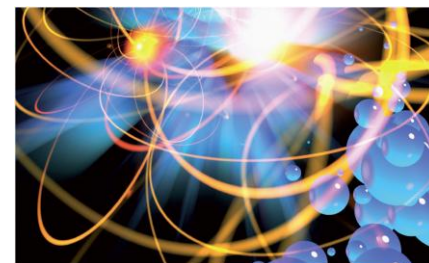


QUÍMICA 2 BATXILLERAT

Unitat 11 DELS ÀTOMS A LES MOLÈCULES. L'ENLLAÇ QUÍMIC



Dels àtoms a l'enllaç

Els **ENLLAÇOS QUÍMICS** són les forces que mantenen units els àtoms, ions o molècules que formen les substàncies químiques (elements i compostos) de manera estable. Aquestes unions es realitzen per a formar agrupacions més estables i de menor energia que les quals tenien per separat.

TIPUS

ENLLAÇ IÒNIC. Es forma entre elements molt allunyats a la taula periòdica. Les substàncies amb aquest enllaç formen estructures cristal·lines (xarxes); tenen punts de fusió i ebullició alts, són dures, difícils de deformar i solen ser solubles en dissolvents polars com l'aigua. No són conductores de l'electricitat, però dissoltes o foses sí que ho són.

Animació que compara l'enllaç iònic amb el covalent (en anglès)

http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/animations/chang_7e_esp/bom1s2_11.swf

ENLLAÇ COVALENT Es forma entre elements de la dreta de la taula periòdica amb diferències d'electronegativitat baixes; formen molècules o estructures per compartició d'electrons. En podem distingir dos tipus:

- **Substàncies moleculars.** Els enllaços entre àtoms són covalents (forts) però l'atracció entre molècules és dèbil. Són tous i amb punts de fusió i ebullició baixos. Insolubles en dissolvents polars.
- **Substàncies atòmiques.** Formades per estructures cristal·lines gegants. Són resistents a les deformacions, són dures i tenen punts de fusió i ebullició alts, fins i tot més elevats que els compostos iònics.

ENLLAÇ METÀL·LIC. Els seus àtoms s'estabilitzen com a ions positius i els electrons que queden lliures es mouen al seu voltant. Són sòlids forts, dúctils (podem fer-ne fils), mal·leables (podem fer-ne làmines), de conductivitat elèctrica elevada, brillantor i insolubilitat en dissolvents.

L'enllaç covalent i la teoria de Lewis (I)

En un **ENLLAÇ QUÍMIC**, el sistema format pels àtoms enllaçats és més estable —menys energètic— que el sistema format pels àtoms separats. El valor de l'energia potencial del sistema corresponent a la distància d'enllaç és precisament l'energia que s'allibera quan es forma l'enllaç.

L'enllaç covalent pot ser **senzill** si està format per un sol parell d'electrons, **doblet** si està format per dos parells o **triple** si està format per tres parells d'electrons.

Habitualment, cadascun dels electrons de l'**enllaç covalent senzill** és aportat per cada element que hi participa. Hi ha algun cas en què els dos electrons de l'enllaç són aportats només per un dels dos àtoms. Aquest fenomen només succeeix quan un dels àtoms té un parell d'electrons de valència per cedir i l'altre àtom pot completar el nivell de valència amb aquesta cessió i s'anomena **enllaç covalent coordinat**.

Gilbert Lewis va formular el 1916 la **Teoria de l'octet**. Segons aquesta, els àtoms formen enllaços covalents compartint electrons fins a aconseguir **vuit electrons en la seva última capa** (capa de valència). Lewis també va idear un sistema de representació dels electrons de la capa de valència i dels enllaços, anomenades **Estructures de Lewis**

! Quan un àtom d'hidrogen s'uneix covalentment amb un altre àtom, comparteix un electró. D'aquesta manera, aconsegueix tenir dos electrons al seu nivell de valència i assoleix la configuració del gas noble més proper: l'heli.

Excepcions a la regla de l'octet.

- A més de l'hidrogen, hi ha altres elements, com el beril·li o el bor, que es queden amb **menys de vuit electrons** al nivell de valència una vegada formats els enllaços covalents corresponents.
- També hi ha molècules amb àtoms que tenen **més de vuit electrons** al nivell de valència. Aquesta circumstància és força habitual en els elements situats al tercer període de la taula periòdica i als següents, perquè tenen orbitals d al nivell de valència.

L'enllaç covalent i la teoria de Lewis (II)

Estructura de Lewis d'un àtom. Es representa mitjançant el símbol de l'element envoltat pels electrons de la capa de valència. Els electrons se simbolitzen mitjançant punts o creus, i un parell d'electrons, mitjançant un segment.

Estructura de Lewis d'una molècula. S'utilitza la mateixa notació que per els àtoms, però els enllaços es representen per guions entre els símbols dels elements: un guió si l'enllaç és simple (-), dos si és doble (=), i tres si és triple (≡).

Existeixen unes regles per realitzar correctament l'estructura de Lewis de les molècules (veure més endavant).

Si el que cal és representar un enllaç covalent coordinat es substitueix el guió per una fletxa dirigida des de l'àtom que aporta els dos electrons fins a l'altre àtom (→).

Hidrogen	$\text{H}^\bullet$	$\text{H}^\bullet$
Carboni	$\cdot\ddot{\text{C}}\cdot$	$\cdot\ddot{\text{C}}\cdot$
Aigua	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{H}$
Etè o etilè	$\begin{array}{cc}\text{H} & \text{H} \\ \vdots & \vdots \\ \text{C} & \vdots \text{C} \\ \vdots & \vdots \\ \text{H} & \text{H}\end{array}$	$\begin{array}{cc}\text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{C} & = \text{C} \\ & \\ \text{H} & \text{H}\end{array}$
Eti o acetilè	$\text{H}:\text{C}:::\text{C}:\text{H}$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$
Amoni	$\left[\begin{array}{c}\text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\text{N}:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H}\end{array} \right]^+$	$\left[\begin{array}{c}\text{H} \\ \uparrow \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \\ \text{H}\end{array} \right]^+$

Pàgina que explica les estructures de Lewis i mostra les d'alguns compostos, entre els que hi ha l'àcid nítric i el sulfúric que contenen enllaços covalents coordinats. (en castellà)

<http://fisicayquimicaenflash.es/fisicayquimicaenflash/molecula/covalente/lewisestruc.htm>

L'enllaç covalent i la teoria de Lewis (III)

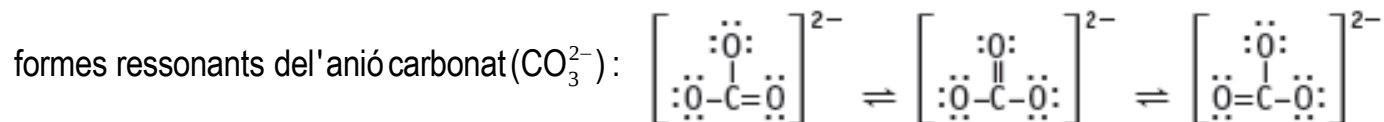
Passos per a representar el diagrama de Lewis d'una molècula senzilla:

1. Comptem tots els electrons de valència
2. Es tria quin és l'àtom central que generalment és el menys electronegatiu. Mai és l'hidrogen i, normalment, no és l'oxigen tampoc.
3. Formem els enllaços entre l'àtom central i els perifèrics
4. Els electrons restants es situen com a parells solitaris pe a completar els octets.
5. Hem de comprovar si la distribució electrònica és correcta i si d'aquesta distribució en resulta una espècie elèctricament neutra.

Exemple: Amoníac (NH₃)

1. Els electrons de valència són: $5 + 3 \cdot 1 = 8$ (4 parells)
2. L'àtom central és el Nitrogen (N)
3.
$$\begin{array}{c} \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ | \\ \text{H} \end{array}$$
4.
$$\begin{array}{c} \text{H}-\bar{\text{N}}-\text{H} \\ | \\ \text{H} \end{array}$$
5. L'estructura és neutra.

Existeixen diverses molècules on els electrons no semblen estar localitzats en posicions fixes (donades per les estructures de Lewis) sinó disposats en diferents posicions. Això s'explica suposant que aquestes molècules són un compost intermedi entre una sèrie d'estructures anomenades **formes ressonants**. Cadascuna d'elles no existeix per si mateixa sinó que existeix el conjunt anomenat **híbrid de ressonància**.



Webs interactives per a practicar les estructures de Lewis (en anglès)

http://employees.oneonta.edu/viningwj/sims/drawing_lewis_structures_m.html

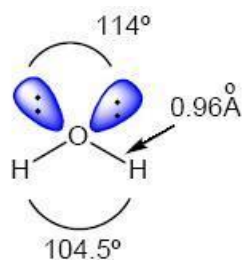
http://www.kj.uib.no/itschemistry/webSites/lewis_overview.htm

Paràmetres moleculars: energia, angle i longitud d'enllaç

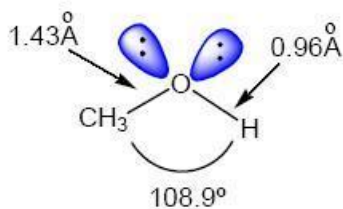
L'**energia d'enllaç** és l'energia que es desprèn quan es forma un enllaç entre dos àtoms en estat gasós. L'energia d'enllaç dels enllaços múltiples és més gran que la d'un enllaç senzill. Així, un enllaç doble té més energia que un enllaç senzill, però no el doble. Succeeix el mateix en un enllaç triple.

La **longitud d'enllaç** és la distància mitjana entre els nuclis atòmics, tenint en compte els moviments de vibració i gir que realitzen els àtoms.

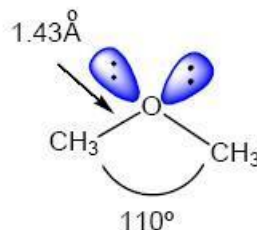
L'**angle d'enllaç** és l'angle mitjà i hipotètic entre el nucli de l'àtom central de la molècula i el nucli de l'àtom enllaçat.



aigua



metanol

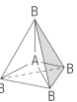


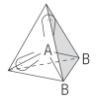
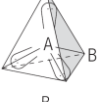
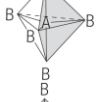
dimetil éter

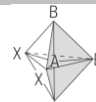
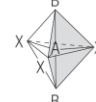
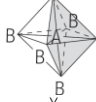
Enllaç	Longitud d'enllaç (nm)
C-H	0,107
C-O	0,143
C=O	0,122
C-C	0,154
C=C	0,133
C≡C	0,120
C-N	0,143
C=N	0,138
C≡N	0,116
N-O	0,136
N=O	0,122
O-H	0,096

Teoria de repulsió entre els parells d'electrons de la capa de valència (RPECV)

Aquesta teoria permet determinar la **geometria** de la molècula. Segons ella, l'àtom central col·loca els electrons de la capa de valència (enllaçants i no enllaçants) com més allunyats possible entre ells. Un parell d'electrons no enllaçants ocupa més volum que un parell d'electrons enllaçants.

NOMBRE DE LIGANDS (B) I PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	NOMBRE LIGANDS (B)	NOMBRE DE PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	ESTEQUIOMETRIA REAL	FORMA DE LA MOLÈCULA	GEOMETRIA	EXEMPLES	ANGLE (GRAUS)
2	2	0	AB ₂	Lineal	B—A—B	BeCl ₂	180°
3	3	0	AB ₃	Plana triangular		BF ₃ , AlCl ₃	120°
3	2	1	AB ₂ X	Angular		SnCl ₂	<120°
4	4	0	AB ₄	Tetraèdrica		CH ₄ , SiH ₄	109,5°
4	3	1	AB ₃ X	Piràmide trigonal		NH ₃ , PCl ₃ , H ₃ O ⁺	<109,5°

NOMBRE DE LIGANDS (B) I PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	NOMBRE LIGANDS (B)	NOMBRE DE PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	ESTEQUIOMETRIA REAL	FORMA DE LA MOLÈCULA	GEOMETRIA	EXEMPLES	ANGLE (GRAUS)
4	2	2	AB ₂ X ₂	Angular		H ₂ O, F ₂ O	
4	1	3	ABX ₃	Lineal		HF, HCl	
5	5	0	AB ₅	Bipiràmide trigonal		PCl ₅	90°, 120°
5	4	1	AB ₄ X	Tetraèdrica irregular		SF ₄	-

NOMBRE DE LIGANDS (B) I PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	NOMBRE LIGANDS (B)	NOMBRE DE PARELLS NO ENLLAÇANTS (X)	ESTEQUIOMETRIA REAL	FORMA DE LA MOLÈCULA	GEOMETRIA	EXEMPLES	ANGLE (GRAUS)
5	3	2	AB ₃ X ₂	Forma de T		ClF ₃	-
5	2	3	AB ₂ X ₃	Lineal		XeF ₂	-
6	6	0	AB ₆	Octaèdrica		SF ₆	90°
6	4	2	AB ₄ X ₂	Plana quadrada		ICl ₄	-

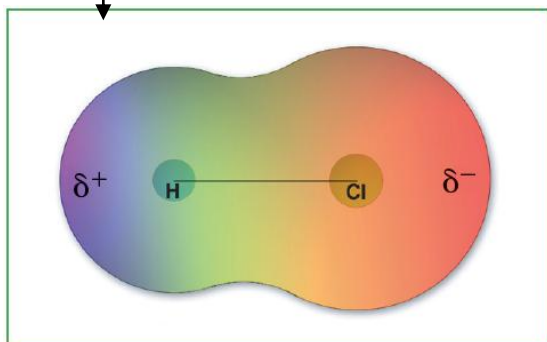
Enllaços polars i molècules polars

Enllaços covalents apolars: es formen entre àtoms iguals o amb electronegativitats molt similars.

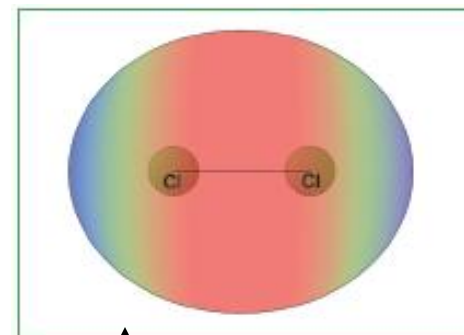
Enllaços covalents polars: es formen entre dos àtoms diferents. L'àtom més electronegatiu atreu més als electrons creant una diferència de càrrega (δ^+ , δ^-), és a dir, un dipol. Es defineix el moment dipolar ($\vec{\mu}$) com el producte d'aquesta càrrega (q) per la distància entre càrregues ($\vec{d}$):

$$\vec{\mu} = q \vec{d}$$

Molècules polars: són les molècules que tenen un moment dipolar total diferent de zero. El moment dipolar total s'obté sumant vectorialment els moments dipolars dels enllaços.



Molècula polar: $\mu_{\text{total}} = \sum \mu_{\text{enllaços}} \neq 0$
Molècula apolar: $\mu_{\text{total}} = \sum \mu_{\text{enllaços}} = 0$

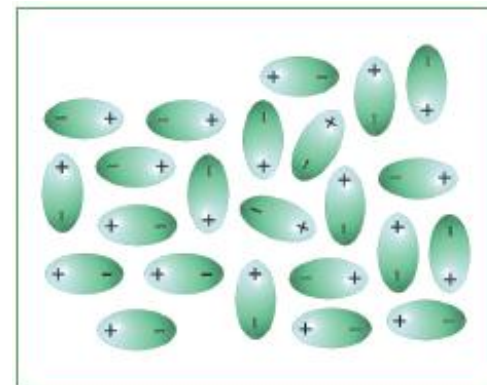


Molècules apolars: són les molècules que tenen un moment dipolar total igual a zero.

Animació que proposa exercicis per a determinar la polaritat o apolaritat de diverses molècules.
http://employees.oneonta.edu/viningwj/sims/determining_molecular_polarity_m.html (en anglès)

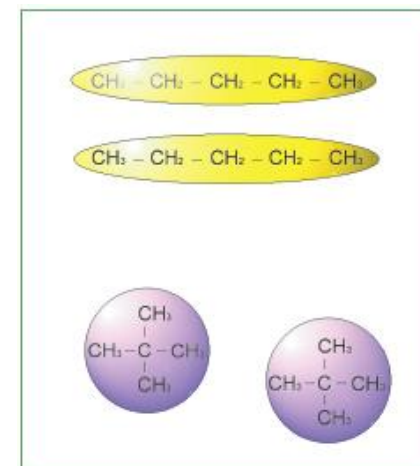
Forces intermoleculars

FORCES DE VAN DER WAALS ENTRE MOLÈCULES POLARS: són forces febles de caràcter electrostàtic entre els dipols de les molècules de substàncies polars ($\mu \neq 0$). Es denominen forces dipol-dipol.



Ordenació dipol-dipol

FORCES DE VAN DER WAALS ENTRE MOLÈCULES APOLARS O FORCES DE LONDON: són forces molt febles de caràcter electrostàtic entre les molècules de substàncies apolars, a causa de la distribució asimètrica de la càrrega que genera un dipol instantani. Són forces dipol instantani-dipol instantani. Es produeixen entre molècules d' H_2 , F_2 , Cl_2 o I_2 . Aquestes forces augmenten amb la grandària dels àtoms i les molècules ja que depenen fortament de la geometria de les molècules.



Superfície de contacte entre molècules

ENLLAÇOS D'HIDROGEN: L'enllaç d'hidrogen es produeix quan un àtom d'hidrogen unit covalentment a un àtom molt electronegatiu (F, O, N) interacciona amb un parell d'electrons no compartit d'altre àtom petit i electronegatiu. És característic de substàncies que contenen enllaços N-H, O-H i F-H

La força d'aquest enllaç augmenta amb la diferència d'electronegativitat entre els àtoms implicats i com més petita sigui la grandària d'aquests. Així es justifiquen l'increment dels punts d'ebullició dels alcohols i algunes solubilitats en aigua.

Introducció als mètodes espectroscòpics en la determinació de l'estructura de les molècules

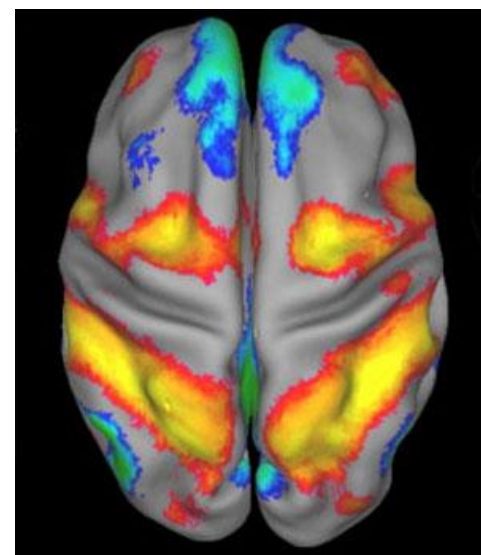
Avui dia moltes especialitzacions dins del món químic, mèdic i biològic necessiten equips electrònics complexos. Alguns exemples són:

- **Analitzador d'espectre infraroig (IR).** Aporta informació sobre la presència o l'absència de grups funcionals orgànics, com el grup alcohol $-OH$, el grup aldehyd $-CHO$, el grup àcid $-COOH$ i molts més.

- **Analitzador d'espectre de ressonància magnètica nuclear (RMN).** Determina amb molta precisió la situació, la disposició i la forma dels hidrògens que envolten una molècula. A partir d'aquesta informació es pot deduir l'esquelet de l'estructura molecular de la substància que s'estudia. S'utilitza molt en els camps de la química orgànica i de la bioquímica, a causa de la presència abundant d'hidrògens en la composició de les seves molècules. Aquesta tècnica també té una gran aplicació mèdica.

- **Espectrometria de masses (MS).** Aporta dades sobre la massa molecular, la fórmula i la disposició dels diferents components dins de la molècula.

- **Analitzador d'espectre ultraviolat (UV).** Reflecteix les excitacions electròniques dels àtoms d'una molècula, i és especialment útil en la detecció d'enllaços múltiples.



Imatge de RMN funcional d'un cervell en repòs. (Marc Raichle)