

BLOQUE I-B ENLACE QUÍMICO

– Enlace Químico

- El enlace químico es la fuerza de atracción que mantiene unidos a dos o más átomos para formar moléculas, iones o redes cristalinas, permitiendo la existencia de sustancias químicas estables. Este enlace se origina por la interacción de los electrones de valencia (los más externos) de los átomos, que tienden a reorganizarse para alcanzar un estado de menor energía y mayor estabilidad.

– Tipos:

ENLACE COVALENTE

El **enlace covalente** es un tipo de enlace químico que se forma cuando **dos átomos comparten uno o más pares de electrones** con el objetivo de alcanzar una configuración electrónica más estable, normalmente cumpliendo la **regla del octeto** (8 electrones en la capa de valencia), o el **dueto** en el caso del hidrógeno.

- Este tipo de enlace es característico de los **no metales** y de algunos **metaloides**, y es fundamental en la química orgánica y en las moléculas que forman los seres vivos.

1. Fundamento del enlace covalente

Cuando dos átomos con electronegatividades similares se aproximan:

- Ninguno de los dos tiene tendencia clara a perder o ganar electrones.
- En lugar de transferir electrones (como en el enlace iónico), los comparten.
- El par de electrones compartido se localiza entre ambos núcleos, manteniéndolos unidos por atracción electrostática.
- **Ejemplo básico:**
- Dos átomos de hidrógeno (H) comparten un electrón cada uno para formar la molécula H_2 .

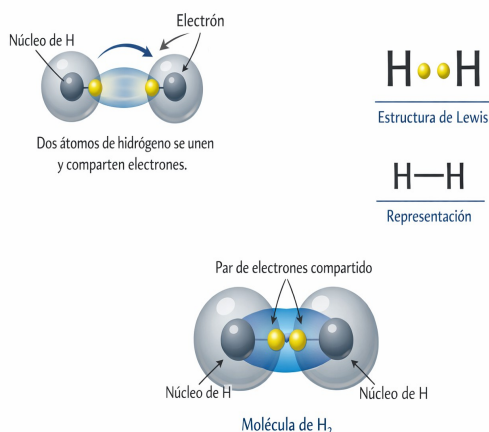
2. Representación del enlace covalente

- Los enlaces covalentes suelen representarse mediante:
- Líneas: cada línea representa un par de electrones compartidos.

3. Tipos de enlace covalente

3.1. Enlace covalente simple

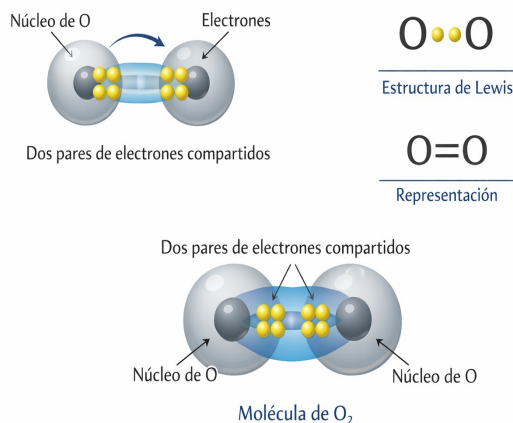
- Se comparte **un par de electrones**.



- **Ejemplos:**
- H_2 Hidrógeno
- Cl_2 Cloro
- CH_4 Metano

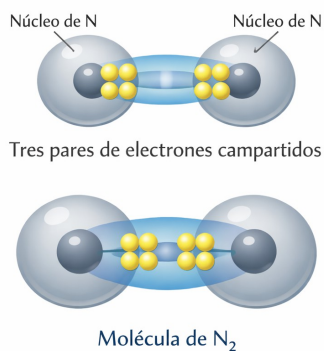
3.2. Enlace covalente doble

Se comparten **dos pares de electrones**.

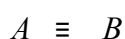


3.3. Enlace covalente triple

Un **enlace covalente triple** es un tipo de enlace químico que se forma cuando **dos átomos comparten tres pares de electrones**, es decir, **seis electrones en total**. Este tipo de enlace aparece cuando los átomos necesitan compartir más electrones para **completar su capa de valencia** y alcanzar una configuración electrónica estable (regla del octeto).



- Se representa mediante **tres líneas** entre los átomos:

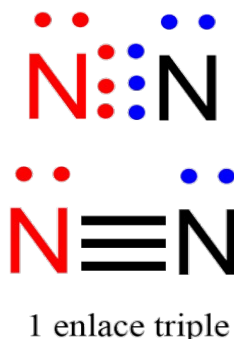


- **Composición del enlace covalente triple**
Un enlace covalente triple está formado por:

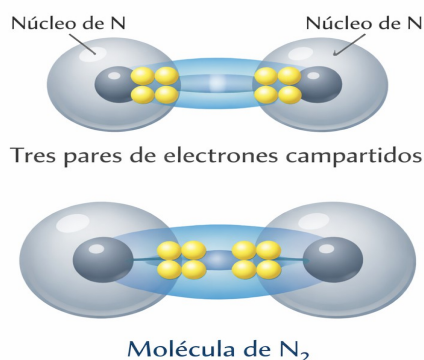
- **1 enlace sigma (σ)**
Se forma por el solapamiento **frontal** de orbitales.
Es el enlace más fuerte y el primero que se forma entre dos átomos.
- **2 enlaces pi (π)**
Se forman por el solapamiento **lateral** de orbitales p.
Refuerzan el enlace sigma, aumentando la estabilidad.

$$\text{Enlace Triple} = 1\sigma + 2\pi$$

- Cada átomo de **nitrógeno (N)** tiene **5 electrones de valencia**.
- Para completar el octeto, cada átomo comparte **3 electrones** con el otro:
Electrones compartidos: 6
Pares enlazantes: 3
Representación de Lewis: $:N \equiv N:$



- Este enlace es **extremadamente fuerte**, lo que explica por qué el nitrógeno molecular es tan estable y poco reactivo en condiciones normales.



- Clasificación según la polaridad

1. Enlace covalente no polar

Un **enlace covalente no polar** es un tipo de enlace químico que se forma cuando **dos átomos comparten uno o más pares de electrones de manera equitativa**, es decir, **ninguno de los átomos atrae con mayor intensidad a los electrones compartidos**.

- Como consecuencia:
No se generan cargas parciales (δ^+ o δ^-)

No existe un dipolo eléctrico en el enlace.

La **densidad electrónica** es simétrica entre los dos átomos.

– **Condición fundamental: diferencia de electronegatividad**

La clave para que un enlace sea no polar es la diferencia de electronegatividad (ΔEN) entre los átomos:

- $\Delta EN \approx 0 \rightarrow$ enlace covalente no polar, ocurre principalmente cuando:
- Los átomos son idénticos (H–H, O–O, N–N)
- O tienen electronegatividades prácticamente iguales

– **Ejemplo:**

Electronegatividad del H = 2,20

En H–H $\rightarrow \Delta EN = 0 \rightarrow$ enlace no polar

- Distribución de los electrones

El par de electrones se encuentra exactamente entre ambos núcleos

La nube electrónica es simétrica

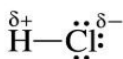
No hay desplazamiento del par electrónico hacia ningún átomo



(a)



(b)



(c)



(d)

Representación mediante estructuras de Lewis

En las estructuras de Lewis, el enlace covalente no polar se muestra como:

- Una línea (—) para un enlace simple
- Dos líneas (=) para un enlace doble
- Tres líneas ($\equiv$) para un enlace triple

– **Ejemplos:**

H—H

O=O

N $\equiv$ N

- **En todos los casos, los electrones compartidos pertenecen por igual a ambos átomos.**

Propiedades de las sustancias con enlaces covalentes no polares

- Las sustancias formadas por este tipo de enlace suelen presentar:
 - Bajo punto de fusión
 - Bajo punto de ebullición
 - Escasa solubilidad en agua
 - Solubilidad en disolventes no polares (benceno, hexano)
 - No conducen la electricidad

– **Resumen final**

- El enlace covalente no polar se forma cuando los átomos comparten electrones por igual
- Es característico de moléculas diatómicas homonucleares

- Da lugar a sustancias con propiedades físicas suaves

2. **Enlace Covalente Polar**

El enlace covalente polar es un tipo de enlace químico que se forma cuando dos átomos comparten uno o más pares de electrones, pero no lo hacen de manera equitativa. Esto ocurre porque uno de los átomos atrae con mayor intensidad a los electrones compartidos, generando una distribución desigual de la carga eléctrica.

- **Como consecuencia:**

- Un átomo queda con carga parcial negativa (δ^-)
- El otro queda con carga parcial positiva (δ^+)
- Estas cargas no son cargas completas (como en los iones), sino parciales, ya que los electrones siguen siendo compartidos.

2.1. **Papel de la electronegatividad**

La electronegatividad es la capacidad que tiene un átomo para atraer hacia sí los electrones de un enlace.

- **Si ambos átomos tienen electronegatividades muy parecidas → enlace covalente no polar**
- **Si existe una diferencia moderada de electronegatividad → enlace covalente polar**
- **Si la diferencia es muy grande → enlace iónico**

- **Ejemplos típicos de enlaces covalentes polares**

- **a) Enlace O–H (agua)**
- El oxígeno es mucho más electronegativo que el hidrógeno
- El oxígeno queda con δ^-
- Los hidrógenos quedan con δ^+
- La molécula es **polar** debido a su geometría angular
- **b) Enlace N–H (amoníaco)**
- El nitrógeno atrae más los electrones que el hidrógeno
- Se forman polos eléctricos
- La molécula resulta polar

2.2 **Distribución de cargas parciales**

En un enlace covalente polar:

- La **nube electrónica** se desplaza hacia el átomo más electronegativo
- Se generan **polos eléctricos**:
- Polo negativo (δ^-)
- Polo positivo (δ^+)
- Este fenómeno da lugar a una **separación interna de cargas**, incluso aunque la molécula sea globalmente neutra.

2.3 **Momento dipolar**

El **momento dipolar (μ)** es una magnitud física que mide:

- La **intensidad de la separación de cargas**
- El grado de polaridad del enlace o de la molécula
- **Depende de:**
- La diferencia de electronegatividad
- La distancia entre los núcleos de los átomos

2.4 **Enlace polar y polaridad molecular (no es lo mismo)**

Es importante distinguir entre:

- Enlace covalente polar

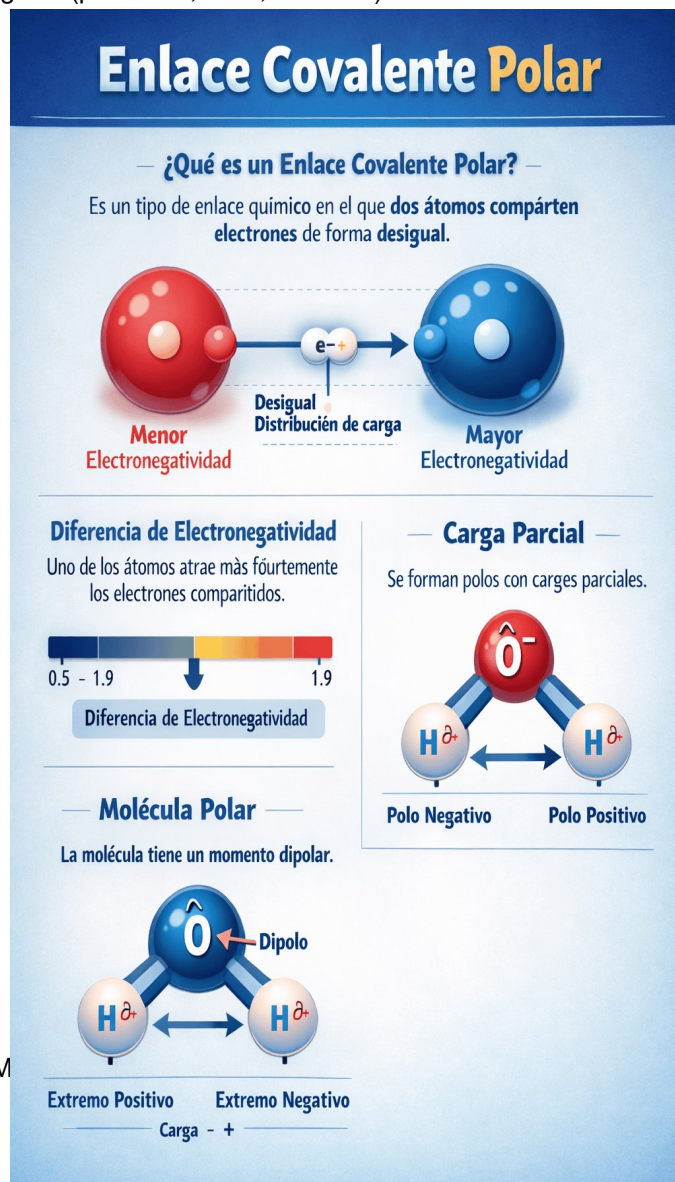
Un enlace individual puede ser polar si hay diferencia de electronegatividad.

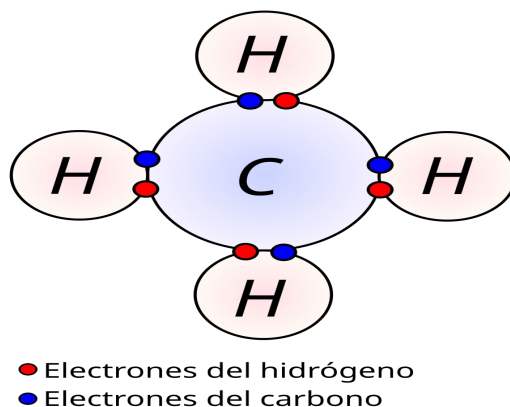
- Molécula polar
- Una molécula será polar solo si la suma de los dipolos no se anula.
- Ejemplo:
- Una molécula puede tener enlaces polares pero ser no polar si su geometría es simétrica.
- Será polar si la geometría provoca una distribución asimétrica de cargas.

2.5 Importancia del enlace covalente polar

El enlace covalente polar explica propiedades fundamentales como:

- Solubilidad en agua
- Puntos de ebullición elevados
- Formación de puentes de hidrógeno
- Comportamiento eléctrico de las sustancias
- Reactividad química
- **Es clave para entender:**
- El comportamiento del agua
- La química orgánica
- Los procesos biológicos (proteínas, ADN, enzimas)





3. Enlace Covalente Dativo (coordinado)

El **enlace covalente dativo**, también llamado **enlace covalente coordinado**, es un tipo especial de **enlace covalente** en el que **el par de electrones compartido procede íntegramente de uno solo de los átomos** enlazados.

- El átomo que aporta el par electrónico se denomina donador.
- El átomo que acepta el par electrónico se denomina aceptor.
- Aunque el origen de los electrones sea distinto, una vez formado, el enlace dativo es indistinguible energéticamente de un enlace covalente normal.

3.1 Fundamento electrónico y cuántico

Para que exista un enlace covalente dativo deben cumplirse dos condiciones fundamentales:

- El átomo donador debe poseer al menos un par de electrones no compartidos (par libre).
- **El átomo aceptor debe presentar:**
Un orbital vacío, o
Una deficiencia electrónica (carga positiva o octeto incompleto).
- **Desde el punto de vista del modelo cuántico, el enlace se forma cuando:**
Un orbital ocupado (con dos electrones) del átomo donador
Se solapa con un orbital vacío del átomo aceptor
- Este solapamiento genera una región de alta densidad electrónica entre ambos núcleos, responsable de la fuerza del enlace.

3.2 Representación química

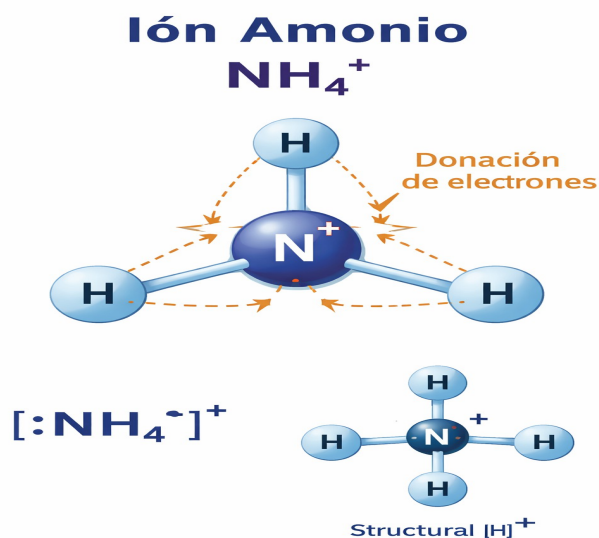
El enlace covalente dativo se representa mediante una flecha: $A \rightarrow B$ donde

- A: átomo donador del par electrónico
- B: átomo aceptor del par electrónico
- Esta flecha no indica polaridad, sino el origen del par de electrones.

Ejemplos fundamentales:

- **Ion amonio (NH_4^+)**
El nitrógeno en el amoníaco (NH_3) posee un par libre
El protón (H^+) carece de electrones

- El nitrógeno dona el par electrónico al protón
- **Resultado:**
Se forma NH_4^+
Todos los enlaces N-H son equivalentes una vez formado el ion



3.3 Relación con la teoría ácido-base de Lewis

- El enlace covalente dativo es la base estructural de la teoría de Lewis:
- Base de Lewis $\rightarrow$ donadora de pares electrónicos
- Ácido de Lewis $\rightarrow$ aceptora de pares electrónicos
- Toda reacción ácido-base de Lewis implica la formación de un enlace covalente dativo.

3.4 Propiedades del enlace covalente dativo

- Es un **enlace fuerte** (comparable al covalente normal)
- Puede ser **polar** o **no polar**, según la diferencia de electronegatividad
- No se distingue experimentalmente de un enlace covalente común
- Es fundamental en:
Complejos metálicos
Química ácido-base
Bioquímica (enzimas, metaloproteínas)

3.5 Diferencias entre enlace covalente dativo y enlace covalente normal

CARACTERÍSTICA	COVALENTE NORMAL	COVALENTE DATIVO
Origen de los electrones	Cada átomo aporta 1 electrón	Un solo átomo aporta los 2
Representación	$\text{A} - \text{B}$	$\text{A} \rightarrow \text{B}$
Necesidad de par libre	No imprescindible	Imprescindible
Necesidad de orbital vacío	No	Sí
Energía del enlace	Alta	Similar
Distinción tras formarse	No	No
Tipo de enlace final	Covalente	Covalente

- **Conclusión final**
- El **enlace covalente dativo** no es un enlace diferente en cuanto a naturaleza, sino **una forma particular de formación del enlace covalente**, caracterizada por el **origen común del par electrónico**. Su comprensión es esencial para entender la **química ácido-base**, la **química de coordinación** y numerosos procesos químicos y biológicos.

TEORÍA DE LA ESTRUCTURA DE LEWIS

1. ¿Qué es la estructura de Lewis?

La estructura de Lewis es un modelo teórico propuesto en 1916 por Gilbert N. Lewis para representar cómo se distribuyen los electrones de valencia en átomos, moléculas e iones, y así explicar la formación de enlaces químicos.

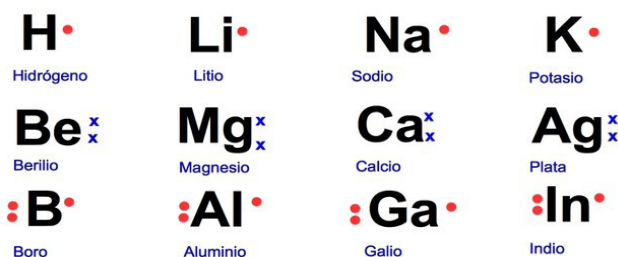
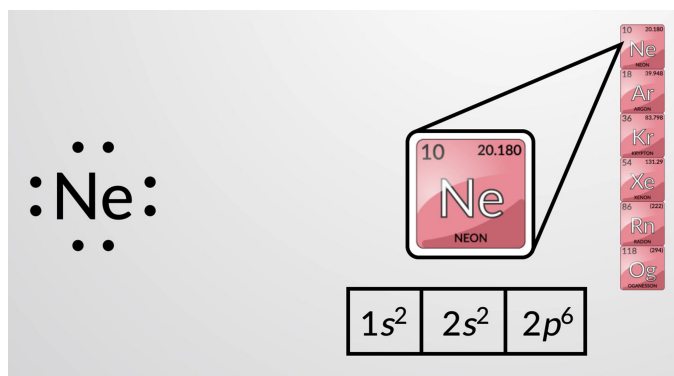
- **Este modelo:**
- Representa electrones de valencia mediante puntos
- Representa enlaces covalentes mediante pares de electrones compartidos
- Permite predecir estabilidad, cargas formales, polaridad y reactividad

2. Electrones de valencia: base de la teoría

Los **electrones de valencia** son los que se encuentran en la **capa electrónica más externa** de un átomo.

GRUPO PERIÓDICO	ELECTRONES DE VALENCIA
Grupo 1	1
Grupo 2	2
Grupo 13	3
Grupo 14	4
Grupo 15	5
Grupo 16	6
Grupo 17	7
Grupo 18	8 (Excepto He: 2)

- Estos electrones son los que **participan en los enlaces químicos**.

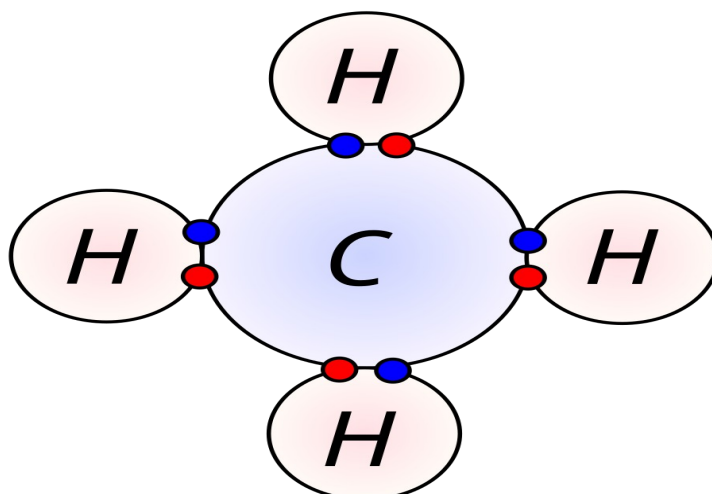


- Un símbolo de Lewis consiste en:
- El símbolo químico del elemento
- Puntos alrededor que representan los electrones de valencia

3. Regla del octeto

La regla del octeto establece que:

- Los átomos tienden a ganar, perder o compartir electrones para alcanzar 8 electrones en su capa de valencia, adoptando la configuración electrónica de un gas noble.
- Excepciones importantes:
- Hidrógeno: se estabiliza con 2 electrones
- Boro: puede tener 6 electrones
- Elementos del 3º periodo en adelante: pueden expandir el octeto



- Electrones del hidrógeno
- Electrones del carbono

4. Enlace covalente en estructuras de Lewis

Par enlazante: par de electrones compartido entre átomos

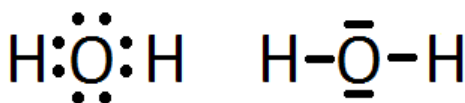
Par libre (no enlazante): par de electrones que no participa en enlaces

4.1 Tipos:

- Enlace simple → 1 par compartido
- Enlace doble → 2 pares compartidos
- Enlace triple → 3 pares compartidos

5. Ejemplos Completos de Estructuras de Lewis

- **Ejemplo 1: Molécula de agua (H₂O)**
- Paso a paso:
- **A) Electrones totales:**
O: 6
2×H: 2
Total = 8 e⁻
- **B) Oxígeno como átomo central**
- **C) Dos enlaces O–H (4 e⁻)**
- **D) Quedan 4 e⁻ → 2 pares libres en O**
- **E) Cumple el octeto , Molécula polar**

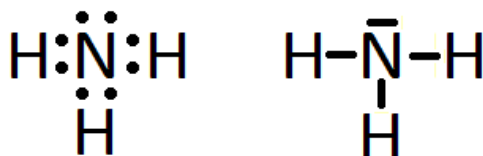


Estructura de Lewis de la molécula de agua

- **Ejemplo 2: Dióxido de carbono (CO₂)**
- **A)** Electrones totales: C = 4, O = 6×2 → 16 e⁻
- **B)** Estructura: O = C = O
- **C)** Dos enlaces dobles
- **D)** Todos los átomos cumplen octeto , Molécula lineal y no polar

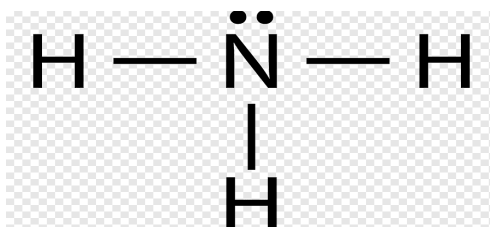


- **Ejemplo 3: Amoníaco (NH₃)**
- **A)** Electrones totales: N = 5, H = 3 → 8 e⁻
- **B)** Tres enlaces N–H
- **C)** Un par libre en N
- **D)** Octeto completo , Molécula polar



Estructura de Lewis de la molécula de amoníaco

- **Ejemplo 4: Ion amonio (NH₄⁺)**
- El nitrógeno **cede un par libre** a H⁺
- Se forma un **enlace covalente dativo**
- Todos los enlaces N–H quedan equivalentes



Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (TRPECV)

- La **TRPECV** explica la **geometría molecular** de una molécula basándose en un principio fundamental:
- Los pares de electrones que rodean a un átomo central se repelen entre sí y se disponen en el espacio de manera que la repulsión total sea mínima.
- Esta teoría permite **predecir la forma tridimensional** de las moléculas y, por tanto, muchas de sus **propiedades físicas y químicas** (polaridad, ángulo de enlace, reactividad, etc.).

1. Fundamento físico de la repulsión electrónica

Los electrones tienen **carga negativa**, por lo que se repelen según la **ley de Coulomb**:

$$F = K \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2}$$

- **Donde:**
- F = fuerza de repulsión
- q_1, q_2 = cargas (electrones)
- r^2 = distancia entre ellos
- k = constante de Coulomb
- Cuanto menor es la distancia entre pares electrónicos, mayor es la repulsión.
- El sistema se estabiliza cuando la **energía potencial electrostática es mínima**.

2. Tipos de pares electrónicos

En torno al átomo central pueden existir:

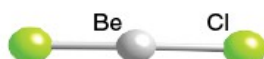
- a) Pares enlazantes (PE): Electrones compartidos entre dos átomos.
- b) Pares no enlazantes o libres (PL): Electrones que pertenecen solo al átomo central.
- **Intensidad de la repulsión**

$$PL - PL > PL - PE > PE - PE$$

Esto explica por qué los **pares libres reducen los ángulos de enlace**.

3. Geometrías electrónicas fundamentales

La TRPECV define primero la **geometría electrónica** (disposición de pares), y luego la **geometría molecular** (solo átomos).



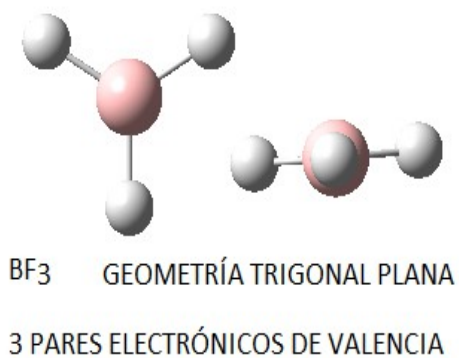
3.1. Dos regiones electrónicas → Lineal

- Ejemplo: BeCl_2 , CO_2

3.2 Tres regiones electrónicas → Trigonal plana

Ángulo ideal:

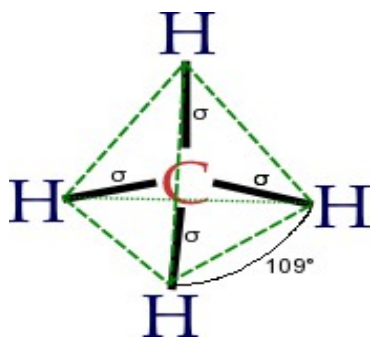
- Ejemplo: BF_3

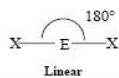


3.3 Cuatro regiones electrónicas → Tetraédrica

Ángulo ideal:

- Ejemplo: CH_4



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

4. Influencia de los pares libres (razonamiento matemático)

- En el metano (CH₄): $\theta = 109,5^\circ$
- En el amoníaco (NH₃):
3 pares enlazantes + 1 par libre $\theta \approx 107^\circ$
- En el agua (H₂O):
2 pares enlazantes + 2 pares libres $\theta \approx 104,5^\circ$

5. Enfoque energético (modelo simplificado)

La energía potencial total del sistema puede expresarse de forma cualitativa como:

$$\sum_{total} = \sum \frac{k \cdot}{r_{i \cdot j}}$$

- **Donde:**
- $r_{i \cdot j}$ = distancia entre pares electrónicos
- El sistema adopta la geometría que minimiza $\sum_{total}$
- Esta minimización conduce a ángulos máximos posibles entre pares.

6. Importancia de la TRPECV

- Predice **formas moleculares**
- Explica **polaridad molecular**
- Justifica **reactividad química**
- Es clave para comprender enlaces, estructuras de Lewis y geometría 3D

7. Conclusión

La **Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia** combina:

- Electrostática (ley de Coulomb)
- Minimización de energía
- Geometría espacial

CONCEPTO DE HIBRIDACIÓN Y SUS TIPOS

1. ¿Qué es la Hibridación?

La **hibridación** es un **modelo teórico de la mecánica cuántica** que explica cómo los **orbitales atómicos** de un mismo átomo (s, p, d) se **combinan matemáticamente** para formar **orbitales híbridos equivalentes**, orientados espacialmente de forma que se minimiza la repulsión electrónica y se explica la **geometría molecular observada**.

- La hibridación **no es un fenómeno físico observable**, sino una **construcción matemática** que surge de la **combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO)**.
- La hibridación se adopta cuando **la energía total del sistema disminuye**, según el principio variacional:

$$\Sigma \text{molécula} < \Sigma \text{orbitales aislados}$$

2. Tipos de Hibridación

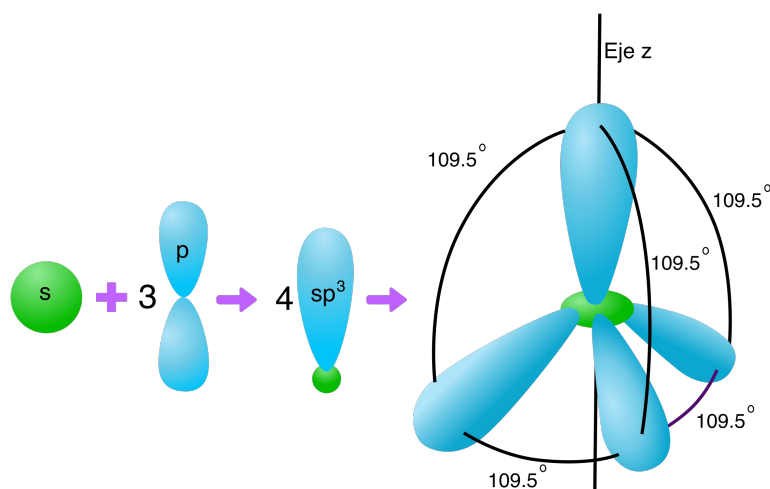
El carbono (C) puede presentar tres tipos principales de hibridación en química orgánica e inorgánica: **sp**, **sp²** y **sp³**.

La hibridación depende del número de enlaces sigma (σ) que forma y de la geometría molecular resultante.

2.1 Hibridación sp³:

Hibridación de 1 átomo de Carbono

- **Combinación 1 orbital s + 1 orbital p**

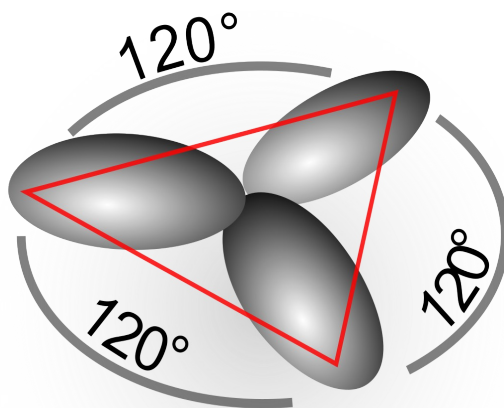


$$sp = \frac{1}{\sqrt{2}}(s \pm p)$$

- **Características**
 - 2 orbitales híbridos equivalentes
 - Geometría: lineal
 - Ángulo: 180°
 - 50 % carácter s
-
- **Ejemplo: Acetileno (C₂H₂):**
 - El carbono tiene configuración excitada: $1s^2 2s^1 2p^3$
 - Forma 2 enlaces σ (C-H)
 - Los otros 2 orbitales p forman enlaces π
 - Explica la triple ligadura C $\equiv$ C

2.2 Hibridación sp^2

- Combinación 1 orbital s + 2 orbitales p



$$sp^2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(s + p_x + p_y)$$

- **Características**

- 3 orbitales híbridos
- Geometría: **trigonal plana**
- Ángulo: **120°**
- 33 % carácter s

- **Ejemplo: Etileno (C₂H₄)**

- El carbono tiene configuración excitada: $1s^2 2s^1 2p^3$
- 3 enlaces σ por carbono
- 1 orbital p sin hibridar $\rightarrow$ enlace π
- Justifica el **doble enlace C=C** y la planaridad de la molécula

2.3 Hibridación sp^3

- **Combinación orbital s + 3 orbitales p**

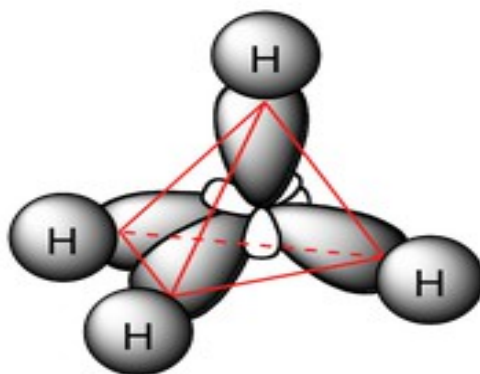
$$sp^3 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z)$$

- **Características**

- 4 orbitales híbridos
- Geometría: **tetraédrica**
- Ángulo ideal: **109,5°**
- 25 % carácter s

- **Ejemplo: Metano (CH₄)**

- 4 enlaces σ equivalentes
- Explica por qué todos los enlaces C-H son iguales

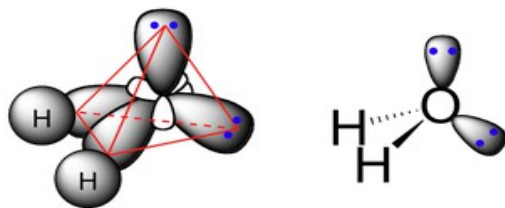


2.4 Hibridación sp^3 con Pares Libres

- **Ejemplos: NH₃ (amoníaco) , H₂O (agua)**
- Los pares libres **repelen más** que los enlaces σ :

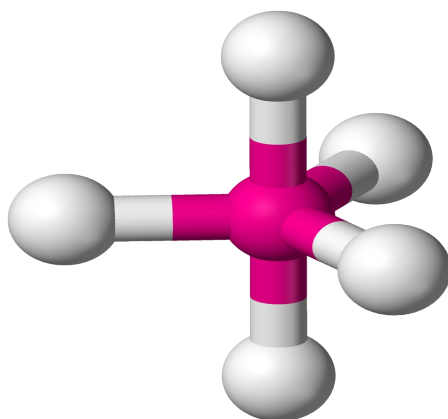
$$\text{Repulsión: LP} - \text{LP} > \text{LP} - \text{BP} > \text{BP} - \text{BP}$$

(LP = par libre, BP = par enlazante)



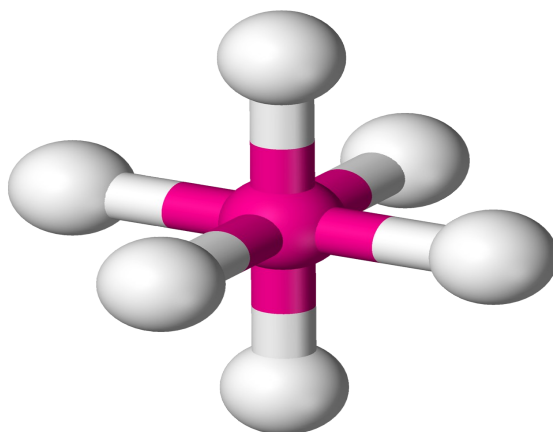
2.5 Hibridación $sp^3 d$

- Combinación $1s + 3p + 1d$
- **Características**
- 5 orbitales híbridos
- Geometría: bipiramidal trigonal
- Ángulos: 90° y 120°
- Ejemplo: PCl_5



2.6 Hibridación $sp^3 d^2$

- Combinación $1s + 3p + 2d$
- **Características**
- 6 orbitales híbridos
- Geometría: **octaédrica**
- Ángulos: 90°
- Ejemplo SF_6



3. RELACIÓN ENTRE HIBRIDACIÓN Y GEOMETRÍA

Nº DOMINIOS ELECTRÓNICOS	HIBRIDACIÓN	GEOMETRÍA
2	sp	Lineal
3	sp^2	Trigonal plana
4	sp^3	Tetraédrica
5	sp^3d	Bipiramidal trigonal
6	sp^3d^2	Octaédrica

4. CONCLUSIÓN

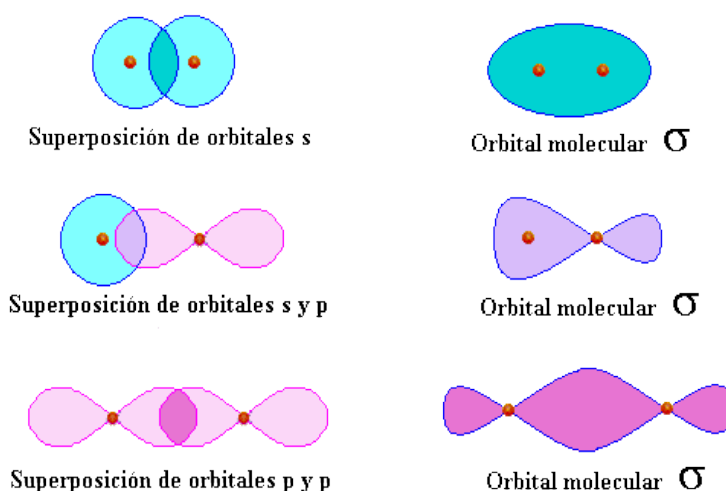
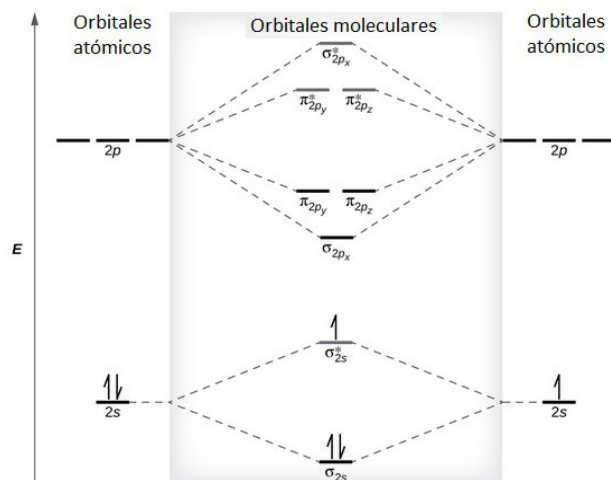
- **La hibridación:**
 - explica **ángulos de enlace**
 - justifica la **igualdad energética de enlaces**
 - conecta la **mecánica cuántica** con la **estructura molecular real**
- **Es una herramienta matemática esencial para comprender:**
 - enlaces simples, dobles y triples
 - geometría molecular
 - reactividad química

TEORÍA DE LOS ORBITALES MOLECULARES (TOM)

1. ¿Qué es la Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)?

La **Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)** explica el **enlace químico** considerando que:

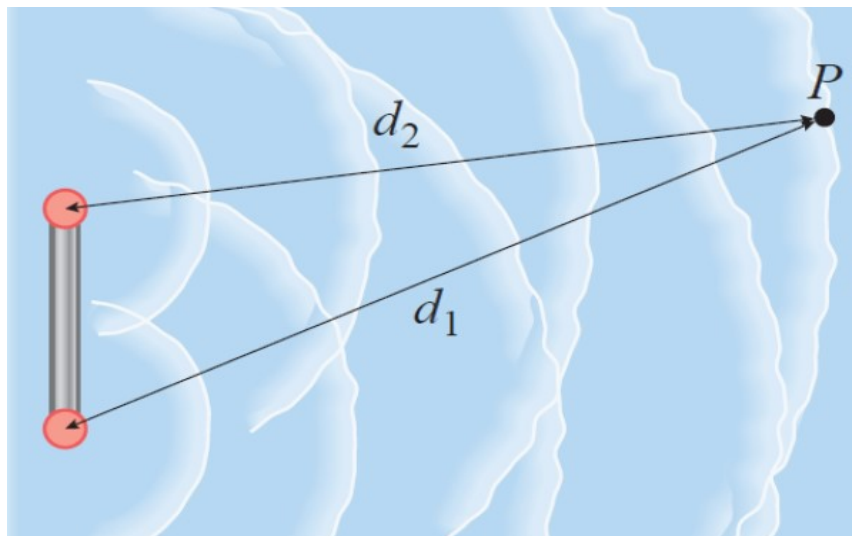
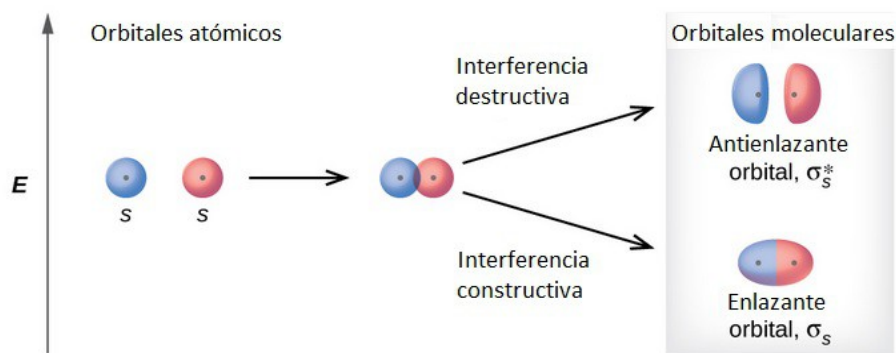
- Los electrones no pertenecen a un átomo concreto
- Están **deslocalizados en toda la molécula**
- Ocupando **orbitales moleculares (OM)** que se extienden sobre varios núcleos.



- A diferencia de la teoría de enlace de valencia, aquí no hay enlaces localizados, sino nubes electrónicas moleculares.

2. Formación de orbitales moleculares

Cuando dos orbitales atómicos (OA) se combinan, se generan dos orbitales moleculares:



2.1 Tipos de orbitales moleculares

- **a) Orbital enlazante (σ o π)**
 - Menor energía que los OA originales
 - Aumenta la densidad electrónica entre los núcleos
 - Favorece el enlace
- **b) Orbital antienlazante (σ^* o π^*)**
 - Mayor energía
 - Presenta un **nodo** entre los núcleos
 - Debilita o impide el enlace

3. Tratamiento matemático básico (LCAO)

La TOM se basa en el método **LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals)**.

3.1 Función de onda molecular

Si ψ_1 y ψ_2 son orbitales atómicos:

Orbital enlazante: $\psi_{OM} = \psi_1 + \psi_2$

Orbital antienlazante: $\psi^*_{OM} = \psi_1 - \psi_2$

3.2 Probabilidad electrónica

La densidad electrónica viene dada por: $\rho = |\psi^2|$

- En el OM enlazante → densidad máxima entre núcleos
- En el OM antienlazante → densidad nula en el nodo

4. Tipos de orbitales moleculares según la superposición

4.1 Orbitales σ (sigma)

- Superposición **frontal**
- Simetría cilíndrica

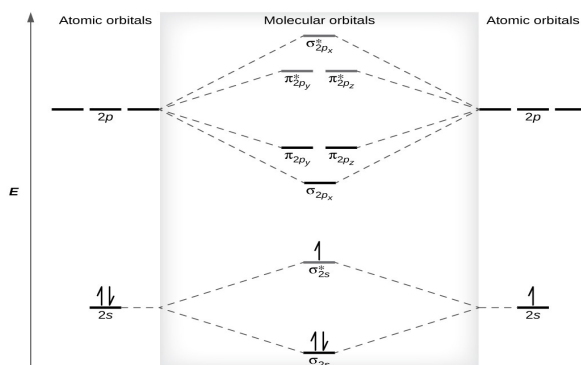
Ejemplos:

s-s
s-p
p-p (eje internuclear)

4.2 Orbitales π (pi)

- Superposición **lateral**
- Densidad electrónica por encima y debajo del eje
- Aparecen en **dobles y triples enlaces**

5. Diagrama de energía de orbitales moleculares



- Los orbitales moleculares se ordenan por **energía creciente**:

$$\sigma 1s < \sigma 1s^* < \sigma 2s < \sigma 2s^* < \pi 2p < \sigma 2p$$

- (El orden exacto puede variar según la molécula)

6. Orden de enlace (razonamiento matemático)

El **orden de enlace (OE)** indica la **estabilidad** de la molécula:

$$OE = \frac{N_{\text{enlazantes}} - N_{\text{antienlazantes}}}{2}$$

- **N**: Número de electrones que están en orbitales moleculares
- si

- $OE > 0 \rightarrow$ molécula estable
- A mayor OE $\rightarrow$ enlace más fuerte y corto

6.1 Ejemplos resueltos paso a paso

- a) Molécula de H_2
- Electrones totales: 2
- Configuración: σs^2

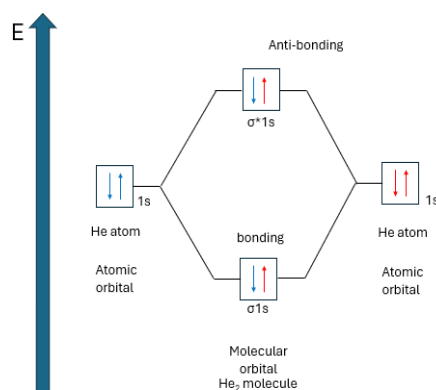
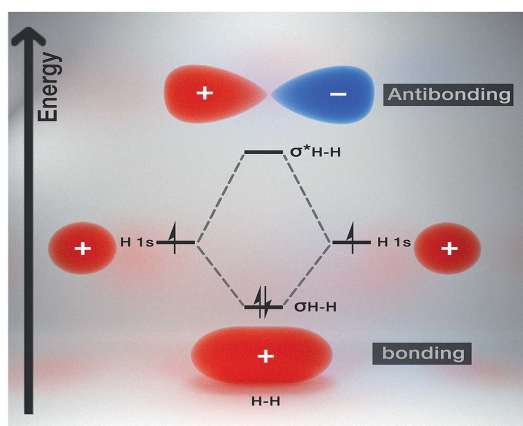
$$OE = \frac{2-0}{2} = 1$$

- Enlace simple y estable

- b) Molécula de He_2
- Electrones totales: 4
- Configuración: $\sigma s^2 \sigma^* s^2$

$$OE = \frac{2-2}{2} = 0$$

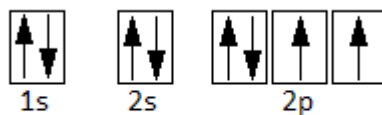
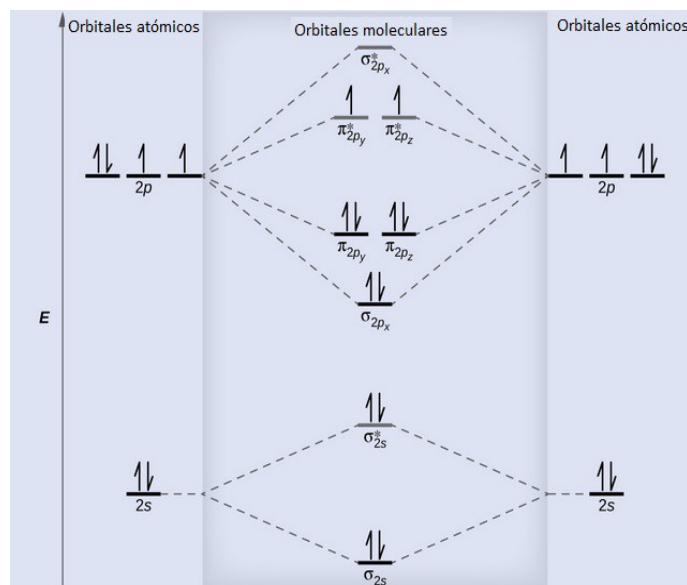
- No existe enlace $\rightarrow$ molécula inestable



- c) Molécula de O_2 (paramagnetismo)
- Electrones totales: 12
- Presenta 2 electrones desapareados en π^*

$$OE = \frac{4-2}{2} = 2$$

- Explica:
- Enlace doble
- Paramagnetismo del oxígeno, imposible de explicar con Lewis



Configuración electrónica del oxígeno ($Z = 8$)

7. Ventajas de la Teoría de Orbitales Moleculares

- Explica el paramagnetismo
- Describe la deslocalización electrónica
- Justifica la estabilidad molecular
- Predice órdenes de enlace
- Es base de la química cuántica moderna

8. Comparación con otras teorías

TEORÍA	ENFOQUE	LIMITACIONES
Lewis	Pares localizados	No explica magnetismo
Enlace de valencia	Solapamiento local	Electrones fijos
Orbitales moleculares	Electrones deslocalizados	Mayor complejidad matemática

9. Conclusión

La **Teoría de Orbitales Moleculares** proporciona una **descripción cuántica completa del enlace químico**, integrando:

- Matemáticas (funciones de onda)
- Física cuántica
- Evidencia experimental
- **Es imprescindible para entender:**
 - Enlaces múltiples
 - Magnetismo molecular

FUERZAS INTERMOLECULARES

1. ¿Qué son las fuerzas intermoleculares?

Las **fuerzas intermoleculares** son **interacciones de naturaleza electrostática** que actúan **entre moléculas** (o entre átomos nobles), manteniéndolas unidas en los **estados líquido y sólido**. Son **mucho más débiles** que los enlaces químicos (iónico, covalente o metálico), pero **determinan propiedades físicas clave** como:

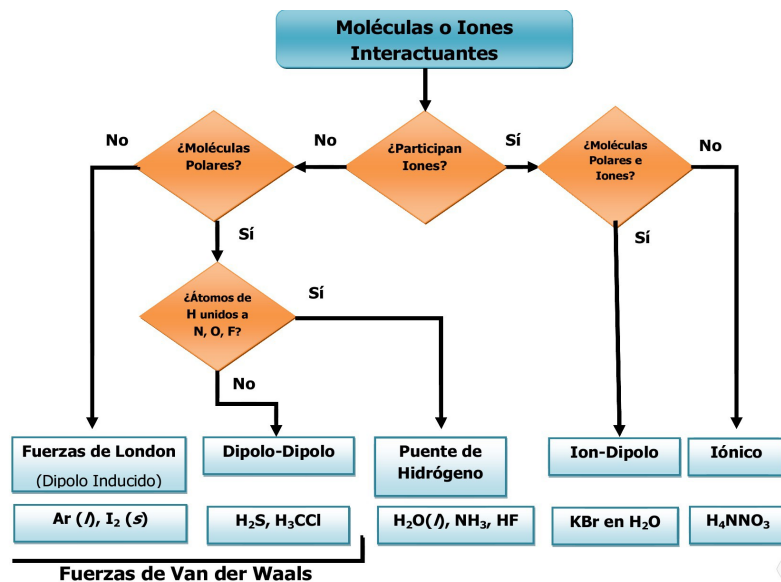
- punto de ebullición y de fusión
- solubilidad
- viscosidad
- tensión superficial,
- estado físico de una sustancia
- **Comparación de energías (orden de magnitud):**
- **Enlace covalente: 200–800 kJ·mol⁻¹**
- **Fuerzas intermoleculares: 0,1–50 kJ·mol⁻¹**

2. Origen físico (razonamiento matemático sencillo)

Todas las fuerzas intermoleculares tienen origen electrostático, es decir, dependen de la ley de Coulomb:

$$F = k \left(\frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} \right)$$

- **donde:**
- q_1 y q_2 son cargas (o cargas parciales δ^+ y δ^-)
- r es la distancia entre ellas,
- k es la constante de Coulomb.
- Al **aumentar la distancia**, la fuerza disminuye rápidamente.
- Al **aumentar la polaridad o el tamaño de la nube electrónica**, la interacción aumenta.



3. Tipos de fuerzas intermoleculares

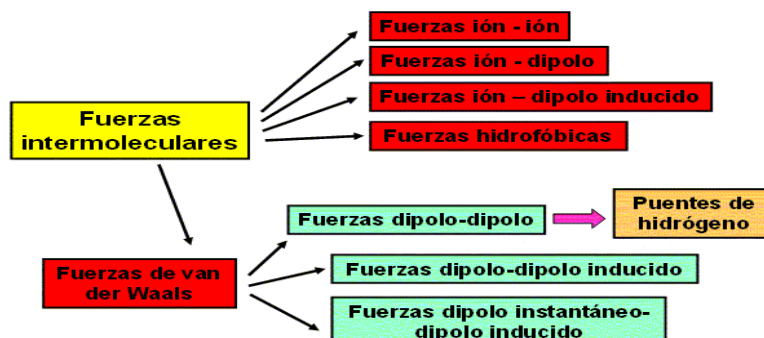
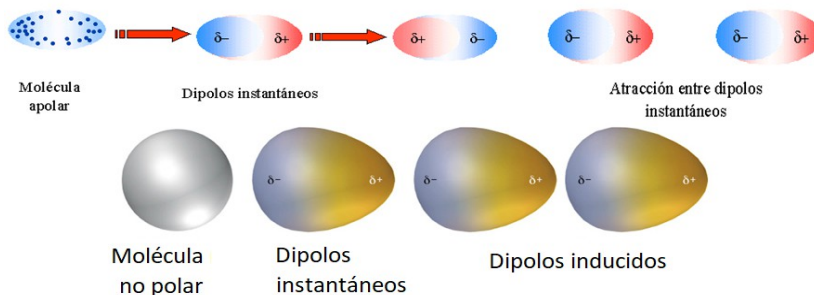
3.1 Fuerzas dipolo-dipolo

Aparecen entre moléculas polares, que poseen un **momento dipolar permanente** (μ).

- El momento dipolar se define como:

$$\mu = q \cdot d$$

- donde:
- q es la carga parcial
- d es la distancia entre cargas
- Moléculas con mayor $\mu \rightarrow$ fuerzas dipolo-dipolo más intensas
- Ejemplo:** HCl, SO₂, CH₃Cl.
- Consecuencia directa: El HCl tiene un punto de ebullición más alto que el Cl₂ (no polar), aunque tengan masas similares.



3.2 Puente de hidrógeno

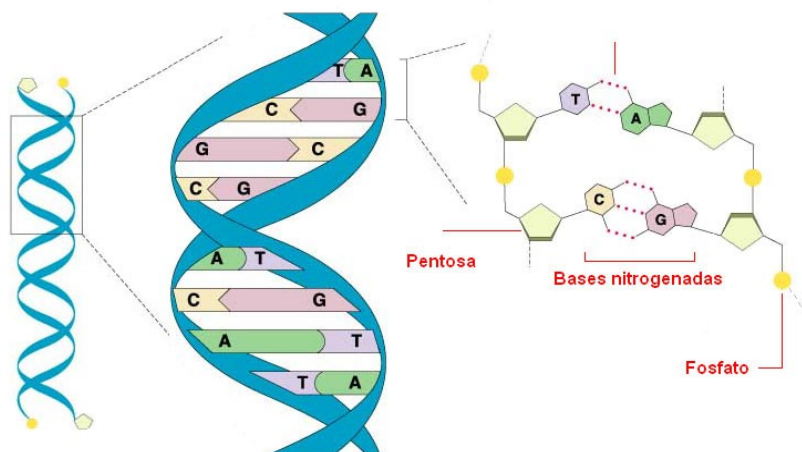
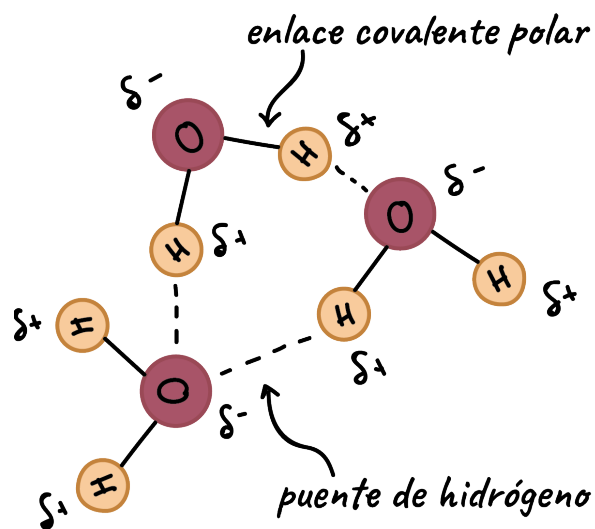
Es un **caso especial y más intenso** de interacción dipolo–dipolo.

– **Condiciones:**

- Hidrógeno unido a **F, O o N**
- Presencia de pares de electrones libres en otra molécula
- **Energía típica:** 10–40 kJ·mol⁻¹

– **Ejemplos:**

- Agua (H₂O)
- Amoníaco (NH₃)
- Alcoholes
- ADN (unión entre bases nitrogenadas)
- El **alto punto de ebullición del agua (100 °C)** se explica por la extensa red de puentes de hidrógeno.



3.3 Fuerzas de dispersión de London

Son **las más débiles**, pero **están presentes en todas las sustancias**.

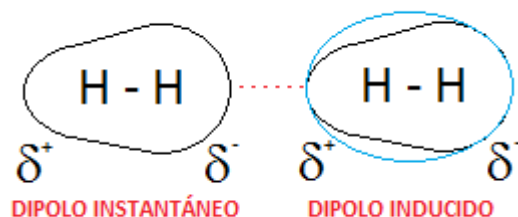
– **Origen:**

- Movimiento de electrones → dipolos instantáneos
- Estos dipolos inducen otros dipolos en moléculas vecinas

– **Su intensidad aumenta con:**

- mayor **masa molar**

- mayor **número de electrones**
- **moléculas más alargadas** (mayor superficie de contacto)
- **Ejemplo clásico:**
- **F₂ y Cl₂ son gases**
- **Br₂ es líquido**
- **I₂ es sólido**
- **Aumenta la fuerza de London al aumentar la masa molecular.**



3.4 Fuerzas ion–dipolo (muy importantes en disoluciones)

- Se producen entre:
- un **ion** (Na⁺, Cl⁻)
- una **molécula polar** (agua)
- Son responsables de la **disolución de sales en agua**
- **La energía de interacción depende de:**

$$E \propto \frac{q \cdot \mu}{r^2}$$

- **Cuanto mayor es la carga del ion y el momento dipolar, mayor es la atracción**
- **Comparación resumida de fuerzas**

TIPO DE FUERZA	INTENSIDAD	¿REQUIERE POLARIDAD?
London	Muy débil	No
Dipolo–dipolo	Media	Sí
Puente de hidrógeno	Alta	Sí (H–F, H–O, H–N)
Ion–dipolo	Muy alta	Ion + molécula polar

4. Importancia en química y biología

- Explican la **estructura del ADN**
- Permiten la **disolución de sustancias**

- Determinan **propiedades físicas** de materiales
- Son clave en **reacciones bioquímicas**

7. **Idea clave para examen**

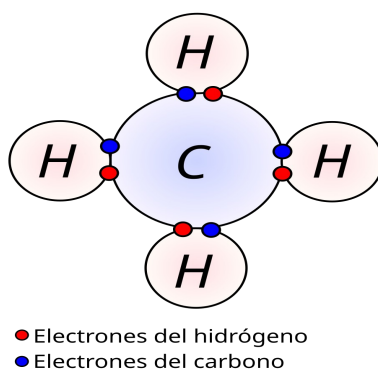
Las fuerzas intermoleculares no rompen enlaces, pero **controlan cómo se agrupan las moléculas** y explican por qué unas sustancias son gases, líquidos o sólidos.

COVALENCIA

1. **¿Qué es la covalencia?**

La **covalencia** es el **tipo de enlace químico** que se forma cuando **dos átomos comparten uno o varios pares de electrones** para alcanzar una configuración electrónica más estable, normalmente el **octeto** (o el **duplete** en el caso del hidrógeno).

- Este tipo de enlace aparece **principalmente entre átomos no metálicos**, cuyos valores de electronegatividad son similares.



2. **Fundamento electrónico del enlace covalente**

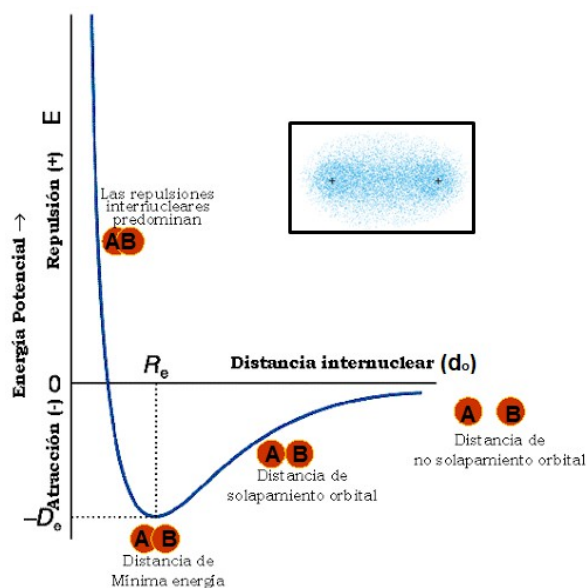
Los electrones compartidos se sitúan en una **región común del espacio** entre los núcleos atómicos.

Esto provoca:

- **Atracción núcleo–electrón**
- **Repulsión electrón–electrón**
- **Repulsión núcleo–núcleo**
- La estabilidad se alcanza cuando la **energía potencial total del sistema es mínima**.
- **Interpretación energética básica**
La energía potencial electrostática puede expresarse (simplificada) como:

$$F = k \left(\frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} \right)$$

- **donde:**
 - q_1 y q_2 son cargas (o cargas parciales δ^+ y δ^-)
 - r es la distancia entre ellas,
 - k es la constante de Coulomb.
- En un enlace covalente, al **disminuir la distancia internuclear**, la energía disminuye hasta un **mínimo**, correspondiente a la **longitud de enlace**.

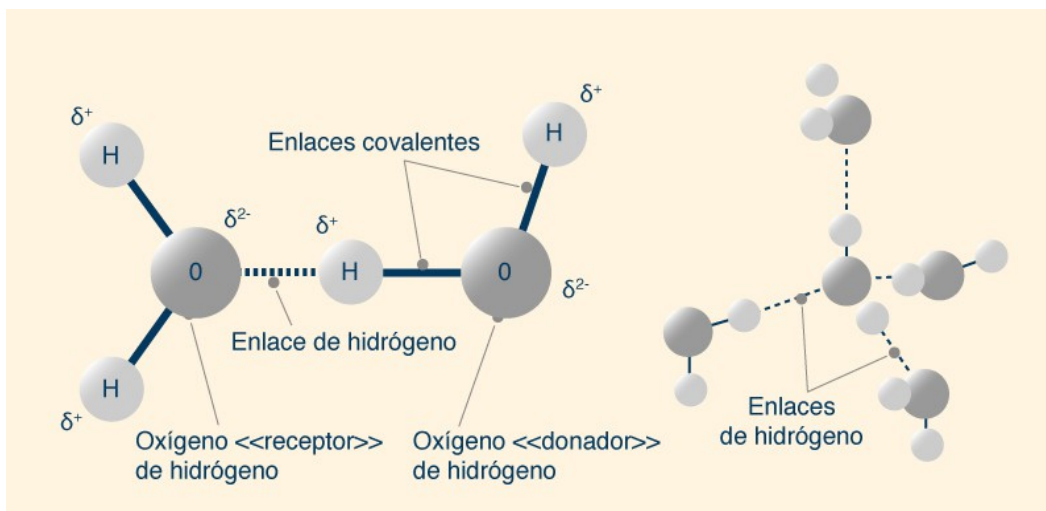


3. **Condición de formación: diferencia de electronegatividad**
La **diferencia de electronegatividad (ΔEN)** permite clasificar el enlace:

$$\Delta EN = |X_A - X_B|$$

- **Criterio orientativo:**

ΔEN	TIPO DE ENLACE
0 – 0,4	Covalente no polar
0,4 – 1,7	Covalente polar
> 1,7	Iónico

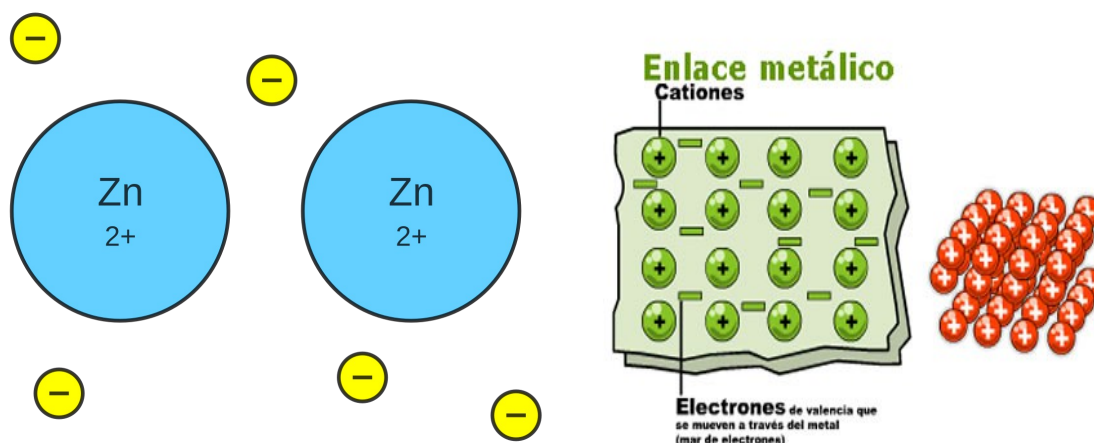


ENLACE METÁLICO

1. ¿Qué es el enlace metálico?

El **enlace metálico** es el tipo de unión química que mantiene cohesionados a los **átomos de los metales** en estado sólido.

- Se basa en la **atracción electrostática** entre:
- **Cationes metálicos** (núcleos + electrones internos)
- y un **conjunto de electrones de valencia deslocalizados**, llamado “**mar de electrones**”
- **No hay moléculas individuales**, sino una **red cristalina tridimensional**



2. Modelo del “mar de electrones”

Idea fundamental

- Cada átomo metálico **cede sus electrones de valencia**
- Estos electrones quedan **libres y móviles** por toda la red
- Los núcleos positivos quedan ordenados formando una **red cristalina**
- La atracción entre **cationes + electrones libres** mantiene el sólido unido
- **El enlace metálico es colectivo**, no localizado entre pares de átomos

3. Razonamiento matemático

– a) Atracción electrostática (Ley de Coulomb)

$$F = k \frac{q^+ \cdot q^-}{r^2}$$

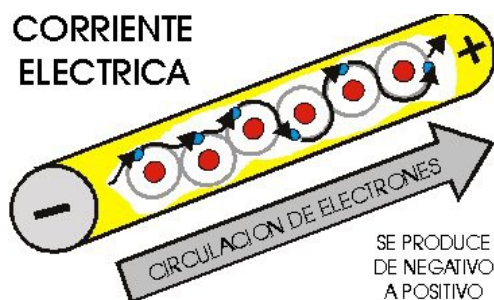
– Donde:

- q^+ → carga del catión metálico
- q^- → carga total del mar de electrones
- r → distancia media entre iones y electrones
- k → constante electrostática
- **Cuanto mayor sea la carga del catión**, mayor será la fuerza del enlace metálico.

4. Energía del enlace metálico

$$E \propto \frac{Z}{r}$$

- Z = número de electrones de valencia aportados
- r = radio atómico



PROPIEDAD	EXPLICACIÓN MEDIANTE ENLACE METÁLICO
Conductividad eléctrica	Electrones libres se desplazan al aplicar un campo eléctrico
Conductividad térmica	Los electrones transportan energía
Maleabilidad	Las capas de cationes se deslizan sin romper el enlace
Ductilidad	La red se deforma manteniendo el mar de electrones
Brillo metálico	Los electrones reflejan la radiación incidente

– **Comparación con otros tipos de enlace**

TIPO DE ENLACE	ELECTRONES	DIRECCIONALIDAD	SUSTANCIAS
Iónico	Transferidos	No direccional	Sales
Covalente	Compartidos	Direccional	Moléculas
Metálico	Deslocalizados	No direccional	Metales

- **Resumen final**
 - El enlace metálico une átomos metálicos mediante electrones libres compartidos colectivamente
 - Se explica con el modelo del mar de electrones
 - Justifica las propiedades físicas de los metales
 - Su intensidad depende del número de electrones de valencia y del radio atómico
-