

# ENLLAÇ QUÍMIC

Química 2n Batx

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

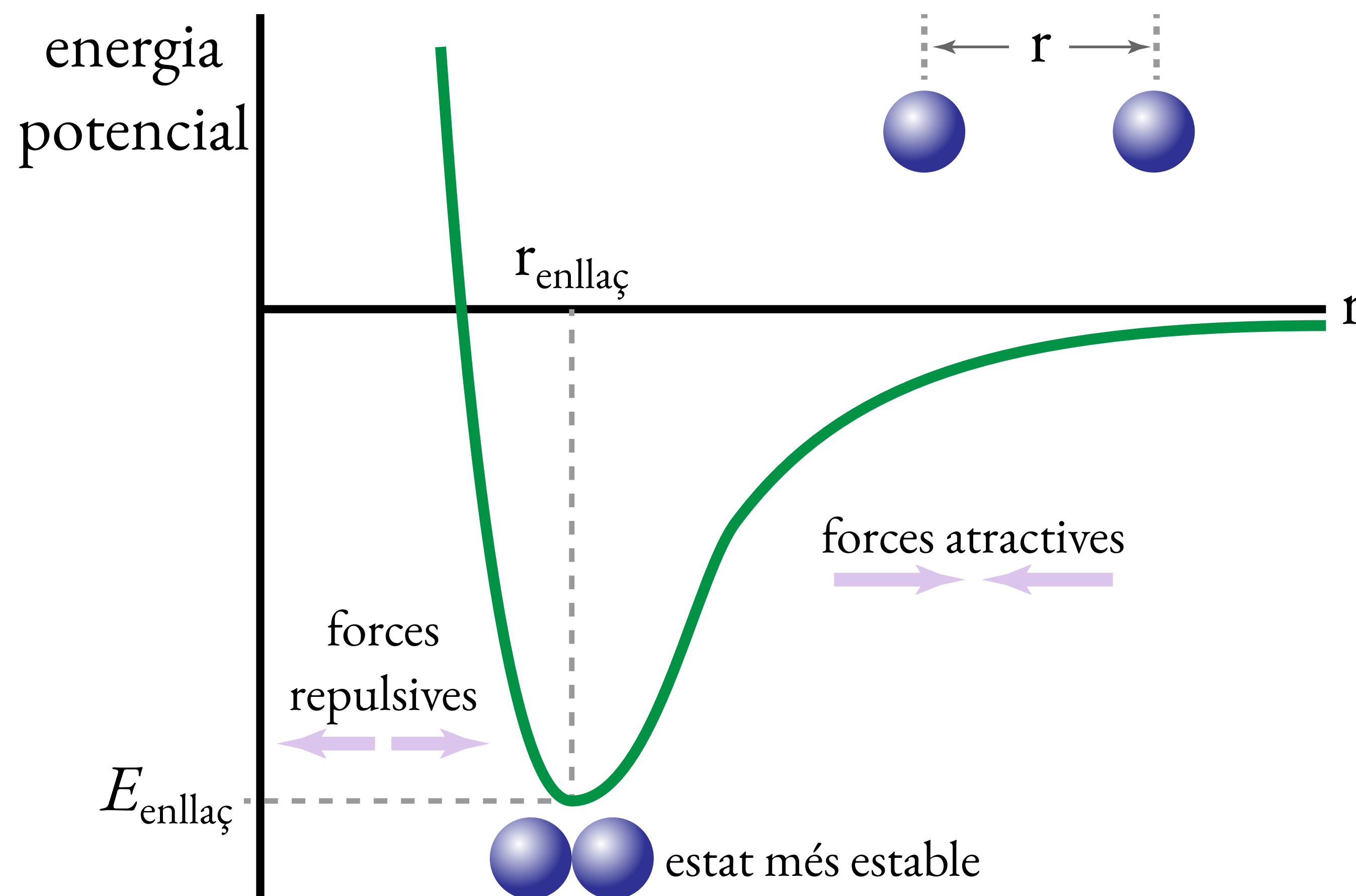


## Regla de l'octet

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.

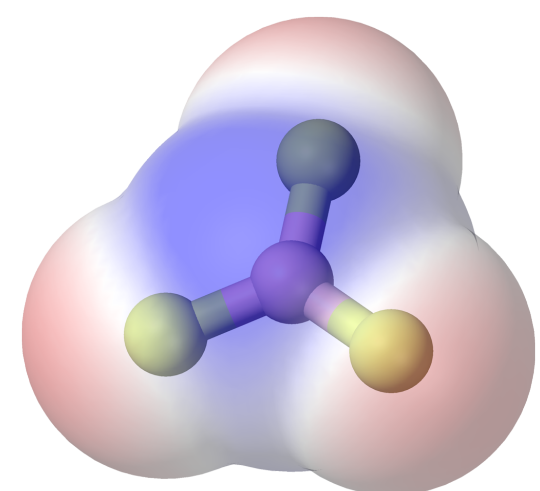
**Longitud d'enllaç** Distància mitjana entre els nuclis de dos àtoms enllaçats.

**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.



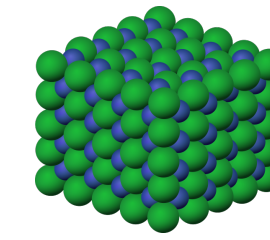
La molècula de  $\text{BF}_3$  té tres enllaços polars però degut a la seva geometria trigonal plana el moment dipolar resultant és nul.  
Font: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boron-trifluoride-elpot-3D-vdW.png>.

## 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).

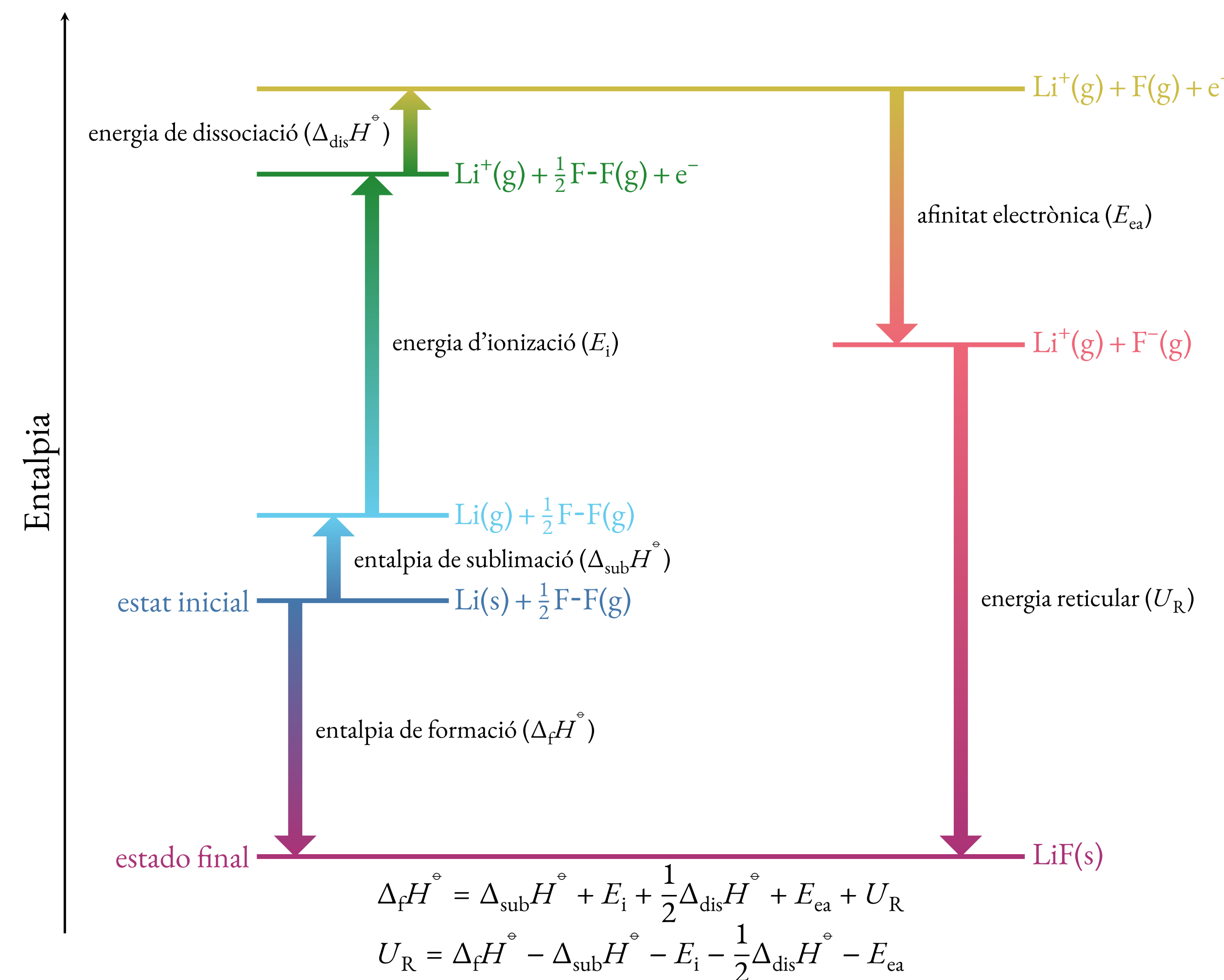
Els composts iònics formen **xarxes cristal·lines** compactes i **neutres** amb diferents geometries en funció del tipus d'ions que les formen.



**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](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).

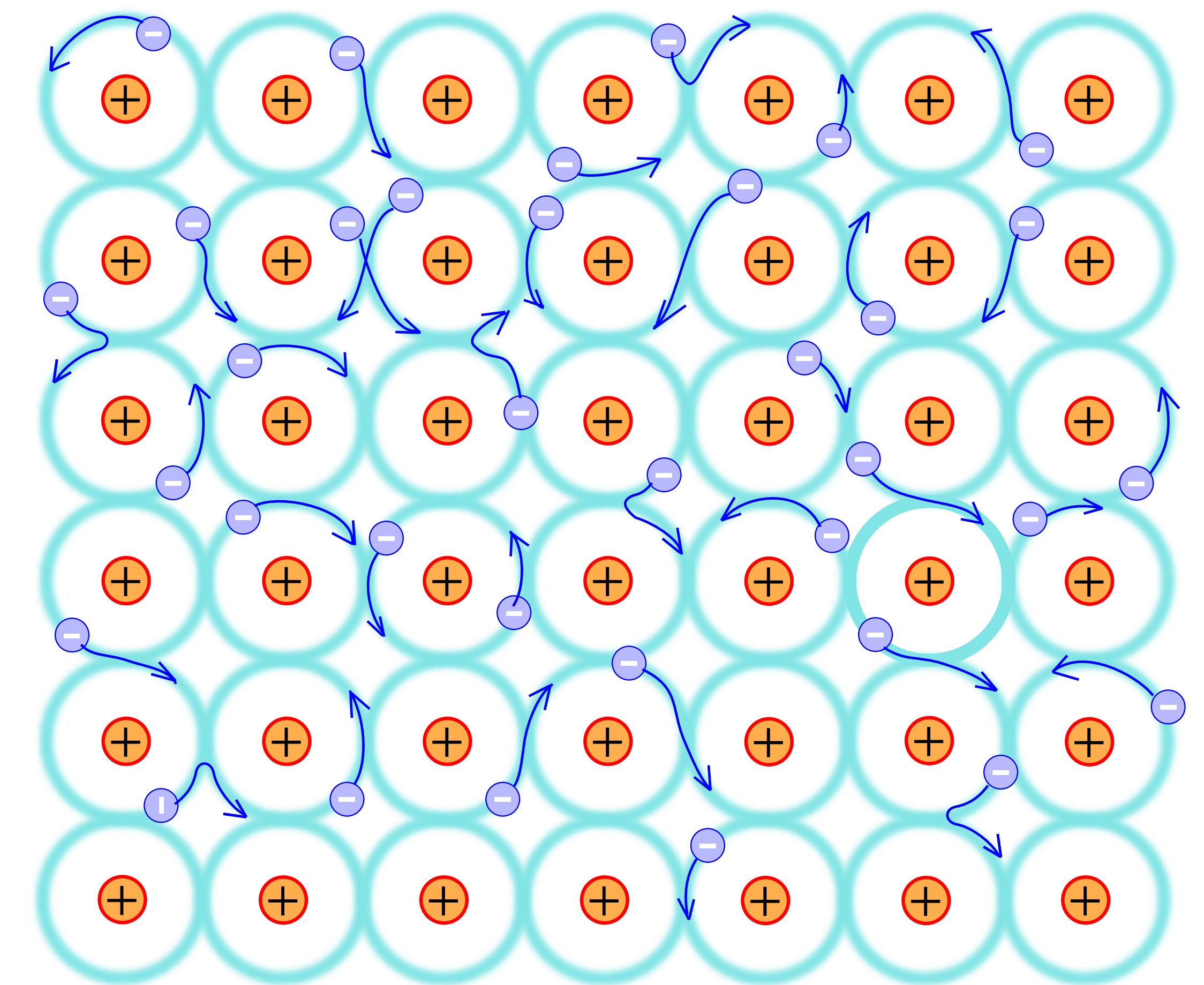
## Propietats de les substàncies iòniques

- 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

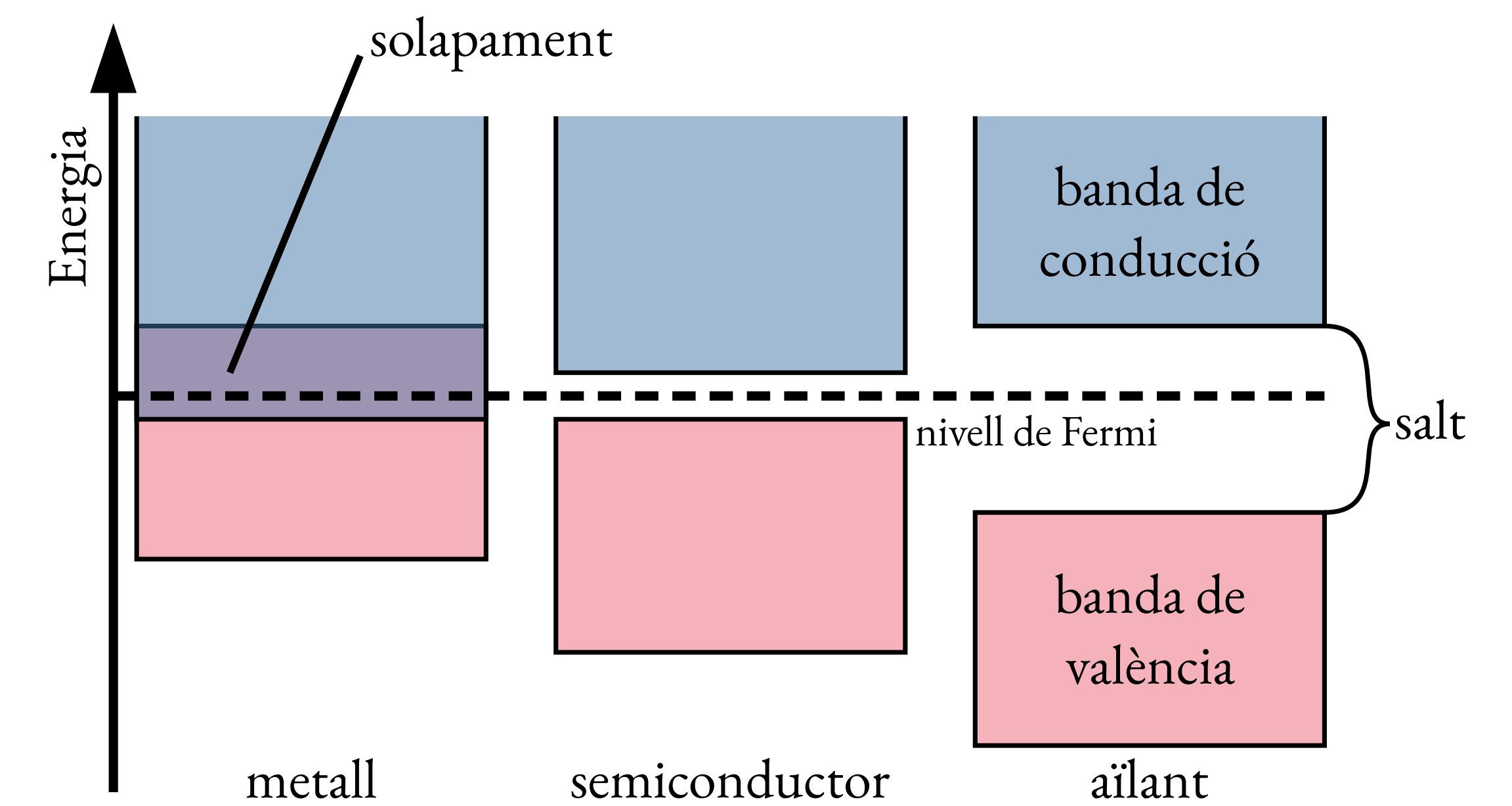
L'**enllaç metàl·lic** és l'enllaç químic que **manté units** els **àtoms** d'un **metall** entre sí. Sorgeix de l'**atracció electrostàtica** entre els **electrons** de conducció i els **cations** metàl·lics.

**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](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metallic_bond_model.svg).

## Teoria de bandes

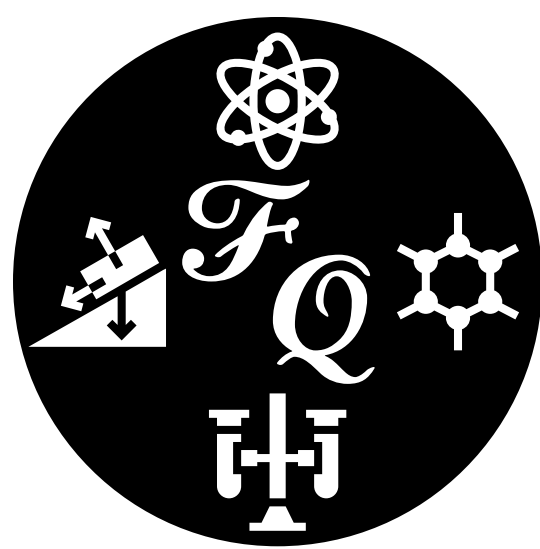


Comparació de l'**estructura de bandes** electròniques d'un **metall**, un **semiconductor** i un **aïllant**.  
Traduïda i adaptada de <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg>.

## Propietats de las susbtàncies 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

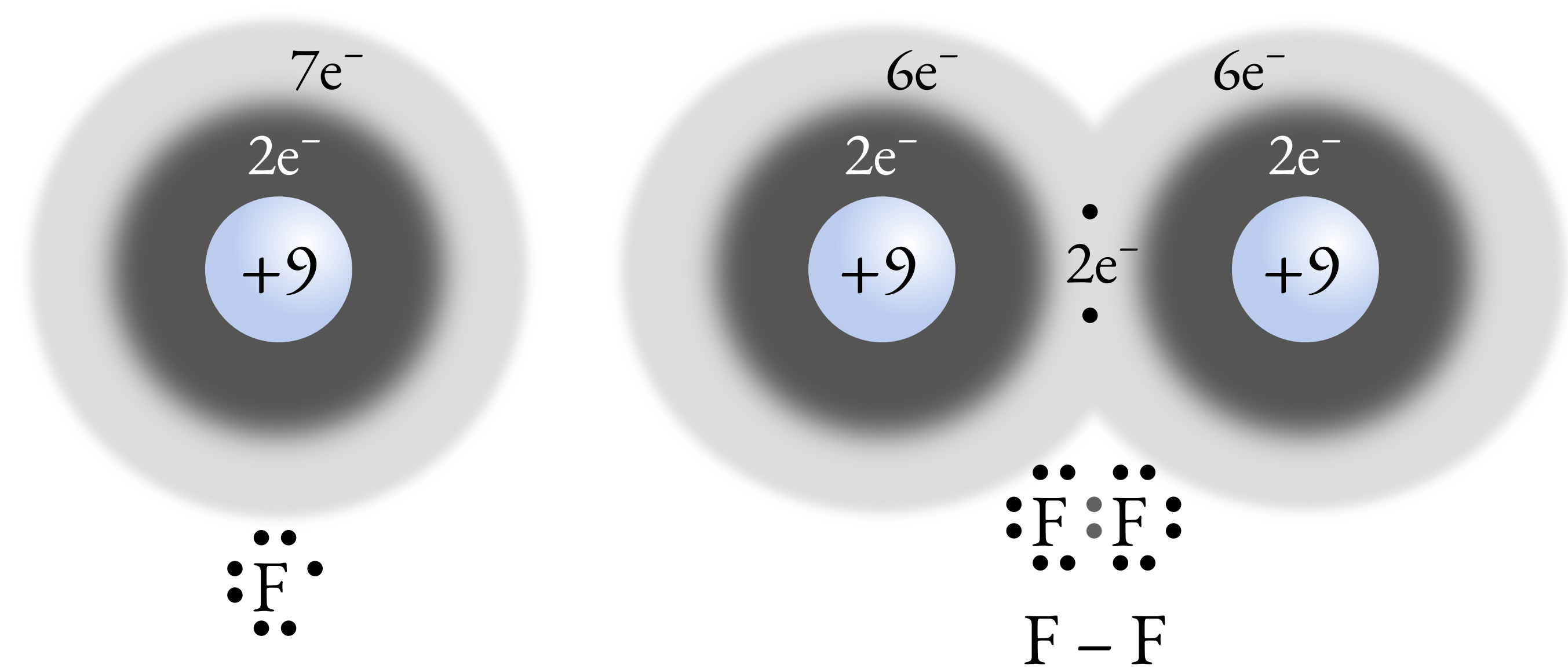
Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦 @ocolomar)



### 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).

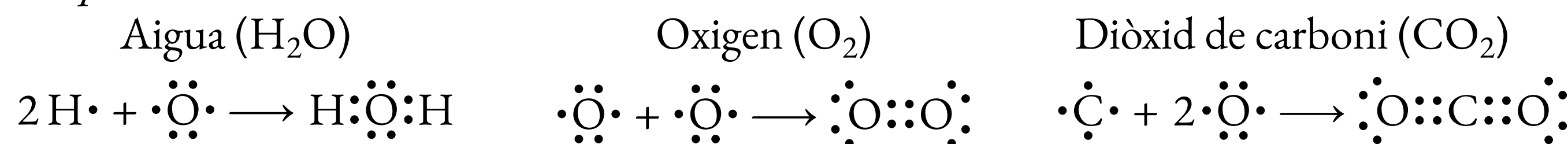


Representació de l'**unió covalent** entre dos àtoms de **fluor** (F) per formar F<sub>2</sub>, amb un parell d'electrons compartit. Adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent\\_bond\\_fluorine.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent_bond_fluorine.svg).

### Estructures de Lewis

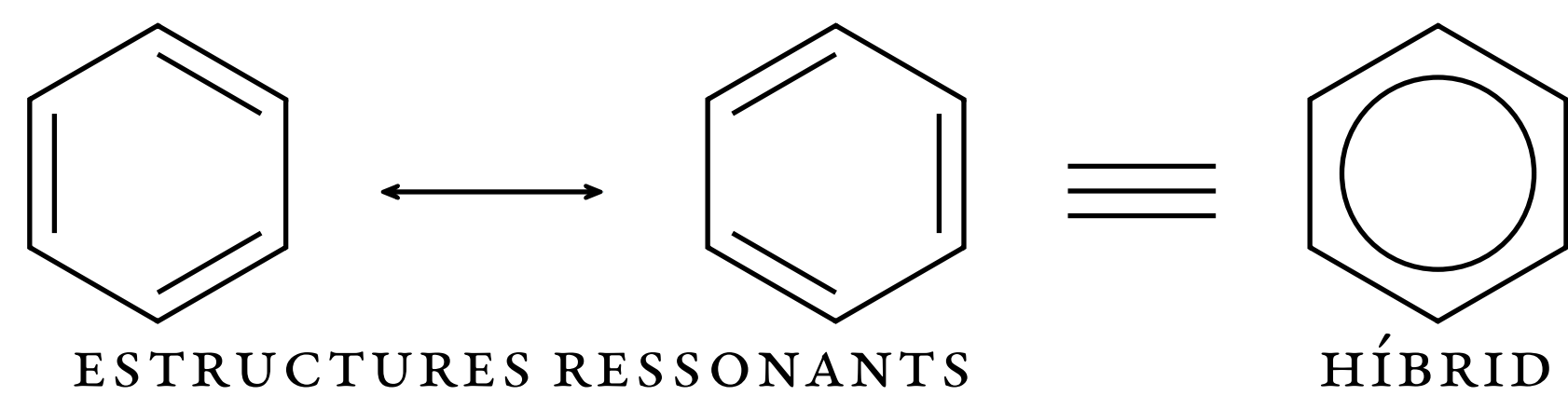
Es tracta de **diagrames** que **mostren** la **unió** entre els **àtoms** d'una **molècula** i els **parells solitaris d'electrons** que poden existir en la molècula.

#### 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.

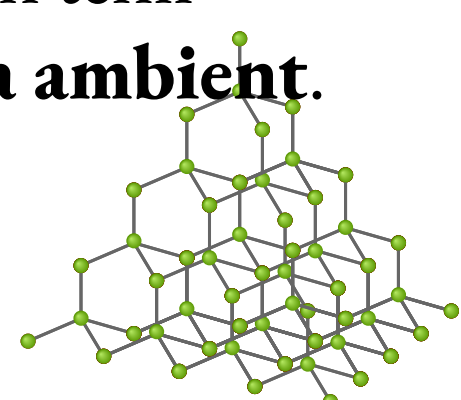
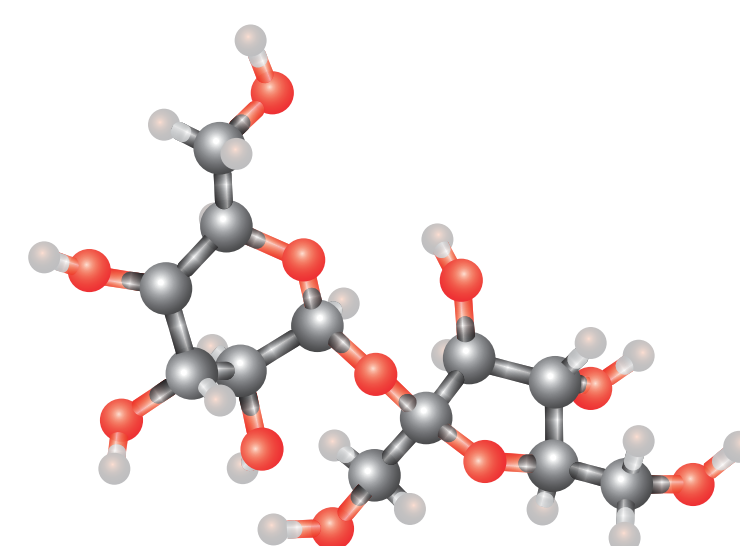


### Propietats de les substàncies covalents moleculars

- 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<sup>-</sup> compartits es troben a una zona de **SOLAPAMENT ORBITAL**:

SOLAPAMENT	ENLLAÇ	ORBITALS	
Frontal (orbitals enfrontats)	$\sigma$ (senzill)	s + s	s + p      p + p
Lateral (orbitals paral·lels)	$\pi$ (múltiple)	p + p	

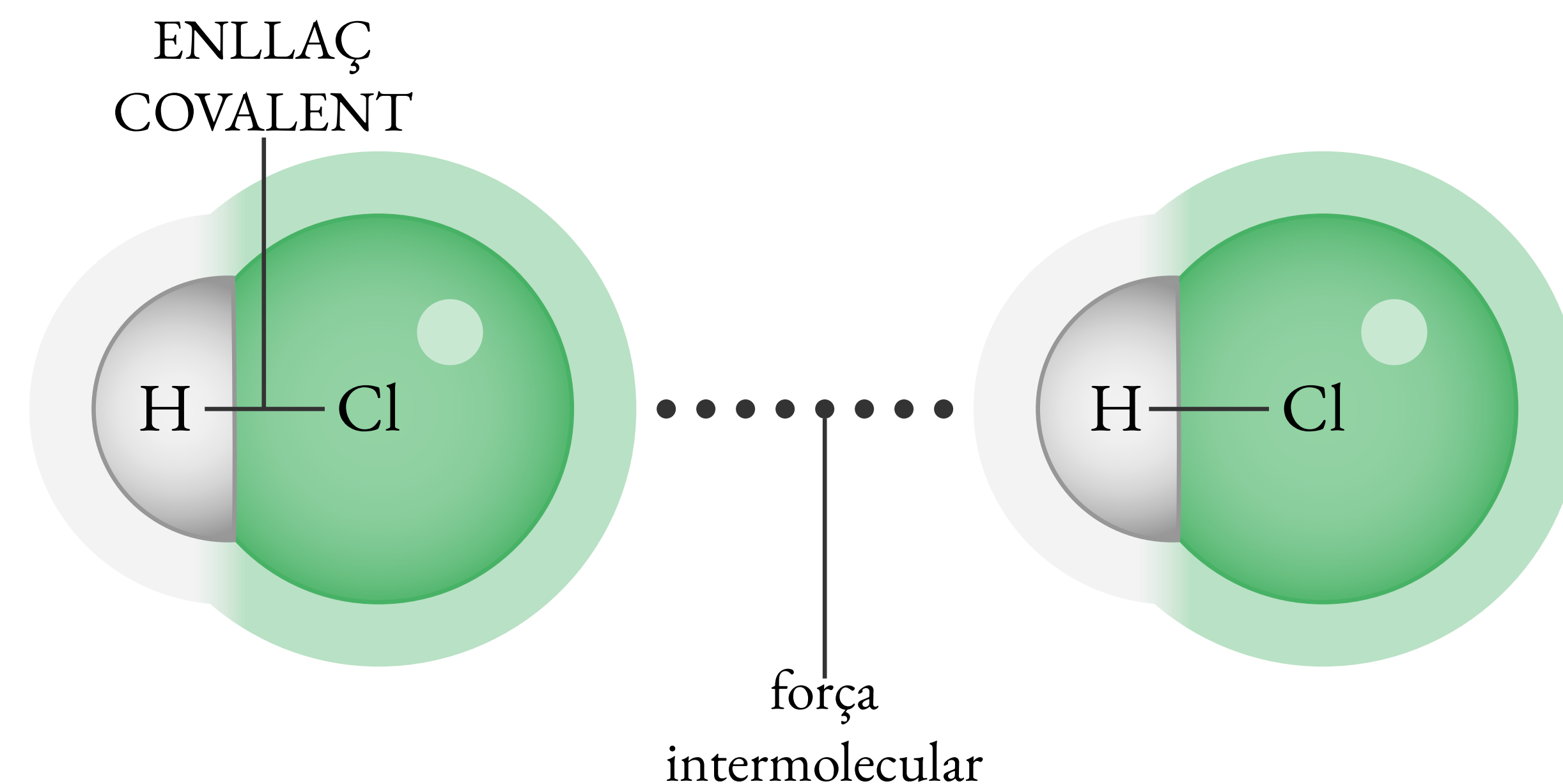
La **HIBRIDACIÓ** consisteix en combinar orbitals atòmics de l'àtom central per formar **ORBITALS HÍBRIDS** energèticament iguals i orientats en la direcció de l'enllaç.

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

### Forces intermoleculars

Les **forces intermoleculars** són les **forces** que existien **entre** les **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/>.

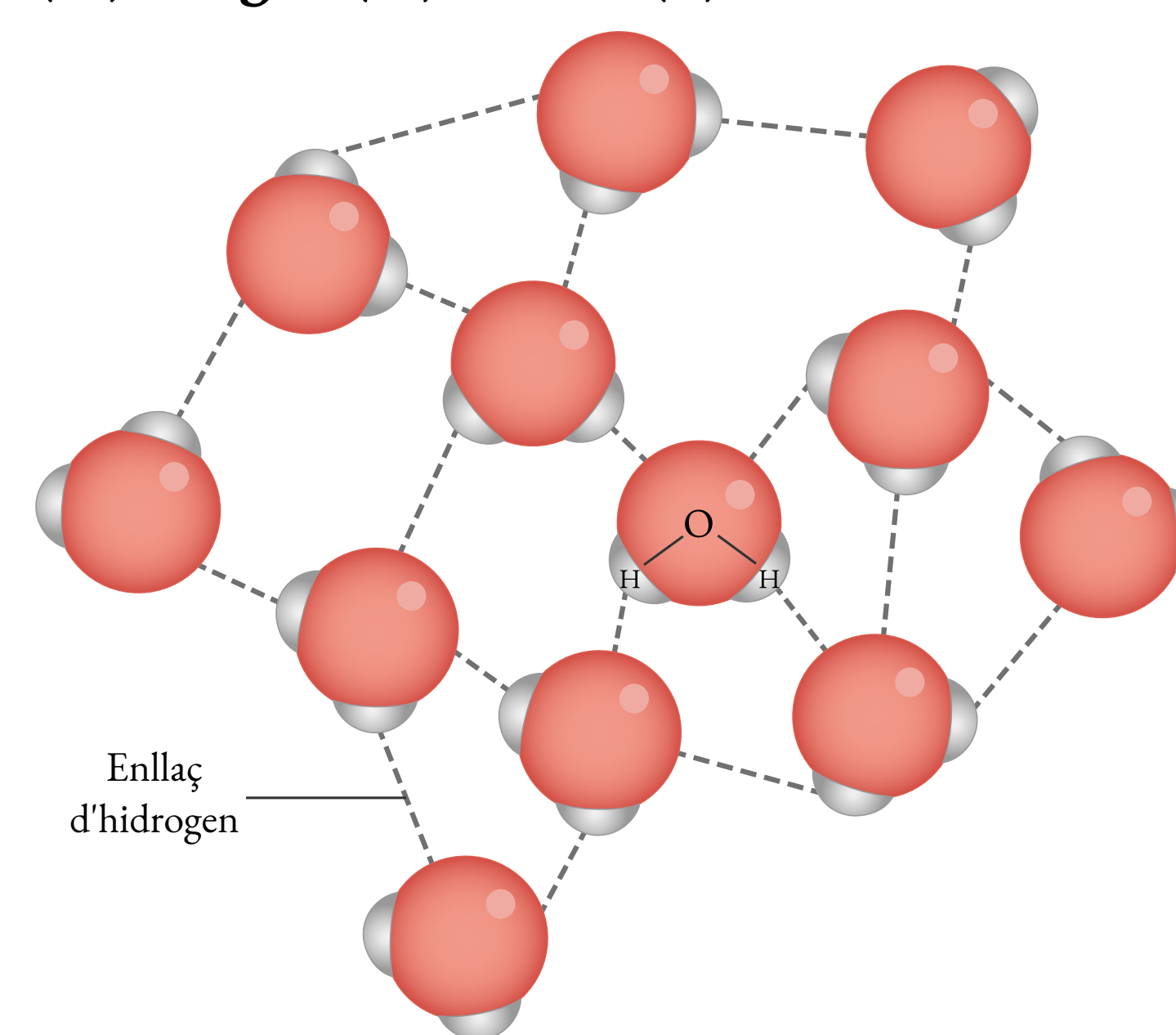
Es poden donar entre **molècules polars** (dipol-dipol, més fortes com més gran sigui la polaritat de la molècula), i **apolars** (anomenades **forces de dispersió de London**, més fortes com més grans i massives són les molècules involucrades).

#### 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** (H<sub>2</sub>O) 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** (H<sub>2</sub>O). 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 <sub>2</sub> 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