

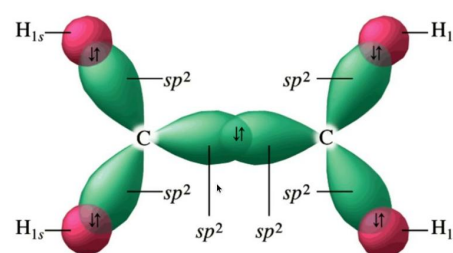
Química General e Inorgánica

Enlace covalente: teorías de enlace

2026

Dra. Florencia Mangiameli

Bioquímica y Farmacia
Turno tarde – Comisiones 7, 8 y 9



1

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

Predicción de la geometría electrónica y forma molecular.

Este modelo es una forma sencilla de predecir la forma de las moléculas, pero no explica por qué existen enlaces entre los átomos.

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

Limitaciones:

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

¿Cómo podemos explicar los enlaces y las geometrías de las moléculas en términos de orbitales atómicos?

2

Teoría del Enlace de Valencia (TEV)

Localización de enlaces entre átomos.

Se origina en la combinación del concepto de Lewis de enlaces por pares de electrones con la idea de los orbitales atómicos.

Teoría de Lewis → se forman enlaces covalentes cuando los átomos comparten electrones y concentra la densidad electrónica entre los núcleos.

Teoría del enlace de valencia → la acumulación de densidad electrónica entre dos núcleos ocurre cuando un orbital atómico de valencia de un átomo se fusiona con uno de otro átomo → *los orbitales comparten una región del espacio, se traslapan, permitiendo a dos electrones con espín opuesto compartir el espacio común entre los núcleos y formar así un enlace covalente.*

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

- ✓ Geometría molecular (en parte).
- ✓ Hibridación (sp , sp^2 , sp^3 , etc.).
- ✓ Formación de enlaces σ (sigma) y π (pi):
 - a. Enlace sigma (σ): densidad electrónica entre los núcleos.
 - b. Enlace pi (π): densidad electrónica por arriba y por debajo del eje de enlace.

3

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.

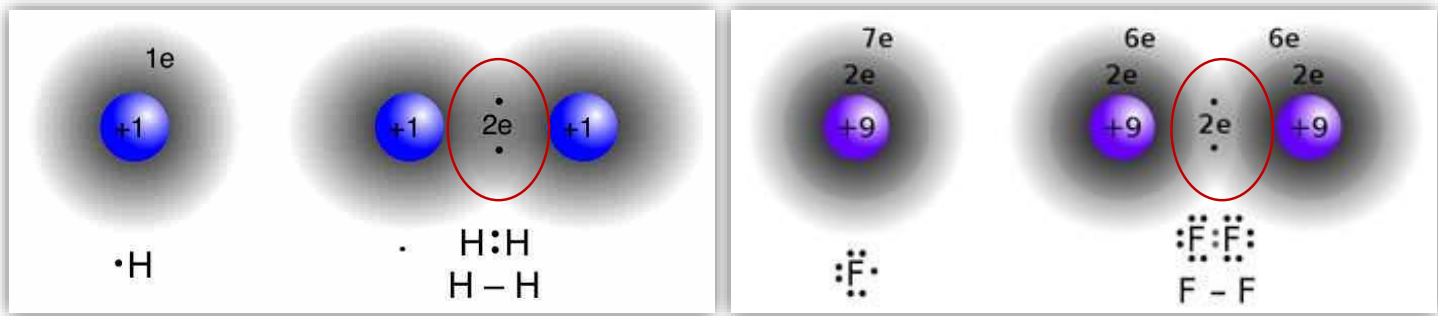
Limitaciones:

- ✓ Más compleja y matemática.

4

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

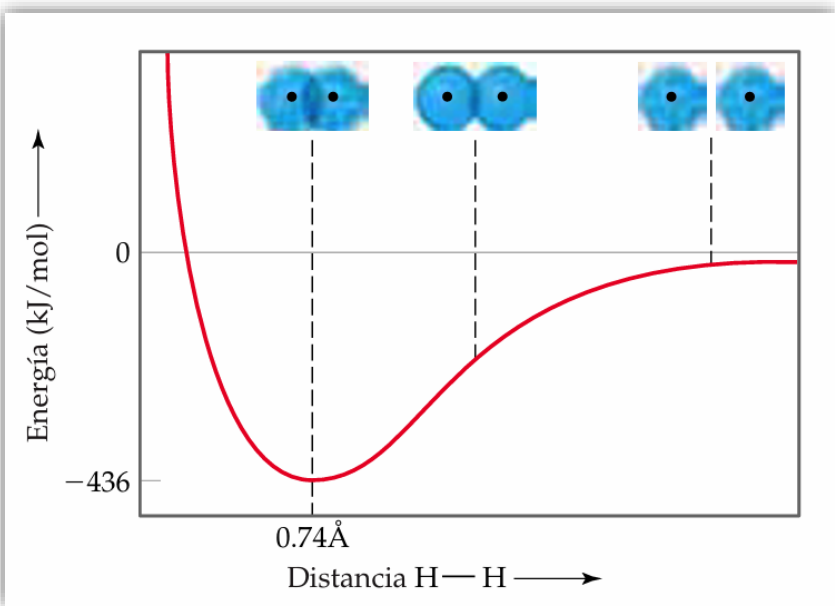
Al traslaparse los orbitales, la densidad electrónica se concentra entre los núcleos. Dado que los electrones de la región de traslape son atraídos simultáneamente por ambos núcleos, mantienen unidos a los átomos y se forma un enlace covalente.



5

Hay una distancia óptima entre los dos núcleos enlazados en cualquier enlace covalente.

- ↓ la distancia entre los átomos
- ↑ el traslape entre sus orbitales
- ↑ la densidad electrónica entre los núcleos
- ↓ la energía potencial del sistema → la fuerza del enlace aumenta, como indica la disminución de la energía en la curva.



6

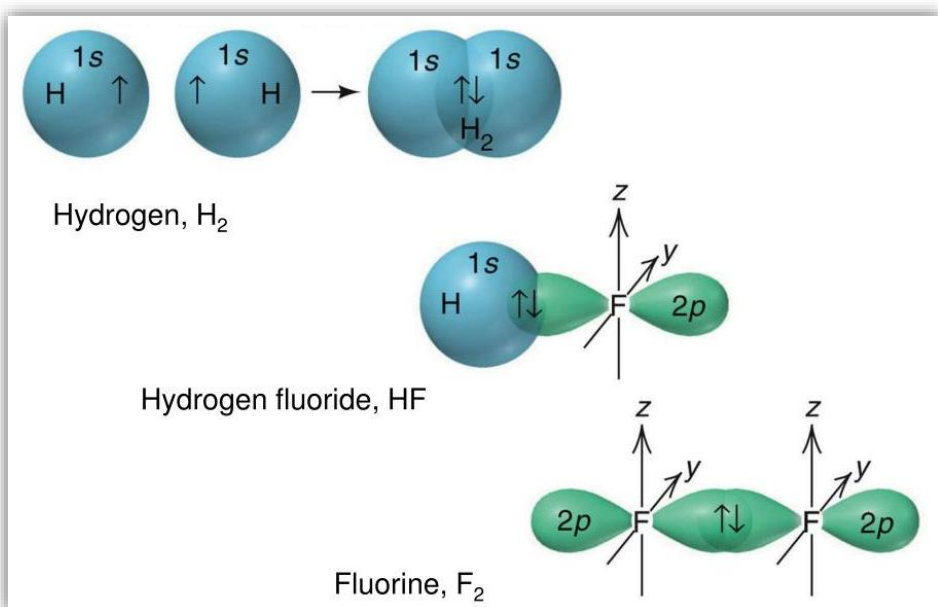
Si los átomos se acercan mucho, la energía \uparrow rápidamente, principalmente por la repulsión electrostática de los núcleos, que se vuelve importante a distancias internucleares cortas.

La distancia internuclear en el mínimo de la curva de energía potencial corresponde a la longitud de enlace experimentalmente.

La longitud de enlace es la distancia a la que las fuerzas de atracción entre cargas distintas (electrones y núcleos) se equilibran con las fuerzas de repulsión entre cargas iguales (electrón-electrón y núcleo-núcleo).

7

Enlaces sigma (σ) formados por solapamiento frontal de orbitales

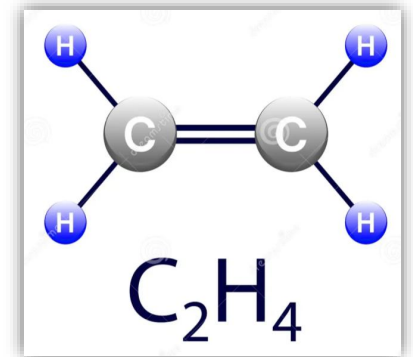


Compuesto formado	Orbitales atómicos que se combinan	Enlace formado por solapamiento
H_2	$1s + 1s$	σ_{s-s}
HF	$1s + 2p$	σ_{s-p}
F_2	$2p + 2p$	σ_{p-p}

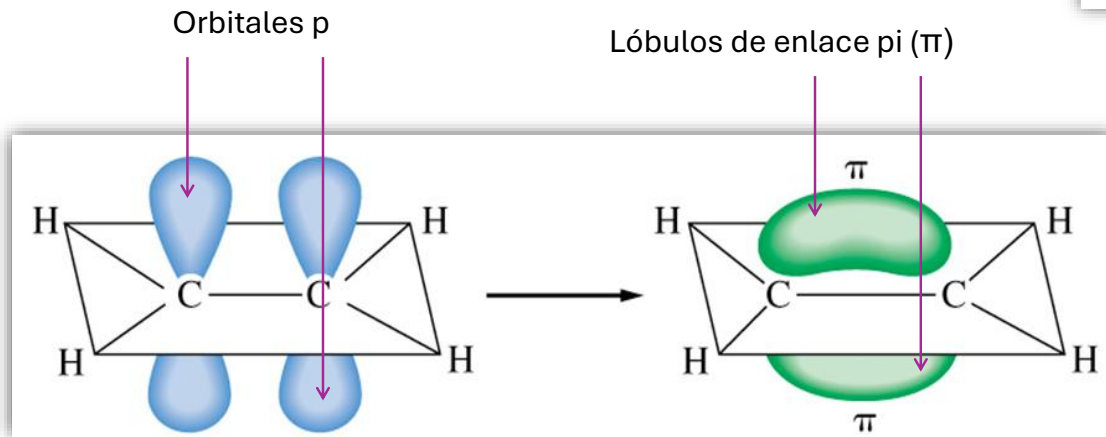
8

Enlace múltiple pi (π) entre orbitales p paralelos

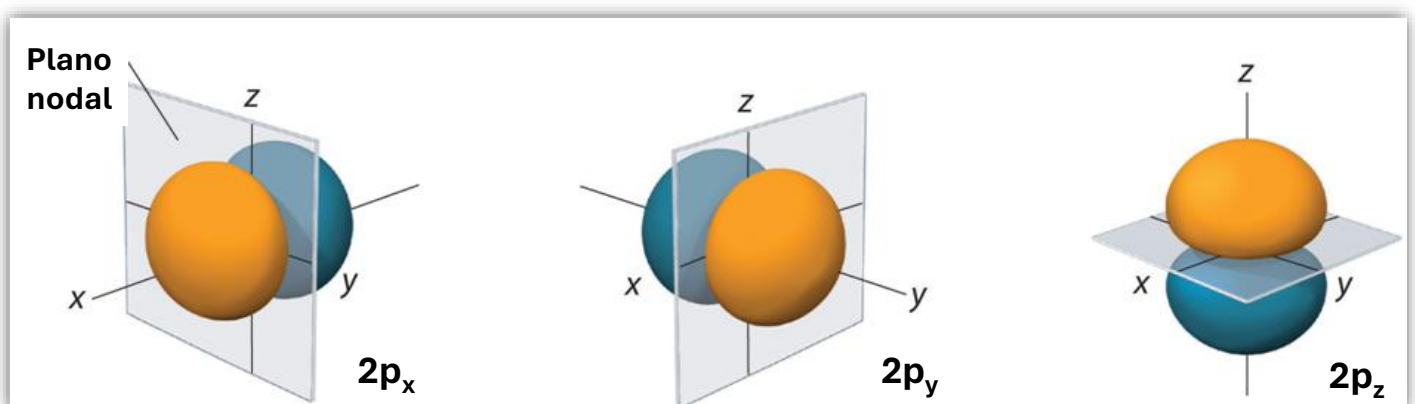
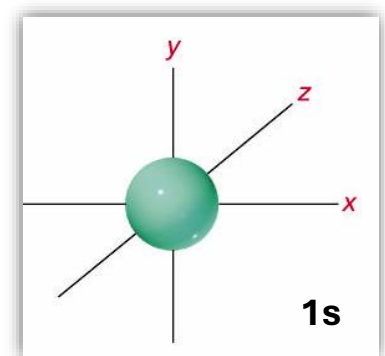
Eteno o etileno

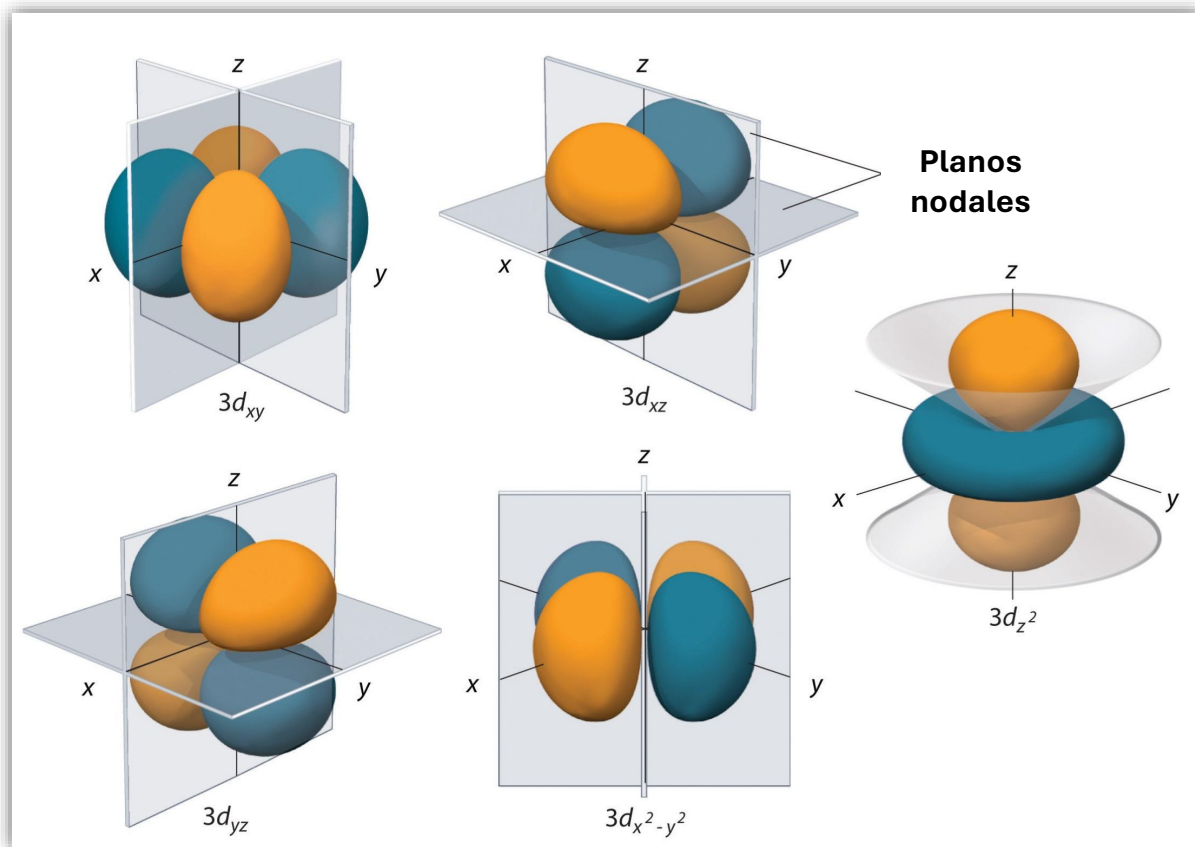


Doble enlace C=C



Recordemos los orbitales atómicos





11

¿Cómo se forman los enlaces en estructuras no lineales con los distintos orbitales atómicos?

Transformando, combinando los orbitales para que se ubiquen en otras posiciones...



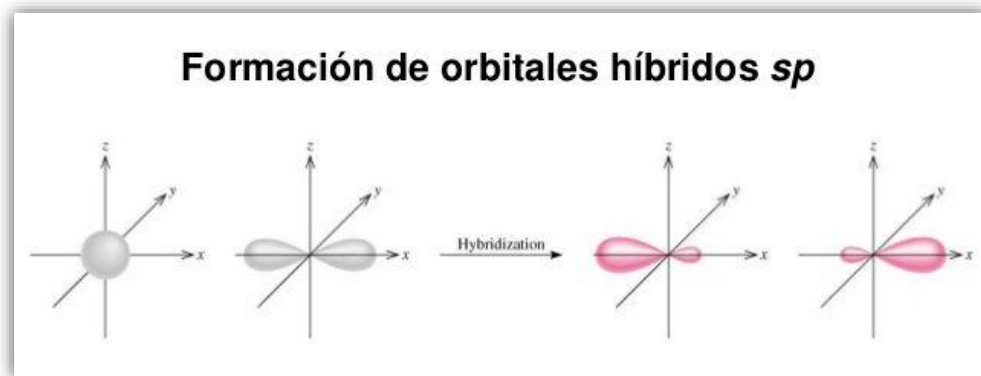
Hibridación de orbitales

12

¿Qué pasa con los distintos orbitales atómicos cuando hibridan?

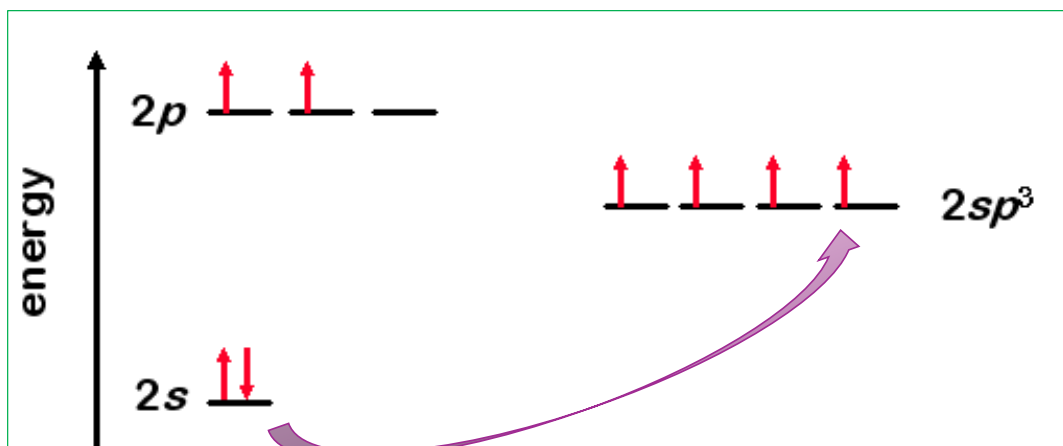
Los orbitales atómicos se “mezclan” y generan nuevos orbitales.

Cunado se combinan 2 orbitales atómicos, se forman 2 nuevos orbitales, con 2 lóbulos. Pero, a diferencia de los orbitales p, un lóbulo es mucho más grande que el otro. Los dos nuevos orbitales tienen forma idéntica, pero sus lóbulos grandes apuntan en direcciones opuestas.



13

Sus energías individuales cambian al combinarse, permitiendo que los electrones sean promovidos a otros niveles de energía (de los orbitales híbridos).

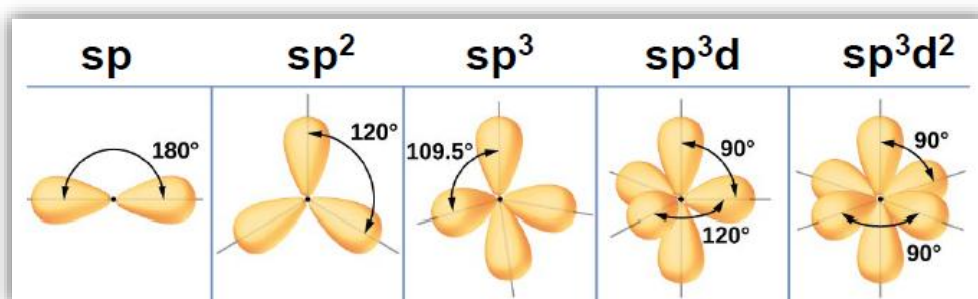


La promoción de un electrón s a un orbital p requiere energía. La formación de orbitales híbridos (entre orbitales atómicos del mismo n), con lóbulos grandes que pueden superponerse mejor con otros átomos que los orbitales atómicos no hibridados y el resultado es un enlace más fuerte.

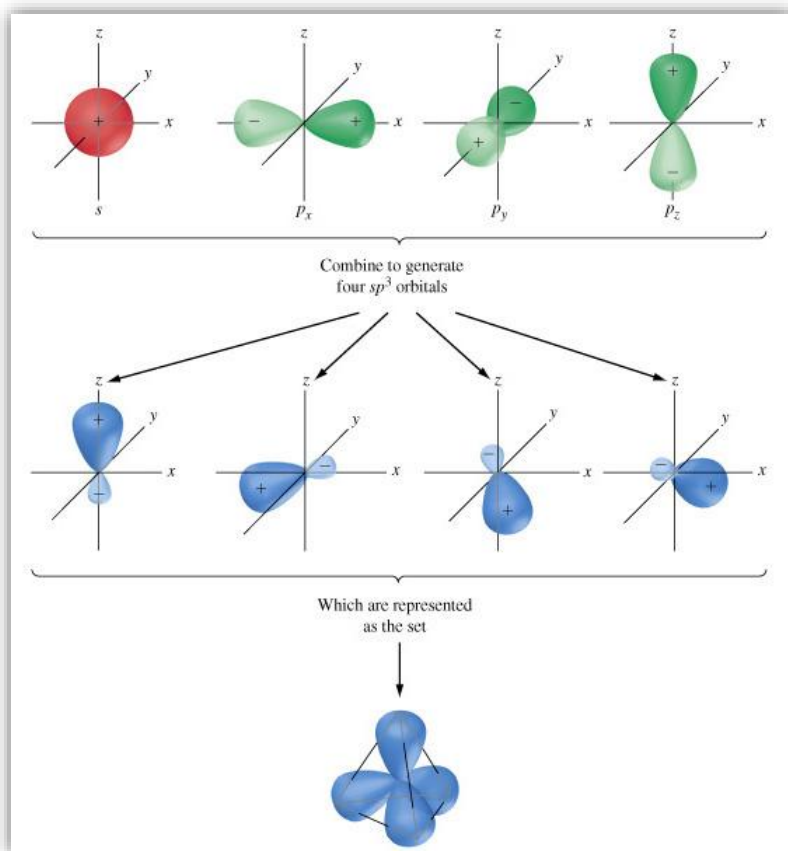
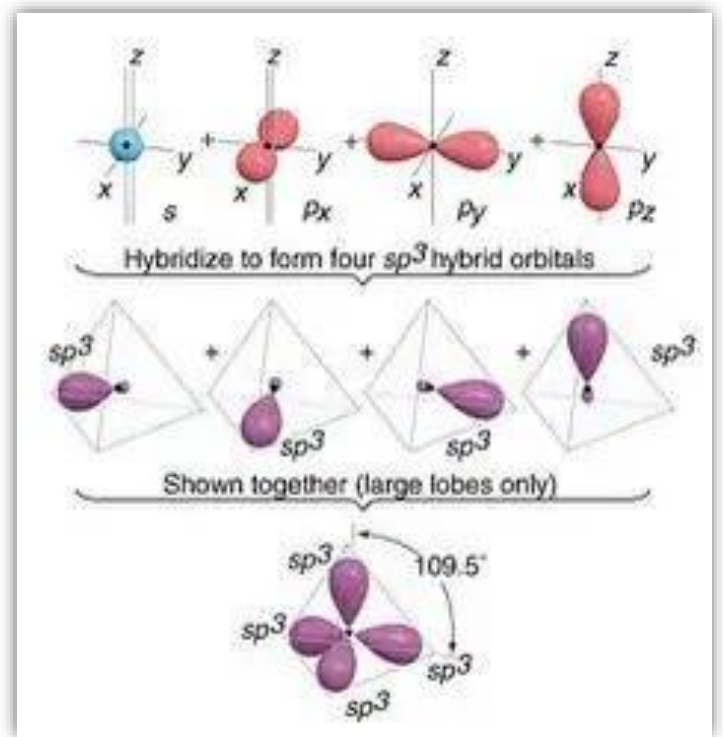
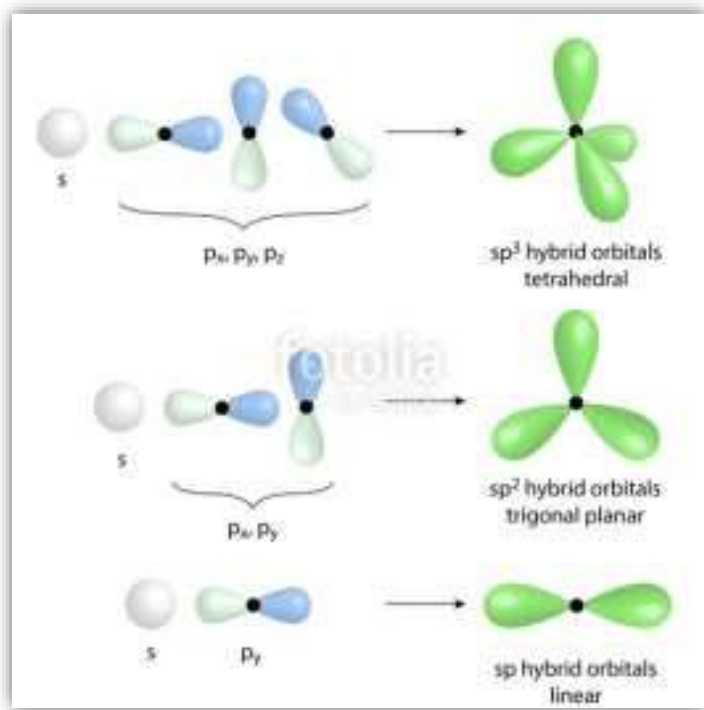
La energía liberada por la formación de los enlaces compensa la energía que debe invertirse en la promoción de electrones.

Tipos de hibridación de orbitales

Tipo y nº de orbitales que se combinan	nº y tipo de orbitales híbridos formados	Elementos que la presentan	Ejemplo
1 s + 1 p	2 orbitales sp	Be, Hg	BeH ₂ - BeF ₂ - HgCl ₂
1 s + 2 p	3 orbitales sp ²	B, S	BH ₃ - SO ₂
1 s + 3 p	4 orbitales sp ³	C, N, O	CH ₄ - NH ₃ - H ₂ O - NH ₄ ⁺
1 s + 3 p + 2 d	5 orbitales sp ³ d	P, S, Br	PH ₅ - SF ₄ - BrF ₃
1 s + 3 p + 2 d	6 orbitales sp ³ d ²	S, Cl, P	SF ₆ - ClF ₅ - XeF ₄ - PF ₆ ⁻



Orbitales híbridos: la mezcla de orbitales al hibridizar nos permite explicar la geometría

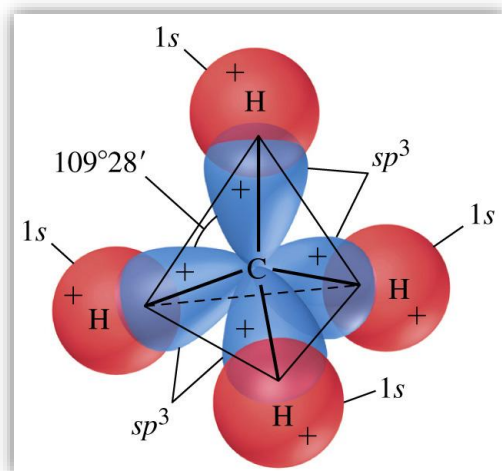
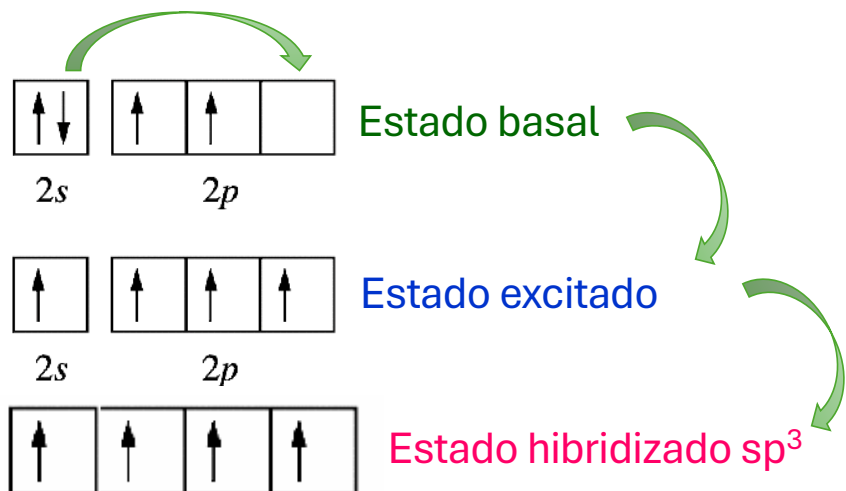


Esquema general de la hibridación sp³ y la geometría que adopta

C: Hibridación sp^3

Configuración electrónica: ${}_6\text{C} = 1s^2 2s^2 2p^2$

Configuración electrónica externa: $2s^2 2p_x^1 2p_y^1$



Forma molecular: tetraedro, 4 enlaces equivalentes

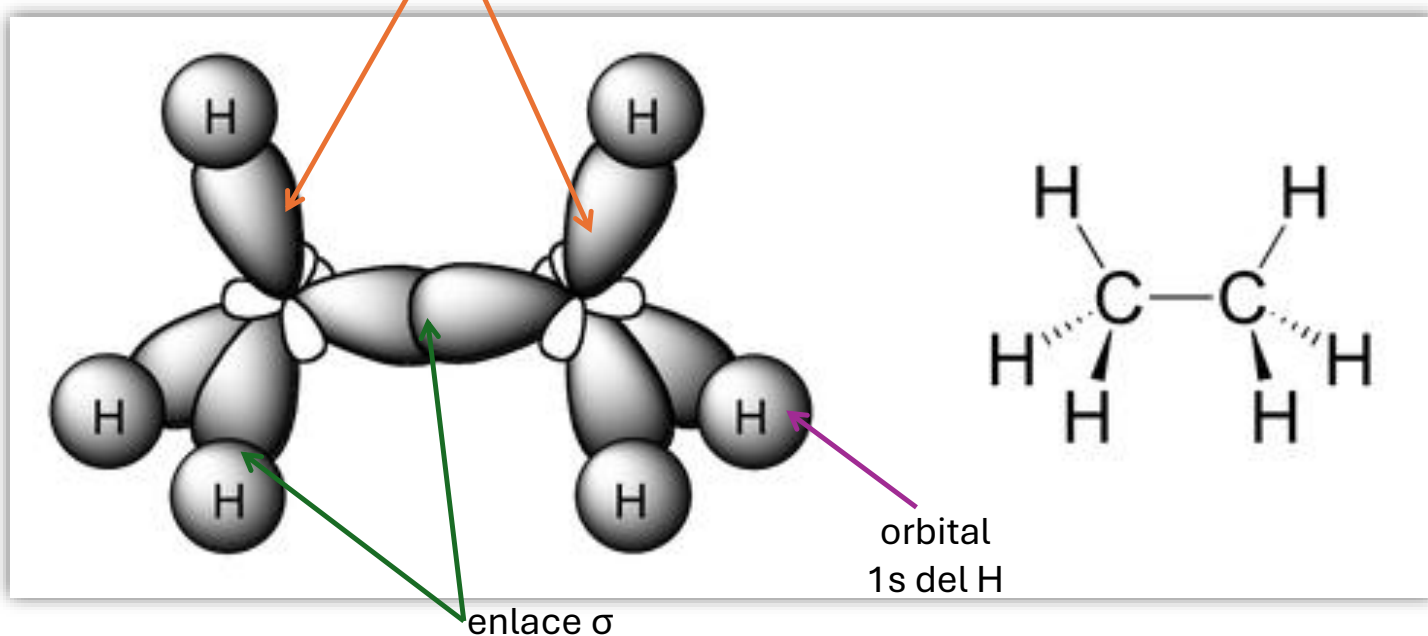
Ejemplo: CH_4

19

sp^3
híbridos

Moléculas mas grandes

Etano: C_2H_6 - $\text{H}_3\text{-C-C-H}_3$

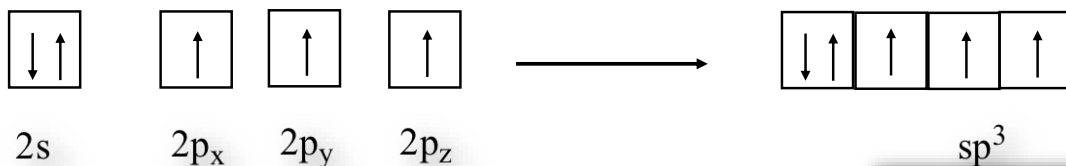


20

N: Hibridación sp^3

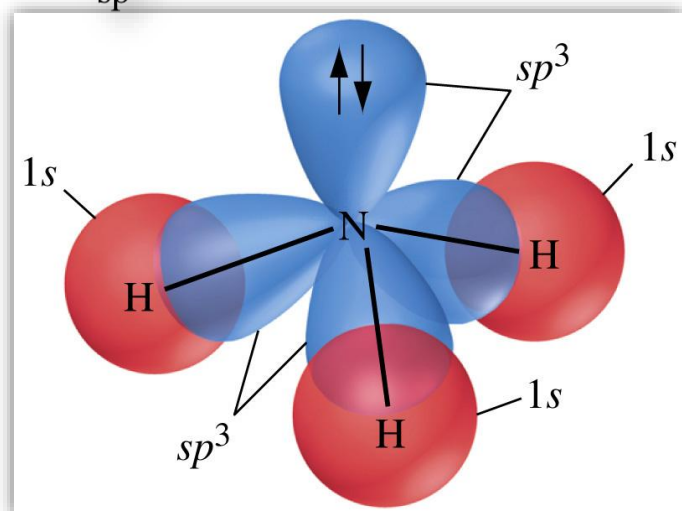
Configuración electrónica: ${}_7\text{N} = 1s^2 2s^2 2p^3$

Configuración electrónica externa: $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$



Forma molecular: pirámide trigonal, 3 enlaces equivalentes y un dominio no enlazante.

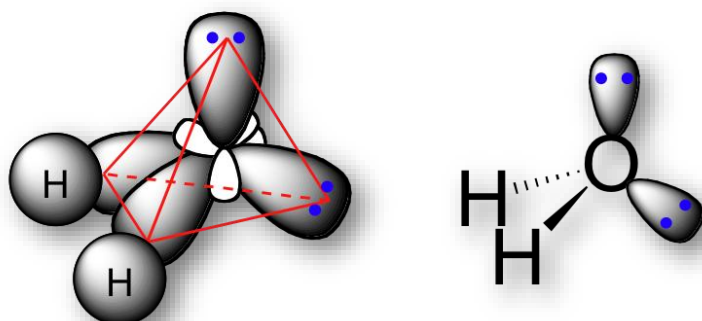
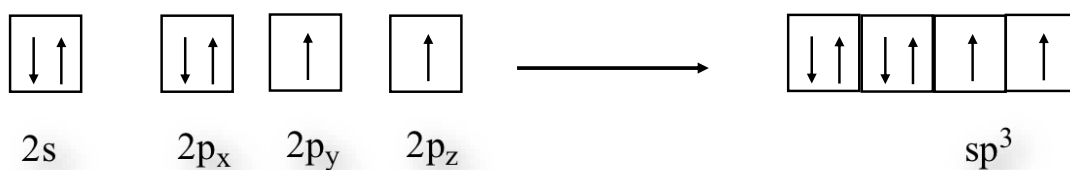
Ejemplo: NH_3



O: Hibridación sp^3

Configuración electrónica: ${}_8\text{O} = 1s^2 2s^2 2p^4$

Configuración electrónica externa: $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$



Forma molecular: angular, 2 enlaces equivalentes y 2 dominio no enlazante.

Ejemplo: H_2O

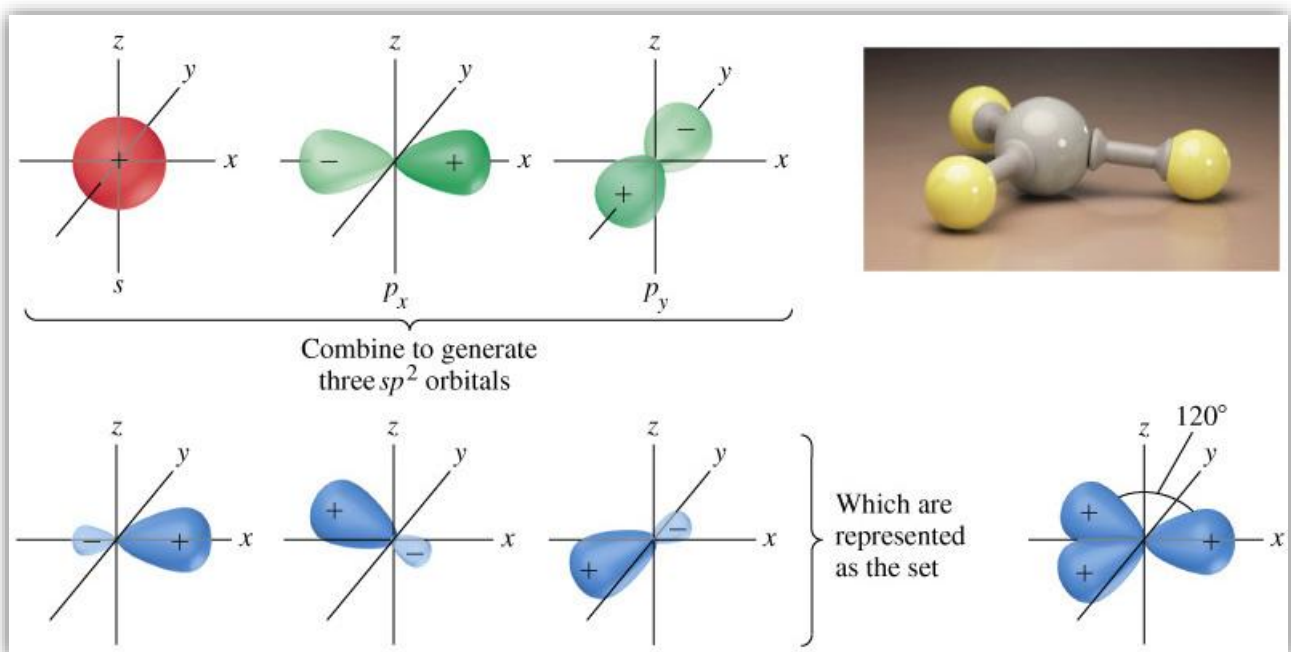
19. TABLA DE GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR, E HIBRIDACIÓN

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 ²	
3	2	1	Plana trigonal	Angular	sp ²	
4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica	sp ³	
4	3	1	Tetraédrica	Pirámide de base trigonal	sp ³	
4	2	2	Tetraédrica	Angular	sp ³	

Pag 35 de Tabla de constantes

23

Esquema general de la hibridización sp² y la geometría que adopta

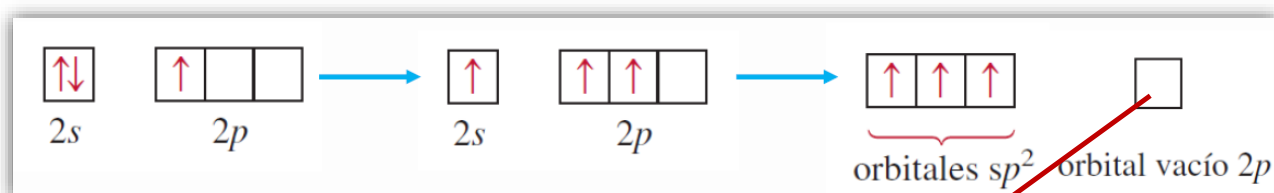


24

B: Hibridación sp^2

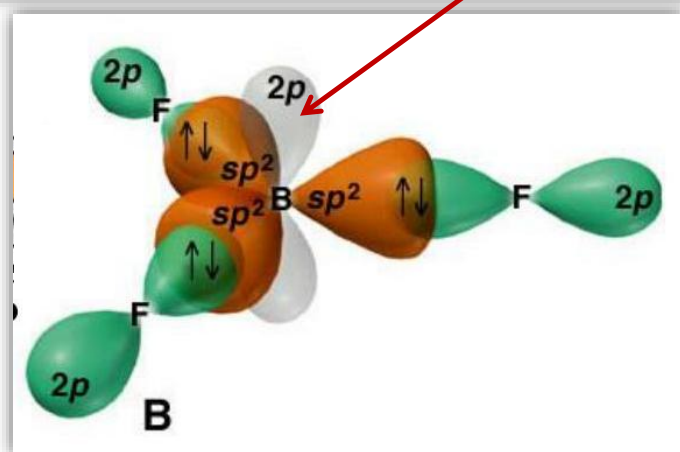
Configuración electrónica: ${}_5\text{B} = 1s^2 2s^2 2p^1$

Configuración electrónica externa: $2s^2 2p_x^1$



Forma molecular: trigonal plana, 3 enlaces equivalentes.

Ejemplo: BF_3

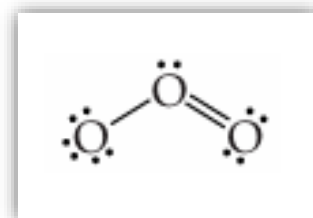
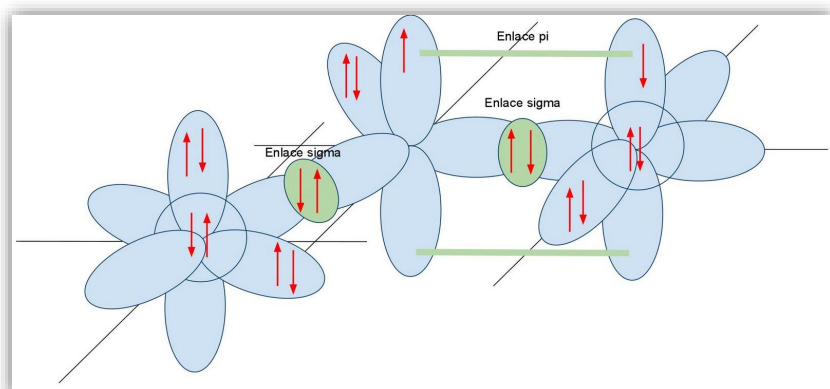
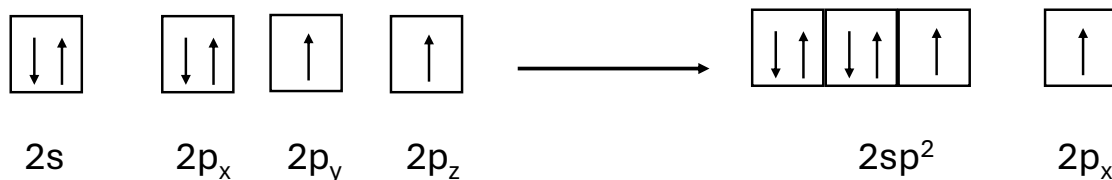


25

O: Hibridación sp^2

Configuración electrónica: ${}_8\text{O} = 1s^2 2s^2 2p^4$

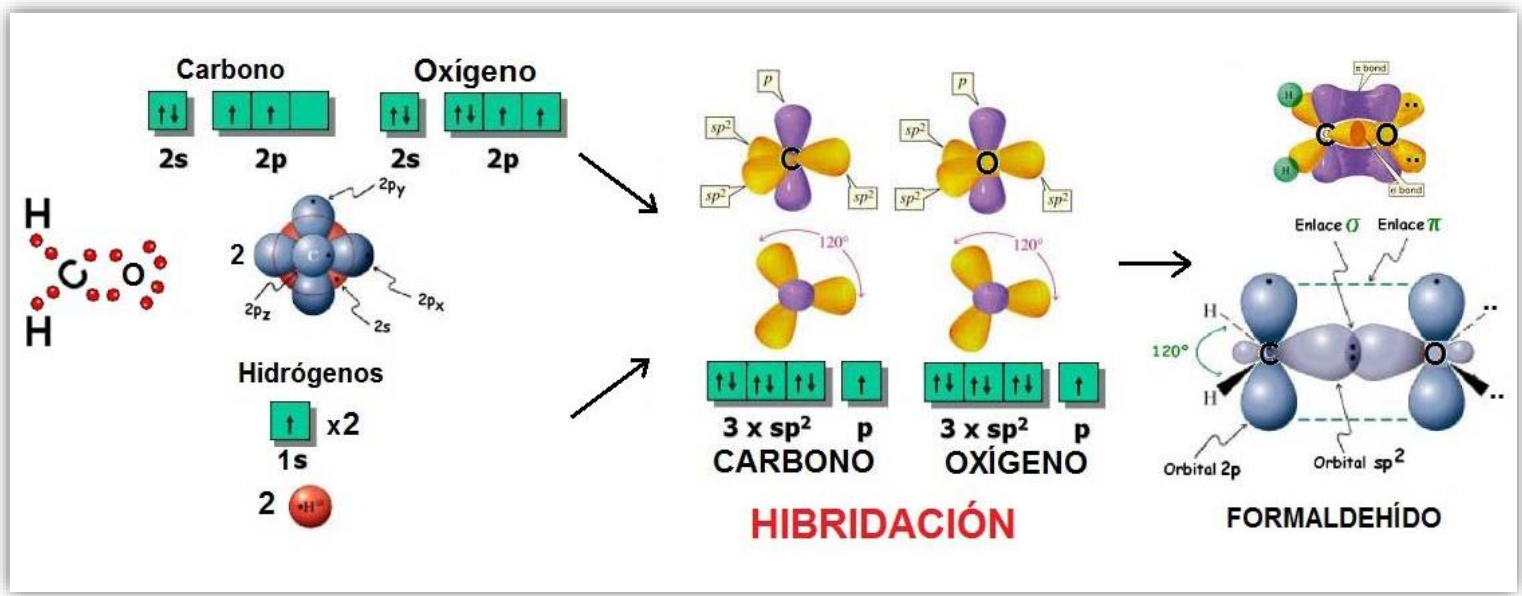
Configuración electrónica externa: $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$



Forma molecular: angular, 2 enlaces σ equivalentes.

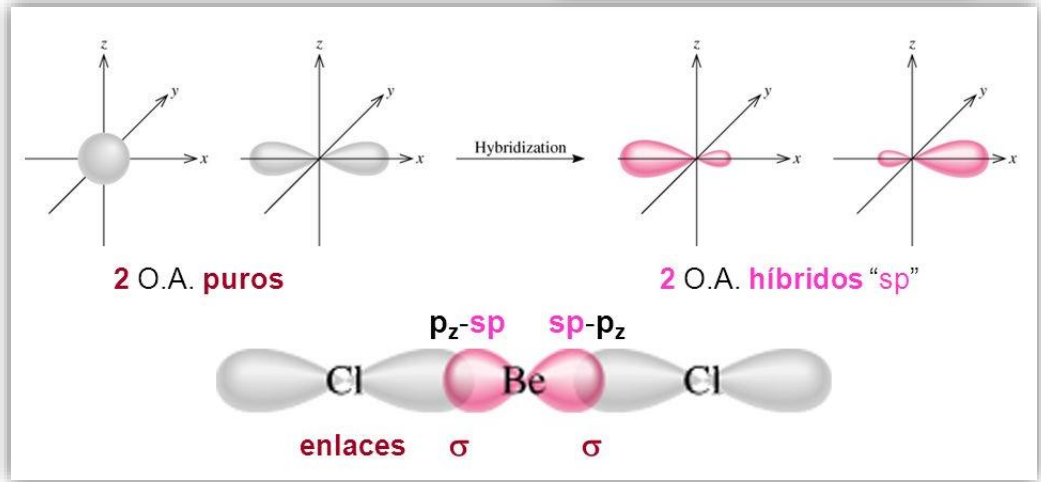
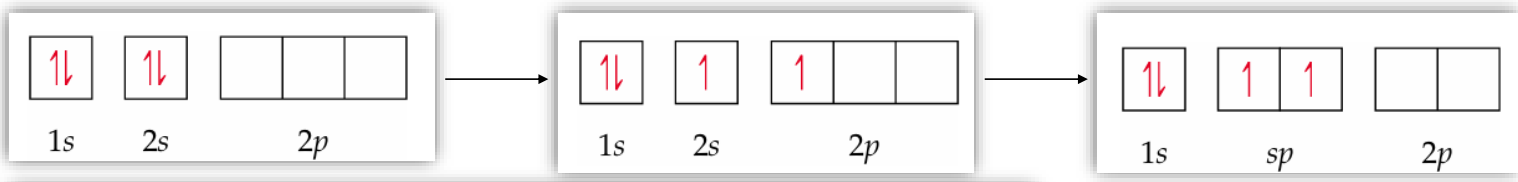
Ejemplo: O_3

26



Be: Hibridación sp

Configuración electrónica: ${}_4\text{Be} = 1s^2 2s^2$
 Configuración electrónica externa: $2s^2$



Forma molecular:
lineal, 2 enlaces
equivalentes.
 Ejemplo: BeCl_2

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 ²	
3	2	1	Plana trigonal	Angular	sp ²	
4	4	0	Tetraédrica	Tetraédrica	sp ³	
4	3	1	Tetraédrica	Pirámide de base trigonal	sp ³	
4	2	2	Tetraédrica	Angular	sp ³	

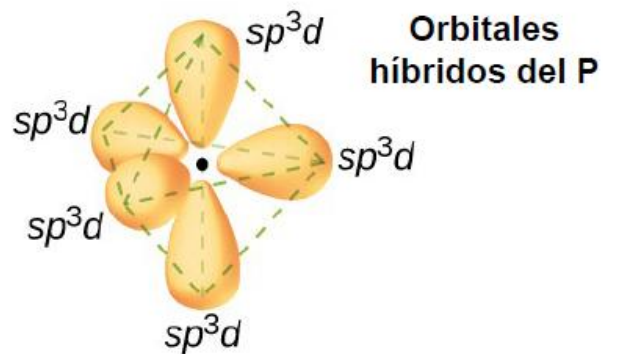
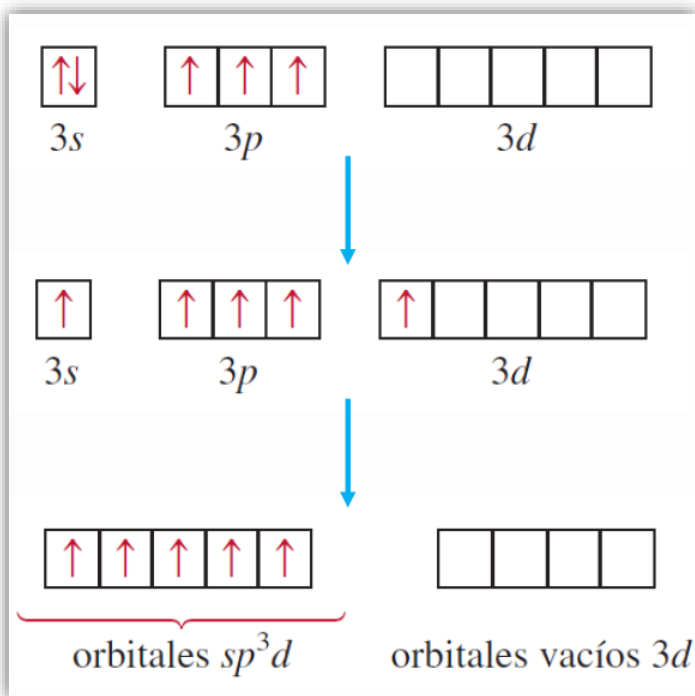
Pag 35 de Tabla de constantes

29

P: Hibridización sp³d

Configuración electrónica: ${}_{15}\text{P} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

Configuración electrónica externa: $3s^2 3s^3 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$

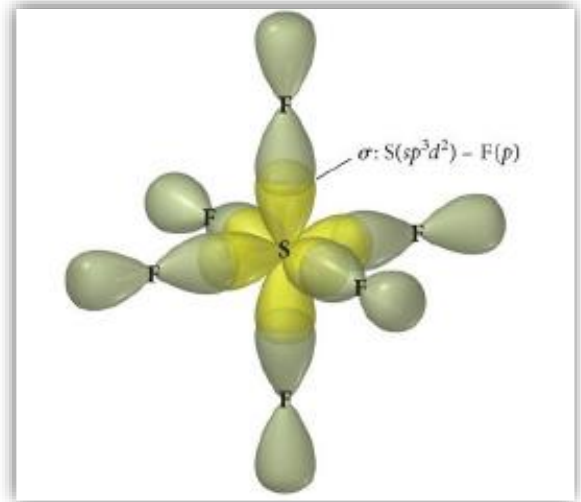
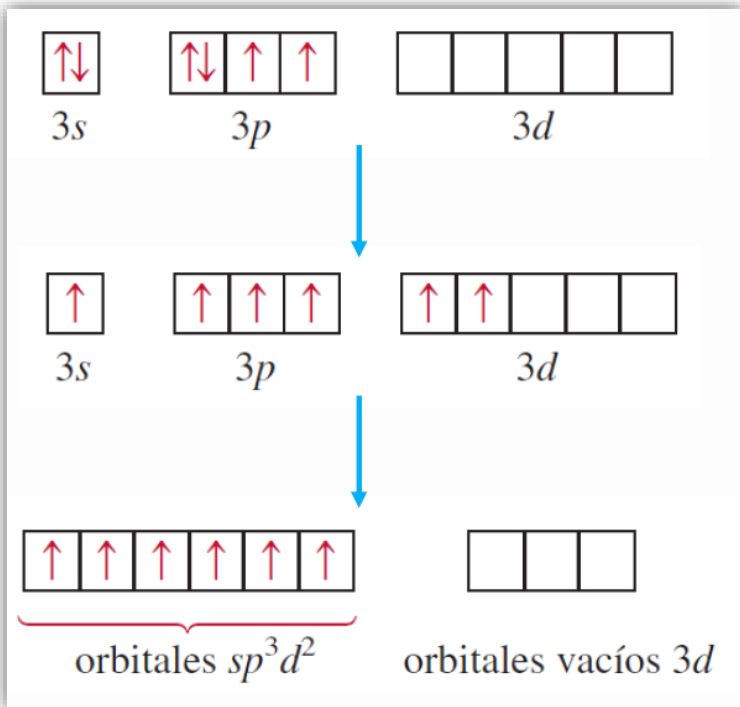


Forma molecular: bipirámide trigonal, 5 enlaces equivalentes. Ejemplo: PF₅

S: Hibridación sp^3d^2

Configuración electrónica: ${}_{16}\text{S} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

Configuración electrónica externa: $3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$



Forma molecular: octaédrica, 6 enlaces equivalentes. Ejemplo: PF_5

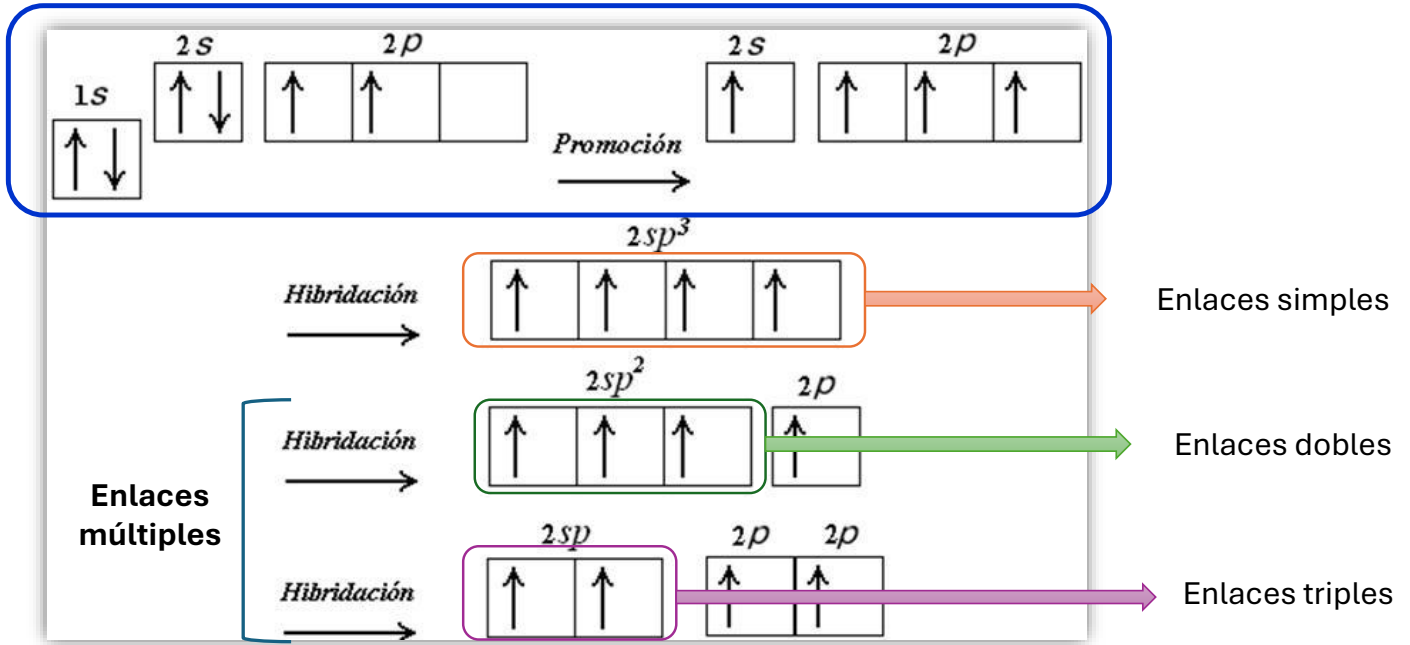
31

Domínios electrónicos	Domínios enlazantes	Domínios no enlazantes	Geometría electrónica	Geometría molecular	Hibridación	Figura representativa
5	5	0	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal	sp^3d	
5	4	1	Bipiramidal trigonal	Balancín o caballete	sp^3d	
5	3	2	Bipiramidal trigonal	Forma de T	sp^3d	
5	2	3	Bipiramidal trigonal	Lineal	sp^3d	

6	6	0	Octaédrica	Octaédrica	sp^3d^2	
6	5	1	Octaédrica	Pirámide de base cuadrada	sp^3d^2	
6	4	2	Octaédrica	Plana Cuadrada	sp^3d^2	

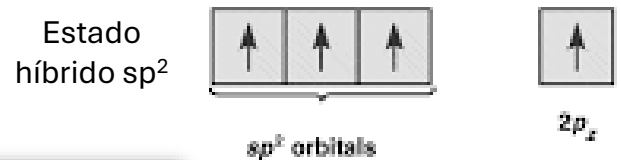
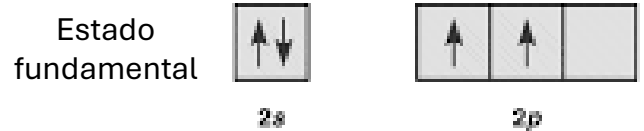
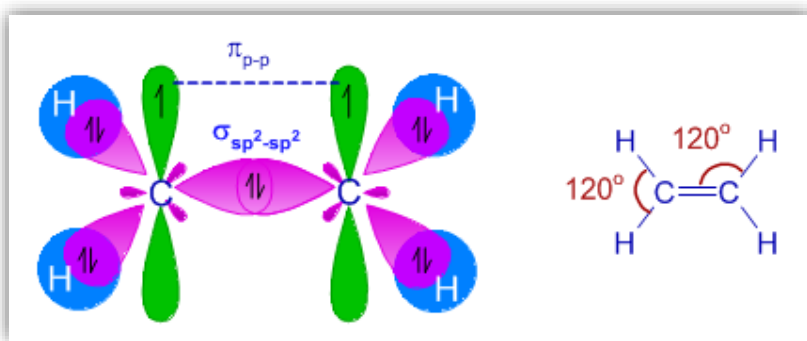
Hibridación de orbitales del C

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



33

C: Hibridización sp^2

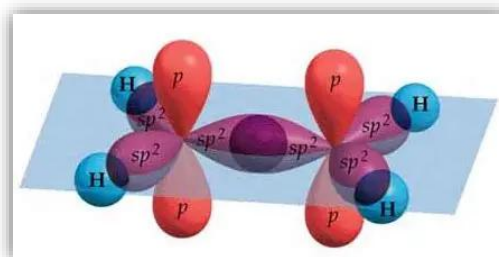


3 enlaces σ

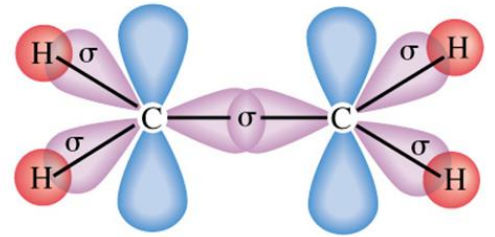
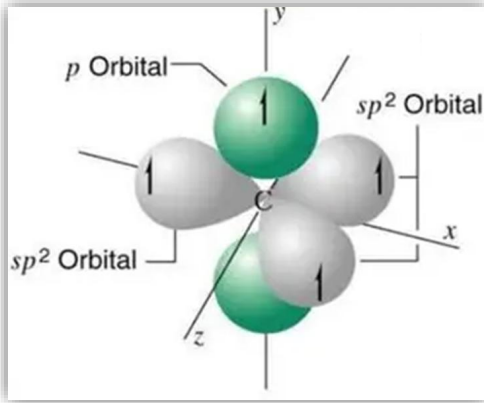
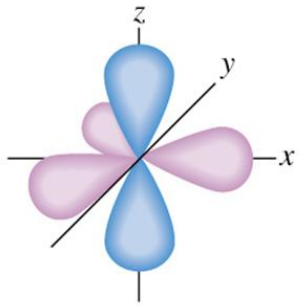
1 enlace π

Forma molecular de cada C:
trigonal plana, 3 enlaces σ
equivalentes.

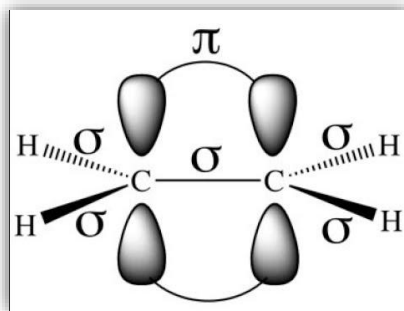
Ejemplo: Eteno - C_2H_4



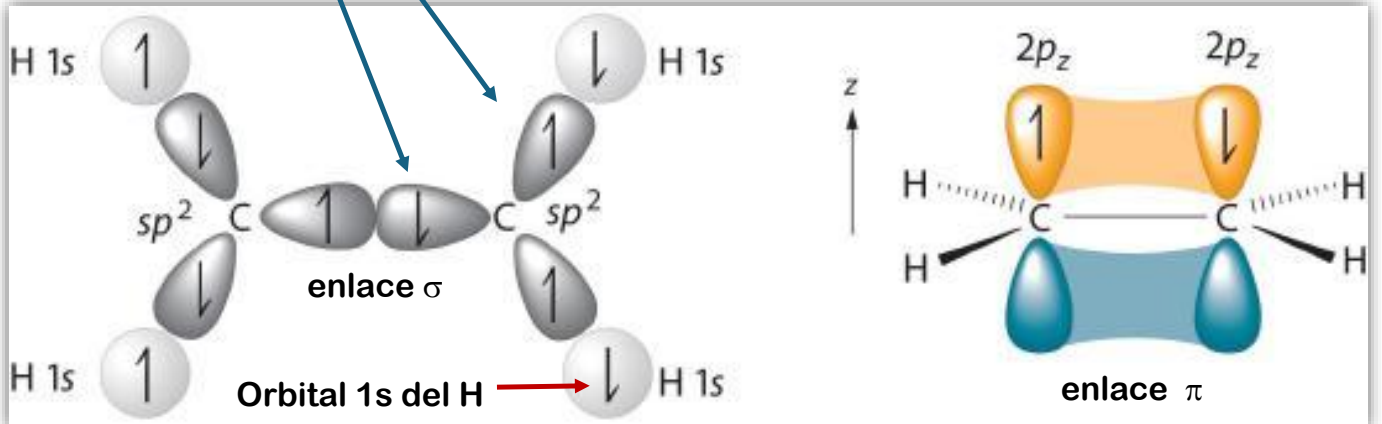
C: Hibridación sp^2



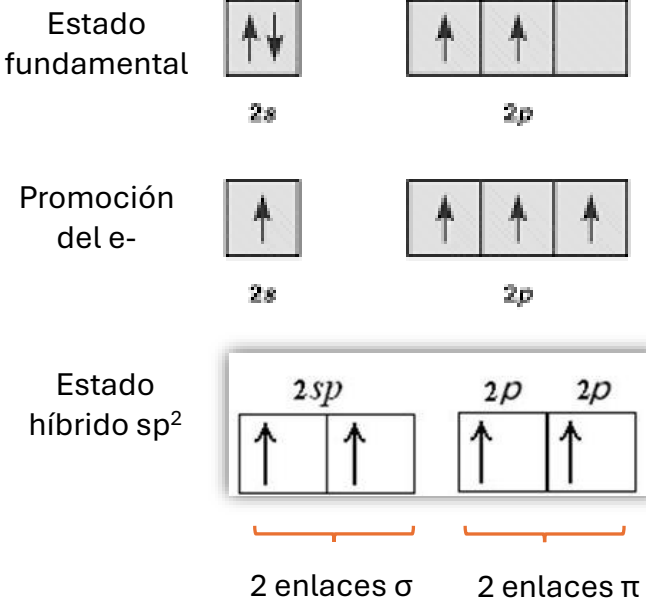
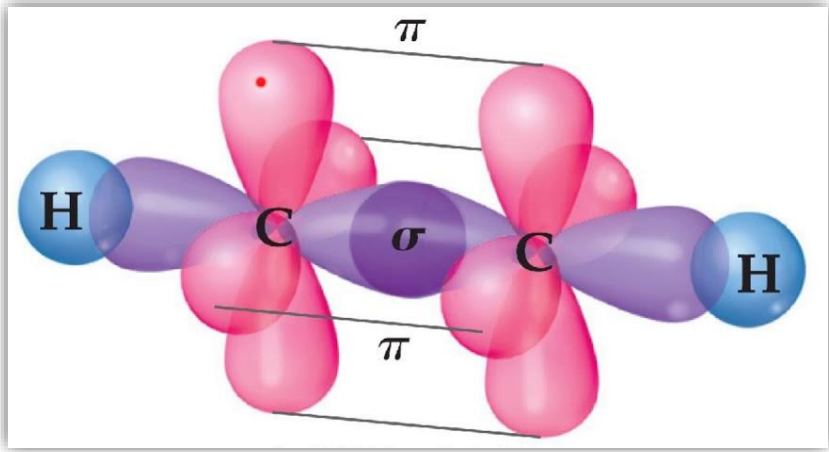
Sigma (σ) bonds



sp^2
híbridos

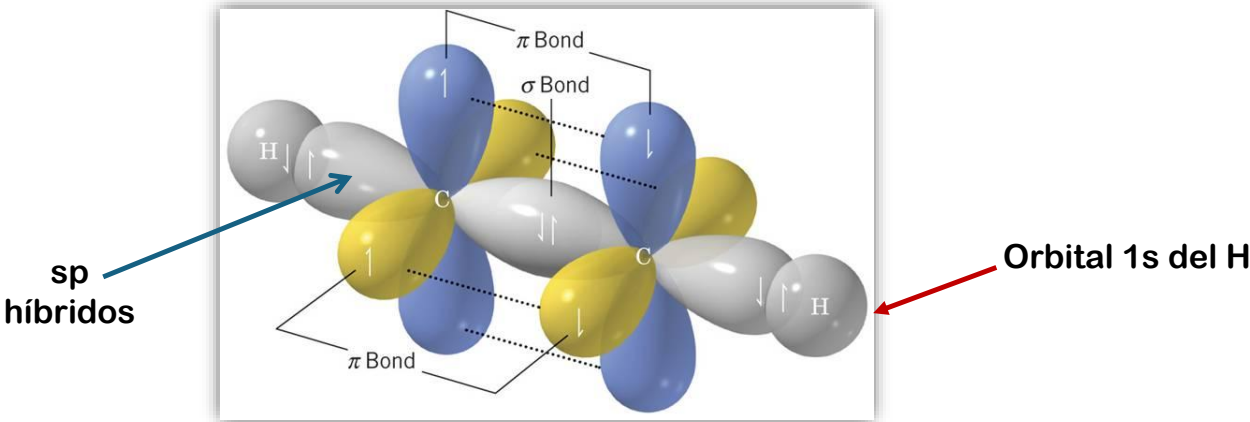
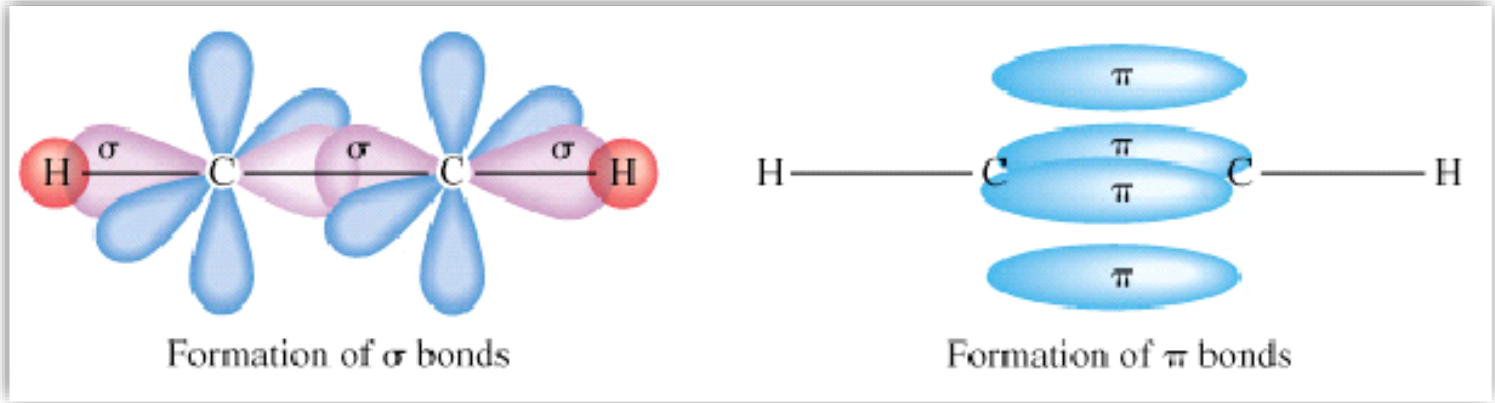


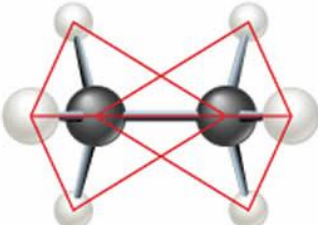
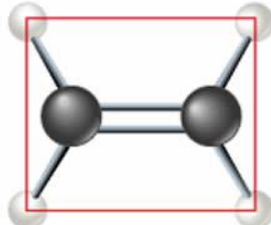

C: Hibridización sp

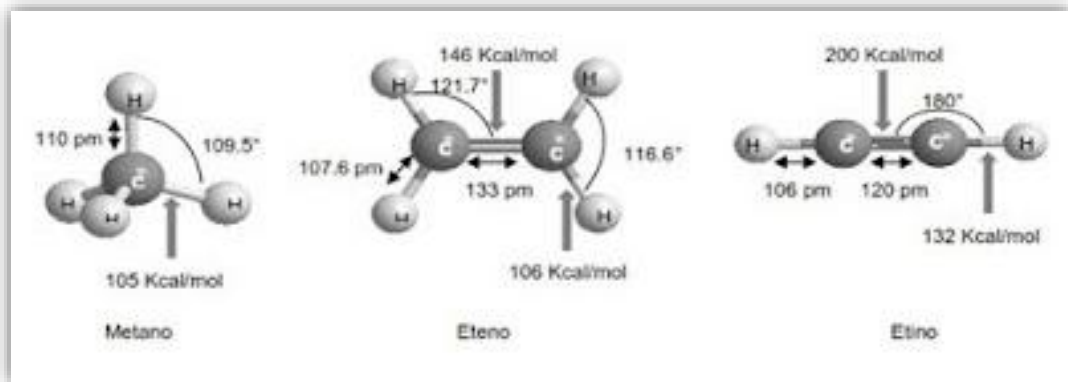


Forma molecular de cada C: lineal, 2 enlaces equivalentes.

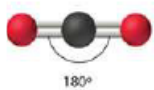
Ejemplo: Etino - C₂H₂



Etano (C ₂ H ₆)	Eteno (C ₂ H ₄)	Etino (C ₂ H ₂)
		
Tetraédrica (enlace sencillo)	Plana (enlace doble)	Lineal (enlace triple)

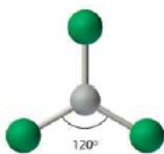


sp

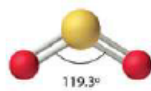


Lineal

sp²

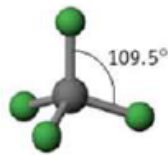


Trigonal
plana

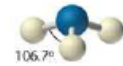


Angular

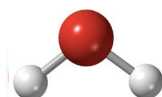
sp³



Tetraédrica

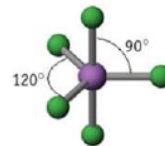


Trigonal
piramidal

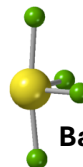


Angular

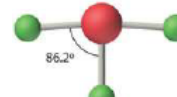
sp³d



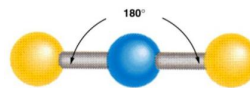
Bipiramidal
trigonal



Balancín

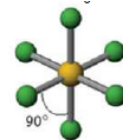


Forma de
T

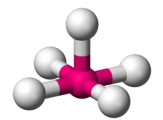


lineal

sp³d²



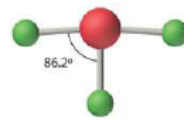
Octaédrica



Pirámide base
cuadrada



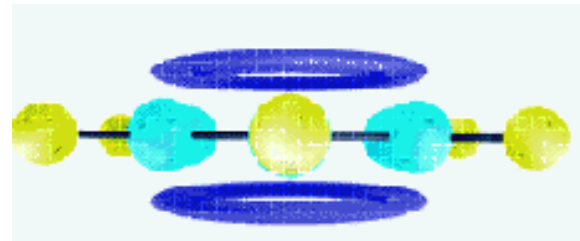
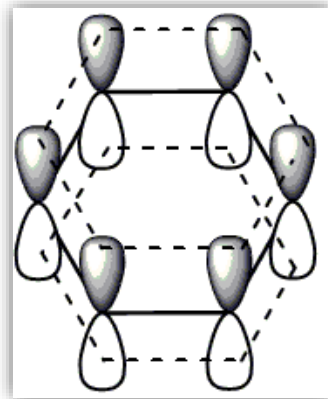
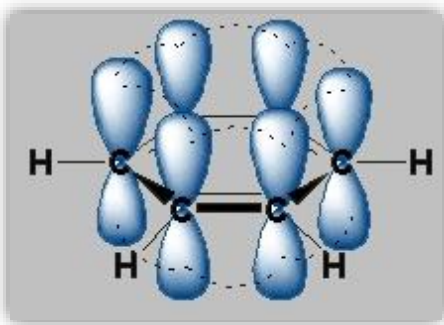
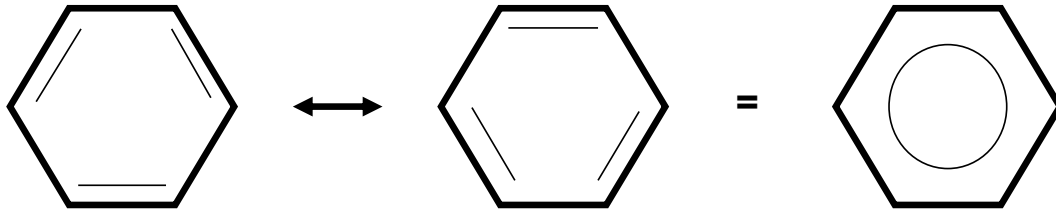
Cuadrada
plana



Forma de
T

**Geometrías
moleculares
(o forma)**

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



41

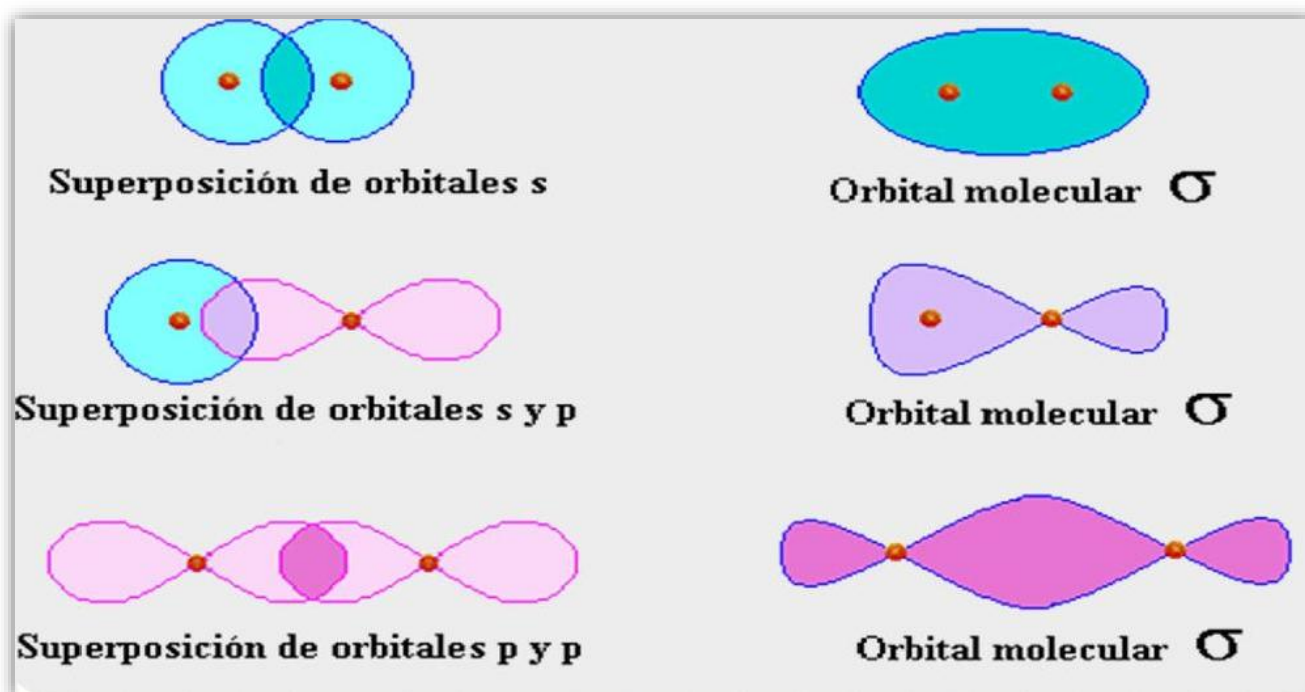
En la TOM los electrones existen en estados de energía permitidos llamados **orbitales moleculares (OM)**, que se pueden extender a todos los átomos de la molécula.

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

Siempre que dos orbitales atómicos se traslapan, se forman dos orbitales moleculares.

42

OM a partir de OA



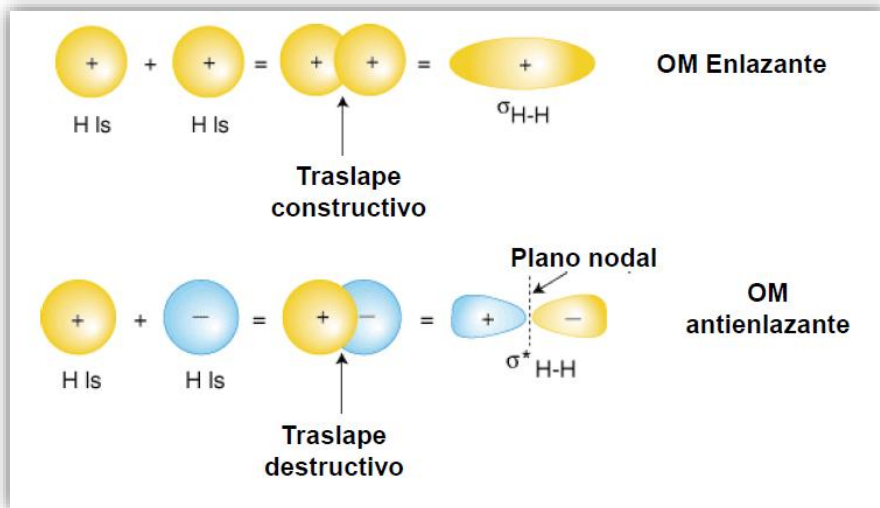
La combinación de 2 OA da lugar a la formación de 2 OM, uno con energía más baja (enlazante) y otro con energía más alta (anti-enlazante) en relación a la energía de los OA que se combinaron. Rigen mismas reglas de llenado que para OA.

OM σ : atravesados por el eje internuclear

OM π : a ambos lados del eje internuclear

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.



Los electrones que ocupan un orbital molecular de enlace se llaman electrones de enlace.

45

La ocupación de los OM de enlace favorece la formación de enlace, en tanto que la ocupación de OM de antienlace es desfavorable.

La estabilidad de un enlace covalente está relacionada con su orden de enlace

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

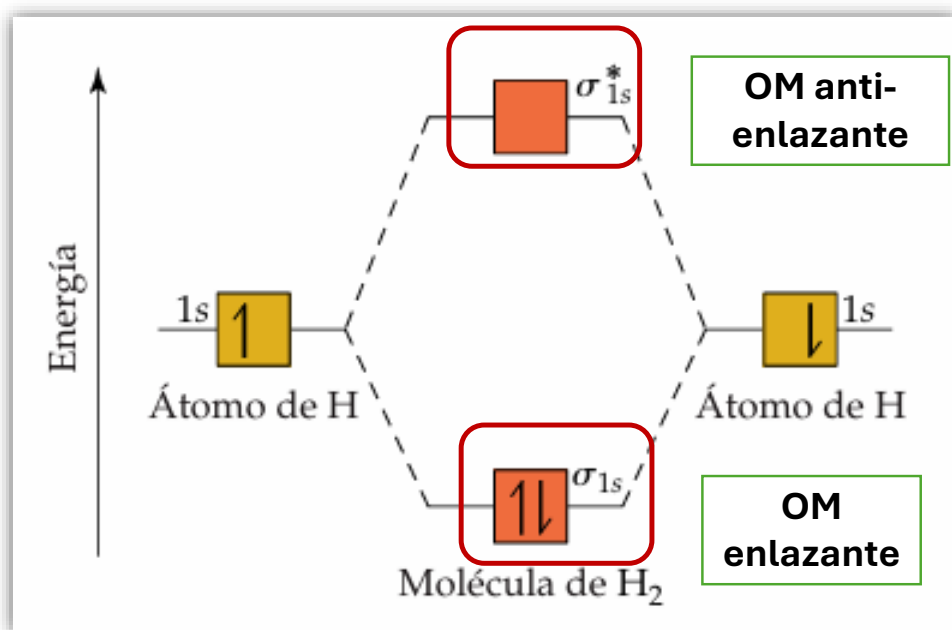
Los e^{-} de OM internos no contribuyen al enlace entre los átomos \Rightarrow en general sólo se consideran los e^{-} de valencia.

Dividimos en dos porque se considera que los enlaces están formados por pares de electrones.

Un orden de enlace de 1 representa un enlace sencillo, un orden de enlace de 2 representa un doble enlace y un orden de enlace de 3 representa un triple enlace.

46

Diagrama de OM de la molécula de H₂

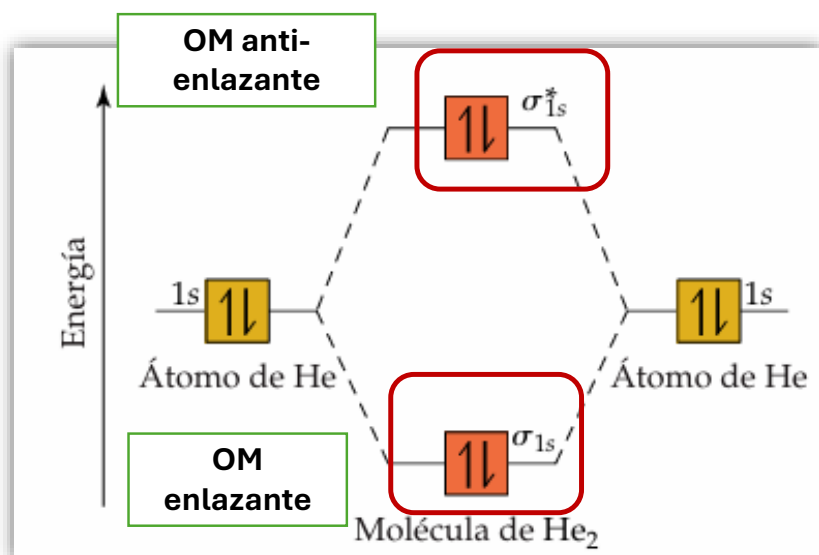


Dado que el orbital σ_{1s} tiene más baja energía que los orbitales $1s$ aislados, la molécula de H₂ es más estable que los dos átomos de H separados.

El H₂ tiene dos electrones de enlace y ninguno de antienlace → orden de enlace $\frac{1}{2} (2-0) = 1$.

47

Diagrama de OM de la molécula de He₂



Requiere que **4 electrones** ocupen sus OM, pero sólo es posible colocar **2 electrones** en el orbital σ_{1s} → los otros dos deberán colocarse en el orbital σ^*_{1s}

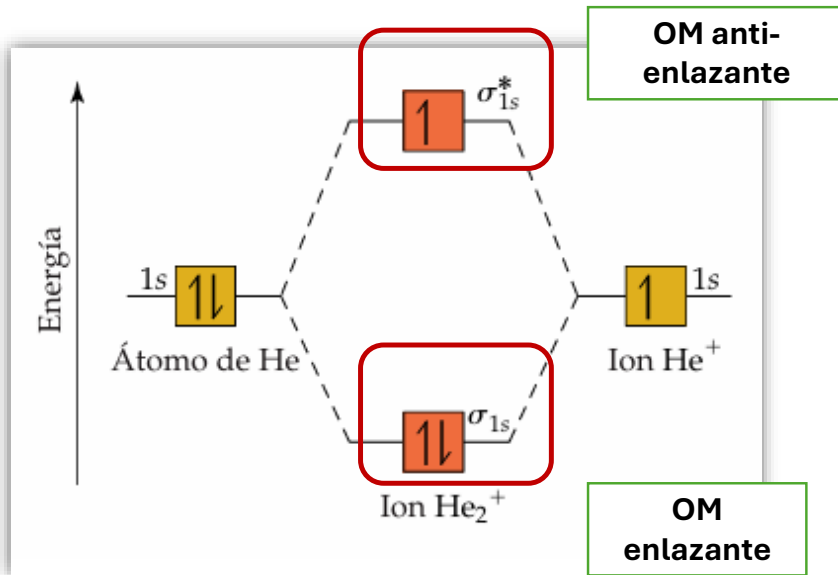
La ↓ de energía por los 2 electrones del OM de enlace se contrarresta por el ↑ de energía de los dos electrones del OM de antienlace.

La molécula de He₂ no existe (igual nº de e⁻ enlazantes y no enlazantes)

orden de enlace: $\frac{1}{2} (2-2) = 0$

48

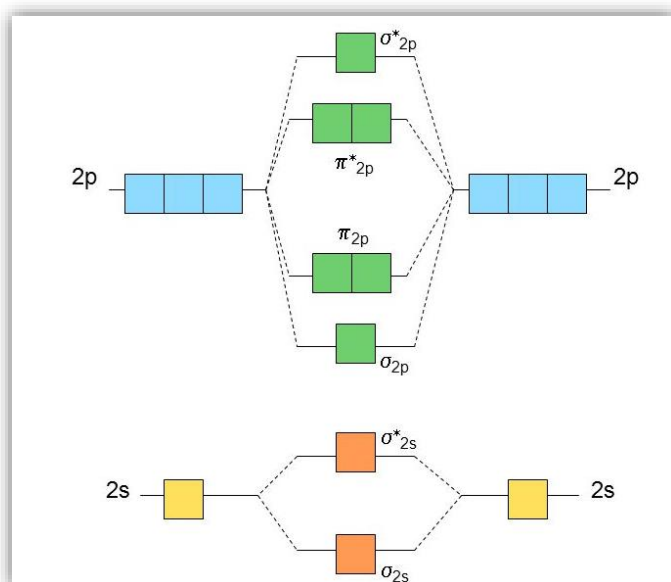
Diagrama de OM del ion He_2^+



Requiere que **3 electrones** ocupen sus OM, es posible colocar **2 electrones** en el orbital σ_{1s} → el tercero debe colocarse en el orbital σ_{1s}^*

$$\text{orden de enlace: } \frac{1}{2} (2-1) = \frac{1}{2}$$

OM con configuraciones electrónicas del B_2 al Ne_2



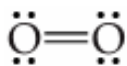
El diagrama supone que no hay interacción entre los orbitales atómicos $2s$ de un átomo y los orbitales atómicos $2p$ del otro átomo.

Los experimentos demuestran que sólo es válido para O_2 , F_2 y Ne_2

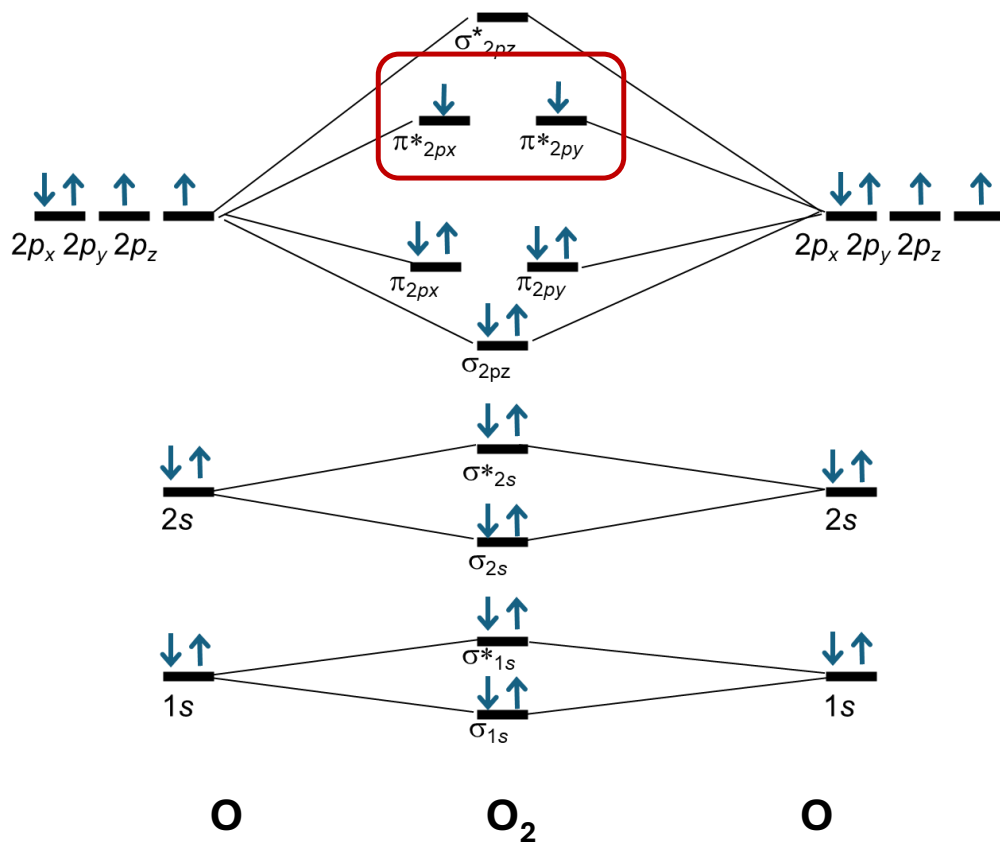
Interacciones $2s$ - $2p$ son lo bastante fuertes como para que se altere el ordenamiento energético de los OM: En el caso de B_2 , C_2 y N_2 , el OM σ_{2p} tiene mayor energía que los OM π_{2p} . En el caso de O_2 , F_2 y Ne_2 , el OM σ_{2p} tiene menor energía que los OM π_{2p} .

Diagrama de OM de la molécula de O₂

La estructura de Lewis no explica el paramagnetismo del O₂.



La TOM predice correctamente 2 electrones no apareados en el orbital π^* 2p de la molécula. También indica correctamente un orden de enlace de 2.



51

$$\text{Orden de enlace en O}_2: \frac{1}{2} (6 - 2) = 2$$

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 N₂, exhiben diamagnetismo, una débil repulsión hacia los campos magnéticos.

52

	Interacción 2s-2p grande			Interacción 2s-2p pequeña		
	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	Ne ₂
σ_{2p}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
π_{2p}^*	<input type="checkbox" value="↑"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑"/> <input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ_{2p}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>
π_{2p}	<input type="checkbox" value="↑"/> <input type="checkbox" value="↑"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/> <input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ_{2s}^*	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
σ_{2s}	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>	<input type="checkbox" value="↑↓"/>
Orden de enlace	1	2	3	2	1	0
Entalpía de enlace (kJ/mol)	290	620	941	495	155	—
Longitud de enlace (Å)	1.59	1.31	1.10	1.21	1.43	—
Comportamiento magnético	Paramagnético	Diamagnético	Diamagnético	Paramagnético	Diamagnético	—