

Teoría del Enlace de Valencia (TEV)

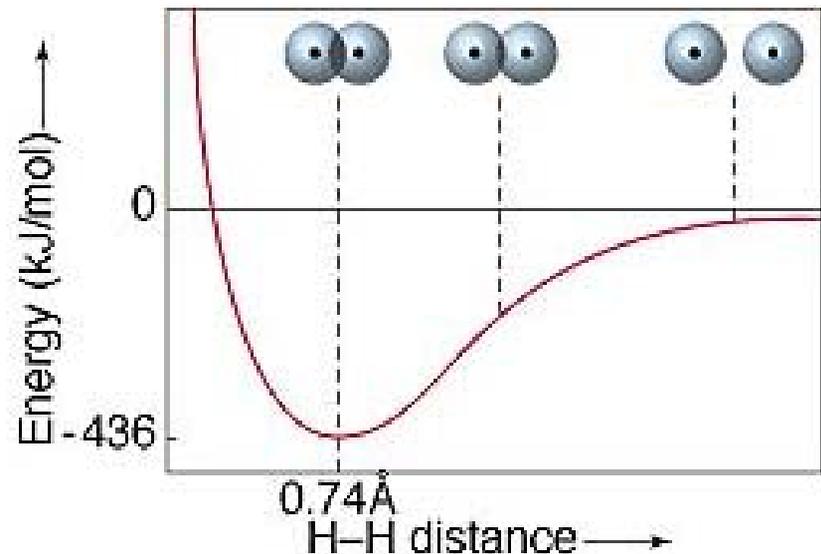
Conceptos Fundamentales.

Aplicación a moléculas sencillas.

Hibridación de Orbitales Atómicos.

Moléculas poliatómicas con enlace sencillo.

Moléculas con enlaces dobles y triples.

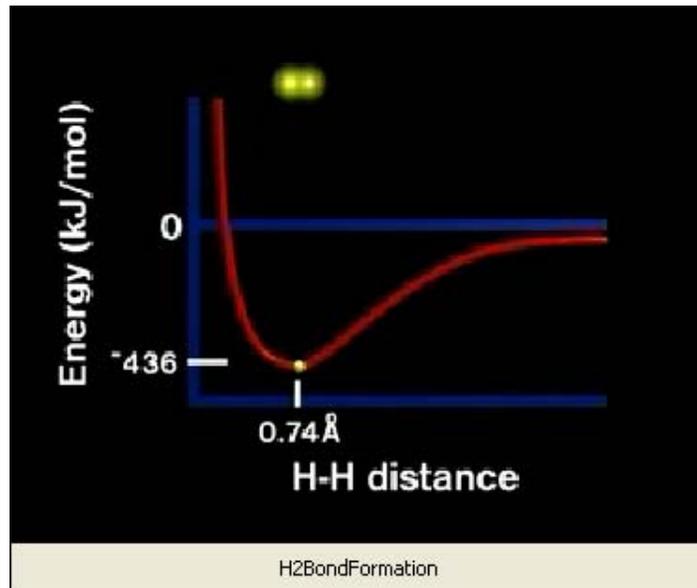


Conceptos Fundamentales

¿Cómo se forman los enlaces?

¿Es posible predecir la fuerza y distancia de enlace?

¿Por qué dos átomos que se aproximan llegan a enlazarse?



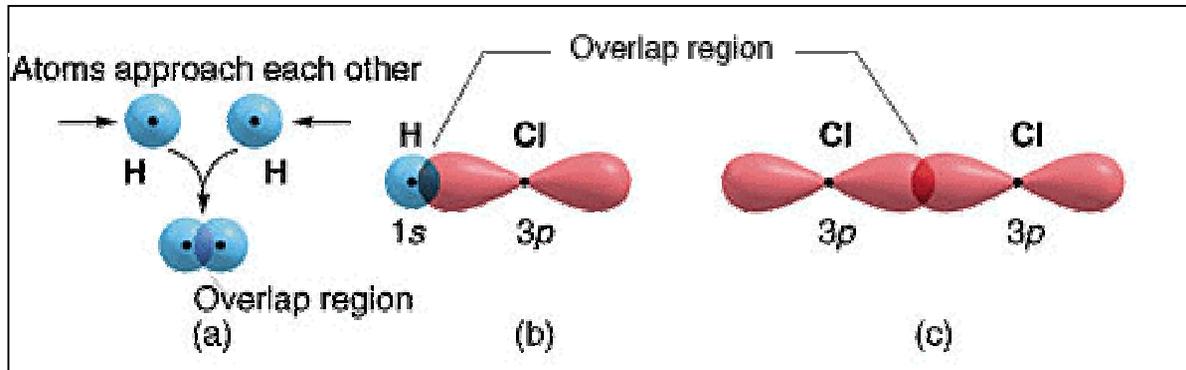
El modelo de Lewis y la RPECV NO pueden responder a estas preguntas.

MECÁNICA CUANTICA y ORBITALES ATÓMICOS

Teoría del Enlace de Valencia (TEV): combina la idea de compartición de pares de electrones entre dos átomos enlazados y el concepto de orbitales atómicos.

El enlace se produce por **solapamiento** de dos orbitales atómicos de átomos distintos, ocupados por un electrón: **ENLACES LOCALIZADOS**

Solapamiento: dos orbitales y sus electrones comparten una región común del espacio entre los dos núcleos.

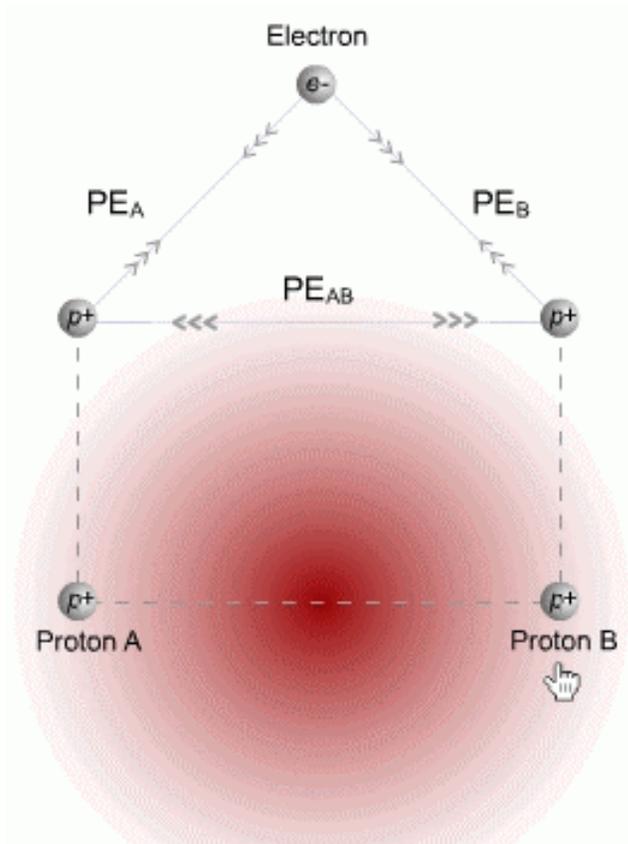


En el espacio de solapamiento los orbitales atómicos (funciones de onda) está *en fase*: **reforzamiento de densidad electrónica entre los núcleos.**

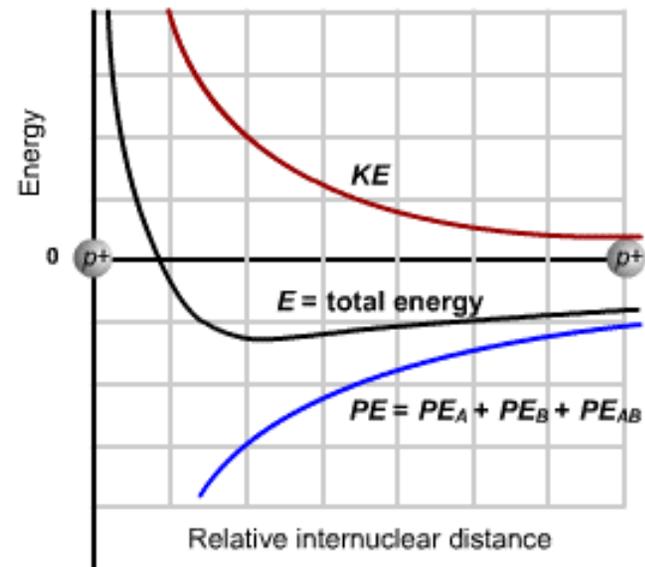
¿Cómo el solapamiento de orbitales une dos átomos?

Ejemplo: H_2^+ (se considera un único electrón compartido por simplicidad)

Energía del sistema cuando el electrón está entre los núcleos enlazados.

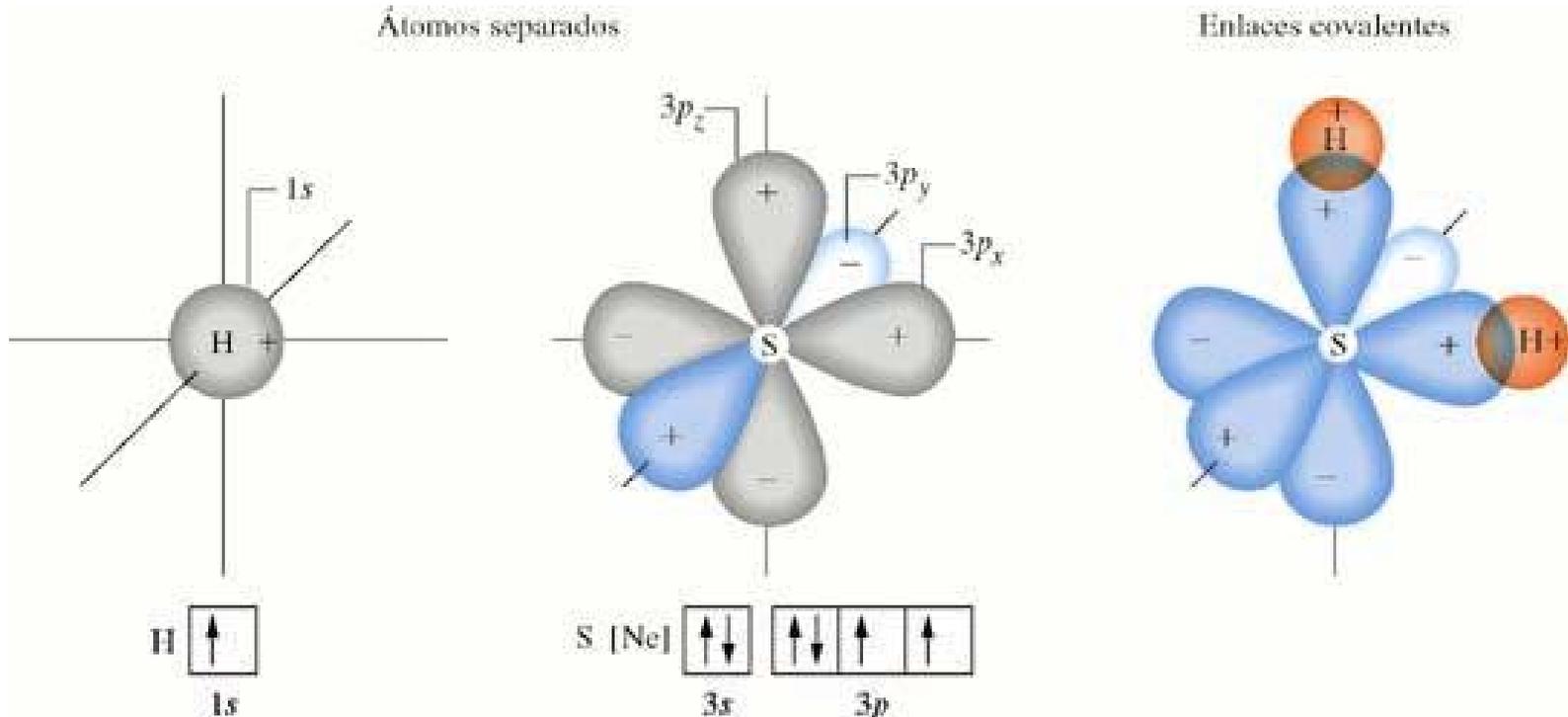


Se alcanza un **mínimo de energía** que asegura la **formación de la molécula**



Aplicación a moléculas sencillas

SH₂



Ángulo H-S-H de 90° (exp. 92°)

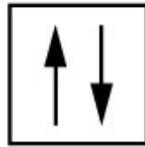
¿Previsión RPECV?

AB₂E₂

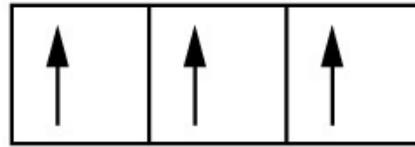
¡¡ ángulo H-S-H de 109.5° !!



N [He]

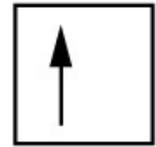


2s

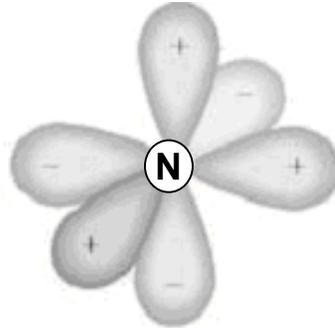


2p

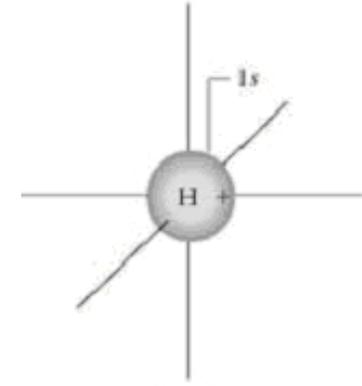
H



1s



Orbitales enlazantes del átomo N

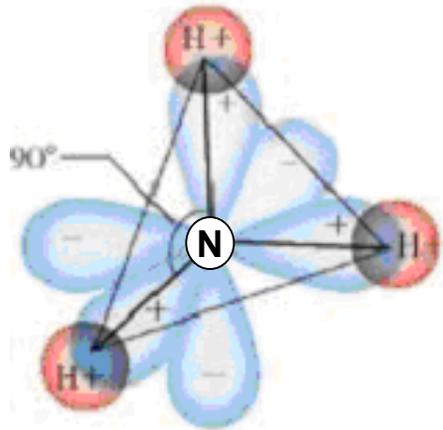


Ángulo H-N-H de 90° (exp. 107°)

¿Previsión RPECV?

AB_3E_1

¡¡ ángulo H-N-H de 109.5° !!

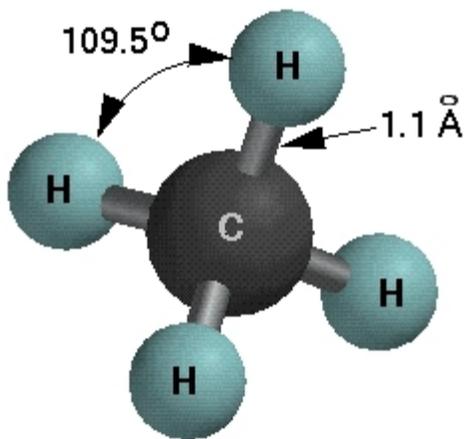


Enlaces covalentes formados

Hibridación de Orbitales Atómicos

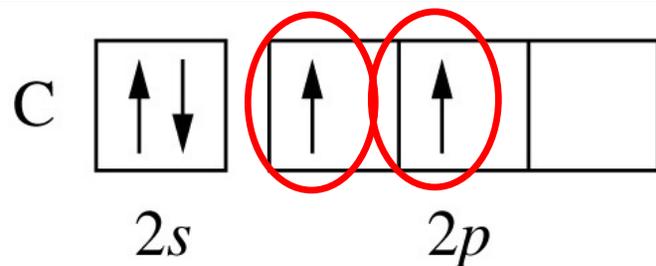
Es posible aplicar el concepto de solapamiento de orbitales a moléculas poliatómicas, pero en muchos casos es necesario introducir modificaciones a la TEV sencilla para explicar la geometría molecular

CH₄ (metano)



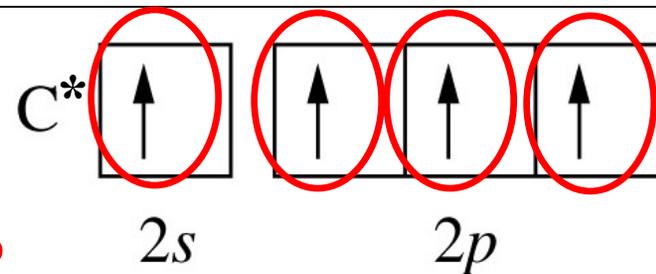
Estado fundamental

Dos enlaces C-H
ángulos H-C-H 90°



Estado excitado

Cuatro enlaces C-H
tres ángulos H-C-H 90°



Hibridación de Orbitales Atómicos

Hibridación de Orbitales Atómicos

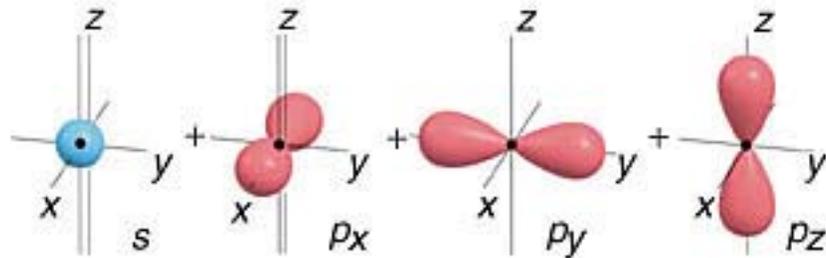
La **combinación lineal** de orbitales atómicos puros de **un mismo átomo** para generar un conjunto nuevo de **orbitales atómicos equivalentes** llamados **híbridos**

Reglas para la Hibridación

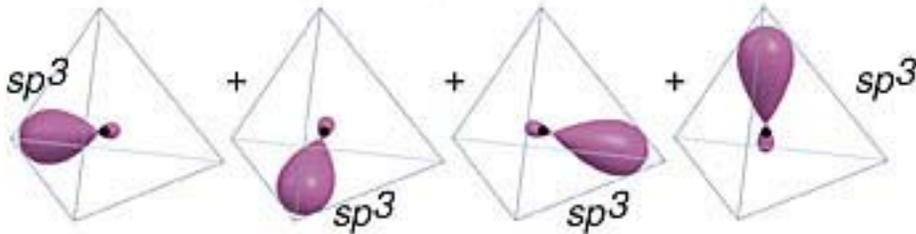
1. El **número** de O.A. **híbridos** que construimos es **igual** al número de O.A. **"puros"** que se combinan.
2. El conjunto de **O.A. híbridos es energéticamente equivalente a los O.A. "puros"** de los que provienen. Se conserva el centro de gravedad de energías en el proceso de hibridación.
3. Al "colocar" los electrones en los nuevos O.A. híbridos el átomo puede pasar a encontrarse en un estado más energético que usando O.A. "puros". A ésta diferencia de energía se le llama **energía de promoción**.
4. A cada **geometría molecular** le corresponde un **esquema** distinto de **hibridación**.

Hibridación sp^3

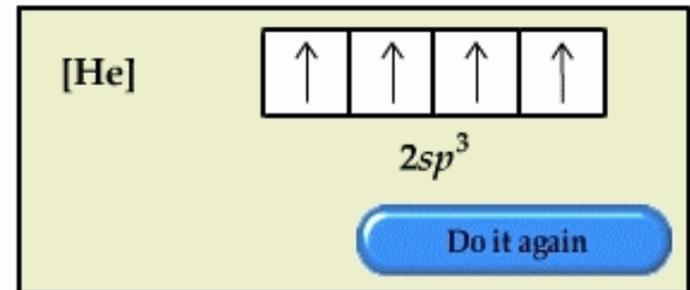
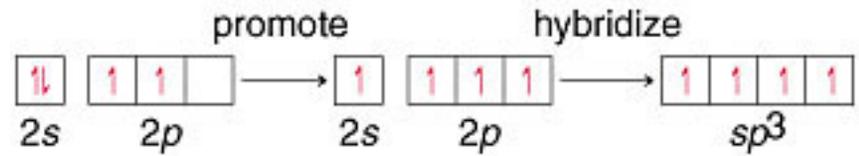
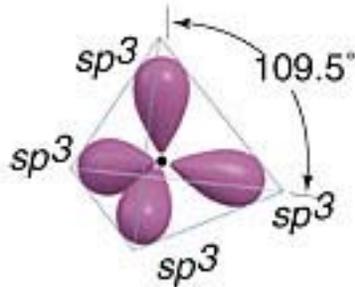
Atomo de C



Hybridize to form four sp^3 hybrid orbitals

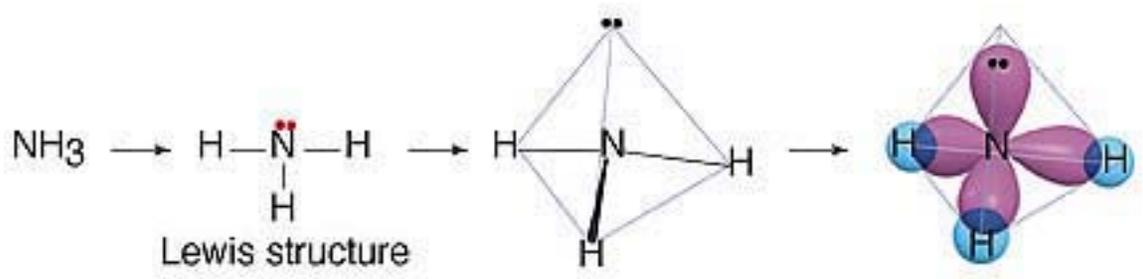
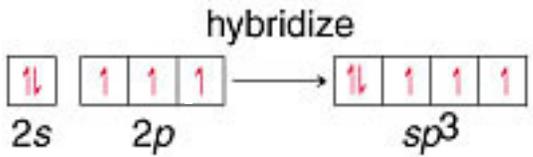
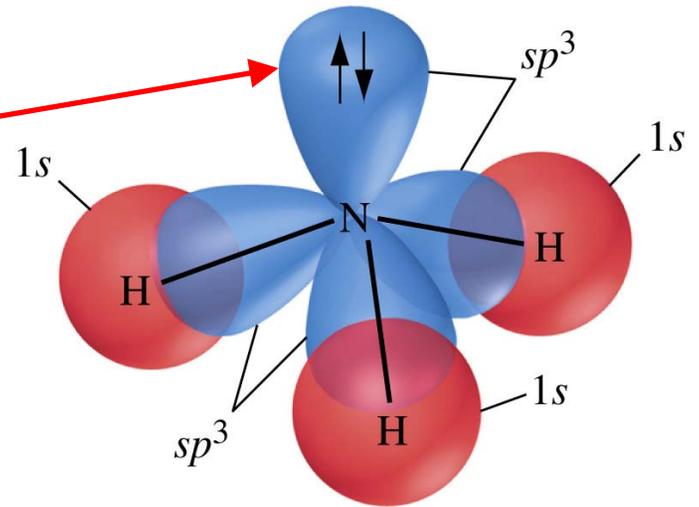


Shown together (large lobes only)



NH₃ (amoniaco)

Atomo de N



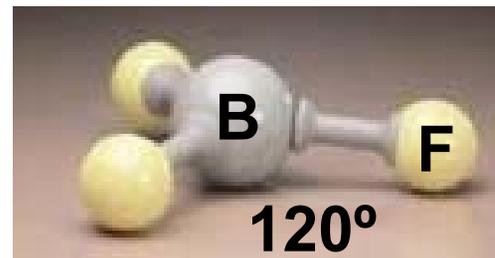
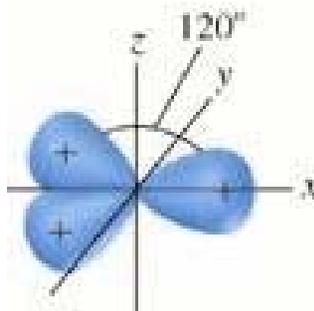
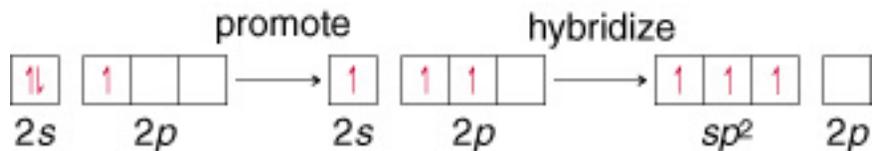
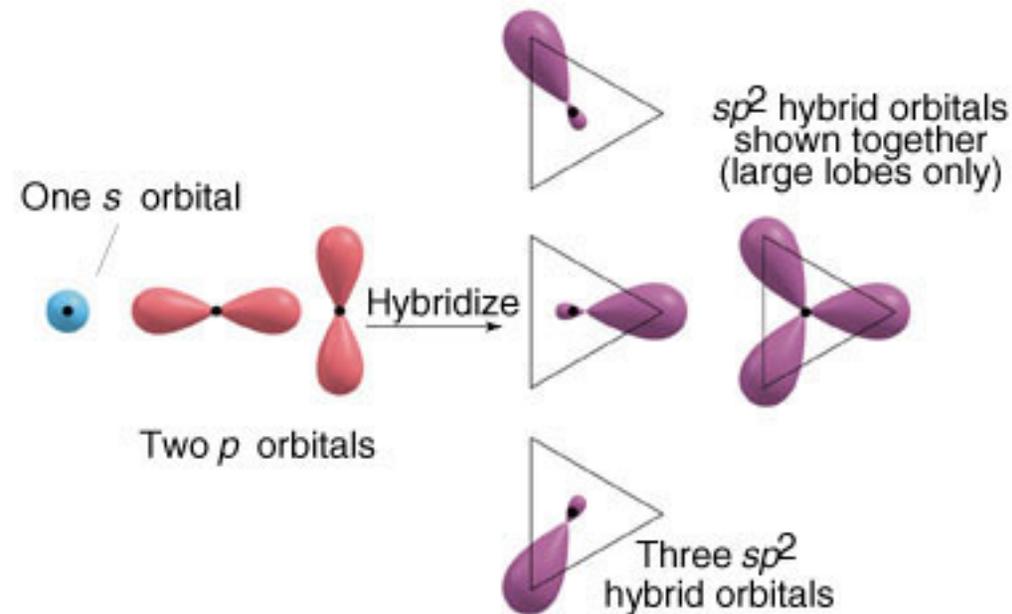
Ángulos H-N-H de 107°

(ángulos H-N-H previstos RPECV de 109.5°)

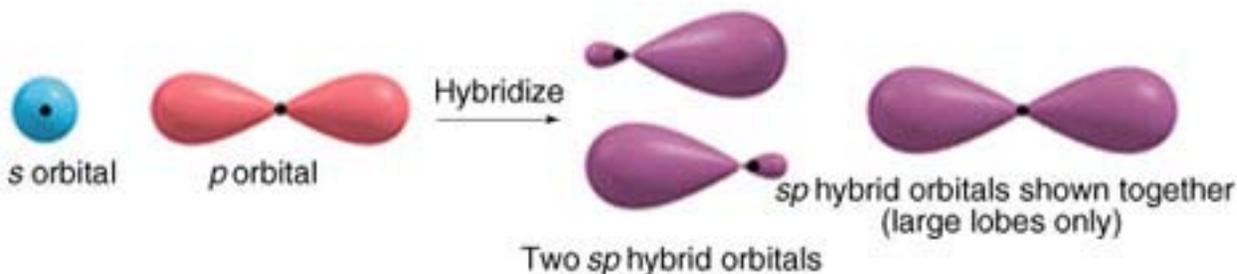
Hibridación sp^2

BF_3 (trifloruro de boro)

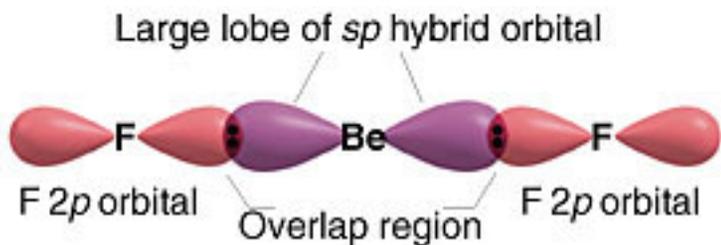
Atomo de B



Hibridación sp



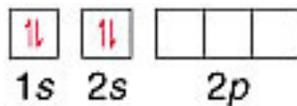
BeF_2 (difloruro de breilio)



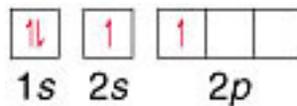
Atomo de Be



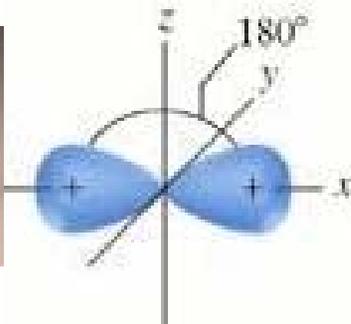
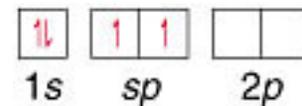
Configuración



Promoción



Hibridación



Orbitales híbridos sp^3d y sp^3d^2

Para elementos del **TERCER periodo en adelante** no siempre es posible explicar la geometría molecular considerando únicamente hibridación de orbitales s y p.

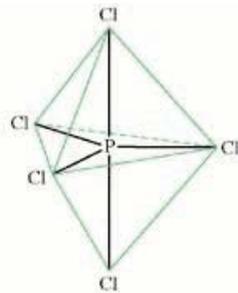
Es necesario **incluir orbitales d** en los esquemas de **hibridación** para explicar la formación de moléculas con geometrías de **bipirámide-triangular y octaédrica** o derivadas de ellas.

Hibridación sp^3d

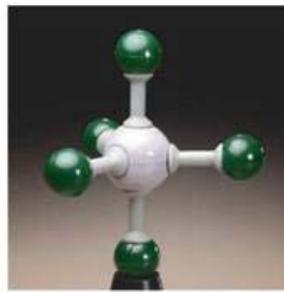
PCl_5 (pentacloruro de fósforo)



(a) Orbitales sp^3d

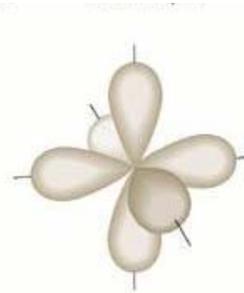


Estructura de bipirámide trigonal

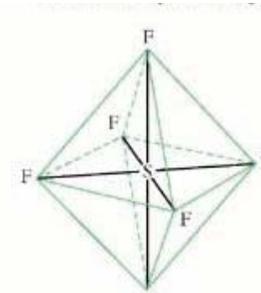


Hibridación sp^3d^2

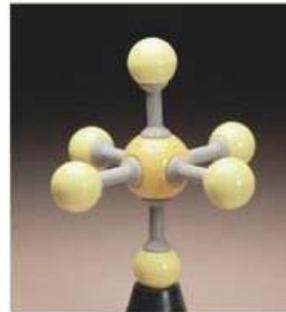
SF_6 (hexafluoruro de azufre)



(b) Orbitales sp^3d^2



Estructura octaédrica



$3sp^3d$



$3d$

Do it again



$3s$

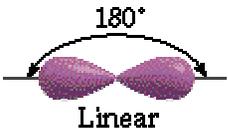
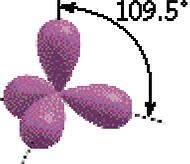
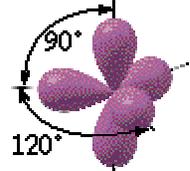
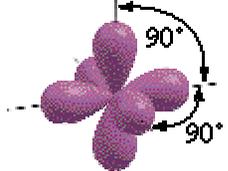
$3sp^3d^2$

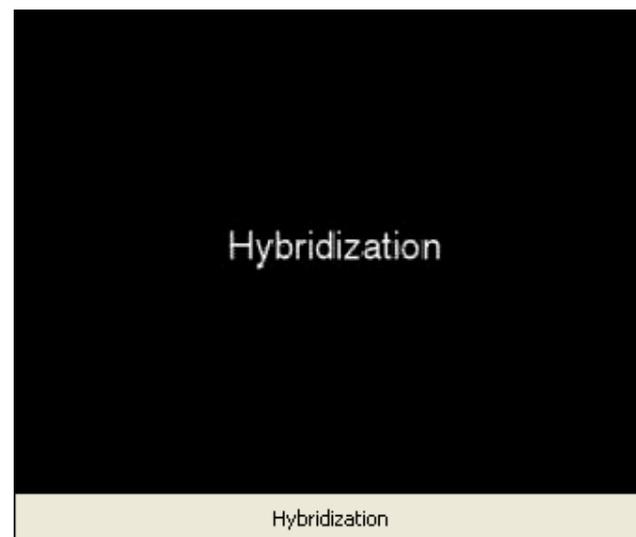
$3d$

Do it again

Hibridación de Orbitales Atómicos y la teoría RPECV

TABLE 9.5 Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets

Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
s, p	Two sp	 <p>180° Linear</p>	$\text{BeF}_2, \text{HgCl}_2$
s, p, p	Three sp^2	 <p>120° Trigonal planar</p>	BF_3, SO_3
s, p, p, p	Four sp^3	 <p>109.5° Tetrahedral</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_4^+$
s, p, p, p, d	Five sp^3d	 <p>90° 120° Trigonal bipyramidal</p>	$\text{PF}_5, \text{SF}_4, \text{BrF}_3, \text{SbCl}_5^{2-}$
s, p, p, p, d, d	Six sp^3d^2	 <p>90° 90° Octahedral</p>	$\text{SF}_6, \text{ClF}_3, \text{XeF}_4, \text{PF}_6^-$



- 1.- Escribir una **estructura de Lewis** aceptable.
- 2.- Utilizar la teoría **RPECV** para **predecir la geometría** probable de los pares de electrones estereoactivos.
- 3.- Seleccionar el **esquema de hibridación** correspondiente a la geometría de los pares de electrones estereoactivos.

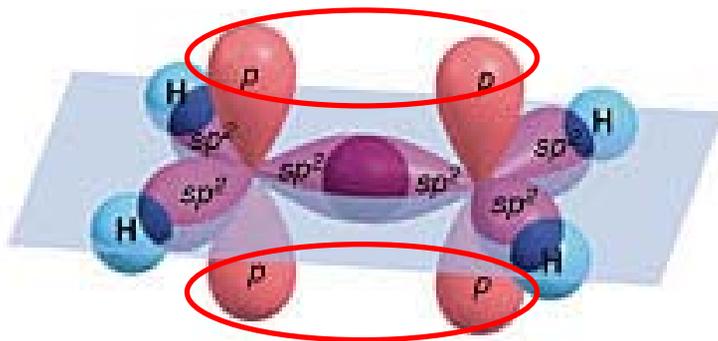
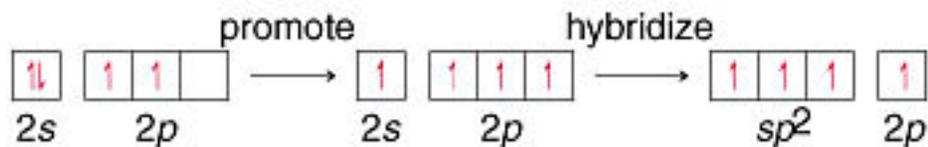
Moléculas con enlaces dobles y triples

C_2H_4 (etileno)

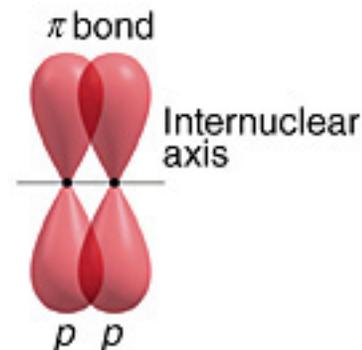


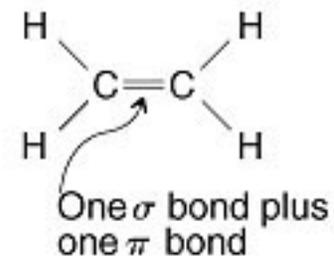
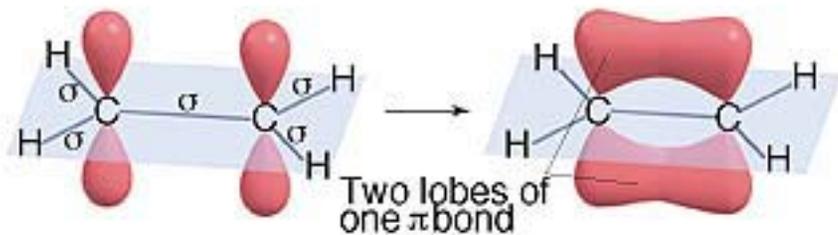
El etileno tiene un enlace doble carbono-carbono en su estructura de Lewis. La teoría RPECV trata cada átomo de C como si estuviera rodeado por tres grupos de electrones en una ordenación trigonal-plana.

Solapamientos frontales: enlaces tipo σ



Solapamiento lateral:
enlace tipo π

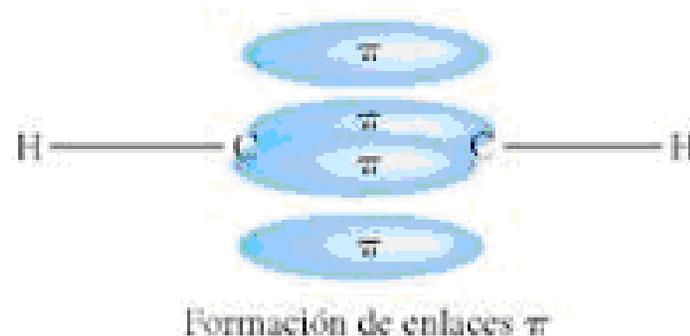
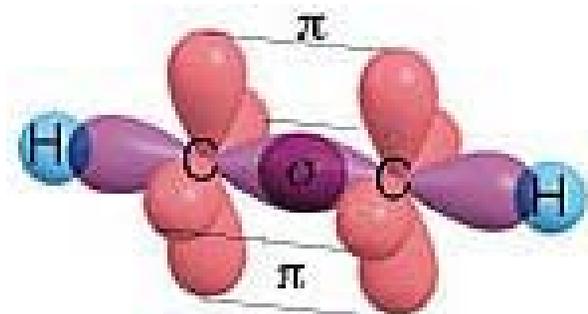
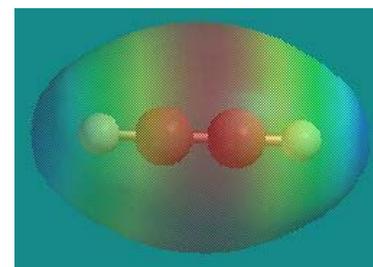




C_2H_2 (acetileno)

El acetileno, C_2H_2 , tiene un enlace *triple*.

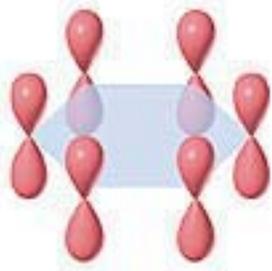
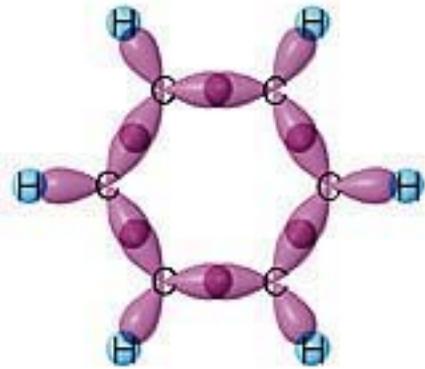
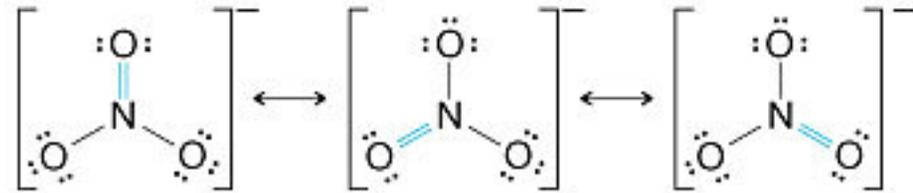
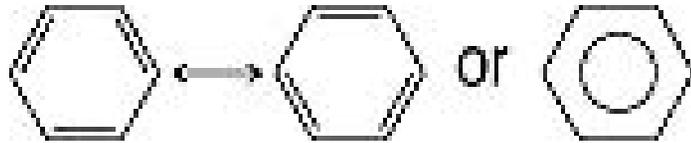
La teoría RPECV dice que la molécula es lineal.



Enlaces π deslocalizados

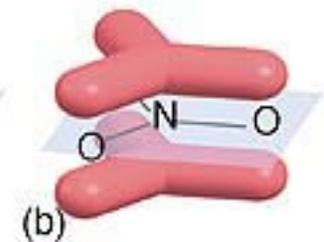
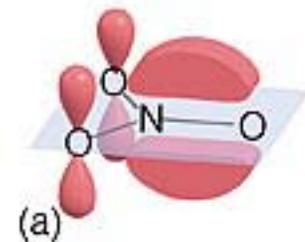
C_6H_6 (benceno)

NO_3^- (nitrato)



(a) σ bonds

(b) $2p$ atomic orbitals



(a)

(b)



(a) Localized π bonds

(b) Localized π bonds

(c) Delocalized π bonds