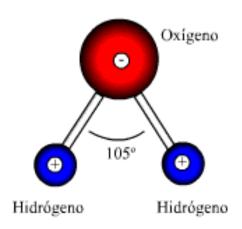
7 ENLACE QUÍMICO



INTRODUCCIÓN

Cuando se acercan dos átomos mutuamente, se ejercen varias fuerzas entre ellos. Algunas de estas fuerzas tratan de mantener los átomos unidos, otras tienden a separarlos. en la mayoría de los átomos, con excepción de los gases nobles , las fuerzas atractivas son superiores a las repulsivas y los átomos se acercan formando un *enlace*. Así, se considera al enlace químico como la fuerza que mantiene unidos a dos o más átomos dentro de una molécula.

7.1 REGLA DEL OCTETO

Los átomos tienden a perder, ganar o compartir electrones en forma tal que queden con un total de 8 electrones en su nivel energético más exterior, esta configuración les proporciona gran estabilidad.

IONES: átomos o conjunto de átomos que poseen carga eléctrica.

<u>Catión:</u> ion con carga positiva. **Ejemplo:** Ca⁺² ion calcio, NH4⁺ ion amonio <u>Anión:</u> ion con carga negativa. **Ejemplo:** Br ion bromuro, ClO²⁻ ion clorito

EJEMPLOS:

El sodio tiene un potencial de ionización bajo y puede perder fácilmente su electrón 3s

$$Na^0 \rightarrow Na^+ + 1e^ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 + 1e^-$$
átomo de ion de sodio sodio

La estructura electrónica del ion sodio resultante es exactamente igual a la del gas noble neón. este ion es una especie muy estable.

Otros elementos ganan electrones para llenar la capa de valencia y alcanzar la configuración estable de 8 electrones. El cloro es un ejemplo:

$$Cl^0$$
 \rightarrow $1e^-$ + $Cl^ 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^5$ \rightarrow + $\frac{1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2}{3p^6}$

átomo de cloro ion cloruro

VIDEOS

Enlace químico y regla del octeto

PRÁCTICA

Ejercicios regla del octeto

7.2 TIPOS DE ENLACES

ENLACE IÓNICO:	Este enlace se origina cuando se transfiere uno o varios electrones de un átomo a otro. Debido al intercambio electrónico, los átomos se cargan positiva y negativamente, estableciéndose así una fuerza de atracción electrostática que los enlaza. Se forma entre dos átomos con una apreciable diferencia de electronegatividades, los elementos de los grupos I y II A forman		EJEMPLO: Na \cdot + \cdot $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$ $\stackrel{\circ}{C}$	
ENLACE COVALENTE	enlaces iónicos con los elementos de los grupos VI y VII A. Se presenta cuando se comparten uno o más pares de electrones entre dos átomos cuya diferencia de electronegatividad es pequeña.		EJEMPLO: 8N° + xNx → 8N° × xNx N−N > N ₂	
	Enlace covalente apolar:	Se establece entre átomos con igual electronegatividad. Átomos del mismo elemento presentan este tipo de enlace.	EJEMPLO:	
	<u>Enlace</u> <u>covalente</u> <u>polar:</u>	Se establece entre átomos con electronegatividades próximas pero no iguales	EJEMPLO:	
	Enlace covalente coordinado:	Se establece por compartición de electrones entre dos átomos pero un átomo aporta el par de electrones compartidos.	EJEMPLO:	
ENLACE METÁLICO	Los electrones que participan en él se mueven libremente, a causa de la poca fuerza de atracción del núcleo sobre los electrones de su periferia.			

VIDEOS

Enlaces químicos Enlace iónico Enlace covalente Enlace metálico

PRÁCTICA

<u>Ejercicios propuestos de enlaces</u>
<u>Ejercicios de enlaces iónico, covalente y metálicos</u>
<u>Ejercicios de enlaces químicos</u>

Basado en la diferencia de electronegatividad entre los átomos que forman el enlace puede predecirse el tipo de enlace que se formará:

Si la diferencia de electronegatividades es mayor que 2. = se formará un *enlace iónico*

Si la diferencia de electronegatividades es mayor que 0.5 y menor a 2.0. = el enlace formado será covalente polar

Si la diferencia de electronegatividades es menor a 0.5 = el enlace será *covalente* puro (o no polar).

EJEMPLOS:

Qué tipo de enlace se formará entre H y O?
 Según la Tabla de Electronegatividades de Pauli, el Hidrógeno tiene una Electronegatividad de 2.2 y el Oxígeno 3.44, por lo tanto la diferencia de electronegatividades será:

3.44 - 2.2 = 1.241.24 es menor que 2.0 y mayor que 0.5. Por lo tanto, el enlace será *Covalente Polar*.

• Decidir si se puede aplicar o no la regla del octeto a las moléculas de: (a) BeCl₂, (b) BCl₂

Como la regla del octeto se basa en el hecho de que todos los gases raros tienen una estructura de ocho electrones, basta con ver si el átomo central completa ocho electrones en la capa de valencia.

7.3 ESTRUCTURAS DE LEWIS Y FÓRMULA ESTRUCTURAL

Las estructuras de Lewis son representaciones adecuadas y sencillas de iones y compuestos, que facilitan el recuento exacto de electrones y constituyen una base importante para predecir estabilidades relativas.

Gilbert Newton **Lewis** (1875-1946): Físico y químico norteamericano. Se le debe el estudio de los electrones periféricos de los átomos, del que dedujo, en 1916, una interpretación de la covalencia; propuso, en 1926, el nombre de "fotón" para el cuanto de energía radiante

1. Se elige el átomo central. Nunca H. Generalmente es el menos electronegativo. 2. Se cuentan los e de valencia = 5 + 3·1 = 8 (4 pares) valencia. 3. Se forman enlaces entre el átomo central y los periféricos. 4. Los e restantes se sitúan como pares solitarios para completar los octetes. Amoníaco, NH₃ 1. N es central 2. e de valencia = 5 + 3·1 = 8 (4 pares) 3. H—N—H

EJEMPLO:

• Escribir la fórmula de Lewis para a) Be, b) O, c) F, d) Li

Si representamos con puntos los electrones de valencia (los que participan en el enlace químico) tenemos:

- Be: Dos electrones s, puesto que su configuración electrónica 1s² 2s² indica que haya dos electrones en el nivel de valencia.
 - ö.
- Dos electrones s y cuatro electrones p, de acuerdo con su configuración electrónica 1s² 2s² 2p⁴; en total, 6 electrones de valencia.
- F•
 Dos electrones s y cinco electrones p (configuración electrónica 1s² 2s² 2p⁵)
- Un electrón s (configuración electrónica 1s² 2s¹).

EJEMPLO:

De acuerdo con la regla del octeto, escribir las formulas electrónicas y estructurales de a) HF, b) CH_4 , c) H_2S .

Se acostumbra usar una línea para representar un par compartido de electrones entre dos átomos

(a) Los electrones de valencia \cdot Be \cdot y con Cl $(3s^23p^5)$:Cl :la estructura de Lewis será: son:

El berilio está rodeado únicamente de cuatro electrones, luego es una excepción a la regla del octeto.

(b) Los electrones de valencia asociados con B $(2s^2 2p^1)$ son: *B* y con Cl $(3s^2 3p^5)$ son: *Cl* la estructura electrónica o de Lewis será

El boro esta rodeado únicamente de seis electrones, luego no cumple la regla del octeto

Explicar la formación del enlace covalente en la molécula de cloruro de hidrogeno gaseoso, HCl.

Usamos los diagramas de Lewis para representar los electrones de valencia:

$$H^{*} + \cdot \ddot{C}I: \longrightarrow H^{*}\ddot{C}I: (0 H-CI)$$

4

El átomo de cloro completa el octeto compartiendo el electrón del átomo de H; así, el cloro alcanza la configuración del gas noble y el hidrogeno alcanza la configuración del gas noble

Resumen de las reglas de Lewis

- Cuenta los electrones de valencia (no olvidar las cargas si se trata de un ion molecular).
- Número de pares de electrones: (electrones de valencia/2)
- Sitúa como átomo central el menos electronegativo. ¡Nunca el H!.
- Une los átomos con pares de electrones enlazantes (PE)
- Completa los octetos agregando pares de electrones solitarios (PS) a los átomos.
- Establece enlaces múltiples con los átomos que queden con su octeto incompleto.
- Asigna cargas formales: CF = Z (#PE/2) (#PS)
- Elige las estructuras con la menor separación de carga posible (recuerda que los átomos del 3^{er} período en adelante admiten más de cuatro pares a su alrededor).
- Indica si hay estructuras equivalentes en resonancia.

VIDEOS

Estructura de Lewis Estructura de Lewis

PRÁCTICA

Ejercicios estructura de Lewis Ejercicios estructura de Lewis Ejercicios para resolver

7.4 CARGA FORMAL

En química, una **carga formal** (FC) es una carga parcial de un átomo en una molécula, asignada al asumir que los electrones en un enlace químico se comparten por igual entre los átomos La carga formal de cualquier átomo en una molécula puede ser calculada por la siguiente ecuación: carga formal = número de electrones de valencia del átomo aislado - electrones de pares libres del átomo en la molécula - la mitad del número total de electrones que participan en enlaces covalentes con este átomo en la molécula.

Carga formal = número de grupo o n^o de electrones de valencia – ½ (n^o de electrones compartidos) – (n^o de electrones no compartidos)

En la siguiente figura se indica el cálculo de la carga formal de cada uno de los átomos que integran el anión carbonato:

carga formal =
$$6 - (4 + \frac{4}{2}) = 0$$

carga formal = $4 - (0 + \frac{8}{2}) = 0$

carga formal = $6 - (6 + \frac{2}{2}) = -1$

carga formal = $4 - (0 + \frac{8}{2}) = 0$

carga formal = $6 - (4 + \frac{4}{2}) = 0$

carga formal = $6 - (4 + \frac{4}{2}) = 0$

carga formal = $6 - (6 + \frac{2}{2}) = +1$

carga formal = $6 - (6 + \frac{2}{2}) = -1$

VIDEOS

Enlace químico, carga formal

PRÁCTICA

Ejercicios de estructura de Lewis y carga formal

7.5 ENERGÍA DE DISOCIACIÓN DE ENLACE

En química, la energía de disociación de enlace, D_0 , es una medida de la fuerza de enlace en un enlace químico. Se define como el cambio de entalpía estándar cuando se rompe un enlace por homólisis, con los reactivos y productos de la reacción de homólisis a 0K (cero absoluto). Así, la energía de disociación de enlace de uno de los enlaces C-H en el etano (C_2H_6) está definido por el proceso:

$$CH_3CH_2$$
-H \rightarrow CH_3CH_2 + H
 $D_0 = \Delta H = 101,1 \text{ kcal/mol (423.0 kJ/mol)}$

La energía de disociación de enlace también se conoce como entalpía de disociación de enlace (o entalpía de enlace), pero estos términos no son estrictamente correctos, puesto que se refieren a la entalpía de la reacción anterior en condiciones estándar, y pueden diferir de D_0 en más de 3 kcal/mol (12 kJ/mol).

La energía de disociación de enlace suele ser diferente a la energía de enlace, que es calculada a partir de la suma de las energías de disociación de enlace de todos los enlaces en una molécula. Por ejemplo, un enlace O-H de la molécula de agua (H-O-H) tiene una energía de disociación de enlace de 493,4 kJ/mol, y se necesita 424,4 kJ/mol para romper el enlace O-H restante. La energía de enlace de los enlaces O-H en el agua es 458,9 kJ/mol, que es la media de los valores. En la misma forma, la remoción sucesiva de los átomos de hidrógeno del metano tiene energías de disociación de enlace que son: 104 kcal/mol (435 kJ/mol) para D(CH₃-H), 106 kcal/mol (444 kJ/mol) para D(CH-H) y finalmente 81 kcal/mol (339 kJ/mol) para D(C-H). En consecuencia, la energía de enlace es 99 kcal/mol o 414 kJ/mol (la media de las energías de disociación de enlace).

Obsérvese que si después de la disociación se forman nuevos enlaces a menor entalpía, habrá una pérdida neta de energía, y el proceso global será exotérmico.

La energía de disociación heterolítica de enlace está involucrada en la ruptura de enlaces químicos por heterólisis.

Tabla 3: Energías promedio disociación Energías de enlace

Enlace	Energía (kJ / molg)	Enlace	Energía (kJ / molg)
H - H	436	N - N	160
C - H	413	N = O	631
N - H	393	N triples N	941
P - H	297	N - O	201
C - C	347	N - P	297
C - O	358	O - H	464
C - N	305	O - S	265
C - Cl	397	O - Cl	269
C = C	607	O - O	204
C = O	805	C-F	552
O = O	498	C-S	259

Por ejemplo:

a) La disociación de hidrógeno (gas de hidrógeno cada 2 átomos de hidrógeno por separado).

$$H_{2(g)} \rightarrow 2H_{(g)}....\Delta H = +436,4KJ$$

La disociación de enlace de H — enlace H es 436,2 kJ.

b) La energía de enlace de un enlace C-H se determina mediante el examen de muchas reacciones en las que los hidrocarburos como el gas metano se dividen en átomos de carbono e hidrógeno

$$CH_{4(g)} \to C_{(s)} + 4H_{(g)}..............\Delta H = 1650 kJ$$

Cuatro enlaces C — H tiene que ser rotos, la energía promedio de cada carbono es + 412.5 kJ. Se trata de valores medios, excepto para los gases diatómicos como el hidrógeno.

Aplicación de la energía de disociación de enlace a la ley de Hess

La Ley de Hess utilizando la fórmula energías de enlace

$$\Delta H = \sum energia.enlaces..rotos - \sum energia.enlaces..formados$$

$$\Delta H = \sum energia.enlace..reactivos - \sum enenrgia.enlace..productos$$

$$\Delta H = \sum energia..proporcionada - \sum energia.liberada$$

Cálculo A H, utilizando las energías de enlace.

Ejemplo: Calcular la energía de la reacción a la quema de metano con oxígeno para formar dióxido de carbono gaseoso y agua gaseosa, con los calores de formación. La ecuación balanceada es la siguiente. Utilice la siguiente lista de energías de enlace

$$C_3 H_8 (g) + 5 O_2 (g) ----> 3 CO_2 (g) + 4 H_2 O (g)$$

Los pasos 1 y 2

- 1) Determinar el número y tipos de enlaces rotos y formados.
- 2) Determinar la variación de energía

Enlaces rotos (reactivos)						
Tipo	#	Bond Energía	Energía			
C - C	2	347 kJ / mol	+ 694 kJ			
C - H	8	413 kJ / mol	+3320 kJ			
O = O	5	498 kJ / mol	+2490 kJ			
Total	6488 kJ					
Enlaces formados (los productos)						
O - H	8	464	- 3.712 kJ			
C = O	6	805	- 4.830 kJ			
Total			- 8.542 kJ			

Paso 3)

Δ H = Energía de los Bonos Roto - Energía de los Bonos formado

 $\Delta H = 6.488 \text{ kJ} - 8542 \text{ kJ}$

 $\Delta H = -2.054 \text{ kJ}$

Los cálculos utilizando Calorimetría

a) Fórmula para el cálculo de la entalpía molar (\(\Delta \text{H} \) sustancia).

$$\Delta H = \frac{m * c * \Delta t}{n}$$

En los cálculos de entalpía molar, utilizando la técnica de calorimetría que el experimentador tiene que determinar lo siguiente:

- 1) la masa de la sustancia (m) en los alrededores (calorímetro).
- 2) Capacidad de calor específico de la sustancia (c) que rodea el sistema.
- 3) los cambios de temperatura en los alrededores (Δ t).
- 4) moles de sustancia (n) en el sistema (la reacción que se produce).

Cálculo del entalpia molar

Ejemplo: Calcular la entalpía molar de la reacción si al 0,25 moles de una sustancia se hace reaccionar el calor produce un aumento de la temperatura ° C 4,5 en 325 ml de agua en un calorímetro taza de café.

- 1) Registrar la información dada.
- a) de la sustancia moles = 0.25 moles
- b) masa de la sustancia en un entorno = 325 ml = 325 g
- c) los cambios de temperatura = 4,5 C
- d) La capacidad de calor específico del agua es 4,19 J/g ° C
- 2) Determinar la información requerida.

Entalpía molar

3) Analizar del problema y hacer un plan para resolver la entalpía molar.

$$\Delta H = \frac{m * c * \Delta t}{n}$$

4) Aplicar la fórmula y resolver el problema

$$\Delta H = \frac{325 \, g * 4,19 \, g \, / \, J * 4,5^{\circ} \, C}{0,25 \, mol}$$

$$\Delta$$
_{sustancia} H = 24.511,5 J/mol

5) respuesta del Estado.

La entalpía molar de la sustancia es de 24,5 kJ / mol

Otros métodos de cálculo de los calores de reacción utilizando la ley de Hess.

a) Con los calores de formación

El cálculo de los Δ H, utilizando la ley de Hess y ecuaciones lleva mucho tiempo y es algo difícil. Hay otra manera de encontrar el Δ H de una reacción, mediante lo que se llama calores de formación. Examine el diagrama de un cambio de energía en el transcurso de una reacción que se muestra a continuación.

Cálculo A H con los calores de formación

El AH de la reacción es la diferencia entre el calor total de los productos y la de los reactivos.

 ΔH = Calor de Productos - Calor de Reactivos

Los químicos se puede calcular el calor total de reactivos y productos que utilizan lo que se denominan Los calores de formaciones. El calor de formación de un compuesto es la cantidad de calor necesaria para formar el compuesto a partir de sus elementos.

Para calcular el calor del reactivo o producto de las sustancias en una ecuación se multiplican los moles de cada sustancia (en la ecuación química) por el calor de formación de dicha sustancia

Los calores de formaciones de diversas sustancias se encuentran en una tabla de calores de formación, a los calores de formación se les da el símbolo $\Delta H_{\rm f.}$

Nota: Los calores de formación de los elementos son cero y que no aparecen a menudo en estas tablas.

b) Formula la ley de Hess con los calores de formación.

El calor de la reacción global es la suma de los calores de los productos menos la suma de los calores de los reactivos.

$$\Delta H = \sum H_f(productos) - \sum \Delta H_f(reactivos)$$

Ejemplo: Calcular el Δ H, de la siguiente reacción con los calores de formaciones

$$C_3 H_8(l) + D_2(g) \Rightarrow CO_2(g) + H_2 O(g)$$

Respuesta:

Paso 1: Balancear la ecuación

$$1 C_3 H_8 (1) + 5 O_2 (g) \implies 3 CO_2 (g) + 4 H_2 O (g)$$

Paso 2: Localizar los calores de formación utilizando una tabla de calores de formación.

$$C_3 H_8 (l) = -103.8 \text{ kJ} / \text{mol}$$

 $O_2(g) = 0 \text{ kJ / mol}$

 $CO_2(g) = -393,5 \text{ kJ} / \text{mol}$

 $H_2 O (g) = -242,0 \text{ kJ/mol}$

Paso 3: Registre los valores en la fórmula y calcular respuesta.

$$\Delta H = \sum H_f(productos) - \sum \Delta H_f(reactivos)$$

$$\Delta \ H = \left[(3 * -393,5 \ kJ \ / \ mol) + (4 * -242,0 \ kJ \ / \ mol) \right] - \left[(1 * -103,8 \ kJ \ / \ mol) + (5 * 0 \ kJ \ / \ mol) \right]$$

$$\Delta H = -2044,7 \text{ kJ}$$

Tabla 4: Calores de formación en kJ/mol

Compuestos inorgánicos	$\Delta { m H^0}_{ m f}$	Compuestos orgánicos	$\Delta H_{\mathrm{f}}^{0}$
$H_2O(g)$	-242,0	Metano	-74,9
H ₂ O(l)	-285,8	Etano	-84,7
HF(g)	-268,6	Atileno	+52,3
HCl(g)	-92,3	Etino	+226,8
NaCl(s)	-411,0	Propano	-103,8
CaO(s)	-635,1	n-Butano	-124,7
CaCO ₃ (s)	-1206,9	n-Hexano	-167,2
CO(g)	-110,5	Benceno	+49,0
CO ₂ (g)	-393,5	Metanol	-238,6
NO(g)	+90,4	Etanol	-277,6
NH ₃ (g)	-46,2	Ac. fórmico	-409,2
SO ₂ (g)	-296,1	Ac. acético	-487,0
SO ₃ (g)	-395,2	Cloroformo	-131,8

VIDEO
<u>Calorimetría</u>
<u>Calorimetría 2</u>

PRÁCTICA

Ejercicios calores de formación

BIBLIOGRAFÍA

 $\frac{http://www.cespro.com/Materias/MatContenidos/Contquimica/QUIMICA_INORGANICA/}{IndexQca.htm}$

ENLACES

http://platea.pntic.mec.es/~jrodri5/web_enlaces_quimicos/00indice_enlaces.html

http://www.educa.madrid.org/web/cepa.pabloguzman.madrid/quimica.htm

http://dewey.uab.es/pmarques/pdigital/webs/bach2quimica.htm

 $\frac{http://www.unlu.edu.ar/\sim qui 10017/Quimica\%20COU\%20muestra\%20para\%20IQ10017/c}{ap2.htm\#enlacequimico}$