

# Química 1r de Batxillerat

## Enllaç Químic

Març de 2011

### Què és l'enllaç químic?

La unió entre un parell d'àtoms rep el nom d'enllaç químic.  
Els àtoms s'uneixen per formar molècules o ions.

### Per què s'uneixen els àtoms?

Podem expressar-ho en termes de forces o en termes d'energia.

- En termes de forces: perquè els àtoms s'atrauen elèctricament.
- En termes d'energia: perquè els àtoms units tenen menys energia que quan estan separats.

# Enllaç químic

## Energia d'enllaç

- Dos àtoms enllaçats tenen menys energia que quan estan separats.
- Com que l'energia de l'univers es conserva, quan dos àtoms s'uneixen, perden (alliberen, desprenen) una energia que ha d'aparèixer d'una altra forma (calor, energia elèctrica...).
- Per definició l'energia que desprenen dos àtoms en enllaçar-se s'anomena energia d'enllaç i se li assigna signe negatiu.
- Inversament per trencar un enllaç i separar els dos àtoms cal suministrar-los (gastar) energia (calor, energia elèctrica...). Aquesta energia té el mateix valor que l'energia d'enllaç i per distingir-la d'ella se li atribueix signe positiu.

# Enllaç químic

## Regla de l'octet

Volem parlar de l'enllaç químic i la seva relació amb les configuracions electròniques dels àtoms enllaçats.

- Bàsicament a l'enllaçar-se els àtoms comparteixen o intercanvien electrons.
- Per tant les seves configuracions electròniques canvien.
- La **Regla de l'octet**, vàlida per a molts elements, afirma que els elements que la compleixen tendeixen a adquirir, en enllaçar-se, 8 electrons en la seva última capa, que és la mateixa configuració que la dels gasos nobles.
- Precisament la poca reactivitat química dels gasos nobles s'atribueix a l'estabilitat d'aquesta configuració.
- Cal remarcar que aquesta regla té excepcions.

# Tipus d'enllaç

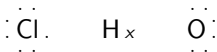
Bàsicament els àtoms s'enllacen de tres formes diferents o tipus d'enllaç.

- **Enllaç covalent.**
- **Enllaç iònic.**
- **Enllaç metàl·lic.**

Cal indicar que dintre de cada tipus hi ha diferents graus.

# Electrons de valència. Simbolisme de Lewis

- **Electrons de valència:** es considera que en l'enllaç intervenen els electrons de l'última capa, **capa de valència**. Aquests electrons reben el nom d'**electrons de valència**.
  - C:  $2s^2 2p^2$ .
  - Cl:  $3s^2 3p^5$ .
- En l'estudi de l'enllaç, especialment en el covalent, se sol utilitzar el **simbolisme de Lewis**, que representa els elements pel seu símbol envoltat pels electrons de valència, representats per punts o aspes.



- És habitual en el simbolisme de Lewis utilitzar un guionet per representar parells d' $e^-$ .



# Enllaç covalent

## Descripció

### Enllaç covalent

L'enllaç covalent s'estableix quan dos àtoms comparteixen un o més parells d' $e^-$ , aportant cada àtom un  $e^-$  a cada parell compartit.

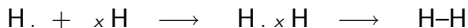
- Entendre l'enllaç covalent en termes de forces d'atracció no és fàcil, però en qualsevol cas, en unir-se d'aquesta manera els àtoms units tenen menys energia que separats.
- El covalent és l'enllaç més freqüent. És l'enllaç que forma les molècules.
- Els elements no metàl·lics s'enllacen covalentment entre ells, però també podem tenir aquest enllaç entre un metall i un no metall, com per exemple la molècula de clorur de beril·li,  $\text{BeCl}_2$ .

# Enllaç covalent

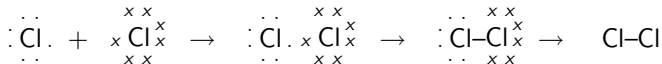
## Exemples I

En els exemples següents els àtoms en enllaçar-se aconseguixen tenir la configuració de gas noble (regla de l'octet).

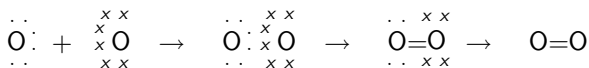
- Dihidrogen,  $H_2$  : enllaç simple, només 1 parell d' $e^-$  compartit.



- Diclor,  $Cl_2$



- Dioxigen,  $O_2$  : enllaç doble, 2 parells d' $e^-$  compartits.

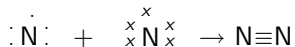




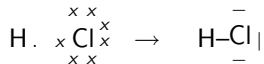
# Enllaç covalent

## Exemples II

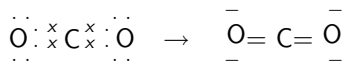
- Dinitrogen,  $N_2$ : triple enllaç, 3 parells d' $e^-$  compartits.



- Clorur d'hidrogen,  $HCl$ .



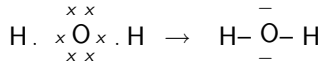
- Diòxid de carboni,  $CO_2$ .



# Enllaç covalent

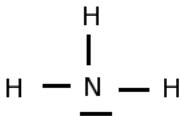
## Exemples III

- L'aigua;  $\text{H}_2\text{O}$

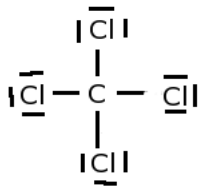


- Amoníac,  $\text{NH}_3$  i tetraclorur de carboni,  $\text{CCl}_4$

Amoníac



Tetraclorur de carboni



# El simbolisme de Lewis i la geometria de la molècula

L'objectiu del simbolisme de Lewis no és obtenir una representació gràfica de la molècula que inclogui la geometria correcta d'aquesta. Per tant, quan representem la molècula d'aigua amb una geometria linial i plana no estem dient que la geometria real d'aquesta molècula sigui precisament aquesta. La geometria molecular depèn de factors que no queden recollits en el simbolisme de Lewis. De fet sabem que la molècula d'aigua és plana, però no linial. Clica en aquest [enllaç](#) per veure la geometria de la molècula d'aigua

## Enllaç covalent datiu , excepcions de la regla de l'octet i mesomeria.

Volem explicar tres aspectes nous de l'enllaç covalent:

- Enllaç covalent datiu o coordinat: Es dóna quan el parell d'electrons enllaçants és aportat per un únic àtom. Això succeeix en l'**ió oxoni**,  $\text{H}_3\text{O}^+$  i en l'**ió amoni**,  $\text{NH}_4^+$ . Clica en el següent enllaç per veure aquest darrer cas: [ió amoni](#).
- Excepcions de la regla de l'octet: El punt clau és que no sempre es compleix la regla de l'octet. Aquesta situació es dóna amb alguns elements del bloc p, és a dir que estan omplint el subnivell p (sis grups de la dreta de la T.P). Tenint en compte que els enllaços són covalents senzills escriu amb la notació de Lewis les molècules  $\text{BF}_3$  i  $\text{BeCl}_2$  i comprova què succeeix.
- Mesomeria o ressonància. Les propietats d'algunes molècules no poden quedar recollides per un únic diagrama de Lewis. Exemples són la molècula del  $\text{SO}_2$  i de l'ozó,  $\text{O}_3$ . En el següent enllaç s'explica aquest darrer cas: [mesomeria](#)

# Polaritat de l'enllaç covalent

- **Enllaç covalent homopolar o no polar:** es dóna quan el parell d' $e^-$  enllaçants es troba igualment compartit pels dos àtoms enllaçats. Perquè això passi els dos àtoms han de tenir la mateixa electronegativitat, cosa que només es dóna quan els dos àtoms són iguals. Estaríem parlant de l'enllaç de les molècules  $H_2$ ,  $Cl_2$  o  $N_2$ .
- Si els dos àtoms tenen electronegativitats diferents, tenim l'**enllaç covalent polar**. En aquest cas, el parell d' $e^-$  enllaçants es troben més a prop de l'àtom més electronegatiu, de manera que aquest queda envoltat per una càrrega negativa i l'altre per una de positiva. Seria el cas de molècules com el  $HCl$  o de l'aigua que tindria l'oxigen unit a dos àtoms d' $H$  per dos enllaços polars.

# Molècules polars

- Les molècules amb enllaços covalents polars poden ser polars. Que ho acabin sent dependrà de la geometria de la molècula.
- Per molècula polar volem dir que tot i ser neutra elèctricament, podem dividir mentalment la molècula en dos pols o parts, una de positiva i l'altra de negativa.
- Les molècules diatòmiques com l'HCl que posseeixen un enllaç polar són polars.
- L'aigua, formada per tres àtoms, és una molècula polar degut a la seva geometria no linial. Enllaç a la molècula d'aigua.
- El CO<sub>2</sub> en canvi és una molècula apolar tot i tenir enllaços polars perquè la seva geometria és linial (tres àtoms en línia recta). Enllaç a la molècula de CO<sub>2</sub>.

# Forces intermoleculars: enllaç de pont d'hidrogen

- Hem dit que l'enllaç covalent és el que s'estableix entre els àtoms per formar molècules.
- Cal dir també, que l'enllaç covalent entre dos àtoms és molt fort. En canvi les interaccions entre les molècules, que reben el nom de forces intermoleculars, solen ser molt més febles.
- Entre aquestes forces intermoleculars tenim **el pont d'hidrogen** i les **forces de van der Waals**.
- El pont d'hidrogen s'estableix entre molècules polars, que contenen hidrogen i altres elements més electronegatius, com el fluor, l'oxigen o el nitrogen, que contenen molts electrons amb doblets no enllaçants (parells d' $e^-$  que no participen en l'enllaç).
- L'hidrogen queda envoltat d'un excés de càrrega positiva, cosa que provoca que s'uneixi a l'àtom electronegatiu d'una altra molècula. Aquesta unió és el que anomenem pont d'hidrogen (clica damunt del subratllat per anar a la wiki).

# Cristalls covalents i substàncies moleculars

Amb l'enllaç covalent podem trobar dos grans tipus de substàncies amb propietats ben diferents:

- Cristalls atòmics covalents.
  - Constitueixen xarxes tridimensionals d'àtoms units per l'enllaç covalent que s'estenen per tot el cristall.
  - Les propietats d'aquestes substàncies venen determinades pel fet que l'enllaç covalent entre àtoms és molt fort.
  - Enllaç a exemples i a les propietats dels cristalls covalents
- Substàncies moleculars.
  - Són compostos formats per molècules, que estan unides per forces intermoleculars, que determinen les seves propietats i que són molt més febles que els enllaços covalents.
  - En estat sòlid formen cristalls moleculars, que es diferencien dels atòmics pel fet que en els nusos de la xarxa hi ha molècules i no àtoms.
  - Enllaç a exemples i a les propietats de les substàncies moleculars

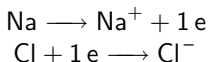


# L'enllaç iònic (I)

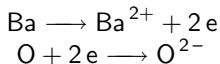
- L'enllaç iònic es forma per transferència d' $e^-$  d'un àtom a un altre, de manera que les noves configuracions electròniques siguin més estables, complint-se, per exemple, la regla de l'octet.
- Com a resultat de la transferència d' $e^-$  es formen ions de signes oposats que s'atrauen elèctricament, establint-se així el que anomenem enllaç iònic.
- L'enllaç iònic, contràriament al covalent, no és dirigit. En altres paraules, la força d'atracció, que exerceix un ió qualsevol, s'estén en totes direccions al seu voltant, de manera que queda envoltat pel nombre més gran possible d'ions de signe contrari, formant-se una xarxa cristal·lina compacta i tridimensional, que es coneix amb el nom de cristall iònic.
- Per tant, és important recordar que aquest enllaç no forma molècules, sinó xarxes cristal·lines .

## L'enllaç iònic (II)

El compost iònic més conegut és el clorur de sodi, NaCl, que és la sal que hi posem al menjar. El procés de transferència d'e<sup>-</sup> el podem representar de la següent manera:



Un altre cas és l'òxid de bari, BaO:



L'enllaç iònic se sol donar entre un metall i no metall, és a dir entre elements de electronegativitats molt diferents. El clorur de sodi en seria un bon exemple, en establir-se l'enllaç entre un element de la primera columna i un de la penúltima de la T.P.

# Propietats dels compostos iònics

Les propietats d'aquests compostos estan determinades per les forces d'atracció electrostàtiques entre els ions que els formen, forces que són molt intenses. En destaquem les següents:

- Són sòlids a temperatura ambient.
- Tenen punts de fusió i d'ebullició elevats.
- Són durs, és a dir, difícils de ratllar.
- Són fràgils, és a dir, es trenquen amb facilitat (veure l'explicació en el llibre per exemple).
- Fosos o en dissolució són conductors de l'electricitat en tenir càrregues lliures (els ions que els formen).
- Són insolubles en dissolvents no polars i molt solubles en polars com l'aigua.
- En solució els ions estan solvatats, és a dir envoltats per molècules de dissolvent. Si aquest és aigua diem que els ions estan hidratats.

# València, electrovalència i nombres d'oxidació

- La **valència** d'un àtom és el nombre d'enllaços covalents que forma. Un mateix element pot tenir diverses valències en funció de l'àtom amb què s'enllaça.
- L'**electrovalència** o **valència iònica** és el nombre d'electrons que un àtom perd o guanya en transformar-se en un ió.
- El **nombre d'oxidació** d'un element en un cert compost és un nombre enter, positiu o negatiu, el valor del qual correspon a la càrrega que tindria un àtom d'aquest element si els electrons de cada enllaç s'assignessin a l'àtom més electronegatiu. Es representen en xifres romanes.

# Nombres d'oxidació

El concepte de nombre d'oxidació és útil per formular compostos. A continuació es dona informació per poder determinar nombres d'oxidació.

- En les molècules formades per dos àtoms idèntics ( $H_2$ ,  $O_2$ ...), els nombres d'oxidació de cada àtom valen zero.
- El nombre d'oxidació del fluor és sempre -I.
- El nombre d'oxidació de l'oxigen és -II, excepte quan es combina amb el fluor que val II i en els peròxids que val -I.
- L'hidrogen quan es combina amb els metalls té nombre d'oxidació -I i quan ho fa amb els no metalls I.
- Els metalls alcalins tenen sempre nombre d'oxidació I i els alcalinoterris II. Els metalls només tenen nombres d'oxidació positius.

# L'enllaç metàl·lic

Els àtoms en els metalls estan units mitjançant l'enllaç metàl·lic. Aquest enllaç s'estableix en compartir tots els àtoms de la xarxa els electrons de valència de cadascun d'ells. Això significa que aquests electrons no estan localitzats al voltant d'un àtom en concret, sinó que tenen llibertat per moure's per tota la xarxa, fet que explica una de les propietats més importants dels metalls, la seva gran conductivitat elèctrica.

El conjunt d'electrons de valència compartits s'anomena **núvol electrònic**.

Per tant en els metalls tenim la xarxa de cations a l'interior del núvol electrònic.

Les atraccions entre els cations i els electrons del núvol confereix estabilitat a tot el metall.

Com ja s'ha dit de passada, en estat sòlid els metalls formen xarxes cristal·lines en els nusos de les quals es troba el catió corresponent (l'àtom desprovist dels seus electrons de valència).

# Propietats dels metalls

- Presenten el que anomenem brillantor metàl·lica, conseqüència de què reflecteixen molt bé la llum.
- Punts de fusió i ebullició alts. Fet que indica que costa alliberar els ions metàl·lics de la xarxa.
- Alta conductivitat elèctrica.
- Alta conductivitat calorífica.
- Són dúctils (es poden estirar en fils) i mal·lables (se'n poden fer làmines).