

UNITAT 3: L'ENLLAÇ QUÍMIC

ENLLAÇ QUÍMIC: és la força que manté units àtoms, ions.. i pot descriure's en funció dels canvis energètics que tenen lloc en aproximar-se dos àtoms. Es formarà l'enllaç si a determinada distància entre ells existeix un mínim d'energia potencial (augment d'estabilitat).

Teoria de Lewis (octet electrònic): els àtoms adquireixen estabilitat en l'enllaç quan arriben a la configuració de gas noble (ns^2np^6). Segons la configuració de l'últim nivell (de valència) es determina el tipus d'enllaç.

ENLLAÇ IÒNIC

Definició: es dona entre un element metàl·lic i un altre no metàl·lic, el metall cedeix un electró (o electrons) al no metall, obtenint-se els corresponents catió i anió, que es mantenen units per forces d'atracció electrostàtiques. Formen xarxes cristal·lines. Factors que afavoreixen la formació:

- Diferència d'electronegativitat dels àtoms
- Càrrega xicoteta dels ions formats
- Catió gran i anió xicotet

Paràmetres de l'enllaç iònic:

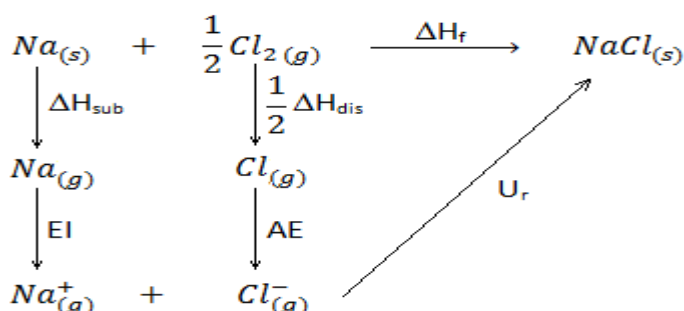
- Índex de coordinació (IC): nre. de ions d'un signe que envolten a un del signe contrari
- Energia reticular (U_R): Energia que s'allibera en formar-se un cristall iònic a partir dels ions en estat gasós. Quan més estable siga el compost format, major seran les forces d'atracció entre els ions del compost i major serà l'energia alliberada.
- Energia de formació del cristall (ΔH_f): inclou tota l'energia involucrada en els diferents processos que han de tenir lloc per a formar el cristall a partir dels elements constituents. $\Delta H_f \longrightarrow$ **Entalpia de sublimació + Entalpia de dissociació + EI + AE + U_R**

Xarxes iòniques: el cristall està format per cel·les unitat que es repeteixen indefinidament al llarg de les tres direccions de l'espai.

- El nombre de càrregues positives i negatives han de ser iguals.
- Els ions d'un signe que envolten a un de l'altre signe es disposen simètricament per tal que la repulsió siga mínima entre els ions del mateix signe.
- Els ions es disposen de la forma més compacta possible.

- La relació entre la grandària dels ions positius i la dels ions negatius, determina que s'adopte una configuració o una altra.

Cicle de Born-Haber: plantejament teòric que mostra totes les energies implicades en la formació d'un cristall iònic. (E. sublimació del metall, E. dissociació, EI, AE, ΔH_f). Amb aquest mètode es calcula l'energia alliberada en la formació d'un compost iònic a través d'un cicle termodinàmic.



Propietats dels compostos iònics:

- A T^a ambient són sòlids que formen xarxes cristal·lines.
- Els punts de fusió i ebullició són elevats.
- Són durs i fràgils.
- Són solubles en dissolvents polars com l'aigua.
- La conductivitat elèctrica és nul·la en estat natural.

ENLLAÇ METÀL·LIC

Definició: Es descriu com un enllaç deslocalitzat entre els centres positius (cations) i els electrons de valència compartits per una gran quantitat d'àtoms metàl·lics. Els metalls, en general, tenen pocs electrons en la capa de valència i s'agrupen de forma molt compacta.

Teoria del núvol electrònic: Suposa que tots els àtoms del metall estan ionitzats per la pèrdua dels electrons de valència. Es forma una xarxa de cations i un gas d'electrons o núvol electrònic, que no pertany a cap àtom en concret i pot desplaçar-se lliurement. La força d'atracció nucli-electró de valència es nul·la i així s'explica la gran conductivitat elèctrica i tèrmica dels metalls.

Teoria de les bandes d'energia. És una teoria que es basa en la idea dels orbitals atòmics de cada àtom compartit formant un orbital molecular gegant. Els electrons dels enllaços estan situats en els orbitals que es formen a partir dels orbitals atòmics. Es

considera tot el metall com una molècula gegant, i s'obtenen els orbitals moleculars deslocalitzats per a tot el metall.

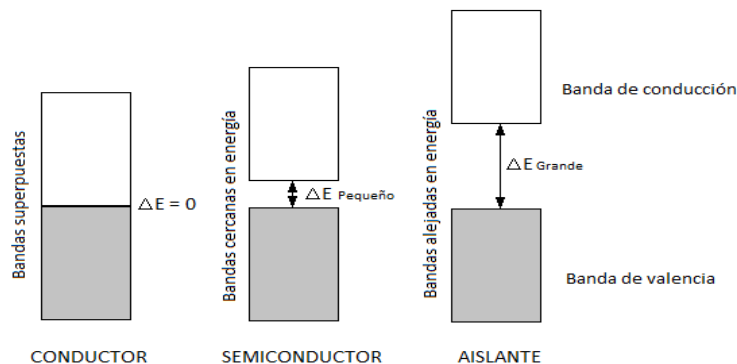
A cada orbital comú li correspon una energia determinada i es representa en funció de l'energia creixent. Entre ells es crea una banda d'energia. Hi ha tres tipus de bandes:

- Bandes ocupades: totalment ocupades pels electrons que no es mouen del seu interior.
- Bandes de valència: on estan els electrons de valència. Poden estar plenes o parcialment plenes.
- Bandes de conducció: està buida o parcialment buida. Facilita la conducció ja que els electrons de valència poden botar a ella i moure's amb llibertat.

En els metalls hi ha conducció per què les bandes de valència es poden superposar i els electrons poden moure's amb total llibertat.

En els semiconductors no es superposen però la diferència d'energia entre elles es xicoteta, i amb un lleuger augment de temperatura els electrons poden promocionar a la banda de conducció.

En els aïllants la distància entre les bandes de valència i de conducció és molt gran, resultant "impossible" la circulació d'electrons.



Propietats dels compostos metàl·lics:

- A T^a ambient són sòlids (tret del mercuri) que formen xarxes metàl·liques.
- Els punts de fusió i ebullició són elevats.
- Gran deformabilitat. Són dúctils i mal·leables.
- La conductivitat elèctrica i tèrmica elevada.
- Tenen una densitat elevada.
- Presenten efecte fotoelèctric (emissió d'electrons al incidir una radiació).