

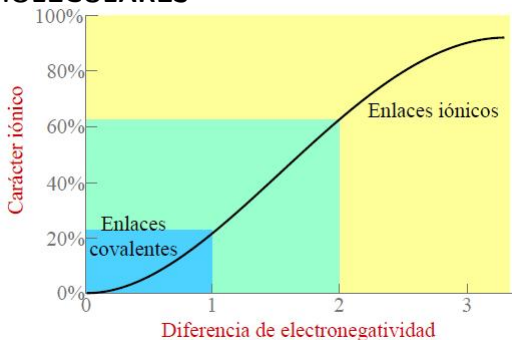
QUÍMICA ESTRUCTURAL I

Prof. Jorge Rojo Carrascosa

4 de noviembre de 2013

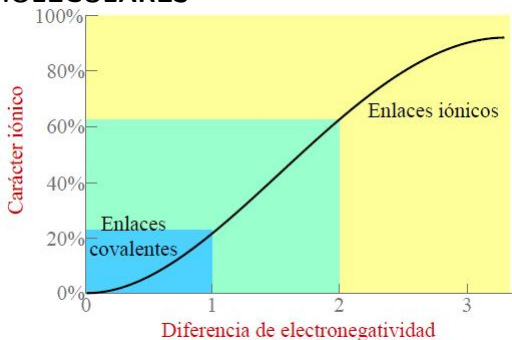
1 ENLACES INTRAMOLECULARES

- ⇒ Iónico
- ⇒ Covalente
- ⇒ Metálico



1 ENLACES INTRAMOLECULARES

- ⇒ Iónico
- ⇒ Covalente
- ⇒ Metálico



2 ENLACES INTERMOLECULARES

- ⇒ Fuerzas de Van Der Waals
- ⇒ Enlaces de Hidrógeno

Atomo muy metálico + Atomo no metálico \Rightarrow **Cristal iónico**

Atomo muy metálico + Atomo no metálico \Rightarrow **Cristal iónico**

Propiedades:

- Sólidos duros
- Altos puntos de fusión y ebullición
- Solubles en disolventes polares
- Fundidos y disueltos son conductores

Atomo muy metálico + Atomo no metálico \Rightarrow **Cristal iónico**

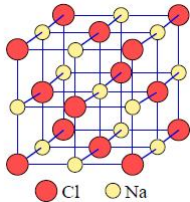
Propiedades:

- Sólidos duros
- Altos puntos de fusión y ebullición
- Solubles en disolventes polares
- Fundidos y disueltos son conductores

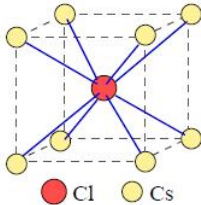
Formación del enlace:

- IONIZACIÓN (Proceso desfavorable)
- ATRACCIÓN ELECTROSTÁTICA (Proceso favorable)

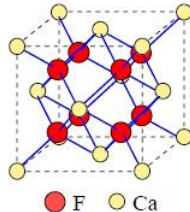
- Redes de Bravais
- Índice o Número de Coordinación



Estructura del NaCl
I.C. del NaCl (6,6)



Estructura del CsCl
I.C. del CsCl (8,8)



Estructura del CaF₂
I.C. del CaF₂ (8,4)

$$U = \frac{N_A Z_1 Z_2 e^2}{R_{eq}} A \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad [U] = \frac{J}{mol}$$

- Constante de Madelung (A): Aumento de energía
- Factor de Lande (n): Disminución de energía

$$U = \frac{N_A Z_1 Z_2 e^2}{R_{eq}} A \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad [U] = \frac{J}{mol}$$

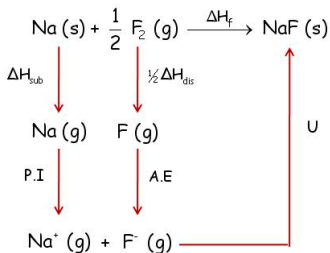
- Constante de Madelung (A): Aumento de energía
- Factor de Lande (n): Disminución de energía

Experimentalmente Ciclo de Born-Haber (Ley de Hess)

$$U = \frac{N_A Z_1 Z_2 e^2}{R_{eq}} A \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad [U] = \frac{J}{mol}$$

- Constante de Madelung (A): Aumento de energía
- Factor de Lande (n): Disminución de energía

Experimentalmente Ciclo de Born-Haber (Ley de Hess)



$$\Delta H_f = \Delta H_{\text{Sub.}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{Dis.}} + \Delta H_{\text{P.I.}} + \Delta H_{\text{A.E.}} + U$$

Enlace Metálico I

Atomo metálicos y sus aleaciones (acero(Fe + C), bronce (Cu+Sn),...)

Propiedades:

Enlace Metálico I

Atomo metálicos y sus aleaciones (acero(Fe + C), bronce (Cu+Sn),...)

Propiedades:

- Sólidos a T^a ambiente (excepto Hg)
- Redes cristalinas más usuales: fcc, bcc, hex.
- Brillo metálico.
- Variados puntos de fusión y ebullición
- Ductiles y Maleables
- Buenos conductores del calor y de la electricidad (no a $\uparrow T^a$)

Enlace Metálico I

Atomo metálicos y sus aleaciones (acero(Fe + C), bronce (Cu+Sn),...)

Propiedades:

- Sólidos a T^a ambiente (excepto Hg)
- Redes cristalinas más usuales: fcc, bcc, hex.
- Brillo metálico.
- Variados puntos de fusión y ebullición
- Ductiles y Maleables
- Buenos conductores del calor y de la electricidad (no a $\uparrow T^a$)

Formación del enlace:

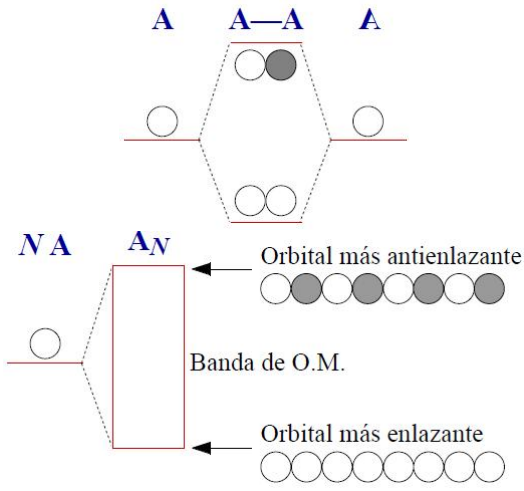
- Orbitales desocupados
- Bajos Potenciales de Ionización
- Teoría mecanocuántica \Rightarrow **Teoría de Bandas de Energía**

Enlace Metálico II/Teoría de Bandas de Energía

- Solapamiento entre orbitales \uparrow si \approx simetría y Energía.
- La combinación de N O.A. de N átomos genera N O.M.
- Al \uparrow los O.M \Rightarrow Banda de Energía

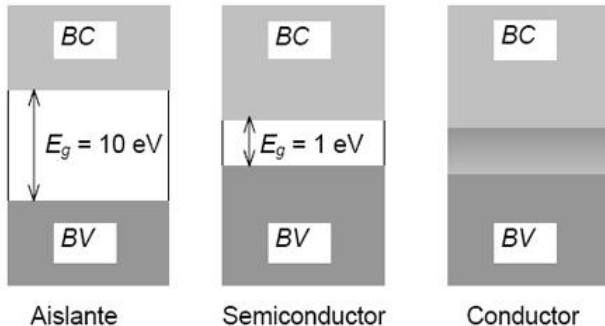
Enlace Metálico II/Teoría de Bandas de Energía

- Solapamiento entre orbitales \uparrow si \approx simetría y Energía.
- La combinación de N O.A. de N átomos genera N O.M.
- Al \uparrow los O.M \Rightarrow Banda de Energía



Aislantes, Semiconductores o Conductores

A $T=300\text{ K}$, el $E_g(\text{Si}) = 1,12\text{ eV}$ y $E_g(\text{Ge}) = 0,66\text{ eV}$



Bandas de Energía en materiales metálicos