

ENLACE QUIMICO

- Teorías y representaciones de enlaces

 - Representación de Lewis

 - Regla del octeto

 - Carga formal y estructuras de resonancia

 - Excepciones a la regla del octeto

Estructuras de Lewis:

Desarrollo un sistema de puntos para representar los electrones de valencia, conocido como : **Diagrama de puntos, símbolo de puntos, estructura de puntos, o estructura de Lewis.**



Gilbert Newton Lewis
(1875-1946,
norteamericano)

Recordemos: el número de electrones de valencia para los elementos representativos es igual al número del grupo al que pertenece el elemento (excepto para el He que tiene 2):

1A									8A
1	2A		3A	4A	5A	6A	7A		2
H									He
3	4	#	5	6	7	8	9	10	
Li	Be		B	C	N	O	F	Ne	
		#							

Símbolos de Lewis

1A									8A
•H									••He
•Li	•Be•	#	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•		••Ne••
		#							

Regla del octeto:

los átomos tienden a ganar, compartir, o perder electrones hasta estar rodeados por 8 electrones de valencia (estructura de gases nobles)

Estructuras de Lewis:

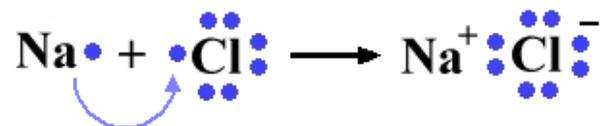
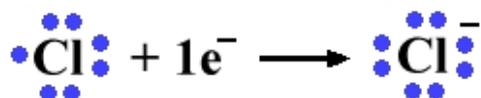
1. Es la representación más simple del enlace químico.
2. Escribe la estructura del compuesto mediante símbolos químicos mostrando qué átomos están unidos entre sí. El átomo menos electronegativo ocupa la posición central, con excepción del H que suele ocupar las posiciones terminales.
3. Cuenta el número 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.
4. 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.
5. 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.

Estructuras de Lewis:

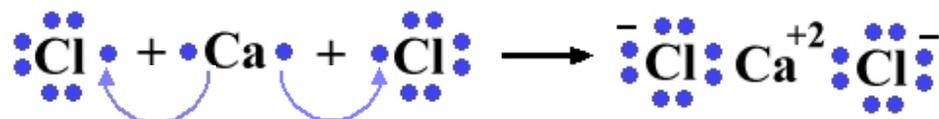
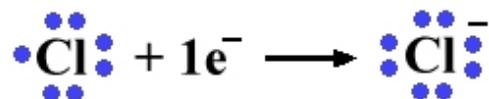
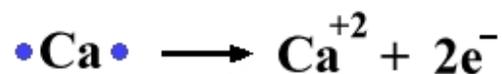
Enlace Químico

Enlace iónico:

Estructura electrónica y estequiometría



NaCl



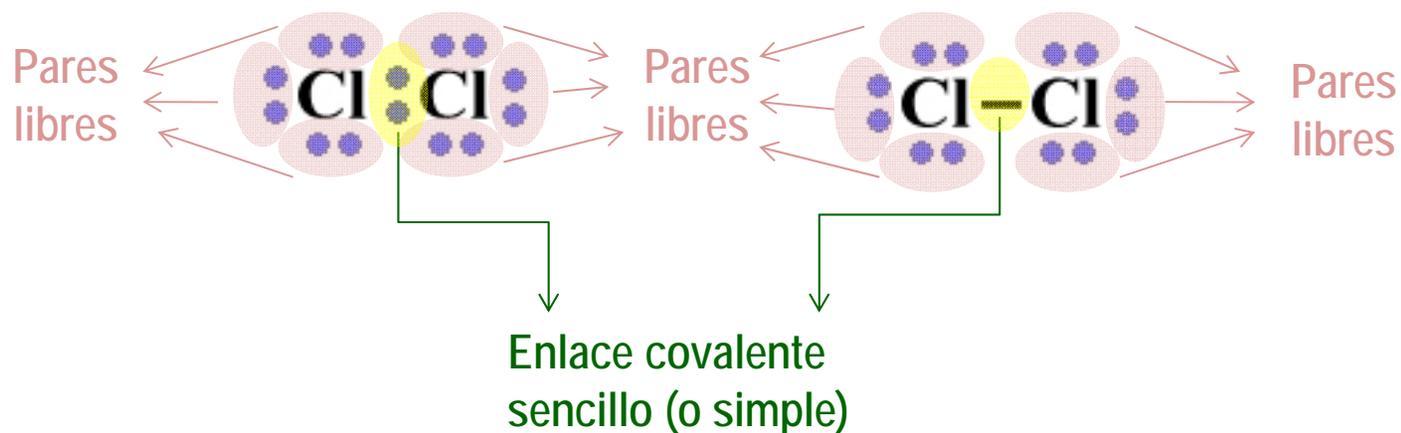
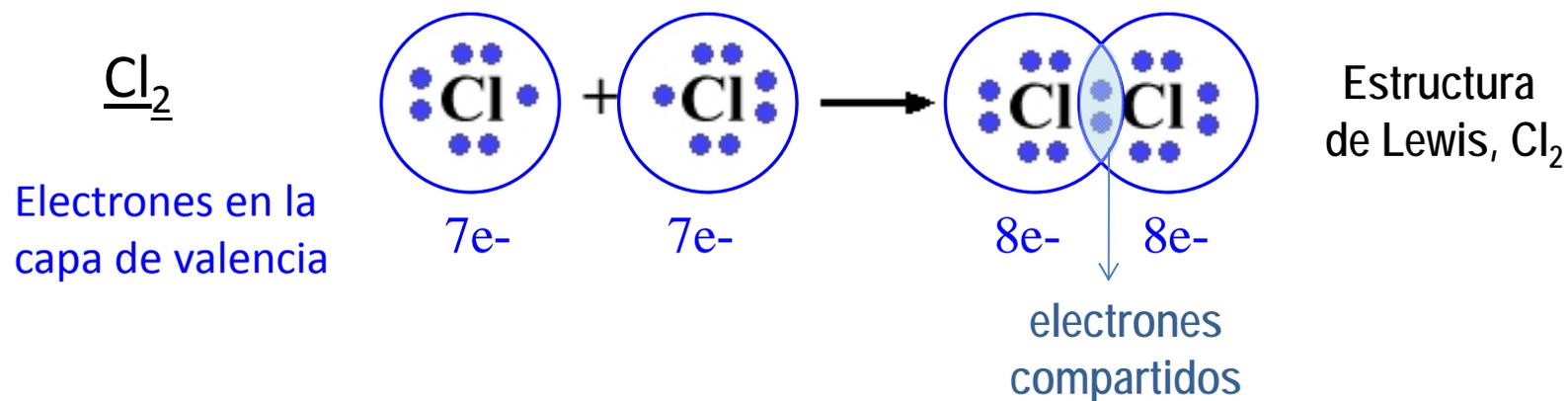
CaCl₂

Se completa la capa de valencia (últimos niveles de energía), adquiriendo una configuración electrónica muy estable (semejante a la del gas noble más cercano)

Estructuras de Lewis:

Enlace Covalente:

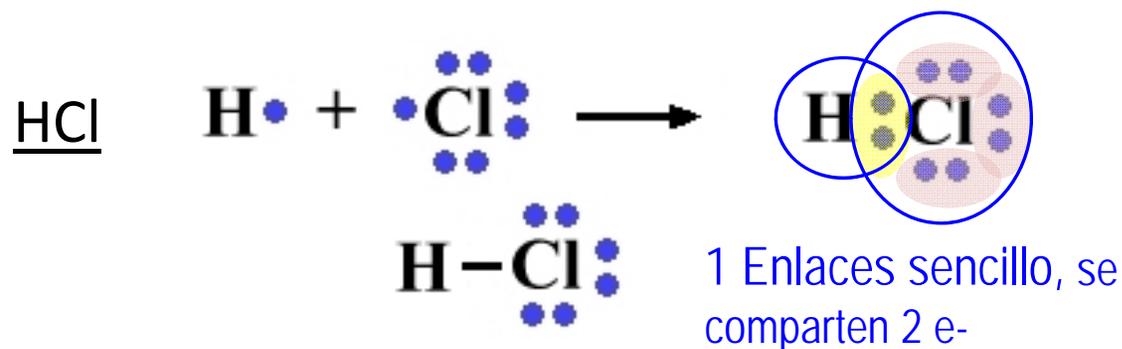
Se comparten pares de electrones entre los átomos enlazados



Estructuras de Lewis:

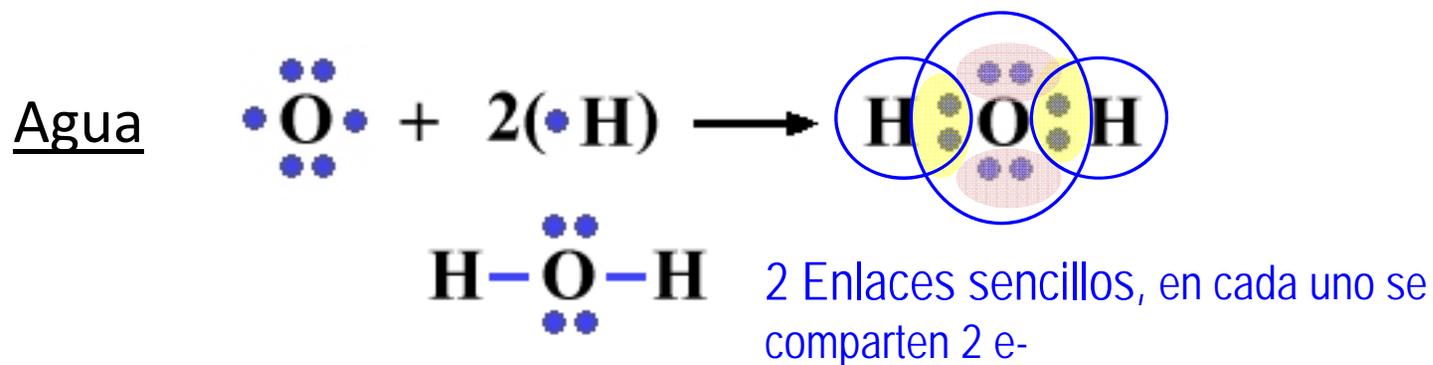
Enlace Químico

Enlace Covalente:

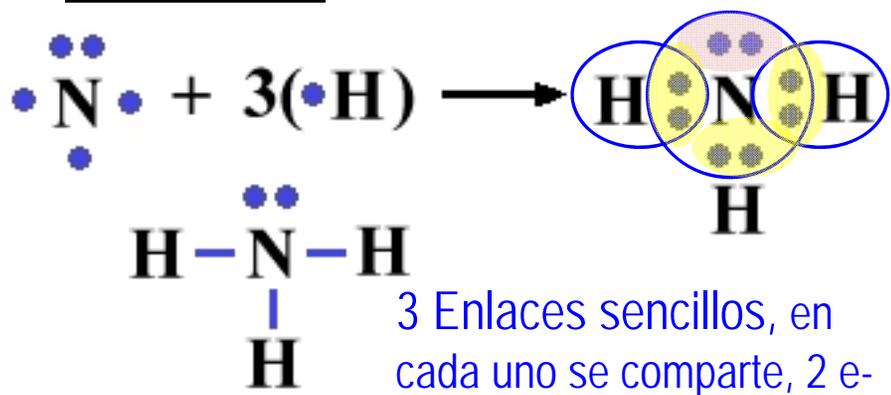


Enlace, pares de e- compartidos

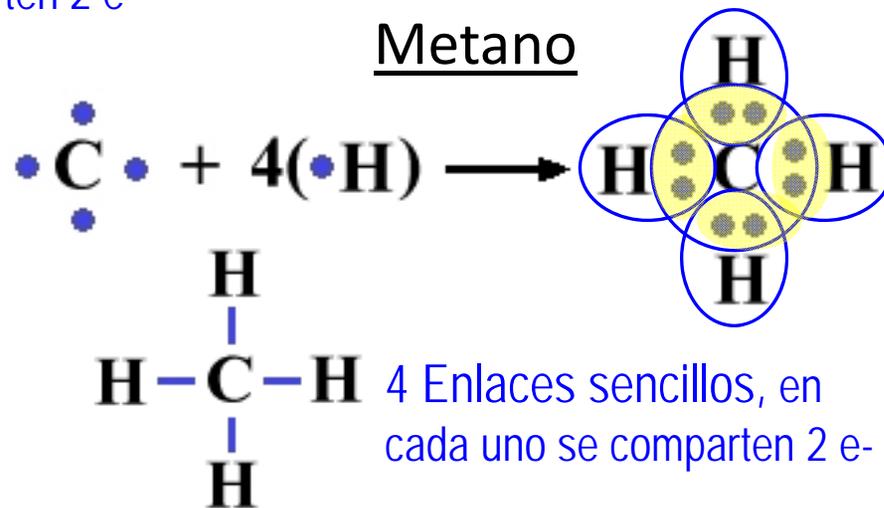
Pares libres



Amoniaco



Metano

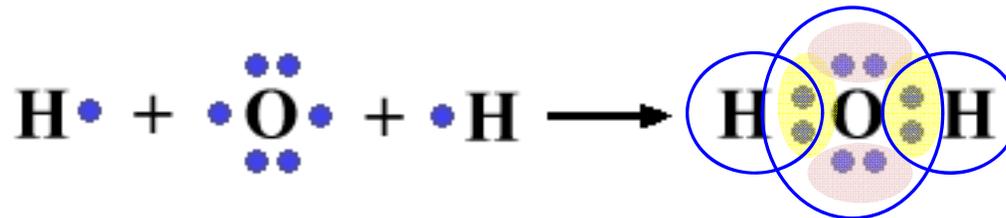


Estructuras de Lewis:

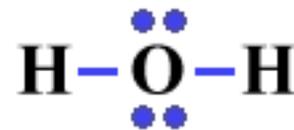
Enlace Químico

Enlace Covalente:

Agua



Enlace, pares de e- compartidos

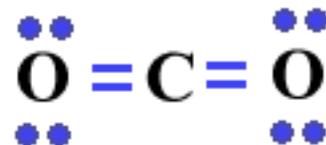
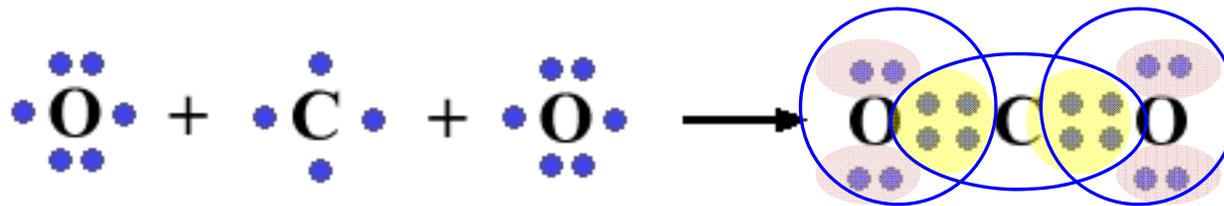


Enlace sencillo:

2 átomos comparten 1 par de e-

Pares libres

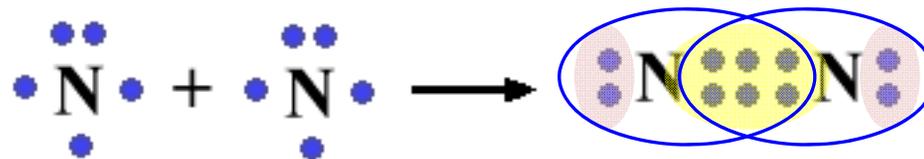
CO₂



Enlace doble:

2 átomos comparten 2 pares de e-

N₂



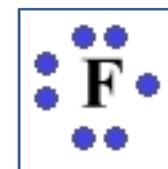
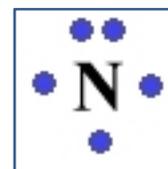
Enlace triple:

2 átomos comparten 3 pares de e-



Problema

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



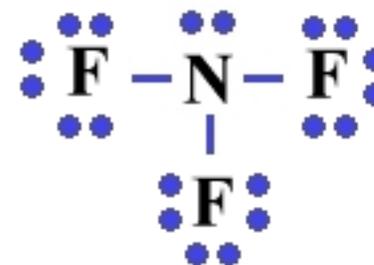
Escribe la estructura de Lewis del trifluoruro de nitrógeno (NF_3).

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



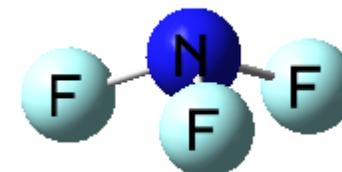
Paso 2 - Contamos los e- de valencia: N(5) $2s^2 2p^3$ y F(7) $2s^2 2p^5$
 $5 + (3 \times 7) = 26$ electrones de valencia

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?

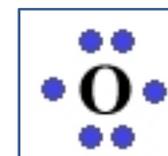
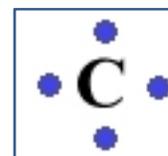
3 enlaces sencillos (3×2) + 10 pares libres (10×2)
 = **26** electrones de valencia





Problema

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

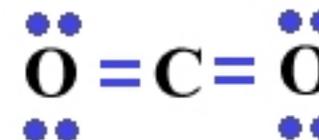


Escribe la estructura de Lewis para el dióxido de carbono (CO_2).

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

Paso 2 - Contamos los e- de valencia: C(4) $2s^2 2p^2$ y O(6) $2s^2 2p^4$
 $4 + (2 \times 6) = 16$ 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.

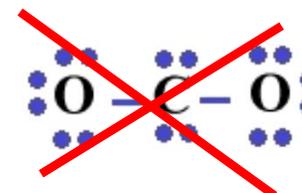


Paso 4- Para confirmar, ¿el # de e- en la estructura es igual al # de e- de valencia?

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

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

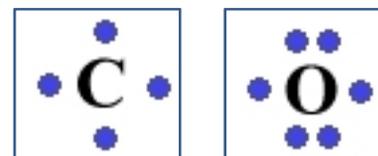
2 enlaces sencillos (2×2) + 8 pares libres (8×2)
 = **20** \neq **16** demasiados electrones de valencia





Problema

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

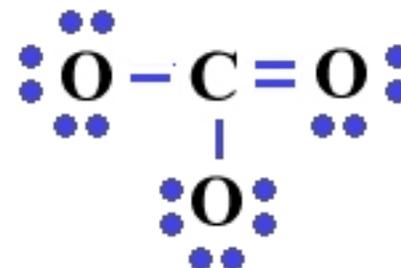


Escribe la estructura de Lewis para el ion carbonato (CO_3^{2-}).

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

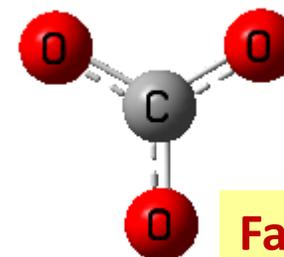
Paso 2 - Contamos los e- de valencia: C(4) $2s^2 2p^2$ y O(6) $2s^2 2p^4$
 $4 + (3 \times 6) + 2(\text{carga}) = 24$ electrones de valencia

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 (3×2) + 10 pares libres (10×2) = $26 \neq 24$
demasiados electrones de valencia



Falla

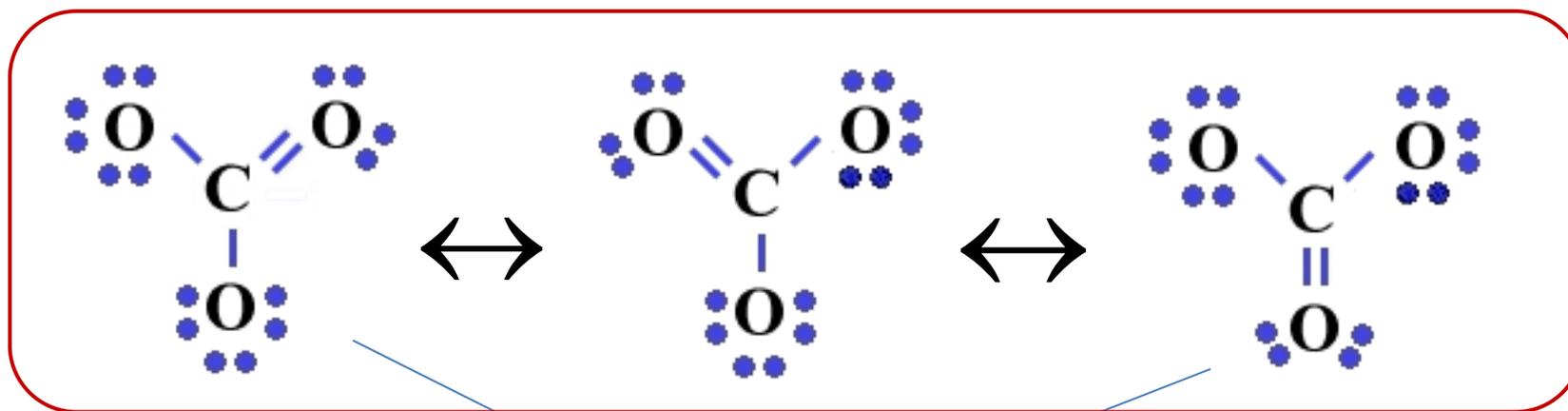
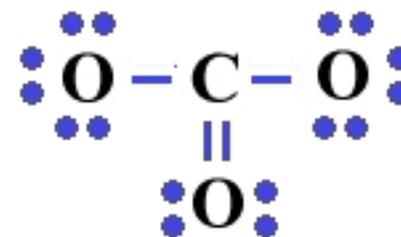
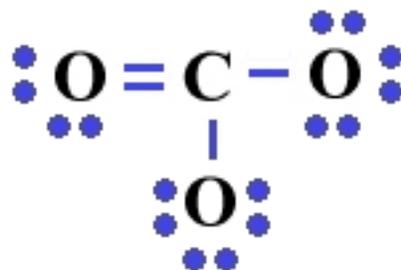
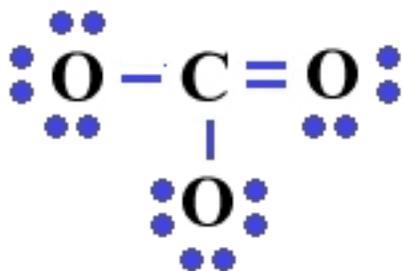
Paso 5- Formar enlaces dobles (de uno en uno y checar)

1 enlace doble (1×4) + 2 simples (2×2) + 8 pares libres (8×2) = 24 ✓

Estructuras de Lewis:

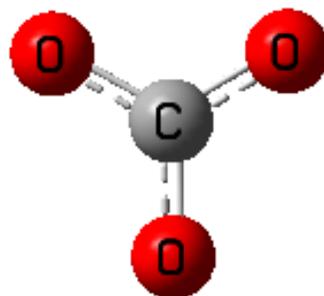
Ion carbonato (CO_3^{2-}).

Estructuras Resonantes:



Estructuras resonantes

Las estructuras de Lewis no explican los ángulos



Estructura observada:

Los 3 átomos de O son idénticos
Las 3 distancias de enlace (CO) son idénticas

Carga Formal:

La carga formal de un átomo (QF^{at}) en una estructura de Lewis es igual al **número total de electrones de valencia en el átomo libre (e^{val}) menos el número total de electrones no enlazados (e^{no-enl}) menos el número de enlaces en los que participa (e^{enl}) :**

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \text{enl} \rightarrow \text{Número de enlaces}$$

$$QF^{at} = e^{val} - e^{no\ enl} - \frac{1}{2} e^{enl} \rightarrow \text{Número de electrones en enlaces}$$

La suma de las cargas formales de todos los átomos que forman una molécula neutra debe ser igual a cero.

La suma de las cargas formales de todos los átomos que forman un ión neutro debe ser igual a la carga del ión (positiva para cationes, negativa para aniones).

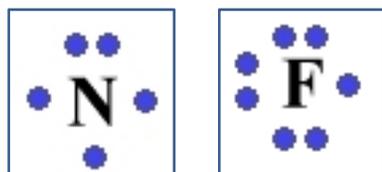
Estructuras de Lewis:

Enlace Químico

Carga Formal:

Trifluoruro de nitrógeno (NF₃)

Átomos libres:

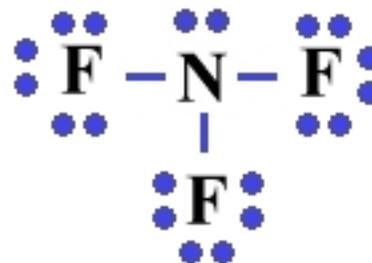


$$QF^N = 5 - 2 - 3 = 0$$

$$QF^F = 7 - 6 - 1 = 0$$

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

Molécula:



$$Q^{total} = QF^N + 3QF^F = 0$$

Molécula neutra

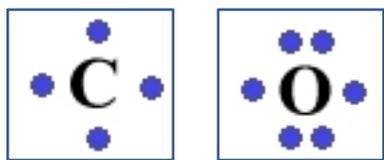
Estructuras de Lewis:

Enlace Químico

Carga Formal:

Dióxido de carbono (CO₂)

Átomos libres:

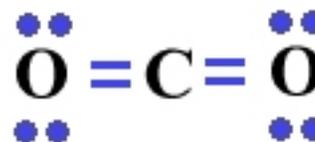


$$QF^C = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$$

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

Molécula:



$$Q^{total} = QF^C + 2QF^O = 0$$

Molécula neutra

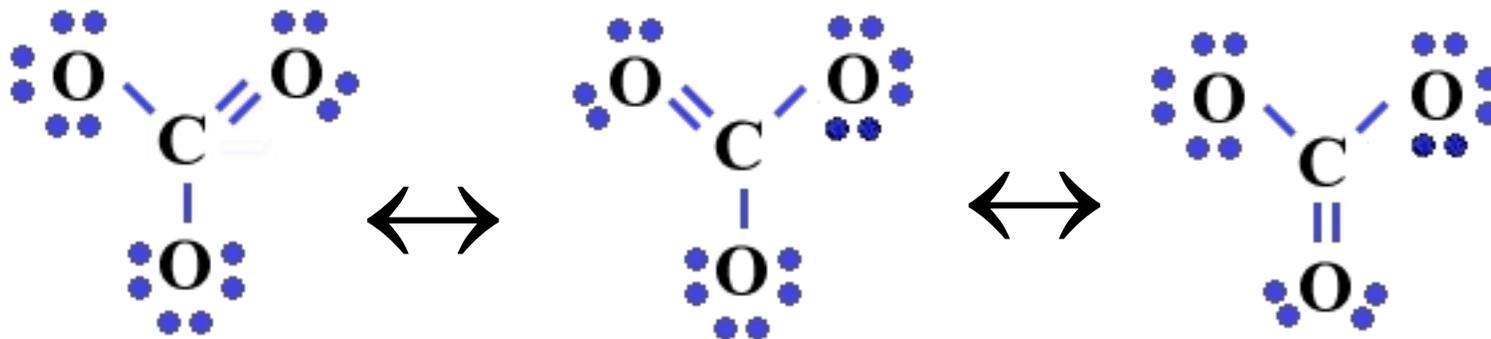
Estructuras de Lewis:

Enlace Químico

Carga Formal:

Ion carbonato (CO_3^{2-})

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



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

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

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

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

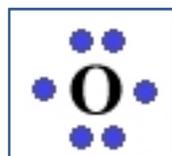
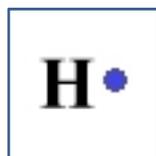
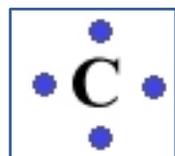
$$= 0 + 2(-1) + 0 = -2$$

Anión (carga = -2) ✓

Estructuras de Lewis:

Formaldehido (CH₂O)

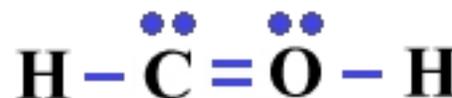
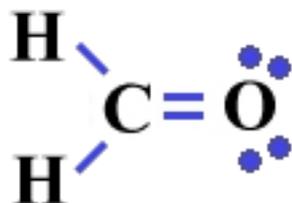
Átomos libres:



e- de valencia:

$$\text{C}(4) 2s^2 2p^2 \quad \text{H}(1) 1s^1 \quad \text{y} \quad \text{O}(6) 2s^2 2p^4 \\ = 4 + 2(1) + 6 = \mathbf{12}$$

Estructuras posibles:



Confirmando:

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

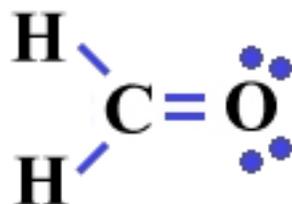
1 enlace doble (1x4) + 2 enlaces
simples (2x2) + 2 pares libres (2x2)
= **12** electrones de valencia

Estructuras de Lewis:

Enlace Químico

Carga Formal:

Formaldehído (CH₂O)



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

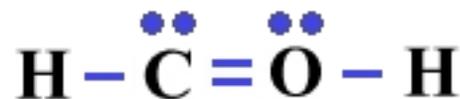
$$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$QF^O = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$$

Molécula neutra

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



$$QF^C = 4 - 2 - 3 = -1$$

$$QF^H = 1 - 0 - 1 = 0$$

$$QF^O = 6 - 2 - 3 = +1$$

$$Q^{total} = QF^C + 2QF^H + QF^O = 0$$

Molécula neutra

Formaldehído (CH₂O)



Para moléculas neutras, es preferible la estructura de Lewis que no tenga cargas formales en vez de aquella en la que haya cargas formales.

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.

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.

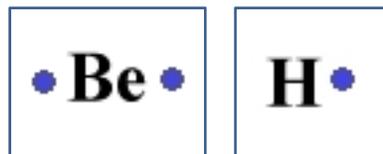
Excepciones a la Regla del Octeto:

El octeto incompleto Átomos hipovalentes

Cuando el átomo central tiene menos de 8 e-

Hidruro de Berilio (BeH_2)

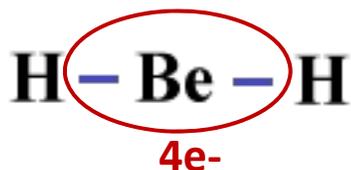
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{Be}(2) 2s^2 \text{ y } \text{H}(1) 1s^1 = 2+2(1) = 4$$

Molécula:



Confirmando:

2 enlaces simples $(2 \times 2) = 4$ electrones de valencia

El Be no cumple con la regla del octeto

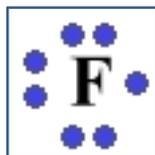
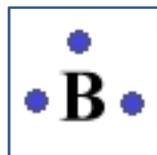
Excepciones a la Regla del Octeto:

El octeto incompleto

Cuando el átomo central no cumple con la Regla del octeto

Trifluoruro de Boro (BF_3)

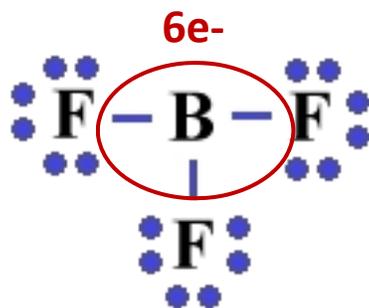
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{B}(3) 2s^2 2p^1 \text{ y } \text{F}(7) 2s^2 2p^5 = 3+3(7) = \mathbf{24}$$

Molécula:



Confirmando:

$$3 \text{ enlaces simples } (3 \times 2) + 9 \text{ pares libres } (9 \times 2) = \mathbf{24} \text{ electrones de valencia}$$

El B no cumple con la regla del octeto

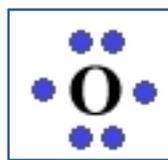
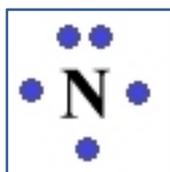
Excepciones a la Regla del Octeto:

Moléculas con número impar de electrones

Hay e- no apareados

Monóxido de nitrógeno (NO)

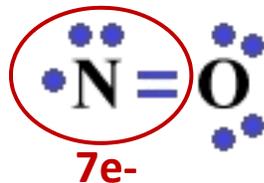
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{N}(5) 2s^2 2p^3 \text{ y } \text{O}(6) 2s^2 2p^4 = 5+6 = \mathbf{11}$$

Molécula:



Confirmando:

$$1 \text{ enlace doble } (1 \times 4) + 3 \text{ pares libres } (3 \times 2) - 1e^- \text{ libre} = \mathbf{11} \text{ electrones de valencia}$$

El N no cumple con la regla del octeto

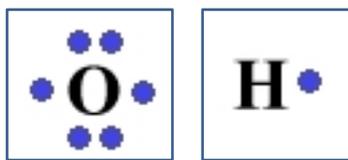
1 e- libre: radical libre

Excepciones a la Regla del Octeto:

Moléculas con número impar de electrones

Radical hidroxilo (OH)

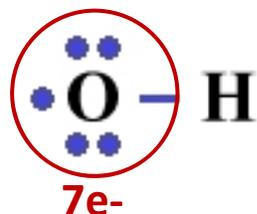
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{O}(6) 2s^2 2p^4 \text{ y } \text{H}(1) 1s^1 = 5+1 = 7$$

Estructura:



Confirmando:

$$1 \text{ enlace simple } (1 \times 2) + 2 \text{ pares libres } (2 \times 2) - 1e^- \text{ libre} = 7 \text{ electrones de valencia}$$

El O no cumple con la regla del octeto

1 e- libre: radical libre

Excepciones a la Regla del Octeto:

Es la excepción más común

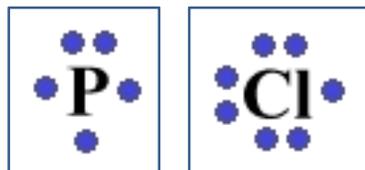
El octeto expandido

Átomos hipervalentes

Cuando el átomo central tiene más de 8 e-

Pentacloruro de fósforo (PCl_5)

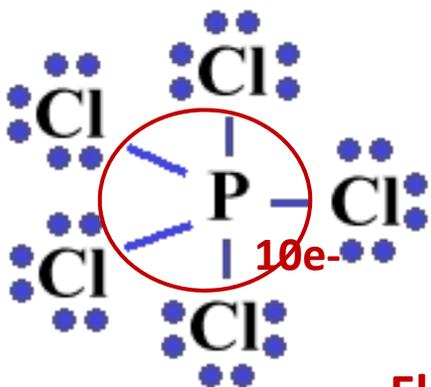
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{P}(5) 3s^2 3p^3 \text{ y } \text{Cl}(7) 3s^2 3p^5 = 5+5(7) = 40$$

Molécula:



Confirmando:

$$5 \text{ enlaces simples } (5 \times 2) + 15 \text{ pares libres } (15 \times 2) = 40 \text{ electrones de valencia}$$

El P no cumple con la regla del octeto

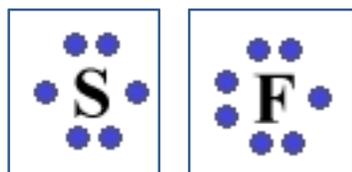
Excepciones a la Regla del Octeto:

El octeto expandido

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

Hexafluoruro de azufre (SF_6)

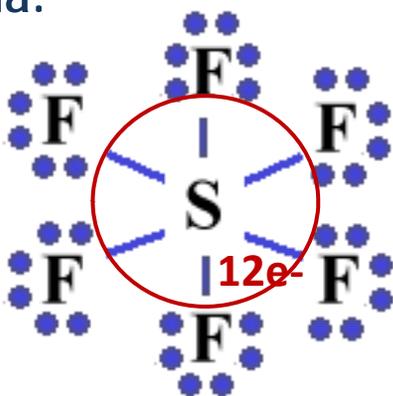
Átomos
libres:



e- de valencia:

$$\text{S}(6) 3s^2 3p^4 \text{ y } \text{F}(7) 2s^2 2p^5 = 6 + 6(7) = \mathbf{48}$$

Molécula:



Confirmando:

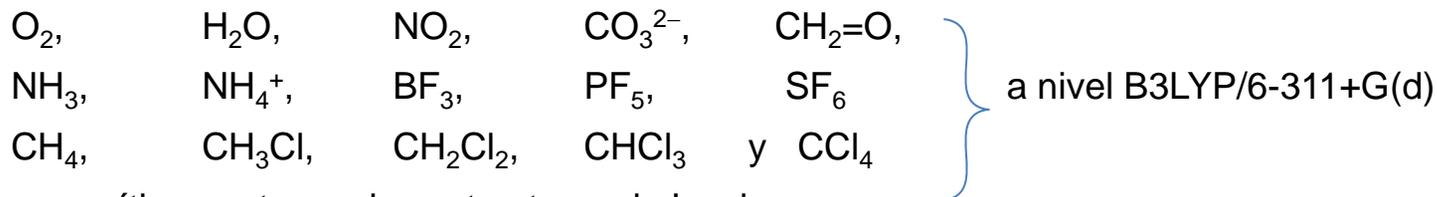
$$6 \text{ enlaces simples } (6 \times 2) + 18 \text{ pares libres } (18 \times 2) = \mathbf{48} \text{ electrones de valencia}$$

El S no cumple con la regla del octeto



Ejercicios

1. Obtenga las geometrías optimizadas de las especies químicas:



- a) Compare críticamente con las estructuras de Lewis.
- b) Obtenga las geometrías optimizadas de estas mismas especies con los niveles de cálculo: HF/3-21G, HF/6-311+G(d) y B3LYP/3-21G. Analice los resultados comparativamente.
- c) Busque en la literatura parámetros geométricos experimentales (especialmente distancias de enlace) y compare con los resultados teóricos.
- d) Obtenga las cargas sobre los átomos con los esquemas de partición de Mulliken, Hirshfeld, Merz-Singh-Kollman y NBO (HF/3-21G) y como cargas formales. Analice los resultados comparativamente.

2. Propón la mejor estructura de Lewis para representar tu molécula de trabajo. De ser necesario considera estructuras resonantes y excepciones a la regla del octeto.

- a) Compara con la geometría optimizada a nivel B3LYP/6-311+G(d).
- b) Obtenga las cargas sobre los átomos con los esquemas de partición de Mulliken, Hirshfeld, Merz-Singh-Kollman y NBO (HF/3-21G) y como cargas formales. Analice los resultados comparativamente.

Se recomienda guardar los archivos obtenidos en (1) y (2) para futuros ejercicios.