

QUÍMICA ESTRUCTURAL II

Prof. Jorge Rojo Carrascosa

7 de noviembre de 2013

Enlace Covalente

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados
Los electrones se encuentran localizados

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Tipos de enlace covalente:

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Tipos de enlace covalente:

- Unión {
 - Sencillo ($\text{Cl}-\text{Cl}$, $\text{H}-\text{Cl}$, NH_3 , ...)
 - Doble ($\text{O}=\text{O}$, $\text{O}=\text{C}=\text{O}$, $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$, ...)
 - Triple ($\text{N}\equiv\text{N}$, $\text{HC}\equiv\text{CH}$, ...)

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Tipos de enlace covalente:

- Unión $\left\{ \begin{array}{l} \text{Sencillo (Cl-Cl, H-Cl, NH}_3, \dots) \\ \text{Doble (O-O, O=C=O, H}_2\text{C=CH}_2, \dots) \\ \text{Triple (N}\equiv\text{N, HC}\equiv\text{CH, } \dots) \end{array} \right.$

- Polaridad $\left\{ \begin{array}{l} \text{Polar (HCl, H}_2\text{O, PH}_3, \dots) \\ \text{Apolar (Cl}_2, \text{CH}_4, \text{BCl}_3, \dots) \end{array} \right.$

Enlace Covalente

Compartición electrónica entre los átomos implicados

Los electrones se encuentran localizados

Agrupaciones de 2 o n átomos

Tipos de enlace covalente:

- Unión $\left\{ \begin{array}{l} \text{Sencillo (Cl-Cl, H-Cl, NH}_3, \dots) \\ \text{Doble (O-O, O=C=O, H}_2\text{C=CH}_2, \dots) \\ \text{Triple (N}\equiv\text{N, HC}\equiv\text{CH, } \dots) \end{array} \right.$

- Polaridad $\left\{ \begin{array}{l} \text{Polar (HCl, H}_2\text{O, PH}_3, \dots) \\ \text{Apoliar (Cl}_2, \text{CH}_4, \text{BCl}_3, \dots) \end{array} \right.$

- Par electrónico $\left\{ \begin{array}{l} \text{Normal (HCl, SiH}_4, \dots) \\ \text{Coordinado (NH}_4^+, \text{H}_2\text{SO}_4, \dots) \end{array} \right.$

Teoría de enlace de Valencia, TEV (1927)

- Existen e^- desapareados en O.A.
- Los átomos mantienen su individualidad en la molécula
- El solapamiento de O.A \Rightarrow O.M.
- Se generan tantos enlaces como e^- desapareados

Teoría de enlace de Valencia, TEV (1927)

- Existen e^- desapareados en O.A.
- Los átomos mantienen su individualidad en la molécula
- El solapamiento de O.A \Rightarrow O.M.
- Se generan tantos enlaces como e^- desapareados

Tipos de enlace:

Enlace σ : $s - s$, $s - p_z$, $s - d_{z^2}$, $p_z - p_z$, $p_z - d_{z^2}$, $d_{z^2} - d_{z^2}$

Enlace π : $p_x - p_x$, $p_y - p_y$, $p_x - d_{xz}$, $p_y - d_{yz}$, $d_{xz} - d_{xz}$, $d_{yz} - d_{yz}$

Enlace δ (elementos de transición): $d_{x^2-y^2} - d_{x^2-y^2}$, $d_{xy} - d_{xy}$

Fortaleza de enlace: $\sigma > \pi > \delta$

Teoría de enlace de Valencia, TEV (1927)

- Existen e^- desapareados en O.A.
- Los átomos mantienen su individualidad en la molécula
- El solapamiento de O.A \Rightarrow O.M.
- Se generan tantos enlaces como e^- desapareados

Tipos de enlace:

Enlace σ : $s - s$, $s - p_z$, $s - d_{z^2}$, $p_z - p_z$, $p_z - d_{z^2}$, $d_{z^2} - d_{z^2}$

Enlace π : $p_x - p_x$, $p_y - p_y$, $p_x - d_{xz}$, $p_y - d_{yz}$, $d_{xz} - d_{xz}$, $d_{yz} - d_{yz}$

Enlace δ (elementos de transición): $d_{x^2-y^2} - d_{x^2-y^2}$, $d_{xy} - d_{xy}$

Fortaleza de enlace: $\sigma > \pi > \delta$

Molécula $O_2 \Rightarrow (1\sigma + 1\pi)$

Teoría de Orbitales Moleculares, TOM (1927-32)

- La molécula se trata como un átomo compuesto por varios núcleos
- Los e^- se localizan en O.M.
- La combinación de 2 O.A. \Rightarrow 2 O.M. (enlazante y antienlazante)

- La molécula se trata como un átomo compuesto por varios núcleos
- Los e^- se localizan en O.M.
- La combinación de 2 O.A. \Rightarrow 2 O.M. (enlazante y antienlazante)

Tipos de enlace:

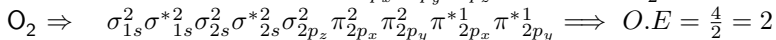
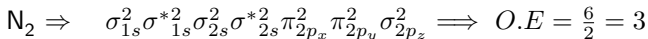
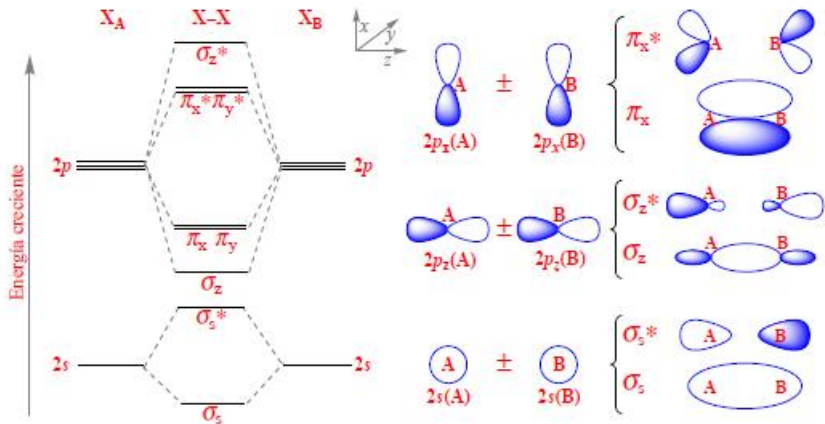
Orbital σ : $s - s$, $s - p_z$, $p_z - p_z$

Orbital π : $p_x - p_x$, $p_y - p_y$

Orden de Energía para los O.M. en moléculas diatómicas homonucleares:

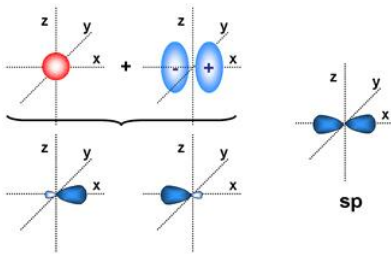
$$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_{2p_z} < \pi_{2p_x} = \pi_{2p_y} < \pi_{2p_x}^* = \pi_{2p_y}^* < \sigma_{2p_z}^*$$

Teoría de Orbitales Moleculares, TOM (1927-32)



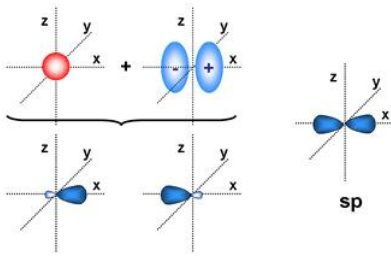
- HIBRIDACIÓN sp

(Geometría Lineal)



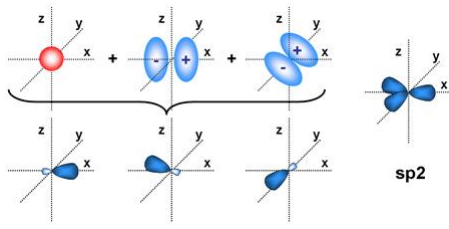
• HIBRIDACIÓN sp

(Geometría Lineal)

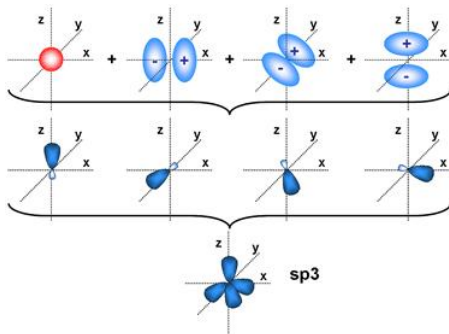


• HIBRIDACIÓN sp^2

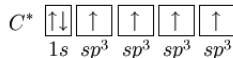
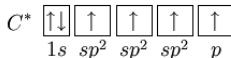
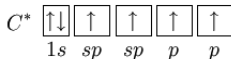
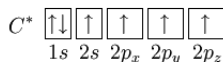
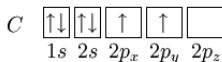
(Geo. Trigonal Plana)










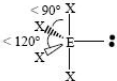







• HIBRIDACIÓN SP^3 (Geometría Tetraédrica)



El átomo de Carbono



Geometria Molecular / Teoria RPECV o VSEPR

VSEPR Geometries					
Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 <p>Linear</p>				
3	 <p>Trigonal Planar</p>	 <p>Bent or Angular</p>			
4	 <p>Tetrahedral</p>	 <p>Trigonal Pyramid</p>	 <p>Bent or Angular</p>		
5	 <p>Trigonal Bipyramid</p>	 <p>Sawhorse or Seesaw</p>	 <p>T-shape</p>	 <p>Linear</p>	
6	 <p>Octahedral</p>	 <p>Square Pyramid</p>	 <p>Square Planar</p>	 <p>T-shape</p>	 <p>Linear</p>

Fuerzas Intermoleculares e Interiónicas Atractivas

- **Fuerzas Coulombianas** $\left\{ \begin{array}{l} \text{lón - lón (250 } kJ/mol) \\ \text{lón - Dipolo (15 } kJ/mol) \end{array} \right.$

Fuerzas Intermoleculares e Interiónicas Atractivas

- **Fuerzas Coulombianas** $\left\{ \begin{array}{l} \text{lón - lón (250 kJ/mol)} \\ \text{lón - Dipolo (15 kJ/mol)} \end{array} \right.$
- **Fuerzas de Van der Waals**
 $\left\{ \begin{array}{l} \text{Keeson} \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo (2 - 0,3 kJ/mol)} \\ \text{Debye} \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo Inducido (0,05 kJ/mol)} \\ \text{London} \Rightarrow \text{Dipolo Instantáneo - Dipolo Inducido (2 kJ/mol)} \end{array} \right.$

Fuerzas Intermoleculares e Interiónicas Atractivas

- **Fuerzas Coulombianas** $\left\{ \begin{array}{l} \text{Ión - Ión (250 kJ/mol)} \\ \text{Ión - Dipolo (15 kJ/mol)} \end{array} \right.$
- **Fuerzas de Van der Waals**
 - $\left\{ \begin{array}{l} \text{Keeson} \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo (2 - 0,3 kJ/mol)} \\ \text{Debye} \Rightarrow \text{Dipolo - Dipolo Inducido (0,05 kJ/mol)} \\ \text{London} \Rightarrow \text{Dipolo Instantáneo - Dipolo Inducido (2 kJ/mol)} \end{array} \right.$
- **Enlace de Hidrógeno**
 - $\left\{ \begin{array}{l} \text{Caracter de enlace localizado} \\ \text{Unión del H con F, O y N} \\ \text{Tipo especial de interacción dipolo-dipolo (20 kJ/mol)} \end{array} \right.$

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 ,...) o Polares (H_2O , NH_3 ,...).

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 ,...) o Polares (H_2O , NH_3 ,...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Covalentes, Atómicas o Reticulares

- Puntos de Fusión y Ebullición Altos.

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Covalentes, Atómicas o Reticulares

- Puntos de Fusión y Ebullición Altos.
- Sólidos duros

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Covalentes, Atómicas o Reticulares

- Puntos de Fusión y Ebullición Altos.
- Sólidos duros
- Aislantes e Insolubles en cualquier disolvente

Sustancias Moleculares

- Apolares (H_2 , CH_4 , ...) o Polares (H_2O , NH_3 , ...).
- Puntos de Fusión y Ebullición Bajos
- Existen Gases (O_2 , N_2 , CH_4 , ...), Líquidos (H_2O , Br_2 , ...) o Sólidas (I_2 , $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, ...).
- No conducen la electricidad.

Sustancias Covalentes, Atómicas o Reticulares

- Puntos de Fusión y Ebullición Altos.
- Sólidos duros
- Aislantes e Insolubles en cualquier disolvente
- Forman redes cristalinas (Diamante C, cuarzo SiO_2 , ...).