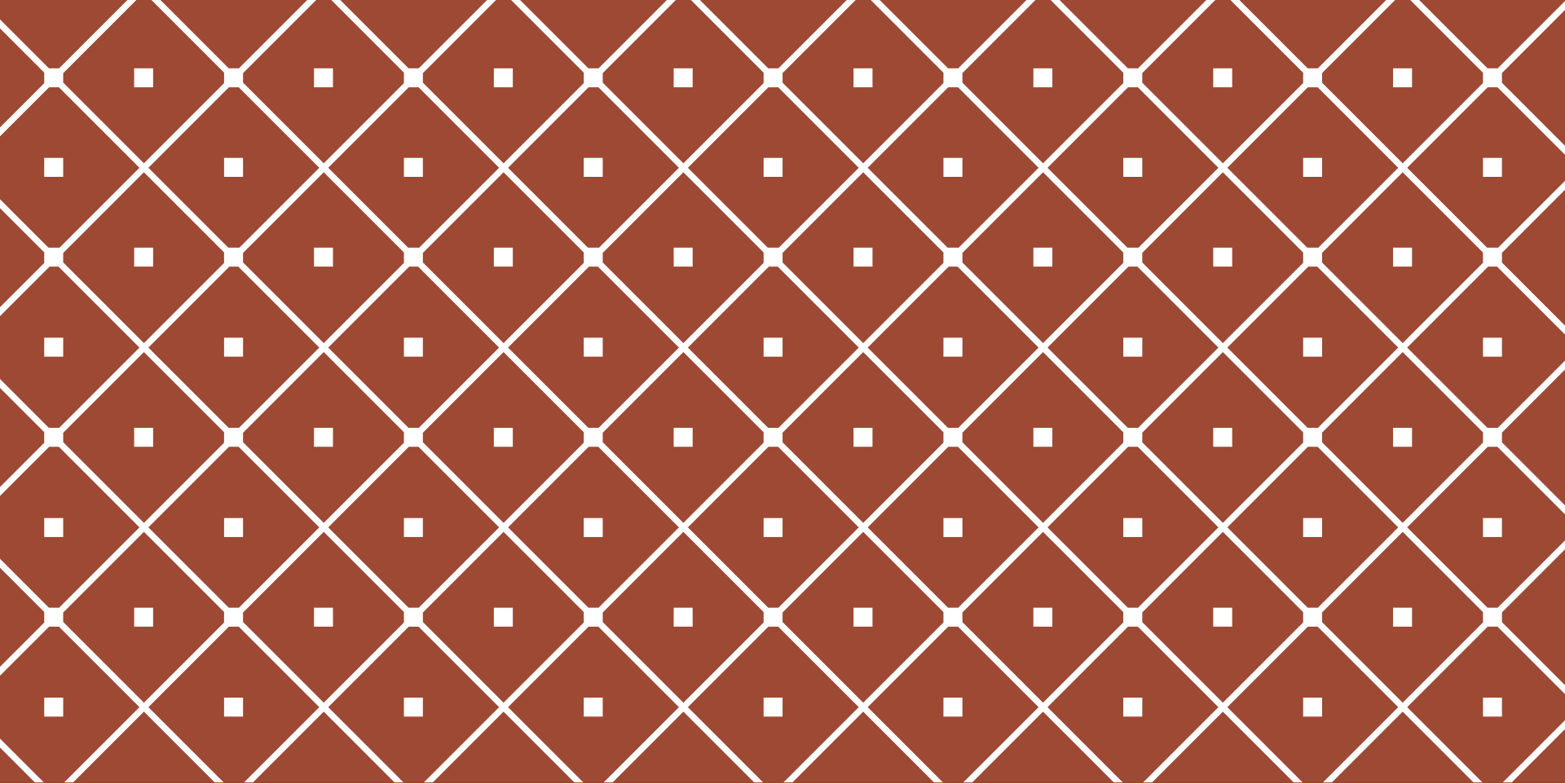




UNITAT 7. L'ENLLAÇ QUÍMIC

Química I Batxillerat

ÍNDEX

- 1. Introducció a l'enllaç**
- 2. L'enllaç iònic**
- 3. L'enllaç metàl·lic**
- 4. L'enllaç covalent**
- 5. Geometria molecular**
- 6. Forces intermoleculars**

1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

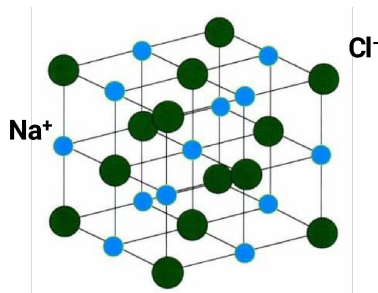
Per què s'uneixen els àtoms?

A la natura la **situació més habitual** és trobar els àtoms enllaçats

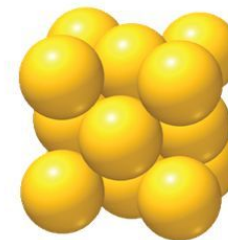
Aigua (H_2O)



Sal comuna (NaCl)



Or (Au)

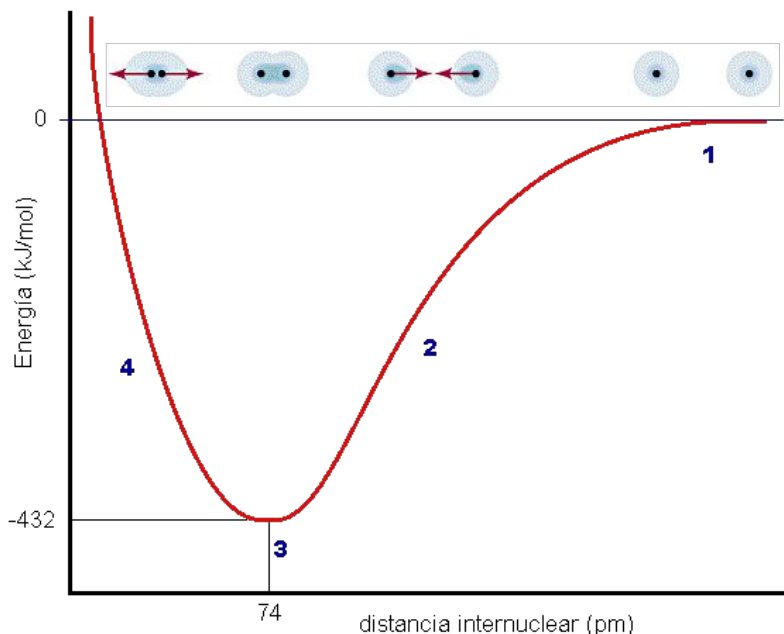


Els **gasos nobles** són dels pocs elements que podem trobar en formar d'**àtoms aïllats**.
(**He, Ne, Ar, Kr, Xe i Rn**)

1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

Per què s'uneixen els àtoms?

Els àtoms s'uneixen perquè així es crea una **situació més estable**, d'energia més **baixa**, que la dels àtoms per separat.



<https://www.youtube.com/watch?v=hEFeLYWTKX0>

<https://www.youtube.com/watch?v=NgD9yHSJ29I&feature=youtu.be>

1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

Electronegativitat i tipus d'enllaç

L'electronegativitat mesura la tendència d'un àtom a atreure els electrons quan s'enllaça amb altres àtoms.

Per mesurar l'electronegativitat s'utilitza l'escala de Pauling

Augment de l'electronegativitat

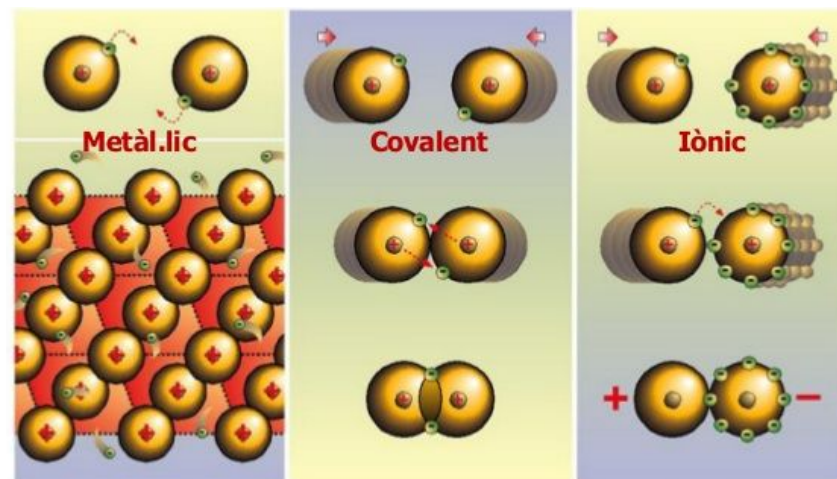
The periodic table is color-coded by groups:

- Group 1 (Alkali Metals):** Red (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
- Group 2 (Alkaline Earth Metals):** Orange (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra)
- Groups 3-10 (Transition Metals):** Green (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn)
- Group 11 (Coinage Metals):** Yellow (Cu, Ag, Au)
- Group 12 (Zn, Cd, Hg):** Light Green (Zn, Cd, Hg)
- Group 13 (Boron Group):** Light Yellow (B, Al, Ga, In, Tl)
- Group 14 (Carbon Group):** Yellow (C, Si, Ge, Sn, Pb)
- Group 15 (Nitrogen Group):** Light Green (N, P, As, Sb, Bi)
- Group 16 (Chalcogens):** Green (O, S, Se, Te, Po)
- Group 17 (Halogens):** Dark Green (F, Cl, Br, I, At)
- Group 18 (Noble Gases):** White (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)

Two large red arrows are present:

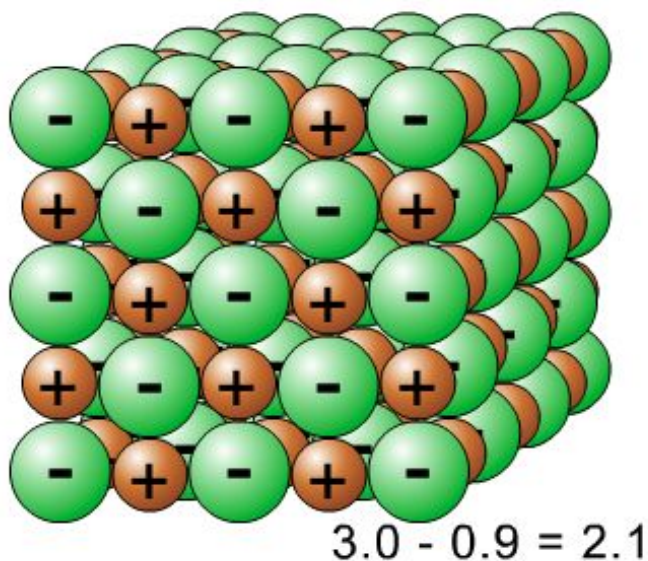
- One arrow points upwards from the bottom left, indicating the direction of increasing atomic number.
- Another arrow points to the right from the top center, indicating the direction of increasing atomic number.

L'electronegativitat dels elements que s'uneixen ens permet preveure el **tipus d'enllaç** que es formarà.



1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

Electronegativitat i tipus d'enllaç



Enllaç iònic

Unió de **metall** (electropositiu) i **no-metall** (electronegatiu). Tenen **electronegativitats molt diferents**.

Es formen **ions** de signe contrari (**catió i anió**).

Força d'enllaç: **atracció electroestàtica entre ions de signe contrari**.

1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

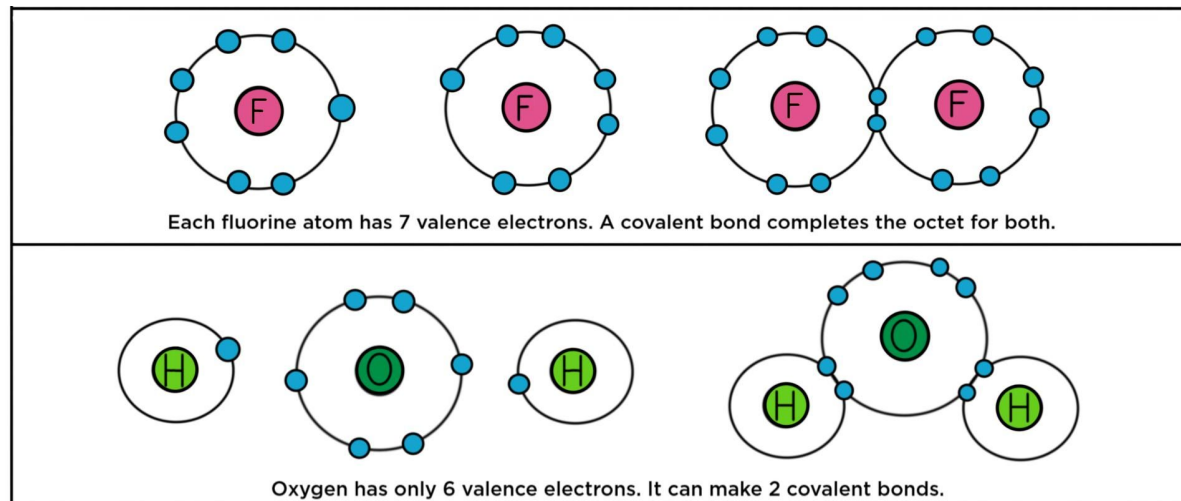
Electronegativitat i tipus d'enllaç

Enllaç covalent

Unió de **no-metalls** (electronegatiu).

Els dos àtoms tendeixen a captar els electrons de l'enllaç, i per això **comparteixen parells d'electrons**.

Força d'enllaç: **compartició de parells d'electrons**.



1. INTRODUCCIÓ A L'ENLLAÇ

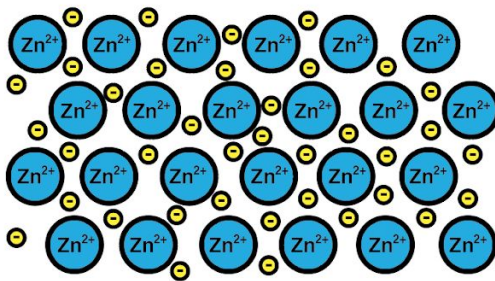
Electronegativitat i tipus d'enllaç

Enllaç metàl·lic

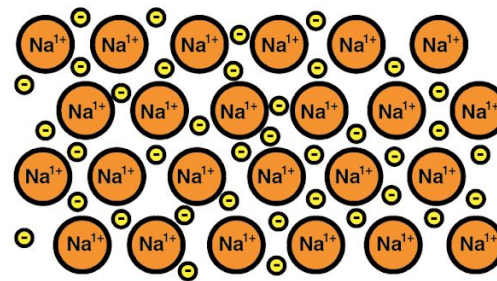
Unió d'àtoms de **metalls** (electropositius)

Es formen **nuclis positius** envoltats d'**electrons deslocalitzats** (model del núvol d'electrons)

Força d'enllaç: **interacció entre el núvol d'electrons i els nuclis positius.**



Zinc



Sodium

2. L'ENLLAÇ IÒNIC

Característiques de l'enllaç iònic

Cal que els dos àtoms tinguin **electronegativitats molt diferents** (un metall i un no-metall).

En un **enllaç iònic** un o més electrons abandonen un àtom i són acceptats per l'altre.

Els dos **ions** de signe contrari queden units per una **força d'atracció electrostàtica** molt intensa.

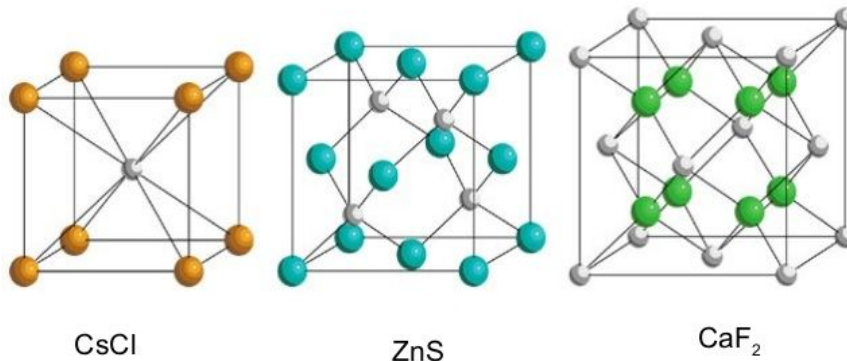


2. L'ENLLAÇ IÒNIC

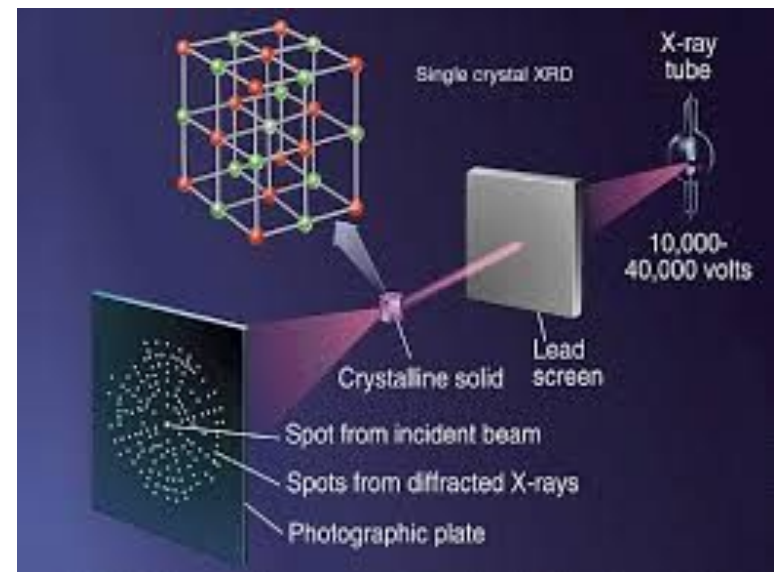
Característiques de l'enllaç iònic

Xarxes cristal·lines iòniques

Els ions formen agrupacions geomètriques regulars de manera que les **forces d'atracció** siguin màximes i les de **repulsió** siguin mínimes.



Determinació de l'estructura de les xarxes iòniques (**difracció de raigs X**)



2. L'ENLLAÇ IÒNIC

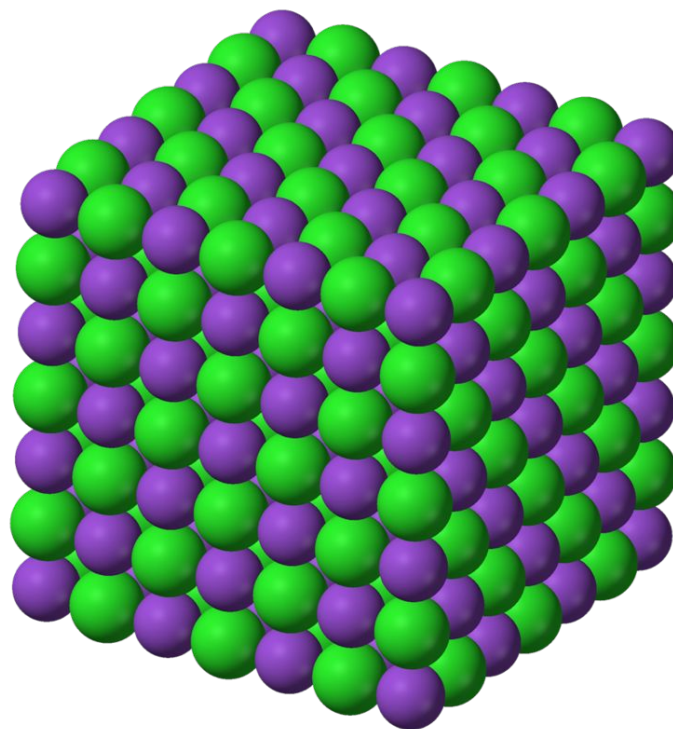
Propietats dels compostos iònics

Alts punts de fusió i ebullició

Són sòlids a temperatura ambient

Les **forces electrostàtiques d'atracció** entre els ions són molt elevades i es necessita molta energia per trencar l'estructura cristal·lina.

El **punt de fusió i ebullició** serà més alt quan “més fort” sigui l'enllaç iònic (quan més gran sigui l'**energia reticular**, que és l'energia alliberada en el procés de formació de l'estructura cristal·lina iònica).



2. L'ENLLAÇ IÒNIC

Propietats dels compostos iònics

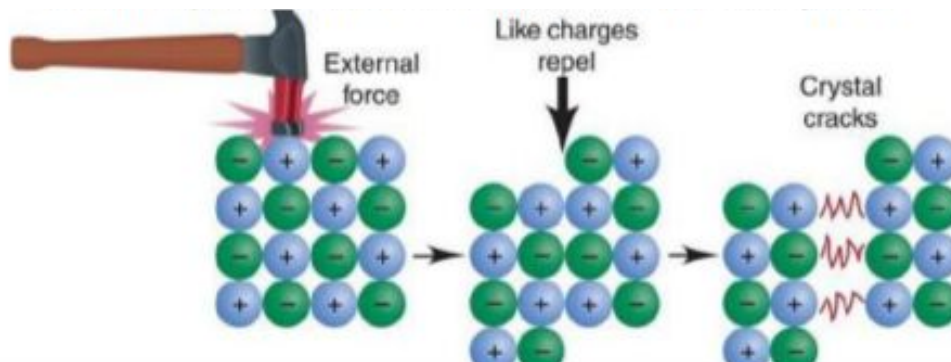
Duresa

Les xarxes són molt **compactes** i en general presenten una gran resistència a ser ratllades.



Fragilitat

Si s'aplica una força exterior es produeix un **lliscament dels ions**, s'esdevenen **repulsions** entre ions del mateix signe i el cristall es trenca.



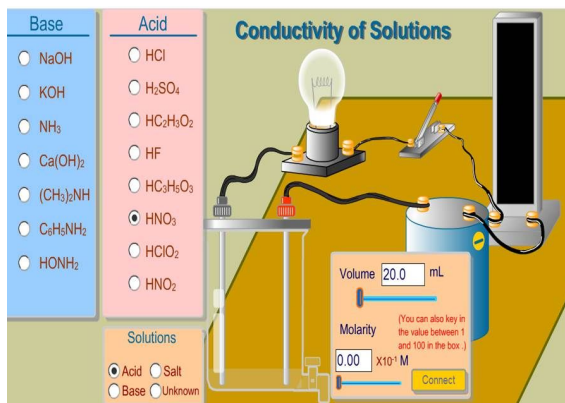
2. L'ENLLAÇ IÒNIC

Propietats dels compostos iònics

Conductivitat elèctrica

Els **sòlids iònics** no són conductors de l'electricitat. Si els ions es poden moure (**compost iònic en dissolució o fos**) conduiran fàcilment el corrent elèctric.

La conductivitat elèctrica d'una dissolució iònica depèn de la **concentració d'ions**.

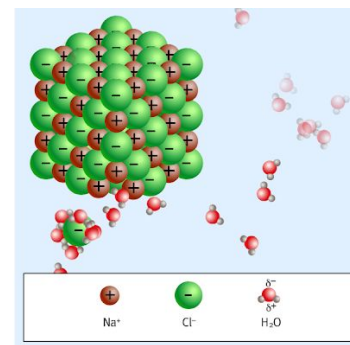


<https://www.youtube.com/watch?v=Bn2abA4FZkw>

Solubilitat en dissolvents polars

Les molècules dels **dissolvents polars** (**aigua, amoníac**, etc.) poden separar els ions de la xarxa. Cada ió queda rodejat de molècules de dissolvent (**interaccions ió-dipol**) i el compost iònic es dissol (**solvatació**)

Cal que **E (solvatació) > E (reticular)** per trencar la xarxa cristal·lina i que el compost iònic es dissolgui.



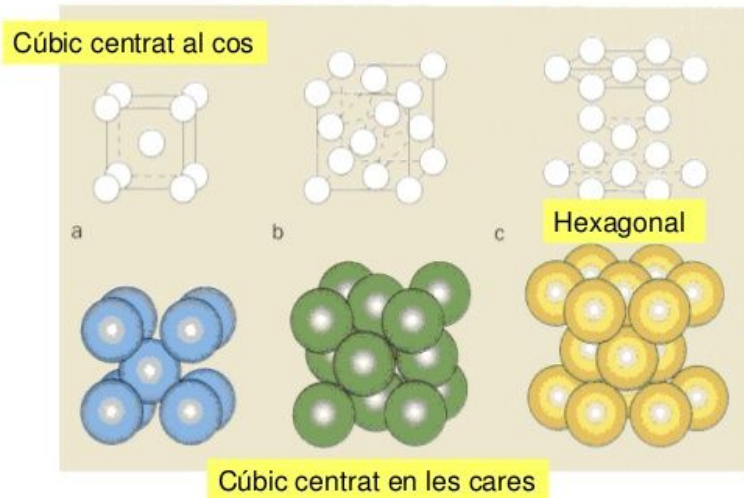
<https://www.youtube.com/watch?v=8yZOPNH8sf4>

3. L'ENLLAÇ METÀL·LIC

Característiques de l'enllaç metàl·lic

L'enllaç metàl·lic es forma entre àtoms d'elements metàl·lics que presenten **baixa electronegativitat** (són electropositius) i formen cations amb facilitat.

Empaquetaments compactes



Model del núvol d'electrons

Els **cations** formen **empaquetaments compactes**.

Els **electrons** estan **deslocalitzats** entre els nuclis.

Els electrons actuen com un “ciment electrònic” i donen cohesió a l'**estructura cristal·lina metàl·lica**.



Permet explicar la majoria de les **propietats**

3. L'ENLLAÇ METÀL·LIC

Propietats dels metalls

Densitat elevada (empaquetaments compactes)

Punts de fusió elevats (forta cohesió entre nuclis)

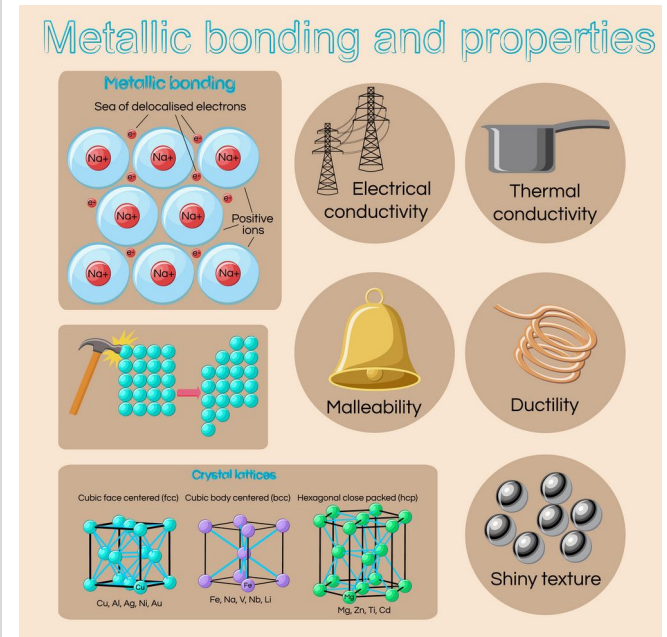
Duresa oposició a ser ratllats (duresa mitjana)

Insolubles (només si reaccionen amb àcids)

Bons conductors de l'electricitat (electrons deslocalitzats)

Bons conductors de la calor (transmissió de vibracions tèrmiques en la xarxa)

Lluentor característica (els electrons emeten radiacions de la mateixa freqüència que la llum incident).

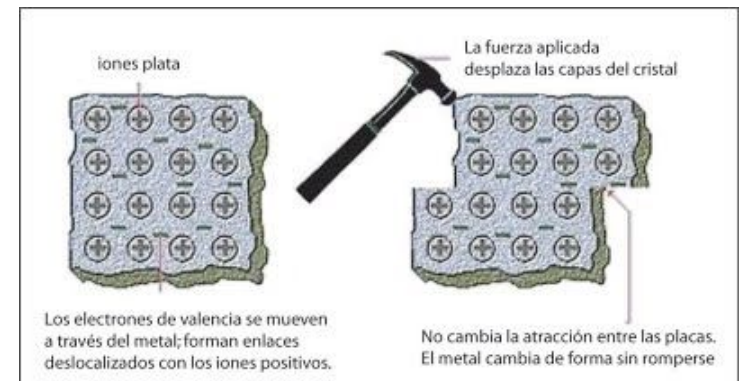


3. L'ENLLAÇ METÀL·LIC

Propietats dels metalls

Ductilitat i mal·leabilitat

Es poden deformar per obtenir **fils** i **làmines** perquè la deformació de la xarxa no provoca situacions inestables.



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Característiques de l'enllaç covalent

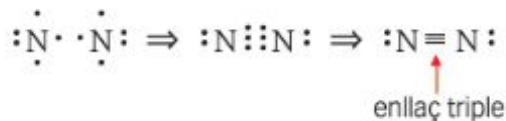
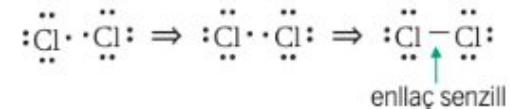
L'enllaç covalent es forma entre àtoms d'elements no-metàl·lics (electronegatiu).

1	2	13	14	15	16	17	18
H ·							He:
Li ·	·Be·	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Ne:
Na ·	·Mg·	·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	·Ar:
K ·	·Ca·	·Ga·	·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	·Kr:
Rb ·	·Sr·	·In·	·Sn·	·Sb·	·Te·	·I·	·Xe:
Cs ·	·Ba·	·Tl·	·Pb·	·Bi·	·Po·	·At·	·Rn:

<https://www.youtube.com/watch?v=aJH93Ee0-pl>

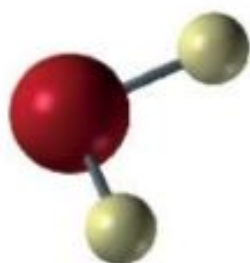
Els àtoms comparteixen un o més parells d'electrons i així adquireixen l'estructura de gas noble (capa de valència plena, situació molt estable).

Segons els nombres de parells d'electrons que comparteixen els àtoms tenim enllaços covalents simples, dobles o triples.

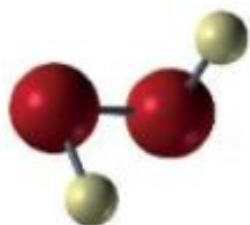
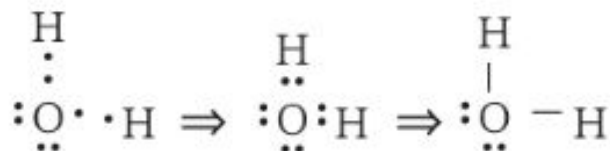


4. L'ENLLAÇ COVALENT

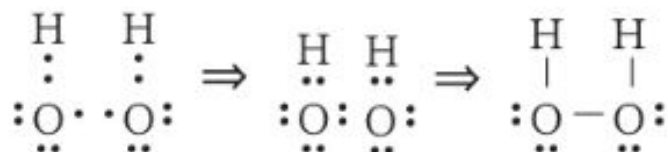
Característiques de l'enllaç covalent



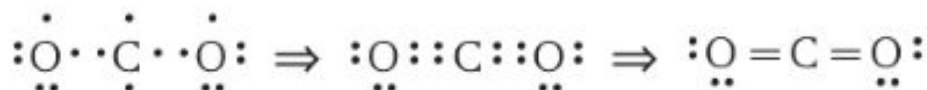
H₂O



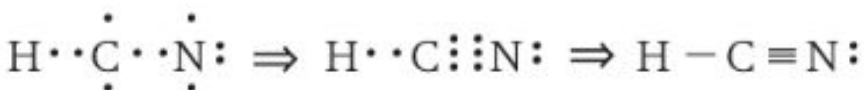
H₂O₂



CO₂



HCN



4. L'ENLLAÇ COVALENT

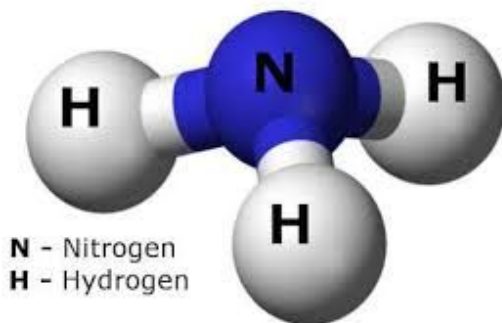
Característiques de l'enllaç covalent

Els enllaços covalents poden originar:

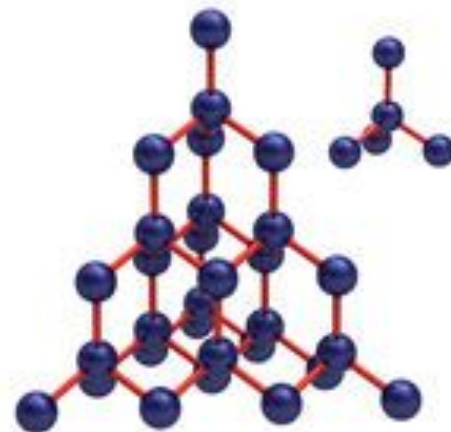
Gasos diatòmics, Cl_2 , N_2 , O_2 .

Molècules, quan s'uneixen pocs àtoms.

Estructures gegants covalents, quan s'estenen a molts àtoms per l'espai (diamant, grafit, quars)



Model molecular de l'amoníac NH_3



Estructura gegant covalent del C (diamant)

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Característiques de l'enllaç

Entalpies d'enllaç ($\Delta H_{\text{enllç}}$)

És l'energia mitjana alliberada quan es forma un mol d'enllaços. Coincideix amb l'energia necessària per trencar un mol d'enllaços.

Com més energia s'allibera, més estable ("més fort") és l'enllaç.

TABLE 7.1

Average Bond Dissociation Energies, D (kJ/mol)^a

H—H	436 ^a	C—H	410	N—H	390	O—H	460	F—F	159 ^a
H—C	410	C—C	350	N—C	300	O—C	350	Cl—Cl	243 ^a
H—F	570 ^a	C—F	450	N—F	270	O—F	180	Br—Br	193 ^a
H—Cl	432 ^a	C—Cl	330	N—Cl	200	O—Cl	200	I—I	151 ^a
H—Br	366 ^a	C—Br	270	N—Br	240	O—Br	210	S—F	310
H—I	298 ^a	C—I	240	N—I	—	O—I	220	S—Cl	250
H—N	390	C—N	300	N—N	240	O—N	200	S—Br	210
H—O	460	C—O	350	N—O	200	O—O	180	S—S	225
H—S	340	C—S	260	N—S	—	O—S	—		
Multiple covalent bonds^b									
C=C	611	C≡C	835	C=O	732	O=O	498 ^a	N≡N	945 ^a

^a Exact value

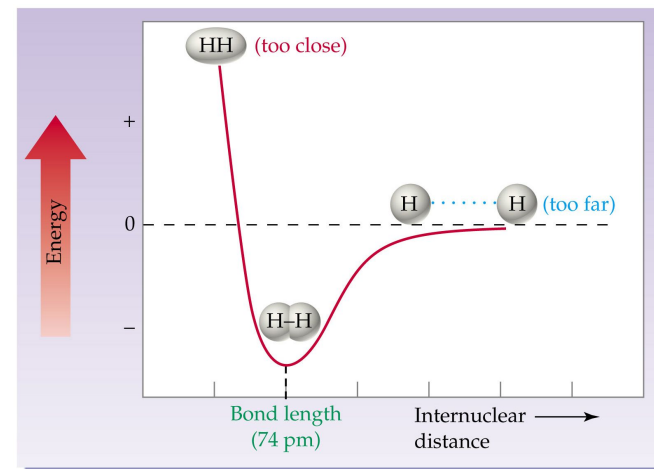
^b We'll discuss multiple covalent bonds in Section 7.5.

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Característiques de l'enllaç covalent

Distància d'enllaç

És la distància entre els nuclis dels àtoms enllaçats per a la qual s'assoleix el mínim d'energia.



■ Average Bond Lengths for Some Single, Double, and Triple Bonds

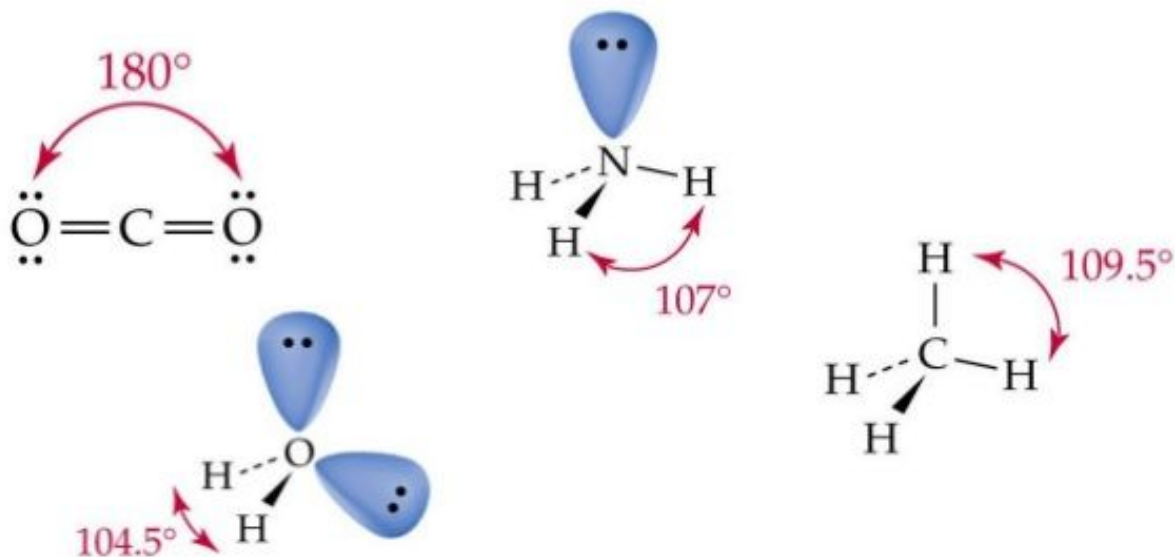
Bond	Bond Length (Å)	Bond	Bond Length (Å)
C—C	1.54	N—N	1.47
C=C	1.34	N=N	1.24
C≡C	1.20	N≡N	1.10
C—N	1.43	N—O	1.36
C=N	1.38	N=O	1.22
C≡N	1.16		
C—O	1.43	O—O	1.48
C=O	1.23	O=O	1.21
C≡O	1.13		

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Característiques de l'enllaç covalent

Angle d'enllaç

És l'angle mitjà hipotètic entre el nucli de l'àtom central de la molècula i el nucli de l'àtom enllaçat.



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Representació de les molècules

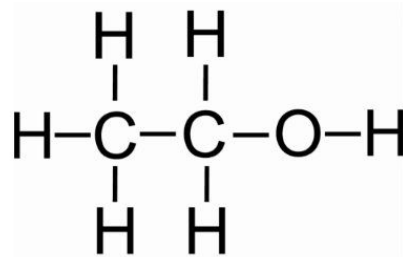
Fórmula empírica: $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

Fórmula molecular:

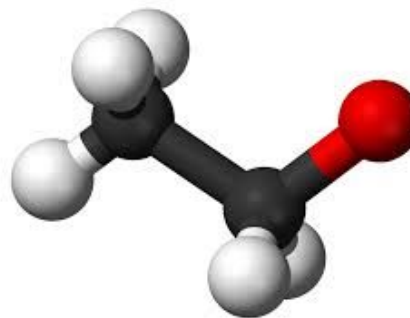
Simple: $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

Semidesenvolupada: $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{OH}$

Desenvolupada:



Model molecular:

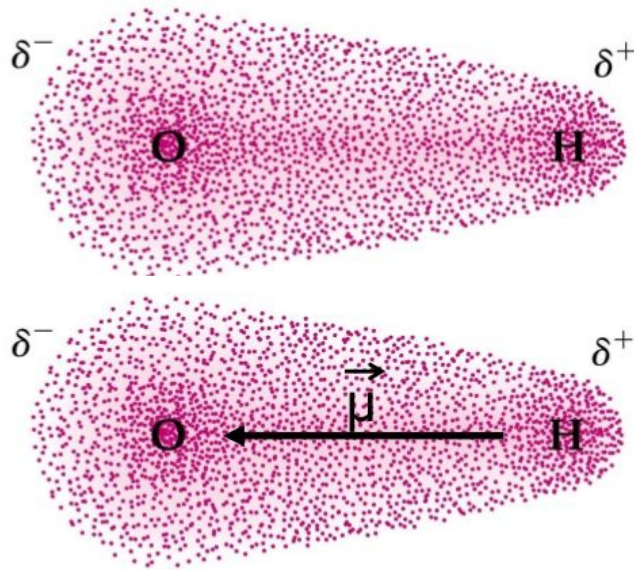


4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Polaritat dels enllaços covalents

Si els àtoms units per un enllaç covalent tenen diferent **electronegativitat** la **densitat electrònica** es concentra al voltant de l'àtom més electronegatiu.



El **gra de polarització d'un enllaç** es mesura amb una magnitud vectorial, el **moment dipolar** (μ).

El **mòdul del vector moment dipolar** depèn dels valors de les càrregues que hi ha sobre cada àtom i de la distància que els separa.

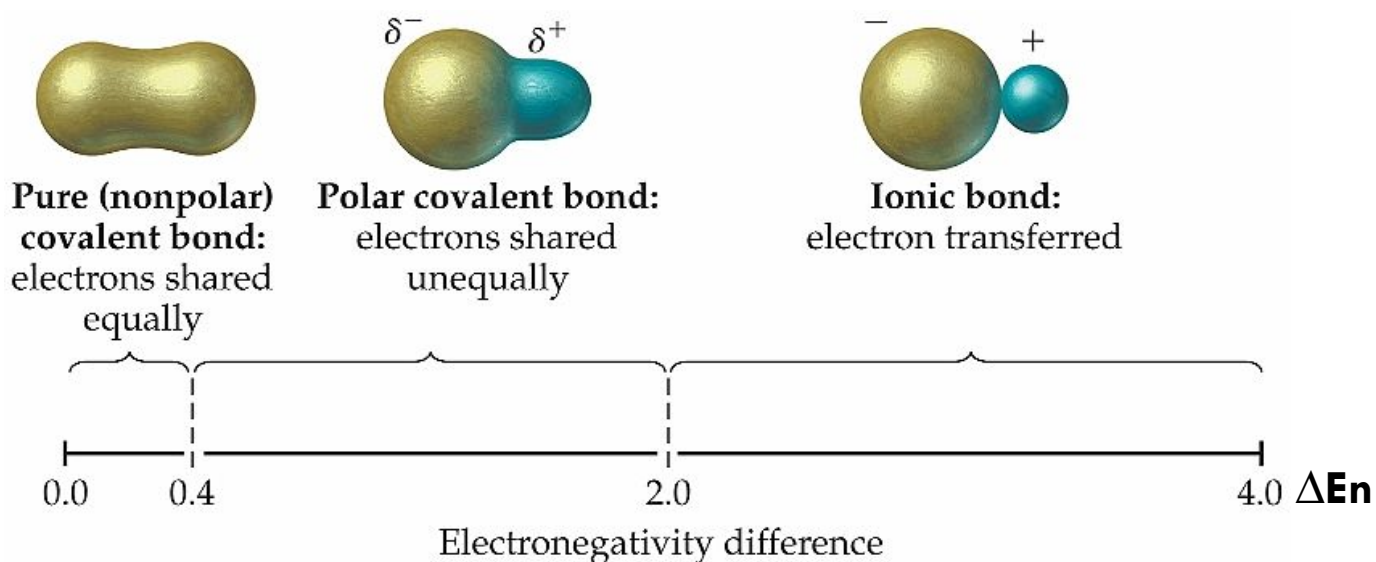
$$(\mu = q \cdot d)$$

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Polaritat dels enllaços covalents

Si la **diferència d'electronegativitats (ΔEn)** entre els àtoms enllaçats és **molt gran**, els electrons ja no es comparteixen i es forma un **enllaç iònic**.



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Polaritat dels enllaços covalents

L'enllaç iònic es pot veure com un **cas extrem de l'enllaç covalent polar** (diferència d'electronegativitats molt gran).

<http://www.educaplus.org/game/naturaleza-del-enlace-quimico>

La **suma vectorial** dels moments dipolars de tots els enllaços d'una molècula és el **moment dipolar** (μ_t) de la molècula i es mesura en una unitat anomenada **debye (D)**.

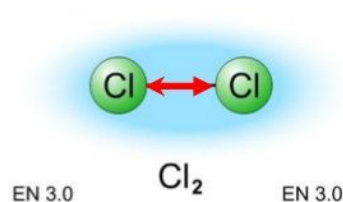
TABLE 10.1 Dipole Moments of Some Common Compounds

Compound	Dipole Moment (D)
NaCl*	9.0
CH ₃ Cl	1.90
H ₂ O	1.85
NH ₃	1.47
HCl	1.11
CO ₂	0
CCl ₄	0

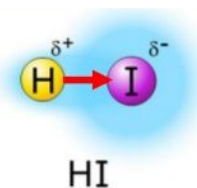
* Measured in the gas phase

Es pot deduir si una **molècula** és **polar** o **apolar** a partir de la seva geometria i de l'**electronegativitat dels àtoms** que la formen.

Si la suma vectorial dels moments dipolars dels enllaços de la molècula és **zero** la molècula és **apolar** i si és **diferent de zero** la molècula és **polar** (és un **dipol**).



molècula **APOLAR** ($\mu_t = 0$)



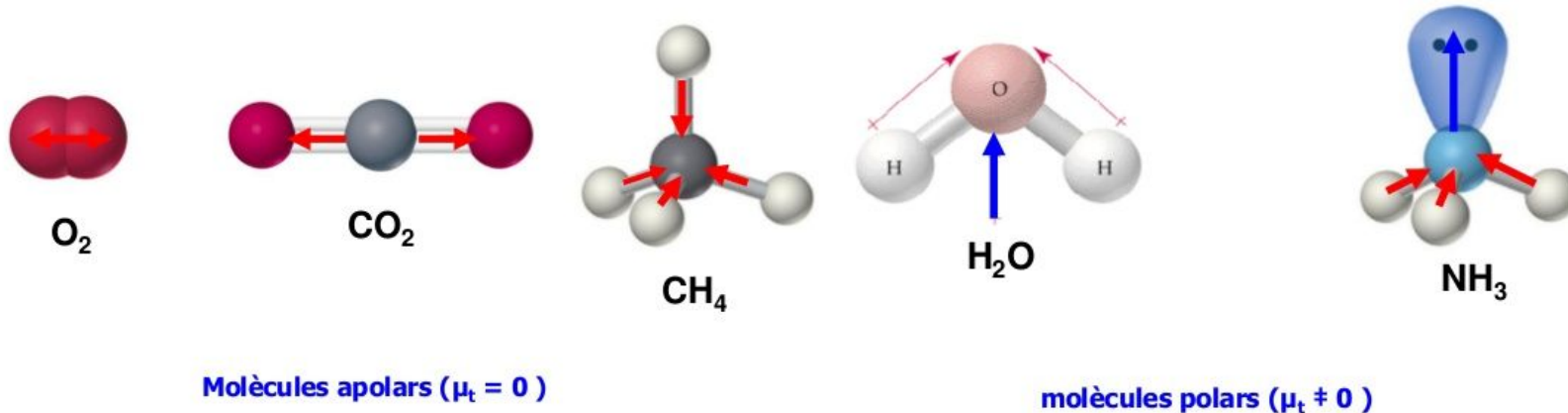
$$2.1 - 2.5 = 0.4$$

molècula **POLAR** ($\mu_t \neq 0$)

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Polaritat de les molècules



La **teoria RPECV** (**R**epulsió entre els **P**arells d'**E**lectrons de la **C**apa de **V**alència) ens permetrà establir la forma geomètrica de les molècules.

4. L'ENLLAÇ COVALENT

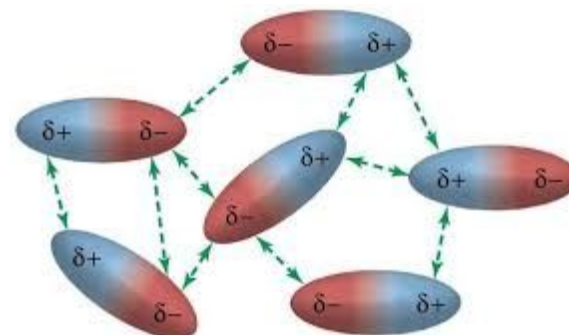
Molècules

Propietats dels compostos covalents moleculars

Les substàncies covalents moleculars estan formades per **molècules** unides entre ells per **forces intermoleculars** (**Van der Waals** i **ponts d'hidrogen**).

Per a **justificar les diferències de propietats** entre les diverses **substàncies covalents moleculars** cal tenir en compte:

1. Si es tracta de **molècules polars** o **apolars** (les forces intermoleculars són més intenses entre molècules polars).
2. Si existeixen **ponts d'hidrogen** entre les molècules (el pont d'hidrogen és una interacció molt intensa).
3. La **massa molecular** (si augmenta la massa de la molècula, les forces intermoleculars són més intenses).



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Molècules

Propietats dels compostos covalents moleculars

Propietat	Justificació
Punts de fusió i ebullició baixos	Forces intermoleculars en general febles (més intenses entre molècules polars i/o amb massa molecular gran) Gasos: O ₂ , H ₂ , N ₂ (apolars) / Líquids: H ₂ O, etanol (polars) / Sòlids I ₂ , glucosa, naftalè (elevada massa molecular).
Sòlids tous i baixa resistència mecànica	Forces intermoleculars febles
Sòlids poc conductors de calor i corrent elèctric	No hi ha llibertat de moviment dels electrons (estan localitzats als enllaços covalents).
Solubilitat	Molècules polars → solubles en H ₂ O i altres dissolvents polars. Molècules apolars → poc solubles o insolubles en H ₂ O, però solubles en dissolvents apolars (èter, benzè i CCl ₄)

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Formes al·lotròpiques

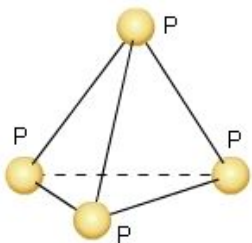
L'al·lotropia és la facultat que tenen certes substàncies d'existir amb **estructures** diverses que presenten **propietats físiques diferents**.

Aquestes formes diferents són conegudes com a **al·lòtrops**. Exemples:

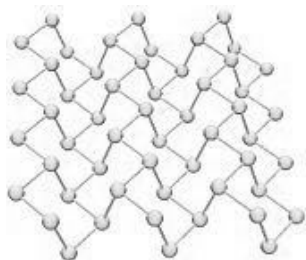
Carboni (diamant, grafit, ful·lerens...)

Fòsfor (blanc, vermell, violeta, negre).

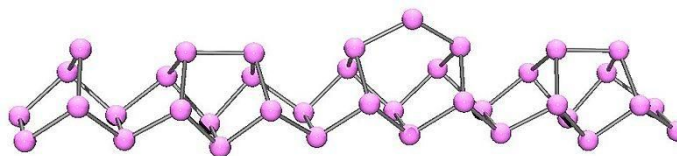
Formes al·lotròpiques del fòsfor



Fòsfor blanc (P_4)



Fòsfor negre



Fòsfor vermell

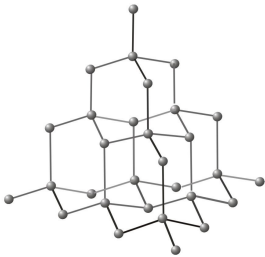


4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Formes al·lotròpiques del carboni

C (diamant)



Estructura

Cada àtom de carboni es troba unit en **forma tetraèdrica** a quatre àtoms de carboni més mitjançant **enllaços covalents** format una **xarxa tridimensional**.

Propietats

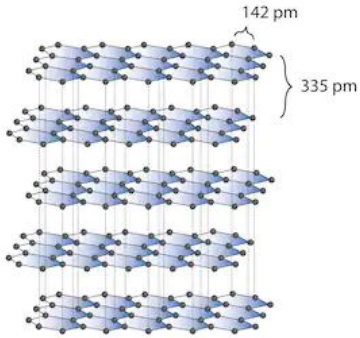
- **Duresa** (10 escala de Mohs): tots els àtoms estan units per enllaços covalents molt forts.
- **Aïllant elèctric**: els electrons es troben localitzats als enllaços i no poden conduir el corrent elèctric.
- **Fragilitat**: rigidesa de l'estructura.
- **Conductivitat tèrmica**: transmissió de les vibracions tèrmiques a través de la xarxa tridimensional.

4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Formes al·lotròpiques del carboni

C (grafit)



Estructura

Capes d'àtoms de carboni enllaçats per enllaços covalents (forts) formant **anells hexagonals**.

Les capes d'àtoms es mantenen unides per **forces de Van der Waals** (febles).

Propietats

- **Tou** (1 – 2 escala de Mohs) i **exfoliable**: les capes d'àtoms es poden separar amb facilitat perquè estan unides per forces febles (Van der Waals).
- **Conductivitat tèrmica**: existeixen electrons deslocalitzats que es poden moure sobre les capes de carbonis hexagonals (orbitals moleculars π).



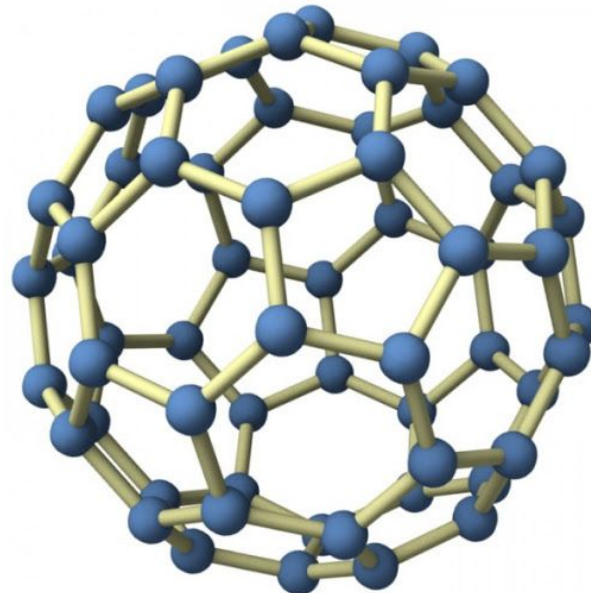
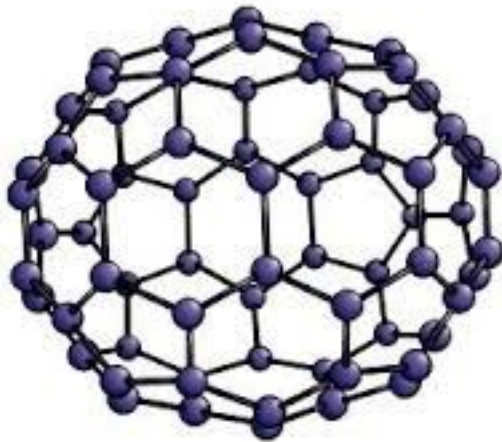
4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Formes al·lotròpiques del carboni

Ful·lerens

Es presenten en forma d'esferes el·lipsoïdes o cilindres. Els ful·lerens esfèrics s'anomenen **buckyesferes** i els cilíndrics **buckytubs** o **nanotubs**.



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Formes al·lotròpiques del carboni

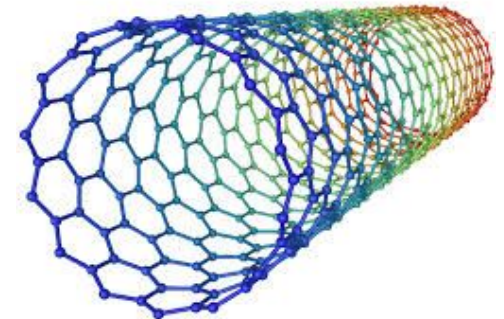
Nanotubs

Estructura

Consisteixen en fulles de grafit enrotllades de forma cilíndrica en les quals els àtoms de carboni estan disposats de manera hexagonal.

Propietats

Tenen un alt interès en **nanotecnologia** per les seves possibles aplicacions que estan relacionades amb les seves propietats excepcionals (**conductors**, **semiconductors** o **aïllants** depenent del seu diàmetre, elevada **força mecànica**, etc.)



4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

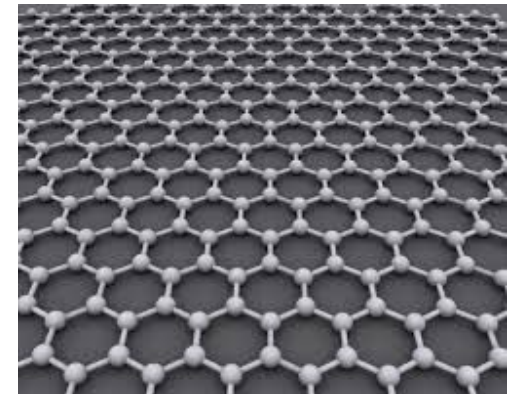
Formes al·lotròpiques del carboni

Grafè Estructura

És una estructura laminar plana, composta per àtoms de carboni empaquetats en forma de niu d'abella mitjançant enllaços covalents.

Propietats

- Alta **conductivitat tèrmica i elèctrica**.
- Semiconductor
- Alta **elasticitat i duresa**.
- Suporta la **radiació ionitzant**.
- És molt **lleuger**, com la fibra de carboni, però més **flexible**.
- Menor efecte Joule, s'escalfa menys quan condueix electrons.
- Consumeix menys electricitat per una mateixa tasca que el silici.



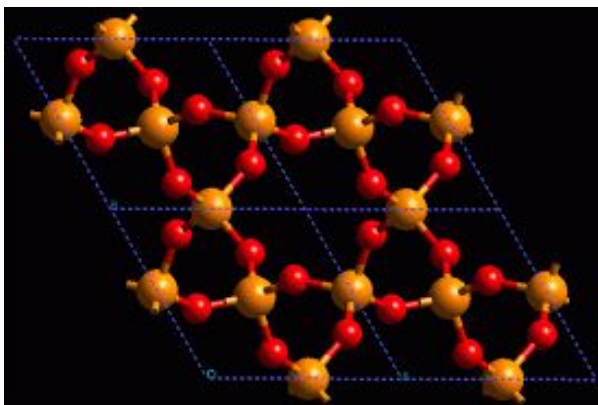
4. L'ENLLAÇ COVALENT

Estructures gegants covalents

Sílice (SiO_2)_n

Estructura del quars

Cada àtom de silici és envoltat d'un tetraedre d'àtoms d'oxigen mitjançant enllaços covalents. Aquesta estructura tridimensional dona lloc a un cristall dur de punt de fusió elevat.



La sílice es pot trobar en forma de **quars**, **sorra**, òpal, sílex, etc.



Quars



Sorra

<https://www.youtube.com/watch?v=VwRLlt6jgdM&feature=youtu.be>

La sorra de quars és el material de base per a la **producció del vidre**. El vidre és un **sòlid amorf**, no un sòlid cristal·lí.

5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria de Lewis

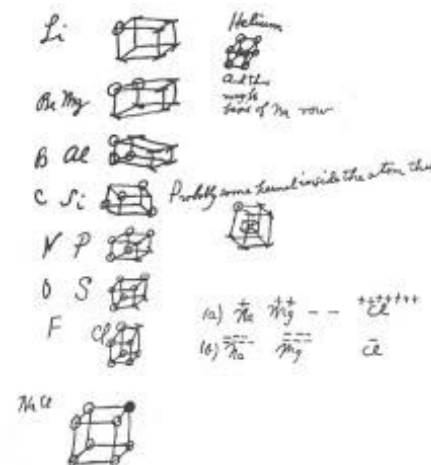


Estructura de Lewis d'àtoms

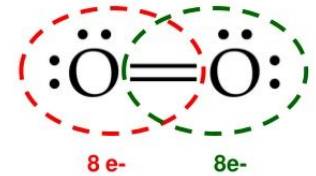
Es representen els **electrons de la capa de valència** com a **punts** dibuixats al voltant del símbol de cada element.

1	2	13	14	15	16	17	18
H •							He:
Li •	•Be•	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne:
Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar:
K •	•Ca•	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr:
Rb•	•Sr•	•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe:
Cs•	•Ba•	•Tl•	•Pb•	•Bi•	•Po•	•At•	•Rn:
s^1	s^2	$s^2 p^1$	$s^2 p^2$	$s^2 p^3$	$s^2 p^4$	$s^2 p^5$	$s^2 p^6$

Les primeres estructures que va proposar Lewis no eren com les actuals, pensava que els electrons d'un àtom se situaven en els vèrtexs d'un cub.



Estructura cúbica dels àtoms segons Lewis (1902)



5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria de Lewis

Estructura de Lewis de molècules

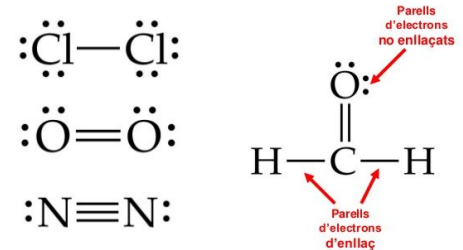
Els àtoms s'uneixen per formar molècules. Els **parells d'electrons compartits** es representen amb guions.

Regla de l'octet

Els àtoms s'uneixen compartint electrons fins a completar la seva última capa amb 8 electrons (**octet** = 4 parells d'electrons), és a dir, per aconseguir la **configuració de gas noble** $s^2 p^6$.

Cada àtom forma tants enllaços covalents com a electrons li falten per aconseguir l'octet.

Estructura de Lewis d'ions



Metal		No Metal		Compuesto iónico
Na •	+	•Cl•	→	Na ⁺ [•Cl•] ⁻ Cloruro de sodio (ion sodio e ion cloruro)
Átomo de sodio		Átomo de cloro		
•Mg•	+	•Ö•	→	Mg ²⁺ [•Ö•] ²⁻ Óxido de magnesio (ion magnesio e ion óxido)
Átomo de magnesio		Átomo de oxígeno		
•Ca•	+	2 •F•	→	Ca ²⁺ [•F•] ₂ ⁻ fluoruro de calcio (ion calcio y dos iones fluoruro)
Átomo de calcio		Átomos de flúor		

5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria de Lewis

Exemples d'estructures de Lewis de molècules i d'ions

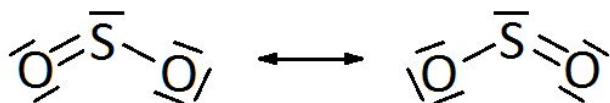
H_2SO_4	HClO_4	NO_2	NO_3^{1-}	PO_4^{3-}	CH_3COOH
$\text{H} \quad 2 \times 1 = 2$ $\text{S} \quad 1 \times 6 = 6$ $\text{O} \quad 4 \times 6 = 24$ 32	$\text{H} \quad 1 \times 1 = 1$ $\text{Cl} \quad 1 \times 7 = 7$ $\text{O} \quad 4 \times 6 = 24$ 32	$\text{N} \quad 1 \times 5 = 5$ $\text{O} \quad 2 \times 6 = 12$ 17	$\text{N} \quad 1 \times 5 = 5$ $\text{O} \quad 3 \times 6 = 18$ $\text{Q} \quad 1^- = 1$ 24	$\text{P} \quad 1 \times 5 = 5$ $\text{O} \quad 4 \times 6 = 24$ $\text{Q} \quad 3^- = 3$ 32	$\text{C} \quad 2 \times 4 = 8$ $\text{H} \quad 4 \times 1 = 4$ $\text{O} \quad 2 \times 6 = 12$ 24

5. GEOMETRIA MOLECULAR

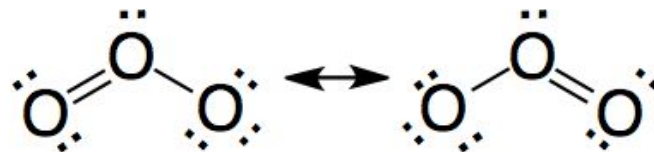
Formes de ressonància

En determinats casos hi ha diferents estructures de Lewis possibles per a una molècula i la situació real és una mitjana de les possibles estructures.

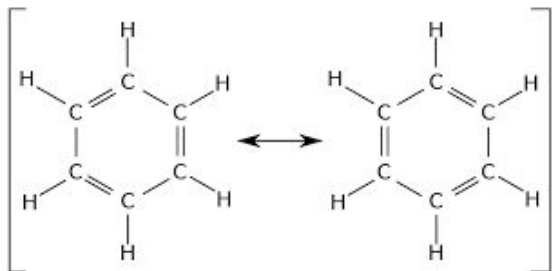
Diòxid de sofre SO_2



Ozó O_3



Benzè C_6H_6



Només es poden determinar experimentalment en alguns casos; per això, es representen les dues formes ressonants.

5. GEOMETRIA MOLECULAR

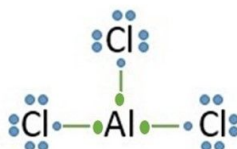
Excepcions a la regla de l'octet

En molts casos podem trobar molècules i ions que tenen estructures de Lewis que no estan d'acord amb la regla de l'octet.

No assoleixen la configuració de gas noble perquè tenen menys de 8 electrons o més.



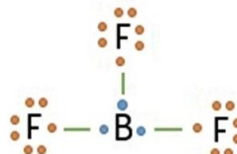
El Hidrògeno al enlazar-se entre sí, no completa su octeto (sólo tiene 2 electrones de valencia).



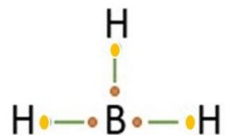
El Aluminio sólo completa 6 electrones de valencia al enlazar-se con el Cloro.



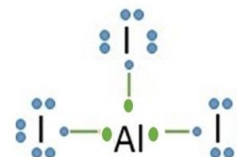
El átomo central (berilio) no forma su octeto al unirse con el Hidrógeno (sólo completa 4 electrones de valencia).



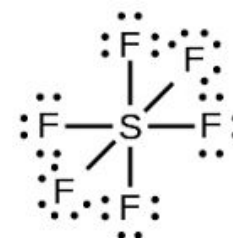
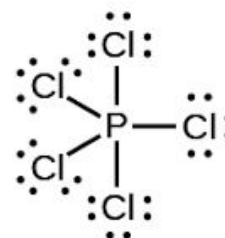
El Boro sólo completa 6 electrones de valencia al enlazar-se con el Flúor.



El Boro sólo completa 6 electrones de valencia al enlazar-se con el Hidrógeno.



El Aluminio sólo completa 6 electrones de valencia al enlazar-se con el Yodo.

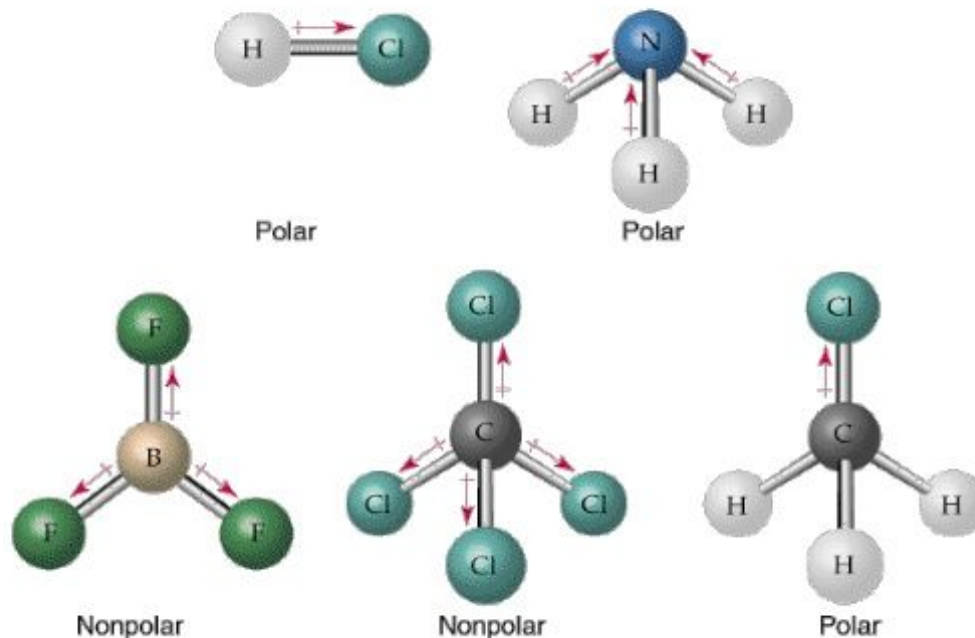


5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria RPECV

Segons la **teoria RPECV** (Repulsió entre els parells d'electrons de la capa de valència) de **Guillespie–Nyholm** (1957) els parells d'electrons al voltant d'un àtom es repelen entre si, i per això els orbitals que contenen aquests parells d'electrons, s'orienten de forma que queden tan separats com sigui possible uns dels altres.

La forma geomètrica d'una molècula permet establir si és **polar** o **apolar** (i a partir d'això les seves propietats).



5. GEOMETRIA MOLECULAR

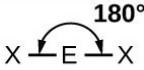
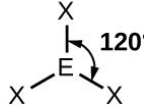
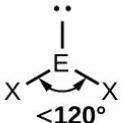
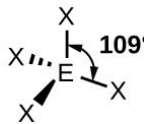
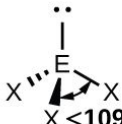
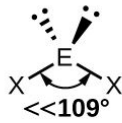
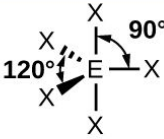
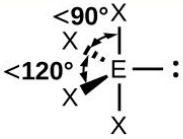
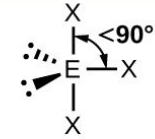
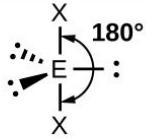
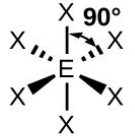
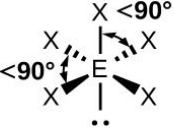
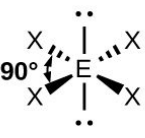
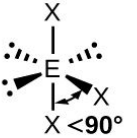
Teoria RPECV

Nombre de parells d'electrons	Exemple de molècula	Disposició de les parelles d'electrons	Geometria de la molècula
2	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}} - \text{Be} - \ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{BeCl}_2 \end{array}$		$\text{Cl}-\text{Be}-\text{Cl}$ lineal
3	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{:}\ddot{\text{F}}\text{:}\ddot{\text{B}}\text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{:}\ddot{\text{F}} \\ \text{BF}_3 \end{array}$		$\begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F}-\text{B}-\text{F} \\ \text{BF}_3 \end{array}$ triangular plana
4	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\text{C}:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \\ \text{CH}_4 \end{array}$		$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \\ \text{CH}_4 \end{array}$ tetraèdrica
5	PCl_5		 bipiramidal trigonal
6	SF_6		 octaèdrica

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

5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria RPECV

Number of electron pairs	Electron pair geometries: 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 Linear				
3	 Trigonal planar	 Bent or angular			
4	 Tetrahedral	 Trigonal pyramid	 Bent or angular		
5	 Trigonal bipyramid	 Sawhorse or seesaw	 T-shape	 Linear	
6	 Octahedral	 Square pyramid	 Square planar	 T-shape	 Linear

5. GEOMETRIA MOLECULAR

Teoria RPECV

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
2	0	2	Linear	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$
3	0	3	Trigonal planar	$\text{H}-\text{C}=\text{O}$
			Bent	$\text{O}=\text{S}$
2	1			

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
5	0		Trigonal bipyramidal	$\text{Cl}-\text{P}-\text{Cl}$
4	1		Seesaw	$\text{F}-\text{S}-\text{F}$
3	2	5	T-shaped	$\text{Cl}-\text{F}$
2	3		Linear	$\text{I}-\text{I}$

Number of Bonds	Number of Lone Pairs	Number of Charge Clouds	Molecular Geometry	Example
6	0		Octahedral	$\text{F}-\text{S}-\text{F}$
5	1	6	Square pyramidal	$\text{Cl}-\text{Sb}-\text{Cl}$
4	2		Square planar	$\text{F}-\text{Xe}-\text{F}$

6. FORCES INTERMOLECULARS

Forces intermoleculars

Són interaccions que s'estableixen **entre les molècules** que formen les substàncies covalents moleculars.

Són de **naturalesa electroestàtica**, encara que molt més **febles** que d'altres forces d'enllaç. Es classifiquen:

Interaccions

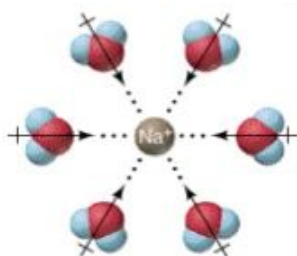
- **ió – dipol** (ió – molècula polar)
- **ió – dipol induït** (ió – molècula apolar)

Forces de Van der Waals

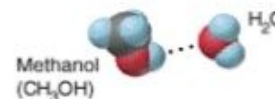
- **Keesom** = **orientació** (dipol – dipol)
- **Debye** = **inducció** (dipol – dipol induït)
- **London** = **dispersió** (entre molècules apolars)

Ponts d'hidrogen

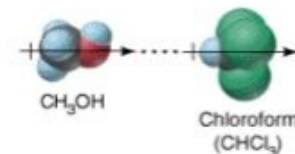
(cas particular de les interaccions (dipol – dipol))



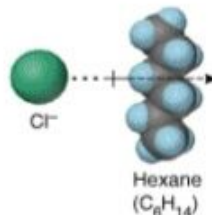
Ion-dipole



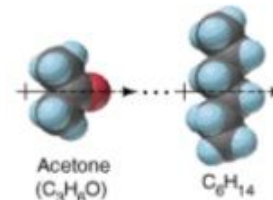
H bond



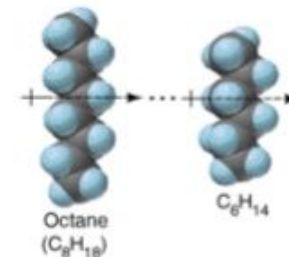
Dipole-dipole
(Keesom)



Ion-induced dipole



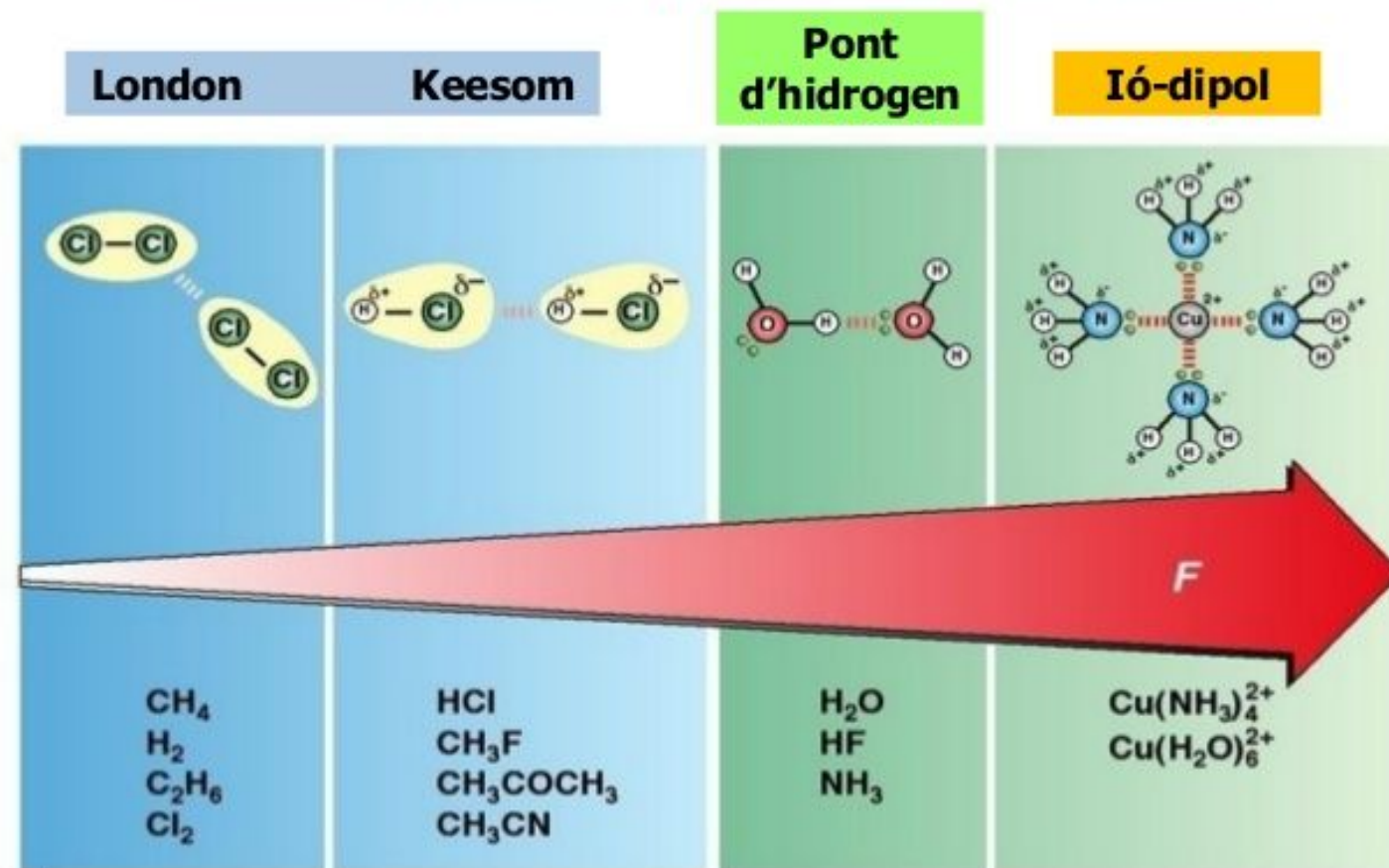
Dipole-induced dipole
(Debye)



Dispersion
(London)

6. FORCES INTERMOLECULARS

Intensitat dels diferents tipus de forces intermoleculars

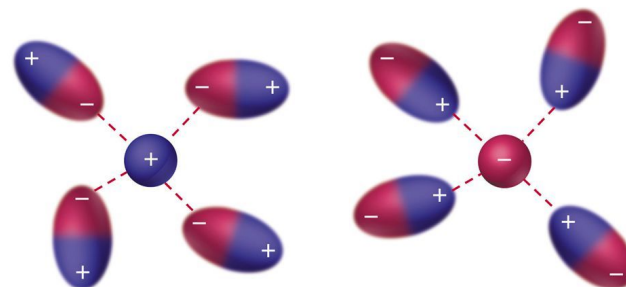


6. FORCES INTERMOLECULARS

Forces ió – dipol (entre un ió i molècules polars)

Els ions es poden envoltar de **molècules polars**.

Aquestes forces són importants en els processos de **dissolució dels compostos iònics** en dissolvents polars com l'aigua (**solvatació**).

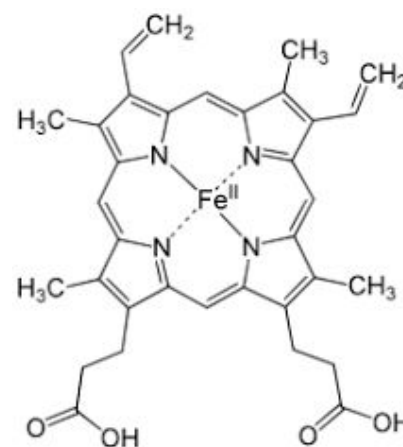


Forces ió – dipol induït (entre un ió i una molècula apolar)

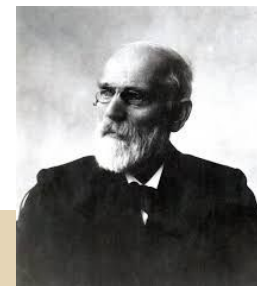
El **camp electroestàtic de l'ió** pot provocar l'aparició d'un **dipol induït** en una **molècula apolar**.

Exemple:

Unió reversible entre l'ió Fe^{2+} de l'hemoglobina i la molècula de O_2 .



6. FORCES INTERMOLECULARS



Forces de Van der Waals

Són **forces d'atracció** que s'estableixen **entre molècules** o àtoms (gasos nobles).

Són forces d'**abast molt curt** i més **febles** que la resta dels enllaços.

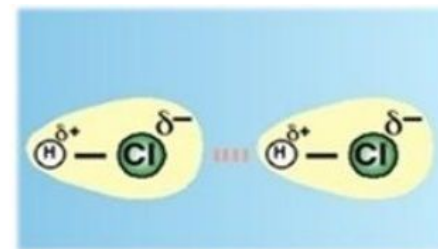
La seva **intensitat** depèn de:

- Si la molècula és **polar** o **apolar**
- La **massa molecular**
- **Efectes estèrics** (geometria de la molècula).

Forces d'orientació o de Keesom (dipol – dipol)

Les **molècules polars** es comporten com **dipols elèctrics permanents** i s'estableix una atracció electroestàtica entre elles.

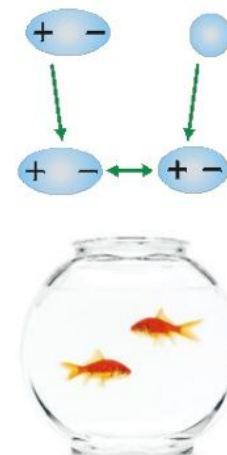
Les forces de Keesom augmenten amb el moment dipolar de la molècula.



Forces d'inducció o de Debye (dipol – dipol induït; entre una molècula polar i una apolar)

Una **molècula polar** pot provocar l'aparició d'un dipol induït en una **molècula apolar** i s'estableix una feble atracció electroestàtica entre elles.

Les forces de Debye expliquen la dissolució de determinats gasos apolars (O_2 i Cl_2) en dissolvents polars com l'aigua.



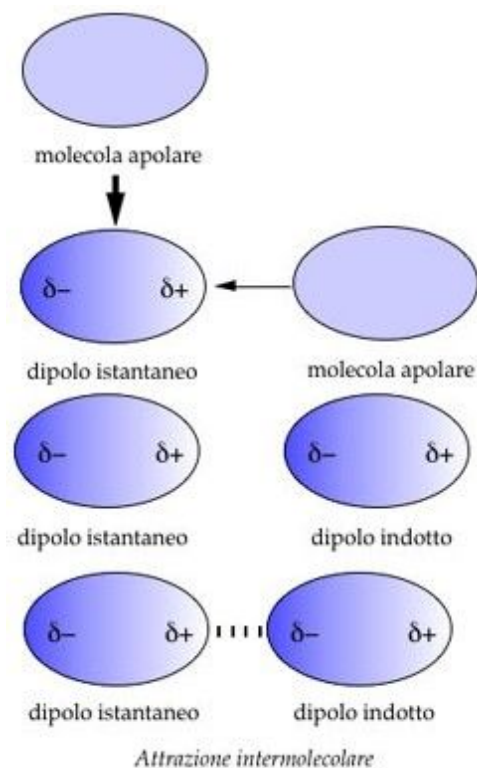
6. FORCES INTERMOLECULARS

Forces de Van der Waals

Forces de dispersió o de London (dipol instantani – dipol induït; entre molècules apolars)

A causa del moviment dels seus electrons, els àtoms neutres i les **molècules apolars** poden tenir distribucions asimètriques de càrrega i formen **dipols instantanis** que s'atrauen entre ells amb **forces molt febles**.

Les forces de London **augmenten amb la massa** i el nombre d'electrons de l'àtom o molècula.



6. FORCES INTERMOLECULARS

Forces de Van der Waals

Els **punts de fusió** i d'**ebullició** de les substàncies moleculars augmenten amb la **massa molecular**.

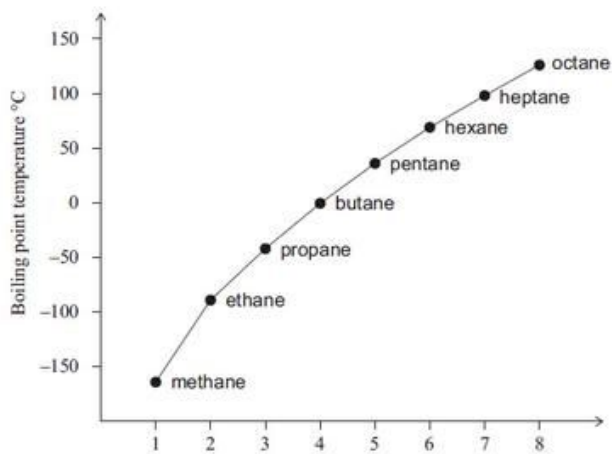


El **butà** (C_4H_{10}) és **gas** a temperatura i pressió normals



L'**octà** (C_8H_{18}) és **líquid** a temperatura i pressió normals

Boiling points vs number of carbon atoms of alkanes

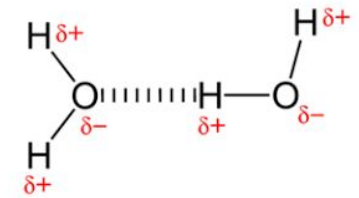


Punt d'ebullició dels alcans

C	Nom	Fórmula	Model
1	Metà	CH ₄	
2	Età	C ₂ H ₆	
3	Propà	C ₃ H ₈	
4	n-Butà	C ₄ H ₁₀	
5	n-Pentà	C ₅ H ₁₂	
6	n-Hexà	C ₆ H ₁₄	

Com més gran és la **massa de les molècules** més intenses són les **forces de Van der Waals**.

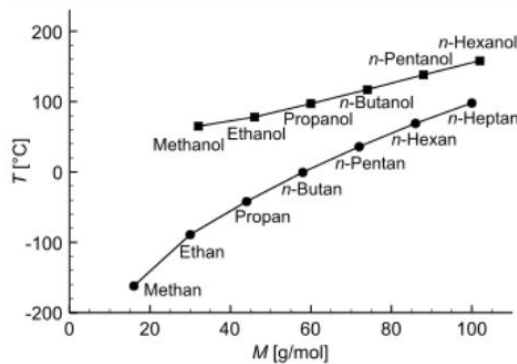
Això explica que els **punts de fusió** i d'**ebullició** de les substàncies moleculars augmentin amb la massa molecular.



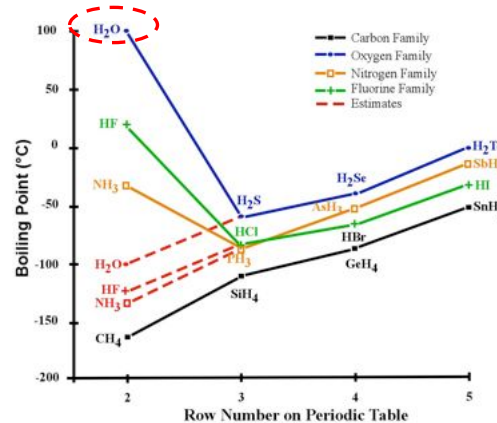
6. FORCES INTERMOLECULARS

Ponts d'hidrogen

Són forces d'atracció entre molècules que tenen àtoms d'**hidrogen** enllaçats amb àtoms d'**elements molt electronegatius (N, O, F)**. És un cas particular d'interacció **dipol – dipol (Keesom)**



Punt d'ebullició dels alcans i alcohols



Punt d'ebullició d'altres substàncies

L'existència de ponts d'hidrogen justifica que els **punts d'ebullició** i **fusió** de determinats compostos (com l'H₂O) siguin anormalment **elevats**. Per això, l'**aigua** és **líquida a temperatura ambient**.

Per passar l'aigua de l'estat sòlid a líquid o de líquid a gas s'ha de subministrar prou energia per **trencar els ponts d'hidrogen** que hi ha entre les molècules d'aigua.

Els ponts d'hidrogen determinen en gran part l'**estructura tridimensional** de les **proteïnes** i també podem trobar ponts d'hidrogen a l'**ADN** (unió entre bases G – C i A – T).

