

1. EL ENLACE QUÍMICO

La mayoría de la materia esta conformada por moléculas o iones formados por los átomos. Una molécula es un agregado de, por lo menos, dos átomos y que mantienen unidos por medio de fuerzas químicas o enlaces químicos. Los átomos combinados pueden ser del mismo o de diferentes elementos químicos y siempre en las mismas proporciones para una molécula definida.

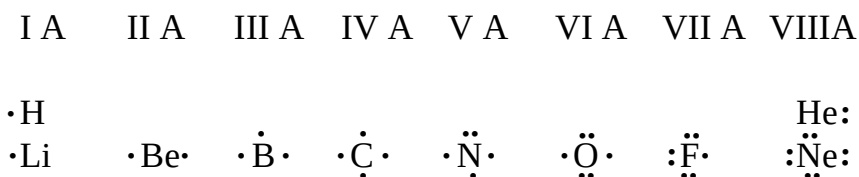
1.1 ESTRUCTURA DE LEWIS

Los átomos se combinan con el fin de alcanzar configuraciones electrónicas más estables, es decir, cuando el átomo es isoelectrónico con un gas noble, y esto lo logra combinando o mezclando los electrones más externos ó electrones de la capa de valencia.

Una estructura de Lewis esta conformada por el símbolo del elemento y un punto por cada electrón de valencia que posea.



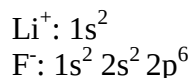
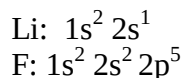
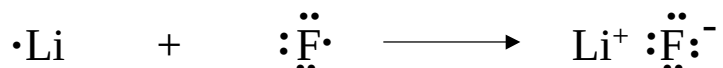
Es importante aclarar que la estructura de Lewis para los elementos de un mismo grupo, desde el 1A hasta el 8A, son idénticas, como se observa en el oxígeno y el azufre que pertenecen al grupo 6A.



1.2 EL ENLACE IÓNICO

El enlace iónico es la fuerza electrostática que mantiene unidos a los iones en un compuesto iónico, el cual esta conformado por elementos de baja energía de ionización (formadores de cationes) y de alta afinidad electrónica (formadores de aniones). Los elementos con mayor tendencia a la formación de cationes son los metales alcalinos y los alcalinoterreos, mientras que los formadores de aniones son los halógenos y el oxígeno. La tendencia en el enlace iónico es completar el ultimo

nivel de energía, por la pérdida o ganancia de uno o mas electrones, como por ejemplo, en la formación del fluoruro de litio:



En la anterior demostración se nota claramente que el litio con su baja energía de ionización pierde un electrón, quedando convertido en el cation litio, por su parte, el flúor poseedor de una alta afinidad electrónica, gana el electrón del litio, convirtiéndose en el anión fluoruro.

1.2.1 La energía de los compuestos iónicos

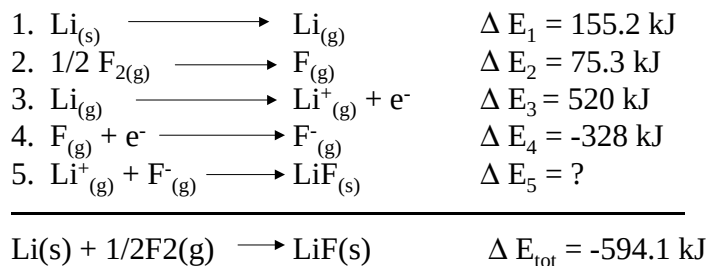
La formación del fluoruro de litio depende de los valores de la energía de ionización y afinidad electrónica de sus átomos, pero recordemos que en un proceso fisicoquímico de esta naturaleza, no contamos con un solo par de átomos reactantes y menos si se encuentran en estado sólido, donde un catión puede estar rodeado por un número específico de aniones y viceversa; por esta razón, la estabilidad final del compuesto fluoruro de litio es una sumatoria de todas las interacciones iónicas existente. Una manera de calcular la estabilidad de un sólido iónico, es determinar la energía necesaria para llevar a fase vapor y separar completamente los átomos de un mol del compuesto, a esta se le llama energía reticular.

Una manera de calcular la energía reticular es aplicando al ley de Coulomb, dado que la energía potencial es proporcional al producto de las cargas de sus iones e inversamente a su radio.

$$E = k \frac{Q_{\text{Li}^+} Q_{\text{F}^-}}{r}$$

Analizando la anterior relación, podemos predecir que la energía final es exotérmica, ya que la carga del litio es positiva y la del flúor es negativa, siendo su producto una energía negativa (exotérmica), demostrando de esta forma la estabilidad del compuesto.

Otra forma de establecer la energía reticular de un compuesto iónico es a través del ciclo de Born-Haber, que relaciona el proceso a energías según los siguientes pasos:



$$\Delta E_{\text{tot}} = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3 + \Delta E_4 + \Delta E_5$$

$$\Delta E_5 = \Delta E_{\text{tot}} - (\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3 + \Delta E_4)$$

$$\Delta E_5 = -594 - (155.2 + 75.3 + 520.0 - 328.0)$$

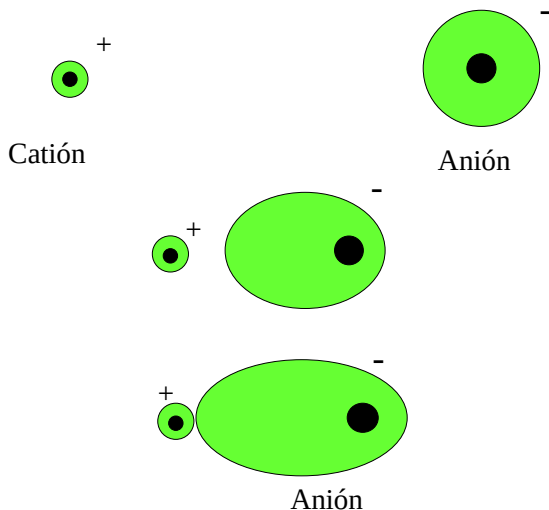
$$\Delta E_5 = -594 - 422.5 = -1016.5 \text{ kJ}$$

Lo inverso en el paso 5, (energía + $\text{LiF}_{(s)}$) produce $\text{Li}^+_{(g)} + \text{F}^-_{(g)}$ se denomina energía reticular, entonces esta debe ser de igual magnitud de ΔE_5 pero de signo contrario (1016.5 kJ).

1.2.2 Polarización y covalencia parcial.

La nube electrónica de un átomo o su ion no es rígida, por lo tanto, son susceptibles a ser polarizadas o deformadas por una fuerza externa y en este caso, por la fuerza generada por el núcleo de otro átomo o ion.

Los cationes debido a la alta concentración de carga eléctrica, son más efectivos en la deformación de una nube electrónica vecina, especialmente la de los iones negativos, debido a su gran tamaño.



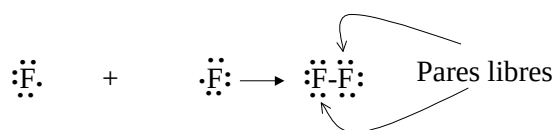
La capacidad que tienen un catión de deformar una nube electrónica vecina se llama poder polarizante, y la tendencia de un anión a dejarse deformar se llama polarizabilidad.

2. EL ENLACE COVALENTE

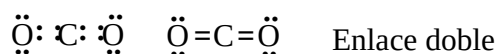
Un enlace covalente, es aquel en el que dos electrones son compartidos por un par de átomos, es decir, los electrones son atraídos por los dos núcleos que participan en el enlace, manteniendo de esta forma, una relación directa entre ellos. El primer científico en hablar de este tipo de enlace fue Gilbert Lewis, quien describió la formación del enlace de hidrógeno como:



En la formación del enlace covalente solo participan los electrones de valencia, y se diferencian de la siguiente forma: electrones de enlace a aquellos que son compartidos por los dos átomos, y pares libres de electrones a aquellos que no forman enlace y que generalmente están apareados entre sí. Ejemplo de esto es la formación del flúor gaseoso:



En el enlace covalente se pueden encontrar el enlaces sencillo, para un solo par de electrones compartidos entre los átomos, enlace doble para los que comparten dos pares de electrones y el enlace triple para los que comparten tres pares de electrones. Es importante aclarar que la longitud de enlace (distancia existente entre los centros de los núcleos que forman el enlace), se hace cada vez mas pequeña a medida que aumenta el número de enlaces.



Como se nota en los anteriores ejemplos, la tendencia de estos átomos es completar ocho electrones en su ultimo nivel de energía (ley del octeto), sin embargo, esta ley presentan algunas excepciones.

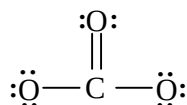
La formación del enlace covalente se puede dividir en dos grupos: los covalentes apolares, formados generalmente por átomos de la misma especie, como en H₂ o F₂, y los covalentes polares, que están formados por átomos de diferente especie, es decir, por átomos que presentan una pequeña diferencia entre sus electronegatividades, por ejemplo, el agua o el dióxido de carbono. Para átomos que presentan una alta diferencia en sus electronegatividades (de dos o más), tienden a formar enlaces iónicos (NaCl, CaO).

2.1 Carga formal

Es la carga eléctrica final que posee una molécula, al determinar la diferencia entre el número de electrones de valencia de un átomo aislado y el número de electrones asignados a ese átomo en la estructura de Lewis. Se puede establecer que los aniones poseen una carga formal negativa, los cationes carga formal positiva y los átomos neutros igual a cero.

Una forma práctica de establecer la carga formal es dibujando la estructura de Lewis y luego aplicar la fórmula:

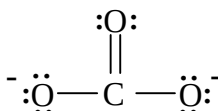
$$\text{Carga formal del átomo} = \text{Electrones de valencia del átomo libre} - \left(\text{Número total de e}^- \text{ en los pares libres} + \frac{1}{2} \text{ del número total de e}^- \text{ enlazados} \right)$$
 Por ejemplo, determinemos la carga formal del ion carbonato (CO₃)



Las cargas formales para los átomos que componen la molécula se calculan así:

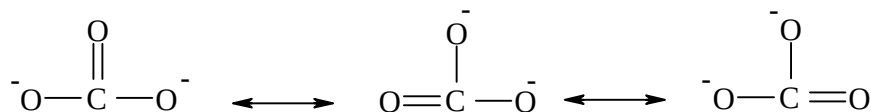
Átomo de carbono	CF = 4 - 0 - (1/2) 8 = 0
Átomo de oxígeno en C=O	CF = 6 - 4 - (1/2) 4 = 0
Átomo de oxígeno en C-O	CF = 6 - 6 - (1/2) 2 = -1

De acuerdo con esto, existe una carga negativa para el enlace sencillo carbono-oxígeno, y como existen dos agrupaciones de estos átomos, la carga formal del ión es -2 ((CO₃)⁻²)



2.2 El concepto de resonancia

Una estructura de resonancia son las dos o más estructuras de Lewis posibles para una misma molécula, la cual no se puede representar por una sola estructura; la doble flecha significa que la estructura esta en resonancia.



2.3 Geometría molecular

La geometría molecular es la distribución espacial de los átomos en una molécula, es bien importante saber que la geometría de la molécula influye tanto en las propiedades físicas y químicas de la molécula. Normalmente las longitudes de enlaces y los ángulos entre los átomos se determinan experimentalmente, estableciendo específicamente las atracciones y repulsiones entre pares de electrones enlazantes y libres; la geometría que la molécula finalmente adquiere es aquella donde existe la mínima repulsión entre sus electrones.

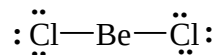
2.3.1 Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

Este modelo explica la distribución geométrica de los pares electrónicos que rodean un átomo central en términos de repulsión electrostática entre dichos. Los enlaces doble y triples se pueden considerar como un enlace sencillo, sin embargo, nosotros conocemos que en enlaces múltiples hay mayor densidad electrónica y esto genera mayor repulsión. Nosotros podemos dividir la moléculas en dos grupos: aquellas que no tienen pares electrónicos libres y las que si lo poseen.

2.3.1.1 Moléculas en las que el átomo central no tiene pares libres de electrones

Consideremos que las moléculas están solo formadas por dos átomos, donde A se considera como el átomo central y B quien se enlaza a el en diferentes proporciones (AB_1 , AB_2 , AB_3 ...). Nosotros debemos diferenciar entre estos dos conceptos: la geometría de los pares de electrones totales que rodean el átomo central y la geometría que realmente adoptan los átomos alrededor de el.

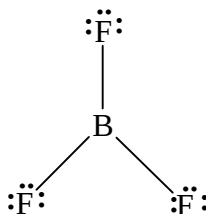
- AB₂ Cloruro de berilio (BeCl₂)



Observando la estructura de Lewis para la molécula, podemos afirmar que los pares enlazantes (electrones que forman el enlace) se repelen entre sí, por lo cual adoptan una posición de mínima repulsión, siendo esta en extremos opuestos, con un ángulo de 180°. En este caso tanto los electrones y los átomos toman la **geometría lineal**.

- AB₃ Trifluoruro de boro (BF₃).

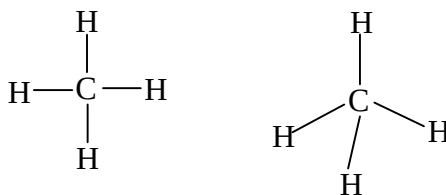
En el trifluoruro de boro, el átomo de boro se enlaza covalentemente con tres átomos de flúor, los cuales apuntan a los vértices de un triángulo equilátero, siendo una estructura totalmente plana.



La anterior estructura tiene una **geometría trigonal plana** con ángulos de 120° entre FBF.

- AB₄ Metano (CH₄)

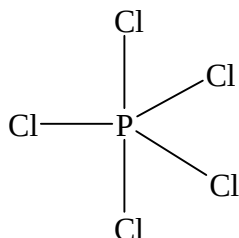
En este caso la estructura de Lewis y la geometría de la molecular son diferentes, miremos la figura:



Debido a que hay cuatro pares de electrones enlazantes, la distribución de los pares de electrones y de los átomos adquieren una configuración de **tetraédro regular**, ya que así la repulsión entre los electrones es mínima. Los ángulos de formación HCH, son de 109.5°.

- AB_5 Pentacloruro de fósforo (PCl_5)

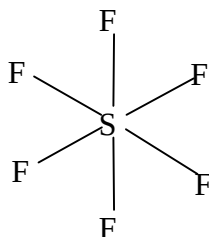
A estructura de Lewis para el pentacloruro de fósforo en fase gaseosa es



Para reducir la fuerza de repulsión de los 5 pares de electrones enlazantes, es distribuirlos en forma de bipiramide trigonal. Los átomos de cloro que están ocupando las posiciones arriba y abajo del fósforo (axiales), forman un ángulo de 90° y los cloros ecuatoriales ubicados en la base de la bipiramide, forman ángulos de 120° .

- AB_6 Hexafluoruro de azufre.

La distribución mas estable para los seis pares de electrones enlazantes SF_6 , es en forma de octaedro regular.



El octaedro se forma por la unión por la base de dos pirámides de base cuadrada y el átomo central se encuentra en los seis vértices. Todos los ángulos de unión son de 90° .

2.3.1.2 Moléculas en las que el átomo central tiene uno o más pares de electrones libres.

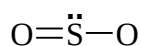
La geometría de este tipo de moléculas es mas compleja ya que se presentan diferentes tipos de repulsión entre los pares enlazantes, entre pares libres y entre un par enlazante y uno libre. De acuerdo con la teoría de RPECV, las fuerzas de repulsión disminuyen según el siguiente orden.

Par libre/par libre > par libre/par enlazante > par enlazante/par enlazante

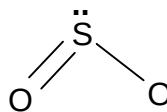
La nomenclatura para este tipo de moléculas es AB_xE_y , donde A es el átomo central, B los átomos que se enlazan y E el número de pares de electrones libres de A

- AB_2E Dióxido de azufre (SO_2)

La estructura de Lewis para esta molécula sería la siguiente

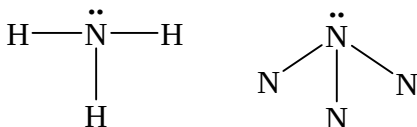


Según esta distribución espacial, la molécula debería ser lineal, pero debido a la presencia de un par libre de electrones, se genera repulsión con los pares enlazantes, dando una nueva geometría que es la angular, esto favorecido por la baja fuerza de repulsión entre pares enlazantes.



- AB_3E Amoniac

La molécula de amoniac contiene tres pares de electrones enlazantes y un par libre; la geometría espacial para los cuatro pares de electrones es distribución tetraédrica, pero debido a su par libre, su geometría molecular es piramidal de base triangular; los ángulos de enlace son de 109.5° .



- AB_2E_2 Agua (H_2O)

Según la distribución electrónica del oxígeno, esta puede realizar dos enlaces y además posee dos pares libres de electrones. La distribución global de los cuatro pares de electrones sería en forma de tetraedro, sin embargo el agua por tener dos pares libres de electrones, los cuales generan gran repulsión sobre los electrones de enlace, generando una estructura angular para la molécula, con ángulo de 105.5° .



- AB₄E Tetrafluoruro de azufre (SF₄)

El átomo central de azufre tiene cinco pares de electrones, cuya distribución debería ser bipiramide de base triangular, pero debido a la presencia de un par de electrones libres, se genera una estructura tetraédrica distorsionada, es decir, los ángulos no son exactamente de 109.5°. Miremos ahora la estructura de Lewis y la estructura real de la molécula.



2.3.1.3 Como utilizar el modelo de RPECV

- Primero escriba la estructura de Lewis de la molécula, considerando solo los pares electrónicos alrededor del átomo central
- Contar el numero de pares electrónicos que rodean al átomo central (pares enlazantes y pares libres), los dobles y triples enlaces se cuentan como sencillos.
- Predecir la geometría de los pares electrónicos y geometría de la molécula.
- Determinar los ángulos de enlace.