

Información General sobre Materiales, Seguridad y Equipos para la Nanotecnología

ESC 211

Traducción: Prof. Rogerio Furlan – Universidad de Puerto Rico en Humacao

© 2013 The Pennsylvania State University

Unidad 3

Visión General de Materiales

Conferencia 2

Maneras de Clasificar los Materiales: Tipos de Enlaces Químicos

Contenido

- Los bloques de construcción básicos de los materiales - Átomos
- Átomos, moléculas y materiales
- Maneras de clasificar los materiales
 - * Tipo de enlace químico
 - * Orgánico e Inorgánico
 - * Fase
 - * Estructura
 - * Propiedades Químicas
 - * Propiedades Físicas

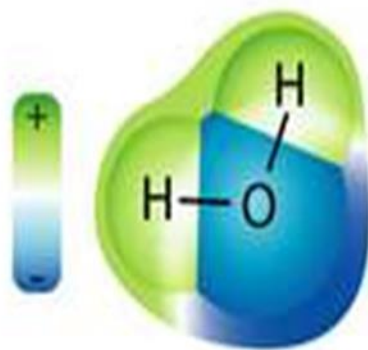
Contenido

- Maneras de clasificar los materiales
 - * Tipo de enlace químico

Una forma de clasificar los materiales es por el tipo de enlace químico que les une.

¿Que es Enlace Químico?

Es la interacción entre los electrones de Valencia que une átomos en moléculas---y en materiales.



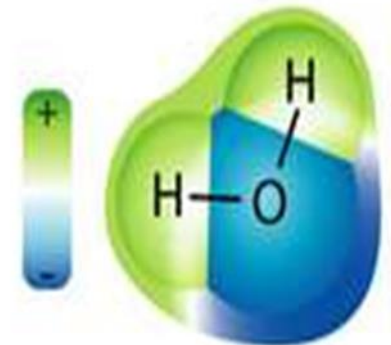
¿Por que el enlace químico ocurre?

Para reducir la energía almacenada

¿Cómo el enlace ocurre?

Entre Átomos

- **Ionico:** transferencia de electrones de valencia entre átomos
- **Covalente:** átomos comparten electrones de valencia
- **Metálico:** esencialmente, electrones de valencia, libres, repartidos en partes iguales entre todos los átomos



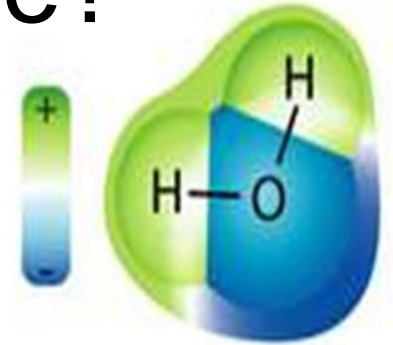
¿Por que el enlace químico ocurre?

Para reducir la energía almacenada

¿Cómo el enlace ocurre?

Entre Moléculas

- **Enlaces de Hidrógeno:** se comparte un protón (es decir, compartir un ión de hidrógeno positivo).
- **Enlaces van der Waals:** la suma de las fuerzas atractivas o repulsivas entre moléculas (o entre partes de la misma molécula) derivadas de variaciones de la fuerza eléctrica.



¿Cómo podemos empezar a entender qué tipo de enlace puede ocurrir para un determinado conjunto de átomos?

Un buen lugar para comenzar es mirar la **electronegatividad** de los átomos implicados. Electronegatividad se define como el grado en que un átomo atrae electrones.

Electronegatividad de los Elementos

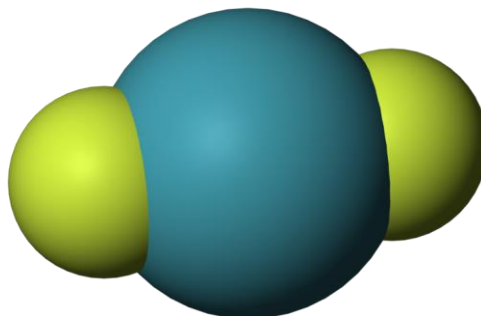
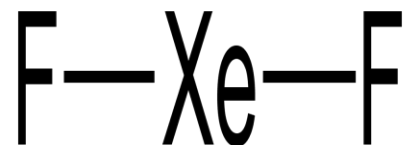
Tabla Periodica electronegatividad utilizando la Escala de Pauling

→ Radio Atómico disminuye → Energía de Ionización aumenta → Electronegatividad aumenta →

<u>Grupo</u> (vertical)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
<u>Periodo</u> (horizontal)																		
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lantánidos	*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27		
Actínidos	**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.3		

Observe que esta tabla tiene más grupos que la la tabla anterior

Diferencias de Electronegatividad



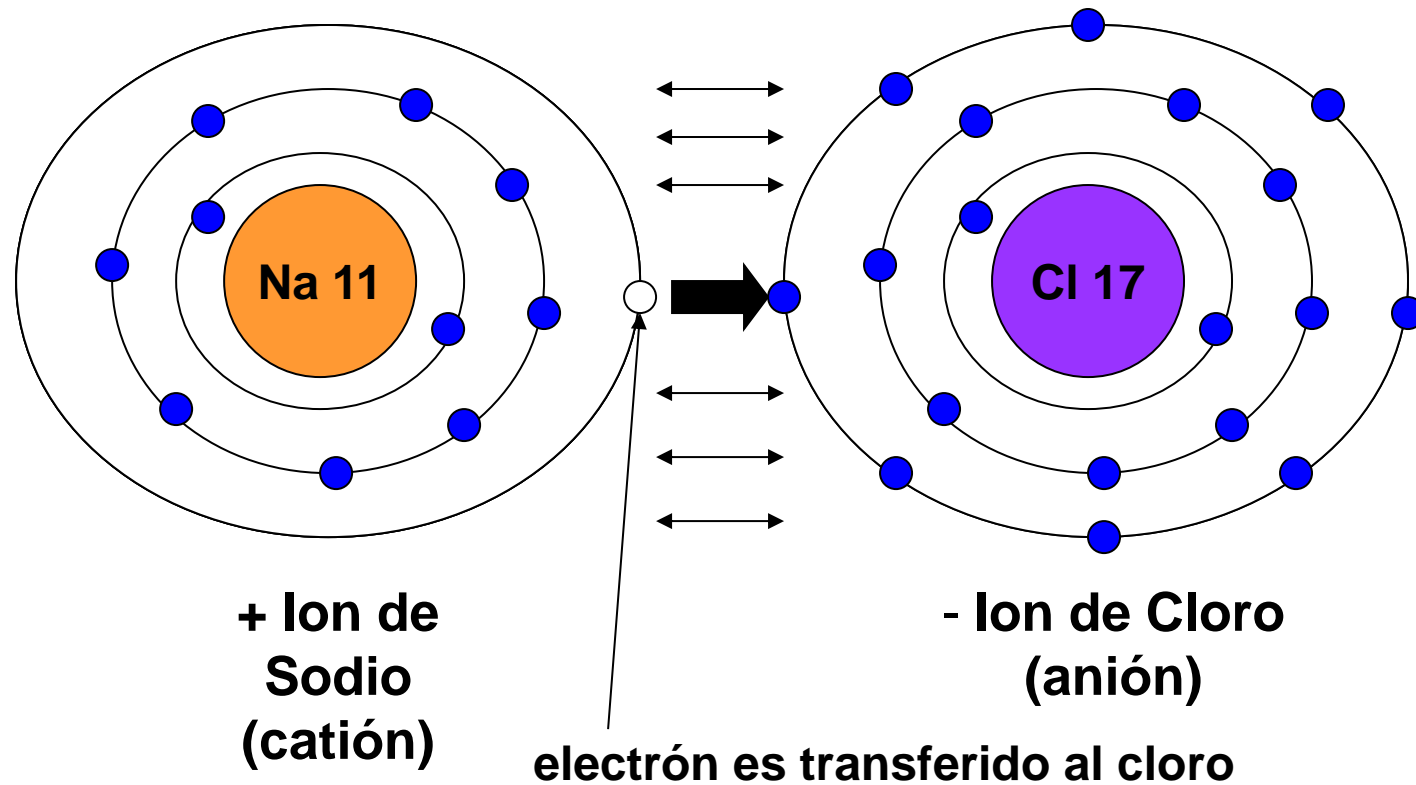
Difluoruro de xenón tiene la fórmula química XeF_2 y es uno de los compuestos más estables de xenón. Es útil en micro y nanofabricación donde se utiliza en la fase gaseosa para la eliminación selectiva de materiales por ejemplo: silicio, molibdeno, tungsteno, titanio, circonio, hafnio, vanadio, tantalio, niobio, boro, fósforo, germanio, arsénico y mezclas de dióxido de silicio, nitruro de silicio, níquel, aluminio, aleación TiNi, fotoresina, fosfosilicato vítreo, borofosfosilicato vítreo, polyimides, oro, cobre, platino, cromo, óxido de aluminio, carburo de silicio y mezclas de los mismos.

Tipos de Enlaces

Iónico

- Diferencia de electronegatividad grande.
- Un ion se forma cuando un átomo gana o pierde uno o más electrones.
- Los iones con cargas opuestas se sienten atraídos mutuamente.
- Enlace iónico consiste en la transferencia de uno o más electrones entre átomos.
- Átomo que pierde el electrón se llama catión.
- Átomo que ganó el electrón se llama anión.

Ejemplo : La Sal de Cocina



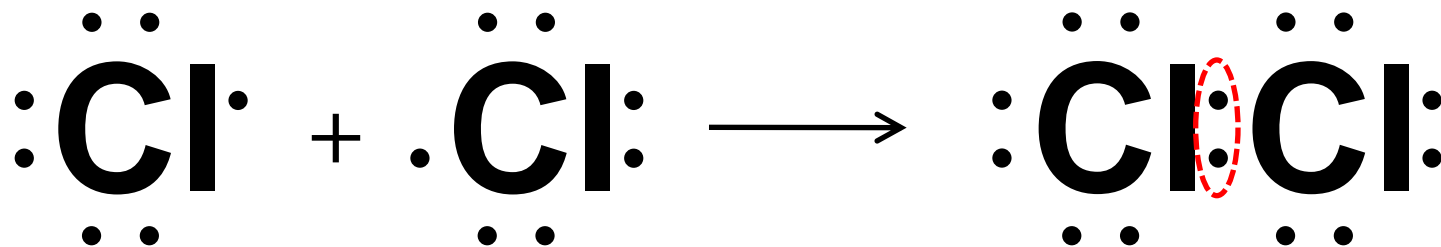
Dominio público: Imagen de uso libre generada por el personal de CNEU

El enlace en los sólidos iónicos es una atracción electrostática.

Tipos de Enlaces

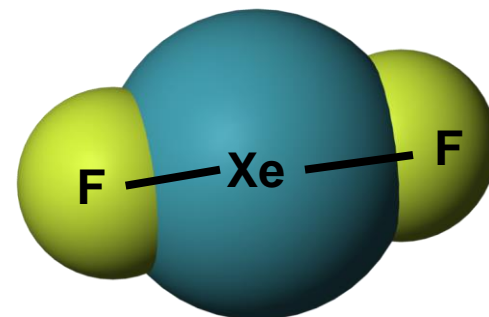
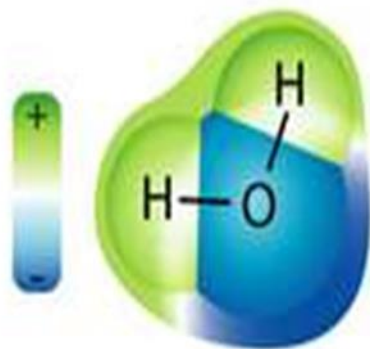
Covalente

- Se comparten electrones entre átomos para alcanzar el octeto y estabilizarse.
- Ocurre entre átomos de electronegatividad similar.
- Grado de diferencia de electronegatividad hace enlace **polar**.
- Más fuerte de los enlaces químicos.
- Muy **direccional**.



Propiedades de Enlaces Covalentes

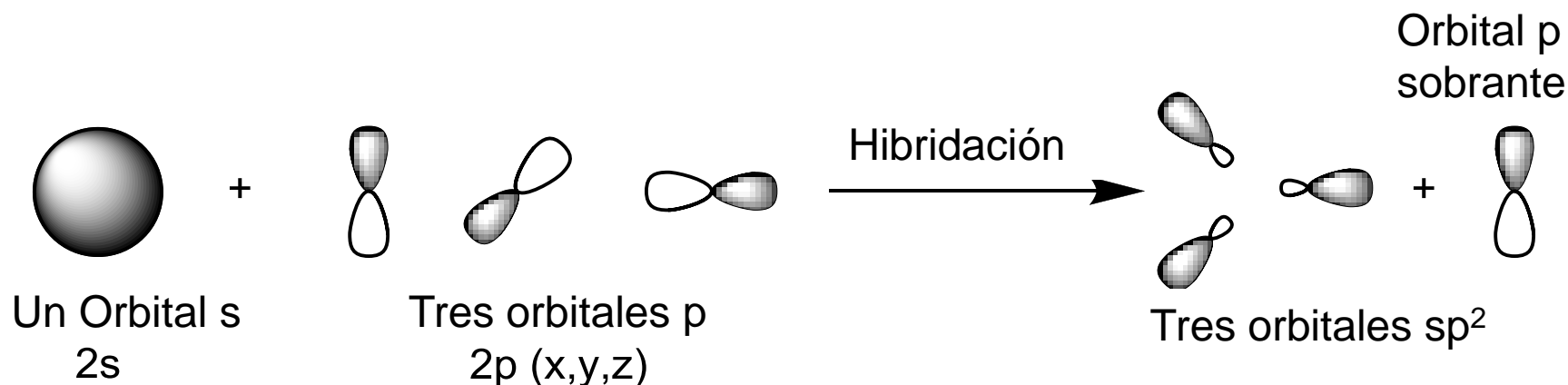
- Pares de electrones son compartidos entre dos átomos.
- Son **direccionales** y tienen átomos en ángulos específicos entre sí.



- Puede tener múltiples enlaces entre dos átomos.

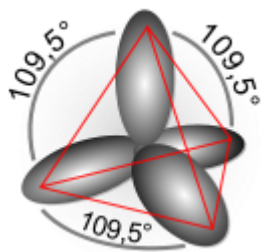
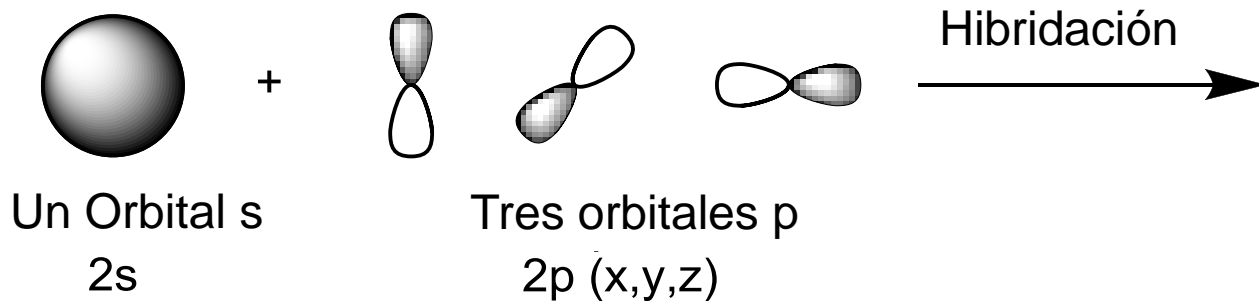
Enlace Covalente: Hibridación

Hibridación: Número de orbitales antes de la hibridación = Number of orbitals after hybridization

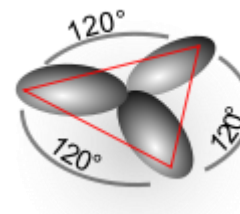


Enlace Covalente

Un Ejemplo--Carbón

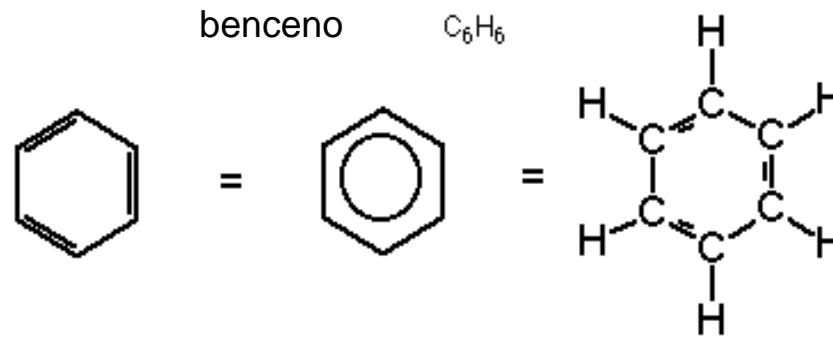


Enlaces σ (sigma)



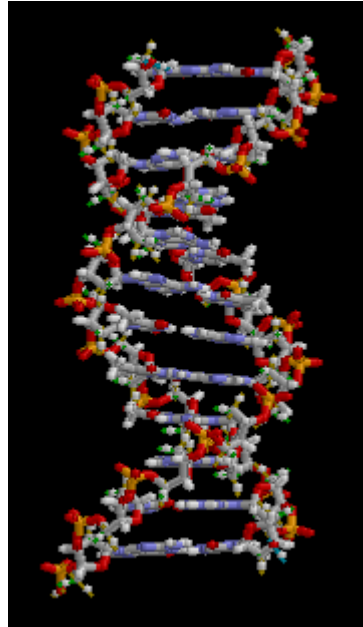
Enlaces σ (sigma) + π

Ejemplo: Enlaces Covalentes en el Benceno



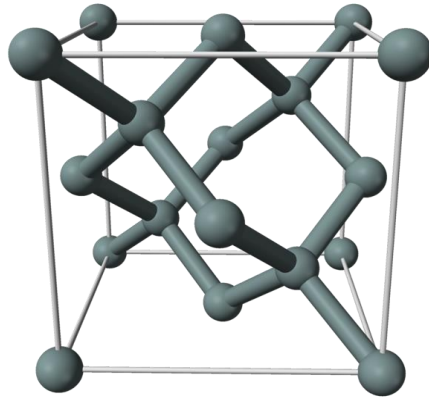
Enlaces σ (sigma) + π

Ejemplo: Enlaces Covalentes en ADN



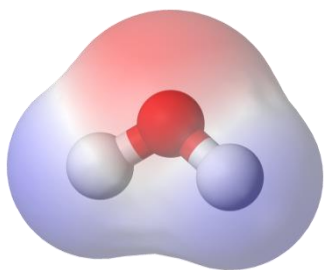
http://en.wikipedia.org/wiki/File:ADN_animation.gif

Ejemplo: Enlaces Covalentes en Silicio

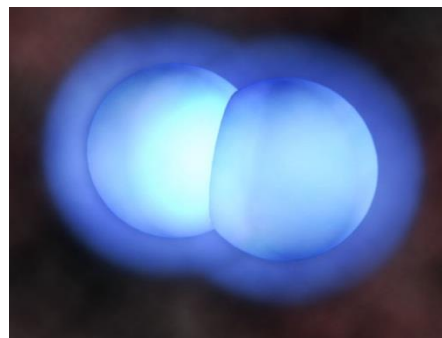


Electronegatividad y Polaridad

La polaridad molecular depende de la diferencia de electronegatividad entre los átomos en un compuesto y la asimetría de la estructura del compuesto. Por ejemplo, una molécula de agua es polar debido a la desigual distribución de sus electrones entre el oxígeno y el hidrógeno en el que el primero tiene mayor electronegatividad que el último, dando por resultado una estructura "doblada", mientras que una molécula de nitrógeno es no polar porque los electrones se comparten uniformemente. Polaridad se relaciona con una serie de propiedades físicas, incluyendo la tensión superficial, solubilidad, y puntos de fusión y ebullición.



Molécula de agua



Molécula de nitrógeno

http://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_polarity y

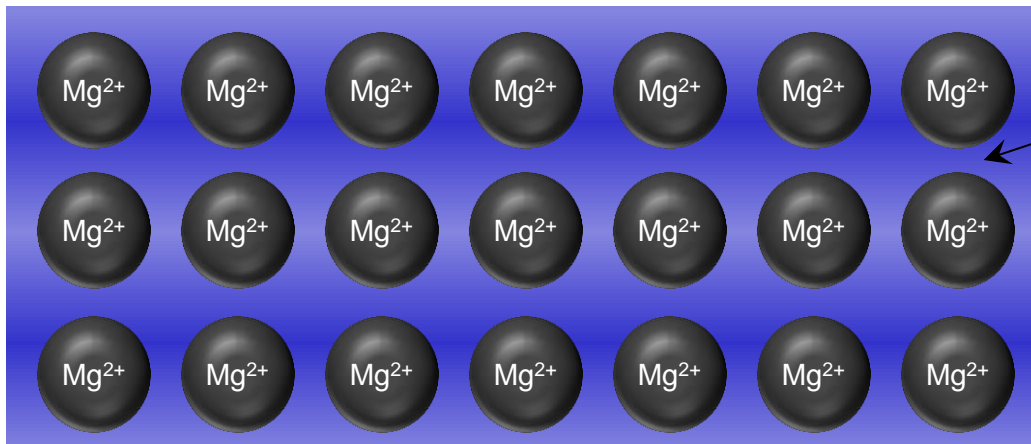
<http://www.bing.com/search?q=nitrogen+molecule&form=DLCMHP&qs=AS&sk=&pq=nitrogen+molecule&sp=1&sc=8-17&pc=MDDR>

Enlace Metálico

Formado en elementos electropositivos (les gusta donar electrones).

Lo electrones son totalmente compartidos — esencialmente libres

Mg aislado \rightarrow Mg^{2+} (en el cuerpo) + 2 e^- deslocalizados

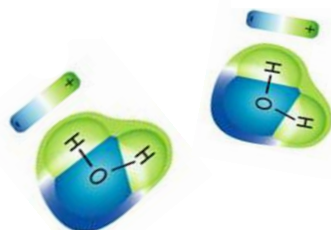


“Mar” de
electrones
deslocalizados

Enlace por Puente de Hidrógeno

Enlace de Hidrógeno

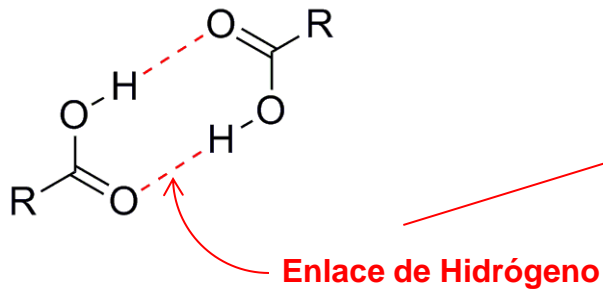
- Una forma de asociación entre un átomo electronegativo (quiere electrones) y un átomo de hidrógeno unido a un segundo átomo relativamente electronegativo.



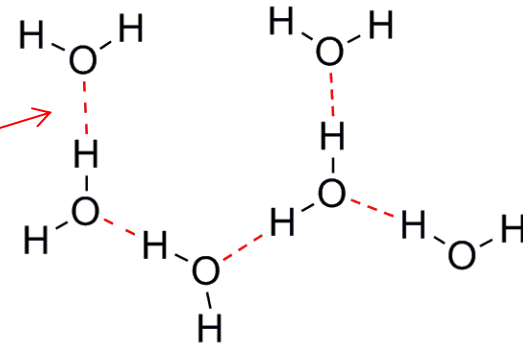
- En la figura arriba parece que un átomo de hidrógeno está siendo compartido entre dos átomos de oxígeno (el oxígeno es electronegativo).
- Es una fuerza de atracción entre dos moléculas.
- Responsable por el elevado punto de ebullición del agua, comparado con moléculas de peso molecular similar.
- Un enlace muy importante en biología, reconocimiento molecular y sistemas auto ensamblados.

Ejemplos de Enlaces de Hidrógeno

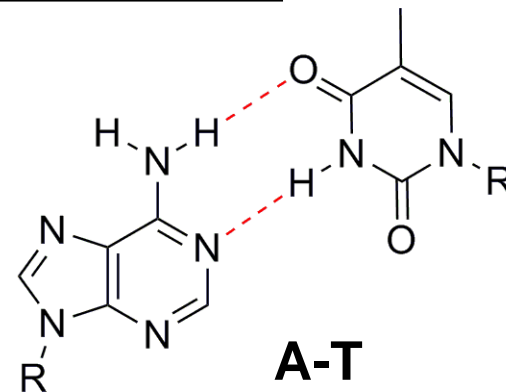
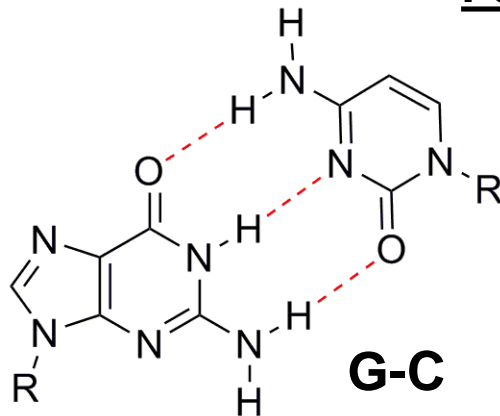
Ácidos Carboxílicos



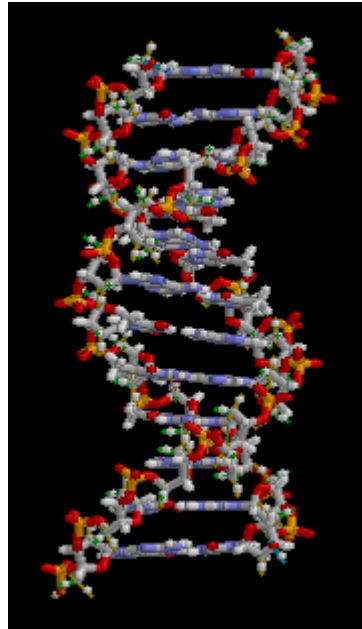
Agua



Pares de Bases de ADN



Ejemplo de Enlaces de Hidrógeno y Covalentes



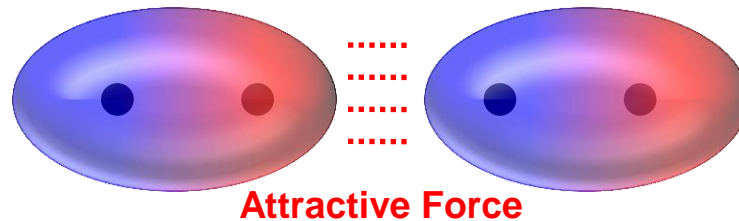
http://en.wikipedia.org/wiki/File:ADN_animation.gif

Fuerzas de Van der Waals

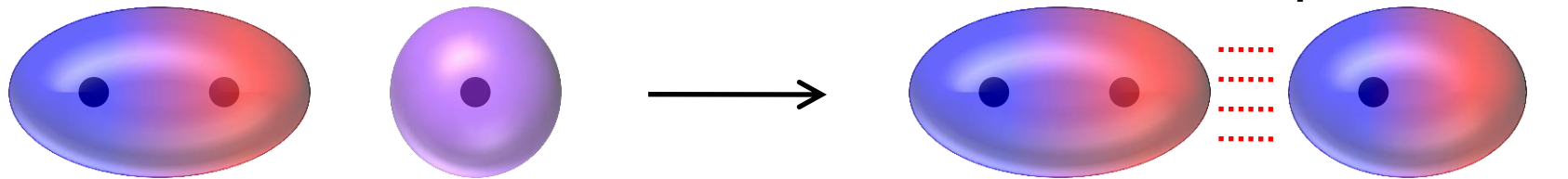
- Actúan entre átomos o moléculas que no están enlazadas.
- Incluyen varios tipos de interacciones:
 - Dipolo-dipolo; atracción entre partes de la molécula parcialmente positivas y parcialmente negativas.
 - Dipolo – dipolo inducido.
 - Fuerzas de dispersión relacionadas con el desplazamiento de la nube (distorsión) de electrones de los átomos o moléculas: más polarizable = interacción más fuerte.
- Esencialmente todos los materiales están sujetos a estas fuerzas relativamente débiles, de corto alcance.
- Este tipo de fuerzas es el tipo dominante de la interacción entre las moléculas orgánicas no polares.

Fuerzas de Van der Waals: Ejemplos

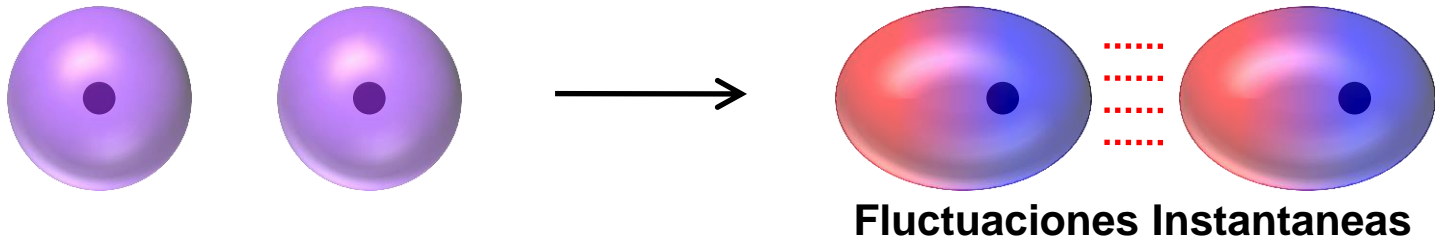
Dipolo Permanente – Dipolo Permanente



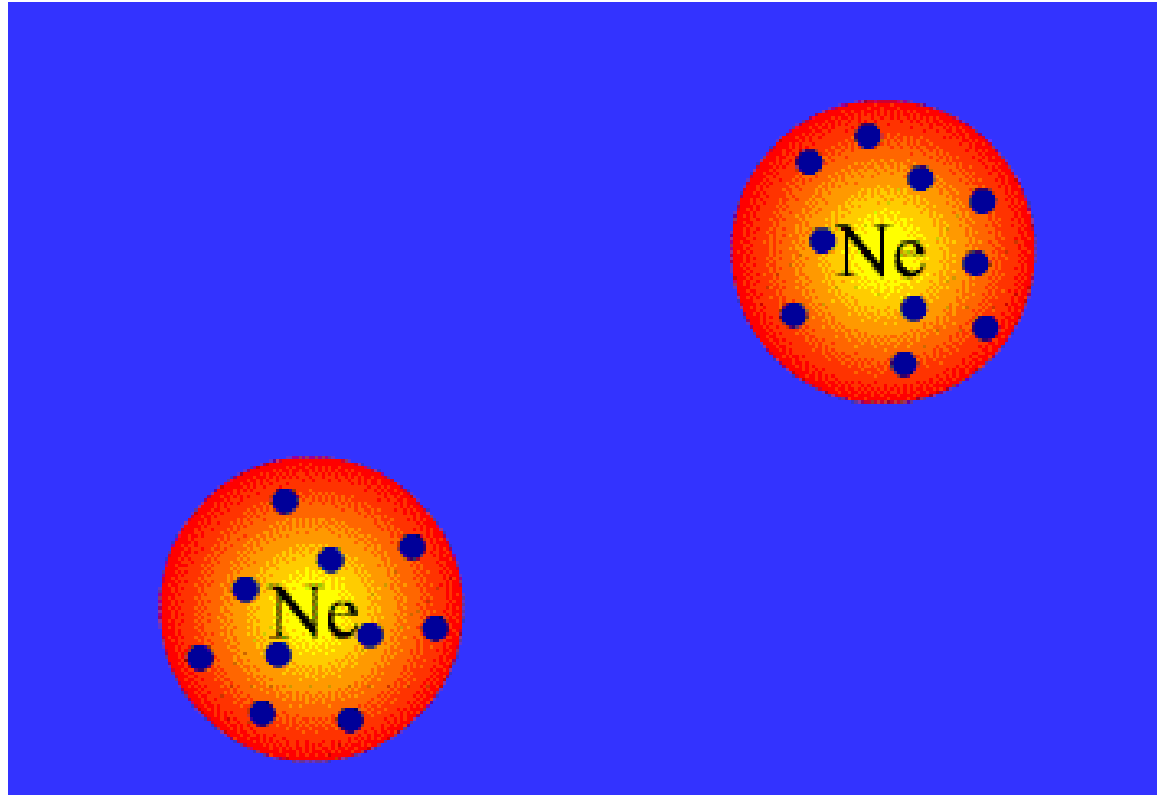
Dipolo Permanente – Dipolo Inducido



Fuerzas Dispersivas (London)



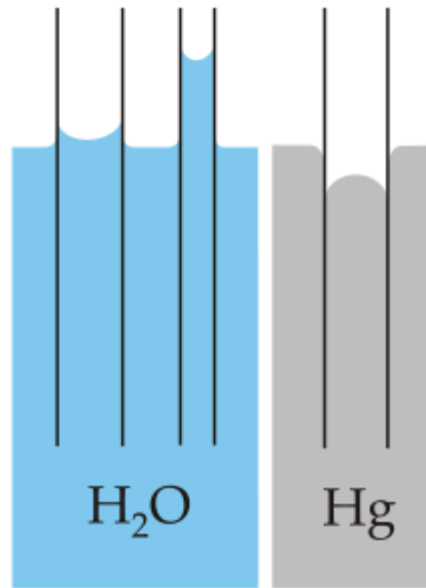
Ejemplo de Interacciones de Van der Waals



<http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/swinerd/forces/forces.htm>

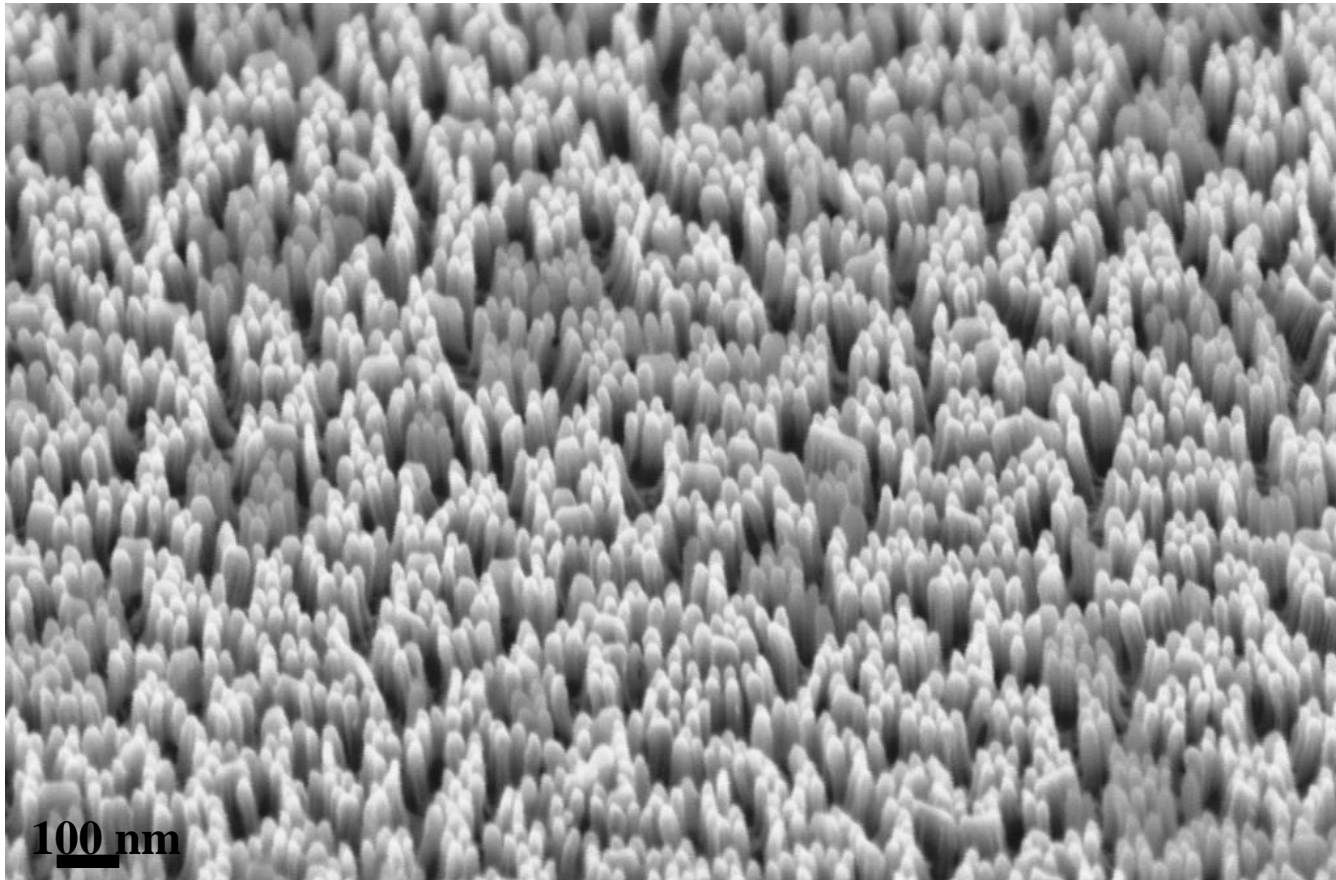
A pesar de que las fuerzas de Van der Waals son débiles y de corto alcance, pueden ser muy importantes en la nano-escala--- porque las distancias entre las cosas pueden ser muy pequeñas.

Atracciones de Van der Waals son responsables por la tensión superficial y capilaridad



Acción capilar de **agua** en comparación con **mercurio** en cada caso con respecto a una superficie polar (p. ej. vidrio)

Atracciones de Van der Waals afectando a las nano-estructuras



Nano – Estructuras PEDOT:PSS