

# ENLACE COVALENTE

## Parte 2

Comisiones 3 y 4  
Prof. Daier  
QGI 2026

1

### Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (TRPEV)

Predicción de la geometría electrónica y forma molecular.

**Principio clave:** Los pares de electrones (de enlace y libres) alrededor del átomo central **se repelen** y adoptan una disposición espacial que **minimiza esas repulsiones**.

**Limitaciones:**

- No explica cómo se forman los enlaces.
- No considera orbitales ni enlaces múltiples.

### Teoría del Enlace de Valencia (TEV)

Localización de enlaces entre átomos.

**Principio clave:** Los enlaces se forman por la superposición de orbitales atómicos que contienen electrones desapareados.

Explica:

- Geometría molecular (en parte).
- Formación de enlaces  $\sigma$  (sigma) y  $\pi$  (pi).
- Hibridación ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ , etc.).

## Teoría de Orbitales Moleculares (TOM)

**Principio clave:** Los orbitales atómicos se combinan para formar **orbitales moleculares**, que pueden extenderse sobre toda la molécula.

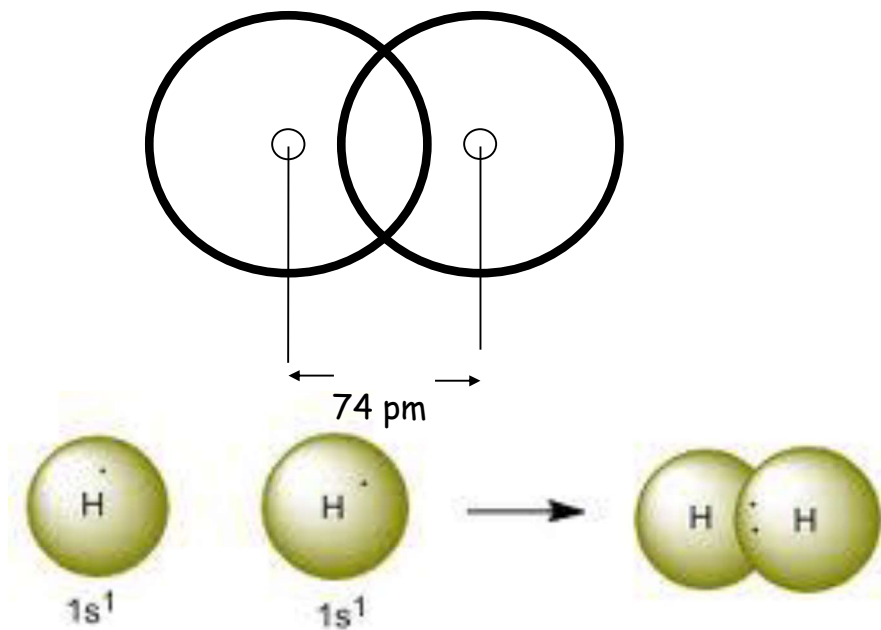
**Explica:**

- Magnetismo (por ejemplo, el oxígeno es paramagnético).
- Energía de enlace y orden de enlace.
- Espectros moleculares y estabilidad.

**Limitaciones:**

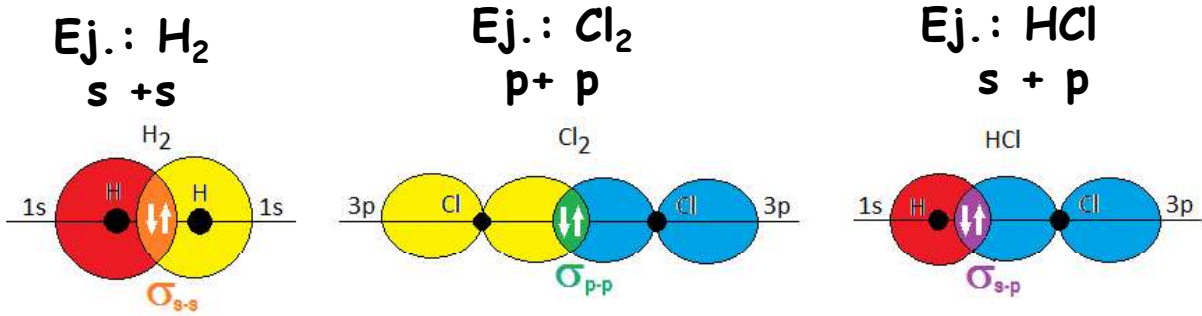
- Más compleja y matemática.

## Formación de enlace por traslape de orbitales: Teoría del enlace de valencia (TEV)

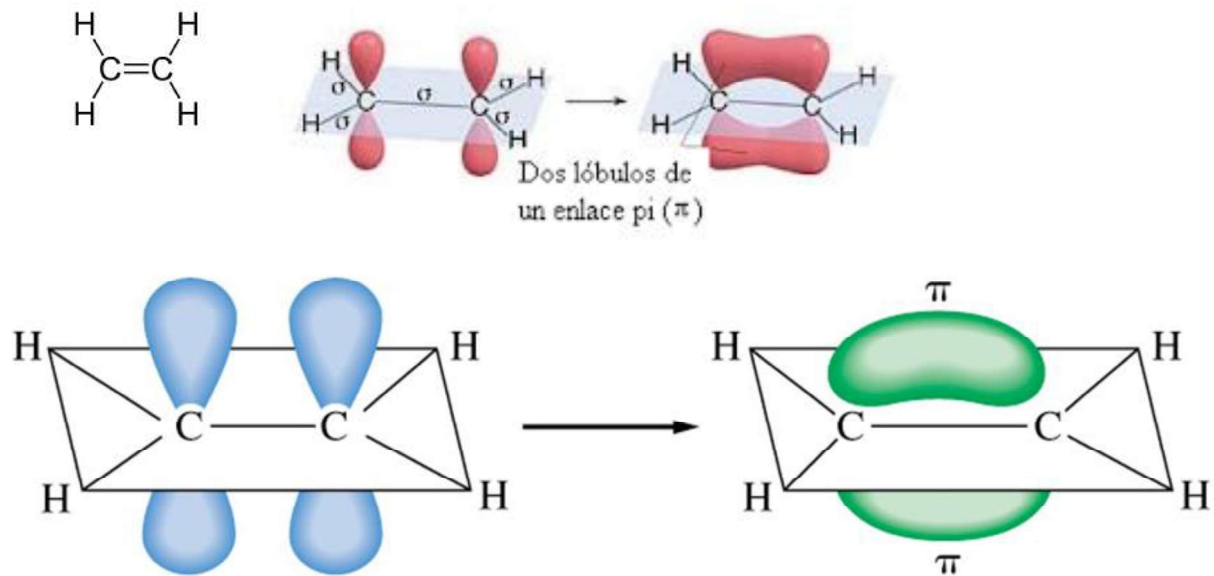


El enlace en la molécula de  $H_2$  se forma por traslape de los orbitales  $1s$  de cada átomo

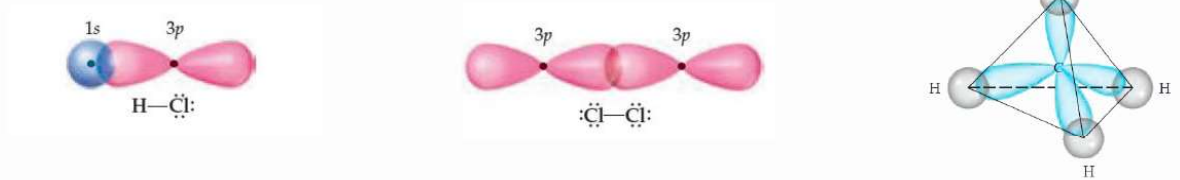
# Enlaces sigma ( $\sigma$ ) formados por solapamiento frontal de orbitales



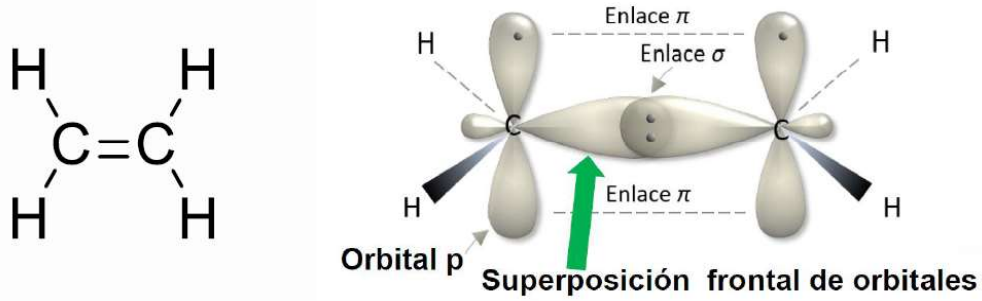
# Enlace múltiple Pi ( $\pi$ ) entre orbitales p paralelos



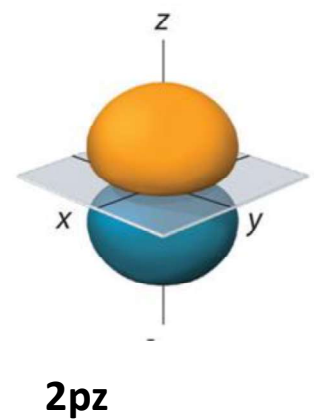
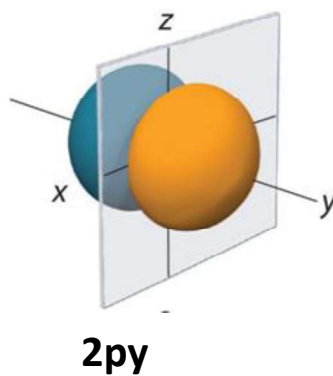
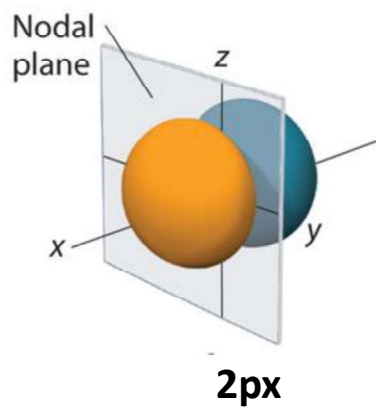
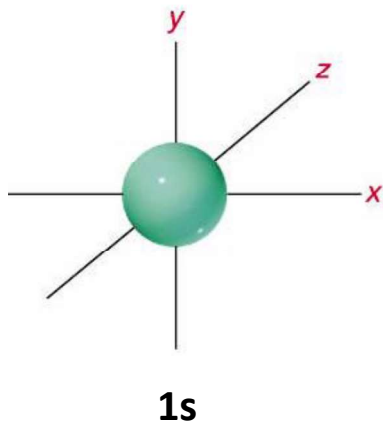
Enlace Simple **Sigma ( $\sigma$ )**: Traslape frontal

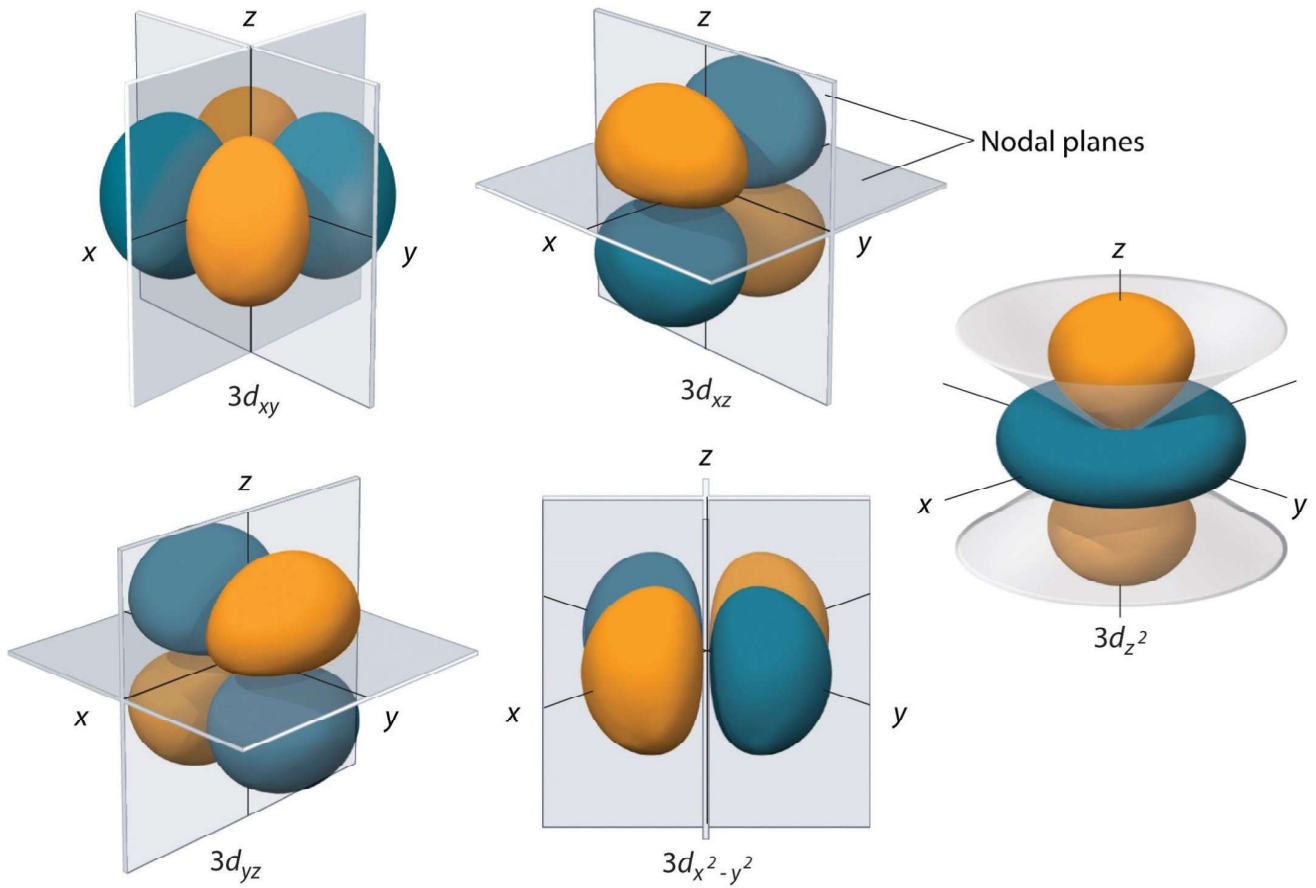


Enlace Múltiple **PI ( $\pi$ )**: Entre orbitales paralelos



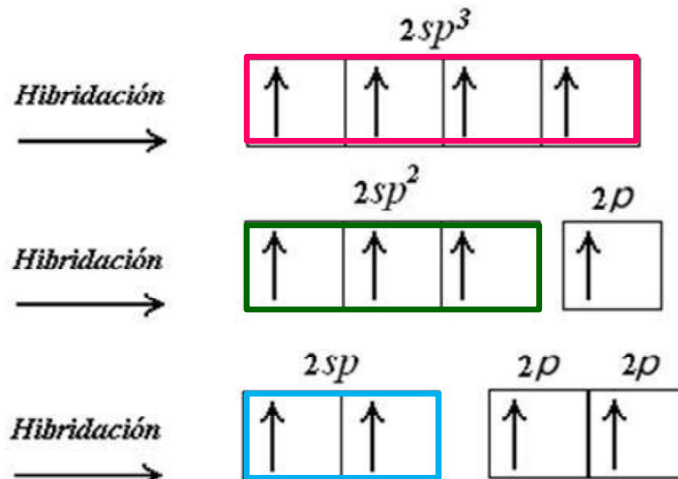
## Orbitales atómicos





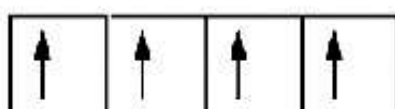
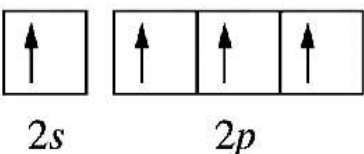
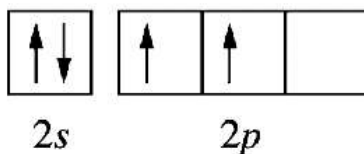
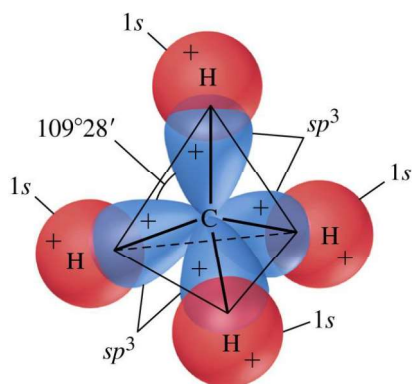
## Hibridación de orbitales del C

El átomo de C puede presentar 3 tipos de orbitales híbridos:  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ .



# Hibridación $sp^3$

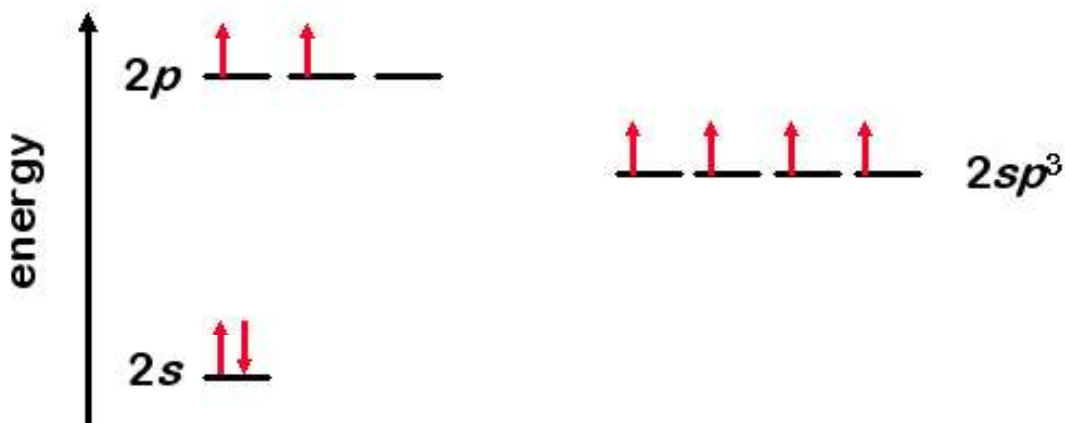
C: configuración electrónica externa:  $2s^2 2p_x^1 2p_y^1$



Metano:  $CH_4$

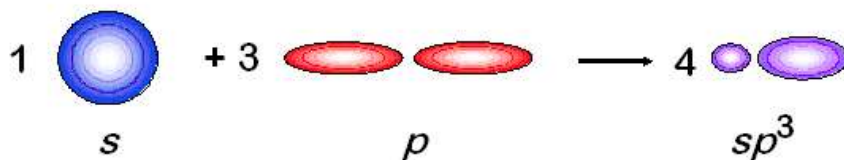
Forma molecular: tetraedro, 4 enlaces equivalentes

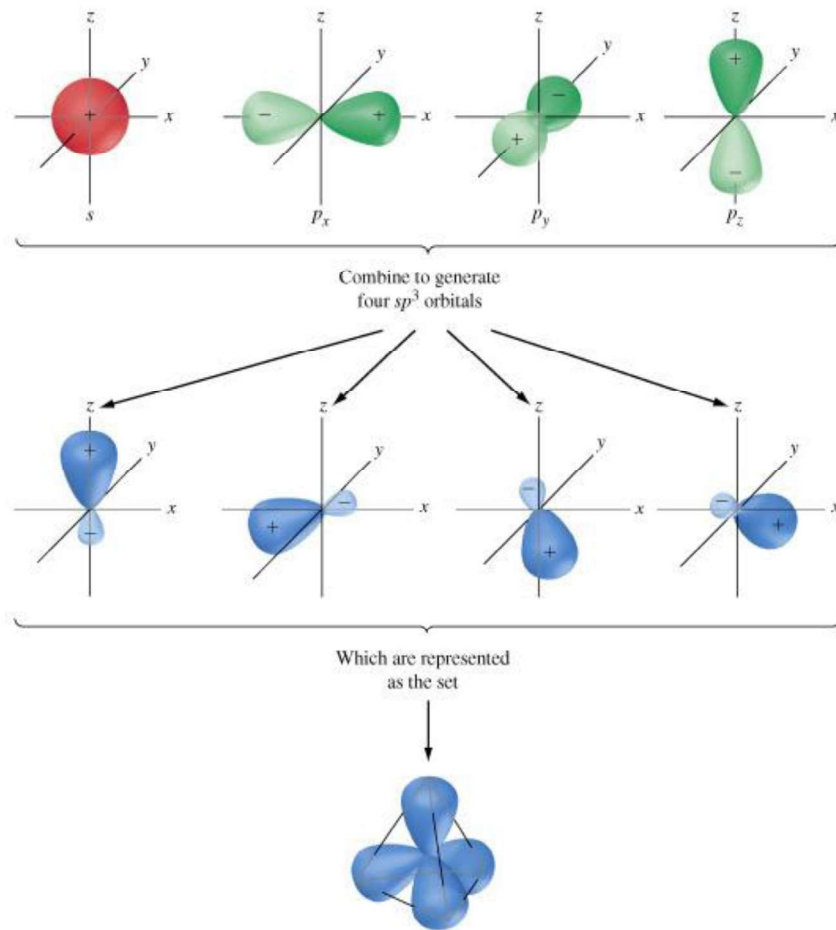
Orbitales híbridos: la mezcla de orbitales nos sirve para explicar la geometría



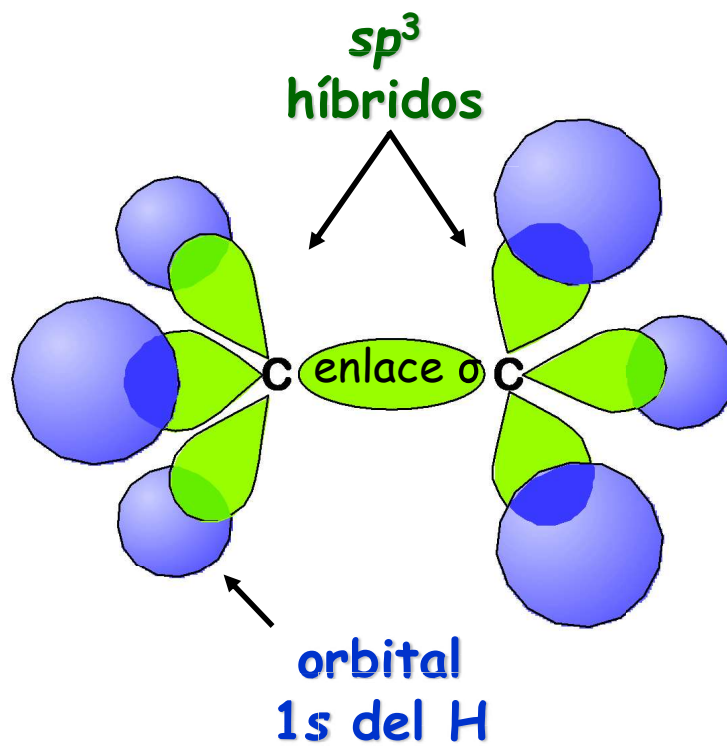
no hibridizado (estado basal)

hibridizado

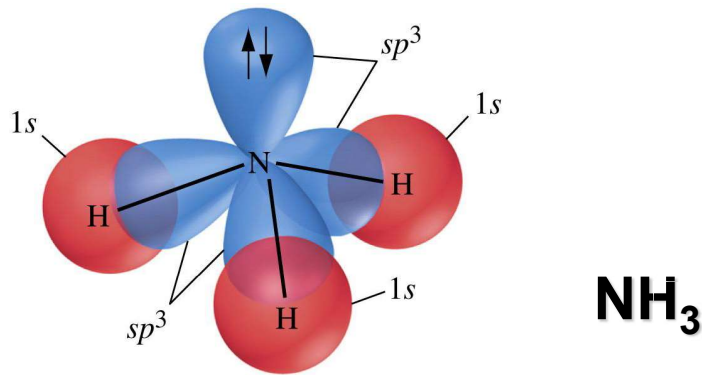
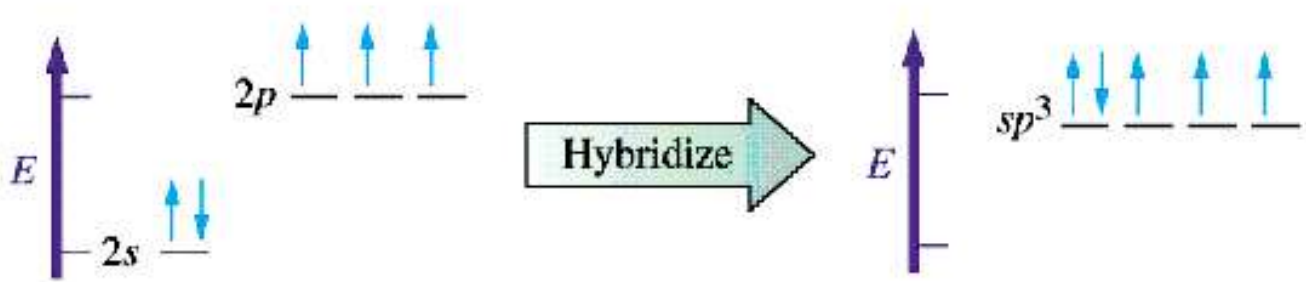




etano:  $C_2H_6$      $H_3-C-C-H_3$



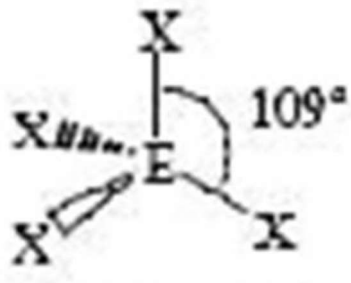
# Hibridación $sp^3$ en el N



Nº de grupos de e<sup>-</sup>

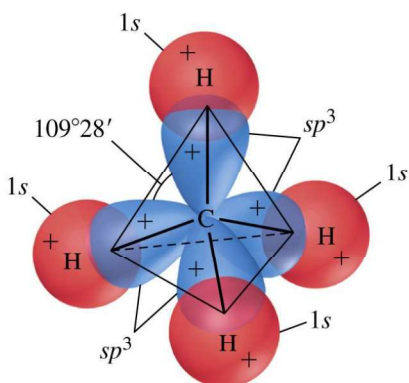
4

Geometría electrónica (predicción RPENV)



Orbitales híbridos (TEV)

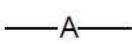
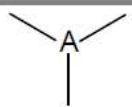
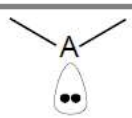
$sp^3$



tetraédrica

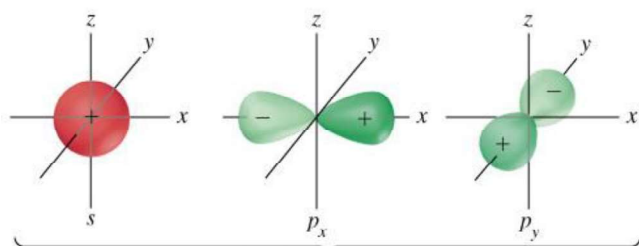
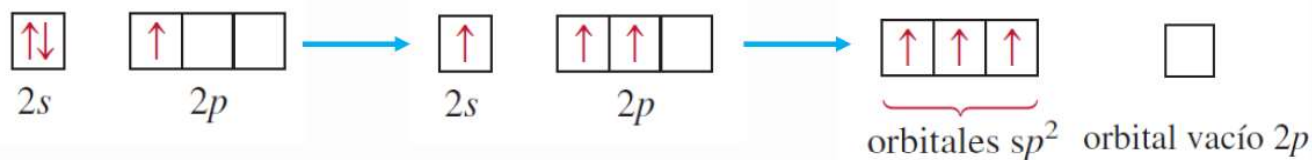
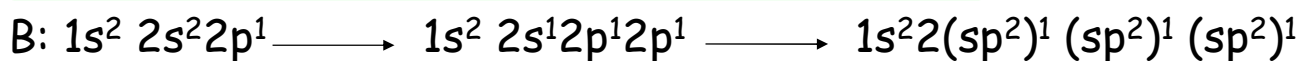
# Pag 35 de Tabla de constantes

## 19. TABLA DE GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR, E HIBRIDACIÓN

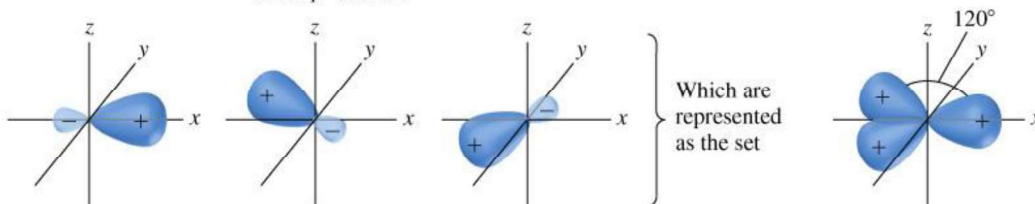
Domínios electrónicos	Domínios enlazantes	Domínios no enlazantes	Geometría electrónica	Geometría molecular	Hibridación	Figura representativa
2	2	0	Lineal	Lineal	sp	
3	3	0	Plana trigonal	Plana trigonal	sp <sup>2</sup>	
3	2	1	Plana trigonal	Angular	sp <sup>2</sup>	

17

### Hibridización sp<sup>2</sup> en el B BF<sub>3</sub>

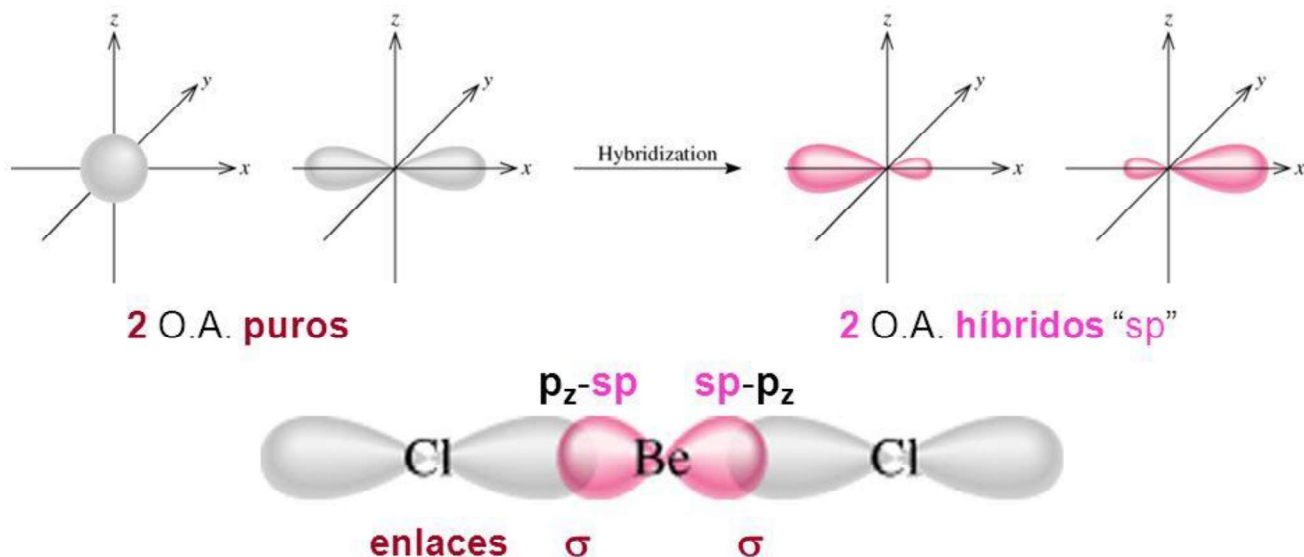
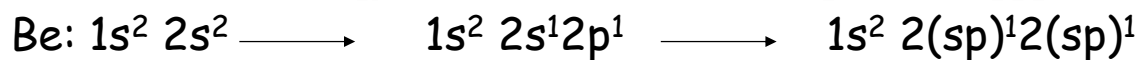


Combine to generate three sp<sup>2</sup> orbitals

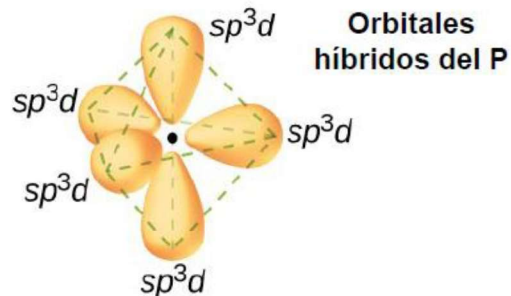
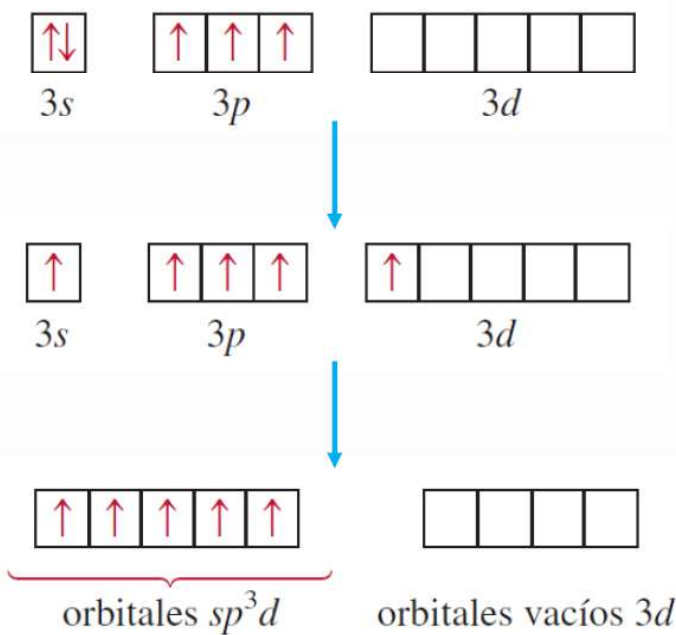
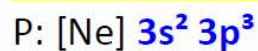


Which are represented as the set

## Hibridación $sp$ en el $\text{BeCl}_2$



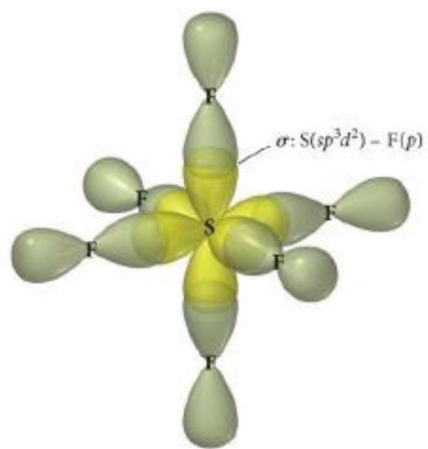
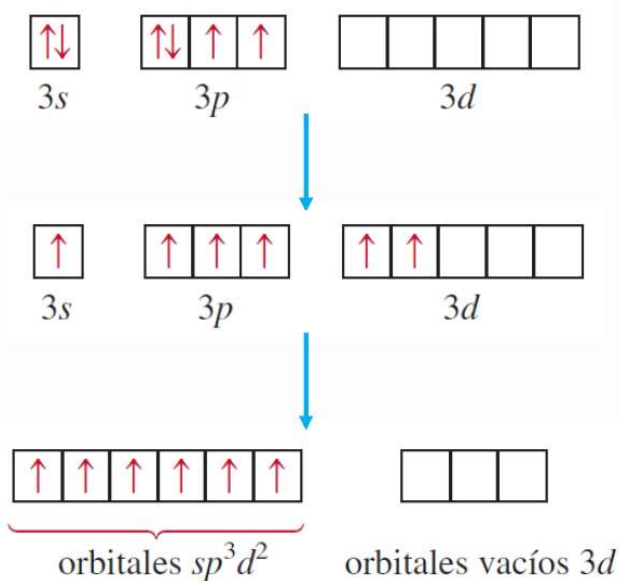
## Hibridación $sp^3d$ en el P. $\text{PCl}_5$



**Bipirámide trigonal**

# Hibridización $sp^3d^2$ en el S. $SF_6$

S: [Ne]  $3s^2 3p^4$

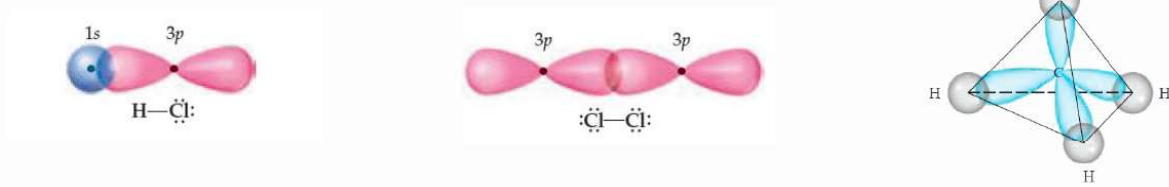


## Resumen

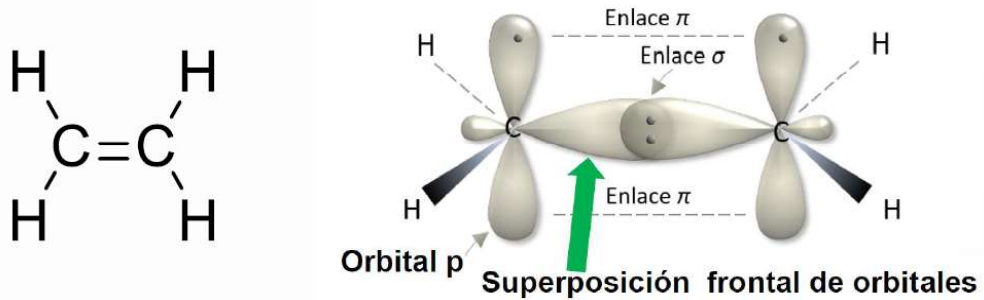
$sp$	$sp^2$	$sp^3$	$sp^3d$	$sp^3d^2$
$H-Be-H$				
lineal	Trigonal plana	tetraédrica	Bipirámide trigonal	octaédrica

# Enlaces múltiples

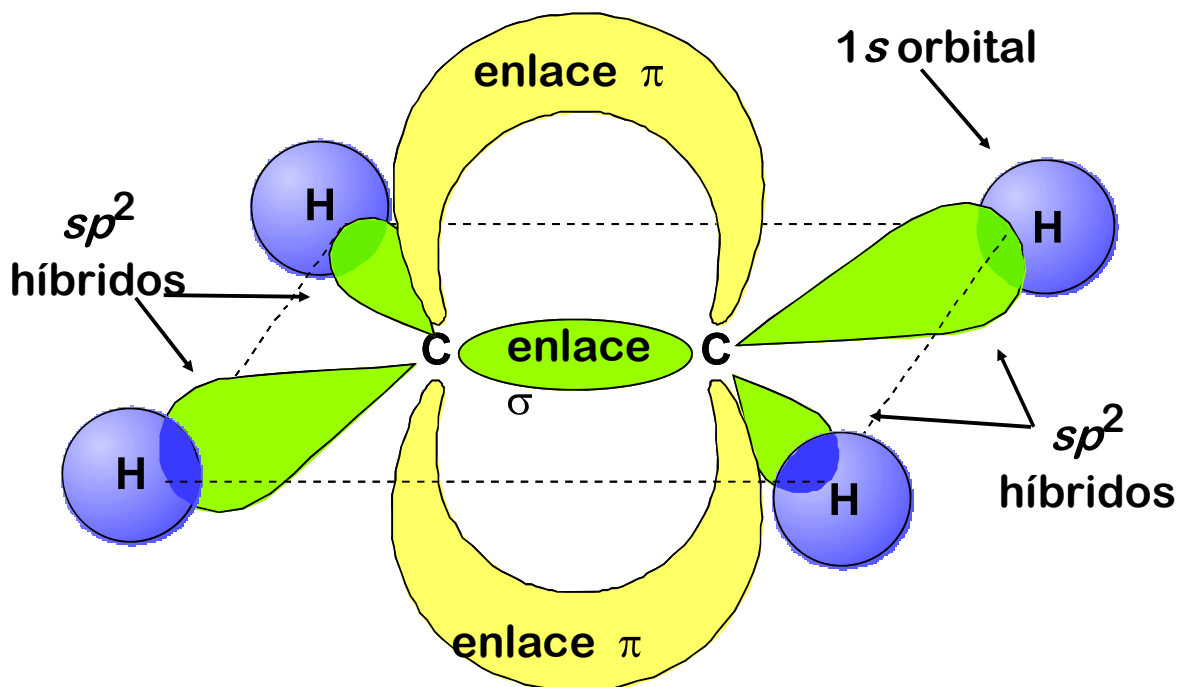
Enlace Simple **Sigma ( $\sigma$ )**: Traslape frontal



Enlace Múltiple **PI ( $\pi$ )**: Entre orbitales paralelos



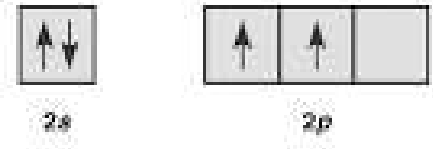
## Enlaces múltiples eteno: $C_2H_4$



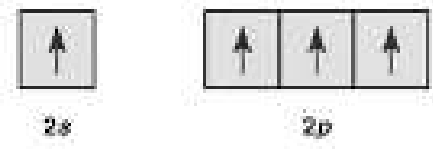
# Hibridación $sp^2$ del C

eteno:  $C_2H_4$ .  $H_2C=CH_2$

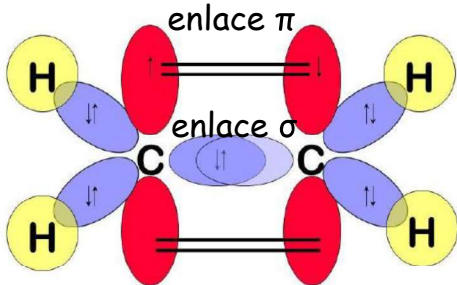
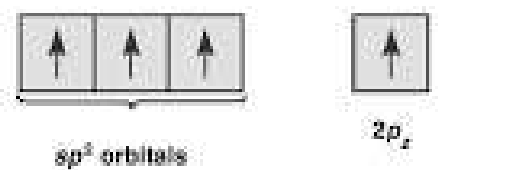
Estado fundamental



Promoción del  $e^-$



Estado híbrido  $sp^2$

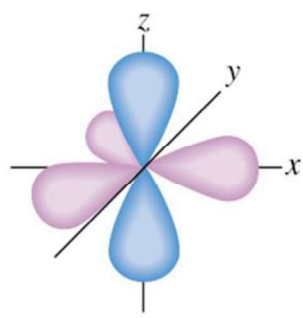


3 enlaces  $\sigma$       enlace  $\pi$

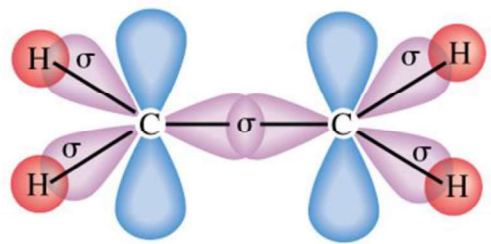
## Enlaces múltiples

eteno:  $C_2H_4$ .

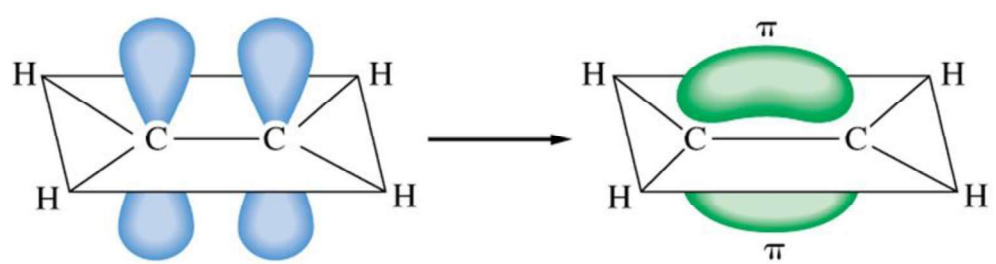
$H_2C=CH_2$



The set of orbitals  $sp^2 + p$



Sigma ( $\sigma$ ) bonds

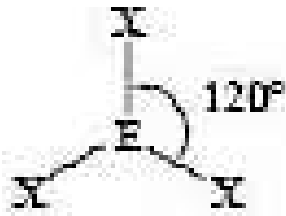


Overlap of  $p$  orbitals leading to pi ( $\pi$ ) bond

Nº de grupos de e<sup>-</sup>

3

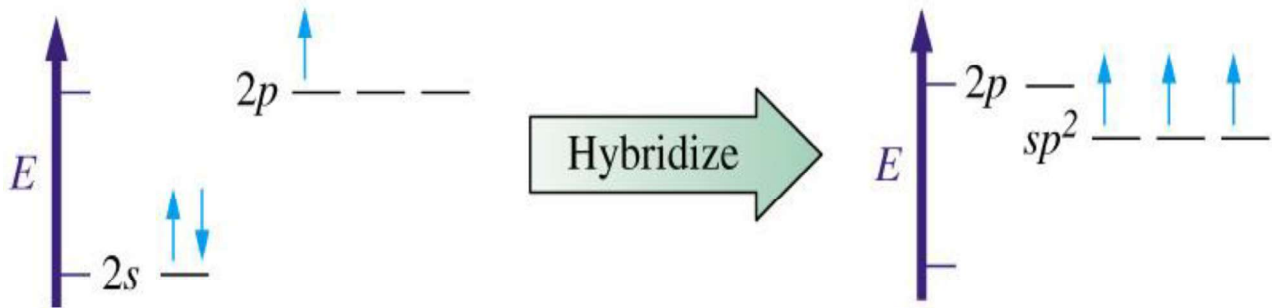
Geometría electrónica (predicción RPENV)



Trigonal Planar

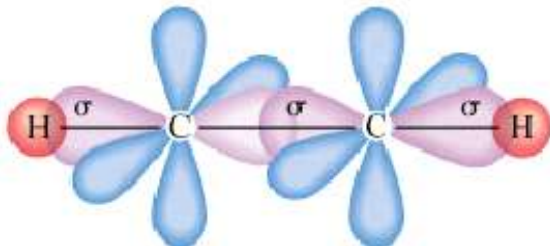
Orbitales híbridos (TEV)

$sp^2$

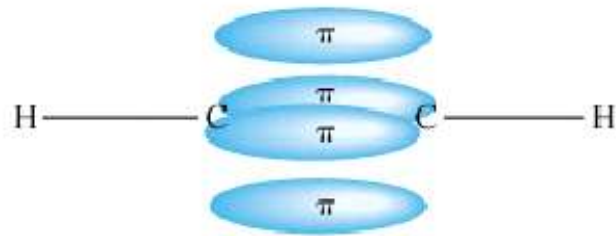


Enlaces múltiples

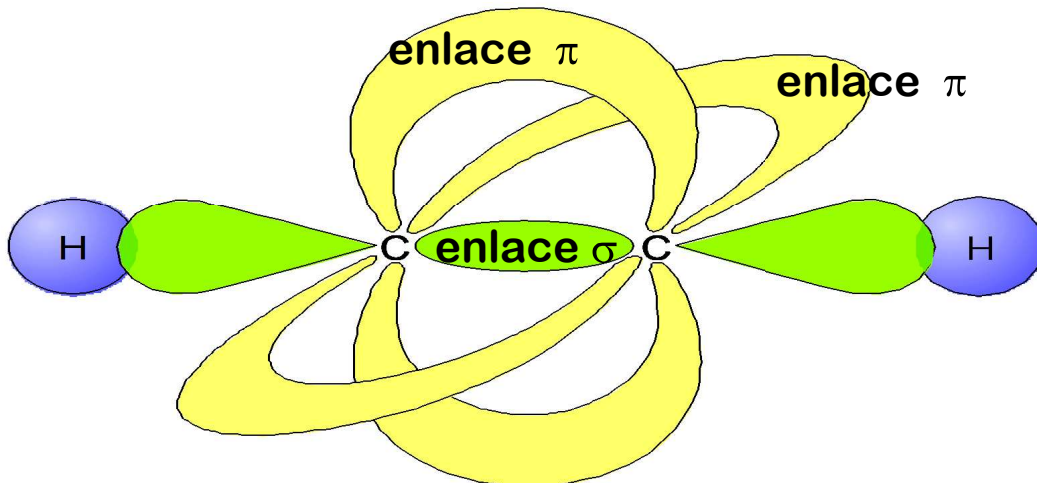
etino:  $C_2H_2$ ,  $HC\equiv CH$



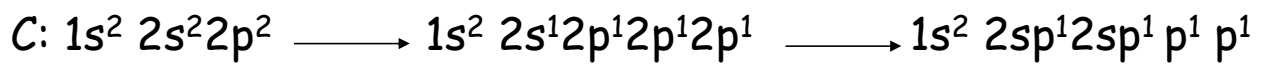
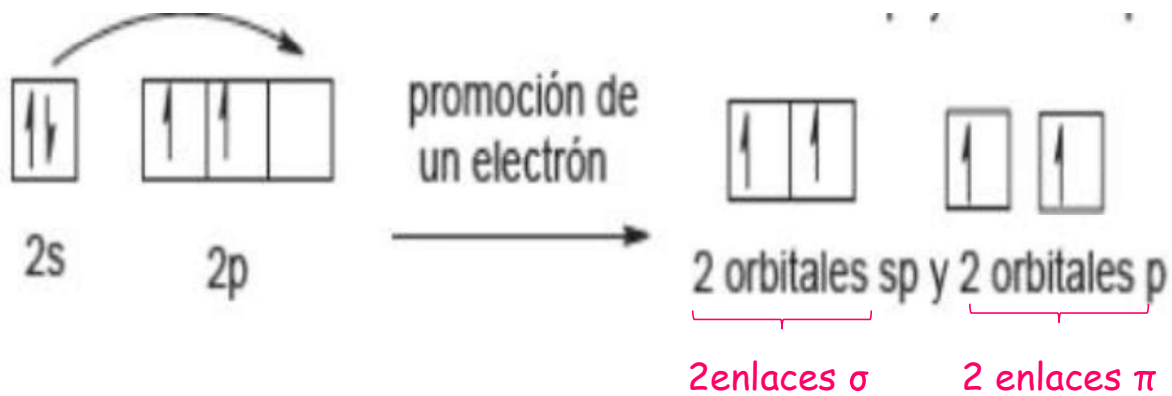
Formation of  $\sigma$  bonds



Formation of  $\pi$  bonds



# Hibridación *sp* en el C



Nº de grupos de  $e^-$

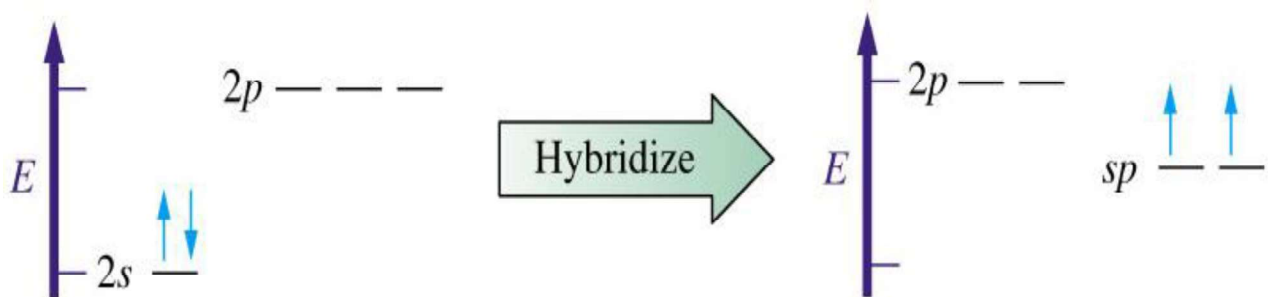
2

Geometría electrónica (predicción RPENV)



Orbitales híbridos (TEV)

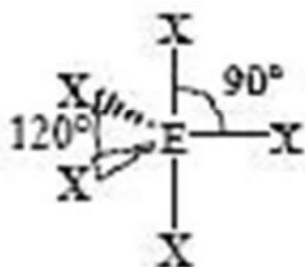
*sp*



Nº de grupos de e<sup>-</sup>

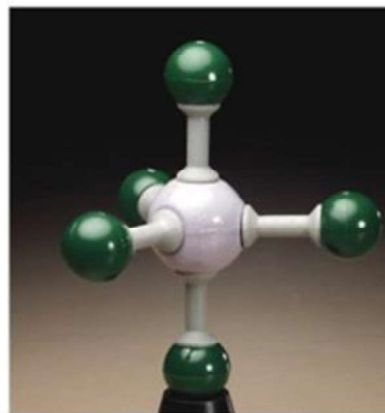
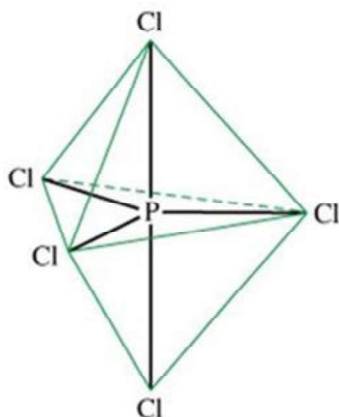
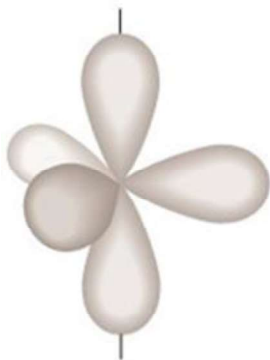
5

Geometría electrónica (predicción RPENV)



Orbitales híbridos (TEV)

$sp^3d$

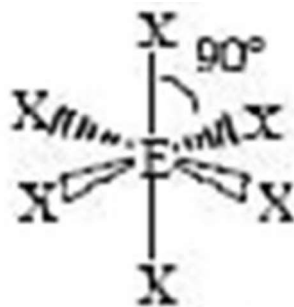


Bipirámide trigonal

Nº de grupos de e<sup>-</sup>

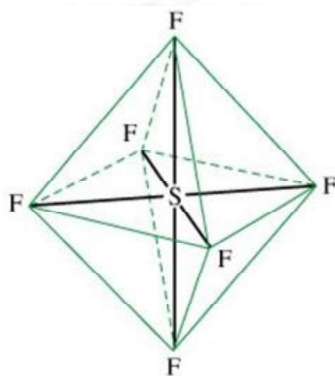
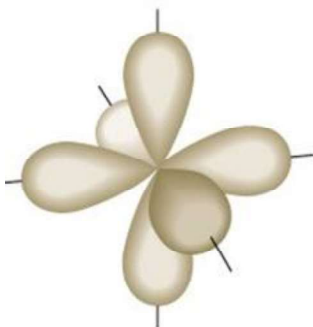
6

Geometría electrónica (predicción RPENV)

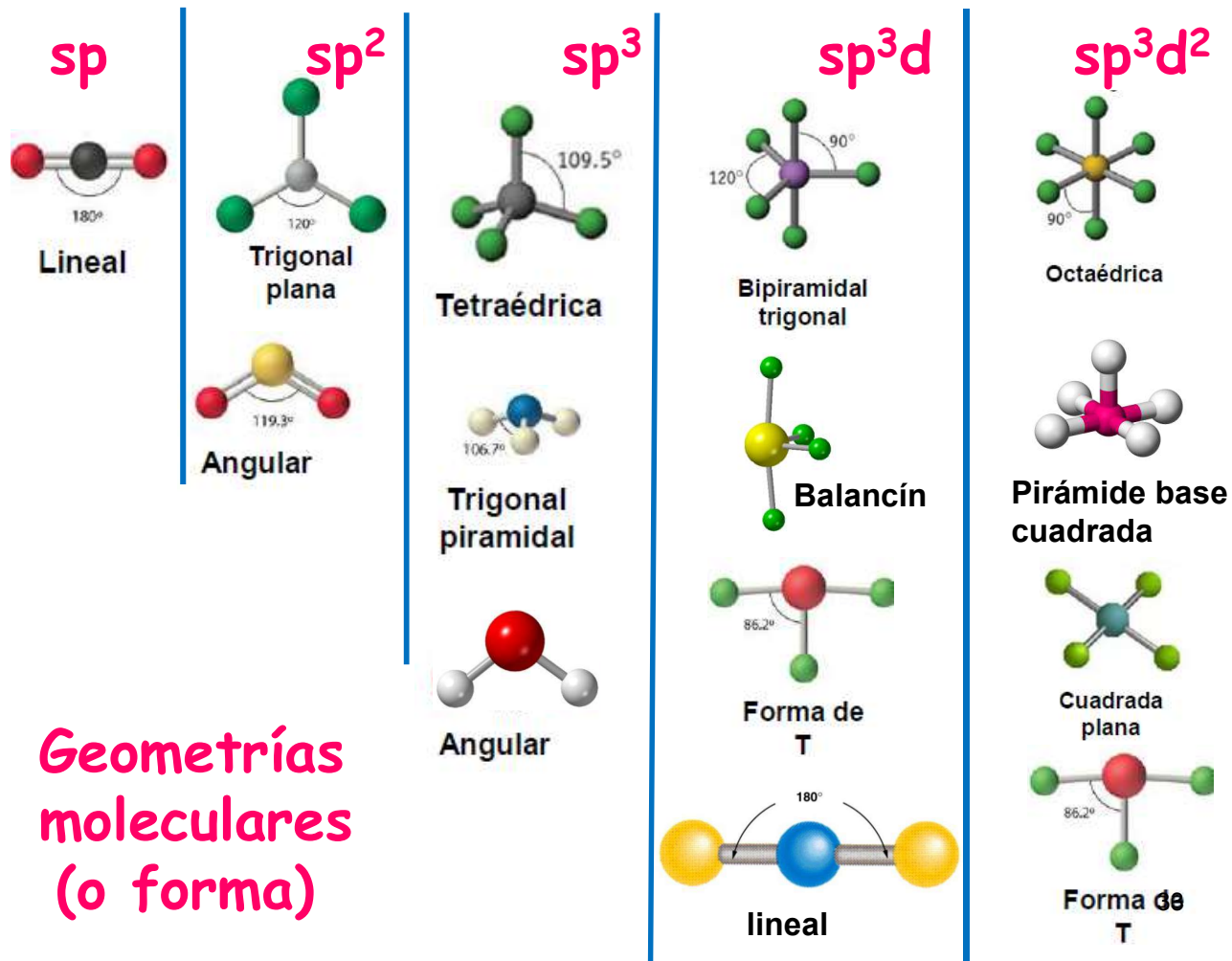


Orbitales híbridos (TEV)

$sp^3d^2$

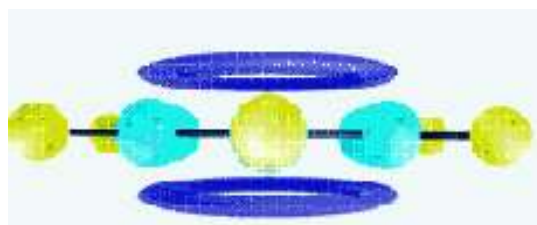
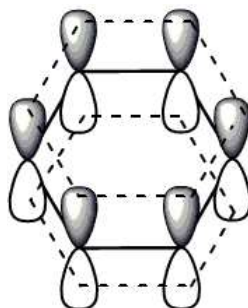
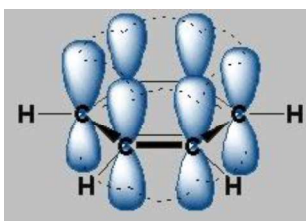
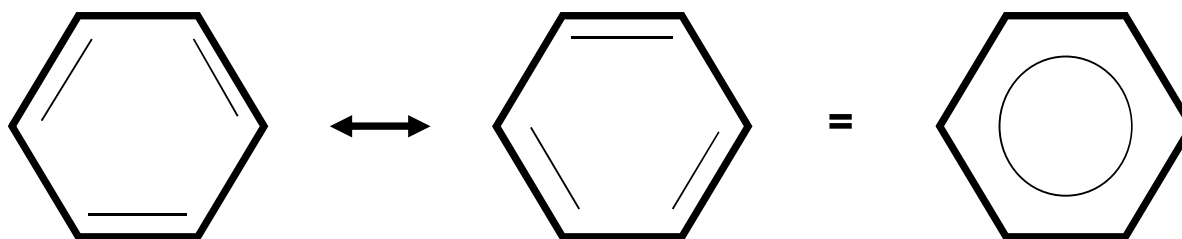


estructura octaédrica



## Geometrías moleculares (o forma)

Electrones deslocalizados, ej.: benceno  
 Hibridación de los C del benceno:  $sp^2$



Teorías de enlace: veremos dos métodos para describir el enlace entre átomos

\* Teoría del enlace de valencia (TEV): Los enlaces se forman por traslape de orbitales de átomos vecinos.

Enlace sigma ( $\sigma$ ): densidad electrónica entre los núcleos.

Enlace pi ( $\pi$ ): densidad electrónica por arriba y por debajo del eje de enlace

\* Teoría de orbitales moleculares (TOM)

Cuando se forma un compuesto, los orbitales atómicos se combinan formando nuevos orbitales, llamados orbitales moleculares.

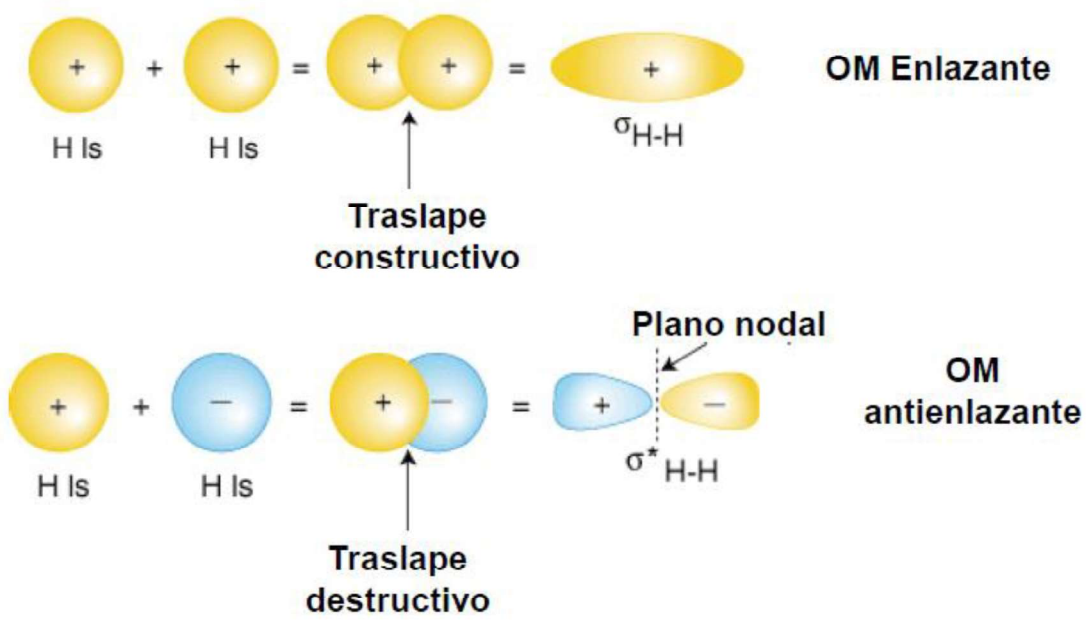
En la TOM los electrones existen en estados de energía permitidos llamados orbitales moleculares (OM), que se pueden extender a todos los átomos de la molécula.

Cuando se combinan orbitales atómicos (OA) para formar OM, el N° de OM formados es igual al N° de OA matemáticamente combinados.

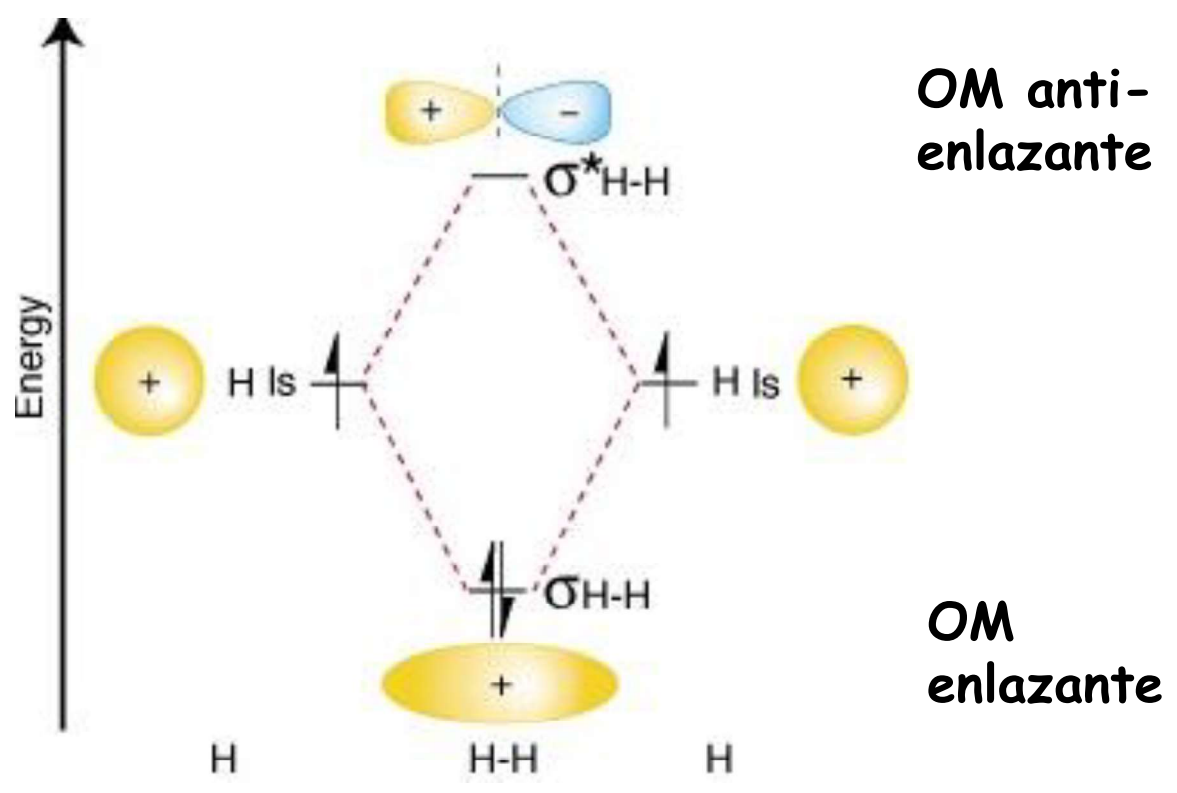
La combinación de 2 OA da lugar a la formación de 2 OM, uno con energía más baja y otro con energía más alta en relación a la energía de los OA que se combinaron. Rigen mismas reglas de llenado que para OA.

OM  $\sigma$ : atravesados por el eje internuclear

OM  $\pi$ : a ambos lados del eje internuclear



## Diagrama de OM de la molécula de $\text{H}_2$



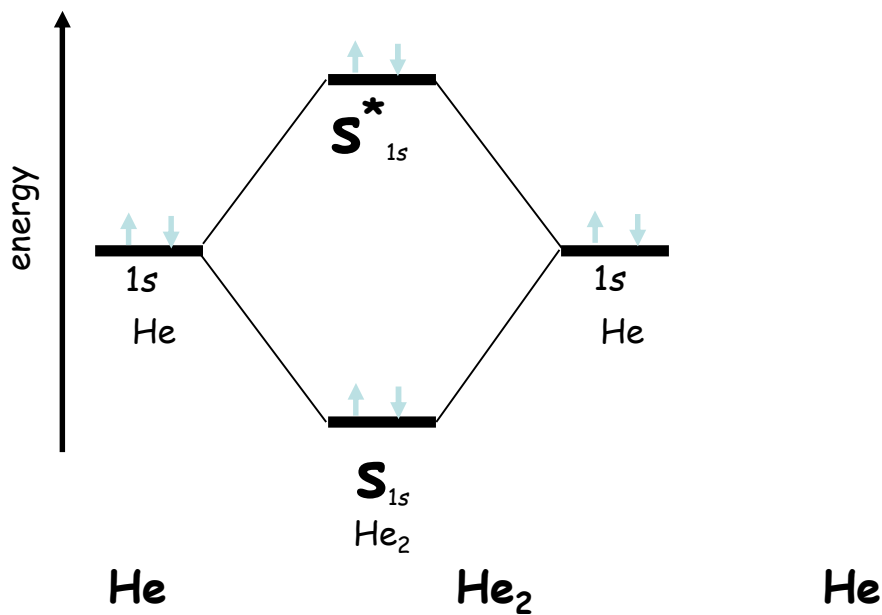
El OM de menor energía concentra la densidad electrónica en la región internuclear y se denomina **orbital molecular de enlace**. El **orbital molecular de antienlace**, de mayor energía, excluye los electrones de la región entre los núcleos. La ocupación de los OM de enlace favorece la formación de enlace, en tanto que la ocupación de OM de antienlace es desfavorable.

Orden de enlace:

$$\frac{1}{2} (\text{N}^\circ \text{ de } e^- \text{ de enlace} - \text{N}^\circ \text{ de } e^- \text{ de antienlace})$$

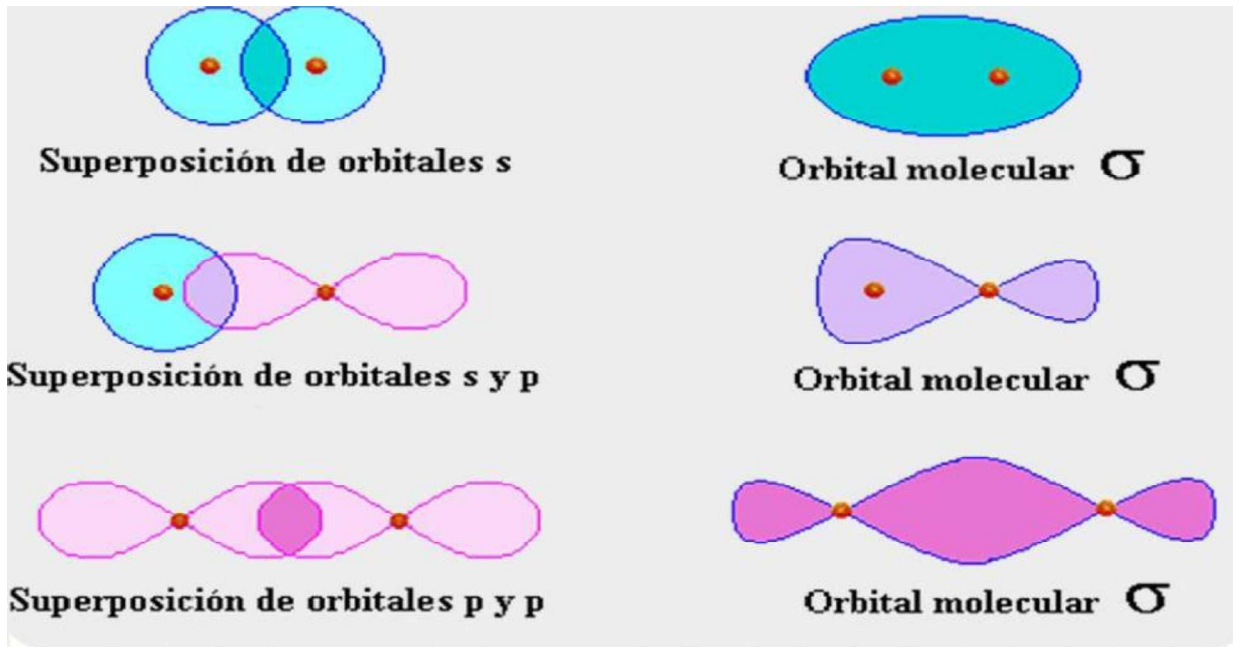
Los  $e^-$  de OM internos no contribuyen al enlace entre los átomos  $\Rightarrow$  en general sólo se consideran los  $e^-$  de valencia.

## Diagrama de OM de la molécula de $\text{He}_2$

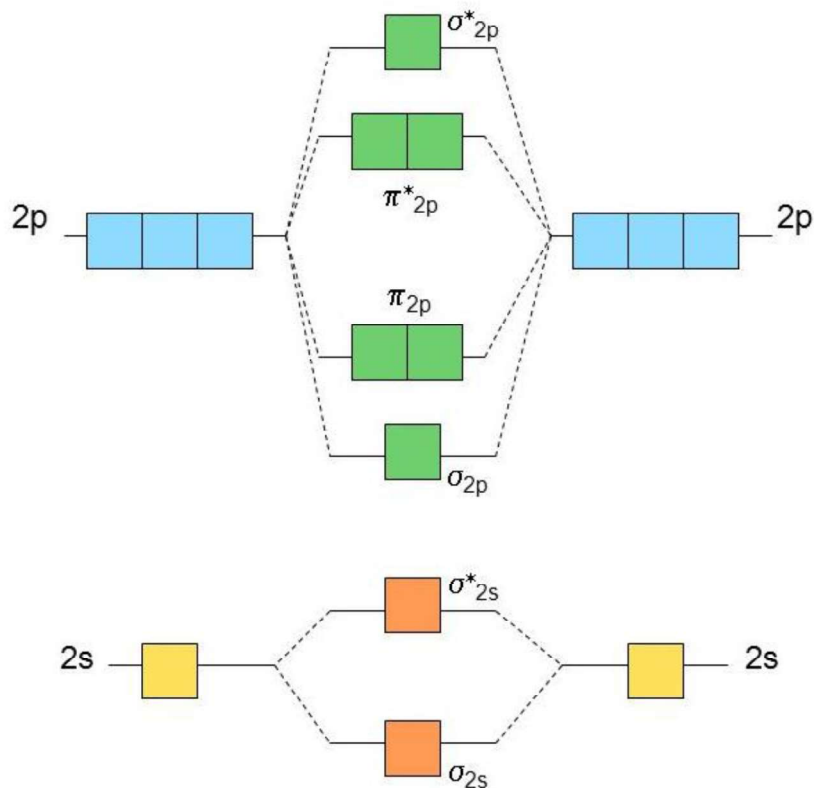


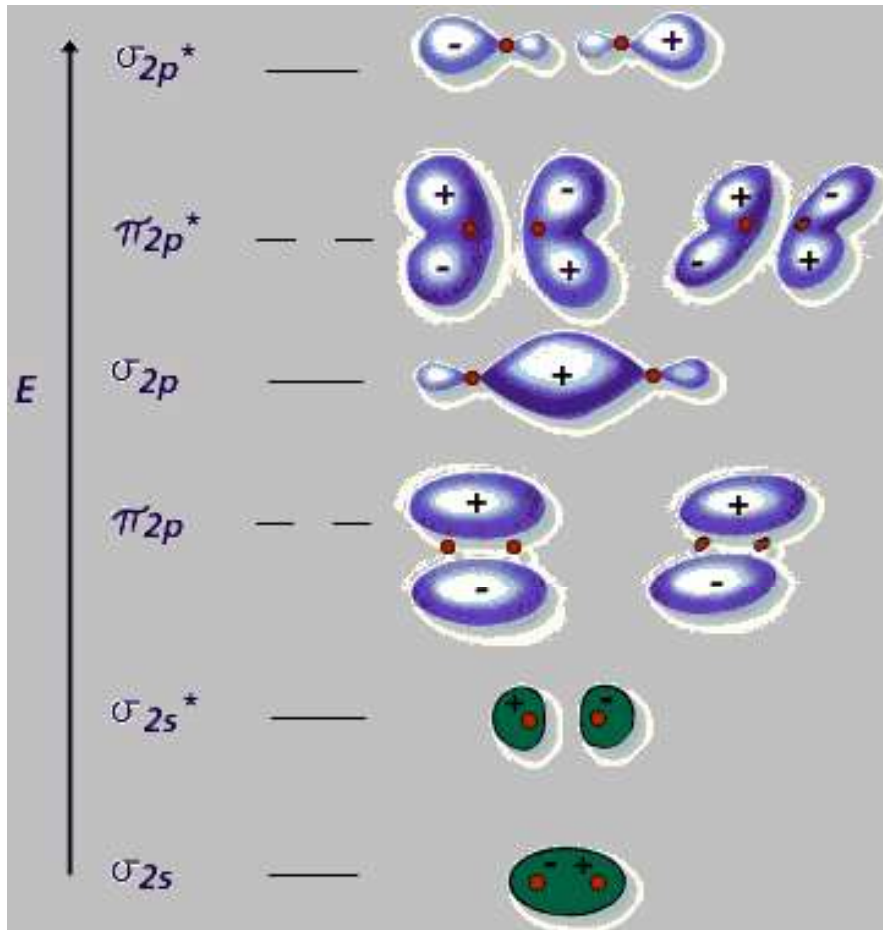
La molécula de  $\text{He}_2$  no existe (igual  $\text{N}^\circ$  de  $e^-$  enlazantes y no enlazantes), sí el ión  $\text{He}_2^+$   
 :orden de enlace:  $\frac{1}{2} (2-1) = \frac{1}{2}$

# OM a partir de OA 2p

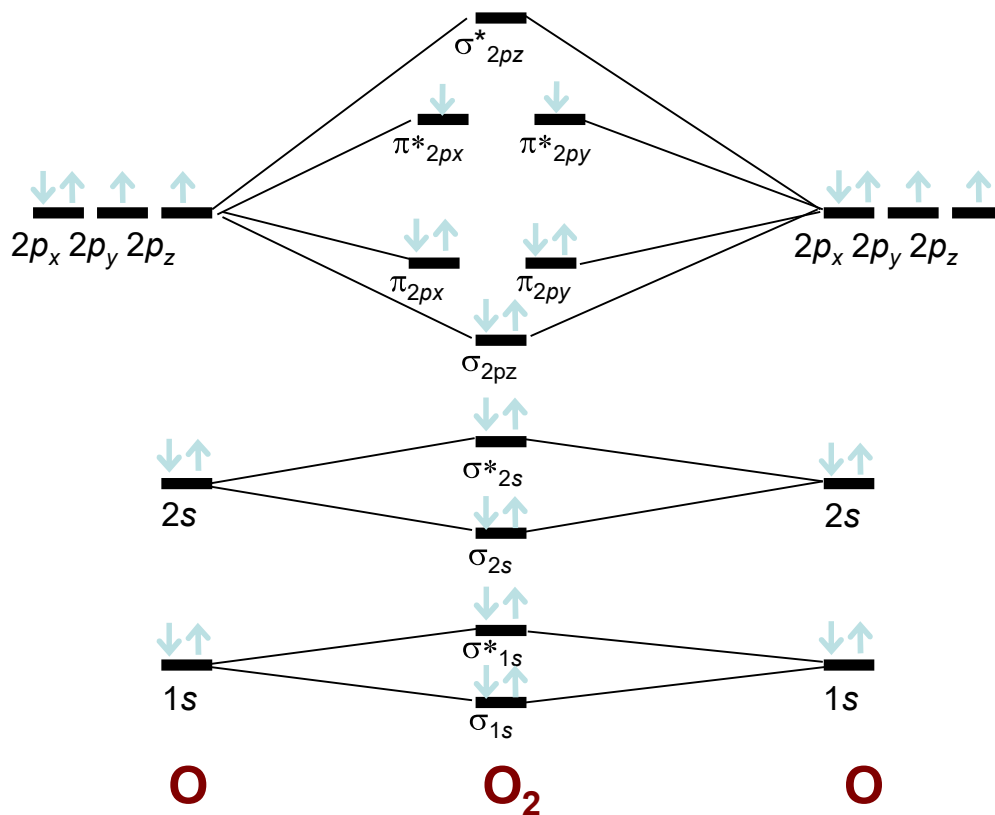


# OM con configuraciones electrónicas del B<sub>2</sub> al Ne<sub>2</sub>





## Diagrama de OM de la molécula de O<sub>2</sub>



Orden de enlace en  $O_2$ :  $\frac{1}{2} (6 - 2) = 2$

El modelo de OM predice correctamente que el dióxígeno debe exhibir paramagnetismo, la atracción hacia un campo magnético que experimenta una molécula que tiene electrones no apareados.

Las moléculas en las que todos los electrones están apareados, como el  $N_2$ , exhiben diamagnetismo, una débil repulsión hacia los campos magnéticos.

	$B_2$	$C_2$	$N_2$	$O_2$	$F_2$	$Ne_2$
$\sigma^*_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>
$\pi^*_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="up"/> <input type="checkbox" value="up"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>
$\sigma_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>
$\pi_{2p}$	<input type="checkbox" value="up"/> <input type="checkbox" value="up"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up"/> <input type="checkbox" value="up"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/> <input type="checkbox" value="up down"/>
$\sigma^*_{2s}$	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>
$\sigma_{2s}$	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>	<input type="checkbox" value="up down"/>
Bond order	1	2	3	2	1	0