

# Enlaces

Parte 1. Enlaces Primarios

Parte 2. Secundarios

## Parte 1.

## | Enlaces Primarios

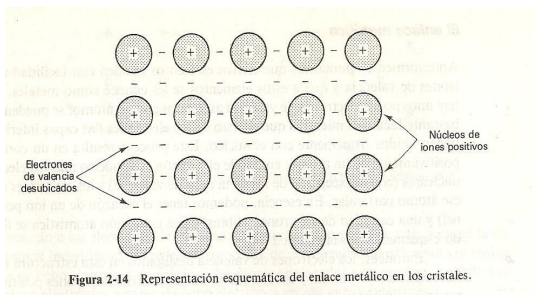
### Compuestos de algunos elementos en función de la electronegatividad.

- |              |     |                              |
|--------------|-----|------------------------------|
| • Na (Z=11): | 0,9 | ¿Qué combinaremos?           |
| • Al (Z=13): | 1,5 | Primero                      |
| • Cu (Z=29): | 1,9 | • 1. Elementos puros e+      |
| • H (Z=1):   | 2,1 | • 2. Elementos puros e-      |
| • C (Z=6):   | 2,5 | • 3. Uno e+ con otro e-      |
| • N (Z=7):   | 3,0 |                              |
| • O (Z=8):   | 3,5 | Después:                     |
| • F (Z=9):   | 4,0 | • Un elemento e+ con otro e+ |
| • Cl (Z=17): | 2,9 | • 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  $\text{Na}^+$  se parece a la  $\text{Ne}^0$ : 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

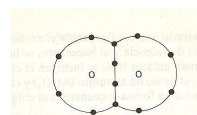
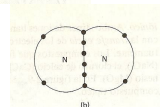
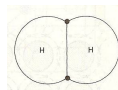
- El enlace metálico forma CRISTALES, con un gran número de átomos para que sea estable.
- NO FORMA MOLÉCULAS
- Red de cationes y gas de electrones
- Cationes con simetría (bastante) esférica

### 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  $H_2O$   $H:O:H$

### 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.

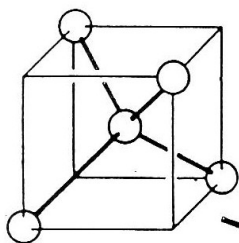
### ¿Por qué son pocos los cristales covalentes 3 D?

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

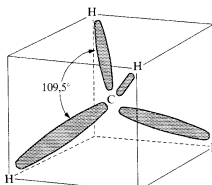
### Cristales 3D Covalentes

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

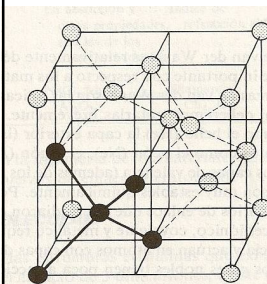
## Hibridación $sp^3$ del C. Figuras auxiliares, ( no celdas)



- Enlace covalente direccional
- 4 enlaces dirigidos



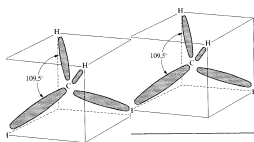
## Enlace Covalente en Cristales Cristal de Diamante. C ( $sp^3$ )



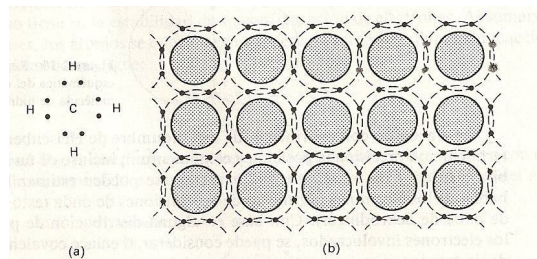
- Diamante: C diamante, un material. Importante cristal covalente.
- También hay Si, Ge y Sn con geometría "diamante".
- Concepto de cristal y de celda. La figura adjunta es una celda.
- Por traslación paralela de la celda, se obtiene geoméricamente el cristal.
- La celda es solo lo que está dentro del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

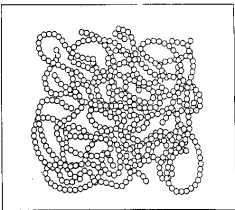
Lo veremos pronto

## Molécula larga del Polietileno ( $C_2H_4$ )<sub>n</sub>

- 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



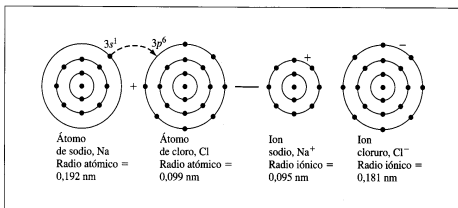
- Cada círculo representa un mero.
- Una molécula larga se une con otra a través de enlaces de dipolo permanente.

## Caso 3:

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

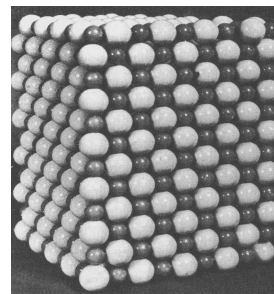
- Ejemplo del Na y el Cl
- El Na cede totalmente un electrón. Queda como catión  $\text{Na}^+$  con capas completas y simetría esférica
- El Cl capta totalmente un electrón. Queda como anión  $\text{Cl}^-$  con capas completas y simetría esférica,

## Caso cristal NaCl



- Formación de un primer par iónico de  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  a partir de  $\text{Na}^0$  y  $\text{Cl}^0$ .
- 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

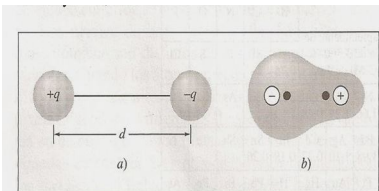
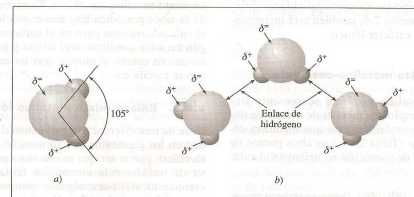


FIGURA 2.26. a) Dipolo eléctrico. El momento dipolar es  $qd$ , y b) momento dipolar eléctrico en una molécula enlazada covalentemente. Obsérvese la separación de los centros de carga positivos y negativos.

## 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

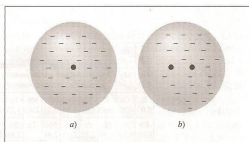


FIGURA 2.27. Distribución de la nube de carga electrónica en un átomo de gas noble. a) Distribución idealizada de una nube de carga electrónica simétrica, y b) caso real con distribución de la nube de carga electrónica asimétrica y que cambia con el tiempo, creando un «dipolo eléctrico instantáneo».

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                   |
| Raón      | -71,0                | -61,8                    |

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