

ENLACE METÁLICO

A continuación se expone qué se entiende por enlace metálico y por material metálico; además, se presentan algunas propiedades generales de los materiales metálicos. También se exponen algunas especificidades de los metales de transición.

Metales puros

Consideremos el caso de metales puros, antes que el de aleaciones resultantes de la combinación de elementos metálicos.

En el caso de metales puros formando un sólido, cada átomo, debido a su electropositividad, pierde sus electrones de valencia. De esta manera se forman cationes y electrones libres. Los cationes de la mayoría de los elementos metálicos que NO son de transición, luego de perder sus electrones de valencia, quedan con una simetría bastante esférica.

Los metales de transición tienen un comportamiento algo diferente (menos esférico y algo direccional), relacionado con la hibridación de sus dos orbitales más externos ((n)s y (n-1)d). Como resultado de esto último, ellos presentan un enlace metálico con una fracción de enlace covalente.

Material y enlace metálico

En los materiales metálicos, los cationes forman una red 3D, la cual es bañada por el gas de electrones libres. La unión no es directa catión a catión, sino que se hace a través del gas de electrones. Ese tipo de unión se llama enlace metálico. En la superficie del cristal existe una barrera de potencial, llamada función de trabajo, que impide que los electrones del gas escapen, a menos que se aplique la suficiente energía para lograrlo.

En el caso de simetría catiónica esférica, el enlace metálico es no direccional: no hay direcciones preferenciales de enlace. (Por el contrario, el enlace covalente es marcadamente dirigido; por ejemplo, en el caso del diamante, hay 4 direcciones posibles y bastante estrictas de enlace.

Por definición, en los materiales metálicos el enlace que predomina es el enlace metálico, según lo ya expuesto.

Una característica general del enlace metálico es que, al igual que el enlace iónico, es un enlace no dirigido que forma cristales 3D, no forma moléculas. (El enlace covalente forma preferentemente moléculas y, ocasionalmente, cristales)

Elemento metálico

Un elemento metálico es un elemento de la Tabla Periódica que es electropositivo. Como tal, éste puede formar, dependiendo de los otros elementos con que se combina, un cristal metálico o un cristal iónico.

Relación Enlace-Propiedades

A continuación nos referimos, para los materiales metálicos, a la relación entre el enlace y algunas propiedades: ductilidad, y conductividad eléctrica y térmica. También es de interés la temperatura de fusión, que es una propiedad relacionada con la intensidad del enlace.

La deformación plástica en los cristales metálicos se relaciona con el deslizamiento de los planos más densos del cristal (estrictamente, por un mecanismo de dislocaciones). Para que se produzca este deslizamiento entre planos sin que haya fractura, **es fundamental** que el enlace sea no direccional. Durante la deformación plástica se requiere que se mantenga la unión entre átomos involucrados en el núcleo de la dislocación en movimiento, sin que haya ruptura del enlace. Que la unión atómica se mantenga en la zona altamente distorsionada que es el núcleo de la dislocación, es posible debido a la no direccionalidad del enlace metálico. Así se explica la relativamente alta ductilidad (alta capacidad de deformación plástica) de los materiales metálicos..

Sabemos que los metales son buenos conductores de la electricidad y del calor. Esto se explica por la presencia del gas de electrones libres en los materiales metálicos; nótese que tal gas no existe ni en los cristales iónicos ni en los covalentes. Ese gas es el responsable de la conductividad eléctrica; los electrones

libres (o de valencia) son eficientes portadores de carga por su poca masa y tamaño.

Hay dos mecanismos importantes de transporte de calor: a) transporte por la red atómica, que existe en todo material y b) transporte por el gas de electrones libres, que existe solo en los materiales metálicos. Generalmente, con excepciones, el transporte por la red es poco eficiente, en tanto que el transporte de calor por el gas de electrones de los metales es siempre relativamente muy eficiente. Ello explica que los materiales metálicos, que sí tienen un gas de electrones, sean mucho mejores conductores del calor que las cerámicas y los polímeros, donde dicho gas no existe. Nótese que el gas de electrones libres de los materiales metálicos es responsable tanto de la buena conductividad térmica como de la buena conductividad eléctrica de estos materiales,

Aleaciones

Para el caso de combinación entre metales, consideremos que tenemos un cristal puro de un metal A, al cual le vamos agregando otro elemento metálico B, gradualmente. (Podemos suponer que agregamos este segundo elemento vía fusión, por ejemplo). Inicialmente el elemento B se disolverá en el cristal A, formando una **solución sólida**, también de carácter metálico. (Tal solución puede ser de sustitución o de inserción, dependiendo de varios factores). Esto hasta un **límite de solubilidad**, a partir del cual puede comenzar a aparecer un segundo cristal coexistiendo con el primero; en ciertos casos particulares, ese límite podría no existir, y se tendría solubilidad total. (Dejémoslo fuera el caso en que este segundo cristal, que aparece más allá del límite de solubilidad, sea una solución sólida basada en el segundo elemento, B). De esta manera, el tipo de enlace de este segundo cristal dependerá fuertemente de la diferencia de electronegatividad entre los elementos A y B. Si dicha diferencia es grande, este segundo cristal podría tener un carácter predominantemente iónico. Los cristales iónicos así formados, llamados compuestos intermetálicos, tienen fórmulas estequiométricas precisas (no son soluciones sólidas, las que tienen un rango de

solubilidad). Así, por ejemplo, el NaZn_{13} es un compuesto iónico estequiométrico. Por el contrario, si la diferencia de electronegatividad fuese moderada, el segundo cristal que aparece también podría ser otra solución sólida de carácter metálico. Además, hay un caso (Cu con Ni) donde los dos metales participantes son tan similares entre sí, que se combinan en todas las proporciones, formando un único tipo de cristal, y no hay límite de solubilidad. Por separado el Cu y el Ni forman el mismo tipo de estructura cristalina, y tienen pesos, radios y valencias similares.

Metales de transición

En el enlace de los metales de transición participan los dos niveles electrónicos más externos, $(n)s$ y $(n-1)d$. Cuando el elemento es excitado, hay una recombinación de estos orbitales (hibridación), quedando algunos orbitales hibridados sólo parcialmente llenos. Debido a lo anterior, los cationes no tienen una simetría completamente esférica y el enlace, si bien es predominantemente metálico, tiene un fuerte carácter covalente. Téngase presente que el enlace covalente no da lugar a simetría esférica, y es dirigido y muy fuerte.

Los metales de transición son un ejemplo importante de materiales con enlace mixto metálico-covalente. Esto hace que los metales de transición tengan propiedades diferentes de los metales que no son de transición. Así, su componente de enlace covalente contribuye a que los metales de transición presenten temperaturas de fusión (una medida indirecta y aproximada de la intensidad del enlace) mayores que la de los metales no de transición. A este respecto, conviene analizar la Tabla 2.8 del texto de Smith.

Los metales de transición también tienen un gas de electrones, y una simetría electrónica algo cercana a la esférica. Por ello, su conductividad eléctrica y térmica, y su ductilidad, también es muy superior a la de los materiales no metálicos.