

UNIONES QUÍMICAS

1. INTRODUCCIÓN

La existencia de especies poliatómicas estables, implica que los átomos interactúan entre sí para formar compuestos de menor energía que la de los átomos de los elementos separados. Cuando esta disminución de energía es mayor que 41,84 kJ/mol, decimos que existen enlaces químicos, ya que este tipo de energías de estabilización producen especies que poseen propiedades químicas características.

Para entender las propiedades químicas y físicas de los compuestos es necesario comprender el enlace químico.

Las fuerzas de atracción que mantienen unidos a los átomos en los compuestos se llaman enlaces químicos.

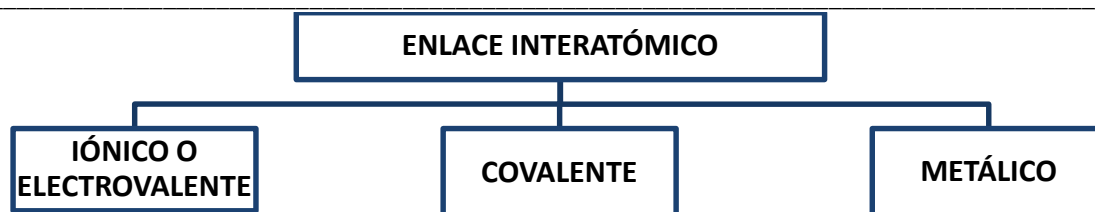
- ✓ Los enlaces entre átomos ocurren debido a la tendencia de todos los sistemas materiales a alcanzar el estado de menor energía, es decir, adquirir estabilidad.
- ✓ Al unirse un par de átomos se libera una cierta cantidad de energía llamada **energía de enlace**, esa misma cantidad de energía debe ser aportada para romper la unión, llamándose en este caso, energía de disociación de enlace.
- ✓ Los átomos unidos por un enlace químico se encuentran vibrando uno frente al otro, llamándose **longitud de enlace** a la distancia que hay entre los núcleos.
- ✓ Los responsables del enlace químico son los electrones de valencia (electrones del último nivel de energía).

Los átomos se encuentran en su punto de **máxima estabilidad (menor energía)**, cuando (generalmente) poseen ocho electrones en el nivel de valencia, es decir la misma configuración electrónica del gas noble más cercano en la tabla periódica. A esta idea se la conoce como:

REGLA DEL OCTETO: cuando los elementos representativos participan en un enlace químico, tienden a ganar o perder electrones hasta quedarse con ocho electrones en su nivel de valencia. Pero esta regla tiene excepciones, por ejemplo: cuando el H interviene en un enlace no se rodea de ocho electrones, sino de dos; el Be de cuatro electrones; el Al y B de seis electrones.

2. ENLACES ENTRE ÁTOMOS

Los diversos tipos de enlaces interatómicos (átomo-átomo) se pueden resumir en el siguiente cuadro:



2.1. ENLACE IÓNICO: Un enlace iónico se produce por transferencia de electrones. Esta transferencia se produce desde el átomo del elemento menos electronegativo hacia el átomo del elemento más electronegativo o desde el átomo del elemento de más baja energía de ionización (E_i), hacia el de alta afinidad electrónica (A_e). Ejemplo: cloruro de sodio (NaCl).

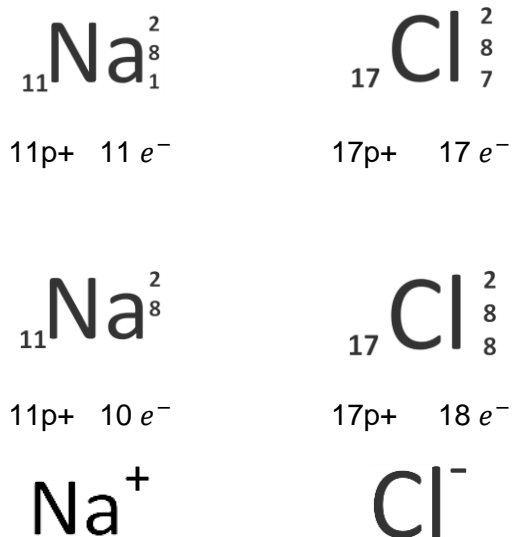
✓ No hay enlace 100% iónico, sino que todo enlace tiene un dado porcentaje de carácter iónico y covalente, predominando uno de ellos.

$A_e \rightarrow$ energía desprendida al incorporar un electrón

$E_i \rightarrow$ energía absorbida para eliminar un electrón

✓ El átomo que pierde electrones se convierte en un ión positivo (**cación**), en tanto que el átomo que gana los electrones se convierte en un ión negativo (**anión**).

Electronegatividad: es la tendencia relativa que tienen los átomos en una unión química de atraer los electrones con mayor o menor intensidad. Está tabulada y se la conoce como electronegatividad de Pauling.



En esta transferencia de electrones, cada átomo adquiere la configuración electrónica de un Gas Noble, solamente si los átomos de la unión son representativos (es decir, cuando se unen átomos de elementos

representativos), por ejemplo el sodio pierde un electrón y adquiere la configuración electrónica del gas Neón (Ne) y el cloro gana un electrón y adquiere la configuración del gas Argón (Ar).

RECORDAR: El Na pierde su electrón, pero sigue siendo sodio, porque lo que identifica al átomo son los protones, los cuales mantienen su número atómico (Z).

C.E. Na : $[Ne] 3s^1$ Configuración electrónica en el estado fundamental

Luego pierde un electrón y adquiere la configuración electrónica del gas noble más cercano, en este caso el neón.

C.E. Na⁺: $[Ne]$ Configuración electrónica del catión sodio.

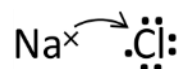
El electrón que perdió el sodio lo recibe el átomo de cloro, el cuál adquiere estabilidad ya que se asemeja al gas noble argón.

C.E. Cl: $[Ne] 3s^2 3p^5$ Configuración electrónica en el estado fundamental

Luego gana un electrón y adquiere la configuración electrónica del gas noble más cercano (argón)

C.E. Cl⁻: $[Ne] 3s^2 3p^6$ Configuración electrónica del anión cloruro.

Esto se puede representar mediante la siguiente estructura de Lewis:



RECORDAR: las estructuras de Lewis permiten realizar una contabilidad de electrones y son de utilidad como primera aproximación para sugerir los esquemas de enlace. En ellas se muestran los electrones de valencia, el número y tipos de enlace, y el orden en que los átomos se encuentran conectados. Se elige un esqueleto razonable (simétrico) para la molécula o ión poliatómico y un átomo central.

RECORDAR: un compuesto iónico puede presentar solamente enlace iónico (homodésmico) como el NaCl (cloruro de sodio); o puede presentar enlace iónico y covalente (heterodésmico), siendo de igual forma un enlace iónico como por ejemplo el NaNO₃ (nitrato de sodio).

2.2. ENLACE COVALENTE

Surge cuando dos átomos comparten uno o más pares de electrones.

En este caso, la diferencia de electronegatividad no es lo suficientemente grande para que se efectúe una transferencia de electrones. Estos enlaces pueden ser *simples* cuando comparten un par de electrones ej.: H₂, *dobles* cuando comparten dos pares de electrones ej: O₂ o *triples* cuando comparten tres pares de electrones ej: N₂.

✓ Un ejemplo de **enlace covalente simple** se produce en la unión de dos átomos de hidrógeno para formar la molécula diatómica H_2 , el par compartido representa el enlace covalente simple.



La configuración electrónica del hidrógeno es $1s^1$ y el orbital donde existe la mayor probabilidad de encontrar su único electrón, puede representarse como una esfera alrededor del núcleo.

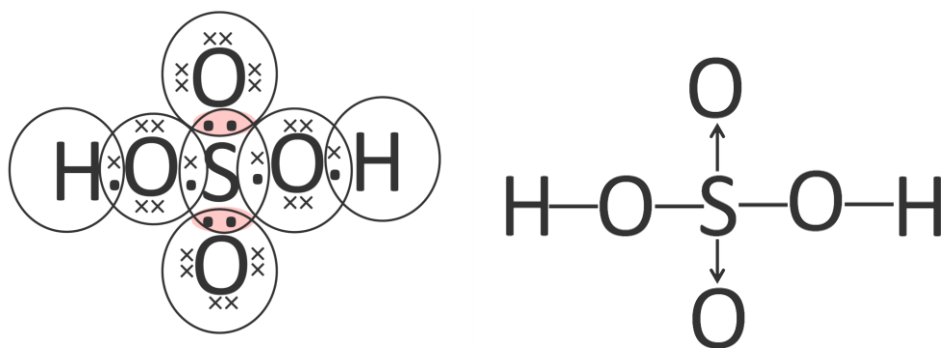
✓ El oxígeno se encuentra en el grupo 16, por lo tanto tiene seis electrones de valencia que se distribuyen de a pares formando un **enlace covalente doble** (O_2) representado mediante la estructura de Lewis:



✓ El nitrógeno se encuentra en el grupo 15, por lo tanto tiene cinco electrones de valencia que se distribuyen formando un **enlace covalente triple** (N_2) representado mediante la estructura de Lewis:



Otro tipo de enlace covalente es la **unión covalente dativa o coordinada**, que se produce cuando uno de los átomos que forma la unión aporta el par de electrones que se va a *compartir*. Ejemplo: El ácido sulfúrico (H_2SO_4) tiene cuatro enlaces covalentes simples y dos enlaces covalentes dativos indicados en la región sombreada de la estructura de Lewis y en la fórmula desarrollada, con flechas cuyo sentido se orienta desde el átomo que “aporta” el par de electrones hacia el átomo que los “recibe”.



2.3. ENLACE METÁLICO

Este tipo de enlace es claramente distinto de los enlaces iónico y covalente. Se establece entre átomos metálicos y podemos describirlo como una red de iones positivos mientras que los electrones de valencia, débilmente sujetos, se mueven con libertad por todo el cristal. El movimiento de estos electrones por todo el cristal hace que las sustancias metálicas sean buenas conductoras del calor y de la electricidad.

3. CRITERIOS PARA IDENTIFICAR LOS DISTINTOS TIPOS DE ENLACE:

✓ Diferencia de electronegatividad ΔEn

Cuando ΔEn es mayor que 1,7 se dice que predomina el enlace iónico.

Cuando ΔEn es menor que 1,7 se dice que predomina el enlace covalente.

Cuando ΔEn es igual a 1,7 se dice que se tiene un 50% de enlace iónico y un 50% de enlace covalente.

Cuando ΔEn es igual a cero se dice que es 100 %covalente.

Por ejemplo el NaCl es un compuesto iónico.

$$En_{Cl} = 3,0 \qquad En_{Na} = 0,9$$

$$\Delta En = En_{Cl} - En_{Na} = 3,0 - 0,9 = 2,1$$

Se busca en tabla $\Delta En = 2,1 \Rightarrow 67\%$ de carácter iónico y 33% de carácter covalente.

\Rightarrow Predomina el enlace iónico en el cloruro de sodio.

✓ Propiedades de los compuestos iónicos y covalentes, las cuales difieren entre sí.

Por ejemplo el ácido fluorhídrico HF es un compuesto iónico de acuerdo al criterio de la diferencia de electronegatividad:

$$En_H = 2,1 \qquad En_F = 4,0$$

$$\Delta En = En_F - En_H = 4,0 - 2,1 = 1,9$$

$\Rightarrow 59\%$ de carácter iónico y 41% de carácter covalente

Pero las propiedades del HF son las siguientes: es líquido en condiciones estándar, no conduce la corriente eléctrica, tiene bajo punto de ebullición, por lo que el compuesto por el segundo criterio es **covalente**.

Si se conocen las propiedades de un compuesto, predominan éstas para saber si el compuesto es iónico o covalente.

4. PROPIEDADES DE COMPUESTOS IÓNICOS Y COVALENTES

Compuestos Iónicos	Compuestos Covalentes
--------------------	-----------------------

<ul style="list-style-type: none"> ✓ Sólidos en condiciones estándar ✓ Poseen alto punto de fusión (por lo general, >400°C). ✓ Poseen alto punto de ebullición ✓ Conducen la corriente eléctrica en solución y en estado fundido, pero no en estado sólido. ✓ Muchos son solubles en solventes polares, como el agua. ✓ La mayoría es poco soluble en solventes no polares. 	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos en condiciones estándar ✓ Poseen bajo punto de fusión (<300°C) ✓ Poseen bajo punto de ebullición ✓ En general no conducen la corriente en estado fundido, ni en solución acuosa ✓ Muchos son poco solubles en solventes polares ✓ La mayoría son solubles en solventes no polares
--	---

5. POLARIDAD DE LOS ENLACES COVALENTES

Los enlaces covalentes pueden ser polares o no polares. Para estudiar la polaridad de una molécula hay que tener en cuenta:

- i. La diferencia de electronegatividad
- ii. La simetría de la molécula

En un enlace no polar como es el caso del H₂, el par de electrones se comparte por igual entre los dos núcleos de hidrógeno (ambos tienen la misma electronegatividad). En este caso el par compartido se encuentra equidistante a ambos núcleos y la densidad electrónica es simétrica.

Cuando se unen átomos iguales la molécula es no polar o apolar.

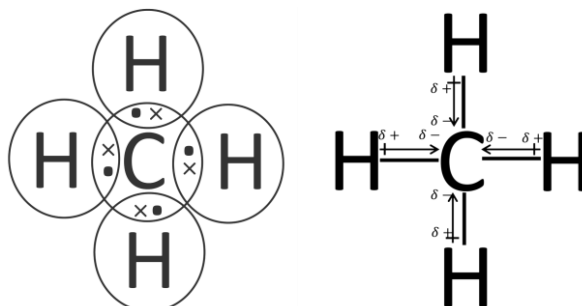
Considerando moléculas diatómicas formadas por distintas clases de átomos, por ejemplo el ácido clorhídrico (HCl), el cloro es más electronegativo que el hidrógeno, por lo tanto atrae al par electrónico compartido con mucho más fuerza que el hidrógeno, por lo tanto se produce un desplazamiento del par compartido hacia el cloro, generando una densidad de carga negativa sobre él y una densidad de carga positiva sobre el hidrógeno, formando un dipolo de enlace, por lo tanto es un enlace polar.

Cuando se unen átomos distintos (de diferente electronegatividad) la molécula es polar.

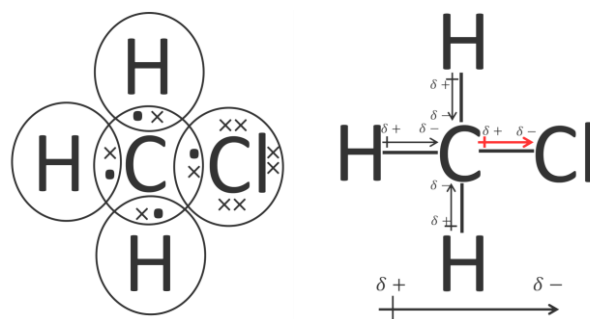


En moléculas poliatómicas se tiene que tener en cuenta los dipolos de enlace y la simetría. Ejemplo: en el metano (CH₄) el carbono es más electronegativo que el hidrógeno, por lo tanto el carbono genera una

densidad de carga negativa sobre él y una densidad de carga positiva sobre el hidrógeno, formando cuatro dipolos de enlace, por lo tanto la molécula debería ser polar, pero se observa que esta molécula es simétrica, entonces los dipolos de enlace se cancelan, resultando entonces una **molécula no polar**.



Si se reemplaza un hidrógeno del metano por un átomo de cloro, se obtiene clorometano, la cual por no ser simétrica los dipolos de enlace no se anulan, por lo que se obtiene un vector resultante y por lo tanto la molécula es polar.



5.1. MOMENTO DIPOLAR

Se indica la polaridad de una molécula por medio del momento dipolar μ , el cual mide la separación de carga en el interior de la molécula.

Es el producto de la distancia “l” que separa las cargas de igual magnitud y signo opuesto y la magnitud de la carga “q”.

$$\mu = l \times q$$

Para que una molécula sea polar es preciso que cumpla las siguientes condiciones:

- Debe existir, por lo menos, un dipolo de enlace o un par de electrones no compartidos.
- Cuando hay dos o más dipolos de enlace, los pares no compartidos deben estar ordenados de manera que los dipolos no se cancelen entre sí.

Una molécula polar tiene un momento dipolar distinto de cero ($\mu \neq 0$) y una molécula no polar tiene un momento dipolar igual a cero ($\mu = 0$).

6. TEORÍAS DEL ENLACE COVALENTE

6.1. TEORÍA DE LA REPULSIÓN ENTRE PARES DE ELECTRONES A NIVEL DE VALENCIA (T.R.P.E.N.V.)

Se considera que el enlace simple, doble, triple y un par no compartido de electrones constituyen una única región de alta densidad electrónica.

La teoría se basa en dos **supuestos**:

- Cada par de electrones del nivel de valencia de un átomo central es significativa.
- Las repulsiones entre los pares de electrones del nivel de valencia determinan las formas de las moléculas.

Se aplica sólo a moléculas covalentes y que sus **moléculas** estén **constituidas por tres o más átomos**.

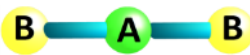
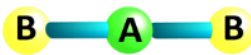
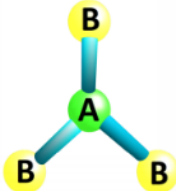
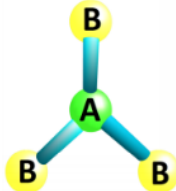
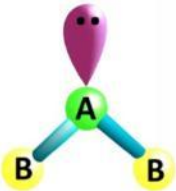

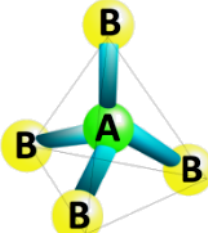
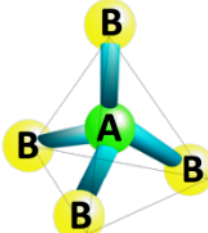
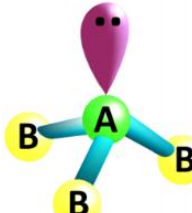



Los pares de electrones del nivel de valencia se encuentran ordenados en torno al átomo central de manera tal que minimizan las repulsiones entre ellos. El *ordenamiento de las regiones de alta densidad electrónica* se conoce como **geometría electrónica del átomo central**.

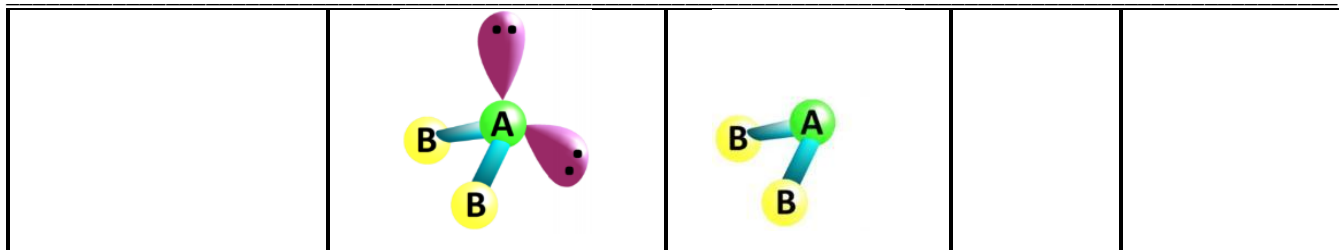
El *átomo central* es el átomo que se encuentra en menor proporción en la molécula o ión, está rodeado por uniones covalentes formadas por pares de electrones.

La **geometría molecular** es la distribución tridimensional de los *átomos* de una molécula. En general, los **ángulos de enlace** y las **longitudes de enlace** se determinan en forma experimental. Sin embargo hay un procedimiento sencillo a partir de la estructura de Lewis de una dada molécula que permite predecir su geometría con bastante éxito, si se conoce el número de “pares de electrones” que rodean el átomo central de la misma llamado **número estérico (n)**. El fundamento de este método es la suposición de que los pares de electrones se repelen entre sí, motivo por el cual los mismos tienden a disponerse tridimensionalmente lo más separado posible, logrando de esta forma la menor repulsión y la mayor estabilidad para la molécula.

Al considerar la repulsión de los pares electrónicos, los enlaces dobles, los enlaces triples y los pares solitarios deben considerarse como si fueran enlaces simples.

CONCLUSIÓN: *Esta teoría determina las geometrías electrónicas y moleculares, los ángulos de enlace y la polaridad de las moléculas. Se aplica solamente a moléculas con enlaces covalentes y constituidas por tres o más átomos.*

Nº Estérico	Geometría Electrónica	Geometría Molecular	Ángulo de Enlace	Polaridad
2 Ejemplos: CO ₂ , BeCl ₂ , CS ₂	<u>Lineal</u> 	<u>Lineal</u> 	180°	No Polar $u = 0$
3				
-Sin pares de electrones libres Ejemplos: BCl ₃ , SO ₃	<u>Trigonal Plana</u> 	<u>Trigonal Plana</u> 	120°	No Polar $u = 0$
-Con 1 par de electrones libres Ejemplo: SO ₂	<u>Trigonal Plana</u> 	<u>Trigonal angular</u> 	< 120°	Polar $u \neq 0$
4				
-Sin pares de electrones libres Ejemplos: CH ₄ , CCl ₄ , HCCl ₃ , H ₃ CCl	<u>Tetraédrica</u> 	<u>Tetraédrica</u> 	109,5°	Polar o No Polar $u \neq 0$ o $u = 0$
-1 par de electrones libres Ejemplos: NH ₃	<u>Tetraédrica</u> 	<u>Pirámide de base triangular</u> 	< 109,5°	Polar $u \neq 0$
-2 pares de electrones libres Ejemplos: H ₂ O	<u>Tetraédrica</u> 	<u>Angular</u> 	<< 109,5°	Polar $u \neq 0$



6.2. TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (T.E.V.):

Estudia los orbitales que forman parte de una unión química covalente por lo tanto esta teoría se puede aplicar a **cualquier molécula** con enlace **covalente sin limitar el número de átomos** de la molécula. En la unión se pueden utilizar **orbitales atómicos puros u orbitales híbridos**.

Orbitales Híbridos: son un conjunto de orbitales de la misma energía, que resultan de una mezcla de orbitales de un mismo átomo, siendo estos orbitales de distinta energía.

Hibridación: es la mezcla de orbitales atómicos, de un dado átomo, de distinta energía para dar un conjunto de orbitales de la misma energía.

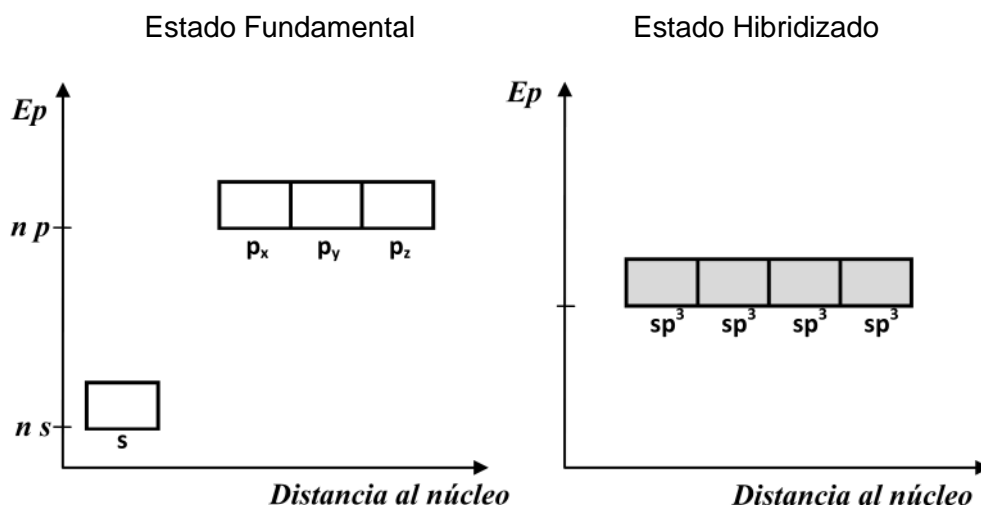
Hibridación de orbitales de elementos representativos: *siempre se tiene los orbitales s y p.*

- Si se mezclan un orbital s con tres orbitales p se obtiene **cuatro orbitales híbridos sp^3**

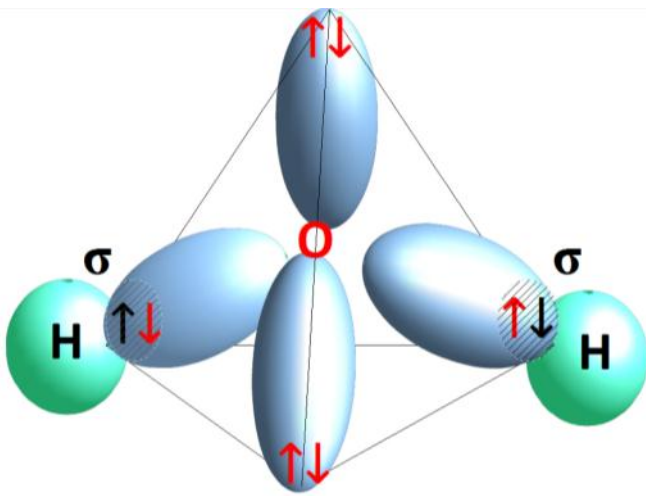
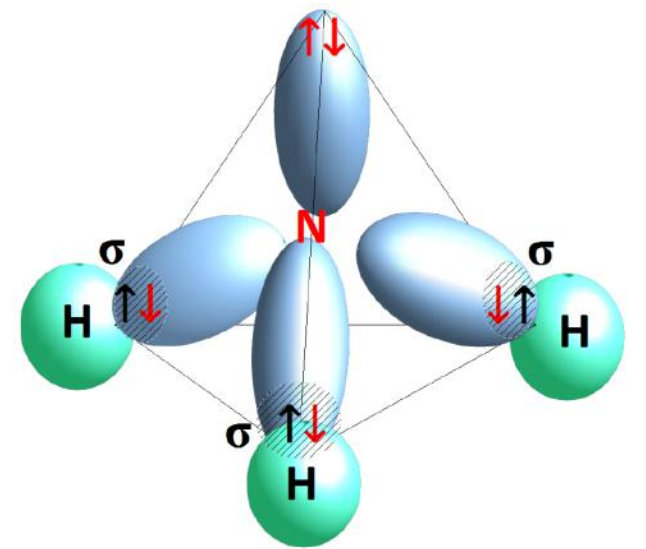
Se realiza la configuración electrónica externa del átomo central en este caso, en forma general

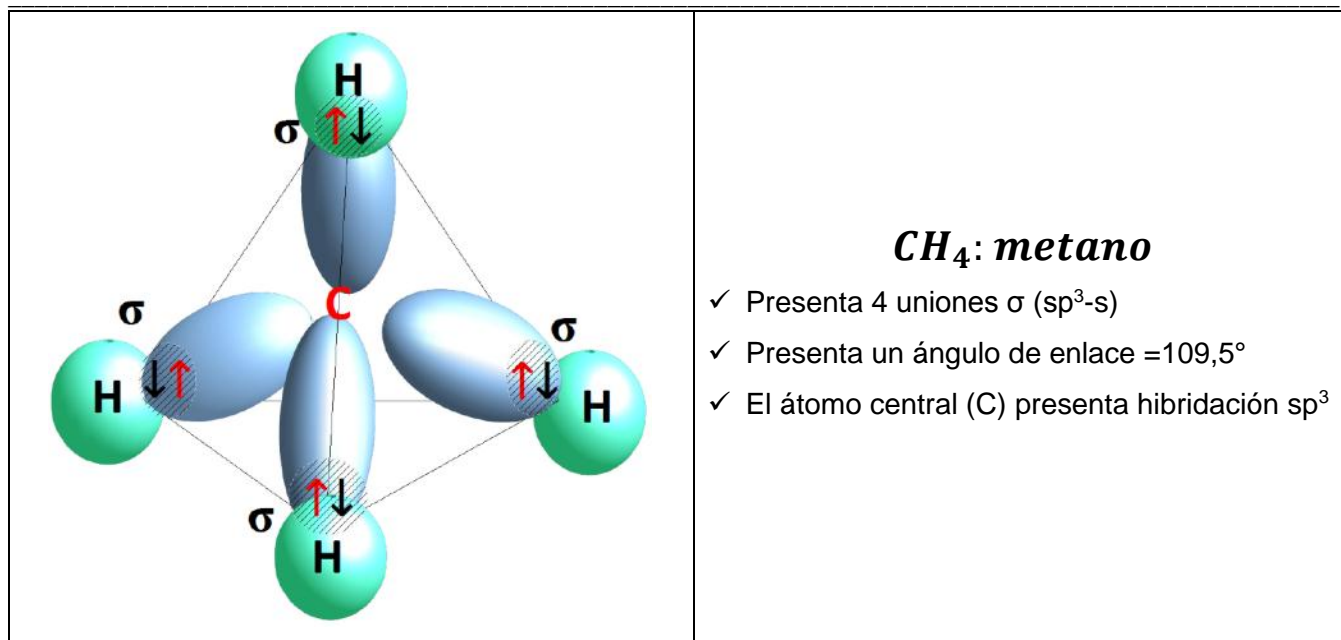
C.E.E.: [gas noble] $ns^2 np^{2...5}$

Diagrama de Energía:



Por ejemplo presentan hibridación sp^3 las siguientes moléculas:

	<p><i>H₂O: agua</i></p> <ul style="list-style-type: none">✓ Presenta 2 uniones σ (sp^3-s)✓ Presenta un ángulo de enlace $<109,5^\circ$✓ El átomo central (O) presenta hibridación sp^3
	<p><i>NH₃: amoníaco</i></p> <ul style="list-style-type: none">✓ Presenta 3 uniones σ (sp^3-s)✓ Presenta un ángulo de enlace $<109,5^\circ$✓ El átomo central (N) presenta hibridación sp^3

**EJERCICIO 1:**

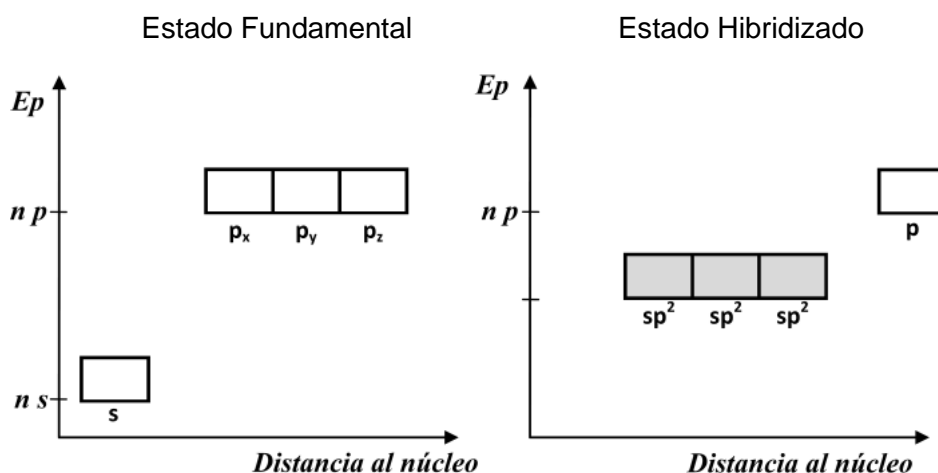
Realice los diagramas de energía para cada una de las moléculas citadas anteriormente.

- Si se mezclan un orbital s con dos orbitales p se obtiene **tres orbitales híbridos sp^2**

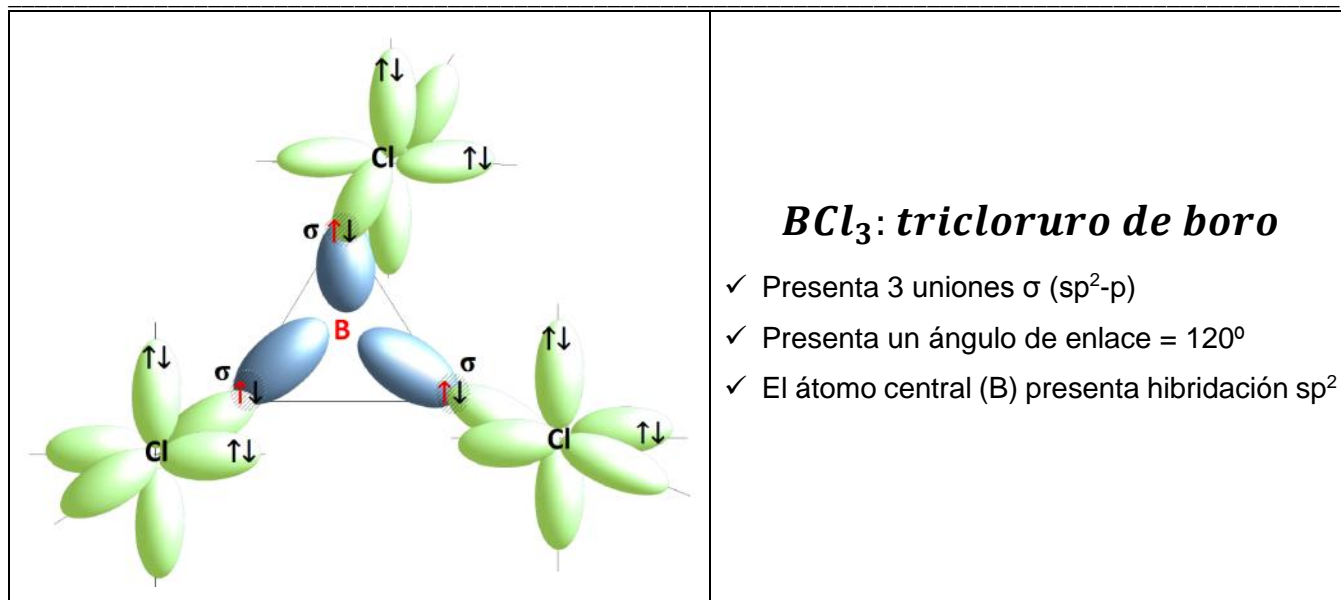
Se realiza la configuración electrónica externa del átomo central en este caso, en forma general

C.E.E. : [gas noble] $ns^2 np^{2...4}$

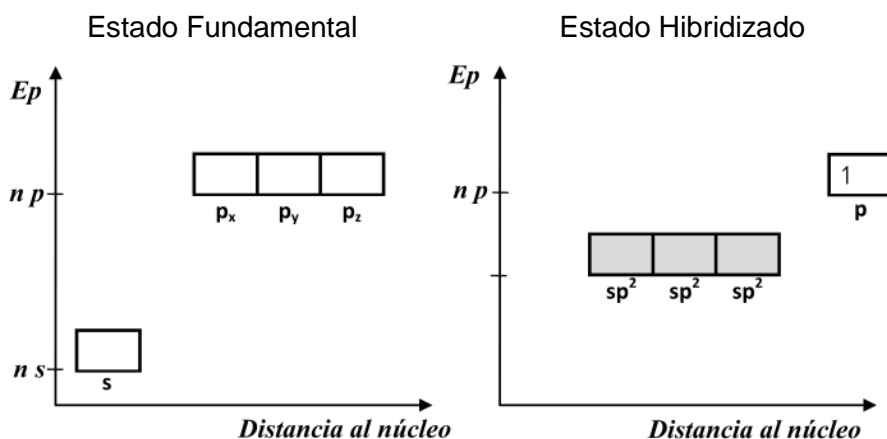
-Diagrama de Energía A:



Por ejemplo:



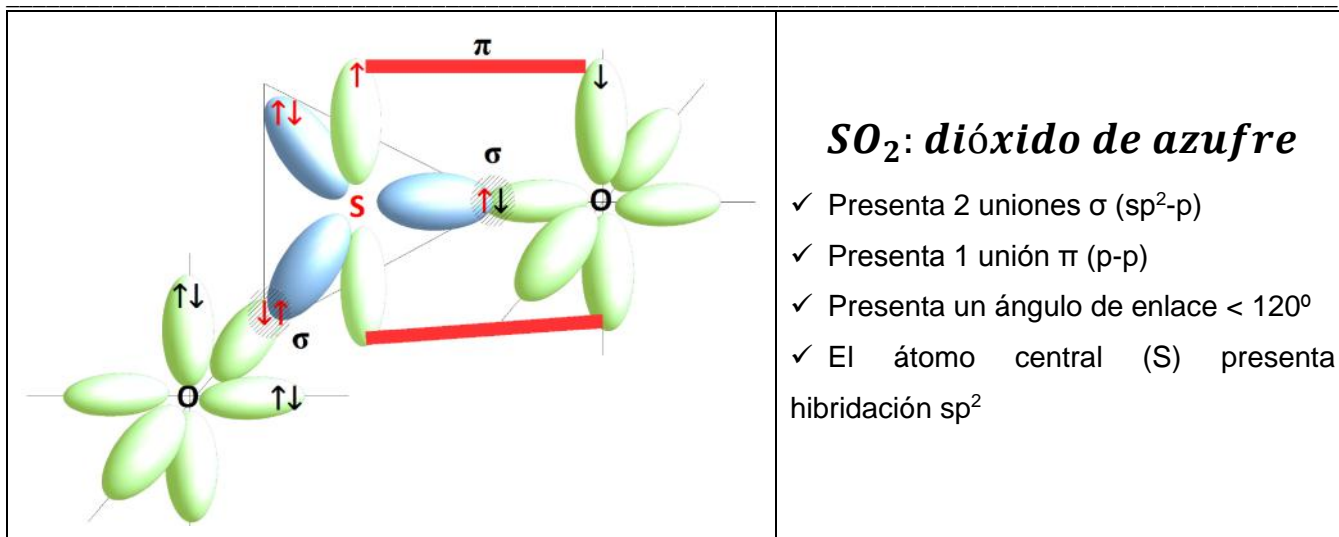
-Diagrama de Energía B:



Se observa que en el diagrama de energía A el orbital **p** puro sin hibridizar está vacío, lo que implica que el compuesto no presenta unión π y si presenta enlaces σ .

En el diagrama de energía B el orbital **p** puro sin hibridizar está ocupado por un electrón, lo que implica que el compuesto presenta una unión π y además presenta enlaces σ .

Por ejemplo:

**EJERCICIO 2:**

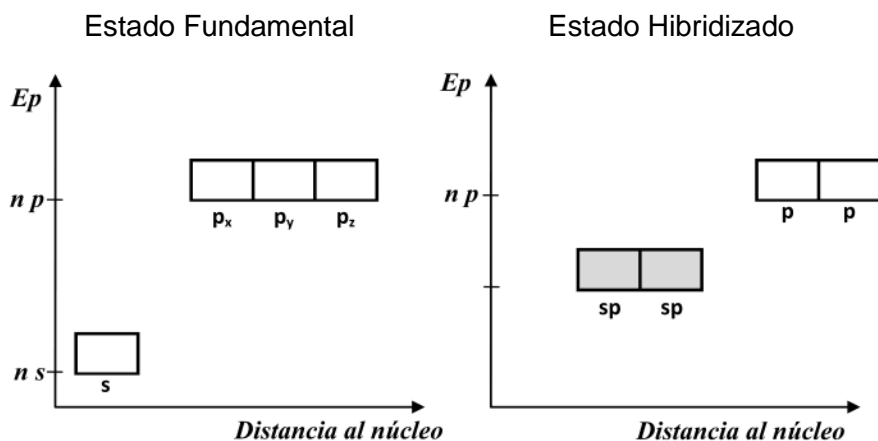
Realice los diagramas de energía para cada una de las moléculas citadas

- Si se mezclan un orbital s con un orbital p se obtiene **dos orbitales híbridos sp** .

Se realiza la configuración electrónica externa del átomo central en este caso, en forma general

C.E.E. : [gas noble] $ns^2 np^{1,2}$

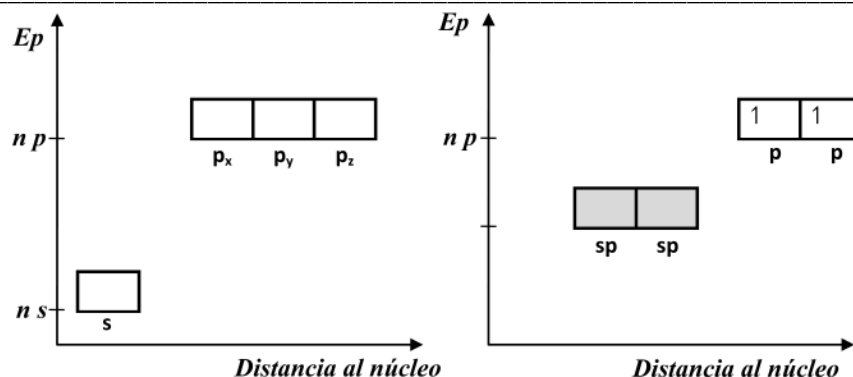
-Diagrama de Energía A:



Por ejemplo: $BeCl_2$

-Diagrama de Energía B:

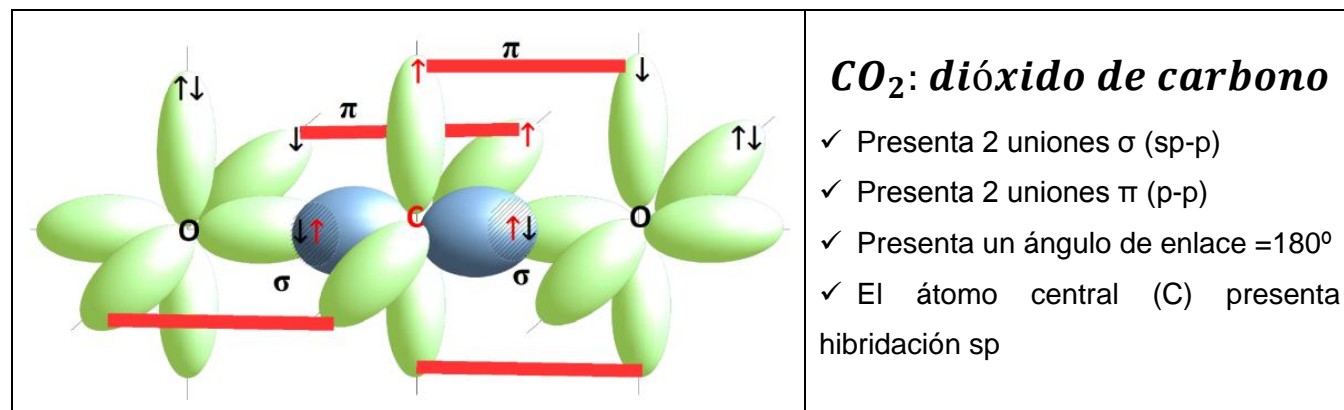
Estado Fundamental	Estado Hibridizado
--------------------	--------------------



Se observa que en el diagrama de energía A los orbitales p puros sin hibridizar están vacíos, lo que implica que el compuesto no presenta unión π y si presenta enlaces σ .

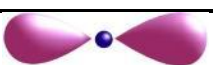

En el diagrama de energía B los orbitales p puros sin hibridizar están ocupados cada uno por un electrón, lo que implica que el compuesto presenta dos uniones π y además presenta enlaces σ .

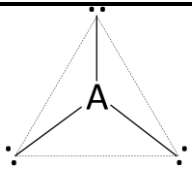
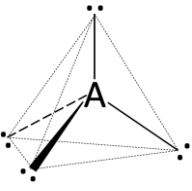

Por ejemplo:



EJERCICIO 3:

Realice los diagramas de energía para cada una de las moléculas citadas

Nº Estérico	Geometría Electrónica	Hibridación	Orientación del orbital hibridizado	Tipo de unión	Ejemplos
2	<u>Lineal</u> :—A—:	sp (180°)	 2 orbitales híbridos sp	2 uniones σ 2 uniones π	*BeCl ₂ CO ₂ , CS ₂
3	<u>Trigonal plana</u>	sp ² (120°)		3 uniones σ 1 union π	*SO ₃ *BCl ₃ SO ₂

			3 orbitales híbridos sp^2		
4	<p><u>Tetraédrica</u></p> 	sp^3 (109,5° y aproximaciones)	 <p>4 orbitales híbridos sp^3</p>	4 uniones σ No presenta unión π	CH_4 NH_3 H_2O CCl_4

* Presenta sólo uniones σ