

TEMA 8.- TEORÍA DE ENLACE QUÍMICO Y GEOMETRÍA MOLECULAR.

Tema 8.- El enlace químico II



1. **Geometría Molecular. Modelo de repulsión de par electrónico en la capa de valencia (VSEPR).**
2. **Polaridad de las especies químicas polinucleares.**
3. **Teorías de enlace químico. El enlace covalente.**
 - ❑ **Introducción.**
 - ❑ **Teoría de enlace de valencia (TEV).**
 - ❑ **Teoría de orbitales moleculares (TOM).**
 - ❑ **Deslocalización electrónica.**
 - ❑ **Enlace Multicentrado.**
 - ❑ **Enlace covalente coordinado.**
4. **El enlace metálico. Teoría de bandas.**
 - ❑ **Conductores, aislantes y semiconductores.**

1.- GEOMETRÍA MOLECULAR.



MODELO DE LA REPULSIÓN ENTRE PARES ELECTRÓNICOS DE LA CAPA DE VALENCIA

A) Moléculas en las que el átomo central no tiene pares de electrones libres

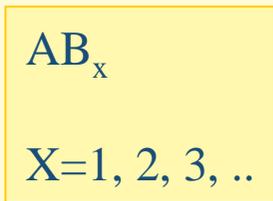


Imagen tomada de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example
2	linear	0	AX_2	(linear)	180°	$BeCl_2$
3	trigonal-planar	0	AX_3	(trigonal-planar)	120°	BF_3
		1	AX_2E	(angular)	120°	SO_2
4	tetrahedral	0	AX_4	(tetrahedral)	109.5°	CH_4
		1	AX_3E	(trigonal-pyramidal)	109.5°	NH_3
		2	AX_2E_2	(angular)	109.5°	OH_2
5	trigonal-bipyramidal	0	AX_5	(trigonal-bipyramidal)	$90^\circ, 120^\circ$	PCl_5

(continues)

1.- GEOMETRÍA MOLECULAR.

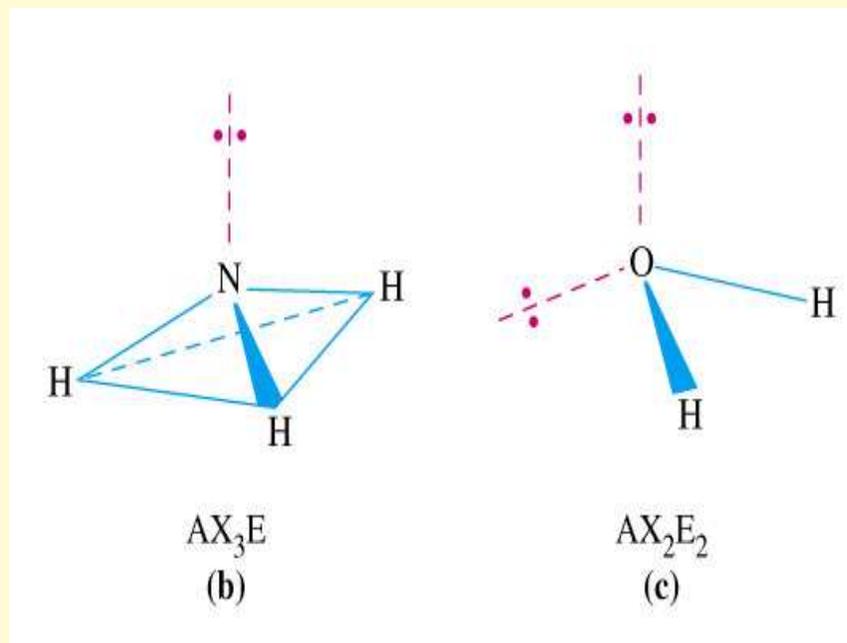


Tema 8.- El enlace químico II

MODELO DE LA REPULSIÓN ENTRE PARES ELECTRÓNICOS DE LA CAPA DE VALENCIA

B) Moléculas en las que el átomo central tiene pares de electrones libres

Amoníaco (NH_3); Agua (H_2O)

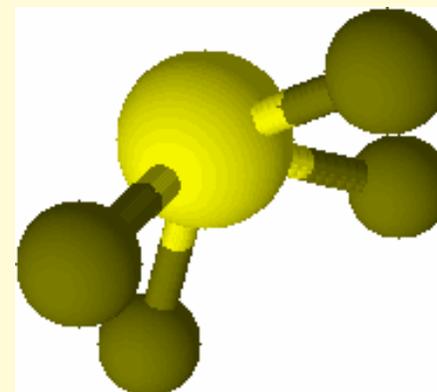


En términos de repulsiones los enlaces múltiples se consideran como enlaces simples

Ejemplo SO_2

Imagen tomada de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

Tetrafloruro de azufre, SF_4



Tema 8.- Teoría de enlace químico y geometría molecular.

1.- GEOMETRÍA MOLECULAR.



Tema 8.- El enlace químico II

TABLE 11.1 (Continued)

Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example
trigonal-bipyramidal		1	AX_2E^b	 (seesaw)	$90^\circ, 120^\circ$	SF_4
trigonal-bipyramidal		2	AX_3E_2	 (T-shaped)	90°	ClF_3
trigonal-bipyramidal		3	AX_2E_3	 (linear)	180°	XeF_2
6	octahedral	0	AX_6	 (octahedral)	90°	SF_6
octahedral		1	AX_5E	 (square-pyramidal)	90°	BrF_5
octahedral		2	AX_4E_2	 (square-planar)	90°	XeF_4



(SF_6)

^aFor a discussion of the structure of SO_2 , see page 416.
^bFor a discussion of the placement of the lone-pair electrons in this structure, see page 412.

TABLE 11.1 Molecular Geometry as a Function of Electron Group Geometry

Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example
2	linear	0	AX_2	 $X-A-X$ (linear)	180°	$BeCl_2$
3	trigonal-planar	0	AX_3	 $X-A-X$ (trigonal-planar)	120°	BF_3
	trigonal-planar	1	AX_2E	 (angular)	120°	SO_2^a
4	tetrahedral	0	AX_4	 (tetrahedral)	109.5°	CH_4
	tetrahedral	1	AX_3E	 (trigonal-pyramidal)	109.5°	NH_3
	tetrahedral	2	AX_2E_2	 (angular)	109.5°	H_2O
5	trigonal-bipyramidal	0	AX_5	 (trigonal-bipyramidal)	$90^\circ, 120^\circ$	PCl_5



$(BeCl_2)$



(BF_3)



(CH_4)



(PCl_5)

Imágenes tomadas de:
 General Chemistry: Principles and Modern Applications
 R.H. Petrucci

2.- MOMENTO DIPOLAR.



MODELO DE LA REPULSIÓN ENTRE PARES ELECTRÓNICOS DE LA CAPA DE VALENCIA

C) Moléculas con enlaces múltiples

Metanol, CH₃OH

MOMENTO DIPOLAR, μ

La carga eléctrica en los enlaces entre átomos distintos no está distribuida de manera homogénea debido a la diferencia de electronegatividad entre ellos.

El **momento dipolar** de una molécula es la suma de los **momentos dipolares de enlace**.

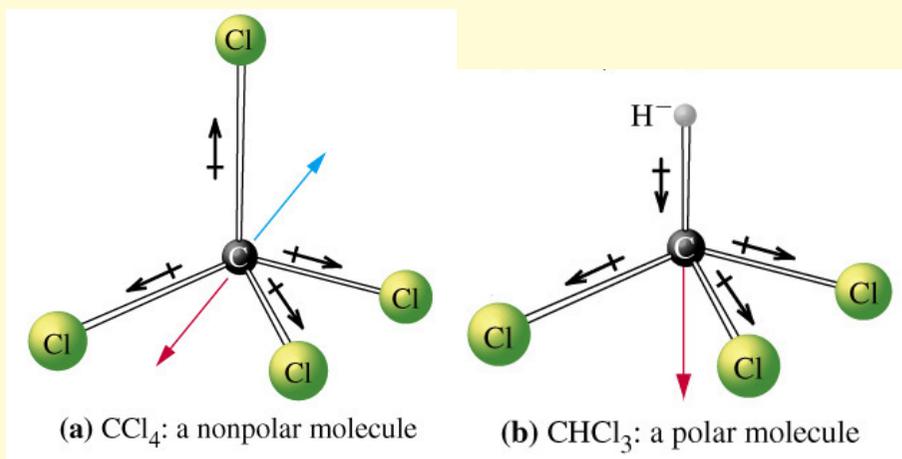
$$\mu = Q \times r$$

Q = carga

r = distancia entre cargas

Unidades Debyes, D

$$1D = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$



Distinción entre isómeros

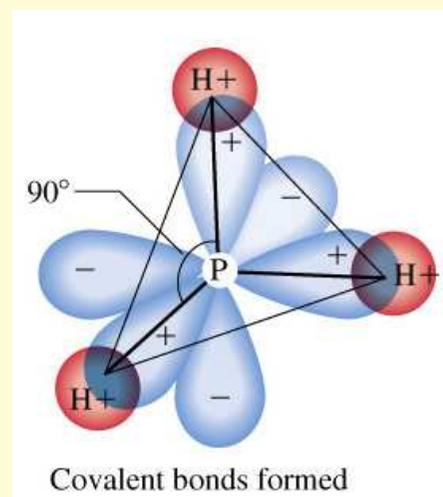
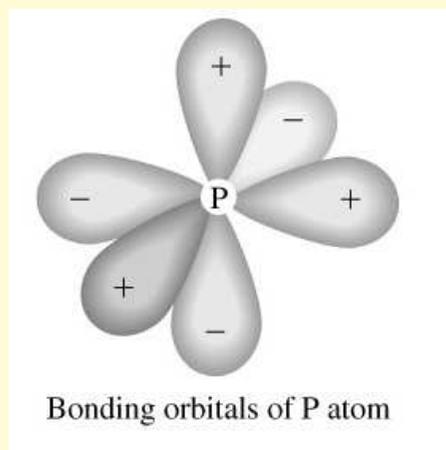
3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Tema 8.- El enlace químico II

TEORÍA DEL ORBITAL ATÓMICO O ENLACE DE VALENCIA

- Los e⁻ compartidos pertenecen simultáneamente a los OA de los elementos enlazados
- Solapamiento de nubes electrónicas



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Tema 8.- El enlace químico II

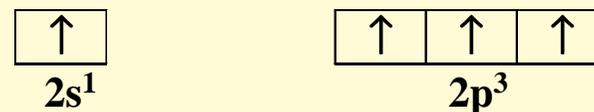
HIBRIDACIÓN

Hibridación sp^3 (metano, CH_4)

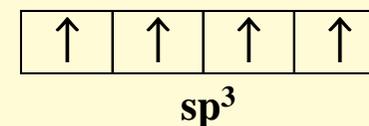
Diagrama orbital del C (estado fundamental)



Promoción de un electrón 2s a un orbital 2p (excitación)

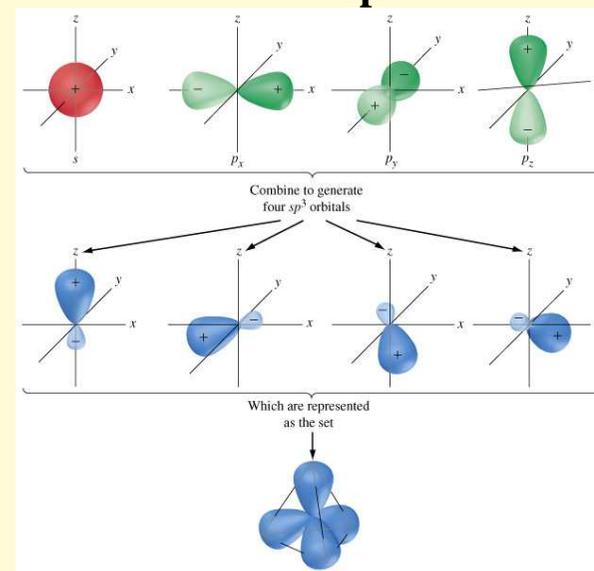


Mezclado de orbital 2s con orbitales 2p (hibridación)



Los orbitales híbridos son orbitales atómicos

Forma y orientación de los orbitales híbridos sp^3



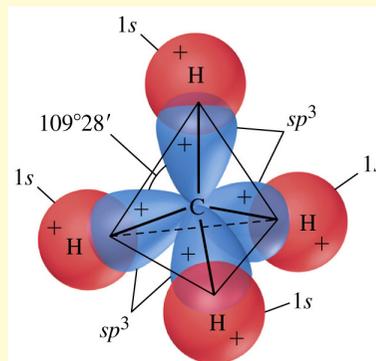
Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Aplicación de la teoría de EV para explicar la formación de enlaces C-H en el **metano**.

Ángulo de enlace H-C-H = 109,5°

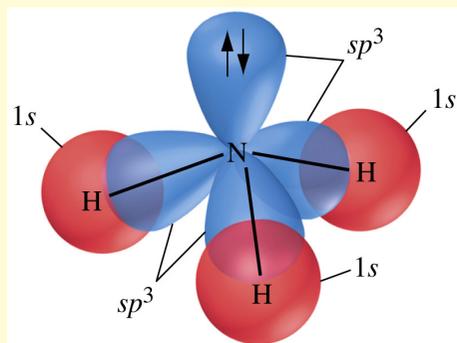


Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

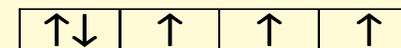
El desprendimiento de energía debido a la formación de enlaces compensa la energía gastada en la excitación.

Amoníaco, NH₃

Diagrama orbital del N



N (estado fundamental)



sp³

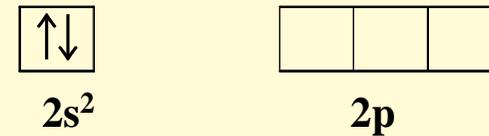
Ángulo de enlace H-N-H = 107,3°

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.

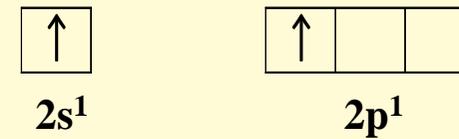


Hibridación sp, Cloruro de berilio (BeCl₂)

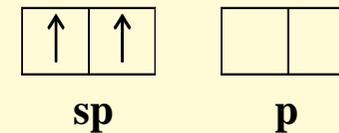
Diagrama orbital del Be (estado fundamental)



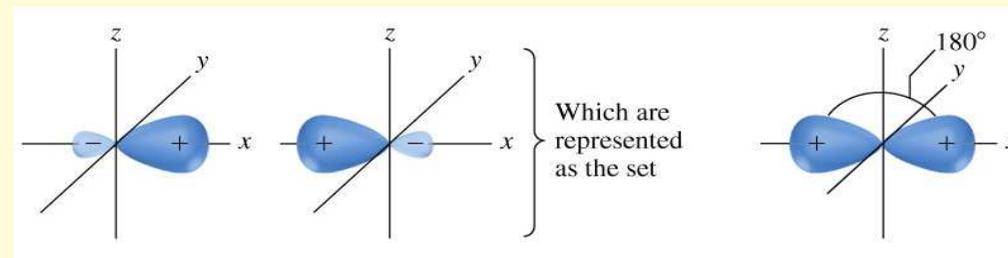
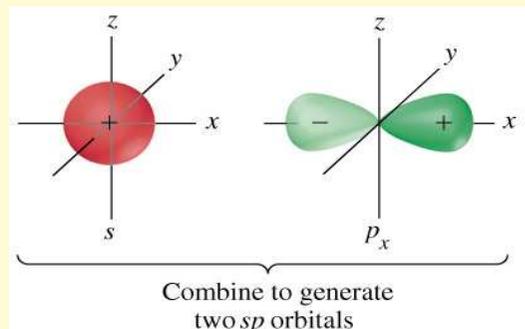
Promoción de un electrón 2s a un orbital 2p (excitación)



Mezclado de orbital 2s con orbital 2p (hibridación)



Forma y orientación de los orbitales sp



Formación de enlaces



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Hibridación sp^2 , (BF_3)

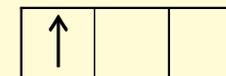
Diagrama orbital del B (estado fundamental)

Promoción de un electrón 2s a un orbital 2p (excitación)

Mezclado de orbital 2s con orbitales 2p (hibridación)



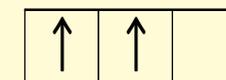
$2s^2$



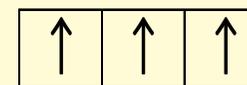
$2p^1$



$2s^1$



$2p^2$

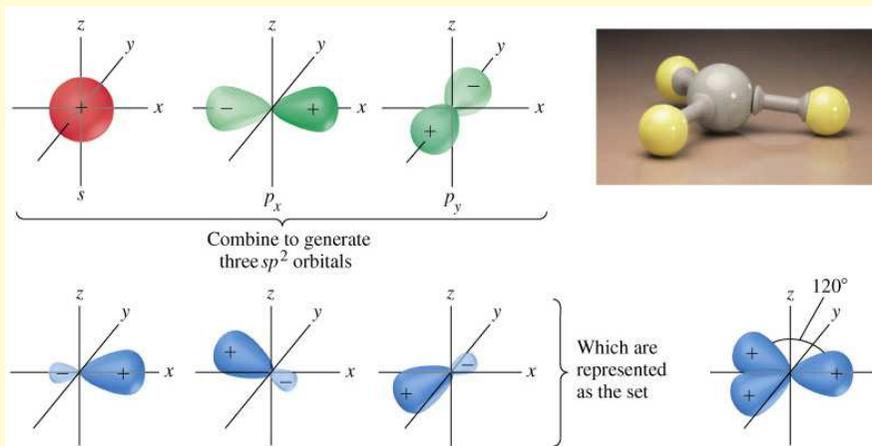


sp^2



p

Formación de enlaces



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

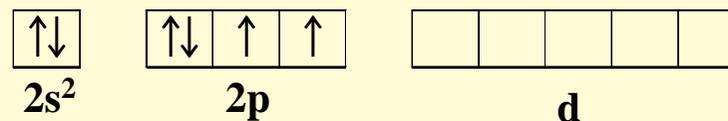
3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



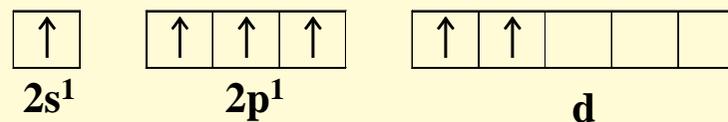
Tema 8.- El enlace químico II

Hibridación sp^3d^2 , (SF_6)

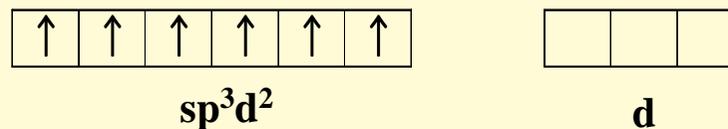
Diagrama orbital del S
(estado fundamental)



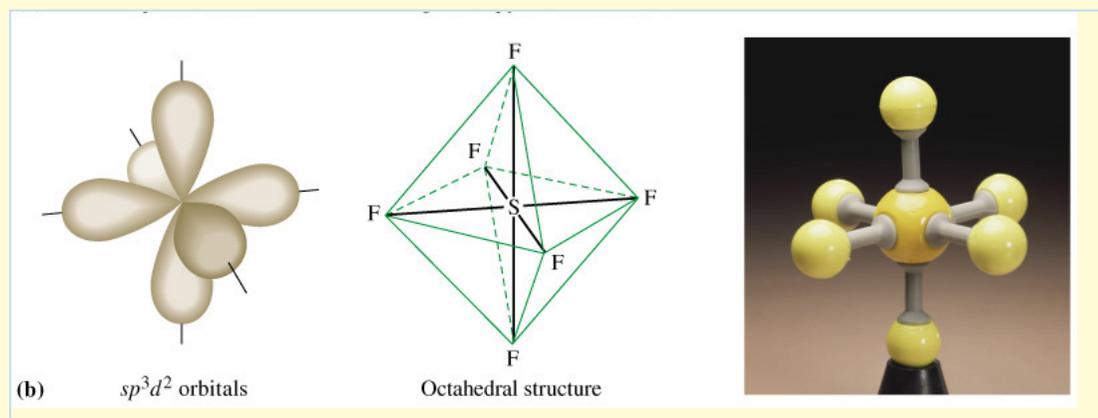
Promoción de un electrón 3s
y uno 3p a dos orbitales 3d
(excitación)



Combinación de orbitales atómicos



Forma y orientación de los orbitales híbridos sp^3d^2



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

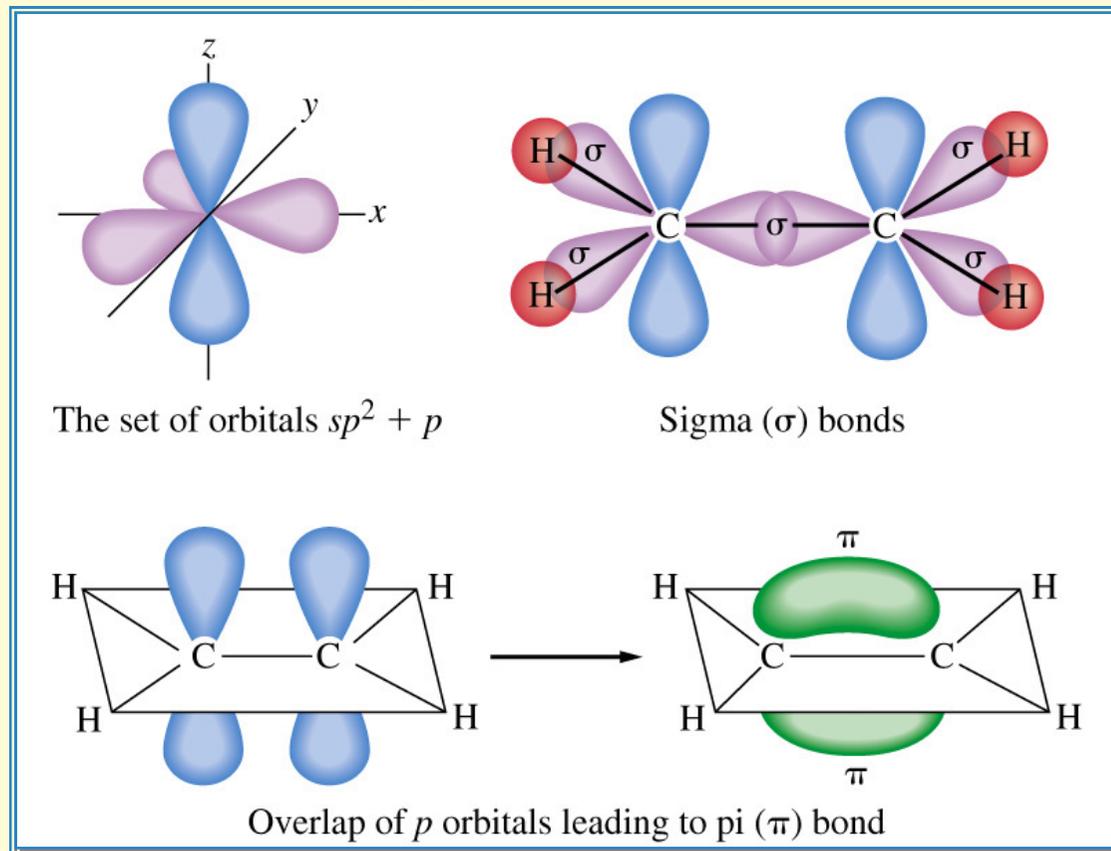
3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Tema 8. - El enlace químico II

Hibridación en moléculas formadas por dobles y triples enlaces:

Molécula de etileno, C_2H_4



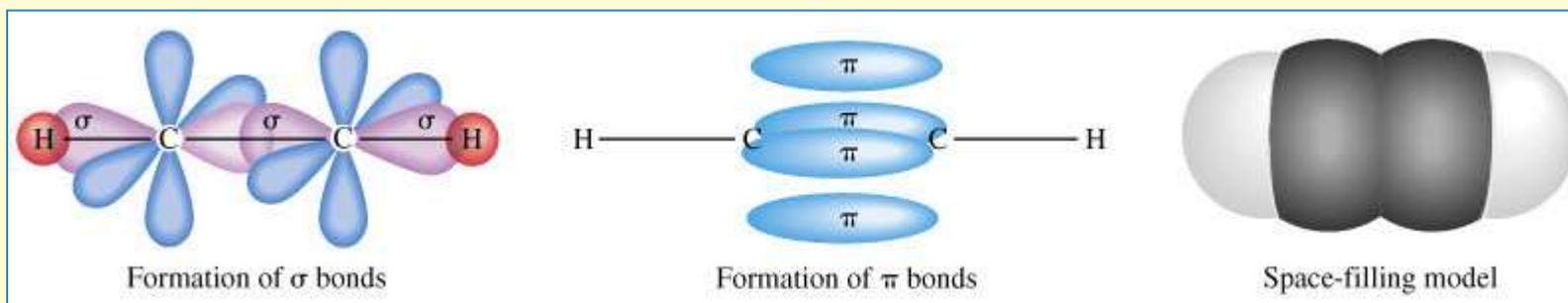
Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Molécula de acetileno, C_2H_2

El C presenta hibridación sp



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Tema 8.- El enlace químico II

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

La teoría de EV falla al explicar las propiedades magnéticas de algunas moléculas.

El O_2 es paramagnética (no posee todos los electrones apareados). La teoría de EV dice que el O_2 es diamagnética (posee todos los electrones apareados).

En teoría de OM supone que todos los e- de una molécula influyen en su estabilidad.

Los OM dan idea de la probabilidad de encontrar un e- en toda la molécula.

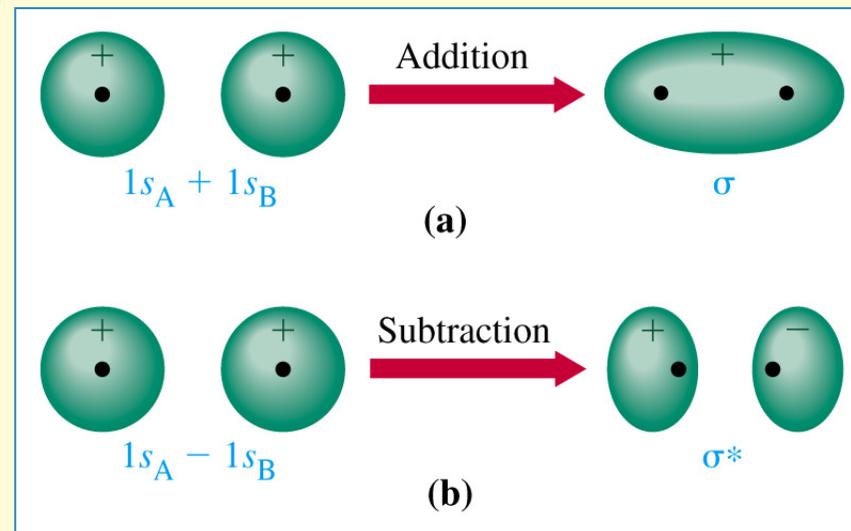
Matemáticamente los OM se pueden expresar como combinaciones lineales de OA. Para dos e-
 $\Psi = \phi_1 \pm \phi_2$. Donde Ψ representa la función de onda que describe el OM y ϕ_1 y ϕ_2 las que describen los OA.

Distribuciones espaciales de OM

Molécula de H_2 , Combinación de orbitales s

Orbitales enlazantes y antienlazantes

Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

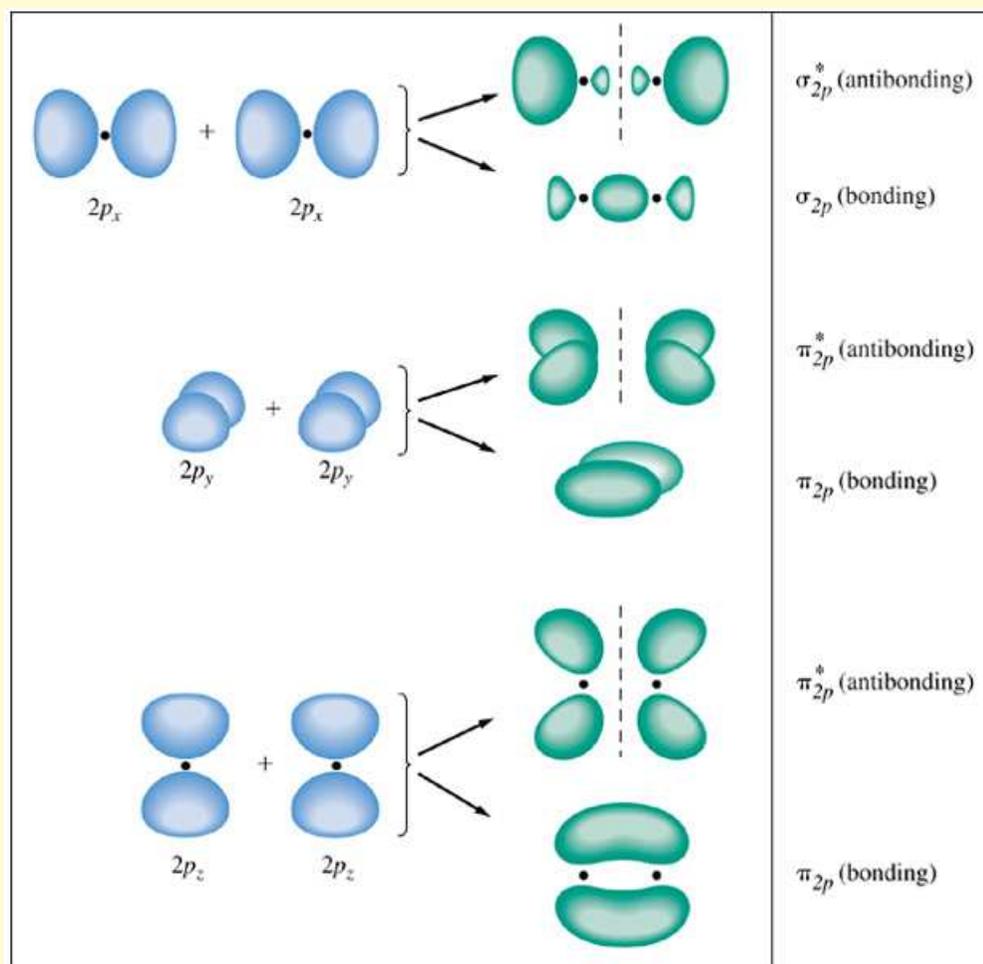


Tema 8.- Teoría de enlace químico y geometría molecular.

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Combinación de orbitales p



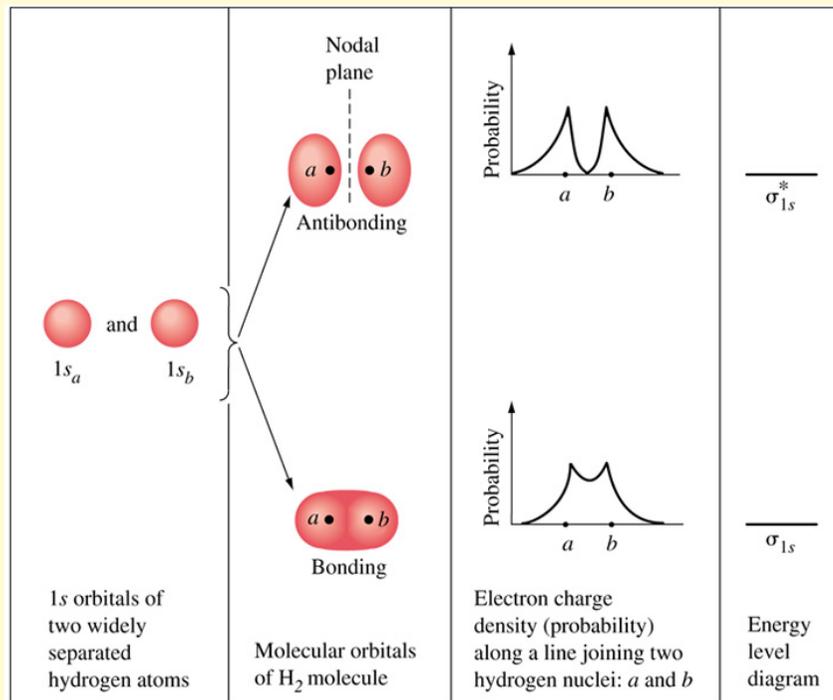
Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.

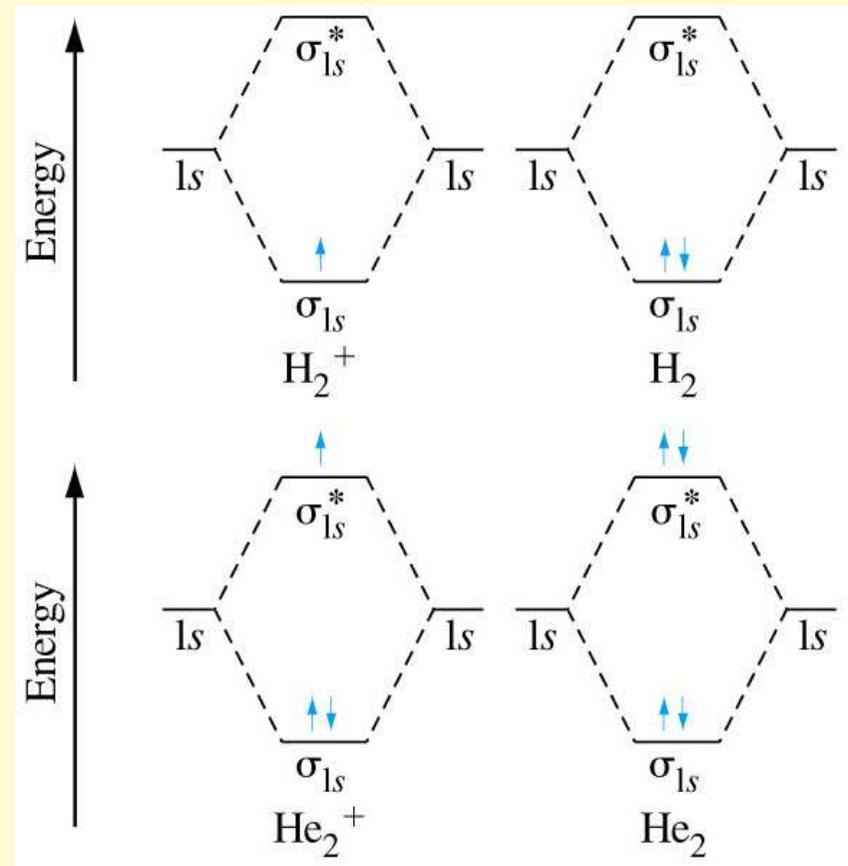


Energía de los OM

Molécula diatómica homonuclear



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

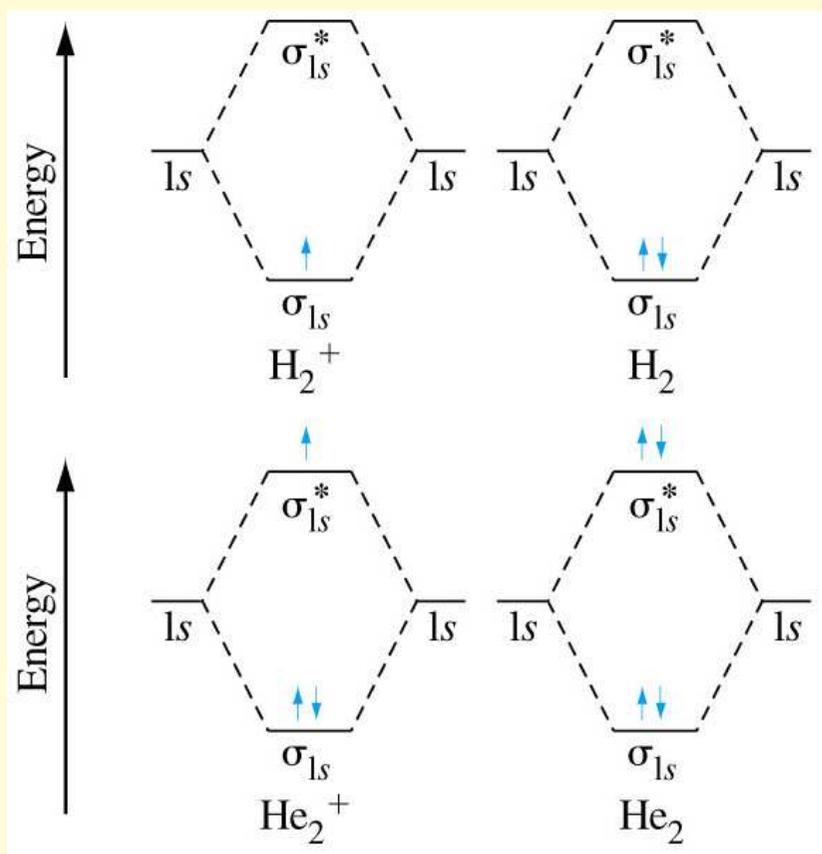


3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



Orden de enlace, OE

$$\text{orden de enlace} = \frac{\text{electrones enlazantes} - \text{electrones antienlazantes}}{2}$$



$$\begin{aligned} \text{OE}(H_2) &= 1 \\ \text{OE}(H_2^+) &= 1/2 \\ \text{OE}(He_2) &= 0 \\ \text{OE}(He_2^+) &= 1/2 \end{aligned}$$

Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



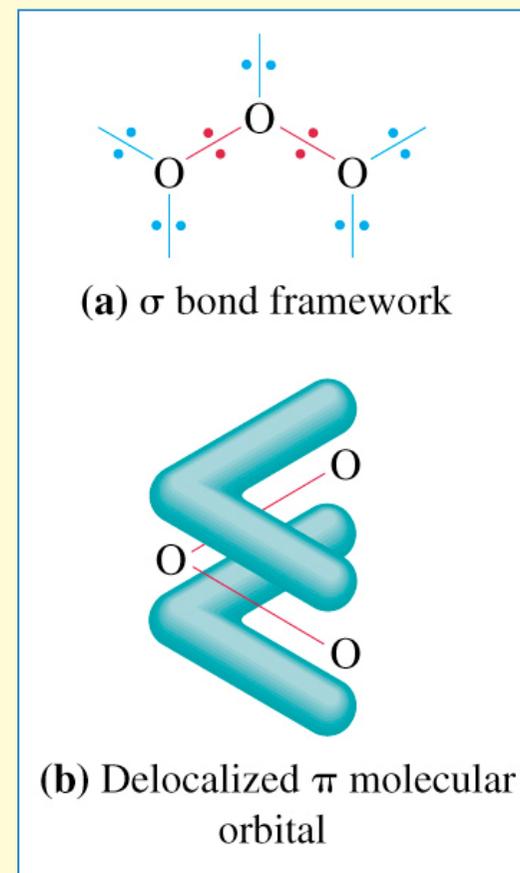
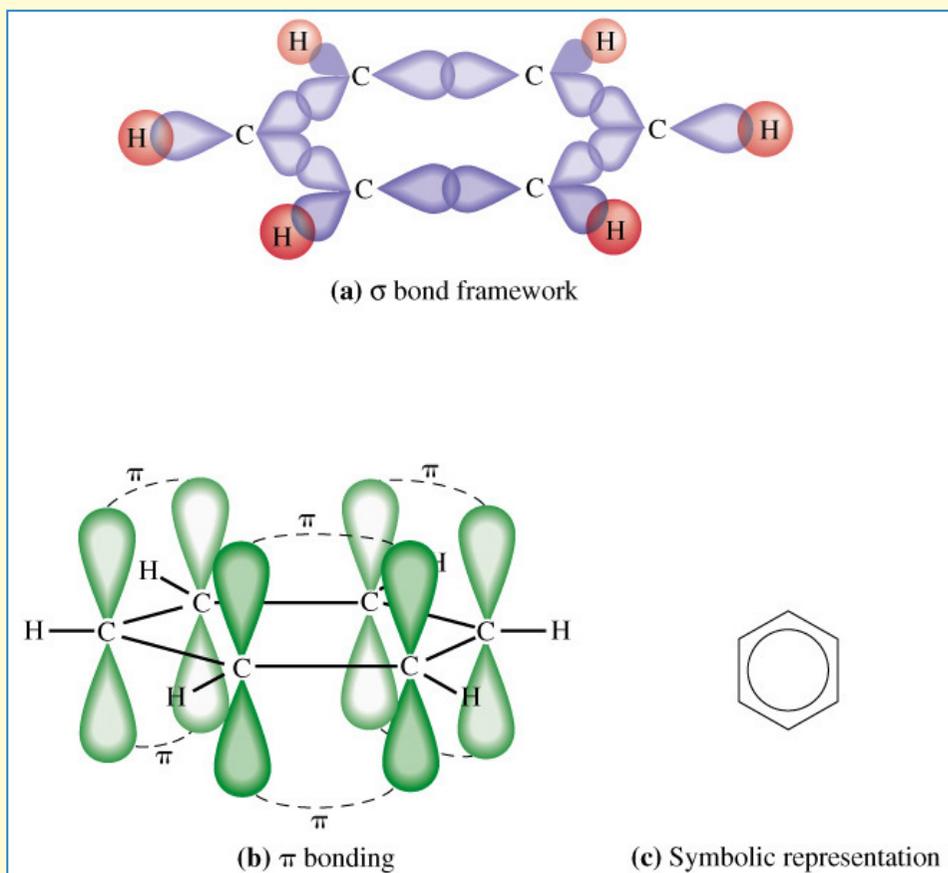
	$2p^*$	\square	\square	\square	\square	\square
	$2p^* \ 2p^*$	\square	\square	\square	\square	\square
	$2p$	\square	\square	\square	\square	$\uparrow\downarrow$
	$2p' \ 2p'$	\square	\square	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
	$2s^*$	\square	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
	$2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
		Li_2	Be_2	B_2	C_2	N_2
Bond order		1	0	1	2	3
Magnetism		Dia-magnetic	-	Para-magnetic	Dia-magnetic	Dia-magnetic
	$2p^*$	\square	\square	$\uparrow\downarrow$		
	$2p^* \ 2p^*$	\uparrow	\uparrow	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$		
	$2p' \ 2p'$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$		
	$2p$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		
	$2s^*$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		
	$2s$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		
		O_2	F_2	Ne_2		
Bond order		2	1	0		
Magnetism		Para-magnetic	Dia-magnetic	-		

Imágenes tomadas de:
 General Chemistry: Principles and Modern Applications
 R.H. Petrucci

3.- TEORÍAS DE ENLACE COVALENTE.



OM deslocalizados



Imágenes tomadas de:
General Chemistry: Principles and Moderns Applications
R.H. Petrucci

4.- EL ENLACE METÁLICO. TEORÍA DE BANDAS.



Tema 8.- El enlace químico II

EL ENLACE METÁLICO

Introducción

Metales ⇒ **Propiedades físicas y químicas características:**

- **Conductores de calor y electricidad**
- **Brillo metálico**
- **Formadores de iones positivos**
- **Reductores**
- **Formadores de óxidos básicos**

Distribución en tabla periódica de metales y no metales

4.- EL ENLACE METÁLICO. TEORÍA DE BANDAS.



Tema 8.- El enlace químico II

ESTRUCTURA Y ENLACE METÁLICO

Ejemplo, Na ($3s^1$) Cúbica centrada en el cuerpo. Cada átomo de Na está rodeado de 8 \Rightarrow
Las teorías de OA y OM no explican el enlace metálico

MODELO DEL GAS ELECTRÓNICO

Un metal está constituido por iones positivos bañados por un mar de electrones.

Este modelo explica sólo de manera cualitativa:

- La conductividad eléctrica y térmica (los e- tienen movilidad)
- Efectos fotoeléctrico y termoiónico (los e- están muy sueltos)
- Ductilidad y maleabilidad

MODELO DE BANDAS

Los e- de enlace pertenecen a todo el metal.

Supongamos 7g de Li (metal) $\Rightarrow 6,022 \times 10^{23}$ (Nav) átomos \Rightarrow Nav e- de valencia en Nav
OA $2s \Rightarrow$ La CL de estos OA da Nav OM muy próximos en energía \Rightarrow banda de energía.

4.- EL ENLACE METÁLICO. TEORÍA DE BANDAS.



Tema 8.- El enlace químico II

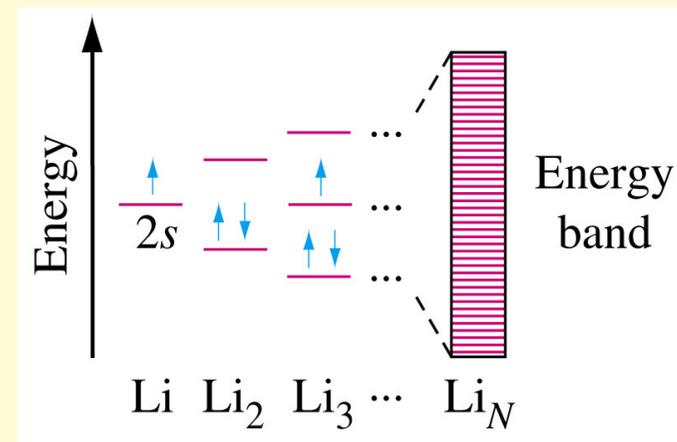
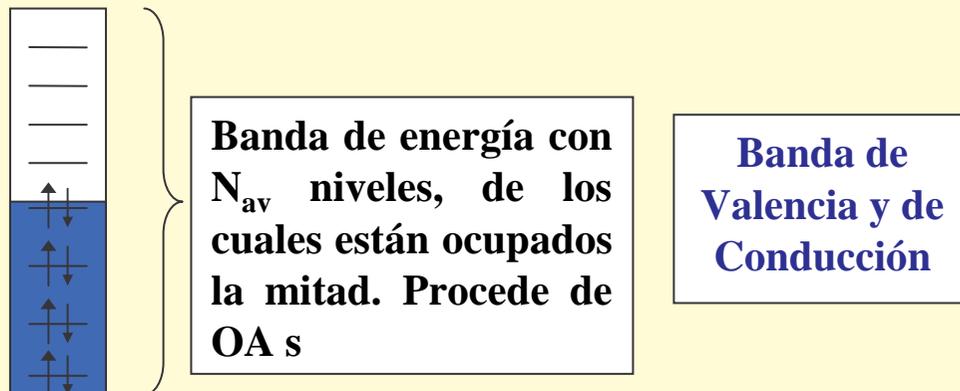
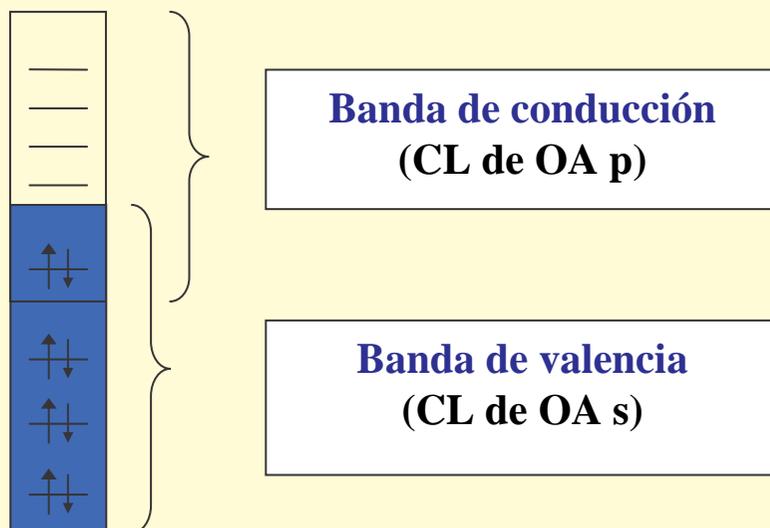


Imagen tomada de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci



4.- EL ENLACE METÁLICO. TEORÍA DE BANDAS.



Tema 8. - El enlace químico II

CARÁCTER CONDUCTOR AISLANTE Y SEMICONDUCTOR

Conductores ($\rho \sim 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$)

Banda semillena

Solapamiento de bandas (una llena y otra vacía)

Aislantes ($\rho \sim 10^{14} - 10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$)

Banda llena y banda vacía separadas por un “gap” de energía grande.

Semiconductores ($\rho \sim 10^{-2} - 10^9 \Omega \cdot \text{cm}$)

Intrínsecos \Rightarrow gap de energía pequeño

Extrínsecos \Rightarrow defectos en la red cristalina

(impurezas, compuestos no estequiométricos)

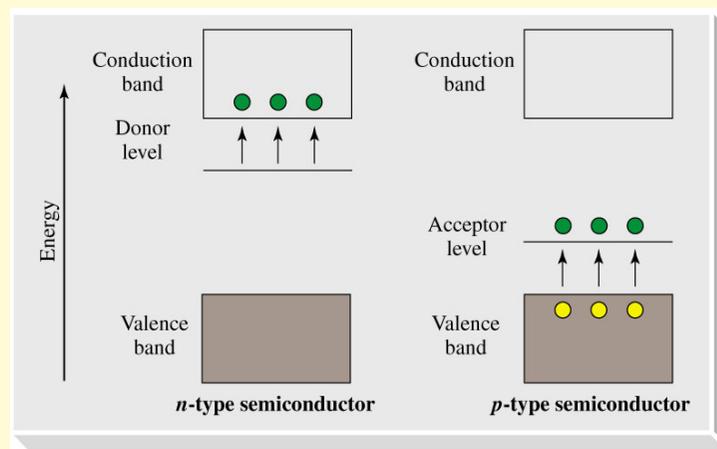


Imagen tomada de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

4.- EL ENLACE METÁLICO. TEORÍA DE BANDAS.



Tema 8.- El enlace químico II

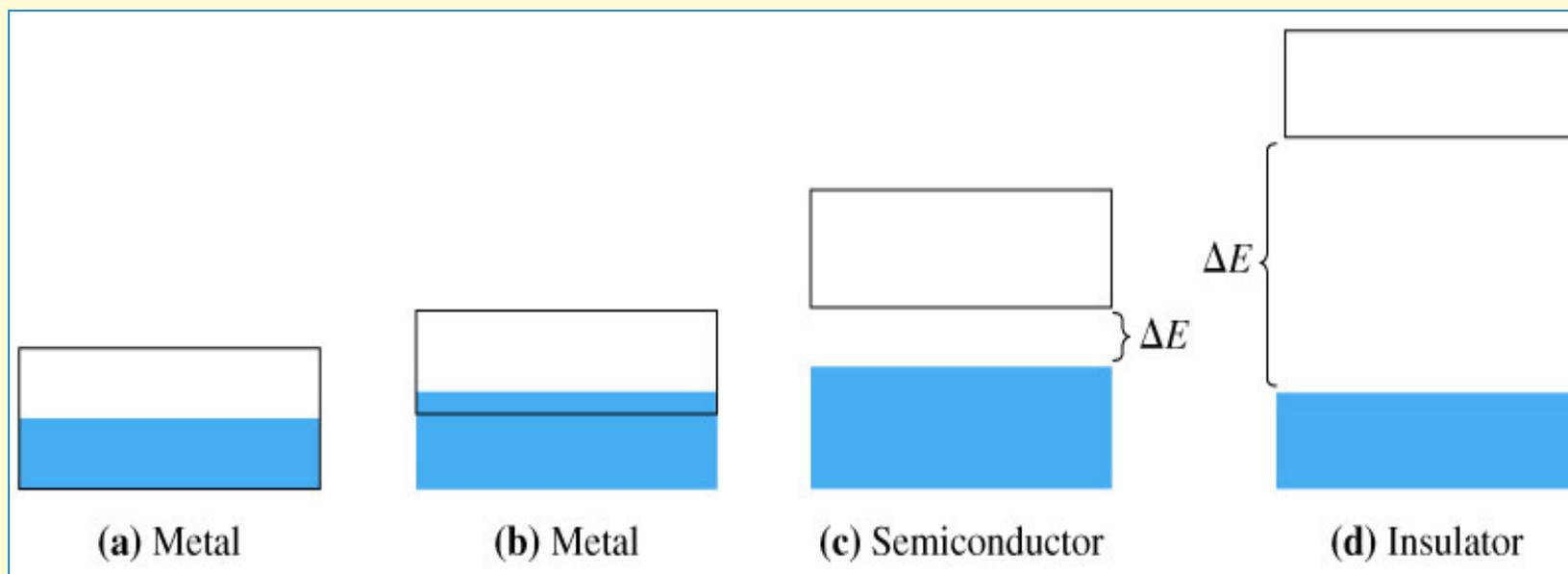


Imagen tomada de:
General Chemistry: Principles and Modern Applications
R.H. Petrucci

Elementos del Grupo 14

	Estaño	Germanio	Silicio	Diamante
Gap (eV):	0,08	0,72	1,11	6,0

TEMA 8.- TEORÍA DE ENLACE QUÍMICO Y GEOMETRÍA MOLECULAR.

Tema 8.- El enlace químico II



1. **Geometría Molecular. Modelo de repulsión de par electrónico en la capa de valencia (VSEPR).**
2. **Polaridad de las especies químicas polinucleares.**
3. **Teorías de enlace químico. El enlace covalente.**
 - ❑ **Introducción.**
 - ❑ **Teoría de enlace de valencia (TEV).**
 - ❑ **Teoría de orbitales moleculares (TOM).**
 - ❑ **Deslocalización electrónica.**
 - ❑ **Enlace Multicentrado.**
 - ❑ **Enlace covalente coordinado.**
4. **El enlace metálico. Teoría de bandas.**
 - ❑ **Conductores, aislantes y semiconductores.**