



ENLLAÇ QUÍMIC

Química 2n Batx

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦 @ocolomar)

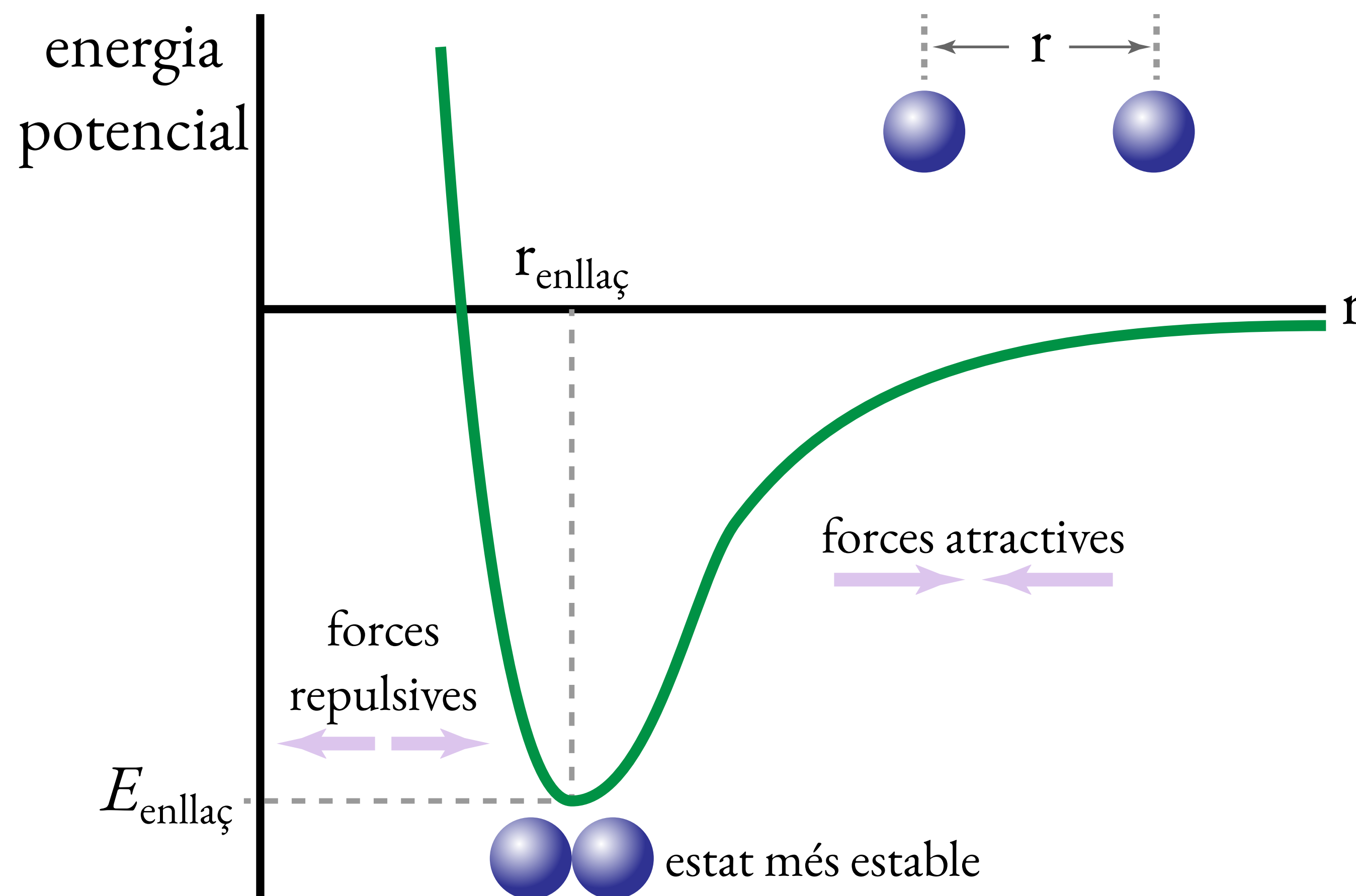


Regla de l'octet

La **configuració més estable** per a qualsevol àtom és disposar de **vuit electrons** a la **capa exterior**.

Els elements tendiran a **unir-se** per completar la seva capa exterior, **intercanviant** (donant/captant → enllaç **iònic**) o **compartint electrons** (enllaç **covalent**), i així **guanyar estabilitat**.

Paràmetres moleculars



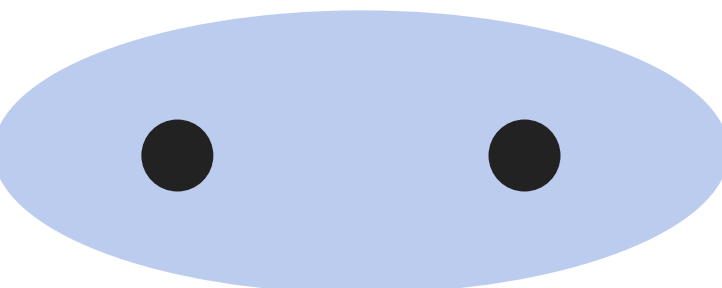
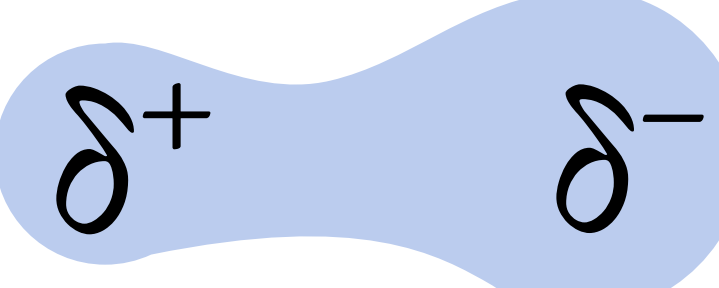

Traduïda i adaptada de
<https://ch301.cm.utexas.edu/section2.php?target=atomic/bonding/covalent-bonding.html>.

Energia d'enllaç És una mesura de la FORTALESA d'un ENLLAÇ QUÍMIC.

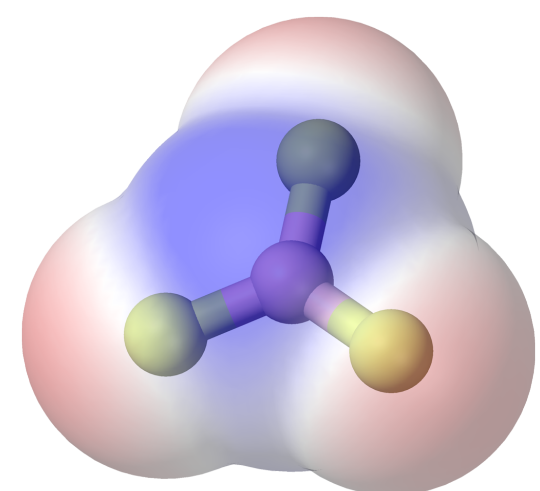
Longitud d'enllaç Distància mitjana entre els nuclis de dos àtoms enllaçats.

Angle d'enllaç Angle format per tres àtoms enllaçats consecutivament.

Polaritat d'enllaç És la separació de càrregues elèctriques al llarg d'un enllaç, donant lloc a un MOMENT DIPOLAR ELÈCTRIC. La diferència d'electronegativitat, $\Delta\chi$, entre els àtoms d'un enllaç determina la seva polaritat:

	$\Delta\chi \lesssim 0.5$	$0.5 \lesssim \Delta\chi \lesssim 2$	$\Delta\chi \gtrsim 2$
	APOLAR	POLAR	IÒNIC
ENLLAÇ			

Una molècula serà polar si el moment dipolar total (suma vectorial) és diferent de zero.



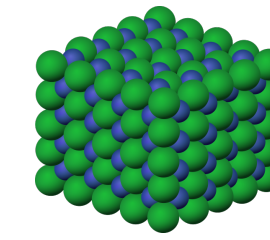
La molècula de BF_3 té tres enllaços polars però degut a la seva geometria trigonal plana el moment dipolar resultant és nul.
Font: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boron-trifluoride-elpot-3D-vdW.png>.

Enllaç iònic

És un enllaç que involucra l'**atracció electrostàtica** entre **ions** de **signe oposat**.

L'**enllaç iònic** sol donar-se **entre metalls** (tendeixen a cedir electrons, convertint-se en cations) i **no metalls** (tendeixen a captar electrons, convertint-se en anions).

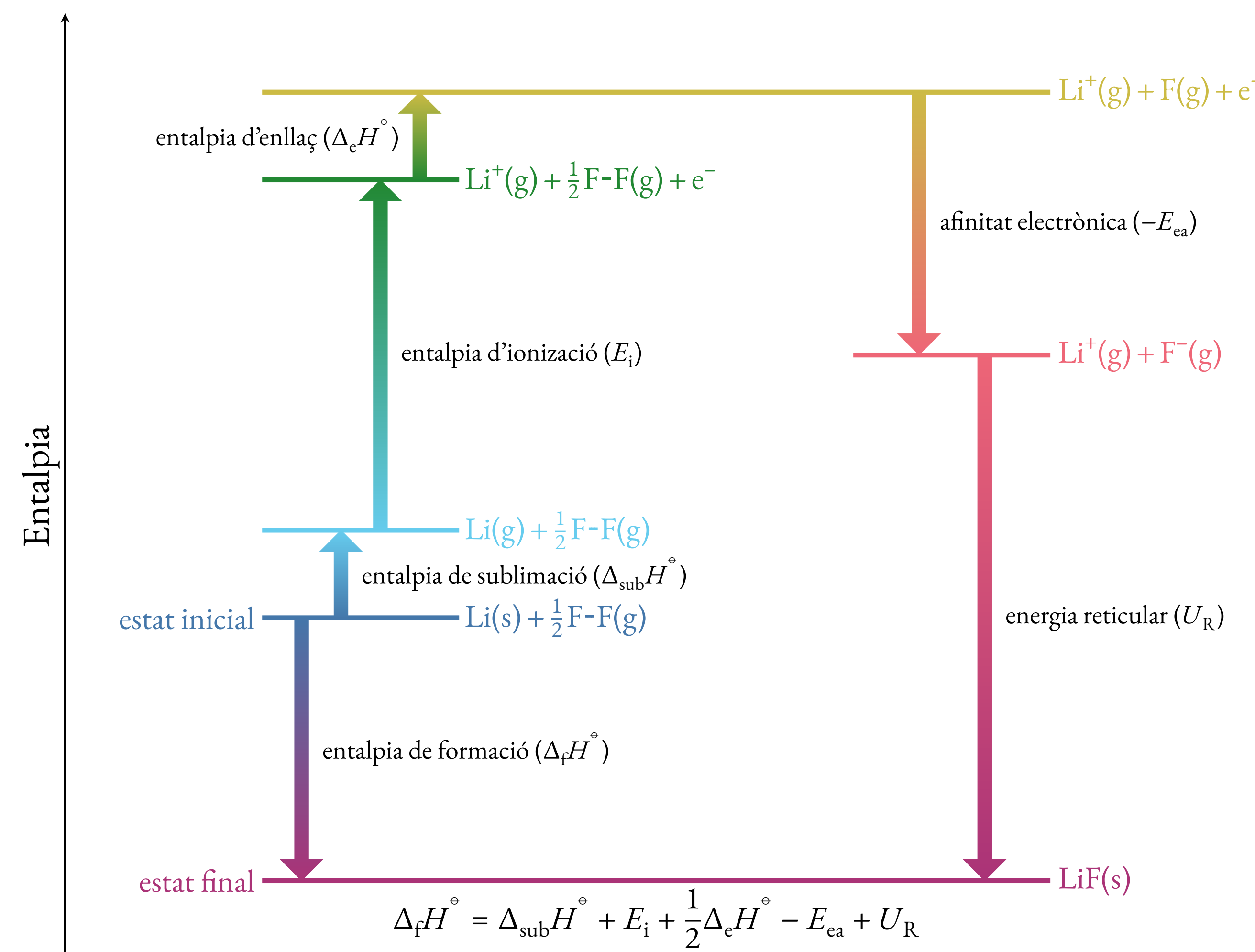
Els composts iònics formen **xarxes cristal·lines** compactes i **neutres** amb diferents geometries en funció del tipus d'ions que les formen.



Energia de xarxa o reticular U_R

És la **l'energia alliberada** al **formar-se** la **xarxa** a partir dels seus ions en estat gasós.

Cicle de Born-Haber Formació d'un compost iònic a partir dels seus elements.



Cicle de Born-Haber per la formació del fluorur de liti (LiF). Basat en
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Born-haber_cycle-LiF.svg.

Equació de Born-Landé Permet calcular l'ENERGIA DE XARXA O RETICULAR U_R :

$$U_R = -\frac{N_A M z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \propto -\frac{z^+ z^-}{r_0},$$

on $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ és la constant d'Avogadro; M és la constant de Madelung, relacionada amb la geometria del cristall; z^+ y z^- són els nombres de càrrega del catió i de l'anión, respectivament; $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ és la càrrega elemental, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$ és la permitivitat elèctrica al buit; r_0 és la distància a l'ió més proper; i $5 < n < 12$ és l'exponent de Born (experimental).

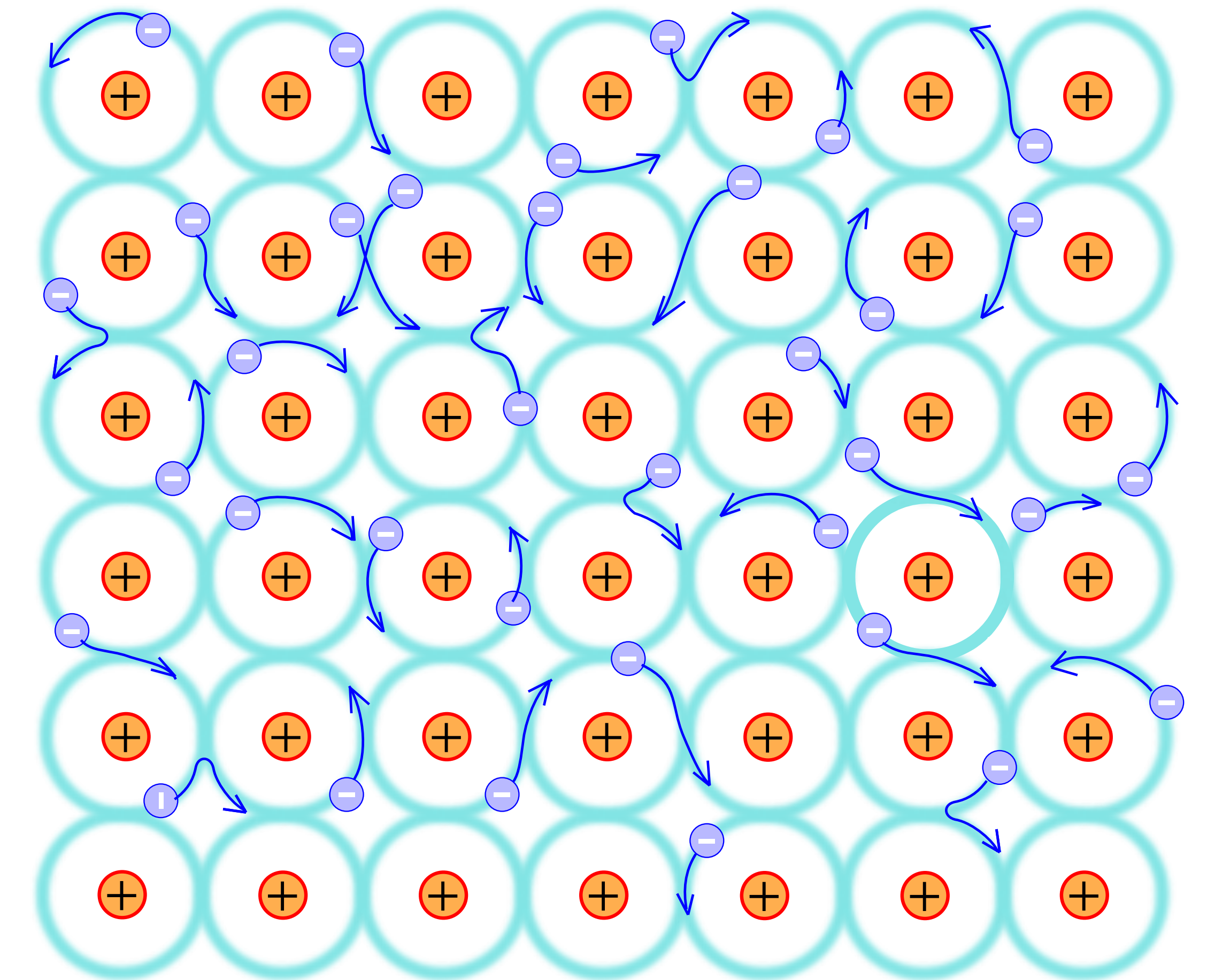
Propietats de les substàncies iòniques

- Degut a les **intenses forces electrostàtiques** entre els ions, solen tenir **temperatures de fusió i ebullició** molt **elevades**, de manera que la majoria són **sòlids cristal·lins** a **temperatura ambient**.
- Davant els **colps**, l'**alineament** dels **ions** positius i negatius es **pot perdre**, pel que són molt **fràgils**, encara que també molt **durs**.
- Fosos** o en **dissolució**, **conduïxen** la **corrent elèctrica**.

Enllaç metàl·lic

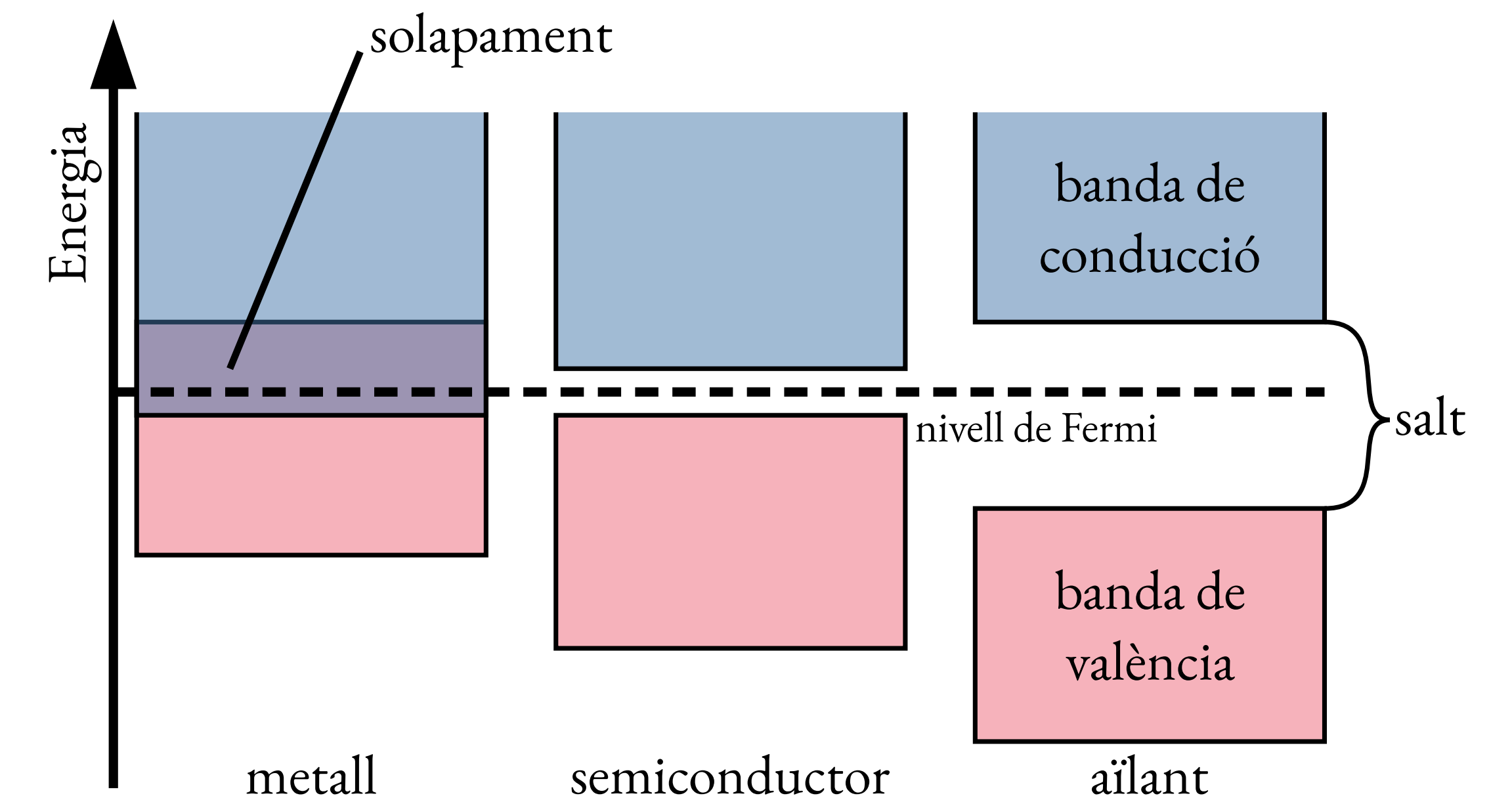
L'**enllaç metàl·lic** és l'enllaç químic que **manté units** els **àtoms** d'un **metall** entre sí. Sorgeix de l'**atracció electrostàtica** entre els **electrons** de conducció i els **cations** metàl·lics.

Model del núvol electrònic



Model del **núvol electrònic**, amb els **cations** en **posicions fixes** i els **electrons movent-se lliurement** en un **núvol**. Font: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metallic_bond_model.svg.

Teoria de bandes



Comparació de l'**estructura de bandes** electròniques d'un **metall**, un **semiconductor** i un **aïllant**.
Traduïda i adaptada de <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg>.

Propietats de las substàncies metàl·liques

- Aparença brillant**.
- Són **bons conductors** de la **calor** i de l'**electricitat**.
- Formen **aliatges** amb altres metalls.
- Tendeixen a cedir** (perdre) **electrons** al reaccionar amb altres substàncies.
- La majoria són **sòlids** a temperatura ambient (**Hg** és 💧).



ENLLAÇ QUÍMIC

Química 2n Batx

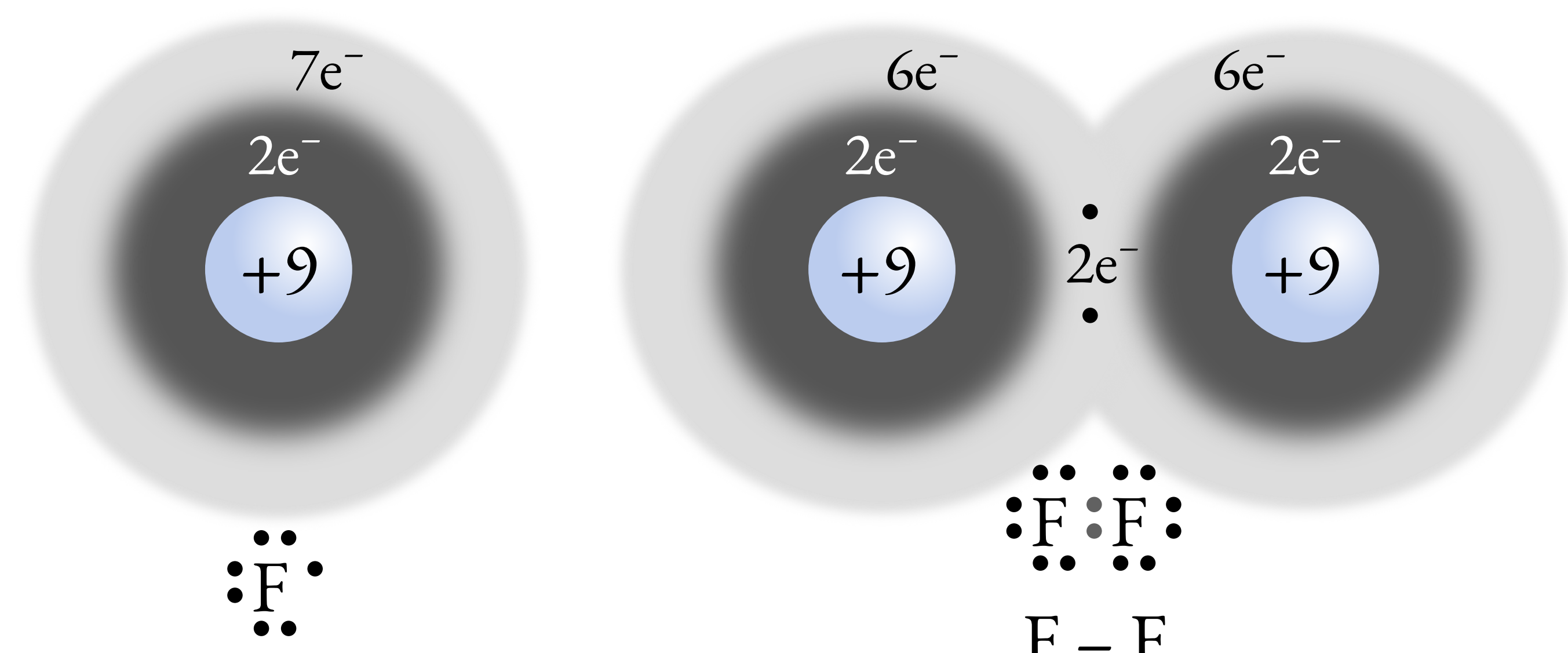
Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦 @ocolomar)



Enllaç covalent

És un enllaç químic que implica la **compartició** de **parells d'electrons** entre àtoms.

L'**enllaç covalent** sol donar-se **entre no metalls** (tendència a captar electrons).

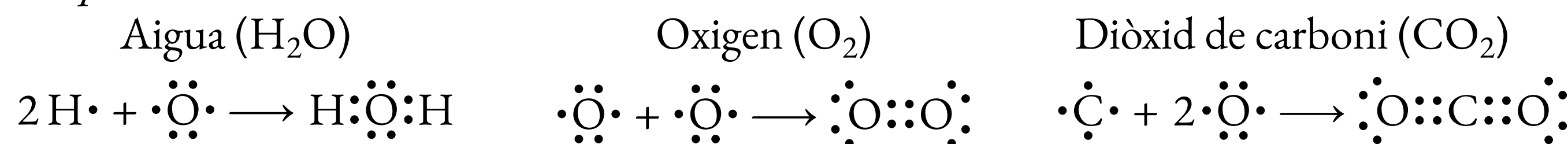


Representació de l'**unió covalent** entre dos àtoms de **fluor** (F) per formar F₂, amb un parell d'electrons compartit. Adaptada de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent_bond_fluorine.svg.

Estructures de Lewis

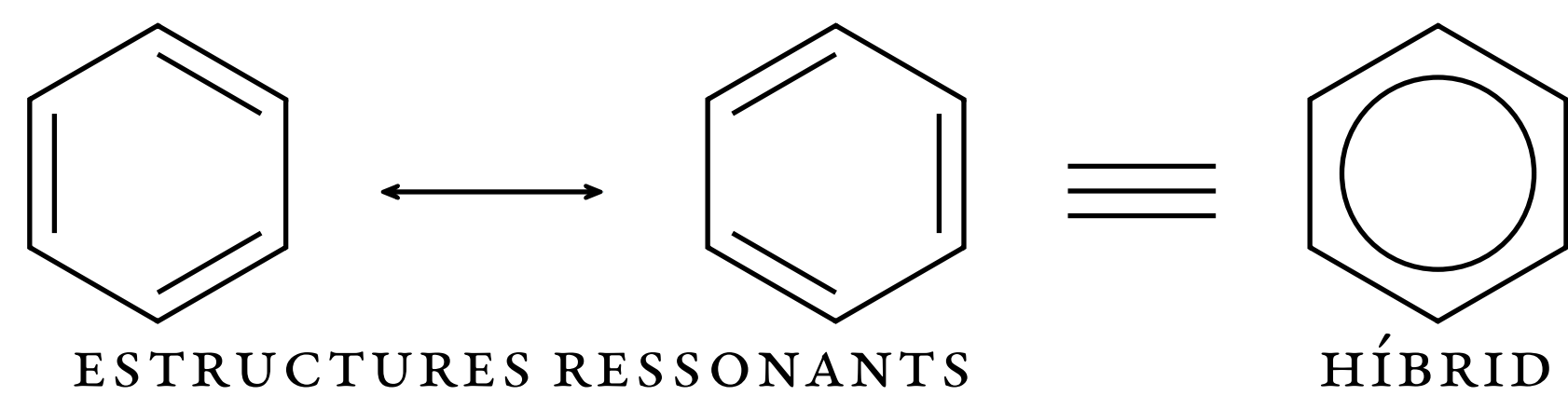
Es tracta de **diagrames** que **mostren** la **unió** entre els **àtoms** d'una **molècula** i els **parells solitaris d'electrons** que poden existir en la molècula.

Exemples



Ressonància

La **RESSONÀNCIA** és una forma de descriure l'enllaç en certes molècules mitjançant la combinació de diverses **ESTRUCTURES RESSONANTS** el conjunt de les quals es coneix com un **HÍBRID** de **RESSONÀNCIA**. És especialment útil per descriure els **ELECTRONS DESLOCALIZATS** (enllaços = en diferents posicions) en certes molècules o ions poliatòmics.

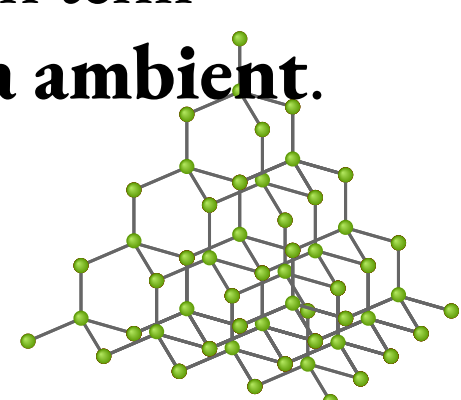
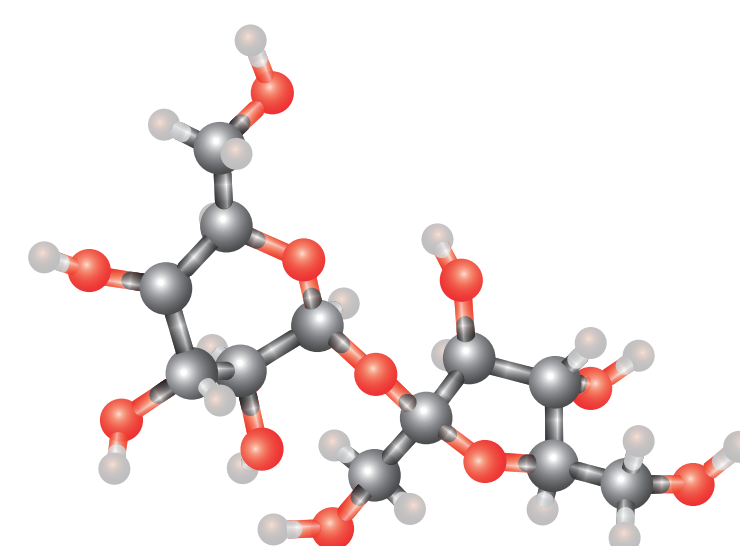


Propietats de les substàncies covalents moleculars

- Degut a les **febles interaccions entre molècules** covalents, solen tenir **temperatures de fusió i ebullició baixes** (molts composts covalents són **líquids** o **gasos** a **temperatura ambient**).
- En estado sòlid són composts **tous** i **fràgils**.
- Són **mals conductors** de la **calor** i de l'**electricidad**.

Propietats de les substàncies covalents cristal·lines

- Degut a la **fortalesa de l'enllaç covalent** entre els àtoms que el formen, solen tenir **temperatures de fusió i ebullició altes**, per tant, són **sòlids** a **temperatura ambient**.
- Són substàncies molt **dures** encara que **fràgils**.
- Solen ser **mals conductors** (a excepció del grafit o el grafe).



Geometria molecular

TRPECV

La **TEORIA DE REPULSIÓ DE PARELLS D'ELECTRONS DE LA CAPA DE VALÈNCIA** (TRPECV) es basa en, como els electrons de valència es repeleixen els uns als altres, aquests tendeixen a adoptar una disposició espacial que minimitza aquesta repulsió.

DENSITATS ELECTRÒNIQUES	NOMBRE DE PARELLS SOLITARIS (EN GROC)			
	0	1	2	3
2	Lineal			
3	Trigonal plana	Angular		
4	Tetraèdrica	Piràmide trigonal	Angular	Lineal
5	Bipiràmide trigonal	Balanci	Forma de T	Lineal
6	Octaèdrica	Piràmide quadrada	Plano quadrada	

TEV/Hibridació

La **TEORIA DE L'ENLLAÇ DE VALÈNCIA** (TEV) es basa en el fet que els e⁻ compartits es troben a una zona de **SOLAPAMENT ORBITAL**:

SOLAPAMENT	ENLLAÇ	ORBITALS	
Frontal (orbitals enfrontats)	σ (senzill)	s + s	s + p p + p
Lateral (orbitals paral·lels)	π (múltiple)	p + p	

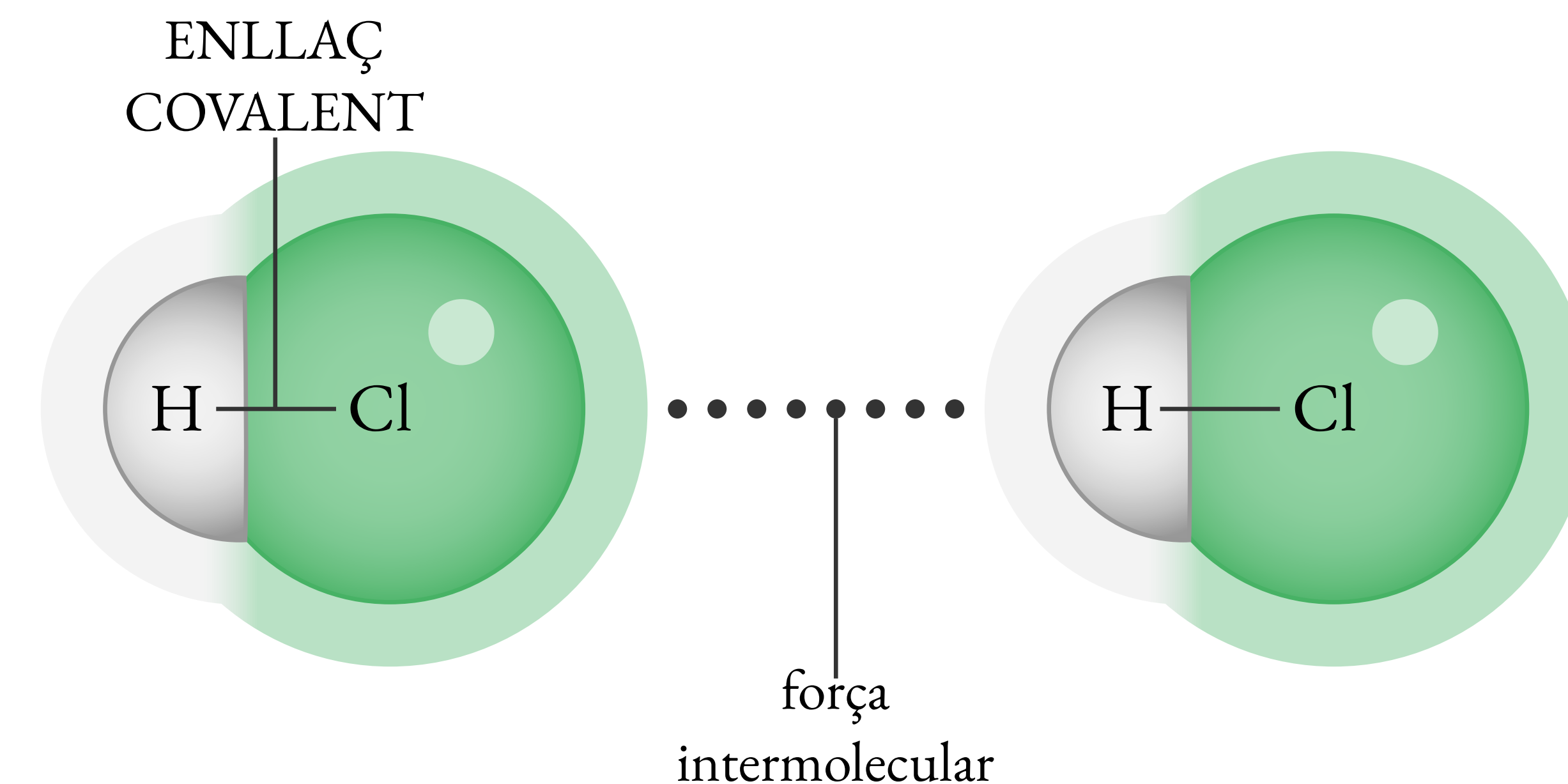
La **HIBRIDACIÓ** consisteix en combinar orbitals atòmics de l'àtom central per formar **ORBITALS HÍBRIDS** energèticament iguals i orientats en la direcció de l'enllaç.

	HIBRIDACIÓ sp	HIBRIDACIÓ sp ²	HIBRIDACIÓ sp ³
ORBITALS ATÒMICS	s + p (2)	s + p + p (3)	s + p + p + p (4)
ORBITALS HÍBRIDS	180°	120°	109,5°
GEOMETRIA (EXEMPLE)	Lineal (BeCl ₂)	Trigonal plana (BF ₃)	Tetraèdrica (CH ₄)

Forces intermoleculars

Les **forces intermoleculars** són les **forces** que existen **entre** las **molècules**, incloent-hi les forces d'atracció o repulsió que actuen entre les molècules i altres tipus de partícules veïnes, per exemple, àtoms o ions. Les forces intermoleculars són **febles en relació amb** les **forces intramoleculars** (les que mantenen unides una molècula).

Forces de van der Waals



Atracció intermolecular entre molècules de **clorur d'hidrogen**, HCl. Traduïda i adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/>.

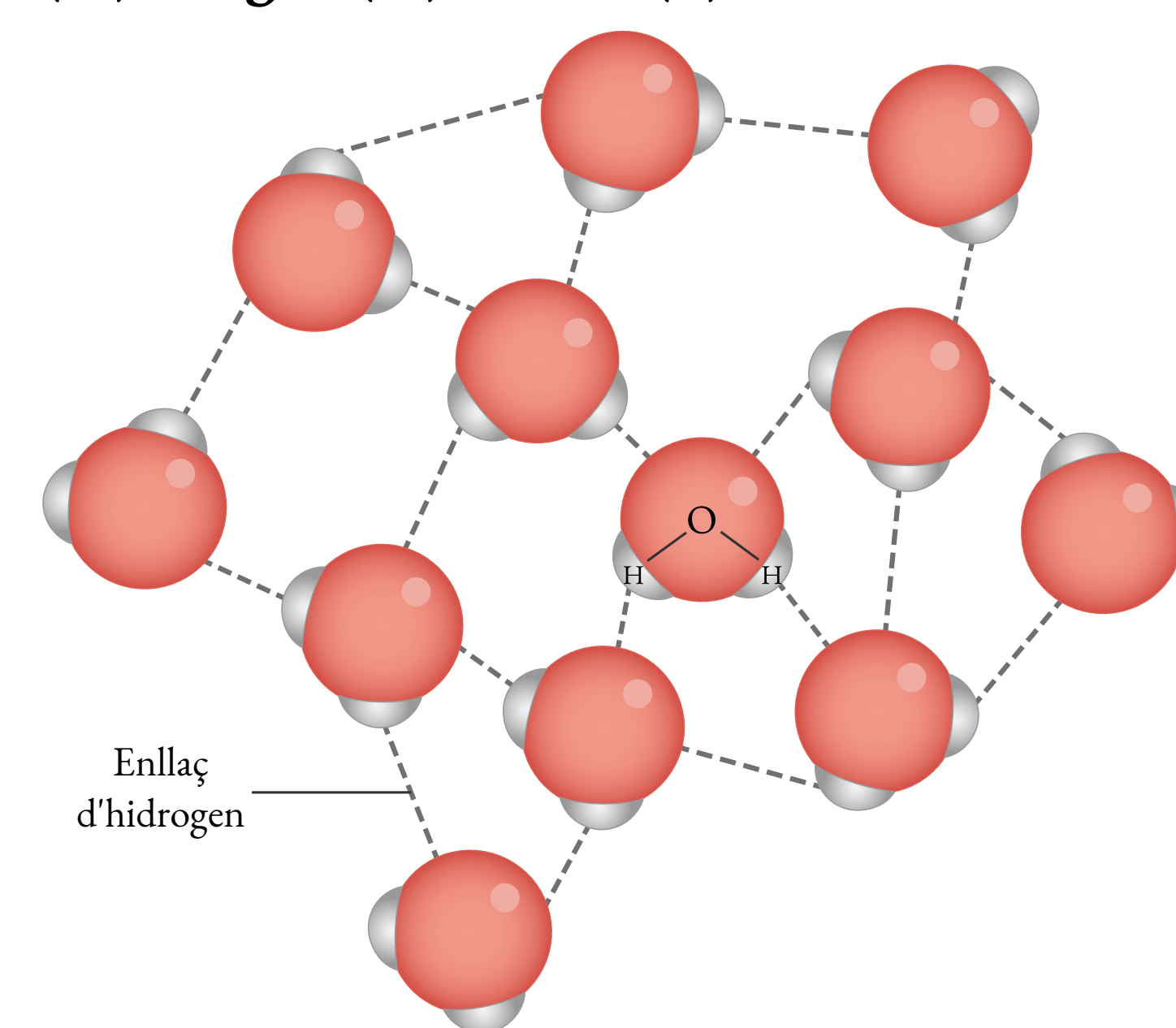
Es poden donar entre **molècules polars** (dipol-dipol, més fortes com més gran sigui la polaritat de la molècula), i **apolars** (anomenades **forces de dispersió de London**, més fortes com més grans i massives són les molècules involucrades).

Enllaços d'hidrogen

Són les **forces** intermoleculars més **intenses**. Es donen entre molècules que contenen àtoms d'**hidrogen** units a àtoms de **nitrogen** (N), **oxigen** (O) o **fluor** (F).

Els **enllaços d'hidrogen** són **responsables** de:

- Que l'**aigua** (H₂O) tingui una **temperatura d'ebullició anormalment alta** (100 °C a pressió atmosfèrica).
- L'**estructura de proteïnes** i **àcids nucleics**, com la **dobla hèlix** de l'**ADN** 🧬.
- L'**estructura de polímers**.



Enllaços d'hidrogen entre àtoms d'H i O en molècules d'**aigua** (H₂O). Traduïda i adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/>.

cristall covalent (grafit)	>	sòlid metàl·lic (Ti)	>	cristall iònic (NaCl)	>	enllaços d'H (H ₂ O)	>	dipol- dipol (CO)	>	London (Ne)
> 3600 °C		1668 °C		801 °C		0 °C		-205 °C		-248.4 °C

← Major fortalesa, temperatures de fusió i ebullició més elevades