

Tema 3

Enllaç Químic

2.1	ENLLAÇ COVALENT	4
2.1.1.	Molècula ió hidrogen	4
2.1.2.	Teoria d'orbitals moleculars (TOM)	6
2.1.2.1.	Molècules diatòmiques: H ₂	9
2.1.2.2.	Molècules diatòmiques homonuclears	10
2.1.2.3.	Molècules diatòmiques heteronuclears	12
2.1.1.	Teoria de l'enllaç de valència	15
2.1.1.1.	TEV i TOM – Semblances i diferències, H ₂	15
2.1.1.2.	Molècules poliatòmiques: Hibridacions	16
2.2	ENLLAÇ IÒNIC	20
2.2.1.	Estructures cristal·lines	20
2.2.1.1.	Tipus de cel·la elemental	22
2.2.1.2.	Nombre de coordinació	23
2.2.2.	Difracció de Raigs X	24
2.2.2.1.	Interferències	24
2.2.2.2.	L'equació de Bragg	25
2.2.3.	Tipus d'empaquetaments	26
2.2.4.	L'energia reticular	33
2.2.4.1.	Constant de Madelung	33
2.2.4.2.	Equació de Born-Landé	35
2.2.4.3.	Equació de Born-Mayer	38
2.2.4.4.	Equació de Kapustinskii	38
2.2.5.	Cicle de Born-Haber	40
2.2.6.	Estabilitat dels compostos iònics	44
2.2.7.	Característiques generals dels compostos iònics	44
2.3	ENLLAÇ METÀL·LIC	47
2.3.1.	Models per a l'enllaç metàl·lic	47
2.3.2.	Empaquetaments	48
2.3.3.	Propietats generals dels compostos metàl·lics	49

Teoria d'enllaç de València

La diferència principal entre els mètodes TEV i TOM és la següent.

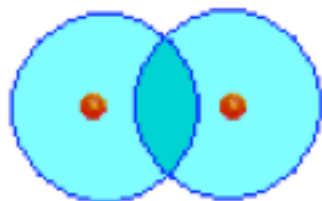
En el mètode **TOM** els electrons es situen en orbitals moleculars construïts a partir de l'aproximació **LCAO**. La funció d'ona del sistema és **producte de MO**.

El mètode **TEV** és molt més senzill conceptualment parlant. Els **enllaços es descriuen mitjançant el solapament (producte) d'electrons d'àtoms adjacents**. Aquesta segona aproximació està basada en les estructures de Lewis que ja coneixeu

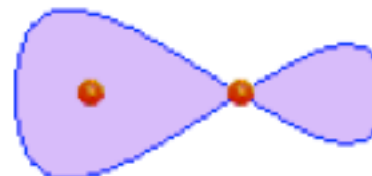
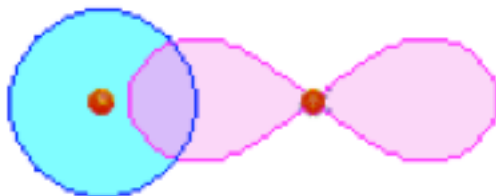
Igual que vàrem fer amb TOM, ho descriurem tot **gràficament!!!**

Veureu que els orbitals resultatnts són molt semblants al que ja heu “vist”!

Formació d'un enllaç tipus σ entre dos orbitals tipus s



Formació d'un enllaç tipus σ entre un orbital tipus s i un tipus p_z



Formació d'un enllaç tipus σ entre un orbital tipus s i un tipus p_z .



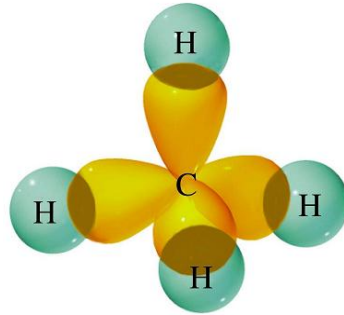
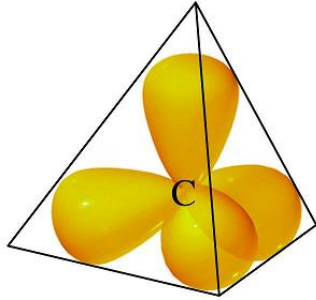
Representació de la superposició lateral de dos orbitals atòmics tipus p per donar un orbital molecular tipus π



La TEV no ens permet poder explicar la geometria de les molècules, per exemple la forma tetraèdrica del CH_4 , ja que els seus orbitals (tipus p) formen angles de 90° . **Com ho fariem perquè aquests orbitals acabessin donant una geometria tetraèdrica?**

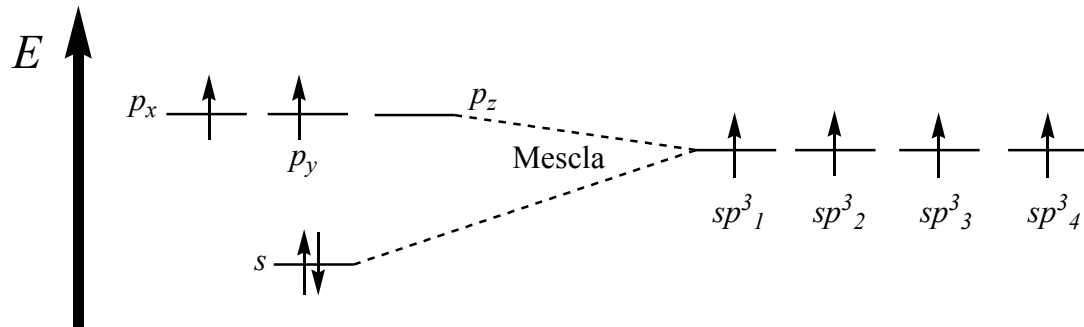
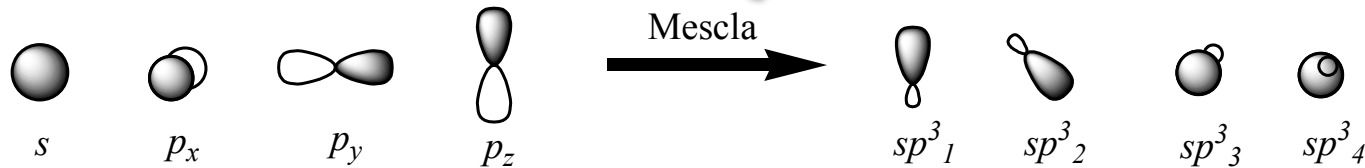
Per tal de poder-ho explicar s'introdueix el concepte de **orbital híbrid**, que no és res més que una **combinació dels orbitals atòmics de un àtom** per poder-ne formar uns de híbrids els quals **presenten la geometria** necessària per explicar-ne l'enllaç. Es tracta d'un procés matemàtic

Hibridació sp^3



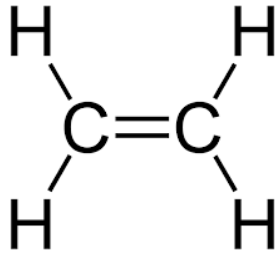
Per tal de descriure la geometria molecular del CH_4 a partir de la TEV **necessitaria que el C** (primera figura) tingués uns orbitals que presentessin les **direccions de un tetraedre**. Després es **solaparien amb els orbitals 1s dels H** i així farien **4 enllaços tipus sigma**.

Els **tres orbitals p i el s del carboni** no formen pas aquesta geometria. Per tant, el que fem, és **combinar-los** per obtenir-ne 4 de **híbrids (OH)** (n'hem combinat 4 OA, i per tant tenim 4 OH)



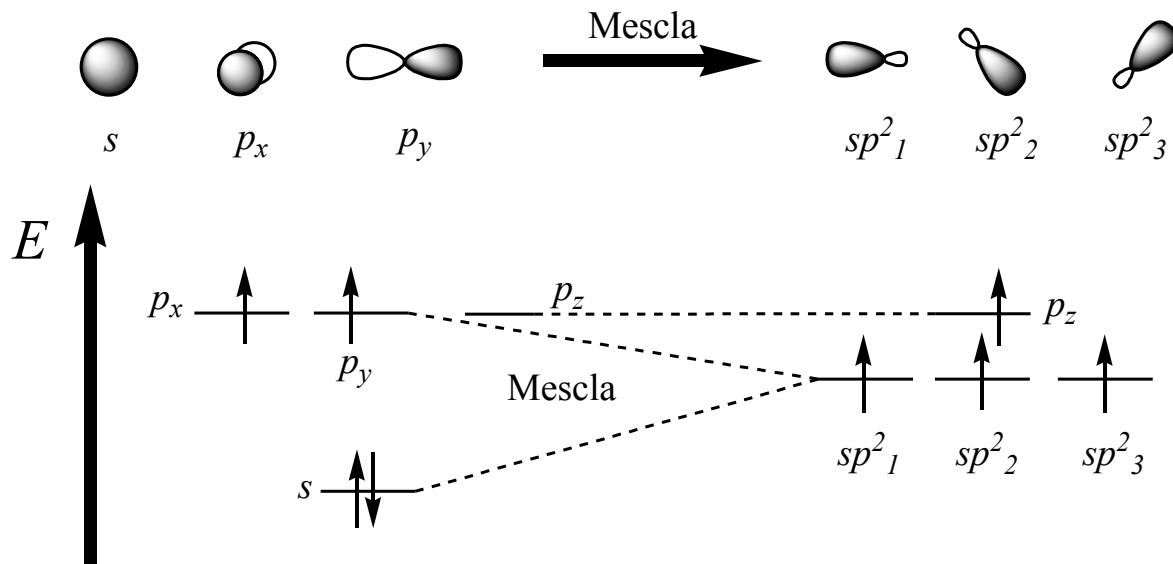
Això representaria el diagrama energètic. Partim de un orbital **s** i 3 orbitals **p** (**4 OA**), i obtenim 4 orbitals híbrids (**4 OH**) **degenerats** (és a dir, tots amb la mateixa energia)

Hibridació sp^2



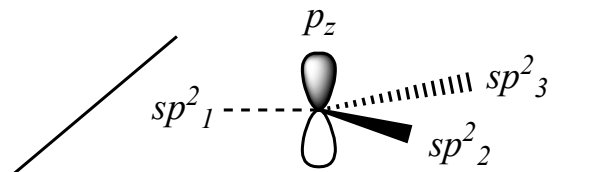
Per tal de descriure la geometria molecular del $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ a partir de la TEV **necessitaria que el C** tingués uns orbitals que presentessin **3 direccions separades 120°** (que tingui una geometria plana trigonal). Després es **solaparien amb els orbitals 1s dels H** i així farien **2 enllaços tipus sigma**. Però fixeu-vos que ara entre els dos C hi ha un doble enllaç **C=C!!!!**

Com que ara **només necessito 3 OH** (3 direccions diferents), combinaré **3 OA**. Per tant agafarem l'orbital **s** i **2 orbitals p**.

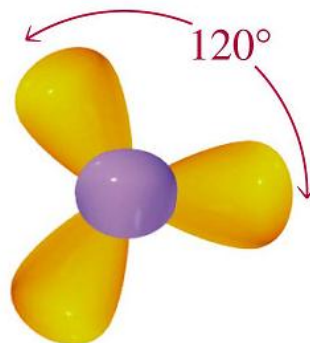
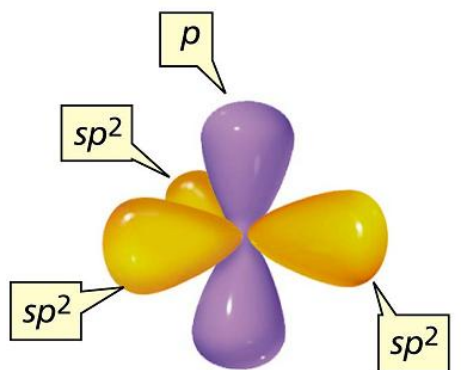


Això representaria el diagrama energètic. Partim de un orbital **s** i 2 orbitals **p** (**3OA**), i obtenim 3 orbitals híbrids (**3 OH**) **degenerats**

Queda un **orbital p sense combinar!!**



Hibridació sp^2

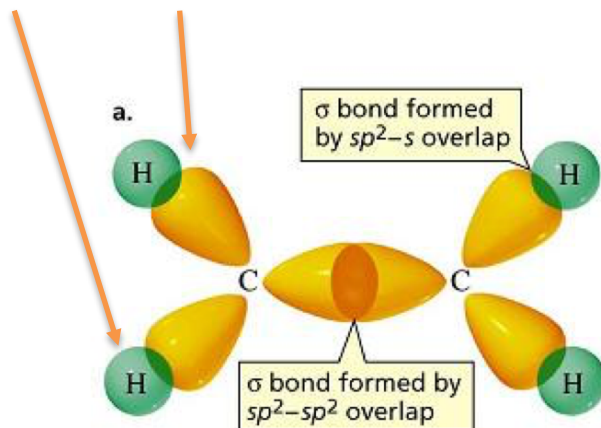


Dos orbitals sp^2 es solapen amb els orbital 1s dels dos H, i tenim dos orbitals **sigma**

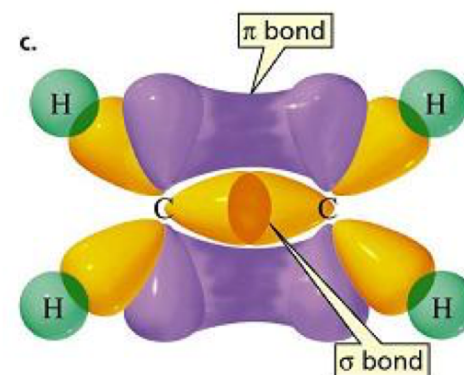
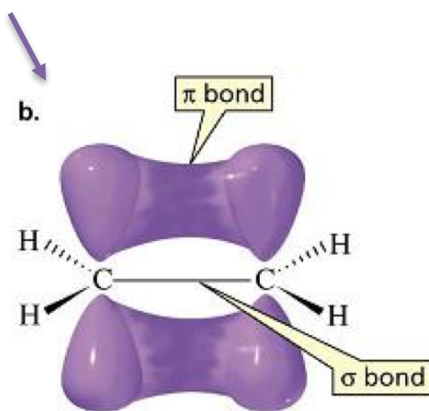
Recordeu que ens ha quedat un orbital p sense combinar (el de color lila). Aquest orbital es combinarà amb l'altre orbital p del segon carboni per així poder formar un enllaç, que té simetria π !

Resumint, la molècula de CH_2CH_2 presenta:

- 4 enllaços tipus **sigma** formats per un orbital sp^2 del C i s del H
- 1 enllaç tipus sigma format per sp^2 de cadascun dels C
- 1 enllaç π (C=C) format pels 2 orbitals p que no s'han hibridat.



El tercer orbital sp^2 es combinarà amb el orbital sp^2 del C veí, per així formar també un orbital tipus **sigma**.



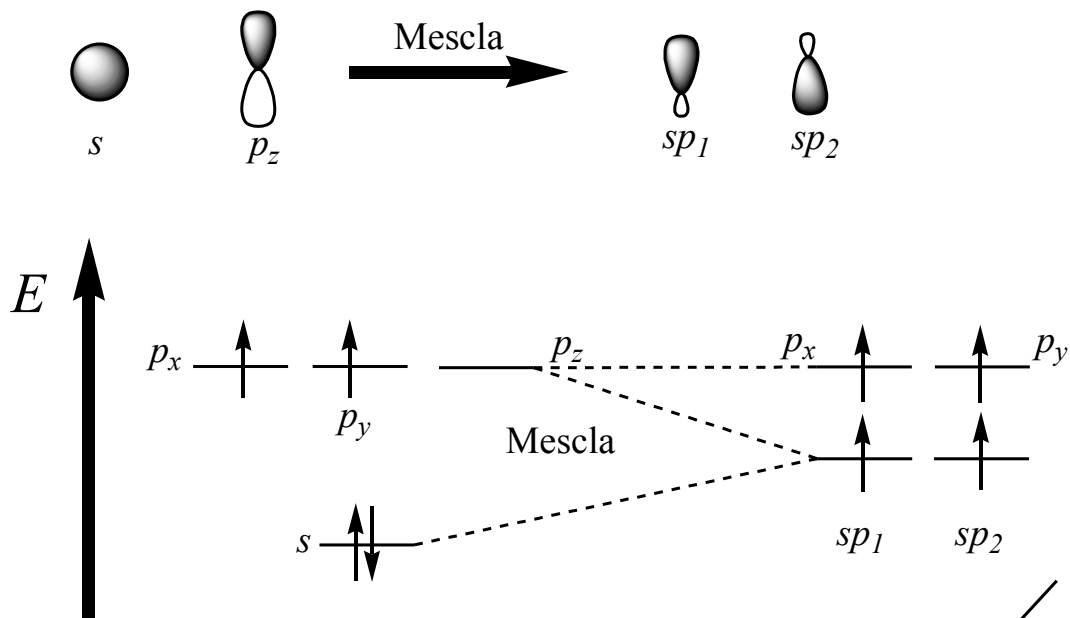
L'enllaç de C=C no són dos enllaços iguals, sino que un és del tipus sigma i l'altre π

Hibridació sp



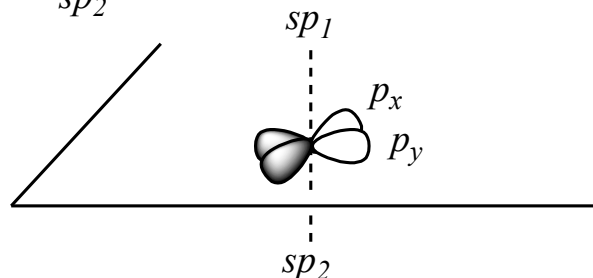
Per tal de descriure la geometria molecular del $\text{CH}\equiv\text{CH}$ a partir de la TEV **necessitaria que el C** tingués uns orbitals que presentessin **2 direccions separades 180°** (que tingui una geometria lineal). Després es **solaparien amb els orbitals $1s$ dels H** i així farien **1 enllaços tipus sigma**. Però fixeu-vos que ara entre els dos C hi ha un **triple enllaç!!!!**

Com que ara **només necessito 2 OH** (2 direccions diferents), combinaré **2 OA**. Per tant agafarem l'orbital **s** i **1 orbital p**.

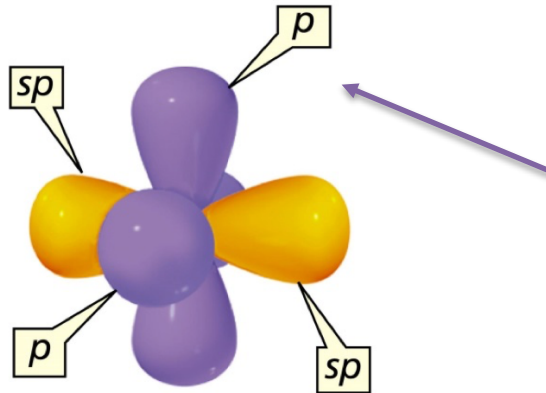


Això representaria el diagrama energètic. Partim de un orbital **s** i 1 orbital **p** (**2OA**), i obtenim 3 orbitals híbrids (**2 OH**) **degenerats**

Queda **dos orbitals p sense combinar!!**

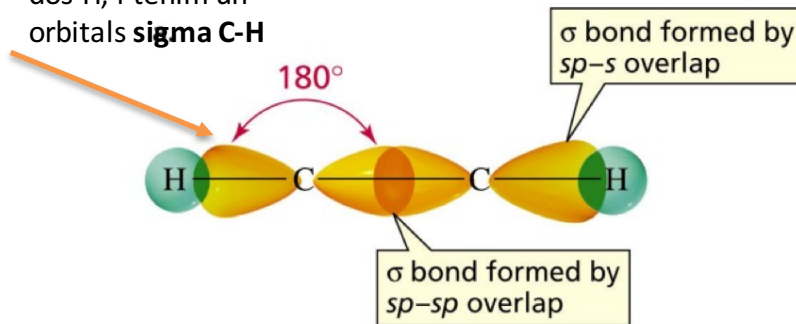


Hibridació sp

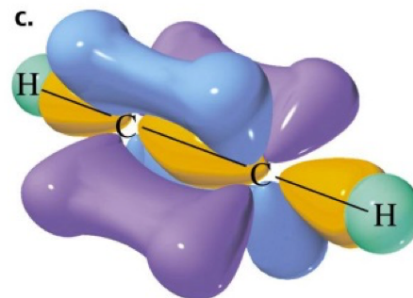
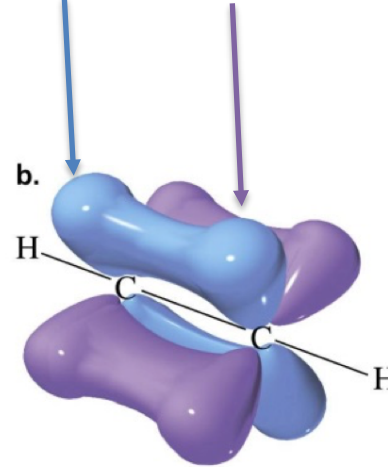


Recordeu que ens ha quedat dos orbital p sense combinar (el de color lila). Aquests orbital es combinarà amb els altres orbitals p del segon carboni per així poder formar dos enllaços, que tenen simetria π !

Un orbital sp es solapen amb els orbital $1s$ dels dos H, i tenim un orbitals **sigma C-H**



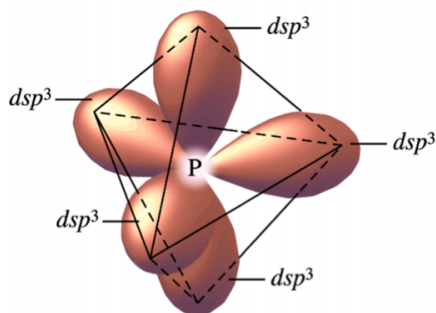
El segon orbital sp es combinarà amb el orbital sp del C veí, per així formar també un orbital tipus **sigma**.



Resumint, la molècula de CHCH presenta:

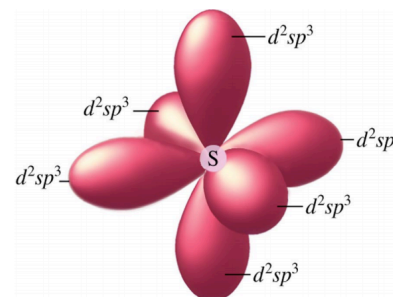
- 2 enllaços tipus **sigma** formats per un orbital sp del C i s del H, C-H
- 1 enllaç tipus sigma format per sp de cadascun dels C
- 2 enllaç π (C=C) format pels 4 orbitals p que no s'han hibridat (2 de cada C)

Hibridació sp^3d



Per tal de poder descriure les **5 direccions d'enllaç** de l'àtom central, necessitem **5 OH**, per això ara també hi combinen un orbital d. Obtenim 5 orbitals degenerats **sp^3d** que estan disposats en forma de **bipiràmide trigonal!**



























Hibridació sp^3d^2



Per tal de poder descriure les **6 direccions d'enllaç** de l'àtom central, necessitem **6 OH**, per això ara també hi combinen 2 orbitals d. Obtenim 5 orbitals degenerats **sp^3d^2** que estan disposats en forma de **octaedre!**

Relació entre VSEPR i Hibridació

Fixeu-vos, que justament el **SN** no és res més que el **nombre de orbitals híbrids** que necessitem per formar la geometria correcta.

VSEPR				Hybridization			
ECC	Bonding Pair	Lone Pair	Electron Distribution Electron geometry domain	Atomic orbitals	Type of Hybridization	Number of Hybrid orbitals	Shape/Geometry
2	2	0	 linear	s, p	sp	2	 linear
3	3	0	 Trigonal planar	s, p, p	sp ²	3	 Trigonal planar
	2	1	 Trigonal planar	s, p, p	sp ²	3	 Bend V shape
4	4	0	 Tetrahedral	s, p, p, p	sp ³	4	 Tetrahedral
	3	1	 Tetrahedral	s, p, p, p	sp ³	4	 Trigonal pyramidal
	2	2	 Tetrahedral	s, p, p, p	sp ³	4	 Bend V shape
5	5	0	 Trigonal Bipyramidal	s, p, p, p, d	dsp ³	5	 Trigonal Bipyramidal
	4	1	 Trigonal Bipyramidal	s, p, p, p, d	dsp ³	5	 Seesaw
	3	2	 Trigonal Bipyramidal	s, p, p, p, d	dsp ³	5	 T shape
	2	3	 Trigonal Bipyramidal	s, p, p, p, d	dsp ³	5	 Linear
6	6	0	 Octahedral	s, p, p, p, d, d	d ² sp ³	6	 Octahedral
	5	1	 Octahedral	s, p, p, p, d, d	d ² sp ³	6	 Square pyramidal
	4	2	 Octahedral	s, p, p, p, d, d	d ² sp ³	6	 Square planar