

# Enlace Covalente: Contenidos

ción

e Lewis. Regla del Octeto

para la formulación de estructuras de Lewis.

al sobre un átomo.

e resonancia.

s a la regla del octeto.

ía molecular (RPECV)

y Polaridad molecular.

el Enlace de Valencia (TEV)

Fundamentales.

a moléculas sencillas.

de Orbitales Atómicos.

moléculas poliatómicas con enlace sencillo.

moléculas con enlaces dobles y triples.

# El Enlace de Orbitales Moleculares (TOM)

Fundamentales: **C**ombinación **L**ineal de **O**rbitales **A**tómicos: **CLOA**

atómicas sencillas homonucleares:

enlazantes y antienlazantes.

$\sigma$  y  $\pi$

Orden electrónica molecular: reglas para su construcción.

Orden electrónica molecular y diagrama de OM

moléculas diatómicas sencillas heteronucleares

moléculas poliatómicas: OM no enlazantes

# Introducción

formación de moléculas es conocida desde el principio de la Química.

Los enlaces son el “*pegamento*” que mantiene unido los átomos

¿Átomos que difícilmente forman enlaces y otros que forman enlaces fuertes?

¿Por qué algunos átomos no forman enlace se denominó **valencia**, pero este concepto era/es bastante **oscuro**

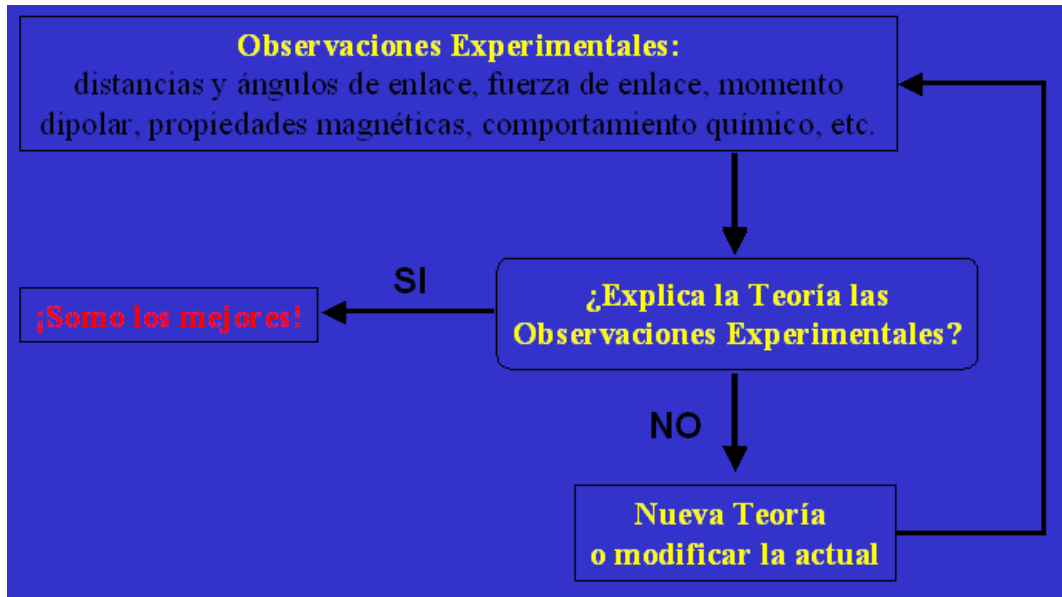
Después de la **Mecánica Cuántica** se desarrollaron varias **Teorías de Enlace**;  
sólo alguna tiene cierta utilidad

**Lewis** fue el primero que se dio cuenta de que:

1. En los enlaces covalentes sólo intervienen los **electrones más externos** (electrones de valencia)  
2. Los átomos del mismo grupo tienen propiedades químicas similares)

3. En los enlaces covalentes **valente** hay **compartición de electrones** entre los átomos enlazados

## Aplicación de cualquier Teoría de Enlace



Lo más importantes son las **distancias de enlace:**  
están **relacionadas con la fuerza del enlace**

(para átomos iguales)

Distancia de enlace (Å)

1.43

**distancia más corta implica**

1.21

**enlace más fuerte**

1.54

**igual distancia implica**

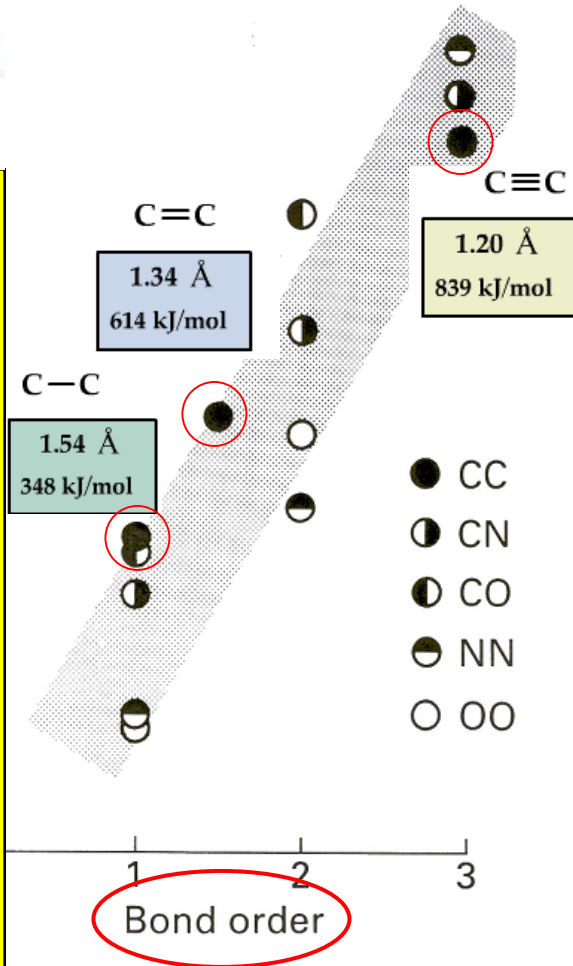
1.33

**igual fuerza de enlace**

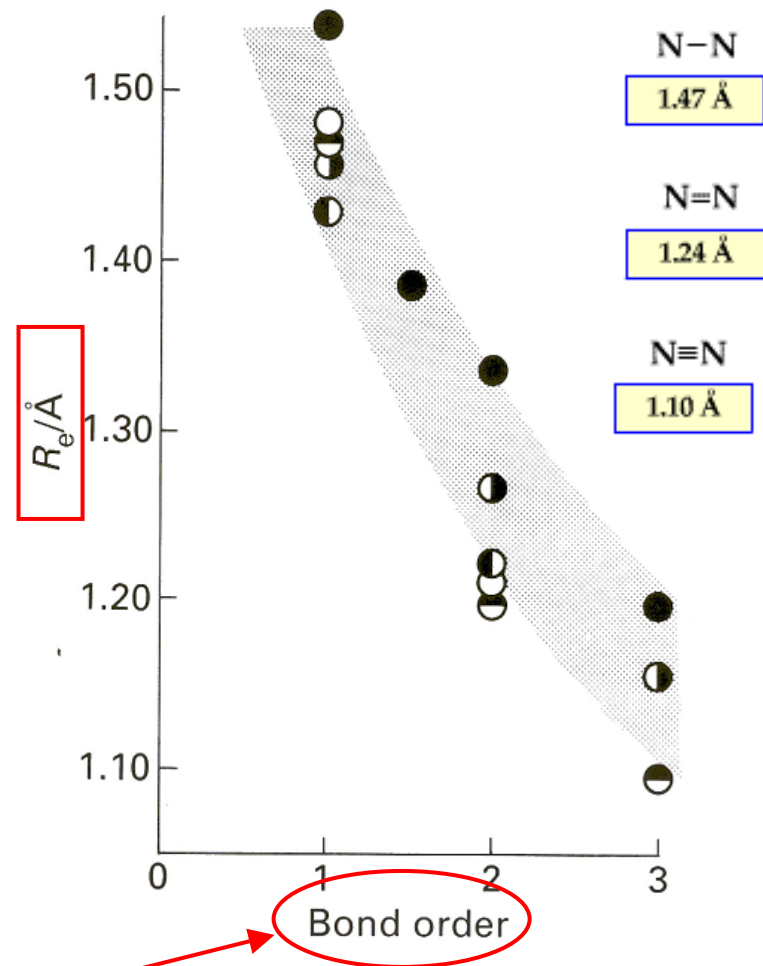
1.20

Ej: O<sub>3</sub> enlaces O-O iguales

## Energía de enlace vs orden de enlace



## Distancia de enlace vs orden de enlace



**orden de enlace:** medida cualitativa de la fuerza del enlace

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ---  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Teoría de Lewis.

**Electrones de valencia** desempeñan un papel fundamental en el **enlace químico**.

**Transferencia de electrones** conduce a los **enlaces iónicos**.

**Compartición de electrones** lleva a los **enlaces covalentes**.

Los electrones se transfieren o se comparten de manera que **los átomos adquieren una configuración de gas noble:**

**El octeto.**

El **enlace químico** se establece entre **dos átomos** de una **molécula** que **comparten un par de electrones**.

El **átomo** diferente del hidrógeno tiende a formar **enlaces** que rodea de **ocho electrones** de valencia.

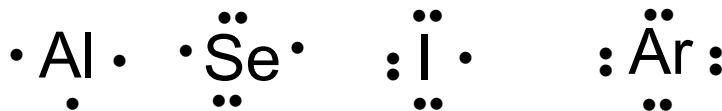
## Símbolos de Lewis



Un **símbolo químico** representa el **núcleo** y los **electrones internos** de un **átomo**.

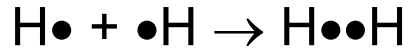
Los **puntos** situados alrededor del símbolo representan a los **electrones de valencia** o **electrones más externos**.

Distintos Grupos T.P.

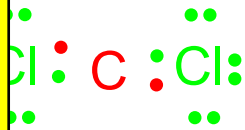
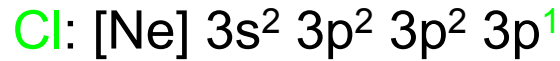
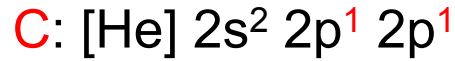


Mismo Grupo T.P.

ejemplos:

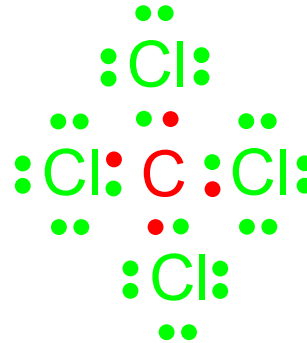
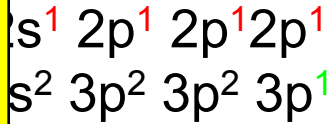


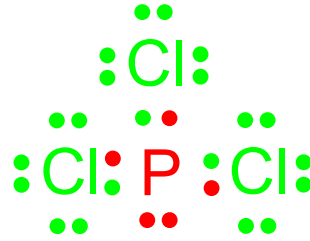
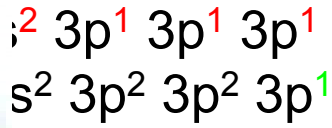
Considerando



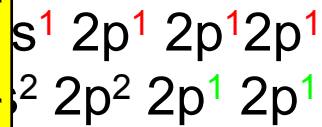
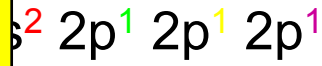
NO se cumple la regla del octeto

o bien se podría considerar la posibilidad de desaparecer electrones en el átomo de C (estado excitado)

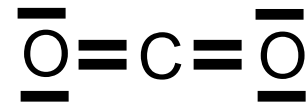




... nos comparten **dos o más pares de electrones**  
se forman **enlaces múltiples**



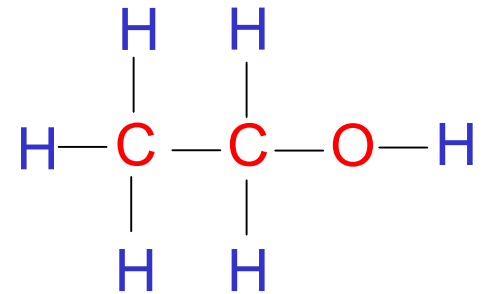
o





## estrategia para la formulación de estructuras de Lewis

La estructura básica del compuesto se representa poniendo los átomos en el espacio unidos por enlaces sencillos.



Se define el **ESQUELETO** de la molécula:

Se debe distinguir entre los átomos **centrales** y los **terminales**.

Se debe contar el **número total de electrones de valencia** disponibles sumando el número de electrones de valencia de cada átomo.

Se restará un electrón por cada unidad de carga positiva y se sumará un electrón por cada unidad de carga negativa.

Se debe asignar **los electrones por cada enlace** entre un átomo central y cada átomo que lo rodean en el esqueleto de la molécula.

Se debe verificar **los octetos** de los átomos.

Los electrones que no participan en enlaces se representan como **pares libres**.

En algunos casos es necesario establecer **enlaces múltiples** entre átomos que se rodean utilizando **pares no enlazantes** de éstos últimos.

ones adicionales:

**centrales** suelen ser los de **menor electronegatividad**.

de **C** son casi siempre **átomos centrales**.

de **H** son siempre **átomos terminales**.

**electrones de valencia** de los átomos de una estructura de Lewis  
ser en ella.

**te**, todos los **electrones están apareados**.

**te**, cada átomo requiere un **octeto**: H sólo requiere 2 *electrones*.

**C, N, O, P y S** son los que más fácilmente forman **enlaces  
útiples**.

**ras** suelen ser compactas y *simétricas*.

ejemplos:

1) Esqueleto



de electrones de valencia

$2 \text{p}^4 \rightarrow$	$6 \text{e}^-$	$1 \text{S} \rightarrow$	$6 \text{e}^-$
$2 \text{p}^4 \rightarrow$	$6 \text{e}^-$	$2 \text{O} \rightarrow$	$\frac{12 \text{e}^-}{18 \text{e}^-}$

de enlaces covalentes

tiende a completar su octeto:

octetos =  $2\text{e}^- \times n^\circ$  de átomos de H +  $8\text{e}^- \times n^\circ$  de átomos restantes

$$2\text{e}^- \times 0 + 8\text{e}^- \times 3 = 24 \text{e}^-$$

enlaces (compartidos) =  $n^\circ$  de  $\text{e}^-$  octetos -  $n^\circ$  de  $\text{e}^-$  de valencia

$$24 \text{e}^- - 18 \text{e}^- = 6 \text{e}^-$$

=  $n^\circ e^- \text{ enlace} / 2$  (cada enlace se forma con un par de  $e^-$ )

$2:$   $6/2 = 3 \text{ enlaces}$



e electrones sin compartir

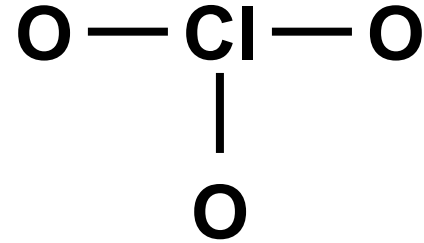
partir =  $n^\circ$  de  $e^-$  de valencia –  $n^\circ$  de  $e^-$  de enlace

$2:$   $18e^- - 6e^- = 12 e^-$  (seis pares)



orato)

### 1) Esqueleto



o de electrones de valencia

$$1 \times 7e^- + 3 \times 6e^- + 1 e^- = 26 e^-$$

o de enlaces covalentes

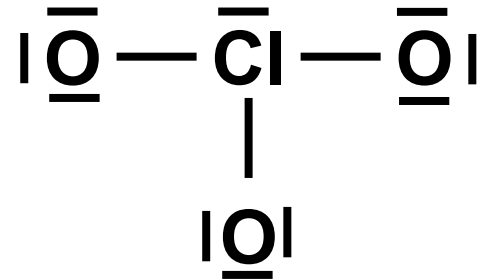
de octeto =  $2 e^- \times 0 + 8 e^- \times 4 = 32 e^-$   
*s para satisfacer todos los octetos)*

e electrones de enlace =  $32 e^- - 26 e^- = 6e^-$  (*compartidos*)

e enlaces =  $6e^- / 2 = 3$  enlaces

o de electrones sin compartir

=  $20 e^-$  (*10 pares*)



¿Dónde está la carga negativa?

onio)

## 1) Esqueleto



o) de electrones de valencia

$$1 \times 5e^- + 1 \times 6e^- - 1 e^- = 10 e^-$$

o) de enlaces covalentes

de octeto =  $2 e^- \times 0 + 8 e^- \times 2 = 16 e^-$   
*s para satisfacer todos los octetos)*

e electrones de enlace =  $16 e^- - 10 e^- = 6e^-$  (*compartidos*)

e enlaces =  $6e^- / 2 = 3$  enlaces

o) de electrones sin compartir



e- =  $4 e^-$  (*2 pares*)

¿Dónde está la carga positiva?

## Carga formal sobre un átomo

La **carga formal** sobre un átomo se define como la **diferencia** entre el **número de electrones de valencia** del átomo libre y el **número de electrones asignados** a ese átomo en la estructura de Lewis.

**Carga formal** =  $n^\circ \text{ e}^- \text{ valencia átomo libre} -$

$= n^\circ \text{ total e}^- \text{ no compartidos} - \frac{1}{2} (n^\circ \text{ e}^- \text{ enlace})$

Las **cargas formales** se utilizan para **elegir la estructura** de Lewis **correcta** para un determinado compuesto químico:

**Reglas generales:**  
 - **Regla de las neutras:** Se prefiere aquella estructura de Lewis para la cual las **cargas formales** sobre todos los átomos sean **nulas**.

- **Regla de la carga neta:** La **carga formal** es igual a la **carga neta** de la especie.

- **Regla de la carga neta:** La **carga formal** del mismo signo en átomos adyacentes es poco probable.

- **Regla de la carga neta:** Las **estructuras de Lewis** con **cargas formales altas** (+2, +3, -2, -3, etc...) son **menos probables** que aquellas con **cargas formales pequeñas**.

- **Regla de la carga neta:** Entre **distribuciones similares** de **cargas**, la **estructura de Lewis** más probable es la en la cual las **cargas negativas** están sobre los **átomos más electronegativos**.

lorato)

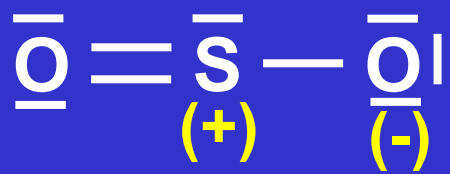


sonio)

$$6 - 2 - 6/2 = +1$$

$$-4 - 4/2 = 0$$

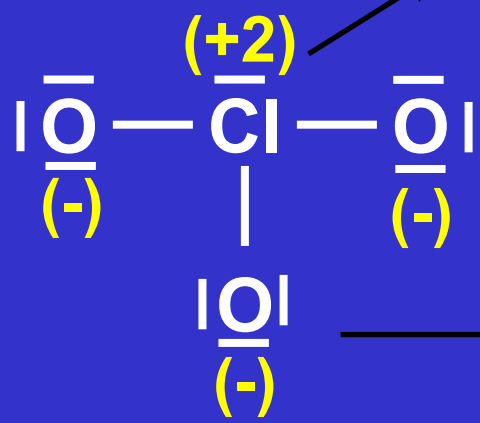
$$6 - 6 - 2/2 = -1$$



$$7 - 2 - 6/2 = +2$$

$$6 - 6 - 2/2 = -1$$

$$6 - 6 - 2/2 = -1$$



$$6 - 6 - 2/2 = -1$$

$$5 - 2 - 6/2 = 0$$

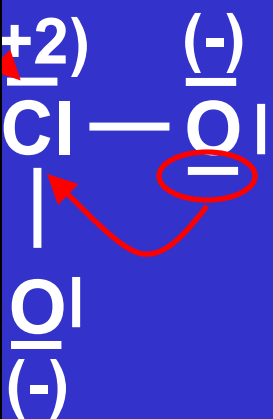
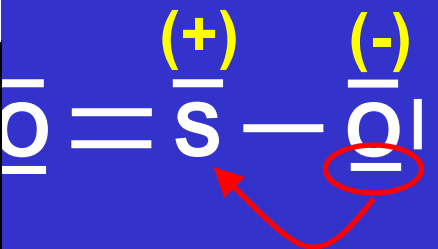
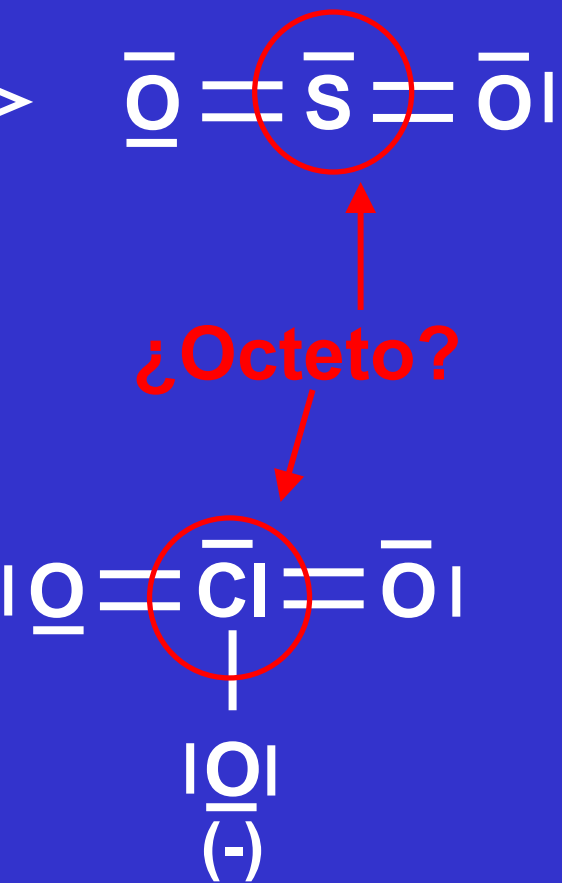


$$6 - 2 - 6/2 = +1$$

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVIA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



En algunos casos se pueden **eliminar cargas formales** de distinto signo en átomos adyacentes por **formación de enlaces adicionales**; el átomo con carga negativa aporta los dos electrones de enlace: **ENLACE DATIVO**

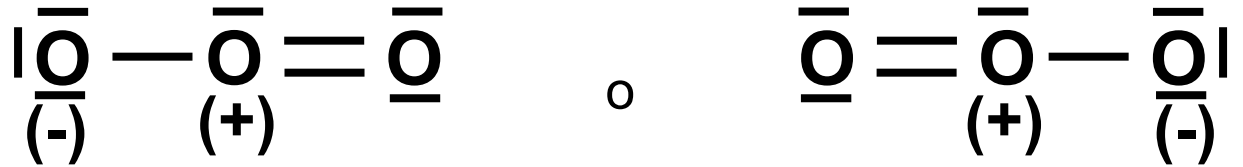


(perchlorato)

## Concepto de resonancia

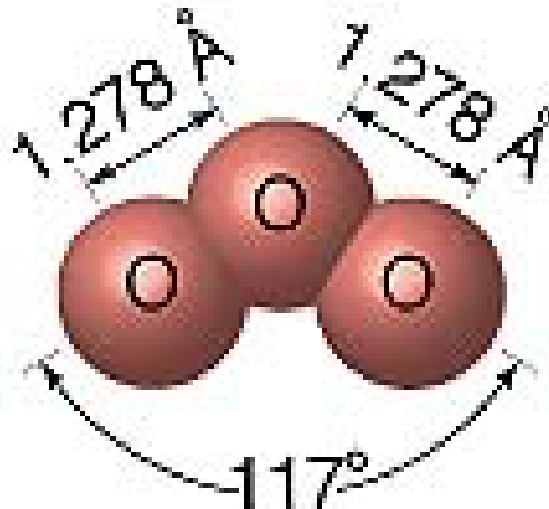
En algunos casos es posible dibujar **dos o más estructuras** de Lewis y **no es posible elegir** una u otra en función de los valores de las energías de enlace.

¿ Posibles estructuras ?



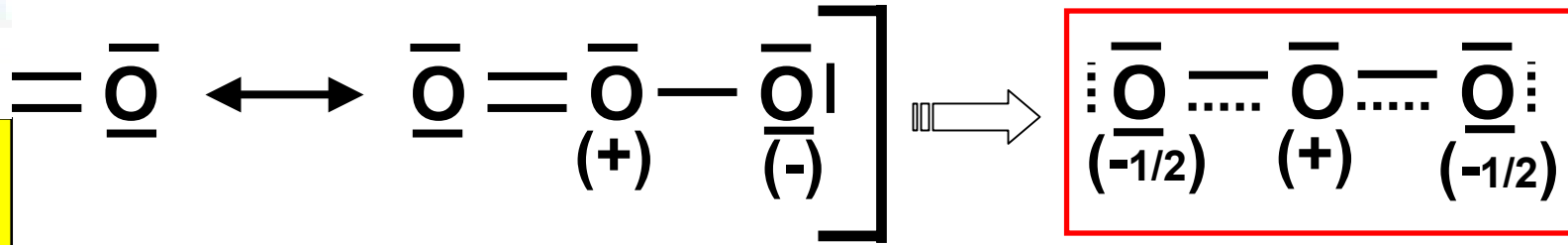
En la molécula de  $O_3$  las dos distancias O-O son iguales:

ninguna de las estructuras representa la realidad

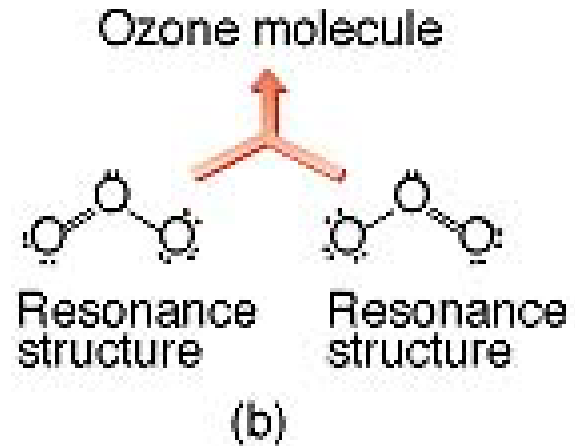
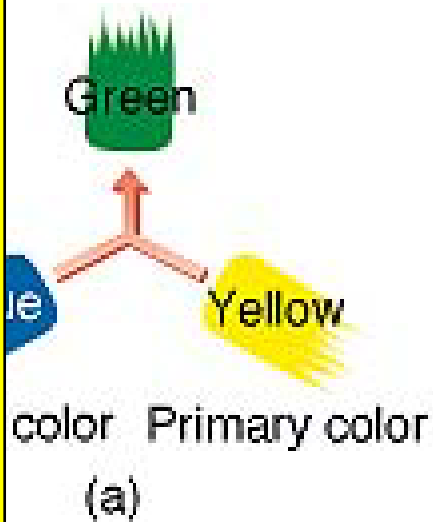


es una **situación intermedia**

de las dos (o más) formas resonantes.



... o **formas resonantes** del  $\text{O}_3$



onato) (todas las distancias C-O son iguales)

$$\text{valencia} = 1 \times 4e^- + 3 \times 6e^- + 2 e^- = 24 e^-$$

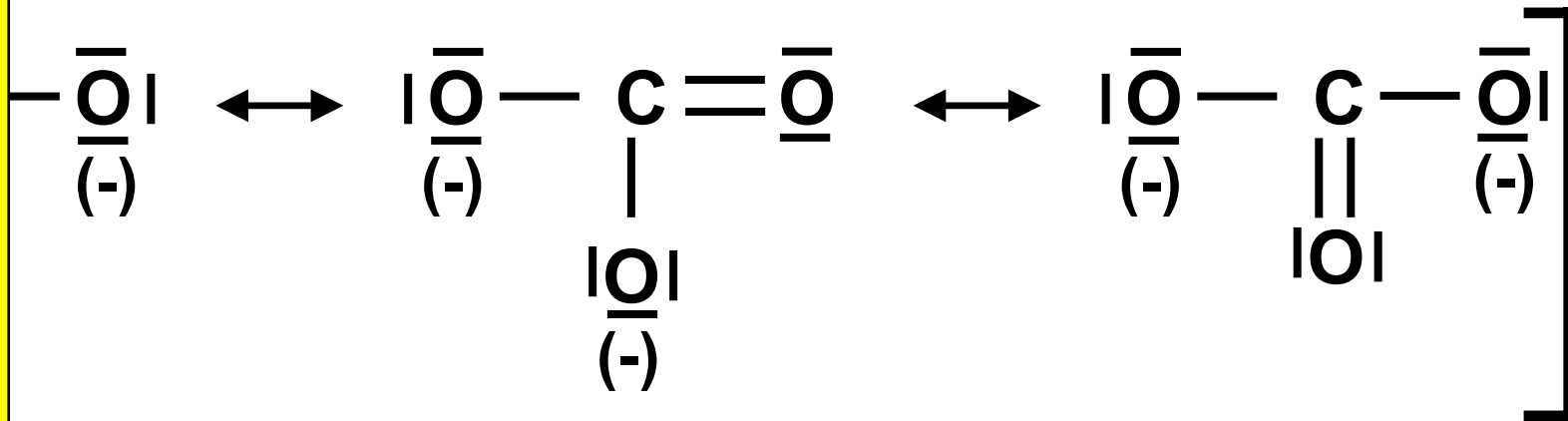
$$\text{octeto} = 4 \times 8e^- = 32 e^-$$

$$\text{enlace} = 32 e^- - 24 e^- = 8 e^- \quad \Rightarrow$$

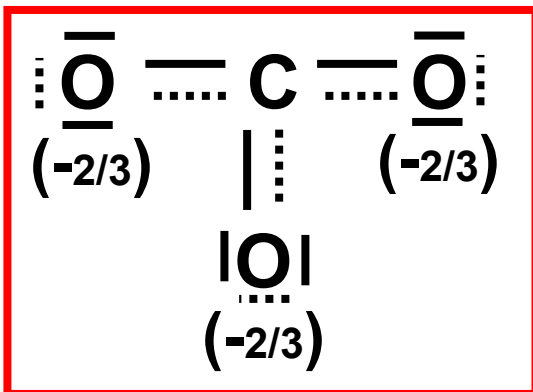
4 enlaces

$$\text{compartir} = 24 e^- - 8e^- = 16 e^- \quad \Rightarrow$$

8 pares



Estructuras o **formas resonantes** del *carbonato*



Orden de enlace C-O: **4/3**  
(Intermedio entre sencillo y doble)

## Excepciones a la regla del octeto

Tipos de excepciones a la regla del octeto:

o incompleto.

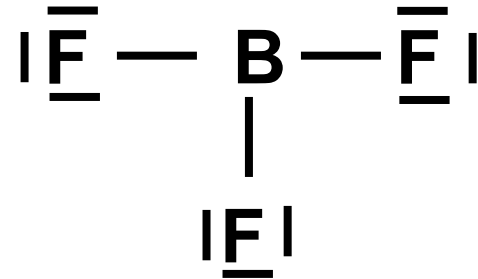
Numero de electrones que rodean al átomo central en una molécula es menor que ocho (8); para átomos **Be, B y Al**



(dos enlaces)



(tres enlaces)



Moléculas con número impar de electrones.

que no pueden cumplir la regla del octeto: 8 y 2 son números pares.

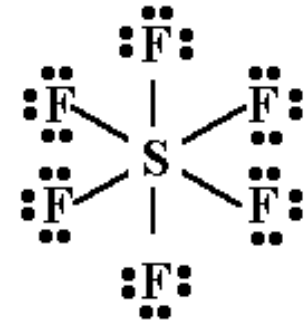
Electrones de valencia:  $1 \times 5e^- + 1 \times 6e^- = 11 e^-$



**expandido.**

En algunos compuestos hay **más de 8 electrones de valencia** alrededor del **centralizado átomo: Octeto Expandido** (hasta un máximo de 12).

Esto ocurre **principalmente en átomos de elementos del 3º período en adelante (Z>20):** los orbitales s y p **tienen orbitales d** para formar enlaces.



**El tamaño del octeto expandido:**

**6 e<sup>-</sup> valencia + 1 e<sup>-</sup> por enlace + e<sup>-</sup> carga**



**= 7 e<sup>-</sup> valencia + 2x1 e<sup>-</sup> de enlace + 1 e<sup>-</sup> carga = 10 electrones**

## Logros y limitaciones de la Teoría de Lewis

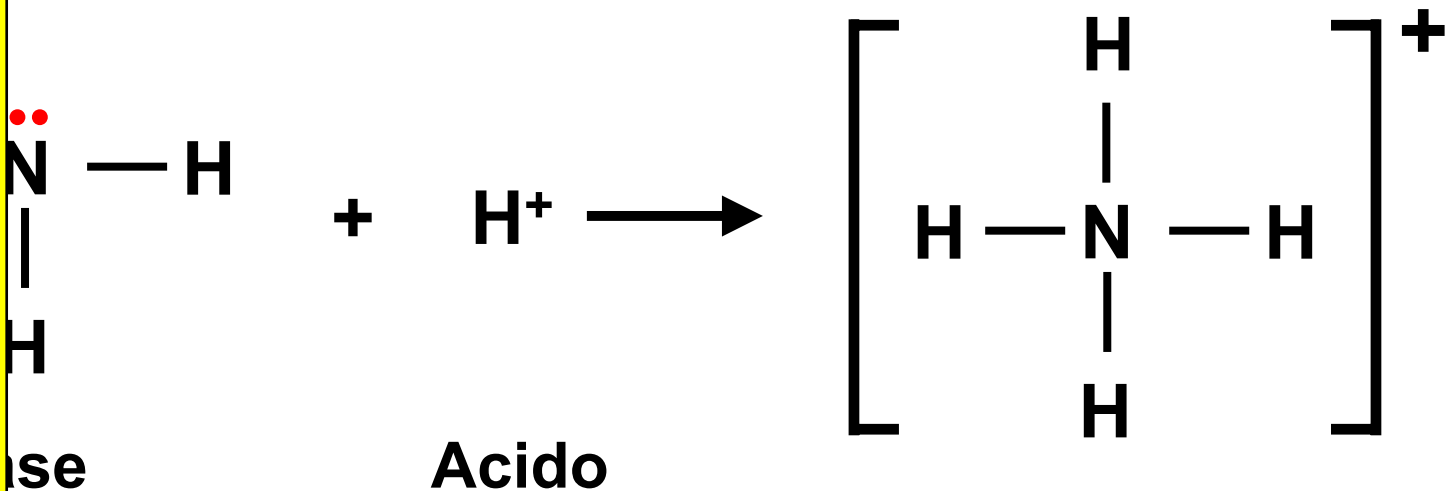
teoría sencilla e intuitiva que unida a la RPECV permite enlace y predecir la geometría de muchas moléculas

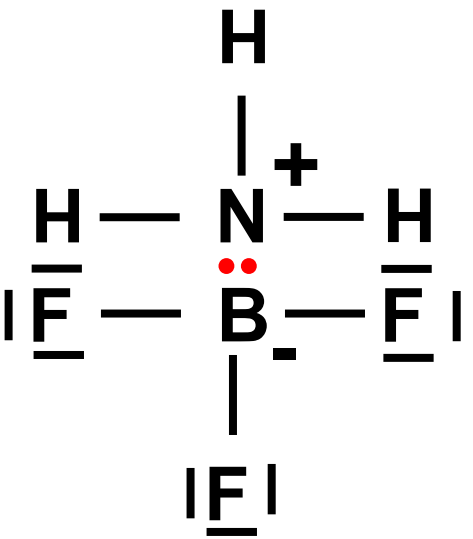
s.

hacer una generalización del concepto de ácidos y bases:

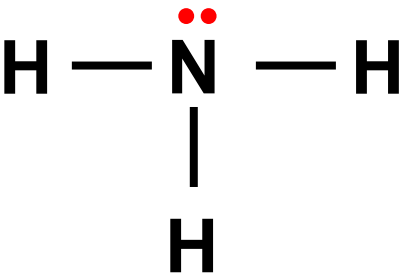
con uno o más pares solitarios serán bases

en las que algún átomo central con octeto incompleto son





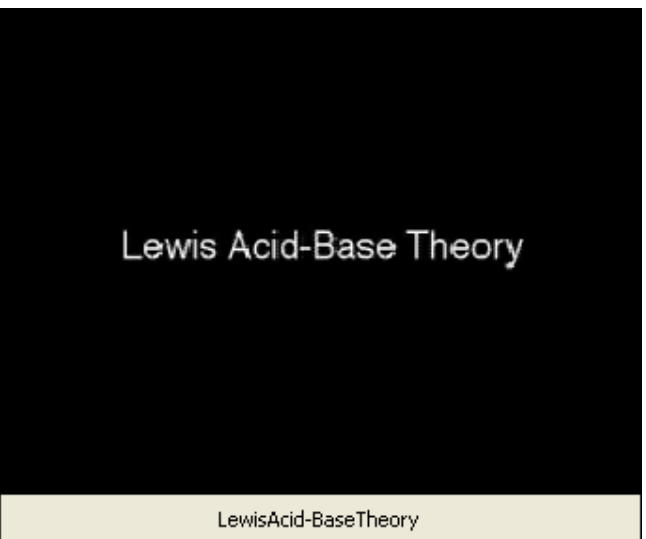
**Aducto**



**Base**



**O**



**Cartagena99**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

...

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



## iones

funciona **bien** para los **20 primeros elementos**.

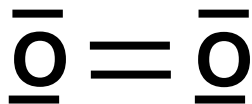
Incluso para éstos hay moléculas (NO) con **número impar** de electrones en las que no se cumple la regla del octeto.

Para **átomos** más **pesados** es muy común que **no** se cumpla la **regla del octeto** (octeto expandido).

**Simplificación** de la realidad: los electrones no están fijos; son muy complejos de movimiento.

**Casos muy importantes** en los que la teoría **no sirve**, incluso no cuenta todas las modificaciones posteriores (incluida la que es una modificación de origen mecanocuántico):

$C_2$  debería tener **enlace cuadruple**. Pero **no** lo tiene:



El enlace en  $N_2$  y  $O_2$  es muy fuerte, pero en el ión  $O_2^+$  es **más fuerte** que en  $O_2$  y más débil que en  $N_2^+$  que en  $N_2$ .

## ¿Por qué?

La existencia de la molécula ión  $H_2^+$  se explica por tierra la hipótesis fundamental de la teoría según la cual el enlace entre átomos se hace por **pares de electrones compartidos**

(aquí sólo hay **un electrón**)