

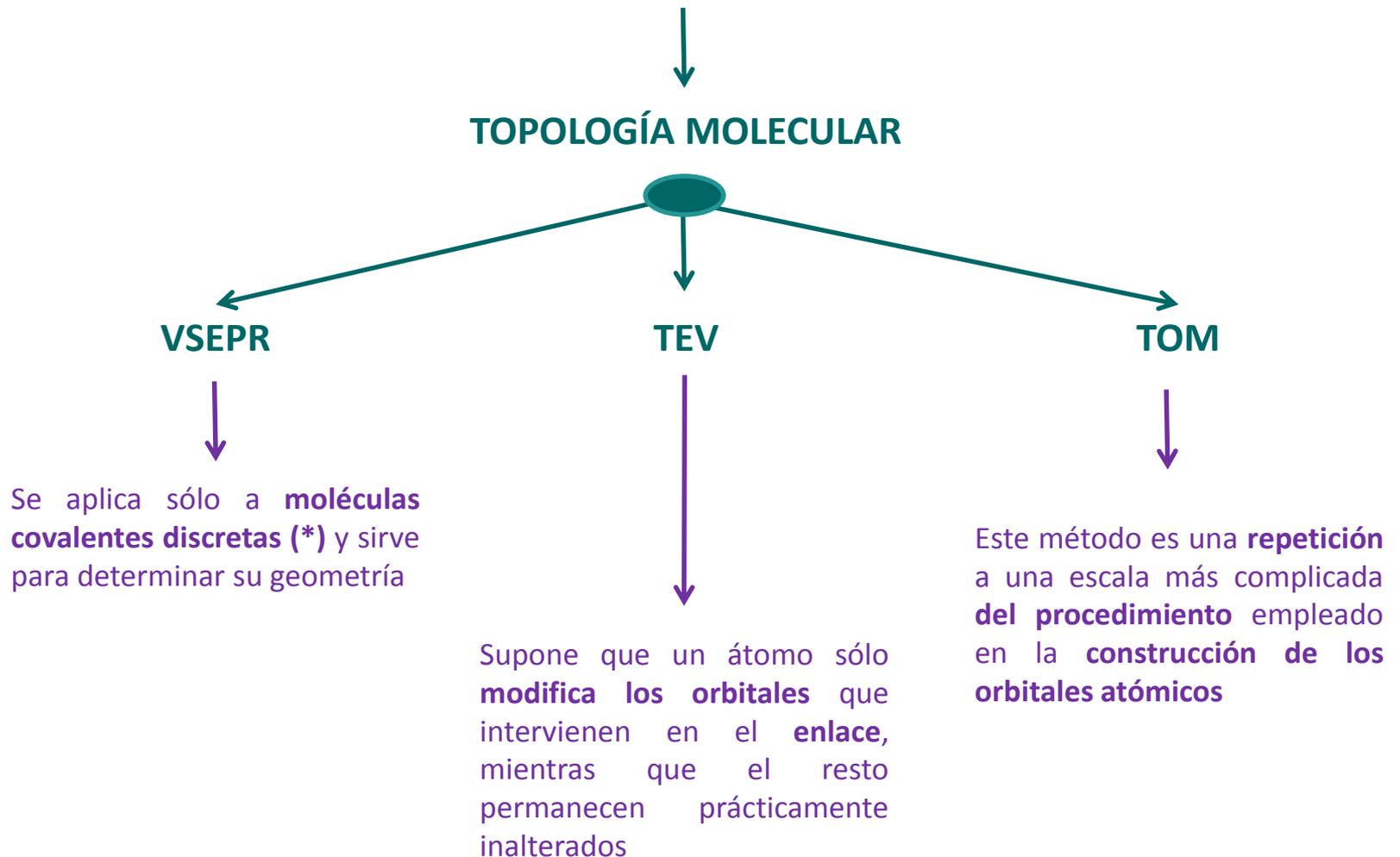
# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula



Grabado de Heinrich Khunrath, "Amphitheatrum Sapientiae Aeternae..." Hannover, 1609

# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## TEORÍAS DE ENLACE (ENLACE COVALENTE)



(\*) molécula constituida por un átomo central unido covalentemente a varios átomos periféricos

# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## VSEPR: TEORÍA DE REPULSIÓN DE LOS ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

---



Las moléculas covalentes tienen sus **pares de electrones**, enlazantes y solitarios, **orientados** de tal manera que las **repulsiones** electrón-electrón queden **minimizadas**



El orden en las repulsiones entre los pares de electrones es:  
**ps-ps > ps-pe > pe-pe**



Las **repulsiones dependen** notablemente **del ángulo entre los pares**. Son fuertes a 90° o menos, más débiles a 120° y muchísimo más débiles a 180°

**PROCEDIMIENTO:** Es necesario dibujar la **estructura de Lewis** para hallar el número de pares de electrones alrededor del átomo central y calcular el número estérico:

$$N^{\circ}\text{estérico}(n + m) = \frac{N^{\circ}e^{-}\text{enlazantes} + N^{\circ}e^{-}\text{solitarios} - N^{\circ}e^{-}\text{II}}{2}$$

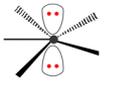
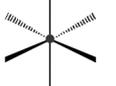
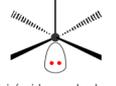
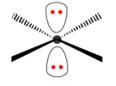
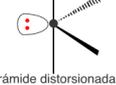
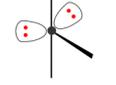
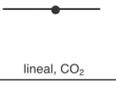
$$N^{\circ}\text{estérico}(n + m) = N^{\circ}\text{átomos periféricos} + N^{\circ}\text{pares solitarios}$$

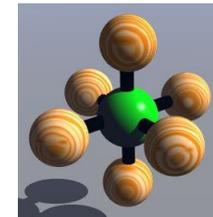
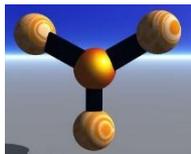
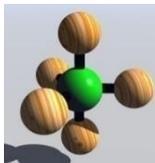
# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## VSEPR: TEORÍA DE REPULSIÓN DE LOS ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

### ESTRUCTURA DE MOLECULAS TIPO $AB_nE_m$

Número de pares de electrones  $\sigma$ : n

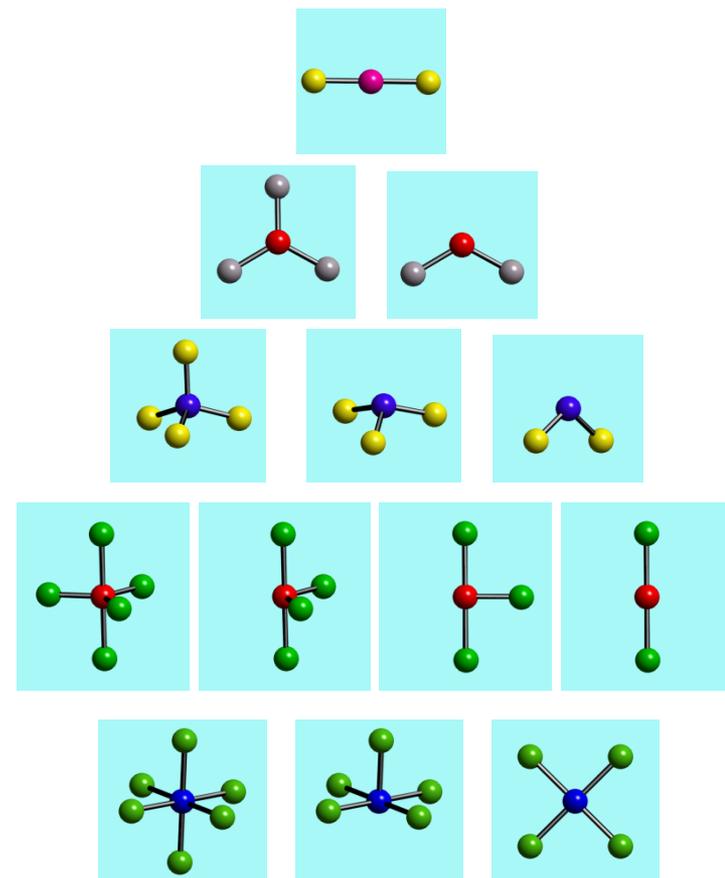
		n = 7	n = 6	n = 5	n = 4	n = 3	n = 2
Número de pares de electrones: m+n	7	 bipirámide pentagonal, IF <sub>7</sub>	 pirámide pentagonal, octaedro distorsionado	 plano pentagonal, XeF <sub>5</sub> <sup>-</sup>			
	6		 octaédrica, SF <sub>6</sub>	 pirámide cuadrada, BrF <sub>5</sub>	 plano cuadrado, XeF <sub>4</sub>		
	5			 bipirámide trigonal, PF <sub>5</sub>	 pirámide distorsionada, SF <sub>4</sub>	 forma de T, ClF <sub>3</sub>	 lineal, ClF <sub>2</sub> <sup>-</sup>
	4				 tetraédrica, CF <sub>4</sub>	 piramidal, NF <sub>3</sub>	 angular, OF <sub>2</sub>
	3					 trigonal plana, BF <sub>3</sub>	 angular, SO <sub>2</sub>
	2						 lineal, CO <sub>2</sub>



# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## VSEPR: TEORÍA DE REPULSIÓN DE LOS ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA

Nº estérico	Geometría de los pares	Nº átomos periféricos	Geometría molecular
2	Lineal (180°)	2	Lineal
3	Trigonal plana (120°)	3	Trigonal
		2	Angular
4	Tetraédrica (109.5°)	4	Tetraédrica
		3	Piramidal
		2	Angular
5	Bipirámide trigonal (90°, 120°)	5	Bipirámide trigonal
		4	Pirámide distorsionada
		3	Forma de T
		2	Lineal
6	Octaédrico (90°)	6	Octaédrico
		5	Pirámide cuadrada
		4	Plano cuadrada



# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## TEV: TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

---

Según esta teoría, el enlace se debe al apareamiento de dos electrones, es decir, a la posibilidad de canje entre ellos y a la mayor atracción que sufren por parte de los dos núcleos. El apareamiento sólo puede tener lugar si los electrones están desapareados en los átomos. De esta forma, los dos electrones que se aparean para formar el enlace están en libertad de adoptar spines opuestos, condición indispensable para el enlace



Los **átomos que constituyen la molécula se parecen mucho a los átomos aislados**, ya que modifican únicamente los orbitales que intervienen en el enlace



El **enlace covalente** tiene lugar **al solaparse los orbitales de valencia**, lo que origina una zona de alta densidad electrónica



Para que este **solapamiento** pueda llevarse a cabo, es necesario que los **orbitales de valencia estén semillenos** (covalencia de un elemento) y con **spines antiparalelos**



También es necesario que los átomos tengan los **orbitales dirigidos** hacia los otros átomos con los que se enlaza (**mejor solapamiento**)

# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## TEV: TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

Si los orbitales atómicos implicados en el enlace no tienen la geometría y energía adecuadas

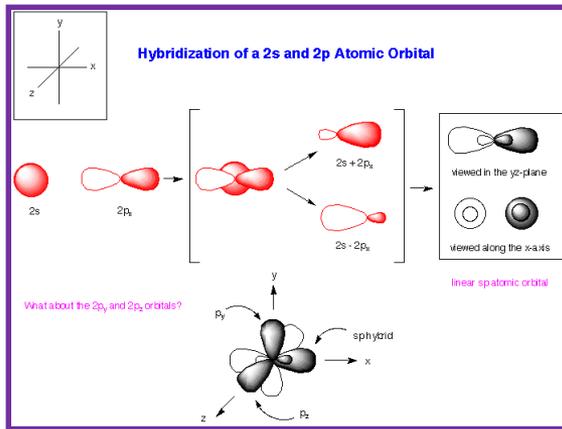
### HIBRIDACIÓN

La **hibridación** es una combinación lineal de orbitales atómicos pertenecientes a un mismo átomo para formar otros orbitales atómicos que reciben el nombre de **orbitales híbridos**

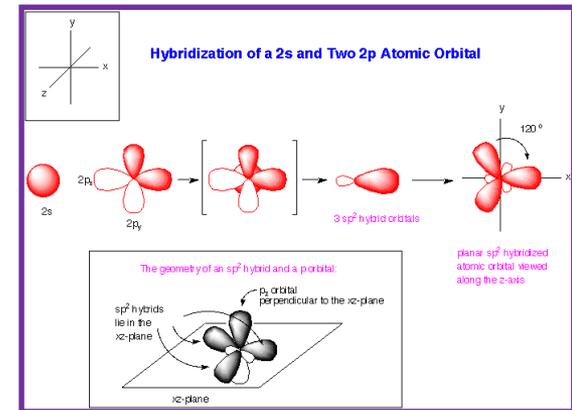
<b>GEOMETRÍA</b>	<b>O. ATÓMICOS</b>	<b>O. HÍBRIDOS</b>	<b>EJEMPLOS</b>
Lineal	s+p	sp	BeCl <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub>
Triangular plana	s+p+p	sp <sup>2</sup>	BF <sub>3</sub> , SnCl <sub>3</sub>
Tetraedro	s+p+p+p s+d+d+d	sp <sup>3</sup> sd <sup>3</sup>	CH <sub>4</sub> , NH <sub>3</sub>
Bipirámide trigonal	s+p+p+p+d	sp <sup>3</sup> d	PCl <sub>5</sub> , SF <sub>4</sub>
Octaedro	s+p+p+p+d+d	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>	SF <sub>6</sub> , BrF <sub>5</sub>

# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

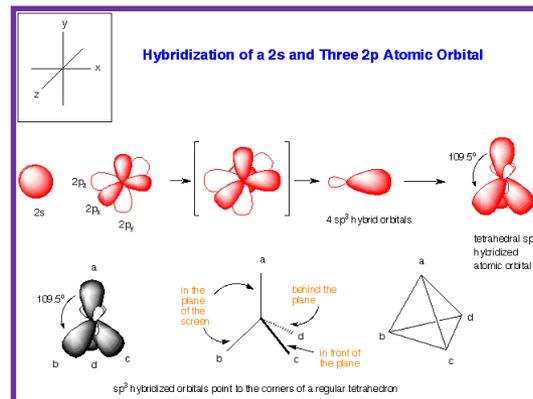
## TEV: TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA



**Hibridación  $sp$**



**Hibridación  $sp^2$**



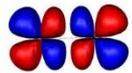
**Hibridación  $sp^3$**

# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

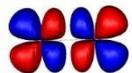
## TOM: TEORÍA DE LOS ORBITALES MOLECULARES

---

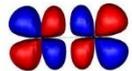
Este método es una repetición a una escala más complicada del procedimiento empleado en la construcción de los orbitales atómicos



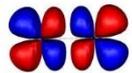
Los **orbitales moleculares** se forman por la combinación o interacción de orbitales atómicos procedentes de dos o más átomos



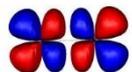
Sólo los **electrones de valencia** están implicados en el enlace químico, y solamente los orbitales de valencia se combinan para formar orbitales moleculares



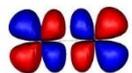
Los orbitales se **conservan** durante el enlace químico. El número de orbitales que se combinan es siempre igual al número de orbitales moleculares que se forman



Los orbitales moleculares exhiben **propiedades** similares a los orbitales atómicos. Por ejemplo, cumplen la regla de Hund y el principio de exclusión de Pauli



Sólo los orbitales atómicos que tienen **propiedades de simetría** idénticas pueden interaccionar entre sí

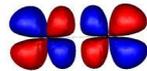


La mezcla de los orbitales es más significativa cuando los orbitales atómicos tienen aproximadamente la **misma energía**. A medida que la diferencia de energía entre los orbitales atómicos se incrementa, la efectividad del solapamiento disminuye

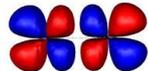
# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula

## TOM: TEORÍA DE LOS ORBITALES MOLECULARES

Cuando dos orbitales atómicos interactúan, se obtienen dos orbitales moleculares



UNO ENLAZANTE (con menor energía, se estabiliza)

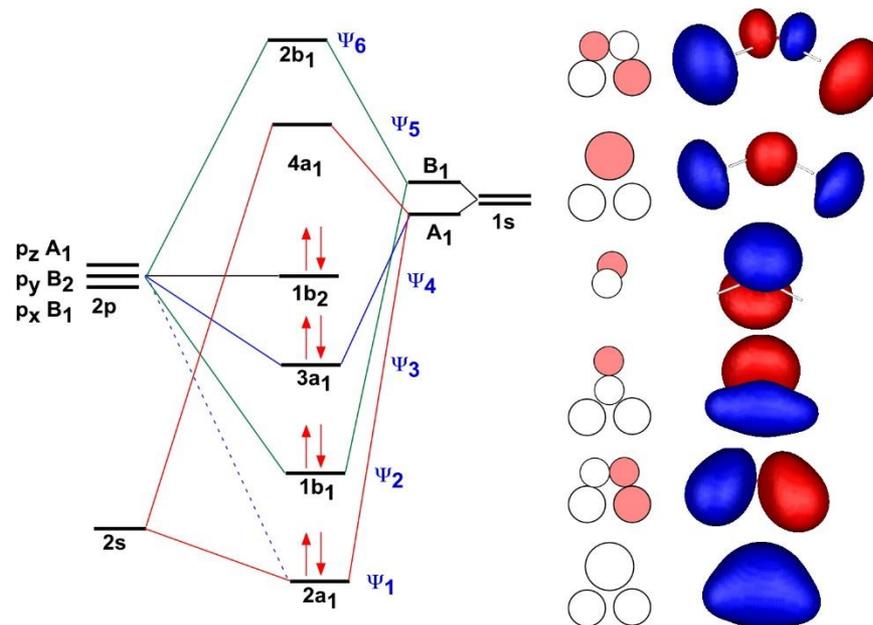


OTRO ANTIENLAZANTE (con mayor energía, se desestabiliza)



Solapamiento FRONTAL: enlace  $\sigma$

Solapamiento LATERAL: enlace  $\pi$



# TEMA 1. Naturaleza del enlace químico en una molécula



Grabado de Heinrich Khunrath, "Amphitheatrum Sapientiae Aeternae..." Hannover, 1609