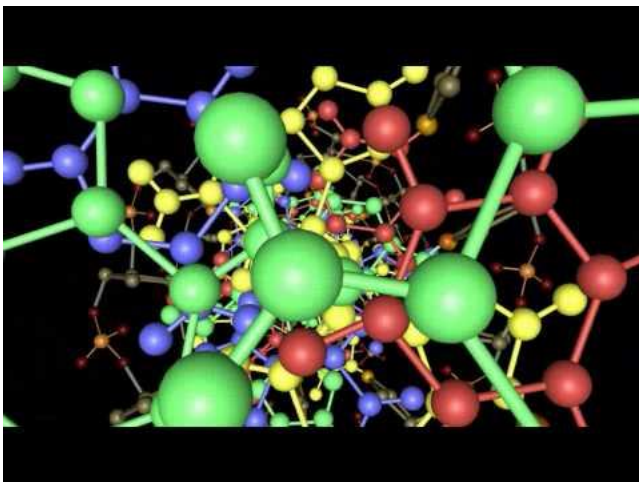


Unidad III: Enlaces químicos

3.1 Introducción

3.1.1 Concepto de enlace químico

Es la fuerza existente dos o más átomos que los mantienen unidos en las moléculas.



Al producirse un acercamiento entre dos o más átomos, puede darse una fuerza de atracción entre los electrones de los átomos y el núcleo de uno u otro átomo.

Si esta fuerza llega a ser lo suficientemente grande para mantener los átomos unidos, se ha formado un enlace químico.

Todos los enlaces químicos son el resultado de la atracción simultánea de dos o más electrones.

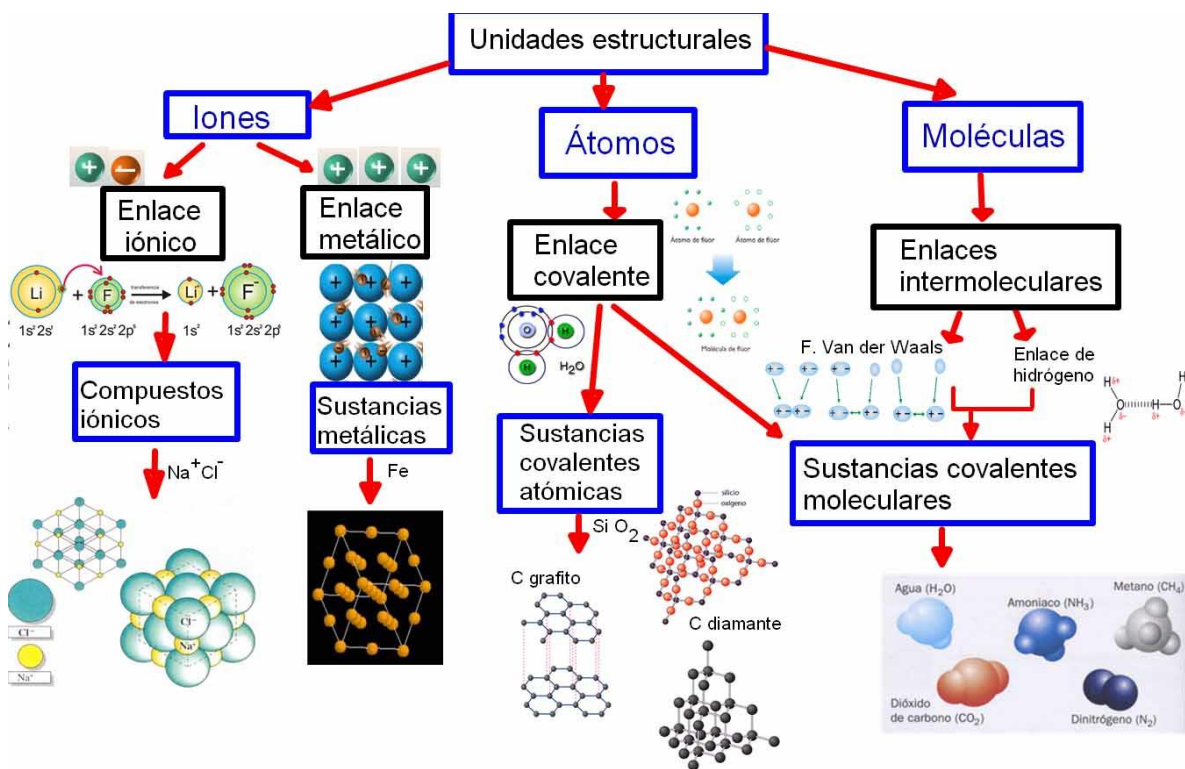
Los átomos se unen porque, al estar unidos, adquieren una situación más estable que cuando estaban separados.

Esta situación de mayor estabilidad suele darse cuando el número de electrones que poseen los átomos en su último nivel es igual a ocho, estructura que coincide con la de los gases nobles.

Los gases nobles tienen muy poca tendencia a formar compuestos y suelen encontrarse en la naturaleza como átomos aislados. Sus átomos, a excepción del helio, tienen 8 electrones en su último nivel. Esta configuración electrónica es extremadamente estable y a ella deben su poca reactividad.

Podemos explicar la unión de los átomos para formar enlaces porque con ella consiguen que su último nivel tenga 8 electrones, la misma configuración electrónica que los átomos de los gases nobles. Este principio recibe el nombre de regla del octeto y aunque no es general para todos los átomos, es útil en muchos casos.

3.1.2 Clasificación de los enlaces químicos



Covalentes:

Las sustancias covalentes son aquellas que presentan enlaces covalentes entre sus átomos y se presentan en forma de grandes redes tridimensionales, como por ejemplo el carbono diamante y el carbono grafito.

El enlace covalente es aquel que se produce cuando los electrones de la última capa de un átomo son atraídos por el núcleo de otro átomo, y lo mismo ocurre con el segundo átomo. Los átomos se acercan hasta que alcanzan un equilibrio en el que las fuerzas de atracción núcleo-electrón y las fuerzas de repulsión núcleo-núcleo y electrón-electrón se equilibran. Se produce un solapamiento de los orbitales atómicos de la última capa. Las propiedades de este tipo de sustancias son: Sólidos, puntos de fusión y ebullición elevados. La solubilidad y la conductividad varían de una sustancia a otra.

Moleculares:

Son aquellas sustancias que presentan enlaces covalentes, pero que en lugar de formar macromoléculas, forman moléculas discretas, como es el caso del agua, del carbono fuereño y del amoniaco.

Las propiedades que presentan este tipo de moléculas son: Son, fundamentalmente, líquidos y gases. Tienen puntos de fusión y ebullición bajos. No conducen la electricidad y son insolubles en agua.

Iónicas:

Las sustancias iónicas son sustancias que presentan enlaces iónicos y forman grandes redes cristalinas.

Los enlaces iónicos se producen cuando en un enlace covalente, la diferencia de electronegatividad entre un átomo y otro es muy grande y suponemos que el par de electrones de enlace está en el átomo más electronegativo. De tal forma que se producen iones positivos y negativos. Este tipo de enlace se da fundamentalmente entre metales y no metales. Estas sustancias son, por ejemplo, el bicarbonato de sodio, el cloruro de potasio y el trisulfuro de aluminio II.

Las propiedades que se dan en este tipo de sustancias son: Sólidos cristalinos, puntos de fusión y ebullición elevadas, solubles en agua, Conducen la electricidad fundidos o en disolución, pero no conducen la electricidad en estado sólido.

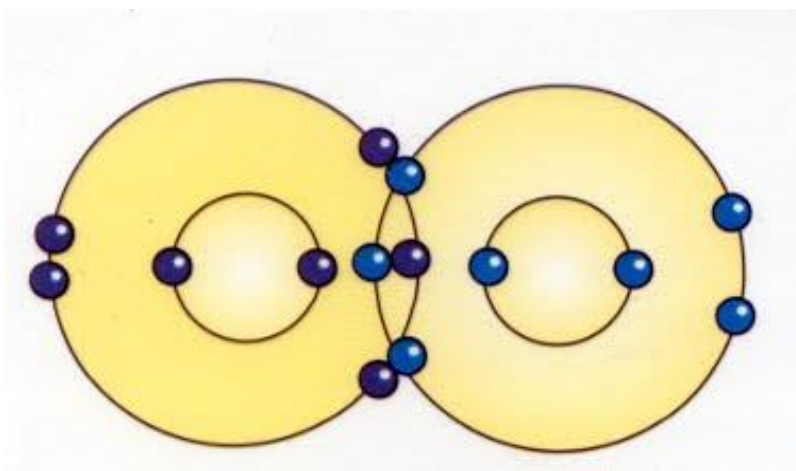
Metálicas:

Son aquellas que presentan un solo elemento, que forman grandes redes metálicas, donde los electrones de la capa de valencia están deslocalizados moviéndose por toda la sustancia, de esta forma, una nube de electrones recubre la sustancia y le da ese característico brillo metálico. Algunas de estas sustancias son el hierro, el sodio y el potasio.

Las propiedades de estas sustancias son: Sólidos, dureza variada. Puntos de fusión y ebullición también muy variadas, insolubles en agua y característico brillo metálico.

3.1.3 Aplicaciones y limitaciones de la Regla del Octeto

La regla del octeto funciona principalmente para los elementos del segundo periodo de la tabla periódica. Estos elementos solo tienen subniveles 2s 2p, los cuales pueden contener un total de ocho electrones. Cuando un átomo de uno de estos elementos forma un compuesto covalente, pueden obtener la configuración electrónica de gas noble [Ne] al compartir electrones con otros átomos del mismo compuesto.



Limitaciones de las reglas de octeto para las fórmulas de Lewis.

Las fórmulas de Lewis normalmente no se escriben para compuestos que contienen metales de transición d y f. Los metales de transición d y f utilizan en el enlace orbitales s y p.

1.- La mayoría de los compuestos covalentes del berilio, Be. Debido a que Be contiene solo dos electrones en la capa de valencia, habitualmente forma solo dos enlaces covalentes cuando se enlaza con otros dos átomos. Por lo tanto se usa cuatro electrones como el número necesario para Be en la etapa 2, en la etapa 5 y 6 se usa solo dos pares de electrones para Be.

2.- La mayoría de los compuestos covalentes de los elementos del Grupo IIIA, especialmente boro, B. Estos elementos contienen solo tres electrones en la capa de valencia, así que a menudo forman tres enlaces covalentes cuando se enlazan a otros tres átomos. Por lo tanto, se usa seis electrones como el número necesario para los elementos IIIA contiene solo tres electrones en la etapa 2; y en las etapas 5 y 6 se usa solo tres pares de electrones para los elementos IIIA.

3.- Los compuestos o iones que contienen un número impar de electrones ejemplos son NO, con 11 electrones en la capa de valencia, y NO₂, con 17 electrones en la capa de valencia.

4.- Compuestos o iones en los que el elemento central necesita más de ocho electrones en la capa de valencia para mantener todos los electrones disponibles, D. cuando uno se encuentra con esto, se añaden las reglas extra a las etapas 4 y 6.

Etapa 4a: si C, el número de electrones compartidos, es menor que el número necesario para enlazar todos los átomos al átomo central, entonces C se aumenta el número de electrones necesario.

Etapa 6a: si C debe aumentarse en la etapa 4a, entonces los octetos de todos los átomos podrían satisfacerse antes de que todos los electrones D hayan sido añadidos. Colocar los electrones extra sobre el elemento central.

3.2 Enlace Covalente

Los enlaces covalentes de las moléculas se forman por solapamiento de orbitales atómicos, de manera que los nuevos orbitales moleculares pertenecen a la molécula entera y no a un solo átomo. Durante la formación de un enlace, los orbitales atómicos se acercan y comienzan a solaparse, liberando energía a medida que el electrón de cada átomo es atraído por la carga positiva del núcleo del otro átomo. Cuanto mayor sea el solapamiento, mayor será el desprendimiento de energía y, por lo tanto, menor será la energía del orbital molecular. Si el proceso de aproximación de los átomos continúa, los núcleos atómicos pueden llegar a repelerse mutuamente, lo que hace que la energía del sistema aumente. Esto significa que la máxima estabilidad (mínima energía) se alcanza cuando los núcleos se encuentran a una distancia determinada que se conoce como longitud de enlace.

Los enlaces covalentes son las fuerzas que mantienen unidos entre sí los átomos no metálicos (los elementos situados a la derecha en la tabla periódica -C, O, F, Cl,...).

Estos átomos tienen muchos electrones en su nivel más externo (electrones de valencia) y tienen tendencia a ganar electrones más que a cederlos, para adquirir la estabilidad de la estructura electrónica de gas noble.

3.2.1 Teorías para explicar el enlace covalente y sus alcances

Normal

Se define de la siguiente manera: "Es el fenómeno químico mediante el cual dos átomos se unen compartiendo una o varias parejas de electrones; por lo tanto, no pierden ni ganan electrones, sino que los comparten".

Un átomo puede completar su capa externa compartiendo electrones con otro átomo.

Cada par de electrones comunes a dos átomos se llama doblete electrónico. Esta clase de enlace químico se llama covalente, y se encuentra en todas las moléculas constituidas por elementos no metálicos, combinaciones binarias que estos elementos forman entre sí, tales como hidruros gaseosos y en la mayoría de compuestos de carbono.

Cada doblete de electrones (representado por el signo :) Intercalado entre los símbolos de los átomos, indica un enlace covalente sencillo y equivale al guion de las fórmulas de estructura.

En enlace covalente puede ser: sencillo, doble o triple, según se compartan uno, dos o tres pares de electrones.

Coordinado

Se define de la siguiente forma: "Es el enlace que se produce cuando dos átomos comparten una pareja de electrones, pero dicha pareja procede solamente de uno de los átomos combinados.

En este caso el enlace se llama covalente dativo o coordinado. El átomo que aporta la pareja de electrones recibe el nombre de donante, y el que los recibe, aceptor. Cuando queremos simplificar la fórmula electrónica se pone una flecha que va del donante al aceptor.

3.2.1.1 Teorías del Enlace de Valencia

En química, la teoría del enlace de valencia explica la naturaleza de un enlace químico en una molécula, en términos de las valencias atómicas. La teoría del enlace de valencia resume la regla que el átomo central en una molécula tiende a formar pares de electrones, en concordancia con restricciones geométricas, según

está definido por la regla del octeto. La teoría del enlace de valencia está cercanamente relacionada con la teoría del orbital molecular.

Una estructura de enlace de valencia es similar a una estructura de Lewis, sin embargo, pueden escribirse varias estructuras de enlace de valencia donde no puede escribirse sólo una estructura de Lewis. Cada una de estas estructuras de EV representa a una estructura de Lewis específica. La combinación de las estructuras de enlace de valencia es el punto principal de la teoría de resonancia. La teoría del enlace de valencia considera que el solapamiento de orbitales atómicos de los átomos participantes formando un enlace químico. Debido al traslape, es más probable que los electrones estén en la región del enlace. La teoría del enlace de valencia considera a los enlaces como orbitales débilmente apareados (traslape pequeño). Típicamente, la teoría del enlace de valencia es más fácil de emplear en moléculas en el estado basal.

3.2.1.2 Hibridación y Geometría molecular

La geometría tridimensional de las moléculas está determinada por la orientación relativa de sus enlaces covalentes. En 1957 el químico canadiense Ron Gillespie basándose en trabajos previos de Nyholm desarrolló una herramienta muy simple y sólida para predecir la geometría (forma) de las moléculas. La teoría por él desarrollada recibe el nombre Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de Valencia (TRPEV) y se basa en el simple argumento de que los grupos de electrones se repelerán unos con otros y la forma que adopta la molécula será aquella en la que la repulsión entre los grupos de electrones sea mínima.

Para la TRPEV grupos de electrones pueden ser:

- un simple enlace
- un doble enlace
- un triple enlace
- un par de electrones no enlazante

Para predecir la geometría de una molécula necesitamos conocer solamente cuantos grupos de electrones están asociados al átomo central para lo cual debemos escribir la fórmula de Lewis de la molécula.

Luego simplemente nos preguntamos cómo los grupos de electrones se distribuirán espacialmente de modo que la repulsión entre ellos sea mínima.

3.2.1.3 Teoría del Orbital Molecular

La Teoría de Orbitales Moleculares (T.O.M.) es la segunda aproximación al estudio del enlace covalente, y la más ampliamente empleada para explicar la estructura y la geometría de muchos sólidos inorgánicos. El punto de partida consiste en asumir que si los dos núcleos implicados en el enlace se ubican a la distancia de equilibrio, los electrones se alojarán no en orbitales atómicos de cada elemento, sino en orbitales moleculares, que son análogos a los atómicos, y que presentan características similares, como se verá más adelante. Esta analogía es de tal grado que al igual que ocurría con los átomos polieletrónicos, no es posible resolver la ecuación de Schrödinger de forma exacta para la molécula, y de nuevo hay que recurrir a métodos aproximados para conocer la forma de las funciones de onda que representen los mencionados orbitales moleculares

Según la teoría del orbital molecular (TOM) los orbitales de los átomos que se enlazan se solapan dando lugar a una serie de orbitales extendidos a toda la molécula (orbitales moleculares).

El proceso de solapamiento, por tanto, no sólo afecta a la capa de valencia sino a todas las capas de los átomos enlazados.

Al igual que en la teoría del enlace de valencia, la extensión del solapamiento está relacionada con la intensidad del enlace y, además, dependiendo de que se produzca frontal o lateralmente, se formarán orbitales moleculares de tipo sigma o pi.

3.3 Enlace iónico

El enlace iónico consiste en la atracción electrostática entre átomos con cargas eléctricas de signo contrario. Este tipo de enlace se establece entre átomos de elementos poco electronegativos con los de elementos muy electronegativos. Es necesario que uno de los elementos pueda ganar electrones y el otro perderlo, y como se ha dicho anteriormente este tipo de enlace se suele producir entre un no metal (electronegativo) y un metal (electropositivo).

El enlace iónico está presente en todos los compuestos iónicos, es decir, aquellos formados por la unión de un catión y un anión.

Recuerda que:

- Forman cationes aquellos elementos con baja energía de ionización (izquierda de la tabla), principalmente los metales de los grupos 1 y 2 de la tabla periódica. Por otro lado, los elementos con alta energía de ionización (no metales de la derecha de la tabla periódica) tienden a ganar electrones y, por tanto, forman con facilidad aniones, al ganar un electrón.

3.3.1 Formación y propiedades de los compuestos iónicos

Un enlace iónico o electrovalente es la unión de átomos que resulta de la presencia de atracción electrostática entre los iones de distinto signo, es decir, uno fuertemente electropositivo (baja energía de ionización) y otro fuertemente electronegativo (alta afinidad electrónica). Eso se da cuando en el enlace, uno de los átomos capta electrones del otro. Gracias a esto se forma un compuesto químico simple.

Dado que los elementos implicados tienen elevadas diferencias de electronegatividad, este enlace suele darse entre un compuesto metálico y uno no metálico. Se produce una transferencia electrónica total de un átomo a otro formándose iones de diferente signo. El metal dona uno o más electrones formando iones con carga positiva o cationes con una configuración electrónica estable. Estos electrones luego ingresan en el no metal, originando un ion cargado negativamente o anión, que también tiene configuración electrónica estable. Son estables pues ambos, según la regla del octeto o por la estructura de Lewis adquieren 8 electrones en su capa más exterior (capa de valencia), aunque esto no es del todo cierto ya que contamos con dos excepciones, la del Hidrógeno (H) que se rodea tan sólo de 1 electron y el Boro (B) que se rodea de seis. La atracción electrostática entre los iones de carga opuesta causa que se unan y formen un compuesto.

3.3.2 Redes cristalinas

La red cristalina está formada por iones de signo opuesto, de manera que cada uno crea a su alrededor un campo eléctrico que posibilita que estén rodeados de iones contrarios.

Los sólidos cristalinos mantienen sus iones prácticamente en contacto mutuo, lo que explica que sean prácticamente incompresibles. Además, estos iones no pueden moverse libremente, sino que se hallan dispuestos en posiciones fijas distribuidas desordenadamente en el espacio formando retículos cristalinos o redes espaciales. Los cristalógrafos clasifican los retículos cristalinos en siete tipos de poliedros llama sistemas cristalográficos. En cada uno de ellos los iones pueden ocupar los vértices, los centros de las caras o el centro del cuerpo de dichos poliedros. El más sencillo de estos recibe el nombre de celdilla unitaria.

3.3.2.1 Estructura

La estructura cristalina es la forma sólida de cómo se ordenan y empaquetan los átomos, moléculas, o iones. Estos son empaquetados de manera ordenada y con patrones de repetición que se extienden en las tres dimensiones del espacio. La cristalografía es el estudio científico de los cristales y su formación.

Estructura:

El estado cristalino de la materia es el de mayor orden, es decir, donde las correlaciones internas son mayores. Esto se refleja en sus propiedades antrópicas y discontinuas. Suelen aparecer como entidades puras, homogéneas y con formas geométricas definidas (hábito) cuando están bien formados. No obstante, su morfología externa no es suficiente para evaluar la denominada cristalinidad de un material.

Diferencia entre vidrios y cristales:

Si nos fijamos con detenimiento, en estos gráficos existe siempre una fracción de los mismos que se repite. Asimismo, los cristales, átomos, iones o moléculas se empaquetan y dan lugar a motivos que se repiten del orden de $1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$; a esta repetitividad, en tres dimensiones, la denominamos red cristalina. El conjunto que se repite, por translación ordenada, genera toda la red (todo el cristal) y la denominamos unidad elemental o celda unidad.

En ocasiones la repetitividad se rompe o no es exacta, y esto diferencia los vidrios y los cristales, los vidrios generalmente se denominan materiales amorfos (desordenados o poco ordenados).

3.3.2.2 Energía reticular

La energía reticular, también conocida como energía de red, es la energía que se necesita para poder separar de manera completa un mol de un compuesto de tipo iónico en sus respectivos iones gaseosos. También se puede decir que la energía

reticular es la energía que se consigue a través de la formación de un compuesto de tipo iónico partiendo siempre de sus iones gaseosos.

Este tipo de energía muestra la estabilidad que tiene las redes cristalinas, y viene medida como energía/mol, teniendo las mismas unidades de medida que tiene la entalpía estándar (ΔH°), es decir KJ/mol, aunque de signo opuesto.