UNIDAD 5

UNIONES QUIMICAS

INTRODUCCION

Durante mucho tiempo después de que fueron identificados con certeza los primeros compuestos químicos, los enlaces entre los átomos que formaban parte de ellos permanecían todavía en el misterio. Sin embargo, a partir del siglo XIX se hicieron numerosas tentativas para explicar la naturaleza de las fuerzas que mantienen unidos a los átomos en un compuesto, los iones y las moléculas en un cristal, etc.

Poco a poco surgieron numerosas teorías y se llegó gradualmente a considerar cada vez más importante el estudio del enlace químico. Esto constituye, en la actualidad, uno de los principales campos de investigación de la ciencia química.

Un criterio importante para predecir el tipo de enlace que se forma entre dos átomos es el criterio de sus electronegatividades. Este concepto fue introducido por primera vez por Linus Pauling, significando un avance en la comprensión de los diferentes tipos de enlace.

O B J E T I V O S

OBJETIVO GENERAL

Al término de la unidad, el alumno:

Comprenderá las diferentes formas de combinación entre los elementos - en base a los principios de la estructura atómica.

OBJETIVOS ESPECIFICOS

El alumno:

5.1 Describirá las causas de formación de enlace.

5.2 Distinguirá los distintos tipos de enlaces químicos.

5.3 Relacionará la electronegatividad con los diferentes tipos de enlaces.

5.4 Relacionará las propiedades de los compuestos con el tipo de enlace.

5.5 Explicará la formación e importancia del "puente de hidrógeno".

5.6 Describirá los tipos de fuerzas e interacción intermolecular.

En las unidades anteriores hemos estudiado los conceptos de compuesto y elemento en lo que respecta a sus propiedades físicas y químicas. Así hemos aprendido que algunos compuestos están formados por moléculas, y los - elementos, por átomos.

En la unidad 4 aprendimos como están consituídos, a su vez, estos últimos. Sabemos que las partículas fundamentales del átomo son tres: los -- protones, los neutrones y los electrones. También sabemos cómo se relacionan y distribuyen estas partículas.

Ahora es apropiado plantear una serie de preguntas: ¿por qué se forman los compuestos?, ¿qué fuerzas originan que los átomos individuales se-agrupen en moléculas?. ¿están todos los compuestos formados por moléculas? Las fuerzas que mantienen juntos a los átomos en los compuestos se llaman- **enlaces o uniones químicas.** Sin embargo, esta simple definición no nos da-mucha información. Para poder responder adecuadamente a estas preguntas es necesario que comprendamos algunas propiedades de los átomos, derivadas de la estructura que poseen éstos.

.1 ENERGIA DE IONIZACION

Es posible medir experimentalmente las energías requeridas para separar electrones de los átomos gaseosos. Así, la energía de ionización ha sido definida como *la energía necesaria para desalojar el electrón en el más alto nivel de energía de un átomo gaseoso*. Cuando un electrón es separado de un átomo, éste se ioniza; es decir, se convierte en un ion positivo. La tabla 1 contiene algunas energías de ionización experimentales.

NUMERO ATOMICO	ELEMENTO	$(E.I.)_1$	$(E.I.)_2$	$(E.I.)_3$	$(E.I.)_4$
		(KCAL/MOL)			
1	H	313	-	-	-
2	He	567	1254	-	-
3	Li	124	1744	2823	-
4	Be	215	420	3548	5020
5	B	191	580	874	5980
6	C	260	562	1104	1487
7	N	335	683	1094	1786
8	O	314	811	1267	1785
9	F	402	807	1445	2012
10	Ne	497	947	1500	2241
11	Na	118	1091	1652	2280
12	Mg	176	347	1848	2521
13	Al	138	434	656	2766
14	Si	188	377	772	1040
15	P	254	453	695	1184
16	S	239	540	808	1090
17	Cl	300	549	920	1230
18	Ar	363	637	943	1379
19	K	100	734	1100	1405
20	Ca	141	274	1180	1550
35	Br	273	498	828	1154
36	Kr	323	566	851	-
37	Rb	96	634	920	-
38	Sr	131	254	-	-
53	I	241	440	723	-
54	Xe	280	489	740	-
55	Cs	90	579	-	-
56	Ba	120	231	-	-
86	Rn	248	-	-	-

TABLA 1. Energías de ionización

La primera energía de ionización, $(E.I.)_1$, es la energía requerida para la reacción

átomo gaseoso + energía ⟶ ion gaseoso monopositivo + electrón

$$M^0(g) + (E.I.)_1 \longrightarrow M^+(g) + e^-$$

en donde $M^0(g)$ corresponde a un átomo de cualquier elemento en el estado gaseoso.

La segunda energía de ionización, $(E.I.)_2$, es la energía requerida para el proceso

ion gaseoso monopositivo + energía ⟶ ion gaseoso dipositivo + electrón

$$M^+(g) + (E.I.)_2 \longrightarrow M^{+2}(g) + e^-$$

De manera similar se definen la tercera, cuarta y mayores energías de ionización.

.1.a LAS ENERGIAS DE IONIZACION DEL LITIO Y DEL SODIO

Consideremos las energías de ionización del litio (numero atómico = 3). En la tabla 1 vemos que se requieren 124 Kcal/mol para la ionización del primer electrón en la reacción

$$Li(g) + (E.I.)_1 \longrightarrow Li^+(g) + e^-$$

$$\left[\textcircled{3+} \ (1s^2\ 2s^1)^{-3} \right]^0 + (E.I.)_1 \longrightarrow \left[\textcircled{3+} \ (1s^2)^{-2} \right]^{+1} + e^-$$

En esta representación aparecen el núcleo atómico -formado por 3 protones- y la corteza electrónica -formada por 3 electrones $(1s^2 2s^1)^{-3}$ lo que nos da por resultado un átomo eléctricamente neutro. Al aplicarle $(E.I.)_1$ a éste se desprende un electrón, dando por consecuencia un exceso de carga positiva igual a 1, formándose el ion monopositivo.

Si continuamos aplicando energía, la ionización del siguiente electrón en la reacción

$$Li^{+} + \text{energía} \longrightarrow Li^{+2} + \text{electrón}$$

ión gaseoso monopositivo + energía ⟶ ión gaseoso dispositivo + electrón

$$\left[\textcircled{3+}\ (1s\ )^{-2}\right]^{+1} + (E.I.)_2 \longrightarrow \left[\textcircled{3+}\ (1s^1)^{-1}\right]^{+2} + e^-$$

requiere casi quince veces más energía, 1744 Kcal. La primera ioniza--- ción dio por resultado un ion con una capa llena de electrones ($1s^2$)--- y para eso se requirió relativamente poca energía. Pero la segunda ---- ionización requiere pasar de una configuración con capa llena de elec-- trones a otra incompleta. Hace falta una gran cantidad de energía pa--- ra efectuar tal cambio, lo que claramente indica que este cambio no --- es favorable.

Analicemos ahora el caso del sodio (número atómico = 11). En la--- tabla 1 encontramos que se requieren 118 Kcal/mol para la ionización--- del primer electrón de acuerdo a la reacción

$$Na(g) + (E.I.)_1 \longrightarrow Na^{+}(g) + e^-$$

$$\left[\textcircled{11+}\ (1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1)^{-11}\right]^{0} + (E.I.)_1 \longrightarrow \left[\textcircled{11+}\ (1s^2\ 2s^2\ 2p^6)^{-10}\right]^{+1} + e^-$$

De manera similar al caso del litio, el núcleo átomico aparece co- mo (11+), por poseer 11 protones y la corteza electrónica, formadà a su-- vez por 11 electrones, aparece como $(1s^1 2s^2 2p^6 3s^1)^{-11}$, lo que nos da -- por resultado un átomo electricamente neutro. Al aplicarle a este la -- $(E.I.)_1$ se desprende un electrón, dando, por consiguiente, un exceso de cargas positivas igual a 1, formándose el ion monopositivo.

Si continuamos aplicando energía, la ionización del siguiente elec trón en la reacción.

$$Na^{+}(g) + (E.I)_2 \longrightarrow Na^{+2}(g) + e^-$$

$$\left[\textcircled{1+}\ (1s^2\ 2s^2\ 2p^6)^{-10}\right]^{+1} + (E.I.)_2 \longrightarrow \left[\textcircled{11+}\ (1s^2\ 2s^2\ 2p^5)^{-9}\right]^{+2} + e^-$$

requiere casi 10 veces más energía, 1091 Kcl/mol. Veamos que la pérdida

del primer electrón dio por resultado un ion con una capa llena de -- electrones $(1s^2 2s^2 2p^6)^{-10}$ y para ello se requirió poca energía. La -- forma del ion Na^{+2} (segunda ionización) requiere pasar de una confi-- guración con capa llena de electrones a otra incompleta. Al igual que en el caso anterior se ve claramente que tal cambio no es favorable.

1.b ¿PORQUE EL MAGNESIO FORMA UN ION + 2?

El magnesio (número atómico = 12) tiene una primera energía de- ionización de 176 Kcal/mol; y una tercera energía de ionización de -- 347 Kcal/mol. De estos datos se puede concluir que no es difícil se- parar dos electrones del magnesio atómico, pero es muy difícil remo-- ver un tercer electrón. De acuerdo al modelo que hemos venido emplean do la ionización del magnesio sería:

$$Mg(g) + (E.I.)_1 \longrightarrow Mg^{+}(g) + e^-$$

$$\left[\textcircled{12+}\ (1s^2 2s^2 2p^6 3s^2)^{-12}\right]^{0} + (E.I.) \longrightarrow \left[\textcircled{12+}\ (1s^2 2s^2 2p^6 3s^1)^{-11}\right]^{+1} + e^-$$

$$\left[\textcircled{12+}\ (1s^2 2s^2 2p^6 3s^1)^{-11}\right]^{+1} + (E.I.)_2 \longrightarrow \left[\textcircled{12+}\ 1s^2 2s^2 2p^6)^{-10}\right]^{+2} + e^-$$

Vemos que la pérdida de los dos primeros electrones lleva a la -- formación de un ion Mg^{+2}, con capa llena de electrones ($1s^2 2s^2 2p^6$). - La tercera ionización requiere ir de una configuración de capa llena- de electrones a una incompleta; el hecho de que este cambio requiera- tanta energía -más de 10 veces que en primera ionización y más de 7- veces que en la segunda- indica que no es un cambio favorable. Las -- energías de ionización apoyan el hecho experimental de que el magne-- sio forma iones +2 en lugar de iones +3.

También es posible, aunque con más dificultad, medir la energía- liberada cuando un átomo gaseoso acepta un electrón para convertirse - en un ion negativo.

En la reacción de fluor (número átomico =9):

$$F(g) + e^- \longrightarrow F(g) + \text{energía}$$

$$\left[\textcircled{9+}\ (1s^2 2s^2 2p^6)^{-9}\right] + e^- \longrightarrow \left[\textcircled{9+}\ (1s^2\ 2s^2\ 2p^6)^{-10}\right]^{-1} + \text{energía}$$

se desprende energía que puede ser medida. Esa energía se llama la *electroafinidad* del átomo del flour. Las energías de ionización y las electroafinidades miden las propiedades de retención o atracción de electrones, pero sólo para las condiciones muy especiales bajo las cuales han sido medidas.

La *afinidad electrónica* se mide en *kilocalorías por átomo gramo* o en *electrón volts por átomo*. Habiendo ganado un átomo un electrón, aquél se carga electronegativamente y la adición posterior de más electrones involucra un nuevo desprendimiento de energía; las afinidades electrónicas subsiguientes a la primera llevarán signo negativo.

Las afinidades electrónicas no pueden medirse directamente, pero es posible calcular sus valores aproximados por ciertos métodos. Las afinidades electrónicas del algunos elementos aparecen en la Tabla 2. Los halógenos poseen altas afinidades electrónicas, ya que la adición de un electrón completa su capa más externa.

TABLA 2 AFINIDADES ELECTRONICAS DE ALGUNOS ELEMENTOS

Elemento	Cambio en su configuración electrónica	Afinidad electrónica (eV)
Sodio	$Na(1s^2 2s^2 2p^6 3s^1) + e = Na^-(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2)$	0.6
Cobre	$Cu(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1) + e = Cu^-(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2)$	2.0
Fluor	$F(1s\ 2s\ 2p) + e = F^-(1s\ 2s\ 2p)$	3.6
Cloro	$Cl(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5) + e = Cl^-(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$	3.8
Oxígeno	$O(1s^2 2s^2 2p^4) + 2e = O^-(1s^2 2s^2 2p^6)$	-7.3

El hecho de que se libere energía nos dice que la *atracción* entre el núcleo de flúor y el electrón adicional es *mayor que la repulsión* entre los electrones del átomo de flúor y el electrón adicional. La liberación de energía indica, por cierto, que hay una cierta estabilidad asociada al hecho de completar la capa de valencia del flúor. Un ion flúor, que posee el nivel 2 completo, tiene mayor energía y es más estable que un átomo de flúor, que tiene el nivel 2 incompleto.

estable que un átomo de flúor, que tiene el nivel 2 incompleto.

Ambos datos - afinidad electrónica y potencial de ionización - pueden combinarse para predecir qué átomos son capaces de arrancar electrones a otros.

Los compuestos se consideran predominantemente electrovalentes cuando su porcentaje de electrovalencia es de 50%, o mayor.

Los compuestos en que predomina la covalencia se dividen a su vez en no polares y polares; el límite es arbitrario. En términos generales, un compuesto se considera predominantemente covalente polar, cuando tiene de 25 a 50% de carácter iónico.

Un átomo que ha perdido o ganado uno o más electrones se denomina ion. También recibe este nombre un grupo de átomos con una carga eléctrica como el ion SO^4.

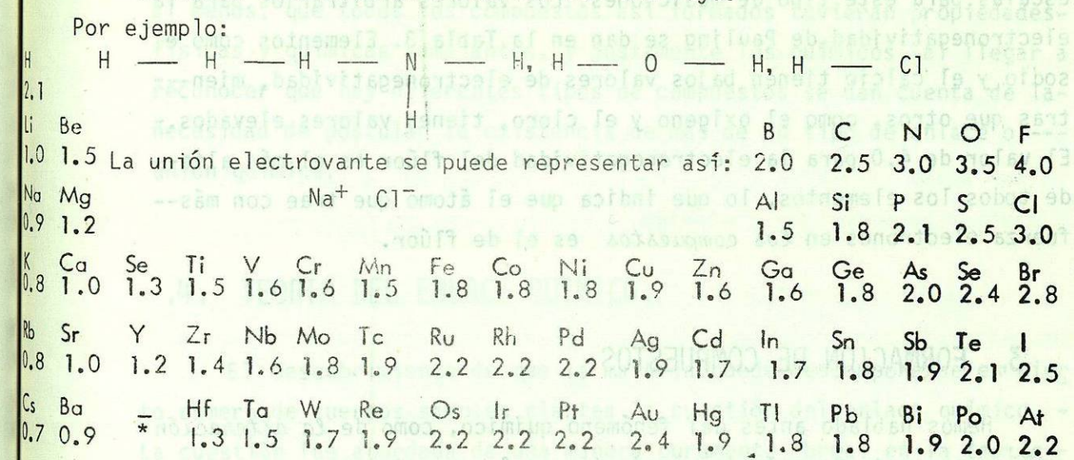
La covalencia pura se produce sólo cuando se unen dos átomos del mismo elemento no metálico para producir una molécula.

Cuando reacciona un no metal con otro no metal, el carácter iónico de la unión es pequeño (CO_2, 22%; Cl, 16%).

Cuando reacciona un metal con un no metal, la unión tiene un alto porcentaje de electrovalencia (v.gr.: NaCl,67%; KF,92%;$CaCl_2$,63%).

La unión covalente se simboliza con una raya.

Por ejemplo:



* Los elementos comprendidos entre el bario y el hafnio tienen valores de 1.1 a 1.2

Dif. Electr.	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
Porcentaje	0.5	1	2	4	6	9	12	15	19	22	26	30	34	39	43	47
Dif. Electr.	1.7	1.8	1.9	2.0	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.2
Porcentaje	51	55	59	63	67	70	74	76	79	82	84	86	88	89	91	92

2. ELECTRONEGATIVIDAD

Para poder estudiar las características de un enlace químico entre átomos, el químico debe tener alguna forma de comparar las fuerzas de atracción entre electrones de átomos ya combinados químicamente. Desafortunadamente, no es posible todavía medir directamente esas propiedades de los átomos. Consecuentemente, los químicos han ideado medios indirectos para comparar las fuerzas de atracción electrónica de los átomos en los *enlaces químicos*.

Bajo vigorosa influencia del químico norteamericano Linus Pauling, se ha podido calcular una importante propiedad de los átomos, a la que se ha dado el nombre de *electronegatividad*. La electronegatividad de un átomo es una medida relativa del poder de atraer electrones que tiene un átomo cuando forma parte de un *enlace químico*. Hay que hacer notar que los químicos calculan la electronegatividad de los átomos por distintos métodos, de suerte que existen diferentes escalas para este tipo de mediciones. Los valores arbitrarios para la electronegatividad de Pauling se dan en la Tabla 3. Elementos como el sodio y el calcio tienen bajos valores de electronegatividad, mientras que otros, como el oxígeno y el cloro, tienen valores elevados. El valor de 4.0 para la electronegatividad del flúor es el más alto de todos los elementos, lo que indica que el átomo que trae con más fuerza electrones en *los compuestos* es el de flúor.

3. FORMACION DE COMPUESTOS:

Hemos hablado antes del fenómeno químico, como de *la alteración que experimenta la materia cuando tienen lugar extensas y permanentes modificaciones en las propiedades fundamentales de una sustancia determinada*. Una alteración en la clase de materia supondrá la producción de una nueva substancia a partir de una u otras varias. Puesto que cada substancia está representada por su propia clase de moléculas, *el cambio químico* es simplemente *una nueva distribución de átomos para constituir nuevos conjuntos moleculares*.

Ahora bien, para que exista interacción entre átomos es necesario que éstos se pongan en íntimo contacto. Además, puesto que las partes de los átomos que entran en contacto son las exteriores, la formación del enlace entre los átomos en una molécula se debe, seguramente, al comportamiento de sus electrones exteriores.

Tengamos en cuenta, de momento, que cada átomo, como conjunto, es eléctricamente neutro. Sobre esta base, no podemos esperar ninguna atracción interatómica a menos que exista alguna fuerte tendencia dentro del átomo, capaz de perturbar la neutralización eléctrica. En realidad hemos hallado ya esta tendencia; si comparamos los valores del potencial de ionización menor valor de la electronegatividad, y de forma similar, a mayor potencial de ionización mayor electronegatividad. Cabría entonces esperar que dos elementos con valores diferentes en sus electronegatividades y potenciales de ionización sufrieran, al ponerse en contacto, reacomodos de sus electrones para que ambos quedaran con sus configuraciones llenas. Sin embargo, esto implicaría, al menos, que todos los compuestos así formados tuvieran propiedades físicas y químicas semejantes, y justamente los químicos, al llegar a reconocer que hay diferentes tipos de compuestos se dan cuenta de la necesidad de postular la existencia de más de un tipo de enlace o unión química.

4. TEORIA DEL ENLACE QUIMICO.

El descubrimiento de que la materia puede descomponerse en cierto número de cuerpos simples plantea la cuestión del enlace químico. La cuestión fue abordada de una manera puramente formal en la *teoría dualista* de A. L. Lavoisier, recogida en la *Nomenclatura de los Académicos franceses* (1787). Se funda en la consideración de que los elementos se combinan dos a dos para formar compuestos binarios que pueden, a su vez, unirse para dar cuerpos más complejos.