

TEMA III ENLACES

1. INTRODUCCIÓN
2. EL ENLACE IÓNICO
 - 2.1. ENERGÍA DEL ENLACE IÓNICO.ENERGÍA RETICULAR.
 - 2.2. CICLO DE BORN-HABER
 - 2.3. PROPIEDADES DE LOS SÓLIDOS IÓNICOS
3. EL ENLACE COVALENTE
 - 3.1. TEORÍA DE LEWIS
 - 3.2. POLARIDAD DEL ENLACE COVALENTE
 - 3.3. ENLACE COVALENTE COORDINADO O DATIVO
 - 3.4. RESONANCIA
 - 3.5. GEOMETRÍA MOLECULAR: MÉTODO DE V.S.E.P.R.
 - 3.6. LA TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (T.E.V.)
 - 3.7. PROMOCIÓN DE ELECTRONES
 - 3.8. SOLAPAMIENTO
 - 3.9. HIBRIDACIÓN
 - 3.10.PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS COVALENTES
4. EL ENLACE METÁLICO
5. FUERZAS INTERMOLECULARES
 - 5.1. FUERZAS DE VAN DER WAALS
 - 5.2. PUENTES DE HIDRÓGENO

1.- INTRODUCCIÓN

Con el término ENLACE se designa al conjunto de interacciones que mantienen unidos a los átomos o a las moléculas entre sí para dar lugar a estructuras más estables que los átomos o moléculas de partida.

La causa que produce el enlace es la economía energética, todos los sistemas físicos evolucionan espontáneamente hacia un mínimo de energía (mayor estabilidad). La unión entre átomos se realiza mediante los electrones de la última capa externa que se llaman electrones de valencia. Los átomos tienden a adquirir la configuración electrónica de gas noble más próximo mediante los enlaces, ganando, perdiendo o compartiendo electrones.

Los enlaces se pueden agrupar en dos grandes conjuntos:

- Enlaces interatómicos o intramoleculares: Son los que mantienen unidos entre sí a un conjunto de átomos para dar lugar a una molécula o a una estructura superior al propio átomo aislado. Estos enlaces se dividen en tres grandes grupos:
 - Enlace iónico
 - Enlace covalente
 - Enlace metálico
- Enlaces intermoleculares: Son los que mantienen unidas entre sí a moléculas de la misma sustancia. Estudiaremos los siguientes:
 - Fuerzas de Van der Waals.
 - Puentes de hidrógeno.

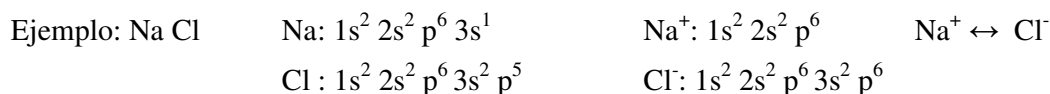
Los enlaces intermoleculares son más débiles que los intramoleculares.

2.- EL ENLACE IÓNICO

Los átomos forman enlace para alcanzar la estructura electrónica de gas noble. A partir de la configuración electrónica de un elemento se puede deducir fácilmente su tendencia a ganar o perder electrones. Los elementos de la izquierda del sistema periódico pueden transformarse fácilmente en iones positivos mediante una pequeña aportación de energía que llamamos POTENCIAL DE IONIZACIÓN. Los elementos de la derecha del sistema periódico tienen tendencia a transformarse en iones negativos cediendo una energía que llamamos AFINIDAD ELECTRÓNICA.

Si dos elementos de electronegatividad muy diferente se hallan uno en presencia del otro se producirá una cesión de electrones desde el elemento menos electronegativo al más electronegativo, formándose los iones positivo y negativo, estos iones se unirán por fuerzas electrostáticas de atracción.

El enlace IÓNICO es el que se forma entre iones de distinto signo por fuerzas electrostáticas. Al número de electrones que un elemento toma o cede para transformarse en ion se le denomina valencia iónica o electrovalencia del elemento.

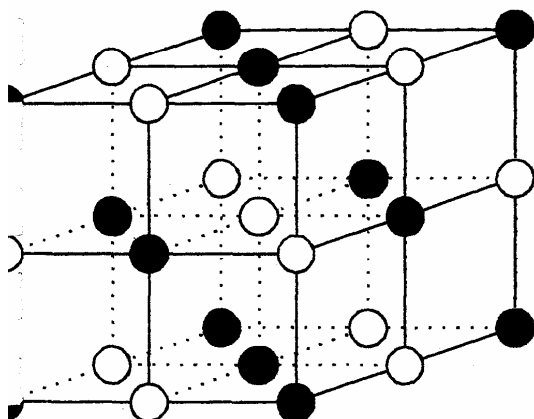


Aunque formulemos los compuestos iónicos como moléculas, por ej. NaCl, los compuestos iónicos no forman moléculas aisladas sino redes cristalinas en donde los iones se sitúan en los puntos donde se maximice la atracción electrostática entre ellos.

Para que se forme una red cristalina los iones se situarán de manera que satisfagan las siguientes condiciones (la geometría de la red dependerá de ello):

- El número de cargas de un signo debe ser igual al número de cargas de signo contrario, para que el cristal resulte eléctricamente neutro.
- Los iones tienden a rodearse del máximo número posible de iones de signo contrario buscando el empaquetamiento lo más compacto posible. El grado de empaquetamiento depende del tamaño de los iones.

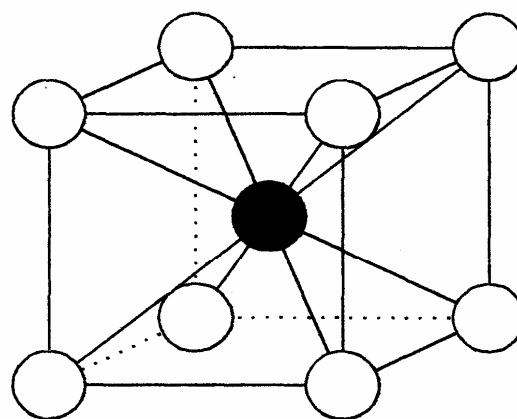
Red cristalina NaCl
i.c. = 6:6



○ **Na+**

● **Cl-**

Red cristalina CsCl
i.c. = 8:8



○ **Cs+**

● **Cl-**

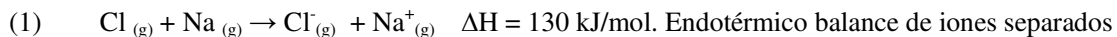
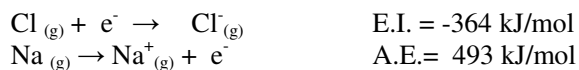
Al número de iones de un signo que rodean a un ion de signo contrario se llama **ÍNDICE DE COORDINACIÓN**

En cuanto al carácter iónico del enlace, es decir, la fortaleza del mismo, se puede establecer que cuanto mayor sea la diferencia de electronegatividad entre los elementos que lo forman mayor será dicho carácter iónico.

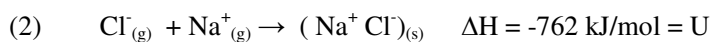
2.1 ENERGÍA DEL ENLACE IÓNICO. ENERGÍA RETICULAR.

Si en la formación de un enlace iónico solo tenemos en cuenta la afinidad electrónica y el potencial de ionización tendríamos un balance energético desfavorable (no supondría estabilización). La energía que se desprende cuando el átomo aceptor gana electrones, afinidad electrónica, no es suficiente para compensar la energía que se necesita para arrancar los electrones del átomo dador, potencial de ionización.

Ejemplo, formación del NaCl:



Cuando los dos iones se unen para formar la red lo hacen desprendiendo energía (exotérmico), lo que hace que el balance global sea exotérmico.



Para el proceso global suma de (1) y (2)



Este balance energético se compensa con la energía que se desprende al formarse la red cristalina, pues al tender los iones a un mínimo de energía potencial desprenden energía, esta

energía se conoce como energía reticular de la red.

ENERGÍA RETICULAR: Se define como la energía necesaria para separar los iones positivos de los negativos, de un mol de sustancia cristalina, hasta una distancia infinita entre ellos.

La energía reticular puede calcularse teóricamente mediante la expresión:

$$U = \frac{NMZ_1 Z_2 e^2}{R^0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

N = Número de Avogadro

M = Constante de Madelung que depende de la geometría del cristal

Z₁ y Z₂ = carga de los iones

R⁰ = suma de los radios iónicos

n = exponente de Born, cuyo valor empírico varía entre 5 y 9 dependiendo del tipo de cristal

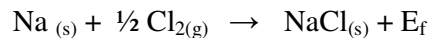
En esta fórmula vemos que el valor de U depende principalmente de la carga y del radio. A mayor carga mayor U y a mayor radio menor U.

Un compuesto iónico es tanto más estable cuanto mayor es su U. La fuerza del enlace iónico vendrá determinada por el valor de U y por tanto, de las cargas y el tamaño de los iones.

2.2 CICLO DE BORN-HABER

Es un modelo teórico que permite calcular la energía reticular de un cristal iónico aplicando la ley de Hess o de conservación de la energía, teniendo en cuenta que la formación de un cristal iónico puede llevarse a cabo por dos caminos distintos:

- Por combinación directa de los elementos, proceso en el que se desprende la energía de formación:



- A través de una serie de etapas:

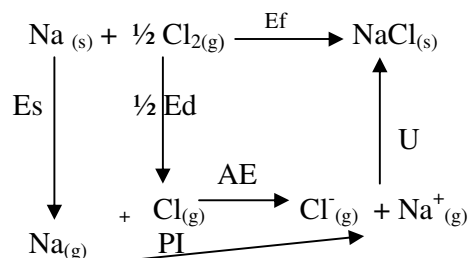
-Sublimación del metal para obtener átomos gaseosos del mismo. Se necesita una energía Es.

-Disociación del no metal para obtener átomos gaseosos, se necesita una energía Ed.

-Ionización del metal. Se necesita una energía PI.

-Ionización del no metal. Se desprende una energía AE.

-Formación del cristal. Se desprende la energía reticular U.



Como la energía debe ser la misma por los dos caminos: $E_f = E_s + \frac{1}{2} E_d + \text{PI} + \text{AE} + U$

despejando: $U = E_f - E_s - \frac{1}{2} E_d - \text{PI} - \text{AE}$

2.3 PROPIEDADES DE LOS SÓLIDOS IÓNICOS

La naturaleza de este enlace le confiere una serie de propiedades características:

- Puntos de fusión y ebullición: los puntos de fusión y ebullición son altos dado que sólo a temperaturas elevadas obtenemos energía suficiente para vencer las fuerzas entre los iones. Por ello, son sólidos a temperatura ambiente y poco volátiles.
- Dureza: Los sólidos iónicos, debido a la fortaleza del enlace, son difíciles de rayar.
- Fragilidad: Son bastante frágiles pues, si debido a fuerzas exteriores conseguimos deslizar un plano del cristal sobre otro dislocamos el empaquetamiento, enfrentando iones del mismo signo, con lo cual aparecen fuerzas repulsivas que rompen el cristal.
- Solubilidad: Los sólidos iónicos son solubles en disolventes polares por el proceso de la solvatación. Los iones de la superficie del sólido son atraídos por los dipolos del disolvente.
- Conductividad: No conducen la electricidad en estado sólido, porque los iones no tienen movilidad, pero si lo hacen en estado de disolución o fundidos. Son conductores de segunda especie o electrólitos.

3 EL ENLACE COVALENTE

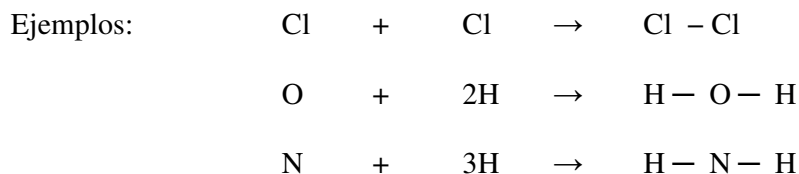
3.1 TEORÍA DE LEWIS

En 1916 Lewis establece su teoría del enlace basada en la *regla del octeto*: cada átomo tiende a conseguir configuración estable de gas noble quedando con ocho electrones (a excepción del helio) en la capa de valencia, cediendo ganando o compartiendo electrones.

Lewis indicó que cuando dos átomos se aproximan pueden enlazarse compartiendo uno o varios pares de electrones y así adquieren la configuración electrónica y la estabilidad del gas noble (el enlace covalente asociado a la compartición de parejas de electrones).

De acuerdo con esta teoría, un enlace covalente se forma entre dos átomos que poseen un electrón desapareado, de forma que el apareamiento de los electrones lleva a un sistema de menor contenido energético que el original. Una vez apareados los dos electrones estos pertenecen por igual a los dos átomos, por cada pareja de electrones compartidos se forma un enlace covalente.

La notación introducida por Lewis proporciona un medio sencillo de representar la estructura de la última capa del átomo y del tipo de enlace. Esta notación consiste en rodear el símbolo químico del átomo de tantos puntos o cruces como electrones de valencia, colocándolos por pares si están apareados y aislados si están desapareados. Dado que cada par de electrones compartidos constituye un enlace se suele sustituir cada par compartido por una raya entre los dos átomos enlazados.

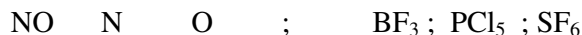


H

Entre dos átomos se pueden compartir más de una pareja de electrones, a este tipo de enlaces se les llama enlaces múltiples (doble, triple)



La regla del octeto no se cumple para muchas especies químicas estables. Por ejemplo:

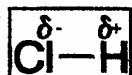


3.2 POLARIDAD DEL ENLACE COVALENTE

Cuando un enlace covalente se da entre dos átomos de un mismo elemento, los dos tienen la misma tendencia a poseer los electrones del enlace, se forma un enlace covalente APOLAR



Cuando un enlace covalente se da entre dos átomos distintos, el más electronegativo tiene más tendencia que el otro a poseer los electrones del enlace, los electrones del enlace estarán más cerca del átomo más electronegativo formándose una pequeña separación de cargas entre los átomos, tenemos un enlace covalente POLAR



El enlace covalente polar es un enlace intermedio entre el enlace covalente puro (apolar) y el enlace iónico. $\text{Cl}^- \text{Na}^+$

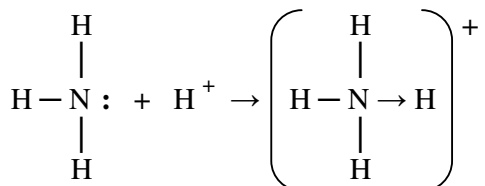
Para las moléculas poliatómicas debemos tener en cuenta diferencia de electronegatividad y la geometría de la molécula, ya que ésta condicionará el momento dipolar total.



3.3 ENLACE COVALENTE COORDINADO O DATIVO

Hasta ahora hemos considerado el enlace covalente formado por la compartición de dos electrones procedentes de dos átomos distintos, pero puede suceder que la pareja de electrones la aporte un sólo átomo.

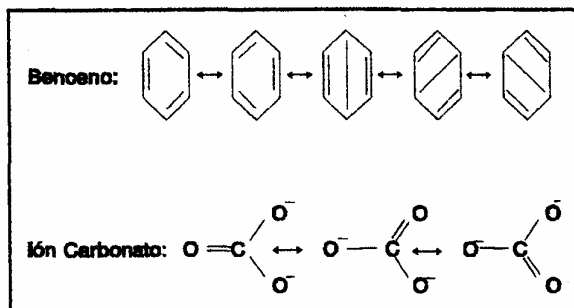
A este tipo de enlace se le llama enlace covalente *coordinado o dativo*. Cuando se da este tipo de enlace la raya se convierte en flecha que va del dador al aceptor



3.4 RESONANCIA

Al intentar establecer las estructuras electrónicas de las moléculas a veces resulta difícil asignar una determinada estructura. Sucede que la verdadera estructura de la molécula no se puede representar y hay que acudir a **representaciones límites ideales**, que no describen individualmente a la molécula, pero que en su conjunto se aproximan al comportamiento real de la misma.

La verdadera estructura, que no se puede representar, recibe el nombre de **híbrido de resonancia**, es una estructura intermedia entre todas las estructuras ideales conocidas como estructuras resonantes.



La energía del híbrido de resonancia es siempre menor que la energía de cualquiera de las estructuras resonantes y la diferencia de energía que existe entre la energía del híbrido de resonancia y la forma resonante más estable recibe el nombre de energía de resonancia.

3.5 GEOMETRÍA MOLECULAR: MÉTODO DE V.S.E.P.R.

Las estructuras de Lewis no explican la geometría de las moléculas sólo representan los pares de electrones.

Los pares de electrones pueden clasificarse en dos clases:

- Pares enlazantes los que se comparten con otros átomos para formar el enlace.
- Pares solitarios (o pares libres) los que no se comparten con otros átomos.

Los pares de electrones se repelen unos a otros y así podemos predecir su orientación geométrica alrededor del núcleo del átomo encontrando el ordenamiento de menor energía, aquel en el cual las repulsiones electrónicas sean mínimas. Esta es la base del método de la *Repulsión entre los Pares de Electrones de la Capa de Valencia* (RPECV o VSEPR).

Las bases del método son las siguientes:

1. Los pares electrónicos de la capa de valencia tienden a orientarse por sí mismos de modo que su energía total se minimiza, aproximándose lo más posible al núcleo. Simultáneamente permanecen en lo posible distanciados entre sí, minimizando las repulsiones electrónicas.
2. Debido a que los pares solitarios están más dispersos que los enlazantes, las repulsiones son más grandes entre pares solitarios, intermedias entre un par solitario y un par enlazante, y más débiles entre dos pares enlazantes.



3. Las fuerzas repulsivas disminuyen notoriamente con el aumento del ángulo entre pares. Son más fuertes a 90°, más débiles a 120°, y mucho más débiles a 180°.

Para predecir la geometría de las moléculas formadas por un átomo central por este método seguiremos los siguientes pasos.

1. En primer lugar, hace falta elegir el átomo central, que será aquél al que se unan todos los demás. Para dicho átomo se suman los electrones de su capa de valencia, y los aportados por los restantes átomos unidos a él, contando solamente los electrones que dichos átomos tienen

desapareados.

2. El número total de electrones resultante de la suma se sitúa por pares alrededor del átomo central, en tantas direcciones como resulten de suponer que en la dirección de un átomo que ha aportado un electrón se debe situar un par de electrones, en aquella que se encuentre un átomo que ha aportado dos electrones se deben situar dos pares de electrones, etc. los electrones restantes se sitúan en direcciones adicionales, poniendo un par en cada dirección.

3. Las direcciones de enlace deberán elegirse de tal modo que los pares de electrones se sitúen tan lejos unos de otros como sea posible, para reducir al máximo las repulsiones. Estas direcciones son las recogidas en la siguiente tabla:

Número de direcciones	Geometría
Dos	Lineal (180°)
Tres	Triángulo equilátero (120°)
Cuarto	Tetraedro (109° 5')
Cinco	Bipirámide trigonal (90° y 120°)
Seis	Octaedro (90°)

4. El requerimiento espacial de un par de electrones no compartidos (par libre) es mayor que el de un par electrónico de enlace, puesto que este último acumula la densidad electrónica en la región internuclear y se encuentra menos extendida, por ello, la existencia de pares libres de electrones obliga a que se cierren los ángulos de los siguientes enlaces.

5. El requerimiento espacial de enlaces múltiples, dobles o triples, es mayor que el de los enlaces sencillos, por lo tanto, la presencia de enlaces múltiples origina sobre los siguientes enlaces el mismo efecto que el citado en el párrafo anterior.

3.6 LA TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA (T.E.V.)

El estudio de la naturaleza del enlace covalente se aborda actualmente utilizando los criterios de la mecánica cuántica.

Existen dos teorías para explicar el enlace covalente, la teoría del enlace de valencia (T.E.V.) y la teoría de orbitales moleculares (T.O.M.), en este curso nos ceñiremos al estudio de la primera.

En la T.E.V. se considera que los átomos que forman la molécula se comportan como átomos aislados, conservando sus orbitales atómicos y modificando sólo los que entran en la formación del enlace.

Para esta teoría se forma el enlace covalente cuando al aproximarse dos átomos sus orbitales atómicos están en posiciones adecuadas para que se produzca una superposición o interpenetración de los orbitales atómicos (*solapamiento*) dando lugar a una zona de elevada densidad electrónica común a los dos átomos que intervienen en el enlace. El solapamiento de los dos orbitales atómicos forma un orbital molecular de valencia

Lo que hace la T.E.V. para explicar la formación de un enlace covalente entre dos átomos A y B, cada uno de ellos con un electrón desapareado, situado en un orbital descrito por una función de onda ψ_A y ψ_B respectivamente, es buscar una nueva función de onda que describa el comportamiento de los dos electrones apareados. Esta función de onda ψ se establece como el producto de las funciones de onda de los electrones individuales:

La formación de un enlace covalente tiene lugar mediante apareamiento de electrones. De acuerdo con esto, un átomo podrá formar un número máximo de enlaces covalentes igual al número de electrones desapareados que posea.

3.7 PROMOCIÓN DE ELECTRONES

Sucede con frecuencia que el número de enlaces covalentes que forma un átomo es mayor que el número de electrones desapareados que posee en su capa de valencia en su estado fundamental.

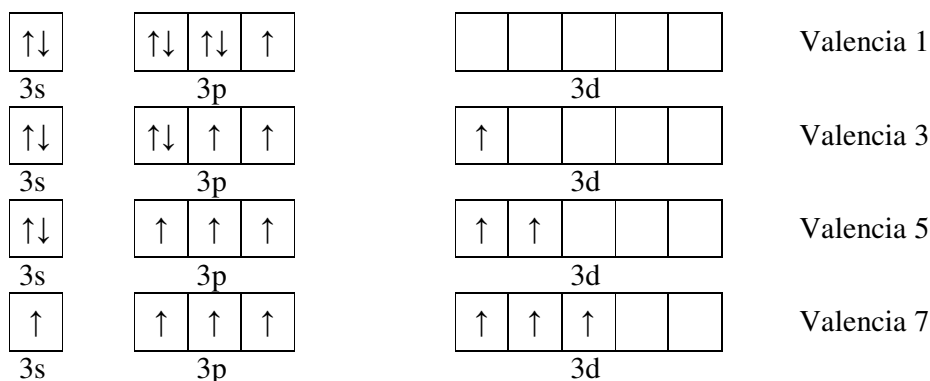
Recibe el nombre de COVALENCIA de un átomo el número de electrones desapareados que utiliza en la formación de enlaces covalentes.

De acuerdo con lo expuesto, el átomo de carbono que tiene una configuración electrónica fundamental $1s^2 2s^2 2p^2$ sólo posee dos electrones desapareados y debe presentar una covalencia máxima de 2, sin embargo existen infinidad de compuestos orgánicos en donde la covalencia del carbono es invariablemente 4.

Esto supone que el átomo de carbono ha de promocionar electrones desde orbitales de menor energía a orbitales de mayor energía:



Análogamente podemos explicar mediante la promoción de electrones la covalencia de los halógenos. A partir del doro, los halógenos poseen orbitales d vacíos, próximos en energía a los orbitales de la capa de valencia, y pueden ocurrir las siguientes promociones:



3.8 SOLAPAMIENTO

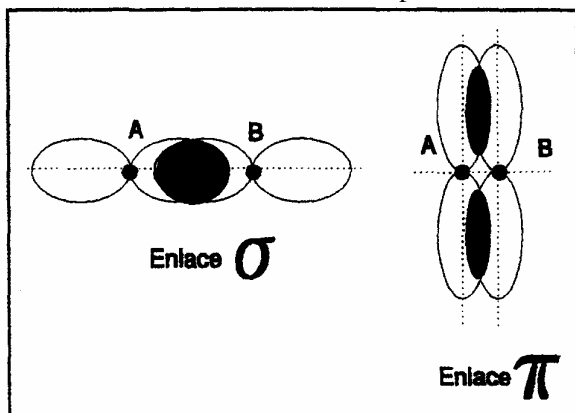
Un enlace covalente lo hemos descrito por una función de onda, resultado de las funciones de onda de los orbitales que forman el enlace. El cuadrado de esta función de onda representa la probabilidad de encontrar simultáneamente a ambos electrones en cada punto del espacio. Cuanto mayor sea ψ^2 tanto mayor será la densidad electrónica y más estable será el enlace covalente.

Una forma más simple de establecer la estabilidad del enlace covalente consiste en calcular el SOLAPAMIENTO, que se define como la integral, extendida a todo el espacio, del producto de las funciones de onda de los dos orbitales que participan en la formación de un enlace covalente:

$$S = \int \Psi_A \cdot \Psi_B \, dT$$

Cuanto mayor sea el valor del solapamiento tanto más estable será el enlace covalente. Una representación gráfica del solapamiento consiste en dibujar la zona donde se superponen los orbitales atómicos que forman el enlace.

Puesto que los orbitales atómicos, salvo los s, tienen carácter dirigido, el enlace se dará en la dirección donde existe el máximo solapamiento.



σ -centrado y simétrico alrededor del eje de enlace.

π -dos regiones en lados opuestos al eje de enlace

Cuando el enlace se da por solapamiento frontal de dos orbitales atómicos tenemos un enlace σ , mientras que si el enlace se da por el solapamiento lateral de dos orbitales atómicos, recibe el nombre de enlace π

El enlace π es más débil que el enlace σ y se da solamente en el caso de que el enlace o no sea posible, en el caso de enlaces múltiples.

3.9 HIBRIDACIÓN

En la mayoría de los casos, la teoría de la repulsión de electrones de valencia permite hacer una predicción estructural, que se adapta bastante bien a la realidad experimental. Por difracción con rayos x se puede conocer la estructura de una molécula y medir las distancias y ángulos de enlace.

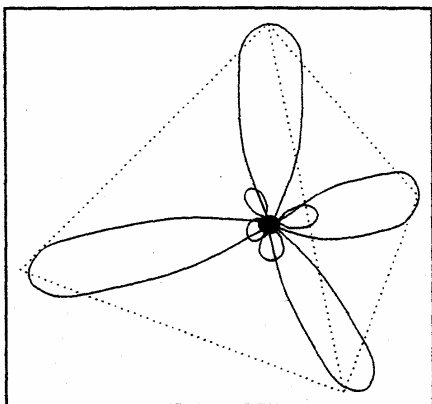
Una vez conocida la estructura geométrica de una molécula quedan perfectamente definidas las direcciones de enlace, y para que se cumpla el principio de máximo solapamiento, es necesario que los orbitales que se utilicen se encuentren dirigidos en dichas direcciones.

Sucede con frecuencia que los orbitales de los átomos no tienen la dirección adecuada y se hace preciso no utilizar orbitales puros, sino una combinación de los mismos.

Se llama hibridación al proceso mediante el cual, a partir de orbitales puros, definidos por sus funciones de onda, se obtienen orbitales híbridos, cuyas funciones de onda son combinación lineal de las anteriores y se adecuan a los principios de máximo solapamiento. En la hibridación mezclamos dos o más orbitales atómicos de energías distintas para dar dos o más nuevos orbitales híbridos iguales y de la misma energía.

-HIBRIDACIÓN sp^3 (tetraédrica)

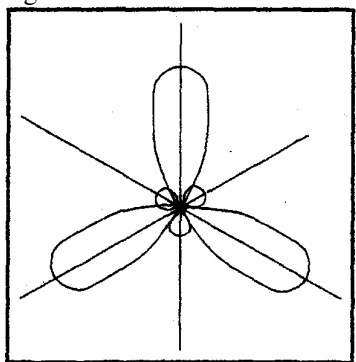
A partir de un orbital s y tres orbitales p se obtienen cuatro orbitales híbridos sp^3 , exactamente iguales, dirigidos a los vértices de un tetraedro regular, formando ángulos de $109,5^\circ$



Mediante la formación de híbridos sp^3 se explica la geometría de las moléculas orgánicas con enlaces sencillos (ejemplo: CH_4)

-HIBRIDACIÓN sp^2 (triangular)

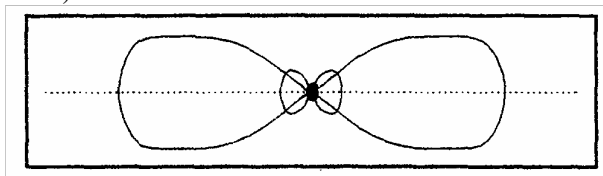
A partir de un orbital s y dos orbitales p se obtienen tres orbitales híbridos sp^2 , iguales, dirigidos a los vértices de un triángulo equilátero (ángulos de 120°).



Mediante la hibridación sp^2 se explica la geometría de la molécula de BCl_3 y los enlaces dobles en las moléculas orgánicas (ejemplo: $CH_2 = CH_2$).

-HIBRIDACIÓN sp (lineal)

A partir de un orbital s y un orbital p se obtienen dos orbitales híbridos sp , iguales, dispuestos linealmente (ángulos de 180°).



Con la hibridación sp se puede explicar la geometría de la molécula de $BeCl_2$ y los enlaces triples de las moléculas orgánicas (ejemplo: $CH \equiv CH$).

En las moléculas orgánicas los enlaces múltiples (doble y triple) son mucho más reactivos que el enlace sencillo, debido a que el enlace π es más débil que el enlace σ .

Otra consecuencia importante de la formación de enlace π es que no es posible el giro de un átomo de carbono respecto a otro unido a él mediante doble o triple enlace, lo que si es posible para el enlace sencillo.

3.10 PROPIEDADES DE LAS SUSTANCIAS COVALENTES

Las características estructurales que presentan las sustancias con enlaces covalentes dependen del número de enlaces covalentes que puede formar cada átomo y de la orientación de estos enlaces. Por ello hay distintos tipos de sustancias covalentes que presentan distintas propiedades y estructuras.

- Sustancias moleculares (existen moléculas).

Es el grupo más numeroso. En ellas el enlace covalente entre átomos es intenso (fuerte) y el enlace entre las moléculas (fuerzas de Van der Waals) es débil, por esta razón son sustancias volátiles de bajo punto de fusión y ebullición.

No conducen la electricidad dado que no tienen electrones libres y no se ionizan.

En general son poco solubles en disolventes polares (agua). Se disuelven en disolventes apolares (orgánicos).

Dentro de estas sustancias las hay que son apolares y polares: las polares se disuelven algo más y presentan puntos de fusión y ebullición más elevados de lo que cabría esperar debido a que los dipolos se atraen entre sí y forman agregados moleculares.

La mayor parte de estas sustancias son gases, también las hay líquidas como el bromo, agua... e incluso sólidas de bajos puntos de fusión y ebullición.

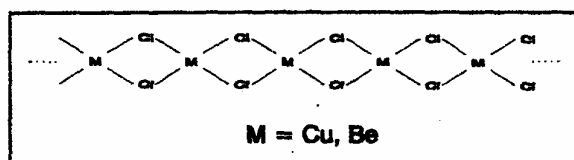
- Sólidos covalentes.

Son sólidos formados por un infinito número de átomos unidos por enlaces covalentes fuertes, son siempre sólidos muy estables.

Para fundir estos sólidos es necesario romper un elevado número de enlaces covalentes, con lo cual tienen muy altos los puntos de fusión y ebullición, y son muy insolubles, tanto en disolventes polares como apolares.

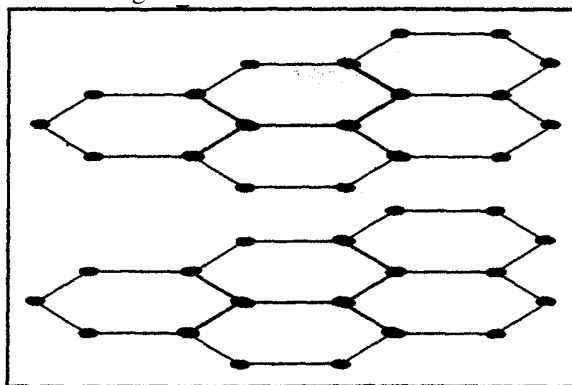
Los sólidos covalentes pueden estar formados por redes mono, di o tridimensionales.

REDES MONODIMENSIONALES Las moléculas polímeras se disponen a lo largo de las aristas de un cristal, formando redes infinitas



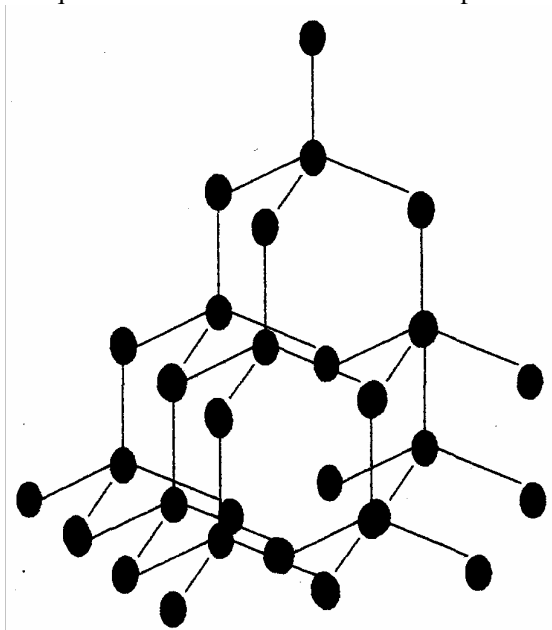
REDES BIDIMENSIONALES

Las moléculas polímeras se disponen en capas paralelas entre sí, unidas por fuerzas de Van der Waals, este tipo de enlace se da en el grafito:



REDES TRIDIMENSIONALES

Algunos elementos, como C, Si o Ge, pueden formar una red tridimensional infinita de átomos, en la que cada átomo se une a sus vecinos por fuertes enlaces covalentes. Un ejemplo es el diamante:



4.- EL ENLACE METÁLICO

Los elementos metálicos se caracterizan por presentarse, en su casi totalidad, en forma sólida con un grado de empaquetamiento muy elevado, de modo que cada átomo metálico se encuentra rodeado por no menos de ocho átomos vecinos.

Los metales tienen muy pocos electrones de valencia *s* y *p*, por lo que no tienen electrones suficientes para formar enlaces covalentes con todos los átomos que los rodean: *Los metales no pueden formar enlaces covalentes.*

Por métodos de difracción con rayos *x* se sabe que los metales presentan redes cristalinas, similares a las de los compuestos iónicos, pero a diferencia de estos, todos los átomos de la red son iguales.

Para poder explicar las propiedades físicas de los metales, dureza, conductividad, etc. se establece la teoría de que las estructuras cristalinas de los metales están constituidas por los núcleos de los átomos y los electrones que no son de valencia. Los electrones de valencia se mueven libremente como si perteneciesen a todo el conjunto, y no a cada átomo: están deslocalizados.

Según esta teoría se pueden explicar las propiedades de los metales:

- **CONDUCTIVIDAD:** Los metales son buenos conductores de la electricidad, debido a la movilidad de los electrones de valencia. La conductividad de los metales suele disminuir con la temperatura, pues aumenta la energía de vibración de los átomos e impiden la libre circulación de electrones.
- **MALEABILIDAD Y DUCTILIDAD:** Los metales se pueden estirar en hilos o láminas, debido a que el enlace metálico no tiene carácter dirigido y sigue actuando después de una deformación.
- **BRILLO METÁLICO:** Los metales presentan brillo metálico en superficies de corte reciente, esto se explica teniendo en cuenta que los electrones de la capa de valencia, al estar pocos retenidos, pueden saltar fácilmente a capas superiores con un pequeño aporte energético (luz), la energía absorbida se devuelve al caer en forma de brillo metálico.
- **EFFECTOS FOTOELÉCTRICO Y TERMOIÓNICO:** Los electrones de valencia están tan poco retenidos que es fácil arrancarlos con un pequeño aporte de energía, como puede ser la luminosa, efecto fotoeléctrico, o la térmica, efecto termoiónico.

TEORÍA DE BANDAS

Esta teoría explica la conductividad de los metales y las propiedades no conductoras de otro tipo de elementos.

Conductores

Los metales tienen pocos electrones de valencia que gozan de gran libertad. Estos electrones ocupan los orbitales s parcial o totalmente.

Como en los metales el grado de empaquetamiento es muy elevado los orbitales atómicos llegan a solapar formando orbitales moleculares. Dado que el número de orbitales atómicos es muy elevado, debido a la gran cantidad de átomos que hay en una muestra de metal, por pequeña que sea, se formarán un número muy elevado de orbitales moleculares. Al ser muy parecidas las energías de estos orbitales, pueden describirse como una banda, denominada en este caso *banda de valencia* (BV). Por otra parte, los orbitales formados por el solapamiento de los orbitales p, que están vacíos, constituyen otra banda denominada *banda de conducción* (BC).

Dado que ambas bandas son contiguas (e incluso superpuestas), bastan cantidades despreciables de energía para que un electrón pase de la banda de valencia a la de conducción, donde puede moverse libremente al estar esta vacía, explicándose así la conductividad de los metales.

Se aumentamos la temperatura mayor número de electrones pasan a la banda de conducción con lo que disminuirá su movilidad. Esto explica que la conductividad de un metal descienda con un aumento de la temperatura.

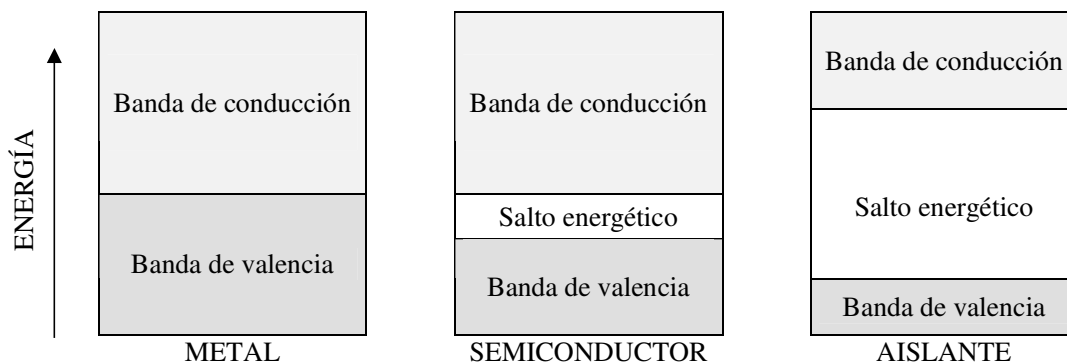
Semiconductores

En el caso de elementos como el silicio y el germanio que tienen propiedades intermedias entre metales y no metales, las bandas de valencia y de conducción se encuentran lo suficientemente próximas en energía como para permitir que los electrones puedan pasar de una banda a otra con una pequeña aportación de energía.

Por esta razón la temperatura favorece la conductividad eléctrica en los semimetales.

Aislantes

En este tipo de sustancias, como son los sólidos covalentes, la distancia entre bandas es lo suficientemente alta como para que el salto requiera cantidades muy elevadas de energía, lo que lo hace impracticable.



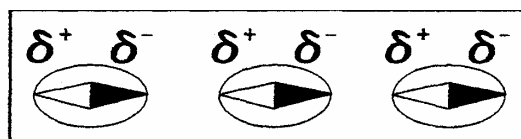
5.- FUERZAS INTERMOLECULARES

Las fuerzas intermoleculares son aquellas que mantienen unidas a las moléculas de los distintos compuestos y de las que depende el estado de agregación de los mismos. Se trata de fuerzas mucho más débiles que las intramoleculares y esto explica que se necesite mucha menor energía para provocar un cambio en el estado de agregación que para la disociación de una molécula.

Estas fuerzas se deben a la existencia de dipolos, aún en moléculas apolares, y pueden ser de dos tipos: Fuerzas de Van der Waals y puentes de hidrógeno.

5.1 FUERZAS DE VAN DER WAALS

Cuando tenemos un compuesto que posee moléculas polares, cuando una de estas moléculas se aproxima a otra se originarán fuerzas de atracción electrostática entre dichas moléculas:



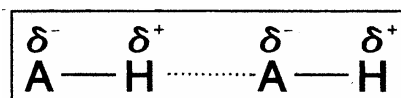
Cuando las moléculas no son polares, hay que tener en cuenta que las moléculas están en continua vibración, lo que origina que las cargas están en continuo desplazamiento dentro de la molécula, esto explica la aparición de dipolos instantáneos en las moléculas, que a su vez originan dipolos inducidos en las moléculas vecinas, con la consiguiente aparición de fuerzas atractivas.

Las fuerzas de atracción entre dipolos inducidos son menores que en las moléculas polares, esto hace que los puntos de fusión y ebullición de las moléculas polares sean mayores.

Cuanto más grandes sean las moléculas más fácilmente podemos conseguir una separación de cargas y mayores serán las fuerzas de Van der Waals. Las fuerzas de Van der Waals aumentan con el tamaño de las moléculas.

5.2 PUENTES DE HIDRÓGENO

El átomo de hidrógeno solo tiene un electrón $1s^1$ por lo que solo puede formar un enlace covalente. Cuando se encuentra unido a un átomo muy electronegativo este enlace resulta muy polar, de forma que se puede establecer una interacción electrostática entre la parte positiva de una molécula, el hidrógeno, y la parte negativa de las moléculas vecinas.



A este tipo de interacción se le denomina enlace por puente de hidrógeno. Para que se den los puentes de hidrógeno se necesitan dos condiciones:

- El hidrógeno debe estar unido a un elemento muy electronegativo.
- El átomo de hidrógeno es muy pequeño, por lo que solo puede interaccionar con átomos también de pequeño tamaño.

Estas dos condiciones limitan la formación de enlaces puentes de hidrogeno a los átomos de F, N y O.

El enlace puente de hidrógeno, al igual que el enlace de Van der Waals, es débil. La existencia de este tipo de enlace explica el por qué los hidruros de F, N y O tienen puntos de fusión y ebullición muy superiores al resto de los elementos de cada grupo.

HIDRUROS	Punto fusión(°C)	Punto ebull. (°C)
H ₂ O	0	100
H ₂ S	-62'9	-60'1
H ₂ Se	-64	-42
H ₂ Te	-54	-1'8