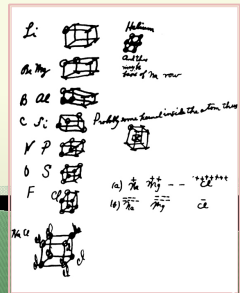


Continuación Tema 2

Prof(a) María Angélica Sánchez Palacios



**TEMA 2. CONTENIDO**

- Introducción a la forma y características de la tabla periódica.
- Introducción a los modelos atómicos. El Método Científico.
- Introducción a la teoría cuántica. Concepto de orbital. Números cuánticos y llenado de la tabla periódica.
- Propiedades periódicas: radio, potencial de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad.
- Enlace químico. Tipos de enlace según relación a la tabla periódica. Enlace iónico, enlace metálico.
- Enlace covalente. Energía de enlace y orden de enlace. Enlace covalente polar. Orbitales híbridos.
- Repulsión entre pares de electrones y forma de las moléculas.
- Polaridad de las moléculas.
- Propiedades de los estados agregados y su relación con el tipo de enlaces: iónicos, metálicos, Van Der Waals, ion dipolo y puente de hidrógeno.

Los electrones de valencia son los últimos electrones de un orbital en un átomo, que son los causantes de los enlaces químicos.

Grupo	e <sup>-</sup> configuración	# de valencia
1A	ns <sup>1</sup>	1
2A	ns <sup>2</sup>	2
3A	ns <sup>2</sup> np <sup>1</sup>	3
4A	ns <sup>2</sup> np <sup>2</sup>	4
5A	ns <sup>2</sup> np <sup>3</sup>	5
6A	ns <sup>2</sup> np <sup>4</sup>	6
7A	ns <sup>2</sup> np <sup>5</sup>	7

Los átomos se combinan ganando, perdiendo ó compartiendo electrones para alcanzar una configuración electrónica estable.

**Enlace Químico**

• Fuerza que actúa entre dos átomos ó grupos de átomos, para mantenerlos unidos en una especie estable diferente, que tiene propiedades medibles.

**Estructura de Lewis**

• Denotar los electrones de valencia y asegurar que no cambien en una Reacción Química.

Estructura de Lewis para los elementos representativos y gases nobles

1 IA	2 2A	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9	10	11 1B	12 2B	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
H	Be											B	C	N	O	F	Ne
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ar
Na	Mg											Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
K	Ca											In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Rb	Sr											Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Cs	Ba																
Fr	Ra																

**Enlace iónico: Se mantiene unido mediante fuerzas electrostática que une los iones (NaCl, MgO, LiF)**

Elementos con alta y baja energías de ionización

$$\text{Li} + \text{F} \rightarrow \text{Li}^+ + \text{F}^-$$


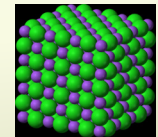
1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup>    1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>5</sup>    1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>    [He] [Ne]

Li → Li<sup>+</sup> + e<sup>-</sup>

e<sup>-</sup> + F → F<sup>-</sup>

Li<sup>+</sup> + F<sup>-</sup> → Li<sup>+</sup> F<sup>-</sup>

Rx exotérmica, ΔHf negativo

Enlace iónico NaCl Reticulo

**Cristales iónicos**

- Puntos de entrecruzamiento ocupados por cationes y aniones
- Se mantienen unidos por atracción electrostática
- Duros, frágiles, punto de fusión alto
- Malos conductores del calor y la electricidad

CsCl
ZnS
CaF<sub>2</sub>

7

Energía electrostática

La energía electrostática ó reticular (E) :es la energía que se requiere para separar completamente una mol de un compuesto sólido en sus iones gaseosos.

$$E = k \frac{Q_+ Q_-}{r}$$

Q<sub>+</sub> carga del catión  
 Q<sub>-</sub> carga del anión  
 r es la distancia entre ambos  
 k cte de proporcionalidad

La energía es directamente proporcional a Q<sub>+</sub> e inversamente proporcional a r.  
 Romper enlace iónico  
 E positiva, Rx endotérmica

Compuesto	E, kJ/mol	P.F. °C	
MgCl <sub>2</sub>	2.527	714	Q= +2,-1
MgO	3.890	2.800	Q= +2,-2
LiF	1.017	845	r F <sup>-</sup> < r Cl <sup>-</sup>
LiCl	828	610	

8

Ciclo de Born-Haber para determinar la energía electrostática

$\Delta H_{total}^{\circ} = \sum \Delta H_{i}^{\circ} \therefore \Delta H_{5}^{\circ} = -1.017 \text{ kJ / mol}$

$\Delta H_{1}^{\circ} = 155.2 \text{ kJ}$      $\Delta H_{2}^{\circ} = 75.3 \text{ kJ}$      $\Delta H_{3}^{\circ} = -1017 \text{ kJ}^?$

$\Delta H_{overall}^{\circ} = -594.1 \text{ kJ}$

$\Delta H_{total}^{\circ} = \Delta H_{1}^{\circ} + \Delta H_{2}^{\circ} + \Delta H_{3}^{\circ} + \Delta H_{4}^{\circ} + \Delta H_{5}^{\circ}$

9

**TABLE 9.1** Lattice Energies and Melting Points of Some Alkali Metal and Alkaline Earth Metal Halides and Oxides

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Melting Point (°C)
LiF	1017	845
LiCl	828	610
LiBr	787	550
LiI	732	450
NaCl	788	801
NaBr	736	750
NaI	686	662
KCl	699	772
KBr	689	735
KI	632	680
MgCl <sub>2</sub>	2527	714
Na <sub>2</sub> O	2570	Sub*
MgO	3890	2800

\*Na<sub>2</sub>O sublimates at 1275°C.

10

**La Química en acción:**  
 Importancia del Cloruro de Sodio

Minas de sal      Sal por evaporación

11

**Enlace metálico:** los átomos se agrupan muy cercanos entre sí, generando estructuras muy compactas . Adquieren estructura de empaquetamiento (cada átomo metálico se rodea de otros átomos). Los electrones de valencia se mueven libremente a través del compuesto (Cu, Fe, etc.)

**Cristales metálicos**

- Puntos de entrecruzamiento ocupados por átomos de metal
- Se mantienen unidos por enlaces metálicos
- Blandos a duros, punto de fusión de bajo a alto
- Buenos conductores de calor y electricidad

Corte transversal de un cristal metálico

núcleo y capa interna e<sup>+</sup>  
 "mar" móvil de e<sup>-</sup>

12

### Estructuras de cristales metálicos

1 1A 2 2A 3 3B 4 4B 5 5B 6 6B 7 7B 8 9 10 11 1B 12 2B 13 3A 14 4A 15 5A 16 6A 17 7A 18 8A

Hexagonal close-packed  
Face-centered cubic  
Body-centered cubic  
Other structures (see caption)

C.C. cara  
C.C. cuerpo  
Hexagonal

**Enlace covalente:** ocurre cuando dos ó más átomos comparten uno ó más pares de electrones.

¿Por qué compartirían electrones dos átomos?

Regla del Octeto

7e<sup>-</sup> + 7e<sup>-</sup> → 8e<sup>-</sup> 8e<sup>-</sup>

Estructura de Lewis para F<sub>2</sub>

Enlace covalente simple  
Par de iones  
Par de iones  
Enlace covalente simple

### Tipos de enlace covalente

Estructura de Lewis para el agua

H<sup>+</sup> +  $\cdot\ddot{O}\cdot$  +  $\cdot H$  →  $H:\ddot{O}:H$  o  $H-\ddot{O}-H$   
2e<sup>-</sup> 8e<sup>-</sup> 2e<sup>-</sup> Enlace covalente simple

**Doble enlace** – dos átomos comparten dos pares de electrones Ejm: CO<sub>2</sub>

$\ddot{O}::\ddot{C}::\ddot{O}$  o  $\ddot{O}=\ddot{C}=\ddot{O}$   
8e<sup>-</sup> 8e<sup>-</sup> 8e<sup>-</sup> Enlaces covalente doble

**Triple enlace** – dos átomos comparten tres pares de electrones Ejm: N<sub>2</sub>

$\ddot{N}:::\ddot{N}:::$  o  $:\ddot{N}\equiv\ddot{N}:$   
8e<sup>-</sup> 8e<sup>-</sup> Enlace triple Enlace covalente triple

### Longitud de los enlaces covalentes

74 pm (H<sub>2</sub>)  
161 pm (HI)

Longitud Triple enlace < Doble enlace < Enlace simple

Bond Type	Bond Length (pm)
C—H	107
C—O	143
C=O	121
C—C	154
C=C	133
C≡C	120
C—N	143
C=N	138
C≡N	116
N—O	136
N=O	122
O—H	96

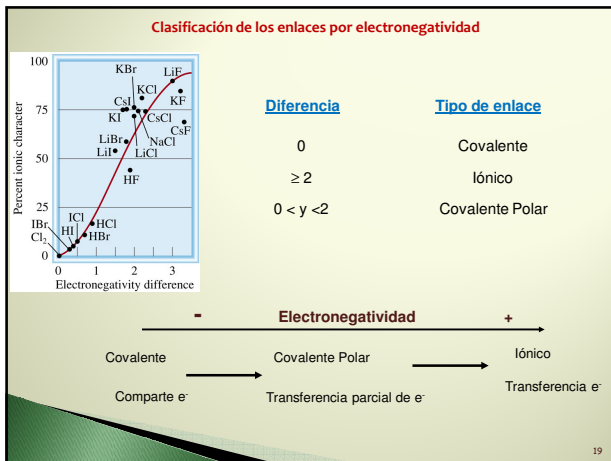
Property	NaCl	CCl <sub>4</sub>
Appearance	White solid	Colorless liquid
Melting point (°C)	801	-23
Molar heat of fusion* (kJ/mol)	30.2	2.5
Boiling point (°C)	1413	76.5
Molar heat of vaporization* (kJ/mol)	600	30
Density (g/cm <sup>3</sup> )	2.17	1.59
Solubility in water	High	Very low
Electrical conductivity		
Solid	Poor	Poor
Liquid	Good	Poor

\*Molar heat of fusion and molar heat of vaporization are the amounts of heat needed to melt 1 mole of the solid and to vaporize 1 mole of the liquid, respectively.

Enlace covalente polar es un enlace donde existe una diferencia de electronegatividad entre los dos átomos. Los electrones pasan mas tiempo en la vecindad de un átomo que del otro.

Alta electronegatividad  
Mediana electronegatividad

H—F  
δ<sup>+</sup> δ<sup>-</sup>



Clasifique los siguientes enlaces en iónicos, covalentes polares y covalentes:

Cs - 0.7	Cl - 3.0	$\Delta = 3.0 - 0.7 = 2.3$	<b>Iónico</b>
H - 2.1	S - 2.5	$\Delta = 2.5 - 2.1 = 0.4$	<b>Covalente Polar</b>
N - 3.0	N - 3.0	$\Delta = 3.0 - 3.0 = 0$	<b>Covalente</b>

### Estructuras de Lewis

- Dibuje la estructura del compuesto, mostrando qué átomos están conectados con otros. Coloque el elemento menos electronegativo al centro.
- Calcule el número total de electrones. Agregue 1 por cada carga negativa y elimine 1 por cada carga positiva.
- Complete los octetos de electrones para todos los elementos, excepto para el hidrógeno.
- Si la estructura tiene demasiados electrones, forme enlaces dobles ó triples en el átomo central.

### Escriba la estructura de Lewis para el NF<sub>3</sub>.

Paso 1 - N es menos electronegativo que el F, coloquémoslo al centro

Paso 2 - Contar los electrones de valencia N - 5 (2s<sup>2</sup>2p<sup>3</sup>) y F - 7 (2s<sup>2</sup>2p<sup>5</sup>)

**5 + (3 x 7) = 26 electrones de valencia**

Paso 3 - Dibujemos enlaces simples entre los átomos de N y F y completemos los octetos.

Paso 4 - Revise que el número de electrones en la estructura, sea igual al número de electrones de valencia

**3 enlaces simples (3x2) + 10 pares de iones (10x2) = 26 electrones de valencia**

### Escriba la estructura de Lewis para el (CO<sub>3</sub>)<sup>2-</sup>.

Paso 1 - El C es menos electronegativo, pongámoslo al centro.

Paso 2 - Contar los e- de valencia C - 4 (2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>) y O - 6 (2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup>) +2 carga - 2e<sup>-</sup>

**4 + (3 x 6) + 2 = 24 electrones de valencia**

Paso 3 - Dibujemos enlaces simples entre los átomos de C y O y completemos los octetos.

Paso 4 - Revisar que el # de e- sea el mismo que el de valencia

**3 enlaces simples (3x2) + 10 pares de iones (10x2) = 26 electrones de valencia**

*Nota: - Demasiados electrones, formemos enlaces dobles:*

2 enlaces sencillos (2x2) = 4  
 1 doble enlace = 4  
 8 pares de iones (8x2) = 16  
**Total = 24**

### Posibles estructuras para el (CH<sub>2</sub>O)

$\text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H}$

$\begin{matrix} \text{H} \\ | \\ \text{C}-\text{O} \\ | \\ \text{H} \end{matrix}$

La **carga formal** de un átomo es la diferencia entre el número de electrones de valencia de un átomo aislado y el número de electrones asignados a ese átomo, en la estructura de Lewis.

**Carga formal en la estructura de Lewis** =  $\frac{\text{Número de electrones de valencia}}{\text{Número de electrones sin enlaces ó libres}} - \frac{1}{2} (\text{Número total de electrones con enlace})$

La suma de las cargas formales de los átomos de una molécula, es igual a la carga de la molécula



$C - 4e^-$     2 enlaces simples (2x2) = 4  
 $O - 6e^-$     1 enlace doble = 4  
 $2H - 2x1e^-$     2 par de e<sup>-</sup> libres (2x2) = 4  
12 e<sup>-</sup>    **Total = 12**

**Carga de un átomo en la estructura de Lewis** =  $\text{Número de electrones de valencia libres} - \text{Número total de electrones sin enlace ó libres} - \frac{1}{2} (\text{Número total de electrones con enlace})$

**Carga del C** =  $4 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = -1$   
**Carga del O** =  $6 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = +1$

Estructura estable ?

25

$C - 4e^-$     2 enlaces simples (2x2) = 4  
 $O - 6e^-$     1 enlace doble = 4  
 $2H - 2x1e^-$     2 pares de e<sup>-</sup> libres (2x2) = 4  
12 e<sup>-</sup>    **Total = 12**

**Carga de un átomo en la estructura de Lewis** =  $\text{Número de electrones de valencia libres} - \text{Número total de electrones sin enlace} - \frac{1}{2} (\text{Número total de electrones con enlace})$

**Carga del C** =  $4 - 0 - \frac{1}{2} \times 8 = 0$   
**Carga del O** =  $6 - 4 - \frac{1}{2} \times 4 = 0$

26

### Carga formal y la estructura de Lewis

- En las moléculas neutras, la suma de las cargas formales deber ser cero.
- En los cationes, la suma de las cargas formales debe ser igual a la carga positiva.
- En los aniones, la suma de las cargas formales debe ser igual a la carga negativa.

**Moléculas con más de una estructura de Lewis?**

- Se selecciona en caso de moléculas neutras, la estructura de Lewis que no tenga cargas formales.
- Estructuras de Lewis con cargas formales grandes (+2, +3, 0-2, -3 o mas) son menos probables, que las que tienen cargas formales pequeñas.
- Moléculas con varias estructuras de Lewis, con la misma distribución de cargas formales la más razonable, es aquella en la que las cargas formales negativas, estén sobre los átomos más electronegativos.

¿Cuál es la estructura correcta para el CH<sub>2</sub>O?

27

Una estructura de resonancia ocurre cuando dos o más estructuras de Lewis para una misma molécula no pueden ser representadas gráficamente por una sola estructura de Lewis.

Todos los enlaces O-O son iguales

¿Cuáles son las estructuras de resonancia para el ion (CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>)?

Todos los enlaces C-O son iguales

28

### Estructuras de resonancia

Benceno C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>

Ión Hiposulfito

29

### Excepciones de la regla el octeto

**Octeto incompleto (< 8e<sup>-</sup>)**

**BeH<sub>2</sub>**

$Be - 2e^-$   
 $2H - 2x1e^-$   
4e<sup>-</sup>

**BF<sub>3</sub>**

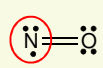
$B - 3e^-$   
 $3F - 3x7e^-$   
24e<sup>-</sup>

3 enlaces simples (3x2) = 6  
9 pares de iones (9x2) = 18  
**Total = 24**

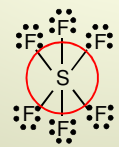
30

### Excepciones de la regla del octeto

**Estructuras con electrones impares**

**NO**  $\frac{N - 5e^-}{O - 6e^-}{11e^-}$  

**El octeto expandido (un átomo central con un número cuántico n > 2, >8e<sup>-</sup>)**

**SF<sub>6</sub>**  $\frac{S - 6e^-}{6F - 42e^-}{48e^-}$  

6 enlaces simples (6x2) = 12  
18 Pares de iones (18x2) = 36  
Total = 48


Al cambio necesario en la entalpía para romper un enlace químico de un mol de un compuesto gaseoso se le llama **energía de enlace**.


**Energía de enlace**

$H_{2(g)} \rightarrow H_{(g)} + H_{(g)} \quad \Delta H^0 = 436.4 \text{ kJ}$

$Cl_{2(g)} \rightarrow Cl_{(g)} + Cl_{(g)} \quad \Delta H^0 = 242.7 \text{ kJ}$

$HCl_{(g)} \rightarrow H_{(g)} + Cl_{(g)} \quad \Delta H^0 = 431.9 \text{ kJ}$

$O_{2(g)} \rightarrow O_{(g)} + O_{(g)} \quad \Delta H^0 = 498.7 \text{ kJ}$  

$N_{2(g)} \rightarrow N_{(g)} + N_{(g)} \quad \Delta H^0 = 941.4 \text{ kJ}$  

> Energía de enlace > Estabilidad del compuesto  
Enlace Simple < Enlace Doble < Enlace Triple

### Energía de enlace para moléculas poliatómicas

$H_2O_{(g)} \rightarrow H_{(g)} + OH_{(g)} \quad \Delta H^0 = 502 \text{ kJ (1er)}$

$OH_{(g)} \rightarrow H_{(g)} + O_{(g)} \quad \Delta H^0 = 427 \text{ kJ (2do)}$

Energía promedio del OH =  $\frac{502 + 427}{2} = 464 \text{ kJ}$

**Algunas entalpías de enlace y entalpías promedio de enlaces en moléculas poliatómicas**

Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)	Bond	Bond Enthalpy (kJ/mol)
H-H	436.4	C-S	255
H-N	393	C-Se	277
H-O	460	N-N	193
H-S	368	N=N	418
H-P	326	N≡N	941.4
H-F	568.2	N=O	176
H-Cl	431.9	N=O	607
H-Br	366.1	O-O	142
H-I	298.3	O=O	498.7
C-H	414	O=P	302
C-C	347	O=S	469
C=C	620	P-P	197
C≡C	812	P=P	489
C-N	276	S-S	268
C=N	615	S=S	352
C≡N	891	P-F	156.9
C=O	351	Cl-Cl	242.3
C=O*	745	Br-Br	192.5
C-P	263	I-I	151.0

**Ambiente Químico afecta (O-H)**  
 $CH_3OH$   $H_2O$

### Cambio en la entalpía y energía de enlace

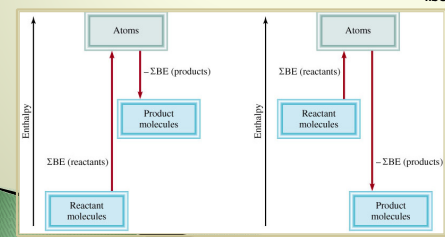
En la mayoría de las reacciones químicas se rompen y se forman enlaces.  
Romper enlace (requiere E) Formar enlace (libera E)

$\Delta H^0_{reacción} = \text{Energía de reactivos} - \text{Energía de productos}$

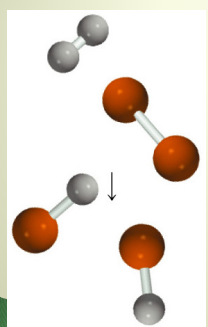
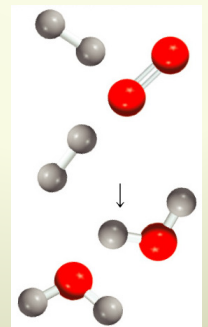
$= \Sigma \Delta E(\text{reactantes}) - \Sigma \Delta E(\text{productos})$   
 $= \text{energía total consumida} - \text{energía total liberada}$

$\Delta H^0 (+)$  Endotérmica consume energía

$\Delta H^0 (-)$  Exotérmica libera energía



$H_2(g) + Cl_2(g) \rightarrow 2HCl(g)$        $2H_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2H_2O(g)$

Utilice la energía de enlace para calcular el cambio de entalpía de:


$H_2(g) + F_2(g) \rightarrow 2HF(g)$

$\Delta H^0 = \Sigma \Delta E(\text{reactantes}) - \Sigma \Delta E(\text{productos})$

Tipos de enlaces rotos	Número de enlaces rotos	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio en la energía (kJ)
H—H	1	436.4	436.4
F—F	1	156.9	156.9

Tipos de enlaces formados	Número de enlaces formados	Energía de enlace (kJ/mol)	Cambio en la energía (kJ)
H—F	2	568.2	1136.4

$\Delta H^0 = 436.4 + 156.9 - 2 \times 568.2 = -543.1 \text{ kJ}$



Utilice la energía de enlace para calcular el cambio de entalpía de:

$$\text{H}_2(g) + \text{F}_2(g) \longrightarrow 2\text{HF}(g)$$

$$\Delta H^\circ = \Sigma \Delta E(\text{reactantes}) - \Sigma \Delta E(\text{productos})$$

Tipos de enlaces rotos	Número de enlaces rotos	Energía de enlace (kJ/mol)	$\Delta$ energía (kJ/mol)
H—H	1	436.4	436.4
F—F	1	156.9	156.9

Tipos de enlaces formados	Número de enlaces formados	Energía de enlace (kJ/mol)	$\Delta$ energía (kJ/mol)
H—F	2	568.2	1136.4

$$\Delta H^\circ = 436.4 + 156.9 - 2 \times 568.2 = -543.1 \text{ kJ}$$

37

**TABLE 11.4** Types of Crystals and General Properties

Type of Crystal	Force(s) Holding the Units Together	General Properties	Examples
Ionic	Electrostatic attraction	Hard, brittle, high melting point, poor conductor of heat and electricity	NaCl, LiF, MgO, CaCO <sub>3</sub>
Covalent	Covalent bond	Hard, high melting point, poor conductor of heat and electricity	C (diamond), SiO <sub>2</sub> (quartz)
Molecular*	Dispersion forces, dipole-dipole forces, hydrogen bonds	Soft, low melting point, poor conductor of heat and electricity	Ar, CO <sub>2</sub> , I <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> (sucrose)
Metallic	Metallic bond	Soft to hard, low to high melting point, good conductor of heat and electricity	All metallic elements; for example, Na, Mg, Fe, Cu

Included in this category are crystals made up of individual atoms. Diamond is a good thermal conductor.

38

