

4.- EL ENLACE QUÍMICO

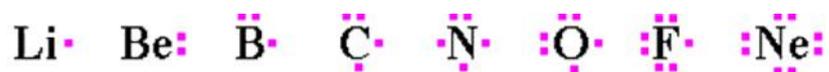
4.1.- <u>Introducción.</u>	92
4.2.- <u>Las sustancias iónicas.</u>	94
4.2.1.- Características del enlace iónico.	94
4.2.2.- El ciclo de Born-Haber	96
4.2.3.- Propiedades de las sustancias iónicas.	98
4.3.- <u>Las sustancias moleculares.</u>	99
4.3.1.- Fundamentos del enlace covalente.	99
4.3.2.- Clasificación de los enlaces covalentes.	100
4.3.3.- Estructuras electrónicas o diagramas de Lewis.	103
4.3.4.- Estructuras espaciales de moléculas	107
4.3.5.- Teoría del enlace de valencia.	111
4.3.6.- Teoría de los orbitales moleculares.	113
4.3.7.- Hibridación de orbitales.	113
4.3.8.- Enlaces intermoleculares.	117
4.3.9.- Propiedades de las sustancias moleculares.	119
4.4.- <u>Los sólidos covalentes (macromoléculas).</u>	119
4.4.1.- Enlaces de las sustancias covalentes.	119
4.4.2.- Propiedades de las sustancias covalentes.	120
4.4.3.- Estructura de algunas sustancias covalentes.	120
4.5.- <u>Las sustancias metálicas.</u>	122
4.5.1.- El enlace metálico.	122
4.5.2.- El modelo del gas de electrones.	122
4.5.3.- La teoría de bandas.	123
4.5.4.- Propiedades de las sustancias metálicas.	123
4.6.- <u>Cuadro resumen de las propiedades de las sustancias.</u>	125

4.1.- Introducción.

En temas anteriores, ya hemos estudiado el átomo y ahora vamos a ver cómo se pueden combinar esos átomos entre sí. Este aspecto es muy importante ya que, como veremos, según el tipo de enlaces que formen, podremos predecir las propiedades de las sustancias.

Las sustancias están constituidas por agrupaciones de átomos. Unas veces, tales agrupaciones forman agregados neutros: las moléculas y otras resultan con carga: los iones. Sólo los gases nobles y algunos metales en estado vapor están constituidos por moléculas monoatómicas (es decir, por átomos sueltos). La unión entre átomos, iones o moléculas es lo que constituye en enlace químico.

En el enlace químico juega un papel decisivo la configuración electrónica de la capa más externa de los átomos, la de mayor energía, llamada capa de valencia. De esa configuración depende, además, el tipo de enlace que se formará, por ello, y dada su importancia, se utilizan los diagramas de Lewis, en los que figura el símbolo del elemento rodeado de tantos puntos como electrones de valencia posea. Así por ejemplo, los diagramas de Lewis de los elementos del segundo periodo son:



En la tabla periódica, todos los átomos de un mismo grupo tiene propiedades similares porque todos tienen los mismos electrones de valencia, y un átomo usa algunos o todos los electrones de valencia para combinarse con otros.

Por otra parte, los gases nobles son muy estables ya que tienen una baja reactividad que se relaciona con su estructura electrónica; todos poseen los orbitales s y p de la última capa completos (a excepción del He). El hecho de que los orbitales de más alta energía de un átomo estén completamente llenos, les da una acusada estabilidad. Esto también se puede comprobar experimentalmente diciendo que tanto el P.I. como la A.E. de los gases nobles son muy altos, (no tienen tendencia ni a coger ni a ceder electrones).

El resto de los átomos, tienden a ganar, perder o compartir electrones con la finalidad de adquirir configuración electrónica de gas noble y ganar así estabilidad. Por ello, los átomos se clasifican según esta tendencia en (además de los gases nobles antes descritos):

Metales:	<ul style="list-style-type: none"> • Elementos que tienen pocos electrones en la última capa (1, 2 ó 3). • Tienen tendencia a perderlos para adquirir configuración electrónica de gas noble (tener la última capa completa). • Se cargarán positivamente formando lo que se denomina un catión.
No metales:	<ul style="list-style-type: none"> • Tienen muchos electrones en la última capa (5, 6 ó 7). • Tienen tendencia a ganar para adquirir configuración electrónica de gas noble (completar la última capa). • Se cargarán negativamente formando lo que se denomina un anión.

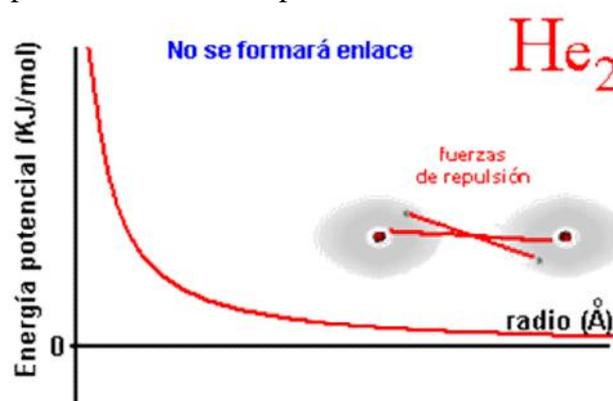
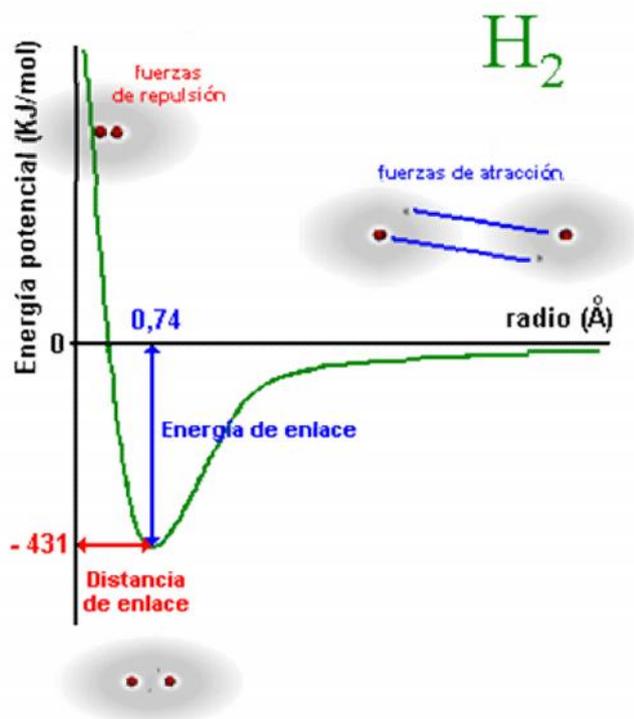
En general, se puede decir que cuando un átomo se combina con otro para formar un compuesto, lo hace de tal manera que con ello adquiere la configuración electrónica del gas noble más cercano, (ocho electrones en su última capa, **regla del octeto**) y eso se puede conseguir a través de una cesión, captación o compartición de e⁻. Esta es la razón por la que los gases nobles son tan inertes.

Hay elementos que no cumplen la regla del octeto, por ejemplo, el H, Li y Be, el número de electrones al que tienden es de dos puesto que el He, (gas noble más cercano), sólo tiene dos; y hay también muchos elementos del tercer período (o superior) que pueden albergar más de ocho electrones en su última capa al poseer orbitales "d" vacíos.

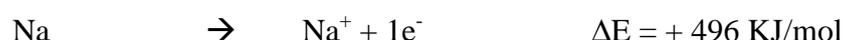
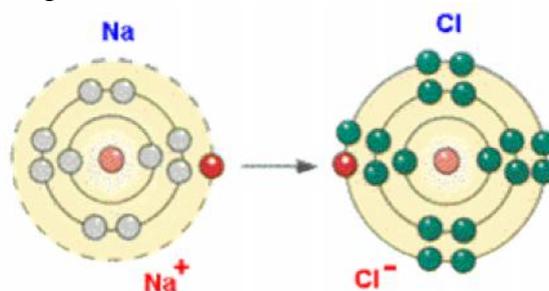
Existen tres tipos fundamentales de enlaces: iónico, covalente y metálico, y con ellos se pueden formar cuatro tipos de sustancias: las iónicas, las moleculares, las covalentes y las metálicas.

Es importante comentar que para que un determinado enlace se forme, tiene que haber necesariamente un desprendimiento de energía, es decir, el compuesto o molécula formada tiene que ser más estable que los átomos de los que se parte, pues de lo contrario no se formará el enlace.

Cuando dos átomos se encuentran infinitamente separados, no hay interacción entre ellos, sin embargo, a medida que se acercan empiezan a aparecer fuerzas de atracción entre el núcleo de uno y la nube electrónica de otro y viceversa con la consiguiente liberación de energía. A una distancia determinada (distancia de enlace), la energía liberada pasa por un mínimo (energía de enlace). Si la distancia de enlace se hace más pequeña, empiezan a aparecer fuerzas de repulsión entre los dos núcleos y las dos nubes electrónicas, tanto más grandes cuanto más cerca estén, para lo cual haría falta aportar energía, tal y como se muestra en la figura (los datos se refieren a la molécula de hidrógeno). Si los átomos nada más empezar a acercarse, generan fuerzas de repulsión, tal y como muestra la segunda figura, nunca formarán un enlace, porque no existe una distancia que estabilice el sistema. Es lo que ocurre al acercar dos átomos de He, por ejemplo.



el átomo de sodio tiene sólo un electrón en su última capa que "tenderá" a perder, quedándose cargado positivamente y, por el contrario, al cloro le falta un electrón para completar su capa, que lo captará del átomo de sodio, incorporándolo al orbital 3p, y así ambos tienen configuración electrónica de gas noble:



Aunque muchas veces se indique que los metales tienden a perder electrones, este fenómeno es siempre energéticamente desfavorable al igual que la aceptación de electrones por parte de los no metales, (salvo en el caso de algunos halógenos).

Desde el punto de vista energético este proceso es desfavorable ya que hay que aportar 148 KJ/mol, (aporte de energía necesario para que los átomos se ionizaran en estado gaseoso). No obstante, la formación de la red cristalina libera gran cantidad de energía por la atracción electrostática que ahora sufren los iones.

Imaginemos los iones Cl^- y Na^+ infinitamente separados en estado gas y que se van acercando para formar el enlace. En un principio se libera energía por la atracción de los iones, pero cuando éstos están muy cerca, empiezan a tener importancia las repulsiones entre los electrones y entre los núcleos de los iones, por lo tanto existe una distancia interiónica para la que la energía potencial electrostática pasa por un mínimo y, en consecuencia, se libera la máxima energía.

Para los iones de Cloro y Sodio esta distancia es de $2,38 \text{ \AA}$, (determinada por difracción de rayos X). Por lo tanto, la energía liberada al acercarse dos iones será:

$$\Delta E = - K \frac{q_1 \cdot q_2}{r} = - 9 \cdot 10^9 \cdot \frac{(1,609 \cdot 10^{-19})^2}{2,38 \cdot 10^{-10}} = - 9,705 \cdot 10^{-19} \text{ J} = - 580,4 \text{ KJ/mol}$$

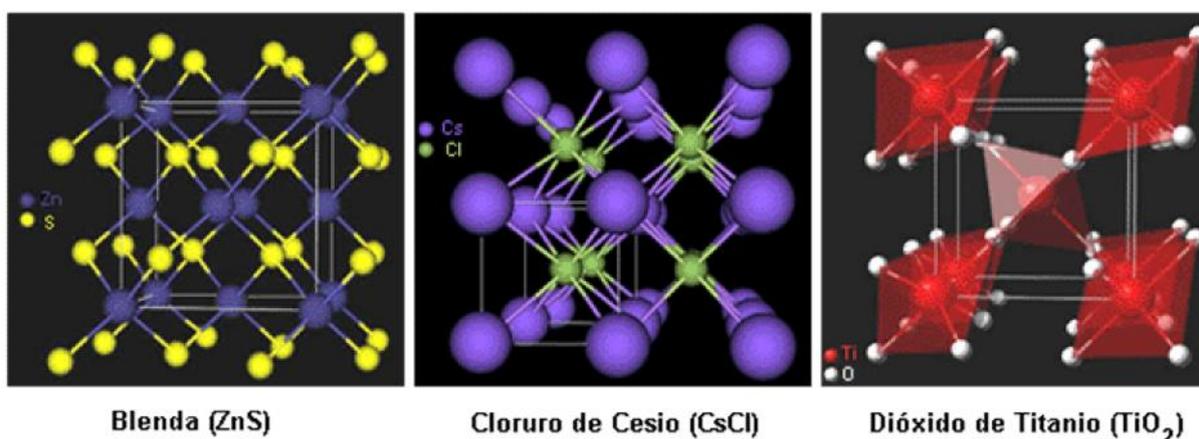
Sin embargo la formación de la red cristalina libera una cantidad de energía mucho mayor debido a que un ion Cl^- es atraído por más de un ion Na^+ y viceversa. En el caso de NaCl, la energía liberada al pasar de iones gaseosos a la red cristalina, (**energía reticular**), es de -790 KJ/mol (mayor que la calculada para dos iones aislados que era de - 580,4 KJ/mol). En definitiva, la energía necesaria para la ionización (que es de 148 KJ/mol), se ve compensada con la que se libera al formarse el cristal (-790 KJ/mol).

Todos aquellos elementos cuya energía de ionización se vea compensada suficientemente por la energía reticular, tendrán tendencia a formar este tipo de enlace. Esto ocurre únicamente cuando se combinan elementos muy electronegativos, (anfígenos y halógenos), de alta afinidad electrónica con elementos poco electronegativos, (alcalinos, alcalinotérreos), de bajo potencial de ionización.

Ahora bien, no existe un enlace iónico puro (del 100 %), lo que quiere decir, que no hay una transferencia total de electrones del metal al no metal, habiendo siempre una parte de compartición de éstos entre los dos átomos enlazados.

La mayoría de las sales que provienen de oxoácidos son también de naturaleza iónica; el anión está formado por varios átomos y también forman redes cristalinas. Lo mismo le ocurre al catión amonio.

Los sólidos iónicos pueden cristalizar en varios tipos de redes. El que lo haga en un tipo u otro de red depende fundamentalmente del tamaño de los iones que la forman y de la carga que posean. Aquí tienes otras estructuras cristalinas diferentes de compuestos iónicos:



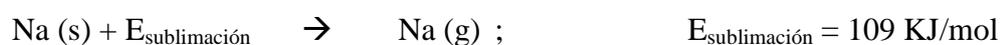
4.2.2.- El ciclo de Born - Haber.

El cambio energético producido en la formación de un sólido iónico a partir de los elementos que lo constituyen, puede calcularse a partir del llamado ciclo de Born – Haber (que es un caso particular de la ley de Hess). Vamos a seguir con el mismo ejemplo del apartado anterior, es decir, la formación del cloruro sódico (sólido) según la siguiente reacción:

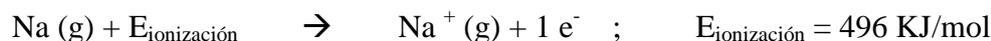


La reacción anterior tiene lugar en varios pasos:

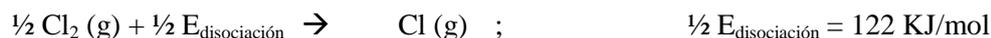
1.- El sodio metálico sólido, en primer lugar tendrá que separar sus átomos entre sí. Para ello habrá que aportar la energía de sublimación del Sodio:



2.- Al sodio gas, habrá que arrancarle un electrón para transformarlo en un ion positivo. Para este proceso necesitaremos aportar la energía de ionización del Sodio:



3.- El Cloro, no metal, en primer lugar tendrá que romper su molécula ya que es diatómico. Para ello tendremos que aportar la mitad de su energía de disociación, ya que por cada molécula que se rompe obtenemos dos átomos de Cloro, por lo tanto sólo habrá que disociar medio mol de moléculas de Cloro para obtener 1 mol de átomos de Cloro.



4.- Posteriormente, tendremos que aportar un electrón a cada átomo de Cloro para transformarlo en un ion negativo. Para ello tendremos que aportar la energía de la afinidad electrónica. Dicha energía suele ser positiva (es decir, hay que aportarla), pero en el caso de algunos halógenos puede llegar a ser negativa (energía desprendida):



5.- Vemos que la energía desprendida no supera a la suministrada; nos faltan 379 KJ/mol. ¿Cómo puede formarse, entonces, el compuesto iónico?. La respuesta está en la energía reticular, que como ya hemos definido antes es la energía desprendida al pasar de los iones en estado gaseoso a la formación de 1 mol de sólido cristalino. En efecto, los iones en estado gaseoso se atraen con orden en la red y así, es evidente que la energía potencial eléctrica se hace menor.



La energía sobrante será la desprendida en la formación de 1 mol del compuesto iónico:

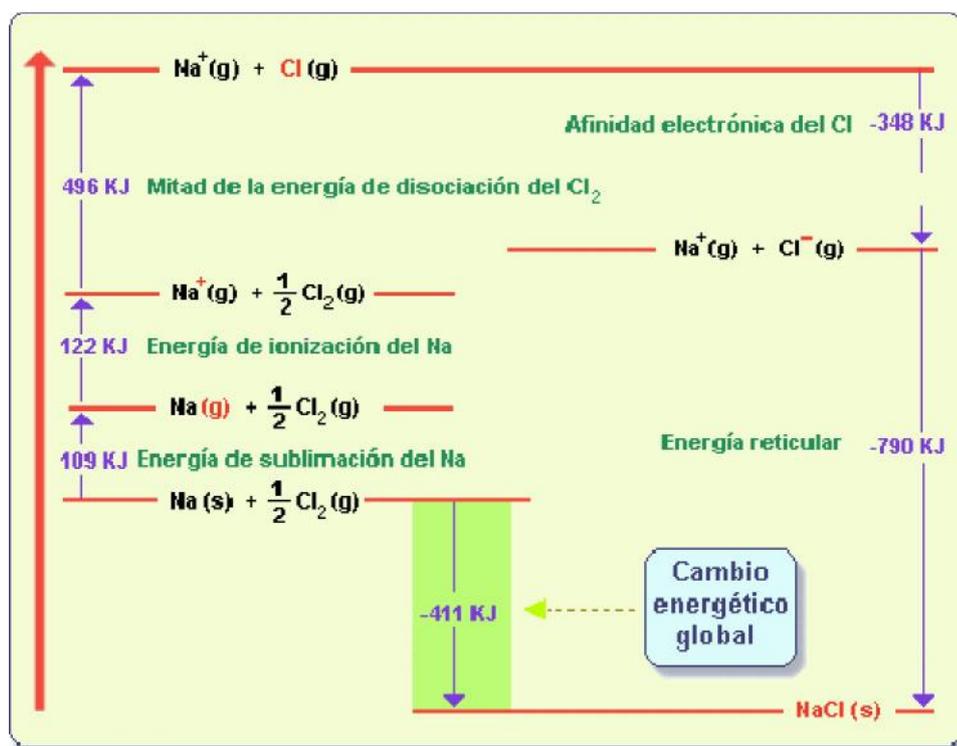
$$E_f = E_{\text{sublimación}} + E_{\text{ionización}} + \frac{1}{2} E_{\text{disociación}} + E_{\text{afinidad}} + E_{\text{reticular}} = 109 + 496 + 122 - 348 - 790 =$$

$$E_f = -411 \text{ KJ/mol}$$

A continuación te mostramos un esquema de todo el proceso:



Este sería el diagrama energético del proceso:

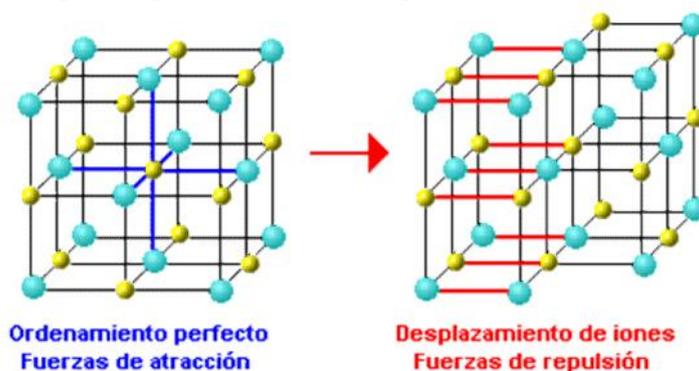


4.2.3.- Propiedades de las sustancias iónicas.

No contienen átomos sino iones y puesto que las fuerzas electrostáticas son muy fuertes, tendrán puntos de fusión y de ebullición muy altos.

En estado sólido no conducen la electricidad, ya que los iones tienen posiciones fijas y carecen de movilidad, pero, al fundirse o disolverse en agua, se desmorona la red cristalina quedando los iones en libertad, por lo que estos compuestos fundidos o disueltos conducen la electricidad.

Son sólidos muy duros porque las fuerzas electrostáticas que unen los iones son grandes, pero también son frágiles, ya que, al haber un ordenamiento tan perfecto en la red, pequeños desplazamientos de los iones hacen que las fuerzas que antes eran de atracción pasen a ser de repulsión, por lo que el sólido se rompe:



En general, los sólidos iónicos son solubles en disolventes polares y no en apolares, ya que, las moléculas del disolvente se colocan alrededor de los iones (orientando sus dipolos de forma adecuada), y éstos se separan de la red cristalina.



Hay que tener en cuenta que, no todas las sustancias que en disolución dan iones son sustancias iónicas; también lo hacen algunas sustancias covalentes polares como HCl o H₂SO₄.

Podemos estudiar la variación de algunas de las propiedades que acabamos de comentar en base a las fuerzas electrostáticas y no direccionales que unen a los iones en la red cristalina. Dichas fuerzas vienen determinadas por la Ley de Coulomb:

$$\vec{F} = K \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} \vec{u}$$

por lo tanto, a medida que los iones estén más cargados, y sus radios sean más pequeños, las fuerzas electrostáticas que los unen serán más fuertes, por lo que, tendrán puntos de fusión y ebullición más altos, serán más duros, serán menos solubles, etc. Con los siguientes datos podrás apreciarlo con mayor facilidad:

Cristal	Q ₁	Q ₂	r (Å°)	Punto de fusión	Dureza	Solubilidad (gr/l)
NaI	1	1	3'11	660	2'8	158'70
NaF	1	1	2'31	988	3'2	4'22
CaF ₂	2	1	2'35	1360	4'0	0'15
Al ₂ O ₃	3	2	1'90	2030	9'0	0'00

4.3.- Sustancias moleculares.

4.3.1.- Fundamentos del enlace covalente.

El enlace iónico se da entre átomos de electronegatividad muy diferente, en cambio, el enlace covalente se da entre elementos de alta electronegatividad muy parecida.

En vez de una cesión de electrones, (como tiene lugar en el enlace iónico), se produce una compartición de pares de e⁻, que se concentran entre los núcleos enlazándolos. El número de pares de electrones compartidos será el necesario para que los dos átomos adquieran configuración electrónica de gas noble. A diferencia del enlace iónico, el **enlace covalente es direccional** y más fuerte; y su formación también comporta una liberación de energía. En la siguiente dirección puedes encontrar una simulación del enlace covalente en la molécula de Hidrógeno:



http://www.visionlearning.com/library/flash_viewer.php?oid=1348

4.3.2.- Clasificación de los enlaces covalentes.

i) atendiendo al número de electrones compartidos:

a) enlace covalente simple: Cada átomo aporta un electrón al enlace, es decir, se comparte un par de electrones entre dos átomos. Un ejemplo es la molécula de Hidrógeno (H₂):



Si los átomos están infinitamente separados, se considera que tienen energía cero, pero a medida que se acercan existen fuerzas de atracción (entre el e⁻ de un átomo y el p⁺ del otro), y fuerzas de repulsión, (entre las dos nubes electrónicas). Al principio las fuerzas de atracción son superiores a las de repulsión por lo que al acercarse se libera energía, pero llega un momento en el que las repulsiones empiezan a tener importancia y cuesta cada vez más acercarlos. Es decir, que la curva pasa por un mínimo y la distancia a la que se produce es la distancia de enlace que para la molécula de H₂ es de 0'74 Å°.

La molécula de Hidrógeno presenta una energía menor a la de los átomos separados (que es una condición indispensable para que exista enlace). En este caso los dos átomos de Hidrógeno adquieren configuración electrónica de gas noble.

Otro ejemplo de este tipo de enlace sería la molécula de cloro:



los dos átomos de cloro tienen 8 electrones a su alrededor y por lo tanto configuración electrónica de gas noble.

b) enlace covalente doble: Cada átomo aporta dos electrones al enlace, es decir, se comparten dos pares de electrones entre dos átomos. Un ejemplo es la molécula de Oxígeno (O₂):



c) enlace covalente triple: Cada átomo aporta tres electrones al enlace, es decir, se comparten tres pares de electrones entre dos átomos, por ejemplo, la molécula de Nitrógeno (N₂):



Es conveniente señalar que a medida que se comparten más pares de electrones, la distancia entre los átomos unidos será menor y el enlace será más fuerte (hará falta más energía para romperlo). Esto se puede comprobar con los datos de la siguiente tabla:

Molécula	Energía (Kcal/mol)	distancia (Å°)
F ₂ (F - F)	36	1'42
O ₂ (O = O)	118	1'21
N ₂ (N ≡ N)	225	1'10

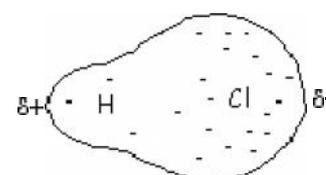
ii) atendiendo a cómo están compartidos los electrones:

a) enlace covalente puro o apolar: Los dos átomos que comparten electrones son del mismo elemento o bien de elementos de la misma electronegatividad para que los electrones enlazantes se compartan por igual. Todos los ejemplos vistos hasta ahora son de este tipo.



b) enlace covalente polar: En un enlace covalente entre dos átomos iguales, los electrones del enlace se hallan igualmente compartidos, y el caso del enlace iónico constituye el otro extremo en el que los e⁻ se transfieren totalmente.

Cuando dos átomos no son iguales, surgen situaciones intermedias en las que los dos e⁻ se encuentran compartidos entre los dos átomos pero no por igual. Por ejemplo, en la molécula de HCl el átomo de cloro es más electronegativo, lo que indica que tiene mayor tendencia a atraer la nube electrónica hacia sí que el hidrógeno, con lo que la molécula es eléctricamente asimétrica con más carga negativa concentrada en el átomo de Cl y una cierta carga positiva en el átomo de H; se crea un momento dipolar.



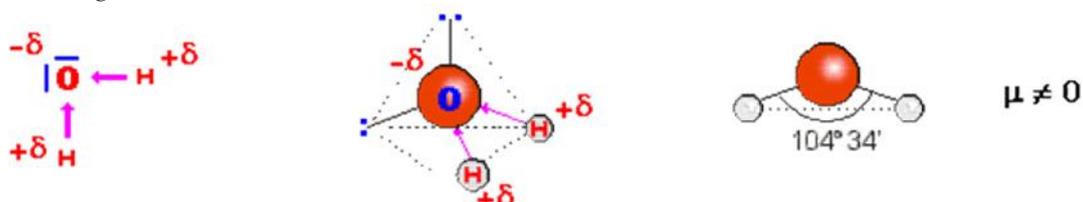
Algunos ejemplos de este tipo de enlaces son:

- el cloruro de hidrógeno:



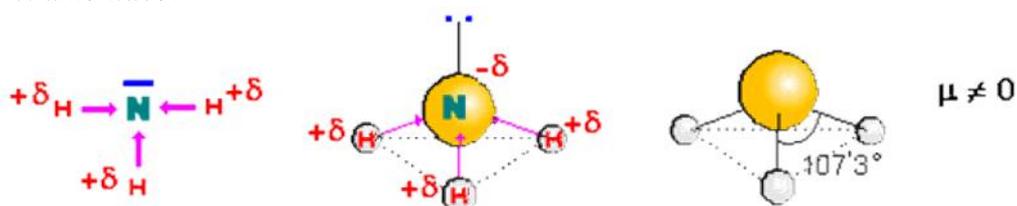
al ser el átomo de cloro más electronegativo, atraerá más hacia él los electrones del enlace y se quedará cargado con una fracción de carga negativa.

- el agua:



la diferencia de electronegatividad entre el O y el H explica su elevada polaridad y esto hace que pueda utilizar como disolvente.

- el amoníaco:

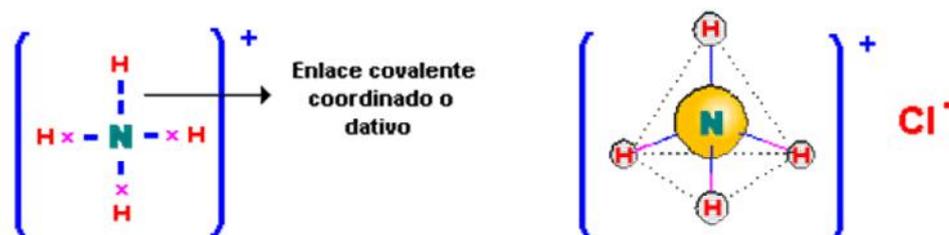


la molécula de amoníaco posee tres enlaces simples polares.

c) enlace covalente coordinado o dativo: Es un enlace covalente en el que el par de e^- que se comparte es aportado por un solo átomo. A los compuestos con este tipo de enlace se llaman complejos. Algunos compuestos con este tipo de enlace son:

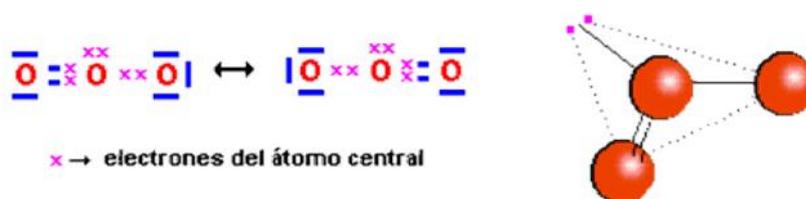
- *el ion amonio*; por ejemplo en el cloruro amónico (NH_4Cl):

es un compuesto iónico, forma redes tridimensionales, ($\text{NH}_4^+ \text{Cl}^-$), donde el catión no es un átomo sino una especie poliatómica en la que sus átomos están unidos por enlaces covalentes, uno de ellos coordinado o dativo:



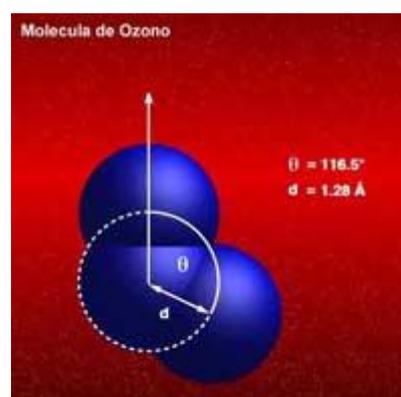
uno de los H ha perdido un e^- y forma con el par de electrones que tiene el N un enlace covalente coordinado.

- *el ozono*: En el enlace simple, es el átomo central el que aporta los dos electrones del enlace:



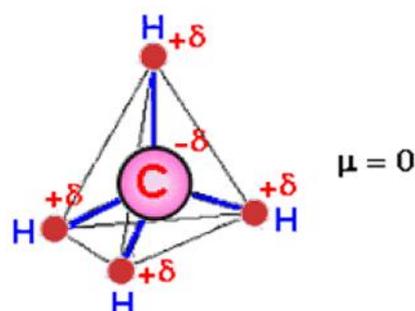
aparecen dos estructuras para el Ozono que se denominan resonantes.

El **fenómeno de resonancia** surge ante la imposibilidad de poder representar el estado electrónico de una molécula o ion mediante una sola estructura. En estos casos, ninguna de las dos (o más) estructuras resonantes tienen existencia real, sino una hibridación de todas ellas. Por ejemplo, en el caso del ozono, los dos enlaces que forma el átomo central con los de los extremos, son exactamente iguales a pesar de que, en la estructura de Lewis, uno de ellos sea un enlace covalente doble y el otro un enlace covalente coordinado. Este fenómeno de la resonancia es bastante frecuente.



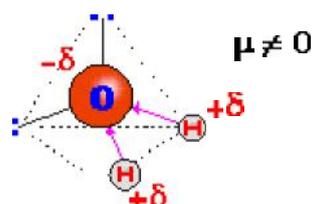
4.3.3.- Estructuras electrónicas o diagramas de Lewis.

No debe confundirse un enlace polar con una molécula polar. Así, por ejemplo, el enlace C-H es covalente polar, pero la molécula de metano (CH_4) es apolar ya que dicha molécula tiene una estructura tetraédrica que anula todos sus momentos dipolares.

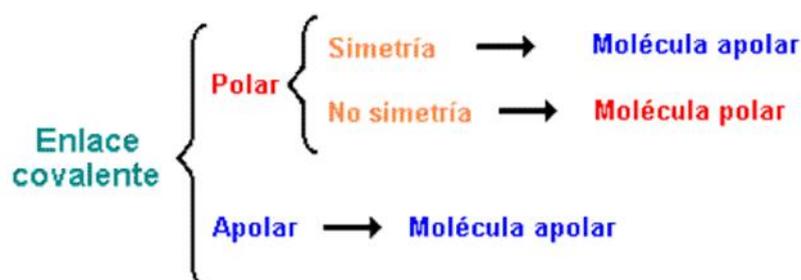


Para conocer si una molécula es polar o no hay que conocer su estructura espacial.

El H_2O es la molécula polar más característica. El ángulo que forman los dos enlaces O-H es de $104'5''$ debido a la repulsión que ejercen sobre los electrones de los enlaces, dos pares de electrones que posee el oxígeno:



En definitiva, una molécula con enlaces covalentes apolares, será necesariamente apolar, pero una molécula con enlaces covalentes polares, será apolar si tiene simetría y polar si carece de ella, es decir:



Para ver la estructura espacial de las moléculas y conocer, en definitiva su polaridad, es muy cómodo utilizar las estructuras de Lewis. Aunque ya las hemos utilizado, vamos a profundizar un poco más en ellas.

d) Se buscan las cargas formales de cada uno de los átomos en las estructuras obtenidas (analizando los electrones que hay alrededor de cada uno de los átomos); y la más estable será la que menos carga formal obtenga.



datos experimentales indican que el dióxido de carbono es una estructura resonante de las tres que hay representadas, teniendo mayor peso específico la del centro.

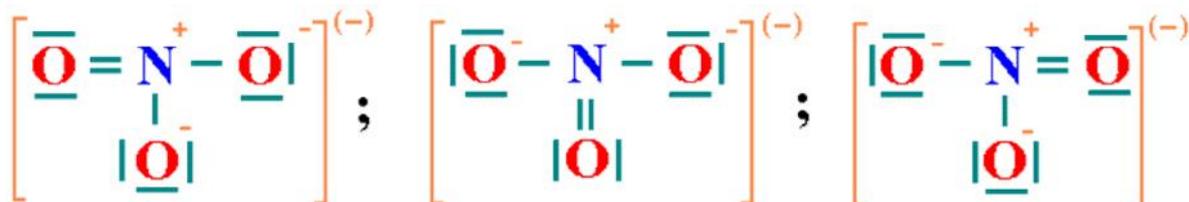
Veamos otro ejemplo representando la estructura de Lewis del ion nitrato (NO_3^-):

$$\text{a) } n^\circ \text{ de enlaces} = \frac{4 \cdot 8 - (6 \cdot 3 + 5 + 1)}{2} = 4$$

b) esqueleto:



c) y d) (entre paréntesis figuran las cargas globales):



datos experimentales demuestran que el ion nitrato es resonante siendo las tres estructuras equivalentes.

Como hemos indicado anteriormente, hay elementos que no cumplen la regla del octeto.

Las causas pueden ser:

- 1.- Tener pocos electrones de valencia, no llegando a completar el octeto. Así le ocurre al hidrógeno, alcalinos, alcalinotérreos, térreos y carbonoideos con valencia +2.
- 2.- Tener muchos electrones de valencia, pudiendo ampliar el octeto al poseer orbitales atómicos vacíos en la capa de valencia.

generalmente es el átomo central de la molécula el que deja de cumplir la regla del octeto. Vamos a verlo con algunos ejemplos:

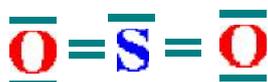
2b) *Dióxido de azufre* (SO₂):

$$n^{\circ} \text{ de enlaces} = \frac{3 \cdot 8 - (6 \cdot 2 + 6)}{2} = 3$$

si nos fijamos del resultado de esa ecuación, 3 enlaces, la estructura de Lewis sería:



serían dos estructuras resonantes con cargas formales, pero al poderse ampliar el octeto en el átomo de azufre, ya que pertenece al 3^{er} periodo:

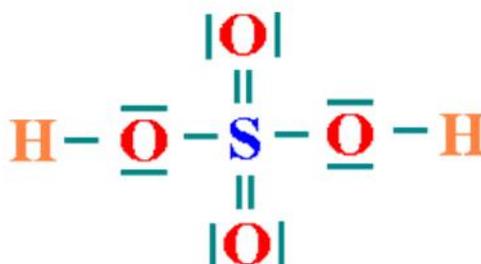


y datos experimentales demuestran la existencia de dobles enlaces. Siempre que sea posible eliminar cargas formales ampliando el octeto, se debe hacer.

2c) *Ácido sulfúrico* (H₂SO₄): Su estructura de Lewis sería:

$$n^{\circ} \text{ de enlaces} = \frac{5 \cdot 8 + 2 \cdot 2 - (6 \cdot 4 + 6 + 2 \cdot 1)}{2} = 6$$

para unir todos los átomos, pero, como el azufre pertenece al tercer período puede ampliar el octeto, y sabiendo que al tratarse de un ácido, los hidrógenos deben estar unidos directamente al oxígeno, se puede ver fácilmente que la estructura de Lewis del ácido sulfúrico será:



4.3.4.- Estructuras espaciales de moléculas.

Una vez realizada la estructura de Lewis de una molécula o ion en el plano, se puede representar su estructura geométrica en el espacio con sólo considerar los pares de electrones enlazantes y no enlazantes que tiene el átomo central de la molécula, teniendo en cuenta que éstos tenderán a separarse el máximo unos de otros, en base a las repulsiones electrostáticas que deben existir. Hay que tener en cuenta que el ángulo de separación entre ellos, también depende del núcleo del átomo al que esté enlazado el átomo central. La tabla de la página 84 nos indica las formas geométricas más corrientes:

Si la molécula posee dobles o triples enlaces, en cuanto a su estructura geométrica, se trata como si fuese un enlace simple.

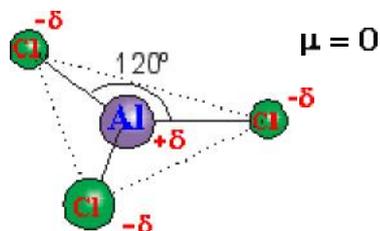
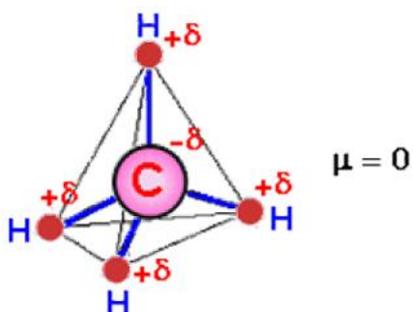
Como se ha comentado con anterioridad, una molécula covalente será polar, en el caso de que, teniendo enlaces covalentes polares, no posee una simetría, por lo que no se anularan los momentos dipolares de cada uno de sus enlaces y la molécula global tendrá un momento dipolar permanente. Por el contrario, si la molécula posee simetría, se anularán sus momentos dipolares y será apolar. Por ejemplo:

a) *Hidruro de berilio* (BeH_2):

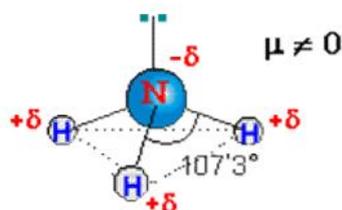


a pesar de que los enlaces son polares, al ser una molécula lineal y simétrica, será apolar ya que se anulan sus momentos dipolares.

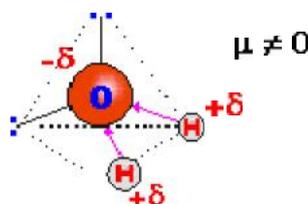
Lo mismo le ocurre al metano (CH_4) o al tricloruro de aluminio (AlCl_3) cuyas estructuras de Lewis ya hemos visto y tienen una estructura espacial tetraédrica y trigonal respectivamente, siendo las dos simétricas y por lo tanto apolares. El elemento más electronegativo es el que se carga negativamente en el dipolo.



b) *Amoniaco* (NH_3): Tiene una estructura espacial de pirámide trigonal que no es simétrica debido al par de electrones antienlazantes que tiene el nitrógeno, y por lo tanto será polar:

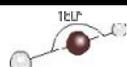
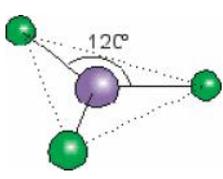
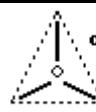
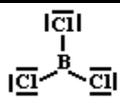
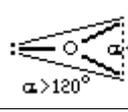
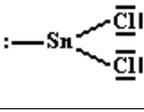
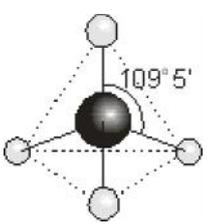
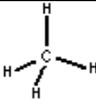
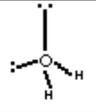
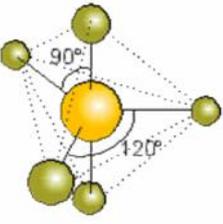
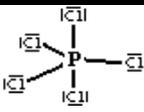
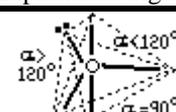
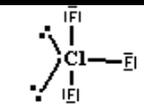
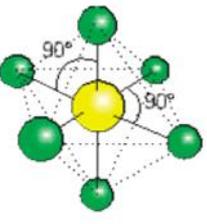
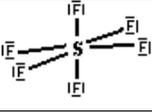
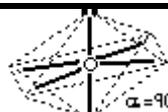
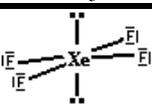


y el agua que también es una molécula polar; tiene una estructura tetraédrica angular que tampoco es simétrica debido a los dos pares de electrones que tiene libres el oxígeno:



A continuación te presentamos una tabla con las estructuras geométricas de moléculas más sencillas y un ejemplo de cada una de ellas. Para deducirlas debes tener en cuenta los siguientes aspectos:

- El número total de pares de electrones que hay alrededor del átomo central te ayudará a determinar la forma espacial de la molécula.
- Fíjate bien en los pares que son enlazantes y no enlazantes ya que es lo que te permitirá deducir si la molécula es polar o apolar.
- Por otro lado, también hay que tener en cuenta si los átomos a los que se une el átomo central son iguales o no, ya que la diferencia de electronegatividad entre ellos también influirá en la simetría o no de la molécula.
- Recuerda que si existen dobles o triples enlaces, a la hora de establecer la estructura espacial de la molécula contarán como si fuese un solo enlace, sólo que al haber más electrones en una zona concreta, los ángulos con respecto a los enlaces adyacentes serán mayores.

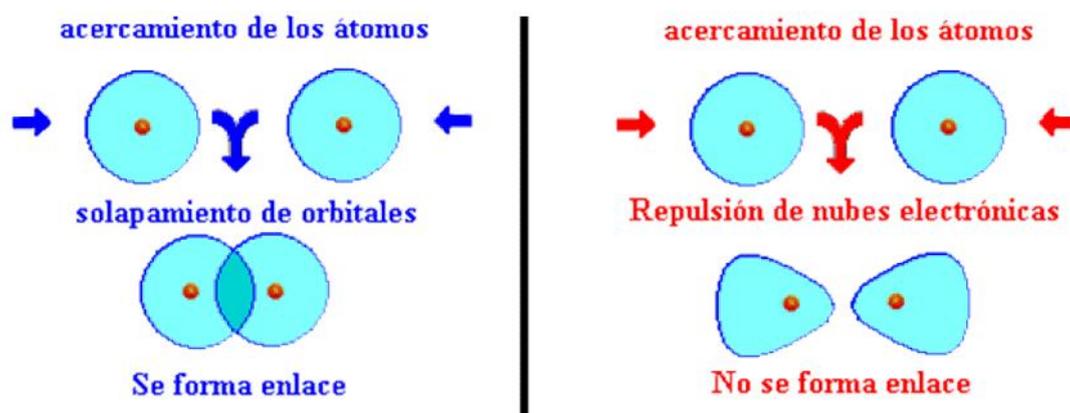
Pares de electrones del átomo central		Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Forma geométrica	Ejemplo	
2		2	0	$\alpha = 180^\circ$ 	$\text{H}-\text{Be}-\text{H}$	
				lineal	lineal	BeH_2
3		3	0	$\alpha = 120^\circ$ 		
				Triangular plana	Triangular plana	BCl_3
		2	1			
				Triangular plana	Angular trigonal	SnCl_2
4		4	0	$\alpha = 109^\circ 5'$ 		
				Tetraédrica	Tetraédrica	CH_4
				3	1	$\alpha > 109^\circ 5'$ $\alpha < 109^\circ 5'$ 
		2	2	$\alpha > 109^\circ 5'$ $\alpha < 109^\circ 5'$ 		
	Tetraédrica			Angular tetraédrica	H_2O	
5		5	0	$\alpha = 120^\circ$ $\alpha = 90^\circ$ 		
				Bipirámide trigonal	Bipirámide trigonal	PCl_5
				4	1	$\alpha > 120^\circ$ $\alpha < 120^\circ$ $\alpha = 90^\circ$ 
		3	2	$\alpha \gg 120^\circ$ $\alpha \ll 120^\circ$ $\alpha = 90^\circ$ 		
	Bipirámide trigonal			Forma de T	ClF_3	
6		6	0	$\alpha = 90^\circ$ 		
				Octoédrica	Octoédrica	SF_6
				5	1	$\alpha > 90^\circ$ $\alpha < 90^\circ$ 
		4	2	$\alpha = 90^\circ$ 		
	Octoédrica			Cuadrangular plana	XeF_4	

4.3.5.- Teoría del enlace de valencia (TEV).

La mecánica cuántica proporciona una explicación más completa del enlace covalente de lo que lo hace la teoría de Lewis de la compartición de electrones, justificando el papel del par de electrones en la constitución de los enlaces y, al mismo tiempo, describiendo la geometría de las moléculas formadas.

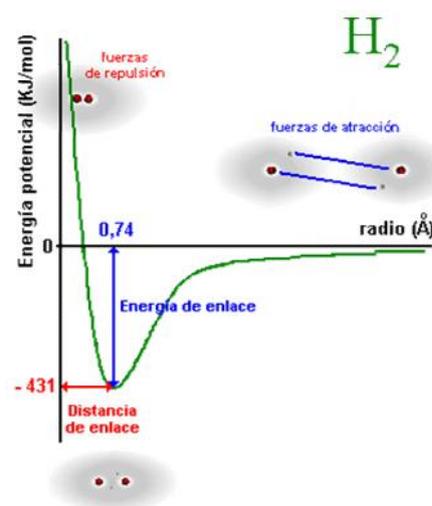
Consideremos la formación de una molécula de hidrógeno (H_2). Cuando los dos átomos de Hidrógeno se aproximan, sus núcleos atraen cada vez más a las nubes electrónicas del otro átomo. Llega un momento en que las nubes se solapan parcialmente, con lo que la densidad electrónica entre los núcleos se ve incrementada. Es esta densidad electrónica elevada la que mantiene unidos, por atracción electrostática, los dos núcleos, quedando así constituida la molécula.

La formación del enlace H – H, puede expresarse, por tanto, diciendo que se solapan los orbitales 1s de los dos átomos. El solapamiento supone que ambos orbitales comparten una región común del espacio entre los dos núcleos, donde podríamos decir que la probabilidad de encontrar al electrón es máxima.



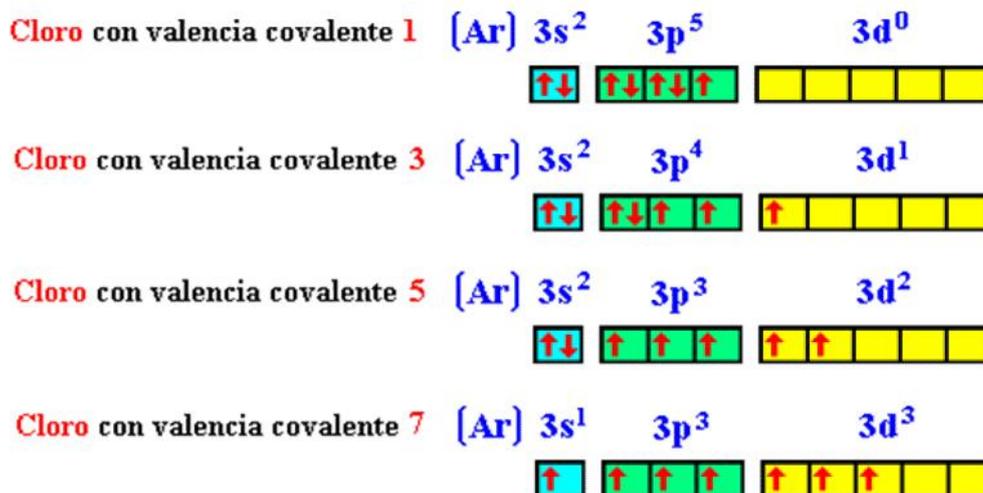
Desde el punto de vista energético, cuando los átomos están muy separados, no hay interacción ($E=0$). Al aproximarse, comienza el solapamiento de los orbitales 1s y la fuerza de atracción entre los átomos se incrementa, con lo que la energía potencial del sistema disminuye y llega a alcanzar un mínimo. En este momento, el solapamiento es el óptimo y la distancia entre los núcleos es precisamente la longitud del enlace H – H de la molécula H_2 . Si a partir de este momento, seguimos acercando los átomos, la energía potencial aumenta debido a la repulsión ejercida por los dos núcleos de los dos átomos.

Una idea que conviene subrayar es que, para que el proceso sea favorable, los orbitales atómicos que se solapan espacialmente deben poseer electrones desapareados con espines opuestos (para no incumplir el principio de exclusión de Pauli). Esto también explicaría la razón por la que los gases nobles no se unen ni siquiera consigo mismos, ya que no tienen electrones desapareados.



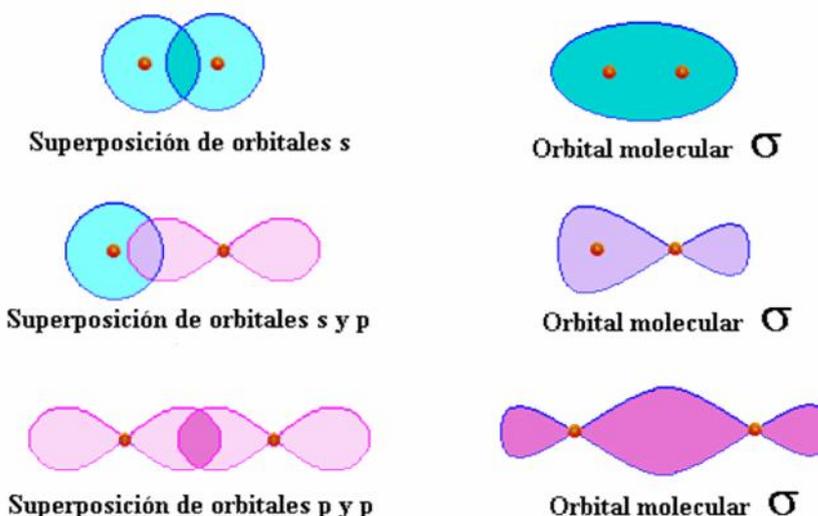
Así pues, la covalencia de un elemento o, el número de enlaces covalentes que podrá formar es igual al número de electrones que posee desapareados. Por ejemplo el flúor tiene una covalencia de 1, el oxígeno de 2.

Algunos elementos tienen más de una covalencia ya que al tener orbitales vacíos pueden aparear electrones, por ejemplo, el cloro tiene una covalencia de 1, 3, 5 ó 7 porque posee los orbitales "3d" vacíos.



En la teoría de los enlaces de valencia (TEV), los orbitales moleculares se forman por solapamiento de los orbitales atómicos. Para un mejor solapamiento de los orbitales atómicos de partida, estos deben tener tamaño y energías parecidas, así como estructuras espaciales adecuadas. La simetría de los orbitales moleculares formados, depende de los orbitales atómicos que participan en el enlace y de la forma en que se solapan. No vamos a profundizar mucho en el tema, pero comentaremos que existen dos posibilidades:

a) **Orbitales moleculares sigma (σ)**: Los orbitales atómicos se solapan frontalmente y se produce un único solapamiento de las respectivas nubes electrónicas. Tiene un eje de simetría con respecto a la línea que une los dos núcleos. Una rotación con respecto a dicho eje no produce ningún cambio. La máxima probabilidad de encontrar a los electrones en este tipo de orbitales, se concentra entre los dos núcleos fundamentalmente. A continuación te presentamos algunos ejemplos:



b) **Orbitales moleculares pi (π)**: Los orbitales atómicos se solapan lateralmente y se produce dos o más solapamiento de las respectivas nubes electrónicas. Existe un plano nodal de simetría que incluye a los núcleos y la máxima probabilidad de encontrar a los electrones en el orbital molecular formado no se concentra entre los núcleos:



Un orbital molecular es tanto más estable cuanto mayor es el grado de solapamiento entre los orbitales atómicos que lo forman. Los orbitales moleculares σ son más estables que los π porque el grado de solapamiento de los orbitales “s” es mayor que el de los “p”.

4.3.6.- La teoría de los orbitales moleculares (TOM).

Dentro del marco de la Mecánica cuántica, existe otra teoría que también trata de explicar el enlace covalente. Esta es la teoría de los orbitales moleculares (TOM).

La TOM es una teoría más completa, pero también más difícil de manejar y entender. Estudia la molécula como un conjunto de núcleos y electrones para los cuales hay que resolver la ecuación de Schrödinger. De esta manera, se obtienen los orbitales del ámbito de toda la molécula que nos indican, al igual que los orbitales atómicos, la zona del espacio que encierra entre un 90 y un 99% de la probabilidad de encontrar a los electrones de la molécula.

Los orbitales moleculares se forman por combinación de orbitales atómicos. Si esta combinación da lugar a un orbital molecular de menor energía que los dos orbitales atómicos de partida se llama enlazante, y si es de mayor energía antienlazante. En general, los e^- sólo se disponen en orbitales moleculares antienlazantes cuando la molécula se encuentra en estado excitado, al haber absorbido energía.

4.3.7.- Hibridación de orbitales.

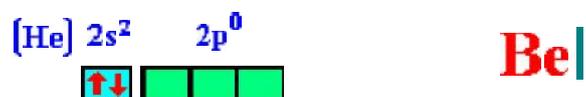
En algunas moléculas se presenta el problema de explicar cómo a partir de orbitales atómicos diferentes se pueden formar enlaces idénticos. Hay que suponer que durante la reacción se produce un proceso de hibridación o recombinación de orbitales atómicos puros, resultando unos nuevos orbitales atómicos híbridos. Dichos orbitales se caracterizan por:

- 1) Se produce el mismo número de orbitales híbridos que orbitales atómicos de partida.
- 2) Son todos iguales, energéticamente y formalmente. Sólo se diferencian en su orientación espacial.
- 3) Para que pueda existir hibridación, la energía de los orbitales atómicos de partida debe ser muy similar.
- 4) Los ángulos entre ellos son iguales.

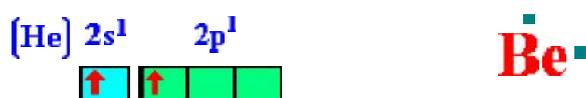
Vamos a ver algunos ejemplos:

a) *Hidruro de berilio* (BeH_2); hibridación sp:

El Berilio tiene de número atómico $Z = 4$ y su estructura electrónica es:

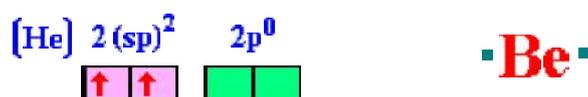


con lo que al no tener electrones desapareados, no podría formar enlaces covalentes. Sin embargo, con un poco de energía, adquiere la siguiente configuración:



ya que al tener los orbitales atómicos 2s y 2p energías muy parecidas, resulta fácil que un electrón de los situados en el orbital 2s pase a ocupar un orbital 2p vacío evitando así la repulsión que podría existir al haber dos electrones en el mismo orbital 2s. De esta manera, al tener dos electrones desapareados podría formar dos enlaces covalentes.

Al unirse con el hidrógeno, se puede pensar que el estar los dos electrones en orbitales atómicos distintos (en energía, forma, tamaño y orientación), los enlaces sean distintos, pero experimentalmente se comprueba que los dos enlaces son idénticos. Esto se explica diciendo que ha habido una homogeneización de un orbital s y otro p (hibridación sp). Se forman dos orbitales híbridos sp:



La molécula de hidruro de berilio es lineal.



b) *Borano* (BH_3); hibridación sp^2 :

El Boro tiene de número atómico $Z = 5$ y su estructura electrónica es:



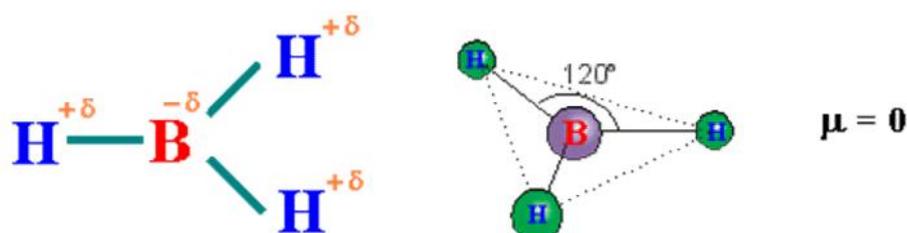
al tener un electrón desapareado, sólo podría formar un enlace. Sin embargo, por la misma razón que en el caso anterior, con un poco de energía, adquiere la siguiente configuración:



Así, al tener tres electrones desapareados puede formar tres enlaces covalentes. Pero, al igual que antes los tres enlaces son iguales a pesar de que los orbitales atómicos en los que están los electrones a compartir son distintos. En este caso se produce una homogeneización de un orbital s y dos p (hibridación sp^2). Se producen tres orbitales híbridos sp^2 :

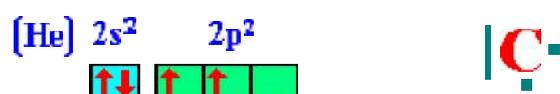


La molécula de trihidruro de boro o borano es trigonal, cada enlace está separado del otro formando un ángulo de 120° :



c) *Metano* (CH_4); hibridación sp^3 :

El Carbono tiene de número atómico $Z = 6$ y su estructura electrónica es:



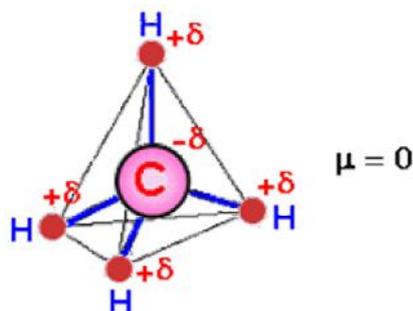
tiene dos electrones desapareados y puede formar dos enlaces. Así es su configuración cuando actúa con valencia 2. Pero la mayoría de los compuestos del carbono tienen lugar cuando éste actúa con valencia 4, adquiriendo la siguiente configuración:



Así, al tener cuatro electrones desapareados puede formar cuatro enlaces covalentes. Experimentalmente, también se ha comprobado que los cuatro enlaces son iguales, produciéndose una homogeneización de un orbital s y tres p (hibridación sp^3). Se producen cuatro orbitales híbridos sp^3 :

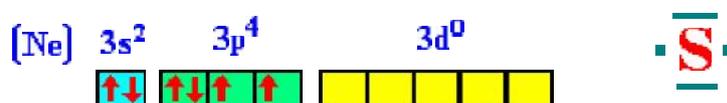


La molécula de tetrahidruro de carbono o metano es tetragonal.



d) *Hexafluoruro de azufre* (SF_6); hibridación sp^3d^2 :

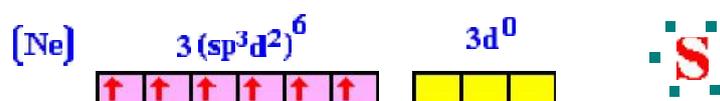
El Azufre tiene de número atómico $Z = 16$ y su estructura electrónica es:



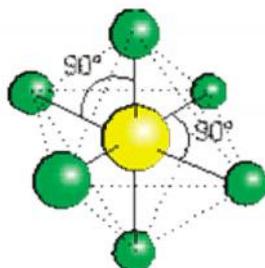
tiene dos electrones desapareados y puede formar dos enlaces. Así es su configuración cuando actúa con valencia 2. Pero, al tener los orbitales 3d una energía similar a la de los 3s y 3p, con un poco más de energía, desaparea todos sus electrones adquiriendo la configuración:



Los seis enlaces que puede formar son iguales, produciéndose una homogeneización de un orbital s, tres p y dos d, es decir, se forman seis orbitales híbridos sp^3d^2 :



La molécula de hexafluoruro de azufre tiene una estructura espacial octoédrica.



4.3.8.- Enlaces intermoleculares.

Entre las moléculas con enlaces covalentes se establecen fuerzas de atracción eléctrica, cuya intensidad depende de la naturaleza de las mismas.

Vamos a diferenciar entre atracciones de tres tipos:

- a) Fuerzas de atracción entre dipolos.
- b) Enlaces por puente de hidrógeno.

a) *Fuerzas de atracción entre dipolos*: Fueron postuladas por Van der Waals en 1873, y a pesar de que son mil veces menores que un enlace covalente, sin ellas no se podría explicar la licuación de determinados gases formados por moléculas no polares.

Son fuerzas débiles de atracción entre dipolos que pueden ser inducidos (Fuerzas de London) o permanentes (Fuerzas de Van der Waals).

- a1) Fuerzas de London: se producen entre sustancias no polares como el N_2 , O_2 , etc. e incluso entre átomos: He, Ne, etc. Si bajamos mucho la temperatura, los electrones de dichas sustancias pierden energía cinética, y entonces, es posible, que en un instante determinado exista más densidad de carga electrónica en un extremo de la molécula que en otro, creándose un dipolo inducido. Si esto ocurre en moléculas (o átomos) contiguos, puede hacer que se atraigan formando uniones entre ellas, pudiéndose llegar a la licuación de dichos gases. A medida que el átomo o la molécula sea más grande, este dipolo inducido será más fácil de crear.
- a2) Fuerzas de Van der Waals: si las moléculas ya son polares, los dipolos se orientan para atraerse con el polo de signo contrario de la molécula vecina, existiendo fuerzas de atracción entre ellas. Aunque estas fuerzas siguen siendo débiles, son mayores que las de London, en las que el dipolo tiene que ser inducido.

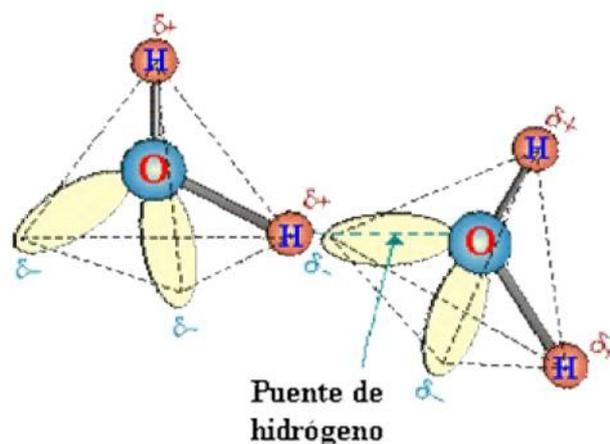


b) enlaces por puente de hidrógeno: Para que se produzca un enlace de este tipo, deben cumplirse dos condiciones:

- 1.- El hidrógeno se une a un elemento muy electronegativo (F, Cl, O o N), con lo que, al ser la diferencia de electronegatividad elevada, se forma un enlace covalente muy polar, donde el hidrógeno es el que se carga positivamente.
- 2.- El elemento al que se une el hidrógeno debe tener pares de electrones que no formen parte del enlace covalente polar con el hidrógeno.
- 3.- La molécula debe ser polar, es decir, debe carecer de simetría que anule los dipolos creados.

Entonces se produce una doble atracción de tipo electrostático entre:

- 1.- dipolos de moléculas contiguas, es decir, el polo positivo de una molécula con el negativo de otra.
- 2.- el polo positivo del dipolo de una molécula con los pares de electrones no enlazantes del elemento al que se une el hidrógeno, de otra molécula.



Este es el llamado enlace por puente de hidrógeno que es mucho más fuerte que las fuerzas de Van der Waals.

Hay que señalar también que los enlaces por puente de hidrógeno se pueden dar entre moléculas diferentes (intermoleculares) o dentro de una misma molécula si su geometría es la adecuada (intramoleculares).

Es importante que se entienda que tanto las fuerzas de Van der Waals como los enlaces por puente de hidrógeno son mucho más débiles que los enlaces covalentes, y de hecho, cuando calentamos una sustancia covalente, se rompen de forma relativamente fácil los enlaces intermoleculares pero nunca los enlaces covalentes que unen a los distintos átomos de la molécula. Por ejemplo, cuando hervimos agua, no obtenemos hidrógeno y oxígeno sino vapor de agua, es decir, se han roto los enlaces por puente de hidrógeno pero no los enlaces covalentes que unen a los átomos de hidrógeno con el de oxígeno.

4.3.9.- Propiedades de las sustancias moleculares.

A temperaturas bajas, todos estos compuestos se encuentran en estado sólido formando redes cristalinas muy débiles. La formación de estas redes se explica por las débiles fuerzas de Van der Waals que se originan por atracción electrostática entre dipolos, ya sean permanentes o inducidos. Los de las moléculas apolares son sólidos blandos (como por ejemplo los de yodo), mientras que los de las sustancias polares son algo más duros ya que las fuerzas que unen las moléculas son algo más grandes, por ejemplo en el hielo.

En general tienen puntos de fusión y ebullición muy bajos, y van aumentando en función de la mayor polaridad de las moléculas o del mayor peso molecular, ya que, de esta manera, al ser más fácil crear el dipolo, las uniones serán más fuertes, por ejemplo:

Sustancia	Punto de ebullición (°C)	Peso molecular (umas)	Momento bipolar (D)
H ₂ O	100	18	1'85
CH ₄	- 164	16	0
CH ₃ - CH ₃	- 89	30	0
CH ₃ - CH ₂ - CH ₃	- 42	44	0'084
CH ₃ - CH ₂ - OH	78'5	46	1,69

Las sustancias apolares no son conductoras de la corriente eléctrica ya que no poseen partículas cargadas que puedan quedar libres; sin embargo, las polares, al tener dipolos permanentes, pueden conducir, aunque poco, la electricidad.

Dichas sustancias suelen presentarse a temperatura ambiente y presión atmosférica como gases, aunque a medida que las fuerzas intermoleculares aumentan, pueden llegar a ser líquidos e incluso sólidos.

Cabe resaltar, también, que los líquidos covalentes polares, como el agua, tienden a ser muy buenos disolventes de las sustancias iónicas, pero la tendencia de las sustancias moleculares es a disolverse en disolventes apolares.

4.4.- Las sustancias covalentes (macromoléculas).

4.4.1.- Enlaces de las sustancias covalentes.

Las sustancias covalentes son gigantescas agrupaciones de átomos unidos por enlaces covalentes formando sólidos con redes tridimensionales. Dichos átomos deben tener una electronegatividad elevada, junto con la capacidad de tener tres o cuatro electrones enlazantes para formar fuertes enlaces covalentes. Se puede considerar a todo el sólido como una gran molécula.

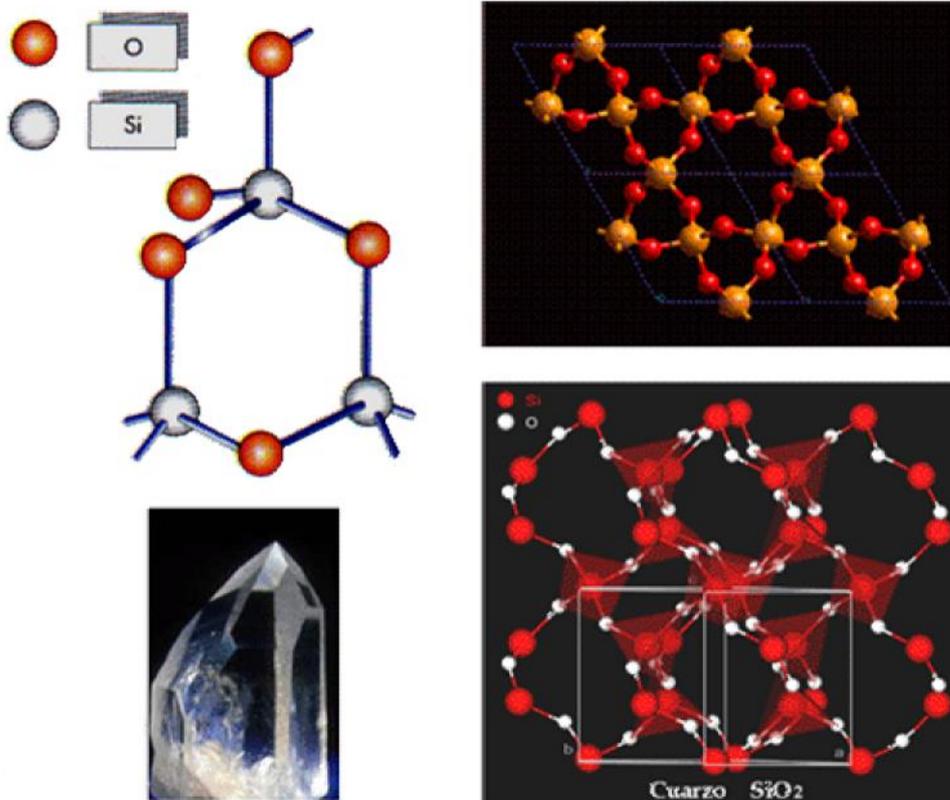
Ejemplos de estas sustancias son el carbono diamante, el cuarzo (dióxido de silicio), el carburo de Silicio, etc.

4.4.2.- Propiedades de las sustancias covalentes.

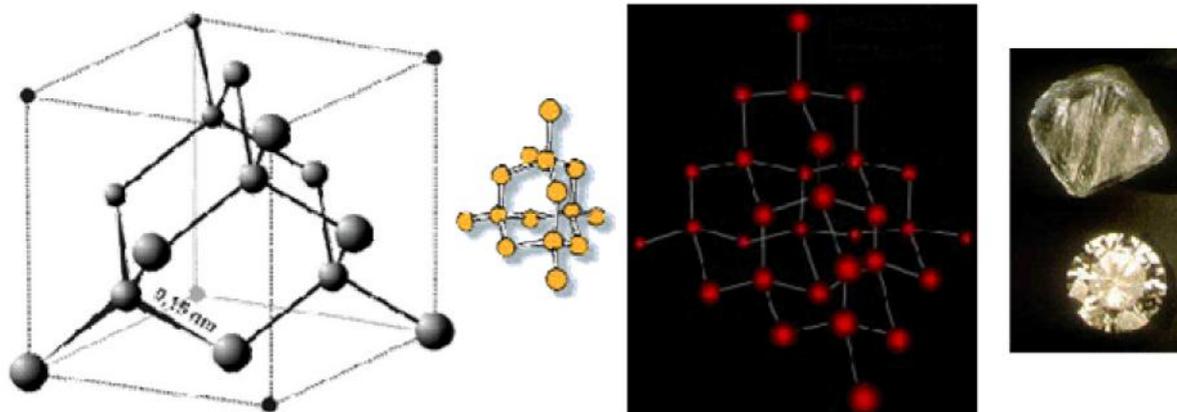
Como los átomos están unidos por fuertes enlaces covalentes muy estables, no es de extrañar que, estos sólidos sean extremadamente duros, tengan puntos de fusión muy altos y sean virtualmente insolubles; sólo se disuelvan en compuestos que reaccionen químicamente con ellos. Tienen escasa conductividad eléctrica debido a la gran localización de los electrones en las regiones donde se encuentran los enlaces covalentes que hacen que sean incapaces de moverse libremente por la acción de un campo eléctrico externo.

4.4.3.- Estructuras de algunas sustancias covalentes.

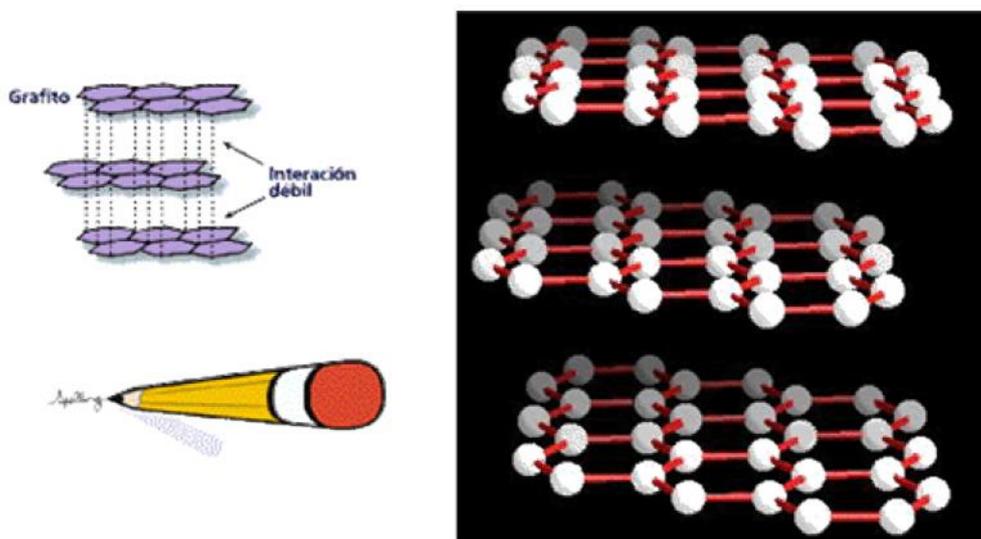
a) Cuarzo: El cuarzo es una estructura particular de cristalizar el dióxido de silicio. Cada átomo de Si se encuentra enlazado con 4 de O y a su vez cada O está unido a dos Si mediante enlaces covalentes polares, formando una red de gran número de átomos, (SiO_2).



b) Carbono diamante y carbono grafito: En el carbono diamante, los átomos de carbono se unen para formar un retículo cristalino de dimensiones infinitas, en la que cada uno de ellos se une a otros cuatro mediante enlaces covalentes puros formando estructuras tetraédricas. Esto explica su elevada dureza, su baja reactividad, su nula conductividad eléctrica y su casi infusibilidad.



Por otra parte, el carbono grafito, es otra estructura cristalina del carbono. Mientras que el carbono diamante es una red tridimensional, el grafito es un sólido con redes en forma de capa. Contiene agrupaciones de átomos de carbono unidos por enlaces covalentes puros, de dimensiones infinitas, pero en dos direcciones. De los cuatro electrones que tiene cada uno de los átomos de carbono, tres se utilizan para unirlos con un enlace covalente puro a otros tres en un mismo plano formando estructuras hexagonales de seis átomos, y el cuarto electrón está deslocalizado entre los planos tratando de unirlos. En virtud de esta estructura, el carbono grafito es conductor de la electricidad y del calor, carece de la dureza del diamante y se exfolia fácilmente, es decir, se puede laminar.



4.5.- Las sustancias metálicas.

4.5.1.- El enlace metálico.

La gran mayoría de los elementos conocidos son metálicos. Todos ellos son conductores del calor y de la electricidad. Se caracterizan por:

- a) Tener pocos electrones en su última capa.
- b) Bajo potencial de ionización.

Los compuestos formados entre los metales se llaman aleaciones y no obedecen, generalmente a las reglas de la estequiometría; así, el cobre disuelve al cinc en cantidades que pueden variar desde la traza hasta el 38'4%. Cualquier aleación de estos dos elementos entre esos dos porcentajes recibe el nombre de latón, y como no posee una composición definida se le clasifica como una simple disolución, aunque sus iones estén unidos por fuertes enlaces metálicos.

Todavía hoy no se conoce un modelo que explique de forma convincente como se unen los átomos de los metales. Estudios de rayos X confirman que en la red cristalina existen iones. Sin embargo debe descartarse el modelo de enlace iónico porque ello supondría la transferencia de electrones lo cual no es lógico en átomos iguales. Por otra parte el enlace covalente también queda descartado ya que en este caso los e^- estarían localizados y los metales no conducirían la electricidad lo que no es cierto.

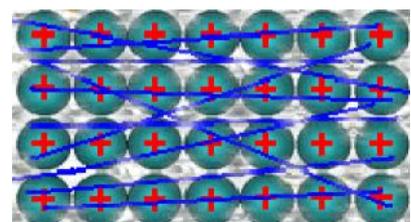
Para explicar los hechos existen dos teorías: el modelo del gas de electrones y la teoría de bandas que a continuación pasamos a detallar.

4.5.2.- El modelo del gas de electrones.

Es el modelo más sencillo basado en la intuición más que en conocimientos científicos rigurosos y está sustentado en las siguientes hipótesis:

- Los átomos metálicos pierden sus electrones de la capa de valencia quedándose cargados positivamente.
- Los cationes forman una red tridimensional ordenada y compacta cuya estructura depende en gran medida del tamaño de los cationes del metal.
- Los electrones de valencia liberados ya no pertenecen a cada ión sino a toda la red cristalina, rodeando a los cationes como si fuesen un gas de electrones, neutralizando la carga positiva.
- El gas de electrones se mueve libremente dentro de la red cristalina de cationes y no puede escapar de ella debido a la atracción electrostática con los cationes.

es decir, el modelo sugiere que los electrones de valencia están totalmente libres y deslocalizados, formando una nube electrónica que interactúa simultáneamente con muchos cationes. Esto explicaría la presencia de iones y la conductividad eléctrica de los metales. Por lo tanto, al hablar de un metal como el Fe, habría que hablar de una gran macromolécula Fe_n .



4.5.3.- La teoría de bandas.

La teoría de bandas está basada en la mecánica cuántica y procede de la teoría de los orbitales moleculares (TOM). En esta teoría, se considera el enlace metálico como un caso extremo del enlace covalente, en el que los electrones de valencia son compartidos de forma conjunta y simultánea por todos los cationes. Desaparecen los orbitales atómicos y se forman orbitales moleculares con energías muy parecidas, tan próximas entre ellas que todos en conjunto ocupan lo que se denomina una “banda de energía”.

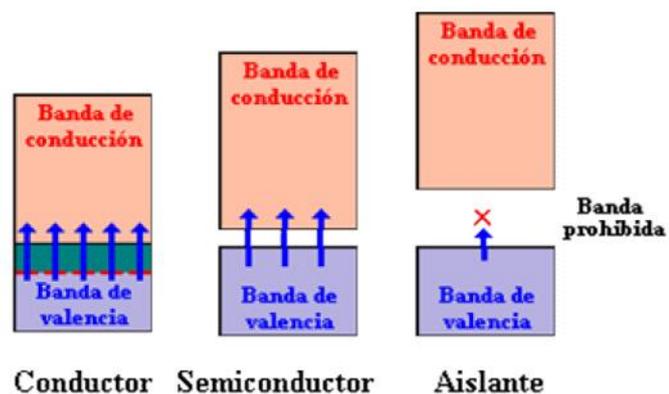
Aunque los electrones van llenando los orbitales moleculares en orden creciente de energía, estas son tan próximas que pueden ocupar cualquier posición dentro de la banda.

La banda ocupada por los orbitales moleculares con los electrones de valencia se llama banda de valencia, mientras que la banda formada por los orbitales moleculares vacíos se llama banda de conducción. A veces, ambas bandas se solapan energéticamente hablando.

Este modelo explica bastante bien el comportamiento eléctrico no solo de las sustancias conductoras sino también de las semiconductoras y las aislantes.

En los metales, sustancias conductoras, la banda de valencia se solapa energéticamente con la banda de conducción que está vacía, disponiendo de orbitales moleculares vacíos que pueden ocupar con un mínimo aporte de energía, es decir, que los electrones están casi libres pudiendo conducir la corriente eléctrica.

En los semiconductores y en los aislantes, la banda de valencia no se solapa con la de conducción. Hay una zona intermedia llamada banda prohibida. En los semiconductores, como el Silicio o el Germanio, la anchura de la banda prohibida no es muy grande y los electrones con suficiente energía cinética pueden pasar a la banda de conducción, por esa razón, los semiconductores conducen la electricidad mejor en caliente. Sin embargo, en los aislantes, la banda prohibida es tan ancha que ningún electrón puede saltarla. La banda de conducción está siempre vacía.



4.5.4.- Propiedades de las sustancias metálicas.

Las propiedades de las sustancias metálicas difieren mucho de unas a otras, pero vamos a hablar en general de todas ellas:

a) **Densidad:** El empaquetamiento compacto de los iones en la red cristalina metálica hace que las densidades de los metales sean altas en general, aunque hay mucha diversidad y excepciones, por ejemplo, los metales alcalinos y el plomo son muy blandos, mientras que el osmio y el platino son muy duros. Todos son sólidos excepto el Mercurio, el Cesio y el Francio que son líquidos.

b) **Puntos de fusión y ebullición:** En general el enlace metálico mantiene los iones fuertemente unidos dado que la mayoría poseen puntos de fusión y de ebullición muy altos, aunque hay grandes variaciones, desde el cesio, (29°C), hasta el platino que es casi infusible.

Los puntos de fusión y ebullición dependen en gran medida de dos factores:

- i) del tamaño: A medida que el tamaño del ion es mayor, el punto de ebullición disminuye.
- ii) del número de electrones cedidos por cada átomo: A medida que el número de electrones cedidos por cada átomo sea mayor, el punto de fusión será más alto.

Aquí te damos unos datos para que lo compruebes tú mismo:

Número de electrones enlazantes	1	2	3
elemento: Punto de fusión (°C)	K : 54 Rb : 39 Cs : 29	Ca : 851 Sr : 771 Ba : 717	Sc : 1397 Y : 1277 La : 887

c) **Conductividad eléctrica y térmica:** Son buenos conductores eléctricos, ya que los electrones de la nube electrónica se pueden mover con total libertad. Por la misma razón, si los metales se calientan, los electrones adquieren mayor energía cinética que se va trasladando por todo el metal.

d) **Propiedades mecánicas:** Son dúctiles (se pueden hacer hilos por estiramiento) y maleables (se pueden laminar) debido a la naturaleza de las fuerzas que mantienen unido al sólido, es decir, que siempre que la separación entre los cationes no sea muy grande, la nube electrónica los mantendrá unidos).



e) **Brillo:** Debido a la movilidad de electrones, son capaces de absorber y después remitir prácticamente todas las longitudes de onda de la luz visible, por eso en general tienen un color negrozco y opaco; el cobre y el oro no remiten una parte de la radiación azul que reciben y por eso tienen un color amarillento.

4.6.- Cuadro resumen de las propiedades de las sustancias.

Propiedad	Sustancias iónicas	Sustancias moleculares	Sustancias macromoleculares	Sustancias metálicas
Dureza	Duras pero frágiles	Blandas	Muy duras	Duras y blandas (gran variedad)
Estado a temperatura ambiente	Sólidas	Gases, líquidas y sólidas	Sólidas	Sólidas menos el Hg (líquido)
Puntos de fusión	Altos	Variados sin llegar a ser altos	Muy altos	Variados pero altos
Puntos de ebullición	Líquidos en gran rango de temperaturas	Líquidos en pequeños rangos de temperatura	Muy altos	Muy altos
Solubilidad en agua	Solubles en general	Insolubles en general	Insolubles	Insolubles en general
Solubilidad en disolventes apolares	Insolubles	Solubles en general	Insolubles	Insolubles
Conductividad eléctrica	Si disueltos o fundidos; no en estado sólido	No	No	Si
Ejemplos	NaCl HgO MgCO ₃	F ₂ CO ₂ CH ₄	Diamante (C _n) Cuarzo (SiO ₂) Carburo de Silicio	Al _n Fe _n Cr _n