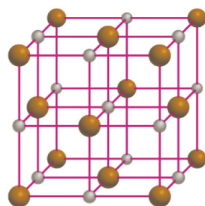
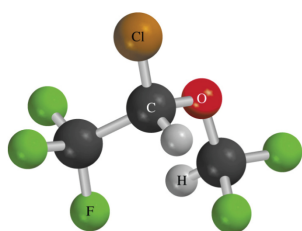
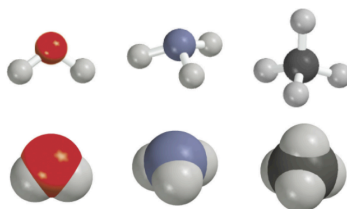


# TEMA 5

## EL ENLACE QUÍMICO. COVALENTE



M<sup>º</sup> PILAR RUIZ OJEDA  
BORJA MUÑOZ LEOZ



### Contenidos:

1. Introducción
2. El enlace covalente según Lewis
  - 1.1. Enlaces sencillos, dobles y triples
  - 1.2. Enlace covalente dativo o coordinado
  - 1.3. Resonancia
3. Limitaciones de las representaciones de Lewis
4. Teoría de Orbitales Moleculares
5. Teoría de Hibridaciones
  - 4.1. Hibridación  $sp$
  - 4.2. Hibridación  $sp^2$
  - 4.3. Hibridación  $sp^3$
6. Polaridad
7. Resumen

## Bibliografía

---

### Libros de Teoría y Problemas

- Chang R. Química. McGraw Hill. México, 2010 (Cap. 9 y 10).
- Petrucci R. H., Harwood W.S. Química General. Prentice Hall. Madrid, 2011 (Cap. 10 y 11).
- Reboiras M.D. Química. La Ciencia Básica. Thomson. Madrid, 2005 (Cap. 10 y 11).

### Libros de Problemas Resueltos

- Fernández M.R., Fidalgo J.A. 1000 Problemas de Química General. Everest. León, 1996.
- Reboiras M.D. Problemas Resueltos de Química. La Ciencia Básica. Thomson. Madrid, 2007.

## Webs de Interés

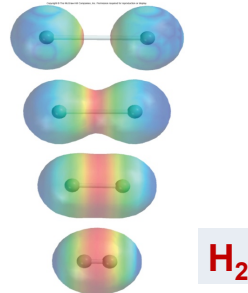
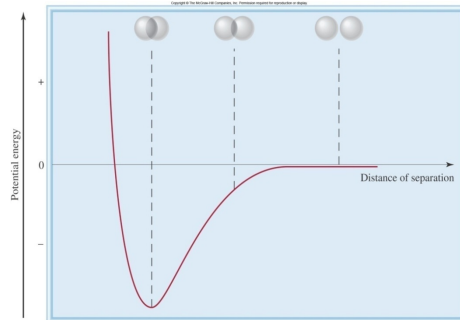
---

### Apuntes sobre Enlaces:

- D:\Documents and Settings\lapruojm\Mis documentos  
\FQ\TEMAS FQ\TEMA 4-ENLACES\ENLACE  
COVALENTE\ENLACES.mht

## 1. Introducción

### ¿Qué es un enlace covalente?



- El enlace covalente se establece como resultado de la compartición de un par de electrones.
- Se origina un sistema cuyo estado energético es inferior al de los átomos aislados.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

5

## 1. Introducción

### ¿Qué parámetros son esenciales en una molécula covalente?

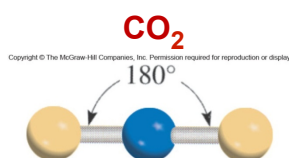
- Energías de Enlace:** Energía liberada (signo negativo) en la formación de un enlace.
- Geometría molecular:** Distribución de los núcleos de los átomos enlazados en el espacio.
  - **Longitud de enlace:** Distancia promedio entre los núcleos de dos átomos enlazados.
  - **Ángulo de enlace:** Ángulo interno entre enlaces adyacentes.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

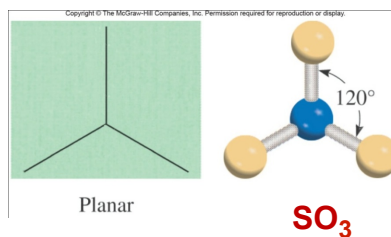
6

## 1. Introducción

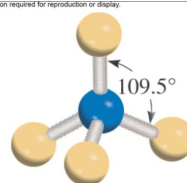
### Geometría de algunas moléculas



**Estereofórmulas**



**CH<sub>4</sub>**

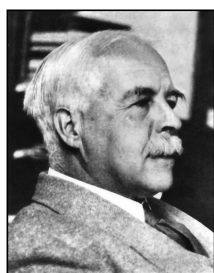


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

7

## 2. El Enlace Covalente según Lewis

**Gilbert Newton Lewis (1916)**



“Los átomos se combinan por compartición de los electrones de valencia (enlace covalente). El nivel de energía más externo de cada átomo tiene cuatro pares de electrones, con una configuración  $ns^2 np^6$ .”

- Este tipo de enlace se da entre los átomos de los elementos más electronegativos del sistema periódico, es decir, **entre no metales**.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

8

## 2. El Enlace Covalente según Lewis

**No Metales**

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

1 1A H	2 2A He																
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar										
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112	113	114	115	116	(117)	118

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Metals
Metalloids
Nonmetals

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

9

## 1. Introducción

- El comportamiento químico de muchas sustancias covalentes está relacionado, en última instancia, con su geometría y distribución electrónica.
- Por eso, es de gran interés poder predecir su geometría para anticipar su comportamiento químico y propiedades.
- Las teorías de enlace mecano-cuánticas son un instrumento adecuado para explicar la geometría de las moléculas covalentes y sus propiedades.
- Sin embargo, antes de plantearlas, vamos a abordar el enlace covalente mediante las representaciones de Lewis, que son más sencillas.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

10

## 2. El Enlace Covalente según Lewis

### Formas de Lewis de los Elementos Representativos

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

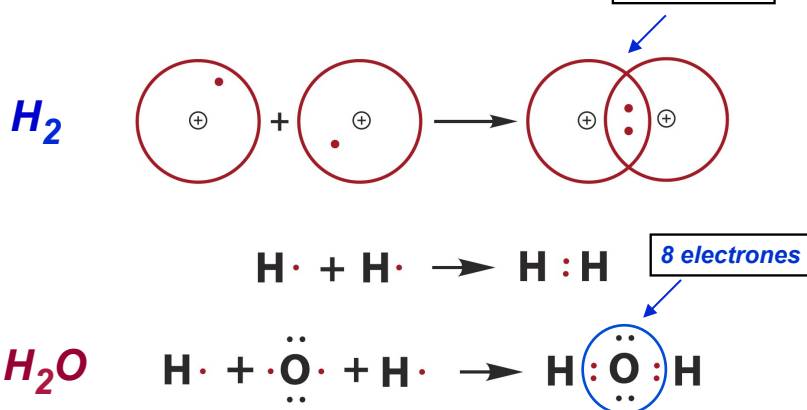
1 1A	2 2A													13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
•H	•Be•													•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
•Li	•Mg•	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B			•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
•K	•Ca•													•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
•Rb	•Sr•													•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
•Cs	•Ba•													•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn•
•Fr	•Ra•																		

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

11

## 1. El Enlace Covalente según Lewis

### El Enlace Covalente

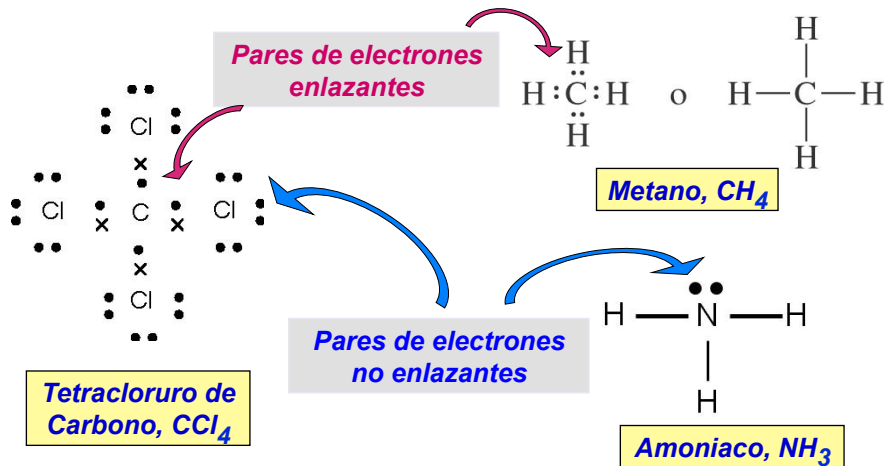


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

12

## 2.1. Enlaces Covalentes Sencillos y Múltiples

### Representaciones de Lewis: Enlaces Sencillos

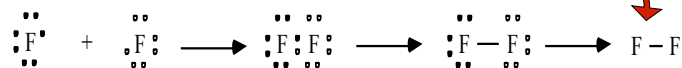


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

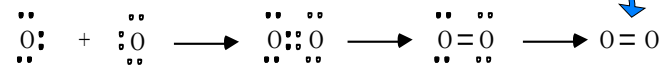
13

## 1.1. Enlaces Covalentes Sencillos y Múltiples

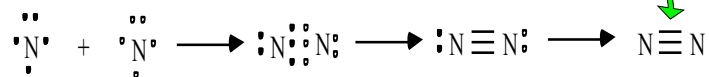
- Molécula de **Flúor** (enlace **sencillo**):



- Molécula de **Oxígeno** (enlace **doble**):



- Molécula de **Nitrógeno** (enlace **triple**):



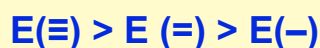
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

14

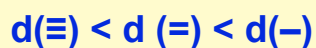
## 2.1. Enlaces Covalentes Sencillos y Múltiples

- A medida que aumenta el orden de enlace, aumenta la densidad de carga entre los núcleos y, como es lógico, la distancia de enlace se reduce (si los átomos son de tamaño similar).
- Los datos experimentales confirman esta predicción:

- La energía de enlace aumenta con el orden de enlace:



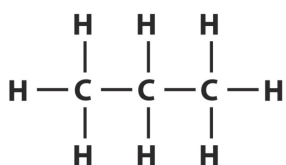
- La longitud de enlace se reduce:



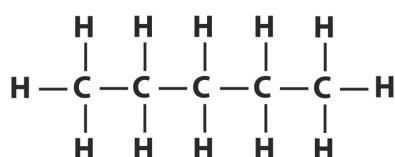
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

## 2.1. Enlaces Covalentes Sencillos y Múltiples

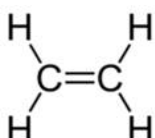
Propano



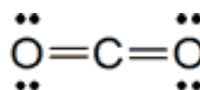
Pentano



Eteno o Etileno



Dióxido de Carbono



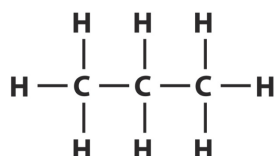
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

16

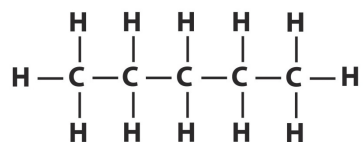


## 1.1. Enlaces Covalentes Sencillos y Múltiples

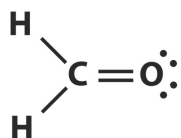
Propano



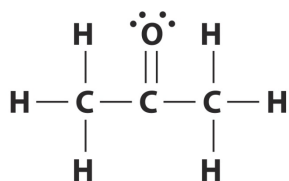
Pentano



Formaldehído



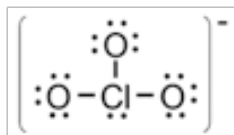
Propano



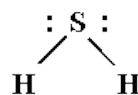
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

17

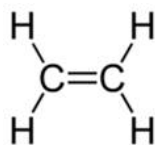
## 1.1. Enlaces Covalentes Sencillos, Dobles y Triples



Ión Clorato

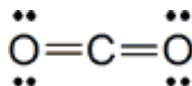


Sulfuro de Hidrógeno



Eteno o Etileno

Dióxido de Carbono

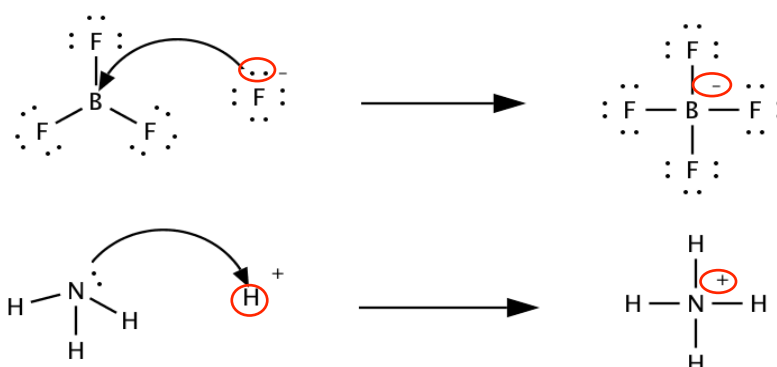


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

18

## 1.2. Enlace Covalente Coordinado o Dativo

Puede ocurrir que uno de los átomos aporte los dos electrones, que comparte con otro átomo. En este caso el enlace se llama enlace **covalente coordinado** o enlace covalente **dativo**.



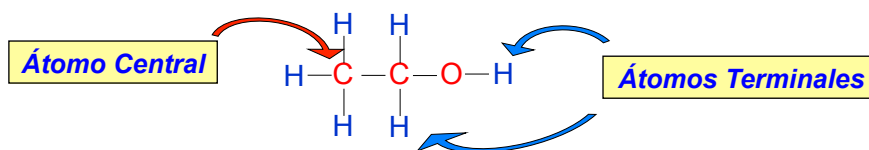
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

19

## 2. El Enlace Covalente según Lewis

En resumen, para representar las moléculas mediante Lewis es preciso tener en cuenta los siguientes criterios:

- Distinguir entre los átomos centrales (los de mayor electronegatividad) y los átomos terminales:



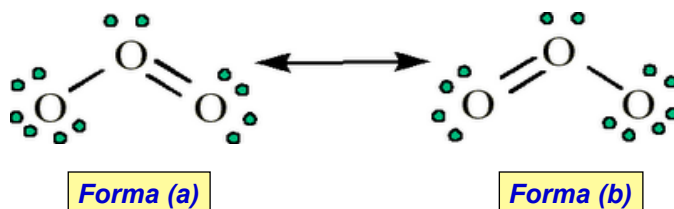
- Los átomos de C son átomos centrales
- Los átomos de H son átomos terminales
- Todos los e<sup>-</sup> de valencia deben estar representados
- Todos los e<sup>-</sup> deben estar apareados y cada átomo con su octeto
- A veces, son necesarios enlaces covalentes múltiples o dativos

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

20

## 2.2. Resonancia

- A veces, las estructuras de Lewis no describen adecuadamente las propiedades de las moléculas.
- **Ejemplo:** Se sabe por estudios experimentales que la molécula de **ozono,  $O_3$** , tiene ambos enlaces O–O idénticos (igual energía y distancia de enlace). Sin embargo, la forma (a) indica que una unión O–O tiene doble enlace y la otra enlace sencillo. Con la forma (b) ocurre lo contrario.

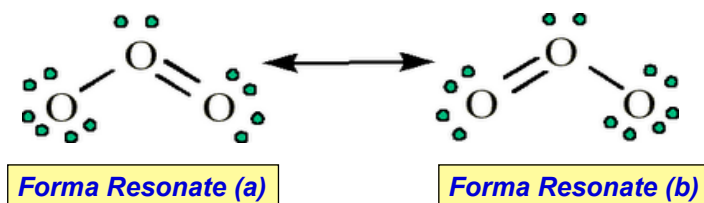


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

21

## 2.2. Resonancia

- Una explicación sería suponer que cada uno de los enlaces del  $O_3$  es intermedio entre el enlace simple y el doble, suposición avalada por el hecho de que la distancia real es intermedia entre la de un enlace simple y la de uno doble.
- Para expresar este concepto escribimos:



La descripción de la estructura real de una molécula mediante distintas formas resonantes se designa con la palabra **resonancia**.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

22

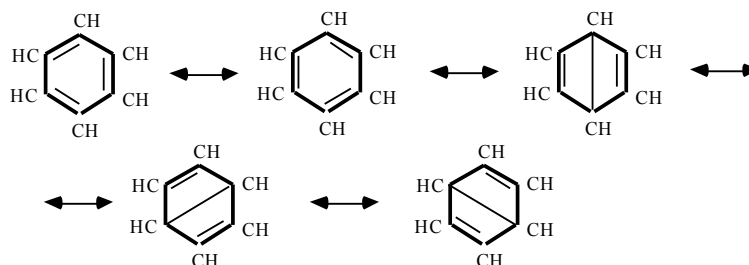
## 2.2. Resonancia

Conviene saber que:

1. Las formas resonantes no tienen existencia real. El  $O_3$  consta de una sola clase de moléculas, que se representan de la mejor manera posible mediante dos formas resonantes.
2. La resonancia surge por las limitaciones que tenemos para representar la molécula real.
3. La flecha de dos puntas no se refiere a un equilibrio (doble flecha). Una forma resonante no se interconvierte en la otra. Ninguna existe.

## 2.2. Resonancia

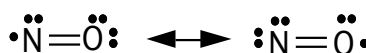
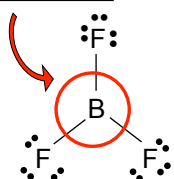
- Uno de los casos de resonancia más interesantes en Química es la molécula de **benceno**,  $C_6H_6$ .
- Su estructura es plana hexagonal: seis átomos de C en los vértices de un hexágono regular unidos a un átomo de H y todos los ángulos de enlace C–C–C son de  $120^\circ$ .
- Podemos considerarlo como un híbrido de resonancia entre cinco estructuras:



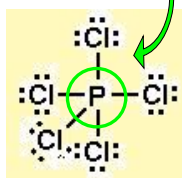
### 3. Limitaciones de las Estructuras de Lewis

1. Muchos compuestos covalentes **no cumplen la regla del octeto** o tienen electrones desapareados:  $\text{BF}_3$ ,  $\text{PCl}_5$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  ...

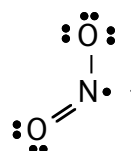
3 pares de  $e^-$



5 pares de  $e^-$



$e^-$   
desapareados



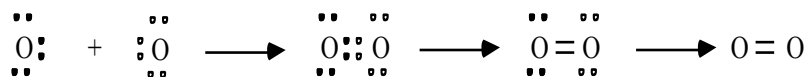
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

25

### 3. Limitaciones de las Estructuras de Lewis

2. Mediante Lewis no se pueden explicar ni las energías de enlace ni la geometría de las moléculas, aspectos esenciales.

3. Las representaciones de Lewis no pueden explicar el paramagnetismo (comprobado experimentalmente) de la molécula de  $\text{O}_2$ .



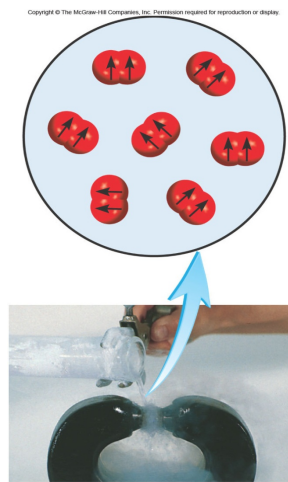
Según Lewis, todos los  $e^-$  están apareados y, sin embargo, la molécula de  $\text{O}_2$  es muy paramagnética. El oxígeno es atraído por un campo magnético:

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

26

### 3. Limitaciones de las Estructuras de Lewis

La molécula de oxígeno debe tener  $e^-$  desapareados que expliquen su paramagnetismo.



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

27

### 4. Teoría de Orbitales Moleculares

- Las limitaciones para explicar el enlace covalente según Lewis nos obligan a recurrir a las teorías cuánticas del enlace químico covalente, que son más rigurosas.
- El procedimiento consiste en establecer la ecuación de onda de Schrödinger del sistema y resolverla.
- Para resolverla, en el caso de moléculas, es necesario recurrir a métodos de aproximación, por la complejidad matemática que presenta:
  1. Método de Orbitales Moleculares (OM) y
  2. Método de Enlace de Valencia (Hibridaciones)

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

28

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

---

- En el **método de OM** los orbitales atómicos pierden sus identidades individuales y se combinan entre sí para formar orbitales nuevos llamados **orbitales moleculares**, que abarcan toda la molécula.
- Para describir las moléculas (o iones) **diatómicas (formadas por 2 átomos)** utilizaremos el método de OM:  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $I_2$ ,  $F_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $NO^+$ , ...

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

---

- En el **método de Enlace de Valencia (EV) o de Hibridaciones** se colocan los átomos en sus posiciones de equilibrio en la molécula, y se considera la interacción entre los orbitales de valencia de cada par de átomos enlazados por separado.
- Para describir las moléculas **poliatómicas (3 átomos o más)** utilizaremos el método de **Hibridaciones**:  $BeCl_2$ ,  $F_3B$ ,  $CH_4$ ,  $NH_3$ ,  $H_2O$ ,  $CCl_4$  ...

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Teoría de Orbitales Moleculares

- Para comprender las propiedades de las moléculas, se deben conocer sus configuraciones electrónicas, esto es, la distribución de los electrones entre los diversos OM.
- El procedimiento es análogo al usado para determinar la configuración electrónica de los átomos.
- Para escribir la configuración electrónica de una molécula:
  1. Se colocan los OM en orden creciente de energía.
  2. Los electrones se colocan en los OM por orden creciente de energía, se aplica el Principio de Exclusión de Pauli (2 electrones por orbital) y las Reglas de Hund.

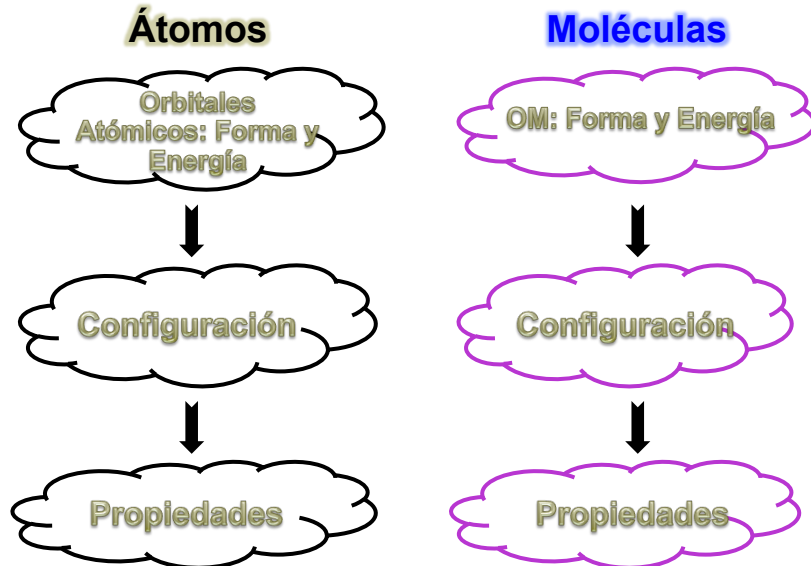
## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

- Por eso, lo primero es conocer la **forma y energía** de los **OM**, para luego hallar la configuración electrónica de las moléculas.
- A partir de la configuración podremos conocer las **propiedades de las moléculas**: orden de enlace, energía de enlace, longitud de enlace y propiedades magnéticas.
- Vamos a aplicar esta teoría a las moléculas del primer y segundo periodo de la Tabla Periódica:





## 4. Teoría de Orbitales Moleculares



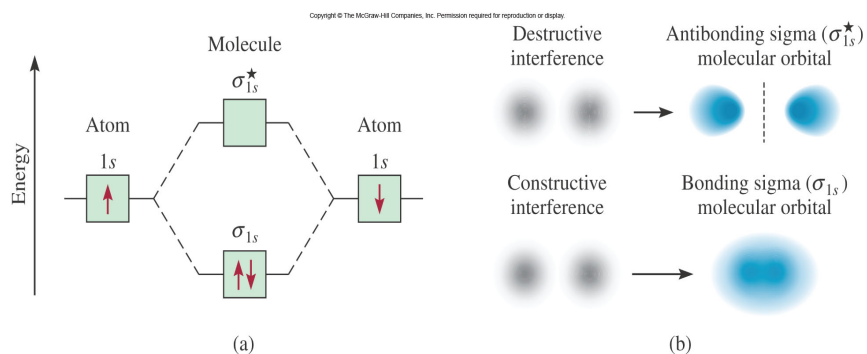
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

33

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Molécula H<sub>2</sub>

Forma y energía de los orbitales moleculares que se forman cuando se solapan los dos orbitales s de dos átomos de H cuando se enlazan:



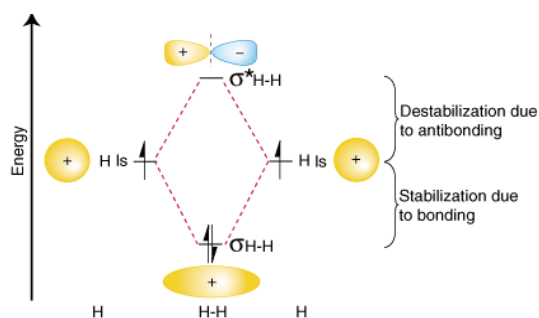
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

34

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

- Como se observa, se forman tantos OM como orbitales atómicos se solapan entre sí. **Esta idea es muy importante.**
- Un orbital es enlazante cuando en la región internuclear la densidad electrónica es máxima.
- Un orbital es antienlazante cuando la densidad electrónica en la zona internuclear es mínima y, por tanto, se trata de un orbital más inestable y de mayor energía que el enlazante.

### Molécula H<sub>2</sub>

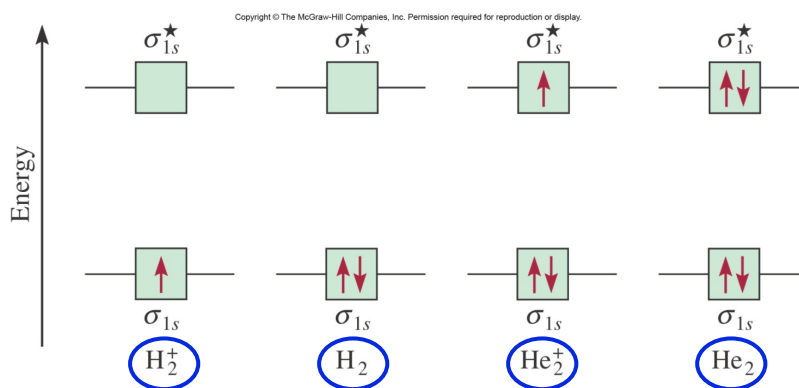


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

35

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

**Ejercicio: Halla la configuración electrónica de las siguientes moléculas: H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>, He<sub>2</sub><sup>+</sup>, He<sub>2</sub>**



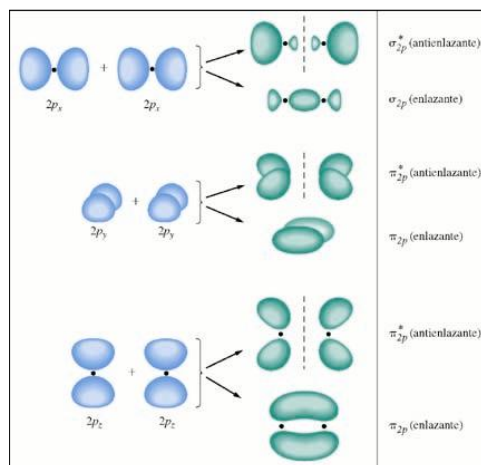
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

36

### 3. Teoría de Orbitales Moleculares

Forma de los OM producidos por el solapamiento de orbitales:

$p_x$   $p_y$   $p_z$



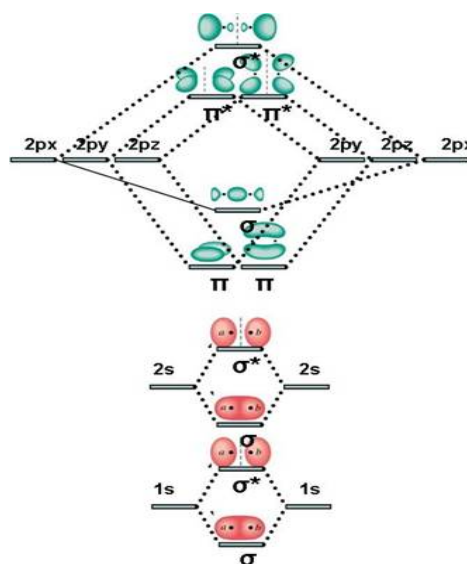
OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

37

### 4. Teoría de Orbitales Moleculares

Diagrama de Energía de los OM formados para moléculas cuyos átomos tienen

$Z < 8$

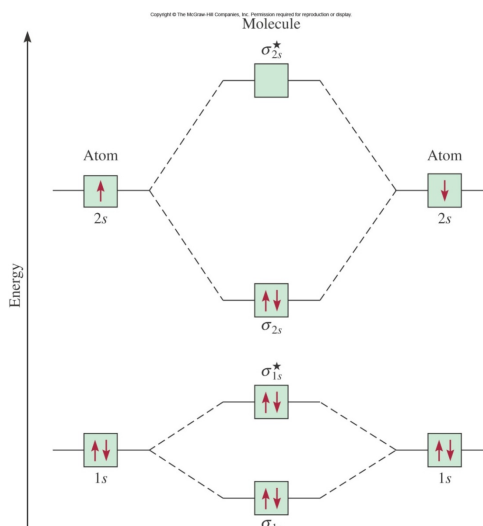


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

38

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Diagrama de Energía de la Molécula $\text{Li}_2$



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

39

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Propiedades de las moléculas

#### 1. Orden de Enlace

$$\text{OE} = [\text{N}^\circ \text{e}^- \text{ en OM enlazantes} - \text{N}^\circ \text{e}^- \text{ en OM antienlazantes}] / 2$$

2. La energía de enlace aumenta con el OE.

3. La longitud de enlace se reduce con el OE.

4. Una sustancia es **paramagnética** si hay  $\text{e}^-$  desapareados en la configuración de sus moléculas.

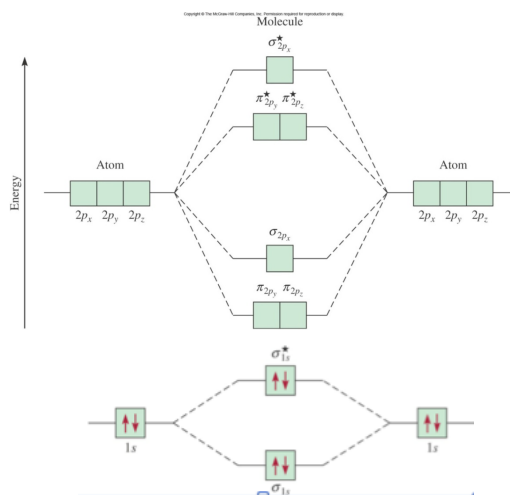
5. Una sustancia es **diamagnética** si hay  $\text{e}^-$  apareados en la configuración de sus moléculas.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

40

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

**Ejercicio:** Completa la configuración de la molécula  $B_2$

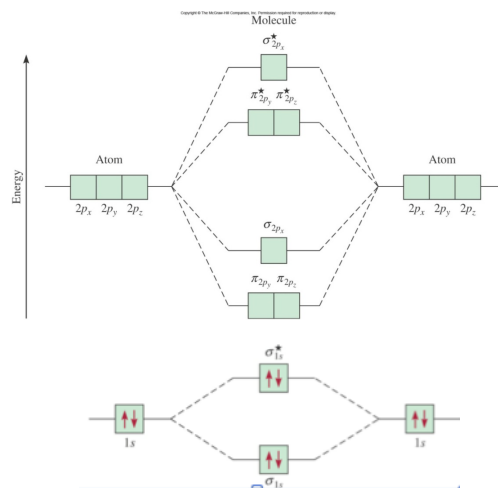


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

41

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

**Ejercicio:** Completa la configuración de la molécula  $C_2$

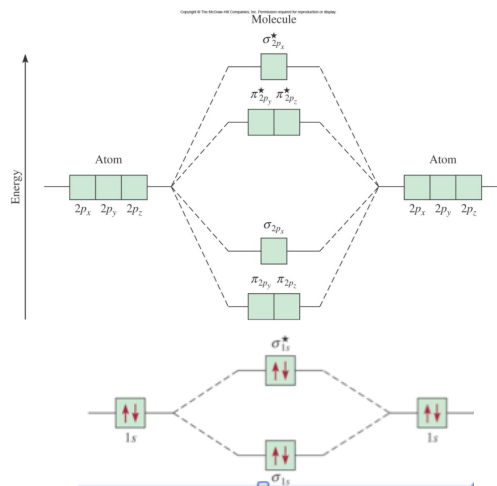


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

42

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Ejercicio: Completa la configuración de la molécula N<sub>2</sub>



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

43

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Ejercicio: Comprueba las configuraciones y las propiedades

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

**TABLE 10.5** Properties of Homonuclear Diatomic Molecules of the Second-Period Elements\*

	Li <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	F <sub>2</sub>	
σ* <sub>2p<sub>x</sub></sub>	□	□	□	□	□	□	σ* <sub>2p<sub>x</sub></sub>
π* <sub>2p<sub>y</sub></sub> , π* <sub>2p<sub>z</sub></sub>	□	□	□	□	↑↑	↓↑	π* <sub>2p<sub>y</sub></sub> , π* <sub>2p<sub>z</sub></sub>
σ <sub>2p<sub>x</sub></sub>	□	□	□	↑↓	↑↓	↑↓	π <sub>2p<sub>y</sub></sub> , π <sub>2p<sub>z</sub></sub>
π <sub>2p<sub>y</sub></sub> , π <sub>2p<sub>z</sub></sub>	□	↑↑	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	σ <sub>2p<sub>x</sub></sub>
σ* <sub>2s</sub>	□	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	σ* <sub>2s</sub>
σ <sub>2s</sub>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	σ <sub>2s</sub>
Bond order	1	1	2	3	2	1	
Bond length (pm)	267	159	131	110	121	142	
Bond enthalpy (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9	
Magnetic properties	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic	

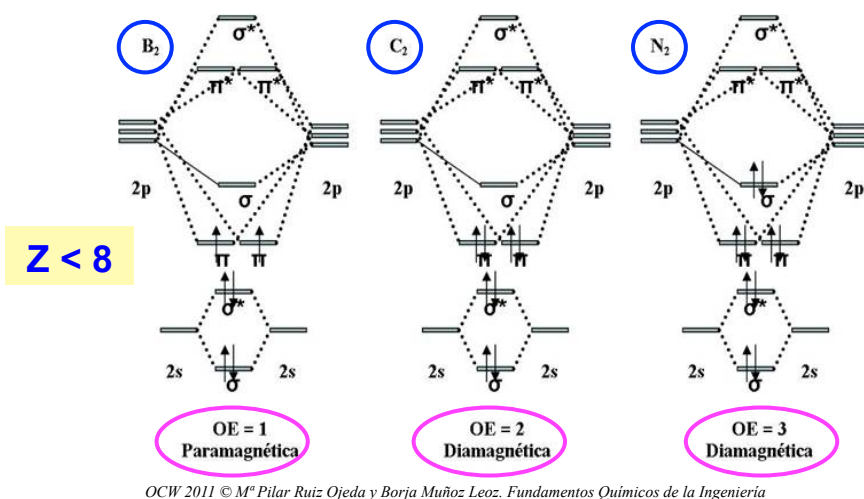
\*For simplicity the σ<sub>1s</sub> and σ\*<sub>1s</sub> orbitals are omitted. These two orbitals hold a total of four electrons. Remember that for O<sub>2</sub> and F<sub>2</sub>, σ<sub>2p<sub>x</sub></sub> is lower in energy than π<sub>2p<sub>y</sub></sub> and π<sub>2p<sub>z</sub></sub>.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

44

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

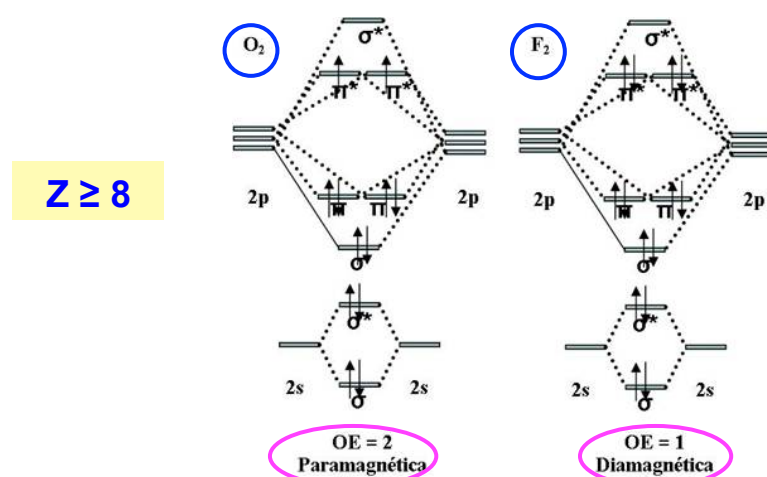
Otra forma de representar los diagramas de energía de las moléculas  $B_2$ ,  $C_2$  y  $N_2$ :



45

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

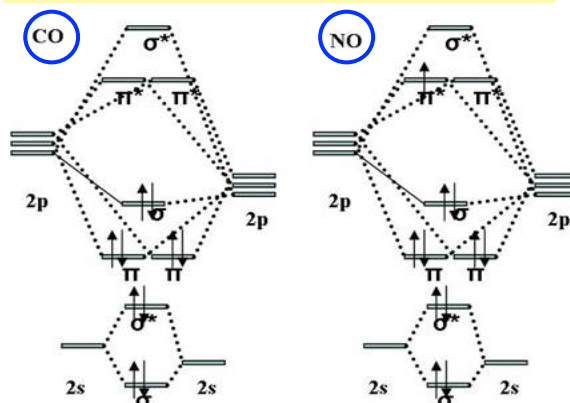
Otra forma de representar los diagramas de energía de las moléculas  $O_2$  y  $F_2$ :



46

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

### Moléculas: CO y NO



**Ejercicio:** Escribe la configuración electrónica de ambas moléculas y calcula su orden de enlace. ¿Cuál de ellas tendrá menor distancia de enlace? ¿Cuál de ellas es paramagnética?

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

47

## 4. Teoría de Orbitales Moleculares

**Ejercicio:** Dibuja el diagrama de energía para el ión nitrosilo,  $\text{NO}^+$ , y responde a las siguientes cuestiones:

1. Escribe su configuración electrónica.
2. Calcula el orden de enlace.
3. ¿Es un ión diamagnético o paramagnético?
4. ¿Cuál es la especie química más estable, el NO o el  $\text{NO}^+$ ? Razona la respuesta.

**Cuestión:** ¿Cuál es la geometría de las moléculas diatómicas?

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

48



## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

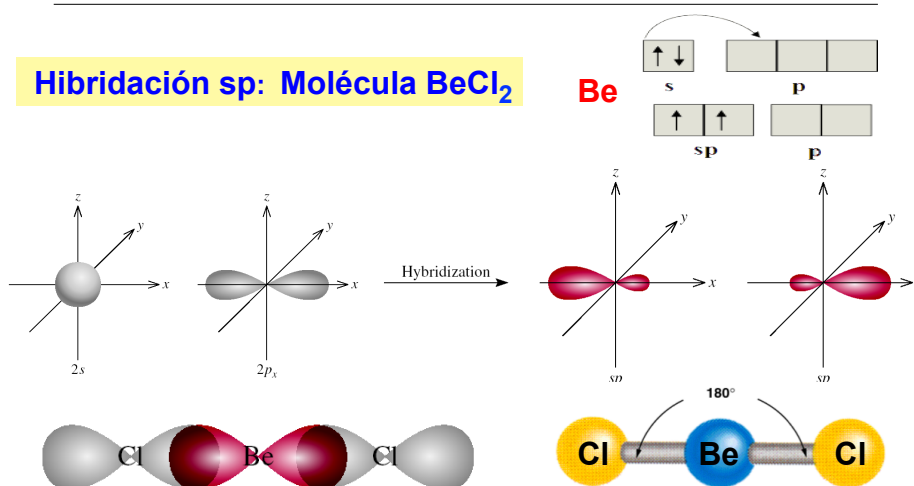
- Con esta teoría, vamos a estudiar las moléculas poliatómicas: su **geometría** y **tipo de enlaces**.
- En esta teoría se considera el tipo de solapamiento que tiene lugar cuando dos de sus átomos se acercan, con independencia del resto de átomos.
- Es decir, vamos a tratar un problema complejo (**molécula poliatómica**) como la suma de problemas más sencillos (de dos en dos átomos).
- Estudiamos 3 tipos de hibridaciones:  $sp$   $sp^2$   $sp^3$

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

49

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

### Hibridación $sp$ : Molécula $\text{BeCl}_2$



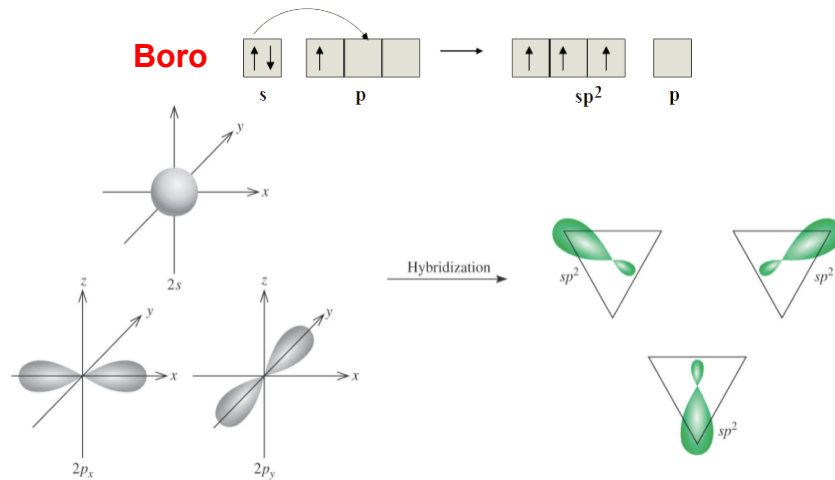
**Geometría Lineal: ángulo 180°**

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

50

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

### Hibridación $sp^2$ : Molécula $BF_3$ (trifluoruro de boro)

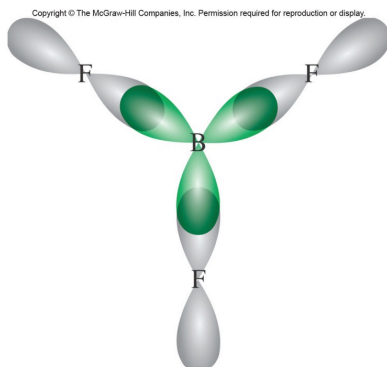


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

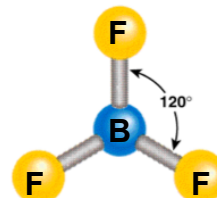
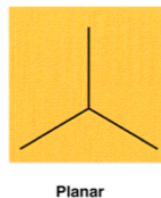
51

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

Luego, se acercan los átomos de F al B y se solapan los orbitales p del Flúor con los híbridos  $sp^2$  formando los enlaces. El esquema de enlaces en el  $BF_3$  es:



- Geometría triangular plana
- Ángulos de  $120^\circ$

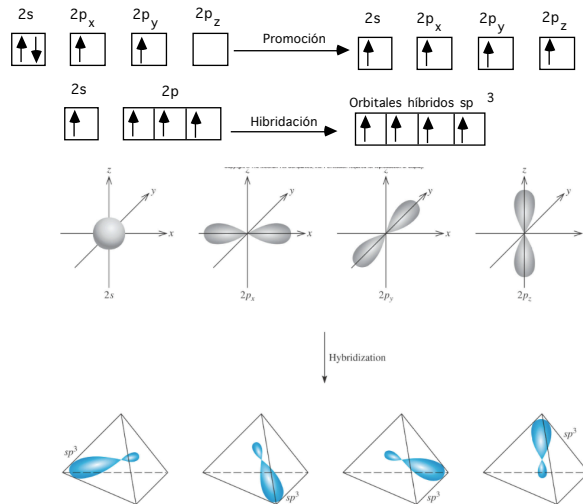


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

52

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

### Hibridación $sp^3$ : Molécula $CH_4$ (metano)

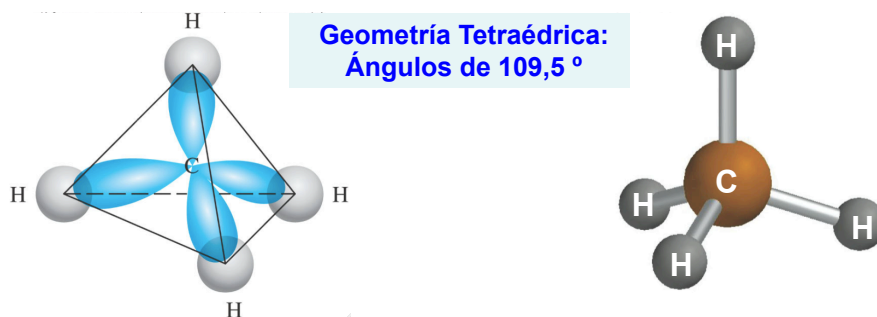


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

53

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

Luego, se acercan los H al C y se solapan los orbitales s con los híbridos  $sp^3$  formando los enlaces. El esquema de enlaces en el **Metano** es:



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

54

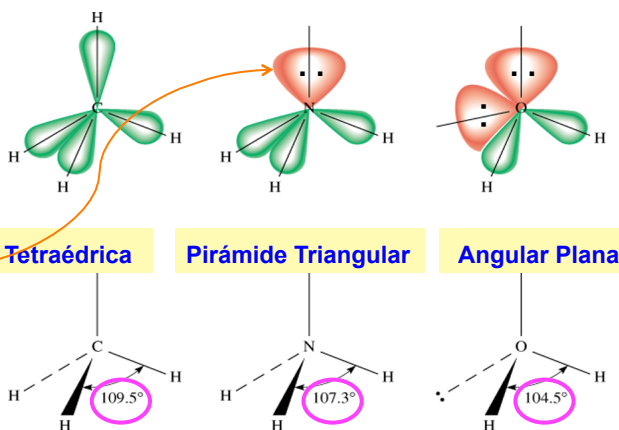
## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

**Ejercicio:** Halla la geometría y clase de enlaces en las moléculas  $\text{NH}_3$  y  $\text{H}_2\text{O}$ .

## 5. Teoría de Hibridaciones o de EV

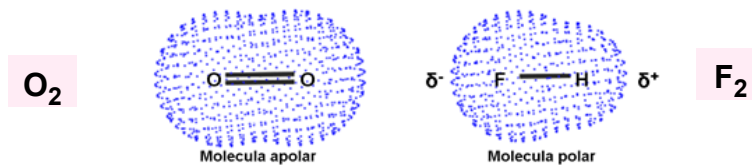
### Solución

Considerar las repulsiones de los pares de electrones no enlazantes



## 6. Polaridad

- En las moléculas diatómicas homonucleares ( $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $N_2$ , ...) ambos átomos son iguales, tienen la misma electronegatividad, y por tanto los electrones se comparten por igual. Son **enlaces covalentes no polares**.
- Ahora bien, si los átomos enlazados son diferentes (heteronucleares), la compartición de electrones resulta desigual debido a la diferente electronegatividad de cada átomo. Son **enlaces covalentes polares**.
- Uno de los átomos adquiere una cierta carga parcial positiva,  $+\delta$ , y el otro una cierta carga parcial negativa,  $-\delta$ .



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

57

## 6. Polaridad

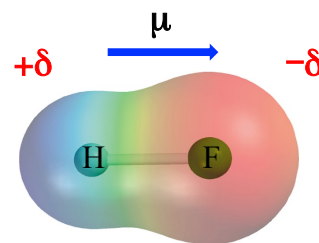
- El carácter polar de un enlace se mide por su momento dipolar,  $\mu$ . Es una magnitud vectorial.
- El sentido va del  $+\delta$  a  $-\delta$
- Su módulo se mide en Debyes, D, y viene dado por:

$$\mu = \delta \cdot r$$

$\delta$  es la carga

$r$  es la distancia entre los núcleos

$$1 \text{ D} = 3.36 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

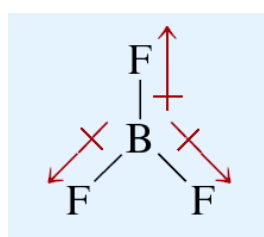


OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

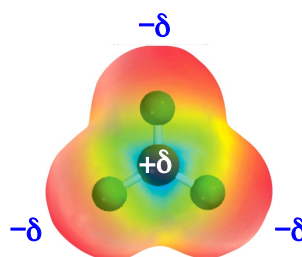
58

## 6. Polaridad

- En moléculas poliatómicas es preciso sumar, de forma vectorial, los momentos dipolares de cada enlace para conocer el momento dipolar resultante de la molécula.
- Si el momento total es nulo, la molécula es apolar.
- Si el momento total no es nulo, la molécula es polar.



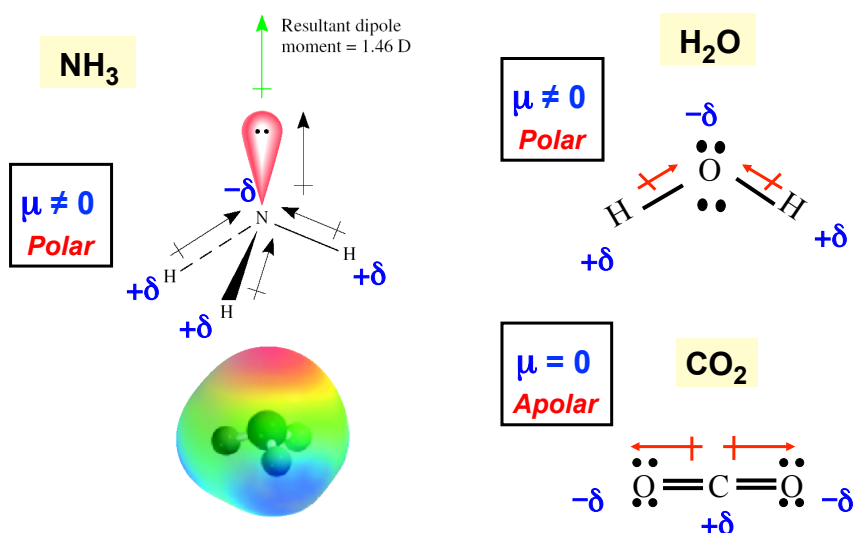
$\mu = 0$   
Apolar



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

59

## 6. Polaridad



OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

60

## 7. Resumen

- Los símbolos de puntos de Lewis representan el número de  $e^-$  de valencia de un átomo. Estos símbolos se utilizan principalmente para los elementos representativos.
- En un enlace covalente, dos átomos comparten dos  $e^-$  (un par). En los enlaces covalentes múltiples, dos átomos comparten 2 ó 3 pares de  $e^-$ .
- Algunos átomos unidos por enlaces covalentes también tienen pares libres, es decir, pares de  $e^-$  de valencia que no participan en los enlaces.
- La distribución de los  $e^-$  de enlace y los pares libres alrededor de los átomos de una molécula se representa por medio de la estructura de Lewis.
- La regla del octeto predice que los átomos forman enlaces covalentes hasta rodearse de 8  $e^-$  cada uno.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

61

## 7. Resumen

- Existen dos métodos en la Mecánica Cuántica para explicar el enlace covalente: la teoría de Orbitales Moleculares y la de Enlace de Valencia.
- La teoría de OM describe el enlace mediante la formación de orbitales moleculares, a partir del solapamiento de orbitales atómicos, que están asociados a la molécula en su conjunto. Se aplica al caso de moléculas diatómicas.
- En la teoría de OM, las configuraciones de las moléculas diatómicas se escriben siguiendo las mismas reglas que en el caso de las configuraciones de los átomos:
  - ✓ Orden creciente de energía
  - ✓ Principio de Exclusión de Pauli
  - ✓ Regla de Hund
- Las moléculas diatómicas son estables si el  $n^\circ$  de  $e^-$  en los OM de enlace es mayor que el  $n^\circ$  de  $e^-$  en OM de antienlace.

OCW 2011 © M<sup>o</sup> Pilar Ruiz Ojeda y Borja Muñoz Leoz. Fundamentos Químicos de la Ingeniería

62

## 7. Resumen

---

- En la teoría de enlace de valencia, los orbitales atómicos híbridos se forman mediante la combinación y reorganización de los orbitales del mismo átomo.
- Esta teoría ofrece buenos resultados cuando se aplica a moléculas poliatómicas de 3 ó más átomos. Este método permite conocer y prever la geometría de las moléculas.
- Se estudian las hibridaciones  $sp$  (lineal), la  $sp^2$  (triangular) y la  $sp^3$  (tetraédrica).
- Finalmente, el momento dipolar es una medida de la separación de la carga en moléculas que contienen átomos de diferente electronegatividad.
- El momento dipolar de una molécula es la resultante de todos los momentos dipolares presentes en ella y depende, por tanto, de la geometría molecular.