

El enlace químico

Contenidos (1)

- 1.- ¿Por qué se unen los átomos?. Tipos de enlace.
- 2.- Enlace iónico.
 - 2.1. Energía reticular.
 - 2.2. Ciclo de Born-Haber.
 - 2.3. Estructura de los compuestos iónicos.
- 3.- Propiedades de los compuestos iónicos.
- 4.- El enlace covalente.
 - 4.1. Teoría de Lewis.
 - 4.2. Resonancia.
 - 4.3. Modelo de repulsión de pares de electrones. Geometría.
 - 4.4. Polaridad en los enlaces y moléculas. Momento dipolar.
- 5.- Teoría del enlace de valencia.

Contenidos (2)

6.- Hibridación.

7.- Teoría de orbitales moleculares (🕒).

8.- Propiedades de los compuestos covalentes.

9.- Enlaces intermoleculares.

9.1. Fuerzas de Van der Waals.

9.2. Enlace de hidrógeno.

10.- Enlace metálico.

10.1. Modelo de deslocalización electrónica (repaso).

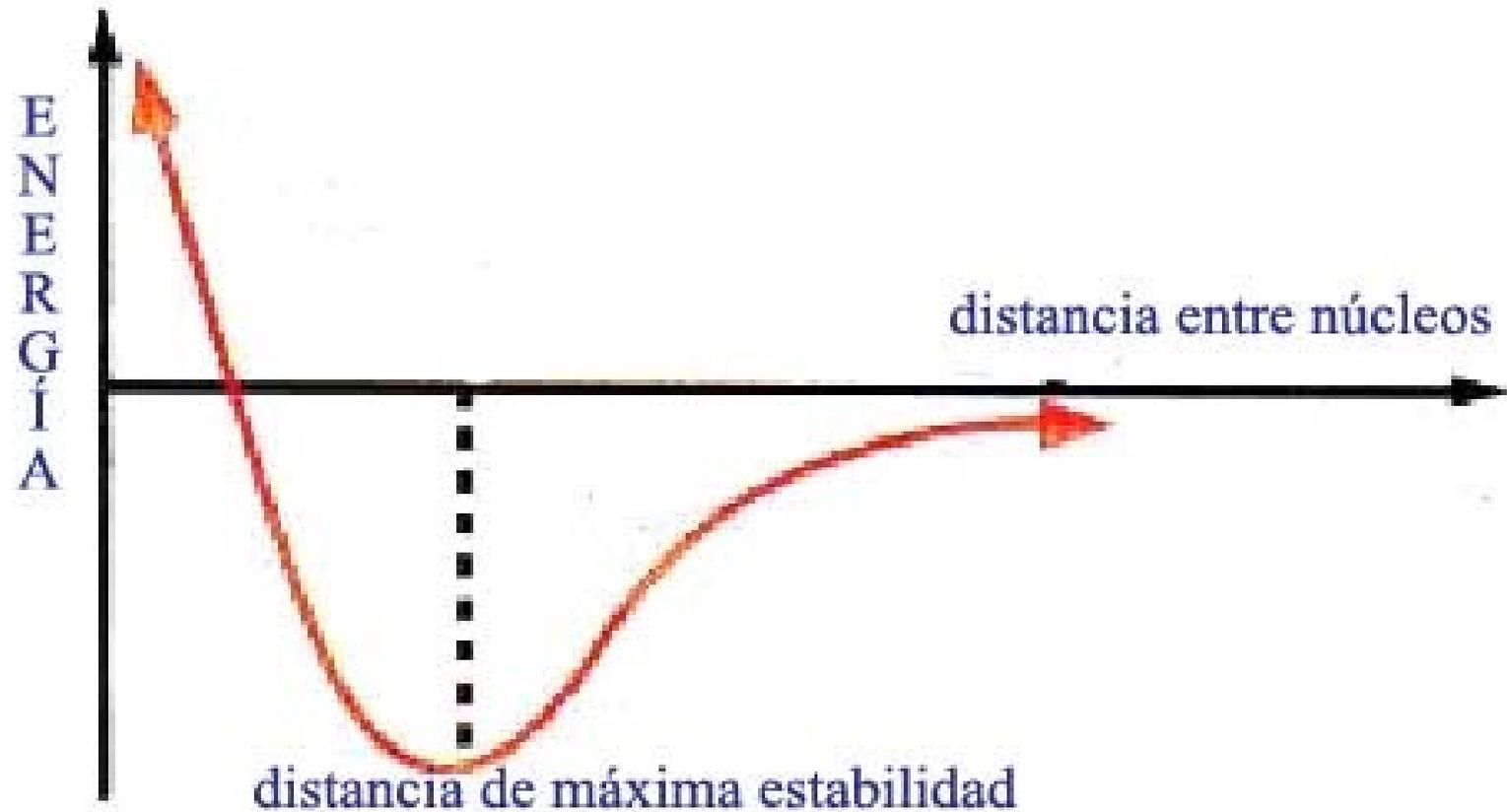
10.2. Teoría de bandas.

11.- Propiedades de los metales.

¿Por qué se unen los átomos?

- Los átomos, moléculas e iones se unen entre sí porque al hacerlo se llega a una situación de mínima energía, lo que equivale a decir de máxima estabilidad.
- Son los electrones más externos, los también llamados electrones de valencia los responsables de esta unión, al igual que de la estequiometría y geometría de las sustancias químicas.

Diagrama de energía frente a distancia interatómica



Recordando...

Tipos de enlaces

- Intramoleculares:
 - Iónico.
 - Covalente.
- Intermoleculares:
 - Fuerzas de Van de Waals
 - Enlaces de hidrógeno.
- Metálico.

Recordando...

Enlace iónico

- Se da entre un metal que pierde uno o varios electrones y un no metal que los captura
- Resultan iones positivos y negativos que se mantienen unidos por atracciones electrostáticas, formando redes cristalinas.
- Las reacciones de pérdida o ganancia de e^- se llaman reacciones de ionización:
- Ejemplo:
$$\text{Na} - 1 e^- \rightarrow \text{Na}^+$$
$$\text{O} + 2e^- \rightarrow \text{O}^{2-}$$
Reac. global: $\text{O} + 2 \text{Na} \rightarrow \text{O}^{2-} + 2 \text{Na}^+$
- Formula del compuesto (empírica): **Na₂O**

Energía de red (reticular) en los compuestos iónicos (ΔH_{ret} o U)

- Es la energía desprendida en la formación de un compuesto iónico sólido a partir de sus iones en estado gaseoso.
- **Ejemplo:** En el caso de la formación de NaCl la E_r corresponde a la reacción:
- $\text{Na}^+ (\text{g}) + \text{Cl}^- (\text{g}) \rightarrow \text{NaCl} (\text{s})$ ($\Delta H_{\text{ret}} < 0$)
- Es difícil de calcular por lo que se recurre a métodos indirectos aplicando la ley de Hess. Es lo que se conoce como ciclo de Born y Haber.

Factores de los que depende la Energía reticular

- Al ser siempre negativa consideraremos siempre valores absolutos.

- A mayor carga de los iones mayor “ U ”.

Ejemplo: Así el CaO (Ca^{2+} y O^{2-}) tendrá “ U ” mayor que el NaCl (Na^+ y Cl^-).

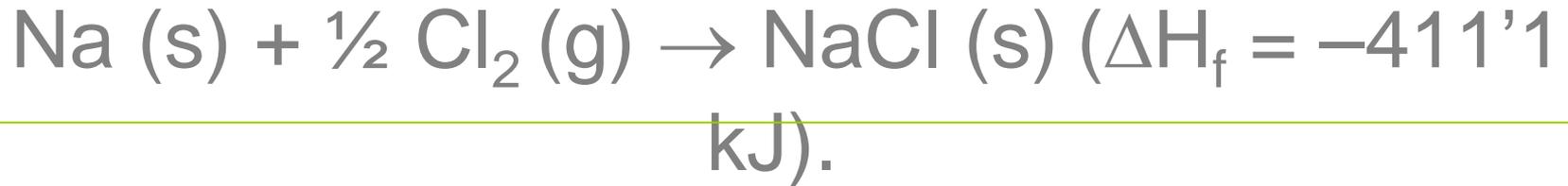
- A menor tamaño de los iones menor “ U ”.

Ejemplo: Así el NaCl (Na^+ y Cl^-) tendrá “ U ” mayor que el KBr (K^+ y Br^-).

Ciclo de Born y Haber

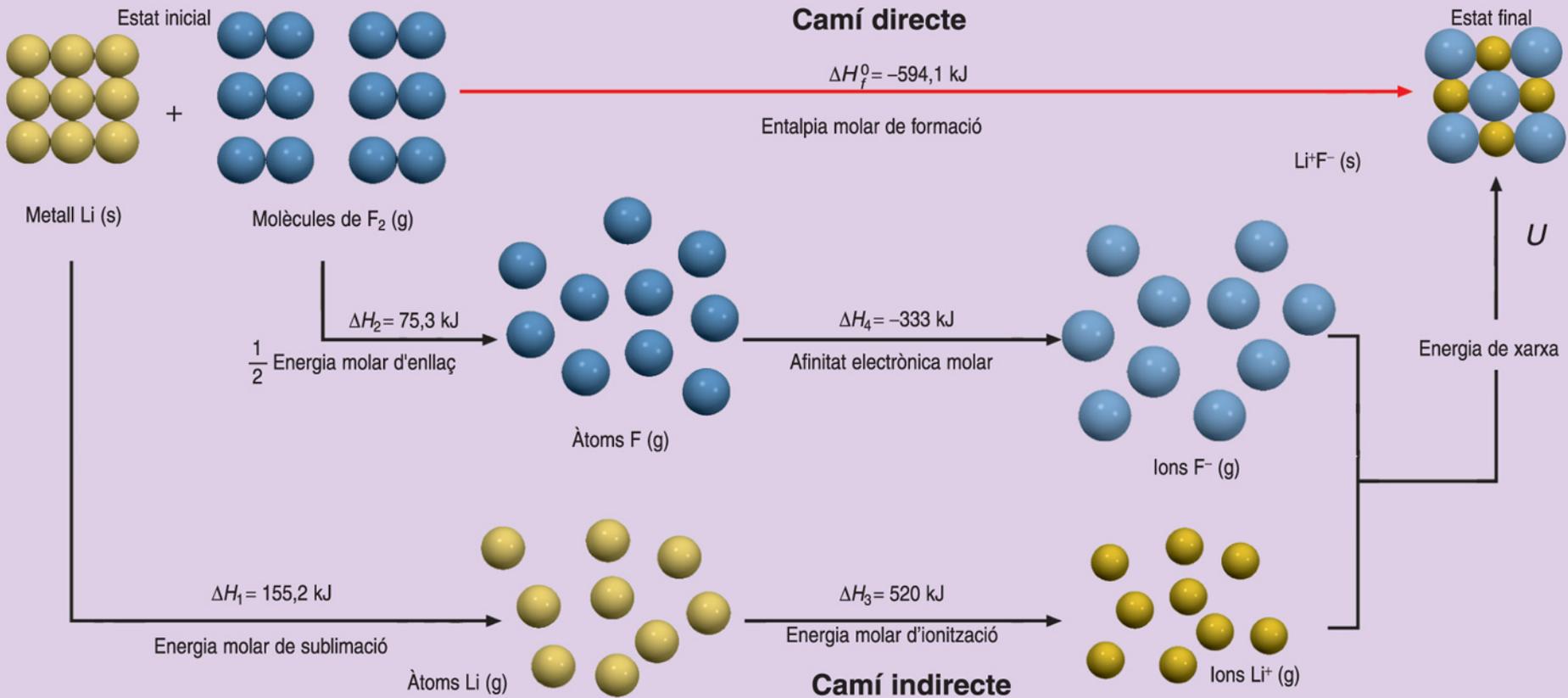
- La reacción global de formación de NaCl es:
- $\text{Na (s)} + \frac{1}{2} \text{Cl}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{NaCl (s)}$ ($\Delta H_f = -411'1 \text{ kJ}$)
- que puede considerarse suma de las siguientes reacciones:
- $\text{Na (s)} \rightarrow \text{Na (g)}$ ($\Delta H_{\text{subl}} = +107'8 \text{ kJ}$)
- $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 \text{(g)} \rightarrow \text{Cl (g)}$ ($\frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} = +121'3 \text{ kJ}$)
- $\text{Cl (g)} \rightarrow \text{Cl}^- \text{(g)}$ ($\Delta H_{\text{AE}} = -348'8 \text{ kJ}$)
- $\text{Na (g)} \rightarrow \text{Na}^+ \text{(g)}$ ($\Delta H_{\text{EI}} = +495'4 \text{ kJ}$)
- $\text{Na}^+ \text{(g)} + \text{Cl}^- \text{(g)} \rightarrow \text{NaCl (s)}$ ($\Delta H_{\text{ret}} = ?$)

Ciclo de Born y Haber



- $\text{Na (s)} \rightarrow \text{Na (g)} \quad (\Delta H_{\text{subl}} = +107'8 \text{ kJ})$
- $\frac{1}{2} \text{Cl}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{Cl (g)} \quad (\frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} = +121'3 \text{ kJ})$
- $\text{Cl (g)} \rightarrow \text{Cl}^- \text{ (g)} \quad (\Delta H_{\text{AE}} = -348'8 \text{ kJ})$
- $\text{Na (g)} \rightarrow \text{Na}^+ \text{ (g)} \quad (\Delta H_{\text{EI}} = +495'4 \text{ kJ})$
- $\text{Na}^+ \text{ (g)} + \text{Cl}^- \text{ (g)} \rightarrow \text{NaCl (s)} \quad (\Delta H_{\text{ret}} = ?)$
- De donde puede deducirse que:
- $\Delta H_{\text{ret}} = \Delta H_f - (\Delta H_{\text{subl}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} + \Delta H_{\text{AE}} + \Delta H_{\text{EI}})$
- $\Delta H_{\text{ret}} = -411'1 \text{ kJ} - (107'8 \text{ kJ} + 121'3 \text{ kJ} - 348'8 \text{ kJ} + 495'4 \text{ kJ}) = -786'8 \text{ kJ}$

Ciclo de Born y Haber



Estructura cristalina

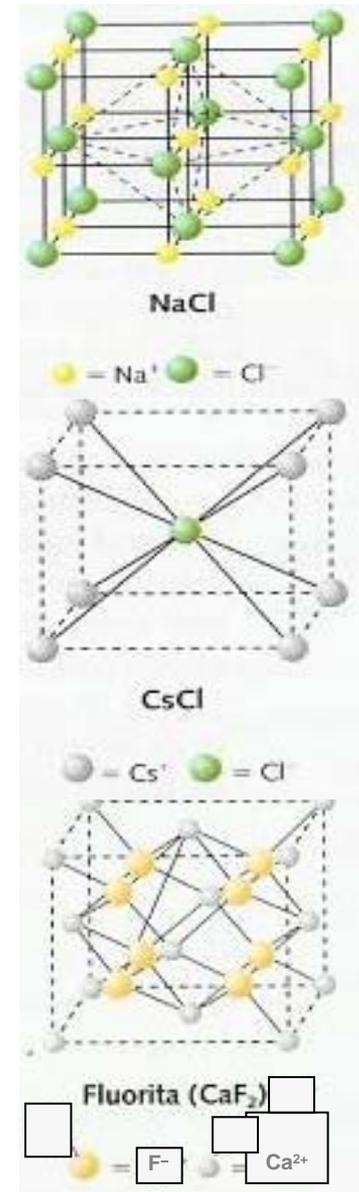
- Los iones en los compuestos iónicos se ordenan regularmente en el espacio de la manera más compacta posible.
- Cada ion se rodea de iones de signo contrario dando lugar a celdas o unidades que se repiten en las tres direcciones del espacio.

Índice de coordinación

- “Es el número de iones de signo opuesto que rodean a un ion dado”.
- Cuanto mayor es un ion con respecto al otro mayor es su índice de coordinación.

Principales tipos de estructura cristalina

- NaCl (cúbica centrada en las caras para ambos iones)
 - Índice de coord. para ambos iones = 6
- CsCl (cúbica para ambos iones)
 - Índice de coord. para ambos iones = 8
- CaF₂ (cúbica centrada en las caras para el Ca²⁺ y tetraédrica para el F⁻)
 - Índice de coord. para el F⁻ = 4
 - Índice de coord. para el Ca²⁺ = 8



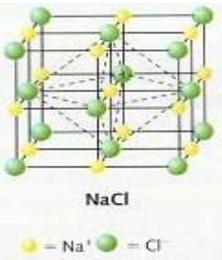
Estructura cristalina.

Factores de los que depende.

- El tamaño de los iones.
- La estequiometría que viene dada por la carga de los iones de forma que el cristal sea neutro.
- Para calcular el n° de átomos por celda se toma una celda unidad y:
 - Se divide por 8 el n° de iones de los vértices.
 - Se divide por 4 el n° de iones de las aristas.
 - Se divide por 2 el n° de iones centrales de las caras.
 - Se suman todos y se añaden los iones del interior de la celda

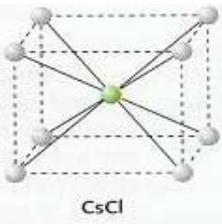
Ejemplo: Calcular el nº de cationes y aniones que hay en las celdas de NaCl, CsCl y CaF₂

- **NaCl:**



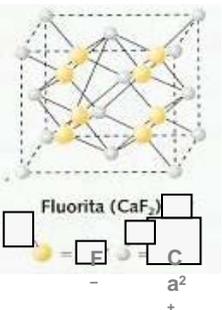
- Cl⁻ : 1 ion en cada vértice ($8/8 = 1$) + 1 ion en el centro de cada cara ($6/2 = 3$). En total, $1 + 3 = 4$
- Na⁺: 1 ion en el centro de cada arista ($12/4 = 3$) + 1 ion en el centro del cubo (1). En total, $3 + 1 = 4$

- **CsCl:**



- Cl⁻ : 1 ion en cada vértice ($8/8 = 1$). En total, **1**
- Cs⁺ : 1 ion en el centro del cubo (1). En total, **1**

- **CaF₂:**



- Ca²⁺ : 1 ion en cada vértice ($8/8 = 1$) + 1 ion en el centro de cada cara ($6/2 = 3$). En total, $1 + 3 = 4$
- F⁻ : 8 iones en el interior de cada celda (8). En total, **8**
- Hay por tanto el doble F⁻ que Ca²⁺

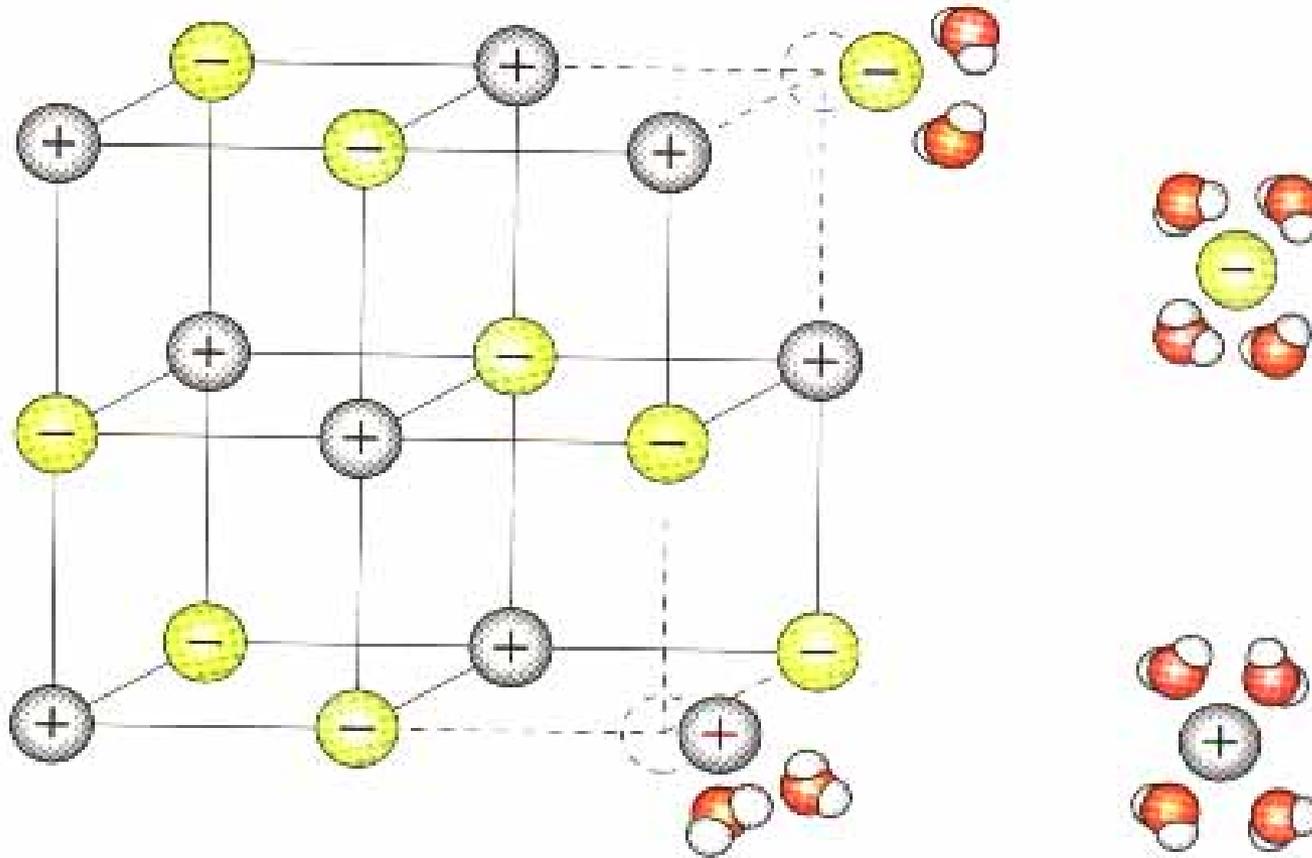
REPASO

Propiedades de los compuestos iónicos

- Puntos de fusión y ebullición elevados (tanto más cuanto mayor ΔH_U) ya que para fundirlos es necesario romper la red cristalina tan estable por la cantidad de uniones atracciones electrostáticas entre iones de distinto signo. Son sólidos a temperatura ambiente.
- Gran dureza.(por la misma razón).
- Solubilidad en disolventes polares (tanto más cuanto menor U) e insolubilidad en disolventes apolares.
- Conductividad en estado disuelto o fundido. Sin embargo, en estado sólido no conducen la electricidad.
- Son frágiles.

Disolución de un cristal iónico en un disolvente polar

REPASO



Solubilidad de un cristal iónico

© Grupo ANAYA. Química 2º Bachillerato.

REPASO

Fragilidad en un cristal iónico



© Grupo ANAYA. Química 2º Bachillerato.

Enlace covalente

- Dos átomos unidos mediante enlace covalente tienen menos energía que los dos átomos aislados.
- Al igual que en el enlace iónico la formación de un enlace covalente va acompañada de un desprendimiento de energía.
- Se llama **energía de enlace** a la energía necesaria para romper 1 mol de un determinado tipo de enlace.
- Es siempre endotérmica (positiva).
- Ejemplo: para romper 1 mol de $\text{H}_2 (g)$ en 2 moles de $\text{H} (g)$ se precisan 436 kJ , $\Rightarrow E_{\text{enlace}}(\text{H}-\text{H}) = + 436 \text{ kJ}$
- La distancia a la que se consigue mayor estabilidad se llama “**distancia de enlace**”.

Recordando...

Teoría de Lewis

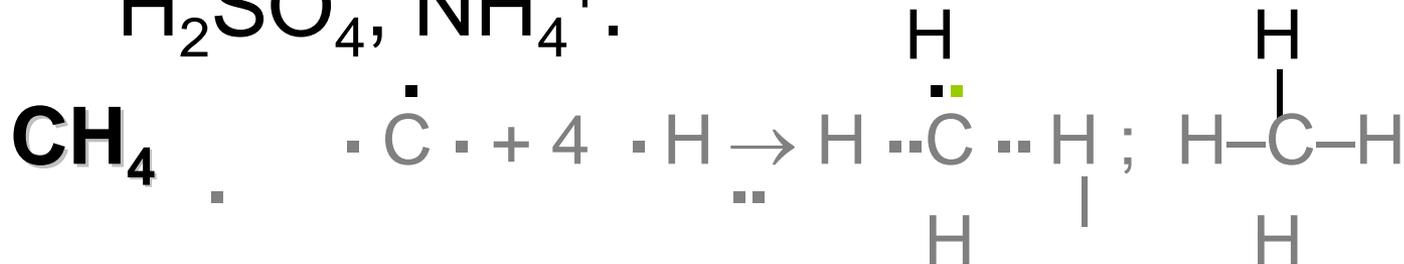
Se basa en las siguientes hipótesis:

- Los átomos para conseguir 8 e⁻ en su última capa comparten tantos electrones como le falten para completar su capa (regla del octete).
- Cada pareja de e⁻ compartidos forma un enlace.
- Se pueden formar enlaces sencillos, dobles y triples con el mismo átomo.

Ejemplo: Escribir las estructuras de

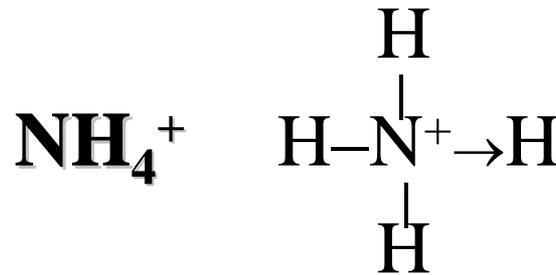
Lewis completas para las siguientes especies químicas: CH₄, HCN, H₂CO,

- H₂SO₄, NH₄⁺.



- **HCN** H—C≡N :

- **H₂CO** $\begin{array}{c} \text{H}-\text{C}=\text{O} : \\ | \\ \text{H} \end{array} \cdot\cdot$



- **H₂SO₄** $\begin{array}{c} : \ddot{\text{O}} : \\ \cdot\cdot \\ \text{H} \cdot\cdot \ddot{\text{O}} \cdot\cdot \ddot{\text{S}} \cdot\cdot \ddot{\text{O}} \cdot\cdot \text{H} \\ \cdot\cdot \\ : \ddot{\text{O}} : \end{array} ; \begin{array}{c} : \ddot{\text{O}} : \\ \cdot\cdot \\ \text{H}-\text{O}-\ddot{\text{S}}-\text{O}-\text{H} \\ \cdot\cdot \\ : \ddot{\text{O}} : \end{array} \quad \begin{array}{c} : \text{O} : \\ || \\ \text{H}-\text{O}-\text{S}-\text{O}-\text{H} \\ || \\ : \text{O} : \end{array}$

Excepciones a la teoría de Lewis

- Moléculas tipo NO y NO₂ que tienen un número impar de electrones.
- Moléculas tipo BeCl₂ o BF₃ con marcado carácter covalente en las cuales el átomo de Be o de B no llegan a tener 8 electrones.
- Moléculas tipo PCl₅ o SF₆ en las que el átomo central tiene 5 o 6 enlaces (10 o 12 e⁻).
 - Sólo en caso de que el no-metal no esté en el segundo periodo, pues a partir del tercero existen orbitales “d” y puede haber más de cuatro enlaces.

Resonancia.

- No siempre existe una única estructura de Lewis que pueda explicar las propiedades de una molécula o ion.
- Por ejemplo, en el ion carbonato CO_3^{2-} el C debería formar un doble enlace con uno de los O y sendos enlaces sencillos con los dos O^- .
- Esto conllevaría a que las distancias C–O y C=O deberían ser distintas y ángulos de enlace distintos.
- Por difracción de rayos X se sabe que tanto distancias como los ángulos O–C–O son iguales.

Resonancia.

- Para explicar tales datos, se supone que los e⁻ de enlace así como los pares electrónicos sin compartir, pueden desplazarse a lo largo de la molécula o ion, pudiendo formar más de una estructura de Lewis distinta.
- En el caso del ion CO₃²⁻, se podrían formar tres estructuras de Lewis en las que el doble enlace se formara con cada uno de los átomos de oxígeno, siendo las tres válidas. Cada una de estas formas contribuye por igual a la estructura del ion CO₃²⁻, siendo la verdadera estructura una mezcla de las tres.

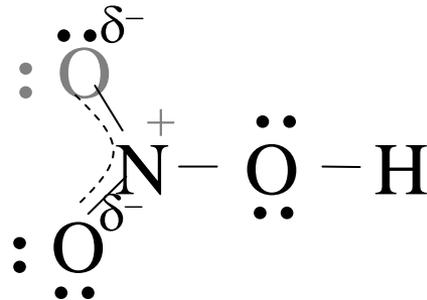
Resonancia.

- Los tres enlaces C–O tienen $\frac{1}{3}$ de doble enlace, por lo que la distancia es intermedia.
- Los tres átomos de oxígeno participan de $\frac{2}{3}$ de carga negativa.
- Se utiliza el símbolo \leftrightarrow entre las distintas formas resonantes.

Ejercicio A: Escribir las distintas formas resonantes del ácido nítrico.



O también



Modelo de repulsión de pares electrónicos y geometría molecular

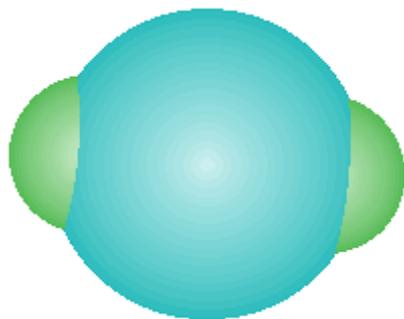
- Los enlaces covalentes tienen una dirección determinada y las distancias de enlace y los ángulos entre los mismos pueden medirse aplicando técnicas de difracción de rayos X.
- La geometría viene dada por la repulsión de los pares de e^- del átomo central.
- **Las parejas de e^- se sitúan lo más alejadas posibles.**

Modelo de repulsión de pares electrónicos y geometría molecular. (cont.).

- El átomo central sólo tiene pares de e^- de enlace.
- El átomo central tiene dos dobles enlaces o uno sencillo y uno triple.
- El átomo central tiene pares de e^- sin compartir.
- El átomo central tiene un enlace doble.

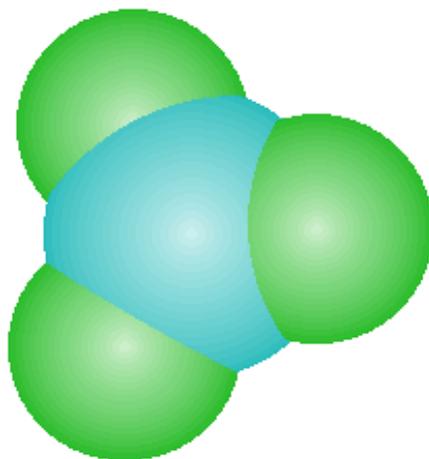
El átomo central sólo tiene pares de e⁻ de enlace.

- BeF₂: El Be tiene 2 pares de e⁻ ⇒ Ang. enl. = 180°.
- BCl₃: El B tiene 3 pares de e⁻ ⇒ Ang. enl. = 120°.
- CH₄: El C tiene 4 pares de e⁻ ⇒ Ang. enl. = 109,4°.



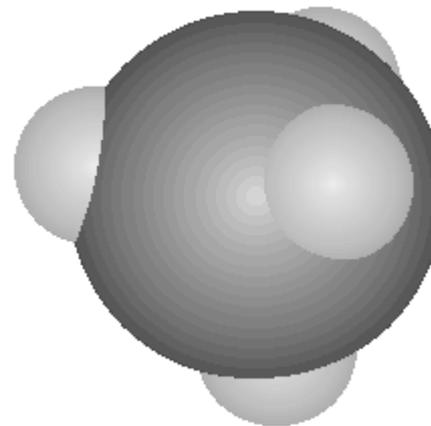
BeF₂

Lineal



BCl₃

Triangular



CH₄

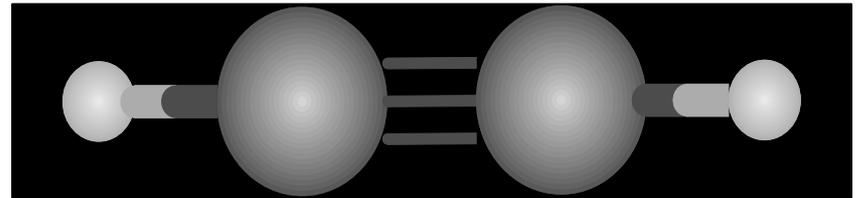
Tetraédrica

El átomo central tiene dos dobles enlaces o uno sencillo y uno triple.

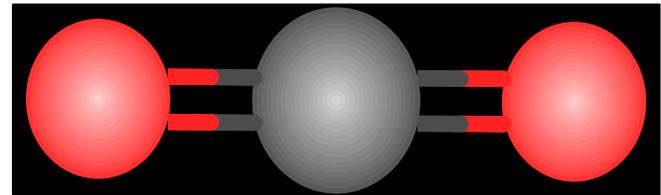
- Como se une únicamente a dos elementos la geometría es lineal.

- **Ejemplos:**

- Etino (acetileno)

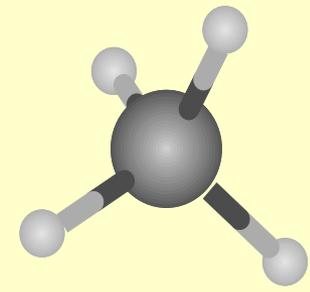


- CO₂

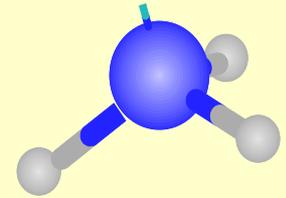


El átomo central tiene pares de e^- sin compartir.

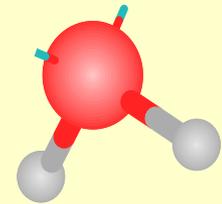
- La repulsión de éstos pares de e^- sin compartir es mayor que entre pares de e^- de enlace.
 - NH_3 : El N tiene 3 pares de e^- compartidos y 1 sin compartir \Rightarrow Ang. enl. = $107'3^\circ < 109'4^\circ$ (tetraédrico)
 - H_2O : El O tiene 2 pares de e^- compartidos y 2 sin compartir \Rightarrow Ang. enl. = $104'5^\circ < 109'5^\circ$ (tetraédrico)



Metano ($109,4^\circ$)



Amoniac ($107,3^\circ$)



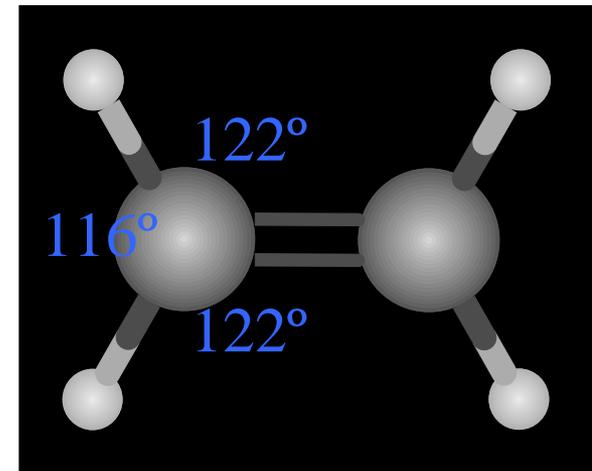
Agua ($104,5^\circ$)

El átomo central tiene un enlace doble.

- La repulsión debida a 2 pares electrónicos compartidos es mayor que la de uno.
- $\text{CH}_2=\text{CH}_2$: Cada C tiene 2 pares de e^- compartidos con el otro C y 2 pares de e^- compartidos con sendos átomos de H. \Rightarrow

– Ang. enl. H–C=C: $122^\circ > 120^\circ$ (triangular)

– Ang. enl. H–C–H: $116^\circ < 120^\circ$ (triangular)

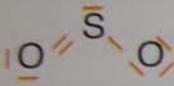
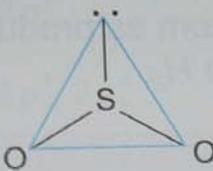
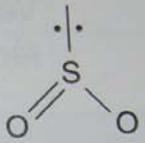
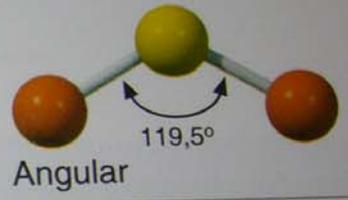
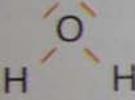
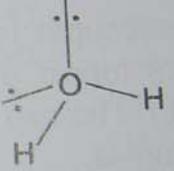
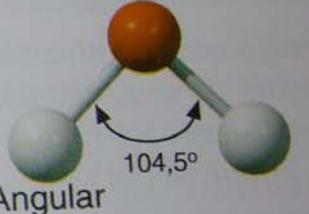
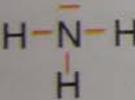
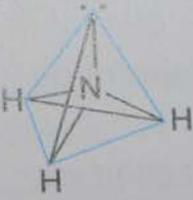
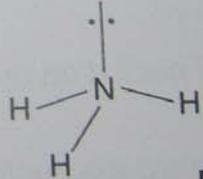
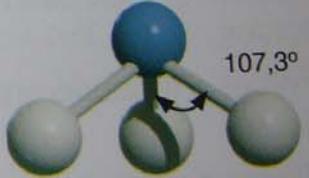


Modelo de repulsión de pares electrónicos.

Sólo tiene pares enlazantes

Tipus de molècula	Molècula	Estructura de Lewis	Parells enllaçants	Parells lliures	Distribució dels parells electrònics	Geometria de la molècula
AB ₂	BeCl ₂		2	-	 Lineal	Cl-Be-Cl Lineal
AB ₂	H ₂ O		2	2	 Tetraèdrica	 Angular
AB ₃	NH ₃		3	1	 Tetraèdrica	 Piramidal trigonal
AB ₄	CH ₄		4	-	 Tetraèdrica	 Tetraèdrica

Pares de electrons lliures

Molècula	Estructura de Lewis	Parells enllaçants	Parells lliures	Distribució dels parells electrònics	Geometria de la molècula
SO ₂		2	1		  Angular 119,5°
H ₂ O		2	2		  Angular 104,5°
NH ₃		3	1		  Piramidal trigonal 107,3°

Iones poliatòmics

Ió	Estructura de Lewis	Parells enllaçants	Parells lliures	Distribució dels parells electrònics	Geometria de l'ió
NO ₂ ⁻ (Nitrit)		2	1	 Triangular plana	 Angular
CO ₃ ²⁻ (Carbonat)		3	0	 Triangular plana	 Triangular plana
ClO ₃ ⁻ (Clorat)		3	1	 Tetraèdrica	 Piramidal trigonal

Geometria molecular

Geometria molecular i polaritat

CO₂

Geometria: lineal

Enllaços C—O: polaritzats



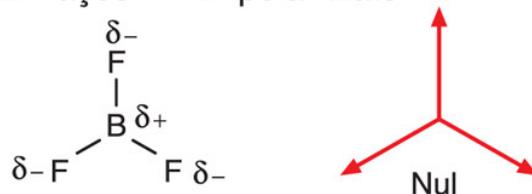
Les dues polaritats s'anul·len.

Molècula: apolar

BF₃

Geometria: plana triangular

Enllaços F—B: polaritzats



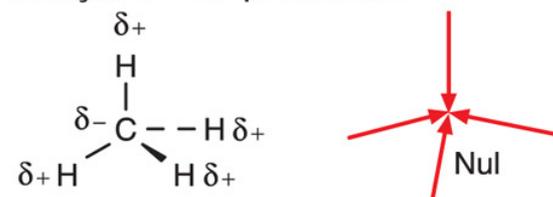
Les tres polaritats s'anul·len.

Molècula: apolar

CH₄

Geometria: tetraèdrica

Enllaços C—H: polaritzats



Les quatre polaritats s'anul·len.

Molècula: apolar

H₂O

Geometria: angular

Enllaços O—H: polaritzats



Les polaritats no s'anul·len.

En una part de la molècula s'acumula una δ^- , mentre que en la part oposada s'acumula una δ^+ .

Molècula: polar

NH₃

Geometria: piràmide de base triangular

Enllaços N—H: polaritzats



Les polaritats no s'anul·len.

En una part de la molècula s'acumula una δ^- , mentre que en la part oposada s'acumula una δ^+ .

Molècula: polar

Ejercicio B: Explique: **a)** Si las

estructuras de Lewis justifican la forma geométrica de las moléculas o si ésta se debe determinar experimentalmente para poder proponer la representación correcta . **b)** Si cada molécula se representa en todos los casos por una única fórmula estructural.

c) Representar las estructuras de Lewis de las siguientes especies: H_2O y NO_3^-

a) Las estructuras de Lewis indican el nº de enlaces que deberán formarse³ pero no entra para nada en la dirección de las moléculas anteriores la estabilidad de las mismas? que tomarán estos y, por tanto, en la geometría molecular.

Por tanto, la geometría debe obtenerse experimentalmente, o acudir al modelo de repulsión de pares electrónicos o a la teoría de la hibridación.

b) En principio sí, pero cuando existen formas resonantes hay más de una fórmula estructural para la misma molécula.

Ejercicio B: Explique: **a)** Si las

estructuras de Lewis justifican la forma geométrica de las moléculas o si ésta se debe determinar experimentalmente para poder proponer la representación correcta. **b)** Si cada molécula se representa en todos los casos por una única fórmula estructural. **c)** Representar las estructuras de Lewis de las siguientes especies: H_2O y NO_3^-

~~Justifican las representaciones de las moléculas anteriores la estabilidad de las mismas?~~



d) Sí, pues se cumple la regla del octeto para todos los átomos, exceptuando como es lógico, al H que únicamente posee un enlace (2 electrones).

Polaridad en moléculas covalentes.

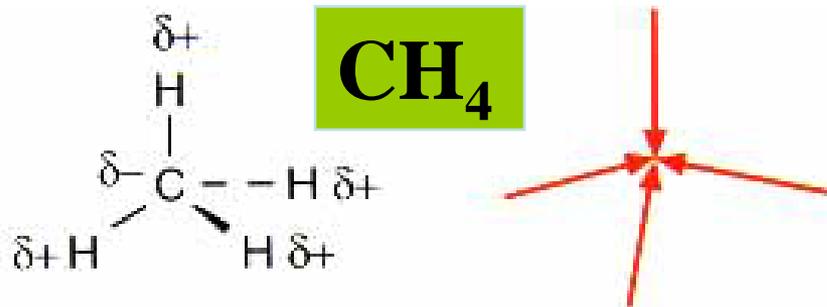
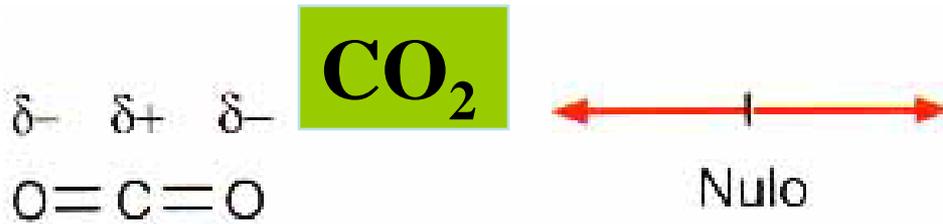
Momento dipolar.

- Las moléculas que tienen enlaces covalentes polares tienen átomos cargados positivamente y otros negativamente.
- Cada enlace tiene un momento dipolar “ μ ” \rightarrow (magnitud vectorial que depende la diferencia de χ entre los átomos cuya dirección es la línea que une ambos átomos y cuyo sentido va del menos electronegativo al más electronegativo).

Momento dipolar (cont).

- Dependiendo de cómo sea $\Sigma \vec{\mu}$ de los enlaces que forman una molécula, éstas se clasifican en:
- **Moléculas polares.** Tienen $\Sigma \vec{\mu}$ no nulo:
 - Moléculas con un sólo enlace covalente. Ej: HCl.
 - Moléculas angulares, piramidales, Ej: H₂O, NH₃.
- **Moléculas apolares.** Tienen $\Sigma \vec{\mu}$ nulo:
 - Moléculas con enlaces apolares. Ej: H₂, Cl₂.
 - $\Sigma \vec{\mu} = 0$. Ej: CH₄, CO₂.

Momentos dipolares. Geometría molecular.



Ejemplo: a) Ordene según la polaridad creciente, basándose en los valores

de electronegatividades de la tabla adjunta, los enlaces siguiente: ~~H-F, H-O, H-N, H-C, C-O y C-Cl~~

Elemento	F	O	Cl	N	C	S	H
Electronegat.	4,0	3,5	3,0	3,0	2,5	2,5	2,1

b) la polaridad de la molécula de CH_4 ¿será igual o distinta de la de CCl_4 ?

- a) $\text{H-C} < \text{C-Cl} < \text{H-N} < \text{C-O} < \text{H-O} < \text{H-F}$
- b) El CH_4 es globalmente apolar ($\vec{\mu} = 0$) pues la suma vectorial de los dipolos de cada enlace (dirigidos hacia el centro) se anula debido a su geometría tetraédrica. El CCl_4 es igualmente apolar por la misma razón; sin embargo los dipolos de los enlaces están en esta ocasión dirigidos hacia fuera.

Ejercicio C: Cuatro elementos diferentes

A,B,C,D tienen número atómico 6, 9,13 y 19

respectivamente. Se desea saber: **a)** El número de electrones de valencia de cada uno de ellos. **b)** Su clasificación en metales y no metales. **c)** La fórmula de los compuestos que B puede formar con los demás ordenándolos del más iónico al más covalente.

a)	A	Z = 6	2-4
	B	Z = 9	2-7
	C	Z = 13	2-8-3
	D	Z = 19	2-8-8-1

b) No metal

No metal

Metal

Metal

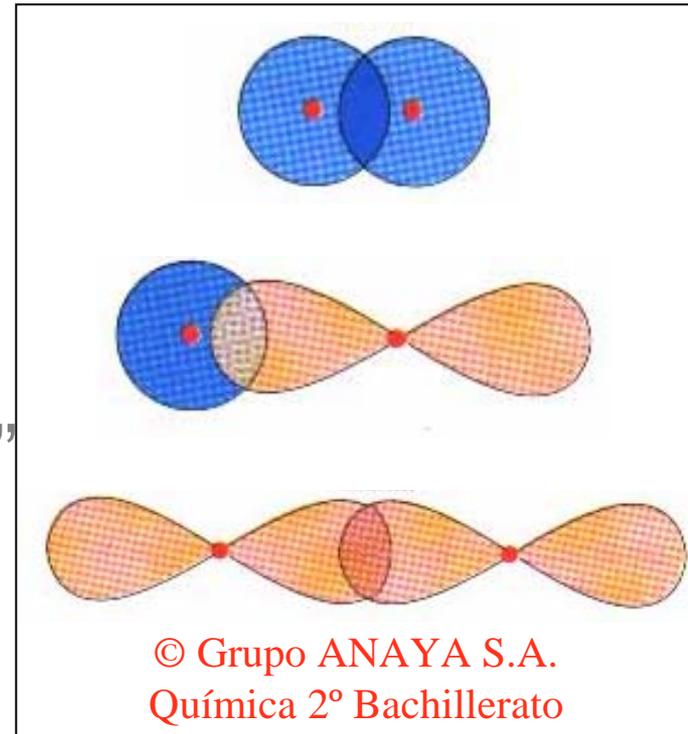
c) DB (*más iónico*) CB_3 AB_4 (*más covalente*)

Teoría del enlace de valencia (E.V.)

- Se basa en la suposición de que los enlaces covalentes se producen por solapamiento de los orbitales atómicos de distintos átomos y emparejamiento de los e^- de orbitales semiocupados.
- Así, 2 átomos de H ($1s^1$) tienen cada uno 1 e^- desapareado en un orbital “s” y formarían un orbital molecular en donde alojarían los 2 e^- .
- Se llama “**covalencia**” al n^0 de e^- desapareados y por tanto al n^0 de enlaces que un átomo forma.

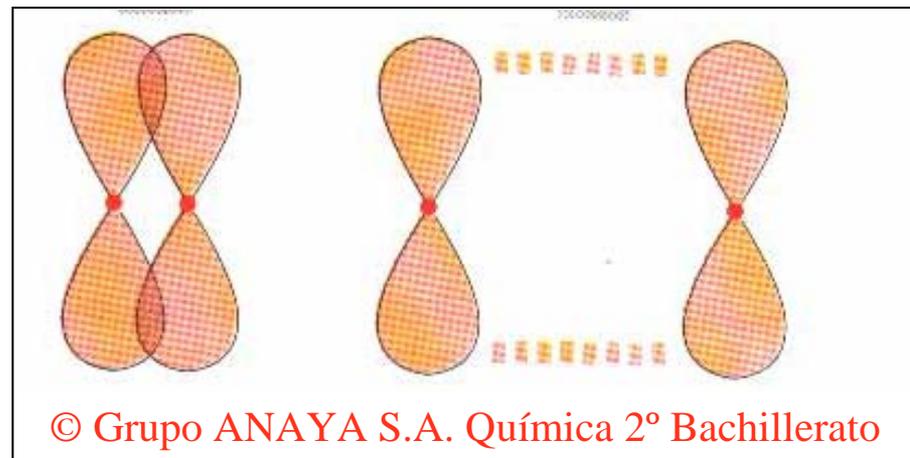
Enlace covalente simple.

- Se produce un único solapamiento de orbitales atómicos. Es frontal y se llama “ σ ” (sigma).
- Puede ser:
 - a) Entre dos orbitales “s”
 - b) Entre un orbital “s” y uno “p”
 - c) Entre dos orbitales “p”.



Enlace covalente múltiple.

- Se producen dos o tres solapamientos de orbitales atómicos entre dos átomos.
- Siempre hay un enlace frontal “ σ ” (sólo 1).
- Si el enlace es doble, el segundo solapamiento es lateral “ π ” (pi).
- Si el enlace es triple, existe un solapamiento “ σ ” y dos “ π ”.



Hibridación de orbitales atómicos.

- Para explicar la geometría de la moléculas (ángulos y distancia) y la covalencia de ciertos átomos se formuló la “**teoría de la hibridación**”.
- Así, por ejemplo el carbono (C) forma cuatro enlaces en compuestos como el CH_4 y en la mayoría de compuestos que forma (para ello precisa promocionar el e^- del orbital 2s al 2p y a continuación formar 4 orbitales de igual energía a partir del 2s y de los 3 orb. 2p).
- Los tipos de hibridación se utilizan fundamentalmente en química orgánica, si bien no es exclusiva de compuestos orgánicos.

Hibridación (cont).

- **Se hibridan:**

- Los orbitales atómicos que van a formar enlaces “ σ ”
- Las parejas de e^- sin compartir.

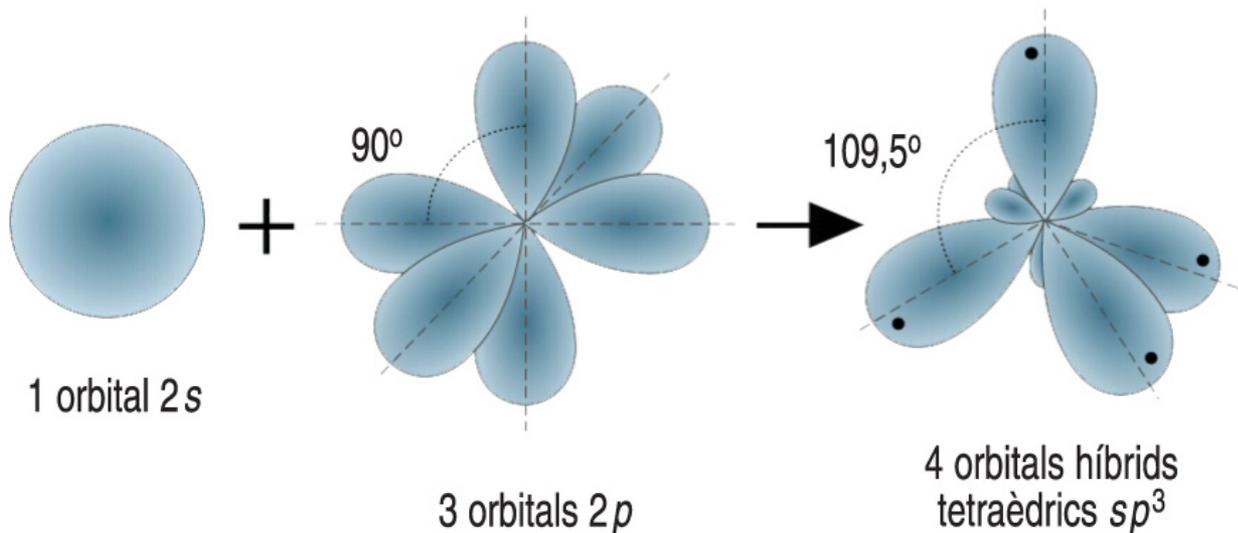
- **No se hibridan:**

- Los orbitales atómicos que van a formar el segundo o tercer enlace.
- Los orbitales atómicos vacíos.

<http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/essentialchemistry/flash/hybrv18.swf>

Tipos de hibridación

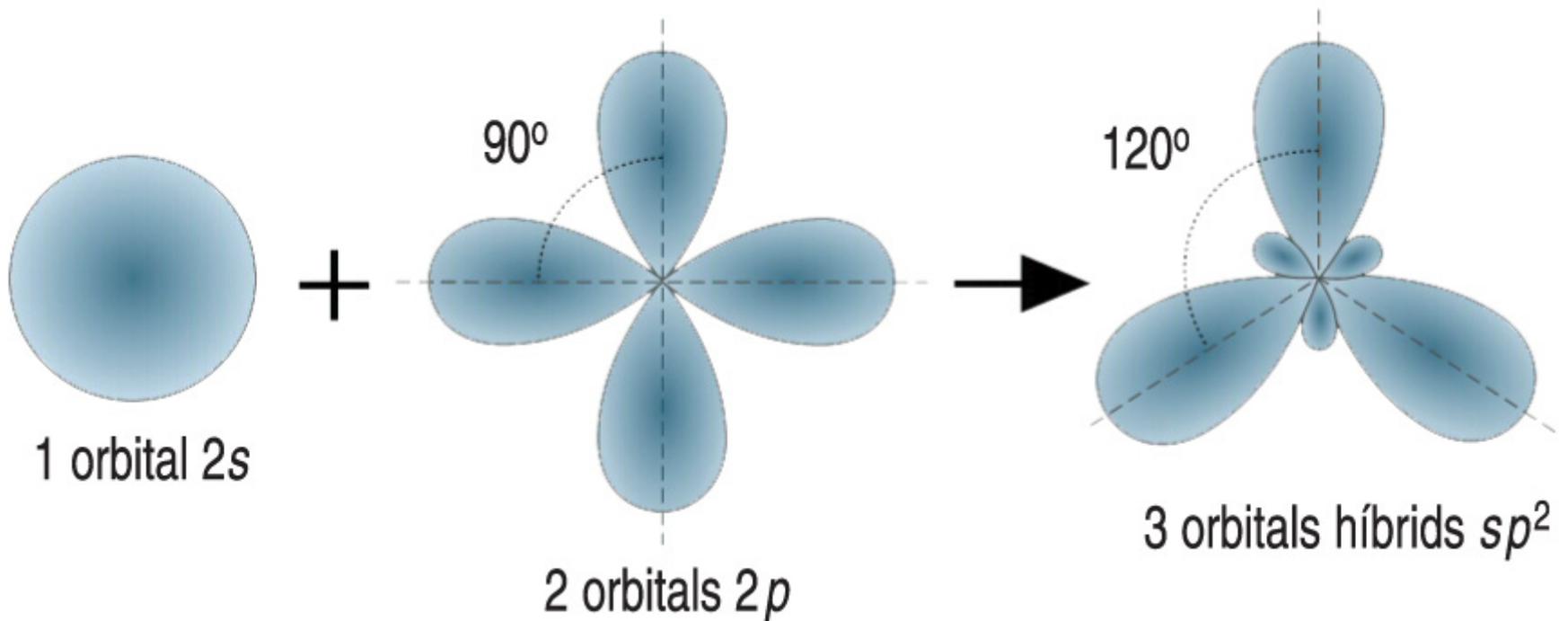
- sp^3
 - 4 enlaces sencillos. Ejemplo: metano
 - 3 enlaces sencillos + 1 par e^- sin compartir. Ej: NH_3
 - 2 enlaces sencillos + 2 par e^- sin compartir. Ej: H_2O



- sp^2

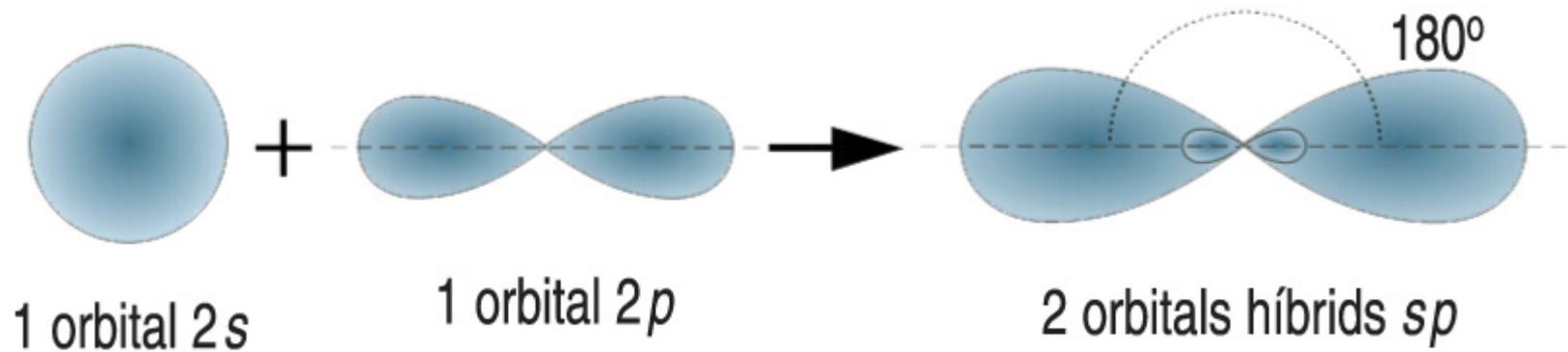
- 3 enlaces sencillos. Ejemplo: BF_3

- 1 enlace doble y 2 sencillos . Ejemplo: eteno

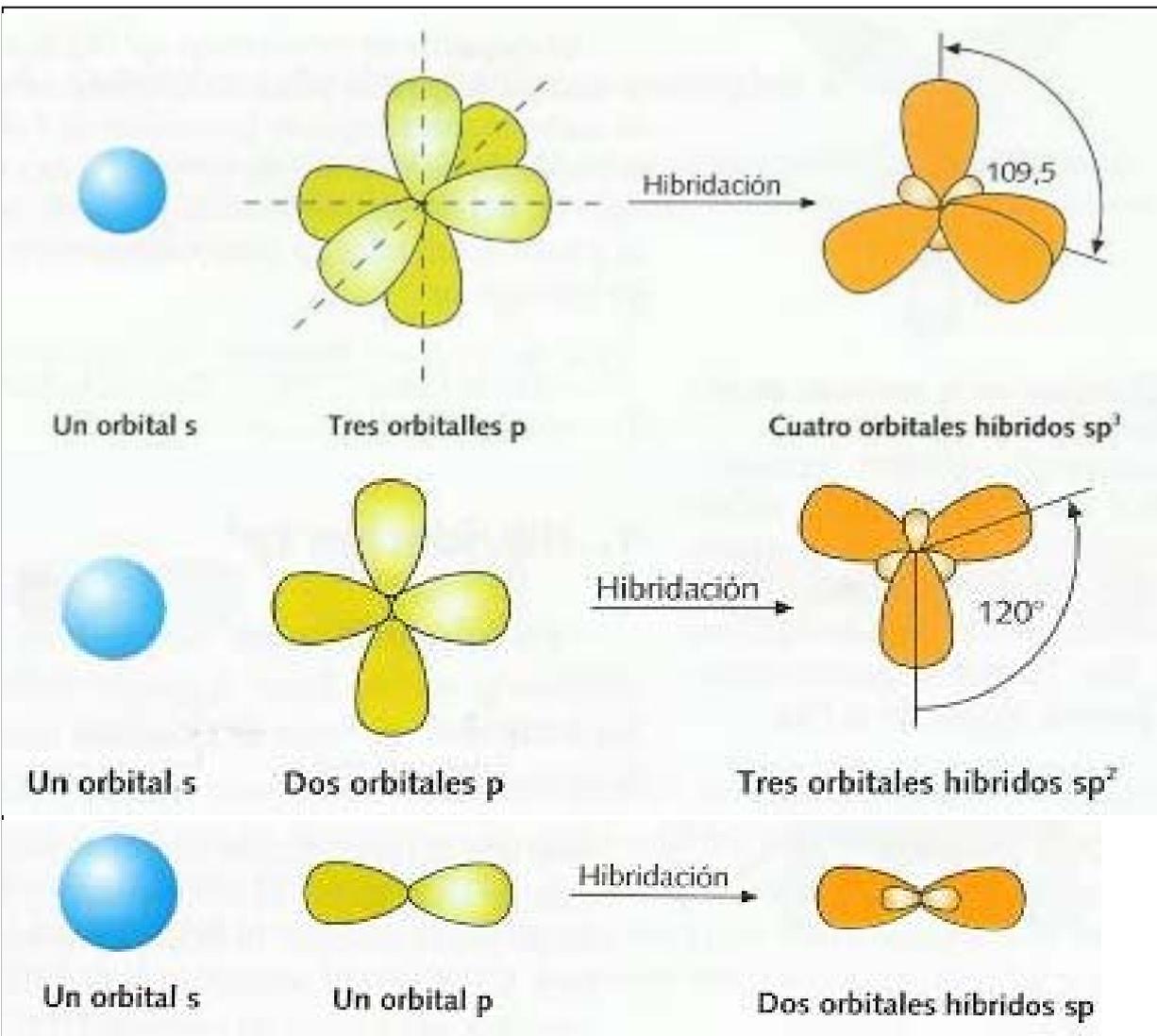


- **sp**

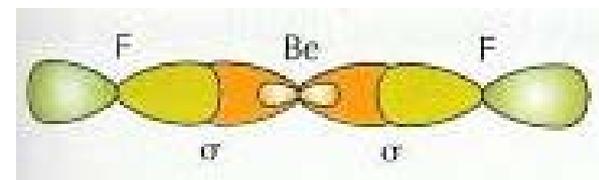
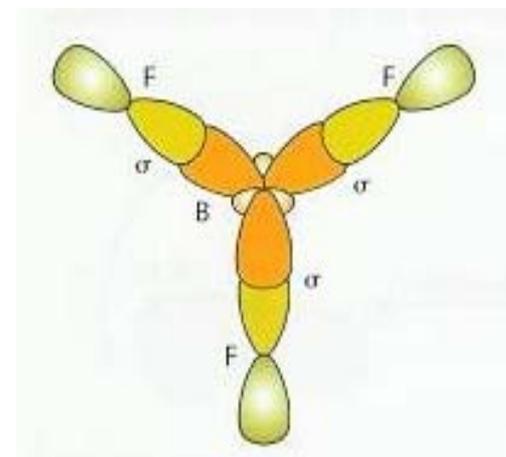
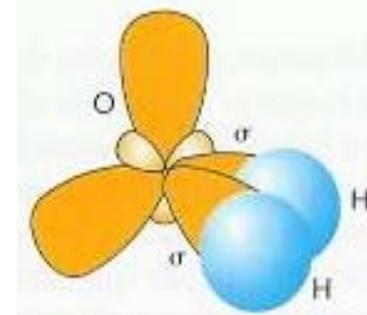
- 2 enlaces sencillos. Ejemplo: BeF_2
- 2 enlaces dobles. Ejemplo: CO_2
- 1 enlace triple y 1 sencillo. Ejemplo: etino



Tipos de orbitales híbridos.



Ejemplos

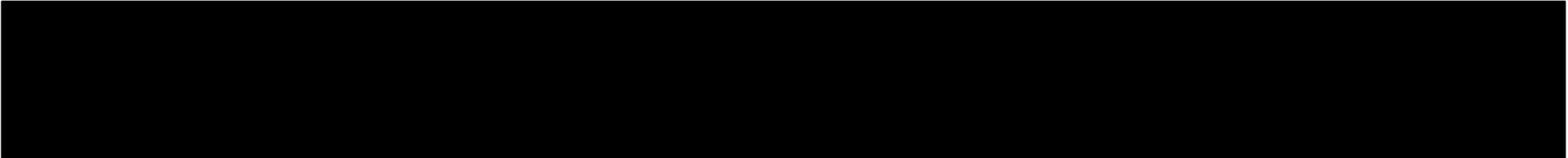


Teoría de orbit. moleculares. (O.M.)

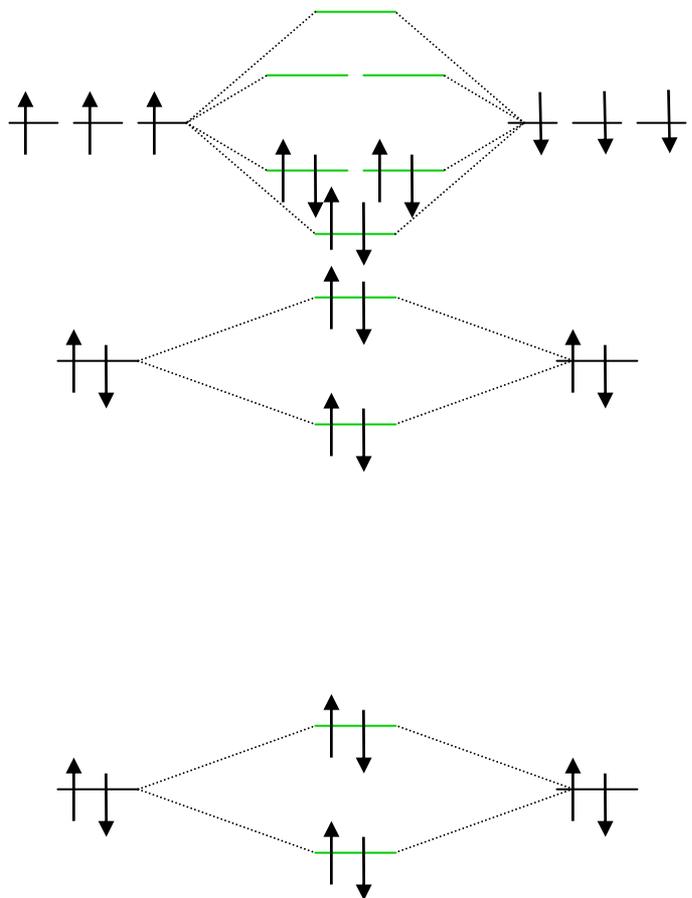
- Permite explicar todas la moléculas existentes.
- Consiste en fijar unos niveles energéticos para los orbitales moleculares y considerarlos “combinación lineal de orbitales atómicos” (C.L.O.A.).
- Hay tantos orbitales moleculares como atómicos y ocuparían distintas zonas espaciales.
- La mitad de ellos tendrían menor energía que la de los orbitales atómicos de los que proceden y por tanto, serían más estables (orbitales enlazantes).

Teoría de orbitales moleculares. (T.O.M.) (cont.).

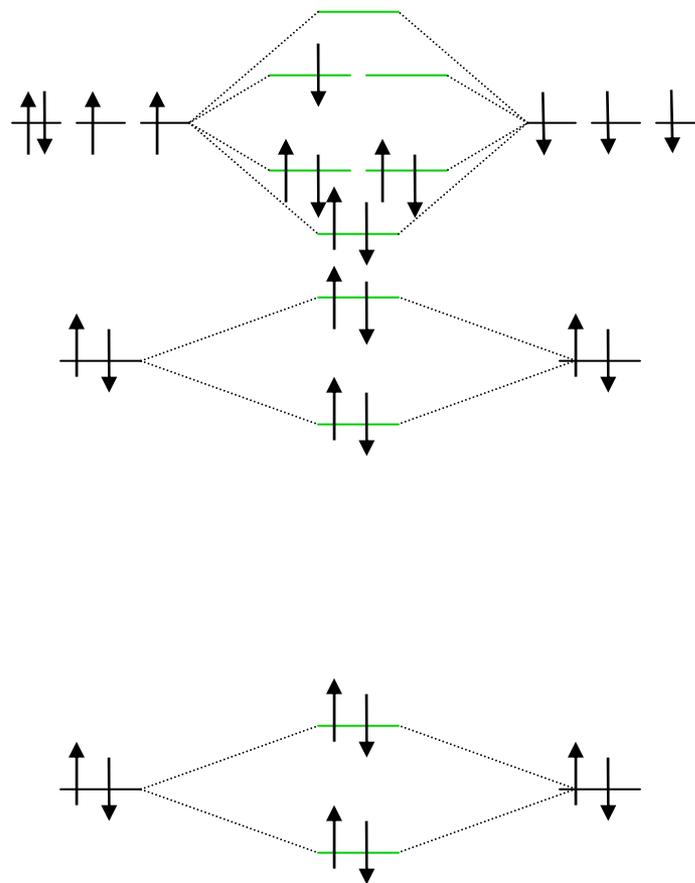
- La otra mitad tendrían mayor energía que los orbitales atómicos de los que proceden y serían más inestables (orbitales antienlazantes).
- Se denomina “orden de enlace” (O.E.) a:

- 
- El O.E. puede ser fraccionario si combinan orbitales apareados y desapareados.

Molécula de N₂



Molécula de NO



O.A. (N) O.M. (N₂) O.A. (N)

O.A. (O) O.M. (NO) O.A. (N)

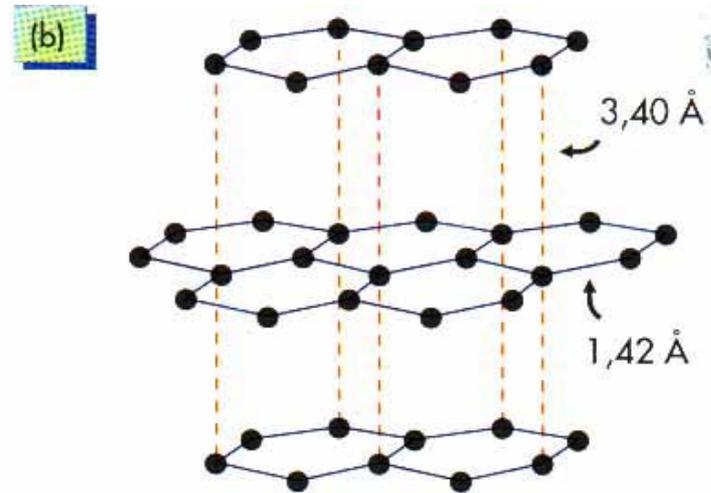
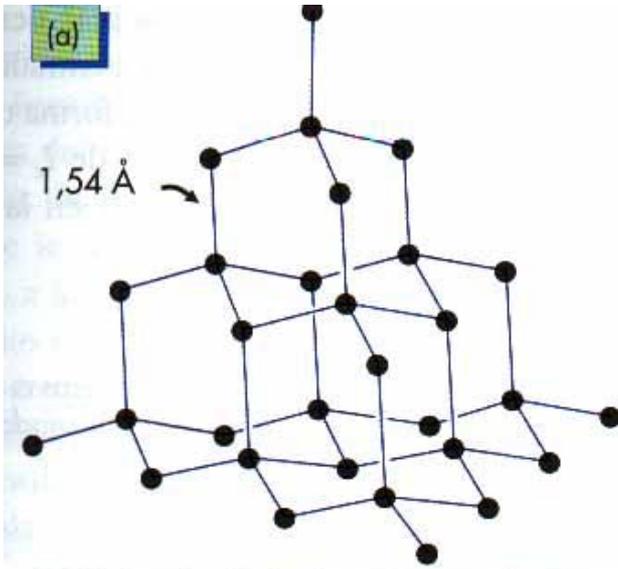
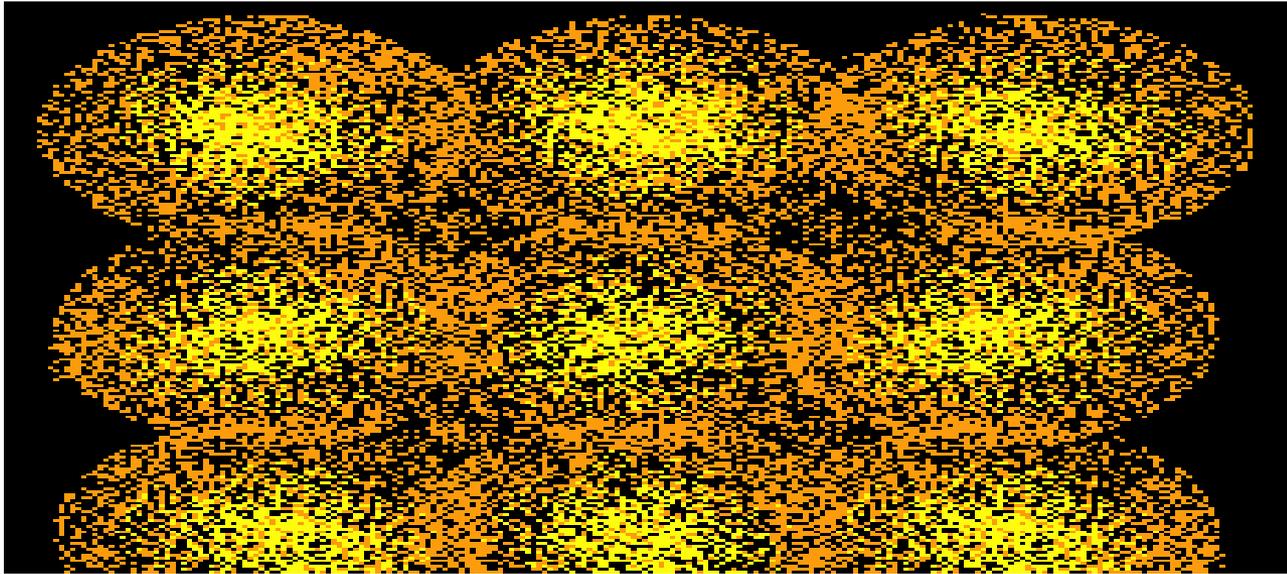
Propiedades de los compuestos covalentes

- **Sólidos covalentes:**

- Los enlaces se dan a lo largo de todo el cristal.
- Gran dureza y P.F alto.
- Son sólidos.
- Insolubles en todo tipo de disolvente.
- Malos conductores.
- El grafito que forma estructura por capas le hace más blando y conductor.

- **Sust. moleculares:**

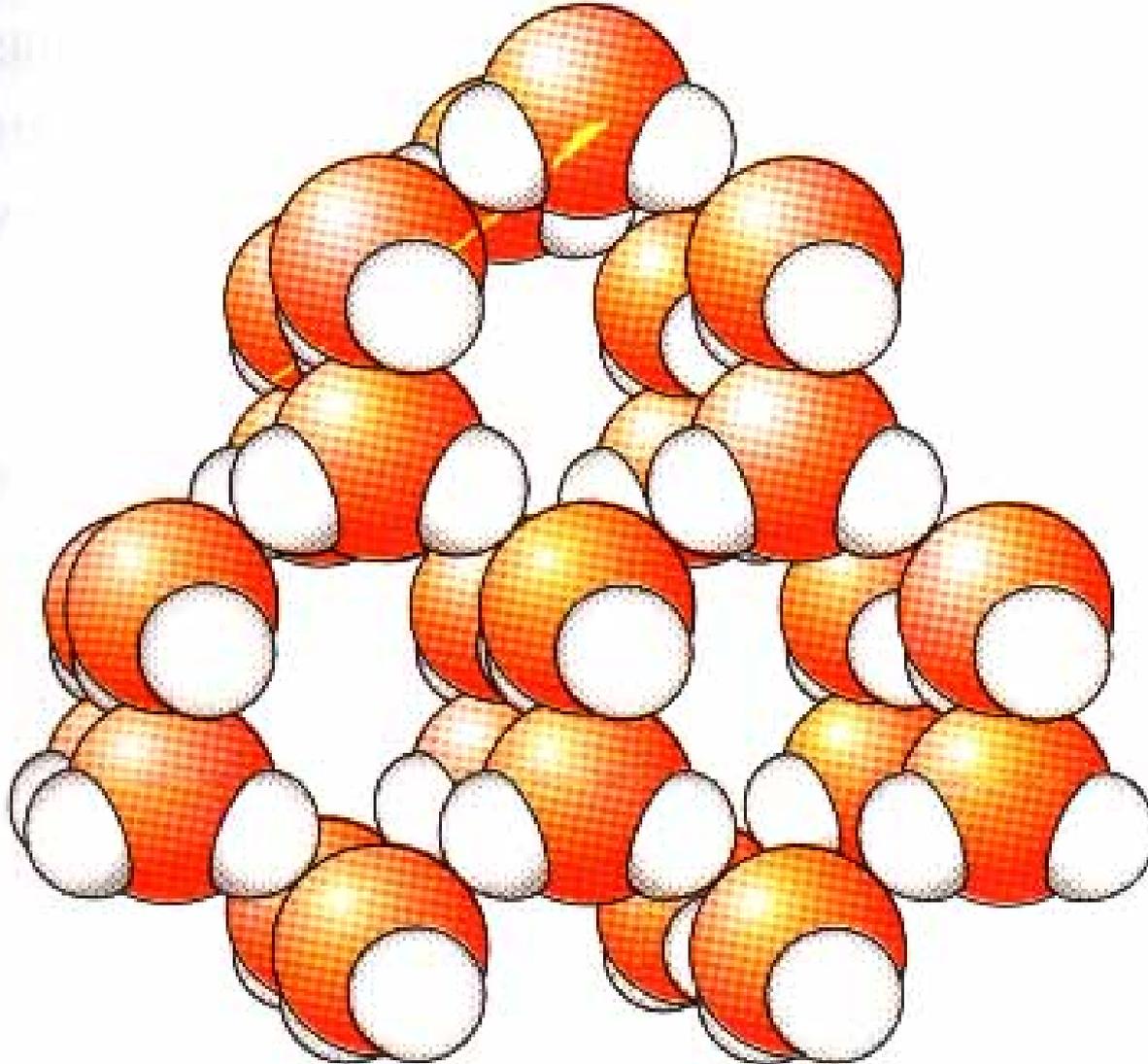
- Están formados por moléculas aisladas.
- P.F. y P. E. bajos (gases).
- Son blandos.
- Solubles en disolventes moleculares.
- Malos conductores.
- Las sustancias polares son solubles en disolventes polares y tienen mayores P.F y P.E.



Enlaces intermoleculares

- **Enlace o puente de Hidrógeno.**
 - Es relativamente fuerte y precisa de:
 - Gran diferencia de electronegatividad entre átomos.
 - El pequeño tamaño del H que se incrusta en la nube de e^- del otro átomo.
 - Es el responsable de P.F y P.E. anormalmente altos.
- **Fuerzas de Van der Waals.**
 - Entre dipolos permanentes (moléculas polares). Son débiles.
 - Entre dipolos instantáneos (moléculas apolares). Son muy débiles.

Estructura del hielo (puentes de hidrógeno)



Enlace metálico

- Lo forman los metales.
- Es un enlace bastante fuerte.
- Los átomos de los metales con pocos e^- en su última capa no forman enlaces covalentes, ya que compartiendo electrones no adquieren la estructura de gas noble.
- Se comparten los e^- de valencia colectivamente.
- Una nube electrónica rodea a todo el conjunto de iones positivos, empaquetados ordenadamente, formando una estructura cristalina de alto índice de coordinación.
- Existen dos modelos que lo explican:
 - **Modelo del mar de electrones:**
 - **Modelo de bandas:**

Modelo de bandas (enlace metálico).

- Se basa en la T.O.M (bandas en el espectro de emisión).
- Se combinan infinidad de orb. atómicos con lo que se producen bandas de orb. moleculares.
- Los e^- ocupan los O.M. enlazantes de menor energía (banda de valencia).
- Quedan los orbitales antienlazantes de mayor energía libres formando la

Propiedades de los compuestos metálicos.

- Son dúctiles y maleables debido a que no existen enlaces con una dirección determinada. Si se distorsiona la estructura los e^- vuelven a estabilizarla interponiéndose entre los cationes.
- Son buenos conductores debido a la deslocalización de los e^- . Si se aplica el modelo de bandas, puede suponerse que la banda vacía (de conducción está muy próxima a la banda en donde se encuentran los e^- de forma que con una mínima energía éstos saltan y se encuentran con una banda de conducción libre.

Propiedades de los compuestos metálicos (cont.).

- Conducen el calor debido a la compacidad de los átomos que hace que las vibraciones en unos se transmitan con facilidad a los de al lado.
- Tienen, en general, altos P. F. y P. E. Dependiendo de la estructura de la red. La mayoría son sólidos.
- Tienen un brillo característico debido a la gran cantidad de niveles muy próximos de energía que hace que prácticamente absorban energía de cualquier " λ " que inmediatamente emiten (reflejo y brillo).

Ejemplo: La configuración electrónica de un elemento: **a)** ¿Permite conocer cuál es su situación en el sistema periódico? **b)** ¿Indica qué clase de enlaces puede formar con otros elementos? **c)** ¿Es suficiente información para saber si el elemento es sólido, líquido o gas? **d)** ¿Sirve para conocer si el elemento es o no molecular? Justifique las respuestas.

a) Sí.

b) Sí.

c) No.

d) Sí. Si acaba en “s” o d” se tratará de un elemento metálico y el compuesto no será molecular. Igualmente, los gases nobles (p^6) se encuentran como átomo aislados. Son moleculares los elementos no metálicos ($p^2 - p^5$).

Ejercicio D: Rellenar el siguiente cuadro poniendo en cada casilla la fórmula del elemento o de un compuesto que formen entre ellos, el tipo de enlace (C = covalente, I = iónico, M = metálico) y el estado de agregación (S = sólido, L = líquido, G= gas), tal como aparece en el ejemplo.

	Cl				H		O				Ca	
Cl	Cl ₂	C	G	HCl	C	G	Cl ₂ O	C	G	CaCl ₂	I	S
H				H ₂	C	G	H ₂ O	C	L	CaH ₂	I	S
O							O ₂	C	G	CaO	I	S
Ca										Ca	M	S