

TEMA3. ENLLAÇ QUÍMIC

3.2 ENLLAÇ COVALENT

3.2.1. Mètode de Lewis

3.2.2. El mètode VSEPR. Geometria i moment dipolar de les molècules

3.2.3 Polaritat d'enllaç

Compte! Que potser alguna numeració no coincideix amb el dossier!!

Tema 3.1

Exemple 3.1 del Dossier

Exercici 3.4 del Dossier

Exercici 3.5 del Dossier

Temes 2.1 i 2.2

Pregunta 3 NR Prova del 21-12-2010

Pregunta 3 R Prova del 23-11-2012

Pregunta 2 Prova del 20-06-2013

<https://www.wolframalpha.com/widgets/view.jsp?id=689aa5a01c216d8b16ed0250cebdc702>

Lewis structure



Lewis structure

BETA

Molecule

Submit

WolframAlpha

Added Sep 29, 2013 by Ibear in Chemistry
finds lewis structure of molecule

Però us aconsello que agafeu les regles 3.2.1.2 i les practiqueu. En la majoria de compostos no us caldrà, ja que fareu bastant com si fossin peces de construcció, però si no us n'ensortiu, segur que seguint la mecànica hi arribeu.

Estructures de Lewis: Càrregues formals

Extret de l'exemple 3.1 del llibre en PDF

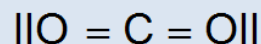
$$cf = ev - enc - \frac{ec}{2}$$

El càlcul de la càrrega formal consisteix a veure en quina mesura (en excés, de manera justa o en defecte) els electrons de valència de l'àtom s'han repartit en haver-hi les comparticions.

Exemple 2.1. Exemples de càlcul de les càrregues formals:

Molècula de CO₂

Assignem a la molècula de CO₂ l'estructura de Lewis següent:



Calculem les càrregues formals del carboni i d'un dels oxígens:

C: 1s²2s²2p², grup IV, 4 electrons de valència.

$$cf_{\text{C}} = 4 - 0 - \frac{8}{2} = 4 - 4 = 0$$

O: 1s²2s²2p⁴, grup VI, 6 electrons de valència

$$cf_{\text{O}} = 6 - 4 - \frac{4}{2} = 6 - 6 = 0$$

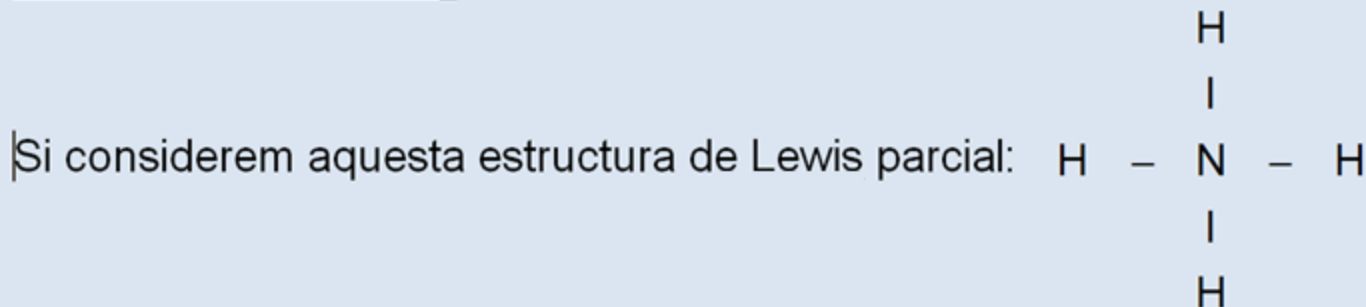
Estructures de Lewis: Càrregues formals

Extret de l'exemple 3.1 del llibre en PDF

$$cf = ev - enc - \frac{ec}{2}$$

Exemple 2.1. Exemples de càlcul de les càrregues formals:

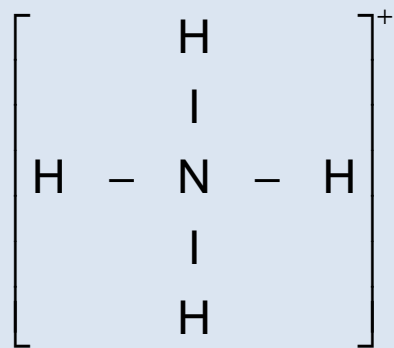
Cas del ió amoni, NH_4^+



N: 5 electrons de valència. $cf_N = 5 - 0 - \frac{8}{2} = 5 - 4 = +1$

H: 1 electró de valència. $cf_H = 1 - 0 - \frac{2}{2} = 1 - 1 = 0$

Com ho representem finalment?



Estructures de Lewis: Càrregues formals

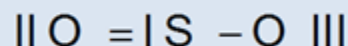
Extret de l'exemple 3.1 del llibre en PDF

$$cf = ev - enc - \frac{ec}{2}$$

Exemple 2.1. Exemples de càlcul de les càrregues formals:

Molècula de SO_2

Quina és la càrrega formal de cada àtom en aquesta proposta d'estructura de Lewis?



$$\text{Primer O: } cf_{\text{O}} = 6 - 4 - \frac{4}{2} = 0$$

$$\text{S: } cf_{\text{S}} = 6 - 2 - \frac{6}{2} = +1$$

$$\text{O de la dreta: } cf_{\text{O}} = 6 - 6 - \frac{2}{2} = -1$$

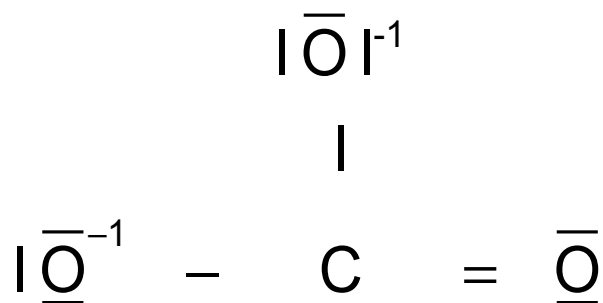
Els tres àtoms són del grup VI i, per tant, tenen 6 electrons de valència.

En aquest cas, la proposta de repartiment de càrregues és la següent:



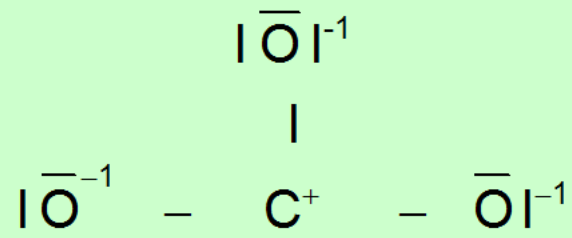
Exercici 2.4. Representeu tres estructures ressonants equivalents de l'anió carbonat.

L'anió carbonat és CO_3^{2-} . Una opció consisteix en repartir les dues càrregues negatives en dos dels tres oxígens a mode de càrregues formals. Donant a cadascun dels oxígens el paper del que té càrrega formal zero s'obtenen les tres **estructures ressonants equivalents**.



Cal recordar que les estructures de Lewis no tenen component geomètric tridimensional, són planes.

Exercici 2.5. Per al cas de l'anió carbonat, es pot considerar una quarta estructura ressonant:



Penseu que els pesos de les quatre estructures ressonants són tots iguals entre ells? Hi ha una estructura que ha de tenir un pes diferent? Quina? Creieu que aquest pes és major o menor que els altres? Els altres pesos són iguals entre ells?

Experimentalment se sap que l'anió carbonat presenta unes distàncies d'enllaç que són totes iguals entre elles...

El mateix podem dir dels angles O-C-O.

Això és compatible amb:

1. La quarta estructura ressonant.
2. Amb les altres 3 estructures si totes 3 tenen el mateix pes.

Adicionalment, la quarta estructura presenta moltes càrregues formals: Segurament el seu pes és menor que el de la *suma* de les altres tres estructures.

Considera la molècula de SOCl_2 (clorur de tionil). Segons la teoria VSEPR digues quina és la seva geometria, quins angles d'enllaç aproximats presenta i raona si té o no moment dipolar.

Dades: $Z(\text{S})=16$, $Z(\text{O})=8$, $Z(\text{Cl})=17$

Primer cal obtenir l'estructura de Lewis

Electrons: S: 6

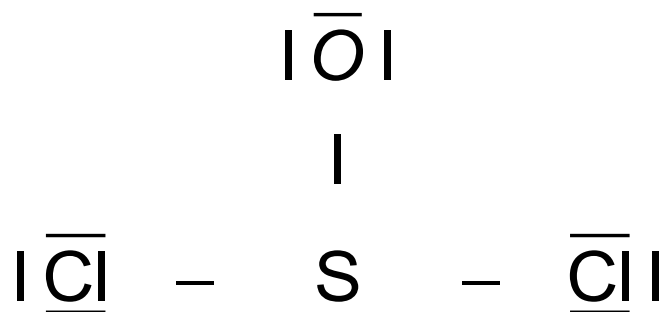
O: 6

Cl: $7 \times 2 = 14$

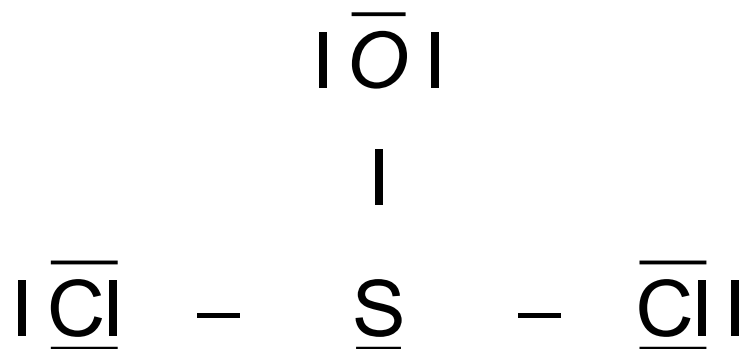
Total: $6 + 6 + 14 = 13$ parelles d'electrons.

Quin àtom assignem com a **àtom central**?

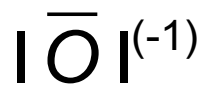
Assolim octets en **establir enllaços** amb el central.



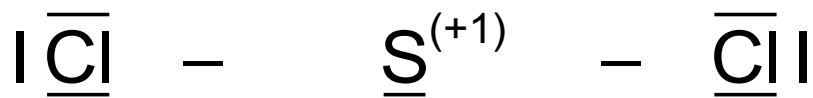
L'àtom central assumeix el parell d'electrons que falta assignar:



Quines són les càrregues formals?

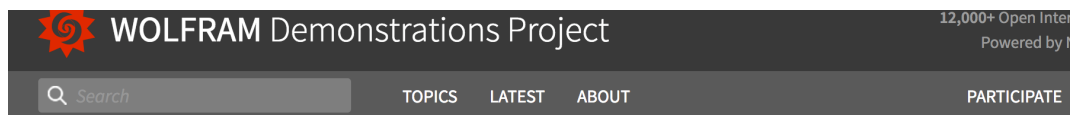


Quina és l'estructura
de Lewis final?

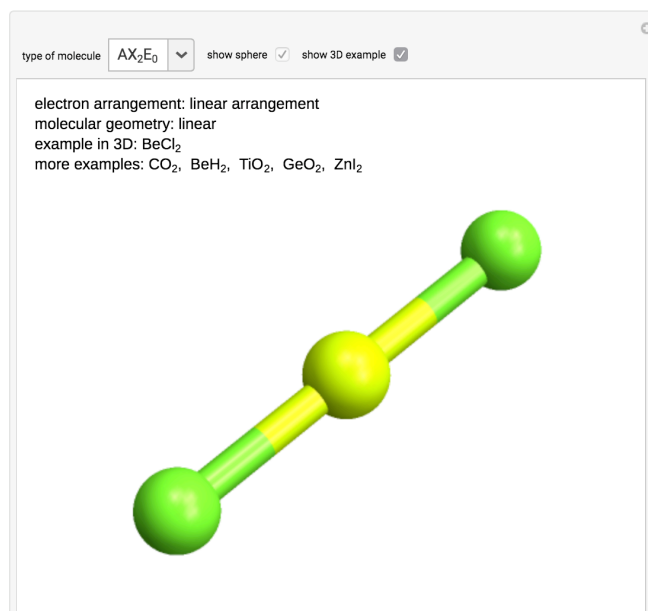


Estructuras de Lewis. Teoria VSEPR. Geometria

<https://demonstrations.wolfram.com/ValenceShellElectronPairRepulsionVSEPRTheory/>



Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR) Theory



Share Demonstrati...



Related Demonstrati...

- Simulatic
Gas Press
Jon McL...
- Compari
Chemical
Stephen '
- Propertie
Elements
Stephen '
- Electron
Browser
Theodore
- n+l Rule f
Electron
C. M. Rlin

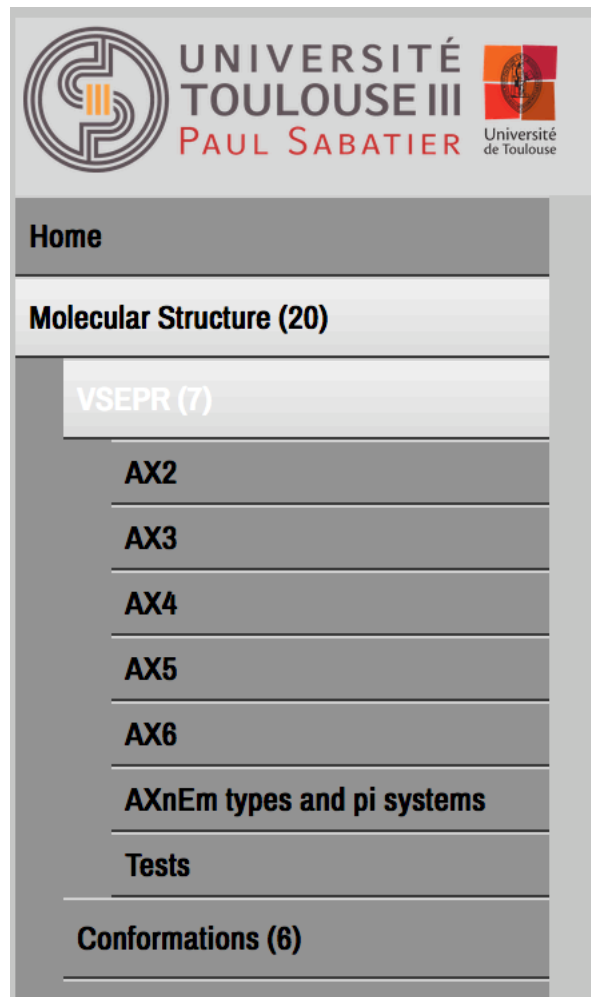
Related Topics




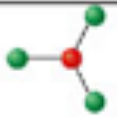



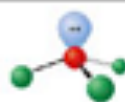





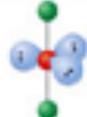
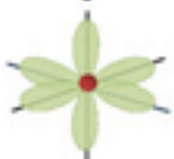


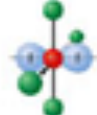
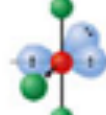

Chemistry »

Estructures de Lewis. Teoria VSEPR. Geometria

<http://vchem3d.univ-tlse3.fr/index.html>

Encara que no sigui un gran web,
podeu veure els diferent tipus de
geometries, basades en VSEPR



Number of Electron Dense Areas	Electron-Pair Geometry	Molecular Geometry				
		No Lone Pairs	1 lone Pair	2 lone Pairs	3 lone Pairs	4 lone Pairs
2 	Linear	 Linear				
3 	Trigonal planar	 Trigonal planar	 Bent			
4 	Tetrahedral	 Tetrahedral	 Trigonal pyramidal	 Bent		
5 	Trigonal bipyramidal	 Trigonal bipyramidal	 Sawhorse	 T-shaped	 Linear	
6 	Octahedral	 Octahedral	 Square pyramidal	 Square planar	 T-shaped	 Linear

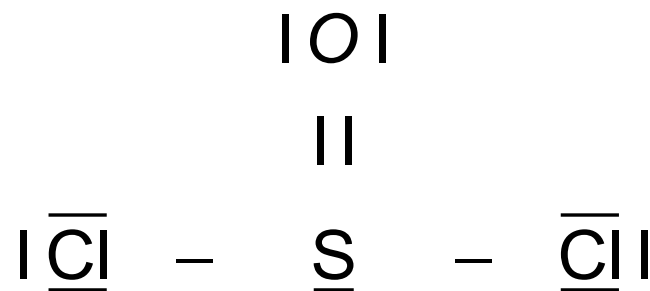
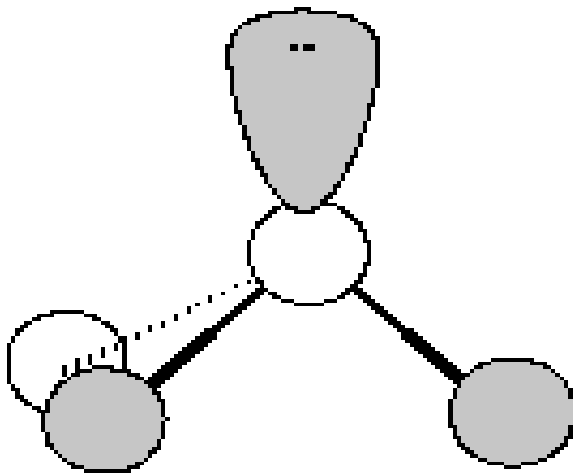
Considera la molècula de SOCl_2 (clorur de tionil). Segons la teoria VSEPR digues quina és la seva geometria, quins angles d'enllaç aproximats presenta i raona si té o no moment dipolar.

Dades: $Z(\text{S})=16$, $Z(\text{O})=8$, $Z(\text{Cl})=17$

Després apliquem la teoria VSEPR

L'element central és el sofre.

Els valors de SN i LP són...

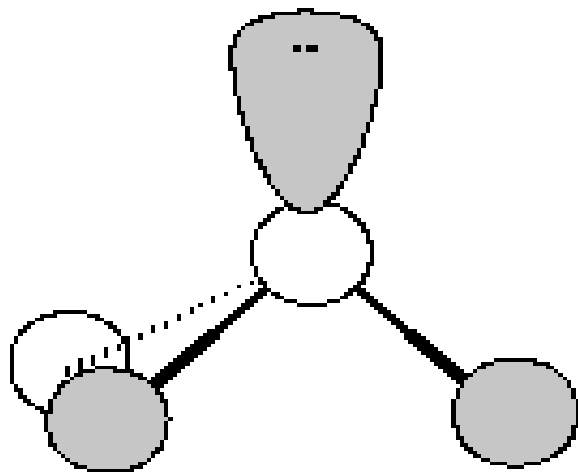


$$\text{SN} = 4$$

$$\text{LP} = 1$$

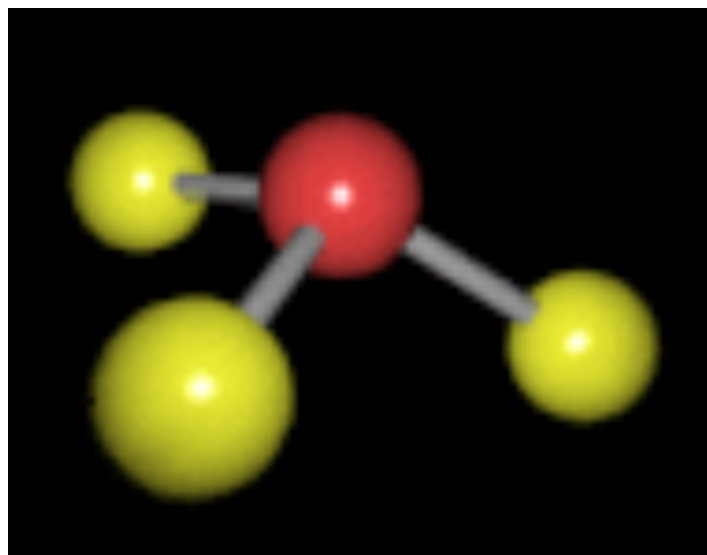
$$\text{DE} = \text{SN} - \text{LP} = 3$$

$$\text{SN} = 4$$
$$\text{LP} = 1$$



Quina és, doncs, la geometria molecular?

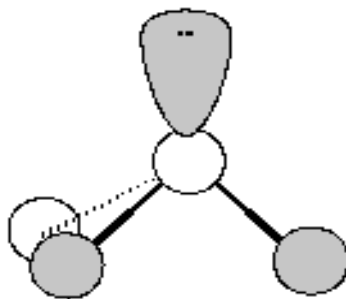
Taula 2.1 llibre PDF: piràmide triangular



Considera la molècula de SOCl_2 (clorur de tionil). Segons la teoria VSEPR digues quina és la seva geometria, quins angles d'enllaç aproximats presenta i raona si té o no moment dipolar.

Dades: $Z(\text{S})=16$, $Z(\text{O})=8$, $Z(\text{Cl})=17$

Angles d'enllaç

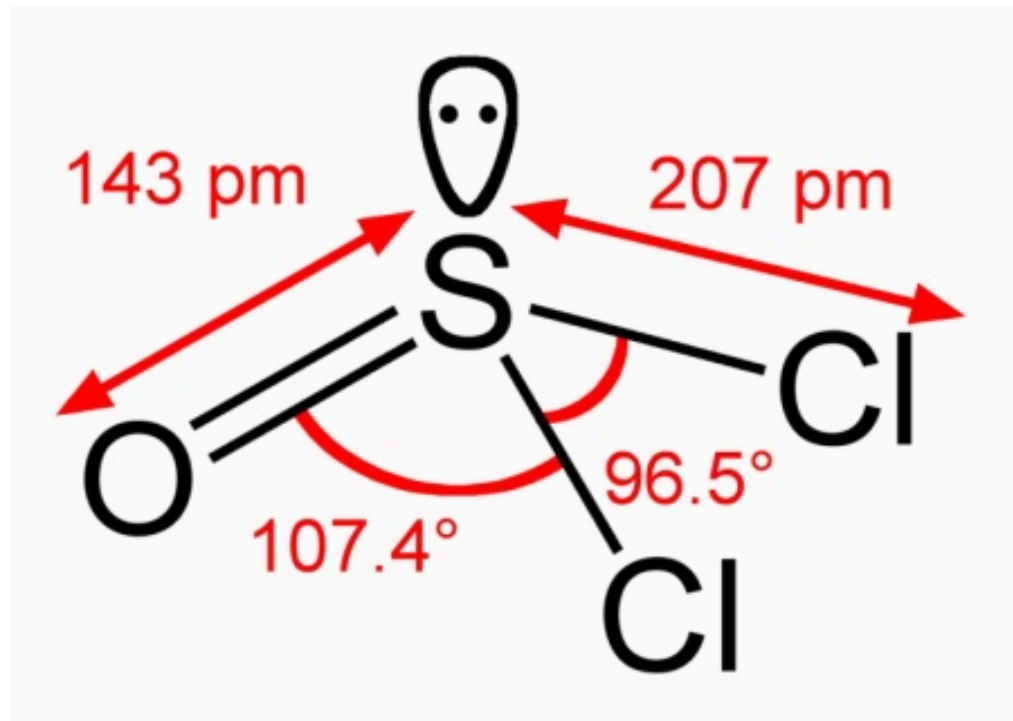


Geometria global tetraèdrica ($\text{SN}=4$)... distorsionada.
Enllaços a uns 109° ?

Parell lliure del sofre \rightarrow provoca tancament:
enllaços Cl-S-Cl i Cl-S=O són menors de 109° .

Angles d'enllaç

Experimentament:



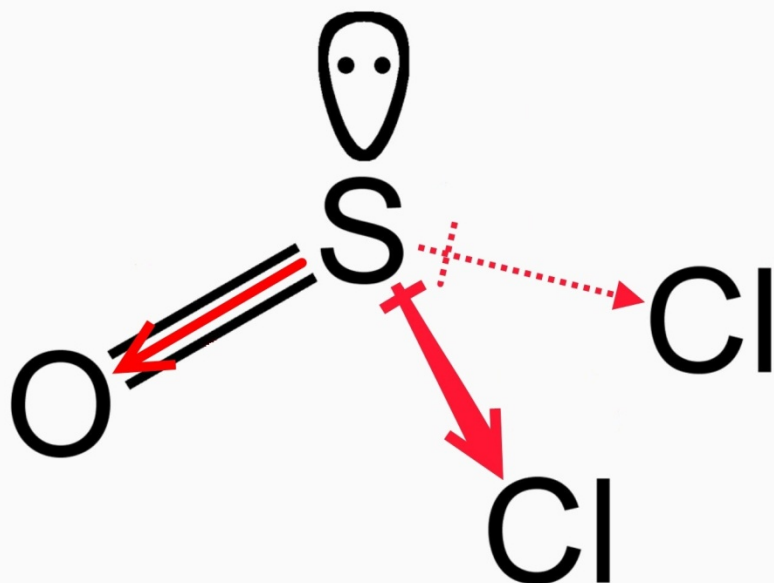
Per què l'angle Cl-S-Cl és el més petit de tots?

Considera la molècula de SOCl_2 (clorur de tionil). Segons la teoria VSEPR digues quina és la seva geometria, quins angles d'enllaç aproximats presenta i raona si té o no moment dipolar.

Dades: $Z(\text{S})=16$, $Z(\text{O})=8$, $Z(\text{Cl})=17$

Moment dipolar

Algun moment dipolar d'enllaç es veu compensat?

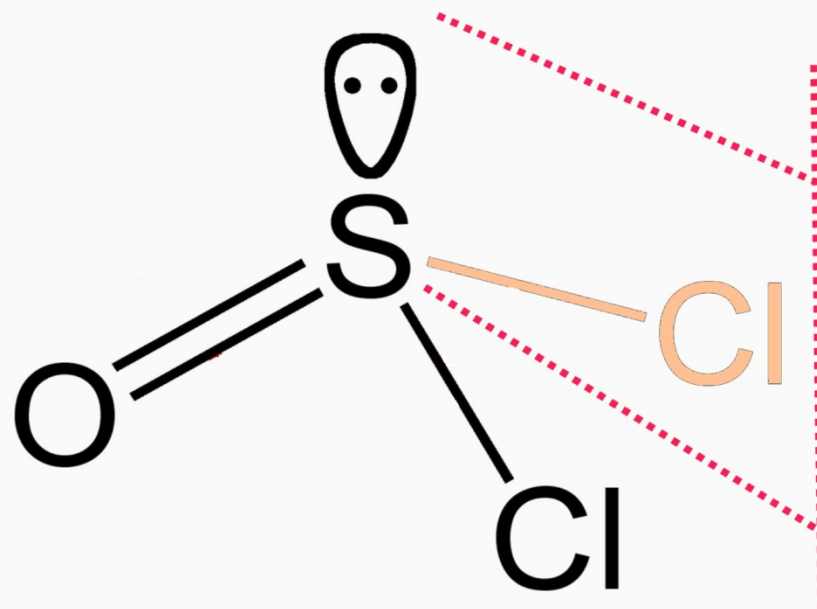


La molècula és polar.
Valor experimental: 1.4 D.

Moment dipolar

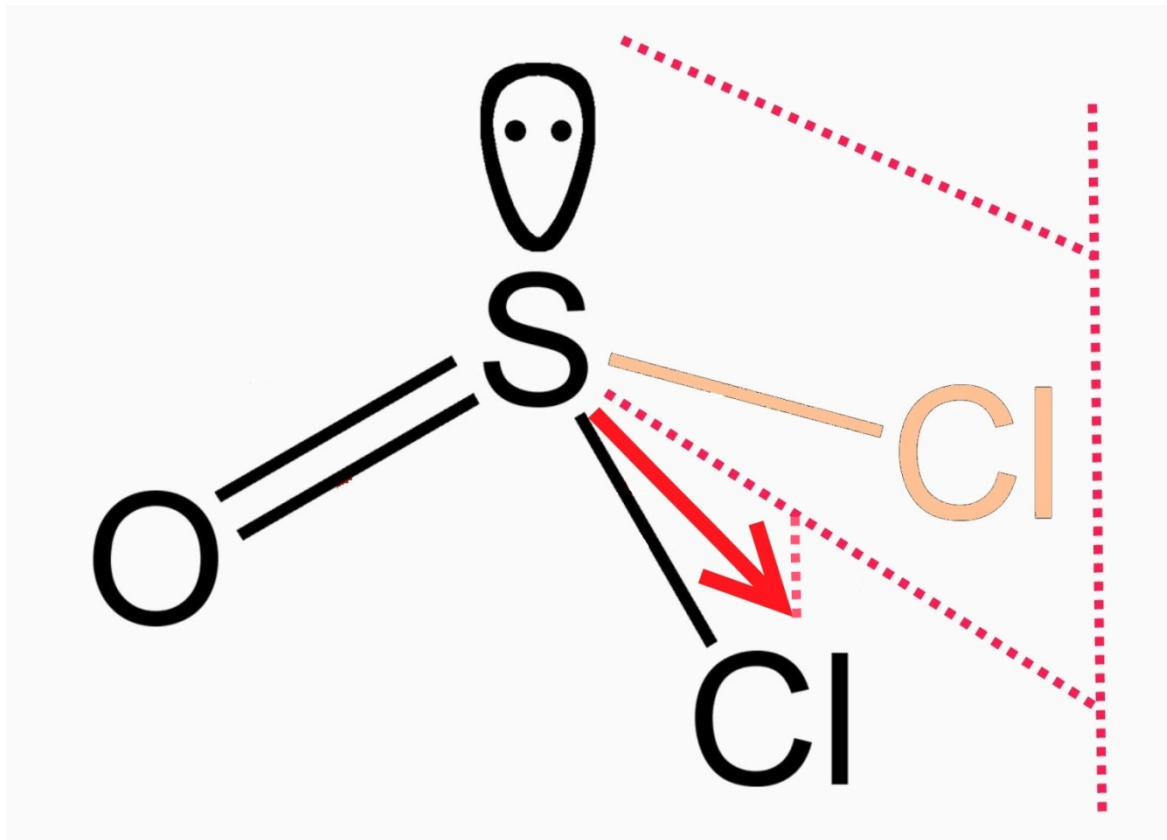
On es troba el **vector moment dipolar**?

La molècula presenta un **pla de simetria**: el vector moment dipolar s'ha de trobar dins d'aquest pla.



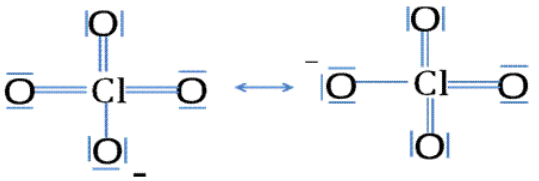
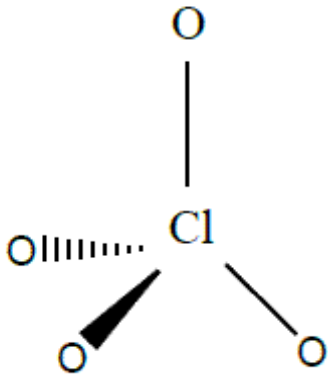
Moment dipolar

On es troba el **vector moment dipolar**?



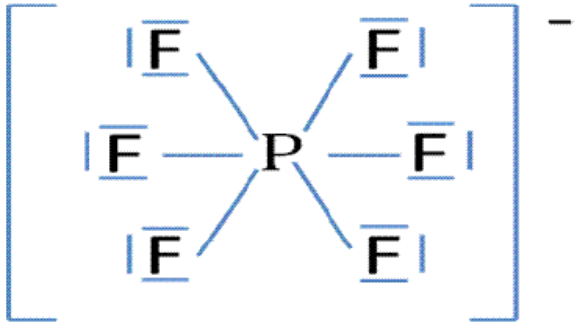
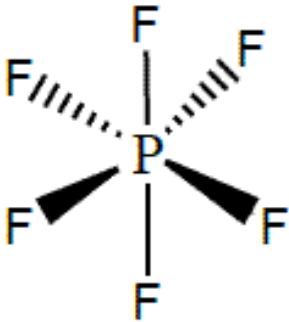
R-3) (10 punts) Resoleu l'estructura de Lewis i determineu la geometria de les 3 molècules o ions que estan indicats a la taula. Esmenteu i raoneu breument si la molècula o ió serà o no polar i per què.

Dades: Número dels electrons de valència: O(6), F(7), P(5), Cl(7), Se(6).

ClO_4^-		
<p>Dibuix estructura Lewis: 16 parells d'electrons</p>  <p>+ 2 estructures ressonants més.</p>	<p>Dibuix geometria</p> 	<p>Nom geometria:</p> <p>Tetraèdrica</p> <p>És polar? Per què?</p> <p>No, perquè és un tetraedre perfecte amb tots els vèrtexs iguals.</p>

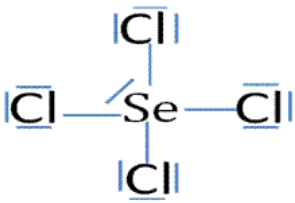
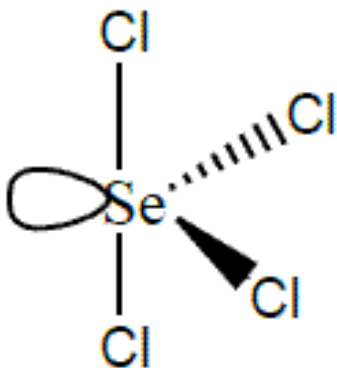
R-3) (10 punts) Resoleu l'estructura de Lewis i determineu la geometria de les 3 molècules o ions que estan indicats a la taula. Esmenteu i raoneu breument si la molècula o ió serà o no polar i per què.

Dades: Número dels electrons de valència: O(6), F(7), P(5), Cl(7), Se(6).

PF_6^-		
<p>Dibuix estructura Lewis</p> 	<p>Dibuix geometria</p> 	<p>Nom geometria: Octaèdrica</p> <p>És polar? Per què? No, perquè és un Octaedre perfecte amb tots els vèrtexs iguals.</p>

R-3) (10 punts) Resoleu l'estructura de Lewis i determineu la geometria de les 3 molècules o ions que estan indicats a la taula. Esmenteu i raoneu breument si la molècula o ió serà o no polar i per què.

Dades: Número dels electrons de valència: O(6), F(7), P(5), Cl(7), Se(6).

SeCl_4		
<p>Dibuix estructura Lewis: 17 parells d'electrons.</p> 	<p>Dibuix geometria</p> 	<p>Nom geometria: Forma de cella/ Forma de balanci/ Tetraedre distorsionat. És polar? Per què? Sí, és polar perquè no hi ha simetria de càrregues ja que falta un dels vèrtexs de la bipiràmide triangular.</p>

NOM i COGNOMS **GG** **GM** **DNI**

2) (10 punts) A l'hora d'analitzar un producte d'origen natural, és necessari dissoldre'l en un dissolvent fluorat polar. En el laboratori disposeu de dos dissolvents fluorats: SF_2 i SF_6 . A través de les estructures de *Lewis* i de la geometria electrònica i molecular de les molècules de dissolvent, predigieu raonadament quin o quins d'aquests dissolvents podreu fer servir.

Dades: $Z(\text{S})=16$; $Z(\text{F})=9$

Podrem fer servir aquells dissolvents formats per molècules polars

$Z_{\text{S}} = 16$; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$; $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$; 6 electrons de valència

$Z_{\text{F}} = 9$; $1s^2 2s^2 2p^5$; $[\text{He}] 2s^2 2p^5$; 7 electrons de valència

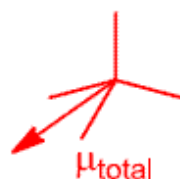
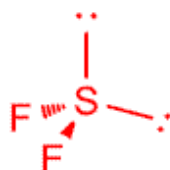
SF_2 : $(1 \times 6) + (2 \times 7) = 20$ electrons de valència a la molècula

Estructura de *Lewis*: $\text{F} \text{---} \text{S} \text{---} \text{F}$

VSEPR: Geometria electrònica: tetraèdrica

Geometria molecular: angular

Molècula Polar



NOM i COGNOMS **GG** **GM** **DNI**

2) (10 punts) A l'hora d'analitzar un producte d'origen natural, és necessari dissoldre'l en un dissolvent fluorat polar. En el laboratori disposeu de dos dissolvents fluorats: SF_2 i SF_6 . A través de les estructures de *Lewis* i de la geometria electrònica i molecular de les molècules de dissolvent, predigieu raonadament quin o quins d'aquests dissolvents podreu fer servir.

Dades: $Z(\text{S})=16$; $Z(\text{F})=9$

Podrem fer servir aquells dissolvents formats per molècules polars

SF_2 : molècula polar

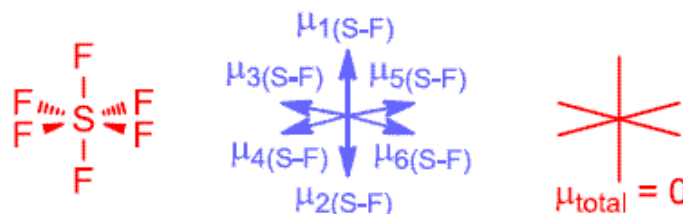
$Z_{\text{S}} = 16$; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$; $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$; 6 electrons de valència

$Z_{\text{F}} = 9$; $1s^2 2s^2 2p^5$; $[\text{He}] 2s^2 2p^5$; 7 electrons de valència

SF_6 : $(1 \times 6) + (6 \times 7) = 48$ electrons de valència a la molècula



VSEPR: Geometria electrònica: octaèdrica
Geometria molecular: octaèdrica
Molècula Apolar



Podrem fer servir només el SF_2