



TEORÍA DEL ENLACE COVALENTE

TEORÍA DEL ENLACE COVALENTE

I. Teoría de repulsión de los pares de electrones de valencia (T.R.P.E.V)

Esta teoría trata de explicar espacialmente la forma de las moléculas, y dice: «las repulsiones entre los pares de electrones en el nivel de valencia determinan la forma de las moléculas».

Los pares de electrones se repelen unos a otros, tanto si están en enlaces químicos (pares enlazantes) como si no están enlazados (pares libres).

Estos grupos de electrones se disponen alrededor de un átomo con orientaciones que minimicen la repulsión. De estas orientaciones proceden las formas geométricas de la moléculas.

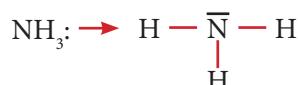
I.1. Regiones de alta densidad electrónica (R.A.D.E.)

Llamada también simplemente Región, es una zona que concentra a los electrones y puede ser:

- ❖ Un enlace covalente simple: $X - Y$
- ❖ Un enlace covalente doble: $X = Y$
- ❖ Un enlace covalente triple: $X \equiv Y$
- ❖ Un par libre de electrones o un único electrón desapareado sobre un átomo con octeto incompleto: \bar{X}

Estas regiones constituyen nubes negativas debido a los electrones y por lo tanto las repulsiones entre los grupos de electrones hacen que estos se alejen entre sí lo más posible, orientándose hacia los vértices de una figura geométrica que tenga como centro al átomo central de la molécula.

Ejemplo:



4 regiones (3 pares enlazantes y 1 par libre)

Ejemplo:



4 regiones (2 pares enlazantes, 2 pares libres)

Ejemplo



3 regiones (1 dativo, 1 enlace doble, 1 par libre)

I.2. Geometría electrónica (G.E.)

Esta geometría considera a las regiones enlazantes y no enlazantes, y dependiendo del número de ellas tenemos lo siguiente:

N.º de regiones	G.E.	Ángulo
2	lineal	180°
3	triangular planar	120°
4	tetaédrica	109,5°
5	bipiramidal	90°, 120°, 180°
6	octaédrica	90°, 180°

I.3. Geometría molecular (G.M.)

También llamada geometría de una molécula, es la representación que se forma cuando solo se involucra a las regiones enlazantes y pueden ser:

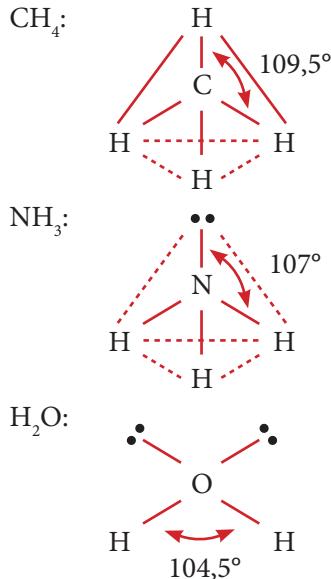
Nº de regiones	Pares enlazantes	Pares libres	GE	∠GE	GM	∠GM	
2 sp	2	0	Lineal	180°	Lineal	180°	
3 sp ²	3	0	Triangular planar	120°	Triangular plana	120°	
	2	1			Angular	<120°	
4 sp ³	4	0	Tetraédrico	109,5°	Tetraédrico	109,5°	
	3	1			Piramidal trigonal	<109,5°	
	2	2			Angular	<109,5°	
5 sp ³ d	5	0	Bipiramidal: 90°; 120°; 180°				
6 sp ³ d ²	6	0	Octaédrica: 90°; 180°				

I.4. Intensidad de repulsión

Es el resultado de que los pares libres de electrones adyacentes y por ello tienden a comprimir los ángulos de enlace.

Par libre – par libre > par libre – par enlazante > par enlazante – par enlazante

Ejemplo:



Ojo: Si la molécula no presenta pares libres, entonces GE = GM.

II. Teoría del enlace de valencia (TEV)

Según la teoría del enlace de valencia, el enlace covalente es el resultado de un acercamiento y superposición o traslape máximo de orbitales entre un orbital de un átomo con otro orbital de átomo. Los orbitales que participan pueden ser puros ó híbridos.

Antes de producirse el enlace covalente, los orbitales puros de cada átomo se «reacomodan»

de modo que les permita adquirir la mejor «estabilidad» cuando se enlazan. Un «reacomodo» de los orbitales significa una mezcla o fusión de orbitales puros que da como resultado orbitales híbridos, entonces el enlace entre los átomos ocurre con orbitales híbridos, así como con orbitales puros.

Enlace covalente = traslape de orbitales puros: s – p – d – f
híbridos: sp – sp² – sp³ – sp³d – sp³d²

Hibridación: Es el reordenamiento de los electrones de valencia en sus orbitales, para generar orbitales desapareados más estables que pueden superponerse con otros. Ejemplo:

Tipo de orbital híbrido	Orbitales puros que participan	Cantidad de orbitales híbridos formados
Sp (2) (Nº Regiones)	1 orb «s» + 1 orb «p»	2 orb híbridos «sp»
Sp ² (3)	1 orb «s» + 2 orb «p»	3 orb híbridos «sp ² »
Sp ³ (4)	1 orb «s» + 3 orb «p»	4 orb híbridos «sp ³ »
Sp ³ d (5)	1 orb «s» + 3 orb «p» + 1 orb «d»	5 orb híbridos «sp ³ d»
Sp ³ d ² (6)	1 orb «s» + 3 orb «p» + 2 orb «d»	6 orb híbridos «sp ³ d ² »

► **Enlace sigma (σ):** Es la superposición de orbitales puros o híbridos de manera frontal, y es más fuerte que el pi (π).

► **Enlace pi (π):** Es la superposición de orbitales tipo «p», de manera lateral.

Ojo: sigma (σ) > pi (π) (más fuerte)
pi (π) > sigma (σ) (más reactivo)

► **Polaridad de una molécula:**

Es una evaluación de la distribución de la nube electrónica.

- **Dipolo de enlace:** se representa como un vector cuya flecha se desplaza hacia el elemento más electronegativo.



- **Momento bipolar ($\vec{\mu}$):** Es una resultante vectorial que se obtiene al sumar todos los dipolos de enlace de una molécula.

Molécula polar	<ul style="list-style-type: none"> • $\vec{\mu} \neq 0$ • distribución asimétrica • par libre (átomo central) electrones
	<ul style="list-style-type: none"> • $\vec{\mu} \neq 0$ • distribución simétrica • no hay par libre electrones
Molécula apolar	<ul style="list-style-type: none"> • $\vec{\mu} = 0$ • distribución simétrica • no hay par libre electrones

FUERZAS INTERMOLECULARES:

Son fuerzas que mantienen unidas a las moléculas, y son fuerzas electrostática debido a la polaridad que presentan las moléculas; estas fuerzas pueden explicar la intensidad de las propiedades físicas, como por ejemplo: punto de ebullición, punto de fusión, tensión superficial, viscosidad, etc.

Estas fuerzas son débiles, comparadas con el enlace iónico y covalente, que son fuerzas interatómicas.

- **Dipolaridad:** Es la distribución no equitativa de la nube electrónica en una molécula y puede ser:
- **Dipolaridad permanente:** Se da solo en moléculas polares que presentan distribución no equitativa en todo momento.

Ejemplo:



Esta dipolaridad permanente es propia de las moléculas polares.

- **Dipolaridad instantánea:** Se presenta en moléculas polares y no polares. Se manifiesta en moléculas no polares, debido al desequilibrio de electrones que generan en forma instantánea una polaridad. Esta fuerza es responsable de que las moléculas no polares se atraigan entre sí.

Ejemplo:



Se denomina fuerza de dispersión de London en moléculas polares debido que desequilibrios de electrones constantes generan una dipolaridad instantánea que se le suma a la permanente.

- **Clasificación:** fuerzas intermoleculares

Sustancia	Dipolaridad	Fuerza intermolecular
Apolar	Instantánea	Dispersión London
Polar	Permanente + instantánea	Dipolo - dipolo + dispersión de London
Polar	Permanente + instantánea	Puente de hidrógeno

- **Observaciones:**

- 1) Un tipo de fuerza dipolo-dipolo se ha seleccionado aparte por ser más fuerte, denominándose: puente de hidrógeno ($\text{H} \rightarrow \text{F}, \text{O}, \text{N}$)
- 2) Si una molécula polar se ve rodeada de iones, se forma una fuerza intermolecular denominada ión-dipolo.
- 3) Intensidad de las fuerzas químicas:



Fuerzas interatómicas



Fuerzas intermoleculares

- 4) A mayor fuerza química, mayor punto de fusión y ebullición, y la longitud de atracción es menor, por lo que tendrá mayor densidad.
- 5) En hidrocarburos isómeros se cumplirá que a mayor ramificación (menos estable), tendrá menor punto de ebullición.
- 6) En moléculas apolares se cumplirá que a mayor masa molecular, tendrá mayores propiedades físicas.

Ejemplo:



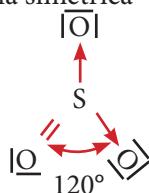
- 7) Lo semejante disuelve a lo semejante. Una molécula polar se disuelve en una sustancia polar como el agua.

Trabajando en clase

1. Para la siguiente molécula del SO_3 , indica el tipo de molécula, su geometría molecular y el ángulo de enlace:
- polar – triangular planar – 120°
 - Apolar – triangular planar – 120°
 - polar – angular – 120°
 - Apolar – angular – $109,5^\circ$
 - polar – angular – $<120^\circ$

Resolución: La molécula del SO_3 se distribuye de la siguiente forma:

Presenta el átomo central con 3 regiones alrededor y tiene forma simétrica



⇒ Molécula es apolar, su geometría molecular es triangular planar y el ángulo es de 120°

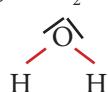
Rpta. b

2. Para la siguiente molécula del CO_2 , indica el tipo de molécula, su geometría molecular y el ángulo de enlace:



- Polar – lineal – 180°
- Apolar – lineal – 180°
- Polar – lineal – 120°
- Apolar – angular – 180°
- Polar – plana trigonal – 120°

3. La molécula de agua (H_2O) se caracteriza por.



(UNALM 1997 – II)

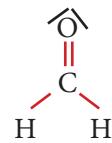
- ser lineal
- ser apolar
- formar un ángulo de $104,5^\circ$
- ser un ión
- tener geometría plana trigonal

4. De acuerdo con la teoría de la repulsión (TRPEV), la mayor repulsión se da entre:

- par enlazante y par enlazante
- par enlazante y par libre
- par libre y par libre
- par de enlace sigma y par de enlace sigma
- Par de enlace sigma y par de enlace pi

5. La geometría electrónica del carbono en el formaldehído (HCHO) es:

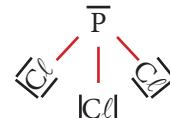
- Lineal
- Plana trigonal
- Angular
- Tetraédrica
- Octaédrica



Resolución: El átomo central presenta tres regiones alrededor; por lo tanto, la geometría electrónica es plana trigonal.

Rpta. b

6. La geometría molecular del tricloruro de fósforo (PCl_3) es:

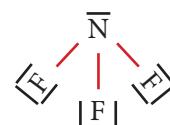


- Lineal
- Plana trigonal
- Tetraédrica
- Angular
- Piramidal trigonal

7. La geometría electrónica, molecular e hibridación del BCl_3 es:

- Lineal – lineal - sp
- Angular – lineal – sp^2
- Plana triangular – sp^2
- Tetraédrica – angular – sp^3
- Angular – plana trigonal – sp^3d

8. En la molécula de NF_3 el ángulo de enlace es:

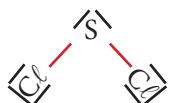


- 90°
- Menor que 90°
- 120°
- Menor que 120°
- Menor que $109,5^\circ$

Resolución: el átomo central presenta 4 regiones alrededor; con 3 pares enlazantes y un par libre; entonces, el ángulo es menor que $109,5^\circ$

Rpta. e

9. En la molécula de SCl_2 , el ángulo de enlace es:



- a) 180°
- b) 90°
- c) 120°
- d) $109,5^\circ$
- e) Menor que $109,5^\circ$

10. Para la molécula del CH_3Cl , la proposición correcta es:

- a) Su momento bipolar es igual a cero
- b) Es una molécula apolar
- c) El cloro tiene baja densidad electrónica
- d) El hidrógeno tiene alta densidad electrónica
- e) El vector dipolo de enlace va desde el carbono hacia el cloro

11. ¿Cuál de los siguientes compuestos es soluble en agua?

(UNALM 2008 – II)

- a) CO_2
- b) N_2
- c) CH_3OH
- d) CH_4
- e) $CH_3 - CH_3$

12. Indica cuál o cuáles de las siguientes moléculas son polares:

- I. O_2
- II. HBr
- III. CCl_4 :
- a) Solo I
- b) I, II y III
- c) Solo III
- d) I y III
- e) Solo II

Resolución:

I. O_2 : Molécula apolar (simétrico)

II. HBr : Molécula polar (asimétrico)

III. CCl_4 : Molécula apolar (simétrico)



Rpta.E

13. Indica cuál o cuáles de las siguientes moléculas son apolares:

I. BF_3 II. H_2S III. $CHCl_3$

- a) Solo I
- b) Solo II
- c) Solo III
- d) I y II
- e) II y III

14. Marca lo correcto respecto a las fuerzas intermoleculares.

- a) La fuerza dipolo-dipolo es igual a la fuerza de London.
- b) El enlace puente de hidrógeno es el más débil.
- c) Las moléculas de agua se unen mediante puente de hidrógeno.
- d) Todas las moléculas presentan fuerza dipolo-dipolo
- e) Todas las fuerzas intermoleculares son de igual intensidad.

15. ¿Cuál de los siguientes compuestos es soluble en agua?

- a) H_2
- b) O_2
- c) NaCl
- d) BH_3
- e) SO_3