

L'ENLLAÇ QUÍMIC

L'**enllaç químic** es defineix com la unió entre àtoms, que poden ser del mateix element o d'elements diferents, en la qual intervenen forces elèctriques entre el nucli i els electrons dels àtoms que hi participen.

L'enllaç químic es dona per criteri merament energètic; tot procés natural tendeix a cercar l'energia mínima i una de les formes d'apropar-se l'assoliment d'aquest objectiu és la unió atòmica. L'explicació és molt simple: els àtoms tenen una quantitat energètica més elevada quan estan per separat que no pas quan es troben a una distància més pròxima (**distància d'enllaç o longitud d'enllaç**).

En la formació d'un enllaç químic s'allibera una quantitat d'energia (**energia d'enllaç**) que coincideix amb l'energia necessària per trencar-los.

D'enllaços químics n'hi ha de **tipus** diversos:

1. Enllaç iònic

L'**enllaç iònic** és l'enllaç que es crea per l'atracció electrostàtica (*atracció que es dona entre càrregues de diferent signe*) entre ions de signe contrari.

Perquè s'estableixi un enllaç iònic entre àtoms de dos elements, **cal que els dos àtoms tinguin electronegativitats molt diferents**, és a dir, és necessari que un dels àtoms no tingui gaire tendència a guanyar electrons i l'altre la tingui molt elevada. Aquesta és la raó per la qual els enllaços iònics es **donen entre metalls i no metalls**.

L'enllaç iònic **requereix la cessió completa d'electrons d'un àtom a un altre**, tot i que no existeix l'enllaç totalment pur entre dos àtoms. Qualitativament, **un enllaç serà més iònic**:

- ✚ Com més electrònicament estables siguin els seus ions una vegada s'han intercanviat el o els electrons.
- ✚ Com més petites siguin les càrregues dels ions que formen l'enllaç.
- ✚ Com més gran sigui el catió (ió positiu) i més petit l'anió (ió negatiu).

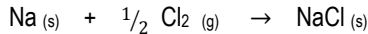
Manca tenir clar que **no hem d'imaginar els compostos iònics** (*compostos els àtoms dels quals s'enllacen a través d'aquest tipus d'enllaç*) **com estructures moleculars sinó com cristalls iònics** (també coneguts amb els noms *d'estructures gegants* o *xarxes cristal·lines iòniques*).

L'elevada atracció electrostàtica entre els ions i la seva ordenació en estructures gegants o cristalls iònics, fa dels compostos iònics unes substàncies de **propietats** bastant definides:

- Són **sòlids** (en la seva majoria) **a temperatura ambient**.
- Tenen **punt de fusió i ebullició alts** donada la gran quantitat d'energia necessària per vèncer les forces electrostàtiques que uneixen els seus àtoms i trencar la seva estructura cristal·lina.
- **Capacitat conductora del corrent elèctric quan es troben fosos o dissolts** ja que els ions tenen la propietat de moure's per l'aplicació d'un camp elèctric. Quan els ions estan en estat sòlid trobem una evident impossibilitat en la conducció del corrent elèctric ja que aquest estan immòbils.
- **Solubilitat en dissolvents polars** (*substàncies amb una distribució asimètrica de la neu electrònica que fa que la molècula presenti un pol positiu i un altre de negatiu separats per una certa distància*).
Quan introduïm un compost iònic en un dissolvent polar, com a conseqüència de l'atracció electrostàtica entre càrregues elèctriques de signe oposat, es produeix una interacció entre els ions i els dipols (partícules amb doble càrrega elèctrica) de les molècules de dissolvent. Si la interacció és prou forta, les molècules de dissolvent poden aconseguir arrencar els ions de l'estructura gegant i provocar-ne el trencament. Llavors, cada ió queda envoltat de molècules de dissolvent [solvatació (o hidrogenació en el cas que el dissolvent sigui l'aigua)] i el compost iònic és dissolt. Posteriorment, es formen enllaços entre cadascun d'aquests ions i les molècules de dissolvent.
- **Duresa** (*resistència a ésser ratllat*) **elevada** degut a l'elevada compactació de la seva estructura. Com més fort és l'enllaç que uneix els seus àtoms més elevada és la duresa que presenta.
- **Fragilitat** (*poca resistència a no ésser fracturat*) **elevada** donada la distorsió de l'empaquetatge del cristall i les repulsions produïdes entre ions de la mateixa càrrega que condueixen al trencament del cristall iònic després d'haver patit l'actuació d'una força externa.

El **canvi energètic produït en la formació d'un sòlid iònic** a partir dels elements que el constitueixen, pot calcular-se a partir d'anomenat **cicle de Born-Haber**.

Per veure-ho clar posarem l'exemple de la formació de clorur de sodi a partir de sodi i clor en estat gasos:

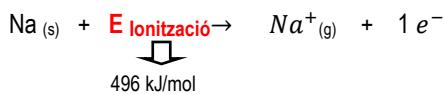


Aquesta reacció té lloc en diversos passos:

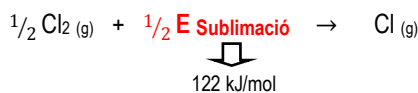
1. El sodi metàl·lic sòlid ha de separar els seus àtoms entre si. Per a això serà necessària l'aportació de l'energia de sublimació del sodi:



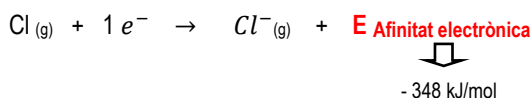
2. Al sodi gas se li haurà d'arrencar un electró per a transformar-lo en un ió positiu. Per a dur a terme aquest procés serà necessària l'aportació de l'energia de ionització del sodi:



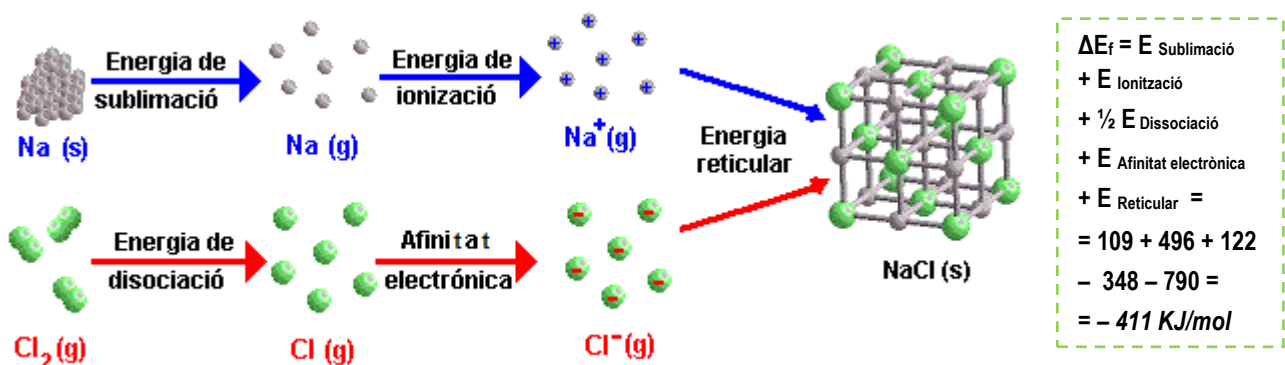
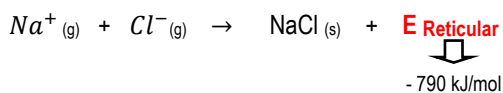
3. El clor (no metall) haurà de trencar la seva molècula ja que és diatòmic. Per a això hem d'aportar la meitat de l'energia de dissociació, ja que per cada molècula que es trenca obtenim dos àtoms de Clor. Per lo tant, només s'haurà de dissociar mig mol de molècules de clor per obtenir un mol d'àtoms de clor:



4. Posteriorment, haurem d'aportar un electró a cada àtom de clor per a transformar-lo en un ió negatiu i aconseguir una quantitat energètica inferior a la que té quan està en forma d'àtom neutre. Per a això haurem d'aportar l'energia de l'afinitat electrònica (en aquest cas s'ha d'aportar però també podem trobar casos en que s'hagi de desprendre):



5. L'energia despresa encara no supera la subministrada. Hem de preveure que els ions, que es troben en estat gasos, s'atrauen per forces electrostàtiques i esdevenen sòlids cristal·lins d'estructura perfectament ordenada. Per a que els ions en estat gasós passin a formar part de l'estructura cristal·lina que he comentat anteriorment és necessari que es desprengui energia. Aquesta energia és la que coneixem com **energia reticular**.



2. Enllaç covalent

L'*enllaç covalent* consisteix en la unió de dos o més àtoms mitjançant electrons compartits i es dona quan la diferència d'electronegativitat entre els àtoms que volen unir-se per criteri energètic (per tal de perdre energia) és 0 o molt propera a 0. **Es dona, doncs, entre els àtoms d'elements no metàl·lics.** En aquest tipus d'enllaç, un parell d'electrons (un de cada àtom) es concentren entre els dos nuclis dels àtoms que s'enllacen, de manera que la densitat de càrrega negativa creada per ells mateixos manté units els dos nuclis positius. Aquests dos electrons passen a ser atrets pels dos nuclis alhora i acaben pertanyent a tots dos àtoms a la vegada. De l'atracció amb la qual els nuclis atòmics atreuen els electrons dependrà la polaritat de l'enllaç:

- Dos **àtoms del mateix element no metàl·lic** tindran electronegativitats idèntiques i atrauran els electrons amb la mateixa intensitat. L'enllaç que els uneixi serà, doncs, apolar.
- En el cas que siguin **àtoms d'elements no metàl·lics diferents** els que comparteixin electrons, ens trobarem en una situació de desigualtat en quant a la intensitat amb que cada àtom atrau els electrons cap a si, la qual ve determinada pel valor d'electronegativitat assignat a l'element al qual pertanyen dits àtoms. La diferència d'electronegativitats entre aquests àtoms no serà prou gran com perquè hi hagi una transferència real d'electrons com passava als compostos iònics però sí prou forta com perquè hi hagi una atracció desigual d'electrons que impliqui càrregues parcials positives (δ^+) i negatives (δ^-) dels enllaços que uneixen aquests àtoms.

Cal remarcar que no és el mateix parlar de polaritat de l'enllaç que de polaritat de la molècula resultant:

- **Una molècula serà polar quan:**

- ✓ Tingui un **moment dipolar** diferent a 0.

$$\vec{\mu} = Q \cdot \vec{d}$$

Càrrega que s'hagi creat [C (Colum)] Distància que separa el àtoms. [m (metre)]

IMPORTANT!

Malgrat que la unitat amb la que el SI expressa moment dipolar és el **C · m**, els químics fan servir tot sovint el **Debye (D)**, que equival a $3 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$.

- ✓ El centre geomètric de càrregues positives i negatives no coincideixi.

- **Una molècula serà apolar quan:**

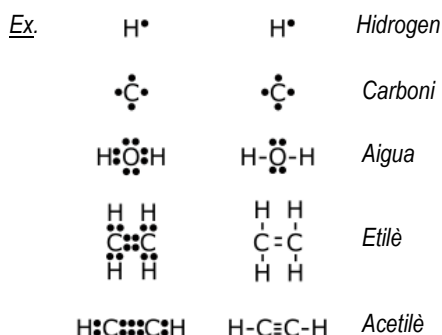
- ✓ Tingui un moment dipolar igual a 0.
- ✓ Quan hi hagi coincidència en el centre geomètric de càrregues positives i negatives.

Cal dir que, de tota manera, **l'enllaç covalent és un enllaç fort.**

El 1916 un químic nord-americà va explicar la formació de l'enllaç covalent a través de l'estructura electrònica dels seus àtoms. Va fixar-se en que tots els gasos nobles (a excepció de l'Heli) tenien 8 electrons a l'últim nivell energètic. Això el va fer arribar a la conclusió de que, si tenint vuit electrons al nivell de valència (últim nivell energètic) els gasos nobles esdevenien tant estables, els àtoms de diferents elements podrien assolir la mateixa configuració electrònica que la d'un gas noble, compartint amb altres àtoms els electrons necessaris per tenir-ne vuit al darrer nivell energètic, i aconseguir així l'estabilitat característica d'aquests elements. Per aquest motiu la **teoria proposada per Lewis** (*així és com es cognomenava el científic*) segueix la **regla de l'octet**.

Les **estructures de Lewis** són representacions de molècules on podem veure els vuit electrons que han d'arribar a omplir-se per aconseguir l'estabilitat del gas noble més proper.

- Els guionets representen els electrons compartits (una parella).
- Els punts representen els electrons de valència (de l'últim nivell energètic ocupat) no compartits.



Les estructures de Lewis són útils per establir una distribució dels parells electrònics a les molècules però no donen informació sobre la seva possible geometria. Un model simple però útil per racionalitzar l'estructura molecular d'un compost és el conegut amb l'acrònim **VSERP (Valence Shell Electronic Pair Repulsion)** o en la seva traducció catalana **RPECV (Repulsió entre Parells d'Electrons de València)**. Aquest model és vàlid per als compostos formats per àtoms dels blocs s i p però no pas per als elements de transició.

El model assumeix com a base que cada parell d'electrons de capa de valència (tant siguin d'enllaç o solitaris) té associat un domini espacial en el que existeix una altra probabilitat de trobar-los. La geometria molecular vindrà determinada per aquella posició d'aquest parell d'electrons que minimitzi les repulsions entre els dominis assignats a cadascun d'ells.

En el model VSERV se solen emprar les següents lletres per representar els compostos:

- A (àtom central).
- X (àtoms enllaçats).
- E (parells d'electrons solitaris associats a l'àtom central).

Per predir la geometria d'una molècula es procedeix de la següent forma:

1. S'escriu l'estructura de Lewis, de la qual es dedueix en nombre de parell d'electrons presents en l'àtom central, ja siguin solitaris o d'enllaç. Els enllaços dobles contenen com senzills.
2. Es distribueixen els parells d'electrons espacialment de forma que es minimitzin les repulsions. Quan els parells solitaris poden situar-se en més d'una posició, se situen allà on més redueixin les repulsions.

Cal recordar, si més no, que tots els parells d'electrons dels àtoms centrals, siguin o no d'enllaç, es distribueixen en l'espai però, això no obstant, només la distribució dels àtoms perifèrics descriu la geometria molecular.

Tot seguit (en una pàgina) mostraré la geometria que presenten, per norma general, les molècules. Abans d'això, però, veig necessària l'aportació d'una idea a que s'ha de tenir en compte: les molècules, a la realitat, no presenten estructures tant regulars com les que veurem a la pàgina següent a causa de tres factors:

1. Coexistència de parells d'electrons enllaçants (pe) i no enllaçants (ps)

Un parell d'electrons no enllaçants està sotmès a la Z^* del seu propi nucli mentre que un parell d'electrons enllaçants no està als dos nuclis als que enllaça i, per tant, està fortament localitzat a una regió internuclear. És lògic pensar que donat que el domini espacial d'un parell d'electrons solitaris està més deslocalitzat, ocuparà un volum major que un parell d'electrons enllaçants. La conseqüència immediata és que les repulsions generades pels parells d'electrons no enllaçants i els parells d'electrons enllaçants no són equivalents:

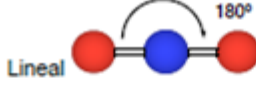
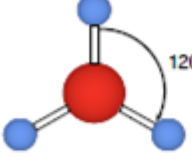
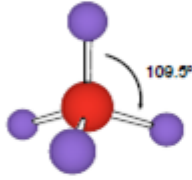
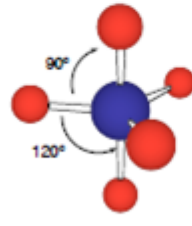
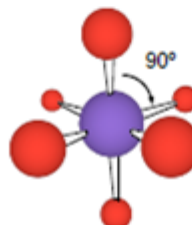
$$R(\text{ps} - \text{ps}) > R(\text{ps} - \text{pe}) > R(\text{pe} - \text{pe})$$

2. Coexistència diferents (i amb diferent electronegativitat)

La presència de diversos àtoms perifèrics dins d'una molècula (MX_3Y) introdueix distorsions respecte la geometria ideal. Comparem les molècules MX_3 i MY_3 on X i Y són àtoms perifèrics de diferents electronegativitats. Si X és més electronegatiu que Y, atraurà més eficaçment els electrons del parell enllaçant, facilitant que l'angle XMX sigui més tancat que el YMY .

3. Presència d'enllaços múltiples.

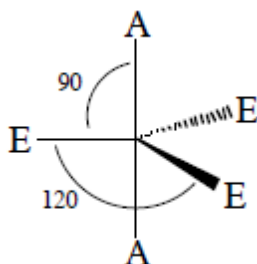
La coexistència d'enllaços simples i múltiples en una mateixa molècula origina una certa asimetria en les repulsions sempre que estiguin deslocalitzats. Un enllaç múltiple suposa una major densitat electrònica en la regió interatòmica, cosa que porta a majors repulsions electrostàtiques que les que pugui originar un de senzill.

PS+PE	Distribució	Fórmula Molecular	Geometria Molecular	Exemples
2	Lineal 	AX_2	Lineal	BeH_2
3	Triangle quilater 	AX_3 AX_2E	Trigonal Plana Angular	$BCl_3, AlCl_3$ $SnCl_2$
4	Tetraedre 	AX_4 AX_3E AX_2E_2 AXE_3	Tetraédrica Piràmide Trigonal Angular Angular	$CH_4, SiCl_4$ NH_3, PCl_3 H_2O, SCl_2 HF
5	Bipiràmide Trigonal 	AX_5 AX_4E AX_3E_2 AX_2E_3	Bipiràmide Trigonal Disferoidal Forma de T Lineal	PCl_5, AsF_5 SF_4 ClF_3 XeF_2
6	Octaèdre 	AX_6 AX_5E AX_4E_2	Octaédrica Piràmide base quadrada Quadrada plana	SF_6 BrF_5 XeF_2

Fins ara hem considerat les molècules en les que l'àtom central era en element del segon període i no podia ampliar el seu octet (podia fer un màxim de 4 enllaços) però els elements de períodes successius tenen la possibilitat d'ampliar l'octet i, per tant, hem de considerar la distribució de 5, 6 o més parells electrònics:

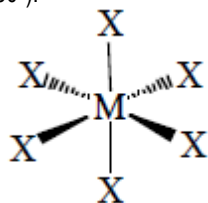
A. 5 parells d'electrons

El poliedre ideal en el cas de distribuir 5 parells d'electrons al voltant del seu àtom central és la **piràmide trigonal**:



B. 6 parells d'electrons

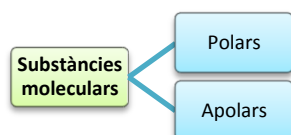
La distribució ideal és l'octaèdrica. En un octaedre totes les posicions són equivalents (els angles són tots iguals i valen 90°).



Podem fer una classificació dels compostos units mitjançant enllaç covalent segons siguin substàncies moleculars o atòmiques.

A. Substàncies moleculars

Les substàncies moleculars estan formades per **molècules unides entre elles mitjançant forces intermoleculars** (interaccions que experimenten entre elles les molècules d'una substància) **febles**.



Tenen unes característiques molt concretes:

- Tenen **punts de fusió i ebullició baixos** a causa de la poca intensitat de les forces intermoleculars que uneixen les seves molècules (generalment). Això fa que la gran majoria siguin líquids a temperatura ambient, tot i que també n'hi ha que es troben en estat líquid o inclús sòlid.
- **Són tous** (poden rallar-se amb facilitat i no presenten gaire resistència mecànica) ja que per ratllar-los només cal vèncer les forces intermoleculars, que són febles.
- **No són bons conductors de la calor ni del corrent elèctric** donat que a la seva estructura no hi ha electrons lliures.
- Les que són polars es dissolen en dissolvents apolars o poc polars i les que no ho són (les que són apolars), en dissolvents polars.

B. Substàncies atòmiques

Les substàncies atòmiques són sòlids **constituïts per àtoms units mitjançant enllaços covalents molt forts formant una xarxa tridimensional**. Que s'anomenin substàncies atòmiques no implica que estiguin formades per un únic tipus d'àtom.

Per regla general compleixen amb les **característiques** següents:

- Presenten **punts de fusió molt elevats**.
- Són **molt durs** (presenten una gran resistència a ser ratllades).
- En tenir els electrons dels seus àtoms en posicions fixes, **no resulten conductores de la calor i el corrent elèctric**.
- Són **pràcticament insolubles en qualsevol tipus de dissolvent**.

Les tres substàncies més significatives d'aquest grup són el diòxid de silici (la sílice), el diamant i el grafit.

2. Enllaç metàl·lic

L'enllaç metàl·lic **consisteix en la unió entre àtoms d'elements metàl·lics tot compartint els electrons de l'últim nivell energètic.**

- ✓ Els elements metàl·lics tenen electronegativitats baixes, així que es poden transformar en ions positius sense necessitat d'adquirir o emetre molta energia.
- ✓ L'existència d'orbitals buits a l'últim nivell energètic fa que els electrons cedits per cada àtom es puguin moure lliurement al voltant de tots els ions positius dels àtoms del metall, actuant de nexes entre ells i formant el que s'anomena núvol electrònic.
- ✓ Aquest tipus d'enllaç **es forma fonamentalment entre metalls alcalins, alcalinoterris i elements de transició o metalls de transició.**

Els metalls constitueixen quasi el 75% dels elements coneguts i presenten unes propietats que els diferencien de la resta:

- Tenen **densitats elevades**.
- Presenten **punts de fusió moderats o alts**.
- Són **pràcticament insolubles en qualsevol tipus de dissolvent** a causa de les seves elevades energies reticulars (energia requerida per a separar completament un d'un compost iònic en els seus ions gasosos)
- Són **dúctils** (es poden deformar fins a convertir-se en fils).
- Són **mal·leables** (poden desglossar-se en làmines)
- Són **bons conductors del corrent elèctric** a causa de la presència d'electrons lliures en forma de núvol electrònic.
- Són **bons conductors de la calor** donada la capacitat de vibració i la mobilitat electrònica.
- Presenten una **lluïent característica**.

Fins ara hem vist quins enllaços possibiliten les unions atòmiques però manca estudiar les forces que, en el cas de compostos covalents, permeten la unió entre les molècules que els formen.

Aquestes forces s'anomenen **forces intermoleculares** i són de naturalesa electrostàtica però molt més febles que les forces d'enllaç que mantenen units els àtoms. N'hi ha dos tipus principals:

1. Forces de Van der Waals

Les *forces de Van der Waals* donen nom a qualsevol tipus d'interacció electrostàtica entre dues molècules, les quals poden ser polars o apolars:

A. Molècules polars

Les molècules polars són aquelles que posseeixen una part carregada positivament i una carregada de forma negativa tot constituint el que anomenem **dipol elèctric**, que és un dipol permanent.

Els **factors que determinen la polaritat d'una molècula** són:

- L'*electronegativitat dels àtoms que la componen*.
- La geometria angular de la molècula.

Les forces de Van der Waals que les uneixen són força dèbils en comparació amb les dels enllaços iònics o covalents.

B. Molècules apolars

Hi ha molècules apolars presents en tots els estats d'agregació (sòlid, líquid i gasós), cosa que evidencia el fet que hagi d'haver algun tipus d'interacció entre elles.

Es pensa que les forces que uneixen els àtoms aïllats i les molècules apolars tenen el seu origen en la interacció entre els extrems de càrrega oposada de **dipols instantanis** que es generen per la distribució asimètrica de la carga elèctrica causada per un previ moviment dels electrons. **Els dipols instantanis poden canviar o desaparèixer en qualsevol moment a conseqüència del moviment electrònic.**

En la gran majoria dels àtoms aquests tipus de forces de Van der Waals són **molt febles** tot i que aquest fet resulta molt relatiu ja que la força que uneix dipols instantanis augmentarà amb la mida dels àtoms i de les molècules (aquesta força anirà en augment com més gran sigui la massa molecular). Donada la feblesa d'aquestes forces, hi ha països on no les consideren de Van der Waals sinó de London i passen a anomenar-les **Forces de London**.

2. Enllaç d'hidrogen

L'enllaç d'hidrogen o pont d'hidrogen es produeix entre molècules que contenen àtoms d'hidrogen units mitjançant enllaç covalent a un altre àtom molt electronegatiu i de mida petita.

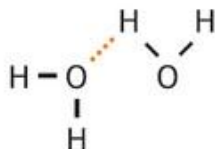
- ✓ És un enllaç de naturalesa electrostàtica.
- ✓ És més fort que el corresponent a altres dipols a causa de:
 1. La gran diferència d'electronegativitat entre l'hidrogen i la resta d'elements periòdics.
 2. La mida petita dels àtoms implicats (+ concentració de càrrega / + aproximació).
- ✓ La seva representació acostuma a fer-se mitjançant una línia discontinua de punts que uneix l'hidrogen d'una molècula amb l'àtom electronegatiu de l'un altre lloc.

IMPORTANT!

Només es creen punts d'hidrogen entre:

- (a) Fluor i Hidrogen.
- (b) Oxigen i Hidrogen.
- (c) Nitrogen i Hidrogen.

Ex.



IMPORTANT!

Un cop assimilat tot això manca saber diferenciar el que és un enllaç del que és una força intermolecular:

- Un **enllaç** és una força intramolecular, és a dir, aquella força que actua en la unió entre els àtoms que formen una molècula.
- Una **força intermolecular** és aquella que s'encarrega de mantenir unides les diverses molècules que formen un compost químic.