



Universidad Nacional Autónoma de México



Facultad de Química

Parámetros de enlace

Jesús Gracia Mora

¿Que es un enlace químico?

Diferentes definiciones:

■ Se establece un enlace químico entre dos átomos o grupos de átomos cuando las fuerzas que actúan entre ellos son de índole tal que conducen a la formación de un agregado con suficiente estabilidad, que es conveniente para el químico considerarlo como una especie molecular independiente.

La naturaleza del enlace químico. Linus PAULING

■ Está claro que la descripción íntima de un enlace químico debe ser esencialmente electrónica. El comportamiento y la distribución de los electrones en torno del núcleo es lo que da el carácter fundamental de un átomo; lo mismo debe de ser para las moléculas. Por ello, en cierto sentido, la descripción de los enlaces en cualquier molécula es, simplemente, la descripción de su distribución electrónica.

Valencia. A. Coulson.

■ La energía que mantiene unidos a dos átomos en un compuesto

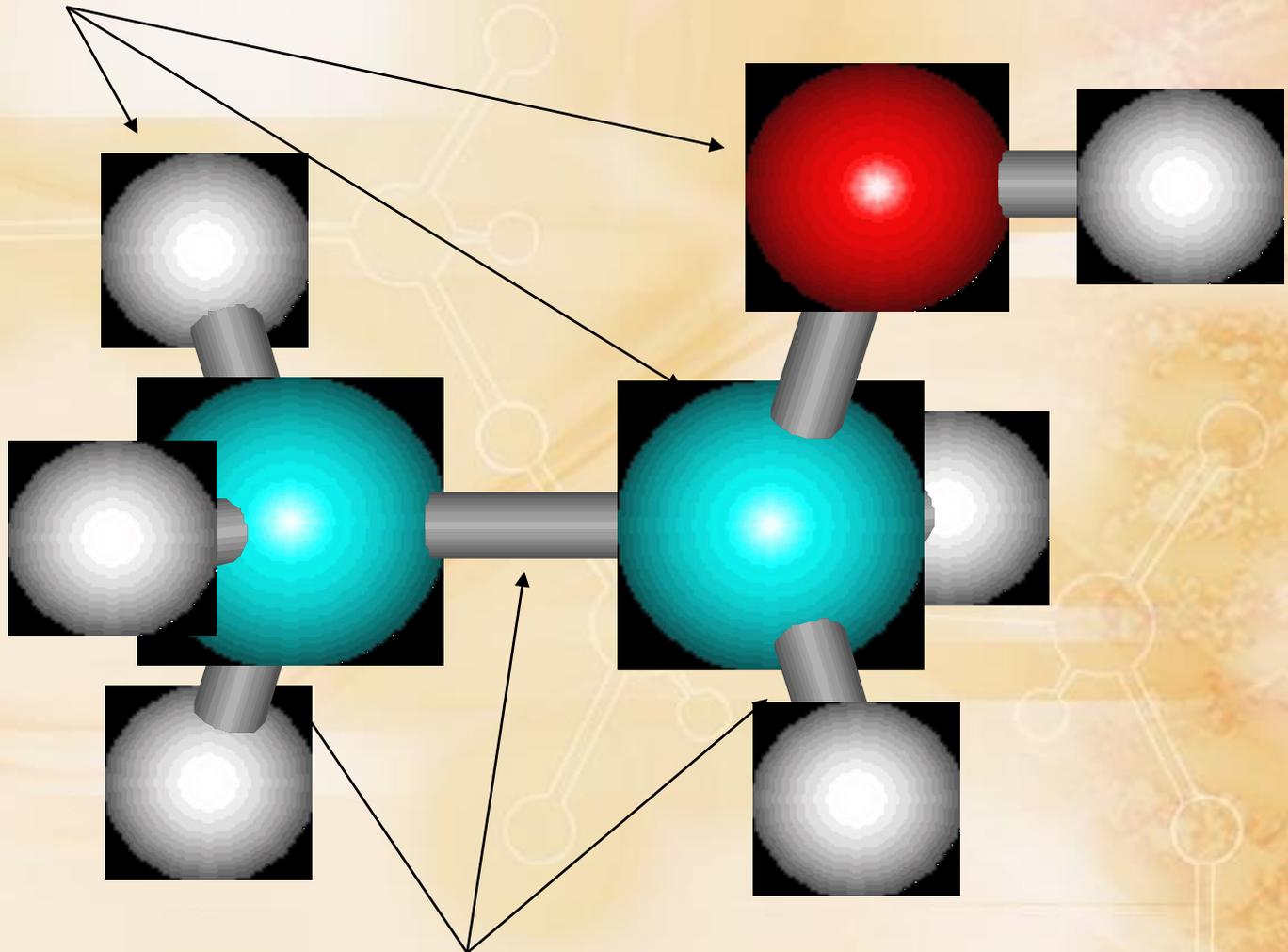
www.learnchem.net/glossary/c.shtml

■ Una fuerza eléctrica que une átomos

Cognitive Science Laboratory, Princeton University



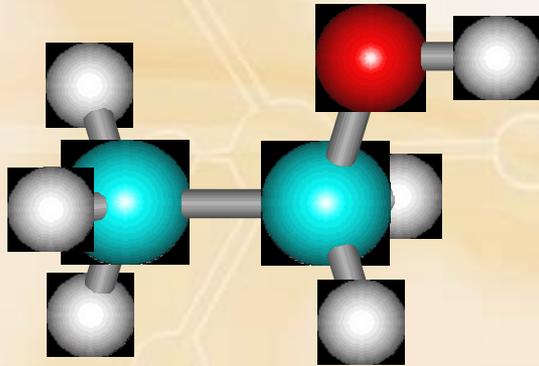
Átomos



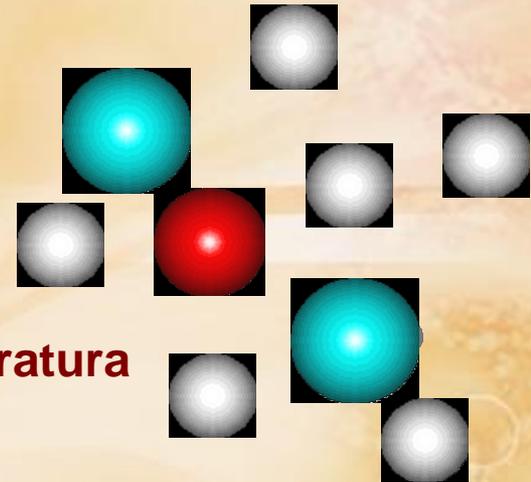
Representación de enlaces químicos



¿Como está una molécula a diferentes temperaturas?



Condiciones normales



Alta temperatura



Baja temperatura

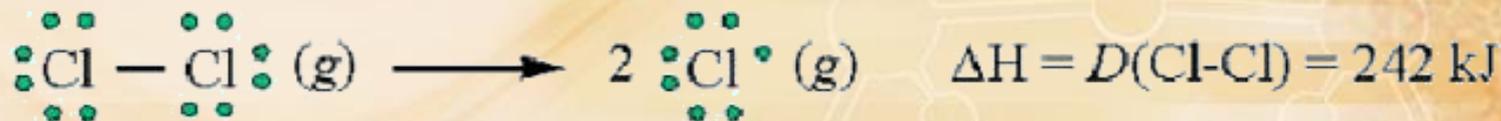


Fuerza de enlace

La estabilidad de una molécula está en función de la fortaleza de los enlaces que mantienen unidos a sus átomos

¿Cómo se mide?

La energía de enlace es el cambio en la entalpía (ΔH , entrada de calor) que se requiere para disociar 1 mol de sustancia gaseosa



Donde $D(\text{Cl-Cl})$ representa la energía de disociación para el enlace Cl-Cl



Fuerza de enlace

Es la cantidad de energía requerida para separar dos átomos unidos

Siempre es un proceso endotérmico



$$\Delta H_D^0 = 436 \text{ kJ/mol} = B$$

<i>Molécula</i>	<i>B (kJ/mol)</i>	<i>Molécula</i>	<i>B (kJ/mol)</i>
H_2	436	I_2	151
N_2	944	HF	565
O_2	496	HCl	431
F_2	158	HBr	366
Cl_2	242	HI	299
Br_2	193	CO	1074



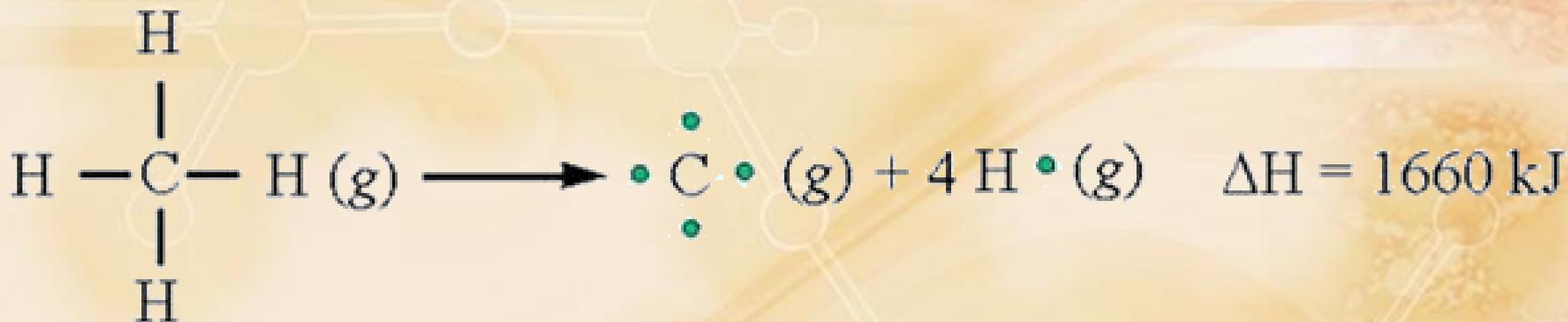
Los parámetros por excelencia

Enlace	Energía (kJ/mol)	Distancia (pm)
H-H	432	74
H-B	389	119
H-C	411	109
H-Si	318	148
H-Ge	288	153
H-Sn	251	170
H-N	386	101
H-P	322	144
H-As	247	152
H-O	459	96
H-S	363	134
H-Se	276	146
H-Te	238	170
H-F	565	92
H-Cl	428	127
H-Br	362	141
H-I	295	161



¿Pero y que pasa cuando tenemos un compuesto que no es una molécula diatómica?

Consideremos la disociación del metano:



Aquí tenemos cuatro enlaces C-H equivalentes, de manera que la energía de disociación de uno solo será:

$$D(\text{C-H}) = (1660/4) \text{ kJ/mol} = 415 \text{ kJ/mol}$$



Al medir el ΔH_0 de una molécula ***diatómica***, no puede haber duda del resultado

En cambio si la molécula es ***poliatómica***, existen problemas de interpretación.

Si hay más de un enlace en la molécula, ***se mide la energía total de ionización y se divide entre el número de enlaces de la molécula***

Es decir consideramos la ***energía promedio***



La energía de enlace para un enlace cualquiera se ve influido por el resto de la molécula

Sin embargo, este es un efecto relativamente pequeño, esto sugiere que los enlaces están realmente entre los átomos

Entonces, la energía para la mayoría de los enlaces varía poco respecto a la energía promedio para ese tipo de enlace

La energía de enlace siempre es positiva, es decir se requiere energía para romper un enlace *covalente*, y siempre hay energía liberada cuando se forma un enlace



De que depende la energía de enlace

Enlace	Energía (kJ/mol)	
H-H	432	
Cl-Cl	242	← La energía de enlace <i>no</i> solo es un promedio
H-Cl	438	
C-N	305	
C=N	615	← La energía depende del “orden de enlace”
C≡N	887	
HO-H	492	
CH ₃ O-H	432	← La energía depende de a quién esté unido En general se informan promedios



Distancias de enlace

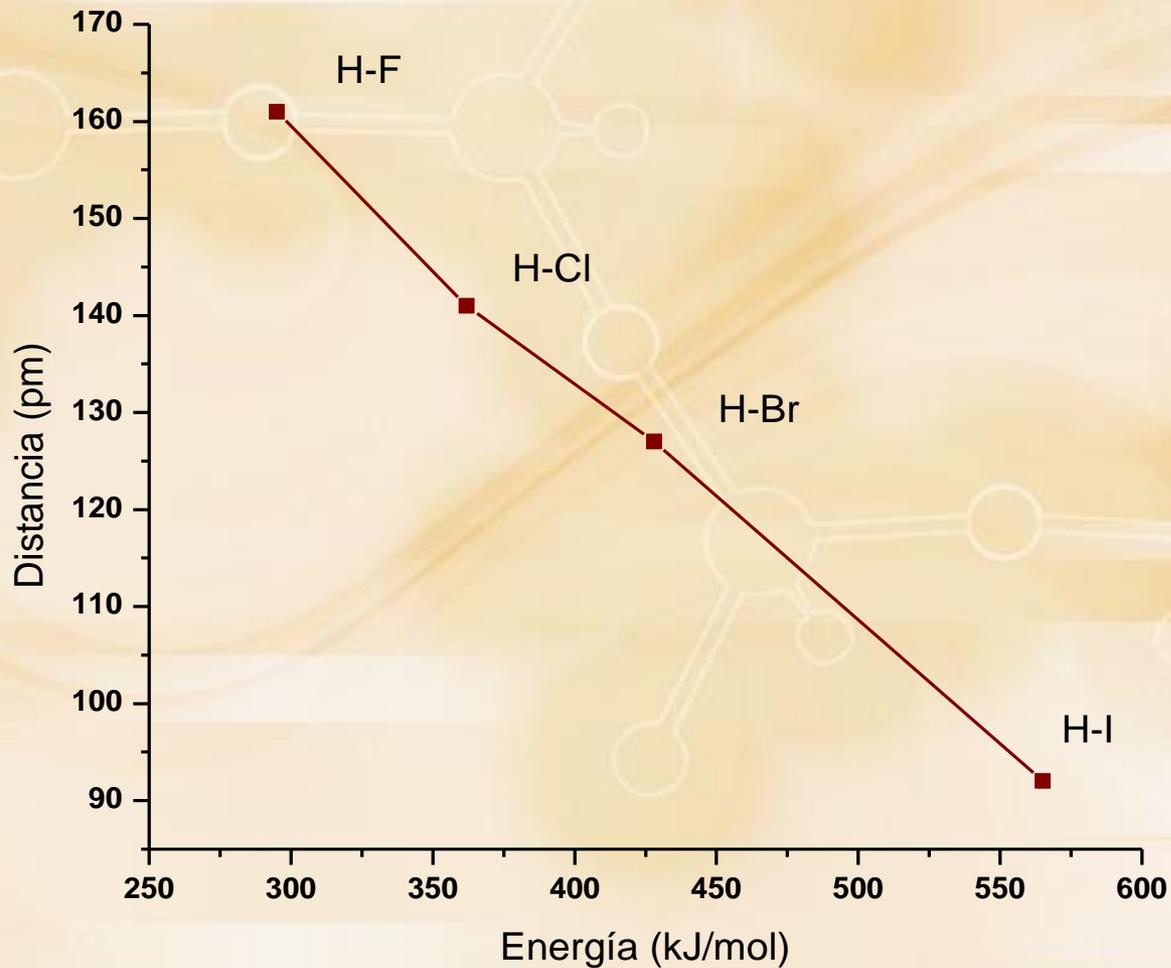
Obviamente dependerán del tipo de enlace, un enlace más fuerte mostrará una distancia menor

Enlace	Energía (kJ/mol)	Distancia (pm)
H-B	389	119
H-C	411	109

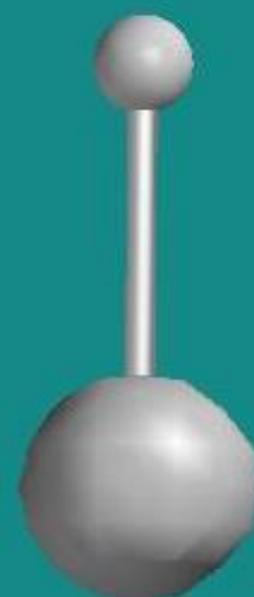
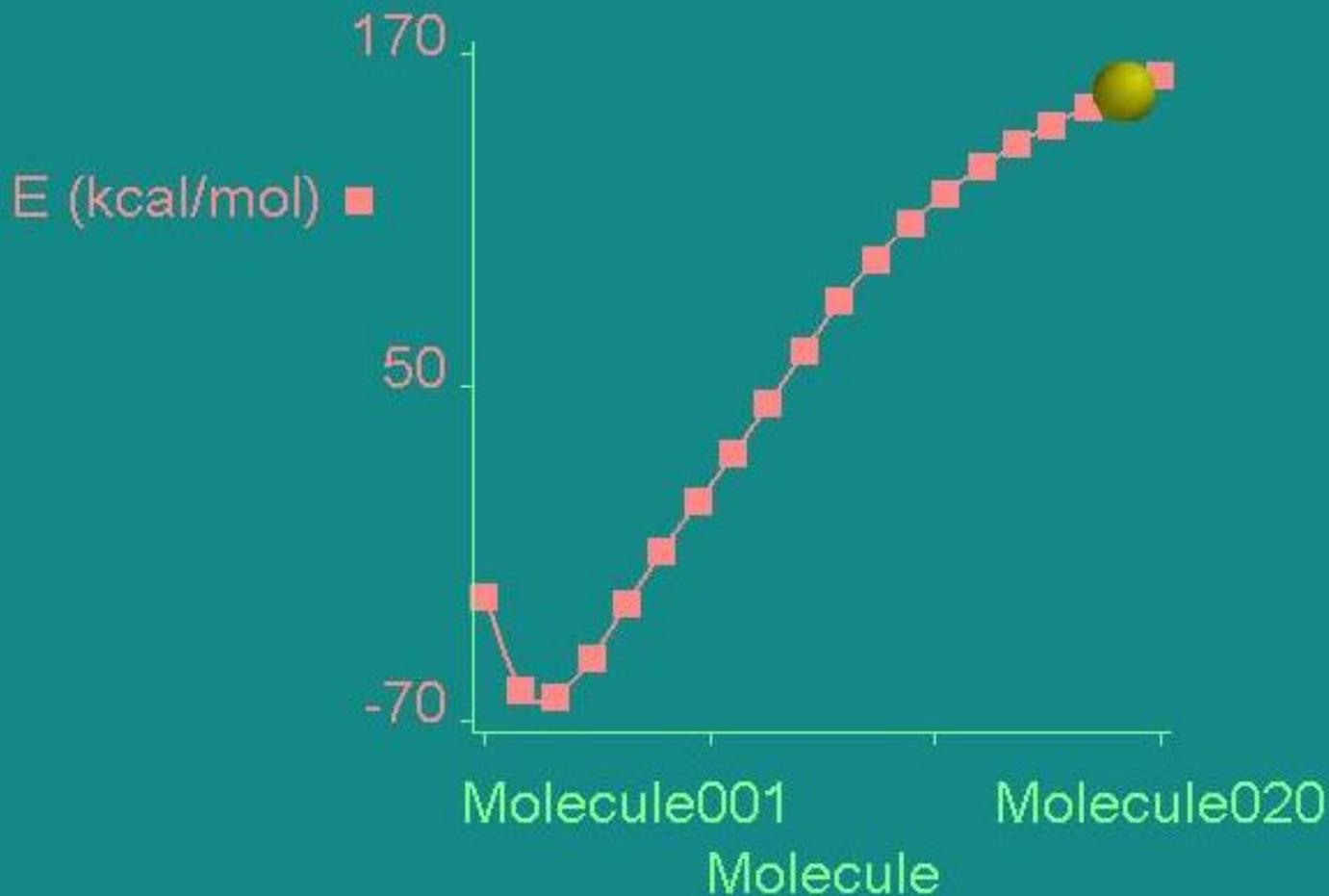


Distancias de enlace

La energía de enlace está relacionada con la distancia, por lo tanto con el tamaño de los átomos



¿Sí la distancia es muy grande ¿hay enlace?



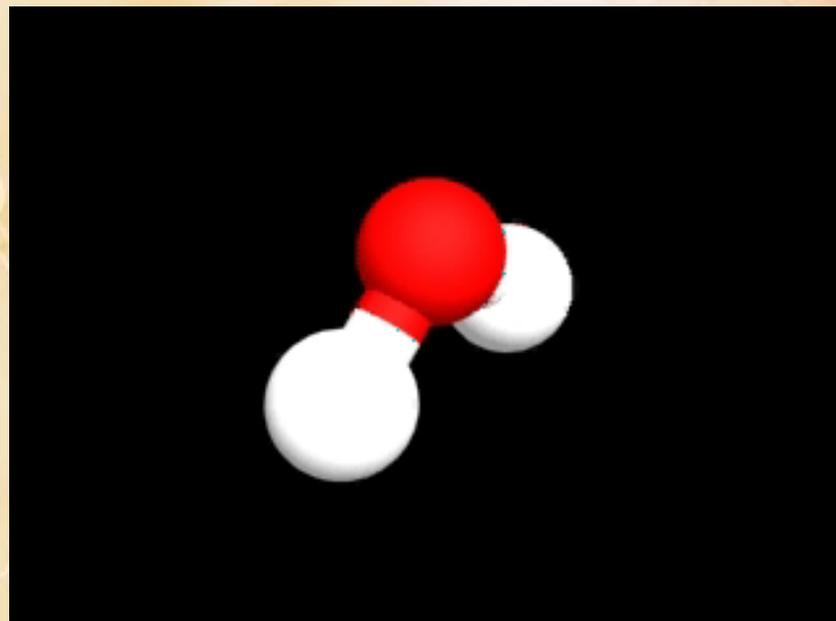
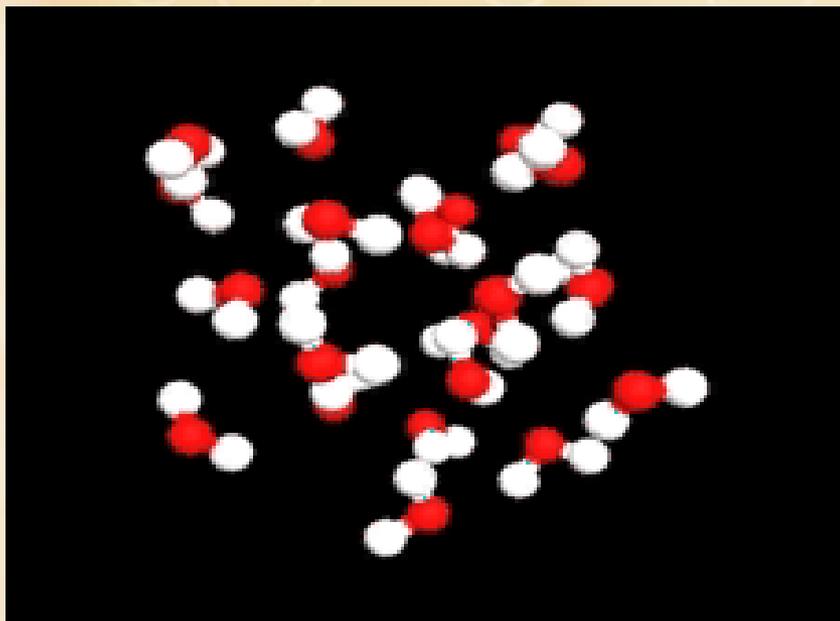
¿Qué es un enlace largo?

El puente de hidrógeno se encuentra en el límite de un enlace químico es muy débil ≈ 5 kcal/mol (21 KJ/mol). Algunos autores opinan que es un extremo de una interacción dipolo-dipolo y que por lo tanto es más cercano a una interacción intermolecular que a un enlace químico formal.

Enlace	Distancia (pm)
F-H · · · F	240
N-H · · · O	290
N-H · · · N	300
N-H · · · S	340



Establecer claras diferencias entre enlaces intermoleculares e intramoleculares

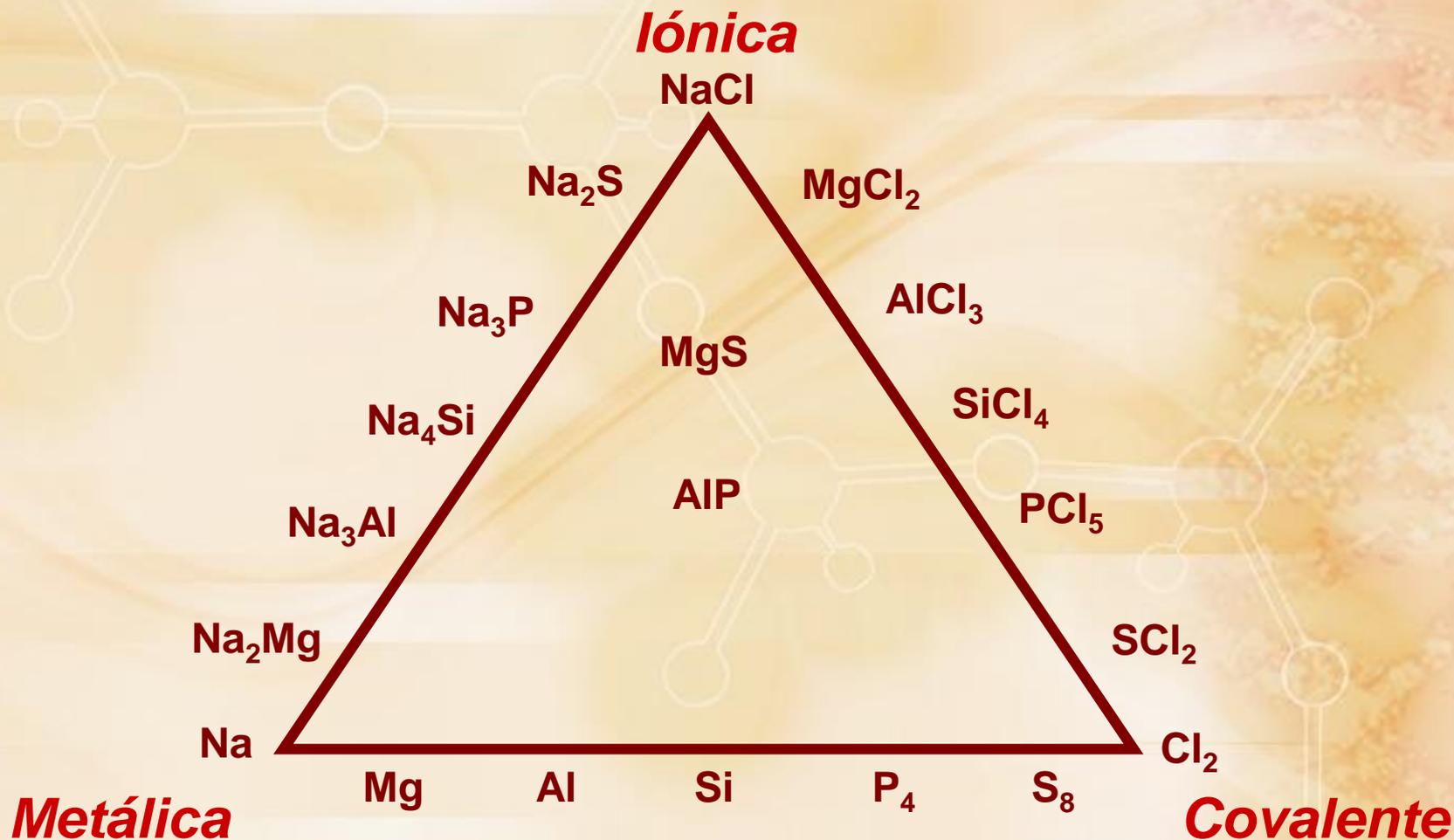


Cuantos compuestos y tipos de enlace existen

El CAS ha indexado aproximadamente cerca de 23 millones de compuestos y cerca de 47×10^6 secuencias y **TODO** esto son sustancias que forman enlaces. Es necesario la sistematización y tratar de entender la naturaleza por lo que surgen MODELOS que nos ayuden a entender explicar y predecir el comportamiento de las sustancias.



Para entender el enlace no solo se ha recurrido a la evidencia experimental como distancias y energías de enlace, la química los estudia a través de modelos.



Los modelos más comunes

Iónico



Son compuestos formados por iones
La naturaleza del enlace es fundamentalmente electrostática iónico

Covalente



Son compuestos que forman sus enlaces a partir de "compartir" electrones. Pueden formar enlaces polares pero no es de naturaleza iónica

Parámetros de enlace

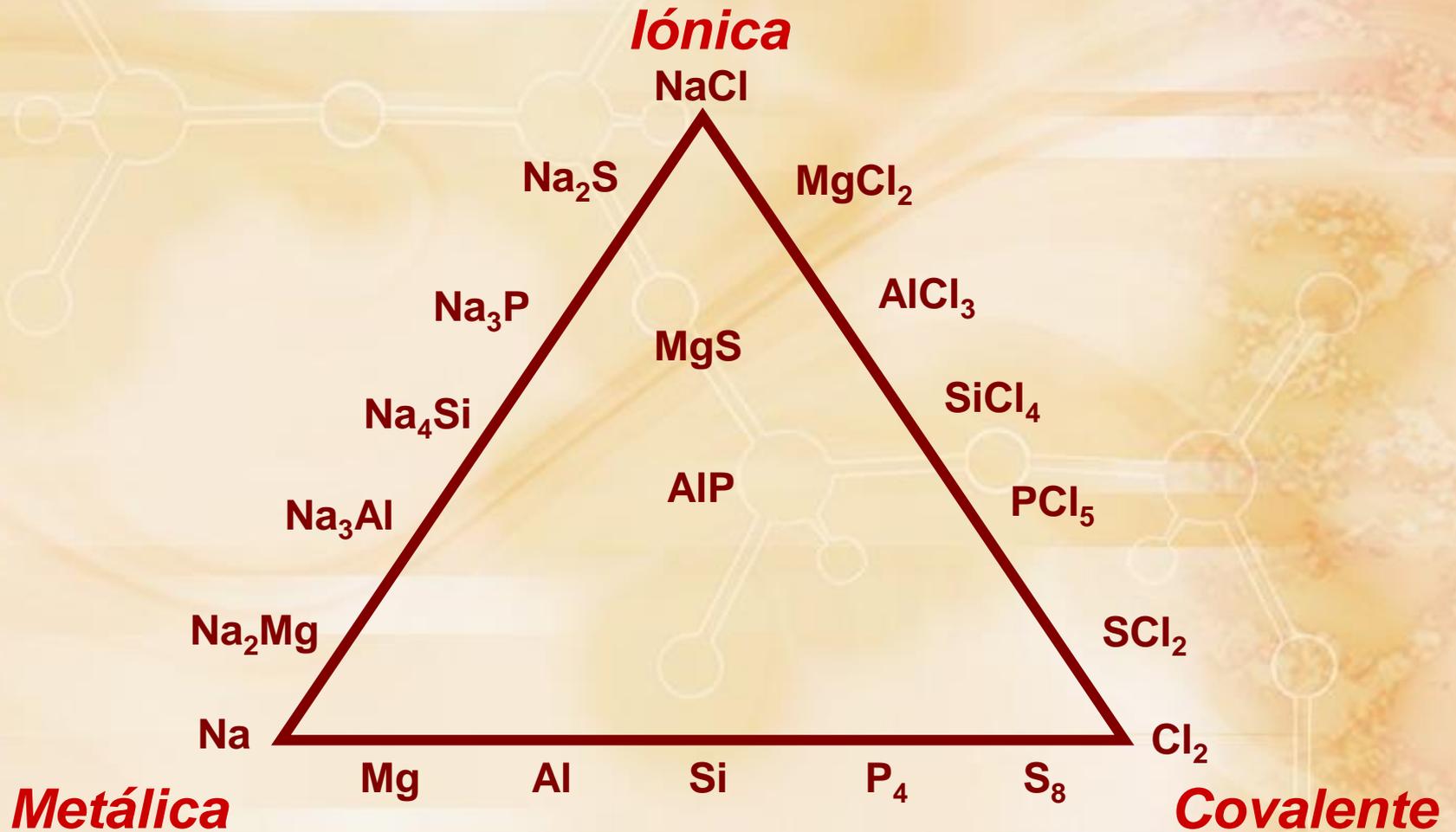
Modelo de Born-Landé
Ciclo Born-Haber
Etc.

Energía de red cristalina
 ΔH de formación Etc.

Modelo de Lewis
Orbitales moleculares
Enlace valencia
Etc.
Orden de enlace
Hibridación, etc.



Nuevamente analizando el triángulo del enlace.



Polaridad del enlace

Pareciera claro, que cuando dos átomos de un mismo elemento comparten un par de electrones, estos comparten igualmente dichos electrones.

Sin embargo, cuando los átomos son de diferentes elementos, esto no tiene por que ocurrir.

Es decir hay átomos que atraen más a los electrones que otros.

En todo caso es claro, que los ***metales*** atraen menos a los electrones que los ***no-metales***.



Polaridad del enlace

Un concepto muy útil para describir como comparten sus electrones un par de átomos es el de polaridad del enlace

Podemos definir los enlaces covalentes usando este concepto así:

- Un **enlace covalente no-polar** es aquel en el cual los electrones están compartidos igualmente por los dos átomos
- Un **enlace covalente polar** es aquel donde uno de los átomos tiene mayor atracción por los electrones que el otro
- Si esta atracción relativa es suficientemente grande, el enlace es un **enlace iónico**



Electronegatividad

Según **Pauling** (1932), es la medida de la tendencia que tiene un átomo en una molécula de atraer a los electrones hacia sí

Y la estima a partir de las energías de enlace o energías de disociación de diversas sustancias, empleando esta expresión:



Donde Δ_{AB} es la diferencia de electronegatividad entre los dos átomos

$$D(A-B) = \frac{1}{2} [D(A-A) + D(B-B)] + \Delta_{AB}$$

$$|\chi_A - \chi_B| = 0.208 \sqrt{\Delta_{AB}}$$



Electronegatividad y polarización

Podemos usar la diferencia en la electronegatividad $\Delta\chi$ entre dos átomos para conocer la polaridad de su enlace:

Compuesto	F ₂	HF	LiF
$\Delta\chi = (\chi_A - \chi_B)$	4.0 - 4.0 = 0	4.0 - 2.1 = 1.9	4.0 - 1.0 = 3.0
Tipo	Covalente no-polar	Covalente polar	Iónico

En el F₂ los electrones están compartidos igualmente entre los dos átomos

El enlace es covalente no-polar

En el HF el átomo de flúor tiene mayor electronegatividad que el átomo de hidrógeno



Electronegatividad y polarización

Los electrones no se comparten igualmente, el átomo de flúor atrae más densidad electrónica que el átomo de H

El enlace es covalente polar.

En el LiF, la electronegatividad del átomo de flúor es suficientemente grande como para despojar completamente de su electrón al litio y el resultado es

Un enlace iónico

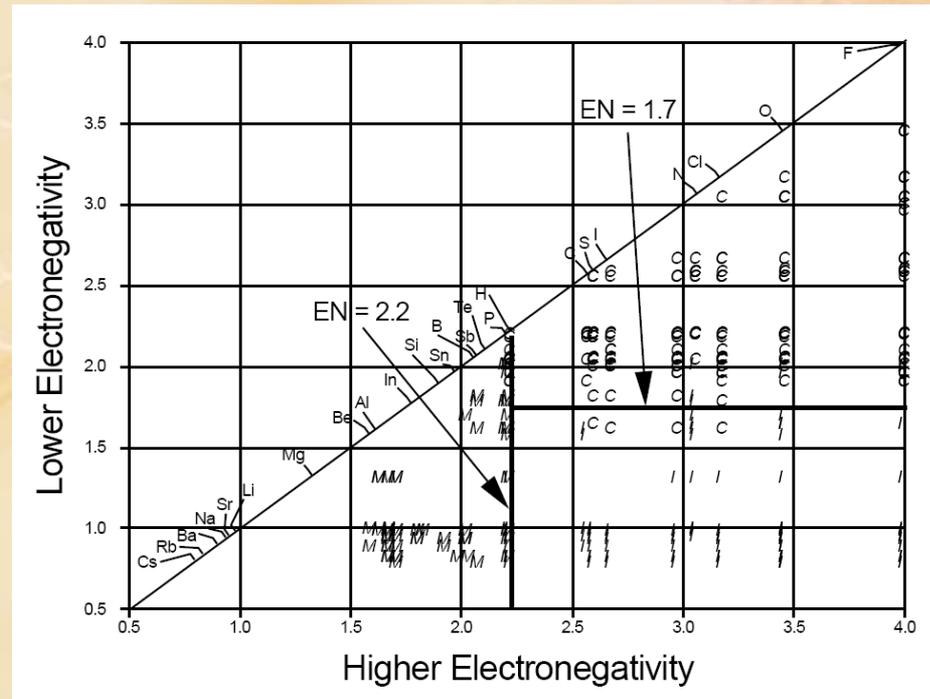
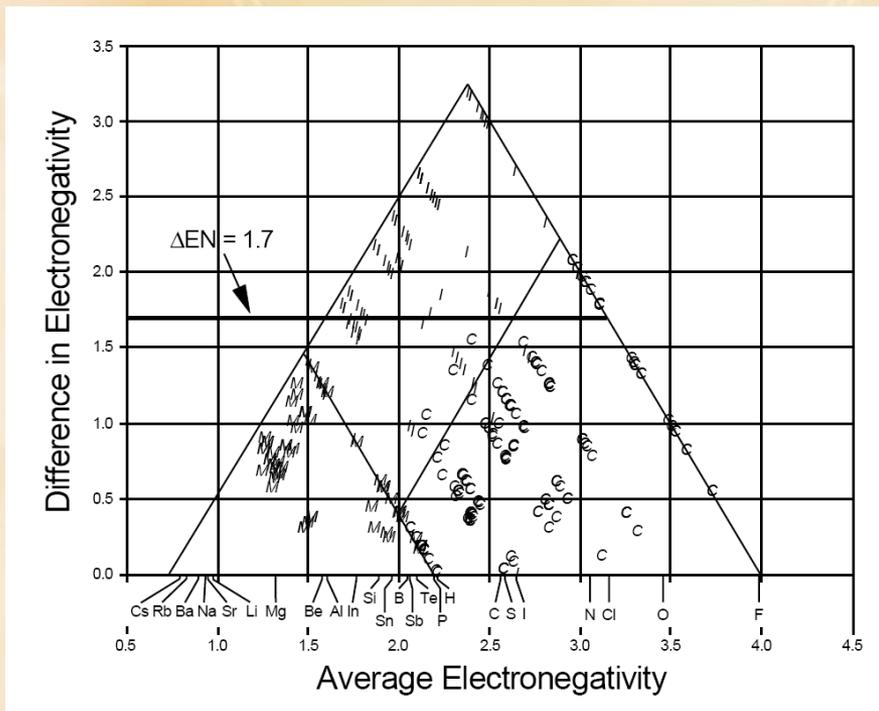
El enlace en H-F puede representarse así:

Los símbolos $\delta+$ y $\delta-$ indican las cargas parciales positiva y negativa respectivamente.

La flecha indica hacia donde jalan los electrones



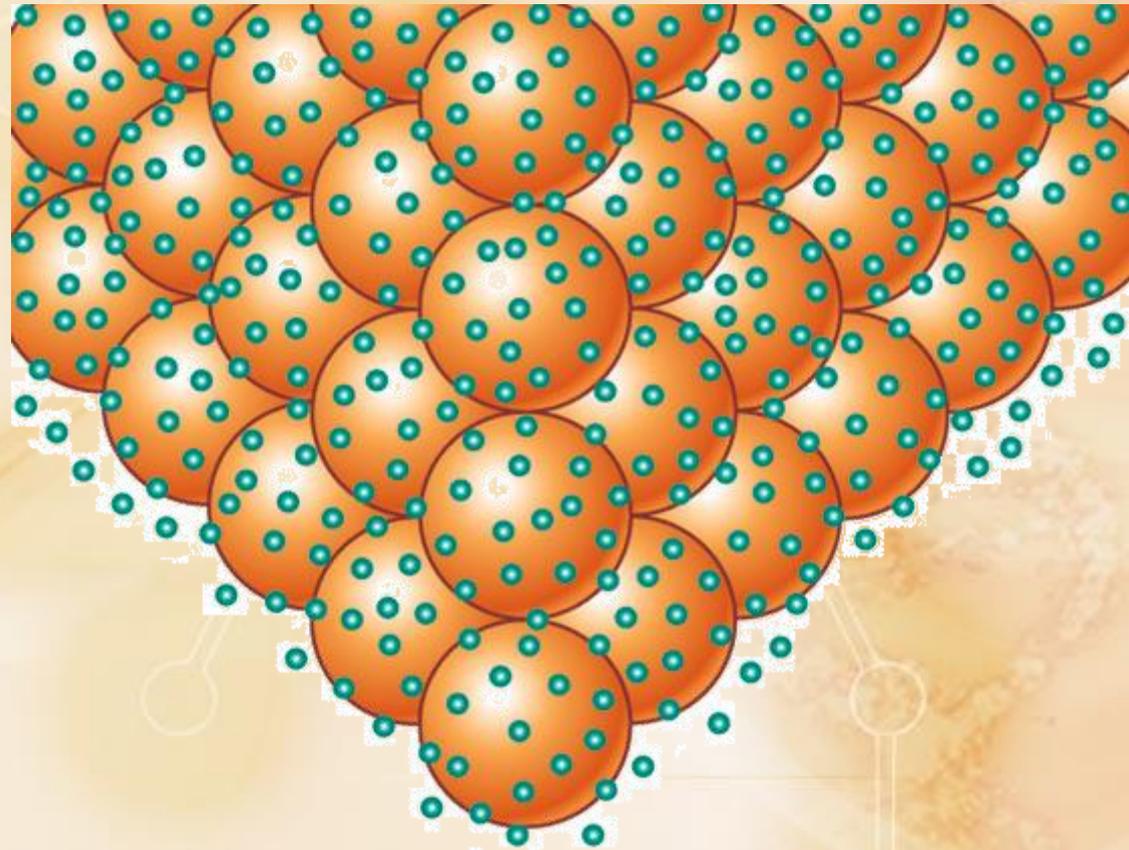
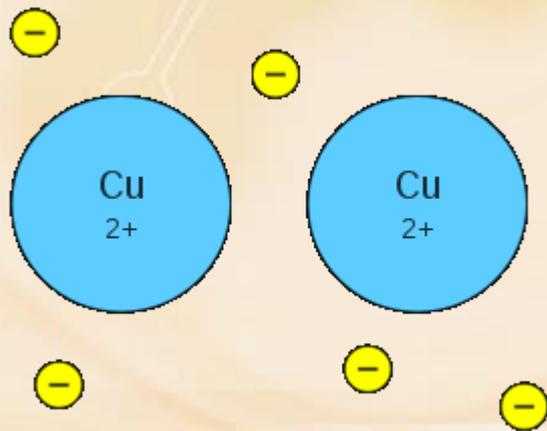
Otro tratamiento más novedoso



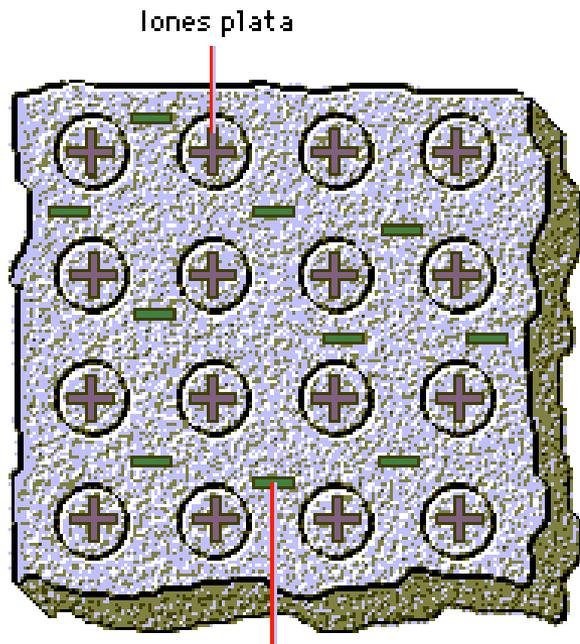
Sproul G. *J. Chem Ed.* **78**, 3 (2001)



Enlace metálico

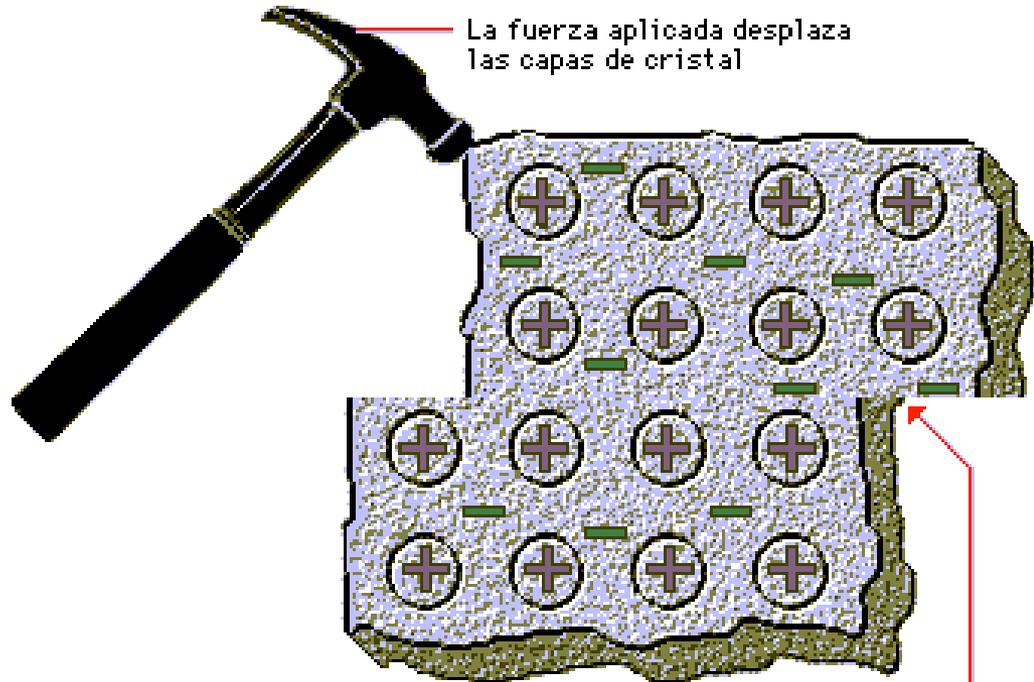


Enlace metálico



Los electrones de valencia se mueven a través del metal; forman enlaces deslocalizados con los iones positivos.

Ilustración de Microsoft



No cambia la atracción entre las capas. El metal cambia de forma sin romperse.



En resumen

- Algunos parámetros que ayudan a entender algunas propiedades como estabilidad, estructura, etc. Son experimentales como las energías de enlace y las longitudes de enlace.
- Estos parámetros y el enlace mismo, no es fácil de explicar en términos simples, es necesario recurrir a modelos.
- Algunos parámetros simples como la electronegatividad pueden explicar satisfactoriamente algunas observaciones como la polaridad de las moléculas.

