

# UNIDAD 8. ENLACE QUÍMICO

## 1. EL ENLACE QUÍMICO.

Llamamos enlace químico a cualquiera de los mecanismos de unión química entre átomos. De esta manera los átomos enlazados constituyen un sistema más estable (por lo tanto también menos energético) que los átomos por separado.

En función de su mecanismo de unión, podemos clasificar el enlace en:

### 1.1 Enlace covalente.

Su mecanismo de unión se basa en la compartición de electrones.

Si recuerdas el concepto de electronegatividad (tendencia a atraer hacia sí los electrones compartidos en un enlace covalente), podemos deducir que para poder compartir electrones, **los elementos deberán tener una electronegatividad similar**. Así decimos que este enlace es característico de la **unión entre elementos no metálicos**.

Por ejemplo, el enlace que une los átomos de H y Cl en la especie HCl es de tipo covalente.

### 1.2 Enlace iónico.

Su mecanismo de unión se basa en la transferencia de electrones.

Podemos decir que cuando los elementos que se unen tienen una **electronegatividad muy distinta** no se permite compartir electrones, sino que más bien se unen mediante la cesión de electrones desde el menos electronegativo (formará catión) al más electronegativo (formará anión). De esta manera podemos encontrar compuestos iónicos cuando **se enlazan elementos metálicos con no metálicos**.

Puede servir de ejemplo cualquiera de los resultantes de la combinación del grupo 1 y 2 (excepto H y Be que forman covalentes) con no metales. NaCl, MgCl<sub>2</sub>...

### 1.3 Enlace metálico.

Su mecanismo de unión se basa en la compartición de electrones, pero en esta ocasión de **forma colectiva entre todos los átomos que componen el metal**.

Se da evidentemente en los metales. Ejemplo Cu, Au...

En resumen:

Electronegatividades de los átomos	Tipo de enlace	Tiene lugar enlace entre	Ejemplos
Ambos altos y similares	Covalente	No metales entre sí	SO <sub>2(g)</sub>
Muy diferentes	Iónico	Metal y no metal	NaCl <sub>(s)</sub>
Ambos bajos y similares	Metálico	Metales entre sí	Fe <sub>(s)</sub>

## 2. ENLACE COVALENTE

### 2.1 TEORÍA Y ESTRUCTURAS DE LEWIS.

Si recordamos el tema anterior, hemos hablado de que los elementos que componen cada grupo de la tabla periódica tienen idéntica configuración electrónica de la capa más externa (la capa de valencia) y son precisamente los electrones de esta capa (electrones de valencia) los que contribuyen a formar el enlace.

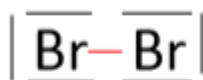
<b>Grupo</b>	<b>Electrones de valencia</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>13</b>	<b>14</b>	<b>15</b>	<b>16</b>	<b>17</b>	<b>18</b>
1	1	H•							•He•
2	2	Li•	•Be•						
13	3			•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
14	4	Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
15	5	K•	•Ca•	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
16	6	Rb•	•Sr•	•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
17	7	Cs•	•Ba•	•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn•
18 (Gases Nobles)	8	Fr•	•Ra•						

(Excepto el He que tiene 2 solo)

De esta manera, el enlace covalente se forma por compartición de electrones de valencia. El objetivo de esta unión es estabilizar la configuración electrónica de los átomos que se unen y puesto que lo más estable que conocemos son los gases nobles (con 8 electrones en la capa de valencia) lo lógico será que el fin de nuestra unión sea hacer que coincida con la de ellos. Esta tendencia se conoce como la **regla del Octeto**. (Nota: el H adquiere la configuración estable llegando solo a 2 electrones, la del He).

La **estructura de Lewis** es la representación de cómo se enlazan esos electrones de valencia (representados por puntos) de cada átomo para formar todo el conjunto de manera que finalmente cada símbolo químico quede rodeado por 8 puntos (regla del octeto). En esta estructura los electrones pueden estar compartidos formando parte del enlace covalente o bien no compartidos a los que llamamos solitarios o no enlazantes.

Ejemplo de estructura de Lewis (Br<sub>2</sub>)



— Representa un par de electrones compartidos  
 — Representa un par de electrones solitarios

De esta manera podemos ver que cada átomo de Br comparte uno de los 7 electrones de su capa de valencia con el otro átomo y así cada uno consigue el octeto.

Se puede llegar a la estructura de Lewis correcta por simple intuición o incluso porque la sabemos de memoria, pero en caso contrario o en caso de duda os recomiendo que sigáis las siguientes reglas para las estructuras de Lewis:

- En caso de especies triatómicas o superiores, tenemos el problema de tener que elegir un átomo central. Éste suele ser el que tiene mayor covalencia (pues será el que pueda formar un mayor número de enlaces con otros átomos). También podemos decir que suele ocupar la posición central el átomo menos electronegativo. Por el contrario, algunos como el H siempre ocupan una posición periférica.
- Si la especie es iónica se quitan o añaden tantos electrones como indica la carga.
- Podemos usar la siguiente ecuación para obtener las estructuras de Lewis:

$$\text{Electrones compartidos} = \text{Electrones necesarios} - \text{Electrones disponibles}$$

(son a los que debe llegar cada elemento,

(los que tiene en capa de valencia)

siempre 8 menos H que es 2)

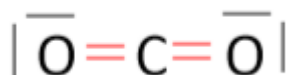
Tenemos que tener en cuenta en esta fórmula cada átomo que compone la estructura, además acordarnos de sumar o restar los electrones de la carga en el caso de especies iónicas.

$$\text{Electrones solitarios (no enlazantes)} = \text{Electrones disponibles} - \text{Electrones compartidos}$$

Ejemplo: Estructura de Lewis CO<sub>2</sub>

Electrones compartidos =  $(3 \times 8) - (4 + 6 \times 2) = 24 - 16 = 8$  electrones compartidos (4 enlaces)

Electrones solitarios =  $16 - 8 = 8$  electrones sin compartir



8 electrones que se comparten (4 enlaces) y el resto de los 8 electrones sin compartir los colocamos en los oxígenos (ya que el C está completo). De esta manera todos alcanzan 8 en total y se cumple la regla del octeto.

## Excepciones a la regla del octeto:

- **Hipovalencia** (como el B, Be... que incumplen la regla del octeto por defecto).

El **Be** tiene 2  $e^-$  en la última capa y para ser estable sólo necesita otros 2, en total 4 electrones, con sólo 2 pares de electrones ya es estable. Tiene un **octeto incompleto**.

Ejemplo: **BeCl<sub>2</sub>**.

$e^-$  nec 20

$e^-$  disp. 16

4  $e^-$  compartidos,



2 enlaces.

El **B** sólo necesita 3 pares de  $e^-$ , (**octeto incompleto**).

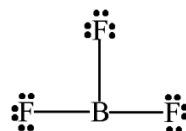
Ejemplo: **BF<sub>3</sub>**.

$e^-$  nec 30

$e^-$  disp. 24

6  $e^-$  compartidos,

3 enlaces.



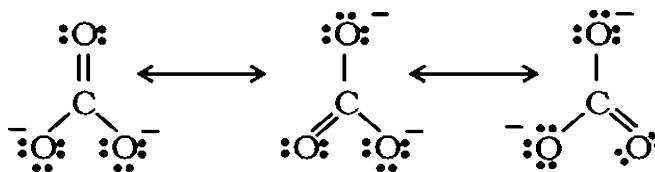
- **Hipervalencia** (que la incumplen por exceso).

Ejemplo: **PCl<sub>5</sub>**



Otros conceptos a tener en cuenta y de los que veremos ejemplos a continuación son:

- **Resonancia**: Cuando una especie química puede ser representada por dos o más estructuras equivalentes, la estructura correcta es una combinación de ellas (híbrido).



- **Enlace covalente dativo o coordinado**: Enlace covalente en el cual, el par de electrones compartidos ha sido proporcionado por uno solo de los átomos implicados.

Ejemplos de estructuras de Lewis frecuentes:

1) <b>Cl<sub>2</sub></b>   $\overline{\text{Cl}}-\overline{\text{Cl}}$	2) <b>O<sub>2</sub></b>   $\overline{\text{O}}=\overline{\text{O}}$
3) <b>H<sub>2</sub></b> H-H	4) <b>N<sub>2</sub></b> $\overline{\text{N}}\equiv\overline{\text{N}}$
5) <b>F<sub>2</sub></b>   $\overline{\text{F}}-\overline{\text{F}}$	6) <b>CO</b> $\overline{\text{C}}\equiv\overline{\text{O}}$
7) <b>CN<sup>-</sup></b> [ $\overline{\text{C}}\equiv\overline{\text{N}}$ ] <sup>-</sup>	8) <b>NO<sup>+</sup></b> [ $\overline{\text{N}}\equiv\overline{\text{O}}$ ] <sup>+</sup>
9) <b>HCl</b> H- $\overline{\text{Cl}}$	10) <b>H<sub>2</sub>O</b> H- $\overline{\text{O}}$ -H
11) <b>N<sub>2</sub>O</b> $\overline{\text{N}}=\text{N}=\overline{\text{O}}$	12) <b>N<sub>3</sub><sup>-</sup></b> [ $\overline{\text{N}}=\text{N}=\overline{\text{N}}$ ] <sup>-</sup>
13) <b>NO<sub>2</sub><sup>+</sup></b> [ $\overline{\text{O}}=\text{N}=\overline{\text{O}}$ ] <sup>+</sup>	14) <b>HCN</b> H-C $\equiv\overline{\text{N}}$
15) <b>NOCl</b> $\overline{\text{O}}=\overline{\text{N}}-\overline{\text{Cl}}$	16) <b>H<sub>2</sub>S</b> H- $\overline{\text{S}}$ -H
17) <b>CS<sub>2</sub></b> $\overline{\text{S}}=\text{C}=\overline{\text{S}}$	18) <b>OCl<sub>2</sub></b>   $\overline{\text{Cl}}-\overline{\text{O}}-\overline{\text{Cl}}$
19) Resonancia* <b>SO<sub>2</sub></b> [ $\overline{\text{O}}-\overline{\text{S}}=\overline{\text{O}}$ ] ↔ [ $\overline{\text{O}}=\overline{\text{S}}-\overline{\text{O}}$ ]	20) <b>CO<sub>2</sub></b> $\overline{\text{O}}=\text{C}=\overline{\text{O}}$

21) Hipovalencia* <b>BF<sub>3</sub></b> $\begin{array}{c} \overline{\text{F}}-\text{B}-\overline{\text{F}} \\   \\ \overline{\text{F}} \end{array}$	22) <b>PF<sub>3</sub></b> $\begin{array}{c} \overline{\text{F}}-\text{P}-\overline{\text{F}} \\   \\ \overline{\text{F}} \end{array}$
23) Hipovalencia* <b>BeH<sub>2</sub></b> H-Be-H	24) <b>CH<sub>4</sub></b> $\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
25) Resonancia* <b>NO<sub>2</sub><sup>-</sup></b> $[\overline{\text{O}}=\overline{\text{N}}-\overline{\text{O}}]^- \leftrightarrow [\overline{\text{O}}-\overline{\text{N}}=\overline{\text{O}}]^-$	26) Resonancia* <b>O<sub>3</sub></b> $[\overline{\text{O}}=\overline{\text{O}}-\overline{\text{O}}] \leftrightarrow [\overline{\text{O}}-\overline{\text{O}}=\overline{\text{O}}]$
27) Hipovalencia* <b>BeCl<sub>2</sub></b> $\overline{\text{Cl}}-\text{Be}-\overline{\text{Cl}}$	28) Hipovalencia* <b>BH<sub>3</sub></b> $\begin{array}{c} \text{H}-\text{B}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
29) <b>NH<sub>3</sub></b> $\begin{array}{c} \text{H}-\overline{\text{N}}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	30) <b>CCl<sub>4</sub></b> $\begin{array}{c} \overline{\text{Cl}} \\   \\ \overline{\text{Cl}}-\text{C}-\overline{\text{Cl}} \\   \\ \overline{\text{Cl}} \end{array}$
31) <b>CH<sub>3</sub>Cl</b> $\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\overline{\text{Cl}} \\   \\ \text{H} \end{array}$	32) <b>NH<sub>4</sub><sup>+</sup></b> $\left[ \begin{array}{c} \text{H} \\ \uparrow \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \uparrow \\ \text{H} \end{array} \right]^+$ <p style="text-align: right;">Enlace dativo*</p>
33) <b>PO<sub>4</sub><sup>3-</sup></b> $\left[ \begin{array}{c} \overline{\text{O}} \\   \\ \overline{\text{O}}-\text{P}-\overline{\text{O}} \\   \\ \overline{\text{O}} \end{array} \right]^{3-}$	34) <b>SO<sub>4</sub><sup>2-</sup></b> $\left[ \begin{array}{c} \overline{\text{O}} \\   \\ \overline{\text{O}}-\text{S}-\overline{\text{O}} \\   \\ \overline{\text{O}} \end{array} \right]^{2-}$
35) Hipervalencia* <b>PCl<sub>5</sub></b> $\begin{array}{c} \overline{\text{Cl}} \\   \\ \overline{\text{Cl}}-\text{P}-\overline{\text{Cl}} \\ / \quad \backslash \\ \overline{\text{Cl}} \quad \overline{\text{Cl}} \end{array}$	36) <b>ClO<sub>3</sub><sup>-</sup></b> $\left[ \begin{array}{c} \overline{\text{O}}-\overline{\text{Cl}}-\overline{\text{O}} \\   \\ \overline{\text{O}} \end{array} \right]^-$

37) $\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{Cl}-\text{C}-\text{Br} \\   \\ \text{Br} \end{array}$ $\text{CCl}_2\text{Br}_2$	38) $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ $\text{C}_2\text{H}_2$
39) $\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H} \end{array}$ $\text{C}_2\text{H}_4$	40) $\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ $\text{C}_2\text{H}_6$

## 2.2 GEOMETRÍA MOLECULAR SEGÚN EL MÉTODO RPECV.

Es fundamental entender que la estructura de Lewis es una representación de cómo se enlazan los átomos, pero en ningún caso refleja la geometría de la molécula.

La geometría de una molécula es el resultado de la distribución tridimensional de sus átomos y viene definida por la disposición espacial de los núcleos atómicos.

El método *RPECV* (*Repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia*) nos permite predecir la geometría de la molécula y su hipótesis central se basa en que:

**"Las nubes electrónicas de los pares de electrones de la capa de valencia que rodean al átomo central se repelen entre sí, adoptando la disposición espacial que minimice la repulsión eléctrica"**


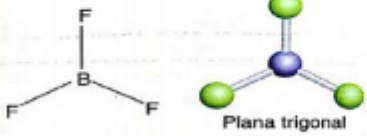
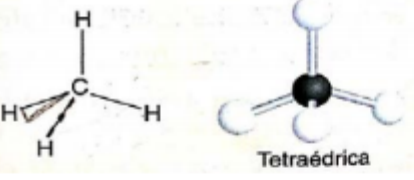
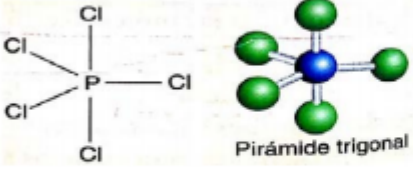

\* *¿Qué es una nube electrónica?*


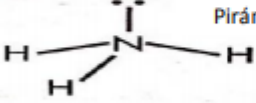
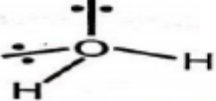
En primer lugar destacar que no son orbitales y que por tanto pueden alojar más de dos electrones. Se trata de regiones de alta densidad electrónica debido tanto a enlaces covalentes de cualquier orden (simples, dobles...) como a pares de electrones solitarios.

**A= Átomo central**

**B= Nubes electrónicas enlazantes** (debidas a *pares de electrones compartidos* de cualquier orden)

**E= Nubes electrónicas no enlazantes** (debidas a *pares de electrones solitarios*)

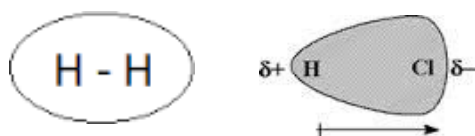
MOLÉCULAS CUYO ÁTOMO CENTRAL CARECE DE PARES DE ELECTRONES SOLITARIOS				
Tipo de Molécula	Nubes electrónicas	Ejemplo	Geometría Molecular	Angulo de enlace( $\alpha$ )
AB <sub>2</sub>	2 enlazantes	BeCl <sub>2</sub>	 Lineal	180°
AB <sub>3</sub>	3 enlazantes	BF <sub>3</sub>	 Plana trigonal	120°
AB <sub>4</sub>	4 enlazantes	CH <sub>4</sub>	 Tetraédrica	109,5°
AB <sub>5</sub>	5 enlazantes	PCl <sub>5</sub>	 Pirámide trigonal	120° y 90°
AB <sub>6</sub>	6 enlazantes	SF <sub>6</sub>	 Octaédrica	90°

MOLÉCULAS CUYO ÁTOMO CENTRAL TIENE PARES DE ELECTRONES SOLITARIOS				
Tipo de molécula	Nubes electrónicas	Ejemplo	Geometría Molecular	Angulo de enlace( $\alpha$ )*
AB <sub>2</sub> E	2 enlazantes 1 no enlazante	SO <sub>2</sub>	 Angular	$\alpha < 120^\circ$
AB <sub>3</sub> E	3 enlazantes 1 no enlazante	NH <sub>3</sub>	 Pirámide trigonal	$\alpha < 109,5^\circ$
AB <sub>2</sub> E <sub>2</sub>	2 enlazantes 2 no enlazante	H <sub>2</sub> O	 Angular	$\alpha < 109,5^\circ$



## 2.3 POLARIDAD DE ENLACE Y DE MOLÉCULAS

La **polaridad de un enlace** viene determinada por la diferencia de electronegatividad existente entre los elementos que lo forman, de manera que si los átomos que se unen tienen electronegatividades similares el enlace es **apolar**; pero si existe una apreciable diferencia de electronegatividad, se dice que el enlace es **polar**. Esto se debe a que los electrones no se comparten de forma equilibrada y se crean excesos y defectos de carga negativa, es decir dipolos eléctricos. El átomo más electronegativo, atrae más a los electrones compartidos del enlace y queda con un exceso de carga negativa ( $\delta^-$ ) y el menos electronegativo con un defecto de carga negativa ( $\delta^+$ ).



En la molécula de hidrógeno los dos átomos atraen por igual a los electrones del enlace, no hay momento dipolar, pero en la molécula de cloruro de hidrógeno el cloro es más electronegativo y se crea un momento dipolar.

A medida que aumenta la diferencia de electronegatividad, el enlace covalente va adquiriendo un **carácter iónico creciente**. La polaridad del enlace se mide por medio de una magnitud física llamada **momento dipolar ( $\mu$ )** y se mide en Debye (D).

### Polaridad de Moléculas

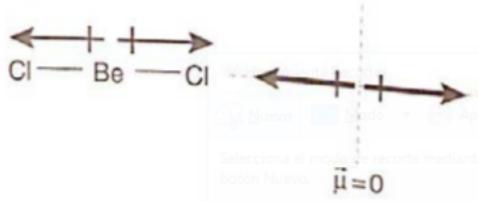
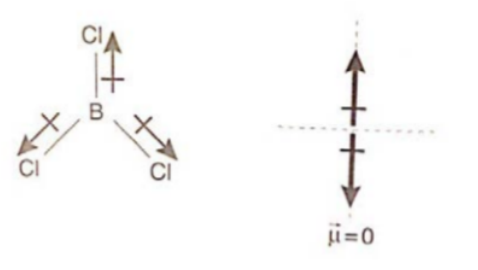
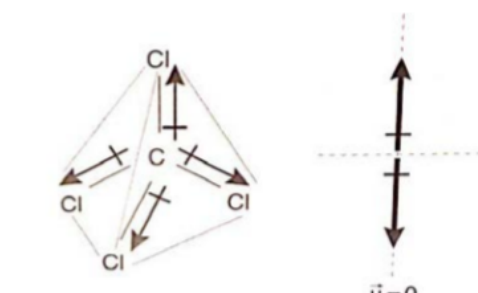
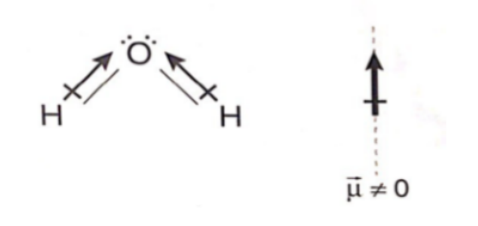
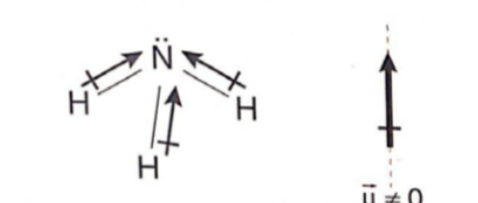
Una molécula diatómica es polar siempre que su enlace covalente lo sea. Así las moléculas diatómicas homonucleares ( $O_2$ ,  $Cl_2$ ,  $N_2$ ...) son siempre apolares mientras que otras diatómicas como el HCl son polares porque existe diferencia de electronegatividad entre sus átomos.

En el caso de moléculas triatómicas y superiores la presencia de enlaces polares no garantiza que la molécula en conjunto lo sea. Esto es debido a que al tratarse de una magnitud vectorial, los momentos dipolares de varios enlaces pueden anularse mutuamente.

Por lo tanto para estudiar la polaridad de las moléculas debemos:

- 1) Dibujar la geometría de la molécula. ¡Importante! Si no dibujamos su geometría sino solo la estructura de Lewis podemos equivocarnos fácilmente.
- 2) Dibujar los momentos dipolares individuales de los enlaces (dirigido desde el elemento menos electronegativo hacia el más electronegativo) y sumarlos vectorialmente para obtener el momento dipolar total. *Si la suma es 0, la molécula es apolar, de lo contrario es polar.*
- 3) Como factor secundario, la presencia de pares de electrones no enlazantes en el átomo central (acumulación de carga negativa) acrecienta o debilita el efecto polar.

Estudia la polaridad de las siguientes moléculas:  $\text{BeCl}_2$ ;  $\text{BCl}_3$ ;  $\text{CCl}_4$ ;  $\text{H}_2\text{O}$ ;  $\text{NH}_3$

<p><b><math>\text{BeCl}_2</math></b></p> 	<p><b>Molécula Apolar.</b> Aunque tiene enlaces polares, los momentos dipolares individuales se anulan por la propia geometría de la molécula y el momento dipolar total es 0.</p>
<p><b><math>\text{BCl}_3</math></b></p> 	<p><b>Molécula Apolar.</b> Aunque tiene enlaces polares, los momentos dipolares individuales se anulan por la propia geometría de la molécula y el momento dipolar total es 0.</p>
<p><b><math>\text{CCl}_4</math></b></p> 	<p><b>Molécula Apolar.</b> Aunque tiene enlaces polares, los momentos dipolares individuales se anulan por la propia geometría de la molécula y el momento dipolar total es 0.</p>
<p><b><math>\text{H}_2\text{O}</math></b></p> 	<p><b>Molécula polar.</b> Los momentos dipolares individuales son muy grandes y se refuerzan mutuamente. Los pares de electrones solitarios del oxígeno contribuyen a aumentar el efecto polar.</p>
<p><b><math>\text{NH}_3</math></b></p> 	<p><b>Molécula polar.</b> Los momentos dipolares individuales son muy grandes y se refuerzan mutuamente. El par de electrones solitarios del nitrógeno en el mismo sentido que el vector resultante, aumenta el efecto polar.</p>

## 2.4 TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (TEV)

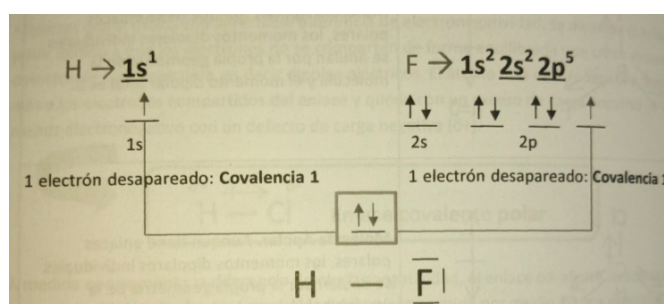
Esta teoría establece que los enlaces se forman como consecuencia de solapamiento de los orbitales atómicos con electrones desapareados y espines opuestos. Los electrones ya apareados no formarán enlaces; por tanto, un elemento puede formar un número de enlaces covalentes igual al número de electrones desapareados (*covalencia*).

*Ejemplo: Formación de enlace en la molécula de HF*

$H \rightarrow 1s^1$ ; tiene un electrón desapareado en un orbital s, por lo que puede formar un único enlace. Tiene covalencia 1.

$F \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ ; También tiene un solo electrón desapareado en un orbital p, por lo que también puede formar un único enlace. Tiene covalencia 1.

De esta manera el orbital con el electrón desapareado del H solaparía con el orbital con el electrón desapareado del F para formar el enlace de HF



Sin embargo, en otros casos, las covalencias obtenidas no coinciden con los valores experimentales. Por ejemplo si analizamos la configuración electrónica del carbono:  $1s^2 2s^2 2p^2$ , teóricamente tendría covalencia 2 (2 electrones desapareados en orbitales p) pero el hecho es que sabemos que tiene covalencia 4 porque puede formar 4 enlaces covalentes.

La Teoría del enlace de valencia (TEV) resuelve esta anomalía con el concepto de **promoción electrónica**, según el cual un átomo podrá "promocionar" electrones a un subnivel energético superior si la energía necesaria que debe adquirir no es muy elevada y la devuelve cuando se forman los enlaces y solo es posible dentro de la misma capa electrónica:



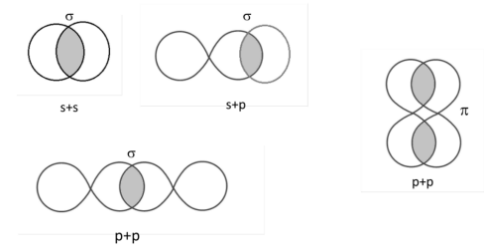
## ENLACES TIPO SIGMA ( $\sigma$ ) Y PI ( $\pi$ )

Existen dos posibilidades de solapamiento de orbitales

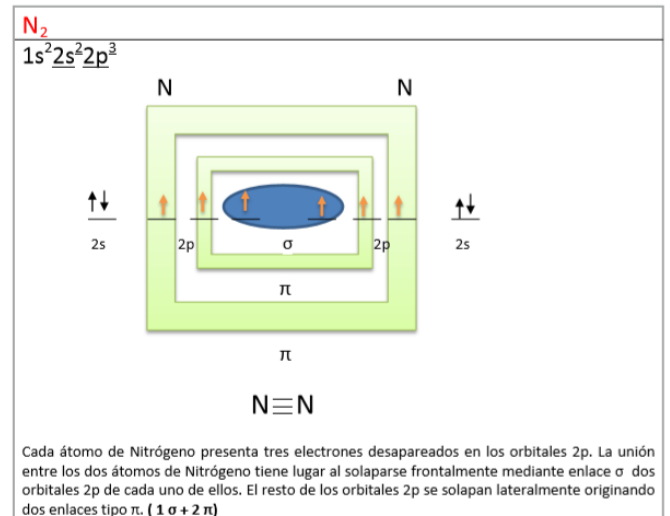
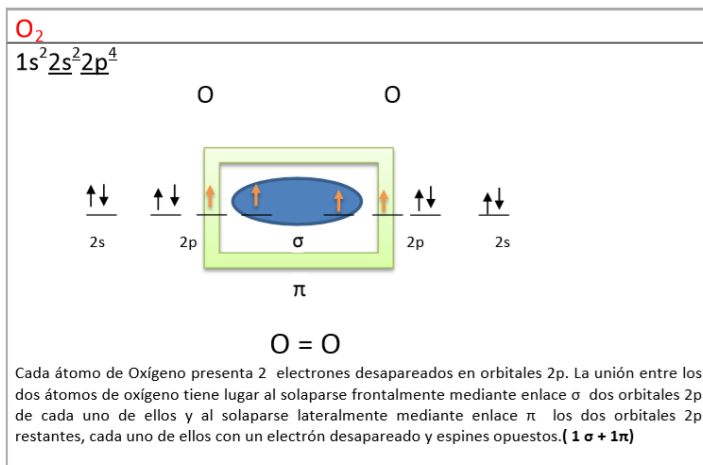
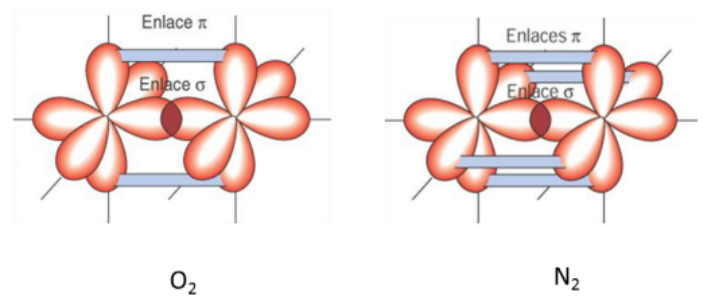
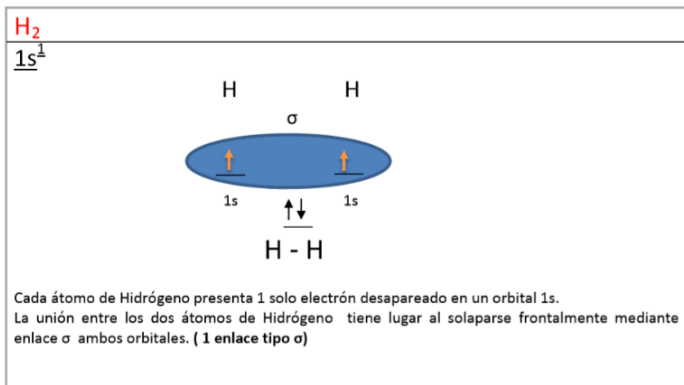
**Enlace  $\sigma$ :** Enlace formado por solapamiento frontal de orbitales.

**Enlace  $\pi$ :** Enlace formado por solapamiento lateral de orbitales.

(Nota: Los siguientes dibujos están hechos para que os hagáis fácilmente una idea mental del concepto pero es más correcto dibujar la forma de los orbitales)



\* Indique, razonadamente, cuántos enlaces  $\pi$  y cuántos  $\sigma$  tienen las siguientes moléculas:



**Conclusión práctica:** Los enlaces simples se forman siempre por solapamiento frontal mediante enlace tipo  $\sigma$  y puesto que no puede haber más de un solapamiento frontal, los enlaces múltiples se formarán por un solapamiento frontal  $\sigma$  y el resto por solapamientos laterales de los orbitales restantes mediante enlaces  $\pi$ .

## HIBRIDACIÓN DE LOS ORBITALES ATÓMICOS.

Ya hemos visto que la TEV justifica la formación del enlace por medio del solapamiento de dos orbitales atómicos que contienen electrones desapareados. Pero en numerosos casos la utilización de orbitales atómicos no justifica la realidad de la molécula. Para justificar este aspecto, esta teoría utiliza como herramienta fundamental el concepto de orbital híbrido.

**La hibridación es el proceso mediante el cual orbitales atómicos puros se combinan entre sí, transformándose en otros orbitales diferentes denominados orbitales híbridos (OH):**

- Se forman tantos OH como orbitales atómicos puros se combinen.
- Todos los OH son idénticos en forma y energía
- Los OH son muy direccionales y los enlaces que se obtiene con ellos son más fuertes.

\* Veamos los siguientes tipos de hibridación:

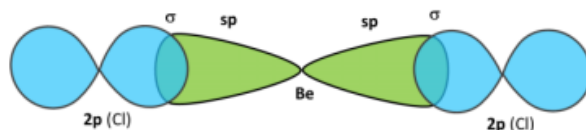
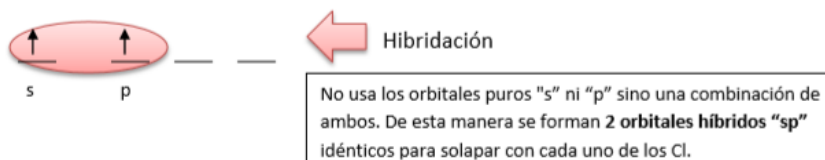
### Hibridación $sp$ (ejemplo $BeCl_2$ ):

La configuración electrónica del átomo central (Be) es  $1s^2 2s^2$ . La falta de electrones desapareados impide, en apariencia, la formación de enlaces; pero, la cercanía energética de los orbitales  $2s$  y  $2p$  permite la promoción electrónica de un orbital a otro de esta manera:



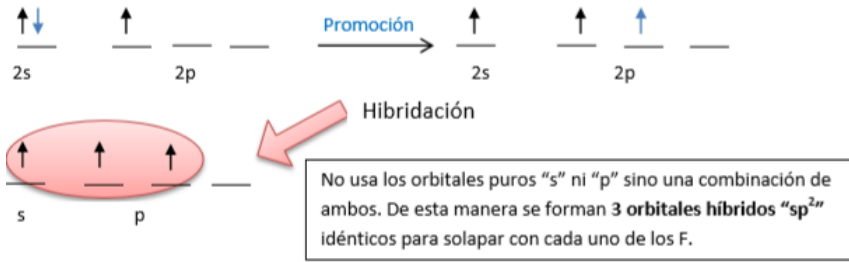
Ahora el átomo de Be si puede formar dos enlaces covalentes con sendos átomos de Cl. Sin embargo, los dos enlaces Be-Cl no serán idénticos, ya que no solapa de la misma manera un orbital  $s$  que un orbital  $p$ . Aquí reside el problema, ya que los datos experimentales revelan que ambos enlaces sí que son idénticos.

La TEV resuelve la cuestión suponiendo que el átomo de Be no usa los orbitales atómicos puros  $2s$  y  $2p$ , sino orbitales híbridos, que proceden de la combinación de ambos. De esa manera los nuevos orbitales se denominan **orbitales híbridos  $sp$** .



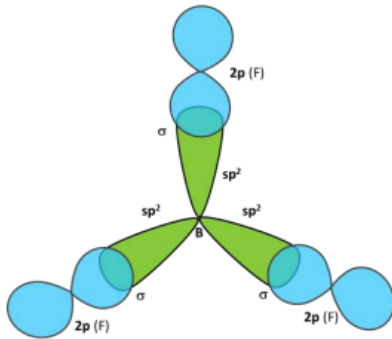
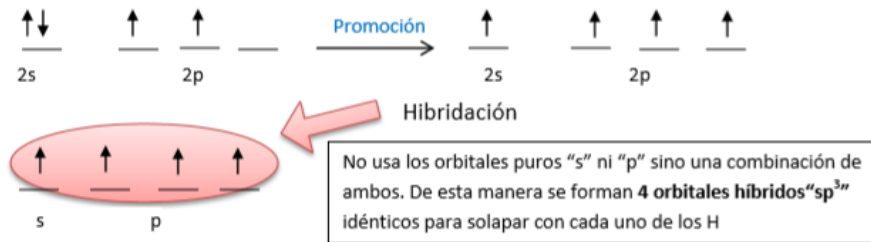
**Hibridación  $sp^2$  (ejemplo  $BF_3$ ):**

De forma análoga al caso anterior pero con el B como átomo central:  $1s^2 2s^2 2p^1$

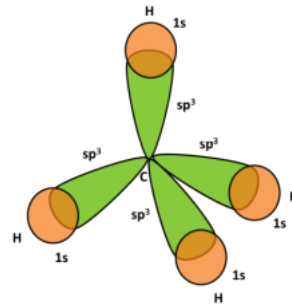


**Hibridación  $sp^3$  (ejemplo  $CH_4$ ):**

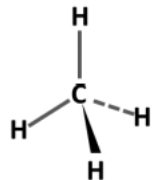
De forma análoga al caso anterior pero con el C como átomo central:  $1s^2 2s^2 2p^2$



Hibridación  $sp^2$



Hibridación  $sp^3$



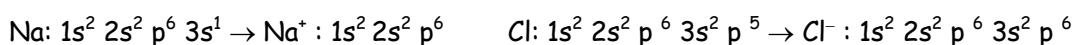
**Conclusión práctica:** Si únicamente nos piden indicar (no justificar) la hibridación del átomo central, es muy práctico conocer esta pequeña tabla de correspondencia entre nubes electrónicas e hibridación del átomo central:

Nubes electrónicas	Hibridación del átomo central
2	$sp$
3	$sp^2$
4	$sp^3$
5	$sp^3d$
6	$sp^3d^2$

### 3. ENLACE IÓNICO.

Este tipo de enlace se produce al unirse un elemento metálico muy electropositivo con uno no metálico muy electronegativo, es decir dos elementos de electronegatividad muy diferente. En estas condiciones ocurre una transferencia de uno o varios electrones del átomo del elemento de baja electronegatividad al de alta, con lo que se forman los iones de los respectivos elementos: el positivo o catión y el negativo o anión, que quedan unidos por atracción electrostática.

Así, por ejemplo, el sodio y el cloro consiguen alcanzar (en forma de sus iones respectivos) la estructura de gas noble:



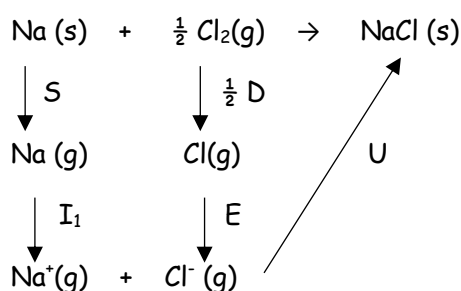
Se llama electrovalencia o valencia iónica de un elemento al número de electrones que suele ganar o perder dicho elemento para formar sus iones.

#### 3.1 CICLO DE BORN-HABER

La energía reticular es una magnitud que nos informa de la estabilidad de la red formada. No se puede calcular de manera directa, por lo que recurrimos al llamado **ciclo de Born-Haber**.

Ejemplo: Energía puesta en juego en la formación de un cristal de **NaCl**

- En primer lugar, se provoca la **sublimación** del sodio con la consiguiente aportación energética (**S**).
- Después provocaremos la disociación del cloro molecular en cloro atómico comunicando la **energía de disociación** oportuna (**D**)
- La siguiente etapa consiste en ionizar al sodio y al cloro en la que interviene la **1ª energía de ionización** del Na (**I<sub>1</sub>**) y la **1ª afinidad electrónica** del Cl (**E**)
- Por último, será necesario la liberación de la energía necesaria para la formación del cristal, **energía reticular** (**U**)

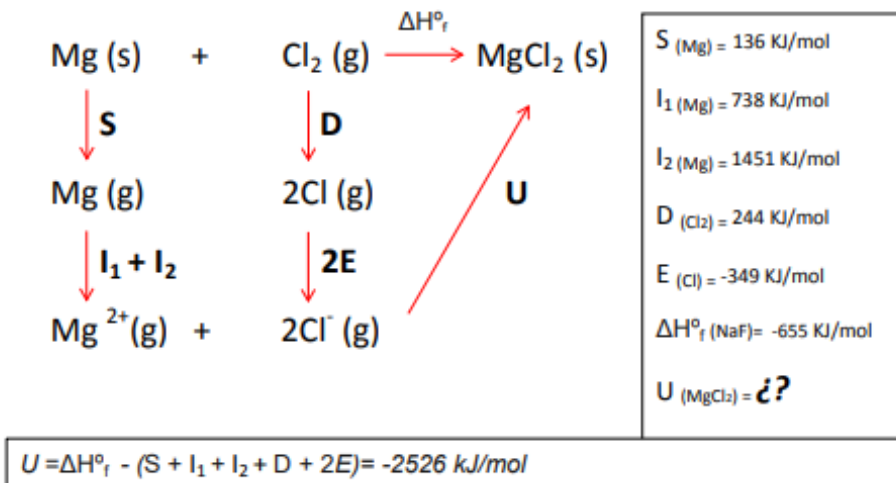
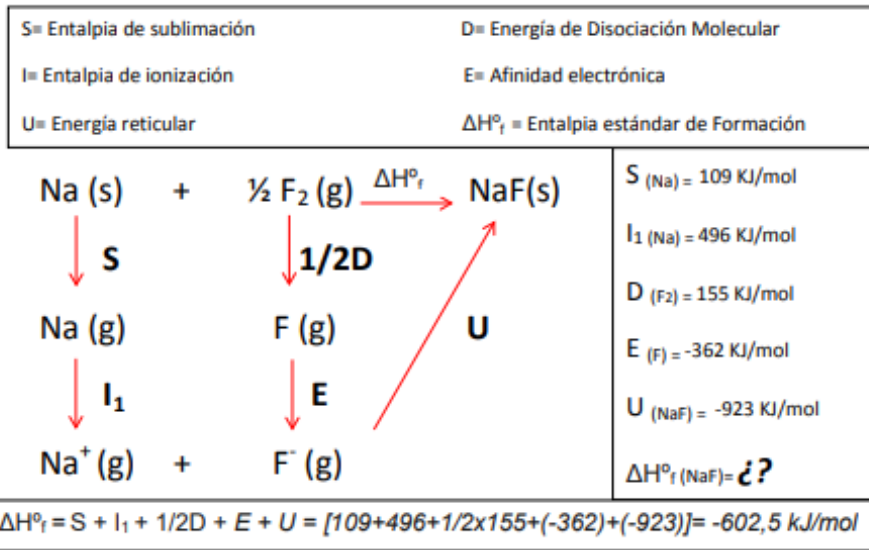


$$\text{Balance energético: } \Delta H^\circ_f = S + I_1 + \frac{1}{2} D + E + U$$

De esta expresión se deduce fácilmente que la energía reticular se puede calcular:

$$U = \Delta H^\circ_f - (S + I_1 + \frac{1}{2} D + E)$$

Otros ejemplos de ciclos de BORN-HABER:





## 4. ENLACE METÁLICO.

Se produce entre elementos que tienen electronegatividades bajas (metales). La teoría de la nube electrónica o mar de electrones propone que cada metal cede sus electrones de la capa de valencia para formar un conjunto electrónico, una nube que se intercala entre todos los átomos manteniéndolos unidos, formando una red metálica. (en el siguiente epígrafe lo estudiaremos con más detalle)

## 5. PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS SEGÚN ENLACE.

### 5.1. Compuestos covalentes

#### 5.1.1. Compuestos covalentes moleculares (HCl, NH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>OH, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, etc...)

Se llaman compuestos covalentes moleculares a aquellos formados por átomos unidos por enlaces covalentes que forman moléculas y éstas a su vez unidas por un tipo de interacción llamadas **fuerzas intermoleculares**, que se caracterizan por ser **débiles**, a diferencia del enlace covalente que requiere bastante más energía para romperlo.



#### 1. Fuerzas de dispersión o London

*¿Cómo es posible que interaccionen dos moléculas que son apolares?* La mecánica cuántica lo explica al contemplar la existencia de fluctuaciones muy rápidas que provocan asimetría en la distribución de la carga eléctrica de la molécula. Esto ocasiona la aparición de un momento dipolar (Dipolo instantáneo) que provoca la formación de dipolos inducidos en las moléculas vecinas. Este tipo de interacción intermolecular son las fuerzas de dispersión o de London.

Se encuentran presentes en todas las moléculas y son las únicas que pueden existir en las moléculas apolares. Estas fuerzas crecen cuanto mayor es el tamaño de la molécula.

(Si miras la tabla periódica podrás ver que la masa molecular es mayor cuanto mayor es el número atómico, de esta manera podemos saber fácilmente el compuesto que tiene las fuerzas de dispersión más intensas).

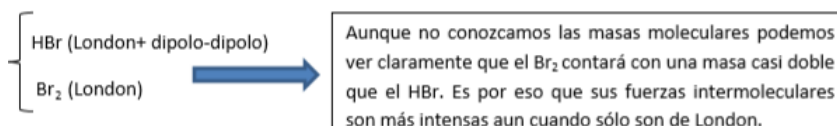
#### 2. Fuerzas dipolo-dipolo (dipolos permanentes)

Se dan en moléculas polares, por lo que a las fuerzas de dispersión (siempre presentes) se les añade este nuevo tipo de fuerza debido a la propia polaridad de las moléculas (Dipolos permanentes). Estas fuerzas crecen cuanto más polar sea la molécula (es decir, cuanta más diferencia de electronegatividad exista entre los átomos que formen la molécula).

*Nota:* En moléculas de masa muy diferente, las fuerzas de dispersión predominarían sobre los dipolos permanentes, y en moléculas de masa parecida predominarían estos últimos.

Esto quiere decir que podemos encontrar ejemplos de moléculas apolares cuyo tamaño sea tan grande que sus fuerzas de London sean más intensas que el conjunto de fuerzas intermoleculares de moléculas polares.

Ejemplo:



### 3. Fuerzas entre dipolos permanentes y dipolos inducidos:

**Se forman entre moléculas polares y apolares.** La presencia de moléculas polares provoca la aparición de dipolos inducidos en las moléculas inicialmente apolares.

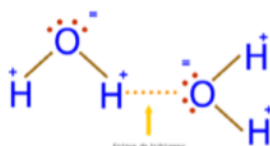
Ej. Entre HCl (dipolo permanente) y N<sub>2</sub> (dipolo inducido).

➤ **Enlaces o puentes de hidrógeno:**

**Es un caso extremo de interacción dipolar (este enlace tiene una fuerza intermedia entre el enlace de Van der Waals y el enlace covalente).**

**Requisitos para formarlo:** Átomos pequeños y electronegativos con pares de electrones solitarios (F, O y N) unidos a átomos de hidrógeno

De esta manera el enlace se produce por la fuerte atracción eléctrica entre el H y los electrones solitarios pertenecientes al átomo pequeño, electronegativo de la molécula vecina.



Ahora que ya hemos hablado del tipo de interacción que existe entre las moléculas podemos justificar adecuadamente las propiedades de los compuestos covalentes moleculares:

### Punto de fusión y ebullición

Al alcanzar las temperaturas de fusión y ebullición se produce en el compuesto un cambio de estado físico, que requiere la rotura de las fuerzas intermoleculares. Como ya hemos dicho que éstas suelen ser débiles, es lógico pensar que **presentan puntos de fusión y ebullición bajos**. Es decir, cambian de estado a bajas temperaturas y en consecuencia **la mayor parte de estas sustancias son gases o líquidos a temperatura ambiente**, aunque si las fuerzas intermoleculares que las mantienen unidas son intensas, pueden permanecer en estado sólido en algunos casos. Por ejemplo, el I<sub>2</sub>, en el que el mayor tamaño de la molécula con respecto los de su grupo hace que tenga unas intensas fuerzas de London, que le permite

estar en estado sólido a temperatura ambiente, mientras que el Br<sub>2</sub> (con menor tamaño y fuerzas de London más débiles) se encuentra en estado líquido.

También debemos tener en cuenta la presencia de enlaces de H, por ejemplo, en el H<sub>2</sub>O, que le confieren unos puntos de fusión y ebullición más elevados de los esperados y le permiten estar en estado líquido a temperatura ambiente mientras que compuestos similares, como el H<sub>2</sub>Te, son gaseosos (aun teniendo mayor masa molecular).

### Solubilidad:

**Compuestos apolares** (CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>...) son prácticamente insolubles en disolventes polares (como el agua) pero **se disuelven bien en disolventes no polares** (éter, benceno, tetracloruro de carbono...) mientras que las **sustancias polares** (HCl, NH<sub>3</sub>, alcoholes) **son más solubles en agua**, sobre todo si pueden formar enlaces de hidrógeno.

Esto se debe a que la disolución es posible cuando las fuerzas de atracción que ejercen las moléculas de soluto entre sí y las del disolvente son de naturaleza e intensidad similares y pueden intercambiarse.

*Ejemplo...*

*¿Cuál de las siguientes moléculas son solubles en agua? NH<sub>3</sub> - C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> - CH<sub>4</sub>*

Sólo el NH<sub>3</sub> porque el resto son apolares.

Los alcoholes son solubles en agua gracias al grupo -OH que les otorga la polaridad y la posibilidad de formar enlaces de H.

### Conductividad eléctrica y térmica:

**No conducen ni la electricidad ni el calor** ya que los electrones permanecen vinculados a los átomos que participan en los enlaces.

Nota: Ciertas sustancias moleculares gaseosas como el HCl pueden producir disoluciones electrolíticas. En este caso, la presencia de las moléculas polares del agua origina que, al disolverse esta sustancia, experimente la rotura asimétrica del enlace H-Cl, con la consiguiente formación de los iones hidratados H<sup>+</sup> y Cl<sup>-</sup> que pueden permitir el paso de la corriente eléctrica por la disolución.

### Otras:

Los compuestos moleculares que se presentan estado sólido suelen tener una dureza baja y otras propiedades mecánicas poco acentuadas.

## 5.1.2. Compuestos covalentes atómicos (cristales covalentes)

En este segundo grupo de sustancias covalentes, al que pertenecen las dos formas cristalinas del carbono puro (grafito y diamante), el cuarzo (SiO<sub>2</sub>) y el corindón (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), no hay moléculas.

Imaginadlo como una sola y gigantesca molécula en la que todos los átomos que la constituyen están unidos entre sí por fuertes enlaces covalentes, lo que les va a conferir sus propiedades **características**:

#### Punto de fusión y ebullición:

**Muy altos** (algunos de ellos los más altos que se conocen). Ello hace que sean sólidos a temperatura ambiente. Se debe a que para separar los átomos de la red, es necesario romper los fuertes enlaces covalentes, lo que requiere mucha energía.

#### Solubilidad:

**Insolubles en todo tipo de disolventes**, tanto polares como apolares. La disolución requiere romper enlaces covalentes y eso solo puede conseguirse mediante reacción química.

#### Conductividad eléctrica y térmica:

**No conducen la electricidad ni el calor** ya que no hay electrones libres. Los electrones de valencia están fijos y localizados en los fuertes enlaces covalentes, con excepción del grafito, que al tener electrones deslocalizados, lo convierte en un aceptable conductor eléctrico.

#### Otras:

Presentan una **gran dureza y rigidez**. La estructura del enlace covalente no permite la deformación y sometidos a grandes tensiones se fracturan.

## 5.2. Compuestos metálicos (Cu, Au, Na, Li, etc...)

#### Modelo de gas de electrones:

Los átomos del metal ionizados por la pérdida de sus electrones de valencia se han convertido en cationes de forma esférica que forman una red tridimensional ordenada y compacta que crea un campo de atracción electrónica.

De esta manera los electrones de valencia (que ya no pertenecen a cada átomo sino al conjunto) rodean la red catiónica como si fuera un gas de electrones que se mueve libremente dentro de la red, pero no puede escapar de ella por su potencial eléctrico atractivo.

**Este modelo debéis mencionarlo para poder justificar las propiedades de los metales:**

#### Punto de fusión y ebullición:

Son variables, pero **la mayoría son altos**.

#### Solubilidad:

Insolubles en disolventes polares o apolares, pero **se disuelven** muy bien **los unos en los otros**, formando aleaciones metálicas y amalgamas (con mercurio).

### Conductividad eléctrica y térmica:

**Excelentes conductores** como justifica el modelo de gas de electrones, donde los electrones moviéndose libremente permiten el paso de la corriente eléctrica o el calor.

### Otras:

Dureza media o baja y **buenas propiedades mecánicas: Son elásticos, dúctiles y maleables.**

Expulsan electrones cuando son calentados o expuestos a luz de alta energía (efecto fotoeléctrico).

Bien pulidos, muestran un brillo característico.

## 5.3. Compuestos iónicos (NaCl, CaO, MgCl<sub>2</sub>...)

### Punto de fusión y ebullición:

En este tipo de compuestos, un enorme número de cationes y aniones se atraen mutuamente, dando lugar a una estructura tridimensional ordenada de iones llamada cristal iónico.

Esta perfecta ordenación justifica que los podamos encontrar en **estado sólido a temperatura ambiente**, con **puntos de fusión y ebullición medios y altos** (aunque no tanto como los cristales covalentes) dependiendo de su energía reticular.

Es decir, la energía reticular es la magnitud fundamental que indica la fortaleza del cristal iónico y se puede definir como la energía que debe aportarse para disgregar un mol de cristal iónico y transformarlo en iones aislados en fase gaseosa.

**Cuanto mayor es la energía reticular, mayores serán los puntos de fusión y ebullición.**

### Solubilidad:

**Solubles en líquidos muy polares, como el agua.** El agua, al ser una molécula polar puede "introducirse" en la estructura reticular del cristal, "desmoronarla" y solvatar los iones.

Aquí debemos tener cuidado porque el compuesto será más soluble cuanto menor sea la energía reticular, ya que de esta manera al agua le costará menos trabajo separar las cargas.

### Conductividad eléctrica y térmica:

Los requisitos generales para ser conductores son que **existan cargas y que haya libertad de movimiento entre ellas.**

De esta manera, **en estado sólido los compuestos iónicos no son conductores** ya que sus iones están ordenados y fijos fuertemente en la estructura iónica.

Sin embargo **fundidos o en disolución sí son conductores** de la electricidad porque las cargas ahora sí que pueden moverse libremente permitiendo el paso de la corriente eléctrica.

### Otras:

**Son duros pero quebradizos.** La fragilidad se debe a que un ligero desplazamiento de los planos iónicos provoca repulsiones electrostáticas, con la siguiente fractura del cristal. Es decir al contrario de lo que pasaba en el caso de los metales.

Sabemos que las propiedades de los compuestos iónicos dependen de su energía reticular, pero... Si nos ponen a comparar las propiedades de dos compuestos iónicos **¿Cómo sabemos quién tiene mayor o menor energía reticular?**

La energía reticular se puede calcular mediante el ciclo de Born-Haber pero no va a ser el caso de este tipo de ejercicios teóricos...así que también la podemos valorar a partir de los siguientes factores: a) La carga de los iones b) la distancia de separación entre las cargas c) la distribución espacial de los iones.

De los cuales vamos a tener en cuenta a) y b) que se relacionan por la ley de Coulomb:

$$F = K \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{d^2}$$

$q_1, q_2$  = Carga de los iones  
 $d$  = Separación entre los iones

Deducimos así, que **iones pequeños y con carga elevada presentan mayor energía reticular ya que de esta manera la atracción entre los iones será mayor.**

### *Ejemplo:*

*Compara la energía reticular y propiedades de: MgCl<sub>2</sub>, CaCl<sub>2</sub>, NaF, NaBr*

**MgCl<sub>2</sub> y CaCl<sub>2</sub> al tener mayor carga tendrán mayores energías reticulares que los otros dos.**

**A su vez entre ellos mismos, al ser el radio del Mg menor que el del Ca podemos afirmar que MgCl<sub>2</sub> tendrá mayor energía reticular y en consecuencia mayor punto de fusión y ebullición y menor solubilidad.**

**Con respecto al NaF y NaBr con una carga parecida y menor que los anteriores también recurrimos al tamaño. El radio del Br es mayor que el del F por lo que el NaBr será el que tenga la menor energía reticular de todas y en consecuencia el menor punto de fusión y ebullición, aunque la mayor solubilidad de todos.**

En resumen:

<b>Energía reticular</b>	<b>MgCl<sub>2</sub> &gt; CaCl<sub>2</sub> &gt; NaF &gt; NaBr</b>
<b>Punto de fusión/ebullición</b>	<b>MgCl<sub>2</sub> &gt; CaCl<sub>2</sub> &gt; NaF &gt; NaBr</b>
<b>Solubilidad</b>	<b>NaBr &gt; NaF &gt; CaCl<sub>2</sub> &gt; MgCl<sub>2</sub></b>