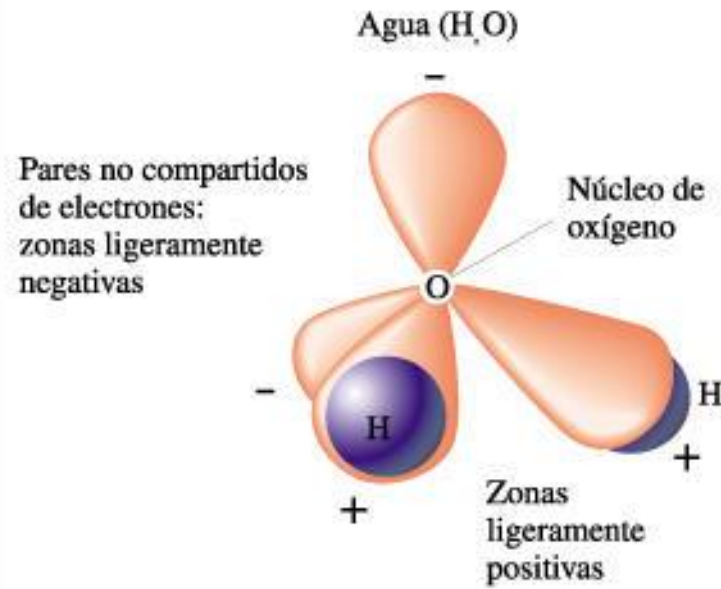


Peter Debye, físico-químico estadounidense (1884-1966)

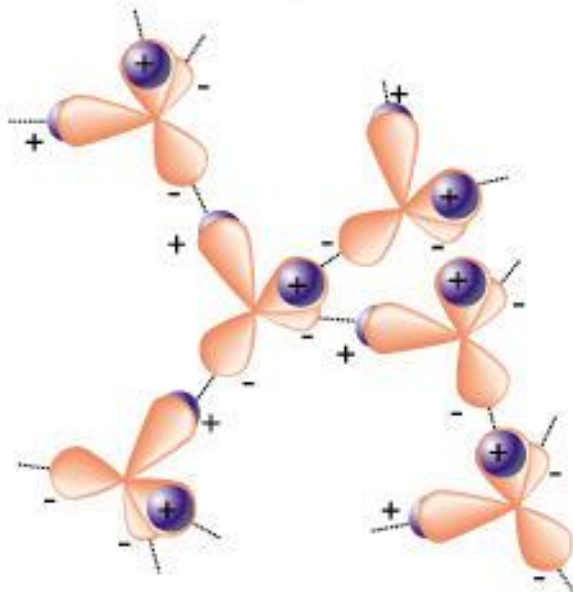
El agua es una molécula polar



Momento dipolar del agua: 1,85 D



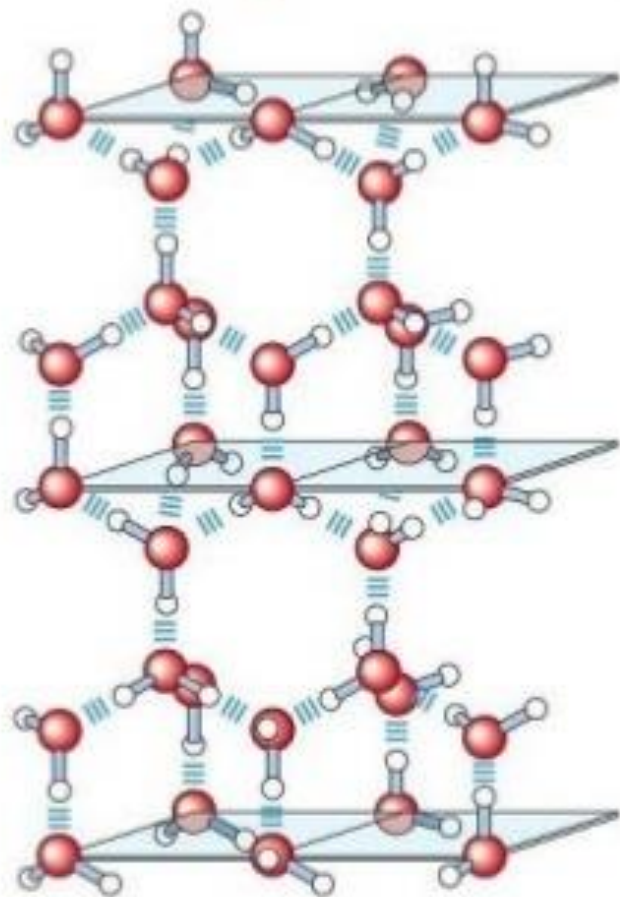
(a)



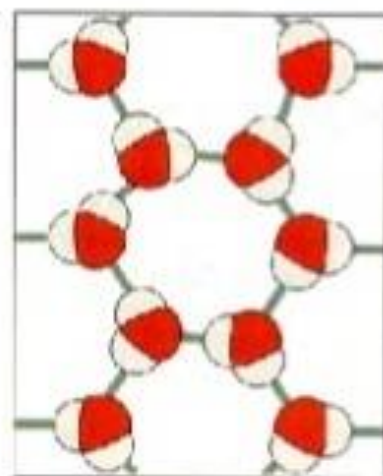
(b)

El agua tiene la capacidad de formar puentes de hidrógeno

Los estados y el “ordenamiento” del agua

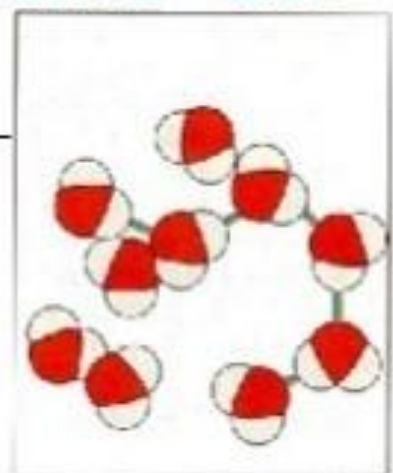


Estructura del agua sólida



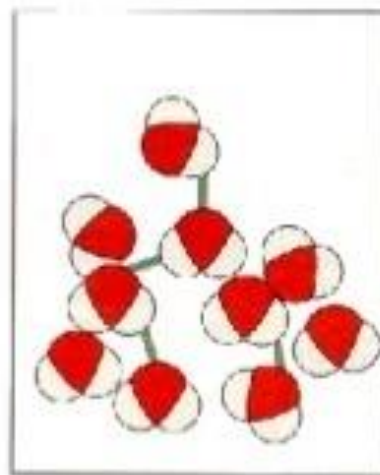
Hielo

Hielo
(-273 a 0 °C)



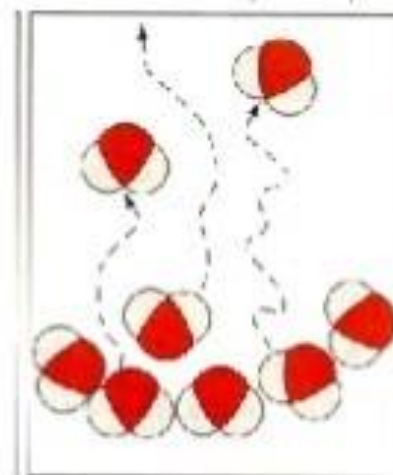
Hielo fundente
(0 °C)

Hielo fundente
(0 °C)



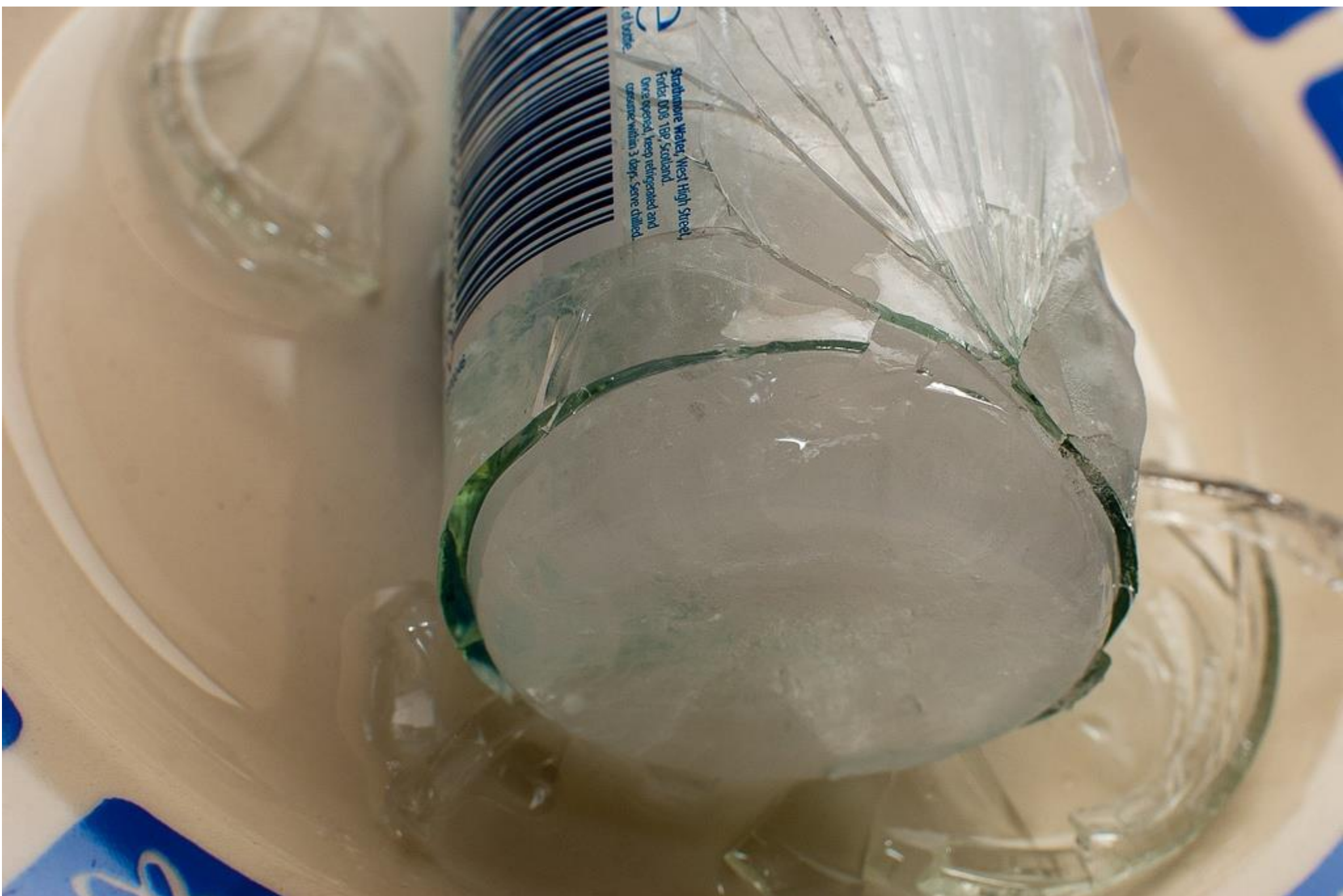
Agua líquida

Agua líquida
(0 a 100 °C)



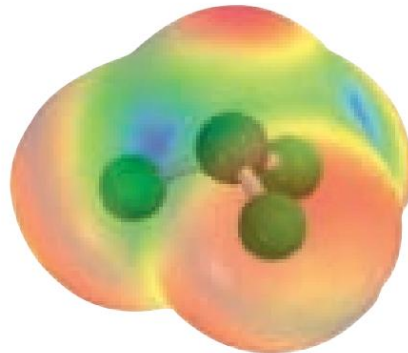
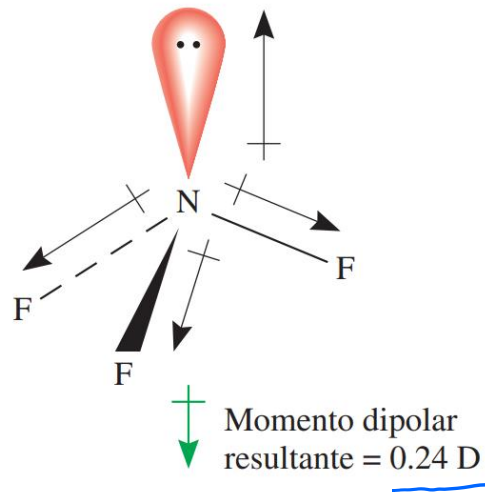
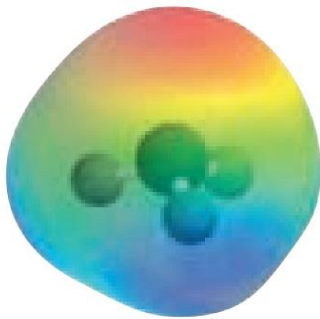
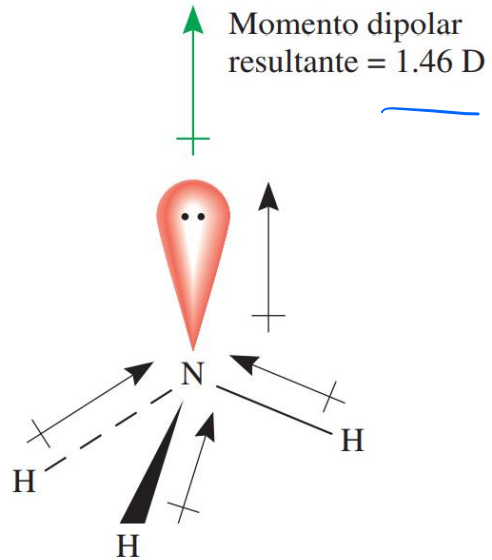
Agua en ebul
(100 °C)

Agua en
evaporación



Strathmore Water, West High Street,
Forfar, DD8 1EP, Scotland.
Once opened, keep refrigerated and
consume within 3 days. Serve chilled.

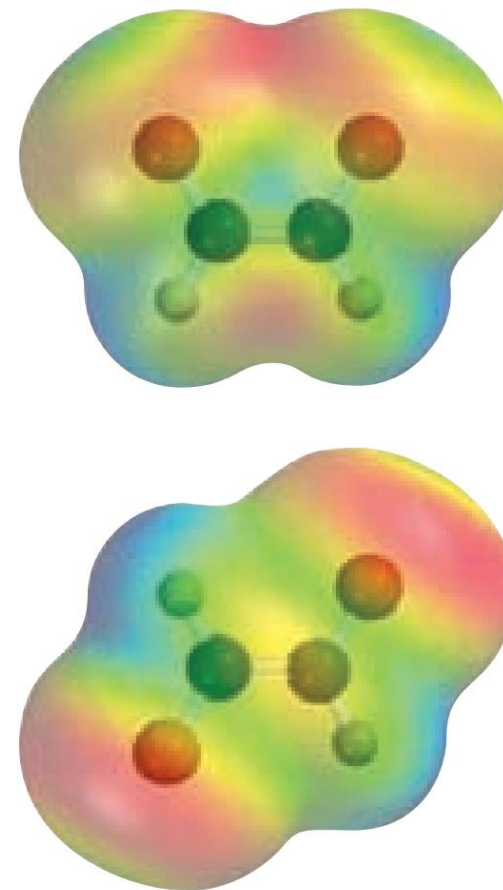
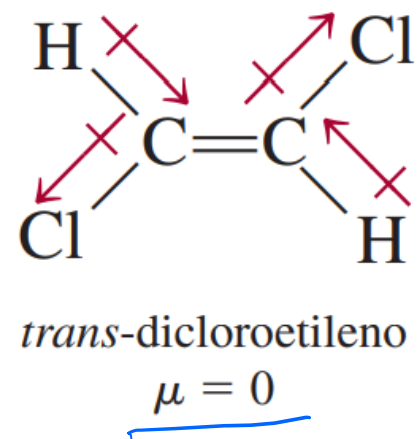
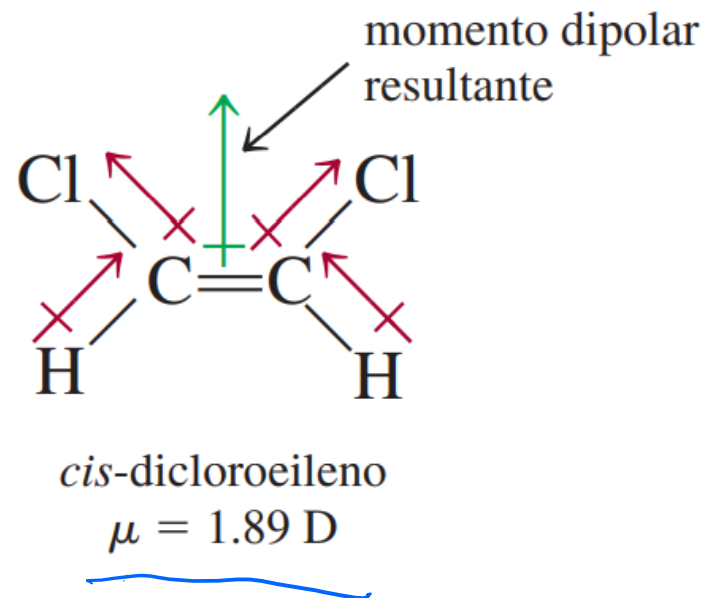
Otras moléculas polares



El **F** (4) es más
electronegativo que el **N** (3)

TABLA 10.3**Momentos dipolares de algunas moléculas**

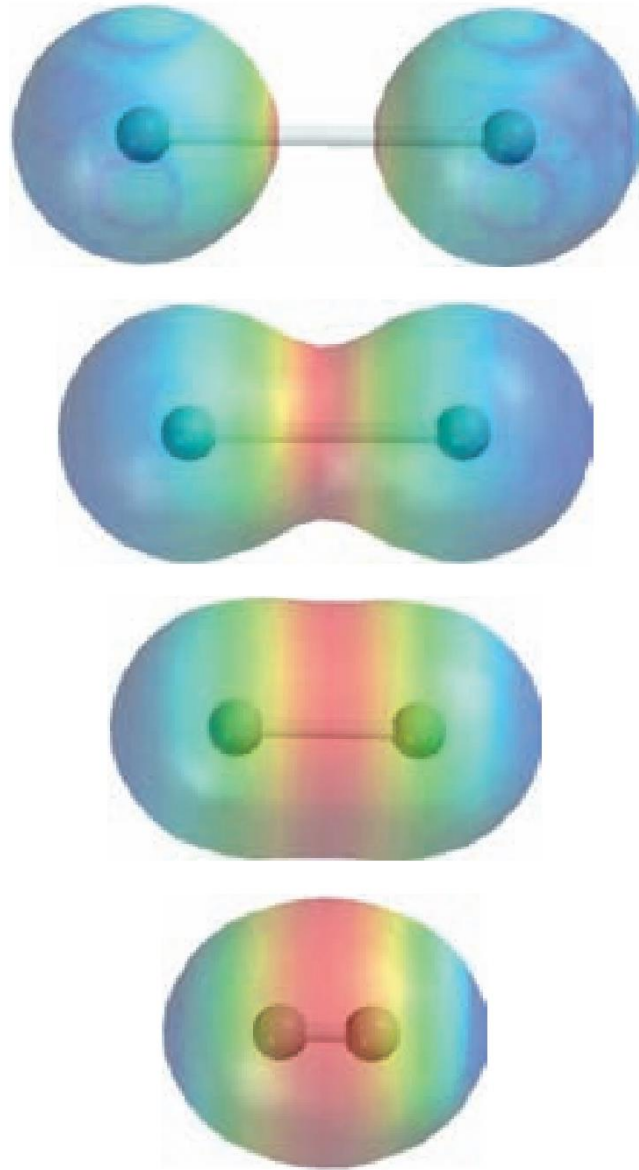
Molécula	Geometría	Momento dipolar
HF	Lineal	1.92
HCl	Lineal	1.08
HBr	Lineal	0.78
HI	Lineal	0.38
H ₂ O	Angular	1.87
H ₂ S	Angular	1.10
NH ₃	Piramidal trigonal	1.46
SO ₂	Angular	1.60



En el *cis*-dicloroetileno (parte superior), los momentos de enlace se refuerzan entre sí y la molécula es polar. Lo opuesto se observa para el *trans*-dicloroetileno y la molécula es no polar.

Volvamos al **enlace covalente**

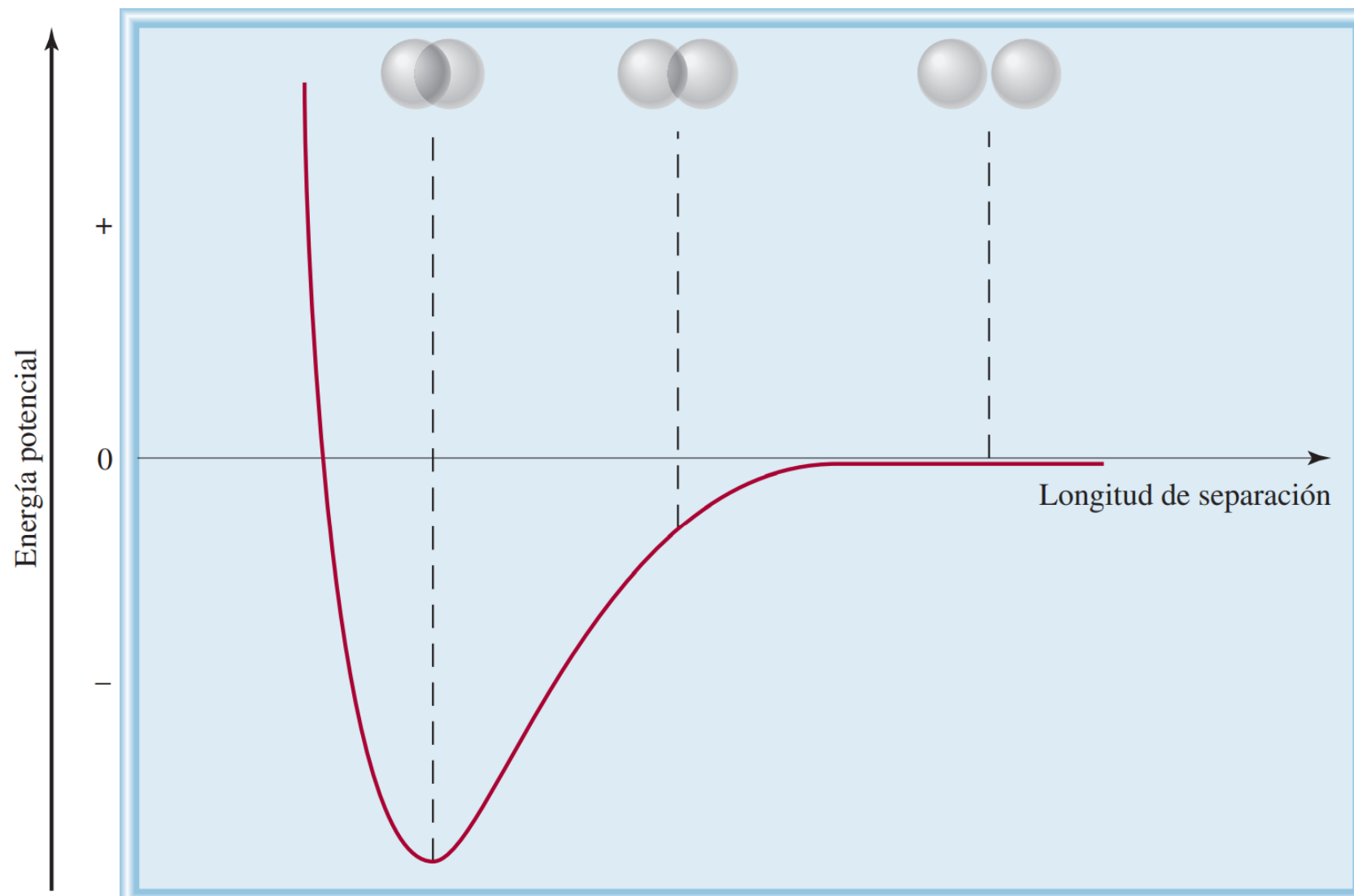




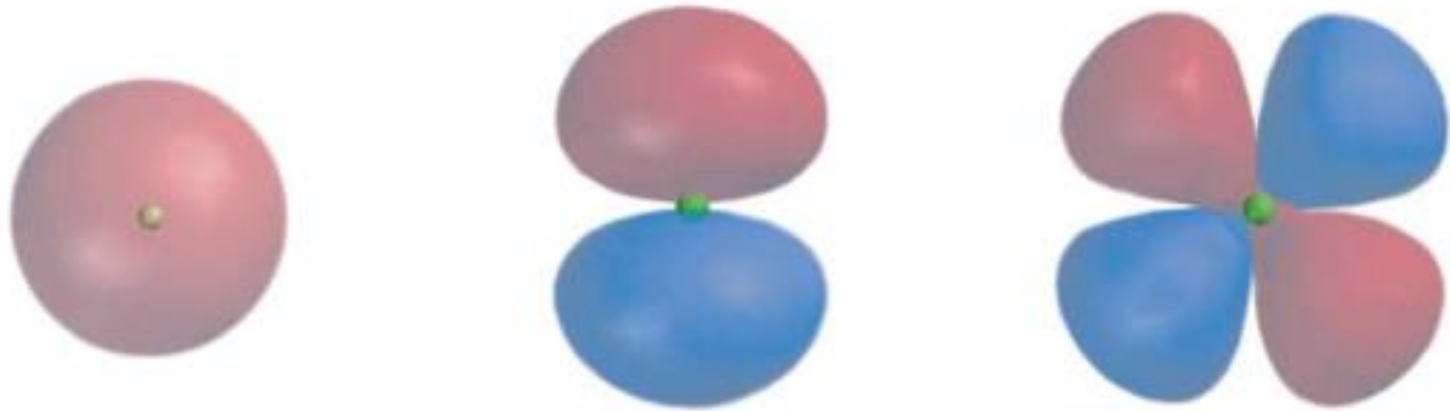
A mayor cercanía aumenta la repulsión entre los núcleos atómicos. La distancia de mayor estabilidad para el enlace H-H es de 74 pm ($0,7 \text{ \AA}$)



Figura 10.5 Cambio en la energía potencial de dos átomos de H con respecto de la longitud de separación. En el punto de energía potencial mínima, la molécula de H_2 se encuentra en su estado más estable y la longitud del enlace es de 74 pm. Las esferas representan los orbitales 1s.



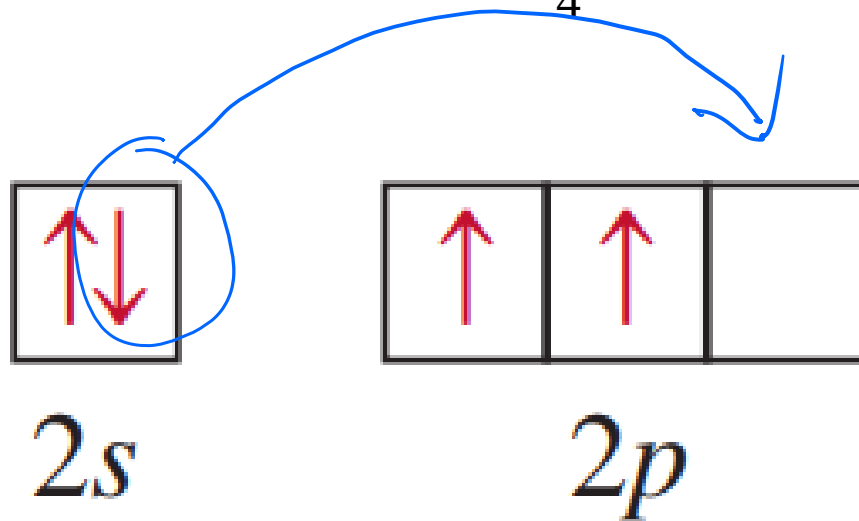
Teoría de Orbitales Híbridos para explicar el enlace covalente



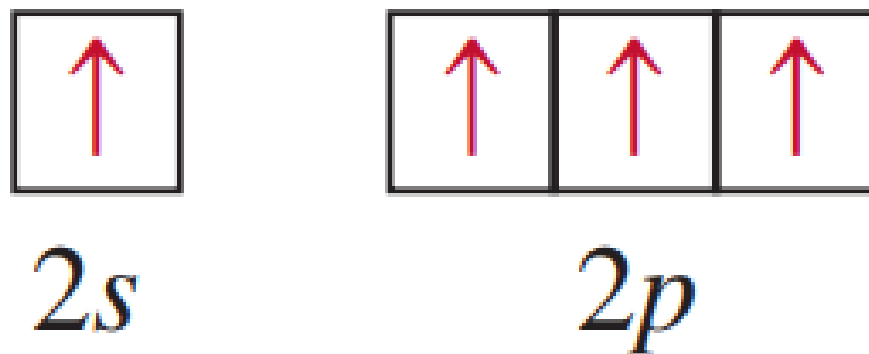
Hibridación de orbitales: se pueden combinar los orbitales atómicos para formar orbitales moleculares

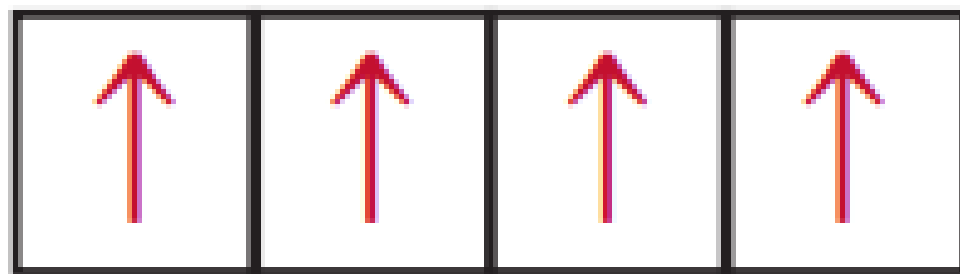
Por ejemplo, la molécula de metano CH_4 tiene cuatro enlaces

Estado fundamental



Estado excitado





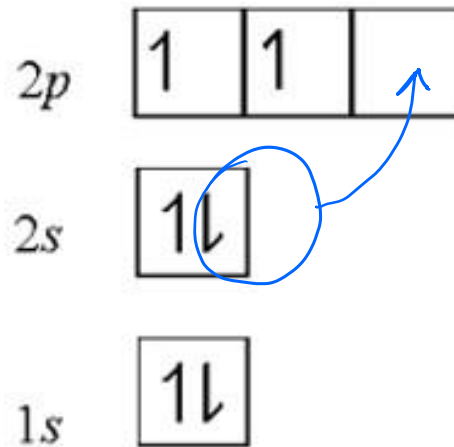
orbitales sp^3

Se forman cuatro **orbitales híbridos sp^3**

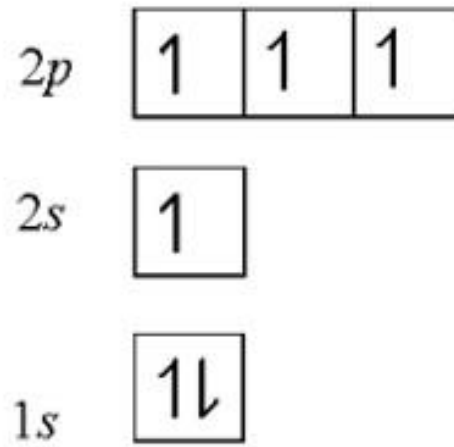
HIBRIDACIÓN sp^3



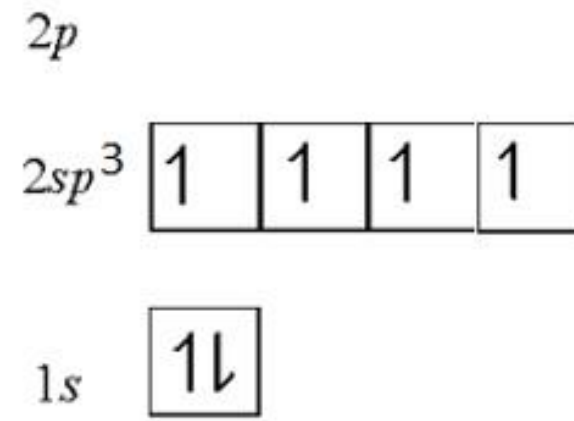
C
Estado fundamental

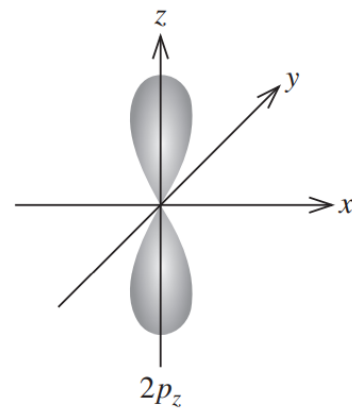
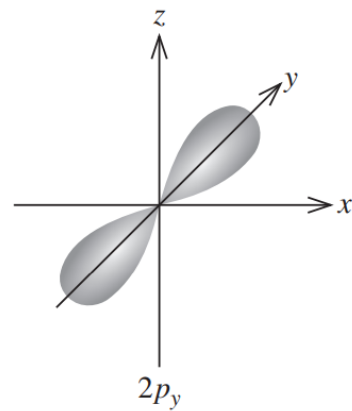
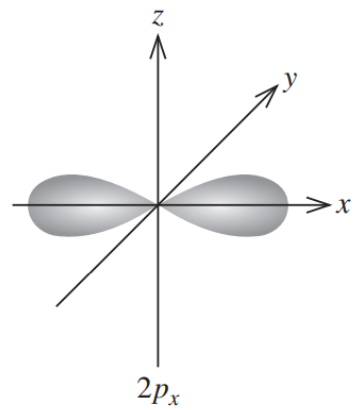
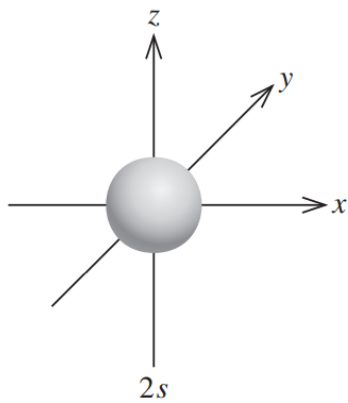


C
Excitado

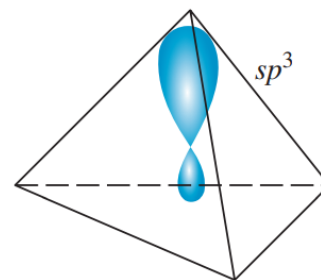
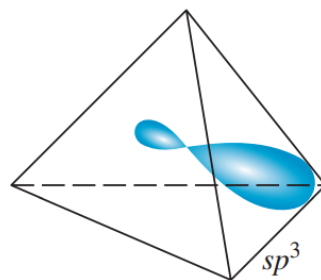
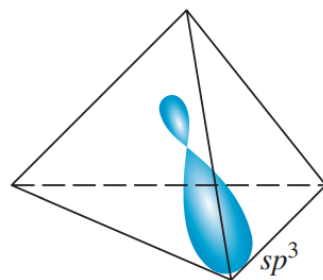
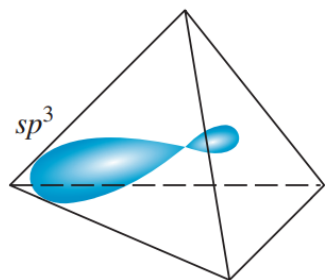


C
Hibridado
 sp^3





Hibridación



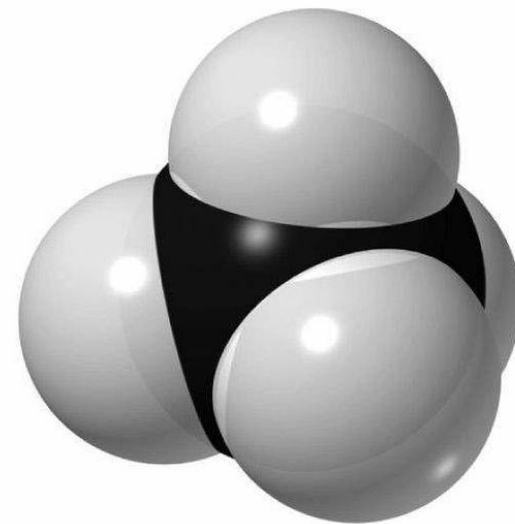
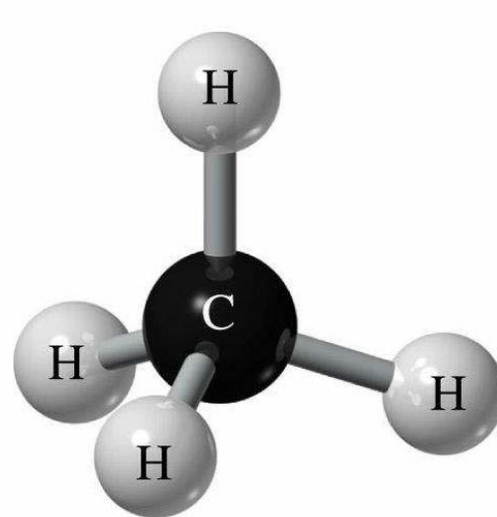
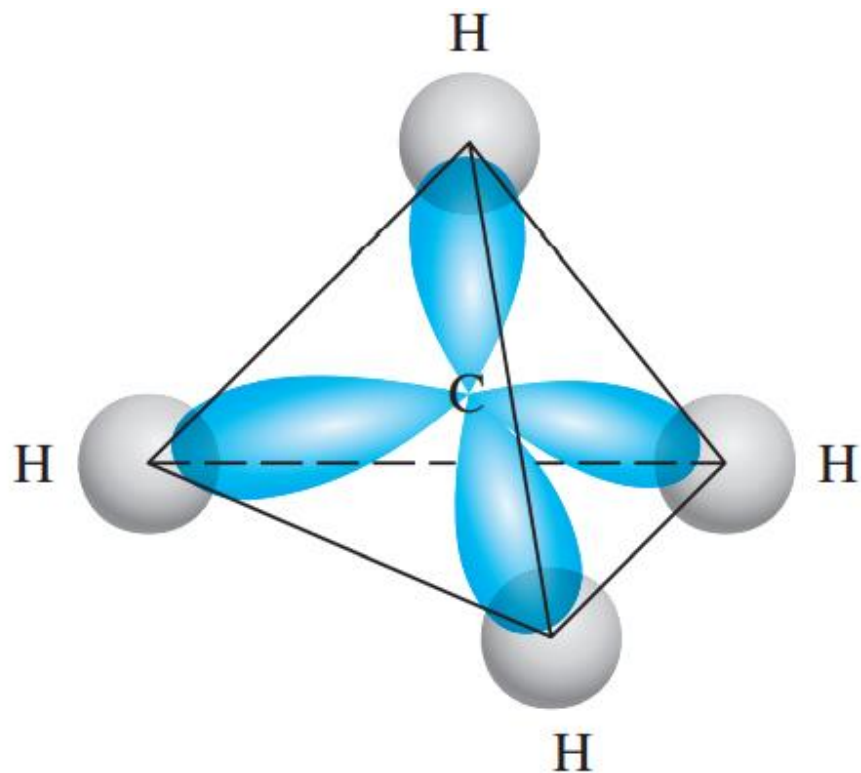


Figura 10.8 Formación de cuatro enlaces entre los orbitales híbridos sp^3 del carbono y los orbitales $1s$ de los hidrógenos, en el CH_4 . Los lóbulos más pequeños no se muestran.

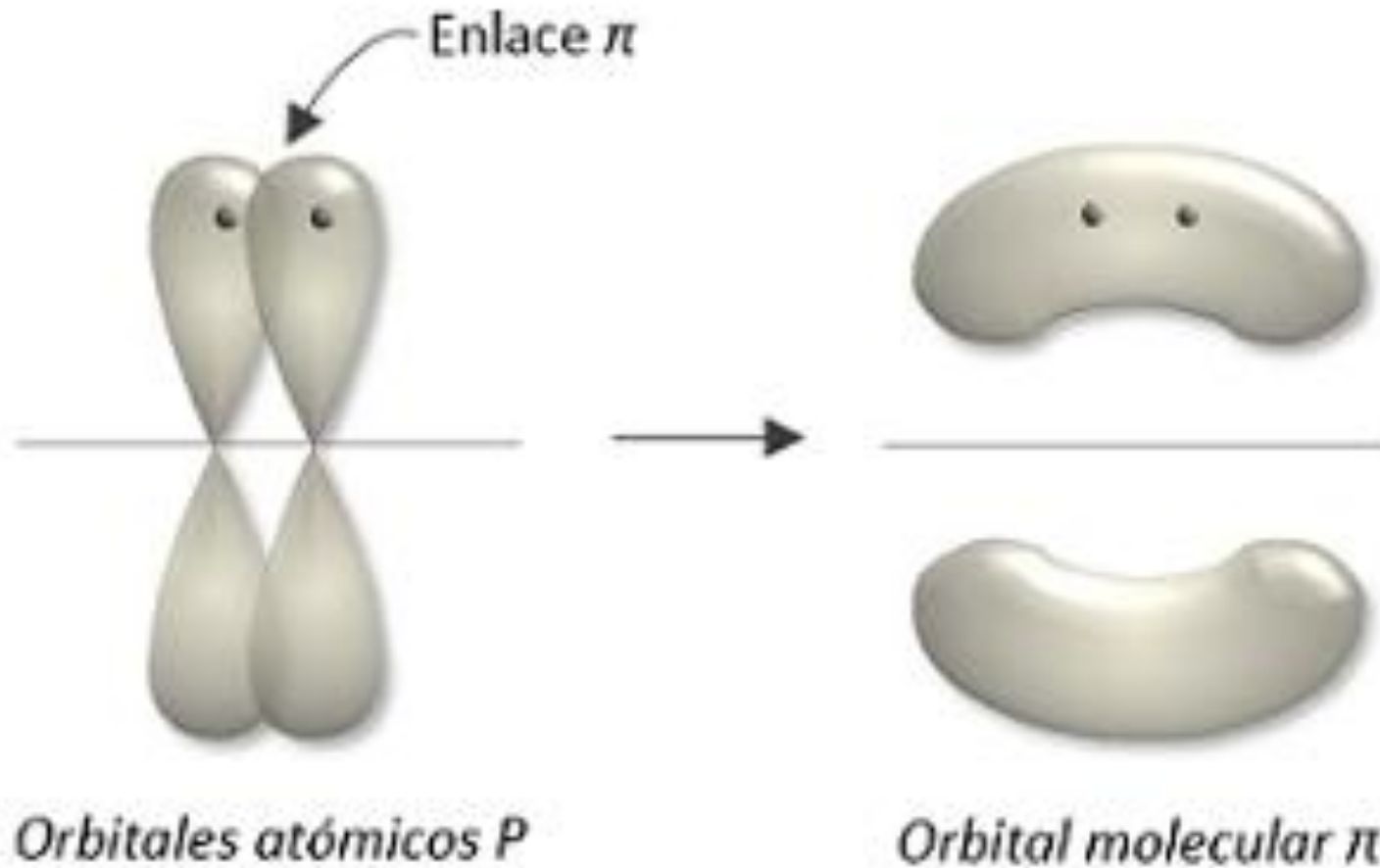
Orbital molecular σ_{p-s} . La unión de un orbital s y uno p

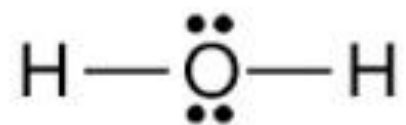


Orbital molecular σ_{p-p} : La unión de dos orbitales p



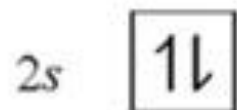
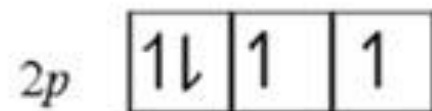
Orbital molecular π : Se forma por la unión de dos orbitales atómicos p paralelos



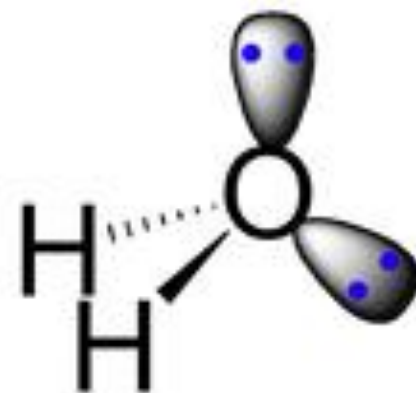
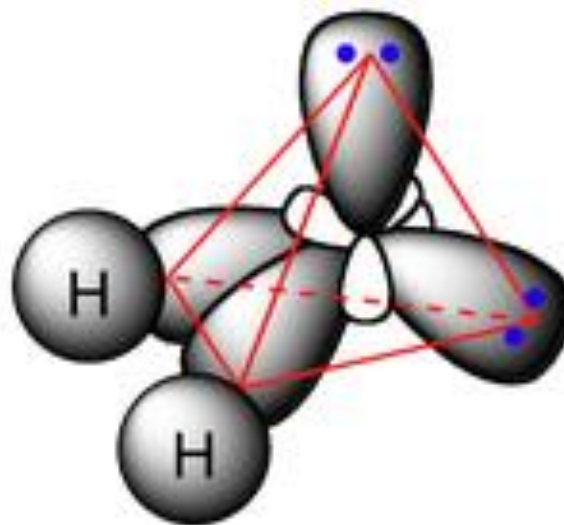
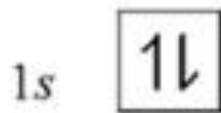
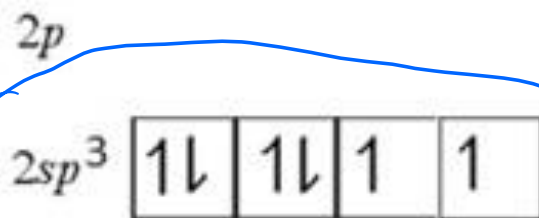


HIBRIDACIÓN sp³

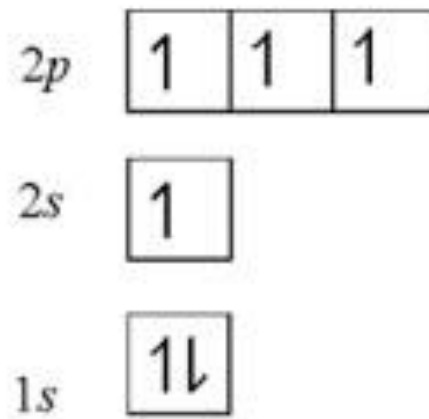
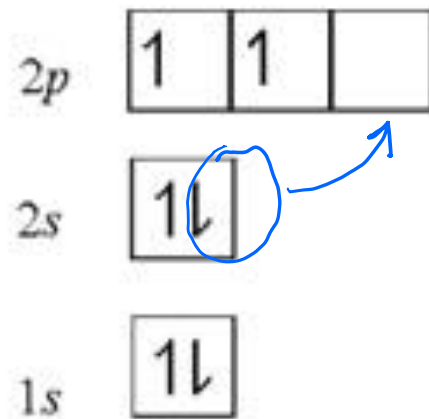
O
Estado fundamental



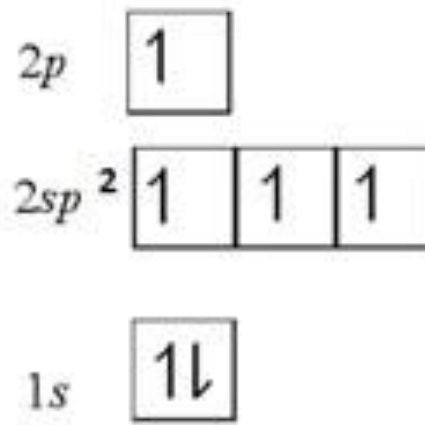
O
Hibridado



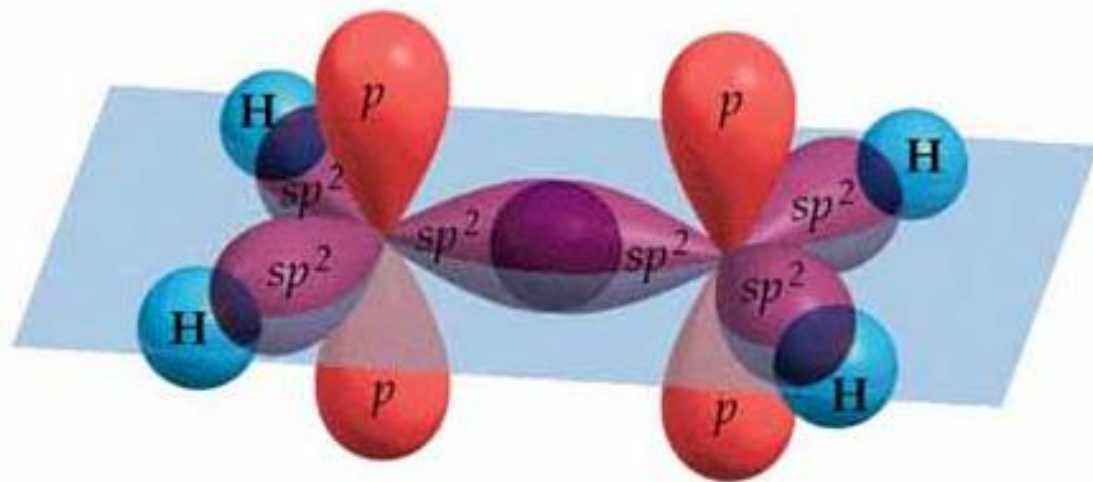
ETENO



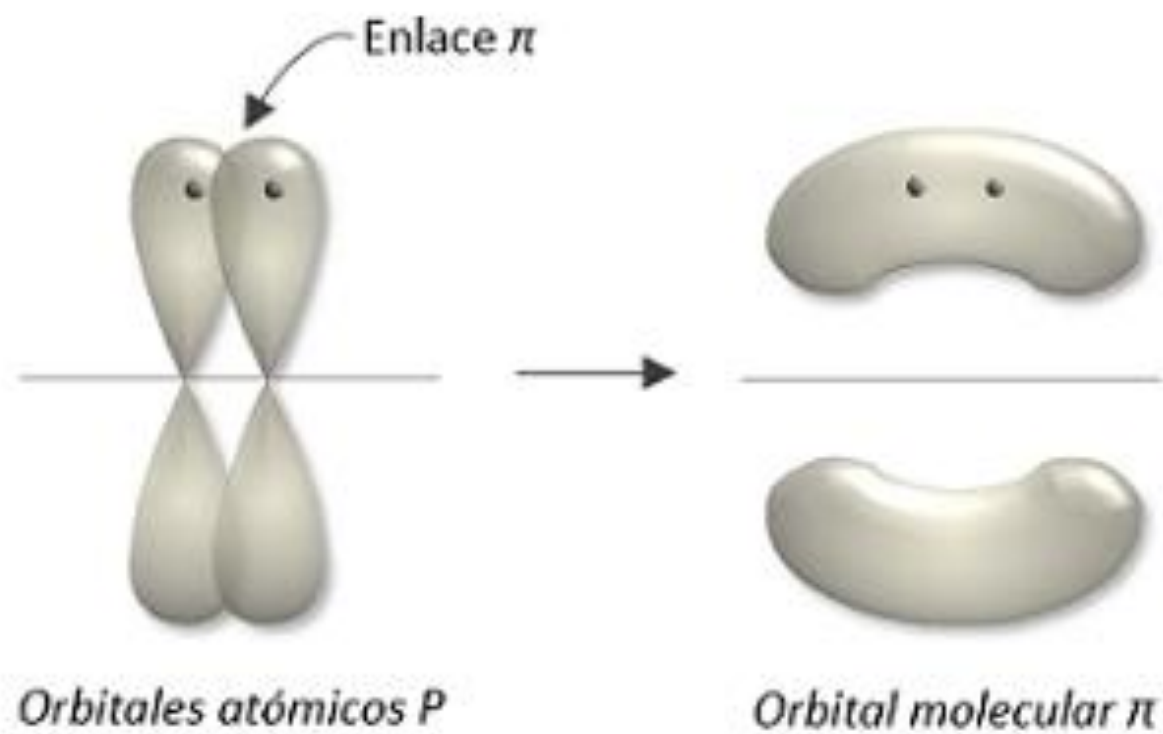
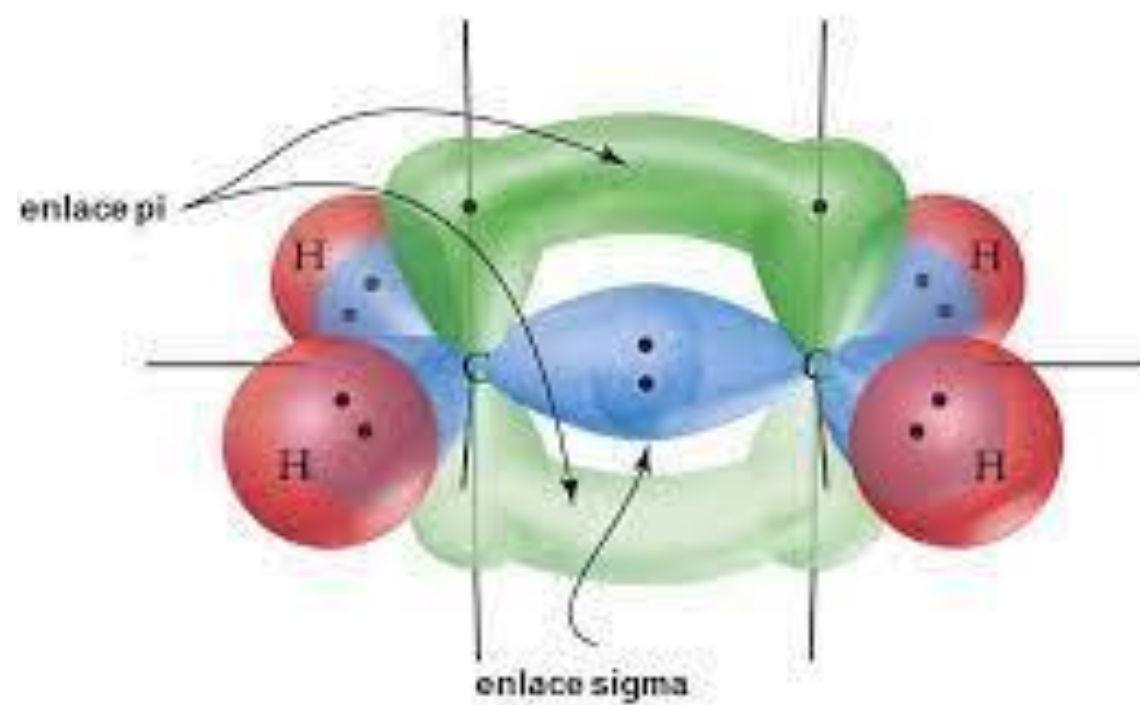
C (sp²)



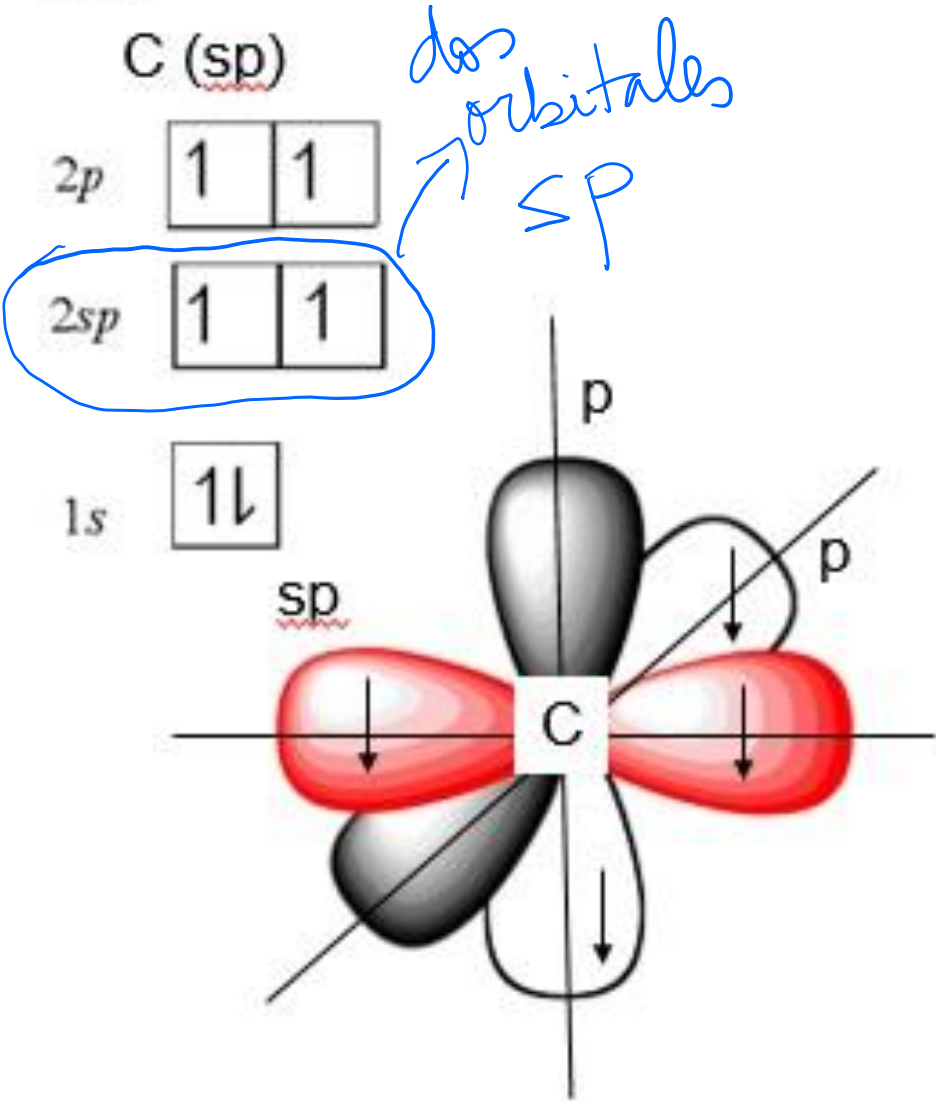
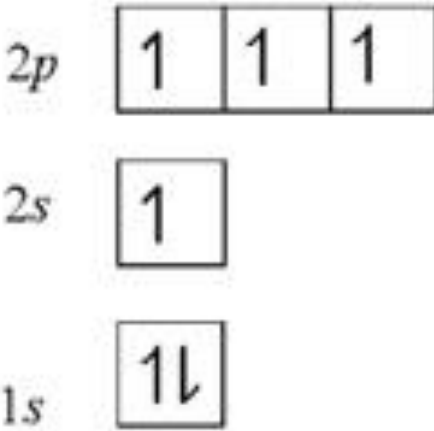
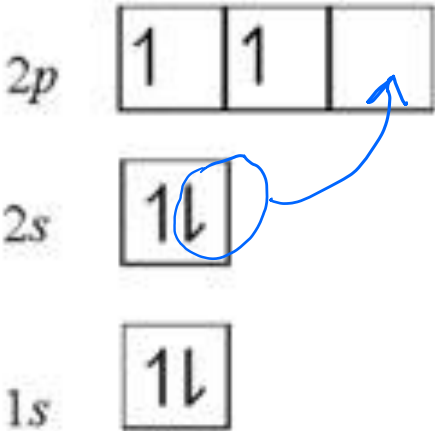
} 3 orbitales híbridos sp²

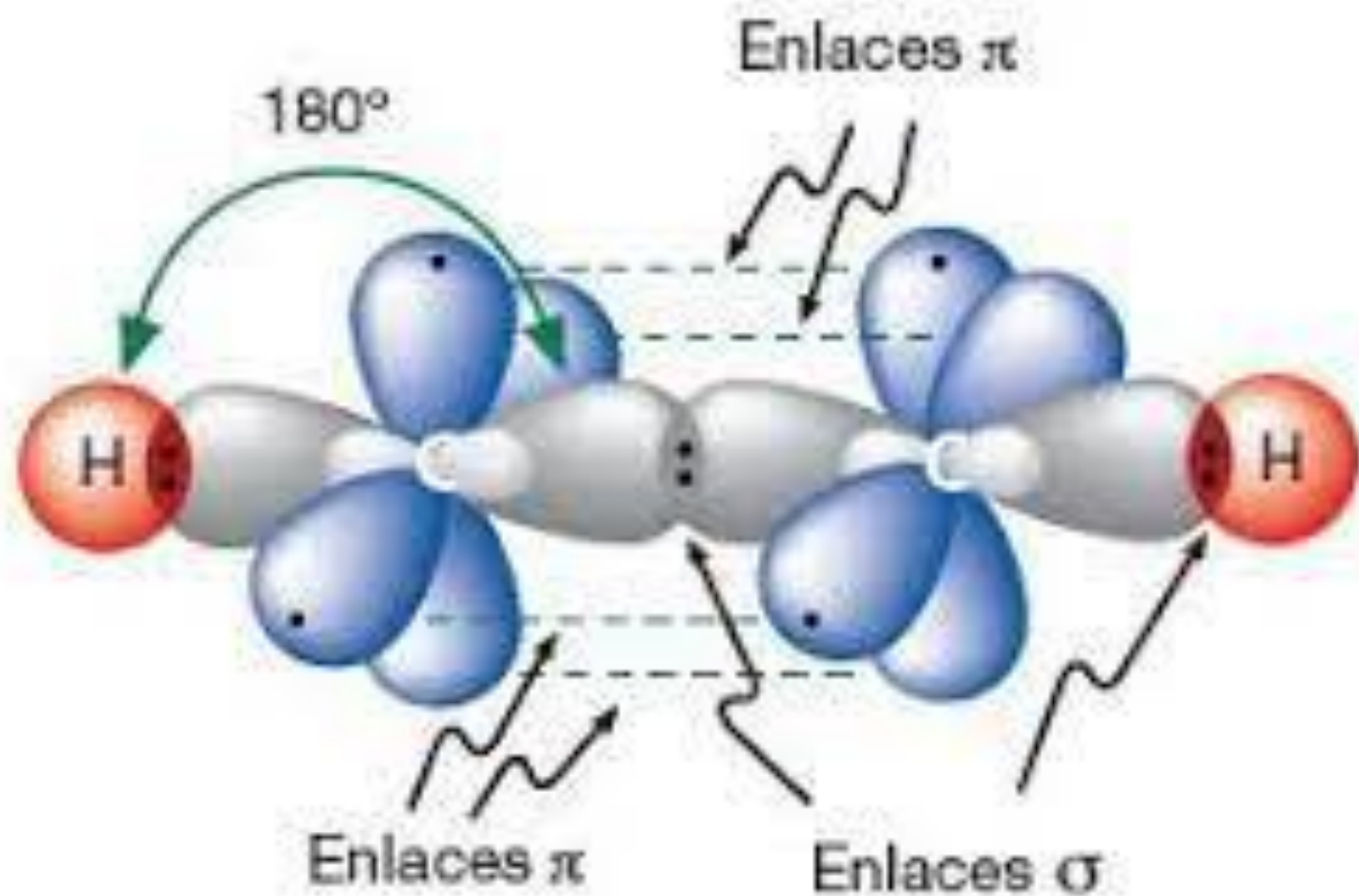
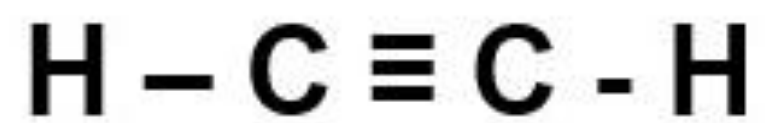


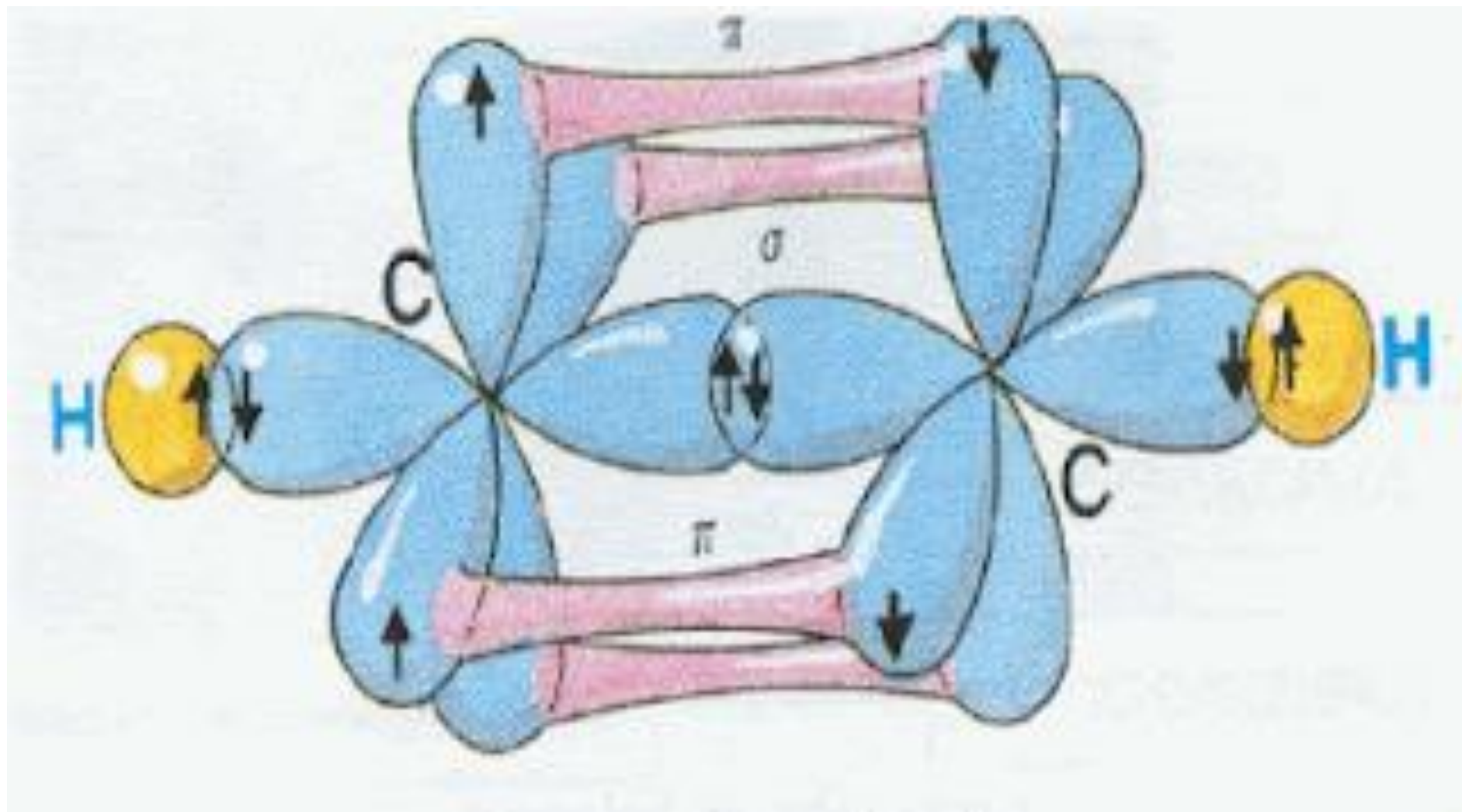
ETENO ($\text{CH}_2=\text{CH}_2$)



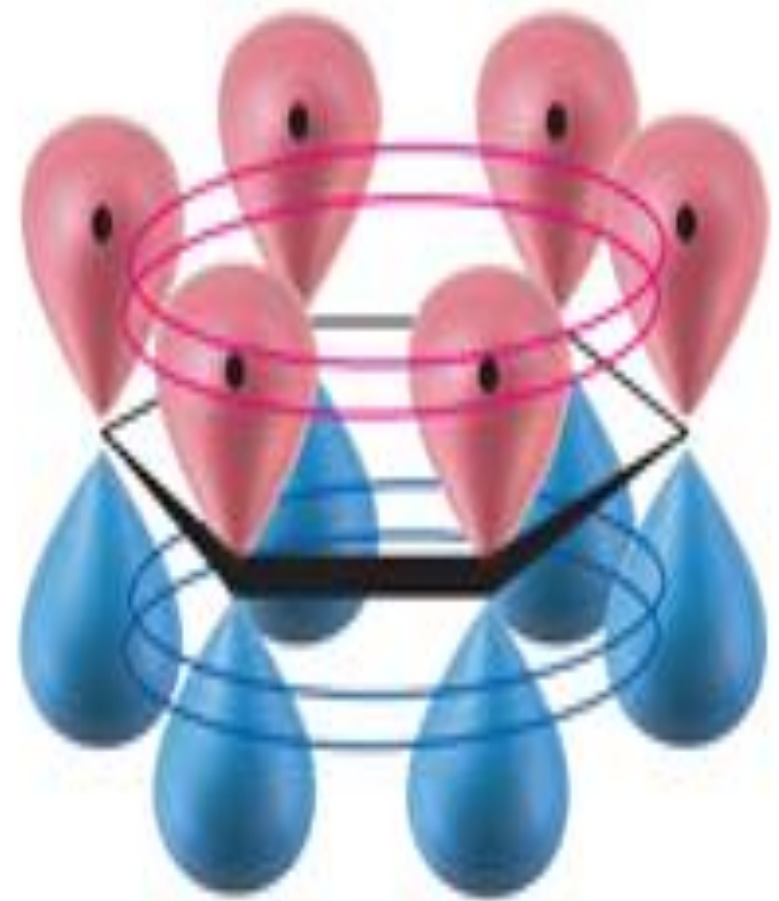
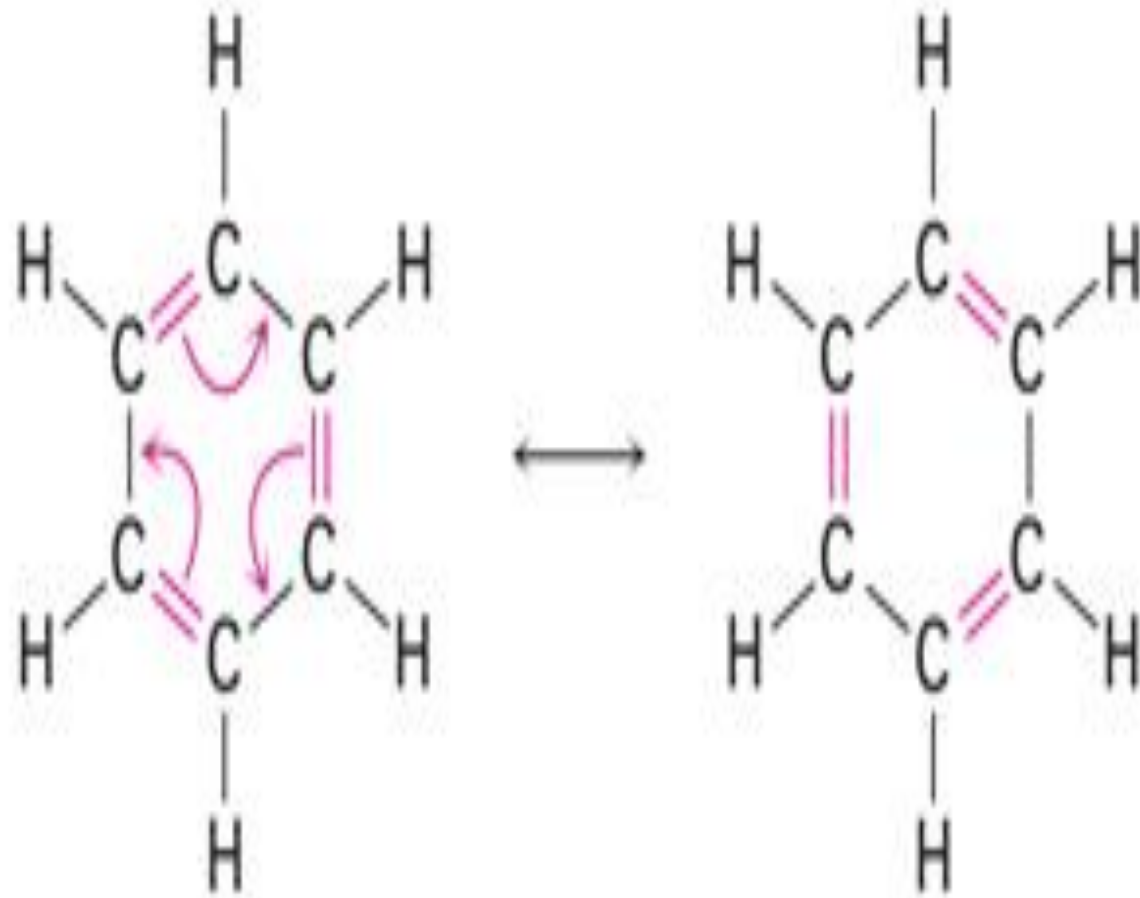
ACETILENO

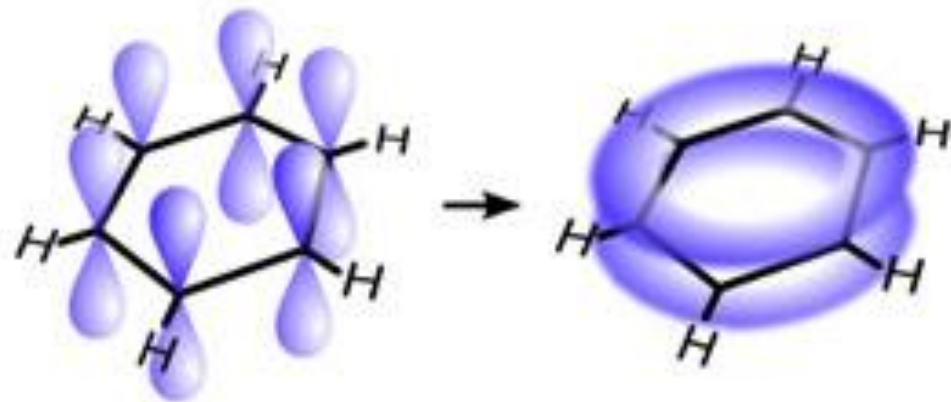
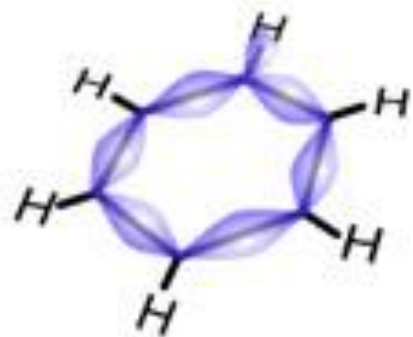
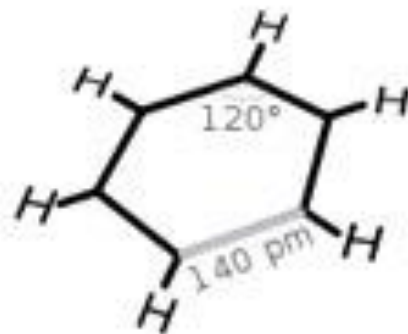
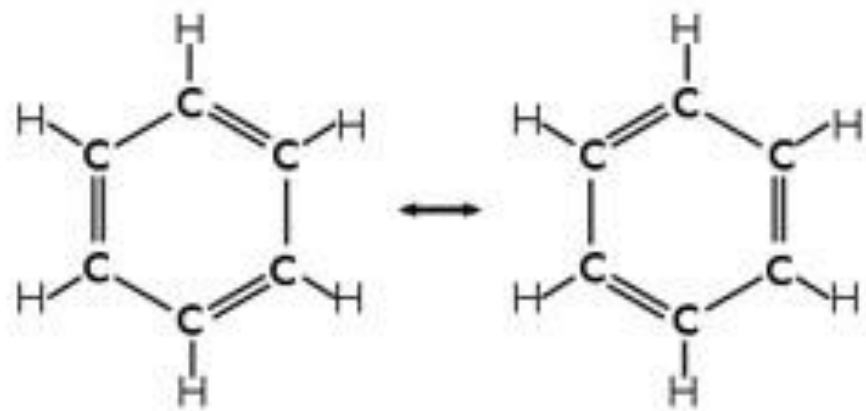
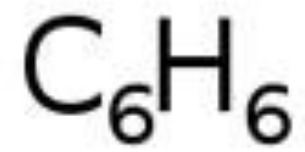


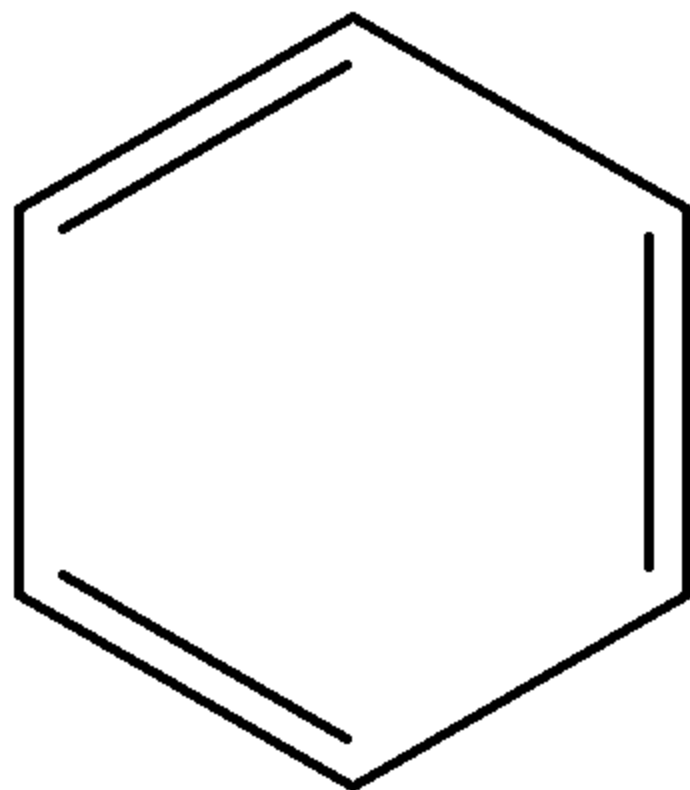


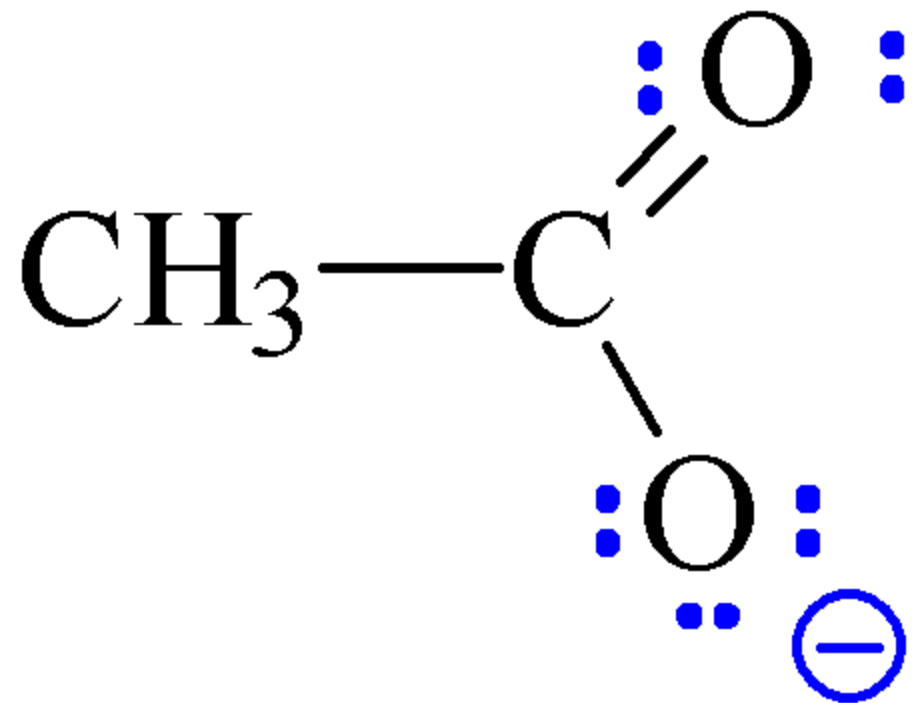


Resonancia. Los electrones se deslocalizan









Ion acetato



β -caroteno

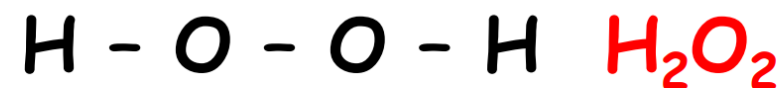
Estado de oxidación: carga aparente que adquiere un átomo cuando forma parte de un compuesto químico

Determinación de estados de oxidación

Estados de oxidación:

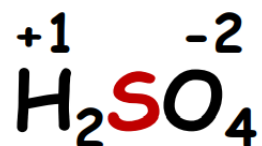
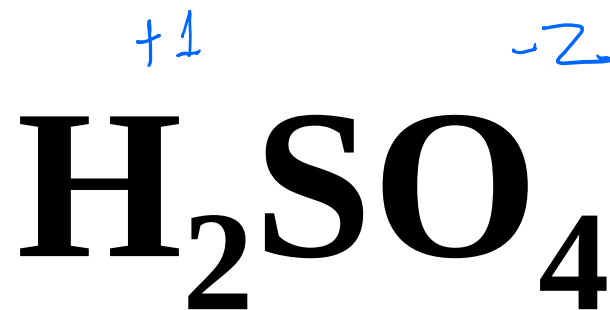
O = -2 excepto en peróxidos -1

H = +1 excepto hidruros -1



Grupo 1 A = +1 (ns^1)

Grupo 2 A = +2 (ns^2)



$+2 +6 -8 = 0$ El ácido sulfúrico es una molécula neutra por tanto la cantidad de cargas (+) y (-) debe ser igual. Con los datos dados, se puede determinar el estado de oxidación de un elemento que tiene varios estados de oxidación

Ácido fosfórico



$$(+)3 + x + 8(-) = 0$$

$$x = +5$$

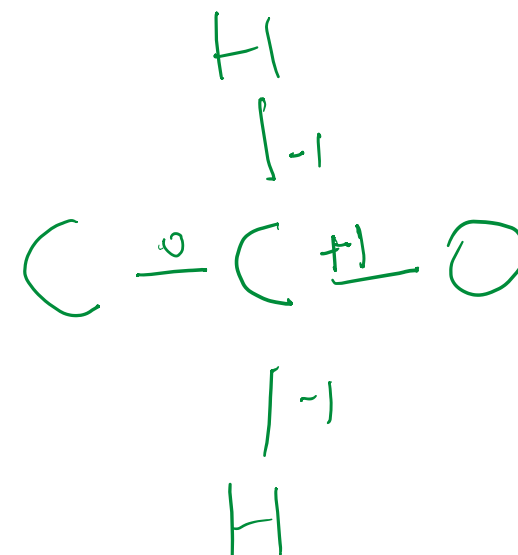
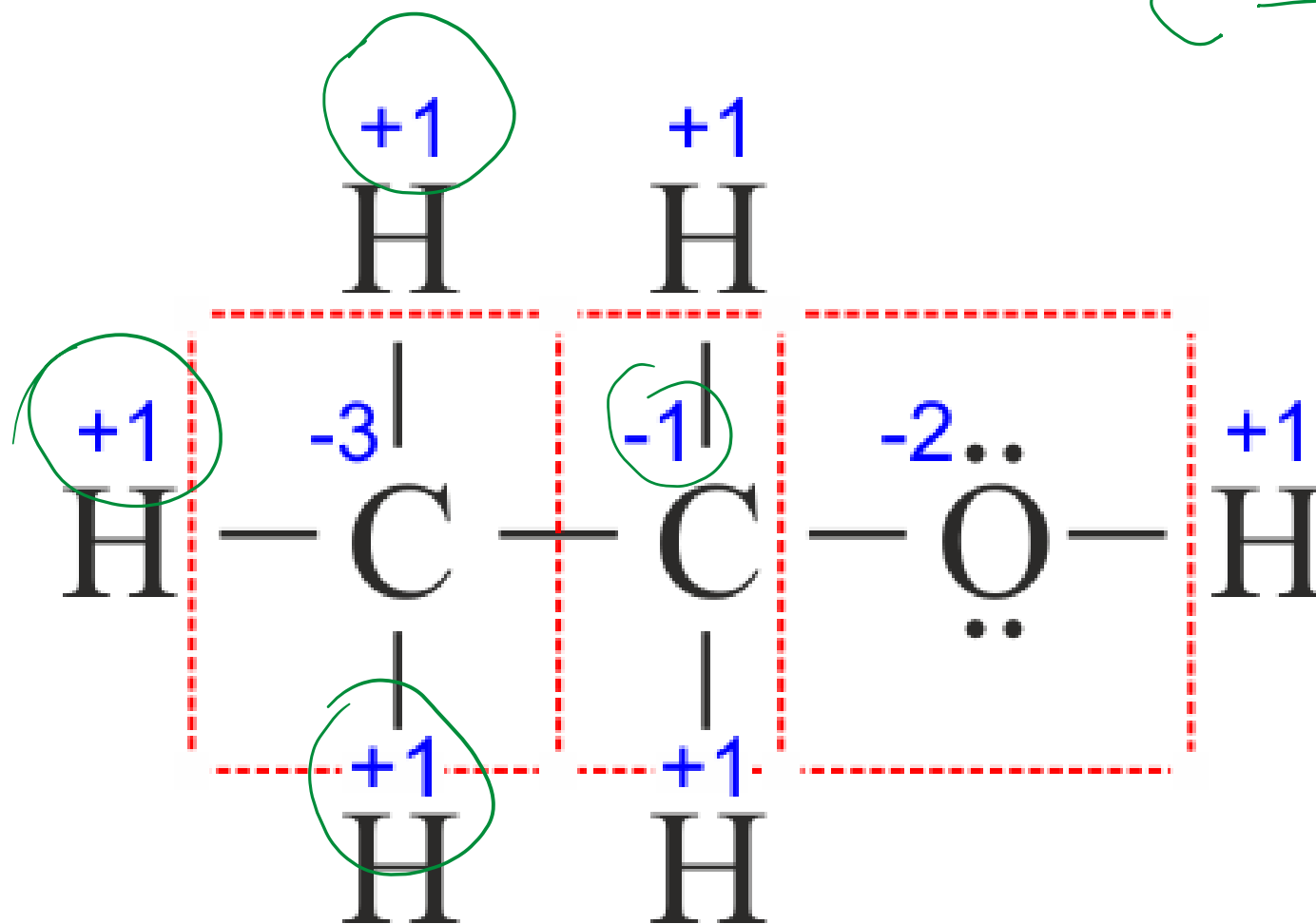
Ácido nítrico



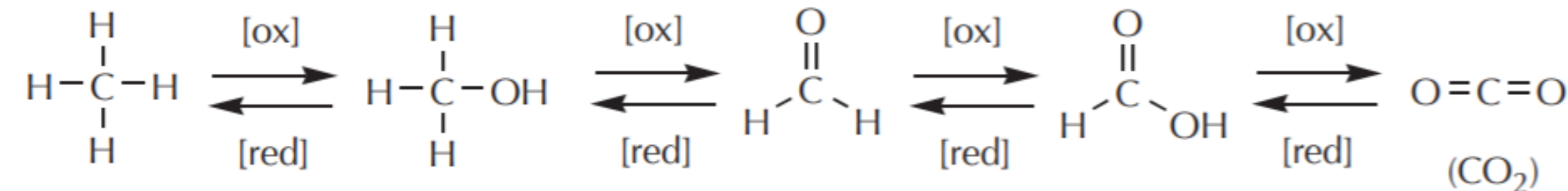
$$(+1)1 + x + (-2)3 = 0$$

$$x = +5$$

Ethanol



OXIDACIÓN



ALCANO

ALCOHOL

ALDEHIDO

ÁCIDO
CARBOXÍLICO

DIÓXIDO DE
CARBONO

Estado más
reducido
(-4)

Estado más
oxidado
(+4)

REDUCCIÓN

