

ENLACE QUÍMICO Y PROPIEDADES DE LOS MATERIALES

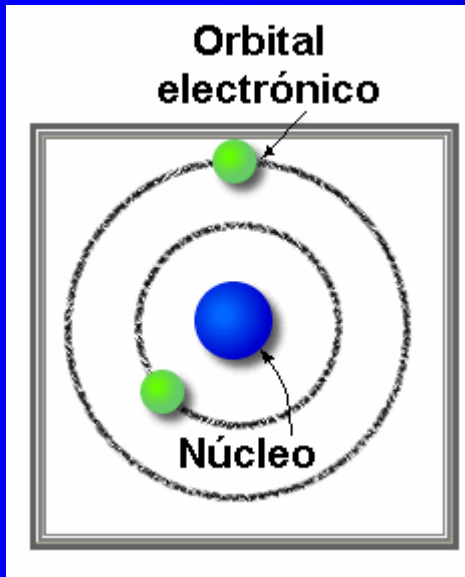
OBJETIVO

Relacionar el tipo de enlace químico con las principales propiedades de los materiales.

INTRODUCCIÓN

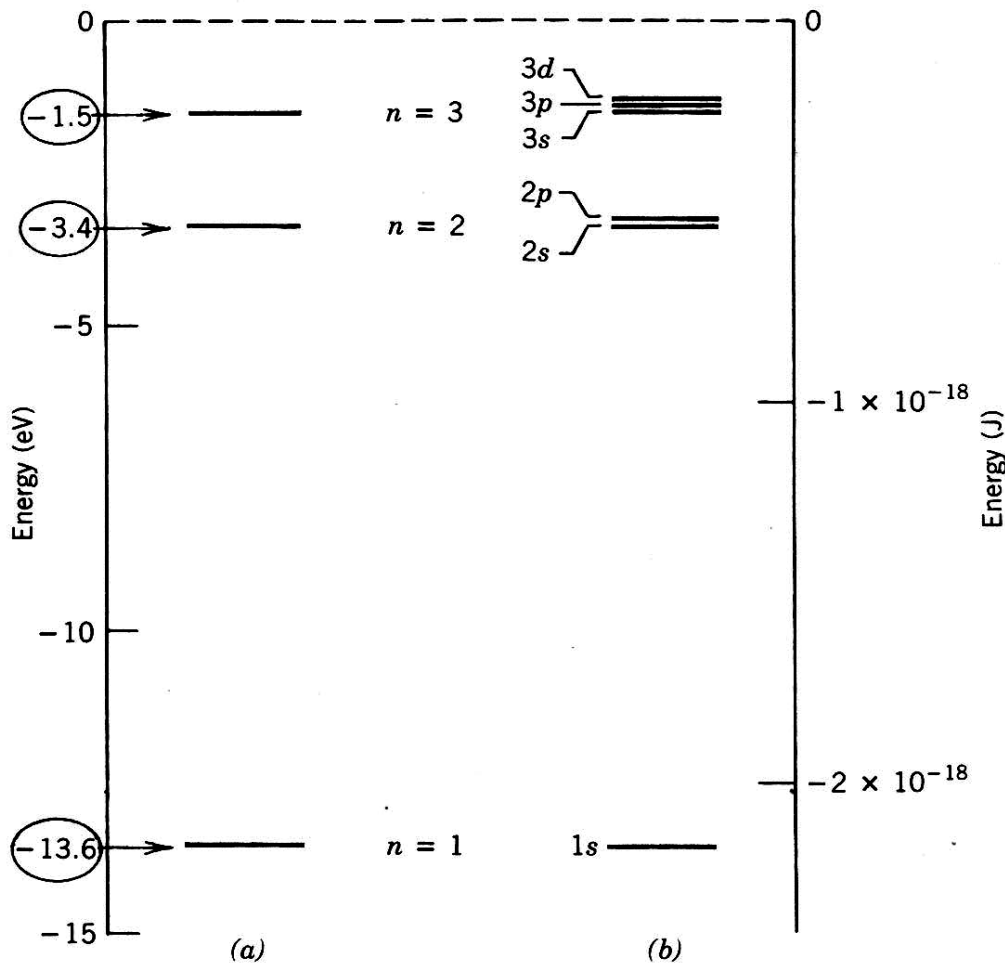
Muchas de las propiedades de los materiales dependen de los arreglos atómicos y de las interacciones existentes entre átomos y/o las moléculas.

Modelos atómicos



Modelo de Bohr

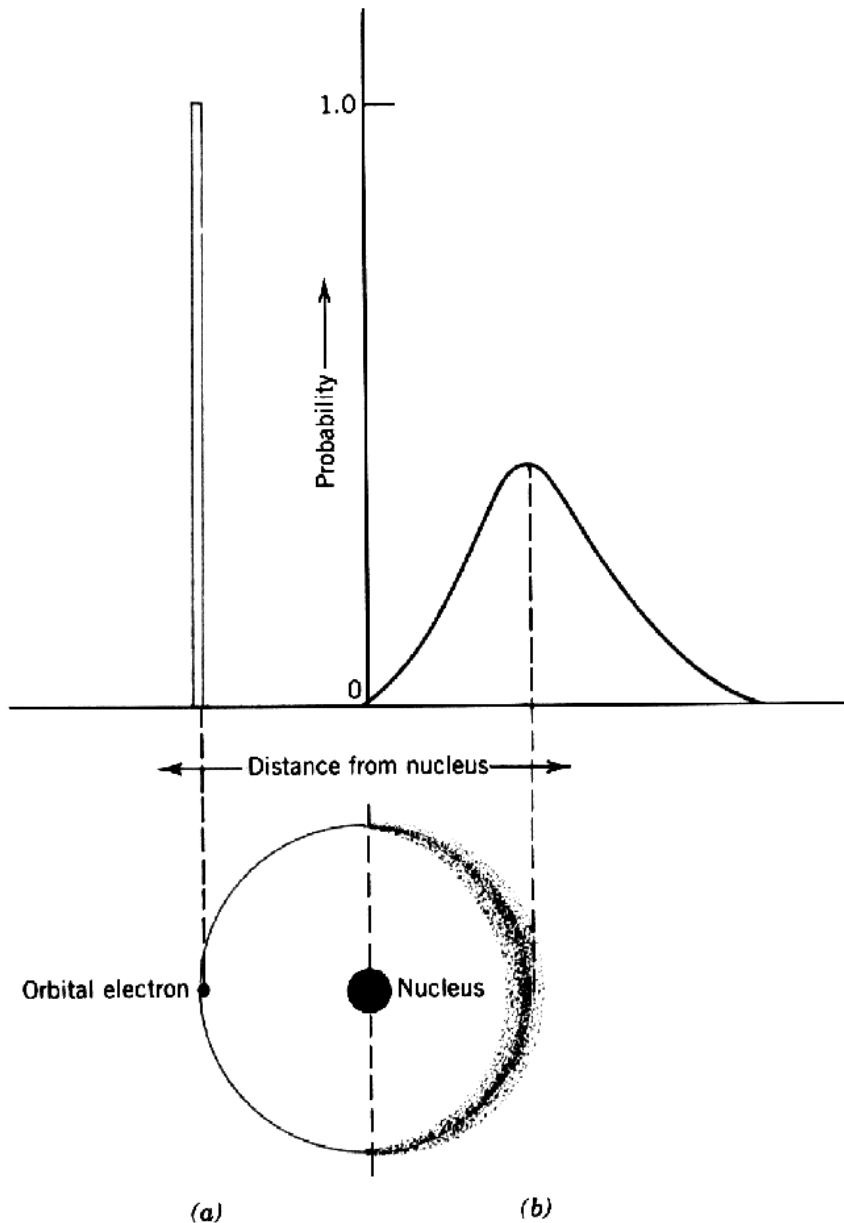
El modelo de Bohr presenta limitaciones significativas, no sirve para explicar varios de los fenómenos en los cuales están involucrados electrones.



Las deficiencias del modelo de Bohr fueron suplidas por el **modelo atómico de la mecánica cuántica**.

En este modelo el electrón presenta características tanto de onda como de partícula.

El electrón ya no es considerado como una partícula que se mueve en un orbital discreto. Su posición pasa a ser considerada como la probabilidad de encontrar un electrón en un lugar próximo del núcleo.



Distribución electrónica,
según:

(a) Modelo atómico de
Bohr

(b) Mecánica cuántica

TABLA PERIÓDICA

Los elementos químicos son clasificados de acuerdo con su configuración electrónica.

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Periodo 1	1																	2
1	H																	He
2	3	4											5	6	7	8	9	10
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	11	12											13	14	15	16	17	18
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	55	56	57*	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	87	88	89**	104	105	106	107	108	109	110	111	112		114		116		118
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub		Uuq		Uuh		Uuo
*Lantánidos	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71				
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
**Actínidos	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				
	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

- No Metales
- Metales alcalinos
- Metales Alcalinotérreos
- Metales de Transición
- Tierras raras
- Gases Nobles
- Metaloides
- Halógenos
- Otros Metales

La electronegatividad de los elementos

IA																		0
1 H 2.1																	2 He -	
IIA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA		
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -	
11 Na 0.9	12 Mg 1.2											13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -	
		IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII			IB	IIB							
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -	
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -	
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -	
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7																

FURZAS DE ENERGIAS DE ENLACE

- Cuando dos átomos se aproximan, ellos ejercen una fuerza el uno contra el otro:

$$F_N = F_A + F_R$$

Donde:

$F_A \equiv$ Fuerza de atracción

$F_R \equiv$ Fuerza de repulsión

$F_N \equiv$ Fuerza resultante

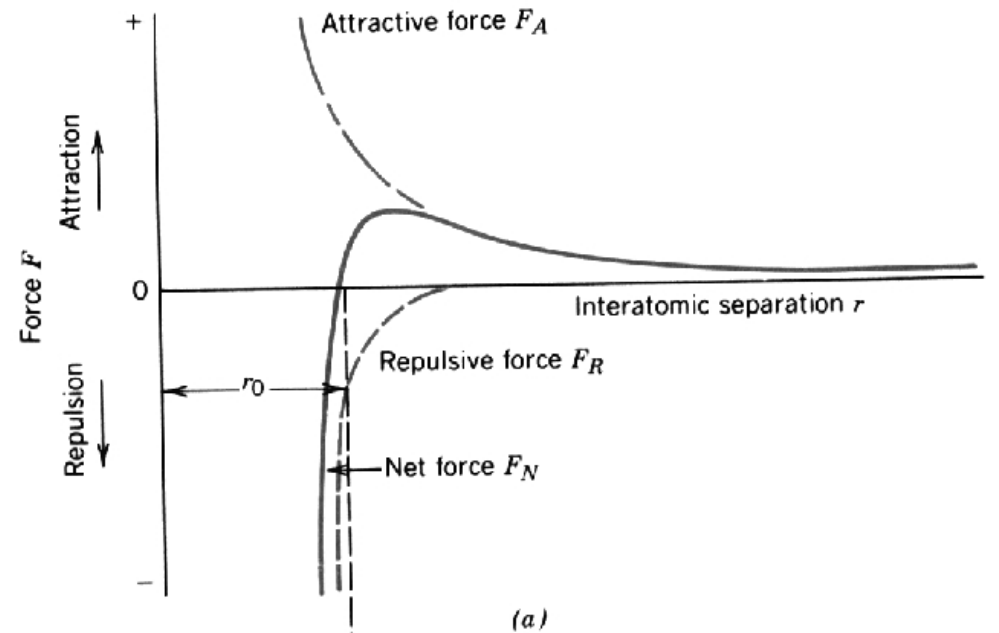
- La energía potencial (E_N) está dada por:

$$E_N = \int F_N dr = \int_{\infty}^r F_A dr + \int_{\infty}^r F_R dr$$

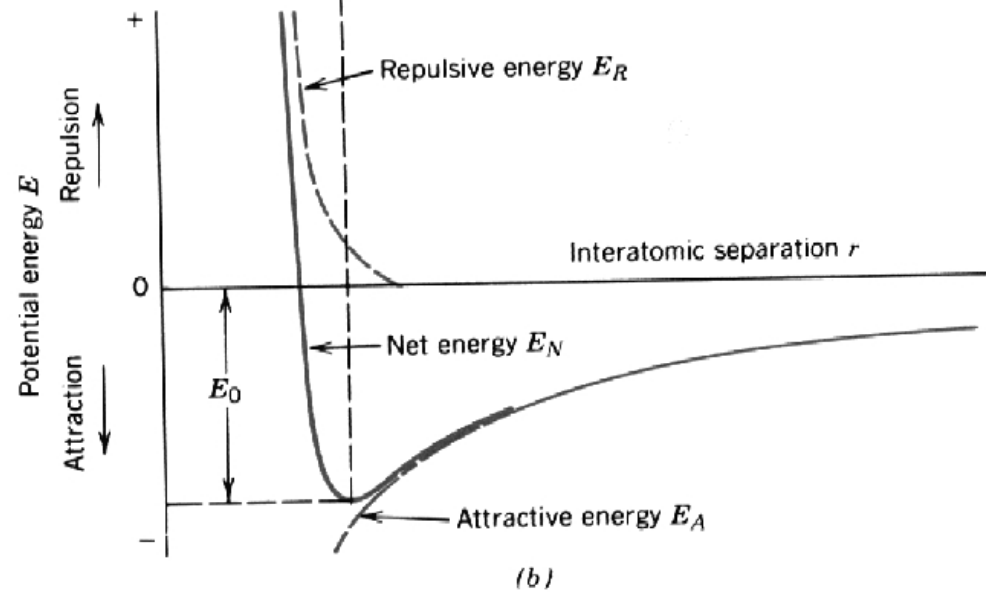
Donde:

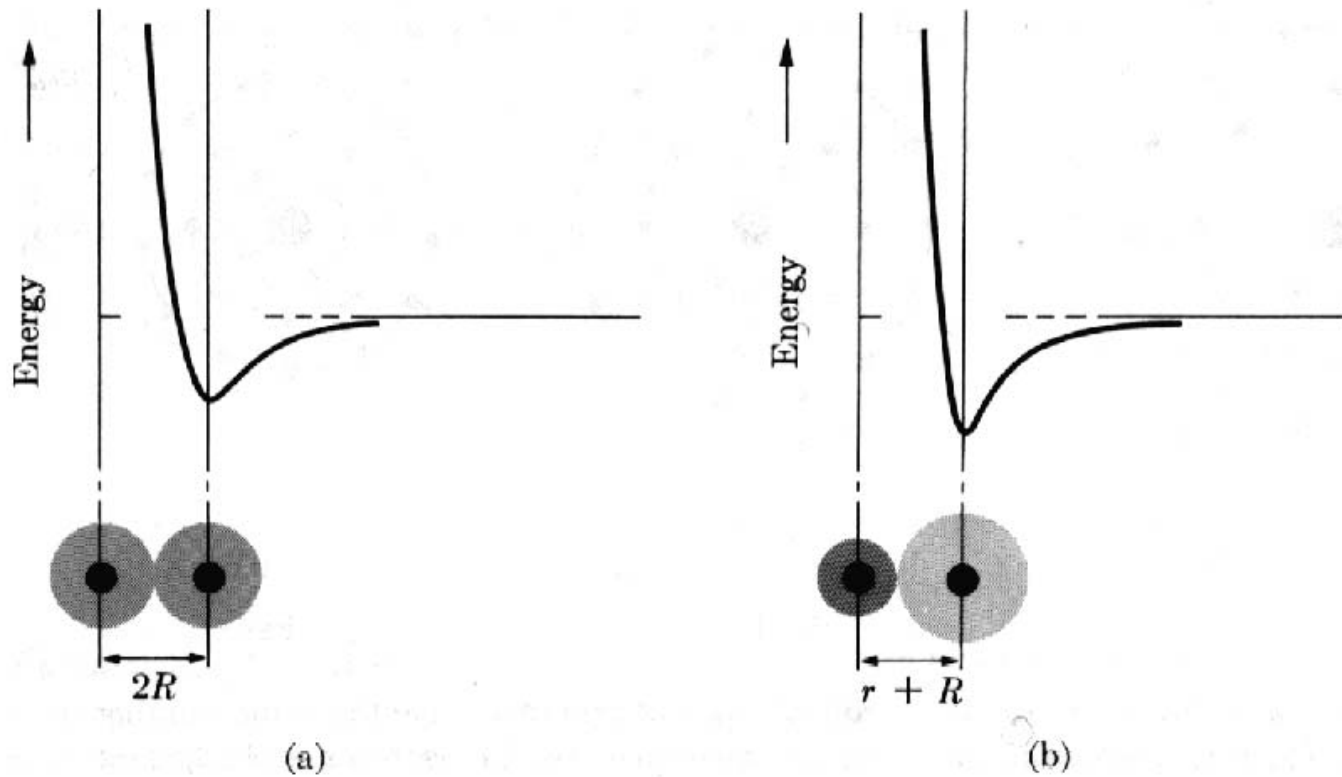
$r \equiv$ distância interatómica

(a) fuerzas de atracción y de repulsión en función de la distancia interatómica para dos átomos aislados



(b) Energía potencial en función de la distancia interatómica para dos átomos aislados

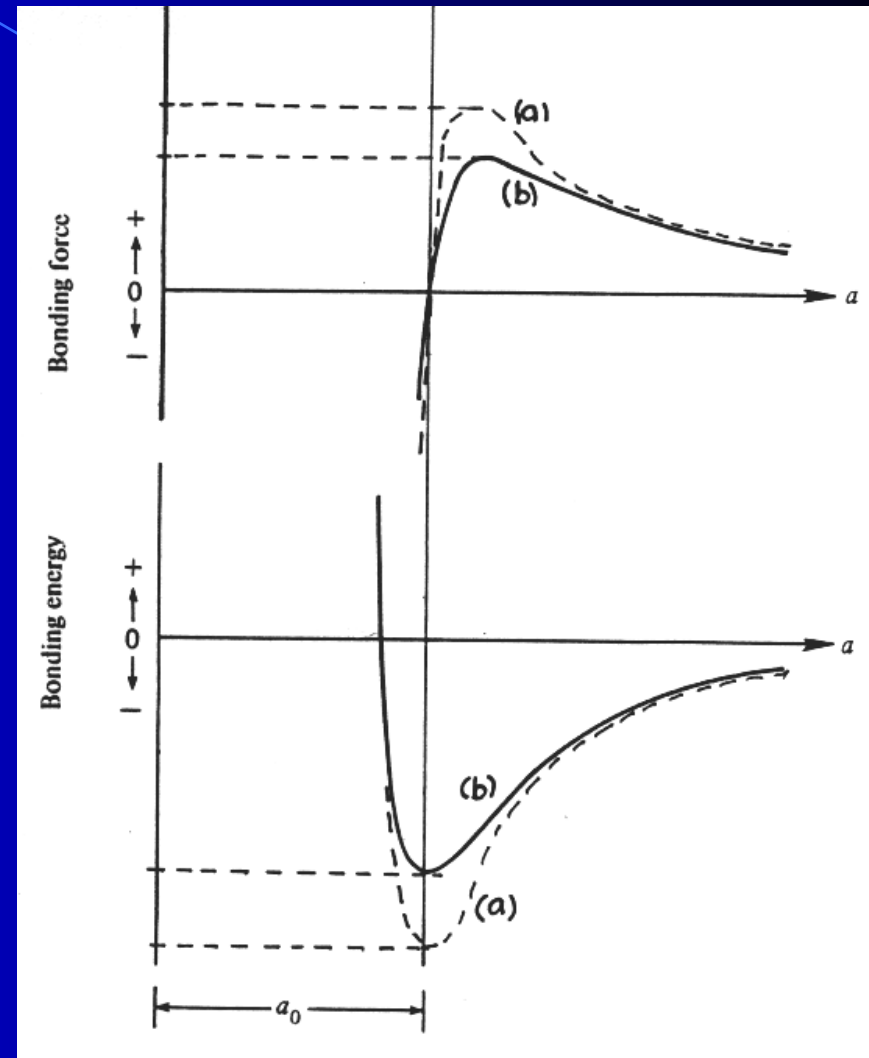




La longitud del enlace entre dos átomos es la distancia correspondiente al punto de mínima energía (suma de los dos radios atómicos). (a) Para metales puros, todos los átomos tienen el mismo radio atómico. (b) Para sólidos iónicos, los radios atómicos son diferentes, una vez que iones adyacentes nunca son idénticos.

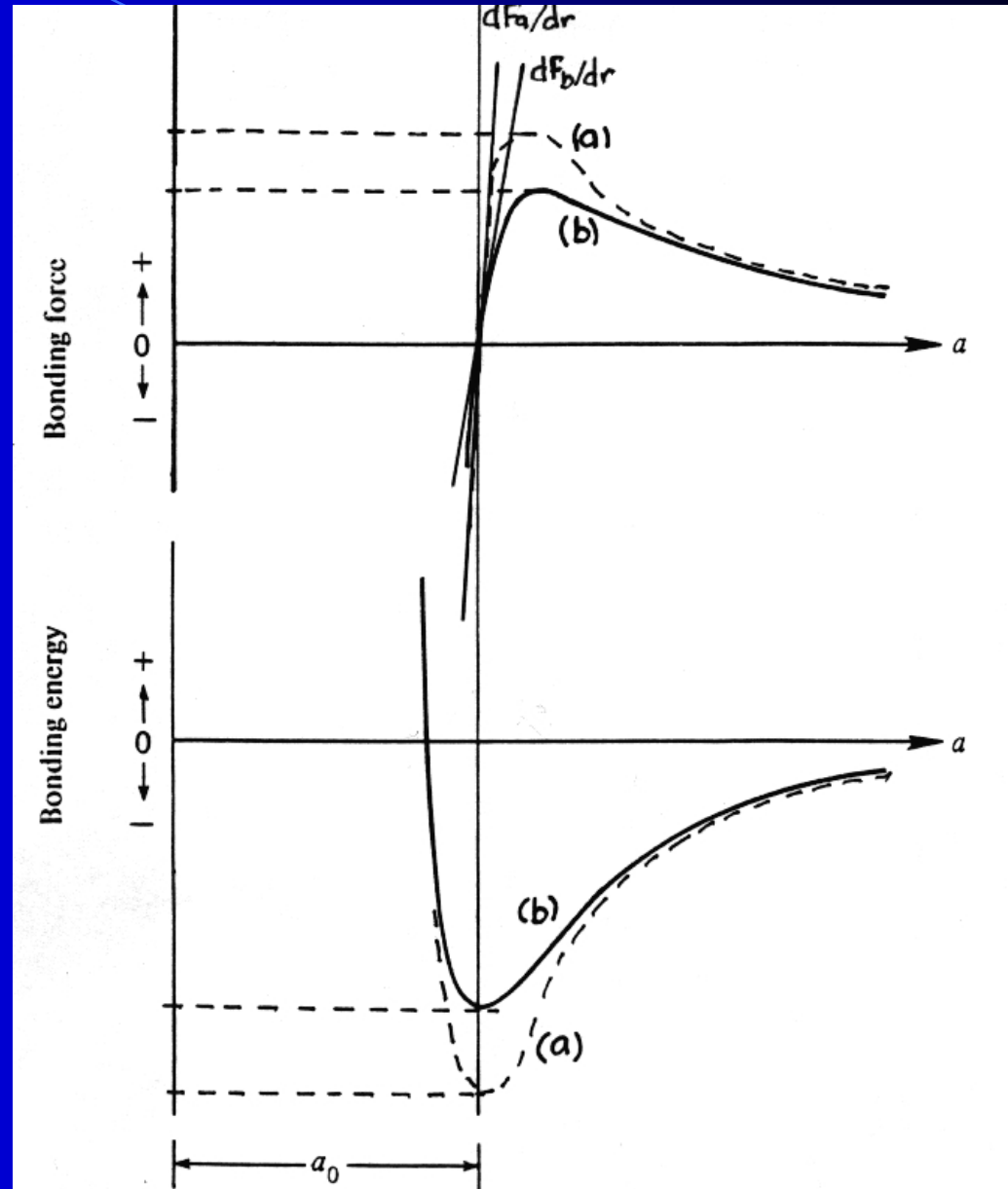
CORRELACIÓN DE LAS PROPIEDADES CON LAS CURVAS DE FUERZA Y DE ENERGIA DE ENLACE

- Resistencia mecánica: Aumenta con la fuerza máxima y con la profundidad del pozo de la curva de energía de enlace.
- Puntos de fusión y ebullición: Aumentan con la profundidad del pozo de la curva de energía de enlace
- Coefficiente de expansión térmica:
- Disminuye con la profundidad del pozo de la curva de energía de enlace



CORRELACION DE LAS PROPIEDADES CON LAS CURVAS DE FUERZA Y DE ENERGIA DE ENLACE

- Módulo de elasticidad: aumenta con la tangente de la curva de fuerza de enlace en el punto donde la fuerza es nula, (dF_N/dr), para $F_N=0$

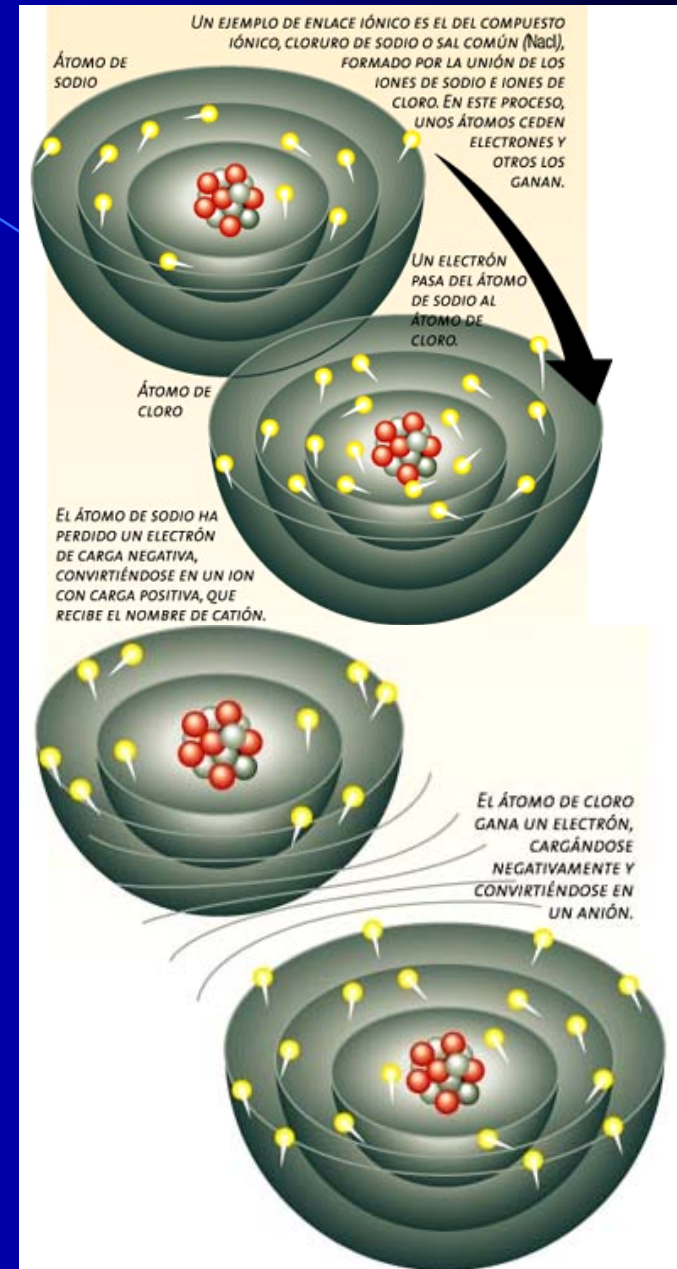


ENLACES PRIMARIOS

(A) ENLACE IÓNICO

- Hay transferencia de electrones de un átomo a otro
- Enlace no-direccional
- Enlace \rightarrow atracción electrostática entre dos iones de cargas opuestas
- Se presenta entre átomos de los primeros y últimos grupos de la tabla periódica.

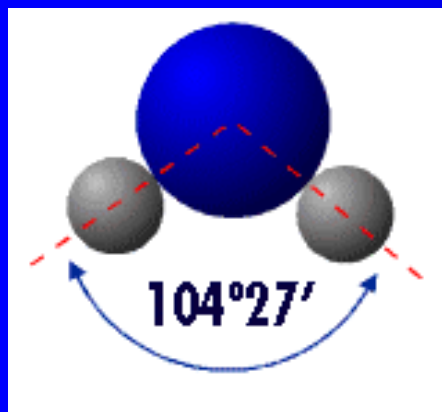
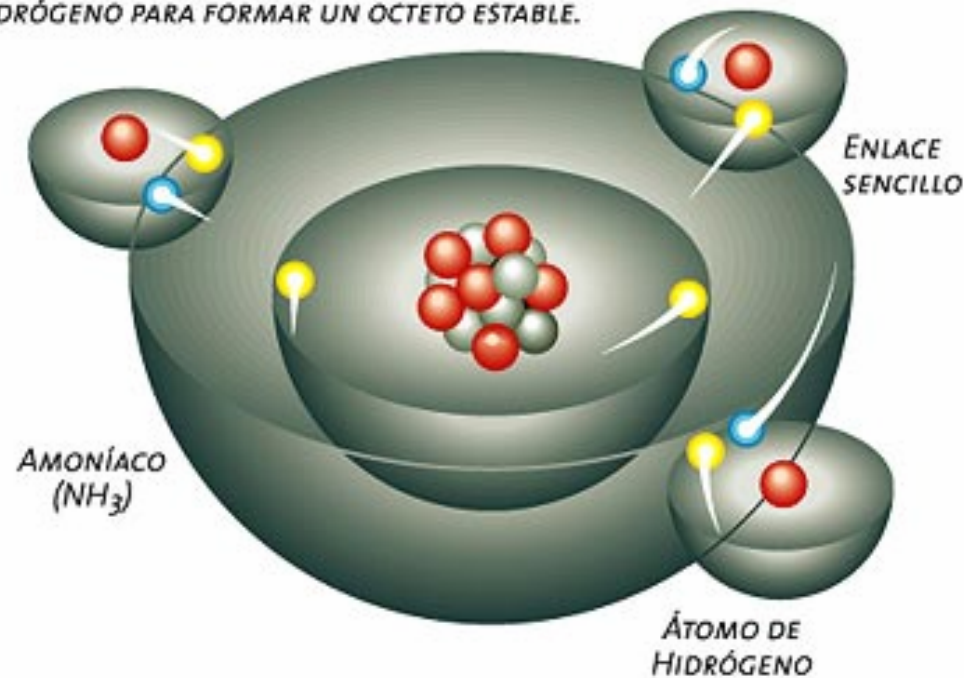
Ejemplo: Para el cloruro de sodio, tanto el catión Na^+ como el anión Cl^- , sus electrones quedan con los orbitales externos completos.



(B) ENLACE COVALENTE

- compartición de electrones de valencia de dos átomos adjacentes
- La unión resultante es altamente direccional

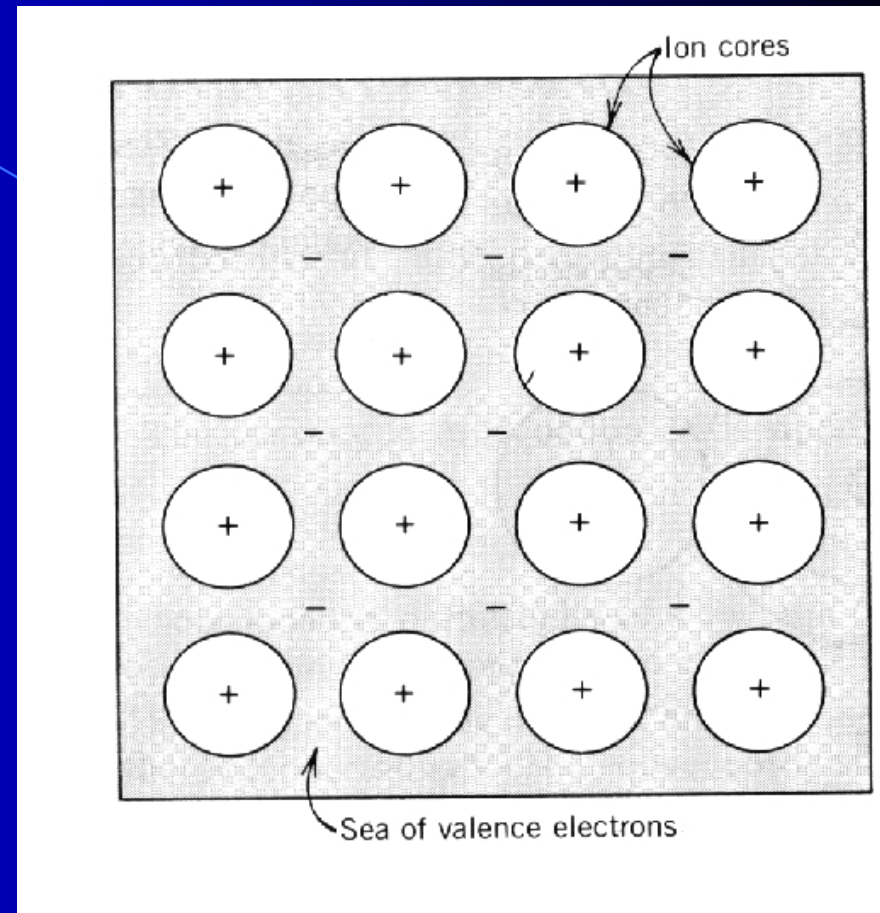
ÉL NITRÓGENO TIENE CINCO ELECTRONES EN SU CAPA ORBITAL EXTERNA Y SE ENLAZA CON TRES ÁTOMOS DE HIDRÓGENO PARA FORMAR UN OCTETO ESTABLE.



Esquema del enlace Covalente del metano (NH₃)

(C) ENLACE METÁLICO

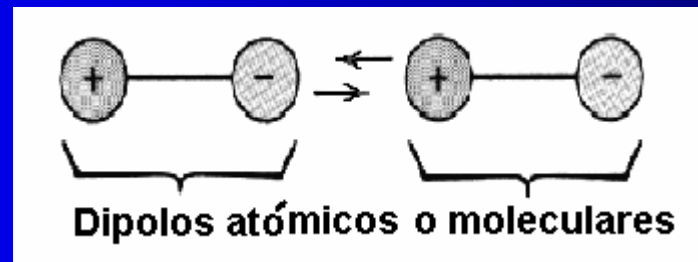
- Involucra compartición de electrones
- no direccional
- metales poseen de uno a tres electrones de valencia
- Los electrones de valencia pasan a ser electrones “libres”, que (i) presentan la misma probabilidad de asociarse a un gran número de átomos vecinos y (ii) forman una nube electrónica



Esquema del enlace metálico

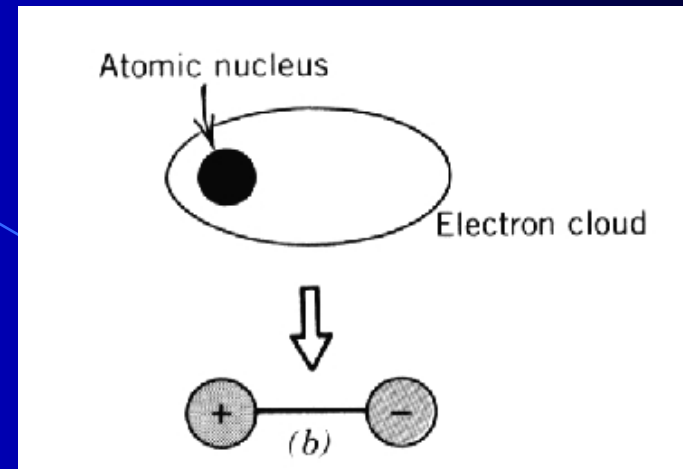
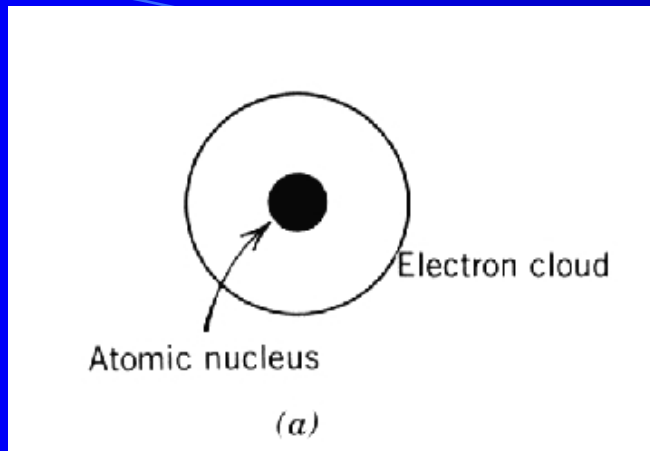
ENLACES SECUNDARIOS O De Van der Waals

- Ocurren atracciones entre dipolos generados por la asimetría de cargas.
- El mecanismo de esos enlaces es similar al de los enlaces iónicos, pero no existen electrones transferidos.

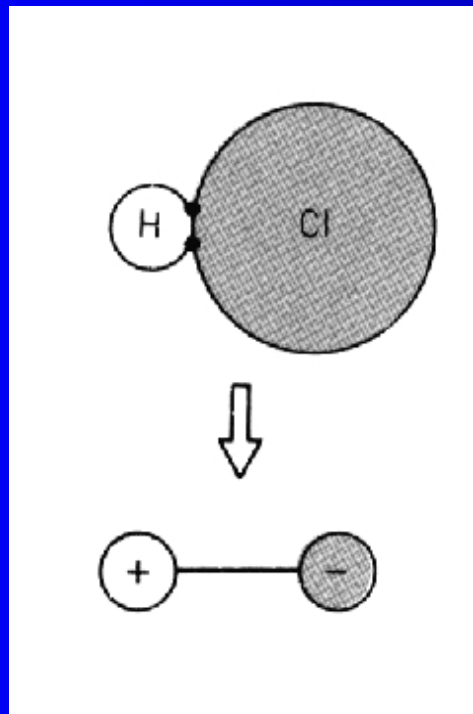


Representación esquemática del enlace de Van der Waals entre dos dipolos.

Los enlaces dipolares pueden ser entre: (i) dipolos inducidos fluctuantes, (ii) dipolos permanentes e inducidos, (iii) dipolos permanentes.

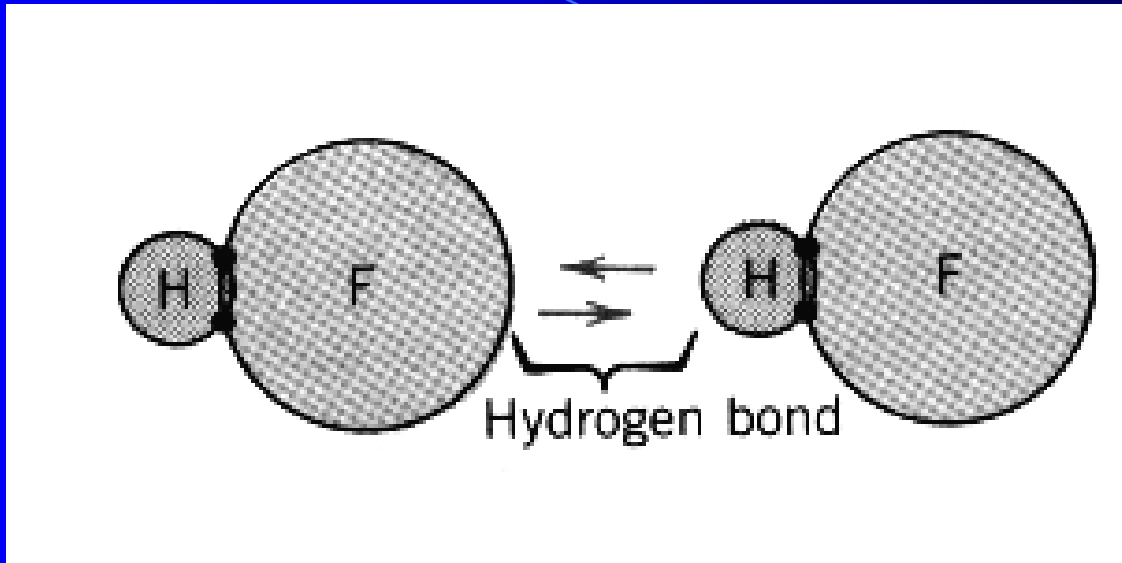


Representación esquemática de (a) un átomo eléctricamente simétrico y (b) un dipolo atómico fluctuante.



Dipolo permanente

PUENTE DE HIDRÓGENIO



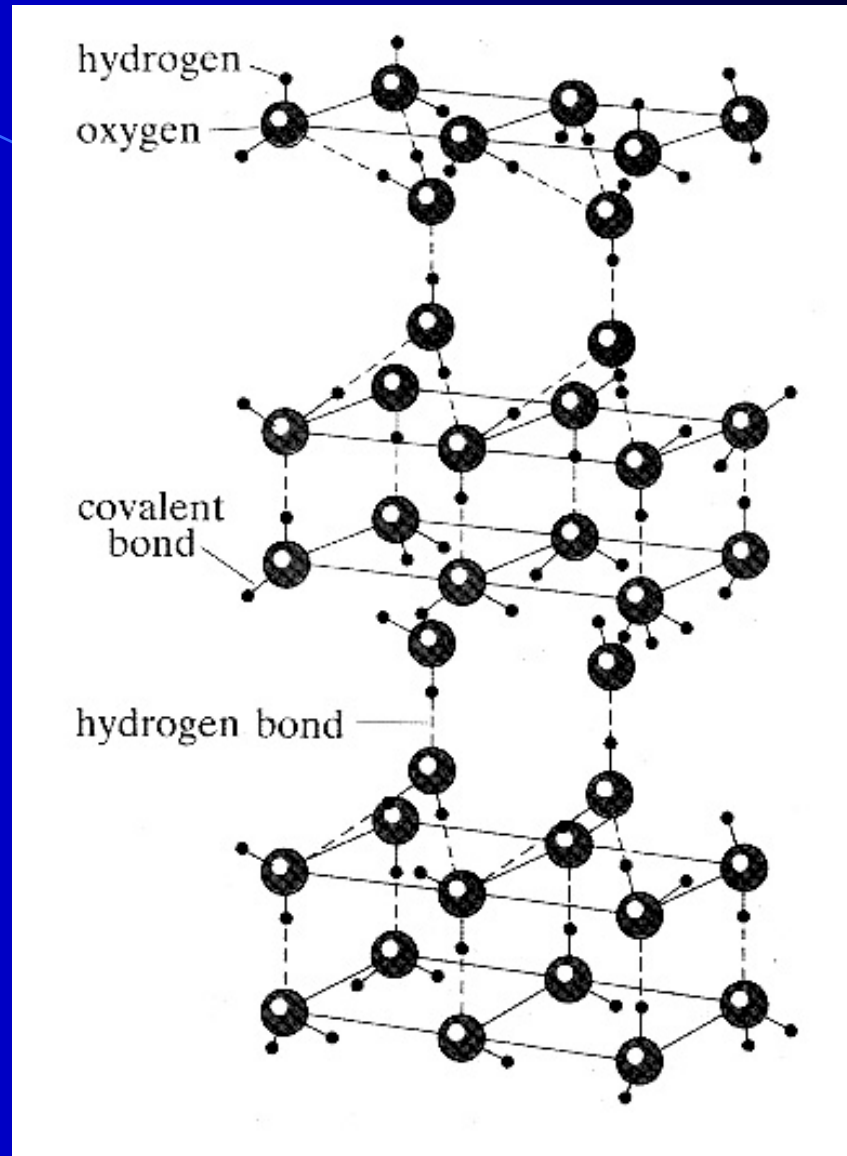
- Es un caso especial de enlace entre moléculas polares.
- Es el tipo de enlace secundario más fuerte.
- Ocurre entre moléculas en que el H está unido covalentemente al F (HF), O (H₂O) o N (NH₃).

Table 2.3 Bonding Energies and Melting Temperatures for Various Substances

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature</i> (°C)
		<i>kJ/mol</i> (<i>kcal/mol</i>)	<i>eV/Atom,</i> <i>Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	-39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	-189
	Cl ₂	31 (7.4)	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35 (8.4)	0.36	-78
	H ₂ O	51 (12.2)	0.52	0

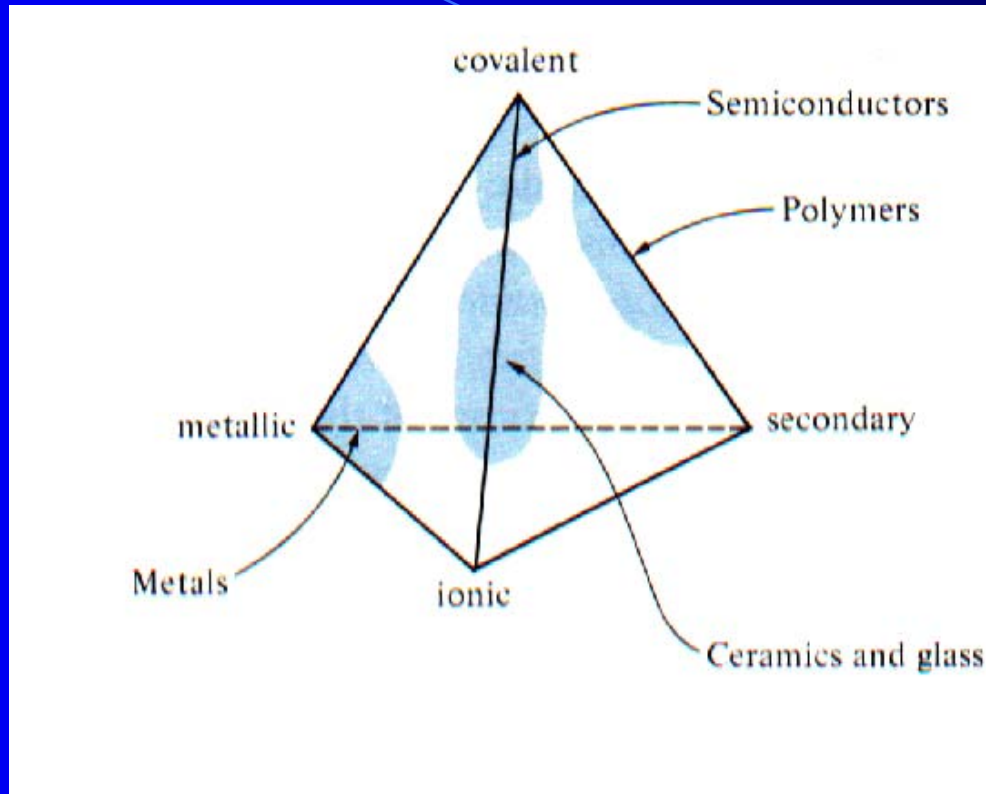
- Densidad: Depende de peso atómico, radio atómico (iónico) y distribución atómica espacial.

- Conductividades, eléctrica y térmica: Están asociadas a la movilidad de los portadores de carga, que a la vez depende de la distribución electrónica espacial.



Puentes de hidrógeno en el agua en el estado sólido (hielo).

MATERIALES SEGÚN EL TIPO DE ENLACE



Tetraedro que representa la contribución relativa de los diferentes tipos de enlace para las cuatro categorías fundamentales de materiales de ingeniería (metales, cerámicas, polímeros y semi-conductores)