

## QUÍMICA INORGÁNICA

Curso Académico 2.003-2.004

### Unidad didáctica número 4.

### Energía de las uniones entre las especies químicas. Enlace químico.

### GUÍA DE ESTUDIO.

#### I.- CONTENIDOS.

Hasta aquí, al menos implícitamente, se ha considerado el átomo como entidad independiente y se han analizado diversas cuestiones relacionadas con su constitución, estructura y propiedades; asimismo se ha aludido al comportamiento de los sistemas materiales, los cuales están constituidos por especies químicas. Sin embargo (tanto si forman parte una especie química como de un sistema material constituidos por especies atómicas) los átomos no se encuentran aislados como entidades individuales; otro tanto hay que decir de especies químicas más complejas. Ello es debido a que, en la práctica, cualquiera que sea el sistema entre las especies químicas individuales de cualquier sistema existen interacciones energéticamente significativas que tienden a unirlos. A la energía responsable de la unión de las entidades químicas se le denomina enlace.

Si se define el **enlace químico** como la energía responsable de la unión de las entidades químicas, es obvio que, en la realidad, hay un solo tipo de enlace: “la energía responsable de la unión de las entidades químicas”. Sin embargo, razones históricas hacen que, normalmente se hable de manera que sugiere la existencia de diferentes clases de enlaces. En realidad hay otra razón: se suele confundir “modelo” con “realidad”.

Al estudiar el enlace entre átomos se ha pretendido justificar, y explicar en lo posible, tanto la energía de las uniones interatómicas como la estereoquímica de la especie resultante; para ello, históricamente se han propuesto diversos modelos. Aparte esos modelos de enlace también se han propuesto otros que no son realmente “de enlace”, puesto que no se plantean los aspectos relacionados con la energía de enlace, sino que únicamente intentan postular la estereoquímica de las especies moleculares; este es el caso de la denominada Teoría de la repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) que conduce a la obtención de los llamados (quizá de manera impropia) diagramas de Lewis. Dicha teoría se basa en el cálculo del número de pares de electrones que rodean al átomo central, situándolos a su alrededor de manera que las repulsiones electrostáticas sean las menores posible, a fin de que el contenido energético de la molécula sea mínimo; la disposición estérica de esos pares de electrones compartidos condicionan la estructura básica de la molécula, estructura que podrá verse modificada por la repulsión debida a los pares de electrones no compartidos del átomo central.

Por lo que respecta al enlace químico propiamente dicho, cuando se ha intentado explicar su naturaleza y justificar las uniones entre especies químicas muy diversas, se ha recurrido a “modelos” que son de utilidad en un número limitado de casos y/o sistemas; pero no en la totalidad de los sistemas y situaciones. Basta repasar cualquier libro clásico de Química General (y de Química Inorgánica) para encontrar términos tales como “enlace iónico”, “enlace covalente”, “enlace covalente coordinado” e incluso “enlace metálico”; términos que consideramos trasnochados y que, en cualquier caso, denominan a modelos.

Aquí consideraremos la existencia de un único enlace químico (la energía responsable de la unión de las entidades químicas) y conscientes de nuestras limitaciones (que nos impiden utilizar un solo modelo válido en todos los casos), plantearemos el tema de manera que para comprender las causas y la naturaleza del mismo habrá que utilizar dos modelos: un modelo de compartición de electrones y otro electrostático. Ambos modelos serán utilizados para justificar en lo posible el enlace entre las diferentes especies químicas.

#### 4.- ENERGÍA DE LAS UNIONES ENTRE LAS ESPECIES QUÍMICAS. ENLACE QUÍMICO.

##### 4.1.- Enlace químico.

A.- Definición.

B.- Teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia y diagramas de Lewis.

C.- Modelos.

##### 4.2.- Modelo Covalente.

###### 4.2.1.- Teoría del enlace de valencia (T.E.V).

4.2.1.1.- Aplicación de la T.E.V. al estudio de las especies moleculares.

A.- Orbitales atómicos.

B.- Orbitales híbridos.

C.- Estereoquímica de las especies moleculares.

D.- Enlaces múltiples.

4.2.1.2.- Aplicación de la T.E.V. al estudio de los compuestos de coordinación.

4.2.1.3.- Aplicación de la T.E.V. al estudio de las redes metálicas.

###### 4.2.2.- Teoría del orbital molecular (T.O.M.).

4.2.2.1.- Aplicación de la T.O.M. al estudio de las especies moleculares.

A.- Moléculas biatómicas homonucleares.

B.- Moléculas biatómicas heteronucleares.

C.- Moléculas triatómicas homonucleares.

D.- Moléculas triatómicas heteronucleares.

4.2.2.2.- Aplicación de la T.O.M. al estudio de los compuestos de coordinación.

4.2.2.3.- Aplicación de la T.O.M. al estudio de las redes metálicas.

##### 4.3.- Modelo electrostático.

4.3.1.- Aplicación del modelo electrostático al estudio de sistemas anión-cation (Redes iónicas).

4.3.1.1.- Estequiometría de las redes iónicas.

4.3.1.2.- Redes iónicas tipos.

- 4.3.1.3.- Energía reticular.
  - A.- Energía de las fuerzas atractivas.
  - B.- Energía de las fuerzas repulsivas.
  - C.- Ecuaciones para el cálculo de la energía reticular.
    - Ecuación de Born-Landé.
    - Ecuación de Born-Mayer.
    - Ecuación de Kapustinkii.
  - D.- Influencia de los radios y cargas de los iones en el valor de la energía reticular.
- 4.3.1.4.- Propiedades características de los compuestos con enlace iónico.
  - A.- Estereoquímica.
  - B.- Dureza.
  - C.- Dilatación térmica.
  - D.- Fragilidad.
  - E.- Conductividad eléctrica.
  - F.- Solubilidad.
- 4.3.1.5.- Polarización de los iones y carácter covalente parcial del enlace iónico.
- 4.3.2.- Aplicación del modelo electrostático a los compuestos de coordinación. Teoría del campo cristalino (T. C. C.).
  - 4.3.2.1.- Desdoblamiento de los orbitales d en un campo octaédrico.
  - 4.3.2.2.- Desdoblamiento de los orbitales d en un campo tetraédrico.
  - 4.3.2.3.- Desdoblamiento de los orbitales d en un campo cuadrado.
- 4.3.3.- Aplicación del modelo electrostático al estudio de las uniones intermoleculares.
  - 4.3.3.1.- Enlaces intermoleculares debidos a fuerzas de Van der Waals.
    - A.- Fuerzas intermoleculares de dispersión nuclear o de London.
    - B.- Fuerzas intermoleculares de inducción o de Debye.
    - C.- Fuerzas intermoleculares de orientación o de Keelson.
    - D.- Aditividad de las energías de los enlaces por fuerzas intermoleculares de Van der Waals.
  - 4.3.3.2.- Enlace de hidrógeno.
- 4.2.- Utilidad de los diferentes modelos de enlace para justificar la estereoquímica y las propiedades de las especies químicas.
  - 4.2.1.- El enlace en las especies moleculares.
  - 4.2.2.- El enlace en los compuestos de coordinación.
    - A.- Compuestos de coordinación de los elementos del Bloque p.
    - B.- Compuestos de coordinación de los elementos del Bloque s.
    - C.- Compuestos de coordinación de los elementos del Bloque d.
      - Complejos con ligandos donadores  $\sigma$  (y/o con sólo enlaces  $\sigma_{M-L}$ ).
      - Complejos con ligandos donadores  $\sigma$  y aceptores  $\pi$ .
      - Complejos con ligandos donadores  $\pi$  y aceptores  $\pi$ .
    - D.- Compuestos de coordinación de los elementos del Bloque f.
  - 4.2.3.- El enlace en los compuestos organometálicos.
    - A.- Compuestos organometálicos con enlace iónico.
    - B.- Compuestos organometálicos con enlace covalente  $\sigma_{M-C}$ .

- C.- Compuestos organometálicos con enlace multicéntrico.
- D.- Compuestos organometálicos con ligandos que poseen enlaces múltiples.

4.2.4.- El enlace en los metales.

4.2.5.- El enlace entre especies moleculares discretas.

#### BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA:

- Valenzuela Calahorro, C.; “Química General e Inorgánica para estudiantes de Farmacia”. Editorial Universidad de Granada. Granada, 2.002. Capítulos 2, 17 y 18.
- Petrucci, R. H.; Harwood, W. S. y Herring, F. G..”Química General” (8ª edición). Prentice Hall. Madrid, 2.002. Capítulos 11, 12 y 13.
- Housecroft, C. E., Sharpe, A. G.; “Inorganic Chemistry”. Prentice Hall. Harlow, 2001. Capítulos 4, 5, 9 y 20.
- Huheey, J. E., Keiter, R. L.; “Química Inorgánica”. 4ª edición, Oxford University Press. Oxford, 2001. Capítulos 11 y 13.
- Purcell, K. F., Kotz, J. C.; “Química Inorgánica”. Editorial Reverté. Barcelona, 1979. Capítulos 9 y 15.