

QUÍMICA ESTRUCTURAL II

Bachillerato Internacional

Prof. Jorge Rojo Carrascosa

www.profesorjrc.es

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Tipos de enlace covalente:

- Unión $\left\{ \begin{array}{l} \text{Sencillo (Cl-Cl, H-Cl, NH}_3, \dots) \\ \text{Doble (O-O, O=C=O, H}_2\text{C=CH}_2, \dots) \\ \text{Triple (N}\equiv\text{N, HC}\equiv\text{CH, } \dots) \end{array} \right.$
- Polaridad $\left\{ \begin{array}{l} \text{Polar (HCl, H}_2\text{O, PH}_3, \dots) \\ \text{Apolar (Cl}_2, \text{CH}_4, \text{BCl}_3, \dots) \end{array} \right.$
- Par electrónico $\left\{ \begin{array}{l} \text{Normal (HCl, SiH}_4, \dots) \\ \text{Coordinado (NH}_4^+, \text{H}_2\text{SO}_4, \dots) \end{array} \right.$

Teoría de enlace de Valencia, TEV (1927)

- Existen e^- desapareados en O.A.
- Los átomos mantienen su individualidad en la molécula
- El solapamiento de O.A $\Rightarrow$ O.M.
- Se generan tantos enlaces como e^- desapareados

Tipos de enlace:

Enlace σ : $s - s$, $s - p_z$, $s - d_{z^2}$, $p_z - p_z$, $p_z - d_{z^2}$, $d_{z^2} - d_{z^2}$

Enlace π : $p_x - p_x$, $p_y - p_y$, $p_x - d_{xz}$, $p_y - d_{yz}$, $d_{xz} - d_{xz}$, $d_{yz} - d_{yz}$

Enlace δ (elementos de transición): $d_{x^2-y^2} - d_{x^2-y^2}$, $d_{xy} - d_{xy}$

Fortaleza de enlace: $\sigma > \pi > \delta$

Molécula $O_2 \Rightarrow (1\sigma + 1\pi)$

Teoría de Orbitales Moleculares, TOM (1927-32)

- La molécula se trata como un átomo compuesto por varios núcleos
- Los e^- se localizan en O.M.
- La combinación de 2 O.A. $\Rightarrow$ 2 O.M. (enlazante y antienlazante)

Tipos de enlace:

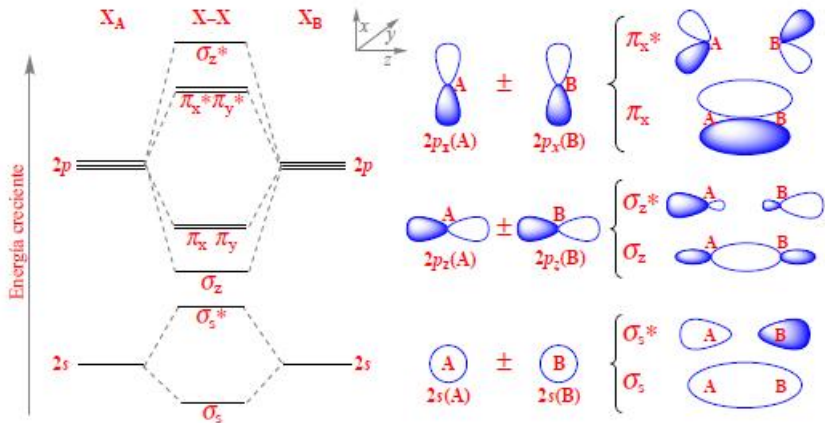
Orbital σ : $s - s$, $s - p_z$, $p_z - p_z$

Orbital π : $p_x - p_x$, $p_y - p_y$

Orden de Energía para los O.M. en moléculas diatómicas homonucleares:

$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_{2p_z} < \pi_{2p_x} = \pi_{2p_y} < \pi_{2p_x}^* = \pi_{2p_y}^* < \sigma_{2p_z}^*$$

Teoría de Orbitales Moleculares, TOM (1927-32)

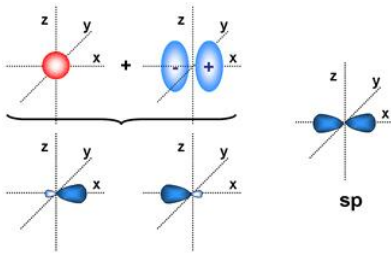


$$N_2 \Rightarrow \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \pi_{2p_x}^2 \pi_{2p_y}^2 \sigma_{2p_z}^2 \Rightarrow O.E = \frac{6}{2} = 3$$

$$O_2 \Rightarrow \sigma_{1s}^2 \sigma_{1s}^{*2} \sigma_{2s}^2 \sigma_{2s}^{*2} \sigma_{2p_z}^2 \pi_{2p_x}^2 \pi_{2p_y}^2 \pi_{2p_x}^{*1} \pi_{2p_y}^{*1} \Rightarrow O.E = \frac{4}{2} = 2$$

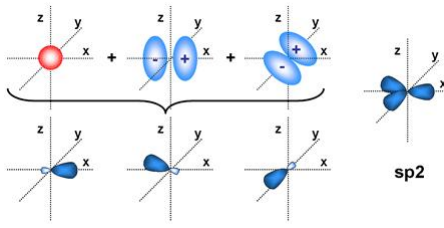
• HIBRIDACIÓN sp

(Geometría Lineal)

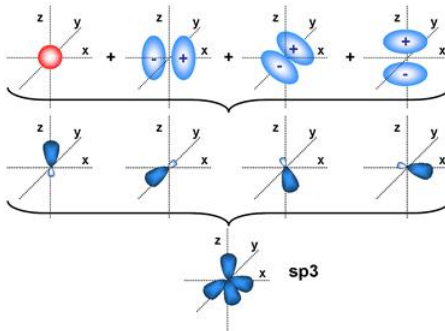


• HIBRIDACIÓN sp^2

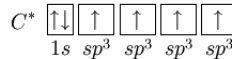
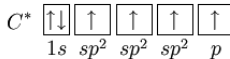
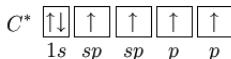
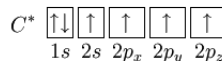
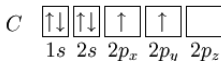
(Geo. Trigonal Plana)



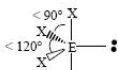
• HIBRIDACIÓN SP^3 (Geometría Tetraédrica)



El átomo de Carbono



Geometria Molecular / Teoria RPECV o VSEPR

VSEPR Geometries					
Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 Linear				
3	 Trigonal Planar	 Bent or Angular			
4	 Tetrahedral	 Trigonal Pyramid	 Bent or Angular		
5	 Trigonal Bipyramid	 Sawhorse or Seesaw	 T-shape	 Linear	
6	 Octahedral	 Square Pyramid	 Square Planar	 T-shape	 Linear

Fuerzas Intermoleculares

Fuerzas Intermoleculares e Interiónicas Atractivas

- **Fuerzas Coulombianas** $\left\{ \begin{array}{l} \text{lón - lón (250 kJ/mol)} \\ \text{lón - Dipolo (15 kJ/mol)} \end{array} \right.$

- **Fuerzas de Van der Waals**

- $$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Keeson} & \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo (2 - 0,3 kJ/mol)} \\ \text{Debye} & \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo Inducido (0,05 kJ/mol)} \\ \text{London} & \Rightarrow \text{Dipolo Instantáneo - Dipolo Inducido (2 kJ/mol)} \end{array} \right.$$

- **Enlace de Hidrógeno**

- $$\left\{ \begin{array}{l} \text{Carácter de enlace localizado} \\ \text{Unión del H con F, O y N} \\ \text{Tipo especial de interacción dipolo-dipolo (20 kJ/mol)} \end{array} \right.$$

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidos (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Covalentes, Atómicas o Reticulares

- Puntos de Fusión y Ebullición Altos.
- Sólidos duros
- Aislantes e Insolubles en cualquier disolvente
- Forman redes cristalinas (Diamante C, cuarzo SiO_2 , ...).