

Tema 3_2. *ENLACE QUÍMICO*

Fuerzas de Coulomb: Una visión simplificada del enlace

ENLACE QUÍMICO = interacción fuerte entre átomos
mediada por los electrones de valencia

- ❶ Un grupo de átomos enlazados constituye una molécula. Las interacciones entre átomos dentro de una molécula son fuerzas de enlace químico
- ❷ Los enlaces químicos sólo se forman y se rompen en las reacciones químicas

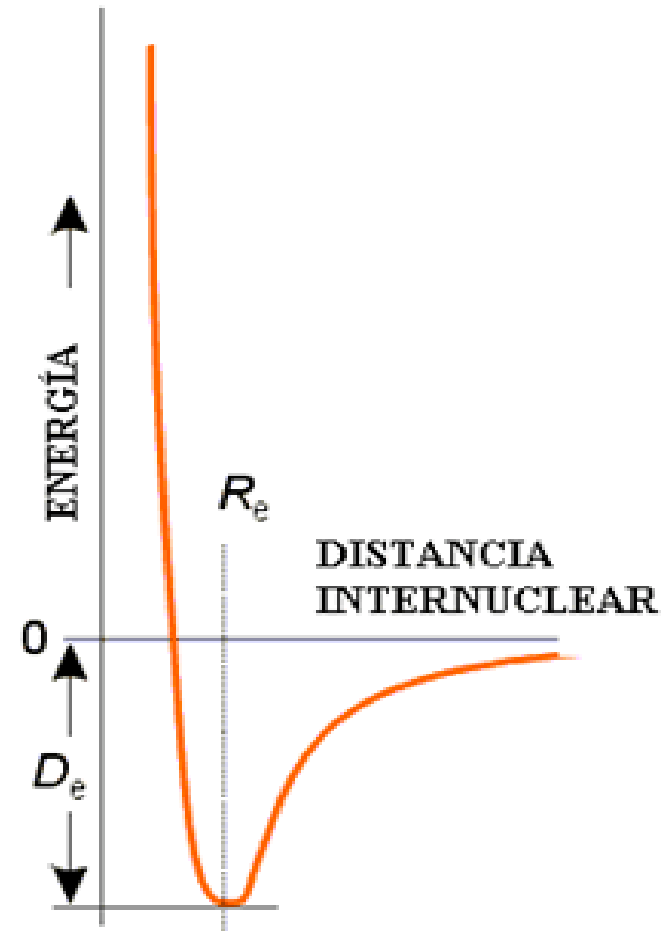
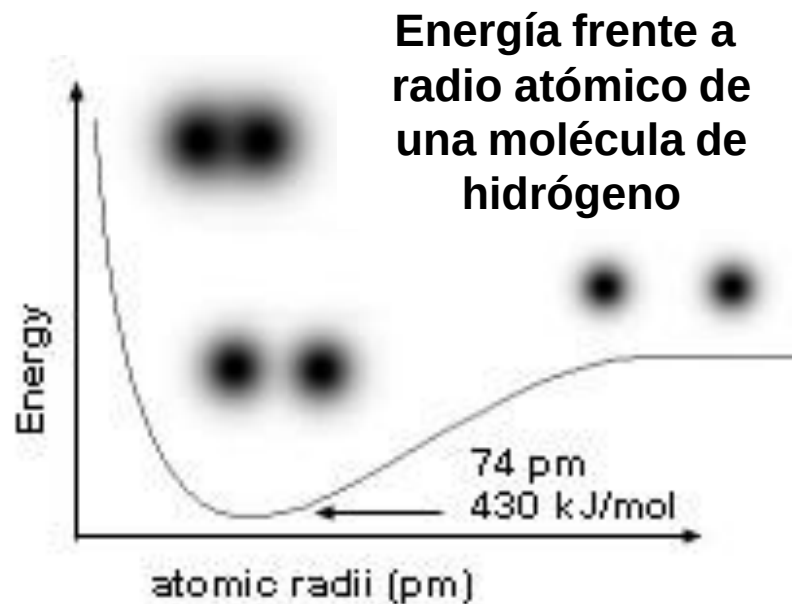
FORMACIÓN DE UN ENLACE

- Las cargas opuestas se atraen entre sí
(atracción de Coulomb)
- Los electrones tienden a distribuirse en el espacio
(intercambio electrónico)

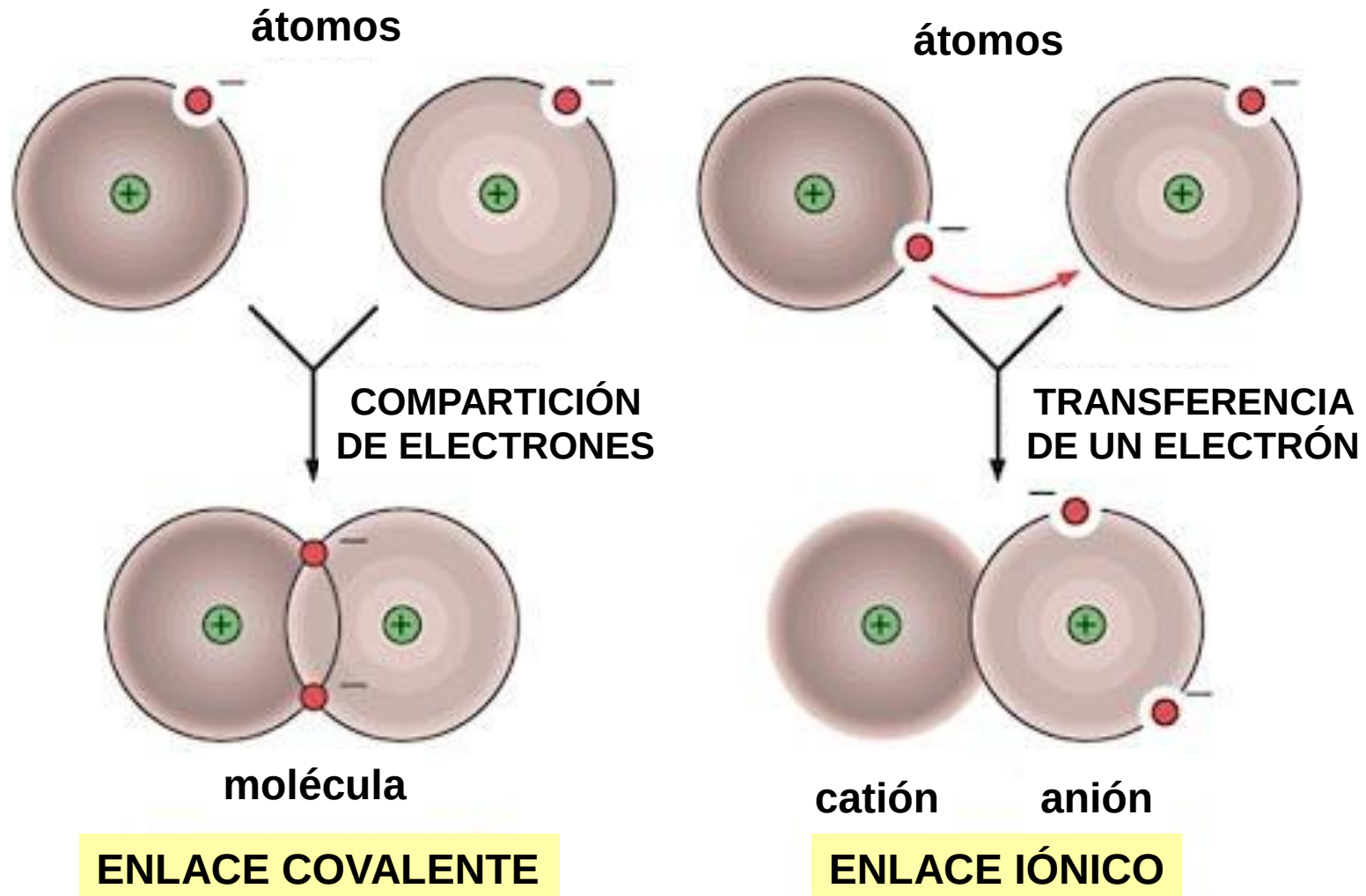
LEY DE COULOMB:

Las cargas opuestas se atraen con una fuerza inversamente proporcional al cuadrado de la distancia entre los centros de las cargas.

- ☐ Fuerza de enlace
- ☐ Longitud de enlace



Dos posibilidades de formación de enlaces:



TÉORÍA DE LEWIS. LA REGLA DEL OCTETE

Gases nobles: configuración electrónica de “capa cerrada”

He (Z=2) $\Rightarrow 1s^2 \Rightarrow$ Capa n=1 completa

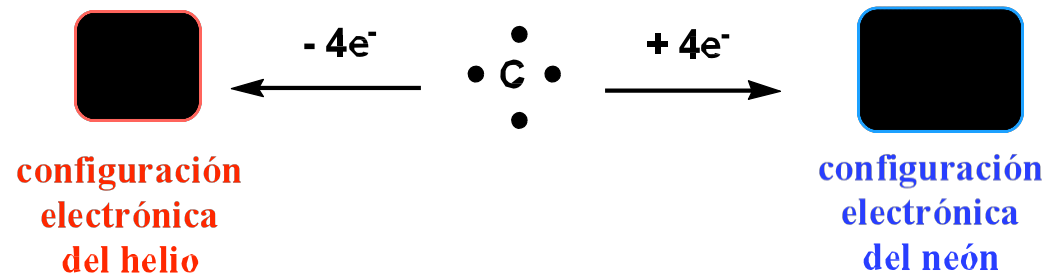
Ne (Z=10) $\Rightarrow [\text{He}]2s^22p^6 \Rightarrow$ Capa n=2 completa

Ar (Z=18) $\Rightarrow [\text{Ne}]3s^23p^6 \Rightarrow$ Subcapas 3s y 3p completas

H 1								He 2
Li 1			B 3	C 4	N 5	O 6	F 7	Ne 8
Na 1	Mg 2		Al 3	Si 4	P 5	S 6	Cl 7	Ar 8
K 1							Br 7	Kr 8
							I 7	Xe 8

Periodo							Halógenos	Gases nobles
Primero	H^1							He^2
Segundo	$\text{Li}^{2,1}$	$\text{Be}^{2,2}$	$\text{B}^{2,3}$	$\text{C}^{2,4}$	$\text{N}^{2,5}$	$\text{O}^{2,6}$	$\text{F}^{2,7}$	$\text{Ne}^{2,8}$
Tercero	$\text{Na}^{2,8,1}$	$\text{Mg}^{2,8,2}$	$\text{Al}^{2,8,3}$	$\text{Si}^{2,8,4}$	$\text{P}^{2,8,5}$	$\text{S}^{2,8,6}$	$\text{Cl}^{2,8,7}$	$\text{Ar}^{2,8,8}$
Cuarto	$\text{K}^{2,8,8,1}$						$\text{Br}^{2,8,18,7}$	$\text{Kr}^{2,8,18,8}$
Quinto							$\text{I}^{2,8,18,18,7}$	$\text{Xe}^{2,8,18,18,8}$

□ **Formación de enlaces iónicos:**



□ **Formación de enlaces covalentes:**



metano



amoníaco



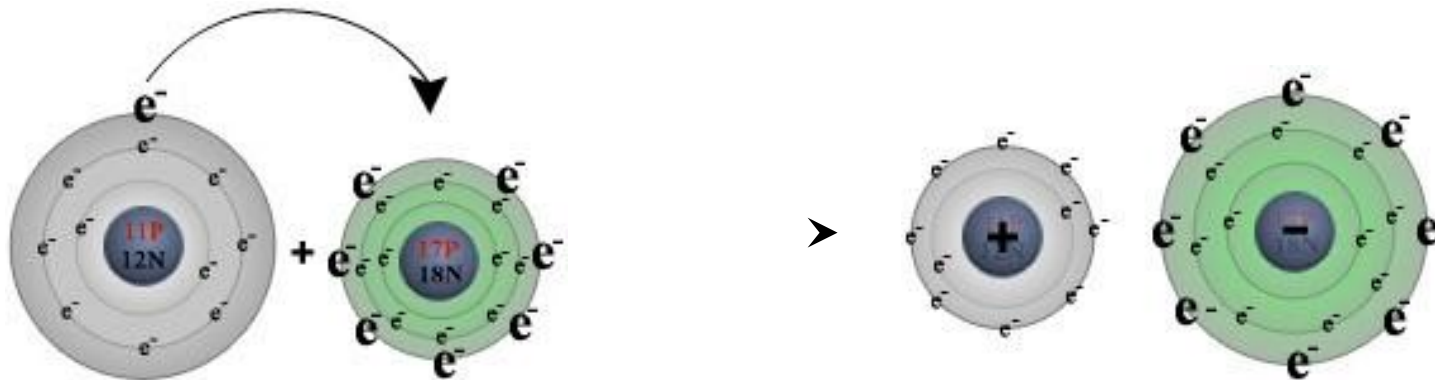
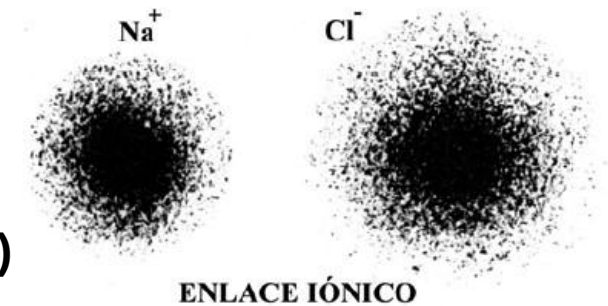
agua

ENLACE IÓNICO

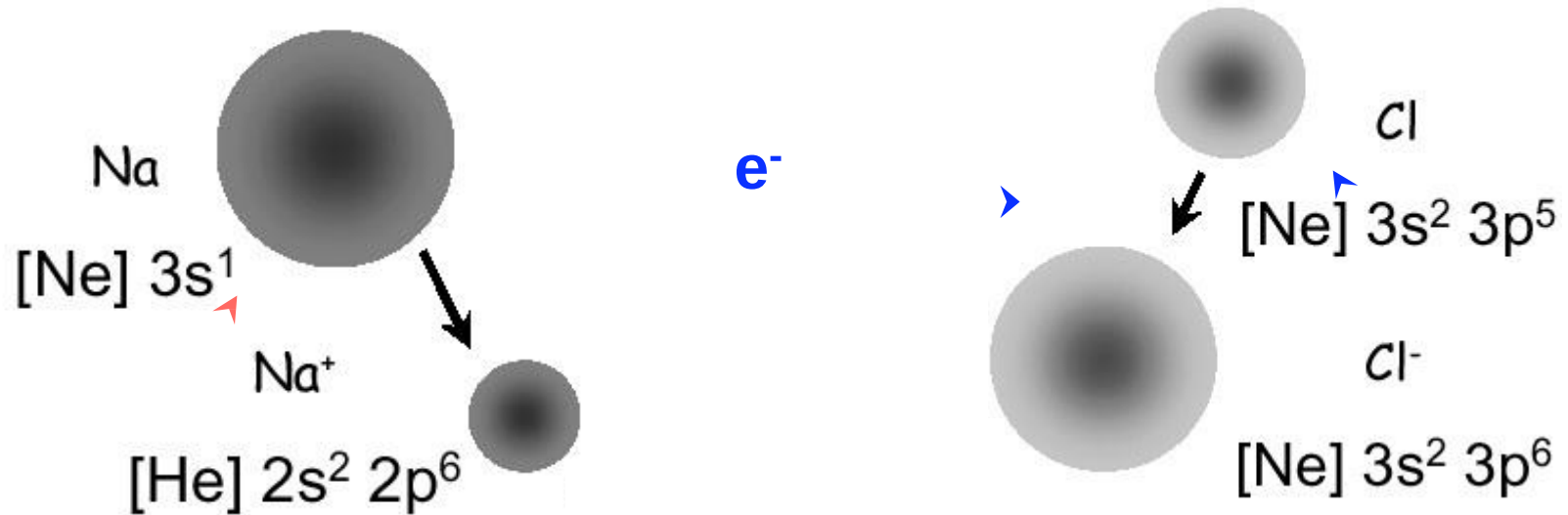
Transferencia de electrones (Kossel, 1916)

- ☐ Mediante pérdida de electrones
 - ☐ átomos metálicos (alcalinos y alcalinotérreos)
 - ☐ energía de ionización baja
 - ☐ formación de **cationes**

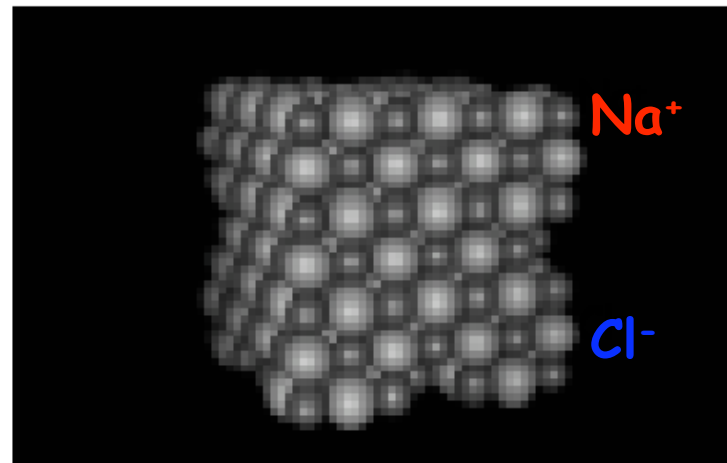
- ☐ Mediante adquisición de electrones
 - ☐ átomos no metálicos (anfígenos y halógenos)
 - ☐ afinidad electrónica elevada
 - ☐ formación de **aniones**



Combinación de un metal y un no metal: **CLORURO SÓDICO**



Poco
electronegativo

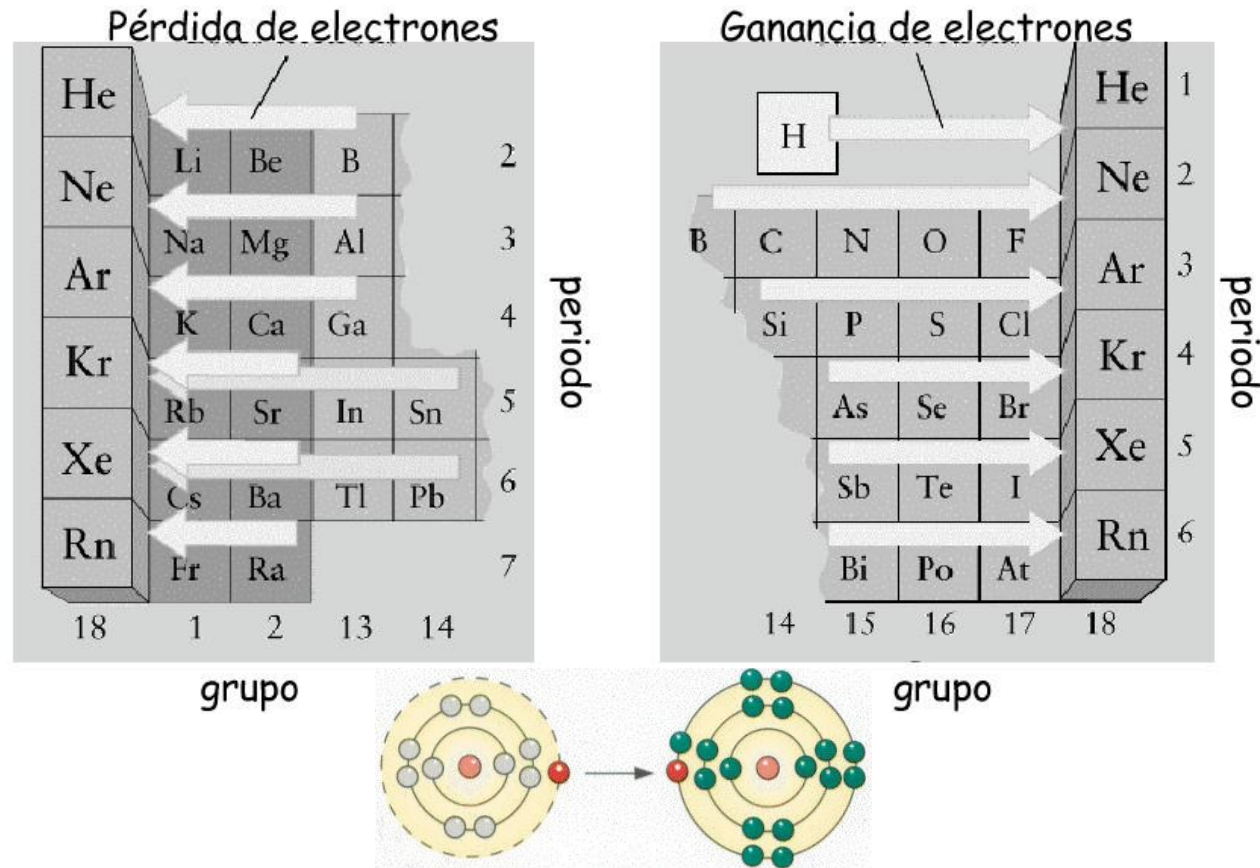


Muy
electronegativo

NaCl

Naturaleza del enlace iónico

Se produce entre elementos muy electronegativos y elementos muy poco electronegativos



- * Aniones: (No metales)
- + Los halógenos (X^-)
 - + Los del grupo 16 (X^{2-})
 - + En algunos casos N (Gr. 15) (X^{3-})



Autores :Blog Educativo San Pablo

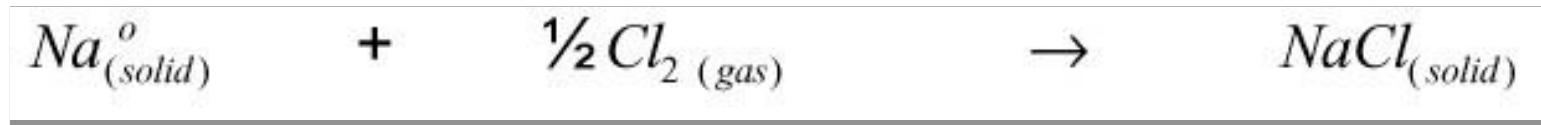
* Cationes: (Metales)

- + Los alcalinos (M^+)
- + Los alcalinotérreos menos el Be (M^{2+})
- + A veces los del grupo 13 menos B (M^+)
- + En algunos casos Sn y Pb (Gr. 14) (M^{2+})

Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl

□ Transformación directa



$$\Delta H_f = -390,4 \text{ kJ/mol}$$

calor de formación negativo

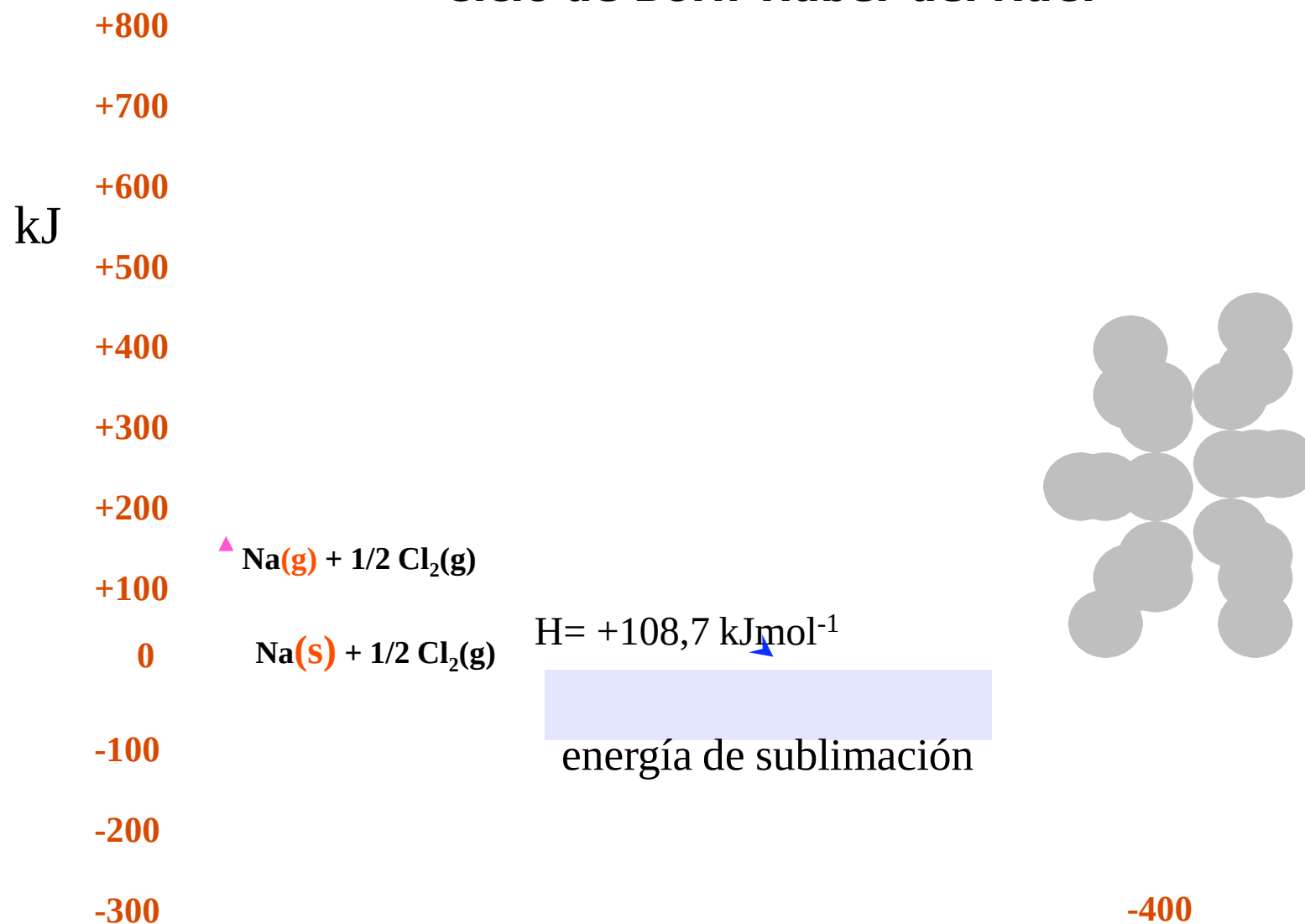
proceso exotérmico

Calor de formación:

“Energía que se desprende, o se absorbe, al formarse un mol de un compuesto químico a partir de sus elementos constituyentes, estando todos ellos (el compuesto inclusive) en el estado ordinario en que se encuentran a temperatura ambiente y presión atmosférica”

Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl



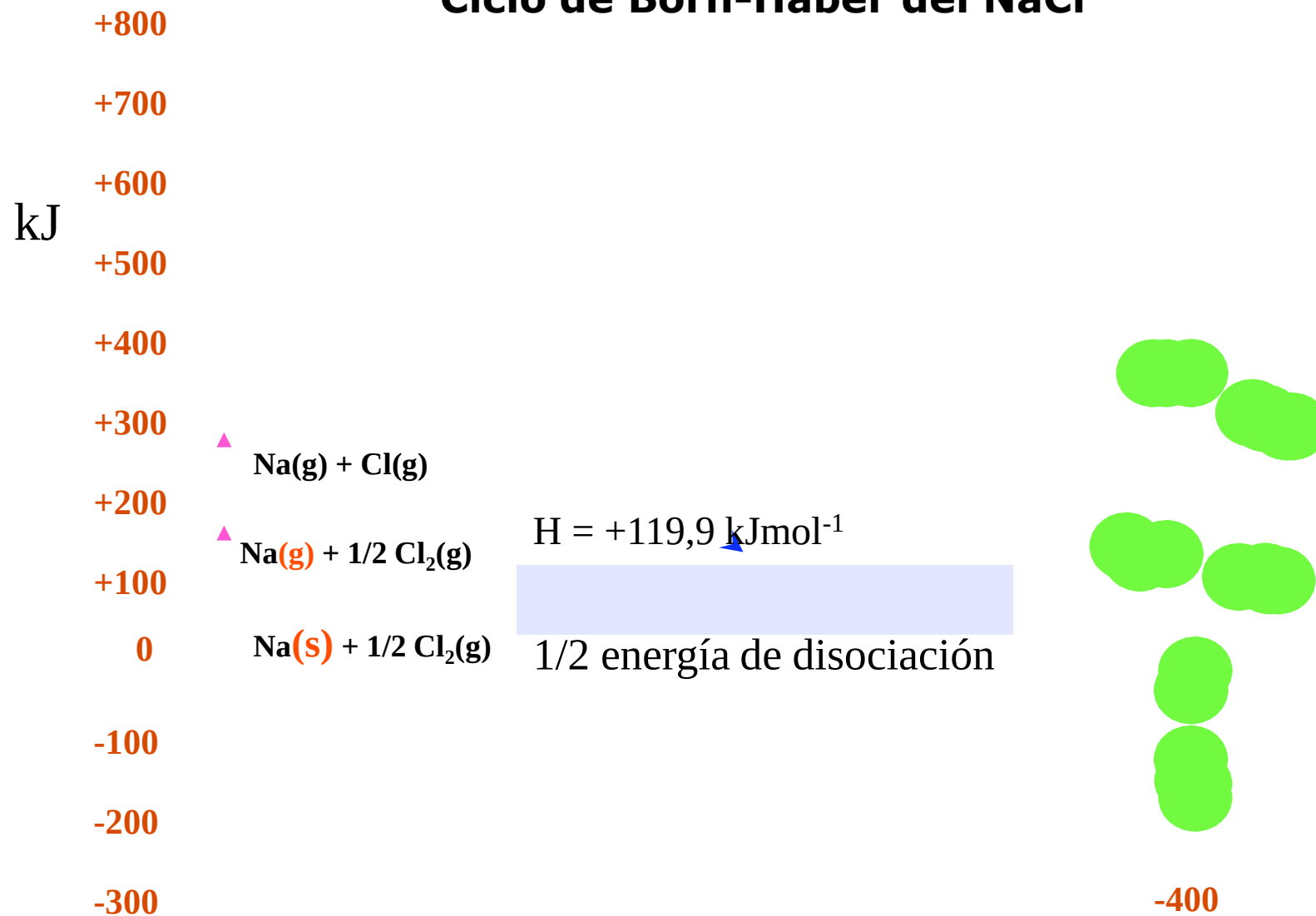
Autores :Blog Educativo San Pablo



Atomiza ción del sodio

Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl



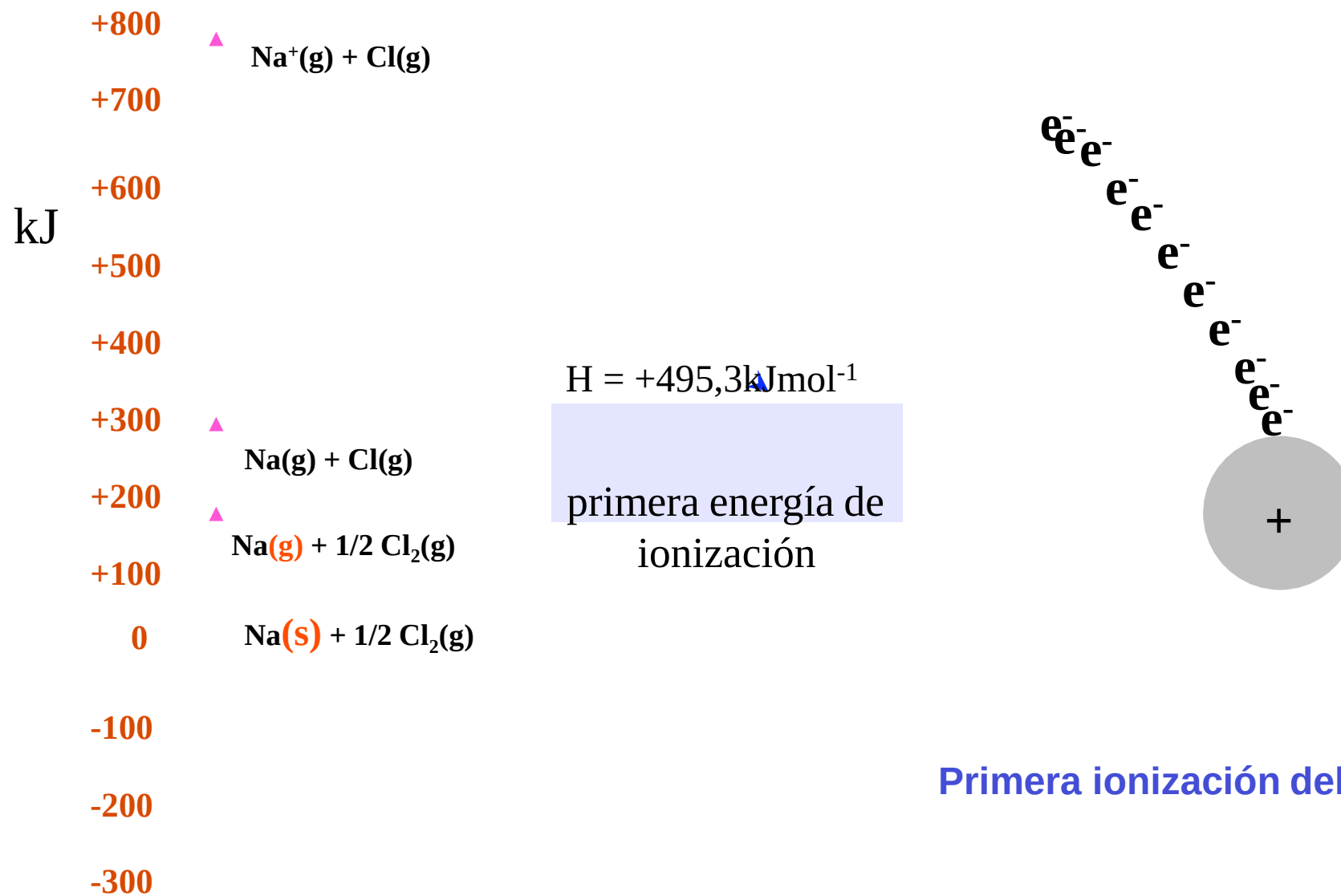
Autores :Blog Educativo San Pablo



Atomiza ción del cloro

Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl



Primera ionización del sodio

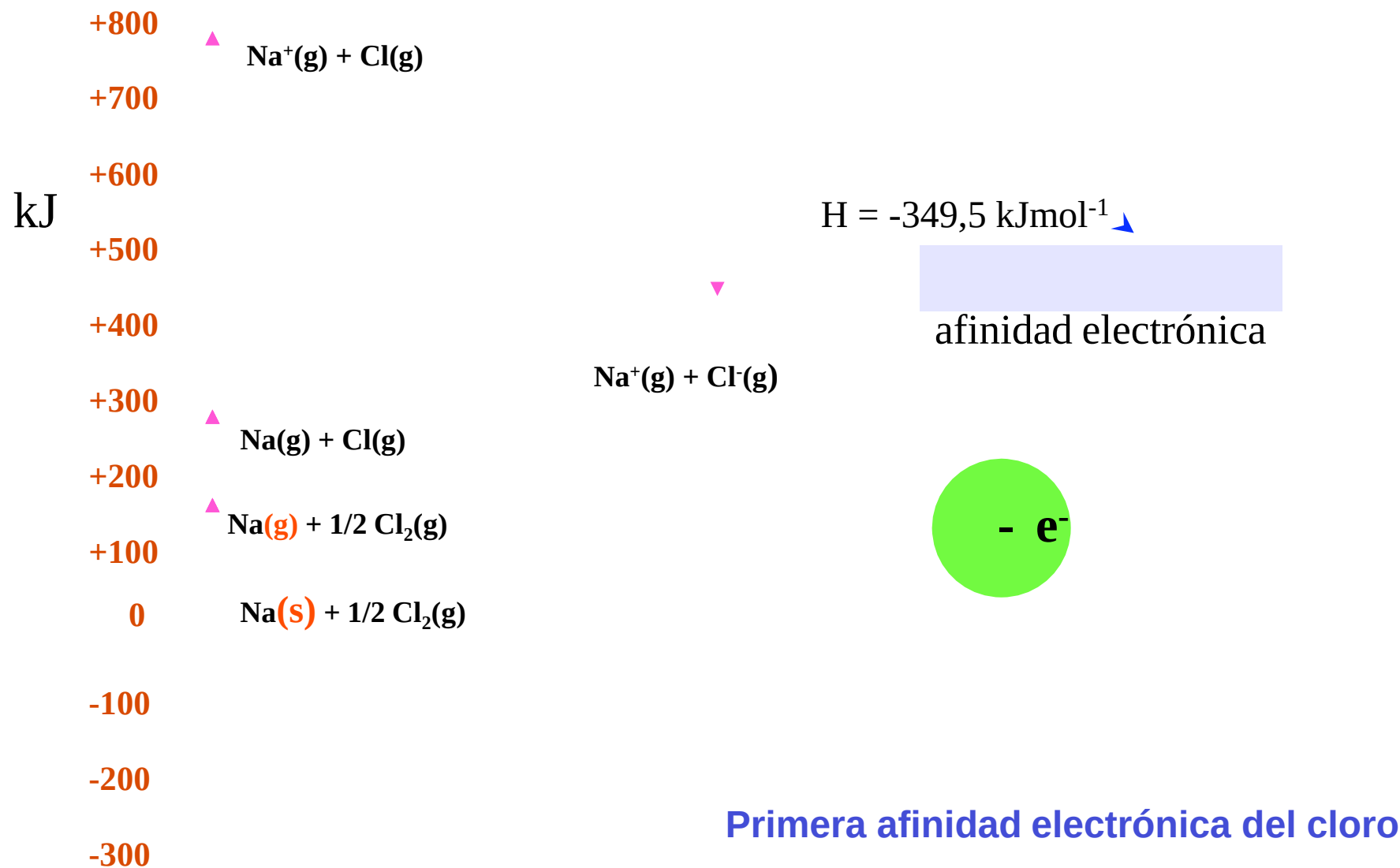
Autores :Blog Educativo San Pablo

-400



Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl



Autores :Blog Educativo San Pablo

-400

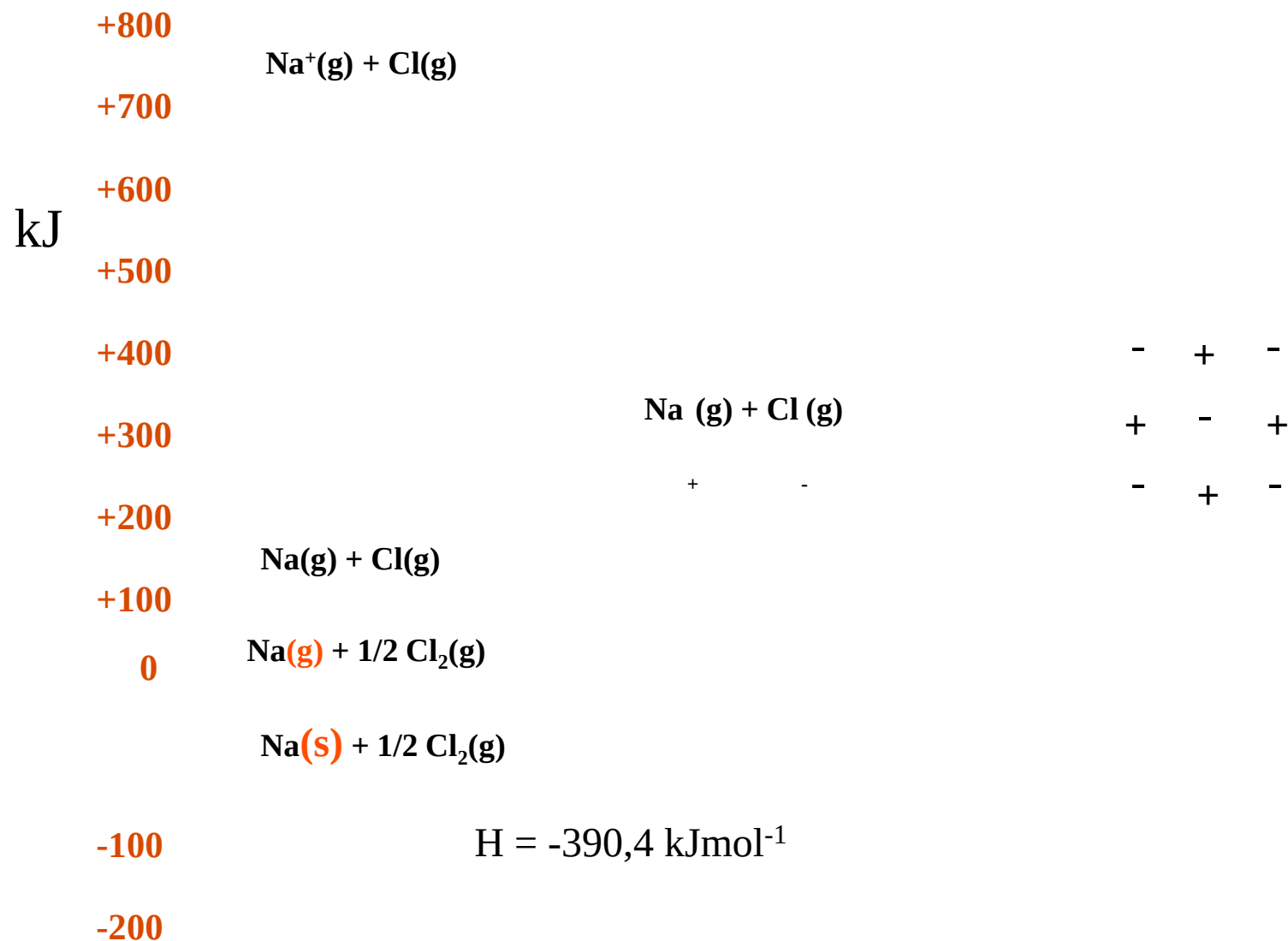




Autores :Blog Educativo San Pablo

Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl





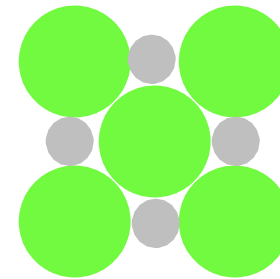
Autores :Blog Educativo San Pablo

-300

-400

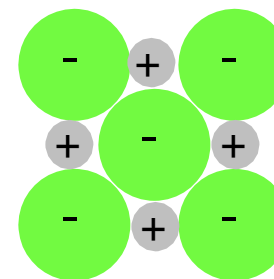
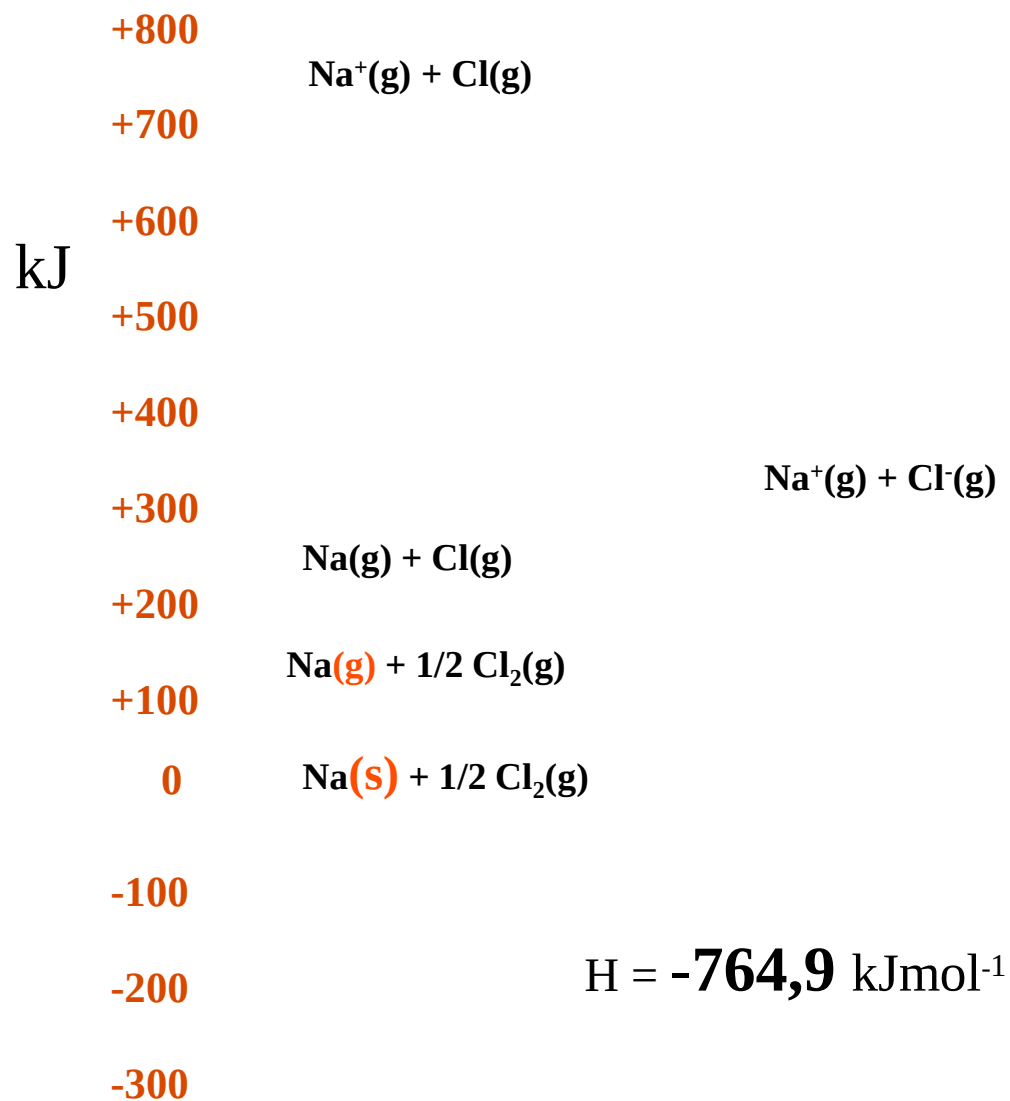
NaCl(s)

Formación de cloruro sódico



Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl



Energía reticular del cloruro sódico



Autores :Blog Educativo San Pablo

-400

NaCl(s)

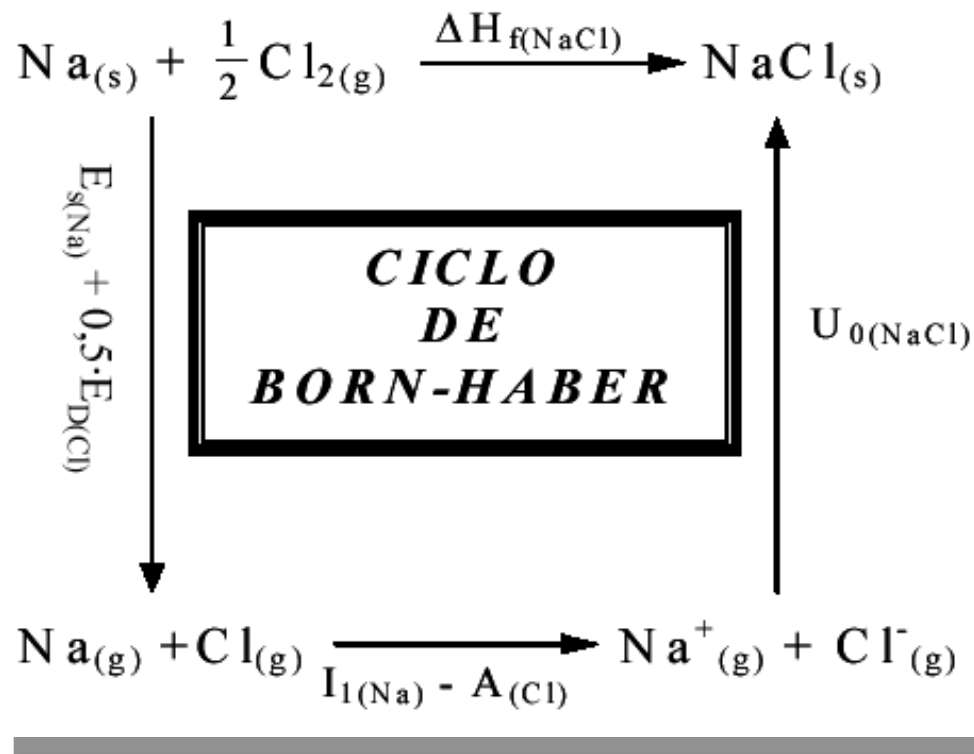


Aspectos energéticos del enlace iónico

Ciclo de Born-Haber del NaCl

□ Energía reticular (U_0):

“Energía que se libera cuando el número adecuado de aniones y de cationes en estado gaseoso condensan para formar un mol del compuesto iónico en estado sólido”

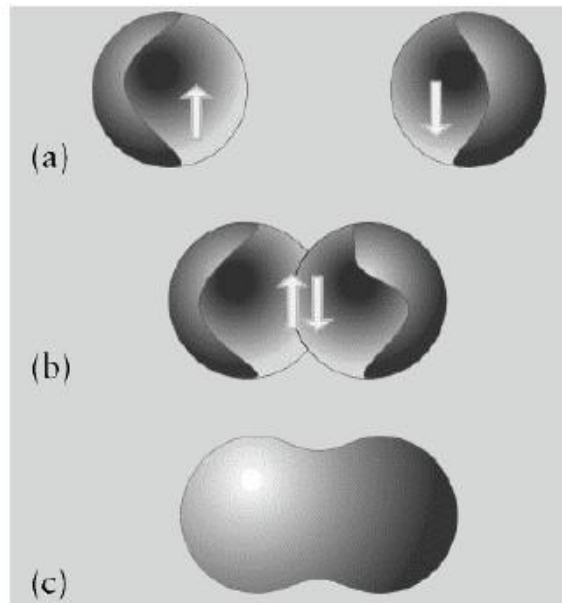


Valores absolutos de energía reticular ($-U_0$) de los haluros de metales alcalinos y de los óxidos y sulfuros de metales alcalinotérreos, calculados mediante el ciclo de Born-Haber (kcal/mol).

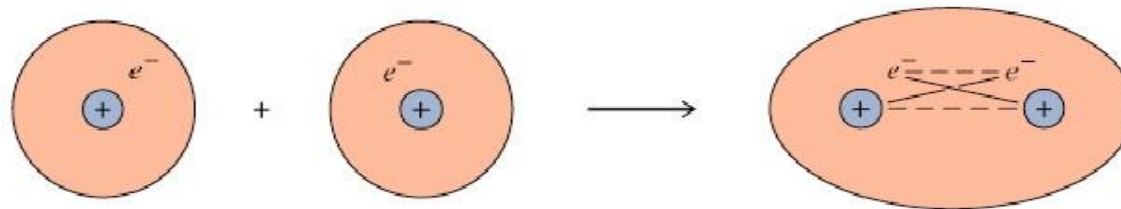
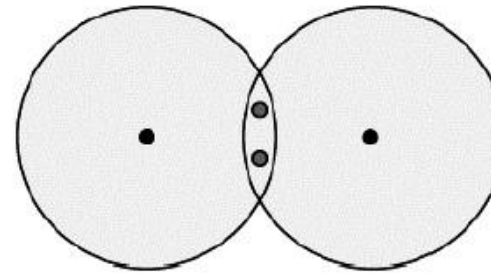
	F ⁻¹	Cl ⁻¹	Br ⁻¹	I ⁻¹
Li ⁺¹	238	192	182	170
Na ⁺¹	214	179	171	160
K ⁺¹	189	163	157	148
Rb ⁺¹	181	158	151	143
Cs ⁺¹	172	148	142	135
	O ⁻²	S ⁻²		
Be ⁺²	1080	893		
Mg ⁺²	940	778		
Ca ⁺²	835	722		
Sr ⁺²	791	687		
Ba ⁺²	747	656		

ENLACE COVALENTE

El enlace covalente se da entre elementos de similar electronegatividad y se origina por la compartición de un par de electrones entre dos átomos



2



átomo 1

átomo 2

molécula



ENLACE COVALENTE

□ Teoría de Lewis y formación de enlaces

Lewis, Langmuir y Kossel (1916-1919):

1. Los electrones, especialmente los de valencia, son los responsables de la formación de enlaces entre los átomos
2. Los electrones de valencia se pueden transferir de un átomo a otro (enlace iónico) o compartir (enlace covalente)
3. Los electrones se transfieren o comparten de forma que los átomos adquieren una configuración electrónica especialmente estable



		1A(1)	2A(2)						
		ns^1	ns^2	3A(13)	4A(14)	5A(15)	6A(16)	7A(17)	8A(18)
				ns^2np^1	ns^2np^2	ns^2np^3	ns^2np^4	ns^2np^5	ns^2np^6
Period	2	• Li	• Be •	• B •	• C •	• N •	• O •	• F •	• Ne •
	3	• Na	• Mg •	• Al •	• Si •	• P •	• S •	• Cl •	• Ar •

ENLACE COVALENTE

□ Teoría de Lewis y formación de enlaces

Configuraciones electrónicas especialmente estables

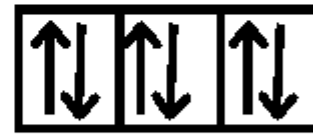
- Una configuración electrónica en la que una capa o subcapa se encuentra completa presenta gran estabilidad química
- La configuración electrónica de valencia de capa completa para elementos del primer periodo es $1s^2$ (2 electrones) mientras que para elementos del segundo periodo es $2s^2 2p^6$ (8 electrones)



$2s^2$



$2s^2$



$2p^6$

Otras
configuraciones
estables:



d^{10}

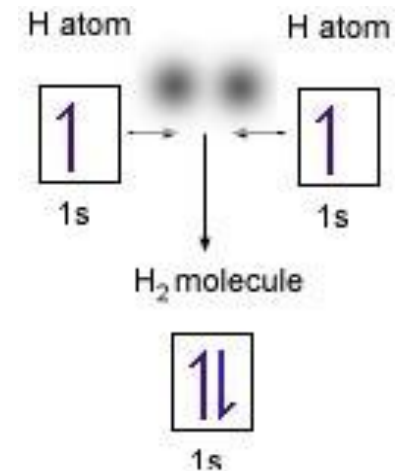
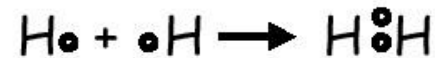


d^5

ENLACE COVALENTE

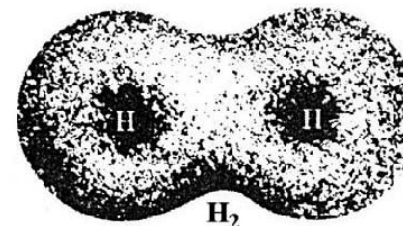
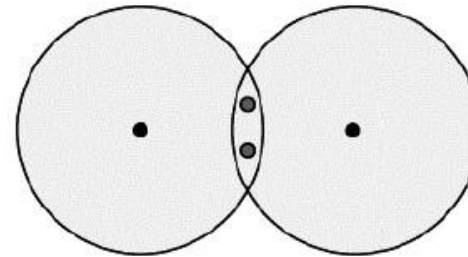
□ Enlace entre dos átomos de hidrógeno

El hidrógeno forma un único enlace porque cada átomo tiende a rodearse de una capa completa de electrones de forma que adopta la configuración $1s^2$

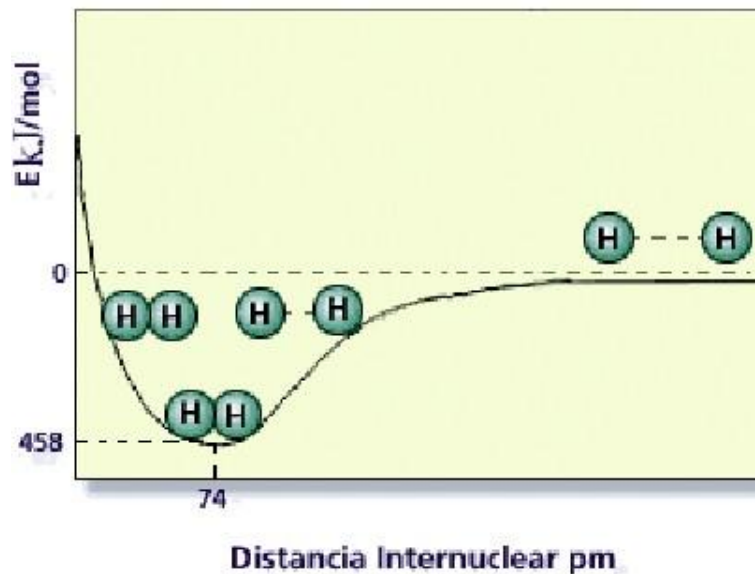


Gracias a la formación del enlace covalente cada átomo de hidrógeno ha adoptado una configuración más estable de capa completa

2



ENLACE COVALENTE

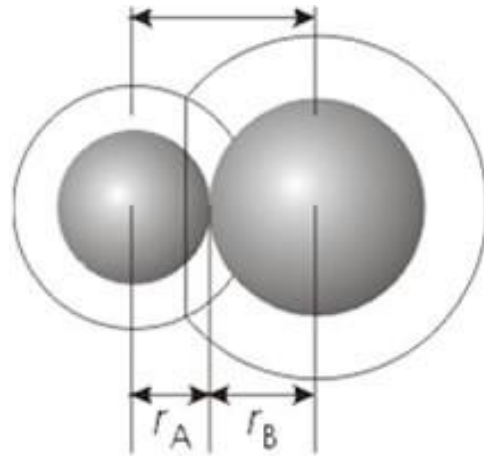


PROPIEDADES DEL ENLACE COVALENTE

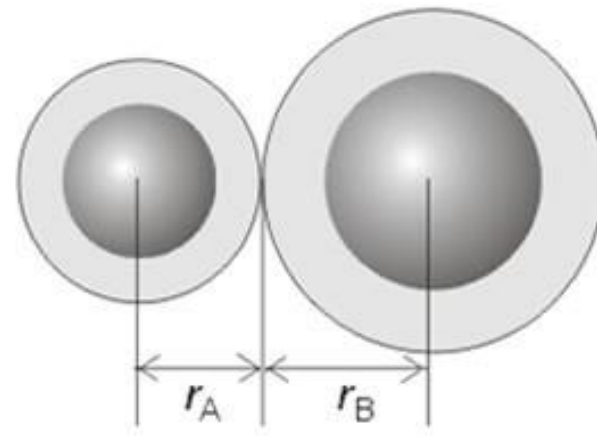
□ Orden de enlace $O.E. = \frac{n^{\circ} e^{-} \text{ enlazantes} - n^{\circ} e^{-} \text{ antienlazantes}}{2}$

□ Distancia de enlace

“Separación internuclear entre los dos átomos enlazados; es decir, en el mínimo de la curva de energía potencial molecular”



radio covalente



radio de Van der Waals

	H ₂ ⁺	H ₂	HF	HCl	HBr	HI	N ₂	O ₂	F ₂	Cl ₂	I ₂
d(Å)	1.06	0.74	0.92	1.27	1.41	1.60	1.09	1.21	1.44	1.99	2.67

PROPIEDADES DEL ENLACE COVALENTE

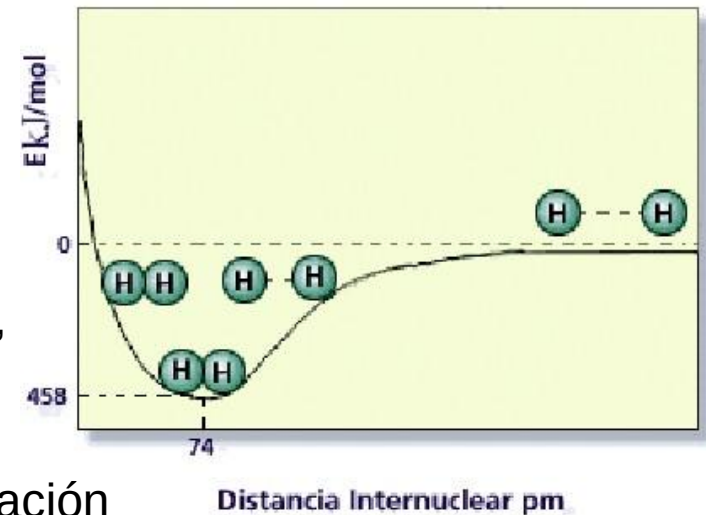
□ Fuerza de enlace

□ **Energía de disociación del enlace**

“Diferencia de energía entre el mínimo de la curva de energía potencial de la molécula diatómica y la energía de los átomos separados”

□ **Entalpía de disociación del enlace**

Variación de entalpía para la reacción de disociación



VARIACIÓN DE LAS ENTALPÍAS DE ENLACE EN LA TABLA PERIÓDICA

Elementos sin electrones sin compartir

	B/kJ mol ⁻¹
C-C	347
Si-C	301
Ge-C	242

Elementos con pares de electrones libres

	B/ (kJ mol ⁻¹)
N-O	163
P-O	368
As-O	330

	B/ (KJ mol ⁻¹)
C-Cl	326
Si-Cl	401
Ge-Cl	339
Sn-Cl	314

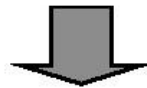
ELECTRONEGATIVIDAD

Capacidad de un átomo para atraer hacia sí los electrones, cuando forma parte de un compuesto

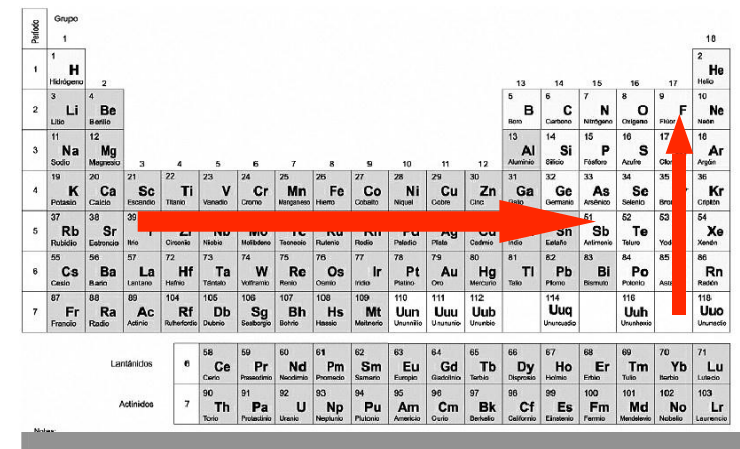
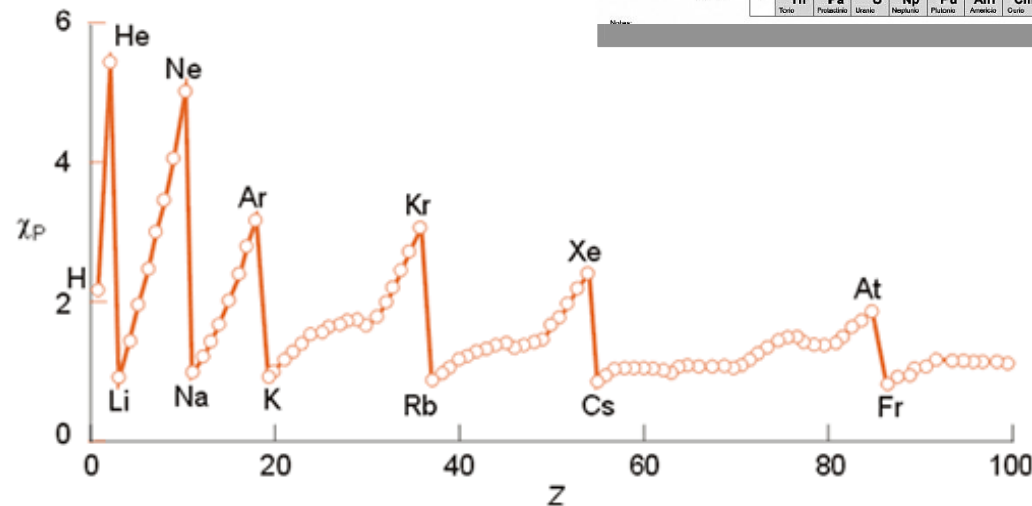
- Átomos electronegativos □ tendencia a atraer electrones
- Átomos electropositivos □ tendencia a perder electrones

Átomos muy electronegativos: altas afinidades electrónicas y altas energías de ionización

Átomos poco electronegativos: bajas afinidades electrónicas y bajas energías de ionización



Los metales son poco electronegativos, los no metales son muy electronegativos

ELECTRONEGATIVIDAD

□ Pauling

$$\Delta = E_{AB} - 1/2 (E_{AA} + E_{BB}) \quad | X_A - X_B | = 0,0102 \times \sqrt{\Delta} \quad \Delta \text{ (kJ/mol)}$$

Period	1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A
	H 2.1												B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
1																	
2	Li 1.0	Be 1.5															
3	Na 0.9	Mg 1.2	3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
4	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.7	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
5	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5
6	Cs 0.7	Ba 0.9	La* 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	Ac† 1.1														

*Lanthanides: 1.1–1.3
†Actinides: 1.3–1.5

ELECTRONEGATIVIDAD

□ Robert Mulliken

$$\chi = (EI + AE) / 2 = \text{Tendencia de un átomo a atraer electrones}$$

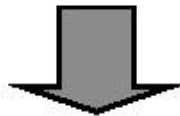
$$X_{\text{Pauling}} = 1,35 (\sqrt{X_{\text{Mulliken}}}) - 1,37$$

Átomos muy electronegativos: altas afinidades electrónicas
y altas energías de ionización

Átomos poco electronegativos: bajas afinidades electrónicas
y bajas energías de ionización

tendencia a
adquirir electrones

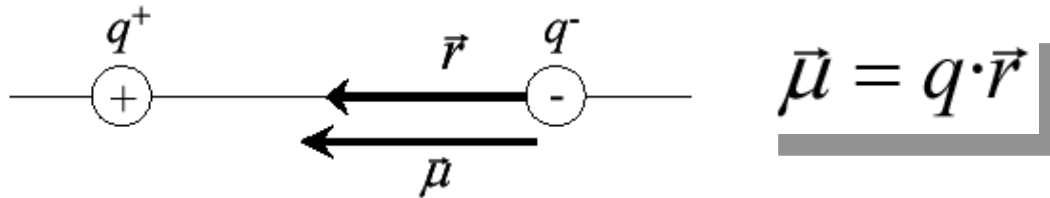
tendencia a
perder electrones



Los metales son poco electronegativos, los no metales son muy electronegativos

MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE Y POLARIZACIÓN

☐ Momento dipolar



$$1 \text{ Debye} = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

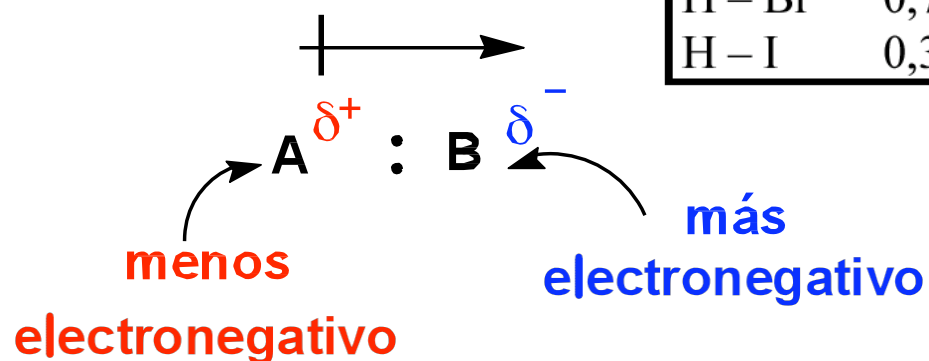
☐ Momento dipolar de enlace

- ☐ Las moléculas que tienen enlaces covalentes polares tienen átomos cargados positivamente y otros negativamente.
- ☐ Cada enlace tiene un momento dipolar “ μ ” (magnitud vectorial que depende la diferencia de χ entre los átomos cuya dirección es la línea que une ambos átomos y cuyo sentido va del menos electronegativo al más electronegativo).

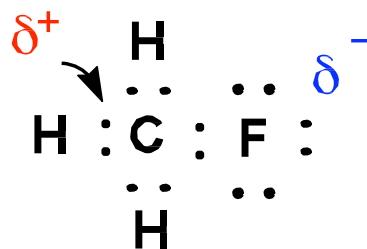
MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE Y POLARIZACIÓN

□ Momento dipolar de enlace

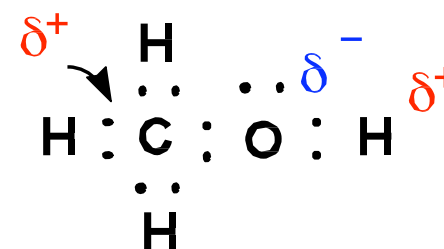
Enlace	μ (D)	Enlace	μ (D)
H – F	1,98	H – O	1,5
H – Cl	1,04	H – N	1,3
H – Br	0,79	H – C	0,4
H – I	0,38		



fluoruro de hidrógeno



fluorometano



metanol

MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE Y POLARIZACIÓN

□ **Momento dipolar de molécula**

Dependiendo de cómo sea $\Sigma \mu$ de los enlaces que forman una molécula, éstas se clasifican en:

✓ **Moléculas polares.** Tienen $\Sigma \mu$ no nulo:

- Moléculas con un sólo enlace covalente. Ej: HCl.
- Moléculas angulares, piramidales, Ej: H₂O, NH₃.

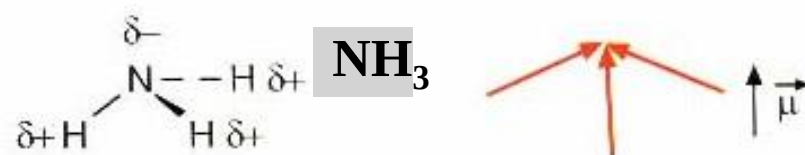
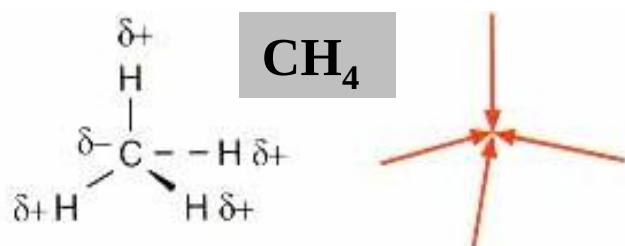
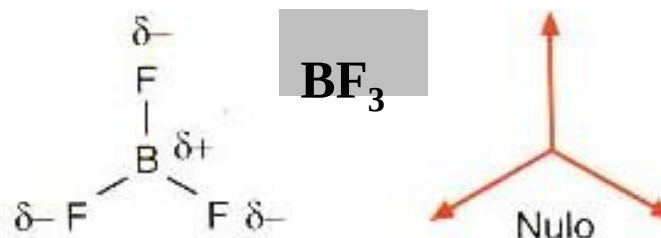
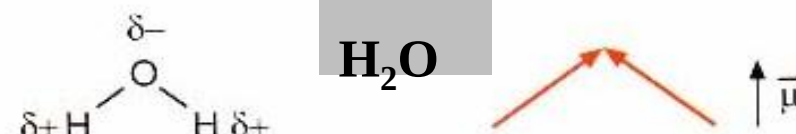
✓ **Moléculas apolares.** Tienen $\Sigma \mu$ nulo:

- Moléculas con enlaces apolares. Ej: H₂, Cl₂.
- $\Sigma \mu = 0$. Ej: CH₄, CO₂.

MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE Y POLARIZACIÓN

□ Momento dipolar de molécula

Suma vectorial de los momentos de enlace existentes en una molécula



Carácter iónico de un enlace

$$\% \text{ iónico} = \frac{\mu_{\text{experimental}}}{\mu_{\text{teórico para enlace iónico}}}$$

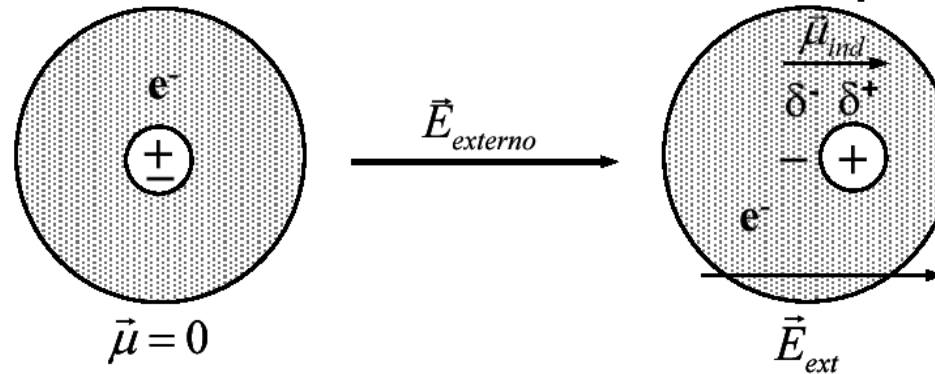
MOMENTO DIPOLAR DE ENLACE Y POLARIZACIÓN

□ Polarización y polarizabilidad

Momento dipolar inducido

$$\vec{\mu}_{ind} = \alpha \cdot \vec{E}$$

polarizabilidad

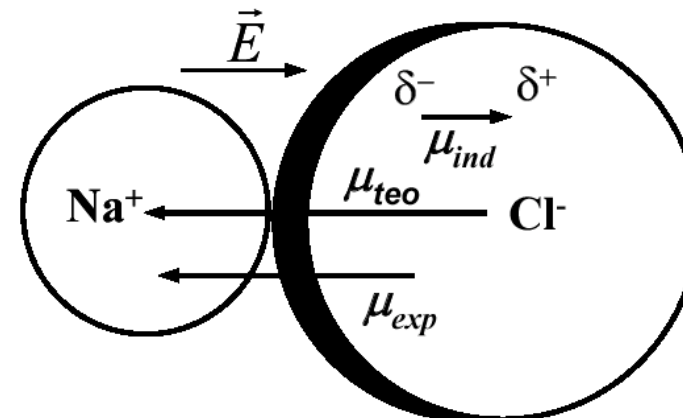


□ Polarización en un enlace iónico

μ teórico(NaCl) = 11,33 D

μ experimental(NaCl) = 9 D

□ % enlace iónico 79,5%



ESTRUCTURAS DE LEWIS

□ Estructuras de Lewis de átomos

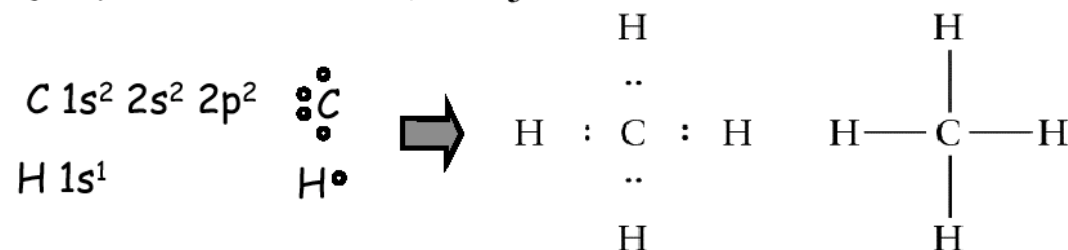
		1A(1)	2A(2)						
		ns^1	ns^2	3A(13)	4A(14)	5A(15)	6A(16)	7A(17)	8A(18)
		ns^1	ns^2	ns^2np^1	ns^2np^2	ns^2np^3	ns^2np^4	ns^2np^5	ns^2np^6
Period	2	• Li	• Be •	• B •	• C •	• N •	• O •	• F •	• Ne •
	3	• Na	• Mg •	• Al •	• Si •	• P •	• S •	• Cl •	• Ar •

□ Estructuras de Lewis de iones



□ Estructuras de Lewis de moléculas

Ejemplo: el metano CH_4



Cada electrón de valencia se representa por un punto

Cada par de electrones es un par de puntos o una línea

ESTRUCTURAS DE LEWIS

☐ Estructuras de Lewis de moléculas

¿Cuántos enlaces covalentes puede formar un átomo?

- Como regla general, un átomo forma tantos enlaces covalentes como sean necesarios para que se complete su capa de valencia mediante pares compartidos de electrones

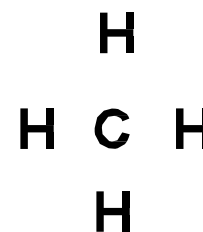


Para elementos del segundo período esto conduce a la adopción de la estructura $2s^2 2p^6$ (regla del octete)

☐ REGLA n° 1: Dibujar el esqueleto molecular

Átomo central:

- ☐ Mayor valencia
- ☐ Mayor tamaño
- ☐ Menos electronegativo



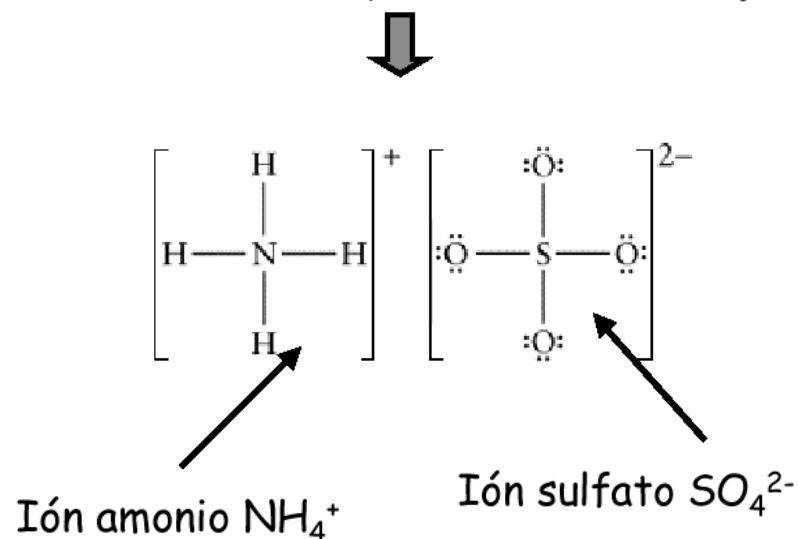
ESTRUCTURAS DE LEWIS

□ Estructuras de Lewis de moléculas

□ REGLA n° 2: Contar el número total de electrones de valencia disponibles

CH₄	4H TM 4 x 1 electrón =	4 electrones
	<u>1C TM 1 x 4 electrones =</u>	<u>4 electrones</u>
	Total	8 electrones
H₃O⁺	3H TM 3 x 1 electrón =	3 electrones
	1O TM 1 x 6 electrones =	6 electrones
	<u>carga TM +1 =</u>	<u>-1 electrón</u>
	Total	8 electrones
NH₂⁻	2H TM 2 x 1 electrón =	2 electrones
	1N TM 1 x 5 electrones =	5 electrones
	<u>carga TM -1 =</u>	<u>+1 electrón</u>
	Total	8 electrones
HBr	1H TM 1 x 1 electrón =	1 electrón
	<u>1Br TM 1 x 7 electrones =</u>	<u>7 electrones</u>
	Total	8 electrones

En los iones poliatómicos se cumple la regla del octeto añadiendo o sustrayendo electrones al conjunto:



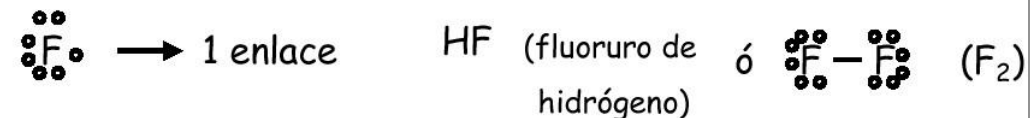
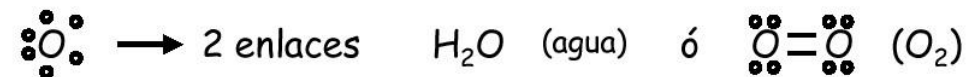
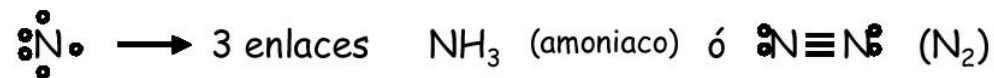
- se añade un electrón por cada carga positiva
- se resta un electrón por cada carga negativa

ESTRUCTURAS DE LEWIS

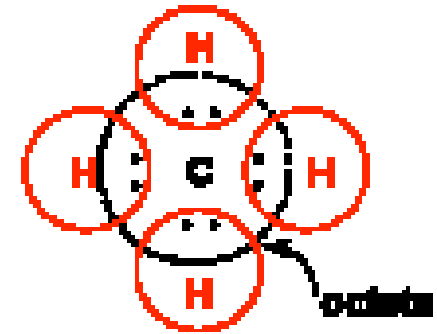
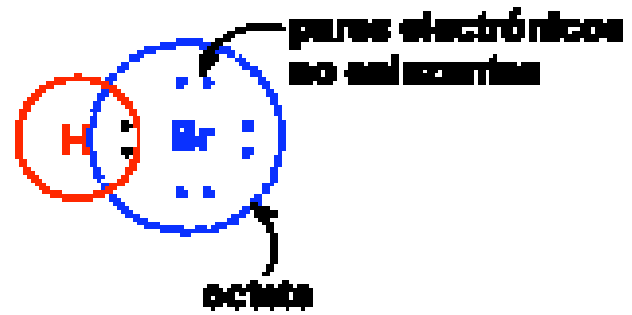
□ Estructuras de Lewis de moléculas

□ REGLA n° 3 (REGLA DEL OCTETE):

Representar todos los enlaces covalentes mediante dos electrones compartidos, asignando al mayor número posible de átomos un octete electrónico (el hidrógeno requiere dos electrones).



Autores :Blog Educativo San Pablo



ESTRUCTURAS DE LEWIS

□ Estructuras de Lewis de moléculas

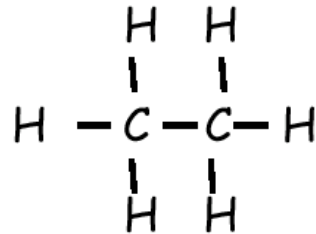
□ REGLA n° 3 (REGLA DEL OCTETE):

Representar todos los enlaces covalentes mediante dos electrones compartidos, asignando al mayor número posible de átomos un octete electrónico (el hidrógeno requiere dos electrones).

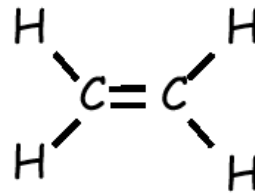
Enlaces simples $C \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} C$ $C - C$

Enlaces dobles $C \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} C$ $C = C$

Enlaces triples $C \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{:}} C$ $C \equiv C$



Etano



Eteno
(etileno)



Etino
(acetileno)

Regla del octete: en todos los casos los átomos de carbono



están rodeados de 8 electrones

ESTRUCTURAS DE LEWIS

☐ Estructuras de Lewis de moléculas

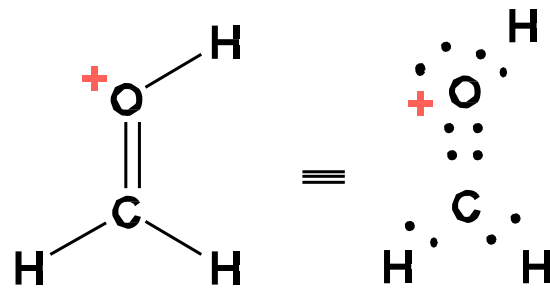
☐ **REGLA n° 4:**

Asignar cargas a los átomos de la molécula.

☐ Par no enlazante ☐ dos electrones

☐ Par enlazante ☐ un electrón

$$\text{CARGA} = \left(\begin{array}{c} \text{n° de electrones} \\ \text{de la capa} \\ \text{externa del átomo} \\ \text{libre neutro} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{n° de electrones} \\ \text{no compartidos} \\ \text{del átomo dentro} \\ \text{de la molécula} \end{array} \right) - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{c} \text{electrones} \\ \text{enlazantes en torno} \\ \text{al átomo dentro} \\ \text{de la molécula} \end{array} \right)$$

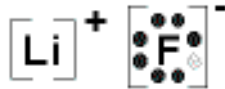


$$\text{carga} = 6 - 2 - 3 = -1$$

ESTRUCTURAS DE LEWIS

☐ Estructuras de Lewis de compuestos iónicos

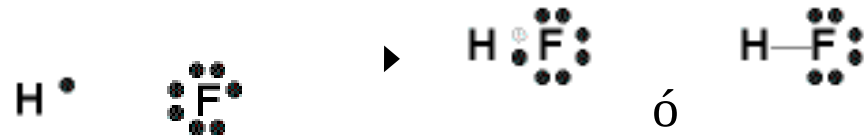
- ☐ Carga global ☐ **cero** (el número de electrones perdidos por un átomo es igual al número de electrones ganados por el otro átomo).
- ☐ La estructura de Lewis del compuesto iónico se construye a partir de la estructura de Lewis de cada ion.



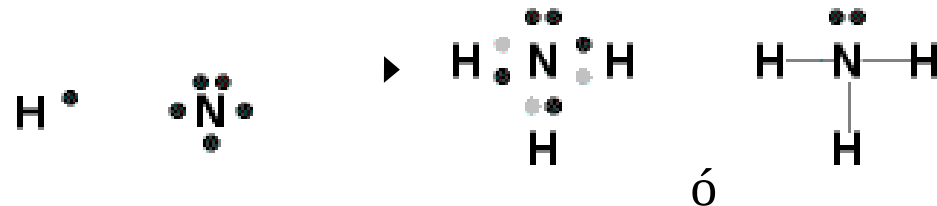
Ejemplo: fluoruro de litio

☐ Estructuras de Lewis de compuestos covalentes

Ejemplo: fluoruro de hidrógeno



Ejemplo: amoníaco



Autores :Blog Educativo San Pablo

Ejemplo: oxígeno molecular

ó

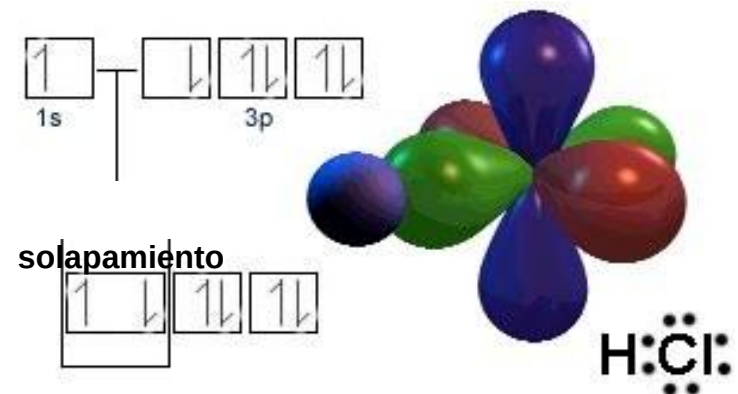
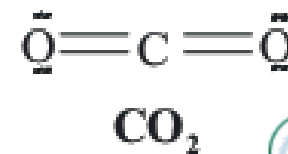
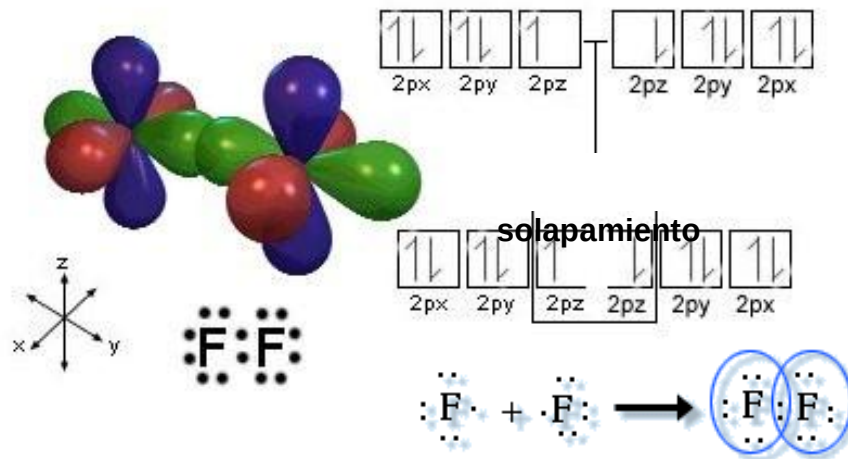
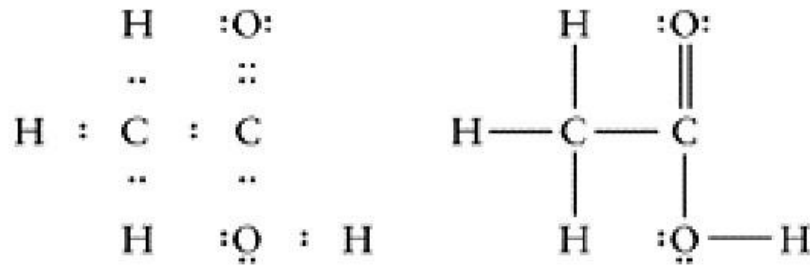


ESTRUCTURAS DE LEWIS

□ Estructuras de Lewis de compuestos covalentes

Estructura de Lewis del ácido acético

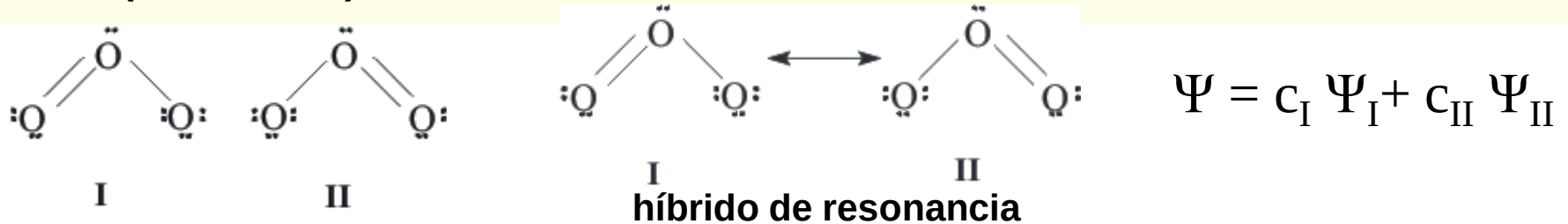
$$4 \text{ H} + 2 \text{ C} + 2 \text{ O} = 4 \times 1 + 2 \times 4 + 2 \times 6 = 24 \text{ electrones}$$



RESONANCIA

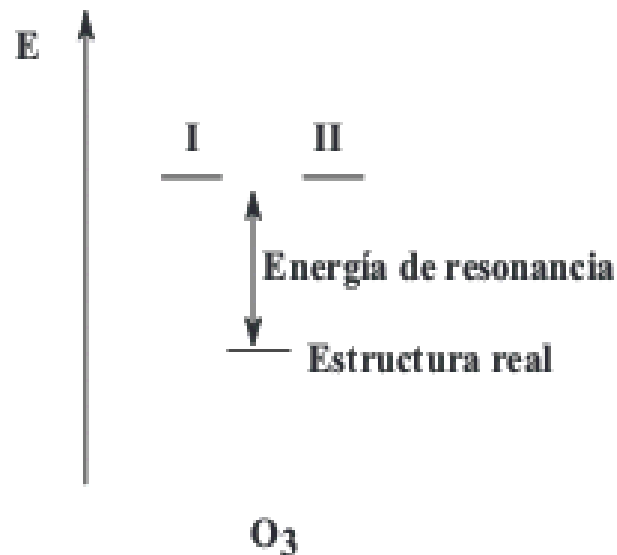
Se produce cuando los enlaces múltiples se pueden escribir en situaciones que son equivalentes:

- Las distancias de enlace $O_{\text{central}}-O_{\text{terminal}}$ son idénticas (1.28 Å).
- Este valor es intermedio entre el de un enlace simple (O-O, 1.48 Å) y el de un enlace doble (O=O, 1.21 Å).



Dos consecuencias:

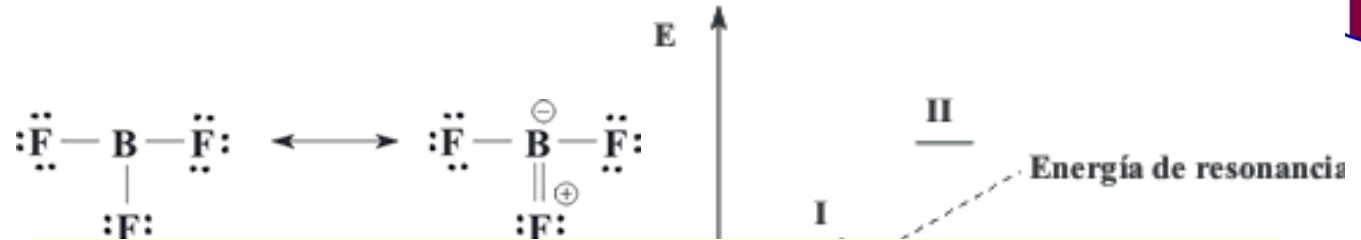
- a) promediar las características de los enlaces de la molécula
- b) reducir la energía del híbrido en resonancia, de manera que ésta será siempre inferior a la de cualquier estructura contribuyente.



RESONANCIA

$$\Psi = c_I \Psi_I + c_{II} \Psi_{II}$$

$$c_I \neq c_{II}$$



Carga formal =

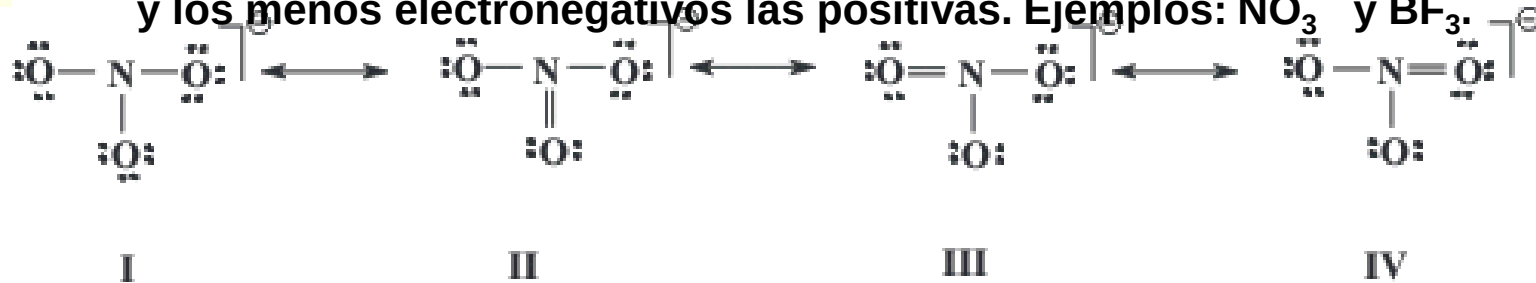
$$N_{\text{valencia}} - N_{\text{pares no compartidos}} - \frac{1}{2} N_{\text{pares compartidos}}$$

BF₃

La estructura resonante que posee la menor energía es aquella en la que:

- 1) las cargas formales sobre los átomos individuales son las más bajas
- 2) los átomos más electronegativos soportan las cargas negativas

y los menos electronegativos las positivas. Ejemplos: NO₃⁻ y BF₃.



O □ carga formal -1
N □ carga formal +2

O (=) □ carga formal 0
O (-) □ carga formal -1



Autores :Blog Educativo San Pablo

N



c

a

r

g

a

f

o

r

m

a

l

+

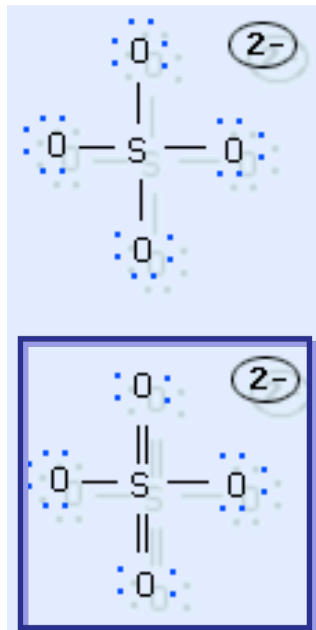
1

CARGA FORMAL

$$\text{Carga formal} = [\text{N}^\circ \text{e}^- \text{valencia átomo libre}] - [\text{N}^\circ \text{e}^- \text{valencia asignados en la molécula}]$$

- Los pares de electrones solitarios resultantes de la formación de los octetes correspondientes alrededor de cada átomo, le pertenecen exclusivamente.
- Electrones compartidos en enlaces se dividen para cada átomo involucrado en la unión.

$$[\text{Electrones de valencia}] = [\text{pares de e}^- \text{ solitarios}] + 1/2 [\text{e}^- \text{ compartidos}]$$



$$[\text{Electrones de valencia del O}] = 7$$

$$[\text{Electrones de valencia del S}] = 4$$

$$[\text{Carga formal O}] = 6\text{e}^- - 7\text{e}^- = -1$$

$$[\text{Carga formal S}] = 6\text{e}^- - 4\text{e}^- = +2$$

$$[\text{Carga formal Oxig. doble enlace}] = 6\text{e}^- - 6\text{e}^- = 0$$

$$[\text{Carga formal Oxig. simple enlace}] = 6\text{e}^- - 7\text{e}^- = -1$$

$$[\text{Carga formal S}] = 6\text{e}^- - 6\text{e}^- = 0$$

- Los átomos en la molécula tratan de adquirir cargas formales lo más cercanas a cero,

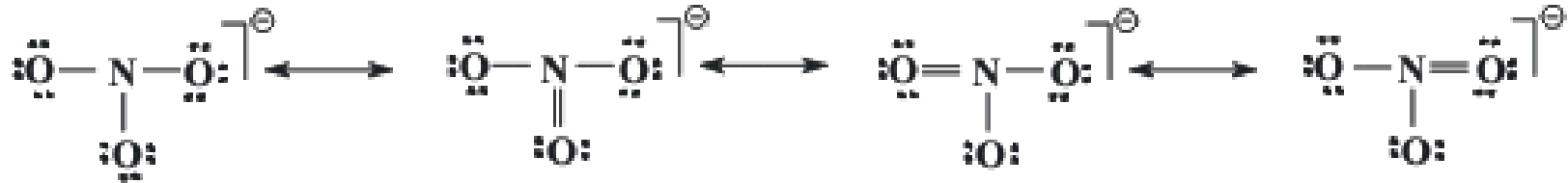


Autores :Blog Educativo San Pablo

☐ **Cualquier carga negativa (-) debe residir en el átomo de mayor electronegatividad.**

NÚMERO DE OXIDACIÓN

Número de oxidación = carga iónica efectiva que tendría un átomo si el par de electrones del enlace perteneciera al átomo más electronegativo.



- ☐ Número oxidación OXÍGENO = -2 (un par de electrones más de los que presenta en su capa de valencia en su estado libre)
- ☐ Número oxidación NITRÓGENO = +5 (no contaría con ningún electrón)
- ☐ La suma de los números de oxidación de todos los átomos es igual a la carga total.
- ☐ Los átomos en su forma elemental tienen números de oxidación iguales a cero.
- ☐ Los átomos de los elementos del grupo 1 poseen el número de oxidación +1.
- ☐ Los del grupo 2 el número de oxidación +2. Los del grupo 13, excepto el B, poseen los números de oxidación +3 y +1.
- ☐ Los del grupo 14, excepto el C y el Si, poseen los números de oxidación +4 y +2.
- ☐ El hidrógeno presenta número de oxidación +1 en sus combinaciones con los no metales y -1 cuando se combina con los metales.
- ☐ El oxígeno posee número de oxidación -2.



Autores :Blog Educativo San Pablo

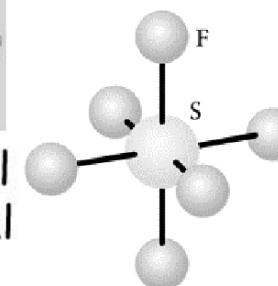
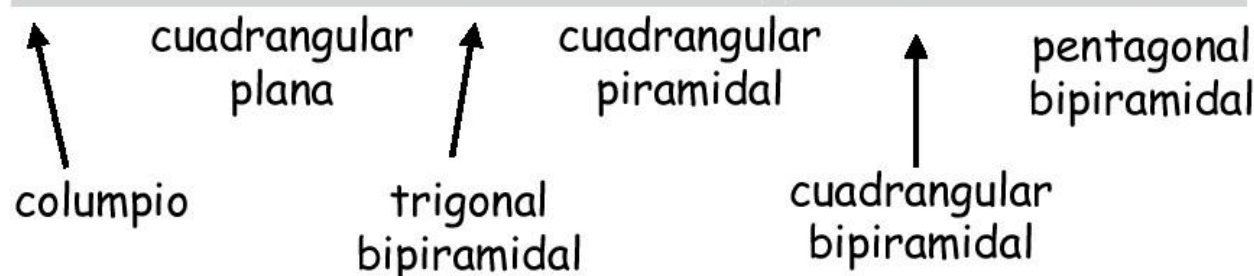
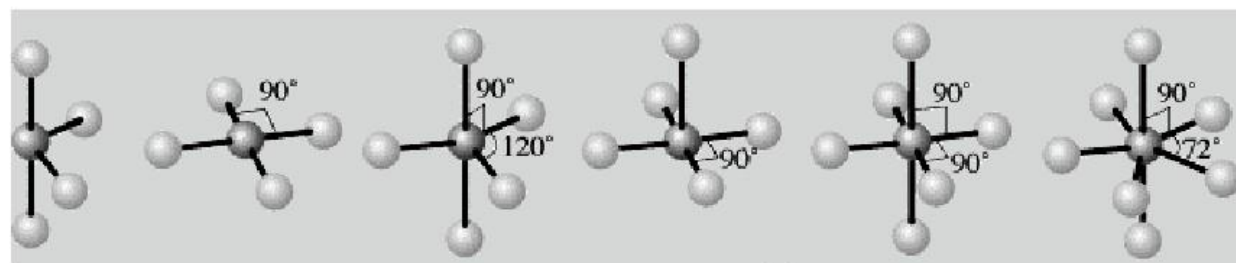
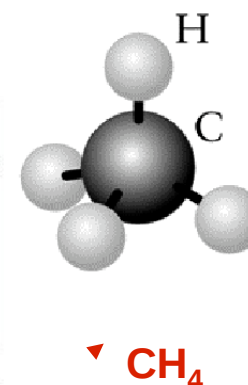
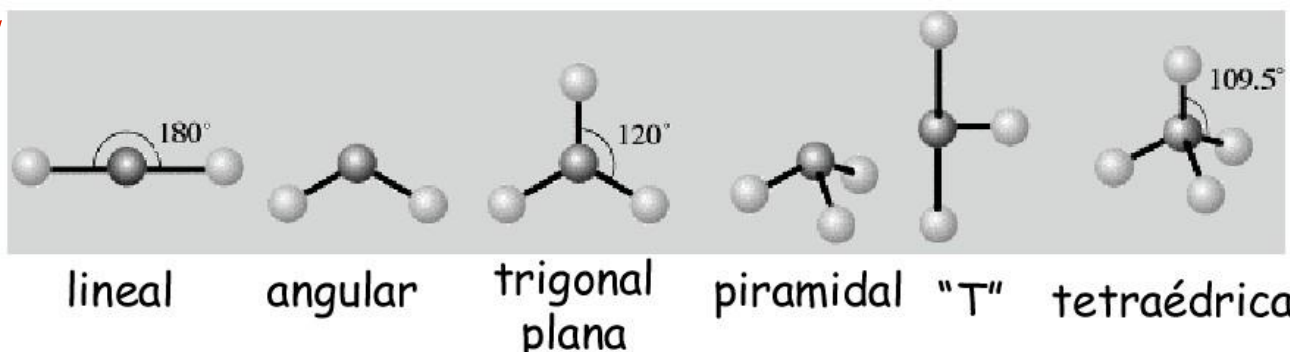
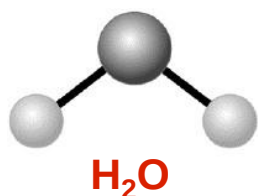
☐ **Los halógenos poseen el número de oxidación -1 .**

TEORÍA RPECV:

Teoría de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia

- Permite deducir a partir de la estructura de Lewis de una molécula la geometría espacial que adopta
- Se aplica principalmente a moléculas con un átomo central y varios periféricos

Geometrías principales en moléculas poliatómicas



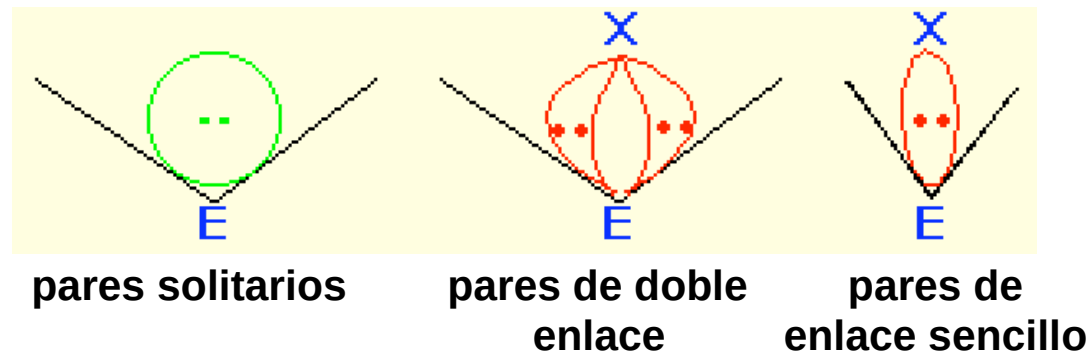
Autores :Blog Educativo San Pablo



TEORÍA RPECV:

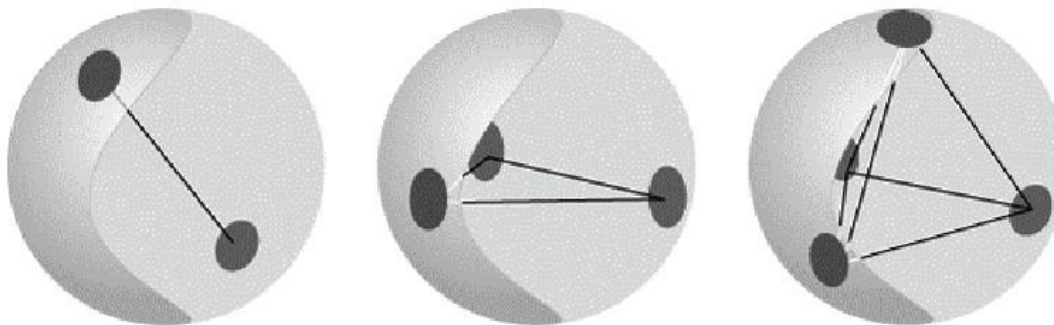
□ Sidgwick y Powell - Gillespie y Nyholm

□ **Índice de Coordinación Electrónico (ICE):**
número de direcciones donde se acumula la densidad electrónica



La hipótesis principal del modelo RPECV

Las regiones de alta concentración de electrones (enlaces y pares libres) se repelen entre sí



Los enlaces y los pares se sitúan de forma que estén lo más alejados posible entre sí

TEORÍA RPECV: Reglas_

a) Los pares de electrones (compartidos y no compartidos) tienden a situarse en aquellas posiciones que minimicen las repulsiones entre ellos.

Las geometrías ideales son:

Nº de pares de electrones

Geometría

2

Lineal (AB_2)

3

Trigonal (AB_3 o AB_2E)

4

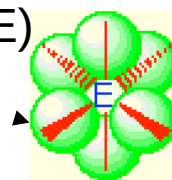
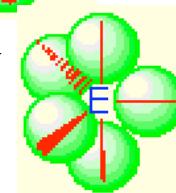
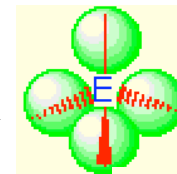
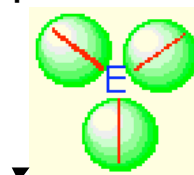
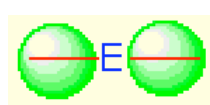
Tetraédrica (AB_4 o AB_3E)

5

Bipirámide trigonal (AB_5 o AB_4E)

6

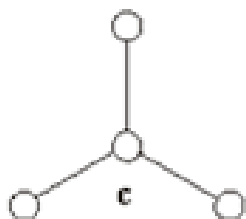
Octaédrica (AB_6 o AB_5E)



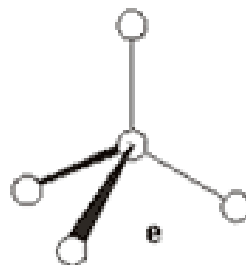
lineal



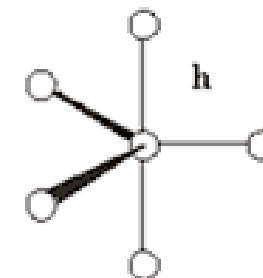
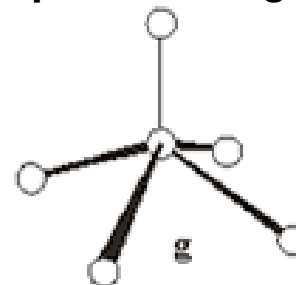
angular



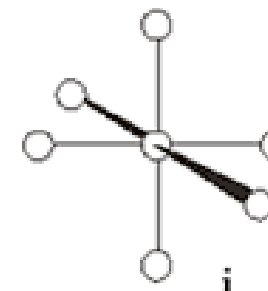
plana trigonal



pirámide trigonal



tetraédrica





**planocua
drada**

**bipirámide
trigonal**

octaédrica

**pirámide
cuadrada**

TEORÍA RPECV: Reglas_

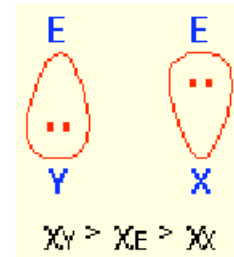
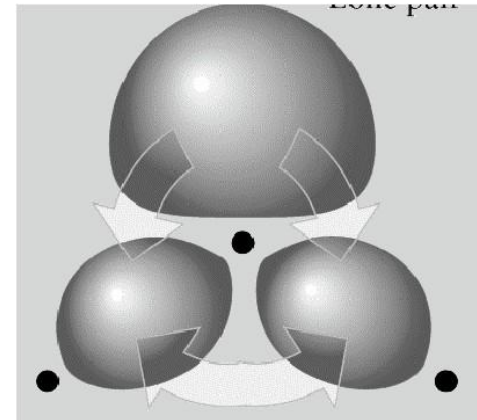
b) Las repulsiones decrecen en importancia en el orden:

$$\text{PNC-PNC} > \text{PNC-PE} > \text{PE-PE}$$

siendo PNC = Par no compartido y PE = par de enlace.

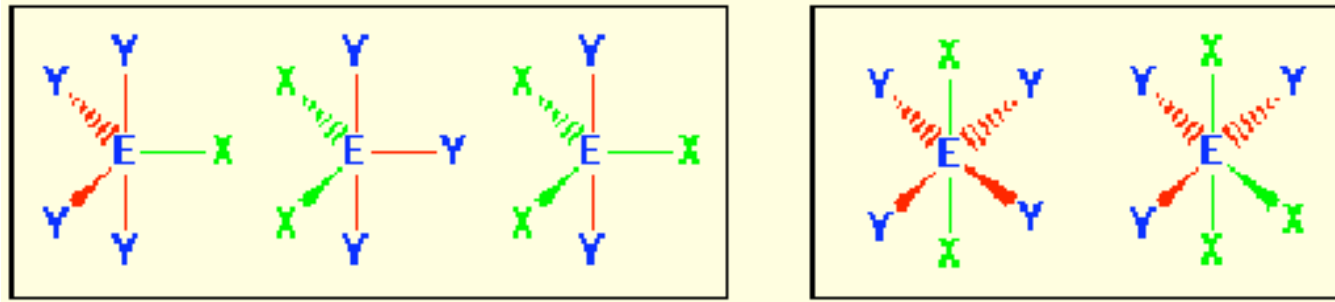
c) Los dobles enlaces ocupan más espacio que los enlaces simples.

d) Los pares de enlace de elementos electronegativos ocupan menos espacio que los de elementos electropositivos.



Los pares solitarios, los enlaces múltiples y los átomos menos electronegativos tienden a situarse alejados entre si y respecto de los otros pares de enlace

Autores :Blog Educativo San Pablo



TEORÍA RPECV:

Uso de la teoría RPECV

ESCRIBIR LA ESTRUCTURA DE LEWIS DE LA MOLÉCULA



DETERMINAR CUANTOS PARES DE ELECTRONES ENLAZANTES Y CUANTOS PARES SOLITARIOS EXISTEN ALREDEDOR DEL ÁTOMO CENTRAL Y CUANTOS EN TOTAL



ESTABLECER LA GEOMETRÍA BÁSICA DE LOS PARES DE ELECTRONES ALREDEDOR DEL ÁTOMO CENTRAL

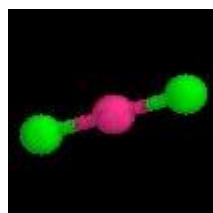
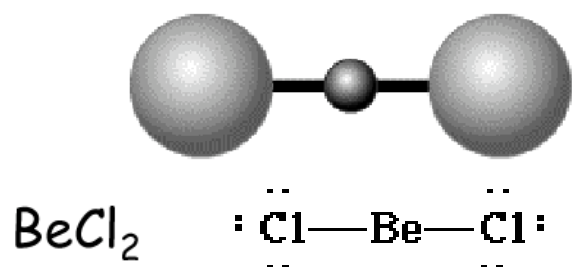


APLICAR LA PRELACIÓN DE FUERZAS DE REPULSIÓN PARA PROPONER LA ESTRUCTURA FINAL DE LA MOLÉCULA

TEORÍA RPECV: Moléculas sin pares libres en el átomo central

AX_n

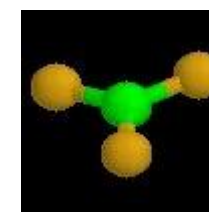
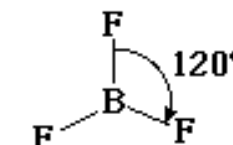
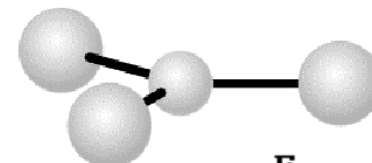
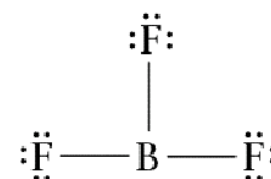
$AX_2 \rightarrow$ lineal



2 pares electrónicos

$AX_3 \rightarrow$ plana trigonal

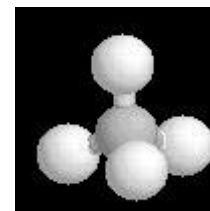
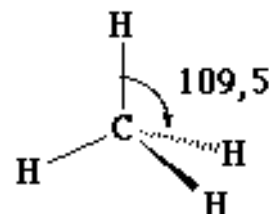
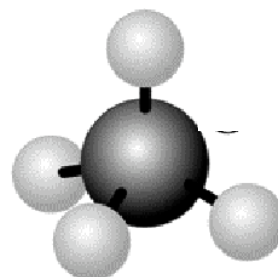
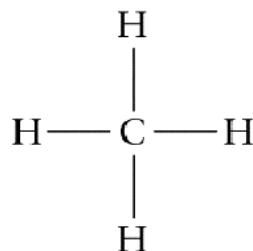
BF_3



3 pares electrónicos

$AX_4 \rightarrow$
tetraédrica

CH_4





Autores :Blog Educativo San Pablo

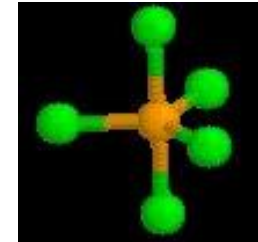
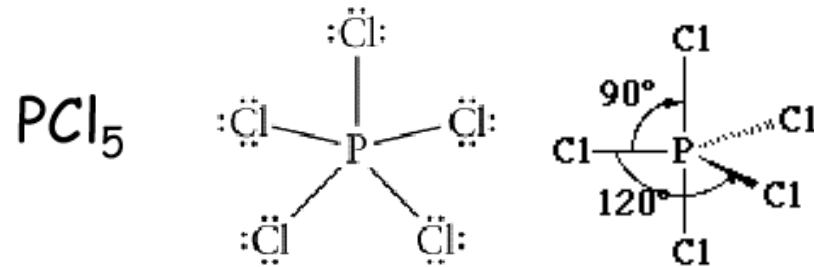
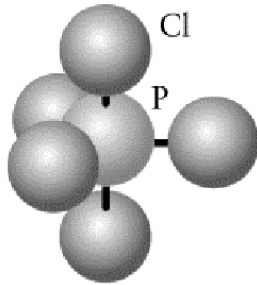
4 pares electrónicos

TEORÍA RPECV:

Moléculas sin pares libres en el átomo central

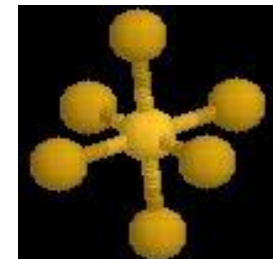
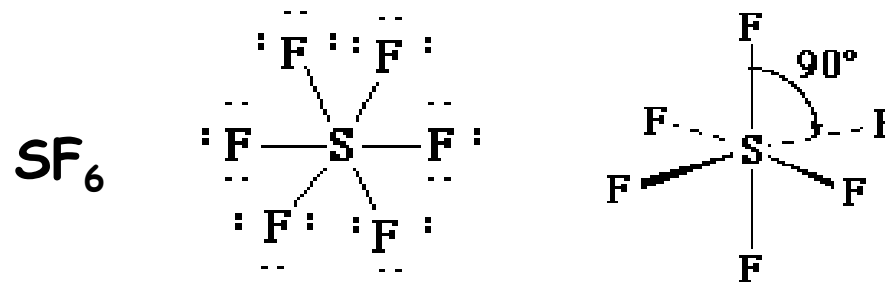
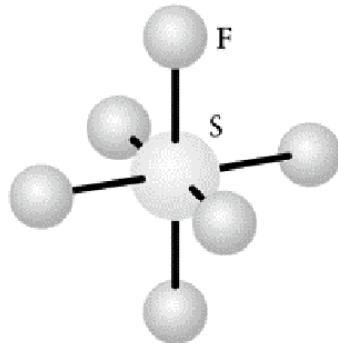
AX_n

$AX_5 \rightarrow$ bipirámide trigonal



5 pares electrónicos

$AX_6 \rightarrow$ octaédrica



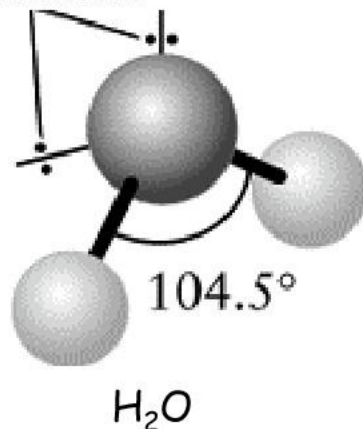
6 pares electrónicos

TEORÍA RPECV:

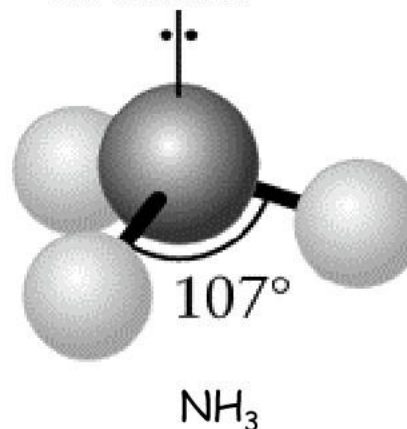
Moléculas con pares libres en el átomo central

Si una molécula tiene pares libres en el átomo central, éstos modifican la forma de la molécula debido a la repulsión

Pares solitarios

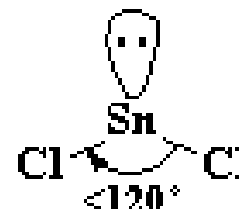


Par solitario



Tres pares electrónicos (Geometría basada en un triángulo)

AX_2E □ angular



2 pares de enlace



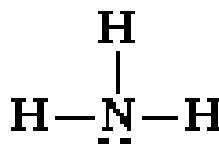
1 par solitario

TEORÍA RPECV:

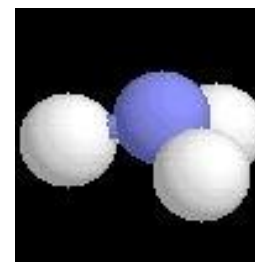
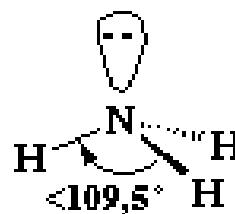
Moléculas con pares libres en el átomo central

Cuatro pares electrónicos (Geometría basada en un tetraedro)

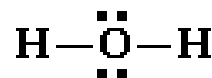
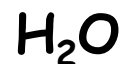
AX_3E □ pirámide trigonal



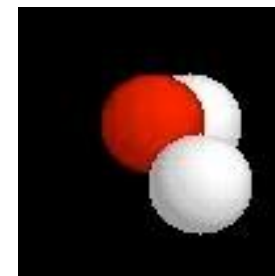
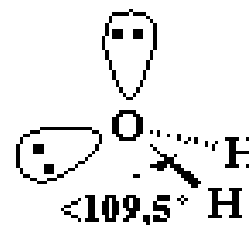
3 pares de enlace
1 par solitario



AX_2E_2 □ pirámide trigonal



2 pares de enlace
2 pares solitarios

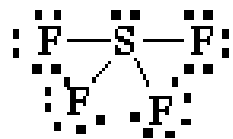


TEORÍA RPECV:

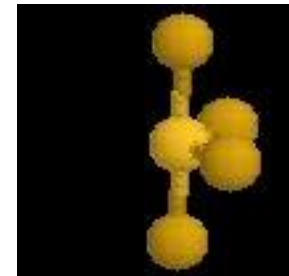
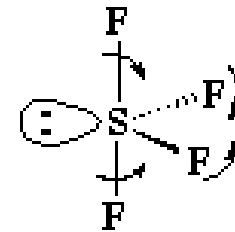
Moléculas con pares libres en el átomo central

Cinco pares electrónicos (Geometría basada en una bipirámide trigonal)

AX_4E □ tetraedro deformado o balancín

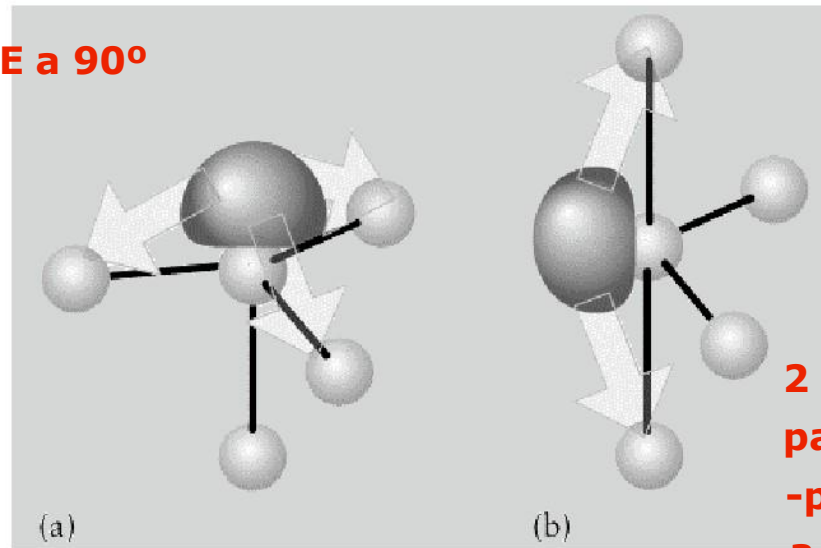


4 pares de enlace
1 par solitario



Moléculas AX_4E

**3 interacciones PNC-PE a 90°
y 1 PNC-PE a 180°**



Menos favorable

Más favorable

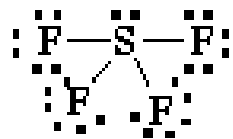
**2 interacciones de tipo
par no compartido(PNC)-
par de enlace(PE)
a 90° y otras dos a 120°**

TEORÍA RPECV:

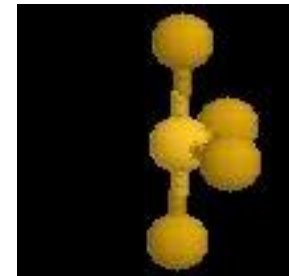
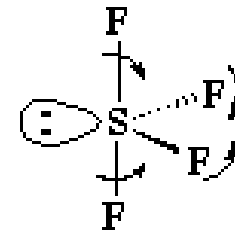
Moléculas con pares libres en el átomo central

Cinco pares electrónicos (Geometría basada en una bipirámide trigonal)

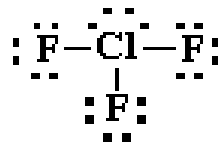
AX_4E □ tetraedro deformado o balancín



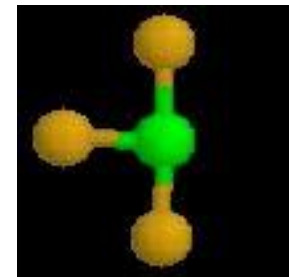
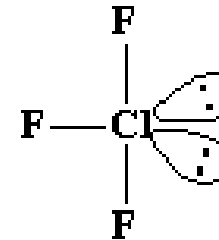
4 pares de enlace
1 par solitario



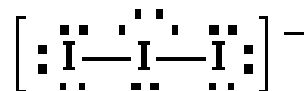
AX_3E_2 □ forma de T



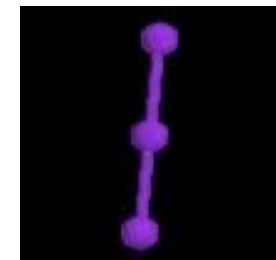
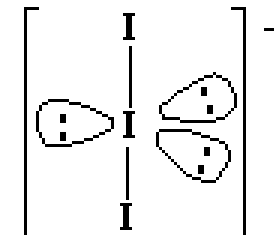
3 pares de enlace
2 pares solitarios



AX_3E_2 □ lineal



2 pares de enlace
3 pares solitarios

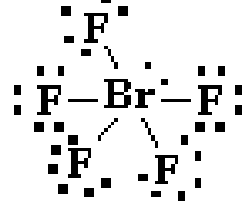


TEORÍA RPECV:

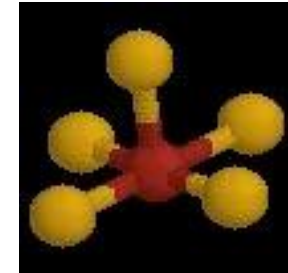
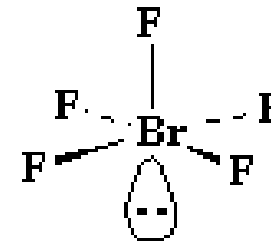
Moléculas con pares libres en el átomo central

Seis pares electrónicos (Geometría basada en un octaedro)

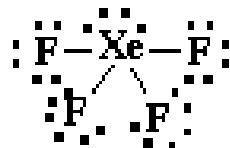
AX_5E □ pirámide cuadrada



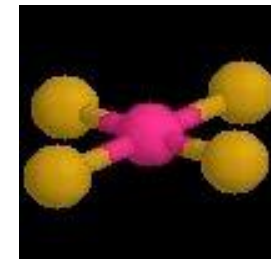
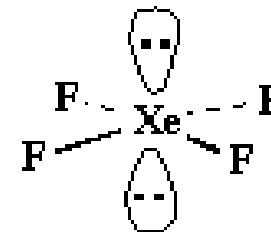
5 pares de enlace
1 par solitario



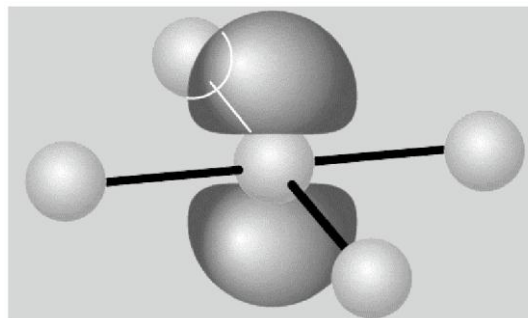
AX_4E_2 □ plano-cuadrada



4 pares de enlace
2 pares solitarios



AX_4E_2



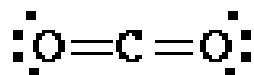
TEORÍA RPECV:

Moléculas con enlaces múltiples

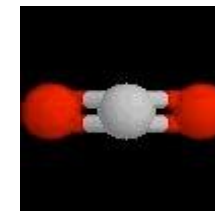
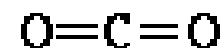
Al contar los pares electrónicos, un enlace múltiple se cuenta como uno sencillo

$AX_2 \square$ lineal

CO_2

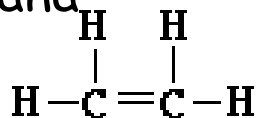


2 enlaces
0 pares solitarios

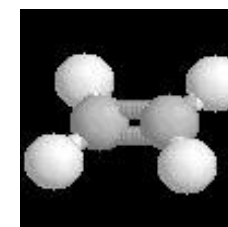
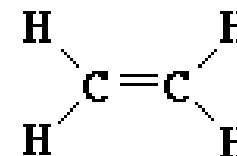


$A_2X_4 \square$ triangular plana

C_2H_4

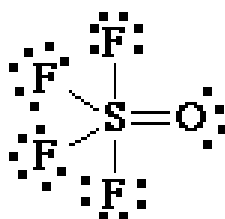


3 enlaces
(cada carbono)
0 pares solitarios

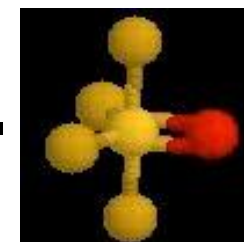
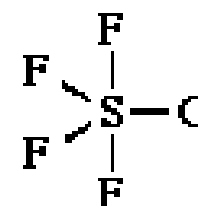


$AYX_4 \square$ bipirámide trigonal

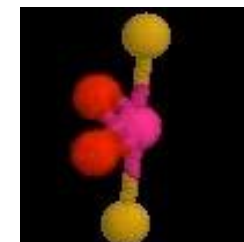
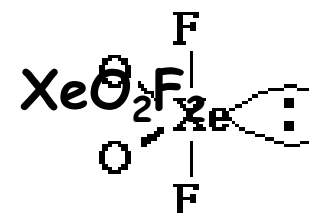
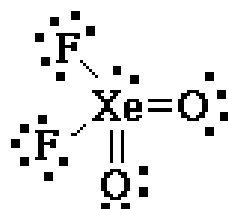
SOF_4



5 enlaces
0 pares solitarios



$AY_2X_2E \square$ balancín





Autores :Blog Educativo San Pablo

io

4

e
n
l
a
c
e
s

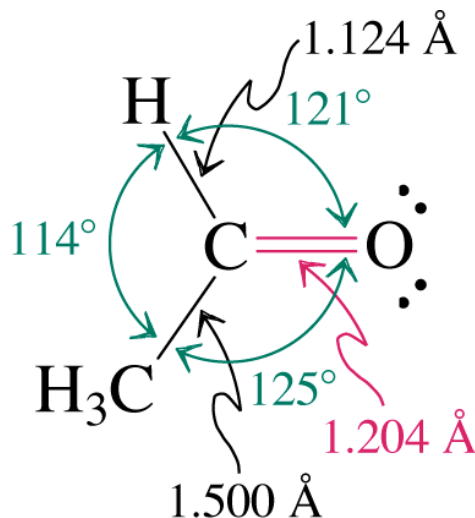
1

p
a
r

s
o
l
i
t
a
r

Moléculas con enlaces múltiples

Los electrones de los enlaces múltiples ejercen una fuerza de repulsión mayor que los sencillos



El doble enlace actúa de forma parecida a un par de electrones no-enlazante, reduce el ángulo de enlace