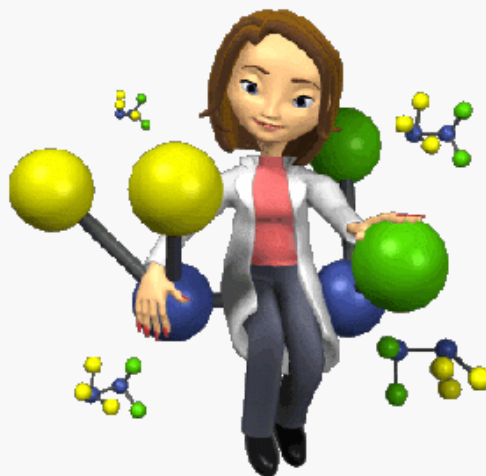


ESTRUCTURA MOLECULAR



QUÍMICA GENERAL
QUÍMICA GENERAL E INORGÁNICA

FACULTAD DE INGENIERÍA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO

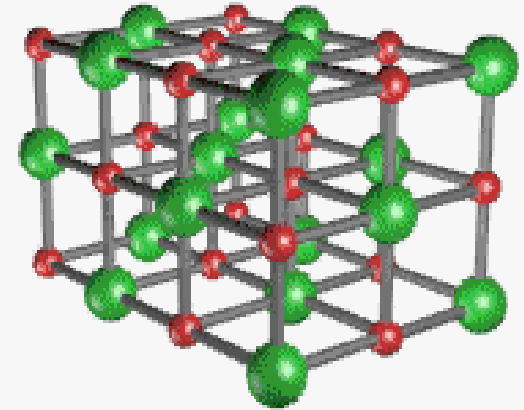
Dra. Graciela Valente

<https://www.youtube.com/watch?v=MRgJ-a6xK3E&t=1s>

ENLACE QUÍMICO

El enlace químico es la unión entre átomos

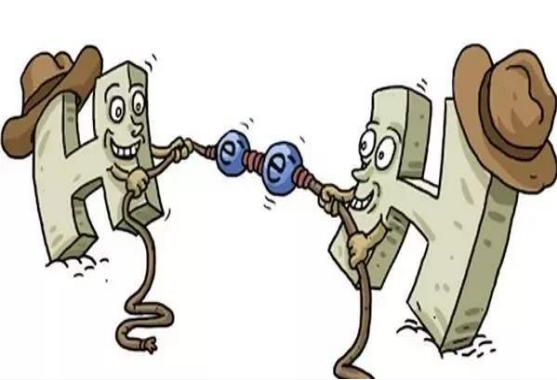
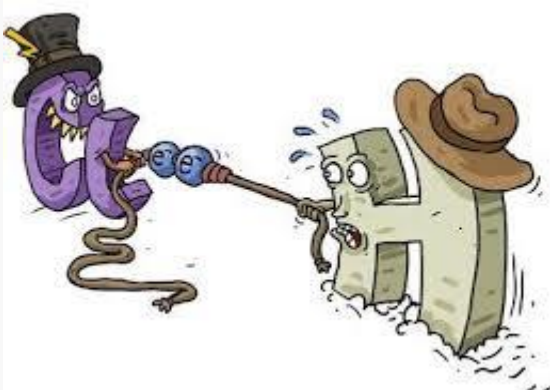
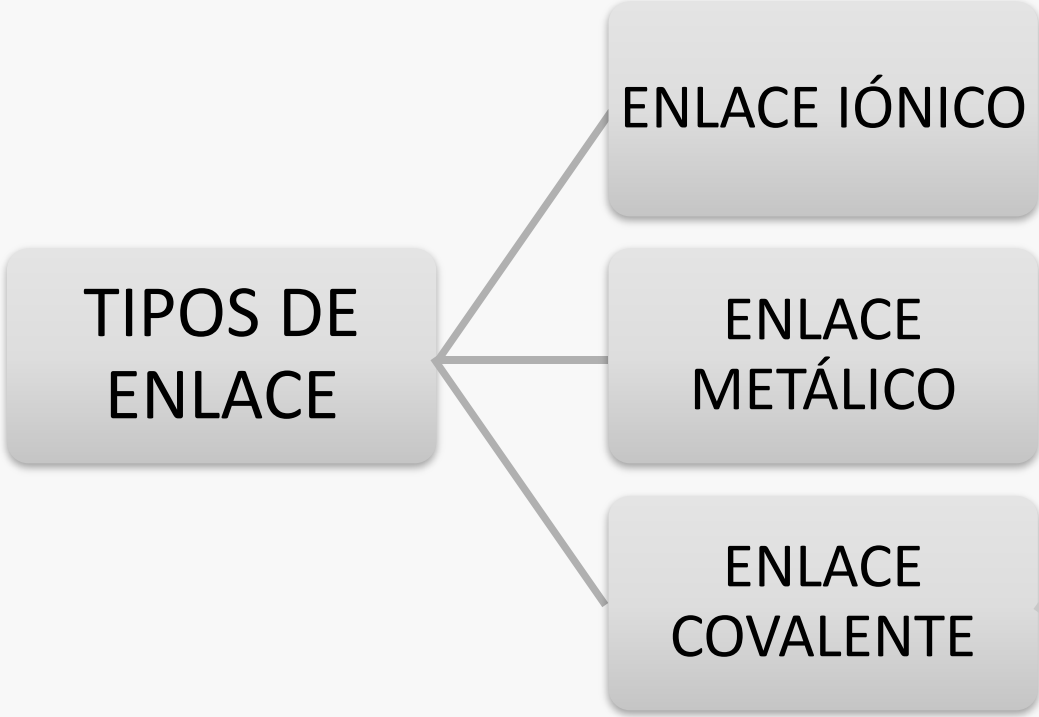
Es un proceso por el cual los átomos ganan, ceden o comparten electrones de la capa de valencia (la capa más externa), hasta conseguir la configuración electrónica propia del gas noble más próximo.



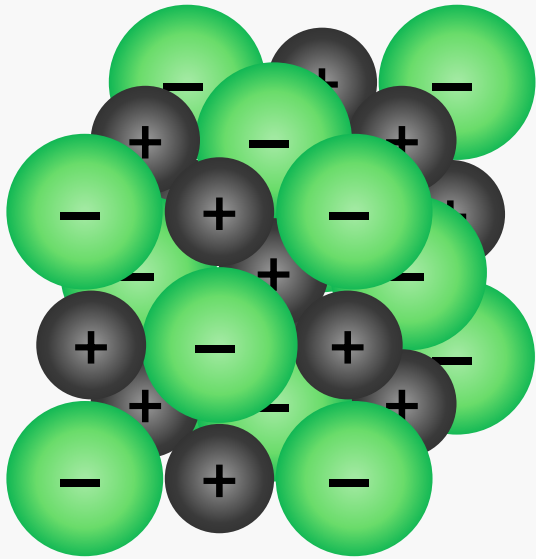
El enlace químico se refiere a las fuerzas de atracción que mantienen unidos a los átomos en los compuestos.

Cuando se forma un enlace químico entre dos átomos, la disposición resultante de los dos núcleos y sus electrones tiene una energía menor que la energía total de los átomos separados.

Los cambios energéticos que determinan la formación de los enlaces aparecen cuando los electrones de valencia de los átomos pasan a una nueva ubicación. Por consiguiente, la formación de los enlaces depende de las estructuras electrónicas de los átomos.



TIPOS DE ENLACE QUÍMICO

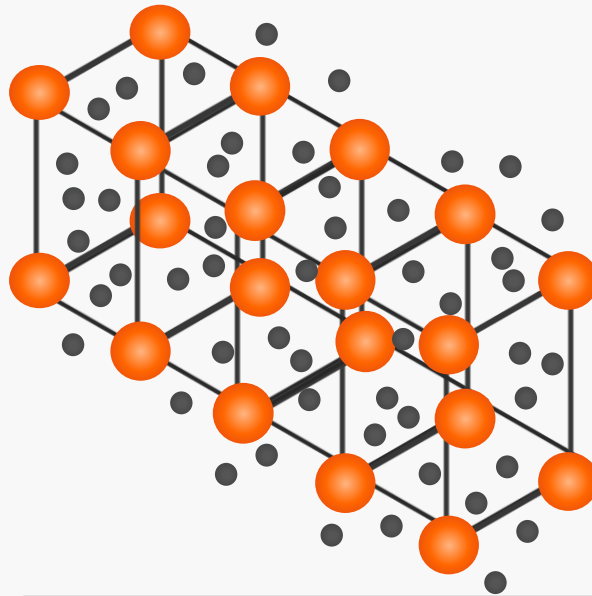


ENLACE IÓNICO

Es la unión que se produce cuando se produce transferencia total de electrones entre dos átomos.

Un sólido iónico es un ensamble de cationes y aniones unidos en forma regular por la fuerza de Coulomb.

Elementos con electronegatividades diferentes.

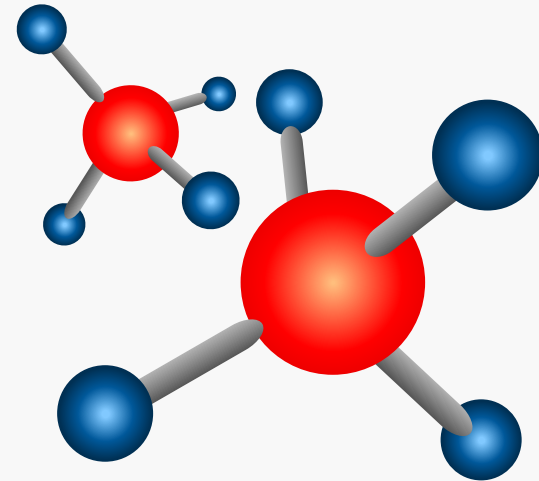


ENLACE METÁLICO

Las sustancias metálicas están formadas por átomos de un mismo elemento metálico.

Se forma un mar de electrones: conjunto de electrones libres, deslocalizados, que no pertenecen a ningún átomo en particular.

Elementos con electronegatividades bajas y similares.



ENLACE COVALENTE

Cuando se forma un enlace covalente, los átomos comparten los electrones hasta alcanzar la configuración del gas noble más próximo.

Elementos con electronegatividades altas y similares.

PROPIEDADES

Compuestos iónicos

- Temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
- Sólidos a temperatura ambiente. La red cristalina es muy estable por lo que resulta muy difícil romperla.
- Son duros (resistentes al rayado).
- No conducen la electricidad en estado sólido, los iones en la red cristalina están en posiciones fijas, no quedan partículas libres que puedan conducir la corriente eléctrica.
- En general son solubles en agua, los iones quedan libres al disolverse y pueden conducir la electricidad en solución.
- Al fundirse también los iones se liberan de sus posiciones fijas, pudiendo conducir la electricidad.
- Ejemplo: NaCl

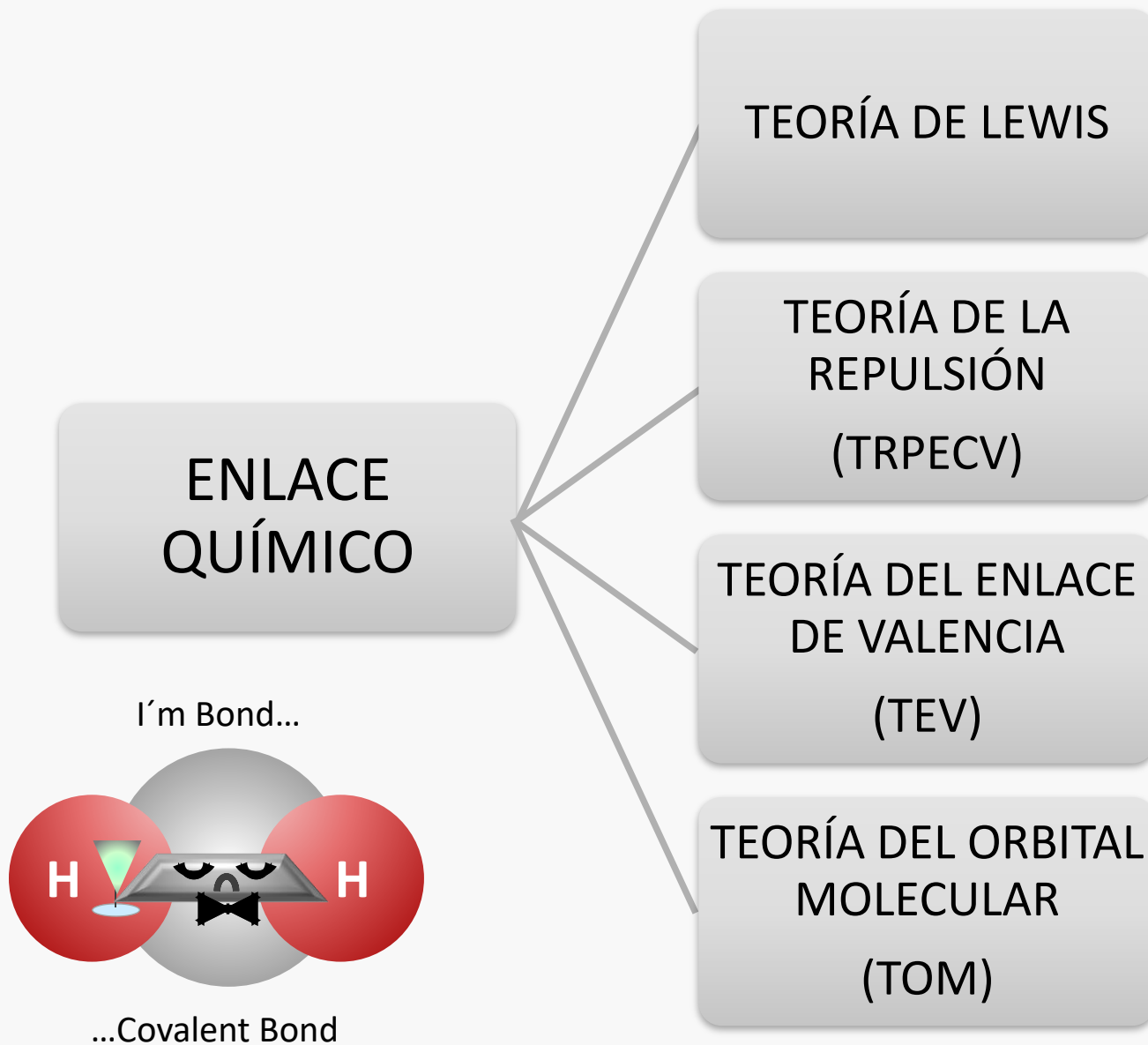
Compuestos metálicos

- Temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas.
- Son sólidos a temperatura ambiente (excepto el mercurio que es líquido).
- En general son duros (resistentes al rayado).
- Buenos conductores de la electricidad (nube de electrones deslocalizada).
- Buenos conductores del calor (facilidad de movimiento de electrones y de vibración de los restos atómicos positivos).
- Son dúctiles (facilidad de formar hilos) y maleables (facilidad de formar láminas) al aplicar presión.
- La mayoría se oxida con facilidad.
- Ejemplo: Fe

Compuestos covalentes

- *Redes covalentes:*
- Presentan temperaturas de fusión y ebullición elevadas.
- Son sólidos a temperatura ambiente.
- Son muy duros.
- No conducen el calor ni la electricidad.
- Son insolubles en agua.
- Ejemplos: SiO₂, diamante.
- *Compuestos moleculares:*
- Temperaturas de fusión y ebullición bajas.
- A temperatura ambiente se encuentran en estado gaseoso, líquido (volátil) o sólido de bajo punto de fusión.
- No conducen la electricidad en ningún estado físico .
- Son malos conductores del calor.
- Son poco solubles en agua.
- Ej. H₂O; I₂; sacarosa.

TEORÍAS DEL ENLACE QUÍMICO



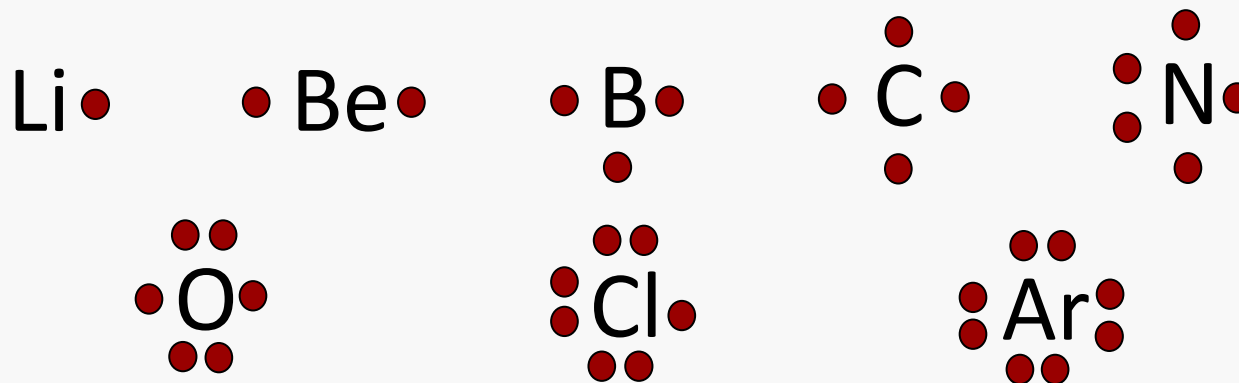
VISIÓN GENERAL DE LA TEORÍA DE LEWIS

1. Los electrones de la capa más externa, capa *de valencia*, juegan un rol fundamental en el enlace químico.
2. En algunos casos los electrones se *transfieren* de un átomo a otro, generando iones positivos o negativos que se atraen entre sí, mediante fuerzas electrostáticas dando lugar a la formación de enlaces iónicos.
3. En otros casos, uno o más pares de electrones se *comparten* entre los átomos, originando enlaces covalentes.
4. Los electrones se transfieren o se comparten de manera que los átomos adquieran una configuración electrónica especialmente estable.

SÍMBOLOS DE LEWIS

Los electrones de valencia de un elemento químico se representan a través de puntos.

EJEMPLOS

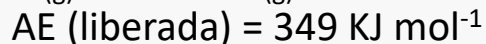
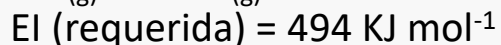
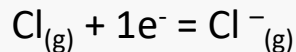
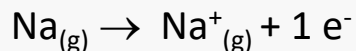
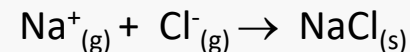
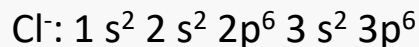
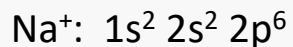
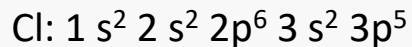


FORMACIÓN DE UN ENLACE IÓNICO

A menudo, para analizar procesos complejos se los separa en pasos simples, que pueden ser hipotéticos, constituyendo así modelos simples y de fácil interpretación.

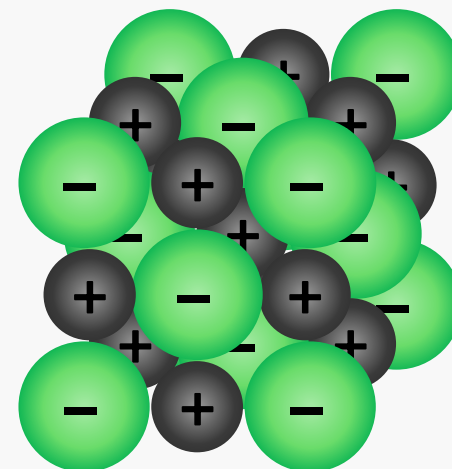
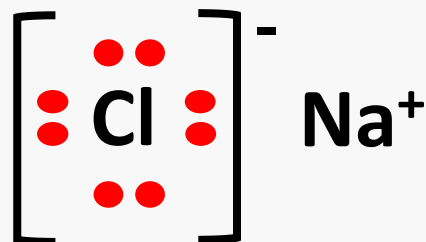
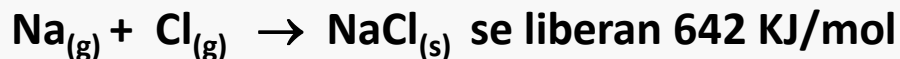
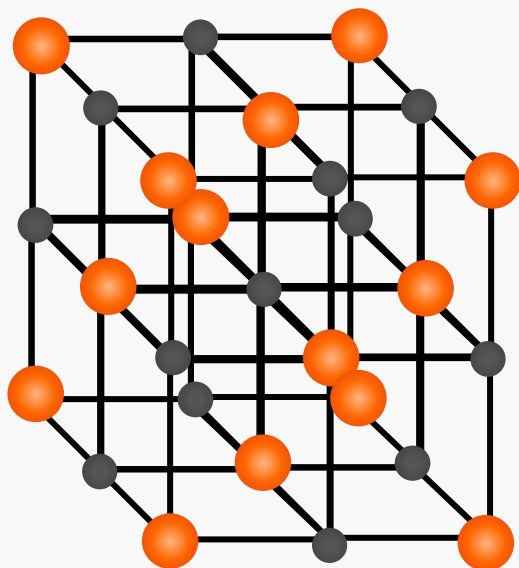
Un modelo que explica la formación de una molécula iónica aplica las siguientes consideraciones:

- Los metales se encuentran en estado natural como sólidos, mientras que algunos elementos no metálicos están como gases formando moléculas diatómicas.
- No obstante para que una reacción ocurra fácilmente los reactivos deberían estar en el estado más disperso posible, esto es el gaseoso.



La energía neta para el proceso de formación:

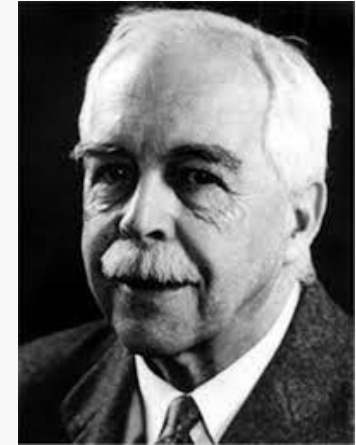
$$494 \text{ KJ mol}^{-1} - 349 \text{ KJ mol}^{-1} - 787 \text{ KJ mol}^{-1} = -642 \text{ KJ mol}^{-1}$$



ENLACE COVALENTE

Cuando se forma un enlace covalente, los átomos comparten los electrones hasta alcanzar la configuración del gas noble más próximo.

Lewis en 1916 llamó a esto la **Regla del Octeto**:



“En la formación de enlaces covalentes, los átomos se acercan todo lo posible para completar sus octetos compartiendo pares de electrones”.

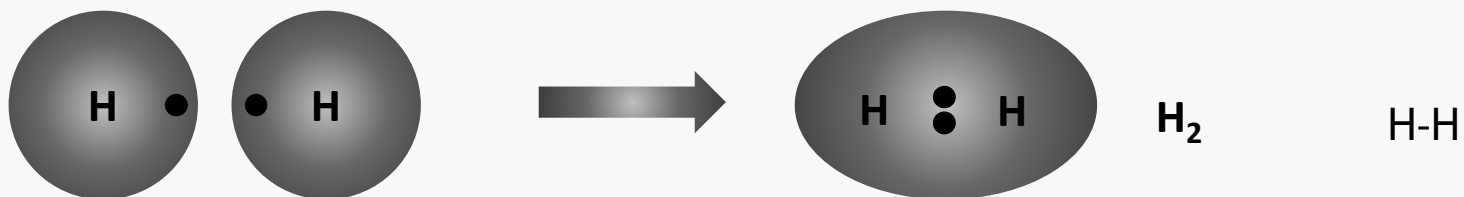
Los **gases nobles** presentan gran estabilidad química y existen como moléculas monoatómicas.

<u>Z</u>	<u>Elemento</u>	<u>Electrones por capa</u>
2	Helio	2
10	Neón	2, 8
18	Argón	2, 8, 8
36	Kriptón	2, 8, 18, 8
54	Xenón	2, 8, 18, 18, 8
86	Radón	2, 8, 18, 32, 18, 8

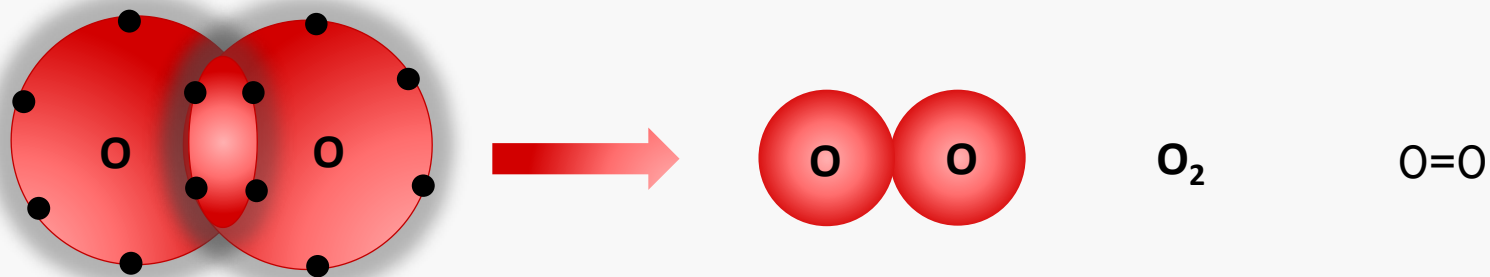
De acuerdo a cuál sea el comportamiento de los electrones de valencia en las uniones químicas se tienen:

1- Pares de e- compartidos entre dos átomos:

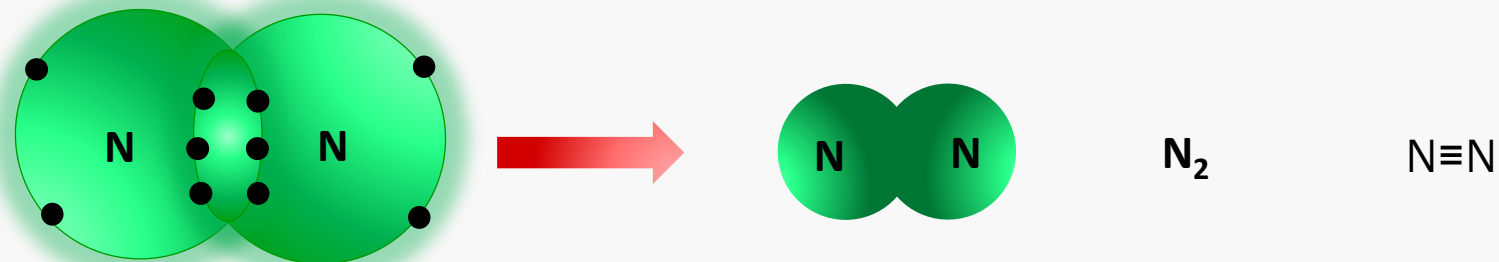
- Enlaces simples



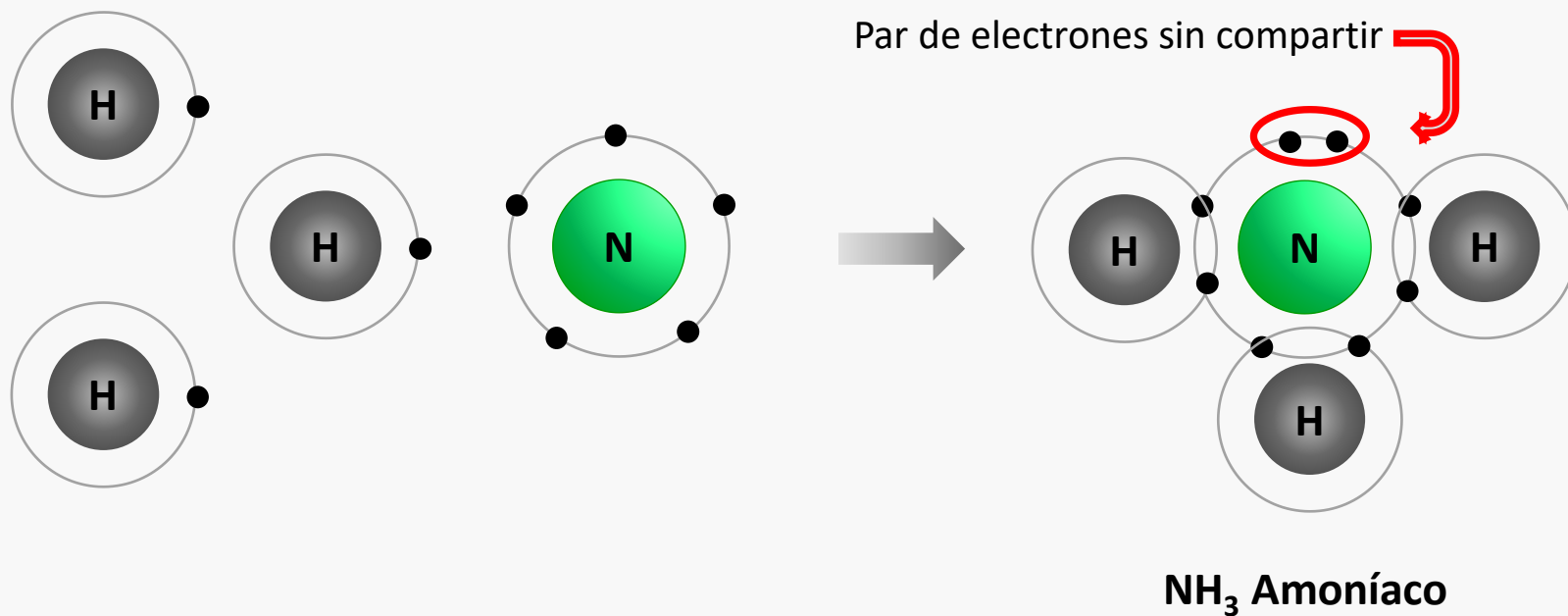
- Enlaces dobles



- Enlaces triples

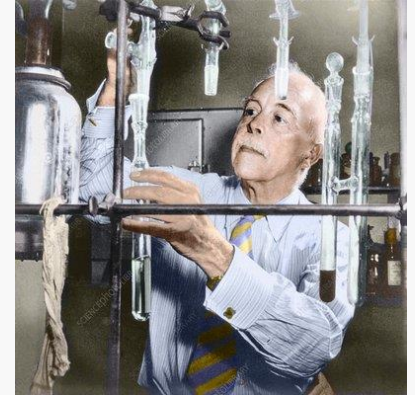


2- Pares de e- no compartidos, par solitario ó par aislado.



ESTRUCTURAS DE LEWIS

La estructura de Lewis se obtiene utilizando todos los electrones de valencia para completar los octetos (o duetos) de los átomos presentes, formando enlaces simples o múltiples y dejando, en algunos casos, electrones como pares solitarios.



1- Se suman los electrones de valencia de los átomos presentes en la molécula. En el caso de un anión se añade un electrón por cada carga negativa y, se restan tantos electrones como cargas positivas tenga si se trata de un catión.

2- Se dibuja una estructura esquemática con los símbolos atómicos unidos mediante enlaces sencillos colocando como átomo central al elemento menos electronegativo.

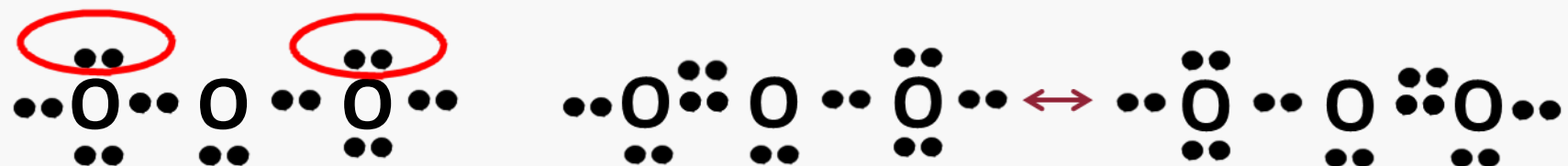
3- Los electrones se disponen de a pares alrededor del átomo central.

4- Los electrones restantes, se colocan, siempre de a pares, alrededor de los vecinos, y si aún quedaran electrones se acomodan sobre el átomo central como electrones libres.

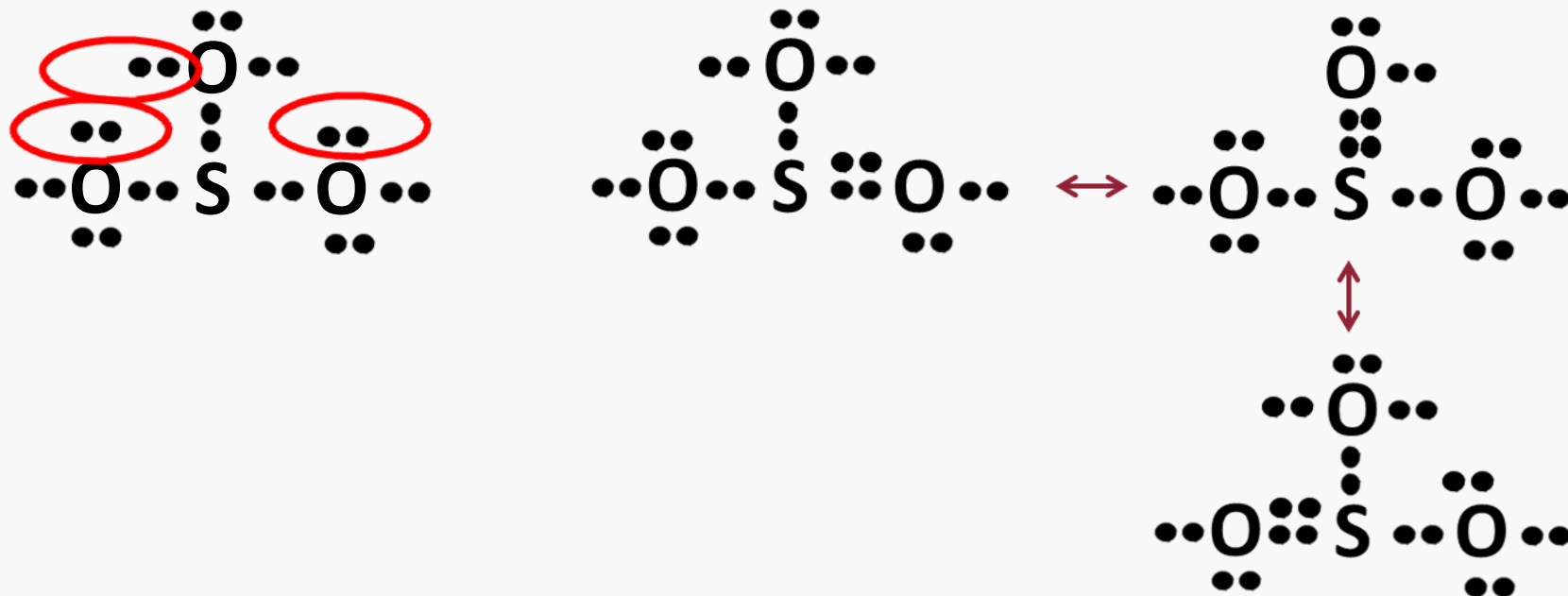
5- Se distribuyen los electrones de forma que se complete un octeto para cada átomo, si es necesario para que esto ocurra, se desplazan pares de electrones en donde no se alcance el octeto.

6- Cada enlace (par de electrones) puede representarse por una raya.

O_3 Electrones de valencia (e-v): $6 \times 3 = 18$



SO_3 (e-v): $6 + 6 \times 3 = 24$



Ejemplo: Estructura de Lewis para el anión carbonato (CO_3^{2-})

Se cuenta el número de electrones totales.

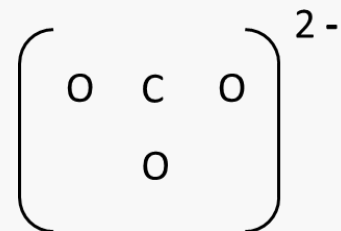
C: 4 electrones de valencia

O: 6 electrones de valencia x 3 átomos = 18 electrones

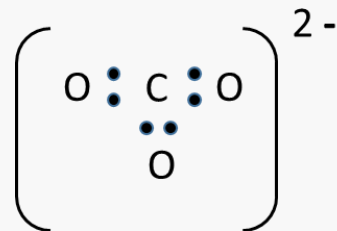
Como es un anión con carga -2 se suman 2 electrones

En total se tienen 24 electrones para distribuir de a pares, para esta caso son 12 pares de electrones.

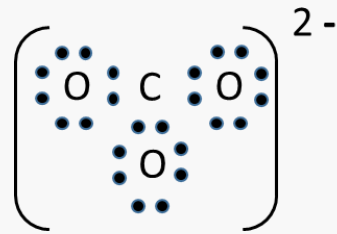
2. Se elige como átomo central el que se encuentra en menor cantidad y que es el menos electronegativo, en este caso C y se dibuja el esquema del compuesto.



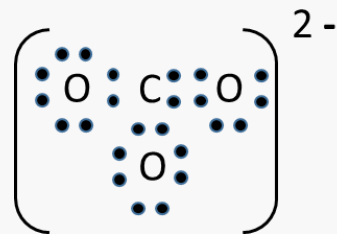
3. Se distribuyen los electrones alrededor del átomo central.



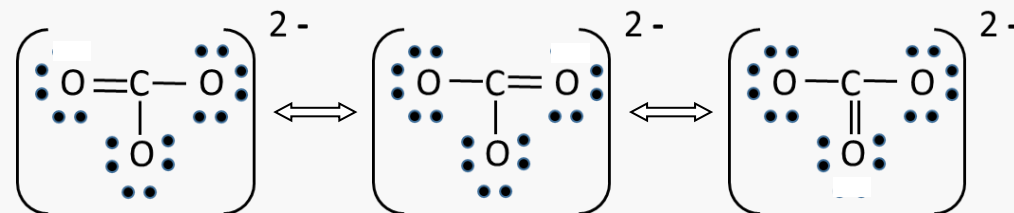
4. Se han repartido 6 electrones, restan 18 más para distribuir alrededor de los vecinos.



5. Se verifica si todos los átomos cumplan el octeto, en este caso al C le falta un par, por lo tanto, se desplaza un par de electrones desde un átomo vecino.



6. Se puede representar cada enlace con una raya. En este punto podemos observar que el desplazamiento podría haberse realizado a partir de cualquiera de los tres átomos de oxígeno, obteniéndose tres estructuras similares y equivalentes, este fenómeno se conoce como Resonancia



EJERCITACIÓN

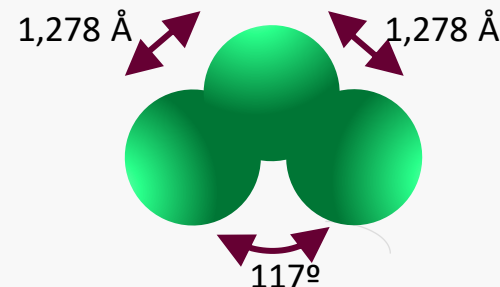
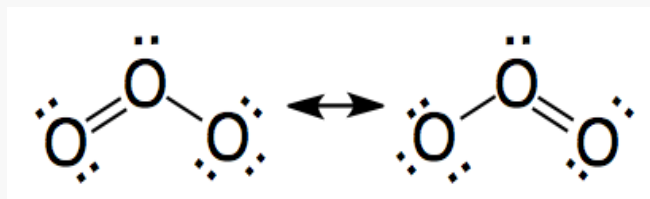
Realizar las estructuras de Lewis para los siguientes compuestos:

- Cloruro de berilio
- Cation amonio
- Dióxido de carbono
- Dióxido de azufre
- Trióxido de azufre
- Metano
- Amoníaco
- Agua
- Anión carbonato
- Anión nitrato
- Anión sulfato
- Nitrato de calcio
- Sulfato de sodio
- Etano
- Eteno (etileno)
- Etino (acetileno)

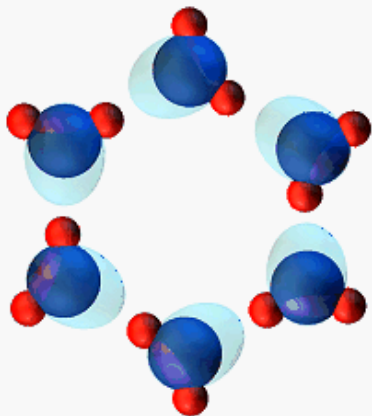
RESONANCIA

Algunas moléculas tienen estructuras que no pueden expresarse correctamente por una única estructura de Lewis. Se dice que en estos casos, las moléculas presentan Resonancia.

Ejemplo: Ozono



La Resonancia es una combinación de estructuras, equivalentes entre sí, con la misma disposición de átomos pero diferentes disposiciones de electrones. Distribuye las características de los enlaces múltiples por toda la molécula y da como resultado una energía más baja.



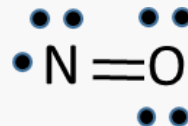
Esta combinación de estructuras se denomina resonancia y la estructura combinada es un híbrido de resonancia.

Algunas especies que presentan resonancia son: O_3 , NO_3^- , SO_3 , NO_2 , y benceno (C_6H_6).

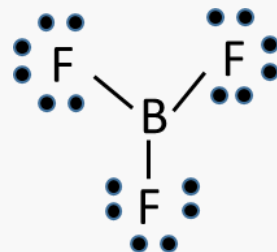
EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO

El C, N, O y F obedecen rigurosamente la regla del octeto siempre que haya suficientes electrones para hacerlo, sin embargo, hay tres clases de excepciones a la regla del Octeto:

- **Especies con n° impar de electrones.**

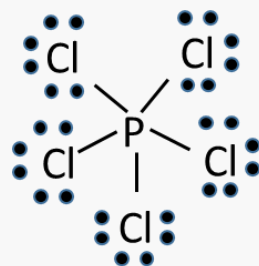


- **Octetos incompletos.**



Los compuestos de boro y aluminio presentan octetos incompletos.

- **Capas de valencia extendidas (Octeto expandido)**



Átomos del período 3 o posteriores.

TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

La estructura de Lewis brinda una representación bidimensional de los enlaces entre átomos para dar lugar a las moléculas. No obstante ello, sabemos que los compuestos son tridimensionales y por ende las estructuras de Lewis no representan la disposición de los átomos en el espacio.

La Teoría de la Repulsión de los Electrones de la Capa de Valencia (VSEPR en inglés), extiende la teoría de formación de enlaces de Lewis, aplicando los conceptos de ángulos y distancias de enlace.


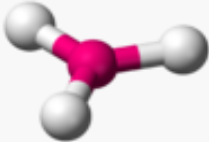
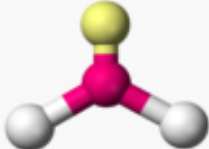
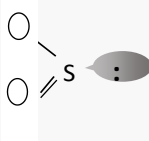
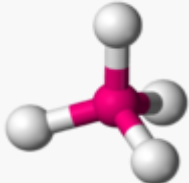
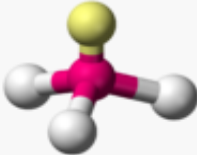
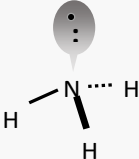
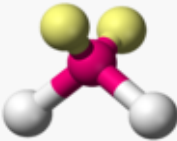
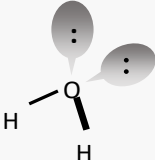
El modelo se basa en la idea de que los electrones de valencia, ubicados alrededor de un átomo central, se repelen entre sí, por lo cual los pares de electrones que se enlazan en moléculas simples se ubican en disposiciones geométricas lo más alejado posibles.

Procedimiento para aplicar la TRPECV

Las regiones de alta concentración electrónica, enlaces y pares solitarios que rodean al átomo central, se disponen en forma tal de minimizar las repulsiones mutuas. El modo general para predecir la fórmula de una molécula o ión consta de los siguientes pasos:

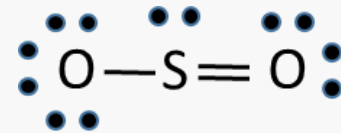
1. Escribir la estructura de Lewis de la molécula o ión y contar el número de pares enlazantes (los que forman el enlace entre el átomo central y sus vecinos) y el número de pares de electrones solitarios.
2. Identificar la disposición geométrica que incluya tanto a los pares de electrones enlazantes como a los solitarios, considerando además, que los enlaces múltiples se cuentan como un solo enlace.
3. Ubicar los átomos y clasificar la forma molecular obtenida.
4. Permitir que en presencia de pares solitarios, la molécula se distorsione de manera que estos electrones se alejen lo más posible de los electrones presentes en los enlaces.

GEOMETRÍAS ELECTRÓNICA Y MOLECULAR MÁS COMUNES

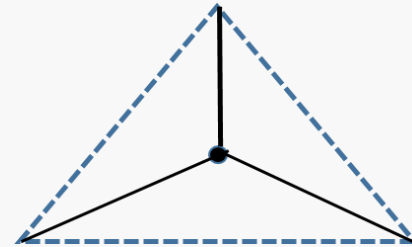
ÁTOMOS VECINOS (m)	PARES SOLITARIOS (n)	GEOMETRÍA MOLECULAR	EJEMPLOS
2	0	LINEAL 	$O = C = O$ $Cl - Be - Cl$
3	0	TRIGONAL PLANA 	H \ C=O / H F \ B-F / F
2	1	ANGULAR 	
4	0	TETRAÉDRICA 	H C / \ H H \ H
3	1	PIRAMIDAL TRIGONAL 	
2	2	ANGULAR 	

Ejemplo: Predecir la forma molecular de SO_2

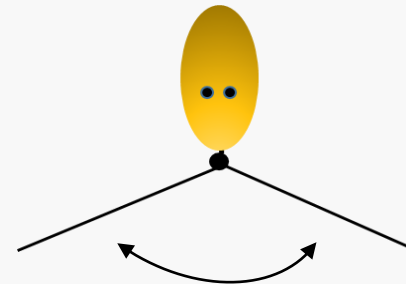
1. Dibujar la estructura de Lewis.



2. Asignar la disposición electrónica alrededor del átomo central, en este caso trigonal plana. (Dos enlaces y un par solitario).

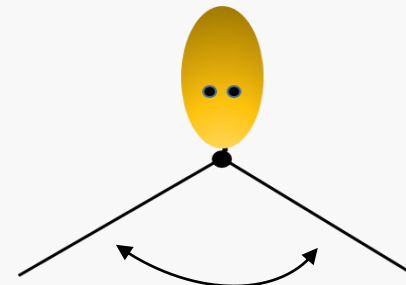


3. Identificar la forma molecular, es decir donde hay átomos unidos al átomo central. Para esta molécula la forma adoptada es angular.



120°

4. Indicar distorsiones si correspondiera. En este caso el ángulo será menor ya que los átomos vecinos se juntarán para sentir menos la repulsión ejercida por el par solitario. Finalmente, la forma obtenida es:



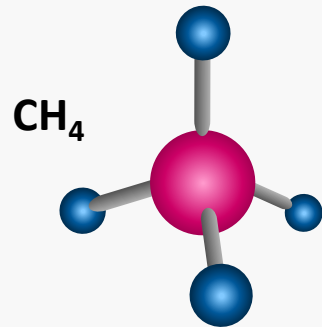
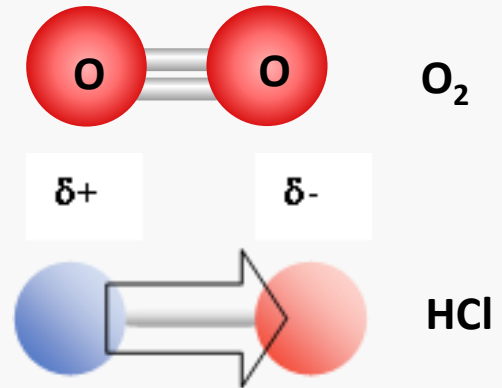
119°

POLARIDAD

Un enlace covalente es polar cuando los electrones no están distribuidos de manera uniforme y por lo tanto tiene un momento dipolar (μ) distinto de cero.

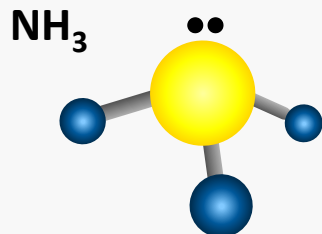
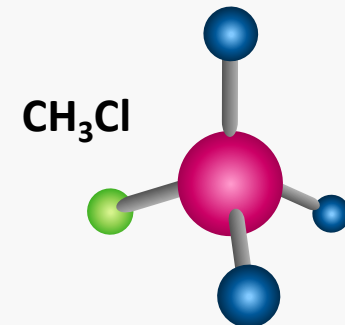
Una molécula diatómica homonuclear, aquella conformada por la misma clase de átomos como O_2 , N_2 , Cl_2 , claramente no presenta un dipolo eléctrico porque su enlace es no polar.

Una molécula diatómica, en cambio, es polar cuando su enlace es polar tal el caso del HCl.



Cuando una molécula poliatómica presenta todos los átomos enlazados iguales y no tiene pares de electrones solitarios sobre el átomo central es posible afirmar que tendrá un momento dipolar nulo y por lo tanto no será polar.

Cuando los átomos vecinos no sean iguales hay que considerar como se han ubicado alrededor del átomo central pero en general podemos decir que las moléculas comunes que presentan esta situación serán polares.



De igual manera, es posible pensar que aquellas moléculas que presentan pares de electrones solitarios sobre el átomo central también serán polares.

TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

Las teorías de Lewis y la TRPECV ayudan a predecir como se comparten los electrones de valencia para formar enlaces y cuál será la distribución espacial de los átomos en una molécula o ión poliatómico, respectivamente. Sin embargo, existen algunos aspectos de los enlaces que estas teorías no pueden explicar.

La TEV proporciona una forma de calcular los valores numéricos de las longitudes y ángulos de enlace. Describe cómo se forma el enlace en términos de la superposición de los orbitales atómicos, a través del concepto de **hibridación de orbitales**.

Combinación algebraica de las ecuaciones de onda de orbitales atómicos puros para obtener orbitales híbridos.

Cuando los átomos de una molécula o ión poliatómico se encuentran lo suficientemente cerca como para combinar sus electrones de valencia, suelen mezclarse o hibridarse para formar nuevos orbitales con orientación espacial diferente y cuya energía total será más baja en comparación de sus orbitales atómicos puros. Este proceso recibe el nombre de **hibridación** y los nuevos orbitales que se forman se llaman **orbitales híbridos**.

Independientemente de cuántos sean los orbitales atómicos, siempre se obtienen tantos orbitales híbridos como orbitales atómicos participaron, es decir: N orbitales atómicos producen N orbitales híbridos.

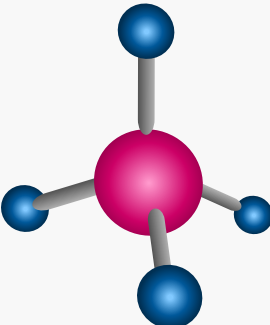
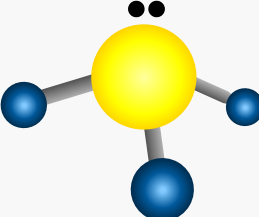
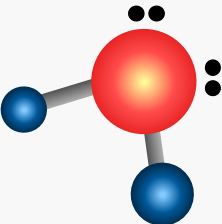
Un aspecto importante que considera la TEV es el tipo de enlaces, siempre que los enlaces sean simples, donde existe superposición de orbitales, se los denomina enlaces sigma (σ). Cuando aparecen dobles y triples enlaces se los denomina enlaces pi (π).

Predicción de la Hibridación y la Forma Molecular

Hay una relación que permite determinar la hibridación de una molécula: $m + n$, donde m es el número de pares de electrones enlazados o el número de átomos vecinos y n es el número de pares de electrones solitarios o no enlazados.

Disposición electrónica	Número de orbitales atómicos	Cantidad de orbitales híbridos	Hibridación del átomo central	$m + n$
Lineal	2	2	sp	2
Trigonal plana	3	3	sp^2	3
Tetraédrica	4	4	sp^3	4
Bipiramidal	5	5	sp^3d	5
Octaédrica	6	6	sp^3d^2	6

EJEMPLOS

COMPUESTO	TEORÍA DE LEWIS	TRPECV	FORMA ELECTRÓNICA	FORMA MOLECULAR	TEV HIBRIDACIÓN
METANO CH₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \cdot\cdot \\ \text{H} : \text{C} : \text{H} \\ \cdot\cdot \\ \text{H} \end{array}$		TETRAÉDRICA	TETRAÉDRICA	$m + n = 4 + 0 = 4$ sp^3
AMONÍACO NH₃	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \text{H} : \text{N} : \text{H} \\ \cdot\cdot \\ \text{H} \end{array}$		TETRAÉDRICA	PIRAMIDAL TRIGONAL	$m + n = 3 + 1 = 4$ sp^3
AGUA H₂O	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \text{H} : \text{O} : \text{H} \\ \cdot\cdot \end{array}$		TETRAÉDRICA	ANGULAR	$m + n = 2 + 2 = 4$ sp^3

EJERCITACIÓN

COMPUESTO	TEORÍA DE LEWIS	TRPECV FORMA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR	TEV HIBRIDACIÓN	POLARIDAD SI/NO	RESONANCIA SI/NO
CATIÓN AMONIO					
DIÓXIDO DE AZUFRE					
ANIÓN CARBONATO					
ANIÓN SULFATO					

BIBLIOGRAFÍA

- Atkins, P. Jones, L. 2012. Principios de Química. Quinta edición. Ed. Panamericana.
- Brown, LeMay y Bursten. 1998. Química: La Ciencia Central. Séptima edición. Ed. Prentice Hall
- Chang, R. 1998. Química General. Sexta edición. Ed. Mc Graw Hill.
- Kotz, J. Treichel, M. 2003. Química y reactividad química. Quinta edición. Ed. Thomson.
- Petrucci, R. Harwood, W. Herring F. 2002. Química General. Vol. I y II. Octava edición. Ed. Prentice Hall.
- Whiten, Davis y Peck. 2015. Química General. Octava edición. Ed. Mc Graw Hill.