

ENLACE QUIMICO Y MOLÉCULAS

- Electronegatividad y polaridad de enlace
- Representación de Lewis, carga formal y estructuras de resonancia
- Excepciones a la regla del octeto

Recordando:

La *electronegatividad* es una medida de la atracción que ejerce un átomo sobre los electrones (densidad electrónica) de un enlace.

La electronegatividad no es estrictamente una propiedad atómica. No se refiere a un átomo aislado sino dentro de una molécula. Es siempre relativa (al otro átomo del enlace)

Dos átomos con electronegatividades muy diferentes forman un enlace iónico. Ejemplo: NaCl

Pares de átomos con diferente electronegatividad forman enlaces covalentes polares, con la densidad electrónica atraída mayormente hacia átomo de mayor electronegatividad (Ejemplo: H₂O y HF). Mientras mayor sea la diferencia de electronegatividad entre los átomos enlazados mayor será la polaridad del enlace.

Pares de átomos idénticos (igual electronegatividad) forman enlaces covalentes no polares, con la densidad electrónica igualmente repartida entre ambos. Ejemplo: O₂

Enlace Químico *Estructura*

Electronegatividad:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.8	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27			
**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.3			

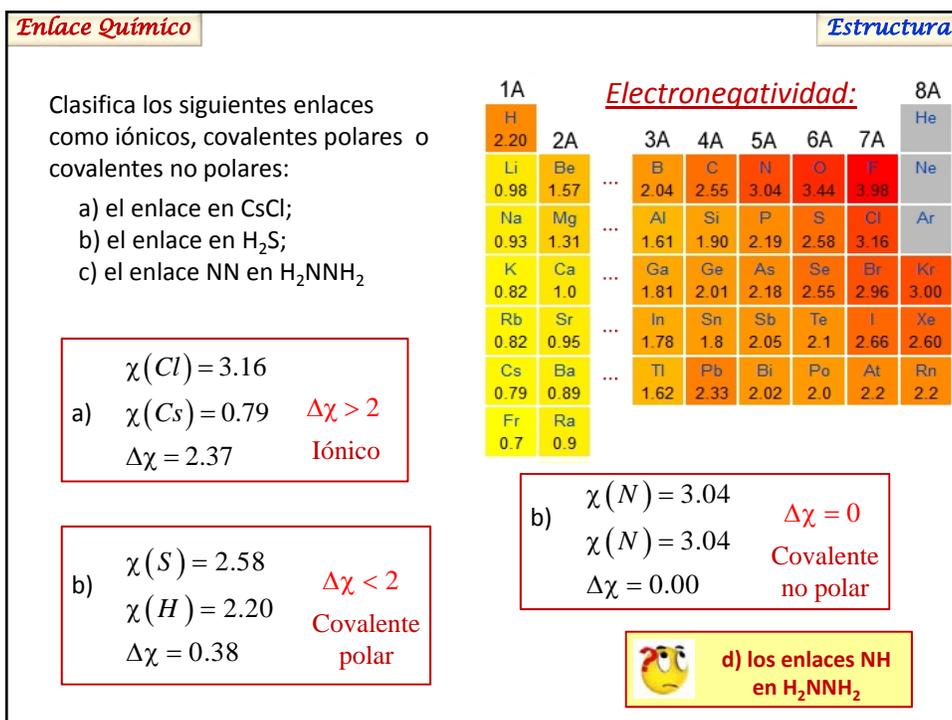
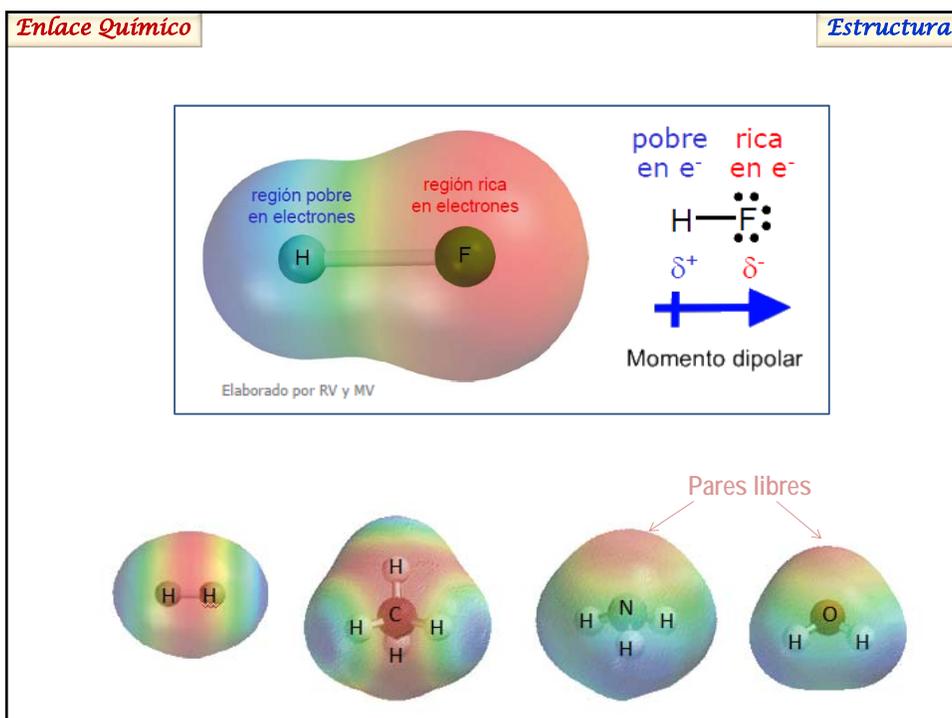
Enlace Químico *Estructura*

Electronegatividad (χ):

Diferencia de electronegatividad entre los átomos enlazados:	Tipo de enlace
$\Delta\chi = 0$	Covalente (No polar)
$0 < \Delta\chi < 2$	Covalente polar
$\Delta\chi \geq 2$	Iónico

Incremento en la diferencia de electronegatividad

Covalente (No polar) Comparten e-	→	Covalente polar Transferencia parcial de e-	→	Iónico Transferencia de e-
--------------------------------------	---	--	---	-------------------------------



Enlace Químico

Estructura

Estructuras de Lewis:

1. Escribe la estructura del compuesto mediante símbolos químicos mostrando qué átomos están unidos entre sí. El átomo menos electronegativo ocupa la posición central, con excepción del H que suele ocupar las posiciones terminales.
2. Cuenta el número total de electrones de valencia presentes. En los aniones poliatómicos suma el número de cargas negativas. En los cationes poliatómicos resta el número de cargas positivas.
3. Dibuja un enlace covalente sencillo entre el átomo central y cada uno de los átomos que lo rodean. Completa los octetos de los átomos enlazados al átomo central (la capa de valencia del átomo de hidrógeno se completa con sólo dos electrones) y del átomo central.
4. Si no se cumple la regla del octeto para el átomo central, agrega dobles o triples enlaces entre este átomo y los que lo rodean usando los pares libres.

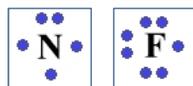
Enlace Químico

Estructura



Problema

3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98

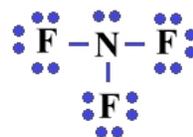


Escribe la estructura de Lewis del trifluoruro de nitrógeno (NF_3).

Paso 1 - N es menos electronegativo que F, colocamos N en el centro N

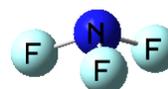
Paso 2 - Contamos los e- de valencia: $\text{N}(5) 2s^2 2p^3$ y $\text{F}(7) 2s^2 2p^5$
 $5 + (3 \times 7) = 26$ electrones de valencia

Paso 3 - Dibujamos un enlace sencillo entre el N y cada F y completamos los octetos para los átomos de N y F con pares libres y enlaces múltiples.



Paso 4 - Para confirmar, ¿el # de e- en la estructura es igual al # de e- de valencia?

3 enlaces sencillos (3×2) + 10 pares libres (10×2)
 = 26 electrones de valencia



Enlace Químico **Estructura**

 **Problema**

	3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F	
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	

C

O

Escribe la estructura de Lewis para el dióxido de carbono (CO₂).

Paso 1- C es menos electronegativo que O, colocamos C en el centro C

Paso 2 - Contamos los e- de valencia: C(4) 2s²2p² y O(6) 2s²2p⁴
4+(2x6)=**16** electrones de valencia

Paso 3- Dibujamos un enlace sencillo entre el C y cada O y completamos los octetos para los átomos de C y O con pares libres y enlaces múltiples.

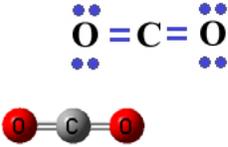
Paso 4- Para confirmar, ¿el # de e- en la estructura es igual al # de e- de valencia?

2 enlaces dobles (2x4) + 4 pares libres (4x2)
= **16** electrones de valencia

¿cómo saber que los enlaces son dobles y no sencillos?

2 enlaces sencillos (2x2) + 8 pares libres (8x2)
= **20 ≠ 16 demasiados** electrones de valencia





Enlace Químico **Estructura**

 **Problema**

	3A	4A	5A	6A	7A
B	C	N	O	F	
2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	

C

O

Escribe la estructura de Lewis para el ion carbonato (CO₃²⁻).

Paso 1- C es menos electronegativo que O, colocamos C en el centro C

Paso 2 - Contamos los e- de valencia: C(4) 2s²2p² y O(6) 2s²2p⁴
4+(3x6)+2(carga)=**24** electrones de valencia

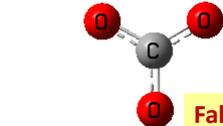
Paso 3- Dibujamos un enlace sencillo entre el C y cada O y completamos los octetos para los átomos de C y O con pares libres y enlaces múltiples.

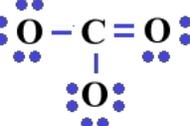
Paso 4- Para confirmar, ¿el # de e- en la estructura es igual al # de e- de valencia?

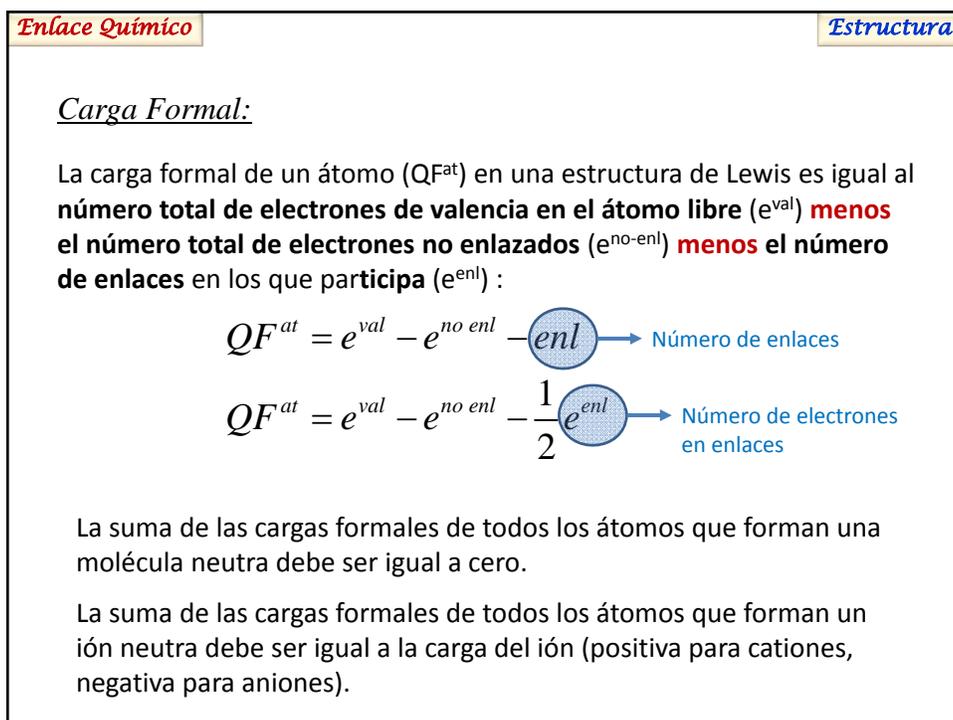
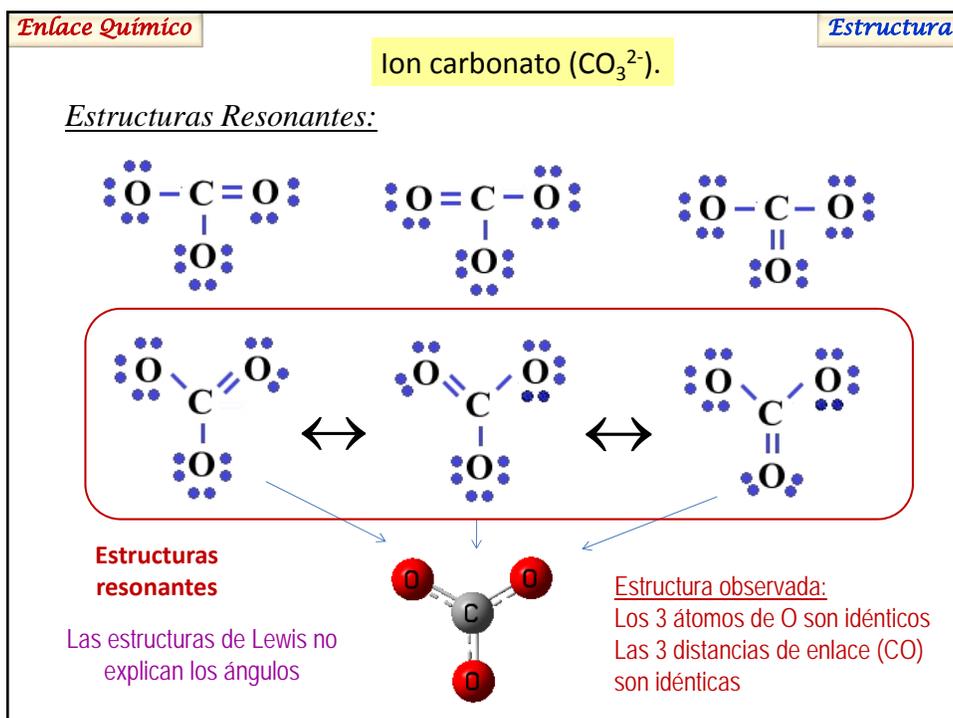
3 enlaces simples (3x2) + 10 pares libres (10x2) = **26 ≠ 24 demasiados** electrones de valencia

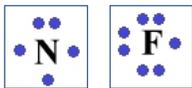
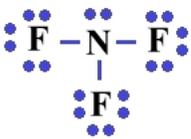
Paso 5- Formar enlaces dobles (de uno en uno y checar)
1 enlace doble (1x4) + 2 simples (2x2) + 8 pares libres (8x2) = **24** ✓

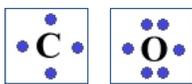
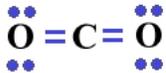
Falla







Enlace Químico	Estructura
<u>Carga Formal:</u>	$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$
Trifluoruro de nitrógeno (NF ₃)	
Átomos libres:	Molécula:
	
$QF^N = 5 - 2 - 3 = 0$	$Q^{total} = QF^N + 3QF^F = 0$
$QF^F = 7 - 6 - 1 = 0$	Molécula neutra <input checked="" type="checkbox"/>

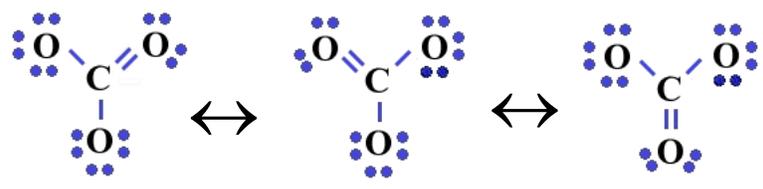
Enlace Químico	Estructura
<u>Carga Formal:</u>	$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$
Dióxido de carbono (CO ₂)	
Átomos libres:	Molécula:
	
$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$	$Q^{total} = QF^C + 2QF^O = 0$
$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$	Molécula neutra <input checked="" type="checkbox"/>

Enlace Químico **Estructura**

Carga Formal:

Ion carbonato (CO_3^{2-})

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$$



$$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$QF^{Osencillo} = 6 - 6 - 1 = -1$$

$$QF^{Odoble} = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$Q^{total} = QF^C + 2QF^{Osencillo} + QF^{Odoble}$$

$$= 0 + 2(-1) + 0 = -2$$

Anión (carga = -2)

Enlace Químico **Estructura**

Formaldehido (CH_2O)

Átomos libres:

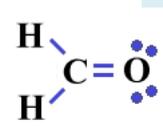
C

H

O

e- de valencia:
 $\text{C}(4) 2s^2 2p^2$ $\text{H}(1) 1s^1$ y $\text{O}(6) 2s^2 2p^4$
 $= 4 + 2(1) + 6 = 12$

Estructuras posibles:



$\text{H} - \overset{\cdot\cdot}{\text{C}} = \overset{\cdot\cdot}{\text{O}} - \text{H}$

Confirmando:

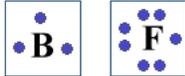
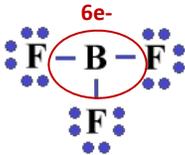
1 enlace doble (1x4) + 2 enlaces simples (2x2) + 2 pares libres (2x2)
= 12 electrones de valencia

1 enlace doble (1x4) + 2 enlaces simples (2x2) + 2 pares libres (2x2)
= 12 electrones de valencia

Enlace Químico	Estructura
<u>Carga Formal:</u>	
Formaldehido (CH ₂ O)	
	$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2}e^{enl}$
$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$	
$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$	$QF^C = 4 - 2 - 3 = -1$
$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$	$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$
$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$	$QF^O = 6 - 2 - 3 = +1$
Molécula neutra <input checked="" type="checkbox"/>	$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$
	Molécula neutra <input checked="" type="checkbox"/>

Enlace Químico	Estructura
Formaldehido (CH ₂ O)	
<p>Para moléculas neutras, es preferible la estructura de Lewis que no tenga cargas formales en vez de aquella en la que haya cargas formales.</p>	
<p>Las estructuras de Lewis con cargas formales grandes (+2, +3 ó -2, -3 ó más) son menos probables que las que tienen cargas formales pequeñas.</p>	
<p>Cuando existen varias estructuras de Lewis con la misma distribución de cargas formales, la estructura más razonable es la que lleve las cargas formales negativas en los átomos más electronegativos.</p>	

Enlace Químico	Estructura
<u>Excepciones a la Regla del Octeto:</u>	
El octeto incompleto Átomos hipovalentes	
Cuando el átomo central tiene menos de 8 e-	
Hidruro de Berilio (BeH₂)	
Átomos libres:	
	e- de valencia: Be(2) 2s ² y H(1) 1s ¹ = 2+2(1) = 4
Molécula:	
	
	Confirmando: 2 enlaces simples (2x2) = 4 electrones de valencia
El Be no cumple con la regla del octeto	

Enlace Químico	Estructura
<u>Excepciones a la Regla del Octeto:</u>	
El octeto incompleto Cuando el átomo central no cumple con la Regla del octeto	
Trifluoruro de Boro (BF₃)	
Átomos libres:	
	e- de valencia: B(3) 2s ² 2p ¹ y F(7) 2s ² 2p ⁵ = 3+3(7) = 24
Molécula:	
	
	Confirmando: 3 enlaces simples (3x2) + 9 pares libres (9x2) = 24 electrones de valencia
El B no cumple con la regla del octeto	

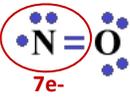
Enlace Químico **Estructura**

Excepciones a la Regla del Octeto:

Moléculas con número impar de electrones Hay e- no apareados

Monóxido de nitrógeno (NO)

Átomos libres:   e- de valencia:
N(5) $2s^2 2p^3$ y O(6) $2s^2 2p^4 = 5+6 = 11$

Molécula:  Confirmando:
1 enlace doble (1x4) + 3 pares libres (3x2) - 1e- libre
= 11 electrones de valencia

El N no cumple con la regla del octeto

1 e- libre: radical libre

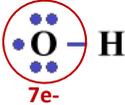
Enlace Químico **Estructura**

Excepciones a la Regla del Octeto:

Moléculas con número impar de electrones

Radical hidroxilo (OH)

Átomos libres:   e- de valencia:
O(6) $2s^2 2p^4$ y H(1) $1s^1 = 5+1 = 7$

Estructura:  Confirmando:
1 enlace simple (1x2) + 2 pares libres (2x2) - 1e- libre
= 7 electrones de valencia

El O no cumple con la regla del octeto

1 e- libre: radical libre

Enlace Químico **Estructura**

Excepciones a la Regla del Octeto:

Es la excepción más común

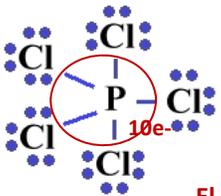
El octeto expandido **Átomos hipervalentes**

Cuando el átomo central tiene más de 8 e-

Pentacloruro de fósforo (PCl₅)

Átomos libres:   e- de valencia:
 $P(5) 3s^2 3p^3$ y $Cl(7) 3s^2 3p^5 = 5+5(7) = 40$

Molécula:



Confirmando:
 5 enlaces simples (5x2) + 15 pares libres (15x2)
 = 40 electrones de valencia

El P no cumple con la regla del octeto

Enlace Químico **Estructura**

Excepciones a la Regla del Octeto:

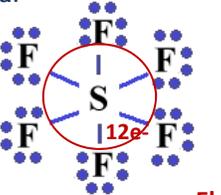
Se presenta cuando los e- de valencia del átomo central tienen $n > 2$

El octeto expandido

Hexafluoruro de azufre (SF₆)

Átomos libres:   e- de valencia:
 $S(6) 3s^2 3p^4$ y $F(7) 2s^2 2p^5 = 6+6(7) = 48$

Molécula:



Confirmando:
 6 enlaces simples (6x2) + 18 pares libres (18x2)
 = 48 electrones de valencia

El S no cumple con la regla del octeto

Estructura

 **PROBLEMARIO**

UNIDAD 3

ELECTRONEGATIVIDAD Y POLARIDAD DE ENLACE

30.- ¿Qué significa el término electronegatividad? En la escala de electronegatividad establecida por Pauling, ¿cuánto abarca la gama de valores de electronegatividad de los elementos? ¿Qué elemento tiene la electronegatividad más alta? ¿A cuál elemento corresponde la electronegatividad más baja?

31.- ¿Existe alguna relación entre la electronegatividad y el tipo de enlace que un átomo "x" forma con un átomo "y"?

32.- ¿Qué es un enlace covalente polar?

33.- De acuerdo a la polaridad predicha por la electronegatividad de los átomos (consulte tablas si es necesario) que forman el enlace, ordena en forma creciente de polaridad los enlaces de las siguientes series:

a) Si-O, C-Br y As-Br.
 b) H-Se, P-Cl y N-Cl.
 c) H-F, O-F y Be-F.
 d) C-S, B-F y N-O
 e) O-Cl, S-Br y C-P.

Indica las cargas parciales (δ^+ , δ^-) que corresponden a cada uno de los átomos.

1A								8A
H								He
2.20								
Li	Be	...	B	C	N	O	F	Ne
0.98	1.57		2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	
Na	Mg	...	Al	Si	P	S	Cl	Ar
0.93	1.31		1.61	1.90	2.19	2.58	3.16	
K	Ca	...	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.82	1.0		1.81	2.01	2.18	2.55	2.96	3.00
Rb	Sr	...	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.82	0.95		1.78	1.8	2.05	2.1	2.66	2.60
Cs	Ba	...	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.79	0.89		1.62	2.33	2.02	2.0	2.2	2.2
Fr	Ra							
0.7	0.9							

Estructura

 **PROBLEMARIO**

UNIDAD 3

REPRESENTACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS DE LEWIS, CARGAR FORMAL Y ESTRUCTURAS RESONANTES

36.- Escribe las estructuras de resonancia para las especies siguientes:

a) SO_3 .
 b) $(\text{NO}_2)^-$.
 c) HNO_3 .
 d) H_3CNO_2 (C es el átomo central y los dos O están unidos al N).
 e) O_3 .
 f) CO_3^{2-} .
 g) HCO_2^- (el H y ambos átomos de O están unidos al C).

41.- Utilice los conceptos de carga formal y electronegatividad para explicar por qué la mejor estructura de Lewis para el BF_3 es la que tiene menos de un octeto alrededor del boro.

42.- Los átomos en la molécula de N_2O_5 están enlazados de forma tal que cada átomo de nitrógeno está unido a tres átomos de oxígeno, y uno de los átomos de oxígeno está unido a los dos átomos de nitrógeno. Utilice el criterio de las cargas formales para seleccionar la(s) fórmula(s) de Lewis para este compuesto. Se sabe que las longitudes de enlace N-O pueden ser de 118 pm o de 136 pm. De acuerdo a las estructuras de Lewis que propusiste, indica a cuales de los enlaces les asignarías estas distancias.

Estructura



PROBLEMARIO

UNIDAD 3

REPRESENTACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS DE LEWIS, CARGAR FORMAL Y ESTRUCTURAS RESONANTES

43.- ¿Cuál de las siguientes estructuras será mas estable? ¿Por qué?

i) $\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{S}}$ ii) $:\ddot{\text{O}}-\text{C}\equiv\text{S}:$

44.- Determina las cargas formales del átomo de C en cada uno de los siguientes compuestos:

- CO_3^{-2} .
- CO_2 .
- CO .
- CS_2 .

45.- El compuesto S_2N_2 tiene una estructura tal que los átomos de S y N se encuentran alternados en los vértices de un cuadrado. Dibuja todas las estructuras de resonancia en las que los átomos cumplan con la regla del octeto. De éstas, selecciona aquellas en las cuales la carga formal de todos los átomos sea cero.

Estructura



PROBLEMARIO

UNIDAD 3

EXCEPCIONES A LA REGLA DEL OCTETO

53.- ¿Cuál es la excepción más común a la regla del octeto? Escribe la estructura de Lewis para cada una de las especies siguientes: XeF_2 , XeF_5^+ , TeF_6 , I_3^- , BH_3 , SO_2 , AsF_6^- , O_2^- , BrF_5 y SO_3^{2-} . Identifica los que no obedecen la regla del octeto y explique por qué no lo hacen.

56.- Las fórmulas de los fluoruros formados por los elementos del tercer periodo son NaF , MgF_2 , AlF_3 , SiF_4 , PF_5 , SF_6 y ClF_3 , respectivamente.

- Clasifica cada uno de estos compuestos como iónico o covalente y escribe la fórmula de Lewis correspondiente.
- ¿Alguna de las estructuras de Lewis no obedece la regla del octeto?
- ¿Observas alguna tendencia en el tipo de enlace formado conforme se avanza de izquierda a derecha en el periodo?
- ¿A qué propiedad o propiedades periódicas atribuyes la tendencia observada?
- ¿Qué propiedades químicas esperarías para tales fluoruros?

57.- Utiliza el criterio de cargas formales para seleccionar la estructura de Lewis que describa adecuadamente la distribución electrónica en las moléculas SOF_2 , HClO_2 , POCl_3 , ClO_2F (considera que los átomos centrales en estas moléculas pueden extender su octeto).