

Enlace químico - Resumo

1.- Por que se unen os átomos?

Os átomos, moléculas e ións únense entre si porque ao facelo se chega a unha situación de mínima enerxía. Chámanse **enlaces** ao conxunto de interaccións que manteñen unidos aos átomos dun composto.

2.- Tipos de enlace.

Hai tres tipos elementais de enlace:

- Iónico (entre ións) cando se unen metais e non-metals.
- Covalente (entre átomos dunha mesma molécula) cando se unen non-metals.
- Metálico (entre catións metálicos unidos por unha nube de e^-) cando se unen metais.

3.- Enlace iónico

Dáse entre un metal que perde un ou varios electróns e un non-metal que os captura, resultando ións positivos e negativos que se manteñen unidos por atraccións electrostáticas, formando os ións unha rede cristalina que se repite nas tres direccións do espacio.

3.1. Enerxía reticular. Tamén chamada enerxía de rede (E_r). É a enerxía desprendida na formación dun mol de composto iónico sólido a partir dos seus ións en estado gasoso. É bastante difícil de calcular polo que se recorre a métodos indirectos aplicando a lei de Hess: ciclo de Born-Haber. Depende da carga e o tamaño dos ións.

3.3. Estrutura cristalina dos compostos iónicos. Os ións nos compostos iónicos ordénanse regularmente no espazo do xeito máis compacto posible. Cada ión rodéase de ións de signo contrario dando lugar a celas ou unidades que se repiten nas tres direccións. Chámase **índice de coordinación** ao número de ións de signo oposto que rodean a un ión dado.

4.- Propiedades dos compostos iónicos.

Son sólidos a temperatura ambiente porque as unións entre os ións, debidas a atraccións electrostáticas entre ións de distinto signo, son fortes. Por iso os seus puntos de fusión e ebulición serán elevados e teñen gran dureza, xa que para raiar un cristal é necesario romper a súa estrutura cristalina.

Son fráxiles, pois ao golpear lixeiramente o cristal, con producir o desprazamento de tan só un átomo, todas as forzas que eran atractivas se converten en repulsivas ao enfrontarse dúas capas de ións do mesmo signo.

Son solubles en disolventes polares

Ao estar os ións fixos dentro da estrutura cristalina non conducen a electricidade, pero son condutores en estado disolto ou fundido xa que nos devanditos estados os ións poden moverse e son atraídos cara aos electrodos de signo contrario.

5.- O enlace covalente.

É o que se forma entre non-metals que comparten os seus electróns.

5.1. Teoría de Lewis. Representacións de Lewis usando a regra do octeto. Os átomos para conseguir estrutura de gas nobre (8 electróns na súa última capa) comparten tantos electróns como lle falten para completar a súa capa. Pódense formar enlaces sinxelos, dobres e triplos; cantos máis enlaces, máis forte é a unión.

5.3. Modelo de repulsión de pares de electróns. Xeometría. A teoría da repulsión dos pares de electróns da capa de valencia (TRPECV) é un modelo que permite predicir a xeometría das moléculas partindo dunha idea intuitiva e sinxela: os electróns da capa de valencia dun átomo, agrupados por pares, sitúanse o máis afastados posibles para que as repulsións entre eles sexan mínimas.

5.4. Polaridade en moléculas covalentes. Momento dipolar. Cando os átomos que comparten electróns nun enlace covalente son distintos, os electróns estarán máis atraídos polo elemento máis electronegativo e a nube electrónica desprázase cara el, aparecendo unha carga parcial negativa (δ^-) no átomo do elemento electronegativo e, polo tanto, haberá unha deficiencia electrónica no outro átomo que terá unha carga parcial positiva (δ^+); dise que o enlace é polar como o do HF, pois o F é máis electronegativo que o H: $\text{H}^{\delta+}-\text{F}^{\delta-}$.

Como un enlace polar é un dipolo eléctrico, a magnitude que determina a polaridade dun enlace é o **momento dipolar** $\vec{\mu}$ que é unha magnitude vectorial que ten por dirección a liña que une os núcleos, o sentido dirixido cara á carga negativa e por valor o produto da carga pola distancia dos núcleos: $\vec{\mu} = (\delta^-) \cdot \vec{d}$.

As moléculas diatómicas con enlaces polares son polares, pero as moléculas poliatómicas con enlaces polares poden ser polares ou non, dependendo da súa xeometría, porque ao ser o momento dipolar unha magnitude vectorial, a resultante dos momentos dipolares pode ser nula.

6.- Teoría do enlace de valencia.

Baséase na suposición de que os enlaces covalentes prodúcense por solapamento dos orbitais atómicos de distintos átomos e emparellamento dos electróns de orbitais semicheos con spins contrarios.

Hai dous tipos de enlaces:

- Sigma (σ) cando se superpoñen frontalmente os orbitais atómicos. Pode darse entre dous orbitais "s", un orbital "s" e un "p" ou entre dous orbitais "p".
- Pi (π) cando se superpoñen dous orbitais "p" paralelos.

Entre dous átomos pode haber enlaces simples (un enlace σ), dobres (un σ e un π) ou triplos (un σ e dous π).

6.1.- Hibridación. Os orbitais atómicos de distinto tipo dun mesmo átomo, cando van formar un enlace, poden combinarse entre si para formar orbitais híbridos de igual enerxía entre si, que se sitúan no espazo de maneira que a repulsión sexa mínima.

Os principais tipos de hibridación son os seguintes:

6.1.1. Hibridación sp^3 : Hibridanse un orbital "s" e tres orbitais "p". Fórmanse catro orbitais con orientación dirixida cara aos vértices dun tetraedro.

6.1.2. Hibridación sp^2 : Hibridanse un orbital "s" e dous orbitais "p". Fórmanse tres orbitais dirixidos cara os vértices dun triángulo equilátero (e queda un "p" sen hibridar).

6.1.3. Hibridación sp : Hibridanse un orbital "s" e un orbital "p". Fórmanse dous orbitais que forman entre si un ángulo de 180° (e quedan dous "p" sen hibridar).

7.- Enlaces intermoleculares.

Son as forzas que unen moléculas e as responsables do estado físico das substancias.

7.1. Forzas de Van der Waals. Son forzas débiles que unen tanto moléculas polares como apolares. Hainas de dous tipos:

- Entre dipolos permanentes que se dan en moléculas polares, porque teñen unha certa distribución de carga. Son débiles e a súa intensidade aumenta coa polaridade dos enlaces.
- Entre dipolos instantáneos (moléculas apolares) xa que o par de electróns de enlace nun momento dado pode encontrarse nun lado da molécula producindo un dipolo instantáneo que induce a formación de dipolos nas moléculas veciñas; como estes dipolos non perduran os enlaces son moi débiles. A intensidade destas forzas aumenta coa masa molecular, porque teñen átomos máis pesados ou maior número de átomos enlazados.

7.2. Enlace ou ponte de hidróxeno. É relativamente forte. Establécese entre moléculas que teñen algún átomo de hidróxeno unido a átomos moi electronegativos e pequenos (fluor, osíxeno e nitróxeno). Cando o hidróxeno está unido a estes átomos, o par electrónico de enlace está moi atraído por eles, aparecendo unha certa carga negativa neses átomos e positiva no hidróxeno, podendo establecese atraccións entre o hidróxeno dunha molécula e a parte parcialmente negativa doutra.

8.- Propiedades dos compostos covalentes.

Hai que diferenciar dous tipos de compostos covalentes, con propiedades moi diferentes:

8.1. Sólidos covalentes: Forman redes cristalinas con todos os átomos unidos por enlaces covalentes, como o diamante ou o cuarzo. Dada a fortaleza deste enlace teñen:

- Gran dureza.
- Puntos de fusión e ebulición moi altos.
- Son insolubles en todo tipo de disolventes.
- Son malos condutores pois non teñen electróns nin ións libres. Unha excepción a estas propiedades é o grafito que forma estrutura por capas.

8.2. Substancias moleculares: Están formadas por moléculas illadas, tanto máis doadas de separar canto menos polares sexan as moléculas, polo que teñen:

- Puntos de fusión e ebulición baixos. Xeralmente son gases a temperatura ambiente.
- Se son sólidas, son brandas.
- Son solubles en disolventes apolares que estabilizan as moléculas con forzas de Van der Waals.
- Son malas condutoras da electricidade porque non teñen cargas libres, aínda que as moléculas polares posúen parcial condutividade.
- As substancias polares son solubles en disolventes polares e teñen maiores puntos de fusión e ebulición ao existir atracción electrostática entre elas.

9.- Enlace metálico.

É o que forman os metais. Os núcleos e os electróns internos dos átomos están empaquetados ordenadamente formando unha estrutura cristalina e os electróns de valencia constitúen unha nube electrónica que rodea a todo o conxunto de ións positivos que a comparten de xeito colectivo. É un enlace bastante forte.

10.- Propiedades dos metais.

Son dúctiles (pódense estirar en fíos) e maleables (pódense estender en láminas finas) debido a que non existen enlaces cunha dirección determinada. Se se distorsiona a estrutura os electróns volven a estabilizala interpoñéndose entre os catións.

Son bos condutores debido á deslocalización dos electróns.

Conducen a calor debido ao compactados que se atopan os átomos, polo que as vibracións nuns se transmiten con facilidade aos do lado.

Teñen, en xeral, altos puntos de fusión e ebulición dependendo da estrutura da rede. A maioría son sólidos.

Teñen un brillo característico debido á gran cantidade de niveis moi próximos de enerxía que fai que practicamente absorban enerxía de calquera lonxitude de onda, que inmediatamente emiten (reflexo e brillo).