

Enlaces

Parte 1. Enlaces Primarios

Parte 2. Secundarios

Parte 1.

| Enlaces Primarios

Compuestos de algunos elementos en función de la electronegatividad.

- Na (Z=11): 0,9
- Al (Z=13): 1,5
- Cu (Z=29): 1,9
- H (Z=1): 2,1
- C(Z=6): 2,5
- N(Z=7): 3,0
- O(Z=8): 3,5
- F(Z=9): 4,0
- Cl(Z=17): 2,9

¿Qué combinaremos?

Primero

- 1. Elementos puros e+
- 2. Elementos puros e-
- 3. Uno e+ con otro e-

Después:

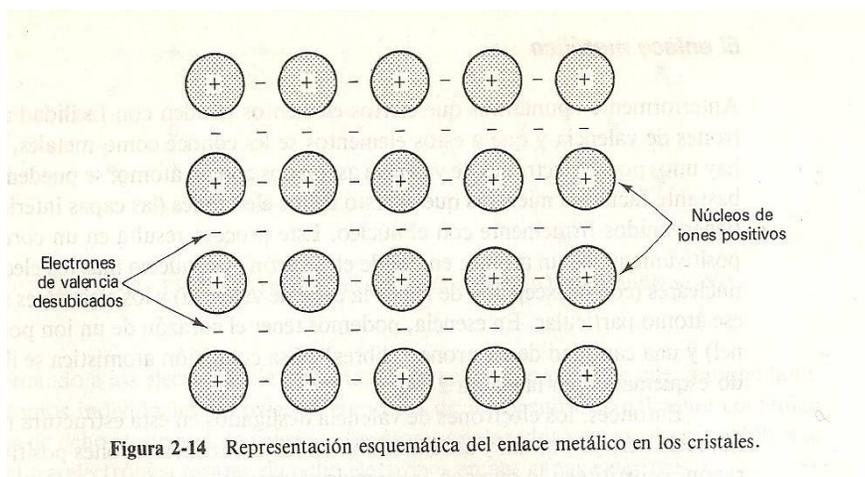
- Un elemento e+ con otro e+
- Un elemento e- con otro e-

Caso 1: Elemento E+ (Metal) Puro (Aleaciones: después)

- Ejemplo Na (Z=11)
- $\text{Na}^0 = 1s^2s^22p^63s^1$

- $\text{Na}^0 = \text{Na}^+ + 1e$
- La estructura electrónica del catión Na^+ se parece a la Ne^0 : es bastante esférica y estable (El grado de esto último depende del metal específico).
- Resultado: catión con simetría bastante esférica y electrón libre

Enlace Metálico y Cristal Metálico



Enlace Metálico

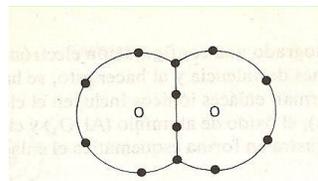
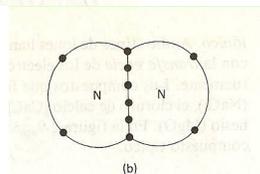
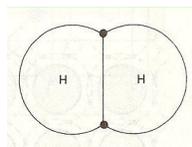
- El enlace metálico forma CRISTALES, con un gran número de átomos para que sea estable.
- NO FORMA MOLÉCULAS
- Red de cationes y gas de electrones
- Cationes con simetría (bastante) esférica

Caso 2: Elemento Electronegativo Puro

- Ejemplo F con F, y después más flúor.
- F(Z=9)
- El F es muy electronegativo. Tiende a captar un electrón.
- Dos átomos de F: cada uno tiende a captar.
- Resultado: comparten un par de electrones.

Enlaces Covalentes en Moléculas

Representaciones esquemáticas de moléculas



- Pares de electrones compartidos

H(Z=1) H:H

F(Z=9) F:F

O(Z=8) O::O

N(Z=6) N:::N

Caso H₂O H:O:H

Enlace covalente

- Entre elementos electronegativos, ya sea puros (p.e., F_2), o en combinación (p.e., H_2O).
- El enlace se debe a pares de electrones (de valencia) compartidos.
- **En el enlace esos electrones están muy localizados. Función $\psi^2 dV$ de los electrones enlazados muy intensa. Ello implica un enlace muy fuerte.**
- Este es el enlace más fuerte de todos.
- Enlace normalmente direccional. (Caso especial H_2).

ENLACE COVALENTE

- Forma moléculas
- También una cantidad reducida de cristales 3D, cristales que son muy importantes.
- Siempre el enlace dentro de una molécula es exclusiva o predominantemente covalente
- El enlace de los metales de transición es predominantemente metálico, pero con una importante componente de enlace covalente.

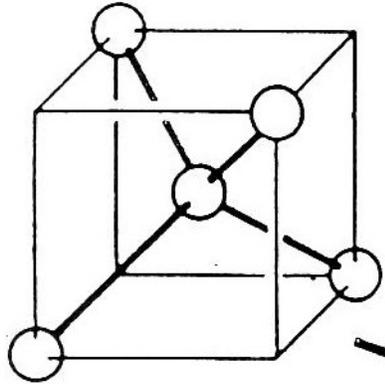
¿Por qué son pocos los cristales covalentes 3 D?

- Caso puro
- Una limitante es el número de enlaces no coplanares.
- Número mínimo de enlaces no coplanares necesarios: 4
- Soluciones posibles, para átomos electronegativos con valencia 4: ver tabla periódica

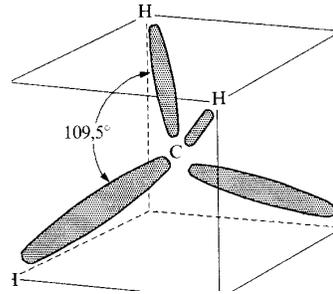
Cristales 3D Covalentes

- C(Z=6)
- Hibridación de orbitales sp^3 , caso de C con cuatro enlaces simples.
- Hibridación: recombinación de orbitales.
- Ver texto de Smith, Cap. 2.

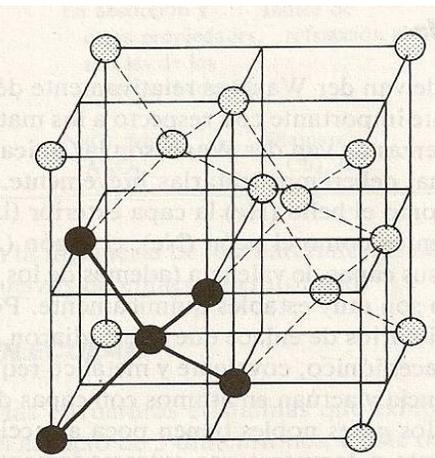
Hibridación sp^3 del C. Figuras auxiliares, (no celdas)



- Enlace covalente direccional
- 4 enlaces dirigidos



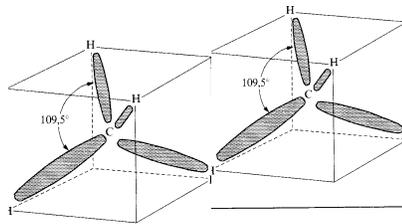
Enlace Covalente en Cristales Cristal de Diamante. C (sp^3)



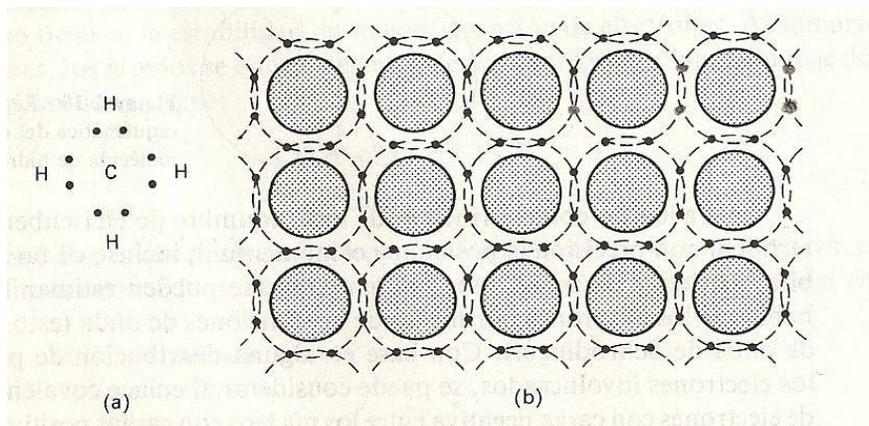
- Diamante: C diamante, un material. Importante cristal covalente.
- También hay Si, Ge y Sn con geometría "diamante".
- Concepto de cristal y de celda. La figura adjunta es una celda
- Por traslación paralela de la celda, se obtiene geoméricamente el cristal.
- La celda es solo lo que está dentro del paralelepípedo respectivo (en este caso, gran cubo)

Un cristal no denso

- El respeto de la direccionalidad y número de enlaces, hace que diamante no sea un cristal denso, en el sentido de que hay espacios libres. Solo 4 de los 8 cubos pequeños de la celda están ocupados con cubos auxiliares.



Enlaces de C (sp^3) en el metano y el diamante. Modelo 2D de algo que es 3D



Otros compuestos del C

- Polímeros

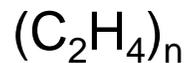
Hay uniones covalentes de C con H y otros elementos electronegativos, dentro de las moléculas.

Ejemplos:

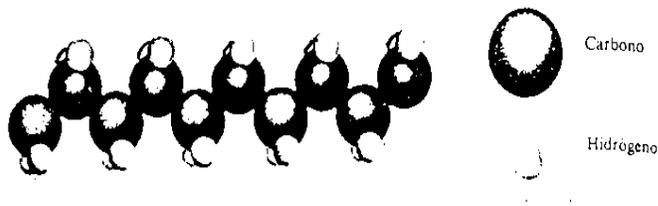
Moléculas largas de Polietileno y Caucho

Lo veremos pronto

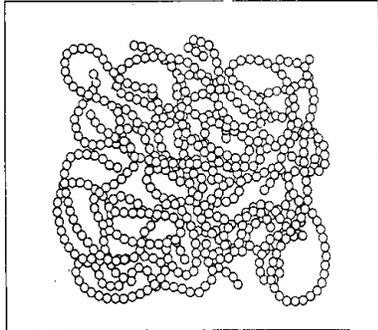
Molécula larga del Polietileno



- Molécula larga o Cristal 1D
- El mero o celda es (C_2H_4) y no CH_2 .
- Hay una columna vertebral de C en zig-zag, e hidrógenos periféricos.



Esquema del material Polietileno



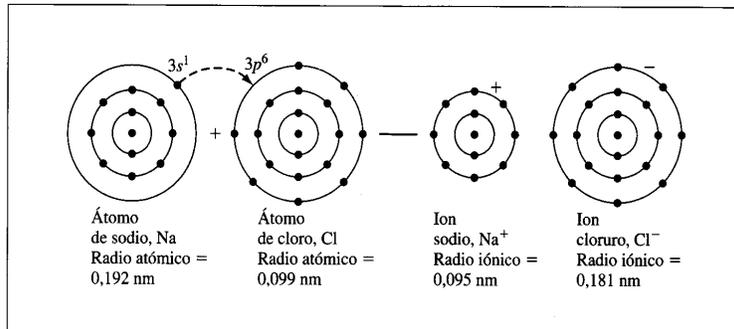
- Cada círculo representa un mero.
- Una molécula larga se une con otra a través de enlaces de dipolo permanente.

Caso 3:

Unión entre un elemento e^+ y otro e^-

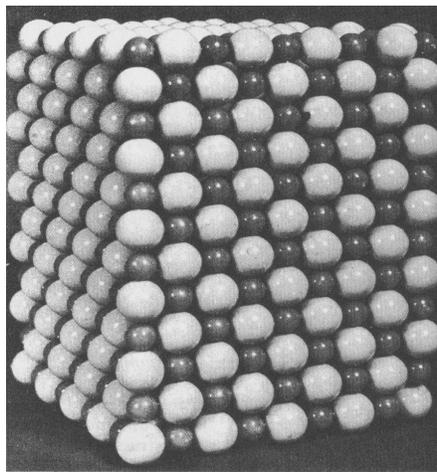
- Ejemplo del Na y el Cl
- El Na cede totalmente un electrón. Queda como catión Na^+ con capas completas y simetría esférica
- El Cl capta totalmente un electrón. Queda como anión Cl^- con capas completas y simetría esférica,

Caso cristal NaCl



- Formación de un primer par iónico de Na⁺Cl⁻ a partir de Na^o y Cl^o.
- En esta ionización, el electrón 3s más externo del Na es liberado y captado por el Cl, que así completa su octeto.
- En el cristal iónico, participan muchísimos átomos de cada especie.

Monocristal de NaCl



Enlace Iónico

- Se forma entre elementos electronegativos y electropositivos.
- Ejemplo: NaCl
- Da lugar a cristales de (muchos) cationes y aniones, con simetría bastante esférica.
- En ausencia de campos externos, como todo cristal, deben ser neutros: fórmula estequiométrica.
- El enlace es de naturaleza electrostática y no direccional.

PARTE 2. ENLACES SECUNDARIOS

ENLACES SECUNDARIOS

(Texto de Smith)

- Enlaces secundarios, de dipolo o moleculares.
- Incluye el caso especial de las “moléculas monoatómicas” de gases nobles
- Recuerde que dentro de las moléculas, los enlaces atómicos son siempre de carácter predominante covalente.

Enlaces

- **Enlaces Primarios**, participan directamente los electrones de valencia. El rol de estos electrones (ser cedidos, compartidos o captados) depende directamente de la electronegatividad de los elementos participantes.
Tipos: covalente, iónico y metálico. (Hay mixtos)
- **Enlaces Secundarios**, de Dipolos (eléctricos) o Intermoleculares (Moleculares). Unen moléculas covalentes o, caso especial, moléculas monoatómicas (gases nobles). Dos casos:
 - Dipolo permanente: moléculas polares
 - Dipolo fluctuante: solo relevante en gases nobles, es el más débil de todos

Enlace de Dipolo Permanente

En moléculas dipolares: no hay coincidencia entre el centro de cargas positivas y negativas

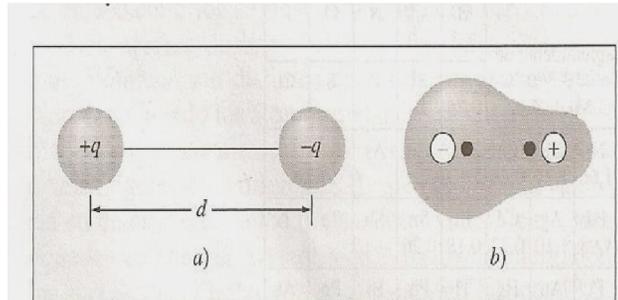
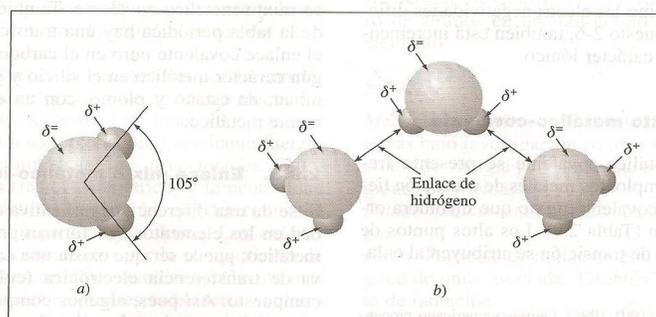


FIGURA 2.26. a) Dipolo eléctrico. El momento dipolar es qd , y b) momento dipolar eléctrico en una molécula enlazada covalentemente. Obsérvese la separación de los centros de carga positivos y negativos.

Condensación del agua. (Licuefacción o solidificación).



- Dentro de la molécula el enlace es covalente (fuerte)
- Entre moléculas el enlace es de dipolo permanente.
- La geometría del cristal no es gobernada por la obtención de la máxima densidad, sino que por satisfacer la direccionalidad de los dipolos

Enlace de Dipolo Fluctuante

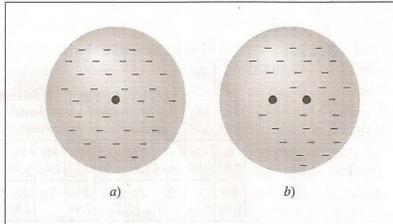


FIGURA 2.27. Distribución de la nube de carga electrónica en un átomo de gas noble. a) Distribución idealizada de una nube de carga electrónica simétrica, y b) caso real con distribución de la nube de carga electrónica asimétrica y que cambia con el tiempo, creando un «dipolo eléctrico instantáneo».

- Enlace débil presente en todos los elementos
- Es importante solo cuando es el único presente: caso de la condensación de los gases inertes.

TABLA 2.10. Puntos de fusión y ebullición de gases nobles a presión atmosférica

Gas noble	Punto de fusión (°C)	Punto de ebullición (°C)
Helio	-272,2	-268,9
Neón	-248,7	-245,9
Argón	-189,2	-185,7
Kriptón	-157,0	-152,9
Xenón	-112,0	-107,1
Radón	-71,0	-61,8

Enlace débil:
temperatura de fusión muy baja