

## O ENLACE QUÍMICO

### CONTIDOS

- 1.- Por que se unen os átomos?
- 2.- Tipos de enlace.
- 3.- Enlace iónico.
  - 3.1. Enerxía reticular.
  - 3.2. Ciclo de Born-Haber.
  - 3.3. Estrutura cristalina dos compostos iónicos.
- 4.- Propiedades dos compostos iónicos.
- 5.- O enlace covalente.
  - 5.1. Teoría de Lewis. Representacións de Lewis usando a regra do octeto.
  - 5.2. Resonancia.
  - 5.3. Modelo de repulsión de pares de electróns. Xeometría.
  - 5.4. Polaridade en moléculas covalentes. Momento dipolar.
- 6.- Teoría do enlace de valencia.
  - 6.1.- Hibridación.
    - 6.1.1. Hibridación  $sp^3$ .
    - 6.1.2. Hibridación  $sp^2$ .
    - 6.1.3. Hibridación  $sp$ .
- 7.- Enlaces intermoleculares.
  - 7.1. Forzas de Van der Waals.
  - 7.2. Enlace ou ponte de hidróxeno.
- 8.- Propiedades dos compostos covalentes.
  - 8.1. Sólidos covalentes.
  - 8.2. Sustancias moleculares.
- 9.- Enlace metálico.
  - 9.1. Modelo de nube electrónica.
  - 9.2. Teoría de bandas.
- 10.- Propiedades dos metais.

## 1.- Por que se unen os átomos?

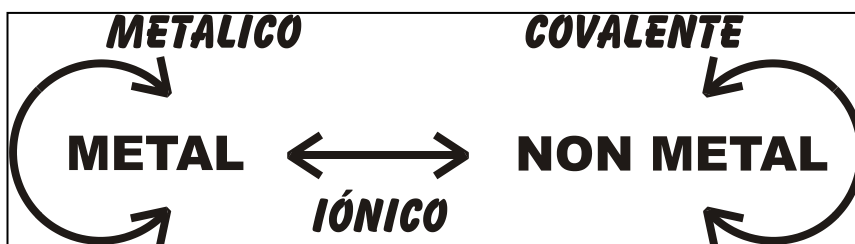
Os átomos, moléculas e ións únense entre si porque ao facelo se chega a unha situación de mínima enerxía, o que equivale a dicir de máxima estabilidade. Chámanse **enlaces** ao conxunto de interaccións que manteñen unidos aos átomos dun composto.

Aínda que na formación dos enlaces participan todos os electróns e núcleos dos átomos, para efectos prácticos só imos a considerar os electróns máis externos, tamén chamados electróns de valencia, como os responsables destas unións.

## 2.- Tipos de enlace.

Dado que hai dous tipos básicos de elementos, hai tres tipos elementais de enlace:

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



No caso do enlace covalente tamén consideraremos unións intermoleculares:

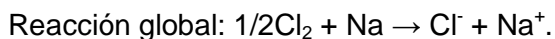
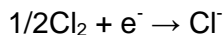
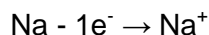
Forzas de Van de Waals  
Enlaces de hidróxeno.

A realidade é máis complexa e hai compostos con propiedades a cabalo entre as propias de compostos iónicos, covalentes ou metálicos, pero a simplificación que facemos permite facilitar a comprensión dos tipos de sustancias e das súas propiedades.

## 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 espazo. Non se forman moléculas cun número limitado de ións, polo que as fórmulas dos compostos iónicos en realidade son empíricas, é dicir, só dan idea da proporción de átomos existentes na rede cristalina.

As reaccións de perda ou ganancia de electróns chámanse reaccións de ionización. Exemplo de reaccións de ionización:

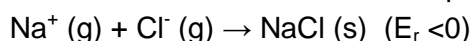


E a fórmula do composto será: NaCl.

### 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.

Exemplo: No caso da formación de NaCl a  $E_r$  corresponde á reacción:



É bastante difícil de calcular polo que se recorre a métodos indirectos aplicando a lei de Hess. É o que se coñece como ciclo de Born-Haber, que veremos a continuación.

Os factores dos que depende a enerxía reticular son a carga e o tamaño dos ións, pois a  $E_r$  (ao ser sempre negativa consideraremos sempre valores absolutos) vai a ser proporcional á forza con que se unen os ións, que segundo a lei de Coulomb, é directamente proporcional ao produto das cargas e inversamente proporcional ao cadrado da distancia entre elas, polo tanto:

- A maior carga dos ións maior  $E_r$ . Así o CaO ( $\text{Ca}^{2+}$  e  $\text{O}^{2-}$ ) terá  $E_r$  maior que o NaCl ( $\text{Na}^+$  e  $\text{Cl}^-$ ).

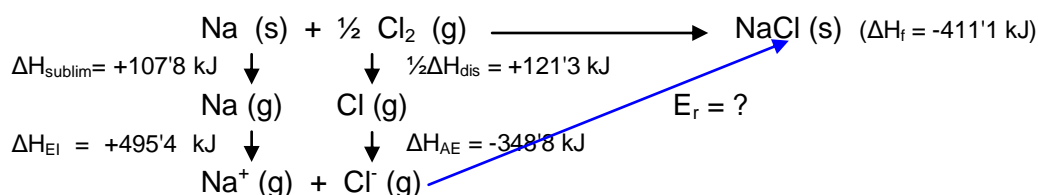
- A menor tamaño dos ións maior  $E_r$ . Así o NaCl ( $\text{Na}^+$  e  $\text{Cl}^-$ ) terá  $E_r$  maior que o KBr ( $\text{K}^+$  e  $\text{Br}^-$ ).

### 3.2. Ciclo de Born-Haber.

Imos a ver como se calcula a enerxía de rede aplicando a Lei de Hess, tomando como exemplo o cloruro sódico. A súa entalpía de formación é:



Esta enerxía deberemos relacionala coas correspondentes aos procesos, que permiten obter os ións en estado gasoso: a sublimación do sodio, a súa enerxía de ionización, a disociación do cloro e a súa afinidade electrónica. Obtemos así:



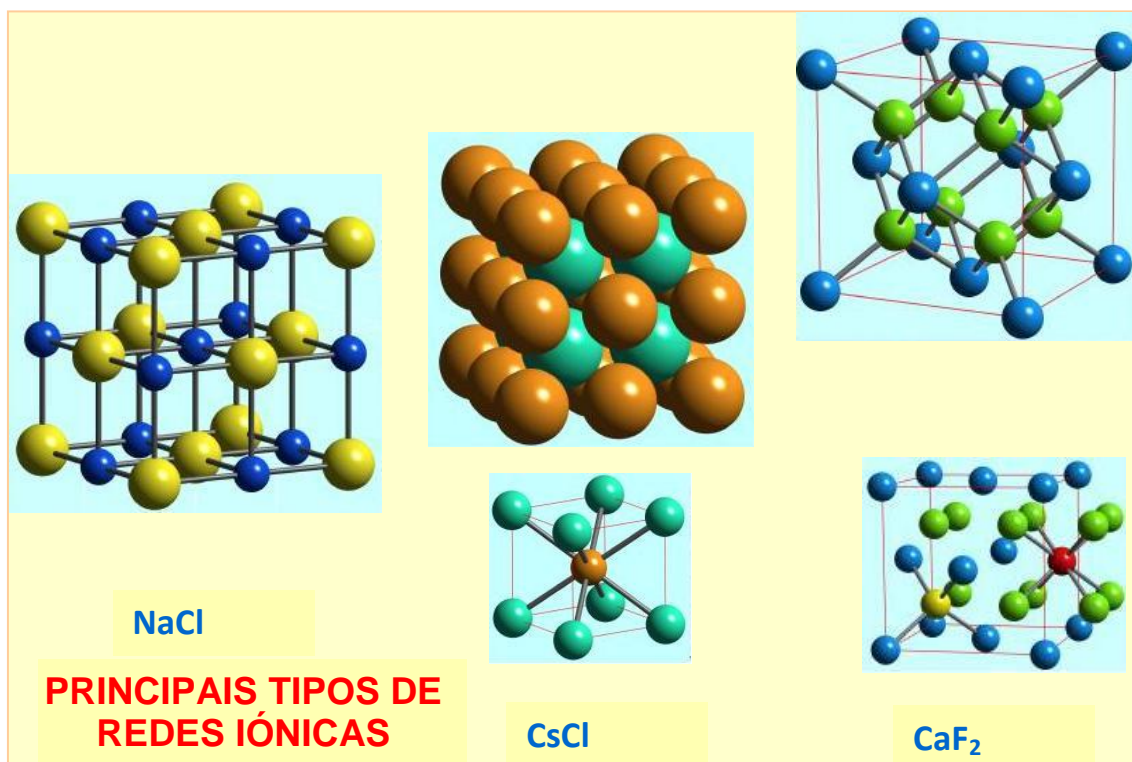
De onde pode deducirse que  $E_r = \Delta H_f - (\Delta H_{\text{subl}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dis}} + \Delta H_{\text{AE}} + \Delta H_{\text{EI}})$   
 $E_r = -411'1 \text{ kJ} - (107'8 \text{ kJ} + 121'3 \text{ kJ} - 348'8 \text{ kJ} + 495'4 \text{ kJ}) = -786'8 \text{ kJ}$

### 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 do espazo.

Chámase **ÍNDICE DE COORDINACIÓN** ao número de ións de signo oposto que rodean a un ión dado. Canto maior é un ión con respecto ao outro maior é o seu índice de coordinación.

Principais tipos de estrutura cristalina:



- NaCl (cúbica centrada nas caras para ambos os dous ións). Índice de coordinación para ambos os dous ións 6.
- CsCl (cúbica para ambos os dous ións). Índice de coordinación para ambos os dous ións 8
- CaF<sub>2</sub> (cúbica centrada nas caras para o Ca<sup>+2</sup> e tetraédrica para o F<sup>-</sup>). Índice de coordinación para o F<sup>-</sup> 4 e para o Ca<sup>+2</sup> 8.

Factores dos que depende a estrutura cristalina:

- O tamaño dos ións.

- A estequiometría que vén dada pola carga dos ións de forma que o cristal sexa neutro.

#### 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. Os seus puntos de fusión e ebulición serán elevados (tanto máis canto maior sexa a enerxía reticular), xa que para fundilos é necesario romper a rede cristalina tan estable pola cantidade de unións.

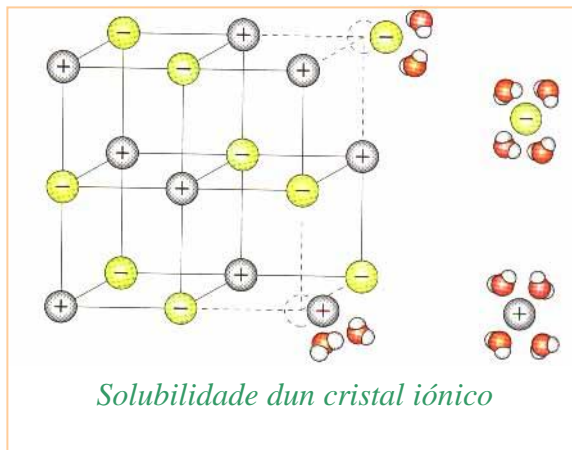
Teñen gran dureza pola mesma razón, xa que para raiar un cristal é necesario romper a súa estrutura cristalina.

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 (tanto máis canto menor  $E_r$ ) posto que os devanditos disolventes ao presentar cargas son capaces de introducirse na estrutura cristalina e estabilizar os ións por atracción ión-dipolo. Pola mesma razón, son insolubles en disolventes apolares.

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



#### 5.- O enlace covalente.

É o que se forma entre non-metais que comparten os seus electróns. Ao igual que no enlace iónico a formación dun enlace covalente vai acompañada dun desprendemento de enerxía.

Chámase enerxía de enlace á enerxía necesaria para romper 1 mol dun determinado tipo de enlace. É sempre endotérmica (positiva) pois sempre é necesario achegar enerxía para romper un enlace. Por exemplo, para romper 1 mol de  $H_2$  (g) en 2 moles de H (g) precísanse 436 kJ, polo que  $E_{\text{enlace}}(H-H) = \Delta H_{\text{dis}}(H_2) = +436$  kJ.

### 5.1. Teoría de Lewis. Representacións de Lewis usando a regra do octeto.

As representacións de Lewis foron ideadas por G.N. Lewis en 1916 para explicar de forma simple o enlace covalente. Nelas represéntanse os electróns de valencia dos átomos que forman os enlaces por puntos, normalmente agrupados por parellas, e aplícanse as seguintes regras:

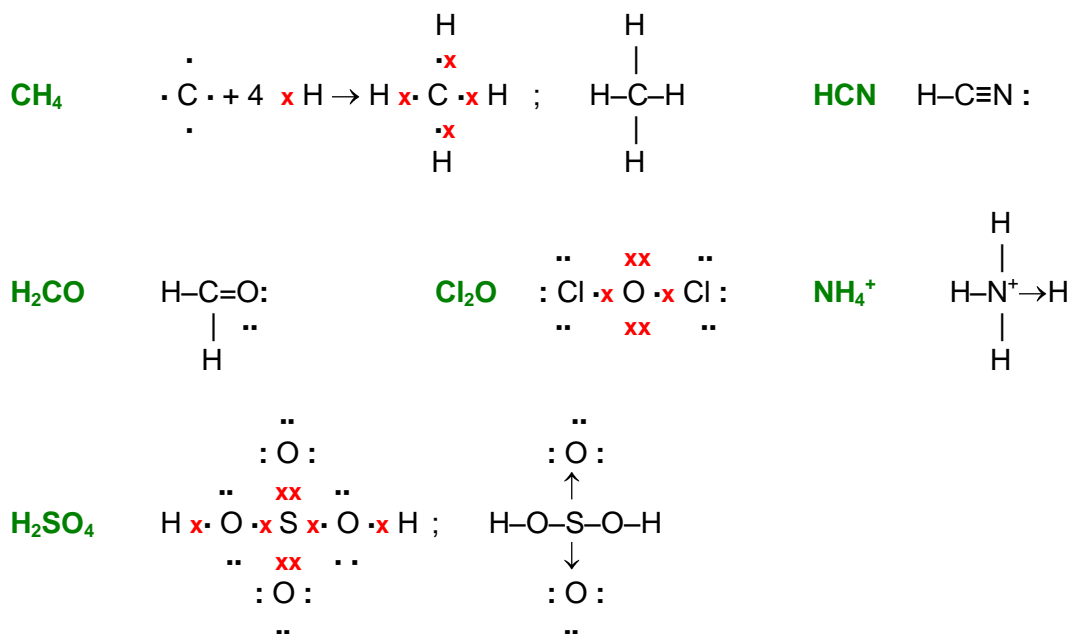
- Os átomos para conseguir estrutura de gas nobre (8 electróns na súa última capa) comparten tantos electróns como lle falten para completar a súa capa (regra do octeto).
- Cada parella de electróns compartidos forma un enlace.
- Pódense formar enlaces sinxelos, dobres e triplos. Cantos máis enlaces, máis forte é a unión.

Nunha das FAQ's explícase detidamente como facer representacións de Lewis.

Excepcións á teoría de Lewis

- Moléculas tipo NO e NO<sub>2</sub> que teñen un número impar de electróns.
- Moléculas tipo BeCl<sub>2</sub> ou BF<sub>3</sub> con marcado carácter covalente nas cales o átomo de Be ou de B non chegan a ter 8 electróns.
- Moléculas tipo PCl<sub>5</sub> ou SF<sub>6</sub> nas que o átomo central pode ter 5 ou 6 enlaces (10 ou 12 e<sup>-</sup>).

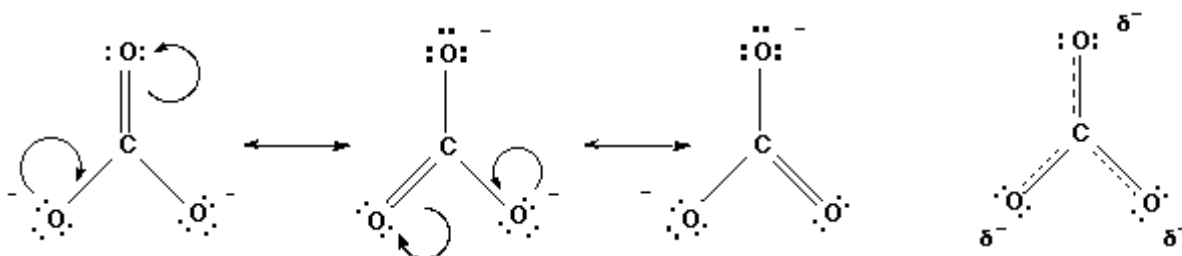
**Exemplo:** Escribir as estruturas de Lewis completas para as seguintes especies químicas: CH<sub>4</sub>, HCN, H<sub>2</sub>CO, Cl<sub>2</sub>O, NH<sub>4</sub><sup>+</sup> e H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.



## 5.2. Resonancia.

En moitas ocasións, non existe unha única estrutura de Lewis que poida explicar as propiedades dunha molécula ou ión. Por exemplo, o ión carbonato  $\text{CO}_3^{2-}$  debería ter unha estrutura na que o átomo central, o carbono neste caso, formase un dobre enlace cun dos átomos de osíxeno e dous enlaces sinxelos cos átomos de osíxeno que soportan a carga negativa tal e como se ve no debuxo de abaixo. Non obstante, isto levaría consigo a que as distancias C-O e C=O deberían ser distintas, e tal e como se verá a continuación, os ángulos de enlace, tamén deberían ser distintos. Por difracción de raios X sábese que as distancias entre o átomo de carbono e cada átomo de osíxeno son iguais, así como os ángulos O-C-O. Para explicar tales datos, supónse que os electróns de enlace así como os pares electrónicos sen compartir, poden desprazarse ao longo da molécula ou ión, podendo formar máis dunha estrutura de Lewis distinta. No caso do ión  $\text{CO}_3^{2-}$ , poderíanse formar tres estruturas de Lewis nas que o dobre enlace se formase con cada un dos átomos de osíxeno, sendo as tres válidas. Cada unha destas formas contribúe por igual á estrutura do ión  $\text{CO}_3^{2-}$ , sendo a verdadeira estrutura unha mestura das tres.

Polo tanto, os tres enlaces C-O teñen  $1/3$  de dobre enlace, polo que a distancia é intermedia. Igualmente, os tres átomos de osíxeno participan de  $2/3$  de carga negativa. Ademais de utilizar o símbolo “frecha de dobre punta” entre as distintas formas resoantes, tamén se utiliza unha única forma mestura de todas (debuxo da dereita), no que aparecen o signo “raia e guión” que indica enlace intermedio entre sinxelo e dobre e as fraccións de carga con “ $\delta^-$ ”.



## 5.3. Modelo de repulsión de pares de electróns. Xeometría.

Os enlaces covalentes teñen unha dirección determinada e as distancias de enlace e os ángulos entre enlaces poden medirse aplicando técnicas de difracción de raios X. As representacións de Lewis non permiten coñecer a xeometría das moléculas. 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*.

Segundo o número e tipo de enlaces, así como o número de pares de electróns sen compartir podemos clasificar as moléculas nos seguintes grupos:



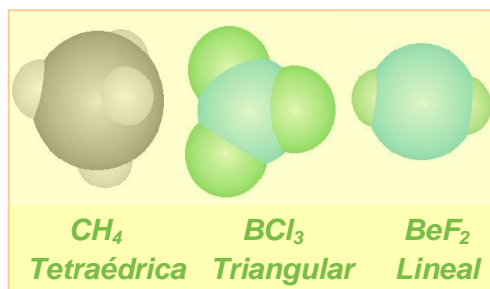
1. O átomo central só ten pares de electróns de enlace sinxelo.

Segundo o número de enlaces, estes sitúanse o máis afastados posibles para reducir o que se poida a repulsión entre as devanditas nubes electrónicas. Así, se existen dous enlaces con dous átomos, estes dirixíranse en sentidos contrarios quedando os tres átomos aliñados, é dicir, formando un ángulo de  $180^\circ$ . No caso de tres enlaces, o xeito máis afastado de situarse é formando ángulos de  $120^\circ$  estando todos os átomos no mesmo plano. Con catro enlaces, estes dirixíranse cara aos vértices dun tetraedro.

Exemplos:  $\text{BeF}_2$ : O Be ten 2 pares de  $e^-$ ;  
Ángulo enlace =  $180^\circ$ . F-Be-F

$\text{BCl}_3$ : O B ten 3 pares de  $e^-$ ; Ángulo enlace  
=  $120^\circ$ .

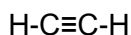
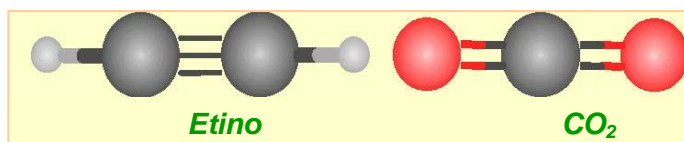
$\text{CH}_4$ : O C ten 4 pares de  $e^-$ ; Ángulo enlace  
=  $109,4^\circ$ .



2. O átomo central ten dous dobres enlaces ou un sinxelo e un triplo.

Como se une unicamente a dous elementos a xeometría é lineal, é dicir, o ángulo que forma o átomo central cos dous átomos aos que está unido é de  $180^\circ$ .

Exemplos:  $\text{C}_2\text{H}_2$  (etino ou acetileno): Cada C forma un triplo enlace e un sinxelo:



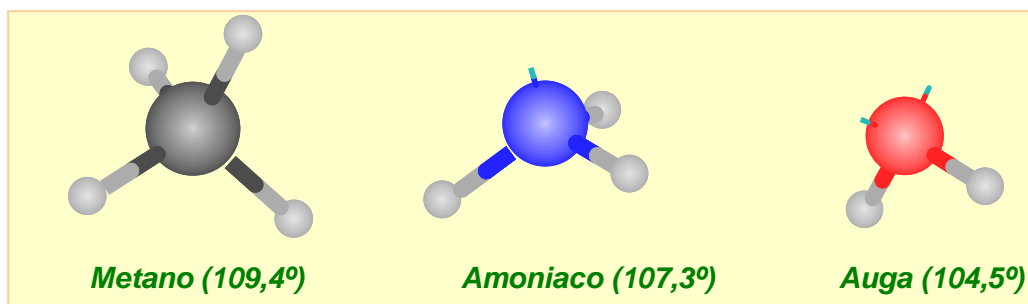
$\text{CO}_2$ : O carbono forma dous dobres enlaces.  $:\text{O}=\text{C}=\text{O}:$

3. O átomo central ten pares de electróns sen compartir.

A repulsión destes pares de electróns sen compartir é maior que entre pares de electróns de enlace.

Exemplos:  $\text{NH}_3$ : O N ten 3 pares de  $e^-$  compartidos e 1 sen compartir Ángulo enlace =  $107'3'' < 109'4''$

$\text{H}_2\text{O}$ : O átomo de O ten 2 pares de  $e^-$  compartidos e 2 sen compartir Ángulo enlace =  $104'5'' < 109'4''$



4. O átomo central ten un enlace dobre.

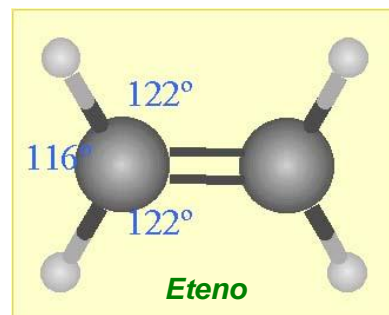
A repulsión debida a 2 pares electrónicos compartidos é maior que a de un.



Exemplo:  $\text{CH}_2=\text{CH}_2$  (eteno): Cada átomo de carbono ten 2 pares de  $e^-$  compartidos co outro carbono e 2 pares de  $e^-$  compartidos con senllos átomos de hidróxeno, de maneira que:

Ángulo enlace  $\text{H}-\text{C}=\text{C}$ :  $122^\circ > 120^\circ$  (triangular)

Ángulo enlace  $\text{H}-\text{C}-\text{H}$ :  $116^\circ < 120^\circ$  (triangular)



A táboa seguinte resume a xeometría de moléculas simples. “A” representa ao átomo central, “X” aos átomos unidos a ese átomo central e “E” aos pares de electróns do átomo central que non participan en enlaces.

Tipo de molécula	Xeometría molecular	Exemplos
$\text{AX}_2$	Lineal	$\text{BeH}_2$ , $\text{BeF}_2$
$\text{AX}_3$	Triangular	$\text{BF}_3$
$\text{AX}_4$	Tetraédrica	$\text{CH}_4$ , $\text{NH}_4^+$ , $\text{SiF}_4$ , $\text{CCl}_4$
$\text{AX}_3\text{E}$	Piramidal	$\text{NH}_3$ , $\text{H}_3\text{O}^+$ , $\text{PCl}_3$ , $\text{AsCl}_3$
$\text{AX}_2\text{E}_2$	Angular	$\text{H}_2\text{O}$ , $\text{F}_2\text{O}$ , $\text{SCl}_2$
$\text{AXE}_3$	Lineal	$\text{HF}$ , $\text{F}_2$ , $\text{HCl}$ , $\text{Cl}_2$

#### 5.4. Polaridade en moléculas covalentes. Momento dipolar.

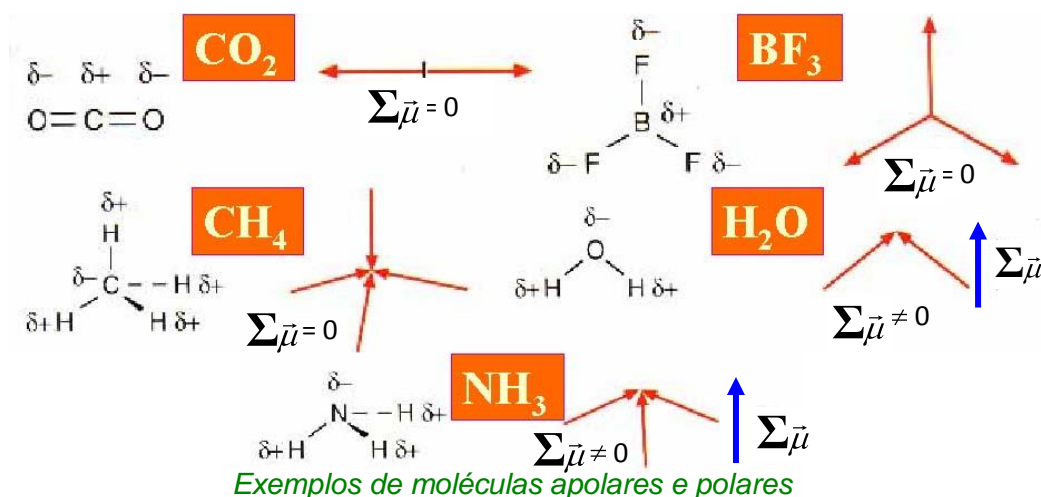
Cando, nun enlace covalente, comparten electróns átomos iguais, os electróns do enlace están atraídos polos núcleos coa mesma intensidade e o enlace é **apolar**, como ocorre no enlace  $\text{H}-\text{H}$  do  $\text{H}_2$ . Sen embargo, cando os átomos son distintos, os electróns estarán máis atraídos polo elemento máis electronegativo e a nube electrónica desprázase cara el, aparecendo unha carga parcial negativa ( $\delta^-$ ) no átomo do elemento electronegativo e, polo tanto, haberá unha deficiencia electrónica no outro átomo que terá unha carga parcial positiva ( $\delta^+$ ); dise que o enlace é **polar** como o do  $\text{HF}$ , pois o  $\text{F}$  é máis electronegativo que o  $\text{H}$ :  $\text{H}^{\delta^+}-\text{F}^{\delta^-}$ .

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.

Exemplos:

<b>Moléculas polares</b>	<b>Moléculas apolares</b>
Diatómicas: $\text{H} \rightarrow \text{Cl}$ , $\text{Cl} \rightarrow \text{F}$	Diatómicas: $\text{H}_2$ ( $\text{H}-\text{H}$ ), $\text{Cl}_2$ ( $\text{Cl}-\text{Cl}$ )
Moléculas angulares, piramidais... como $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{NH}_3$	Moléculas nas que o momento dipolar se anula pola súa xeometría como $\text{CO}_2$ , $\text{BF}_3$ , $\text{CH}_4$



**Exemplo:**

a) Ordene, segundo a polaridade crecente, os enlaces seguintes:  $\text{H}-\text{F}$ ,  $\text{H}-\text{O}$ ,  $\text{H}-\text{N}$ ,  $\text{H}-\text{C}$ ,  $\text{C}-\text{O}$  e  $\text{C}-\text{Cl}$ , baseándose nos valores de electronegatividades da táboa adxunta. b) A polaridade da molécula de  $\text{CH}_4$  será igual ou distinta da de  $\text{CCl}_4$ ?

Elemento	Electronegatividade
F	4,0
O	3,5
Cl	3,0
N	3,0
C	2,5
S	2,5
H	2,1

**Solución:**

a)  $\text{H}-\text{C} < \text{C}-\text{Cl} < \text{H}-\text{N} < \text{C}-\text{O} < \text{H}-\text{O} < \text{H}-\text{F}$

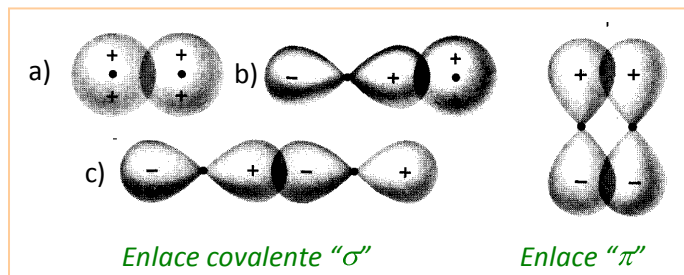
b) O  $\text{CH}_4$  é globalmente apolar ( $\mu=0$ ) pois a suma vectorial dos dipolos de cada enlace (dirixidos cara ao centro) anúlase debido á súa xeometría tetraédrica. O  $\text{CCl}_4$  é igualmente apolar pola mesma razón; non obstante os dipolos dos enlaces están nesta ocasión dirixidos cara a fóra.

## 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. Así, 2 átomos de  $\text{H}$  ( $1s^1$ ), que teñen, cada un, 1 electrón desaparellado nun orbital "s", formarían un enlace onde se aloxarían os 2 electróns.

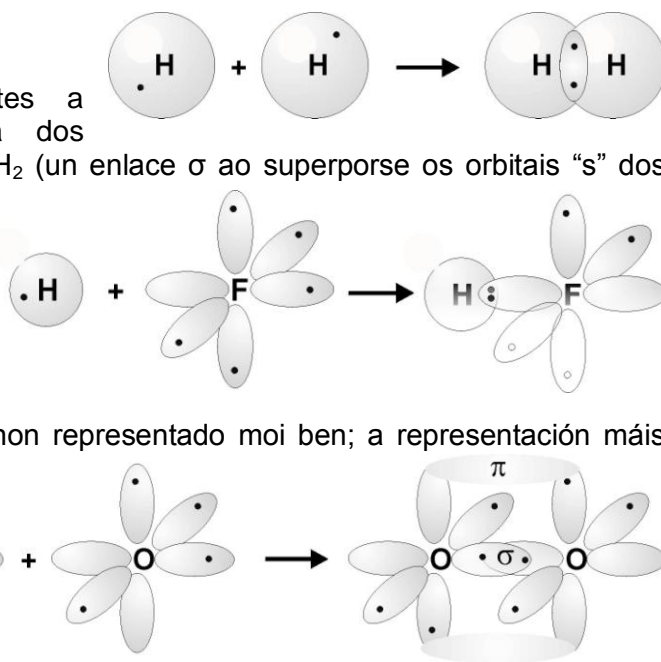
Hai dous tipos de enlaces:

- Sigma ( $\sigma$ ) 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 ( $\pi$ ) cando se superpoñen dous orbitais "p" paralelos.



Entre dous átomos pode haber enlaces simples (un enlace  $\sigma$ ), dobres (un  $\sigma$  e un  $\pi$ ) ou triplos (un  $\sigma$  e dous  $\pi$ ).

Nas figuras á marxe tes a xustificación, segundo a teoría dos enlaces de valencia, dos enlaces  $H_2$  (un enlace  $\sigma$  ao superporse os orbitais "s" dos átomos de hidróxeno), HF (un enlace  $\sigma$  ao superporse o orbital "s" do hidróxeno co "p<sub>y</sub>" do fluor) e  $O_2$ . Neste caso ademais de superporse frontalmente os orbitais "p<sub>y</sub>" do osixeno, superpóñense en paralelo os "p<sub>z</sub>", formando un enlace  $\pi$  (aquí non representado moi ben; a representación máis correcta desta superposición tela na imaxe superior).



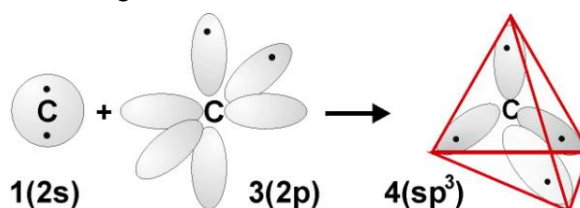
## 6.1.- Hibridación.

Para explicar a xeometría de certas moléculas (ángulos e distancia) Pauling formulou a **teoría da hibridación**, que se basea en que 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.

Así, por exemplo, o carbono "C" ten catro enlaces iguais en moitos compostos como o  $CH_4$  e os alcanos (propano, butano...) e para iso precisa promover un electrón do orbital 2s ao 2p e a continuación formar 4 orbitais de igual enerxía a partir do 2s e dos tres orbitais 2p).

Os principais tipos de hibridación son os seguintes:

**6.1.1. Hibridación  $sp^3$ :**  
Híbranse un orbital "s" e tres orbitais "p". Fórmanse catro orbitais con orientación dirixida cara aos vértices dun tetraedro, formando ángulos de



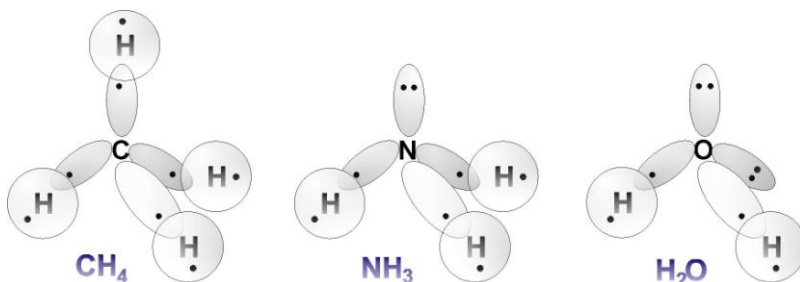
109° 28'. Exemplos:

CH<sub>4</sub> con 4  
enlaces sinxelos.

NH<sub>3</sub> con 3  
enlaces sinxelos e 1  
par de electróns sen  
compartir.

H<sub>2</sub>O con 2

enlaces sinxelos e 2 pares de electróns sen compartir.

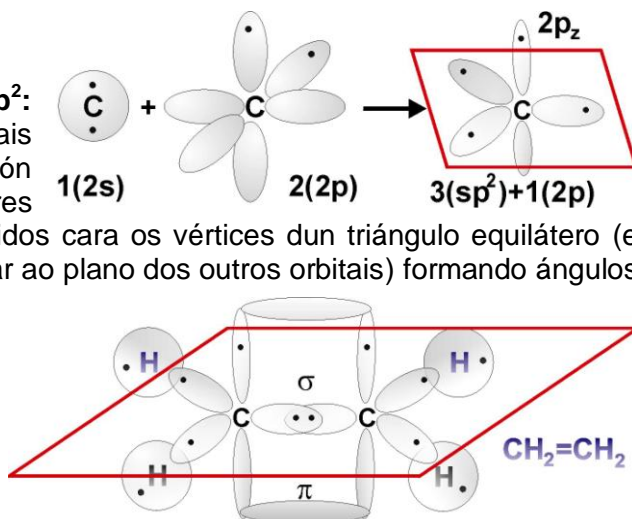


**ATENCIÓN!** Cando se representan átomos con hibridación, hai que poñerlle os electróns que xuntan entre os orbitais que hibridan. P.ex.: C, 4 e<sup>-</sup> (2s<sup>2</sup>, 2p<sup>2</sup>); N, 5 e<sup>-</sup> (2s<sup>2</sup>, 2p<sup>3</sup>); O, 6 e<sup>-</sup> (2s<sup>2</sup>, 2p<sup>4</sup>). Só poden formar enlaces cos orbitais que non están cheos con 2 e<sup>-</sup>.

**6.1.2. Hibridación sp<sup>2</sup>:**  
Híbranse un orbital "s" e dous orbitais "p". Na figura represéntase a hibridación cos orbitais "p<sub>x</sub>" e "p<sub>y</sub>". Fórmanse tres orbitais que están no plano XY, dirixidos cara os vértices dun triángulo equilátero (e queda o "p<sub>z</sub>" sen hibridar perpendicular ao plano dos outros orbitais) formando ángulos de 120°. Exemplos:

BF<sub>3</sub> con 3 enlaces sinxelos.

CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub> con 1 enlace dobre  
(o σ entre os sp<sup>2</sup> e o π entre os p<sub>z</sub>) e  
4 sinxelos, no mesmo plano, entre  
os C e os H.

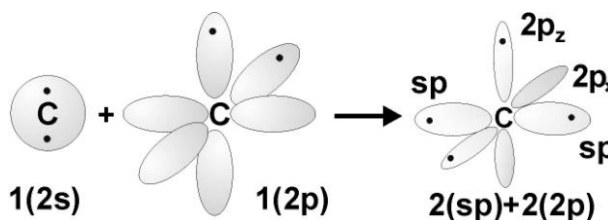


**6.1.3. Hibridación sp:** Híbranse un orbital "s" e un orbital "p". Na figura represéntase a hibridación co orbital "p<sub>y</sub>". Fórmanse dous orbitais orientados segundo o eixo "Y", que forman entre si un ángulo de 180° (e quedan dous "p" sen hibridar, o "p<sub>x</sub>" e o "p<sub>z</sub>"). Exemplos:

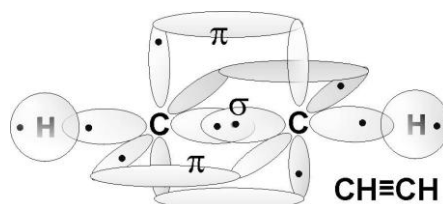
BeF<sub>2</sub> con 2 enlaces sinxelos.

CO<sub>2</sub> con 2 enlaces dobres.

CH≡CH con 1 enlace triplo (o σ entre os sp, o π entre os p<sub>z</sub> e o π entre os p<sub>x</sub>) e 2 sinxelos, na mesma dirección, entre os C e os H.



Nos exemplos citados nos distintos tipos de hibridacións, centreime no caso dos compostos de carbono, pola gran importancia que ten que poida presentar ata tres tipos distintos de enlace entre os seus átomos, como verás nos temas dedicados a química orgánica. Así, a variedade de enlaces favorece que haxa miles de compostos orgánicos, a rixidez do dobre enlace explica a existencia de isomería cis-trans, a do triple enlace que non produza isomería...



### Exercicio:

Que hibridacións presentan os átomos de carbono do composto  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{C}\equiv\text{CCH}_3$ ?

**Solución:** Imos percorrer o composto comezando pola esquerda:

O 1º só ten enlaces simples polo que ten hibridación  $sp^3$ ; igual o 2º.

O 3º ten un enlace dobre polo que ten hibridación  $sp^2$ ; igual o 4º.

O 5º só ten enlaces simples polo que ten hibridación  $sp^3$ .

O 6º ten un enlace triple polo que ten hibridación  $sp$ ; igual o 7º.

O 8º só ten enlaces simples polo que ten hibridación  $sp^3$ .

Pode verse unha simulación de hibridación en:

[http://www.cneq.unam.mx/paidoteca/enlaces/orbitales\\_hibridos.htm](http://www.cneq.unam.mx/paidoteca/enlaces/orbitales_hibridos.htm)

## 7.- Enlaces intermoleculares.

Son as forzas que unen moléculas e as responsables do estado físico das substancias. Segundo a súa forza clasifícanse en:

### 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. Son as responsables, p. ex., de que o punto de ebulición do etanol ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ) sexa  $78,3^\circ\text{C}$ , maior que o do dimetiléter ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ) que é  $-25^\circ\text{C}$ , porque a diferenza de electronegatividade entre o O e o H é maior que entre o C e o O e polo tanto hai un enlace máis polar.

- 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. Pero como estes dipolos non perduran os enlaces son moi débiles.

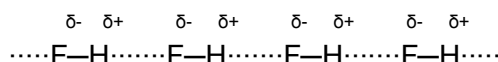
A intensidade destas forzas aumenta coa masa molecular, porque teñen átomos máis pesados ou maior número de átomos enlazados. Por iso o punto de ebulición dos halóxenos aumenta do fluor o iodo:

Halóxeno:	$\text{F}_2$	$\text{Cl}_2$	$\text{Br}_2$	$\text{I}_2$
Temperatura ebulición ( $^\circ\text{C}$ ):	-188	-34	58,8	184



## 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.



Estes enlaces son os responsables dos puntos de fusión e ebulición anormalmente altos das substancias que os conteñen como, por exemplo, a auga ou HF:

Composto:	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> S	H <sub>2</sub> Se	H <sub>2</sub> Te
Temperatura ebulición (°C):	100	-60,8	-41,5	-1,8

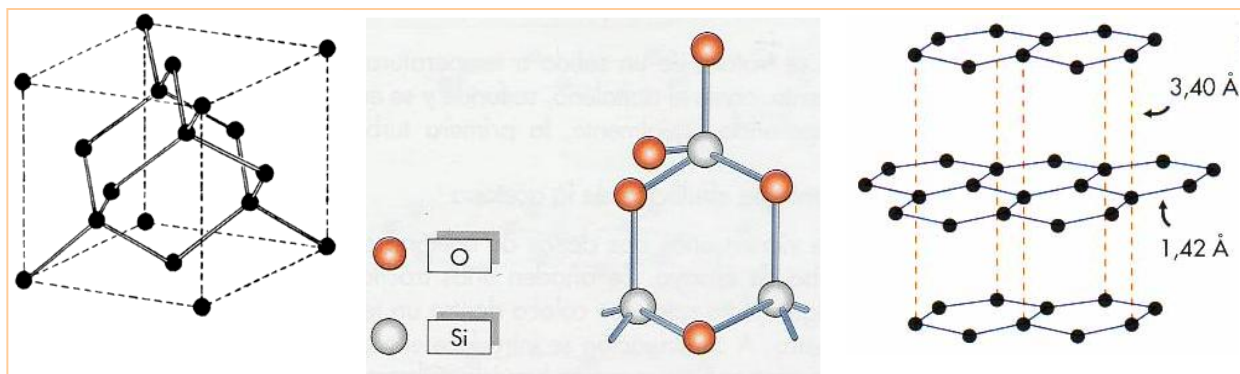
Os puntos de ebulición van aumentando coa masa molecular, como era de esperar, sen embargo o da auga é excepcionalmente alto a causa da maior intensidade das pontes de hidróxeno.

## 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 se fosen moléculas xigantescas. P. ex. o diamante ou o cuarzo.



Estrutura do diamante

Estrutura do cuarzo

Estrutura do grafito

Dada a fortaleza deste enlace os sólidos covalentes teñen:

- . Gran dureza.
- . Puntos de fusión e ebulición moi altos.

- . Son insolubles en todo tipo de disolventes.
- . Son malos conductores pois non teñen electróns nin ións libres.

Unha excepción a estas propiedades é o grafito que forma estrutura por capas (nas que cada átomo de carbono, con hibridación  $sp^2$ , está unido aos demais con enlaces  $\sigma$ , formando un mosaico de hexágonos), o que o fai máis brando, e condutor porque cada átomo de carbono achega un electrón a un macroenlace  $\pi$  moi deslocalizado, formado por solapamento dos orbitais “p” que non hibridaron.

### **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 moleculares que estabilizan as moléculas con forzas de Van der Waals.
- . Son malas condutoras porque non teñen cargas libres, aínda que as moléculas polares posúen parcial condutividade.
- . As substancias polares son solubles en disolventes polares, que as estabilizan por forzas de atracción dipolo-dipolo, e teñen maiores puntos de fusión e ebulición ao existir atraccións electrostáticas entre as súas moléculas.

## **9.- Enlace metálico.**

É o que forman os metais. É un enlace bastante forte. Os átomos dos metais caracterízanse por ter poucos electróns na súa última capa e non forman enlaces covalentes, xa que compartindo electróns non adquiren a estrutura de gas nobre. Forman, pois un enlace no que conseguen a estabilidade, compartindo os electróns de valencia de xeito colectivo, formando unha nube electrónica que rodea a todo o conxunto de ións positivos, empaquetados ordenadamente, formando unha estrutura cristalina de alto índice de coordinación.

Existen dous modelos que o explican:

### **9.1. Modelo de nube electrónica.**

Cada átomo de metal achega os seus electróns de valencia a unha especie de fondo común co que se produce unha deslocalización destes. A estrutura do metal podería considerarse como catións formando os nodos da estrutura cristalina estabilizados por unha "nube de electróns" que evita a repulsión entre estes.

### **9.2. Teoría de bandas.**

Baséase na teoría de orbitais moleculares pola cal ao enlazarse os átomos se forman tantos orbitais moleculares como orbitais atómicos había. Se se combinan infinidade de orbitais atómicos de igual enerxía formaríanse dúas bandas formadas por orbitais moleculares de moi parecida enerxía, unha de menor enerxía formada polos orbitais moleculares enlazantes (banda de valencia) e a outra de maior enerxía polos antienlazantes (banda de condución). O modelo de bandas vén avalado polos



espectros de emisión. As liñas nos espectros de emisión dos metais en estado gasoso transfórmanse en bandas no caso de metais en estado sólido.

Nos metais ambas as dúas bandas están moi xuntas, de maneira que os electróns saltan con moita facilidade da banda de valencia á de condución por onde circulan con gran facilidade a través de todo o cristal metálico. Se a diferenza de enerxía entre ambas as dúas bandas, é maior teremos os semicondutores, substancias ás que subministrando esa pequena cantidade de enerxía pasan a conducir con facilidade. Se a diferenza de enerxía é maior, teremos as substancias illantes.

## **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. Se se aplica o modelo de bandas, pode supoñerse que a banda baleira (de condución) está moi próxima á banda onde se encontran os electróns de forma que cunha mínima enerxía estes saltan e se encontran cunha banda de condución libre.

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).