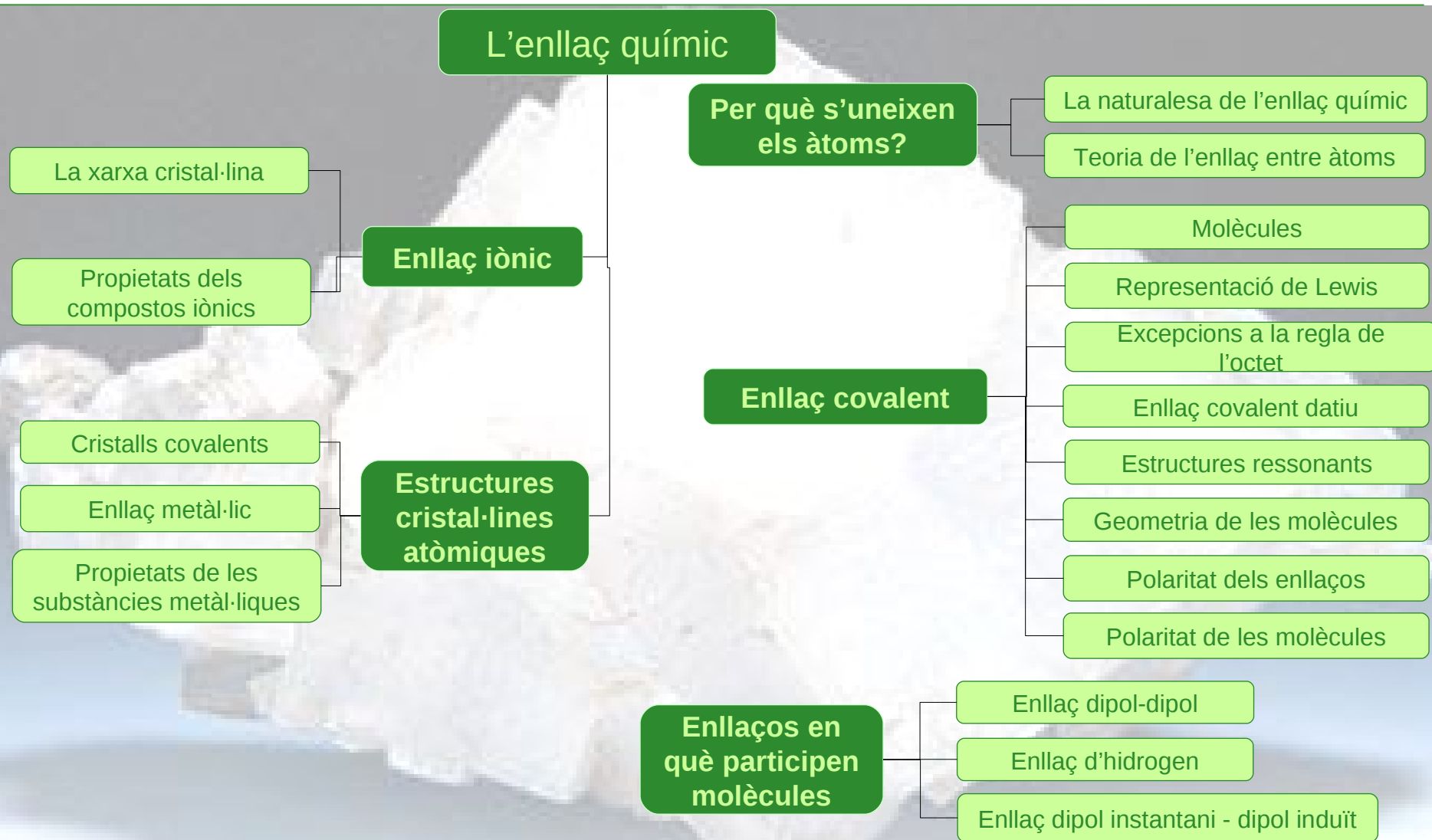


L'enllaç químic

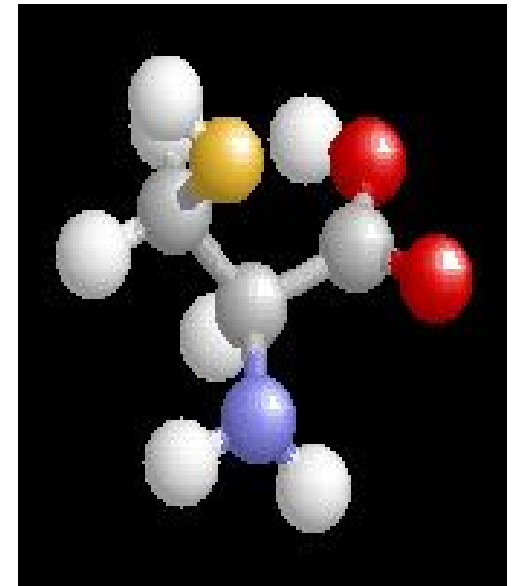


Esquema de continguts

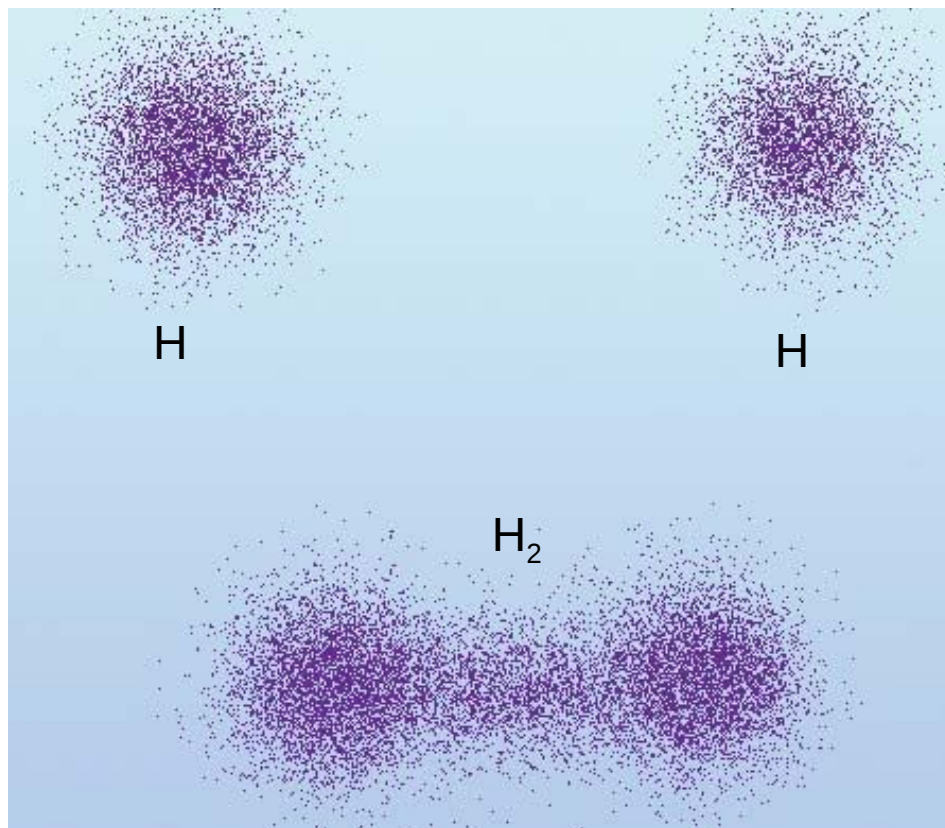


ENLLAÇ QUÍMIC

Força entre àtoms que dóna lloc a una estructura superior més estable energèticament i que es pot considerar una espècie química independent.



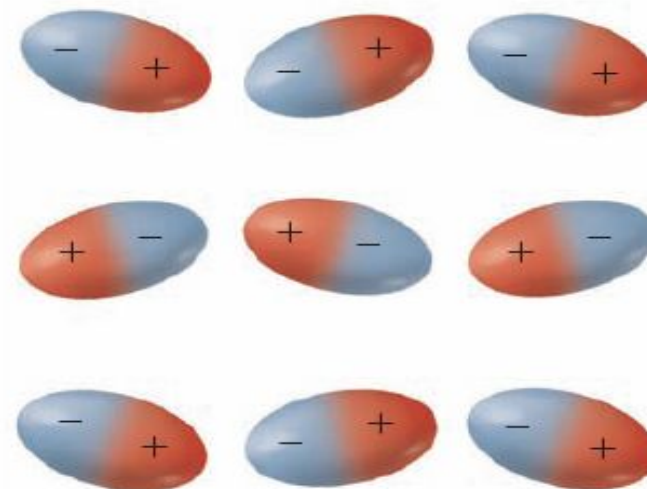
La naturalesa de l'enllaç químic



▲ Representació del núvol d'electrons d'àtoms d'hidrogen separats i de la molècula d'hidrogen, H_2 .

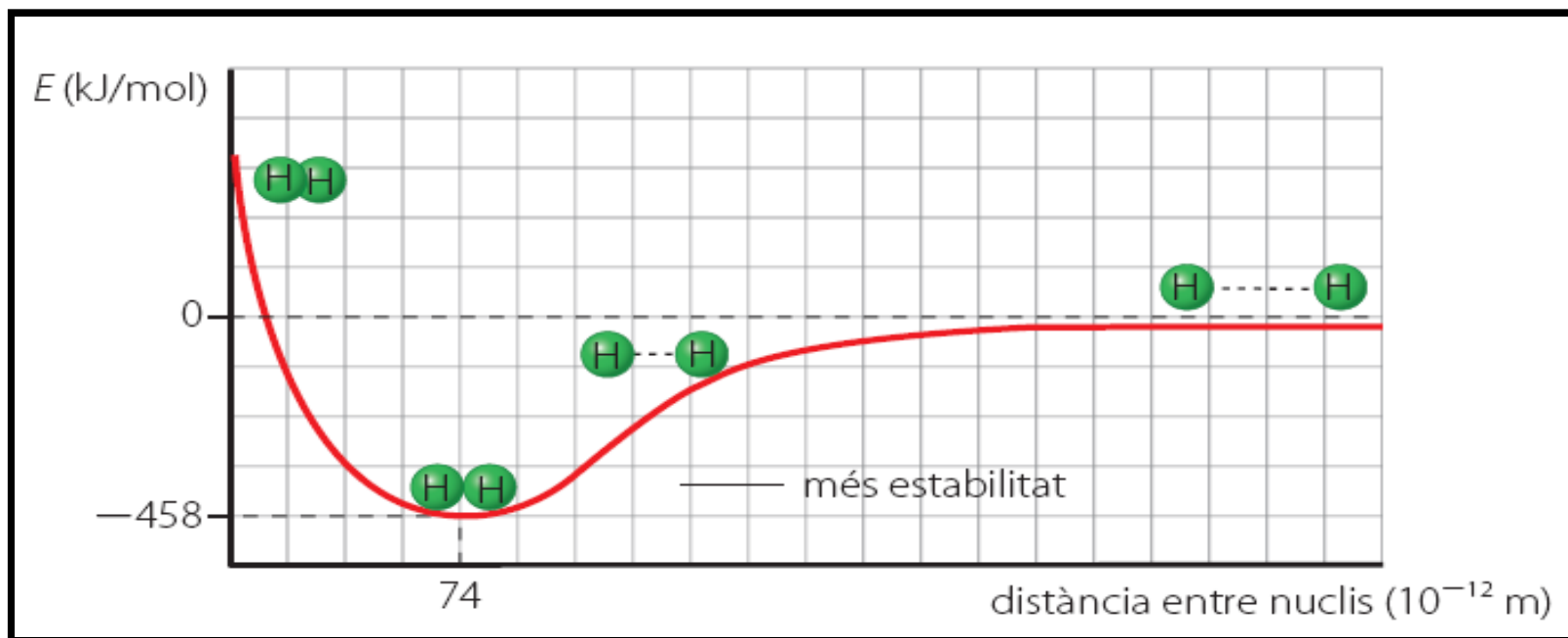
Les forces que mantenen units els àtoms, els ions o les molècules en les substàncies químiques s'anomenen enllaços químics.

Les molècules s'orienten i s'enllacen per interaccions de tipus elèctric. ▼



La naturalesa de l'enllaç químic

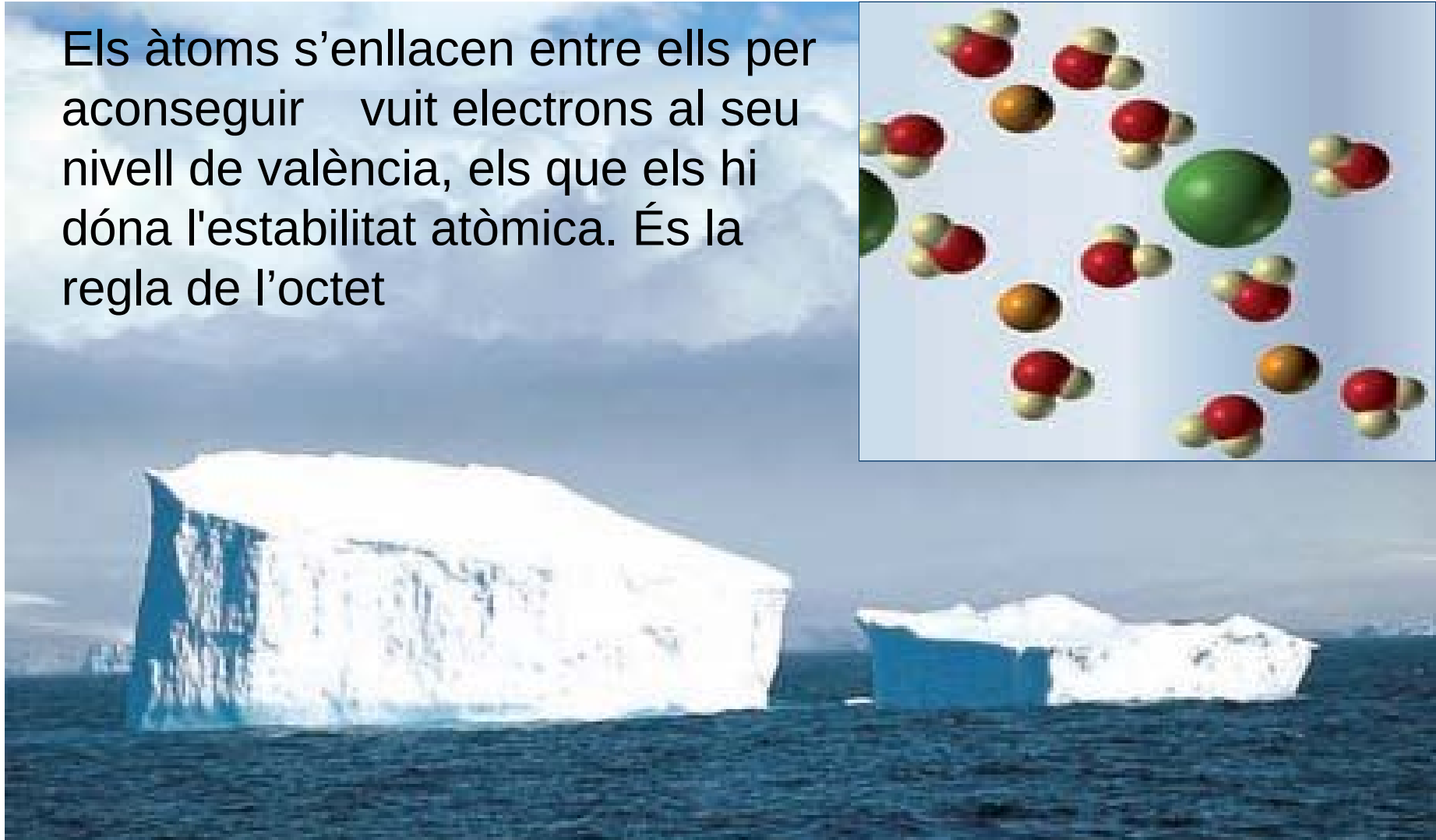
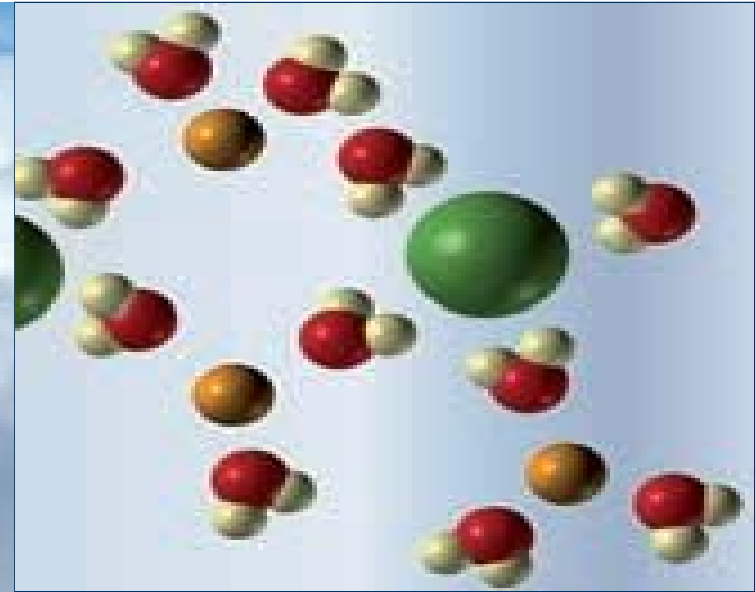
Dos àtoms s'enllacen si l'energia assolida en la seva unió és inferior a la que tenia cadascun d'ells per separat.



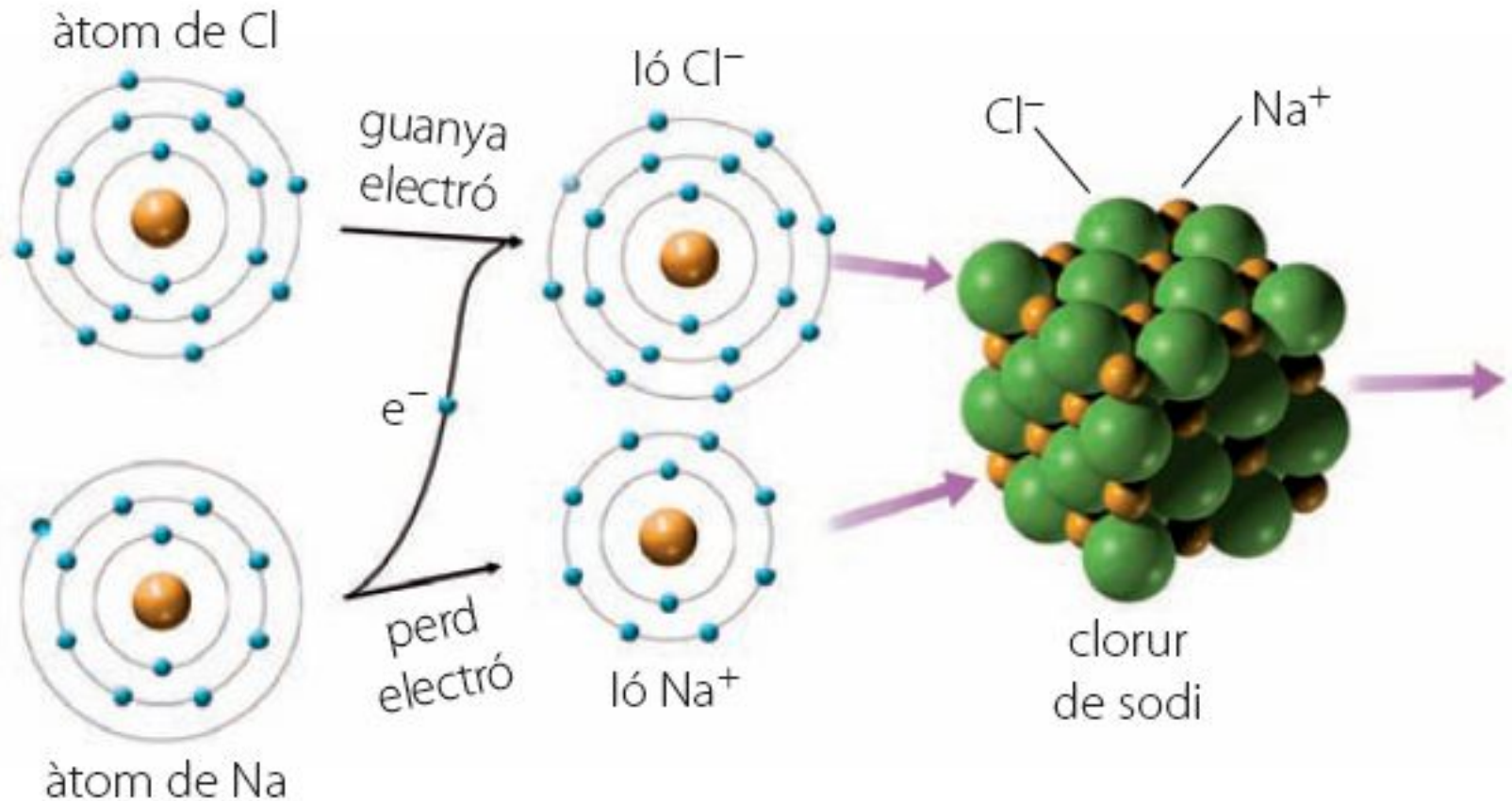
La distància d'enllaç és al distància en què l'energia és mínima i, per tant, l'estabilitat molecular és màxima.

Teoria de l'enllaç entre àtoms. Regla de l'octet

Els àtoms s'enllacen entre ells per aconseguir vuit electrons al seu nivell de valència, els que els hi dóna l'estabilitat atòmica. És la regla de l'octet



Enllaç iònic



L'enllaç és fruit de l'atracció entre ions de signe oposat.

Enllaç iònic

És l'enllaç entre un metall i un no-metall. Aquests dos elements tenen **electronegativitats** molt diferents.

L'enllaç es forma per transferència d'electrons d'un àtom a un altre.

Dissociació: $\text{CuCl}_2 \rightarrow \text{Cu}^{+2} + 2 \text{Cl}^-$

Aquest enllaç forma dos tipus d'ions: un **anió** i un **catió**.

Les estructures iòniques estan compostes per la unió d'ions de càrregues oposades.

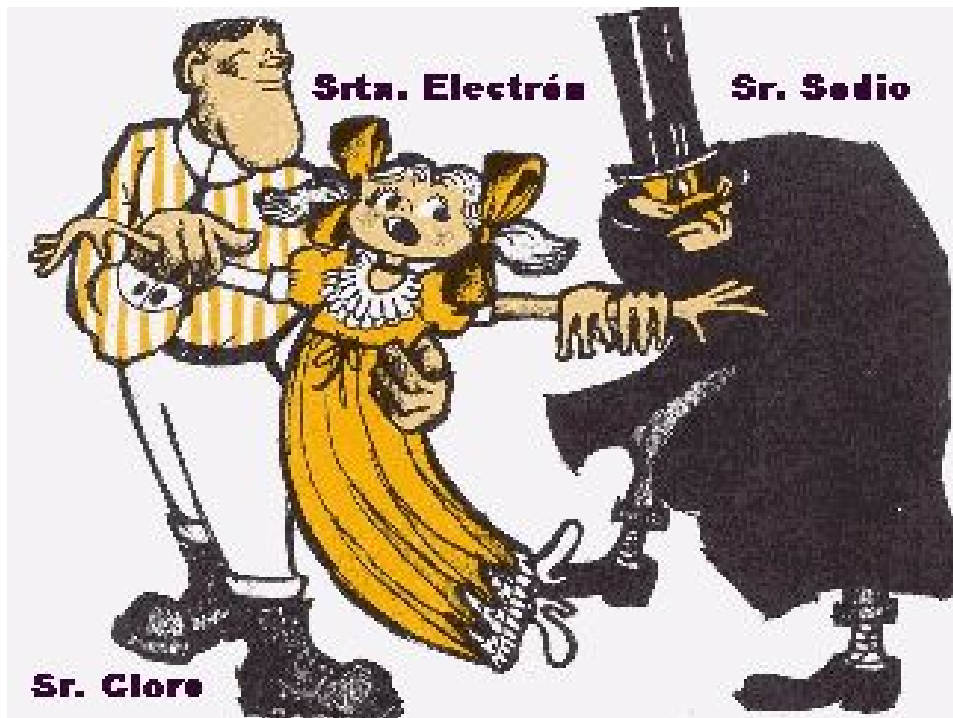
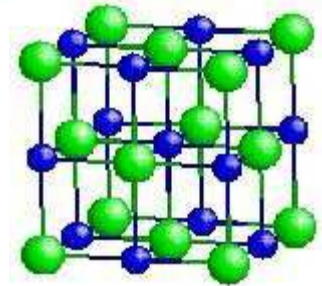
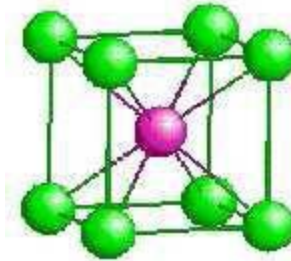
La força d'enllaç entre els ions són de tipus electroestàtic i són forces molt intenses.

L'enllaç és fruit de l'atracció entre ions de signe oposat.

Els ions s'ordenen en una xarxa iònica tridimensional, **NO formen MOLÈCULES**, **formen cristalls iònics**.

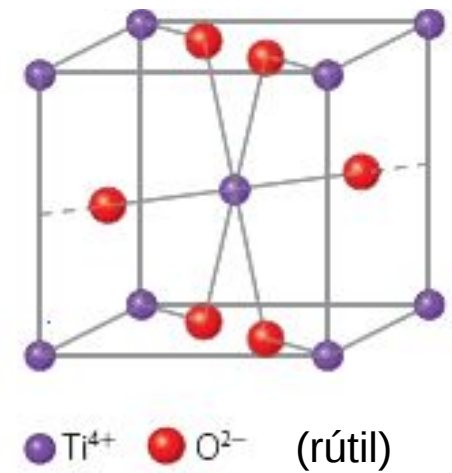
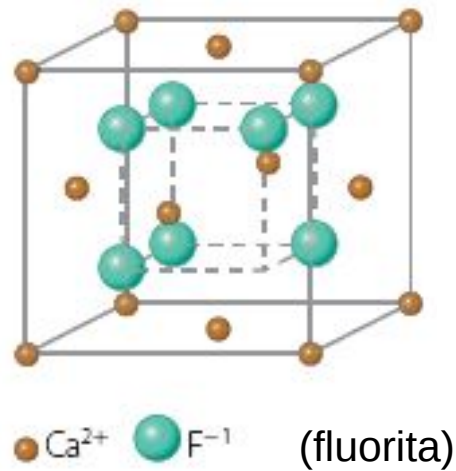
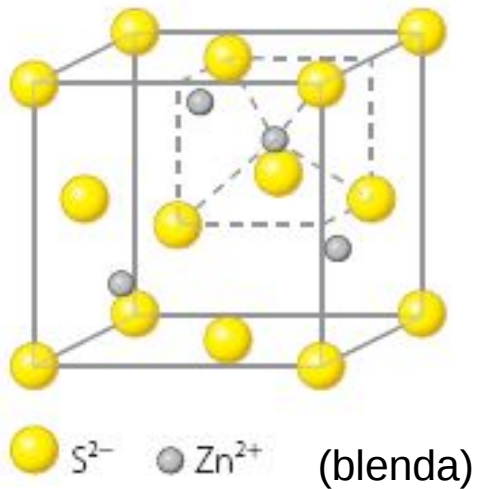
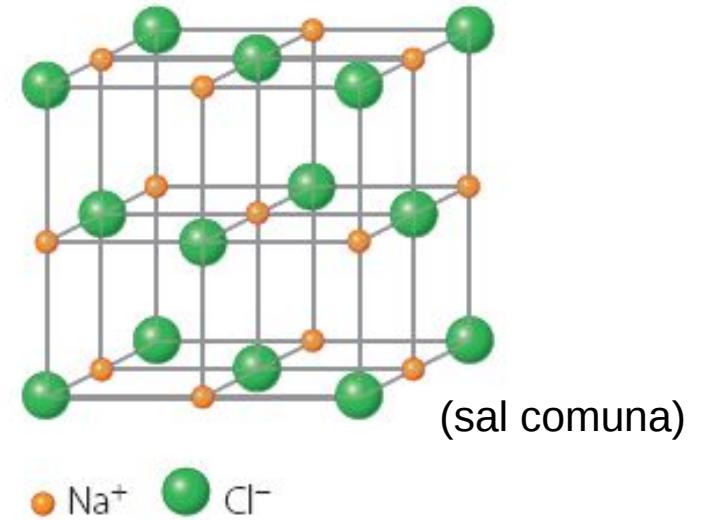
Enllaç iònic

Quan formem aquests reticles cristallins s'allibera molta energia, **Energia Reticular**.



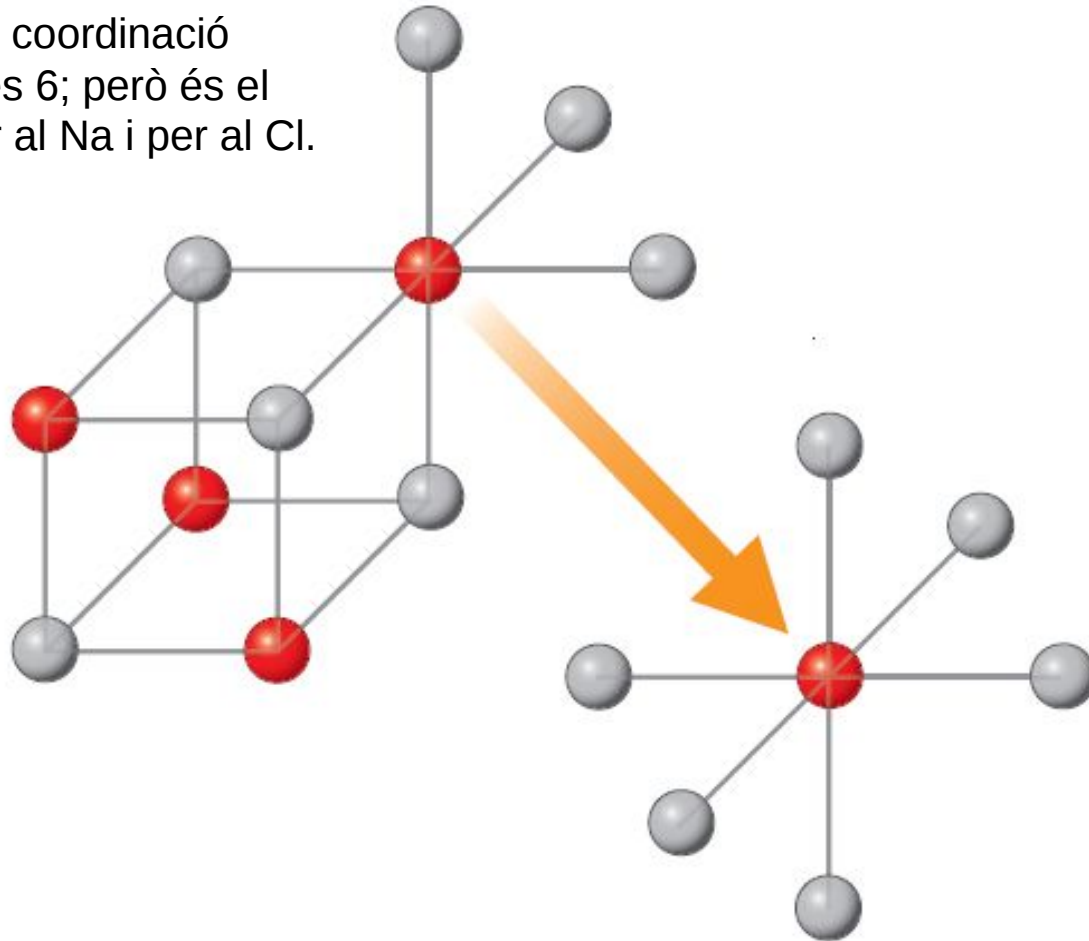
La xarxa cristal·lina

Halita



La xarxa cristal·lina

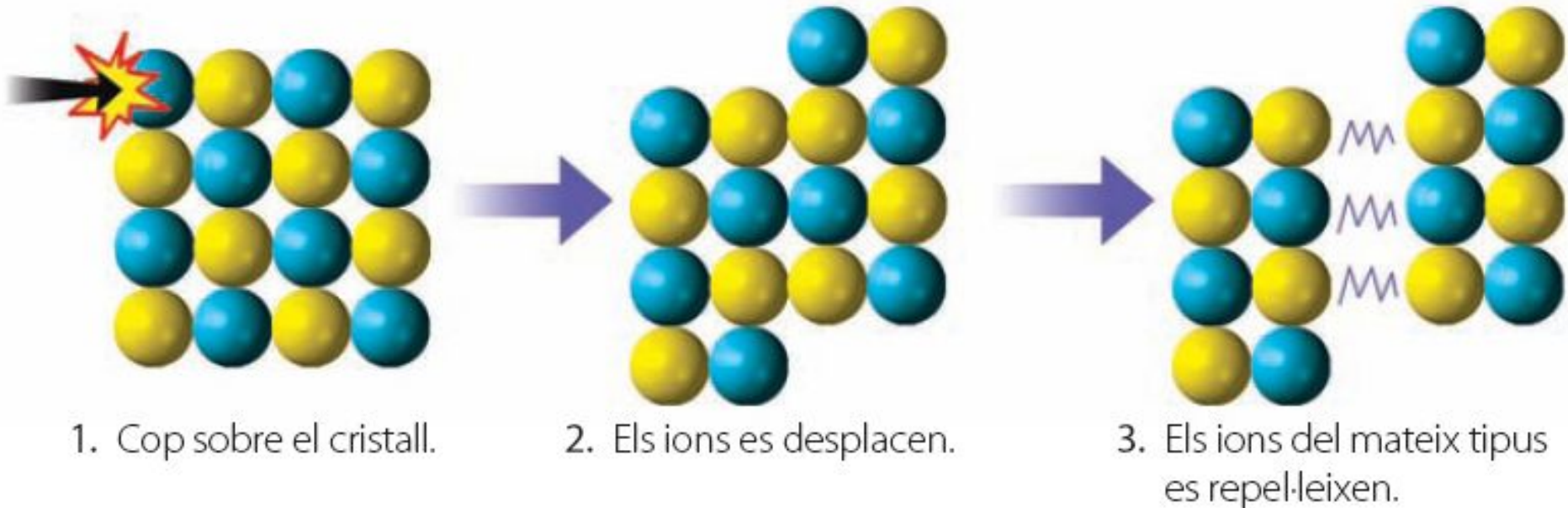
L'índex de coordinació del NaCl és 6; però és el mateix per al Na i per al Cl.





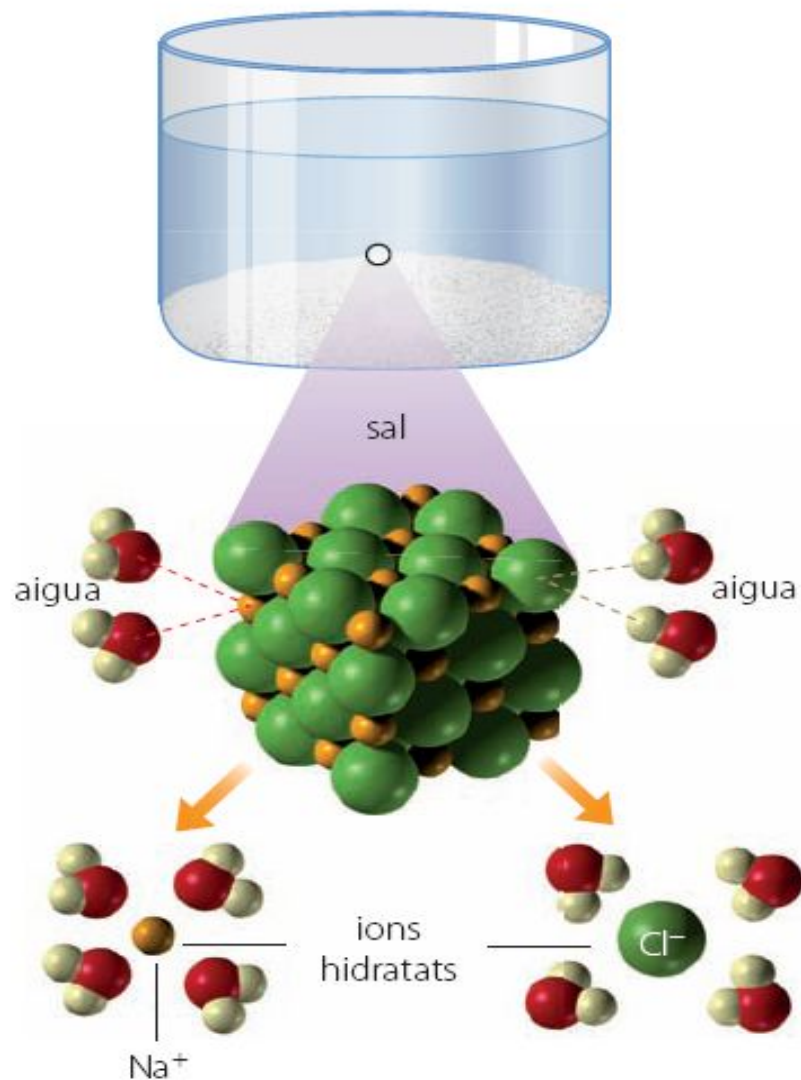
Propietats dels compostos iònics

Quan es colpeja, el cristall iònic es trenca.



Propietats dels compostos iònics

Si l'energia de les molècules d'aigua que envolten l'ió compensa l'energia que cal per trencar el cristall o l'energia de xarxa o energia reticular, l'ió es dissol i passa a l'aigua en forma d'ió hidratat o solvatat; és a dir, envoltat de molècules d'aigua.



Propietats dels compostos iònics

- Sòlids a temperatura ambient.
- Estructura cristallina compacta.
- Temperatura de fusió i ebullició molt elevades.
- Són molt durs i difícils de ratllar.
- Són molt fràgils.
- Són substàncies conductores en dissolució però no són conductores en estat sòlid.
- Són solubles en disolvents polars. Els ions queden solvatats (envoltats per molècules polars de disolvent), en el cas específic de l'aigua es diu que els ions queden hidratats.

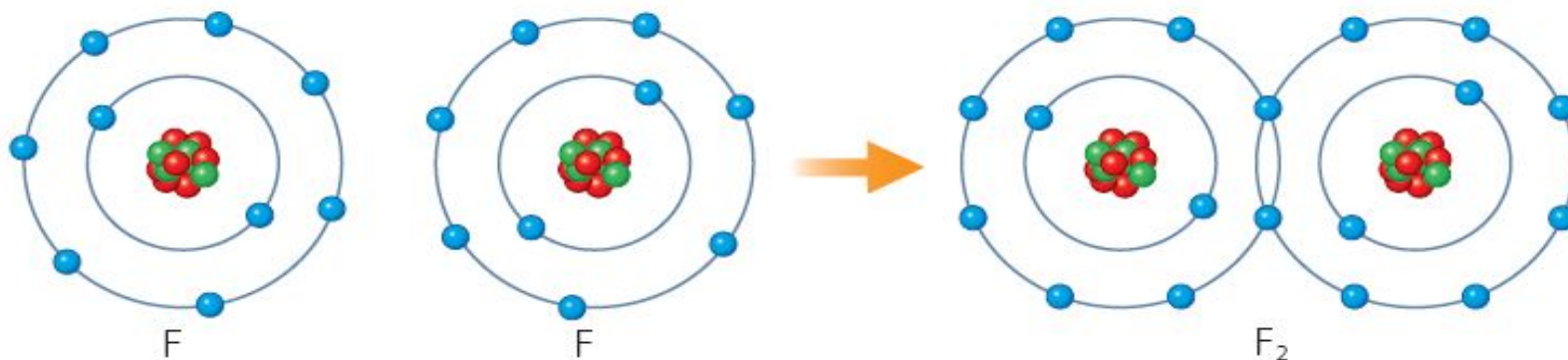
Enllaç covalent

Cristall (SiO_2) de quars format per una estructura gegantina d'àtoms de Si i O units per enllaços covalents.



Enllaç covalent

L'enllaç es produeix perquè els electrons compartits són atrets pels nuclis dels dos àtoms



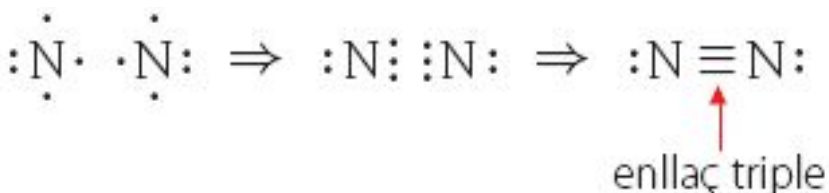
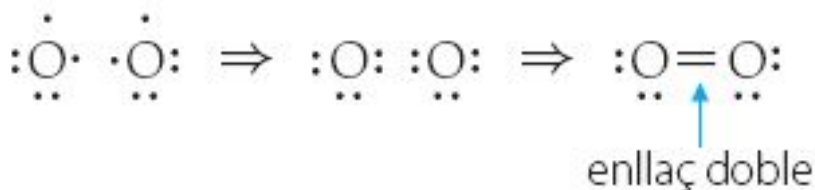
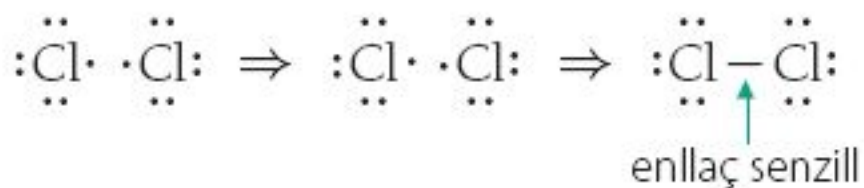
Aquest enllaç es produeix entre no-metall i no-metall.
Està basat en la compartició d'electrons de la capa de valència.
Aquest enllaç consta de dos electrons, cadascun d'ells d'un dels àtoms que hi participa.
Aquest parell d'electrons s'anomena **doblet enllaçant**.

Representació de Lewis

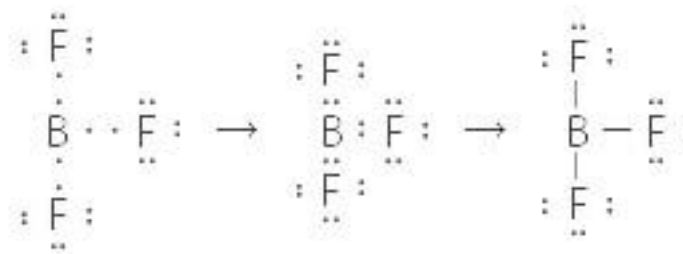
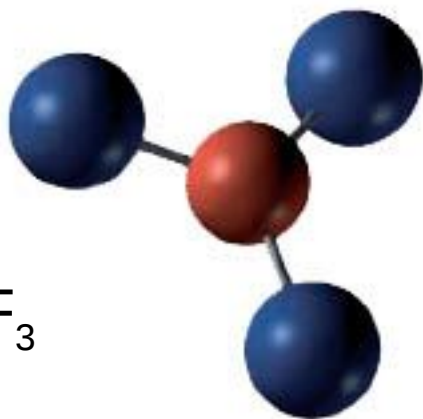
Es poden trobar un, dos o tres doblets donant peu a enllaços senzills, dobles o triples.

Un enllaç covalent sempre dóna **MOLÈCULES**.

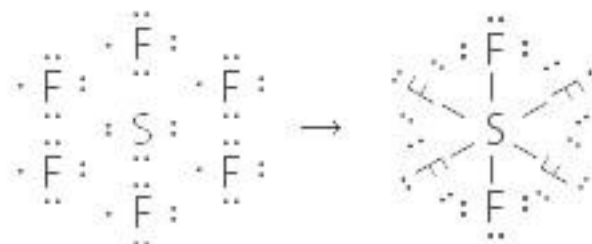
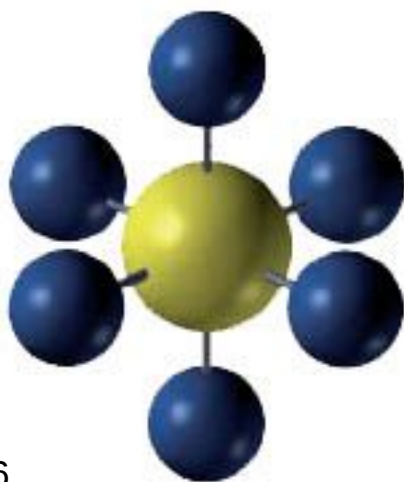
També es poden anomenar **compostos químics**.



Excepcions a la regla de l'octet



L'àtom de B tan sols té 3 electrons al seu nivell de valència. Per tant, només pot formar 3 enllaços covalents.



L'àtom de S té 6 electrons al seu nivell de valència i els pot utilitzar per formar 6 enllaços covalents.

Enllaç covalent datiu

Quan els dos electrons del doblet enllaçant estan aportats per un únic àtom que acaba formant l'enllaç covalent, es diu que es forma enllaç covalent datiu o coordinat.

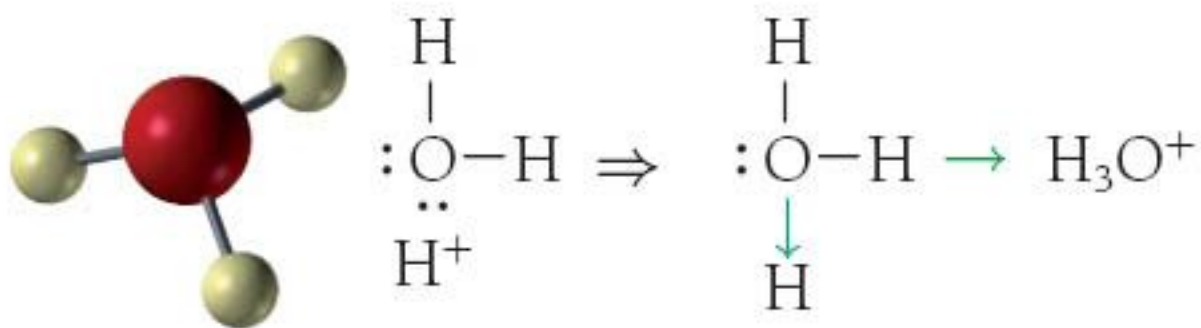
L'àtom que dona els dos electrons ho fa segurament per assolir una estructura més estable i afavorir que l'altre àtom compleixi la regla de l'octet.

L'espècie química que té un parell d'electrons lliures que pot cedir es diu el donador (base segons el concepte de Lewis sobre àcid-base)

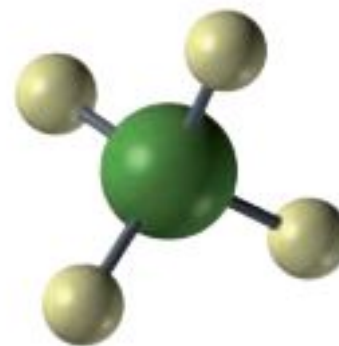
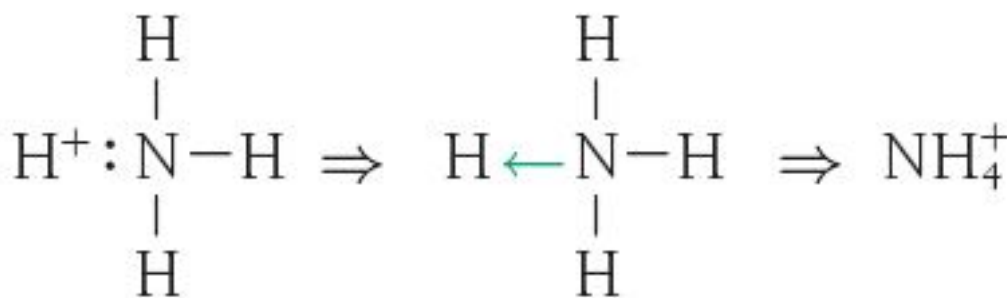
L'espècie química que té un orbital buit i accepta el parell d'electrons es diu el acceptor (àcid segons el concepte de Lewis sobre àcid-base)

Enllaç covalent datiu

Àtom donador → Àtom acceptor

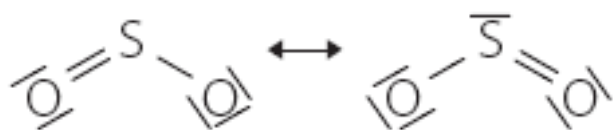


L'ió hidroni es forma quan una molècula d'aigua capta un protó, H^+ .

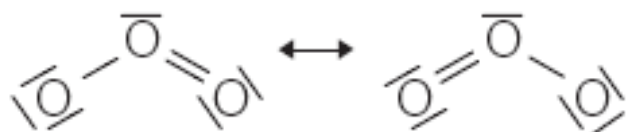


L'ió amoni (NH_4^+) es forma quan una molècula d'amoníac capta un protó, H^+ .

Estructures ressonants

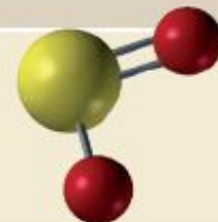
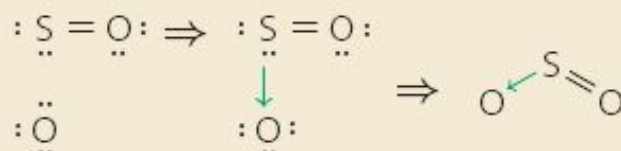


La molècula de SO_2 es pot escriure de les dues maneres.

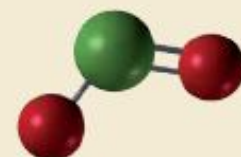
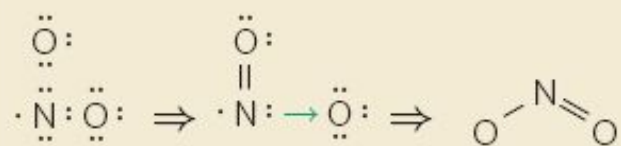


Estructures ressonants de l' O_3 (ozó)

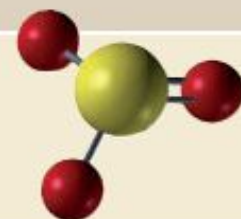
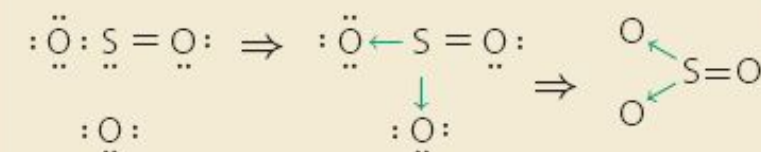
Diòxid de sofre (SO_2)



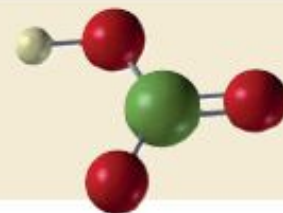
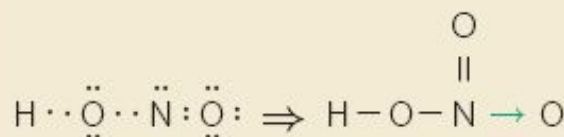
Diòxid de nitrogen (NO_2)



Triòxid de sofre (SO_3)



Àcid nítric (HNO_3)



Geometria de les molècules

Dues esferes tenen una disposició lineal.



Quatre esferes es disposen tetraèdricament.



Sis esferes adopten una disposició octaèdrica



Tres esferes adopten una ordenació trigonal.

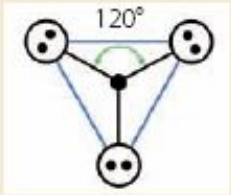
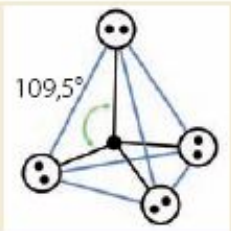
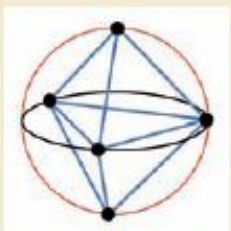
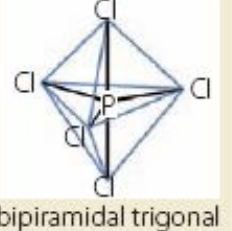
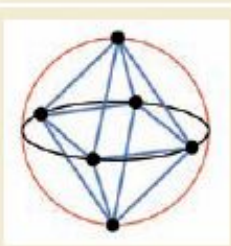


Cinc esferes adopten una disposició bipiramidal trigonal.

La teoria de repulsió de parells d'electrons de la capa de valència, TRPECV, es basa en la màxima que afirma que les molècules cerquen tenir l'orientació que faci que hi hagi menys repulsió entre els parells d'electrons que hi ha al voltant de l'àtom central.

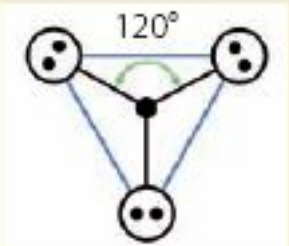
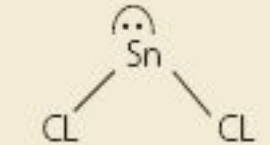
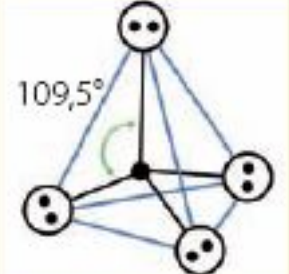
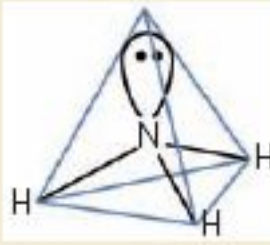
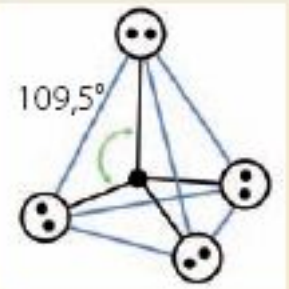
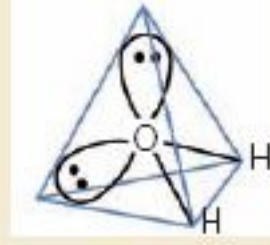
Geometria de les molècules

La geometria de la molècula coincideix amb la disposició a l'espai de les parelles d'electrons perquè tots participen de l'enllaç.

Nombre de parells d'electrons	Exemple de molècula	S Disposició de les parelles d'electrons	Geometria de la molècula
2	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}} - \text{Be} - \ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{BeCl}_2 \end{array}$		Cl-Be-Cl lineal
3	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:} \text{B} \text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{BF}_3 \end{array}$		$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F}-\text{B}-\text{F} \\ \text{BF}_3 \end{array}$ triangular plana
4	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\text{C}:\text{H} \\ \text{H} \\ \text{CH}_4 \end{array}$		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \\ \text{CH}_4 \end{array}$ tetraèdrica
5	PCl ₅		 bipiramidal trigonal
6	SF ₆		 octaèdrica

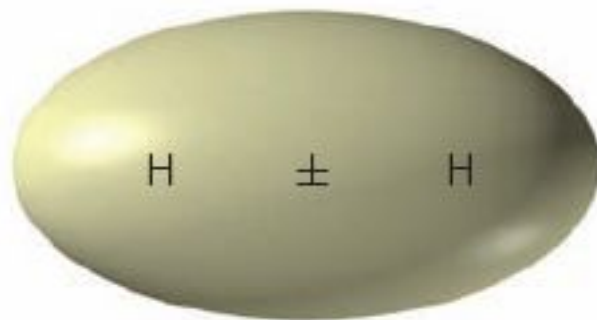
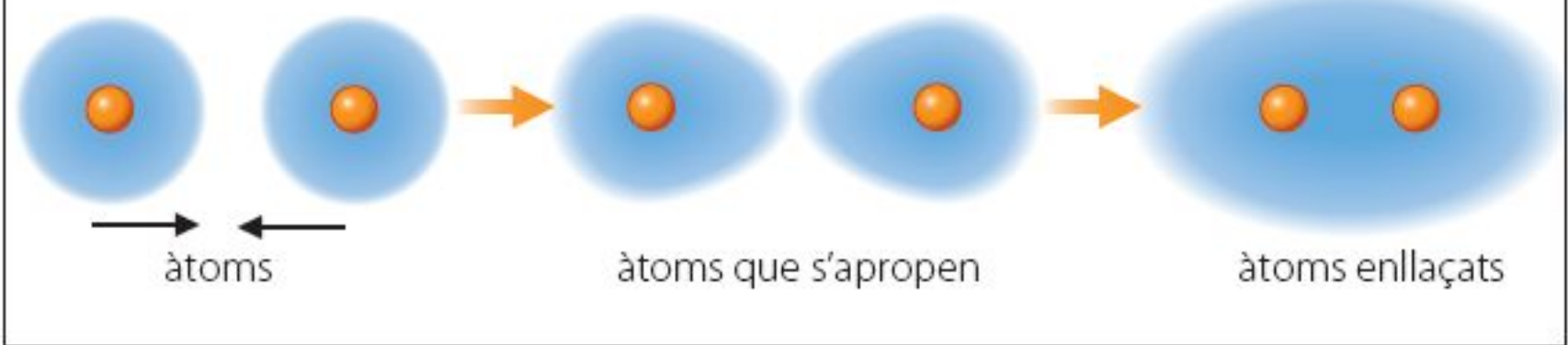
Geometria de les molècules

La geometria de la molècula no coincideix amb la disposició dels àtoms perquè no tots els parells d'electrons són enllaçants.

Nombre de parells d'electrons	Exemple de molècula	Disposició de les parells d'electrons	Geometria de la molècula
2 enllaçants 1 no enllaçant	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Sn}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Sn}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$ SnCl_2		 angular
3 enllaçants 1 no enllaçant	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{:}\ddot{\text{N}}\text{:} \quad \text{H} \\ \quad \text{:}\ddot{\text{H}}\text{:} \\ \text{NH}_3 \end{array}$		 piramidal triangular
2 enllaçants 2 no enllaçants	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \quad \text{H} \\ \quad \text{:}\ddot{\text{H}}\text{:} \\ \text{H}_2\text{O} \end{array}$		 angular

Polaritat dels enllaços

Representació d'un enllaç covalent



enllaç covalent **apolar**
 $\text{H}-\text{H}$



enllaç covalent **polar**
 $\delta^+ \quad \delta^-$
 $\text{H}-\text{Cl}$

Polaritat dels enllaços

Apolar.

Els electrons d'un doblet enllaçant estan igualment compartits. Pertànyen als dos àtoms per igual.

Són àtoms d'electronegativitat igual o molt semblant. A la majoria de casos són enllaços entre àtoms iguals. Molècules diatòmiques com Cl_2 o O_2 .

Polar.

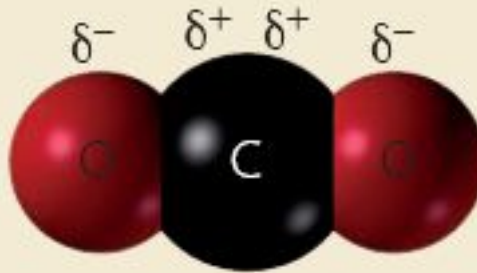
Els electrons d'un doblet enllaçant no estan compartits per igual. Es troben més pròxims a un dels dos àtoms.

Són àtoms d'electronegativitat diferent, els electrons estan més pròxims a l'àtom més electronegatiu.

Molècules diatòmiques formades per dos àtoms diferents es consideren sempre polars: HCl

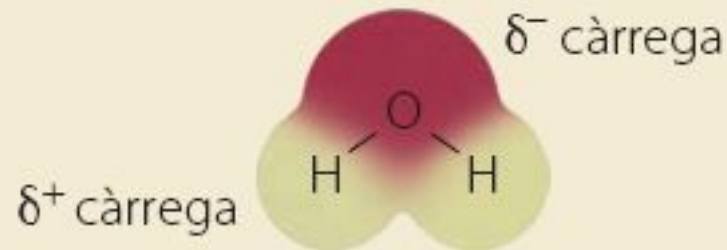
Polaritat de les molècules

CO₂: molècula apolar amb enllaços polars



Molècules poliatòmiques, a més de tenir electronegativitats diferents, la seva disposició espacial també ha de ser adequada

H₂O: molècula polar amb enllaços polars



Propietats de les substàncies covalents

Enllaç covalent molt fort però interacció entre molècules covalents és dèbil (forces intermoleculars).

Punts de fusió i ebullició baixos, en general es troben en estat gasós.

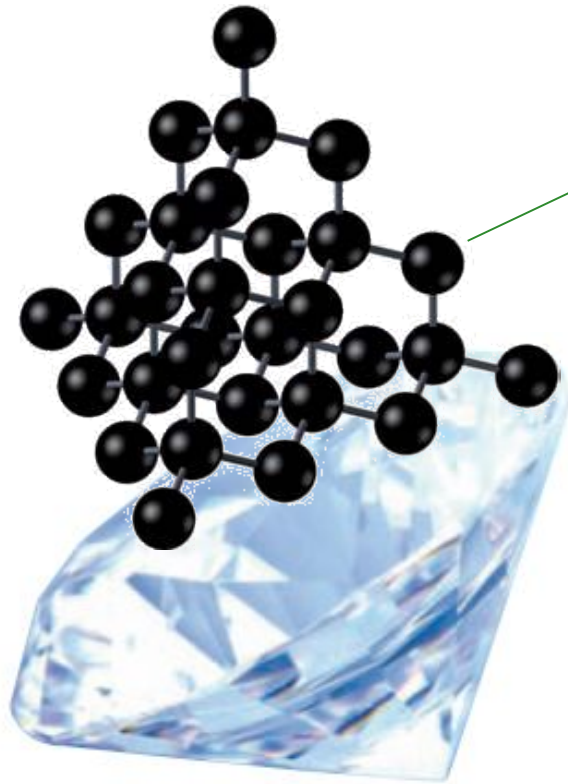
Segons el seu pes atòmic es poden trobar en estat líquid o sòlid, però de característiques molt volàtils.

No condueixen electricitat.

Substàncies covalents polars es dissolen en dissolvents polars. En canvi, les covalents apolars es dissolen en dissolvents apolars.

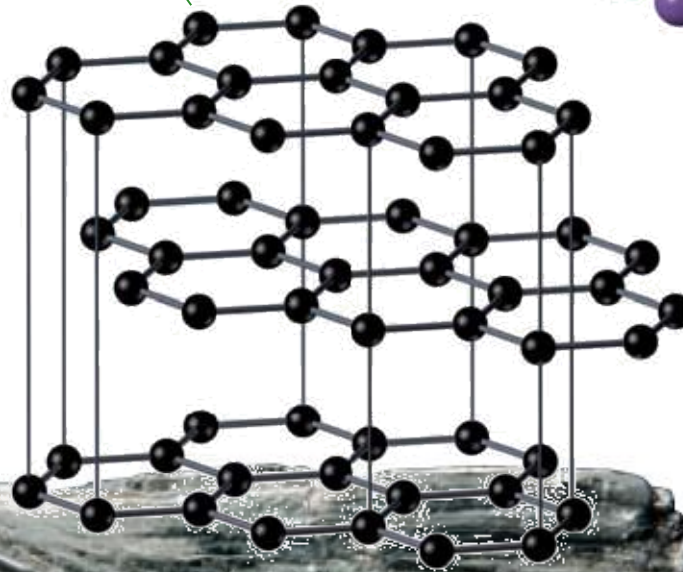
Forces intermoleculars són diferents per substàncies polars i no polars.

Cristalls covalents



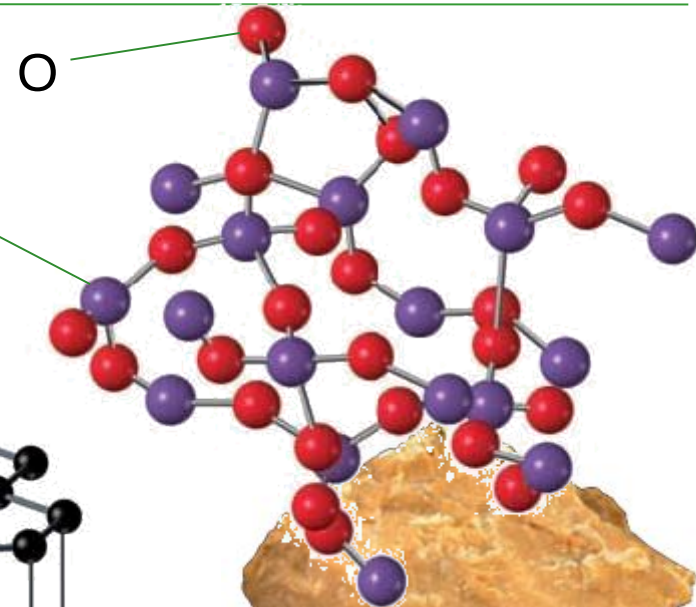
Diamant

C



Grafit

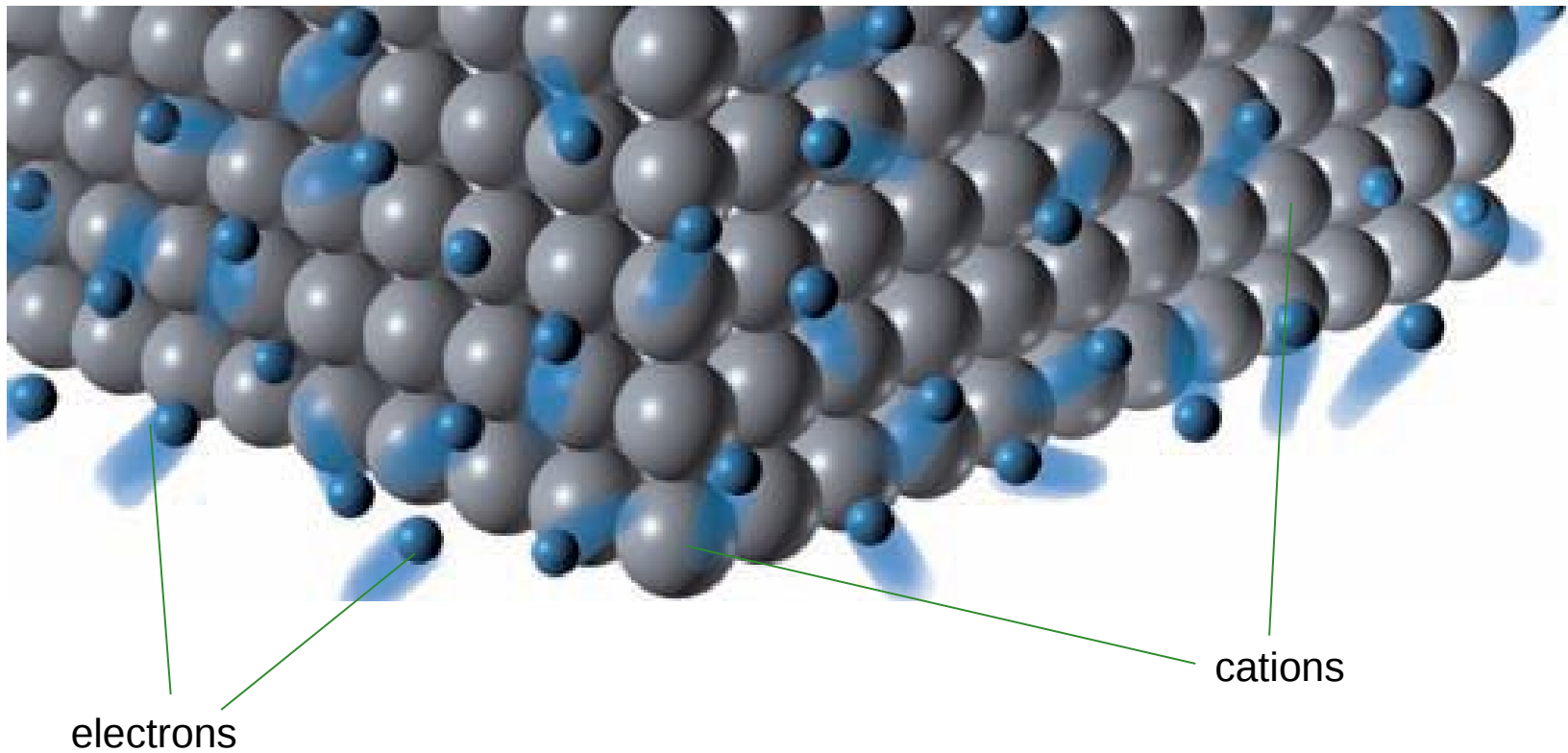
Si



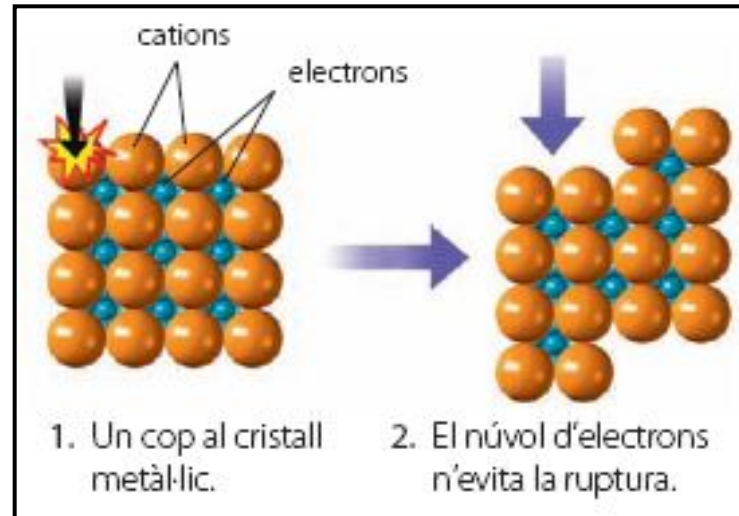
Sílice

Enllaç metàl·lic

Els electrons de tots els àtoms se situen al voltant dels nuclis de manera deslocalitzada.



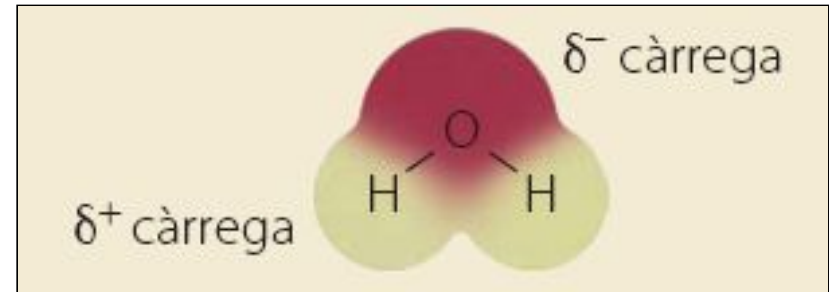
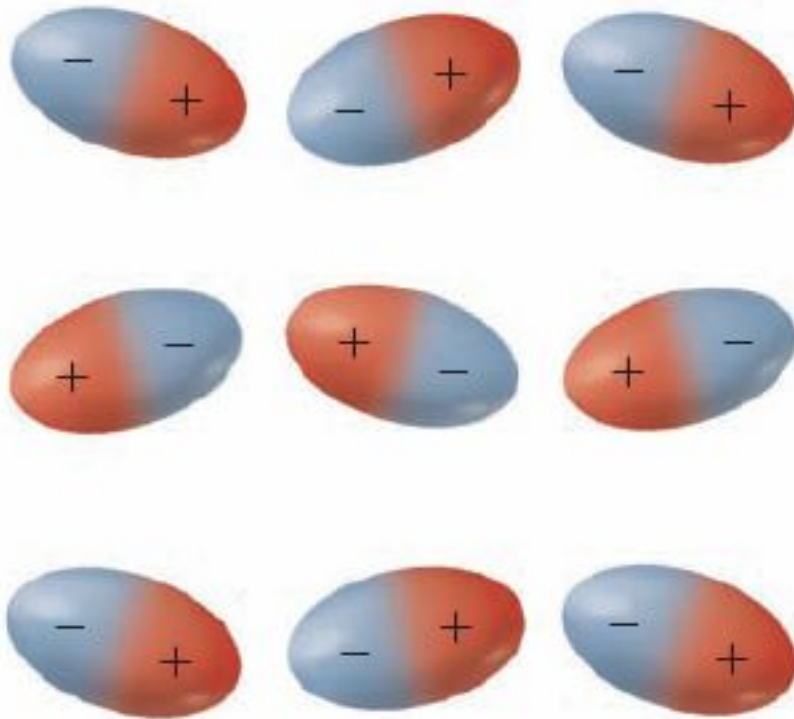
Propietats de les substàncies metàl·liques



- Sòlides a temperatura ambient.
- Punt de fusió alt.
- Condueixen bé la calor i l'electricitat.
- Dúctils i mal·leables.
- Es poden ratllar i deformar pels cops.

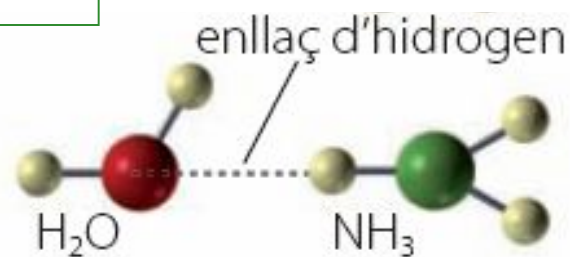
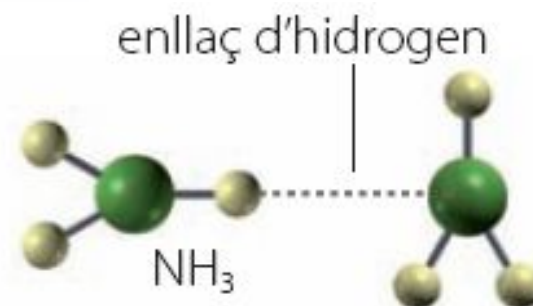
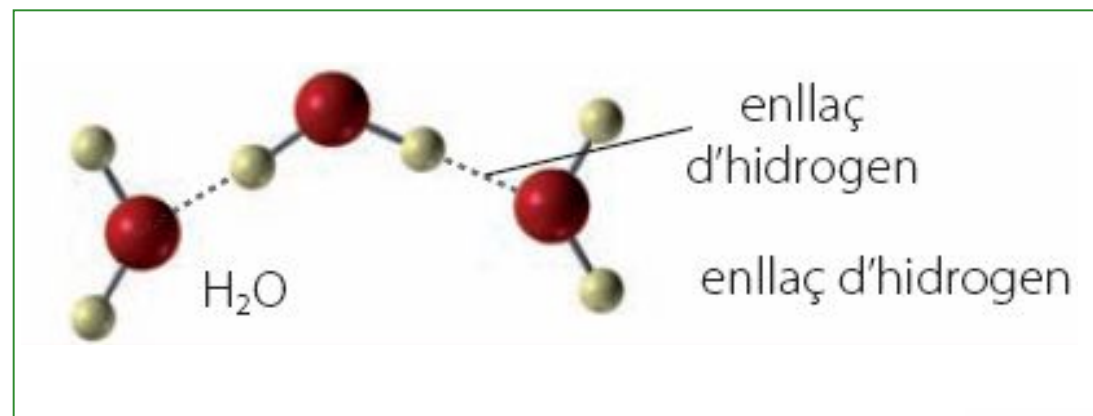


Enllaç dipol-dipol

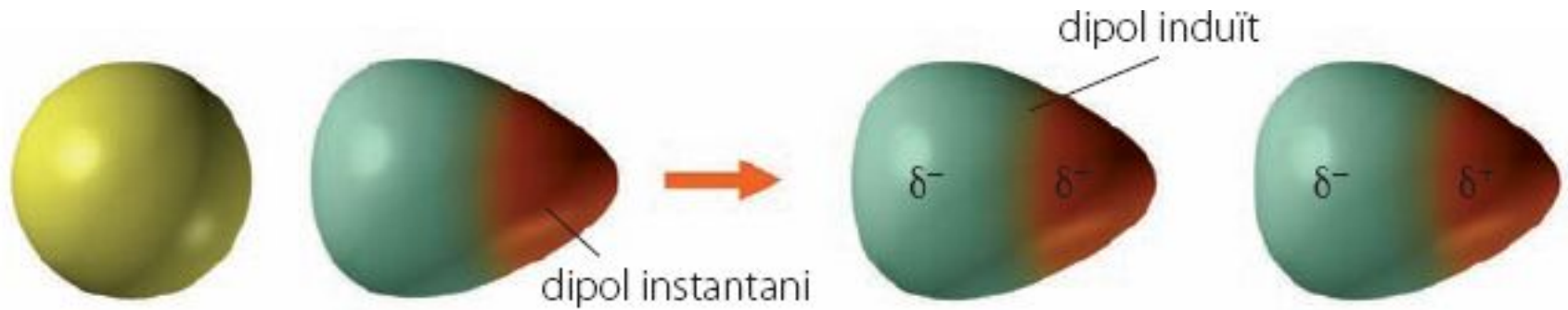


Com més gran sigui la separació de càrregues dins la molècula, més gran és el dipol.

Enllaç d'hidrogen



Enllaç dipol instantani - dipol induït



Enllaç ió-dipol

En una solució d'un compost iònic, els hidrògens de les molècules d'aigua se situen envoltant l'anió

