

Enlace químico

José Mariano Lucena Cruz
chenalc@gmail.com

19 de mayo de 2010

El enlace químico

La unión entre átomos, moléculas o iones constituye el llamado **enlace químico**.

Su fundamento siempre es de tipo eléctrico.

Las fuerzas que mantienen unidos a los átomos o iones se denominan **interatómicas** o simplemente **enlaces** (iónicos, covalentes y metálicos).

Las fuerzas que mantienen unidas a las moléculas se denominan **intermoleculares**.

Definición

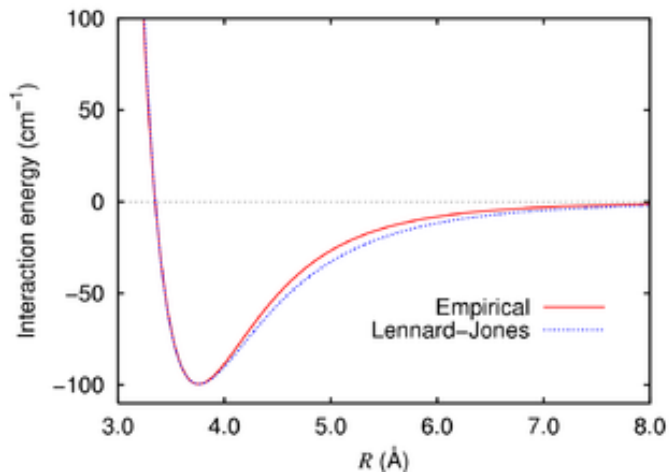
*Se denomina **enlace químico** al conjunto de fuerzas que mantienen unidos los átomos cuando forman moléculas o cristales, así como a las fuerzas que mantienen unidas a las moléculas cuando las sustancias se presentan en estado líquido o sólido.*

El enlace químico

La causa de que se produzca el enlace es la búsqueda de estabilidad ("economía energética"), y en ello juega un papel decisivo la configuración electrónica de la capa o nivel de valencia.

La **energía de enlace** es la energía que se desprende en la formación de un enlace y resulta del balance energético entre atracciones y repulsiones de los átomos que se unen.

Energía de enlace

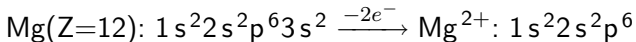
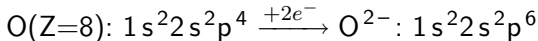


Electronegatividad y enlace

- Si la diferencia de E.N. entre los átomos es **mayor que 1,7** el enlace es fundamentalmente **iónico**.
- Si esa diferencia es **inferior a 1,7**, siendo ambas **mayores de 2**, el enlace es fundamentalmente **covalente**.
- Si la diferencia es **inferior a 1,7**, siendo ambas **menores de 2**, el enlace es fundamentalmente **metálico**.

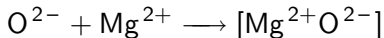
Definición

El **enlace iónico** se da cuando se combinan elementos con electronegatividades muy diferentes. El menos electronegativo (metal) cederá electrones –y formará iones positivos– al más electronegativo (no metal), que formará iones negativos. El enlace se produce por la atracción electrostática entre los iones de distinto signo.



Definición

Electrovalencia o **valencia iónica** es el número de electrones que un elemento gana o pierde para transformarse en un ion.



Definición

Energía reticular o energía de red es la que hay que comunicar a un mol de un compuesto iónico para separar completamente sus iones hasta una distancia en la que no interaccionen.

En el proceso de unión de estos iones para formar un mol de compuesto iónico se liberará una energía exactamente igual.

Esta energía es una buena medida de la estabilidad de los compuestos iónicos.

Definición

Es un ciclo termodinámico en el que se estudian, desde un punto de vista energético, todos los procesos que intervienen en la formación de un compuesto iónico a partir de sus elementos en sus estados termodinámicos más estables.

Ejemplo: **Formación del cloruro de sodio NaCl**

Partimos de sodio y de cloro, en sus formas más estables: [Na(s) y Cl₂(g)].

Los procesos que hay que tener en cuenta son: **sublimación** del sodio, **disociación** del cloro, **ionización** del sodio, **ionización** del cloro, y la **aproximación** de los iones para formar el compuesto iónico.

Definición

Es un ciclo termodinámico en el que se estudian, desde un punto de vista energético, todos los procesos que intervienen en la formación de un compuesto iónico a partir de sus elementos en sus estados termodinámicos más estables.

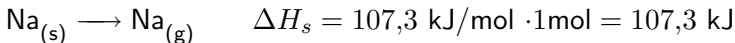
Ejemplo: **Formación del cloruro de sodio NaCl**

Partimos de sodio y de cloro, en sus formas más estables: [Na(s) y Cl₂(g)].

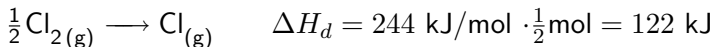
Los procesos que hay que tener en cuenta son: **sublimación** del sodio, **disociación** del cloro, **ionización** del sodio, **ionización** del cloro, y la **aproximación** de los iones para formar el compuesto iónico.

Ciclo de Born-Haber para el NaCl

- 1 **Sublimación** del sodio metálico (sólido) para obtener átomos individuales (gas). La energía que hay que aportar es la energía (entalpía) de sublimación ($\Delta H_s(\text{Na})$).



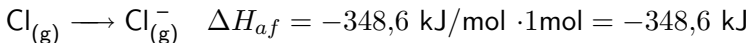
- 2 **Disociación** de las moléculas de cloro, para obtener átomos de cloro. Esta es la energía de disociación ($\Delta H_d(\text{Cl}_2)$).



- 3 **Ionización** de los átomos de sodio por pérdida de un electrón. Esta es la 1ª energía de ionización del sodio ($\Delta H_i(\text{Na})$).



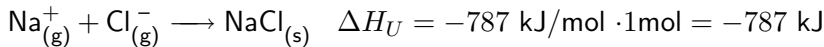
- 4 **Ionización** de los átomos de cloro por captación de un electrón. Esta es la 1ª afinidad electrónica del cloro ($\Delta H_{af}(\text{Cl})$).



Ciclo de Born-Haber para el NaCl

El valor global positivo de las energías anteriores indicaría que la formación del NaCl es energéticamente desfavorable. Pero hay que tener en cuenta además que los iones se ordenan en una red cristalina iónica, con lo que hay que tener en cuenta un paso más:

- **Aproximación** de los iones hasta la distancia a la que quedarán en la red. Esta es la energía reticular o de red (ΔH_U).



En este proceso, según el principio de conservación de la energía, la energía de formación del NaCl será:

$$\Delta H_f = \Delta H_s + \Delta H_d + \Delta H_i + \Delta H_{af} + \Delta H_U = -411 \text{ kJ/mol}$$

Estructura de los cristales iónicos

La fórmula de un compuesto iónico no indica la unión de dos iones para formar una molécula, ya que no forman moléculas, sino la proporción en la que entran cuando forman redes cristalinas iónicas o, simplemente, **cristales iónicos**.

Un cristal está formado por la repetición indefinida de una estructura básica denominada **celda unidad**.

La forma en que se disponen los iones de una red cristalina depende de la proporción de aniones y cationes y de sus respectivos tamaños.

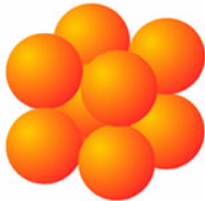
En un cristal iónico se cumple:

- El número de cargas de un signo debe ser igual al de cargas de signo contrario.
- Los iones se ordenarán en el espacio de modo que se consiga el empaquetamiento más compacto posible. El grado de empaquetamiento dependerá del tamaño de los iones.

Se llama **índice de coordinación** al número de iones de un signo que rodean a cada ion de signo contrario en su esfera más próxima. Es una característica del tipo de red formada.

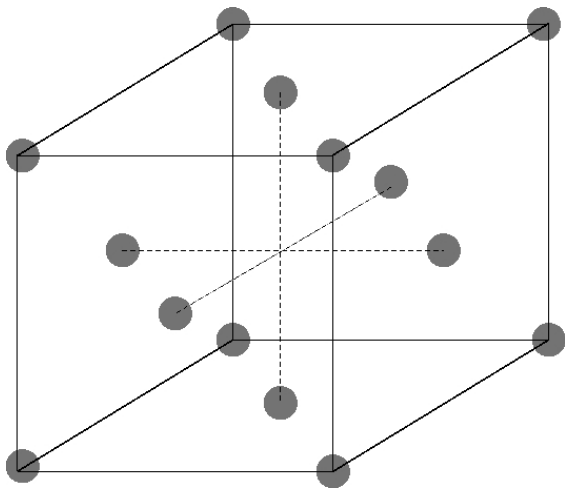
Tipo **AB**: Cúbica centrada en el cuerpo

Ejemplo: CsCl



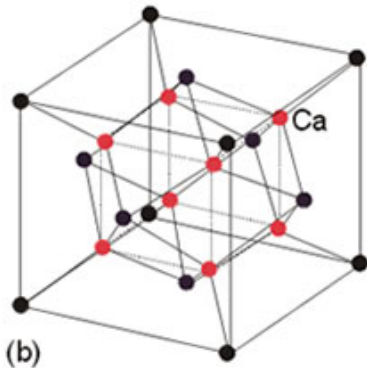
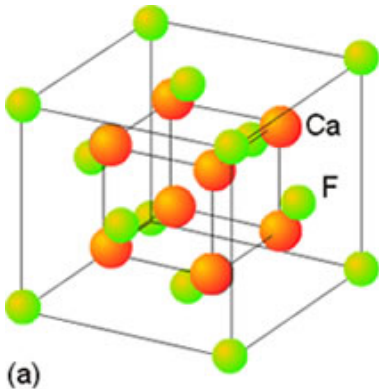
Tipo **AB**: Cúbica centrada en las caras

Ejemplo: NaCl



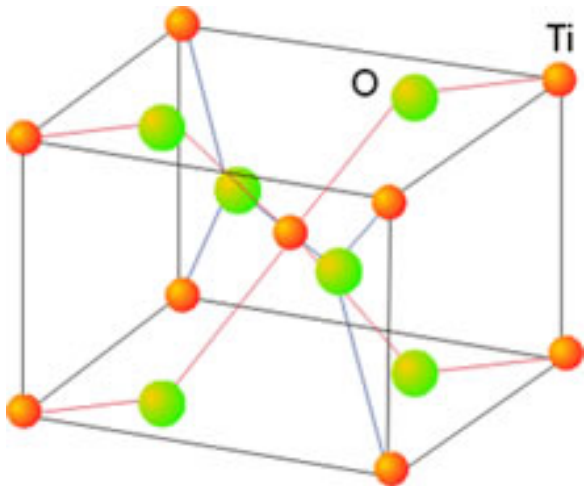
Tipo AB_2 : Fluorita

Ejemplo: CaF_2



Tipo AB_2 : Rutilo

Ejemplo: TiO_2



Teniendo en cuenta que un enlace iónico resulta de la atracción electrostática entre iones, y esta viene dada por la ley de Coulomb, un enlace iónico será más fuerte cuanto mayor sea la carga de los iones y menor su tamaño (más próximas estén las cargas entre sí).

De la misma forma, mayor será la energía de la red cristalina (energía reticular) y como muchas de las propiedades de los compuestos iónicos dependen de su energía reticular (punto de fusión, solubilidad) podemos establecer una correspondencia entre ambas.

Factores de los que depende la formación de un enlace iónico

La formación de un compuesto iónico viene determinada por la entalpía de formación (ΔH_f); así cuanto más negativa sea esta, más favorecida está la formación de dicho enlace.

- Diferencia de electronegatividad. A mayor diferencia, más favorecido está el enlace iónico.
- Carga de los iones. Cuanto más pequeña, más fácil que se forme el compuesto iónico.
- Tamaño de los iones. Cuanto más parecidos (catión grande y anión pequeño), mejor empaquetamiento y más favorable la formación del compuesto iónico.

Propiedades de los compuestos iónicos

- Sólidos a temperatura ambiente
- Solubles en disolventes polares
- No conducen la electricidad en estado sólido, sí en estado líquido
- Son duros pero frágiles

El **enlace covalente** se da entre átomos con electronegatividades altas y parecidas. Los átomos comparten en ese caso electrones de su capa de valencia.

Covalente apolar: Cuando los átomos que se enlazan tienen la misma electronegatividad.

Covalente polar: Cuando los átomos que se combinan tienen distinta electronegatividad.

Los átomos ganan, pierden o comparten electrones para lograr la configuración del gas noble más próximo, (ns^2np^6), salvo los que busquen la del helio. Esta se conoce como (regla del octeto).

Los electrones de valencia se disponen alrededor del símbolo del elemento, y cuando se va a enlazar con otro, comparte uno o varios de esos electrones con el otro átomo estableciéndose un enlace por cada par de electrones compartidos.

Las estructuras así formadas son representaciones bidimensionales, pero nada establecen acerca de la geometría de las moléculas, es decir de la disposición de los átomos en el espacio.

Reglas para la representación de estructuras de Lewis

- 1 Hacer un esquema de la molécula indicando cuáles son los átomos unidos por enlaces sencillos.
- 2 Sumar el número de electrones de valencia de cada átomo para calcular el total. Si se trata de una especie cargada, debe añadirse un electrón por cada carga negativa y restar un electrón por cada carga positiva.
- 3 Restar del total el número de electrones para los enlaces sencillos. Con el resto completar octetos empezando por los más electronegativos. Asignar cargas formales.
- 4 Si quedan átomos con octetos incompletos, convertir pares de electrones no enlazantes en enlazantes. Recalcular las cargas.
- 5 Si la regla anterior "crea" cargas formales nuevas, desechar esa estructura y utilizar la del punto 3.
- 6 Si el átomo central pertenece al periodo tercero y superiores, la regla del octeto puede no cumplirse (presentan orbitales *d*). Para eliminar cargas formales debe recurrirse a la formación de enlaces múltiples.

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl

- H₂O

- NH₃

- CH₄

- Cl₂

- O₂

- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H_2O
- NH_3
- CH_4
- Cl_2
- O_2
- N_2

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H₂O
- NH₃
- CH₄
- Cl₂
- O₂
- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H₂O
- NH₃
- CH₄
- Cl₂
- O₂
- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H₂O
- NH₃
- CH₄
- Cl₂
- O₂
- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H₂O
- NH₃
- CH₄
- Cl₂
- O₂
- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Formación de enlaces sencillos y múltiples

- HCl
- H₂O
- NH₃
- CH₄
- Cl₂
- O₂
- N₂

Ejemplos de estructuras de Lewis

Más allá de la regla del octeto

- PCl_5
- SF_6
- IF_7
- BF_3

Ejemplos de estructuras de Lewis

Más allá de la regla del octeto

- PCl_5
- SF_6
- IF_7
- BF_3

Ejemplos de estructuras de Lewis

Más allá de la regla del octeto

- PCl_5
- SF_6
- IF_7
- BF_3

Ejemplos de estructuras de Lewis

Más allá de la regla del octeto

- PCl_5
- SF_6
- IF_7
- BF_3

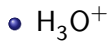
Ejemplos de estructuras de Lewis

Enlaces covalentes coordinados

- H_3O^+
- SO_2
- SO_3

Ejemplos de estructuras de Lewis

Enlaces covalentes coordinados



Ejemplos de estructuras de Lewis

Enlaces covalentes coordinados

- H_3O^+
- SO_2
- SO_3

Ejemplos de estructuras de Lewis

Estructuras resonantes. Enlaces deslocalizados



Ejemplos de estructuras de Lewis

Estructuras resonantes. Enlaces deslocalizados



La **Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia** permite pronosticar la geometría de las moléculas atendiendo a los pares de electrones de la capa de valencia que se disponen alrededor del átomo central en una molécula.

Los pares de electrones enlazantes y los no enlazantes se sitúan tan lejos como sea posible para minimizar las fuerzas de repulsión.

El efecto repulsivo de los pares no enlazantes es mayor que el de los enlazantes (estos están más localizados), ocupando así más volumen en el espacio.

Los pares enlazantes, sean de un enlace sencillo, uno doble o triple, mantienen a los átomos unidos en las mismas posiciones, por tanto se tomarán como si fueran un solo par.

Para pronosticar la geometría aproximada de una molécula según la **TRPECV** se determinan cuántos pares de electrones de valencia enlazantes y no enlazantes existen alrededor de un átomo dado. Estos pares están dirigidos en el espacio de manera que se reduzca la repulsión entre ellos. Así, 2, 3, 4, 5 y 6 pares de electrones conducen, respectivamente, a geometrías lineal, trigonal (triangular), tetraédrica, bipiramidal trigonal (triangular) y octaédrica.

Cuando algunos pares de electrones son enlazantes y otros son no enlazantes, la geometría será la del poliedro regular distorsionado, con los pares no enlazantes ocupando aparentemente más espacio que los enlazantes.

Polaridad de enlaces y moléculas

Un enlace entre dos átomos de distinta electronegatividad resulta **polar**. El par de electrones de enlace se deja sentir más en el átomo más electronegativo, con lo que este adquiere una carga parcial negativa (δ^-) y el otro átomo una carga parcial positiva (δ^+).

La polaridad del enlace se mide mediante el **momento dipolar**, ($\vec{\mu}$).

$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{r}$$

donde q es la carga parcial y \vec{r} es el vector distancia de la carga positiva a la negativa.

Ahora bien, la polaridad de una molécula viene determinada también por su momento dipolar, que es la suma **vectorial** de los momentos dipolares de todos sus enlaces:

$$\vec{\mu}_{molec} = \sum \vec{\mu}_{enlac}$$

Teoría del enlace de valencia

El enlace covalente se puede explicar mucho mejor dentro del marco de la Mecánica Cuántica. Para ello existen dos teorías: la del enlace de valencia (**TEV**) y la de los orbitales moleculares (**TOM**).

La **TEV** establece que un enlace covalente se forma cuando en una zona del espacio se superponen dos orbitales atómicos (**solapan**), cada uno de los cuales tiene un electrón (desapareado). Como los dos electrones pertenecen ahora a los dos orbitales indistintamente deberán estar apareados y tener, por tanto, sus espines antiparalelos, para cumplir el PEP.

Un átomo podrá formar tantos enlaces covalentes como electrones sea capaz de compartir. Esta posibilidad equivale a que un átomo puede formar tantos enlaces covalentes como electrones desapareados tenga (**covalencia**).

Tipos de solapamientos

Cuando la zona de solapamiento de los orbitales atómicos está situada justo entre los núcleos de los átomos enlazados, a lo largo de la línea internuclear, el enlace se denomina tipo **sigma, σ** .

Cuando el solapamiento se da fuera de la línea internuclear, a un lado y otro de dicha línea, se produce de forma lateral y el enlace se denomina tipo **pi, π** .

El solapamiento frontal de las nubes electrónicas es más efectivo que el lateral de ahí que el enlace σ sea más fuerte que el π .

Hibridación de orbitales

Para explicar la geometría de las moléculas dentro de la **TEV** hay que admitir la formación, previa al enlace, de **orbitales híbridos** como combinación de orbitales atómicos.

Se forman tantos orbitales híbridos como orbitales atómicos se combinan, y su disposición espacial viene determinada por la **TRPECV**. Además, dichos orbitales son **isoenergéticos**, es decir, todos tienen la misma energía y los electrones alojados en ellos deben cumplir el PEP.

Un mismo átomo puede formar unos orbitales híbridos u otros, dependiendo de los enlaces que forme.

Tipos de orbitales híbridos

Tipo de O.H.	O.A. que se combinan	Nº de O.H.
sp	1 s + 1 p	2
sp ²	1 s + 2 p	3
sp ³	1 s + 3 p	4
sp ³ d	1 s + 3 p + 1 d	5
sp ³ d ²	1 s + 3 p + 2 d	6
sp ³ d ³	1 s + 3 p + 3 d	7

Hibridación del carbono

Para los enlaces	Adopta hibridación	Como en
Sencillos	sp^3	CH_3-CH_3 (Etano)
Dobles	sp^2	$CH_2=CH_2$ (Eteno)
Triples	sp	$CH\equiv CH$ (Etino)

Hay que distinguir dos tipos:

1 Sólidos covalentes

- Diamante
- Grafito
- Sílice

Que son sólidos duros y de muy alto punto de fusión, pues poseen estructuras cristalinas análogas a los compuestos iónicos pero con enlaces covalentes entre todos sus átomos.

2 Sustancias moleculares

Líquidos, gases o sólidos de bajo punto de fusión. Solubles en disolventes de polaridad parecida. No conducen la electricidad. Blandas y elásticas.

Se da cuando se combinan átomos de elementos con parecida electronegatividad pero baja (elementos metálicos). Habitualmente las sustancias metálicas están formadas por átomos de un solo elemento, aunque a veces se pueden obtener combinaciones de elementos, como las **aleaciones**.

Existen dos modelos para explicar este enlace:

- 1 Modelo de mar de electrones
- 2 Teoría de bandas, basada en la TOM

Propiedades de los metales

- Sólidos a temperatura ambiente (salvo el mercurio), con puntos de fusión moderadamente altos.
- Elevada conductividad del calor y la electricidad.
- Dúctiles y maleables.

Fuerzas intermoleculares

Son las que mantienen unidas a las moléculas de las sustancias unidas por enlace covalente y permiten que estas aparezcan en estado sólido o líquido, o que se disuelvan en otras sustancias. En general son mucho más débiles que los enlaces entre átomos. Existen los siguientes tipos:

Enlaces de hidrógeno. Son las interacciones que se dan entre moléculas que tienen átomos de hidrógeno unidos a otros átomos muy electronegativos y de pequeño tamaño (F, O y N). Es el más fuerte de los enlaces intermoleculares.

Fuerzas de Van der Waals (interacciones moleculares entre dipolos).

Son a su vez de varios tipos:

- Dipolo-dipolo
- Ion-dipolo
- Dipolo-dipolo inducido
- Dipolo instantáneo-dipolo inducido