

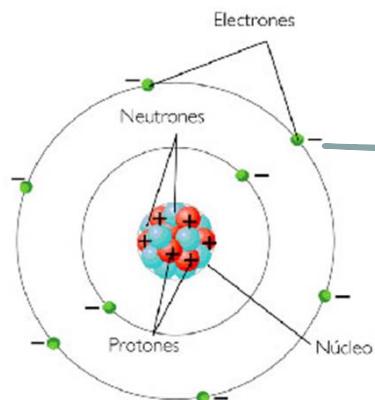
Tema 2. Estructura atómica y enlace químico

- 1. Estructura electrónica de los átomos**
- 2. El enlace químico**
 - 2.1. Energía de enlace**
 - 2.2. Longitud de enlace y ángulos de enlace**
 - 2.3. Electronegatividad**
 - 2.4. Momento dipolar de enlace**
 - 2.5. Curva de energía potencial de enlace**
- 3. Tipos de enlace**
 - 3.1. Enlace covalente y estructura molecular**
 - 3.2. Enlace iónico y compuesto iónicos**
 - 3.3. Enlace metálico y sus propiedades**
- 4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares**
- 5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales**
- 6. Polímeros**

1. Estructura electrónica de los átomos

Las reacciones químicas consisten en la recombinación de electrones entre átomos para romper unos enlaces y formar otros nuevos.

El comportamiento de los electrones en átomos y moléculas no puede ser descrito mediante la mecánica clásica



Según la mecánica clásica, los electrones en órbita están sometidos a aceleración y en esa situación una partícula cargada emitiría radiación, perdiendo energía y colapsando a los núcleos

La solución surge en el siglo XX con la mecánica cuántica u ondulatoria que reconoce que los electrones tienen propiedades de onda y corpúsculo (**dualidad onda-corpúsculo**).

1. Estructura electrónica de los átomos

No podemos hablar de trayectoria de los electrones. Todo lo que podemos conocer del electrón queda recogido en la **función de onda**: función obtenida de la solución de la **ecuación de Schrödinger** (el equivalente cuántico de las ecuaciones de movimiento newtonianas).

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

Diagrama que muestra la ecuación de Schrödinger. Los términos están etiquetados con burbujas:

- Hamiltoniano
- Función de onda
- Energía

El cuadrado de la función de onda nos informa de la probabilidad de encontrar al electrón en una determinada región del espacio (dentro del átomo o molécula que esté bajo estudio)

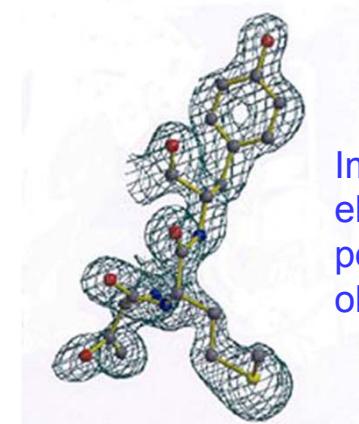
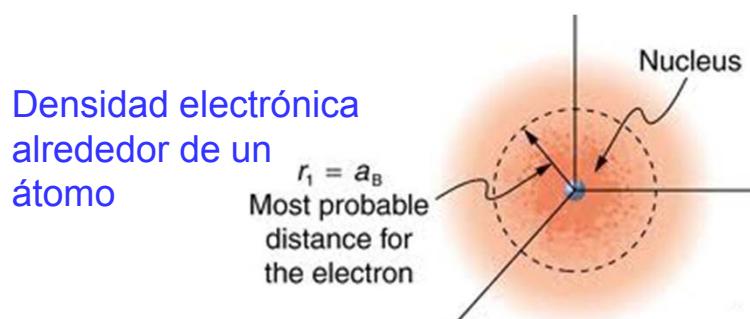


Imagen de densidad electrónica de una porción de proteína obtenida por Rayos X

1. Estructura electrónica de los átomos

La configuración electrónica de un átomo es la distribución de sus electrones alrededor del núcleo.

La configuración electrónica se construye a partir de los **orbitales atómicos**, funciones matemáticas que describen el comportamiento de los electrones (la función de onda del electrón en el átomo). Nos informa de en qué regiones es más probable encontrar al electrón

Los orbitales atómicos se clasifican por su tamaño y orientación:



1s orbital

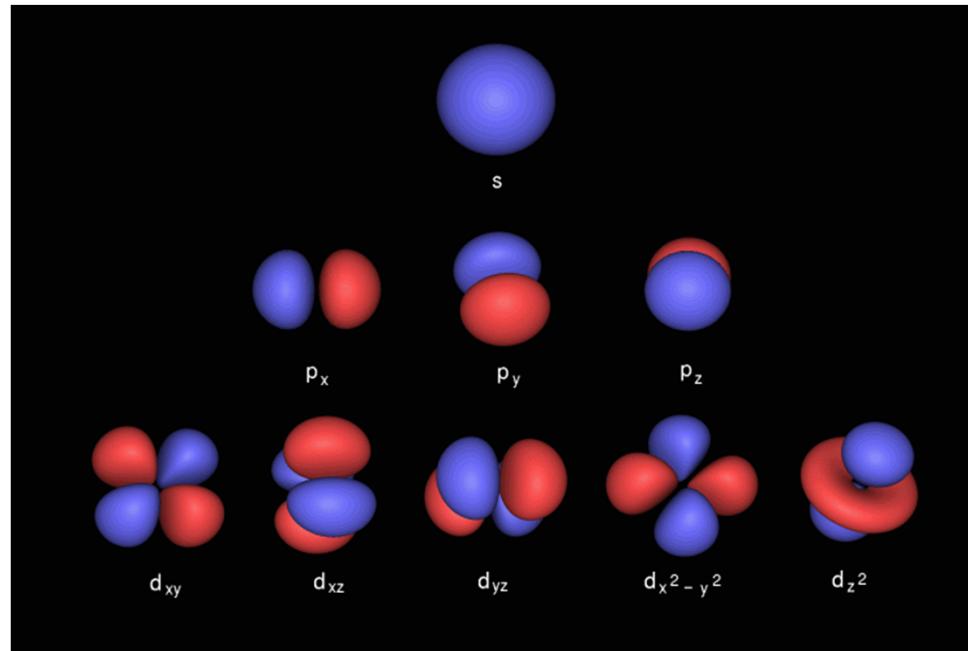
2s orbital

El número o capa se refiere al 'tamaño' del orbital

La letra o subcapa a su geometría
(en este caso esférica)

1. Estructura electrónica de los átomos

Existen diferentes geometrías para los orbitales (s, p, d,...)



Capa 1 → 1s

Capa 2 → 2s, 2p (3 orbitales)

Capa 3 → 3s, 3p (3 orbitales), 3d (5 orbitales)

.....

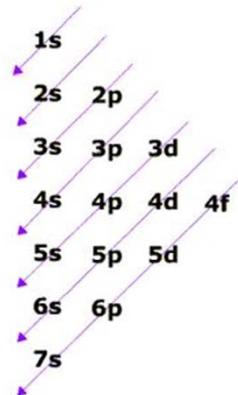
La capa “n” contiene n subcapas con un total de n^2 orbitales

1. Estructura electrónica de los átomos

1. Los electrones de un átomo ocupan los orbitales de forma que minimicen la energía del átomo

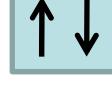
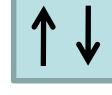
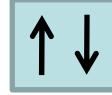
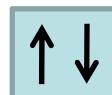
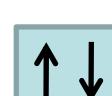
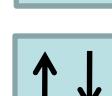
Orden de llenado: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s,

ORDEN DE LLENADO
DE LOS ORBITALES



2. En cada orbital pueden situarse un máximo de 2 electrones (ppio de exclusión de Pauli)
3. Si hay orbitales de idéntica energía disponibles (ej: los 3 orbitales 2p) los electrones los ocupan de forma desapareada.

1. Estructura electrónica de los átomos

Elemento	Z	Diagrama de orbitales				Configuración electrónica
		1s	2s	2p	3s	
H	1					$1s^1$
He	2					$1s^2$
Li	3					$1s^2 2s^1$
Be	4					$1s^2 2s^2$
B	5					$1s^2 2s^2 2p^1$
C	6					$1s^2 2s^2 2p^2$
N	7					$1s^2 2s^2 2p^3$
O	8					$1s^2 2s^2 2p^4$

1. Estructura electrónica de los átomos

Elemento	Z	Diagrama de orbitales	Configuración electrónica
F	9	1s 2s 2p 3s ↑↓ ↑↓ ↑↓↑↓↑	1s ² 2s ² 2p ⁵
Ne	10	1s 2s 2p 3s ↑↓ ↑↓ ↑↓↑↓↑↓	1s ² 2s ² 2p ⁶
Na	11	1s 2s 2p 3s ↑↓ ↑↓ ↑↓↑↓↑↓ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹

Octeto completo:
configuración muy estable

La configuración electrónica determina la afinidad de cada átomo por captar o ceder electrones, dependiendo de la cuál sea la forma más sencilla de alcanzar el octeto completo.

Ejercicio: ¿Cómo es la configuración electrónica del flúor si gana un electrón? ¿Y la del sodio si pierde uno?

1. Estructura electrónica de los átomos

The Periodic Table displays the following information for each element:

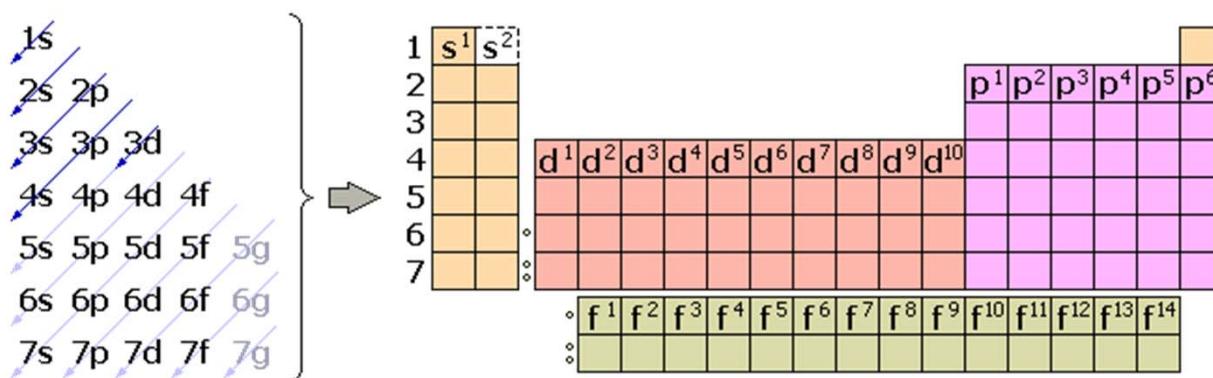
- Atomic number**: The element's position in the sequence.
- Symbol**: The standard one- or two-letter abbreviation for the element.
- Atomic mass**: The relative mass of the element.

The table is organized into groups:

- S Block (Groups 1 and 2)**
- p Block (Groups 13-18)**
- d Block (Groups 3-12)**

Elements are categorized as:

- Metals** (shaded blue)
- Non-metals** (shaded orange)
- Post-transition metals** (shaded green)
- Lanthanides (Ce-Lu)** and **Hafnium (Hf)** (shaded yellow)
- Actinides (Th-Lr)** (shaded grey)



Llenado de orbitales

2. El enlace químico

Se llama **enlace químico** a las fuerzas de unión entre los átomos que forman un compuesto. Cuando dos átomos se enlazan, se redistribuyen los electrones de los átomos de forma que la energía total del conjunto disminuye por debajo de la energía de los átomos separados.



Al aproximarse dos átomos, sus electrones se redistribuyen de acuerdo con la presencia de dos núcleos cargados positivamente

Los tres casos extremos de redistribución de electrones corresponden con los modelos de enlace tradicionales: iónico, el covalente y el metálico

2. El enlace químico

- **Enlace covalente:** considera que los electrones de enlace están esencialmente compartidos entre los dos átomos
- **Enlace iónico:** considera que uno de los dos átomos ha cedido sus electrones al otro, estableciéndose una atracción electrostática entre las entidades catiónica (carga positiva) y aniónica (carga negativa) formadas
- **Enlace metálico:** Asume que los electrones de enlace están absolutamente deslocalizados en la red cristalina, permitiendo un enlace entre los átomos metálicos a larga distancia.

Sin embargo, la mayoría de las situaciones de enlace reales se describen mejor considerando una situación intermedia iónica-covalente-metálica.

2.1. La energía de enlace

Energía de enlace

- Energía que se desprende cuando se forma un enlace (cambiada de signo)
- Energía necesaria para romper un enlace



$$\left. \begin{array}{l} E_{\text{enlace}} > 0 \\ \\ E_{\text{enlace}} = 435 \text{ kJ/mol} \end{array} \right\}$$

2.2. Longitud y ángulo de enlace

Longitud de enlace: Valor promedio de la distancia entre los núcleos de dos átomos unidos por un enlace

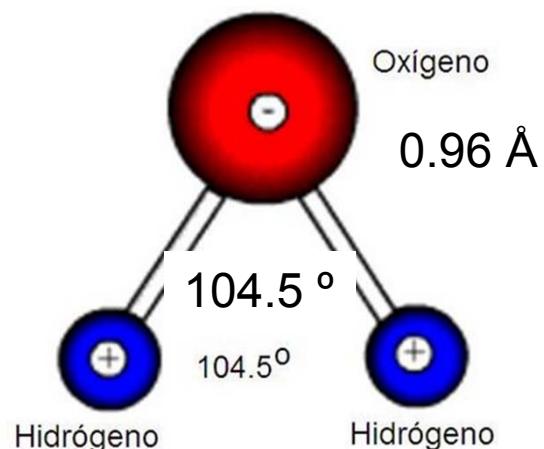
O—H (H_2O) 0.96 Å

C—H (CH_4) 1.095 Å

O—H (H_2O_2) 0.97 Å

C—H (C_2H_4) 1.087 Å

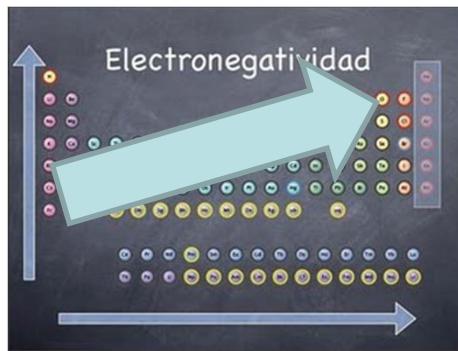
Ángulo de enlace: Valor promedio del ángulo definido por tres núcleos de átomos unidos consecutivamente



2.3. Electronegatividad

Las diferentes afinidades de los átomos por los electrones de una molécula se definen mediante el término de electronegatividad (EN)

Pauling (1901-1994) introdujo una escala de 0.7 (Fr) hasta 4.0 (F)



Si un átomo tiene una gran tendencia a atraer electrones se dice que es muy electronegativo (elementos cercanos al Fluor en la tabla periódica) y si su tendencia es a perder esos electrones se dice que es muy electropositivo (como los elementos alcalinos, 1^a columna de la tabla periódica)

Cuando en un enlace se unen dos átomos de distinta electronegatividad, aparece una separación de cargas ya que los electrones se acercan hacia el más electronegativo

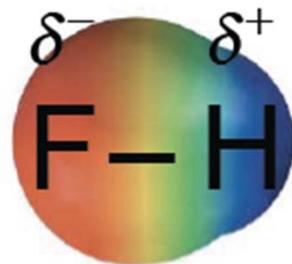


2.4. Momento dipolar de enlace

Momento dipolar de enlace

Cuando se combinan dos átomos de diferente electronegatividad para formar un enlace, los electrones puestos en común no se distribuyen por igual. Los electrones implicados en el enlace tendrán una mayor tendencia a estar próximos al átomo más electronegativo

La EN del átomo de flúor es mayor que la del átomo de hidrógeno. Por eso cuando se combinan para formar HF los electrones se acercan más al flúor que al hidrógeno.



La distribución asimétrica de cargas provoca la aparición de un dipolo eléctrico

2.4. Momento dipolar de enlace

Momento dipolar de enlace

$$\vec{\mu} = q \cdot \vec{r}$$

- q es la carga del sitio positivo (en Coulombios en el SI)
- r es la distancia entre los centros de las cargas (en metros en el SI)
- El momento dipolar es un vector dirigido de la carga positiva hacia la negativa



Molécula	Momento dipolar (D)
H-H	0
H-I	0.42
H-Br	0.79
H-Cl	1.03
H-F	1.91

(1 Debye = $3.33 \cdot 10^{-30}$ C·m)

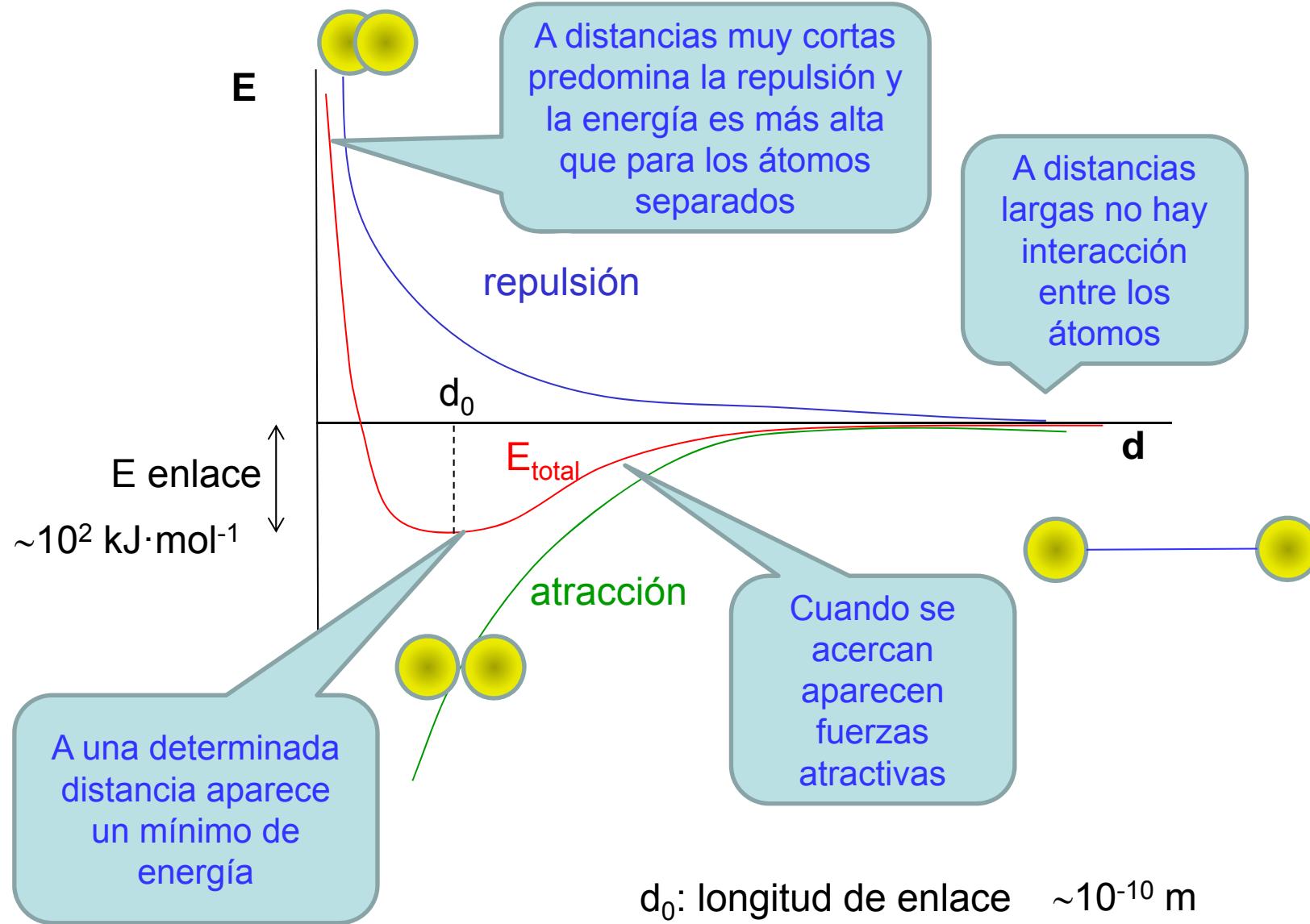
2. 5. Curva de energía potencial de enlace

Variación energética que tiene lugar cuando cambia la distancia entre los átomos que forman el enlace

Fuerzas que aparecen

- **Fuerzas de atracción** entre el núcleo de cada átomo y los electrones del otro. Se deben a la capacidad de deslocalización de la densidad electrónica entre los dos átomos. Predominan a largas distancias
- **Fuerzas de repulsión** Se deben fundamentalmente a la proximidad entre cargas del mismo signo (electrón-electrón o núcleo-núcleo). Predominan a cortas distancias

2.5. Curva de energía potencial de enlace



3. Tipos de enlace

Enlace iónico: Transferencia de electrones entre un elemento electronegativo y otro electropositivo (Fuerzas electrostáticas)

- Sólidos iónicos (NaCl)

Enlace covalente: Compartición de electrones entre elementos electronegativos (no metálicos)

- Moléculas (O_2) y sólidos moleculares (Hielo)
- Sólidos covalentes (diamante)

Enlace metálico: Compartición de electrones entre elementos electropositivos

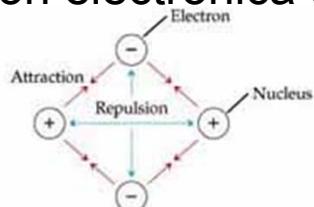
- Metales (Ag, Au)

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

El **enlace covalente** se forma por compartición de pares de electrones entre dos átomos

Normalmente aparece entre átomos de elementos no metálicos cuyas electronegatividades no sean muy diferentes.

Ejemplo: la molécula de H_2 se forma cuando los dos átomos de H se acercan. La densidad electrónica se redistribuye debido a las interacciones electrostáticas (electrón-electrón y electrón-núcleo). La densidad electrónica aumenta en la región internuclear, compartiendo un par de electrones al que cada átomo aporta uno. De esta forma cada átomo de H se ve ‘rodeado’ de dos electrones, alcanzando la configuración electrónica del gas noble más cercano



Interacciones electrostáticas en H_2

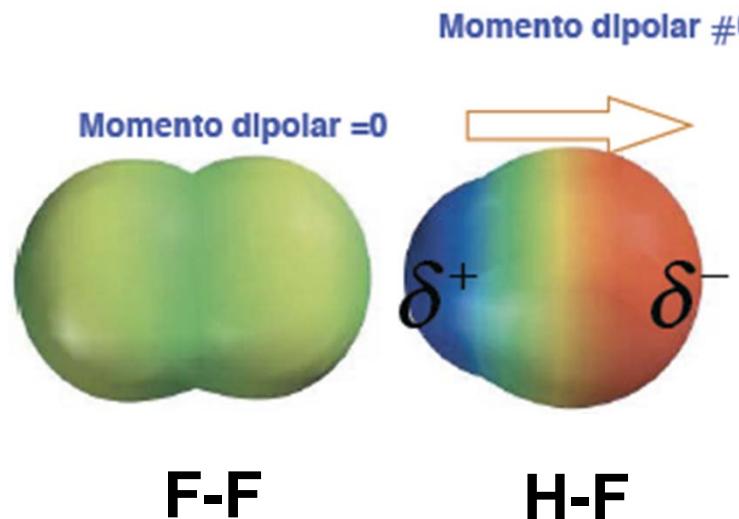


Densidad electrónica en H_2

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

La compartición de electrones sólo puede ser equitativa en moléculas **homonucleares**: H₂, F₂, O₂,

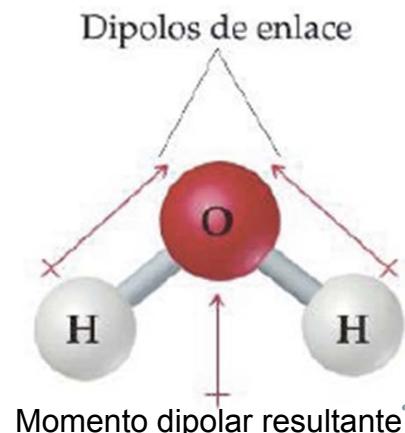
En moléculas **heteronucleares** los electrones se distribuyen de forma asimétrica y tenemos un **enlace covalente polar**



La polaridad del enlace aumenta con la diferencia de electronegatividad. Si esta es muy grande el átomo más electronegativo puede quedarse con el par de electrones quedando cargado negativamente (anión) mientras que el otro átomo queda cargado positivamente (catión). Entonces se habla de enlace iónico

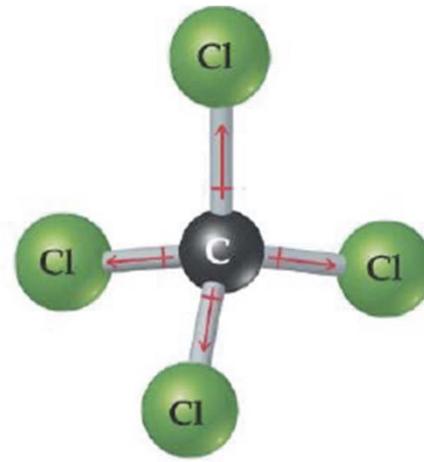
3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Es importante distinguir entre la polaridad de un enlace y la polaridad de una molécula. Una molécula formada por enlaces polares puede ser o no polar:



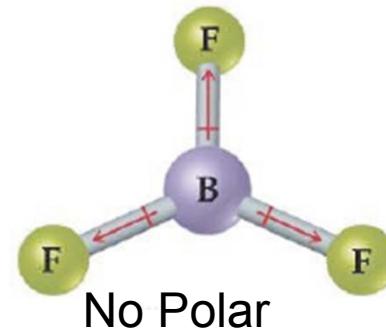
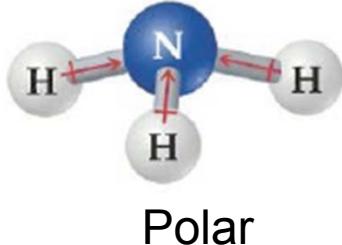
Polar

La polaridad del agua determina alguna de sus propiedades como la capacidad de disolver algunas sales



No Polar

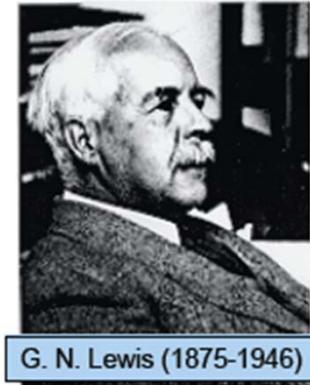
Los dipolos de enlace son vectores y para sumarlos hay que tener en cuenta la geometría molecular



3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Teoría de Lewis del enlace covalente

- En el enlace químico sólo intervienen los electrones de las capas externas de los átomos (capas de valencia)
- El enlace covalente se forma por compartición de pares de electrones
- El número de pares compartidos define el orden o multiplicidad del enlace



G. N. Lewis (1875-1946)

Los electrones se comparten de forma que los átomos adquieran configuraciones electrónicas particularmente estables, normalmente la de gas noble.

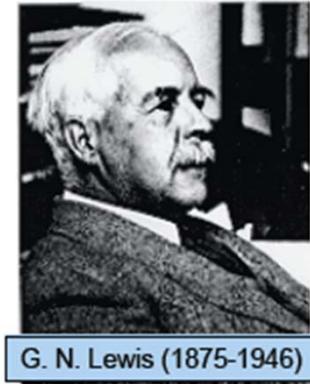
Regla del octeto:

“Los átomos se unen entre si compartiendo pares de electrones, en un intento de adquirir una capa electrónica exterior de ocho electrones similar a la de los gases nobles.”

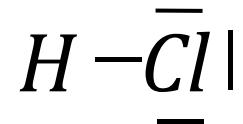
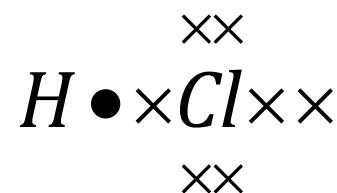
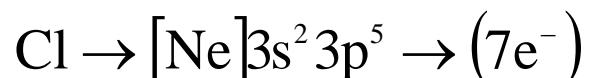
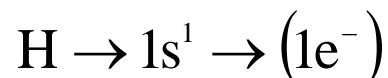
3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Símbología de Lewis

- Se utiliza el símbolo del átomo rodeado de puntos
- Los puntos representan los electrones de valencia
- Se pueden diferenciar los electrones provenientes de uno u otro átomo utilizando puntos y otros símbolos
- Un par de electrones se puede representar por una raya



G. N. Lewis (1875-1946)



3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Una estructura de Lewis es una representación convencional de la distribución de electrones alrededor de cada uno de los átomos de una molécula, según el modelo del enlace por pares de electrones.

orbitales	2s	2p		
F: [He]	↑↓	↑↓	↑↓	↑
O: [He]	↑↓	↑↓	↑	↑
N: [He]	↑↓	↑	↑	↑
orbitales	1s			
H:	↑			

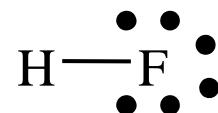
HF

$$\text{Electr. Necesarios } N = 2 \times 1(\text{H}) + 8 \times 1(\text{F}) = 10$$

$$\text{Electr. Disponibles } D = 1 \times 1(\text{H}) + 7 \times 1(\text{F}) = 8$$

$$\text{Electr. Compartir } C = N - D = 2 \text{ (1 par de electrones)}$$

Solución



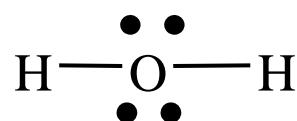
H_2O

$$\text{Electr. Necesarios } N = 2 \times 2(\text{H}) + 8 \times 1(\text{O}) = 12$$

$$\text{Electr. Disponibles } D = 1 \times 2(\text{H}) + 6 \times 1(\text{O}) = 8$$

$$\text{Electr. Compartir } C = N - D = 4 \text{ (2 par de electrones)}$$

Solución



orbitales	2s	2p		
C: [He]	↑↓	↑	↑	
$\text{C}^*: [\text{He}]$	↑	↑	↑	↑

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Una estructura de Lewis es una representación convencional de la distribución de electrones alrededor de cada uno de los átomos de una molécula, según el modelo del enlace por pares de electrones.

orbitales	2s	2p		
F: [He]	↑↓	↑↓	↑↓	↑
O: [He]	↑↓	↑↓	↑	↑
N: [He]	↑↓	↑	↑	↑
orbitales	1s			
H:	↑			

orbitales	2s	2p		
C: [He]	↑↓	↑	↑	
C*: [He]	↑	↑	↑	↑

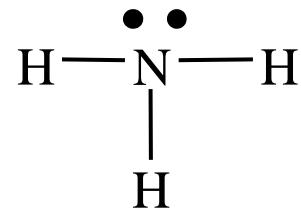


$$\text{Electr. Necesarios N} = 2 \times 3(\text{H}) + 8 \times 1(\text{N}) = 14$$

$$\text{Electr. Disponibles D} = 1 \times 3(\text{H}) + 5 \times 1(\text{N}) = 8$$

$$\text{Electr. Compartir C} = \text{N} - \text{D} = 6 \text{ (3 par de electrones)}$$

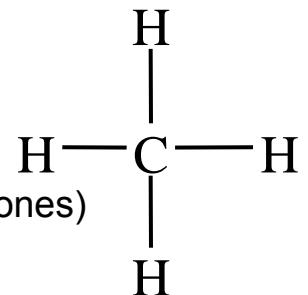
Solución



$$\text{Electr. Necesarios N} = 2 \times 4(\text{H}) + 8 \times 1(\text{C}) = 16$$

$$\text{Electr. Disponibles D} = 1 \times 4(\text{H}) + 4 \times 1(\text{C}) = 8$$

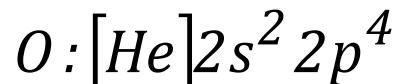
$$\text{Electr. Compartir C} = \text{N} - \text{D} = 8 \text{ (4 par de electrones)}$$



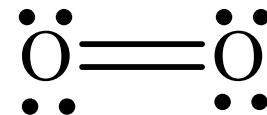
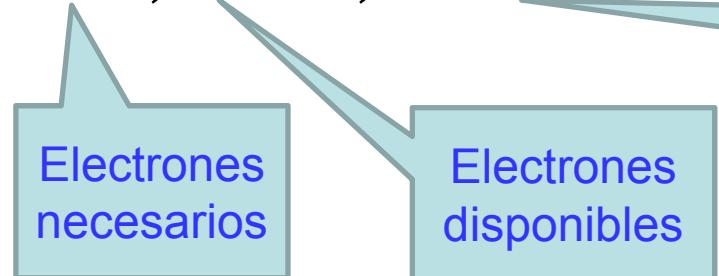
Solución

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

-Algunas moléculas requieren dos pares de electrones de enlace entre sus átomos constituyentes (doble enlace): Ej. O₂



$$N = 2 \cdot 8; D = 2 \cdot 6; C = 4$$

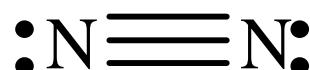


Electrones
a compartir

-Tres pares de electrones entre dos átomos de una molécula se describe como un triple enlace:

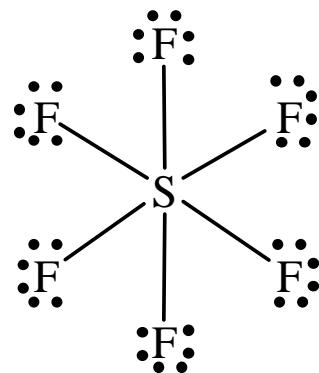


$$N = 2 \cdot 8; D = 2 \cdot 5; C = 6$$

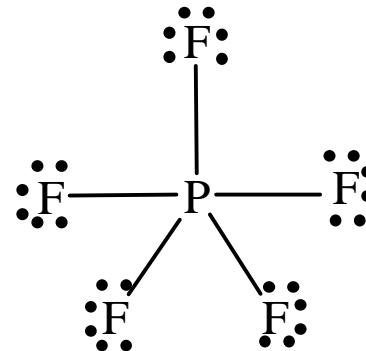


3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Moléculas hipervalentes: contienen átomos con más de un octeto de e-



S: 6 pares e-



P: 5 pares e-



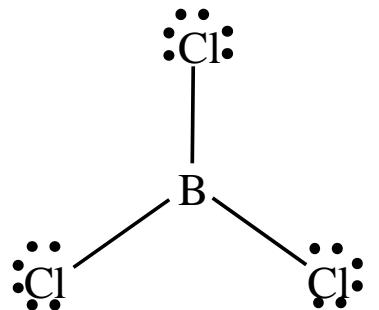
Debemos considerar los orbitales “d”

orbitales	s	p			d			
S*: [Ne]	↑	↑	↑	↑	↑	↑		
P*: [Ne]	↑	↑	↑	↑	↑			

Las moléculas hipervalentes pueden aparecer a partir del tercer período

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Moléculas hipovalentes: contienen átomos con menos de cuatro pares de e-

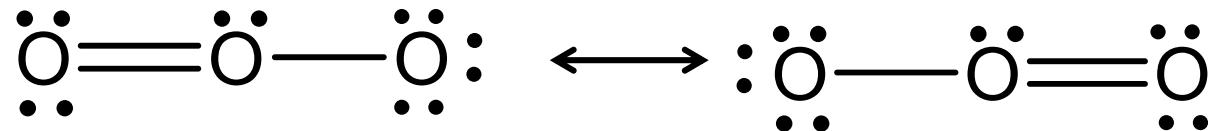


El B tiene 3 pares de e- a su alrededor



Resonancia

-Para la molécula de ozono (O_3) tenemos dos posibilidades:



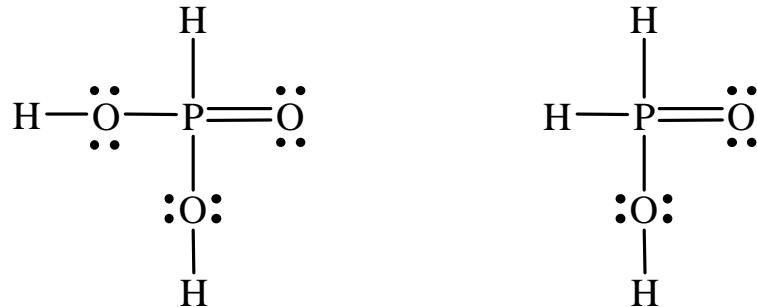
-Experimentalmente las dos distancias O-O son iguales (127.8 pm): mayor que un enlace doble O=O y menor que un enlace sencillo O-O

-La verdadera estructura es un híbrido de ambas

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Reglas para escribir las estructuras de Lewis

- 1- El elemento menos EN suele ser el átomo central, excepto H.
- 2- Los átomos de O no se enlazan entre ellos.
Excepciones: O₂, O₃, peróxidos y superóxidos
- 3- En los ácidos oxiácidos el H suele unirse al O, y no a los átomos centrales.
Excepciones: H₃PO₃ y H₃PO₂

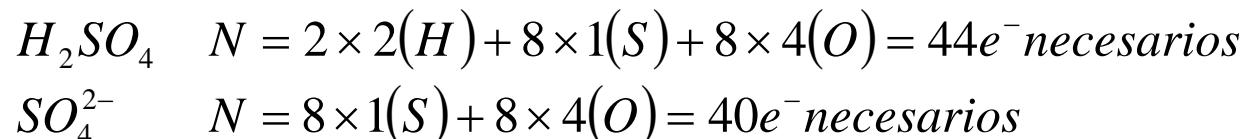


- 4- Los átomos de C tienden a unirse entre ellos.
- 5- La disposición de átomos se realiza del modo más simétrica posible

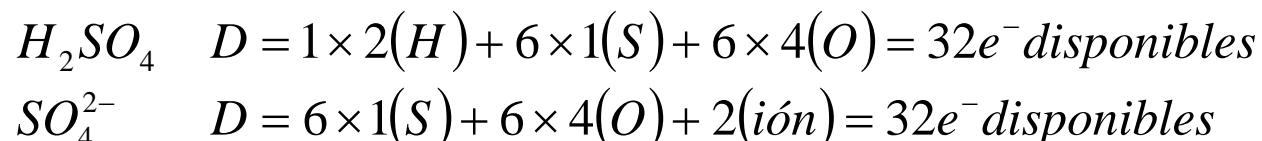
3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Reglas para escribir las estructuras de Lewis

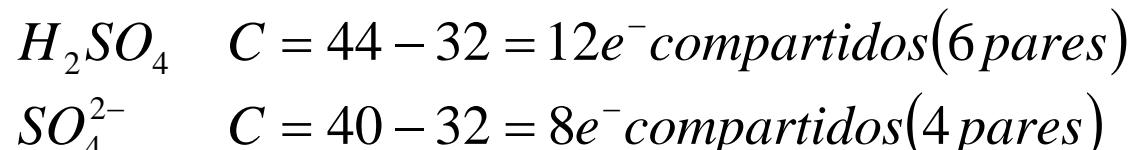
6- Se calcula el número de e- de valencia (N) que se requieren para adquirir la configuración de gas noble:



7- Se calcula el número de e- disponibles de todos los átomos. Si tenemos un ión hemos de sumar el nº de e- de la carga negativa o restar los de la carga positiva:



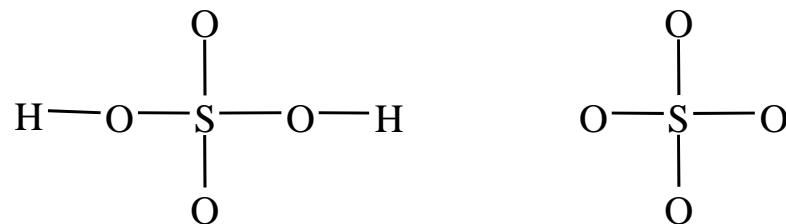
8- Se calcula el número de e- compartidos mediante la diferencia C=N-D:



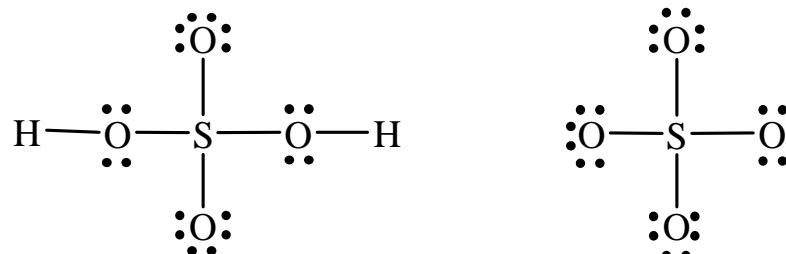
3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Reglas para escribir las estructuras de Lewis

9- Se disponen los e- compartidos en el esqueleto, utilizando enlaces dobles y triples si es necesario:



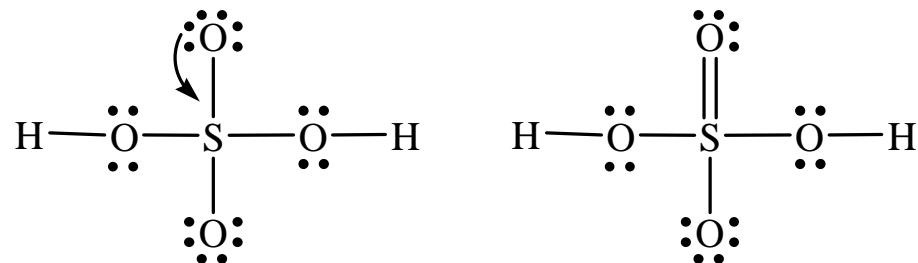
10- Se colocan los e- restantes como pares solitarios completando el octeto de cada átomo:



3.1. Enlace covalente y estructura molecular

Reglas para escribir las estructuras de Lewis

11- Pueden escribirse estructuras de Lewis alternativas promoviendo pares de e- no enlazantes de átomos periféricos a pares enlazantes:



Si el átomo central es del segundo período no podemos violar la regla del octeto

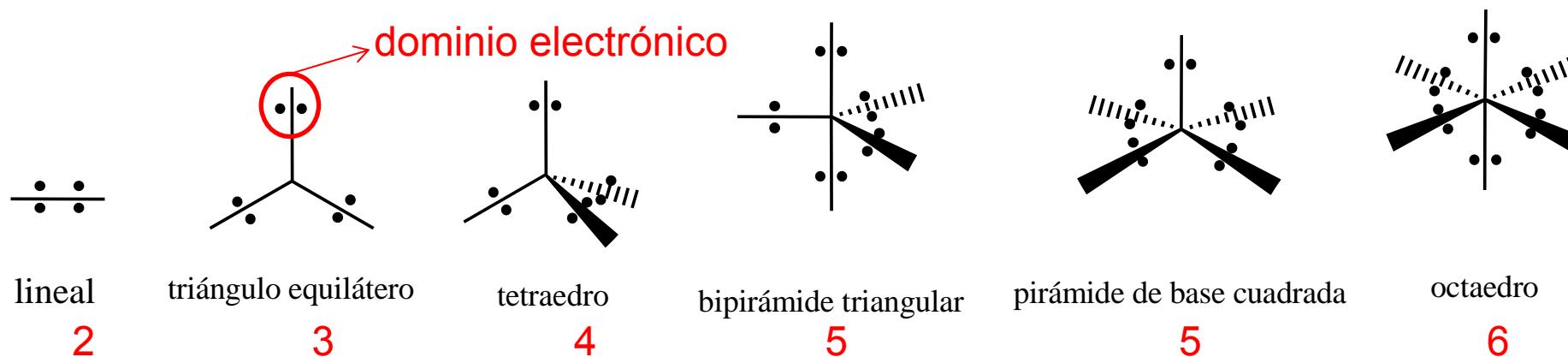
Si el átomo central es del tercer período y sucesivos, el nº de pares de e- a su alrededor puede exceder de 4.

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

El modelo de Lewis no proporciona ninguna información acerca de la geometría de la molécula

La teoría de las repulsiones entre los pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) intenta explicar la geometría basándose en consideraciones electrostáticas:

Gillespie: “En un conjunto de N cargas eléctricas puntuales, iguales y situadas a la misma distancia de un punto fijo (origen de coordenadas), la disposición espacial de mínima energía es la que minimiza las repulsiones electrostáticas.”



3.1. Enlace covalente y estructura molecular

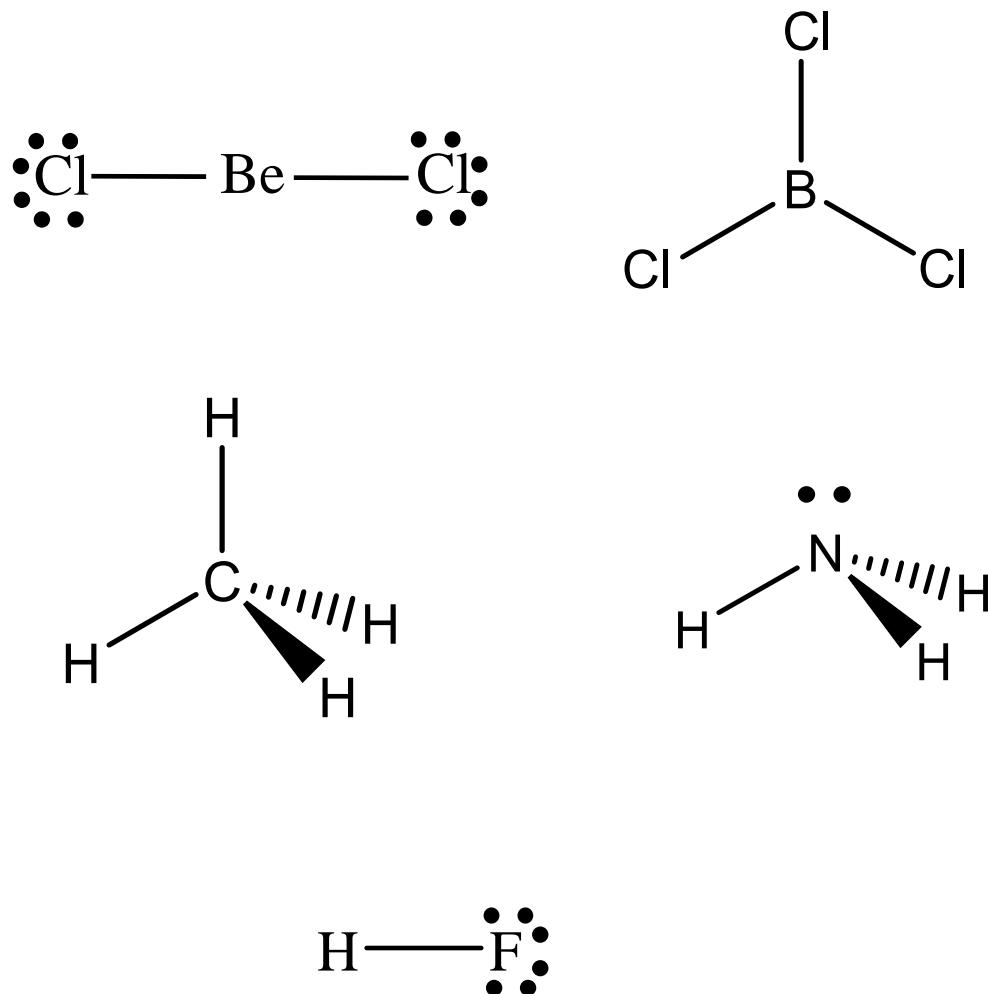
Dominios / Pares de e-	Distribución de los dominios / pares de e-	n	m	AX_n	Forma geométrica	Ejemplos
2	lineal	2	0	AX_2	lineal	$BeCl_2$
3	Plana triangular	3	0	AX_3	Plana triangular	BCl_3
4	tetraédrica	4	0	AX_4	tetraédrica	CH_4
		3	1	AX_3	piramidal	NH_3
		2	2	AX_2	Angular	H_2O
		1	3	AX	lineal	HF

n: nº de pares de e- enlazantes ocupando regiones distintas (los enlaces múltiples cuentan como un dominio)

m: nº de pares de e- no enlazantes

3.1. Enlace covalente y estructura molecular

orbitales	s	p		
F: [He]	↑↓	↑↓	↑↓	↑
O: [He]	↑↓	↑↓	↑	↑
N: [He]	↑↓	↑	↑	↑
C*: [He]	↑	↑	↑	↑
B*: [He]	↑	↑	↑	
Be*: [He]	↑	↑		
Li: [He]	↑			

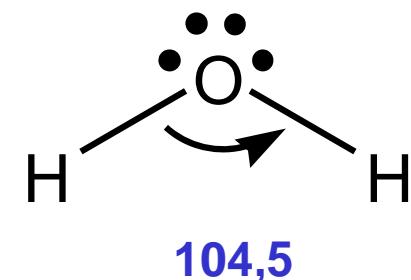
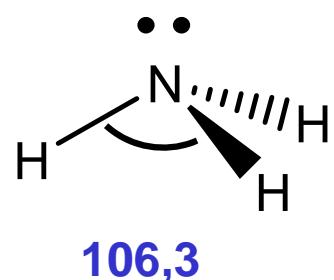
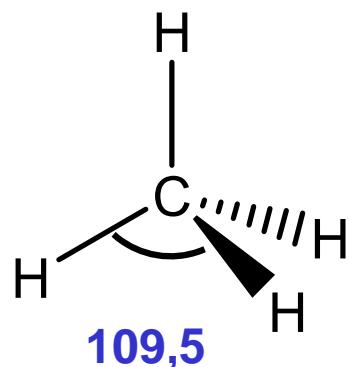


3.1. Enlace covalente y estructura molecular

1- Influencia de los pares de e- no enlazantes:

El dominio de un par de e⁻ no enlazantes ocupa un mayor volumen.

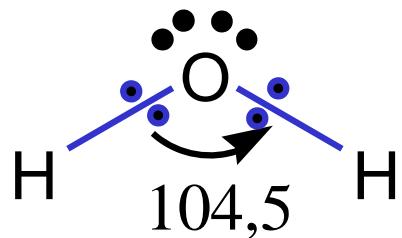
“La repulsión entre dos pares no enlazantes es mayor que la repulsión entre un par no enlazante y un par enlazante, y ésta a su vez mayor que la repulsión entre dos pares enlazantes.”



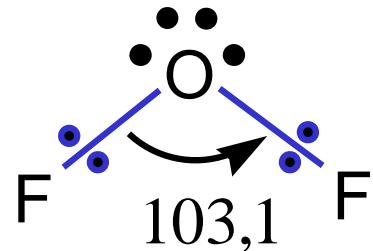
3.1. Enlace covalente y estructura molecular

2- Diferencia de EN entre átomos:

El par e- se encuentra más cerca, por término medio, del átomo más EN



$$EN_F > EN_H$$



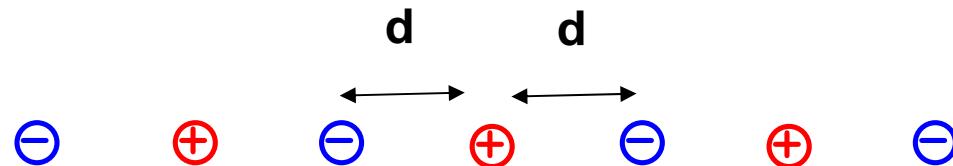
El ángulo F-O-F es más cerrado

3.2. Enlace iónico y compuestos iónicos

- ⌘ Los átomos de casi todos los elementos pueden ganar o perder electrones para dar especies cargadas denominadas *iones*.
- ⌘ Los compuestos formados por iones se conocen como *compuestos iónicos*.
 - Los metales tienden a perder electrones para formar iones cargados positivamente llamados *cationes*.
 - Los no metales tienden a ganar electrones para formar iones con carga negativa denominados *aniones*.

3.2. Enlace iónico y compuestos iónicos

Caso hipotético: Cristal unidimensional formado por un alineamiento de cationes (+ z) y aniones (-z)



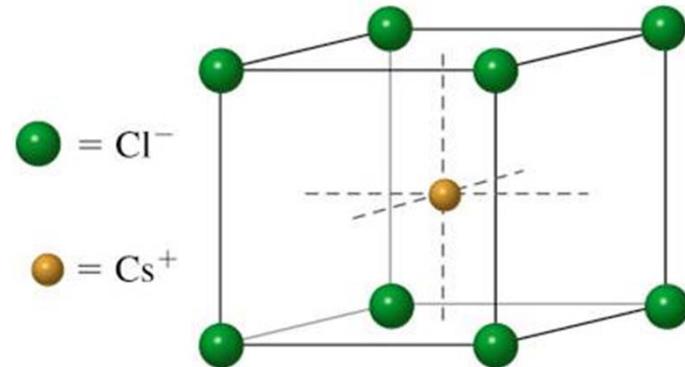
Energía de enlace = Energía electrostática

$$\begin{aligned} E = & -2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_C e||z_A e|}{d_{CA}} - 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_C e||z_A e|}{3d_{CA}} - 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_C e||z_A e|}{5d_{CA}} - \dots \\ & + 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_C e||z_C e|}{2d_{CA}} + 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_C e||z_C e|}{4d_{CA}} + \dots \\ & + 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_A e||z_A e|}{2d_{CA}} + 2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{|z_A e||z_A e|}{4d_{CA}} + \dots \end{aligned}$$

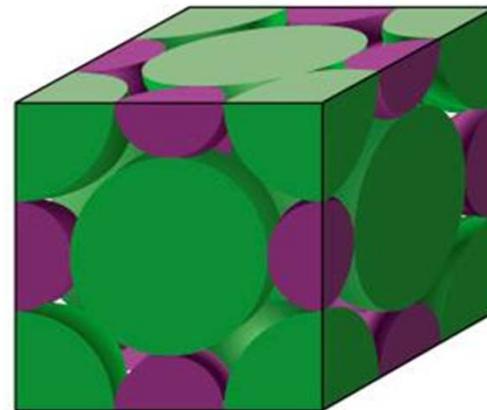
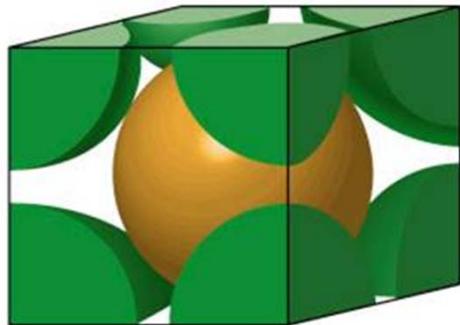
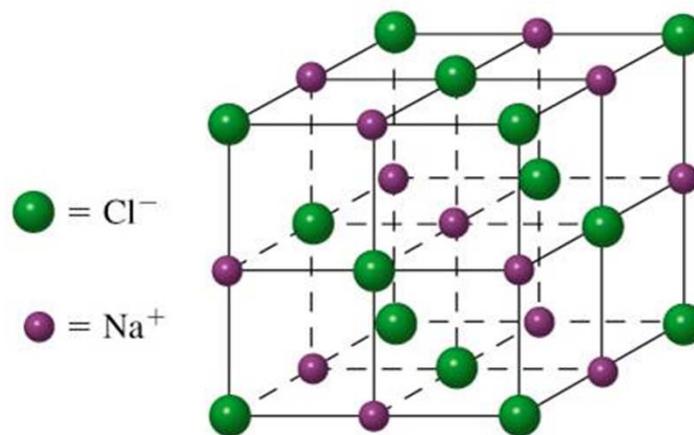
El sólido iónico tiene un contenido energético inferior (es más estable) que el conjunto de sus iones

3.2. Enlace iónico y compuestos iónicos

CsCl

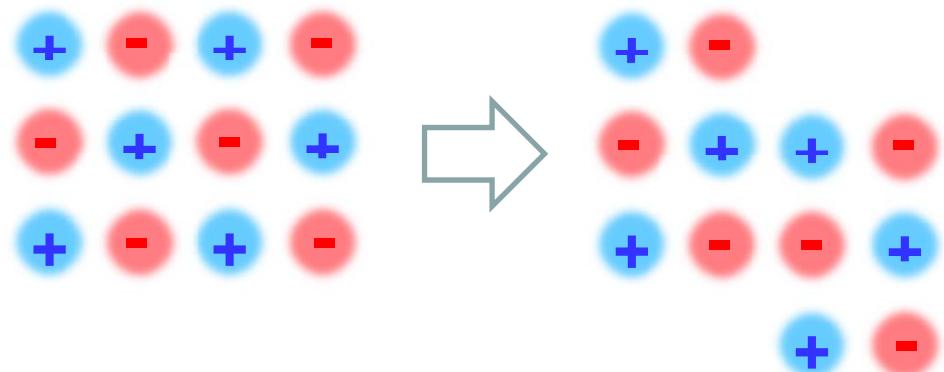


NaCl



3.2. Enlace iónico y compuestos iónicos

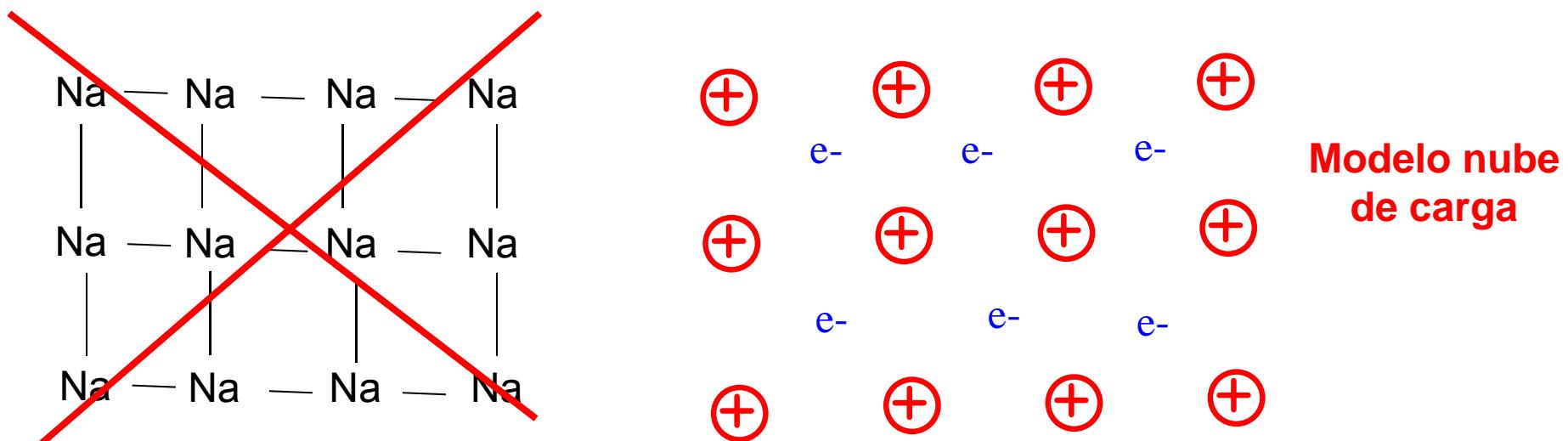
- Formados por un elemento electropositivo y otro electronegativo
- Los átomos (iones) se disponen formando redes cristalinas
- Solubles en agua (formada por moléculas polares que pueden estabilizar los iones) e insolubles en disolventes orgánicos
- Puntos de fusión elevados (debido a las fuertes interacciones electrostáticas)
- Conducen la corriente eléctrica cuando están disueltos o fundidos (los iones pueden desplazarse)
- Frágiles (un desplazamiento en la red provoca la aparición de fuertes repulsiones)



3.3. Enlace metálico y sus propiedades

Enlace metálico: formado entre átomos electropositivos dando lugar normalmente a sólidos cristalinos a T ambiente

- Los átomos se disponen formando redes cristalinas
- El número de electrones es insuficiente para formar enlaces con todos los átomos vecinos



El enlace metálico resulta de la interacción entre el **gas electrónico** y los **átomos** cargados positivamente

3.3. Enlace metálico y sus propiedades

Propiedades físicas: Puntos de fusión

Li 180 °C		
Na 98 °C	Mg 650 °C	Al 660 °C
K 64 °C	Ca 838 °C	
Rb 39 °C	Sr 770 °C	
Cs 29 °C	Ba 725 °C	

Aumenta tamaño del ion 

Aumenta número electrones compartidos 

Explica las tendencias en base al modelo de nube de carga

3.3. Enlace metálico y sus propiedades

Propiedades metales:

Conductividad eléctrica

La conductividad eléctrica de los metales aumenta al disminuir T

Al bajar la temperatura las vibraciones de los cationes que forman la red cristalina son de menor amplitud, la estructura se deforma menos e interfiere menos con el movimiento de los electrones

Conducción del calor

La propagación del calor es rápida en los metales ya que los e^- se pueden desplazar rápidamente de una parte a otra del metal

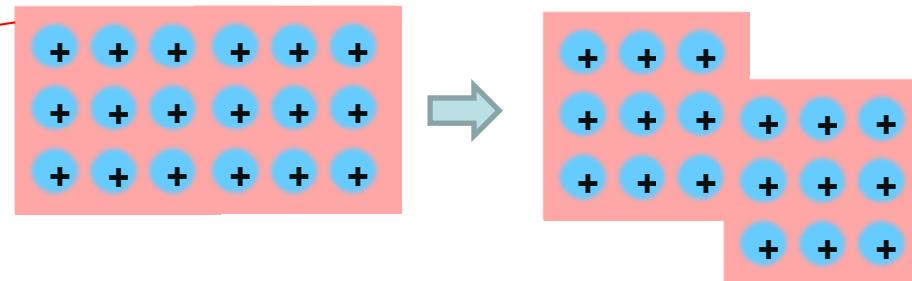
3.3. Enlace metálico y sus propiedades

Propiedades mecánicas

Los metales son dúctiles y maleables

Los átomos del metal puedes desplazarse sin necesidad de romper enlaces

Mar de electrones



Brillo

Los metales tienen un aspecto brillante

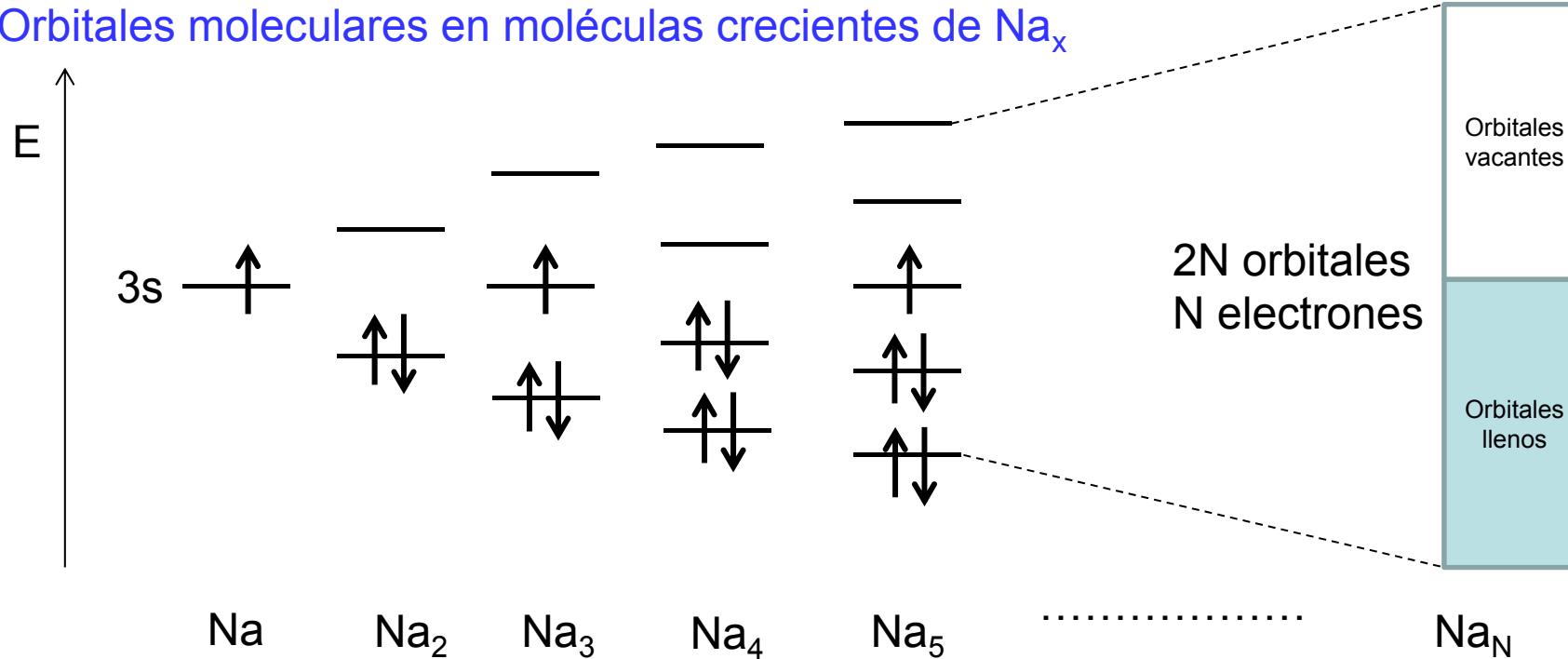
Los metales reflejan la luz ya que los electrones no necesitan absorber radiación visible para excitarse y desplazarse en el interior del metal

3.3. Enlace metálico y sus propiedades

N átomos de Na formando un cristal: Teoría de bandas

Los orbitales atómicos se combinan para formar orbitales moleculares que describen el comportamiento electrónico en la molécula

Orbitales moleculares en moléculas crecientes de Na_x



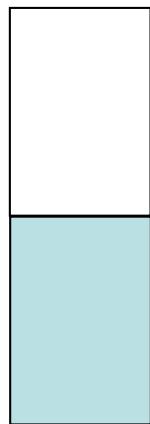
Banda: conjunto de orbitales muy próximos en energía

Banda de valencia: formada por los orbitales y electrones de la capa más alta

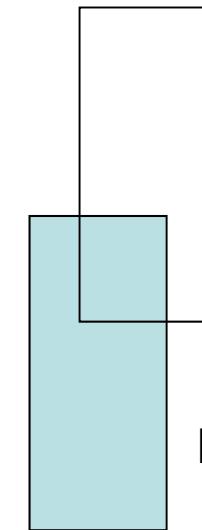
Banda de conducción: una banda parcialmente llena proporciona movilidad a los e⁻ ya que éstos pueden promoverse con facilidad a los orbitales vacantes

3.3. Enlace metálico y sus propiedades

Conductores (metales)



Banda semillena



Banda 2p vacía

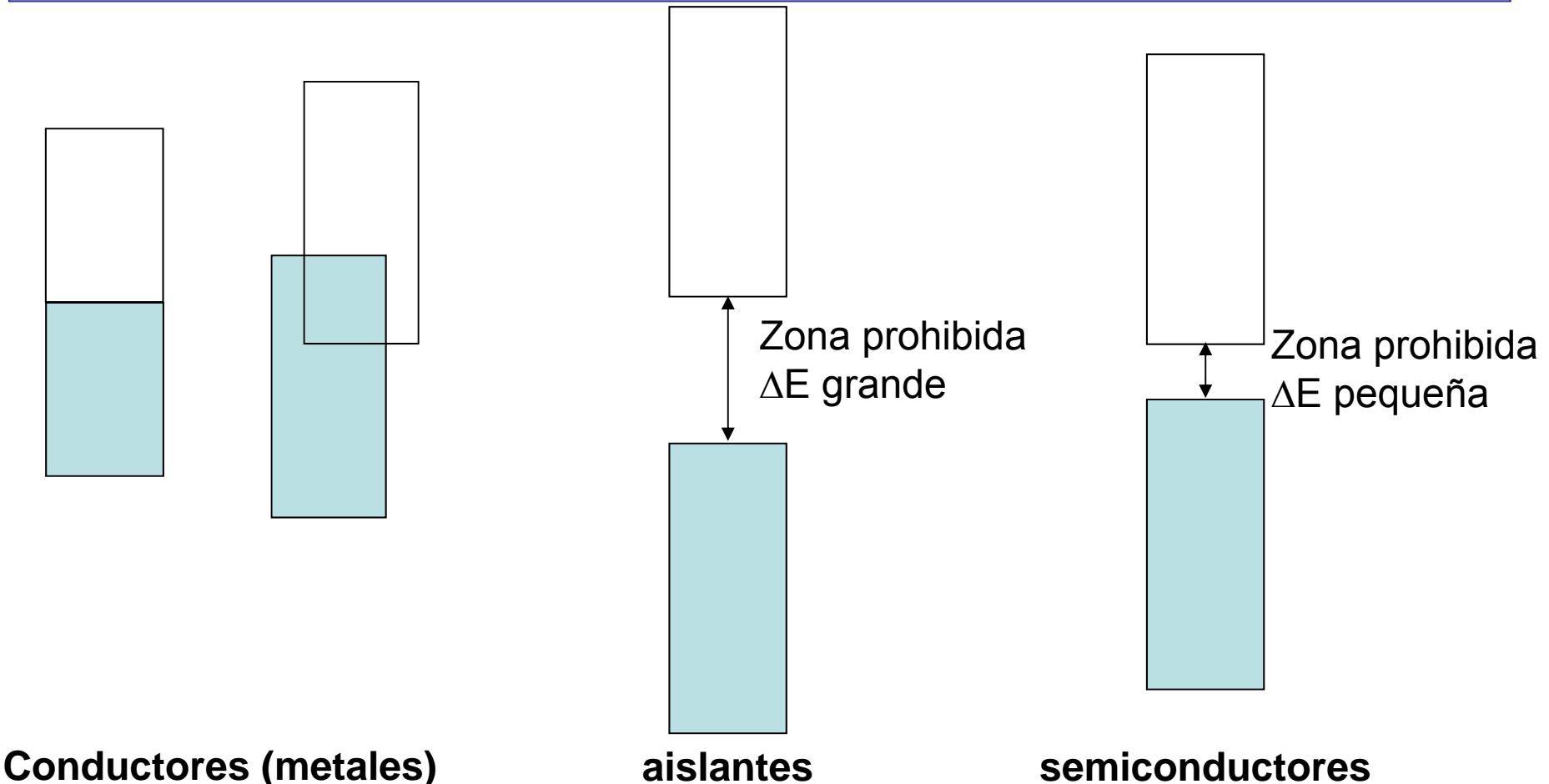
Banda 2s llena

Ejemplo; Na ($3s^1$), Li ($2s^1$)

Ej: Berilio ($2s^2$)

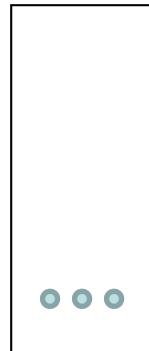
La conducción eléctrica puede deberse a una banda semillena o al solapamiento entre una banda llena y una vacía

3.3. Enlace metálico y sus propiedades



En los semiconductores intrínsecos la energía térmica o la radiación pueden promover el paso de electrones de la banda llena a la vacía, en la cual el desplazamiento de electrones es posible

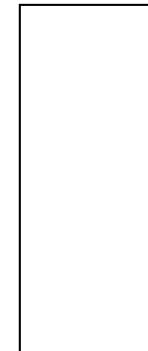
3.3. Enlace metálico y sus propiedades



Ejemplo: Si dopado con P
Los átomos de P (dadores)
ceden electrones a la banda
vacía



Semiconductores tipo n



Ejemplo: Si dopado con Al
Los átomos de Al (aceptores)
toman electrones de la banda
llena, dejando huecos
positivos



Semiconductores tipo p

En los semiconductores extrínsecos se cede una sustancia con átomos diferentes que ceden electrones a la banda vacía (tipo n) o toman electrones de la banda llena, dejando huecos en la misma (tipo p)

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

En condiciones habituales la mayoría de metales y compuestos iónicos son sólidos, debidos a las fuertes interacciones que aparecen entre los átomos.

Los compuestos covalentes (formados por átomos unidos por enlaces covalentes) pueden aparecer de dos formas distintas:

- Como moléculas aisladas que pueden interaccionar entre sí (**sustancia molecular**)
- Formando una red de enlaces covalentes que se extiende formando una gran estructura fuertemente unida (**sólido covalente**)

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

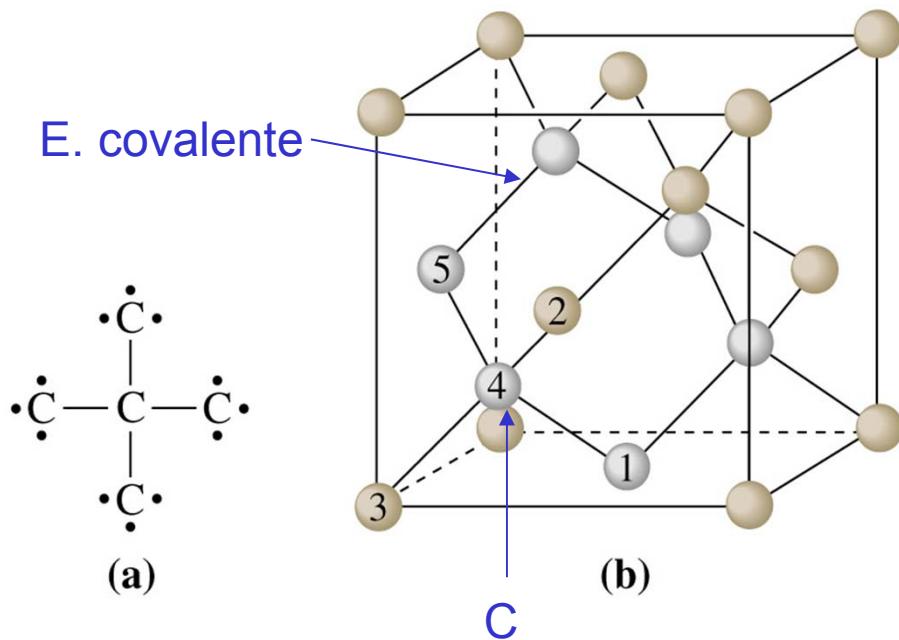
	Sustancias moleculares	Sólidos covalentes
Unidad estructural	molécula	átomo
Enlace entre unidades	Fuerzas intermoleculares	Enlace covalente
Puntos de fusión y ebullición	Bajos	Altos
a P y T ordinarias	Líquidos o gases	sólidos
Ejemplos	O_2 , H_2O	diamante

Molécula: conjunto finito de átomos unidos entre si mediante enlaces covalentes.

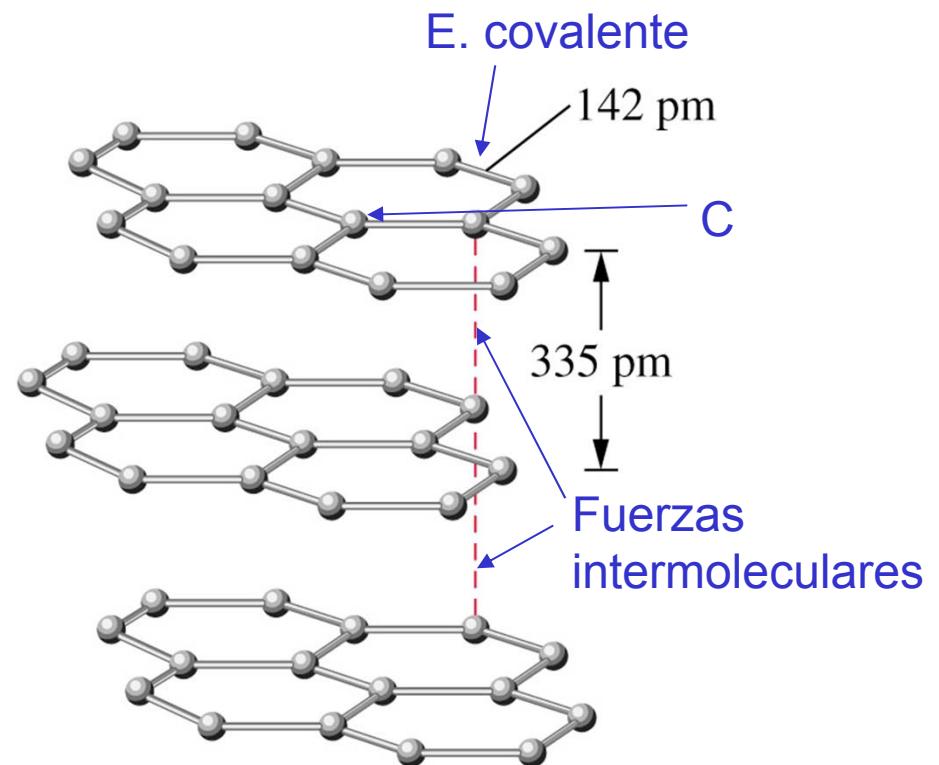
4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Alótropos: formas estructurales diferentes de un elemento.

Diamante



Grafito



Cristalino, transparente, $d=3,53 \text{ g/cm}^3$, elevada dureza, aislante, inerte.

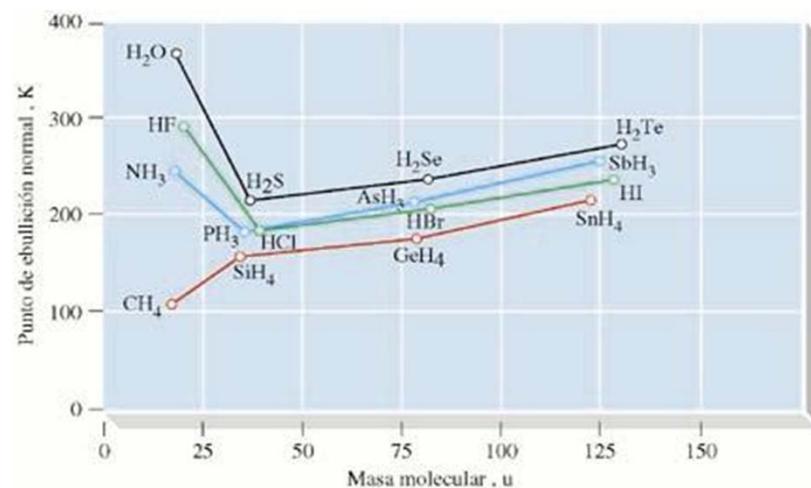
Negro, $d=2,25 \text{ g/cm}^3$, baja dureza, conductor, más reactivo.

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Las sustancias moleculares también pueden condensar formando líquidos o sólidos debidos a las interacciones que aparecen entre moléculas distintas (**fuerzas o interacciones intermoleculares**)

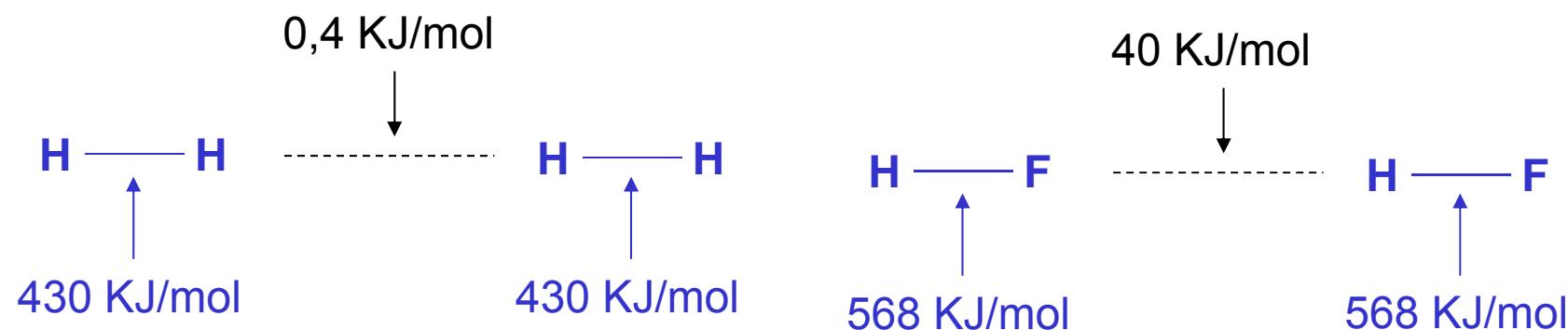
Dependiendo de la magnitud de estas fuerzas será más o menos fácil condensar o solidificar una sustancia molecular.

Así, la temperatura de ebullición (paso de líquido a gas) es una medida de las fuerzas intermoleculares



4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Las moléculas se mantienen unidas por fuerzas intermoleculares. Estas son menos importantes que las fuerzas de enlace, pero pueden ser suficientemente grandes como para vencer su energía cinética y permitir que se mantengan unidas formando sólidos o líquidos



La energía cinética aumenta con la temperatura. La energía cinética promedio a 25° C: 4,8 KJ/mol

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

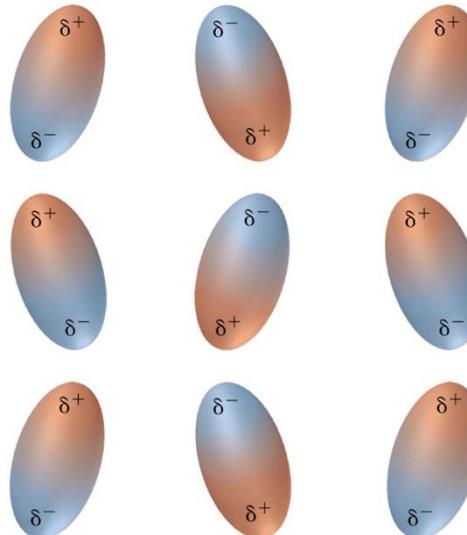
Fuerzas entre	Tipo de interacción	Dependencia de E con d	Descripción
Molécula polar-molécula polar	Dipolo - dipolo		Keesom
Molécula polar-molécula apolar	Dipolo - dipolo inducido	$1/d^6$	Debye o inducción
Molécula apolar-molécula apolar	Dipolo inducido - dipolo inducido		London o dispersión

En general se conocen como fuerzas de Van der Waals

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

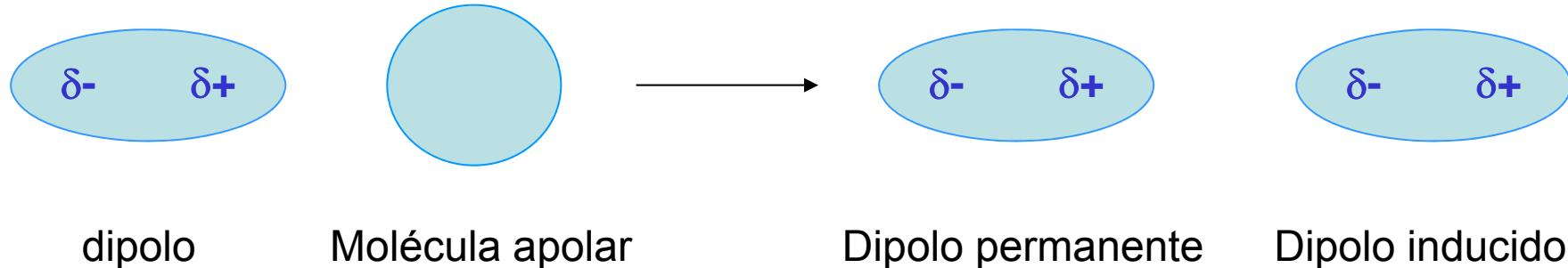
Dipolo - Dipolo

Entre moléculas polares



Dipolo – dipolo inducido

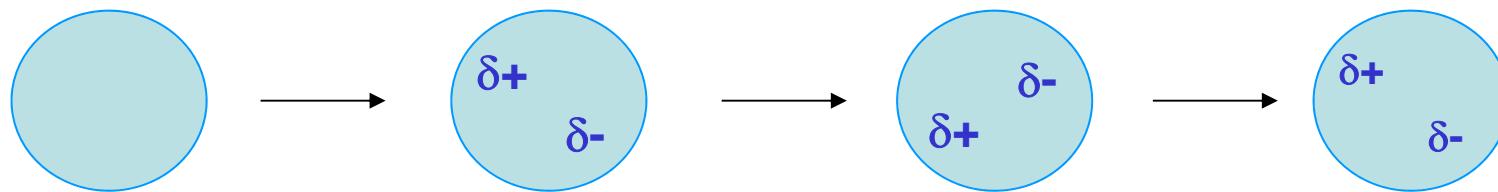
Una molécula polar puede inducir un dipolo en una molécula apolar



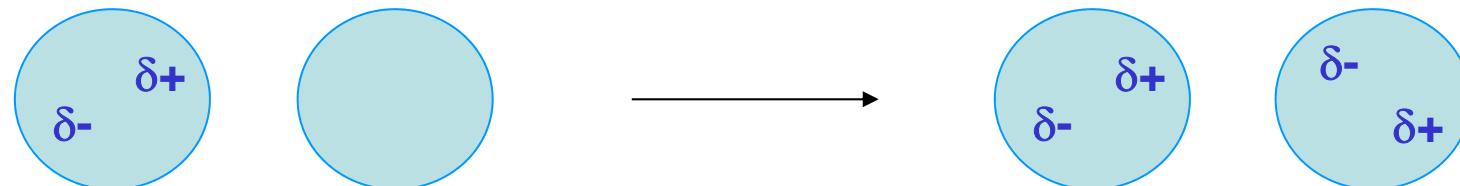
4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Dipolo inducido – dipolo inducido: fuerzas de London

Una molécula apolar (o un átomo) puede poseer un momento dipolar instantáneo, que puede cambiar de magnitud y dirección, debido a fluctuaciones en la densidad electrónica.



El dipolo temporal induce otros dipolos entre las moléculas (o átomos) vecinas e interactúan atractivamente entre si.



Las fuerzas de London aumentan con el número de electrones y por tanto con la masa atómica o molecular.

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Propiedades físicas:

	Pf (°C)
Ne	-248,77
Xe	-140,2

	Pf (°C)
N ₂	-198
NO	-153
H ₂ O	0

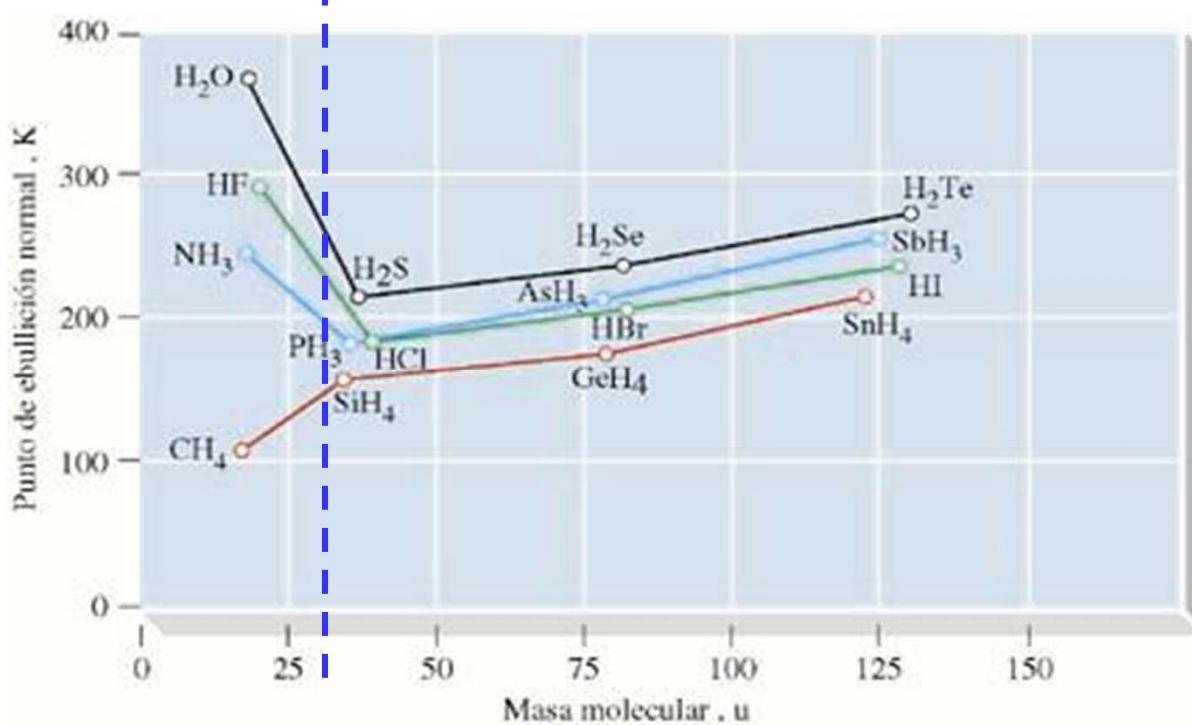
Cuestión: explique estas tendencias

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

Enlace de hidrógeno

Comportamiento 'anómalo':
presentan ptos de ebullición
mayor del esperado

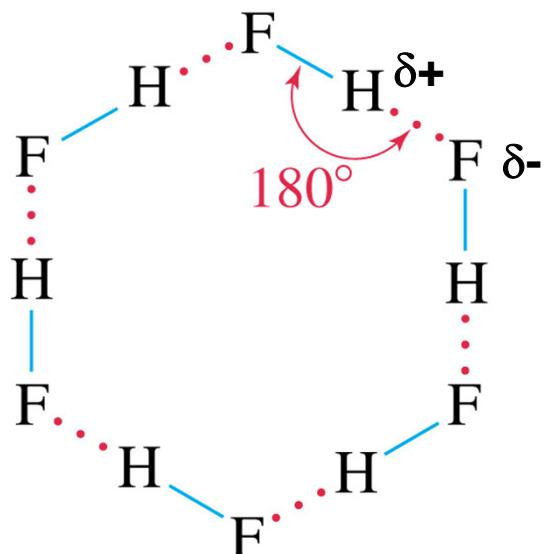
Comportamiento 'normal': el pto de ebullición
aumenta con la masa molecular



4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

- Moléculas polares con átomos de hidrógeno enlazados con elementos muy electronegativos.
- El átomo electronegativo posee pares de electrones no enlazantes.
- Especialmente importantes en moléculas con átomos de F o de O enlazados a H.



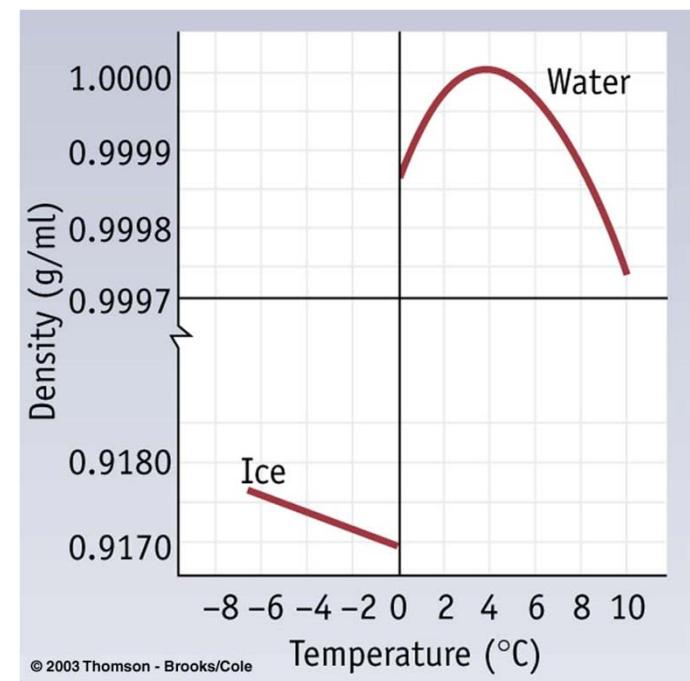
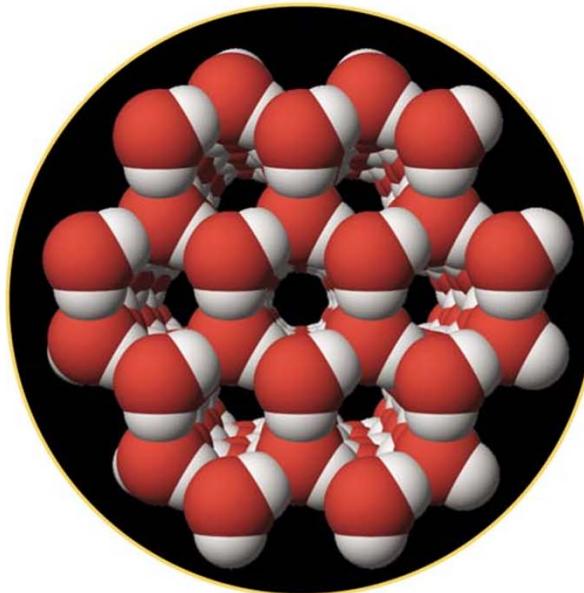
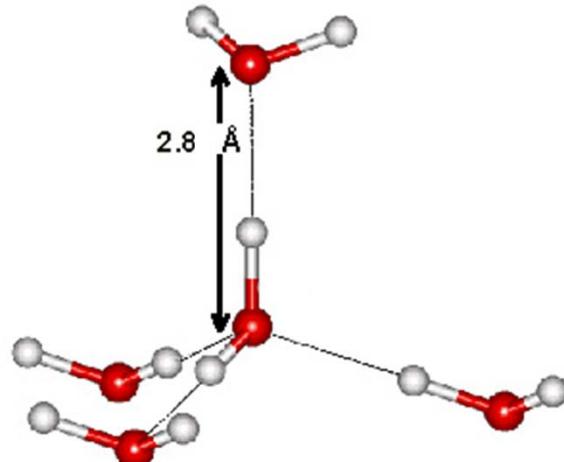
Fuerzas direccionales (el hidrógeno ha de aproximarse en la dirección de los pares no enlazantes)

Cuestión: Explique por qué los puntos de ebullición del HF y HCl son 20º C y -85º C, respectivamente.

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

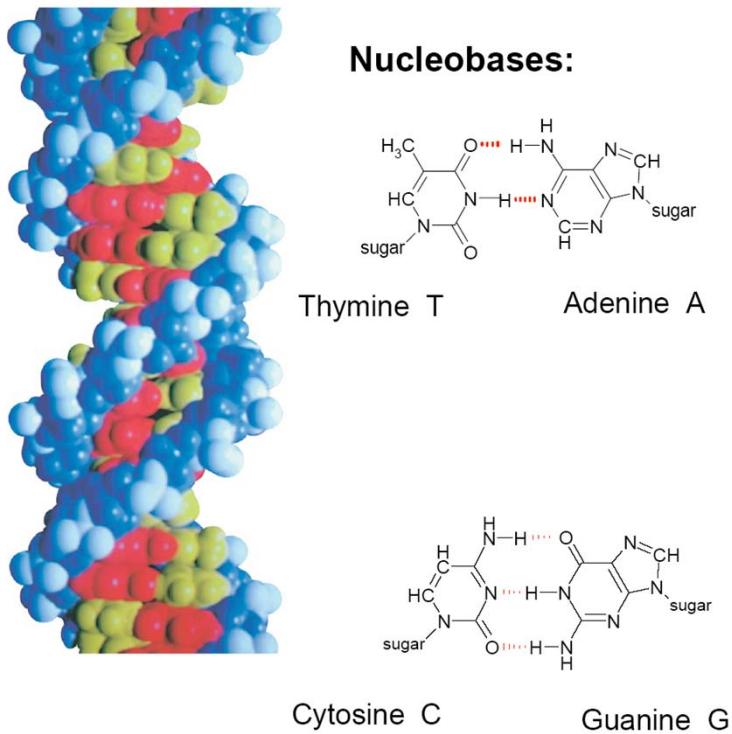
Es la interacción atractiva dominante en el agua líquida y responsable de sus propiedades. Por ejemplo el comportamiento anormal de la densidad con la temperatura que aumenta de 0 a 4° C se debe a la estructura tetraédrica, consecuencia de la formación de puentes de hidrógeno entre moléculas de agua (cada molécula de agua puede formar 2 actuando como dador y 2 como aceptor).



4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

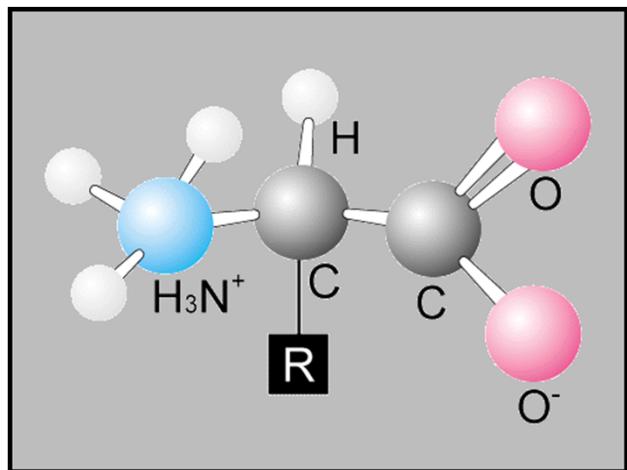
Su intensidad y direccionalidad hace de los puentes de hidrógeno una de las interacciones fundamentales para construir estructuras organizadas



4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

La estructura secundaria de las proteínas (el plegamiento espacial de la secuencia de aminoácidos que las forman) puede explicarse teniendo en cuenta la afinidad de los aminoácidos a formar enlaces de hidrógeno entre los átomos del esqueleto o backbone (los que no están en las cadenas laterales)

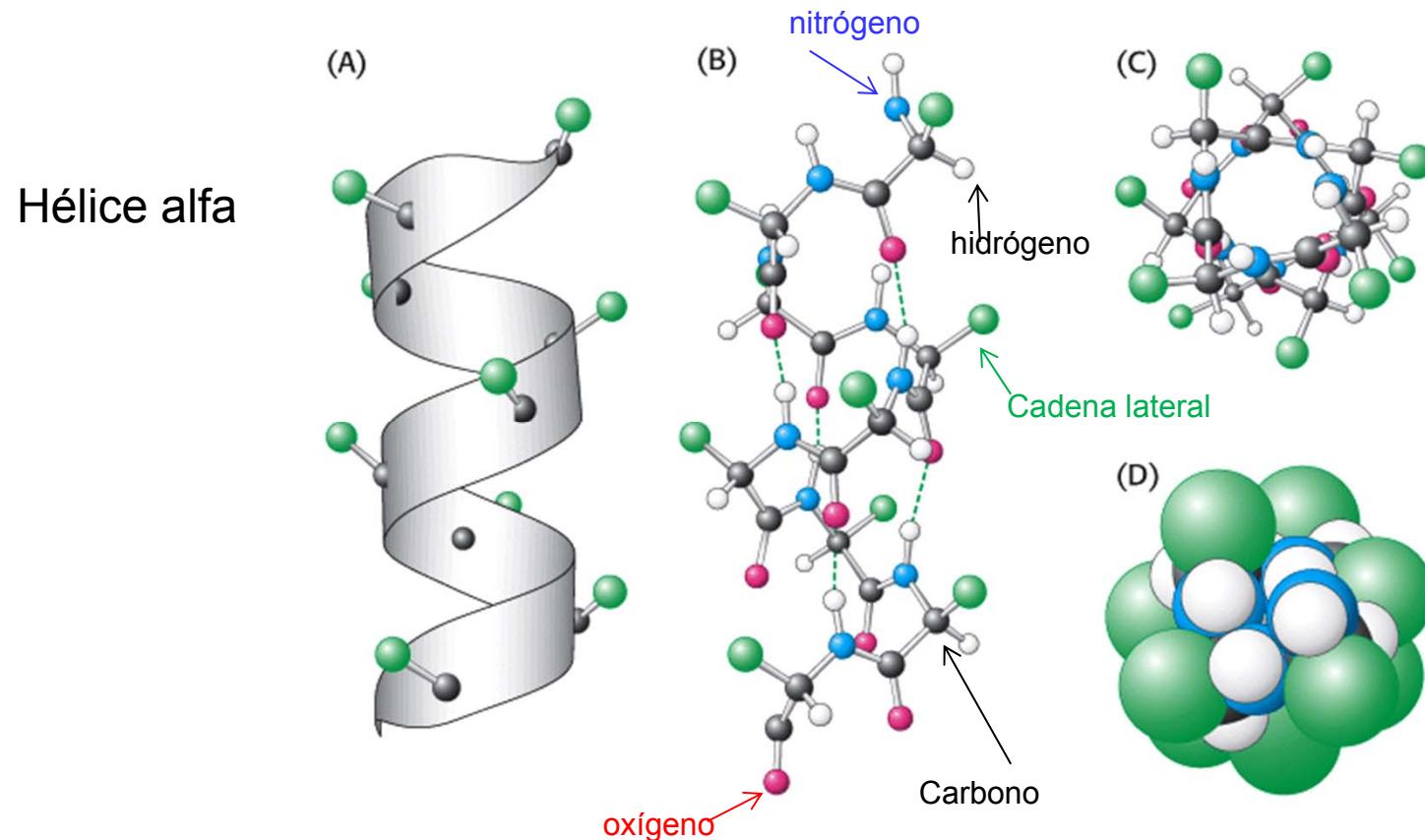


Aminoácido: grupo carboxilo y grupo amina unidos a un mismo átomo de carbono sustituido por un hidrógeno y una cadena lateral

4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

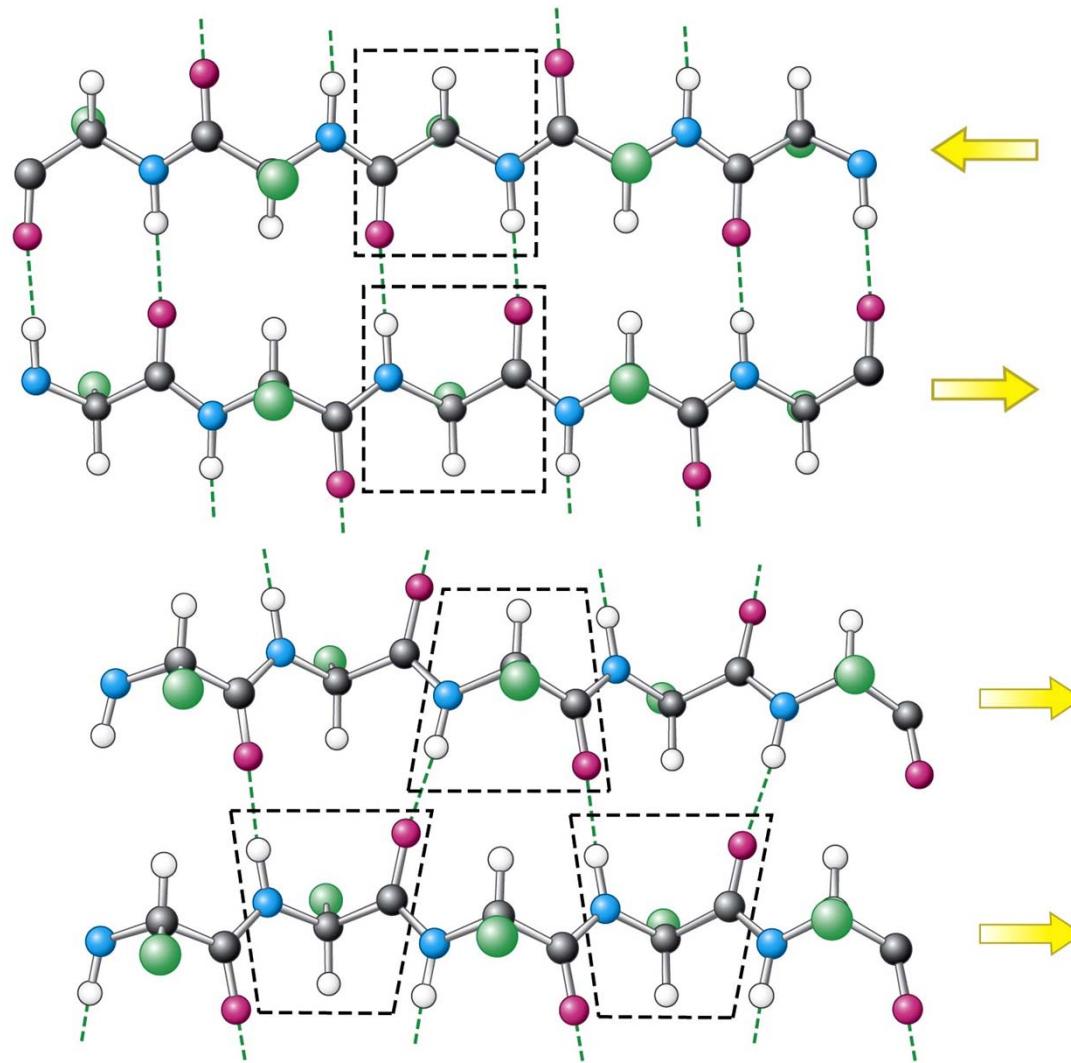
La estructura secundaria de las proteínas (el plegamiento espacial de la secuencia de aminoácidos que las forman) puede explicarse teniendo en cuenta la afinidad de los aminoácidos a formar enlaces de hidrógeno entre los átomos del esqueleto o backbone (los que no están en las cadenas laterales)



4. Sólidos covalentes, sustancias moleculares y fuerzas intermoleculares

- Enlaces o puentes de hidrógeno

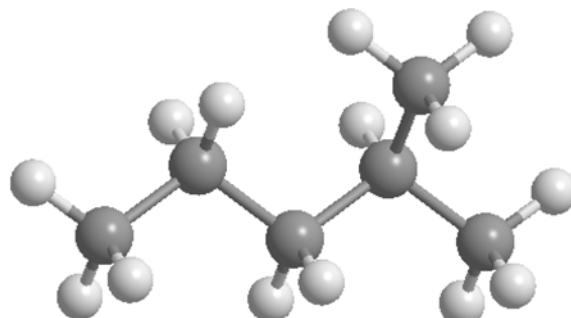
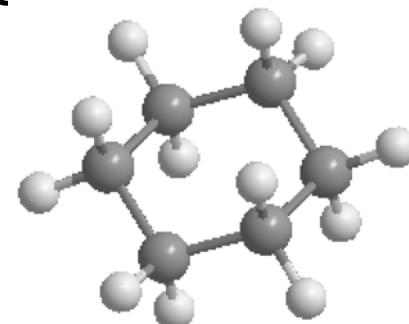
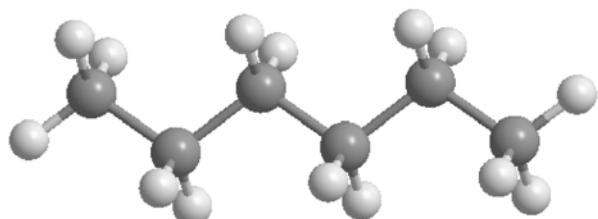
Hoja beta



5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Los compuestos orgánicos contienen átomos de carbono e hidrógeno fundamentalmente; en combinación con oxígeno, nitrógeno, azufre....

Existe una gran diversidad de compuestos orgánicos debido a la capacidad del carbono de formar fuertes enlaces covalentes entre sí (sencillo, dobles y triples), dando lugar a cadenas **lineales, ramificadas y ciclos**:



5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Los compuestos orgánicos formados sólo por C e H son los hidrocarburos:

- Alcanos (enlaces simples C-C)
- Alquenos (al menos un enlace doble C=C)
- Alquinos (al menos un enlace triple C≡C)

Los alkanos se nombran a partir de la cadena más larga:

1C: metano

2C: etano

3C: propano

4C: butano

5C: pentano

6C: hexano

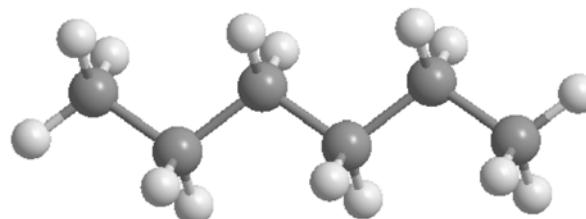
7C: heptano

8C: octano

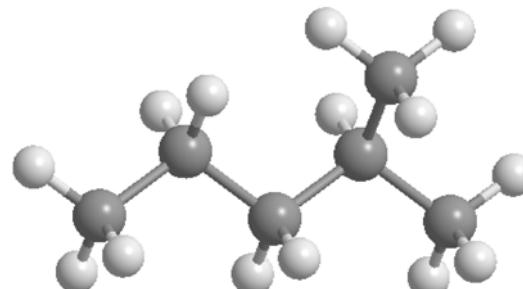
9C: nonano

10C: decano

11C: undecano



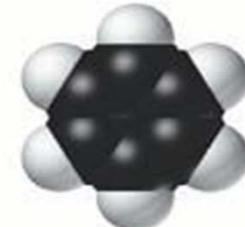
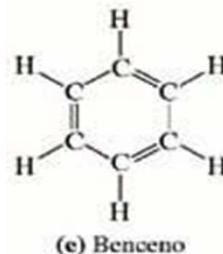
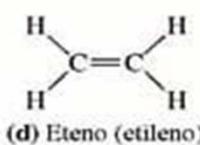
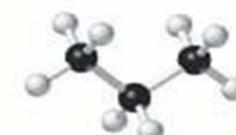
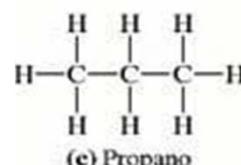
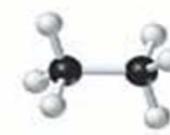
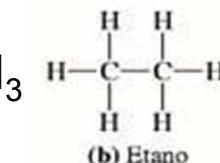
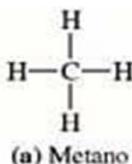
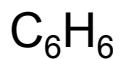
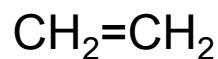
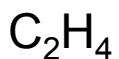
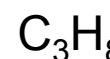
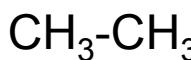
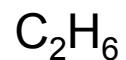
Hexano



2-metilpentano

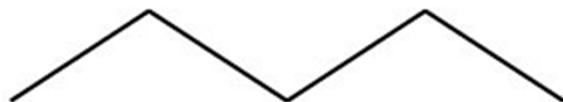
5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Representación de algunos hidrocarburos



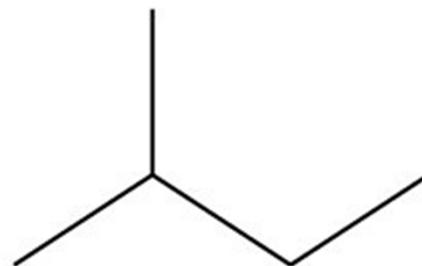
5. Formulación orgánica. Grupos funcionales

Ilustraciones simples de estructuras orgánicas



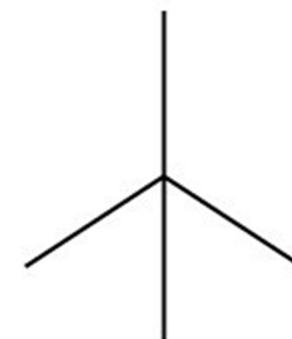
(1)

pentano



(2)

metilbutano



(3)

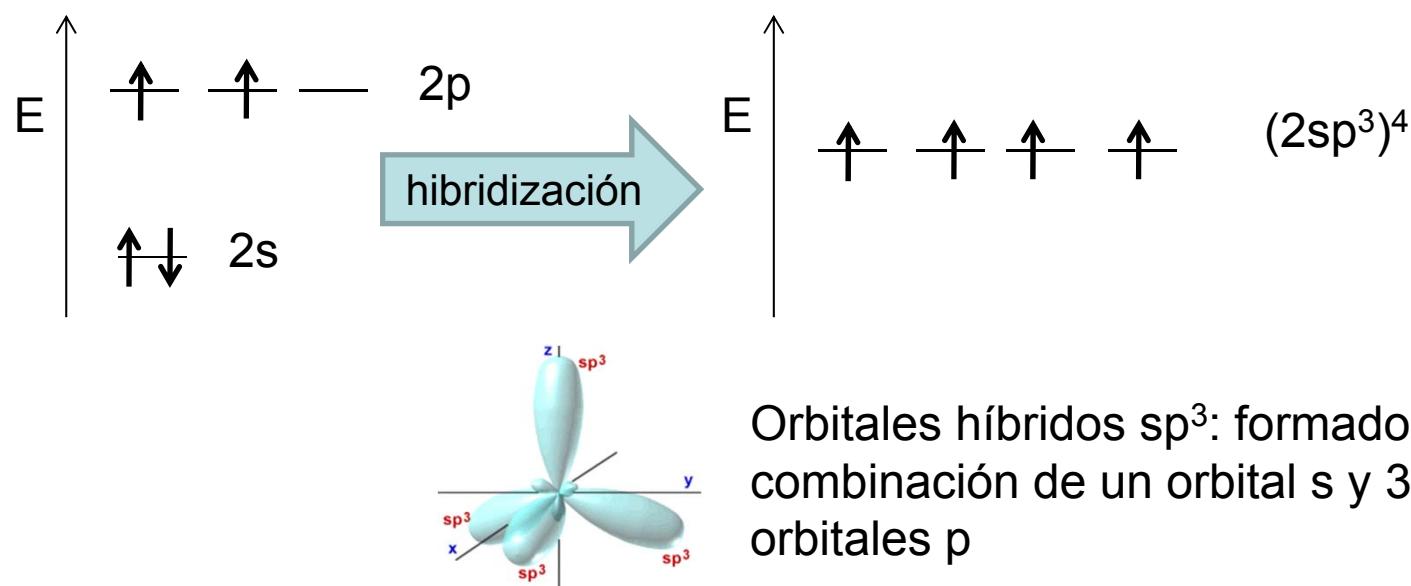
dimetilpropano

5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Formación de enlaces en el Carbono

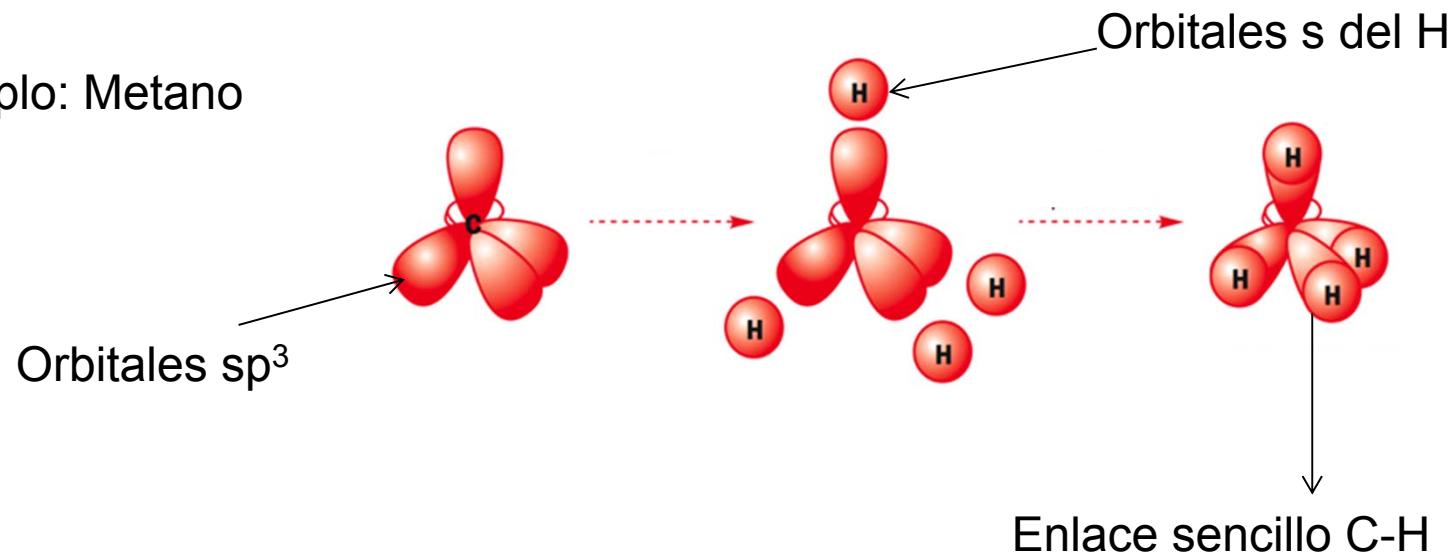


Los tipos de enlaces que forman el carbono se explican mejor tomando de partida en lugar de los orbitales atómicos 2s y 2p, soluciones obtenidas de la combinación algebraica de los mismos

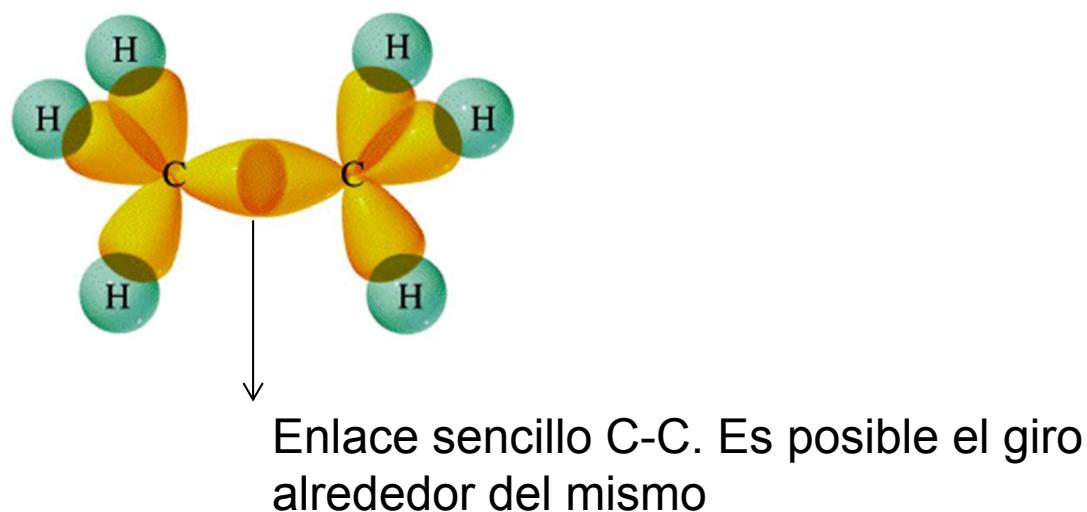


5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Ejemplo: Metano

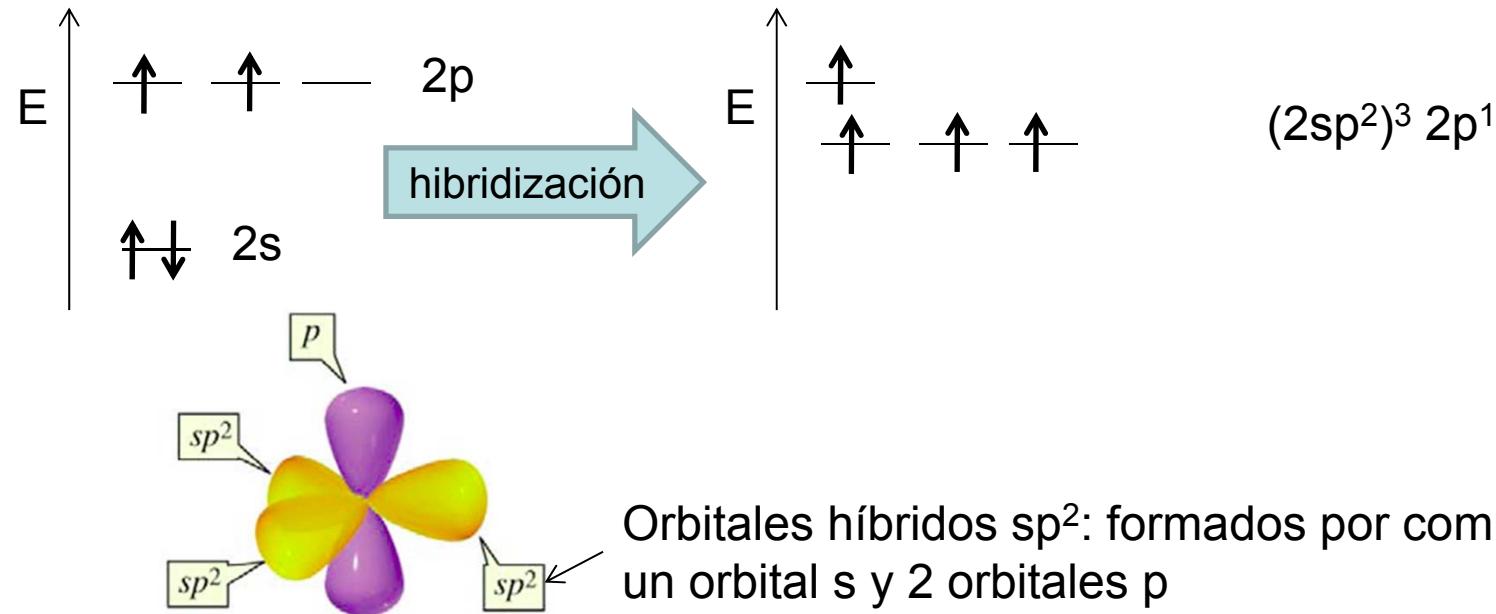


Ejemplo: Etano

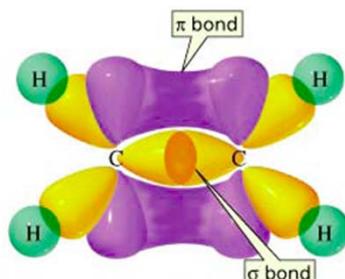


5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Son posibles otras hibridaciones



Ejemplo: Eteno



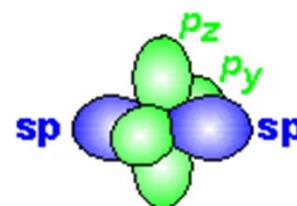
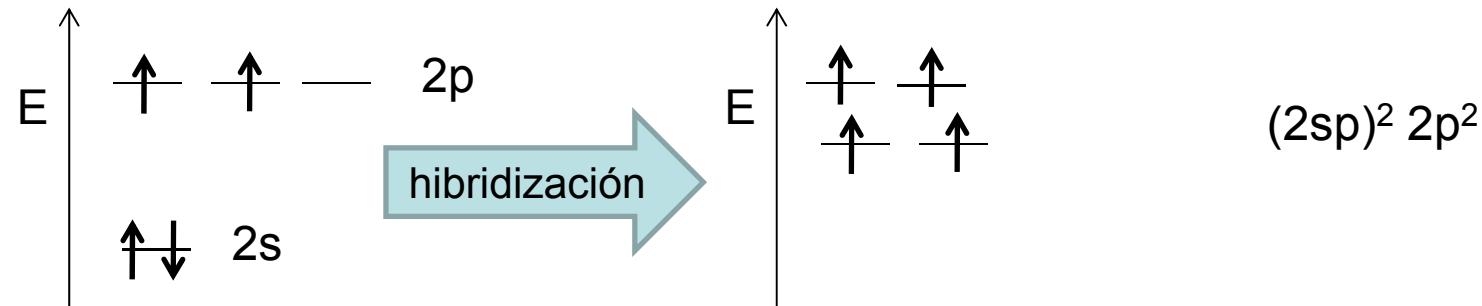
En el eteno, cada C forma 2 enlaces con H combinando orbitales sp^2 del C y s del H

Entre los C se forman dos enlaces: uno por combinación sp^2-sp^2 y otro p-p (enlace doble)

No es posible el giro alrededor del enlace C=C (hay que romper el enlace p-p)

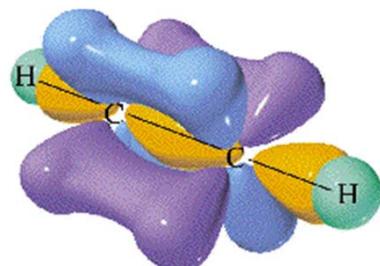
5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Son posibles otras hibridaciones



Orbitales híbridos sp: formados por combinación de un orbital s y 1 orbital p

Ejemplo: Etino o acetileno



En el etino, cada C forma 1 enlace con H combinando orbitales sp del C y s del H

Entre los C se forman tres enlaces: uno por combinación sp-sp y dos por p-p (enlace triple)

5. Compuestos orgánicos. Grupos funcionales

Grupos funcionales: agrupaciones diferenciadas de átomos que proporcionan a las moléculas propiedades físicas y químicas específicas.

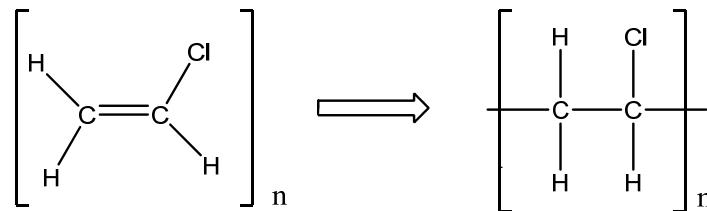
Alcano	$R-H$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$	Hexano
Alqueno		$CH_2=CHCH_2CH_2CH_3$	1-Penteno
Alquino		$CH_3C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$	2-Octino
Alcohol	$R-OH$	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	1-Butanol
Haluro de alquilo	$R-X^b$	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2Br$	1-Bromohexano
Éter	$R-O-R'$	$CH_3-O-CH_2CH_2CH_3$	1-Metoxipropano (metil propil éter) ^c
Amina	$R-NH_2$	$CH_3CH_2CH_2-NH_2$	1-Aminopropano (propilamina) ^c
Aldehido			Butanal (butiraldehído) ^c
Cetona			3-Hexanona (etil propil cetona) ^c
Ácido carboxílico			Ácido butanoico (ácido butírico) ^c
Ester			Butanoato de metilo (butirato de metilo) ^c
Amida			Butanamida (butiramida) ^c
Areno	$Ar-H^d$		Etilbenceno
Haluro de arilo	$Ar-X^b$		Bromobenceno
Fenol	$Ar-OH$		4-Clorofenol (p-clorofenol) ^c

Grupos funcionales

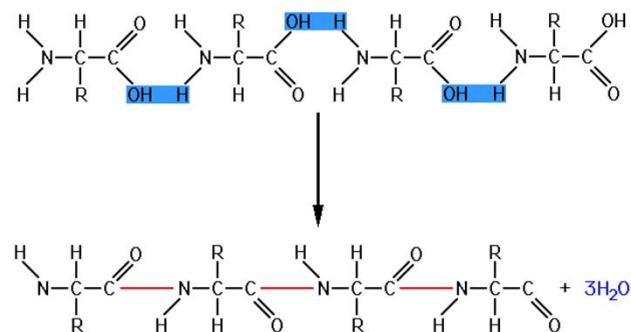
6. Polímeros

Los polímeros son macromoléculas (peso molecular $> 10^4 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$) formadas por unión de moléculas sencillas (o monómeros).

Ej: PVC, policloruro de vinilo

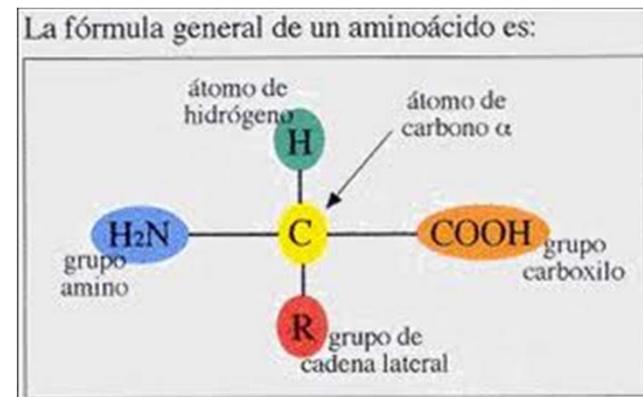
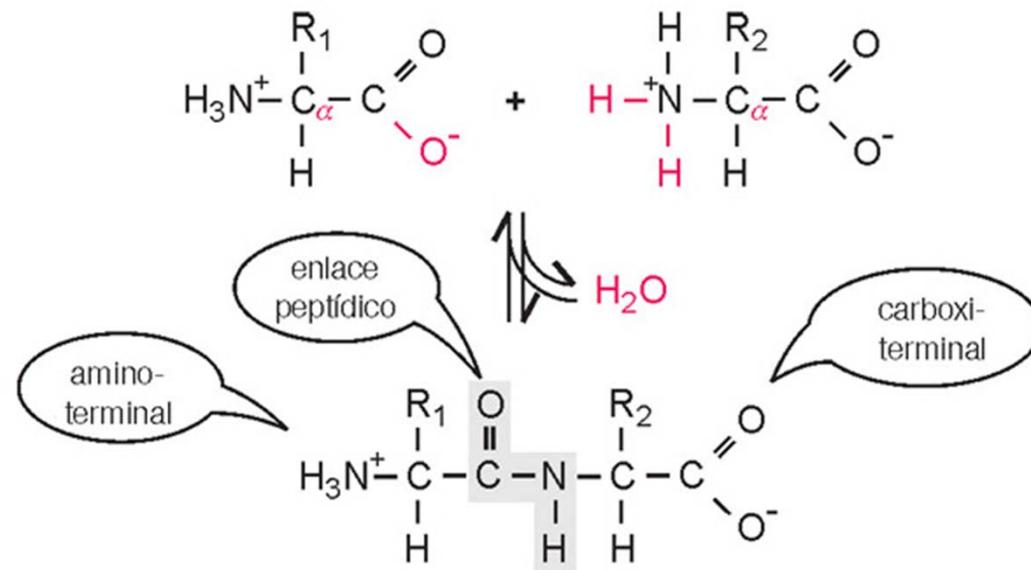


El PVC se forma a partir de un único tipo de monómero (homopolímero). Las proteínas son polímeros formados por unión de 20 tipos distintos de monómeros (los 20 aminoácidos esenciales)



6. Polímeros

El grupo amida

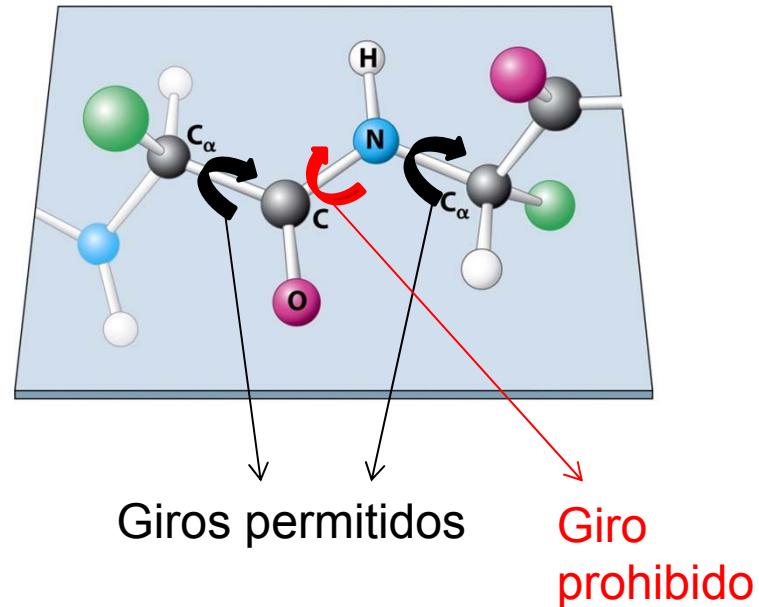
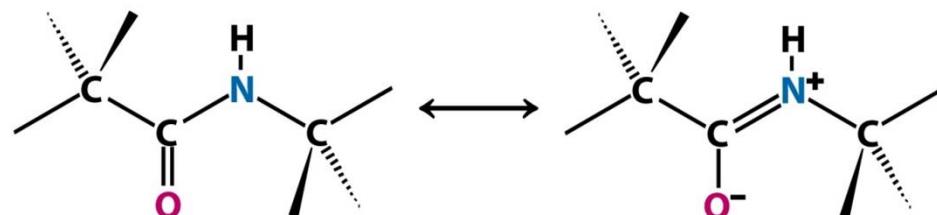


serie de aminoácidos unidos → **cadena polipeptídica o proteína**

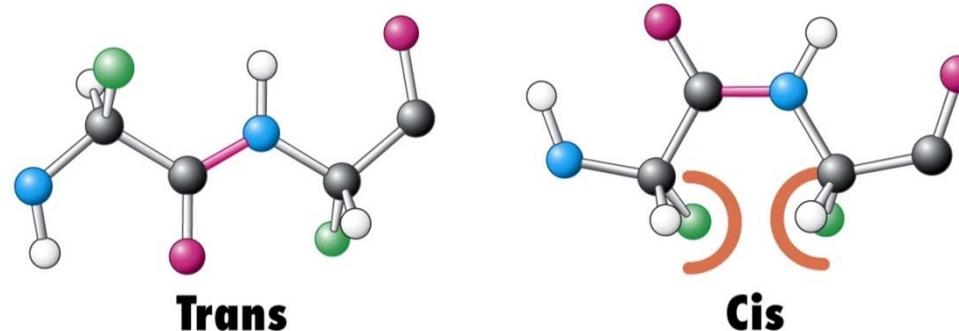
por convenio: el extremo amino terminal se considera que es el comienzo de la cadena polipeptídica

6. Polímeros

el enlace peptídico es esencialmente **plano** ya que tiene cierto carácter de **doble enlace**



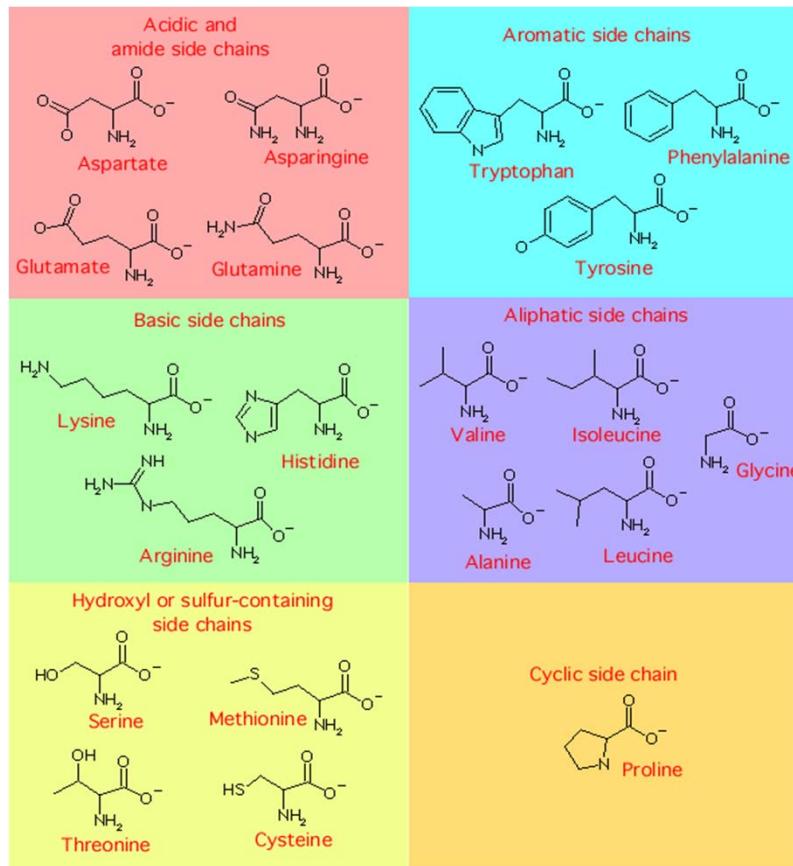
Hay dos posibles disposiciones en el enlace peptídico: casi todos los enlaces peptídicos en las proteínas son **trans**



6. Polímeros

Definición proteína

- macromoléculas más abundantes en los seres vivos
- formadas a partir de 20 aminoácidos
- aminoácido: grupo carboxilo y otro amino unidos al mismo C



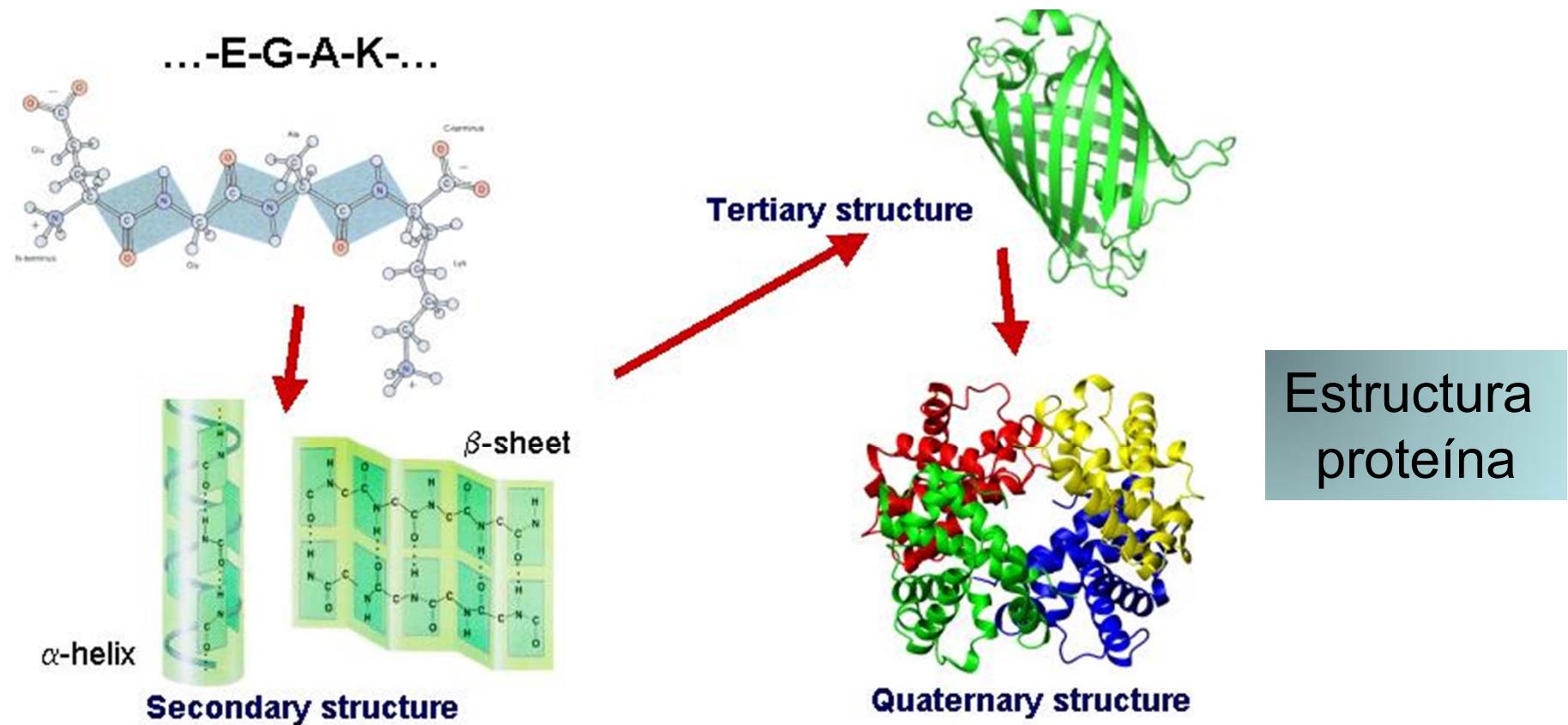
Hay 20 aminoácidos comunes encontrados en proteínas

6. Polímeros

Nomenclatura de aminoácidos

Amino acid	Three-letter abbreviation	One-letter abbreviation	Amino acid	Three-letter abbreviation	One-letter abbreviation
Alanine	Ala	A	Methionine	Met	M
Arginine	Arg	R	Phenylalanine	Phe	F
Asparagine	Asn	N	Proline	Pro	P
Aspartic acid	Asp	D	Serine	Ser	S
Cysteine	Cys	C	Threonine	Thr	T
Glutamine	Gln	Q	Tryptophan	Trp	W
Glutamic acid	Glu	E	Tyrosine	Tyr	Y
Glycine	Gly	G	Valine	Val	V
Histidine	His	H	Asparagine or aspartic acid	Asx	B
Isoleucine	Ile	I	Glutamine or glutamic acid	Glx	Z
Leucine	Leu	L			
Lysine	Lys	K			

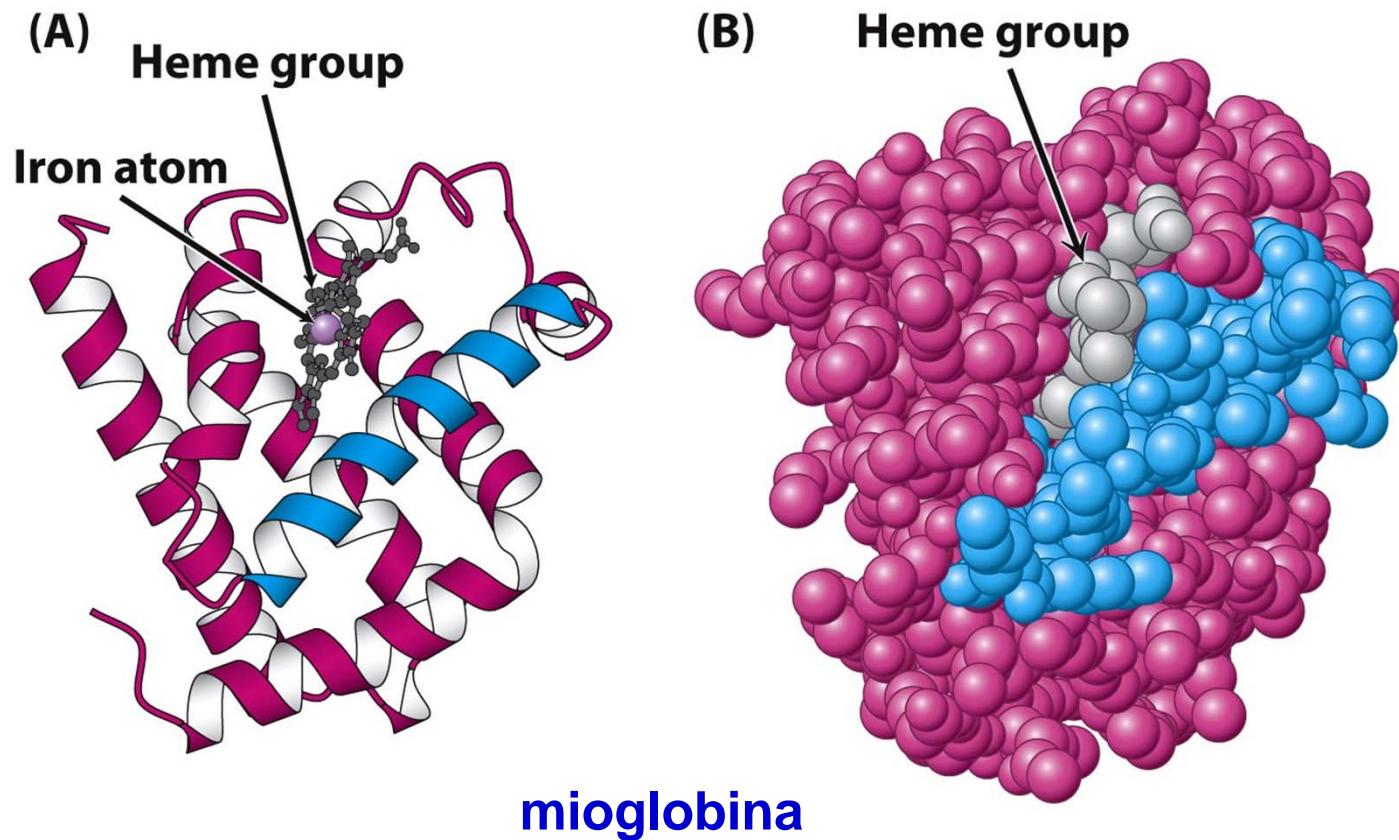
6. Polímeros



- (A) **Estructura primaria**, secuencia de aminoácidos (enlace peptídico)
- (B) **Estructura secundaria**, plegamiento péptidos (enlaces de hidrógeno backbone)
- (C) **Estructura terciaria**, estructura conformacional de la proteína.
- (D) **Estructura cuaternaria**, una proteína que consiste en más de una cadena

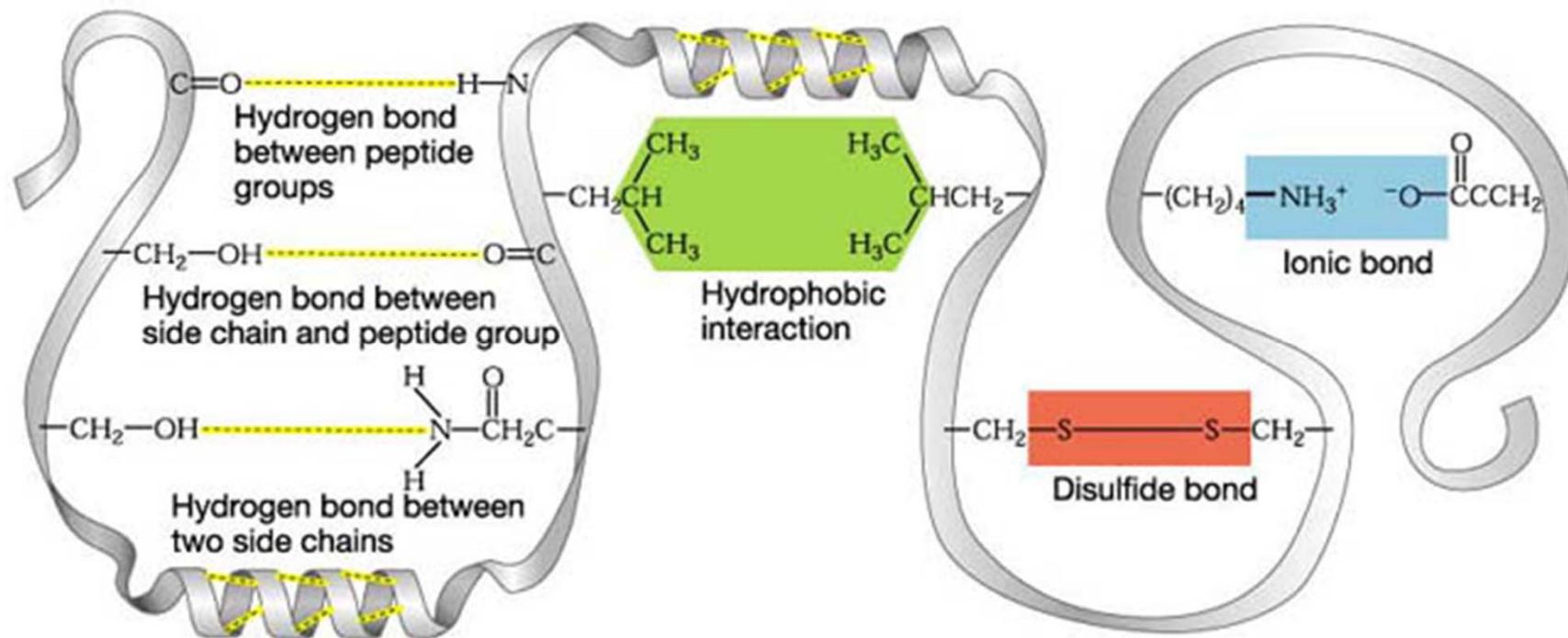
6. Polímeros

- la **estructura terciaria** corresponde a plegamientos tridimensionales.
- la proteína se pliega sobre sí misma
- Se debe a la formación de interacciones entre las **cadenas laterales** de los aminoacidos



6. Polímeros

interacciones y enlaces en la estructura terciaria



puentes de H

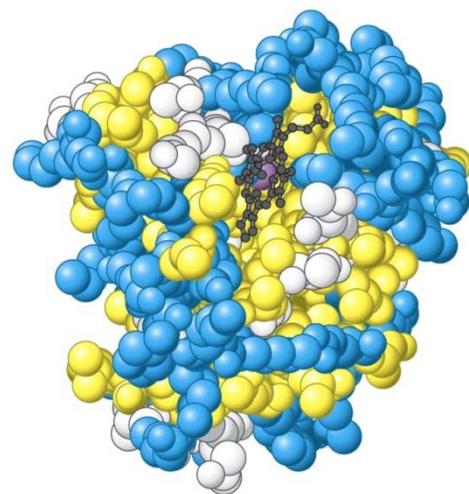
interacciones
hidrofóbicas
(Van der Waals)

enlaces iónicos

6. Polímeros

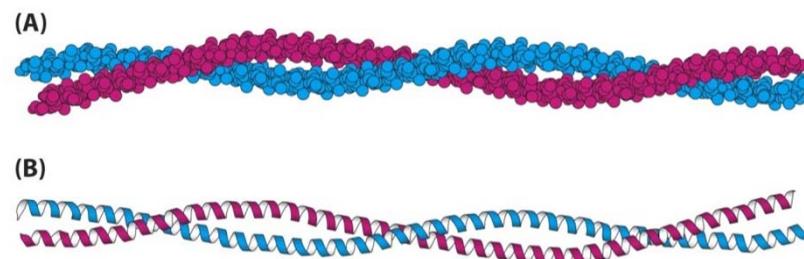
Existen muchas formas posibles para las proteínas. Estas forma o geometría determina su función

Globular



Mioglobina: se pliega para que sus cadenas hidrofóbicas laterales estén en el interior y sus cadenas polares, cargadas, estén en la superficie en contacto con el agua

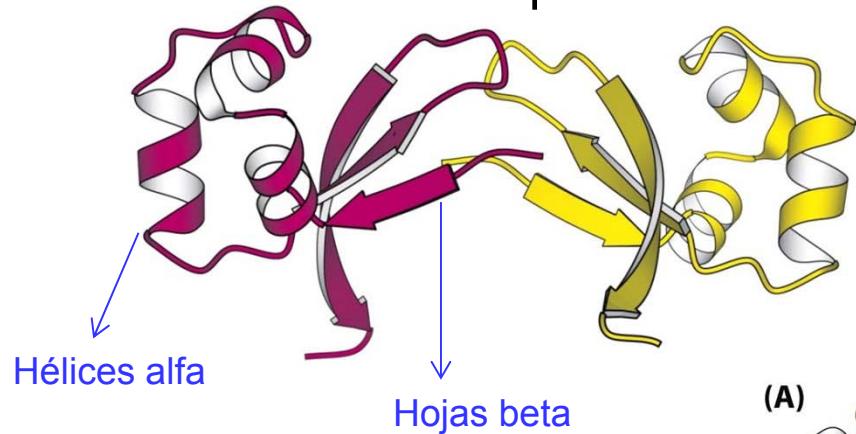
Proteínas fibrosas



Queratina alfa: Formada por dos hélices alfa enrolladas entre sí. Presente en el cabello, uñas, cuernos,...Es una proteína de gran resistencia y función estructural

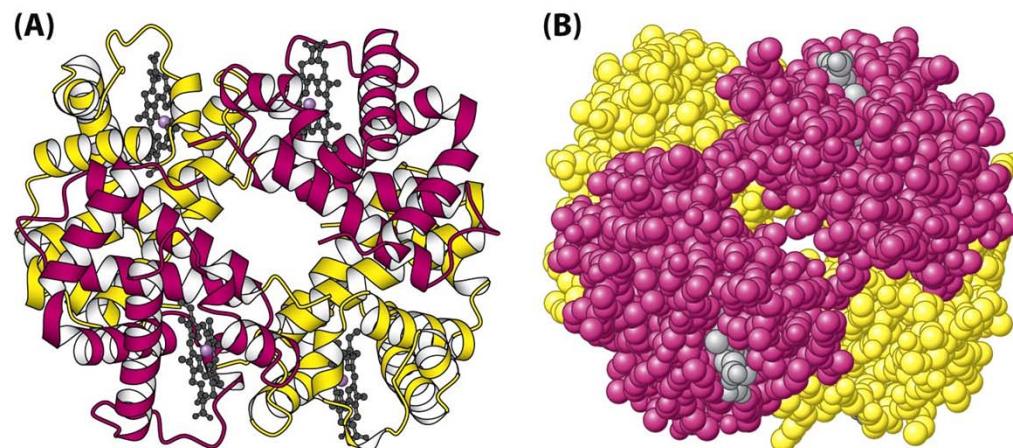
6. Polímeros

- **la estructura cuaternaria** corresponde a la asociación de cadenas polipeptídicas o **subunidades**, cada una de ellas con su estructura terciaria
- se mantiene por interacción entre aminoácidos de cadenas polipeptídicas diferentes
- la forma más simple es un dímero (2 subunidades idénticas)



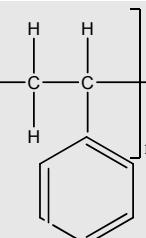
proteína de unión a DNA, Cro
(dímero)

hemoglobina humana
(tetrámero: a_2b_2)



6. Polímeros

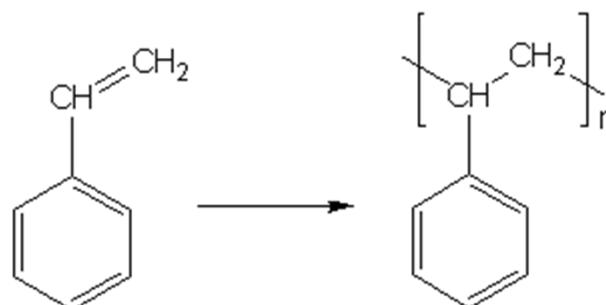
Polímeros sintéticos

Nombre	Polímero	Aplicaciones
Polietileno	$\left[\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ -\text{C}- & -\text{C}- \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array} \right]_n$	Bolsas, botellas, tubos,...
Polipropileno	$\left[\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ -\text{C}- & -\text{C}- \\ & \\ \text{H} & \text{CH}_3 \end{array} \right]_n$	Recipientes, juguetes,...
PVC	$\left[\begin{array}{c} \text{H} & \text{Cl} \\ & \\ -\text{C}- & -\text{C}- \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array} \right]_n$	Tuberías, mangueras,....
teflón	$\left[\begin{array}{c} \text{F} & \text{F} \\ & \\ -\text{C}- & -\text{C}- \\ & \\ \text{F} & \text{F} \end{array} \right]_n$	Rodamientos, aislamientos,...
Poliestireno	$\left[\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ -\text{C}- & -\text{C}- \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array} \right]_n$ 	Empaquetado, aislante

6. Polímeros

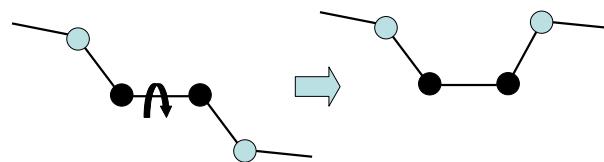
Nombre	Polímero	Aplicaciones
Nylon 66	$\left[\text{C}(=\text{O})-\text{(CH}_2\text{)}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}-\text{(CH}_2\text{)}_6-\text{NH} \right]_n$	Fibra textil
Poliuretano	$\left[\text{O}-\text{(CH}_2\text{)}_4\text{O}-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}-\text{(CH}_2\text{)}_6-\text{NH}-\text{C}(=\text{O}) \right]_n$	Fibras extensibles

Los polímeros se obtienen por reacción entre monómeros. Un procedimiento muy habitual es por apertura de doble enlace y posterior **adición**:



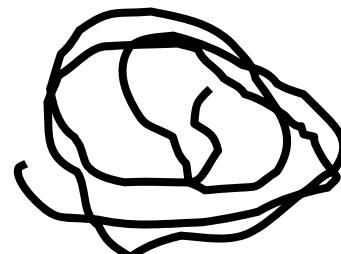
6. Polímeros

Termoplásticos: son polímeros que funden al aumentar la temperatura y pueden ser moldeados fácilmente para darles su forma definitiva, que se estabiliza al enfriar. Comprenden el 90% de los polímeros. Son termoplásticos el poliestireno, polimetacrilato de metilo, acetato de polivinilo, PVC.



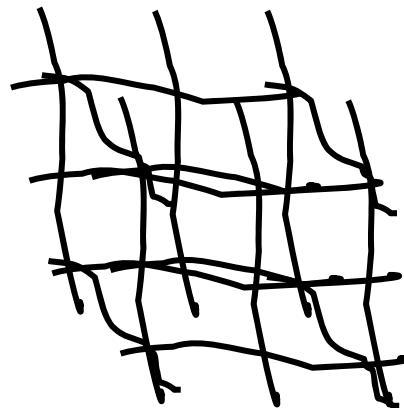
Al aumentar la Temperatura las moléculas adquieren Energía para girar alrededor de los enlaces (sencillos), adoptando diversas formas.

La forma ‘promedio’ sería la de un ovillo (si no hay interacciones específicas tipo enlace de hidrógeno):



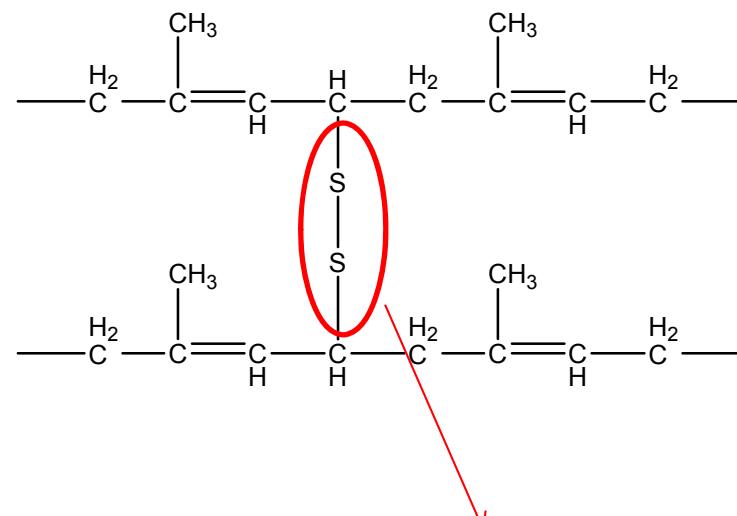
6. Polímeros

Termoestables o termofijos: son polímeros entrecruzados que se obtienen a partir de monómeros que reaccionan entre ellos. Conservan su forma al calentar debido a que sus cadenas son muy rígidas y están entrecruzadas entre si por uniones covalentes, por ejemplo resinas epoxi entrecruzadas, poliuretanos (isocianato+poliol), bakelita (formaldehido+fenol).



6. Polímeros

Elastómeros o cauchos: son materiales que presentan propiedades elásticas pueden sufrir grandes deformaciones, recuperando su forma original una vez cesa la causa que produjo la deformación, por ejemplo goma de caucho.



Vulcanización del caucho