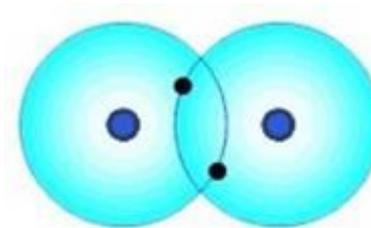
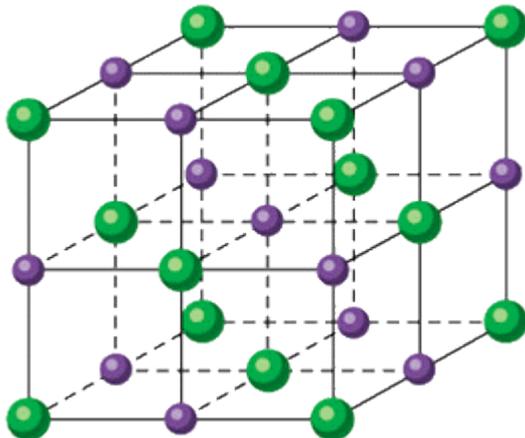




- 2.1 Introducción
- 2.2 Enlace Iónico
- 2.3 Enlace Covalente
- 2.4 Enlace Iónico Vs Enlace Covalente
- 2.5 Modelo (RPECV)
- 2.6 Teoría del enlace de Valencia (TEV)
- 2.7 Teoría de orbitales moleculares (TOM)



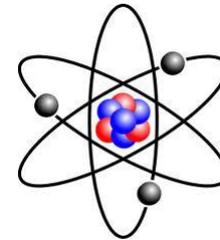
2.1 Introducción



Desde un punto de vista químico la unidad mínima de materia son los átomos

Los átomos están formados por un núcleo y por **electrones**, que orbitan a su alrededor.

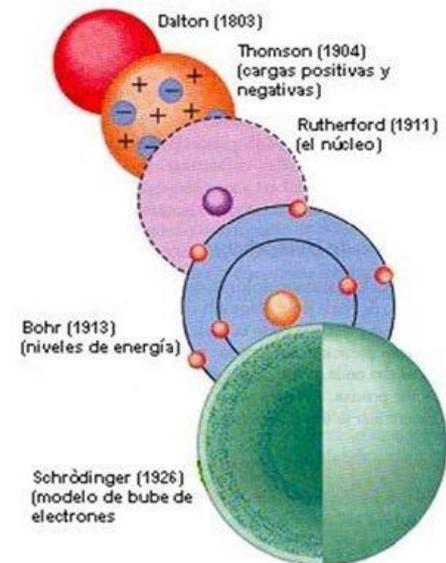
El núcleo se divide en 2 tipos de partículas { **neutrones**
protones



El modelo atómico actual, modelo mecano cuántico

Para llegar al modelo atómico actual hemos ido pasando por un conocimiento previo y otro tipo de modelos atómicos

Entender perfectamente la estructura de los átomos, nos da el fundamento para comprender la reactividad y propiedades de estos



2.1 Introducción



Distintos experimentos han permitido medir algunas de las propiedades de los átomos

	CARGA ELÉCTRICA		MASA	
	C	relativa	g	uma
PROTÓN	$1,602 \cdot 10^{-19}$	+1	$1,673 \cdot 10^{-24}$	1,0073
NEUTRÓN	0	0	$1,675 \cdot 10^{-24}$	1,0087
ELECTRÓN	$-1,602 \cdot 10^{-19}$	-1	$9,109 \cdot 10^{-28}$	0,0005486

Protón y neutrón tienen aprox. la misma masa

Protón y electrón tienen carga contraria

Electrón tiene masa despreciable

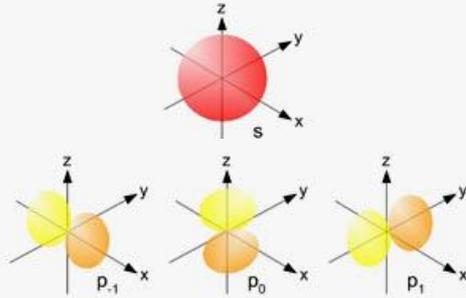
Neutrón no tiene carga

El enlace químico se da gracias a la interacción entre los electrones de distintos átomos

2.1 Introducción

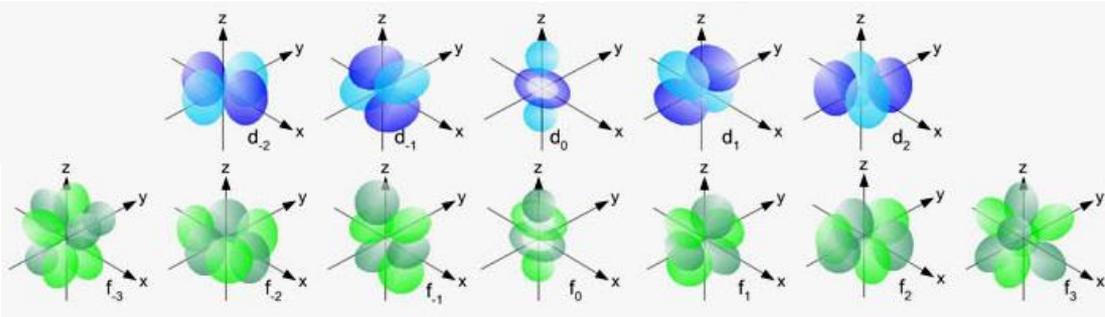


Los electrones (e^-) orbitan alrededor del núcleo, en cada orbital pueden coexistir hasta 2 electrones



Orbital s 1 orientación

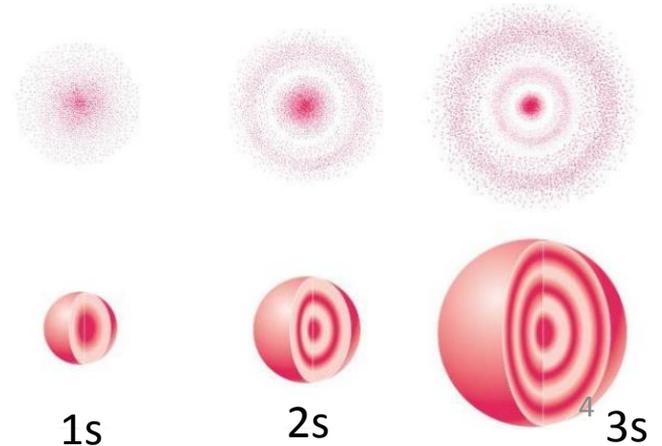
Orbital p 3 orientaciones



Orbital d 5 orientaciones

Orbital f 7 orientaciones

Los orbitales hacen referencia a **densidad electrónica**, un espacio por donde los electrones se pueden encontrar aunque no seamos capaces de ubicarlos específicamente

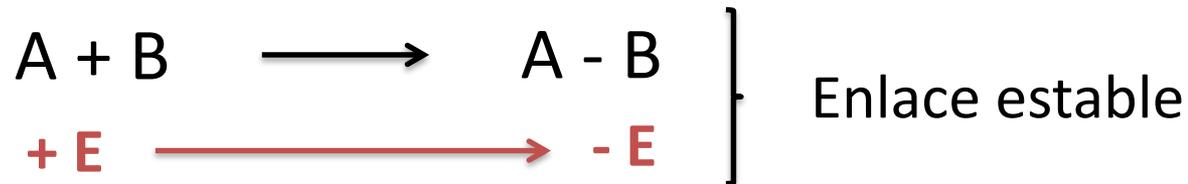




Tipos de enlace

Enlace químico = unión entre átomos

La Energía de los 2 átomos enlazados < la energía de los 2 átomos sin enlazar



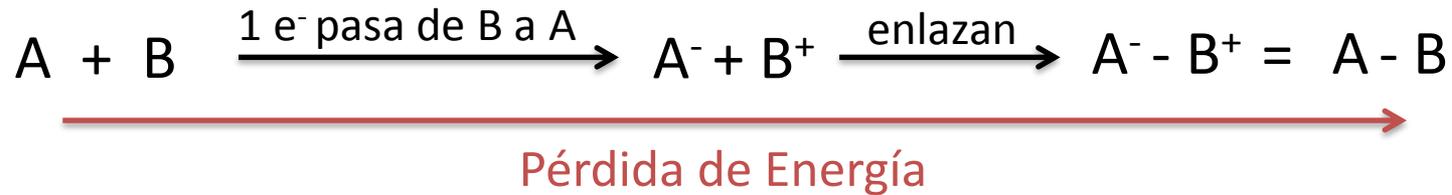
3 tipos de Enlace: Enlace iónico, Enlace covalente y Enlace metálico

Los átomos actúan de distinta manera para reducir la energía

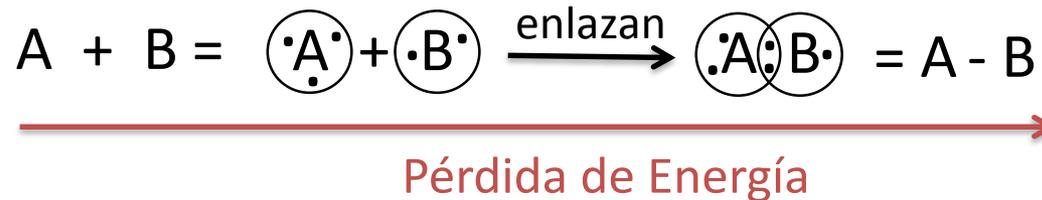


Tipos de enlace

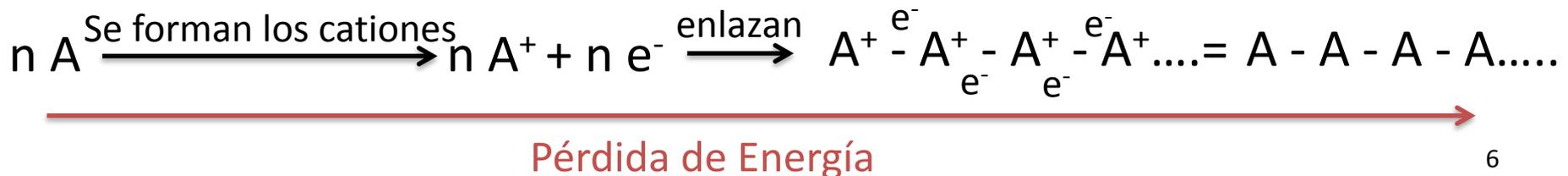
Enlace Iónico: hay una transferencia completa de los e^- desde un átomo a otro



Enlace Covalente: Los átomos comparten los electrones



Enlace Metálico: Muchos átomos pasan a ser cationes, y se mantienen unidos por un mar de e^- .

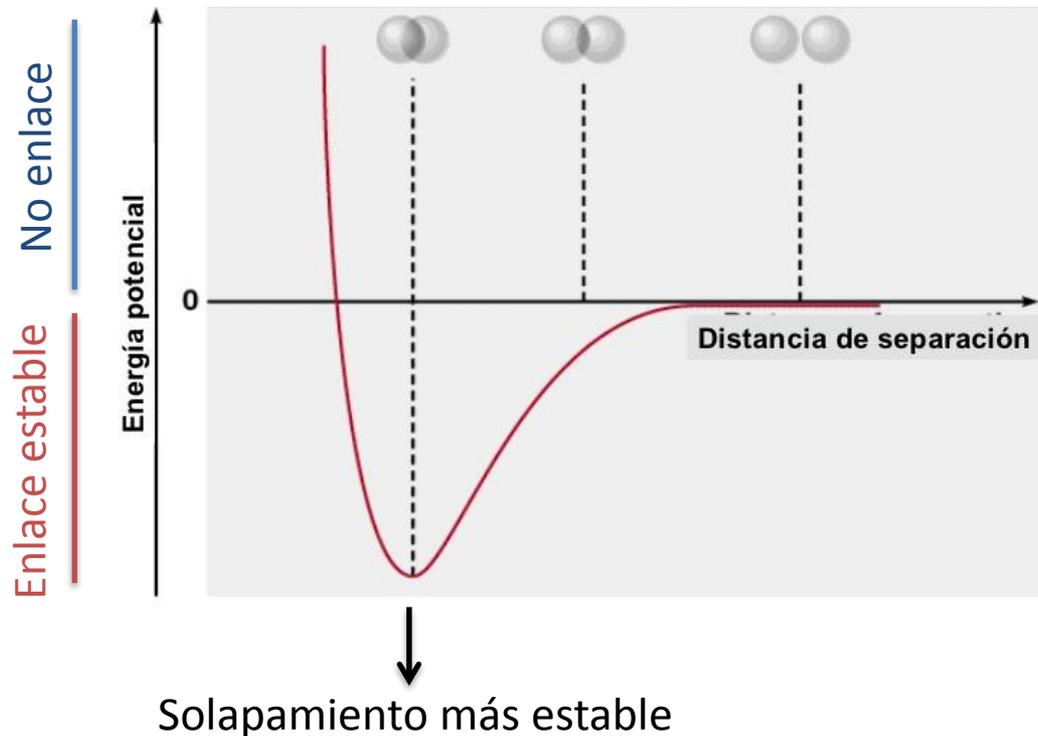




Energía potencial de un enlace



Cada uno de los 2 átomos, tiene 1 único e^- en un orbital, los 2 orbitales **solapan**



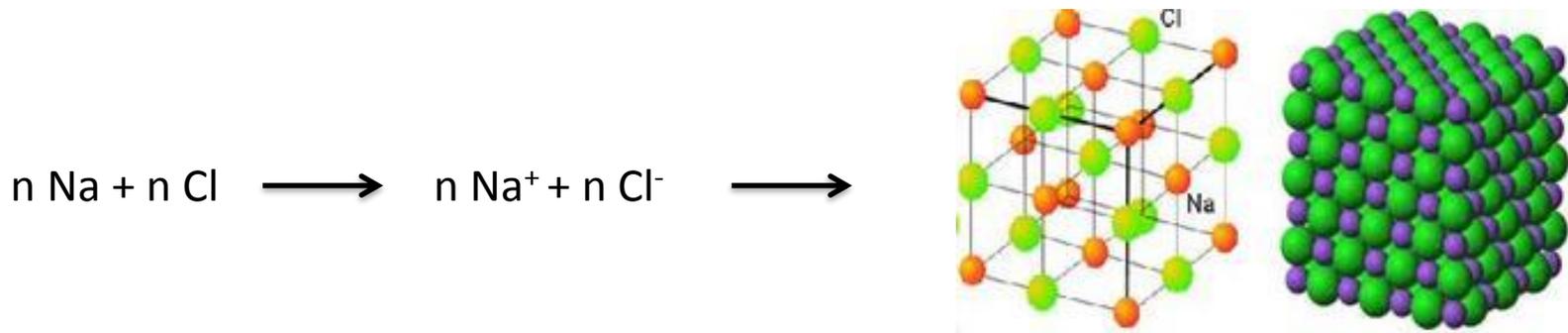
Los electrones tienden a estar enlazados, a una distancia determinada, coincide con la menor energía potencial.

Cualquier par de e^- se puede representar bajo este esquema, aunque la curva cambiará en $f(x)$ de los e^- involucrados

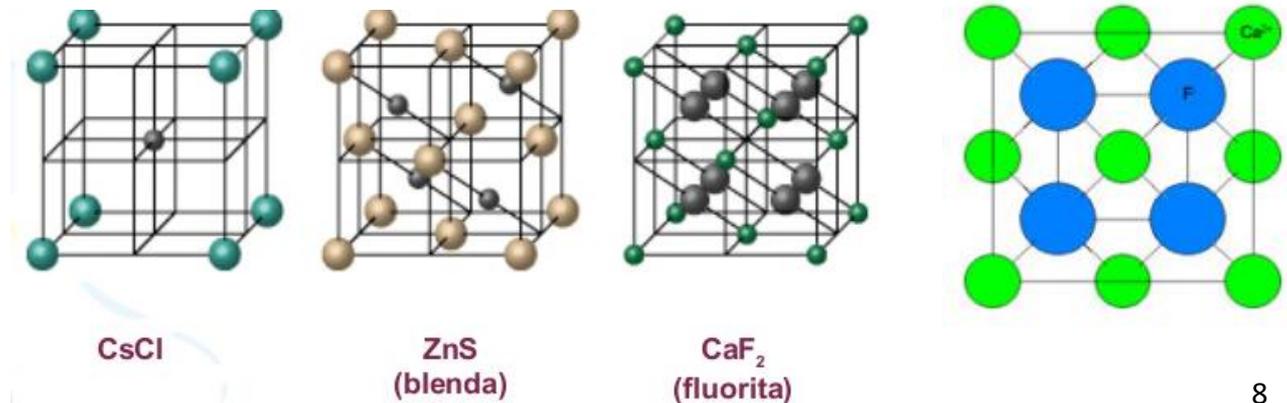


Sólidos iónicos

Un sólido iónico es un ensamblaje de cationes y aniones unidos de forma regular, constituyendo lo que denominamos una red iónica



El ensamblaje se puede dar, dependiendo de los átomos implicados, de muchas geometrías diferentes





Formación de iones

Los átomos ganan o pierden e^- para formar iones, aniones (X^-) o cationes (X^+)

CATIONES⁺

He	1	2	13/III	14/IV	2
Li	Be	B			
Ne	Na	Mg	Al		3
Ar	K	Ca	Ga		4
Kr	Rb	Sr	In	Sn	5
Xe	Cs	Ba	Tl	Pb	6
Rn	Fr	Ra			7

Los elementos del bloque s, del bloque d, y de los primeros grupos del bloque p, tienden a perder sus e^- de valencia, ya que su EI es más baja

En el caso de los elementos metálicos, bloque d, y los elementos de la izquierda del bloque p, pueden estabilizarse con la pérdida de diferente cantidad de e^- , ya que también pueden estabilizarse, con otras capas llenas, o la capa d semillena.

ANIONES⁻

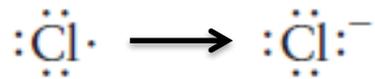
Los elementos del bloque p, no metálicos, tienden a adquirir e^- suficientes como para completar su capa de valencia, y formar un anión que corresponde con la configuración electrónica del siguiente gas noble.

	H				18/VIII	1
	He					
14/IV	15/V	16/VI	17/VII			2
C	N	O	F		Ne	
Si	P	S	Cl		Ar	3
Ge	As	Se	Br		Kr	4
Sb	Te	I			Xe	5
Bi	Po	At			Rn	6



Símbolos de Lewis

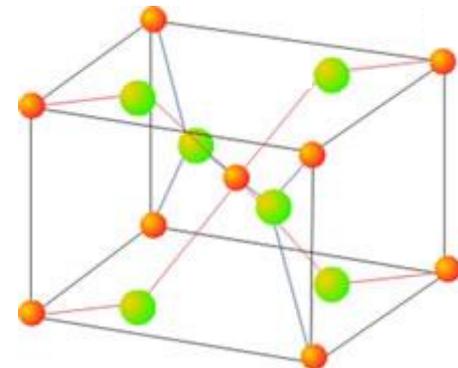
Podemos representar cada e⁻ de valencia como un punto alrededor del elemento.



Formación de aniones



Formación de cationes



Estructura tipo rutilo



Energía de los compuestos iónicos

La formación de una red iónica da estabilidad a los átomos enlazados

Energía reticular: la energía necesaria para separar un mol de compuesto iónico sólido en sus iones en estado gaseoso



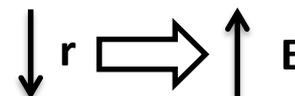
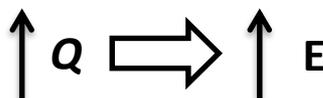
Podemos conocer la estabilidad de un compuesto iónico si conocemos su energía reticular

Podemos comparar la estabilidad de diferentes sólidos iónicos en función de las diferentes energías reticulares que hay entre ellos

La ley de Coulomb: la energía potencial entre dos iones es directamente proporcional al producto de sus cargas e inversamente proporcional a la distancia que las separa

$$E \propto \frac{Q_+ \cdot Q_-}{r} = k \frac{Q_+ \cdot Q_-}{r}$$

Es una energía negativa, por tanto se libera y da estabilidad al sistema





Energía de los compuestos iónicos

Aunque un sólido iónico da estabilidad al sistema, es necesario un aporte de Energía a los átomos para que puedan llegar a estabilizarse como sólido

La energía requerida para la estabilización del sólido iónico es aportada por la interacción entre cargas de diferentes signo.

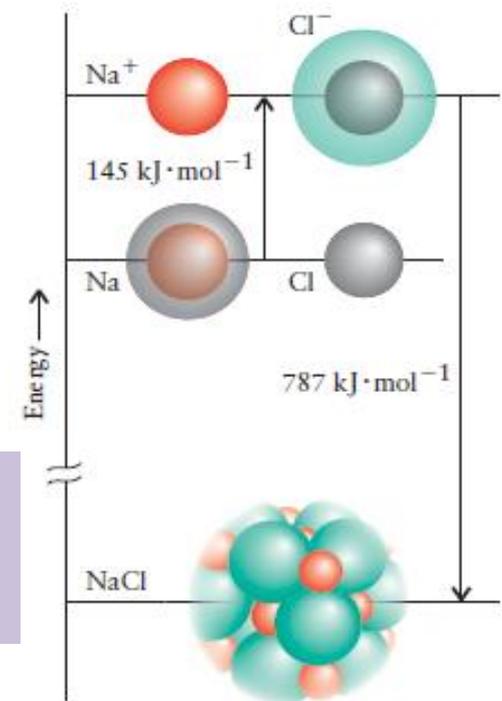
El sodio y el Cloro se encuentran en un nivel de energía.

Necesitamos un aporte energético para pasarlas hasta estado de ión

Como iones interactúan devolviendo energía al sistema

Si suponemos que un compuesto iónico se forma en varias etapas:

Ciclo de Born-Haber: relaciona las energías reticulares de los compuestos iónicos con las energías de ionización, afinidad electrónica y otras propiedades atómicas y moleculares





Propiedades de los compuestos iónicos

No son volátiles y tienen un punto de fusión alto

No conducen la electricidad, si que lo hacen cuando están fundidos o disueltos en agua

La mayoría son solubles en agua

Duros, frágiles

Estas son sus propiedades pero..... ¿a que se deben?



Se deben a su estructura

Las propiedades de una sustancia dependen siempre de la estructura que adopten los núcleos atómicos y los electrones



Propiedades de los compuestos iónicos

Altos puntos de fusión



Sólidos a temperatura ambiente

↑ Carga ⇒ ↑ Pto. de fusión

↓ radio ⇒ ↑ Pto. de fusión

No son volátiles

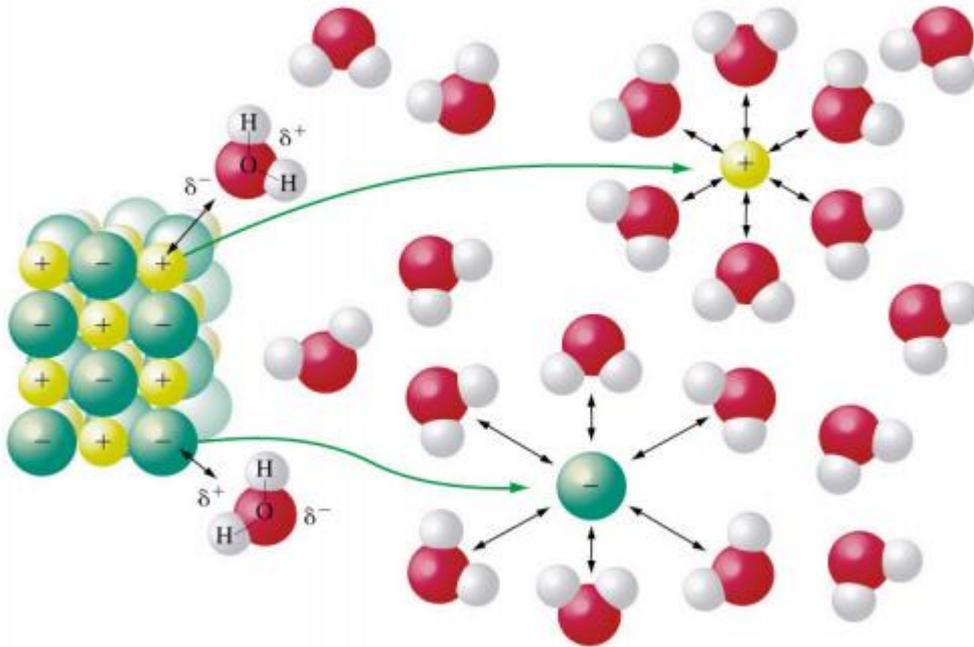
Compuesto	Energía reticular (kJ/mol)	Punto de Fusión (°C)
LiF	1012	845
LiCl	828	610
LiBr	787	547
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	755
NaI	686	651
KCl	699	772
KBr	686	730
KI	632	686
MgCl ₂	2527	712
Na ₂ O	2570	1275*
MgO	3890	2800

* a esta temperatura el Na₂O sublima



Propiedades de los compuestos iónicos

La mayoría son solubles en agua



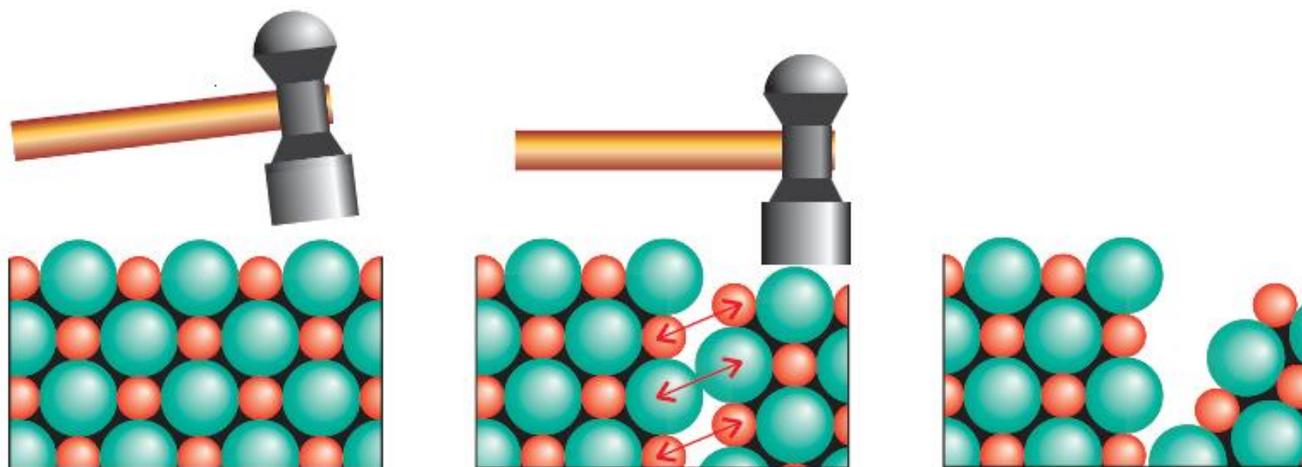
En presencia de líquido polar, como H_2O , los iones se separan dando lugar a las sales solvatadas



Propiedades de los compuestos iónicos

Frágiles

Se rompen ante una fuerza relativamente pequeña

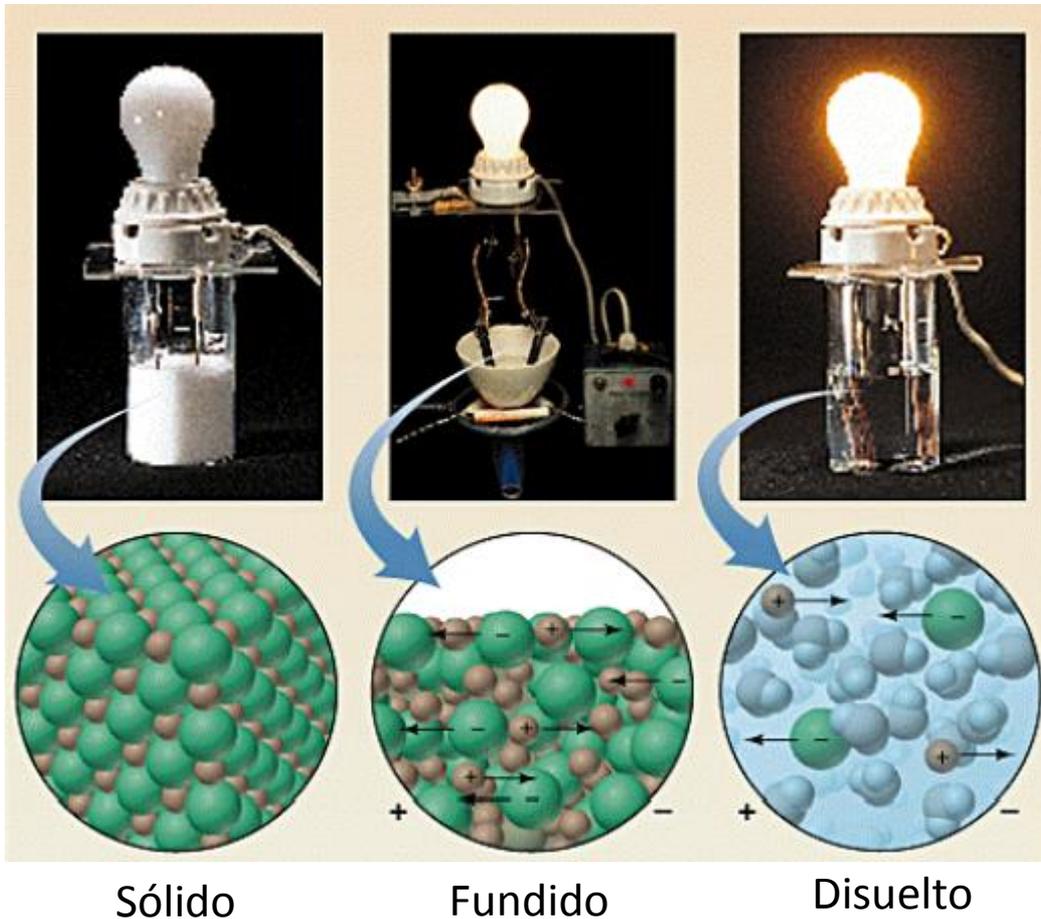


Puedes romper sal con los dedos, sin embargo no fundes la sal en la mano



Propiedades de los compuestos iónicos

La conductividad depende de la capacidad de conducir electrones



No conducen la electricidad, si que lo hacen cuando están fundidos o disueltos en agua

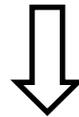


Naturaleza del enlace covalente

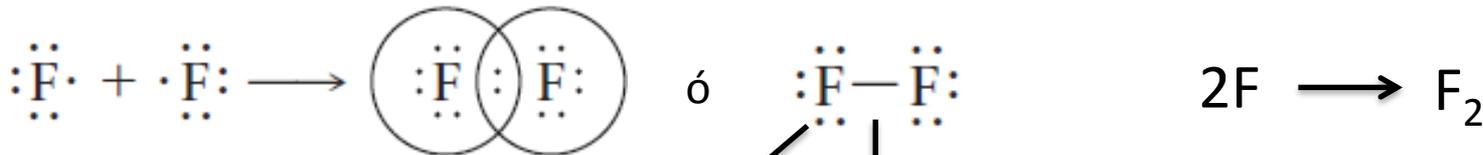
Los átomos son más estables cuando tienen completa la capa de valencia.

Una posibilidad para que 2 o más elementos completen su capa de valencia es compartir e⁻

Los no metales, tienden a este tipo de enlace cuando se unen entre ellos. Dando lugar a moléculas



Regla del octeto: En la formación de enlaces covalentes, los átomos se acercan todo lo posible a completar sus octetos compartiendo pares de electrones



Cada uno de los Flúor mantiene 3 pares de electrones libres

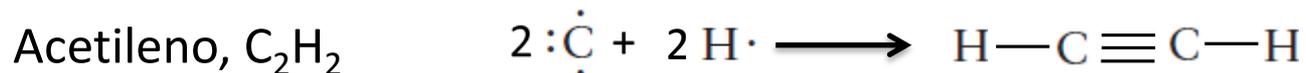
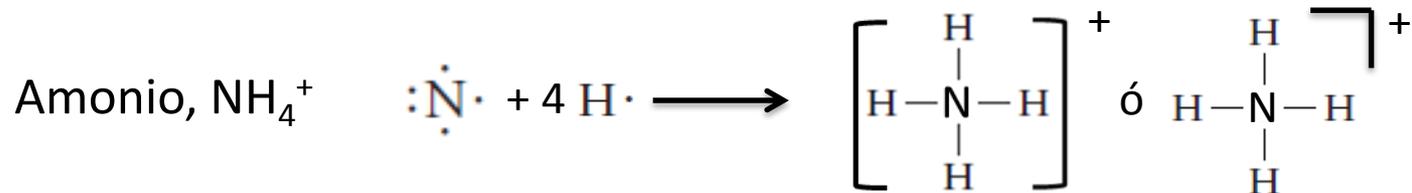
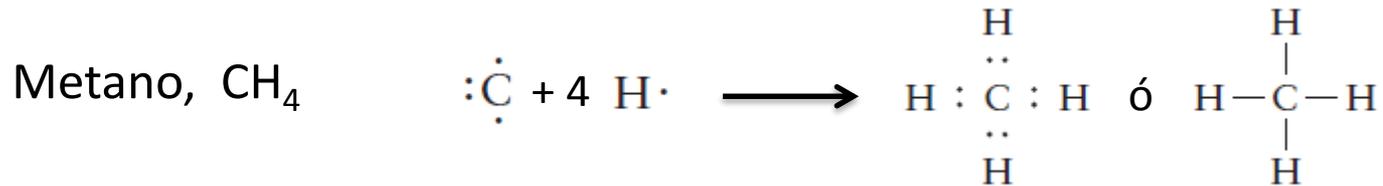
La línea representa un par de e⁻ compartidos

2.3 Enlace Covalente



Especies poliatómicas

En la mayoría de ocasiones para formar una molécula se unen varios elementos para cada uno de ellos completar su capa de valencia



Enlace sencillo

Enlace doble

Enlace triple



Energía



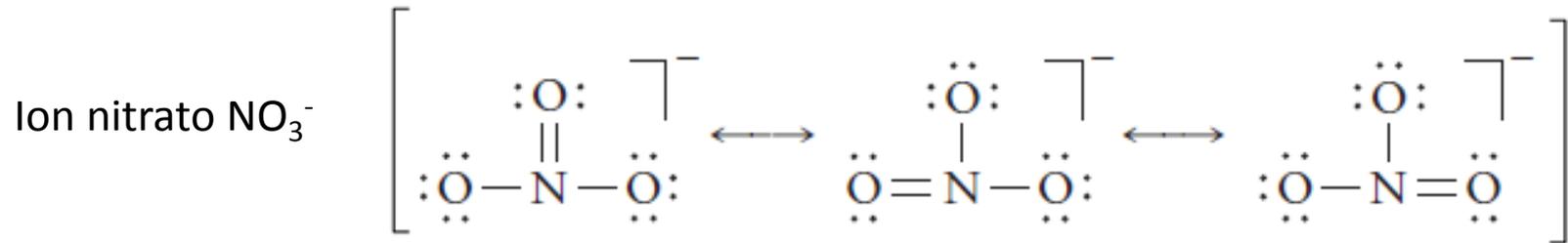
longitud

2.3 Enlace Covalente

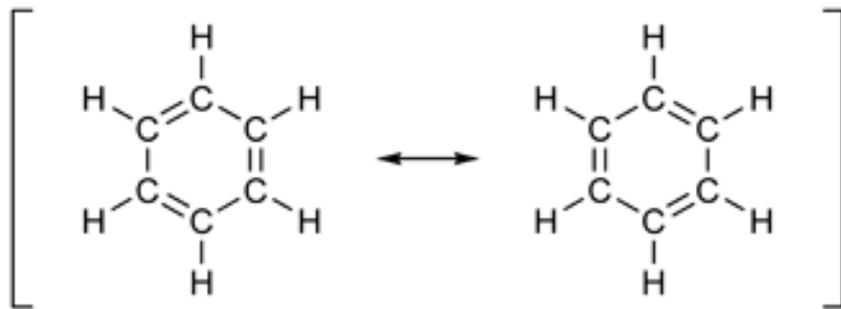


Resonancia

En ocasiones hay estructuras que no se pueden expresar con una única estructura de Lewis



Experimentalmente se te demuestra que no hay 1 enlace doble y 2 simples, son 3 enlaces de igual tamaño y energía, entre simples y dobles



Benceno, C_6H_6

Los 6 enlaces internos, son enlaces con propiedades entre simple y doble.



Carga formal

Si las estructuras de lewis de una molécula no tienen la misma energía, no contribuyen de la misma manera a la estructura resonante.

La carga formal nos permite identificar la estructura que más contribuye a cada estructura resonante

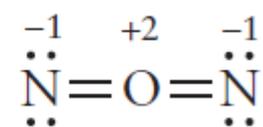
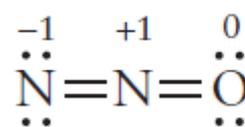
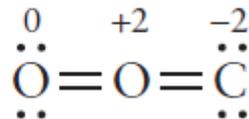
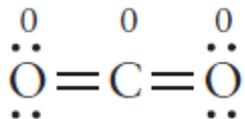
Carga formal = carga que tiene un átomo si tomase medio electrón de cada enlace

$$\text{Carga formal} = V - (L + \frac{1}{2}B)$$

V = e⁻ de valencia del átomo en estado libre

L = e⁻ que forman pares solitarios

B = e⁻ enlazados



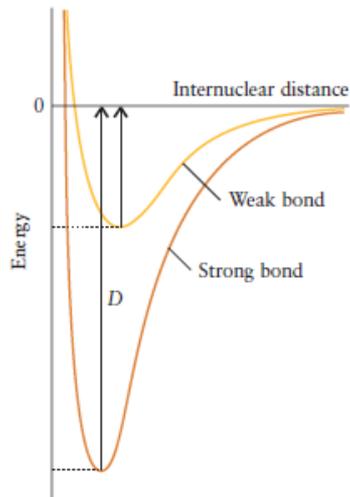
La estructura donde la carga formal esté más repartida será la más estable



Energía del enlace covalente

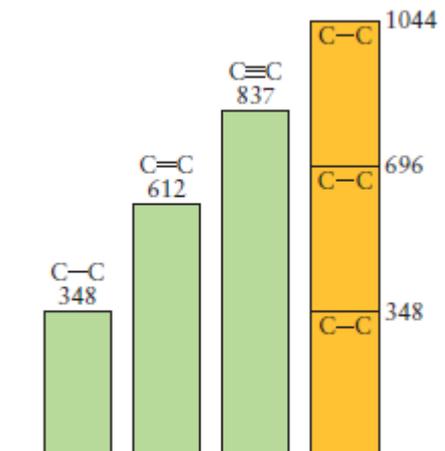
Las propiedades de las moléculas dependerán de la fuerza del enlace covalente

La energía para romper un enlace covalente, **Energía de disociación.**



- Cuanto mayor es la energía de enlace, mayor es su pozo de potencial

- Los enlaces múltiples son de mayor energía que los enlaces simples (pero no dobles y triples)





Energía del enlace covalente

- La distancia debilita la fuerza del enlace, a mayor distancia entre átomos menor es la energía del enlace

Longitud de enlace en (pm)

$$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$$

Enlace	pm
C—H	109
C—C	154
C=C	134
C···C*	139
C≡C	120
C—O	143
C=O	112
O—H	96
N—H	101
N—O	140
N=O	120

Longitud de enlace promedio

Enlace	pm
H ₂	74
N ₂	110
O ₂	121
F ₂	142
Cl ₂	199
Br ₂	228
I ₂	268

Longitud de enlace



Energía del enlace covalente

H ₂	424
N ₂	932
O ₂	484
CO	1062
F ₂	146
Cl ₂	230
Br ₂	181
I ₂	139
HF	543
HCl	419
HBr	354
HI	287

Molécula E. Disociación (kJ/mol)

C—H	412	C—I	238
C—C	348	N—H	388
C=C	612	N—N	163
C⋯C*	518	N=N	409
C≡C	837	N—O	210
C—O	360	N=O	630
C=O	743	N—F	195
C—N	305	N—Cl	381
C—F	484	O—H	463
C—Cl	338	O—O	157
C—Br	276		

* Resonancia benceno

Energía de disociación promedio para diferentes enlaces (kJ/mol)



Propiedades de los compuestos covalentes

Constituyen moléculas a partir de un número definido de átomos iguales o diferentes

En condiciones normales pueden ser sólidos líquidos o gases

Bajos puntos de fusión y ebullición

En disolución no son buenos conductores de la electricidad

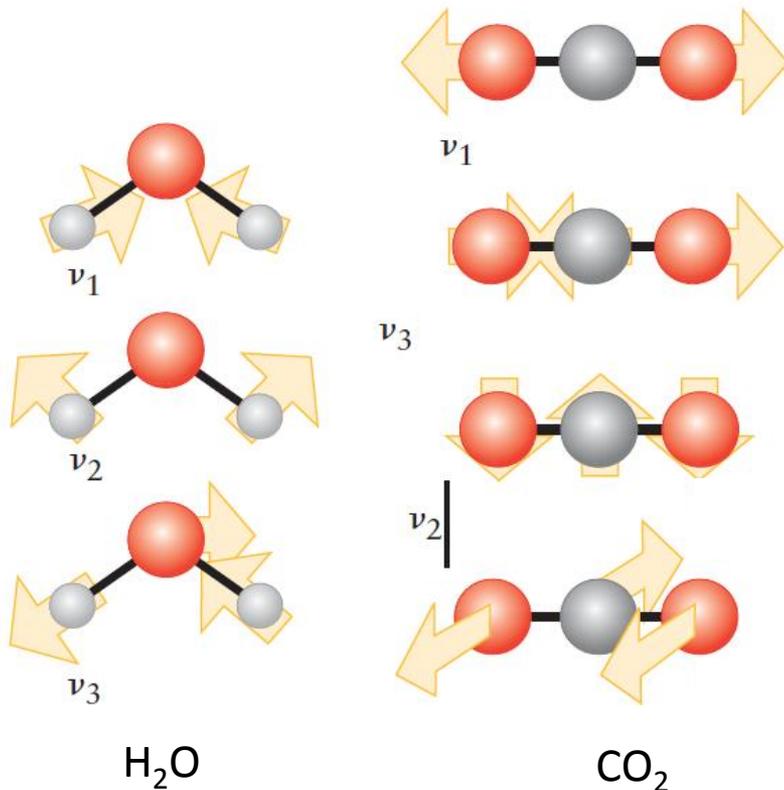
La mayoría son insolubles en disolventes polares como el agua

La mayoría son solubles en disolventes no polares como el tetracloruro de carbono (CCl_4) o el Hexano (C_6H_{14})



Vibración del enlace

Aunque a priori los enlaces puedan parecer uniones rígidas, los átomos 'vibran' alrededor de un enlace, existen pequeños movimientos de los núcleos atómicos alrededor de las posiciones de equilibrio del enlace



En función de la geometría de la molécula y el número de átomos de esta existen diferentes modos normales de vibración

A partir del estudio de estos movimientos se puede obtener un montón de información sobre las moléculas



Técnicas espectroscópicas

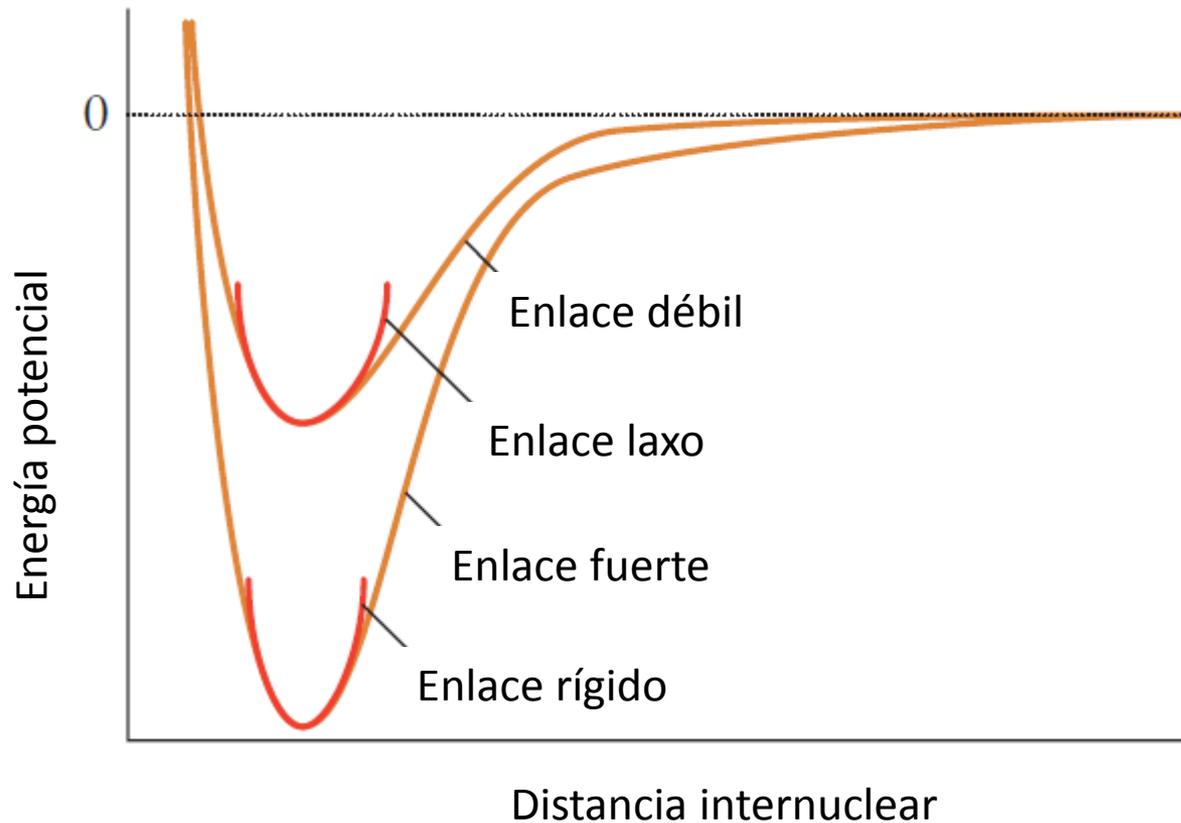
2.3 Enlace Covalente



Diferentes curvas de potencial caracterizan enlaces de distinto tipo

Profundidad de la curva \longrightarrow Fuerza del enlace

Inclinación del valle \longrightarrow Rigidez del enlace

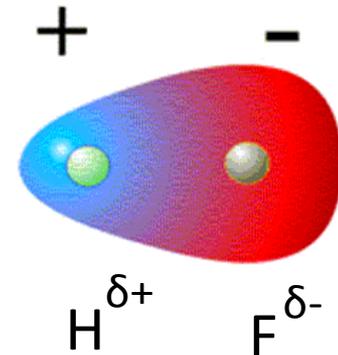
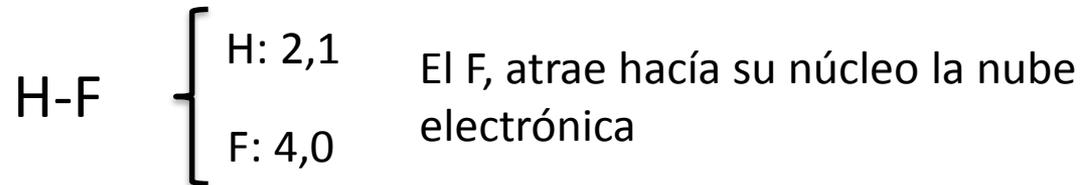




Electronegatividad

Electronegatividad: Capacidad de un átomo para atraer hacia sí los electrones de un enlace químico

Medimos la capacidad relativa de cada átomo, según la tabla del Tema 2.

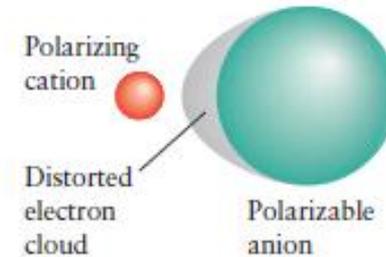


Si la diferencia de electronegatividad es grande se genera, **un enlace polar**, puesto que cada uno de los átomos queda parcialmente cargado



Polarizabilidad

En un enlace iónico existe cierta atracción de los electrones por parte de los cationes



Un catión pequeño, con la carga muy concentrada, tirará de los electrones con fuerza tiene por tanto un gran **poder polarizante**

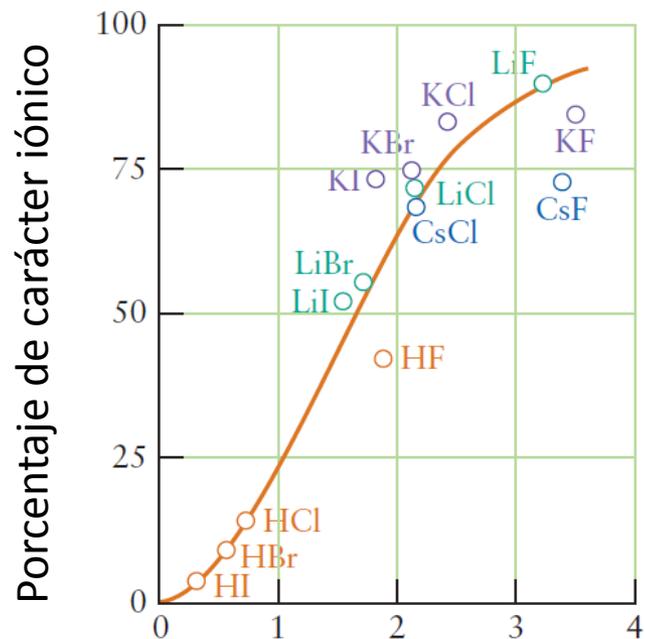
Un anión grande, con una nube electrónica muy dispersa, tenderá a ceder parte de la nube electrónica ante un catión con poder polarizante, será altamente **polarizable**

La polarizabilidad es la manera en que un enlace iónico muestra su tendencia covalente

2.4 Enlace Iónico Vs Enlace Covalente



% de carácter iónico



ΔX , diferencia de electronegatividad

Aunque físicamente no hay diferencia entre un enlace covalente polar y un enlace iónico se suele establecer la siguiente diferenciación, si la diferencia de electronegatividad > 2 enlace iónico, si es menor de 2 enlace covalente polar.

2.4 Enlace Iónico Vs Enlace Covalente



Cualquier enlace que se forme entre dos átomos tendrá cierta tendencia a ser comportarse como enlace iónico y cierta tendencia a comportarse como enlace covalente

No existen enlaces 100% iónicos o 100% covalentes

En función de las características de los átomos que componen un enlace existirá una mayor tendencia a formar enlace iónico (enlace de donación) o enlace covalente (enlace de compartición)



Geometría molecular

Las moléculas adquieren una disposición espacial, la cual afecta a sus propiedades físicas.

El modelo de Lewis, explica el enlace, pero no informa acerca de la forma que adoptan las moléculas en el espacio, no informa acerca de los ángulos de enlace.

El modelo de **Repulsiones de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia** permite de manera sencilla e intuitiva asignar una geometría determinada a las moléculas, en función de los electrones de valencia, minimizando la distancia angular entre los pares de e^- presentes en la molécula

Los dobles y triples enlaces, para la geometría, se consideran como enlaces sencillos. Cuando tenemos formas resonantes podemos aplicar RPECV a cualquiera de ellas.



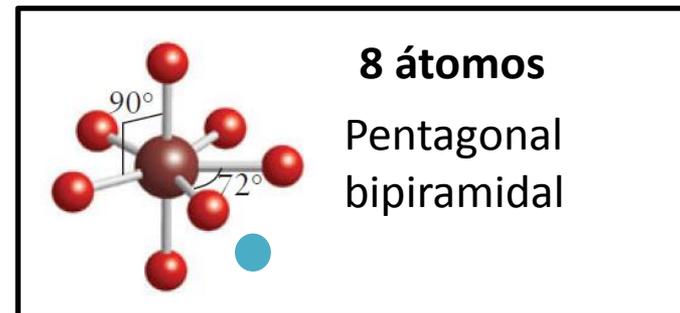
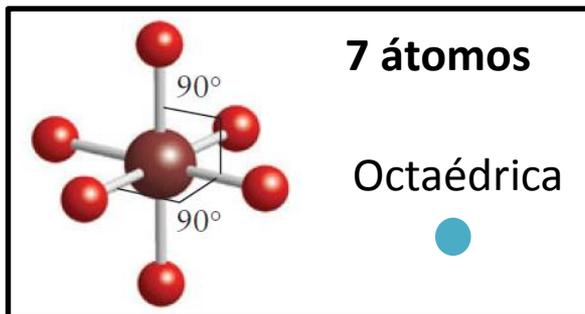
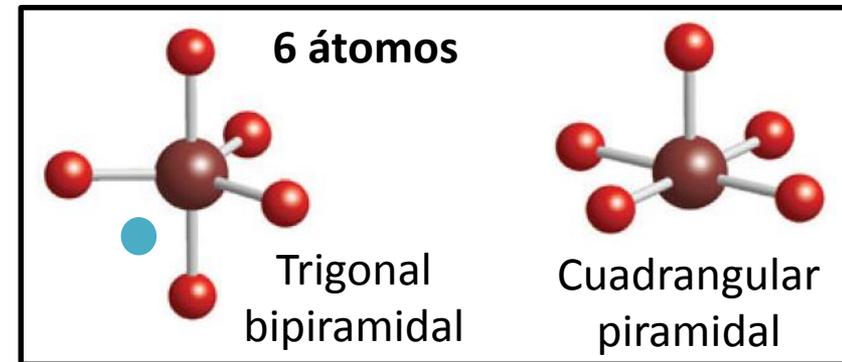
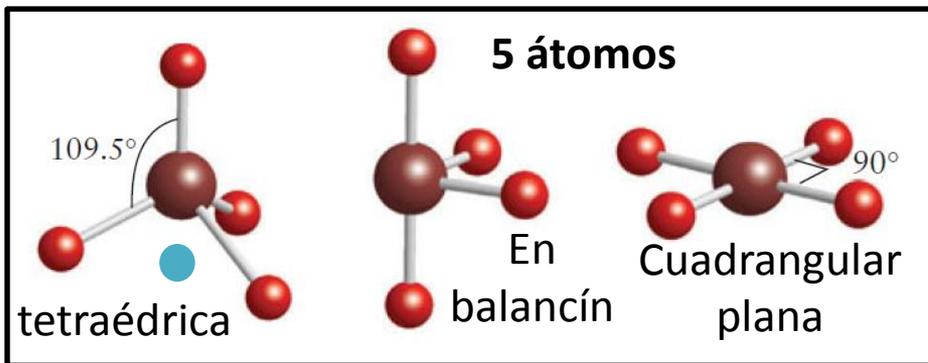
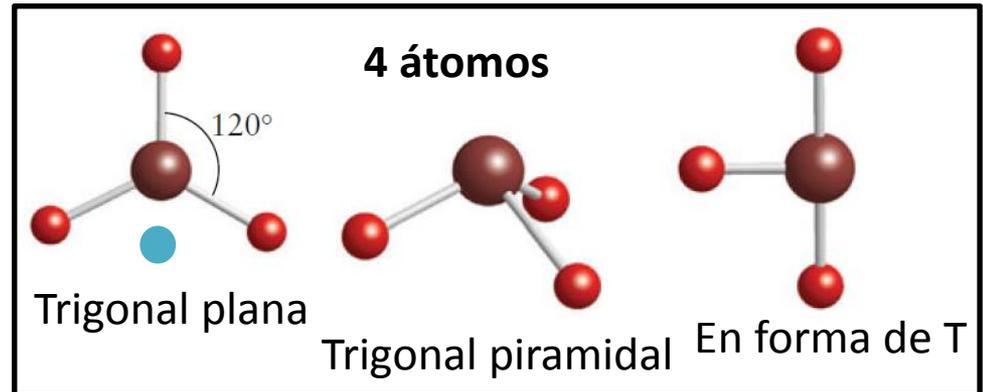
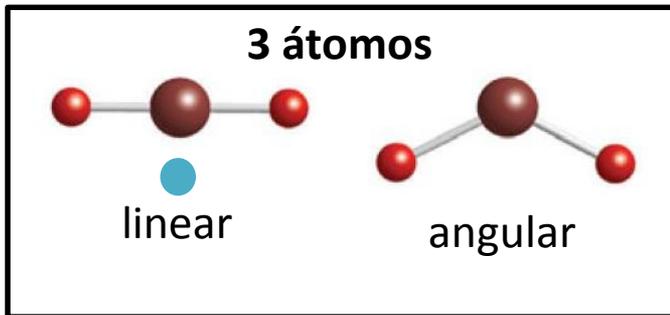
Geometría molecular

Para poder predecir la geometría de una molécula en función de los electrones de valencia de los átomos implicados necesitamos tener en cuenta tres conceptos:

- Los dobles y triples enlaces hay que tratarlos como enlaces sencillos
- Hay que tener en cuenta todos los pares de electrones enlazantes presentes entre los diferentes átomos implicados
- Los pares de electrones libres presentes en un átomo se tratan como si fuesen un par de electrones enlazantes

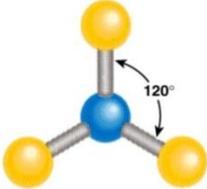
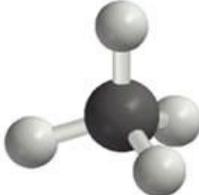
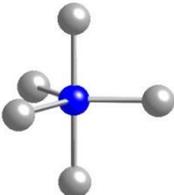
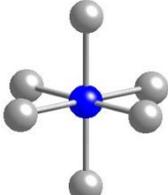


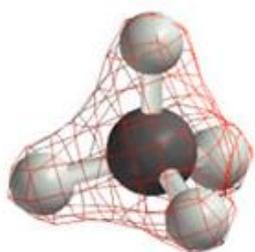
Posibles geometrías



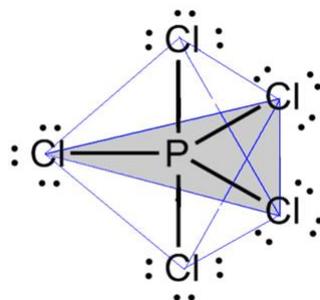
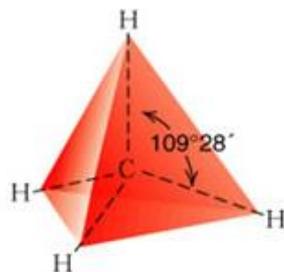


Átomo central sin pares de e⁻ libres

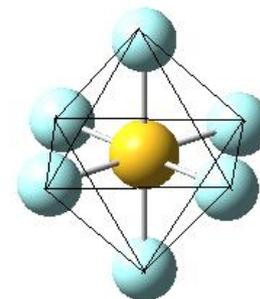
BeCl ₂	BF ₃	CH ₄	PCl ₅	SF ₆
2 pares de e- de enlace	3 pares de e- de enlace	4 pares de e- de enlace	5 pares de e- de enlace	6 pares de e- de enlace
180°	120°	109.5°	120°, 90°	90°
				
Lineal	Triangular plana	Tetraédrica	Bipirámide trigonal	Octaédrica



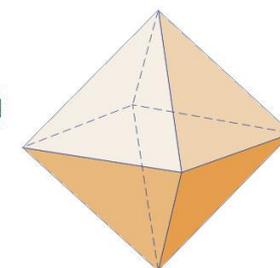
tetraédrica



Bipirámide trigonal



Octaedro



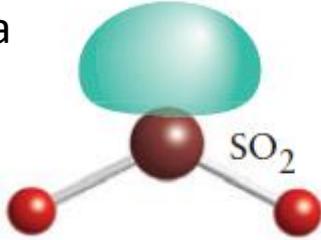


Átomo central con pares de e⁻ libres

Triangular plana

AX₂E

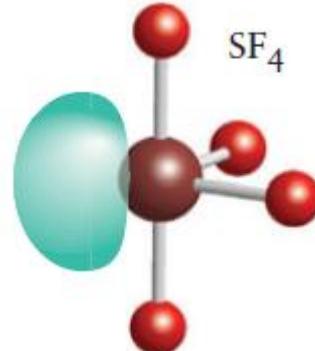
Angular



Bipirámide trigonal

AX₄E

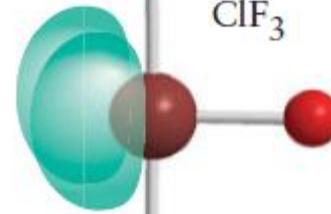
En balancín



Bipirámide trigonal

AX₃E₂

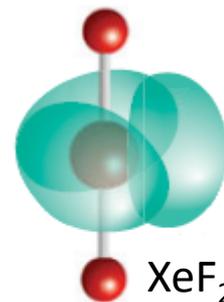
En forma de T



Bipirámide trigonal

AX₂E₃

Lineal



Octaédrica

IF₅

Cuadrangular piramidal

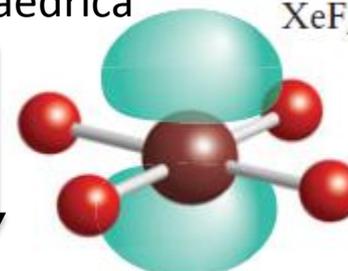
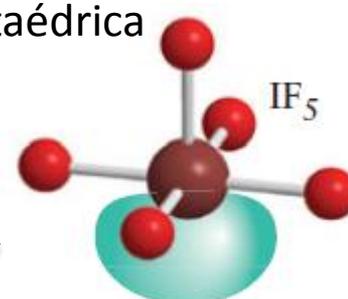
AX₅E

Octaédrica

XeF₄

Cuadrangular plana

AX₄E₂





Momento dipolar de enlace

El momento dipolar de enlace o momento de enlace indica si la polaridad de enlace es distinta de cero

Siempre que haya un enlace entre átomos diferentes, o con una electronegatividad diferente, se generará un momento dipolar

$$\mu = Q \cdot r$$

Q = carga; r = distancia entre cargas

μ se mide en Debye: $1D = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$

$\mu \neq 0$



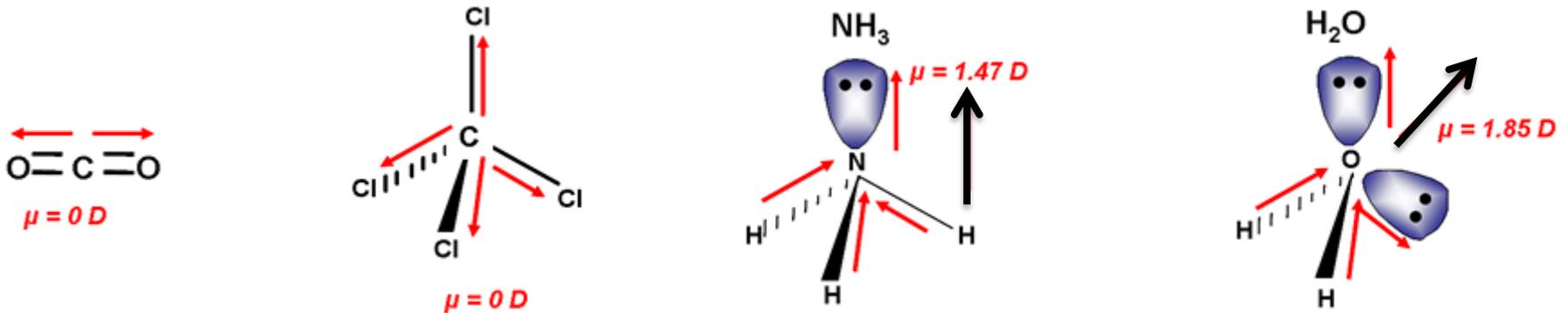
El enlace tiene momento dipolar y la densidad electrónica estará desplazada sobre uno de los átomos



Momento dipolar de una molécula

Una molécula se considera polar si la suma neta de todos los momentos dipolares de sus enlaces es distinta de 0

La geometría es crucial para conocer el momento dipolar de una molécula.



Los enlaces individuales pueden ser polares, y la molécula apolar.
El momento dipolar de la molécula se mide cómo el μ_{total} de la molécula



Teorías mecano-cuánticas para el enlace

El modelo RPECV permite explicar geometría pero no permite explicar las propiedades mecanocuánticas del enlace covalente. No explica que pasa con los orbitales de los distintos e⁻ involucrados

Para explicar la situación de los electrones y los orbitales involucrados en cada enlace, usamos dos teorías, la TEV y la TOM, ninguna de las 2 permite explicar al 100% todas las propiedades de los enlaces, pero cada una de ellas permite explicar muchas de las propiedades moleculares.

TEV → En una molécula los electrones interactúan a través de sus orbitales atómicos, generando orbitales distribuidos alrededor de más de un átomo

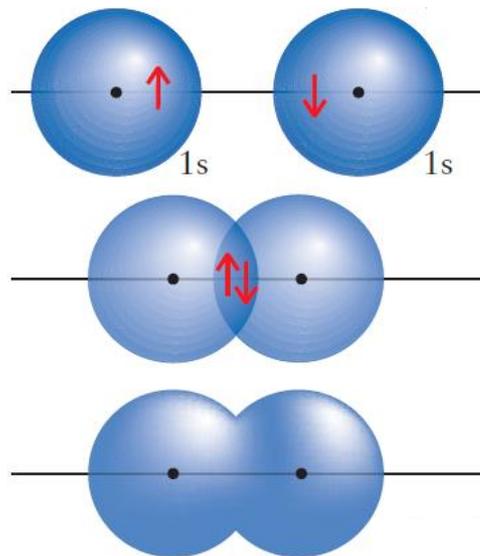
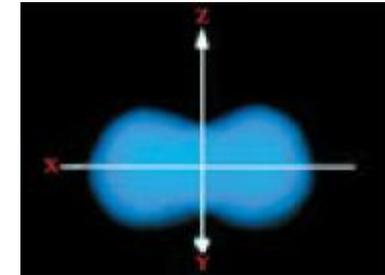
TOM → Los átomos enlazados generan orbitales moleculares, compuestos por todos los electrones pertenecientes a la molécula

Para poder estudiar los enlaces mediante estas dos teorías es necesario recurrir a la configuración electrónica de los átomos implicados



Enlaces sigma (σ)

Cuando existe una interacción directa entre 2 orbitales atómicos con un único átomo que solapan de forma directa se forma un orbital de tipo (σ)



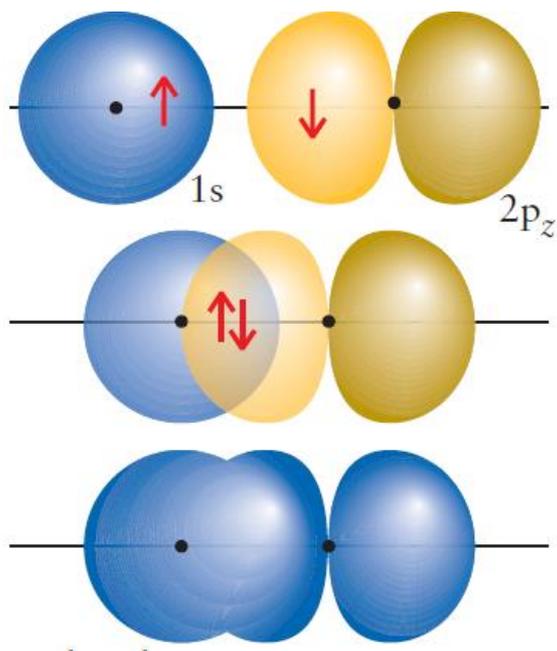
Enlace formado en la molécula de H_2

Para que exista un enlace sigma es necesario que la orientación de los orbitales atómicos sea la adecuada por esta razón 2 orbitales de tipo s siempre podrán interactuar para formar un enlace sigma

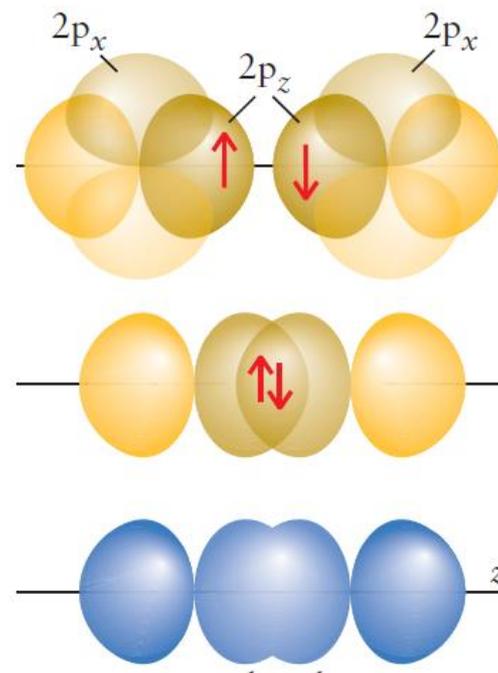
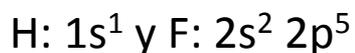


Enlaces sigma (σ)

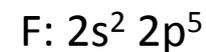
Existen otras posibles interacciones directas entre orbitales atómicos que nos dan lugar a enlaces de tipo sigma, por ejemplo la interacción entre orbitales s y orbitales p_z y la interacción entre orbitales p_z con orientación adecuada



Enlace formado en la molécula de HF



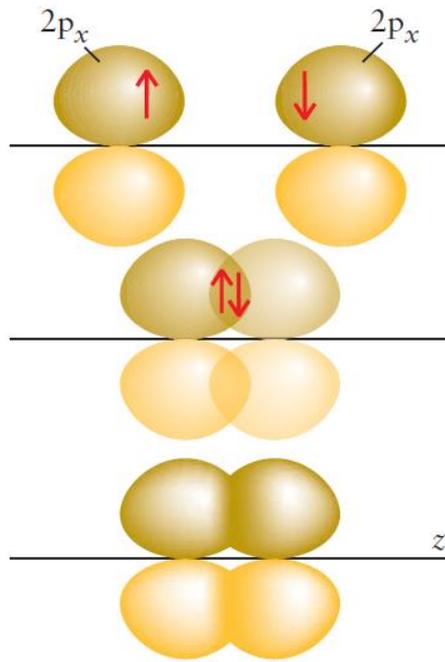
Enlace formado en la molécula de F_2





Enlaces pi (π)

Los enlaces π se forman por el solapamiento lateral de los orbitales p con orientación adecuada



La interacción entre orbitales p con orientación adecuada (de manera lateral) da lugar a los orbitales de tipo π

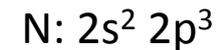
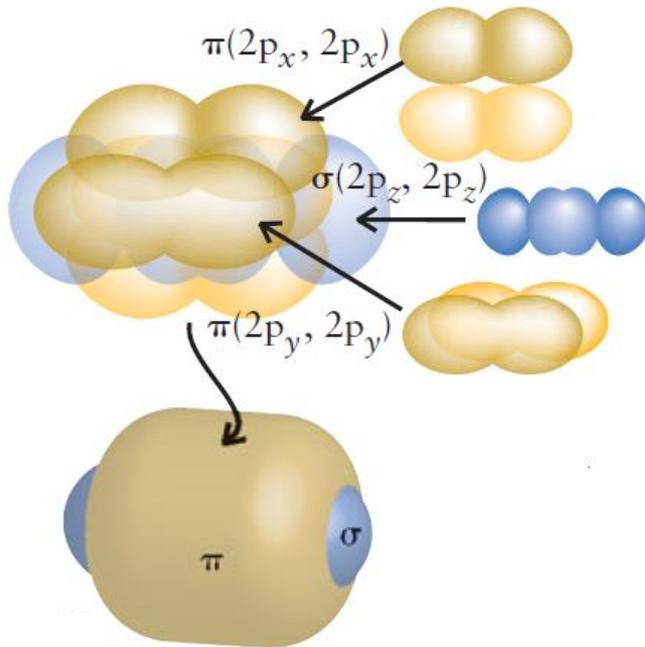
Orbitales p_x interaccionando de manera adecuada para la formación de un orbital π



Enlaces múltiples

La TEV permite explicar los enlaces múltiples a partir de la suma de enlaces σ y π

La molécula de N_2 esta explicada mediante un enlace triple entre los dos átomos de N



Los 3 orbitales p de los átomos de N interaccionan dando lugar a 1 enlace σ y 2 enlaces π . Lo que se traduce en un triple enlace.

Enlace simple = es un enlace σ

Enlace doble = es un enlace σ + un enlace π

Enlace triple = es un enlace σ + dos enlaces π

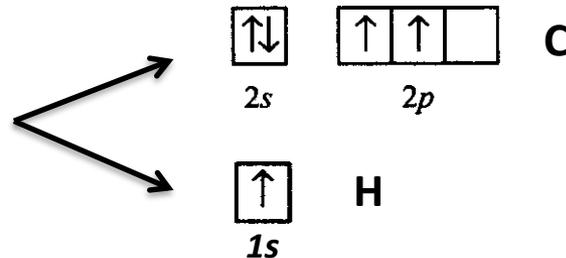


Hibridación de orbitales atómicos

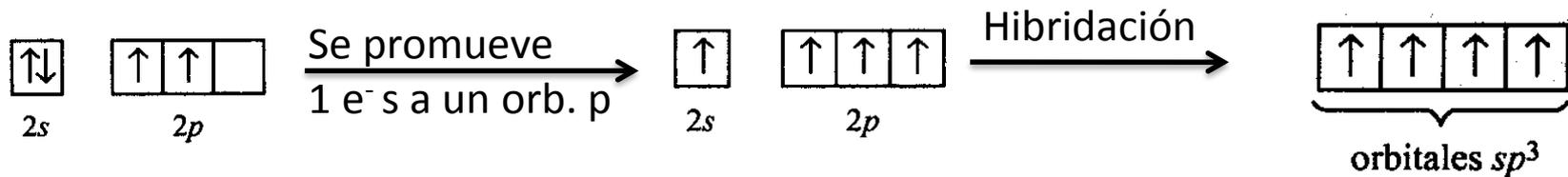
2 orbitales s solapan perfectamente, por geometría esférica como en el H_2 , pero orbitales con diferente geometría deben de adaptarse para un buen solapamiento.

Hibridación sp^3

Cuando el C y el H se enlazan



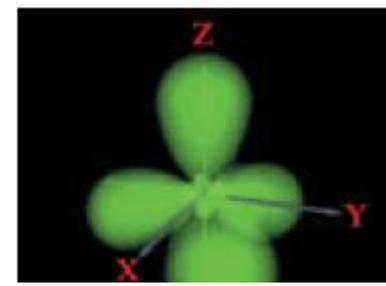
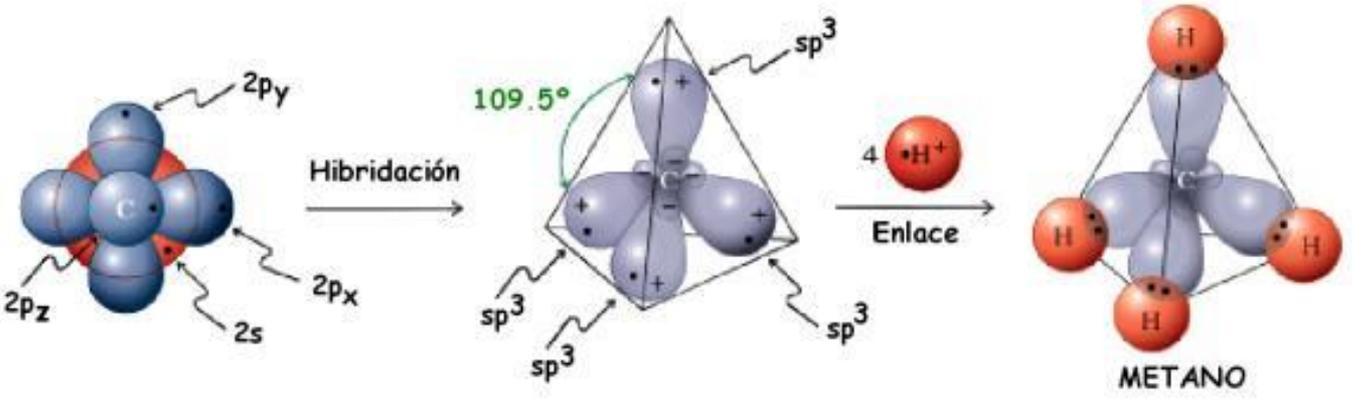
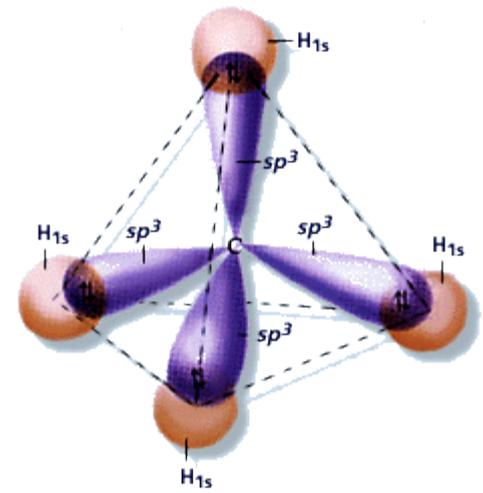
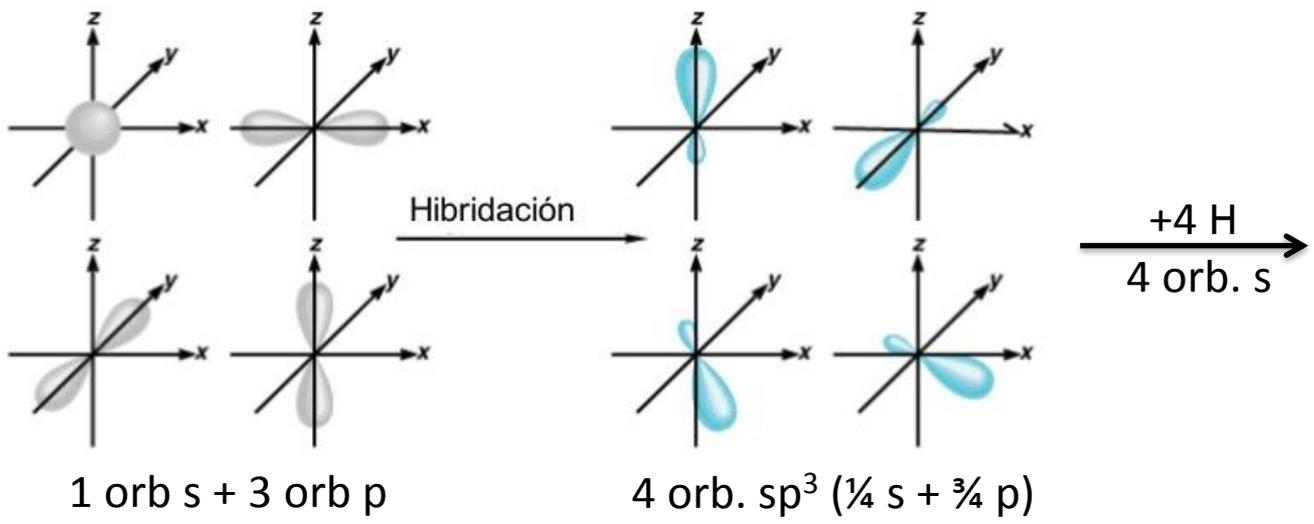
C Sólo 2 e^- desapareados, sólo 2 posibles enlaces, sin embargo CH_2 es inestable, es estable el metano CH_4



Cada 1 de los 4 orbitales sp^3 enlaza con 1 orbital s de los átomos de H $\rightarrow CH_4$



Hibridación de orbitales atómicos



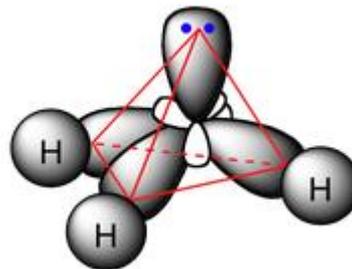
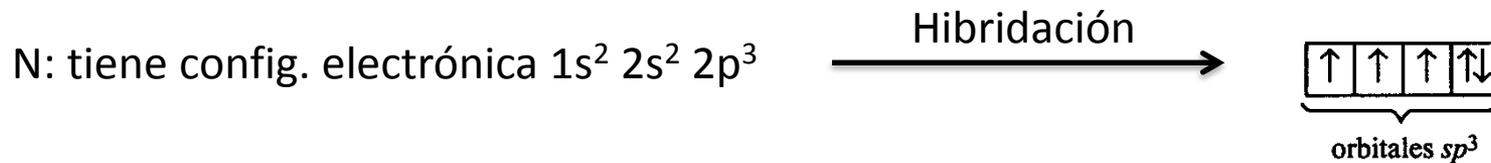
Se explica la geometría tetraédrica



Hibridación de orbitales atómicos

La hibridación permite explicar el modelo RPECV, se explica la geometría de las moléculas en base a la formación de orbitales híbridos.

Toda molécula tetraédrica, ya sea con pares de e⁻ libres en el átomo central o sin ellos se pueden explicar bajo la existencia de orb. sp^3



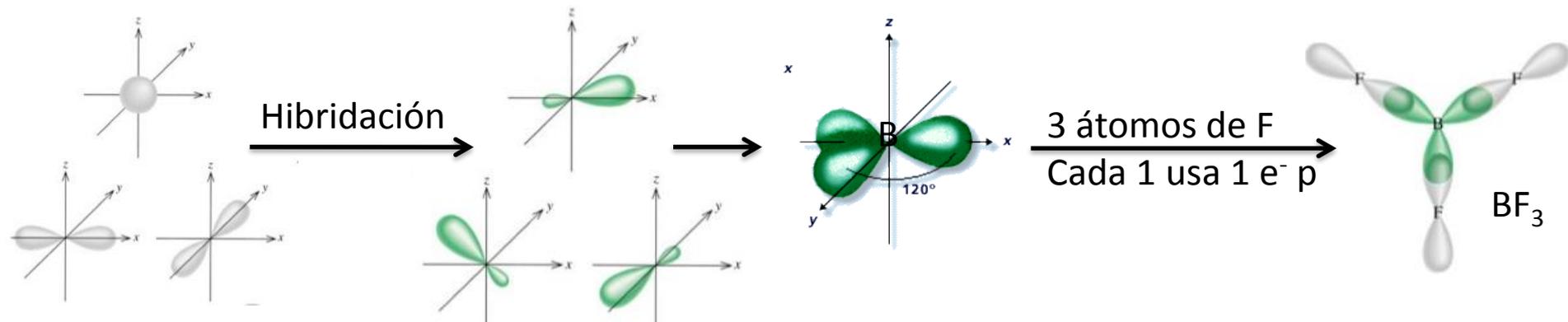
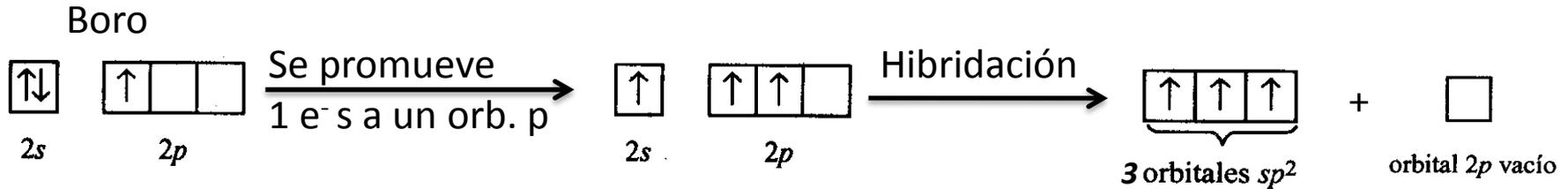
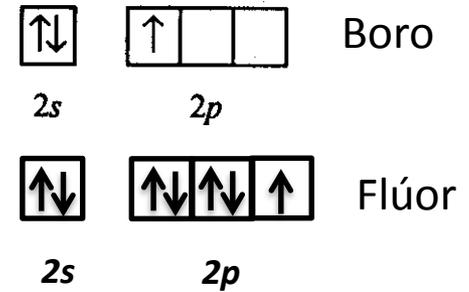
Amoníaco, NH_3



Hibridación de orbitales atómicos

Hibridación sp^2

Esta relacionada con la geometría: triangular plana (BF_3)

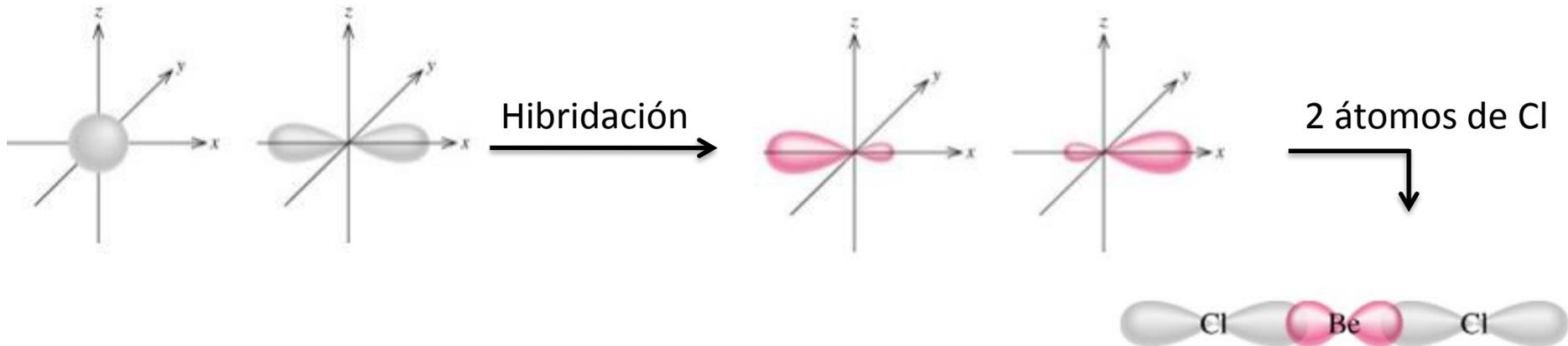
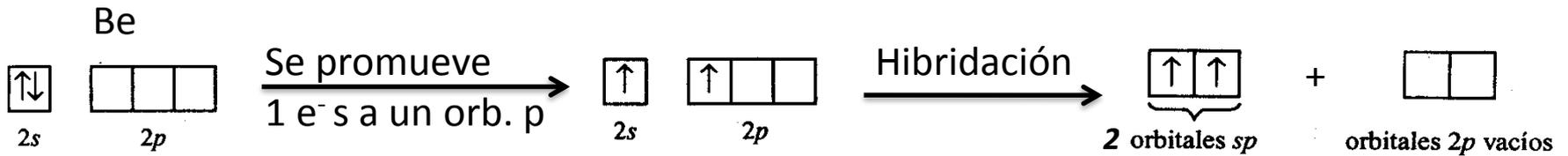
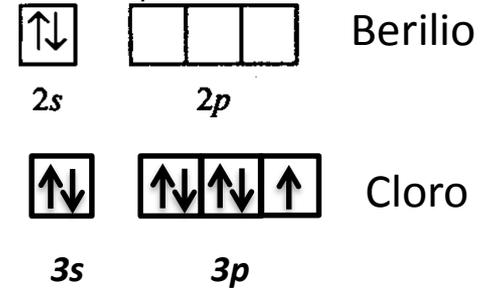




Hibridación de orbitales atómicos

Hibridación sp

Esta relacionada con la geometría: lineal (BeCl_2)





Reglas sobre orbitales híbridos

- La hibridación sólo aplica a moléculas, nunca a átomos aislados.
- Implica, por lo menos, la unión de 2 orbitales atómicos de diferente tipo, (s, p, d y f).
- El número de orbitales híbridos generados es siempre igual al número de orbitales atómico puros que participan en la hibridación.
- Tienen siempre formas diferentes a los orbitales atómicos.
- La hibridación requiere Energía, pero tras el enlace el sistema recupera de sobra esta energía.
- Los enlaces covalentes se forman por solapamiento de orbitales híbridos, de orbitales atómicos puros, o de ambos tipos.



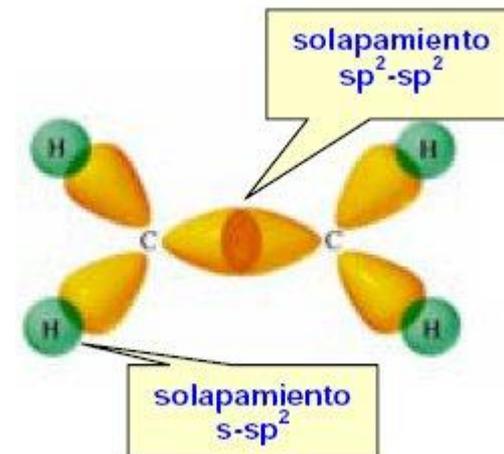
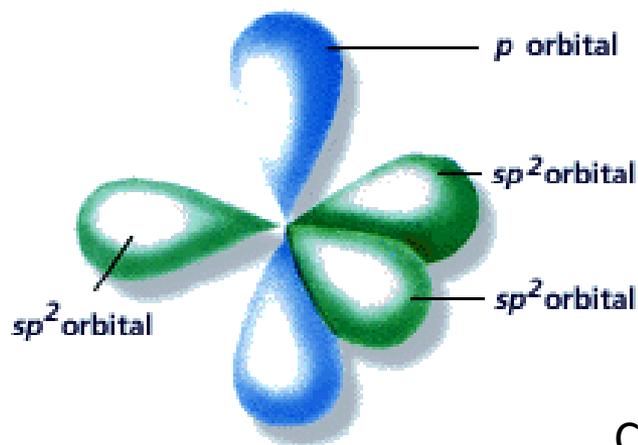
Hibridación en enlaces múltiples

La hibridación también nos permite explicar los dobles y triples enlaces en moléculas que a priori no tendrían tendencia a formar enlaces múltiples

Doble enlace

Para explicar la gran estabilidad del enlace del etileno C_2H_4 según la TEV tenemos que admitir que los átomos de C tienen hibridación sp^2

Cada C forma 3 orbitales sp^2 en el mismo plano y mantiene un orbital p perpendicular



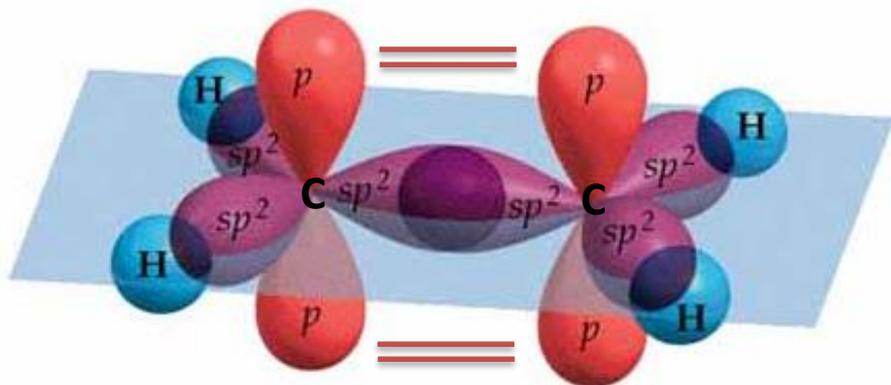
Cada orbitales sp^2 genera un enlace, 2 con los orbitales s de los H, y el restante entre 2 orbitales sp^2



Hibridación en enlaces múltiples

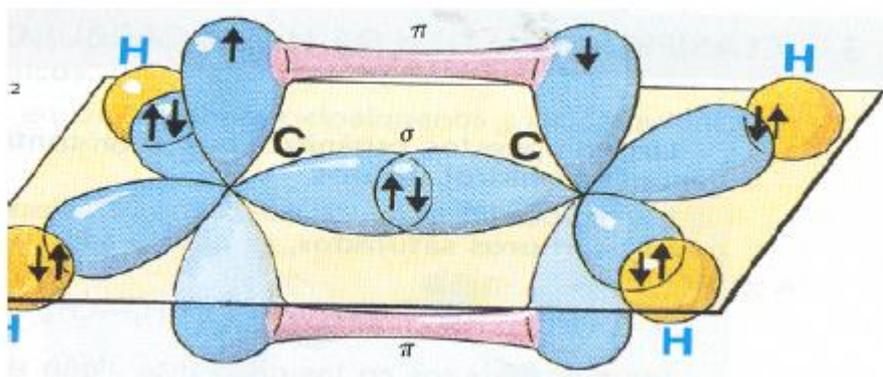
Los orbitales p, perpendiculares generan enlace por **solapamiento lateral**

solapamiento lateral



Enlace sigma (σ) enlace por solapamiento de orbitales ya sean s y s, p y p o s y p.

Enlace pi (π) enlace por solapamiento lateral de orbitales p. Es algo más débil que el enlace σ .



doble enlace: enlace σ + enlace π es más débil que la suma de 2 enlaces σ por separado

C_2H_4 es una molécula plana, todos los átomos en el mismo plano

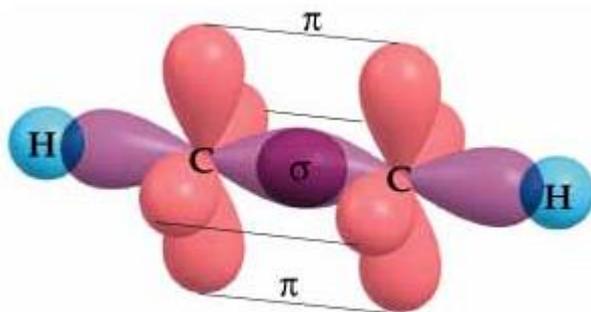




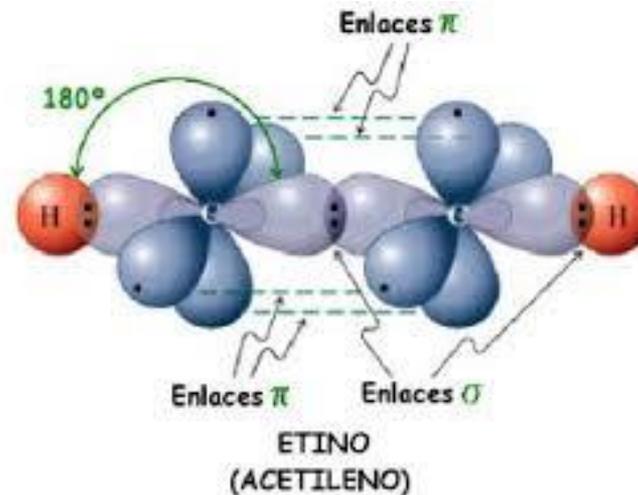
Hibridación en enlaces múltiples

Triple enlace

C_2H_2 Etino o acetileno, para explicar la estabilidad de esta molécula, admitimos que el C tiene el orbital s y 1 orbital p con hibridación sp. Mientras que los 2 orbitales p perpendiculares



triple enlace: enlace σ + 2 enlace π



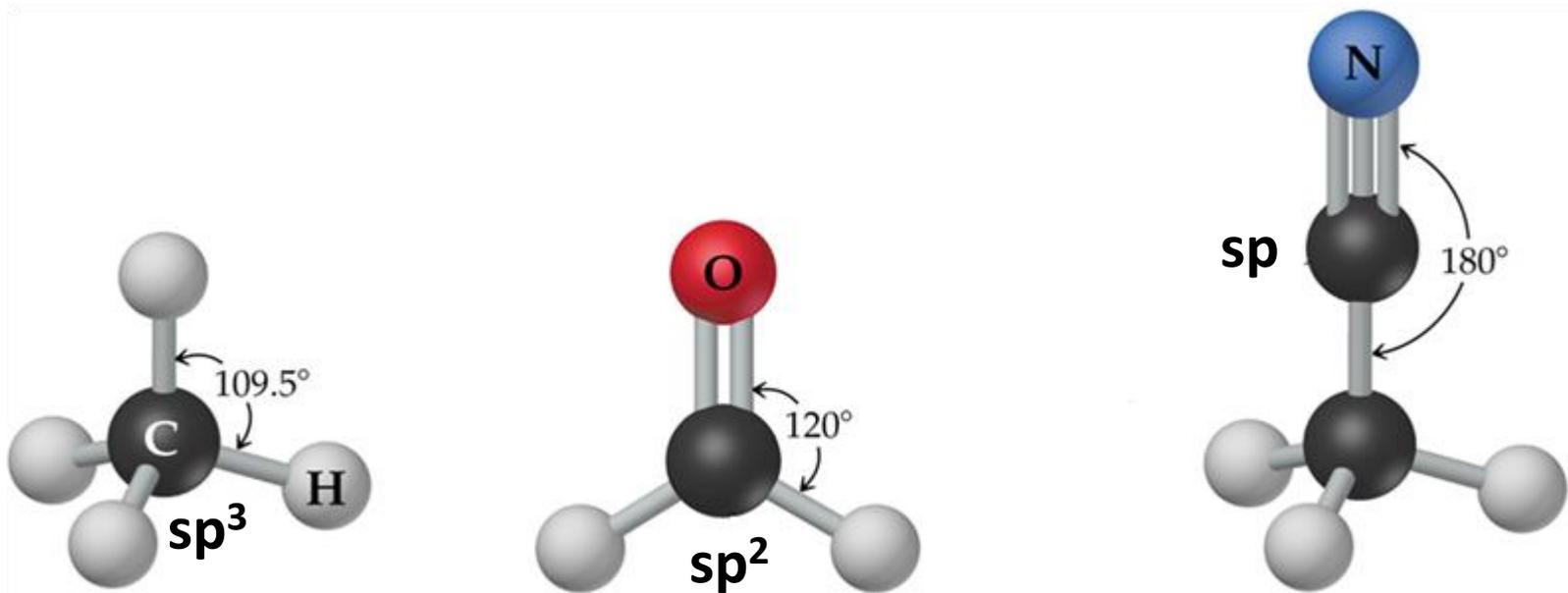


Hibridación en enlaces múltiples

Cuando un átomo de carbono forma 4 enlaces sencillos sufre una hibridación sp^3

Cuando un átomo de carbono forma al menos 1 enlace doble sufre una hibridación sp^2

Cuando un átomo de carbono forma 1 enlace triple sufre una hibridación sp





Existencia de Orbitales para toda la molécula

TEV \longrightarrow Geometría, fortaleza de enlaces múltiples y geometría de enlaces múltiples no sirve, para explicar la fuerza de algunos enlaces o algunas propiedades magnéticas

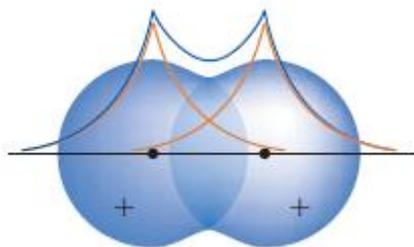
Es necesario que exista un **orbital molecular**, no un solapamiento de los diferentes orbitales atómicos o de orbitales híbridos si no la existencia de un orbital común a toda la molécula.

Los orbitales moleculares se localizan sobre toda la molécula y no sobre los pares enlazantes o pares solitarios

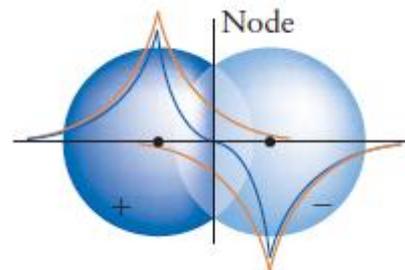
\longleftarrow Teoría de **O**rbitales **M**oleculares

Según esta teoría el solapamiento de dos orbitales atómicos, da lugar a un par de orbitales moleculares 1 enlazante (de menor energía) y otro antienlazante (de mayor energía).

2.6 Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)



Interacción constructiva
enlazante



Interacción destructiva
antienlazante

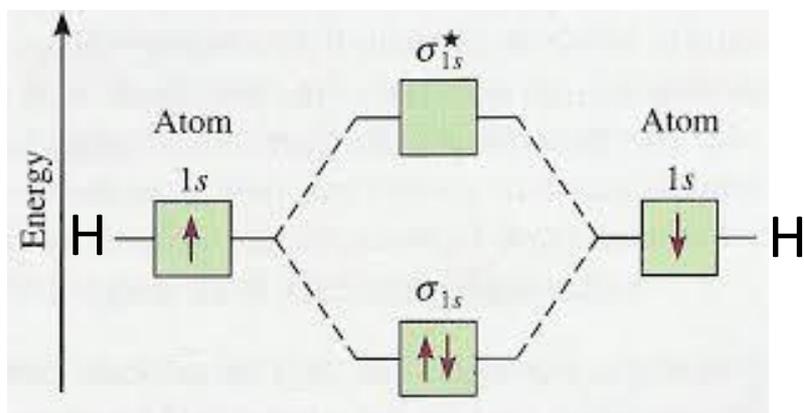
e^- en el orbital molecular enlazante produce un enlace covalente estable

e^- en el orbital molecular antienlazante* produce un enlace covalente inestable

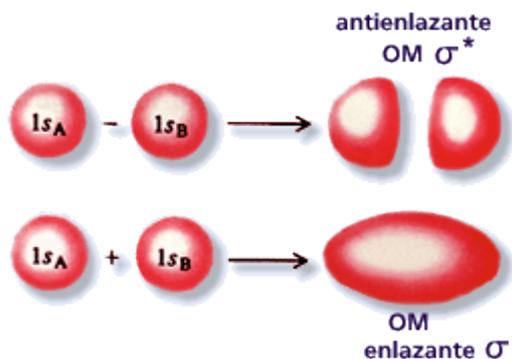


Interacciones de orbitales s

Para el H_2 , tenemos 2 orbitales s, tenemos la generación de un orbital σ , y un orbital σ^*



El orbital molecular enlazante (σ) es de menor energía que el orbital atómico de partida



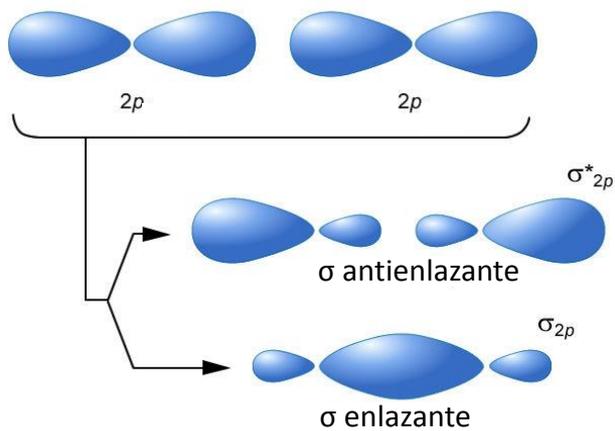
El orbital molecular antienlazante (σ^*), es de mayor energía que el de partida.

Para cualquier orbital s, (2s, 3s,...) el tratamiento es el mismo que para el orbital 1s

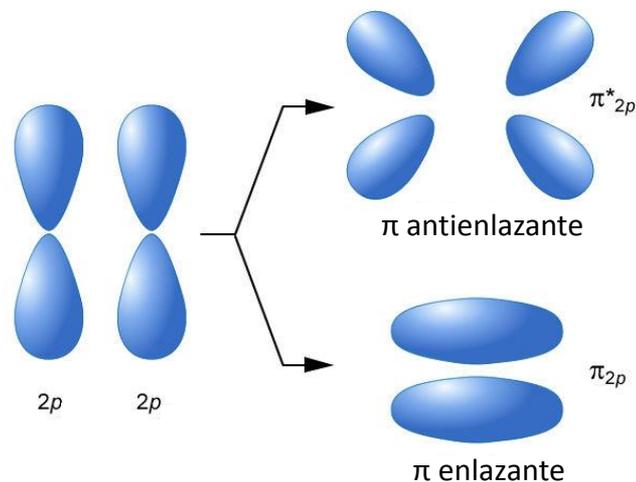


Interacciones de orbitales p

2 posibilidades



Interacción frontal (orbital σ)



Interacción lateral (orbital π)



Diagramas de Energía de Orbitales Moleculares

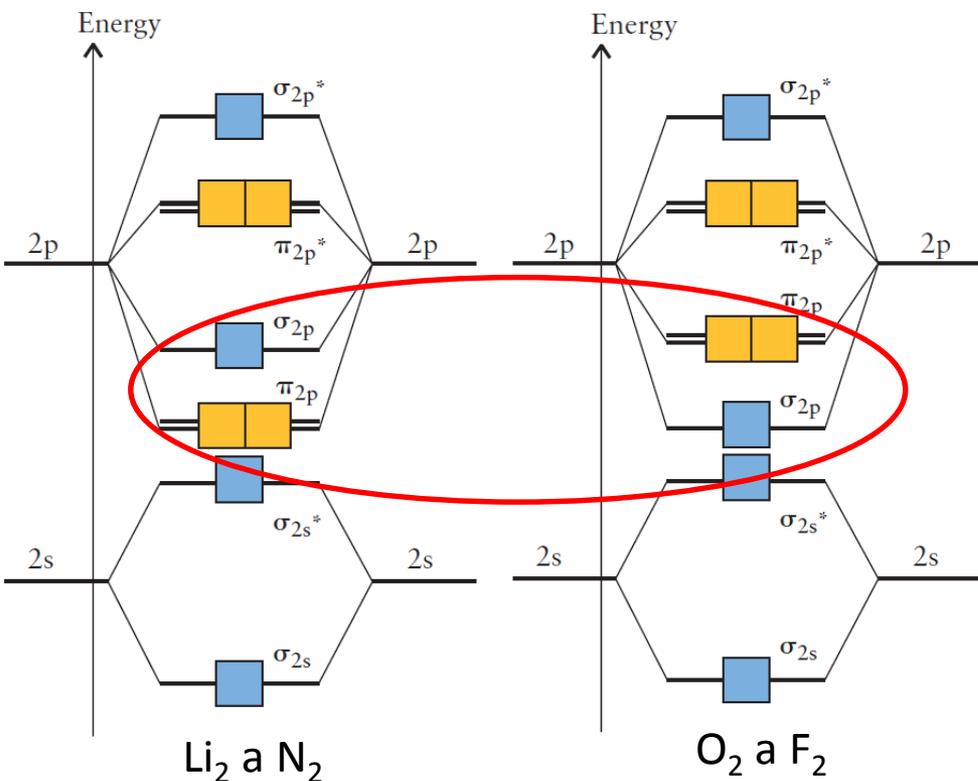


Diagrama general de niveles de energía de orbitales moleculares

Dependiendo de la molécula que se quiera estudiar, los orbitales atómicos tendrán diferente número de electrones, y se irán rellenando de manera distinta, pudiendo demostrar propiedades como el **Orden de Enlace**, o propiedades magnéticas, cómo si una sustancia es **diamagnética o paramagnética**.

La TOM permite completar el conocimiento sobre los enlaces covalentes



Diagramas de Energía de Orbitales Moleculares

A medida que la molécula se complica la TOM nos muestra la formación de orbitales más complejos, por interacción de los electrones de todos los átomos presentes en la molécula

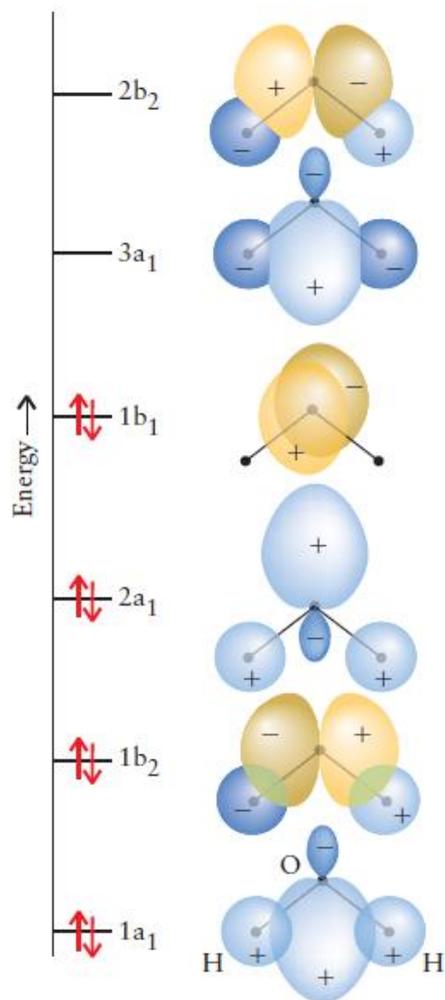


Diagrama de Orbitales moleculares para una molécula triatómica como es el H_2O