

# QUÍMICA GENERAL I

Curs 2019\_2020

Grup D

Prof. Ismael Navarro Fuertes

[isnafuer@uv.es](mailto:isnafuer@uv.es)

Departament de Química Orgànica

Facultat de Química



# QUÍMICA GENERAL I

**Tema 1.** INTRODUCCIÓ. Formulació inorgànica

**Tema 2.** ESTRUCTURA ATÒMICA

**Tema 3.** ÀTOMS POLIELECTRÒNICS I PROPIETATS PERIÒDIQUES

**Tema 4.** ENLLAÇ QUÍMIC I

**Tema 5.** ENLLAÇ QUÍMIC II. Formulació química orgànica

**Tema 6.** ESTRUCTURA I ENLLAÇ. COMPORTAMENT QUÍMIC ÀCID-BASE

**Tema 7.** SUBSTÀNCIES MOLECULARS

**Tema 8.** SÒLIDS NO MOLECULARS

# QUÍMICA GENERAL I

## Característiques generals de l'assignatura

- ✓ **L'assignatura Química general I** és una assignatura troncal que s'imparteix en el primer curs del títol de grau en Química durant el primer quadrimestre. En el pla d'estudis consta d'un total de 6 crèdits ECTS.
- ✓ **Junt amb Química general II** (assignatura troncal de primer curs i que s'imparteix durant el segon quadrimestre), es pretén, essencialment, que l'estudiant aprofundisca en aquells coneixements de química que ha anat adquirint en els cursos de batxillerat i que, en determinats aspectes, els complete.
- ✓ D'aquesta manera, s'establiran els fonaments imprescindibles perquè pugui abordar posteriorment amb èxit l'estudi **de les distintes branques que conformen la disciplina**.
- ✓ En concret, en aquesta assignatura s'abordaran, a banda d'elements bàsics com **la nomenclatura, la formulació i l'estequiometria**, tots els aspectes relacionats amb la descripció de la matèria, com l'estructura atòmica i les propietats periòdiques, l'estructura molecular i l'enllaç químic, els estats d'agregació, els distints tipus de sòlids i de grups funcionals orgànics.

## **Coneixements bàsics**

- **Utilitzar la taula periòdica.** Conèixer els símbols dels elements químics, els blocs i els grups de la taula periòdica.
- **Relacionar la posició en la taula periòdica, el nombre atòmic d'un element i la configuració electrònica dels elements.**
- **Anomenar i formular compostos inorgànics senzills:** binaris (de l'hidrogen, de l'oxigen, de no-metalls amb metalls i de no-metalls entre si, combinacions pseudobinàries (hidròxids i cianurs), compostos ternaris (oxàcids i oxosals) i quaternaris (oxosals àcides).
- **Anomenar i formular compostos orgànics senzills:** amb una i dues funcions: hidrocarburs (alcans, alquens, alquins i aromàtics), derivats halogenats, compostos amb oxigen (alcohols, èters, aldehids, cetones, àcids i èsters), amb sofre (tiols i tioèters), amb nitrogen (amines, nitrils, amides i derivats nitrats) i compostos halogenats.
- **Distingir entre fórmula empírica, fórmula molecular i fórmula desenvolupada.**
- **Determinar les quantitats de matèria implicades en una reacció química,** bé en fase gas, amb sòlids o líquids, o en dissolució, manejant adequadament els conceptes de puresa, densitat, rendiment, reactiu limitant i reactius en excés, i concentració, així com l'equació d'estat dels gasos ideals i la llei de Dalton de les pressions parcials.
- **Calcular les quantitats necessàries per a preparar una determinada dissolució,** tant si es parteix de substàncies pures com impures, i usar correctament les diverses formes d'expressar la concentració.

### Teories atòmiques i propietats periòdiques

- Conèixer els paràmetres que caracteritzen la radiació electromagnètica i conèixer la hipòtesi de Planck. Racionalitzar la dualitat ona-corpúscle i explicar l'efecte fotoelèctric.
- Saber descriure experiments que posen de manifest la quantització de l'energia.
- Racionalitzar les línies observades en els espectres de l'hidrogen mitjançant el model de Bohr.
- Conèixer la dualitat ona-corpúscle de la matèria i les conseqüències del principi d'incertesa de Heisenberg.
- Interpretar els conceptes de funció d'ona i densitats de probabilitat de trobar un electró.
- Relacionar les possibles combinacions de nombres quàntics amb els nivells, subnivells i orbitals.
- Distingir la part radial i la part angular de les funcions d'ona monoelèctriques. Saber representar-les qualitativament segons els nombres quàntics associats.
- Aplicar els conceptes de poder penetrant d'un orbital, càrrega nuclear efectiva i constant d'apantallament en àtoms polielectrònics.
- Conèixer el nombre quàntic d'espín. Enunciar el principi d'exclusió de Pauli i la regla de la màxima multiplicitat de Hund i aplicar el principi de construcció per a escriure configuracions de mínima energia per a àtoms i ions polielectrònic
- Definir radi covalent, radi de Van der Waals, radi metàl·lic, radi iònic, energia d'ionització, afinitat electrònica i electronegativitat.
- Definir orbital molecular i classificar-los com a enllaçants, antienllaçants o no enllaçants, i com a sigma o pi.
- Dibuixar el diagrama d'orbitals moleculars de molècules diatòmiques d'elements representatius del primer i segon període i obtenir-ne les configuracions electròniques.
- Calcular, a partir d'aquest diagrama, l'ordre d'enllaç i donar una explicació a propietats moleculars com ara les distàncies i les energies d'enllaç o el caràcter diamagnètic o paramagnètic.
- Justificar i predir la variació de les propietats dels elements al llarg de la taula periòdica.

# QUÍMICA GENERAL I

## Objectius generals de l'assignatura

### Enllaç químic I i II

- Conèixer i diferenciar els tipus bàsics d'enllaç.
- Descriure els aspectes bàsics associats a la formació d'enllaços covalents (simples o múltiples): energia d'enllaç, distància d'enllaç, polaritat d'enllaç.
- Dibuixar les estructures de Lewis d'espècies neutres i carregades, inorgàniques i orgàniques, i dilucidar si compleixen o no la regla de l'octet, identificar possibles formes ressonants i decidir, si hi ha diverses estructures possibles, quina és la més raonable mitjançant el càlcul de càrregues formals.
- Predir la geometria molecular mitjançant l'ús del model de repulsió de parells d'electrons de la capa de valència (RPECV).
- Justificar i predir la polaritat de molècules diatòmiques i poliatòmiques, tant inorgàniques com orgàniques.
- Descriure els elements bàsics del model d'enllaç covalent localitzat i el concepte d'orbital híbrid.
- Identificar el tipus d'hibridació en molècules inorgàniques senzilles i en els àtoms de carboni i heteroàtoms de molècules orgàniques.

# QUÍMICA GENERAL I

## Objectius generals de l'assignatura

### Substàncies moleculars (Química orgànica)

- Deduir algunes propietats de molècules orgàniques en funció de l'estructura del grup funcional que continguen.
- Identificar centres àcids i bàsics en un compost molecular.
- Identificar espècies nucleòfiles i electròfiles.
- Identificar les distintes forces intermoleculars (forces dipolars, de dispersió i enllaços d'hidrogen) i descriure'n les característiques.
- Explicar, a partir d'aquestes, propietats o fenòmens d'interès (estats d'agregació, punts de fusió i ebullició, solubilitats, etc.)

# QUÍMICA GENERAL I

## Objectius generals de l'assignatura

### Substàncies no moleculars

- Definir sòlid cristal·lí i sòlid amorf.
- Descriure les forces intermoleculars en els sòlids moleculars i relacionar-les amb l'estructura i les propietats que presenten.
- Descriure les característiques fonamentals dels sòlids covalents, la seua estructura i les seues propietats.
- Identificar tipus de sòlids i predir-ne les propietats basant-se en la naturalesa de les interaccions entre les partícules que constitueixen la xarxa cristal·lina.
- Descriure les característiques fonamentals dels sòlids metàl·lics i les estructures més freqüents, i relacionar-les amb els empaquetaments compactes d'esferes.
- Enunciar les característiques fonamentals del model del mar d'electrons i justificar, a partir d'aquest, les propietats observades dels metalls.
- Explicar els trets bàsics de la teoria de bandes i justificar, a partir d'aquesta, l'existència de conductors, aïllants, semiconductors intrínsecs i extrínsecs, tant de tipus p com n.
- Descriure les característiques fonamentals dels sòlids iònics i relacionar el tipus d'enllaç que posseeixen i la seua estructura amb les propietats que presenten.
- Saber descriure'n les estructures més usuals.
- Definir energia reticular d'una xarxa iònica i relacionar-la amb altres magnituds termodinàmiques mitjançant cicles de Born-Haber.



### Competències transversals

- ✓ **Utilitzant models moleculars, construir l'estructura d'una espècie molecular o iònica.**
- ✓ **Fer un dibuix en perspectiva d'aquesta estructura.**
- ✓ **Descriure de forma correcta:** un gràfic, una taula de valors i una estructura.
- ✓ **Justificar amb arguments racionals fets científics o opinions de manera rigorosa, i redactar de manera adequada.**
- ✓ **Obtindre, analitzar, seleccionar, gestionar, sintetitzar i presentar informació de caràcter científic de manera adequada, utilitzant adequadament les fonts bibliogràfiques i les tecnologies de la informació i la comunicació.**
- ✓ **Relacionar els continguts químics abordats en el curs amb fenòmens de la vida quotidiana o d'interès mediambiental, i ser capaç d'explicar-los.**
- ✓ **Interpretar frases senzilles redactades en anglès sobre els temes estudiats.**

# QUÍMICA GENERAL I

**Tema 1.** INTRODUCCIÓ. Formulació inorgànica

**Tema 2.** ESTRUCTURA ATÒMICA

**Tema 3.** ÀTOMS POLIELECTRÒNICS I PROPIETATS PERIÒDIQUES

**Tema 4.** ENLLAÇ QUÍMIC I

**Tema 5.** ENLLAÇ QUÍMIC II. Formulació química orgànica

**Tema 6.** ESTRUCTURA I ENLLAÇ. COMPORTAMENT QUÍMIC ÀCID-BASE

**Tema 7.** SUBSTÀNCIES MOLECULARS

**Tema 8.** SÒLIDS NO MOLECULARS

# QUÍMICA GENERAL I

## Classes presencials

Les classes constaran de les corresponents

**introduccions**  
**teòriques**

als apartats dels temes proposats en la guia docent.

Al llarg de les classes anirem **resolent problemes clau** per a assolir els conceptes d'una col·lecció proposada. La resta quedaran per a la pràctica personal de l'alumnat.

Al principi de cadascun dels temes es proporcionaran els **capítols o apartats de la bibliografia** que corresponga.

La gent que **vulga eixir a resoldre problemes** pot fer-ho.

L'actitud i la participació

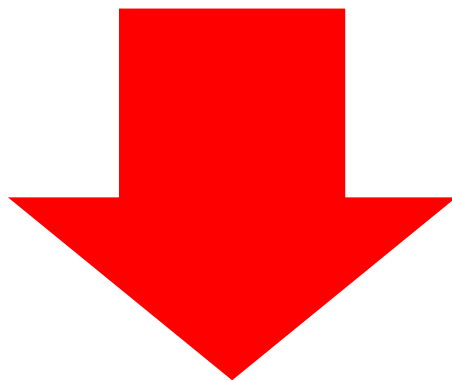
**es valorarà**

**positivament** en la

qualificació final. Addicionalment **eixireu de tant en tant** a resoldre problemes a la pissarra.

# QUÍMICA GENERAL I

Classes presencials



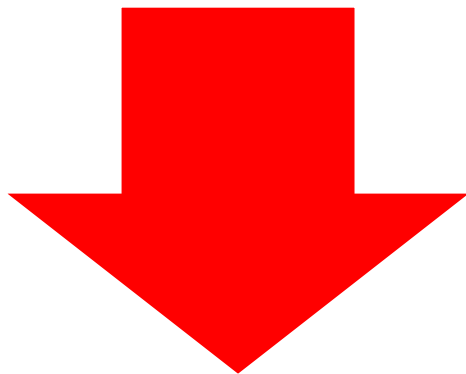
**Podeu interrompre** la classe  
per a aclarar qualsevol  
dubte que tingueu...

**No podeu** interrompre  
**amb la vostra actitud.**  
Sobretot per respecte als  
companys que sí que  
atenen...



# QUÍMICA GENERAL I

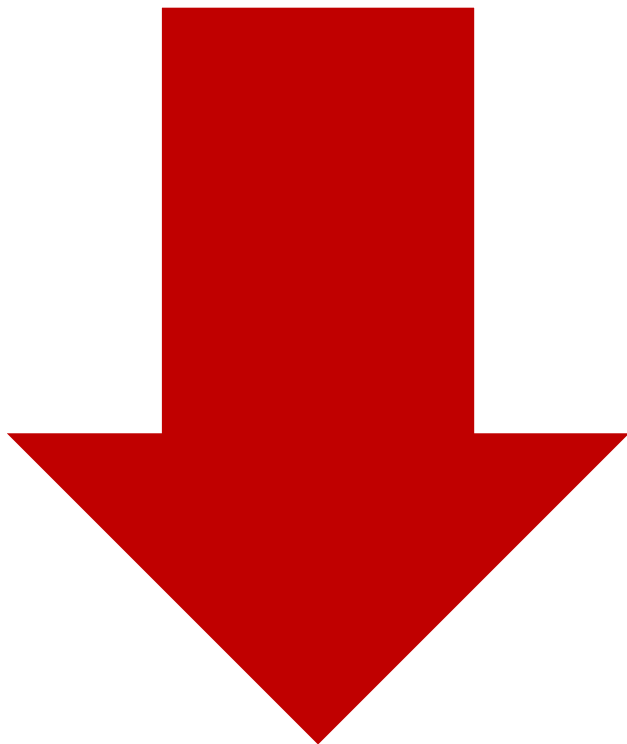
Classes presencials



És imprescindible  
disposar **d'una taula  
periòdica** dels  
elements en qualsevol  
format amb les dades  
claus dels pesos  
atòmics, etc.

No necessiteu  
el mòbil ni el  
portàtil per a  
res.





**Està  
terminantment  
prohibit gravar o  
fer fotos de les  
classes presencials.**

# QUÍMICA GENERAL I

## Tutories reglades

Es treballaran  
**qüestions curtes**  
**relacionades**  
amb el tema del qual  
**hem estat parlant en**  
les sessions prèvies.

Podeu **utilitzar el**  
**material** que tingueu  
**de classe o**  
**bibliogràfic**  
que vulgueu.  
**Jo estaré a la classe**  
per a ajudar-vos o  
solucionar dubtes.

**Avaluaré el resultat**  
per a tindre una nota  
vostra. Sobretot per a la  
gent que **ha agafat**  
**l'opció de les**  
**tutories amb**  
**qualificació del**  
**15 %.**



# QUÍMICA GENERAL I

Tutories NO reglades

Tinc hores  
programades per a  
poder quedar amb  
vosaltres i resoldre  
**qüestions**  
**relacionades**  
amb el tema que hem  
tractat.

**És altament**  
**recomanable** que  
porteu el temari al dia.  
L'experiència ens diu  
que **les presses**  
**d'última hora** no  
porten a cap resultat bo  
en l'examen...

# QUÍMICA GENERAL I

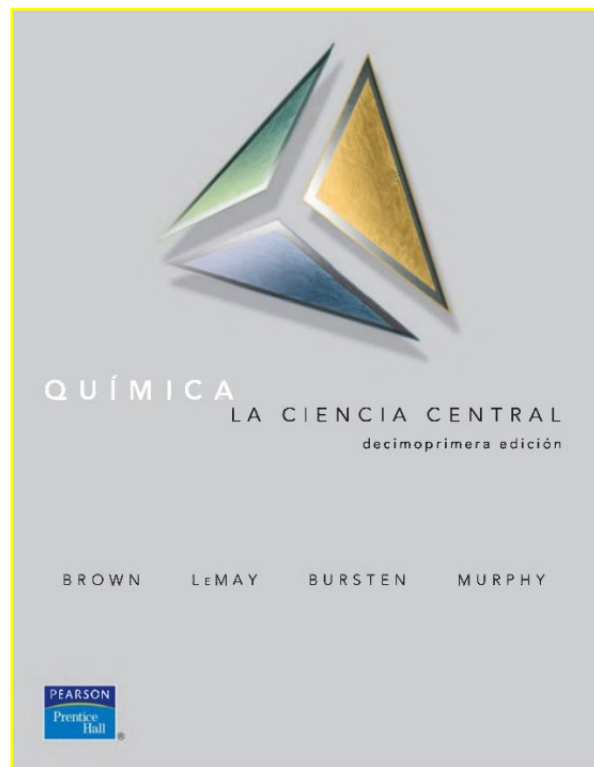
Tutories NO reglades

En els exàmens es demana  
**una comprensió de la  
matèria donada** que es  
demostra resolent qüestions  
relacionades, tant numèriques  
com de concepte.

**És**  
**IMPRESINDIBLE**  
que **PRACTIQUEU...**

# QUÍMICA GENERAL I

## Bibliografía



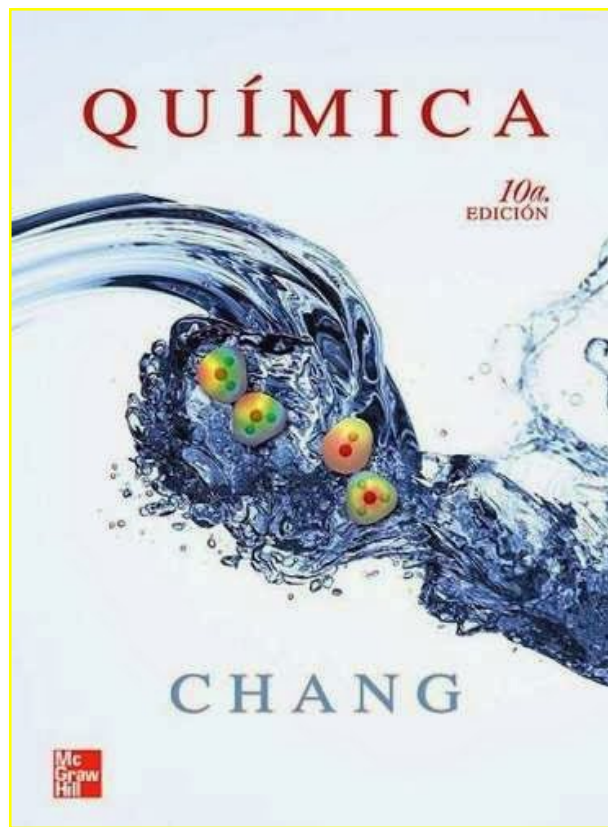
### ***QUÍMICA: LA CIENCIA CENTRAL***

T. L. Brown, H. E. Lemay, Jr., B. E. Bursten,  
C. J. Murphy i P. Woodward.

Ed. Pearson. 11a ed., 2009.

# QUÍMICA GENERAL I

## Bibliografía

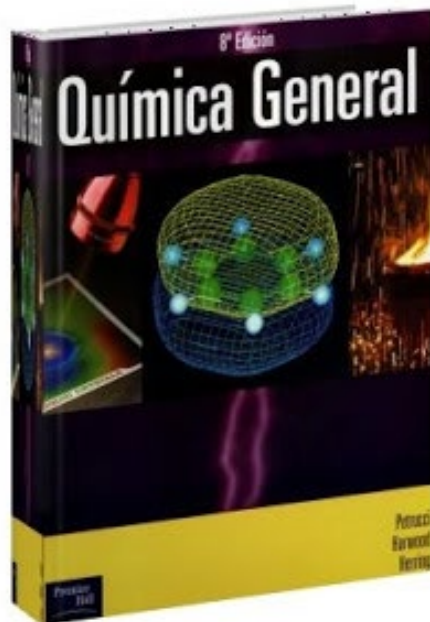


*QUÍMICA*

R. Chang. Ed. Mc Graw Hill. 10a ed., 2010.

# QUÍMICA GENERAL I

## Bibliografía



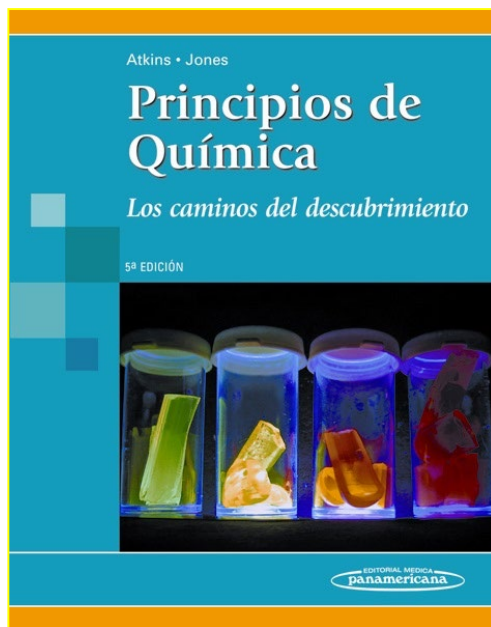
### *QUÍMICA GENERAL*

R. H. Petrucci, W. S. Harwood, F. G. Herring.

Ed. Pearson Educación (Prentice Hall). 8a ed., 2003.

# QUÍMICA GENERAL I

## Bibliografía



*PRINCIPIOS DE QUÍMICA. Los caminos del descubrimiento*

P. Atkins, L. Jones (ed.). Buenos Aires: Ed. Médica Panamericana. 5ª ed., 2012.

### Resumen del Contenido

1	Las propiedades de la materia y su medida	1
2	Los átomos y la teoría atómica	34
3	Compuestos químicos	68
4	Las reacciones químicas	111
5	Introducción a las reacciones en disolución acuosa	151
6	Gases	192
7	Termoquímica	241
8	Los electrones en los átomos	294
9	La Tabla Periódica y algunas propiedades atómicas	360
10	Enlace químico I. Conceptos básicos	395
11	Enlace químico II. Aspectos adicionales	449
12	Fuerzas intermoleculares: líquidos y sólidos	498
13	Las disoluciones y sus propiedades físicas	557
14	Cinética química	602
15	Principios del equilibrio químico	665
16	Ácidos y bases	697
17	Otros aspectos de los equilibrios ácido-base	745
18	Solubilidad y equilibrios de iones complejos	784
19	Espontaneidad. Entropía y energía Gibbs	819
20	Electroquímica	863
21	Química de los elementos de los grupos principales I: Grupos 1, 2, 13 y 14	917
22	Química de los elementos de los grupos principales II: Grupos 18, 17, 16, 15 e hidrógeno	976
23	Elementos de transición	1031
24	Iones complejos y compuestos de coordinación	1069
25	Química nuclear	1111
26	Estructura de los compuestos orgánicos	1147
27	Reacciones de los compuestos orgánicos	1208
28	Química de los seres vivos	1266

### APÉNDICES

A.	Operaciones matemáticas	A1
B.	Conceptos físicos básicos	A11
C.	Unidades SI	A15
D.	Tablas de datos	A17
E.	Mapas conceptuales	A37
F.	Glosario	A39
G.	Respuestas a las Evaluaciones de conceptos	A55

# QUÍMICA GENERAL I

## Bibliografia

## Resumen del Contenido

1	Las propiedades de la materia y su medida	1
2	Los átomos y la teoría atómica	34
3	Compuestos químicos	68
4	Las reacciones químicas	111
5	Introducción a las reacciones en disolución acuosa	151
6	Gases	192
7	Termoquímica	241
8	Los electrones en los átomos	294
9	La Tabla Periódica y algunas propiedades atómicas	360
10	Enlace químico I. Conceptos básicos	395
11	Enlace químico II. Aspectos adicionales	449
12	Fuerzas intermoleculares: líquidos y sólidos	498
13	Las disoluciones y sus propiedades físicas	557
14	Cinética química	602
15	Principios del equilibrio químico	665
16	Ácidos y bases	697
17	Otros aspectos de los equilibrios ácido-base	745
18	Solubilidad y equilibrios de iones complejos	784
19	Espontaneidad. Entropía y energía Gibbs	819
20	Electroquímica	863
21	Química de los elementos de los grupos principales I: Grupos 1, 2, 13 y 14	917
22	Química de los elementos de los grupos principales II: Grupos 18, 17, 16, 15 e hidrógeno	976
23	Elementos de transición	1031
24	Iones complejos y compuestos de coordinación	1069
25	Química nuclear	1111
26	Estructura de los compuestos orgánicos	1147
27	Reacciones de los compuestos orgánicos	1208
28	Química de los seres vivos	1266

## APÉNDICES

A.	Operaciones matemáticas	A1
B.	Conceptos físicos básicos	A11
C.	Unidades SI	A15
D.	Tablas de datos	A17
E.	Mapas conceptuales	A37
F.	Glosario	A39
G.	Respuestas a las Evaluaciones de conceptos	A55

**Tema 1. INTRODUCCIÓ. Formulació inorgànica**

**Tema 2. ESTRUCTURA ATÒMICA**

**Tema 3. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS I PROPIETATS PERIÒDIQUES**

**Tema 4. ENLLAÇ QUÍMIC I**

**Tema 5. ENLLAÇ QUÍMIC II. Formulació química orgànica**

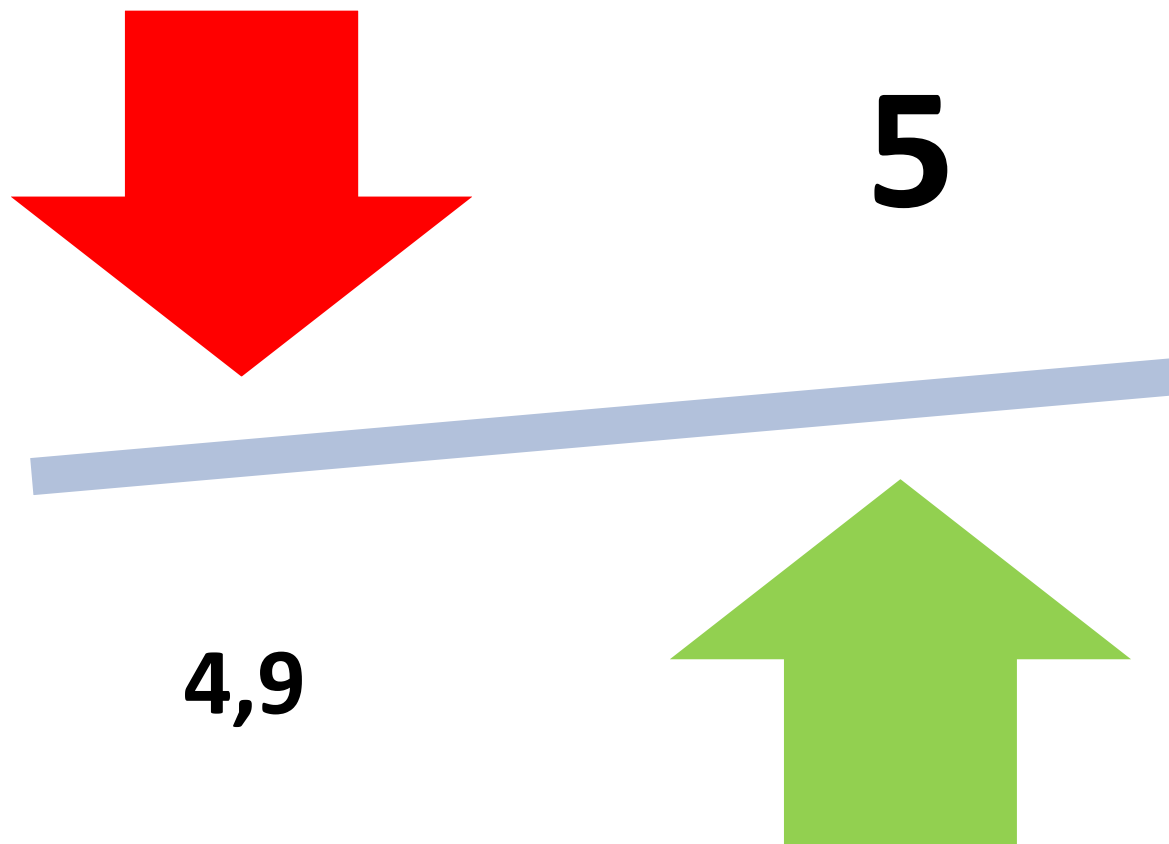
**Tema 6. ESTRUCTURA I ENLLAÇ. COMPORTAMENT QUÍMIC ÀCID-BASE**

**Tema 7. SUBSTÀNCIES MOLECULARS**

**Tema 8. SÒLIDS NO MOLECULARS**

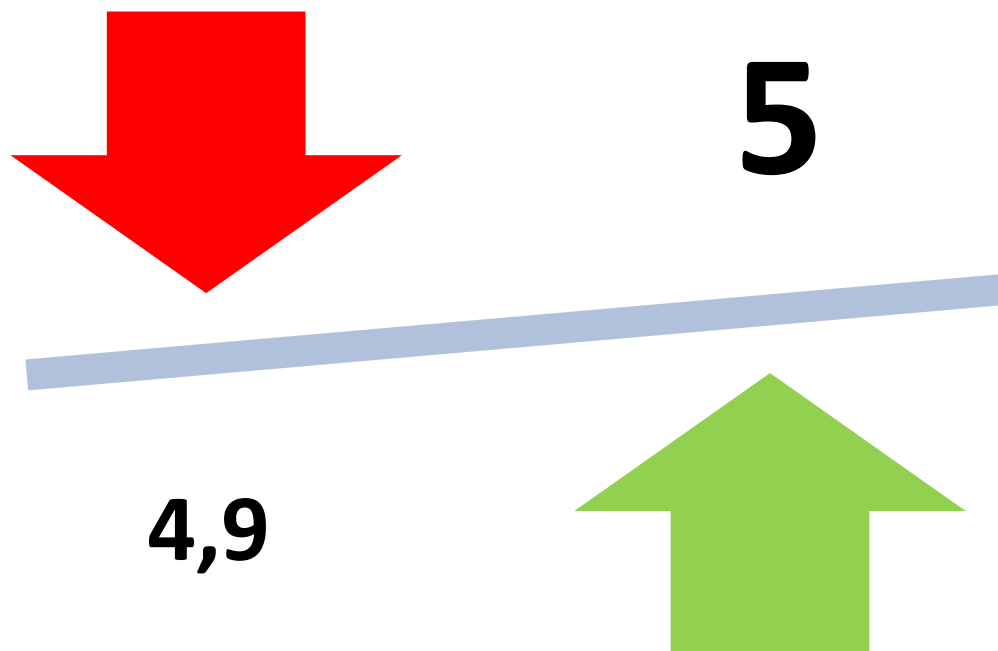


# Examen escrit (100 %)



**Examen escrit (85 %)**

**Avaluació tutories (15 %)**



**Examen escrit (85%)**

**Avaluació tutories (15 %)**

És obligatori  
**traure un 5** en  
les dues parts  
de l'assignatura.

Els estudiants que vulguen acollir-se a la  
**modalitat d'avaluació amb**  
**tutories** reglades hauran de comunicar-  
ho al professor per correu electrònic

**abans del 23 de**  
**setembre.**

Heu d'escriure un correu electrònic

**amb correcció.**

**No** responc **anònims,**

ni tampoc corregisc tutories,

ni exàmens anònims.

# QUÍMICA GENERAL I

## **2019 International year of the periodic table**

<https://www.iypt2019.org/>

<https://www.webelements.com/>

# QUÍMICA GENERAL I

**2019**

**International year  
of the periodic  
table**

<https://www.iypt2019.org/>

***La química és una de  
les ciències que més  
ha permès avançar a  
la societat.***



# TEMA 1. INTRODUCCIÓ

## Què és la química?



- Definició i branques de la química.
- Definició i propietats de la matèria.

## Estructura atòmica



- Principals fites històriques. Classificacions de la matèria. Mescles. Elements, compostos
- La taula periòdica

## Mesura de la matèria



- Pesos atòmics; molècules i fórmules químiques
- El nombre d'Avogadro i el mol. Composició percentual

## Reaccions químiques



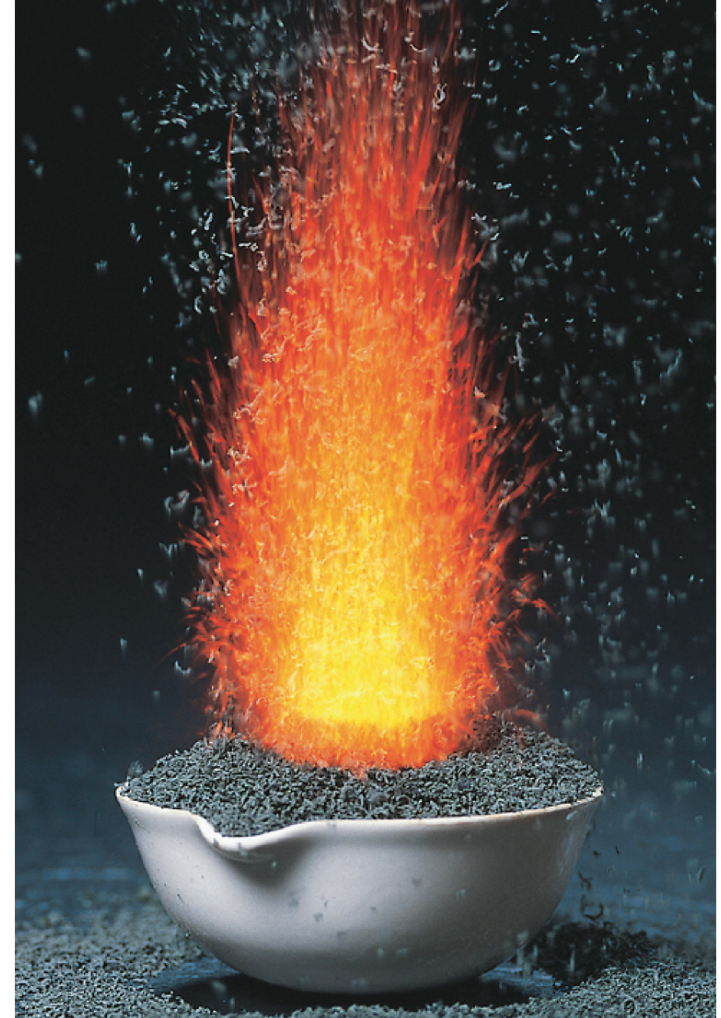
- Estequiometria
- Dissolucions i gasos



# Què és la química?

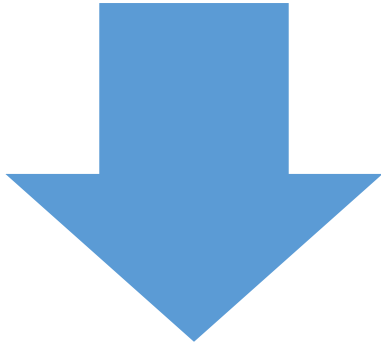
**Ciència** que estudia l'estructura, la composició i les propietats de **la matèria**, així com **les transformacions** que aquesta experimenta durant les reaccions químiques

- Descomposició del dicromat amònic

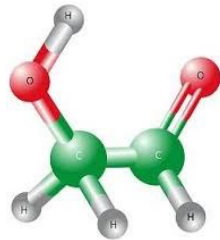
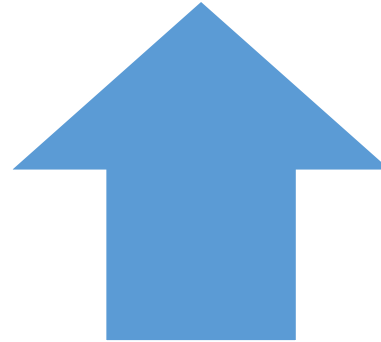


Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

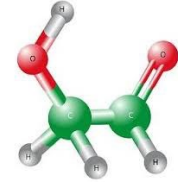
**Nivell  
macroscòpic** tangible, visible



**Nivell microscòpic**

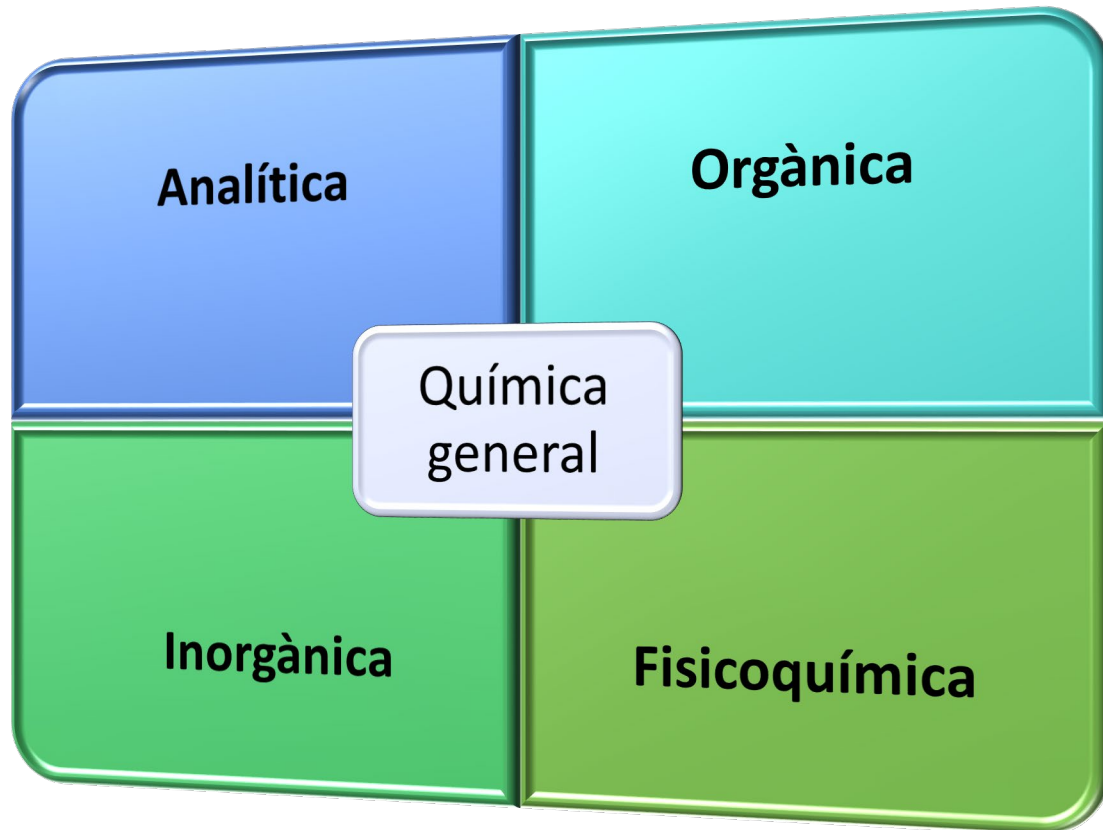


molècules, àtoms, enllaços




**Ciència** que busca  
comprendre les propietats i el  
comportament de **la**  
**matèria** mitjançant l'estudi  
de les propietats i el  
comportament dels **àtoms i**  
**les molècules**

# Disciplines de la química



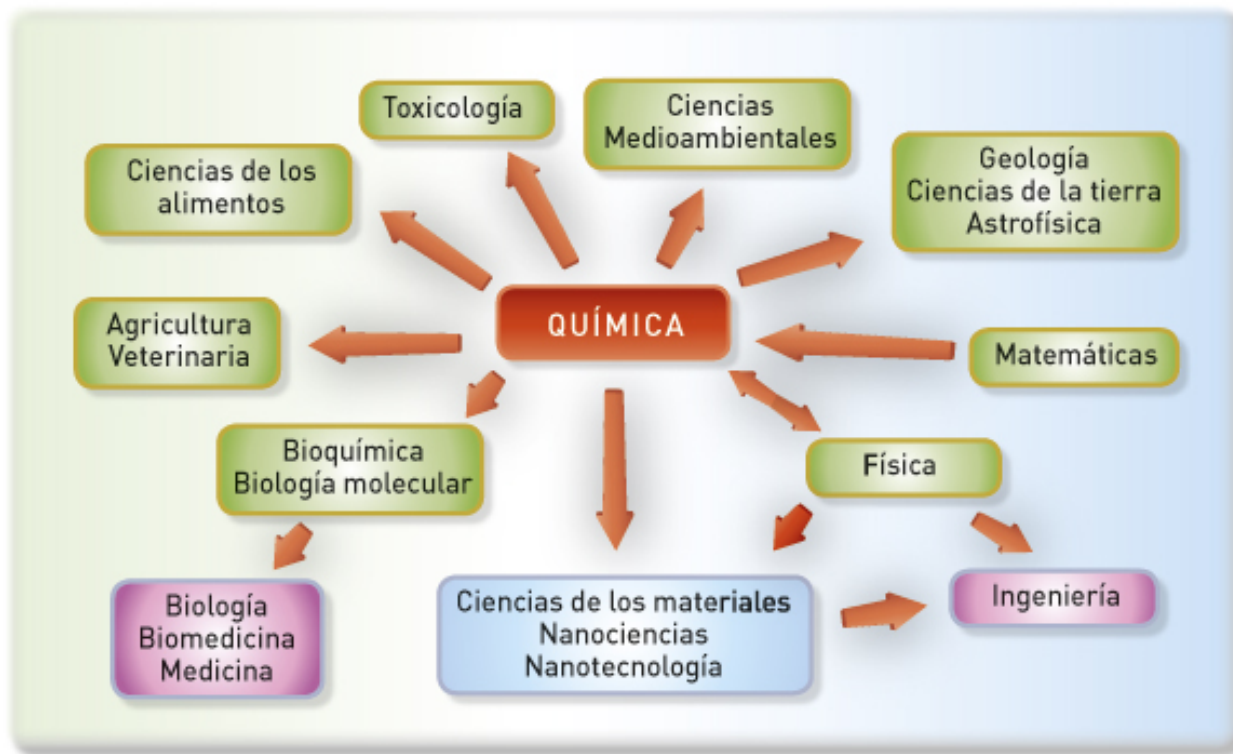
## Altres disciplines.....

- 
- Enginyeria química
  - Química organometàlica

- 
- Química computacional
  - Química mèdica

- 
- Bioquímica
  - Química industrial

## Relació de la química amb altres ciències:



<http://www.losavancesdelaquimica.com/blog/2009/10/la-relacion-entre-la-quimica-y-otras-disciplinas-cientificas/>

# Propietats de la matèria

**La matèria** és tot allò que té **massa** i que ocupa **un volum** en l'espai.



✓ Una **propietat física** és la que té una mostra de matèria mentre que **NO en canvie la composició.**

- (d'aparença física, color, olor, temperatura, densitat, punt de fusió, punt d'ebullició, duresa, etc.)

✓ Una **propietat química** és la capacitat d'una mostra de matèria per a experimentar un **canvi en la seua composició.**

- (inflamabilitat, caràcter àcid-bàsic, oxidant-reductor, etc.)



(a)



(b)



(c)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

Durant una reacció química **una substància es transforma** en una altra **químicament diferent.**

Procés físic

Procés químic

L'aigua es calfa en un microones.



L'aigua es congela amb gel.



Un clau es rovella.



Un gas es comprimeix en una bombona. ✓

Un tros de carbó crema.

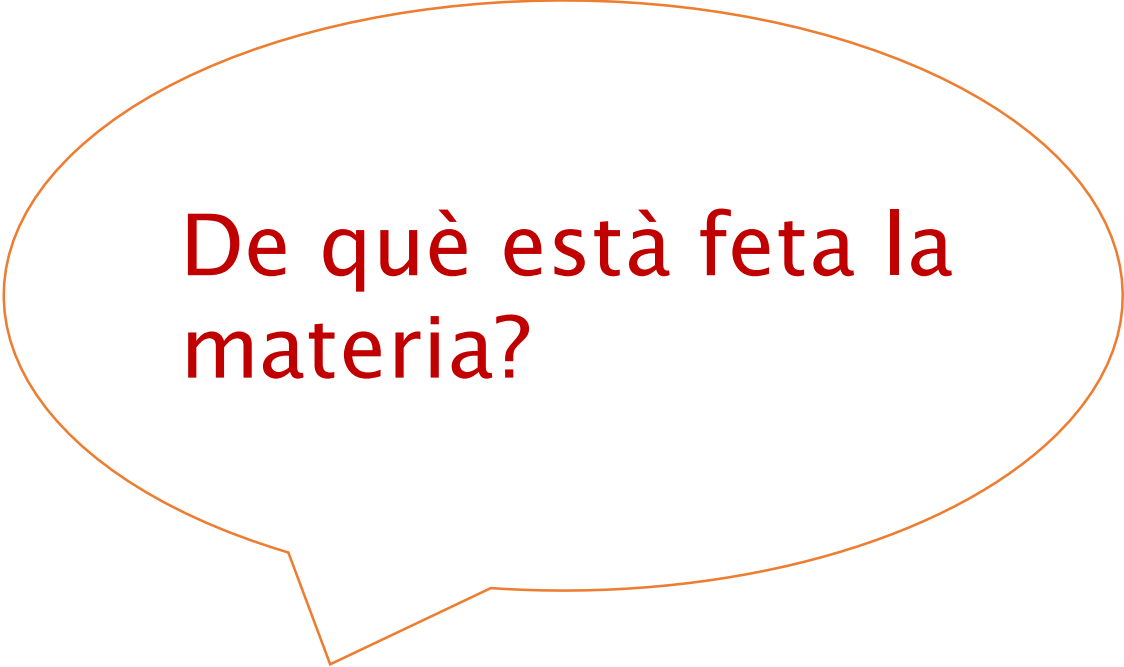


## Estructura atòmica



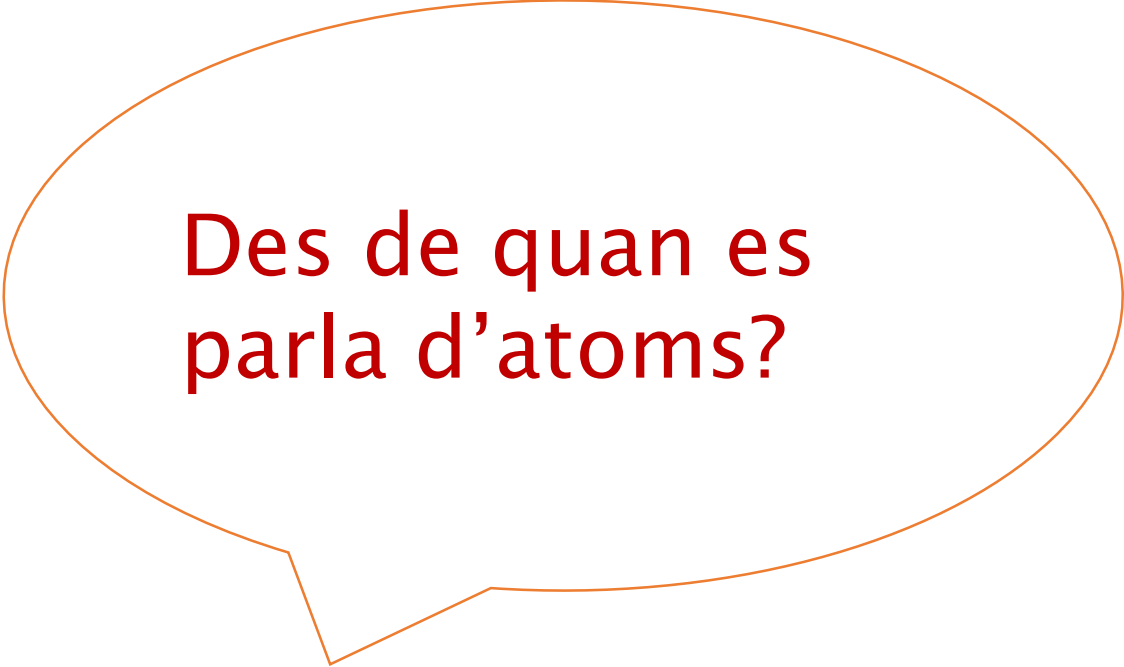
- Principals fites històriques. Classificacions de la matèria. Mescles. Elements, compostos
- La taula periòdica

# Estructura atòmica. Principals fites històriques



**De què està feta la  
materia?**

# Estructura atòmica. Principals fites històriques



**Des de quan es  
parla d'atoms?**

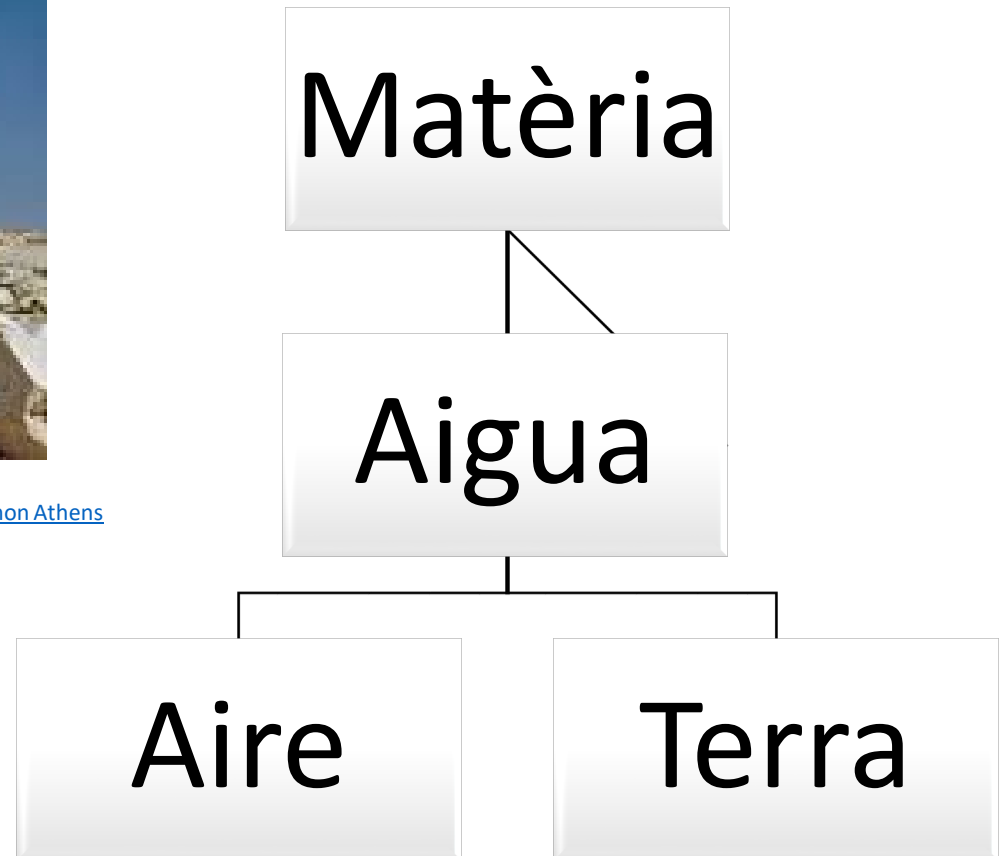
# Antiga Grècia

Al voltant del 600 aC, els filòsofs grecs començaren a especular sobre el món físic que els envoltava.



[Steve Swayne - File:O Partenon de Atenas.jpg](#), originally posted to [Flickr](#) as [The Parthenon Athens](#)

## Tales de Milet



# Aristòtil (384 aC-322 aC)

**Els elements formen un medi continu.**

**El buit no pot existir...**

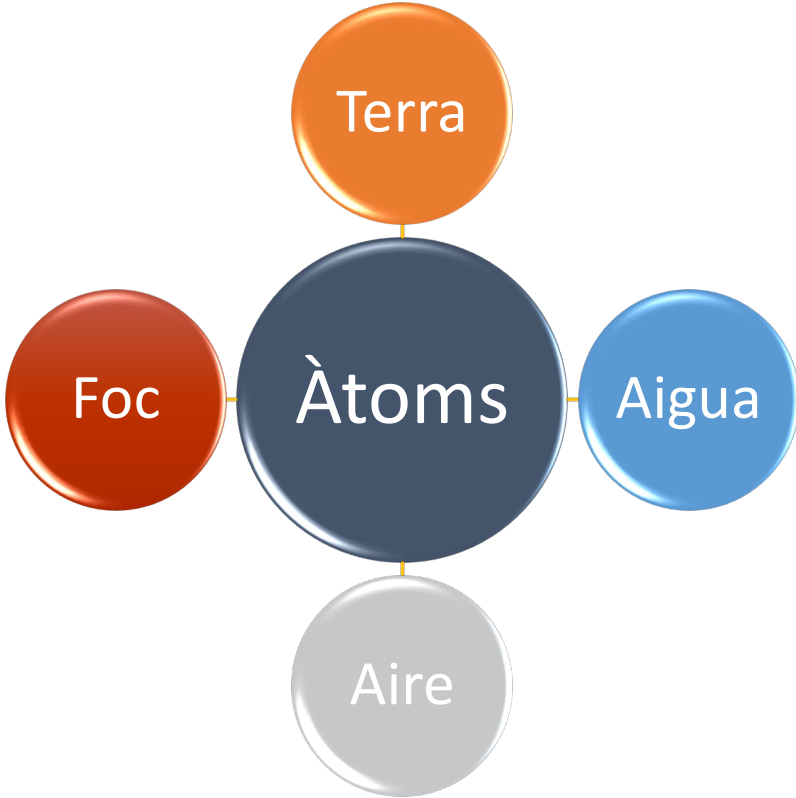




Demòcrit (460 aC-370 aC)



Els elements  
estan formats  
per àtoms.



Bust d'un grec identificat com a [Demòcrit](#). L'original fou trobat a la Villa dei Papiri a Herculaneum., [CC BY-SA 3.0](#). Ús cultural lliure.

## Demòcrit (460 aC-370 aC)



Демокрит (460-370 гг. до н.э.)

La idea atòmica no va tenir èxit...

**Pero no es va oblidar mai  
completament!**

# Edat mitjana

## ALQUÍMIA

Tractava de descobrir una substància capaç de transmutar els metalls en or i plata, a més d'allargar la vida humana indefinidament...

Es considera la predecessora de la ciència química moderna.

**Quina és la quantitat d'òxid de estany que es pot obtenir quan reaccionen 0,455 g d'estany en presència de 2,315 g d'oxigen si el metall es consumeix completament i quan acaba la reacció queden 2,015 g del gas?**

# Segle XVIII

Antoine Laurent de Lavoisier (1743-1794)

Es considera el fundador de la química moderna.



**Antoine-Lavrent Lavoisier.**

*Line engraving by Louis Jean Desire Delaistre, after a design by Julien Leopold Boilly.*  
Domini públic.

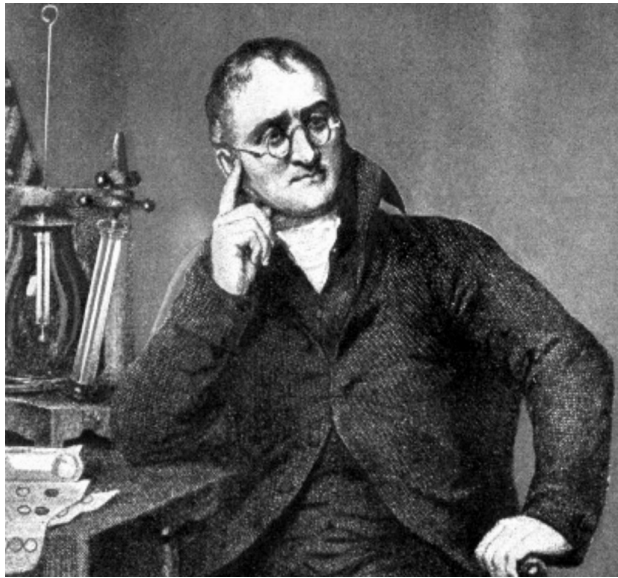
Mesures riguroses i quantitatives



**Llei de conservació de la massa**

# Segle XIX

Jonh Dalton (1766-1844)



John Dalton. *Line engraving by W. H. Worthington, 1823, after J. Allen, 1814.*

<https://wellcomecollection.org/works/d9pg6efd> CC-BY-4.0

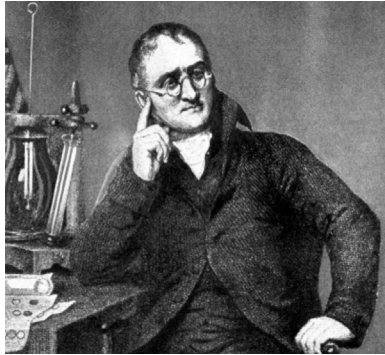
**Reprenem la teoria atómica!**

**Llei de les proporcions constants de Joseph Proust.**

Totes les mostres d'un mateix compost tenen **la mateixa proporció en massa** dels elements que la constitueixen.

# Segle XIX

Jonh Dalton (1766-1844)



John Dalton. Line engraving by W. H. Worthington, 1823, after J. Allen, 1814.

<https://wellcomecollection.org/works/d9pg6efd> CC-BY-4.0

Les unitats més  
menudes que formen  
la matèria són  
**els àtoms.**



Àtoms  
**“blocs de  
construcció”** de la  
matèria.



Els àtoms s'uneixen  
entre sí en **proporcions  
definides i constants.**

# Segle XIX

Els àtoms dels elements són les **partícules bàsiques** de la matèria. Són **indivisibles** i no poden ser creats ni destruïts en una reacció.

Els àtoms d'un element determinat **són idèntics**, posseeixen un mateix pes i tenen les mateixes propietats químiques.

Els àtoms dels diferents elements químics **es combinen entre si**, en relació de nombres senzills, per a **formar molècules compostes**.

Els àtoms dels elements poden combinar-se entre **si en més d'una proporció entera senzilla**, per a formar més d'un compost.



**Quins dels postulats estan vigents encara?**

# Segle XIX

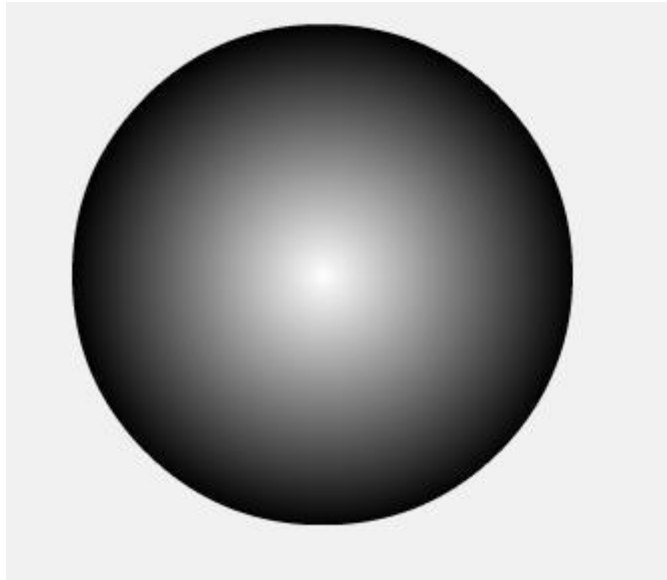
Els àtoms dels elements són les **partícules bàsiques** de la matèria. Són **indivisibles** i no poden ser creats ni destruïts en una reacció.

Els àtoms d'un element **determinat són idèntics**, posseeixen un mateix pes i tenen les mateixes propietats químiques.

Els àtoms dels diferents elements químics **es combinen entre sí**, en relació de nombres senzills, per a **formar molècules compostes**.

Els àtoms dels elements poden combinar-se entre **si en més d'una proporció entera senzilla**, per a **formar més d'un compost**.

**Què hi ha dins d'un àtom?**



# Segle XIX

Photograph owned by Institut International de Physique Solvay, Brussels, Belgium -  
<http://www.solvayinstitutes.be/Conseils%20Solvay/Physics%20Pictures.html>



VERSCHAFFELT      LAUE    RUBENS    GOLDSCHMIDT    HERZEN    LINDEMANN    de BROGLIE    POPE    GRUNEISEN    HOSTELET  
 HASENOHRL    JEANS    BRAGG      Mme CURIE    SOMMERFELD    EINSTEIN                      KNUDSEN    LANGEVIN  
 NERNST      RUTHERFORD    WIEN      J.J. THOMSON    WARBURG    LORENTZ    BRILLOUIN    BARLOW    KAMERLINGH ONNES    WOOD    GOUY    WEISS

Second Solvay Conference on Physics, Brussels, 1913, Domini public.

# Segle XIX

## Model atòmic de J. J. Thomson (1897)

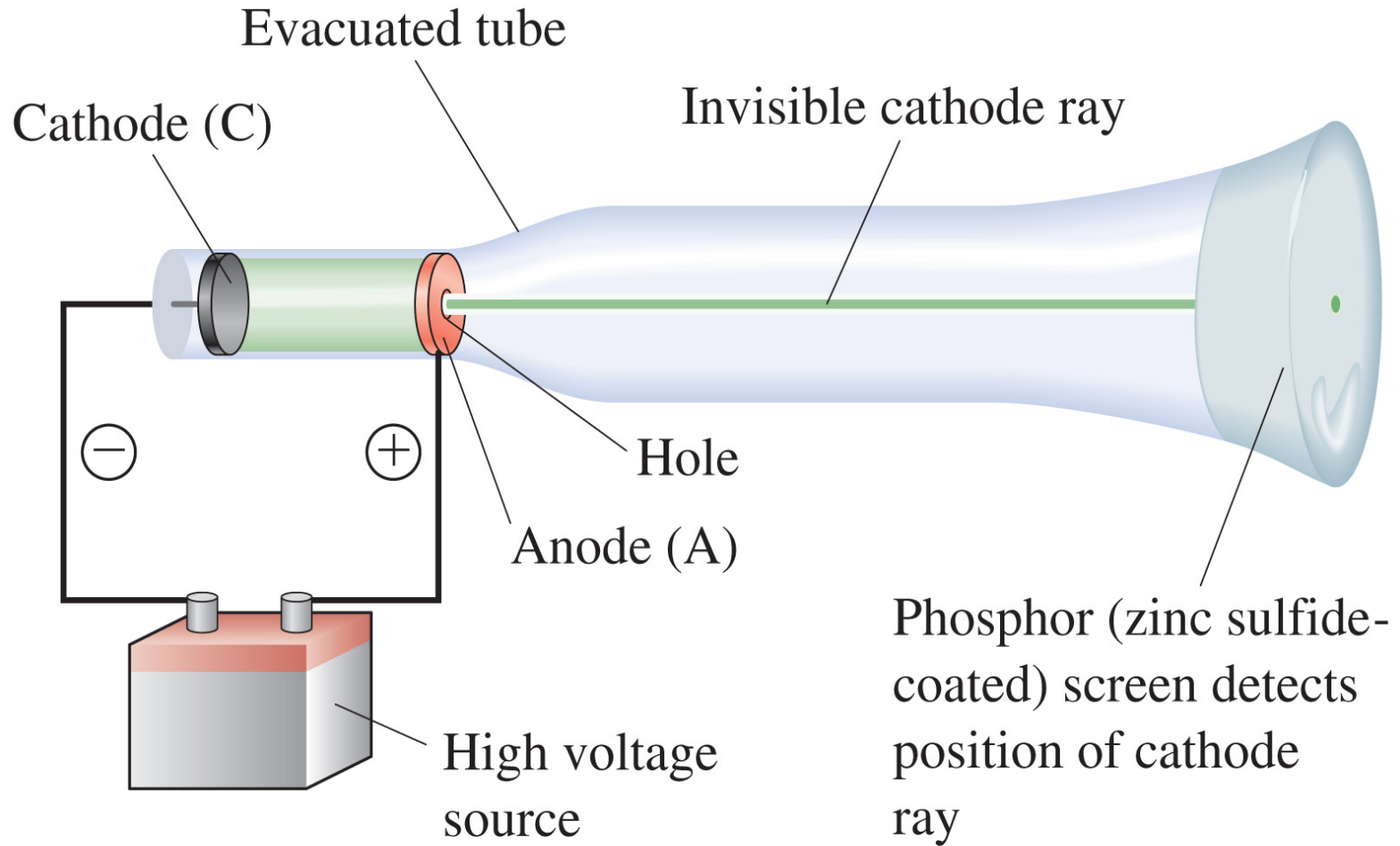


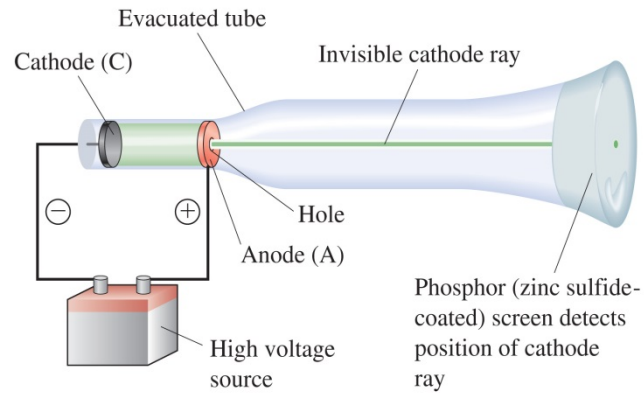
From Lord Rayleigh's biography of Thomson - Google  
Photograph of a young JJ Thomson. 1861. Domini public.



**N**  **BEL**  
Prize in Physics 1906

# Experiment amb raigs catòdics





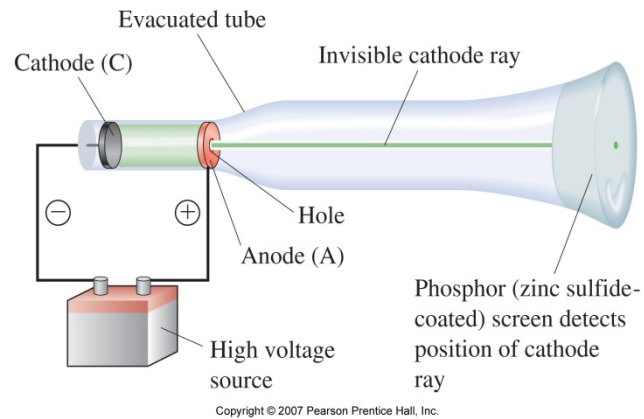
Va sotmetre els raigs catòdics a l'acció d'un **camp elèctric.**



Va observar que els raigs catòdics es desviaven a la **part positiva del condensador**.



Va concloure que els raigs estaven formats per **partícules amb càrrega negativa.**

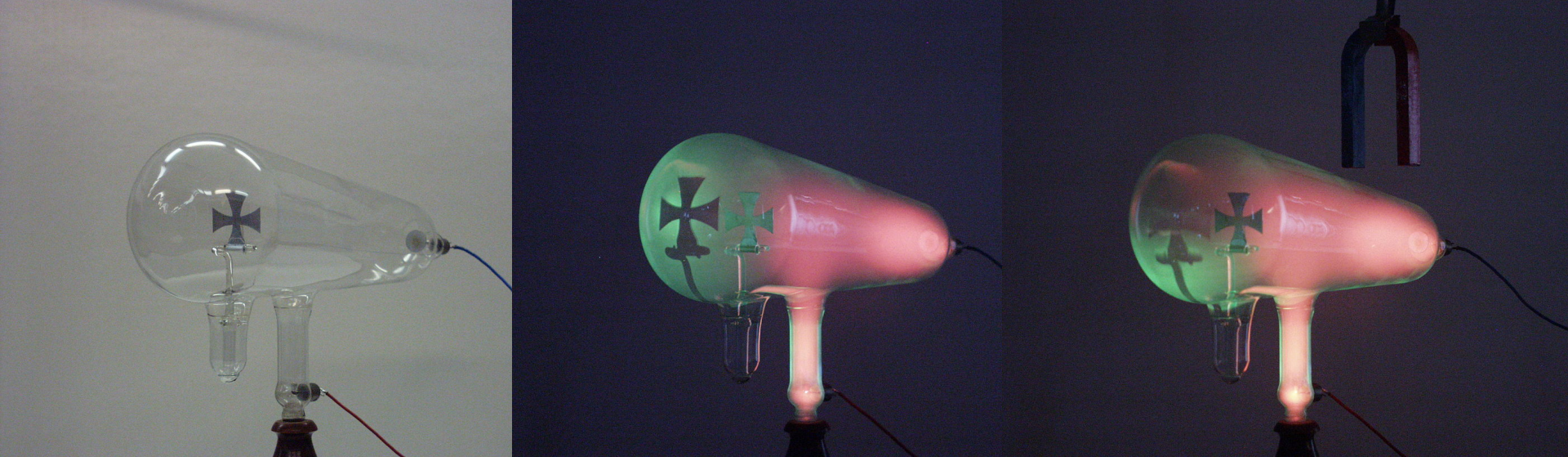


Variant el camp elèctric i mesurant les desviacions de les partícules va establir **el quocient entre la massa i la càrrega de l'electró.**



$$e / m_e = -1,76 \times 10^8 \text{ C/g}$$





Zátonyi Sándor, (ifj.) - Own work. Katódsugarak mágneses mezőben(4).jpg. Wikipedia. Public domain.

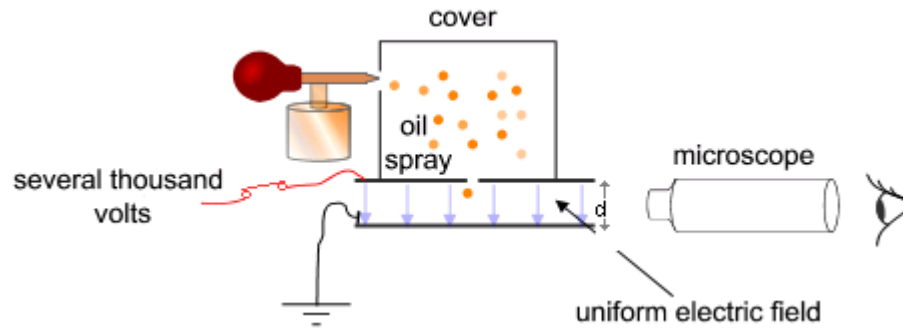
Variant el camp elèctric i mesurant les desviacions de les partícules va establir **el quocient entre la massa i la càrrega de l'electró.**



$$e / m_e = -1,76 \times 10^8 \text{ C/g}$$

# Segle XIX-XX

Experiment de la gota d'oli de **Robert Millikan** (1913)



De Theresa Knott – “English Wikipedia”. Domini public.

“Intensitat del F elèctrica vs F gravitatòria” és un múltiple enter de

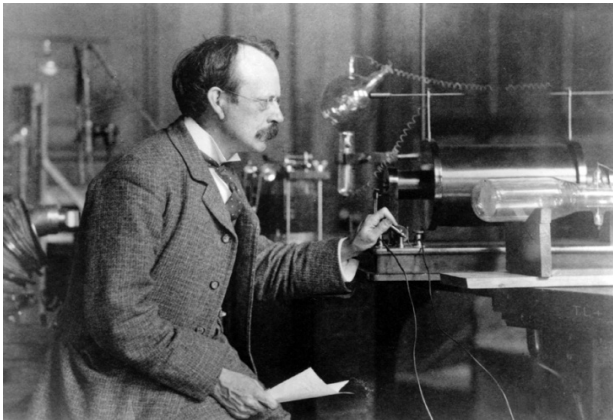


$$e = -1,592 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{Massa de l'electró } (m_e) = \frac{-1,602 \times 10^{-19} \text{ C}}{-1,76 \times 10^8 \text{ C/g}} = 9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$$

# Segle XIX-XX

## Descobriments de l'electró



Model atòmic de J. J. Thomson (1897)

1

- Basat en el treball dels tubs catòdics es va suggerir la possibilitat que els àtoms estigueren formats per **ELECTRONS i PROTONS** (donat que són neutres).

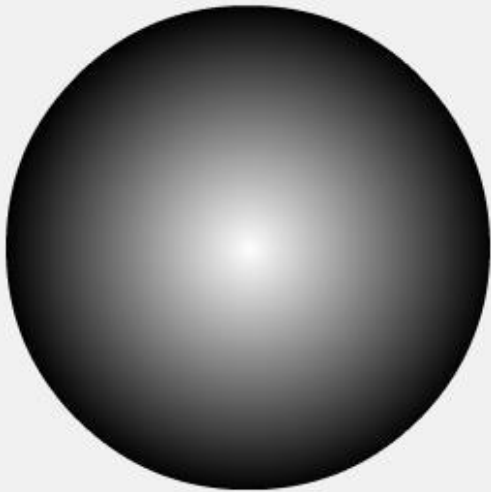
2

- Com que no s'havia determinat mai experimentalment la presència dels protons com a partícules es va admetre la idea que la **càrrega positiva es trobava distribuïda uniformement** per tot l'àtom.

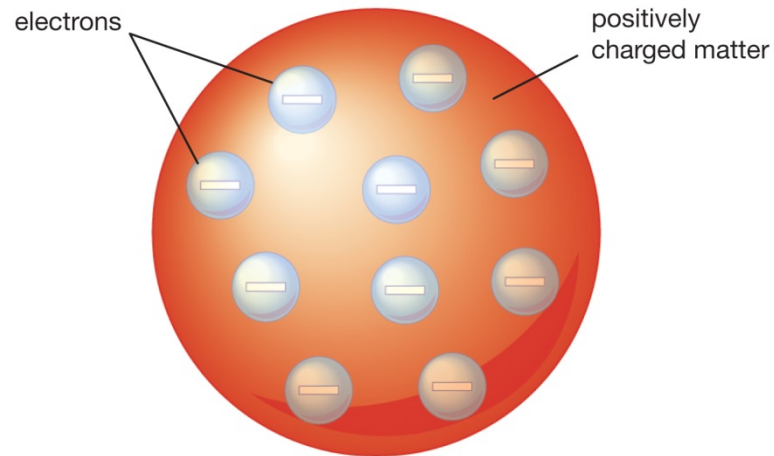
3

- És el que es coneix com a "**Model d'esfera compacta**" o "*Model de plum cake*".

## Què hi ha dins d'un àtom?



**Jonh Dalton**  
(1766-1844)

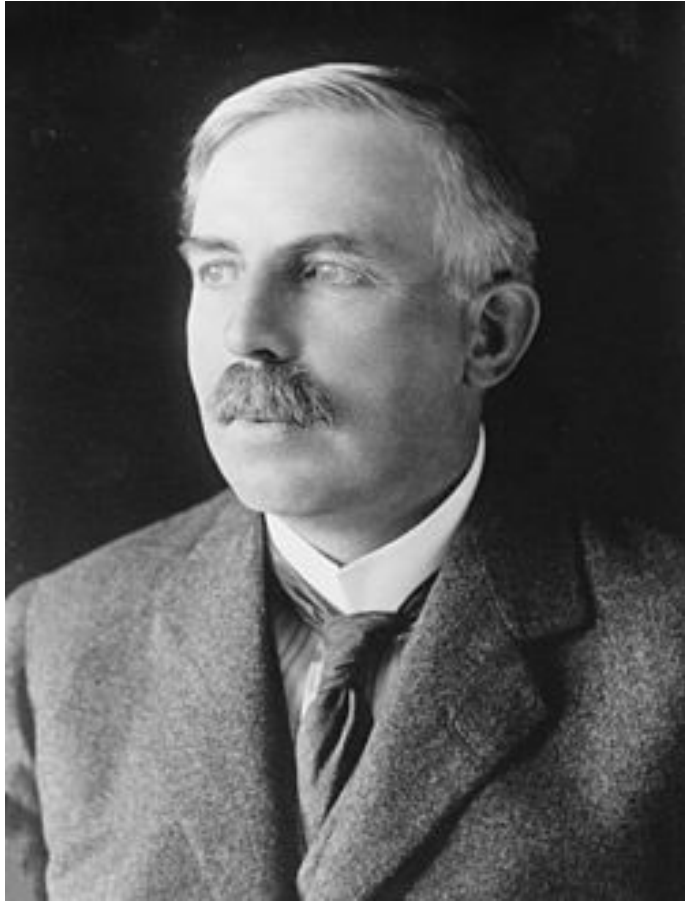


© 2012 Encyclopædia Britannica, Inc.

**J. J. Thomson**  
(1897)

# Segle XX

## Model atòmic d'Ernest Rutherford (1905)

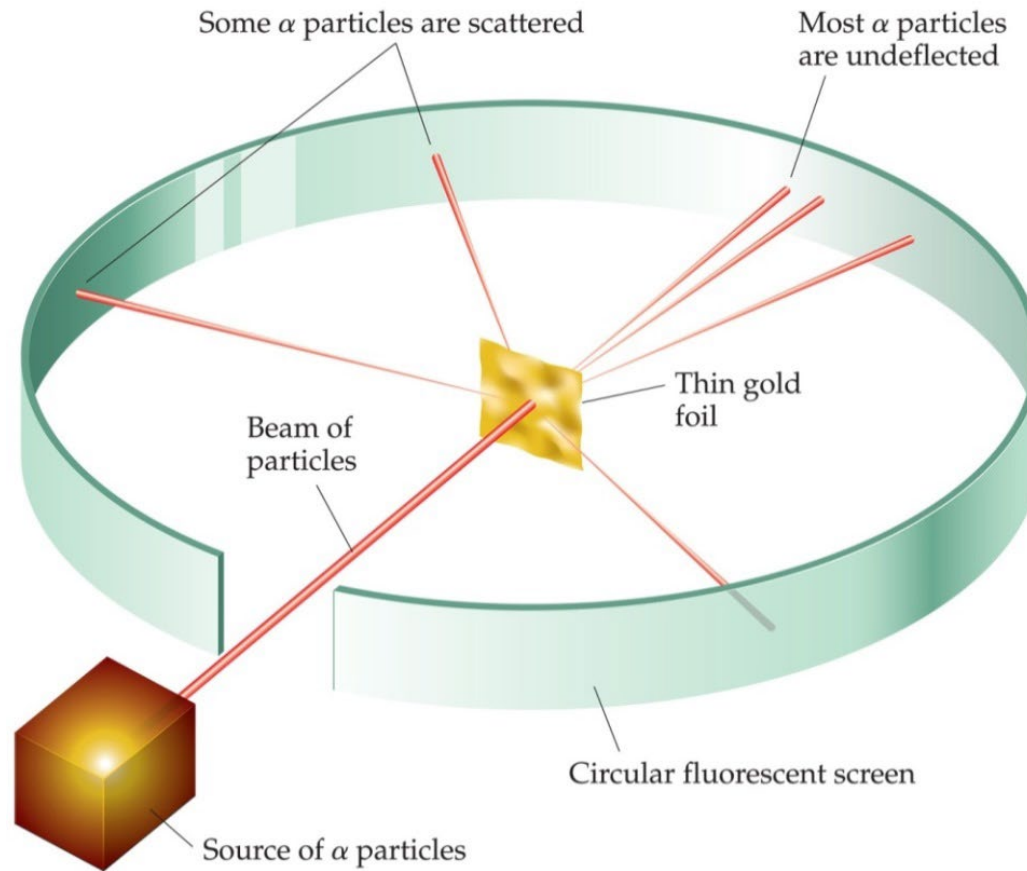


## Premi Nobel de Química 1908

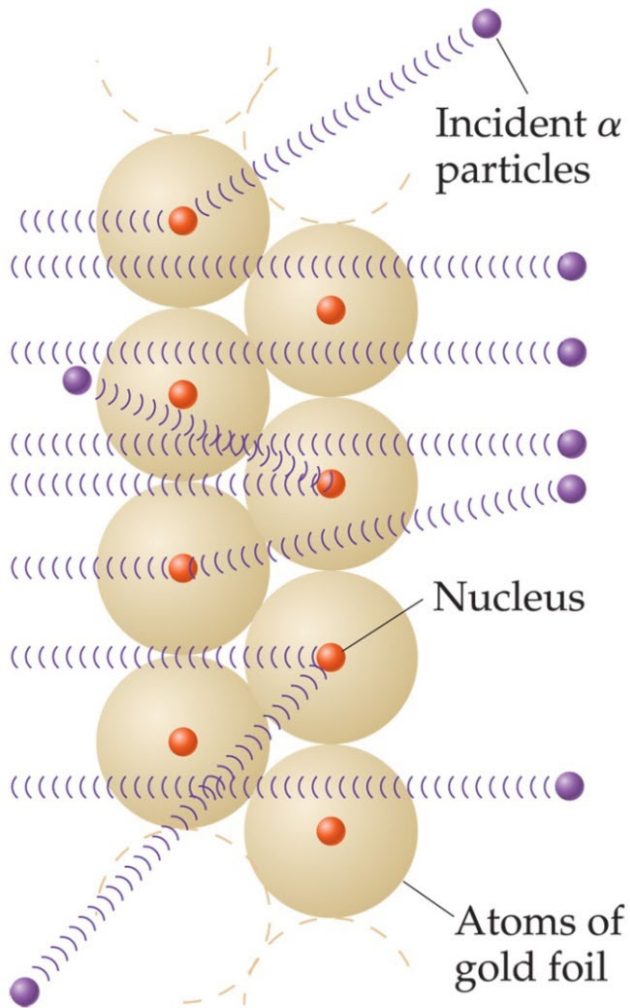
George Grantham Bain Collection (Library of Congress) -imatge disponible en la [Biblioteca del Congrés](#) dels Estats Units d'Amèrica sota el codi

# Segle XX

## Experiment de dispersió de partícules $\alpha$

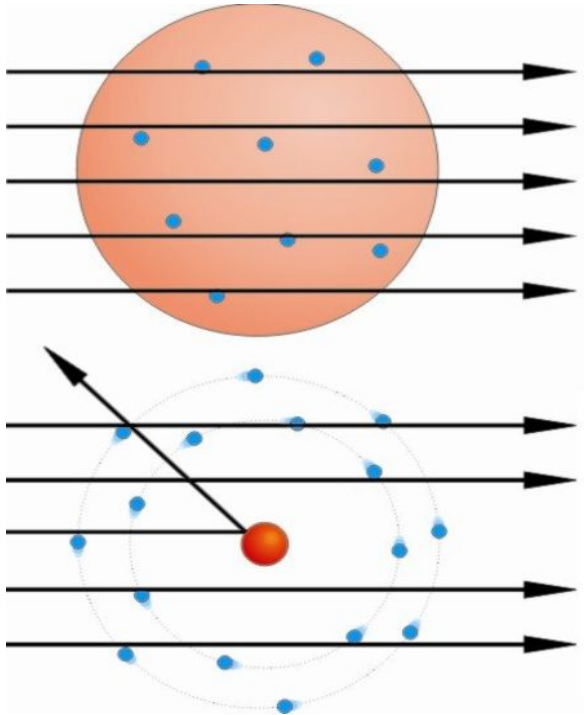


# Segle XX

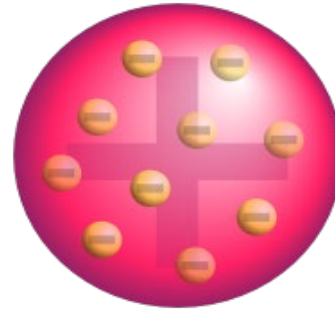


En bombardejar amb partícules la làmina d'àtoms d'or van observar una **dispersió de la trajectòria** d'aquestes, inclús algunes que rebotaven cap enrere.

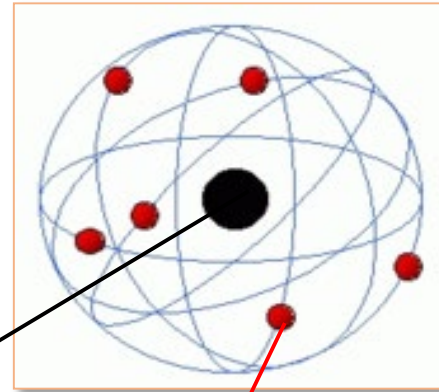
Rutherford va proposar un model nuclear d'àtom en el qual la càrrega positiva estava concentrada **en el NUCLI ATÒMIC.**



Nucli



Thomson

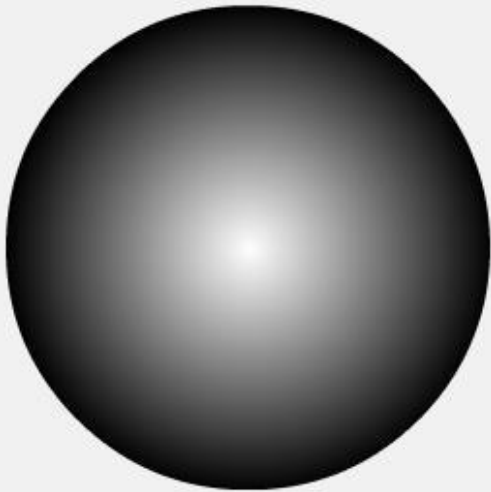


Rutherford

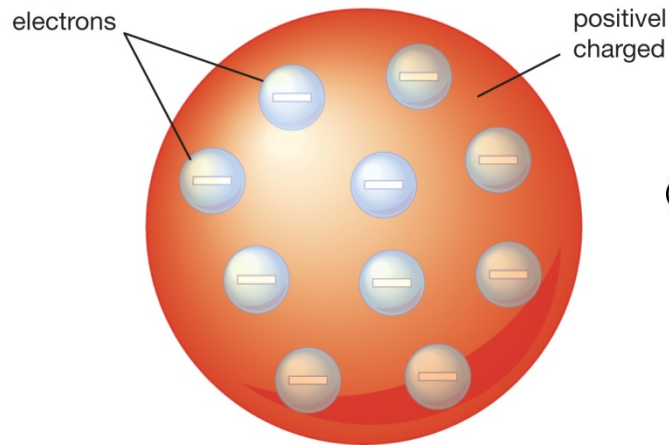
Electrons



# Què hi ha dins d'un àtom?

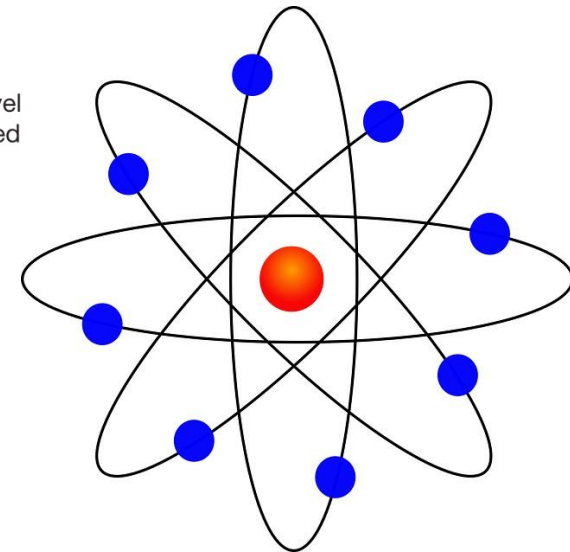


**Jonh Dalton**  
(1766-1844)



© 2012 Encyclopædia Britannica, Inc.

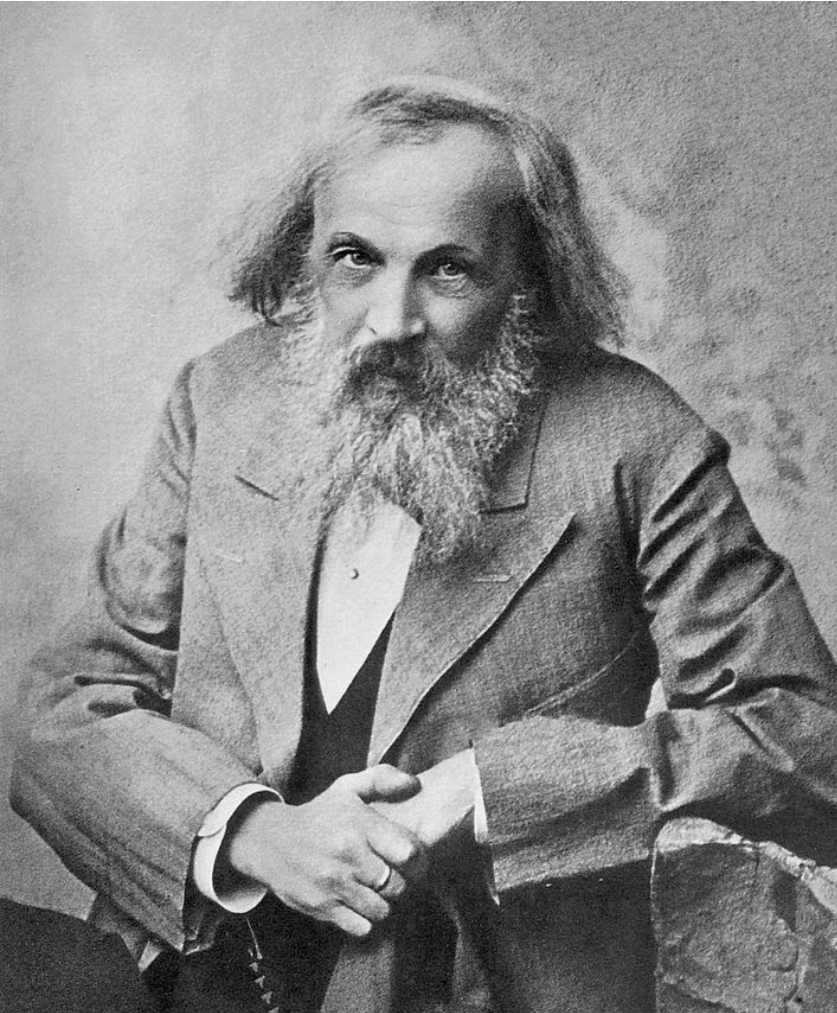
**J. J. Thomson**  
(1897)



**E. Rutherford**  
(1910)

# Segle XX

## Periodicitat de les propietats dels elements

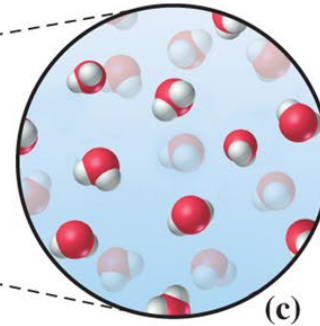
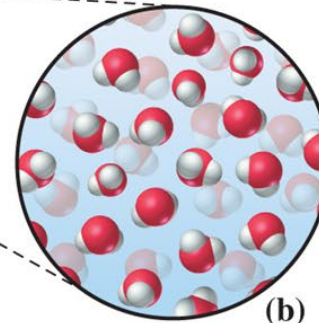
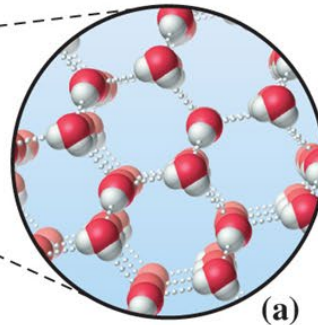
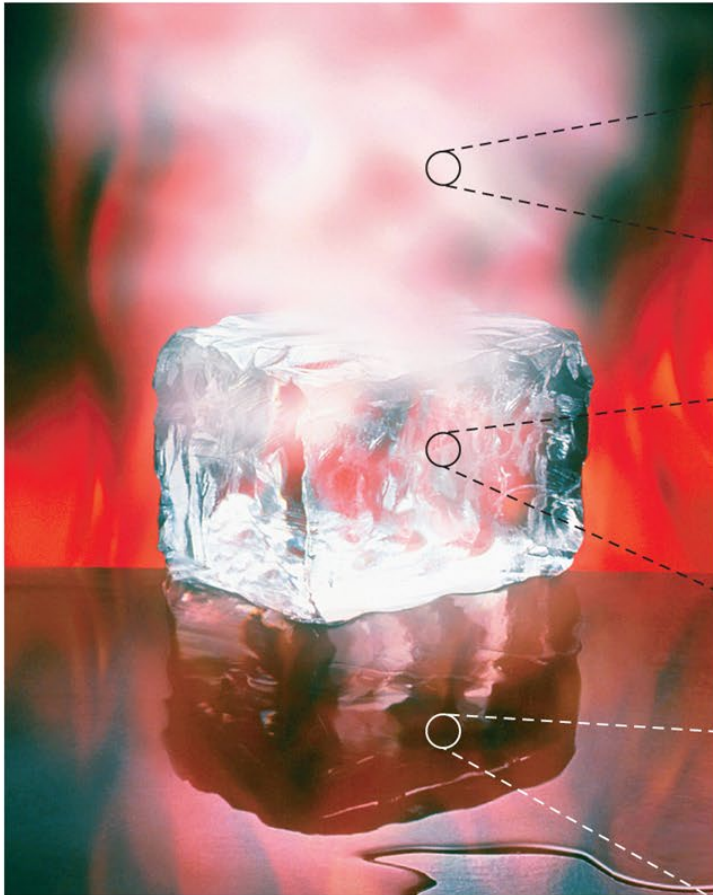


Al voltant del segle XIX, un grup de químics es van adonar de les similituds en les **propietats químiques** dels diferents elements.

El químic rus **DMITRI MENDELÉIEV** va proposar una **taula periòdica** d'ordenació dels elements per propietats químiques similars.

# Classificació de la matèria

## Estat físic



Estats físics de l'aigua:

- vapor d'aigua

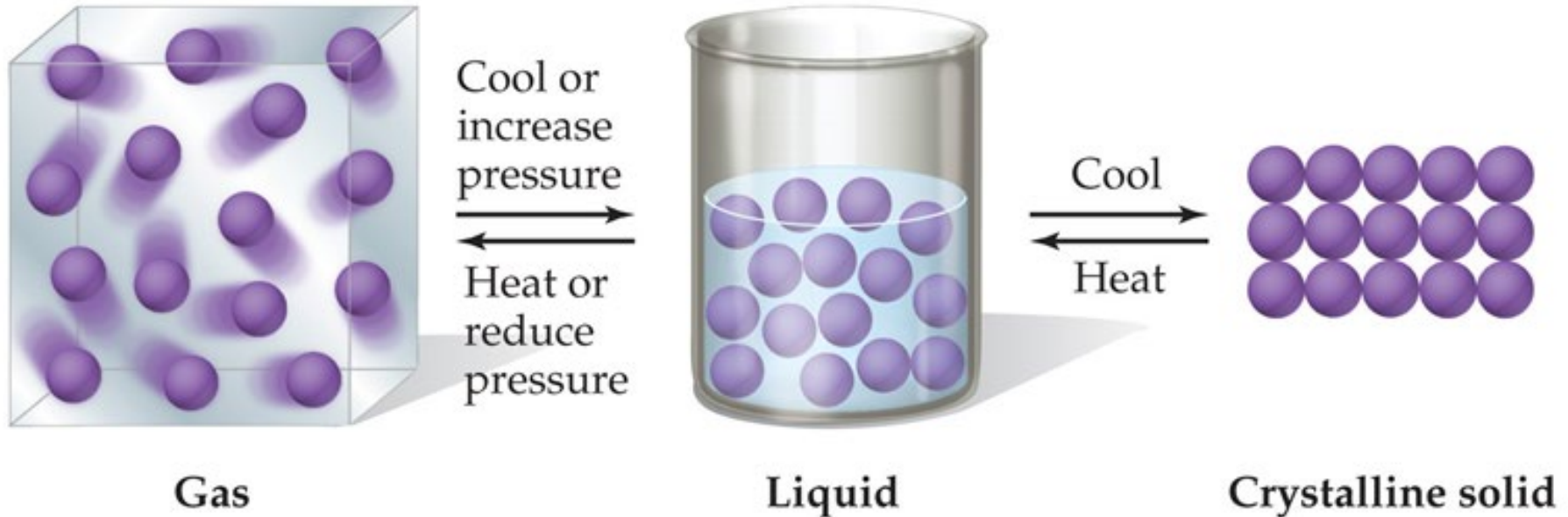
- gel

- aigua líquida

# Classificació de la matèria

## Estat físic

- Adopten la forma del recipient que els conté.
- Desordre. Moviment lliure relatiu.
- No es comprimeixen fàcilment.

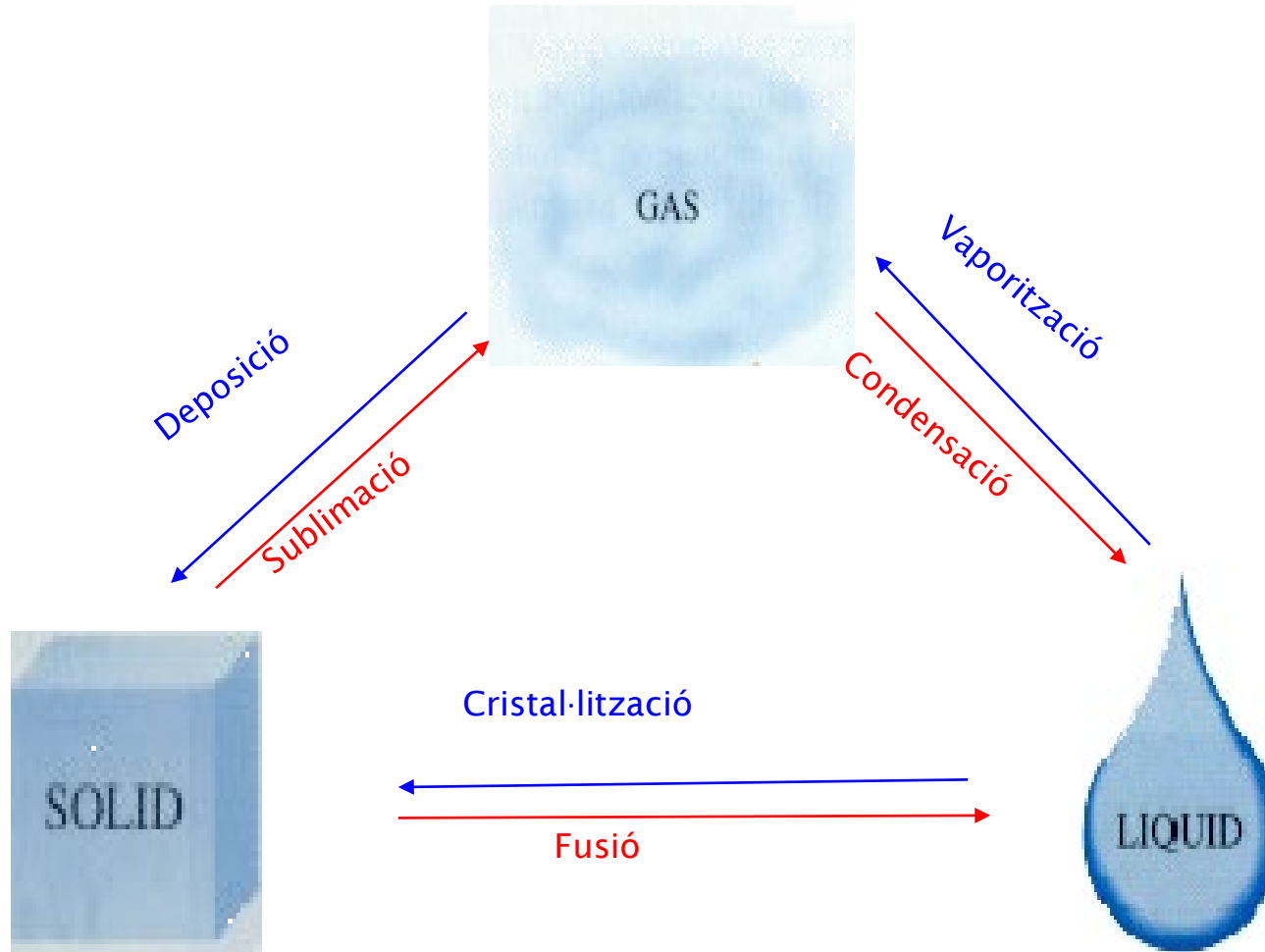


- Són menys densos que els líquids i els sòlids.
- Desordre total. Espai buit entre partícules.
- Llibertat completa de moviment.
- Ocupen tot el volum del recipient que els conté.
- Es poden comprimir fàcilment.

- Les substàncies són rígides.
- Partícules ordenades.
- Tenen forma definida.
- El volum no canvia amb la P o T.

# Classificació de la matèria

## Estat físic

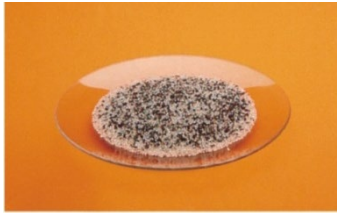


## Mescles

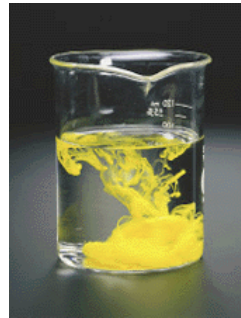
Substàncies pures

- Mescles heterogènies: no tenen la mateixa composició, aparença i propietats en tots els seus punts.
  
- Mescles homogènies o dissolucions: les seues propietats són uniformes en tots els seus punts, independentment de la grandària de la mostra.

## Mescles



Llimadura de ferro en arena.

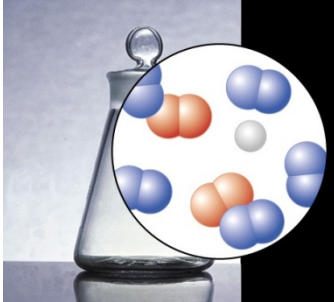


Aigua i iodur potàssic.

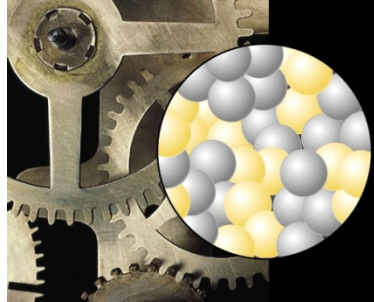


Granit:  
quars, feldespat i mica negra.

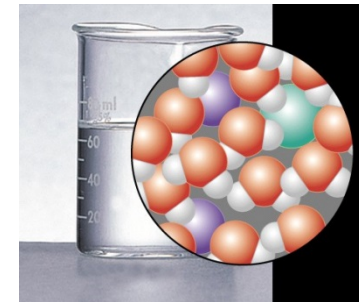
## Mescles



Aire: nitrogen (N<sub>2</sub>),  
oxigen (O<sub>2</sub>) i argó (Ar).



Llautó: coure (Cu) i zinc (Zn).

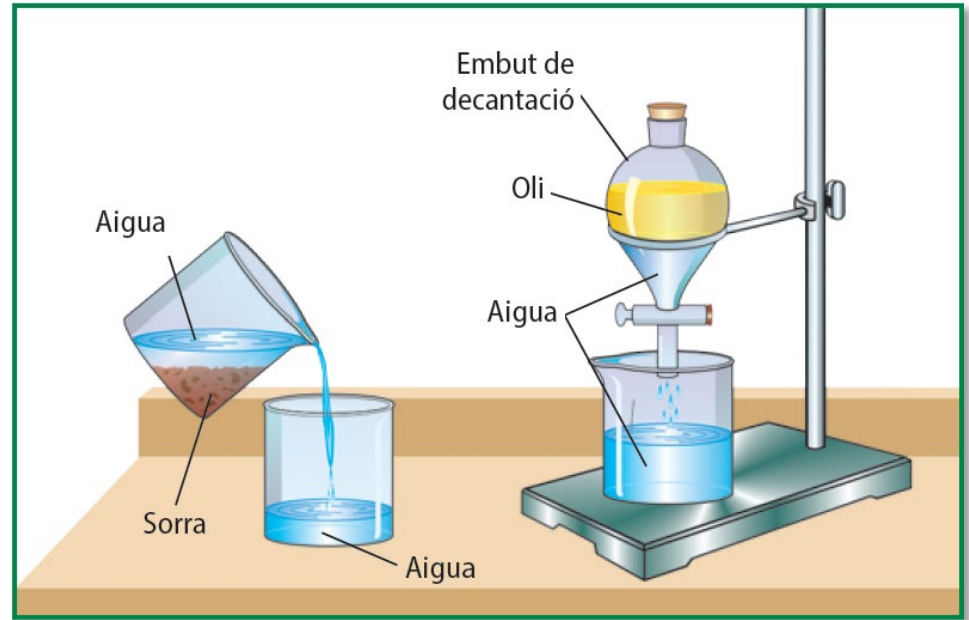


Sal dissolta en aigua.

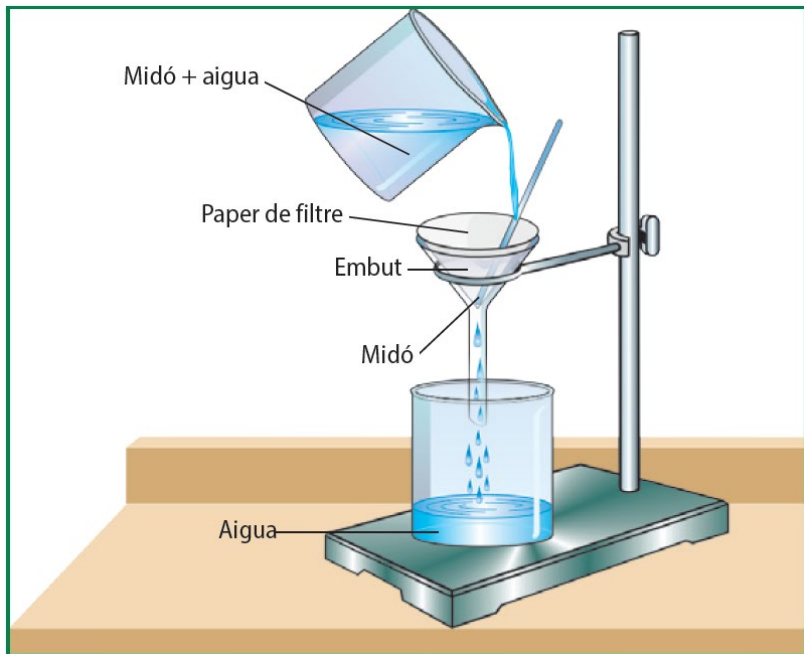


# Mescles heterogènies: separació

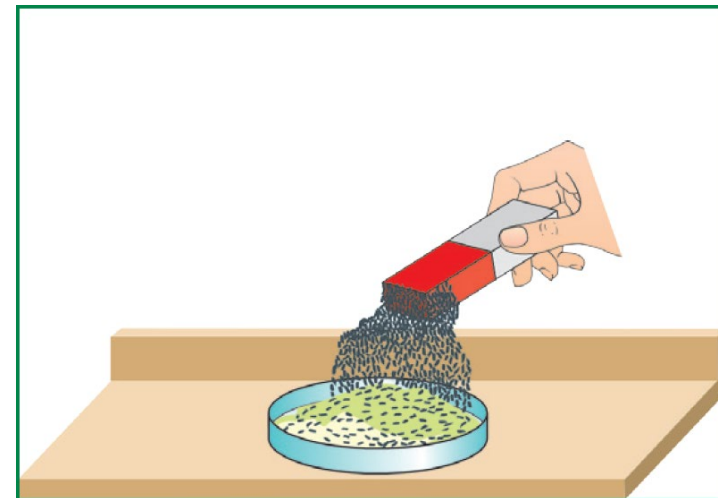
## Decantació



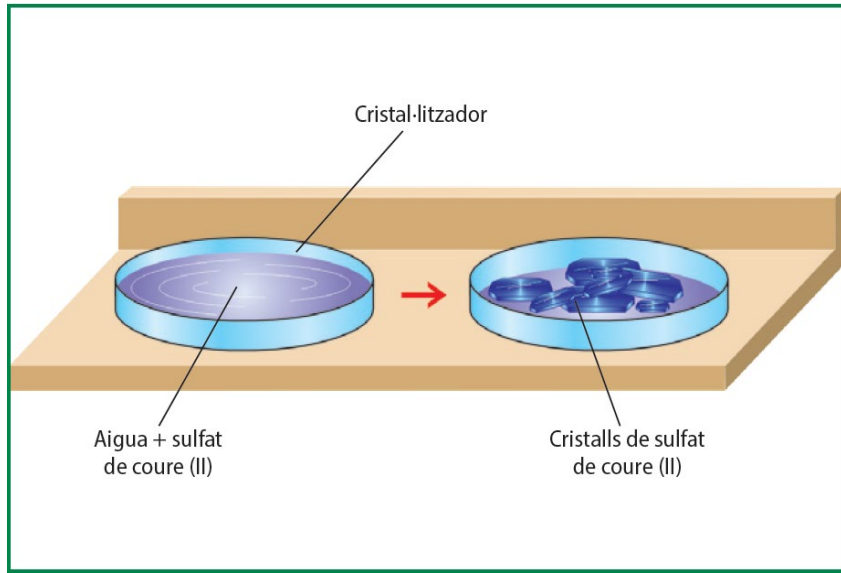
## Filtració



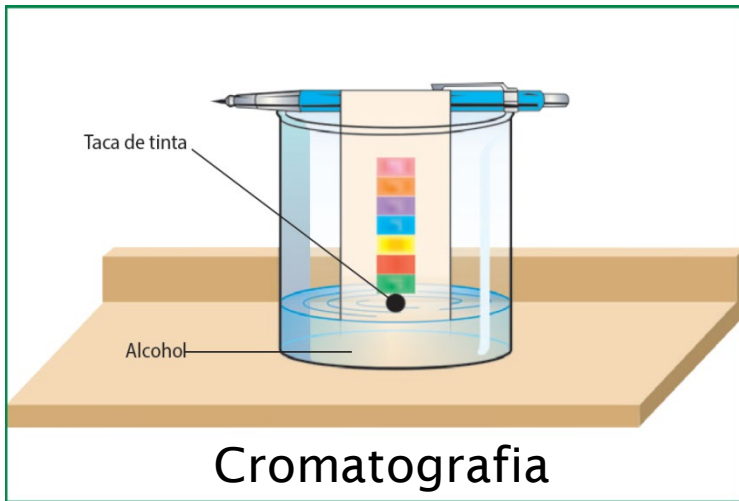
## Imantació



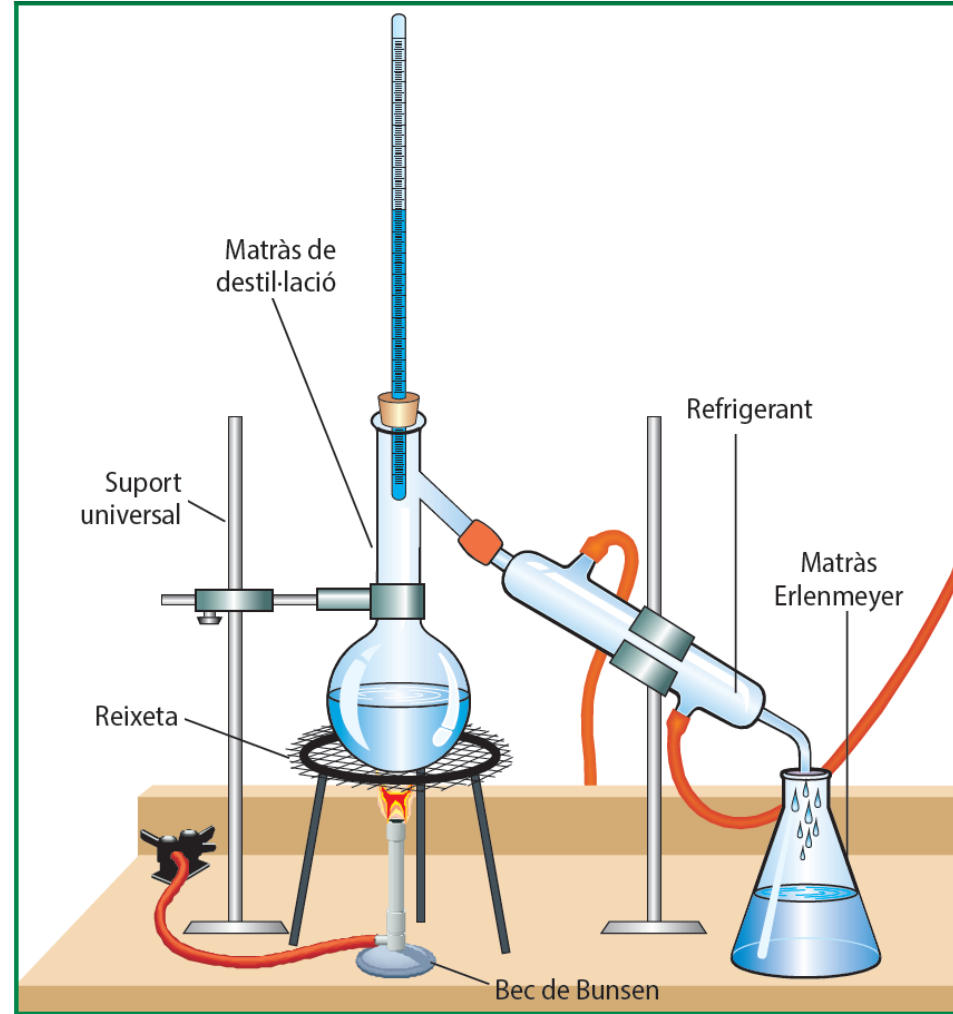
# Mescles homogènies: separació



Cristal·lització



Cromatografia



Destil·lació

## Substàncies pures

COMPOSTOS

ELEMENTS

# Substàncies pures

## elements

### Els elements

- Formes més simples de la matèria.
- Són substàncies en les quals trobem **un únic tipus d'àtom**.

### Es coneixen 118 elements diferents

- 28 s'han obtingut **artificialment** (no s'han trobat a la naturalesa).
- Tots estan ordenats en la **taula periòdica**.

# la TAULA PERIÒDICA

Metalls alcalins

Gasos nobles

Metalls alcalinoterris

Halògens

Grups principals

Metalls de transició

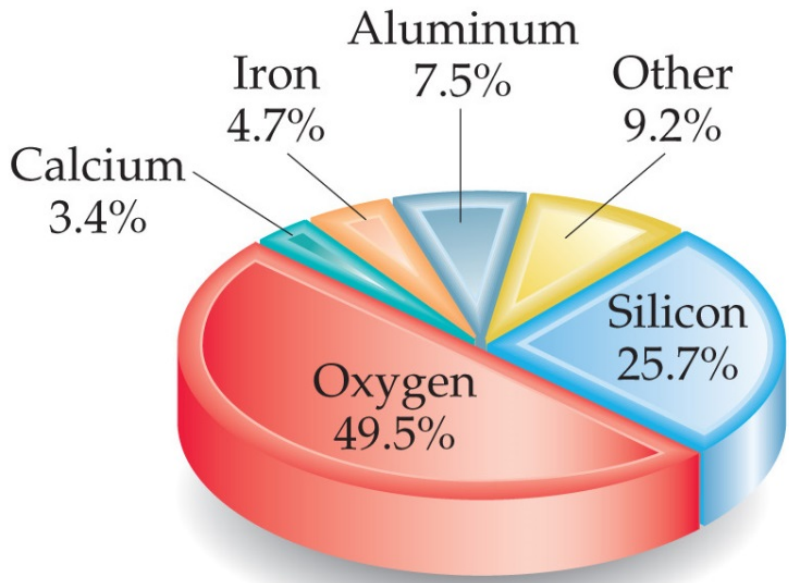
1A 1 H 1.00794	2 2A 4 Be 9.01218											13 3A 5 B 10.811	14 4A 6 C 12.011	15 5A 7 N 14.0067	16 6A 8 O 15.9994	17 7A 9 F 18.9984	18 8A 2 He 4.00260					
3 Li 6.941	11 Na 22.9898	19 K 39.0983	37 Rb 85.4678	55 Cs 132.905	87 Fr (223)	3 3B 21 Sc 44.9559	4 4B 22 Ti 47.88	5 5B 23 V 50.9415	6 6B 24 Cr 51.9961	7 7B 25 Mn 54.9381	8 8B 26 Fe 55.847	9 8B 27 Co 58.9332	10 8B 28 Ni 58.693	11 1B 29 Cu 63.546	12 2B 30 Zn 65.39	13 3A 31 Al 26.9815	14 4A 32 Si 28.0855	15 5A 33 P 30.9738	16 6A 34 S 32.066	17 7A 35 Cl 35.4527	18 8A 36 Ar 39.948	
						19 39 Y 88.9059	20 40 Zr 91.224	21 41 Nb 92.9064	22 42 Mo 95.94	23 43 Tc (98)	24 44 Ru 101.07	25 45 Rh 102.906	26 46 Pd 106.42	27 47 Ag 107.868	28 48 Cd 112.411	31 49 In 114.818	32 50 Sn 118.710	33 51 Sb 121.757	34 52 Te 127.60	35 53 I 126.904	36 54 Xe 131.29	
						*La 57 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	
						†Ac 89 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)		114 (287)		116 (289)		118 (293)	
*Lanthanide series						58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967			
†Actinide series						90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)			

Grups principals

Lantànids i actínids

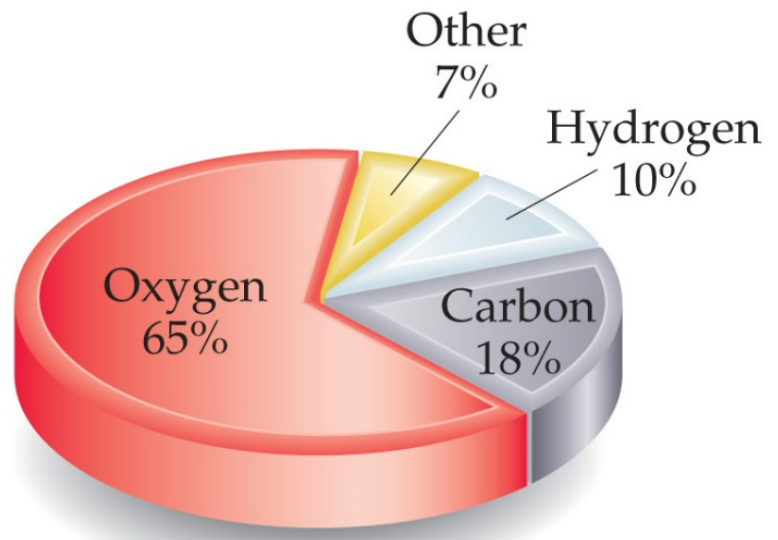
# Substàncies pures

elements



Earth's crust

(a)



Human body

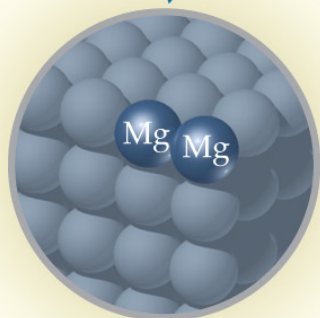
(b)

Els compostos són substàncies que resulten de **l'agrupació d'àtoms de diferents elements** en una proporció definida.

Els compostos **es poden descompondre en els seus elements només per mitjans químics**. Exemple: electròlisi de l'aigua.

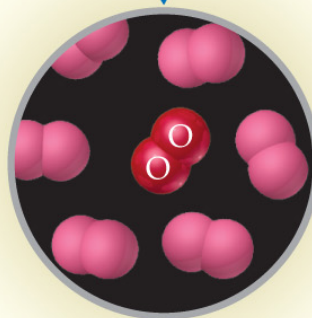
## COMBINATION REACTION

*In combination reactions, two or more substances react to form one product.*



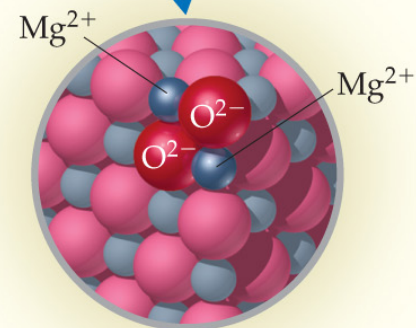
The ribbon of magnesium metal is surrounded by oxygen in the air, and as it burns, an intense flame is produced.

+



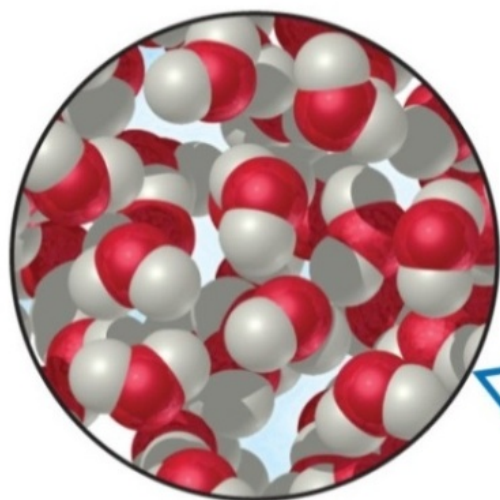
When magnesium metal burns, the Mg atoms react with  $\text{O}_2$  molecules from the air to form magnesium oxide,  $\text{MgO}$ , an ionic solid.

→

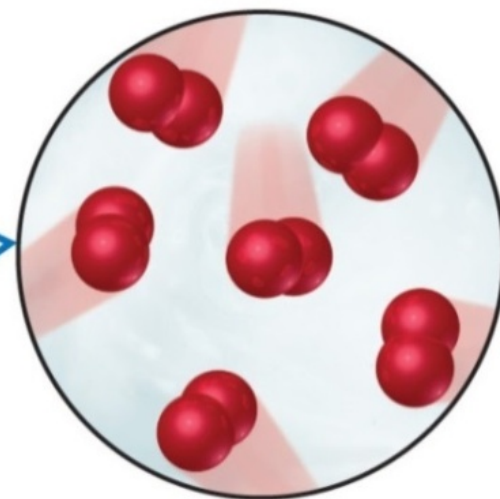
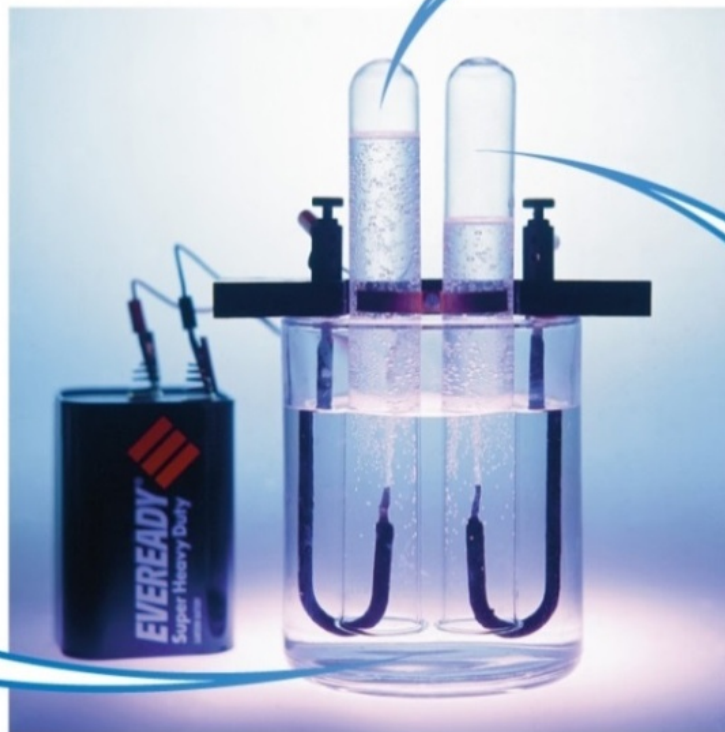


At the end of the reaction, a rather fragile ribbon of white solid,  $\text{MgO}$ , remains.

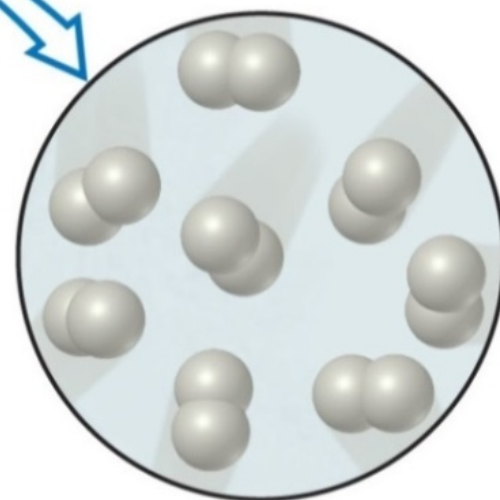




Water,  $\text{H}_2\text{O}$



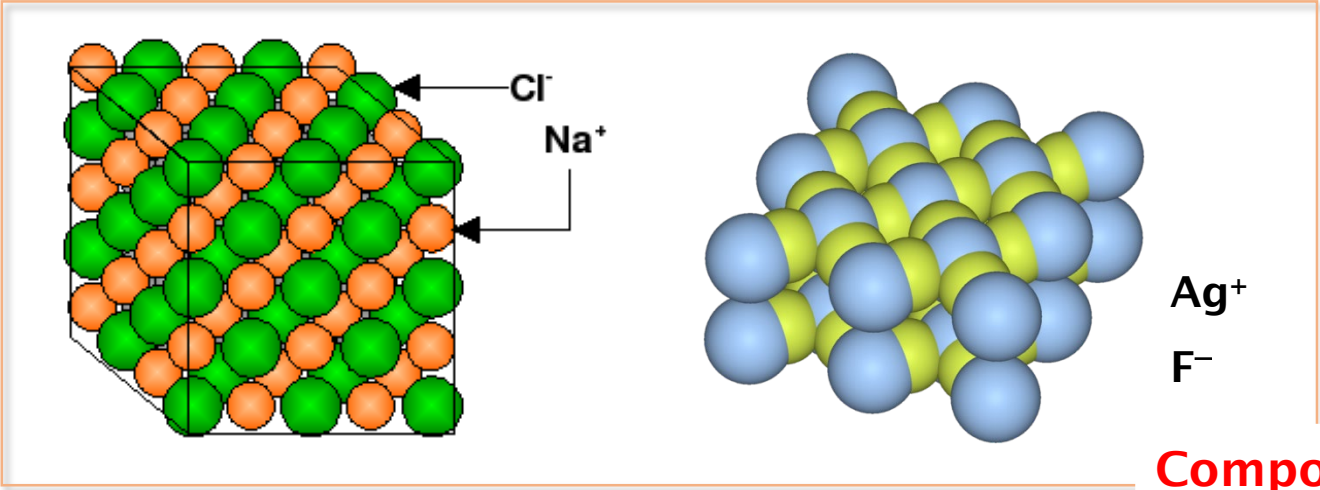
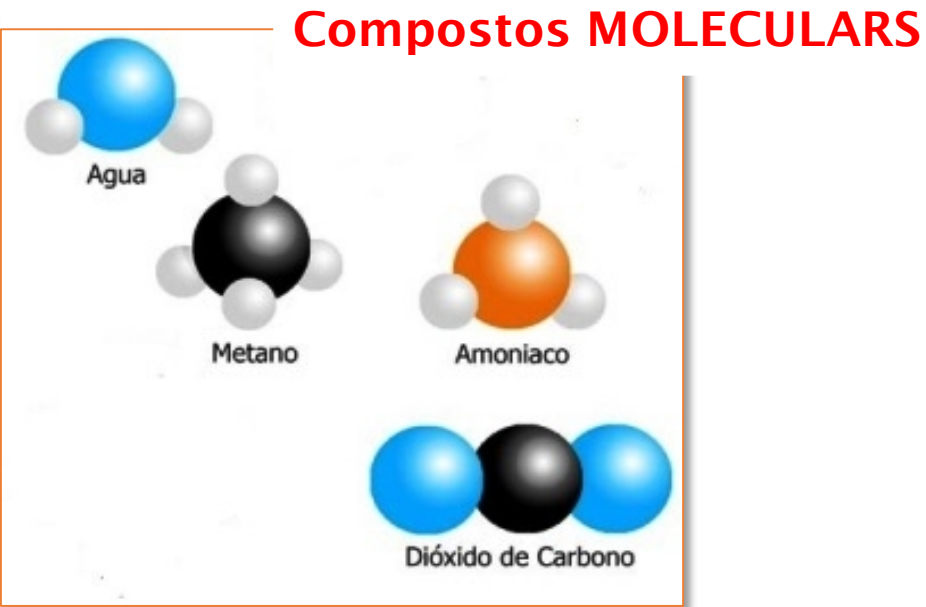
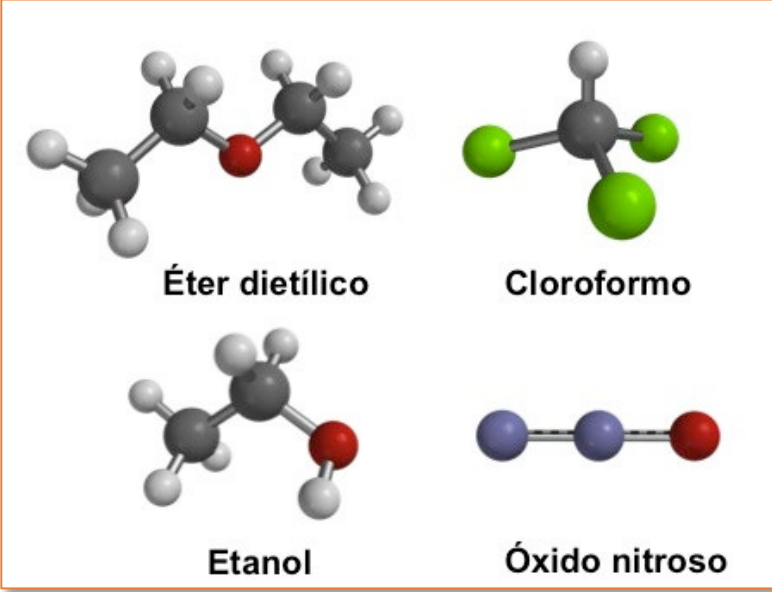
Oxygen gas,  $\text{O}_2$



Hydrogen gas,  $\text{H}_2$

# Substàncies pures

# Compostos



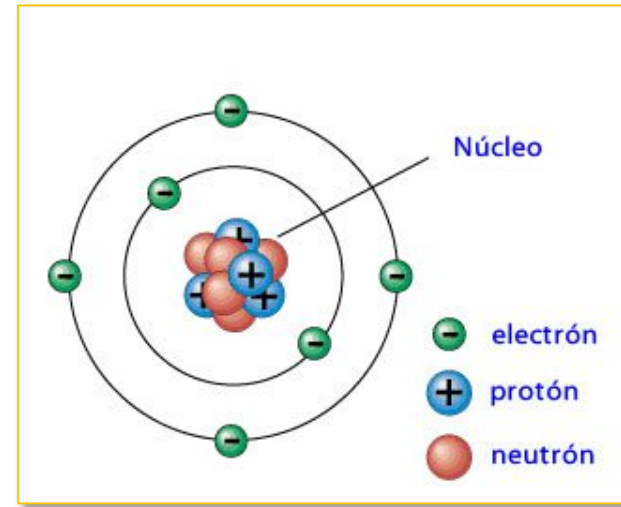
## Mesura de la matèria



- Pesos atòmics; molècules i fórmules químiques
- El nombre d'Avogadro i el mol.  
Composició percentual

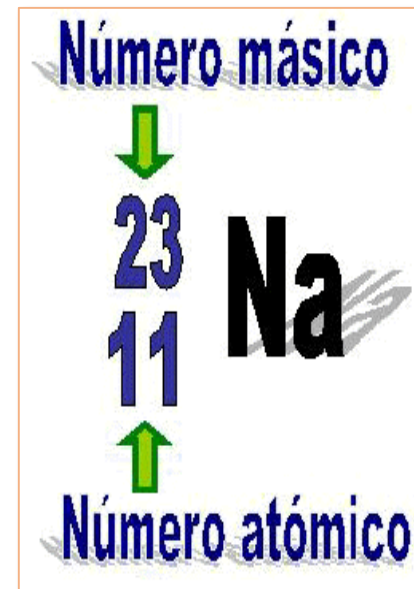


# Mesura de la matèria



□ **NOMBRE ATÒMIC (Z)** = nombre de protons

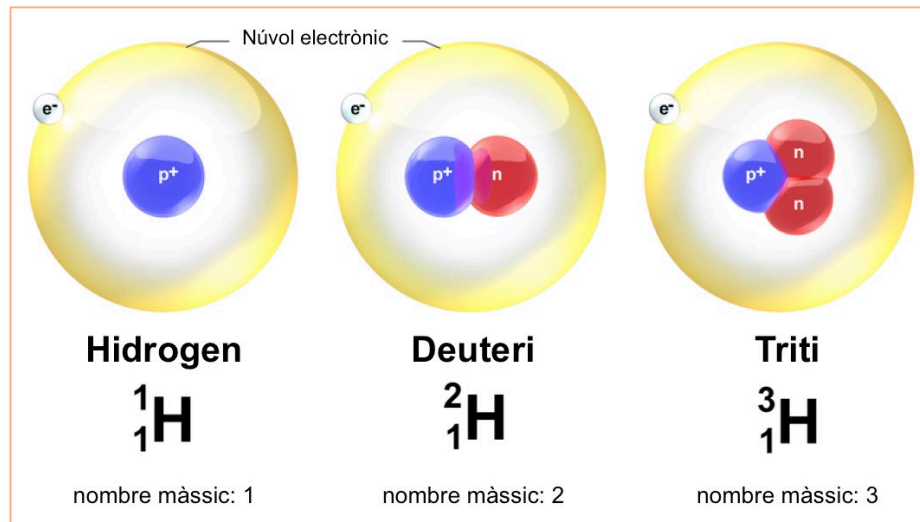
□ **NOMBRE MÀSSIC (A)** = protons + neutrons



# Mesura de la matèria

## ISÒTOPS

Àtoms d'un element que tenen el **mateix Z** però distint **A**, és a dir, tenen **diferent nombre de neutrons**.



# la TAULA PERIÒDICA

Metalls alcalins

Gasos nobles

Metalls alcalinoterris

Halògens

Grups principals

1A 1 H 1.00794	2 2A 4 Be 9.01218	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A 2 He 4.00260
3 Li 6.941	12 Mg 24.3050	3B	4B	5B	6B	7B	8B	9B	10B	11B	12B	13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.066	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9381	26 Fe 55.847	27 Co 58.9332	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 *La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra 226.025	89 †Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)		114 (287)		116 (289)		118 (293)

Metalls de transició

\*Lanthanide series

†Actinide series

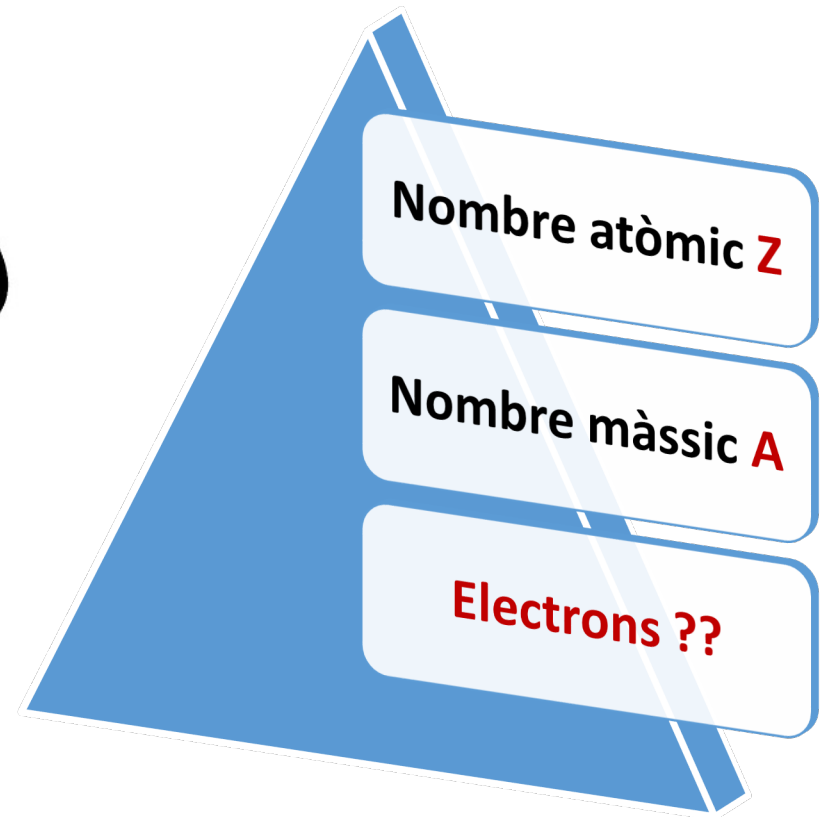
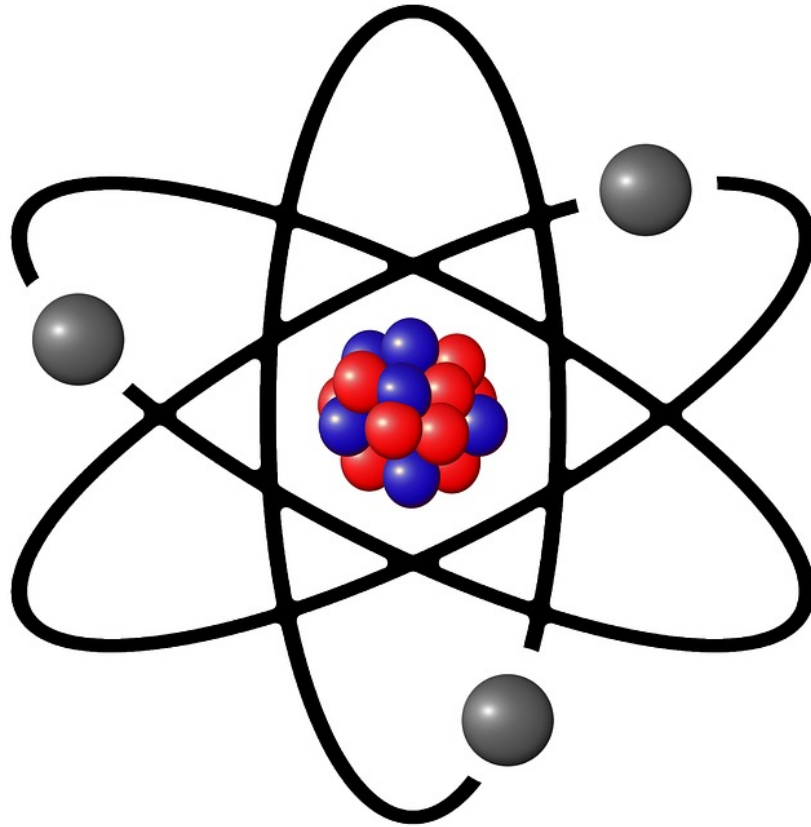
Grups principals

Lantànids i actínids

58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)

# Mesura de la matèria

Ordenació dels elements



# Mesura de la matèria



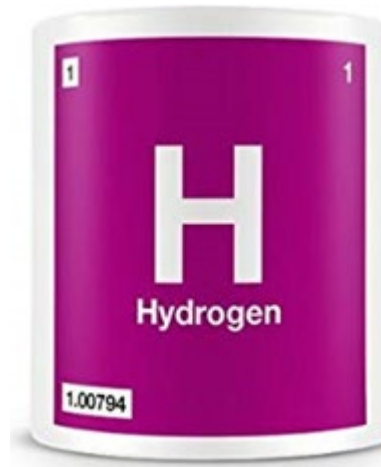
Quina és la massa  
d'un element?



# Mesura de la matèria

Massa atòmica

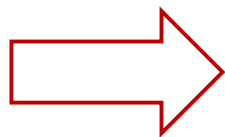
1 àtom de  $^{12}\text{C} = 12 \text{ uma}$



1 àtom de  $^1\text{H} = 1,00794 \text{ uma}$

1 àtom de  $^{16}\text{O} = 15,9949 \text{ uma}$

□ **Unitat de massa atòmica (u o uma)** =  $1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}$



(1 g =  $6,02214 \times 10^{23} \text{ uma}$ )

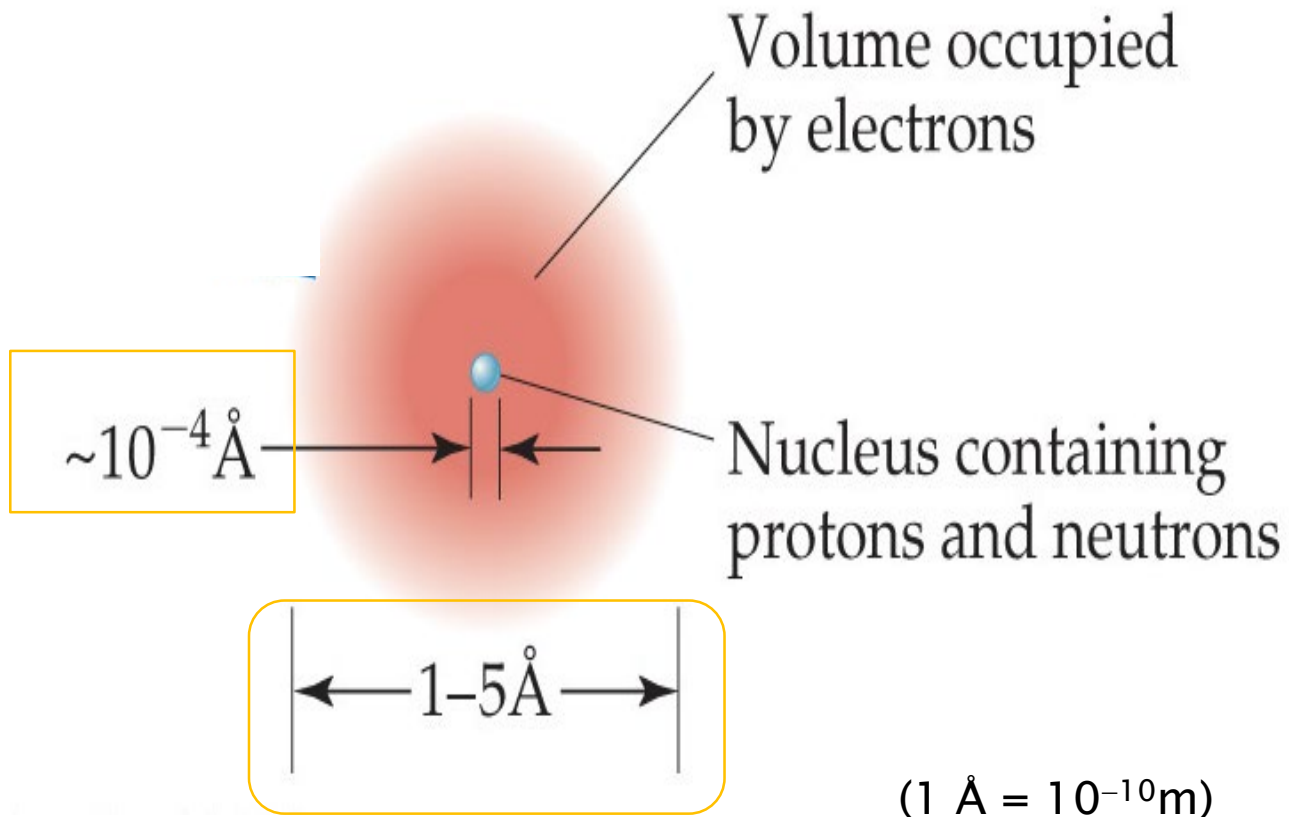
# Mesura de la matèria

**Table 3.1** *Properties of subatomic particles.*

Particle	Symbol	Unit charge, e <sup>a</sup>	Mass, g	Mass, u <sup>b</sup>
Electron	$e^- ({}_{-1}^0e^-)$	1-	$9.10939 \times 10^{-28}$	$5.48680 \times 10^{-4}$
Proton	$p ({}_{1}^1p^+)$	1+	$1.672623 \times 10^{-24}$	1.00728
Neutron	$n ({}_{0}^1n^0)$	0	$1.674929 \times 10^{-24}$	1.00866

<sup>a</sup>The charges here are given *relative* to the magnitude of the charge on the electron, which is called the **elementary charge**, which is  $1.60218 \times 10^{-19}$  C (coulomb).

<sup>b</sup>An **atomic mass unit**, u, is defined as exactly  $\frac{1}{12}$  the mass of a carbon-12 atom:  
 $u = 1.66054 \times 10^{-24}$  g. Relative atomic masses (see the end pages of this book) may be interpreted as molar masses in grams or as atomic masses in atomic mass units.



# Mesura de la matèria

Massa atòmica

## MASSA ATÒMICA O PES ATÒMIC

**Mitjana** de les masses dels isòtops naturals d'un element **ponderada** d'acord amb la seua **abundància** relativa.



Massa atòmica = 22,990 uma

# Mesura de la matèria



Quina és la massa  
d'un compost?

# Mesura de la matèria

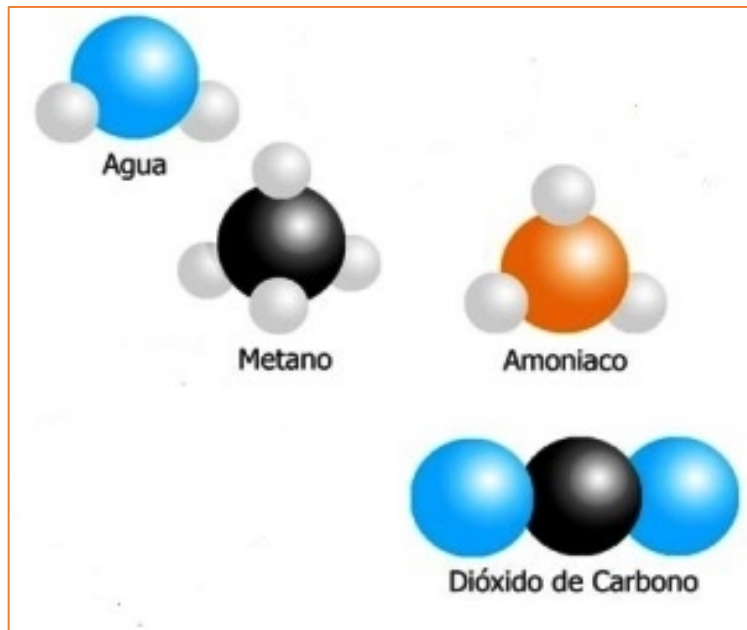
## MOLÈCULA

Conjunt **d'àtoms iguals o diferents** units estretament i que constitueixen la quantitat mínima d'una substància que manté **unes propietats químiques constants**.

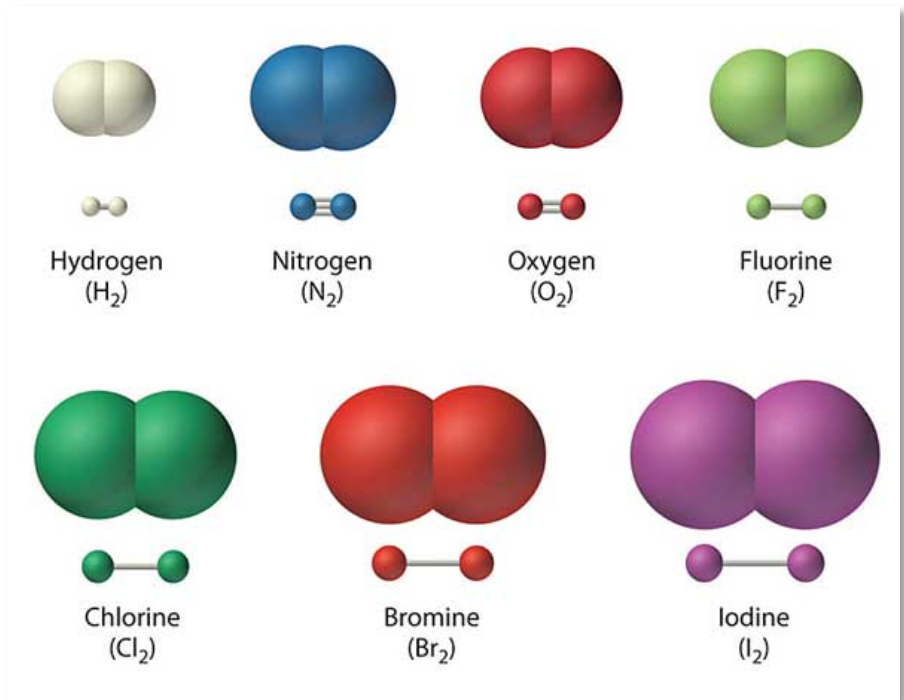
# Mesura de la matèria

## ELEMENTS

## Compostos MOLECULARS



## Elements que existeixen com a MOLÈCULES DIATÒMIQUES



# Mesura de la matèria

## Tipus de fórmules

### Fórmula empírica

Indica **la relació més senzilla** entre els àtoms d'una molècula.

### Fórmula molecular

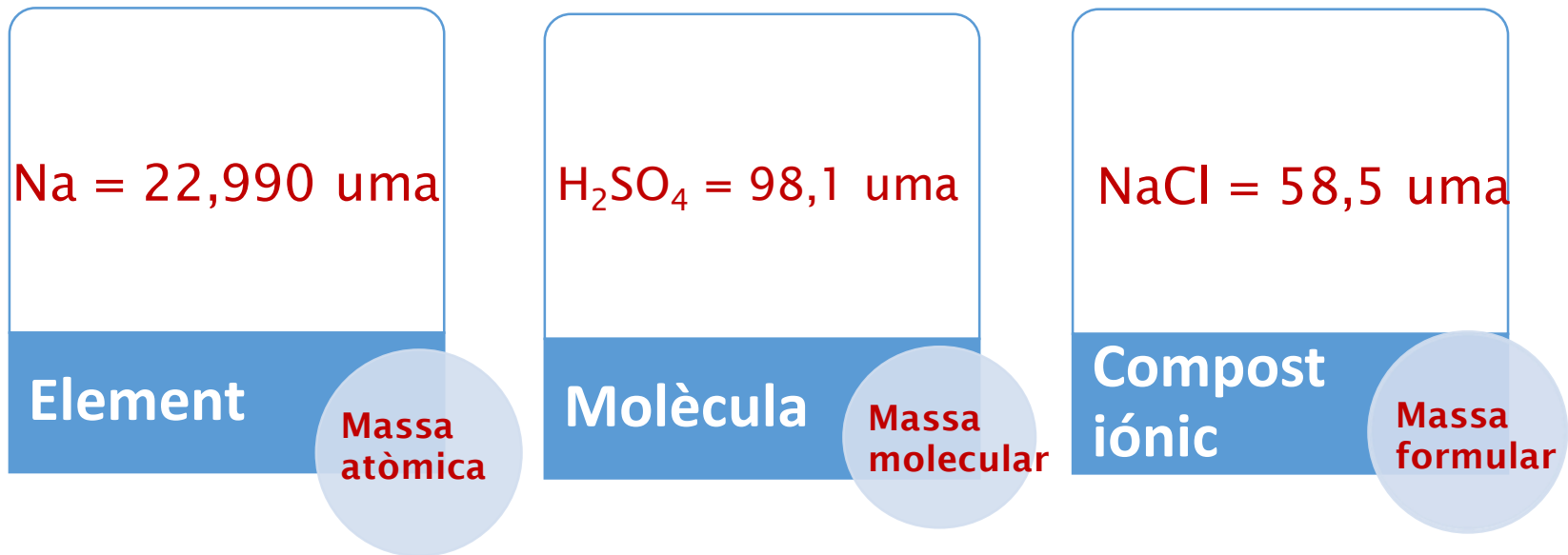
Indica **el nombre d'àtoms** que formen part d'una molècula.





# Mesura de la matèria

**Massa formular:** suma dels pesos atòmics de cadascun dels àtoms en una *fórmula química*.



# Mesura de la matèria

## El nombre d'Avogadro i el mol

Magnitud	Nom de la unitat	Símbol de la unitat
longitud	metre	m
massa	quilogram	kg
temps	segon	s
intensitat de corrent	ampere	A
temperatura	kelvin	K
<b>quantitat de substància</b>	<b>mol</b>	<b>mol</b>

# Mesura de la matèria

El nombre d'Avogadro i el mol



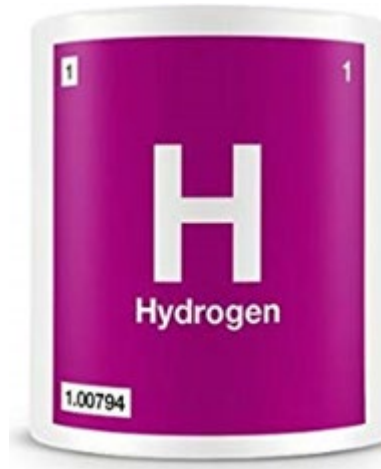
**1 KG**



# Mesura de la matèria

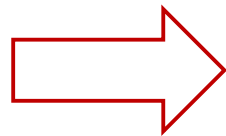
## Massa atòmica

1 àtom de  $^{12}\text{C} = 12 \text{ uma}$



1 àtom de  $^1\text{H} = 1,0078 \text{ uma}$

□ **Unitat de massa atòmica (u o uma)** =  $1,66054 \times 10^{-24} \text{ g}$



(1 g =  $6,02214 \times 10^{23} \text{ uma}$ )

# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

Un **mol** és la **quantitat de matèria** que conté tantes partícules (àtoms, molècules, ions...) com el nombre d'àtoms que hi ha exactament en 12g de  $^{12}\text{C}$ , que són  **$6.022 \times 10^{23}$**

**Nombre d'Avogadro**



From a drawing by C. Sentier, executed in Torino at Litografia Doyen in 1856. - [Edgar Fahs Smith collection](#).  
Domini públic.

# Mesura de la matèria

Massa atòmica

Una **dotzena** és la **quantitat de matèria** que conté tantes **partícules**

(àtoms, molècules, ions...) com

..... que en són

**12.**

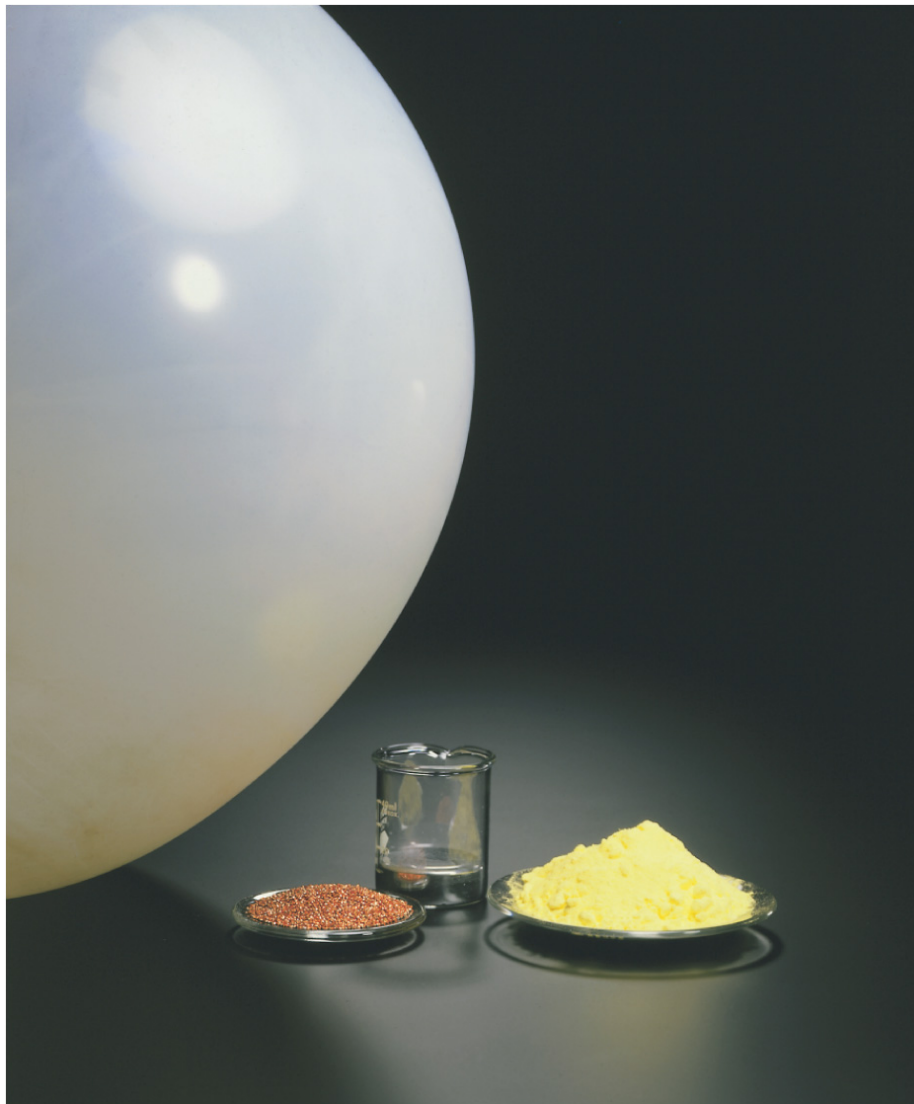
# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

- ✓ 1 mol d'àtoms de  $^{12}\text{C}$  =  $6,022 \times 10^{23}$  àtoms de  $^{12}\text{C}$
  - ✓ 1 mol de molècules de  $\text{H}_2\text{O}$  =  $6,022 \times 10^{23}$  molècules de  $\text{H}_2\text{O}$
  - ✓ 1 mol de ions  $\text{NO}_3^-$  =  $6,022 \times 10^{23}$  ions  $\text{NO}_3^-$
  - ✓ 1 mol de taronges Navel late?
- 
- ✓ 1 dotzena d'àtoms de  $^{12}\text{C}$  = 12 àtoms de  $^{12}\text{C}$
  - ✓ 1 dotzena de molècules de  $\text{H}_2\text{O}$  = 12 molècules de  $\text{H}_2\text{O}$
  - ✓ 1 dotzena d'ions  $\text{NO}_3^-$  = 12 ions  $\text{NO}_3^-$

# Mesura de la matèria

Concepte de mol



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

**MASSA MOLAR ( $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ )** = massa en **grams** d'un **mol** de substància.

La massa d'un àtom d'un element (**en uma**) és **numèricament igual** a la massa (en **grams**) d'**1 mol** d'àtoms d'aquest element. El mateix ocorre per a altres classes de substàncies (molècules, ions, unitats formulars...).

**Unitat de massa atòmica (u o uma)** =  $1,66054 \times 10^{-24}$  g

(1 g =  $6,02214 \times 10^{23}$  uma)

# Mesura de la matèria

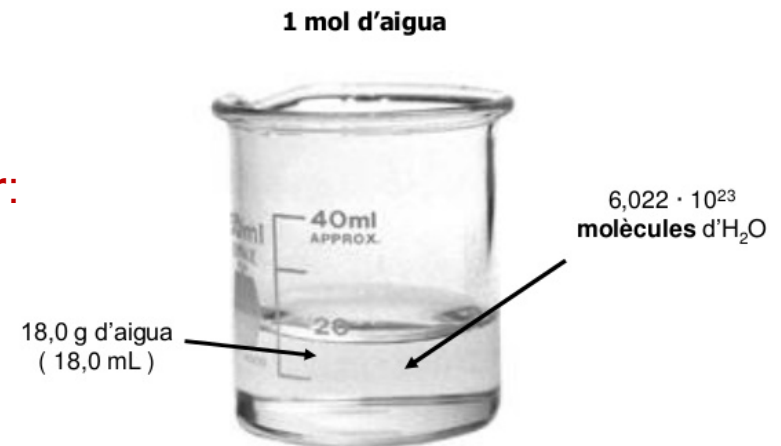
## Concepte de mol

- Per a un àtom coincidirà amb la **massa atòmica**:

1 **mol** de carboni son **12,0 g** de C  
(1 àtom de C = 12,0 uma)

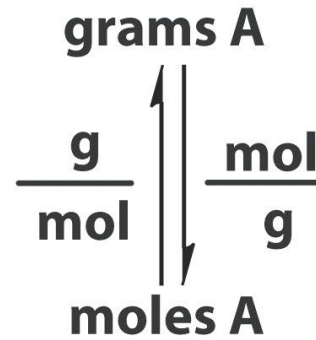
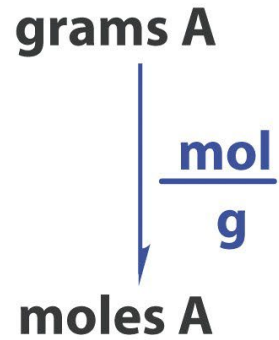
- Per a una molècula parlarem de **massa molar**:

1 **mol** d'aigua son **18,0 g** de H<sub>2</sub>O  
(1 molècula de H<sub>2</sub>O = 18,0 uma)



# Mesura de la matèria

Concepte de mol



# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

- Calculeu el nombre de mols de glucosa ( $C_6H_{12}O_6$ ) que hi ha en 5,380 g de  $C_6H_{12}O_6$
- Quantes molècules de glucosa hi ha en 5,23 g de  $C_6H_{12}O_6$ ?  
Quants àtoms d'oxigen hi ha en aquesta mostra?
- Determineu la fórmula d'un compost que té la següent composició percentual en pes: 24,75% K, 34,77% Mn, 40,51% O.

# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

- Calculeu el nombre de mols de glucosa ( $C_6H_{12}O_6$ ) que hi ha en 5,380 g de  $C_6H_{12}O_6$

$$M(C_6H_{12}O_6) = 6M(C) + 12M(H) + 6M(O) = 6(12,01 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) + 12(1,01 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) + 6(16,00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) = \mathbf{180,18 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}$$

$$1 \text{ mol de } C_6H_{12}O_6 = 180,18 \text{ g de } C_6H_{12}O_6$$

$$\begin{aligned} \text{Mols de } C_6H_{12}O_6 &= (5,380 \text{ g } \cancel{C_6H_{12}O_6}) \left( \frac{1 \text{ mol } C_6H_{12}O_6}{180,18 \text{ g } \cancel{C_6H_{12}O_6}} \right) \\ &= \mathbf{0,0299 \text{ mol } C_6H_{12}O_6} \end{aligned}$$

# Mesura de la matèria

## Concepte de mol

- Quantes molècules de glucosa hi ha en 5,23 g de  $C_6H_{12}O_6$ ?  
Quants àtoms d'oxigen hi ha en aquesta mostra?

Molècules de  $C_6H_{12}O_6$

$$= (5,23 \text{ g } \cancel{C_6H_{12}O_6}) \left( \frac{1 \text{ mol } \cancel{C_6H_{12}O_6}}{180,2 \text{ g } \cancel{C_6H_{12}O_6}} \right) \left( \frac{6,02 \times 10^{23} \text{ molècules de } C_6H_{12}O_6}{1 \text{ mol } \cancel{C_6H_{12}O_6}} \right)$$
$$= 1,75 \times 10^{22} \text{ molècules de } C_6H_{12}O_6$$

Àtoms de O =  $(1,75 \times 10^{22} \text{ molècules de } \cancel{C_6H_{12}O_6}) \left( \frac{6 \text{ àtoms O}}{1 \text{ molècula de } \cancel{C_6H_{12}O_6}} \right)$

$$= 1,05 \times 10^{23} \text{ àtoms de O}$$

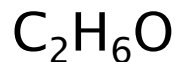
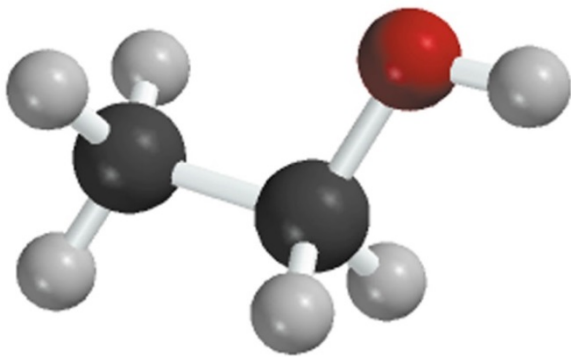
# Mesura de la matèria

## Composició percentual

Percentatge en massa amb què contribueix cada element a la substància.

$$\% \text{ de l'element} = \frac{n \times \text{massa molar de l'element}}{\text{massa molar del compost}} \times 100\%$$

**n** és el nombre de mols de l'element en **1 mol** del compost



$$\% \text{ C} = \frac{2 \times (12,01 \text{ g})}{46,07 \text{ g}} \times 100\% = 52,14\%$$

$$\% \text{ H} = \frac{6 \times (1,008 \text{ g})}{46,07 \text{ g}} \times 100\% = 13,13\%$$

$$\% \text{ O} = \frac{1 \times (16,00 \text{ g})}{46,07 \text{ g}} \times 100\% = 34,73\%$$

$$52,14\% + 13,13\% + 34,73\% = 100,0\%$$

# Mesura de la matèria

## Composició percentual

- Determineu la fórmula d'un compost que té aquesta composició percentual en pes: 24,75% K, 34,77% Mn, 40,51% O.

$$n_{\text{K}} = 24,75 \text{ g K} \times \frac{1 \text{ mol K}}{39,10 \text{ g K}} = 0,6330 \text{ mol K}$$

$$n_{\text{Mn}} = 34,77 \text{ g Mn} \times \frac{1 \text{ mol Mn}}{54,94 \text{ g Mn}} = 0,6329 \text{ mol Mn}$$

$$n_{\text{O}} = 40,51 \text{ g O} \times \frac{1 \text{ mol O}}{16,00 \text{ g O}} = 2,532 \text{ mol O}$$

K  $\approx$  1 àtom

Mn = 1 àtom

O  $\approx$  4 àtoms



Fórmula empírica



## Reaccions químiques

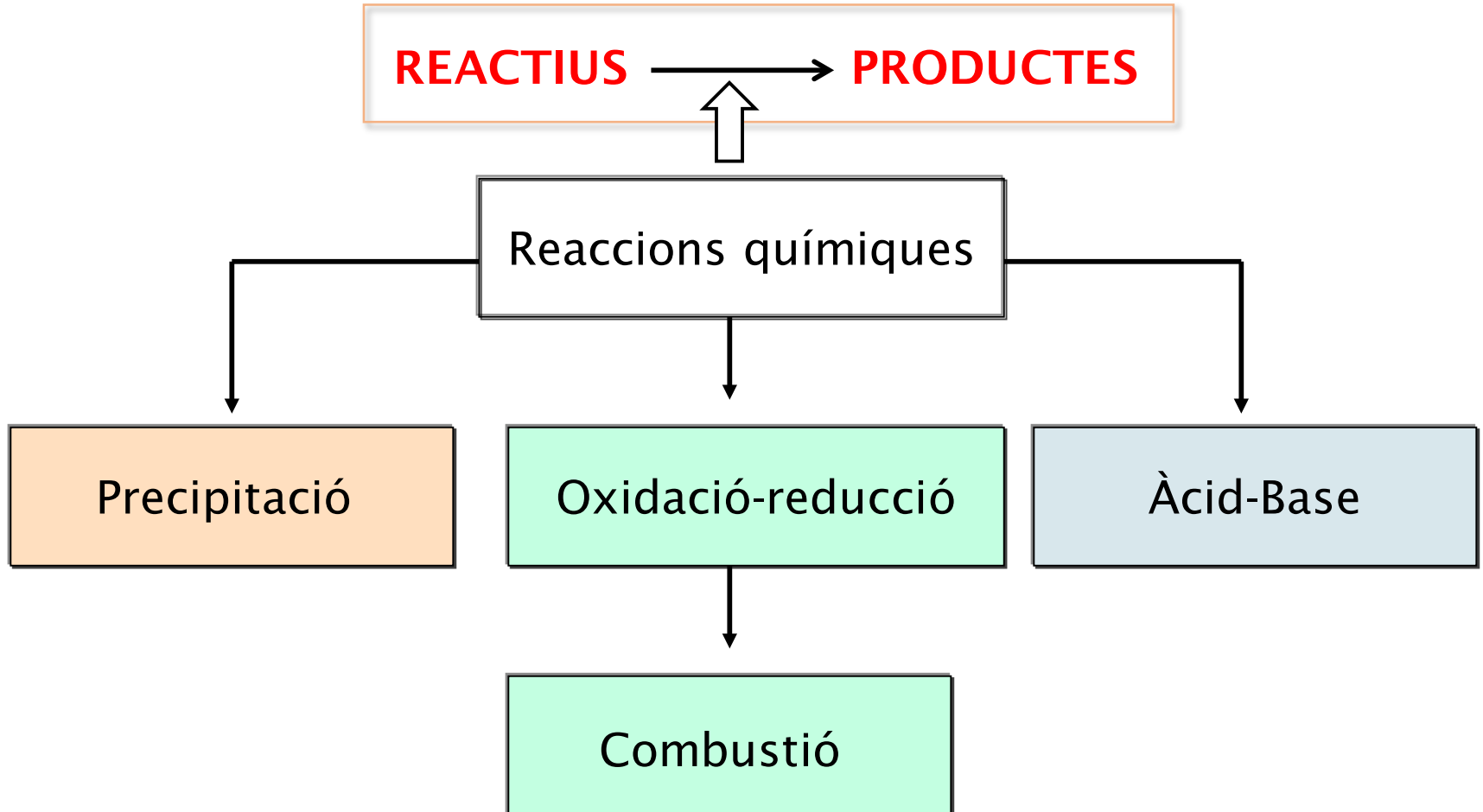


- Estequiometria
- Dissolucions i gasos

# Reaccions químiques

Estequiometria

Processos pels quals la **matèria es transforma**.

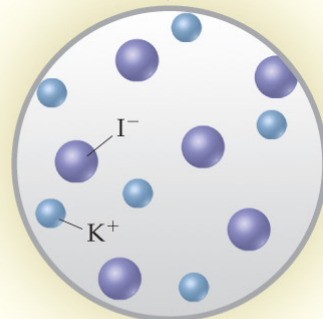


# Reaccions químiques

## Precipitació

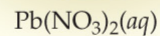
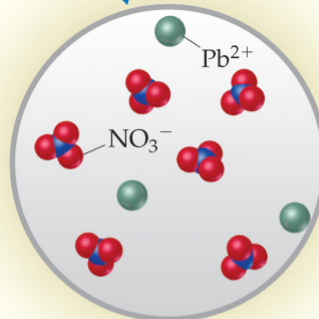
### PRECIPITATION REACTION

Reactions that result in the formation of an insoluble product are known as precipitation reactions.



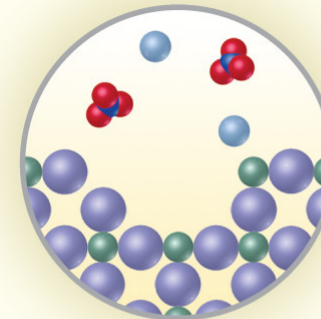
The addition of a colorless solution of potassium iodide (KI)

+



to a colorless solution of lead nitrate

→



$PbI_2(s) + 2 \text{KNO}_3(aq)$   
produces a yellow precipitate of lead iodide ( $PbI_2$ ) that slowly settles to the bottom of the beaker.

# Reacciones químicas

Àcid-base



(a)

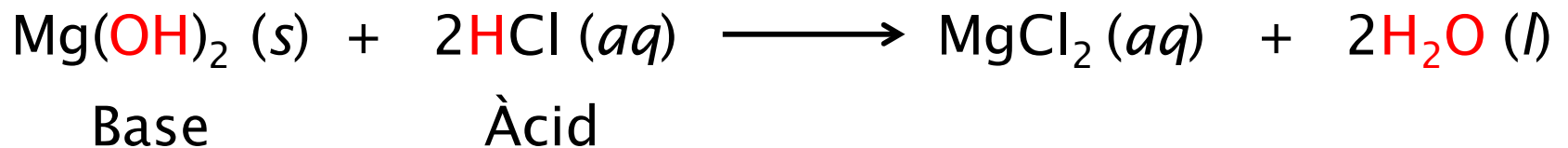


(b)



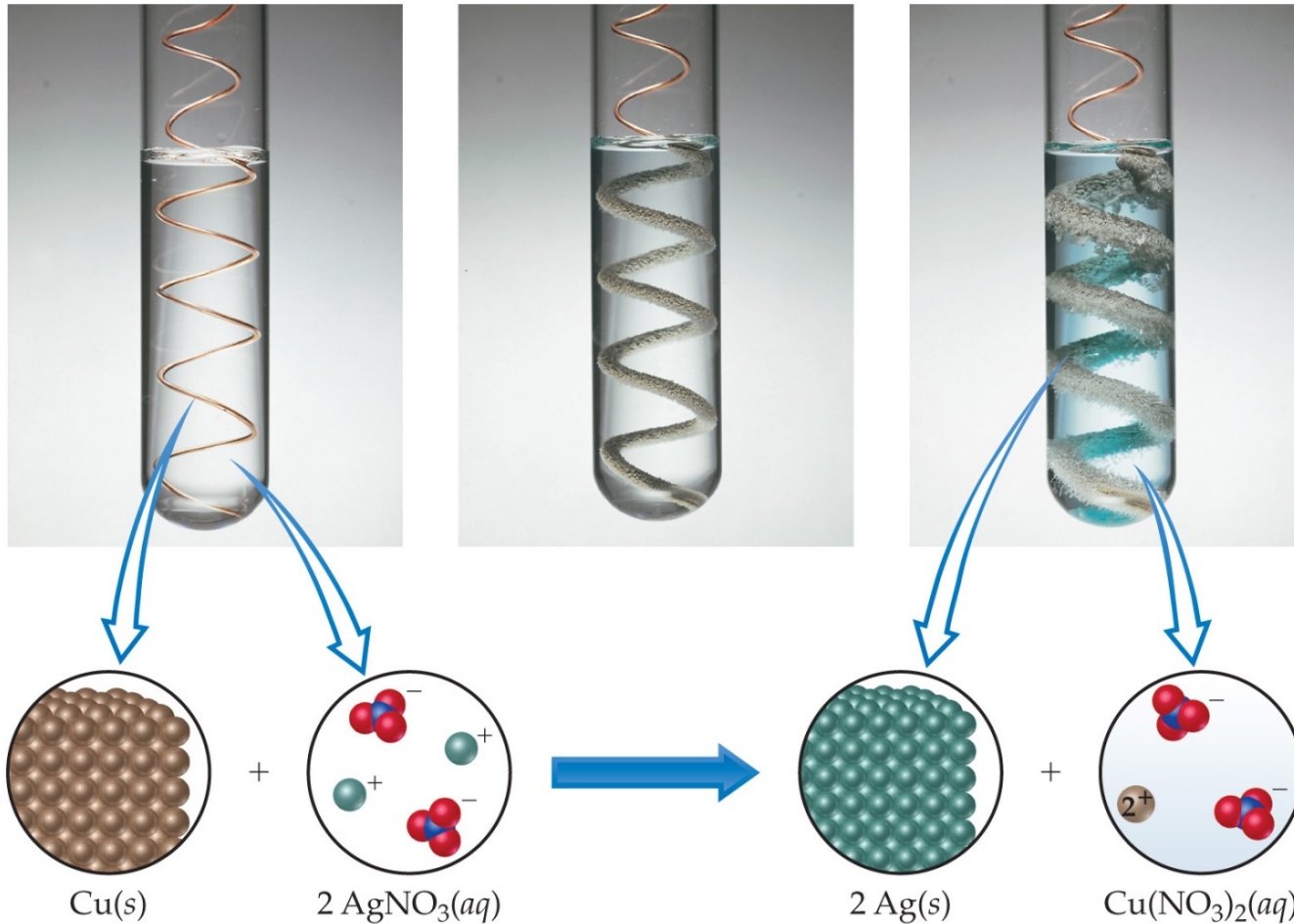
(c)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Reaccions químiques

Oxidació-reducció



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

$\text{Cu}(0)$

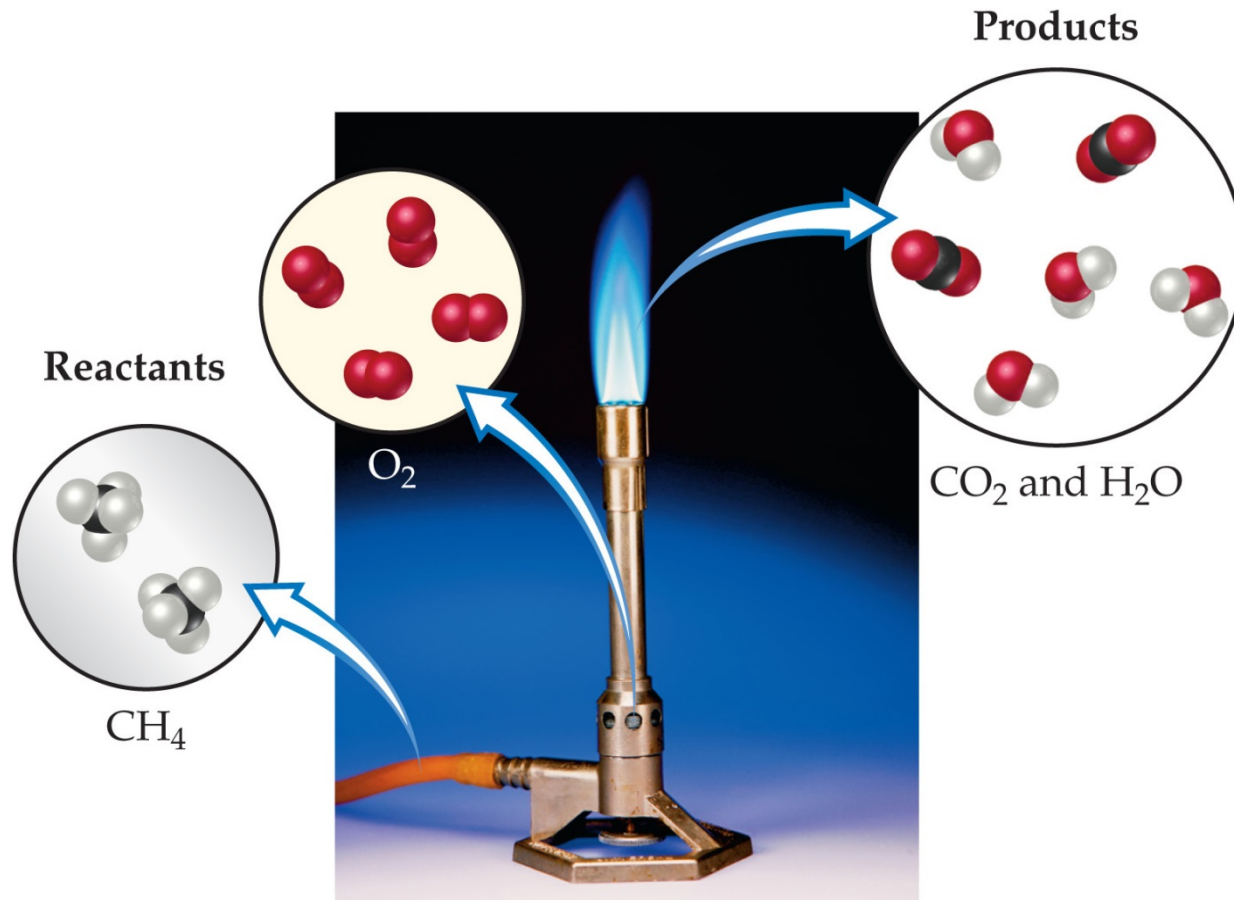
$\text{Ag}^+$

$\text{Ag}(0)$

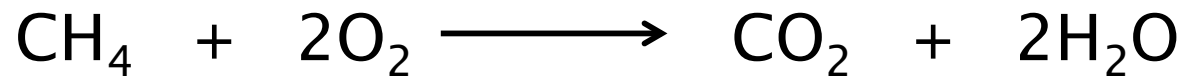
$\text{Cu}^{2+}$

# Reaccions químiques

Combustió



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



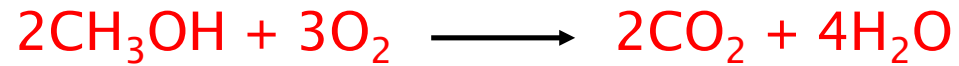
# Reaccions químiques

Igualació



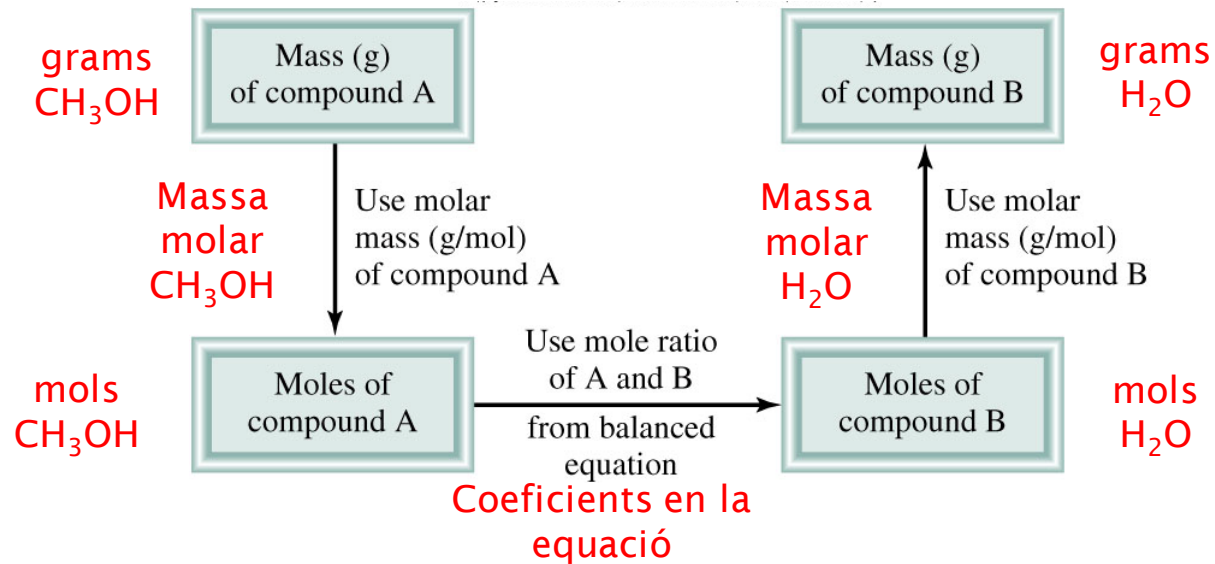
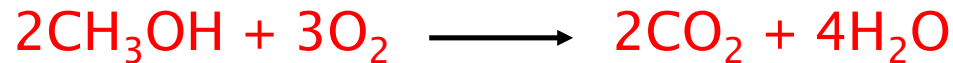
**Coefficients estequiomètrics**

El metanol fa combustió en l'aire segons aquesta equació. Si 209 g de metanol es consumeixen en la combustió, quina massa d'aigua s'hi produeix?





El metanol fa combustió en l'aire segons aquesta equació. Si 209 g de metanol es consumeixen en la combustió, quina massa d'aigua s'hi produeix?



$$209 \text{ g } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}} \times \frac{1 \text{ mol } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}}}{32,0 \text{ g } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}}} \times \frac{4 \text{ mol } \text{H}_2\text{O}}{2 \text{ mol } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}}} \times \frac{18,0 \text{ g } \text{H}_2\text{O}}{1 \text{ mol } \cancel{\text{H}_2\text{O}}} =$$

235 g  $\text{H}_2\text{O}$

# Reaccions químiques

Reactiu limitant

Exemple:

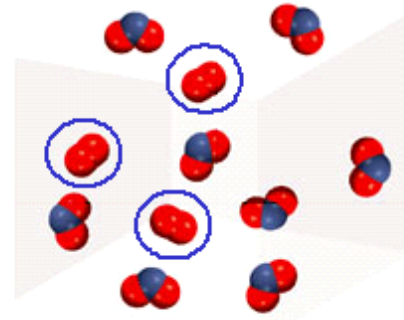
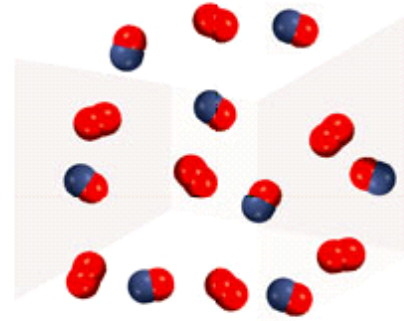


**NO** és el **reactiu limitant**

↓  
Reactiu que es consumeix totalment en una reacció.

$\text{O}_2$  és el **reactiu en excés**

Antes de comenzar la reacción



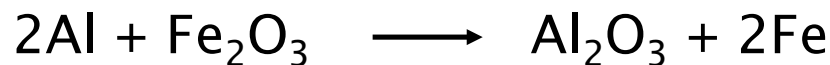
Después que la reacción se completa



A una reacció, 124 g de Al reaccionen amb 601 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Calculeu la massa de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  que es forma.



A una reacció, 124 g de Al reaccionen amb 601 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Calcule la massa de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  que es forma.



$$124 \text{ g Al} \times \frac{1 \text{ mol Al}}{27,0 \text{ g Al}} \times \frac{1 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3}{2 \text{ mol Al}} \times \frac{160 \text{ g Fe}_2\text{O}_3}{1 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3} = 367 \text{ g Fe}_2\text{O}_3$$

Per a 124 g de Al calen 367 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

Com que hi ha més  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  (601 g), **Al és el reactiu limitant**

S'utilitza el reactiu limitant per a calcular la quantitat de producte que es pot formar:

$$124 \text{ g Al} \times \frac{1 \text{ mol Al}}{27,0 \text{ g Al}} \times \frac{1 \text{ mol Al}_2\text{O}_3}{2 \text{ mol Al}} \times \frac{102 \text{ g Al}_2\text{O}_3}{1 \text{ mol Al}_2\text{O}_3} = 234 \text{ g Al}_2\text{O}_3$$

# Reaccions químiques

## Rendiment d'una reacció

El **rendiment teòric** és la quantitat de producte que resultaria si **tot** el reactiu limitant reaccionara.

El **rendiment real** és la quantitat de producte que realment s'obté de la reacció. (**No és mai major que el rendiment teòric.**)

$$\text{Rendiment percentual [\%]} = \frac{\text{rendiment real}}{\text{rendiment teòric}} \times 100$$

# Reaccions químiques

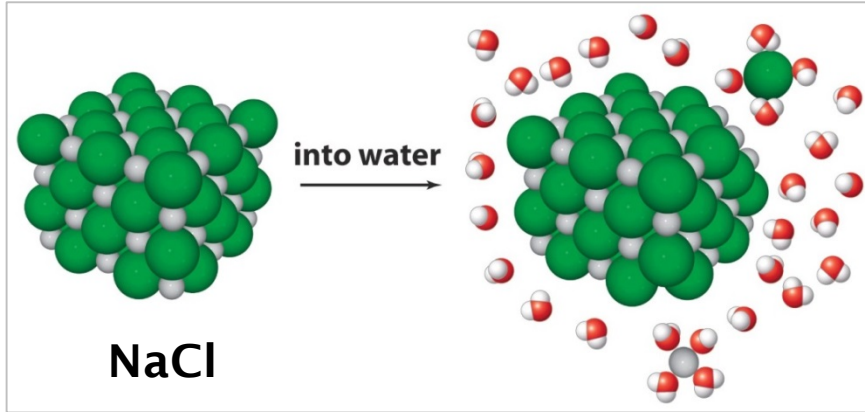
## Rendiment d'una reacció

En una reacció, 177g d'un mineral de Al de riquesa en alumini del 70 % reaccionen amb 601 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Calculeu la massa d' $\text{Al}_2\text{O}_3$  que es forma si el rendiment de la reacció és del 65 %.

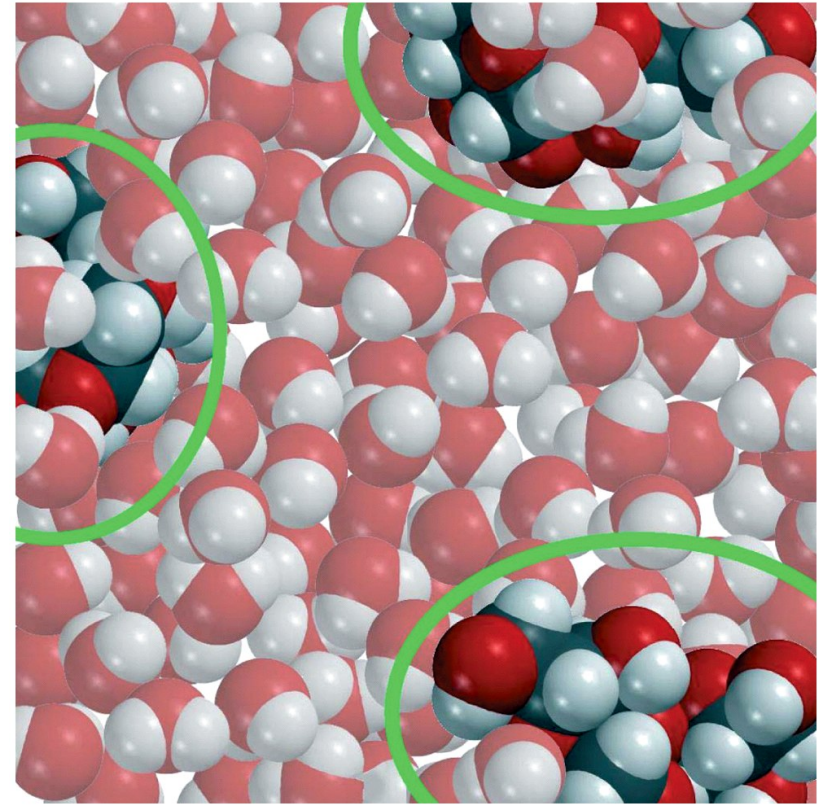
# Reaccions químiques

Dissolucions

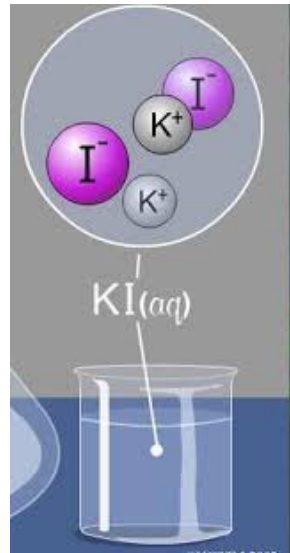
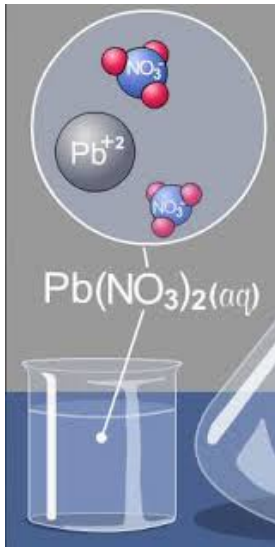
Electròlits



No electròlits



Molècules de sacarosa  
(sucre) dissoltes en aigua.



# Reaccions químiques

## Dissolucions

### Percentatge

- **Massa:**  $\text{g solut/g dissolució} \times 100$
- **Volum:**  $\text{ml solut/mL dissolució} \times 100$

### Fracció

- **Molar:**  $\text{mols solut A}/(\text{mols de solut} + \text{mols de dissolvent})$
- **Parts per milió (ppm):**  $\text{mg solut/Kg dissolució}$

### Concentració

- **Molaritat:**  $\text{mols solut/L dissolució}$
- **Molalitat:**  $\text{mols solut/kg dissolvent}$
- **Massa/volum:**  $\text{g solut/L dissolució}$



# Reaccions químiques

Gasos



L'atmosfera

## L'atmosfera

Component*	Content (mole fraction)	Molar Mass
Nitrogen	0.78084	28.013
Oxygen	0.20948	31.998
Argon	0.00934	39.948
Carbon dioxide	0.000382	44.0099
Neon	0.00001818	20.183
Helium	0.00000524	4.003
Methane	0.000002	16.043
Krypton	0.00000114	83.80
Hydrogen	0.0000005	2.0159
Nitrous oxide	0.0000005	44.0128
Xenon	0.000000087	131.30

\*Ozone, sulfur dioxide, nitrogen dioxide, ammonia, and carbon monoxide are present as trace gases in variable amounts.

# Reacciones químicas

## Gasos

**TABLE 18.3** ■ Sources and Typical Concentrations of Some Minor Atmospheric Constituents

Minor Constituent	Sources	Typical Concentrations
Carbon dioxide, CO <sub>2</sub>	Decomposition of organic matter; release from the oceans; fossil-fuel combustion	375 ppm throughout the troposphere
Carbon monoxide, CO	Decomposition of organic matter; industrial processes; fossil-fuel combustion	0.05 ppm in unpolluted air; 1–50 ppm in urban traffic areas
Methane, CH <sub>4</sub>	Decomposition of organic matter; natural-gas seepage	1.77 ppm throughout the troposphere
Nitric oxide, NO	Electrical discharges; internal combustion engines; combustion of organic matter	0.01 ppm in unpolluted air; 0.2 ppm in smog
Ozone, O <sub>3</sub>	Electrical discharges; diffusion from the stratosphere; photochemical smog	0 to 0.01 ppm in unpolluted air; 0.5 ppm in photochemical smog
Sulfur dioxide, SO <sub>2</sub>	Volcanic gases; forest fires; bacterial action; fossil-fuel combustion; industrial processes	0 to 0.01 ppm in unpolluted air; 0.1–2 ppm in polluted urban environment

# Reacciones químicas

## Gasos

**TABLE 10.1** ■ Some Common Compounds That Are Gases at Room Temperature

Formula	Name	Characteristics
HCN	Hydrogen cyanide	Very toxic, slight odor of bitter almonds
H <sub>2</sub> S	Hydrogen sulfide	Very toxic, odor of rotten eggs
CO	Carbon monoxide	Toxic, colorless, odorless
CO <sub>2</sub>	Carbon dioxide	Colorless, odorless
CH <sub>4</sub>	Methane	Colorless, odorless, flammable
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	Ethylene	Colorless, ripens fruit
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Propane	Colorless, odorless, bottled gas
N <sub>2</sub> O	Nitrous oxide	Colorless, sweet odor, laughing gas
NO <sub>2</sub>	Nitrogen dioxide	Toxic, red-brown, irritating odor
NH <sub>3</sub>	Ammonia	Colorless, pungent odor
SO <sub>2</sub>	Sulfur dioxide	Colorless, irritating odor

# Reaccions químiques

Gasos

Menys densos  
que líquids i  
sòlids.

Ocupen tot el  
volum del  
recipient que  
els contenen.

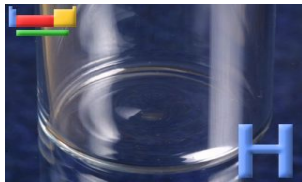
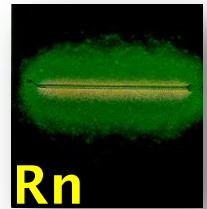
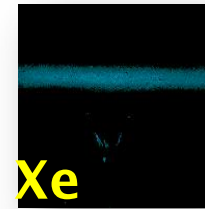
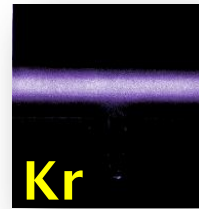
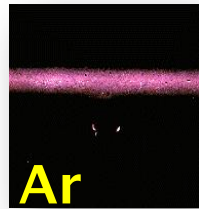
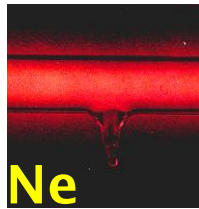
Poden expandir-  
se i comprimir-  
se fàcilment.

Formen mescles  
homogènies els  
uns amb els  
altres.

# Reaccions químiques

Gasos

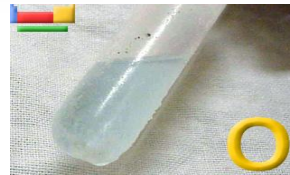
Elements que  
existeixen com a  
gasos en  
condicions normals  
(T i P)



H<sub>2</sub>



N<sub>2</sub>



O<sub>2</sub>



F<sub>2</sub>

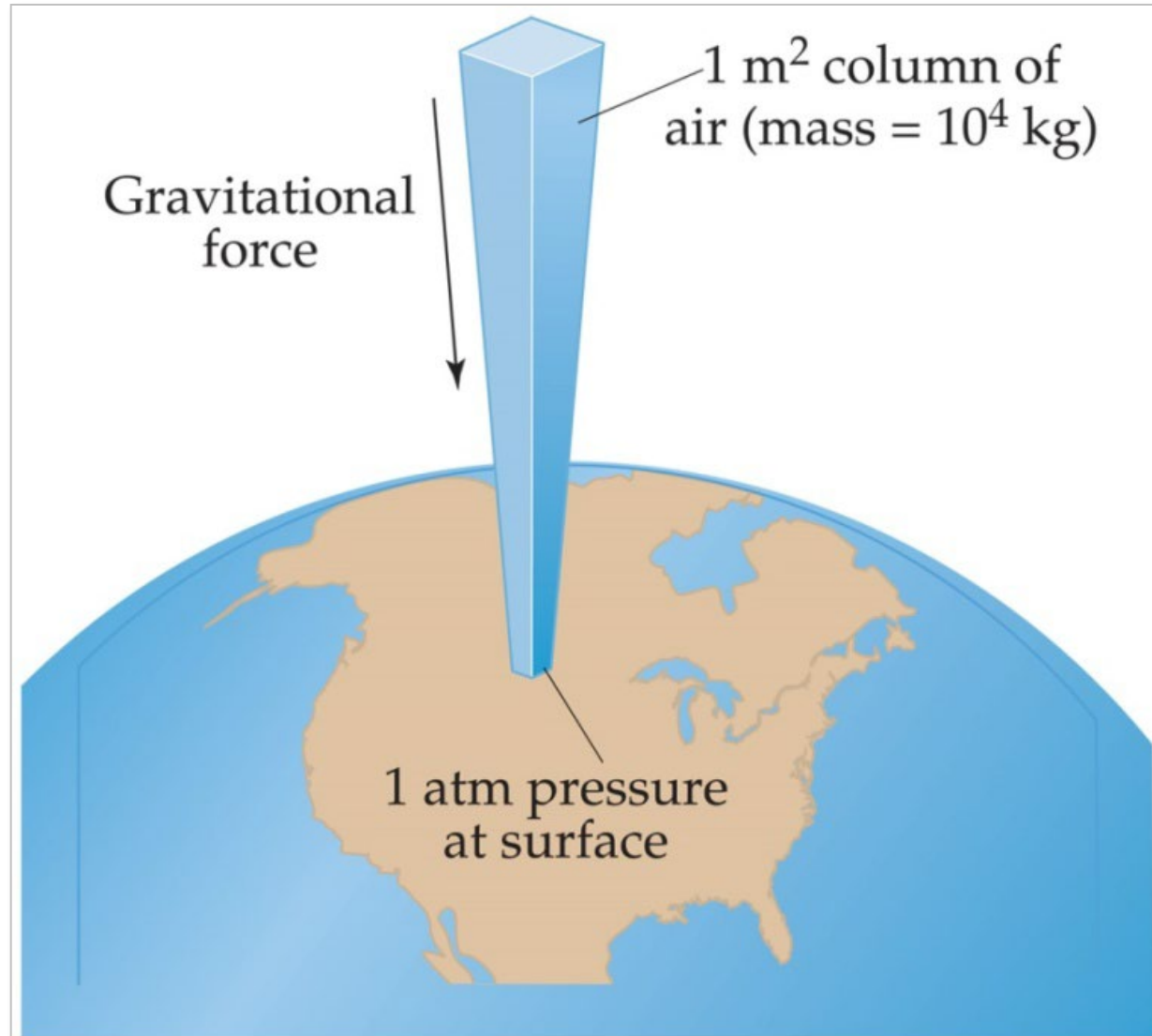


Cl<sub>2</sub>

# Reaccions químiques

Gasos

## L'atmosfera. Pressió atmosfèrica



# Reaccions químiques

Gasos

$$P = \frac{F}{A}$$

$$F = m \cdot a = 10,000 \text{ kg} \times 9.8 \text{ m/s}^2 \approx 1 \times 10^5 \text{ N}$$

$$P = \frac{1 \times 10^5 \text{ N}}{1 \text{ m}^2} = 1 \times 10^5 \text{ N/m}^2$$
$$= 1 \times 10^5 \text{ Pa} = 1 \times 10^2 \text{ kPa} \quad (\text{N/m}^2 = \text{Pa} = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2})$$

La **pressió atmosfèrica** al nivell del mar és d'aproximadament **100 kPa** o **1 bar**.

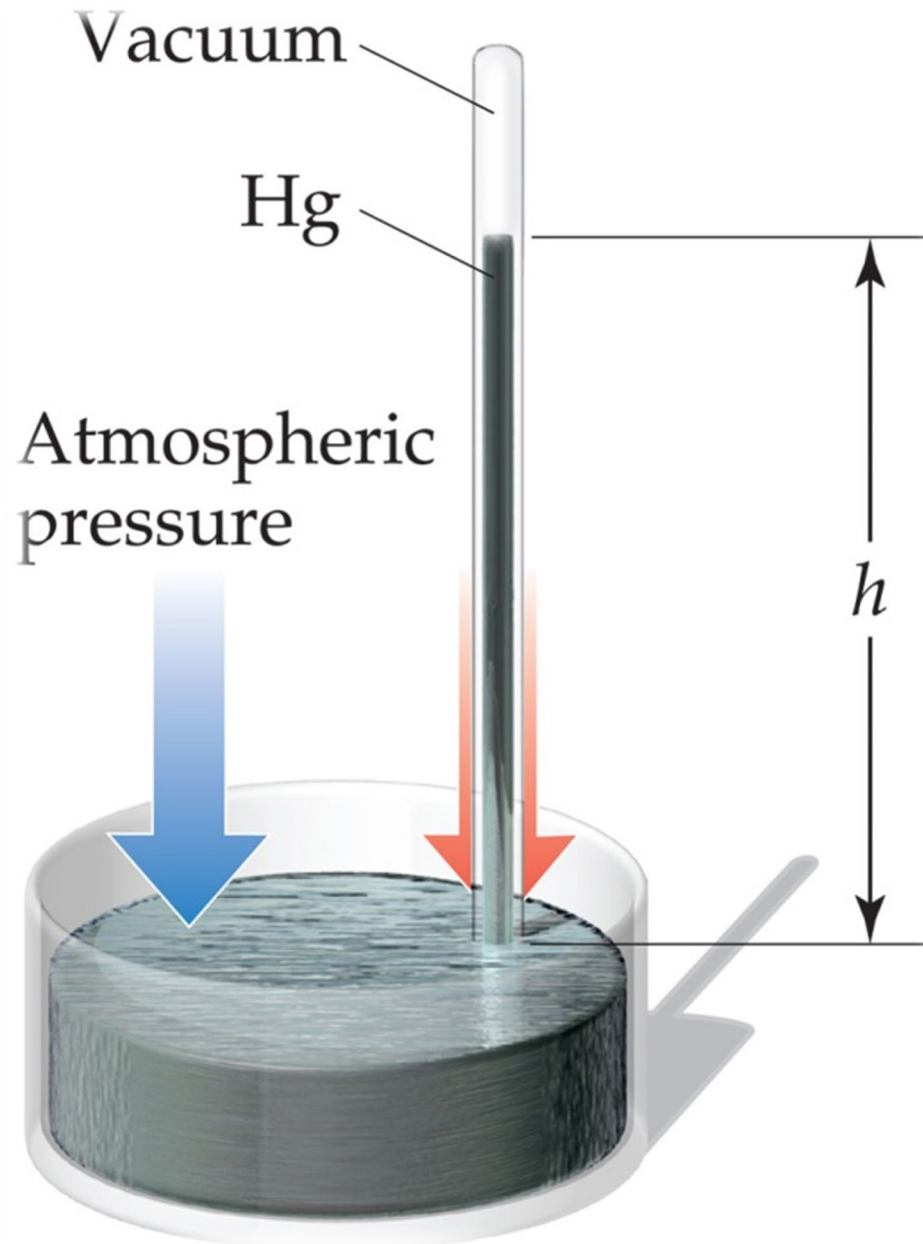


# Reaccions químiques

Gasos

## Baròmetre de mercuri

(Torricelli; 1608-1647)



# Reaccions químiques

Gasos

La **pressió atmosfèrica estàndard**, que correspon a la pressió típica a nivell del mar, és la pressió suficient per a sostindre una **columna de mercuri** de **760 mm d'altura** ( $h$ )

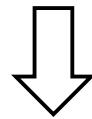
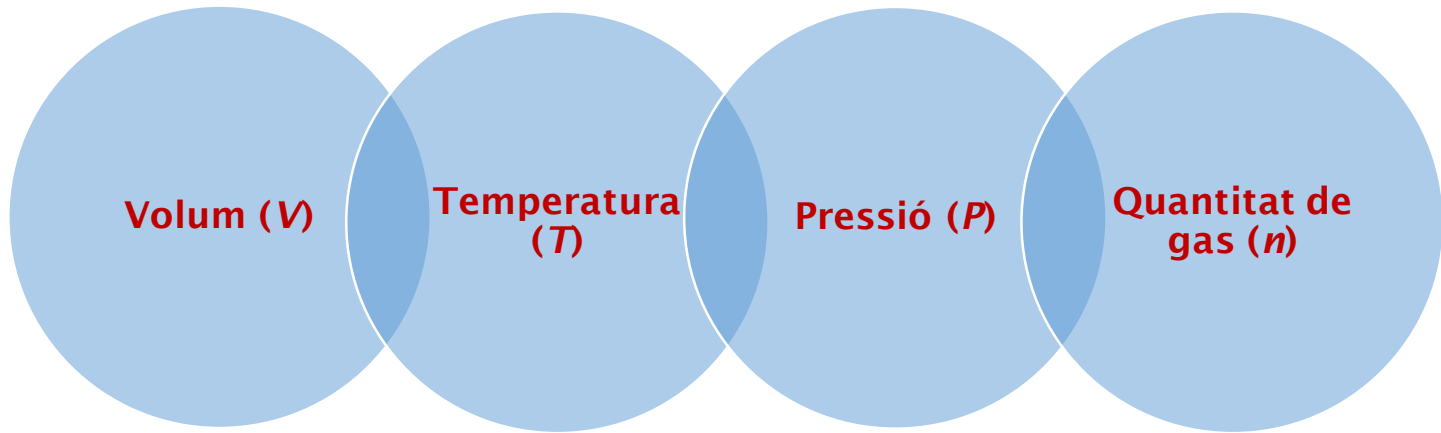
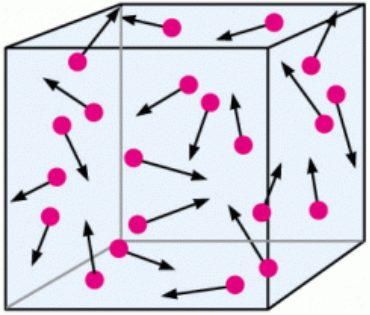
## Unitats de pressió

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ torr} = 1,01325 \cdot 10^5 \text{ Pa} = 1,013 \text{ bar}$$

$$1 \text{ Pa} = 1 \text{ N} / \text{m}^2 \text{ (S.I.)}$$

# Reaccions químiques

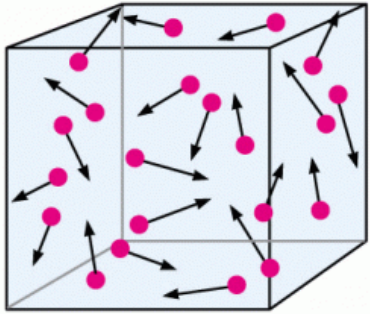
## Lleis dels gasos ideals



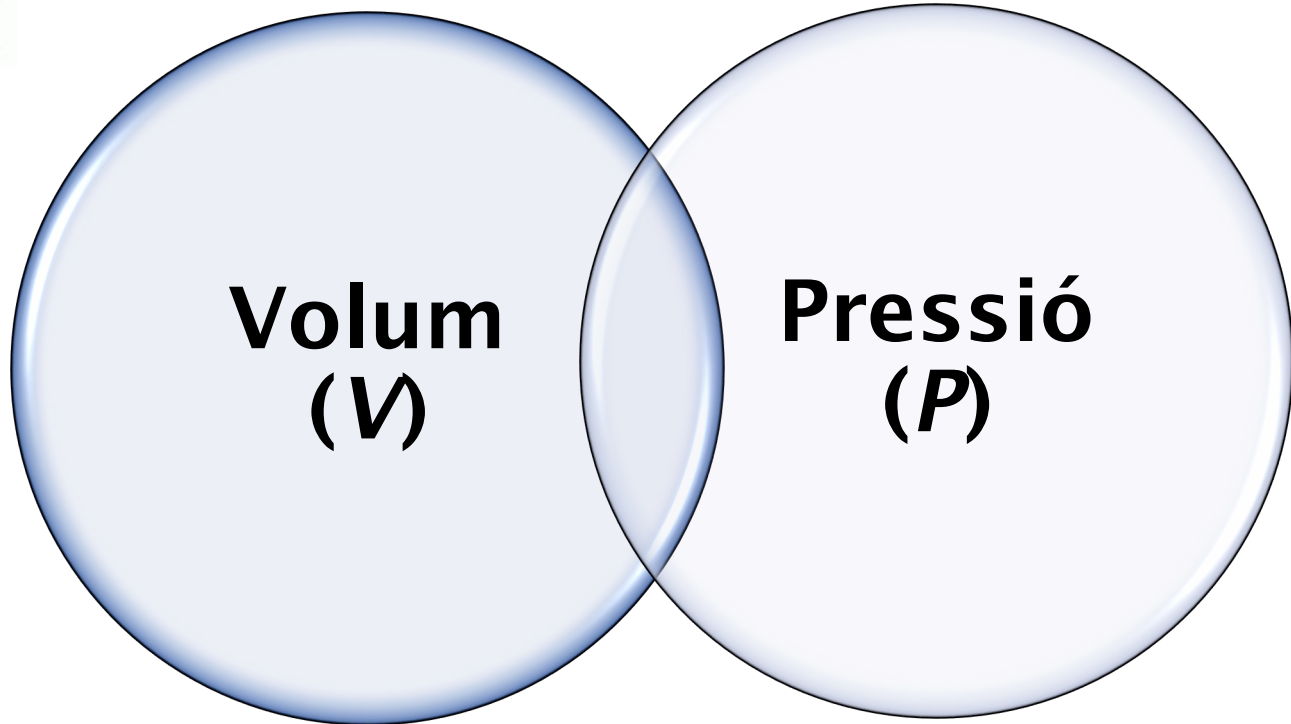
**Equació dels gasos ideals**

# Reaccions químiques

## Lleis dels gasos ideals



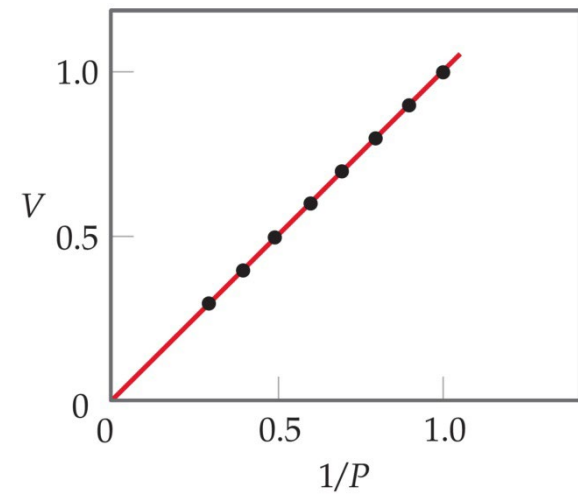
## Llei de Boyle



El **volum** d'una  
quantitat fixa de gas  
mantinguda a una  
**temperatura  
constant** és  
inversament  
proporcional a la  
**pressió**.

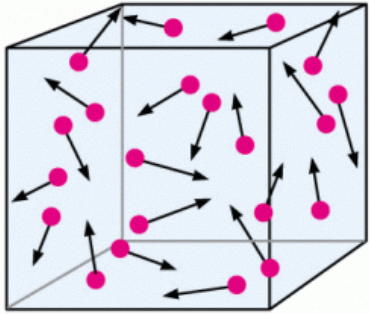
$$P \cdot V = k$$

$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2$$

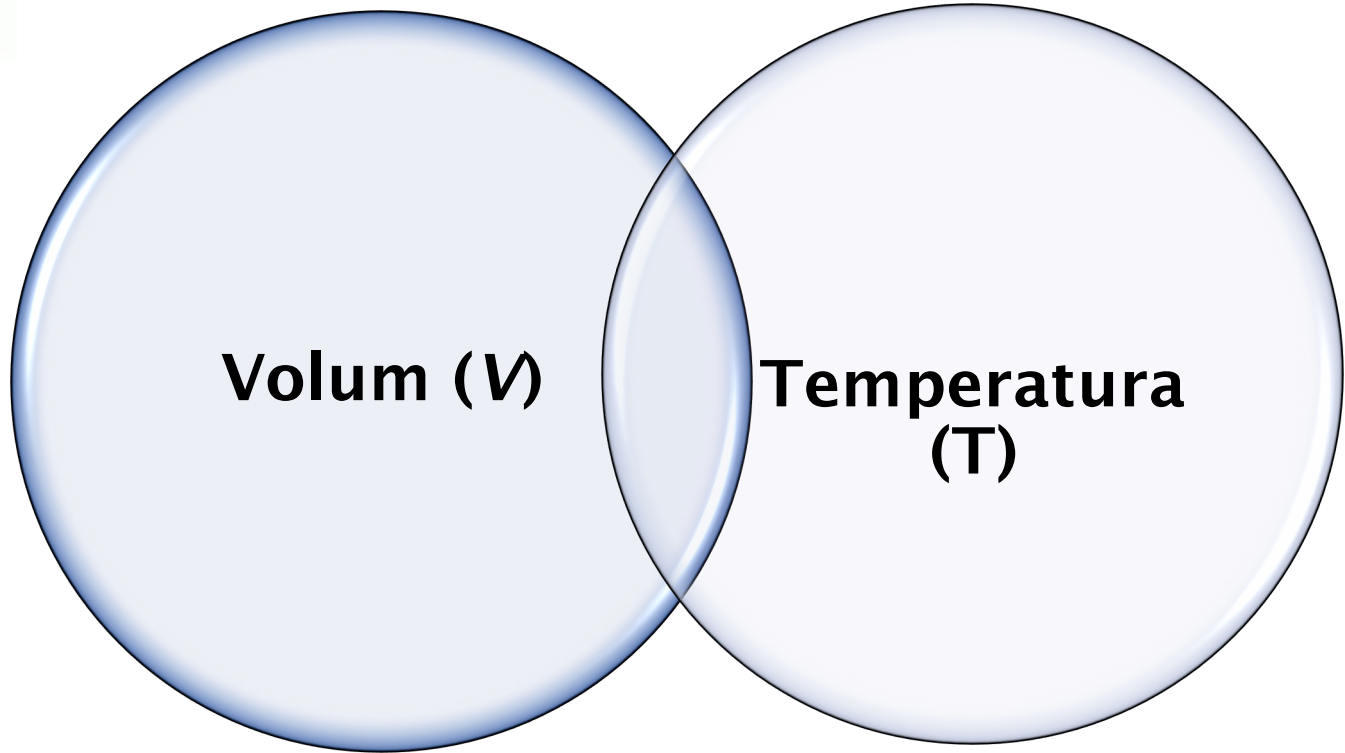


# Reaccions químiques

Lleis dels gasos ideals



## Llei de Charles



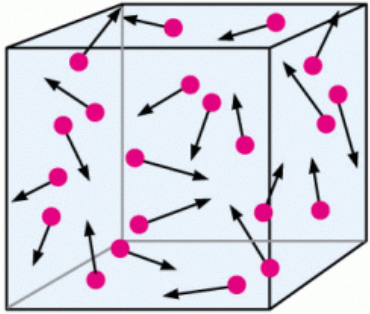


El **volum** d'una  
quantitat fixa de gas  
mantinguda a **pressió  
constant** és  
**directament**  
**proporcional** a la seua  
**temperatura absoluta**  
(0 K = -273,15 °C).

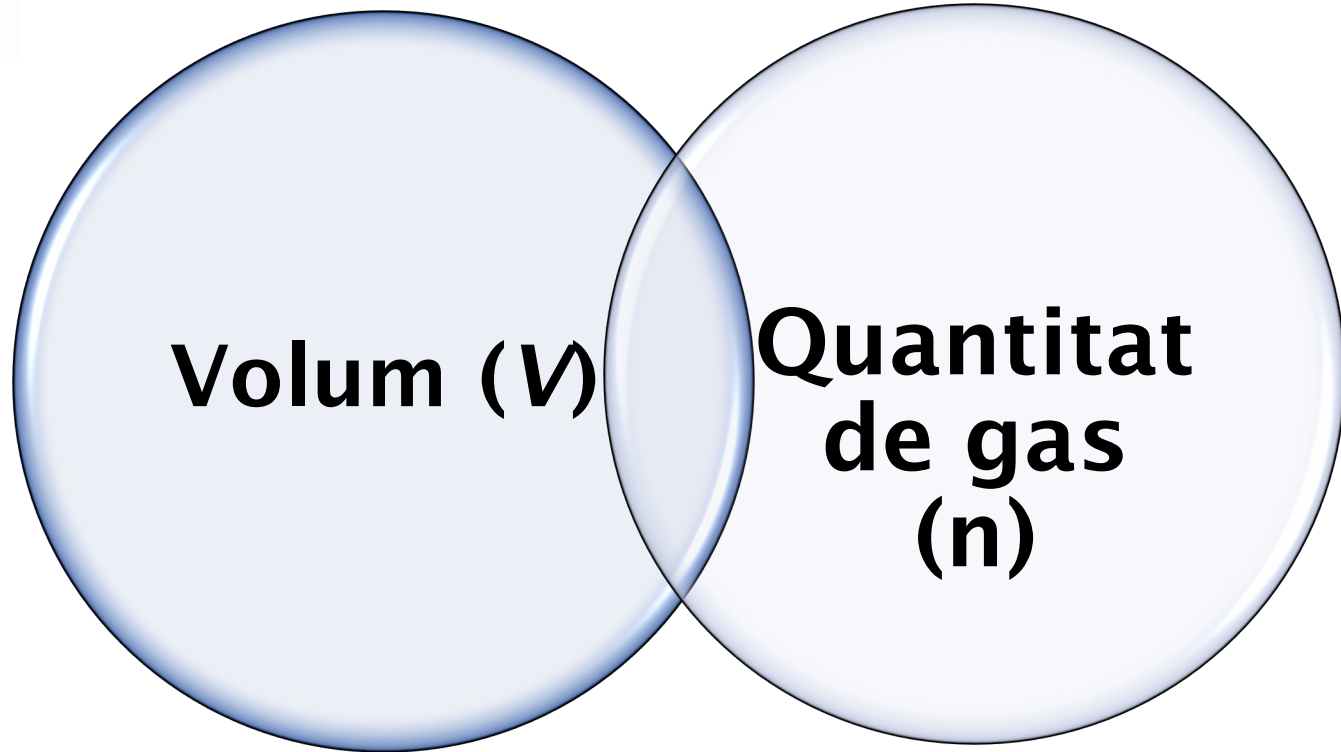
$$V = k \cdot T$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$





## Llei d'Avogadro





A unes  
determinades  
P i T, **els volums**  
de gasos que  
reaccionen entre  
si es troben **en**  
**relacions de**  
**nombres sencers**  
**senzilles.**

**Llei dels volums de  
combinació (Gay-Lussac)**

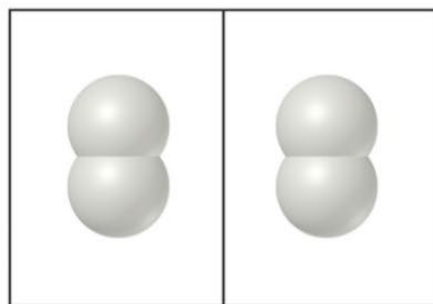
Observation

Two volumes  
hydrogen

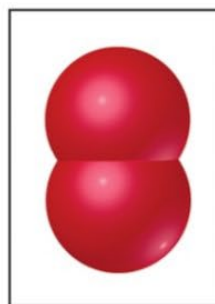
One volume  
oxygen

Two volumes  
water vapor

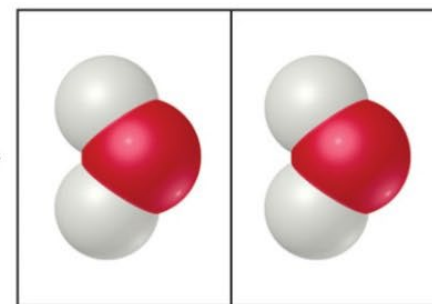
Explanation



+



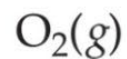
→



Equation



+



→



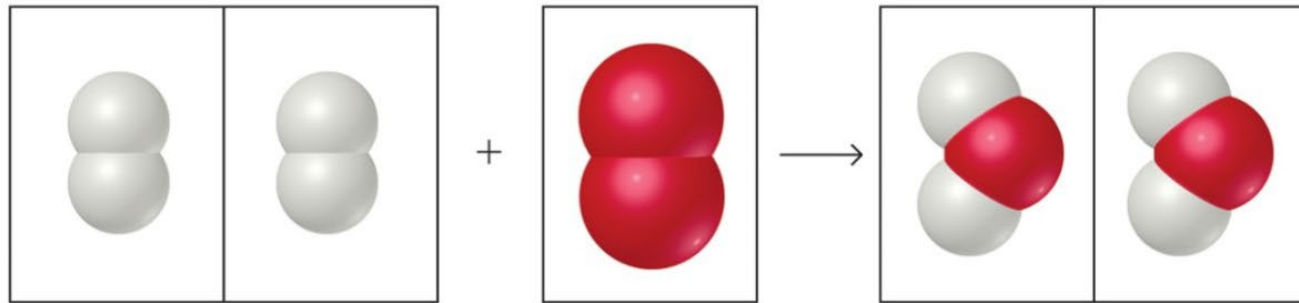
Observation

Two volumes  
hydrogen

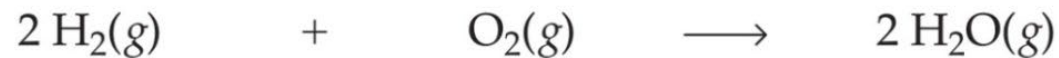
One volume  
oxygen

Two volumes  
water vapor

Explanation



Equation



## Hipòtesi d'Avogadro

**Volums** iguals de gasos  
diferents en les mateixes  
condicions de **P i T** contenen  
el mateix **nombre de**  
**molècules.**

# Reaccions químiques

## Lleis dels gasos ideals



Cada gas té els mateixos **V, T i P** i, per tant, conté **el mateix nombre de molècules.**

Volume	22.4 L	22.4 L	22.4 L
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm
Temperature	0 °C	0 °C	0 °C
Mass of gas	4.00 g	28.0 g	16.0 g
Number of gas molecules	$6.02 \times 10^{23}$	$6.02 \times 10^{23}$	$6.02 \times 10^{23}$

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



**1 mol**

**I Massa?**

### Llei d'Avogadro

El volum d'un gas mantingut a **temperatura i pressió constants** és directament proporcional al **nombre de mols** del gas.

$$V = k \cdot n$$

# Reaccions químiques

## Lleis dels gasos ideals

- *Llei de Boyle*  $V \propto 1/P$  ( $n, T$  constants)
- *Llei de Charles*  $V \propto T$  ( $n, P$  constants)
- *Llei d'Avogadro*  $V \propto n$  ( $P, T$  constants)

$$V \propto \frac{nT}{P}$$
$$V = R \frac{nT}{P}$$

constant de proporcionalitat

$$P V = n R T$$

**R = constant dels gasos** →

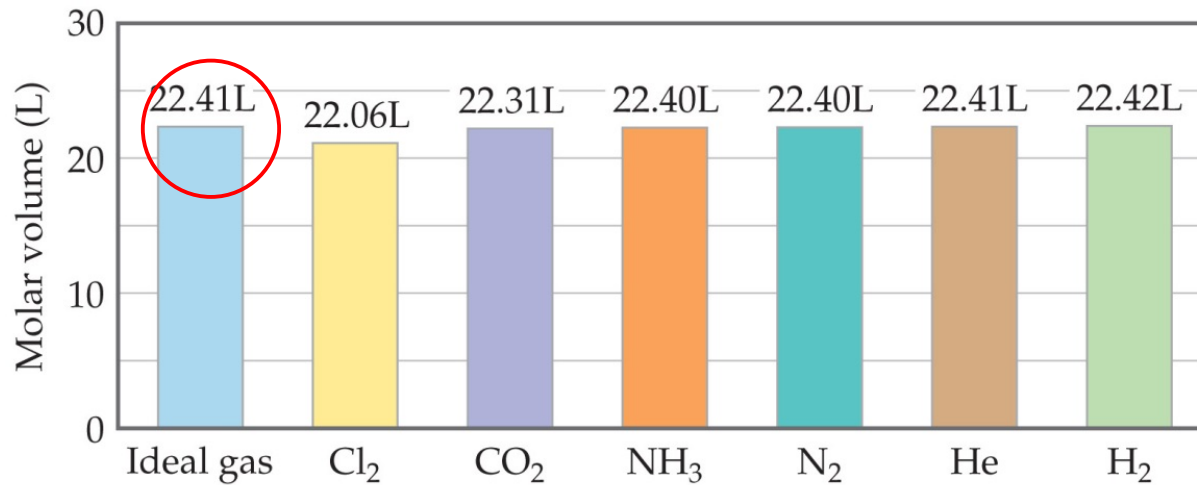
Units	Numerical Value
L-atm/mol-K	0.08206
J/mol-K*	8.314
cal/mol-K	1.987
m <sup>3</sup> -Pa/mol-K*	8.314
L-torr/mol-K	62.36

\*SI unit

# Reaccions químiques

Idealitat

- Volum ocupat per 1 mol de gas ideal mesurat en *condicions normals* de P (*1 atm*) i T (*0°C*) = *volum molar* del gas.

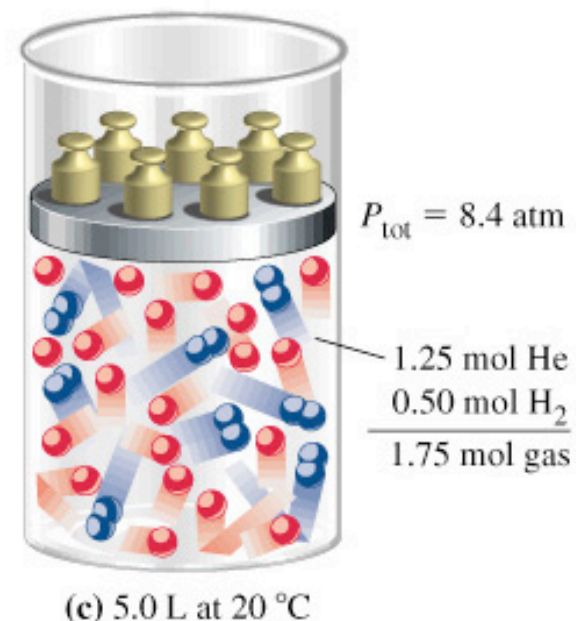
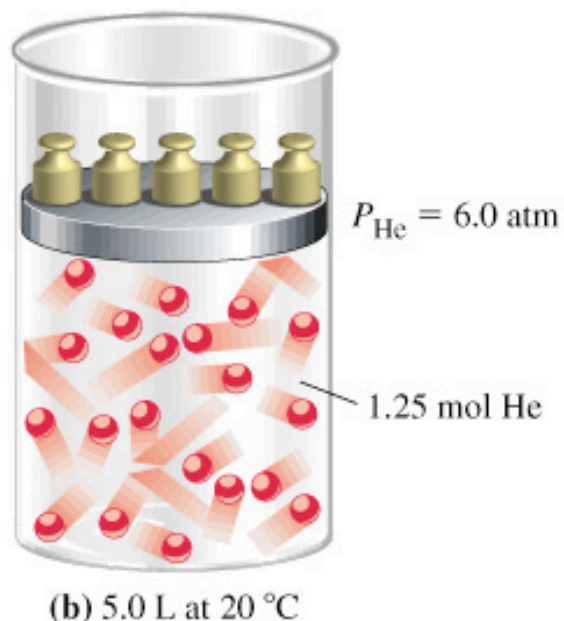
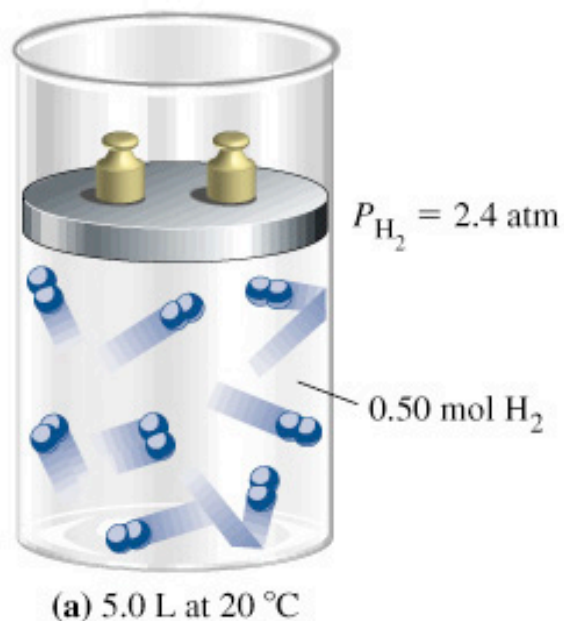


Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{(1,0 \text{ mol}) (0,08206 \text{ L}\cdot\text{atm}/\text{mol}\cdot\text{K}) (273,15 \text{ K})}{1,0 \text{ atm}} = 22,41 \text{ L}$$

# Reaccions químiques

## Mescles: Llei de Dalton





# Reaccions químiques

Mescles: Llei de Dalton

La **pressió total** d'una mescla de gasos és igual a la **suma de les pressions parcials** que cada gas exerciria si estigueren presents a soles.

$$P_{\text{total}} = P_1 + P_2 + P_3 + \dots$$

$P_1, P_2, \text{ etc.}$  = **pressió parcial** de cada gas

# Reaccions químiques

## Mescles: Llei de Dalton

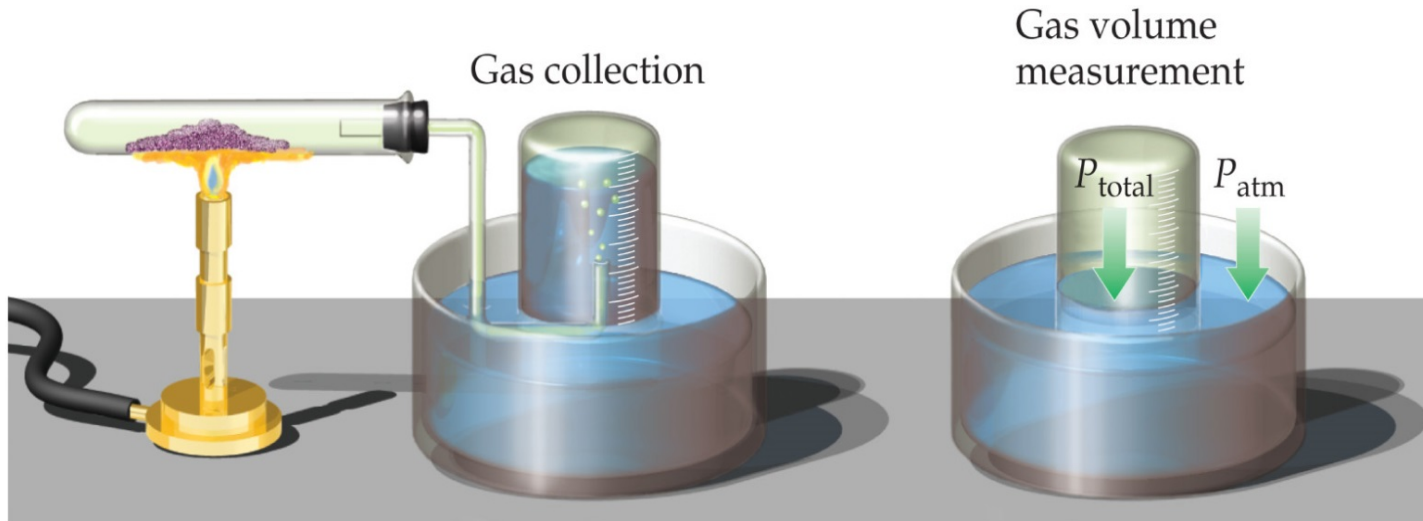
La **pressió parcial** d'un gas ( $P_A$ ) en una mescla és igual a la pressió que tindria el gas si ocupara, tot sol, el volum total de la mescla a la temperatura d'aquesta.

$$\frac{P_A}{P_t} = \frac{n_A RT/V}{n_t RT/V} = \frac{n_A}{n_t} \rightarrow \text{Fracció molar del gas A } (X_A)$$

$$P_A = \frac{n_A}{n_t} P_t = X_A \cdot P_t$$

# Reaccions químiques

## Recol·lecció de gasos sobre aigua



(a)

(b)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

$$P_{\text{total}} = P_{\text{gas}} + P_{\text{H}_2\text{O}}$$

# Informació general

**Unitats de mesura**

# 1-4 The Measurement of Matter

**TABLE 1.1 SI Base Quantities**

Physical Quantity	Unit	Symbol
Length	meter <sup>a</sup>	m
Mass	kilogram	kg
Time	second	s
Temperature	kelvin	K
Amount of substance <sup>b</sup>	mole	mol
Electric current <sup>c</sup>	ampere	A
Luminous intensity <sup>d</sup>	candela	cd

<sup>a</sup>The official spelling of this unit is “metre,” but we will use the American spelling.

<sup>b</sup>The mole is introduced in Section 2-7.

<sup>c</sup>Electric current is described in Appendix B and in Chapter 20.

<sup>d</sup>Luminous intensity is not discussed in this text.

**TABLE 1.2 SI Prefixes**

Multiple	Prefix
$10^{18}$	exa (E)
$10^{15}$	peta (P)
$10^{12}$	tera (T)
$10^9$	giga (G)
$10^6$	mega (M)
$10^3$	kilo (k)
$10^2$	hecto (h)
$10^1$	deka (da)
$10^{-1}$	deci (d)
$10^{-2}$	centi (c)
$10^{-3}$	milli (m)
$10^{-6}$	micro ( $\mu$ ) <sup>a</sup>
$10^{-9}$	nano (n)
$10^{-12}$	pico (p)
$10^{-15}$	femto (f)
$10^{-18}$	atto (a)
$10^{-21}$	zepto (z)
$10^{-24}$	yocto (y)

<sup>a</sup>The Greek letter  $\mu$   
(pronounced “mew”).

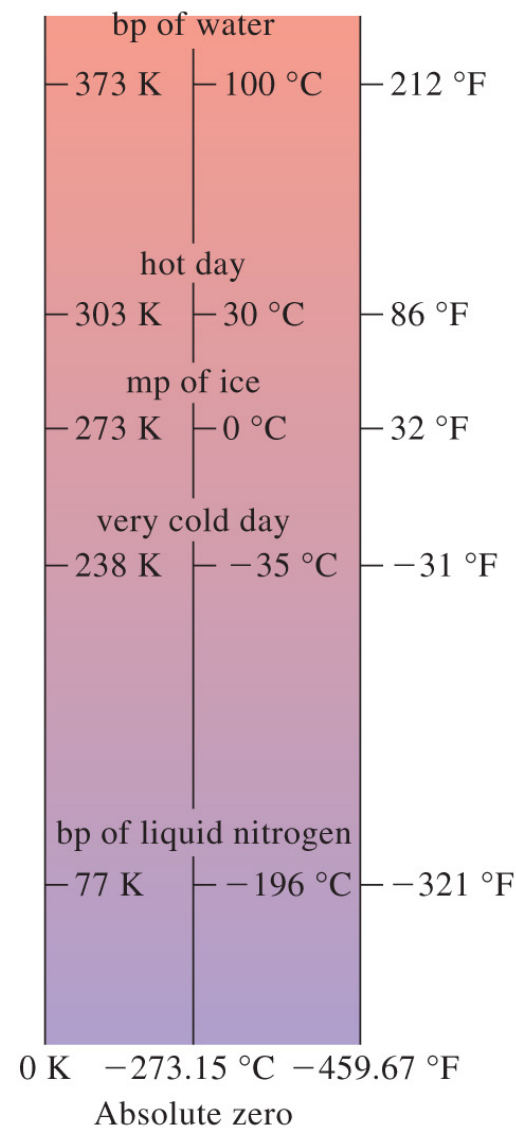
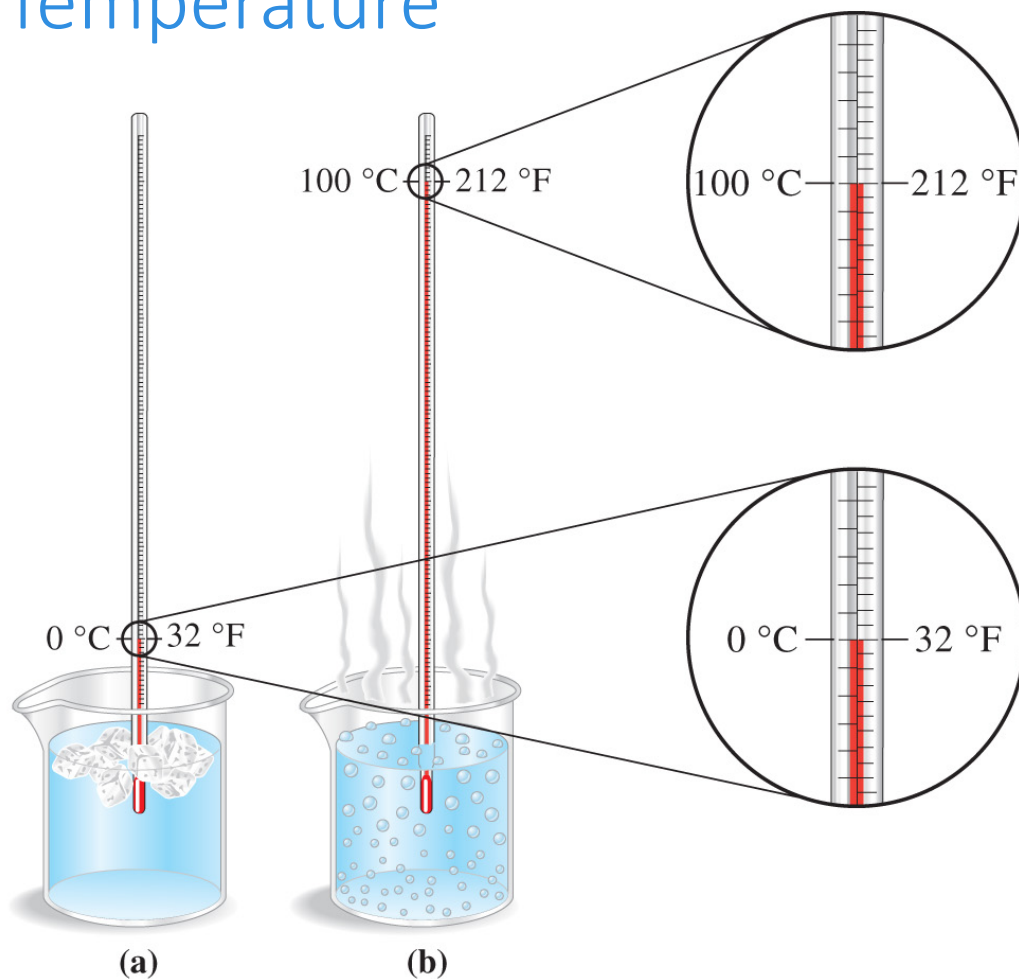
# Mass

- Mass is the **quantity** of matter in an object.
- Weight is the force of gravity on an object.

- $W \propto m$        $W = g \times m$

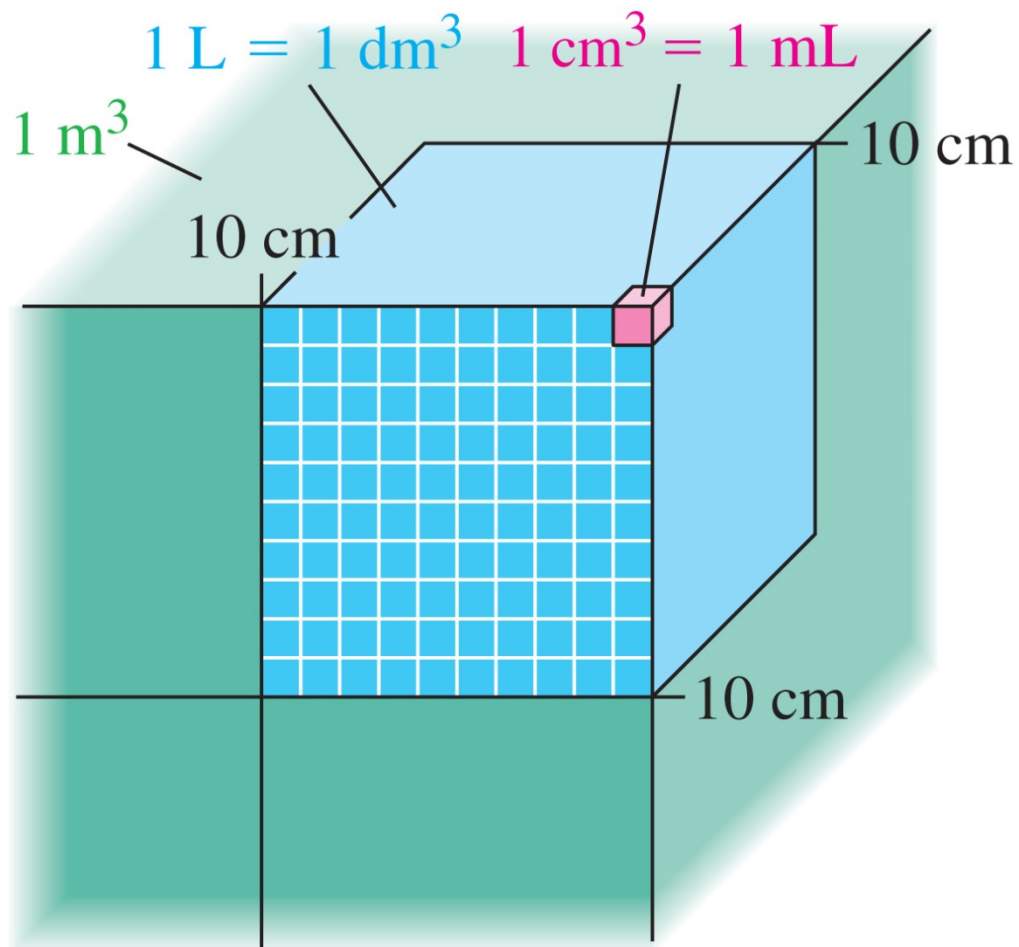


# Temperature





# Volume



## SI Units

Length	meter, m
Mass	Kilogram, kg
Time	second, s
Temperature	Kelvin, K
Quantity	Mole, $6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

1

## Non-SI Units

Length	Angstrom, Å, $10^{-8} \text{ cm}$
Volume	Liter, L, $10^{-3} \text{ m}^3$
Energy	Calorie, cal, 4.184 J

### Pressure

$$1 \text{ Atm} = 1.064 \times 10^2 \text{ kPa}$$

$$1 \text{ Atm} = 760 \text{ mm Hg}$$

## Derived Units

Force	Newton, $\text{kg m s}^{-2}$
Pressure	Pascal, $\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$
Energy	Joule, $\text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$

## 1-5 Density and Percent Composition

$$\delta = m/V$$

$$m = V\delta$$

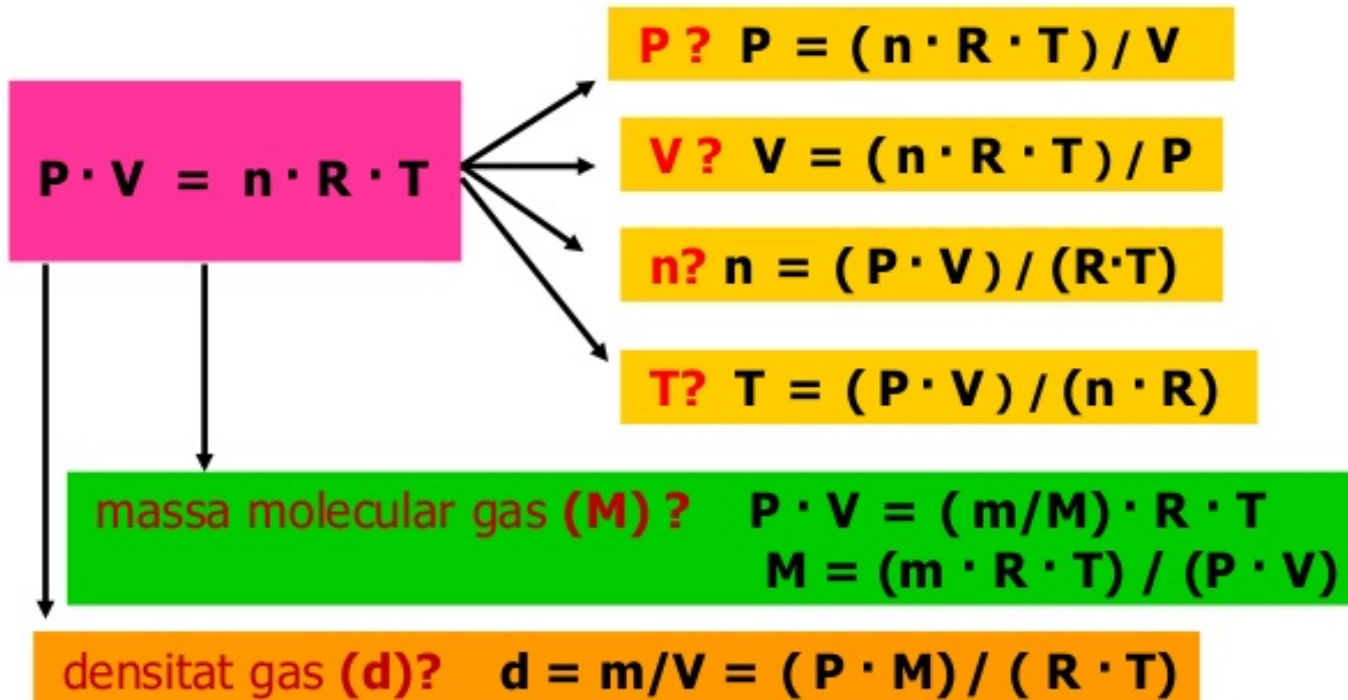
$$V = m/\delta$$

$$\text{g/mL}$$

Mass and volume are **extensive** properties.

Density is an **intensive** property.

# Equació dels gasos ideals



# Bibliografia recomanada

Llibre de text de *Química* de 2n de Batxillerat (com a punt de partida).

**Petrucci:** Capítols 1, 3, 4, 5, 6 (fins a l'apartat 6.7)

**Brown:** Capítols 1, 2, 3, 4, 10 (fins a l'apartat 10.7)

**Chang:** Capítols 1, 2, 3, 4, 5 (fins a l'apartat 5.7)

# TEMA 2. Estructura electrònica

## Descobriments



Models atòmics

Espectres atòmics. Efecte fotoelèctric

## Mecànica quàntica



Model atòmic de Bohr

Comportament ondulatori de la matèria. Principi d'incertesa

## Orbitals atòmics



Equació de Schrödinger i funcions d'ona. Nombres quàntics

Orbitals atòmics hidrogenoides. Representació d'orbitals atòmics



# TEMA 2. Estructura atòmica

## Bibliografia recomanada

**Petrucci**: capítols 2, 9

**Chang**: capítols 2, 7

**Brown**: capítols 2, 6

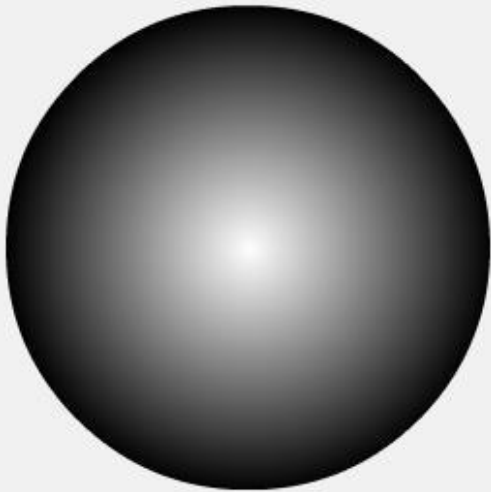
## Bibliografia complementària

*Química*. Un proyecto de la ACS. Ed. Reverte. 2004.

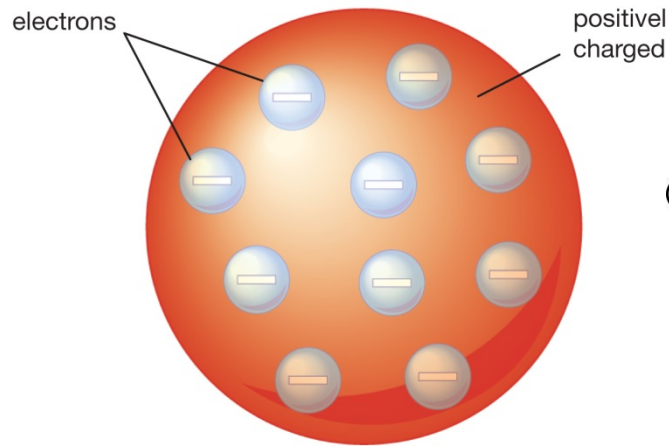
S.F. Mason. *Chemical Evolution*. Oxford University Press. 1992.



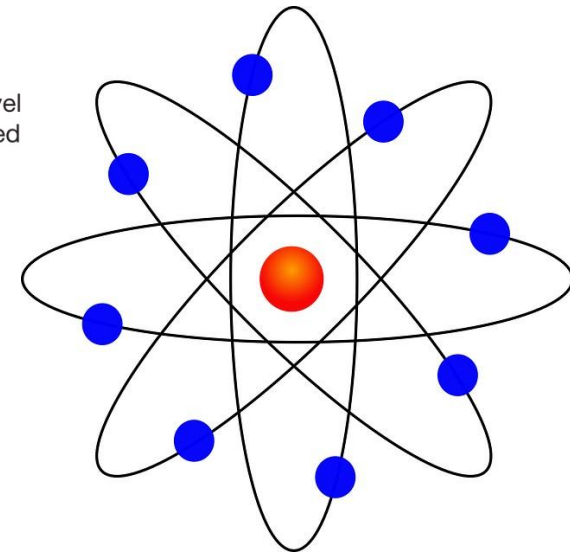
# Què hi ha dins d'un àtom?



**Jonh Dalton**  
(1766-1844)



**J. J. Thomson**  
(1897)



**E. Rutherford**  
(1910)

© 2012 Encyclopædia Britannica, Inc.



**Com estan organitzats els electrons?**

**Per què és tan important aquesta pregunta per a la química?**



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Heisenberg i Bohr.

# La llum com a ona



# La llum com a ona



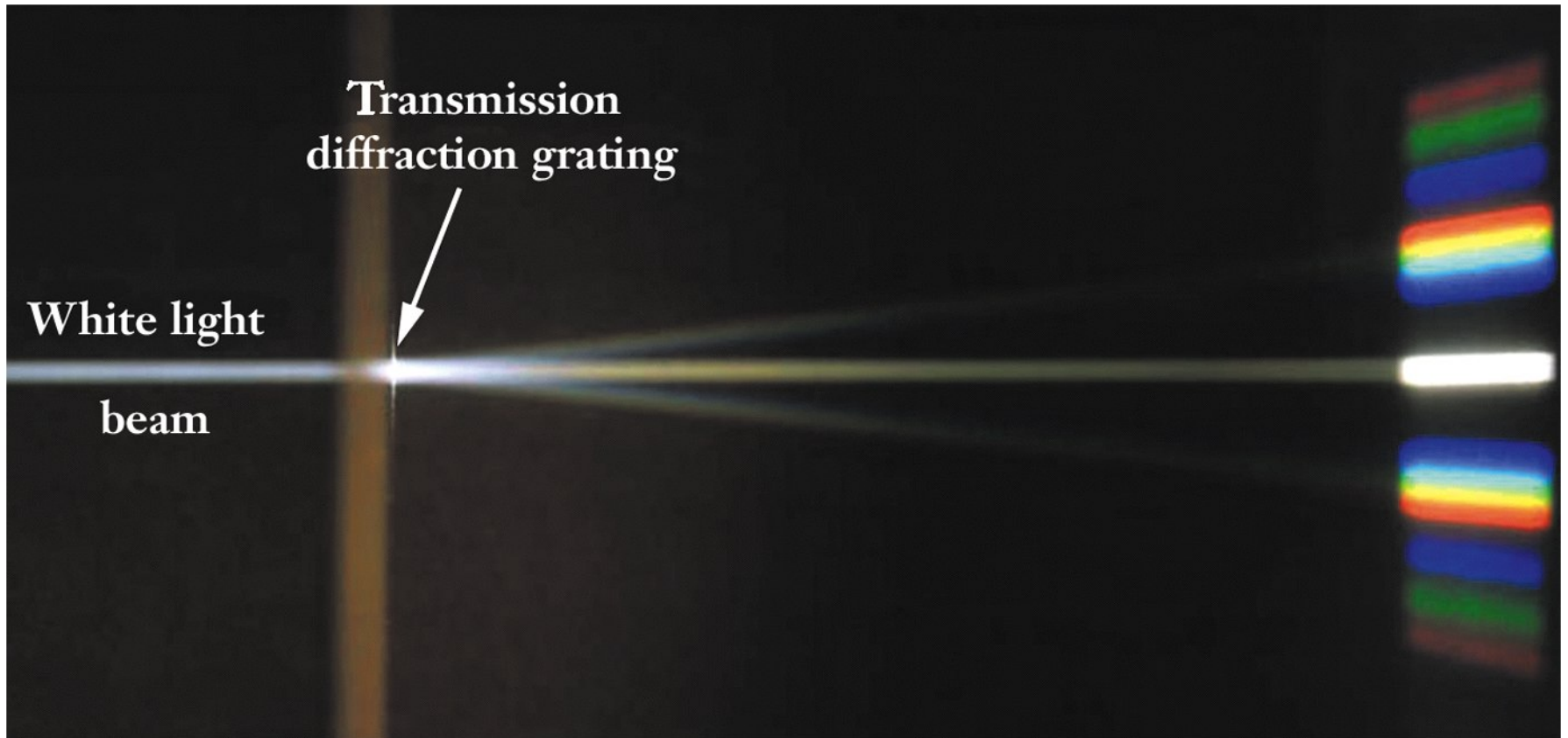
Isaac Newton (1642-1727)

Dispersió i refracció de la llum del sol.

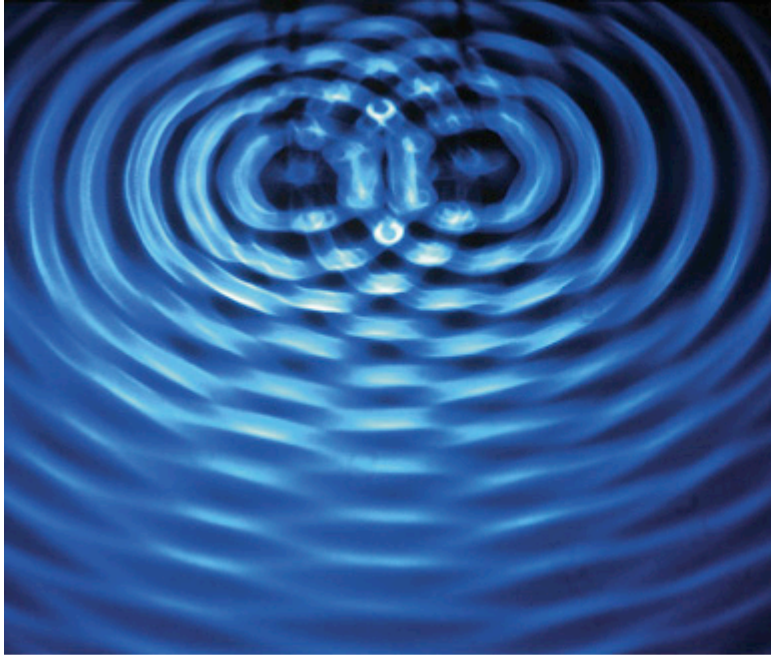
# Naturalesa ondulatòria de la llum

## Difracció de la llum solar

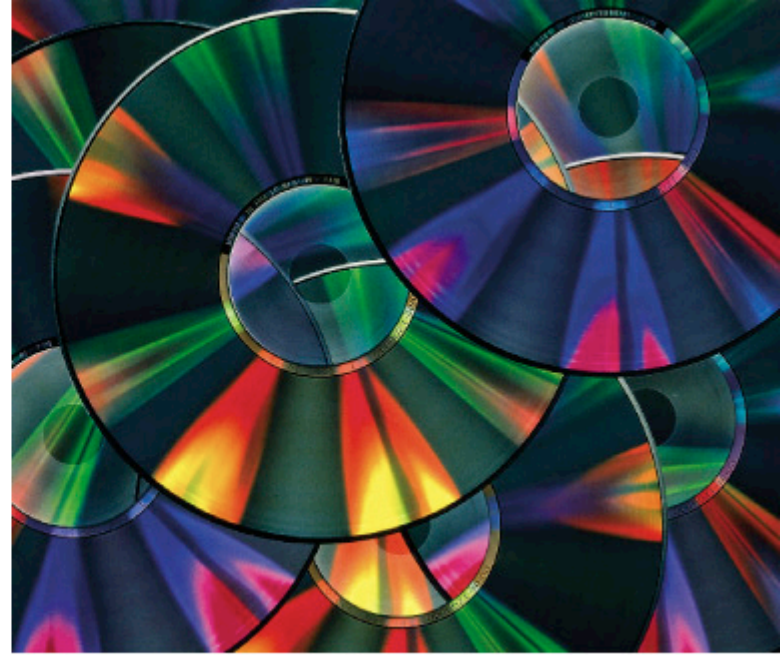
Xarxa de difracció



# ALTRES FENÒMENS RELACIONATS

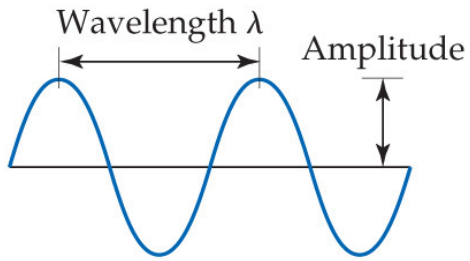


(a)

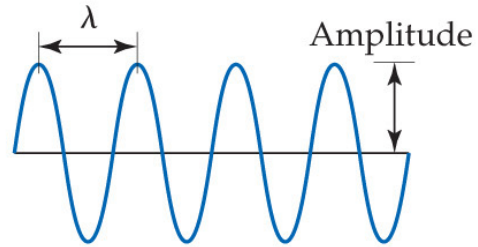


(b)

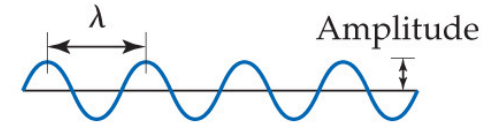
# Les ones



(a) Two complete cycles of wavelength  $\lambda$

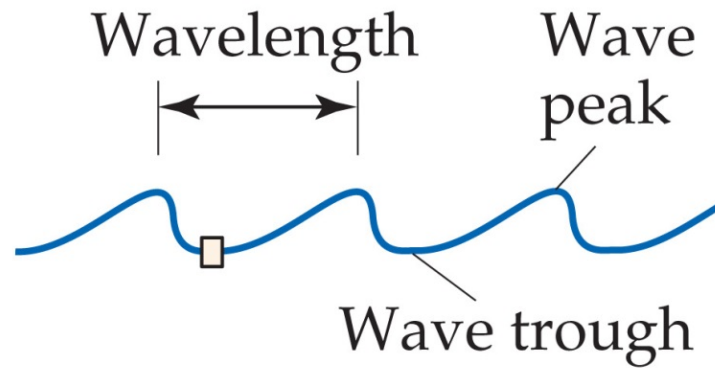


(b) Wavelength half of that in (a); frequency twice as great as in (a)



(c) Same frequency as (b), smaller amplitude

# Les ones



(a)



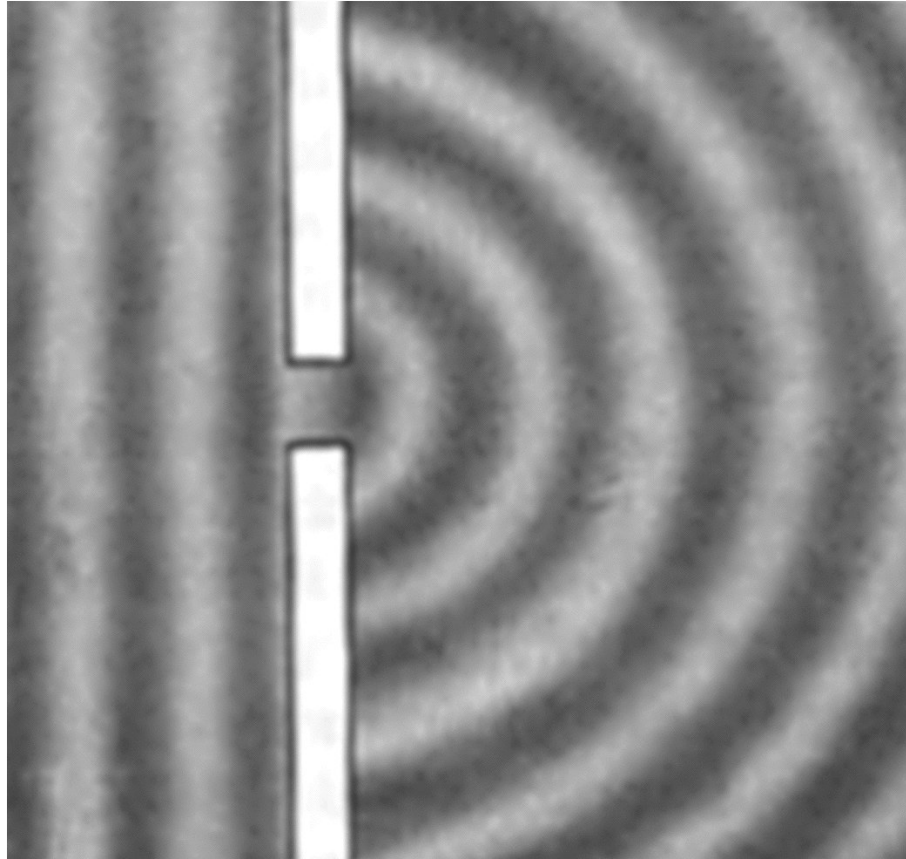
(b)



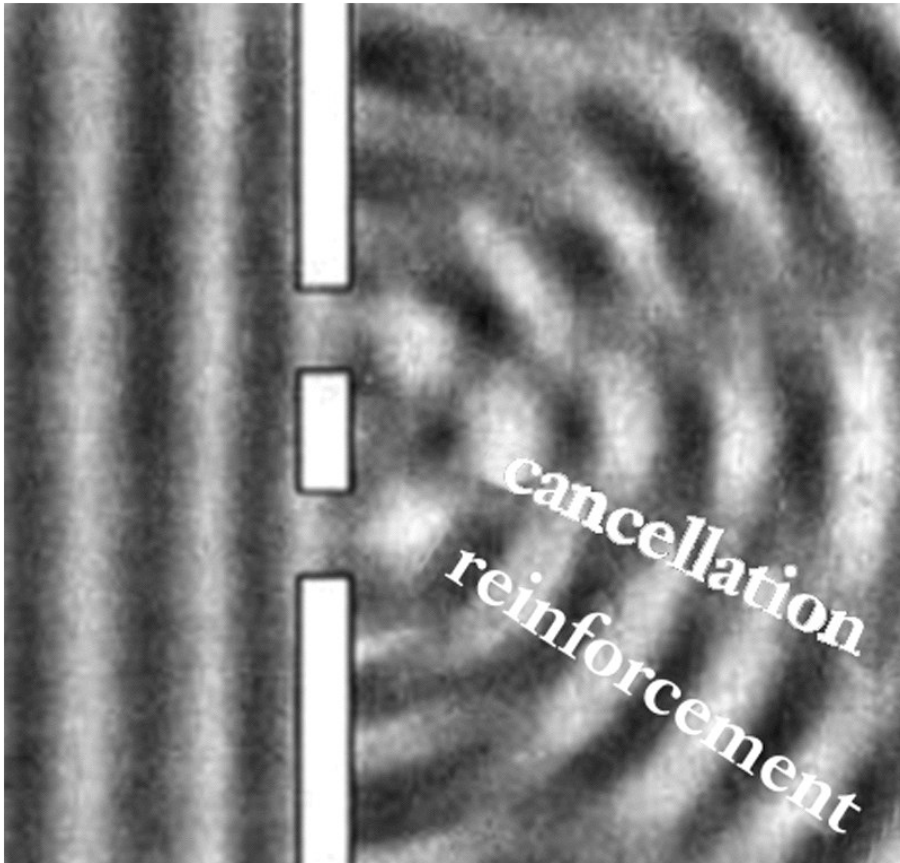
# Les ones



# I si això passara amb la llum?



# I si això passara amb la llum?

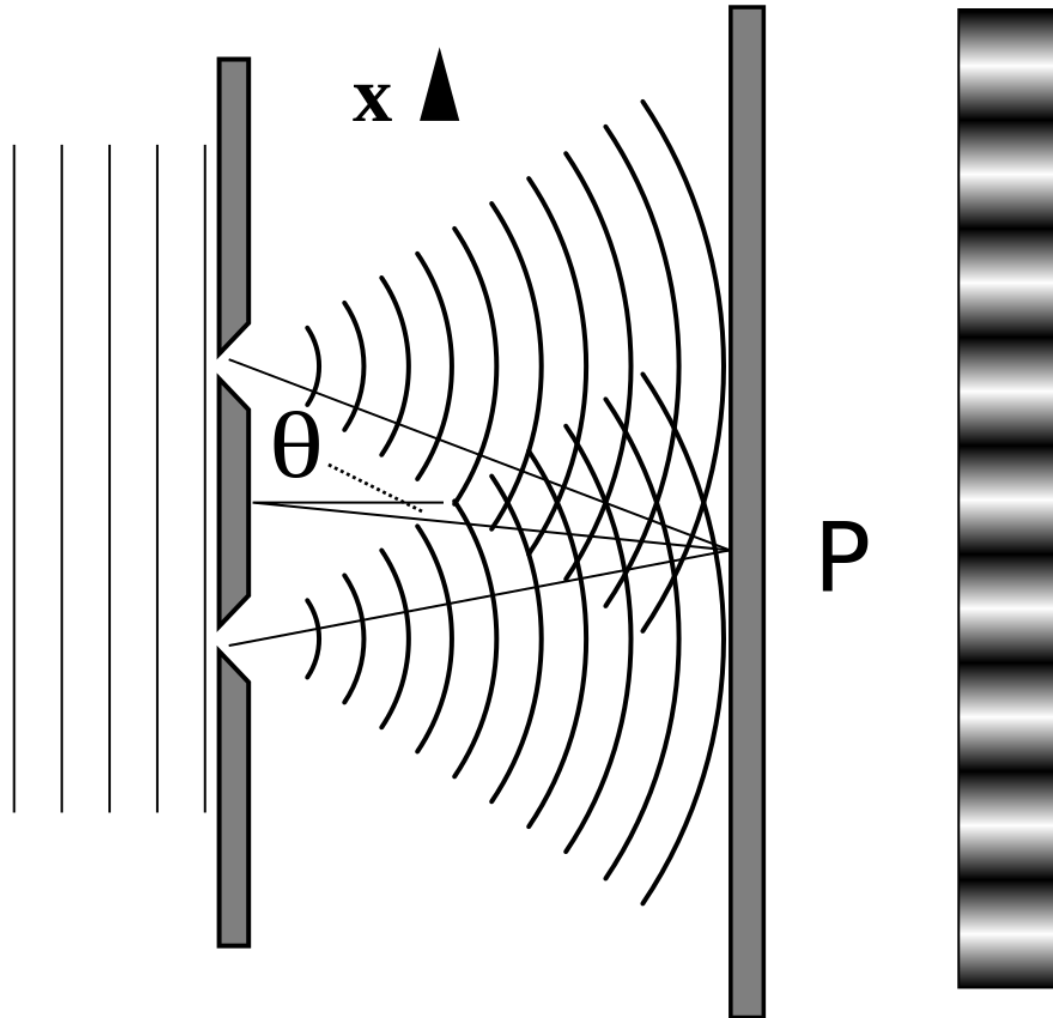


observer 1

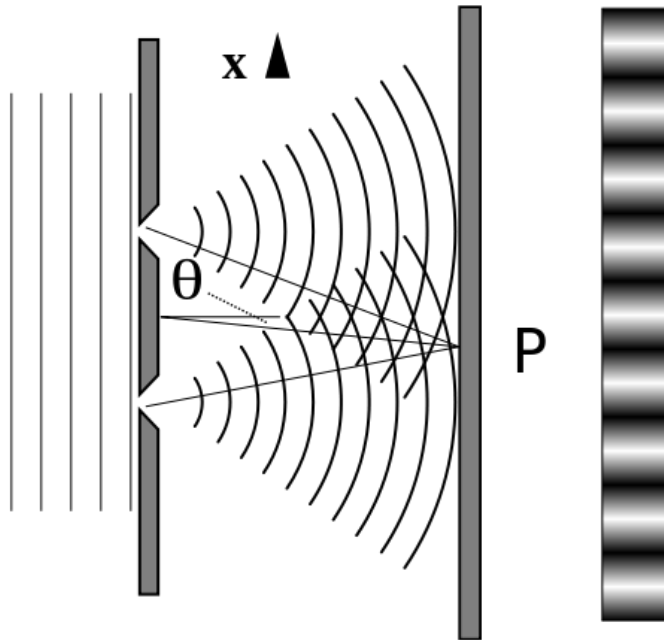


observer 2

# Difracció de la llum. Experiment de Thomas Young. 1801



# Difracció de la llum. Experiment de Thomas Young. 1801



Les escletxes s'han de situar a 1000 vegades la  $\lambda$  utilitzada.

- Condició 1

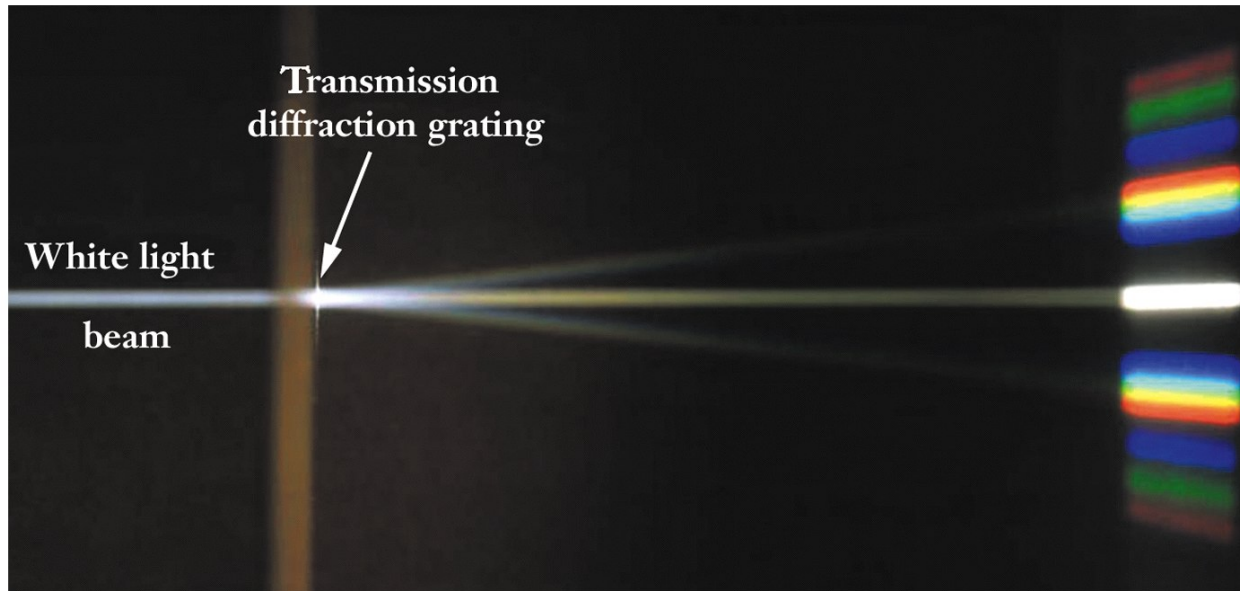
L'obertura de les escletxes ha de ser un poc menor de la  $\lambda$ .

- Condició 2

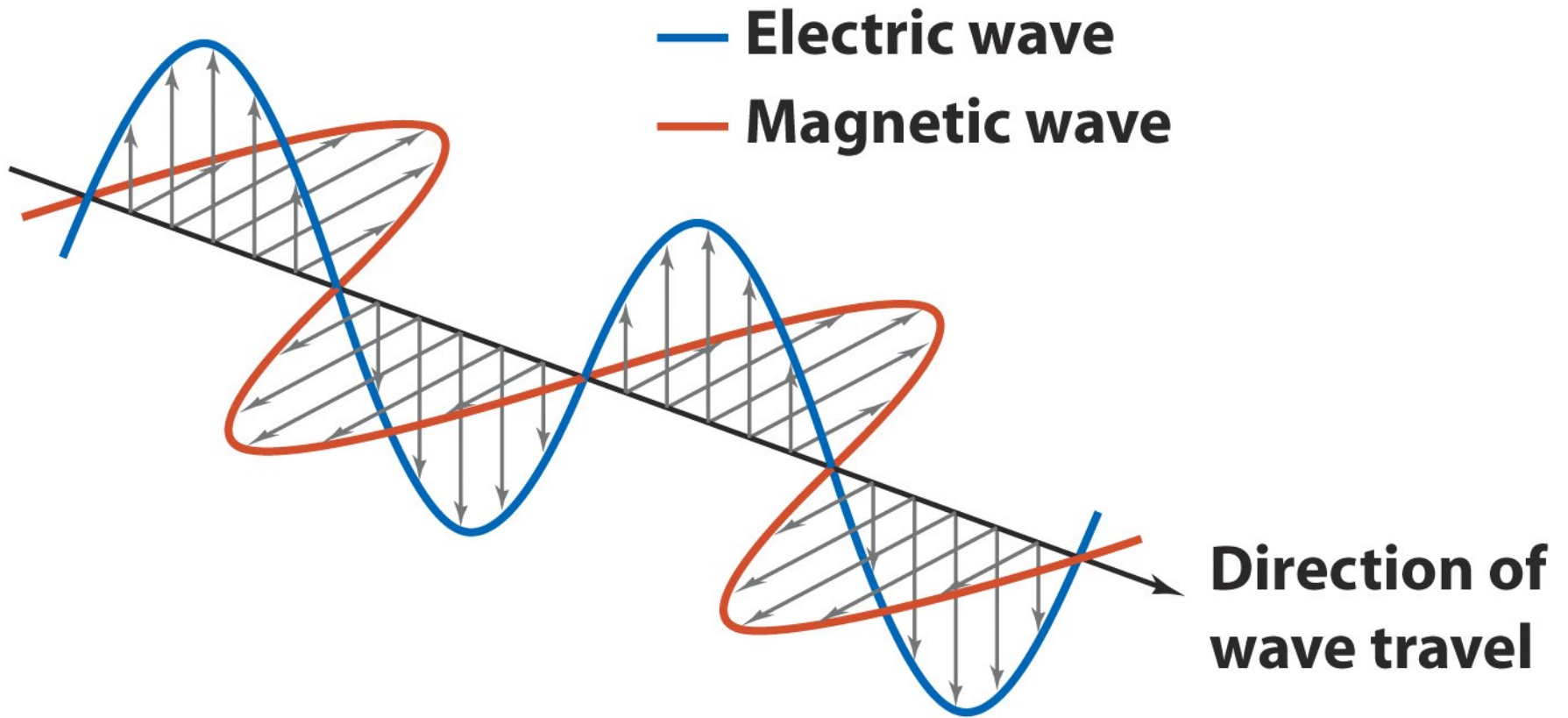
Diagrama de l'experiment de la doble escletxa.

[Ebohr1.svg](#): [en>User:Lacatosias](#). Wikipedia.

# La llum pareix una ona

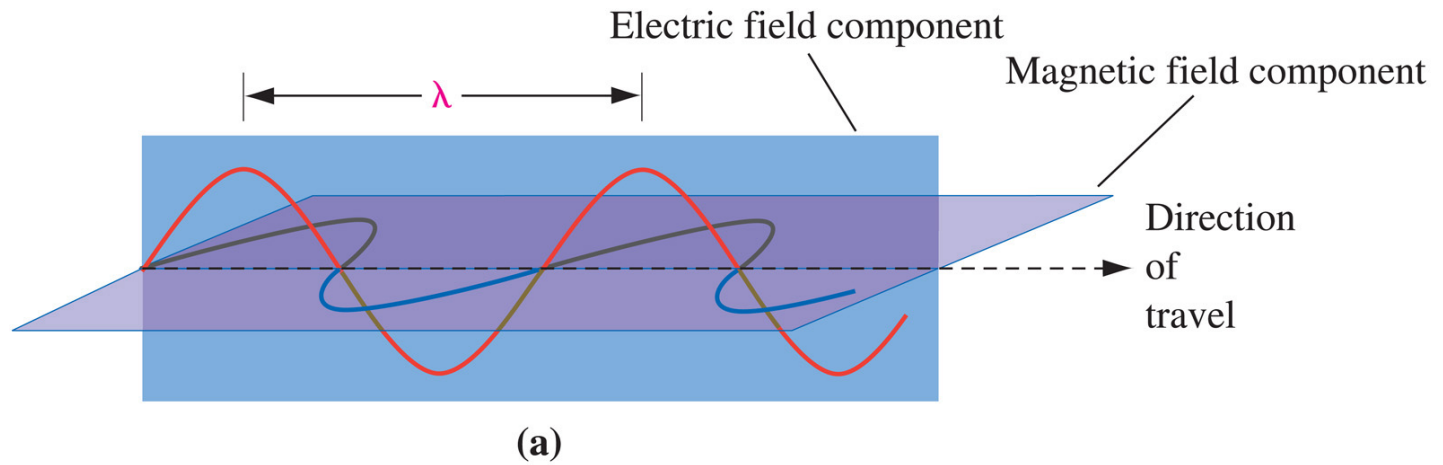


# La llum com a radiació electromagnètica

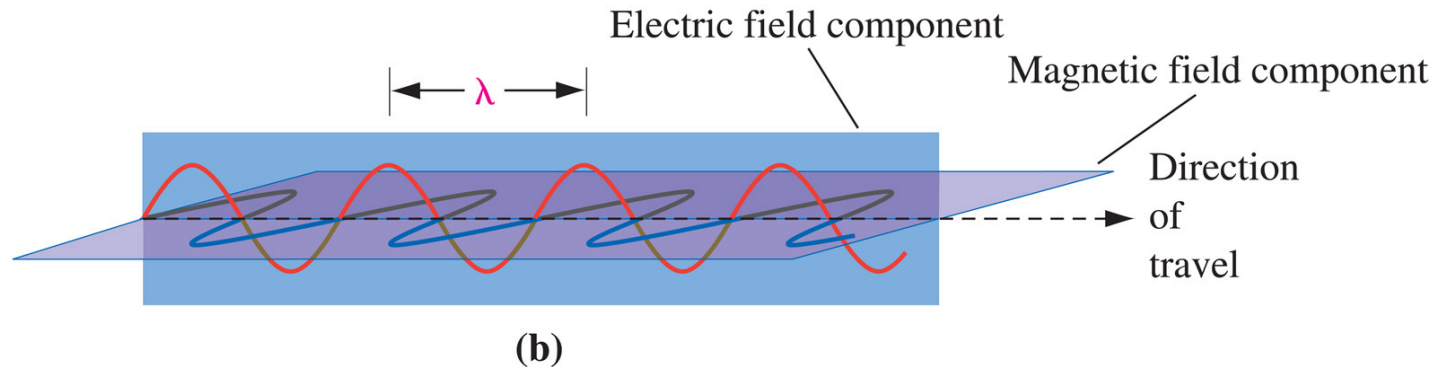


# La llum com a radiació electromagnètica

**Baixa  $\nu$**

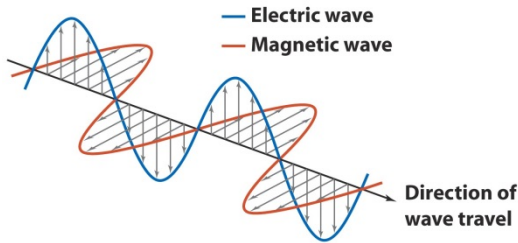


**Alta  $\nu$**





# La llum com a radiació electromagnètica



$$c = \lambda \cdot \nu$$

$c$  = “rapidesa” de la llum:

$$3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

**En el buit.**

**Magnitud escalar (celeritat).**

$\lambda$  = longitud d'ona (m)

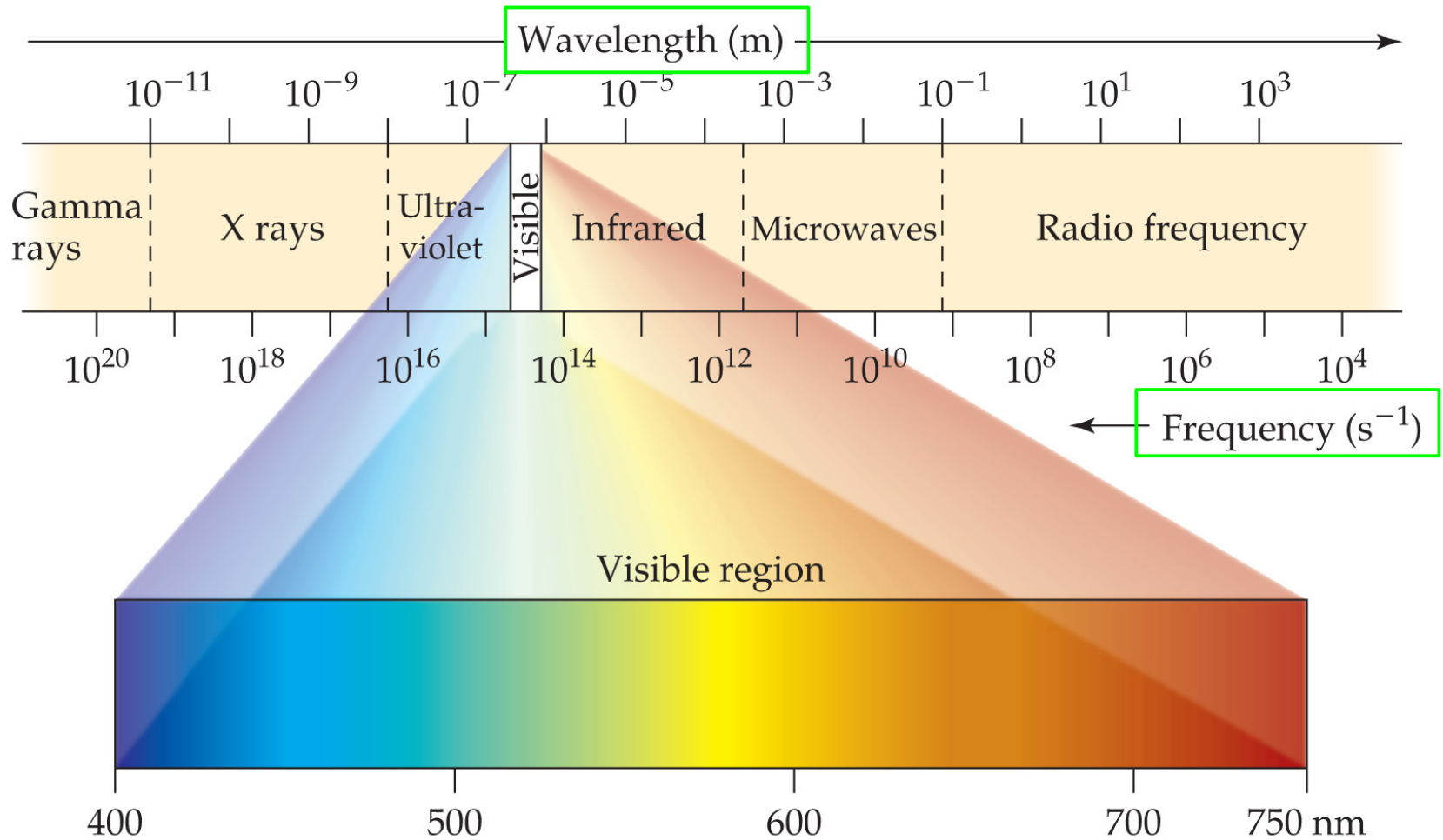
$\nu$  = freqüència (Hz = s<sup>-1</sup>)

# La llum com a radiació electromagnètica

**Dispersió de la llum del sol**  
(l'índex de refracció depén de la longitud d'ona).



# Espectre de radiacions electromagnètiques



# Espectre de radiacions electromagnètiques

Es poden explicar  
tots els efectes  
mitjançant **la**  
**naturalesa**  
**ondulatòria** de  
la llum?

# TEMA 2. Estructura atòmica

## Mecànica quàntica



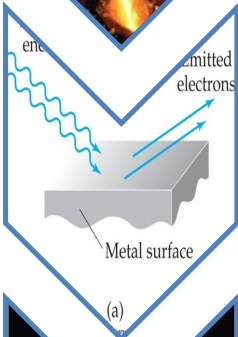
- Model atòmic de Bohr
- Comportament ondulatori de la matèria. Principi d'incertesa



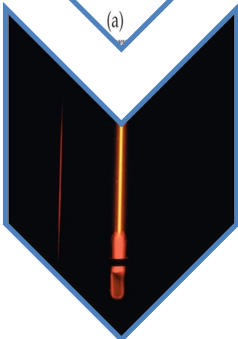
# Fenòmens que **no podia explicar** la física clàssica ni la naturalesa ondulatoria de la llum



- **Radiació del cos negre** (emissió de llum que prové d'objectes calents).



- **Efecte fotoelèctric** (emissió d'electrons de superfícies metàl·liques).

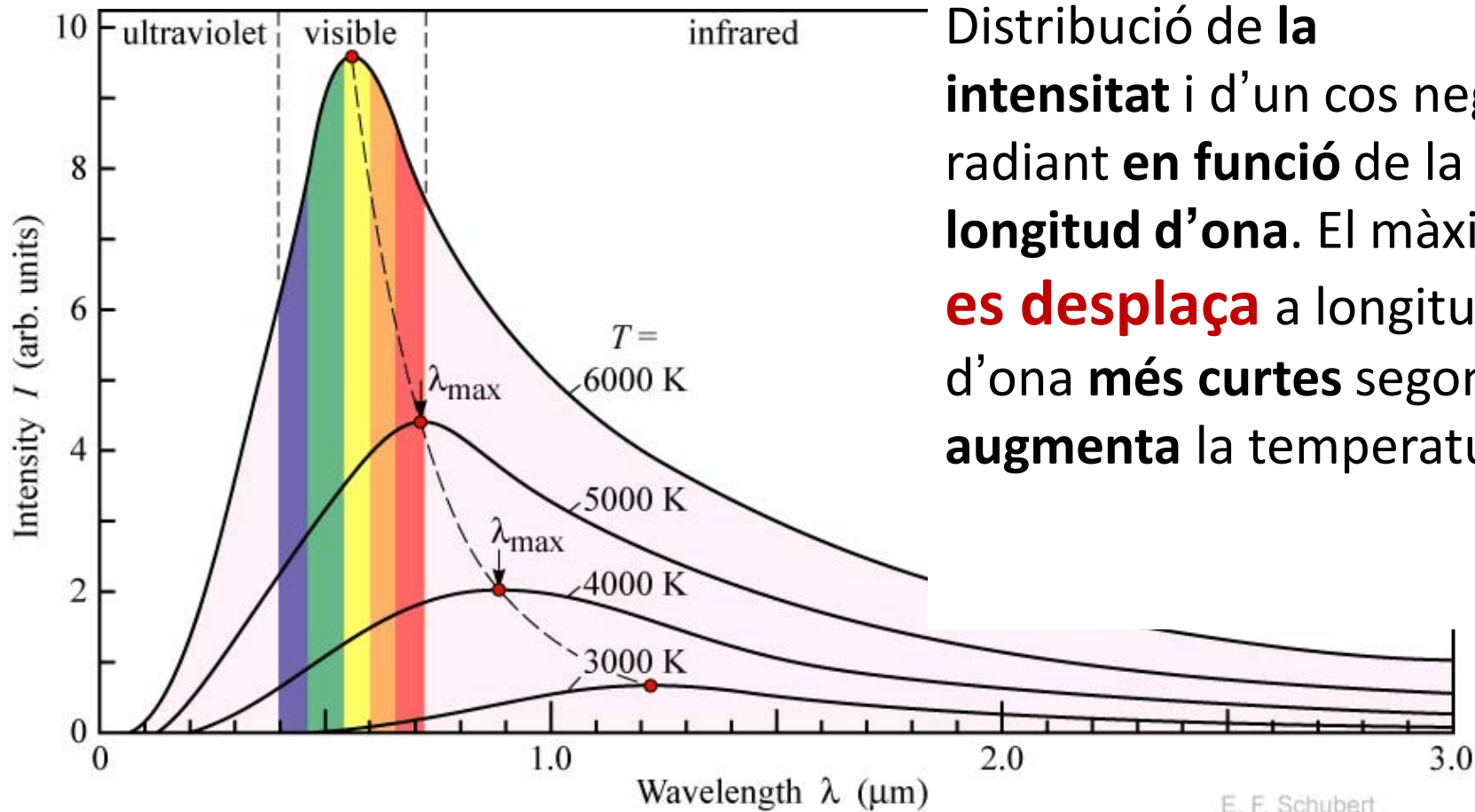


- **Espectres d'emissió** (emissió de llum per àtoms de gas excitats).

# Mecànica quàntica. Radiació del cos negre

(Emissió de llum que prové d'objectes calents.)

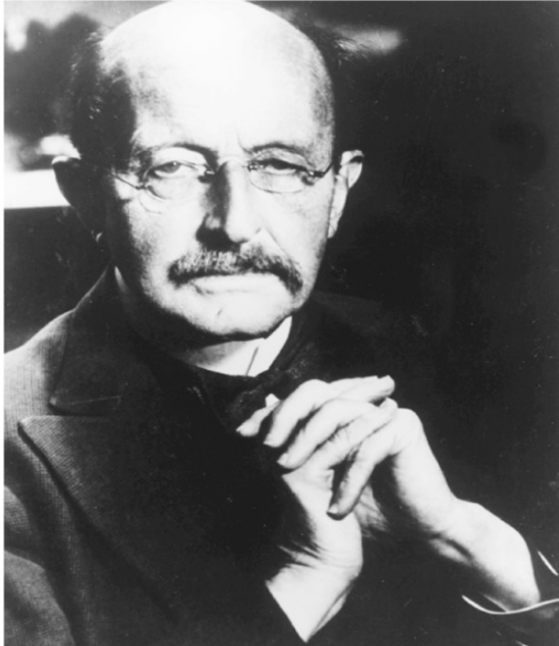




Distribució de la **intensitat** i d'un cos negre radiant **en funció** de la **longitud d'ona**. El màxim **es desplaça** a longituds d'ona **més curtes** segons **augmenta** la temperatura.



# Hipòtesi de Planck: quantificació de l'energia (1900)



Copyright © 2011 Pearson Canada Inc.



(1918)

Els àtoms només poden **emetre o absorbir** energia (radiació electromagnètica) en “**paquets**” d'energia discrets de **certa grandària mínima** anomenats **quàntums**.

# Hipòtesi de Planck: quantificació de l'energia (1900)

*Energy, like matter,  
is discontinuous.*

$$E = h \cdot \nu$$

$h = \text{constant de Planck} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

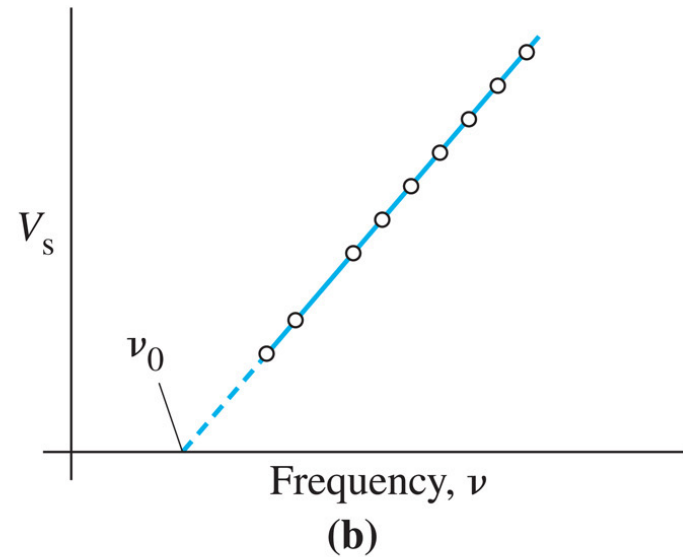
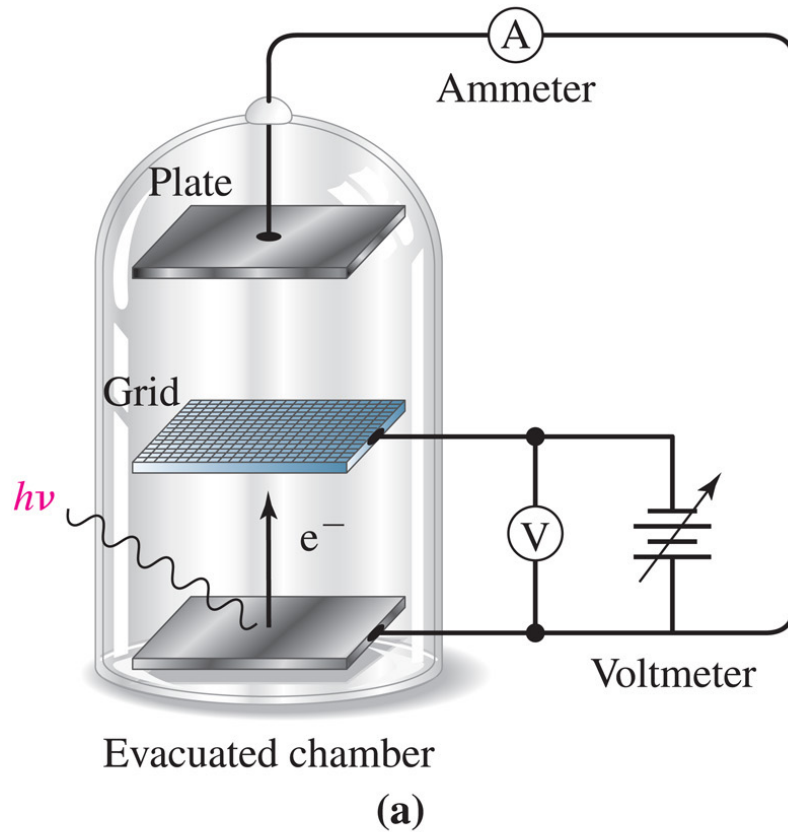


L'energia d'un **quàntum** de radiació electromagnètica és proporcional a la freqüència de la radiació.

# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

(Emissió d'electrons de superfícies metàl·liques-)

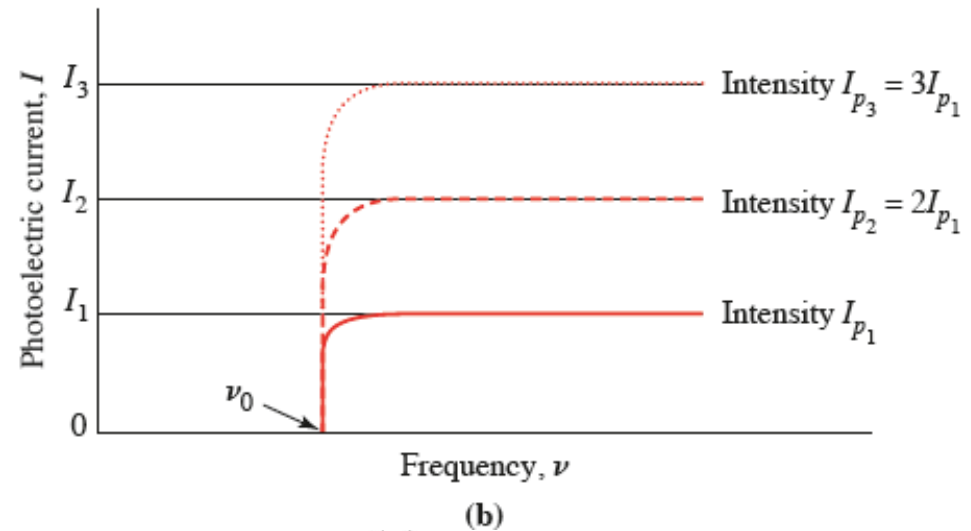
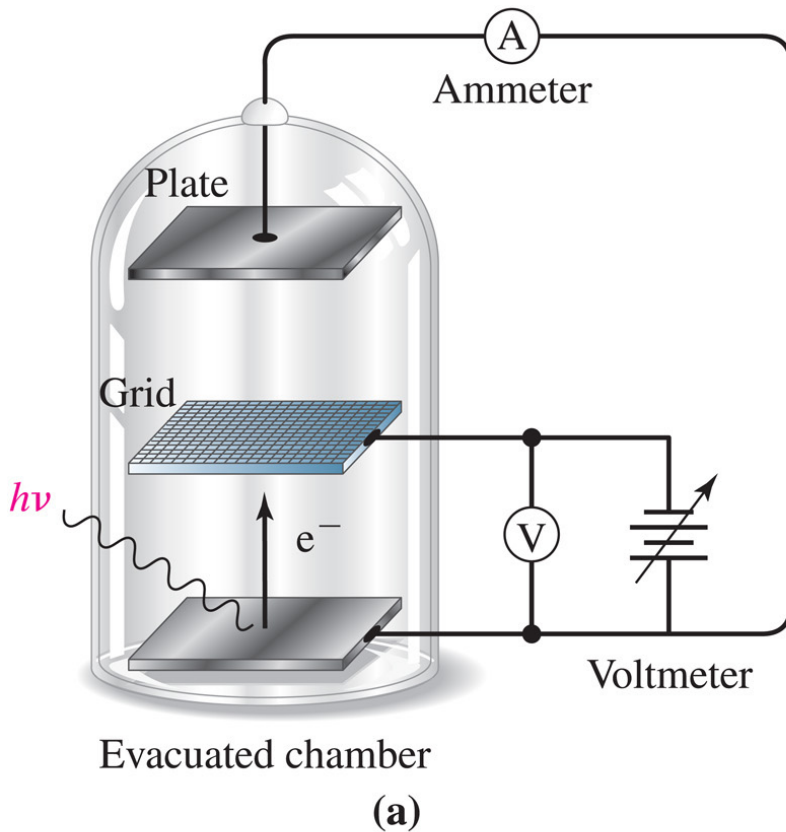
## Efecte fotoelèctric. H. Hertz (1887)



# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

(Emissió d'electrons de superfícies metàl·liques.)

## Efecte fotoelèctric. H. Hertz (1887)



# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

(Emissió d'electrons de superfícies metàl·liques.)

1

Emissió d'electrons quan la **freqüència** de la llum incident en la superfície metàl·lica excedeix un **valor llindar determinat** ( $\nu_0$ ) propi de cada metall.

2

Electrons expulsats immediatament, independentment de la **intensitat** de la radiació (d'aquesta depén **el nombre** d'electrons emesos).

3

**Energia cinètica** dels electrons expulsats augmenta amb la **freqüència** de la radiació incident.

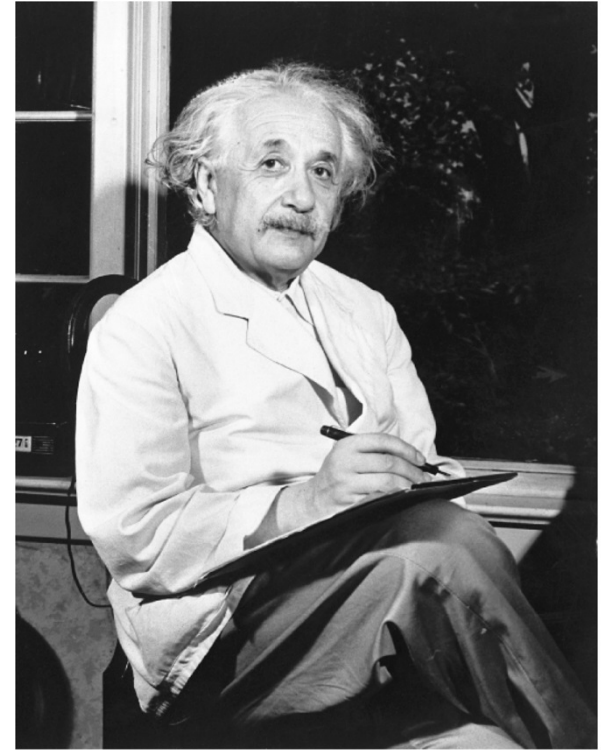
# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

(Emissió d'electrons de superfícies metàl·liques.)

Explica l'efecte fotoelèctric aplicant **la hipòtesi de Planck**:

l'*energia* de la radiació electromagnètica es propaga en forma de **quàntums de llum o fotons**, d'energia.

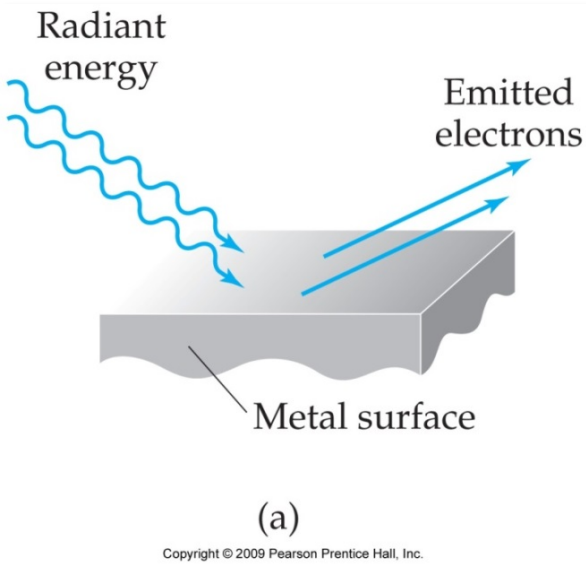
$$E = h \cdot \nu$$



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric



E. cin. electró  
expulsat

$$\frac{1}{2} m \cdot v^2 = h \cdot \nu - \phi$$

E aportada pel  
fotó incident



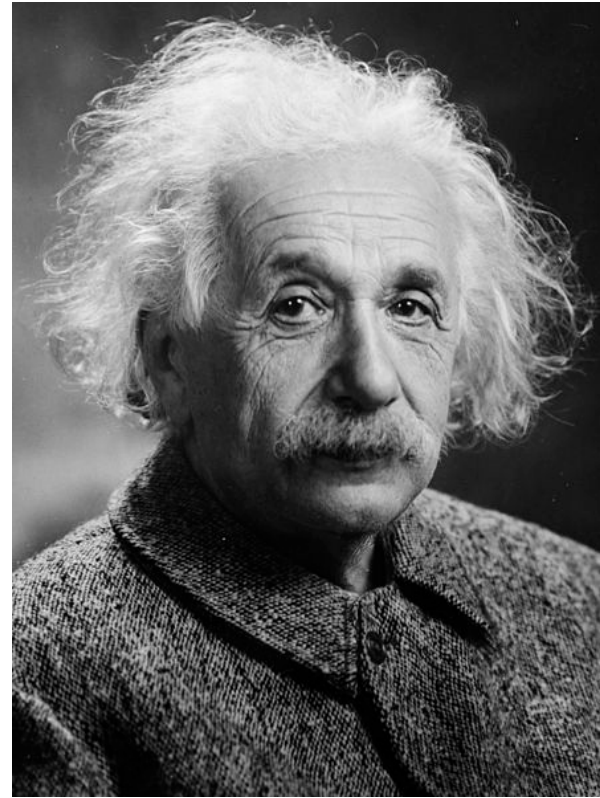
Energia mínima per a  
arrancar un electró =  
FUNCIÓ TREBALL del  
metall =  $h \cdot \nu_0$

$$E_{\text{cin.}} = h \cdot \nu - h \cdot \nu_0 = h \cdot (\nu - \nu_0)$$

# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

La llum també es  
pot interpretar  
com un conjunt  
**de partícules.**

**A. Einstein (1905)**



This image is available from the United States [Library of Congress's Prints and Photographs division](#) under the digital ID [cph.3b46036](#). Domini public.



# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

Calculeu l'energia d'un fotó de llum groga amb una longitud d'ona de 589 nm.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$c = \lambda \cdot \nu$$

$$E = h \cdot \nu$$

# Mecànica quàntica. Efecte fotoelèctric

Sabent la longitud d'ona de la llum podem calcular l'energia d'un fotó d'aquesta llum.

$$\nu = c/\lambda$$

$$E = h\nu$$

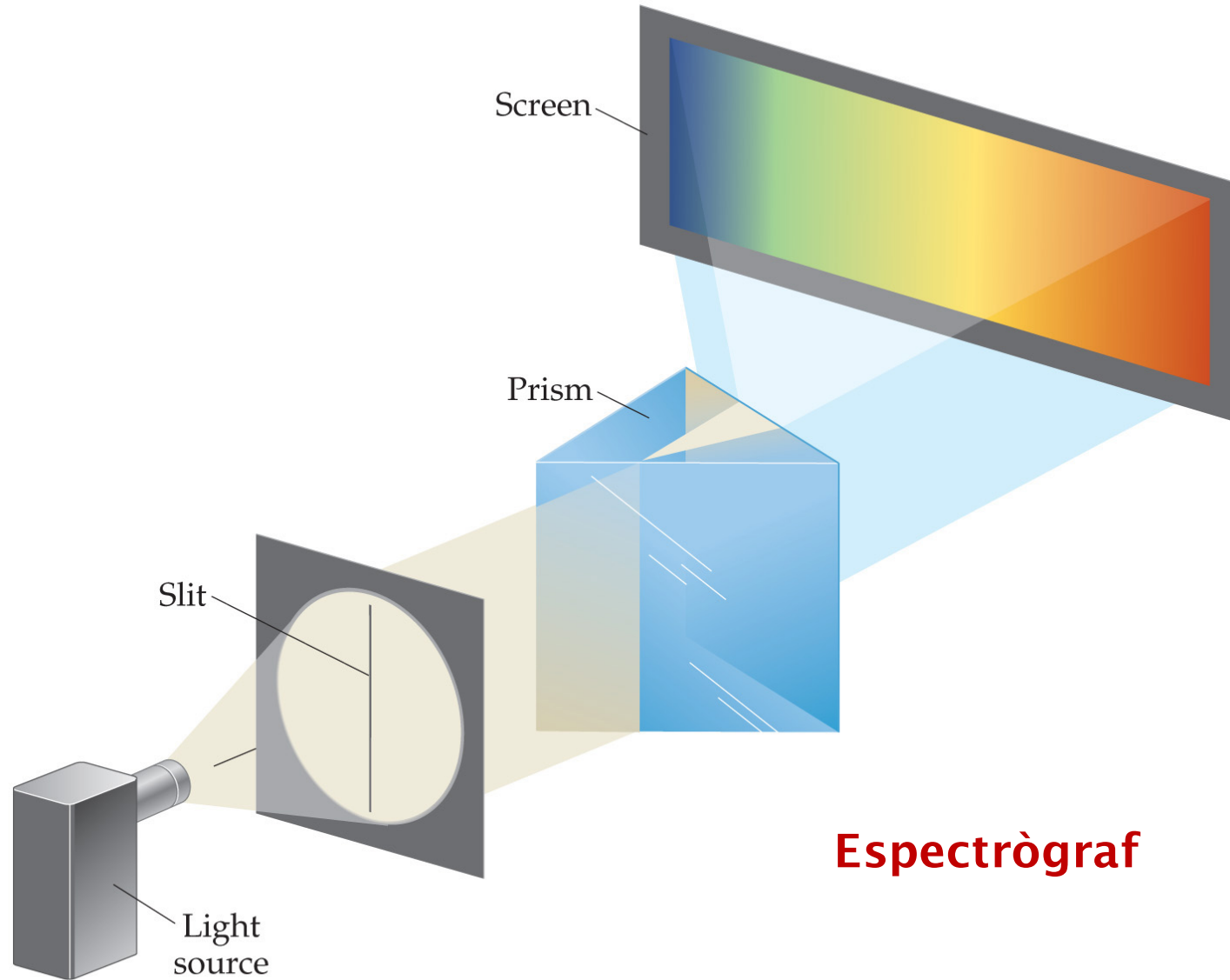
$$\nu = c/\lambda = 5.09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$E = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})(5.09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}) = 3.37 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$(6.02 \times 10^{23} \text{ photons/mol})(3.37 \times 10^{-19} \text{ J/photon}) = 2.03 \times 10^5 \text{ J/mol}$$

$$(6.02 \times 10^{23} \text{ photons/mol})(3.37 \times 10^{-19} \text{ J/photon}) = 2.03 \times 10^5 \text{ J/mol}$$

# Mecànica quàntica. Espectres atòmics



**Espectrògraf**

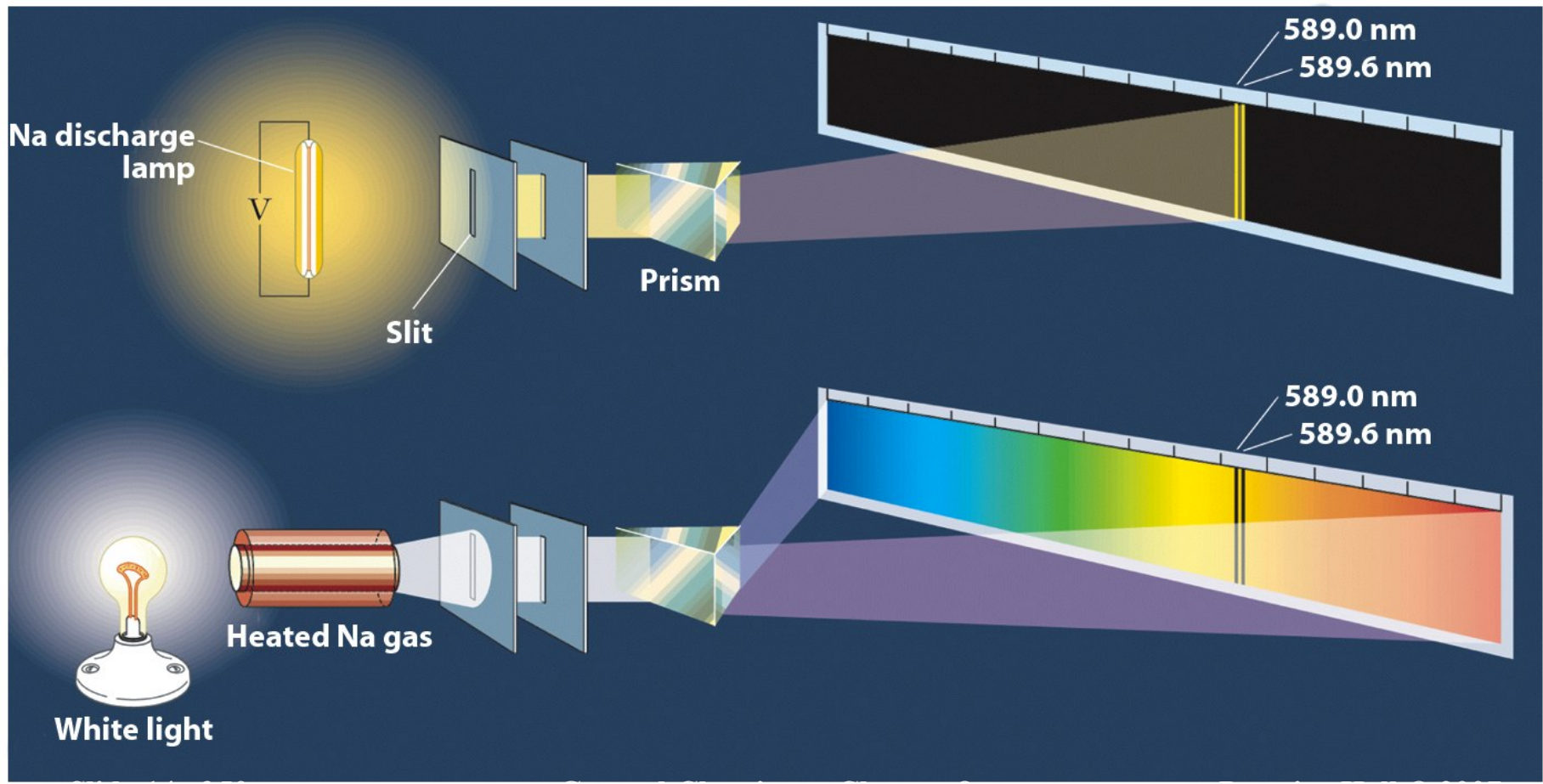
# Mecànica quàntica. Espectres atòmics



Què passa quan registrem l'espectre **d'un element pur** radiant en un espectrògraf ?

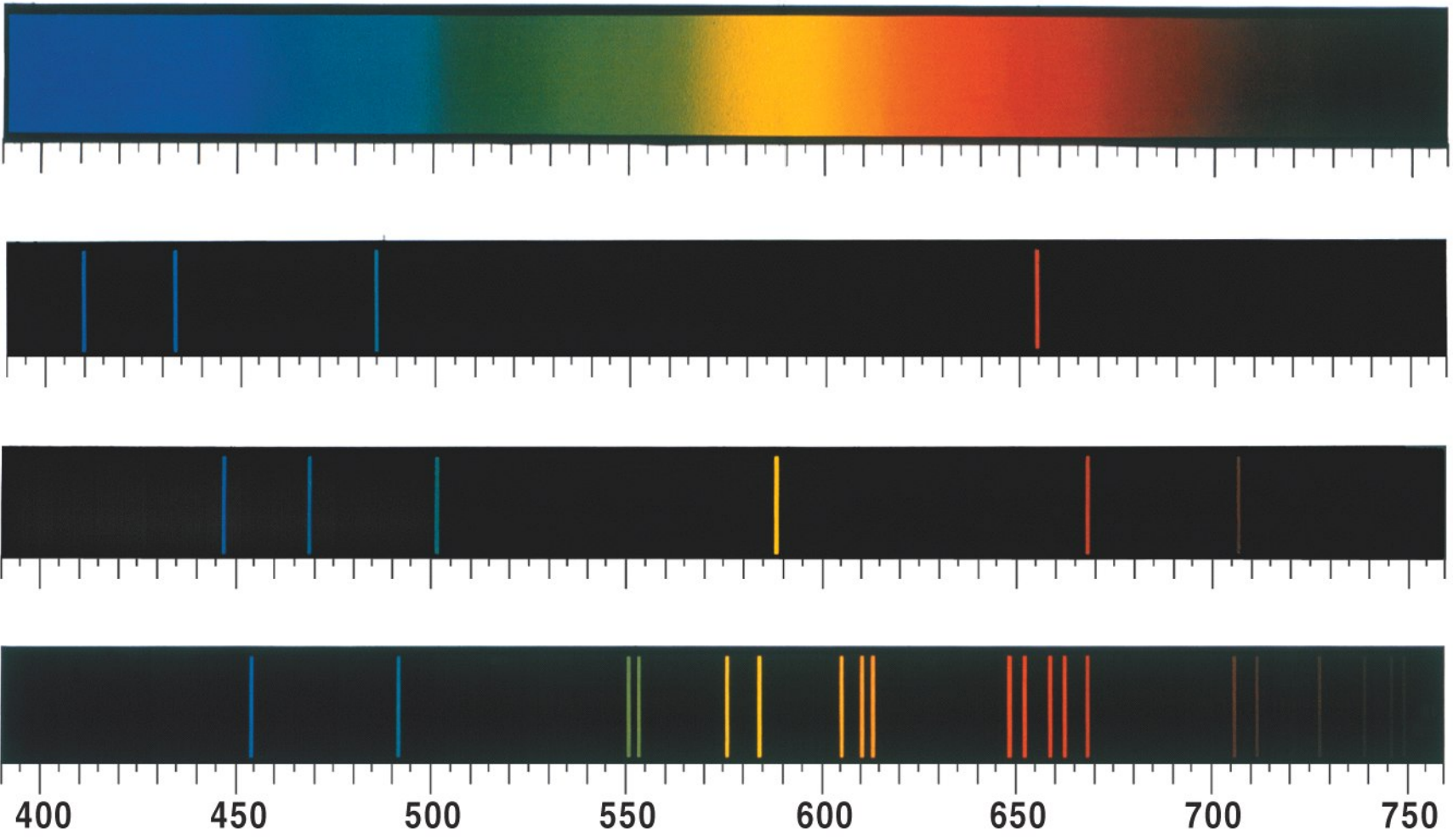
# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Espectre d'emisió vs espectre d'absorció dels àtoms



# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

Espectre d'emissió de la llum blanca vs espectre d'emissió d'H, He i Ba.

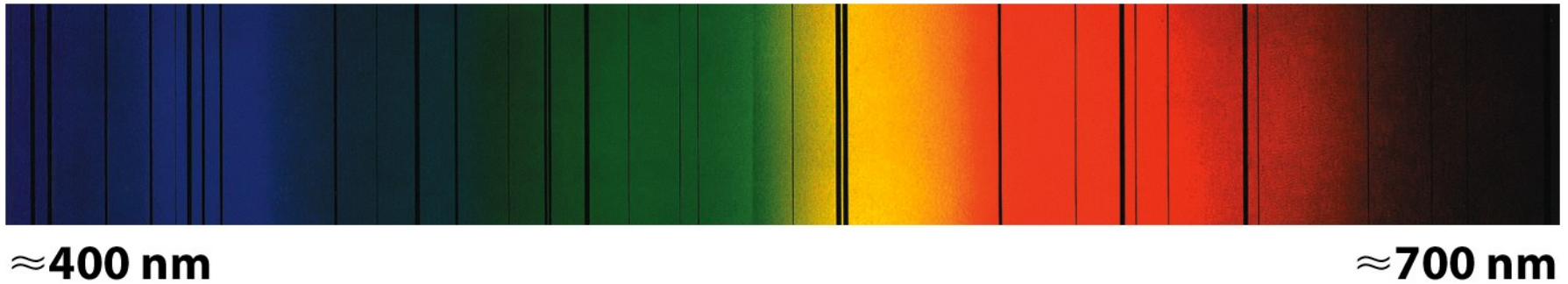


# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

La naturalesa  
**ondulatòria** de  
la llum **no**  
**explica** aquest  
fenomen.

# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

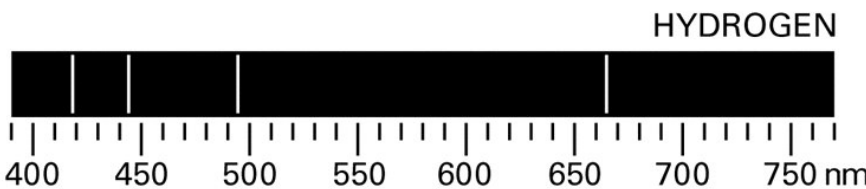
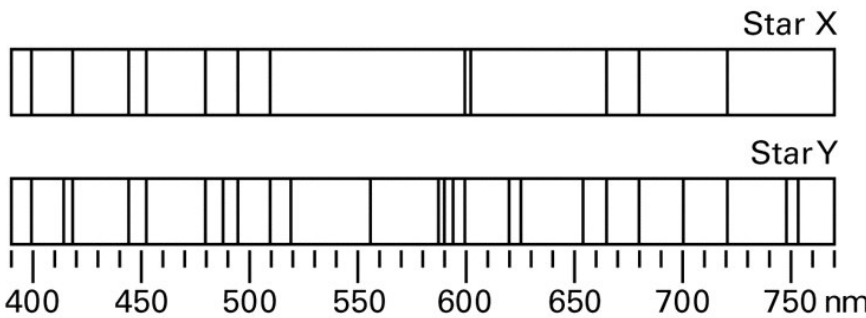
## Espectre d'emissió de la llum solar





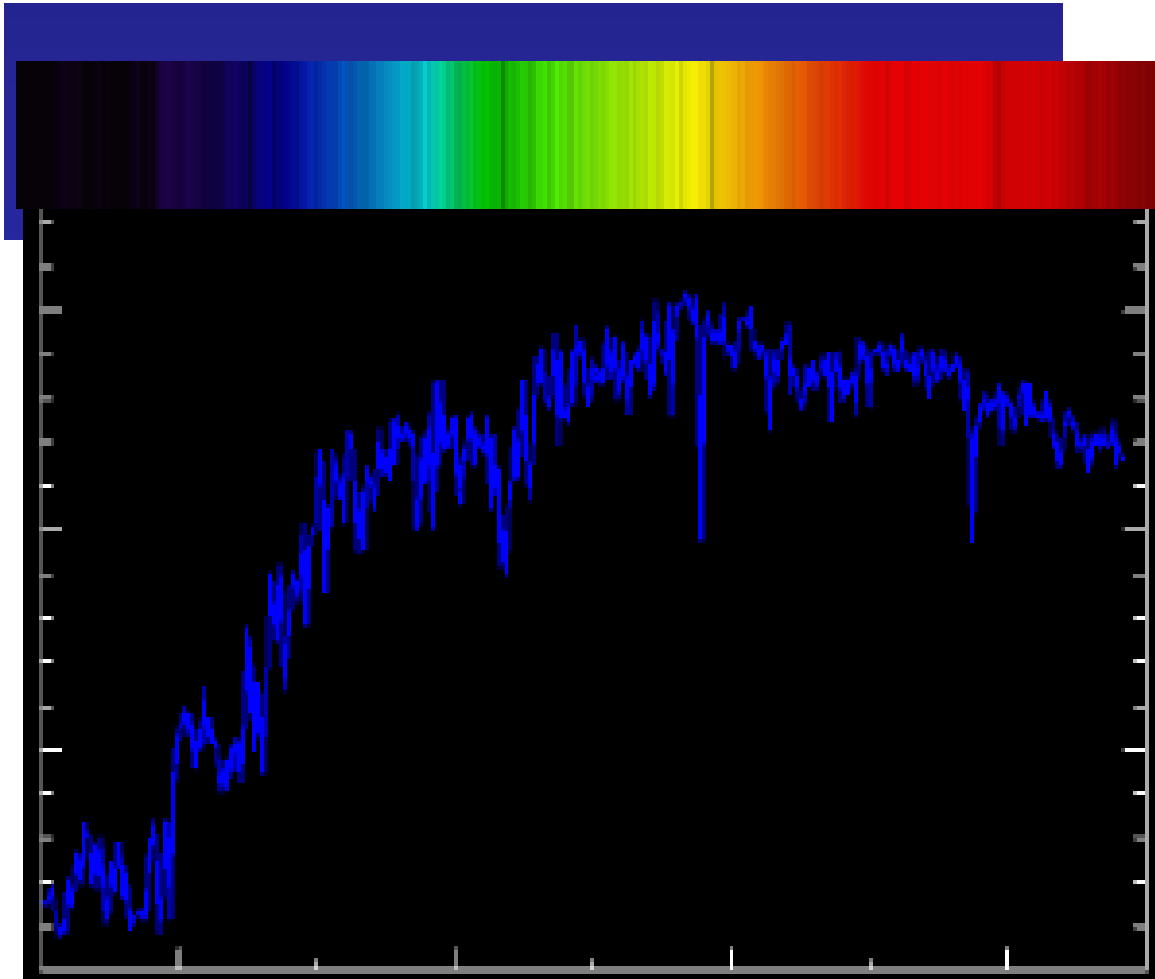
# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Espectre d'emissió de les estrelles



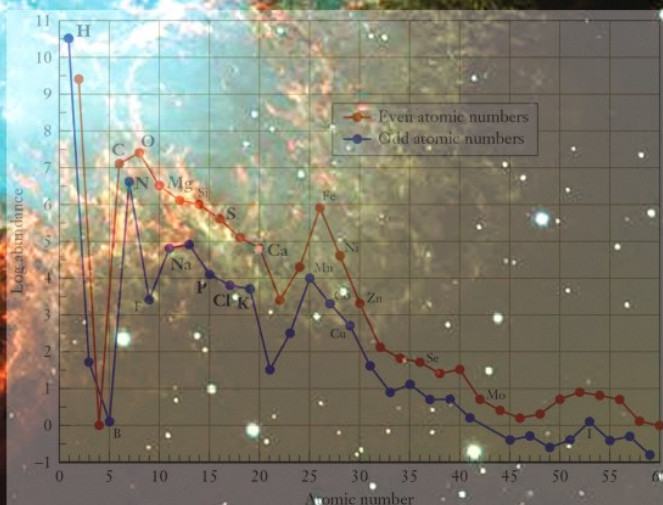
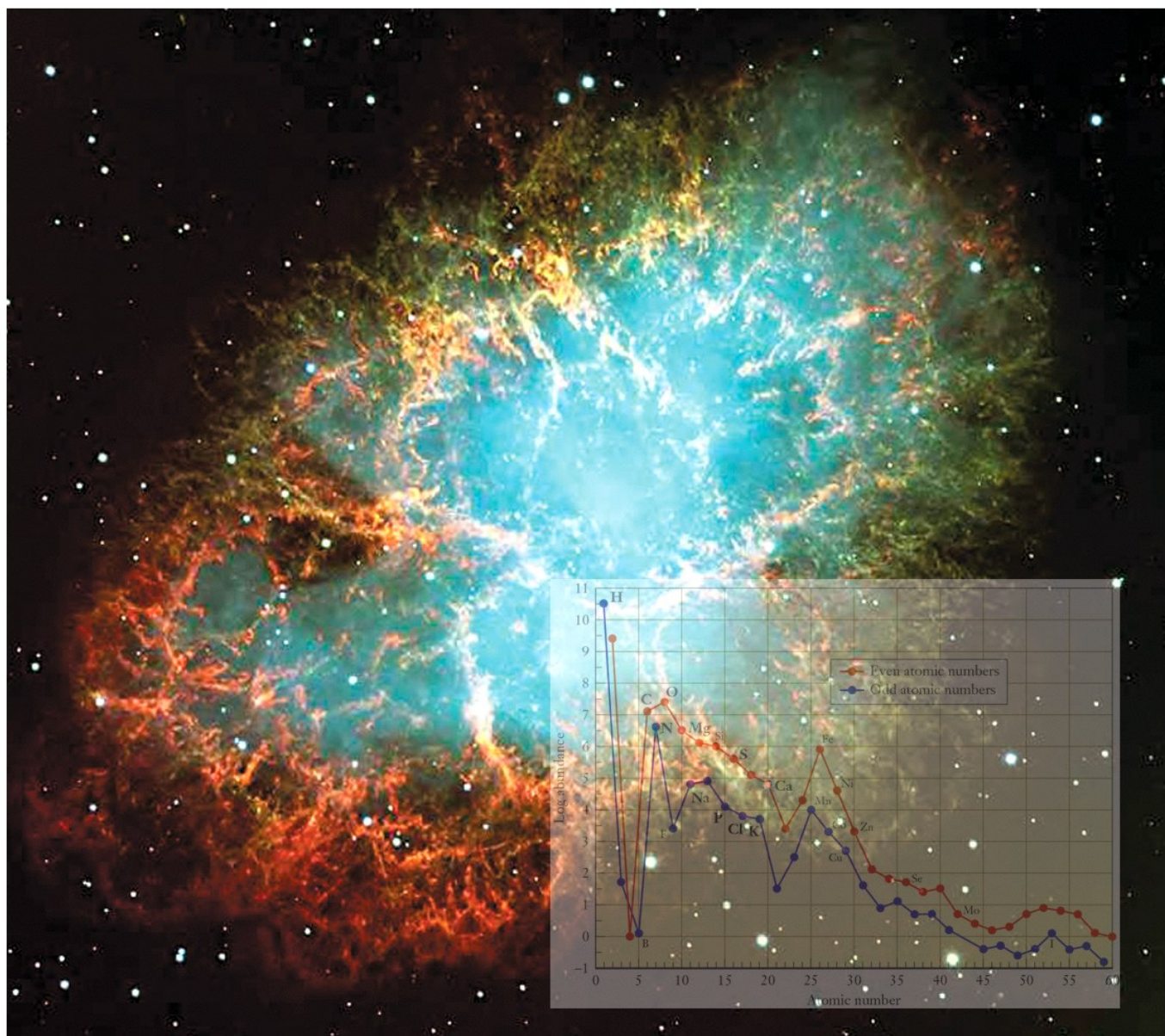
# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Espectre d'emissió de les estrelles

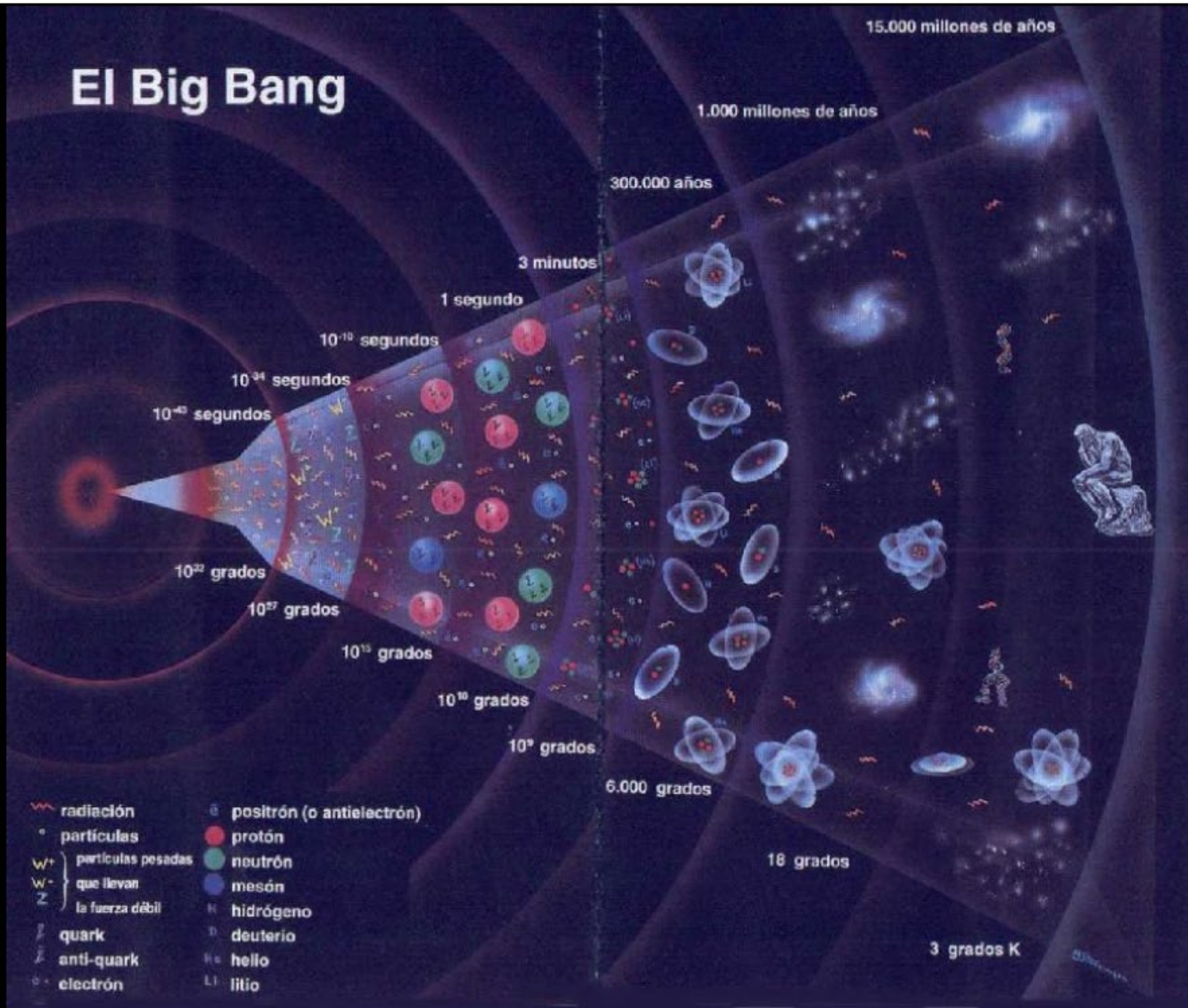


# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Una supernova en explosió



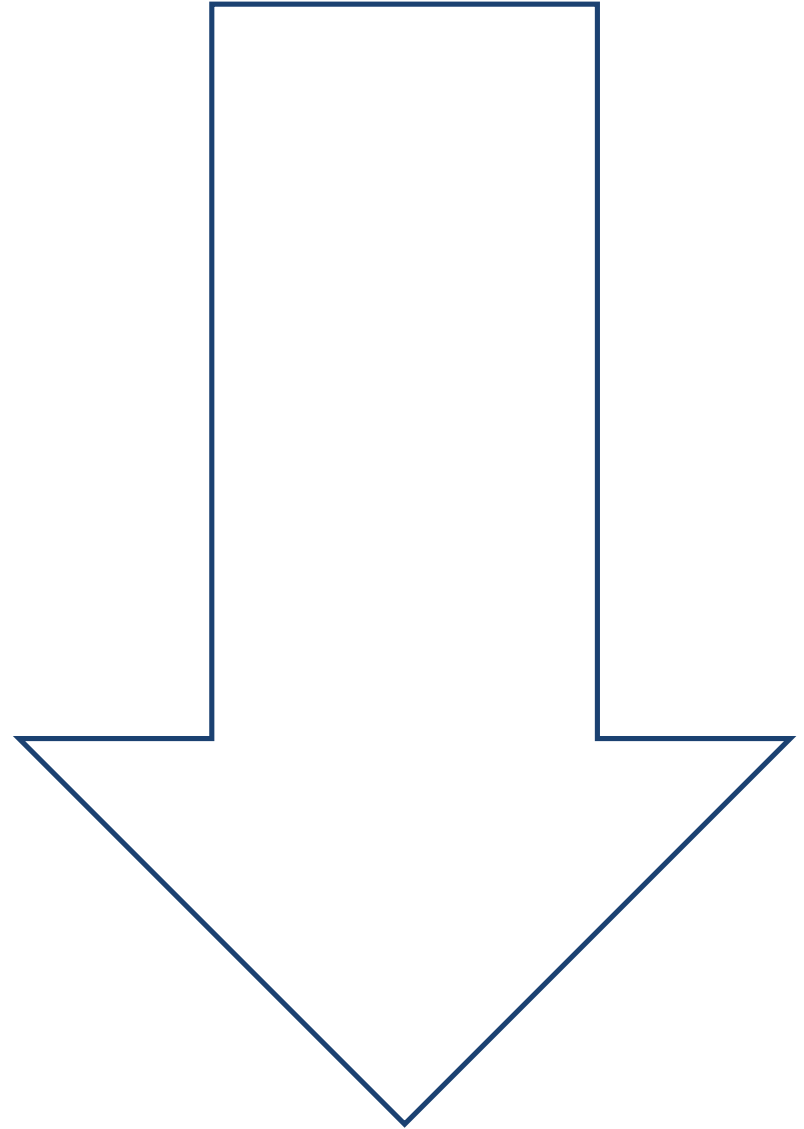
# El Big Bang



# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

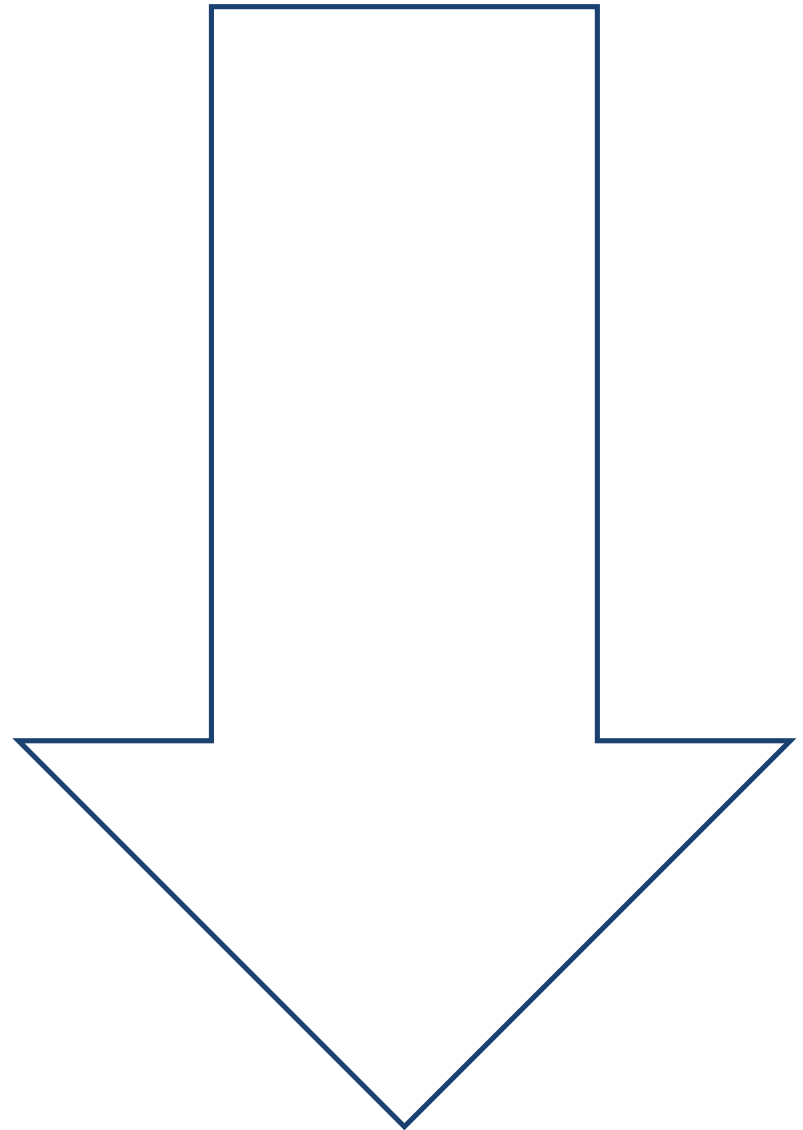
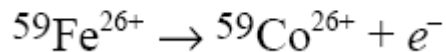
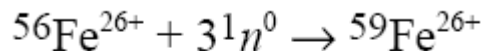
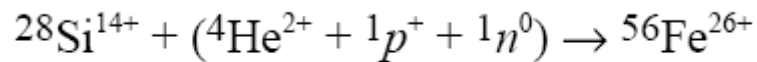
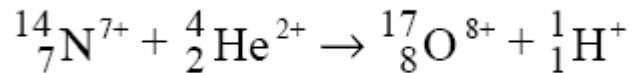
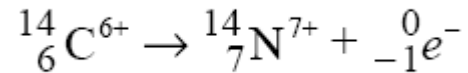
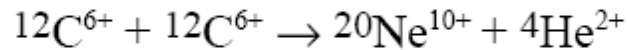
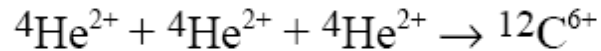
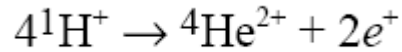
**Formació d'elements nous**

Recordeu **l'alquímia?**

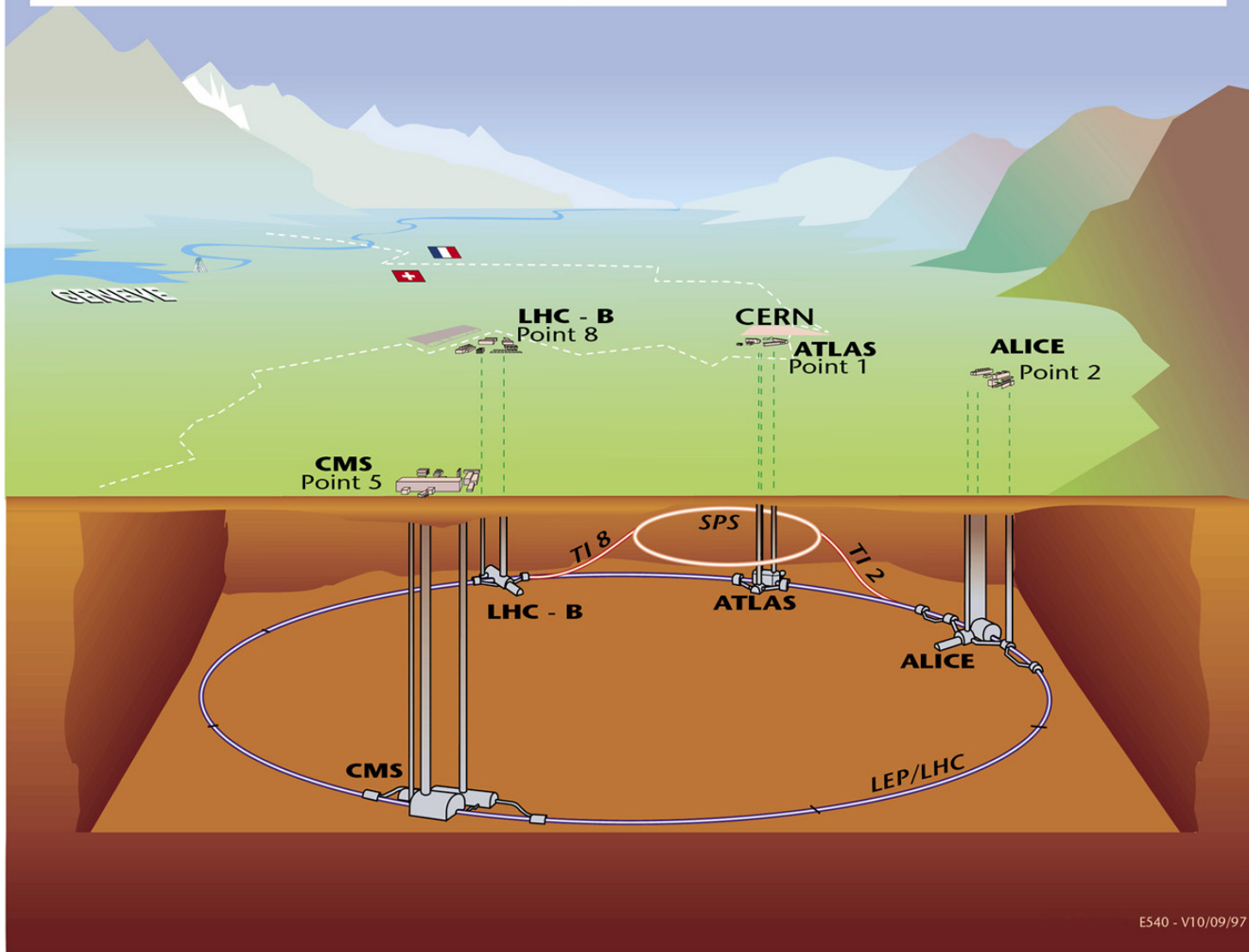


# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Formació d'elements nous

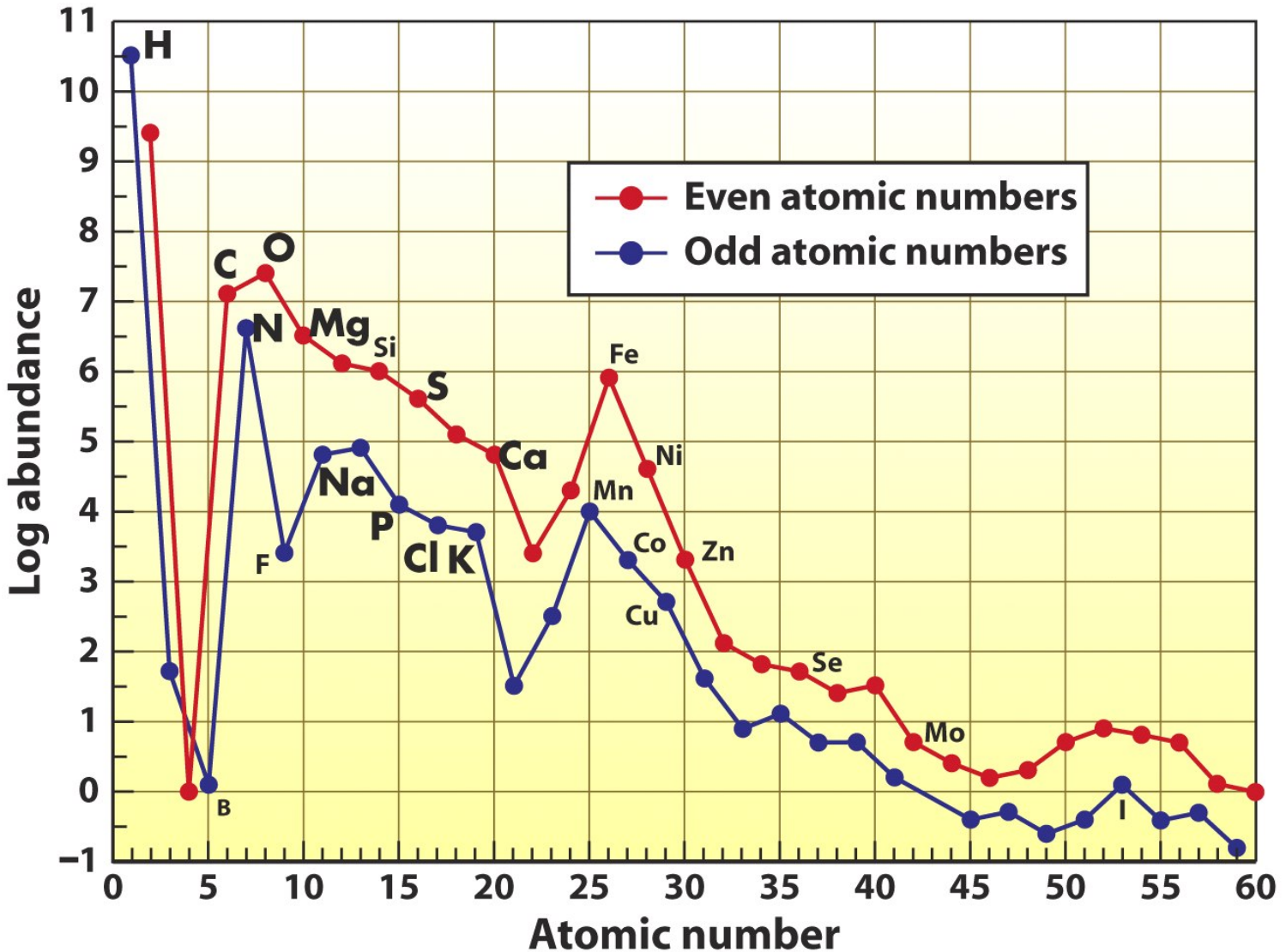


# Overall view of the LHC experiments.



# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

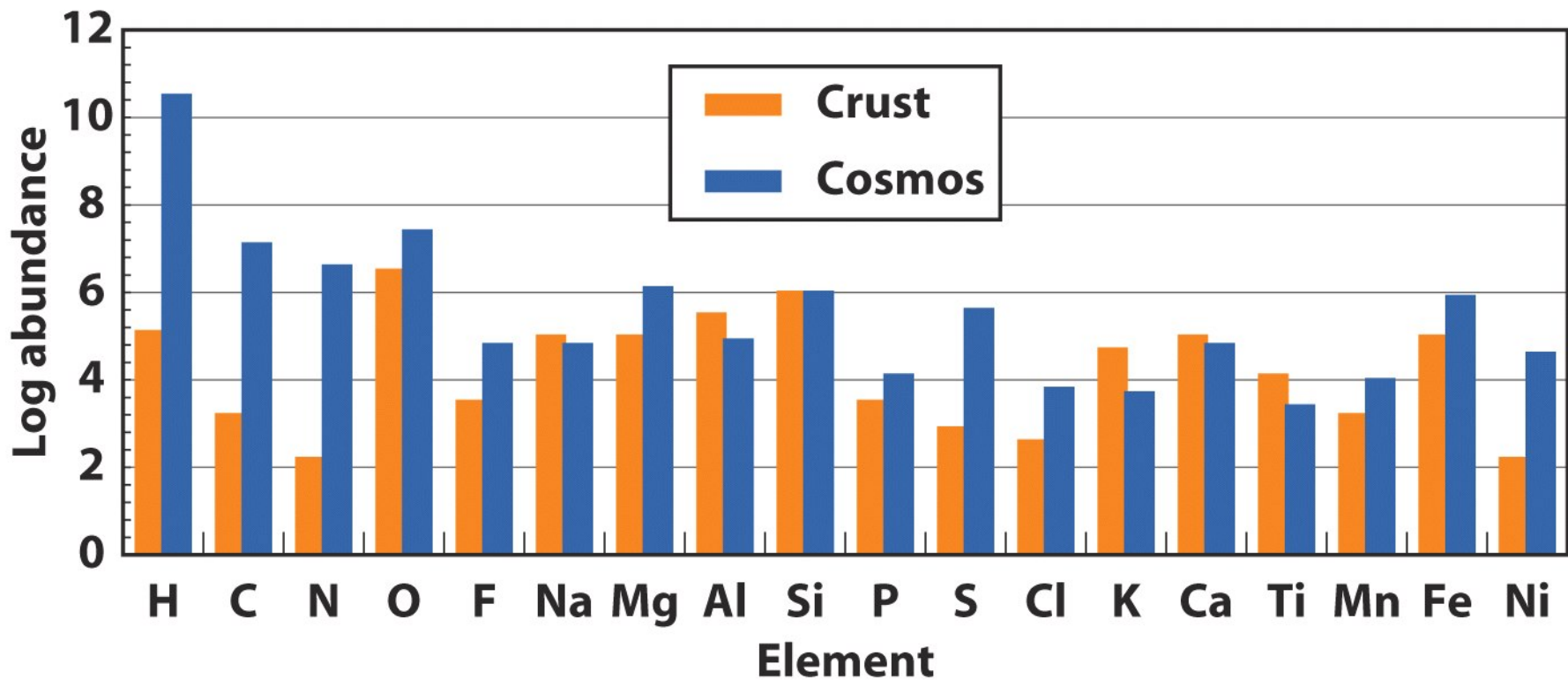
## Abundància dels elements





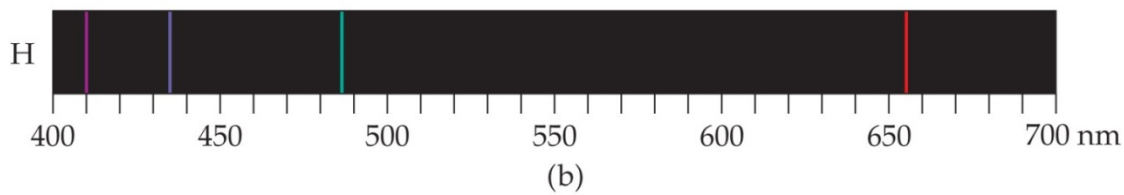
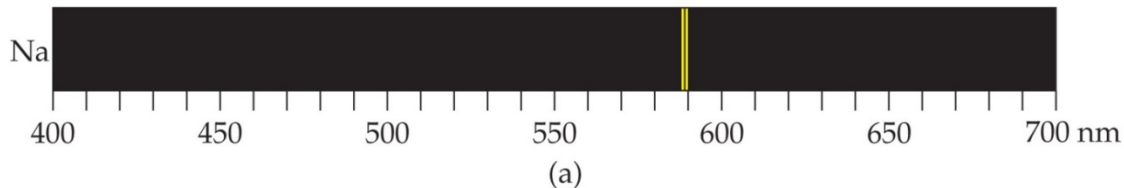
# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

## Abundància dels elements

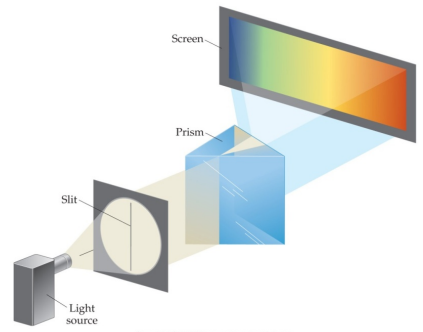


# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

Espectre d'emissió de la llum blanca vs espectre d'emissió d'H, He i Ba



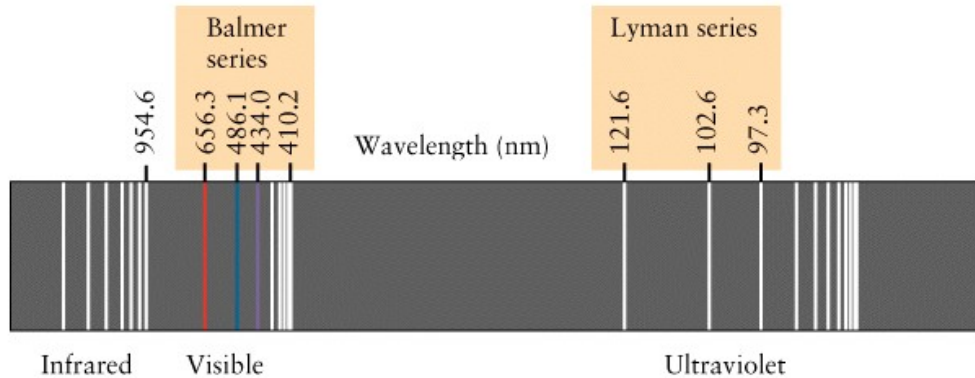
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

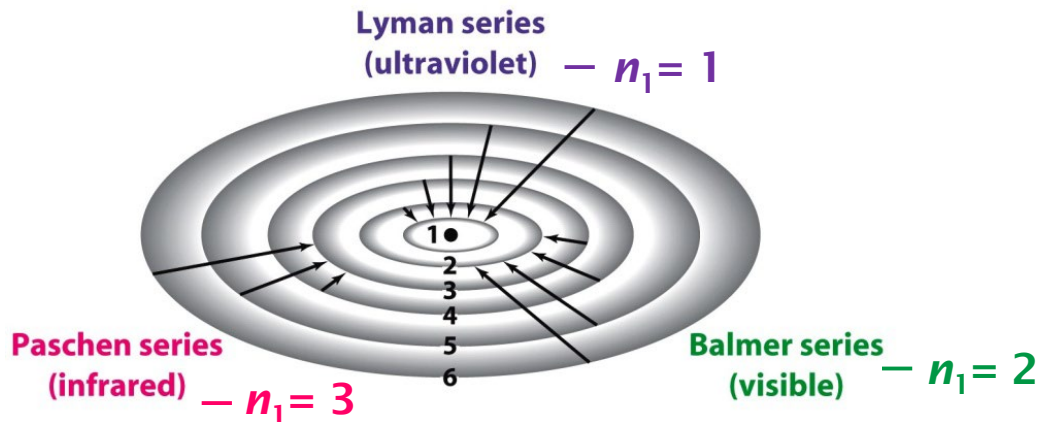
Espectre d'emissió de l'H. Equació de Rydberg



Equació de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

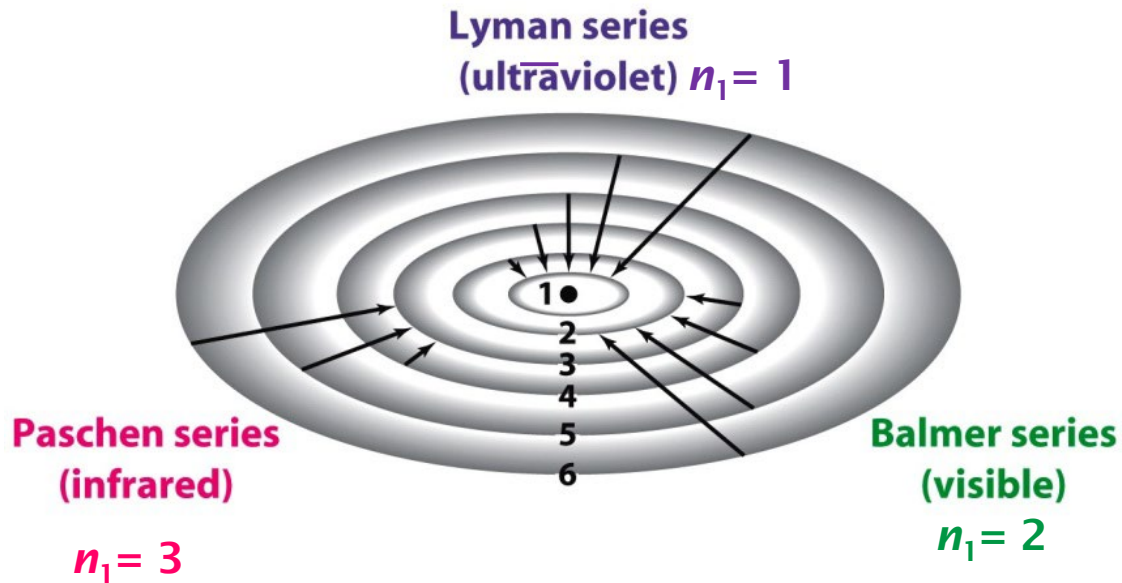
$R_H$  = constant de Rydberg  
( $109678 \text{ cm}^{-1}$ )  
( $3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ )



# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

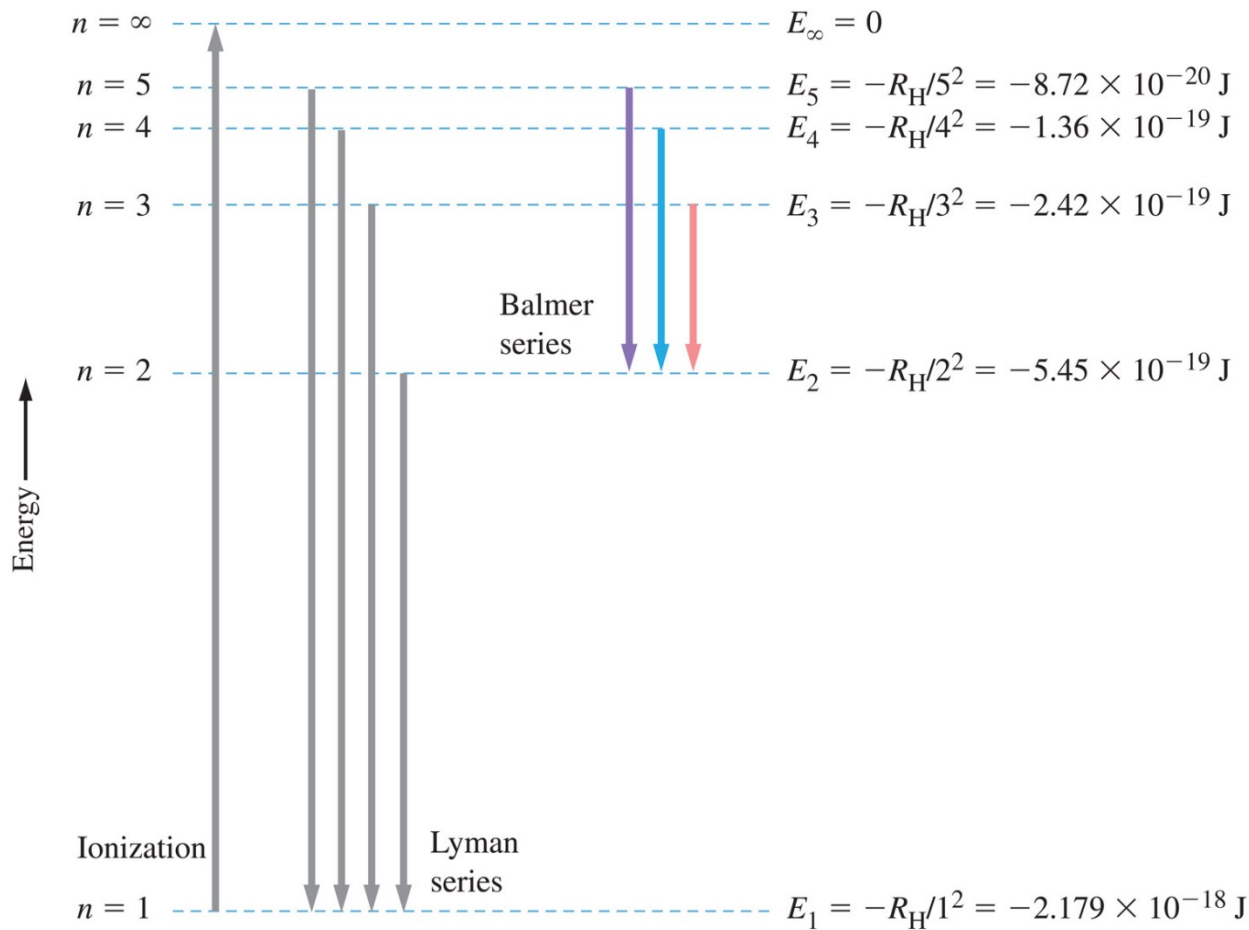
Espectre d'emissió de l'H. Equació de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

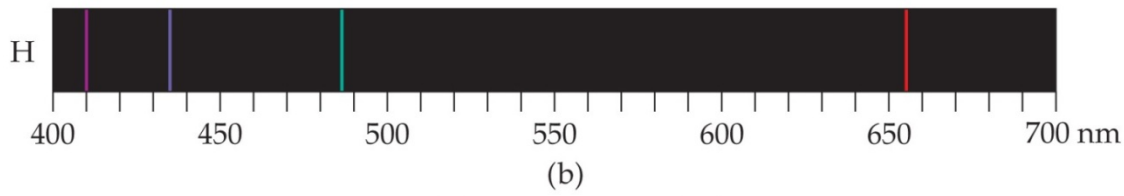
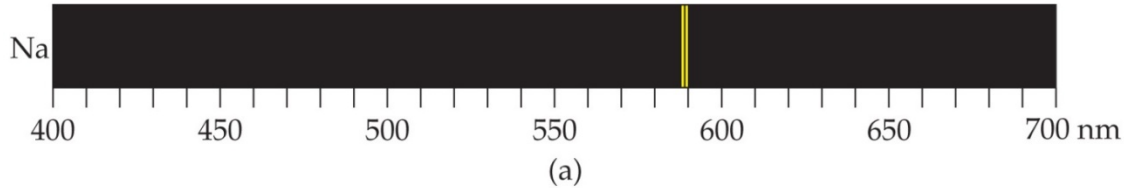


# Mecànica quàntica. Espectres atòmics

Espectre d'emissió de la llum blanca vs espectre d'emissió d'H, He i Ba



# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)



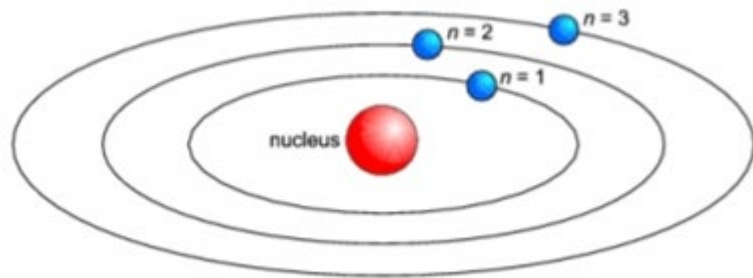
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

El físic Niels Borh, **cap al 1913**, va desenvolupar una teoria atòmica suposant que **els electrons** es **disposaven en capes** al voltant del nucli atòmics.



# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)



The American Institute of Physics credits the photo [\[1\]](#) to [AB Lagrelius & Westphal](#), Niels Bohr's [Nobel Prize biography](#), 1922



# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

L'electró es mou fent **òrbites circulars** amb **radis** determinats, corresponents a valors determinats d'**energia**.

$$E_n = -\frac{R_H}{n^2}$$

$n$  = nombre quàntic ( $n = 1, 2, 3\dots$ )  
 $R_H$  = constant de *Rydberg* ( $2,179 \cdot 10^{-18}$  J)

Com més baixa siga l'energia de l'electró (més negativa),

l'àtom serà més estable.  **$n=1$**  (estat fonamental)



# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

Un electró en un estat d'energia  
permés **no irradia energia**  
i **no cau cap al nucli** (estat  
estacionari).



# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

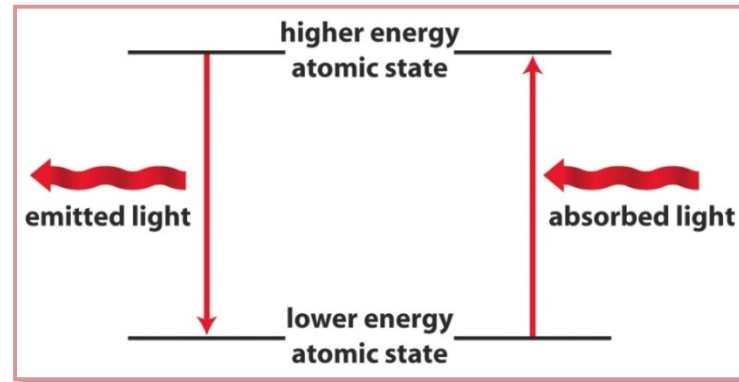
Quan l'electró passa d'un estat permés d'energia a un altre **emet o absorbeix energia** en forma **d'un fotó**, l'energia del qual correspon **a la diferència d'energia** entre els dos estats.

$$\epsilon = h\nu?$$

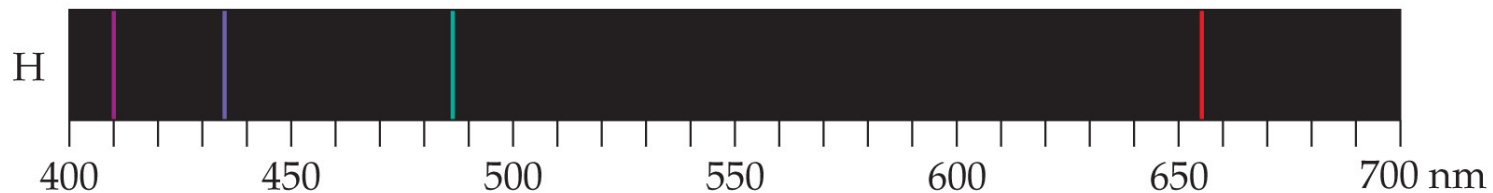


# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

$$\Delta E = E_{\text{fotó}} = h \cdot \nu$$



Aquestes **transicions electròniques** originen les línies en els **espectres atòmics**.

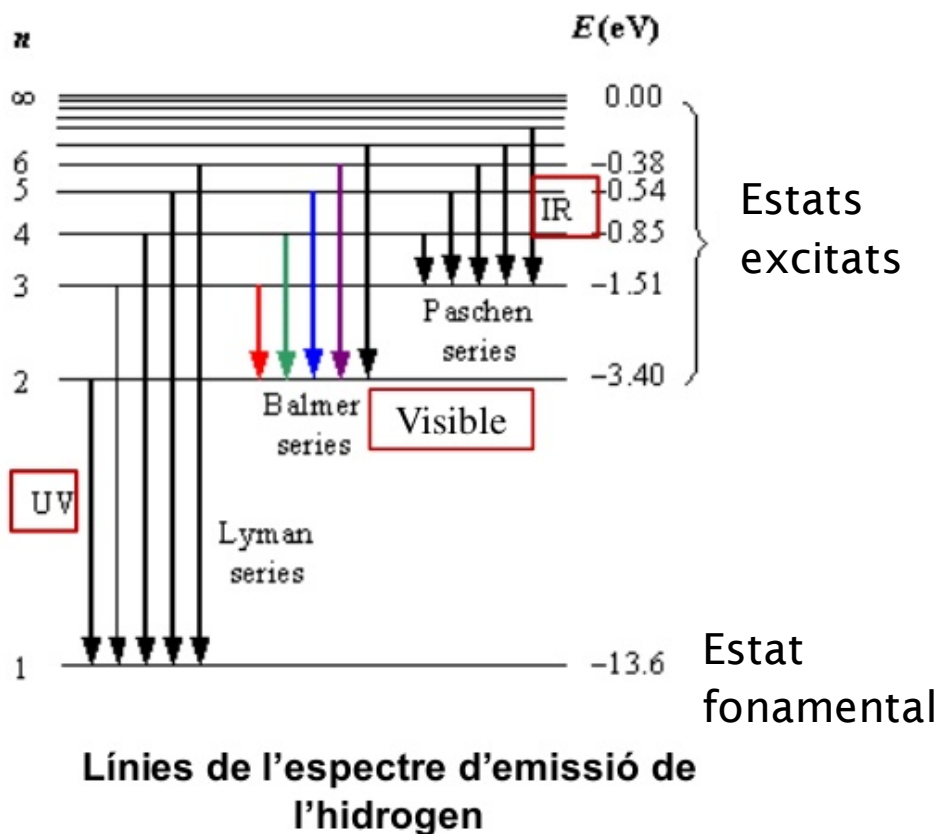


# Mecànica quàntica. El model de Bohr (1913)

$$\Delta E = E_{\text{fotó}} = h \cdot \nu$$

$$\Delta E = E_f - E_i = \frac{-R_H}{n_f^2} - \frac{-R_H}{n_i^2} = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu = hc/\lambda$$

# Mecànica quàntica. Transicions electròniques en l'àtom d'hidrogen



Model vàlid per a **sistemes amb un electró:**

H, He<sup>+</sup>, Li<sup>+2</sup>

# Mecànica quàntica. Transicions electròniques en l'àtom d'hidrogen

**Exercici.** És probable que existisca, per a l'àtom d'hidrogen, un nivell d'energia  $E_n = -1,00 \times 10^{-20} \text{ J}$ ?

$$E = -\frac{R_H}{n^2}$$

# Mecànica quàntica. Transicions electròniques en l'àtom d'hidrogen

**Exercici.** Calcula la transició des de  $n=5$  a  $n=2$  de la línia de la sèrie de Balmer de l'hidrogen. En quina regió de l'espectre electromagnètic apareixerà?

$$\Delta E = R_H \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$



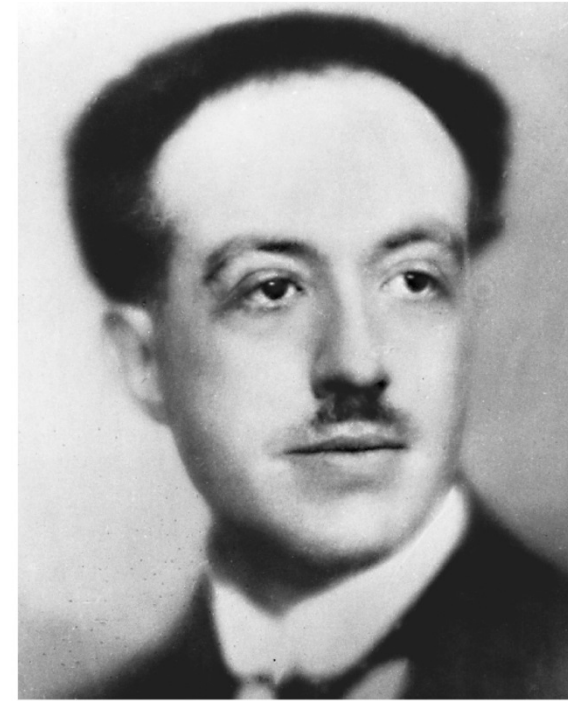
# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

La llum (ona) pot  
tindre una  
naturalesa **de**  
**tipus**  
**corpuscular.**

I si totes les  
**partícules**  
tingueren un  
**comportament**  
**d'ona?**

# Mecànica quàntica. Dualitat ona-partícula (De Broglie, 1924)

Va proposar que **totes les partícules** haurien de considerar-se com **proveïdes de propietats ondulatòries**.



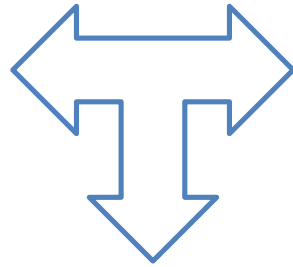
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**L. De Broglie**  
(1892-1987)



# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

$$E = mc^2$$



$$E = h\nu$$

$$h\nu = mc^2$$

$$h\nu/c = mc = p$$



$$p = h/\lambda$$



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**L. De Broglie**  
(1892-1987)



# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$



**Longitud d'ona**  
associada a una  
partícula **de**  
**massa m.**

$h$  = constant de Planck (J·s).

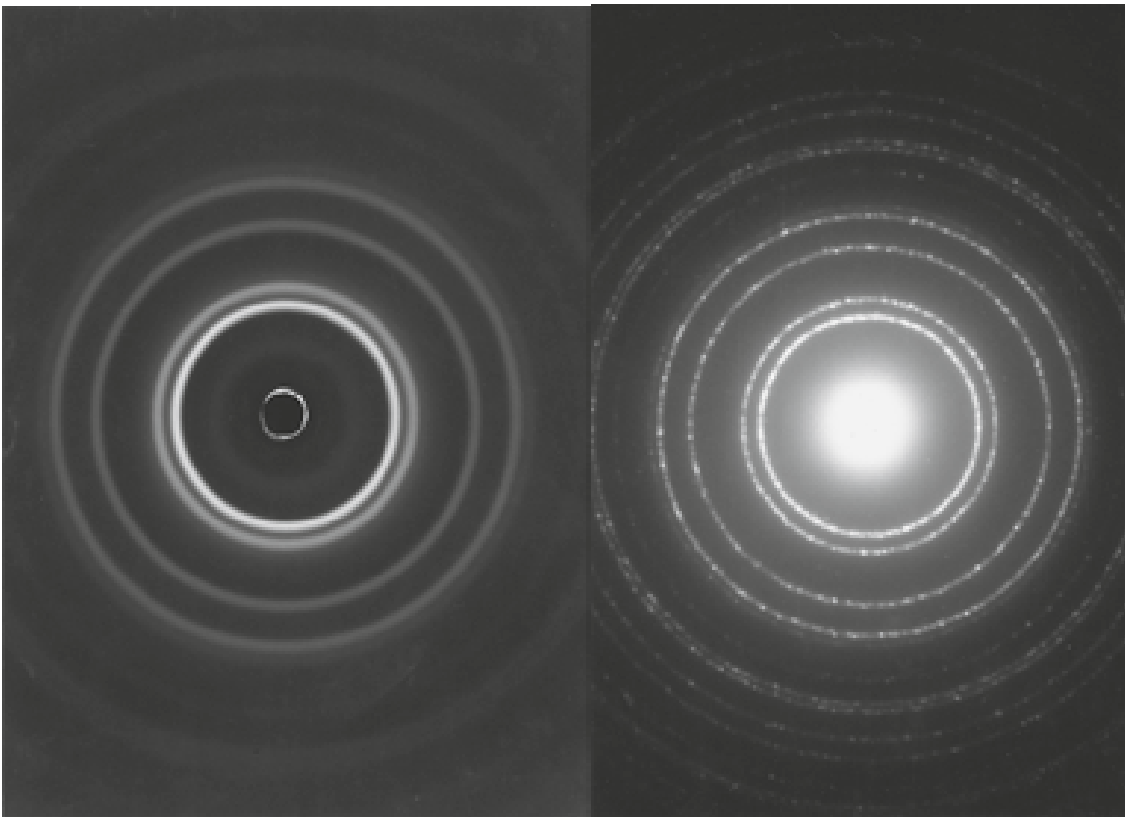
$p$  = *moment lineal* d'una partícula.

$\lambda$  = longitud d'ona (m).

$m$  = massa de la partícula (Kg).

$v$  = velocitat de la partícula (m/s).

# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria



Wave properties of electrons demonstrated.

Un ***electró*** que es mou al voltant del nucli es comporta com una ***ona estacionària***, és a dir, té una ***longitud d'ona*** particular.

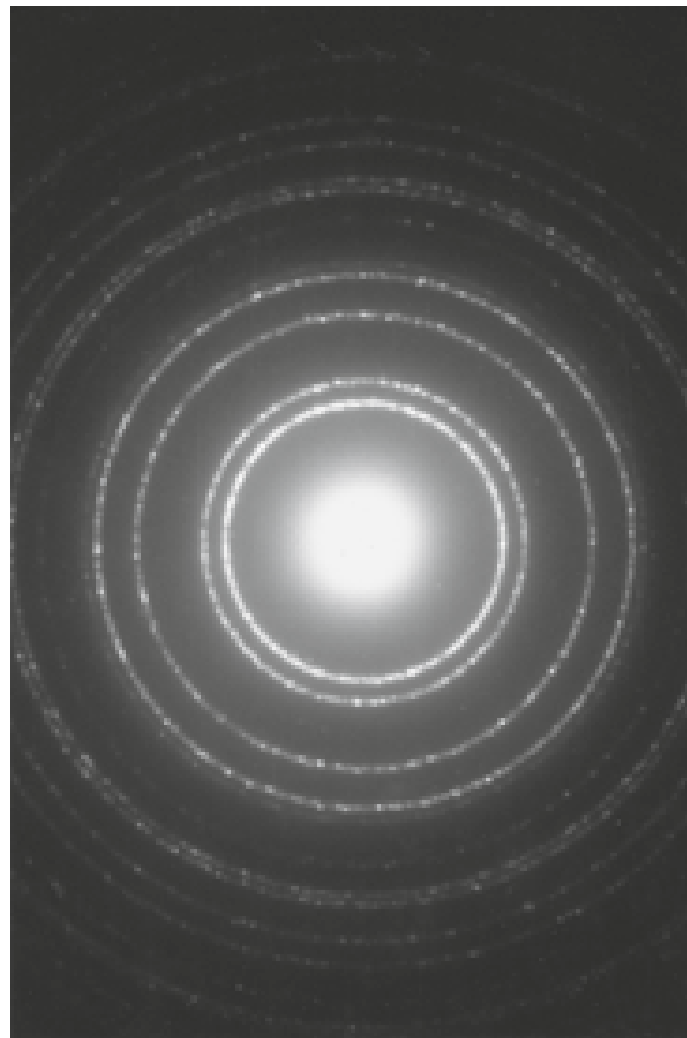
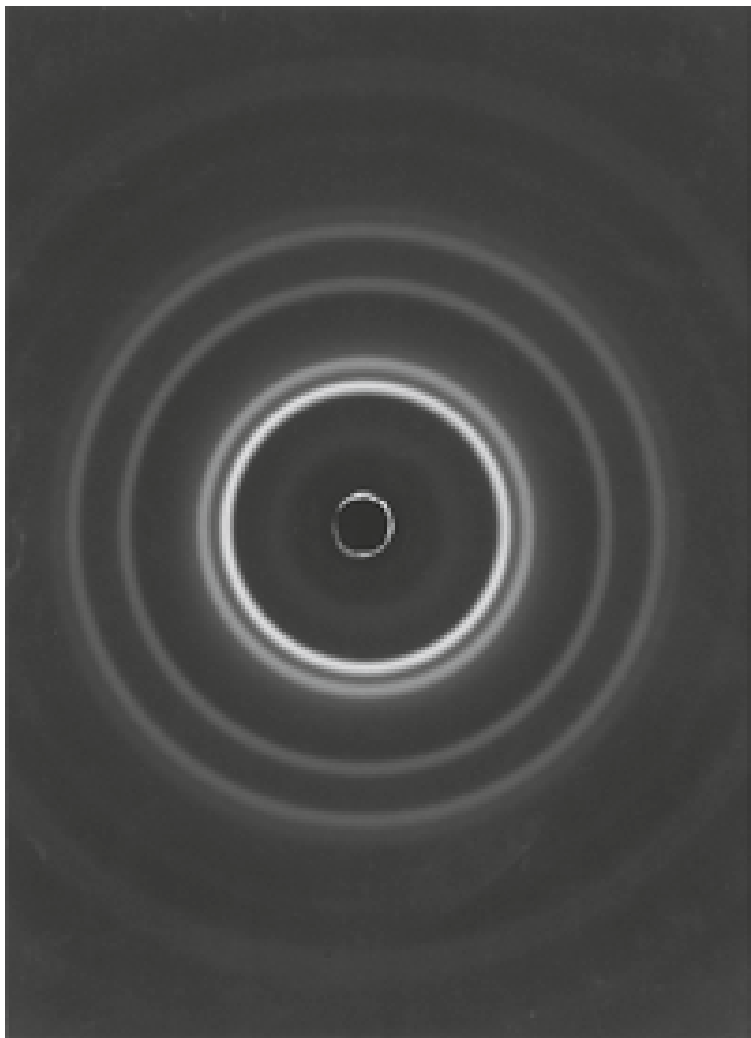
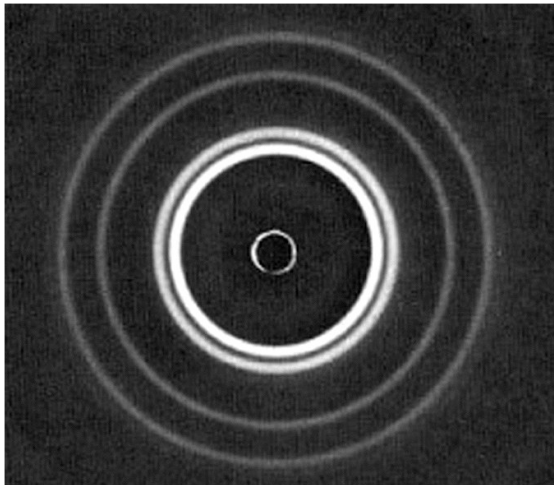


FIGURE 8-16

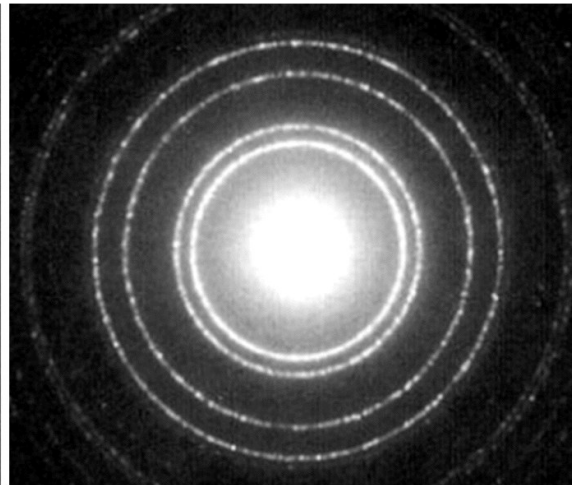
**Wave properties of electrons demonstrated.**

# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

Difracció de rajos X produïda per un full metàl·lic d'alumini.



Difracció d'electrons per un full metàl·lic, cosa que confirma la naturalesa ondulatoria dels electrons.



G.P. Thomson (1927)

$\lambda$  associada als Rajos X= 1 Angstrom

$\lambda$  associada als electrons= 1,22 Angstrom

Separació àtoms d'alumini: 2 Angstroms

# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

**Exercici.** Calcula la  $\lambda$  associada a un electró amb  $v = 5.97 \times 10^6$  m/s.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}; m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{(9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}) (5.97 \times 10^6 \text{ m/s})} \left( \frac{1 \text{ kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2}{1 \text{ J}} \right)$$

$$= 1.22 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.22 \text{ \AA}$$

$$\text{J} = \text{N}\cdot\text{m} = \text{kg}\cdot\frac{\text{m}}{\text{s}^2}\cdot\text{m} = \text{kg}\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$

- El radi de la primera òrbita de l'atom d'hidrogen de Borh és 0,44 Å.



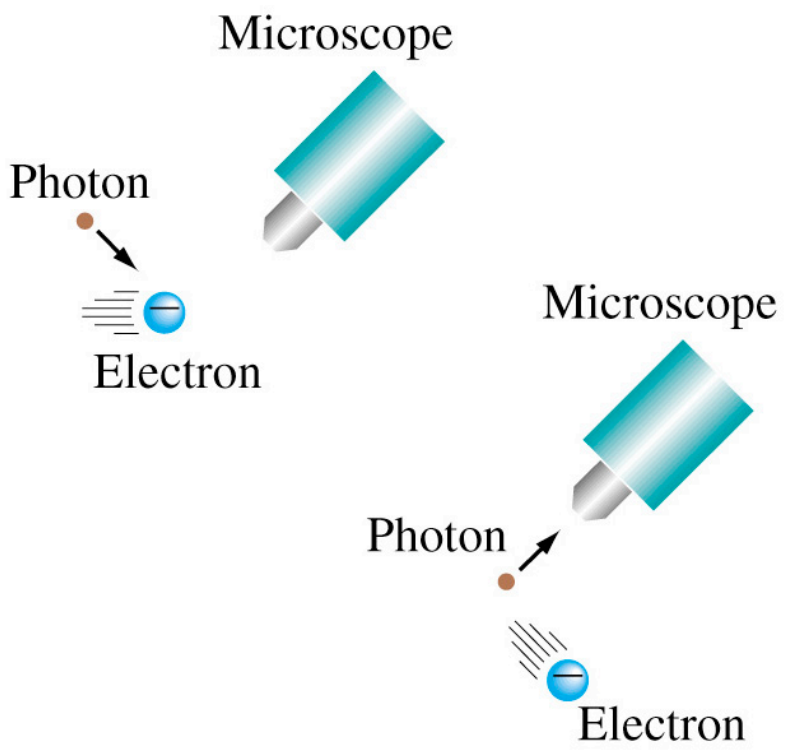
# Mecànica quàntica. Comportament ondulatori de la matèria

**Exercici.** Calcula la  $\lambda$  associada a un cotxe de massa 1000 kg i velocitat 120 km/h.

$$\lambda = 1.99 \times 10^{-28} \text{ A}$$

Només és possible detectar propietats ondulatòries per a partícules de massa molt xicoteta, **com un electró.**

# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927



$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{4\pi m}$$



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Heisenberg and Bohr.



# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927

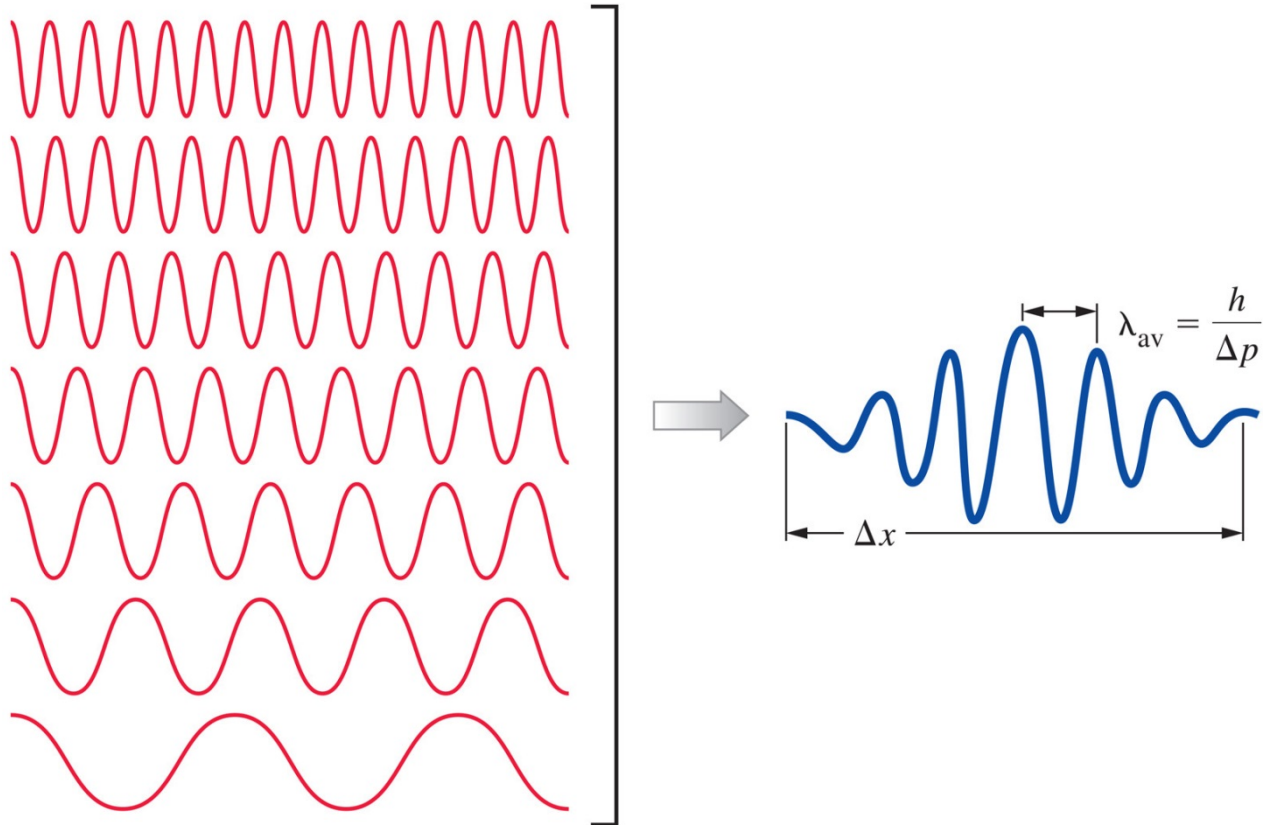
És inherentment impossible conèixer de manera simultània tant **el moment** ( $p = m \cdot v$ ) exacte de l'electró com **la seua posició** exacta en l'espai ( $x$ ).

$$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$\Delta x$  = error en la posició (m)

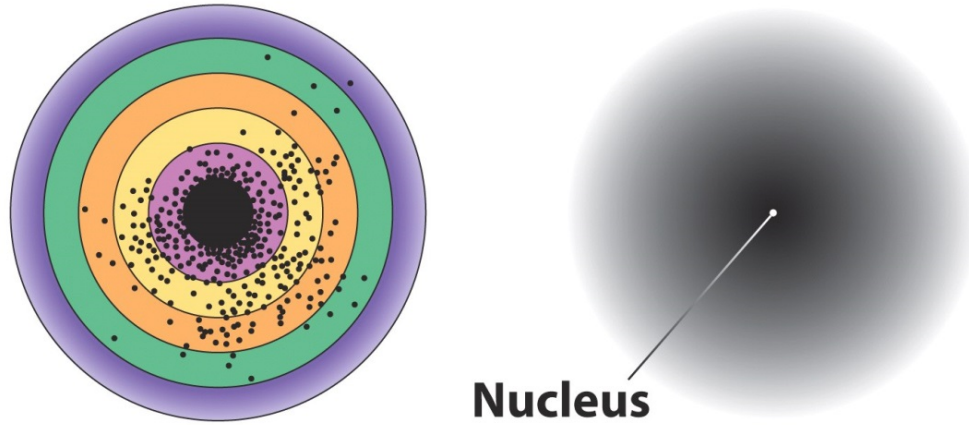
$\Delta(m \cdot v) = \Delta p$  = error en la quantitat de moviment (Kg·m/s)

# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927



**Conseqüència:** no es pot especificar la trajectòria d'una partícula

# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927

**Exercici.** Calcula la indeterminació, en la mesura simultània de la velocitat d'un electró ( $m_e = 0,910961 \times 10^{-30}$  kg), la posició del qual queda determinada amb una precisió de  $0,01 \text{ \AA}$ .

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi m} \Rightarrow$$

$$\Delta v \geq \frac{h}{4\pi m \cdot \Delta x} = \frac{6,6262 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{4 \cdot \pi \cdot 0,910961 \cdot 10^{-30} \text{ kg} \cdot 0,01 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \frac{\text{N}\cdot\text{m}}{\text{J}} \frac{\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}^2}{\text{N}} = 5,78 \cdot 10^7 \text{ ms}^{-1}$$



$$\text{J} = \text{N}\cdot\text{m} = \text{kg}\cdot\frac{\text{m}}{\text{s}^2}\cdot\text{m} = \text{kg}\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$

Si es vol conèixer amb bona precisió la posició de l'electró, serà pràcticament impossible conèixer-ne la velocitat, independentment de l'instrument de mesura usat.

# Mecànica quàntica. Principi d'incertesa. Heisenberg, 1927

**Exercici.** Un camió de massa 1000 kg es mou en línia recta. Mitjançant fotografies successives se'n pot mesurar la posició amb una precisió de l'ordre de la longitud d'ona de la llum utilitzada ( $\lambda=5000 \text{ \AA}$ ). Quina és la indeterminació de la mesura simultània de la seua velocitat?

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi} \Rightarrow \Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{h}{4\pi m} \Rightarrow$$

$$\Delta v \geq \frac{h}{4\pi m \cdot \Delta x} = \frac{6,6262 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}}{4 \cdot \pi \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot 5000 \cdot 10^{-10} \text{ m}} \frac{\text{N}\cdot\text{m}}{\text{J}} \frac{\text{kg}\cdot\text{m}}{\text{s}^2} = 1,05 \cdot 10^{-31} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$\text{J} = \text{N}\cdot\text{m} = \text{kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot \text{m} = \text{kg} \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$



**Restricció mecànic-quàntica menyspreable respecte als errors associats al instrument de mesura.**

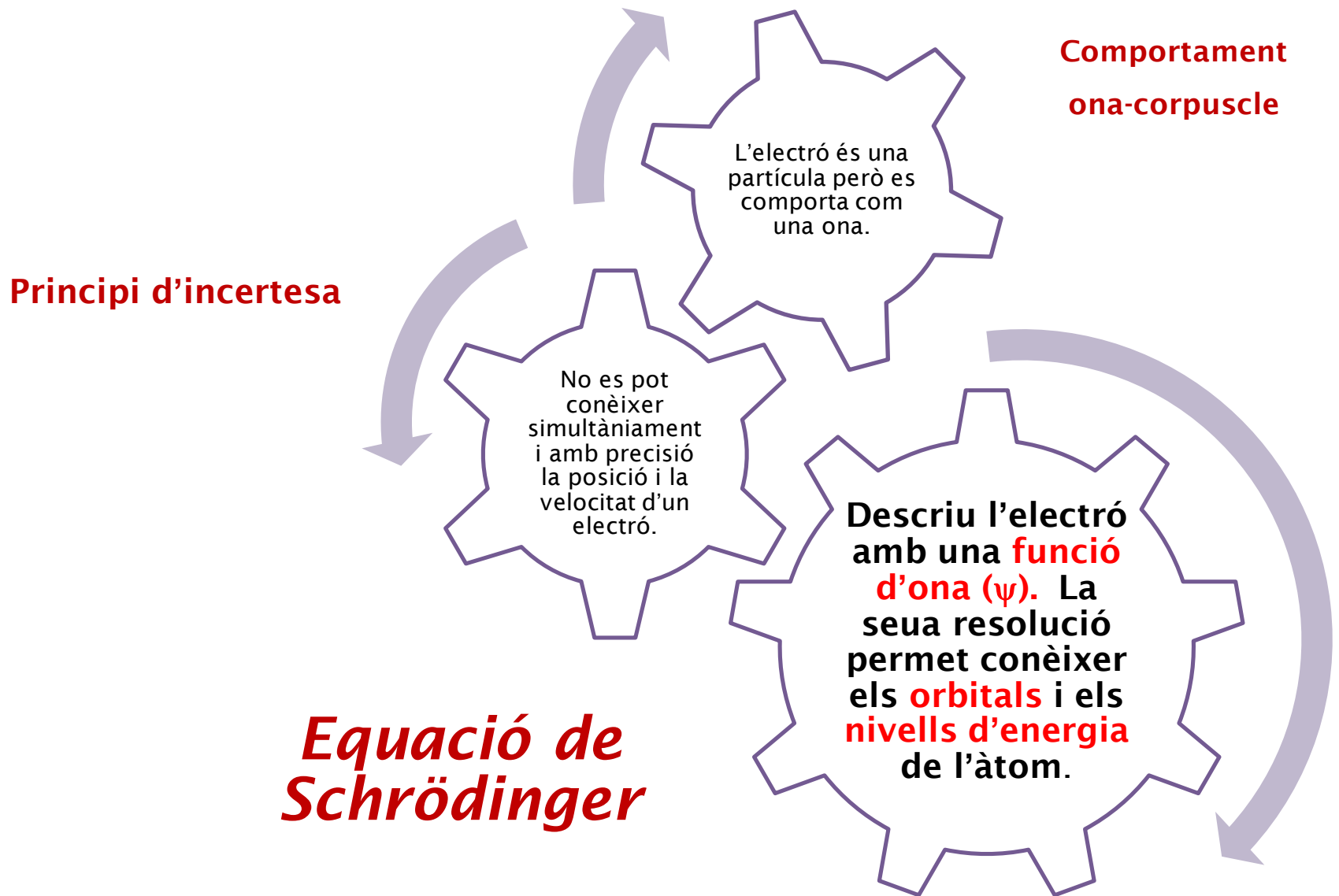
## Orbitals atòmics



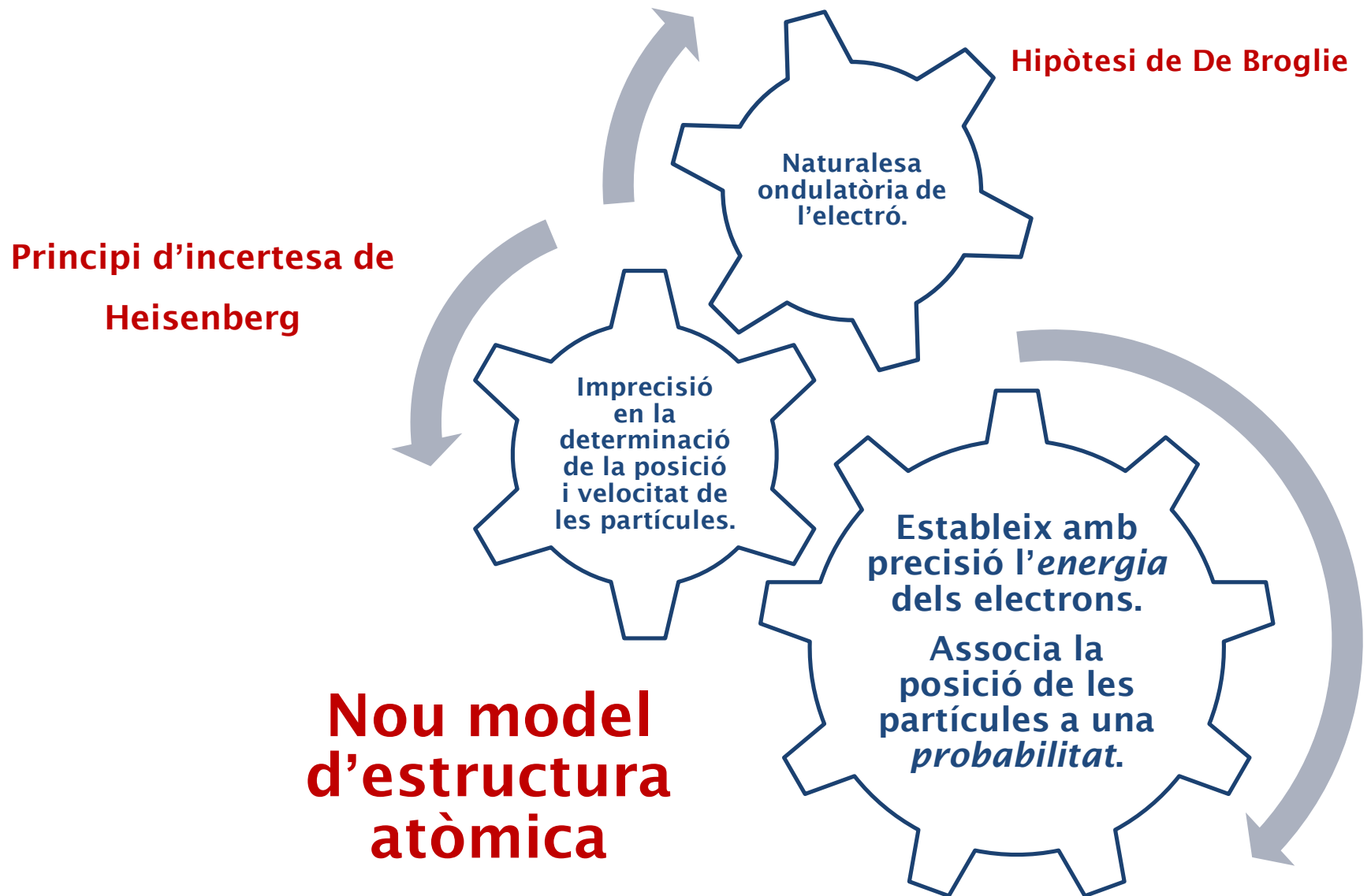
- Equació de Schrödinger i funcions d'ona. Nombres quàntics
- Orbitals atòmics hidrogenoides. Representació d'orbitals atòmics



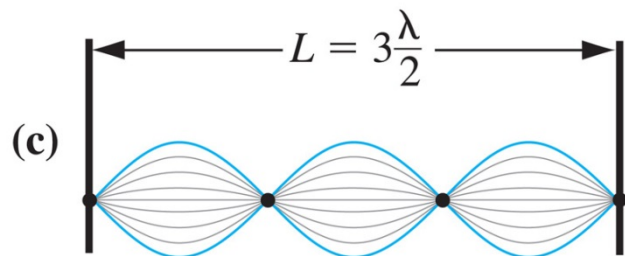
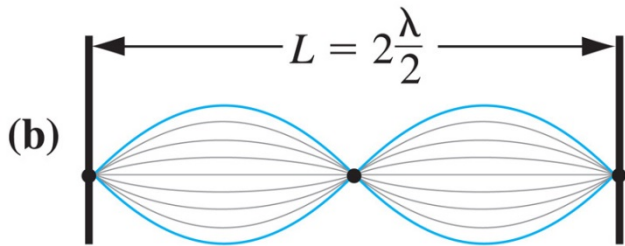
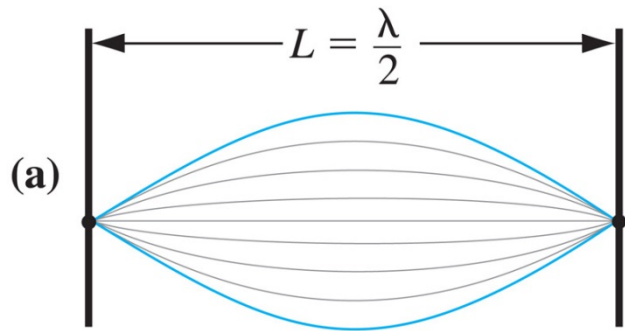
# Model atòmic d'orbitals. Fonaments



# Model atòmic d'orbitals. Fonaments



# Model atòmic d'orbitals. Fonaments



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Ona estacionària  
(Ex.: vibració cordes guitarra)**

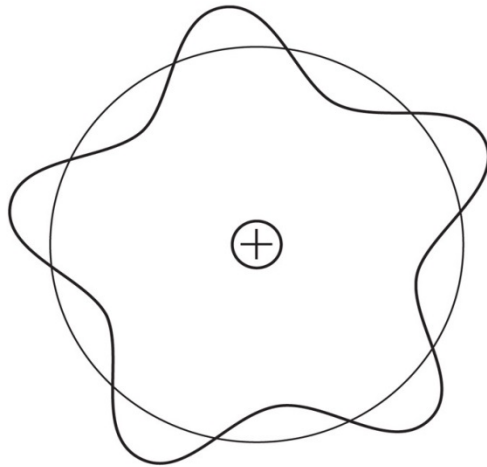
$$\lambda = \frac{2L}{n}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

L= longitud corda  
n= nombre de nodes

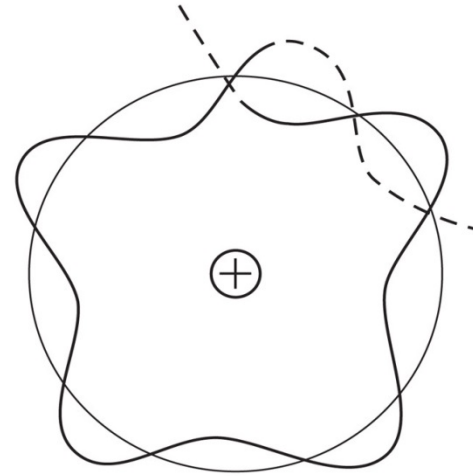
**Les longituds d'ona estan quantitzades perquè no només poden ser un nombre enter.**

# Model atòmic d'orbitals. Fonaments

Electró com una ona de matèria.



(a)

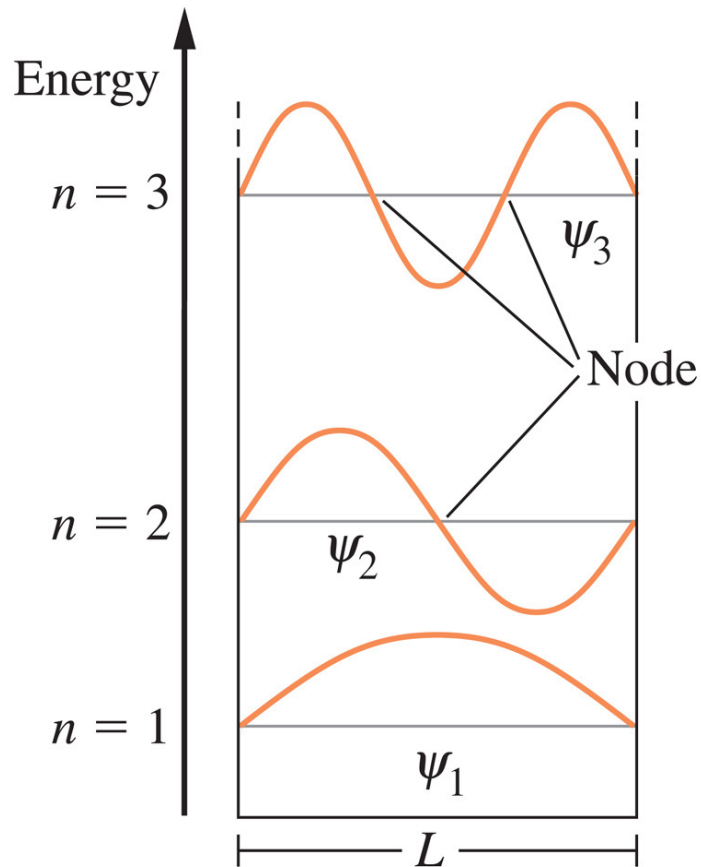


(b)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right)$$

# Model atòmic d'orbitals. Fonaments



Electró com una ona de matèria.  
Partícula en una caixa.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

The wave functions

# Model atòmic d'orbitals.

## Relació de l'energia cinètica amb el nombre quàntic

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$



$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Relació partícula-ona de Louis De Broglie.

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$



$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

Relació longitud d'ona amb longitud caixa.

$$E_k = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$



$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

# Model atòmic d'orbitals.

Relació de l'energia cinètica amb el nombre quàntic

$$!!!! E_K = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} !!!!!$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

# Model atòmic d'orbitals.

## Equació d'Erwin Schrödinger (1927) i funcions d'ona



Un electró o qualsevol altra partícula amb propietats ondulatòries es pot descriure amb una **funció d'ona** ( $\psi$ ), funció matemàtica els valors de la qual varien amb la posició.

Nobel foundation - Wikipedia. Domini públic.

[http://nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1933/schrodinger-bio.html](http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1933/schrodinger-bio.html)





# Model atòmic d'orbitals.

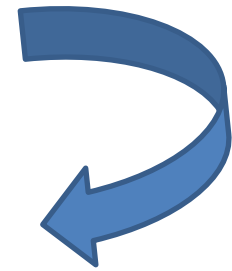
## Equació d'Erwin Schrödinger (1927) i funcions d'ona

$$-\frac{h}{4\pi m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

energía cinética + energia potencial = energia total

$$-\frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

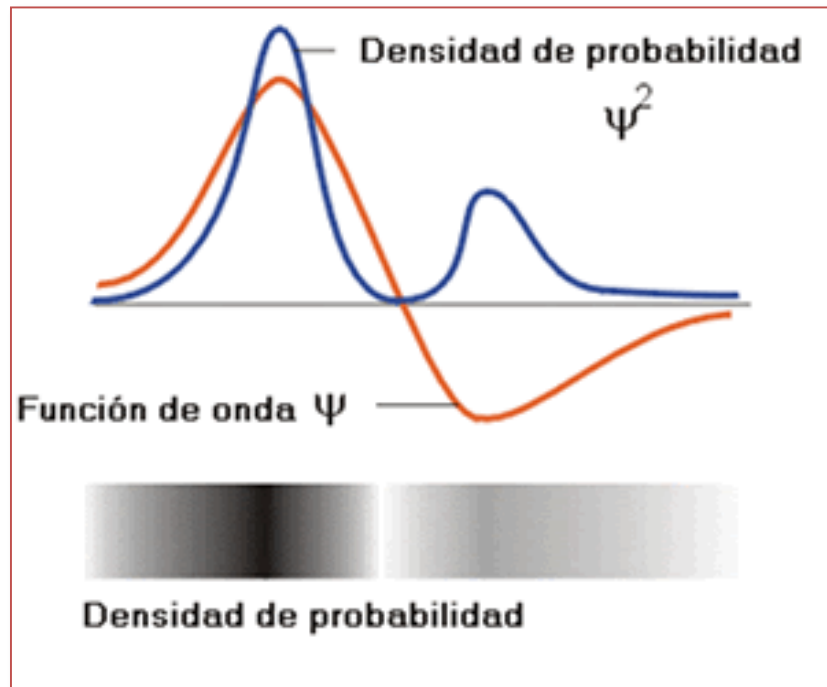
$$-\frac{Ze^2}{r}$$



$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

# Model atòmic d'orbitals. Interpretació física

**Funció d'ona** ( $\psi$ ), funció matemàtica els valors de la qual varien amb la posició.



D'acord amb la **interpretació física de la funció d'ona**, la **probabilitat** de trobar una partícula (un electró) en una regió és **proporcional al valor de  $\psi^2$** .

$$\psi^2 = \text{densitat de probabilitat} = \frac{\text{probabilitat}}{\text{volum d'una regió}} \quad \text{és igual a 0 en un node}$$

# Model atòmic d'orbitals. Equació d'Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

→ Nivells d'energia

→ Funcions d'ona

$h$  = constant de Planck     $m$  = massa de l'electró     $E$  = energia total de l'electró     $V$  = energia potencial de l'electró

$$- \frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

$\psi$  Les solucions de la funció d'ona descriuen **ORBITALS ATÒMICS.**

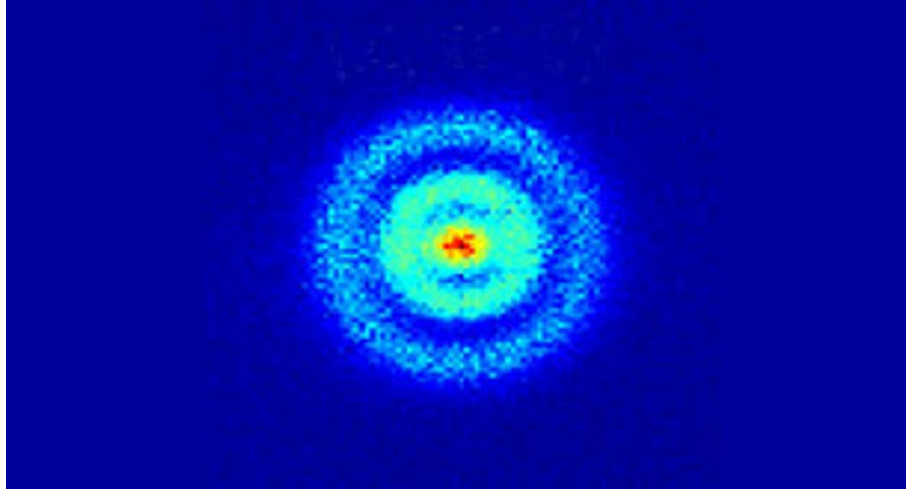
Regió de l'espai en què la probabilitat de trobar l'electró és elevada (90 %)

# Model atòmic d'orbitals. Equació d'Schrödinger

$\psi$  Les solucions de la funció d'ona descriuen **ORBITALS ATÒMICS.**

Cada **orbital** descriu una distribució específica de densitat electrònica en l'espai, per tant, té una **energia** i una **forma** característiques.

# Model atòmic d'orbitals. Equació d'Schrödinger



Orbitals d'un àtom d'hidrògen.

# Model atòmic d'orbitals. Equació d'Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

COORDENADES CARTESIANES (X, Y, Z)

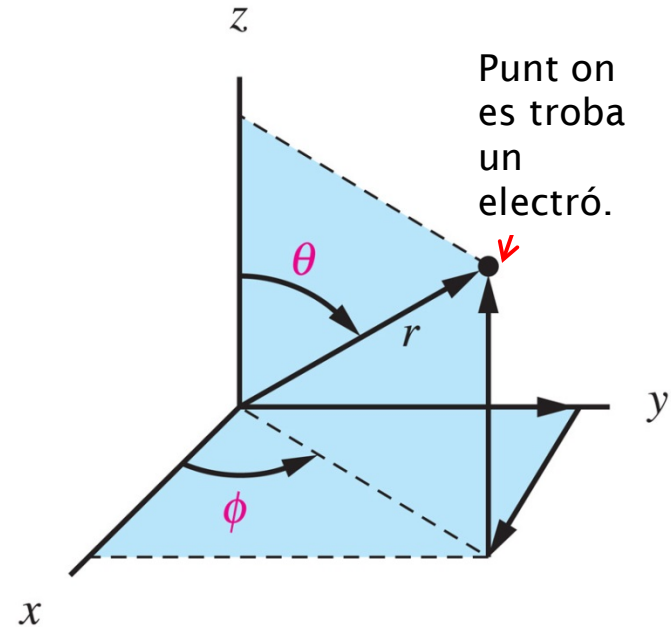
$$\Psi(x, y, z) \Rightarrow \Psi(r, \theta, \phi)$$

COORDENADES POLARS ESFÈRIQUES

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

FUNCIÓ D'ONA  
RADIAL

FUNCIÓ D'ONA  
ANGULAR



Spherical polar coordinates

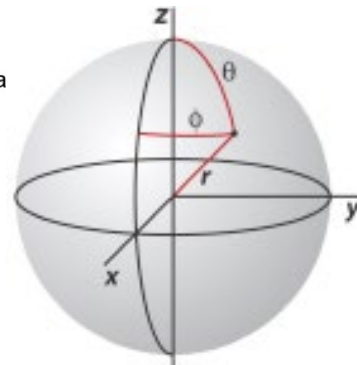
$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

Copyright © 2007 Pea



# Model atòmic d'orbitals. Solucions de l'equació d'ones

Un orbital ve caracteritzat per  
**3 nombres quàntics:**

**Nombre quàntic principal  
n**

- Descriu la grandària i l'energia de l'orbital.
- (n = 1, 2, 3...)

**Nombre quàntic secundari,  
azimutal o de moment  
angular  
(l = 0 fins n-1)**

- Determina la forma de l'orbital atòmic.
- l = 0 orbital s
- l = 1 orbital p
- l = 2 orbital d
- l = 3 orbital f

**Nombre quàntic magnètic  
(ml = de -l a +l)**

- Descriu l'orientació espacial de l'orbital.

# Model atòmic d'orbitals. Solucions de l'equació d'ones

Nombres quàntics

$n$	$l$	$m$	nº de orbitales
1	0	0	1
2	0	0	4
	1	-1	
	1	0	
	1	+1	
3	0	0	9
	1	-1	
	1	0	
	1	+1	
	2	-2	
	2	-1	
	2	0	
	2	+1	
	2	+2	



# Model atòmic d'orbitals. Solucions de l'equació d'ones

## Nombres quàntics

NIVELL principal o CAPA electrònica principal.

- Conjunt d'orbitals amb el mateix valor de  $n$ .

SUBNIVELL o subcapa

- Conjunt d'orbitals amb els mateixos valors de  $n$  i  $l$ . Cada subcapa es designa amb un nombre (el valor de  $n$ ) i una lletra ( $s, p, d, f$ ).

# Model atòmic d'orbitals. Solucions de l'equació d'ones

## Nombres quàntics

orbitals <i>s</i>	orbitals <i>p</i>	orbitals <i>d</i>	orbitals <i>f</i>
$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m_l = 0$	$m_l = -1, 0, +1$	$m_l = -2, -1, 0, +1, +2$	$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$
<b>1 orbital <i>s</i></b> en una subcapa <i>s</i> .	<b>3 orbitals <i>p</i></b> en una subcapa <i>p</i> .	<b>5 orbitals <i>d</i></b> en una subcapa <i>d</i> .	<b>7 orbitals <i>d</i></b> en una subcapa <i>d</i> .

# Model atòmic d'orbitals. Solucions de l'equació d'ones

## Nombres quàntics

**TABLE 3.1** Allowed Combinations of Quantum Numbers  $n$ ,  $l$ , and  $m_l$  for the First Four Shells

Capa	$n$	$l$	$m_l$	Orbital Notation	Number of Orbitals in Subshell	Number of Orbitals in Shell
K	1	0	0	1s	1	1
L	2	0	0	2s	1	4
		1	-1, 0, +1	2p	3	
M	3	0	0	3s	1	9
		1	-1, 0, +1	3p	3	
		2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	
N	4	0	0	4s	1	16
		1	-1, 0, +1	4p	3	
		2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
		3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

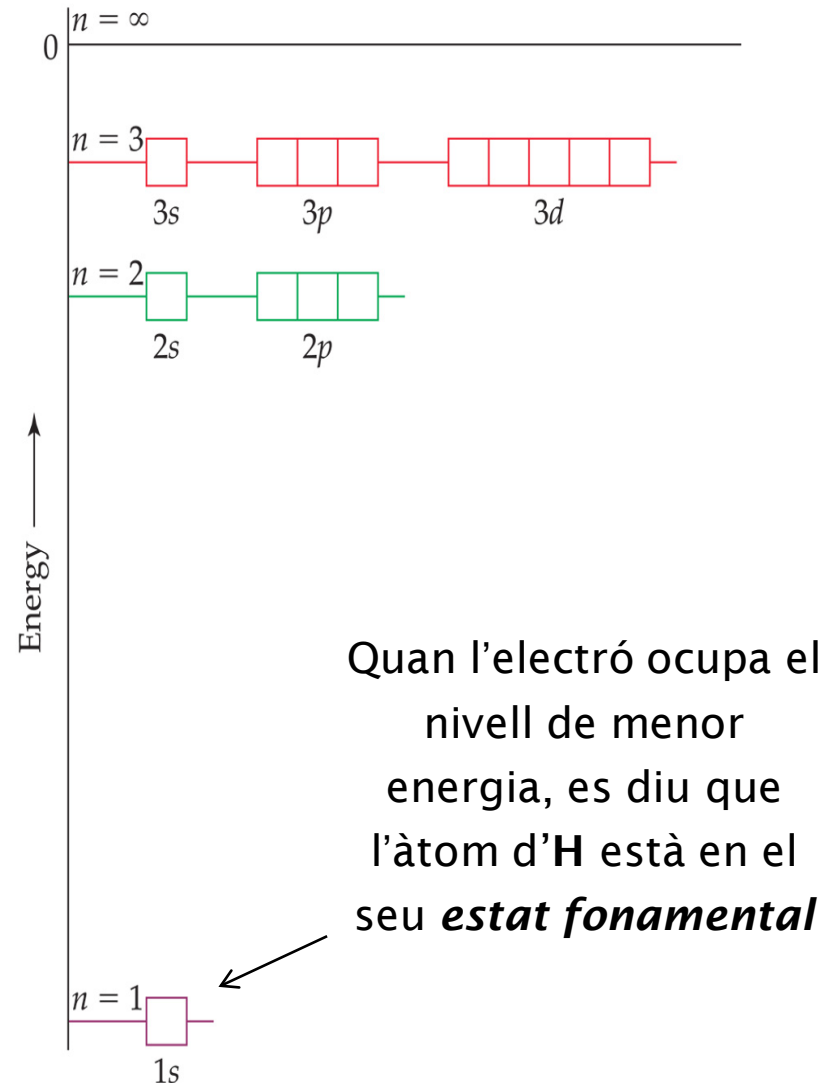
$n^2$  orbitals en una capa.  
 $(2l + 1)$  orbitals en una subcapa.

# Model atòmic d'orbitals. Energies permeses de l'electró en l'H

Nivells d'energia dels orbitals en l'àtom d'hidrogen.

Tots els orbitals amb el mateix valor de  $n$  tenen la mateixa energia i es diu que són **orbitals degenerats**.

$$E_n = -2.178 \cdot 10^{-18} \left( \frac{1}{n^2} \right) \text{ J}$$



Quan l'electró ocupa el nivell de menor energia, es diu que l'àtom d'H està en el seu **estat fonamental**

# Model atòmic d'orbitals. En resum... idees fonamentals

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

Els orbitals atòmics són funcions d'ona, és a dir, solucions matemàtiques de l'equació d'ones de Schrödinger.

La funció d'ona per si mateixa no té significat físic. Tanmateix, el quadrat  $\Psi^2$  representa la densitat de probabilitat de trobar l'electró en una regió al voltant del nucli.

Cada orbital ve definit per 3 nombres quàntics. Aquest conjunt particular de nombres quàntics proporciona una forma particular a les funcions  $R$  i  $Y$ .

Quan parlem de la forma d'un orbital, ens referim a la distribució espacial de la densitat de probabilitat electrònica, és a dir, a regions tridimensionals que contenen la major part de la probabilitat de trobar l'electró.

**TABLE 8.1 The Angular and Radial Wave Functions of a Hydrogen-Like Atom**

Angular Part  $Y(\theta, \phi)$

Radial Part  $R_{n, \ell}(r)$

$$Y(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

$$R(1s) = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$$

$$R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$$

$$R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2)e^{-\sigma/2}$$

$$Y(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi$$

$$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

$$Y(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi$$

$$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/2}$$

$$Y(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$$

$$Y(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$$

$$Y(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos 2\phi$$

$$Y(d_{xy}) = \left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \sin 2\phi$$

$$\sigma = \frac{2Zr}{na_0}$$

$$Y(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$$

$$Y(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$$

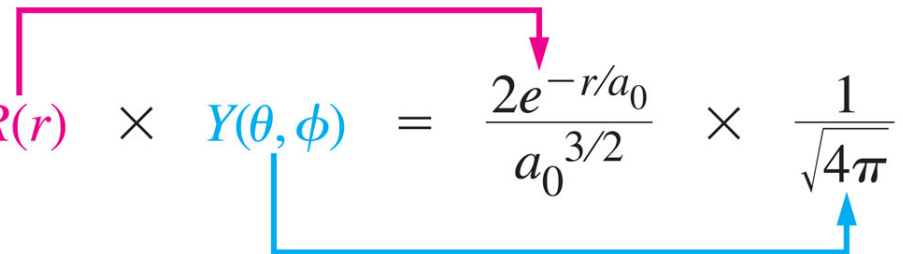
$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$$

$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  ("radi de Bohr")

**Part angular i part radial de la funció d'ona d'un àtom hidrogenoide.**

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics

## Orbitals 1s

$$\psi(1s) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{(\pi a_0^3)}}$$


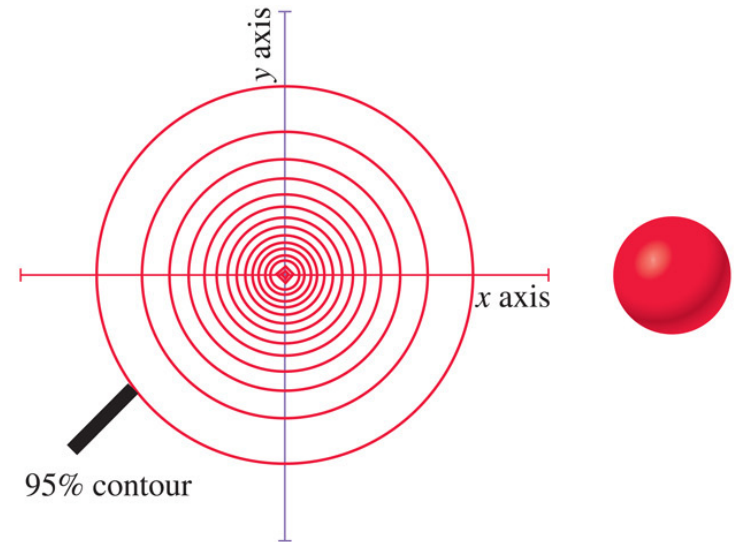
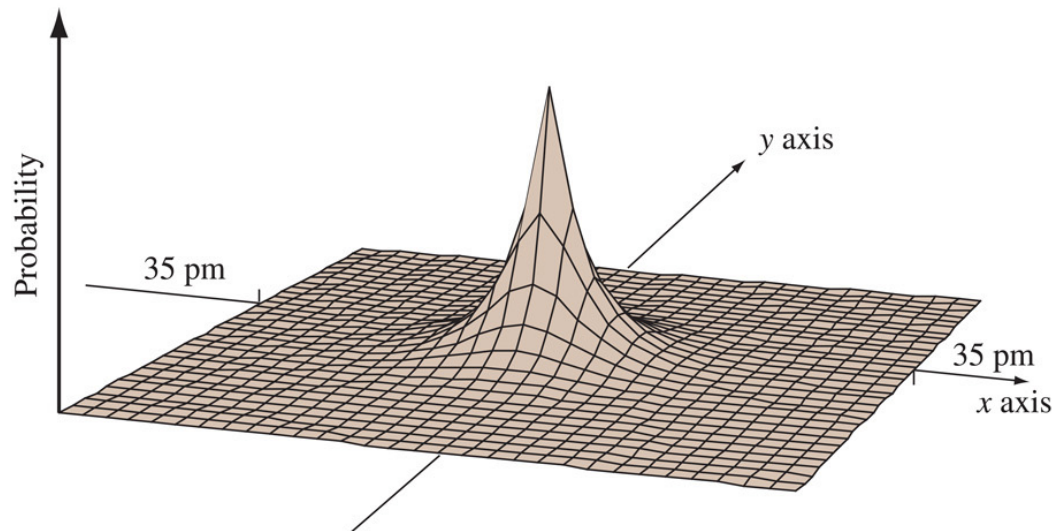
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics

## Orbitals 1s

$$\psi(1s) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics

## Orbitals 2s

$$\psi(2s) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$



1s



2s



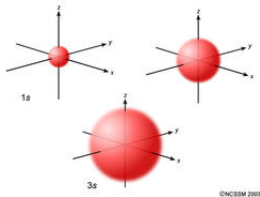
3s

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics

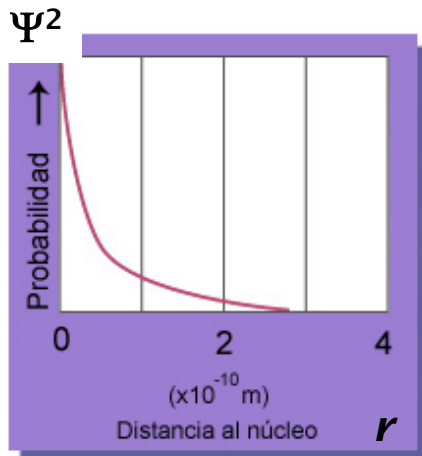
Tenen **simetria esfèrica**. El valor de la funció d'ona (i la probabilitat de trobar l'electró) només depèn de la distància al nucli ( $r$ ) però no dels angles  $\theta$  i  $\phi$ . [Part angular de la funció d'ona = constant]

Per a determinats valors de  $r$  la funció  $\Psi$  s'anula (**nodes** = punts en què una funció d'ona canvia de signe). Els orbitals  $ns$  presenten  **$n-1$  nodes radials**.

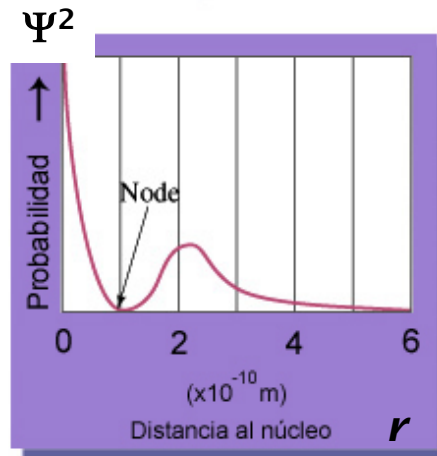
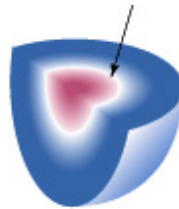
La seua extensió (grandària) augmenta amb el valor de  **$n$** .



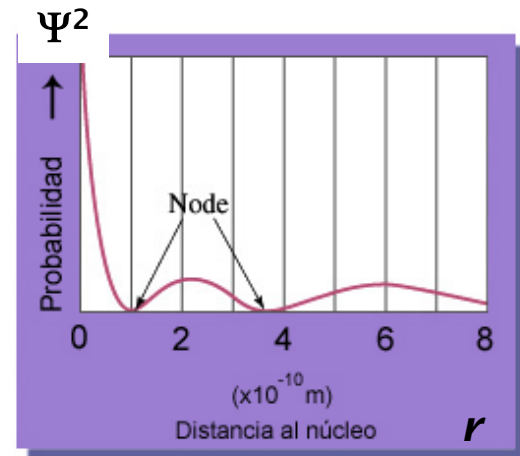
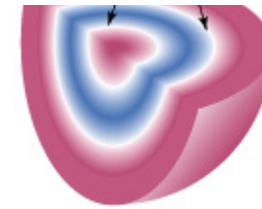
$$\psi(2s) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a_0^3}\right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$



1s



2s



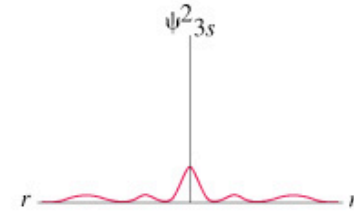
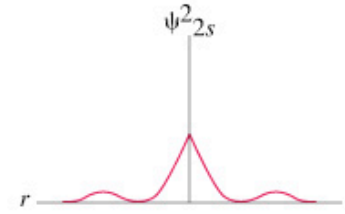
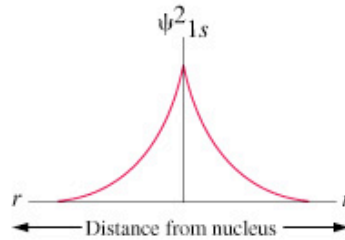
3s

Les gràfiques representen **la probabilitat** de trobar els electrons **a distàncies variables** del nucli.

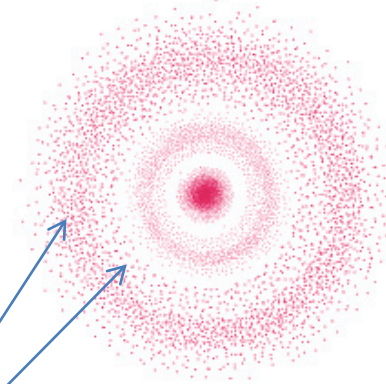
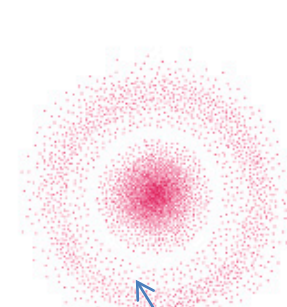
# Model atòmic d'orbitals. Orbitals S. Formes de representació

**Funció densitat de probabilitat.**

Densitat de probabilitat electrònica ( $\Psi^2$ ) o densitat de càrrega en funció de  $r$ .



**Distribució de les densitats de probabilitat electrònica en un pla.**



Com més menut és l'espaiat entre punts, major és la probabilitat de trobar un electró i major és la densitat de càrrega.

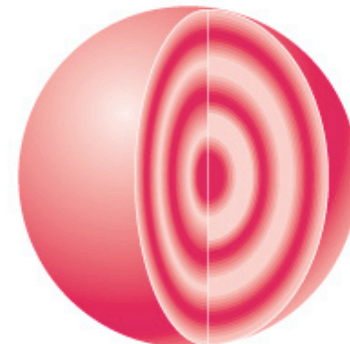
**Envolent esfèrica** que conté el 90 % de la densitat de càrrega electrònica.



(a) 1s



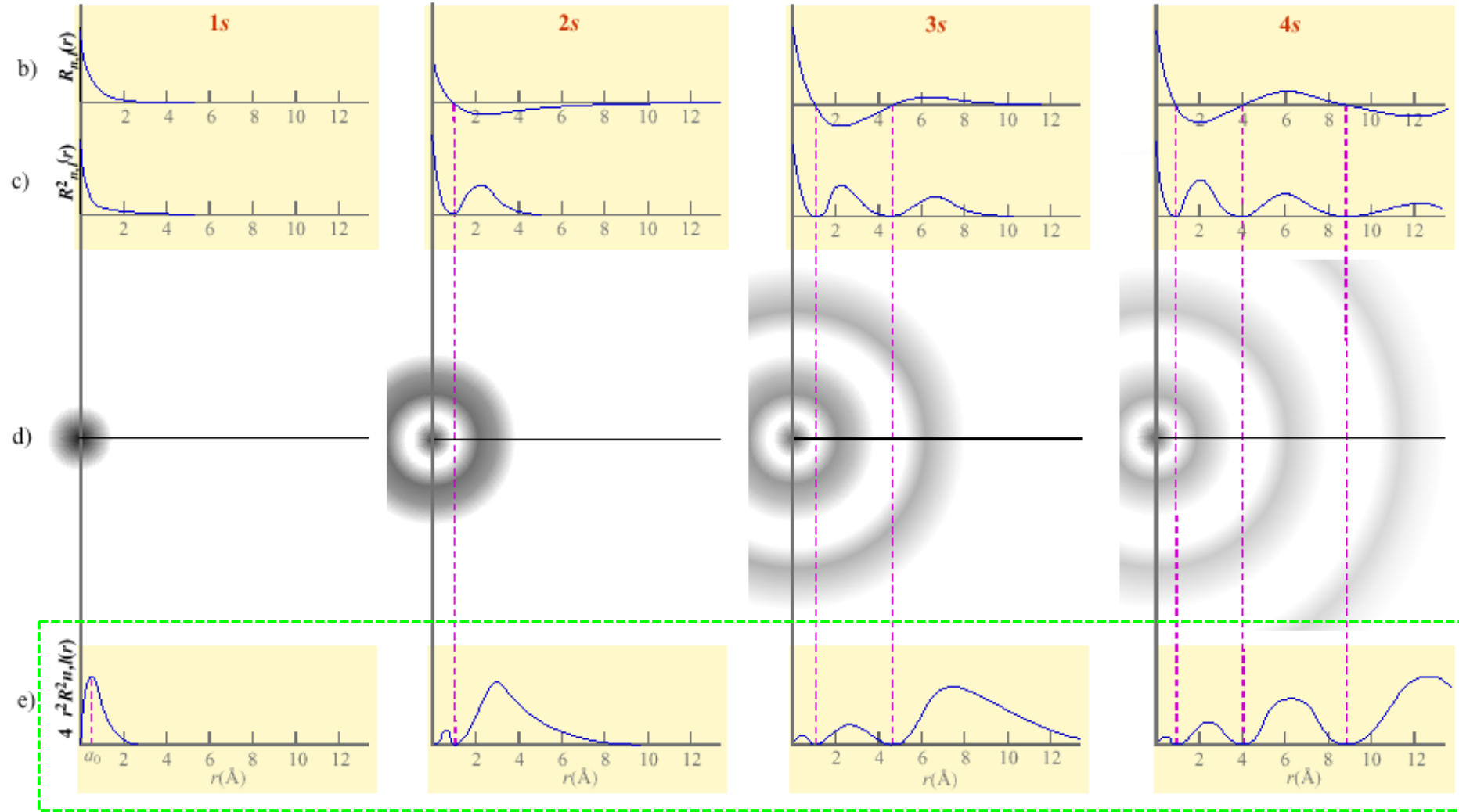
(b) 2s



(c) 3s

Probabilitat del 90 % de trobar un electró.

Parte Radial



- b) Grafica de la parte radial de la función de onda. ( $\Psi$ )
- c) Cuadrado de la parte radial de la función de onda. ( $\Psi^2$ )
- d) Representación de un corte ecuatorial de la nube de probabilidad electrónica.
- e) Función de distribución radial (nos da la probabilidad de encontrar al electrón en una corona esférica de radio  $r$  y espesor  $\delta r$ ).



# Model atòmic d'orbitals. Distribució de probabilitat radial

Poder penetrant

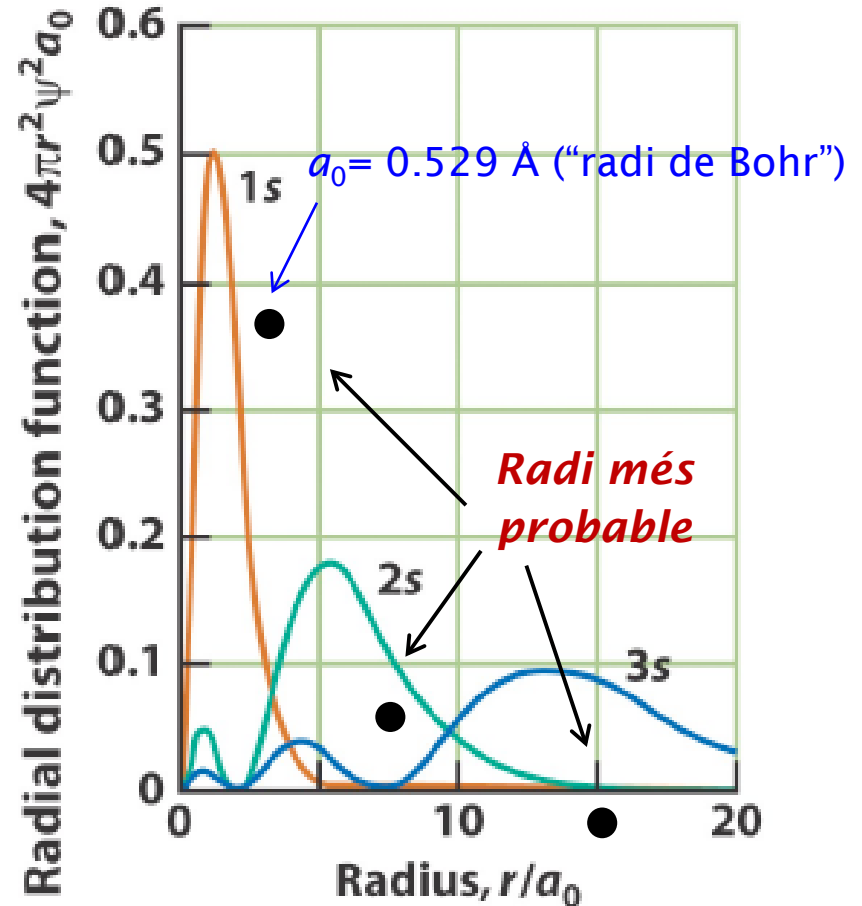
## Funció de distribució radial

$$P(r) = r^2 R^2(r)$$

Per a orbitals s s'expressa com:

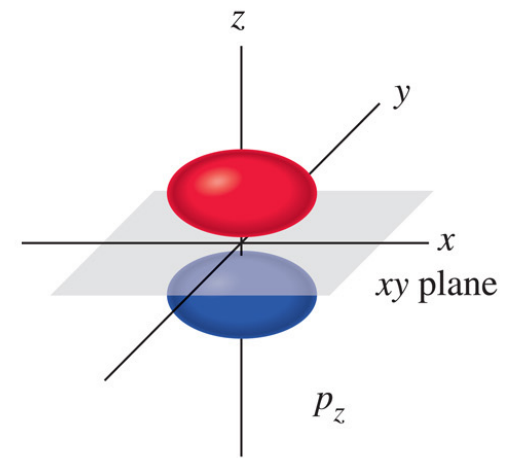
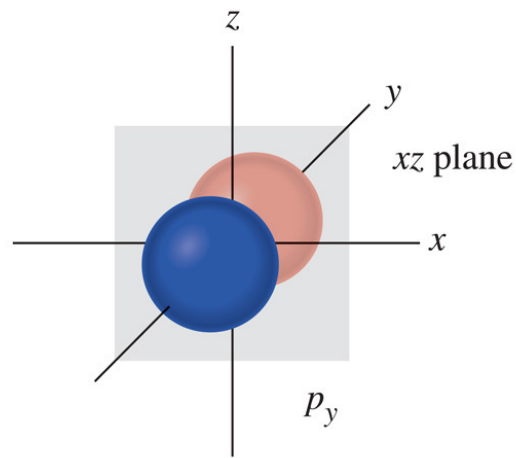
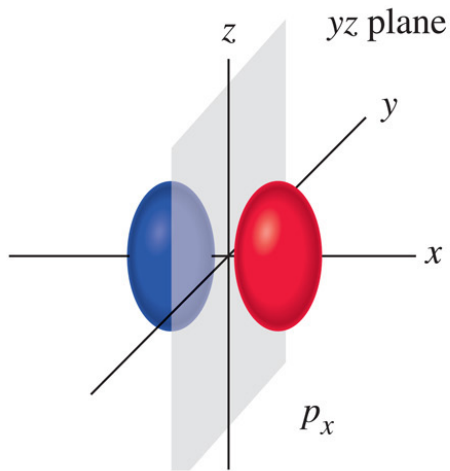
$$P(r) = 4\pi r^2 \Psi^2(r)$$

- Indica la probabilitat de trobar l'electró a una certa distància del nucli independentment de la direcció (en una corona esfèrica de radi  $r$  i grossària  $dr$ ).
- Relacionades amb el *poder penetrant* i la *difusió* dels orbitals atòmics.



# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics P

## Orbitals $p$



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics P

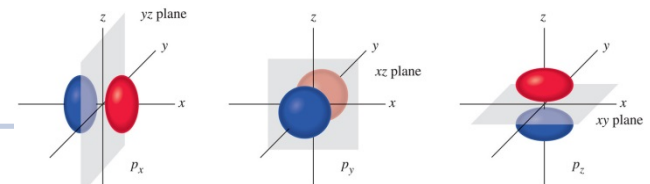
## Orbitals $p$

Les funcions d'ona depenen de les coordenades angulars ( $\theta$  y  $\phi$ )

Tenen dos lòbuls que es marquen com a + i - per a indicar que la funció d'ona (part angular) té un signe diferent en les dues regions.

Els dos lòbuls estan separats per un pla nodal que travessa el nucli i on  $\Psi = 0$ .

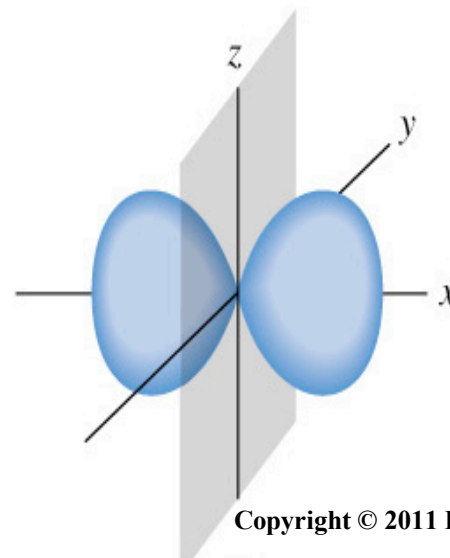
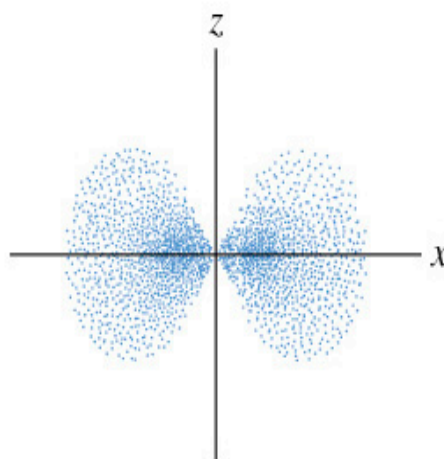
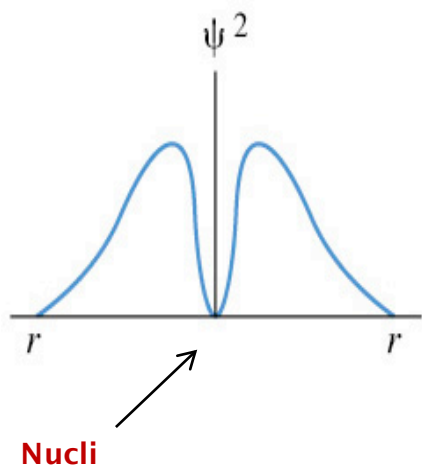
Hi ha tres orbitals p:  $p_x$ ,  $p_y$  i  $p_z$  i la seua grandària augmenta amb n. **També presenten nodes radials.**





# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics $P_x$

Densitat de probabilitat



Copyright © 2011 Pearson Canada Inc.

El valor de  $\Psi^2$  és zero en el nucli, augmenta fins a un màxim per cada un dels costats i després cau amb la distància ( $r$ ) sobre una línia que passa a través del nucli (és a dir, al llarg de l'eix  $x$ ,  $y$ , o  $z$ ).

Els punts representen la probabilitat i la densitat de càrrega de l'electró en un pla que passa a través del nucli.

Superfície límit que tanca el 90 % de probabilitat de trobar a l'electró  $2p_x$ . La probabilitat disminueix fins a zero en el pla nodal  $yz$ .

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics $P_x$

## Orbitals $2p$

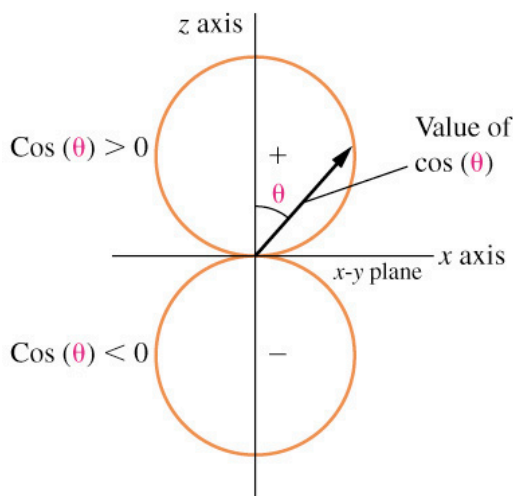
### Part radial

$$R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$$

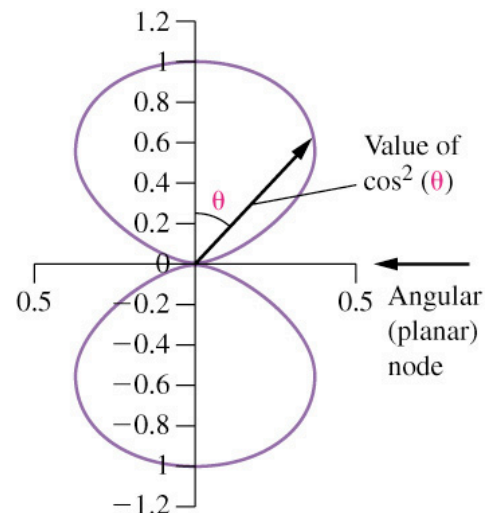
Els tres tenen la mateixa part *radial*, sempre positiva. **No hi ha nodes radials.**

### Part angular

$$Y(pz) = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta$$



$Y(\theta)_{2pz}$   
 $r = \text{constant}$



$Y^2(\theta)_{2pz}$   
 $r = \text{constant}$

# Model atòmic d'orbitals. Representació d'orbitals atòmics $P_x$

## Orbitals $3p$

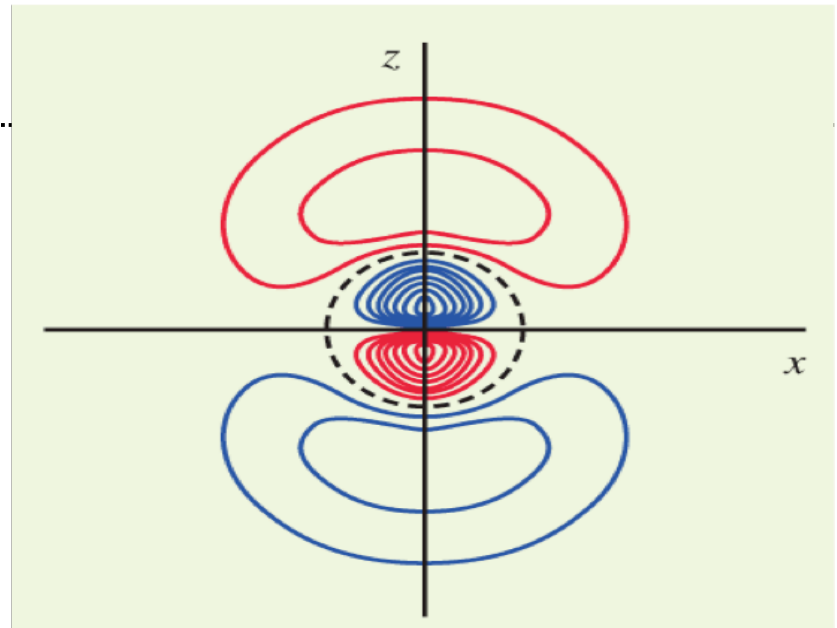
### Part radial

$$R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} (4-\sigma) \sigma e^{-\sigma/2}$$

Els tres ( $P_x$ ,  $P_y$ ,  $P_z$ ) tenen **un node radial**.

### Part angular

$$Y(p_z) = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \theta$$



orbital  $3p_z$

# Model atòmic d'orbitals. **Nodes orbitals**

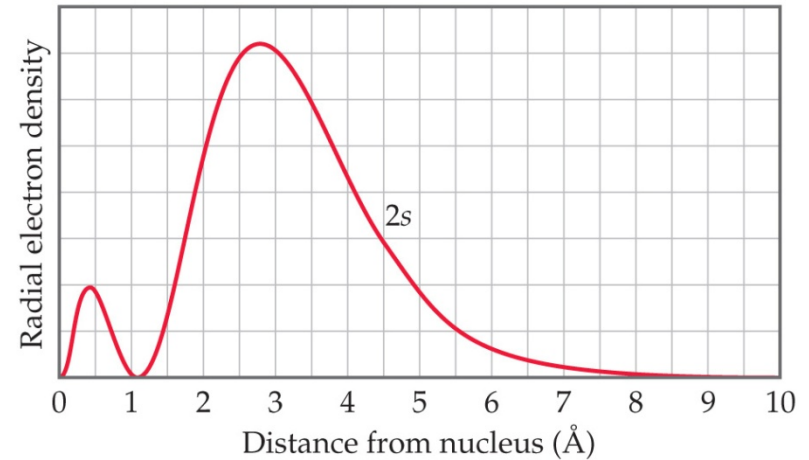
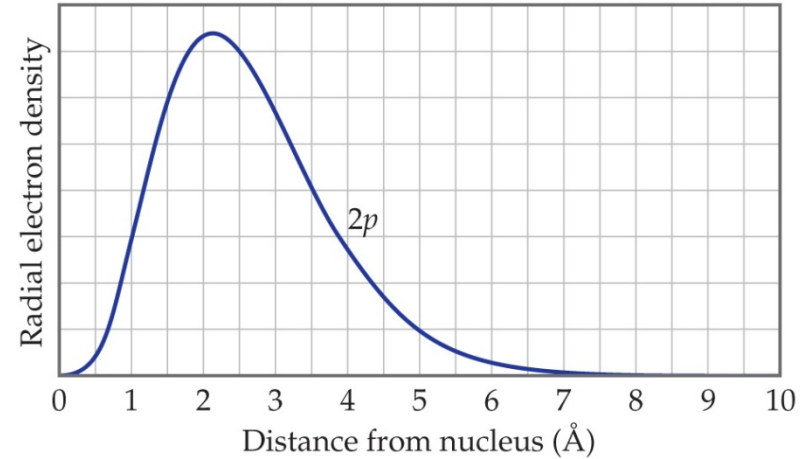
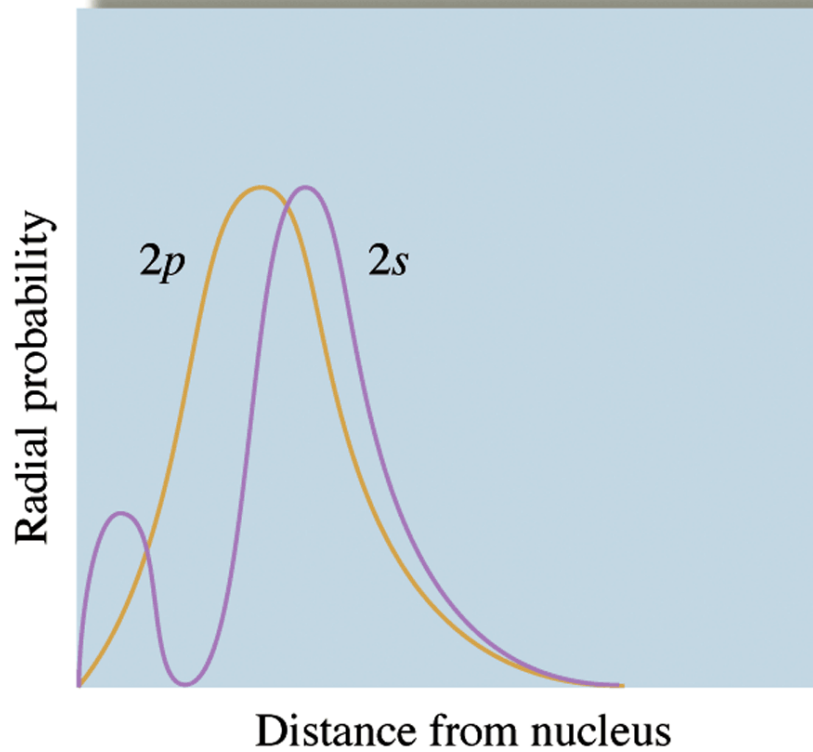
Orbital	Nodes radials = $n-l-1$	Nodes angulars = $l$
ns	$n-1$	0
np	$n-2$	1
nd	$n-3$	2

**Nodes totals=  $n - 1$**

# Model atòmic d'orbitals. Probabilitat radial i poder penetrant

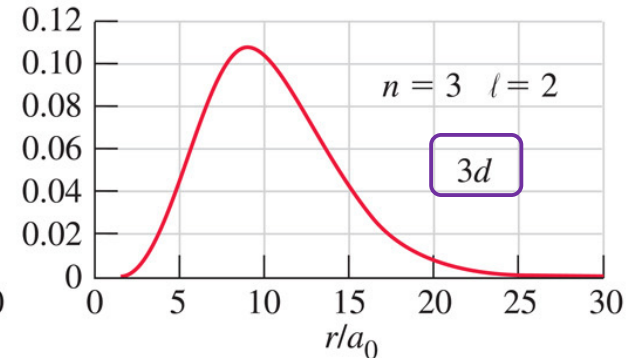
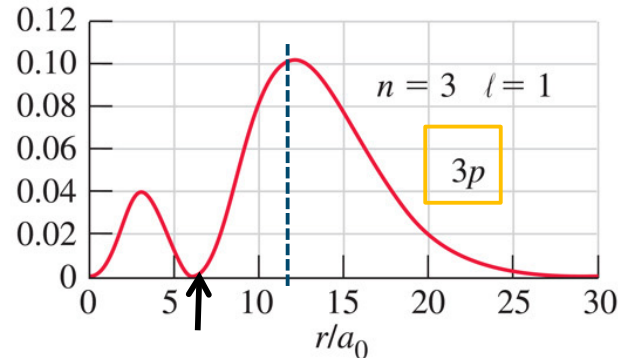
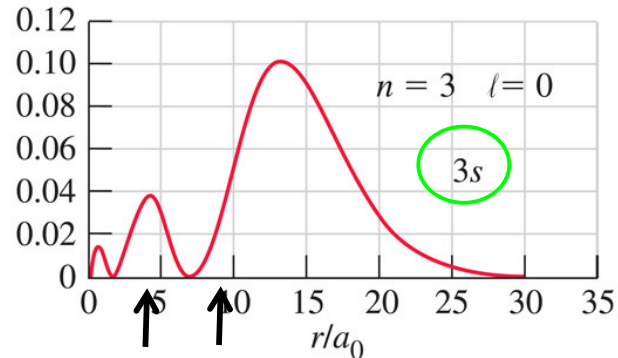
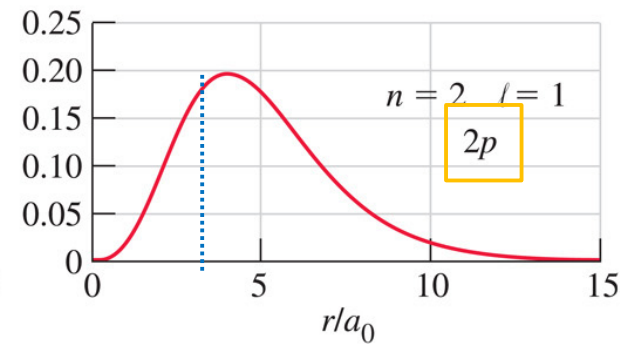
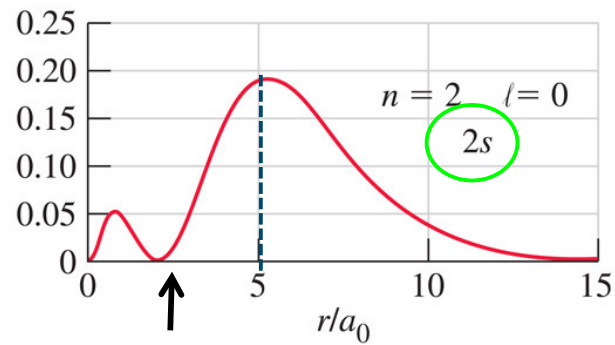
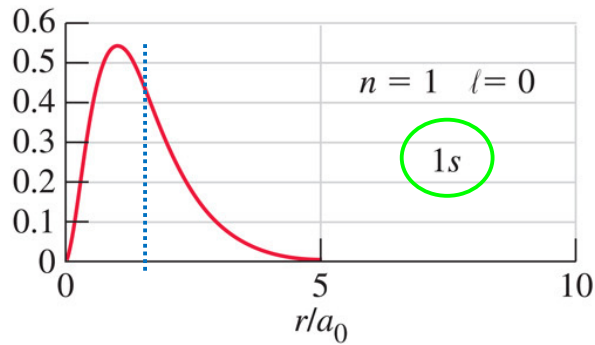
**Poder penetrant i difusió dels orbitals atòmics.**

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$



# Model atòmic d'orbitals. Representació orbitals atòmics

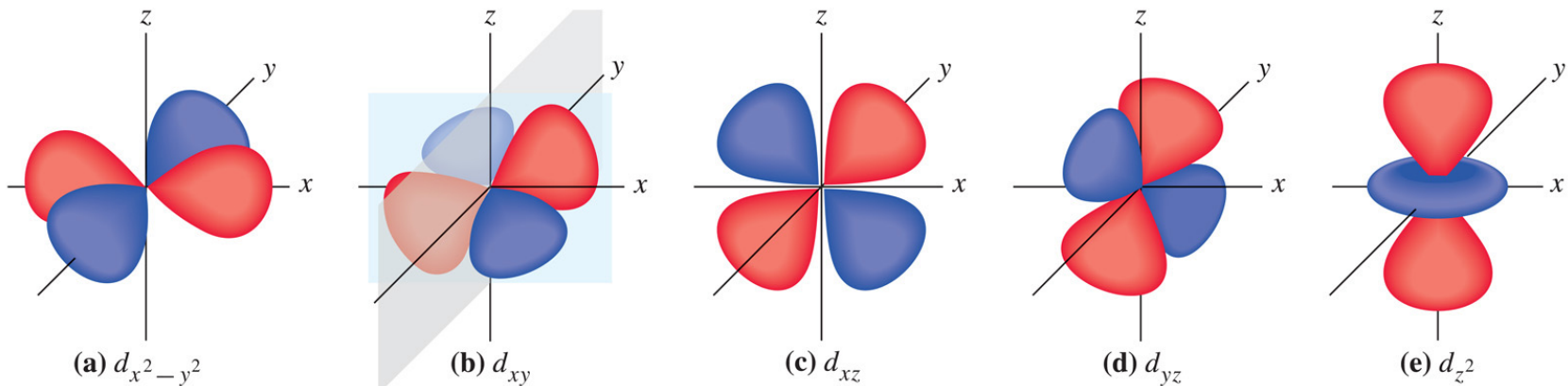
## Distribució de probabilitat radial



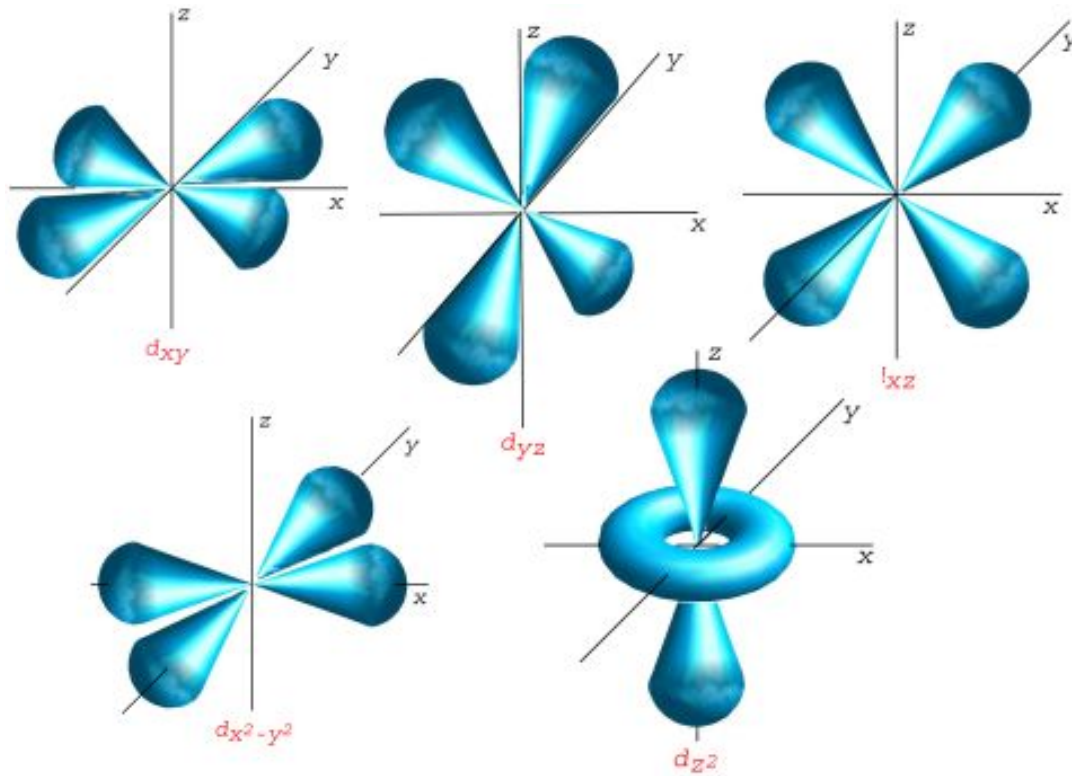
**Nodes RADIALS**

# Model atòmic d'orbitals. Representació orbitals atòmics

## Orbitals d



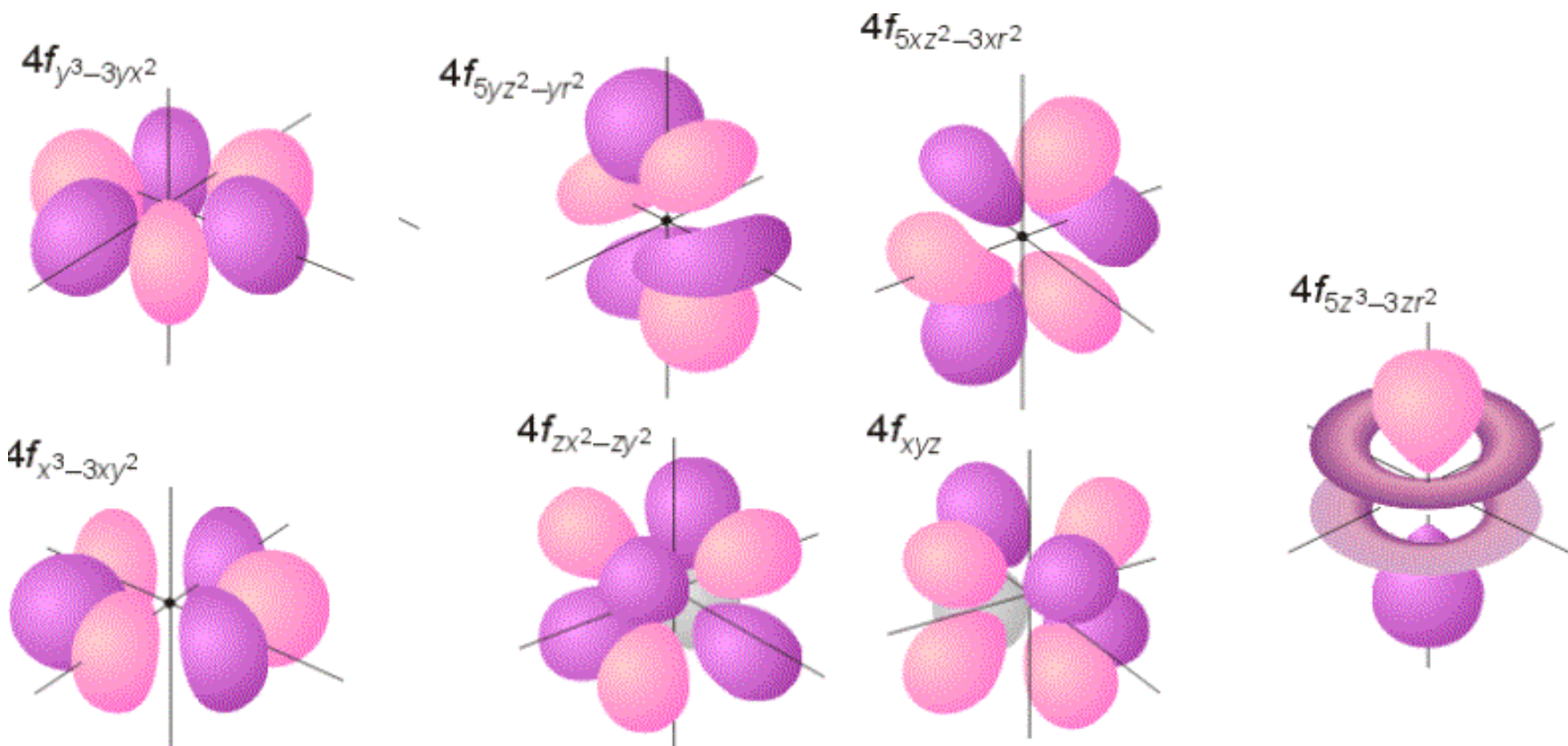
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

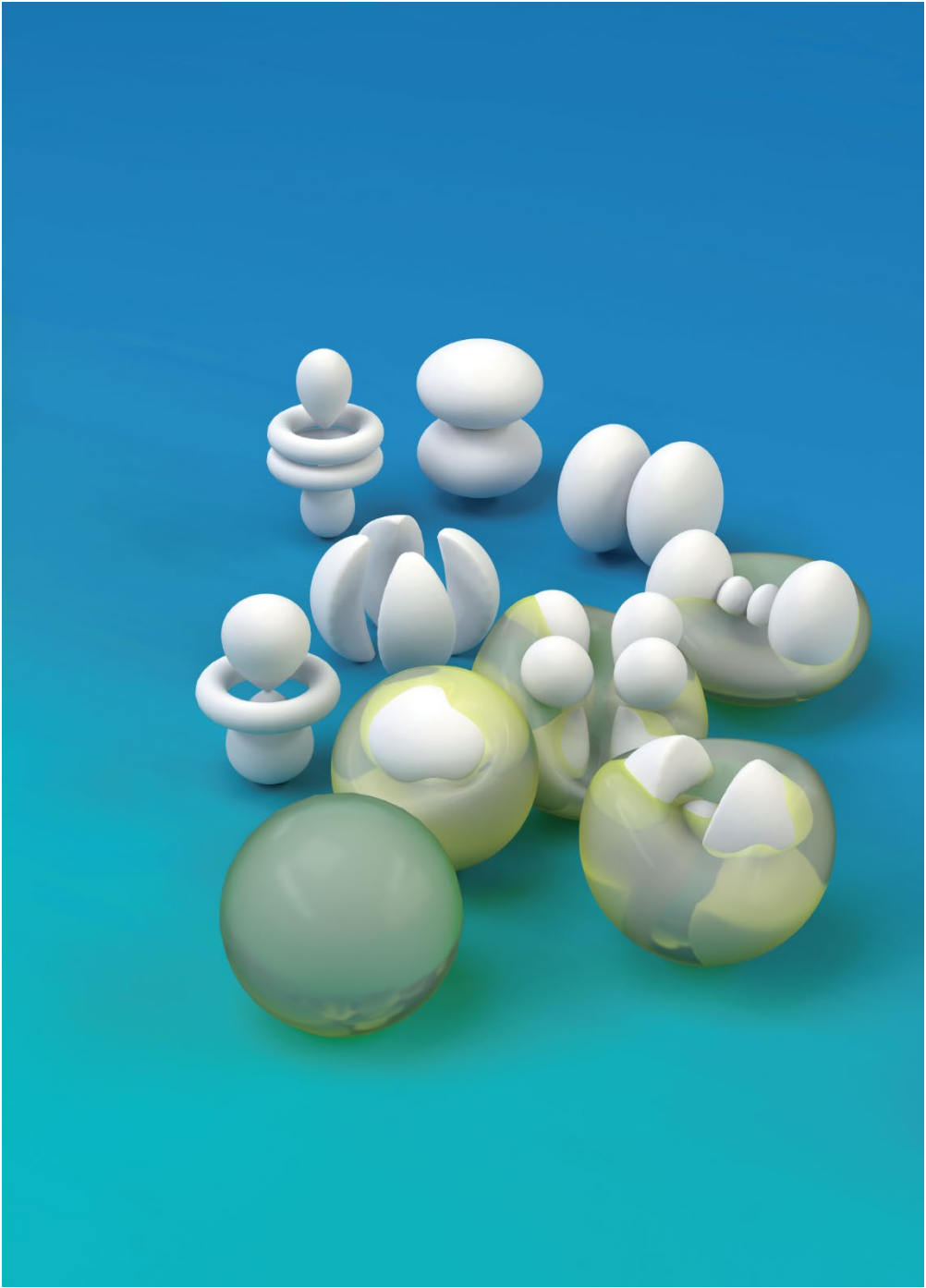


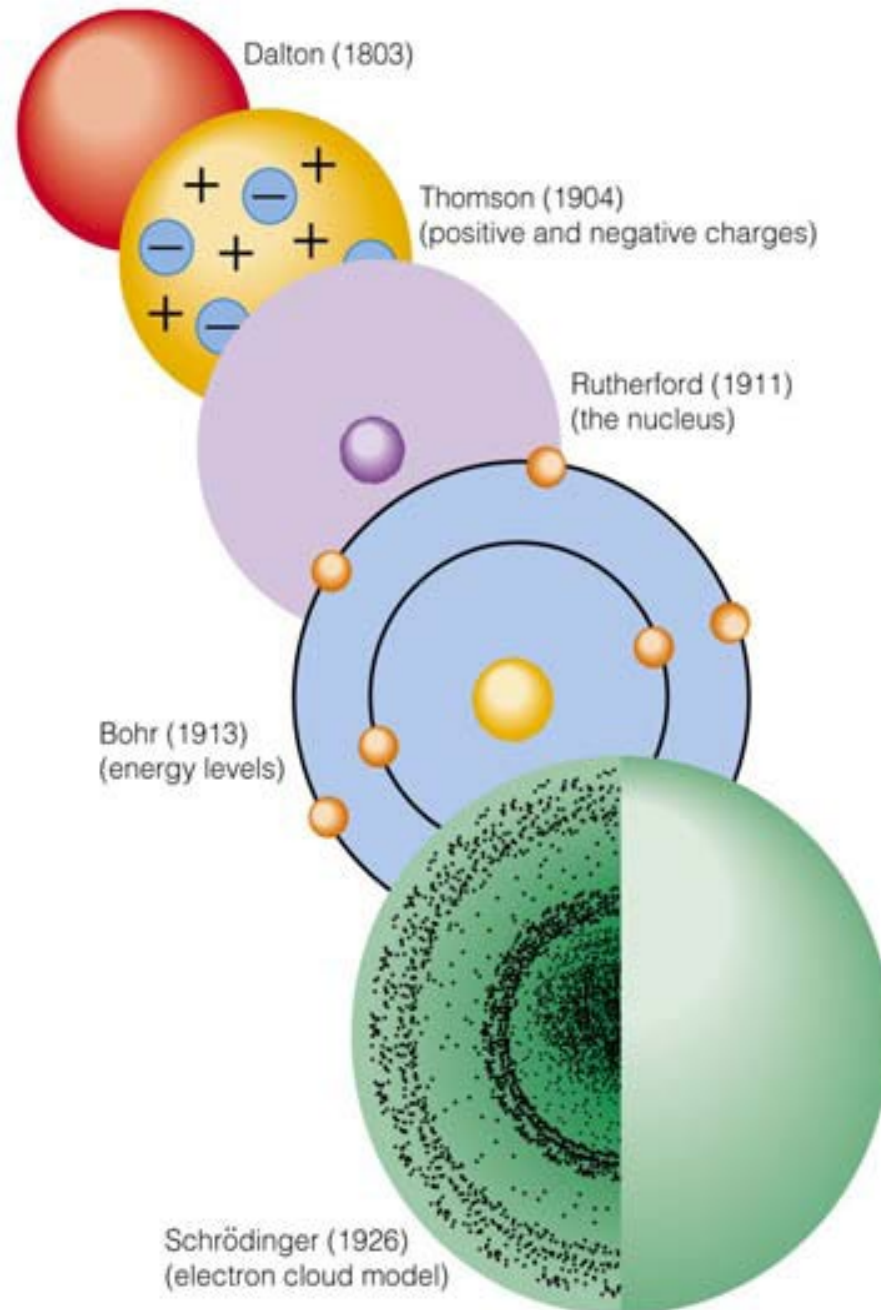


# Model atòmic d'orbitals. Representació orbitals atòmics

## Orbitals f





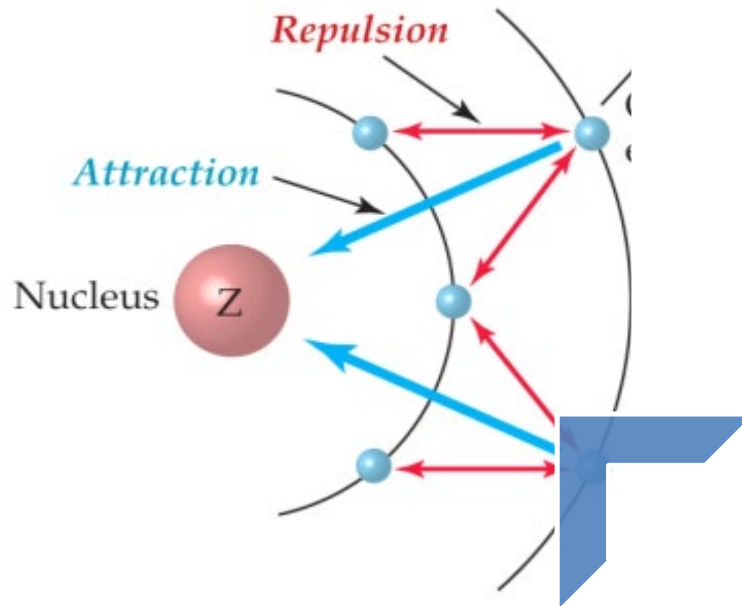


## Algunes idees clau.....

- **1. Radiació electromagnètica:** la radiació electromagnètica és una forma de transmissió d'energia mitjançant una ona. Les ones de la radiació electromagnètica es caracteritzen per una amplitud, la longitud d'ona,  $\lambda$ ; la distància entre les crestes; i  $\nu$ , que indica la freqüència de les fluctuacions. La freqüència es mesura en hertz, Hz, (cicles per segon). La longitud d'ona i la freqüència estan relacionades per l'equació  $C = \lambda * \nu$ , on  $c$  és la rapidesa de la llum. El caràcter d'ona de la radiació electromagnètica implica que les ones es poden descompondre en components individuals de diferents longituds d'ona, que genera un patró de difracció, en xocar amb una superfície amb solcs molt pròxims.
- **2. Espectres atòmics dels elements:** la dispersió de la llum visible pot dur a terme en totes les seues longituds d'ona mitjançant un prisma o, per exemple, amb les gotes de pluja; la llum blanca és un exemple d'espectre continu. Contràriament, els espectres produïts per la llum emesa per àtoms i ions excitats es denominen *espectres atòmics* o espectres de línies, perquè només emeten radiació a freqüències concretes.
- **3. Quantització de l'energia:** l'estudi de la radiació electromagnètica emesa pels objectes calents va conduir a la teoria de Planck, que postula que l'energia només pot tindre valors discrets, sent el "**quàntum**" la unitat més xicoteta d'energia. L'energia d'un quàntum ve donada per  $E = h * \nu$  on  $h$  és la constant de Planck. La interpretació d'Einstein de l'efecte fotoelèctric (la capacitat de la llum per a emetre electrons quan colpeja certes superfícies) va conduir a una nova interpretació de la radiació electromagnètica on la llum té la naturalesa de partícula a més de les seues propietats d'ona. Les "**partícules**" de llum s'anomenen *fotoons*. L'energia d'un fotó està relacionada amb la freqüència de la radiació per  $E_{\text{fotó}} = h * \nu$ , enganxant amb la hipòtesi de Plank.
- **4. El model atòmic de Bohr:** el primer intent d'explicar els espectres atòmics (de línies) el va fer Niels Bohr, qui va postular que un electró en un àtom d'hidrogen existeix en una òrbita circular, definida per un nombre quàntic  $n$ , que descriu l'energia de l'electró en l'òrbita. L'estat de l'electró amb un nombre quàntic més baix,  $n = 1$ , es denomina *estat fonamental*. Un estat excitat d'un àtom d'hidrogen correspon a aquells estats amb  $n > 1$ . La teoria de Bohr també proporciona un mitjà per a construir un diagrama de nivells d'energia d'àtoms hidrogenoides per a comprendre els espectres d'emissió.

# Orbitals atòmics. Idees clau.

- **5. La mecànica quàntica. Antecedents.** D'una banda, les idees de Louis de Broglie al voltant de la dualitat ona-partícula segons la qual, les partícules de matèria com els protons i els electrons podrien mostrar, a vegades, propietats d'ona, estengueren el concepte de la llum com a ona-partícula. D'altra banda, el principi d'incertesa de Heisenberg, que va postular que no podem conèixer simultàniament el moment precís d'una partícula subatòmica i la seua posició, (la incertesa inherent en la posició i el moment d'una partícula com a ona) va anticipar la proposta de tractar l'electró com una partícula amb comportament d'ona, d'energia definida però de posició altament indeterminada.
- **6. Mecànica ondulatòria.** L'aplicació del concepte de dualitat ona-partícula requereix que considerem l'electró en un sistema mitjançant una funció d'ona que correspon a una ona estacionària dins d'un sistema limitat. L'aplicació d'aquestes idees a una partícula en una caixa mono dimensional mostra que, en el nivell més baix d'energia, l'energia de la partícula no és zero, és a dir, el sistema té una energia en el punt zero. La solució de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen proporciona funcions d'ona denominades *orbitals*, que són el producte d'una funció d'ona angular,  $\psi(\theta, \phi)$ , i una funció d'ona radial,  $R(r)$ .
- **7. Nombres quàntics i orbitals dels electrons.** Els tres nombres quàntics que sorgeixen de l'equació de Schrödinger són el nombre quàntic principal,  $n$ ; el nombre quàntic del moment angular orbital,  $l$ ; i el nombre quàntic magnètic,  $m$ . Tots els orbitals amb el mateix valor de  $n$  estan en la mateixa capa principal electrònica (nivell principal), i tots els orbitals amb els mateixos valors de  $n$  i  $l$ , estan en la mateixa subcapa (subnivell). Els orbitals amb diferent valor de  $l$  (0, 1, 2, 3, etc.) es designen per les lletres s, p, d, f. Els electrons en la mateixa subcapa d'un àtom hidrogenoide tenen la mateixa energia i es diu que són degenerats.
- **8. Representació dels orbitals de l'àtom d'hidrogen.** La interpretació de les solucions de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen condueix a una descripció de les formes de la distribució de la **probabilitat electrònica** per als electrons en els orbitals s, p, d. La representació tanca el 90 % de trobar l'electró en una regió de l'espai. El nombre de nodes en un orbital ( $n - 1$ ) augmenta amb  $n$ . Els nodes apareixen on la funció canvia de signe. La representació de la densitat de la probabilitat ens dona una visió millor del poder penetrant dels orbitals.



# TEMA 3

## ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

# TEMA 3. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

## Nivells energètics



Penetració orbital i apantallament

Càrrega nuclear efectiva

## Configuracions electròniques



Principi de construcció (*aufbau*)

Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund

## La Taula Periòdica. Propietats



Grandària atòmica. Energia d'ionització

Afinitat electrònica. Caràcter metàl·lic i no metàl·lic



# TEMA 3. ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

## Bibliografia recomanada

**Petrucci**: capítols 2, 9, 10

**Chang**: capítols 2, 7 i 8

**Brown**: capítols 2, 6 i 7

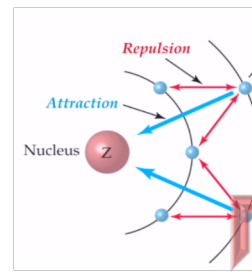
## Bibliografia complementària

*Química*. Un proyecto de la ACS. Ed Reverte. 2004.

S.F. Mason. *Chemical Evolution*. Oxford University Press. 1992.







# TEMA 3

## ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

# Nivells energètics

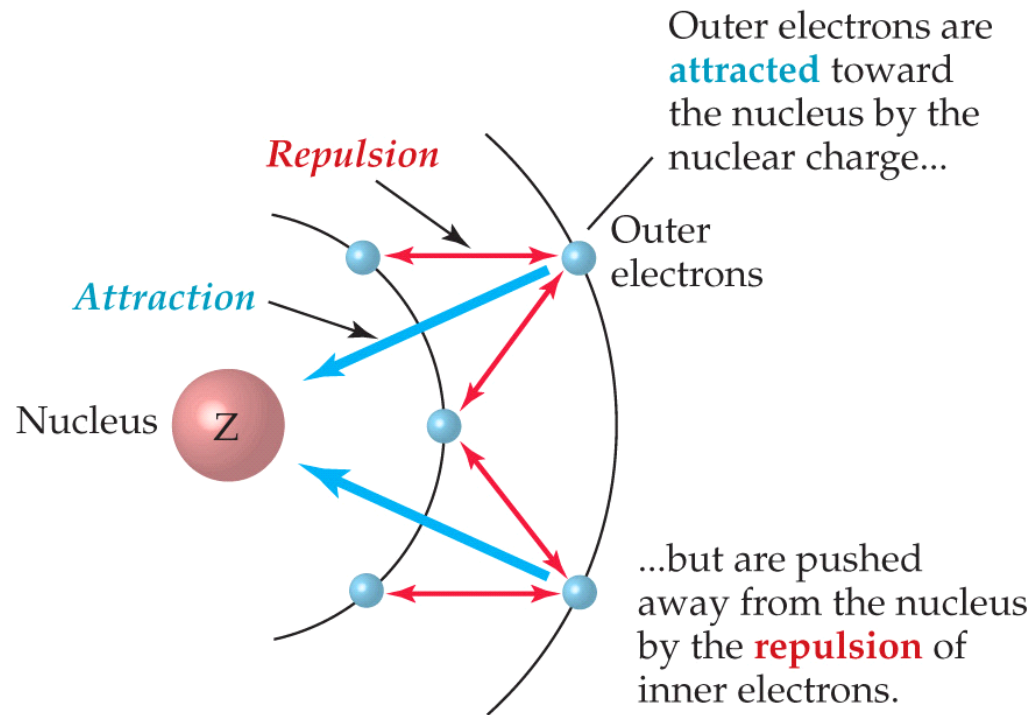


Penetració orbital i apantallament

Càrrega nuclear efectiva



# Com interactuen els electrons?



# Àtoms polieletrònics

---

El tractament dels àtoms amb més d'un electró requereix tindre en compte els efectes de:

Les repulsions intereletròniques.

---

La penetració orbital cap al nucli.

---

L'apantallament nuclear.

---

El nombre quàntic d'espín, que especifica l'energia intrínseca d'un electró en qualsevol orbital.

---

# Àtoms polieletrònics

---

La restricció pel que fa  
**al nombre**  
**d'electrons que**  
**pot contenir** ens  
porta a:

Principi d'exclusió de Pauli.

---

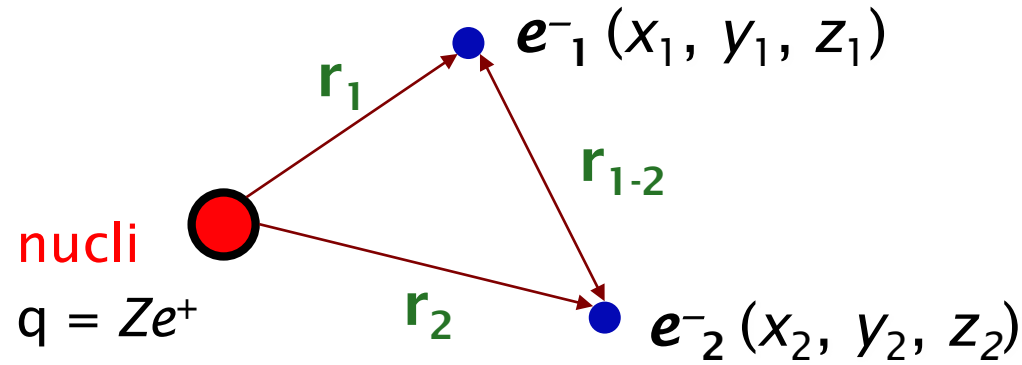
La regla de Hund.

---

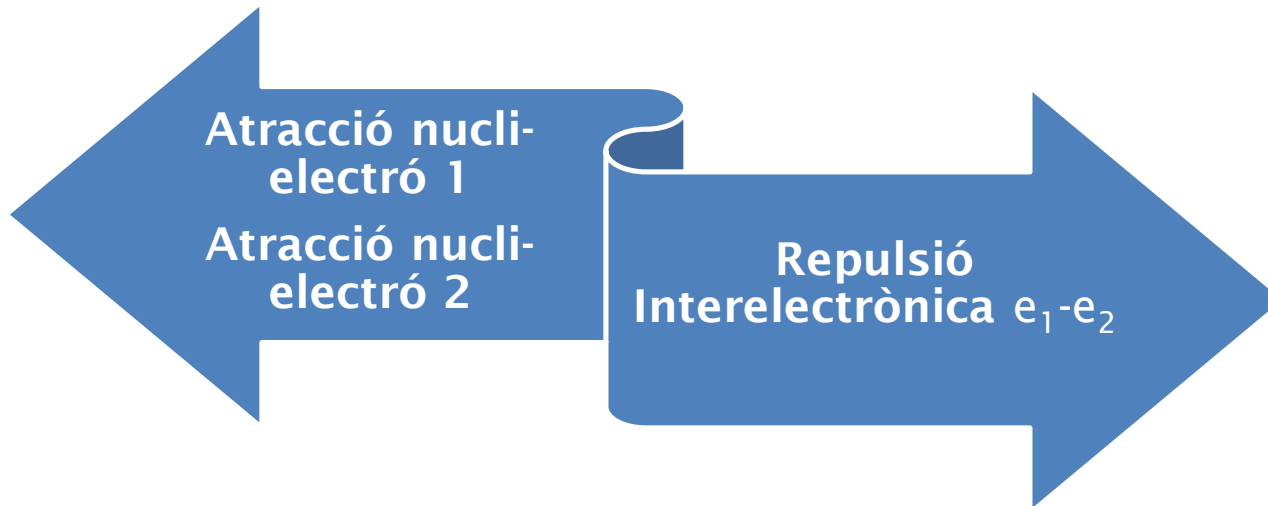
Principi *aufbau* per a  
establir les **configuracions**  
**electròniques** dels elements.

---

# Àtoms polieletrònics

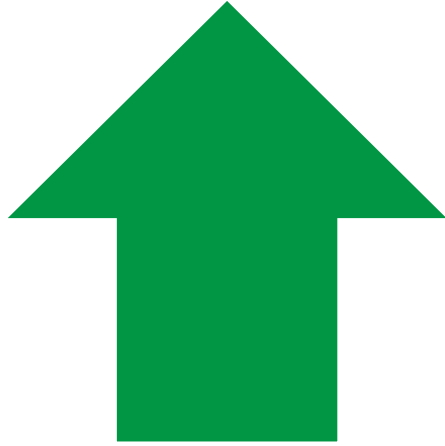


**En els àtoms multieletrònics cal considerar...**

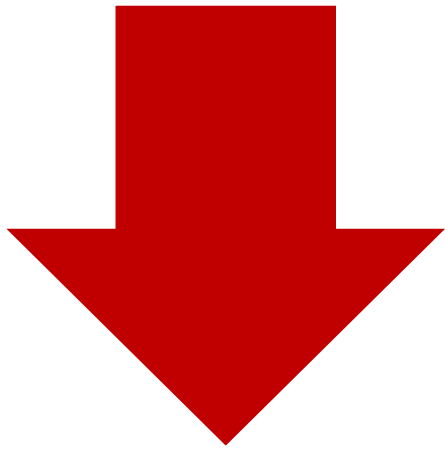
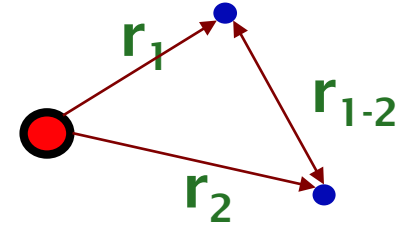


**...tot contribueix a l'energia potencial ( $V$ ) del sistema.**

# Àtoms polieletrònics



L'equació de Schrödinger **només té solucions exactes** per a sistemes monoelctrònics.

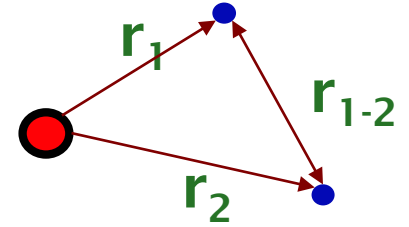


L'equació de Schrödinger **no té solucions analítiques** per a àtoms polieletrònics.

# Àtoms polieletrònics



En els àtoms  
multieletrònics  
cal utilitzar  
mètodes  
computacionals  
en els quals  
**sempre s'adopten  
aproximacions  
per a simplificar  
el problema.**



# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant

## Aproximació orbital

---

S'hi desprecien **les repulsions intereletròniques** i es tracten els electrons **com si foren independents**

Un sistema amb  $n$  electrons (irresoluble) es convertix en  $n$  problemes amb només un electró, les solucions dels quals són orbitals atòmics hidrogenoides.

---

La seua forma (distribució espacial) és aproximadament la mateixa que per als orbitals de l'hidrogen.

---

L'energia dels orbitals es modifica notablement. *Es perd la degeneració dels orbitals amb el mateix valor de  $n$  però diferent  $l$ .*

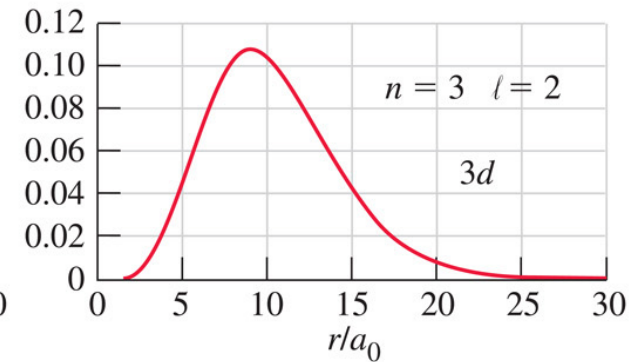
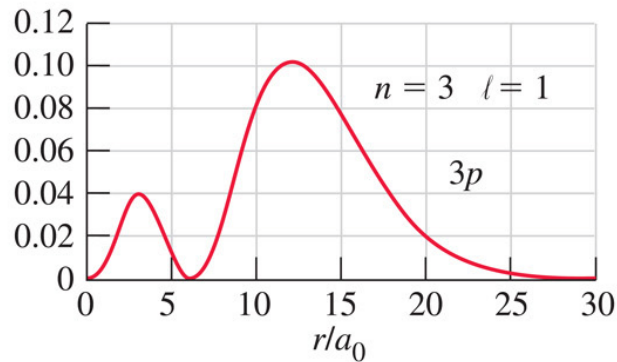
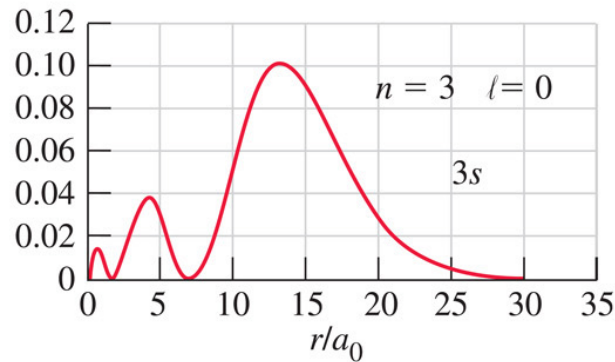
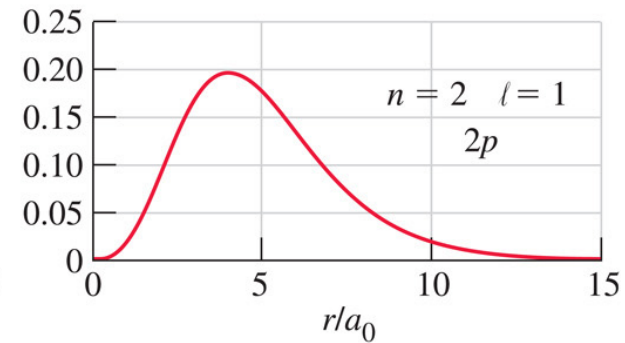
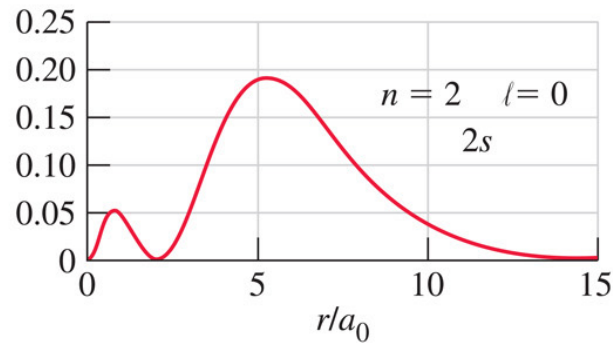
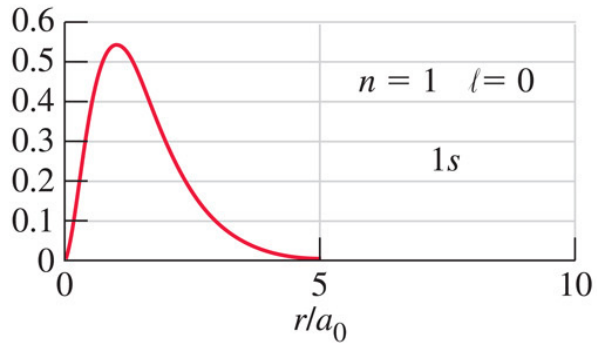
---



# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant

Funció de distribució de probabilitat radial.

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$



# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant

**Funció de distribució de probabilitat radial.**

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$

## Poder penetrant

- Probabilitat de trobar un electró prop del nucli.

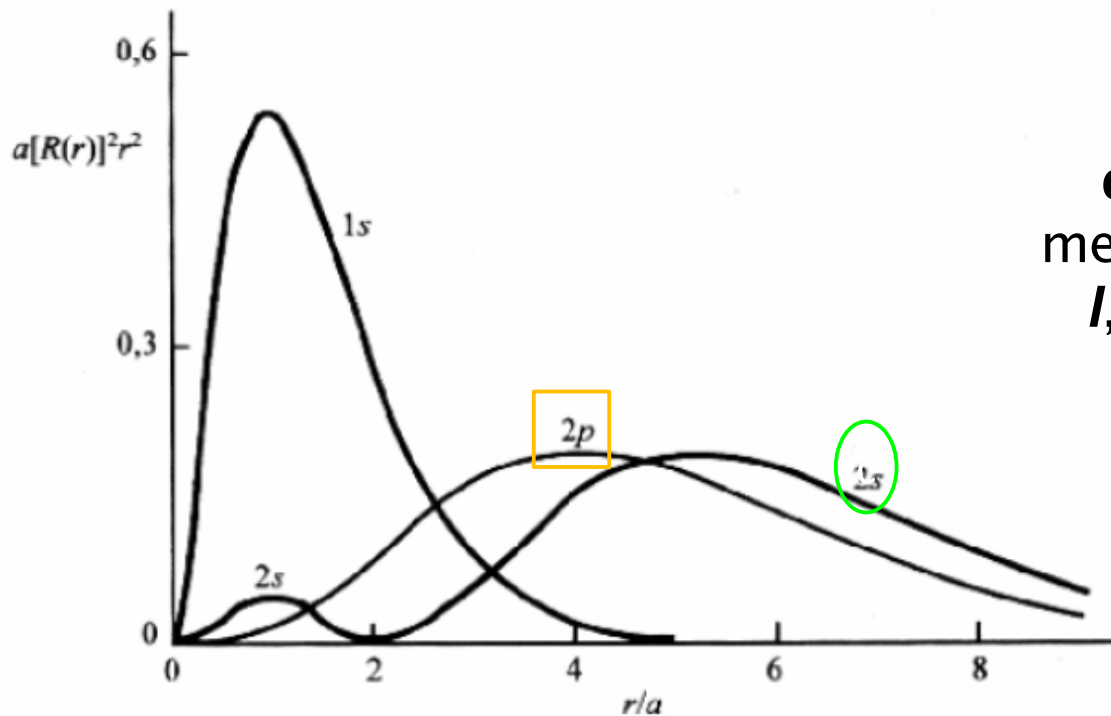
## Apantallament

- Disminució de l'eficàcia de l'atracció per part del nucli que experimenta un electró com a conseqüència de les repulsions intereletròniques que generen els electrons més pròxims al nucli.

# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant

Funció de distribució de probabilitat radial.

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$



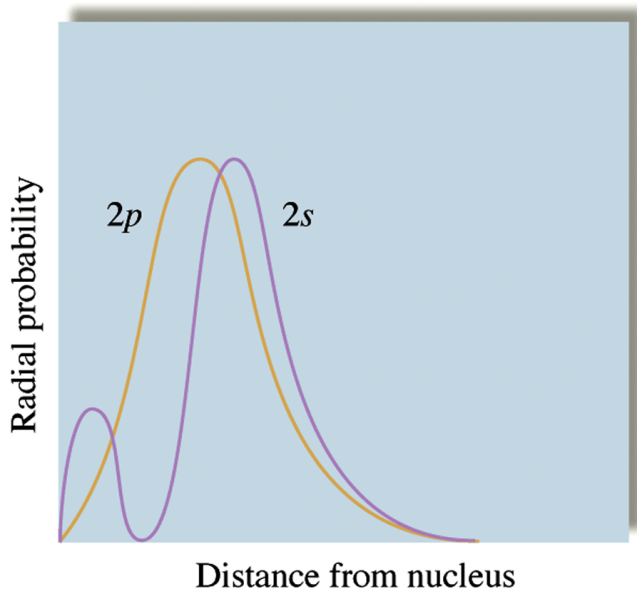
Per a un mateix nombre quàntic principal  $n$ , com menor siga el nombre quàntic  $l$ , **major serà** el seu **poder penetrant**.

**Poder penetrant:  $s > p > d > f$**

# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant i apantallament

Funció de distribució de probabilitat radial.

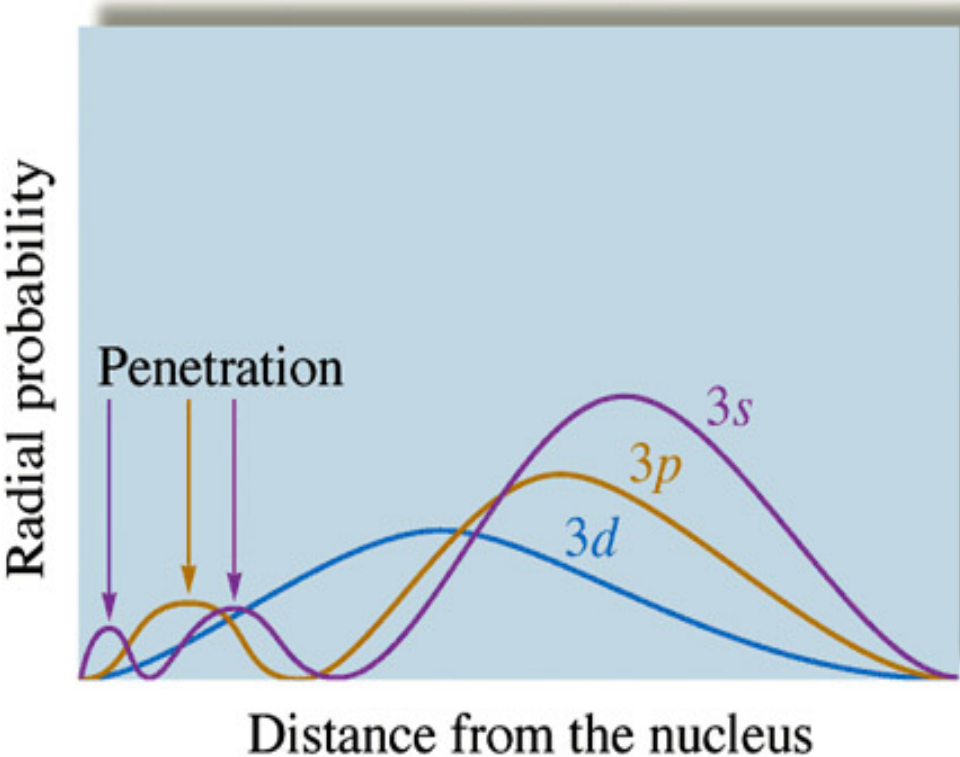
$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$$



Els electrons  $2s$  tenen una **probabilitat major d'estar a prop** del nucli que un electró  $2p$ . L'orbital  $2s$  és **més penetrant** que el  $2p$ .



# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant i apantallament



Com es troben més a prop del nucli, els electrons 3s es veuen més atrets pel nucli (perceben una **càrrega nuclear efectiva major**) que els 3p i, per tant, tenen menor energia.

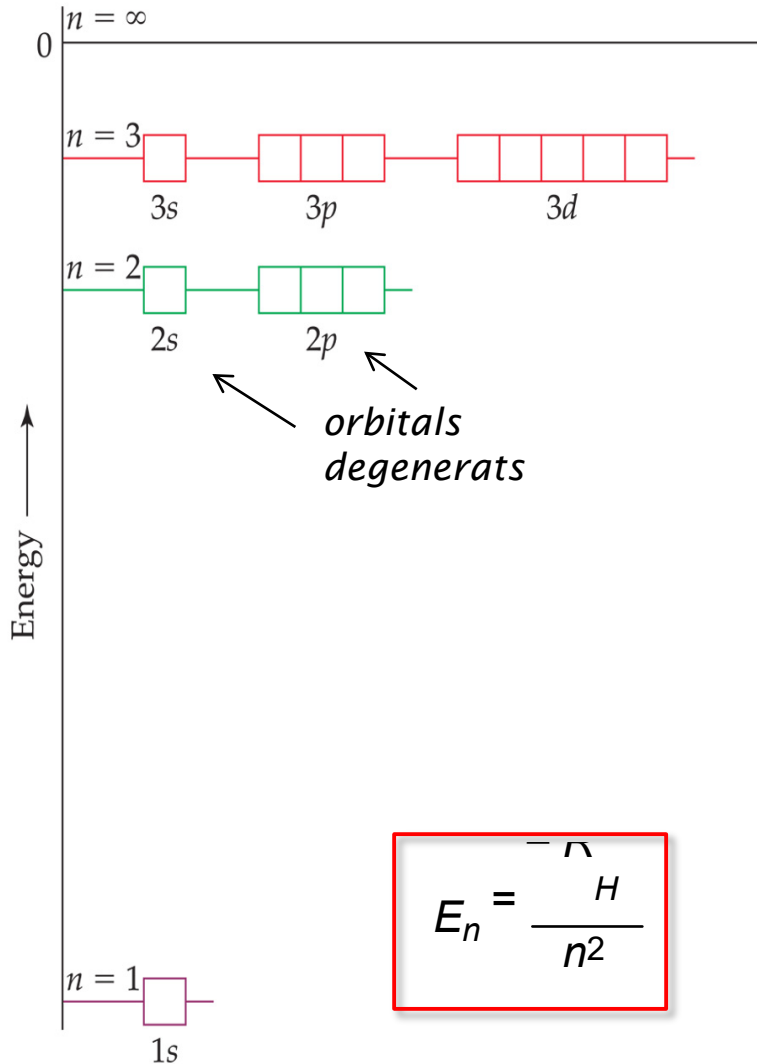
Els electrons 3s **apantallen** del nucli als 3p.

# Àtoms polieletrònics. Poder penetrant i apantallament

La conseqüència del diferent poder penetrant és que **es perd la degeneració** entre els orbitals **del mateix  $n$  però diferent  $l$ .**

# Àtoms polieletrònics. Energia dels orbitals

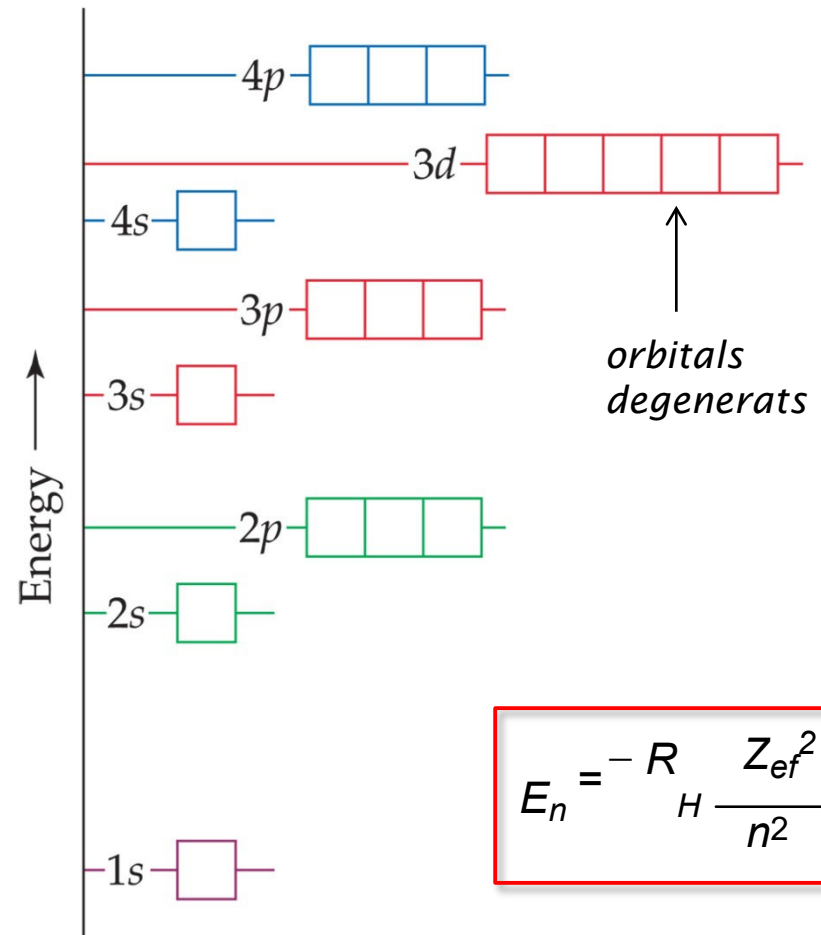
Nivells d'energia dels orbitals en  
l'àtom d'hidrogen.



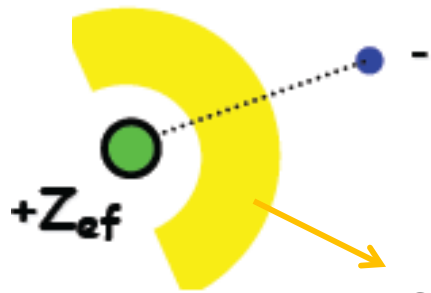
Nivells d'energia dels orbitals d'àtoms polieletrònics.



$ns < np < nd < nf$



# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva



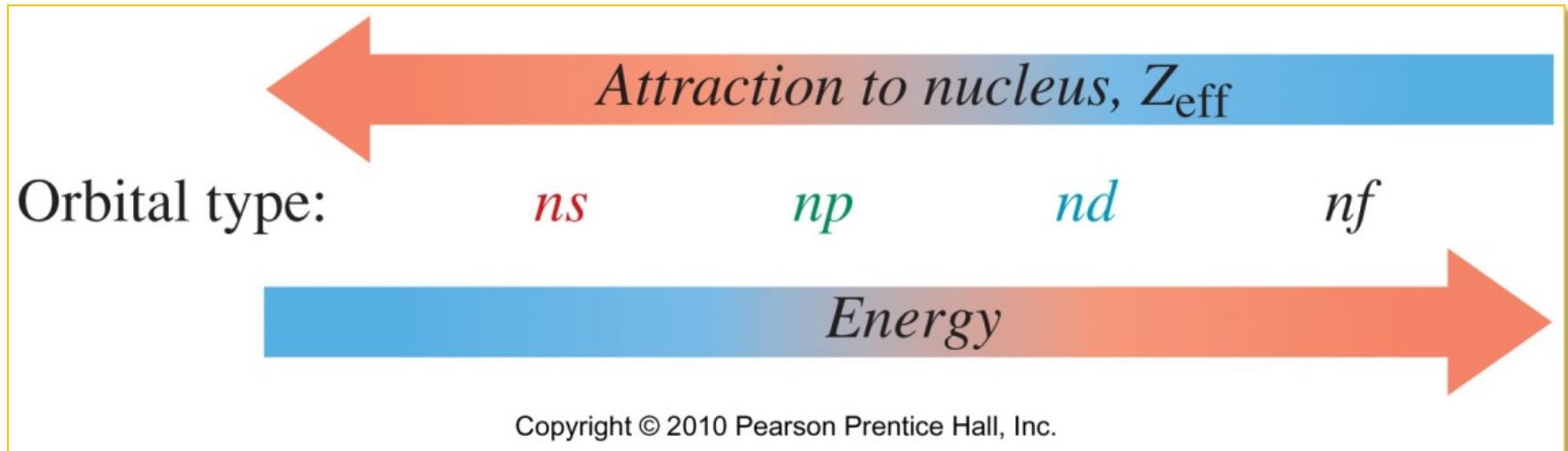
$S$  = efecte apantallant dels electrons més interns.

$$Z^* = Z - S$$

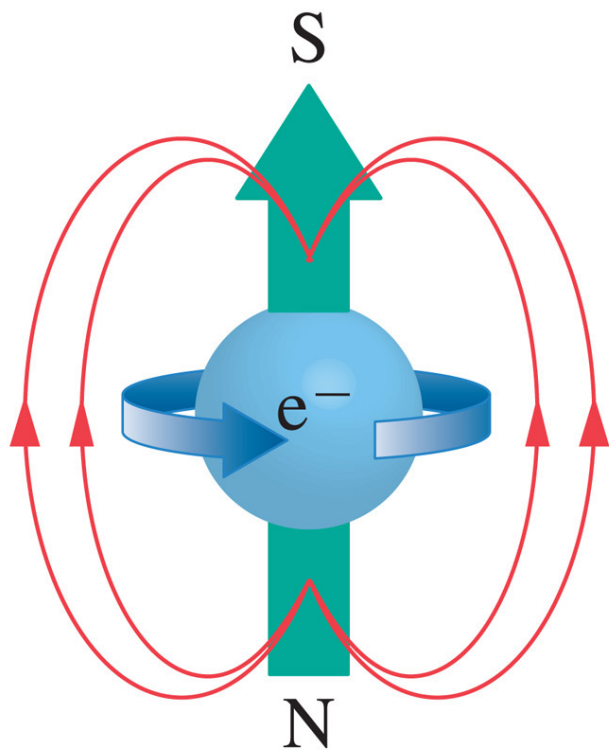
La càrrega nuclear que percep un electró com a conseqüència de la presència d'altres electrons es denomina **càrrega nuclear efectiva ( $Z^*$  o  $Z_{ef}$ )**.



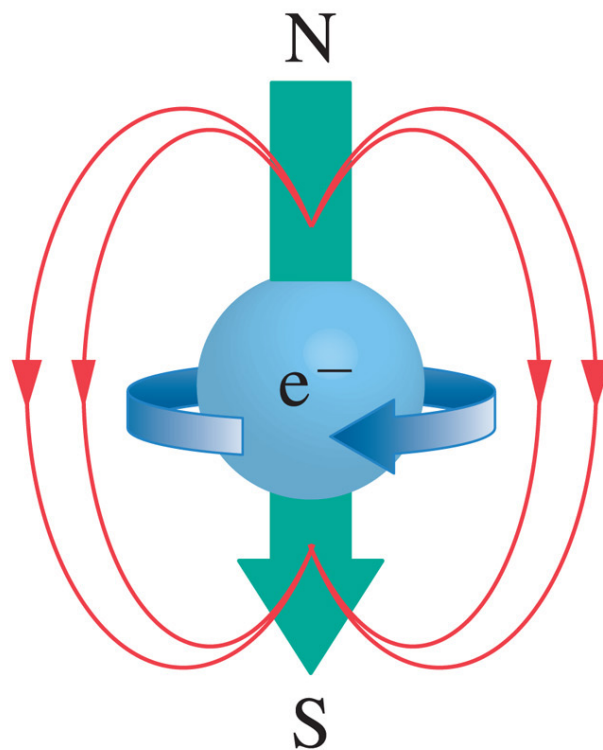
# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva



# Àtoms polieletrònics. Número quàntic d'espí

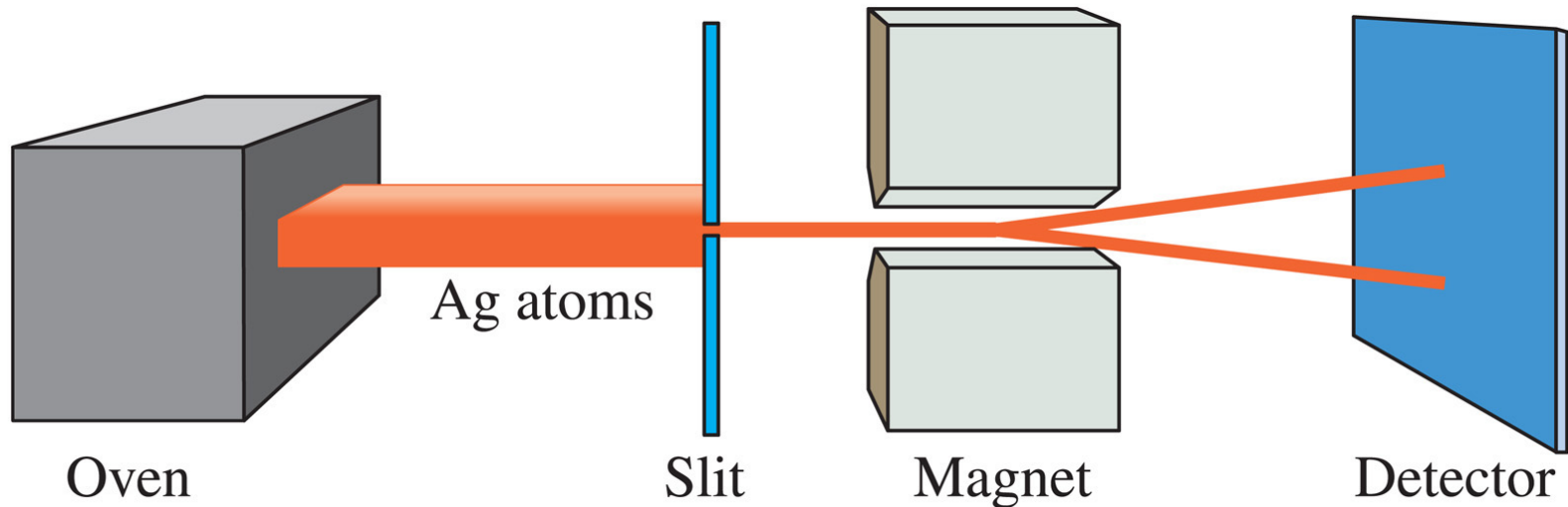


$$m_s = +\frac{1}{2}$$

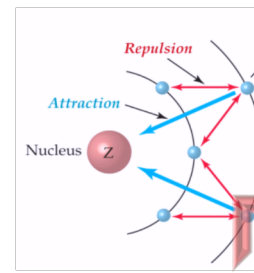


$$m_s = -\frac{1}{2}$$

# Àtoms polieletrònics. L'experiment de Stern-Gerlach



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



## TEMA 3 ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

# Configuracions electròniques



Principi de construcció (*aufbau*)

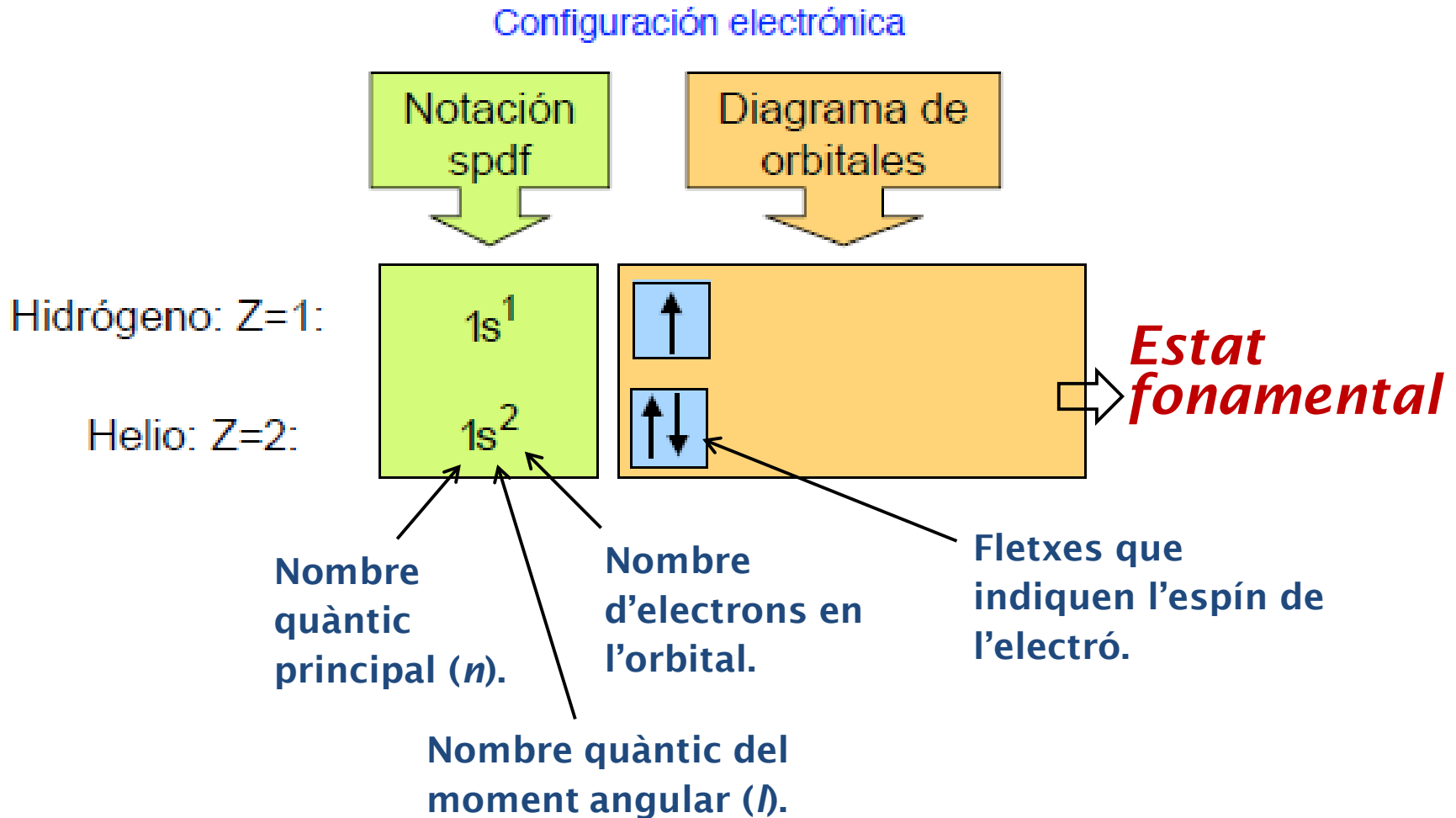


Principi d'exclusió de Pauli. Regla de Hund



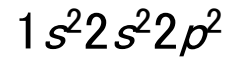
# Àtoms polieletrònics. Configuracions electròniques

Distribució dels electrons en els orbitals d'un àtom.

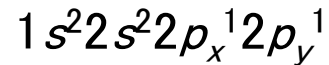


# Àtoms polieletrònics. Configuracions electròniques

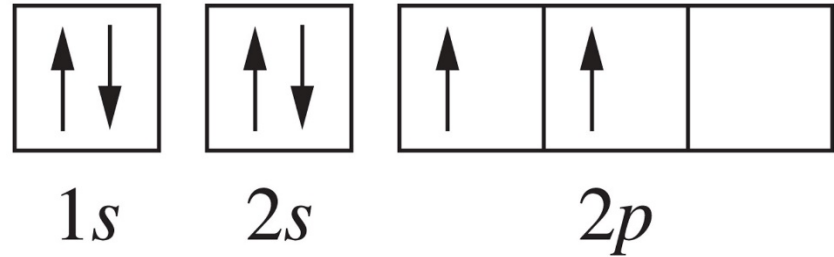
*spdf* notation (condensed)



*spdf* notation (expanded)



*spdf* notation



# Àtoms polieletrònics. Configuracions electròniques

## Regles per a la distribució dels electrons

---

Els electrons ocupen els orbitals de manera que es minimitze l'energia total de l'àtom. Els orbitals s'omplin d'acord amb l'ordre creixent de les seues energies.

---

Dos electrons d'un àtom no poden tindre els quatre nombres quàntics iguals (**principi d'exclusió de Pauli**).

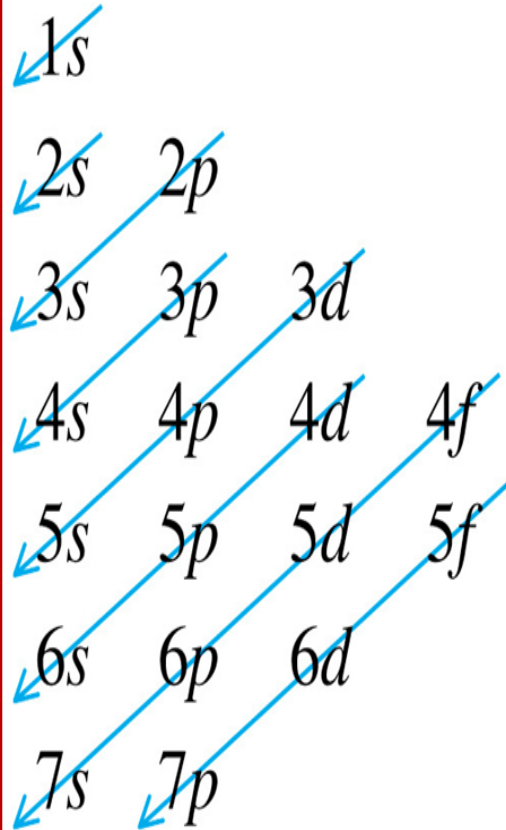
---

Quan hi ha orbitals d'energia idèntica (degenerats), els electrons ocupen inicialment aquests orbitals de manera que s'aconsegueisca la màxima multiplicitat d'espín, és a dir, **el nombre màxim d'electrons desaparellats** (**regla de Hund**).

---

# Àtoms polieletrònics. Minimització de l'energia

## Principi d'*Aufbau* (construcció progressiva)



La configuració electrònica *fonamental* s'obté omplint els orbitals **per ordre creixent d'energia**.

L'ordre d'ompliment exacte s'estableix **experimentalment** mitjançant estudis espectroscòpics i magnètics.

Els orbitals semiplens i totalment plens són **més estables** que els orbitals parcialment plens.

Per als lantànids i els actínids **NO s'observa** regularitat pel fet que les diferències d'energia entre els orbitals *d* i *f* són molt xicotetes.



# Àtoms polieletrònics. Regla d'exclusió de Pauli

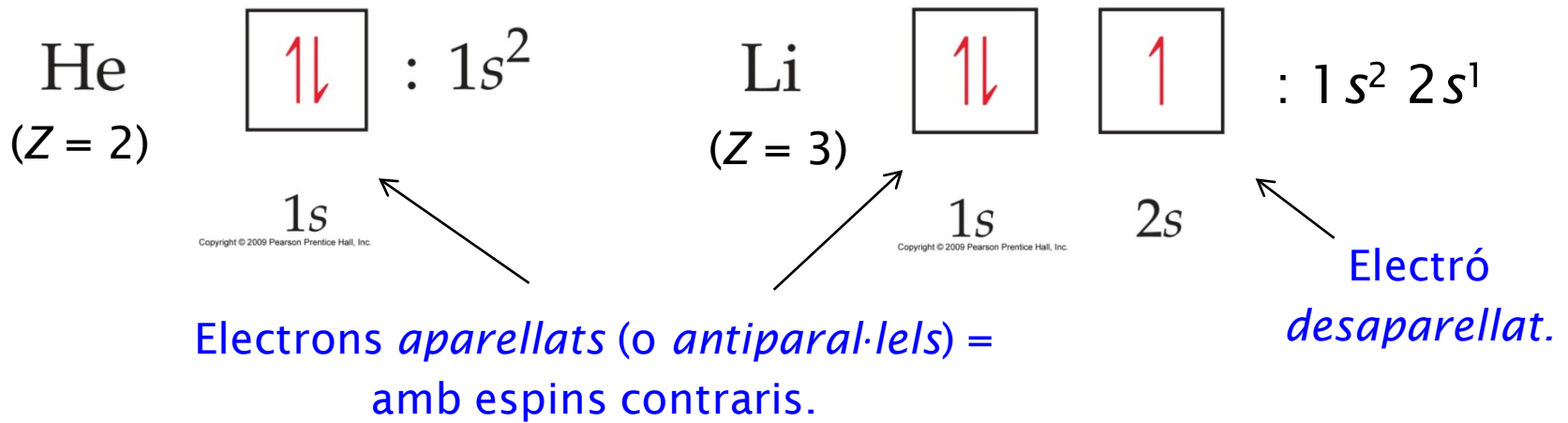
Un orbital pot tenir **un màxim de 2 electrons** i han de tenir espins contraris ( $m_s = +1/2$  i  $m_s = -1/2$ ).

- 1

Dos electrons d'un àtom **NO poden** tindre els quatre nombres quàntics ( $n, l, m_l$  i  $m_s$ ) iguals.

- 2.

# Àtoms polieletrònics. Regla d'exclusió de Pauli



# Àtoms polieletrònics. Regla de Hund

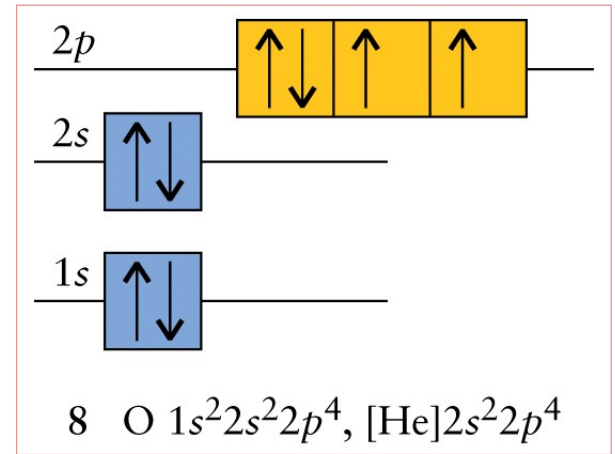
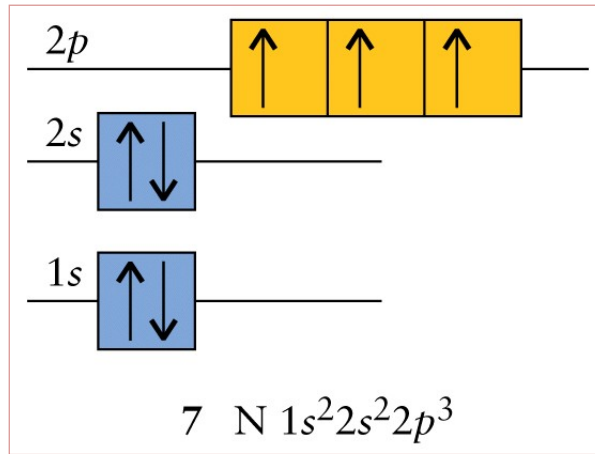
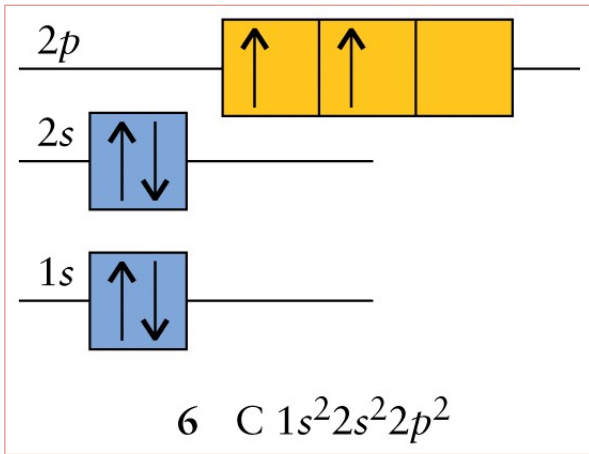
La distribució electrònica **més estable** en els subnivells és aquella que té un nombre majors **d'espins paral·lels** (desaparellats).

- 1

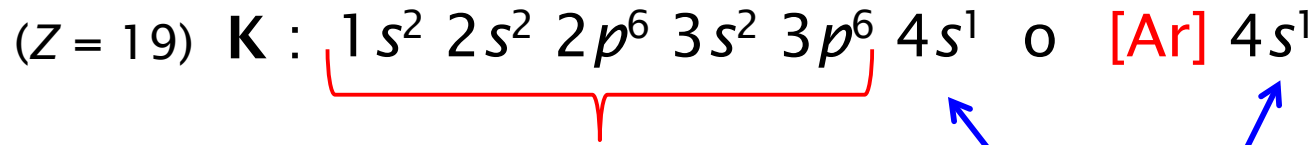
Dos electrons d'un àtom **no poden** tenir els quatre nombres quàntics ( **$n$ ,  $l$ ,  $m_l$  i  $m_s$** ) **iguals**.

- 2

# Àtoms polieletrònics. Regla de Hund

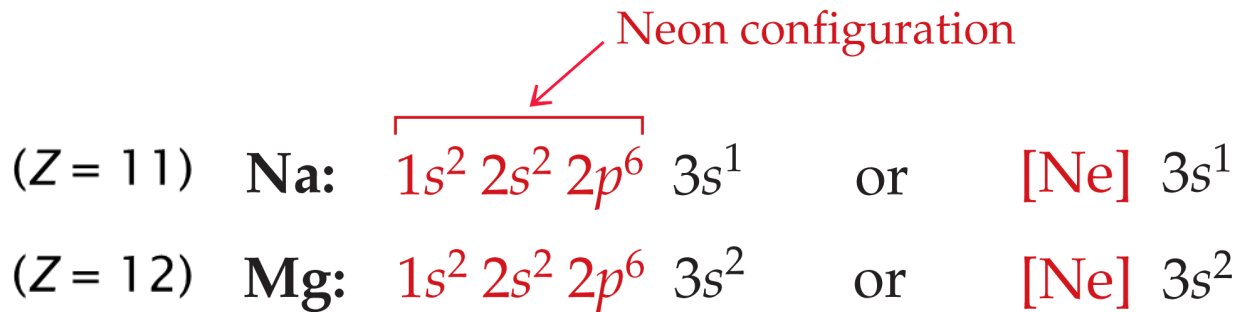


# Àtoms polieletrònics. Regla de Hund



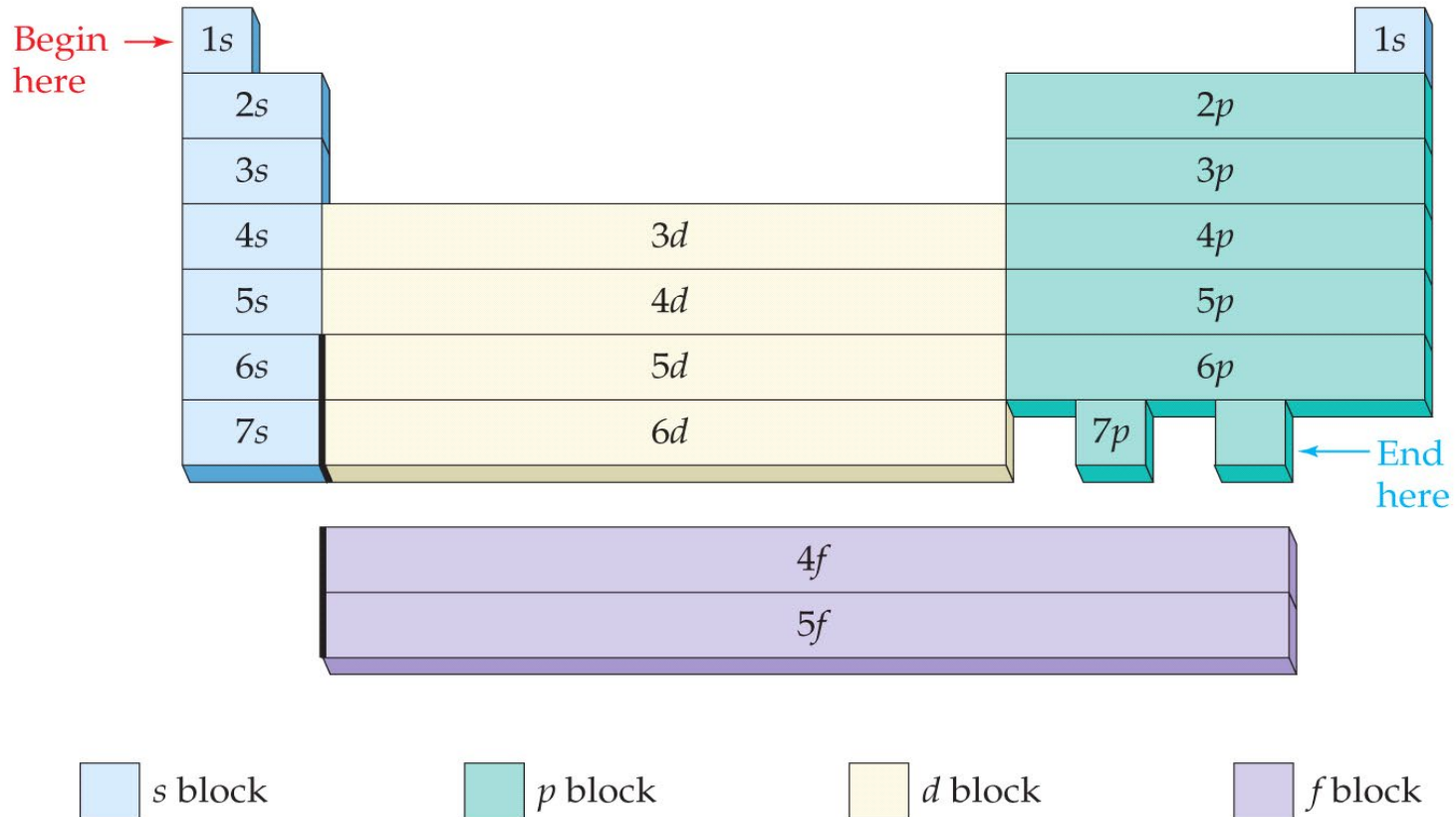
*Electrons interns* =  
nucli o capa interna  
del Ar (Z = 18).

*Electrons de valència* =  
electrons *s/p* en capa externa.



# Àtoms polieletrònics. Configuració electrònica

Beginning at the top left and going across successive rows of the periodic table provides a method for remembering the order of orbital filling:  $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p$  and so on.



# Àtoms polieletrònics. Configuració electrònica

Grupo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Período																		
1	H 1s <sup>1</sup>																	He 1s <sup>2</sup>
2	Li 2s <sup>1</sup>	Be 2s <sup>2</sup>											B 2p <sup>1</sup>	C 2p <sup>2</sup>	N 2p <sup>3</sup>	O 2p <sup>4</sup>	F 2p <sup>5</sup>	Ne 2p <sup>6</sup>
3	Na 3s <sup>1</sup>	Mg 3s <sup>2</sup>											Al 3p <sup>1</sup>	Si 3p <sup>2</sup>	P 3p <sup>3</sup>	S 3p <sup>4</sup>	Cl 3p <sup>5</sup>	Ar 3p <sup>6</sup>
4	K 4s <sup>1</sup>	Ca 4s <sup>2</sup>	Sc 3d <sup>1</sup>	Ti 3d <sup>2</sup>	V 3d <sup>3</sup>	Cr 3d <sup>4</sup>	Mn 3d <sup>5</sup>	Fe 3d <sup>6</sup>	Co 3d <sup>7</sup>	Ni 3d <sup>8</sup>	Cu 3d <sup>9</sup>	Zn 3d <sup>10</sup>	Ga 4p <sup>1</sup>	Ge 4p <sup>2</sup>	As 4p <sup>3</sup>	Se 4p <sup>4</sup>	Br 4p <sup>5</sup>	Kr 4p <sup>6</sup>
5	Rb 5s <sup>1</sup>	Sr 5s <sup>2</sup>	Y 4d <sup>1</sup>	Zr 4d <sup>2</sup>	Nb 4d <sup>3</sup>	Mo 4d <sup>4</sup>	Tc 4d <sup>5</sup>	Ru 4d <sup>6</sup>	Rh 4d <sup>7</sup>	Pd 4d <sup>8</sup>	Ag 4d <sup>9</sup>	Cd 4d <sup>10</sup>	In 5p <sup>1</sup>	Sn 5p <sup>2</sup>	Sb 5p <sup>3</sup>	Te 5p <sup>4</sup>	I 5p <sup>5</sup>	Xe 5p <sup>6</sup>
6	Cs 6s <sup>1</sup>	Ba 6s <sup>2</sup>	*	Hf 5d <sup>2</sup>	Ta 5d <sup>3</sup>	W 5d <sup>4</sup>	Re 5d <sup>5</sup>	Os 5d <sup>6</sup>	Ir 5d <sup>7</sup>	Pt 5d <sup>8</sup>	Au 5d <sup>9</sup>	Hg 5d <sup>10</sup>	Tl 6p <sup>1</sup>	Pb 6p <sup>2</sup>	Bi 6p <sup>3</sup>	Po 6p <sup>4</sup>	At 6p <sup>5</sup>	Rn 6p <sup>6</sup>
7	Fr 7s <sup>1</sup>	Ra 7s <sup>2</sup>	**	Rf 6d <sup>2</sup>	Db 6d <sup>3</sup>	Sg 6d <sup>4</sup>	Bh 6d <sup>5</sup>	Hs 6d <sup>6</sup>	Mt 6d <sup>7</sup>	Ds 6d <sup>8</sup>	Rg 6d <sup>9</sup>	Cn 6d <sup>10</sup>	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lantánidos	*	La 5d <sup>1</sup>	Ce 4f <sup>1</sup>	Pr 4f <sup>2</sup>	Nd 4f <sup>3</sup>	Pm 4f <sup>4</sup>	Sm 4f <sup>5</sup>	Eu 4f <sup>6</sup>	Gd 4f <sup>7</sup>	Tb 4f <sup>8</sup>	Dy 4f <sup>9</sup>	Ho 4f <sup>10</sup>	Er 4f <sup>11</sup>	Tm 4f <sup>12</sup>	Yb 4f <sup>13</sup>	Lu 4f <sup>14</sup>		
Actínidos	**	Ac 6d <sup>1</sup>	Th 5f <sup>1</sup>	Pa 5f <sup>2</sup>	U 5f <sup>3</sup>	Np 5f <sup>4</sup>	Pu 5f <sup>5</sup>	Am 5f <sup>6</sup>	Cm 5f <sup>7</sup>	Bk 5f <sup>8</sup>	Cf 5f <sup>9</sup>	Es 5f <sup>10</sup>	Fm 5f <sup>11</sup>	Md 5f <sup>12</sup>	No 5f <sup>13</sup>	Lr 5f <sup>14</sup>		
	subnivel ns		subnivel np				subnivel (n-1)d						subnivel (n-2)f					

# Àtoms polieletrònics. Configuració electrònica

**TABLE 3.2** Valence-Shell Electron Configurations of Main-Group Elements

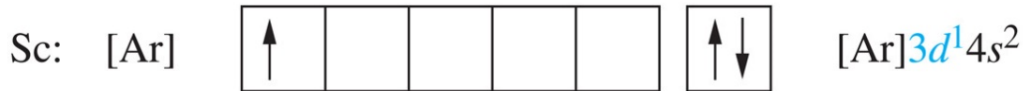
Group	Valence-Shell Electron Configuration
1A	$ns^1$ (1 total)
2A	$ns^2$ (2 total)
3A	$ns^2 np^1$ (3 total)
4A	$ns^2 np^2$ (4 total)
5A	$ns^2 np^3$ (5 total)
6A	$ns^2 np^4$ (6 total)
7A	$ns^2 np^5$ (7 total)
8A	$ns^2 np^6$ (8 total)

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Electrons de valència** en els grups de la Taula Periòdica.



# Àtoms polieletrònics. Quart període



Irregularitat



Irregularitat



3d

4s

**Estabilitat lleugerament major amb subnivells semiplens (3d<sup>5</sup>) i completament plens (3d<sup>10</sup>).**

# Àtoms polielelectrònics. Cinquè període

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
																	Ne
																	Ar
																	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe

S'omplin els  
*5s, 4d, 5p*

a) **Z=37 i 38**

Rb: [Kr] 5s<sup>1</sup>

Sr: [Kr] 5s<sup>2</sup>

b) **Z=39-48: 2<sup>a</sup> sèrie de transició (Y-Cd)**

Energia dels orbitals 4d ≥ 5s: "4d<sup>n</sup> 5s<sup>2</sup>"

(irregularitats en diversos elements)



c) **Z=49-54: (In-Xe) orbitals 5p**

## 2a sèrie transició

Y [Kr] 4d<sup>1</sup>5s<sup>2</sup>

Zr [Kr] 4d<sup>2</sup>5s<sup>2</sup>

Nb [Kr] 4d<sup>3</sup>5s<sup>2</sup>

Mo [Kr] 4d<sup>5</sup>5s<sup>1</sup>

Tc [Kr] 4d<sup>5</sup>5s<sup>2</sup>

Ru [Kr] 4d<sup>7</sup>5s<sup>1</sup>

Rh [Kr] 4d<sup>8</sup>5s<sup>1</sup>

Pd [Kr] 4d<sup>10</sup>5s<sup>0</sup>

Ag [Kr] 4d<sup>10</sup>5s<sup>1</sup>

Cd [Kr] 4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup>

In: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	Sn: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	Sb: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	Te: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	I: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	Xe: [Kr] 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>
--	--	--	--	---	--

# Àtoms polieletrònics. Sisè període

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
6	Cs	Ba	La(*)	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn



Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

a) **Z=55 i 56** (orbitals **6s**)

Cs: [Xe] 6s<sup>1</sup>

Ba: [Xe] 6s<sup>2</sup>

S'omplin els  
**6s, 4f, 5d, 6p.**

b) **5d o 4f? (Z=58-71)**

(\*) La: [Xe] **5d<sup>1</sup> 6s<sup>2</sup>** “vs” [Xe] 4f<sup>1</sup> 5d<sup>0</sup> 6s<sup>2</sup>

Subnivell **4f**: lantànids (Z=58-71)

Com que és molt semblant l'energia dels orbitals (n-2)f- (n-1)d-ns és **difícil conèixer-ne l'estructura electrònica vertadera.**

# Àtoms polieletrònics. **Sisè període**

Ce: [Xe] 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	Pr: [Xe] 4f <sup>3</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Nd: [Xe] 4f <sup>4</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Pm: [Xe] 4f <sup>5</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Sm: [Xe] 4f <sup>6</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Eu: [Xe] 4f <sup>7</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Gd: [Xe] 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
Tb: [Xe] 4f <sup>9</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Dy: [Xe] 4f <sup>10</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Ho: [Xe] 4f <sup>11</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Er: [Xe] 4f <sup>12</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Tm: [Xe] 4f <sup>13</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Yb: [Xe] 4f <sup>14</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>	Lu: [Xe] 4f <sup>14</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>

# Àtoms polieletrònics. *Sisè període*

## *c) Subnivell 5d: 3a sèrie de transició (Z=72-80)*

Hf: [Xe] $4f^{14} 5d^2 6s^2$	Ta: [Xe] $4f^{14} 5d^3 6s^2$	W: [Xe] $4f^{14} 5d^4 6s^2$	Re: [Xe] $4f^{14} 5d^5 6s^2$
---------------------------------	---------------------------------	--------------------------------	---------------------------------

Os: [Xe] $4f^{14} 5d^6 6s^2$	Ir: [Xe] $4f^{14} 5d^7 6s^2$	Pt: [Xe] $4f^{14} 5d^9 6s^1$	<b>Au: [Xe]</b> $4f^{14} 5d^{10} 6s^1$	Hg: [Xe] $4f^{14} 5d^{10} 6s^2$
---------------------------------	---------------------------------	---------------------------------	---	------------------------------------

## *d) Subnivell 6p: Z=81-86 (Tl-Rn)*

Tl: [Xe] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^1$	Pb: [Xe ] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^2$	Bi: [Xe ] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^3$	Po: [ Xe] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^4$	At: [ Xe] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^5$	Rn: [Xe ] $4f^{14}$ $5d^{10} 6s^2 6p^6$
---	--	--	--	--	--

# Àtoms polieletrònics. Setè període

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
7	Fr	Ra	Ac(*)	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Da	Rg	Uub	¿?	Uuq	¿?	Uuh	¿?	Uuo



Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
----	----	---	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

a)  $Z=87$  i  $88$  (orbitals  $7s$ )

Fr:  $[Rn] 7s^1$

Ra:  $[Rn] 7s^2$

b) Quin és més estable,  $6d$  o  $5f$ ?

(\*) Ac:  $[Rn] 6d^1 7s^2$  “vs”  $[Xe] 5f^1 6d^0 7s^2$

Després de l'Ac, s'omplin els orbitals  $5f$ .

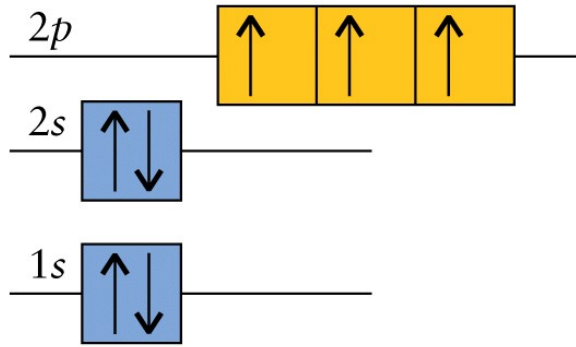
Subnivell  $5f$ : actínids ( $Z=90-103$ )



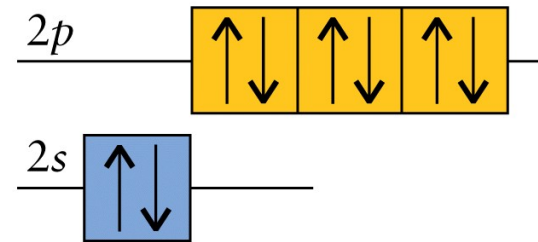
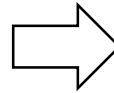
Th: $[Rn] 5f^0$ $6d^2 7s^2$	Pa: $[Rn] 5f^2$ $6d^1 7s^2$	U: $[Rn] 5f^3$ $6d^1 7s^2$	Np: $[Rn] 5f^4$ $6d^1 7s^2$	Pu: $[Rn] 5f^6$ $6d^0 7s^2$	Am: $[Rn] 5f^7$ $6d^0 7s^2$	Cm: $[Rn] 5f^7$ $6d^1 7s^2$
Bk: $[Rn] 5f^9$ $6d^0 7s^2$	Cf: $[Rn] 5f^{10} 6d^0 7s^2$	Es: $[Rn] 5f^{11}$ $6d^0 7s^2$	Fm: $[Rn] 5f^{12} 6d^0 7s^2$	Md: $[Rn] 5f^{13} 6d^0 7s^2$	No: $[Rn] 5f^{14} 6d^0 7s^2$	Lr: $[Rn] 5f^{14} 6d^1 7s^2$

# Àtoms polieletrònics. Anions i cations

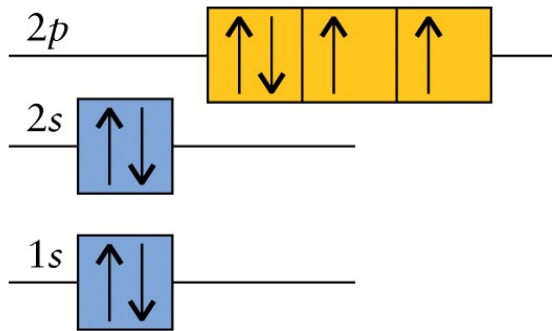
Anions  $\Rightarrow$  Aufbau



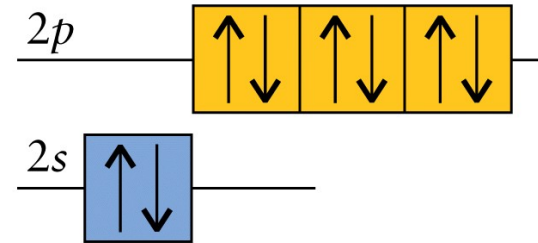
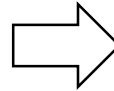
7 N  $1s^2 2s^2 2p^3$



$N^{3-}$  [He] $2s^2 2p^6$



8 O  $1s^2 2s^2 2p^4$ , [He] $2s^2 2p^4$



$O^{2-}$  [He] $2s^2 2p^6$

# Àtoms polieletrònics. **Cations**

---

## **Regles per a la configuració electrònica dels cations.**

Eliminar els electrons de l'*orbital de major  $n$* ; si n'hi ha diversos, es comença pel de *valor major de  $l$* .

---

Una vegada buidats els orbitals de major valor de  $n$ , s'elimina els electrons dels nivells  $d$  parcialment plens; i si en fera falta més, es continua amb els  $f$  parcialment plens.

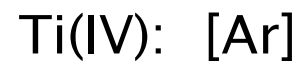
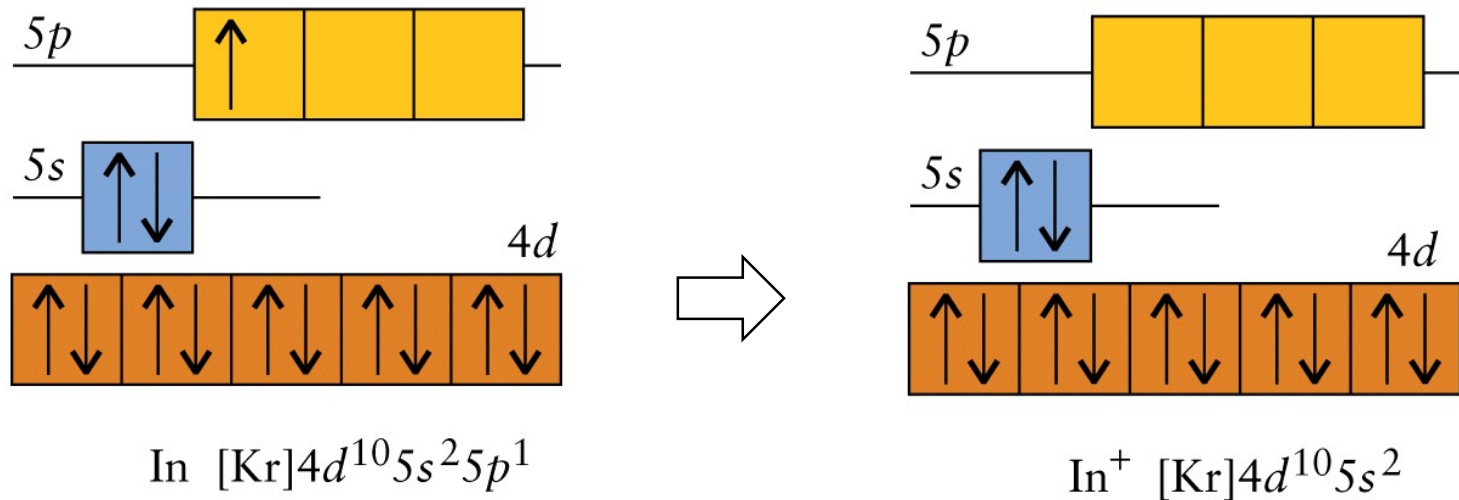
---

---

Si encara fora necessari eliminar **més electrons**,  
torneu a la regla 1.



# Àtoms polieletrònics. **Cations**



# Àtoms polieletrònics. **Cations**

## ☐ Ions d'elements representatius:



## ☐ Ions de transició (blocs *d* i *f*):

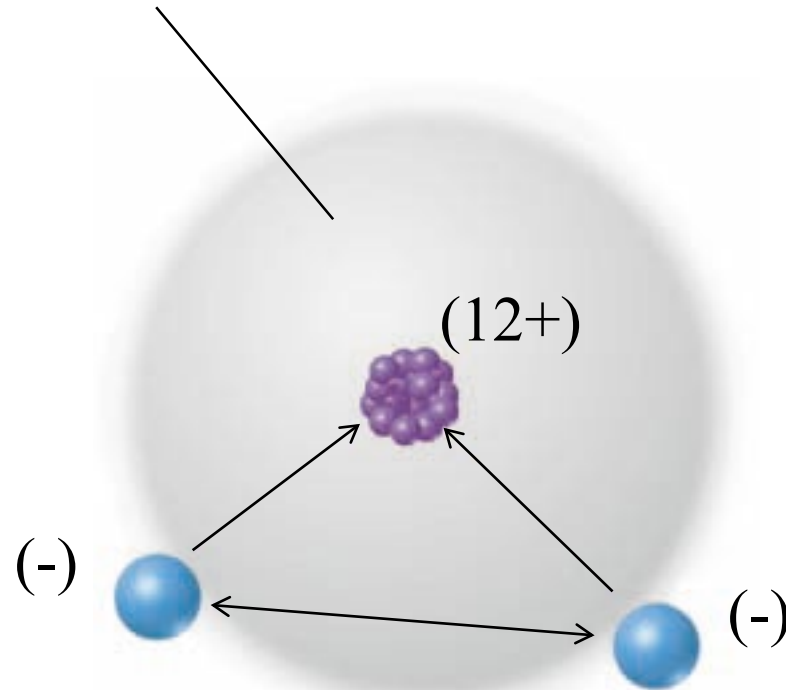
Els electrons  $ns$  es perden abans que els  $(n-1)d$ , i aquests, abans que els  $(n-2)f$ .



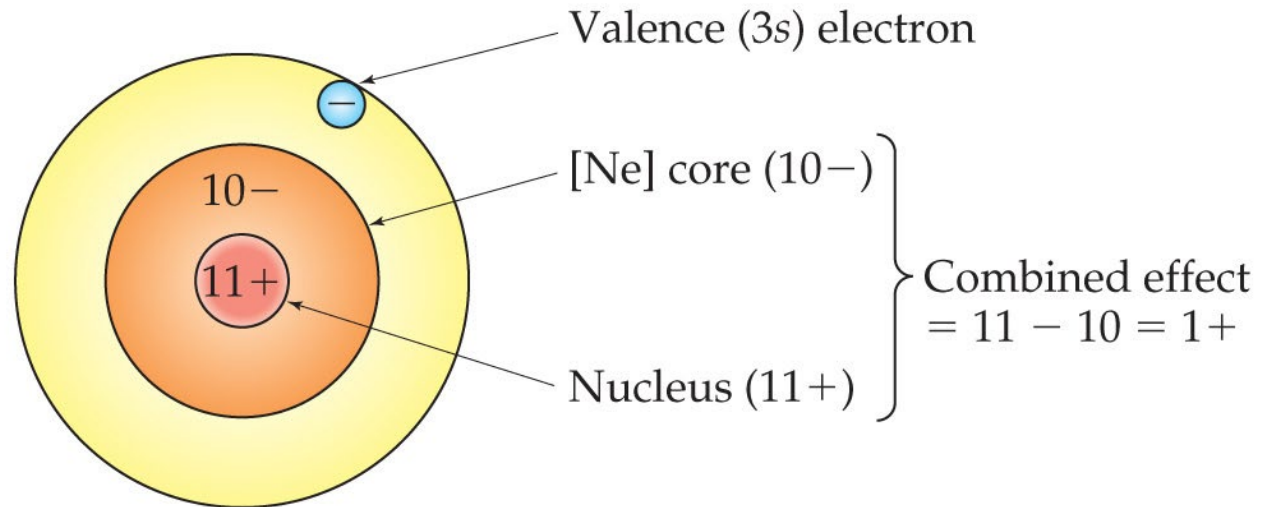
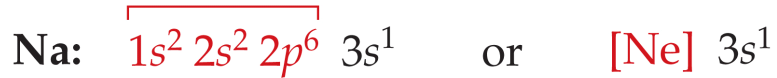
66	Dy: $[\text{Xe}] 4f^{10} 6s^2$	$\text{Dy}^{3+}: [\text{Xe}] 4f^9 6s^0$
71	Lu: $[\text{Xe}] \mathbf{4f^{14}} 5d^1 6s^2$	$\text{Lu}^{3+}: [\text{Xe}] \mathbf{4f^{14}} 5d^0 6s^0$
91	Pa: $[\text{Rn}] \mathbf{5f^2} 6d^1 7s^2$	$\text{Pa}^{3+}: [\text{Rn}] \mathbf{5f^2} 6d^0 7s^0$
94	Pu: $[\text{Rn}] \mathbf{5f^6} 6d^1 7s^2$	$\text{Pu}^{3+}: [\text{Rn}] \mathbf{5f^6} 6d^0 7s^0$
103	Lr: $[\text{Rn}] \mathbf{5f^{14}} 6d^1 7s^2$	$\text{Lr}^{3+}: [\text{Rn}] \mathbf{5f^{14}} 6d^0 7s^0$

# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva

Screen of electron charge  
from 10 core electrons



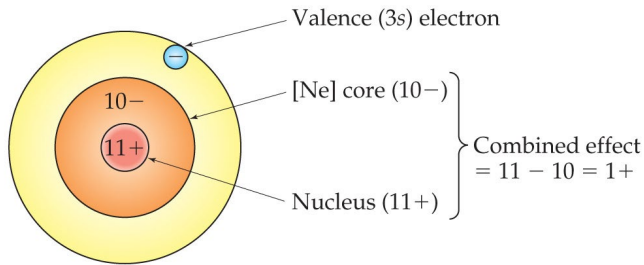
# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva



(a)

**L'electró més extern experimenta una atracció nuclear menor?**

# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva

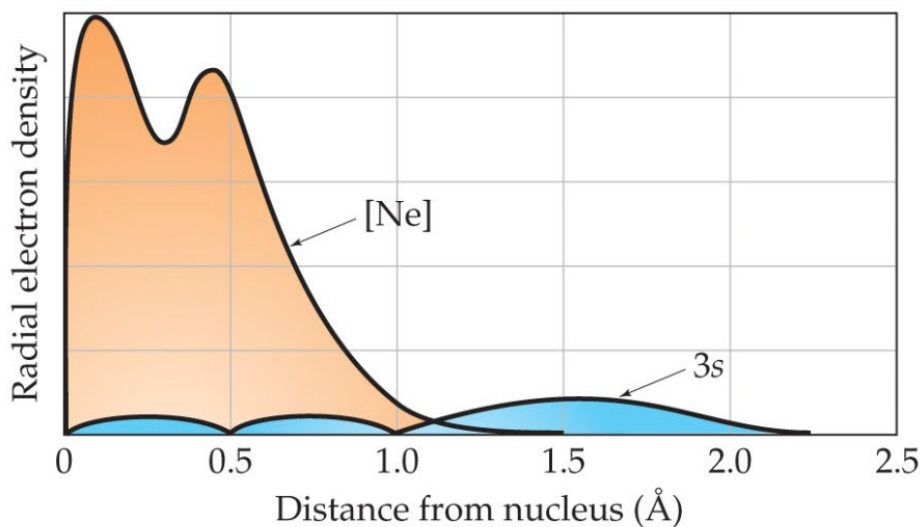
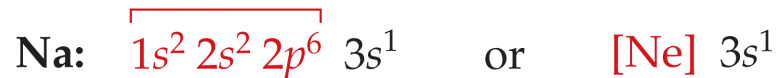


(a)

Copyright © 2011 Pearson Canada Inc.

L'electró més extern  
experimenta una atracció  
nuclear **menor, major**  
**o exactament igual a +1?**

# Àtoms polieletrònics. Càrrega nuclear efectiva



(b)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

A causa del **poder penetrant** de l'orbital 3s, el nucli del Ne no és completament efectiu i **apantalla** l'electró 3s, cosa que fa que la **càrrega nuclear efectiva** que experimenta l'electró 3s siga un **poc major de +1**.

# Àtoms polieletrònics. Regles de Slater

Regles de Slater per a la determinació de  $S$ :

$$Z^* = Z - S$$

$S = \text{constant de pantalla.}$

# Àtoms polieletrònics. Regles de Slater

1) Escriu la configuració electrònica completa, agrupa els orbitals  $ns$  i  $np$  i disposa-ho separatament de la resta:

[1s] [2s 2p] [3s 3p] [3d] [4s 4p] [4d] [4f] [5s 5p] [5d] [5f]...

2) Tots els electrons d'orbitals amb  $n$  major (els situats a la dreta) no contribueixen a l'apantallament.

3) Per a electrons  $s$  o  $p$ :

- Els electrons en el mateix [ $ns$   $np$ ] apantallen 0,35 unitats de càrrega nuclear.
- Els electrons en els nivells  $n-1$  apantallen 0,85 unitats.
- Els electrons en nivells  $n-2$  o inferiors apantallen completament (1,0 unitats).

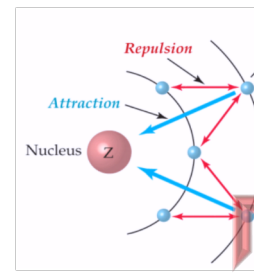
4) Per a electrons  $d$  o  $f$ :

- Els electrons en el mateix [ $nd$ ] [ $nf$ ] apantallen 0,35 unitats de càrrega nuclear.
- Els electrons en els grups situats a l'esquerra apantallen completament (1,0 unitats).

5) Per a obtenir la càrrega nuclear efectiva experimentada per l'electró: restarem a la càrrega nuclear  $Z$ , la suma de les constants d'apantallament obtingudes del resultat d'aplicar les regles 2-4.

**Nota:** encara que aquestes regles serveixen fins al nivell  $3d$ , podem fer-ne una extensió cap a orbitals més externs.





## TEMA 3 ÀTOMS POLIELECTRÒNICS

### La Taula Periòdica. Propietats



- Grandària atòmica. Energia d'ionització
- Afinitat electrònica. Caràcter metàl·lic i no metàl·lic



# The Periodic table

Alkali Metals

Noble Gases

Alkaline Earths

Halogens

Main Group

Transition Metals

1 1A 1 H 1.00794	2 2A 4 Be 9.01218																	18 8A 2 He 4.00260
3 Li 6.941	12 Mg 24.3050																	10 Ne 20.1797
11 Na 22.9898	20 Ca 40.078	3 3B 21 Sc 44.9559	4 4B 22 Ti 47.88	5 5B 23 V 50.9415	6 6B 24 Cr 51.9961	7 7B 25 Mn 54.9381	8 8B 26 Fe 55.847	9 8B 27 Co 58.9332	10 8B 28 Ni 58.693	11 1B 29 Cu 63.546	12 2B 30 Zn 65.39	13 3A 13 Al 26.9815	14 4A 14 Si 28.0855	15 5A 15 P 30.9738	16 6A 16 S 32.06	17 7A 17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948	
19 K 39.0983	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.4678	56 Ba 137.327	*La 57 *La 138.906	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.60	53 I 126.904	54 Xe 131.29	
55 Cs 132.905	88 Ra 226.025	†Ac 89 †Ac 227.028	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (272)	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.980	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)	
87 Fr (223)																	87 Xe 118	








*Lanthanide series	58 Ce 140.115	59 Pr 140.908	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.965	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.26	69 Tm 168.934	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
†Actinide series	90 Th 232.038	91 Pa 231.036	92 U 238.029	93 Np 237.048	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (260)

Main Group

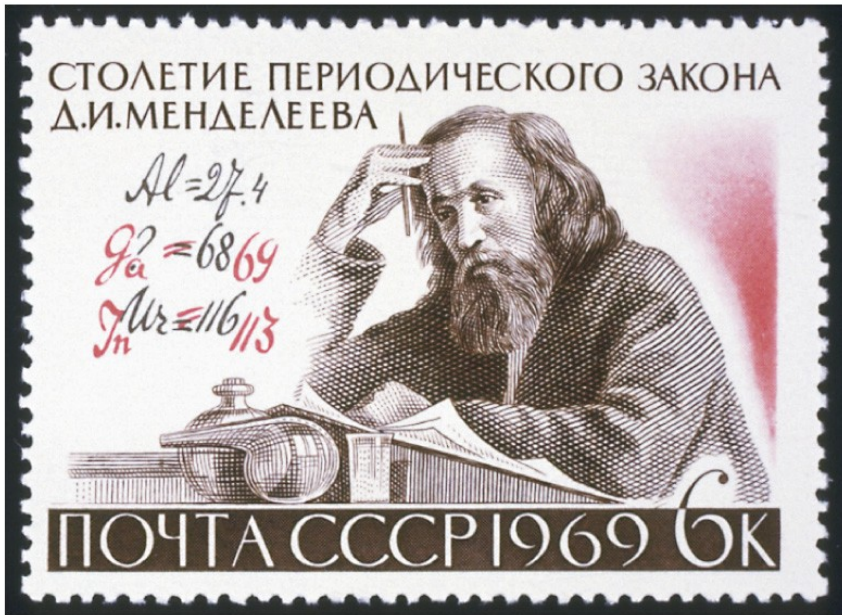
Lanthanides and Actinides

# La taula periòdica

H																He															
Li		Be												B	C	N	O	F	Ne												
Na		Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar												
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe														
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn														
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg																					
																La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
																Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

	<u>Ancient Times</u>		1735–1843		1894–1918		
	Middle Ages–1700		1843–1886		1923–1961		1965–

# La taula periòdica



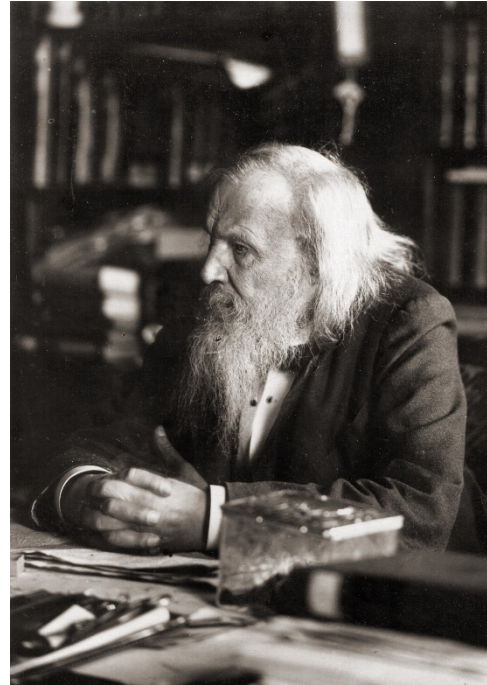
Quan els elements estan disposats per **ordre creixent de massa atòmica**, certs **conjunts de propietats** es repeteixen **periòdicament**.

# La Taula Periòdica



**Julius Lothar Meyer**

<http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Lmeyer.jpg>. Domini públic.



**Dmitri Mendeléeiev en 1897**

*Wikipedia*. Domini públic.

“Es pot apreciar el geni de Mendeléiev quan recordem que **només es coneixien 62 elements** quan va formular la taula periòdica. Per a reunir elements similars a la taula, **va ignorar les masses atòmiques d’uns quants elements**, suggerint que eren incorrectes, i es va veure obligat a deixar alguns buits, que va predir que estarien ocupats per alguns elements que aleshores no s’havien descobert. **A més, va atrevir-se a predir les propietats físiques i químiques d’aquests.** No va ser fins que es va descobrir que alguns d’aquests elements tenien propietats que concordaven bé amb les prediccions de Mendeléiev que molts químics van superar el seu escepticisme inicial sobre el valor de la taula periòdica. A més, la posterior determinació d’algunes masses atòmiques, **el descobriment d’isòtops** i la constatació que **l’ordre dels elements es basa en nombres atòmics** més que en masses atòmiques, van proporcionar una justificació per als casos en què Mendeléiev **va ignorar l’ordre de les masses atòmiques**. S’han suggerit moltes modificacions de la taula original, però la Taula Periòdica que s’usa àmpliament avui dia no és massa diferent de la que va proposar inicialment Mendeléiev; s’hi han incorporat molts elements addicionals, però sense canviar-ne l’estructura general. La Taula Periòdica no només proporcionava als químics una classificació molt útil dels elements, sinó que va tenir un paper vital en l’elucidació de l’estructura d’àtoms i la comprensió de la valència. **Avui continua sent una eina de treball més útil per al químic.**”

Extracte del llibre *Chemical Bonding and Molecular Geometry. From Lewis to Electron densities*. R. J. Gillespie i P. L. A. Popelier.

# La Taula Periòdica

Reihen	Gruppe I. — R <sup>2</sup> O	Gruppe II. — RO	Gruppe III. — R <sup>2</sup> O <sup>3</sup>	Gruppe IV. RH <sup>4</sup> RO <sup>2</sup>	Gruppe V. RH <sup>3</sup> R <sup>2</sup> O <sup>5</sup>	Gruppe VI. RH <sup>2</sup> RO <sup>3</sup>	Gruppe VII. RH R <sup>2</sup> O <sup>7</sup>	Gruppe VIII. — RO <sup>4</sup>
1	H = 1							
2	Li = 7	Be = 9,4	B = 11	C = 12	N = 14	O = 16	F = 19	
3	Na = 23	Mg = 24	Al = 27,3	Si = 28	P = 31	S = 32	Cl = 35,5	
4	K = 39	Ca = 40	— = 44	Ti = 48	V = 51	Cr = 52	Mn = 55	Fe = 56, Co = 59, Ni = 59, Cu = 63.
5	(Cu = 63)	Zn = 65	— = 68	— = 72	As = 75	Se = 78	Br = 80	
6	Rb = 85	Sr = 87	?Yt = 88	Zr = 90	Nb = 94	Mo = 96	— = 100	Ru = 104, Rh = 104, Pd = 106, Ag = 108
7	(Ag = 108)	Cd = 112	In = 113	Sn = 118	Sb = 122	Te = 125	J = 127	
8	Cs = 133	Ba = 137	?Di = 138	?Ce = 140	—	—	—	— — — —
9	(—)	—	—	—	—	—	—	
10	—	—	?Er = 178	?La = 180	Ta = 182	W = 184	—	Os = 195, Ir = 197, Pt = 198, Au = 199
11	(Au = 199)	Hg = 200	Tl = 204	Pb = 207	Bi = 208	—	—	
12	—	—	—	Th = 231	—	U = 240	—	

# La Taula Periòdica. Mendeléeiev, 1869

H = 1										
Li = 7	Be = 9.4					B = 11	C = 12	N = 14	O = 16	F = 19
Na = 23	Mg = 24					Al = 27.3	Si = 28	P = 31	S = 32	Cl = 35.5
K = 39	Ca = 40	?, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn				? = 68	? = 72	As = 75	Se = 78	Br = 80

There is an unknown element, which turns out to be gallium (Ga), beneath aluminum (Al)...

...and another unknown element, which turns out to be germanium (Ge), beneath silicon (Si).

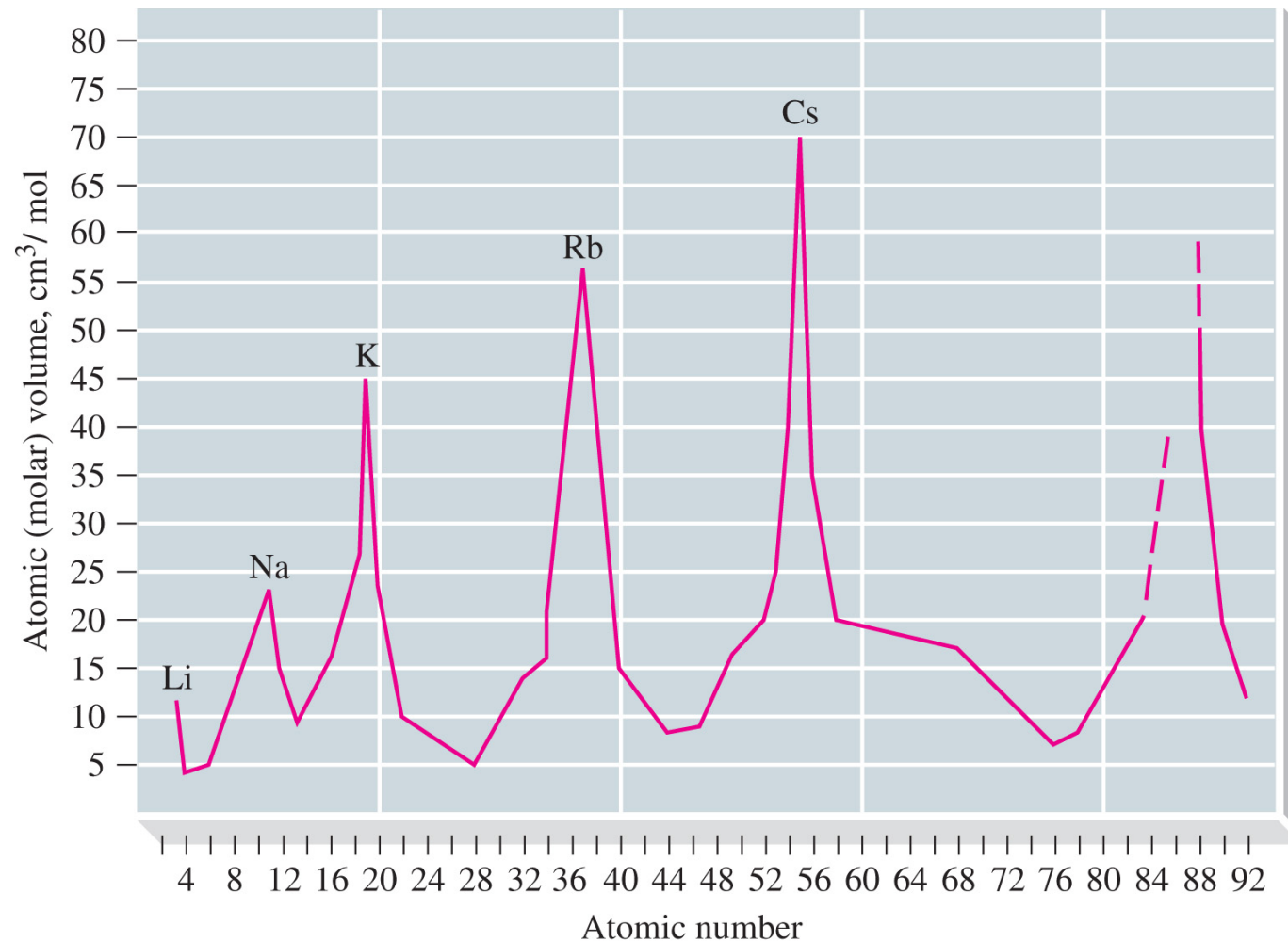


# La Taula Periòdica. Mendeléeiev 1869

**TABLE 5.1** A Comparison of Predicted and Observed Properties for Gallium (*eka*-Aluminum) and Germanium (*eka*-Silicon)

Element	Property	Mendeleev's Prediction	Observed Property
Gallium ( <i>eka</i> -Aluminum)	Atomic mass	68 amu	69.72 amu
	Density	5.9 g/cm <sup>3</sup>	5.91 g/cm <sup>3</sup>
	Melting point	Low	29.8 °C
	Formula of oxide	X <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
	Formula of chloride	XCl <sub>3</sub>	GaCl <sub>3</sub>
Germanium ( <i>eka</i> -Silicon)	Atomic mass	72 amu	72.61 amu
	Density	5.5 g/cm <sup>3</sup>	5.35 g/cm <sup>3</sup>
	Color	Dark gray	Light gray
	Formula of oxide	XO <sub>2</sub>	GeO <sub>2</sub>
	Formula of chloride	XCl <sub>4</sub>	GeCl <sub>4</sub>

# La Taula Periòdica

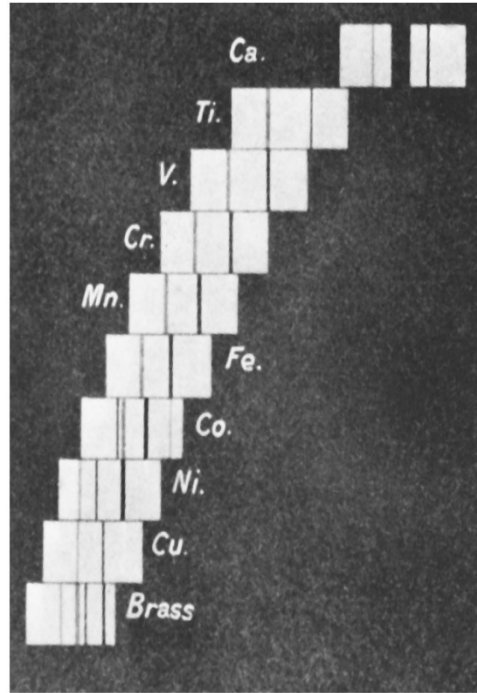
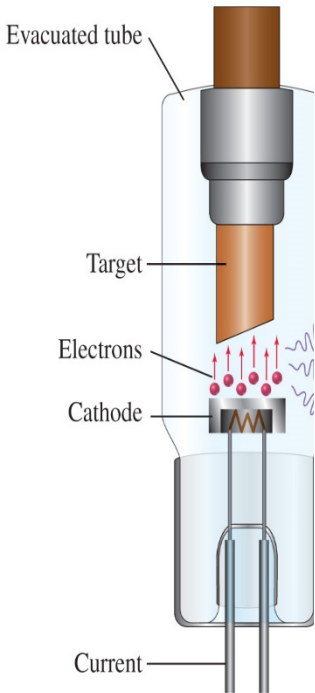


# La Taula Periòdica. Moseley, 1913



La *Llei Periòdica de Moseley* estableix que **les propietats físiques i químiques** dels elements són funcions periòdiques dels seus **nombres atòmics (Z)**.

# La Taula Periòdica. Moseley 1913



L'emissió de raigs X s'explica en termes de transicions d'electrons que cauen en **òrbites properes al nucli** atòmic. Les **frequències** estan relacionades amb les **càrregues nuclears** per:

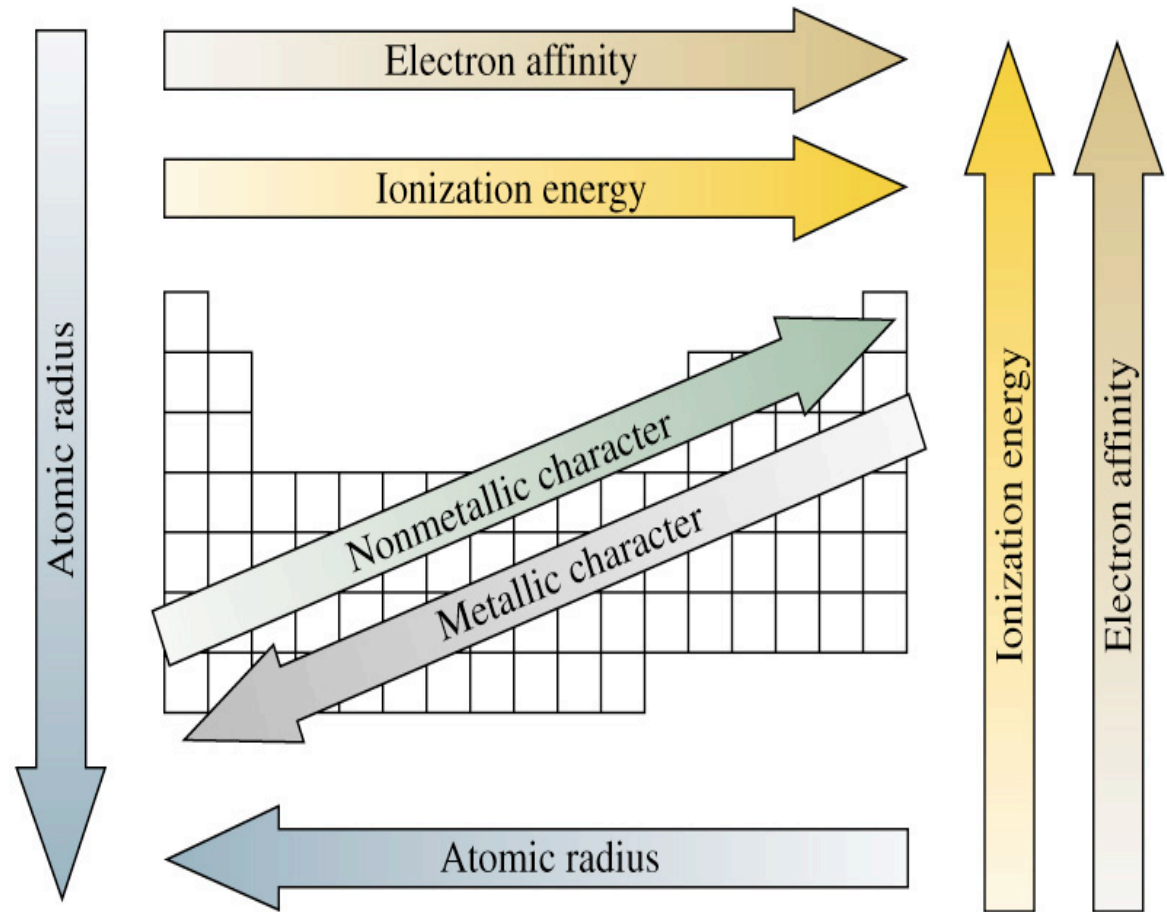
$$\nu = A (Z - b)^2$$

Va permetre **predir nous elements (43, 61, 75)** més tard descoberts.

# La Taula Periòdica. Propietats periòdiques

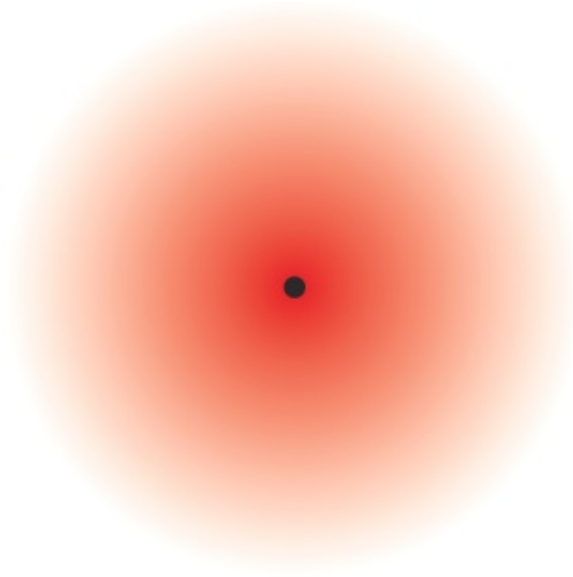
- Rèdi atòmic.
- Energia d'ionització.
- Afinitat electrònica.
- Caràcter metàl·lic.
- Electronegativitat.

(Tema 4: enllaç covalent.)



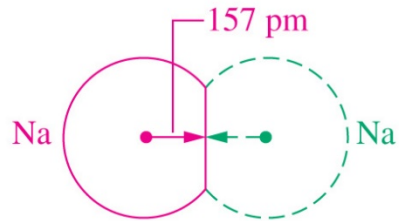
# La Taula Periòdica. Radi atòmic. Grandària d'àtoms i ions

Diferents maneres  
d'assignar **la**  
**grandària** a un  
àtom en funció de si  
està **aïllat o**  
**formant enllaços**  
amb altres àtoms.



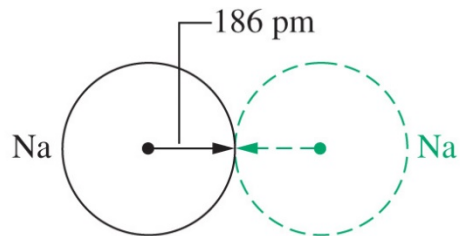
# La Taula Periòdica. Radi atòmic. Grandària d'àtoms i ions

Covalent radius:



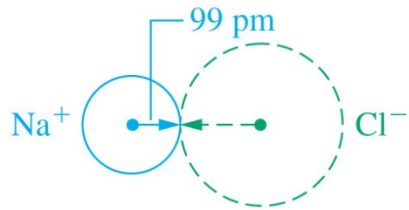
- Radi covalent
  - Radi de Van der Waals

Metallic radius:



- Radi metàl·lic

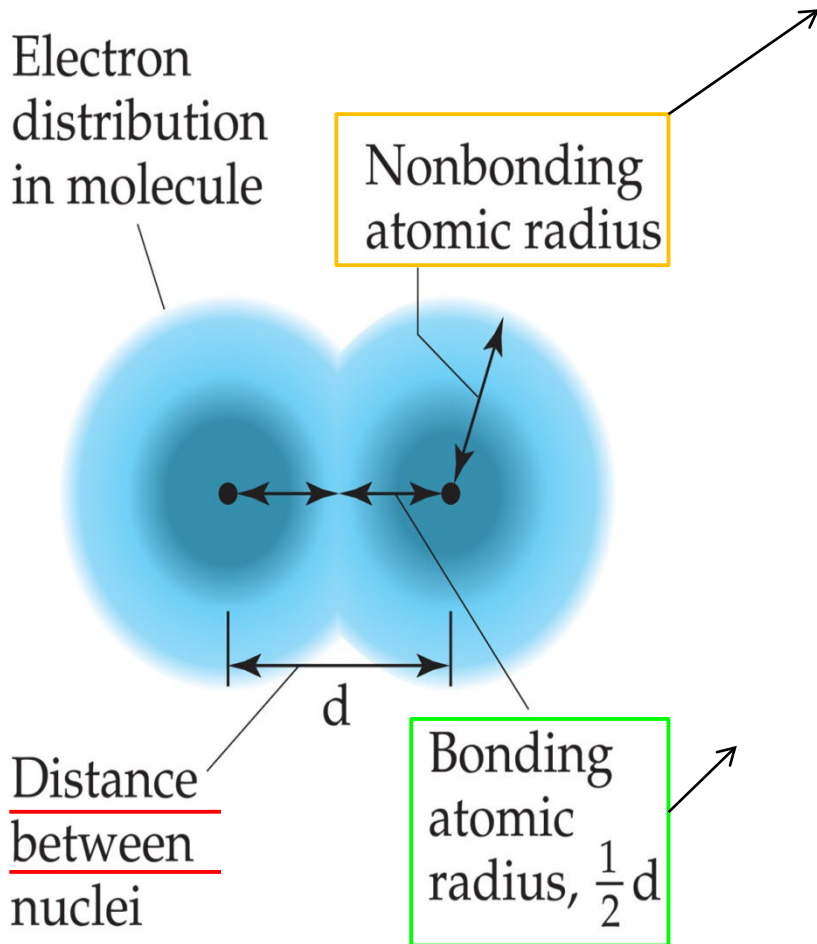
Ionic radius:



- Radi iònic

# La Taula Periòdica. **Ràdio atòmic. Grandària d'àtoms i ions**

## **Distància internuclear**



## **Radi de *Van der Waals***

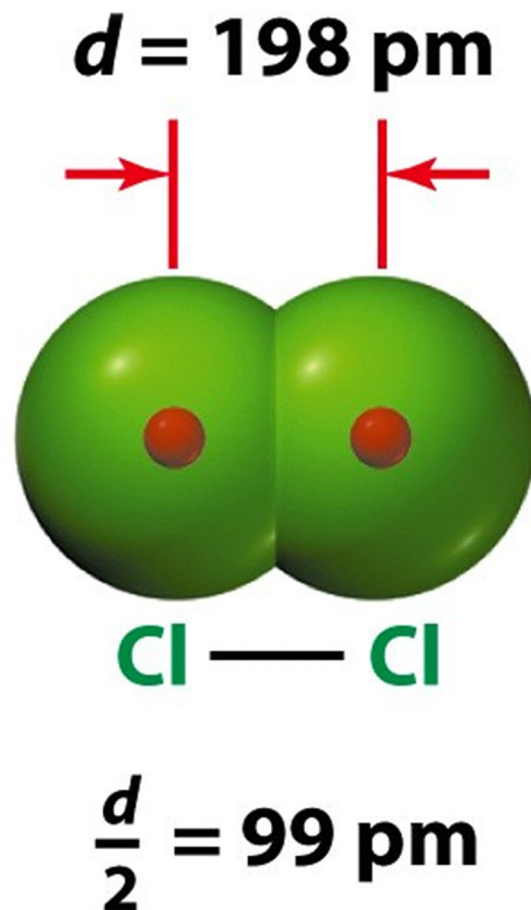
Ràdio efectiu d'un àtom quan **no està involucrat** en la unió amb un altre àtom. És la mitat de la distància entre dos àtoms d'un element sense estar enllaçats més que per forces de Van der Waals.

## **Radi *covalent*.**

S'obté a partir de mesures de **distàncies internuclears** dels compostos químics.



# La Taula Periòdica. Radiatòmic. Grandària d'àtoms i ions



*Radi covalent.*

# Radi atòmic

Radius increases ↓      Radius decreases →      Radius increases ↓

H 1																	He 2
Li 3	Be 4											B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10
Na 11	Mg 12											Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18
K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54
Cs 55	Ba 56	Lu 71	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86

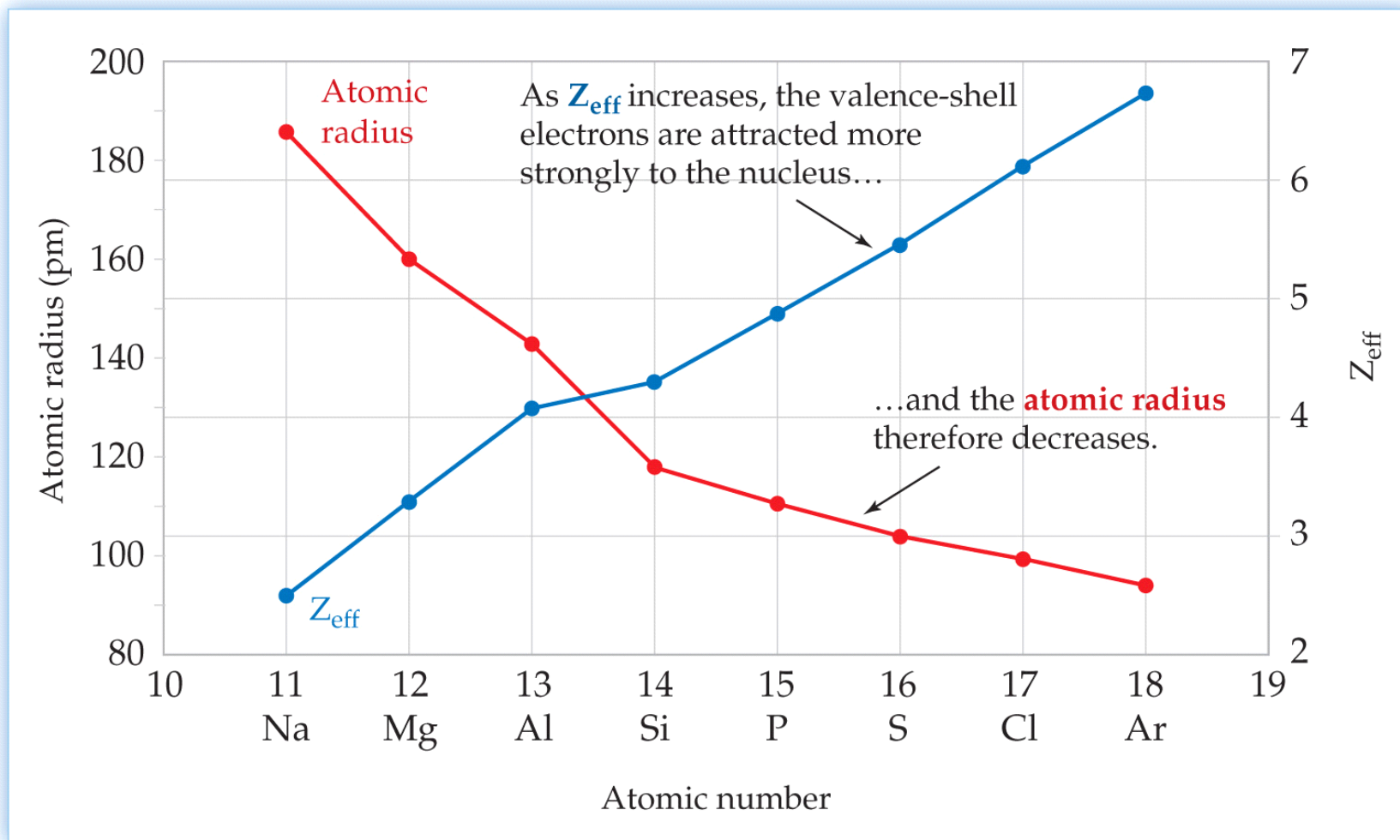
# La Taula Periòdica. Radi atòmic. Grandària d'àtoms i ions

Els electrons de valència es troben en orbitals de **nombre quàntic principal creixent**. Per tant, estan cada vegada **millor apantallats**, perceben menys la càrrega nuclear i, per això, **la grandària de l'àtom augmenta**.

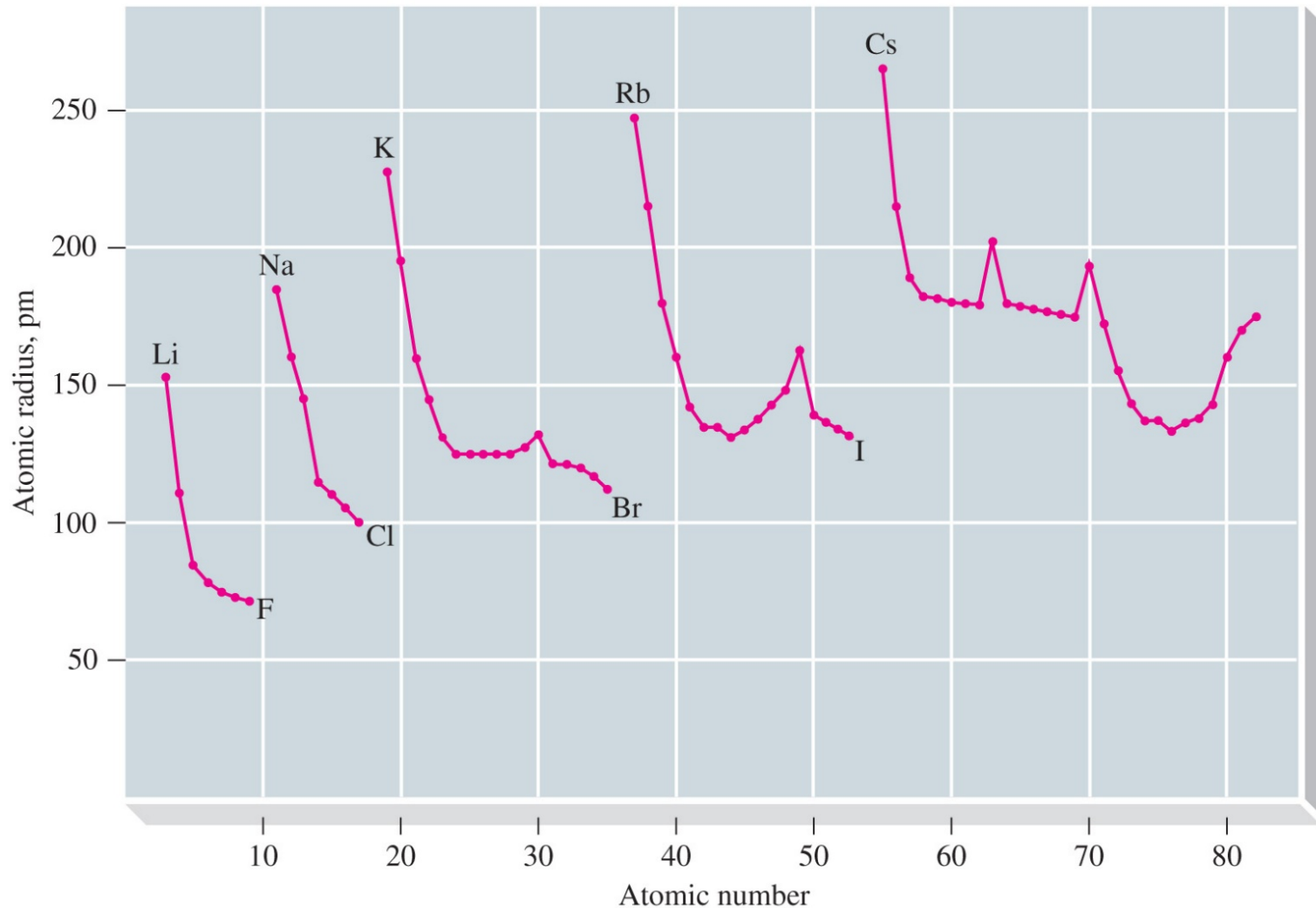
*L'augment de la càrrega nuclear efectiva atrau* de manera constant **els electrons** de valència cap al nucli, cosa que fa que **disminuïska el radi atòmic**.

# La Taula Periòdica. Rèdio atòmic. Grandària d'àtoms i ions

## Període 3



# La taula periòdica. **Ràdio atòmic. Grandària d'àtoms i ions**



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Nota:** Els valors representats corresponen al radi metàl·lic i covalent.

No estan inclosos els gasos nobles per la dificultat de mesurar el radi covalent d'aquestes elements (només es coneixen per al Kr i Xe). Les excepcions que poden observar-se estan fora de l'abast de l'assignatura.

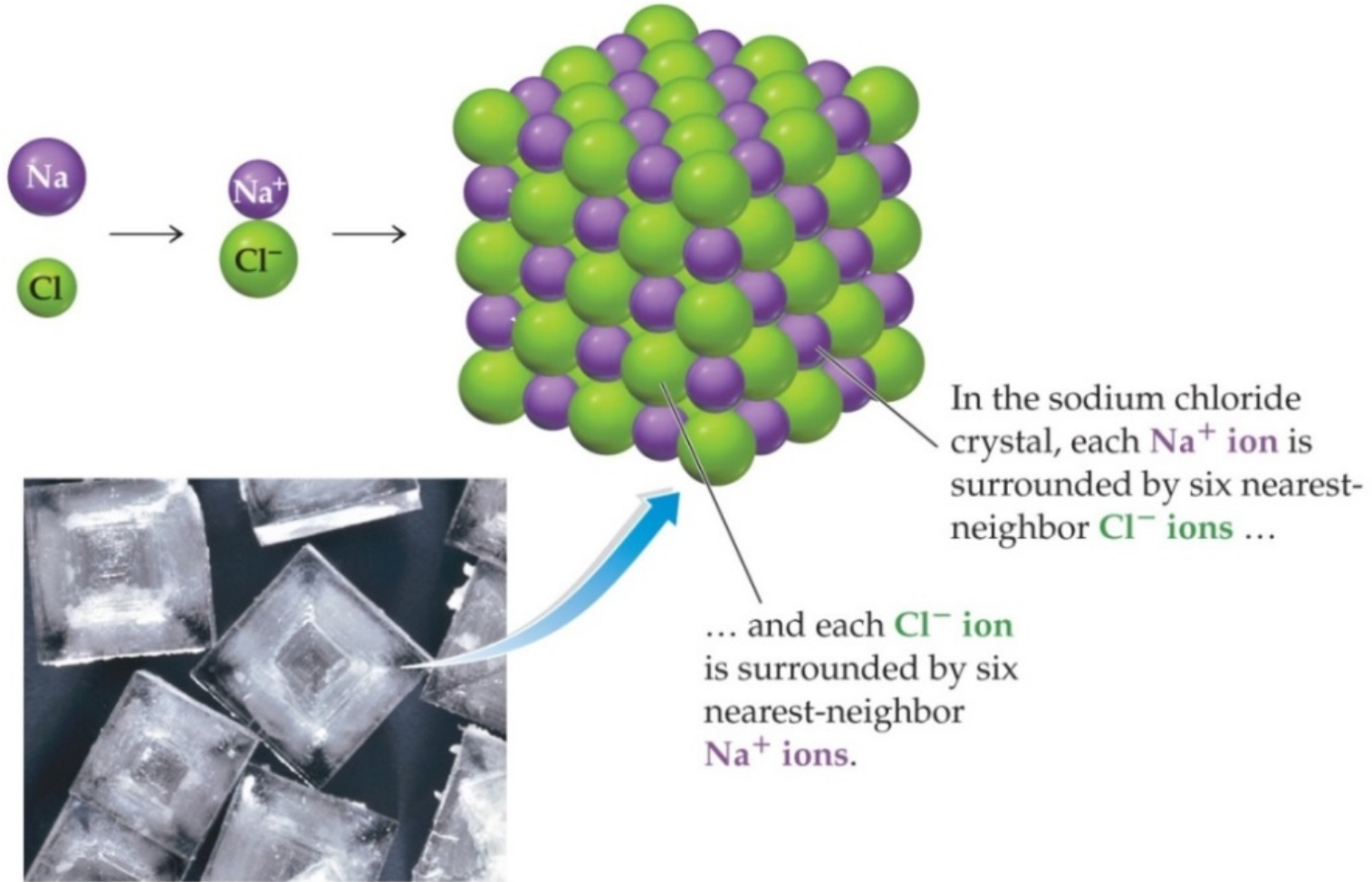
# La Taula Periòdica. El grandària té conseqüències



## No més liti per favor...

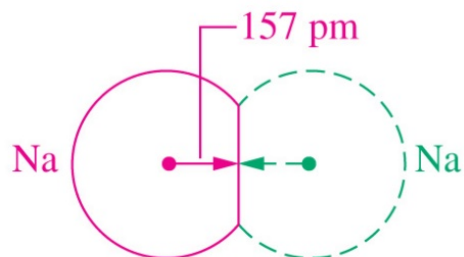
La famosa beguda Seven-Up contenia al principi **citrat de liti**. S'assegurava una abundància d'energia, d'entusiasme, una pell més clara, un cabell sa i els ulls brillants! El liti es va llevar de la beguda al principi de 1950 quan se'n va descobrir l'acció **antipsicòtica**.

# La taula periòdica. **Ràdio iònic**

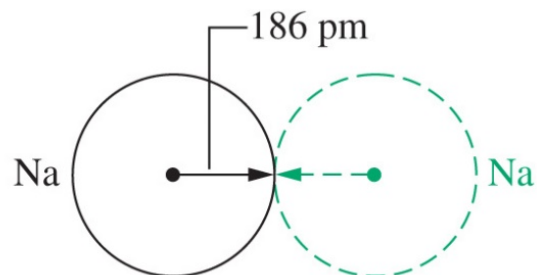


# La Taula Periòdica. Radi iònic

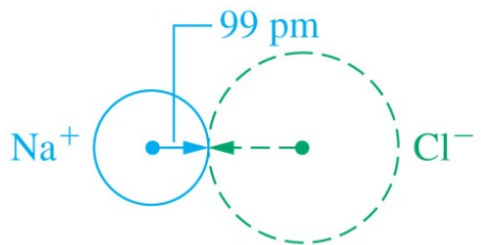
Covalent radius:



Metallic radius:

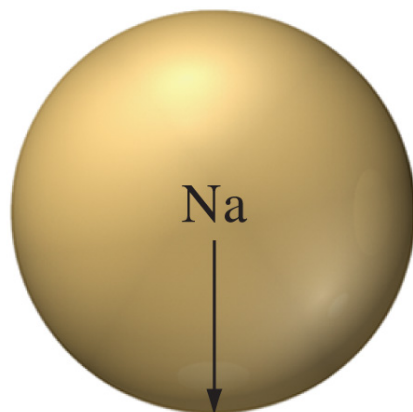


Ionic radius:

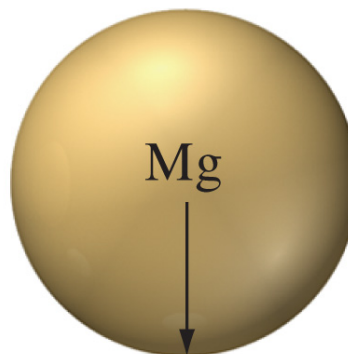




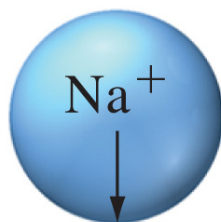
# La Taula Periòdica. Radi iònic. Cations



186 pm



160 pm

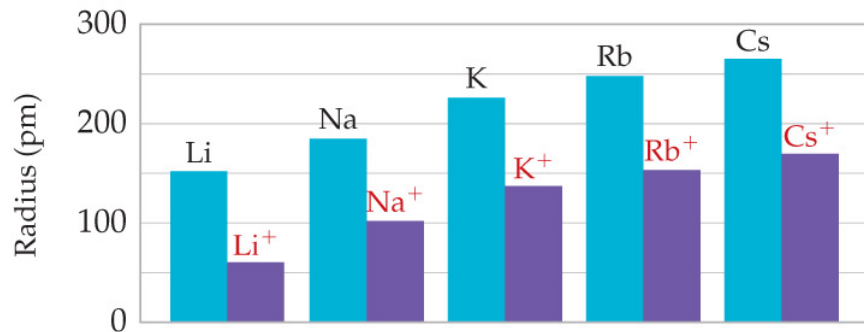


99 pm

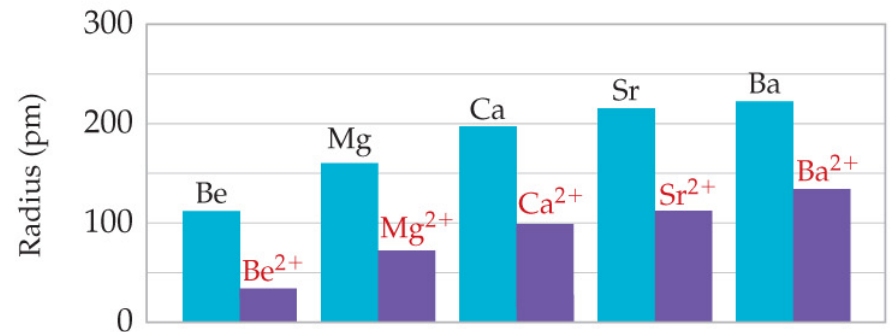


72 pm

# La Taula Periòdica. Radi iònic. Cations



(a)



(b)

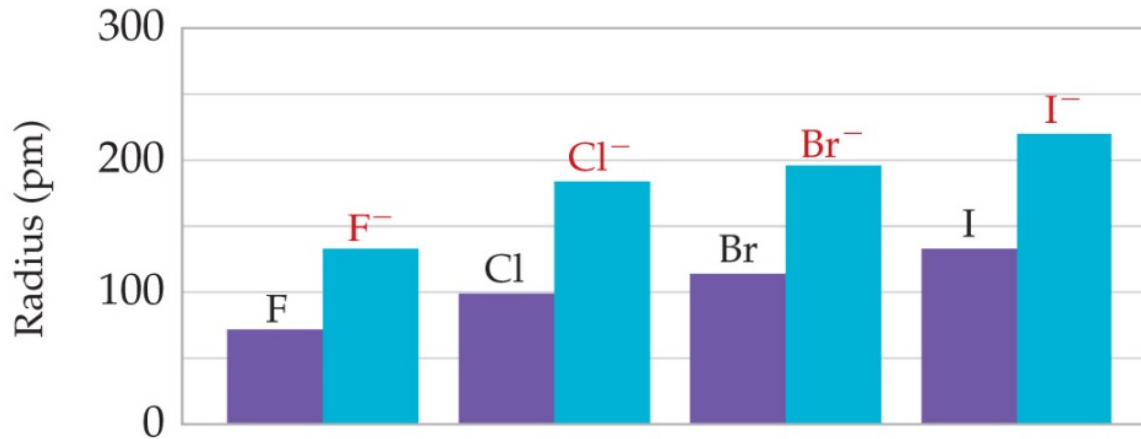
**Cations** are smaller than their neutral atoms, both because the principal quantum number of the valence-shell electrons is smaller for the cations and because  $Z_{\text{eff}}$  is larger.

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

Els radis iònics de **cations isoelectrònics** són **menors** com **major** en siga la **càrrega positiva**.

Ex.  $\text{Mg}^{2+}$  és més xicotet que  $\text{Na}^+$ .

# La Taula Periòdica. Radi iònic. Anions



**Anions** are larger than their neutral atoms because of additional electron–electron repulsions and a decrease in  $Z_{\text{eff}}$ .

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

Els radis iònics d'**anions isoelectrònics** son **majors** com **més negativa** en siga la càrrega.

# La Taula Periòdica. Radi iònic. Anions

<p><b>Li</b> 152</p> <p><b>Li<sup>+</sup></b> 59</p>	<p><b>Be</b> 111</p> <p><b>Be<sup>2+</sup></b> 27</p>																<p><b>B</b> 88</p> <p><b>N<sup>3-</sup></b> 171</p>	<p><b>C</b> 77</p> <p><b>O<sup>2-</sup></b> 140</p>	<p><b>N</b> 75</p> <p><b>F<sup>-</sup></b> 133</p>	<p><b>O</b> 73</p>	<p><b>F</b> 71</p>					
<p><b>Na</b> 186</p> <p><b>Na<sup>+</sup></b> 99</p>	<p><b>Mg</b> 160</p> <p><b>Mg<sup>2+</sup></b> 72</p>																<p><b>Al</b> 143</p> <p><b>Al<sup>3+</sup></b> 53</p>	<p><b>Si</b> 117</p> <p><b>P<sup>3-</sup></b> 212</p>	<p><b>P</b> 110</p> <p><b>S<sup>2-</sup></b> 184</p>	<p><b>S</b> 104</p>	<p><b>Cl</b> 99</p> <p><b>Cl<sup>-</sup></b> 181</p>					
<p><b>K</b> 227</p> <p><b>K<sup>+</sup></b> 138</p>	<p><b>Ca</b> 197</p> <p><b>Ca<sup>2+</sup></b> 100</p>	<p><b>Sc</b> 161</p> <p><b>Sc<sup>3+</sup></b> 75</p>	<p><b>Ti</b> 145</p> <p><b>Ti<sup>2+</sup></b> 86</p>	<p><b>V</b> 132</p> <p><b>V<sup>2+</sup></b> 79</p> <p><b>V<sup>3+</sup></b> 64</p>	<p><b>Cr</b> 125</p> <p><b>Cr<sup>2+</sup></b> 82</p> <p><b>Cr<sup>3+</sup></b> 62</p>	<p><b>Mn</b> 124</p> <p><b>Mn<sup>2+</sup></b> 83</p>	<p><b>Fe</b> 124</p> <p><b>Fe<sup>2+</sup></b> 77</p> <p><b>Fe<sup>3+</sup></b> 65</p>	<p><b>Co</b> 125</p> <p><b>Co<sup>2+</sup></b> 75</p> <p><b>Co<sup>3+</sup></b> 61</p>	<p><b>Ni</b> 125</p> <p><b>Ni<sup>2+</sup></b> 70</p>	<p><b>Cu</b> 128</p> <p><b>Cu<sup>+</sup></b> 96</p> <p><b>Cu<sup>2+</sup></b> 73</p>	<p><b>Zn</b> 133</p> <p><b>Zn<sup>2+</sup></b> 75</p>	<p><b>Ga</b> 122</p> <p><b>Ga<sup>3+</sup></b> 62</p>	<p><b>Ge</b> 122</p>					<p><b>As</b> 121</p> <p><b>Se<sup>2-</sup></b> 198</p>	<p><b>Se</b> 117</p>	<p><b>Br</b> 114</p> <p><b>Br<sup>-</sup></b> 196</p>						
<p><b>Rb</b> 248</p> <p><b>Rb<sup>+</sup></b> 149</p>	<p><b>Sr</b> 215</p> <p><b>Sr<sup>2+</sup></b> 113</p>																			<p><b>Ag</b> 144</p> <p><b>Ag<sup>+</sup></b> 115</p>	<p><b>Cd</b> 149</p> <p><b>Cd<sup>2+</sup></b> 95</p>	<p><b>In</b> 163</p> <p><b>In<sup>3+</sup></b> 79</p>	<p><b>Sn</b> 141</p> <p><b>Sn<sup>2+</sup></b> 93</p>	<p><b>Sb</b> 140</p> <p><b>Sb<sup>3+</sup></b> 76</p>	<p><b>Te</b> 137</p> <p><b>Te<sup>2-</sup></b> 221</p>	<p><b>I</b> 133</p> <p><b>I<sup>-</sup></b> 220</p>

# La Taula Periòdica. Energia d'ionització

Energia mínima requerida per a **separar un electró** (el de més energia) **de l'estat fonamental** d'un àtom o ió aïllat **en estat gasós**.

$$I = R_H \frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2}$$



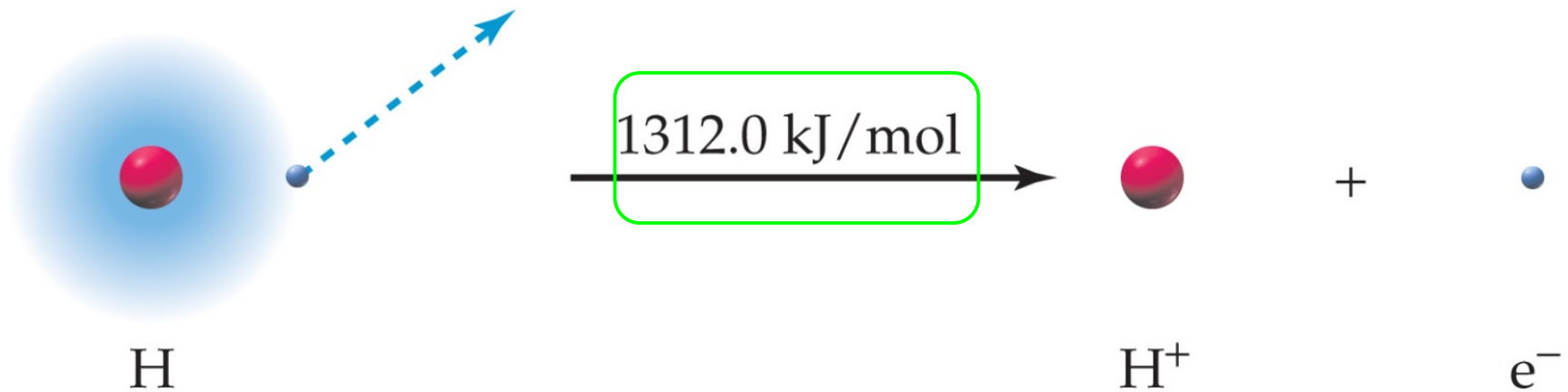
$$I_1 = 738 \text{ kJ}$$



$$I_2 = 1451 \text{ kJ}$$

# Propietats periòdiques. Energia d'ionització

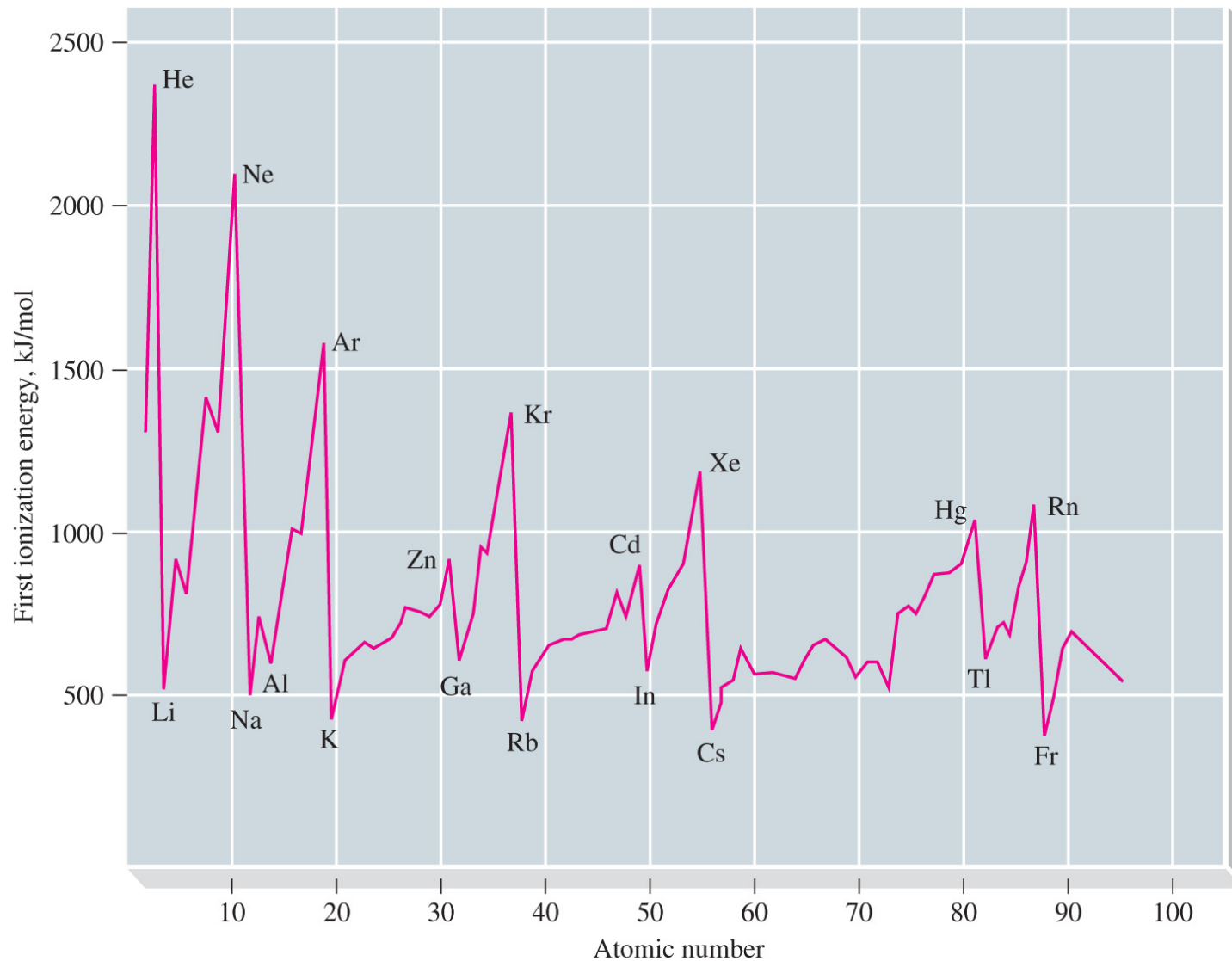
La ionització **és un procés endotèrmic** (l'àtom absorbeix energia).



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

A més energia d'ionització, **més dificultat** per a separar l'electró!

# Propietats periòdiques. Energia d'ionització



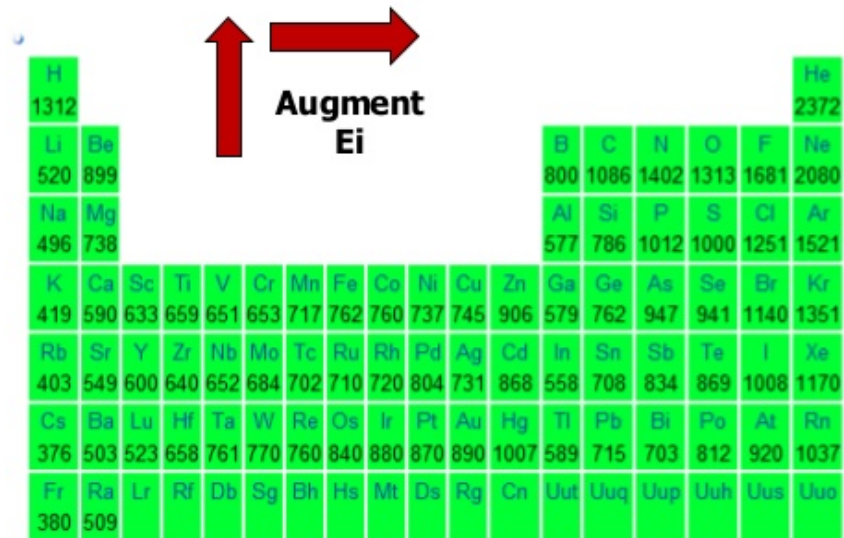
# Propietats periòdiques. Energia d'ionització

**En un període**  $I_1$  augmenta gradualment degut a l'augment progressiu de la càrrega nuclear efectiva.

**En un grup**  $I_1$  disminueix cap a baix perquè augmenta la grandària (augmenta  $n$ ) i augmenta l'apantallament.

Propietats periòdiques

## Energia d'ionització Variació periòdica



Augment  $E_i$

H																			He
1312																			2372
Li	Be																		Ne
520	899																		2080
Na	Mg																		Ar
496	738																		1521
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr	
419	590	633	659	651	653	717	762	760	737	745	906	579	762	947	941	1140		1351	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe	
403	549	600	640	652	684	702	710	720	804	731	868	558	708	834	869	1008		1170	
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn	
376	503	523	658	761	770	760	840	880	870	890	1007	589	715	703	812	920		1037	
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus		Uuo	
380	509																		

Valors de la primera energia d'ionització (kJ/mol)



**Table 4.2** *Successive ionization energies, in  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ , for the first 20 elements.*

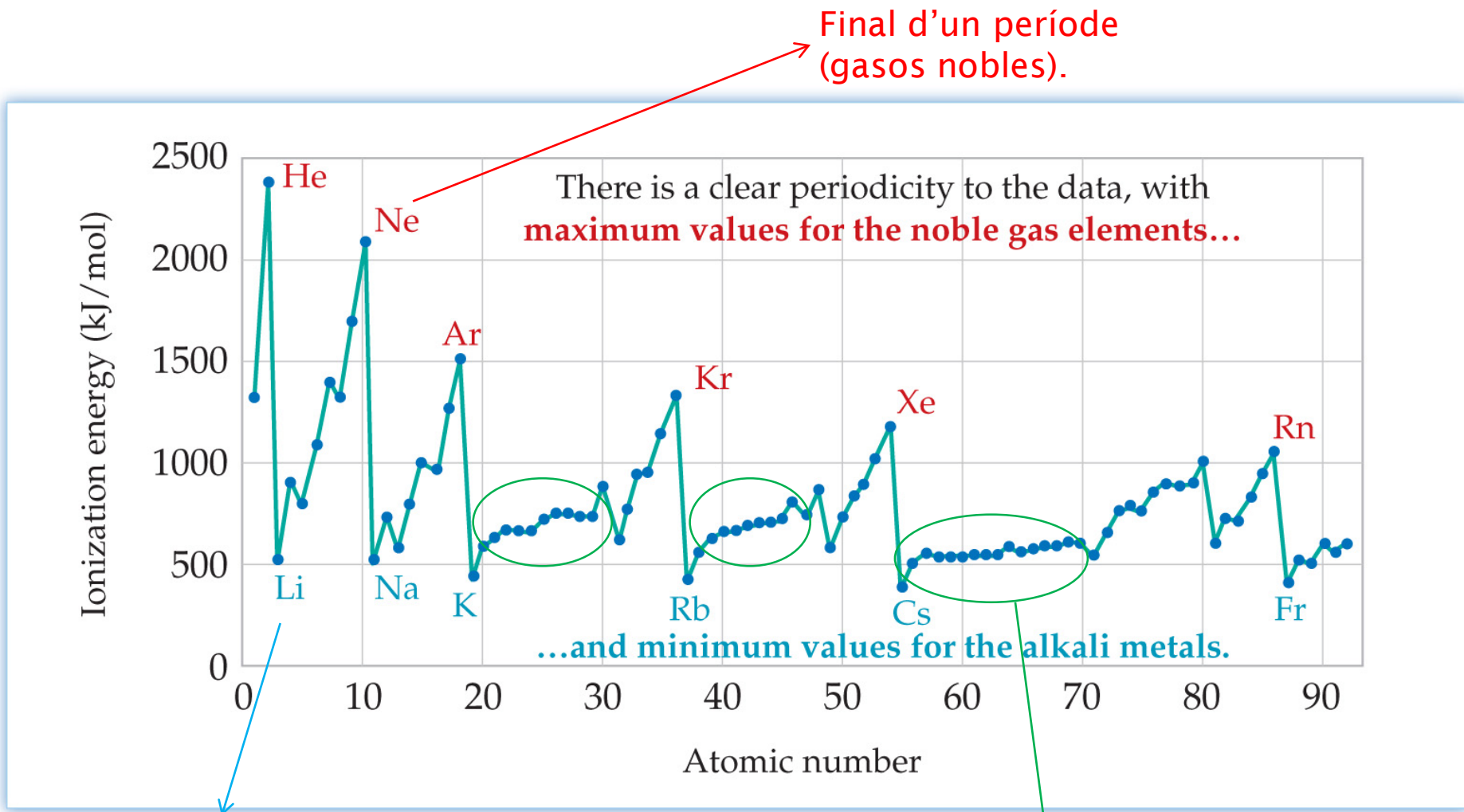
The column number is the number of the electron removed. Column 1, for example, is the first ionization energies that have been plotted in Figures 4.4 and 4.31. The shading calls attention to the ionization energies before a large jump (more than a factor of 3) for the next electron lost.

Atom	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$_1\text{H}$	1,312									
$_2\text{He}$	2,373	5,248								
$_3\text{Li}$	520	7,300	11,808							
$_4\text{Be}$	899	1,757	14,850	20,992						
$_5\text{B}$	801	2,430	3,660	25,000	32,800					
$_6\text{C}$	1,086	2,350	4,620	6,220	38,000	47,232				
$_7\text{N}$	1,400	2,860	4,580	7,500	9,400	53,000	64,400			
$_8\text{O}$	1,314	3,390	5,300	7,470	11,000	13,000	71,300	84,000		
$_9\text{F}$	1,680	3,370	6,050	8,400	11,000	15,200	17,900	92,000	106,000	
$_{10}\text{Ne}$	2,080	3,950	6,120	9,370	12,200	15,000	20,000	23,100	115,000	131,000
$_{11}\text{Na}$	496	4,560	6,900	9,540	13,400	16,600	20,100	25,500	28,900	141,000
$_{12}\text{Mg}$	738	1,450	7,730	10,500	13,600	18,000	21,700	25,700	31,600	35,500
$_{13}\text{Al}$	578	1,820	2,750	11,600	14,800	18,400	23,300	27,500	31,900	38,500
$_{14}\text{Si}$	786	1,580	3,230	4,360	16,000	20,000	23,800	29,200	33,900	38,700
$_{15}\text{P}$	1,012	1,904	2,910	4,960	6,240	21,000	25,400	29,900	35,900	40,960
$_{16}\text{S}$	1,000	2,250	3,360	4,660	6,990	8,500	27,100	31,700	36,600	48,100
$_{17}\text{Cl}$	1,251	2,297	3,820	5,160	6,540	9,300	11,000	33,600	38,600	43,960
$_{18}\text{Ar}$	1,521	2,666	3,900	5,770	7,240	8,800	12,000	13,800	40,800	46,200
$_{19}\text{K}$	419	3,052	4,410	5,900	8,000	9,600	11,300	14,900	17,000	48,600
$_{20}\text{Ca}$	590	1,145	4,900	6,500	8,100	11,000	12,300	14,200	18,200	20,380

Mg:  $[\text{Ne}]3s^2$

Si:  $[\text{Ne}]3s^23p^2$

# Propietats periòdiques. Energia d'ionització



Començament d'un període (metals alcalins). Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

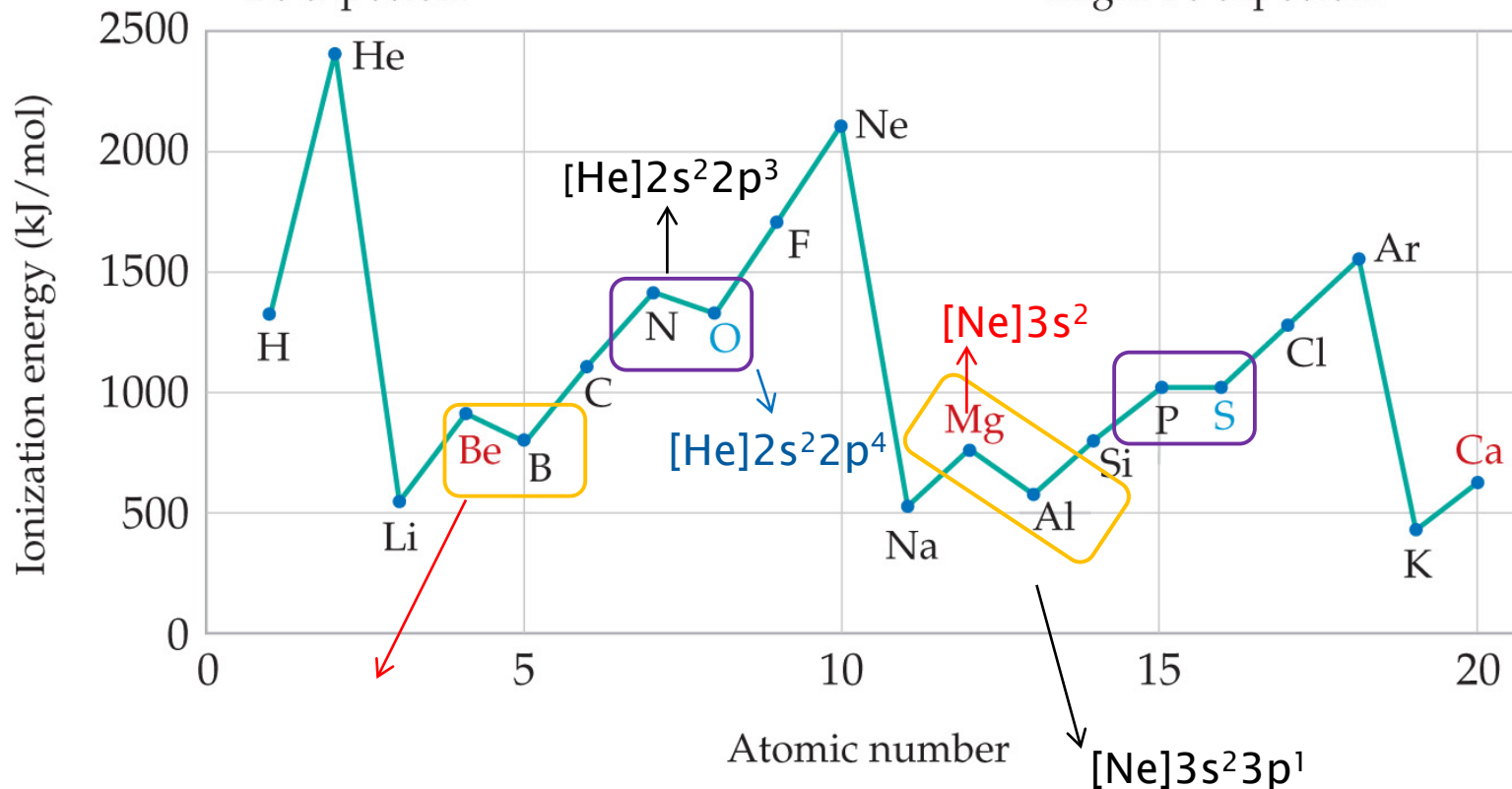
Metalls de transició.

# Propietats periòdiques. Energia d'ionització

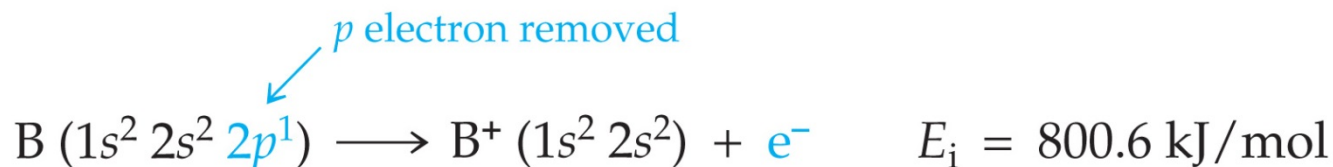
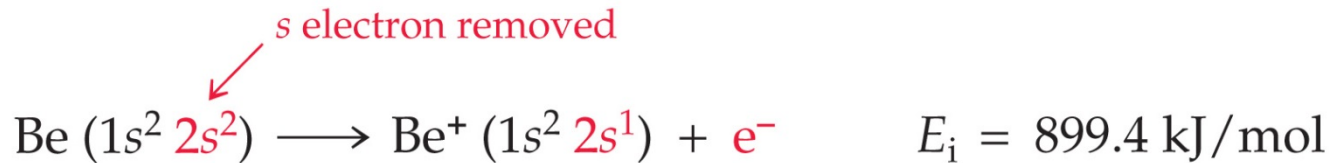
## Irregularitats

The **group 2A elements** (**Be, Mg, Ca**) have slightly larger  $E_i$  values than might be expected.

The **group 6A elements** (**O, S**) have slightly smaller  $E_i$  values than might be expected.

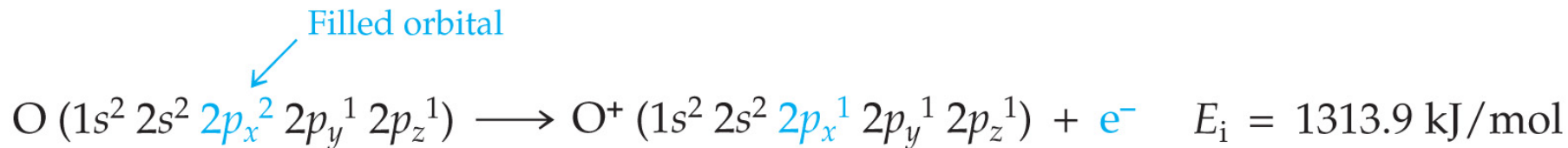
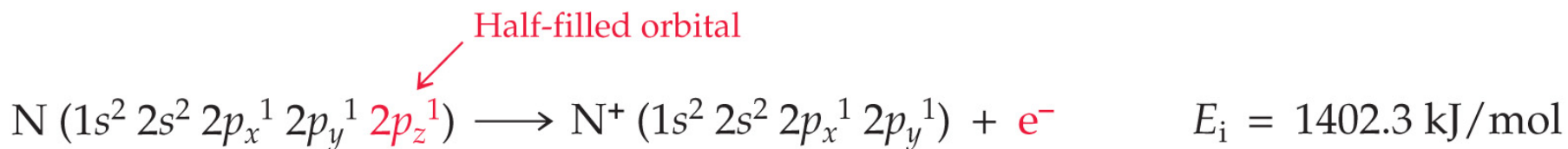


# Propietats periòdiques. Energia d'ionització. Irregularitats



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

---

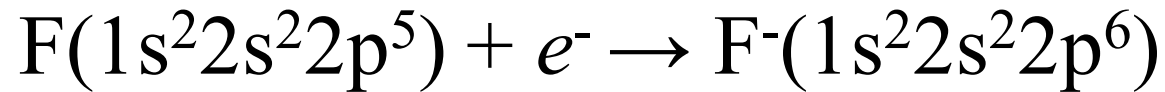


Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

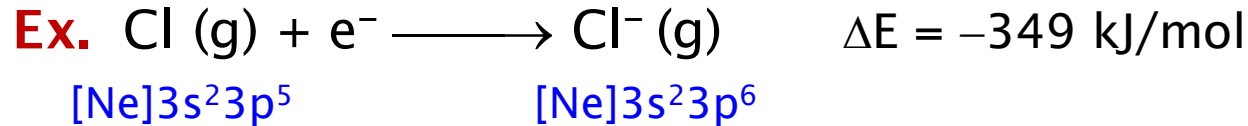
# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica

És l'energia  
intercanviada  
(normalment  
alliberada) quan un  
àtom neutre, en  
*estat gasós* i en el  
seu estat  
fonamental, **capta**  
**un electró.**

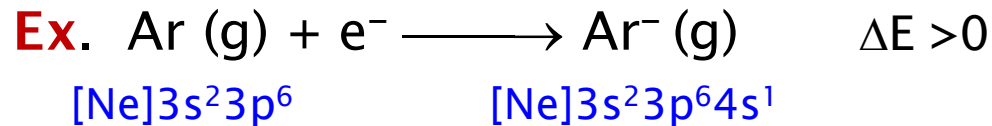
# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica



# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica



Procés *exotèrmic*, ja que l'electró afegit resulta fortament atret pel nucli.



L'anió té una energia major que l'àtom i l'electró per separat.

# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica

*En general, l'afinitat electrònica es fa més negativa (exotèrmica) en anar cap a la dreta en un període (augmenta en valor absolut).*

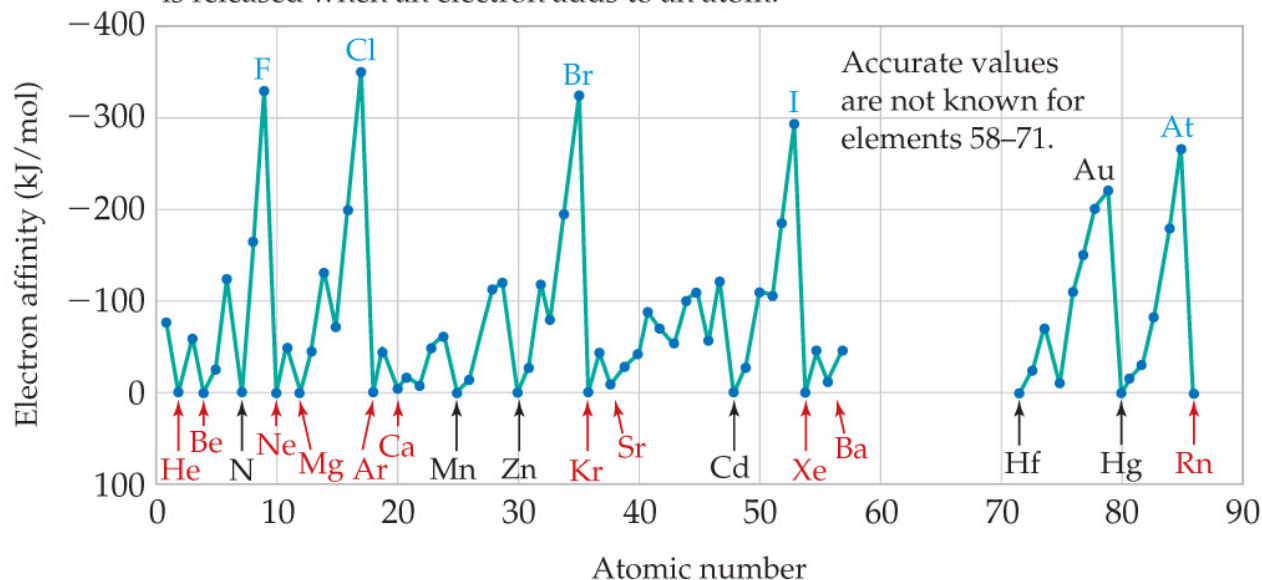
1	2	13	14	15	16	17	18
H -72.8							He >0
Li -59.6	Be >0	B -26.7	C -121.8	N +7	O -141.0	F -328.0	Ne >0
Na -52.9	Mg >0	Al -42.5	Si -133.6	P -72	S -200.4	Cl -349.0	Ar >0
K -48.4	Ca -2.37	Ga -28.9	Ge -119.0	As -78	Se -195.0	Br -324.6	Kr >0
Rb -46.9	Sr -5.03	In -28.9	Sn -107.3	Sb -103.2	Te -190.2	I -295.2	Xe >0
Cs -45.5	Ba -13.95	Tl -19.2	Pb -35.1	Bi -91.2	Po -186	At -270	Rn >0

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica

A negative value for  $E_{ea}$ , such as those for the **group 7A elements (halogens)**, means that energy is released when an electron adds to an atom.



A value of zero, such as those for the **group 2A elements (alkaline earths)** and **group 8A elements (noble gases)**, means that energy is absorbed but the exact amount can't be measured.

# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica. Irregularitats

## Entre els grups 1 i 2:

L'electró que s'hi afig ha de col·locar-se en un orbital  $p$ , queda més lluny del nucli i experimenta repulsió dels orbitals  $s$ .

H -73							He > 0
Li -60	Be > 0	B -27	C -122	N > 0	O -141	F -328	Ne > 0
Na -53	Mg > 0	Al -43	Si -134	P -72	S -200	Cl -349	Ar > 0
K -48	Ca -2	Ga -30	Ge -119	As -78	Se -195	Br -325	Kr > 0
Rb -47	Sr -5	In -30	Sn -107	Sb -103	Te -190	I -295	Xe > 0
1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A

## Entre els grups 14 i 15:

El grup 15 (5A) no té orbitals buits (té subcapes  $p$  semiplenes), per la qual cosa l'electró extra ha de col·locar-se en un orbital ja ocupat i s'hi produeixen repulsions més fortes.

# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica. Irregularitats



Per què és tan freqüent trobar **òxids metàl·lics** en la naturalesa si la segona **energia d'ionització és tan elevada?**

# Propietats periòdiques. Afinitat electrònica. Irregularitats

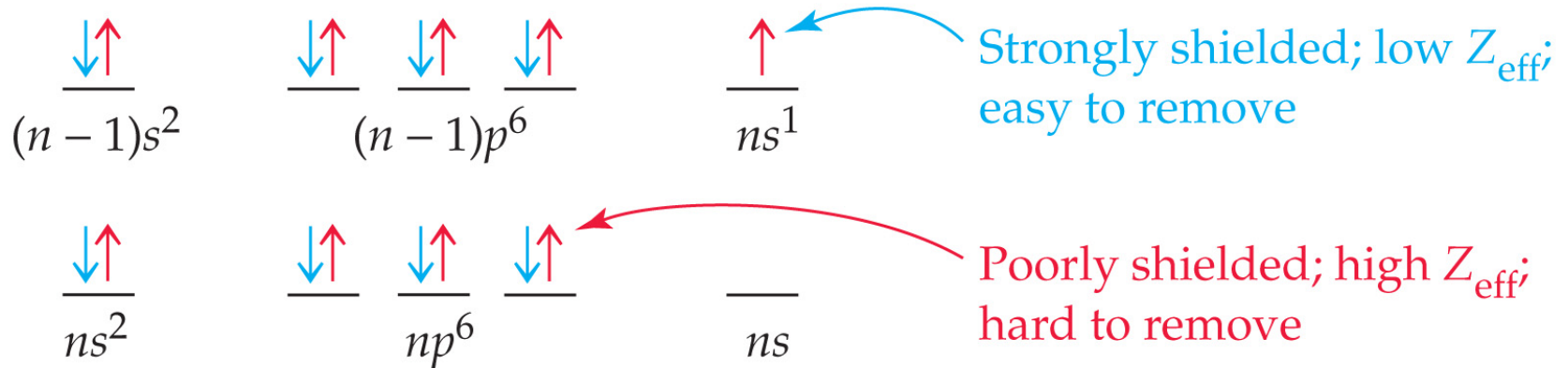


- ✓ Està clar que **l'adquisició d'un segon electró** per part de l'oxigen **no és un procés afavorit**, perquè en aquest cas l'electró ha d'aproximar-se a un carregat negativament en lloc de a un àtom neutre, experimenta **una forta repulsió**.
- ✓ Però encara que la formació de l'oxigen dianiònic sembla poc probable, aquest **pot existir en molt compostos iònics**, com per exemple el **MgO**.
- ✓ El motiu és global... energèticament parlant, ja que la formació d'aquests compostos s'acompanya d'altres processos **molt més favorables des del punt de vista energètic**.

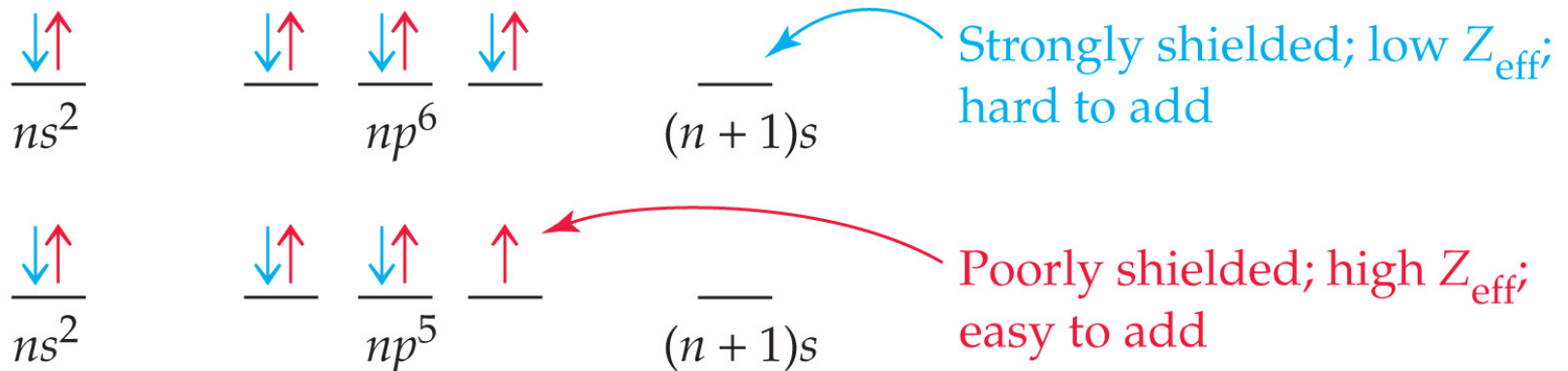
(Revisarem aquesta formació quan estudiem els compostos iònics al cicle de Born-Haber.)

# Propietats periòdiques. Afinitat vs energia d'ionització

## Energia d'ionització.



## Afinitat electrònica.



# Propietats periòdiques. **Caràcter metàl·lic**

- **Metalls**
  - Conductors de l'electricitat i del calor.
  - Mal·leable i dúctils.
  - Punts de fusió de moderats a elevats.
  - Tendència a formar cations.
- **No metalls**
  - No conductors de l'electricitat ni del calor.
  - Sòlids i trencadissos.
  - Alguns són gasos a temperatura i P ambient.
- **Metal·loides**
  - Propietats barrejades.

# Propietats periòdiques. Caràcter metàl·lic

	1	2	13	14	15	16	17	18
H <sup>+</sup>	H							He
He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
Ar	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Kr	Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe

# Propietats periòdiques. Caràcter metàl·lic

**TABLE 9.2** Electron Configurations of Some Metal Ions<sup>a</sup>

"Noble Gas"		"Pseudo-Noble Gas" <sup>b</sup>	"18 + 2" <sup>c</sup>	Other
Li <sup>+</sup>	Be <sup>2+</sup>	Ga <sup>3+</sup>	In <sup>+</sup>	Cr <sup>2+</sup> , Cr <sup>3+</sup>
Na <sup>+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Tl <sup>3+</sup>	Tl <sup>+</sup>	Mn <sup>2+</sup> , Fe <sup>2+</sup>
K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Cu <sup>+</sup>	Sn <sup>2+</sup>	Fe <sup>3+</sup> , Co <sup>2+</sup>
Rb <sup>+</sup>	Sr <sup>2+</sup>	Ag <sup>+</sup> , Au <sup>+</sup>	Pb <sup>2+</sup>	Ni <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup>
Cs <sup>+</sup>	Ba <sup>2+</sup>	Zn <sup>2+</sup>	Sb <sup>3+</sup>	
Fr <sup>+</sup>	Ra <sup>2+</sup>		Bi <sup>3+</sup>	
Al <sup>3+</sup>				

<sup>a</sup>Main-group metal ions are printed in black and transition metal ions in blue.

<sup>b</sup>In the configuration labeled "pseudo-noble gas," all electrons of the outermost shell have been lost. The next-to-outermost electron shell of the atom becomes the outermost shell of the ion and contains 18 electrons, for example, Ga<sup>3+</sup>: [Ne]3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>3d<sup>10</sup>.

<sup>c</sup>In the configuration labeled "18 + 2" all outer-shell electrons except the two s electrons are lost, producing an ion with 18 electrons in the next-to-outermost shell and 2 electrons in the outermost, for example, Sn<sup>2+</sup>: [Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>6</sup>4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup>.



# Propietats periòdiques. Caràcter metàl·lic

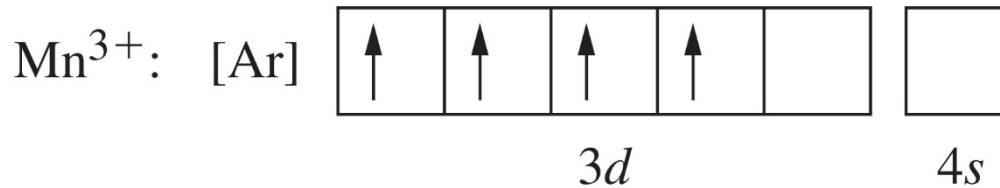
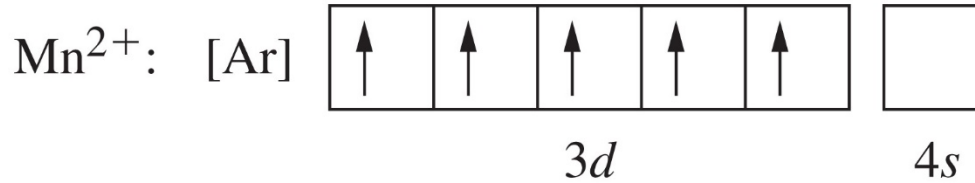
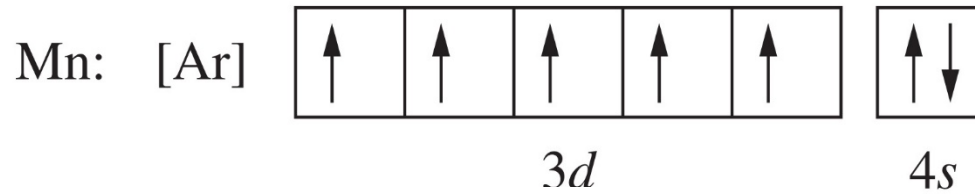
## Estats d'oxidació representatius

1A	2A	Transition metals										3A	4A	5A	6A	7A	8A	
H <sup>+</sup>																H <sup>-</sup>	N O B L E  G A S E S	
Li <sup>+</sup>														N <sup>3-</sup>	O <sup>2-</sup>	F <sup>-</sup>		
Na <sup>+</sup>	Mg <sup>2+</sup>											Al <sup>3+</sup>		P <sup>3-</sup>	S <sup>2-</sup>	Cl <sup>-</sup>		
K <sup>+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Sc <sup>3+</sup>	Ti <sup>4+</sup>	V <sup>5+</sup> V <sup>4+</sup>	Cr <sup>3+</sup>	Mn <sup>2+</sup> Mn <sup>4+</sup>	Fe <sup>2+</sup> Fe <sup>3+</sup>	Co <sup>2+</sup> Co <sup>3+</sup>	Ni <sup>2+</sup>	Cu <sup>+</sup> Cu <sup>2+</sup>	Zn <sup>2+</sup>				Se <sup>2-</sup>	Br <sup>-</sup>		
Rb <sup>+</sup>	Sr <sup>2+</sup>									Pd <sup>2+</sup>	Ag <sup>+</sup>	Cd <sup>2+</sup>		Sn <sup>2+</sup> Sn <sup>4+</sup>	Sb <sup>3+</sup> Sb <sup>5+</sup>	Te <sup>2-</sup>		I <sup>-</sup>
Cs <sup>+</sup>	Ba <sup>2+</sup>									Pt <sup>2+</sup>	Au <sup>+</sup> Au <sup>3+</sup>	Hg <sub>2</sub> <sup>2+</sup> Hg <sup>2+</sup>		Pb <sup>2+</sup> Pb <sup>4+</sup>	Bi <sup>3+</sup> Bi <sup>5+</sup>			

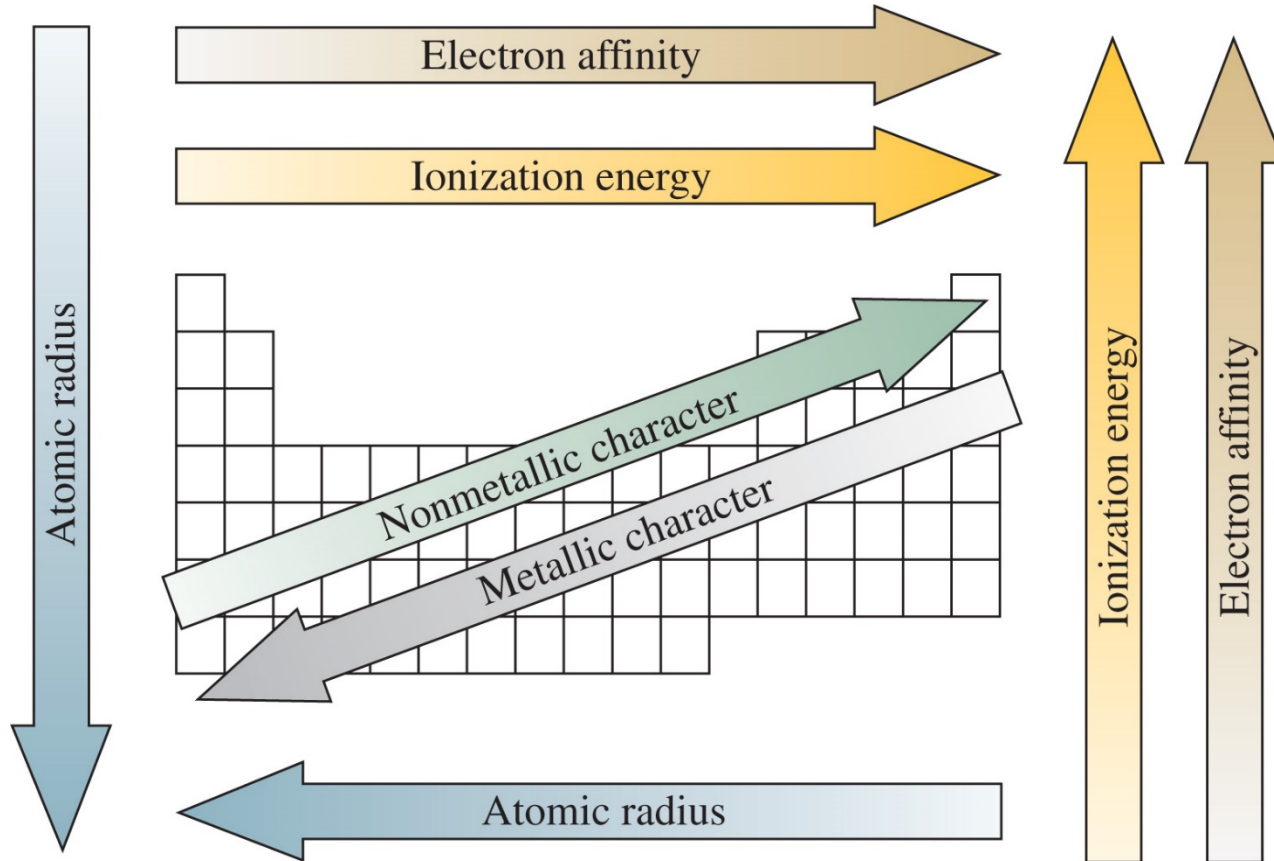
# Propietats periòdiques. Caràcter metàl·lic. Magnetisme

- **Diamagnètiques (àtoms o ions):**
  - Tots els electrons estan aparellats.
  - Feblement repel·lits per un camp magnètic.
- **Paramagnètiques (àtoms o ions):**
  - $e^-$  desaparellats.
  - Atrets per un camp magnètic extern.

# Propietats periòdiques. Caràcter metàl·lic. Magnetisme



# Propietats periòdiques. **Resum**



# Propietats periòdiques.

## Algunes idees clau...

**1. Àtoms multieletrònics:** en els àtoms multieletrònics, els orbitals amb diferent valor de  $l$ , no són degenerats. **La pèrdua de degeneració** en la capa principal és el resultat de la diferent **càrrega nuclear efectiva**,  $Z_{\text{ef}}$ , experimentada pels electrons en les diferents subcapes.

**2. Espín de l'electró:** el quart nombre quàntic va ser definit per Stern i Gerlach i van demostrar que els electrons posseeixen una qualitat denominada *espí electrònic*. El nombre quàntic de l'espín electrònic,  $m_s$ , té el valor de  $+1/2$  o  $-1/2$ .

**3. Configuracions electròniques:** la configuració electrònica descriu com es distribueixen els electrons en els diferents orbitals en les capes principals i les subcapes d'un àtom. Els electrons omplir els orbitals des de l'energia més baixa a la més alta, assegurant que l'energia de l'àtom es troba en un mínim. **El principi d'exclusió de Pauli** estableix que hi ha un màxim de dos electrons que poden ocupar un orbital. **La regla de Hund** diu que quan hi ha orbitals degenerats disponibles, els electrons ocupen inicialment aquests orbitals individualment. Les configuracions electròniques es representen mitjançant la notació spdf expandida o condensada, o per un diagrama d'orbitals. **El procés aufbau** s'usa per assignar les configuracions als elements de la Taula Periòdica. Els electrons que s'afegen a la capa amb nombre quàntic principal **més alt** es denominen **electrons de valència**.

# Propietats periòdiques.

## Algunes idees clau...

**4. Configuracions electròniques i la taula periòdica.** Els elements del mateix grup de la taula periòdica tenen configuracions electròniques similars. **Els grups 1 i 2** corresponen al bloc *s*, amb els orbitals *s* de la capa de valència plens o parcialment plens. **Els grups 13 al 18** corresponen al bloc *p* amb els orbitals *p* de la capa de valència plens o parcialment plens. **El bloc d correspon als grups 3 al 12**, quan s'està omplint el nivell d'energia “*n-1*”, és a dir, que tenen els orbitals *d* plens o parcialment plens. En els elements del bloc *f*, denominats *lantànids* o *actínids*, s'ompli la capa “*n-2*” amb electrons, és a dir que tenen orbitals *f* plens o parcialment plens.

**5. La llei periòdica i la Taula Periòdica.** El fonament experimental de la taula periòdica dels elements és la llei periòdica: **algunes propietats es repeteixen periòdicament quan els elements es disposen en ordre creixent de nombre atòmic**. El fonament teòric és que les propietats d'un element estan relacionades amb la configuració electrònica dels seus àtoms i els elements d'un mateix grup de la taula periòdica tenen configuracions similars. Els elements es poden classificar **en metalls, no metalls i metal·loides**. **Els metal·loides comparteixen característiques dels metalls i dels no metalls**. **Els no metalls se subdivideixen**, al seu torn, en gasos nobles, i la resta de no metalls dels grups principals, mentre que els metalls inclouen metalls dels grups principals i elements de transició.

# Propietats periòdiques.

## Algunes idees clau...

**6. La grandària dels àtoms i els ions.** Els radis atòmics poden ser covalents, metàl·lics i de Van der Waals. En general, els radis atòmics decreixen al llarg dels períodes i augmenten en descendir en el grup de la taula periòdica, reflectint la variació de la càrrega nuclear efectiva,  $Z_{ef}$  al llarg de períodes i grups. **Els radis iònics dels ions positius són menors** que els de l'àtom neutre original, mentre que **els ions negatius són més grans** que l'àtom original. Els radis iònics segueixen les mateixes tendències periòdiques que els radis atòmics. Els àtoms o ions que tenen la mateixa configuració electrònica es diuen isoelectrònics. Quan es comparen els radis **d'espècies isoelectròniques, l'espècie de més càrrega negativa és la que té un radi atòmic o iònic major.**

**7. Propietats periòdiques.** L'estudi de la **primera energia d'ionització** mostra que la seua variació periòdica està governada **per la variació de  $Z_{ef}$**  és a dir, l'energia d'ionització disminueix cap avall en els grups i augmenta al llarg del període. D'altra banda, **l'afinitat electrònica (Ae)** és la variació d'energia quan un àtom en estat gasós gana un electró, però no segueix una variació periòdica consistent. **Les característiques metàl·liques, no metàl·liques i metal·loides dels àtoms** estan relacionades amb una sèrie de propietats atòmiques. En general, s'associen amb **els metalls els radis atòmics grans** i les energies de ionització baixes, mentre que els no metalls posseeixen radis atòmics xicotets, energies d'ionització altes i afinitats electròniques amb valors negatius grans. Les propietats magnètiques d'un àtom o ió es basen en l'existència d'electrons desaparellats. Els àtoms o ions paramagnètics tenen un o més electrons desaparellats. En els àtoms o ions diamagnètics, tots els electrons estan aparellats.

# TEMA 4. ENLLAÇ QUÍMIC I

## Tipus d'enllaços

### Teoria de Lewis

Enllaç iònic

Enllaç covalent

## Enllaç covalent

Polaritat d'enllaç i electronegativitat

Representació d'estructures de Lewis.  
Ressonància

## Forma de les molècules

Teoria RPECV

Molècules polars i apolars

## Força dels enllaços covalents

Ordre i longitud d'enllaç

Energia d'enllaç





# L'enllaç químic. Tipus generals



**Iònic** = forces electroestàtiques entre ions amb càrregues contràries. Sol donar-se entre metalls i no-metalls.

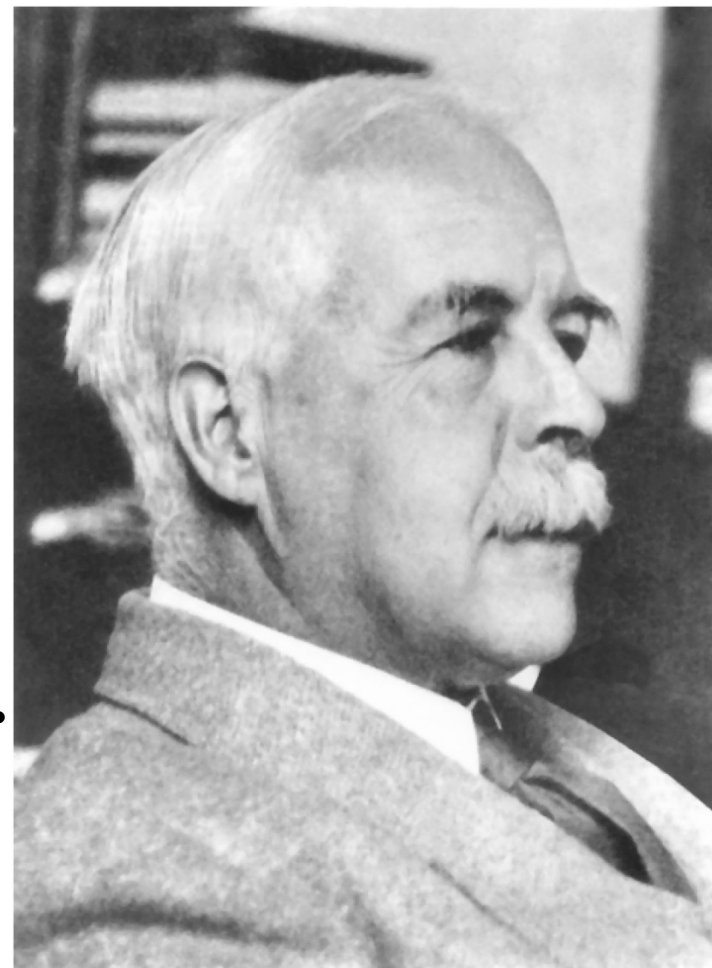
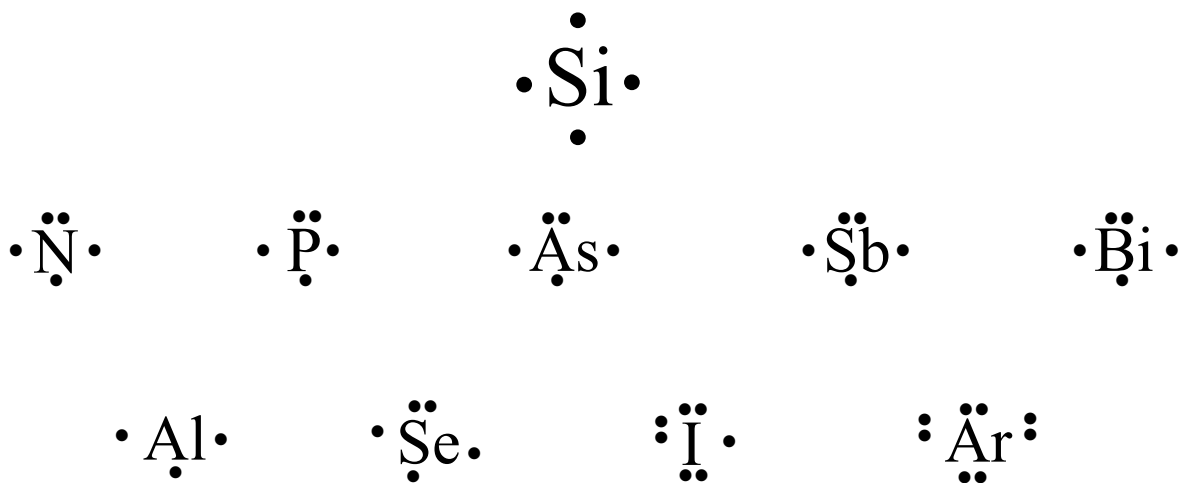


**Metà·lic** = cada àtom d'un metall s'uneix a diversos àtoms veïns.



**Covalent** = format quan dos àtoms comparteixen un o més parells d'electrons. Generalment es forma entre àtoms no metà·lics.

# L'enllaç químic. L'enllaç de Lewis



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

*G. N. Lewis*  
(1875-1946)

# L'enllaç químic. La regla de l'octet

Símbol químic  
d'un element  
més un punt  
per cada  
**electró de  
valència.**

	Configuració electrònica	Símbol de Lewis
<b>C</b> (Z = 6)	$[\text{He}]2s^2 2p^2$	$\cdot\overset{\cdot}{\text{C}}\cdot$
<b>N</b> (Z = 7)	$[\text{He}]2s^2 2p^3$	$\cdot\overset{\cdot}{\text{N}}\cdot$
<b>O</b> (Z = 8)	$[\text{He}]2s^2 2p^4$	$:\overset{\cdot}{\text{O}}\cdot$
<b>F</b> (Z = 9)	$[\text{He}]2s^2 2p^5$	$:\overset{\cdot}{\text{F}}\cdot$
<b>Ar</b> (Z = 18)	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$	$:\overset{\cdot}{\text{Ar}}\cdot$

El *nombre d'electrons de valència* de qualsevol element coincideix amb el **nombre de grup** de l'element (1A-8A) excepte per l'heli.

# L'enllaç químic. **La regla de l'octet**

Quan els àtoms formen part d'un compost, es representen **els electrons per parells** afegint **una ratlla** per cada parell.

(Quan hi ha un punt només entenem que parlem d'un radical.)

# L'enllaç químic. La regla de l'octet

---

**Els electrons de valència són clau per a formar enllaços**

Els àtoms tendeixen a **guanyar, perdre o compartir electrons** fins que **es troben envoltats per 8 electrons** de valència.

---

La **configuració electrònica** de la capa de valència **és la dels gasos nobles** (excepte He), els quals són molt estables.

---

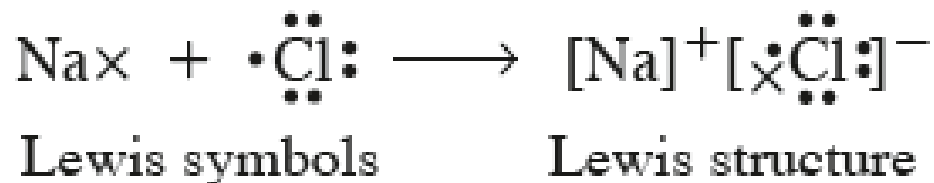
Un **octet d'electrons** consisteix en les subcapes **s** i **p** d'un àtom plenes.

---

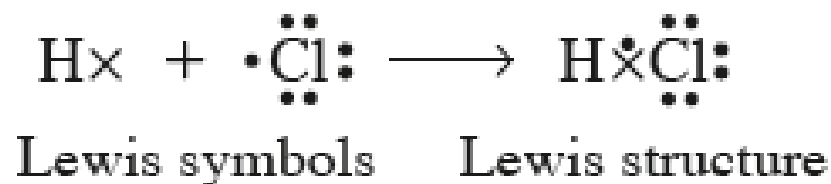
# L'enllaç químic. La regla de l'octet

Com completen  
la capa de  
valència?

*Ionic bonding*  
(transfer of  
electrons):



*Covalent bonding*  
(sharing of  
electrons):



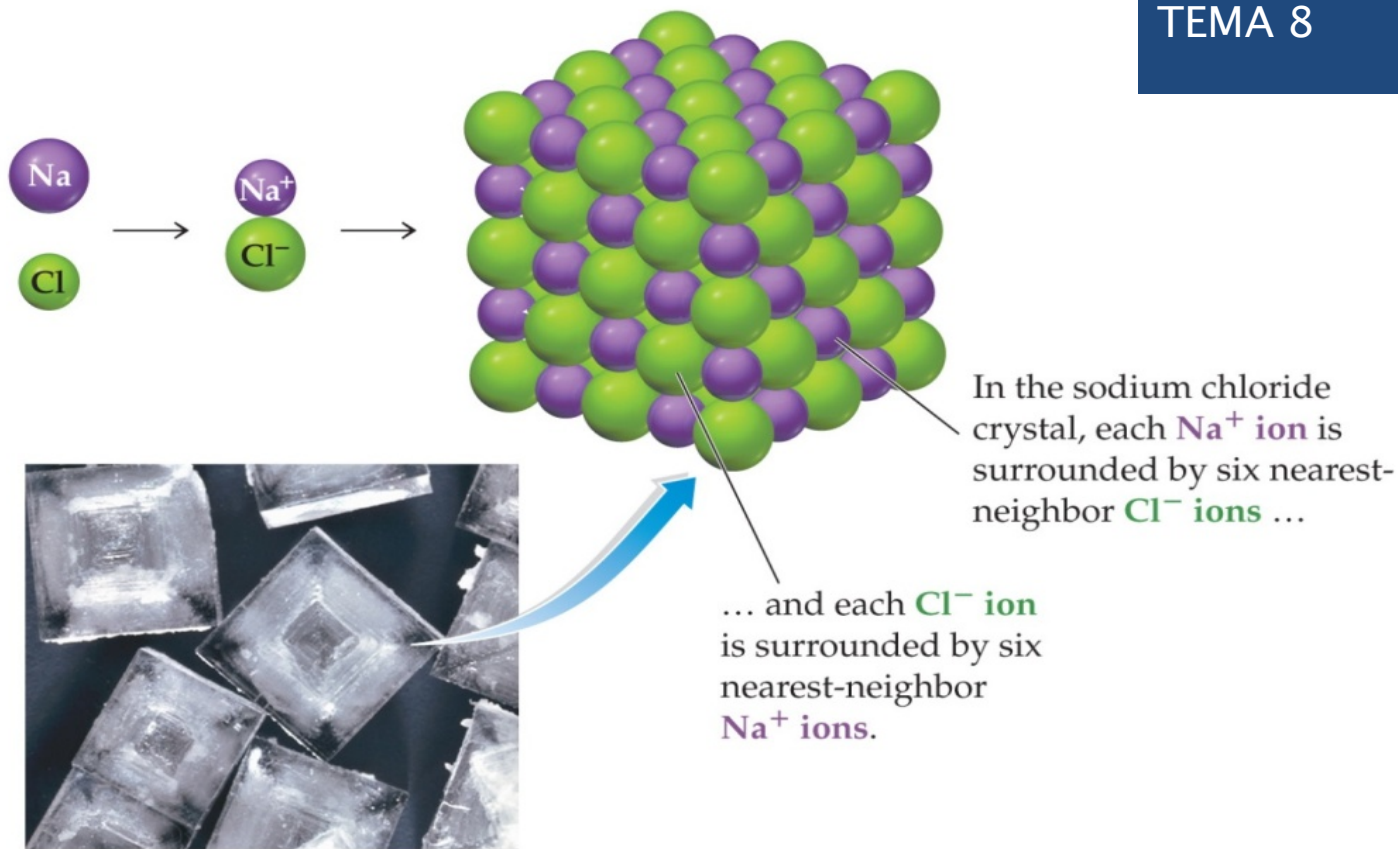
# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç iònic



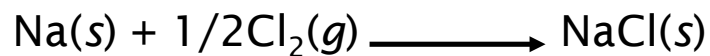
Unnumbered figure p195a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç iònic.

TEMA 8



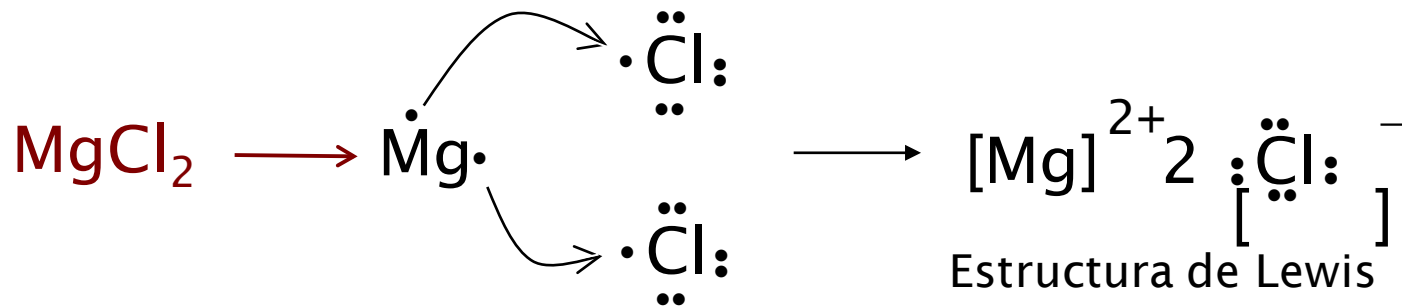
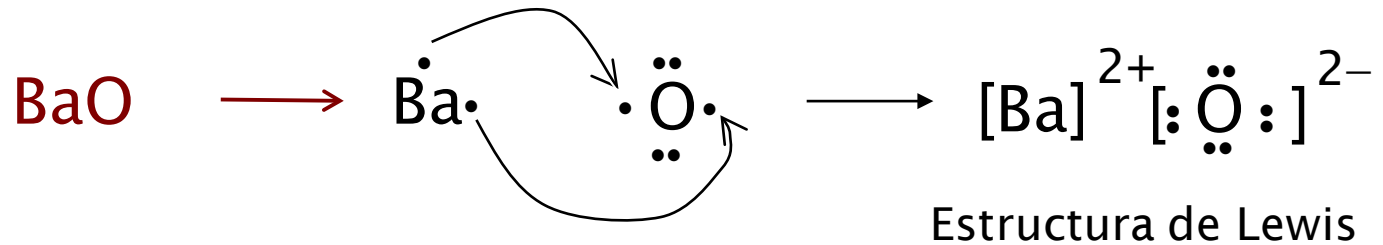
Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.



$$\Delta G_f^\circ = -410.9 \text{ kJ}$$



# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç iònic

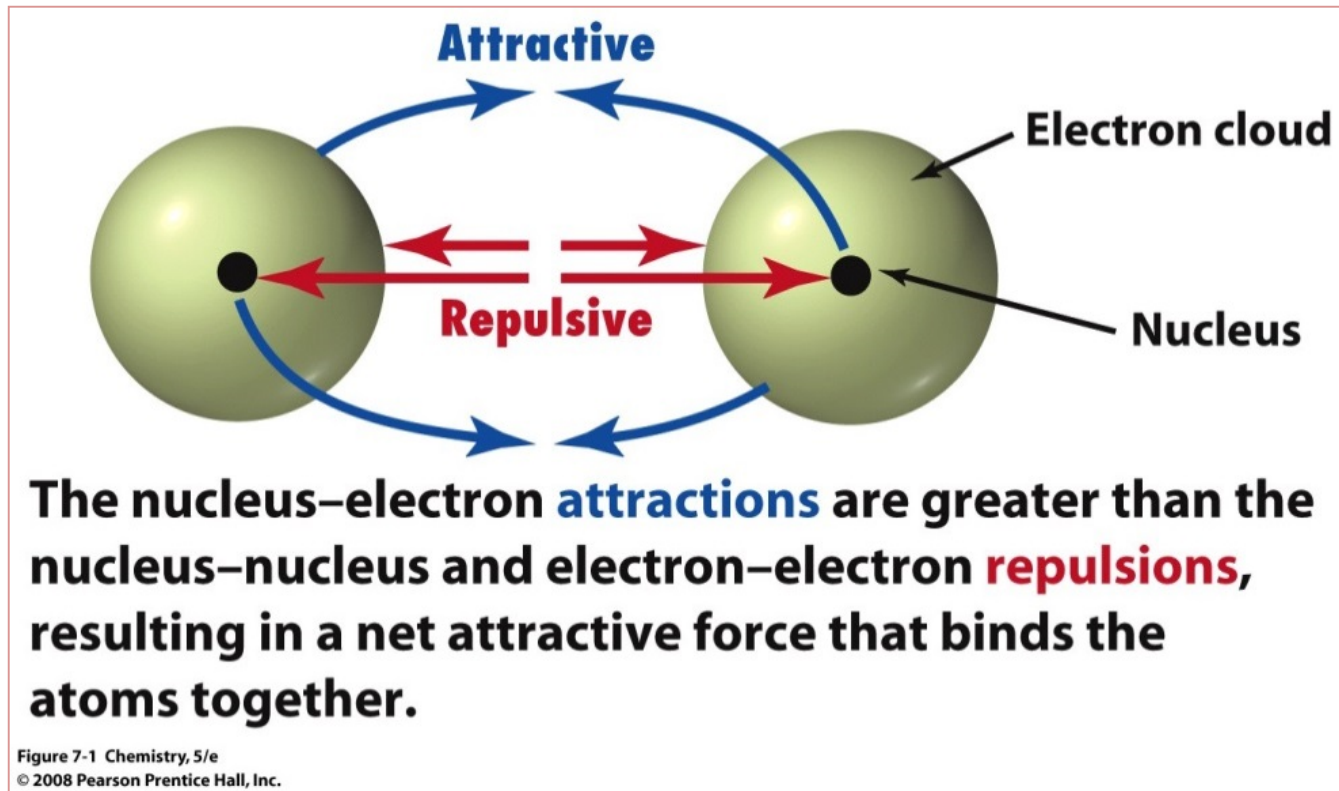


# L'enllaç químic. **La regla de l'octet. Enllaç covalent**



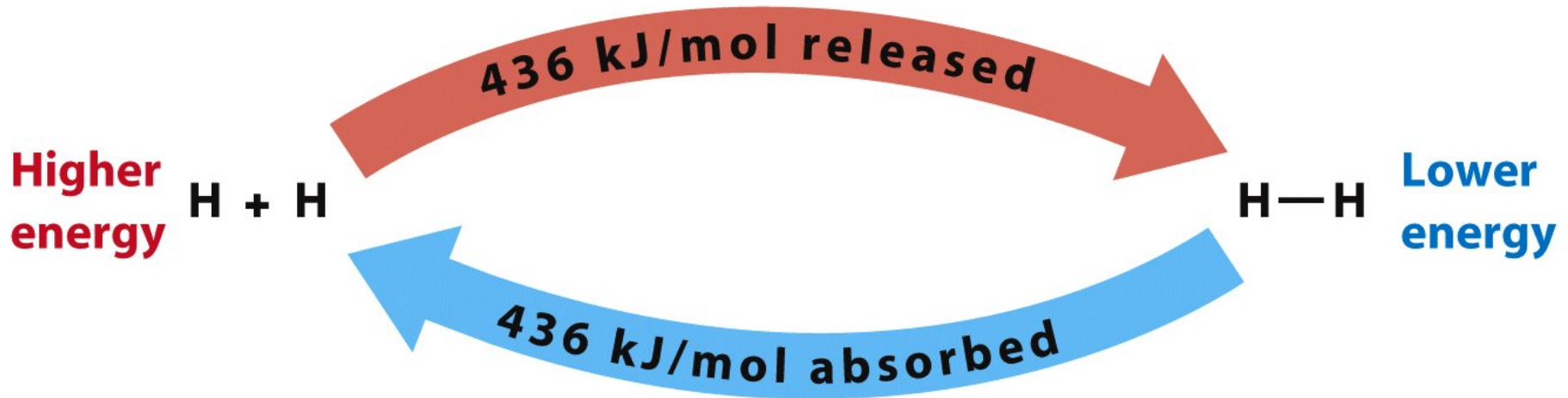
Per què **es**  
**forma** un  
enllaç  
covalent?

# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç covalent



**Interaccions electrostàtiques** (atraccions i repulsions entre electrons i nuclis).

# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç covalent



Unnumbered 7 p225a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

La concentració de la densitat electrònica entre els nuclis dona lloc a una **força atractiva neta** que manté unida la molècula (**enllaç covalent**).

# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç covalent

If the atoms are too close, strong repulsions occur.

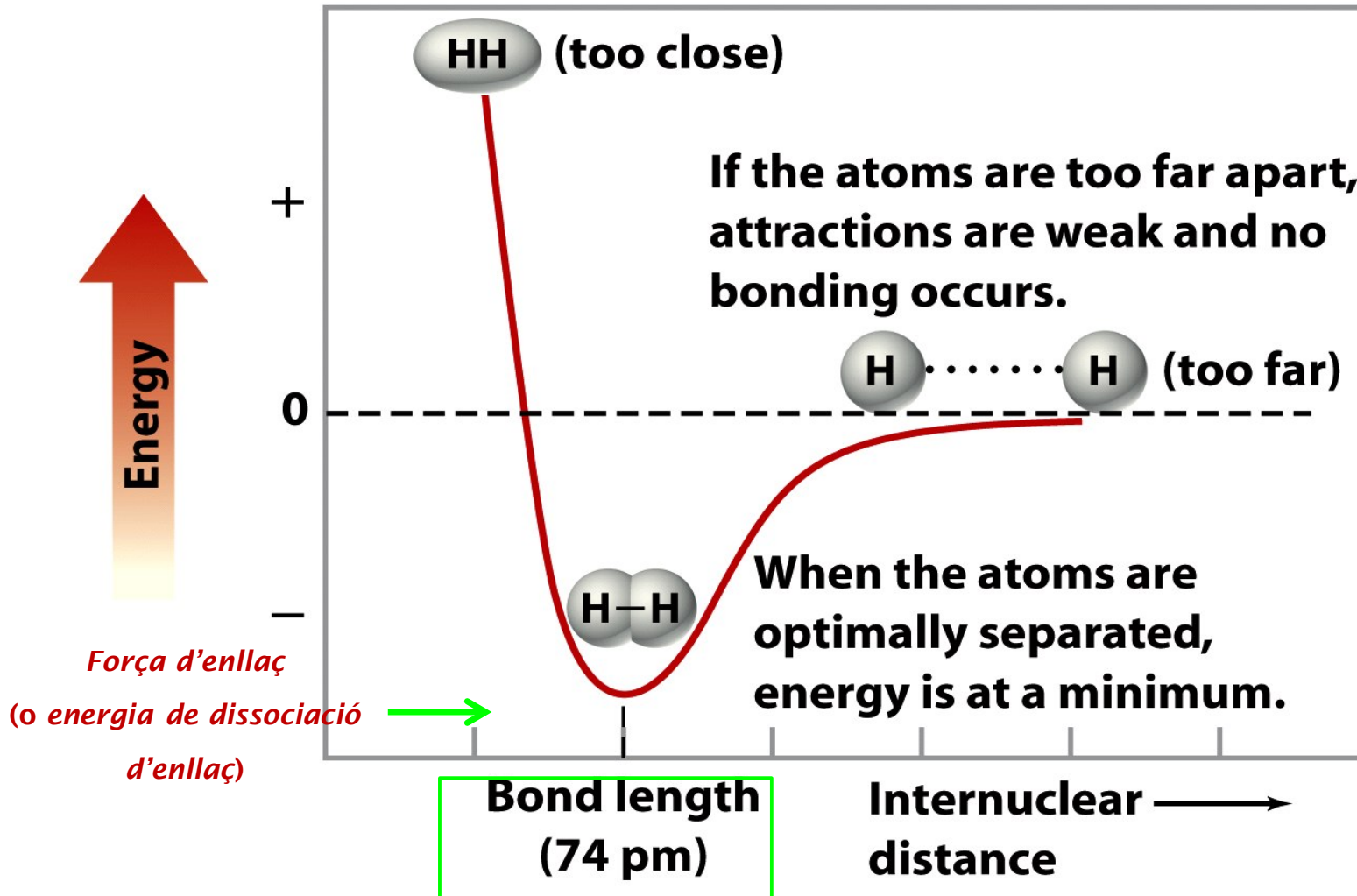


Figure 7-2 Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

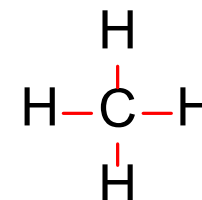
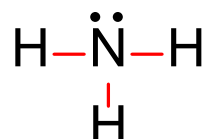
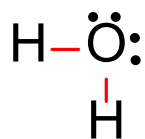
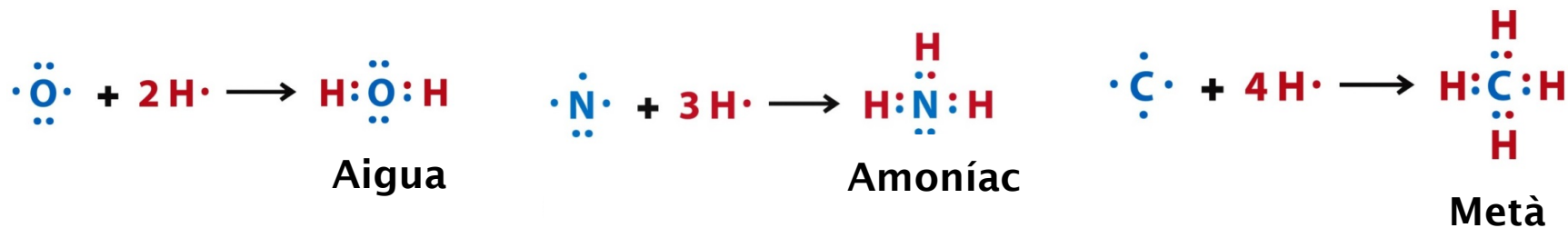
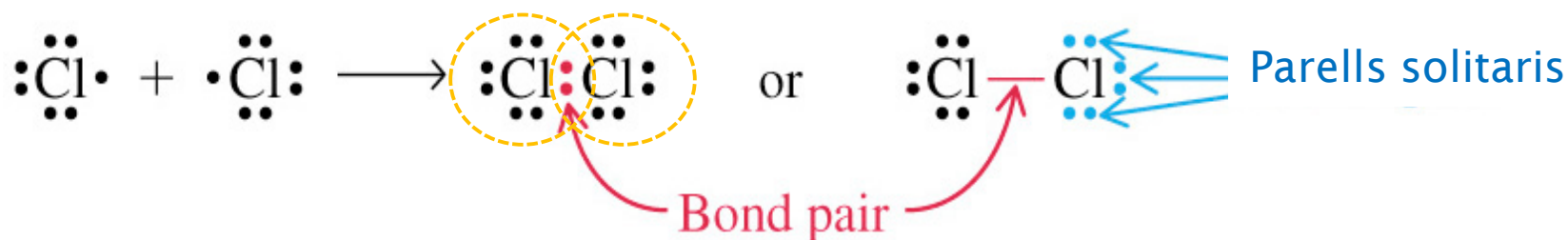
*Longitud d'enllaç*

# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç covalent

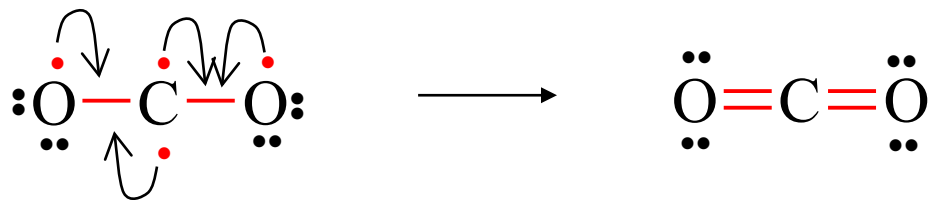
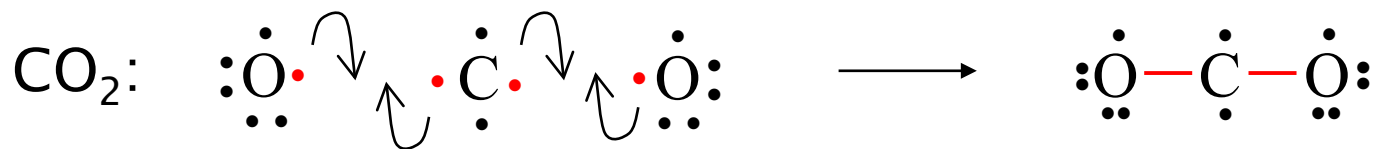
**Enllaç simple**



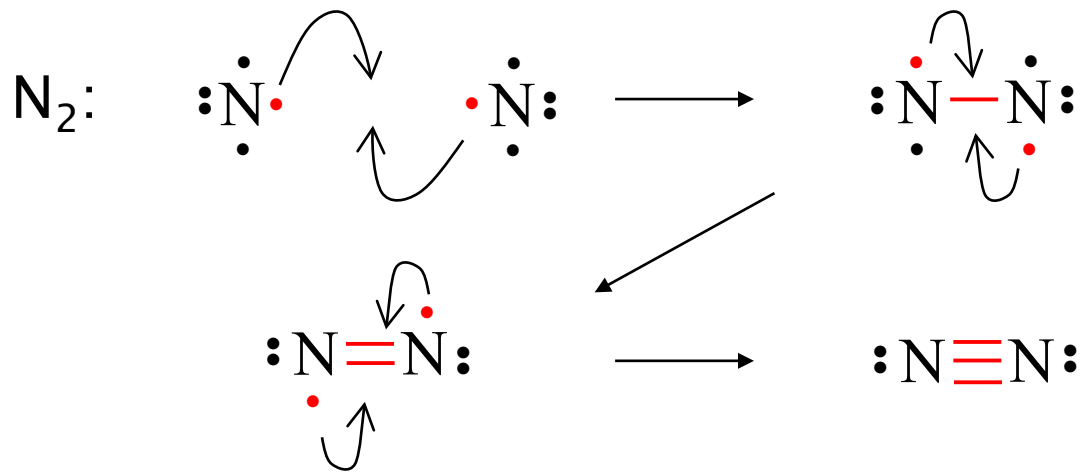
Parell enllaçant



# L'enllaç químic. La regla de l'octet. Enllaç covalent



**Enllaços  
dobles**



**Enllaços  
triples**

# TEMA 4. ENLLAÇ QUÍMIC I

## Enllaç covalent



- Polaritat d'enllaç i electronegativitat
- Representació d'estructures de Lewis.  
Ressonància





# L'enllaç químic. Polaritat de l'enllaç



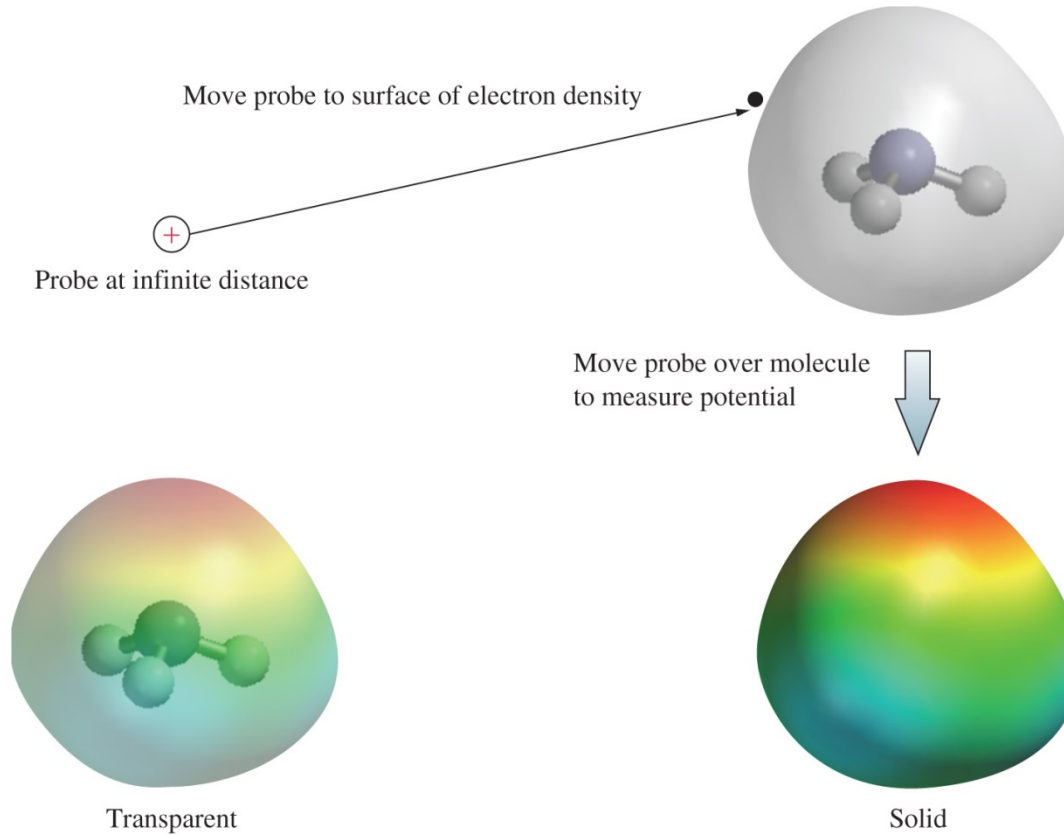
Sempre es  
comparteixen  
els electrons  
“al 50 %”?

L'enllaç químic. **Polaritat de l'enllaç**

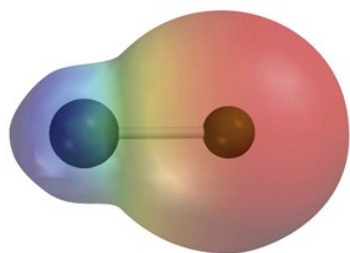
# **Polaritat**

**Concepte que descriu la forma en què es comparteixen electrons entre els àtoms.**

# L'enllaç químic. Polaritat de l'enllaç

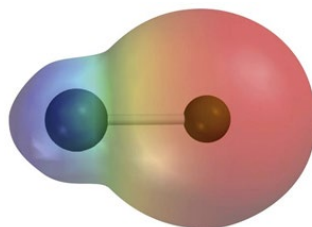


# L'enllaç químic. Polaritat i electronegativitat



NaCl

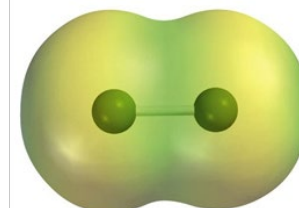
Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



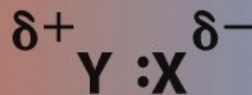
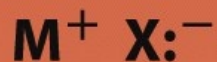
HCl

Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Cl<sub>2</sub>



Unnumbered 7 p227c Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



**Ionic**

**(full charges)**



**Polar covalent**  
**(partial charges)**



**Nonpolar covalent**  
**(electronically symmetrical)**

Figure 7-3 Chemistry, 5/e

© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

**L'enllaç químic.** Polaritat de l'enllaç

# **Electronegativitat**

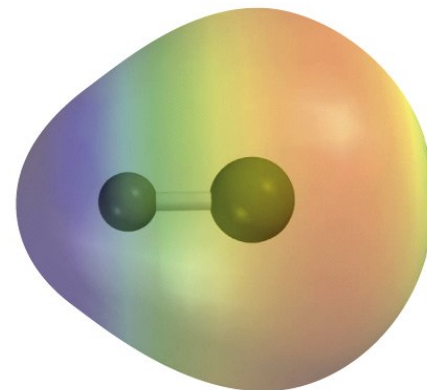
**Capacitat d'un àtom en una molècula d'atraure els electrons d'un enllaç químic.**

# L'enllaç químic. Polaritat i electronegativitat



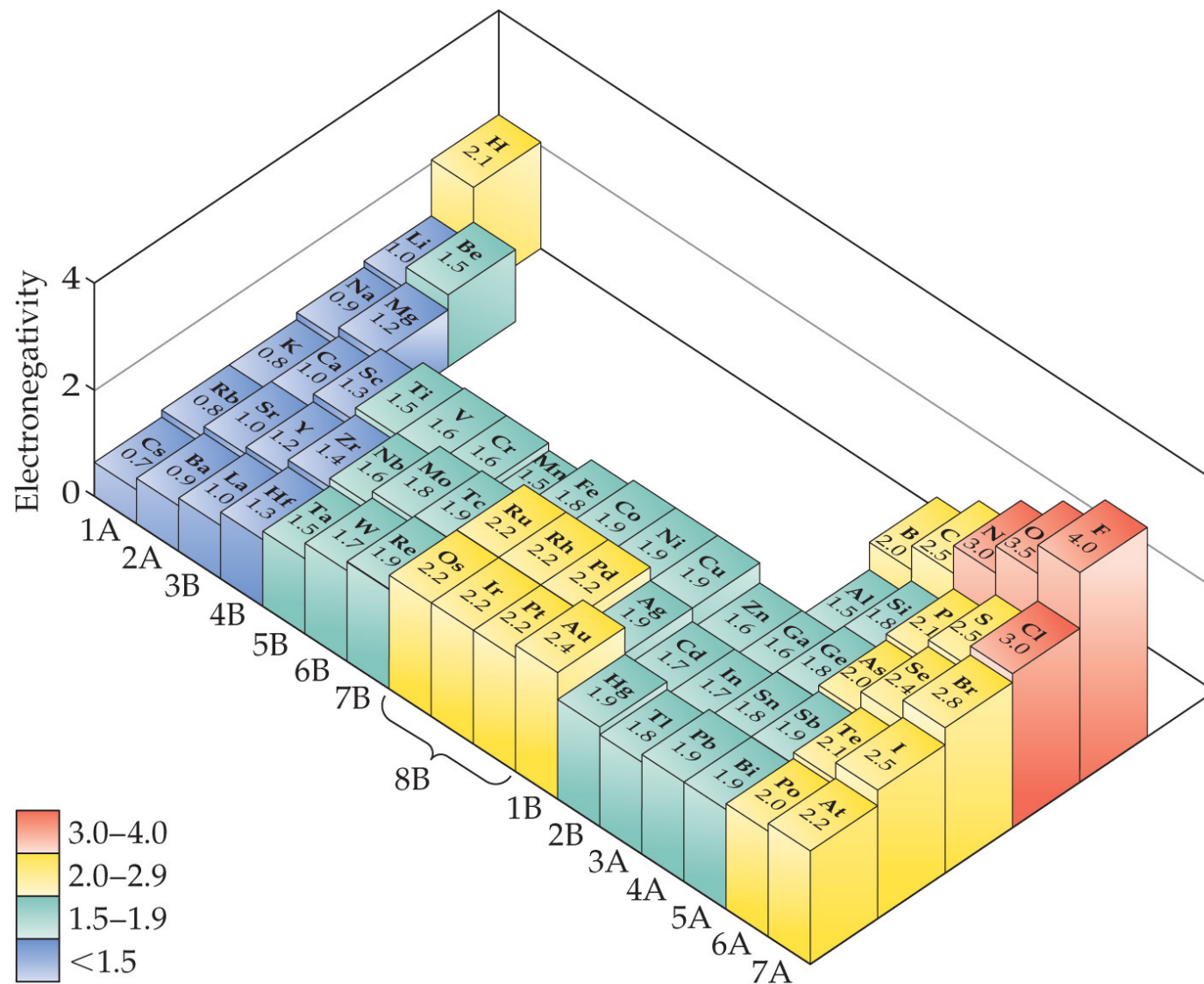
**A polar covalent bond.**

**The bonding electrons are attracted more strongly by Cl than by H.**



**Cl** es molt més *electronegatiu* que **H**.

# L'enllaç químic. Electronegativitat. Escala de Pauling



# L'enllaç químic. Electronegativitat. Escala de Pauling

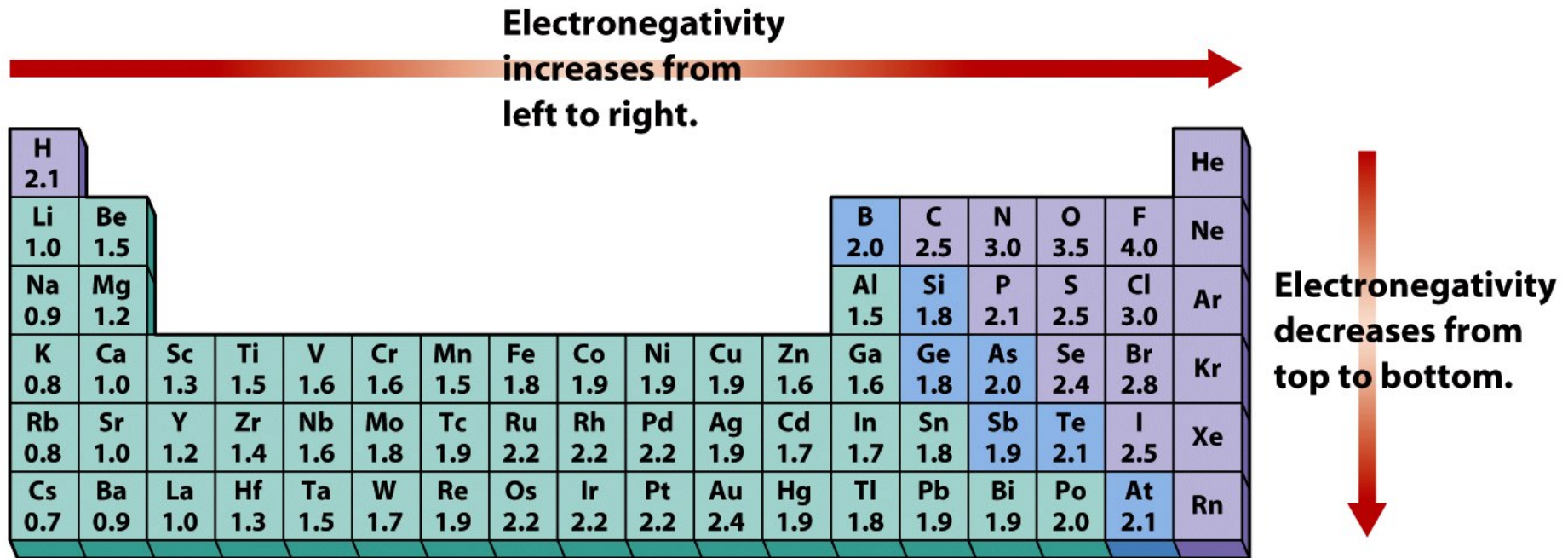
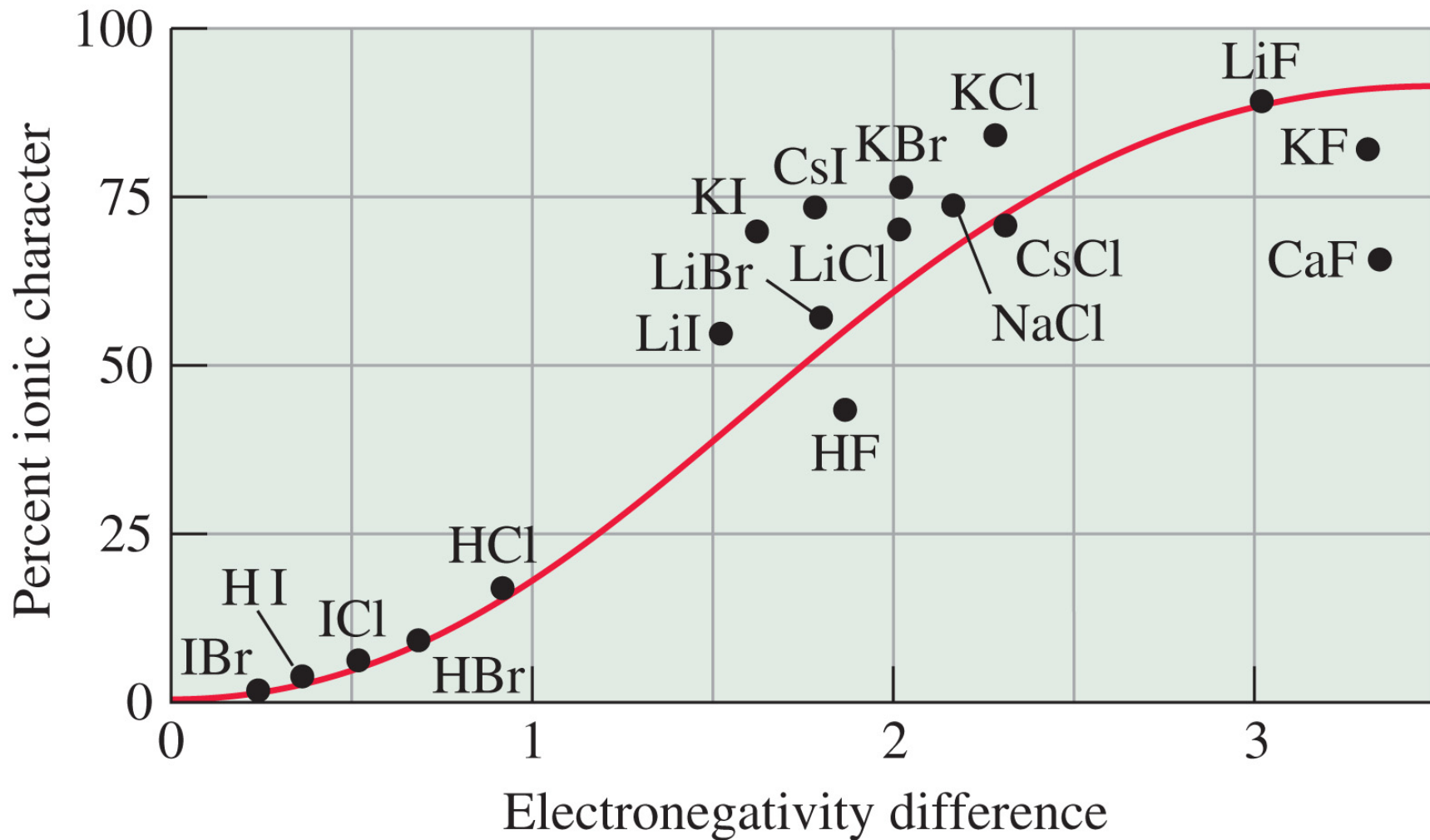


Figure 7-4 Chemistry, 5/e

© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

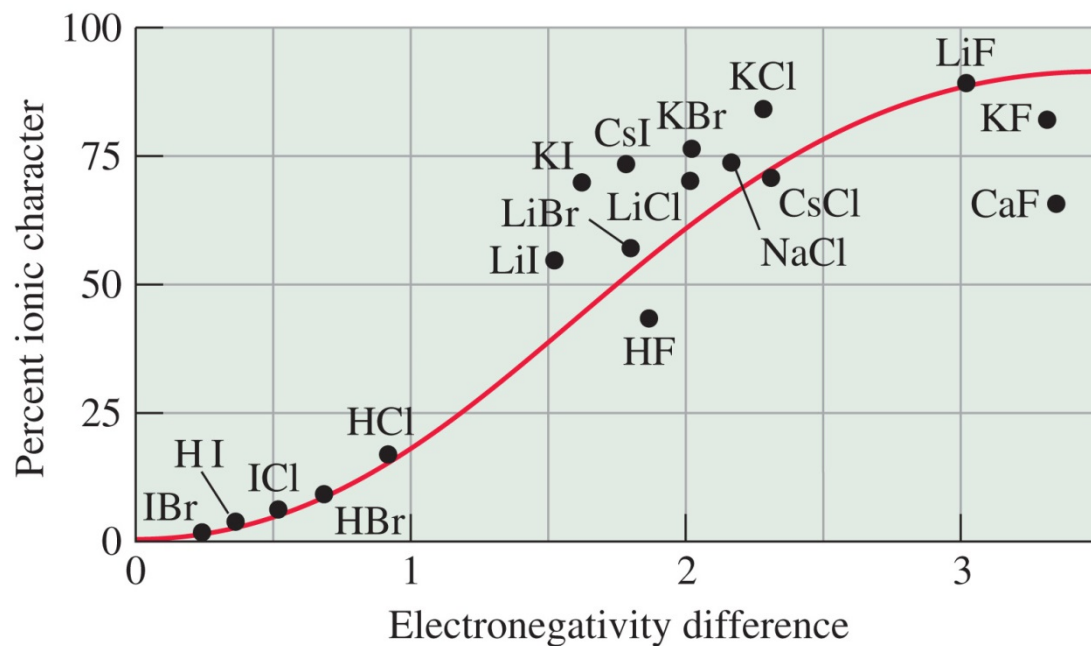


# L'enllaç químic. Electronegativitat. Escala de Pauling



# L'enllaç químic. Electronegativitat. Escala de Pauling

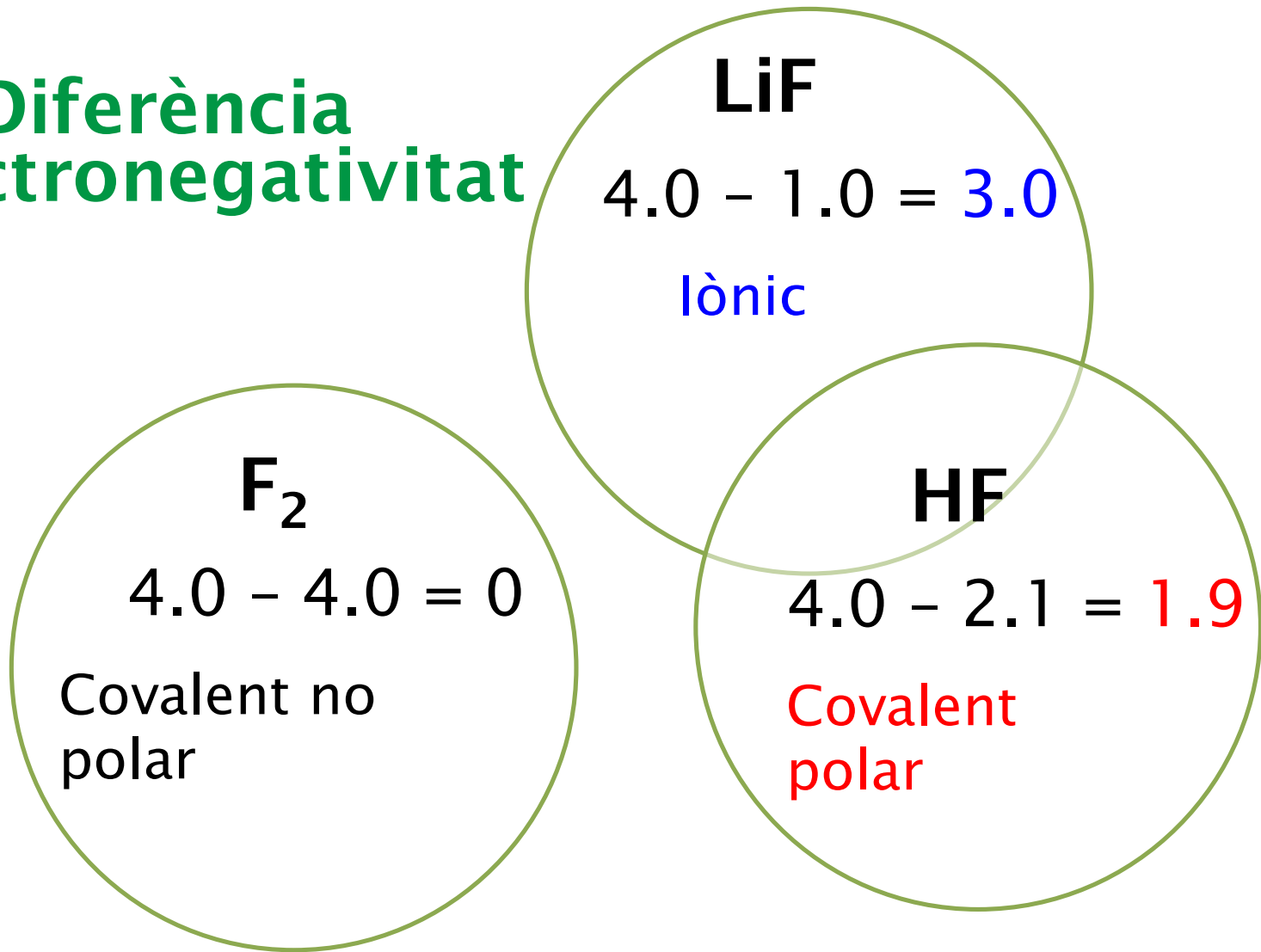
Com més gran siga la **diferència d'electronegativitat** entre dos àtoms, **més polar** en serà l'enllaç.



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic. Electronegativitat. Escala de Pauling

## Diferència d'electronegativitat



# L'enllaç químic

## Representació d'estructures de Lewis

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

1. Es dibuixa l'esquelet molecular.



Normalment **l'àtom menys electronegatiu** va al centre.

IA	IIA	Transition Metals					VIIIA	
H•							•He•	
Li•	•Be•		•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
Na•	•Mg•		•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
K•	•Ca•							

Legend:

- Representative elements (Yellow box)
- Noble gases (Green box)

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

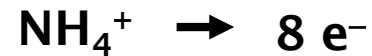
**2. Es compta** *el nombre total d'electrons de valència.*



# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

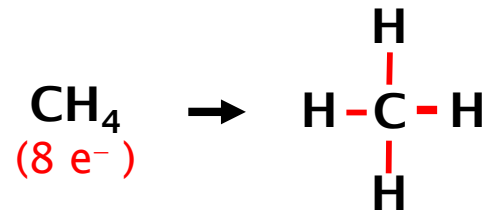
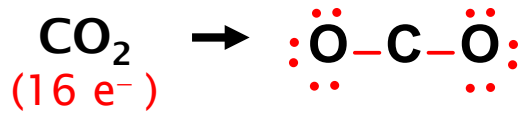
## 2. Es compta *el nombre total d'electrons de valència.*

Per a anions, se sumen les càrregues negatives, i per a cations, se'n resten les positives.



# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

**3. Es dibuixa un enllaç simple** entre l'àtom *central* (el menys *electronegatiu*) i cadascun dels àtoms que l'envolten.

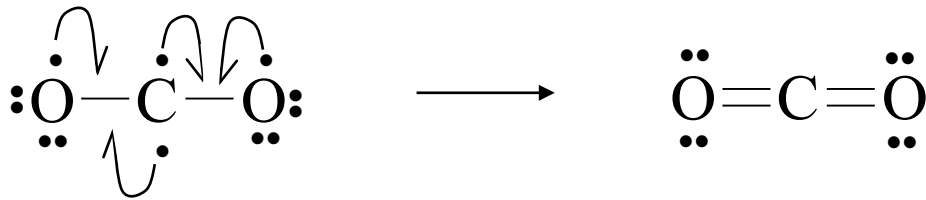
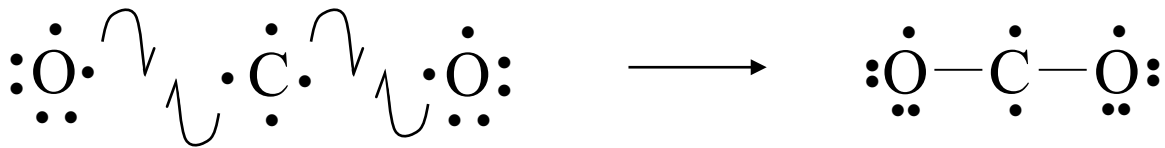


Els electrons que **no pertanyen** als enllaços poden quedar inicialment com parells solitaris.



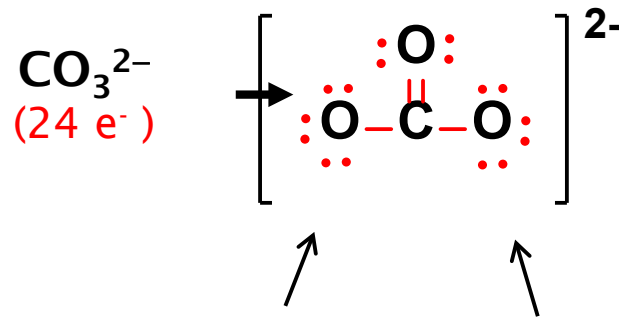
# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

**4. Si no s'acomplix la *regla de l'octet*** (doblets per a l'H) per a l'àtom central, **es poden escriure enllaços dobles o triples** utilitzant els parells solitaris dels àtoms que l'envolten.



# L'enllaç químic. Representació d'estructures de lewis

## 5. Es determina la **càrrega formal**.



*Càrrega formal = -1*

*Càrrega formal = -1*

**Diferència** entre els electrons de valència **d'un àtom aïllat** i el nombre d'electrons **assignats a aquest àtom** en una estructura de Lewis.

# L'enllaç químic. Càrregues formals

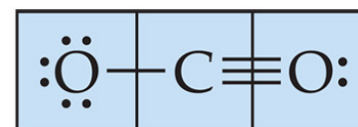
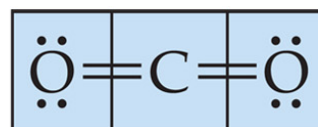
## *Càrrega formal*

d'un àtom en una estructura de Lewis.

Nombre total d'electrons de valència en l'àtom lliure.

Nombre total d'electrons no enllaçants.

$-\frac{1}{2}$  (Nombre total d'electrons d'enllaç.)



Valence electrons:

6 4 6

6 4 6

-(Electrons assigned to atom):

6 4 6

7 4 5

Formal charge:

0 0 0

-1 0 +1

# L'enllaç químic. Càrregues formals

**No representen càrregues reals dels àtoms.**

**Només representen una convenció de comptabilitat.**

**Les càrregues formals no són càrregues reals**, això es pot comprovar comparant el mapa de potencial electrostàtic de la molècula HCN que teniu en l'exposició i les càrregues formals deduïdes per a l'estructura de Lewis. El mètode usat per a assignar càrregues formals és només una forma de “comptabilitat electrònica”. **Juntament amb els estats d'oxidació**, són els dos conceptes que s'usen per a predir la distribució electrònica d'un compost. El concepte **d'estat d'oxidació** tendeix a exagerar el caràcter iònic de l'enllaç i s'usa per a predir i racionalitzar propietats de compostos.

# L'enllaç químic. Càrregues formals

**No representen càrregues reals dels àtoms.**

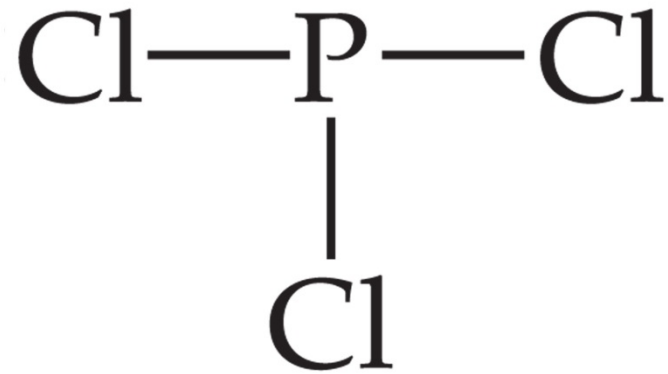
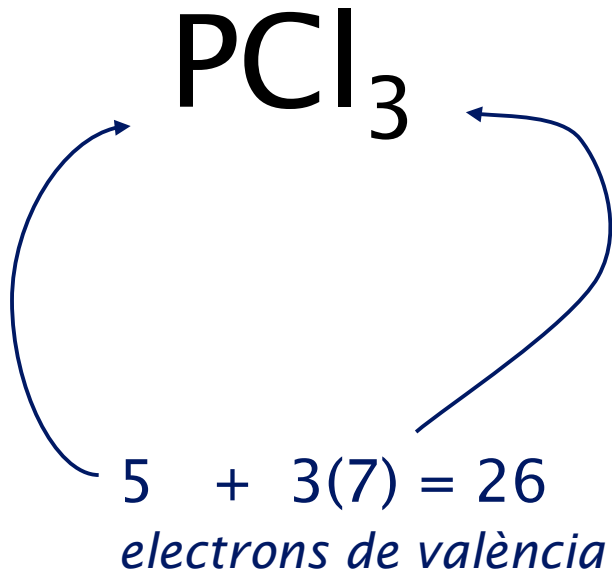
**Només representen una convenció de comptabilitat.**

D'altra banda, el concepte de *càrrega formal* tendeix a exagerar el **caràcter covalent** de l'enllaç i es fan servir per a establir quina estructura de Lewis és la més adequada.

Per a moltes molècules, l'enllaç s'acosta més al covalent pur que a l'iónic pur i, per això, **la càrrega formal** d'un àtom sol ser, però no sempre, **numèricament semblant a la càrrega real**. Aquesta és la raó per la qual es presta atenció a les càrregues formals a l'hora d'establir la importància de les diferents estructures de Lewis. Convé destacar que **els químics encara qüestionen i debaten si és cert** que la millor estructura és la que té menys càrregues formals i més reduïdes.

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

Exemples:

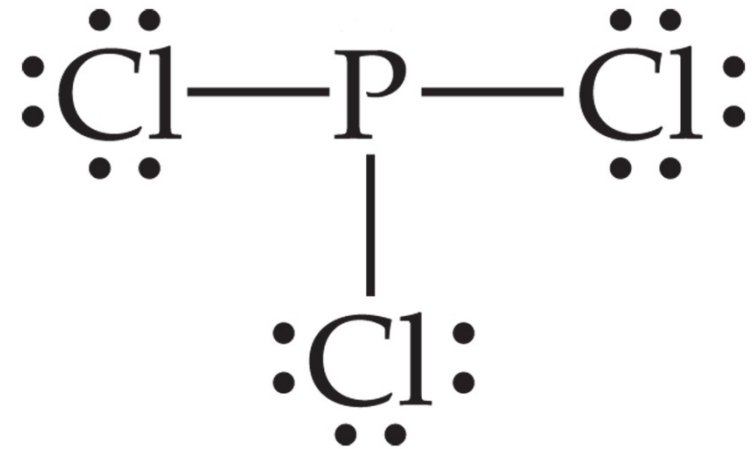


$$26 - 6 = 20$$

*electrons que falten per col·locar*

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

Exemples:



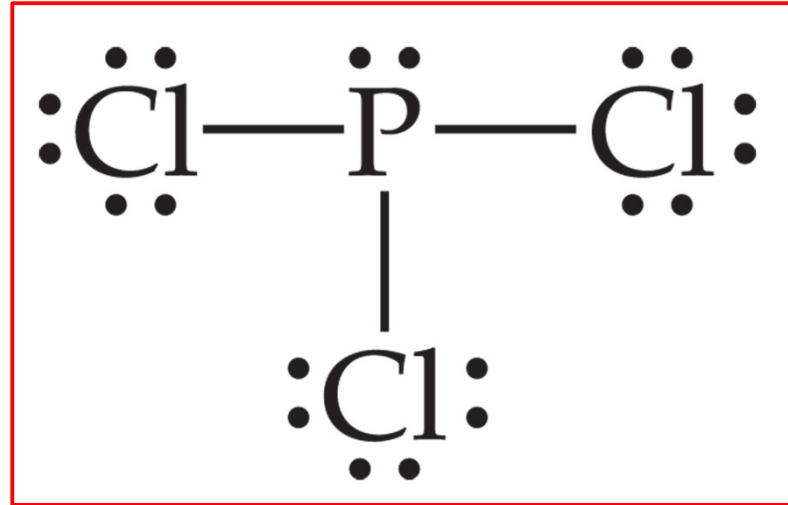
$$26 - 6 = 20$$

$$20 - 18 = 2$$

*electrons que falten per col·locar*

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

Exemples:



$$26 - 6 = 20$$

$$20 - 18 = 2$$

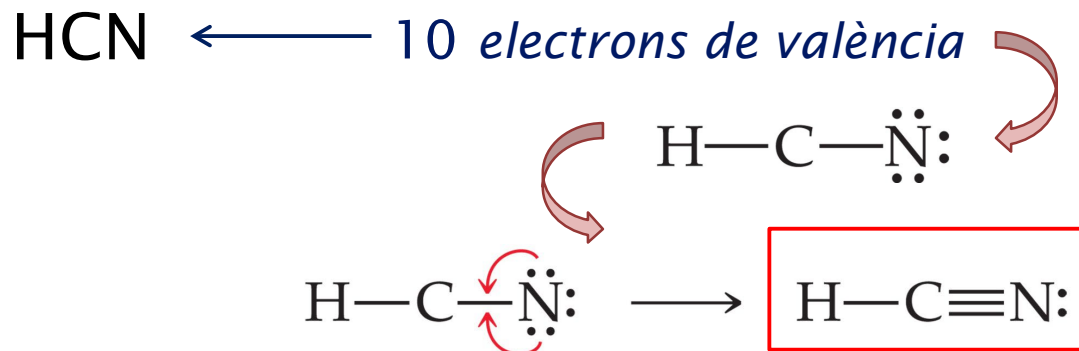
$$2 - 2 = 0$$

*electrons que falten per col·locar*

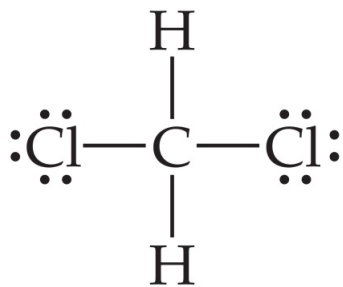


# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

Exemples:



$\text{CH}_2\text{Cl}_2$   
Diclorometà



$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ || \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \end{array}$

Formaldehid,  $\text{CH}_2\text{O}$

$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} & \\ & / & \diagdown \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$

Etilè,  $\text{C}_2\text{H}_4$

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

## Writing a Lewis Structure for a Polyatomic Ion.

Write the Lewis structure for the nitronium ion,  $\text{NO}_2^+$ .

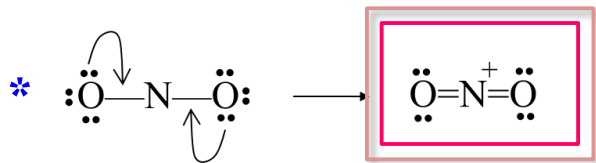
**Step 1:** Total valence  $e^- = 5 + 6 + 6 - 1 = 16 e^-$

**Step 2:** Plausible structure:  $\text{O}-\text{N}-\text{O}$

**Step 3:** Add  $e^-$  to terminal atoms:  $:\ddot{\text{O}}-\text{N}-\ddot{\text{O}}:$

**Step 4:** Determine  $e^-$  left over:  $16 - 4 - 12 = 0$

**Step 5:** Use multiple bonds to satisfy octets.

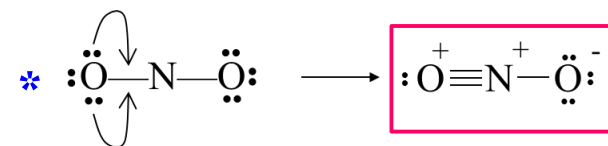


**Step 6:** Determine formal charges:

$$\text{FC}(\text{O}) = 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$$

$$\text{FC}(\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$$

Estructura alternativa:



$$\text{FC}(\text{O}\equiv) = 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$$

$$\text{FC}(\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2}(8) = +1$$

$$\text{FC}(\text{O}-) = 6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$$

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

A. Suma de càrregues formals = càrrega total del catió o anió.

B. Càrregues formals més xicotetes possibles.

C. Càrregues negatives sobre àtoms més electronegatius.

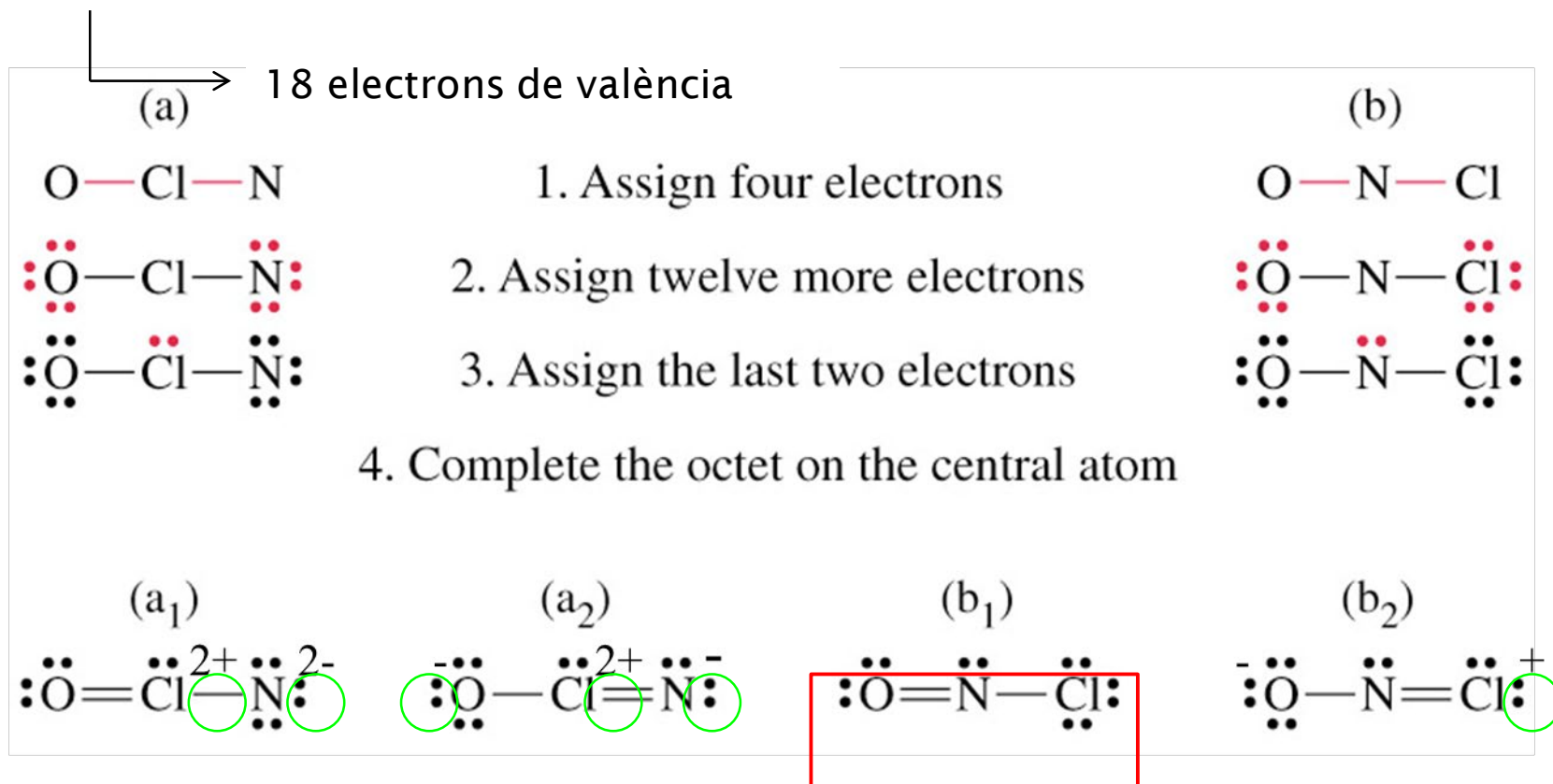
D. Estructures amb càrregues del mateix signe en àtoms adjacents són poc probables.

# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

**Exercici.** Escriviu l'estructura de Lewis més plausible per a clorur de nitrosil (NOCl), un dels oxidants que es generen en aigua règia.

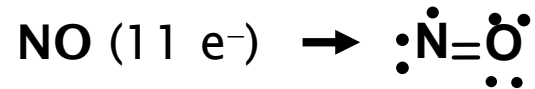
# L'enllaç químic. Representació d'estructures de Lewis

Write the most plausible Lewis structure of nitrosyl chloride, NOCl, one of the oxidizing agents present in *aqua regia*.

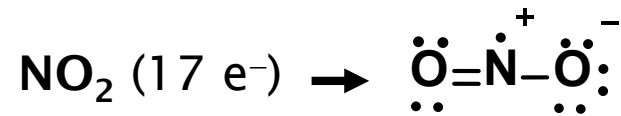


# L'enllaç químic. Excepcions a la regla de l'octet

1. Espècies amb un *nombre imparell* d'electrons de valència.



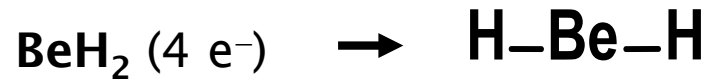
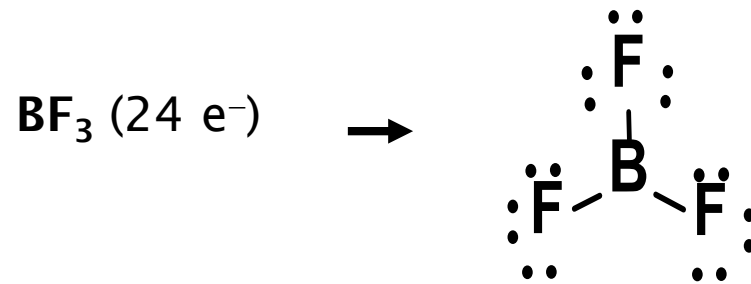
Electró com a radical.



Distribució de càrregues formals.

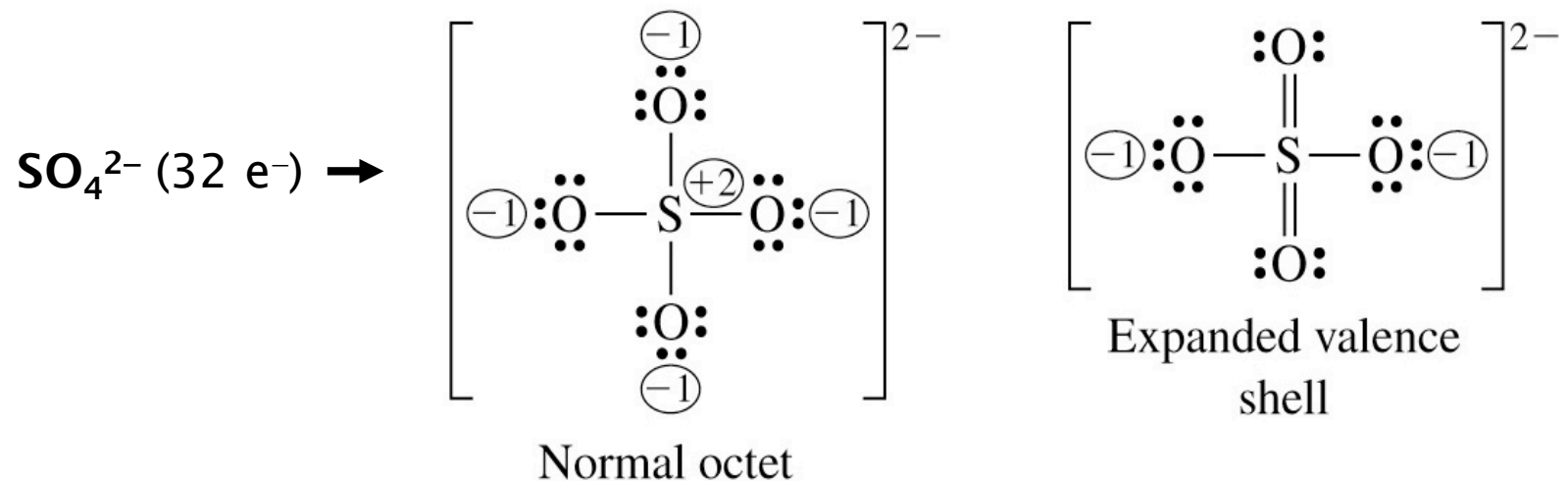
# L'enllaç químic. Excepcions a la regla de l'octet

## 2. Octet incomplet:



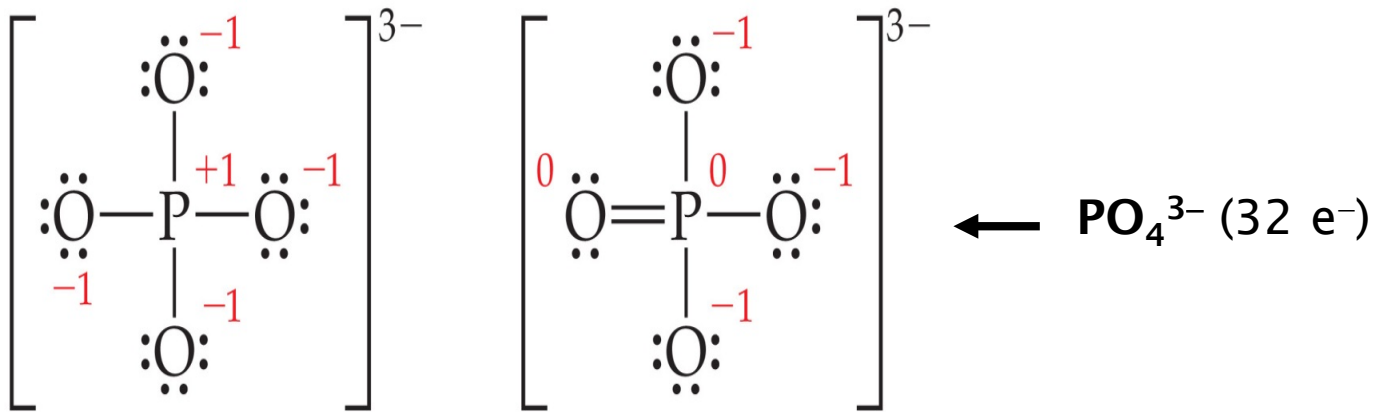
# L'enllaç químic. Excepcions a la regla de l'octet

3. *Octet expandit*: elements a partir del tercer període, amb orbitals *d* de baixa energia disponibles per a allotjar electrons.



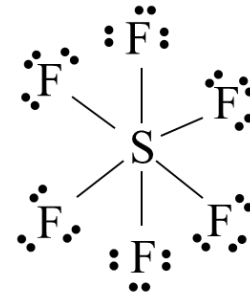
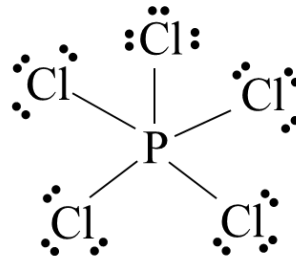
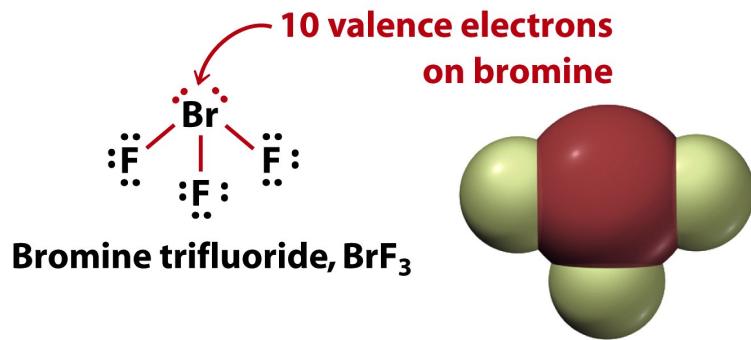


# L'enllaç químic. Excepcions a la regla de l'octet



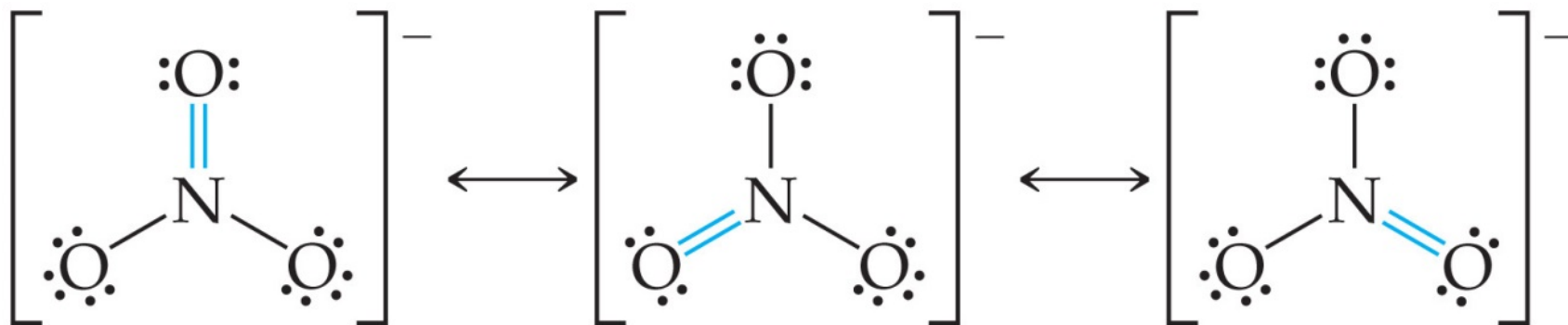
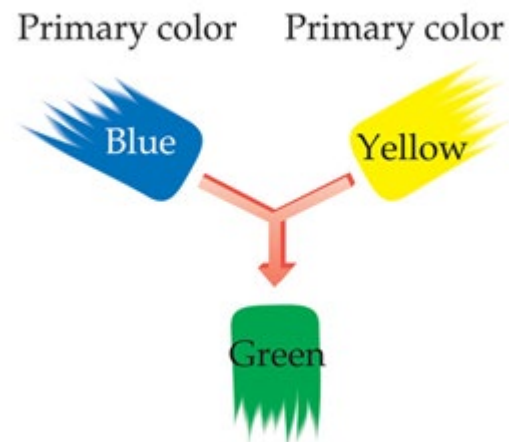
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic. Excepcions a la regla de l'octet



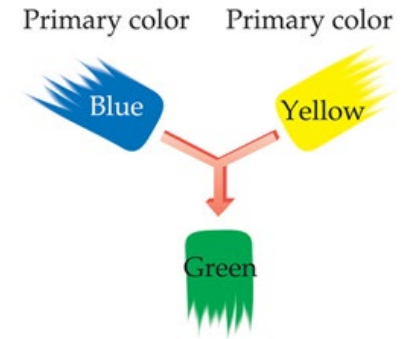
# L'enllaç químic. Ressonància

## Ió nitrat, $\text{NO}_3^-$



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

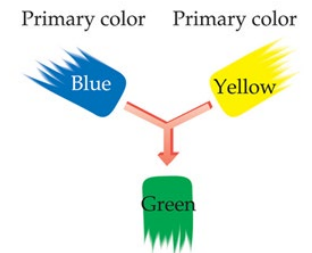
# L'enllaç químic. Ressonància



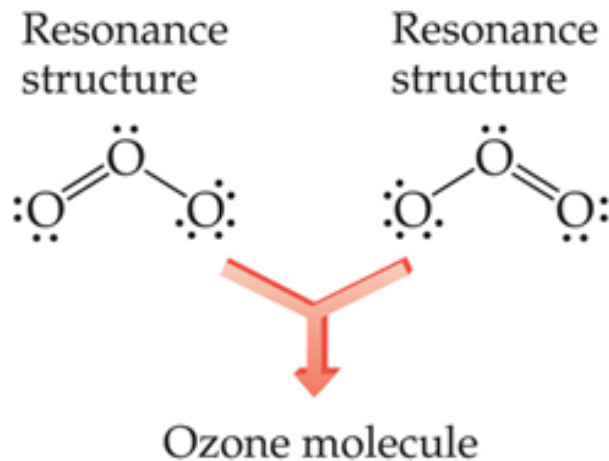
**Quina és la molècula real?**

La molècula real es descriu com la mitjana de les dues estructures de ressonància i es diu que és un **híbrid de ressonància**.

# L'enllaç químic. Ressonància

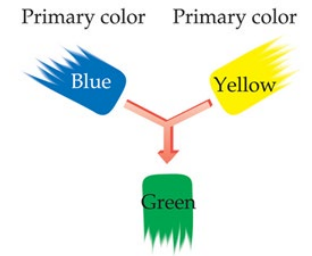


## Quina és la molècula real?

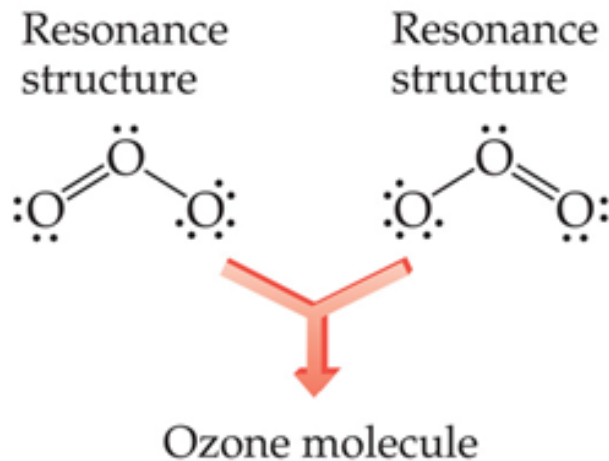


La disposició dels àtoms  
(connectivitat) és la mateixa i  
el que canvia és la  
*distribució dels electrons.*

# L'enllaç químic. Ressonància

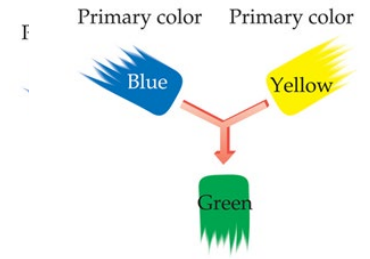


## Estabilització per ressonància

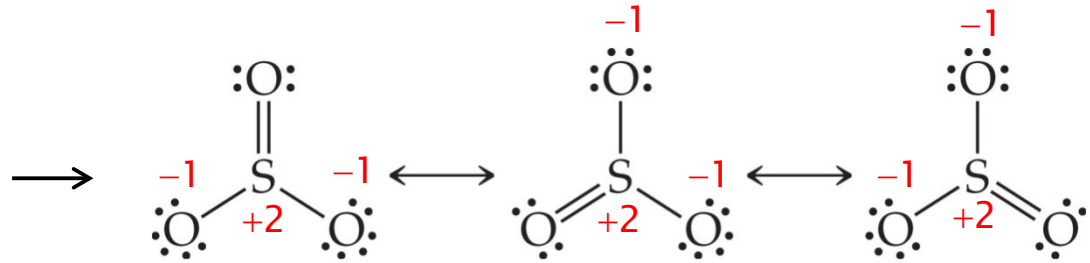


Com **més gran siga el nombre** d'estructures de ressonància *equivalents* **que es puguen dibuixar**, major serà **l'estabilitat** de la molècula.

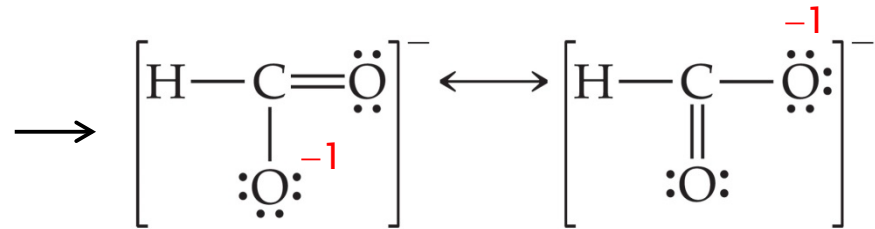
# L'enllaç químic. Ressonància



**Triòxid de sofre**



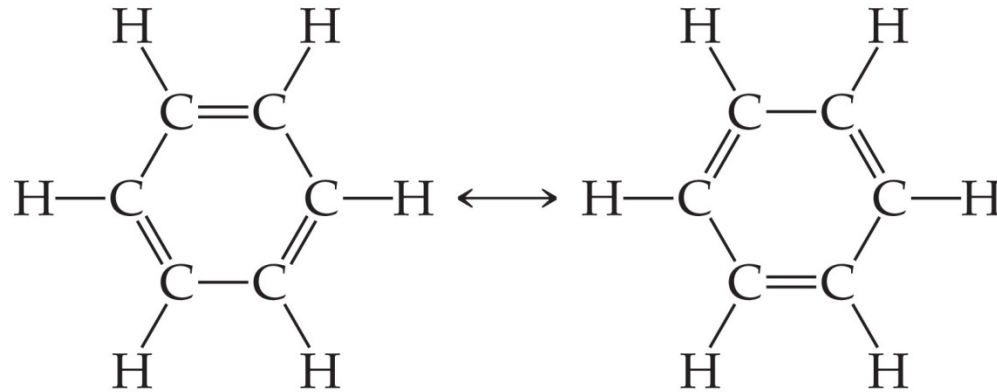
**Anió format,  $\text{HCO}_2^-$**



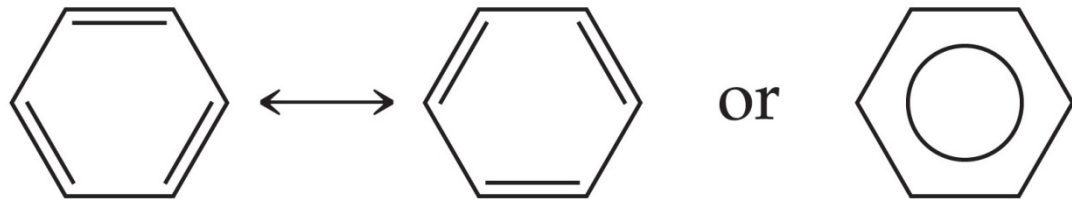
# L'enllaç químic. Ressonància

El benzè

$C_6H_6$



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



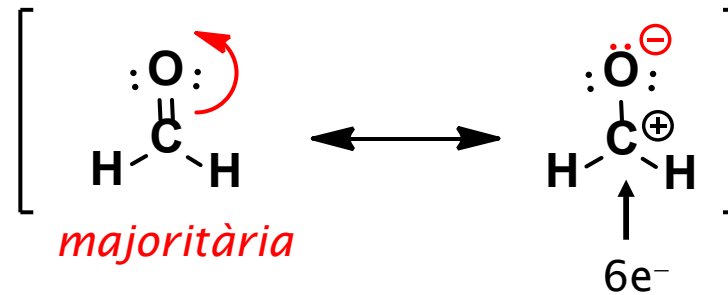
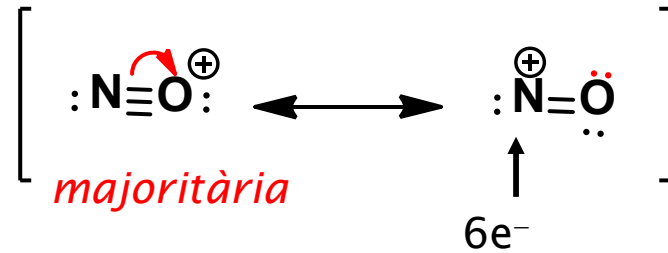
**L'enllaç químic.** Estructures ressonants NO equivalents

**I si totes les estructures  
ressonants no són equivalents?**

**Contribució a l'híbrid de  
ressonància.**

# L'enllaç químic. Estructures Ressonants NO equivalents

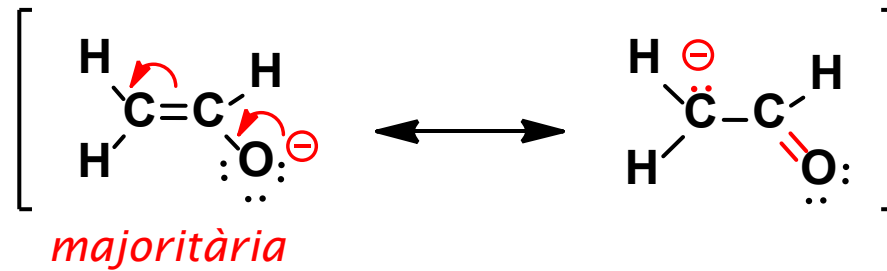
## 1r Nombre d'octets màxim.



# L'enllaç químic. Estructures Ressonants NO equivalents

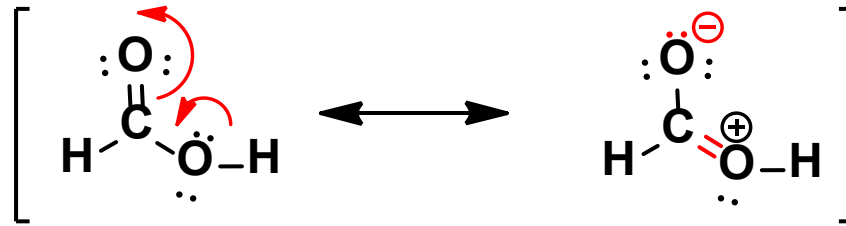
## 2n Electronegativitat

(càrregues negatives en àtoms més electronegatus).



# L'enllaç químic. Estructures Ressonants NO equivalents

## 3r Separació mínima de càrregues.



*majoritària*

# TEMA 4. ENLLAÇ QUÍMIC I

## Forma de les molècules



- Teoria RPECV
- Molècules polars i apolars

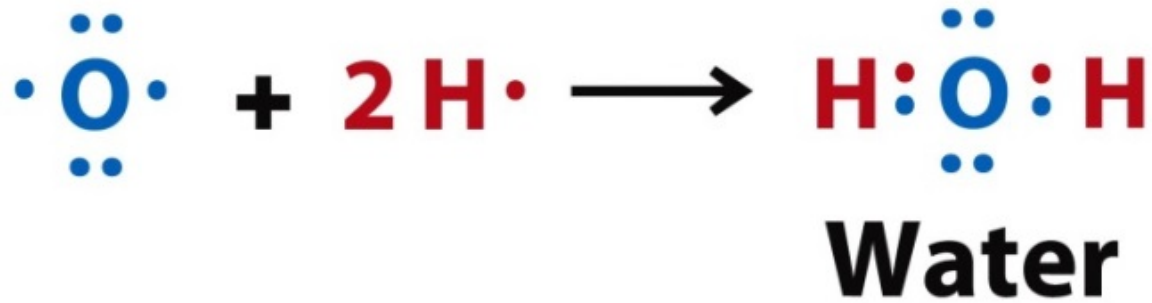


# L'enllaç químic I. Forma de les molècules

## Què és la forma molecular?

**La figura geomètrica** obtinguda quan **s'uneixen els nuclis dels àtoms enllaçats** mitjançant línies rectes.

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules

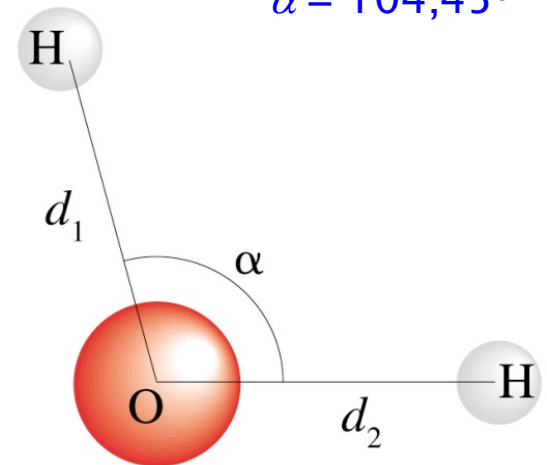


**Forma  
angular**

Unnumbered 7 p230d Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

La forma i grandària d'una molècula determinant-ne els **angles d'enllaç** i les **longituds d'enllaç**.

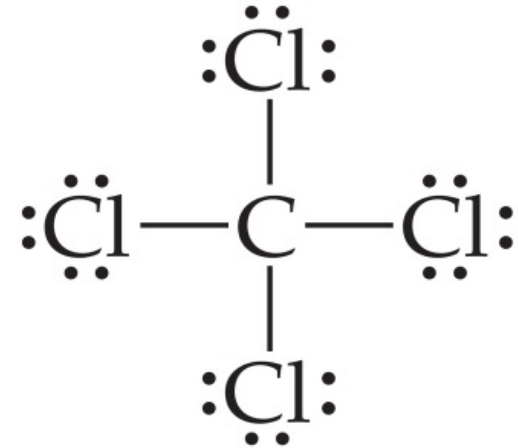
$$d_1 = d_2 = 95,8 \text{ pm}$$
$$\alpha = 104,45^\circ$$



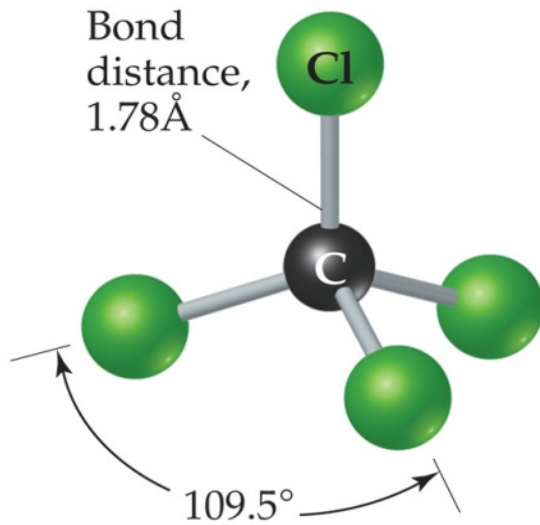
# L'enllaç químic I. Forma de les molècules



(a)



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



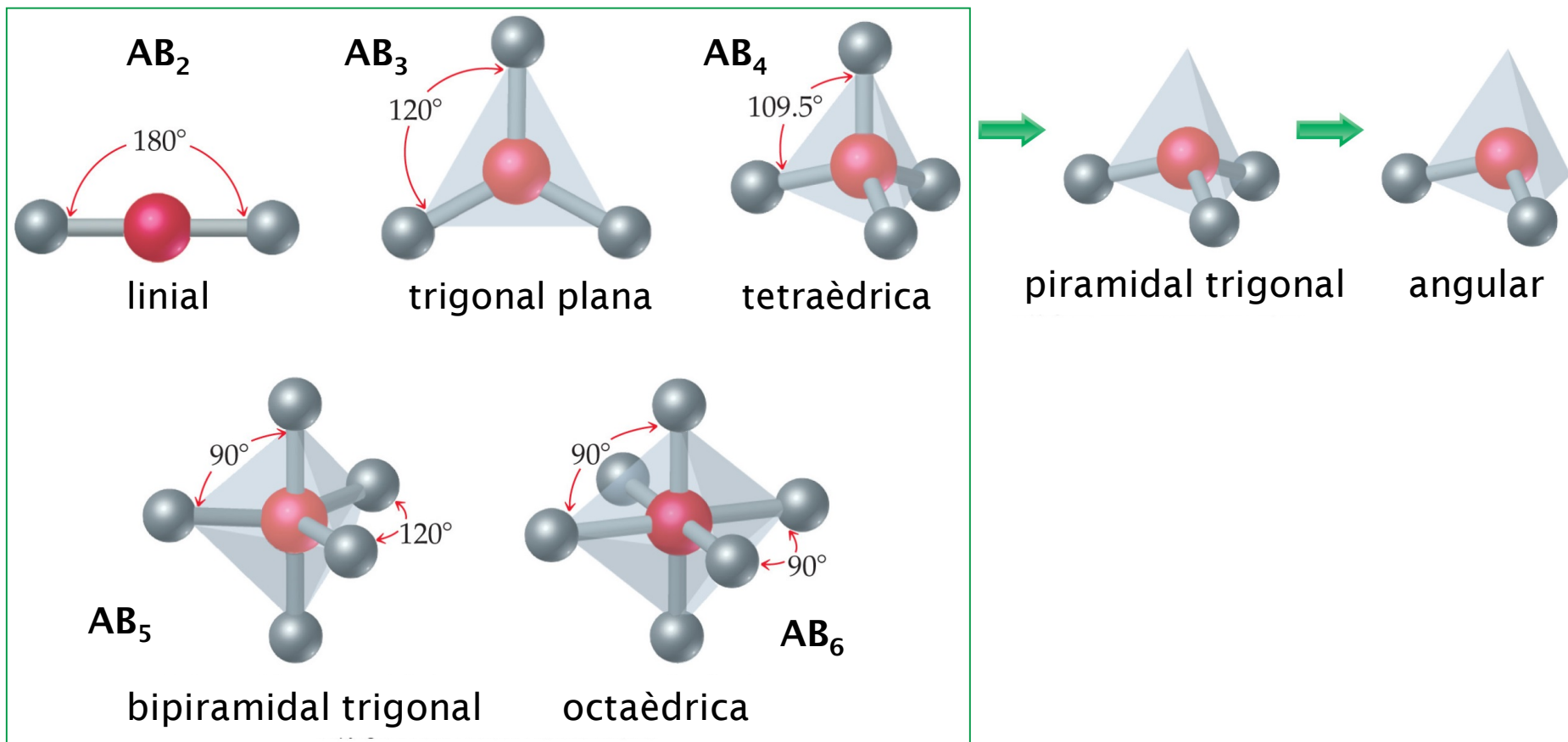
(b)

**Geometria tetraèdrica**



# L'enllaç químic I. Forma fonamental de les molècules

## Tipus $AB_n$



# L'enllaç químic I. Forma fonamental de les molècules

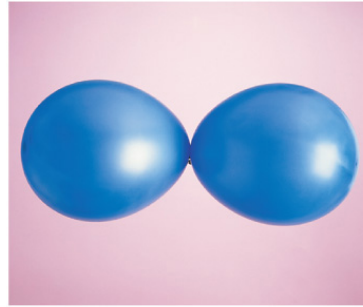
**Com poder predir la forma  
molecular?**

**Teoria de la Repulsió entre Parells  
d'Electrons de la Capa de València**

# L'enllaç químic I. Forma fonamental de les molècules

## TRPECV

Teoria de  
Gillespie



(a) Two balloons adopt a linear arrangement.

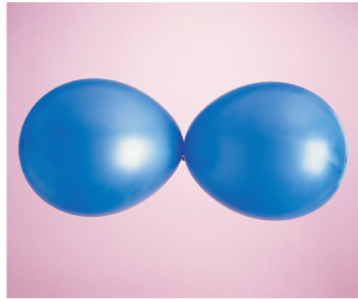


(b) Three balloons adopt a trigonal-planar arrangement.



(c) Four balloons adopt a tetrahedral arrangement.

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV



(a) Two balloons adopt a linear arrangement.



(b) Three balloons adopt a trigonal-planar arrangement.



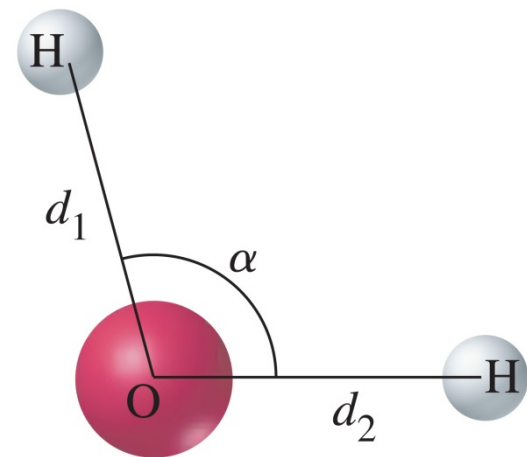
(c) Four balloons adopt a tetrahedral arrangement.

Els parells d'electrons **es repel·leixen** entre si, tant si es troben formant enllaços (*parells enllaçants*) com quan estan sense compartir (*parells solitaris*).

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV

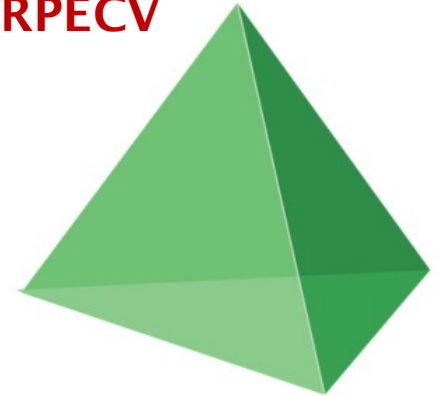
El model se centra en **dominis d'electrons** (grups) al voltant de l'àtom central, que poden ser:

- *un parell d'electrons (enllaçant o solitari);*
- *un electró desaparellat;*
- *un enllaç doble o triple.*

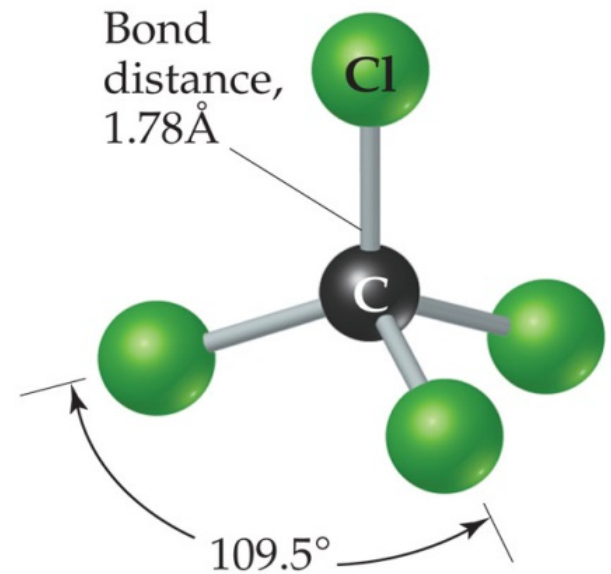


# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV

Els grups (dominis) d'electrons **es repel·leixen entre si** i es distribueixen al voltant de l'àtom central de manera que **se'n minimitzen les repulsions.**

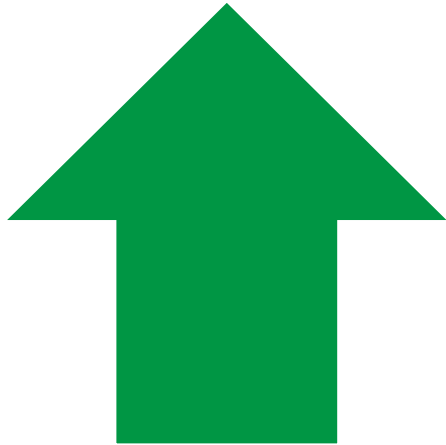


(a)

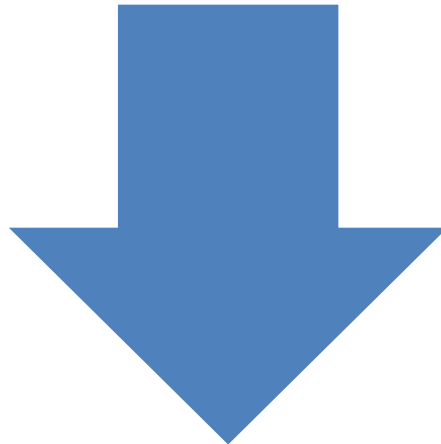


(b)

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV



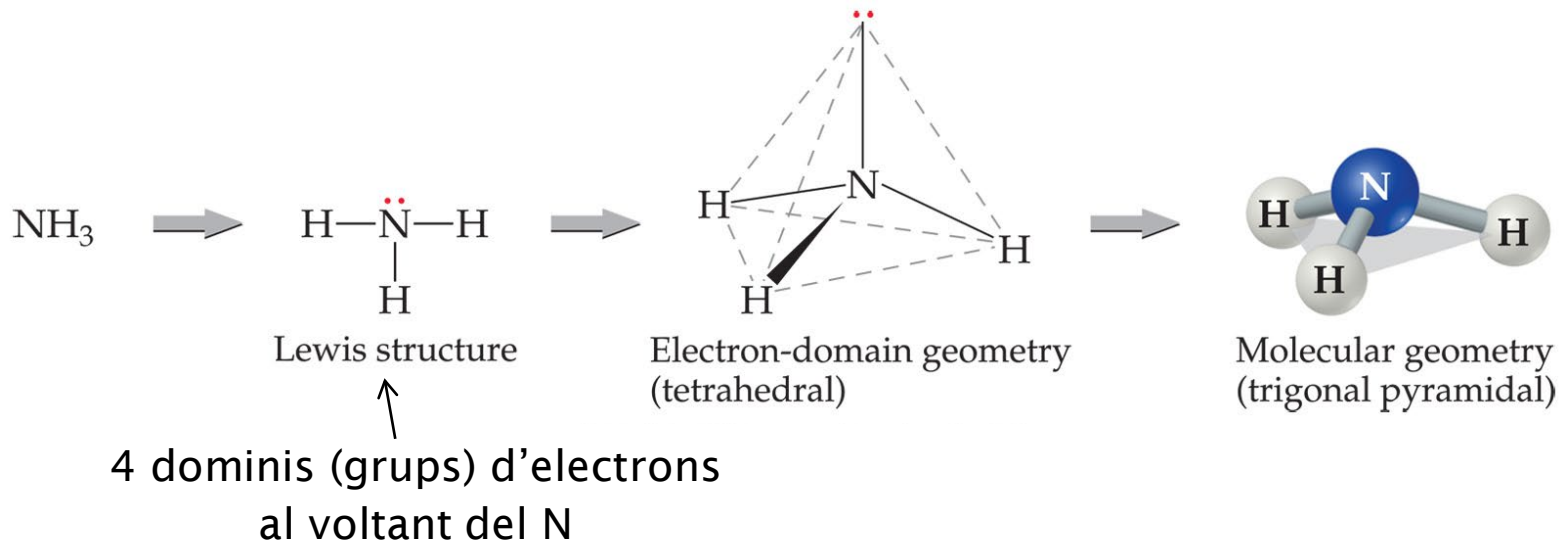
**Geometria dels dominis (grups) d'electrons:**  
disposició dels dominis d'electrons al voltant de l'àtom central d'una molècula o ió.



**Geometria molecular:**  
disposició dels àtoms en una molècula o ió; els parells no enllaçants no formen part de la descripció de la geometria molecular.

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV

Les dues coincideixen quan tots els dominis d'electrons són parells enllaçants.

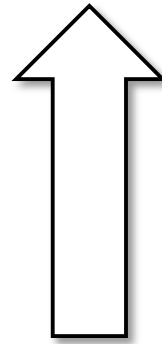




# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV

## Força de les repulsions

***Els parells d'electrons solitaris*** s'estenen més que els parells enllaçants. Per això, **la repulsió** entre dos **parells solitaris és major** que entre parells enllaçants.



*parell solitari – parell solitari*  
*parell solitari – parell enllaçant*  
*parell enllaçant – parell enllaçant*

# L'enllaç químic I. Forma de les molècules, TRPECV

Com més es force l'acostament de dos dominis d'electrons, **major serà la repulsió** entre si.

La repulsió entre dos dominis d'electrons és major per a un angle de  $90^\circ$  que per a un de  $120^\circ$  o de  $180^\circ$ .

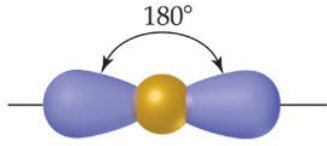
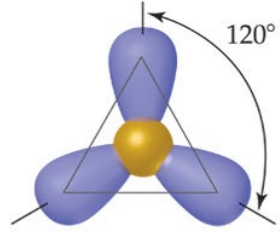
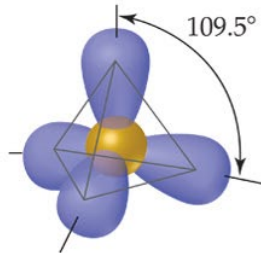
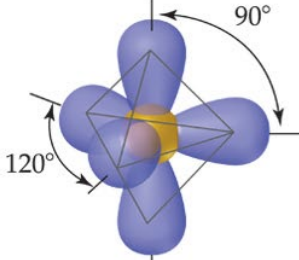
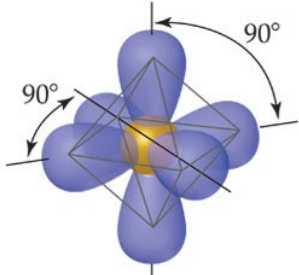
- **A**

**Els enllaços múltiples** concentren una densitat de càrrega major i, per tant, generen **repulsions major** que els senzills.

- **B**

# L'enllaç químic I.

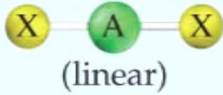

## Geometria dels dominis d'electrons

Number of Electron Domains	Arrangement of Electron Domains	Electron-Domain Geometry	Predicted Bond Angles
2		Linear	180°
3		Trigonal planar	120°
4		Tetrahedral	109.5°
5		Trigonal bipyramidal	120° 90°
6		Octahedral	90°

# L'enllaç químic I. TRPECV. Geometria lineal

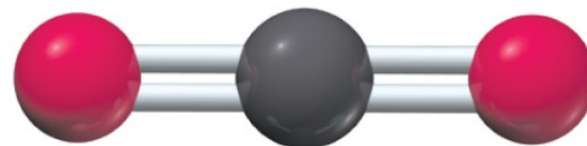
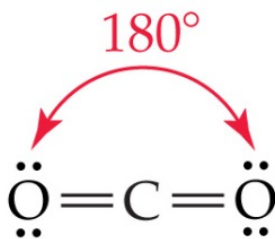
Només dona lloc a una **geometria molecular lineal**.

TABLE 10.1 Molecular Geometry as a Function of Electron-Group Geometry

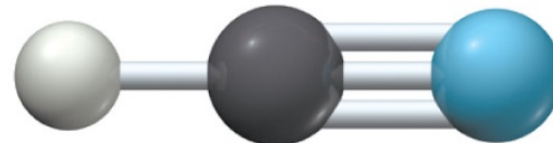
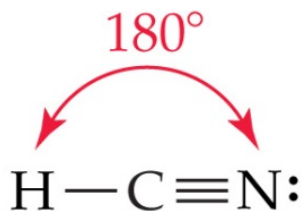
Number of Electron Groups	Electron-Group Geometry	Number of Lone Pairs	VSEPR Notation	Molecular Geometry	Ideal Bond Angles	Example
2	linear	0	AX <sub>2</sub>	 (linear)	180°	BeCl <sub>2</sub> 

# L'enllaç químic I. TRPECV. Geometria **linear**

A CO<sub>2</sub> molecule is linear, with a bond angle of 180°.



An HCN molecule is linear, with a bond angle of 180°.

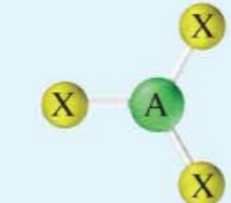

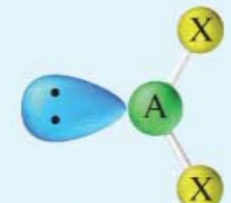


# L'enllaç químic I. TRPECV. Geometria **trigonal plana**

## 2 possibles geometries moleculars

**Trigonal plana**, si tots els dominis d'electrons són enllaçants

**Angular**, si un dels dominis és un parell no enllaçant.

3	trigonal planar	0	$AX_3$	 (trigonal planar)	$120^\circ$	$BF_3$	
	trigonal planar	1	$AX_2E$	 (bent)	$120^\circ$	$SO_2^a$	

# L'enllaç químic I. TRPECV. Geometria tetraèdrica

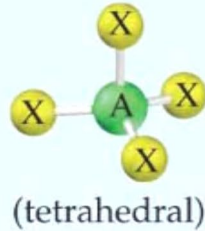
Hi ha 3 geometries possibles:  
tetraèdrica, piramidal trigonal i angular.

4

tetrahedral

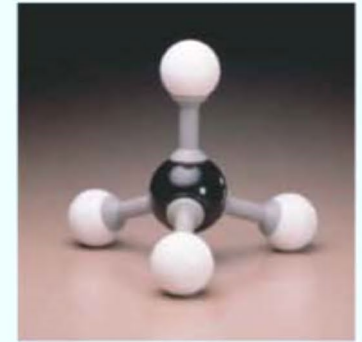
0

$AX_4$



$109.5^\circ$

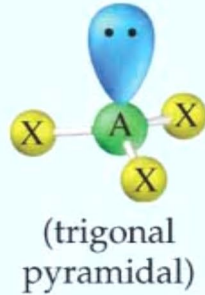
$CH_4$



tetrahedral

1

$AX_3E$



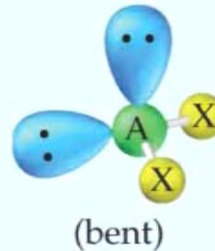
$109.5^\circ$

$NH_3$

tetrahedral

2


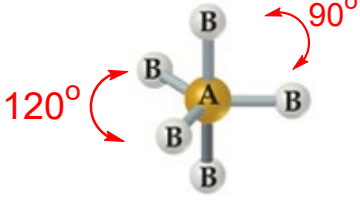

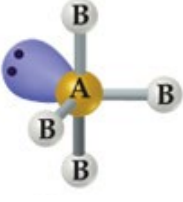

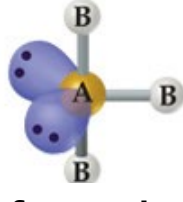

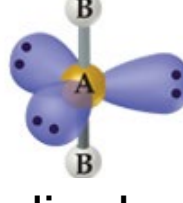
$AX_2E_2$



$109.5^\circ$

$OH_2$

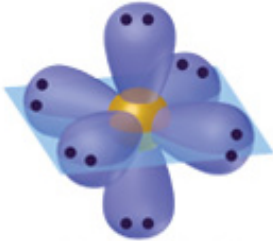
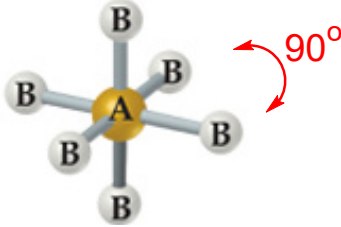
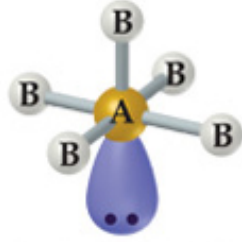
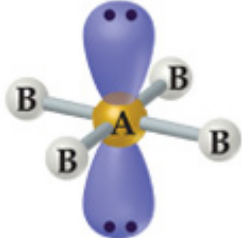
# L'enllaç químic I. TRPECV. 5 dominis d'electrons

Total Electron Domains	Electron-Domain Geometry	Bonding Domains	Nonbonding Domains	Molecular Geometry	Example
5	 <i>bipiramidal trigonal</i>	5	0 $AB_5$	 bipiramidal trigonal	$PCl_5$
	 <i>balanci</i>	4	1 $AB_4E$	 balanci	$SF_4$
	 <i>forma de T</i>	3	2 $AB_3E_2$	 forma de T	$ClF_3$
	 <i>lineal</i>	2	3 $AB_2E_3$	 lineal	$XeF_2$

Axial position  
 Equatorial positions  
 Axial position  
 2 tipus de posicions en aquesta geometria: axials i equatorials.

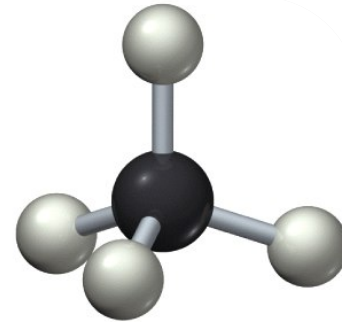
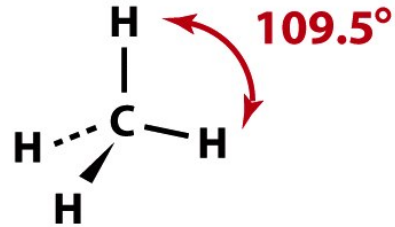


# L'enllaç químic I. TRPECV. 6 dominis d'electrons

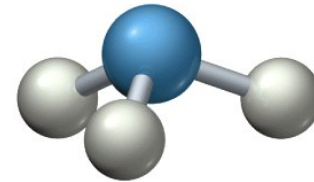
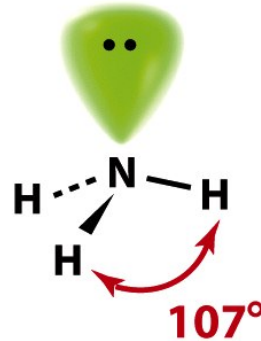
Total Electron Domains	Electron-Domain Geometry	Bonding Domains	Nonbonding Domains	Molecular Geometry	Example
6	 <i>octaèdrica</i>	6	0 $AB_6$	 <i>octaèdrica</i>	$SF_6$
		5	1 $AB_5E$	 <i>piramidal quadrada</i>	$BrF_5$
		4	2 $AB_4E_2$	 <i>pla quadrada</i>	$XeF_4$

# L'enllaç químic I. Efectes dels electrons NO enllaçants sobre els angles d'enllaç

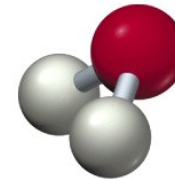
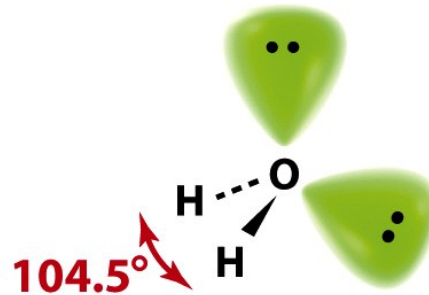
A methane molecule is tetrahedral, with bond angles of  $109.5^\circ$ .



An ammonia molecule is trigonal pyramidal, with bond angles of  $107^\circ$ .

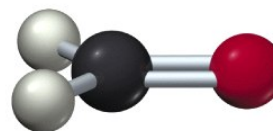
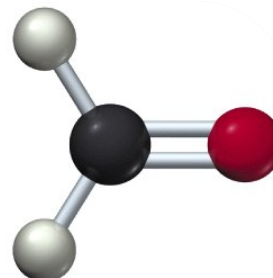
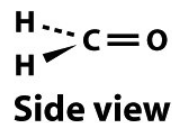
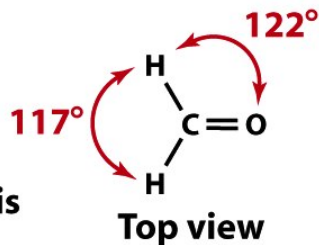


A water molecule is bent, with a bond angle of  $104.5^\circ$ .

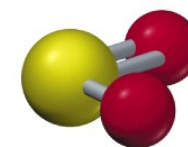
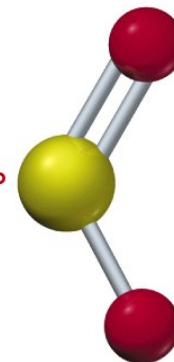
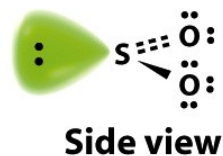
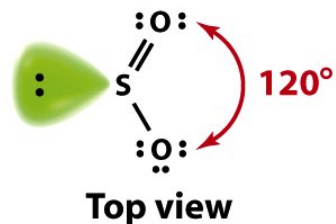


# L'enllaç químic I. Efectes dels enllaços múltiples sobre els angles d'enllaç

A formaldehyde molecule is trigonal planar, with bond angles of roughly  $120^\circ$ .

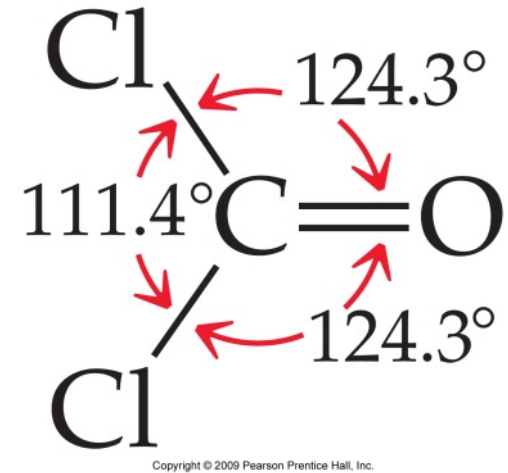
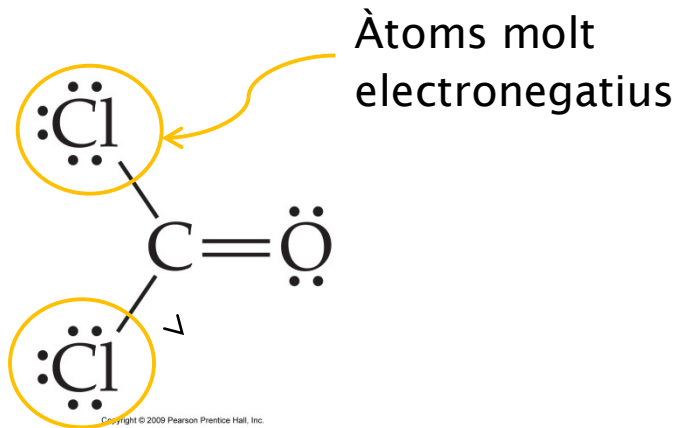


An  $\text{SO}_2$  molecule is bent with a bond angle of approximately  $120^\circ$ .



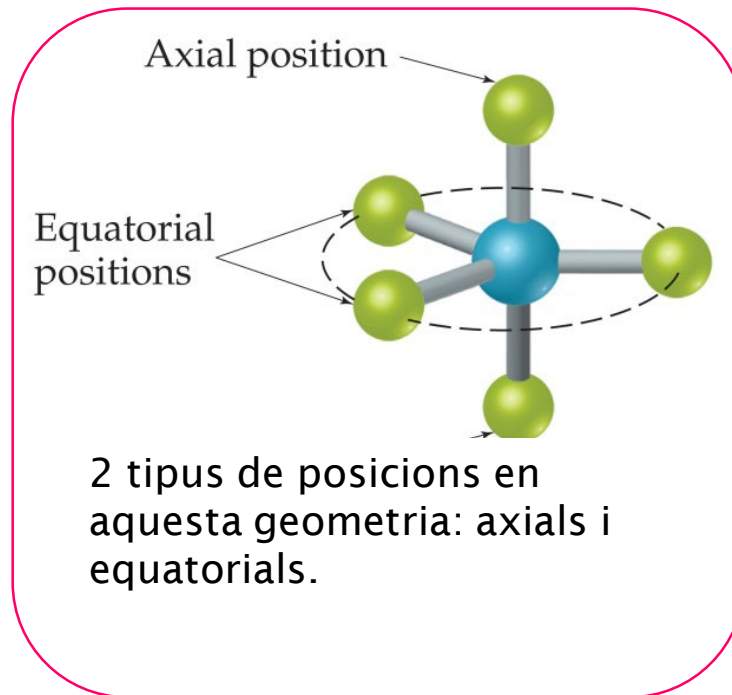
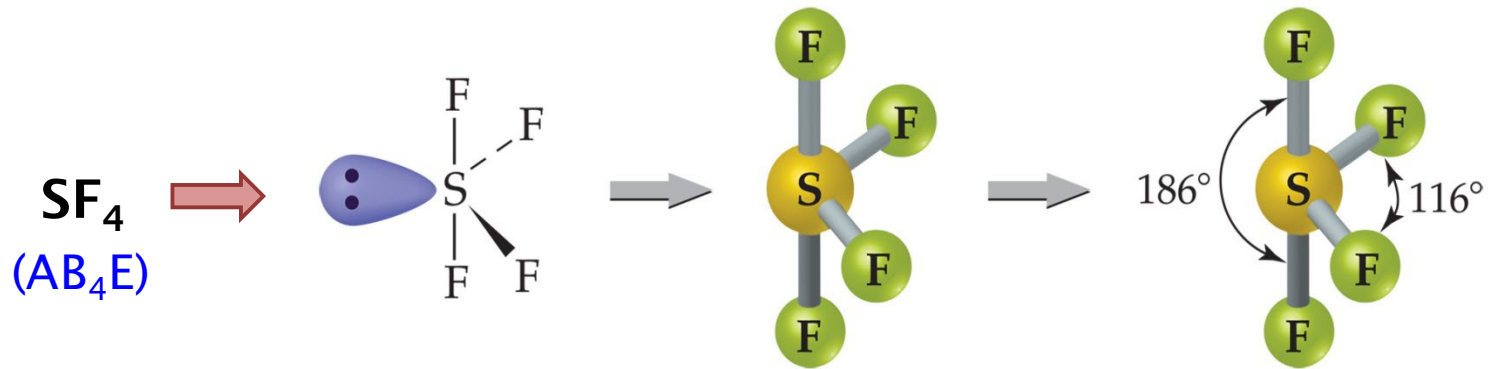
# L'enllaç químic I. Efectes dels enllaços múltiples sobre els angles d'enllaç

## Ex. fosgen ( $\text{COCl}_2$ )



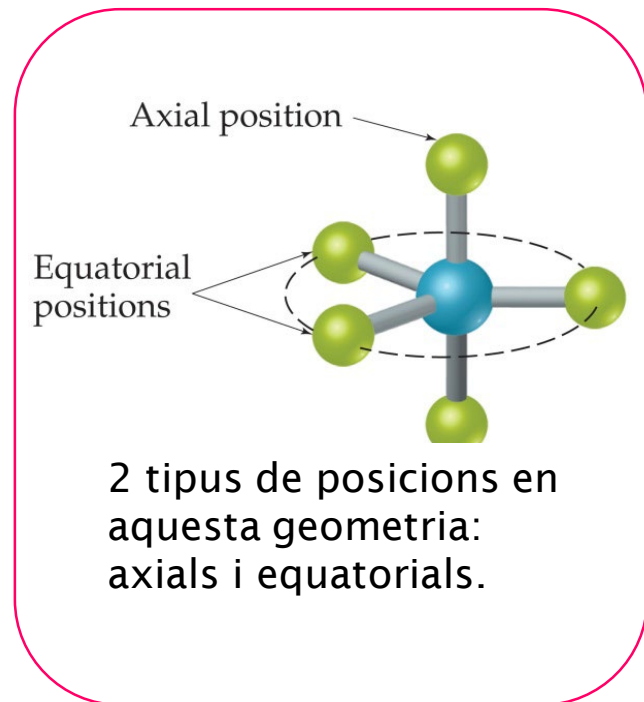
Hauria de ser  $120^\circ$ , segons la geometria **trigonal plana**; però el doble enllaç comprimeix l'angle fins a  $111.4^\circ$ .

# L'enllaç químic I. TRPECV. Exemples

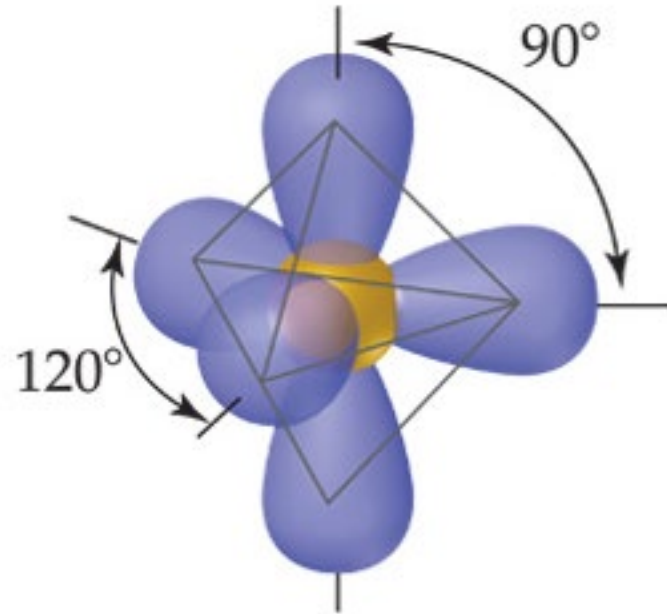
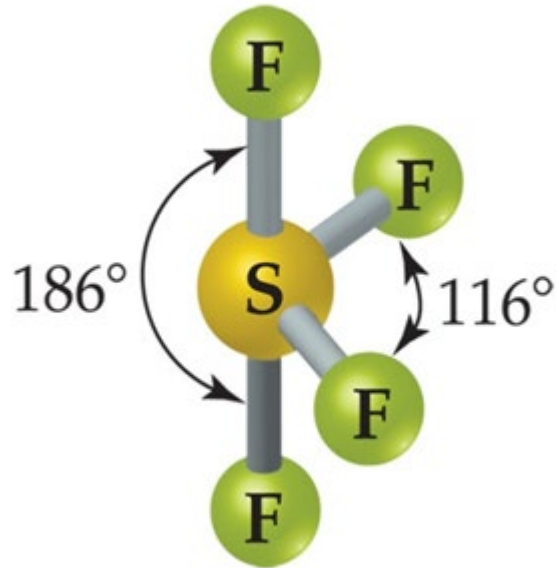


# L'enllaç químic I. TRPECV. Exemples

En aquesta geometria,  
**les conformacions  
d'energia menor**  
resulten quan es  
col·loquen els parells  
d'electrons **no**  
**enllaçants** en  
**posicions equatorials**,  
on la separació és **de**  
**120°**.



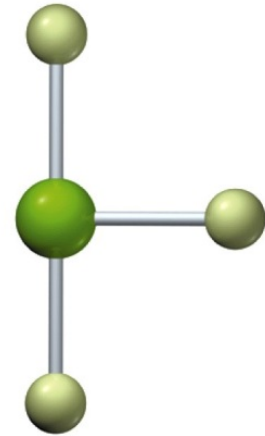
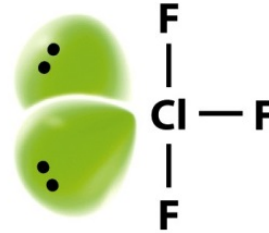
# L'enllaç químic I. **TRPECV**. Exemples



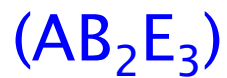
# L'enllaç químic I. TRPECV. Exemples



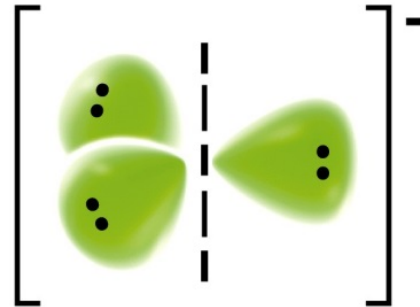
A  $ClF_3$  molecule is T-shaped (turn  $90^\circ$  to see it).



Unnumbered 7 p246c Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



An  $I_3^-$  ion is linear.



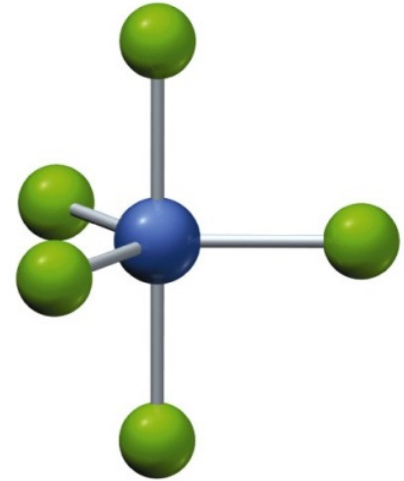
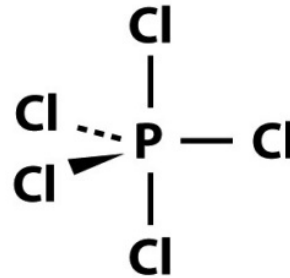
Unnumbered 7 p246d Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



# L'enllaç químic I. TRPECV. Exemples

(AB<sub>5</sub>)

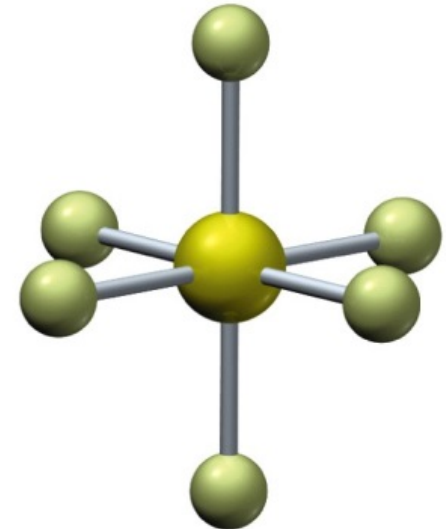
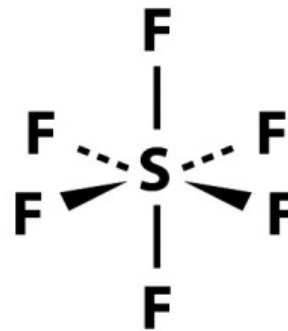
A PCl<sub>5</sub> molecule is trigonal bipyramidal.



Unnumbered 7 p246a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

(AB<sub>6</sub>)

An SF<sub>6</sub> molecule is octahedral.

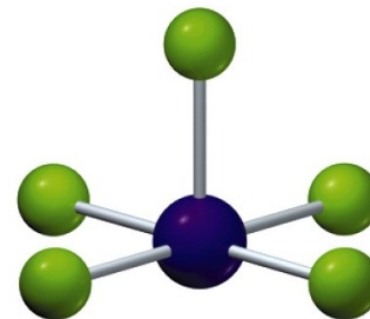
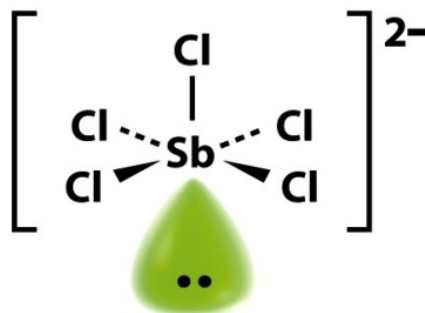


Unnumbered 7 p247b Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic I. TRPECV. Exemples

(AB<sub>5</sub>E)

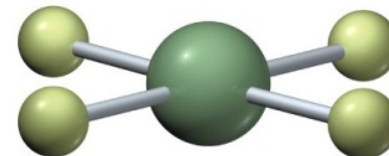
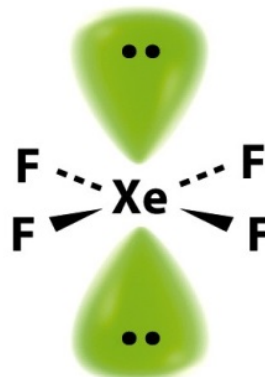
An SbCl<sub>5</sub><sup>2-</sup> ion  
has a square  
pyramidal shape.



Unnumbered 7 p247c Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

(AB<sub>4</sub>E<sub>2</sub>)

An XeF<sub>4</sub> molecule  
has a square planar  
shape.

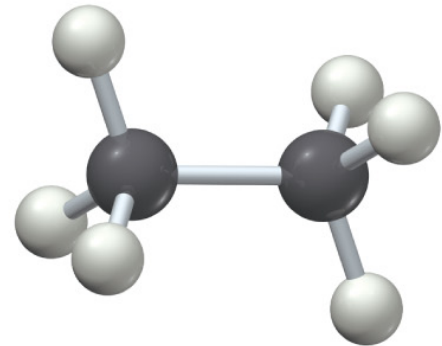
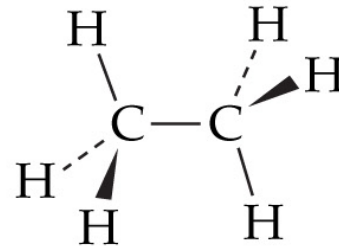
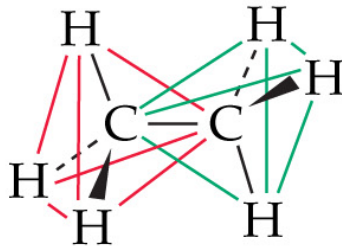


Unnumbered 7 p247d Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic I. TRPECV.

## Forma de molècules amb més d'un àtom central

Each carbon atom in ethane has tetrahedral geometry, with bond angles of  $109.5^\circ$ .

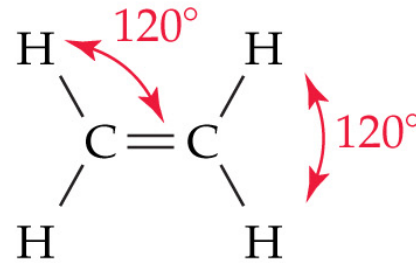
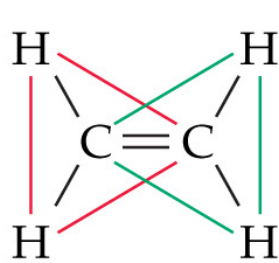


Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

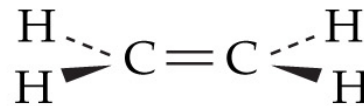
# L'enllaç químic I. TRPECV.

## Forma de molècules amb més d'un àtom central

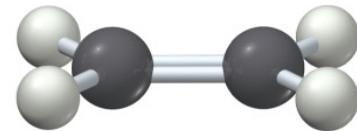
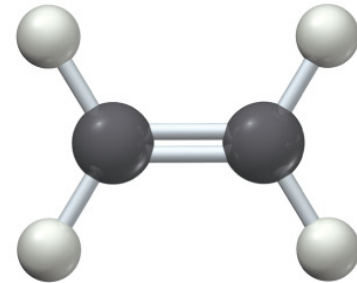
Each carbon atom in ethylene has trigonal planar geometry. As a result, the entire molecule is planar, with bond angles of  $120^\circ$ .



Top view

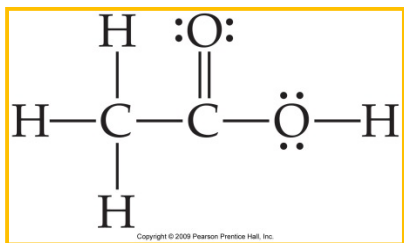


Side view



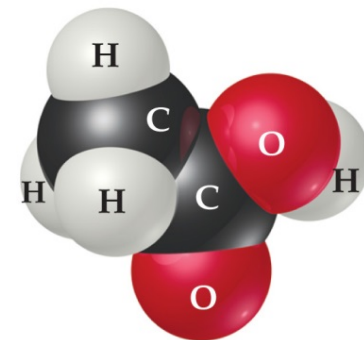
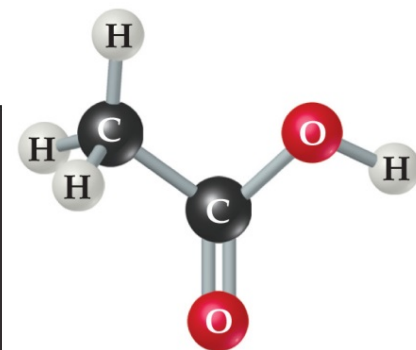
# L'enllaç químic I. TRPECV.

## Forma de molècules amb més d'un àtom central



Number of electron domains	4	3	4
Electron-domain geometry	Tetrahedral	Trigonal planar	Tetrahedral
Predicted bond angles	109.5°	120°	109.5°

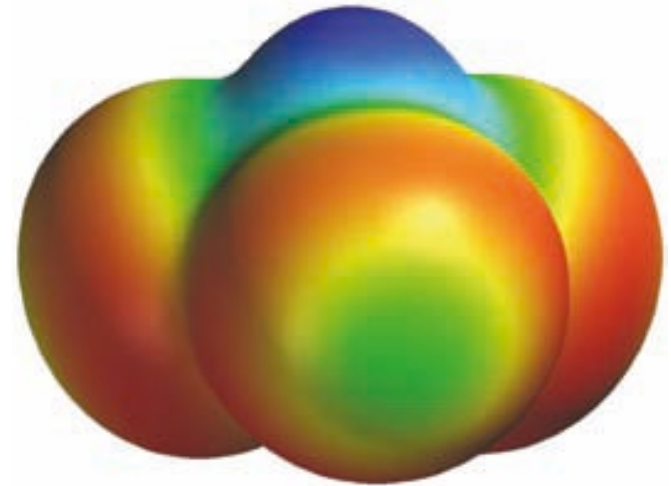
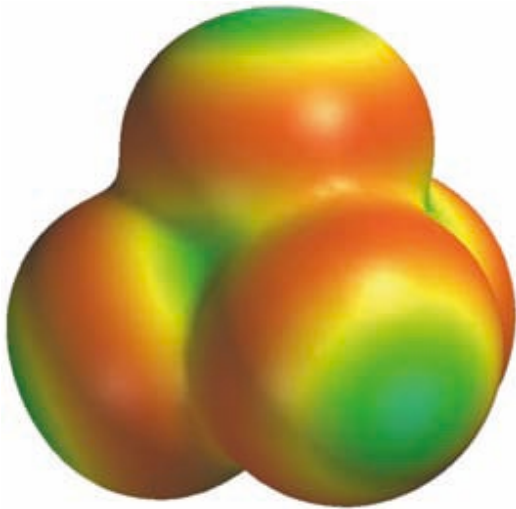
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

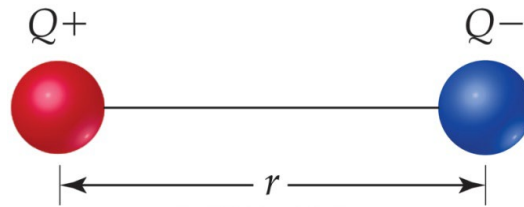
# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

## Polaritat molecular



# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

## Moment dipolar ( $\mu$ )

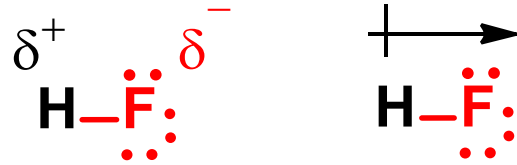


$$\mu = Q \cdot r$$

Es mesura en *debyes*

( $1D = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ )

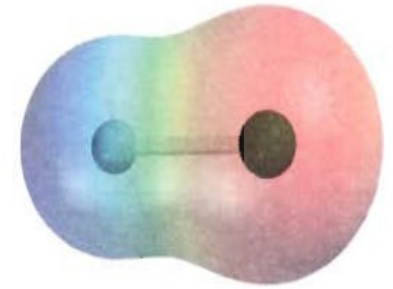
# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars



**Enllaç covalent polar**



La magnitud del desplaçament de la càrrega en un enllaç **covalent polar** ve donada pel **moment dipolar** ( $\mu$ ), que serà diferent de 0.

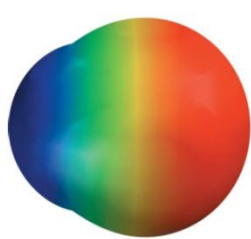


**molècula polar**



# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

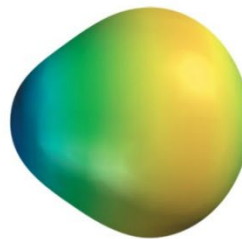
Compound	Bond Length (Å)	Electronegativity Difference	Dipole Moment (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44



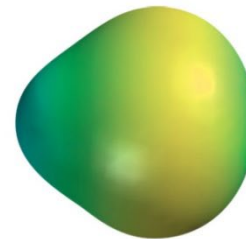
HF



HCl



HBr



HI

Com més gran siga *la diferència d'electronegativitat* entre dos àtoms, **més polar** en serà l'enllaç.

# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

**Una molècula amb enllaços polars, és sempre polar?**

La **polaritat d'una molècula** ve condicionada per dos factors:

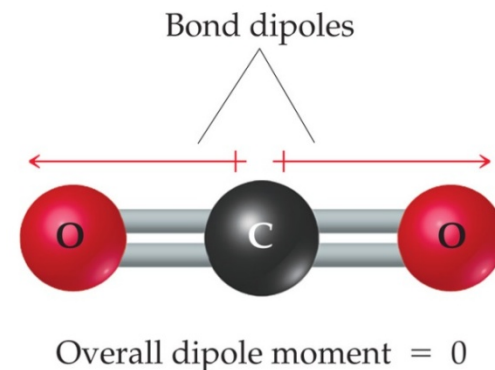
- 1) La presència d'enllaços polaritzats.
- 2) La geometria de la molècula.

# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

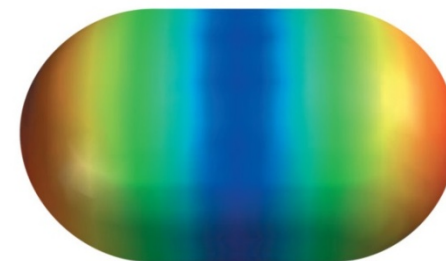
**Table 9.1** Dipole moments of selected molecules

Molecule	Dipole moment, D	Molecule	Dipole moment, D
HF	1.91	PH <sub>3</sub>	0.58
HCl	1.08	AsH <sub>3</sub>	0.20
HBr	0.80	SbH <sub>3</sub>	0.12
HI	0.42	O <sub>3</sub>	0.53
CO	0.12	CO <sub>2</sub>	0
ClF	0.88	BF <sub>3</sub>	0
NaCl*	9.00	CH <sub>4</sub>	0
CsCl*	10.42	<i>cis</i> -CHCl=CHCl	1.90
H <sub>2</sub> O	1.85	<i>trans</i> -CHCl=CHCl	0
NH <sub>3</sub>	1.47		

\*These two species consist of pairs of ions in the gas phase.



(a)



(b)

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

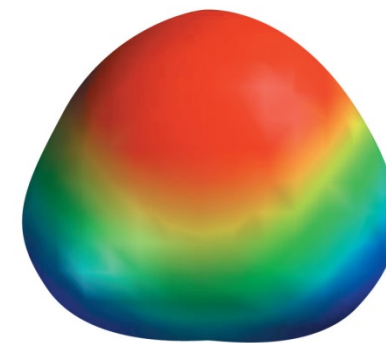
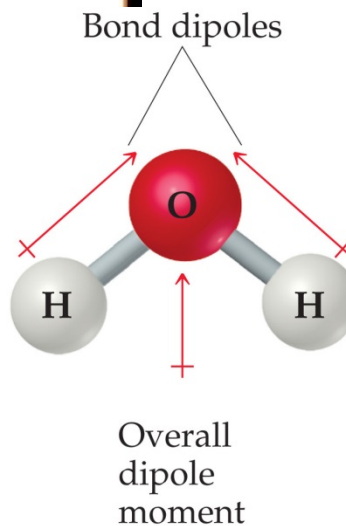
**El moment dipolar general d'una molècula poliatòmica és la suma vectorial dels seus dipols d'enllaç.**

# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars

**Table 9.1** Dipole moments of selected molecules

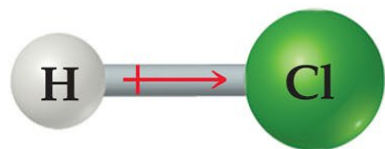
Molecule	Dipole moment, D	Molecule	Dipole moment, D
HF	1.91	PH <sub>3</sub>	0.58
HCl	1.08	AsH <sub>3</sub>	0.20
HBr	0.80	SbH <sub>3</sub>	0.12
HI	0.42	O <sub>3</sub>	0.53
CO	0.12	CO <sub>2</sub>	0
ClF	0.88	BF <sub>3</sub>	0
NaCl*	9.00	CH <sub>4</sub>	0
CsCl*	10.42	<i>cis</i> -CHCl=CHCl	1.90
H <sub>2</sub> O	1.85	<i>trans</i> -CHCl=CHCl	0
NH <sub>3</sub>	1.47		

\*These two species consist of pairs of ions in the gas phase.

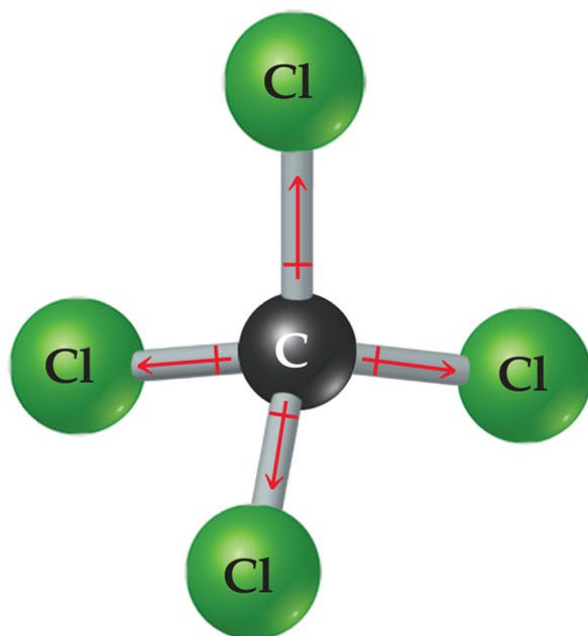


# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars. Exemples

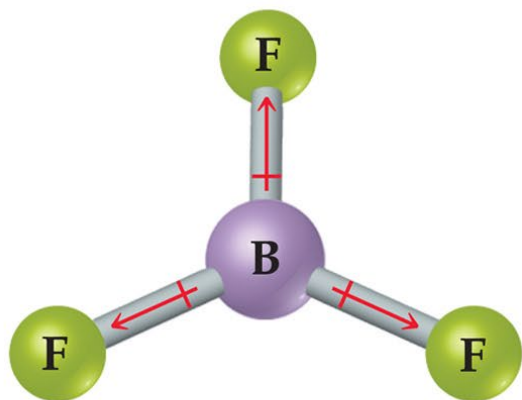
Exemples:



Polar

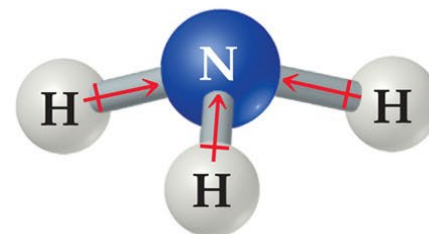


Nonpolar

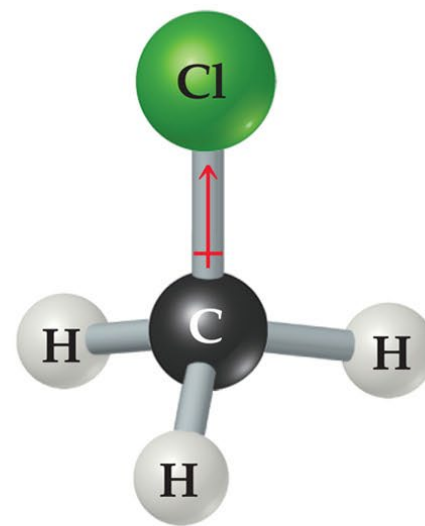


Nonpolar

→ Àtom central envoltat simètricament per àtoms idèntics.



Polar



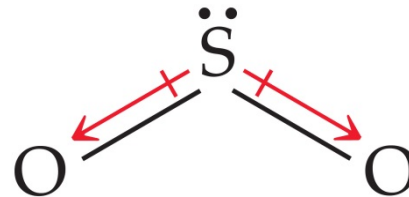
Polar

# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars. Exemples.

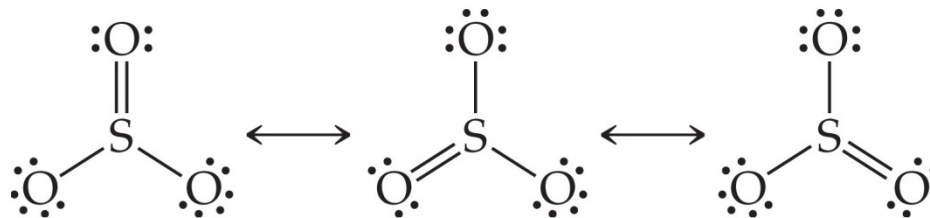
Exemples:



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



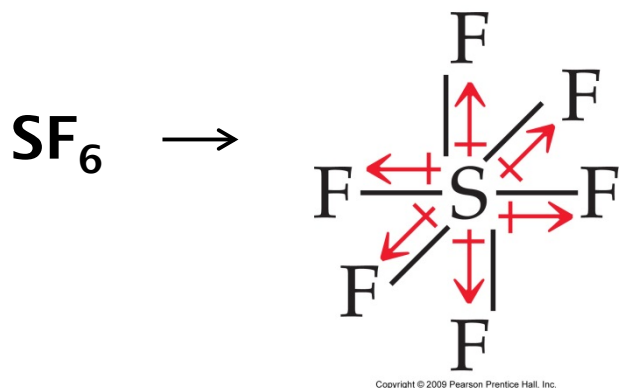
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

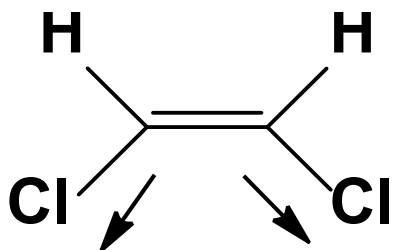
*Molècula apolar,  $\mu = 0$*

# L'enllaç químic I. Molècules polars i apolars. Exemples.

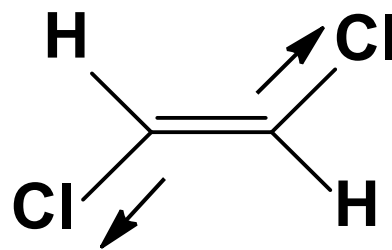


*Molècula apolar,  $\mu = 0$*

(La geometria octaèdrica és simètrica.)



*Molècula polar,  $\mu = 1.90$*



*Molècula apolar,  $\mu = 0$*

# TEMA 4. ENLLAÇ QUÍMIC I

## Força dels enllaços covalents



Ordre i longitud d'enllaç

Energia d'enllaç





# L'enllaç químic I. Força dels enllaços covalents

TABLE 11.2 Some Average Bond Lengths<sup>a</sup>

Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm
H—H	74.14	C—C	154	N—N	145
H—C	110	C=C	134	N=N	123
H—N	100	C≡C	120	N≡N	109.8
H—O	97	C—N	147	N—O	136
H—S	132	C=N	128	N=O	120
H—F	91.7	C≡N	116	O—O	145
H—Cl	127.4	C—O	143	O=O	121
H—Br	141.4	C=O	120	F—F	143
H—I	160.9	C—Cl	178	Cl—Cl	199
				Br—Br	228
				I—I	266

**Longitud d'enllaç:**  
distància entre els centres de dos àtoms units per un enllaç covalent.

<sup>a</sup>Most values (C—H, N—H, C—H, ...) are averaged over a number of species containing the indicated bond and may vary by a few picometers. Where a diatomic molecule exists, the value given is the actual bond length in that molecule (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, HF, ...) and is known more precisely.

# L'enllaç químic I. Força dels enllaços covalents

TABLE 11.2 Some Average Bond Lengths<sup>a</sup>

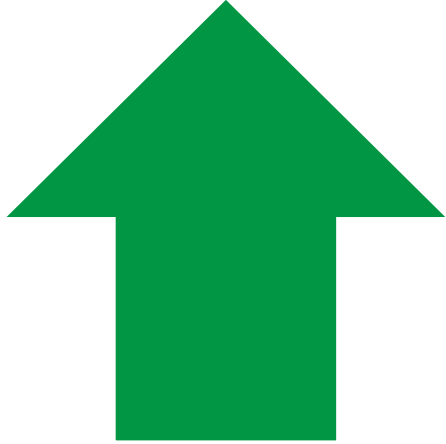
Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm
H—H	74.14	C—C	154	N—N	145
H—C	110	C=C	134	N=N	123
H—N	100	C≡C	120	N≡N	109.8
H—O	97	C—N	147	N—O	136
H—S	132	C=N	128	N=O	120
H—F	91.7	C≡N	116	O—O	145
H—Cl	127.4	C—O	143	O=O	121
H—Br	141.4	C=O	120	F—F	143
H—I	160.9	C—Cl	178	Cl—Cl	199
				Br—Br	228
				I—I	266

**Ordre d'enllaç:**  
descriu si un enllaç  
covalent és...

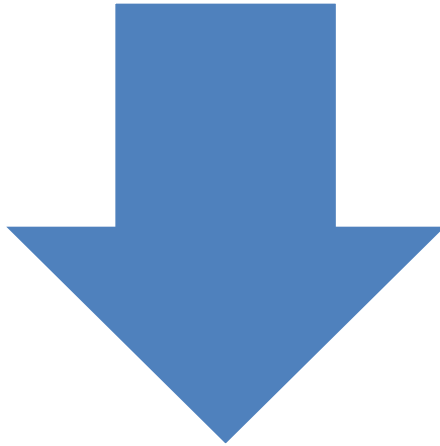
*simple* (ordre d'enllaç = 1),  
*doble* (ordre d'enllaç = 2) o  
*triple* (ordre d'enllaç = 3).

<sup>a</sup>Most values (C—H, N—H, C—H, ...) are averaged over a number of species containing the indicated bond and may vary by a few picometers. Where a diatomic molecule exists, the value given is the actual bond length in that molecule (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, HF, ...) and is known more precisely.

# L'enllaç químic I. **Força dels enllaços covalents**



**Com més  
ordre d'enllaç,**



**menys  
longitud i més  
energia de  
l'enllaç.**

# L'enllaç químic I. Força dels enllaços covalents

**Exercici:** determineu la longitud d'enllaç en la molècula BrCl.

**Resultat:** 214 pm

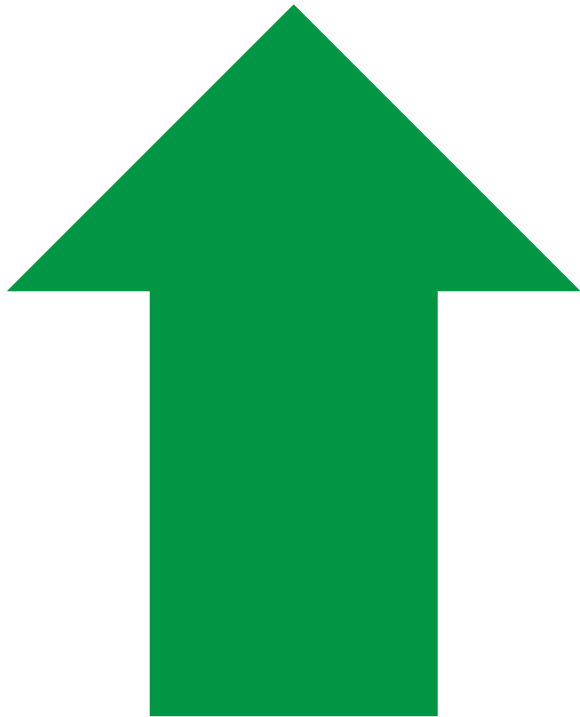
**Observada:** 213.4 pm

TABLE 11.2 Some Average Bond Lengths<sup>a</sup>

Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm	Bond	Bond Length, pm
H—H	74.14	C—C	154	N—N	145
H—C	110	C=C	134	N=N	123
H—N	100	C≡C	120	N≡N	109.8
H—O	97	C—N	147	N—O	136
H—S	132	C=N	128	N=O	120
H—F	91.7	C≡N	116	O—O	145
H—Cl	127.4	C—O	143	O=O	121
H—Br	141.4	C=O	120	F—F	143
H—I	160.9	C—Cl	178	Cl—Cl	199
				Br—Br	228
				I—I	266

<sup>a</sup>Most values (C—H, N—H, C—H, ...) are averaged over a number of species containing the indicated bond and may vary by a few picometers. Where a diatomic molecule exists, the value given is the actual bond length in that molecule (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, HF, ...) and is known more precisely.

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

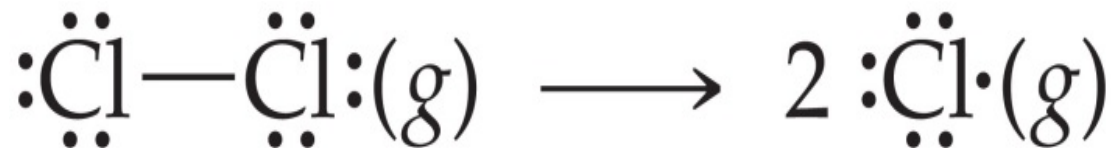


**L'estabilitat d'una molècula es relaciona amb la força dels enllaços covalents que conté.** La força d'un enllaç covalent entre dos àtoms es determina per l'energia necessària per a trencar l'enllaç.

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

## Energia de dissociació o entalpia d'enllaç

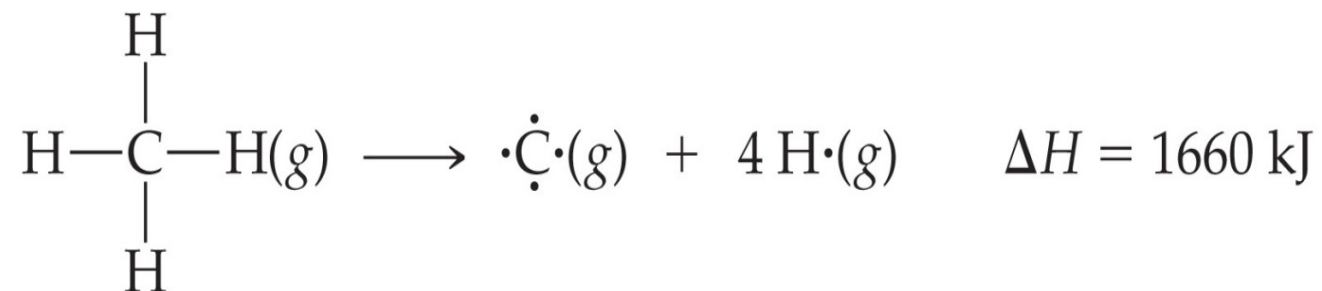
és la quantitat d'energia necessària per a trencar un *mol* d'enllaços covalents en una espècie *gasosa*.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

$$\Delta H = D (\text{Cl-Cl}) = 242 \text{ kJ/mol}$$

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç



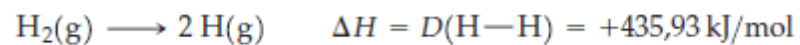
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

Entalpia d'enllaç *mitjana* per a l'enllaç C-H,  $D(\text{C-H}) = 415 \text{ kJ/mol}$

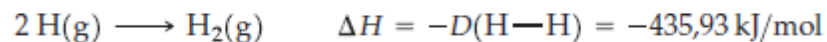
# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

Per a molècules diatòmiques:

Ruptura d'enllaç



Formació d'enllaç



En altres casos:





# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

Com més gran siga l'entalpia d'enllaç, més fort serà l'enllaç.

TABLE 7.1 Average Bond Dissociation Energies,  $D$  (kJ/mol)

H-H	436 <sup>a</sup>	C-H	410	N-H	390	O-H	460	F-F	159 <sup>a</sup>
H-C	410	C-C	350	N-C	300	O-C	350	Cl-Cl	243 <sup>a</sup>
H-F	570 <sup>a</sup>	C-F	450	N-F	270	O-F	180	Br-Br	193 <sup>a</sup>
H-Cl	432 <sup>a</sup>	C-Cl	330	N-Cl	200	O-Cl	200	I-I	151 <sup>a</sup>
H-Br	366 <sup>a</sup>	C-Br	270	N-Br	240	O-Br	210	S-F	310
H-I	298 <sup>a</sup>	C-I	240	N-I	—	O-I	220	S-Cl	250
H-N	390	C-N	300	N-N	240	O-N	200	S-Br	210
H-O	460	C-O	350	N-O	200	O-O	180	S-S	225
H-S	340	C-S	260	N-S	—	O-S	—		
Multiple covalent bonds <sup>b</sup>									
C=C	611	C≡C	835	C=O	732	O=O	498 <sup>a</sup>	N≡N	945 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Exact value

<sup>b</sup> We'll discuss multiple covalent bonds in Section 7.5.

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

Com més gran siga l'entalpia d'enllaç, més fort serà l'enllaç.

TABLA 10.3 Energías de enlace promedio<sup>a</sup>

Enlace	Energía de enlace, kJ/mol	Enlace	Energía de enlace, kJ/mol	Enlace	Energía de enlace, kJ/mol
H—H	436	C—C	347	N—N	163
H—C	414	C=C	611	N=N	418
H—N	389	C≡C	837	N≡N	946
H—O	464	C—N	305	N—O	222
H—S	368	C=N	615	N=O	590
H—F	565	C≡N	891	O—O	142
H—Cl	431	C—O	360	O=O	498
H—Br	364	C=O	736 <sup>b</sup>	F—F	159
H—I	297	C—Cl	339	Cl—Cl	243
				Br—Br	193
				I—I	151

<sup>a</sup>Aunque todos los datos se dan aproximadamente con la misma precisión (tres cifras significativas), algunos valores se conocen con más precisión. Concretamente, los valores de las moléculas diatómicas: H<sub>2</sub>, HF, HCl, HBr, HI, N<sub>2</sub> (N≡N), O<sub>2</sub> (O=O), F<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub> y I<sub>2</sub> no son realmente energías de enlace promedio sino energías de disociación del enlace.

<sup>b</sup>El valor para los enlaces C=O en el CO<sub>2</sub> es 799 kJ/mol.

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

Com més gran siga l'entalpia d'enllaç, més fort serà l'enllaç.

Entalpías de enlace promedio (kJ/mol)							
<b>Enlaces sencillos</b>							
C—H	413	N—H	391	O—H	463	F—F	155
C—C	348	N—N	163	O—O	146		
C—N	293	N—O	201	O—F	190	Cl—F	253
C—O	358	N—F	272	O—Cl	203	Cl—Cl	242
C—F	485	N—Cl	200	O—I	234		
C—Cl	328	N—Br	243			Br—F	237
C—Br	276			S—H	339	Br—Cl	218
C—I	240	H—H	436	S—F	327	Br—Br	193
C—S	259	H—F	567	S—Cl	253		
		H—Cl	431	S—Br	218	I—Cl	208
Si—H	323	H—Br	366	S—S	266	I—Br	175
Si—Si	226	H—I	299			I—I	151
Si—C	301						
Si—O	368						
Si—Cl	464						
<b>Enlaces múltiples</b>							
C=C	614	N=N	418	O <sub>2</sub>	495		
C≡C	839	N≡N	941				
C=N	615	N=O	607	S=O	523		
C≡N	891			S=S	418		
C=O	799						
C≡O	1072						

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

Si recordem la  
termoquímica...

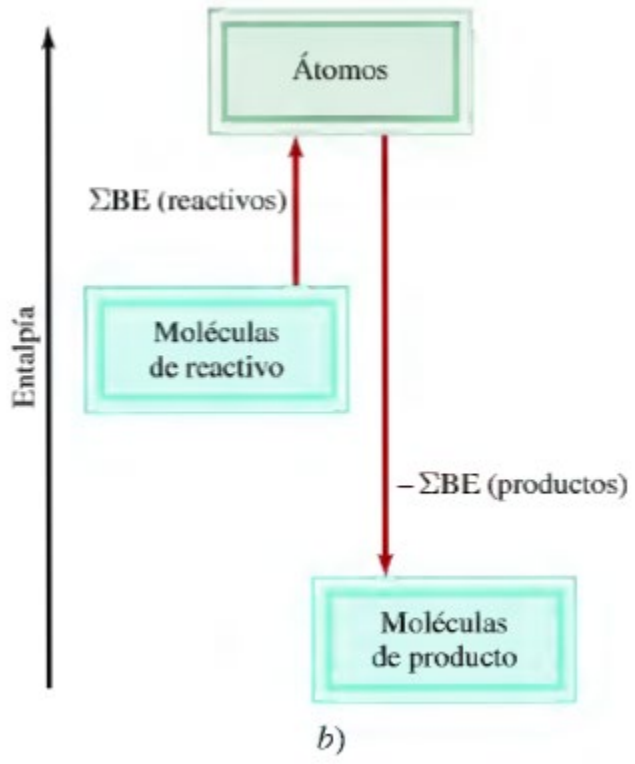
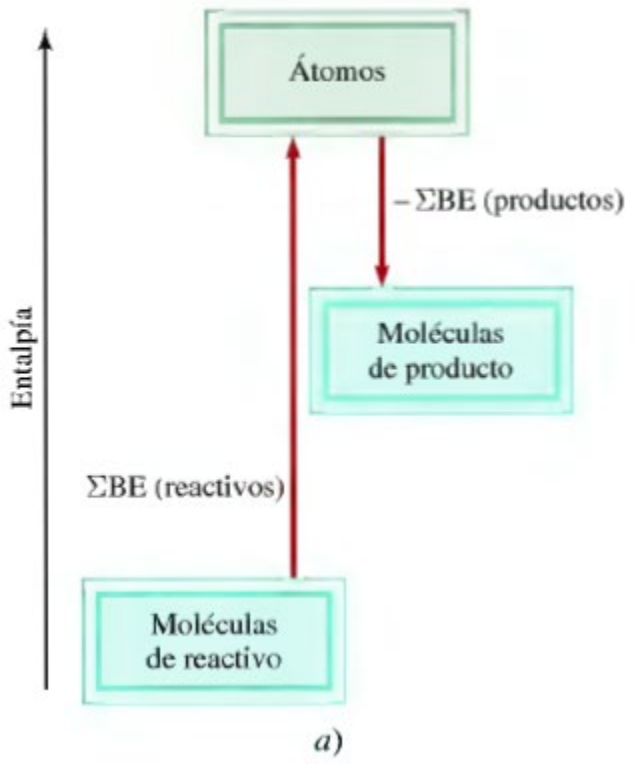
Reactius gasosos

Àtoms gasosos

Productes gasosos



# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

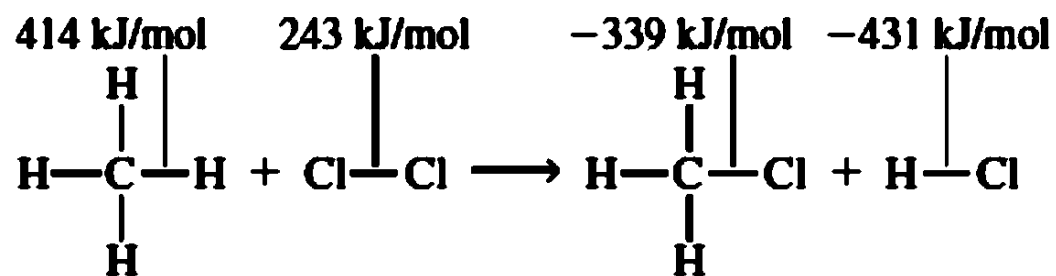


# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

**... i això es pot  
traduir en...**

$$\begin{aligned}\Delta H &= \Delta H (\text{ruptura del enllaç}) + \Delta H (\text{formación del enllaç}) \\ &\approx \sum EE (\text{reactivos}) - \sum EE (\text{productos})\end{aligned}$$

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç



*$\Delta H$  para la ruptura neta de enlaces:*

1 mol C—H enlaces	+414 kJ
1 mol Cl—Cl enlaces	+243 kJ
<hr/>	
suma:	+657 kJ

*$\Delta H$  para la formación neta de enlaces:*

1 mol C—Cl enlaces	-339 kJ
1 mol H—Cl enlaces	-431 kJ
<hr/>	
suma:	-770 kJ

*Entalpía de la reacción:*  $\Delta H = 657 - 770 = -113 \text{ kJ}$

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

$$\begin{aligned}\Delta H &= \Delta H (\text{ruptura del enlace}) + \Delta H (\text{formación del enlace}) \\ &\approx \sum EE (\text{reactivos}) - \sum EE (\text{productos})\end{aligned}$$

**Podem predir l'entalpia de formació  
d'un producte  
usant les energies d'enllaç en comptes  
de les entalpies de formació.**



# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

$$\Delta H = \Delta H (\text{ruptura del enllac}) + \Delta H (\text{formació del enllac}) \\ \approx \sum EE (\text{reactivos}) - \sum EE (\text{productos})$$

**ATENCIÓ!!!!!!**

**Les entalpies d'enllaç són promedis...  
per tant es molt més acurat el càlcul amb  
entalpies de formació.**

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

$$\begin{aligned}\Delta H &= \Delta H (\text{ruptura del enlace}) + \Delta H (\text{formación del enlace}) \\ &\approx \sum EE (\text{reactivos}) - \sum EE (\text{productos})\end{aligned}$$

**+ ATENCIÓ!!!!!!**

**No vol dir que el procés es done o siga espontani...**

# L'enllaç químic I. Energia d'enllaç

## Exercici 1:

Calculeu l'entalpia de la reacció de descomposició de la trinitroglicerina.



**Exercici 2:** El fosgè és una substància usada com gas verinós al llarg de la primera guerra mundial. Se'n va fer la síntesi per l'acció de la llum solar a una mescla de monòxid de carboni i clor (*phos + gene* = 'nascut de'). El compost té la composició percentual següent:

**C ( 12,14 %) O (16,17 %) Cl (71,69 %).**

**La seua massa molar és 98,9 g / mol.**

**Determineu:**

- a) La fórmula molecular del compost.
- b) Dibuixeu tres estructures de Lewis que acomplisca.
- c) Determineu quina és la més important d'aquestes estructures.
- d) Determineu l'entalpia de formació del fosgè gasós a partir de monòxid de carboni i clor gasós.

# Algunes idees clau.....

1. Els símbols de Lewis representen **els electrons de valència** d'un àtom mitjançant punts situats al voltant del símbol químic. Una estructura de Lewis és una combinació de símbols de Lewis utilitzats per a representar enllaços químics. Normalment, **tots els electrons d'una estructura de Lewis estan aparellats** i cada àtom de l'estructura adquireix 8 electrons en la seua capa de valència (completar les capes com si foren gasos nobles, és el que es coneix com **regla de l'octet**). En la teoria de Lewis, els enllaços químics es classifiquen en enllaços iònics, quan hi ha transferència d'electrons entre els àtoms, o enllaços covalents, quan hi ha compartició d'electrons entre els àtoms. La majoria dels enllaços tenen un caràcter parcialment iònic i parcialment covalent.

2. Els parells d'electrons compartits per a formar enllaços entre dos àtoms s'anomenen **parells enllaçants**, mentre que els electrons no compartits en un enllaç químic es diuen **parells solitaris**. Un únic parell d'electrons compartit entre dos àtoms constitueix un enllaç covalent simple. Quan els dos electrons d'un enllaç covalent provenen d'un dels àtoms només, l'enllaç es diu enllaç **covalent coordinat**. En construir l'estructura de Lewis d'una molècula on tots els àtoms segueixen la regla de l'octet, és freqüent que hi calguen més d'un parell d'electrons i s'hi formen enllaços covalent múltiples. Dos parells d'electrons compartits constitueixen un enllaç covalent doble, i tres parells compartits constitueixen un enllaç triple.

3. Un enllaç covalent en què el parell d'electrons no es comparteix per igual, pels dos àtoms de l'enllaç, s'anomena enllaç **covalent polar**. La polaritat d'un enllaç es pot predir comparant l'electronegativitat dels àtoms involucrats. Com més diferència d'electronegativitats entre dos àtoms, més polaritat de l'enllaç i més caràcter iònic té l'enllaç. Els mapes de potencial electrostàtic són una eina molt eficaç per a representar la distribució de càrrega electrònica, tant en molècules polars com en les no polars.

4. Per a escriure l'estructura de Lewis d'una molècula covalent cal conèixer-ne l'esquelet estructural, és a dir, quin és l'àtom central i quins àtoms hi ha units. Els àtoms units a un únic àtom es diuen *àtoms terminals*. Normalment **l'àtom amb l'electronegativitat més baixa és l'àtom central**. El concepte de càrrega formal sol ajudar a seleccionar l'esquelet estructural i a establir la versemblança d'una estructura de Lewis. **Hi haurà ressonància** quan hi hagi més d'una estructura de Lewis acceptable. Quan hi ha ressonància, l'estructura vertadera és un híbrid de les dues o més estructures ressonants.

5. Les excepcions a la regla de l'octet apareixen en:

(a) **Les espècies amb nombre imparell d'electrons**, com el NO que té un electró desaparellat i és paramagnètic. Moltes d'aquestes espècies són fragments moleculars molt reactius, com l'OH, anomenats radicals lliures.

(b) **Algunes molècules amb octets incomplets** en l'estructura de Lewis, és a dir, sense electrons suficients per a completar un octet en cada àtom.

(c) **Espècies amb capa de valència expandida**, compostos d'alguns no metalls del tercer període i següents, en els quals la capa de valència de l'àtom central s'a d'expandir a 10 o 12 electrons per a poder escriure l'estructura de Lewis.

**6. La teoria de la repulsió entre parells d'electrons de la capa de valència (RPECV)** és útil per a predir **la geometria molecular o forma molecular**. La forma d'una molècula o ió poliatòmic depèn de la distribució geomètrica dels grups d'electrons de la capa de valència, anomenada *geometria de grups d'electrons*, i si aquests grups contenen parells d'electrons enllaçants o parells solitaris. Els angles entre grups de electrons permeten predir els angles d'enllaç en una molècula. Una aplicació important de la forma molecular és establir si els moments dipolars d'enllaç es combinen produint un moment dipolar resultant total. Les molècules amb moment dipolar resultant són molècules polars; i les que no tenen moment dipolar són no polars.

**7.** Els enllaços covalents senzills, dobles o triples, es diu que tenen un ordre d'enllaç 1, 2 o 3, respectivament. **La longitud d'enllaç** és la distància entre els centres dels dos àtoms units covalentment. Com més gran és l'ordre d'enllaç, més curta és la longitud d'enllaç. D'altra banda, l'energia de dissociació és l'energia necessària per a trencar 1 mol d'enllaços covalents en fase gasosa. Les energies d'enllaç mitjanes es poden utilitzar per a estimar les variacions d'entalpia en les reaccions entre gasos, i també fan bones aproximacions en altres estats.

# TEMA 5. ENLLAÇ QUÍMIC II

## Teoria de l'enllaç de valència



- Solapament d'orbitals. Orbitals híbrids
- Enllaços múltiples. Hibridació en l'àtom de carboni

## Teoria d'orbitals moleculars



- Molècules diatòmiques del primer i del segon període. Magnetisme
- Molècules diatòmiques heteronuclears senzilles

## Deslocalització electrònica



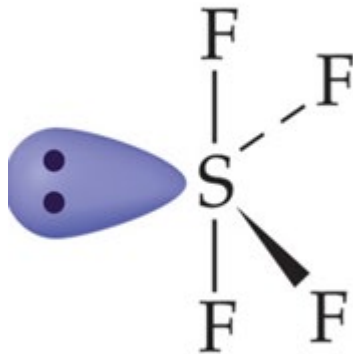
- Benzè
- Ozò i ions poliatòmics



# L'enllaç químic II. L'enllaç covalent

## Model de Lewis

### Característiques principals



Descriu la connectivitat (forma d'enllaçar-se els àtoms).

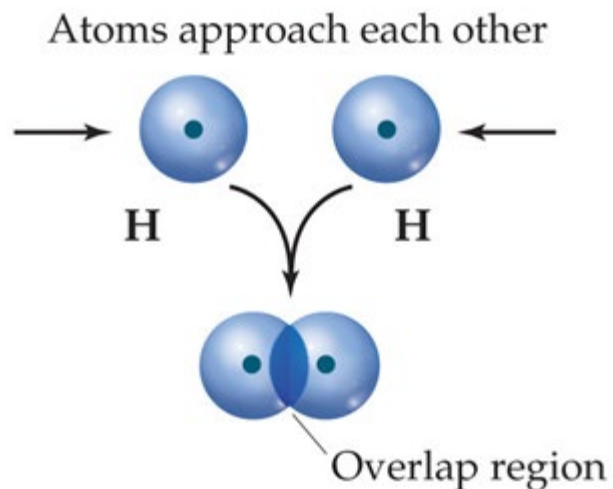
Permet deduir la polaritat dels enllaços, les càrregues formals, la forma o geometria de les molècules (RPECV).

**NO permet explicar les diferències entre distints tipus d'enllaços covalents (senzills, dobles, forts, febles...) ni per què unes molècules són més estables que altres.**



# L'enllaç químic II. L'enllaç covalent

## Teoria de l'enllaç de valència



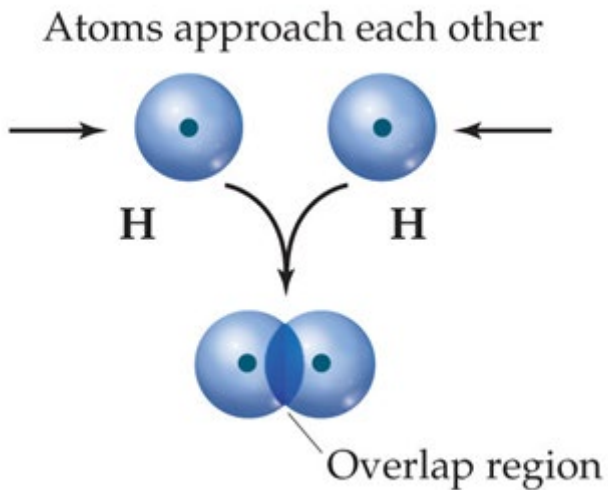
L'enllaç covalent es forma **per solapament d'orbitals atòmics** cadascun dels quals conté **un electró**.

Per tant, cada enllaç implica dos electrons que es troben en la regió entre els dos nuclis i són compartits pels dos àtoms enllaçats.

**Només els electrons enllaçants** es troben en la regió de solapament dels orbitals, de manera que estan **"localitzats"** entre els nuclis.

# L'enllaç químic II. L'enllaç covalent

## Teoria de l'enllaç de valència

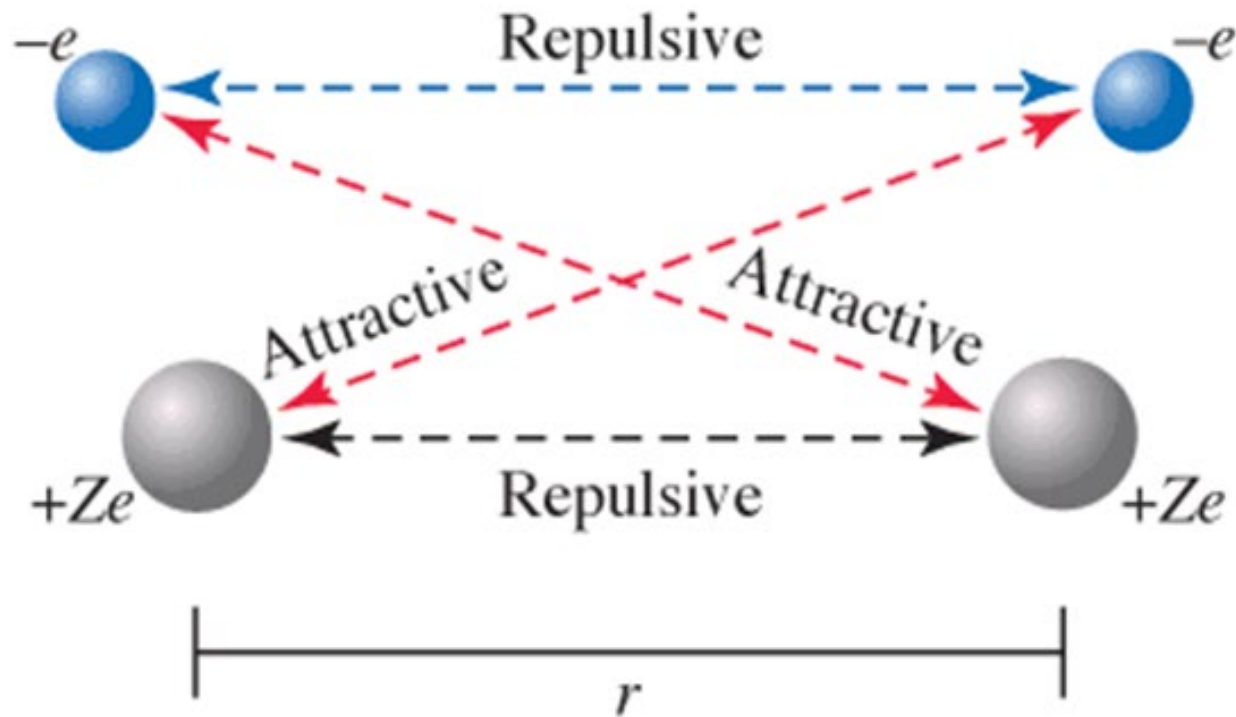


S'hi té en compte **la forma, la grandària i l'energia** de cada orbital atòmic on es troba l'electró que formarà l'enllaç.

**Com més gran siga el solapament d'orbitals, més fort serà l'enllaç.**

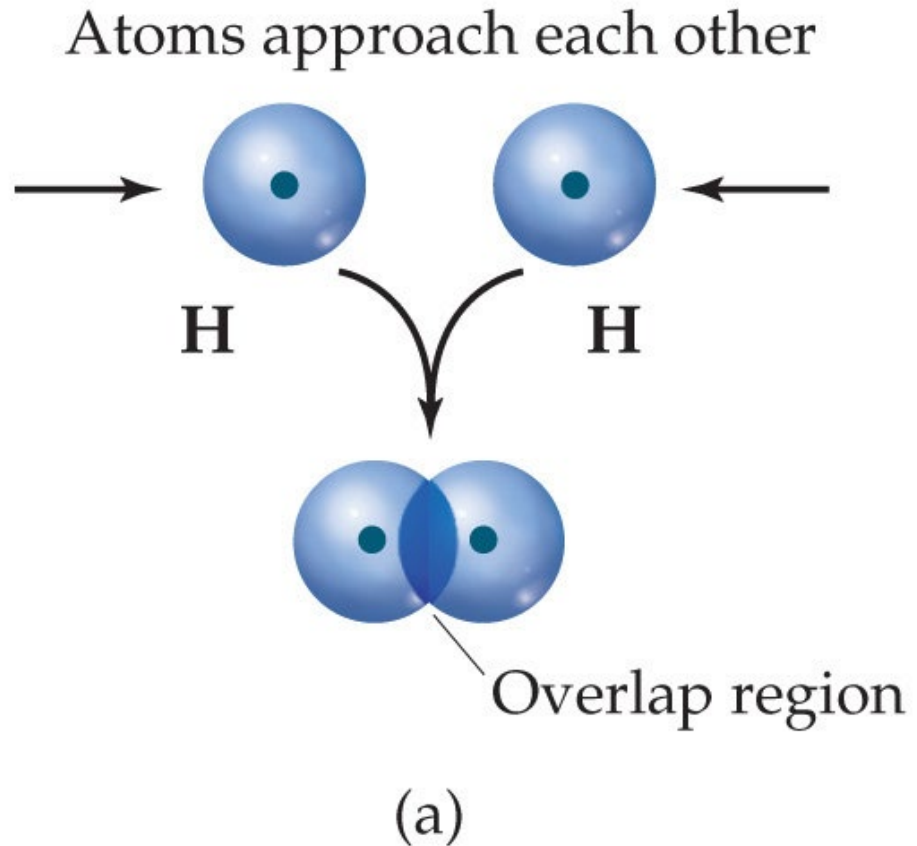
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

Relació de forces que intervenen en la formació d'un enllaç químic.



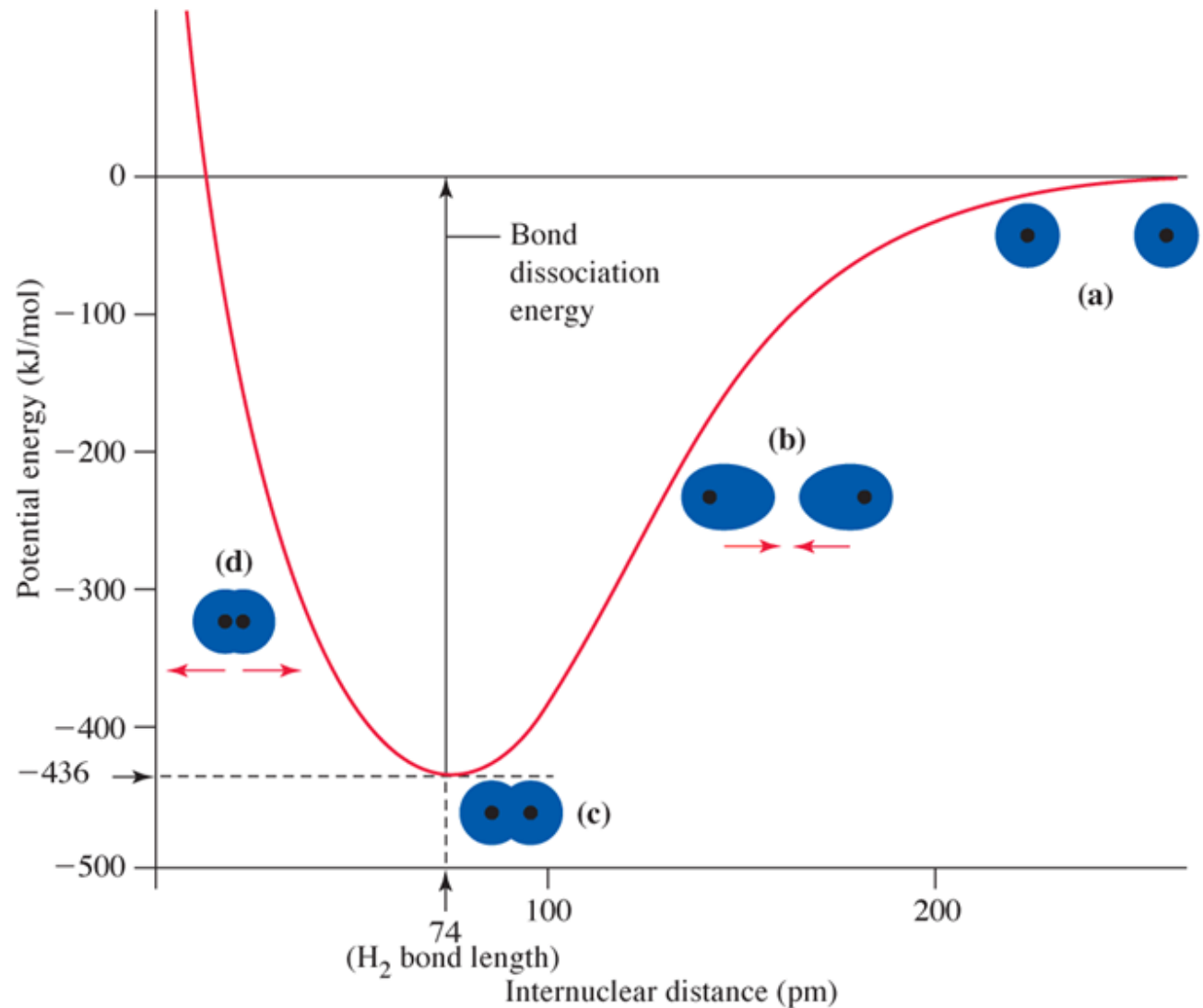
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

Els electrons d'aquesta regió **són atrets simultàniament pels dos nuclis**, mantenen units els àtoms i formen l'enllaç covalent.



L'enllaç de l' $\text{H}_2$  resulta del **solapament de dos orbitals 1s** de dos àtoms d'hidrogen.

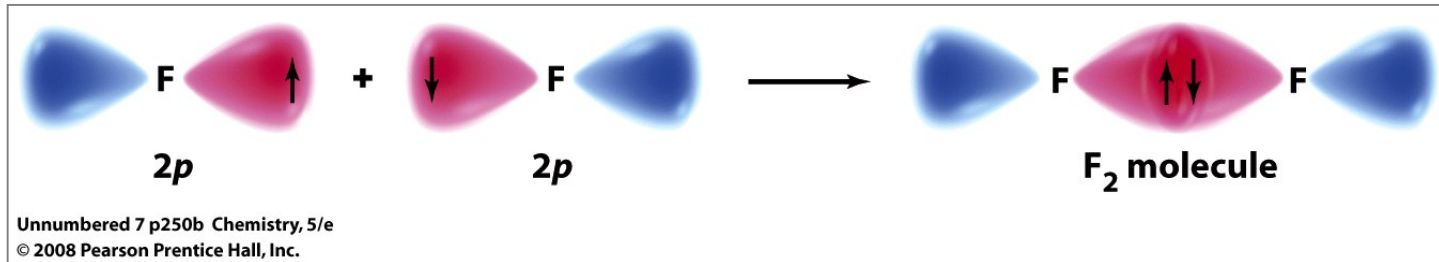
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



**Força de l'enllaç**  
(energia alliberada  
en la formació de  
l'enllaç H-H o  
energia de  
dissociació  
d'enllaç).

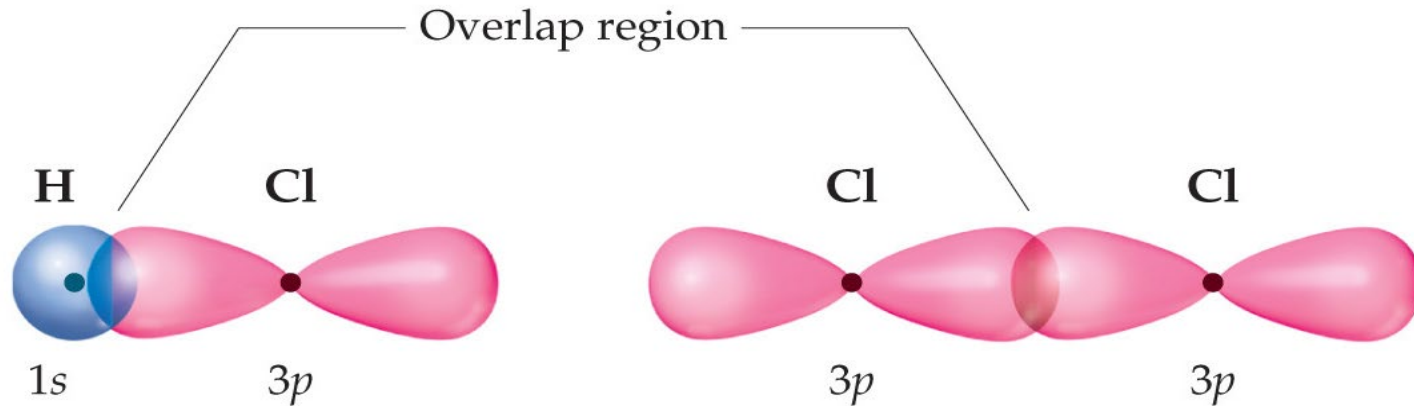
**Longitud d'enllaç**

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

L'enllaç HCl resulta del solapament d'un orbital  $1s$  del H i d'un orbital  $3p$  del Cl.

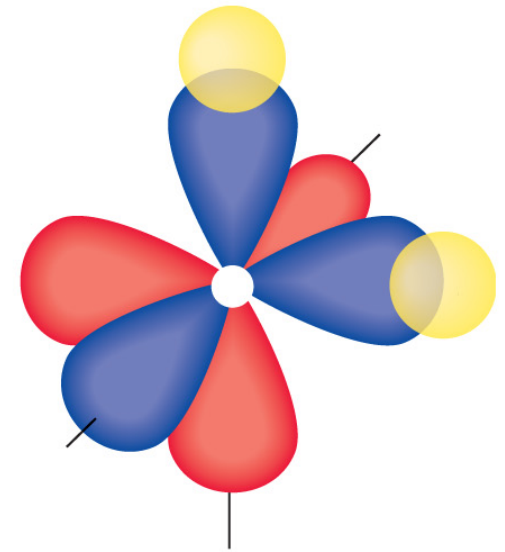
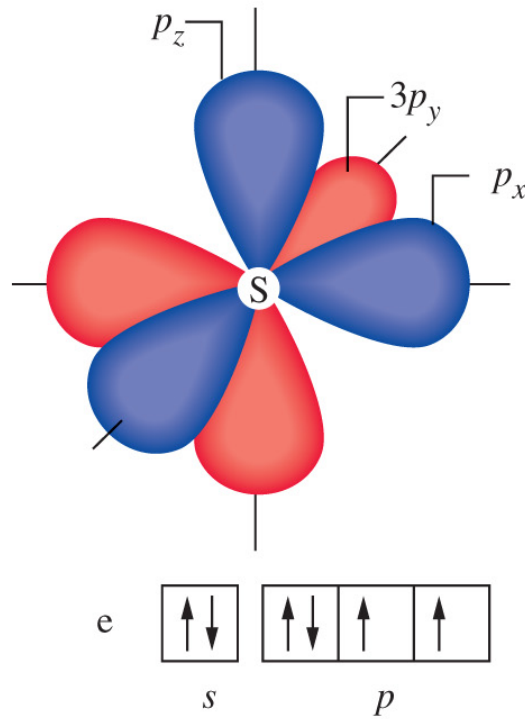
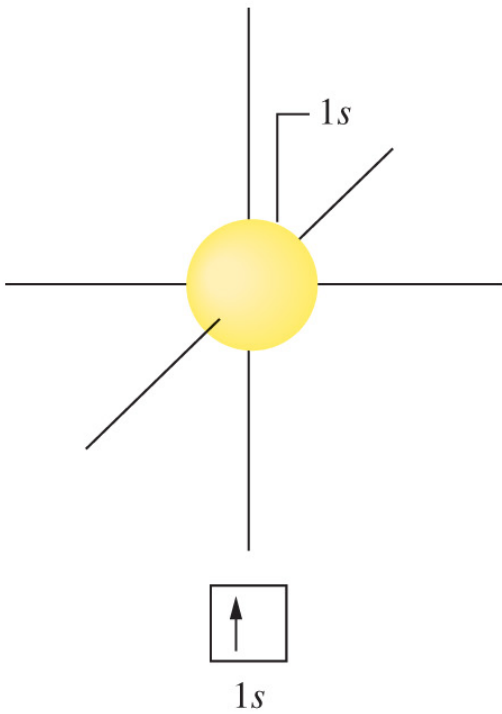


L'enllaç del  $\text{Cl}_2$  resulta del solapament de dos orbitals  $3p$  dels dos àtoms de clor.

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

Isolated atoms

Covalent bonds



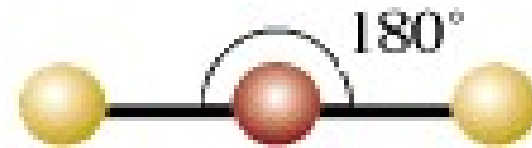


# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

## Com fem el BeH<sub>2</sub>?

Molècula lineal  
(segons RPECV)

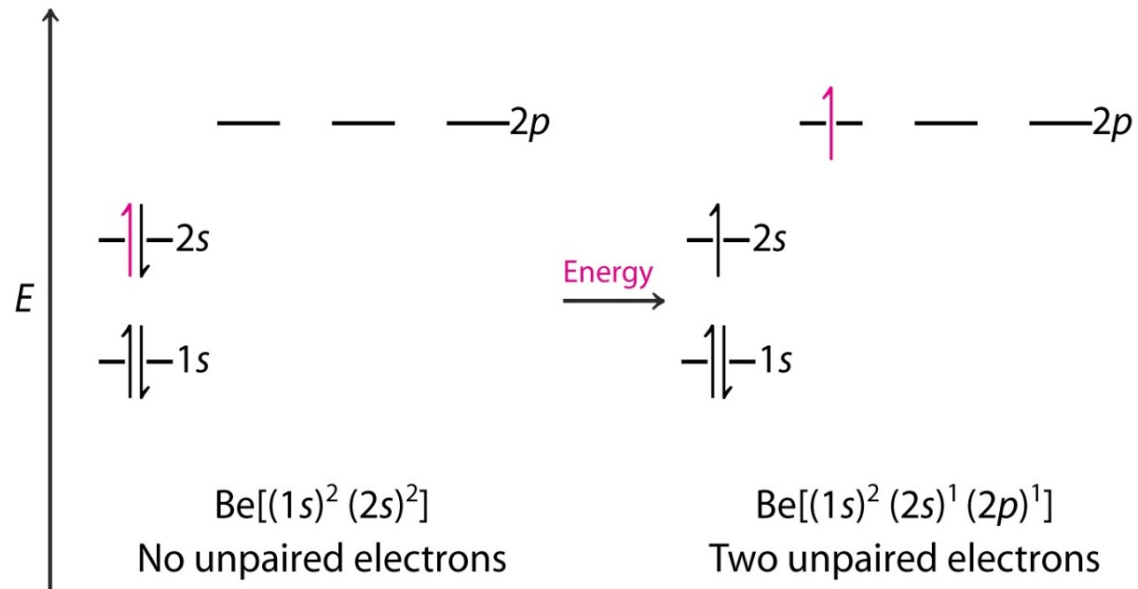
Be:  $1s^2 2s^2$



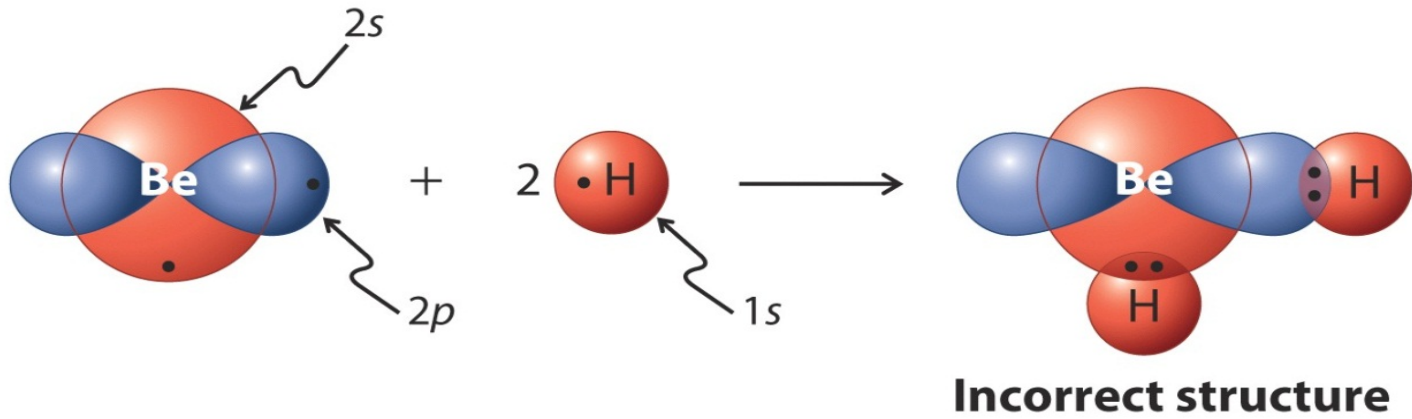
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

## Idea 1!

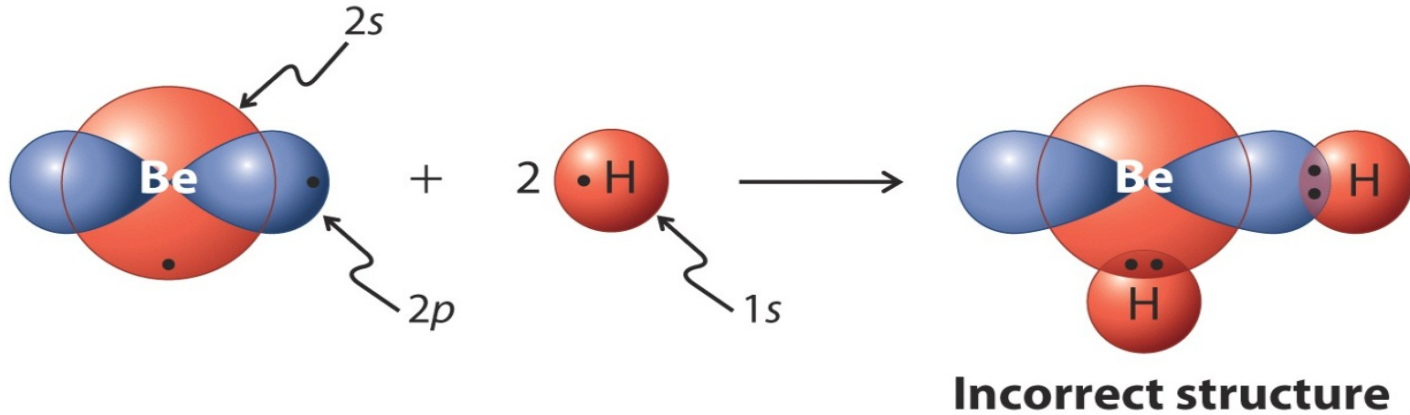
Segons el diagrama d'orbitals, el beril·li en el seu estat fonamental no pot formar enllaços amb els àtoms d'H. No obstant això, **pot formar dos enllaços “promovent” un dels electrons 2s cap a un orbital 2p.**



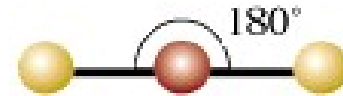
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



Els dos enllaços que el Be pot formar amb els dos electrons desaparellats **no són idèntics** per què un el forma amb un orbital **2s** i l'altre, amb un orbital **2p**.



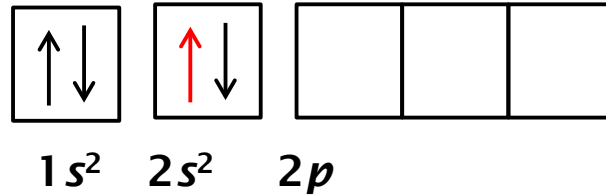
## Idea 2!

### *Hibridació*

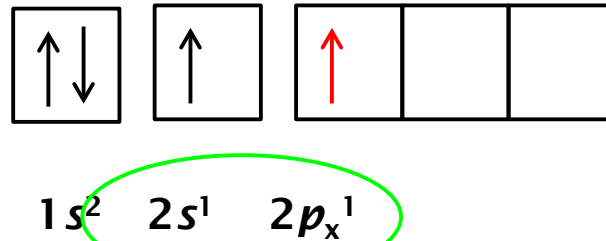
procés basat en combinar de manera matemàtica les funcions d'ona d'alguns orbitals d'un àtom per a obtenir altres funcions que descriuen els orbitals amb els quals es formen els enllaços, anomenats *orbitals híbrids*.

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

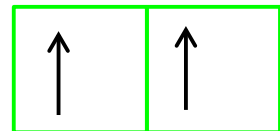
Be ( $Z = 4$ )



energia  
↓



hibridació  
↓

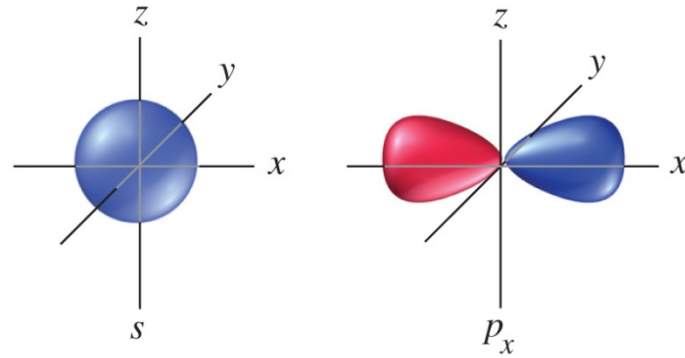


**2 orbitals híbrids  $sp$**

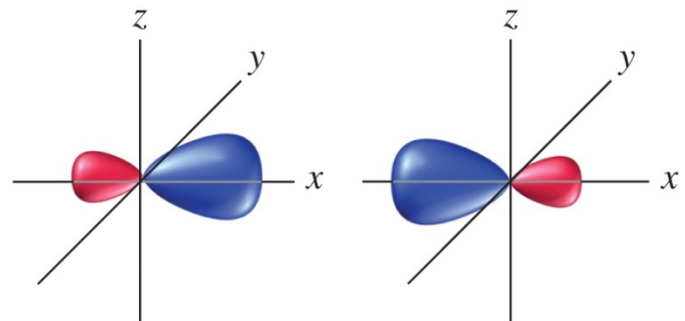
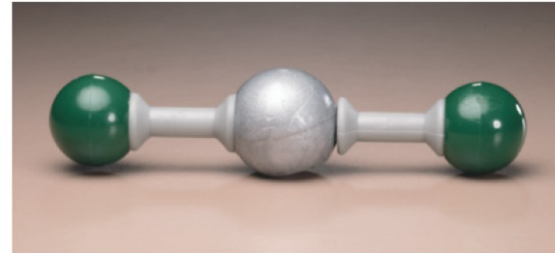
**(50 % caràcter  $s$  – 50 % caràcter  $p$ )**

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

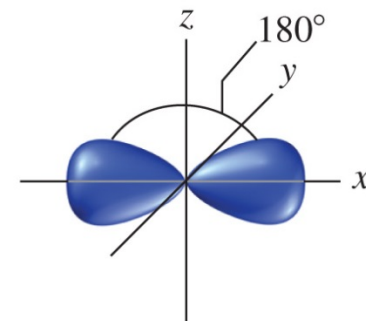
***Hibridació  $sp$*** :  $s + p \longrightarrow 2 sp$  (forma *lineal*)



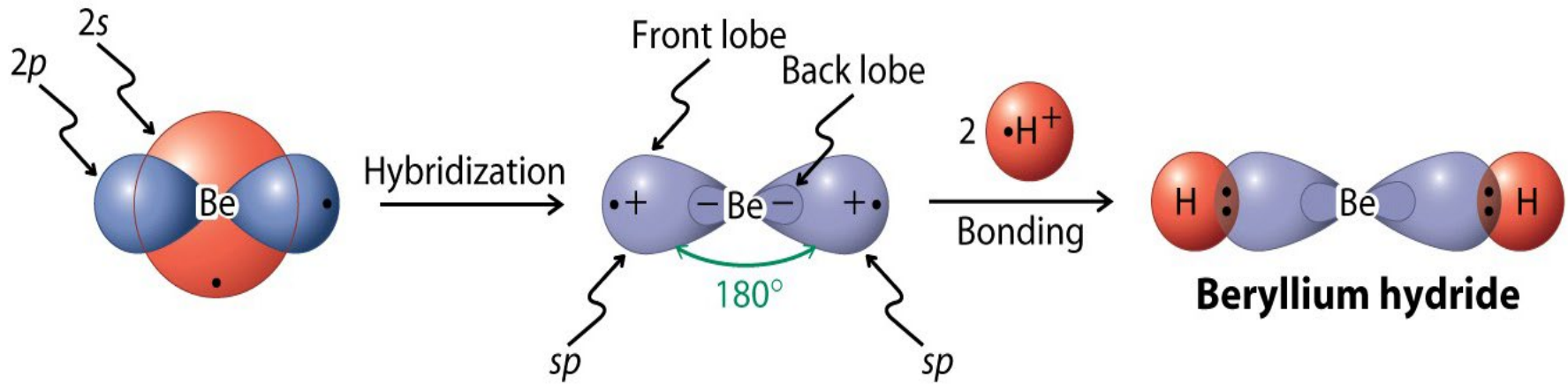
Combine to generate  
two  $sp$  orbitals



Which are  
represented  
as the set



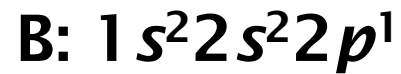
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



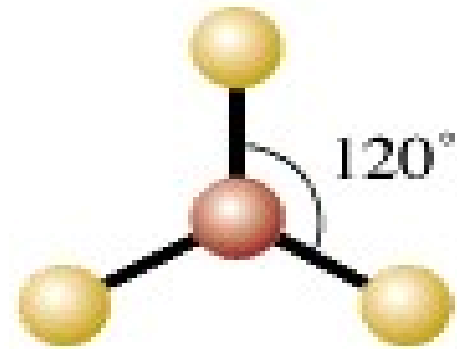
Formació de **2 enllaços equivalents** i amb geometria lineal per *solapament dels orbitals híbrids  $sp$  del Be i els orbitals atòmics  $1s$  dels àtoms d'H.*



# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

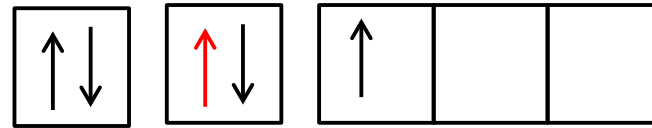


Molècula trigonal plana (segons RPECV).



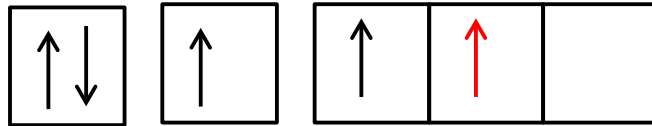
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

B ( $Z = 5$ )



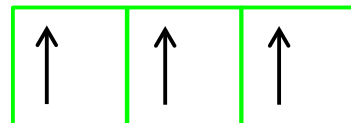
$1s^2$   $2s^2$   $2p^1$

energia



$1s^2$   $2s^1$   $2p_x^1$   $2p_y^1$

*hibridació*

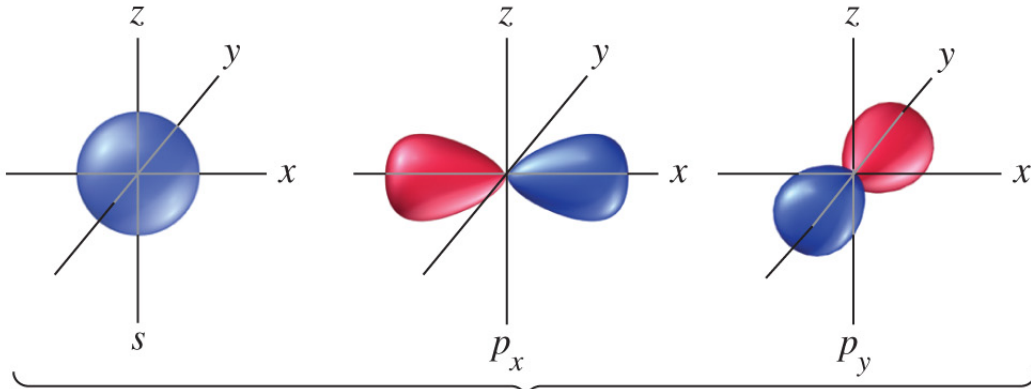


*3 orbitals híbrids  $sp^2$*

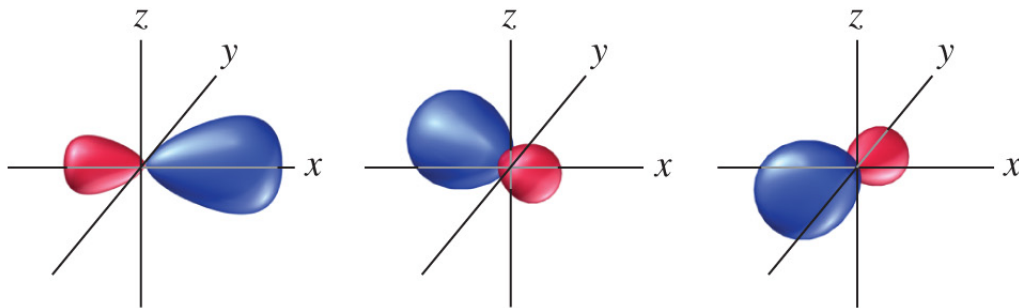
**(33 % caràcter  $s$  – 66 % caràcter  $p$ )**

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

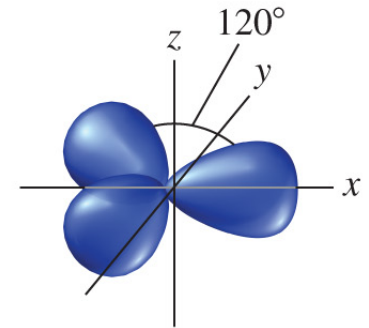
**Hibridació  $sp^2$**      $s + p + p$     **3  $sp^2$  (forma trigonal)**



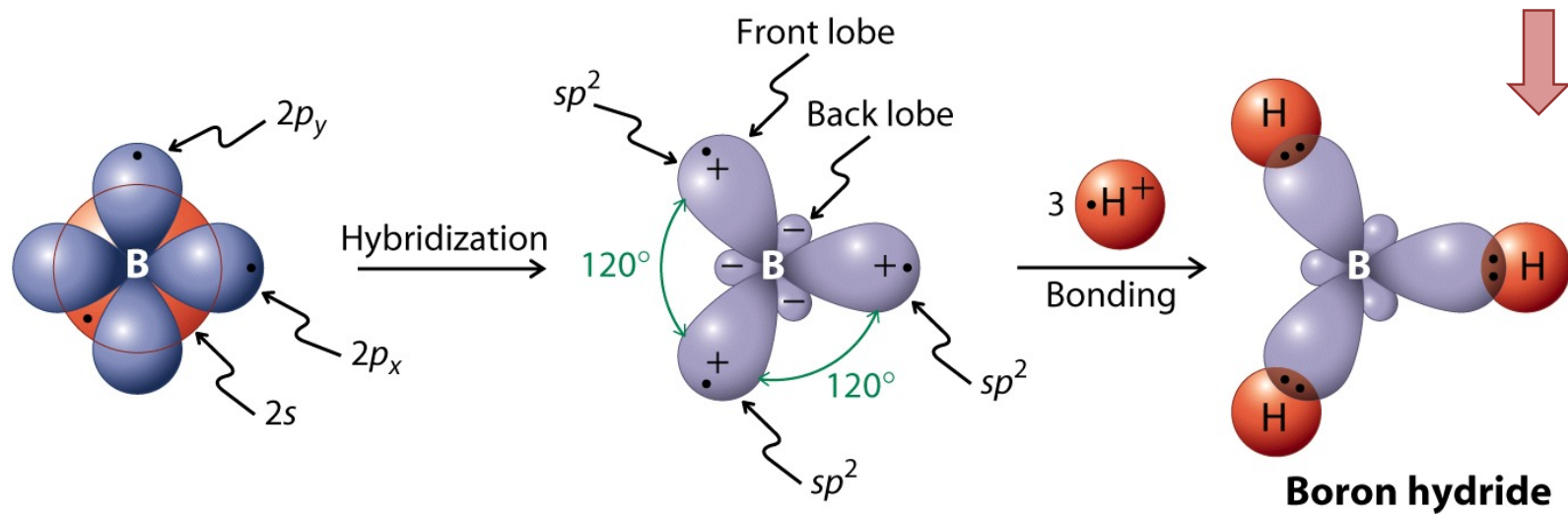
Combine to generate  
three  $sp^2$  orbitals



Which are  
represented  
as the set

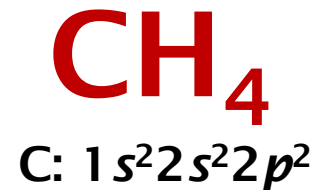


# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

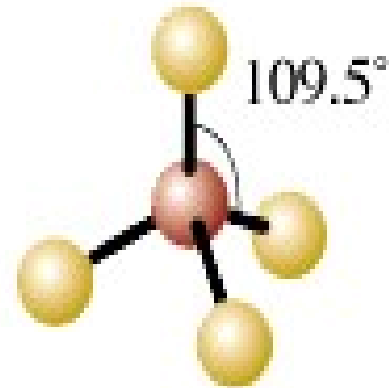


Formació de 3 enllaços  
covalents per  
**solapament dels**  
**orbitals híbrids  $sp^2$**   
del B i dels orbitals  $1s$   
de l'H.

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

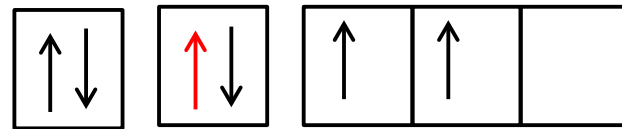


Tetraèdrica (RPECV)



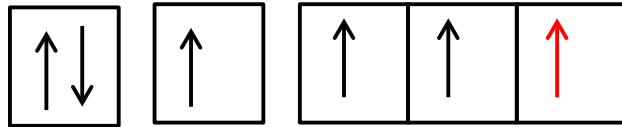
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

C ( $Z = 6$ )



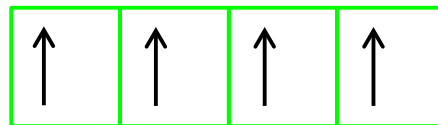
$1s^2$   $2s^2$   $2p_x^1$   $2p_y^1$

energia  
↓



$1s^2$   $2s^1$   $2p_x^1$   $2p_y^1$   $2p_z^1$

hibridació  
↓

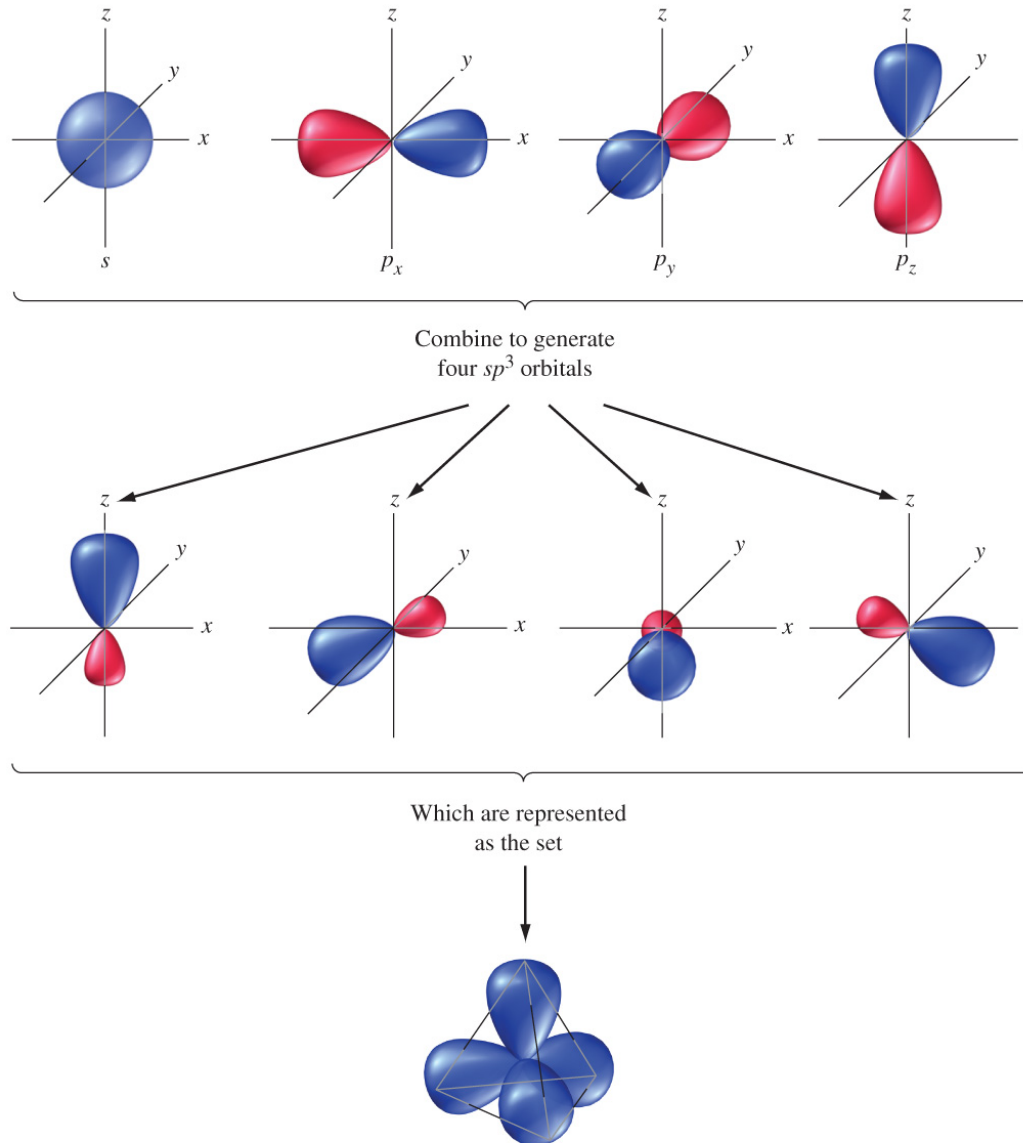


4 orbitals híbrids  $sp^3$

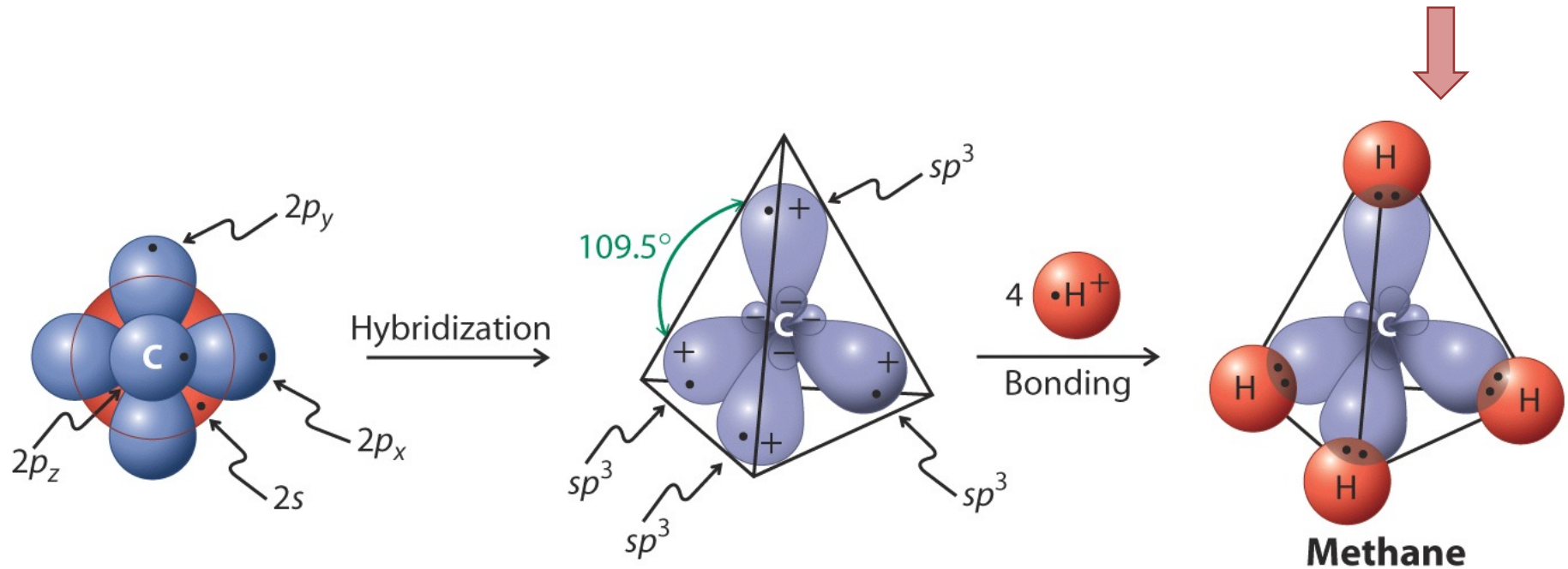
(25 % caràcter  $s$  – 75 % caràcter  $p$ )

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

## Hibridació $sp^3$



# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



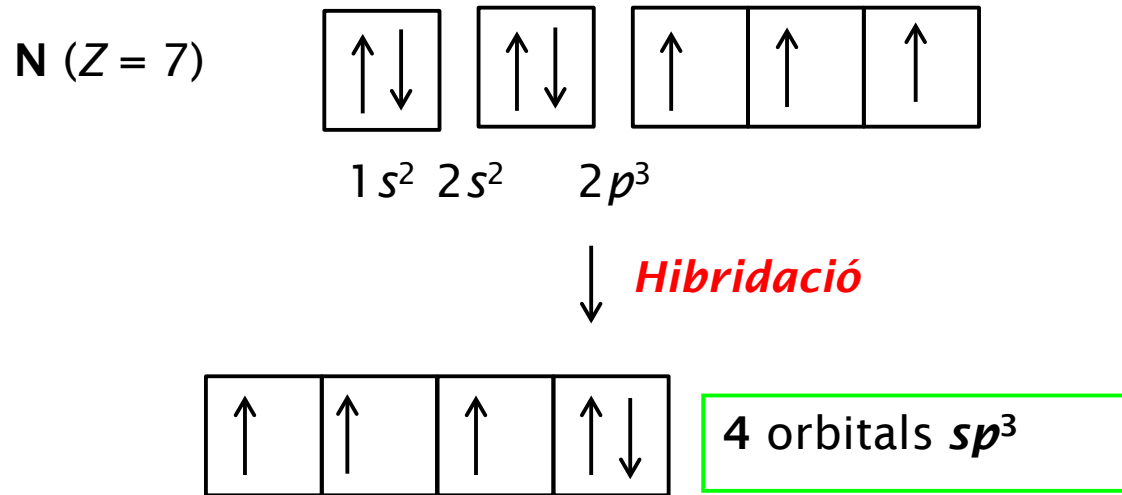
Formació de 4  
enllaços covalents  
per **solapament**  
**dels orbitals**  
**híbrids  $sp^3$**  del C i  
els orbitals  $1s$  de l'H.



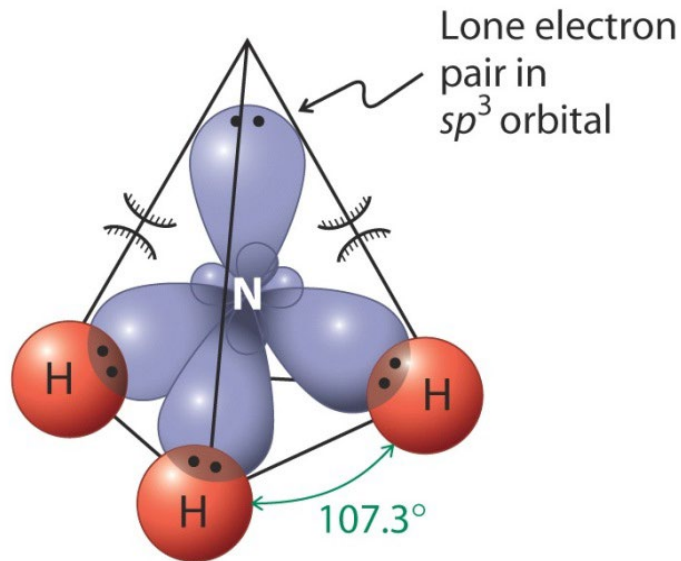
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

El concepte ***d'hibridació*** també s'usa per a descriure els enllaços de molècules que contenen **parells d'electrons no enllaçants** sobre l'àtom central.

# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

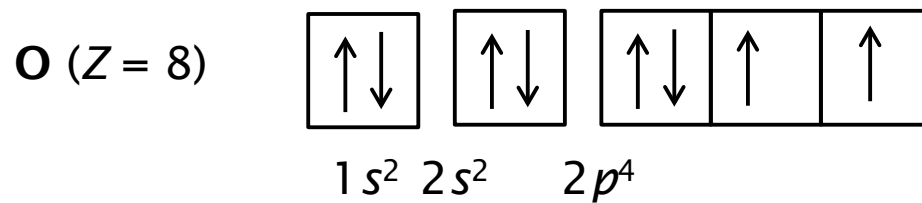


**Geometria de  
piràmide trigonal**

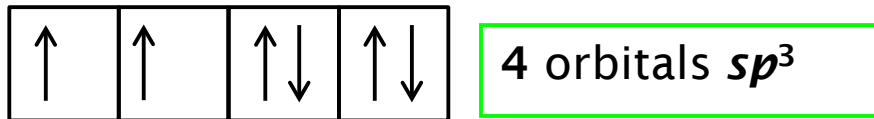


**Ammonia**

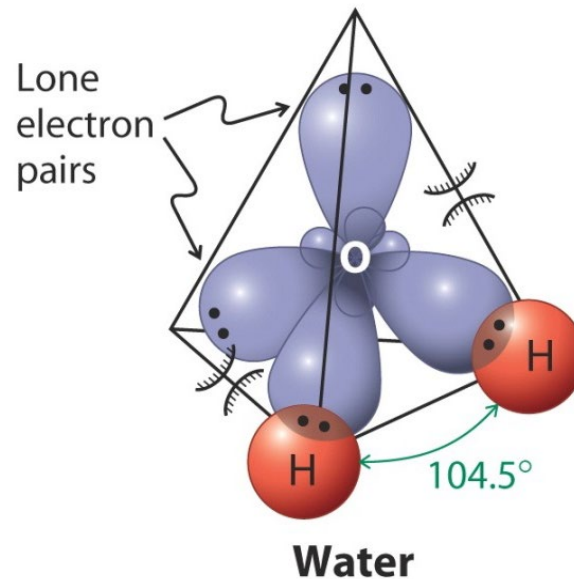
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



↓ *Hibridació*

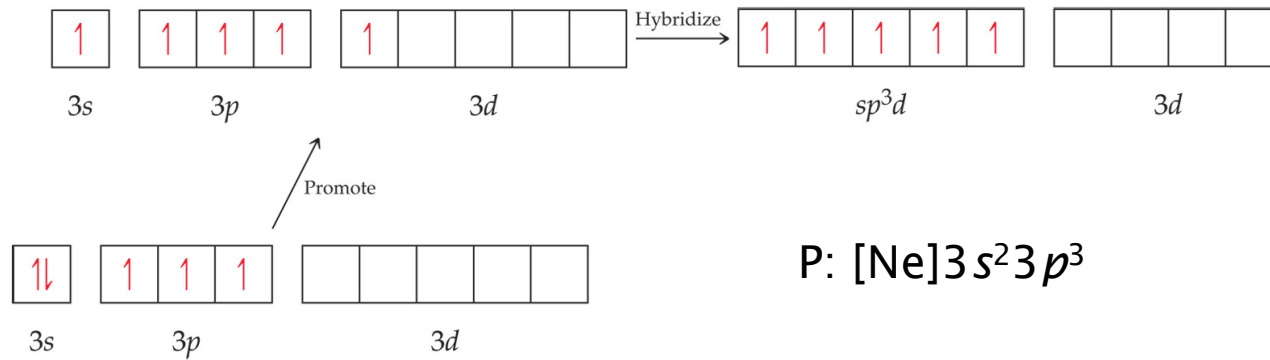


**Geometria angular**

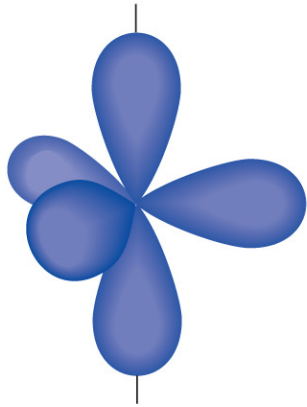


# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència

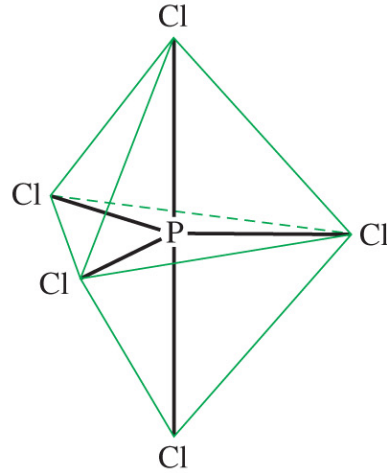
## Hibridacions que involucren orbitals *d*



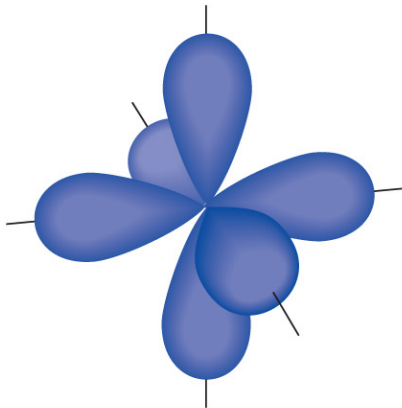
# L'enllaç químic II. Teoria de l'enllaç de valència



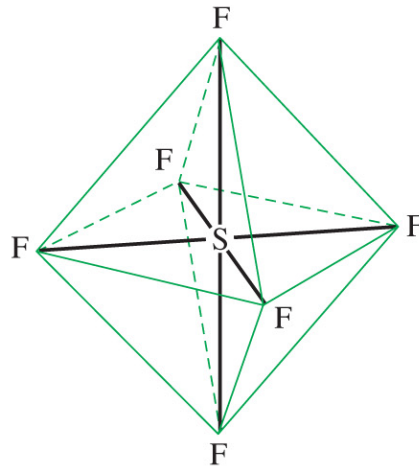
(a)  $sp^3d$  orbitals



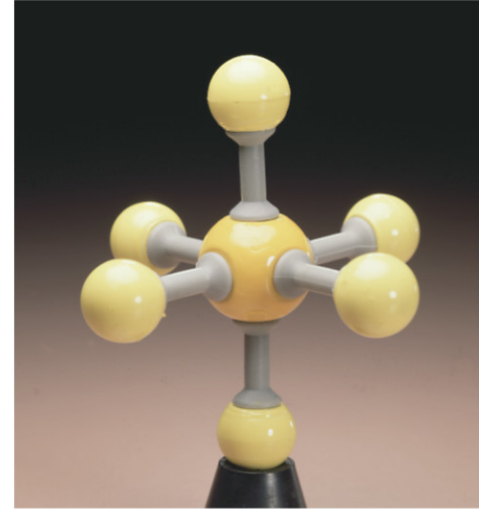
Trigonal-bipyramidal structure



(b)  $sp^3d^2$  orbitals



Octahedral structure



# L'enllaç químic II. **Hibridació. Resum i conceptes**

## El concepte **d'hibridació**

permet explicar matemàticament la forma de les molècules i predir la major part de la reactivitat química dels grups funcionals.

El nombre total  
**d'orbitals híbrids**  
que es formen sempre és igual al nombre d'orbitals atòmics que es combinen.

# L'enllaç químic II. **Hibridació**

---

**Per a formar enllaços els orbitals híbrids poden solapar-se amb orbitals atòmics o amb altres orbitals híbrids.**

Un orbital **s** i un **p** es combinen per a formar **2 orbitals híbrids sp** equivalents que apunten en sentits oposats (geometria lineal).

---

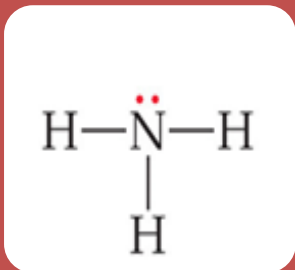
Quan es combina un orbital **s** i dos orbitals **p**, s'obtenen **3 orbitals híbrids sp<sup>2</sup>** que apunten cap als vèrtexs d'un triangle equilàter (geometria trigonal).

---

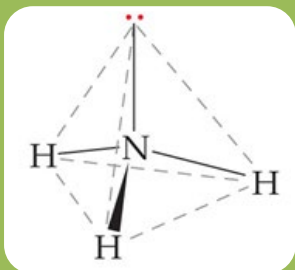
Un orbital **s** també pot combinar-se amb 3 orbitals **p** donant com a resultat **4 orbitals híbrids sp<sup>3</sup>** els lòbuls grans dels quals apunten cap als vèrtexs d'un tetraedre (geometria tetraèdrica).

---

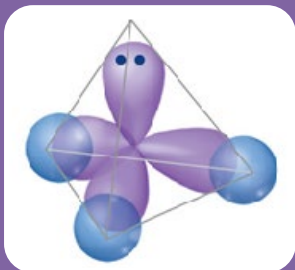
# L'enllaç químic II. Hibridació. Predicció dels orbitals híbrids



Representa una **estructura de Lewis correcta.**



Determina la geometria dels grups d'electrons al voltant de l'àtom central utilitzant **el model RPECV.**

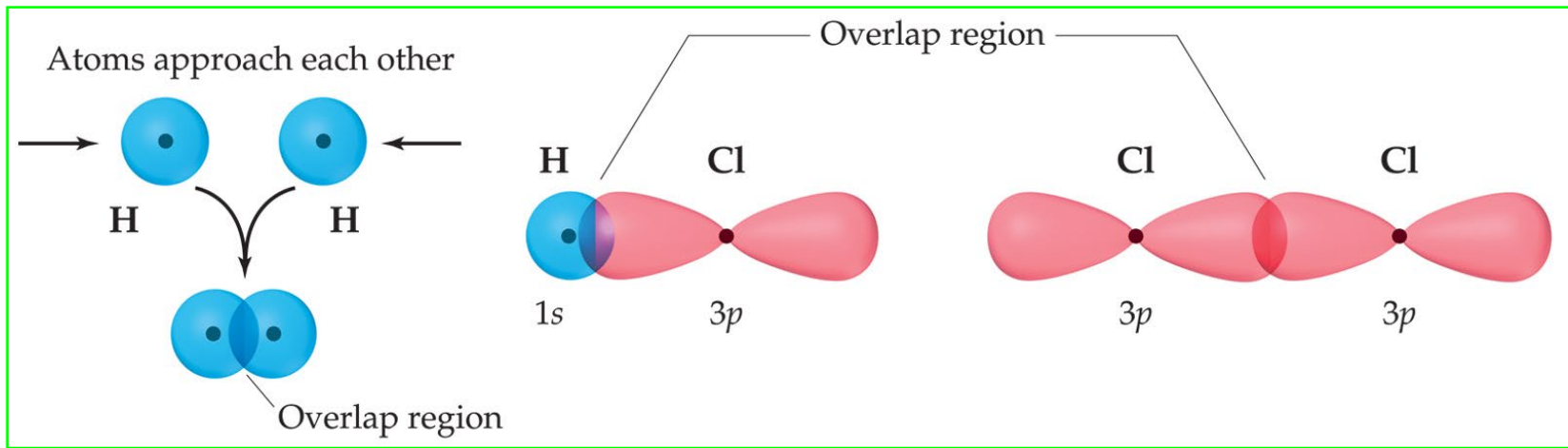


Selecciona l'esquema d'hibridació corresponent per a acomodar els parells d'electrons d'acord amb la disposició **geomètrica.**



# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples

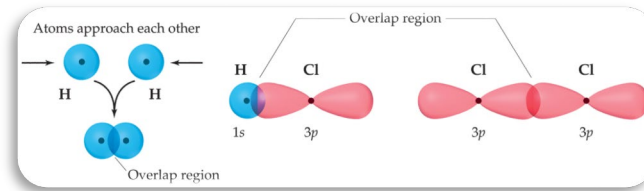
## Enllaç $\sigma$



# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples

## Enllaç $\sigma$

Solapament frontal d'orbitals.

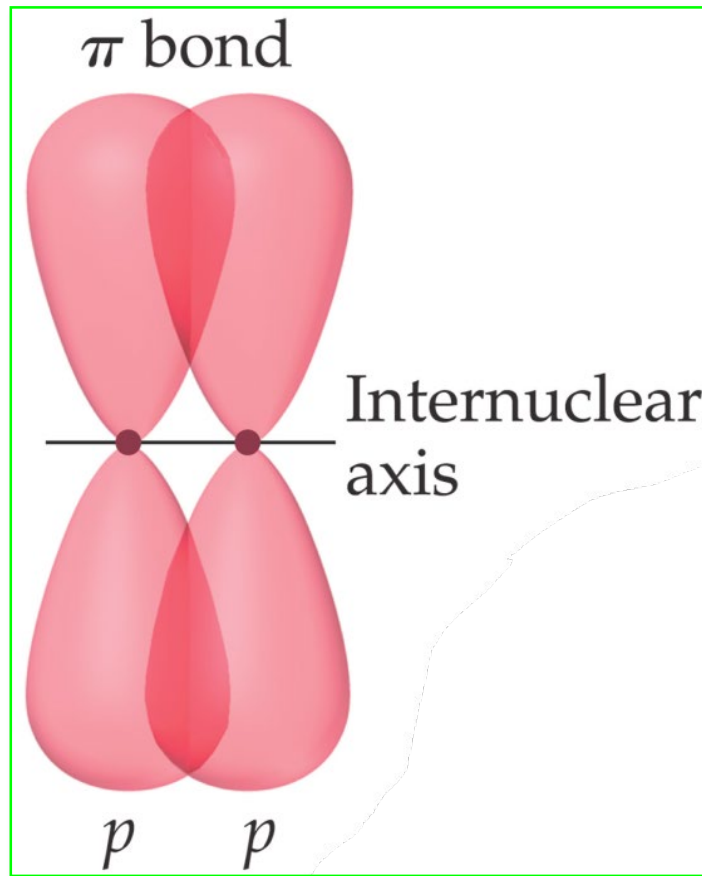


La densitat electrònica es concentra **al llarg de la línia** que connecta els àtoms (eix internuclear).

Tots els enllaços senzills  
**són enllaços  $\sigma$ .**

# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples

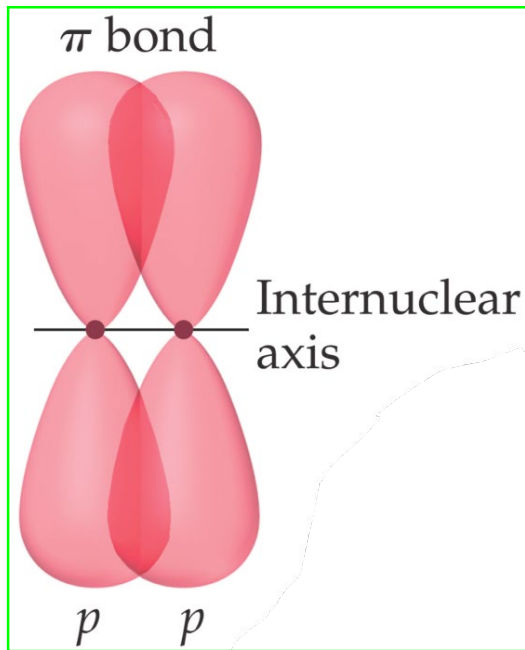
## Enllaç $\pi$



# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples

## Enllaç $\sigma$

Solapament lateral d'orbitals.



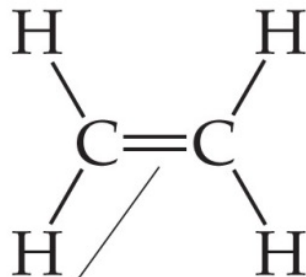
Els orbitals implicats en la formació de l'enllaç  $\pi$  són **orbitals p sense hibridar**.

Un **enllaç doble** consisteix en un enllaç  $\sigma$  i un  $\pi$ ; i un enllaç triple, un  $\sigma$  i dos  $\pi$ .

# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples



One  $\sigma$  bond



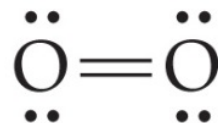
One  $\sigma$  bond plus  
one  $\pi$  bond

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, I

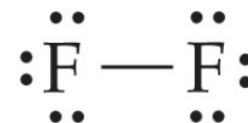
Valence bond  
theory predicts:



1  $\sigma$  bond  
and 2  $\pi$  bonds



1  $\sigma$  bond  
and 1  $\pi$  bond



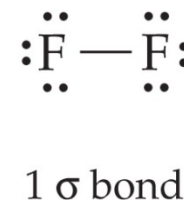
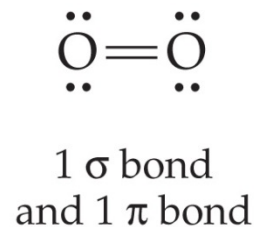
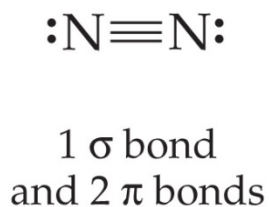
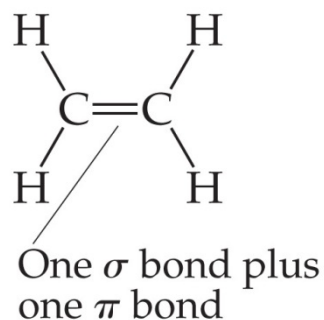
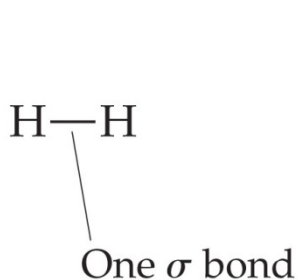
1  $\sigma$  bond

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

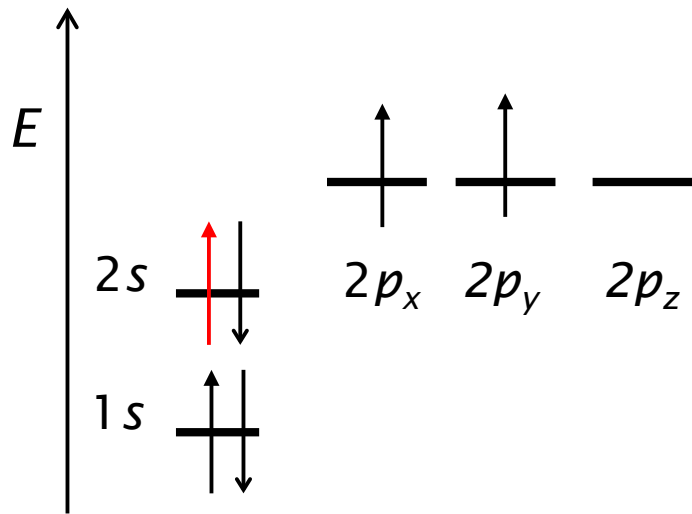
# L'enllaç químic II. Enllaços múltiples

## Comparativament...

El **solapament total** en un **enllaç  $\pi$**  tendeix a ser **menor** que en un **enllaç  $\sigma$** , per la qual cosa els enllaços  $\pi$  són **generalment més dèbils**.

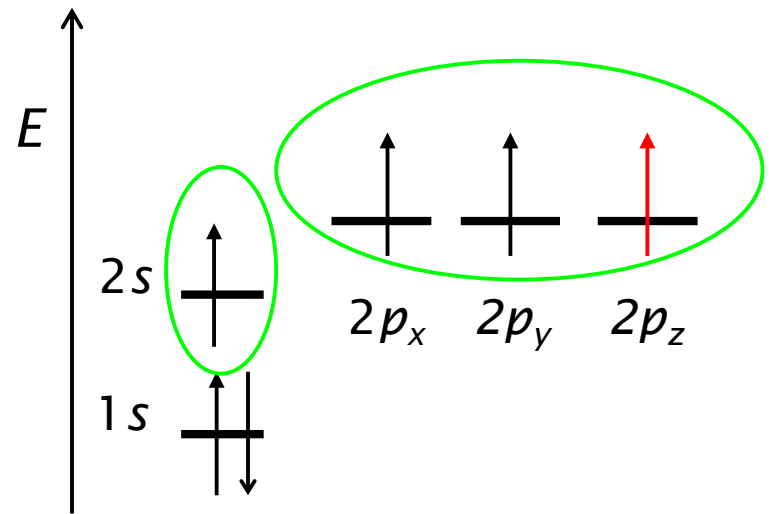
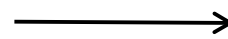


# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni



C (estat fonamental)

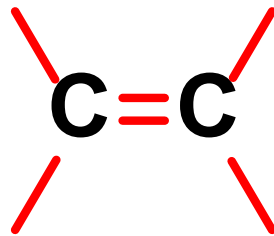
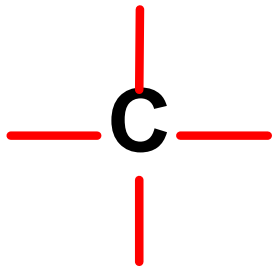
96 kcal/mol



C (estat excitat)

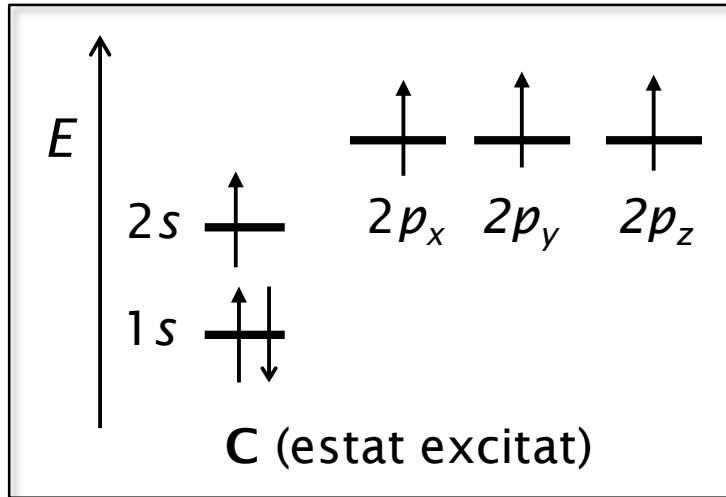
# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni

Si l'àtom de carboni forma sempre 4 enllaços...



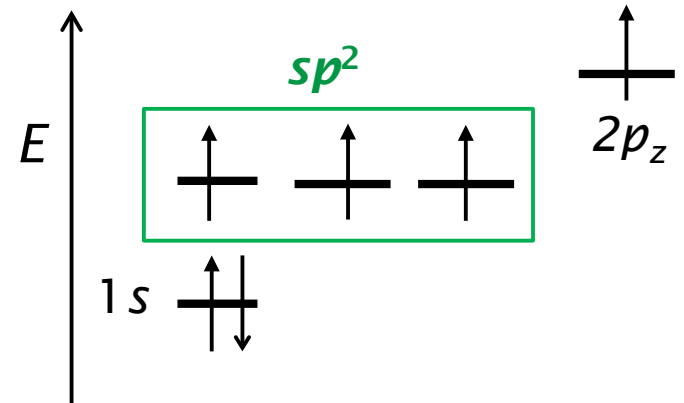
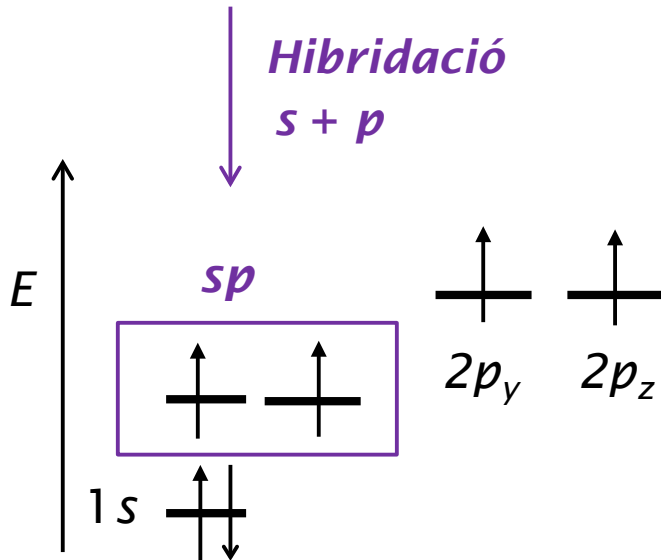
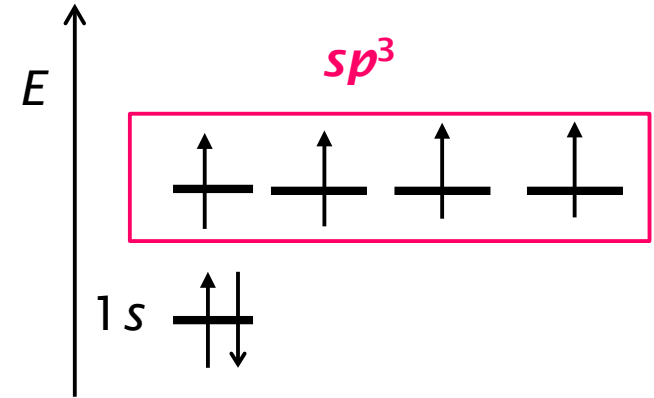


# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni

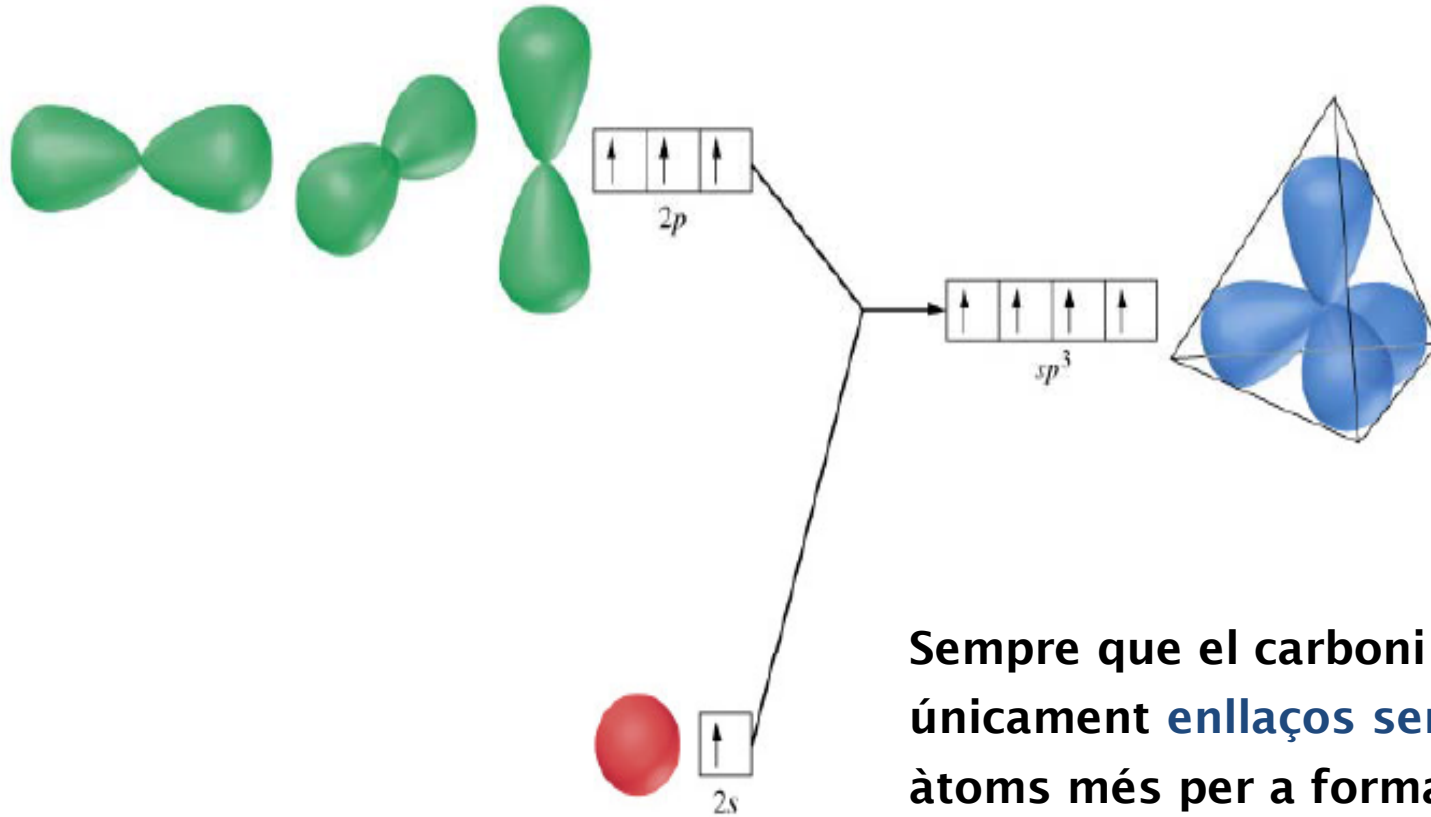


Hibridació  
 $s + p + p + p$

Hibridació  
 $s + p + p$

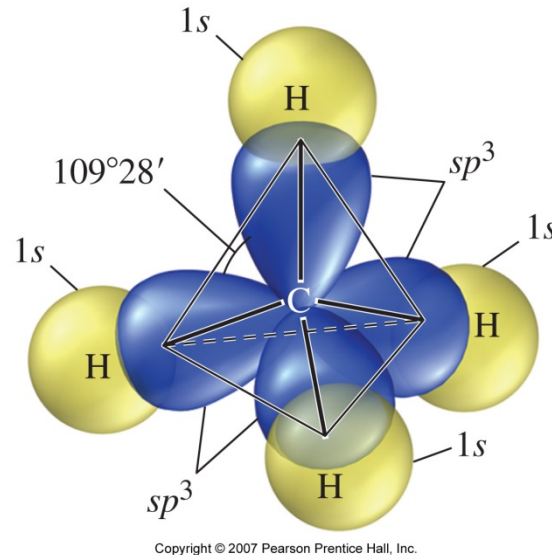


# L'enllaç químic II. Enllaç C-C simple. Hibridació $sp^3$



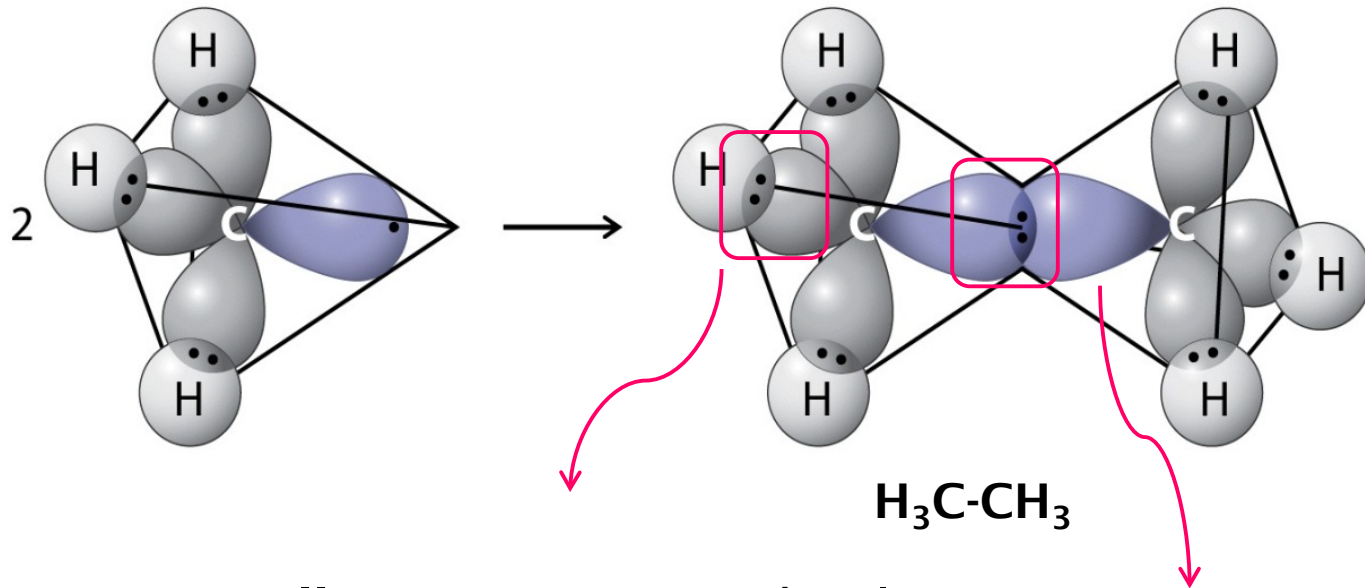
Sempre que el carboni forme únicament **enllaços senzills** amb quatre àtoms més per a formar una molècula, els orbitals implicats per a formar els enllaços són **orbitals híbrids  $sp^3$**  i els àtoms al voltant del carboni es disposen en forma tetraèdrica.

# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni. $sp^3$



Sempre que el carboni forme únicament **enllaços senzills** amb uns altres **quatre àtoms** per a formar una molècula, els orbitals implicats per a formar els enllaços son **orbitals híbrids  $sp^3$**  i els àtoms al voltant del carboni es disposen en forma tetraèdrica.

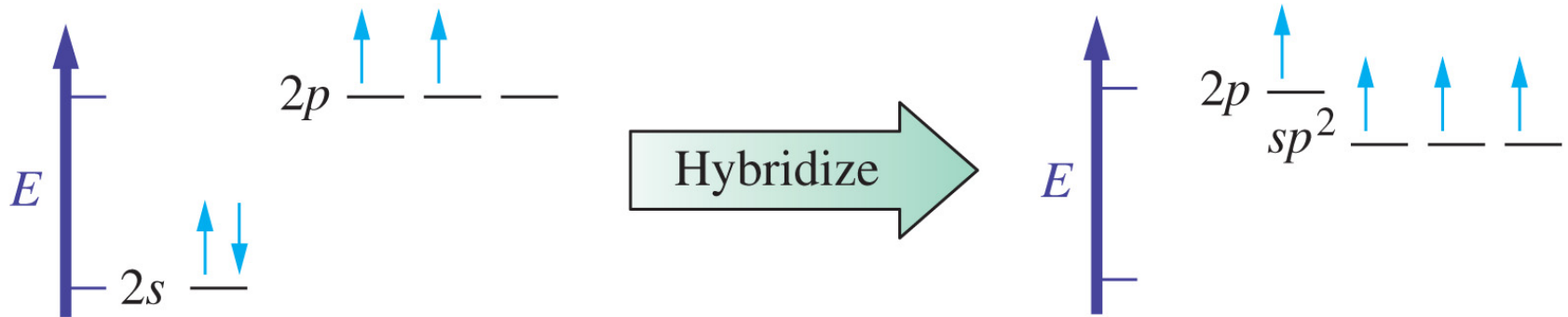
# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni. $sp^3$



Enllaç  $\sigma$  entre un orbital  $sp^3$  del C i l' $1s$  de l'H.

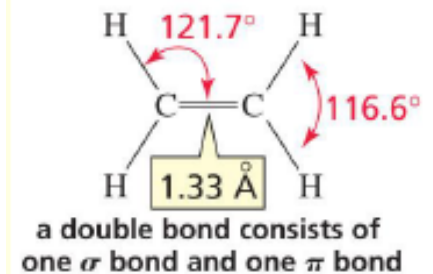
Enllaç  $\sigma$  entre un orbital  $sp^3$  d'un àtom de C i altre  $sp^3$  de l'altre C.

# L'enllaç químic II. Enllaç C-C doble. Hibridació $sp^2$



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

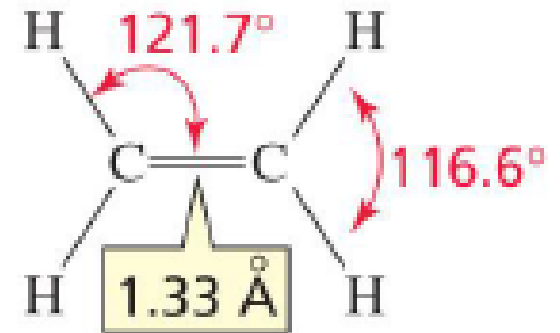
La **hibridació  $sp^2$**  permet explicar l'estructura de les molècules que presenten dobles enllaços C=C i, en general, enllaços dobles covalents del C (C=O, C=N).



# L'enllaç químic II. Enllaç C-C doble. Hibridació $sp^2$

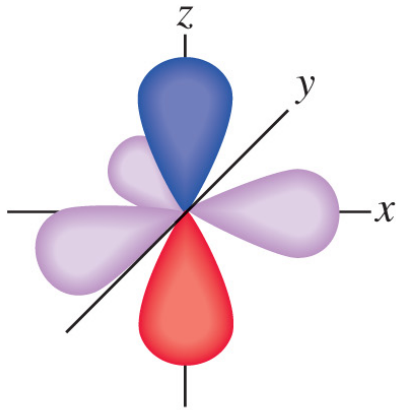


La hibridació  $sp^2$  permet explicar l'estructura de les molècules que presenten **dobles enllaços C=C** i, en general **enllaços dobles covalents del C** (C=O, C=N).



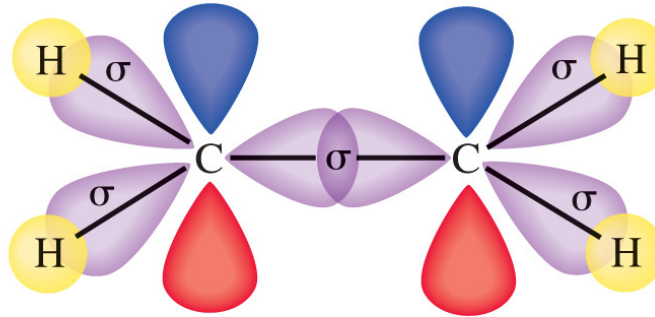
a double bond consists of one  $\sigma$  bond and one  $\pi$  bond

# L'enllaç químic II. Enllaç C-C doble. Hibridació $sp^2$

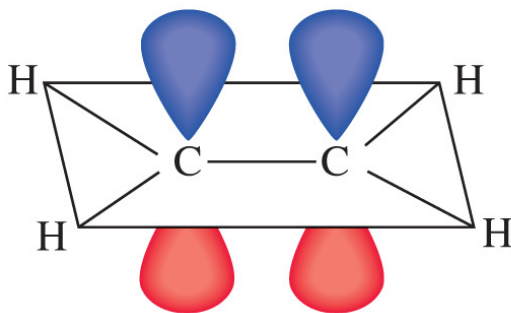


The set of orbitals  $sp^2 + p$

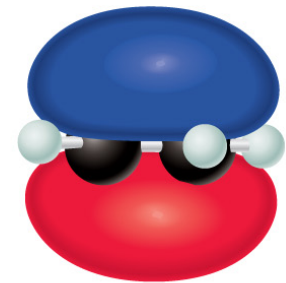
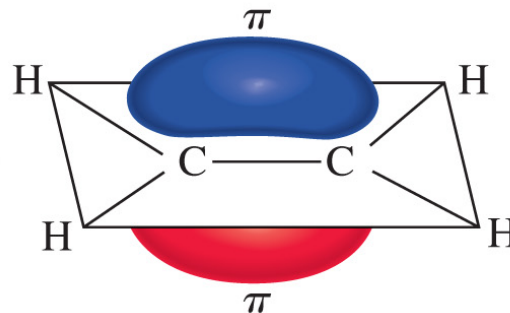
Orbital p no hibridat.



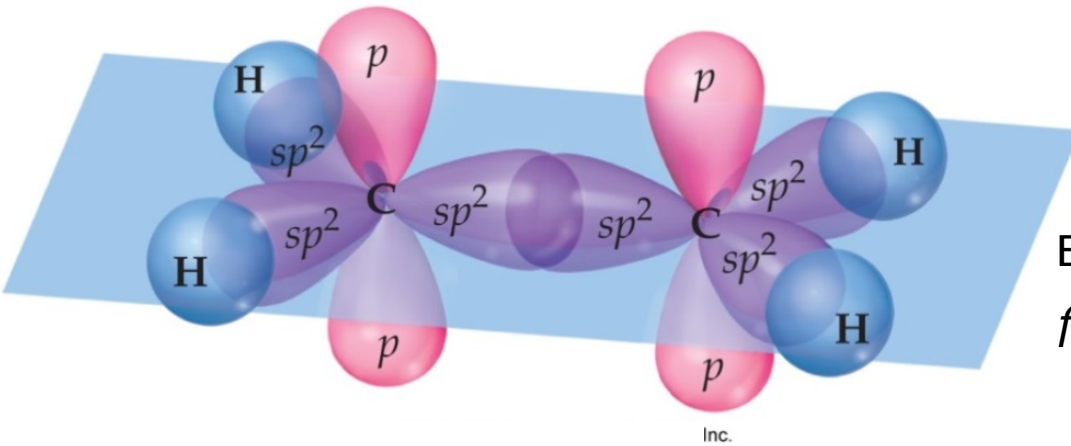
Sigma ( $\sigma$ ) bonds



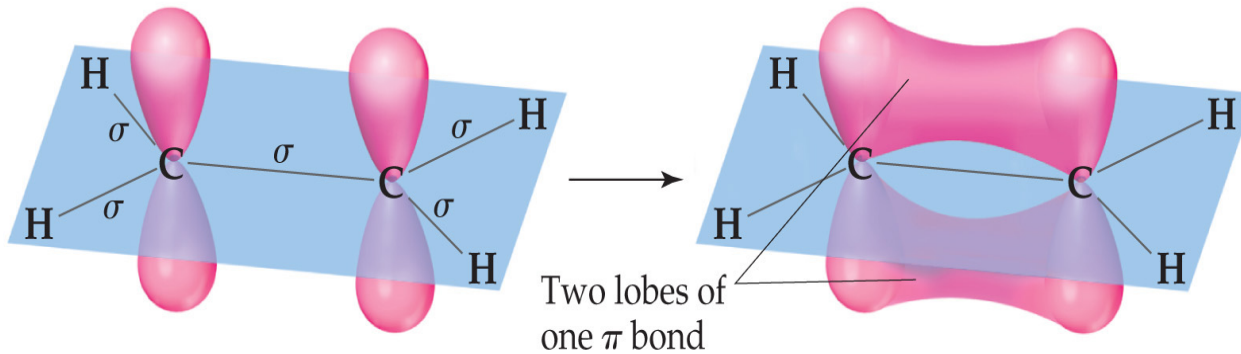
Overlap of  $p$  orbitals leading to pi ( $\pi$ ) bond



# L'enllaç químic II. Enllaç C-C doble. Hibridació $sp^2$



Esquelet d'enllaços  $\sigma$  : solapament *frontal* d'orbitals  $sp^2$  dels C i  $1s$  dels H.



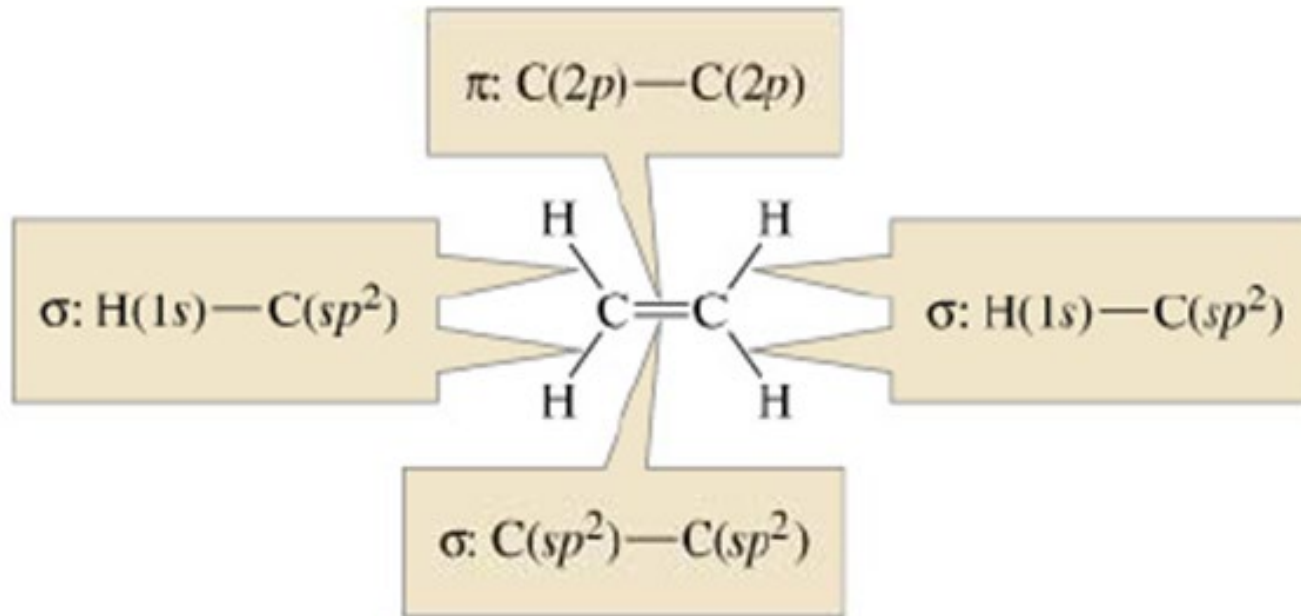
**Enllaç  $\pi$**  format per solapament *lateral* dels orbitals  $2p$ .



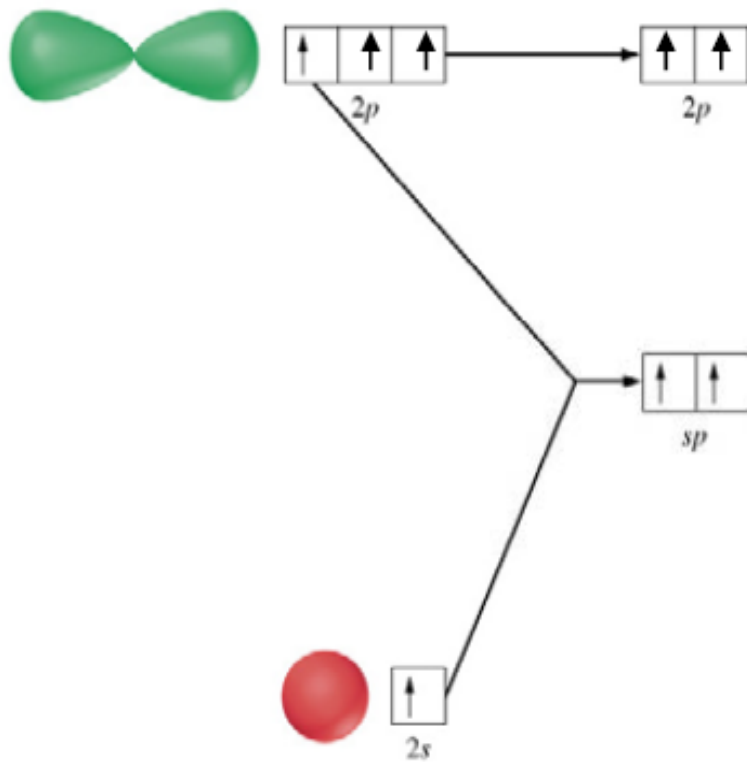
# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni. $Sp^2$



Esquema de les hibridacions i tipus d'enllaç en l'etè.

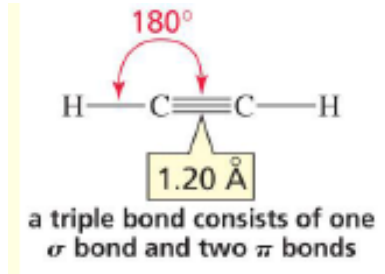


# L'enllaç químic II. Enllaç triple. Hibridació Sp



Els dos orbitals  $2p$  que no es combinen es situen perpendiculars als nous orbitals híbrids  $sp$ .

Els dos orbitals  $sp$  tenen un 50% de caràcter  $s$  i un 50% de caràcter  $p$



La hibridació  $sp$  és útil per a explicar els **enllaços triples** del carboni.

# L'enllaç químic II. Enllaç triple. Hibridació Sp



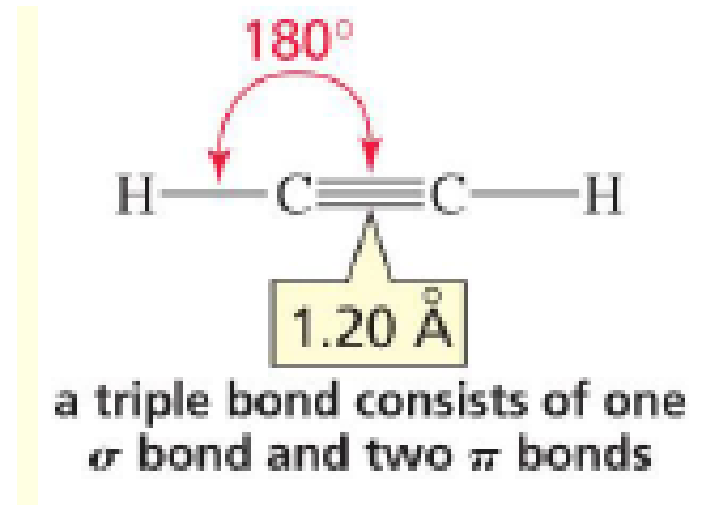
La hibridació *sp*

és útil per a

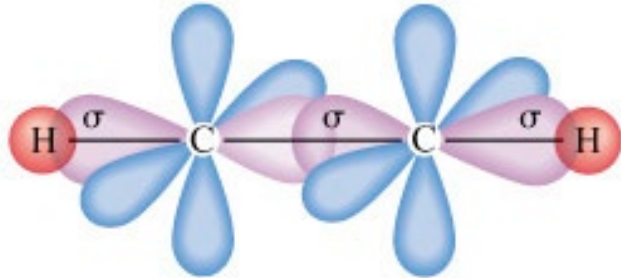
explicar els

enllaços triples

del carboni.



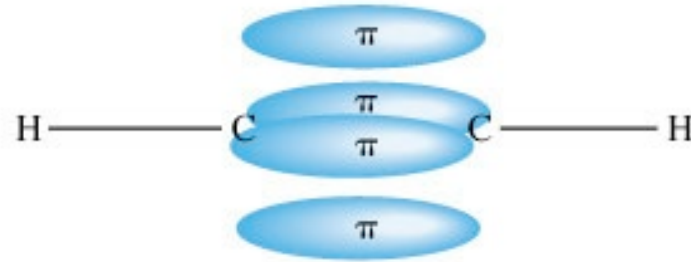
# L'enllaç químic II. Enllaç triple. Hibridació $sp$



Formation of  $\sigma$  bonds



Esquelet d'enllaços  $\sigma$ :  
solapament *frontal*  
d'orbitals  $sp$  dels C i  
 $1s$  dels H.



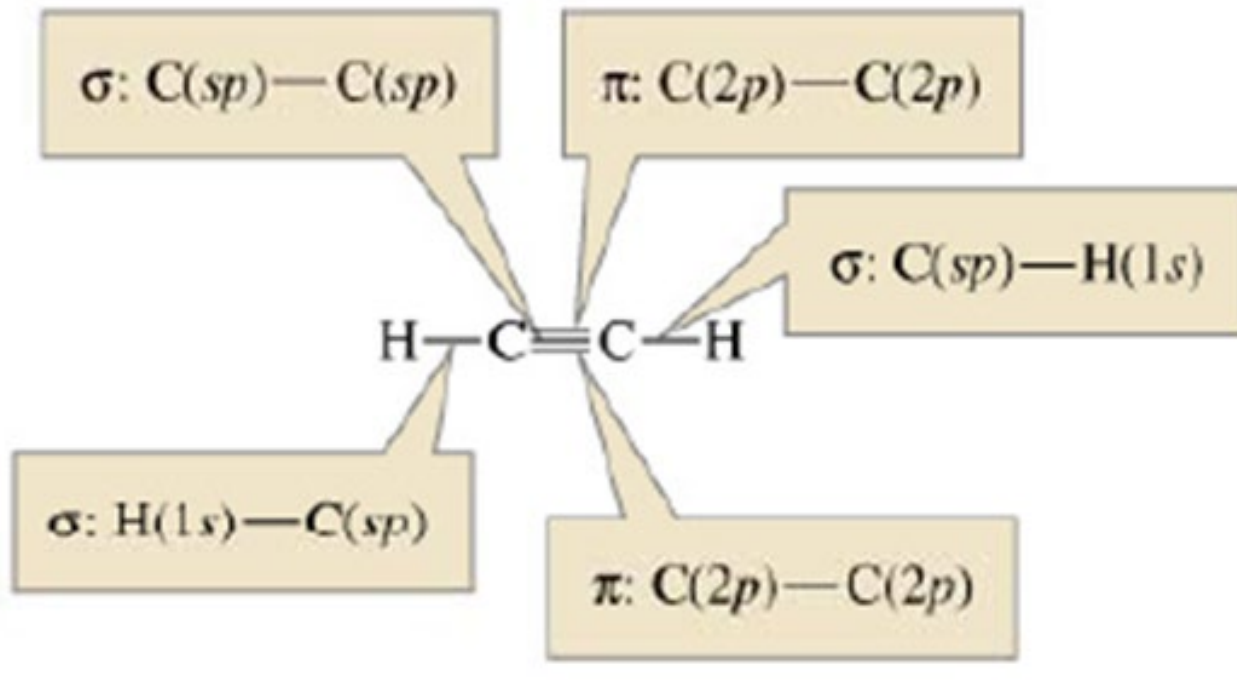
Formation of  $\pi$  bonds



Formació dels dos  
enllaços  $\pi$  per  
solapament *lateral*  
dels orbitals  $2p$  dels  
C.

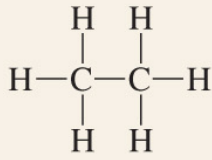
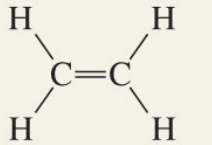
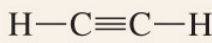
# L'enllaç químic II. Enllaç triple. Hibridació Sp

Esquema de les hibridacions i tipus d'enllaç en l'etè.



# L'enllaç químic II. Hibridació en l'àtom de carboni

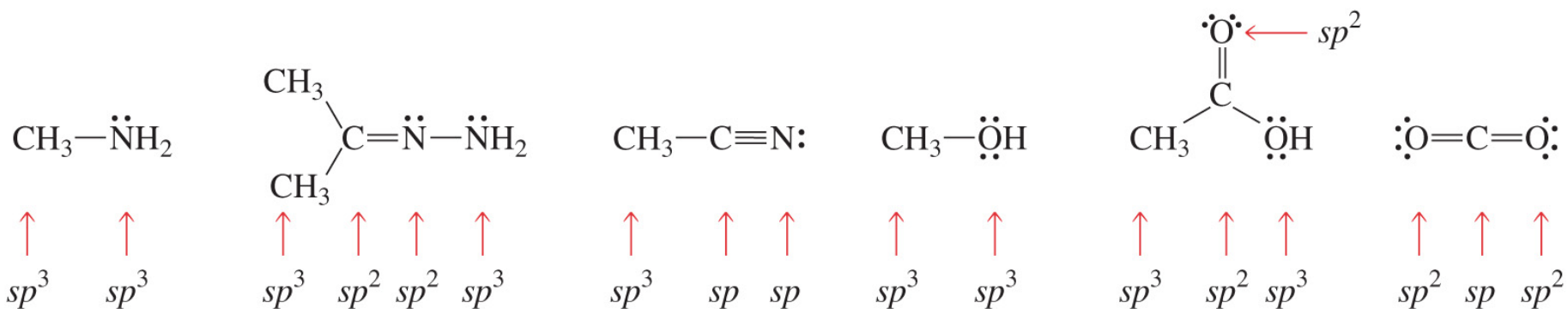
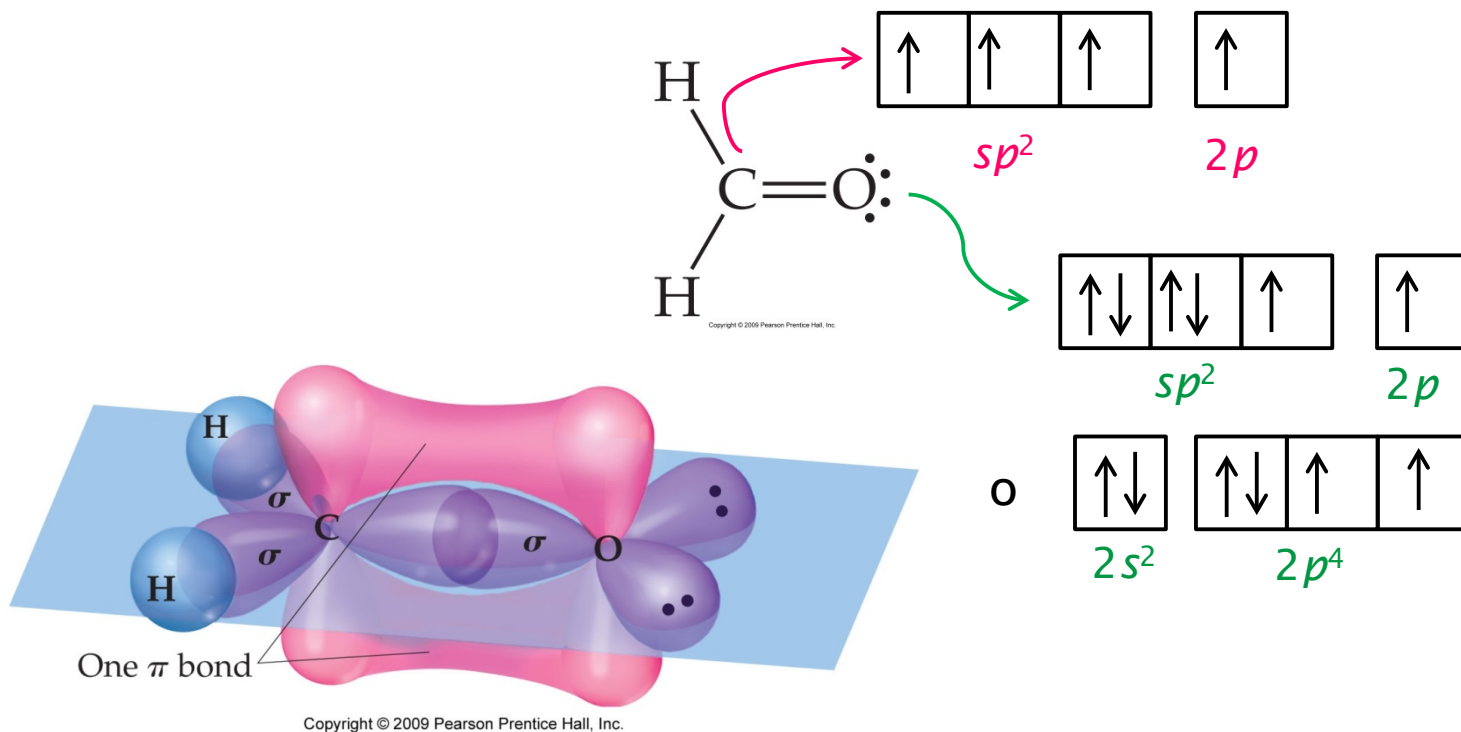
**Table 1.7 Comparison of the Bond Angles and the Lengths and Strengths of the Carbon–Carbon and Carbon–Hydrogen Bonds in Ethane, Ethene, and Ethyne**

Molecule	Hybridization of carbon	Bond angles	Length of C—C bond (Å)	Strength of C—C bond (kcal/mol) (kJ/mol)	Length of C—H bond (Å)	Strength of C—H bond (kcal/mol) (kJ/mol)		
 ethane	$sp^3$	109.5°	1.54	90	377	1.10	101	423
 ethene	$sp^2$	120°	1.33	174	728	1.08	111	466
 ethyne	$sp$	180°	1.20	231	967	1.06	131	548

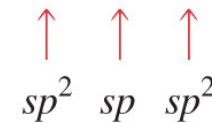
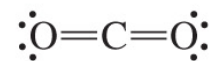
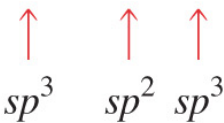
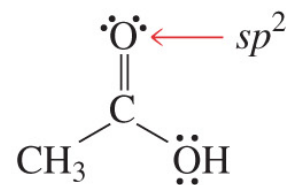
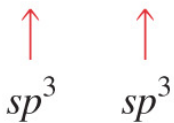
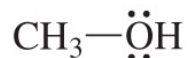
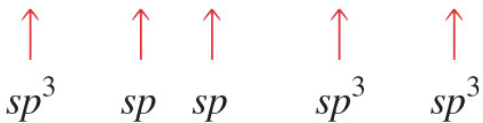
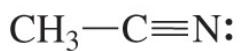
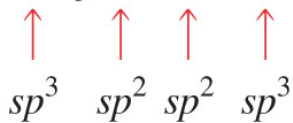
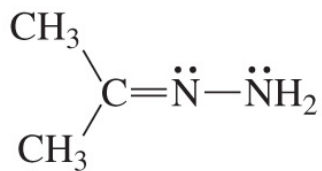
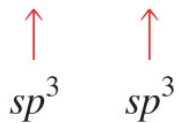
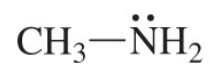
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Orbitals més curts**  
**(menor % caràcter p)**

# L'enllaç químic II. Exemple: formaldehid



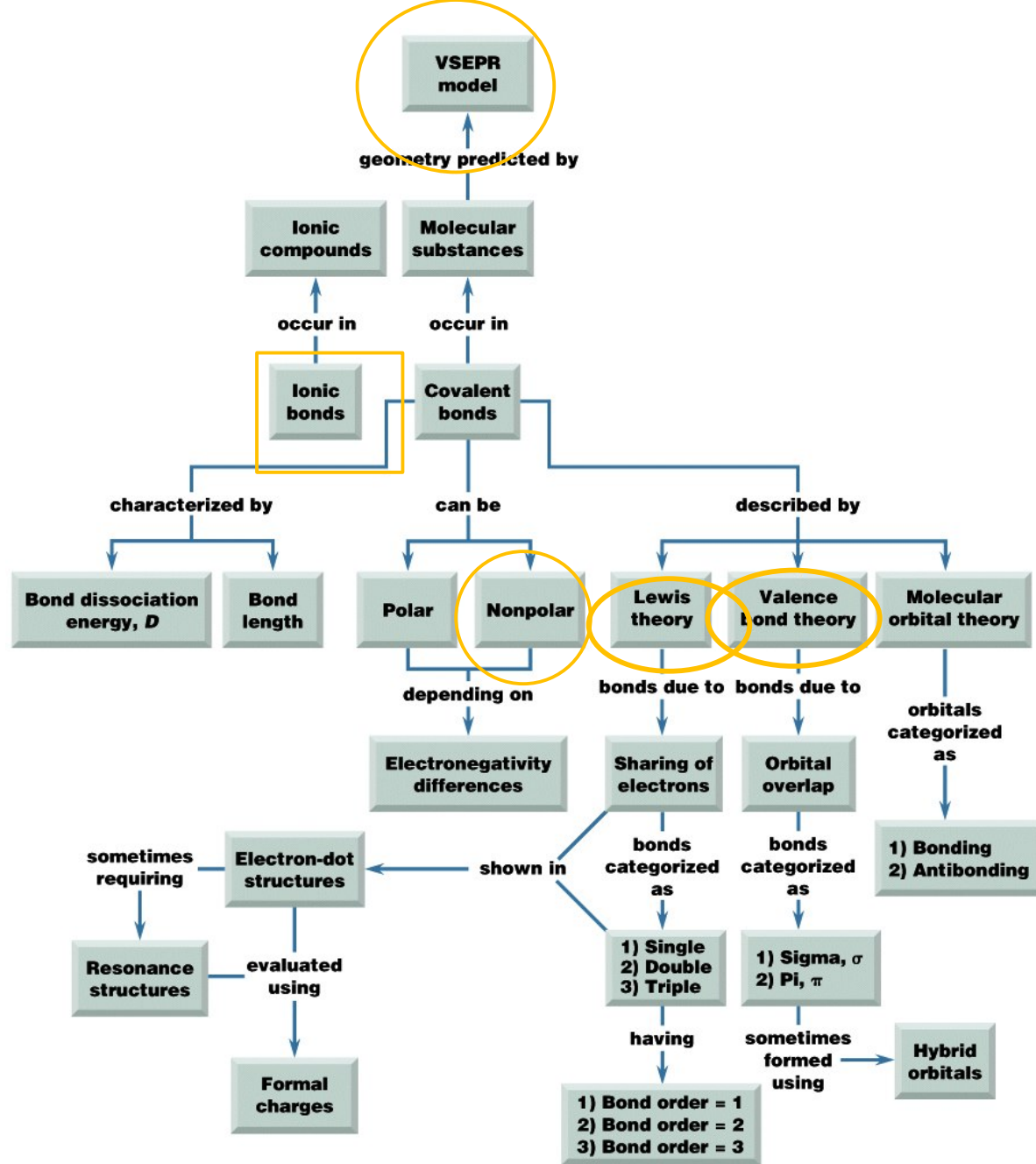
# L'enllaç químic II. Més exemples



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Diagrama resum de l'enllaç químic



# TEMA 5. ENLLAÇ QUÍMIC II

## Teoria d'orbitals moleculars



Molècules diatòmiques del primer i del segon període.  
Magnetisme

Molècules diatòmiques heteronuclears senzilles



# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

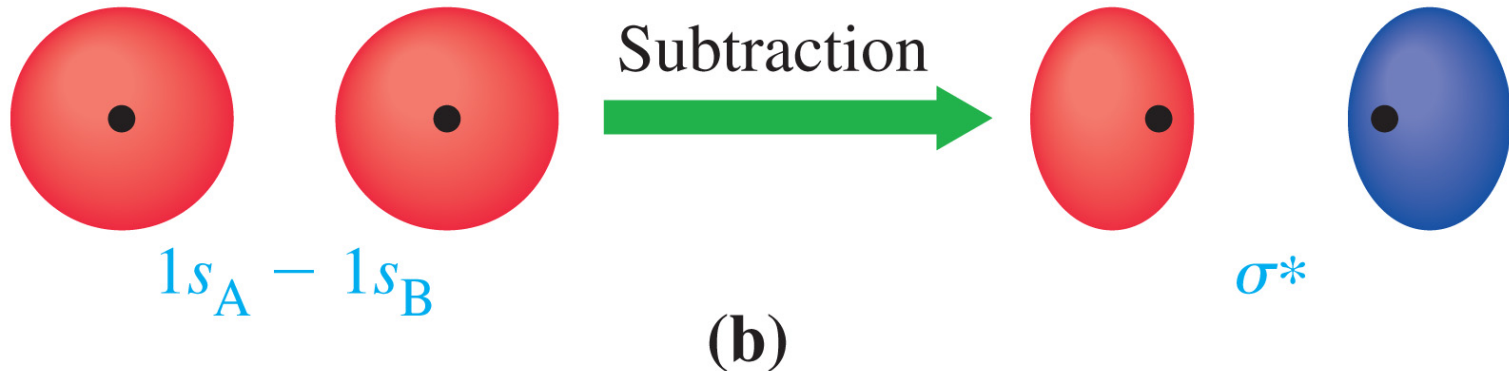
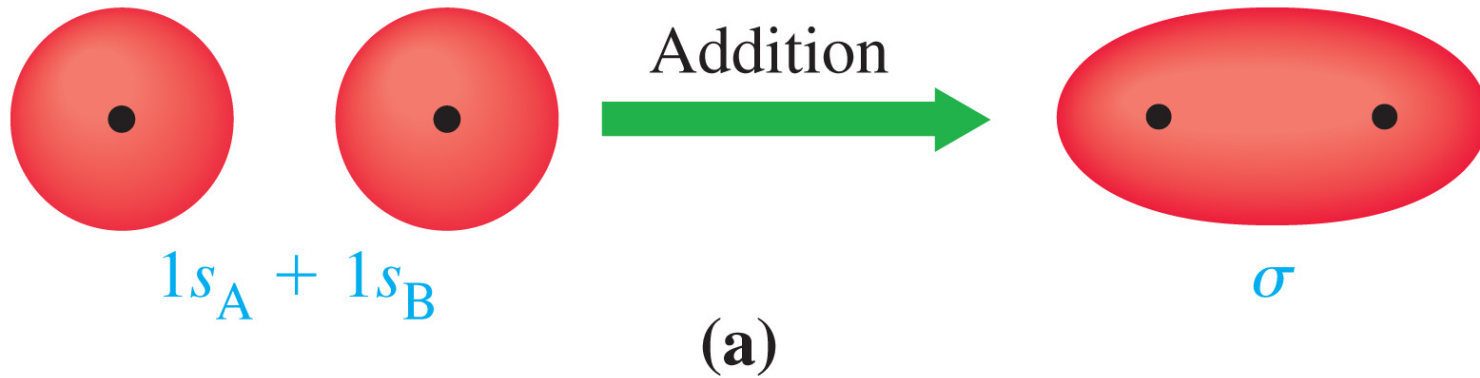
## Orbital atòmic (OA):

funció d'ona amb un quadrat que descriu la probabilitat de trobar un electró dins d'una regió de l'espai al voltant del nucli *d'un àtom*.

## Orbital molecular (OM):

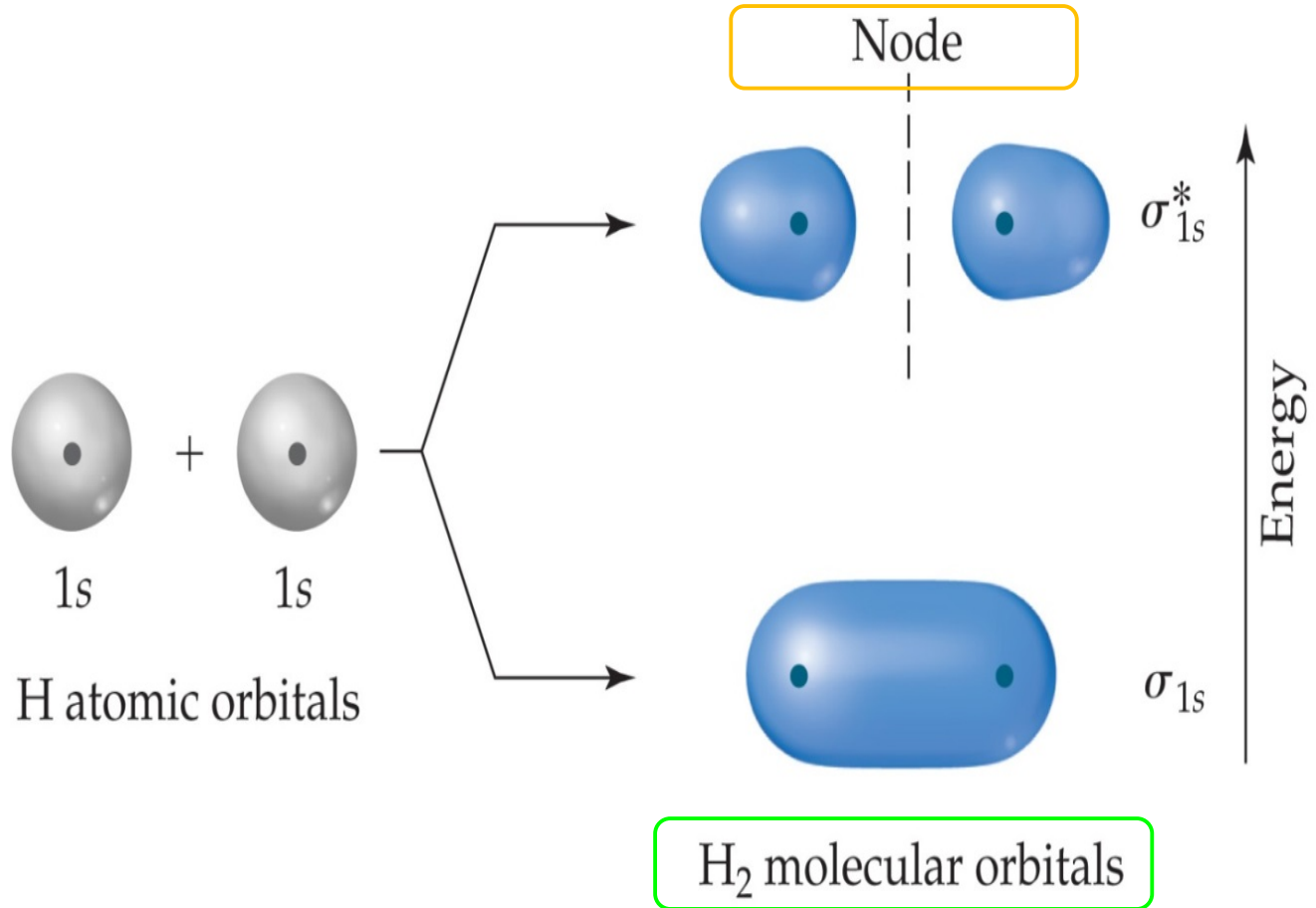
funció d'ona el quadrat de la qual descriu la probabilitat de trobar un electró dins d'una regió de l'espai al voltant *d'una molècula*.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

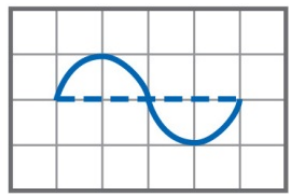


# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

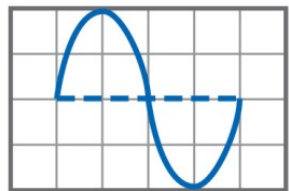
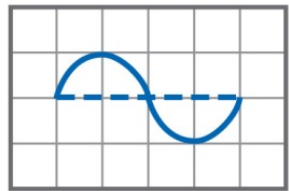
H<sub>2</sub>



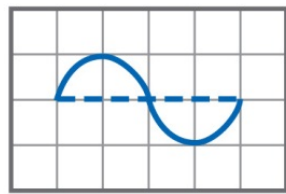
# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars



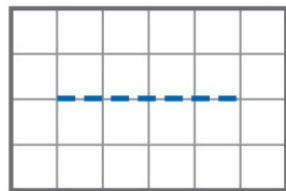
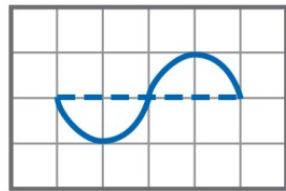
+



Constructive  
combination



+

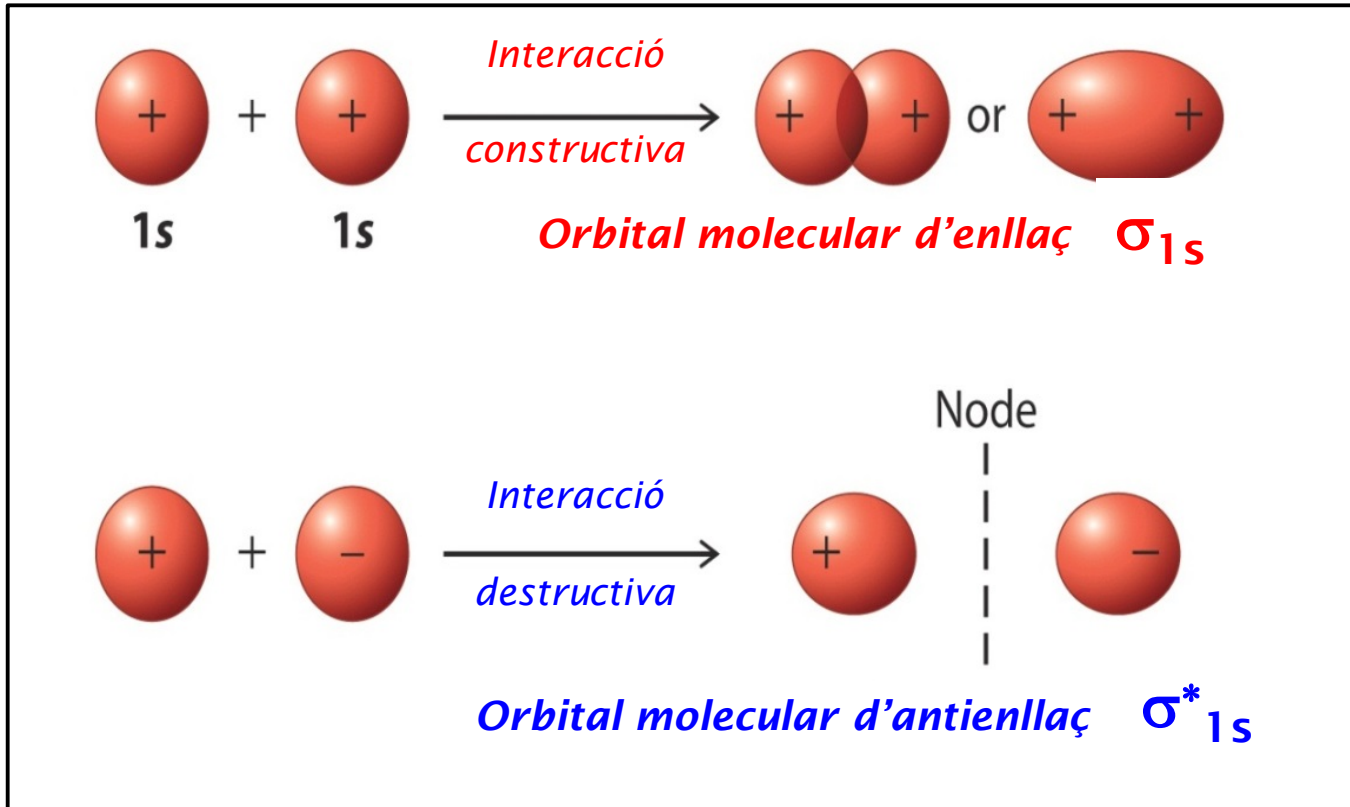


Destructive  
combination

El **OM** es formen per **solapament** o **combinació d'orbitals atòmics (OA)**. Perquè els OA se solapen de forma neta, els signes o **fases** de les funcions d'ona que se solapen han de ser adequats.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

Combinar dos orbitals 1s que tenen la mateixa fase produïx un OM  $\sigma_{1s}$



Combinar dos orbitals 1s que estan oposats en fase produïx un OM  $\sigma^*_{1s}$

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

---

Quan **dos** orbitals atòmics es combinen es formen **dos** orbitals moleculars.

Un dels OM formats és l'orbital molecular **enllaçant** (o d'enllaç).

---

Concentra la densitat electrònica entre els dos nuclis (les funcions d'ona dels orbitals atòmics es combinen en aquesta regió).

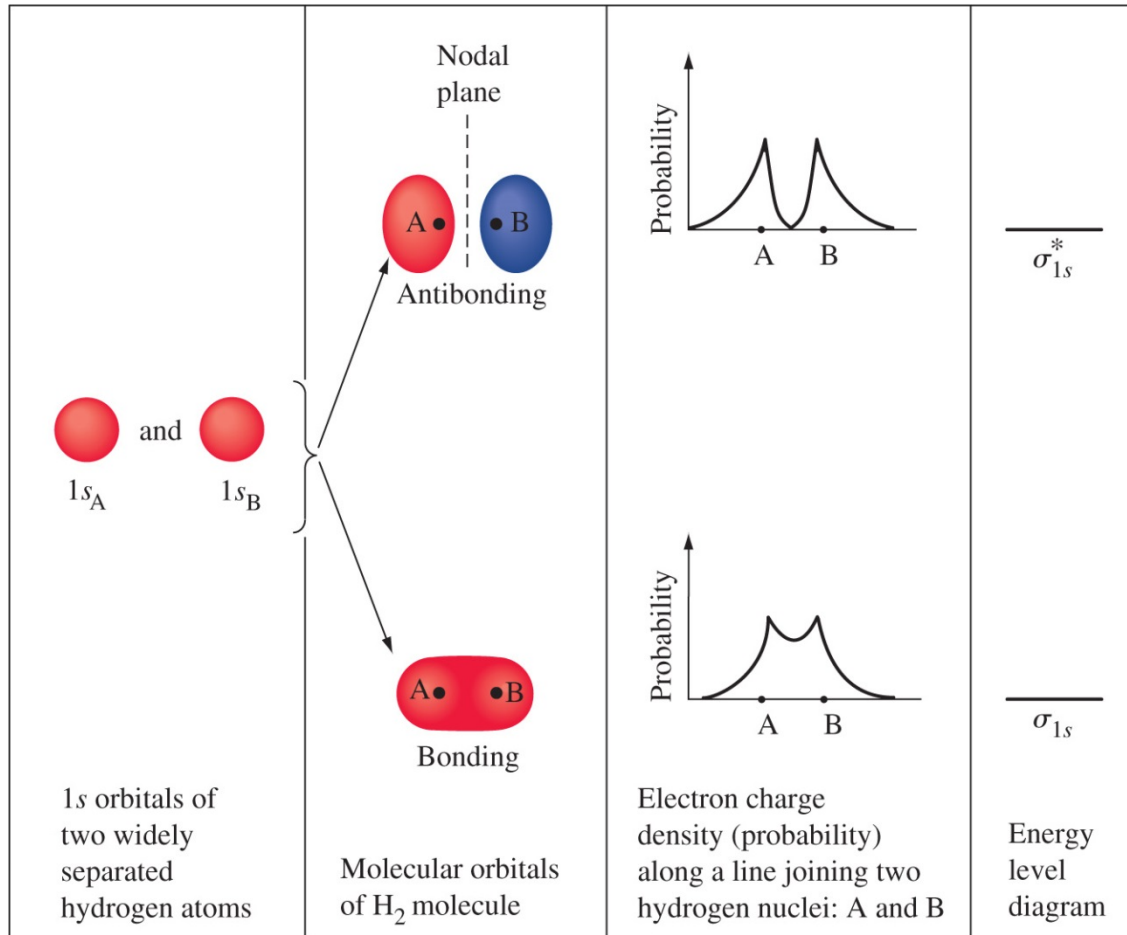
---

La seua energia és menor que la dels orbitals atòmics per separat.

---



# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Els electrons situats en un orbital enllaçant **augmenten** l'estabilitat de la molècula.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars

## Idees bàsiques

(configuració electrònica,  
energia, solapament...)

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars. Idees bàsiques

1

- El nombre **d'OM** que es formen **és igual** al nombre **d'OA** que es combinen.

2

- Com **més estable** és l'OM d'enllaç, menys estable serà el corresponent OM d'antienllaç

3

- **L'ompliment** dels OM es fa **de menys a més energia** (**principi Aufbau**). En una molècula estable, el nombre d'electrons en els OM d'enllaç és major que en els d'antienllaç.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars. Idees bàsiques

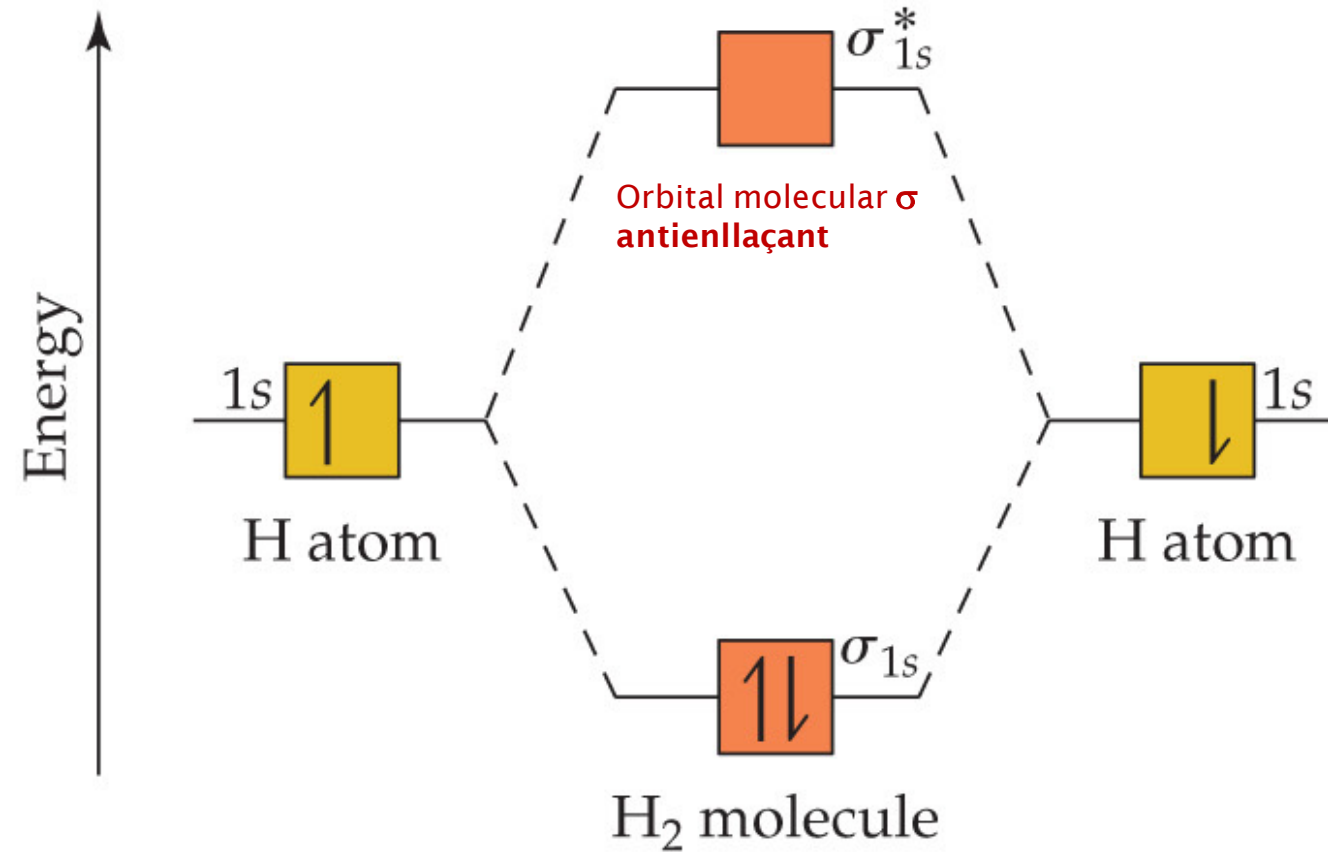
4

- Cada OM només pot acceptar dos electrons amb espins oposats (**principi d'exclusió de Pauli**).

5

- En OM de la mateixa energia, **la regla de Hund** prediu la configuració més estable: els electrons ocupen els OM amb **espins paral·lels**.

# L'enllaç químic II. OM. Molècules homoatòmiques

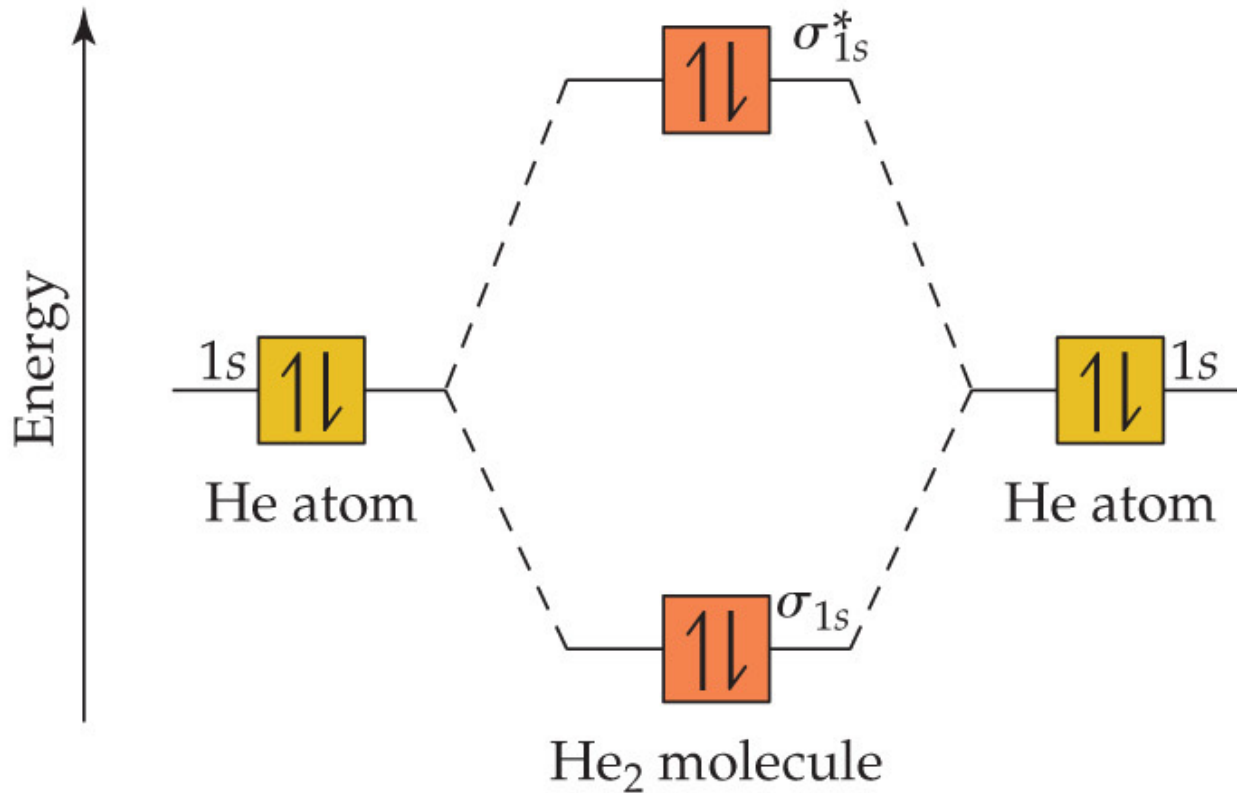


(a)

Com l'OM  $\sigma_{1s}$  té **menys energia** que els OA 1s aïllats, la molècula d'H<sub>2</sub> és **més estable** que els àtoms d'H separats.

# L'enllaç químic II. OM. Molècules homoatòmiques

## He<sub>2</sub>



(b)

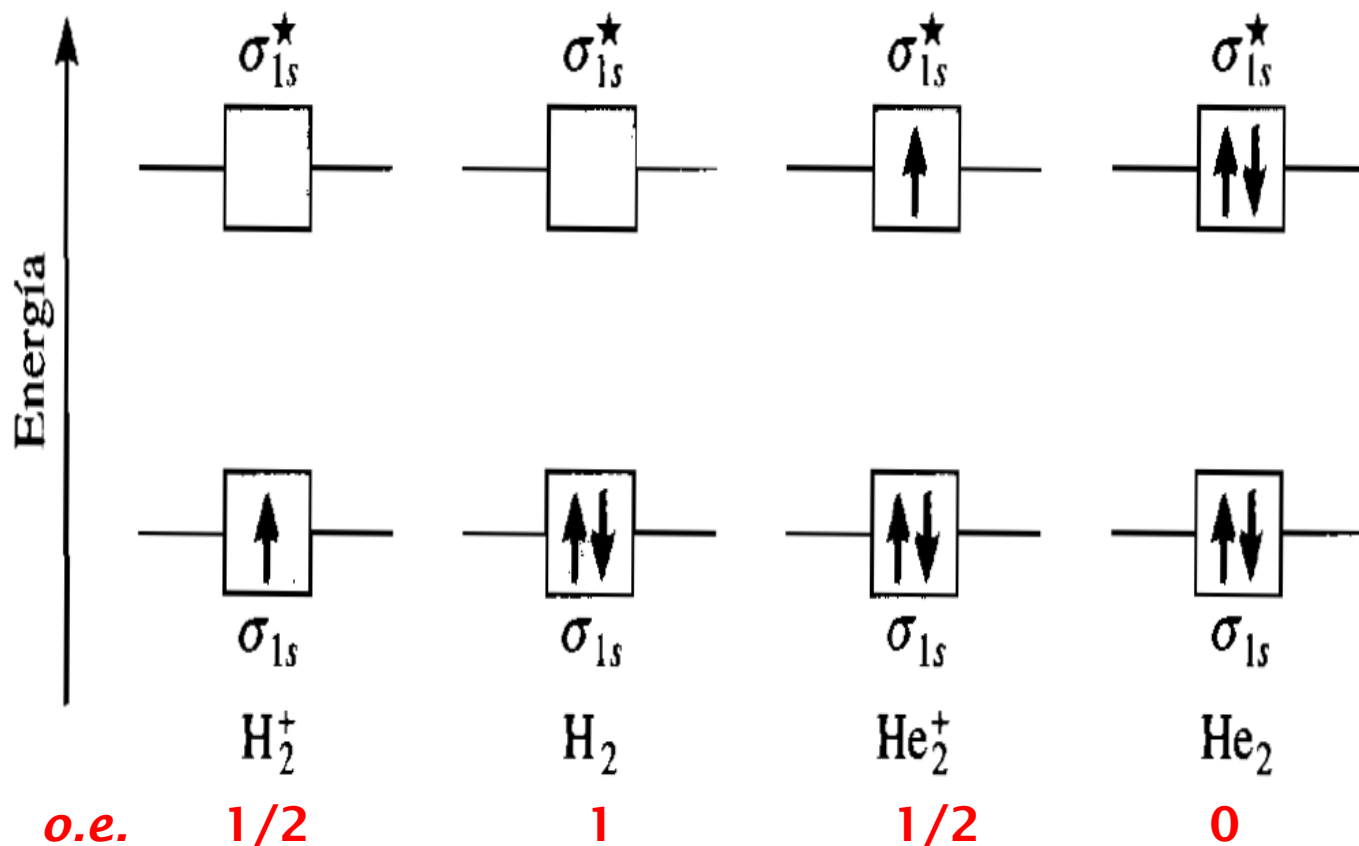
Per a  
acomodar **els 4 electrons**,  
**dos** han  
d'estar en  
un **OM**  
**antienllaçant**.  
La molècula  
**He<sub>2</sub>** no és una  
espècie  
**estable**.

# L'enllaç químic II. **Ordre d'enllaç**

$$\text{Ordre d'enllaç} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \text{nombre d'electrons} \\ \text{en els OM d'enllaç} \end{array} - \begin{array}{l} \text{nombre d'electrons} \\ \text{en els OM d'antienllaç} \end{array} \right\}$$

Indica **l'estabilitat** d'una molècula segons la teoria d'OM.

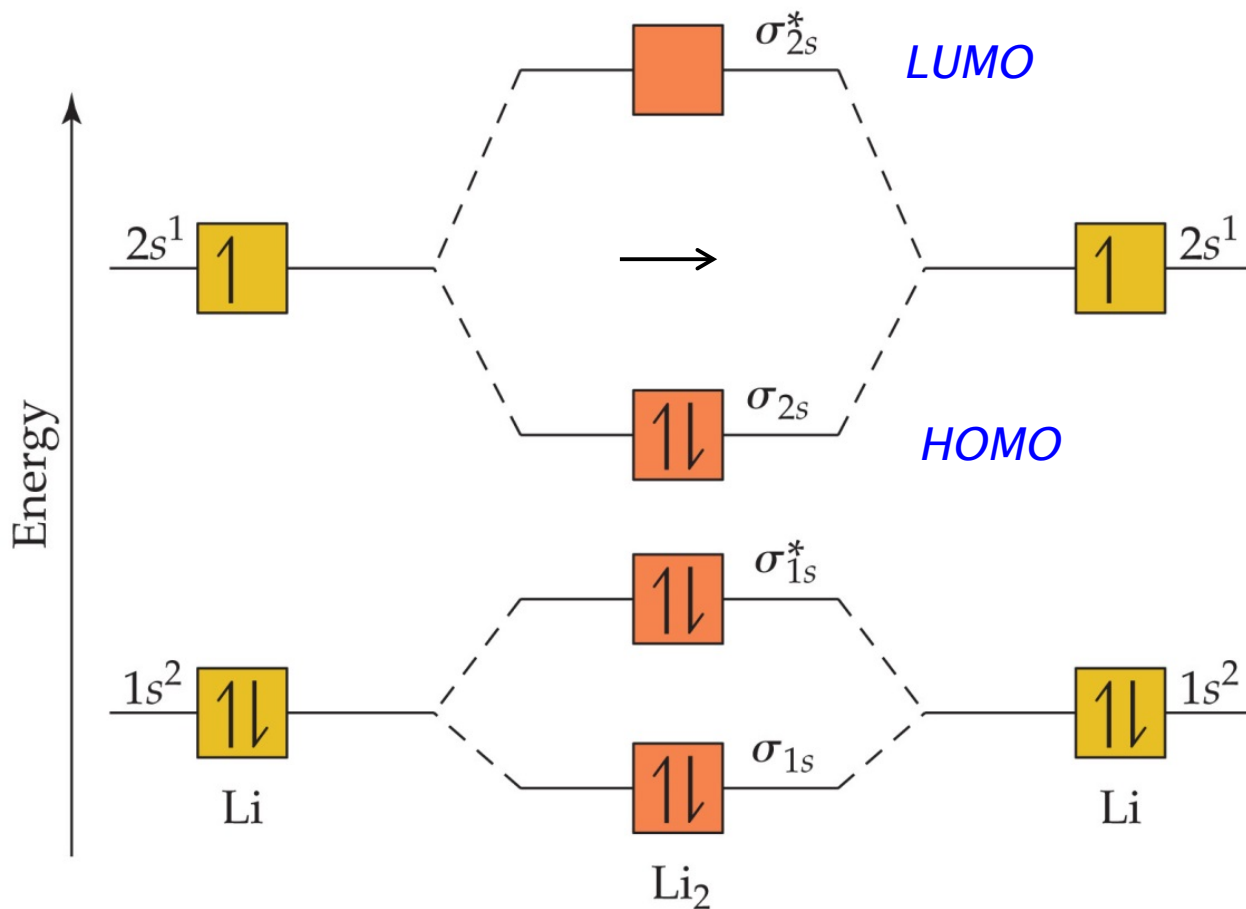
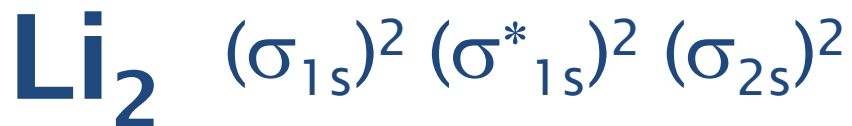
# L'enllaç químic II. **Ordre d'enllaç**



Una molècula **serà estable** si hi ha un nombre major d'electrons **enllaçants** que **d'antienllaçants**, és a dir, si l'ordre d'enllaç és més gran que 0.



# L'enllaç químic II. Exemple



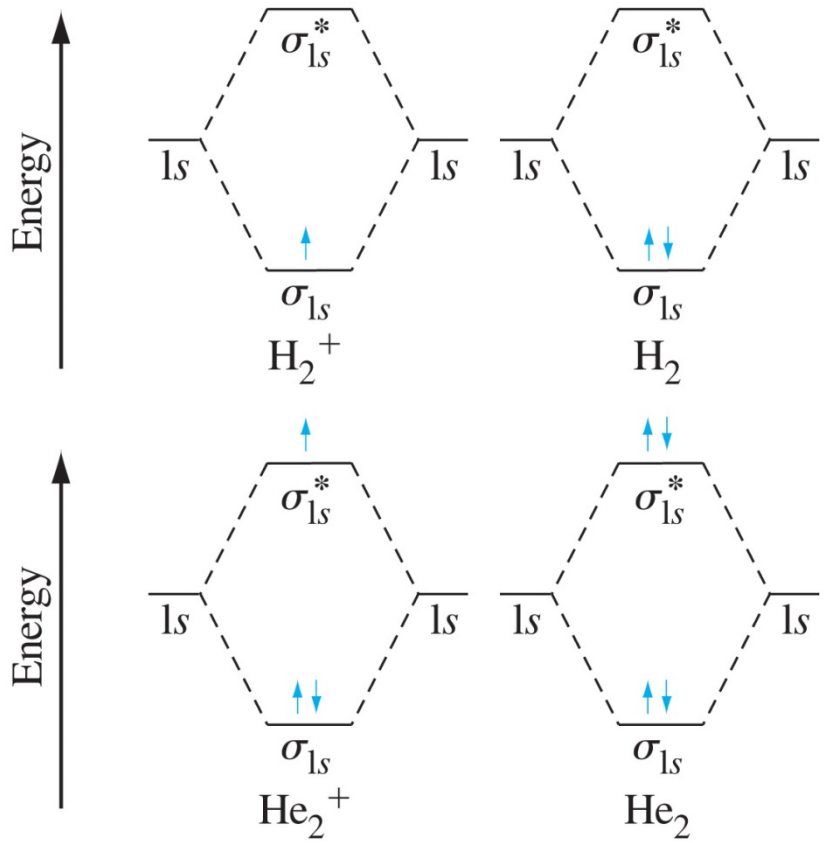
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

*Ordre d'enllaç = 1 = enllaç senzill*

*OA frontera* = són els que es combinen per a formar l'enllaç.

Els orbitals 1s pràcticament no contribueixen a l'enllaç de la molècula de  $\text{Li}_2$ .

# L'enllaç químic II. Exemple

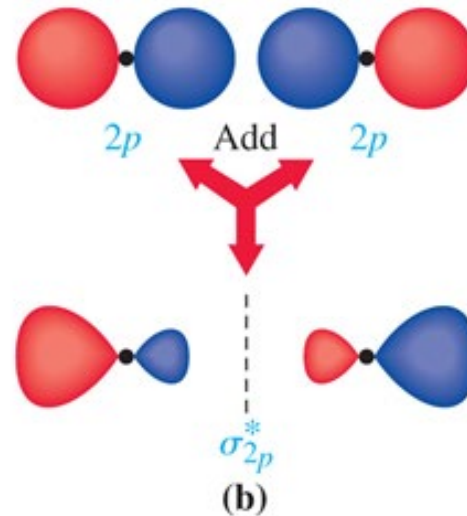
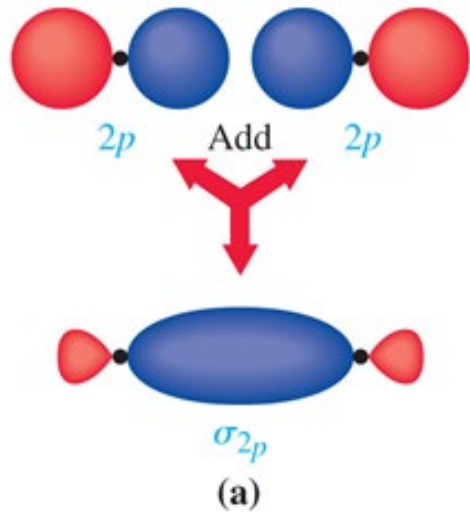


$$EO_{H_2} = (2-0)/2 = 1$$

$$EO_{He_2^+} = (2-1)/2 = 1/2$$

$$EO_{He_2} = (2-2)/2 = 0$$

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars d'orbitals atòmics 2p



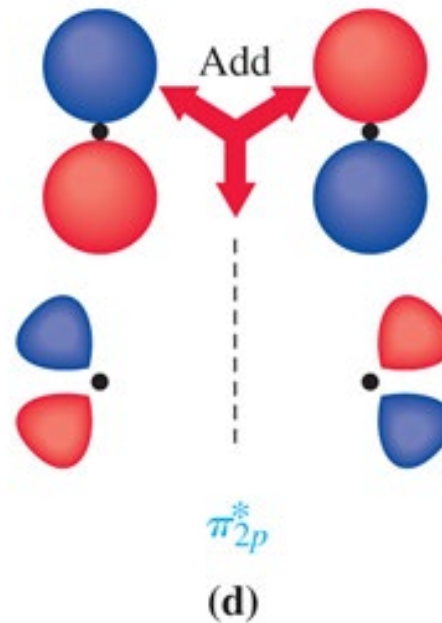
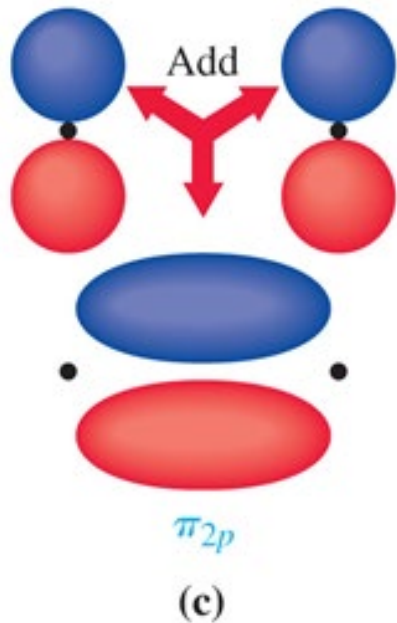
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

## Enllaç sigma

El solapament (combinació) frontal d'orbitals  $p$  forma orbitals moleculars  $\sigma$  i  $\sigma^*$ .

Aquest solapament situa la màxima densitat electrònica en l'eix que uneix els dos nuclis.

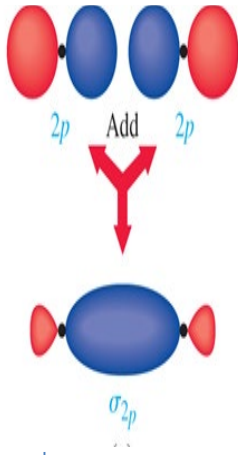
# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars d'orbitals atòmics 2p



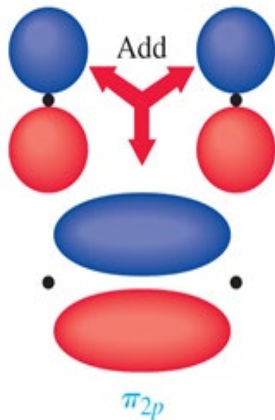
## Enllaç pi

El solapament (combinació) lateral d'orbitals p forma **orbitals moleculars p i p\***. Aquest solapament situa la màxima densitat electrònica **per damunt i per davall** del pla que conté els nuclis.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars d'orbitals atòmics 2p

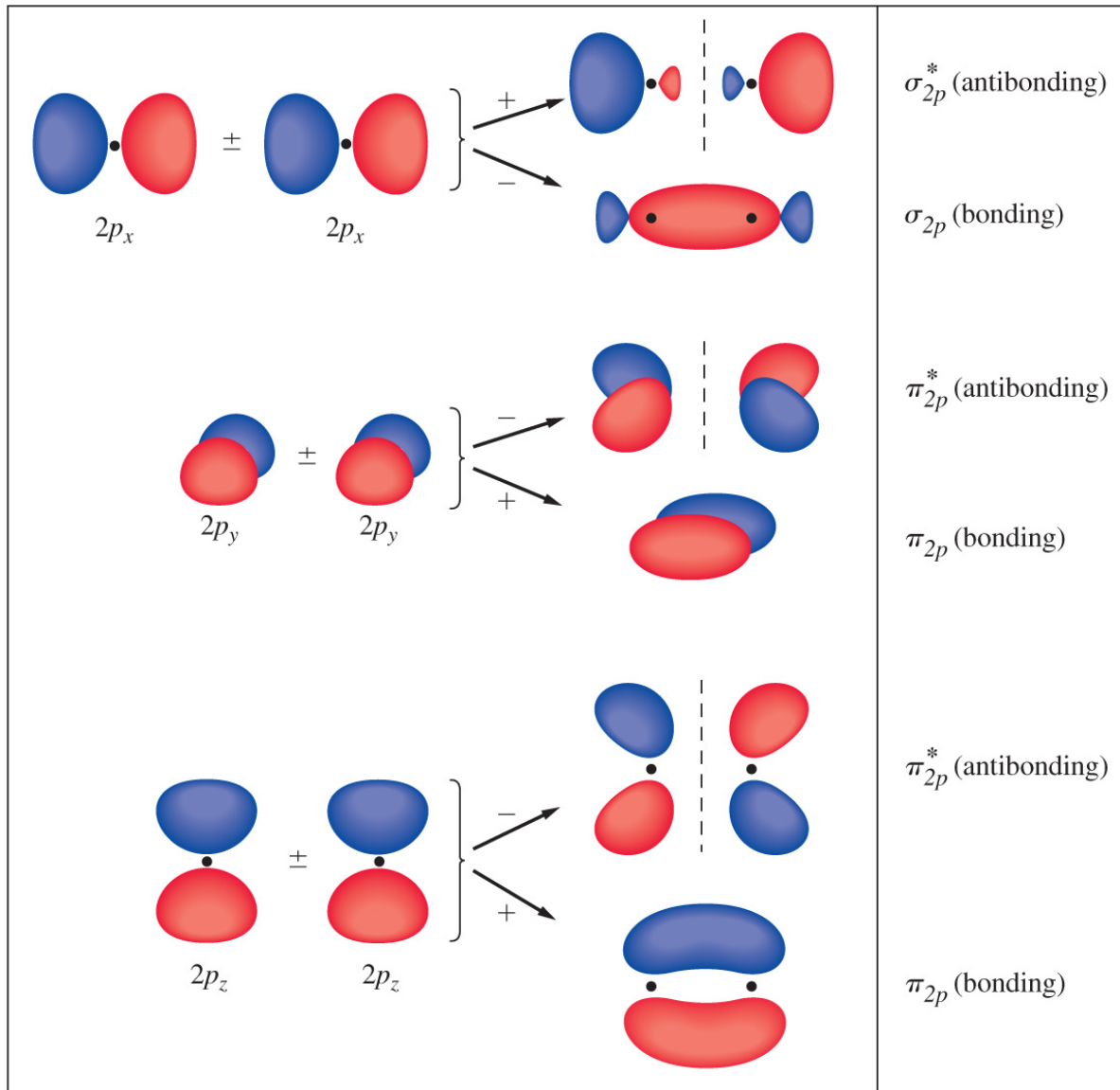


Només es poden combinar **un parell d'orbitals p de forma frontal**; els altres dos han de combinar-se **de forma lateral** per a formar els OM de tipus p.

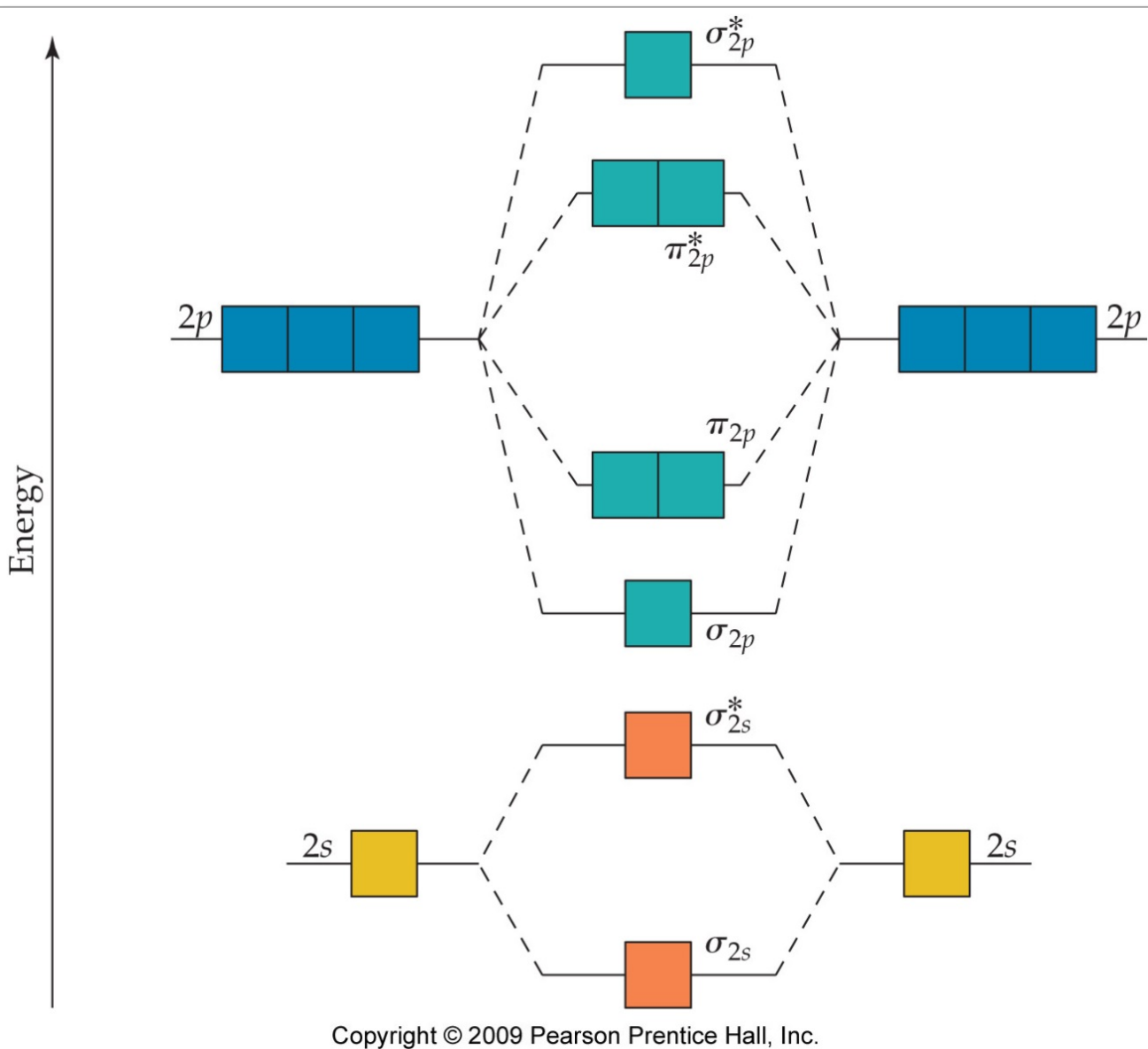


Com hi ha **2 parells d'orbitals atòmics p** perpendiculars a l'eix internuclear, es formen 4 OM de tipus p, **dos enllaçants i dos antienllaçants**.

# L'enllaç químic II. Orbitals moleculars d'orbitals atòmics 2p



# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(homo)atòmiques



## B<sub>2</sub> al Ne<sub>2</sub>

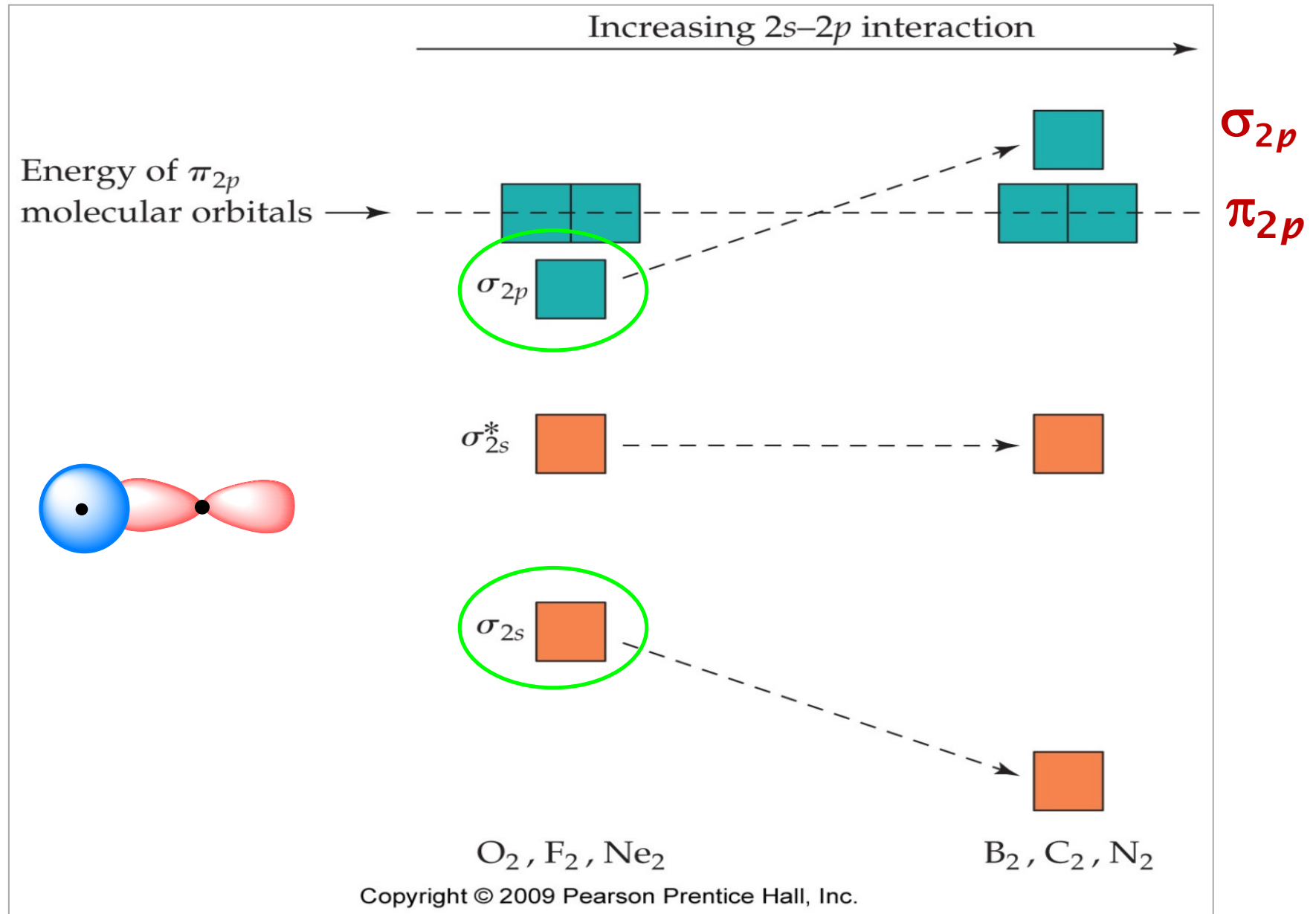
OA de valència 2s i 2p

El diagrama assumeix que **NO HI HA INTERACCIÓ** entre l'orbital atòmic 2s d'un àtom i els orbitals 2p d'un altre àtom, cosa que només és vàlida per a O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub> i Ne<sub>2</sub>.

Esquema d'orbitals moleculars per a

$$Z \geq 8$$

# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(homo)atòmiques





# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(homo)atòmiques

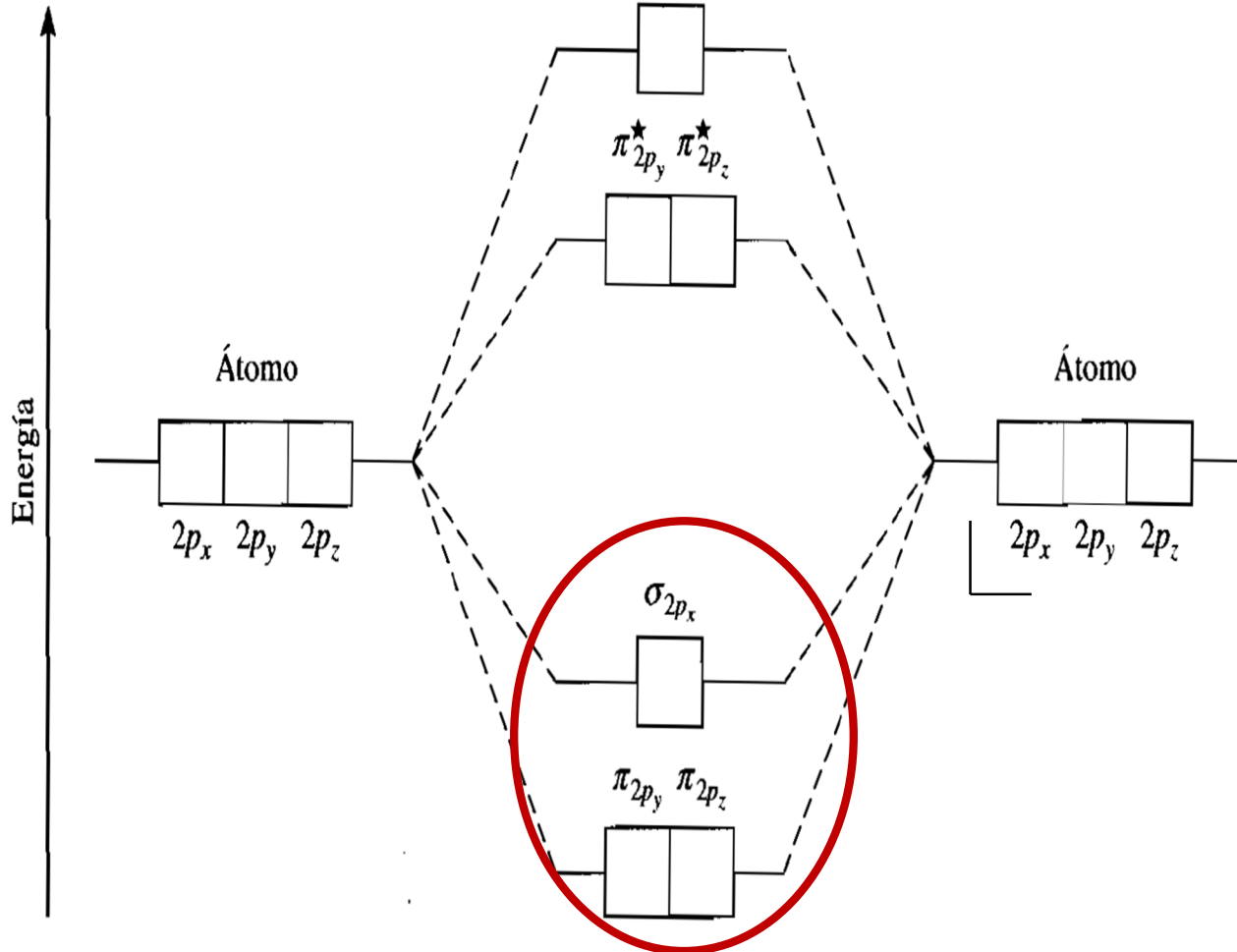
## B<sub>2</sub> al Ne<sub>2</sub>

### Z ≤ 7

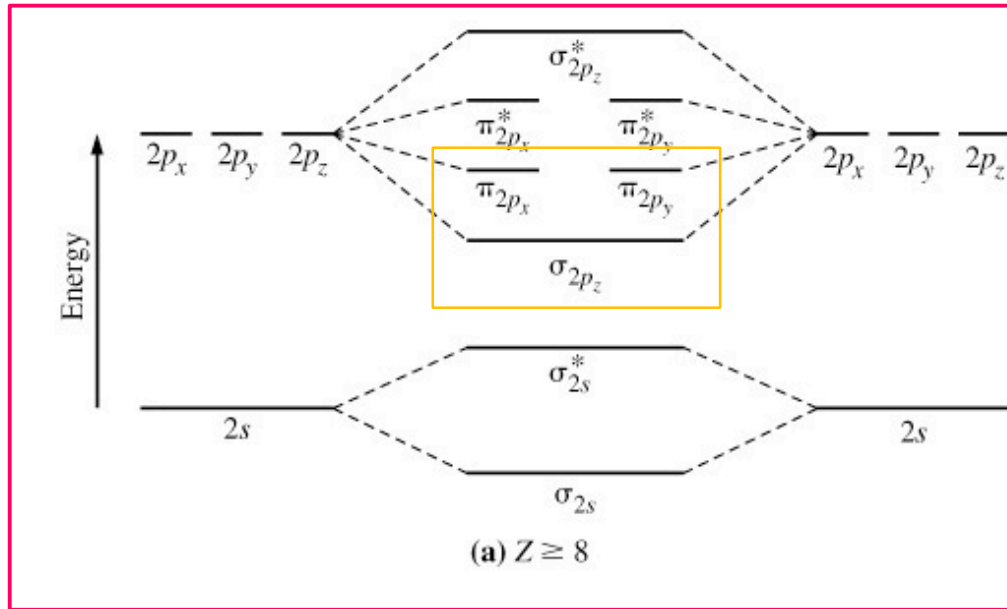
Diagrama general dels nivells d'energia orbitals moleculars per a les molècules diatòmiques homonuclears del segon període.

Per a simplificar, s'han llevat els orbitals corresponents al solapament dels OA s. Observeu que l'orbital sigma 2p enllaçant té una energia major que els 2 pi enllaçants.

Això vol dir que els electrons situats en els orbitals sigma 2s enllaçants són menys estables.

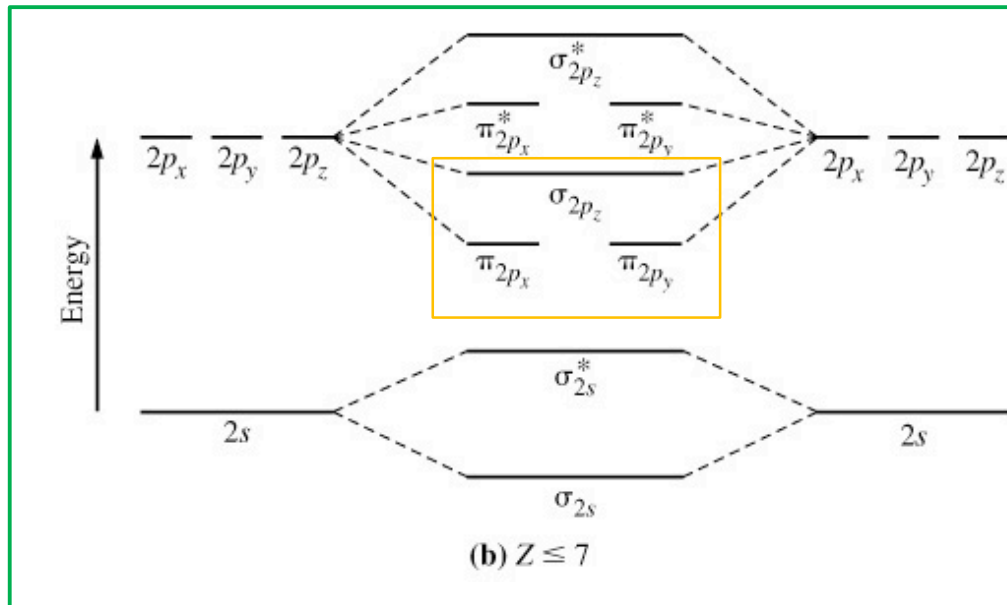


# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(homo)atòmiques



No interacció  $2s-2p$

$O_2, F_2, Ne_2$



Interacció  $2s-2p$

$Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2$

# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(homo)atòmiques

## B<sub>2</sub> al Ne<sub>2</sub>

$\sigma_{2p}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\pi_{2p}^*, \pi_{2p}^*$	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
$\sigma_{2p}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓
$\pi_{2p}, \pi_{2p}$	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑ <input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓ <input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓ <input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓
$\sigma_{2s}^*$	<input type="checkbox"/>	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓
$\sigma_{2s}$	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓	<input style="text-align: center;" type="checkbox"/> ↑↓
	Li <sub>2</sub>	Be <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
Bond order	1	0	1	2	3
Magnetism	Diamagnetic	–	Paramagnetic	Diamagnetic	Diamagnetic

# L'enllaç químic II. OM. Propietats magnètiques

## Paramagnetisme

Propietat d'una molècula amb un o més **electrons no aparellats** de ser **atreta** cap a un camp magnètic. Com més electrons no aparellats tinga la molècula, major en serà la força d'atracció.

## Diamagnetisme

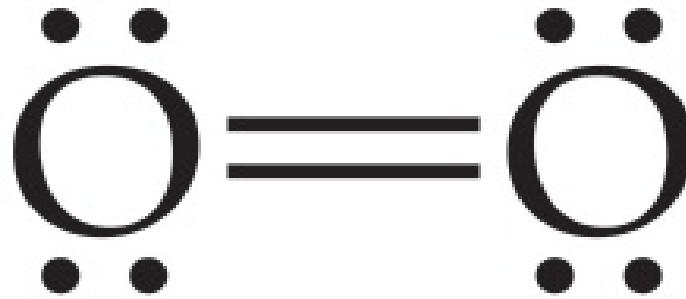
Propietat d'una molècula amb tots els **electrons aparellats** de ser **repel·lida** dèbilment per un camp magnètic. El diamagnetisme és un efecte molt més dèbil que el paramagnetisme.

# L'enllaç químic II. OM. Propietats magnètiques

El comportament d'una substància en un *camp magnètic* proporciona **informació** sobre la distribució dels seus electrons.

# L'enllaç químic II. OM. Propietats magnètiques

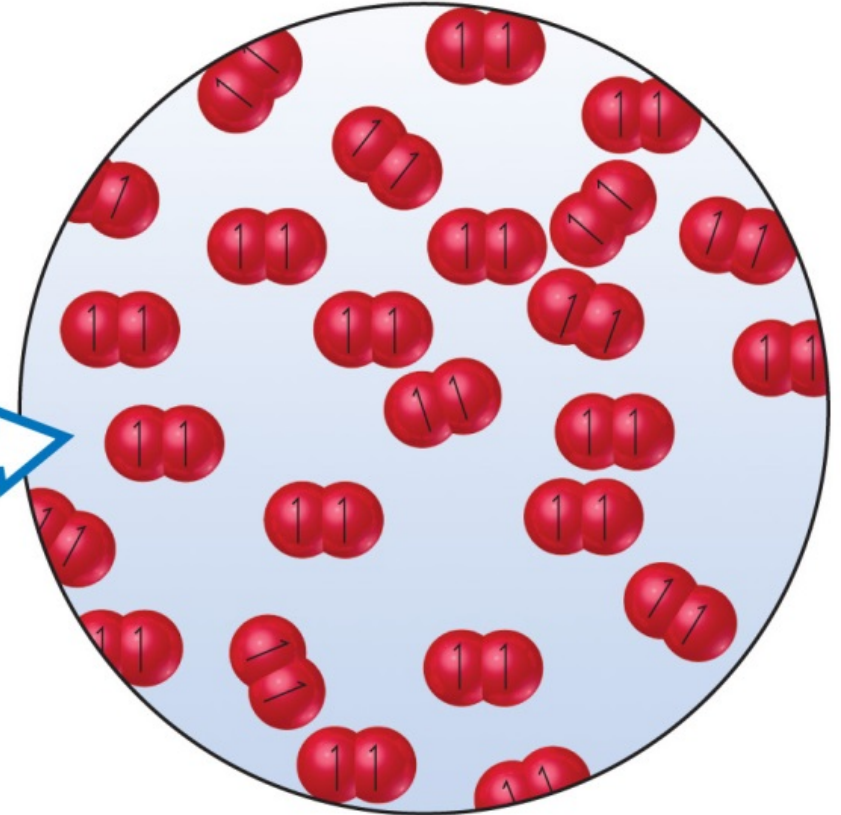
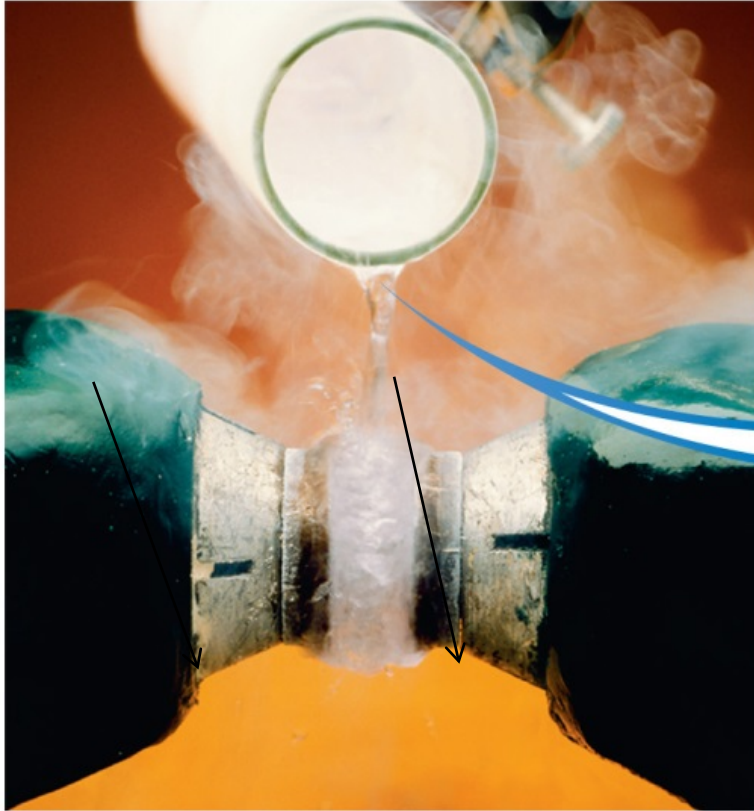
Segons la teoria de Lewis i la teoria de l'enllaç de valència, seria una molècula **diamagnètica**.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

Se sap que és **paramagnètica**, i això ho explica la teoria d'OM.

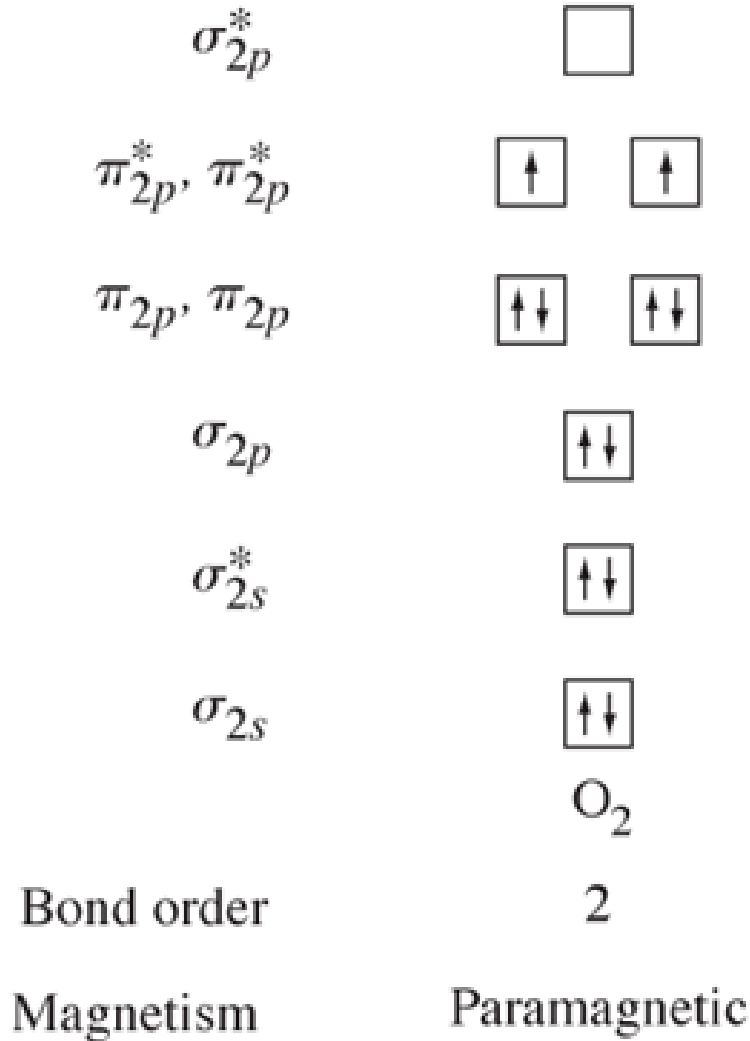
# L'enllaç químic II. OM. Propietats magnètiques



**IMANT**

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic II. OM. Propietats magnètiques





**I si les molècules foren  
heteronuclears?**

# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(hetero)nuclears

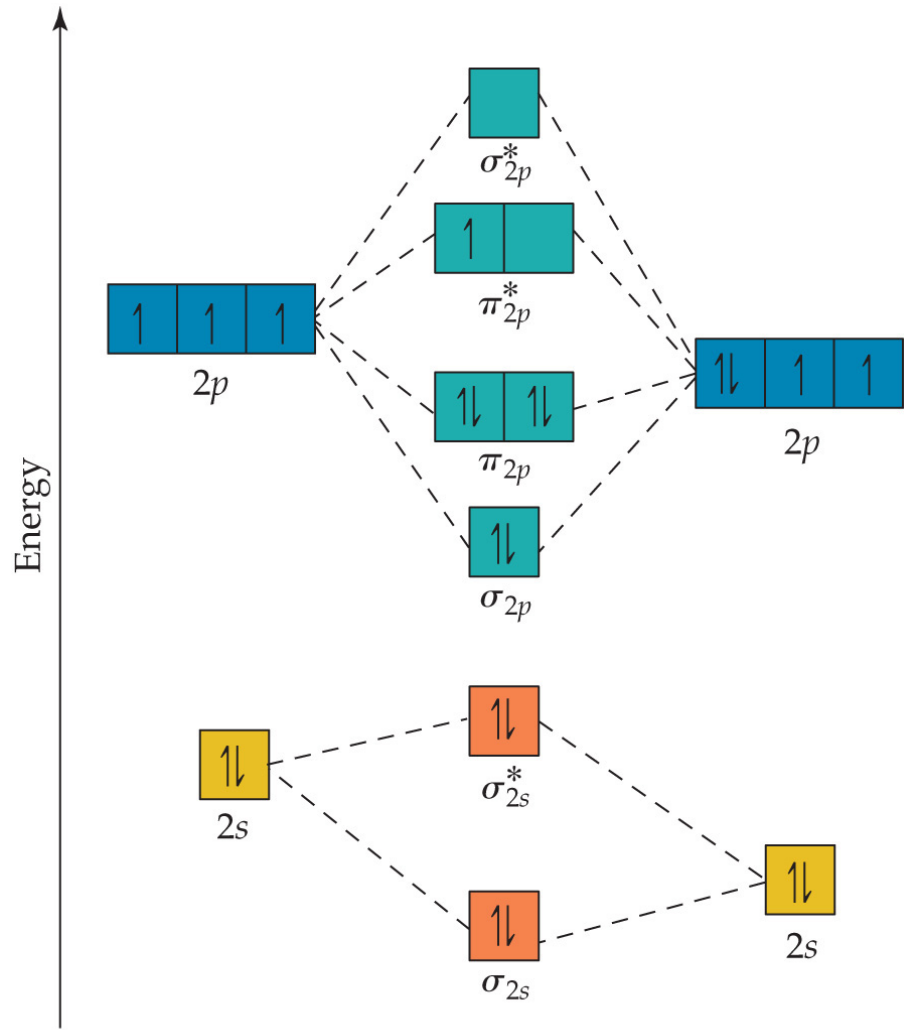
1

- Els OA es combinen de manera **més eficaç** amb altres OA amb una energia similar i una simetria adequada.

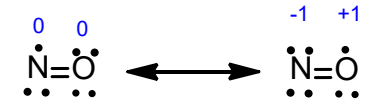
2

- L'eficàcia amb què es combinen dos OA és proporcional **al seu solapament**. A mesura que augmenta el solapament, l'energia de l'OM d'enllaç disminueix i l'energia de l'OM antienllaçant augmenta.

# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(hetero)nuclears



**NO**



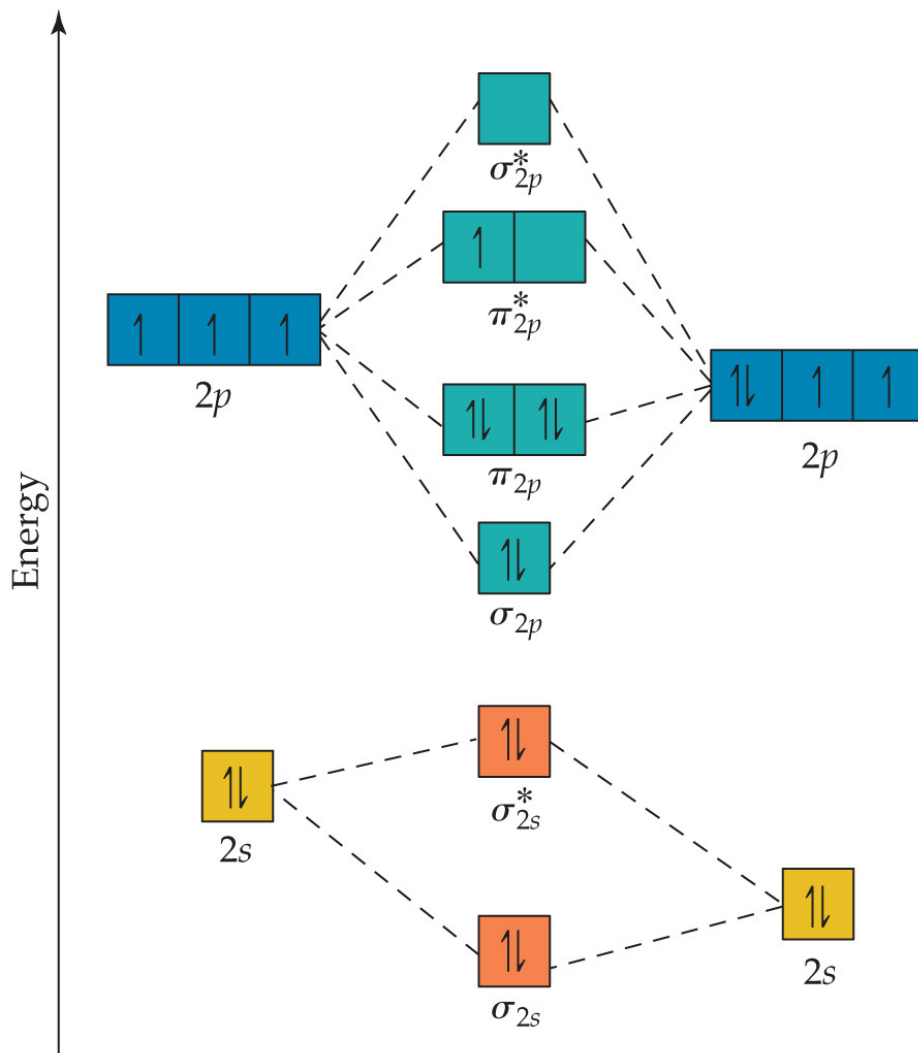
11 e valència

N atom      NO molecule      O atom

# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(hetero)nuclears

# NO

Un OM tindrà **més contribució** de l'orbital atòmic que es **trobe més prop en** energia.



Els orbitals atòmics de l'àtom més electronegatiu tindran **menys** energia que els de l'element menys electronegatiu.

En general, l'energia dels orbitals enllaçants està **més pròxima** a la dels orbitals atòmics de l'element més electronegatiu.

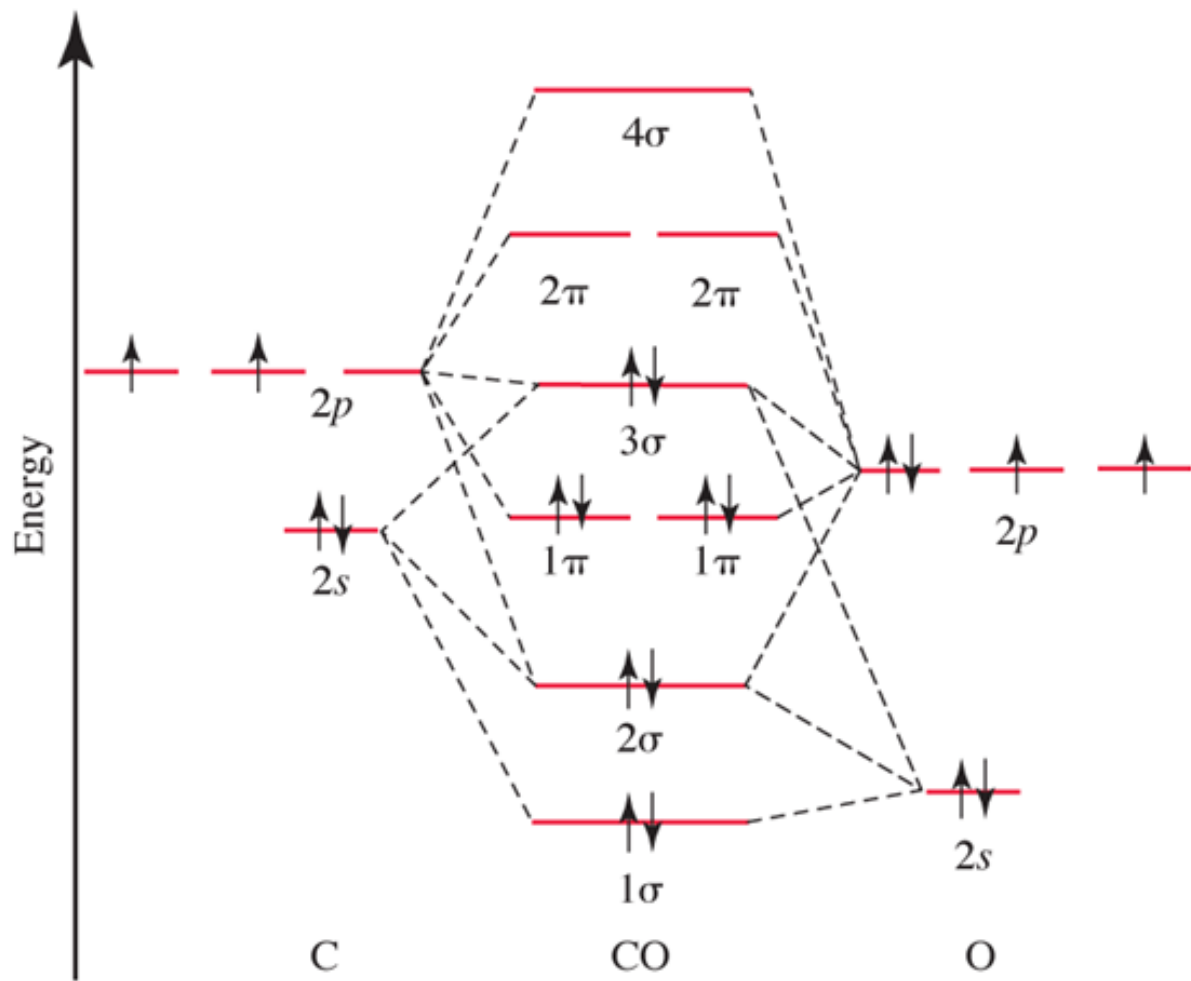
N atom

NO molecule

O atom

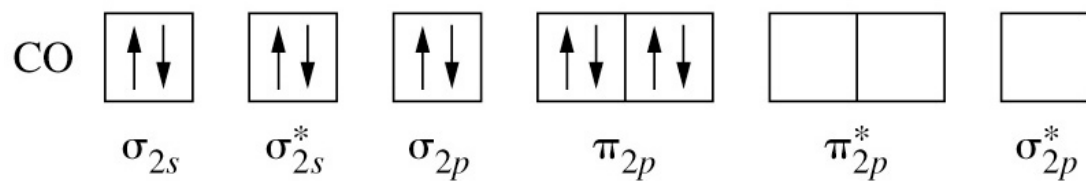
# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(hetero)nuclears

## CO



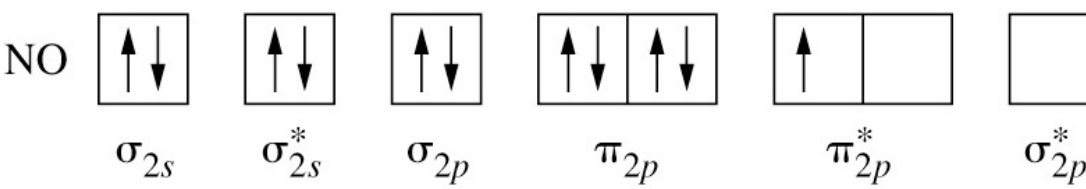
# L'enllaç químic II. OM. Molècules di(hetero)nuclears

## NO i CO



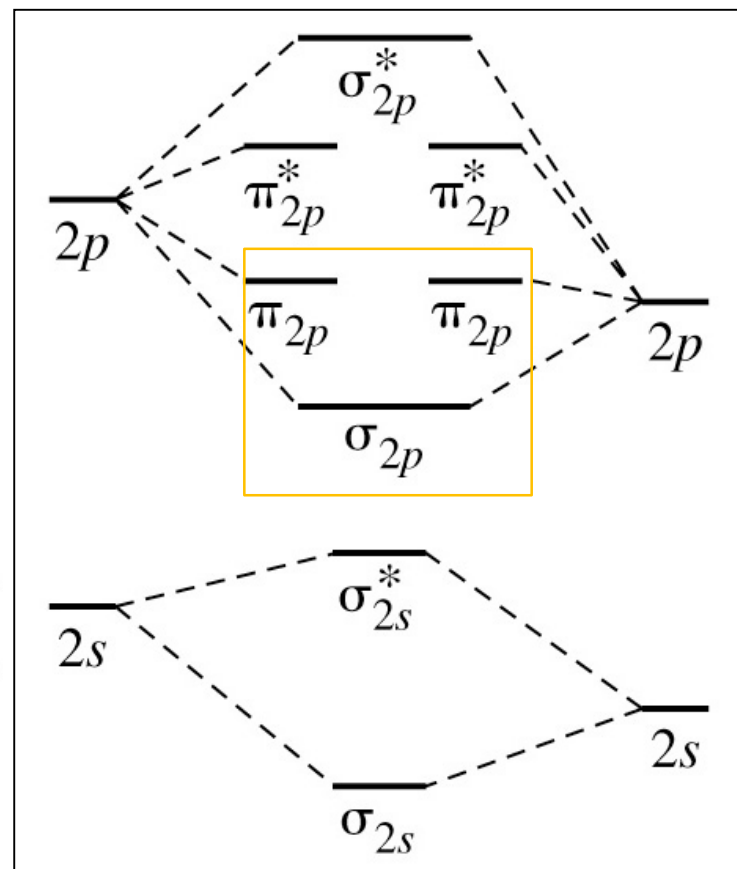
Ordre d'enllaç = 3

Diamagnètica



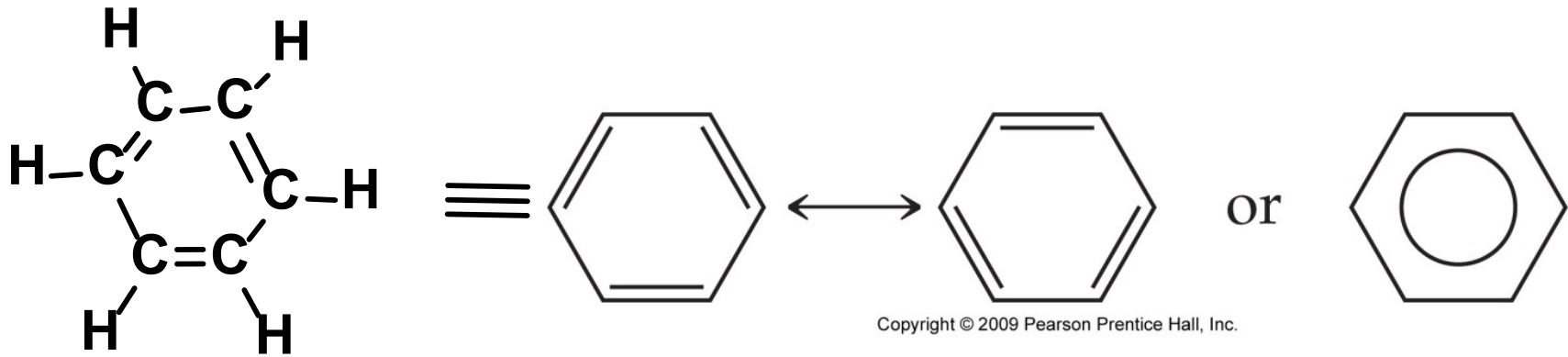
Ordre d'enllaç = 2,5

Paramagnètica

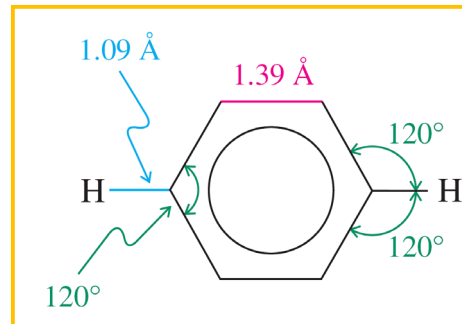


# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància)

## Benzè, $C_6H_6$ (F. Kekulé, 1865)

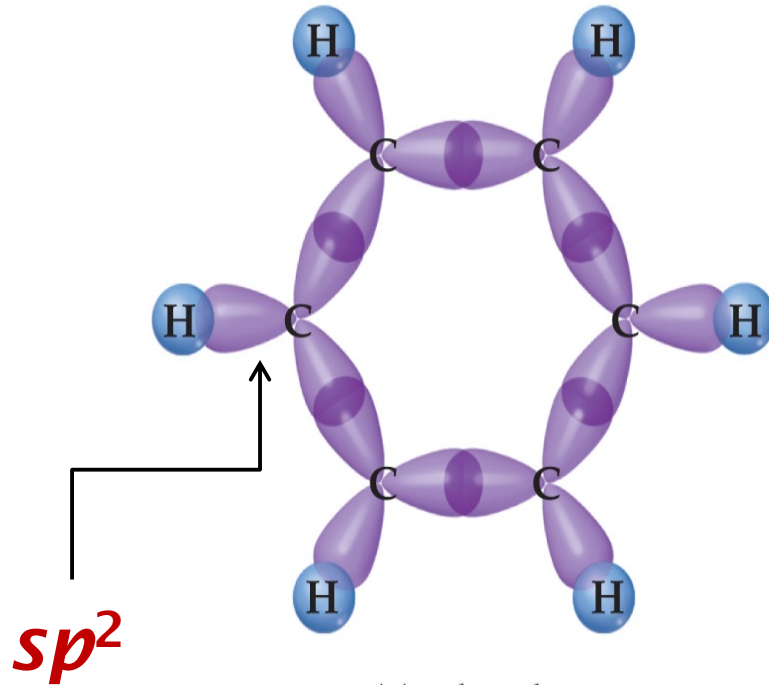


Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

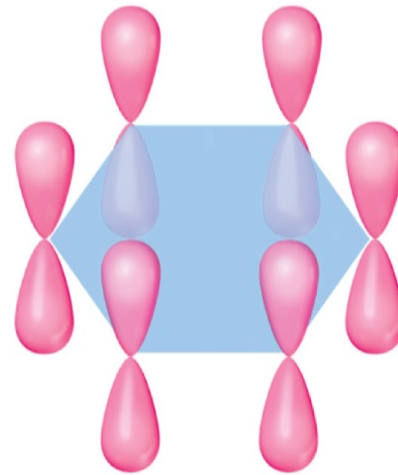


# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Benzè

## Segons el mètode de l'enllaç de valència



(a)  $\sigma$  bonds



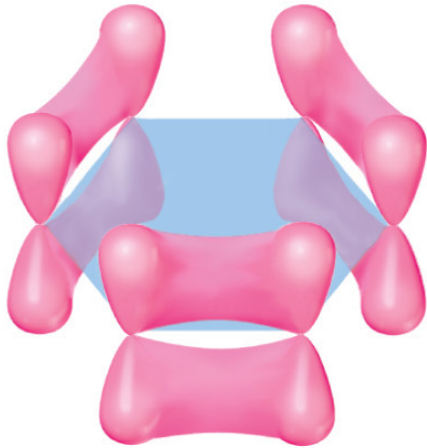
(b)  $2p$  atomic orbitals

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

Formaran els enllaços  $\pi$  del benzè.



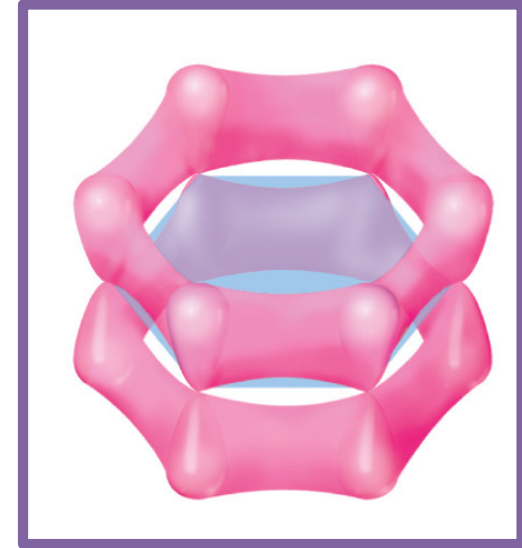
# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Benzè



(a) Localized  $\pi$  bonds



(b) Localized  $\pi$  bonds

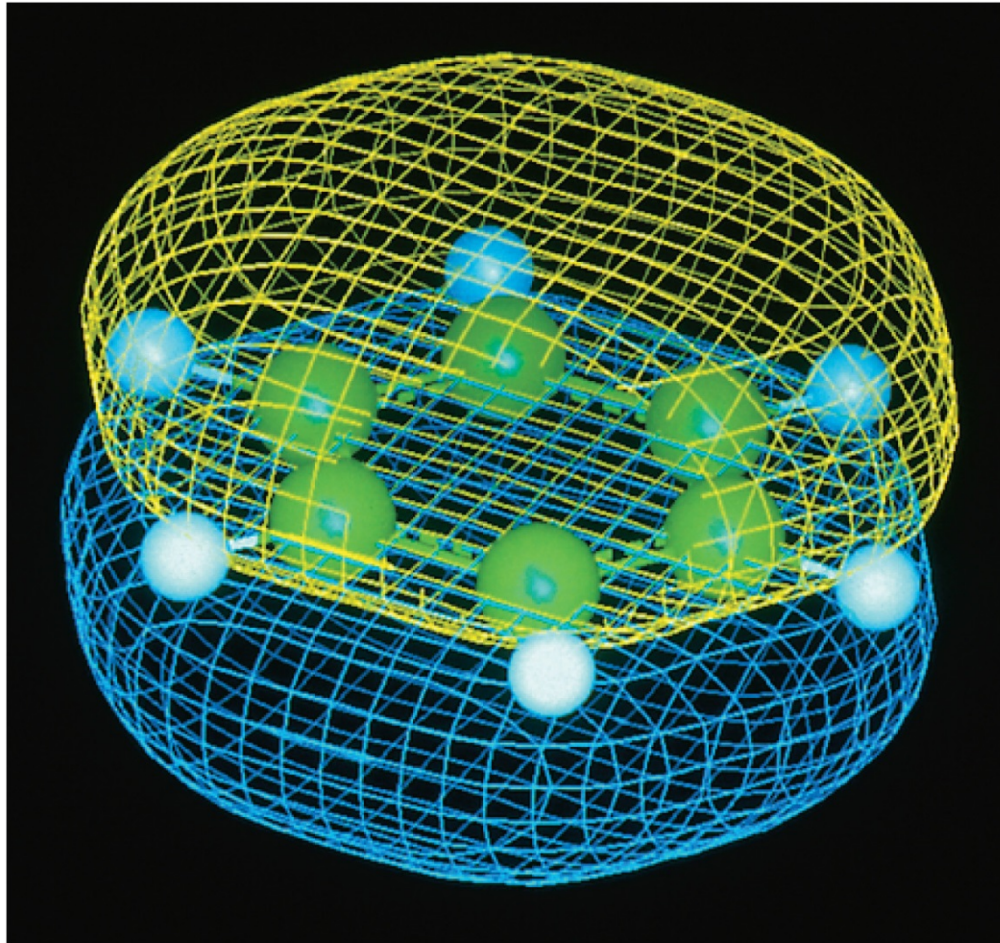


(c) Delocalized  $\pi$  bonds

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

En molècules que tenen **enllaços múltiples** i més d'una **estructura de ressonància**, com el benzè, els enllaços  $\pi$  estan **deslocalitzats**, és a dir, estan distribuïts entre diversos àtoms.

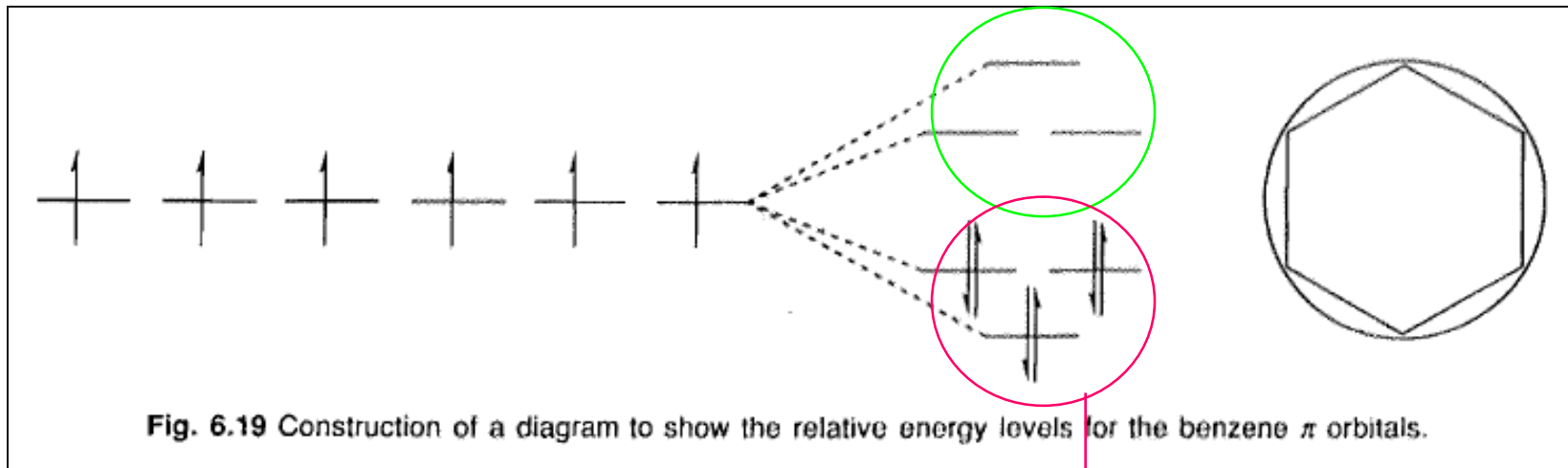
# Segons el mètode d'orbitals moleculars



# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Benzè

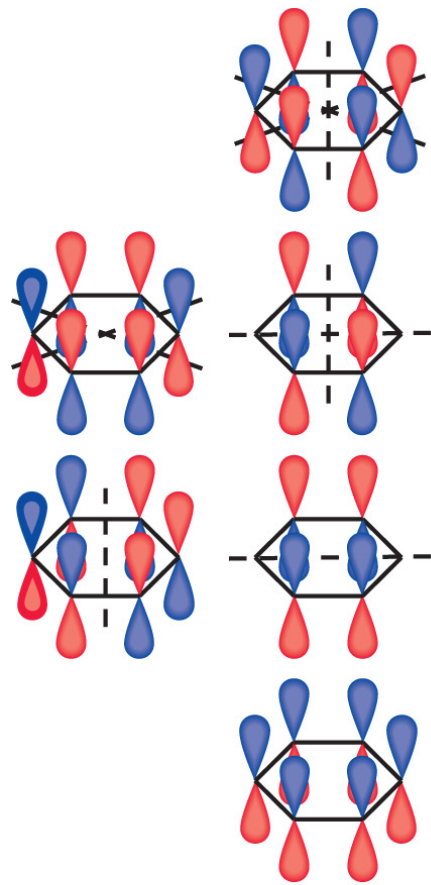
6 orbitals atòmics  $2p$   
dels àtoms de C

Orbitals moleculars  $\pi$  antienllaçants



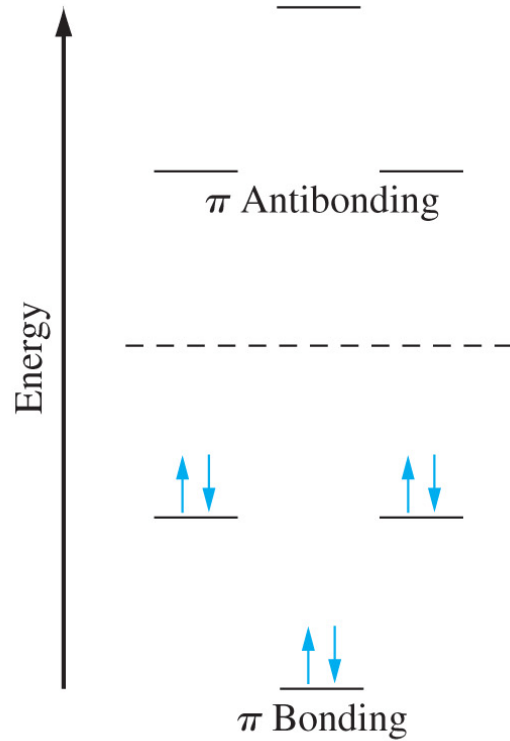
Orbitals moleculars  $\pi$  enllaçants

# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Benzè

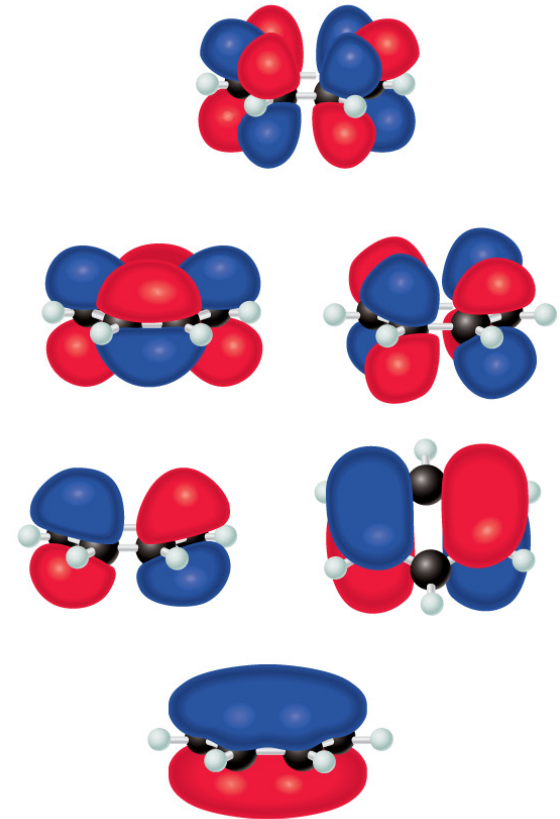


$\pi$  orbitals of benzene

(c)



(b)



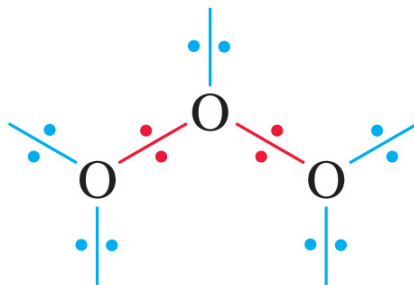
Computed  $\pi$  orbitals

(a)

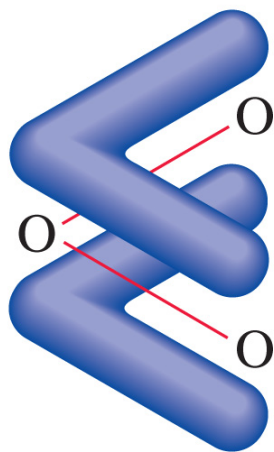
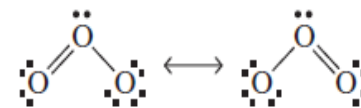
# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Ozó

14 e<sup>-</sup> en orbitals sp<sup>2</sup>

4 e<sup>-</sup> en orbitals p

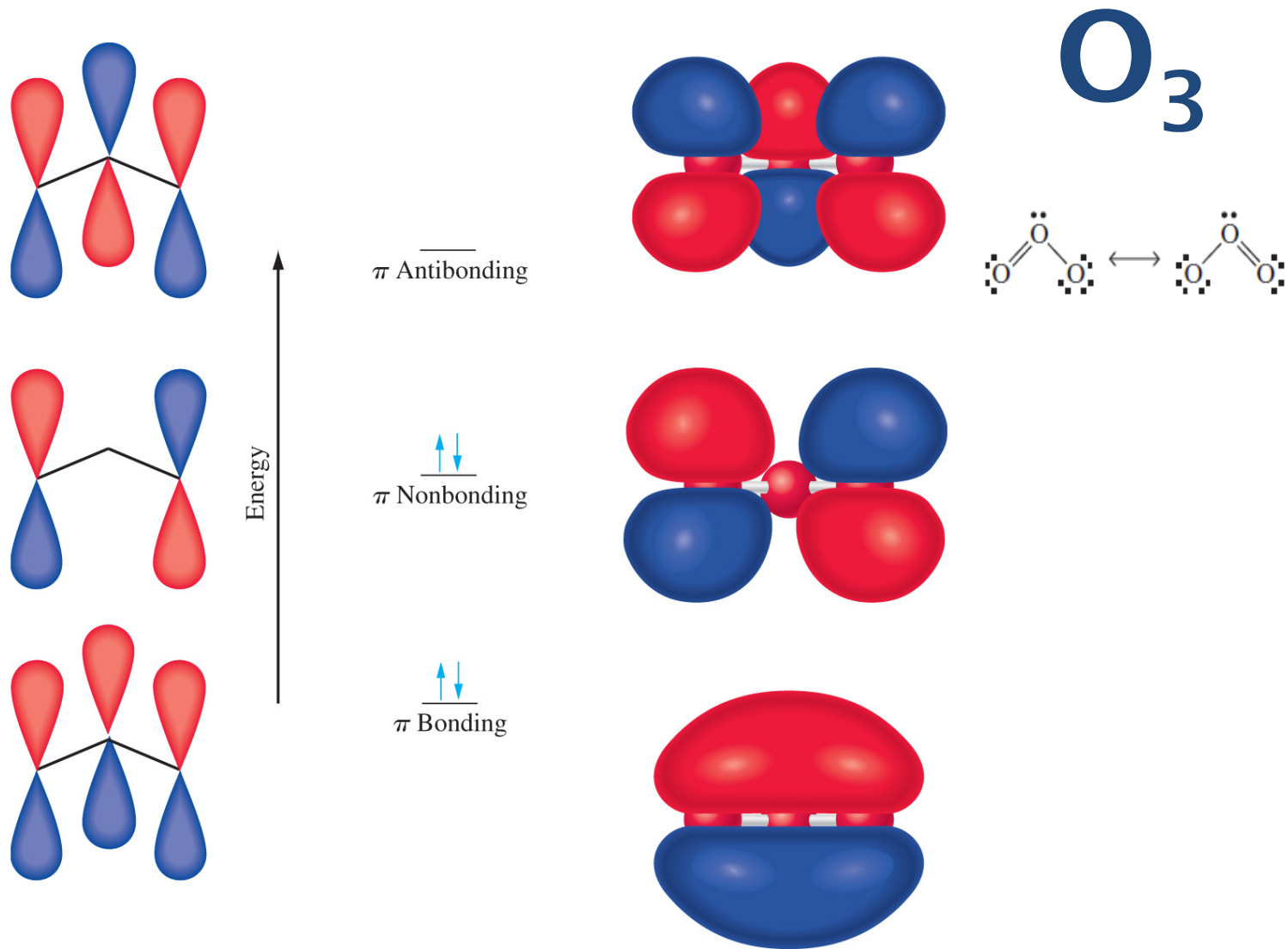


(a)  $\sigma$  bond framework



(b) Delocalized  $\pi$  molecular orbital

# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Ozó



# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Ozó



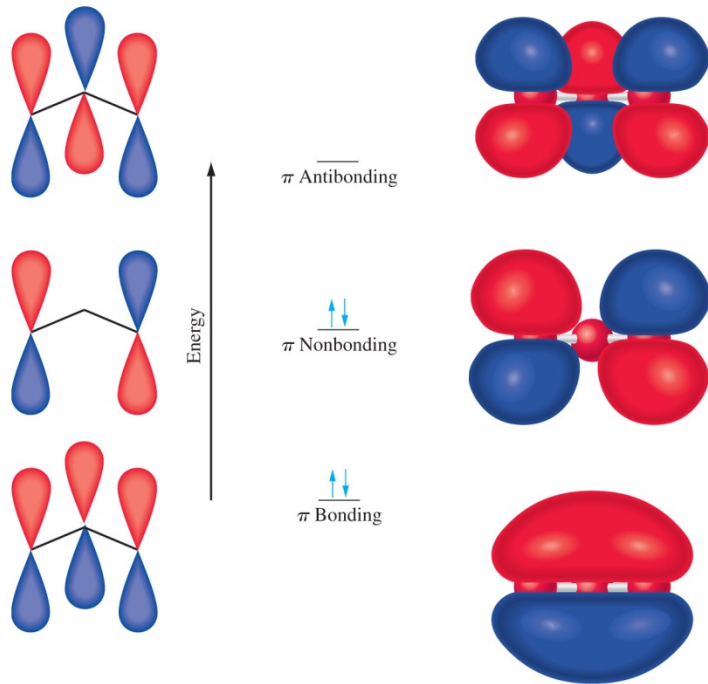
## Orbitals moleculars de la molècula d'ozó.

L'orbital molecular **enllaçant**  $\pi$  es forma amb els orbitals 2p amb el **mateix signe**. L'orbital molecular **antienllaçant**  $\pi$  es forma amb els tres orbitals 2p amb **signes oposats**. L'orbital molecular **no enllaçant**  $\pi$  té un node simple i amb contribució zero de l'àtom central en la funció d'ona.

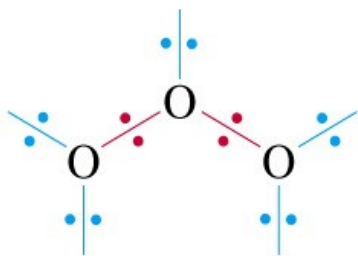
Aquest orbital **es denomina no enllaçant** perquè **no hi ha node ni regió de major densitat** electrònica entre l'àtom central i els seus veïns.

L'orbital no enllaçant té la mateixa energia que els orbitals originals 2p dels àtoms d'oxigen, mentre que l'orbital molecular enllaçant  $\pi$  està **estabilitzat** respecte als orbitals originals; i

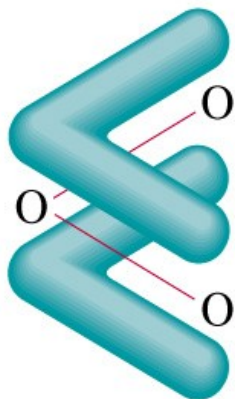
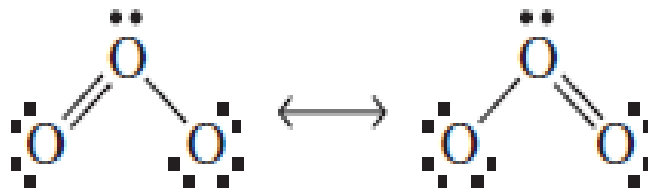
l'orbital **antienllaçant**  $\pi$  està **desestabilitzat** en una quantitat igual respectivament als orbitals originals 2p. El diagrama de nivells d'energia es mostra en el centre de la figura, amb els orbitals moleculars calculats  $\pi$  a la dreta.



# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Ozó



(a)  $\sigma$  bond framework



(b) Delocalized  $\pi$  molecular orbital

L'ordre d'enllaç associat amb els orbitals moleculars  $\pi$  és

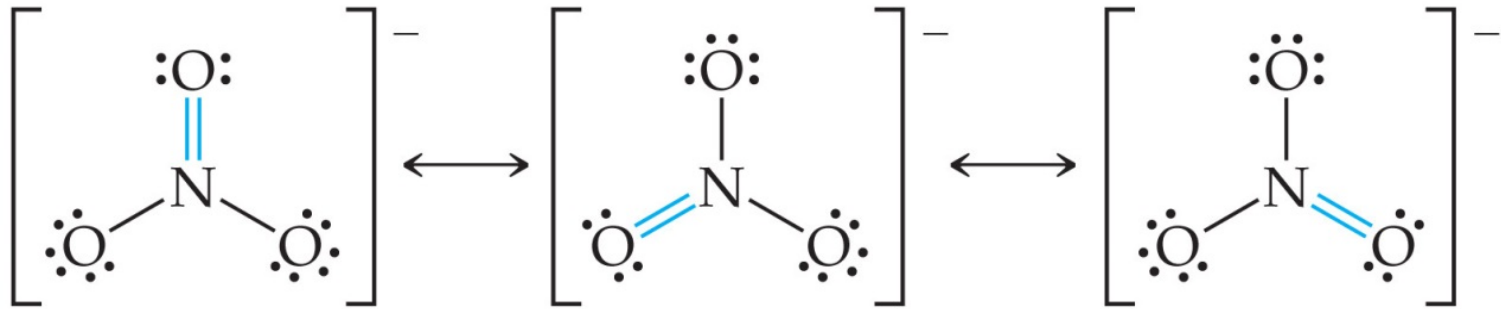
$$(2 - 0) / 2 = 1.$$

Aquest enllaç  $\pi$  es distribueix entre els dos enllaços O - O i suposa **la meitat d'un enllaç  $\pi$**  per a cada un (0,5).

Per tant, **l'ordre d'enllaç total** per als enllaços O - O es d'**1,5** en l'ozó. Això és equivalent a **la mitjana** de les dues estructures de Lewis.

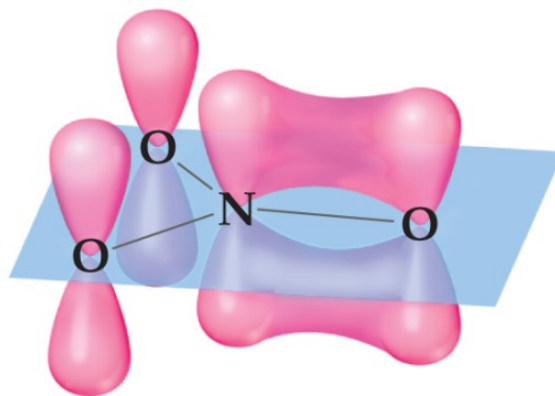


# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Nitrat

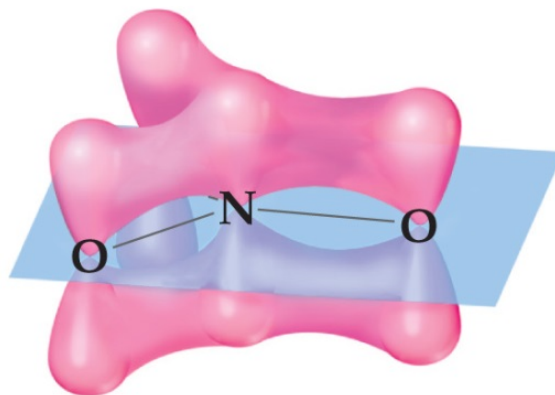


Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Nitrat

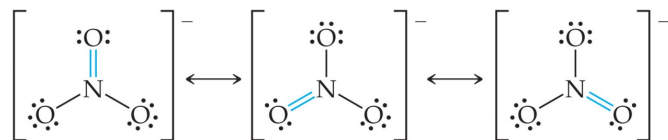


(a) N—O  $\pi$  bond in one of the resonance structures of  $\text{NO}_3^-$ .



(b) Delocalization of the  $\pi$  bonds in the  $\text{NO}_3^-$  ion.

# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Nitrat



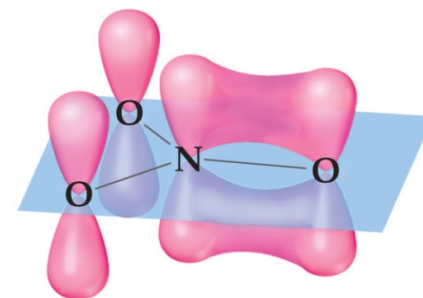
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

La geometria de dominis d'electrons del N és trigonal plana, per tant, **hibridació  $sp^2$** .

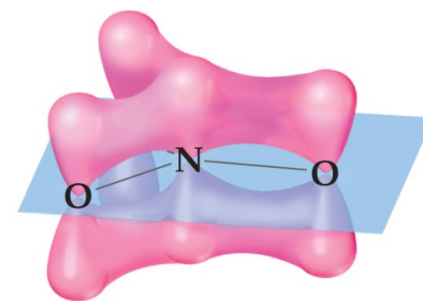
Els orbitals **híbrids  $sp^2$**  s'utilitzen per a formar els tres **enllaços  $\sigma$**  N-O.

L'orbital  **$2p$  no hibridat** de l'àtom de N s'utilitza per a formar l'**enllaç  $\pi$** .

Com cada estructura de ressonància hi contribueix per igual, l'**enllaç  $\pi$  està deslocalitzat** sobre els tres enllaços N-O, com s'observa en la representació (b).



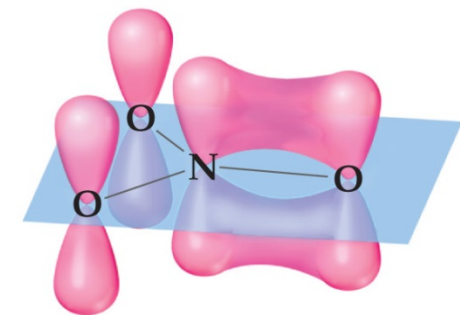
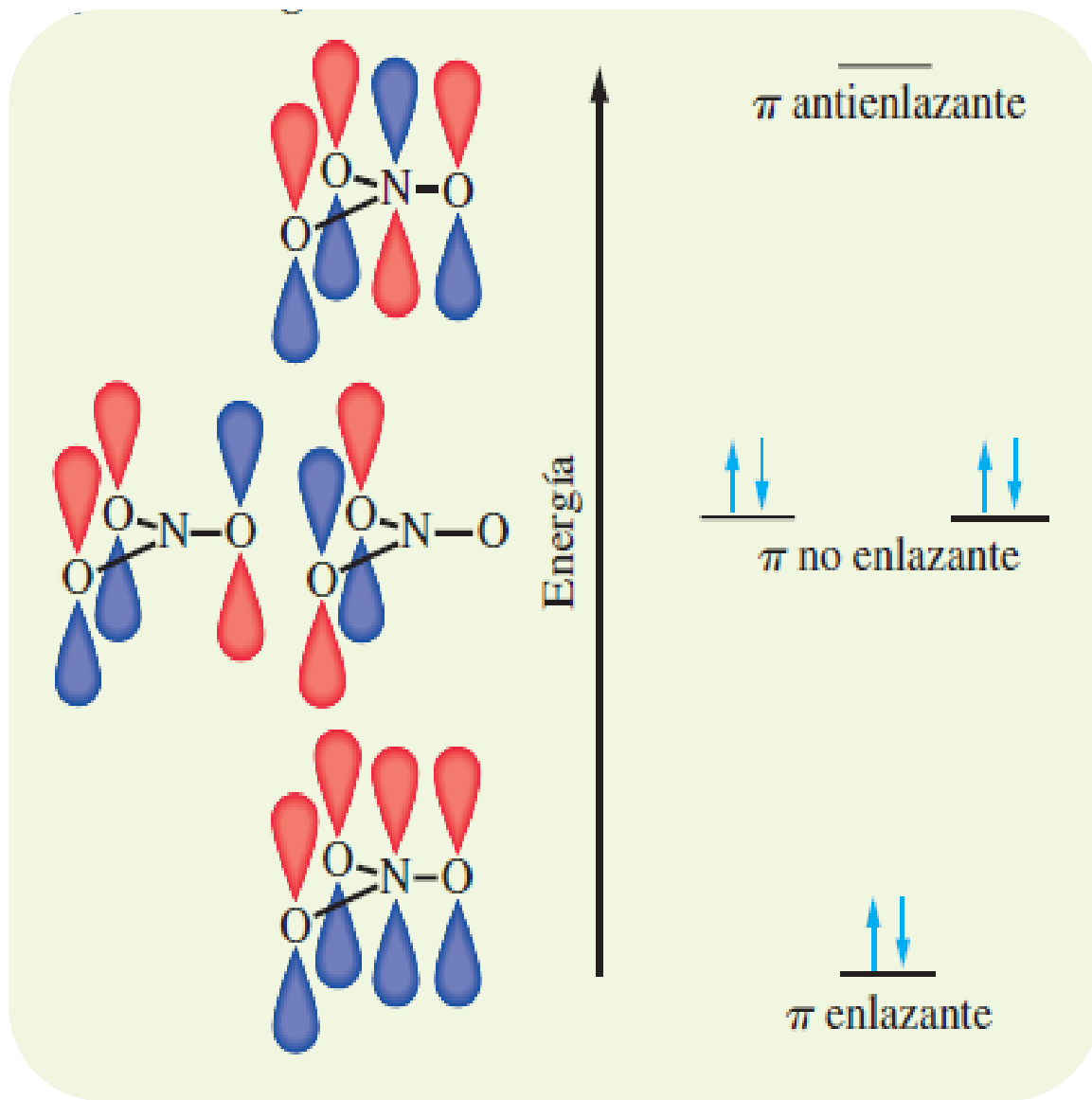
(a) N—O  $\pi$  bond in one of the resonance structures of NO<sub>3</sub><sup>-</sup>.



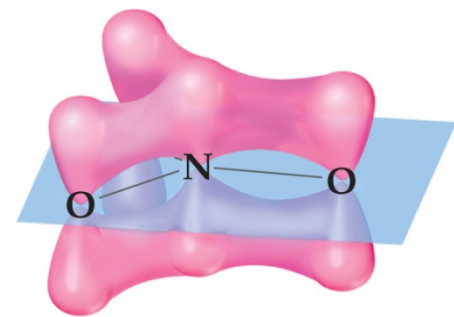
(b) Delocalization of the  $\pi$  bonds in the NO<sub>3</sub><sup>-</sup> ion.

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic II. Deslocalització (ressonància). Nitrat



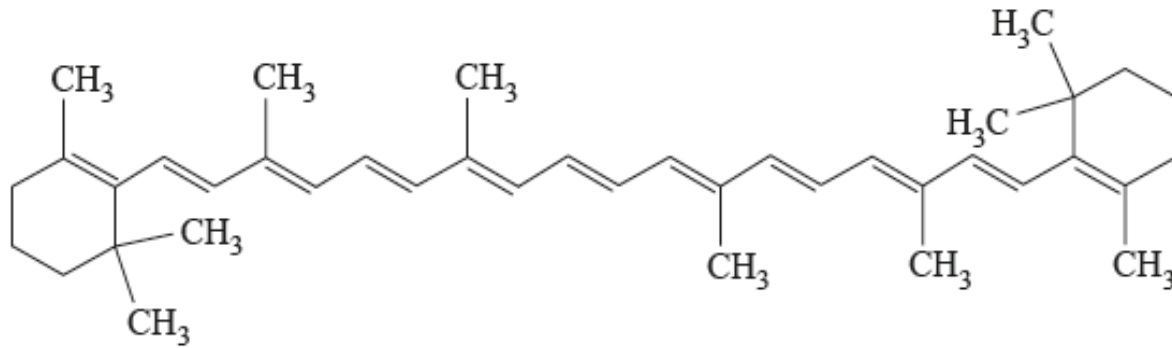
(a) N—O  $\pi$  bond in one of the resonance structures of  $\text{NO}_3^-$ .



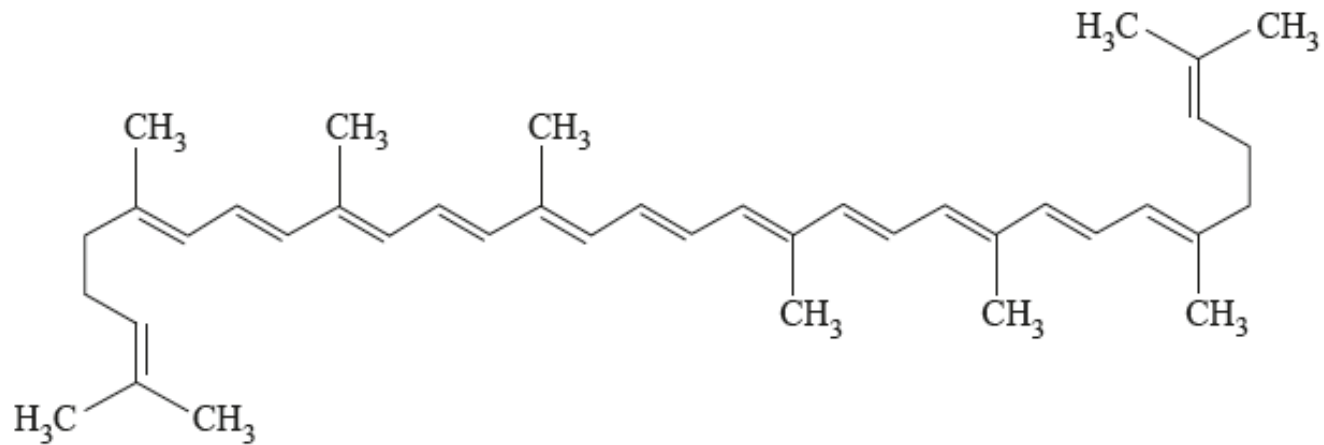
(b) Delocalization of the  $\pi$  bonds in the  $\text{NO}_3^-$  ion.

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

# L'enllaç químic II. **Deslocalització. Grans molècules**

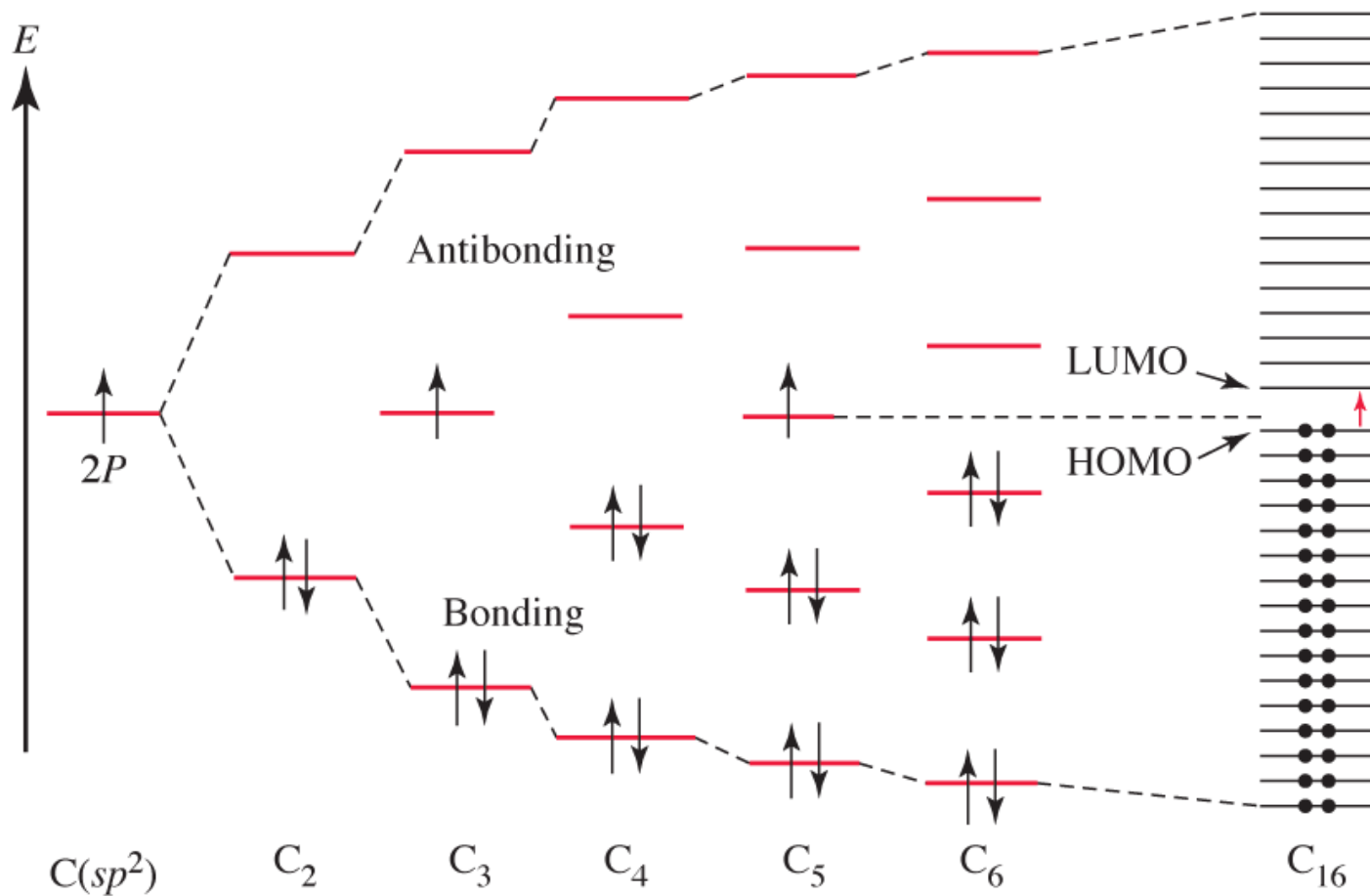


$\beta$ -Carotene, C<sub>40</sub>H<sub>56</sub>



Lycopene, C<sub>40</sub>H<sub>58</sub>

# L'enllaç químic II. Deslocalització. Grans molècules



▲ FIGURE 11-35  
The formation of  $\pi$  molecular orbitals in a long-chain polyene

# Algunes idees clau... Tema 5

**1.** Un requeriment fonamental per a una teoria d'enllaç és que proporcione **una descripció de l'estructura electrònica** de les molècules millor que les idees senzilles del model de Lewis. El mètode d'enllaç de valència considera un enllaç covalent en termes del solapament d'orbitals atòmics dels àtoms enllaçats.

**2.** Algunes molècules es poden descriure en termes de **solapament d'orbitals atòmics** però, sovint, hi calen mescles d'orbitals atòmics: **orbitals híbrids**. L'esquema d'hibridació triat és el que produeix una orientació dels orbitals que coincideix amb la geometria de grups d'electrons prevista per **la teoria RPECV**. Els orbitals híbrids  $sp$  s'associen amb geometries de grups d'electrons lineals; els orbitals híbrids  $sp^2$ , amb geometries trigonals planes; els orbitals híbrids  $sp^3$ , amb geometries tetraèdriques; els orbitals híbrids  $sp^3d$ , amb geometria bipiramidal trigonal; i els orbitals híbrids  $sp^3d^2$ , amb geometries octaèdriques.

**3.** El solapament frontal dels orbitals dona lloc a **enllaços s (sigma)**. El solapament lateral de dos orbitals  $p$  dona lloc a **un enllaç p (pi)**. Els enllaços covalents simples són **enllaços s**. Un enllaç doble consisteix en un enllaç  $s$  i un enllaç  $p$ . Un enllaç triple consisteix en un enllaç  $s$  i dos enllaços  $p$ . **La forma geomètrica d'una espècie determina l'esquelet d'enllaços s, i els enllaços p s'hi afegixen per a completar la descripció de l'enllaç.**

**4. En la teoria d'orbitals moleculars**, els electrons s'assignen a orbitals moleculars. El nombre i tipus d'orbitals moleculars estan relacionats amb els orbitals atòmics d'on provenen. La densitat de càrrega electrònica entre els àtoms és alta en els **orbitals moleculars enllaçants i molt baixa en els orbitals antienllaçants**. **L'ordre d'enllaç** és la meitat de la diferència entre el nombre d'electrons en orbitals moleculars enllaçants i antienllaçants. Els diagrames de nivells d'energia dels orbitals moleculars i el mètode *Aufbau* poden usar-se per a descriure l'estructura electrònica d'una molècula, de manera semblant al que es va fer en el tema 3 per a les configuracions electròniques dels àtoms.

**5.** L'enllaç en la molècula de benzè,  $C_6H_6$ , es basa parcialment en el **concepte d'orbitals moleculars deslocalitzats**. Aquests orbitals són regions d'alta densitat de càrrega electrònica que s'estenen a diversos àtoms en una molècula. Els orbitals moleculars deslocalitzats també proporcionen una alternativa al concepte de ressonància per a altres molècules i ions.

**6. D'altra banda, les representacions de densitat de càrrega poden utilitzar-se com a guia per a comprendre l'enllaç en les molècules que no tenen estructures de Lewis simples.** En molècules com  $SF_6$  s'empra el concepte d'*hiperconjugació*. Per al  $SCl_2$  la densitat electrònica s'analitza en termes de les direccions d'enllaç i punts crítics d'enllaç. Per al  $H_2SO_4$  i  $SO_4$  els punts crítics d'enllaç obtinguts a partir de la densitat de càrrega indiquen que els dibuixos de les estructures de Lewis amb la càrrega formal més senzilla és una de les millors maneres de representar l'enllaç en aquests compostos. En general, s'han d'escriure les estructures de Lewis sense capes de valència expandides.



# TEMA 6. SUBSTÀNCIES MOLECULARS

## Estats de la matèria



Conceptes generals

## Forces intermoleculars



Interaccions ió-dipol. Forces dipol-dipol.  
Forces de dispersió (de London)

Enllaç d'hidrogen. Influència en les propietats moleculars

## Forces intermoleculars en líquids



Tensió superficial. Capil·laritat. Viscositat

## Diagrames de fases



Pressió de vapor. Punt triple. Punt crític



# Substàncies moleculars. Estats de la matèria



# Substàncies moleculars. **Estats de la matèria**

**Els estats de la matèria**

**són una manifestació de les forces d'atracció** que mantenen unides les molècules.

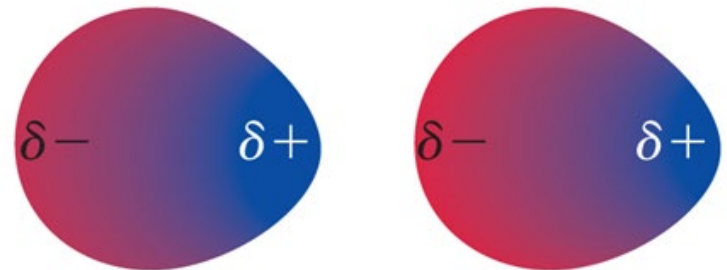
**Substàncies moleculars.** Estats de la matèria

**Qui en són les  
responsables?**

**Les forces intermoleculars**

# De quina naturalesa són?

Es tracta en general d'**interaccions electrostàtiques** de diferent magnitud que tenen lloc entre les molècules.



# Substàncies moleculars. Estats de la matèria

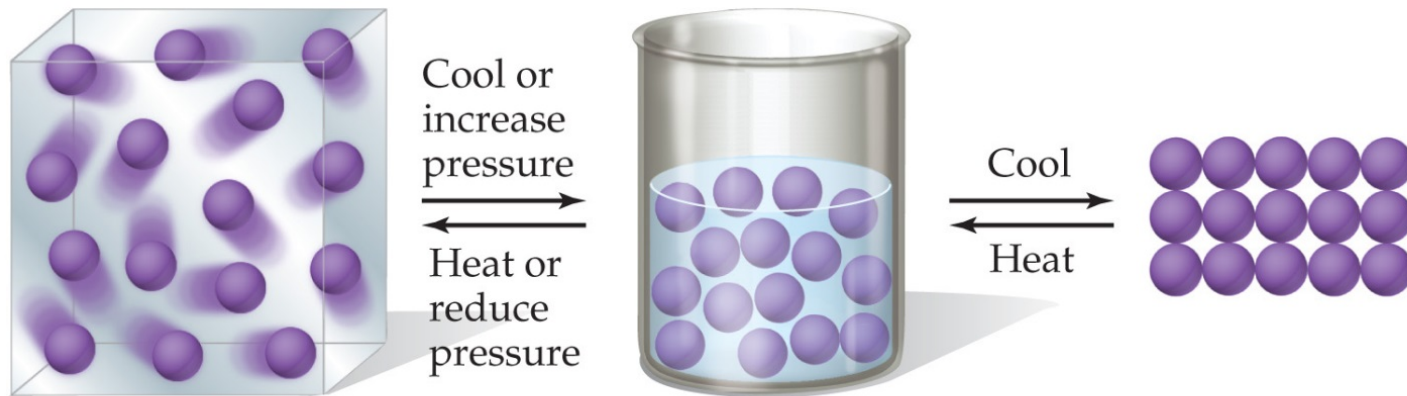
De què són  
responsables...?

De les propietats  
macroscòpiques de la matèria.



# Substàncies moleculars. Estats de la matèria

Augmenten les **forces intermoleculares.**



**Gas**

Total disorder; much empty space; particles have complete freedom of motion; particles far apart

**Liquid**

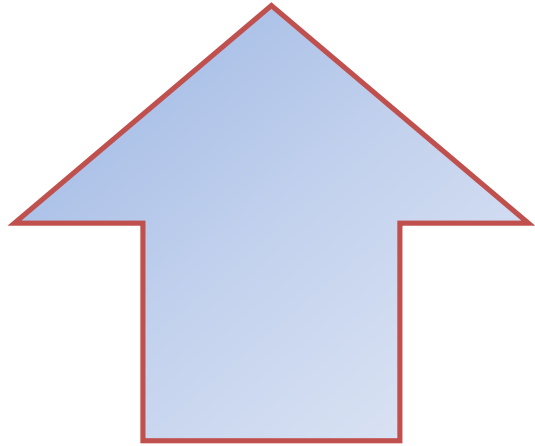
Disorder; particles or clusters of particles are free to move relative to each other; particles close together

**Crystalline solid**

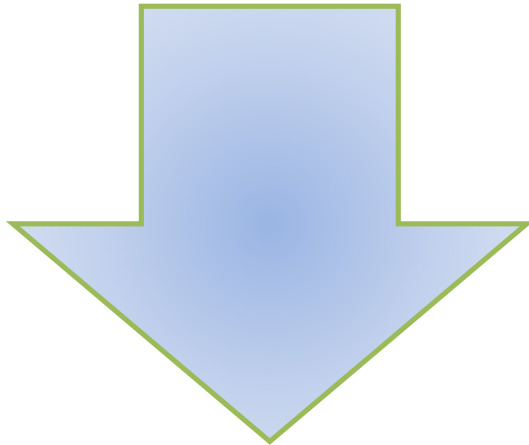
Ordered arrangement; particles are essentially in fixed positions; particles close together

# Substàncies moleculars. Estats de la matèria

L'estat d'una substància depèn del equilibri entre:



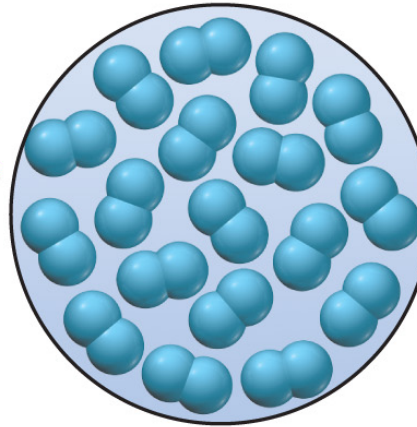
**L'energia cinètica** de les partícules (àtoms, molècules o ions).



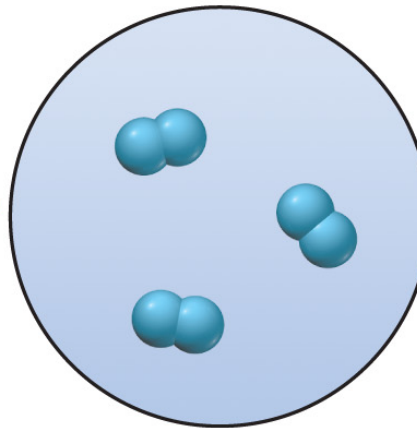
**L'energia de les interaccions** (energia d'atracció de les molècules).



# Substàncies moleculars. **Estats de la matèria**



$\text{N}_2$  molecules are weakly attracted to one another at **low temperature** by intermolecular forces, causing nitrogen to become liquid.



At **higher temperatures**, intermolecular forces are no longer able to keep molecules close together, so nitrogen becomes a gas.

# TEMA 6. SUBSTÀNCIES MOLECULARS

## Forces\_intermoleculares



- Interaccions ió-dipol. Forces dipol-dipol. Forces de dispersió (de London)
- Enllaç d'hidrogen. Influència en les propietats moleculars



# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

## INTERACCIONS INTERMOLECULARS

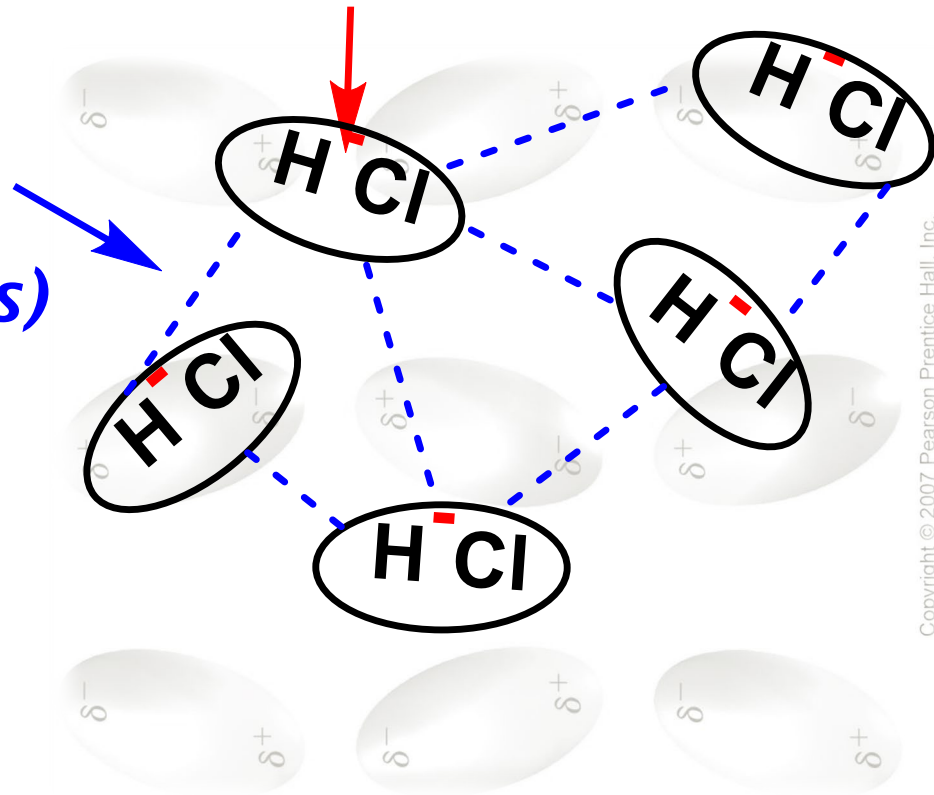
# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

Són les **forces d'atracció** entre les molècules (àtoms o ions). Es tracta d'interaccions de **naturalesa electrostàtica** i són **molt més febles** que els enllaços iònics o covalents.

# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

**Interaccions fortes**  
*(intramoleculars)*

**Interaccions dèbils**  
*(intermoleculars)*



# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

**Forces ió-dipol**

```
graph TD; A[Forces ió-dipol] --- B[Forces de Van der Waals]; B --- C[Forces dipol-dipol]; B --- D[Forces de dispersió]; B --- E[Enllaços d'hidrogen];
```

**Forces de Van der Waals**

**Forces dipol-dipol**

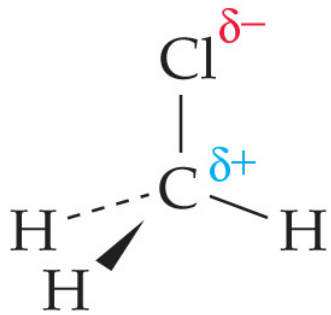
**Forces de dispersió**

**Enllaços d'hidrogen**

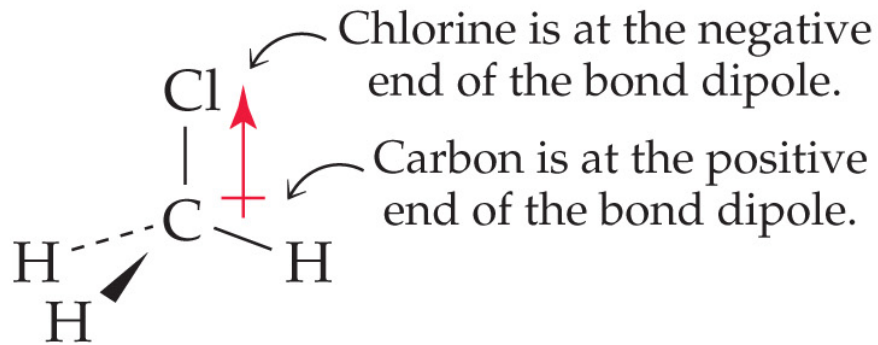
## Dipol d'enllaç

degut a la diferència

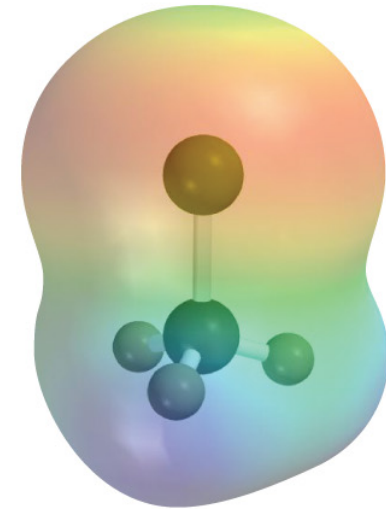
d'electronegativitat entre C i Cl.



or



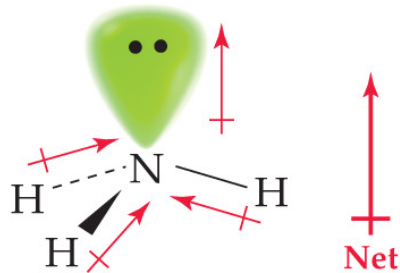
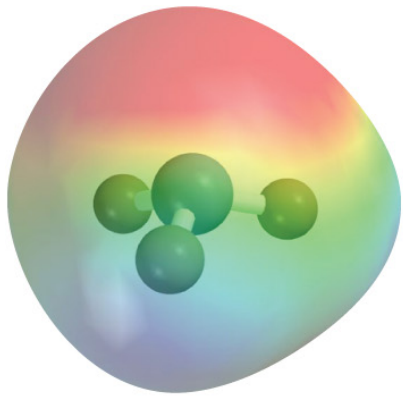
Chloromethane, CH<sub>3</sub>Cl



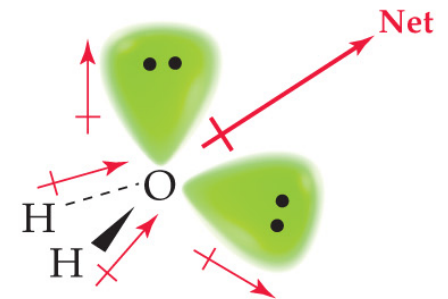
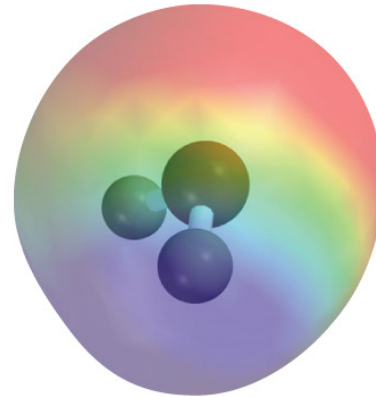
# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

## Molècules polars,

amb moment dipolar ( $\mu$ ), degut que les polaritats individuals dels enllaços no es cancel·len entre si.



Ammonia ( $\mu = 1.47$  D)



Water ( $\mu = 1.85$  D)



# Substàncies moleculars. Tipus d'interaccions

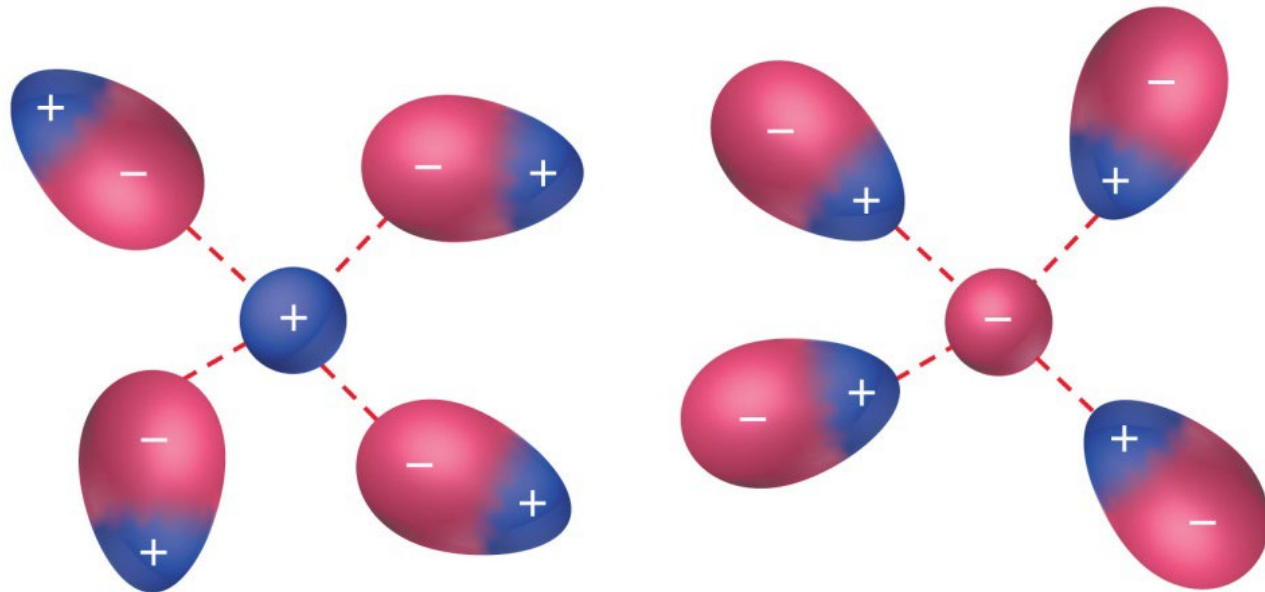


# Substàncies moleculars. Forces ió-dipol

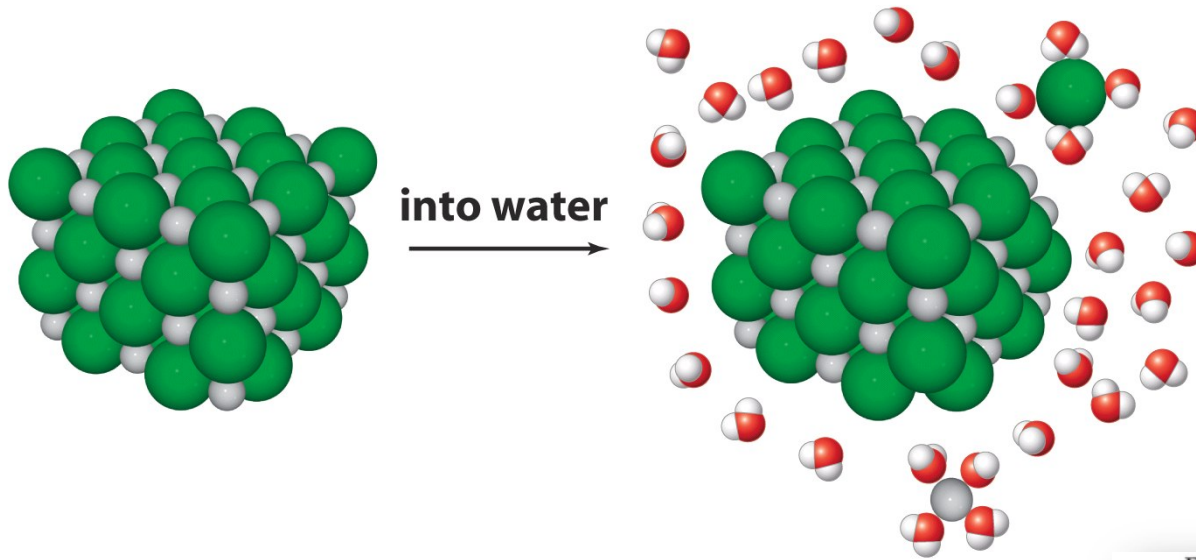
Són forces d'atracció entre un **ió**

(catió o anió) i una **molècula polar**

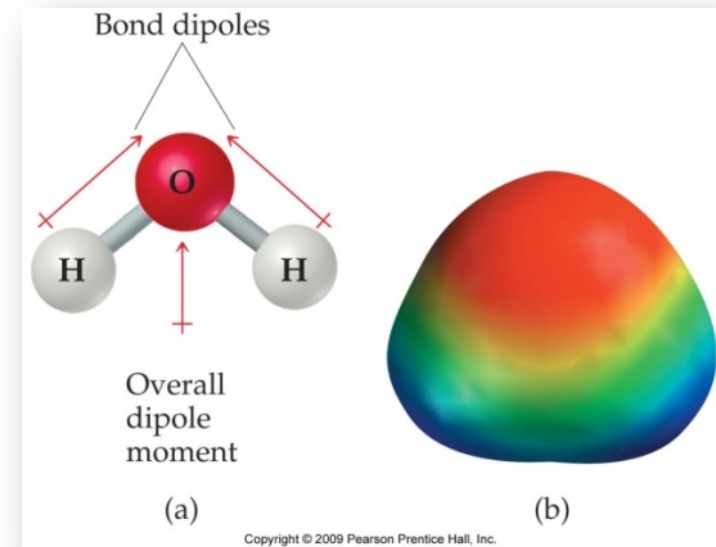
(o dipol).



# Substàncies moleculars. Forces ió-dipol

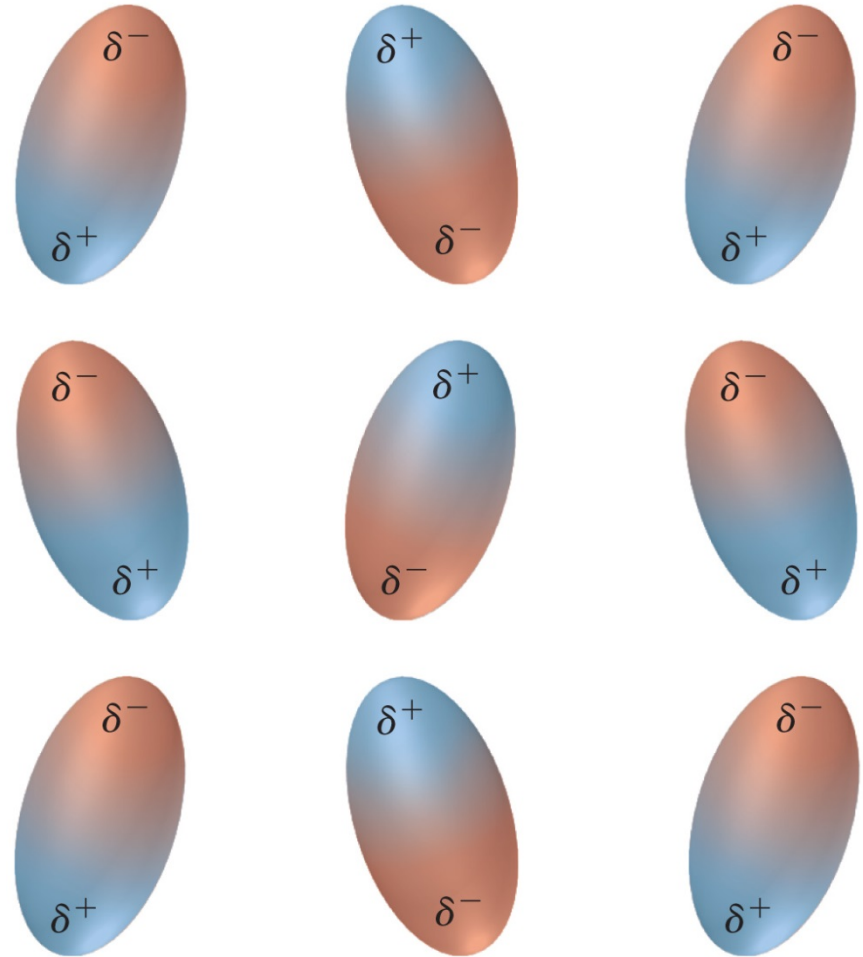


Ex. dissolució de **NaCl** en aigua.



# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dipol-dipol

Són forces d'atracció entre **molècules polars**, és a dir, molècules amb moment dipolar. Aquestes interaccions fan que les molècules tendeixen a ordenar-se.



# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dipol-dipol

**TABLE 11.2 ■ Molecular Weights, Dipole Moments, and Boiling Points of Several Simple Organic Substances**

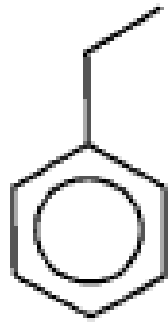
Substance	Molecular Weight (amu)	Dipole Moment $\mu$ (D)	Boiling Point (K)
Propane, CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	44	0.1	231
Dimethyl ether, CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	46	1.3	248
Methyl chloride, CH <sub>3</sub> Cl	50	1.9	249
Acetaldehyde, CH <sub>3</sub> CHO	44	2.7	294
Acetonitrile, CH <sub>3</sub> CN	41	3.9	355

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

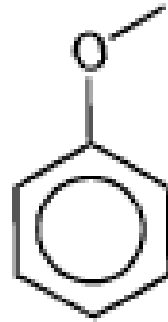
# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dipol-dipol

$N_2$	NO	$O_2$
$\mu = 0$ (nonpolar) mol. mass = 28 u bp = 77.34 K	$\mu = 0.153$ D (polar) mol. mass = 30 u bp = 121.39 K	$\mu = 0$ (nonpolar) mol. mass = 32 u bp = 90.19 K

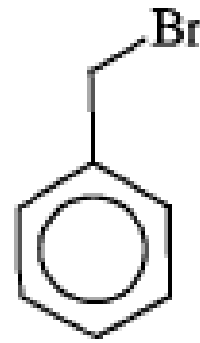
# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dipol-dipol



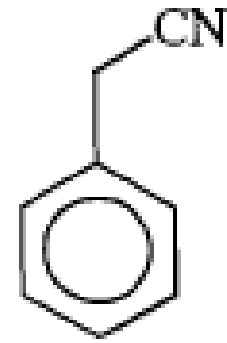
Punto ebullició (°C): 136



153



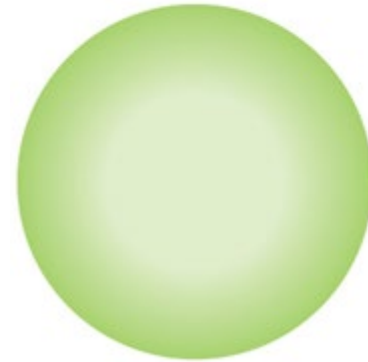
197



232

# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dispersió

Són forces d'atracció entre  
**molècules NO  
polars**, és a dir,  
molècules amb moment  
dipolar zero.

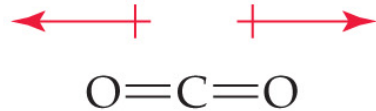
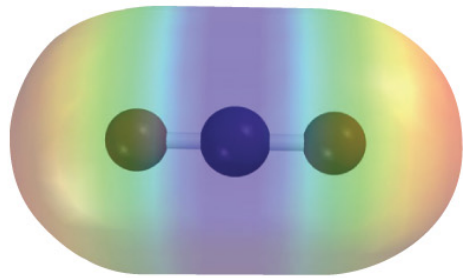




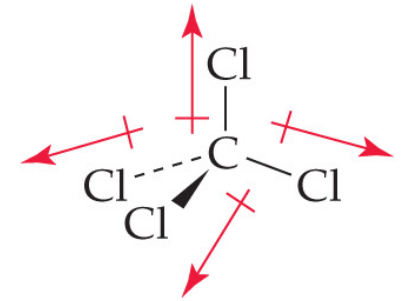
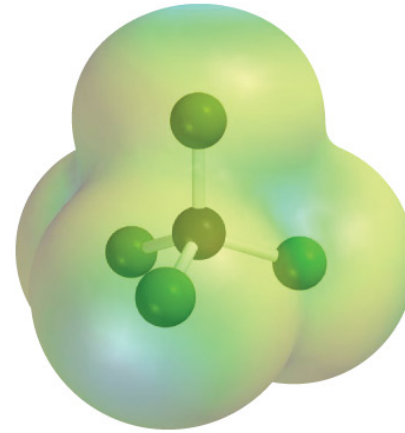
# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dispersió

**Molècules no polars**, és a dir, amb moment dipolar ( $\mu$ ) = 0.

**Les polaritats individuals dels enllaços es cancel·len entre si.**



Carbon dioxide ( $\mu = 0$ )

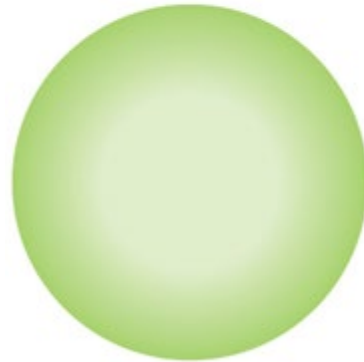


Tetrachloromethane ( $\mu = 0$ )

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

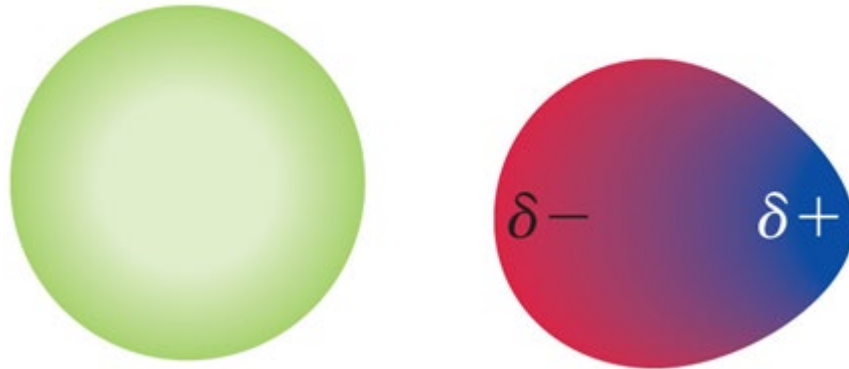
# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dispersió

**Si la molècula és no polar,  
d'on ixen les forces  
intermoleculars?**



# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dispersió

## Concepte de dipol instantani.

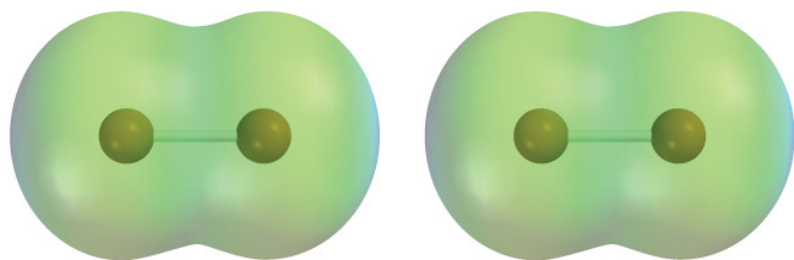


## Substàncies moleculars. Van der Waals. Dispersió (de London)

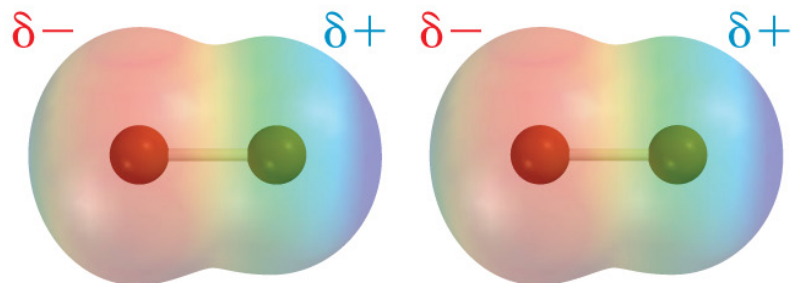
Sorgeixen **pel moviment continu dels electrons**, cosa que dona lloc a l'aparició de **dipols instantanis i dipols induïts**, que interaccionen entre si.

**També apareixen en molècules polars...**

# Substàncies moleculars. Van der Waals. Dispersió (de London)



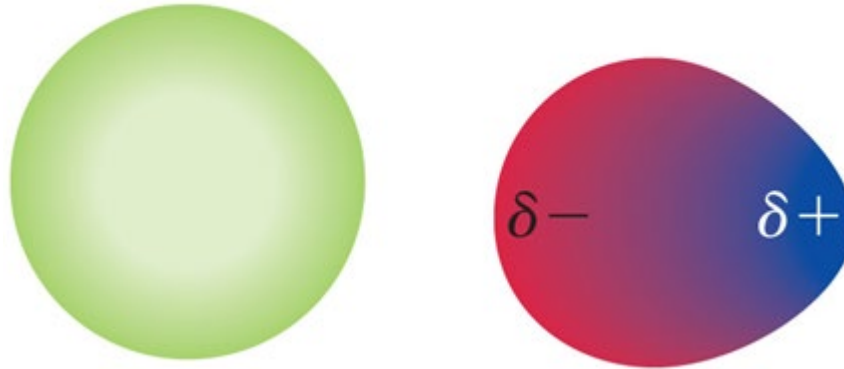
Averaged over time, the electron distribution in a  $\text{Br}_2$  molecule is **symmetrical**.



At any given instant, the electron distribution in a molecule may be **unsymmetrical**, resulting in a temporary dipole and inducing a complementary attractive dipole in neighboring molecules.

# Substàncies moleculars. Forces Van der Waals. Dispersió

## Concepte de dipol polaritzabilitat.



# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

La facilitat amb què **el núvol electrònic**  
**d'una molècula** puga **distorsionar-se**  
per a originar **un dipol instantani**.

# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

En general, les **molècules més grans** presenten una **polaritzabilitat major**, perquè tenen més electrons i aquests es troben més lluny del nucli.



Les molècules **més polaritzables** tenen forces de dispersió **més grans**.





# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

Halogen	Molecular Weight (amu)	Boiling Point (K)	Noble Gas	Molecular Weight (amu)	Boiling Point (K)
F <sub>2</sub>	38.0	85.1	He	4.0	4.6
Cl <sub>2</sub>	71.0	238.6	Ne	20.2	27.3
Br <sub>2</sub>	159.8	332.0	Ar	39.9	87.5
I <sub>2</sub>	253.8	457.6	Kr	83.8	120.9
			Xe	131.3	166.1

# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

Compound	Polarizability,* $10^{-25} \text{ cm}^3$	Molar Mass, amu	Boiling Point, K
H <sub>2</sub>	7.90	2.0158	20.35
O <sub>2</sub>	16.0	31.9988	90.19
N <sub>2</sub>	17.6	28.0134	77.35
CH <sub>4</sub>	26.0	16.04	109.15
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	44.7	30.07	184.55
Cl <sub>2</sub>	46.1	70.906	238.25
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	62.9	44.11	231.05
CCl <sub>4</sub>	105	153.81	349.95

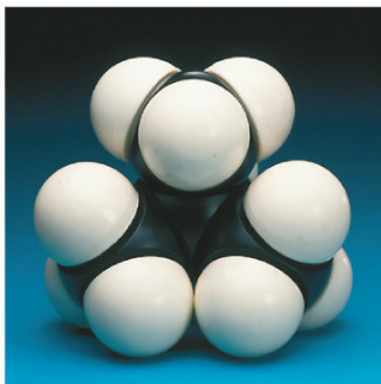
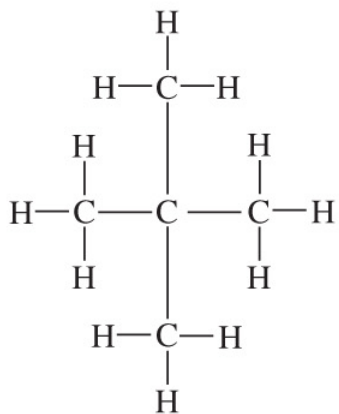
\*Sometimes polarizability is referred to as *polarizability volume*. Note that the units of polarizability given above have the units of volume. That provides a measure of the atomic or molecular volume.

# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

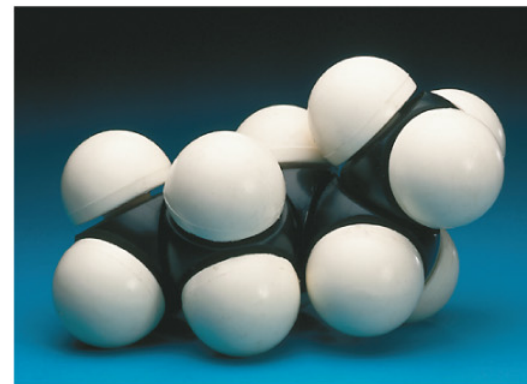
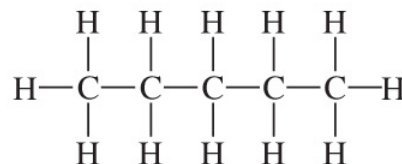
La **forma de les molècules** també influeix en la magnitud de les forces de dispersió: en **molècules ramificades** (en comparació amb molècules lineals) la superfície de contacte disminueix i les interaccions intermoleculars **són menys intenses.**

# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

## Ramificada vs Lineal

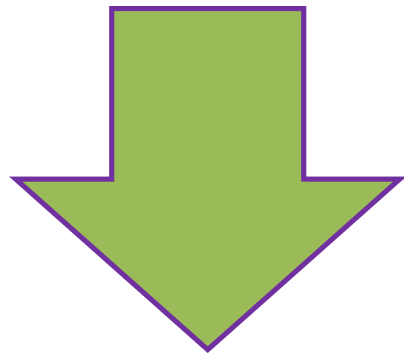


(a) Neopentane  
bp = 9.5 °C



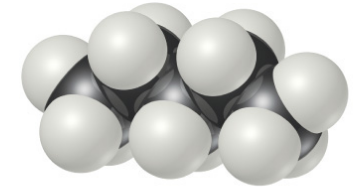
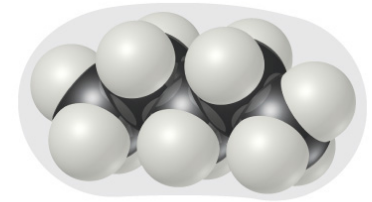
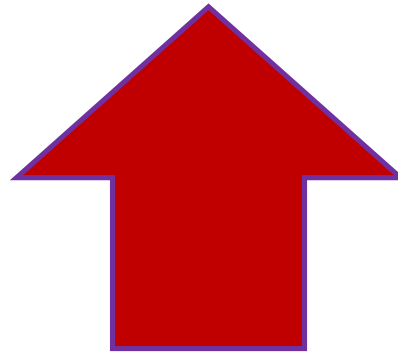
(b) Pentane  
bp = 36.1 °C

# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

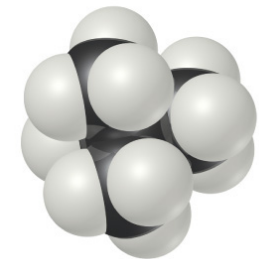


Molècules  
més  
ramificades

Forces  
intermoleculars  
menys intenses

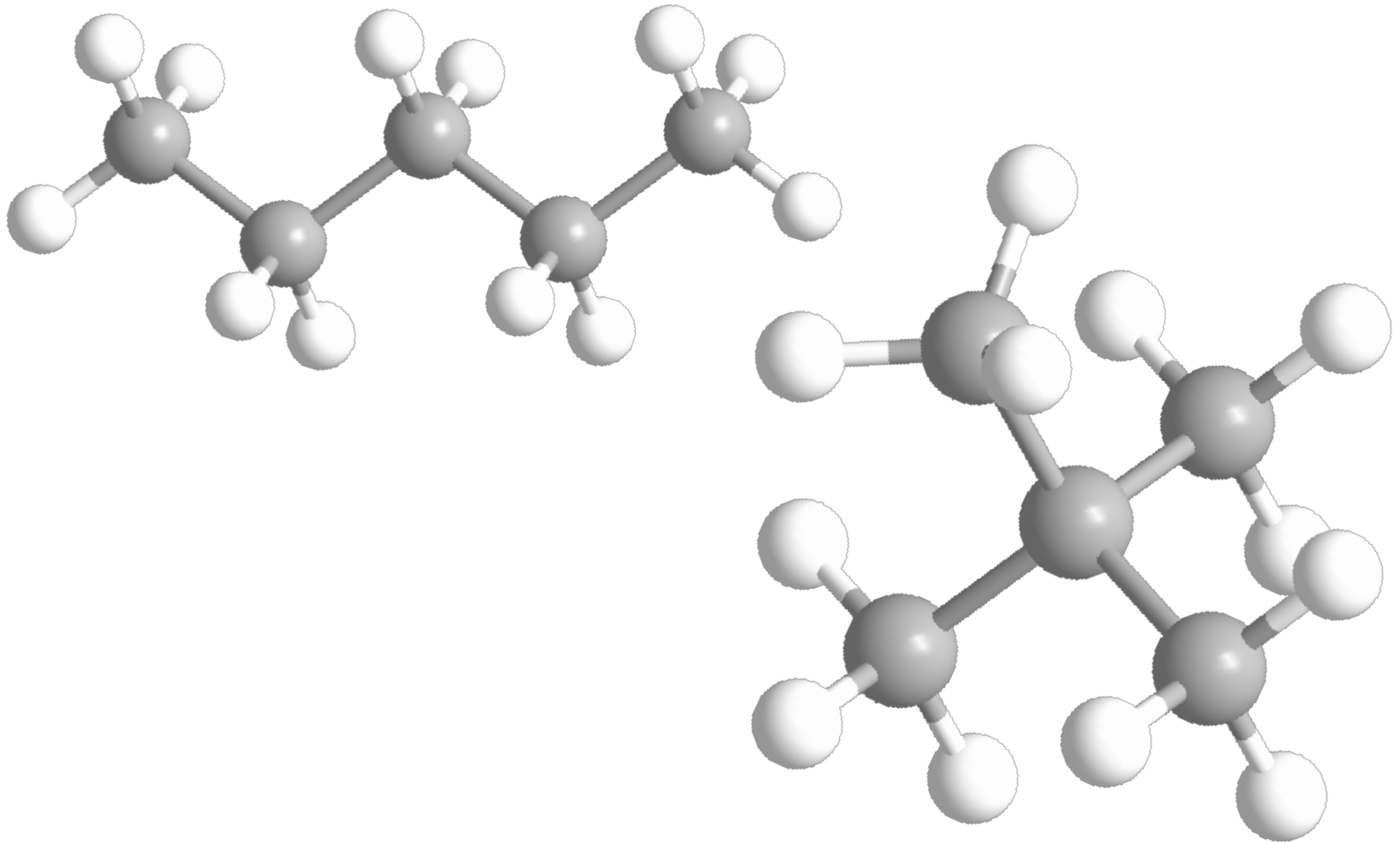


*n*-Pentane  
(bp = 309.4 K)

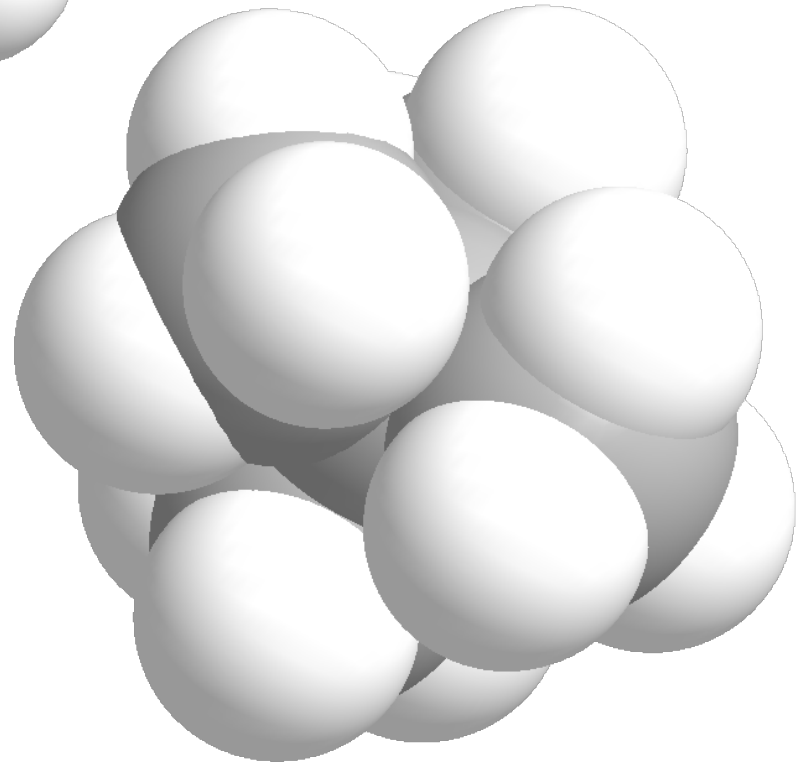
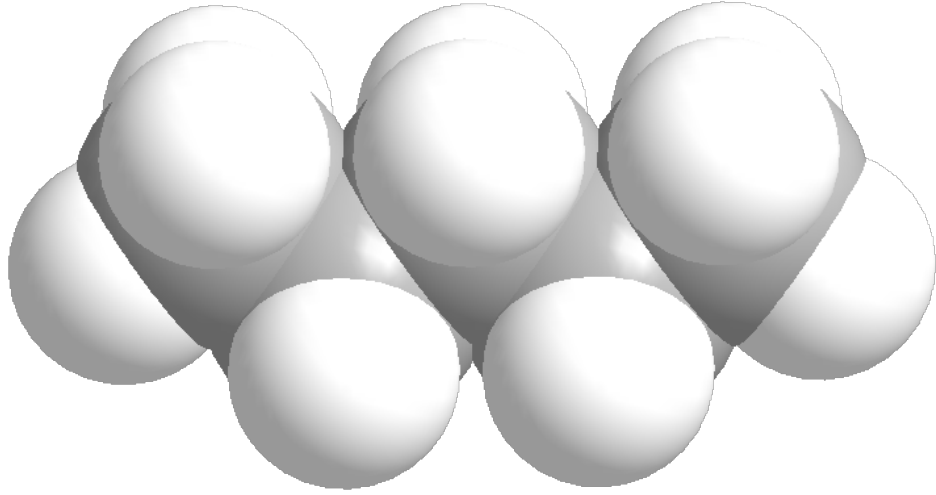


Neopentane  
(bp = 282.7 K)

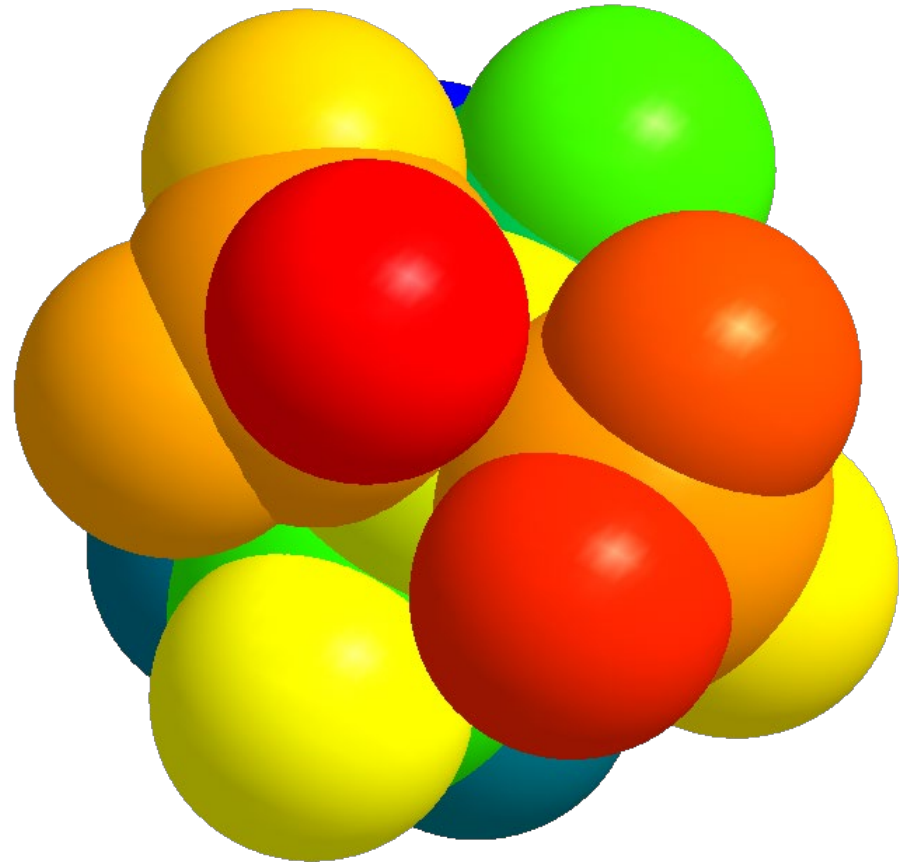
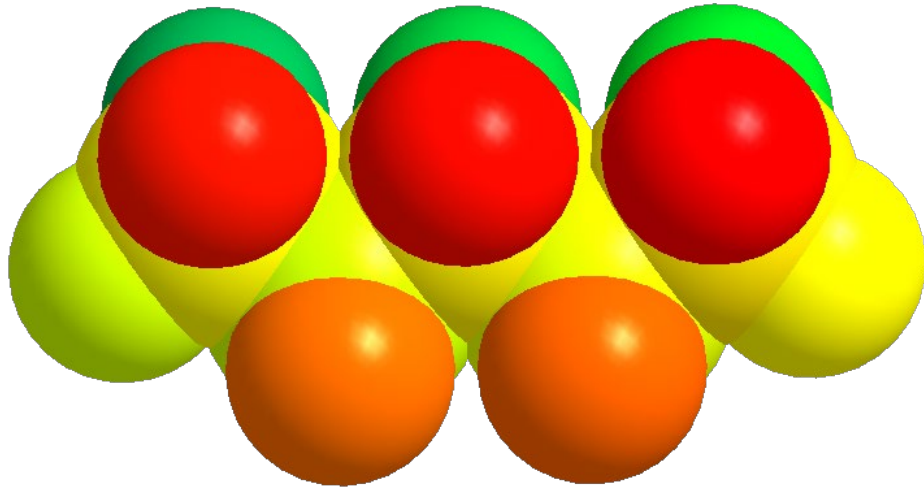
# Substàncies moleculars. **Polaritzabilitat**



# Substàncies moleculars. **Polaritzabilitat**



# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat








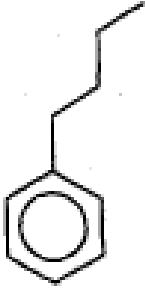
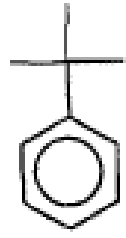
# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

**Table 2.1 Nomenclature and Physical Properties of Straight-Chain Alkanes**

Number of carbons	Molecular formula	Name	Condensed structure	Boiling point (°C)	Melting point (°C)	Density <sup>a</sup> (g/mL)
1	CH <sub>4</sub>	methane	CH <sub>4</sub>	-167.7	-182.5	
2	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	ethane	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-88.6	-183.3	
3	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	propane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-42.1	-187.7	
4	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	butane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-0.5	-138.3	
5	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	pentane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	36.1	-129.8	0.5572
6	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	hexane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	68.7	-95.3	0.6603
7	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	heptane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	98.4	-90.6	0.6837
8	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	octane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	125.7	-56.8	0.7026
9	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	nonane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> CH <sub>3</sub>	150.8	-53.5	0.7177
10	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	decane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> CH <sub>3</sub>	174.0	-29.7	0.7299
11	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	undecane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> CH <sub>3</sub>	195.8	-25.6	0.7402
12	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	dodecane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>10</sub> CH <sub>3</sub>	216.3	-9.6	0.7487
13	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	tridecane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> CH <sub>3</sub>	235.4	-5.5	0.7546
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
20	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	eicosane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>18</sub> CH <sub>3</sub>	343.0	36.8	0.7886
21	C <sub>21</sub> H <sub>44</sub>	heneicosane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>19</sub> CH <sub>3</sub>	356.5	40.5	0.7917
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
30	C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	triacontane	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>28</sub> CH <sub>3</sub>	449.7	65.8	0.8097

<sup>a</sup>Density is temperature dependent. The densities given are those determined at 20°C (*d*<sup>20°</sup>).

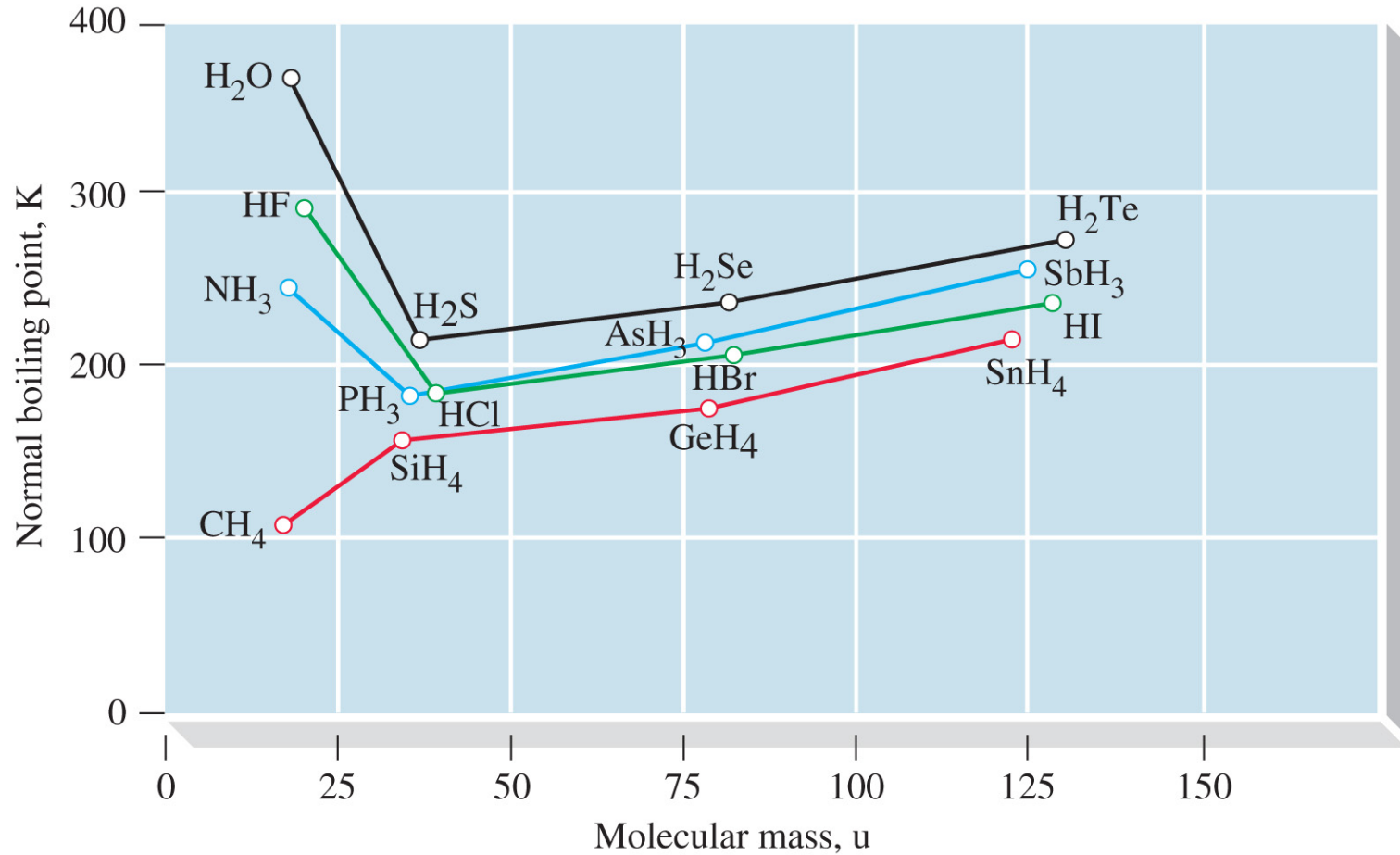
# Substàncies moleculars. Polaritzabilitat

					
Peso Molecular:	78	92	106	134	134
Punto ebullició:	80	110	136	182	167 °C

**Enllaç**

**d'hidrogen**

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen



# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen

És un tipus d'interacció dipol-dipol  
**especialment fort** que es dona

entre:

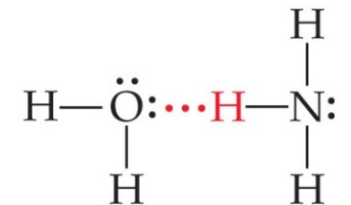
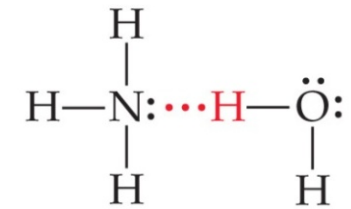
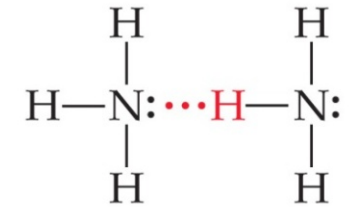
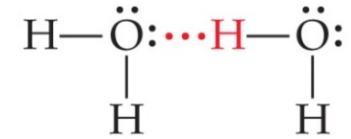
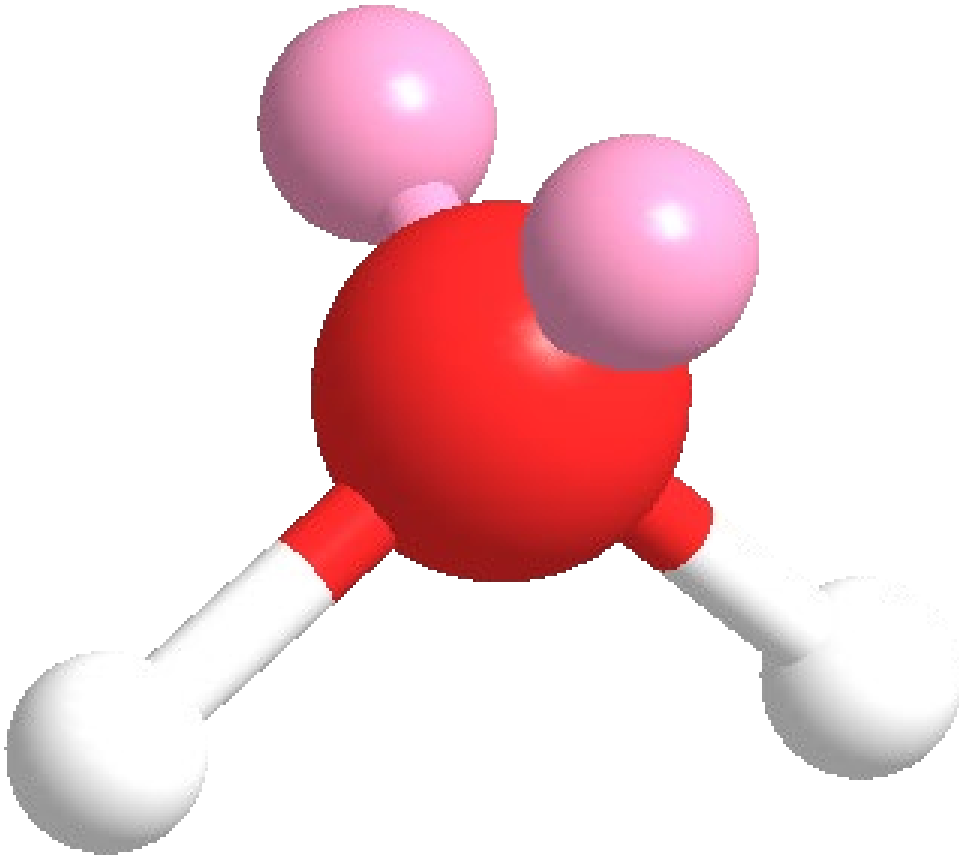
**l'àtom d'H d'un enllaç polar (O-H, N-H, F-H)**

**i un àtom electronegatiu xicotet (O, N, F),**

**amb parells d'electrons solitaris.**

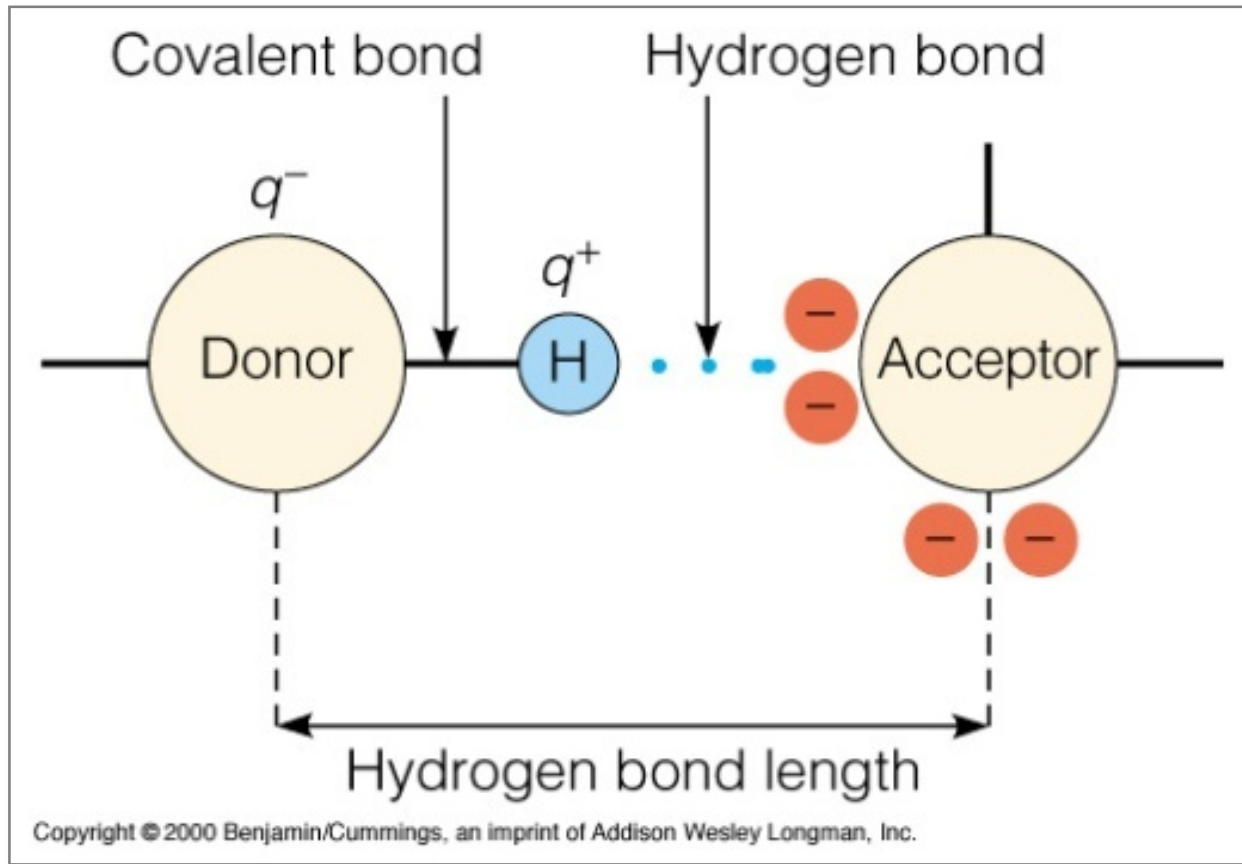
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen

## Parells d'electrons solitaris



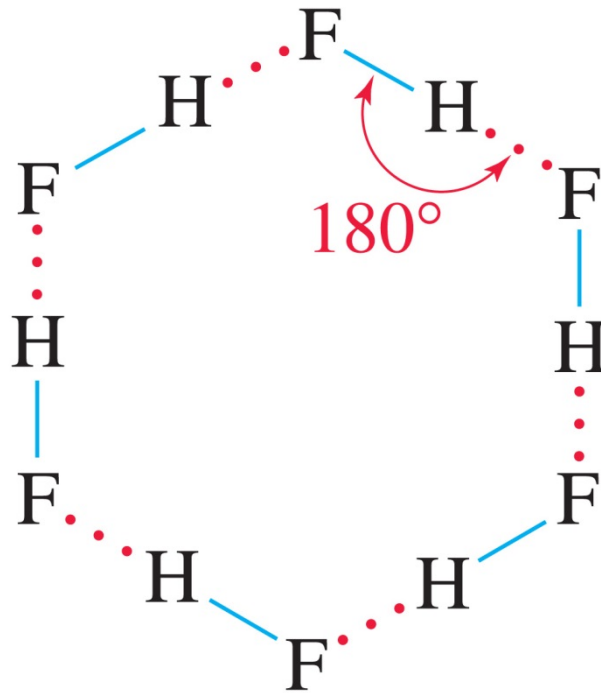
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen

Donador  
d'hidrogen

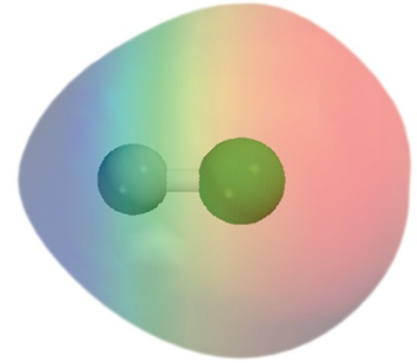


Acceptor  
d'hidrogen

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen



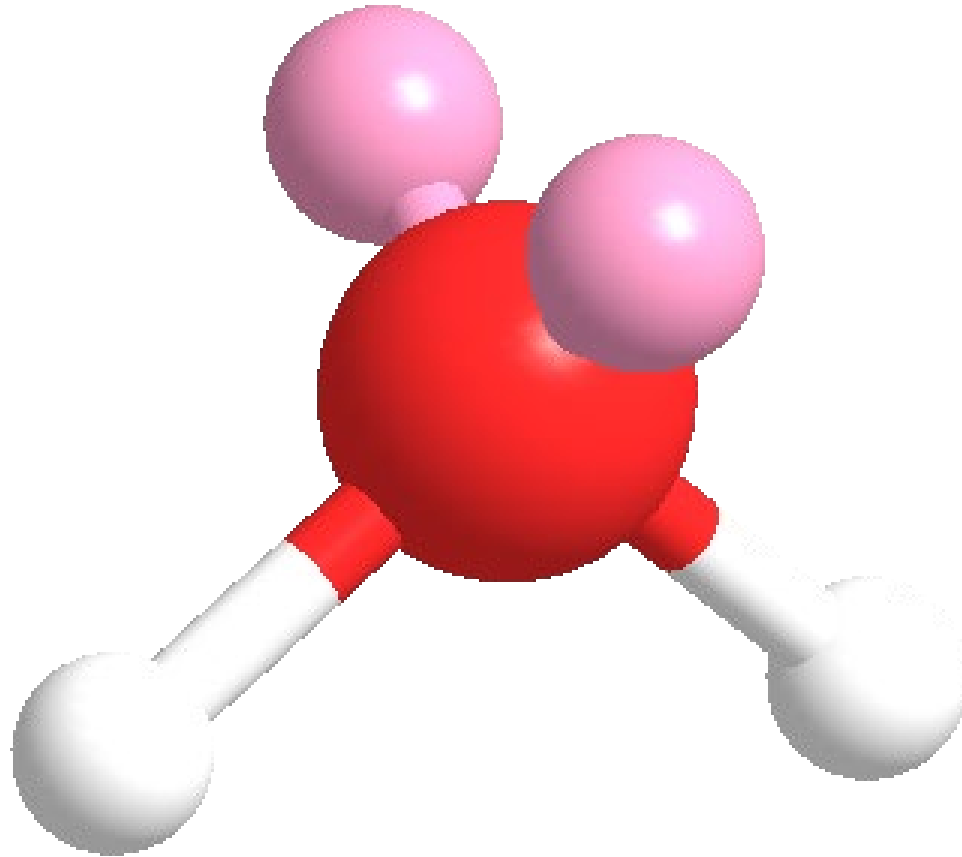
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



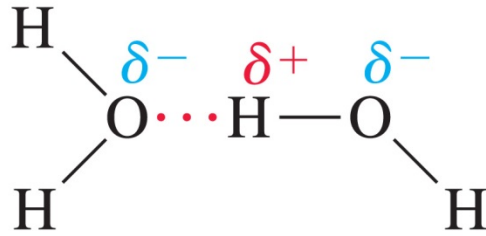
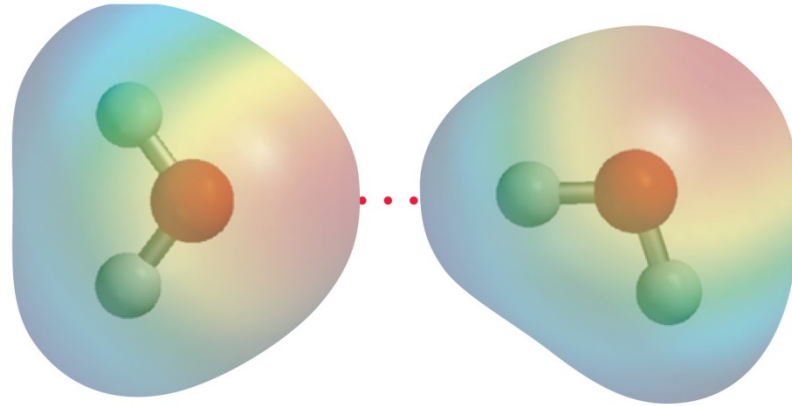
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



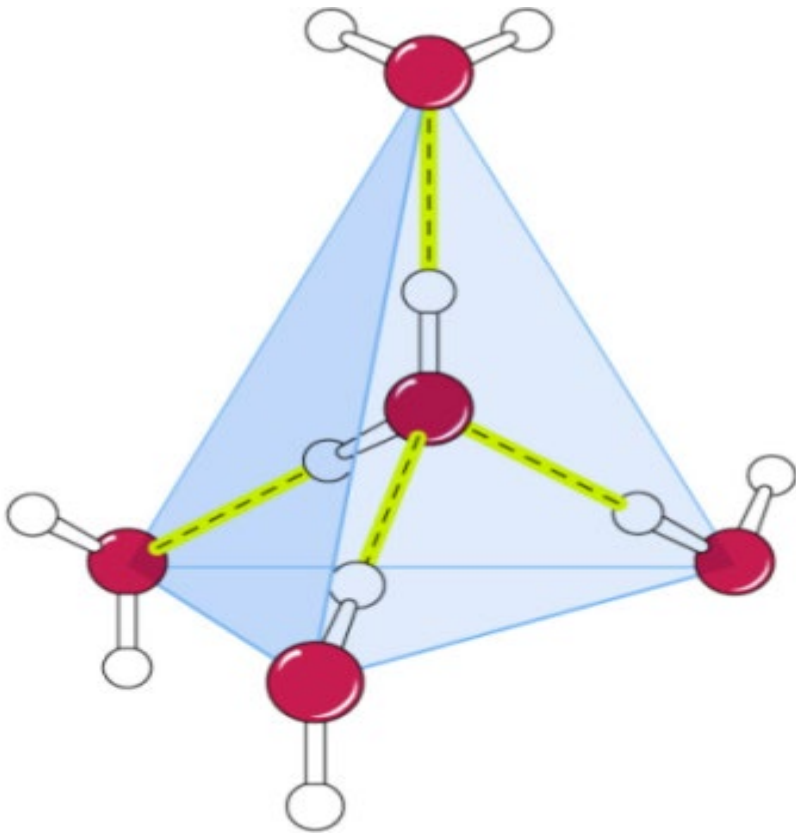
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua



# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua



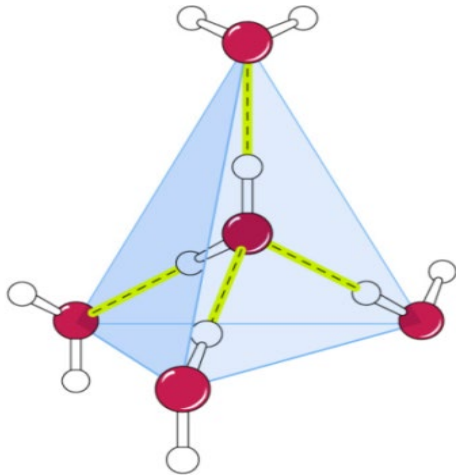
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua



Una molècula  
d'aigua pot  
formar fins a  
**4 enllaços  
d'hidrogen**

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua

## L'exclusivitat de l'aigua

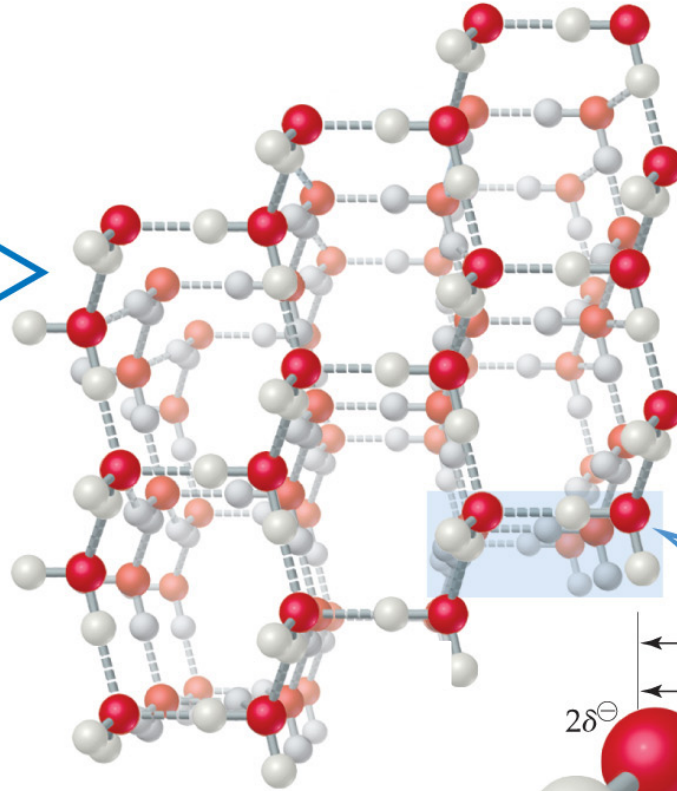


Encara que **molts compostos poden formar ponts d'hidrogen intermoleculars**, el que fa **diferent a l' $\text{H}_2\text{O}$**  d'altres molècules polars, com  **$\text{NH}_3$  i  $\text{HF}$** , és que cada àtom d'oxigen forma **dos ponts d'hidrogen**, el mateix nombre de parells lliures d'electrons que posseeix aquest àtom. Així, les molècules d'aigua s'enllacen en una **extensa xarxa tridimensional** on cada àtom d'oxigen forma un tetraedre amb quatre àtoms d'hidrogen, dos units per enllaços covalents i dos per ponts d'hidrogen. Aquesta igualtat en el nombre d'àtoms d'hidrogen i de parells lliures no és típica del  **$\text{NH}_3$**  ni de  **$\text{HF}$**  o, per ser més precisos, de cap altra molècula que siga capaç de formar ponts d'hidrogen. Per tant, aquestes molècules formen anells o cadenes, **però no estructures tridimensionals.**

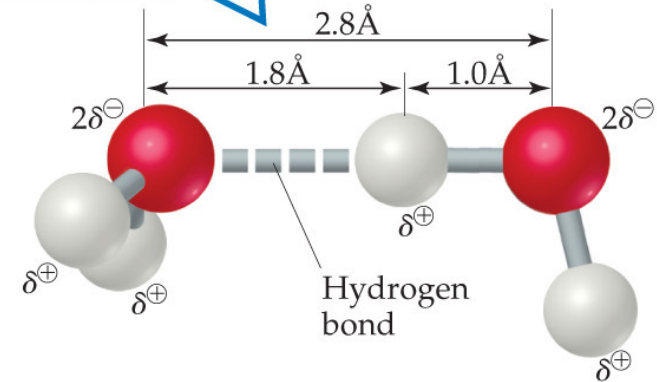
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua



(a)

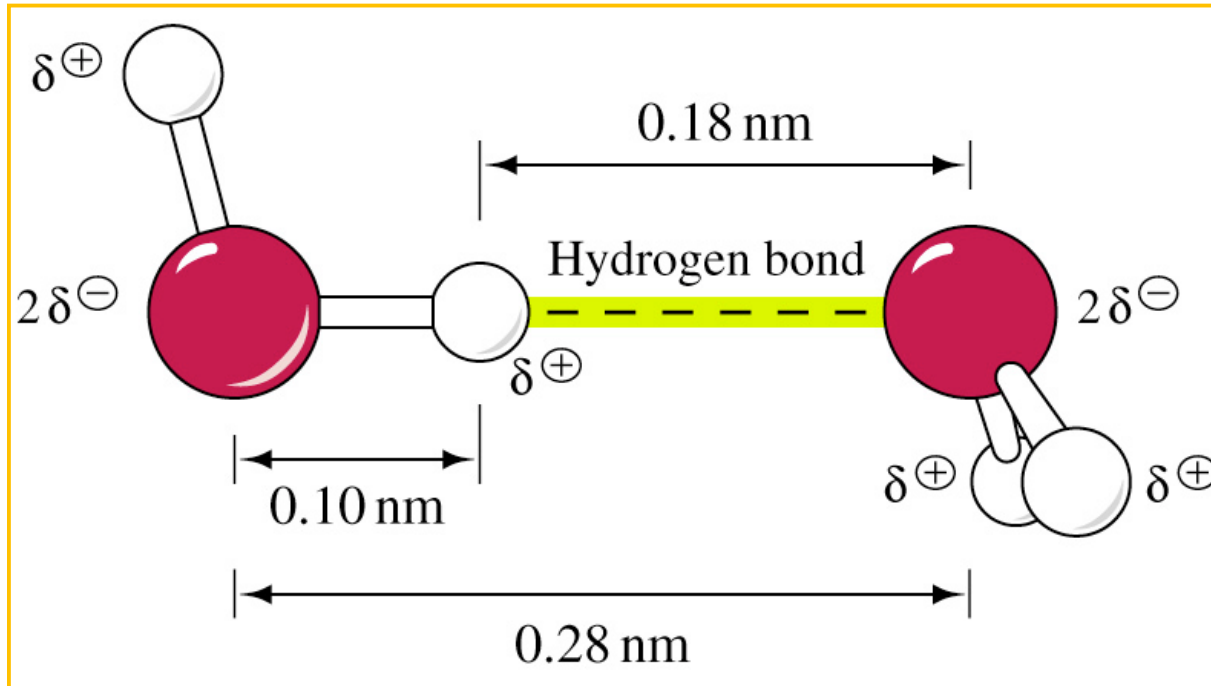


(b)



(c)

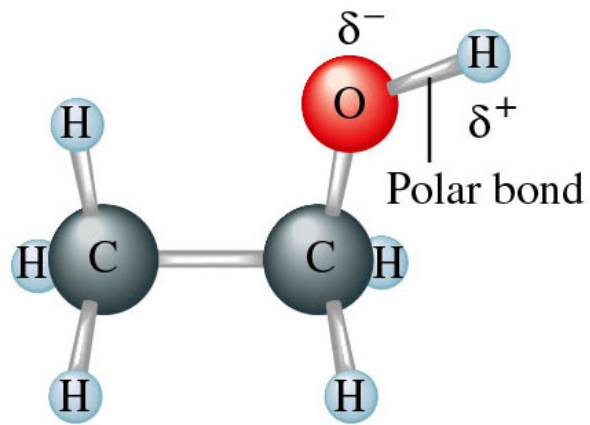
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen en l'aigua



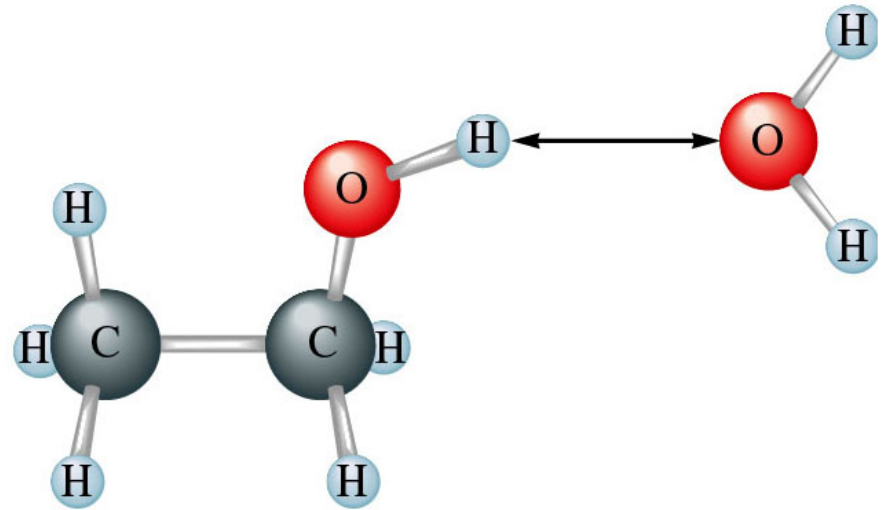
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen

**Només hi ha l'enllaç  
d'hidrogen **OH** a l'aigua?**

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen. Altres substàncies



(a)



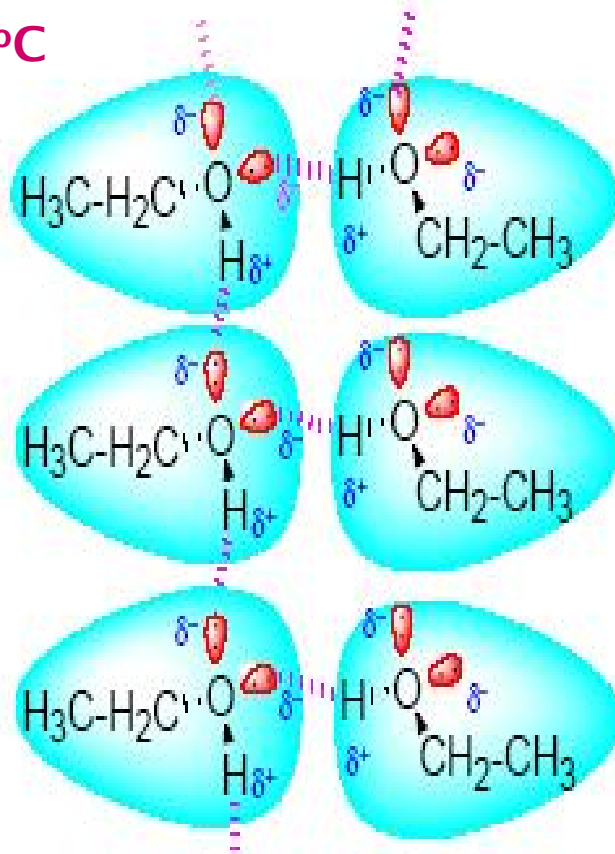
(b)



# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen. Altres substàncies

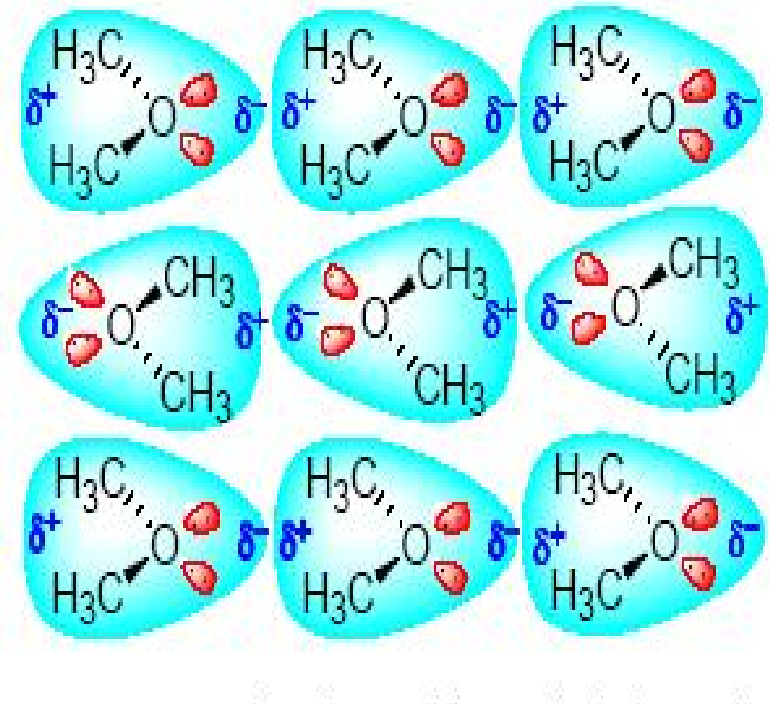
Interacciones por puente de hidrógeno en el etanol

p.eb. = 78°C



Interacciones dipolo-dipolo en el dimetil éter

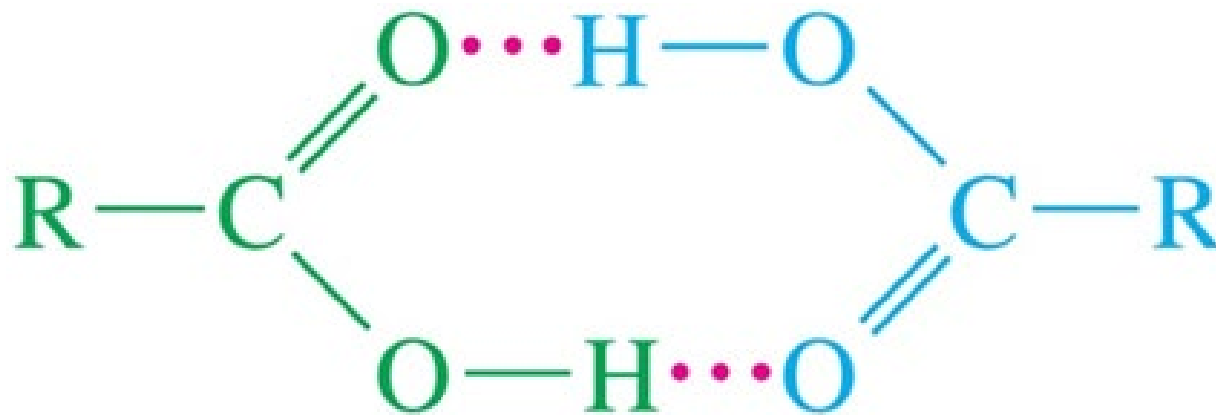
p.eb. = -25°C



**Substàncies moleculars.** Enllaç d'hidrogen. Altres substàncies

**I poden ser dobles?**

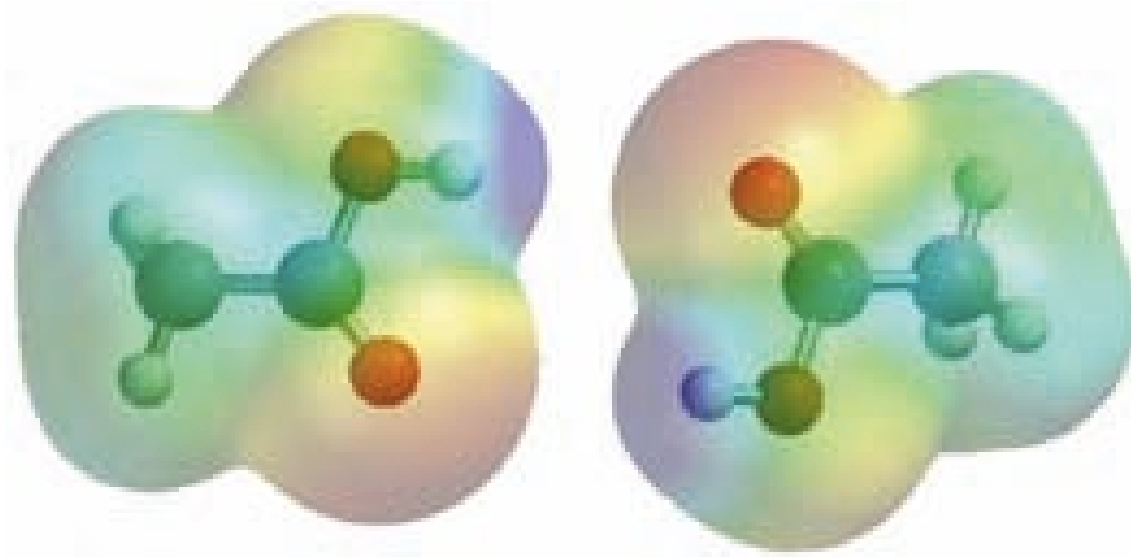
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen múltiple



hydrogen-bonded acid dimer

Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

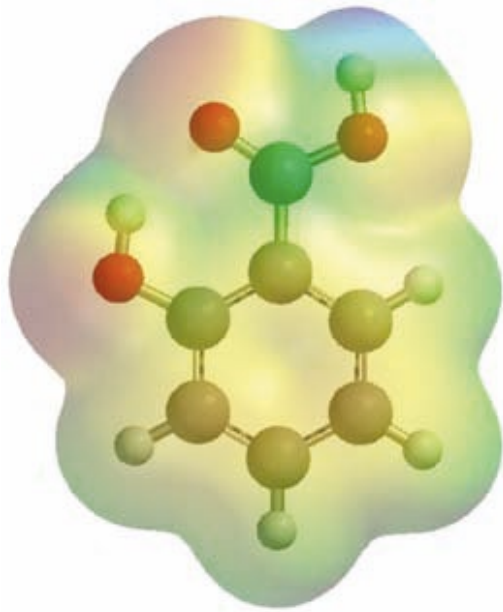
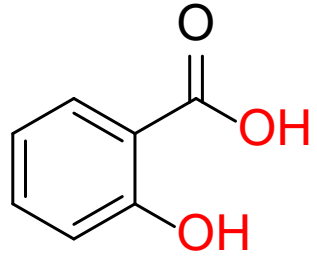
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen múltiple



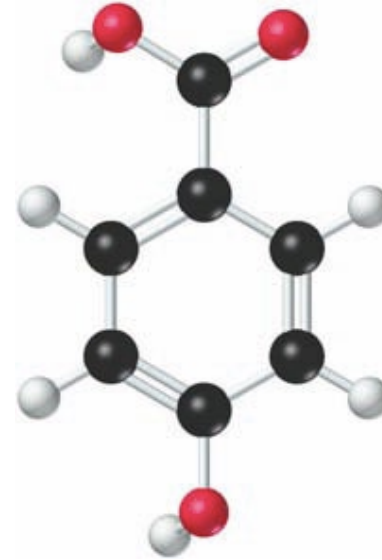
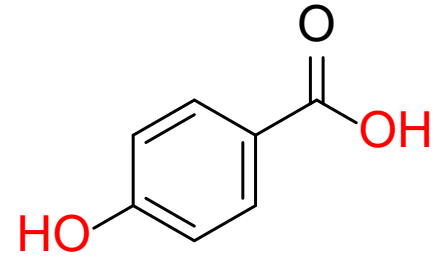
**Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen**

**I poden ser interns?**

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen intern



*o*-hidroxibenzoic àcid  
(acetil salicílic)

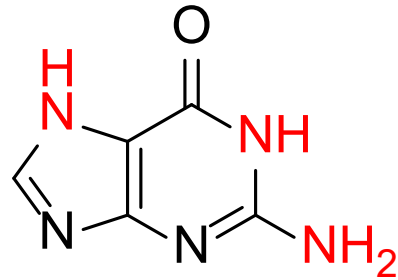


*p*-hidroxibenzoic àcid

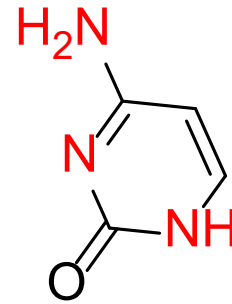
**Substàncies moleculars.** Enllaç d'hidrogen en la matèria viva

**I en la matèria viva?**

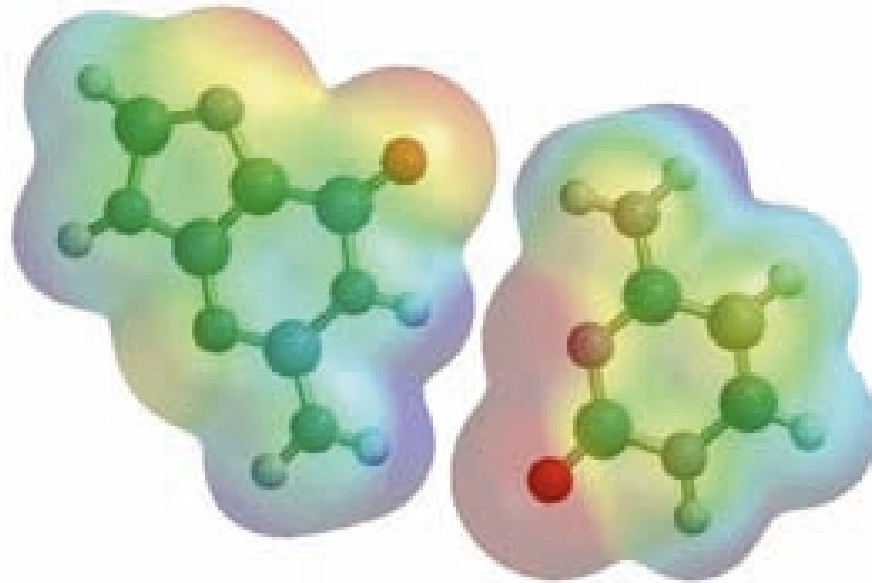
# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen a la matèria viva



*Guanina*

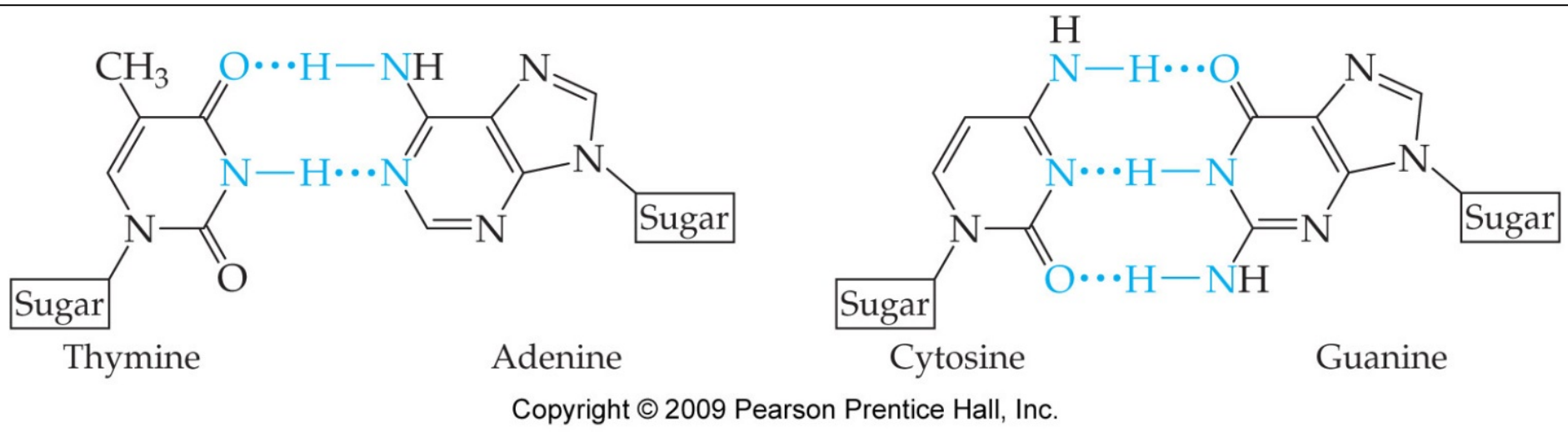


*Citosina*

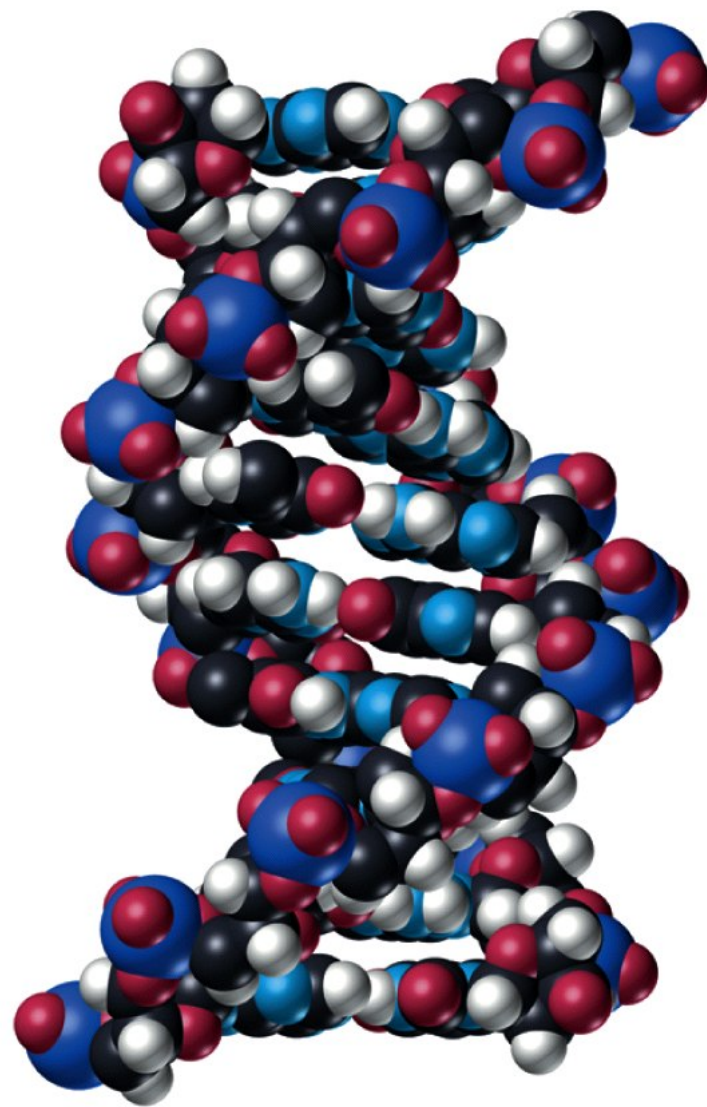
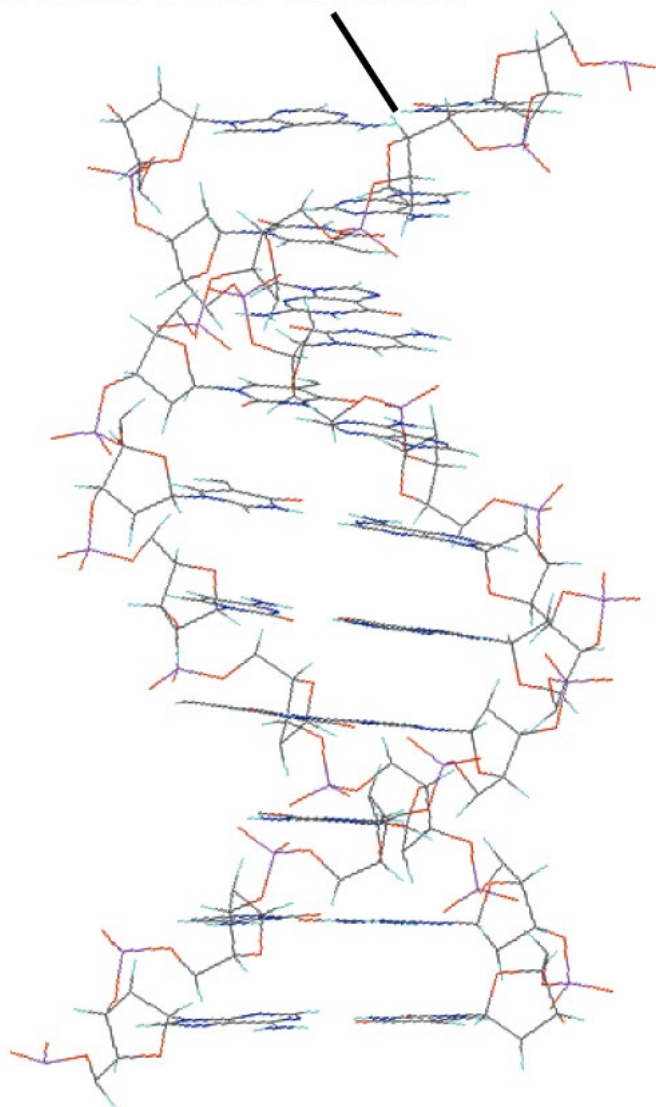




# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen



# Hydrogen bond between chains

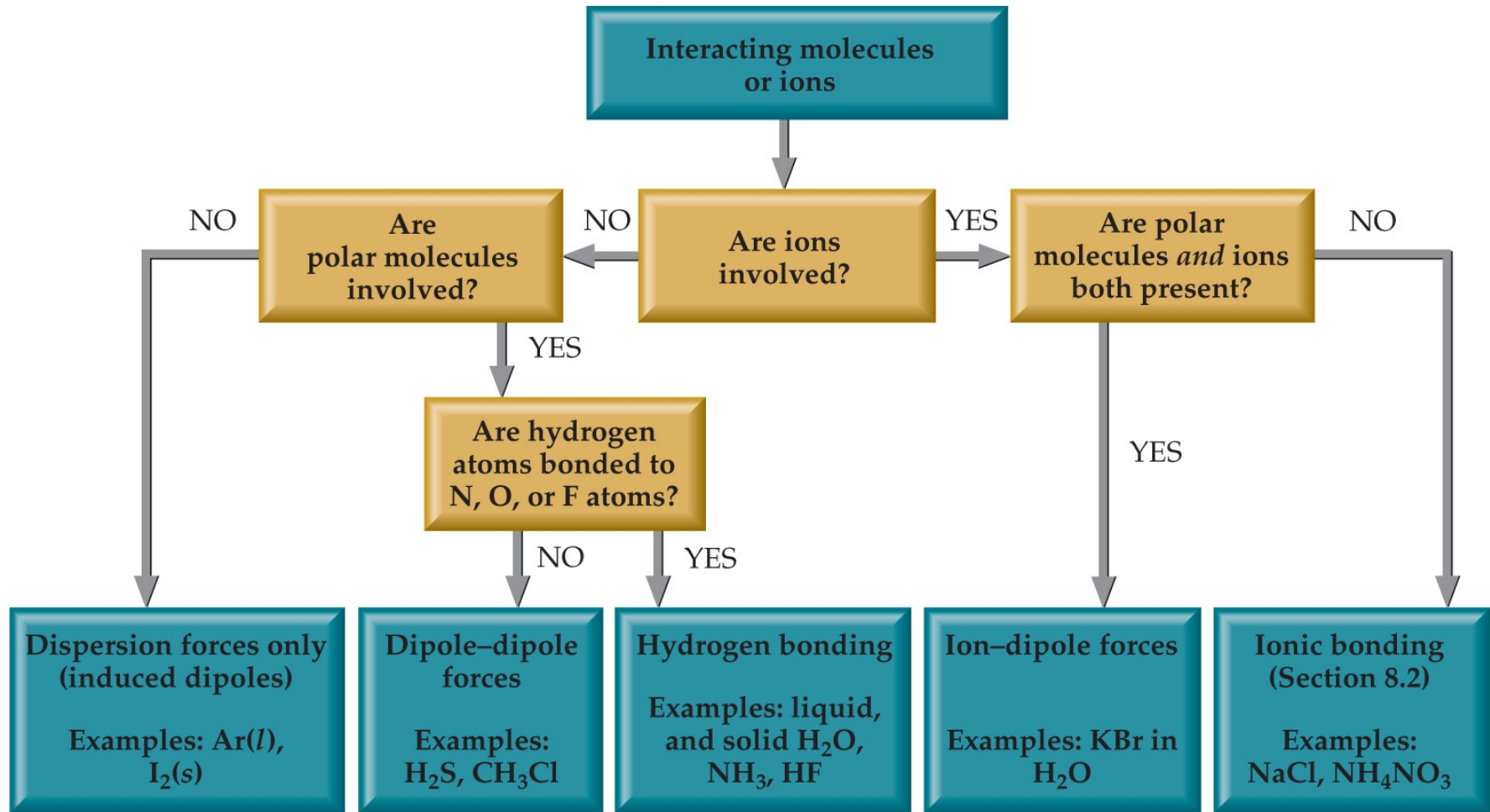


# Substàncies moleculars. **Comparativa general de forces**

**TABLE 10.5** A Comparison of Intermolecular Forces

Force	Strength	Characteristics
Ion–dipole	Moderate (10–50 kJ/mol)	Occurs between ions and polar solvents
Dipole–dipole	Weak (3–4 kJ/mol)	Occurs between polar molecules
London dispersion	Weak (1–10 kJ/mol)	Occurs between all molecules; strength depends on size, polarizability
Hydrogen bond	Moderate (10–40 kJ/mol)	Occurs between molecules with O—H, N—H, and F—H bonds

# Substàncies moleculars. Diagrama de resum general



van der Waals forces

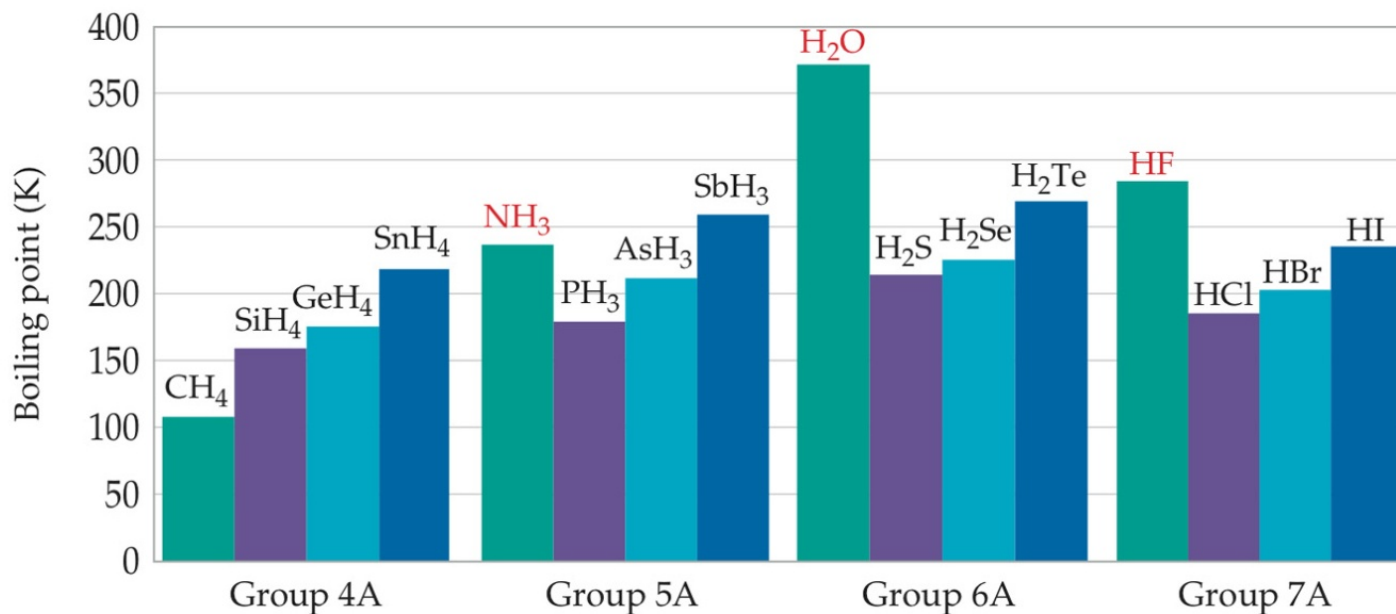
**Substàncies moleculars.** Propietats de les molècules

**Influència en les propietats de  
les molècules**

**Punts de fusió i d'ebullició**

# Substàncies moleculars. Enllaç d'hidrogen. Punt d'ebullició.

**TABLE 10.4** Boiling Points of the Covalent Binary Hydrides of Groups 4A, 5A, 6A, and 7A

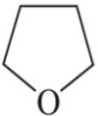


The boiling points generally increase with increasing molecular mass down a group of the periodic table, but the hydrides of nitrogen (**NH<sub>3</sub>**), oxygen (**H<sub>2</sub>O**), and fluorine (**HF**) have abnormally high boiling points because these molecules form hydrogen bonds.

# Substàncies moleculars. Punts de fusió i d'ebullició

**TABLE 14-1**

Comparison of the Boiling Points of Ethers, Alkanes, and Alcohols of Similar Molecular Weights

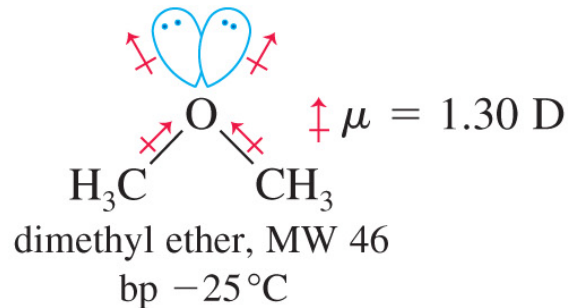
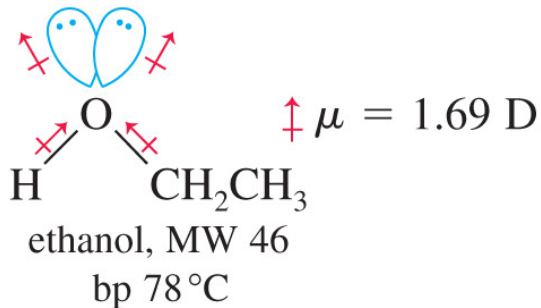
Compound	Formula	MW	bp (°C)	Dipole Moment (D)
water	H <sub>2</sub> O	18	100	1.9
ethanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> —OH	46	78	1.7
dimethyl ether	CH <sub>3</sub> —O—CH <sub>3</sub>	46	−25	1.3
propane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	44	−42	0.1
<i>n</i> -butanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> —OH	74	118	1.7
tetrahydrofuran		72	66	1.6
diethyl ether	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> —O—CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	74	35	1.2
pentane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	72	36	0.1

*Note:* The alcohols are hydrogen bonded, giving them much higher boiling points. The ethers have boiling points that are closer to those of alkanes with similar molecular weights.

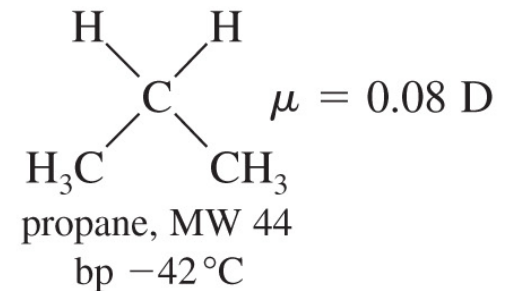
# Substàncies moleculars. Punts de fusió i d'ebullició

Els alcohols estan presents en els ponts d'hidrogen mentre que els èters no.

Els èters presenten punts d'ebullició similars als alcans corresponents **per a un pes molecular equivalent.**



Cor ..... Inc.

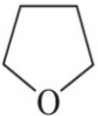




# Substàncies moleculars. Punts de fusió i d'ebullició

**TABLE 14-1**

Comparison of the Boiling Points of Ethers, Alkanes, and Alcohols of Similar Molecular Weights

Compound	Formula	MW	bp (°C)	Dipole Moment (D)
water	H <sub>2</sub> O	18	100	1.9
ethanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> —OH	46	78	1.7
dimethyl ether	CH <sub>3</sub> —O—CH <sub>3</sub>	46	−25	1.3
propane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	44	−42	0.1
<i>n</i> -butanol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> —OH	74	118	1.7
tetrahydrofuran		72	66	1.6
diethyl ether	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> —O—CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	74	35	1.2
pentane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	72	36	0.1

*Note:* The alcohols are hydrogen bonded, giving them much higher boiling points. The ethers have boiling points that are closer to those of alkanes with similar molecular weights.

**Substàncies moleculars.** Propietats de les molècules

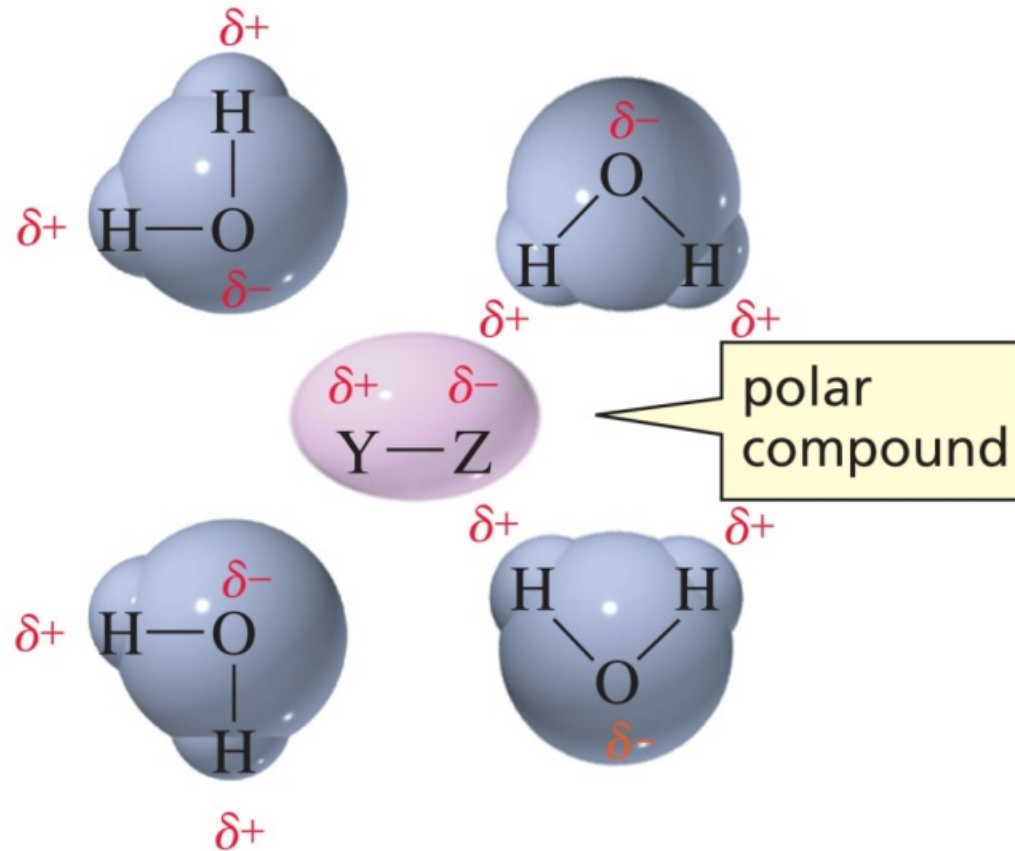
**Influència en les propietats de  
les molècules.**

**Solubilitat**

# Substàncies moleculars. Propietats de les molècules

Podem relacionar la  
**solubilitat** amb la capacitat  
d'establir **interaccions**  
**intermoleculars** entre el  
**solut i el dissolvent.**

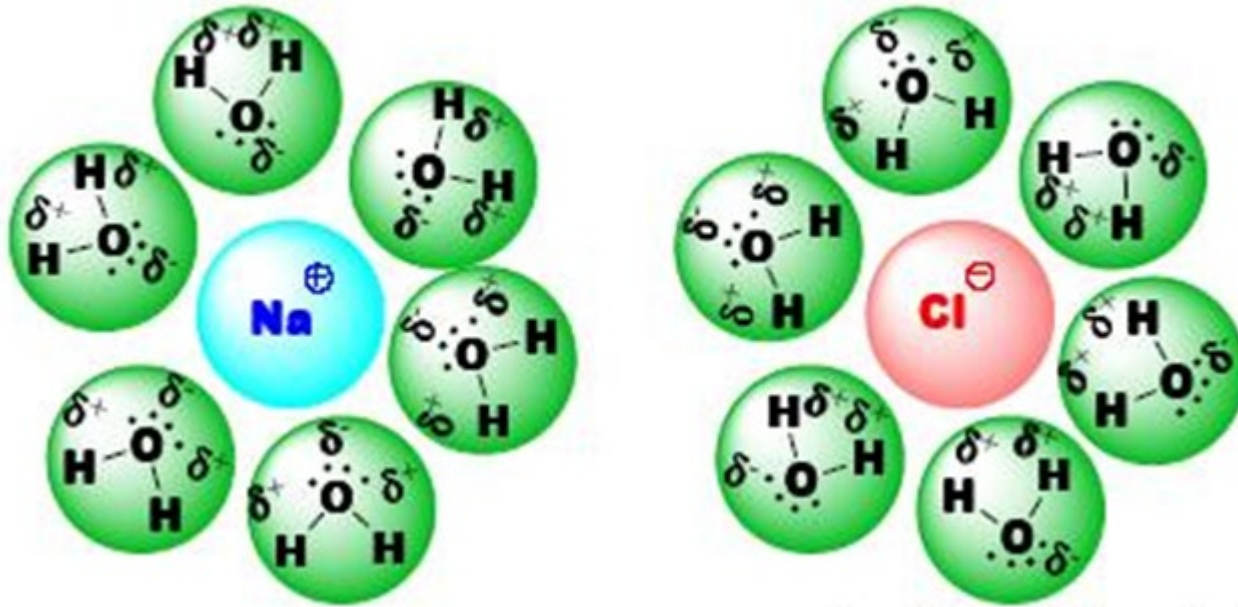
# Substàncies moleculars. Solut polar-dissolvent polar



**solvation of a polar compound by water**

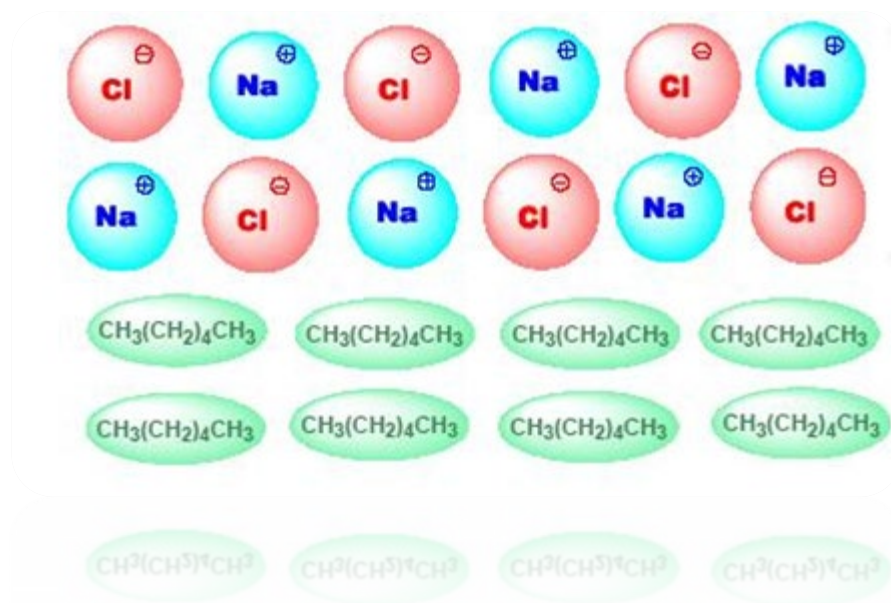
# Substàncies moleculars. Solut polar-dissolvent polar

Solvatació dels ions  $\text{Na}^+$  i  $\text{Cl}^-$  per molècules d'aigua.



# Substàncies moleculars. Solut polar-dissolvent apolar

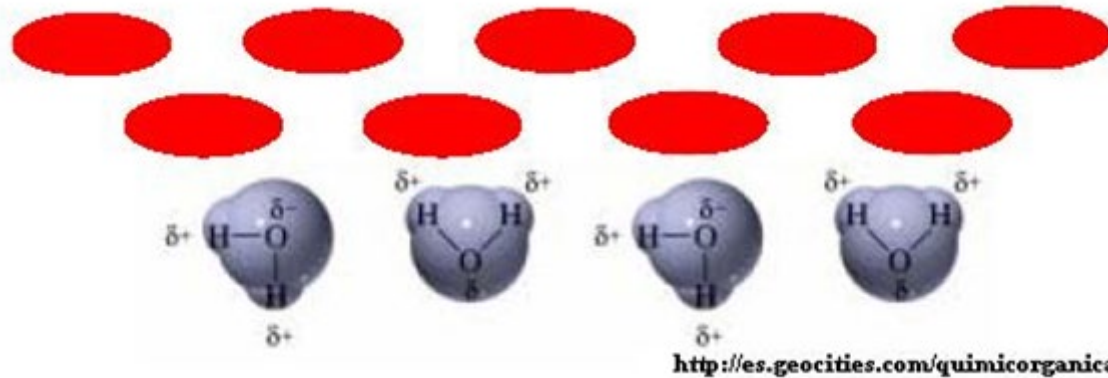
## Xarxa iònica $\text{Na}^+$ i $\text{Cl}^-$



Dissolvent NO polar (hexà)

# Substàncies moleculars. Solut NO polar-dissolvent polar

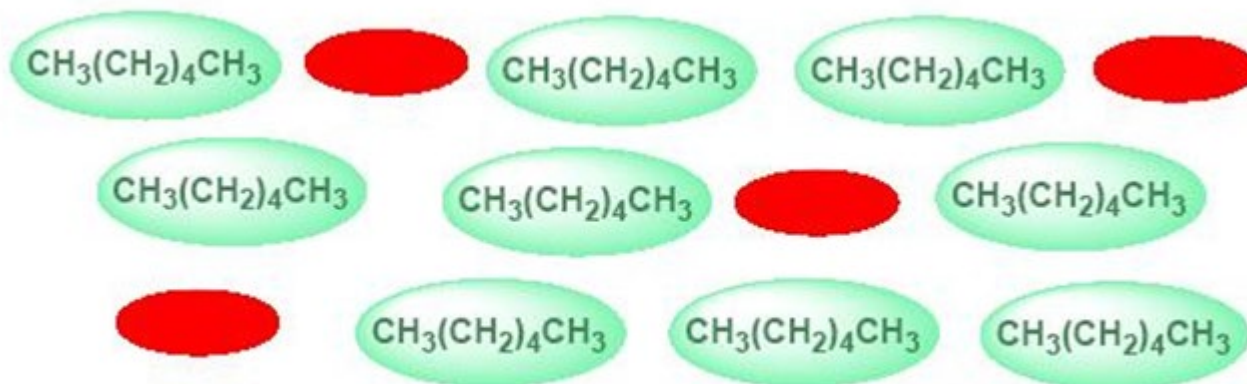
Solut NO polar (hexà o un greix)



Dissolvent polar **aigua**

# Substàncies moleculars. Solut NO polar-dissolvent apolar

Solut NO polar (hexà o un greix)

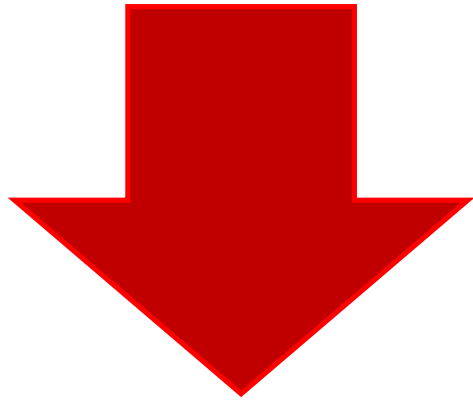


<http://es.geocities.com/quimicorganica>

Dissolvent NO polar



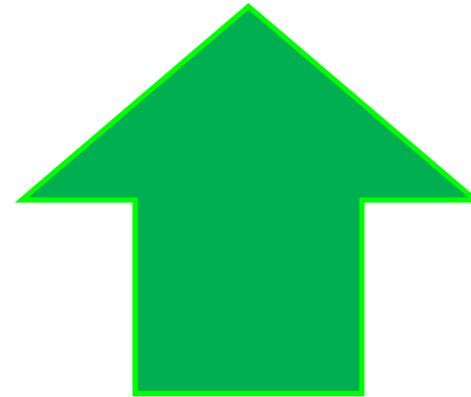
# Substàncies moleculars. Solut -dissolvent



**Polar-No Polar**  
**No Polar-Polar**



**Polar-Polar**  
**No polar-No  
polar**



# Substàncies moleculars. Propietats de les molècules

**I si el compost té una part  
polar i una apolar?**

# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

**TABLE 10-3**

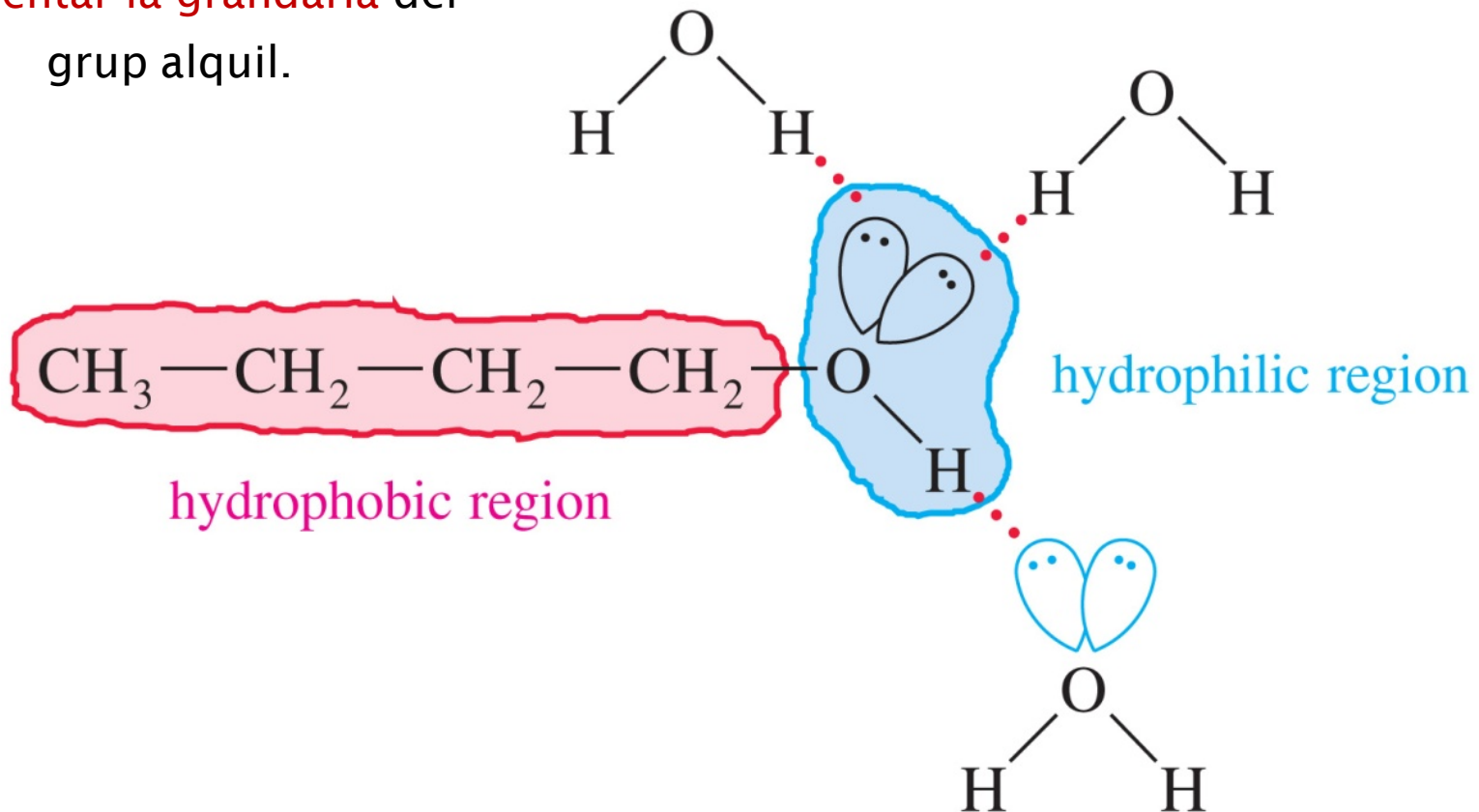
Solubility of Alcohols in Water  
(at 25 °C)

Alcohol	Solubility in Water
methyl	miscible
ethyl	miscible
<i>n</i> -propyl	miscible
<i>t</i> -butyl	miscible
isobutyl	10.0%
<i>n</i> -butyl	9.1%
<i>n</i> -pentyl	2.7%
cyclohexyl	3.6%
<i>n</i> -hexyl	0.6%
phenol	9.3%
hexane-1,6-diol	miscible

# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

## Alcohols alquílics

Solubles en aigua però la **solubilitat disminueix** en **augmentar la grandària** del grup alquil.



# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

**TABLE 10-3**

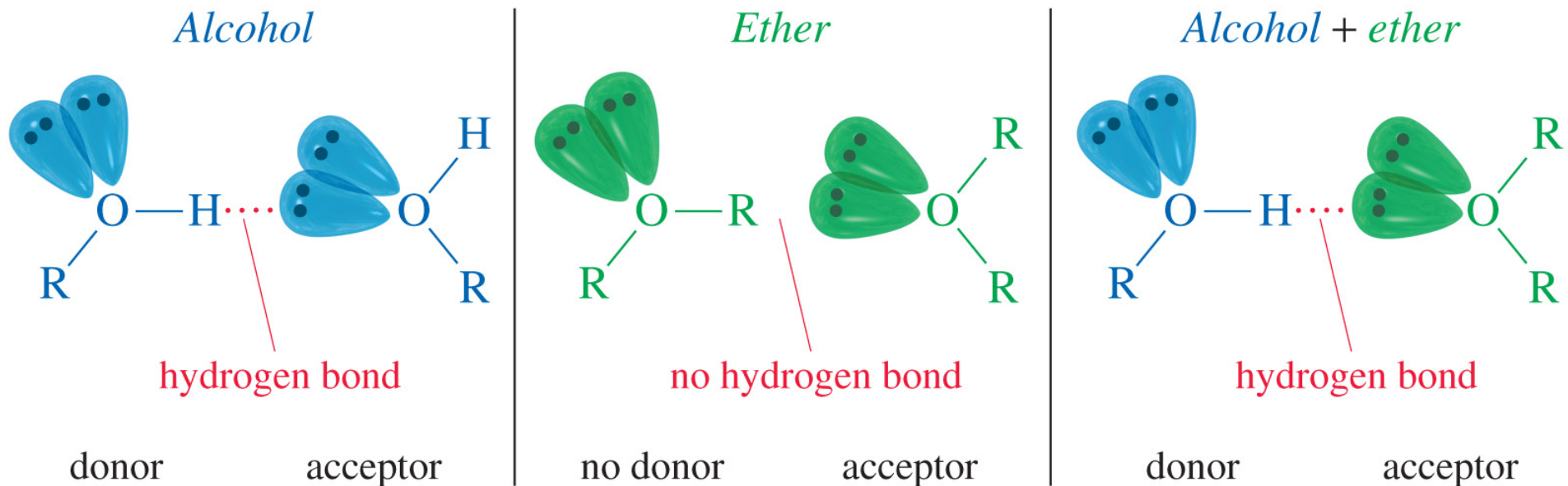
Solubility of Alcohols in Water  
(at 25 °C)

Alcohol	Solubility in Water
methyl	miscible
ethyl	miscible
<i>n</i> -propyl	miscible
<i>t</i> -butyl	miscible
isobutyl	10.0%
<i>n</i> -butyl	9.1%
<i>n</i> -pentyl	2.7%
cyclohexyl	3.6%
<i>n</i> -hexyl	0.6%
phenol	9.3%
hexane-1,6-diol	miscible

# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

**Èters.** Poden formar enllaços d'hidrogen amb l'aigua i amb alcohols però no amb si mateix.

Solubilitat en funció de la **cadena alquílica R.**

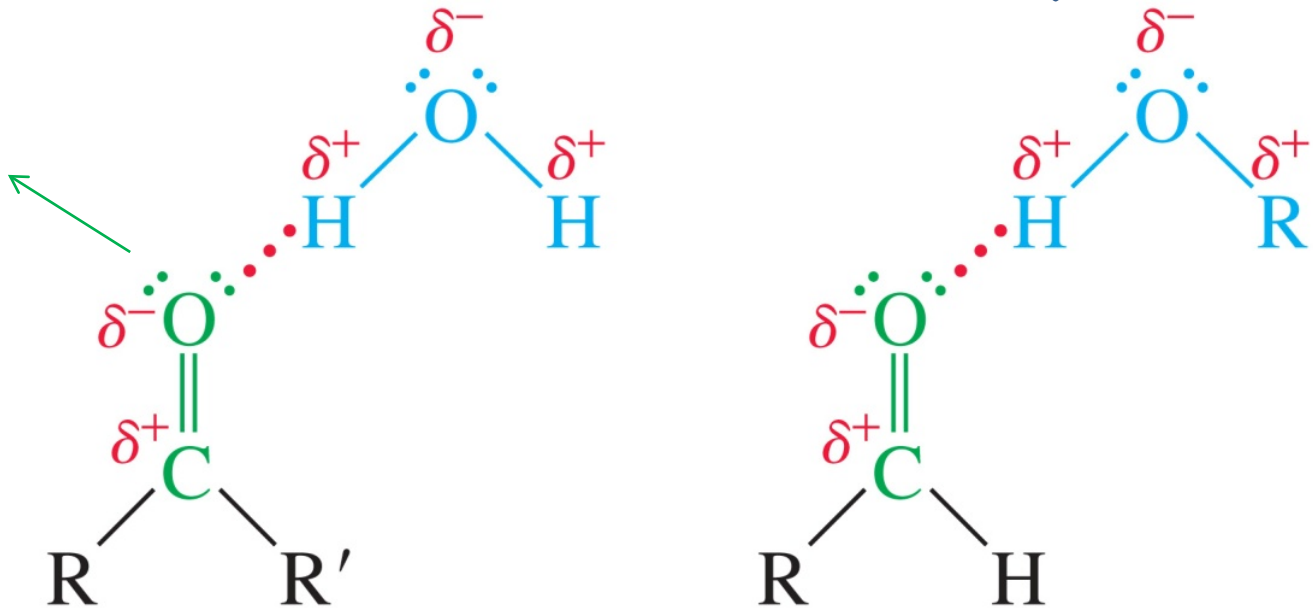


# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

**Compostos carbonílics** miscibles amb **aigua** i també amb **alcohols**.

Solubilitat en funció de la **cadena alquílica R**.

Acceptador de H

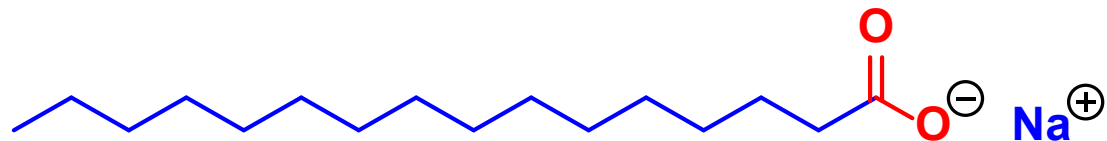
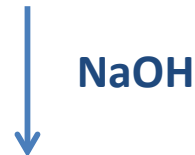
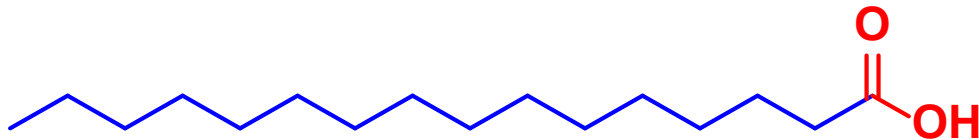


# Substàncies moleculars. Molècules polars i apolars

## Àcids carboxílics

miscibles amb **aigua** o  
formen emulsions!

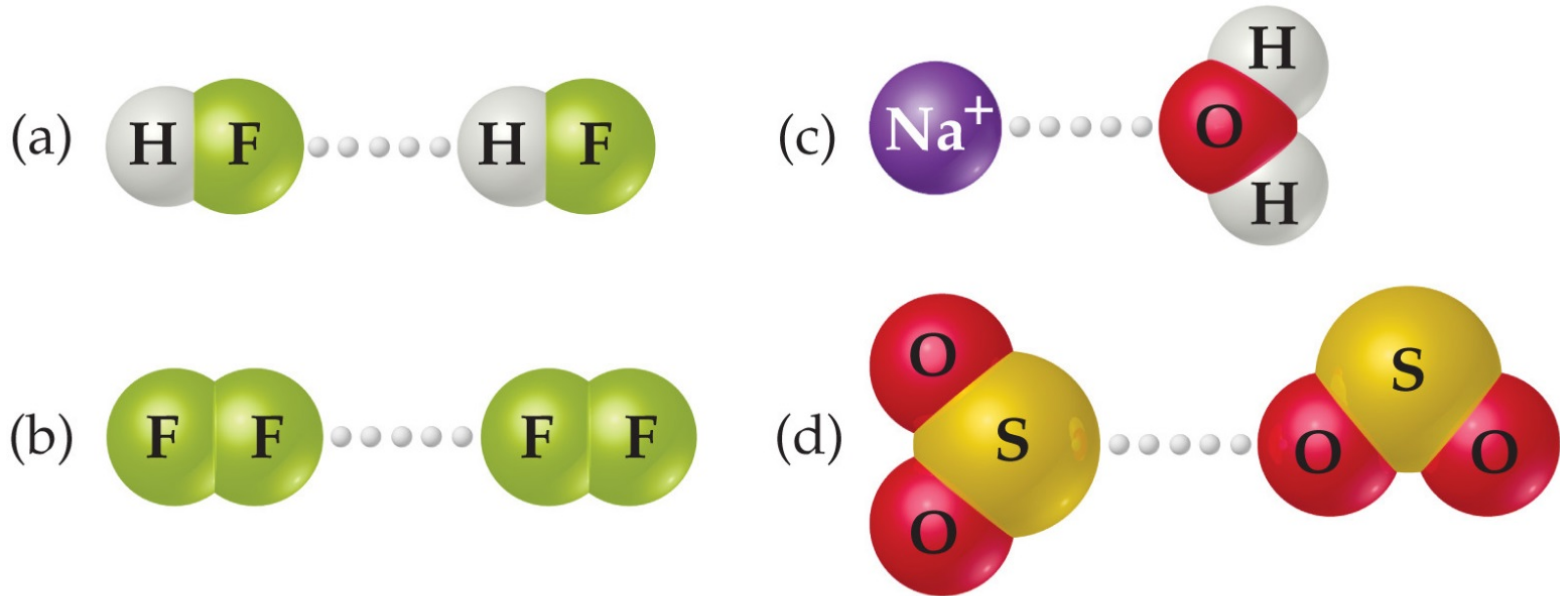
Solubilitat o  
formació de sabó  
en funció de si  
estan lliures o  
formen un  
carboxilat.





# Substàncies moleculars. Forces intermoleculars

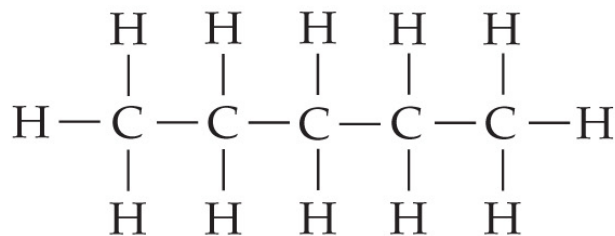
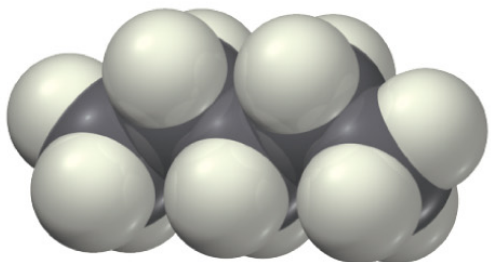
Quin tipus de força d'atracció intermolecular apareix en cada un dels casos següents? Quines dues interaccions són més fortes que les altres dues?



# Substàncies moleculars. Forces intermoleculars

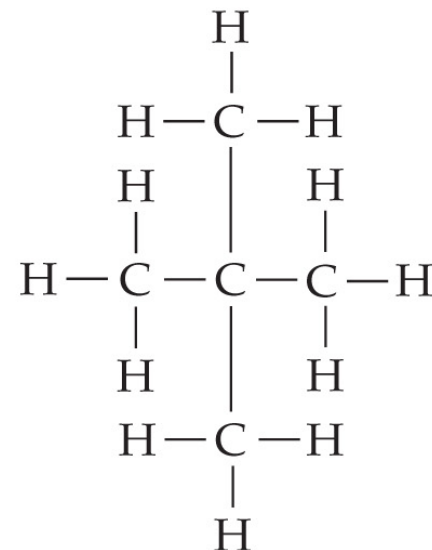
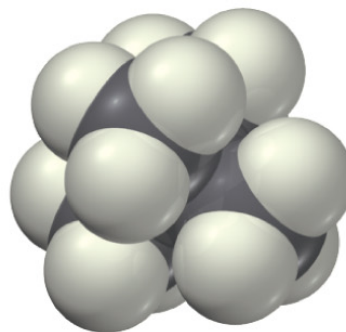
El butà i el 2,2-dimetilpropà són compostos no polars i tenen la mateixa fórmula molecular, encara que el butà té el punt d'ebullició més alt ( $-0.5\text{ °C}$  comparat amb els  $-11.7\text{ °C}$ ). Explica a què es deu.

# Substàncies moleculars. Forces intermoleculars



Pentane (bp = 309.2 K)

Longer, **less compact molecules** like pentane feel stronger dispersion forces and consequently have higher boiling points.



2,2-Dimethylpropane (bp = 282.6 K)

**More compact molecules** like 2,2-dimethylpropane feel weaker dispersion forces and have lower boiling points.

# Substàncies moleculars. Forces intermoleculars

**Identifiqueu les forces intermoleculars que intervenen en els compostos següents:**

- a) HCl
- b) CH<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>
- c) CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>
- d) Kr

# Substàncies moleculars. Forces intermoleculars

## WORKED EXAMPLE 10.3

### IDENTIFYING INTERMOLECULAR FORCES

Identify the likely kinds of intermolecular forces in the following substances:

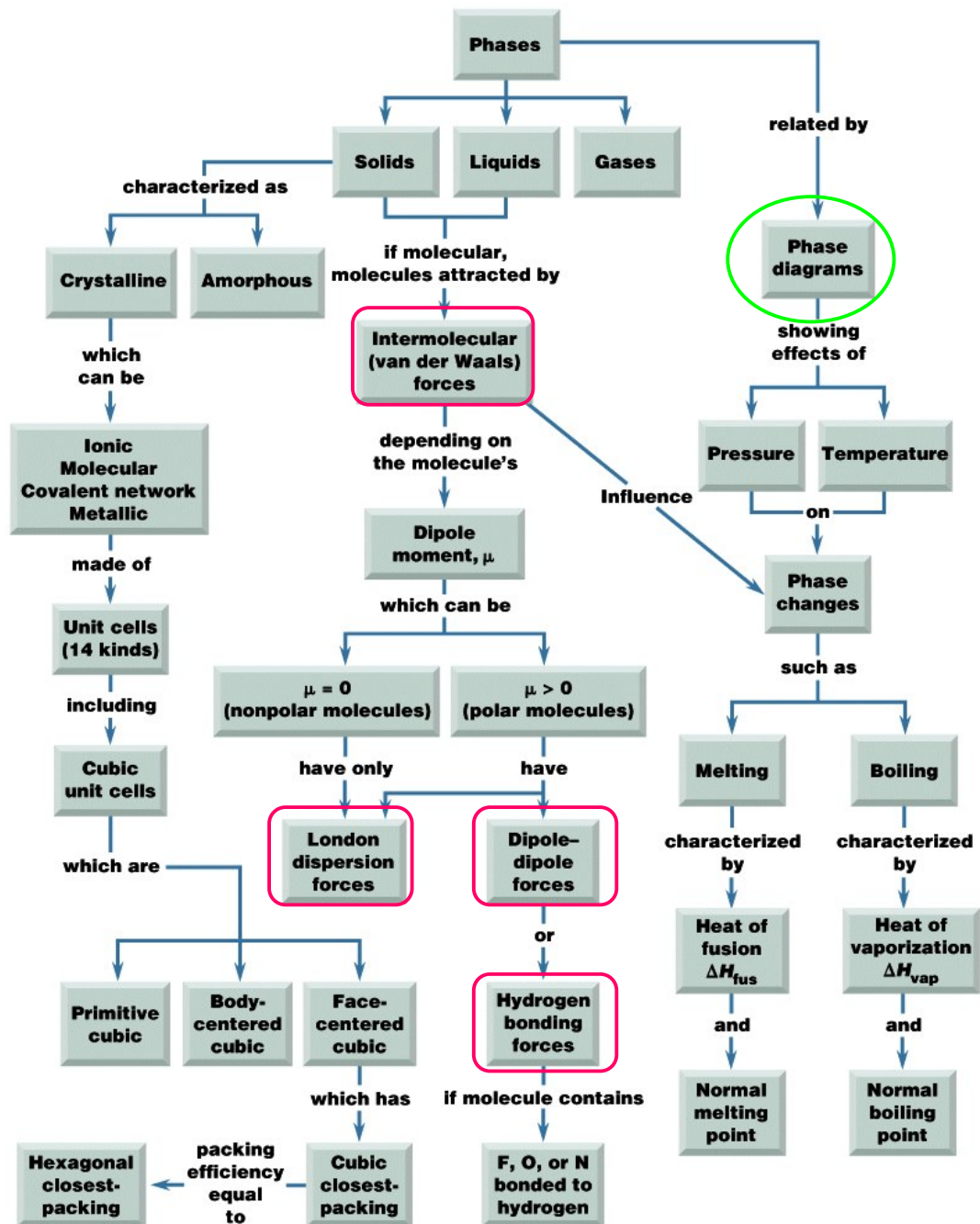
- (a) HCl      (b) CH<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>      (c) CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>      (d) Kr

### STRATEGY

Look at the structure of each substance, and decide what intermolecular forces are present. All molecules have dispersion forces; polar molecules have dipole–dipole forces; and molecules with O–H, N–H, or F–H bonds have hydrogen bonds.

### SOLUTION

- (a) HCl is a polar molecule but can't form hydrogen bonds. It has dipole–dipole forces and dispersion forces.
- (b) CH<sub>3</sub>CH<sub>3</sub> is a nonpolar molecule and has only dispersion forces.
- (c) CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> is a polar molecule that can form hydrogen bonds. In addition, it has dipole–dipole forces and dispersion forces.
- (d) Kr is nonpolar and has only dispersion forces.



# TEMA 6. SUBSTÀNCIES MOLECULARS

## Forces intermoleculars en líquids



Tensió superficial. Capil·laritat. Viscositat

Entalpia de vaporització. Pressió de vapor

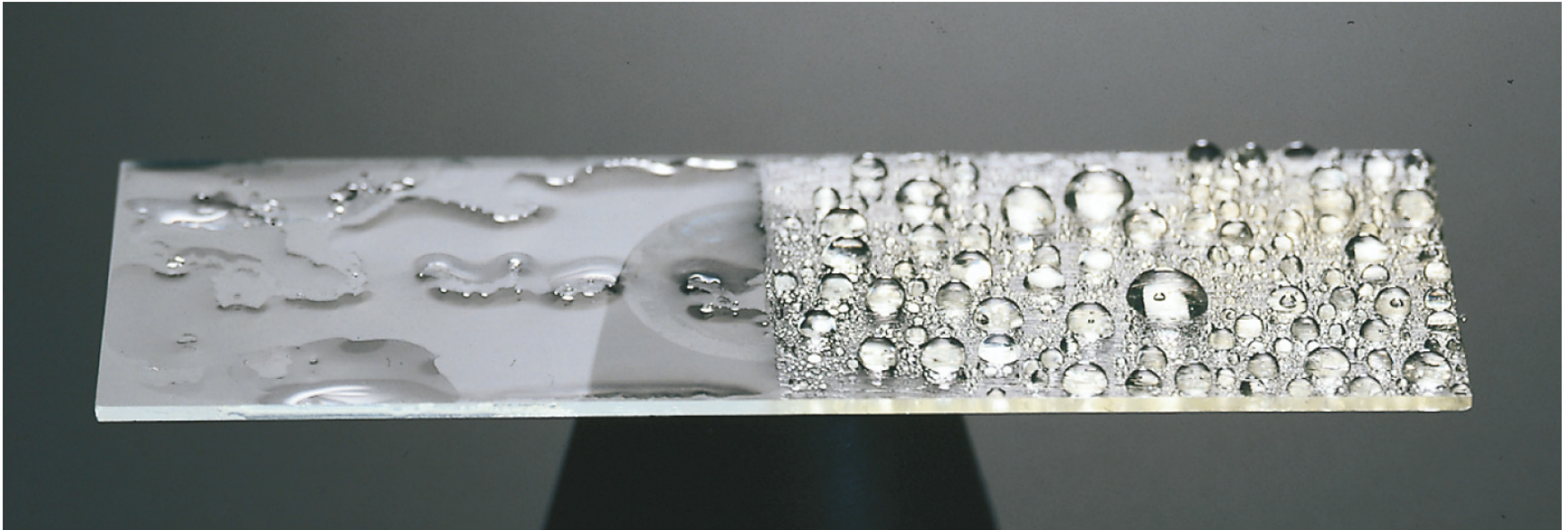


# Tensió superficial



# Forces intermoleculars en líquids. Tensió superficial

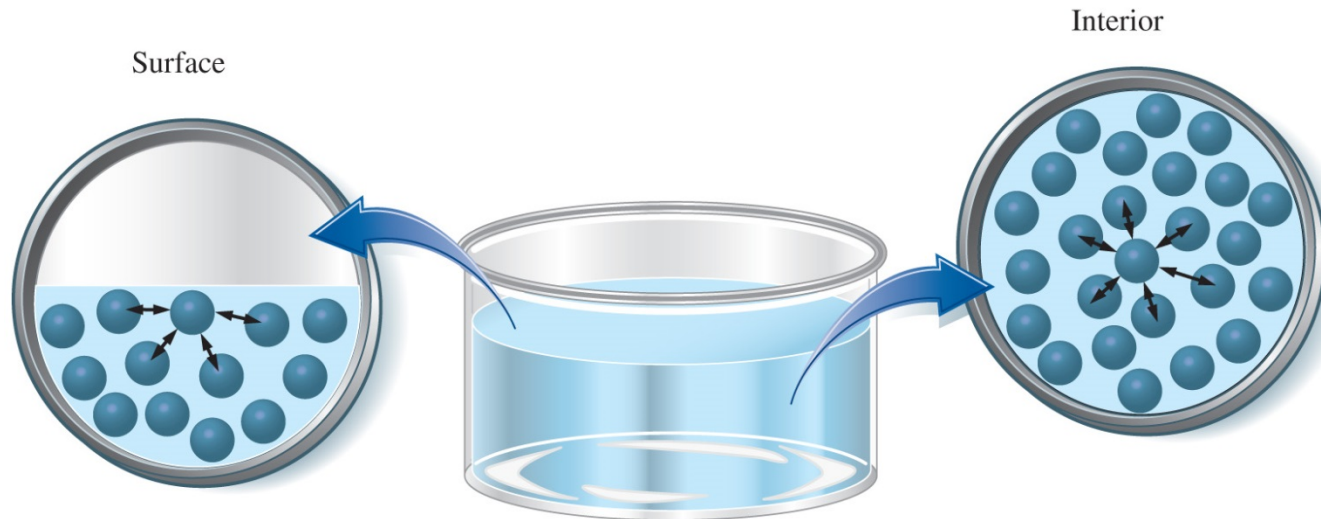
L'aigua s'escampa en una fina pel·lícula sobre una **superfície de vidre net** (a l'esquerra). Si el vidre està **recobert d'oli o greix**, les forces d'adhesió entre l'aigua i l'oli no són prou fortes per a escampar l'aigua i **les gotes es queden en la superfície (dreta)**.



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Forces intermoleculars en líquids. Tensió superficial

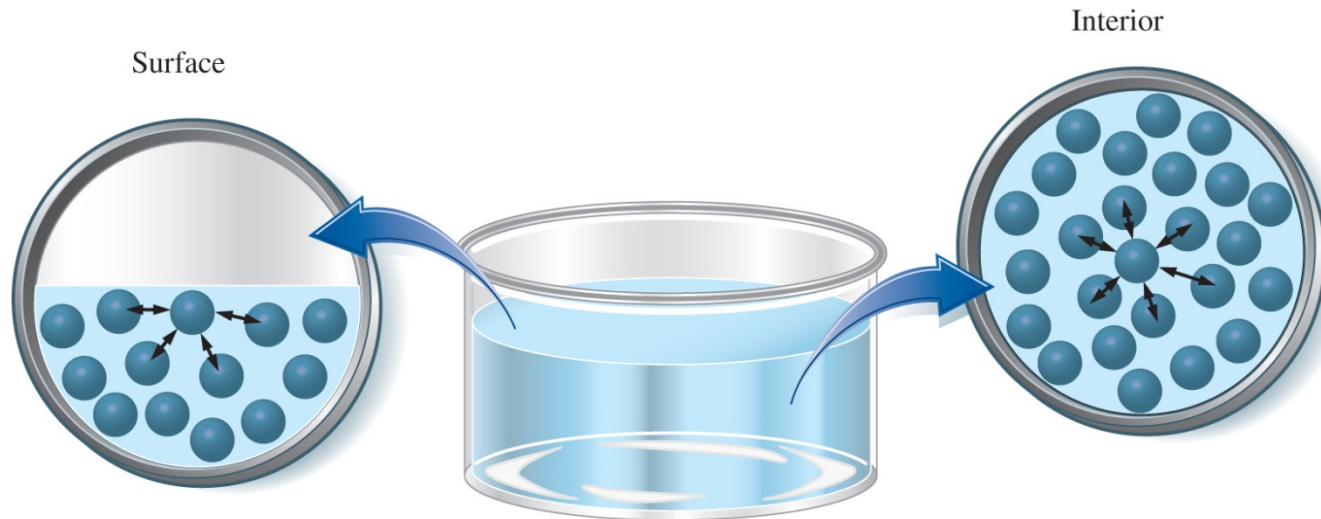
Les molècules que hi ha **en la superfície** només es veuen atretes per altres molècules de la superfície i per molècules davall de la superfície. Les **molècules a l'interior** experimenten forces de molècules veïnes en **totes les direccions**.



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Forces intermoleculars en líquids. Tensió superficial

Temperatura?



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Substàncies moleculars. Tensió superficial



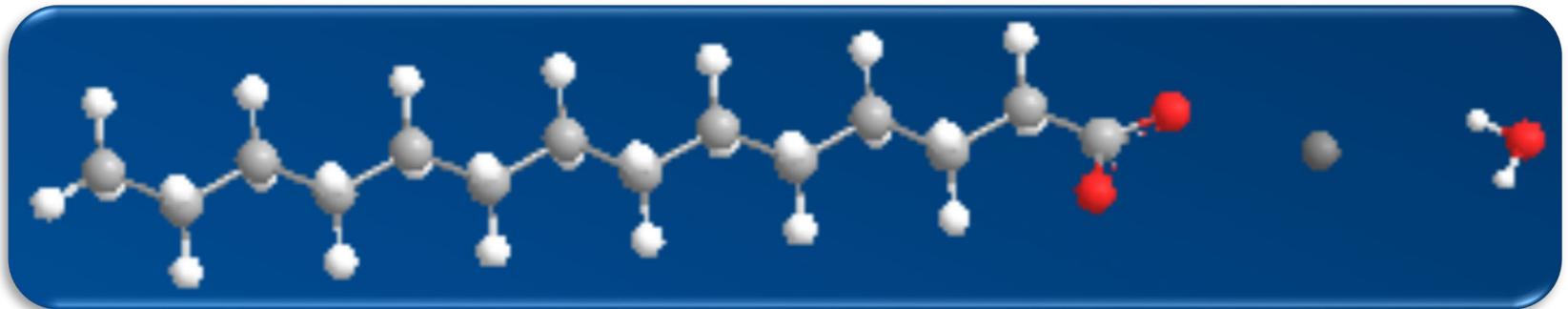
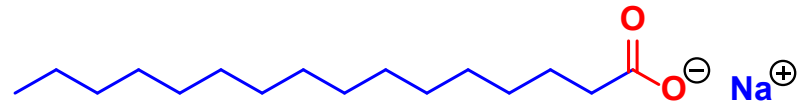
**Quantitat d'energia necessària per a augmentar la superfície d'un líquid per unitat d'àrea (e.g.  $1 \text{ cm}^2$ ).**

**Coeficients de tensió superficial respecte a l'aire líquid.**

Aigua	Aigua sabonosa	Alcohol etílic	Mercuri
7,3	3,0	2,2	47

# Forces intermoleculars en líquids. Tensió superficial

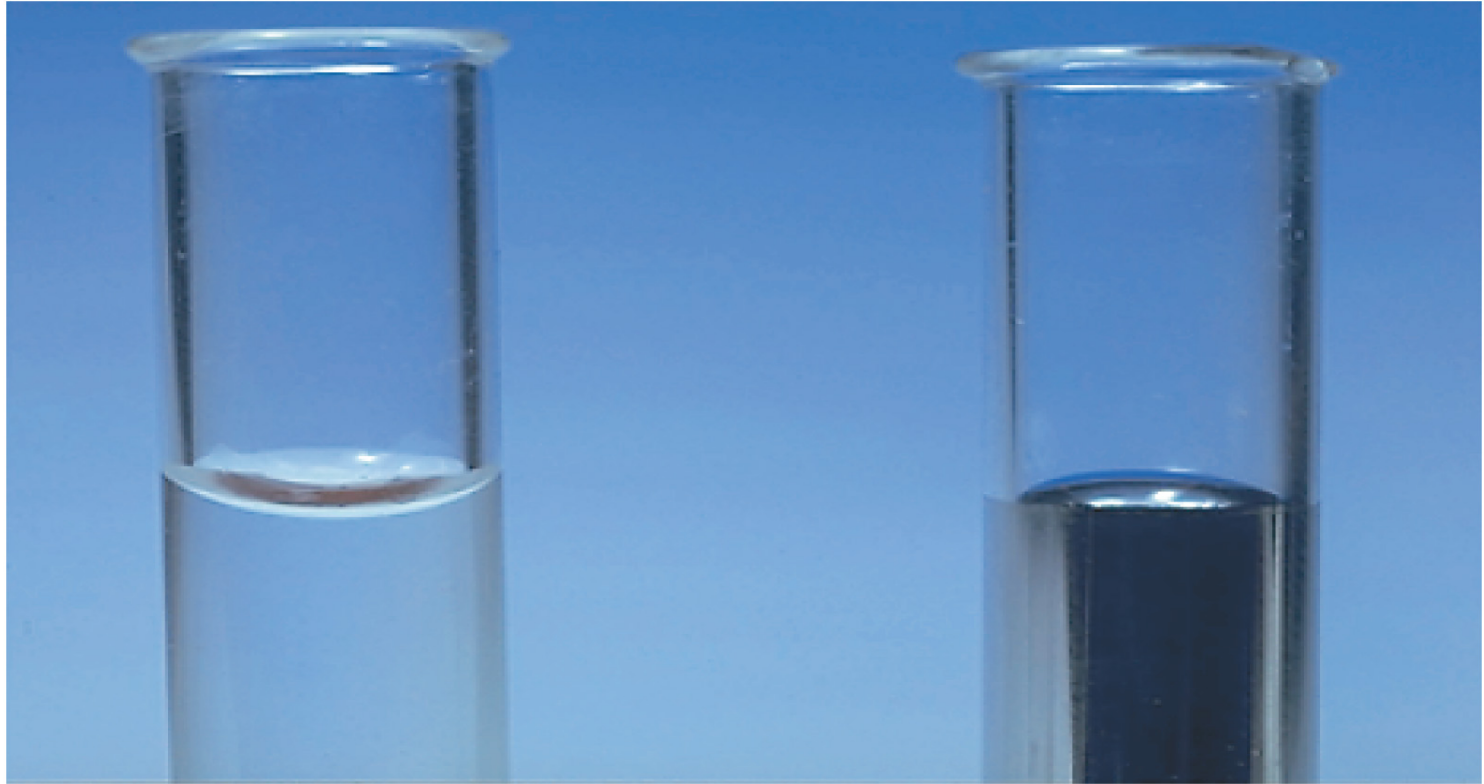
Quin funció fa, entre altres, un tensioactiu?



**Disminueix la tensió superficial** (per això s'hi formen  
bromeres!)

# Capilaritat

# Forces intermoleculars en líquids. **Capilaritat**



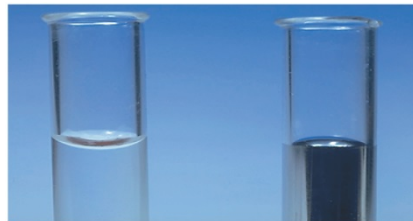
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Forces intermoleculars en líquids. **Capilaritat**

**Equilibri** entre les forces intermoleculars de la substància i les forces intermoleculars amb el material que la conté.

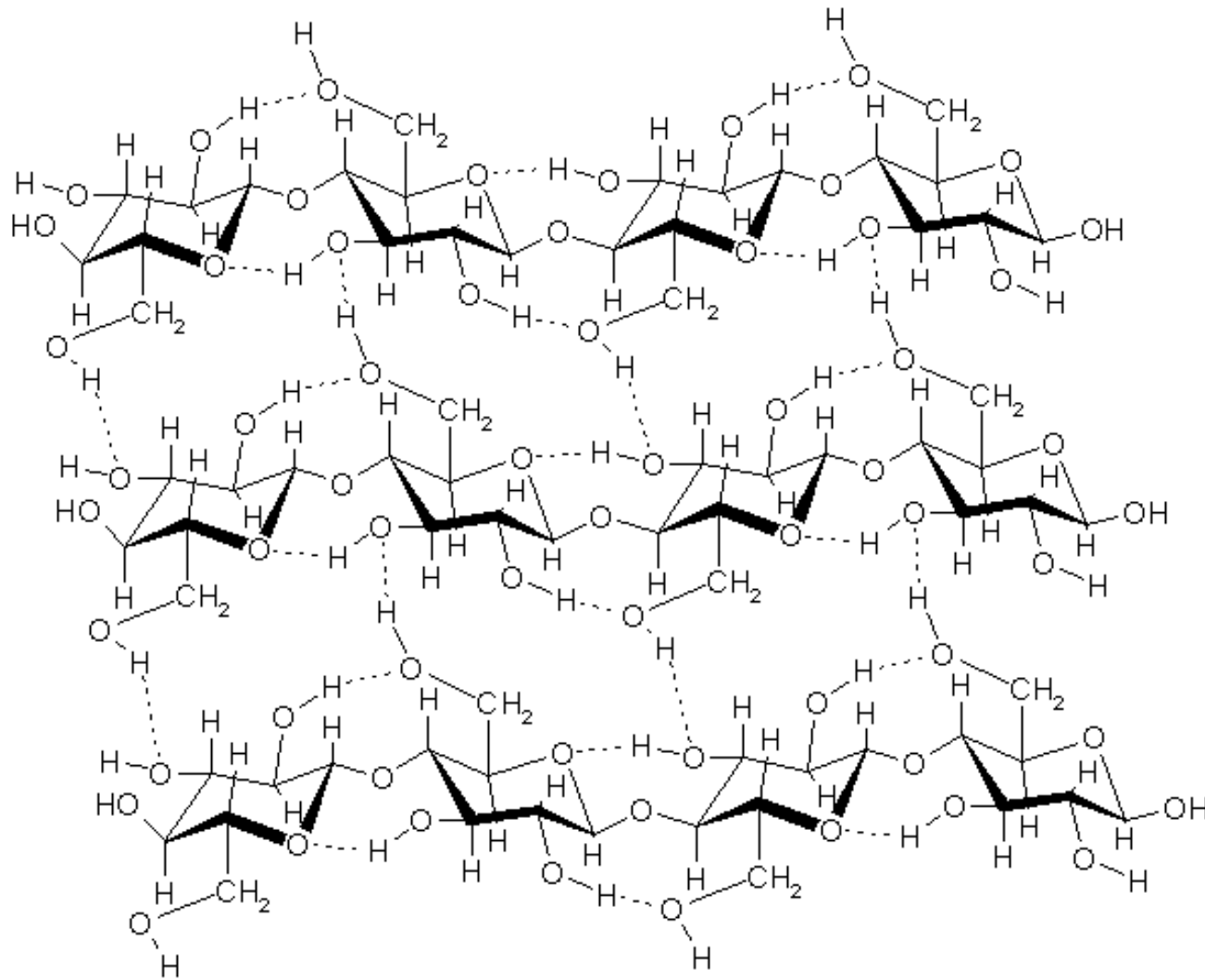
Forces de cohesió

Forces d'adhesió





# Forces intermoleculars en líquids. Capilaritat

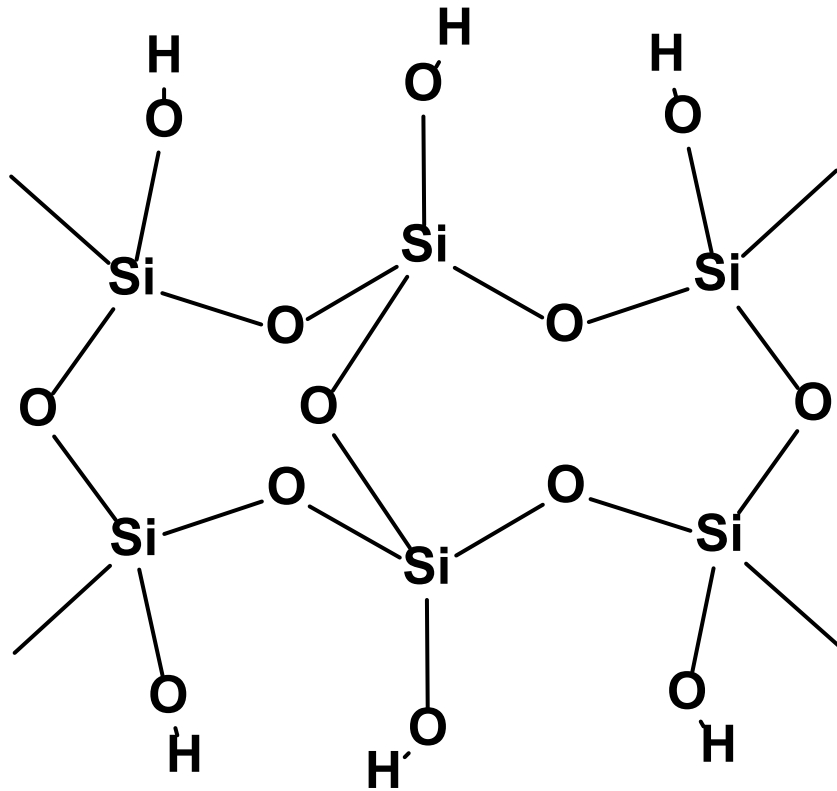


**La capilaritat**

és la força  
responsable de  
l'absorció i del

**transport  
d'aigua** als  
organismes  
**vegetals.**

# Forces intermoleculars en líquids. **Capilaritat**



**La capilaritat** és la força responsable de l'absorció i el **transport de molècules orgàniques en la cromatografia de capa fina.**

# Viscositat

# Forces intermoleculars en líquids. **Viscositat**



**Resistència d'un líquid a fluir.**

# Forces intermoleculars en líquids. **Viscositat**



**Com més fortes  
siguen les forces  
d'atracció  
intermoleculars,  
més gran és la  
viscositat.**

Quan un líquid flueix, una **part del líquid es mou** respecte a la resta.

**Les forces de cohesió** dins del líquid creen una **fricció** interna, que en redueix la velocitat flux.

# Forces intermoleculars en líquids. Viscositat

Com li afectarà la temperatura?

TABLA 11.3 Viscosidad de algunos líquidos comunes a 20°C

Líquido	Viscosidad (N s/m <sup>2</sup> )*
Acetona (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O)	$3.16 \times 10^{-4}$
Benceno (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	$6.24 \times 10^{-4}$
Sangre	$4 \times 10^{-3}$
Tetracloruro de carbono (CCl <sub>4</sub> )	$9.69 \times 10^{-4}$
Éter dietílico (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )	$2.33 \times 10^{-4}$
Etanol (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH)	$1.20 \times 10^{-3}$
Glicerol (C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub> )	1.49
Mercurio (Hg)	$1.55 \times 10^{-3}$
Agua (H <sub>2</sub> O)	$1.01 \times 10^{-3}$

\* Las unidades del SI de la viscosidad son newton-segundo por metro cuadrado.

# TEMA 6. SUBSTÀNCIES MOLECULARS

## Diagrames de fases



Pressió de vapor. Punt triple. Punt crític



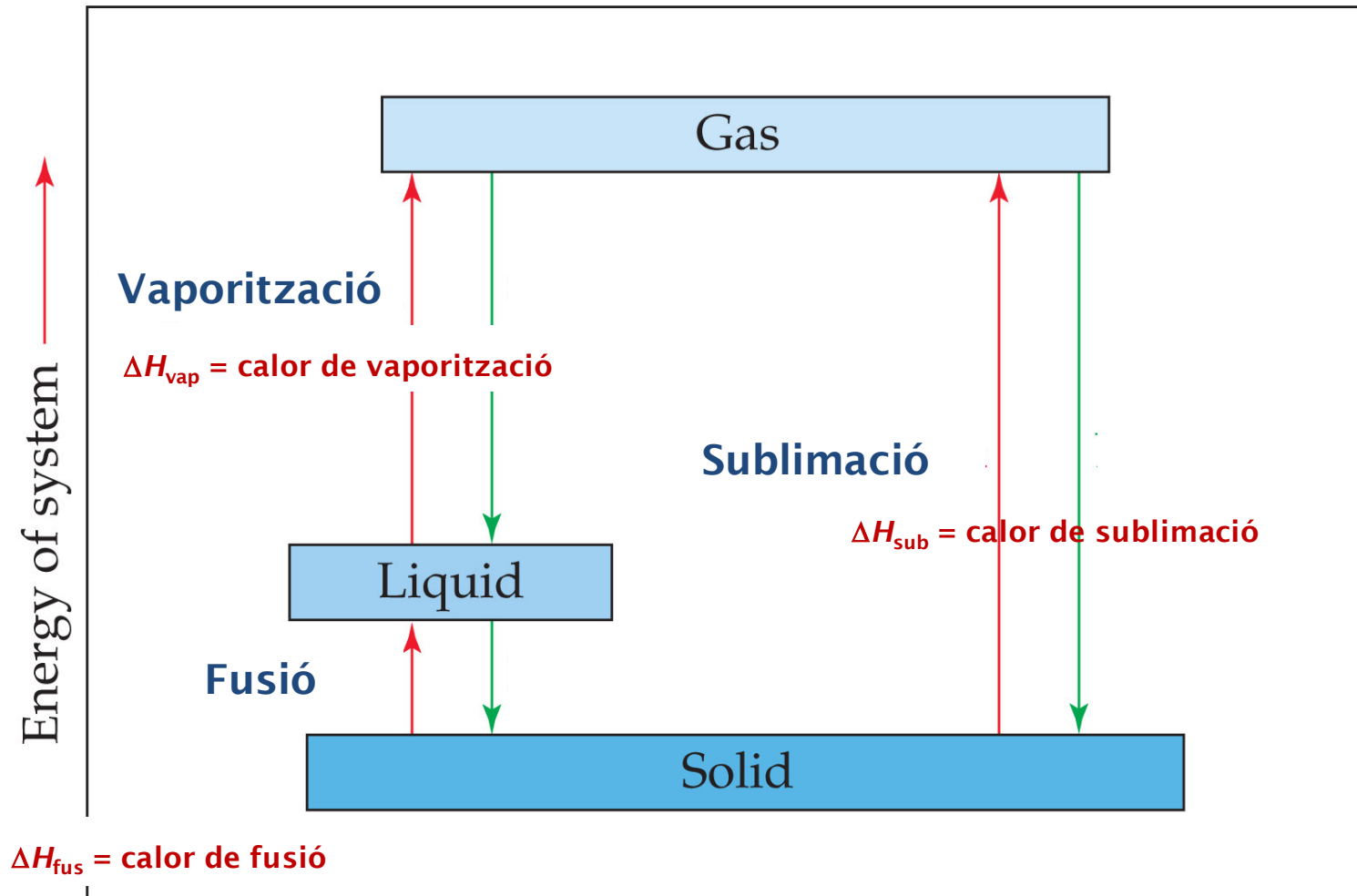
# Canvis de fase

Corbes de calfament

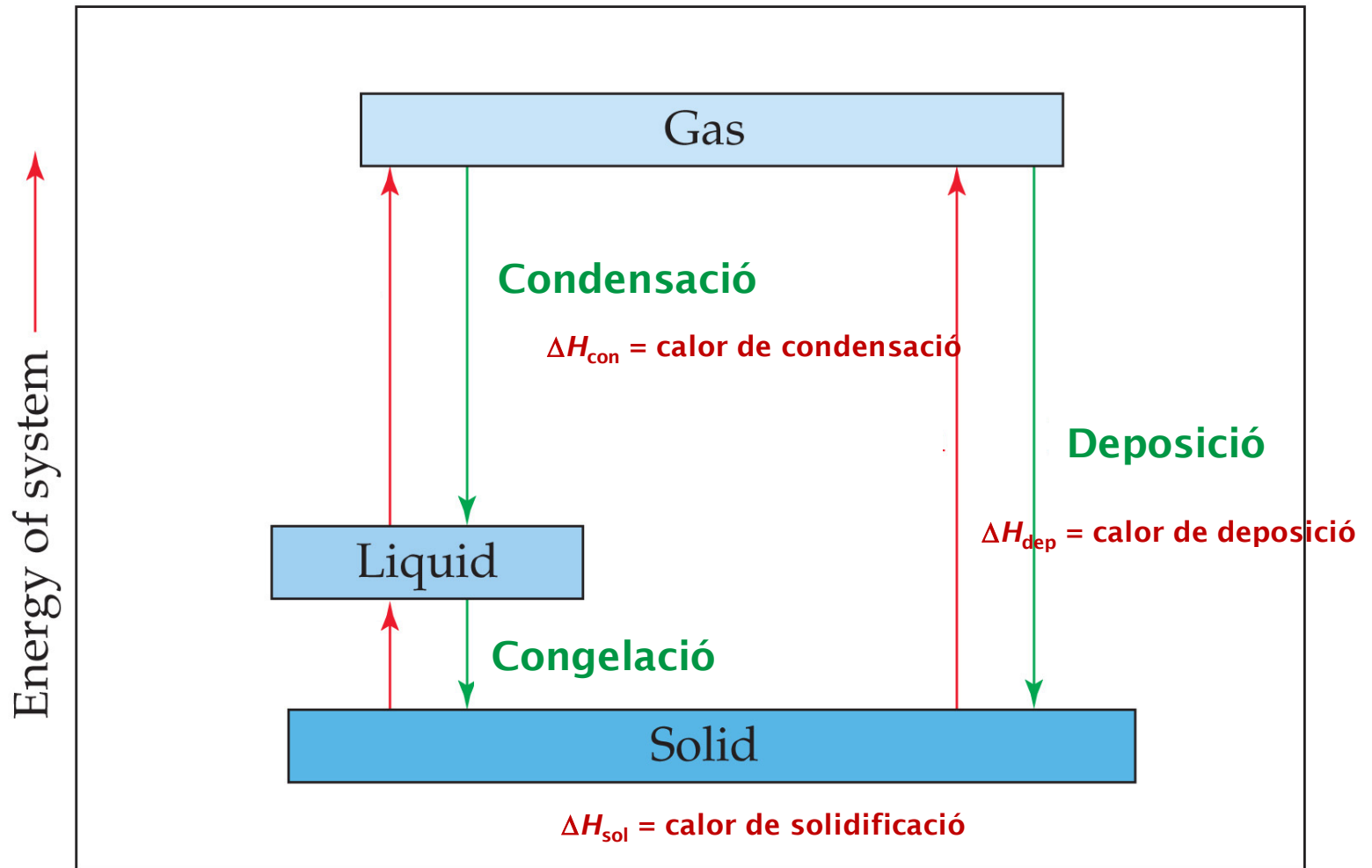
Entalpia de vaporització



# Forces intermoleculars. Canvis de fase

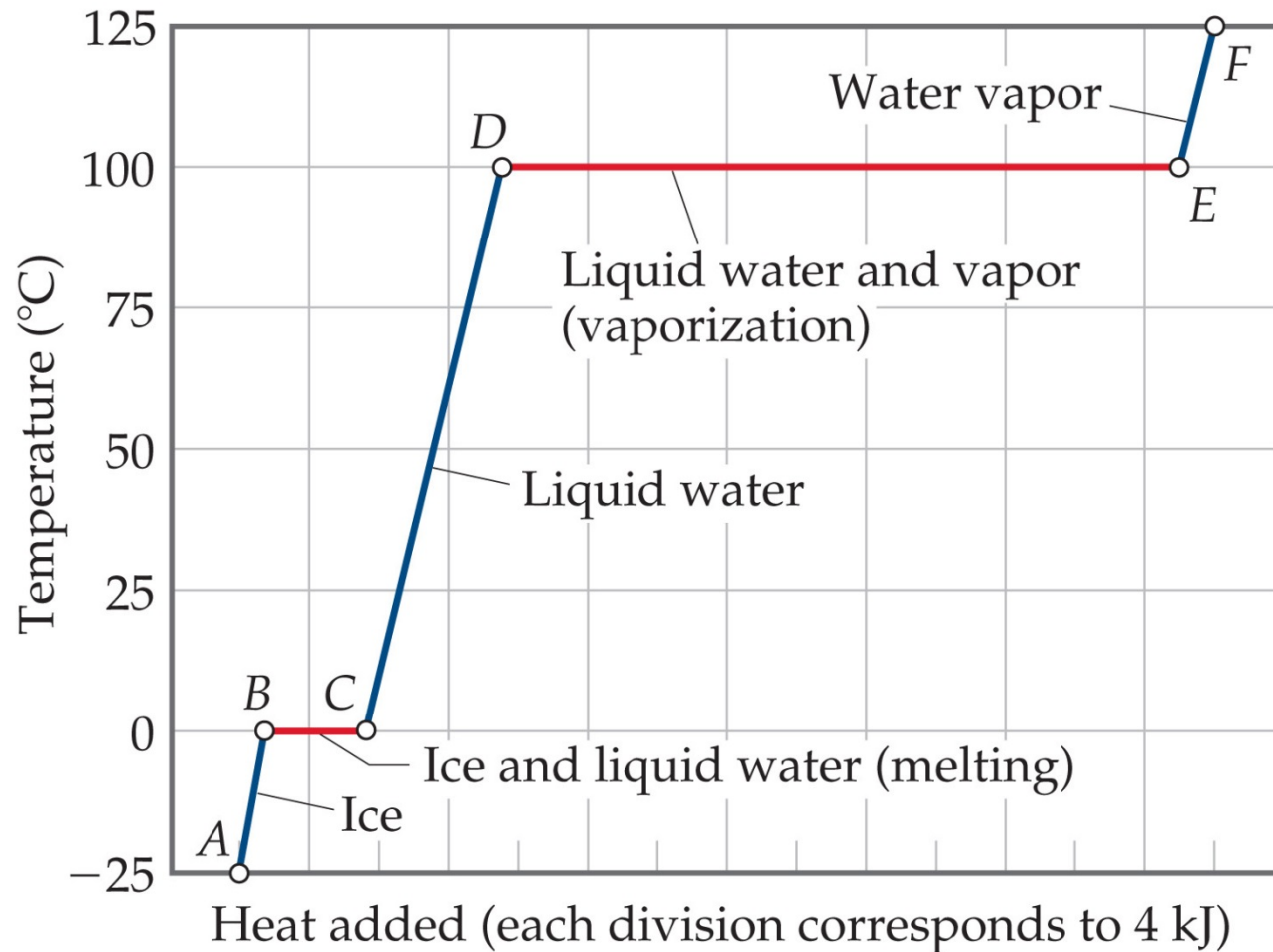


# Forces intermoleculars. Canvis de fase



# Forces intermoleculars. Corbes de calfament

Canvis que es donen quan **1 mol d'aigua** es calfa de  $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $125\text{ }^{\circ}\text{C}$ , a una pressió constant d'**1 atm**.



$$\Delta H_{\text{vap}} = 40.7 \text{ KJ/mol (DE)}$$

$$\Delta H_{\text{fus}} = 6.01 \text{ KJ/mol (BC)}$$

# Forces intermoleculars. Entalpia de vaporització

$$\Delta H_{\text{vap}} = H_{\text{vapor}} - H_{\text{líquid}} = - \Delta H_{\text{condensació}}$$

## Dependència de les forces intermoleculars.

TABLE 12.3 Some Enthalpies of Vaporization at 298 K<sup>a</sup>

Liquid	$\Delta H_{\text{vap}}$ , kJ mol <sup>-1</sup>
Diethyl ether, (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> O	29.1
Methyl alcohol, CH <sub>3</sub> OH	38.0
Ethyl alcohol, CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	42.6
Water, H <sub>2</sub> O	44.0

<sup>a</sup> $\Delta H_{\text{vap}}$  values are somewhat temperature-dependent (see Exercise 93).

# Forces intermoleculars. Entalpia de vaporització

$$\Delta H_{\text{vap}} = H_{\text{vapor}} - H_{\text{líquid}} = - \Delta H_{\text{condensació}}$$

## FACTORS que faciliten la evaporació

---

**Augment de la temperatura:** més molècules tenen energia cinètica suficient per a superar les forces d'atracció intermoleculars en el líquid.

---

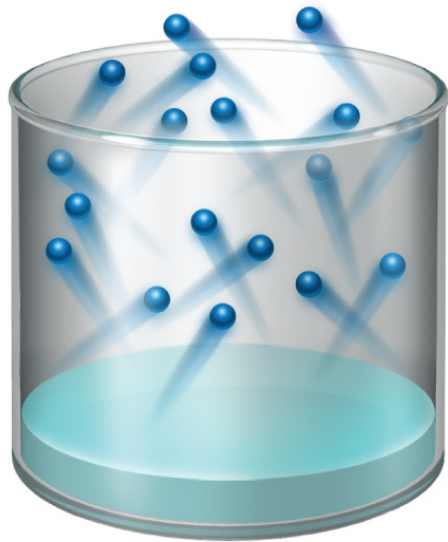
**Augment de la superfície del líquid:** una proporció més gran de les molècules de líquid es troben a la superfície.

---

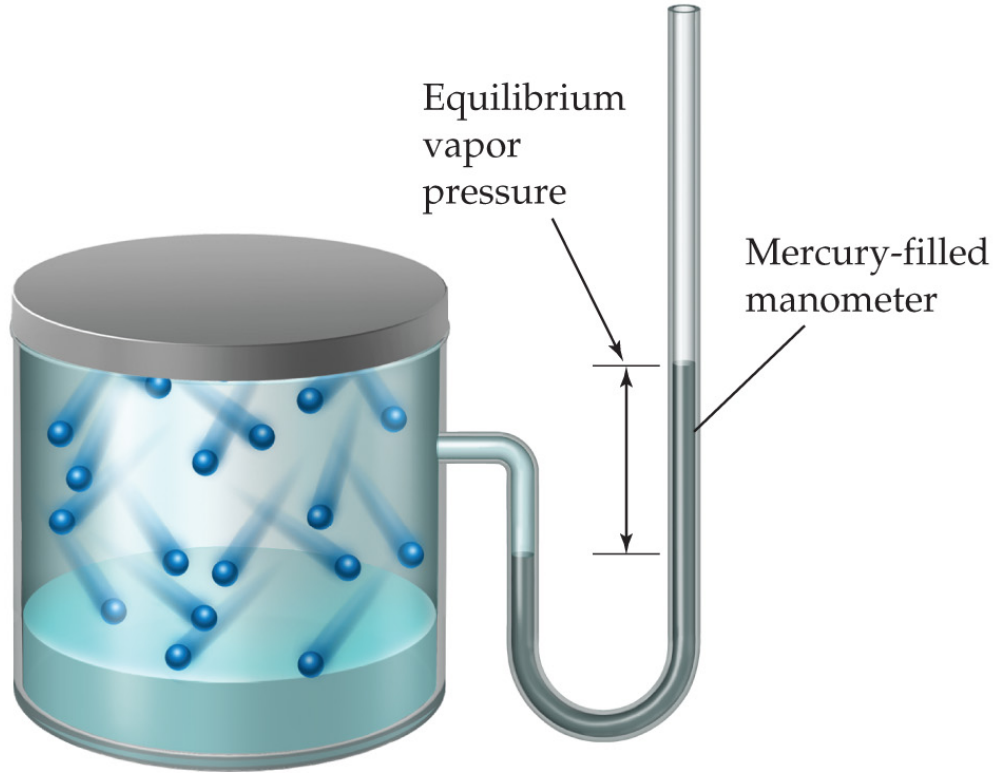
**Disminució de la força de les forces intermoleculars:** l'energia cinètica necessària per a superar les forces d'atracció intermoleculars és menor, i més molècules tenen prou energia per a escapar.

---

# Forces intermoleculars. Pressió de vapor



A liquid sitting for a length of time in an open container evaporates, but ...

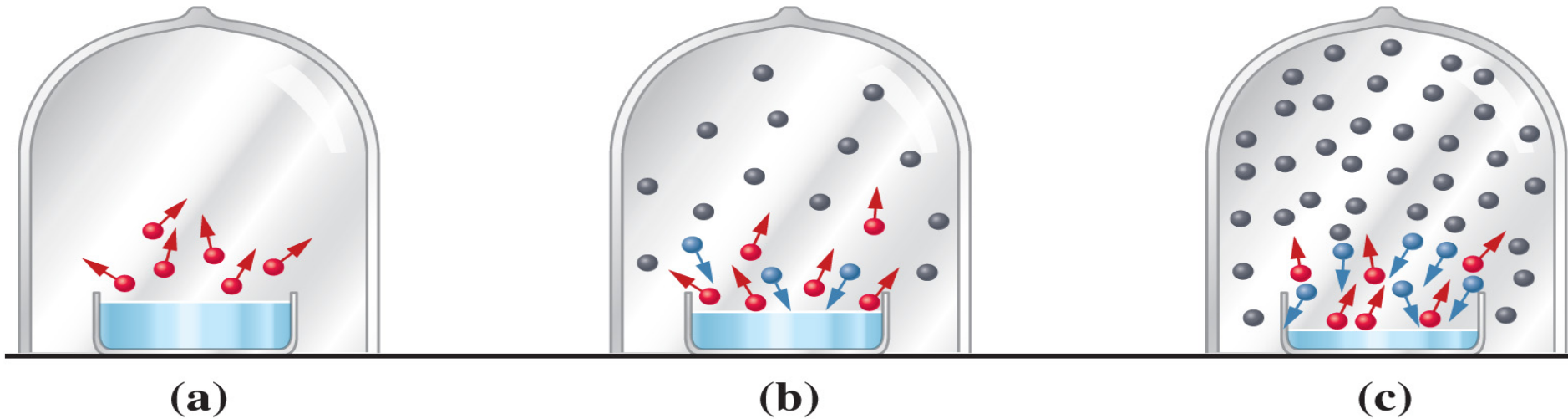


... a liquid sitting in a closed container causes a rise in pressure.

# Forces intermoleculars. Pressió de vapor

- Molecules in vapor state
- Molecules undergoing vaporization
- ← Molecules undergoing condensation

Pressió de vapor  $f(T)$

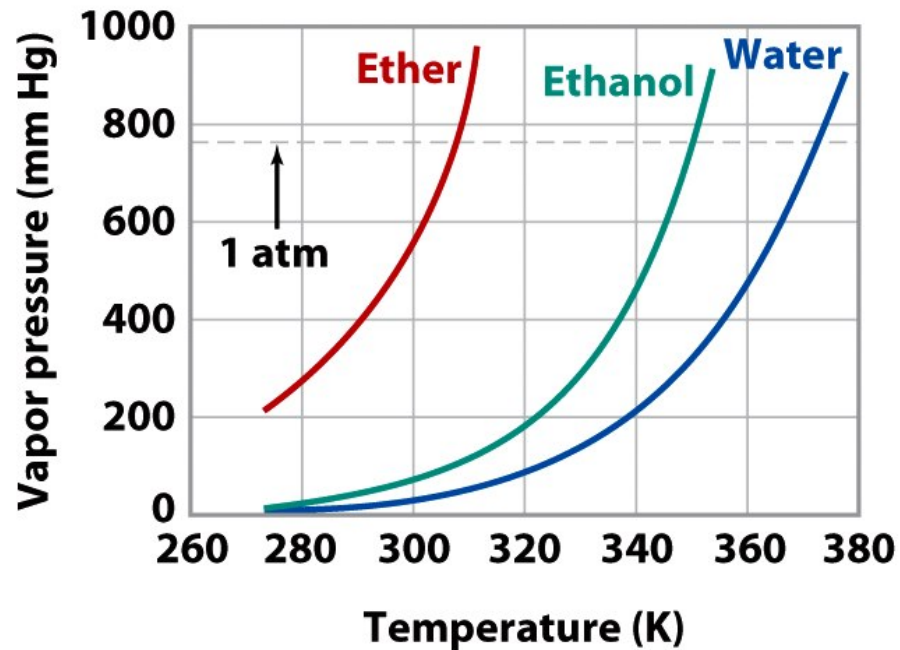


Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

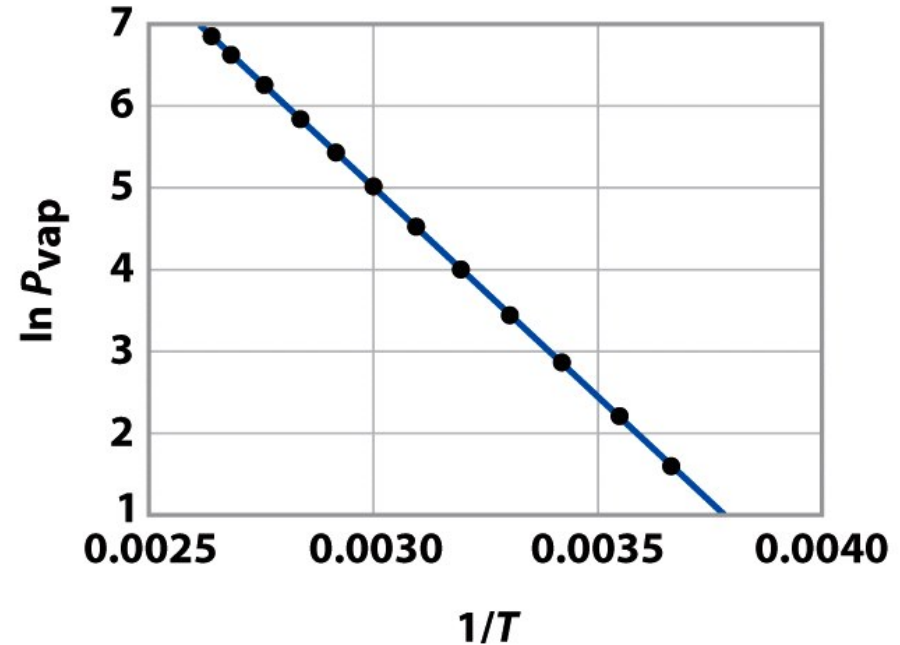
**En l'equilibri**, les molècules entren i ixen del líquid a la mateixa velocitat. Això produeix una **pressió de vapor estable** que no canvia **mentre la T és constant**.

# Forces intermoleculars. Pressió de vapor

## Dependència amb la temperatura



The vapor pressures of ether, ethanol, and water show a nonlinear rise when plotted as a function of temperature.



A plot of  $\ln P_{\text{vap}}$  versus  $1/T$  (Kelvin) for water, prepared from the data in Table 10.8, shows a linear relationship.



# Forces intermoleculars. Pressió de vapor

Dependència amb la temperatura

$$\ln \left( \frac{P_2}{P_1} \right) = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

**Equació de Clausius-Clapeyron**

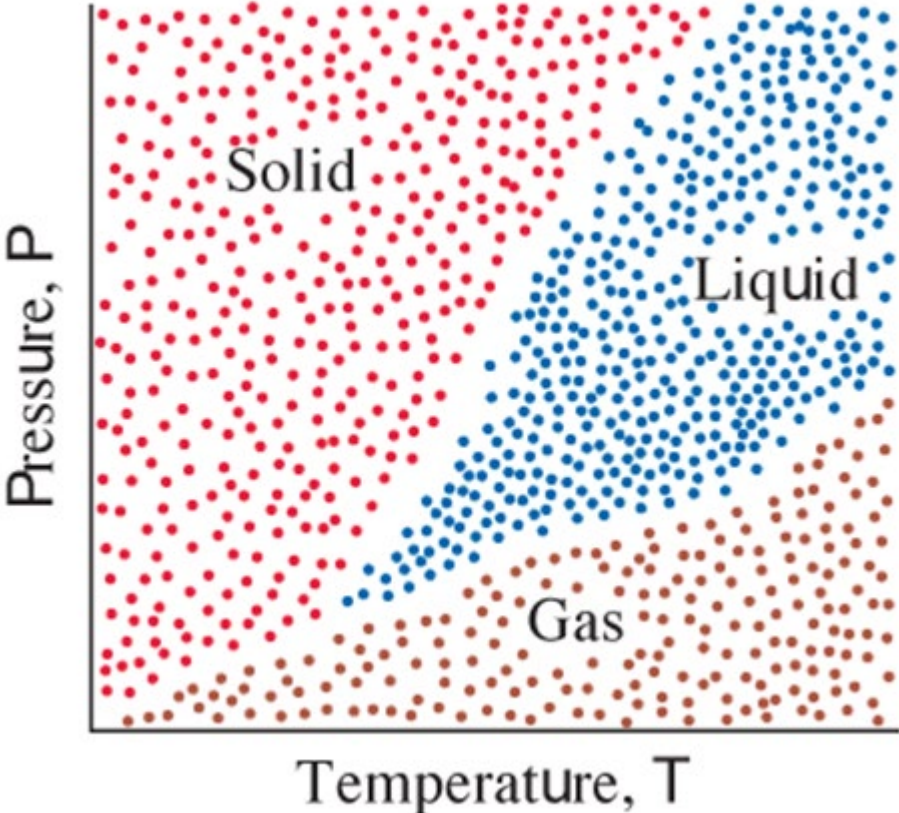
# Forces intermoleculars. Pressió de vapor

## Punt d'ebullició

La T en què la pressió de vapor és 760 torr (1 atm) és el punt d'ebullició normal d'un líquid.

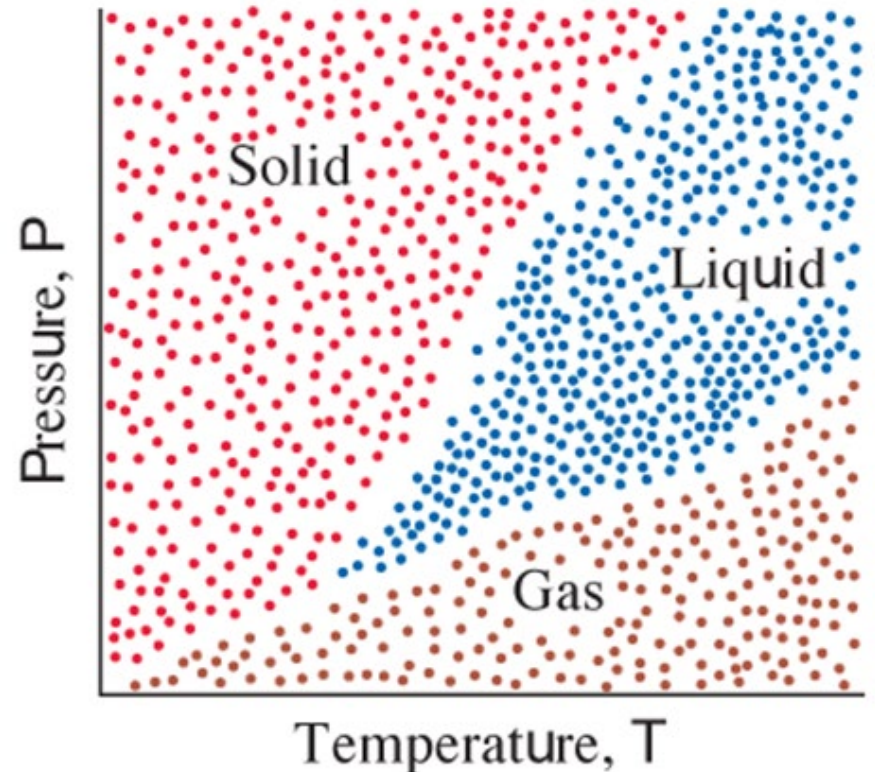
Ex. **aigua** = 100 °C; **èter** = 34,6 °C; **etanol** = 78,3 °C.

# Diagrammes de fase



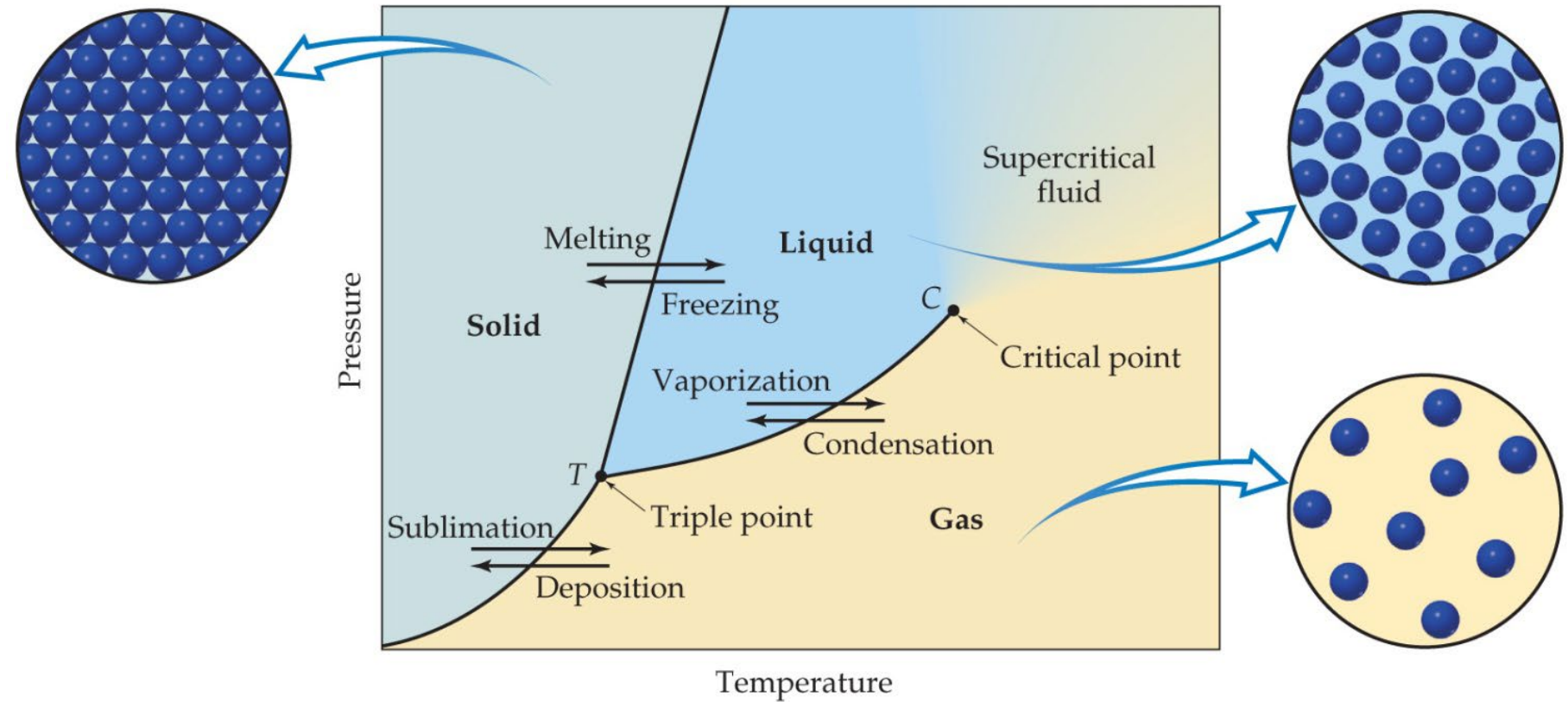
# Forces intermoleculars. Diagrames de fases

Són una **forma gràfica** de resumir les **condicions de temperatura i pressió** en què existixen els diferents **estats de la matèria**, bé com a fases úniques o com a **dues fases en equilibri**.



# Forces intermoleculars. Diagrames de fases

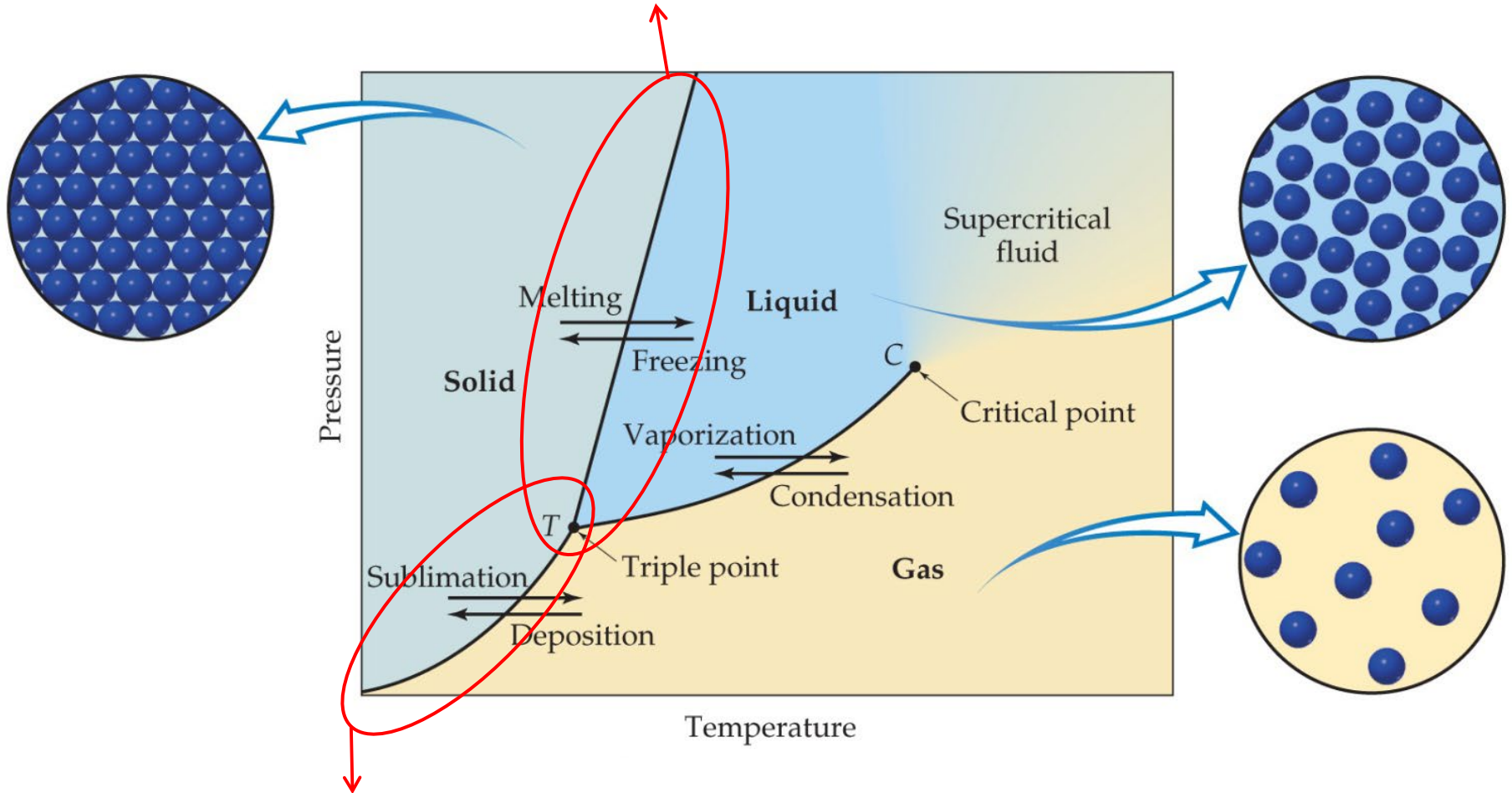
Ens permeten predir la fase d'una substància que és estable en qualsevol temperatura i pressió.



# Forces intermoleculars. Diagrames de fases

Canvi en el punt de fusió del sòlid quan la pressió augmenta.

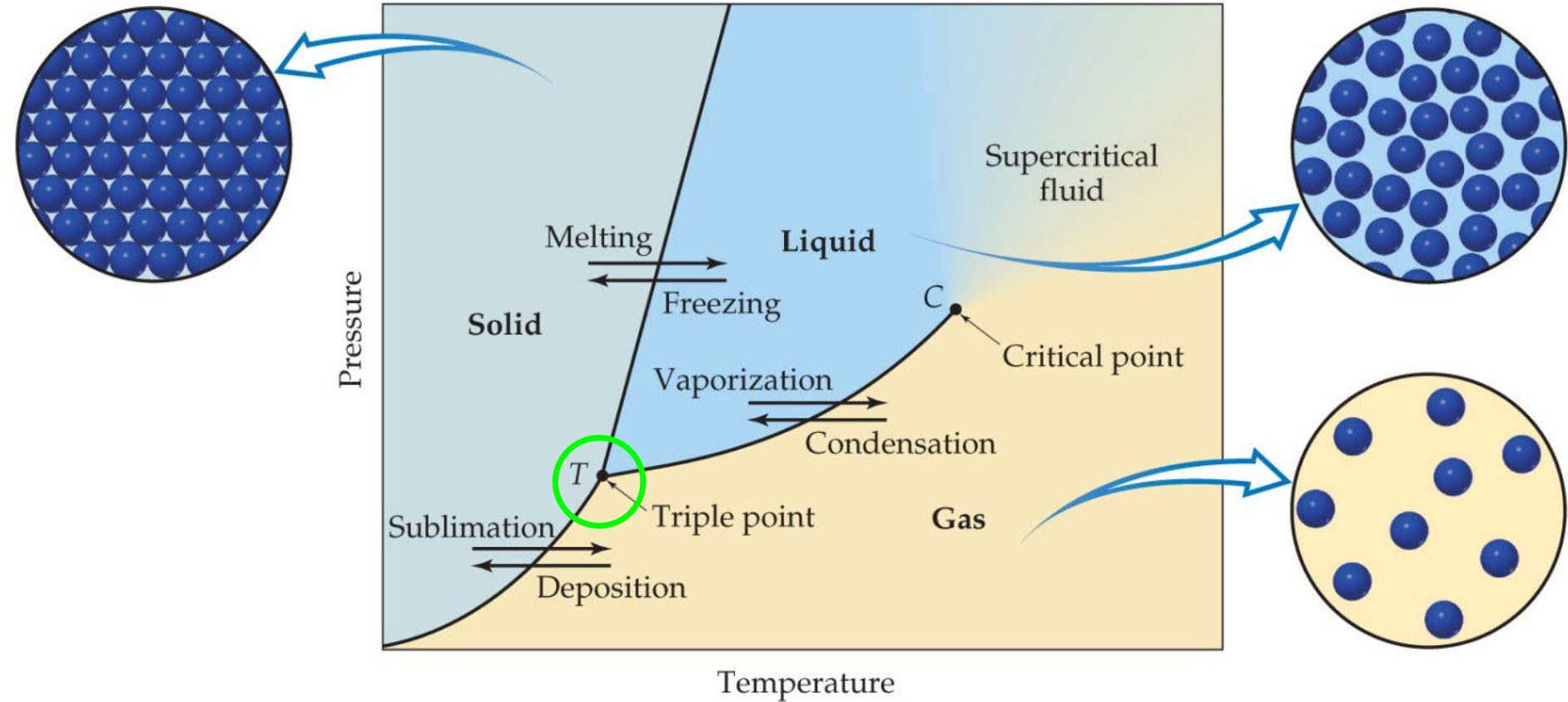
(CORBA DE FUSIÓ)



(CORBA DE SUBLIMACIÓ)

Canvi en la pressió de vapor del sòlid quan sublima a diferents temperatures.

# Forces intermoleculars. Diagrames de fases



## PUNT TRIPLE

En aquests valors de temperatura i pressió, les tres fases es troben en equilibri dinàmic.

# Forces intermoleculars. Diagrames de fases



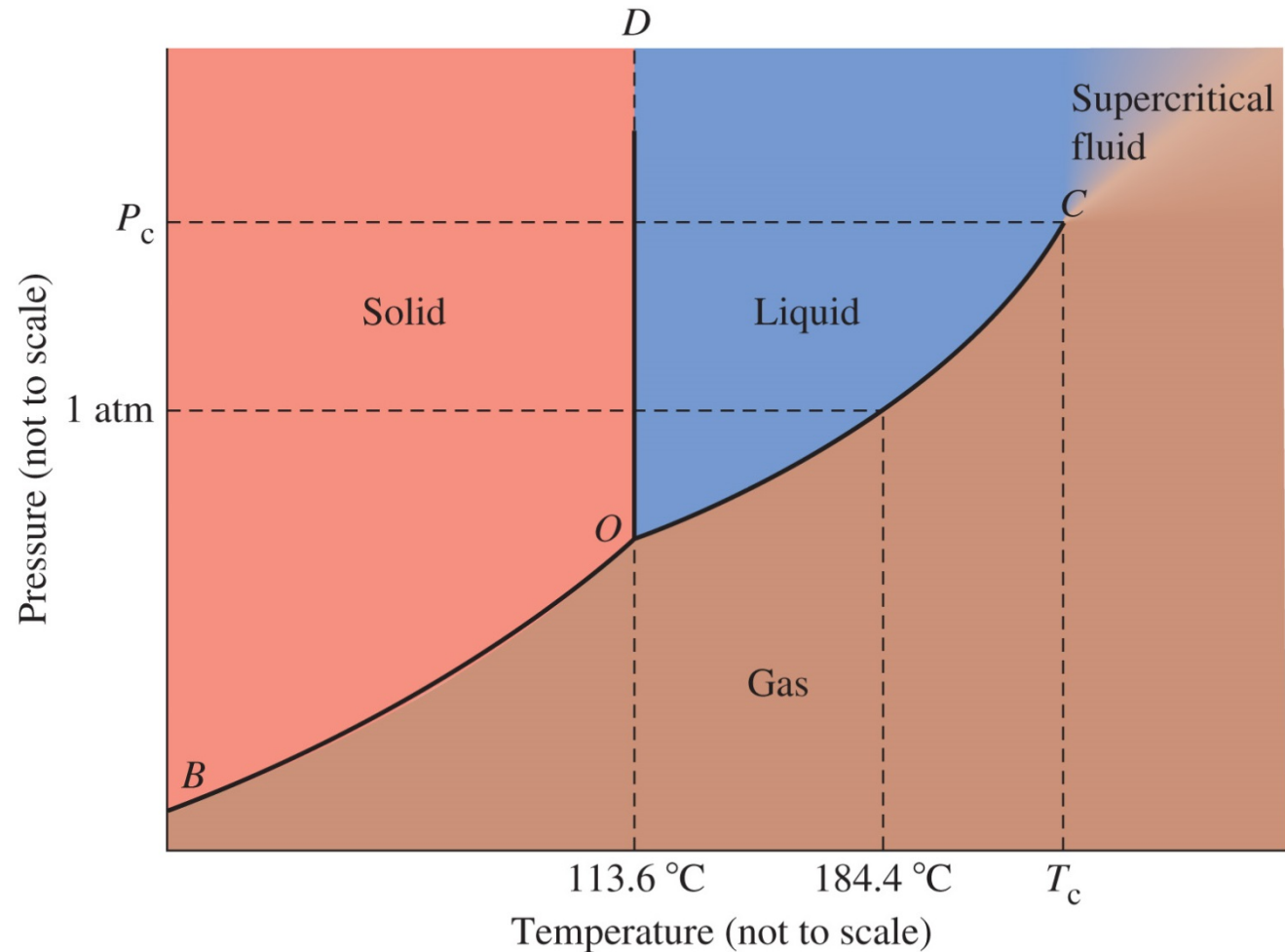
## Línia O-D. Corba de fusió.

Representa l'efecte de la pressió sobre el punt de fusió del iode.

### O. PUNT TRIPLE

113,6 °C i 91,6 atm.

Les tres fases es troben en equilibri dinàmic.





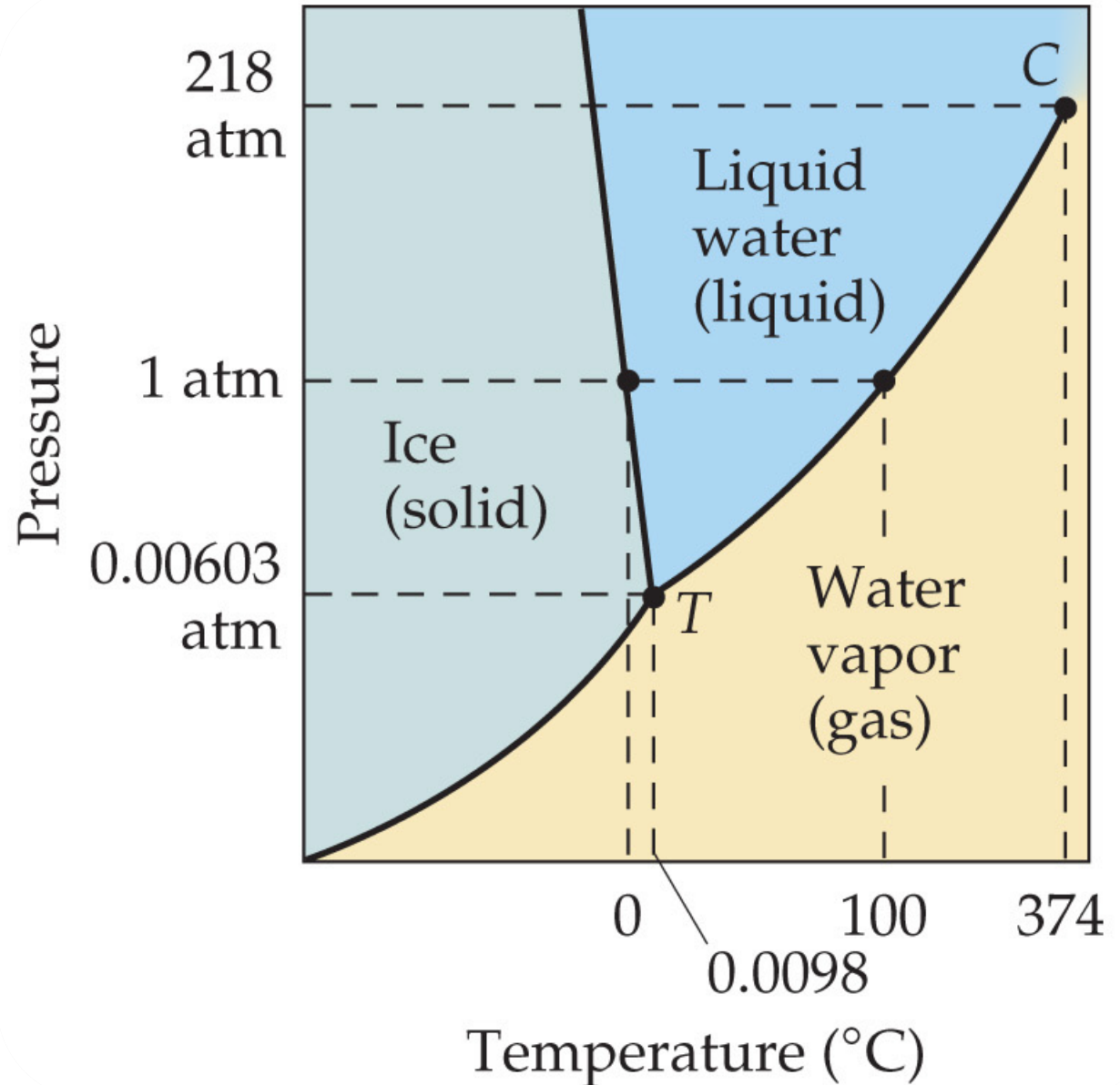
# Forces intermoleculars. Diagrames de fases



**Punt triple:** 0,0098 °C i  
0,00603 atm.

**Punt d'ebullició normal:** 100  
°C

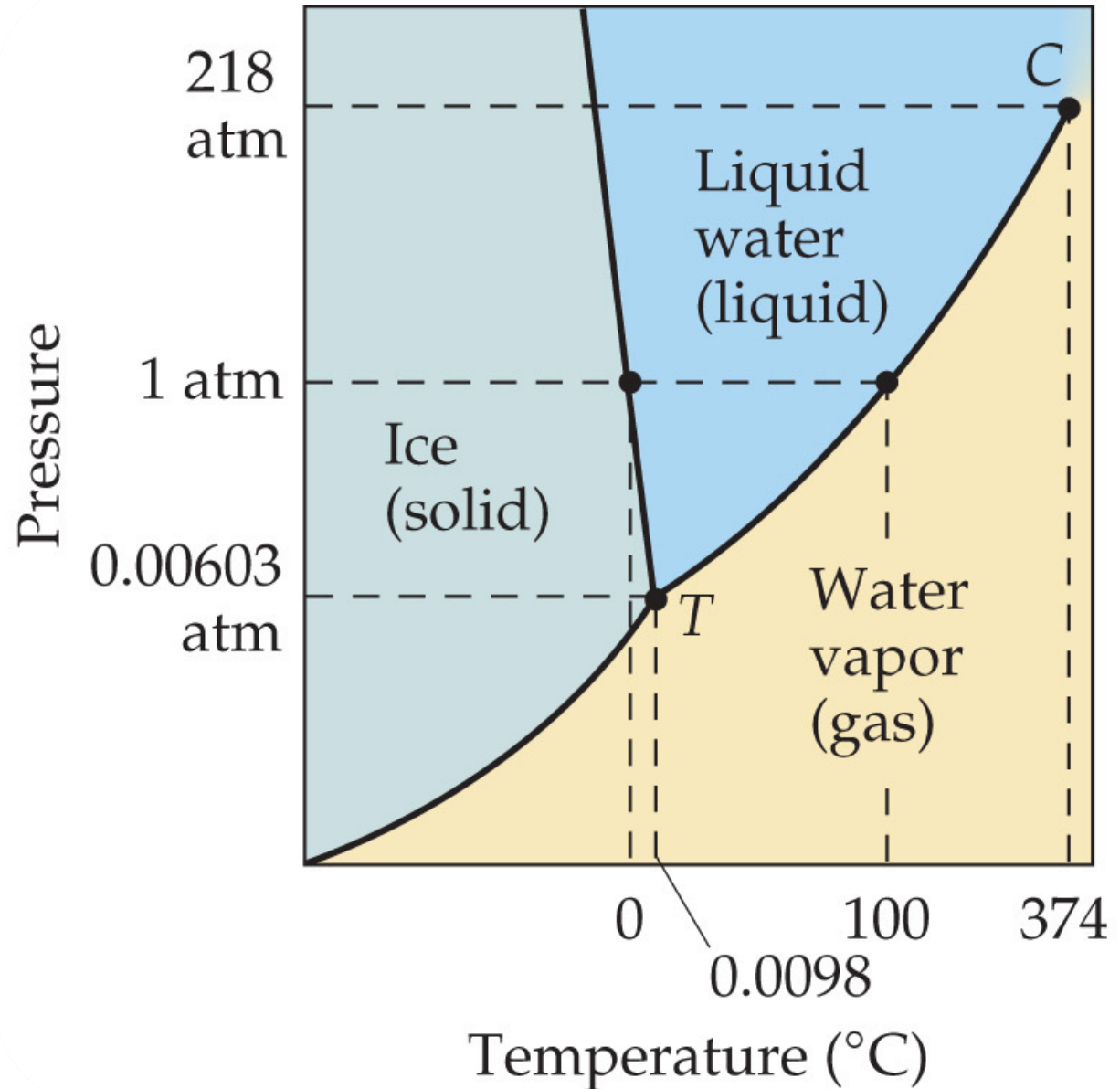
**Punt de fusió normal:** 0 °C.



# Forces intermoleculars. Diagrames de fases



Els elevats valors de **T crítica (374 °C)** i **P crítica (218 atm)** es deuen a **interaccions de Van der Waals fortes** entre les molècules d'aigua.

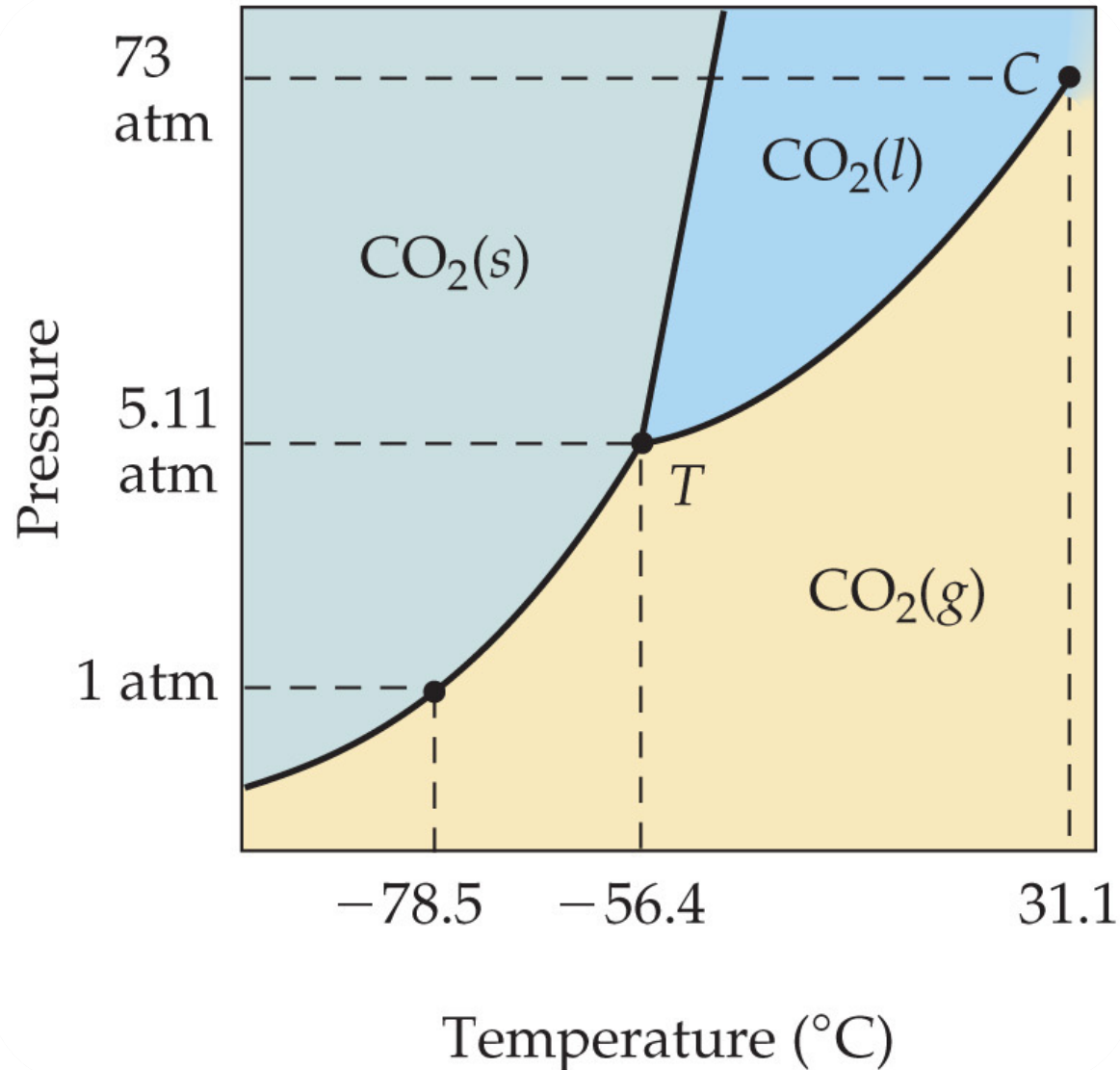


# Forces intermoleculars. Diagrames de fases



- **El punt triple** correspon a una T de  $-56,4^{\circ}\text{C}$  i  $5,11\text{ atm}$ . Perquè el CO<sub>2</sub> existisca en forma líquida, la P ha de superar les  $5,11\text{ atm}$ . Com a conseqüència el sòlid no fon sinó que sublima quan es calfa a  $1\text{ atm}$ .
- **El punt de sublimació normal** del CO<sub>2</sub> és de  $-78,5^{\circ}\text{C}$ .

**El punt crític** correspon a  $31,1^{\circ}\text{C}$  i  $73\text{ atm}$ .



# Forces intermoleculars. Punt crític



Aproximadamente  $10\text{ }^{\circ}\text{C}$   
por debajo de  $T_c$



Aproximadamente  $1\text{ }^{\circ}\text{C}$   
por debajo de  $T_c$



Temperatura  
crítica  $T_c$

# Forces intermoleculares. Punt crític

## Temperatura i pressió crítiques

Tota substància té una **TEMPERATURA CRÍTICA (TC)**, per damunt de la qual la fase gasosa no es pot liquar, independentment de la magnitud de la pressió que s'hi aplique. Aquesta és també la temperatura més alta en què una substància pot existir en forma líquida.

Dit d'una altra manera, **per damunt de la temperatura crítica** no hi ha una distinció fonamental entre un líquid i un gas, simplement es té **un fluid**.

La **PRESSIÓ CRÍTICA** ( $P_c$ ) és la pressió mínima que cal aplicar per a dur a terme la líquefacció a la temperatura crítica.

# Forces intermoleculars. Punt crític



Aproximadamente 10 °C  
por debajo de  $T_c$



Aproximadamente. 1 °C  
por debajo de  $T_c$



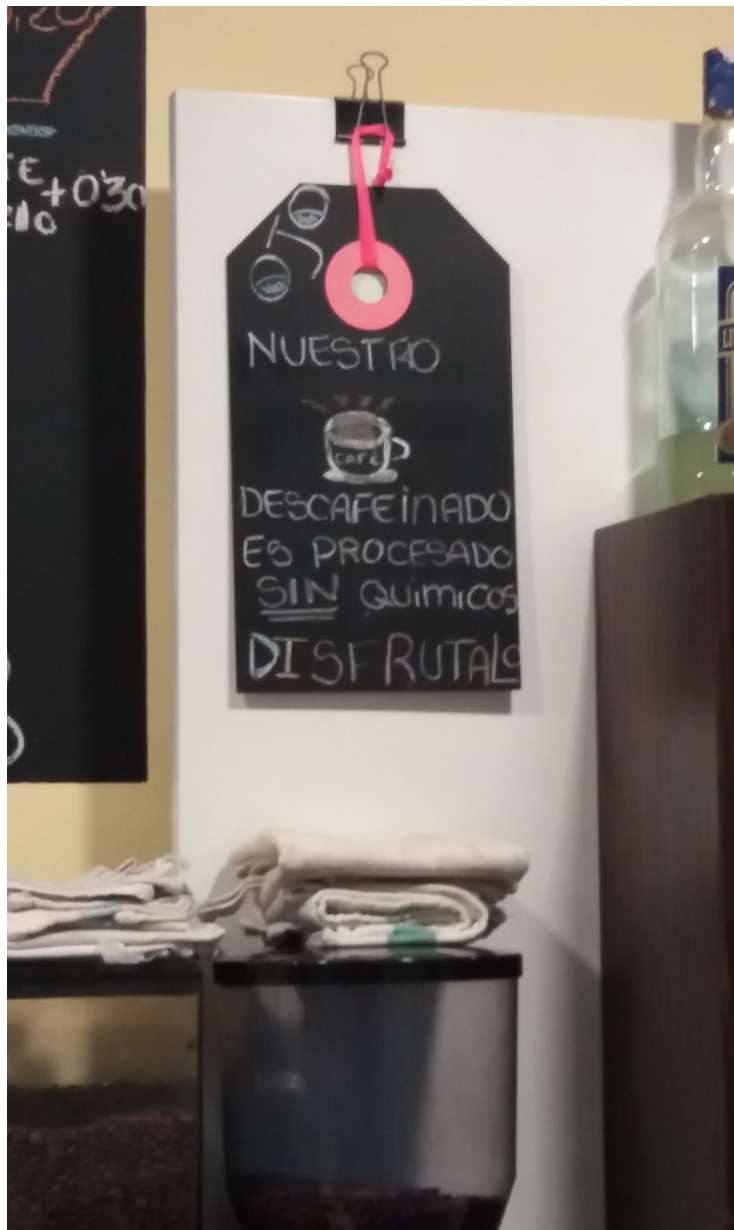
Temperatura  
crítica  $T_c$

## Comportament híbrid

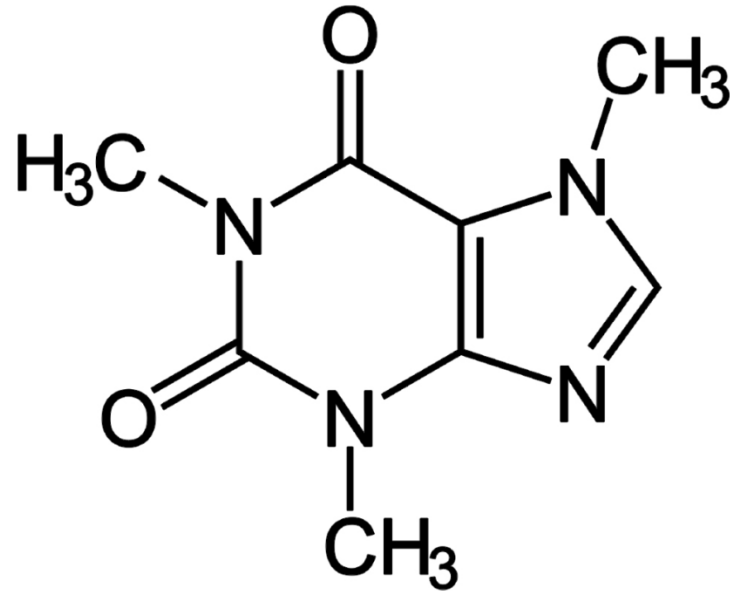
**Pot difondre com si fora un gas.**

**Pot dissoldre substàncies com si foren líquids.**

# Forces intermoleculares. Fluids supercríticos



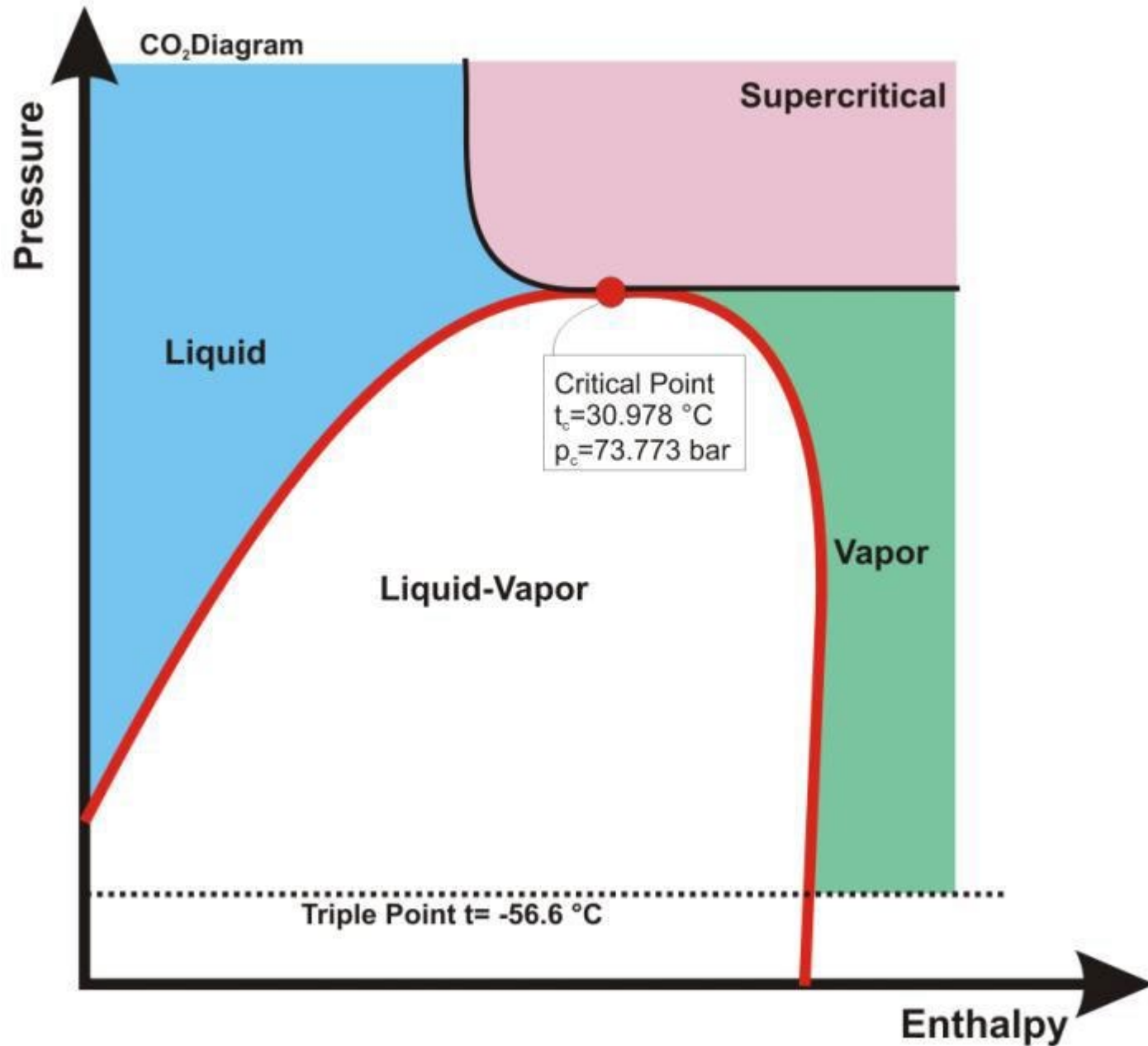
# Forces intermoleculaires. Fluids supercritiques



*Caffeine*  
(coffee)



# Forces intermoleculares. Fluids supercríticos



# Forces intermoleculares. **Fluïts supercrítics**

## Us agrada el cafè descafeïnat

És difícil saber com anomenar l'estat de la matèria que es dona en temperatures i pressions per damunt del punt crític, perquè **els estats líquid i gasós es fan idèntics i indistingibles en aquest punt**. Per exemple, aquest estat de la matèria té la **densitat alta d'un líquid però la viscositat baixa d'un gas**. El terme que s'hi usa és «**fluid supercrític**» (FSC). Segons la figura de la transparència anterior, el tram de línia discontinua que comença en la zona de vapor per davall de la isoterma crítica ens porta a un gas de baixa densitat per damunt de la isoterma. Quan hi augmenta molt la pressió, **es produeix un fluid supercrític de densitat molt major**. Si, mentre la pressió supera la pressió crítica  $P_c$ , la temperatura es redueix per davall de la temperatura crítica, s'obté un líquid. Fins i tot, amb una reducció major de la pressió, la mostra roman en la fase líquida. Seguint el camí descrit, hem anat des d'un gas a un líquid sense observar interfase líquid-gas. L'única manera d'observar la interfase líquid-vapor, és creuar el límit de la fase per davall de la isoterma crítica. En aquest cas s'observaria la interfase líquid-vapor si es disminueix la pressió sobre el líquid fins a arribar a un punt de la corba de pressió de vapor.

Encara que normalment no pensem que els líquids i sòlids puguin ser solubles en els gasos, els líquids i sòlids són molt més solubles en un gas **per damunt de la seua pressió i temperatura crítiques**. Això es deu, fonamentalment al fet que la densitat del FSC és alta i s'aproxima a la d'un líquid. En els fluids supercrítics les molècules estan molt més pròximes entre si que en els gasos ordinaris i poden exercir **forces atractives fortes sobre les molècules d'un solut sòlid o líquid**. Els FSC **posseeixen propietats de dissolvent similars als dissolvents líquids ordinaris**. Variar la pressió d'un FSC significa variar-ne la densitat i, també, les propietats com a dissolvent. Per tant, pot aconseguir-se que un FSC com el diòxid de carboni, pugui utilitzar-se com un dissolvent comú.



# Forces intermoleculares. **Fluïts supercrítics**

Fins fa molt poc temps, el principal mètode d'obtenció del cafè descafeïnat era l'extracció de cafeïna amb un dissolvent com el clorur de metilè ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ). Aquest dissolvent presenta problemes perquè és perillós de manipular i difícil d'eliminar completament del cafè. Ara s'hi utilitza el fluid supercrític  $\text{CO}_2$ . En aquest procés, els grans de cafè verd es posen en contacte amb  $\text{CO}_2$  a  $90^\circ\text{C}$  aproximadament i 160-220 atm. El contingut de cafeïna se'n redueix de la concentració normal, 1-3 %, fins a un 0,02%. Quan es redueix la temperatura i la pressió del  $\text{CO}_2$ , la cafeïna precipita. Després, el  $\text{CO}_2$  es recicla.

## **Qüestions per a pensar...**

1. Per què funcionen bé els fluïts supercrítics com a dissolvents?
1. Quins problemes presenta l'extracció amb un dissolvent clorat com el diclorometà?
2. I quins avantatges?
3. Què vol dir la frase "Després, el  $\text{CO}_2$  es recicla".
4. Es podria reciclar el diclorometà?
5. Quan la cafeïna s'extrau amb diòxid de carboni supercrític, es queda retinguda en un suport sòlid inert. Com penseu que es recupera d'aquest suport?

# Algunes idees clau..... tema 6

**1. Les forces intermoleculars que hi ha entre les molècules es coneixen en forma conjunta com a forces de Van der Waals.** Les forces intermoleculars d'atracció més habituals són entre dipòls induïts i instantanis (forces de dispersió o forces de London). La magnitud de les forces de dispersió depèn de la facilitat amb què es produeixen els desplaçaments dels electrons dins de les molècules. Això causa una descompensació temporal de la distribució de càrrega electrònica, és a dir, sobre la polaritzabilitat de la molècula. En les substàncies polars, també hi ha forces dipol-dipol. Algunes substàncies que contenen hidrogen mostren atraccions intermoleculars significatives denominades enllaços d'hidrogen. En aquestes molècules hi ha àtoms d'H enllaçats a àtoms molt electronegatius, N, O o F, que són atrets simultàniament per altres àtoms molt electronegatius en la mateixa molècula o en molècules diferents. L'enllaç d'hidrogen té conseqüències importants en les propietats físiques, com els punts d'ebullició, i és una força intermolecular clau en els sistemes vius.

**2. El punt d'ebullició** normal és la temperatura a la qual la pressió de vapor d'un líquid és igual a 1 atm. **El punt crític** és la pressió i la temperatura a la qual un líquid i el seu vapor es fan indistingibles. **La pressió de vapor**, la pressió exercida pel vapor en equilibri amb un líquid, és una mesura de la volatilitat del líquid que també està relacionada amb la intensitat de les forces intermoleculars. La conversió d'un líquid a vapor s'anomena *vaporització* o *evaporació*; el procés invers s'anomena *condensació*. La dependència de la pressió amb la temperatura es representa mitjançant la corba de pressió de vapor i es pot expressar mitjançant l'equació de Clausius-Clapeyron. Quan la pressió de les molècules que escapen de la superfície del líquid iguala la pressió exercida per les molècules en l'atmosfera, es diu que es produeix l'ebullició.

**3. Algunes propietats dels líquids**, com la tensió superficial, l'energia necessària per a estendre la superfície d'un líquid i la viscositat, la resistència d'un líquid a fluir, són propietats relacionades amb les forces intermoleculars. Fenòmens habituals com la forma d'una gota, la formació de meniscs i la capil·laritat depenen de la tensió superficial. En concret, aquests fenòmens estan relacionats amb el balanç entre les forces de cohesió, forces intermoleculars entre les molècules d'un líquid, i les forces adhesives, forces intermoleculars entre les molècules d'un líquid i una superfície.

**4. Quan es calfen els sòlids cristal·lins** s'arriba a una temperatura en què l'estat sòlid es converteix en líquid. Quan es calfen els sòlids cristal·lins, s'arriba a una temperatura en què l'estat sòlid es converteix en líquid, s'ha produït la fusió. Aquesta temperatura és el punt de fusió. **Quan els líquids es refreden**, es forma l'estat cristal·lí durant el procés de congelació, i la temperatura en què això passa és el punt de congelació. Sota certes condicions, els sòlids poden convertir-se directament en vapor pel procés de sublimació. El procés invers es diu *deposició*. La sublimació, la pressió de vapor i el punt de fusió es troben entre les propietats afectades per les forces intermoleculars.

**5. Un diagrama de fases és una representació gràfica** de les condicions en què existeixen els sòlids, els líquids i els gasos (o vapors) com a fases simples o com a dues o més fases en equilibri. Els punts significatius en un diagrama de fases són el punt triple, on coexisteixen totes les fases, el punt de fusió, el punt d'ebullició i el punt crític, a partir de la qual, és possible un fluid supercrític. Algunes substàncies poden existir en diferents formes d'estat sòlid; aquest comportament s'anomena *polimorfisme*.

# TEMA 7. COMPORTAMENT QUÍMIC ÀCID-BASE DE LES MOLÈCULES

## Teories generals àcid-base

Àcids i bases de ArrheniusLowry

Àcids i bases de Brønsted-Lowry pKa.

Àcids i bases de Lewis

## Àcids i bases orgàniques

Àcids, alcohols i amines

Factors que influeixen en la força d'un àcid o d'una base

## Factors que influeixen en la força d'un àcid o d'una base

Polaritat. Força d'enllaç. Estabilitat de la base

## Nucleofília i electrofília

Nucleòfils i electròfils. Reacció de substitució

# Bibliografia recomanada

**Petrucci**: capítols 16; 27

**Chang**: capítols 15, 24

**Brown**: capítols 16, 25

## Bibliografia complementària

*Química*. Un proyecto de la ACS. Ed. Reverte. 2004.

S.F. Mason. *Chemical Evolution*. Oxford University Press. 1992.



# TEMA 7. COMPORTEMENT QUÍMIC À ACID-BASE DE LES MOLÈCULES



Àcid-Base

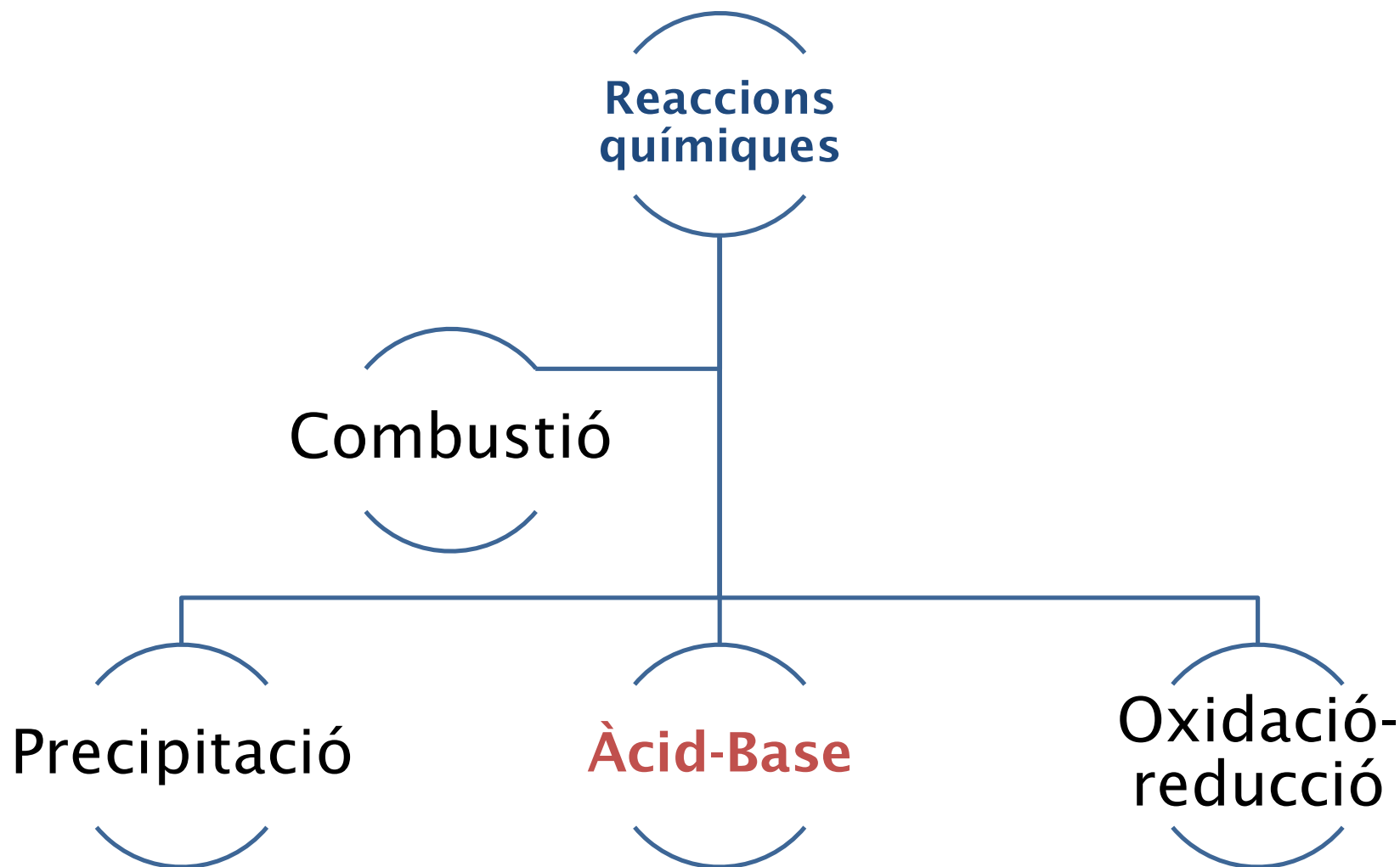
# Àcids i bases. Tipus de reaccions químiques

## Reacció química

transformació de la matèria que es pot visualitzar com una **redistribució electrònica** per ruptura d'enllaços i formació d'altres nous.



# Àcids i bases. Tipus de reaccions químiques



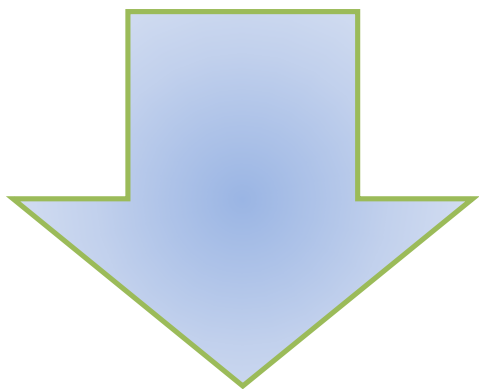
# Àcids i bases. Definició d'Arrhenius



Svante August

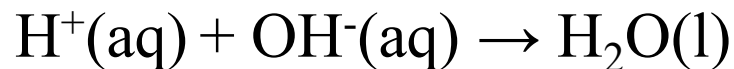
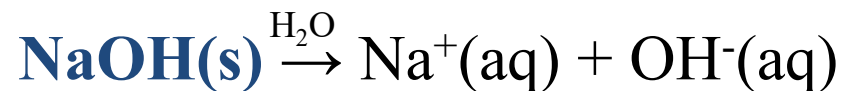
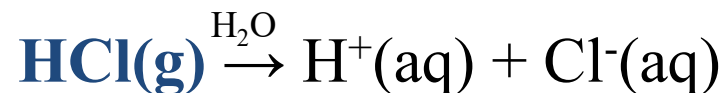
**Arrhenius**

**Àcid** = substància que, quan es dissol en aigua, fa que augmente la concentració d'ions  $H^+$ .



**Base** = substància que, quan es dissol en aigua, fa que augmente la concentració d'ions  $OH^-$ .

# Àcids i bases. Definició d'Arrhenius

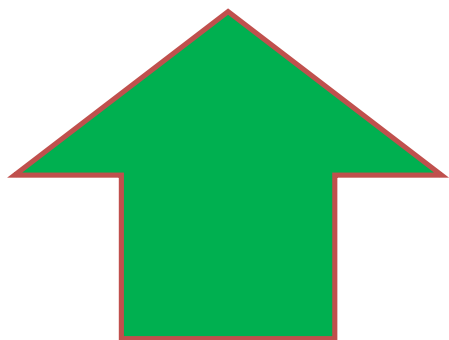


# Àcids i bases. Definició d'Arrhenius

Com expliquem que el  
**NH<sub>3</sub>** siga bàsic?

# Àcids i bases. Definició de Brønsted-Lowry

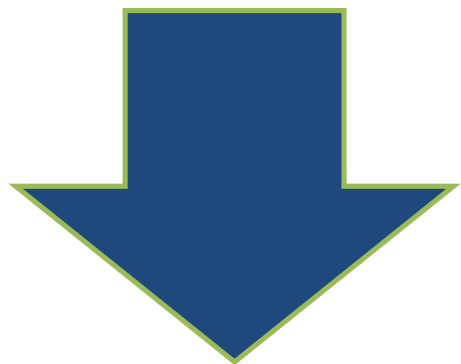
## Àcid



substància (molècula o ió) que dona un  $\text{H}^+$  a una altra substància.

## Brønsted-Lowry

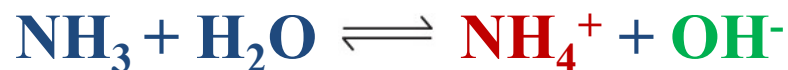
## Base



substància que accepta un  $\text{H}^+$ .

# Àcids i bases. Definició de Brønsted-Lowry

- Un àcid és un **donador** de protons.
- Una base és un **acceptor** de protons.

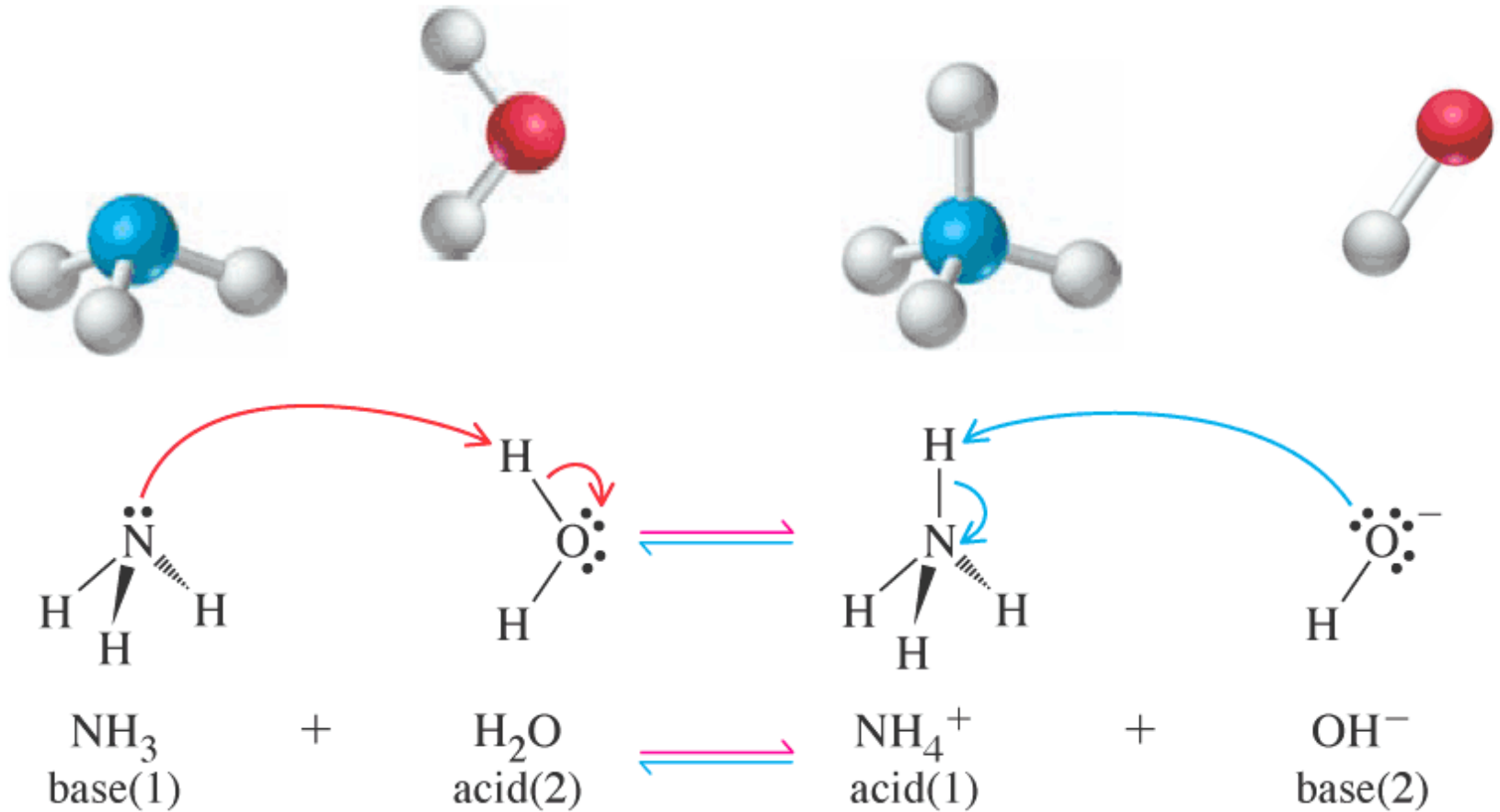


**Parells  
conjugats  
àcid-base**

- **NH<sub>4</sub><sup>+</sup>** és l'àcid conjugat del **NH<sub>3</sub>**

- **OH<sup>-</sup>** és la base conjugada del **H<sub>2</sub>O**

# Àcids i bases. Definició de Brønsted-Lowry



Reacció àcid-base de tipus Bronsted-Lowry amb una base dèbil.

# Àcids i bases. B-L. L'equilibri àcid-base.

## Un àcid FORT



Si HX és un àcid més fort que l'ió hidroni, àcid conjugat de l' $\text{H}_2\text{O}$ , se'n podrà extreure el protó i l'equilibri es desplaçarà cap a la dreta.

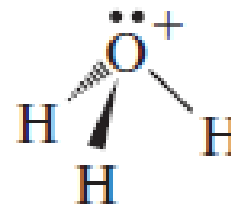
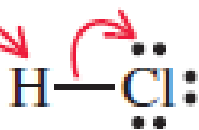
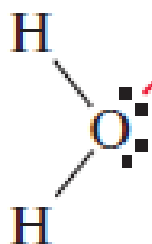
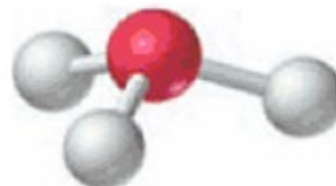


Àcid més fort que  $\text{H}_3\text{O}^+$



# Àcids i bases. Definició de Brønsted-Lowry

## Exemple d'un ÀCID FORT



**Base 2**

**Acid 1**

**Acid 2**

**Base 1**

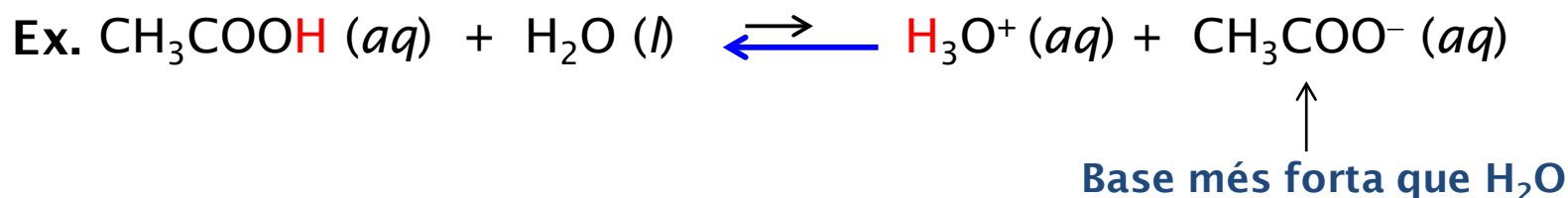


# Àcids i bases. B-L. L'equilibri àcid-base

## Un àcid DÈBIL

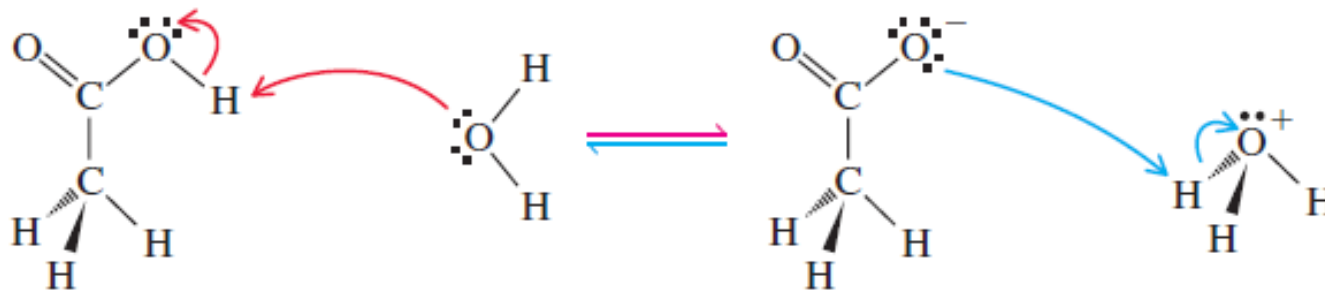
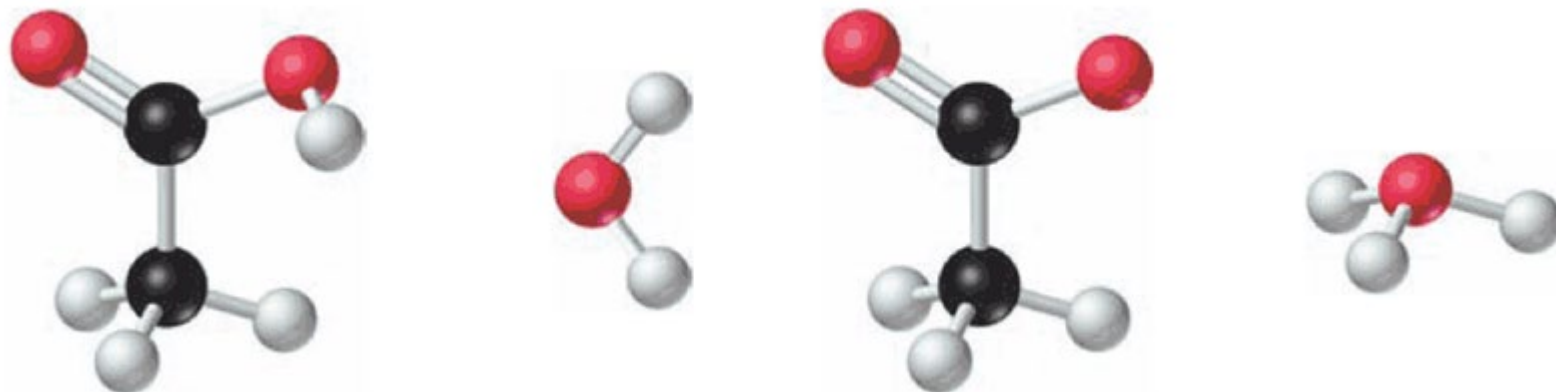


Si  $\text{X}^-$  és una base més forta que  $\text{H}_2\text{O}$ , l'equilibri es desplaçarà cap a l'esquerra. Això passa quan  $\text{HX}$  és un àcid dèbil.



# Àcids i bases. Definició de Brønsted-Lowry

## Exemple d'un ÀCID FEBLE



Àcid 1

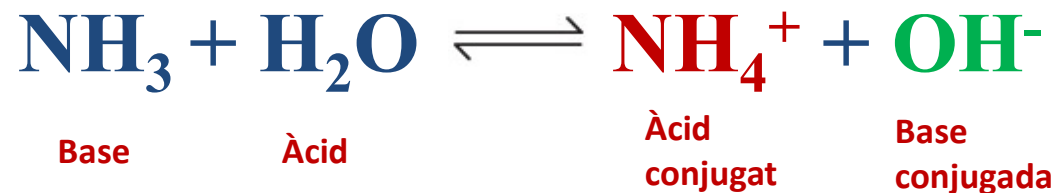
Base 2

Base 1

Àcid 2



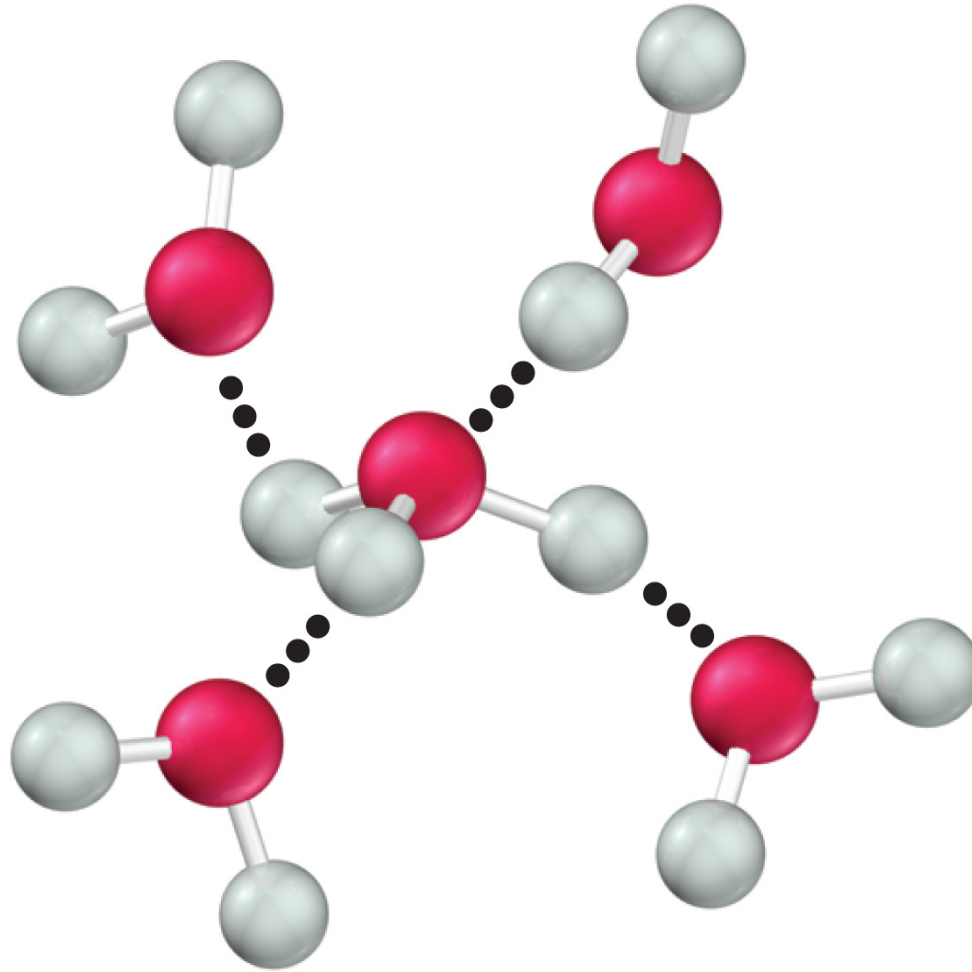
# Àcids i bases. B-L. La constant d'equilibri



$$K = \frac{a_{\text{NH}_4^+} a_{\text{OH}^-}}{a_{\text{NH}_3} a_{\text{H}_2\text{O}}}$$

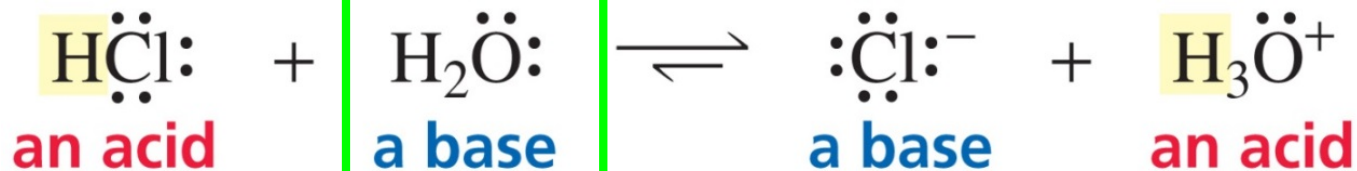
$$K_b = K [\text{H}_2\text{O}] = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]}{[\text{NH}_3]} = 1.8 \times 10^{-5}$$

# Àcids i bases. B-L. La constant d'equilibri

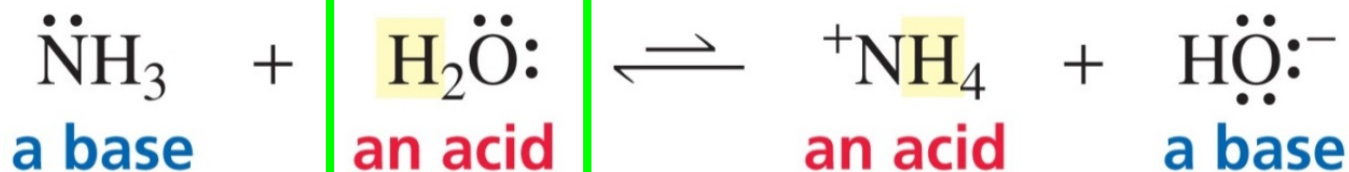


Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Àcids i bases. B-L. Caràcter àcid-base de l'aigua



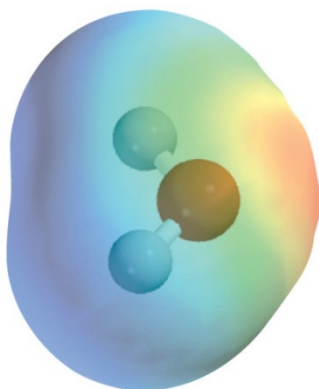
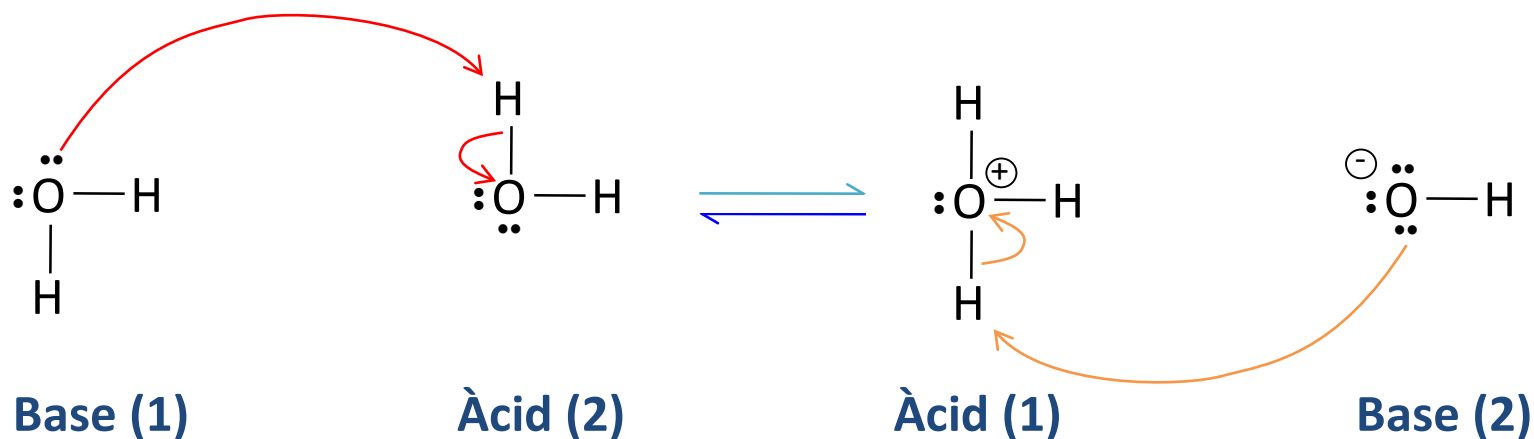
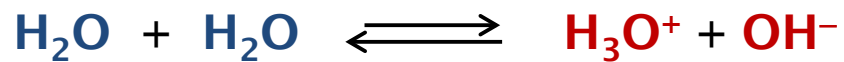
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



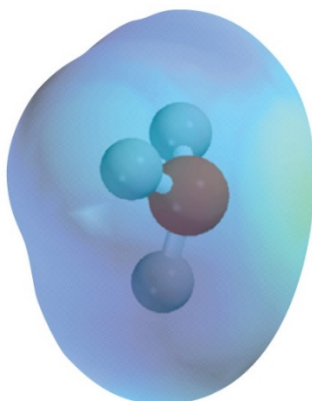
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Substància *anfòtera* o *anfipròtica*

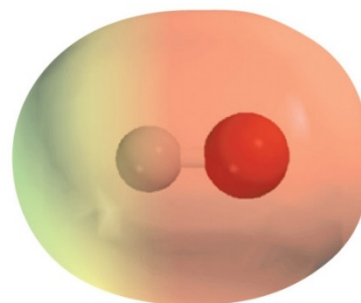
# Àcids i bases. Autoionització de l'aigua



H<sub>2</sub>O

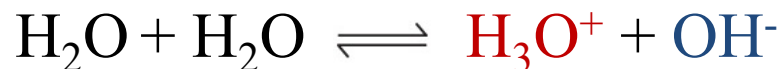


H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>



HO<sup>-</sup>

# Àcids i bases. **Autoionització de l'aigua**



Base

Àcid

Àcid conjugat

Base conjugada

$$K_c = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}][\text{H}_2\text{O}]}$$

$$K_w = K_c[\text{H}_2\text{O}][\text{H}_2\text{O}] = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

**CONSTANT  
DEL  
PRODUCTE  
IÒNIC DE  
L'AIGUA**

Quan  $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$ , la dissolució és **neutra**.

En dissolucions **àcides**,  $[\text{H}^+] > [\text{OH}^-]$   
i en dissolucions **bàsiques**,  $[\text{H}^+] < [\text{OH}^-]$



# Àcids i bases. Autoionització de l'aigua. L'escala de pH

## pH and pOH

El potencial de l'ió de l'hidrogen es va definir en 1909 com “el logaritme negatiu de  $[H^+]$ ”.

$$pH = -\log[H_3O^+]$$

$$pOH = -\log[OH^-]$$

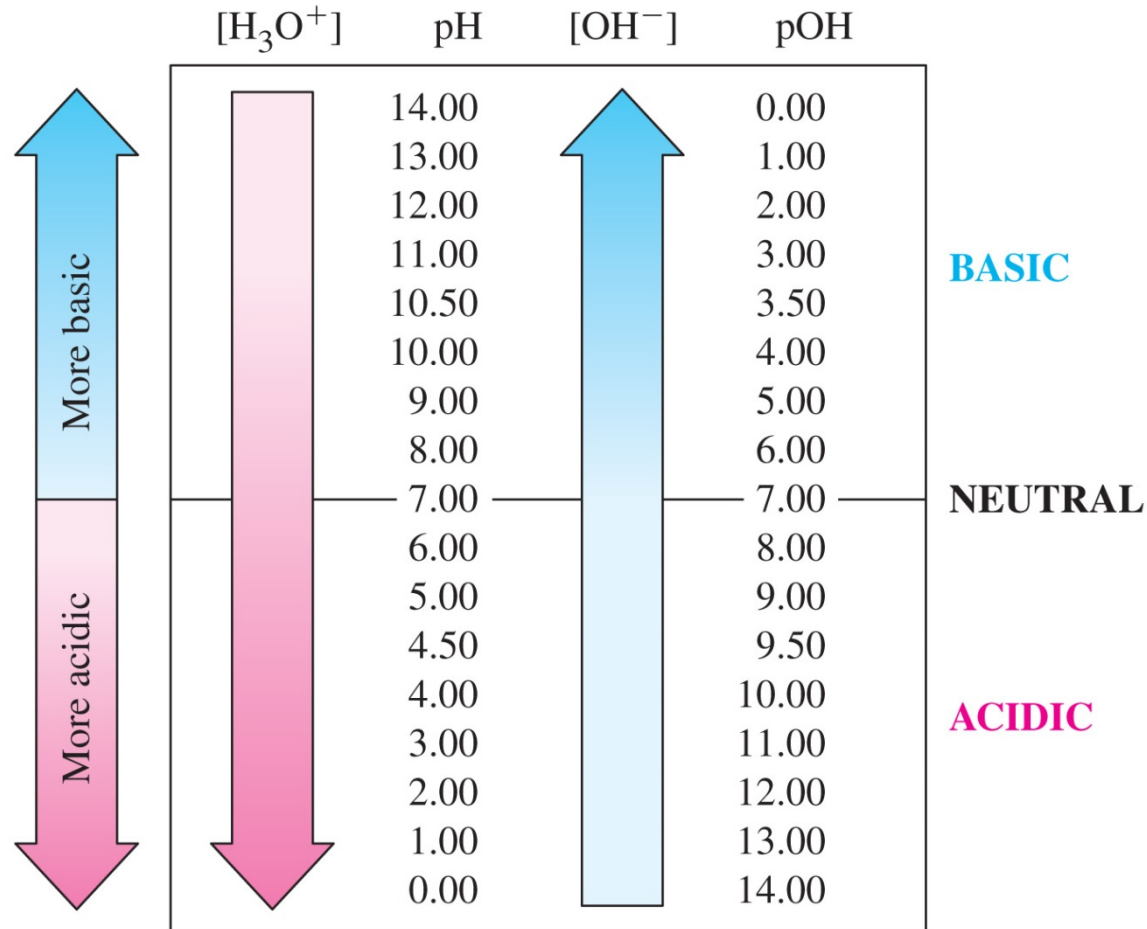
$$K_w = [H_3O^+][OH^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

$$-\log K_w = -\log[H_3O^+] - \log[OH^-] = -\log(1.0 \times 10^{-14})$$

$$pK_w = pH + pOH = -(-14)$$

$$pK_w = pH + pOH = 14$$

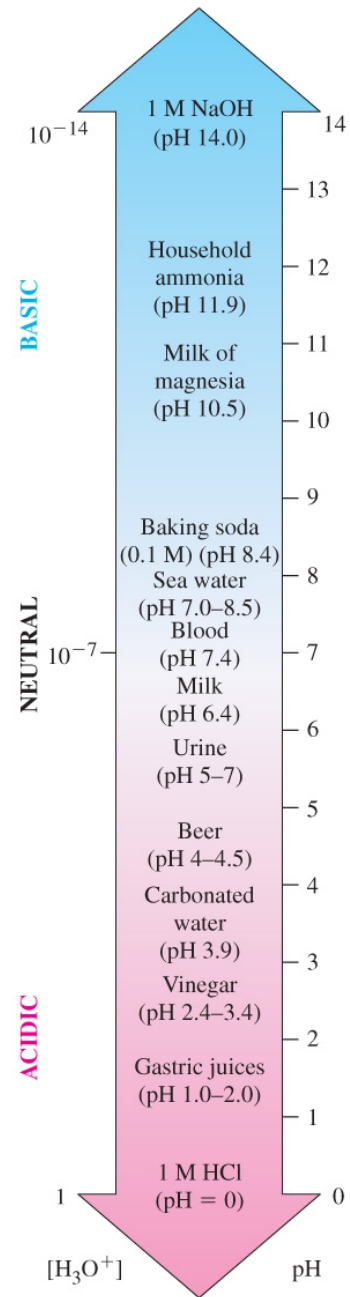
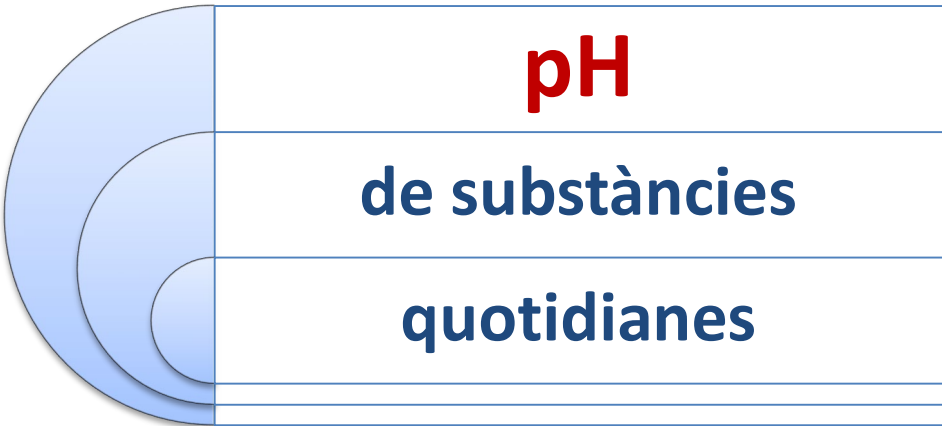
# Àcids i bases. Autoionització de l'aigua. L'escala de pH



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2011 Pearson Canada Inc.

# Àcids i bases



# Àcids i bases

## Àcids forts



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

## Thymol Blue Indicator

pH < 1.2    pH < 2.8 < pH

# Àcids i bases. Àcids i bases forts

**TABLE 16.2**  
**The Common Strong**  
**Acids and Strong**  
**Bases**

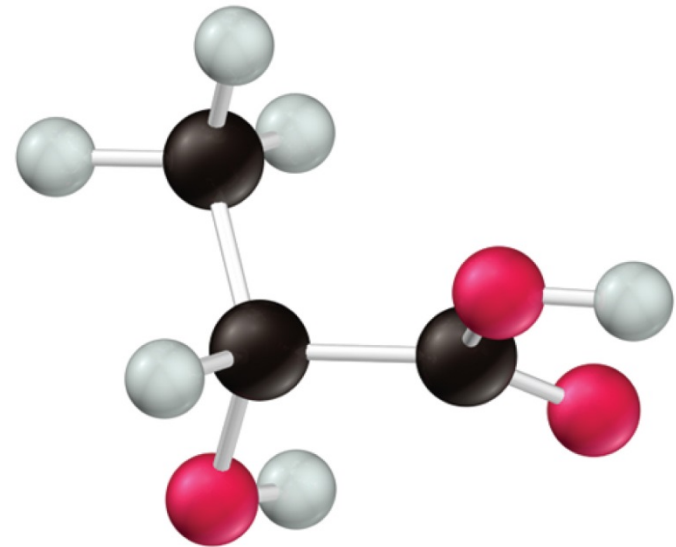
Acids	Bases
HCl	LiOH
HBr	NaOH
HI	KOH
HClO <sub>4</sub>	RbOH
HNO <sub>3</sub>	CsOH
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> <sup>a</sup>	Mg(OH) <sub>2</sub>
	Ca(OH) <sub>2</sub>
	Sr(OH) <sub>2</sub>
	Ba(OH) <sub>2</sub>

<sup>a</sup>H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> ionizes in two distinct steps. It is a strong acid only in its first ionization (see page 720).

**S'ionitzen**  
**completament en**  
**dissolucions aquoses.**  
***Són electròlits forts.***

# Àcids i bases

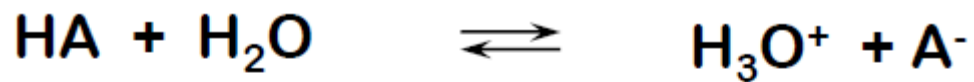
## Àcids i bases febles



Lactic acid

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Àcids i bases. Àcids i bases febles

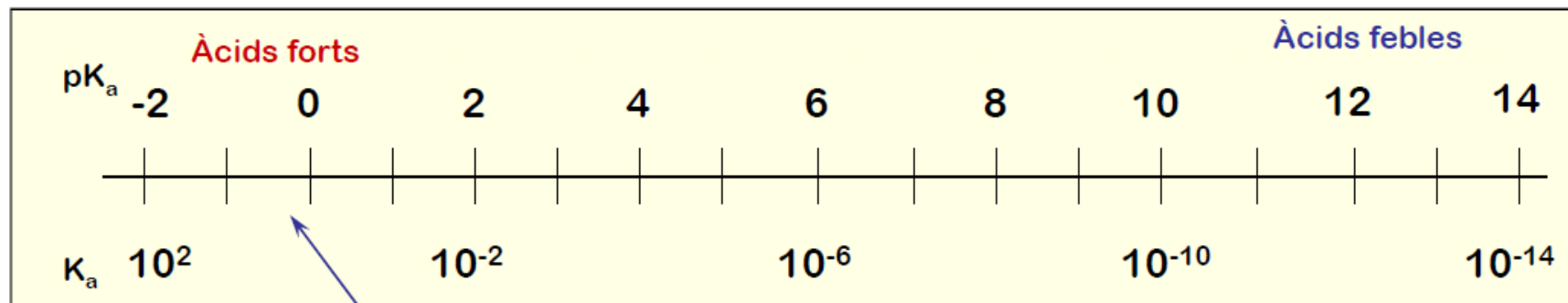


$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

$$\text{p}K_a = -\log K_a$$

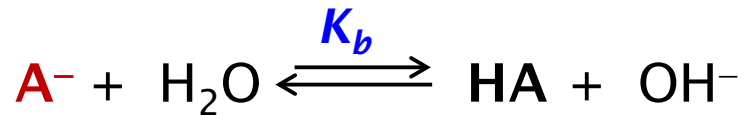
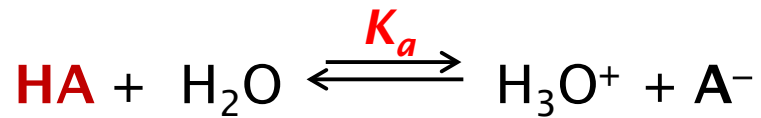
S'ionitzen  
parcialment en  
dissolucions  
aquoses.

Una forma ràpida de conèixer la força d'un àcid...



Quant menor és el valor de pK<sub>a</sub>, més fort és l'àcid

# Àcids i bases. Àcids i bases febles



Per a un àcid  
**HA** i la seua base  
conjugada **A<sup>-</sup>**  
podem escriure:

$$K_a \times K_b = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+] [\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \times \frac{[\text{OH}^-] [\text{HA}]}{[\text{A}^-]} = [\text{H}_3\text{O}^+] [\text{OH}^-] = K_w = 1 \times 10^{-14}$$



# Àcids i bases. Àcids i bases febles

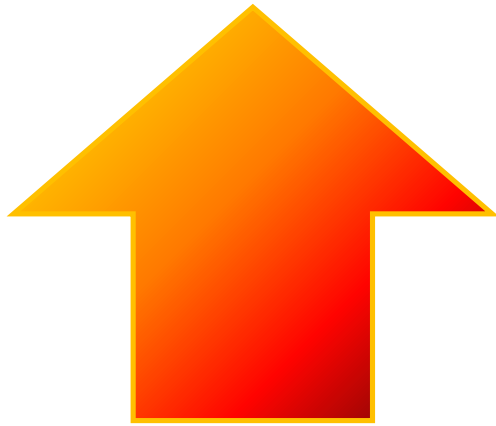
$$pK_a + pK_b = 14$$

A mesura que **augmenta** la força d'un àcid ( $K_a$ ), la força de la seua base conjugada ha de **disminuir** ( $K_b$ ).

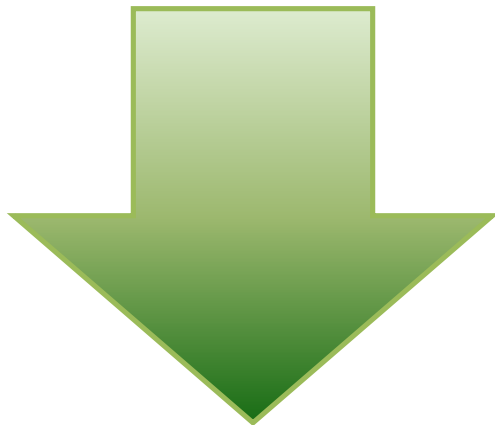
*Com més fort és un àcid, més feble n'és la base conjugada.*

# Àcids i bases. Àcids i bases febles

$$pK_a + pK_b = 14$$



Com més fort és  
un àcid,



més feble n'és la  
base conjugada.

# Àcids i bases. Utilitat dels valor de pKa

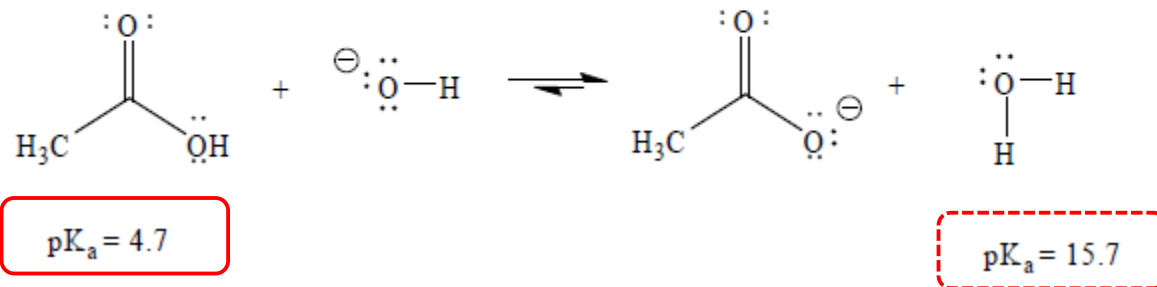
**Permeten diferenciar entre àcids forts i febles.**

- **Àcid fort** és aquell més fort que l'ió  $\text{H}_3\text{O}^+$  ( $K_a$  elevat,  $\text{p}K_a$  pròxims a zero o negatius).
- Una **base forta** és aquella més forta que l'ió  $\text{OH}^-$ .

# Àcids i bases. Utilitat dels valor de pKa

Permeten predir la direcció de la transferència d'H<sup>+</sup>

Un àcid cedirà un protó a la base conjugada de qualsevol àcid que siga més feble que ell, és a dir, que tinga major pK<sub>a</sub>.



La base conjugada d'un àcid podrà emprar-se per a captar un protó de qualsevol àcid de pK<sub>a</sub> més baix que el seu àcid conjugat.

# Àcids i bases. Àcids i bases febles

## Força relativa d'alguns àcids i les seues bases corresponents

Àcid	Nom	pK <sub>a</sub>	Base conjugada	Nom
CH <sub>4</sub>	Metà	50	CH <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Ió metanur
NH <sub>3</sub>	Amoniac	34	NH <sub>2</sub> <sup>-</sup>	Ió amidur
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	Etanol	16.0	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O <sup>-</sup>	Ió etòxid
H <sub>2</sub> O	Aigua	15.7	HO <sup>-</sup>	Ió hidròxid
HCN	Àcid cianhídric	9.2	CN <sup>-</sup>	Ió cianur
CH <sub>3</sub> COOH	Àcid acètic	4.7	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	Ió acetat
HF	Àcid fluorhídric	3.5	F <sup>-</sup>	Ió fluorur
HNO <sub>3</sub>	Àcid nítric	-1.3	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Ió nitrat
HCl	Àcid clorhídric	-7.0	Cl <sup>-</sup>	Ió clorur

+feble

+forta

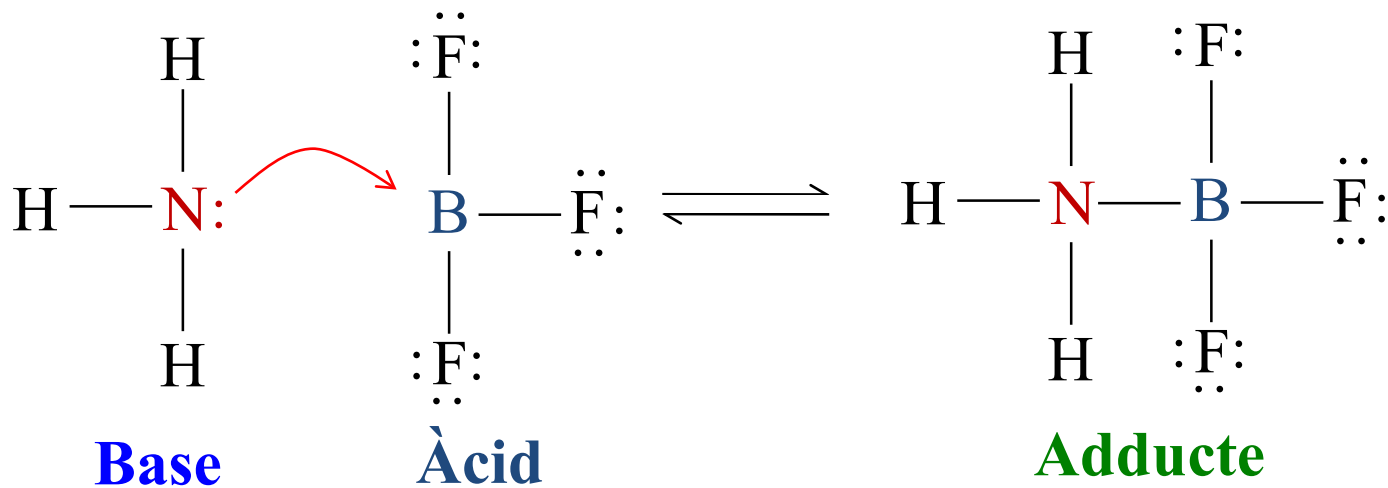
+fort

+feble

Existeix una relació inversa entre la força àcida d'un àcid i la força bàsica de la seua base conjugada.

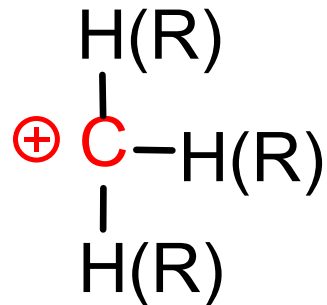
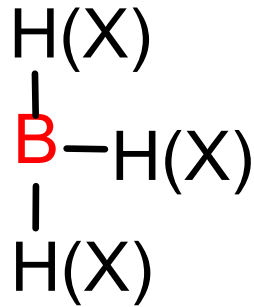
# Àcids i bases de Lewis

# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis



# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

**Àcid de Lewis**  
Acceptor de parells  
d'electrons  
(espècie "deficient" en  
electrons).

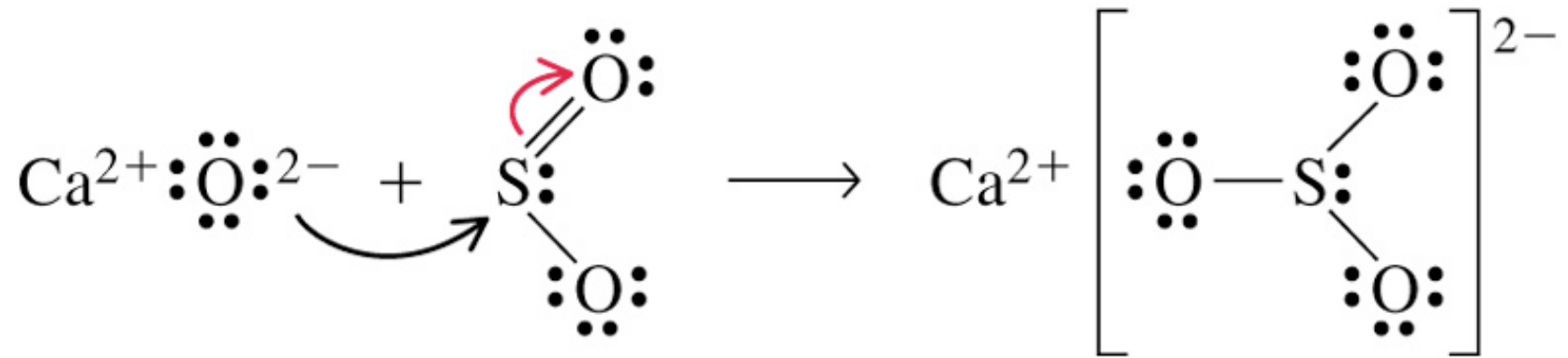






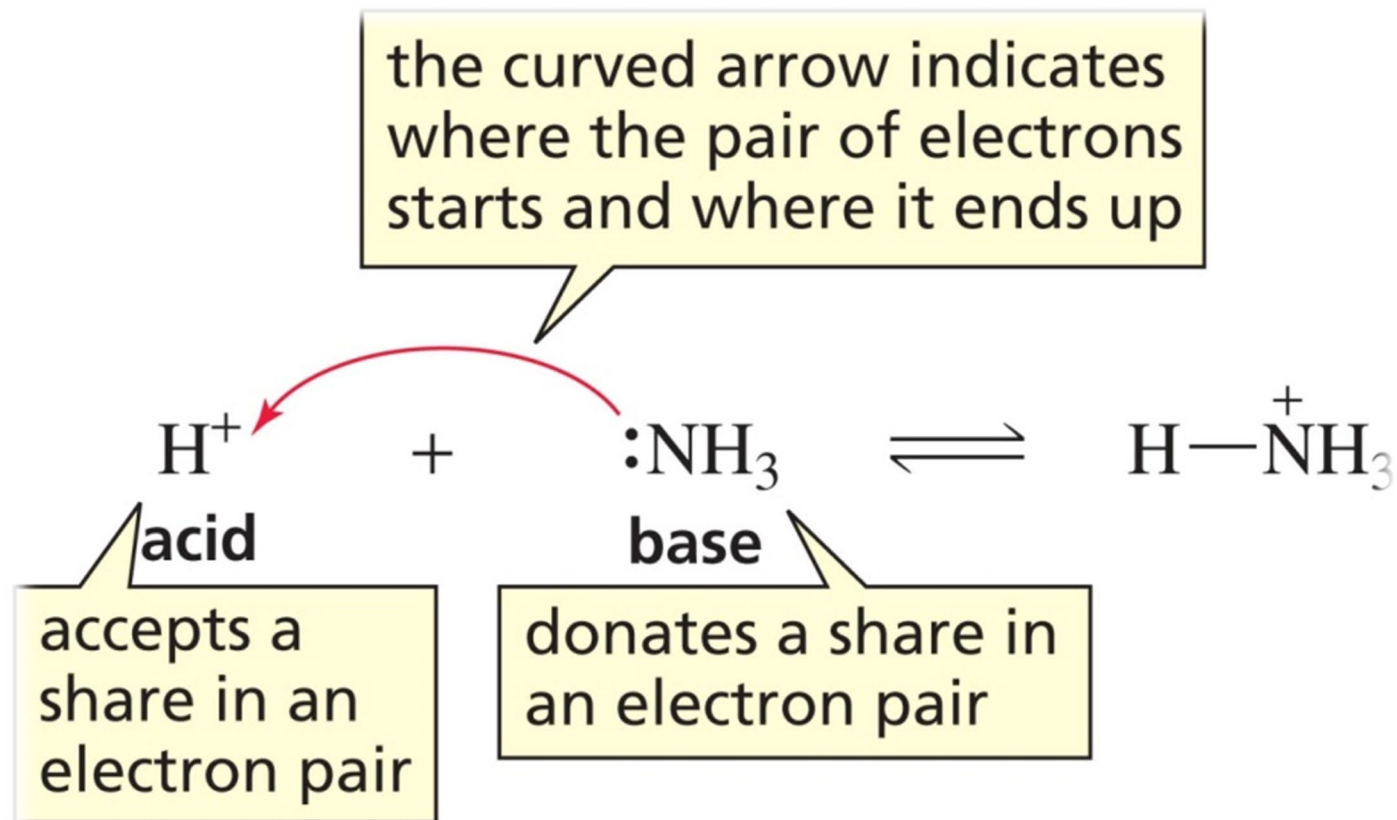
# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

## Formació del sulfít de calci.



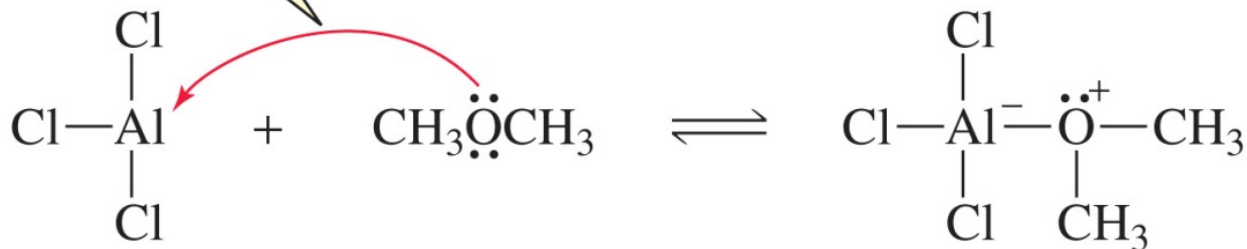
# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

## Formació de l'ió amoni.

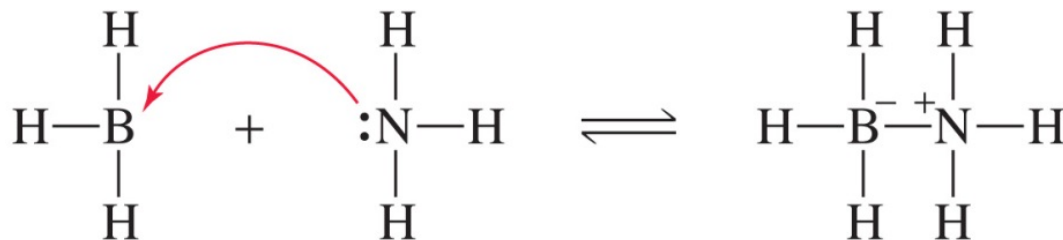


# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

the curved arrow indicates where the pair of electrons starts and where it ends up



**aluminum trichloride** a Lewis acid    **dimethyl ether** a Lewis base



**borane** a Lewis acid    **ammonia** a Lewis base

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

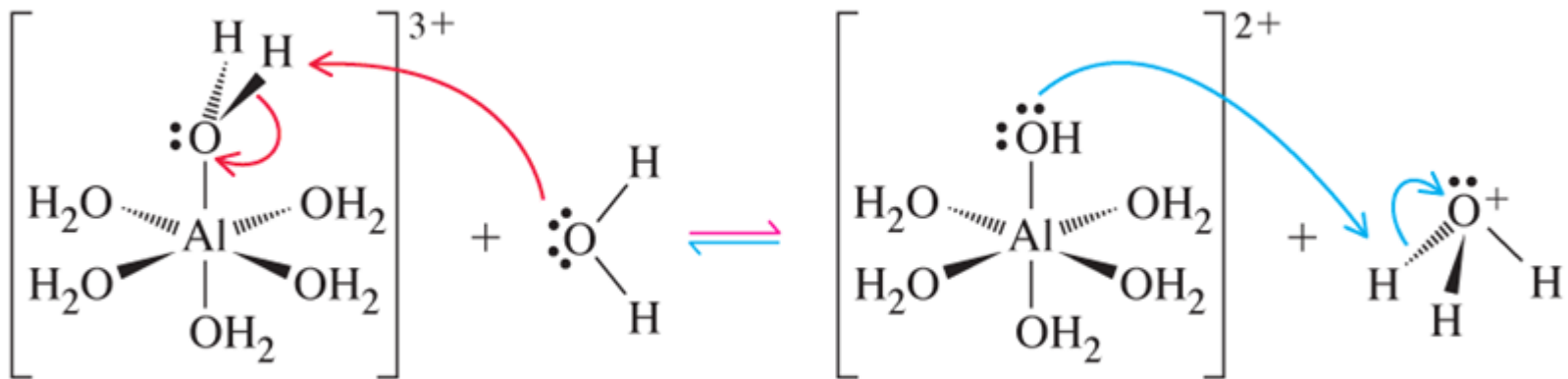
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

## Altres exemples

# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

## Hidròlisi de $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$

Per a produir  $\text{H}_3\text{O}^+$

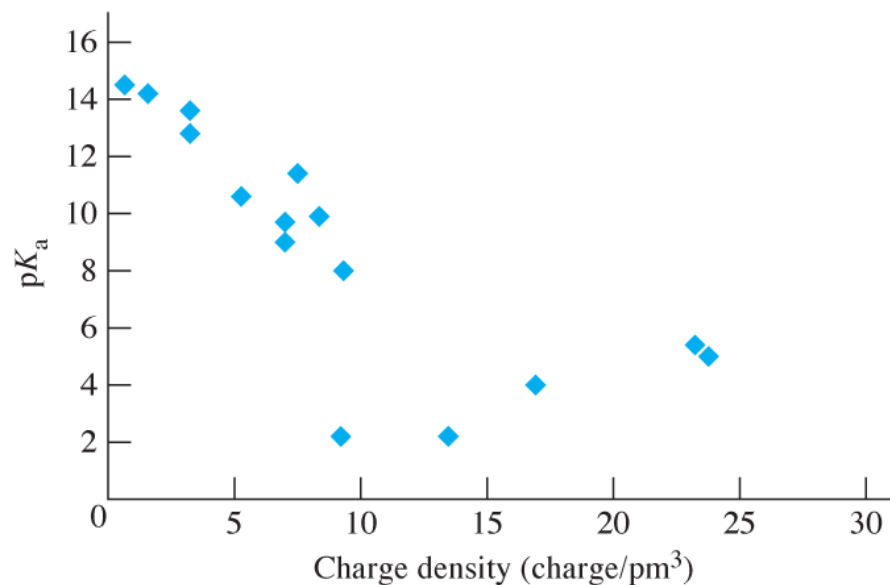


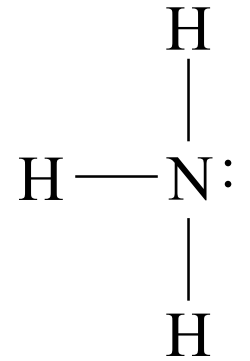
# Àcids i bases. Acceptors i donadors de Lewis

## Acidesa de cations per a produir $\text{H}_3\text{O}^+$ Relació càrrega/radi

Metal Cation	Ionic Radius, pm	$\rho \times 10^7$ , Charge $\text{pm}^{-3}$	$\text{pK}_a$
$\text{Li}^+$	76	3.27	13.6
$\text{Na}^+$	102	1.53	14.2
$\text{K}^+$	138	0.680	14.5
$\text{Be}^{2+}$	45	23.2	5.4
$\text{Cu}^{2+}$	66	9.33	8.0
$\text{Ni}^{2+}$	69	8.35	9.9
$\text{Mg}^{2+}$	72	7.51	11.4
$\text{Zn}^{2+}$	74	7.00	9.0
$\text{Co}^{2+}$	74	7.00	9.7
$\text{Mn}^{2+}$	83	5.23	10.6
$\text{Ca}^{2+}$	100	3.22	12.8
$\text{Al}^{3+}$	53	23.8	5.0
$\text{Cr}^{3+}$	61	17.0	4.0
$\text{Ti}^{3+}$	67	13.5	2.2
$\text{Fe}^{3+}$	78	9.19	2.2

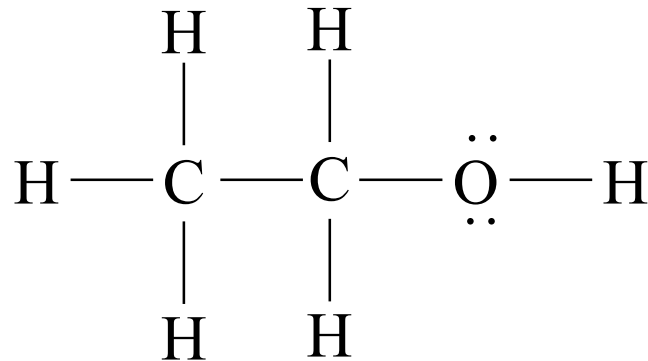
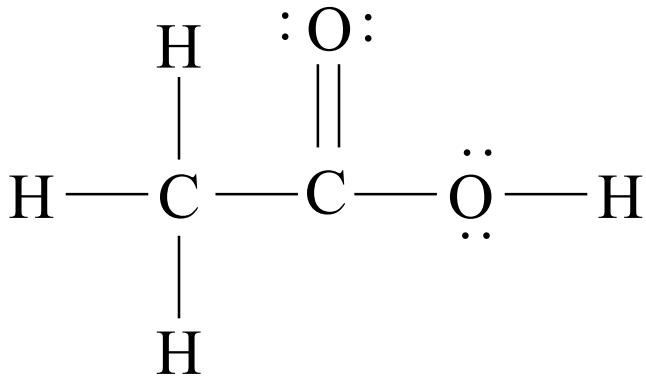
The  $\text{pK}_a$  of  $\text{H}_3\text{O}^+$  is  $-1.7$ , and the  $\text{pK}_a$  of water is  $15.7$ .





# Àcids i bases orgàniques

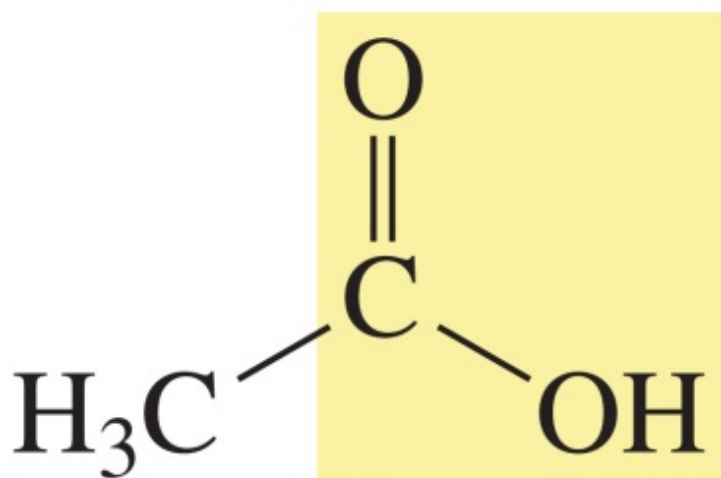
(àcids carboxílics, alcohols i amines)



# Àcids i bases. Àcids carboxílics

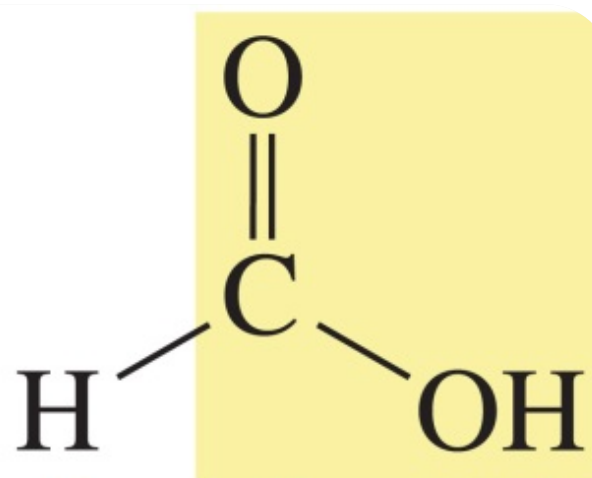
## Àcids carboxílics

Són àcids moderadament forts ( $pK_a$  entre 3 i 5).



**acetic acid**

**$pK_a = 4.76$**



**formic acid**

**$pK_a = 3.75$**

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

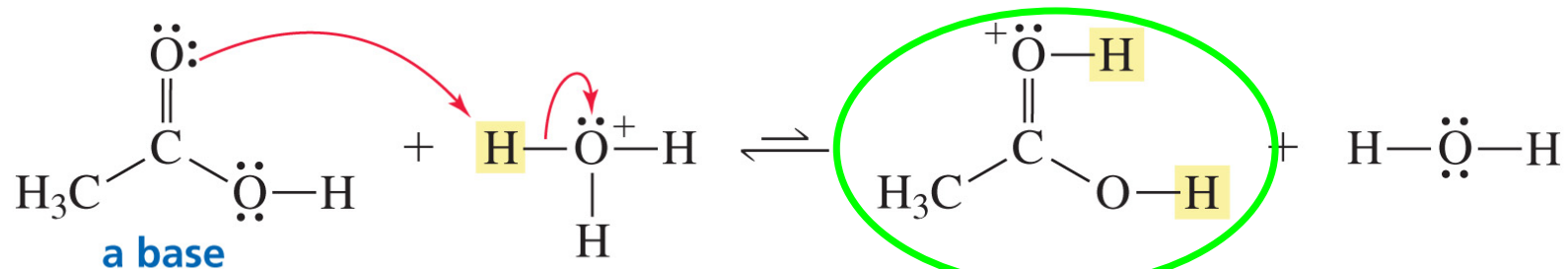
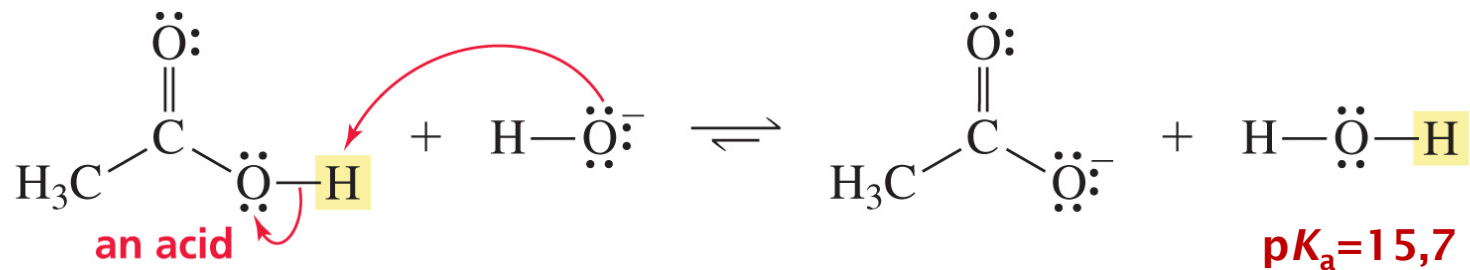
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

$pK_a = 4.76$

$pK_a = 3.75$



# Àcids i bases. Àcids carboxílics



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

$\text{pK}_a = 4,76$

Àcid carboxílic protonat  
(àcid molt fort  $\text{pK}_a = -6,1$ )

# Àcids i bases. Alcohols

## Alcohols (-OH)

Són àcids dèbils ( $pK_a \sim 16$ ).



methyl alcohol

$$pK_a = 15.5$$



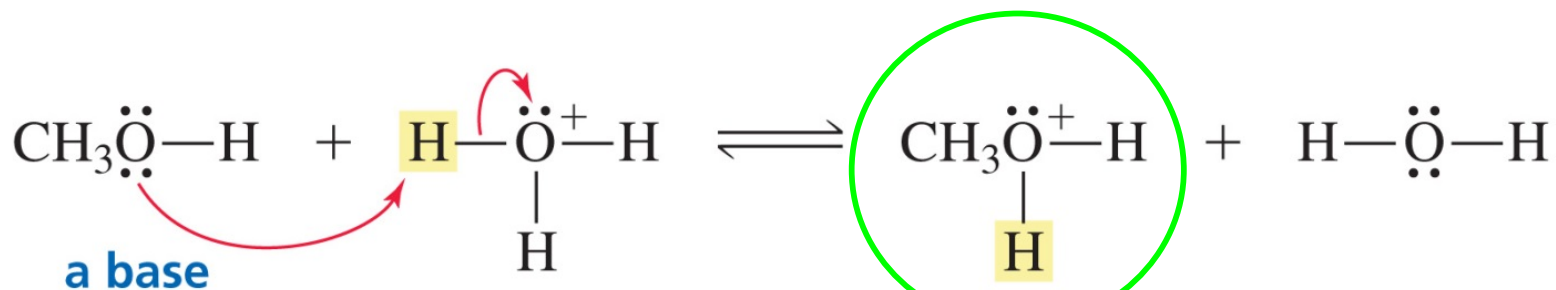
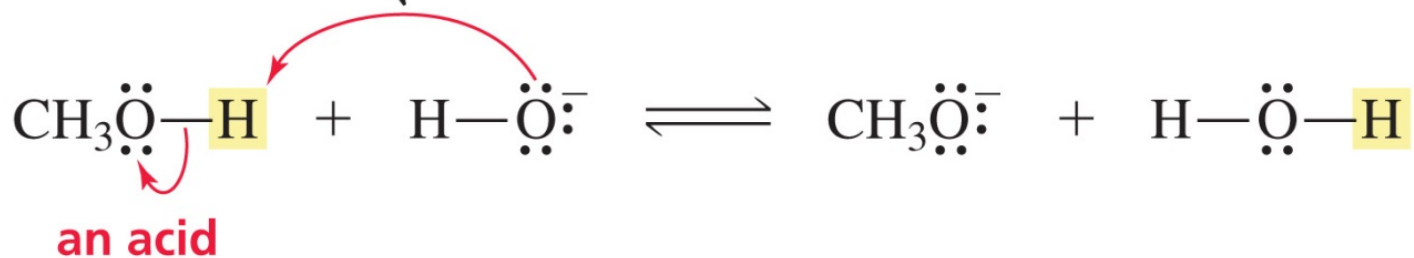
ethyl alcohol

$$pK_a = 15.9$$

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# Àcids i bases. Alcohols

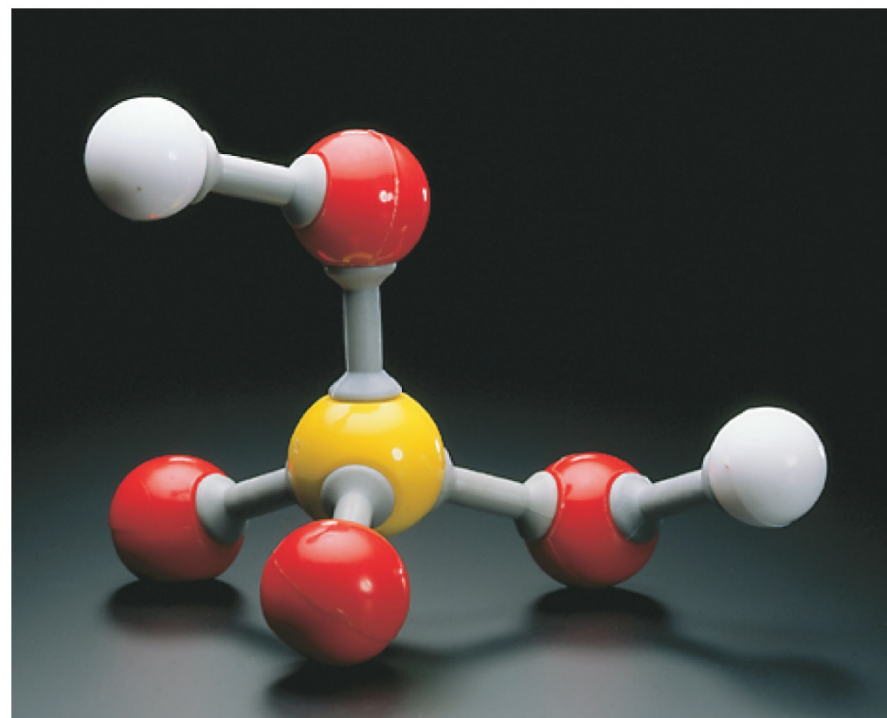
a curved arrow indicates where the electrons start from and where they end up



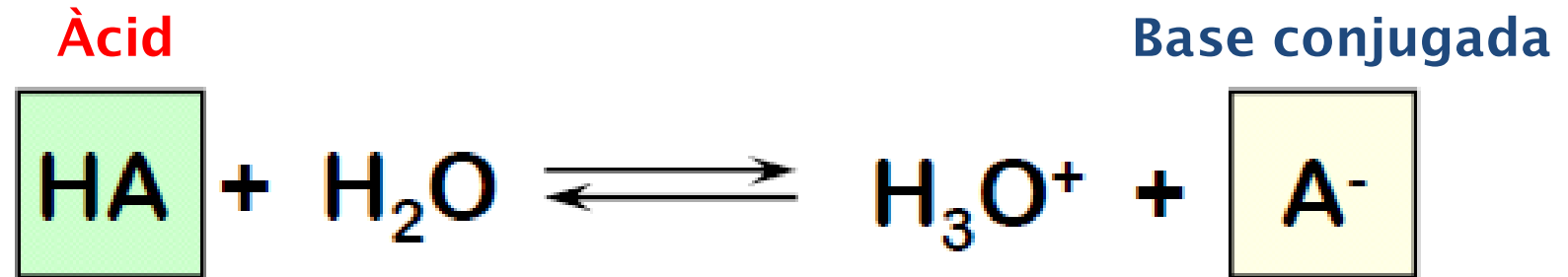
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Alcohol protonat  
(àcid molt fort:  $\text{p}K_a = -2,5$ )

# Factors que influeixen en la força d'un àcid.



# Àcids i bases. Factors que influeixen en la força d'un àcid



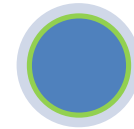
**1**

**Polaritat**  
de l'enllaç  
H-A



**2**

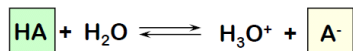
**Força**  
de l'enllaç  
H-A



**3**

**Estabilitat**  
de la base  
conjugada, A<sup>-</sup>

# Àcids i bases. Factors que influeixen en la força d'un àcid



**Table 1.9 The  $pK_a$  Values of Some Simple Acids**

$\text{CH}_4$   
 $pK_a = 60$

$\text{NH}_3$   
 $pK_a = 36$

$\text{H}_2\text{O}$   
 $pK_a = 15.7$

$\text{HF}$   
 $pK_a = 3.2$

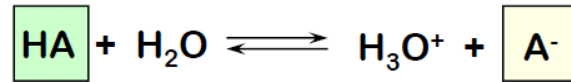
$\text{H}_2\text{S}$   
 $pK_a = 7.0$

$\text{HCl}$   
 $pK_a = -7$

$\text{HBr}$   
 $pK_a = -9$

$\text{HI}$   
 $pK_a = -10$

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Polaritat d'enllaç

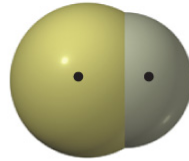


## Polaritat de l'enllaç

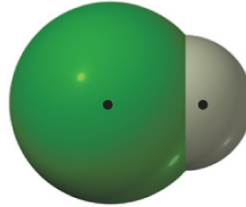
### H-A

Una molècula que conté H pot transferir més fàcilment un protó si l'enllaç està polaritzat.

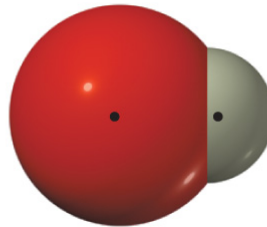
# Àcids i bases. Factors que influeixen. Polaritat d'enllaç



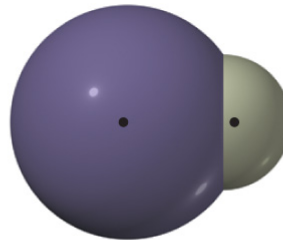
hydrogen fluoride



hydrogen chloride



hydrogen bromide



hydrogen iodide

$pK_a = 3,18$

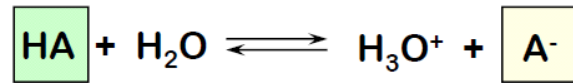
$pK_a = -2,2$

$pK_a = -4,8$

$pK_a = -10$



# Àcids i bases. Factors que influeixen. Força d'enllaç



## Força de l'enllaç

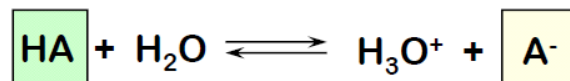
### H-A

Els enllaços molt forts es dissocien amb més dificultat que els enllaços més dèbils.









**H-F** = àcid dèbil

Enllaç molt polar però molt fort.

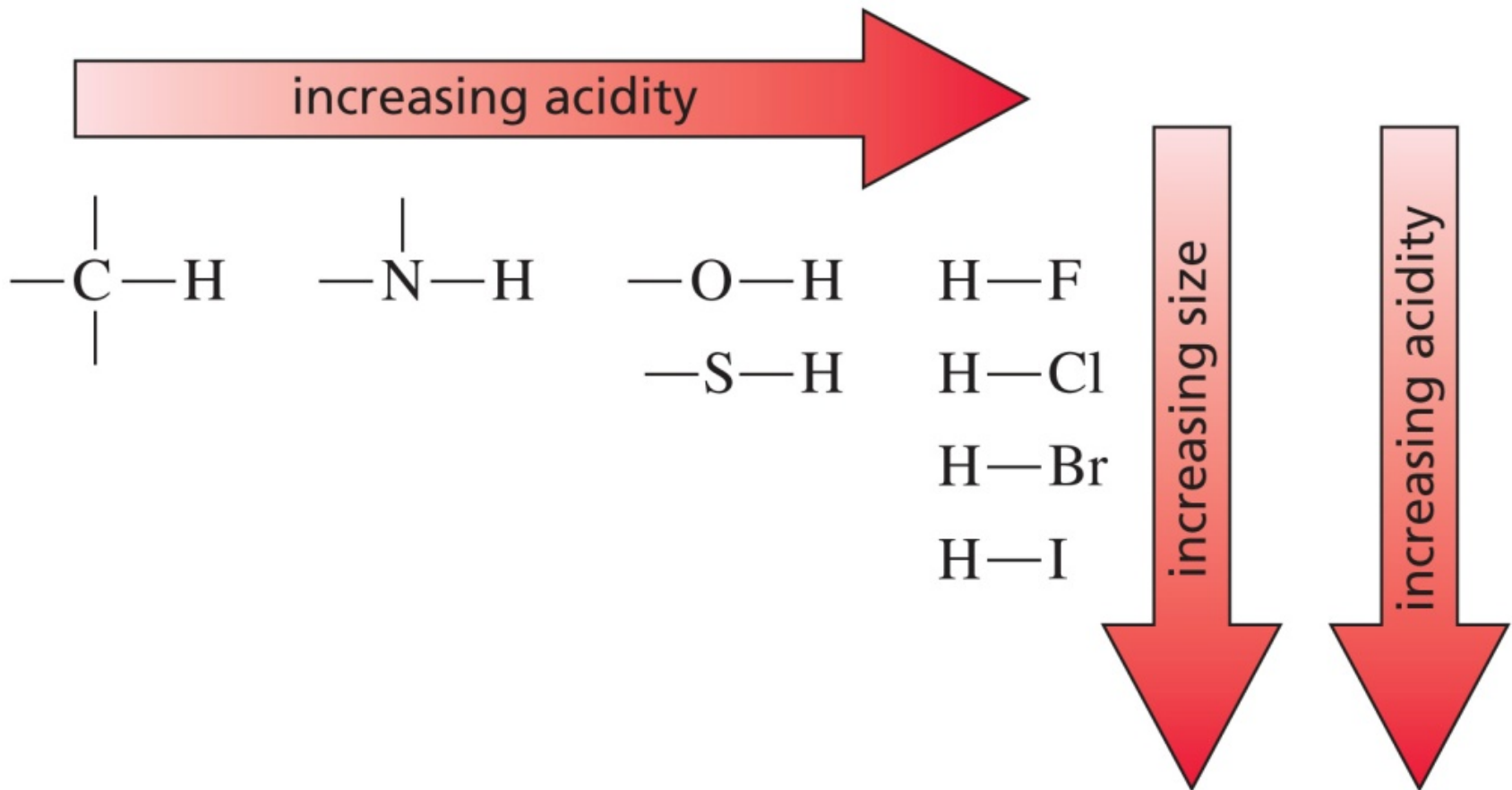
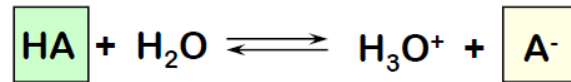
# Àcids i bases. Factors que influeixen. Polaritat d'enllaç



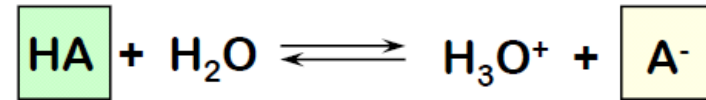
**Table 1.6 Hydrogen–Halogen Bond Lengths and Bond Strengths**

Hydrogen halide	Bond length (Å)	Bond strength	
		kcal/mol	kJ/mol
 hydrogen fluoride		136	571
 hydrogen chloride		103	432
 hydrogen bromide		87	366
 hydrogen iodide		71	298

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Polaritat d'enllaç



# Àcids i bases. Factors que influeixen. Estabilitat de la base

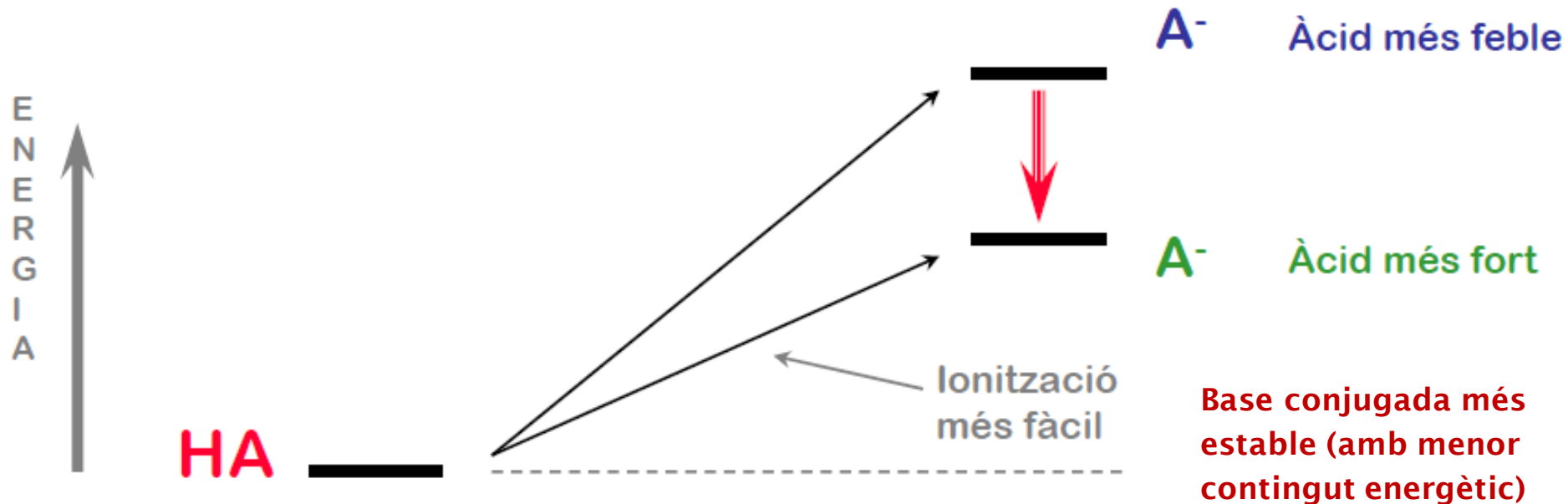


## Estabilitat de la base conjugada $\text{A}^-$

En general, com **més estable**  
siga la base conjugada,  
**més fort** serà l'àcid.

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Estabilitat de la base

La diferència entre un àcid fort i un de feble pot relacionar-se amb l'estabilitat de la seua base conjugada.



# Àcids i bases. Factors que influeixen. Estabilitat de la base

## EFFECTES MÉS IMPORTANTS

Poden provocar canvis en pKa en diverses unitats.

**Electronegativitat** de l'àtom unit a l'hidrogen.

**Càrrega** de l'àtom que té l'hidrogen.

**Grandària** de l'àtom que té l'hidrogen.

**Hibridació** de l'àtom unit a l'hidrogen.

**Ressonància** i aromaticitat.

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Estabilitat de la base

---

## EFFECTES MENORS

Canvis xicotets en el pKa,  
excepte si es dona més d'un  
alhora.

## Efectes inductius

---

## Canvis en la solvatació

---

## EFFECTE DE L'ELECTRONEGATIVITAT

Si un **H** està unit a **àtoms diferents del mateix període** de la taula periòdica,

en **augmentar l'electronegativitat** de l'àtom unit a l'hidrogen

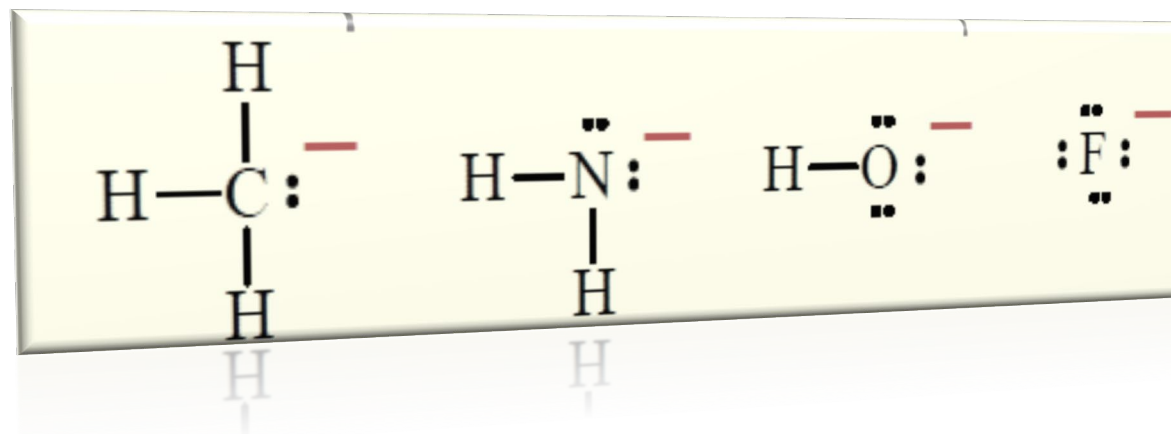
**augmenta l'acidesa**



# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Efecte de l'electronegativitat

$\text{CH}_4$	$\text{pK}_a$ >45	$\text{RCH}_3$	$\text{pK}_a$ >45	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$	$\text{pK}_a$ 20
$\text{NH}_3$	34	$\text{RNH}_2$	35	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}_2$	15
$\text{H}_2\text{O}$	15,7	$\text{ROH}$	18	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$	5
$\text{HF}$	3.5				

**Bases  
conjugades**



# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Efecte de l'electronegativitat

relative electronegativities:  $C < N < O < F$

most electronegative

relative acidities:  $CH_4 < NH_3 < H_2O < HF$

strongest acid

relative stabilities:  ${}^{-}CH_3 < {}^{-}NH_2 < HO^{-} < F^{-}$

most stable

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Efecte de l'electronegativitat

Table 1.9 The  $pK_a$  Values of Some Simple Acids

$\text{CH}_4$ $pK_a = 60$	$\text{NH}_3$ $pK_a = 36$	$\text{H}_2\text{O}$ $pK_a = 15.7$	$\text{HF}$ $pK_a = 3.2$
<p>Com <b>més electronegatiu</b> és l'àtom que <b>suporta</b> la càrrega negativa (en la base conjugada) <b>més àcid</b> és el <b>compost</b></p>		$\text{H}_2\text{S}$ $pK_a = 7.0$	$\text{HCl}$ $pK_a = -7$
			$\text{HBr}$ $pK_a = -9$
			$\text{HI}$ $pK_a = -10$

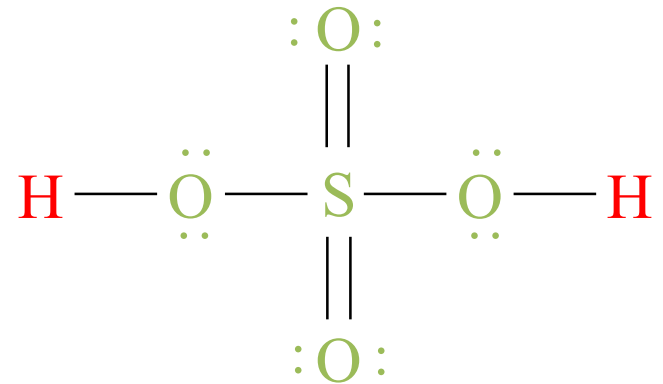
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

$pK_a = -10$

## Oxoàcids

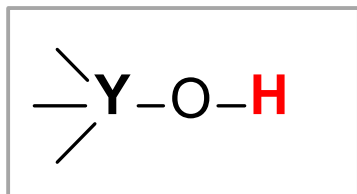
Àcids en què els **grups O-H** i moltes vegades àtoms d'oxigen addicionals, s'enllacen a un **àtom central no metàl·lic**.



**Taula  
comparativa  
dels pKa dels  
oxoàcids més  
representatius**

Nom	Fórmula	pKa
Àcid perclòric	HClO <sub>4</sub>	-10
Iodur d'hidrogen	HI	-10
Bromur d'hidrogen	HBr	-9
Àcid sulfúric	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-6.62
Clorur d'hidrogen	HCl	-7
Àcid nítric	HNO <sub>3</sub>	-2
Ió hidroni	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	-1.74
Àcid clòric	HClO <sub>3</sub>	-1.0
Àcid iòdic	HIO <sub>3</sub>	0.75
Àcid fosfòric	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	2.15
Fluorur d'hidrogen	HF	3.2
Àcid nítrós	HNO <sub>2</sub>	3.3
Àcid hidrazoic	HN <sub>3</sub>	4.63
Àcid carbònic	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	6.36
Àcid hipoclorós	HOCl	7.53
Àcid hipobromós	HOBr	8.65
Àcid cianhídric	HCN	9.25
Àcid hipoiodós	HOI	10
Peròxid d'hidrogen	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.6
Aigua	H <sub>2</sub> O	15.74
Amoníac	H <sub>3</sub> N	34

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Oxoàcids



Y = no metal

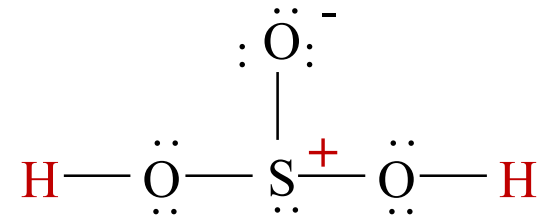
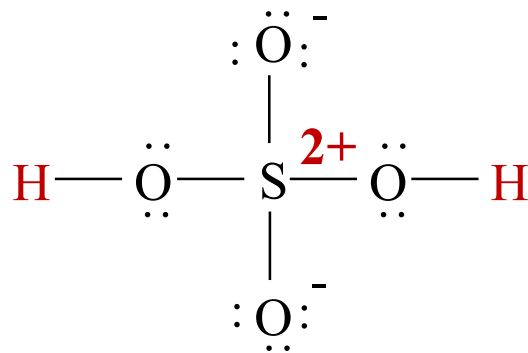
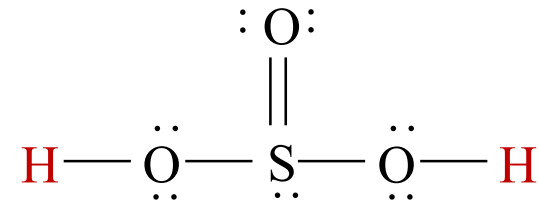
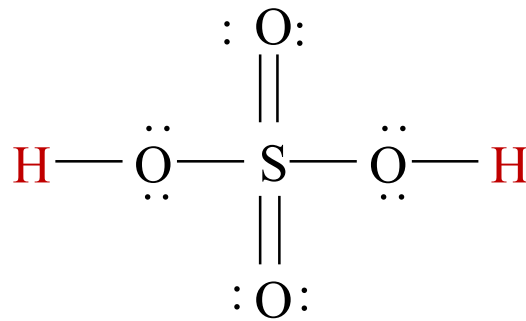
	EN de Y	$K_a$
<b>HClO</b>	3.0	$3.0 \times 10^{-8}$
<b>HBrO</b>	2.8	$2.5 \times 10^{-9}$
<b>HIO</b>	2.5	$2.3 \times 10^{-11}$

La força de l'àcid  
augmenta en  
augmentar  
l'electronegativitat  
de l'àtom central **Y**

(en el cas d'oxoàcids amb el  
mateix nombre de grups OH i el  
mateix nombre d'àtoms d'O).

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Oxoàcids

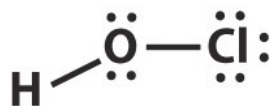
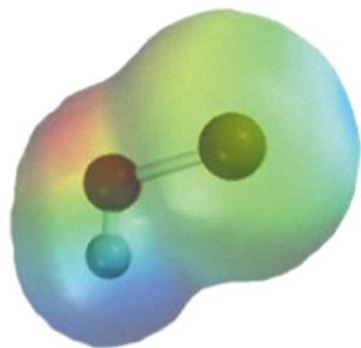
Per a oxoàcids amb **el mateix àtom central Y** la força de l'àcid augmenta en augmentar el **nombre d'àtoms d'O** terminals units.



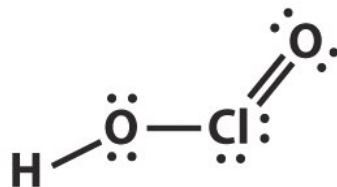
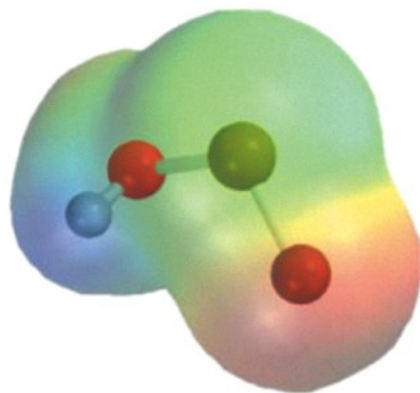
$$K_a \approx 10^3$$

$$K_a = 1.3 \times 10^{-2}$$

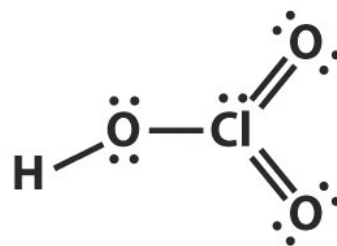
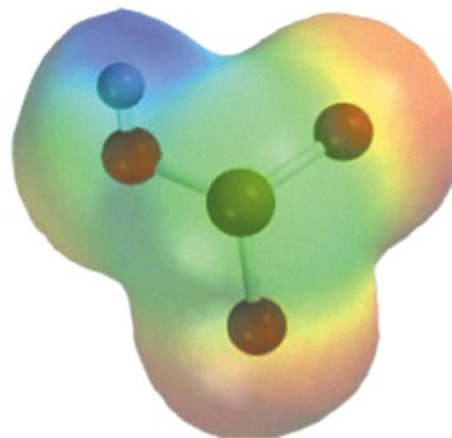
# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Oxoàcids



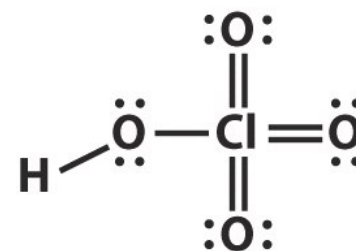
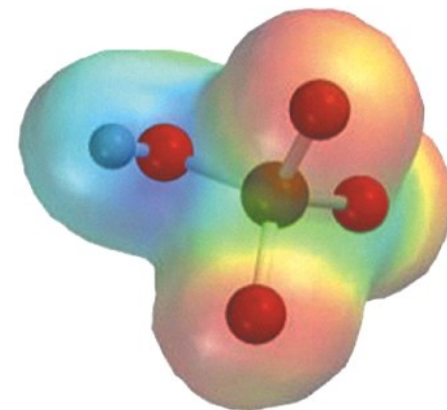
Hypochlorous acid



Chlorous acid



Chloric acid



Perchloric acid

Weakest acid



Strongest acid



# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Càrrega

## EFFECTE DE LA CÀRREGA

pKa

$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	16	$\text{H}-\text{N}-\text{H}$	34	$\text{Ar}-\text{NH}_2$	25
$\text{H}-\overset{+}{\text{O}}-\text{H}$	-1.7	$\text{H}-\overset{+}{\text{N}}-\text{H}$	9.2	$\text{Ar}-\overset{+}{\text{N}}\text{H}_3$	4
$\text{R}-\overset{+}{\text{O}}-\text{H}$	-3.5	$\text{R}-\overset{+}{\text{N}}\text{H}_3$	10		
$\text{R}-\overset{+}{\text{C}}=\text{O}-\text{H}$	-6	$\text{R}-\overset{+}{\text{C}}\equiv\text{N}-\text{H}$	-10		
$\text{R}-\overset{+}{\text{C}}=\text{O}-\text{H}$	-7				

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Càrrega

Els àcids conjugats de bases febles neutres són àcids forts: posseeixen un protó “extra” i una càrrega positiva.

		pK <sub>a</sub>			
$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	16	$\text{H}-\text{N}-\text{H}$	34	$\text{Ar}-\text{NH}_2$	25
$\text{H}-\text{O}^+-\text{H}$	-1.7	$\text{H}-\text{N}^+-\text{H}$	9.2	$\text{Ar}-\text{NH}_3^+$	4
$\text{R}-\text{O}^+-\text{H}$	-3.5	$\text{R}-\text{NH}_3^+$	10		
$\text{R}-\text{C}(=\text{O})^+-\text{H}$	-6	$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}^+-\text{H}$	-10		
$\text{R}-\text{C}(=\text{O})^+-\text{H}$	-7				

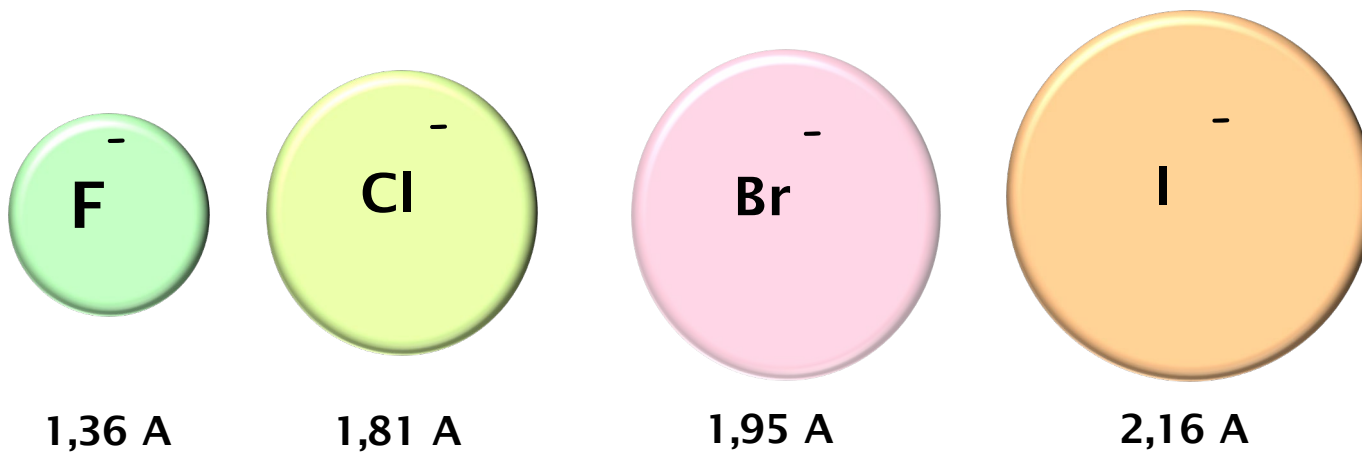
# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Grandària

## Efecte de la grandària

	$pK_a$
HF	3.5
HCl	-7
HBr	-9
HI	-10

En augmentar la grandària de l'àtom unit a l'H, l'enllaç serà més dèbil i el compost **més àcid**. Per tant, l'acidesa augmenta en un grup de la taula periòdica cap avall (augmenta el radi i disminueix la força de l'enllaç amb l'H).

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Grandària



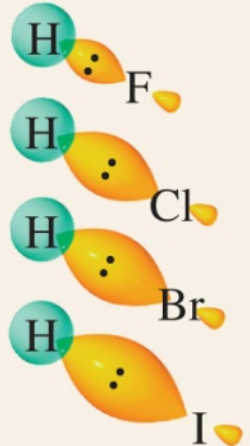
La **càrrega negativa** en la base conjugada d'un àtom més gran, origina una **base més estable** i augmenta la força de l'àcid.

**Recordeu la polaritzabilitat...?**

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Grandària

**Table 1.6 Hydrogen–Halogen Bond Lengths and Bond Strengths**

Hydrogen halide	Bond length (Å)	Bond strength	
		kcal/mol	kJ/mol
H—F	0.917	136	571
H—Cl	1.2746	103	432
H—Br	1.4145	87	366
H—I	1.6090	71	298

The image shows four Lewis structures of hydrogen halides (HF, HCl, HBr, HI) arranged vertically. Each structure consists of a hydrogen atom (H) on the left and a halogen atom (F, Cl, Br, I) on the right. The hydrogen atom is represented by a light blue circle with the letter 'H' inside. The halogen atom is represented by a yellow circle with the letter 'F', 'Cl', 'Br', or 'I' inside. A pair of yellow dots between the H and the halogen atom represents the single covalent bond. The bond length increases from HF to HI, and the bond strength decreases from HF to HI.

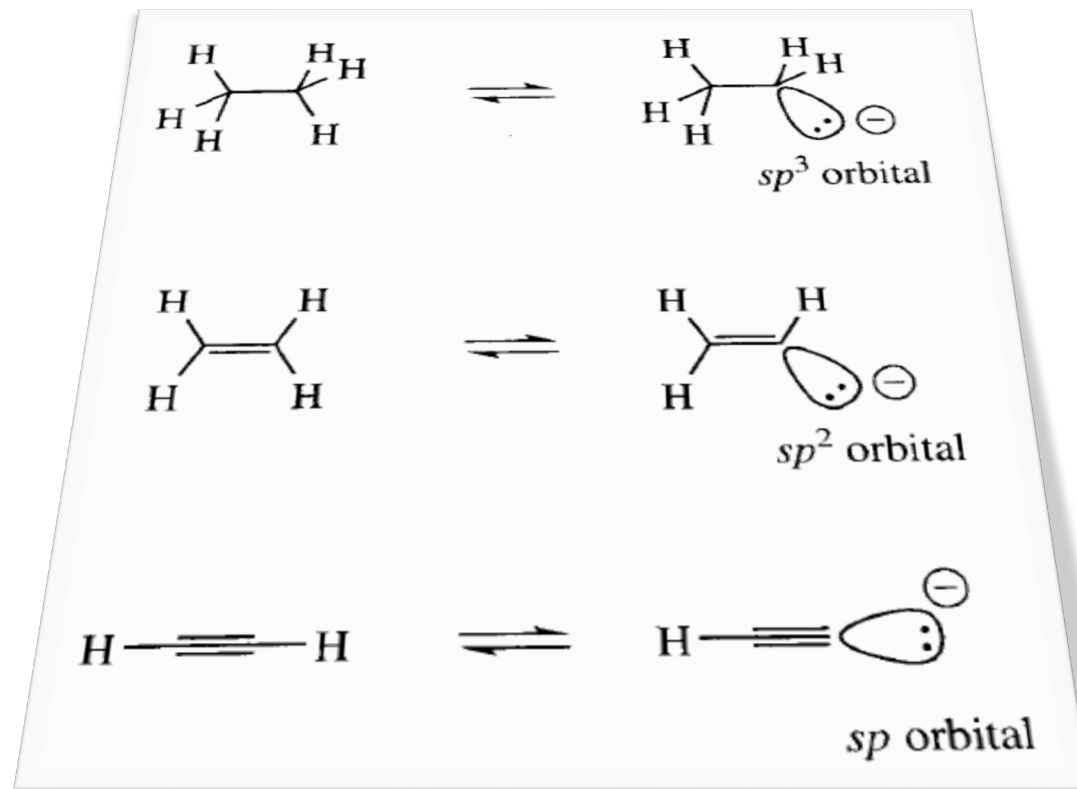
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

## I la força d'enllaç...?

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Hibridació.

## EFFECTE DE LA HIBRIDACIÓ

Un **major caràcter "s"** en l'orbital que conté la càrrega negativa en la base conjugada correspon a **un àcid més fort** (la càrrega estarà més estabilitzada per estar més prop del nucli)



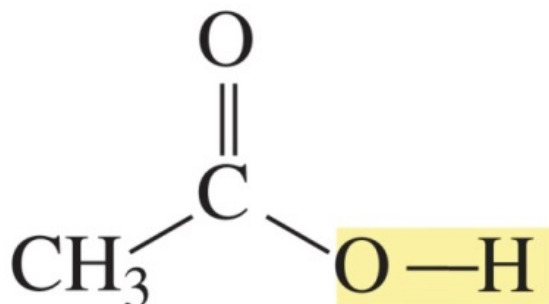
# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Hibridació

		pK <sub>a</sub>
sp <sup>3</sup>	H <sub>3</sub> C-CH <sub>3</sub>	≈50
sp <sup>2</sup>	H <sub>2</sub> C=CH <sub>2</sub>	44
sp	HC≡CH	25

**Recordeu el caràcter penetrant dels orbitals...?**

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància

Per què hi ha tanta diferencia en la acidesa de l'etanol i l'àcid acètic?



$$pK_a = 4.76$$

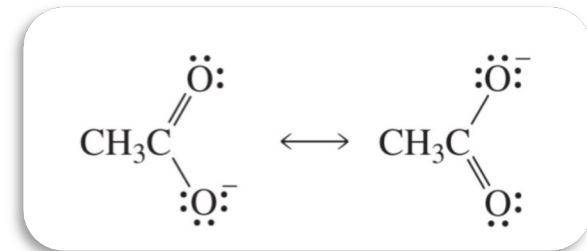


$$pK_a = 15.9$$

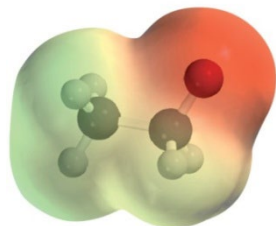
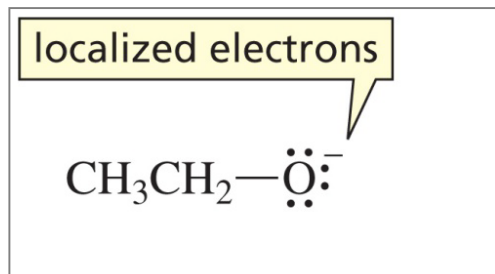


# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància

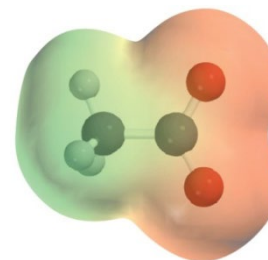
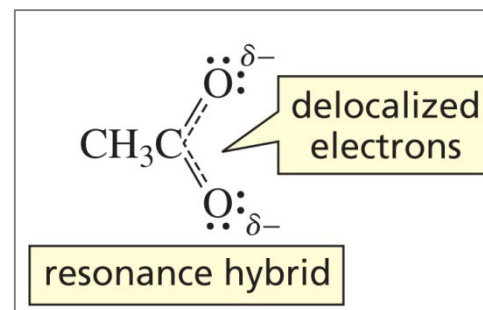
## Concepte de DESLOCALITZACIÓ DE CÀRREGA



### Ió etòxid



### Ió acetat



Estabilitzat per ressonància.

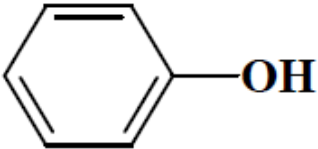
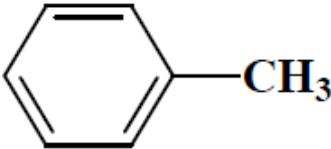
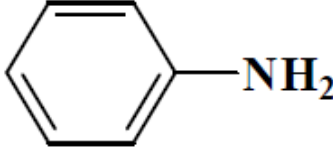
## EFFECTE DE LA RESSONÀNCIA

Quan la **càrrega negativa** de la base conjugada **pot deslocalitzar-se per ressonància**, **la força de l'àcid augmenta**.

A més, un **nombre més gran** de formes resonants o formes resonants més estables **fan més forts els àcids**.

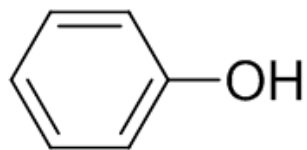
# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància

## EXEMPLES

	pK <sub>a</sub>		pK <sub>a</sub>		pK <sub>a</sub>
$R-OH$	15-18	$R-CH_3$	45	$R-NH_2$	35
	10		41		28
$R-C(=O)OH$	5	$CH_3O-C(=O)CH_3$	25	$R-C(=O)NH_2$	15
		$R-C(=O)CH_3$	20		
		$R-C(=O)CH_2-C(=O)R$	9		

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància

**Fenol**



pKa = 10

**VS**

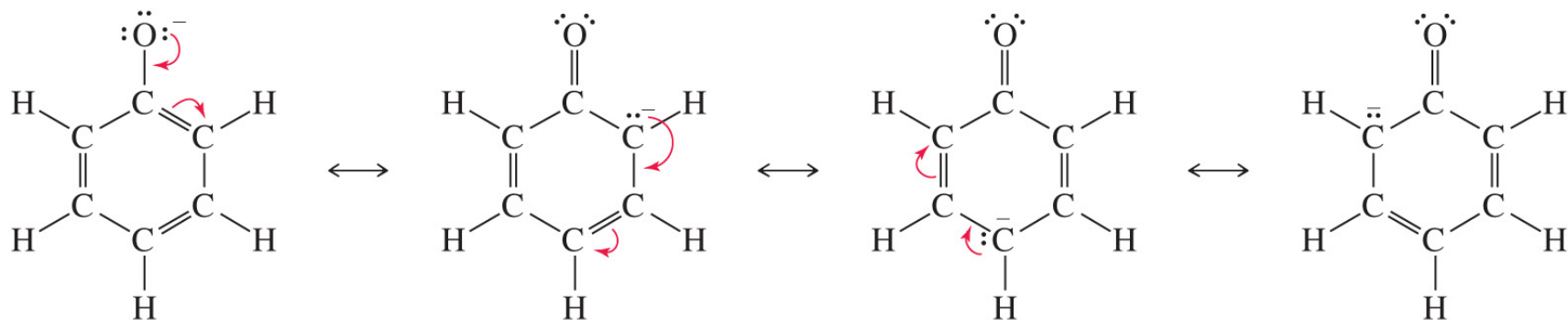
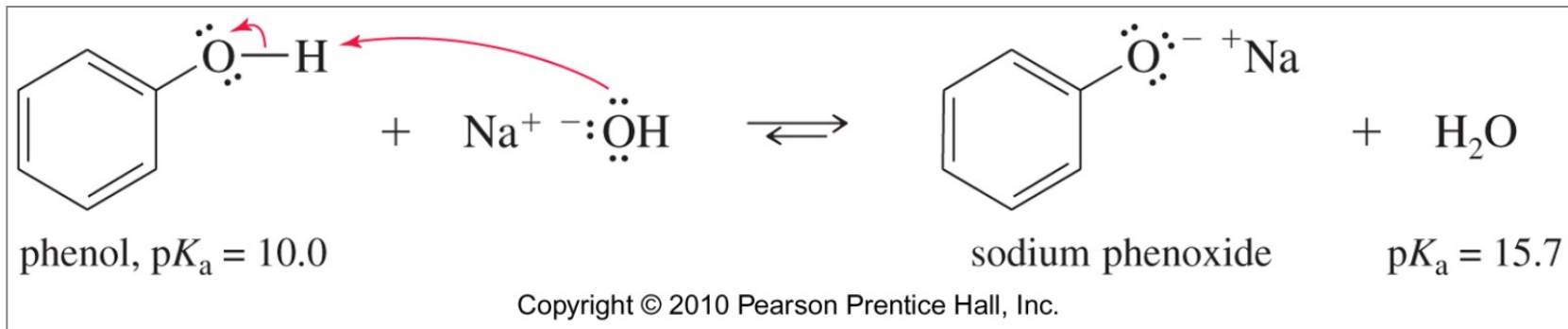
**Etanol**



pKa = 16

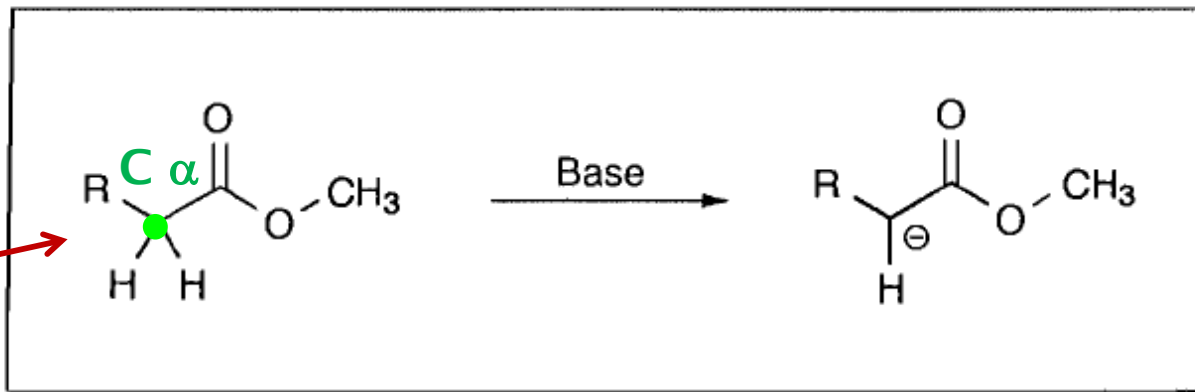
**Estabilització per  
ressonància?**

# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància



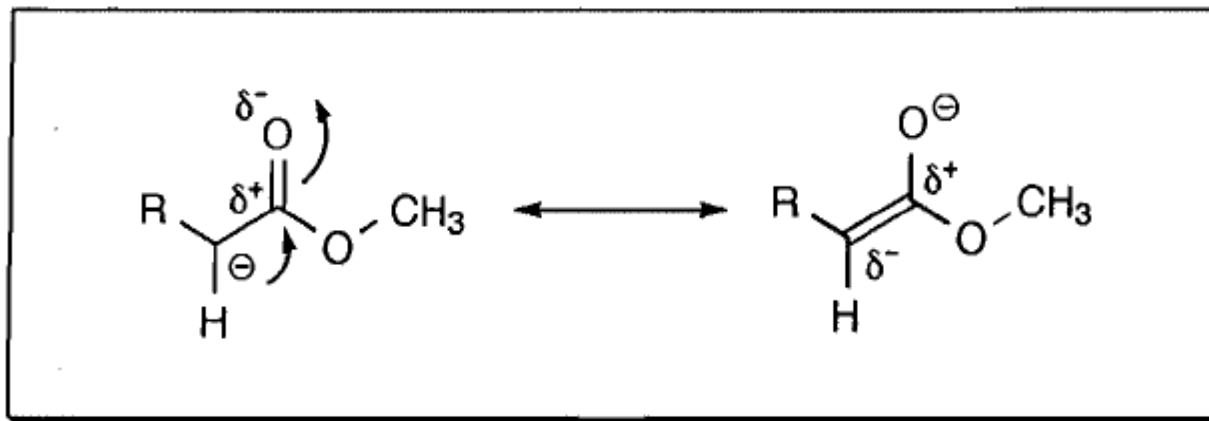
# Àcids i bases. Estabilitat de la base. Ressonància

H àcids



*Scheme 2.9 Esters can be deprotonated  $\alpha$  to ester carbonyls.*

## Estabilització per ressonància



*Scheme 2.10 Rationalization of the acidity of protons  $\alpha$  to ester carbonyls.*

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Estabilitat de la base

---

## **EFFECTES MENORS**

Canvis xicotets en el pKa, excepte si se'n dona més d'un alhora.

**Efectes inductius.**

---

**Canvis en la solvatació.**

---

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

---

**Transmissió  
de polaritat a  
través  
d'enllaços  $\sigma$**

És de xicoteta intensitat.

---

Augmenta quan augmenta el nombre de grups polars units al mateix àtom.

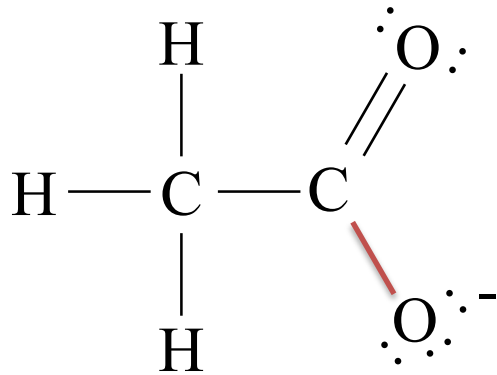
---

Disminueix amb la distància entre el dipol original i l'enllaç en qüestió.

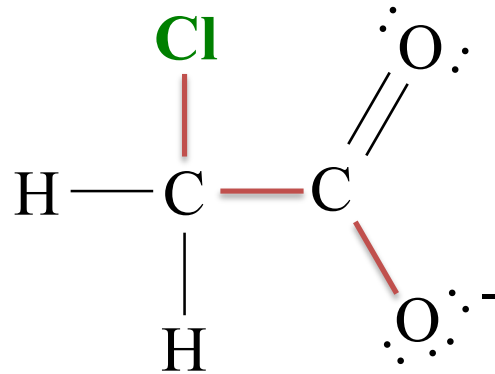
---



# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

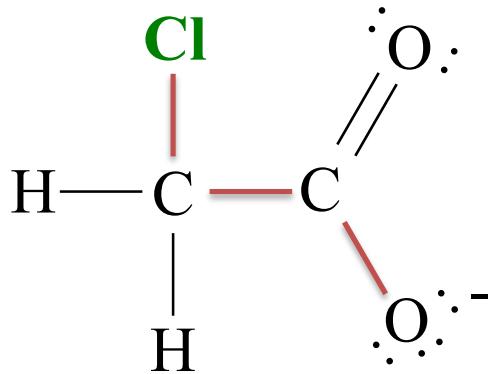


$$K_a = 1.8 \times 10^{-5}$$



$$K_a = 1.4 \times 10^{-3}$$

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

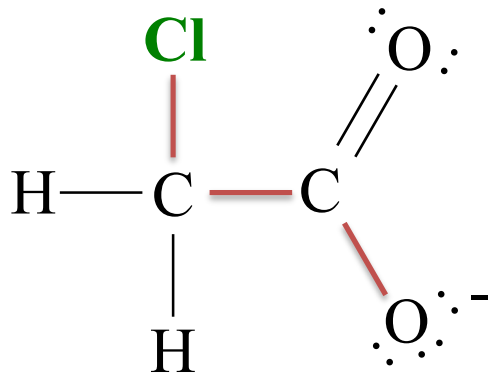


$$K_a = 1.4 \times 10^{-3}$$

L'àtom de Cl (molt electronegatiu) exercix un **efecte inductiu electron-tractor**, ja que retira densitat electrònica del C.

➡ Els **grups alquil** i altres àtoms menys electronegatius que el C poden cedir densitat electrònica al C i s'anomenen **grups electron-donadors**.

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu



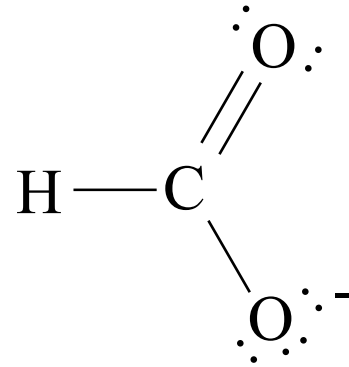
$$K_a = 1.4 \times 10^{-3}$$

L'àtom de Cl (molt electronegatiu) exercix un **efecte inductiu electró-atractor**, ja que retira densitat electrònica del C.

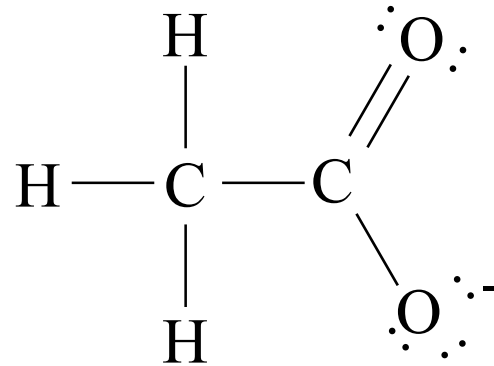
➡ Els **grups alquil** i altres àtoms menys electronegatius que el C poden cedir densitat electrònica al C i s'anomenen **grups electron-donadors**.

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

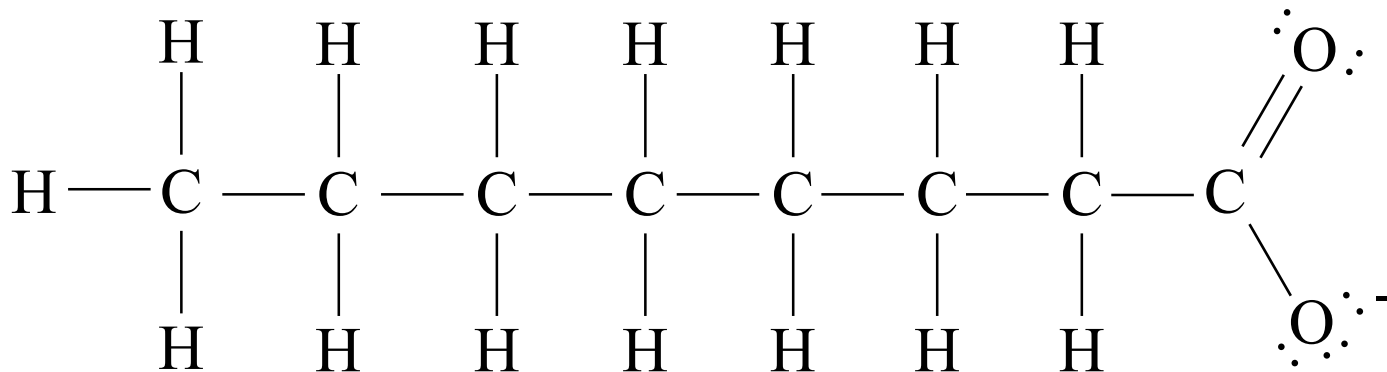
... ?



$$pK_a = 3,74$$



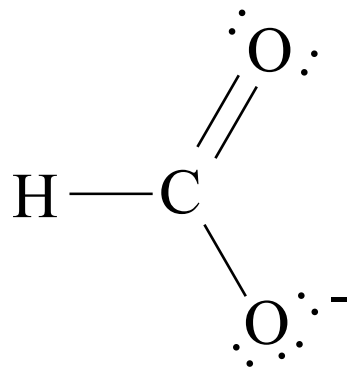
$$pK_a = 4,74$$



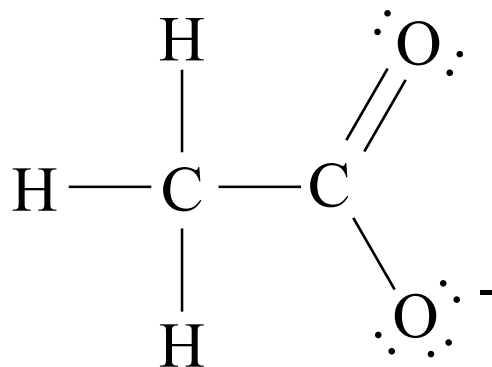
$$pK_a = 4,88$$

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

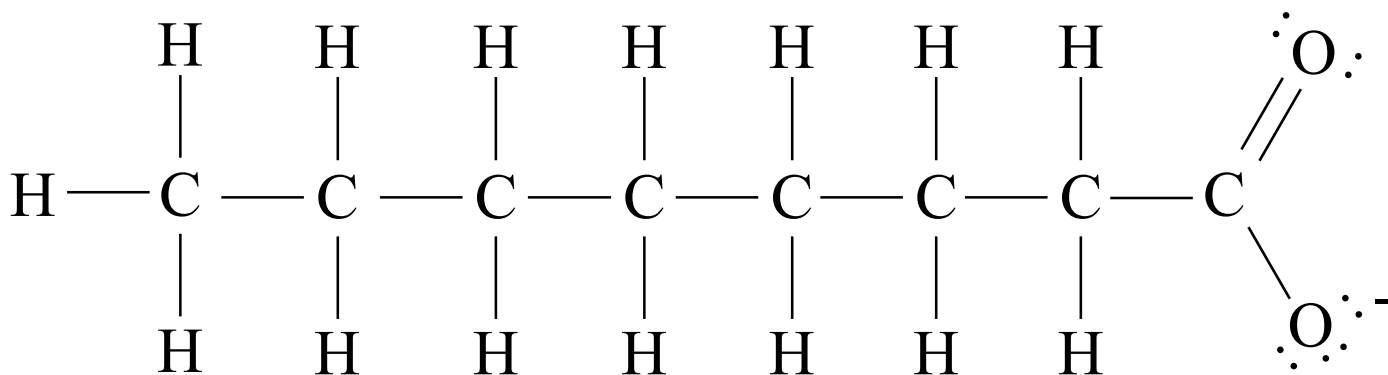
Els **grups alquil** i altres àtoms menys electronegatius que el C poden **cedir densitat electrònica** al C i s'anomenen **grups electró-donadors**.



$$pK_a = 3,74$$



$$pK_a = 4,74$$



$$pK_a = 4,88$$

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

## Efectes inductius

Els àtoms electronegatiu augmenten la força d'un àcid perquè el seu efecte inductiu **electró-atractor** contribueix a **deslocalitzar** (i per tant a **estabilitzar**) la càrrega negativa de la base conjugada.

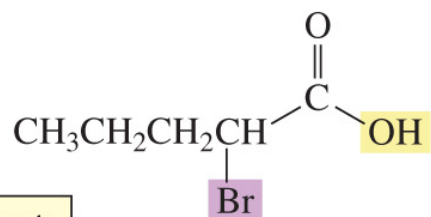
# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

Poden ser acumulatius...

Augment de l'electronegativitat	pK <sub>a</sub>	Polisubstitució	pK <sub>a</sub>
I—CH <sub>2</sub> COOH	3.1	CH <sub>3</sub> —COOH	4.7
Br—CH <sub>2</sub> COOH	2.9	Cl—CH <sub>2</sub> —COOH	2.8
Cl—CH <sub>2</sub> COOH	2.8	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{Cl}-\text{CH}-\text{COOH} \end{array}$	1.2
F—CH <sub>2</sub> COOH	2.6	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\   \\ \text{Cl}-\text{C}-\text{COOH} \\   \\ \text{Cl} \end{array}$	0.6

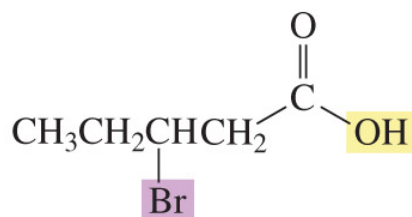
# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

Poden actuar en més d'un enllaç...

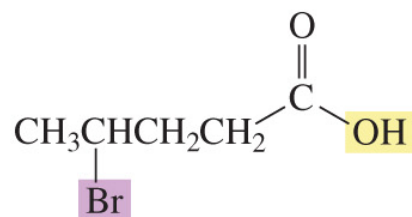


most acidic

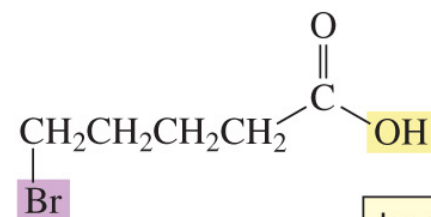
$pK_a = 2.97$



$pK_a = 4.01$



$pK_a = 4.59$



$pK_a = 4.71$

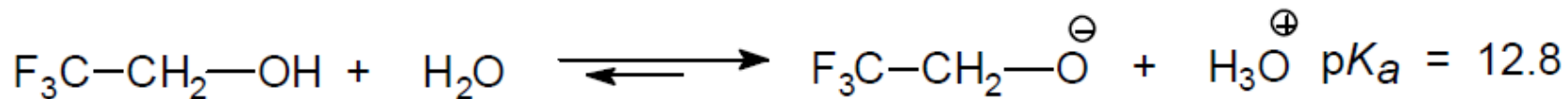
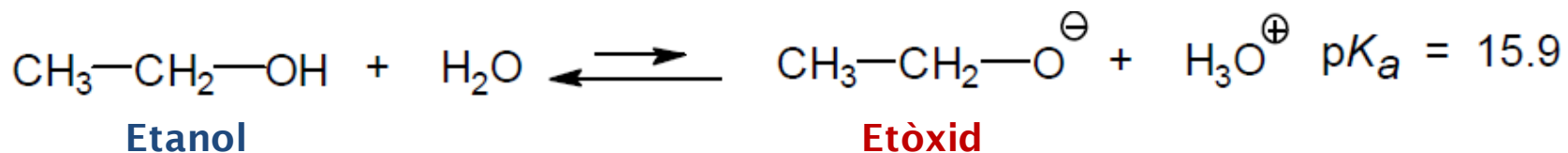
least acidic

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte inductiu

Poden actuar en més d'un enllaç.



Trifluoroetanol

**Anió trifluoroetòxid**  
més estabilitzat a causa  
de l'efecte atraient sobre  
la càrrega negativa que  
exerceixen els àtoms  
de F.

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte de la solvatació

## EFFECTE DE LA SOLVATACIÓ

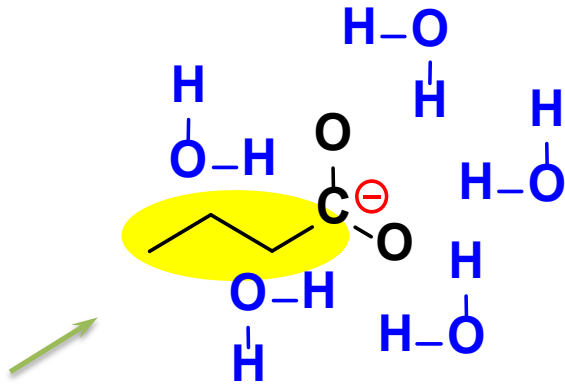
$\text{CH}_3\text{—COOH}$	4.75
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{—COOH}$	4.87
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—COOH}$	4.81

Són prou semblants...

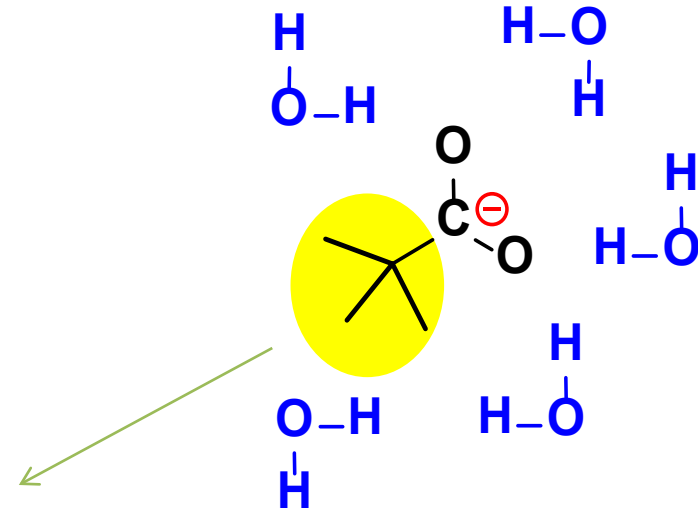
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{—C—COOH} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	5.02
--	------

....aquest té major  $\text{pK}_a$

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte de la solvatació



No ramificat



**Problemes estèrics** (el grup *t*-butil, més voluminós, no es solvata tan bé).

# Àcids i bases. Factors que influeixen. Efecte de la solvatació



Una major solvatació disminueix l'energia de l'ió (base conjugada), per tant serà una **base més estabilitzada** i l'àcid de partida més fort.

**Bases orgàniques**

**Amines**

## Amines

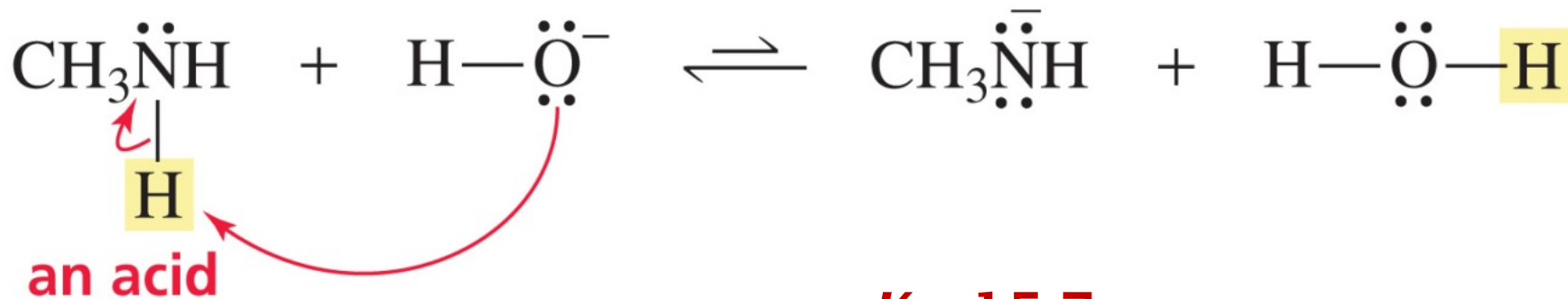


- Contenen el grup amino,  $\text{-NH}_2$ .
- Són àcids molt dèbils.
- El seu comportament habitual és com a bases.

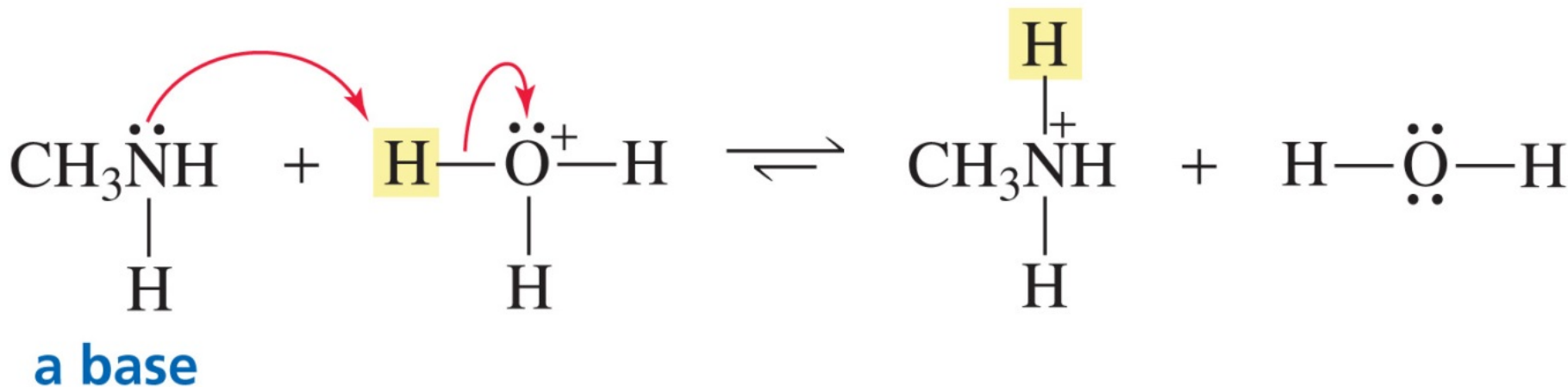


# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

$pK_a = 40$



$pK_a = 15,7$

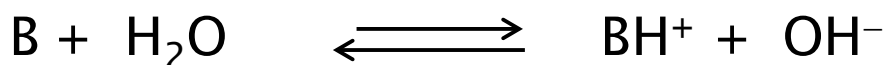


# **Factors que influeixen en la força d'una base**



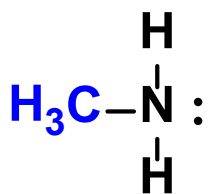
# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

## Factors que influeixen en la força d'una base

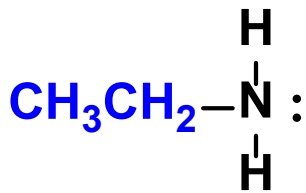


$$K_b = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$$

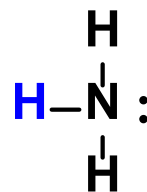
$pK_b = -\log [K_b]$



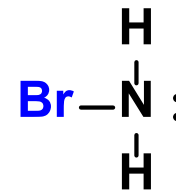
Metilamina  
 $pK_b = 3,38$



Etilamina  
 $pK_b = 3,37$



Amoniaco  
 $pK_b = 4,74$



Bromoamina  
 $pK_b = 7,61$

# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

---

**Factors que influencien la força d'una base**

Com més fort és un àcid, **més feble** n'és la base conjugada.

---

Els factors **estructurals i electrònics** que **estabilitzen** les bases **disminueixen** la seua basicitat.

---

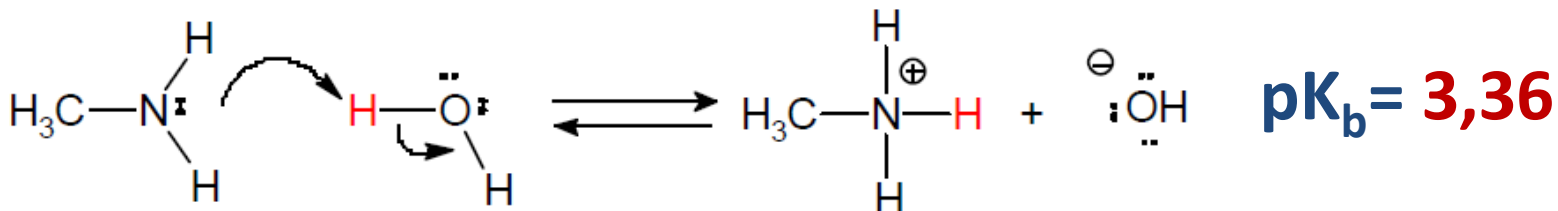
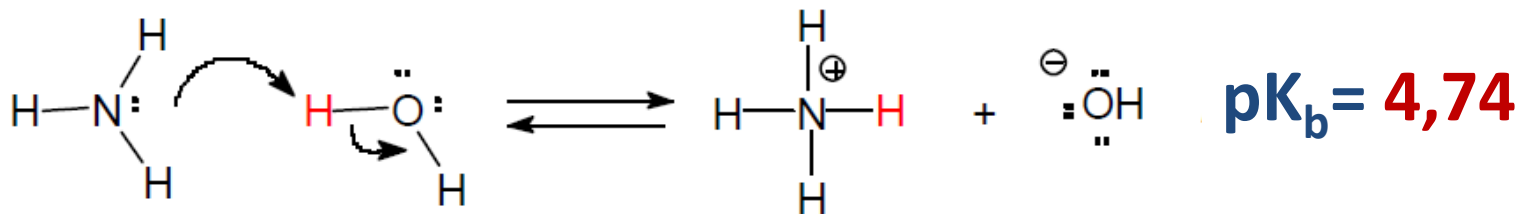
Els factors que ajuden a **estabilitzar més l'àcid conjugat** que la base, faran **augmentar la basicitat**.

---

## Efecte inductiu

Amoníac

Cations amoni



Metilamina

# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

La diferència de basicitat pot explicar-se per l'**efecte inductiu electró-donador** dels grups alquil.

El **grup metil** en la metilamina ajuda a establir **la càrrega positiva en el nitrogen** i per tant el seu àcid conjugat .

Per tant, la metilamina **és una base més forta** que l'amoniac.

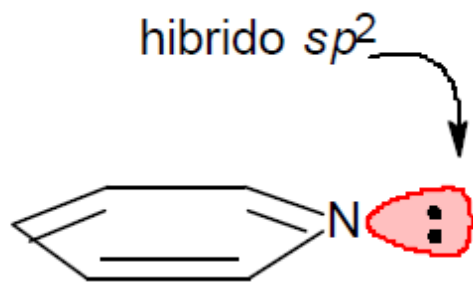
$\text{CH}_3\text{NH}_2$   
methylamine  
 $\text{p}K_a = 40$

$\text{NH}_3$   
ammonia  
 $\text{p}K_a = 36$

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

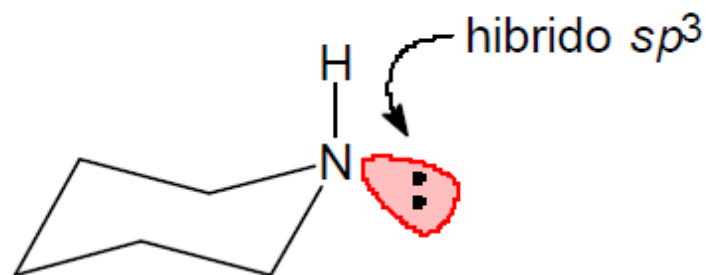
## Hibridació



piridina

$pK_b = 8.75$

**Electrons més atrets pel nucli i per tant menys disponibles.**

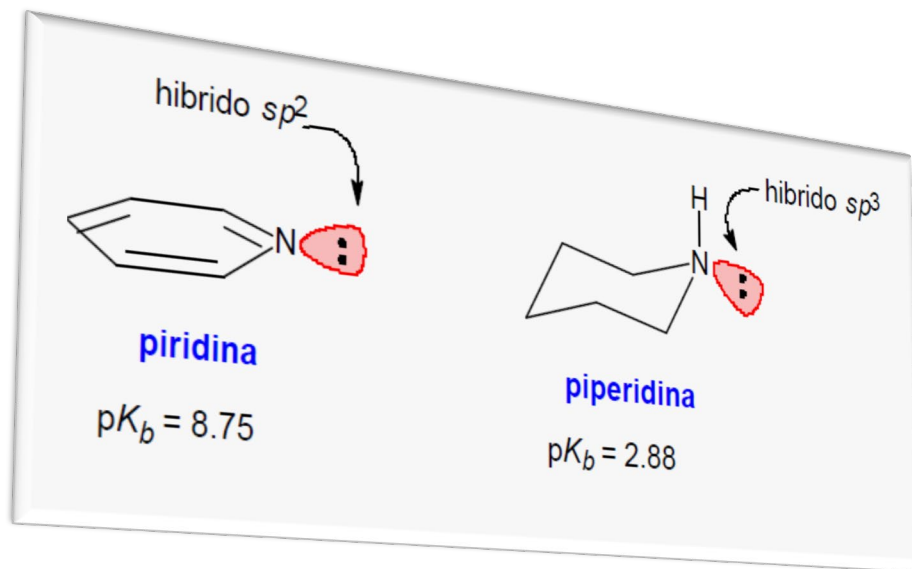


piperidina

$pK_b = 2.88$

En augmentar el caràcter “s” de l’orbital en què es troba el parell d’electrons en disminueix la basicitat.

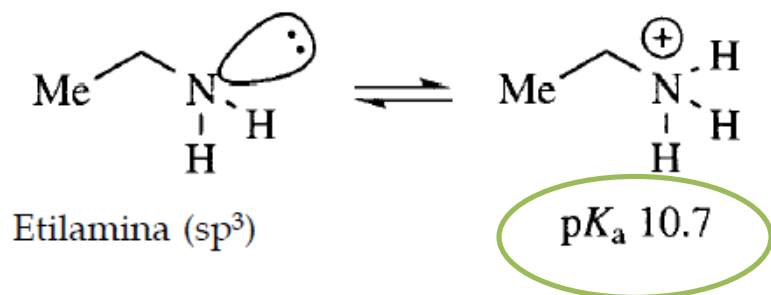
# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines



En augmentar el **caràcter "s"** de l'orbital en què es troba el parell d'electrons en **disminueix** la basicitat.

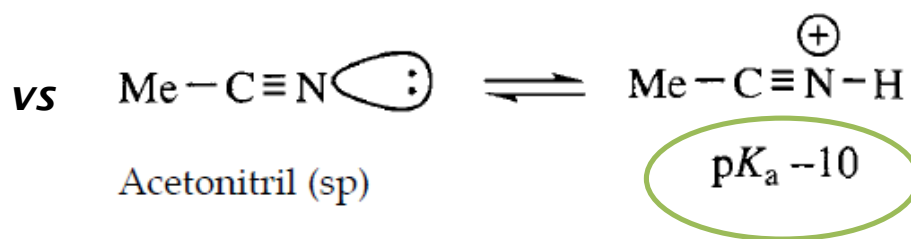
**Recordeu el caràcter penetrant dels orbitals...?**

# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines



**Base més  
força**

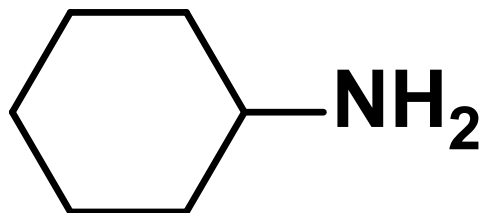
**Major  
caràcter “s”**



**Aneu amb precaució...  
són valors de  $pK_a$ ...**

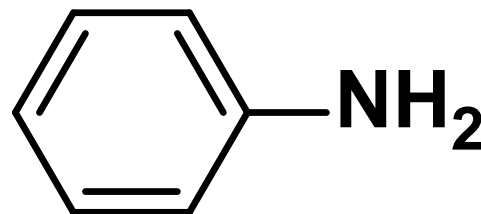
# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

## Ressonància



Ciclohexilamina  
 $pK_b \approx 3,36$

vs

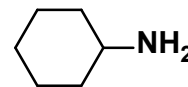


Anilina  
 $pK_b \approx 9,13$

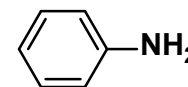


# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

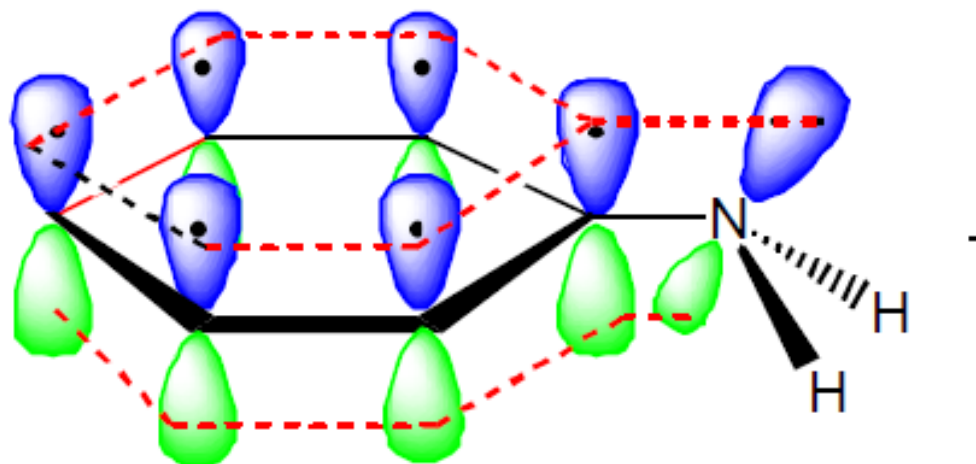
## Ressonància



Ciclohexilamina  
 $pK_b = 3,36$



Anilina  
 $pK_b = 9,13$

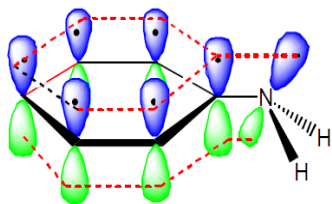


anilina

Estabilitzada per ressonància

# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

La possibilitat de deslocalitzar els electrons per **ressonància** en la base disminueix la basicitat. Les amines aromàtiques són bases més febles que les alifàtiques.

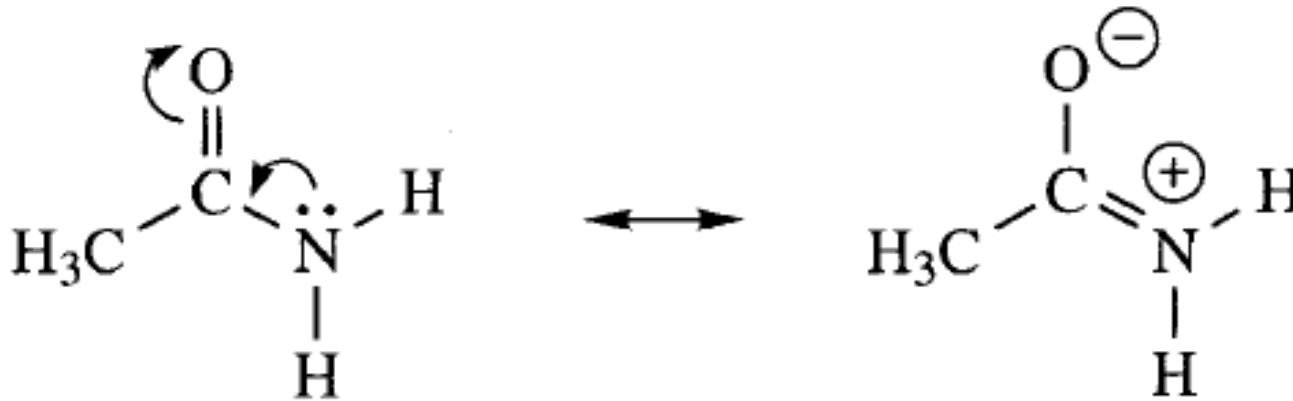


anilina

Estabilitzada per ressonància

# Àcids i bases Org. Factors que influeixen. Amines

**Les amides**  
són molt  
**menys**  
bàsiques que  
**les amines.**



**Acetamida**

# TEMA 7. COMPORTAMENT QUÍMIC ÀCID-BASE DE LES MOLÈCULES

## Àcis i bases com a reactius



Els conceptes de **nucleofília i electrofília**

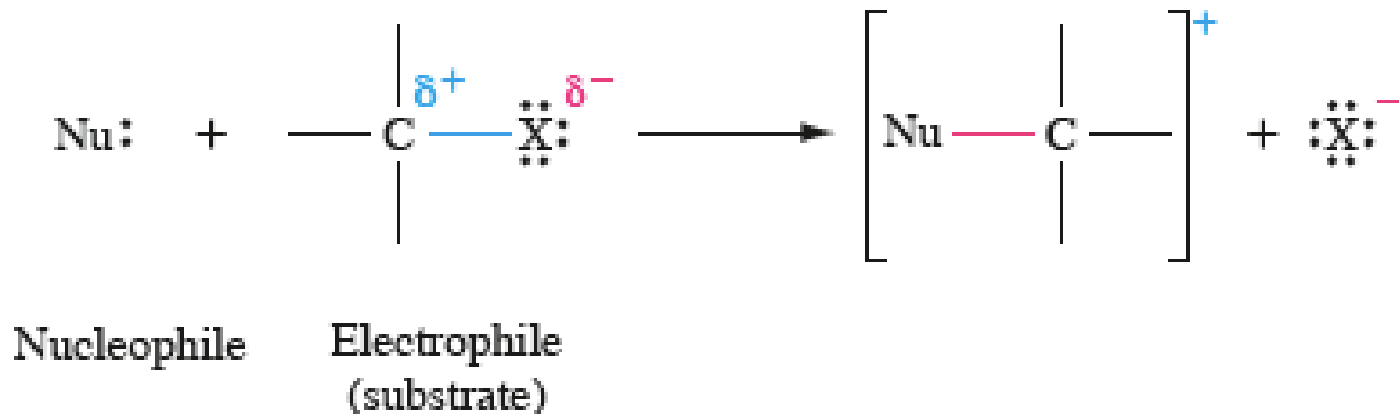
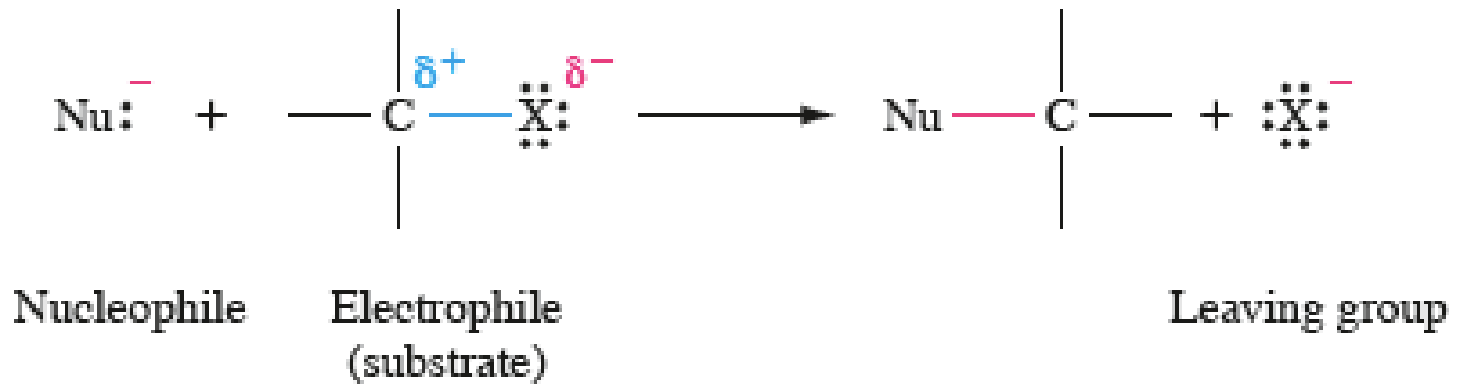
# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

Reacció en la qual un **nucleòfil** (espècie rica en electrons) reacciona amb un substrat o **electròfil** (espècie deficitària electrònicament) per a donar un **compost nou**.

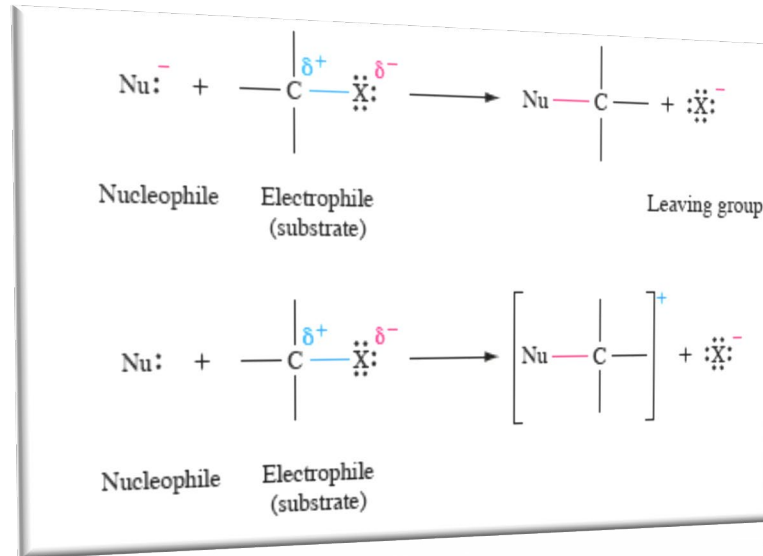
**Si se'n trenca un enllaç**, a més, es produeix un **grup eixint** que abans estava en l'electròfil.

# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

Reacció en la qual un **nucleòfil** (espècie rica en electrons) reacciona amb un substrat o **electròfil** (espècie deficitària electrònicament) per a donar un **compost nou** més un **grup eixint** que abans estava en l'electròfil.



# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

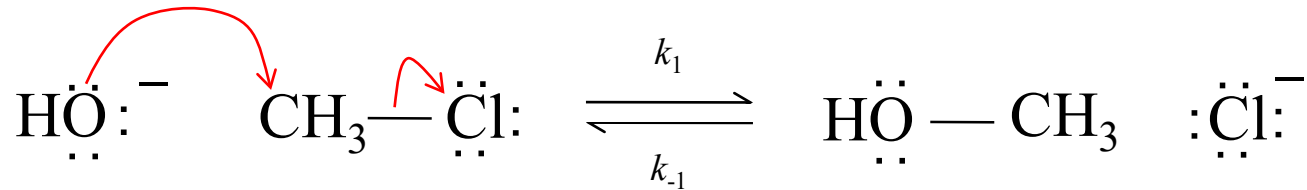


**Nucleòfil,** espècie rica en electrons que és capaç de reaccionar amb molècules que tinguen llocs amb densitat electrònica.

**Electròfil,** espècie deficitària electrònicament que és capaç d'acceptar electrons d'una altra molècula.

**Grup eixint,** (abans estava en l'electròfil) es una part de l'electròfil que s'escindeix i arrossega la càrrega electrònica que ha aportat el nucleòfil.

# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica



**Nucleòfil**, espècie rica en electrons que és capaç de reaccionar amb molècules que tinguen llocs amb densitat electrònica.

**Electròfil**, espècie deficitària electrònicament que és capaç d'acceptar electrons d'una altra molècula.

**Grup eixint**, (abans estava a l'electròfil) es una part de l'electròfil que s'escindeix i arrossega la càrrega electrònica que ha aportat el nucleòfil.



# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

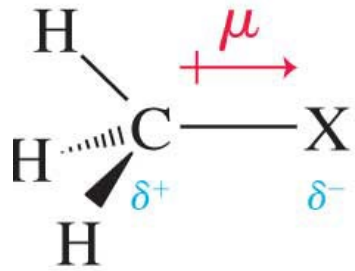
**TABLE 27.1** Classification of Common Nucleophiles

Excellent Nucleophiles		
		Rate <sup>a</sup>
NC <sup>-</sup>	Cyanide	126,000
HS <sup>-</sup>	Thiolate	126,000
I <sup>-</sup>	Iodide	80,000
Good Nucleophiles		
		Rate
HO <sup>-</sup>	Hydroxide	16,000
Br <sup>-</sup>	Bromide	10,000
N <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Azide	8,000
NH <sub>3</sub>	Ammonia	8,000
NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	Nitrite	5,000
Fair Nucleophiles		
		Rate
Cl <sup>-</sup>	Chloride	1,000
CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	Acetate	630
F <sup>-</sup>	Fluoride	80
CH <sub>3</sub> OH	Methanol	1
H <sub>2</sub> O	Water	1

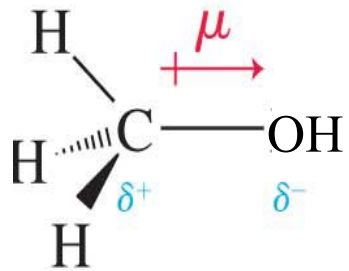
<sup>a</sup>The rate is a relative rate. A rate of 100 means that the nucleophile reacts 100 times as fast as water does.

# Nucleòfils

# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

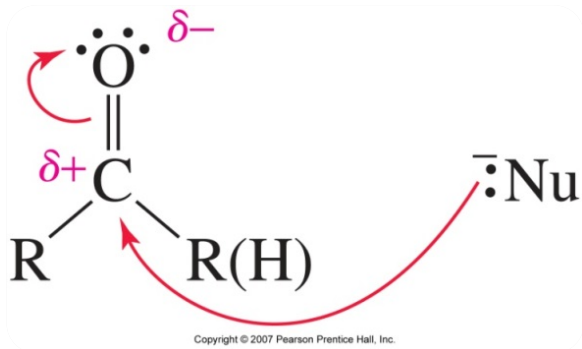


**C** unit a halògen  
(halurs d'alquil)



**C** unit a alcohol

# Electròfils



**C** carbonílic

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

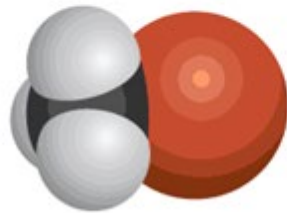
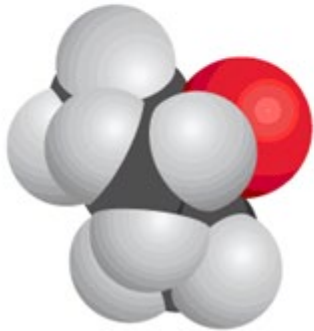
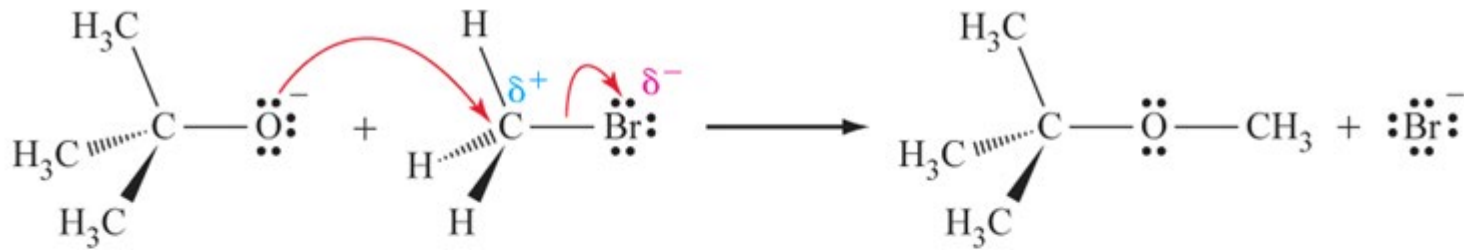
# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

**Nucleòfil**

**Electròfil**

**Nou compost**

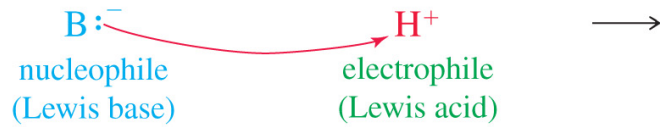
**Grup eixint**



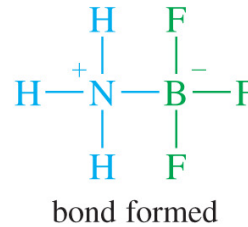
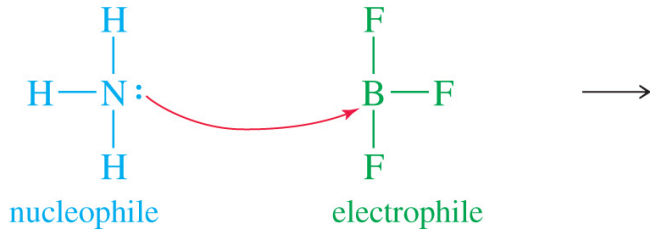
## Sempre hi ha grup eixint...?

- Quan es forma un enllaç en una reacció polar, *el nucleòfil ataca l'electròfil.*
- Quan es trenca un enllaç, l'àtom més electronegatiu rep els electrons.

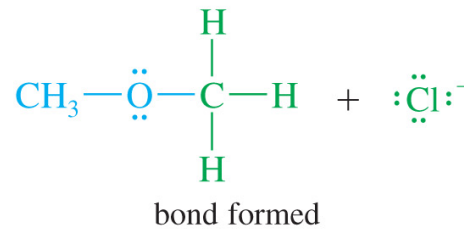
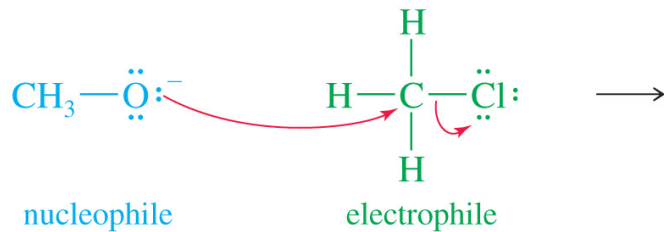
# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica



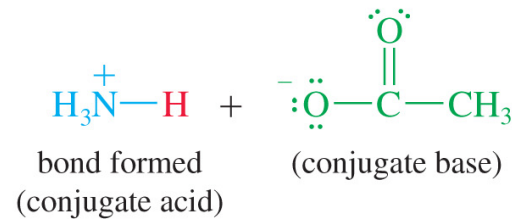
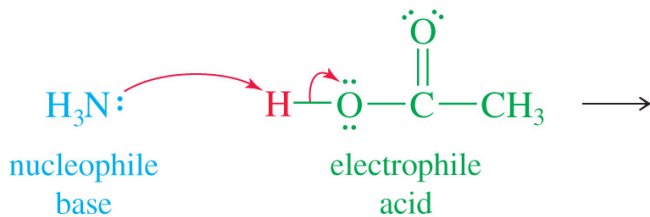
Reacció àcid-base de Lewis



No es trenca cap enllaç!

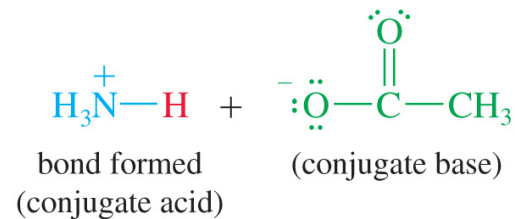
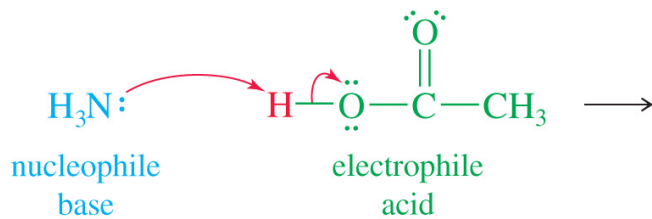
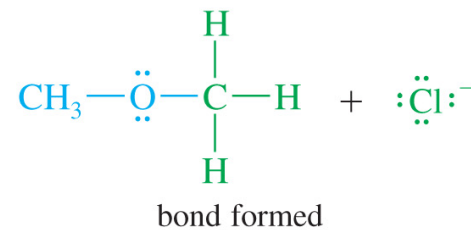
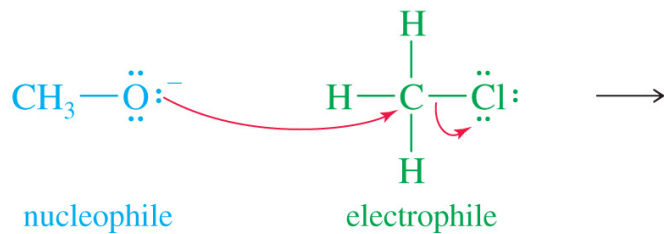
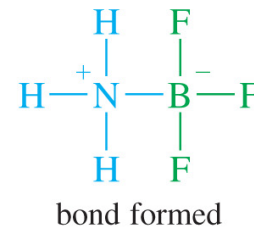
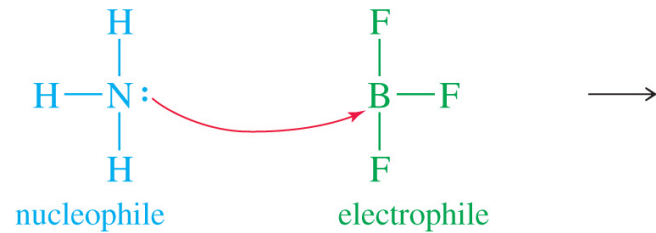
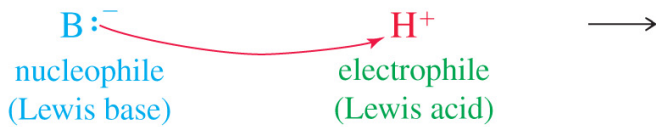


Reacció electròfil-nucleòfil



Reacció àcid-base (Bronsted)

# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica



Copyright © 2010 Pearson Prentice Hall, Inc.

Reacció àcid-base  
(Bronsted)

És una base o un nucleòfil...?

# Nucleòfils i electròfils. Reaccions de substitució nucleofílica

## És una base o un nucleòfil...?

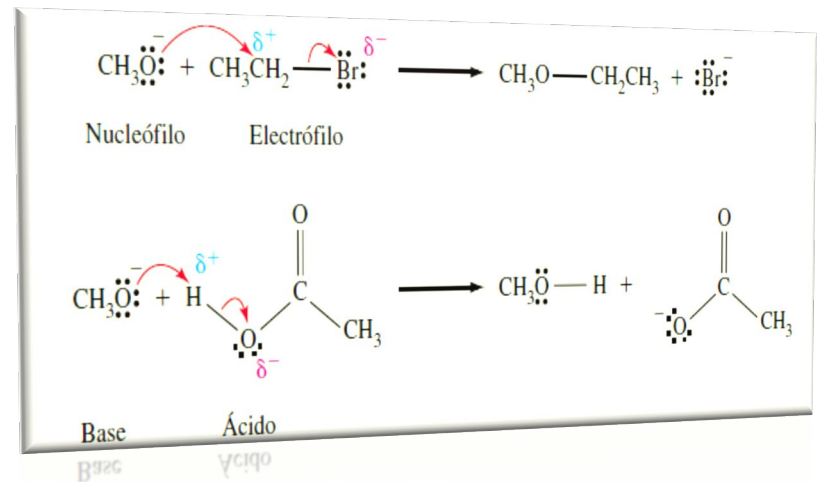
Una molècula o un ió que tinga un parell d'electrons solitaris pot actuar com un **donador de parells d'electrons** en una reacció amb un **protó o un àtom de carboni electròfil**. En els dos casos es forma un nou enllaç.

Quan es forma l'enllaç amb un **protó**, el donador de parells d'electrons ha reaccionat **com una base**. Quan l'enllaç és amb un **àtom de carboni**, el donador de parells d'electrons ha reaccionat com un **nucleòfil**. Els químics utilitzen els termes *basicitat* o *nucleofília* quan es refereixen a la tendència d'un donador de parells d'electrons a actuar com una base o un nucleòfil en una reacció. **La basicitat és una mesura de la tendència d'un donador de parells d'electrons a reaccionar amb un protó.**

**La nucleofília és una mesura de la disponibilitat** (o rapidesa) amb la qual un nucleòfil ataca un àtom de carboni electròfil. Quan es compara la basicitat de molècules o ions s'utilitzen **les constants d'equilibri (Kb)** i per tant **la basicitat és una propietat d'equilibri (termodinàmica)**. Quan es compara la nucleofília de molècules o ions, es fa en funció de les velocitats amb

què ataquen un carboni electròfil i, per tant, **la nucleofília és una propietat cinètica.**

El que pot resultar una mica confús és que una molècula o ió amb un parell solitari puga actuar **bé com una base, bé com un nucleòfil**. Per exemple, l'ió metòxid,  $\text{CH}_3\text{O}^-$ , és alhora una base forta i un bon nucleòfil. Així, és important comprendre no només factors que afecten la basicitat sinó també aquells que afecten la nucleofília.



# Algunes idees clau... tema 7

1. **El concepte central en la teoria d'Arrhenius** descriu una reacció de neutralització com la combinació d'ions d'hidrogen i d'ions d'hidròxid per a formar aigua (expressió 16.1). La decisió més important d'aquesta teoria és que no té en compte el paper clau del dissolvent en la dissociació d'un solut. D'altra banda, **la teoria de Brønsted-Lowry** descriu un àcid com a donador de protons i una base com a acceptor de protons. En una reacció àcid-base, una base pren un protó ( $H^+$ ) d'un àcid. En general, les reaccions àcid-base són reversibles, però l'equilibri es desplaça en el sentit des dels àcids i les bases més fortes cap als seus conjugats més febles. De la base conjugada ( $A^-$ ) procedeix l'àcid  $HA$ , mentre que l'àcid conjugat ( $HB^+$ ) procedeix de la base ( $B$ ). Les combinacions de  $HA / A^-$  i  $B / HB^+$  es coneixen com a parells àcid-base conjugats. Les constants d'equilibri que representen la dissociació d'un àcid o d'una base en aigua es descriuen correntment com a constant de dissociació de l'àcid i constant de dissociació de la base, respectivament.

2. **Algunes substàncies, per exemple l'aigua, es diu que són amfipròtiques.** Poden actuar com un àcid o com una base. En aigua pura i en dissolucions aquoses, l'autodissociació de l'aigua té lloc en una extensió molt menuda i produeix  $H_3O^+$  i  $OH^-$ , en la forma descrita per la constant d'equilibri  $K_w$ , coneguda com el producte iònic de l'aigua. Les denominacions pH i pOH s'utilitzen freqüentment per a descriure les concentracions d' $H_3O^+$  i  $OH^-$  en les dissolucions aquoses.

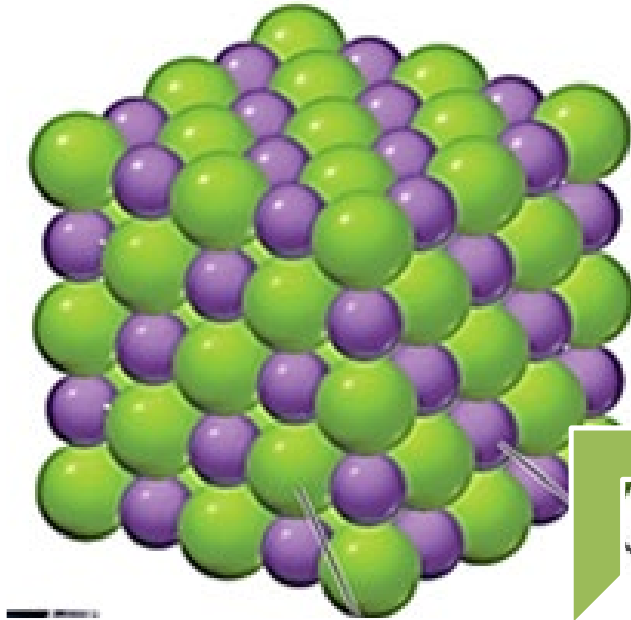
3. **La teoria àcid-base de Lewis** preveu un acceptor de parells d'electrons com un àcid de Lewis i un donador de parells d'electrons com una base de Lewis. El compost d'addició d'una reacció àcid-base de Lewis és designat com un adducte. La teoria és més útil en situacions que no es poden descriure mitjançant transferència de protons, per exemple, en reaccions que impliquen gasos i sòlids, en reaccions entre compostos orgànics i en complexos de coordinació.



4. En les dissolucions aquoses, **els àcids forts** s'ionitzen totalment per a produir  $\text{H}_3\text{O}^+$  i les bases fortes es dissocien totalment per a produir  $\text{OH}^-$ . Els àcids i les bases fortes comuns s'inclouen i poden memoritzar fàcilment. **Les dissociacions d'àcids febles i bases febles** són reaccions reversibles, i l'extensió del seu grau de dissociació pot relacionar-se amb les constants  $K_a$  i  $K_b$  o els seus equivalents logarítmics,  $\text{p}K_a = -\log K_a$  i  $\text{p}K_b = -\log K_b$ . Un altre mètode utilitzat per a indicar el grau de dissociació és el percentatge de dissociació.

5. **En les reaccions entre ions i aigua**, els ions reaccionen com àcids o bases febles. El pH de les dissolucions de sals depenen dels anions o dels cations presents. Els anions que procedeixen d'àcids febles proporcionen dissolucions amb pH 7.7, mentre que els cations que procedeixen de bases febles proporcionen dissolucions amb pH 7.

6. **L'estructura molecular està íntimament relacionada amb la força d'àcids i bases.** Per exemple, en els **oxiàcids** amb el mateix nombre de grups OH i el mateix nombre d'àtoms d'O, la força àcida augmenta en augmentar l'electronegativitat de l'àtom central. Per als oxiàcids amb el mateix àtom central, la força àcida s'incrementa en augmentar el nombre d'àtoms d'oxigen units a l'àtom central. **D'altra banda, les estructures dels àcids carboxílics**, els quals són àcids orgànics que contenen el grup COOH, també ajuden a comprendre'n l'acidesa. L'acidesa de molts àcids febles està associada amb el grup àcid carboxílic, COOH. **Les bases febles contenen típicament un o més àtoms de nitrogen.** La composició molecular i l'estructura són les claus per a determinar si una substància és àcida, bàsica o amfipròtica. A més, l'estructura molecular determina si un àcid o una base són forts o febles. Per a valorar la força de l'àcid, per exemple, cal prendre en consideració els factors que afecten la força de l'enllaç que es trenca per a alliberar  $\text{H}^+$ . Per a valorar la força de la base, el tema principal són els factors que afecten la capacitat dels parells d'electrons solitaris per a unir-se a un protó. Tant en àcids com en bases l'estabilitat de la base, o l'àcid conjugat és clau per a comprendre'n la força com un àcid o una base.



# TEMA 8

## SÒLIDS NO MOLECULARS

# TEMA 8. SÒLIDS NO MOLECULARS

## Tipus de sòlids



- Conceptes generals

## Estructures cristal·lines



- Estructures compactes. Tipus
- Difracció de raigs X

## Sòlids iònics



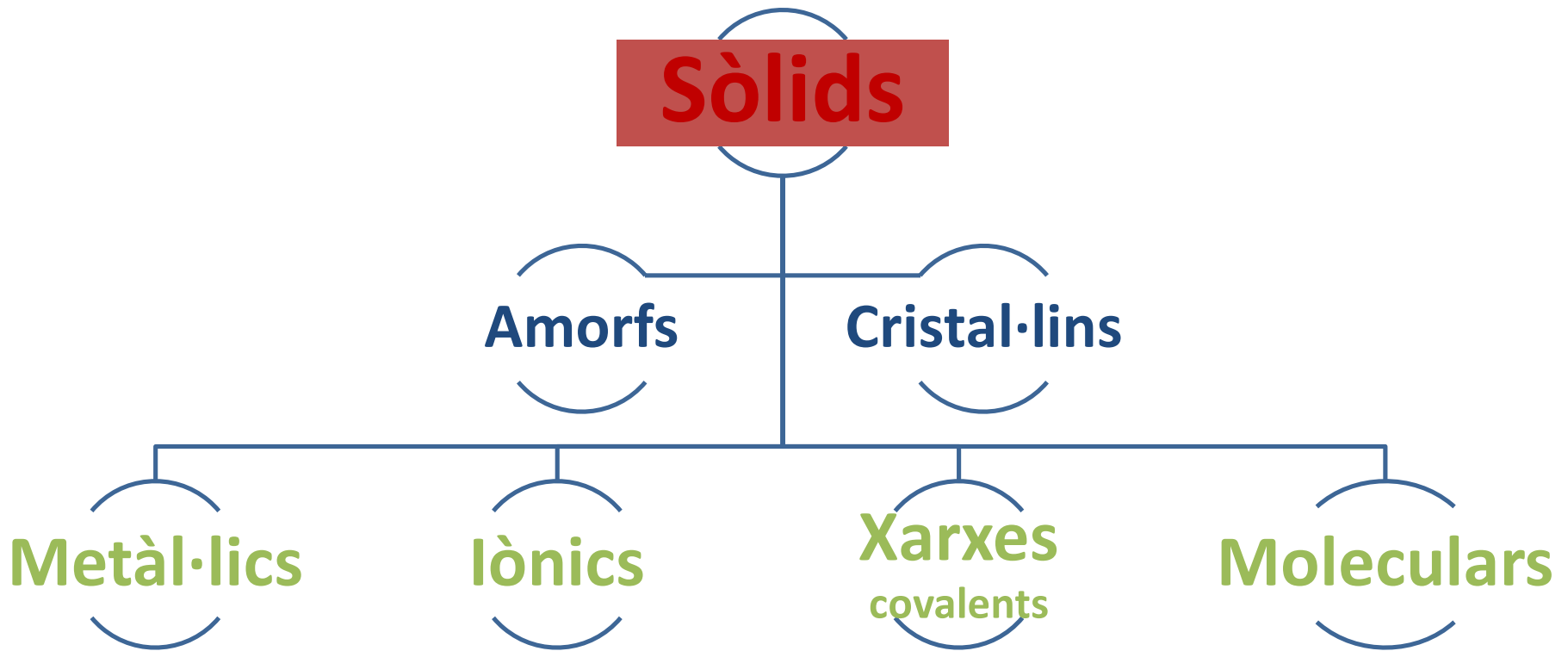
- El cicle de Born-Haber
- Polarització i covalència. Regles de Fajans
- Estructures cristal·lines iòniques

## Sòlids metàl·lics



- El model del mar d'electrons
- Teoria de bandes
- Semiconductors

# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Conceptes generals**



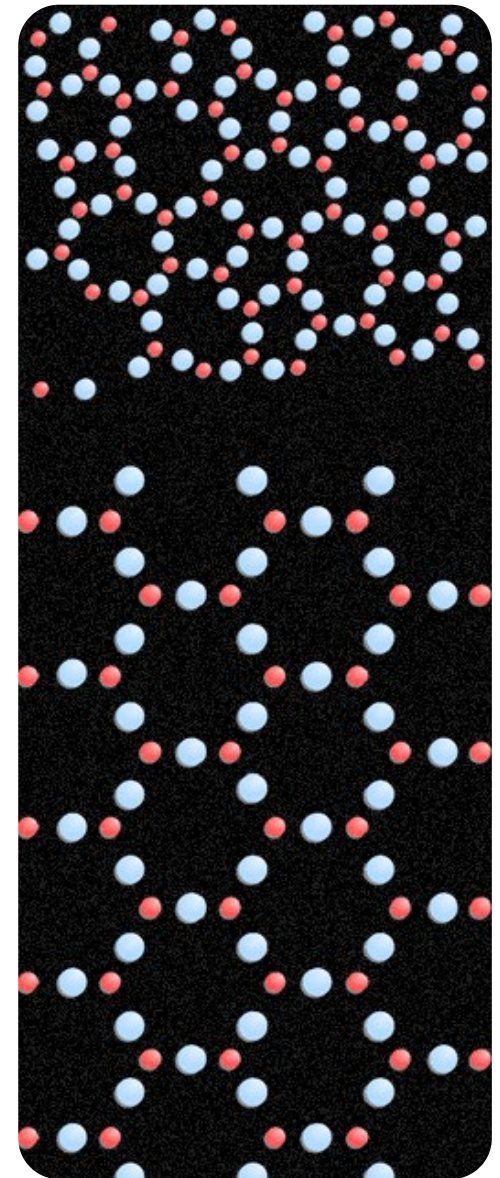
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids amorfs

## SÒLIDS AMORFS

Les partícules **no**  
tenen estructures  
ordenades sinó  
que estan  
disposades de  
**forma aleatòria.**

$\text{SiO}_2$   
en el vidre

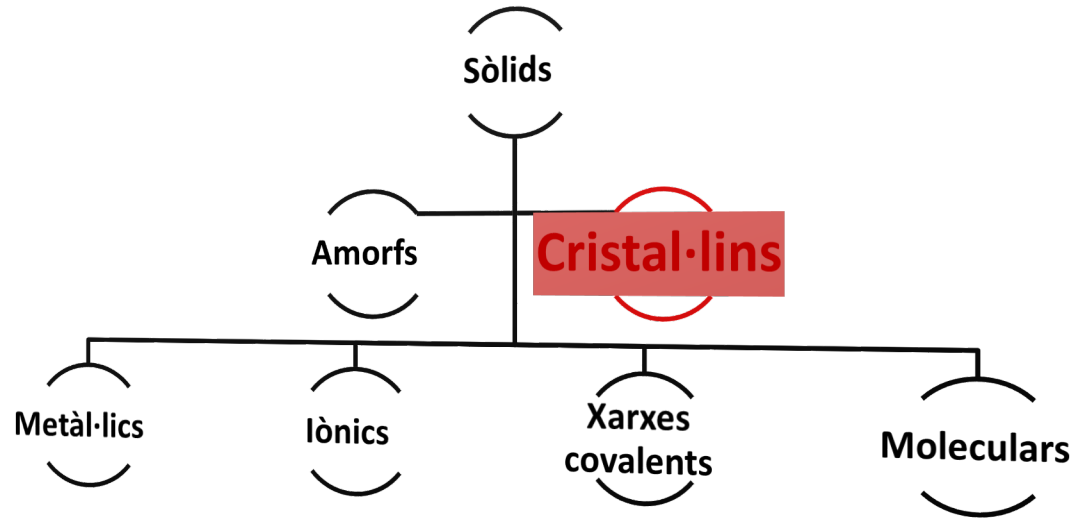
$\text{SiO}_2$   
en el quars



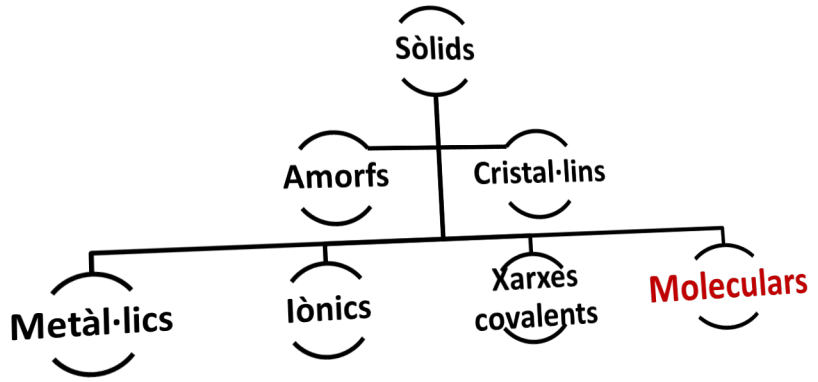
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids cristal·lins

## SÒLIDS CRISTAL·LINS

les seues partícules estan  
ordenades en  
arreglaments  
tridimensionals ben  
definitos i vibren al voltant  
de posicions fixes.



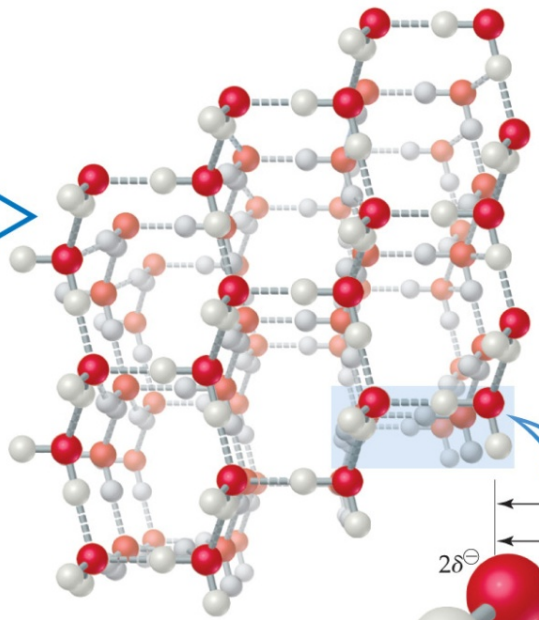
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids cristal·lins



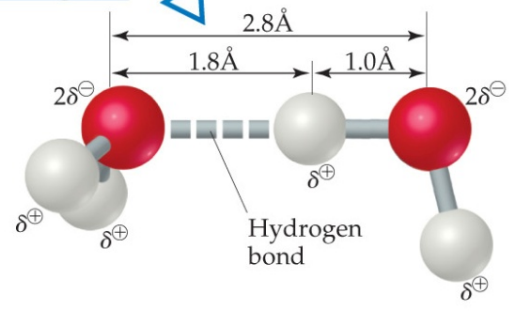
**SÒLIDS MOLECULARS**  
Les partícules són **MOLECULES** que es mantenen unides mitjançant **FORCES DE VAN DER WAALS**.



(a)

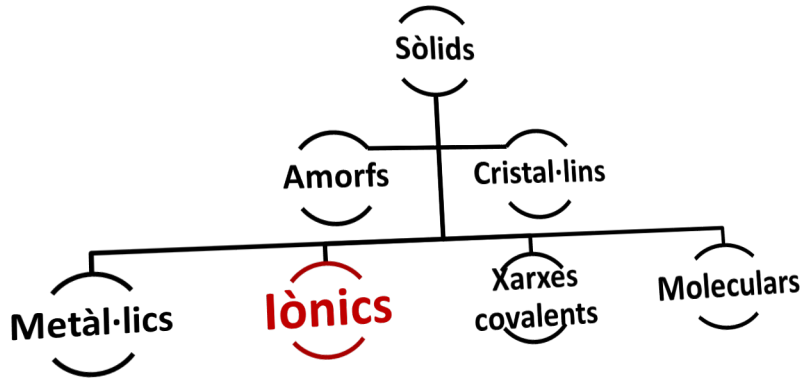


(b)

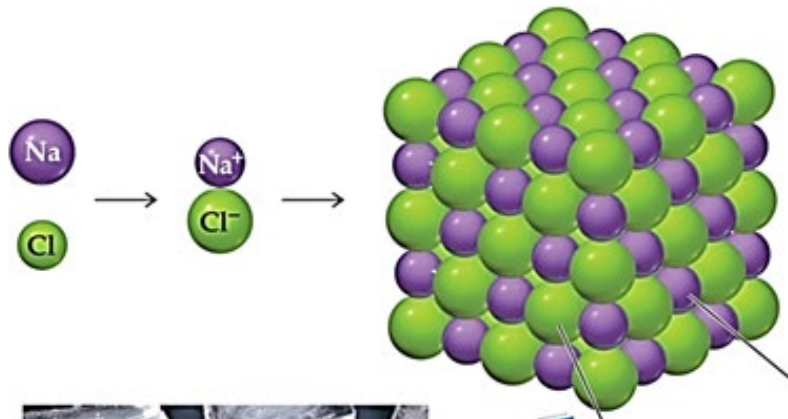


(c)

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids cristal·lins



**SÒLIDS IÒNICS**  
Les partícules són **IONS** que es mantenen units mitjançant **ENLLAÇOS IÒNICS** en una disposició tridimensional ordenada.

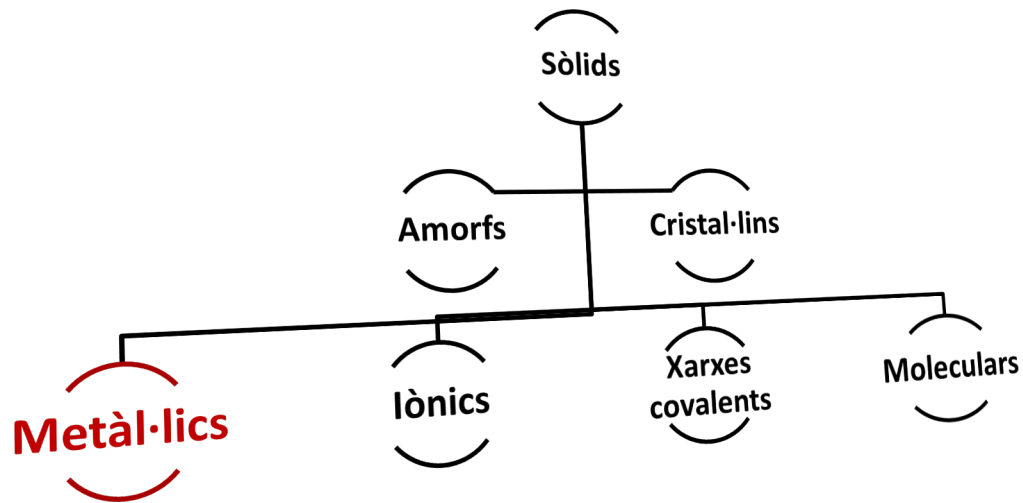


In the sodium chloride crystal, each  $\text{Na}^+$  ion is surrounded by six nearest-neighbor  $\text{Cl}^-$  ions ...

... and each  $\text{Cl}^-$  ion is surrounded by six nearest-neighbor  $\text{Na}^+$  ions.



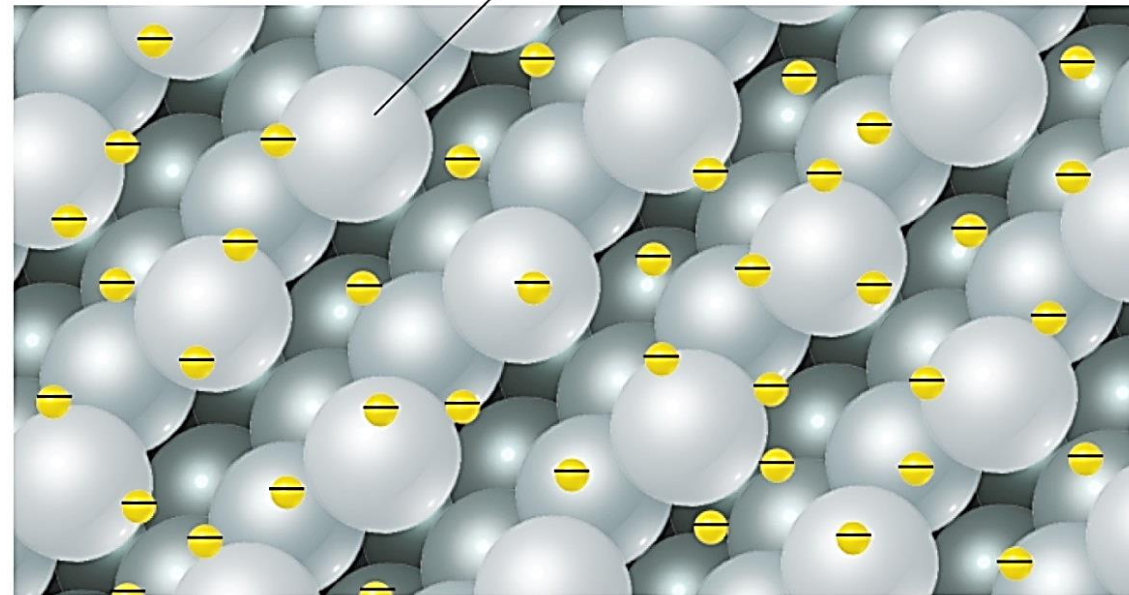
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids cristal·lins



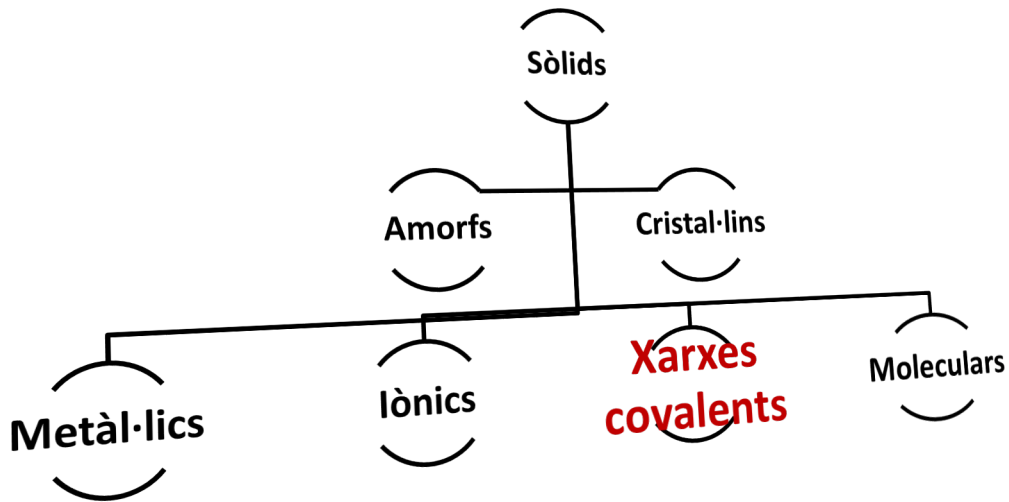
## SÒLIDS METÀ·LICS

Les partícules són **ÀTOMS** units mitjançant els electrons de valència, que es troben deslocalitzats **al llarg de tot el sòlid** (es pot visualitzar com un conjunt d'ions positius immersos en un mar d'electrons).

Metal ion (+)

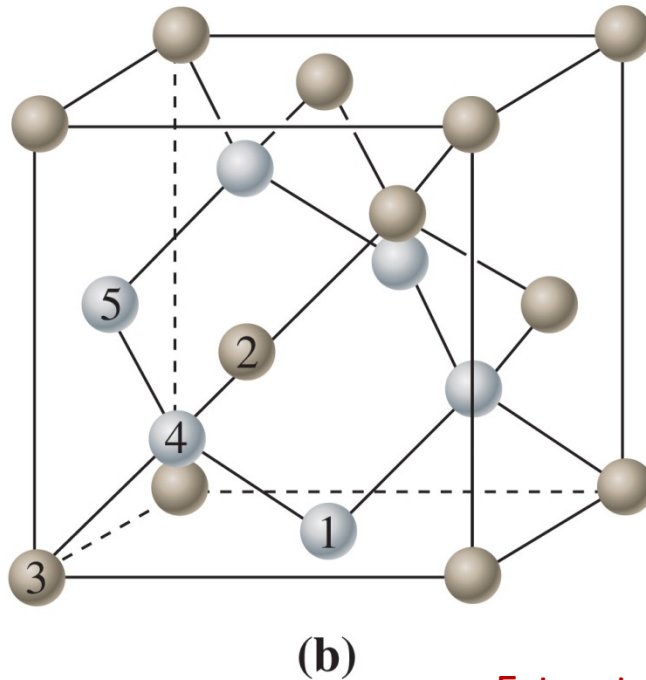
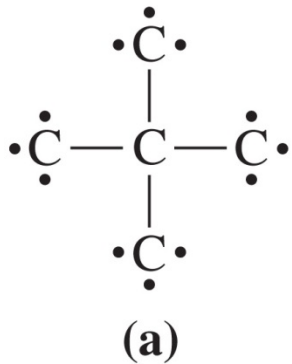


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids cristal·lins

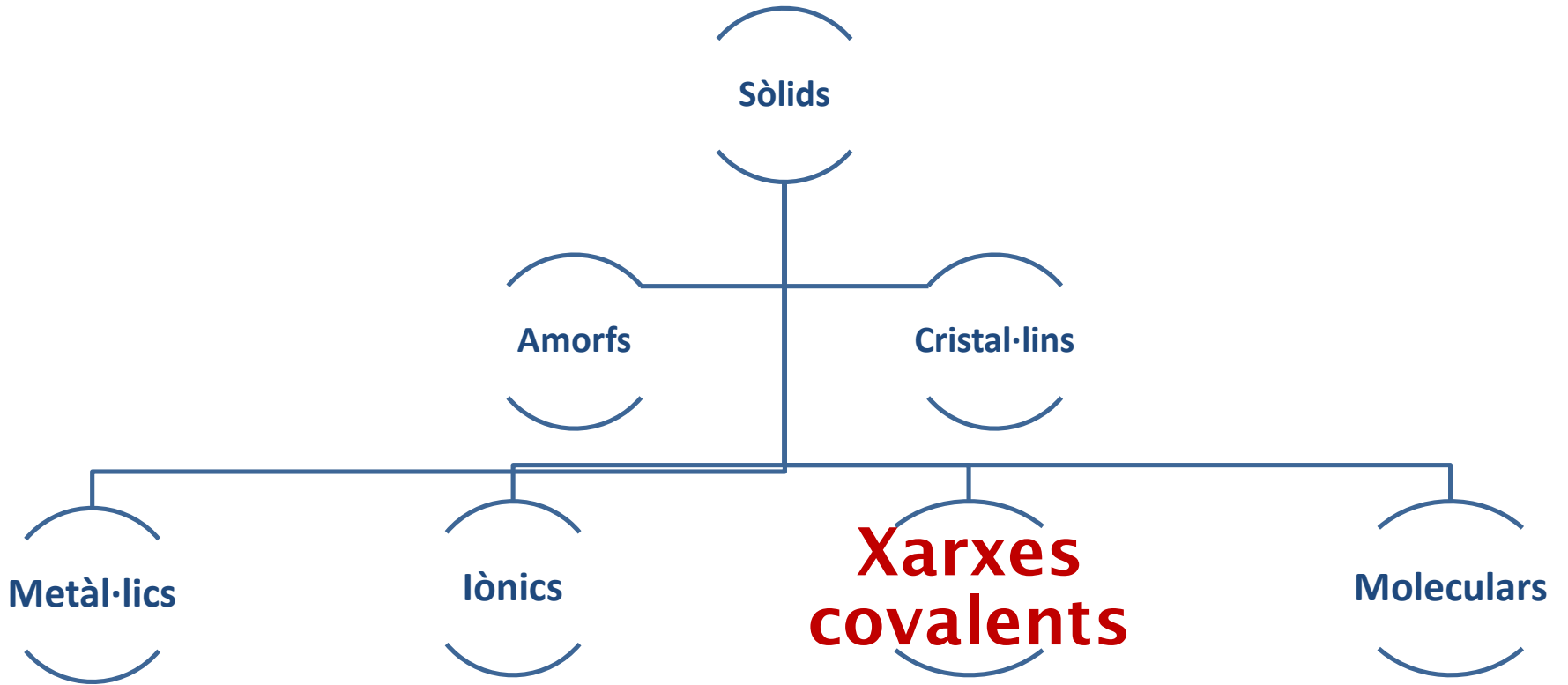


## XARXES COVALENTS

Les partícules són ÀTOMS, units mitjançant ENLLAÇOS COVALENTS que formen una gran matriu tridimensional.



Estructura tridimensional del diamant



# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS



Quars

Les seues  
partícules són  
ÀTOMS, units  
mitjançant  
ENLLAÇOS  
COVALENTS  
formant **una**  
**gran matriu**  
**tridimensional**

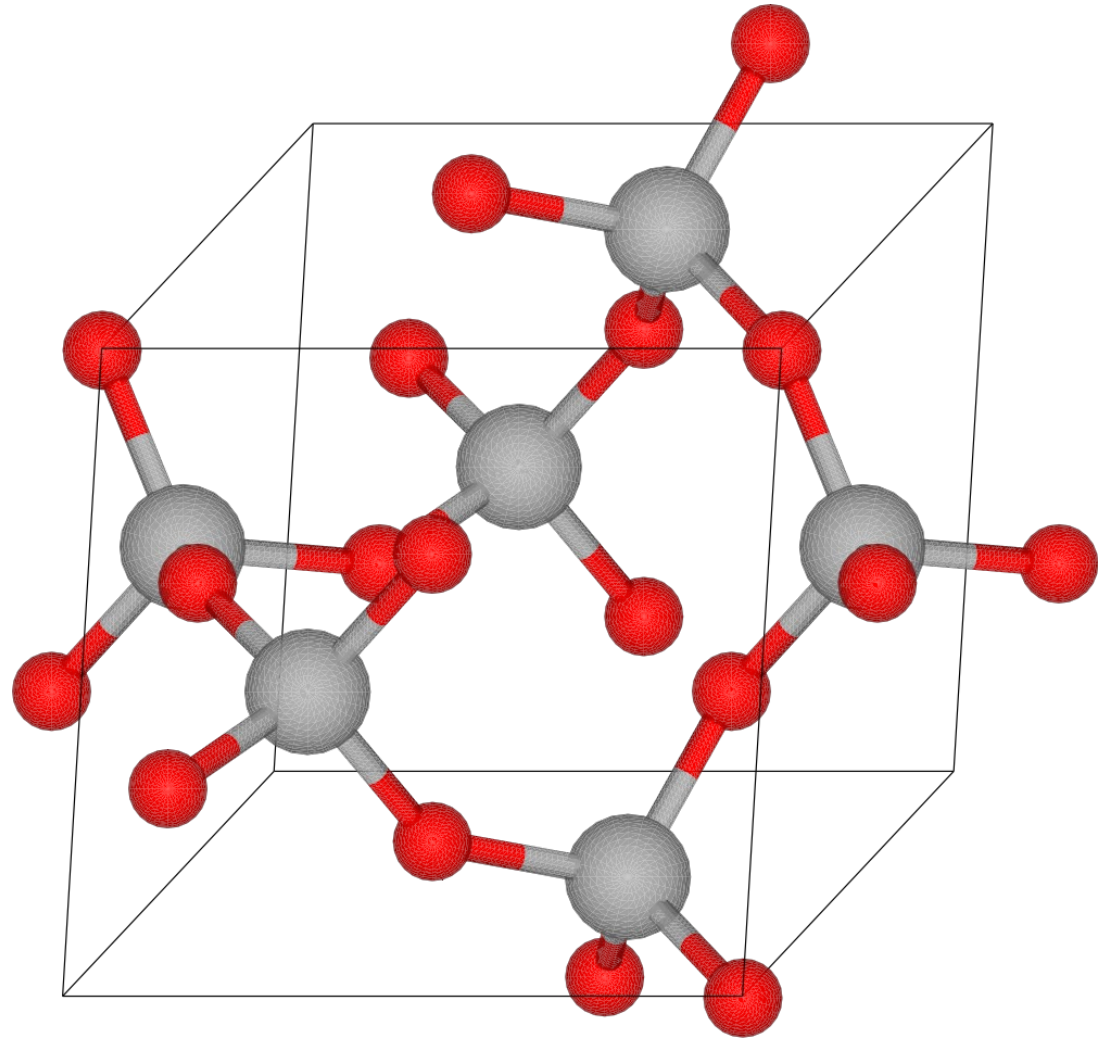


# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

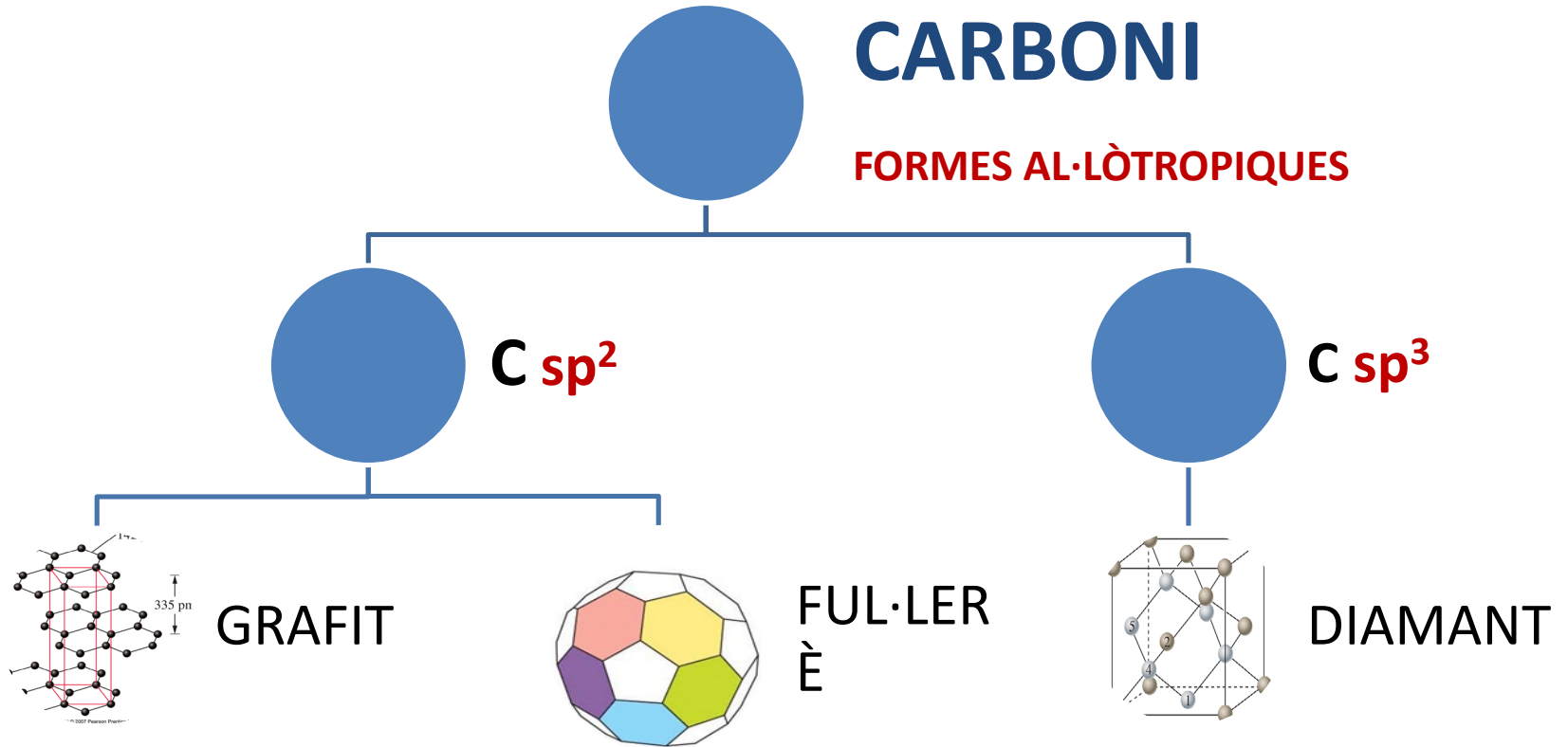


**α-quars**

(Els oxígens són els àtoms rojos, els grisos són silicis.)



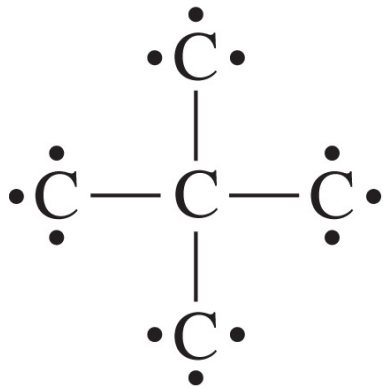
# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS



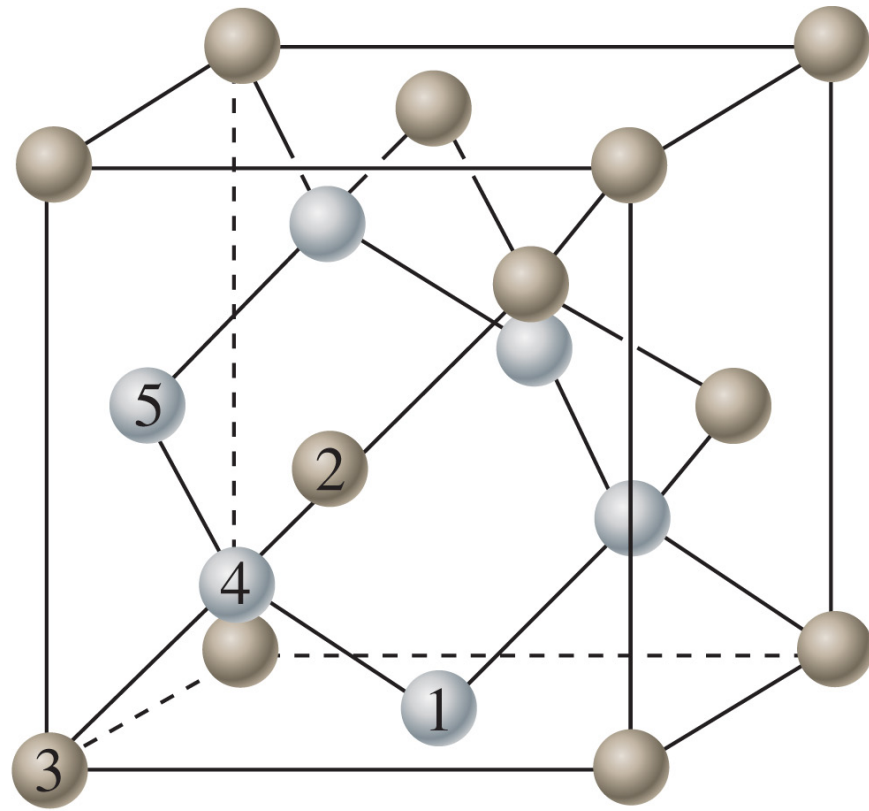
# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

## Diamant

### C $sp^3$



(a)

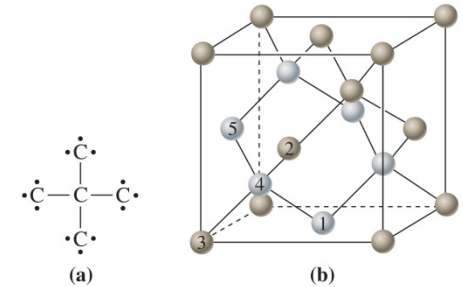


(b)

# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

## Diamant

### C $sp^3$



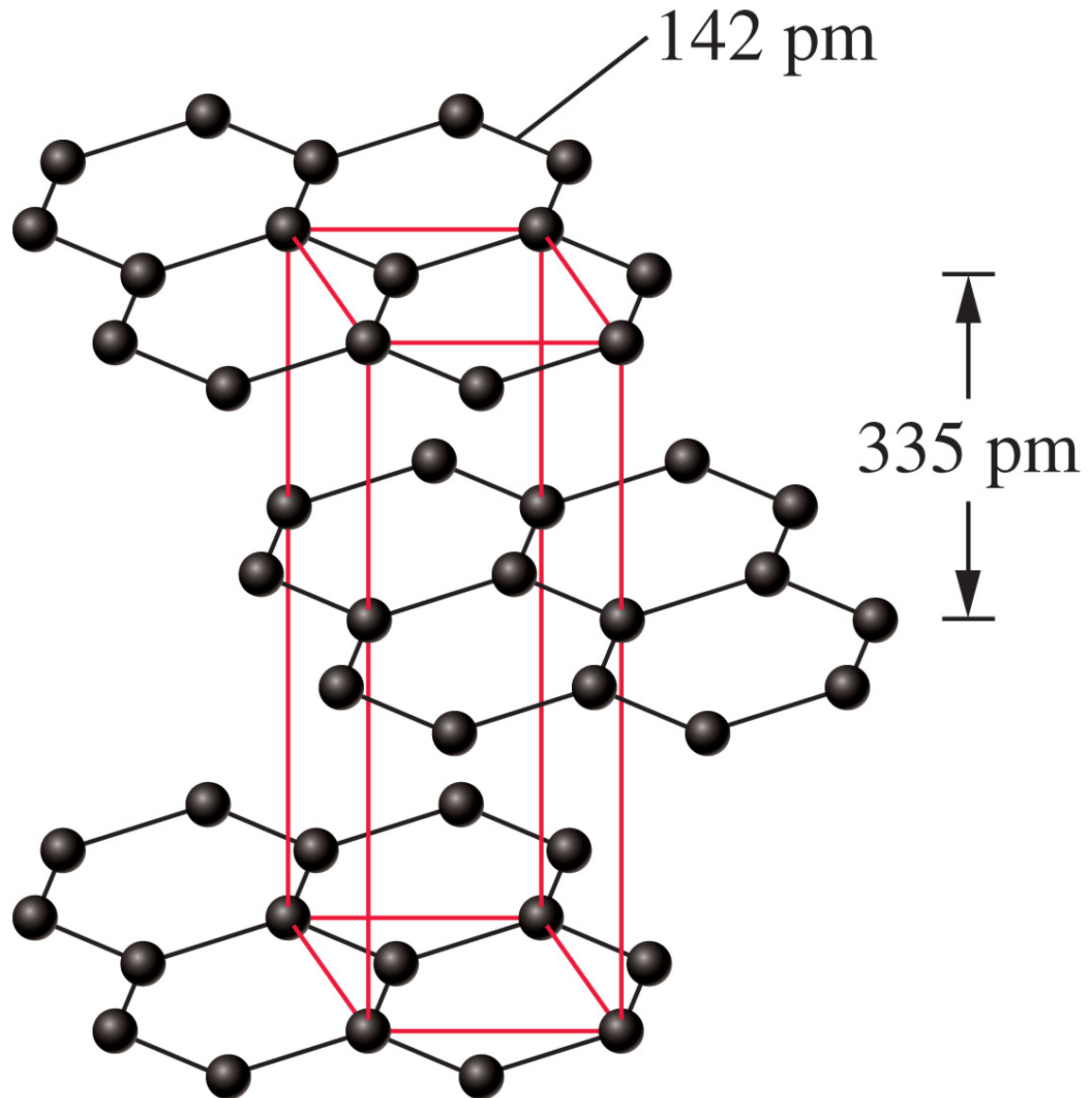
L'estructura de Lewis en dues dimensions és útil només per a mostrar que aquest esquema d'enllaç implica un nombre d'àtoms de carboni cada vegada major que condueix a una molècula gegant. **No ens dona cap informació de l'estructura tridimensional de la molècula.**

En la visió del cristall, cada àtom s'enllaça amb altres quatre. Des d'una direcció determinada es pot veure una ordenació hexagonal no plana d'àtoms de carboni (gris). Si la meitat d'àtoms de carboni se substitueix per àtoms de silici, l'estructura resultant és la **del carbur de silici (carborúndum)**. Tant el diamant com el carbur de silici són **extremadament durs** d'ací el seu ús com a abrasius. De fet, el diamant és la substància més dura que es coneix. Per a ratllar o trencar els cristalls de diamant o carbur de silici, han de trencar-se els enllaços covalents. Aquests dos materials **no són conductors de l'electricitat** i no es fonen ni se sublimen fins que s'aconsegueixen temperatures molt altes. El SIC se sublima a 2.700 °C, i el diamant es fon per damunt de 3.500 °C.



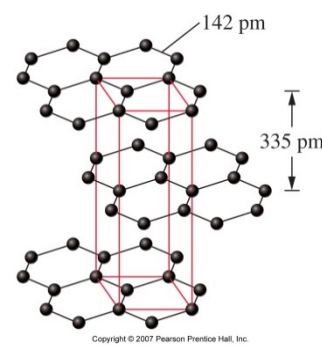
# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

Grafit  
 $C_{sp^2}$



# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

## Grafit $Csp^2$



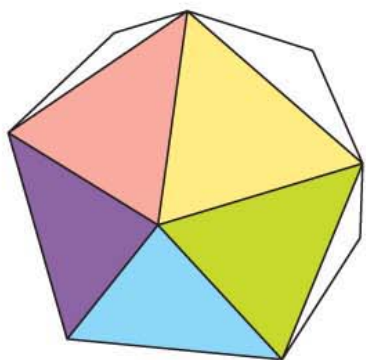
En el grafit, l'enllaç implica un conjunt d'orbitals  $sp^2 + p$ . Els tres orbitals  $sp^2$  es troben en un pla formant angles de  $120^\circ$  i els orbitals  $p$  se solapen de la mateixa forma descrita per als àtoms de carboni en el benzè,  $C_6H_6$ . Així, els electrons  $p$  estan deslocalitzats; no estan restringits a la regió entre dos àtoms de C, sinó que estan compartits per molts àtoms de C en un pla d'àtoms de C. Cada àtom de carboni forma enllaços covalents forts amb tres àtoms de carboni veïns en el mateix pla, i donen lloc a capes d'àtoms de carboni en una ordenació hexagonal. L'enllaç, dins d'una capa és fort però les forces intermoleculares entre capes són forces de Van der Waals **molt més febles** (les distàncies d'enllaç dins d'una capa són  $142 \text{ pm}$ . Entre les capes, són de  $335 \text{ pm}$ ).

L'estructura del cristall del grafit és única i li proporciona algunes propietats característiques. Com l'enllaç entre les capes és feble, les capes poden lliscar-se les unes damunt de les altres fàcilment. Com a resultat, el grafit és un bon lubricant, tant en forma seca com en suspensió en oli. Si s'exerceix una pressió moderada sobre un tros de grafit, les capes de grafit es desfan; que és el que passa quan usem un llapis de grafit. A més, com els electrons  $p$  estan deslocalitzats, es mouen a través dels plans dels àtoms de carboni quan s'hi aplica un camp elèctric; el grafit condueix l'electricitat. Una aplicació important d'aquest és en el·lectrodes de les bateries i en processos industrials d'electròlisi. El diamant no condueix l'electricitat perquè tots els seus electrons de valència estan localitzats o fixos permanentment en enllaços covalents simples.

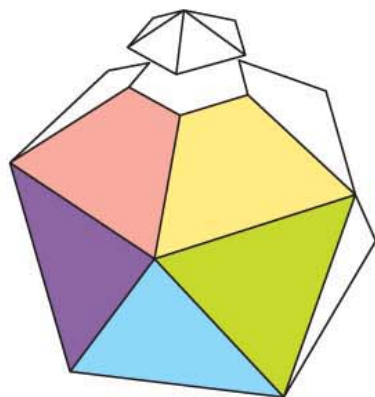
# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

## FUL·LERENS

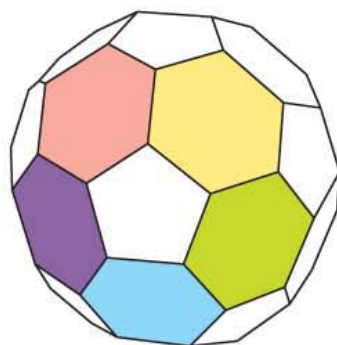
**C** $sp^2$



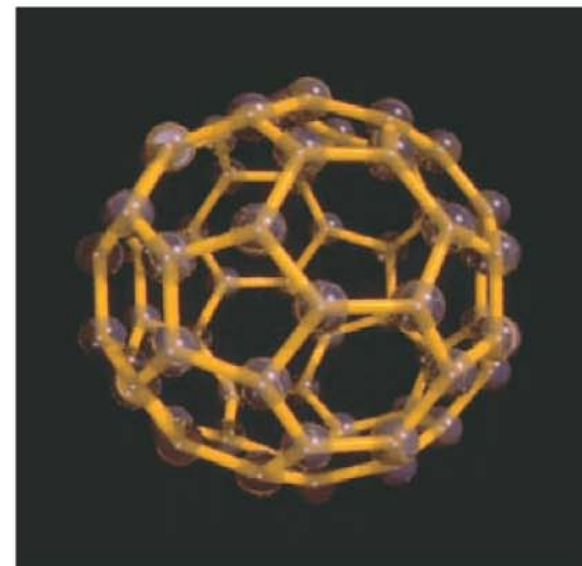
(a)



(b)



(c)



(d)

▲ FIGURE 12-34  
Fullerenes

**C**<sub>60</sub>

# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS



## FUL·LERENS i nanotubs de carboni

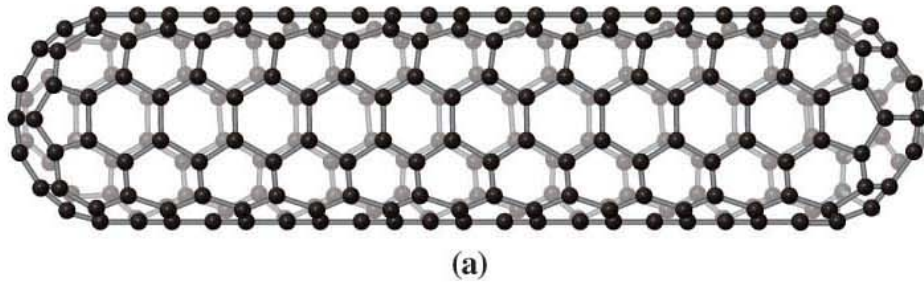
En 1985, en experiments dissenyats per a simular les condicions que es donen a prop de les estrelles roges gegants, es van descobrir una sèrie de compostos de carboni que van ser caracteritzats per espectroscòpia de masses. El pic més intens de l'espectre es va trobar a **720** **uma i correspon a la molècula C<sub>60</sub>**. Durant un temps, la proposta d'una estructura acceptable per a aquesta molècula va ser un repte.

**Ni l'estructura del diamant ni la del grafit podien justificar una molècula amb 60 àtoms de carboni**, ja que suposaven enllaços «penjants» a les vores de les estructures.

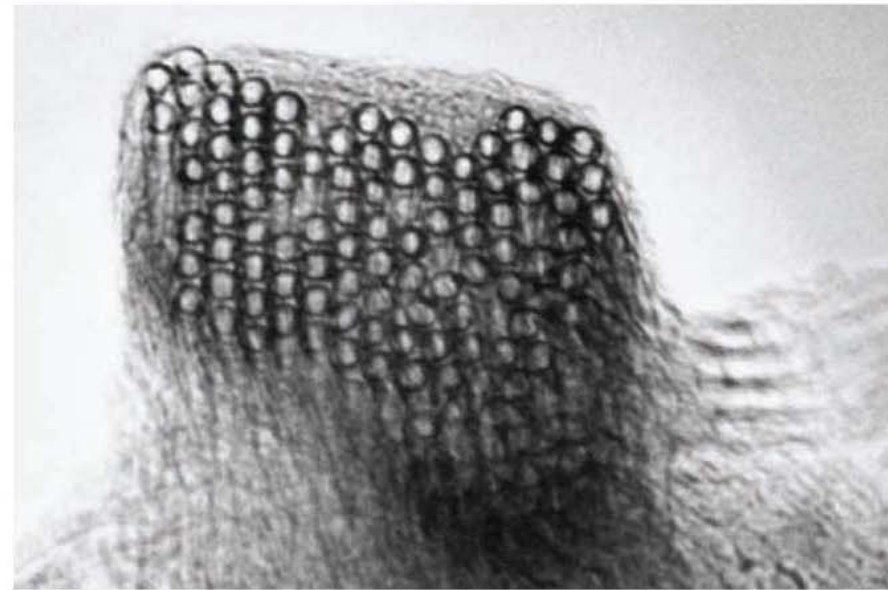
L'estructura que s'hi va proposar finalment i que va ser confirmada per cristal·lografia de raigs X és la d'un icosaedre truncat, **una figura tridimensional composta per 12 cares pentagonals i 20 hexagonals, amb un àtom de carboni en cadascun dels 60 vèrtexs**. Aquesta figura s'assembla a una pilota de futbol i també a les cúpules geodèsiques, una semblança que va conduir al nom proposat: *buckminsterfullerenes* (la cúpula geodèsica és una forma arquitectònica desenvolupada per R. Buckminster Fuller). Des de 1985, s'han descobert molts altres ful·lerens, incloent-hi C<sub>70</sub>, C<sub>74</sub> i C<sub>82</sub>. **Els ful·lerens també poden formar compostos, alguns per atac d'àtoms o grups d'àtoms a la seua superfície**, uns altres incloent un àtom dins de l'estructura del ful·lerè. Fins ara, s'han obtingut diversos milers de ful·lerens.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. XARXES COVALENTS

## FUL·LERENS i nanotubs de carboni



▲ FIGURE 12-35  
Nanotubes



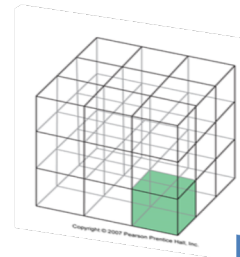
(b)

# SÒLIDS NO MOLECULARS. CHARACTERÍSTIQUES. Taula resum

TABLE 12.7 Characteristics of Crystalline Solids

Types	Structural Particles	Strongest Contributing Forces <sup>a</sup>	Typical Properties	Examples
Metallic	Cations and delocalized electrons	Metallic bonds	Hardness varies from soft to very hard; melting point varies from low to very high; lustrous; ductile; malleable; very good conductors of heat and electricity	Na, Mg, Al, Fe, Sn, Cu, Ag, W
Ionic	Cations and anions	Electrostatic attractions	Hard; moderate to very high melting points; nonconductors as solids, but good electric conductors as liquids; many are soluble in polar solvents such as water	NaCl, MgO, NaNO <sub>3</sub>
Network covalent	Atoms	Covalent bonds	Most are very hard and either sublime or melt at very high temperatures; most are nonconductors of electricity	C(diamond), C(graphite), SiC, AlN, SiO <sub>2</sub>
Molecular <i>Nonpolar</i>	Atoms or nonpolar molecules	Dispersion forces	Soft; extremely low to moderate melting points (depending on molar mass); sublime in some cases; soluble in some nonpolar solvents	He, Ar, H <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , CCl <sub>4</sub> , CH <sub>4</sub> , I <sub>2</sub>
<i>Polar</i>	Polar molecules	Dispersion forces and dipole–dipole attractions	Low to moderate melting points; soluble in some polar and some nonpolar solvents	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O, CHCl <sub>3</sub> , HCl
<i>Hydrogen-Bonded</i>	Molecules with H bonded to N, O, or F	Hydrogen bonds	Low to moderate melting points; soluble in some hydrogen-bonded solvents and some polar solvents	H <sub>2</sub> O, NH <sub>3</sub>

<sup>a</sup> Generally speaking, more than one type of force contributes. For each case above, we have listed only the strongest of all the contributing forces.



TEMA 8.  
SÒLIDS NO  
MOLECULARS

# Estructures cristal·lines

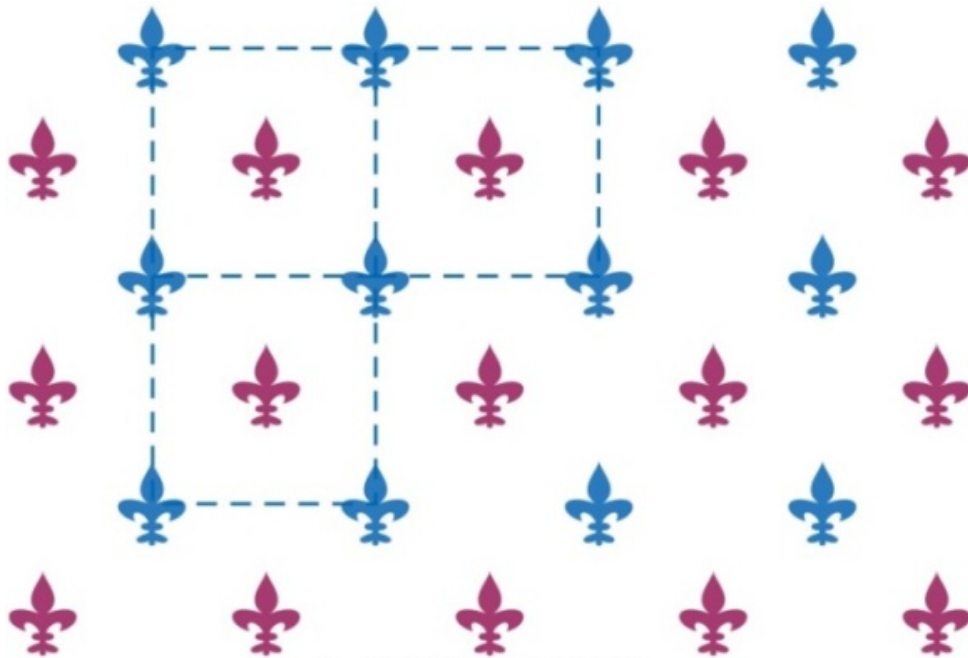


Estructures compactes. Tipus



Difracció de raigs X

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines

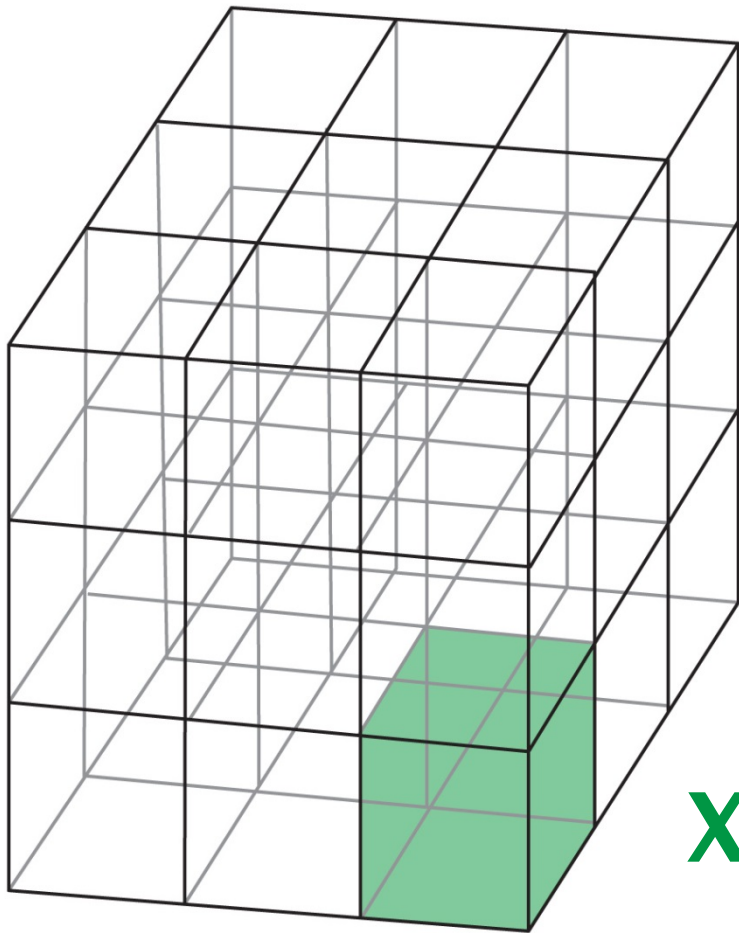


Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Patrò repetitiu  
en dues  
dimensions**



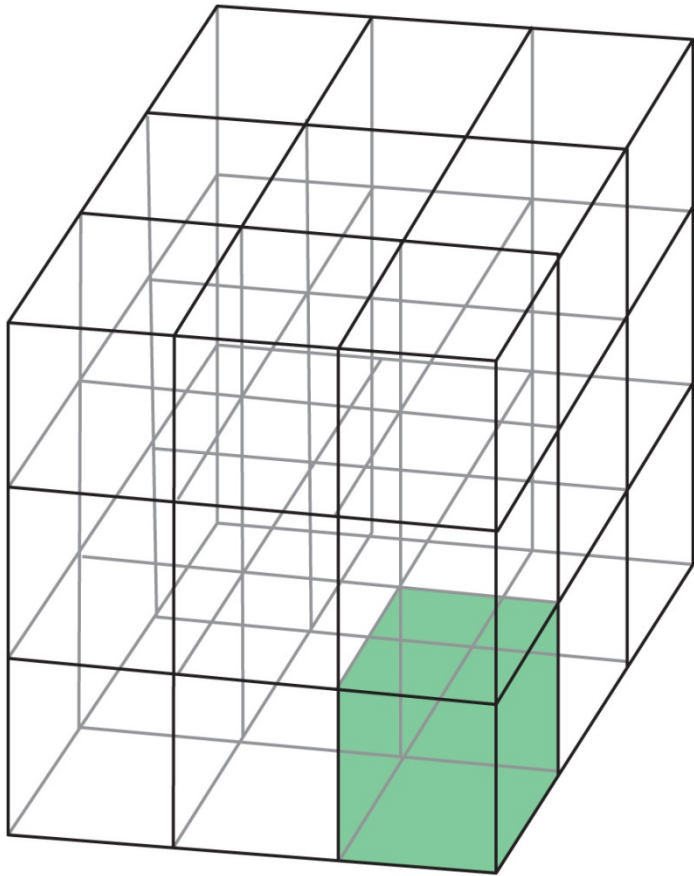
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines



Un **sòlid cristal·lí** es pot representar mitjançant un arreglament tridimensional de punts anomenat

## XARXA CRISTAL·LINA

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

## XARXA CRISTAL·LINA

Figura tridimensional amb 6 cares ordenades en tres conjunts de plans paral·lels. Per ex. el cub.

## XARXA CÚBICA

Plans equidistants i perpendiculars entre si, amb angles de  $90^\circ$ .

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines

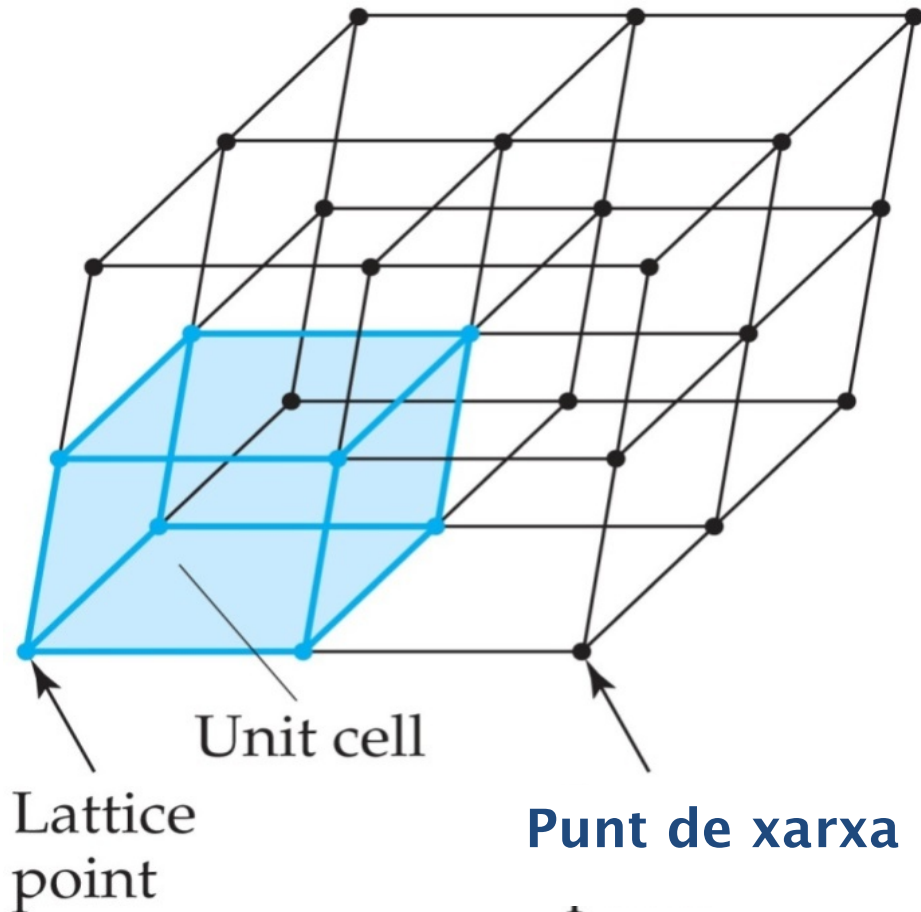
## CEL·LA UNITAT

unitat mínima (paral·lelepípede)  
que en **repetir-se** mostra la  
simetria completa de l'estructura  
cristal·lina.

## Punt de xarxa

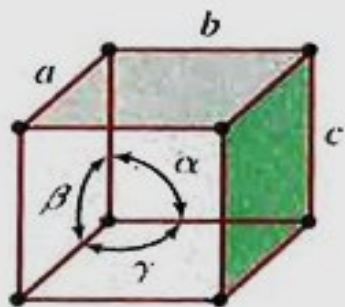
Cada punt de la xarxa  
cristal·lina que representa un  
entorn idèntic dins del sòlid.

Generalment, els punts de la xarxa  
defineixen les posicions de les partícules  
estructurals del sòlid cristal·lí.

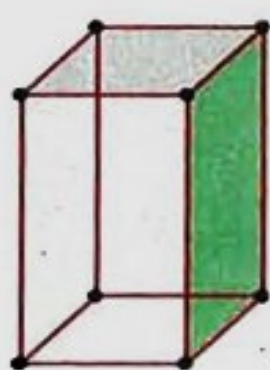


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines

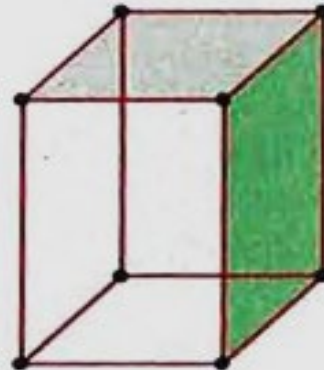
## ELS 7 TIPUS DE XARXES CRISTAL·LINES



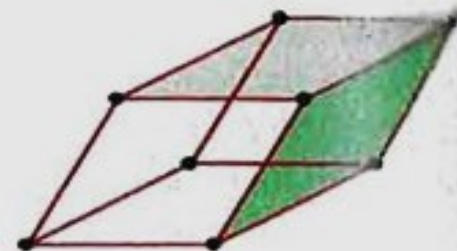
Cúbica simple  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Tetragonal  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



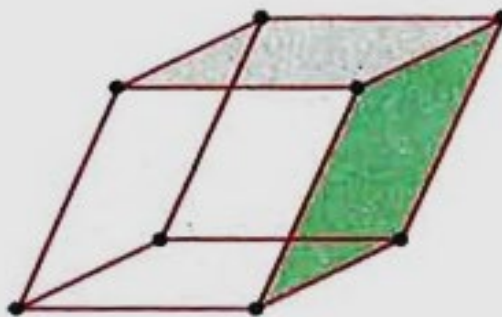
Ortorròmbica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Romboèdrica  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



Monoclínica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\gamma \neq \alpha = \beta = 90^\circ$



Triclínica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

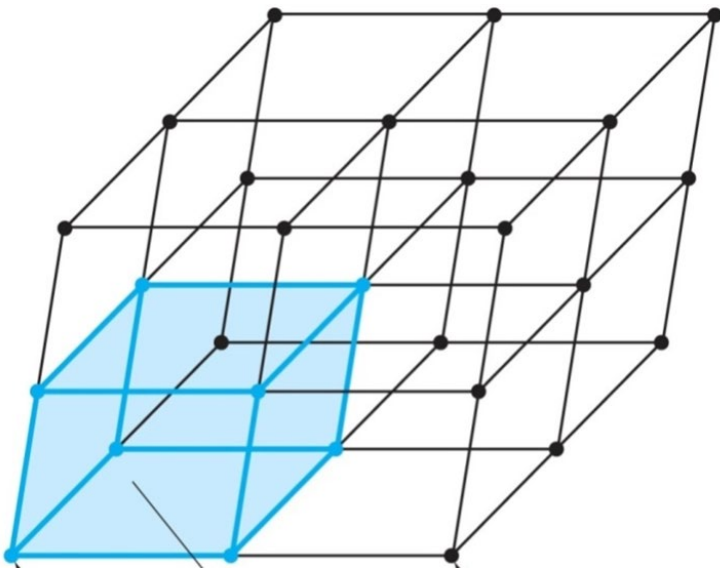


Hexagonal  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines

## Cel·les unitat cúbiques

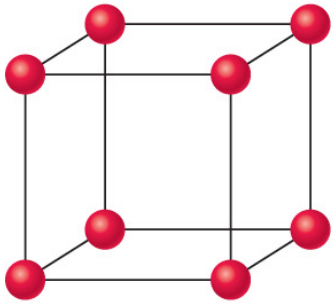
Les estructures cristal·lines més senzilles consten de cel·les unitat cúbiques amb un àtom (o partícula estructural del sòlid) centrat en cada punt de xarxa.



Cel·la cúbica simple o primitiva

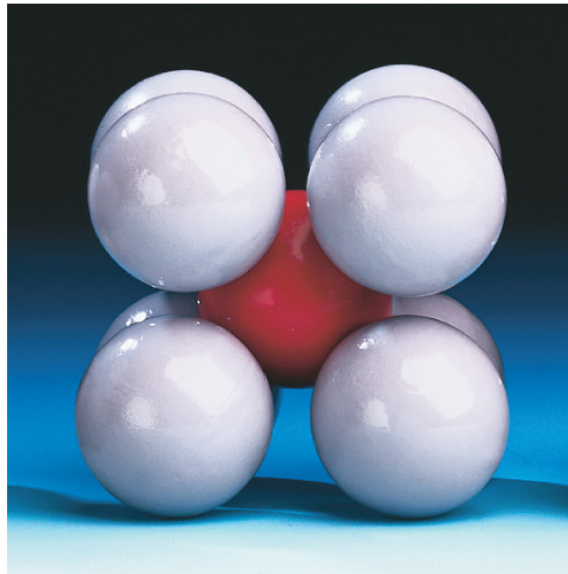
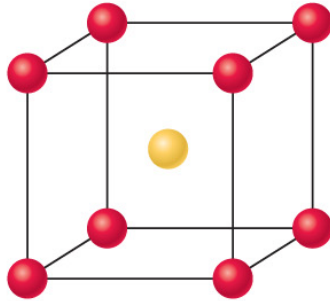
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Xarxes cristal·lines

Cel·la cúbica simple  
o primitiva



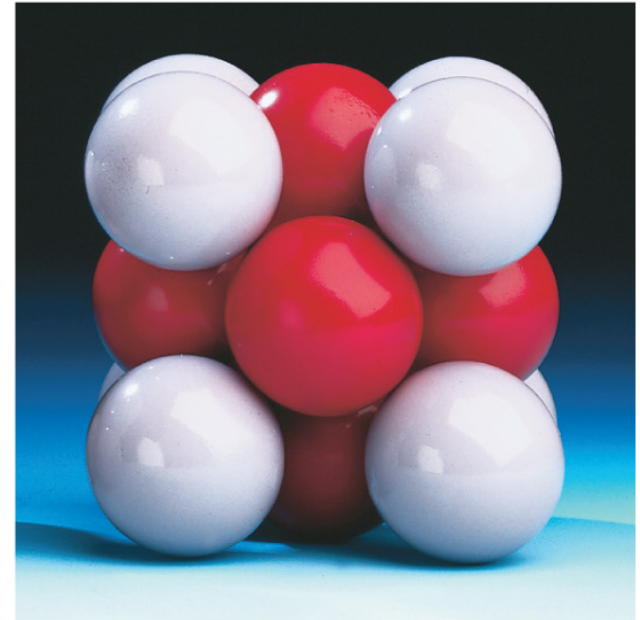
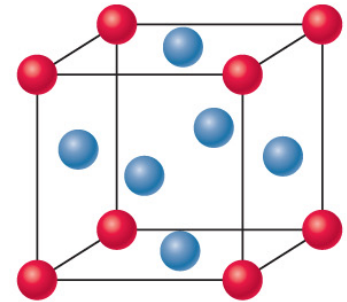
Simple cubic

Cúbica centrada en  
el cos (bcc)



Body-centered cubic

Cúbica centrada en  
les cares (fcc)



Face-centered cubic

**SÒLIDS NO MOLECULARS.** Xarxes cristal·lines

# Empaquetament compacte d'esferes

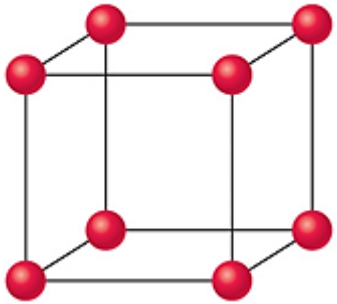


# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Xarxes cristal·lines**



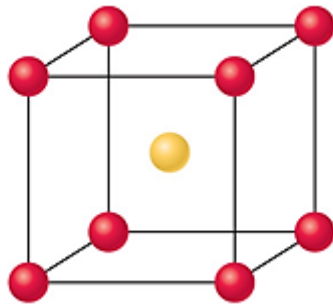


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament d'esferes idèntiques en un sistema cúbic



Cúbic simple

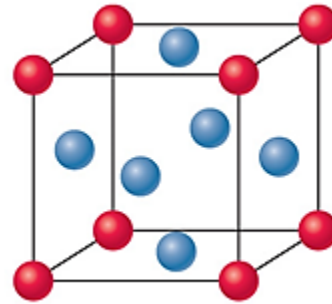
52 %



Cúbic centrat  
en el cos

*bcc*

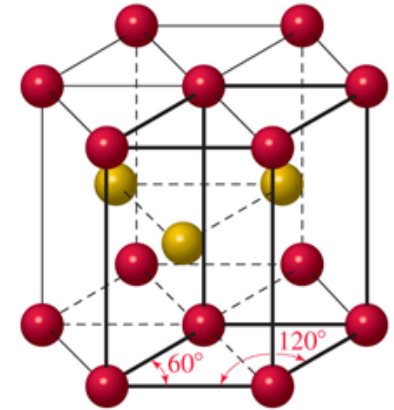
68 %



Cúbic centrat  
en les cares

*fcc*

74 %

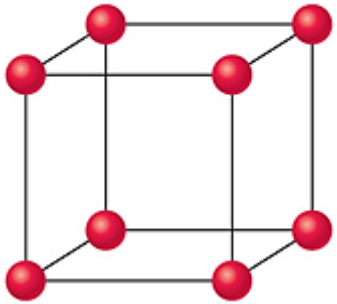


Hexagonal  
Compacte

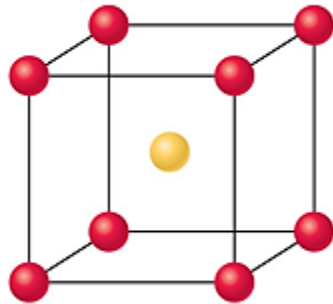
*hcp*

74 %

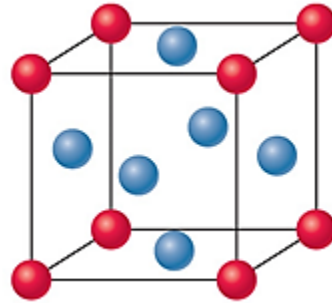
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament d'esferes idèntiques en un sistema cúbic



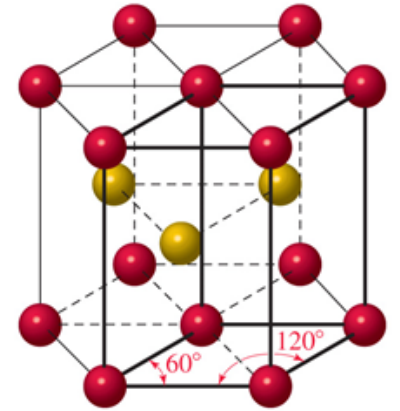
Po



Fe, Na



Cd, Mg

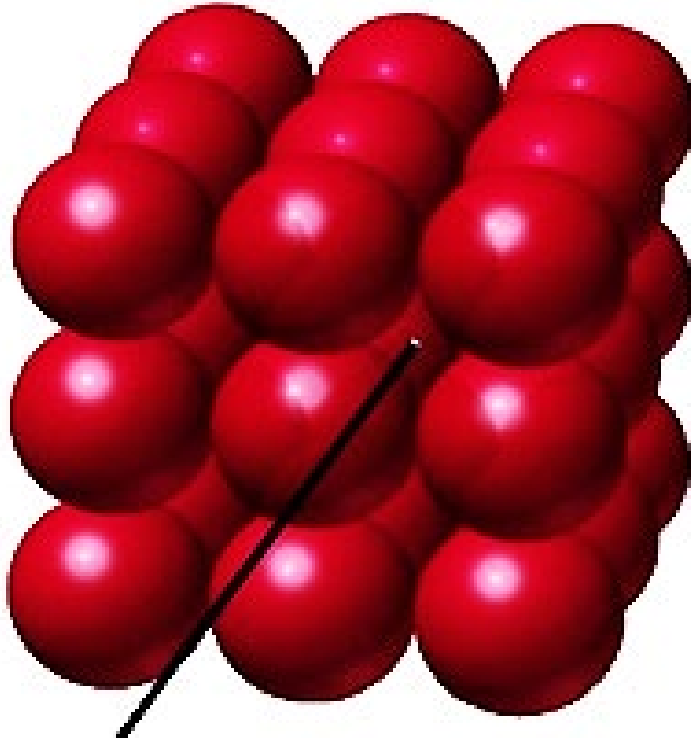
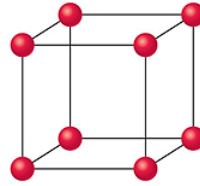


Ag, Cu

Sistemes d'empaquetament típics de metalls...

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic simple

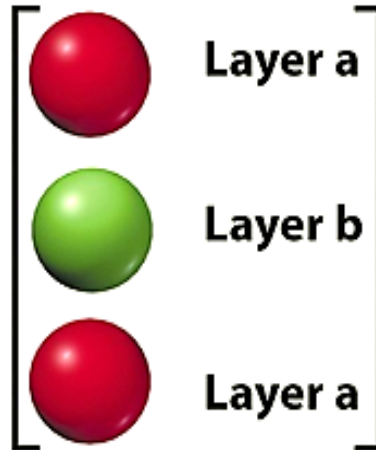
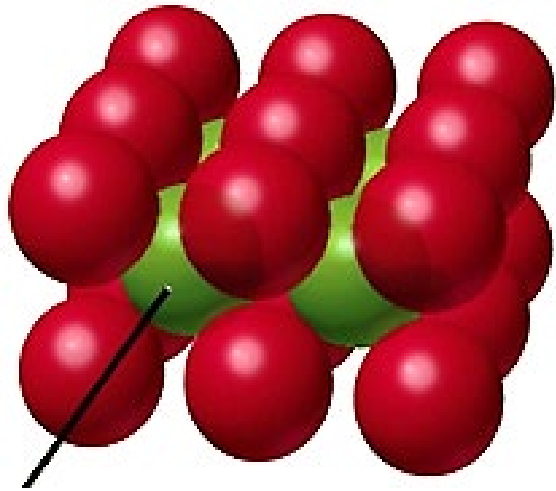
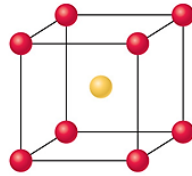


En un **empaquetament cúbic simple** totes les capes són idèntiques i tots els àtoms estan ordenats en files i columnes.

Cadascuna de les esferes **està envoltada** (es toca) **de sis esferes**. Quatre en la mateixa capa, una directament dalt i una directament baix.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic centrat en el cos



En un **empaquetament cúbic centrat en el cos** les esferes de la capa b ocupen els buits de la primera capa a. La tercera capa és una repetició de la primera.

Cadascuna de les esferes **està envoltada** (es toca) **de huit esferes**. Quatre en la capa de dalt i quatre en la de baix.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Hexagonal compacte (*hcp*)

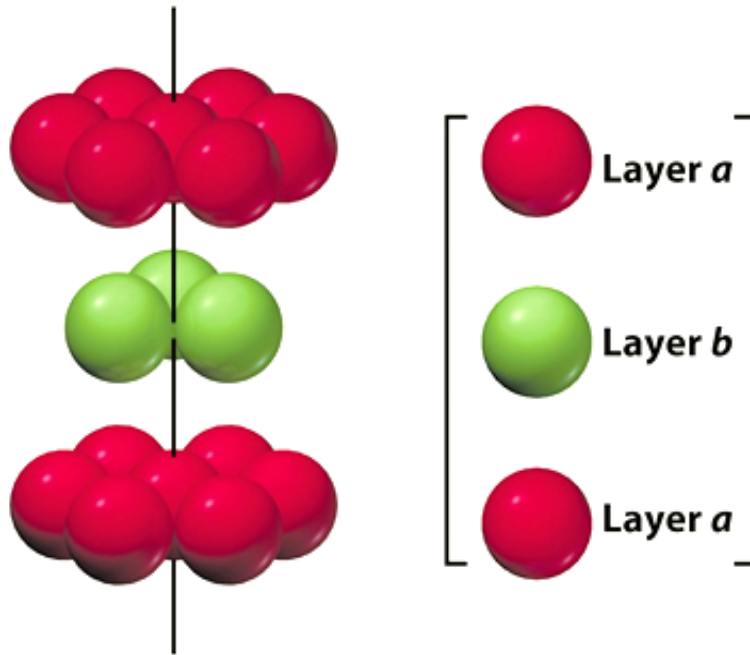
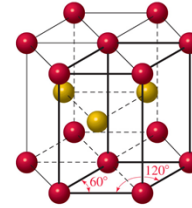


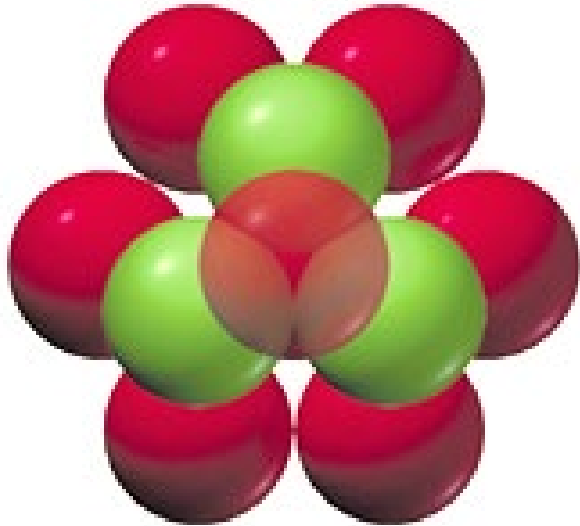
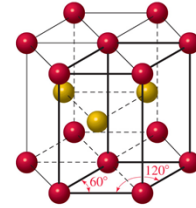
Figure 10-21a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

En un **empaquetament hexagonal compacte** hi ha dues capes hexagonals que se situen alternativament una damunt de l'altra.

Cadascuna de les esferes està envoltada d'altres sis. **Les esferes en la capa b** se situen en **les depressions triangulars** de la capa a. La tercera capa és una repetició de la primera.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Hexagonal compacte (hcp)

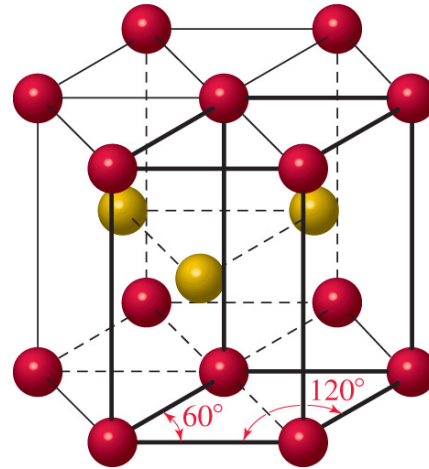


En un **empaquetament hexagonal compacte** hi ha dues capes hexagonals que se situen alternativament una damunt de l'altra.

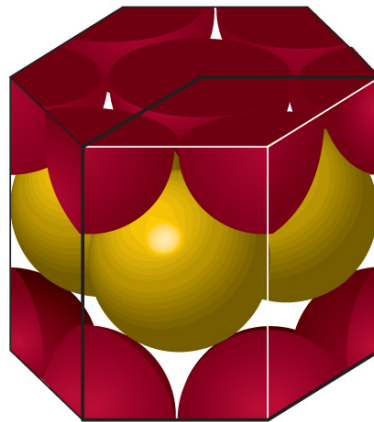
Cadascuna de les esferes està envoltada d'altres sis. Les esferes d'una capa se situen **en les depressions triangulars** de la capa de baix.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Hexagonal compacte



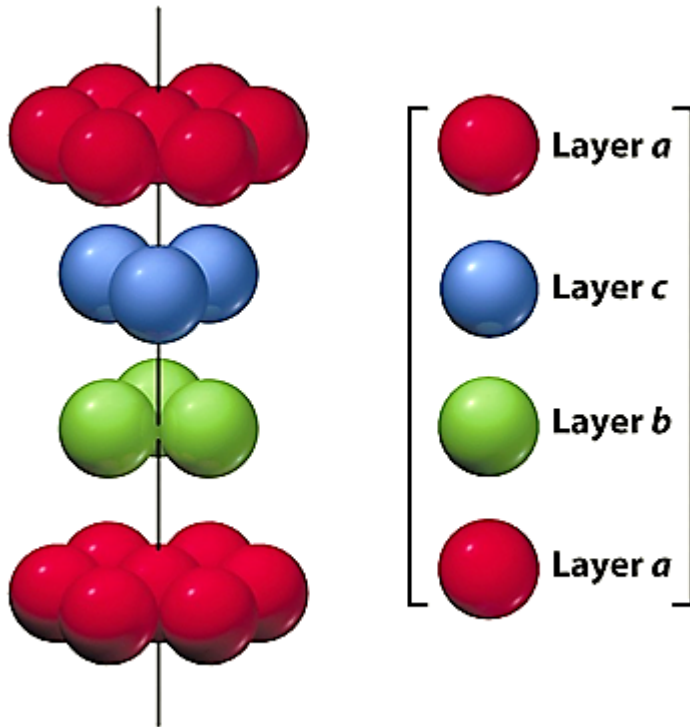
(a)



(b)

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic compacte (o centrat en les cares) (*fcc* o *ccp*)



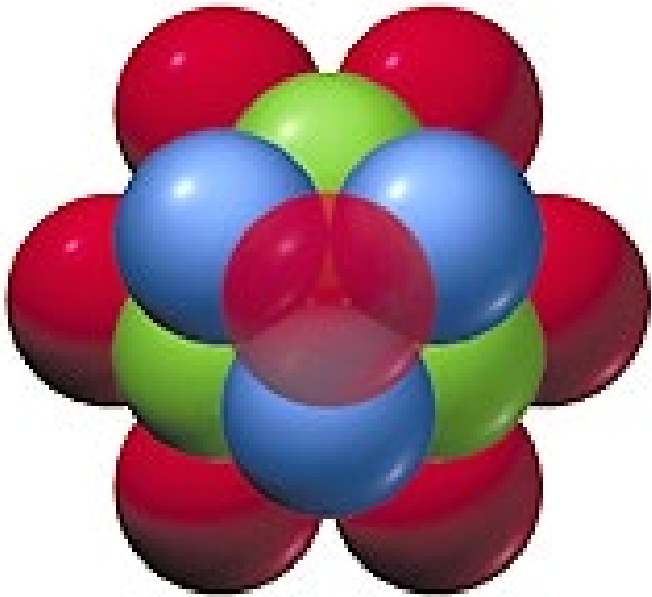
En un **empaquetament cúbic compacte**, o centrat en les cares, hi ha tres capes hexagonal alternatives, cadascuna situada a **les depressions triangulars** de l'altra.

Cadascuna de les esferes està envoltada d'altres sis. La quarta capa és una **repetició de la primera**.



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic compacte (o centrat en les cares) (*fcc* o *ccp*)

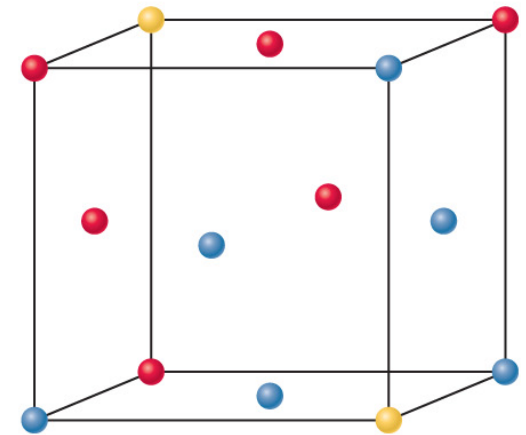
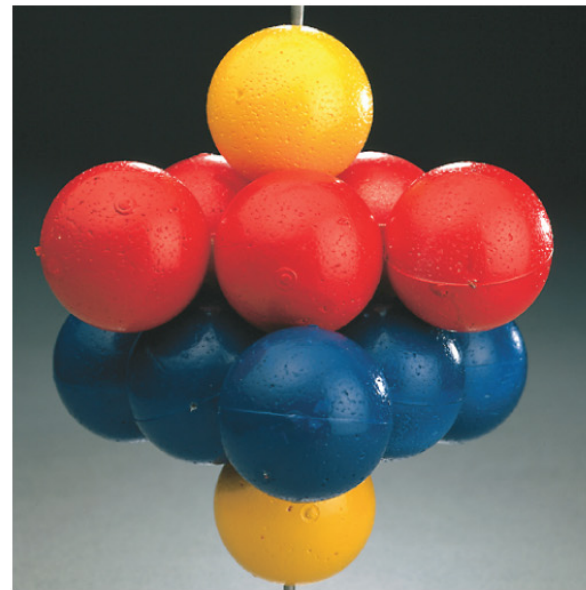


En un **empaquetament cúbic compacte**, o centrat en les cares, hi ha tres capes hexagonal alternatives, cadascuna situada en **les depressions triangulars** de l'altra.

Cadascuna de les esferes està envoltada d'altres sis. La quarta capa és una **repetició de la primera**.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

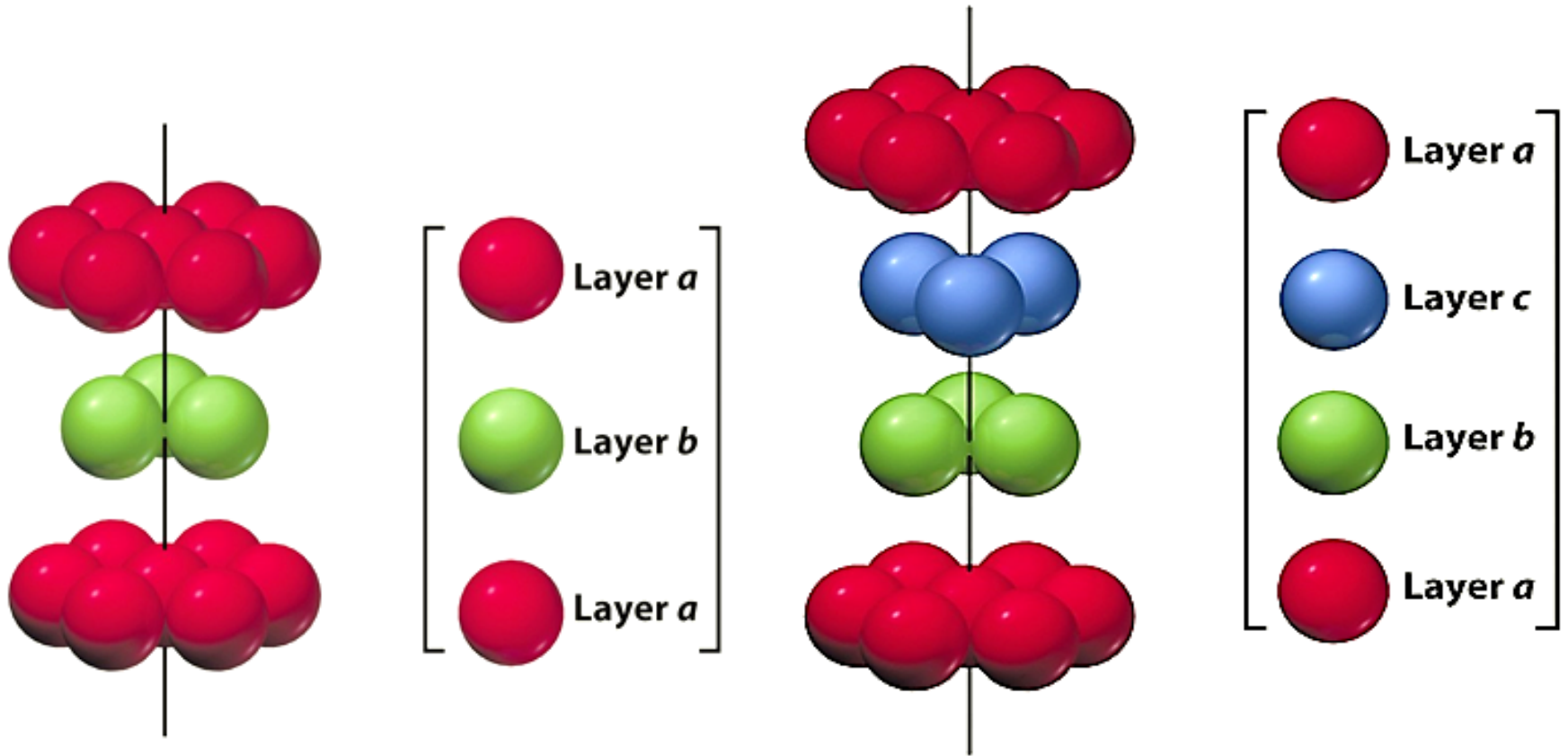
## Cúbic compacte (o centrat en les cares) (*fcc* o *ccp*)



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Hexagonal compacte vs Cúbic compacte

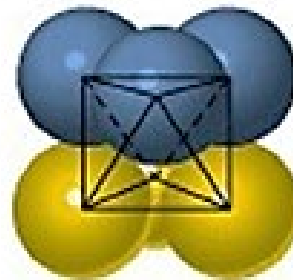
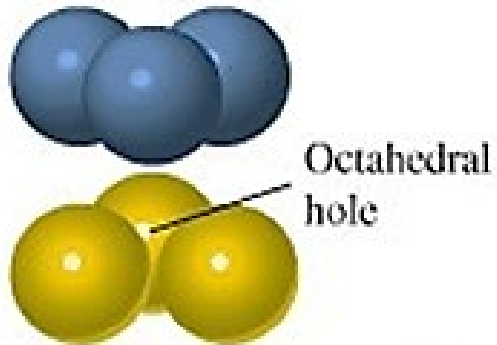
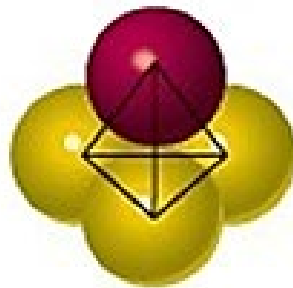
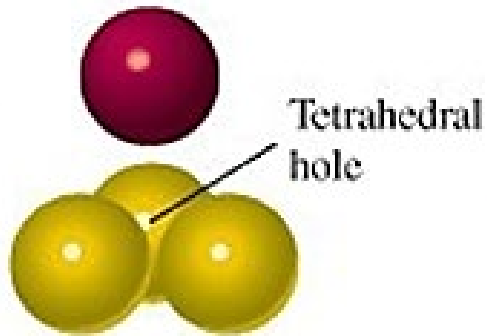
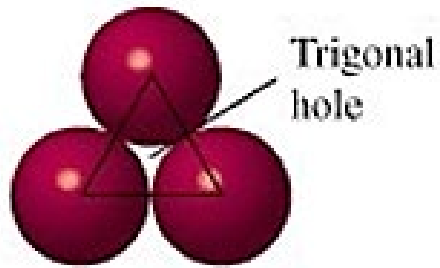


# **SÒLIDS NO MOLECULARS.** Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

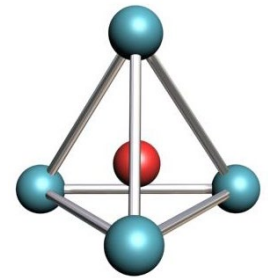
**Poden haver-hi buits  
("forats") en les  
estructures  
compactes?**

**I, a més, poden estar ocupats...**

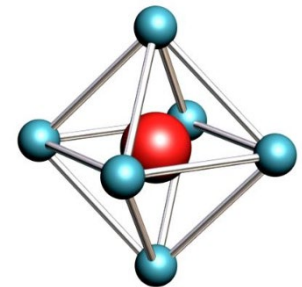
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic



Buit en tetraèdrics

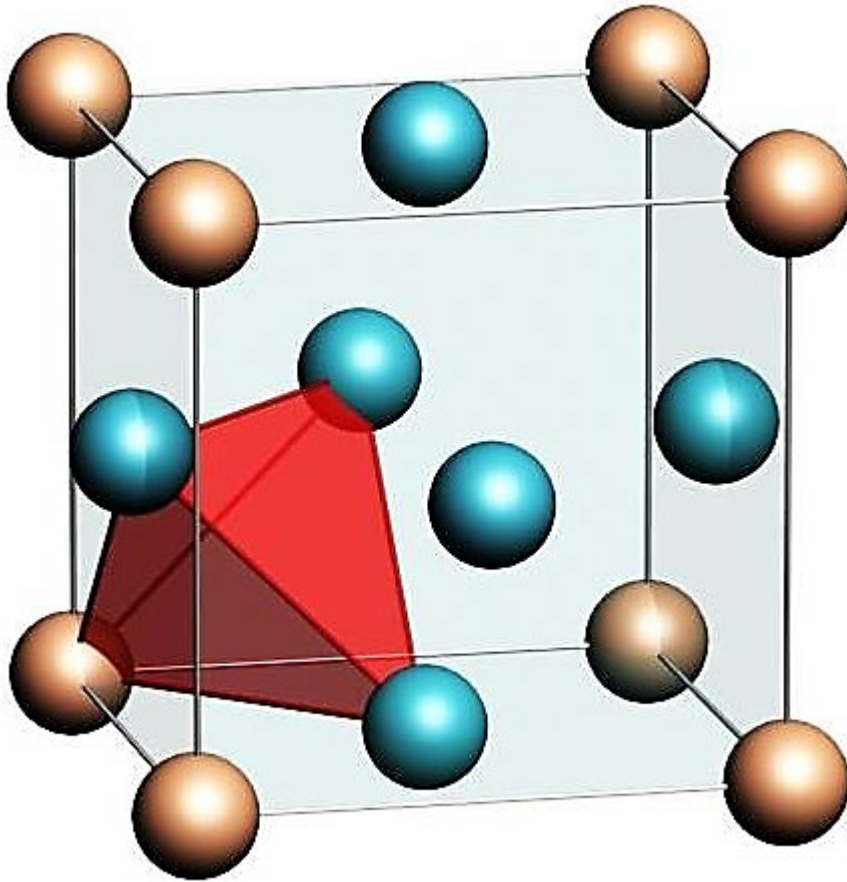


Buit en octaèdrics

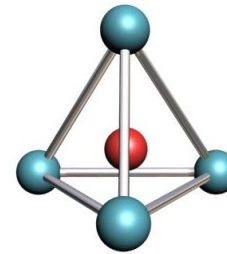


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic compacte (o centrat en les cares)

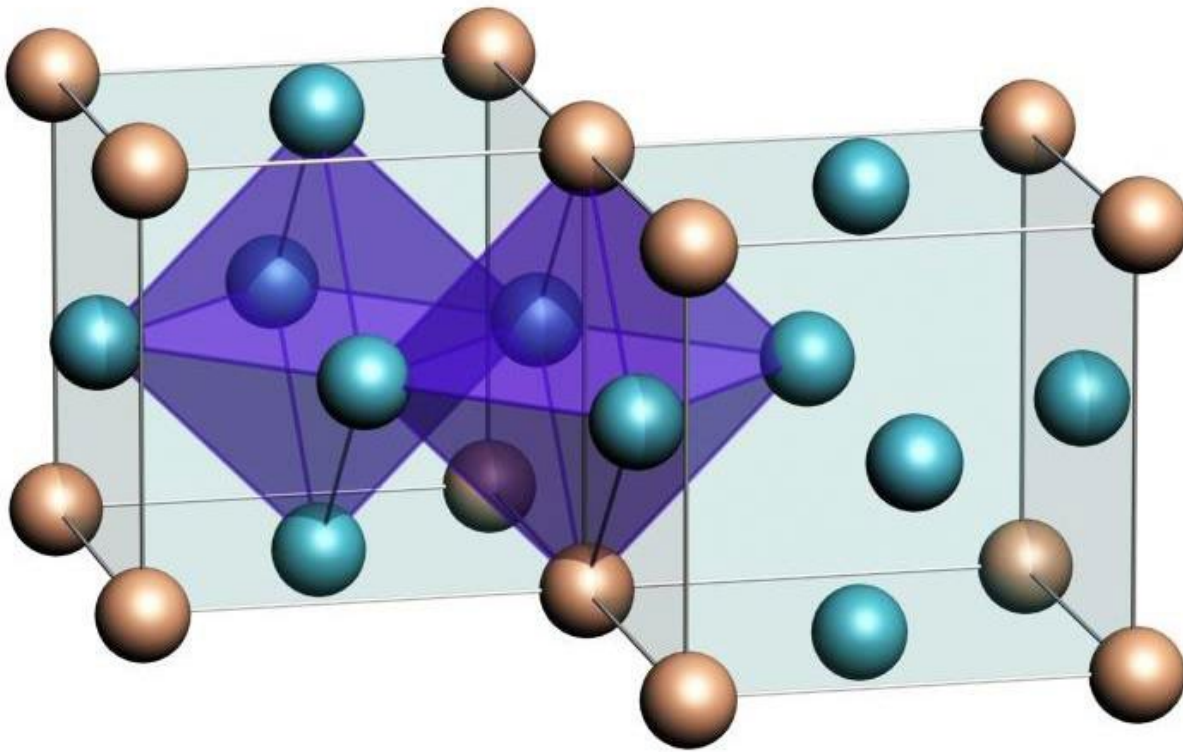


Buit en  
tetraèdrics

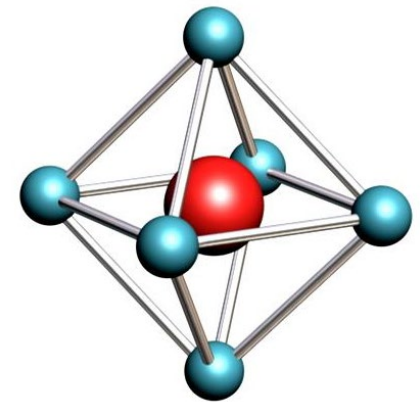


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic compacte (o centrat en les cares) (*fcc*)

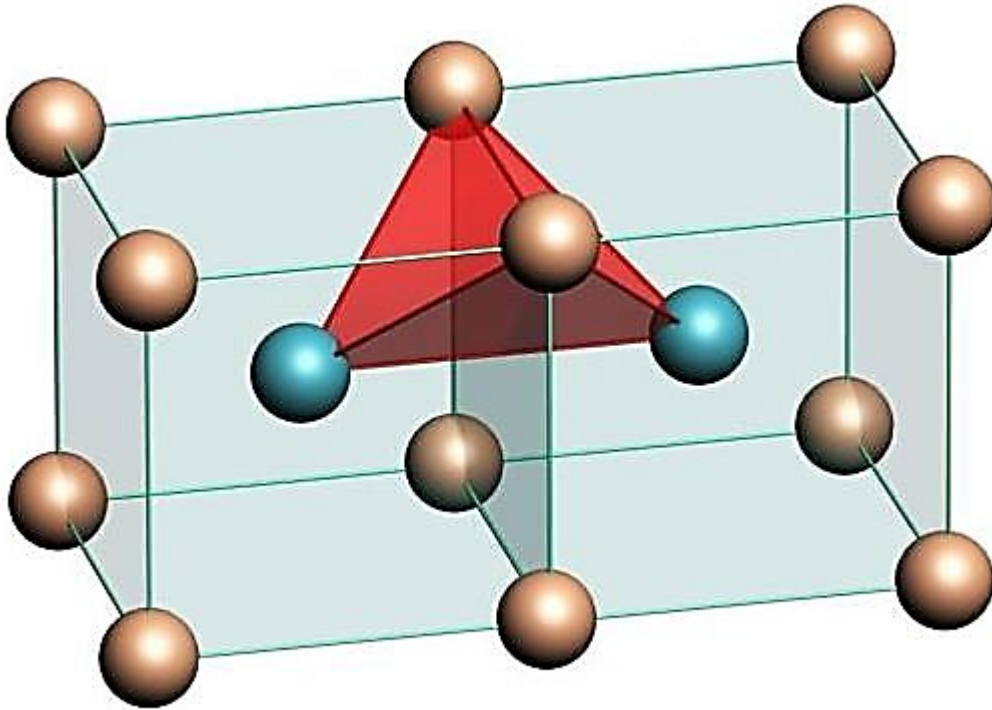


Buit en octaèdrics

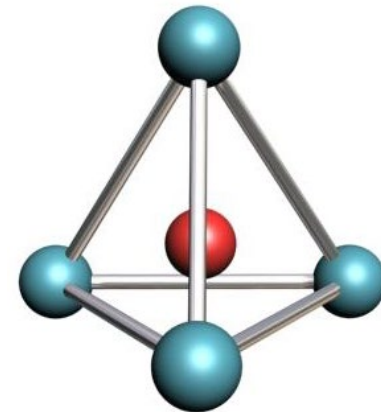


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic centrat en el cos



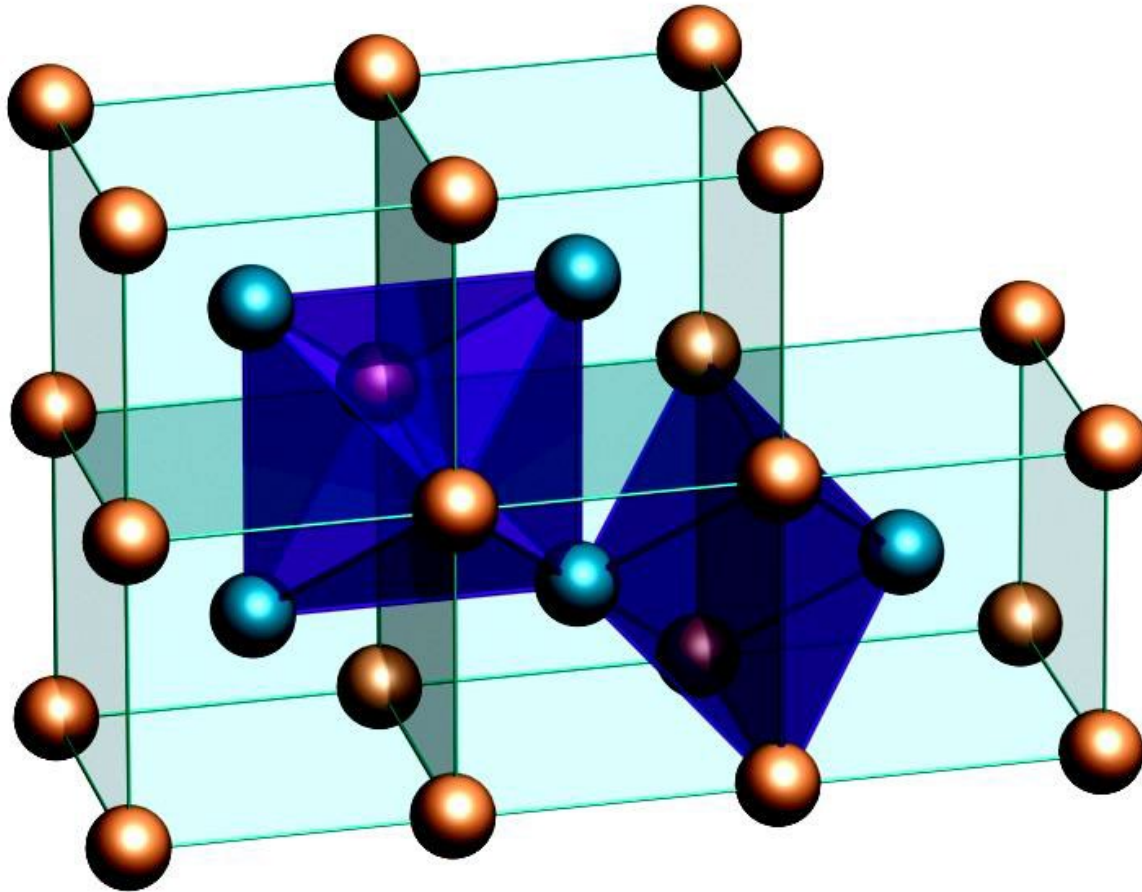
## Buit tetraèdric



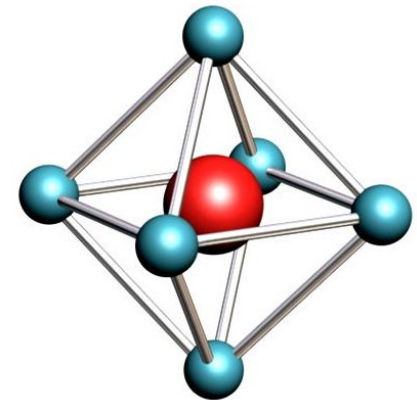


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Cúbic centrat en el cos



Buit en  
octaèdric



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

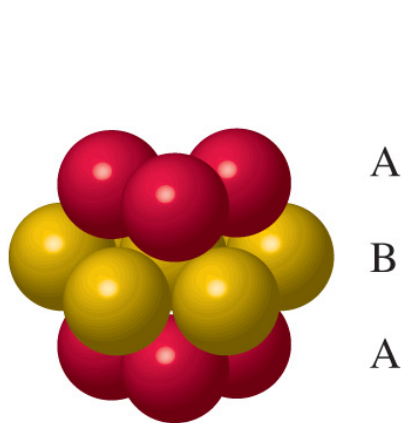
## Nombre de coordinació

És el nombre de partícules amb què està en contacte una partícula determinada en una estructura cristal·lina.

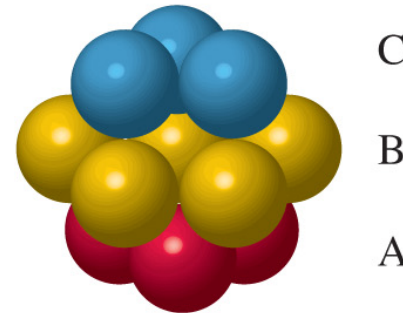
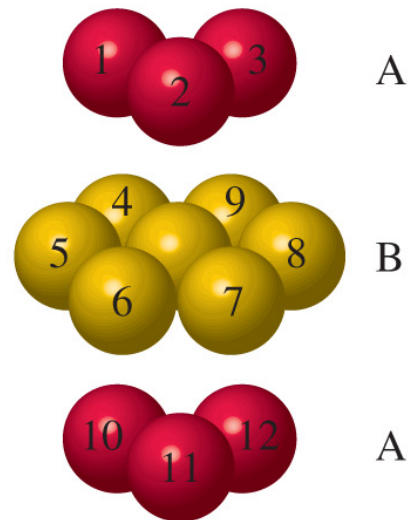
# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Formes d'empaquetament en un sistema cúbic**

## Estructures compactes

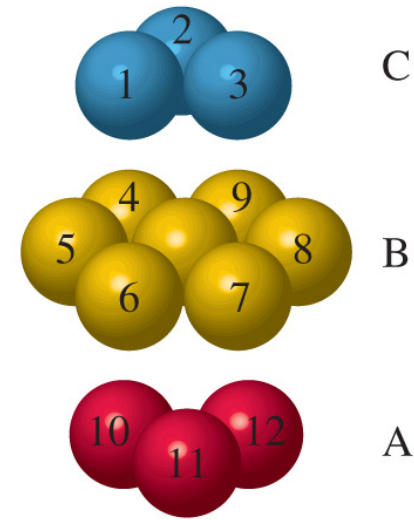
**NOMBRE DE COORDINACIÓ = 12**  
en estructures *compactes*



hcp



ccp



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Formes d'empaquetament en un sistema cúbic

## Taula-resum d'estructures simples i compactes

**TABLE 10.10** Summary of the Four Kinds of Packing for Spheres

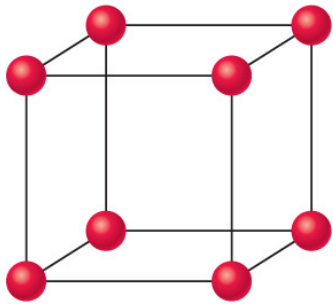
<b>Structure</b>	<b>Stacking Pattern</b>	<b>Coordination Number</b>	<b>Space Used (%)</b>	<b>Unit Cell</b>
Simple cubic	<i>a-a-a-a</i>	6	52	Primitive cubic
Body-centered cubic	<i>a-b-a-b</i>	8	68	Body-centered
Hexagonal closest-packed	<i>a-b-a-b</i>	12	74	(Noncubic)
Cubic closest-packed	<i>a-b-c-a-b-c</i>	12	74	Face-centered cubic

# Nombre d'àtoms per cel·la unitat

És el nombre de  
**partícules** total que  
formen part de la cel·la  
unitat.

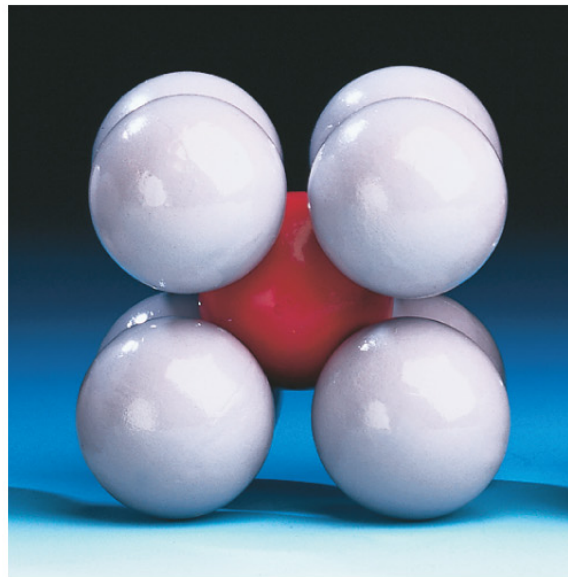
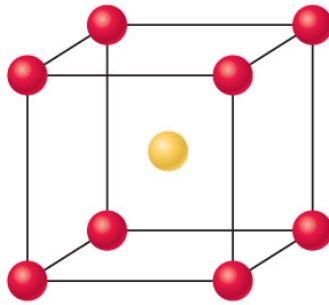
# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Nombre d'àtoms per cel·la unitat**

Cel·la cúbica simple  
o primitiva



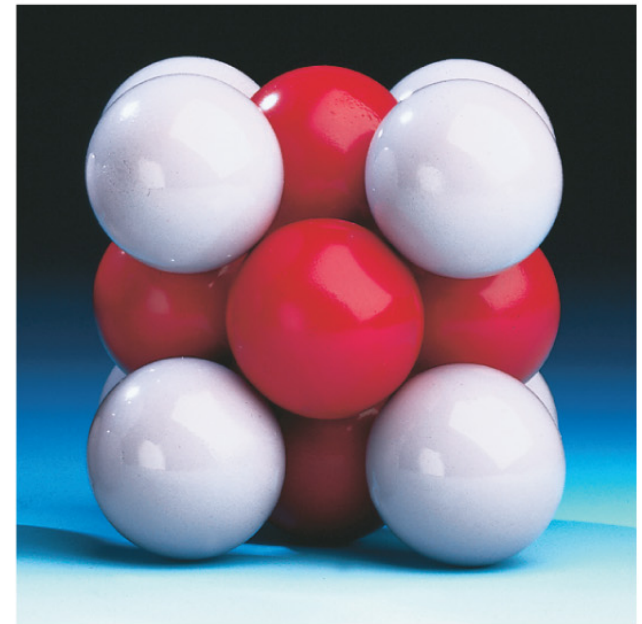
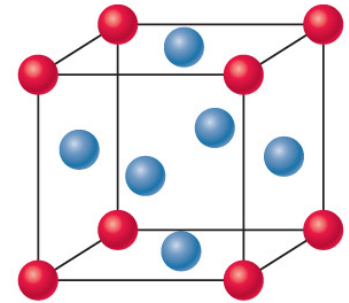
Simple cubic

Cel·la cúbica centrada  
en el cos (bcc)



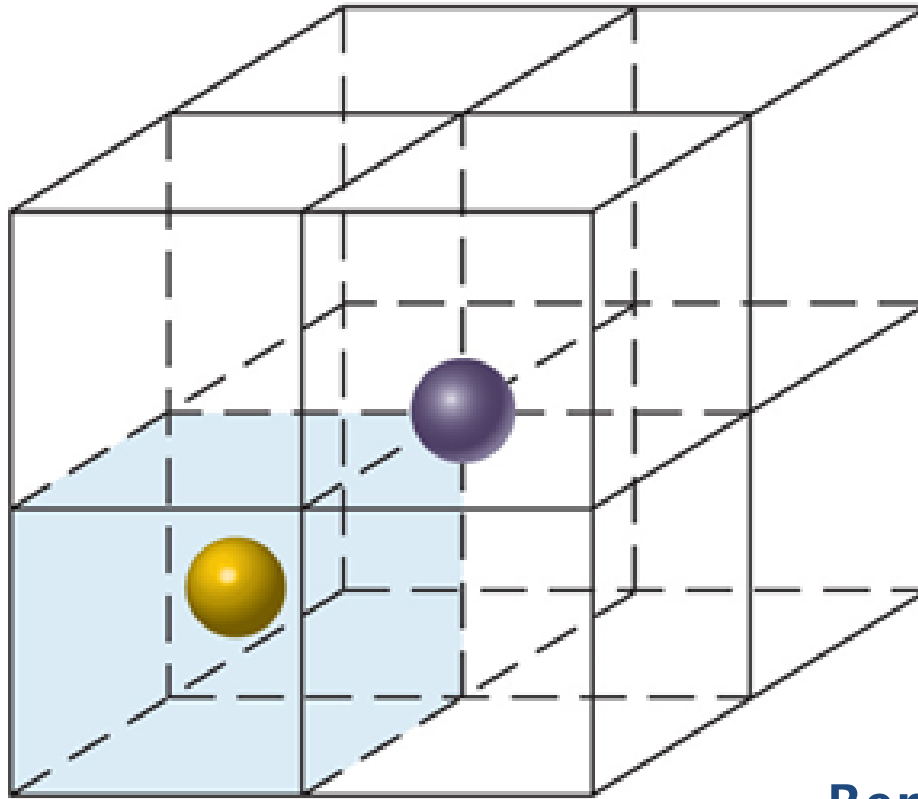
Body-centered cubic

Cel·la cúbica centrada  
en les cares (fcc)



Face-centered cubic

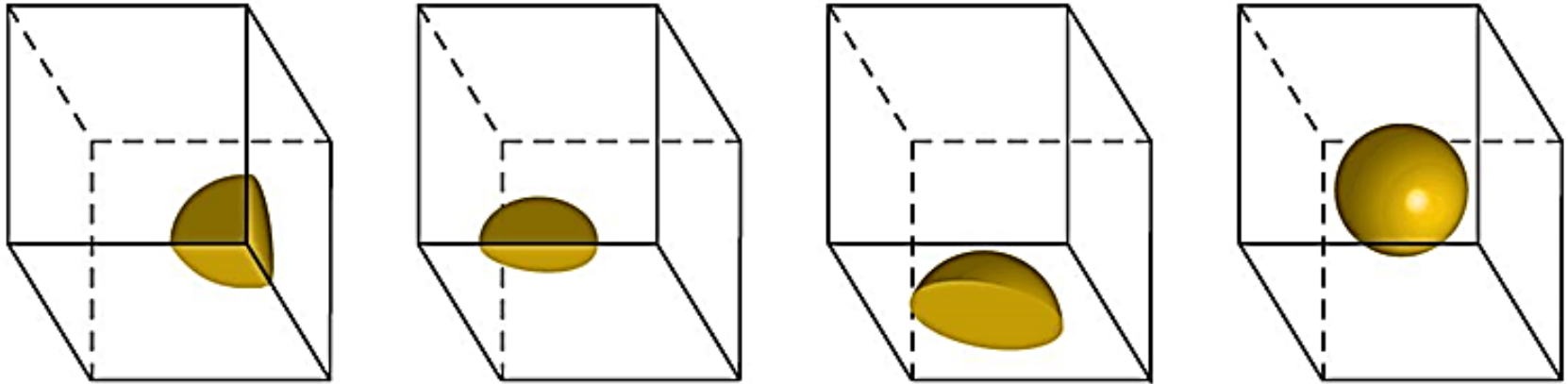
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Nombre d'àtoms per cel·la unitat



Les cel·les  
s'apilen  
compartint  
àtoms...

Representació de 8 cel·les unitat. L'àtom **groc** pertany per **complet** a la cel·la pintada en blau. L'àtom **morat**, en un vèrtex, està **compartit** per les 8 cel·les unitat.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Nombre d'àtoms per cel·la unitat

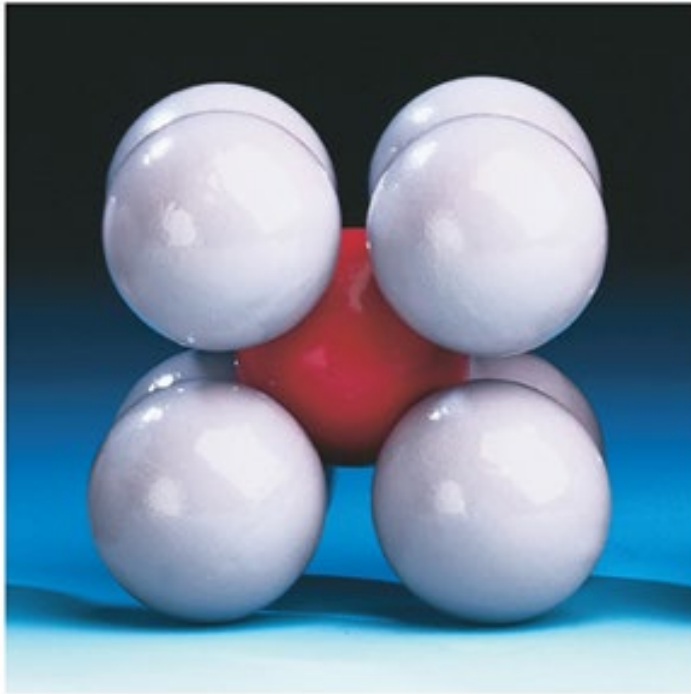


**Les cel·les s'apilen compartint àtoms.....**



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Nombre d'àtoms per cel·la unitat

*bcc*

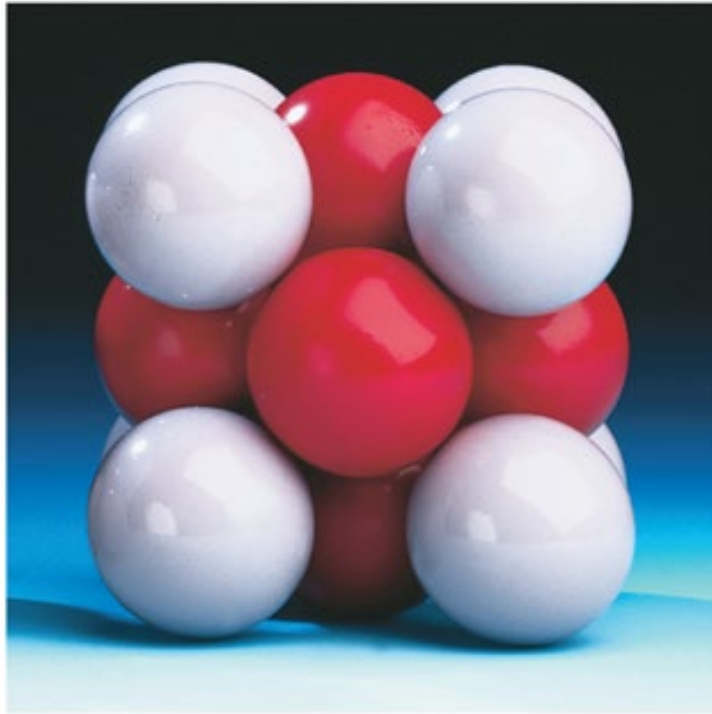


Body-centered cubic

Només **l'àtom central** pertany completament a la cel·la unitat. Els àtoms dels vèrtexs **estan compartits** entre vuit cel·les adjacents.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Nombre d'àtoms per cel·la unitat

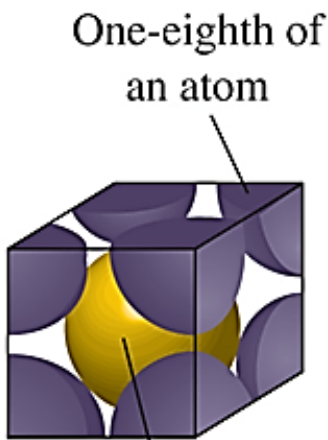
*fcc*



Face-centered cubic

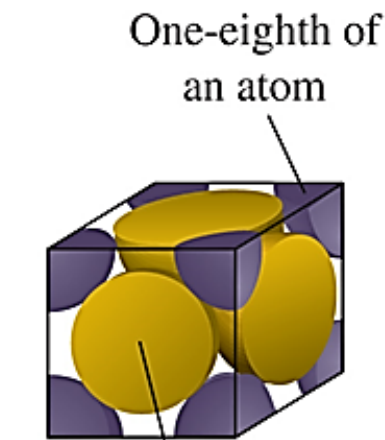
Els àtoms dels vèrtexs **estan compartits** entre vuit cel·les adjacents. Els àtoms de les cares **estan compartits entre 2 cel·les.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Nombre d'àtoms per cel·la unitat



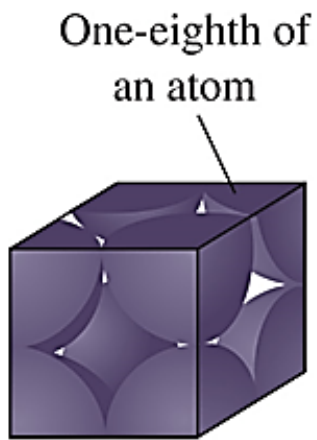
One atom  
**(b)**  
Body-centered  
cubic

**2**



One half of an atom  
**(c)**  
Face-centered  
cubic

**4**



**(d)**  
Simple  
cubic

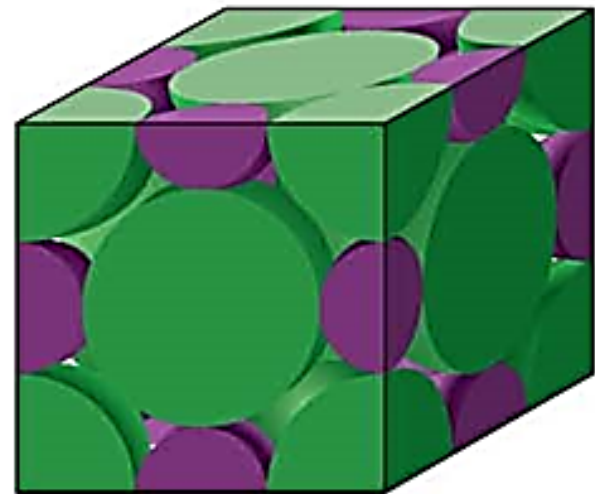
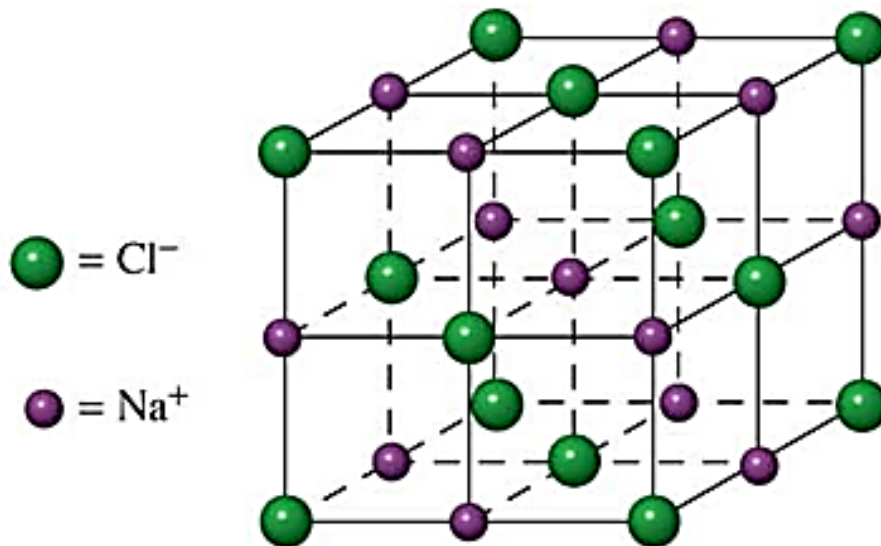
**1**

**Esferes  
compartides  
en cadascuna  
de les cel·les  
unitat.**

**Àtoms per  
cel·la unitat**

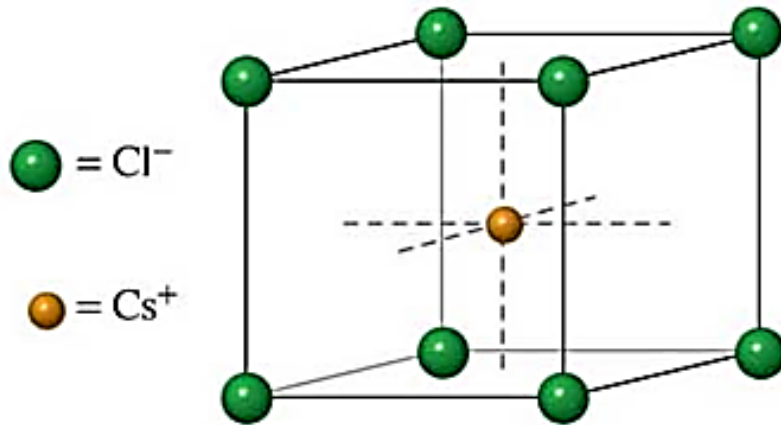
# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

## Cel·la cúbica simple



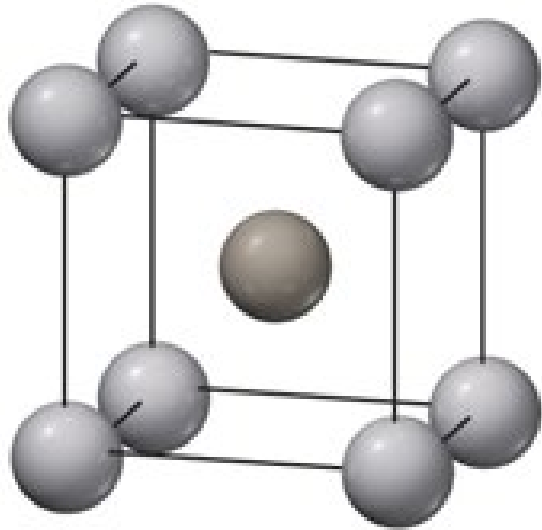
# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

## Cúbica centrada en el cos (bcc)



# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

## Cúbica centrada en el cos (bcc)

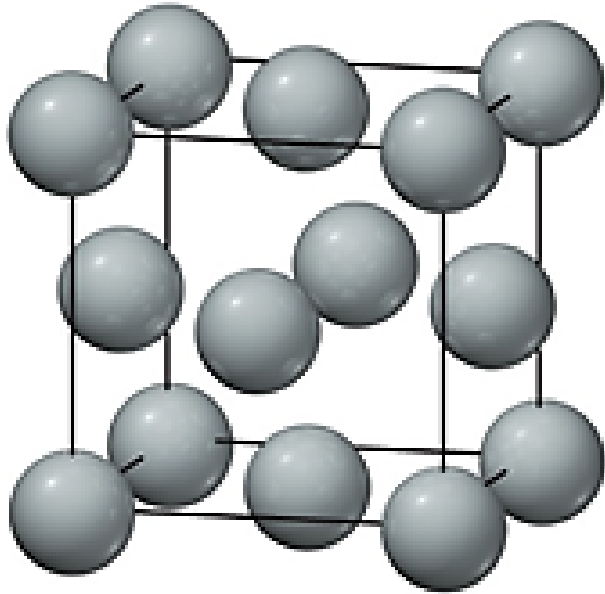


CuZn

**Cel·la unitat cúbica  
centrada en el cos  
(bcc) del compost  
CuZn.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

**Cúbica  
centrada en  
les cares (*fcc*)**

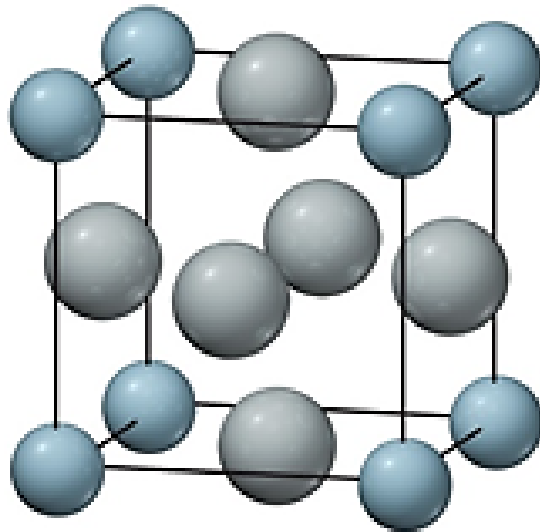


Ni

**Cel·la unitat cúbica  
centrada en les  
cares (*fcc*) del  
metall Ni, amb  
empaquetament  
cúbic compacte.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

**Cúbica  
centrada en  
les cares (*fcc*)**



$\text{Ni}_3\text{Al}$

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

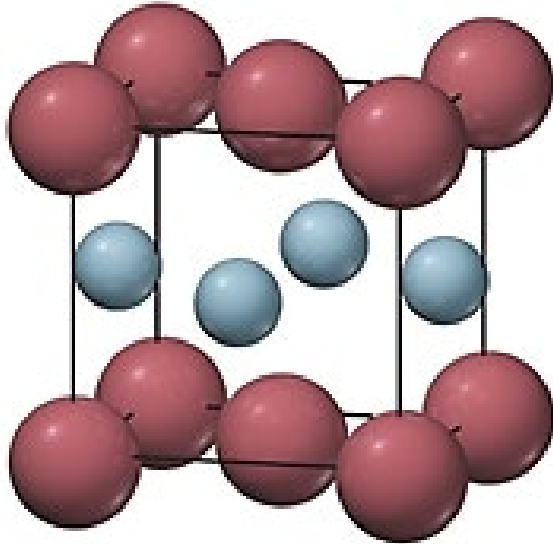
**Estructura ordenada  
(fcc) del  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , amb  
els àtoms de Ni en  
gris i els d'Al en  
blau.**

Cel·la unitat cúbica  
centrada en el cos (bcc)  
del compost CuZn.



# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Eixamples**

**Cúbica  
centrada en  
les cares (*fcc*)**



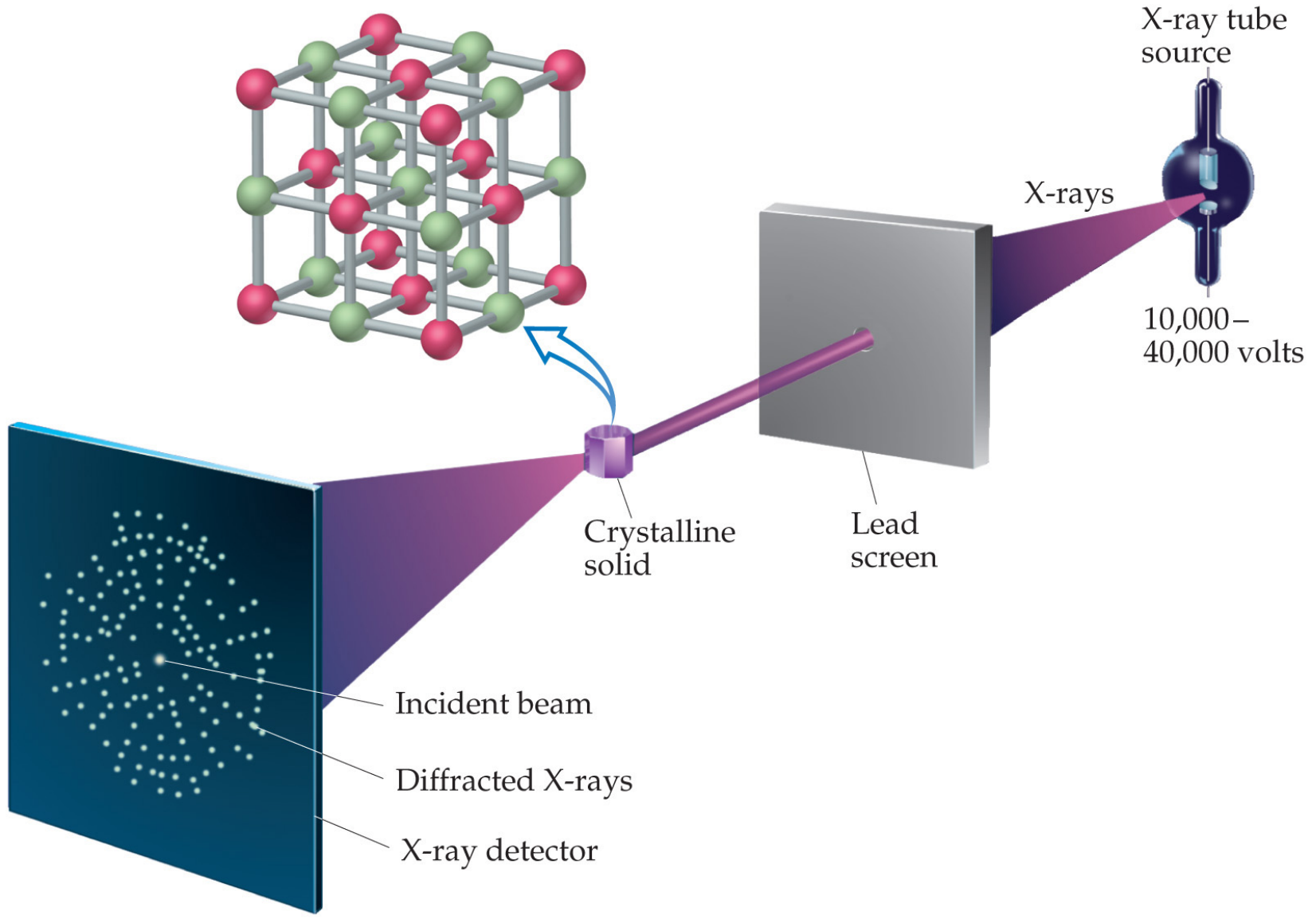
TiAl

**Estructura ordenada  
(fcc) del TiAl, amb  
els àtoms de Ti en  
roig i els d'Al en  
blau.**

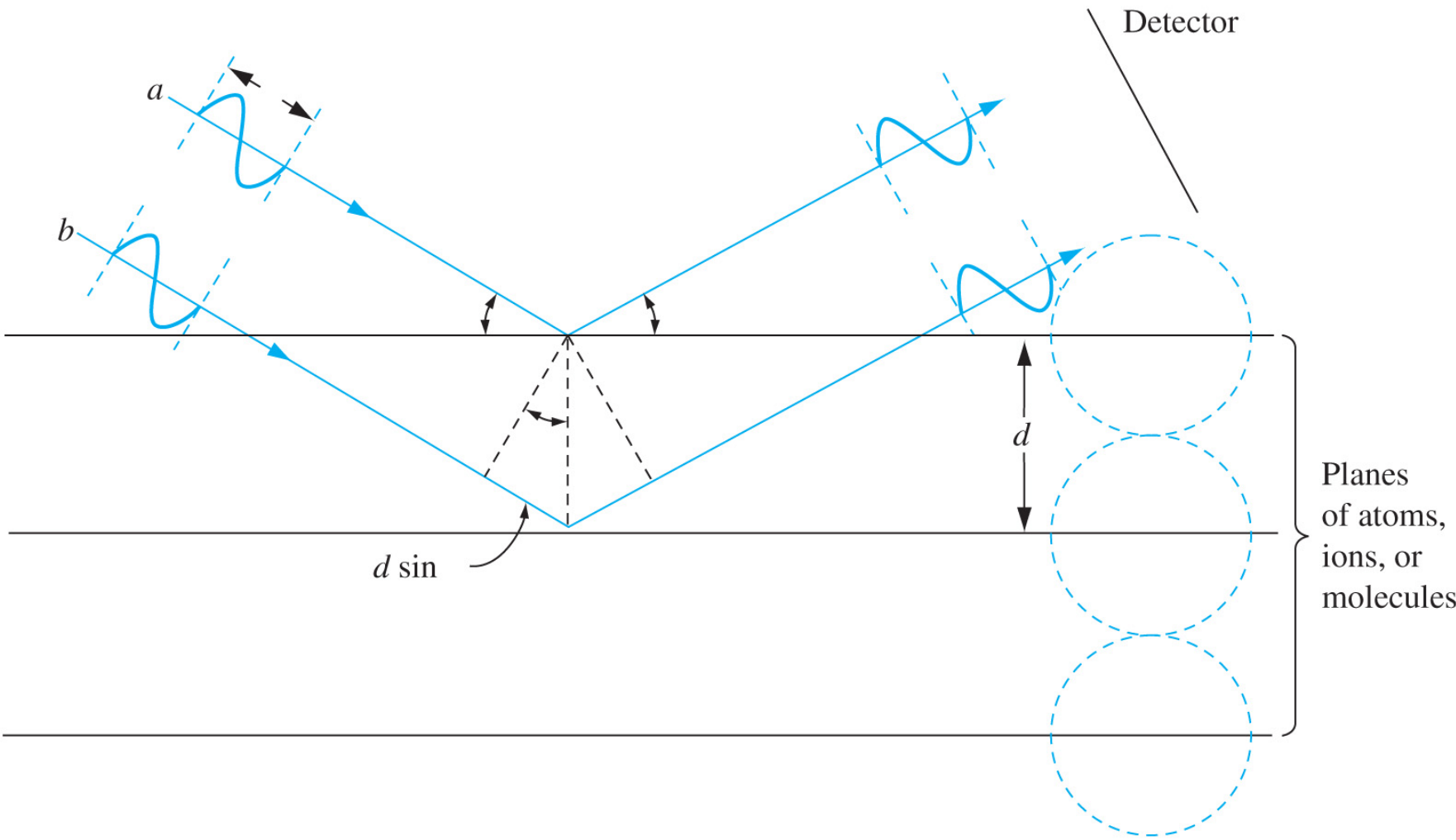
# Difracció de raigs X

**Determinació  
d'estructures cristal·lines**

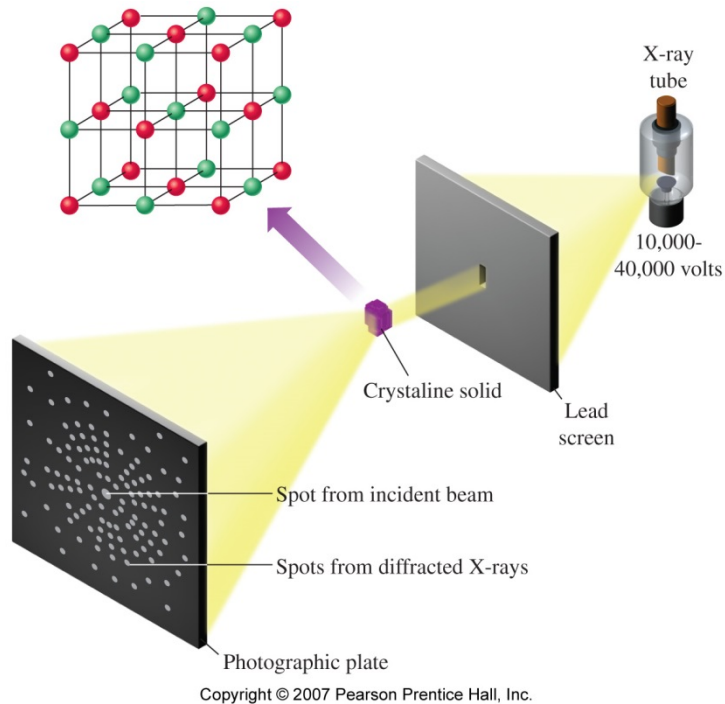
# Estructures cristal·lines. Difracció de raigs X



# Estructures cristal·lines. Difracció de raigs X



# Estructures cristal·lines. Difracció de raigs X



En la cristal·lografia de raigs X, un feix de llum és difractat per un cristall. **El patró de difracció**, registrat en forma de taques en un detector, depén de l'arreglament particular d'àtoms en el cristall.

# Estructures cristal·lines. Difracció de raigs X

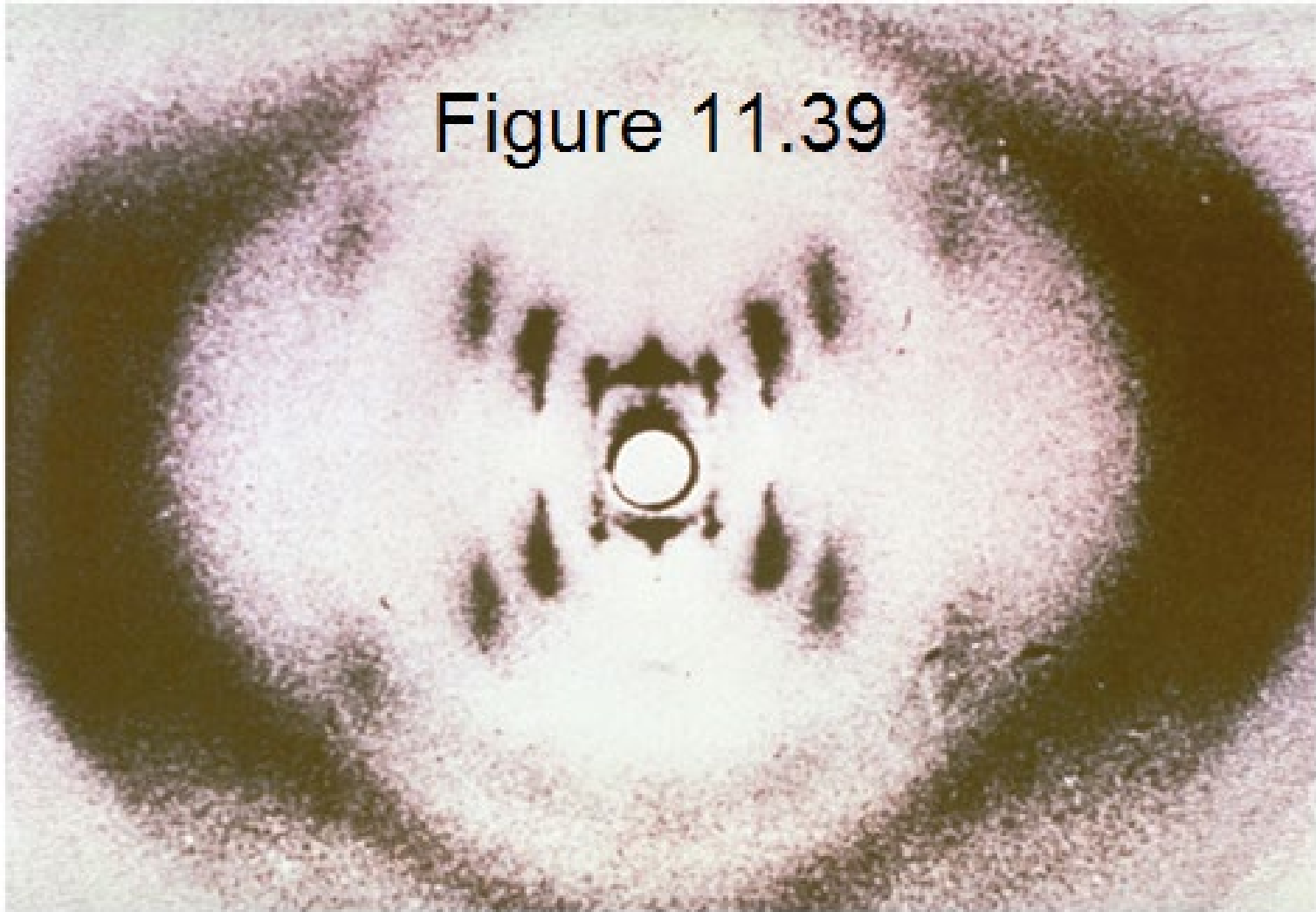
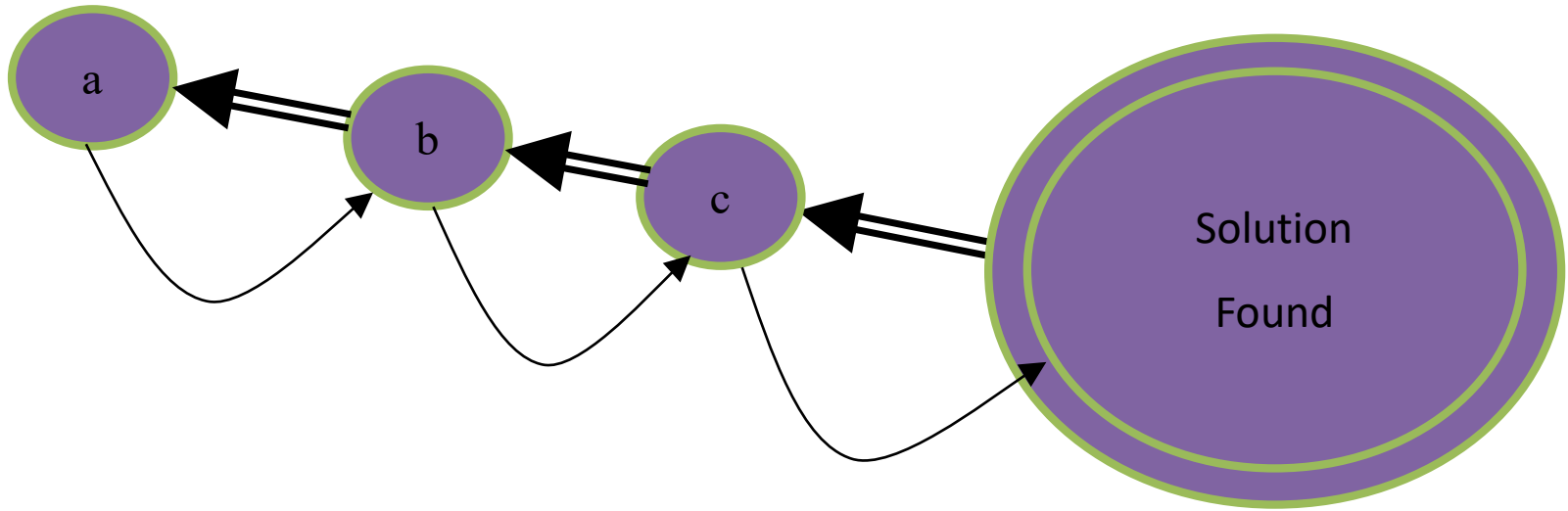


Figure 11.39

# Estructures cristal·lines. Difracció de raigs X



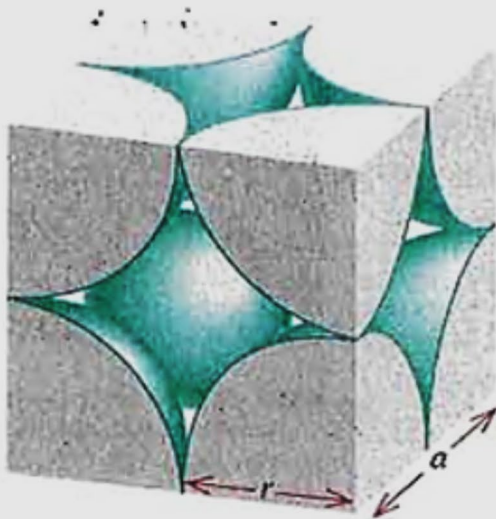
**A voltes, per a resoldre un problema hem de pensar de manera inversa...**

**Càlculs amb  
estructures  
cristal·lines**



# Estructures cristal·lines. Com calcular el radi d'una partícula

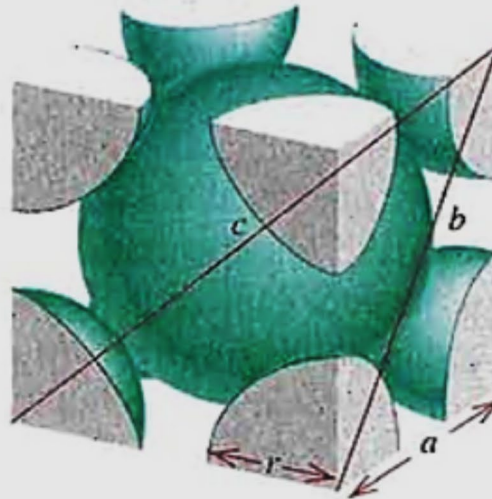
## Cúbica simple



scc

$$a = 2r$$

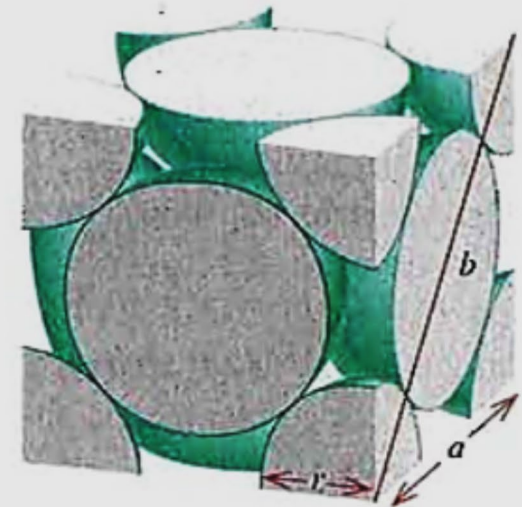
## Centrada al cos



bcc

$$\begin{aligned} b^2 &= a^2 + a^2 \\ c^2 &= a^2 + b^2 \\ &= 3a^2 \\ c &= \sqrt{3}a = 4r \\ a &= \frac{4r}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

## Centrada a les cares



fcc

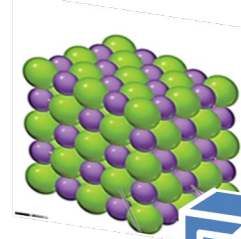
$$\begin{aligned} b &= 4r \\ b^2 &= a^2 + a^2 \\ 16r^2 &= 2a^2 \\ a &= \sqrt{8}r \end{aligned}$$

# Estructures cristal·lines. **Com calcular el radi d'una partícula**

**Exercici 1.** A T ambient, el ferro cristal·litza en una estructura **bcc**. Mitjançant difracció de raigs X s'ha determinat que l'aresta de la cel·la cúbica és de 287 pm. Quin és el radi d'un àtom de ferro?

**Exercici 2.** La plata cristal·litza en un empaquetament cúbic compacte amb una aresta de 407 pm. Quin és el radi de l'àtom de plata en pm?

**Exercici 3.** El níquel cristal·litza en un empaquetament cúbic centrat en les cares amb una aresta de 352,4 pm. Quina és la densitat del níquel?



TEMA 8.  
SÒLIDS NO  
MOLECULARS

# Sòlids iònics



- El cicle de Born-Haber
- Polarització i covalència. Regles de Fajans
- Estructures cristal·lines iòniques

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Característiques generals

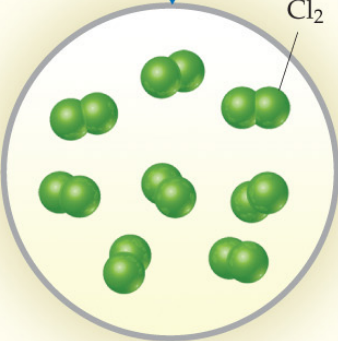
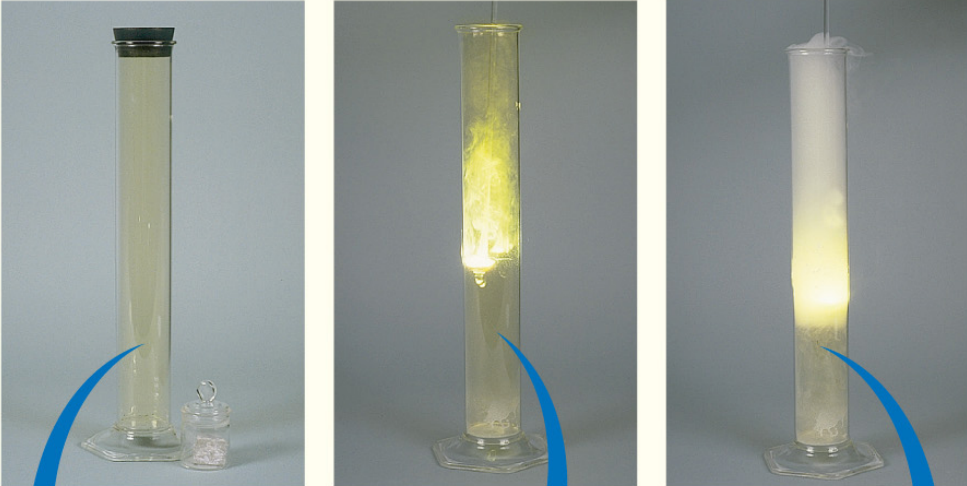
TABLE 11.7 ■ Types of Crystalline Solids

Type of Solid	Form of Unit Particles	Forces Between Particles	Properties	Examples
Molecular	Atoms or molecules	London dispersion forces, dipole–dipole forces, hydrogen bonds	Fairly soft, low to moderately high melting point, poor thermal and electrical conduction	Argon, Ar; methane, CH <sub>4</sub> ; sucrose, C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> ; Dry Ice, CO <sub>2</sub>
Covalent-network	Atoms connected in a network of covalent bonds	Covalent bonds	Very hard, very high melting point, variable thermal and electrical conduction	Diamond, C; quartz, SiO <sub>2</sub>
Ionic	Positive and negative ions	Electrostatic attractions	Hard and brittle, high melting point, poor thermal and electrical conduction	Typical salts—for example, NaCl, Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
Metallic	Atoms	Metallic bonds	Soft to very hard, low to very high melting point, excellent thermal and electrical conduction, malleable and ductile	All metallic elements—for example, Cu, Fe, Al, Pt

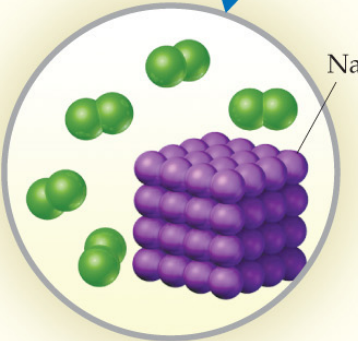
# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Sòlids iònics. Característiques generals**

## FORMATION OF SODIUM CHLORIDE

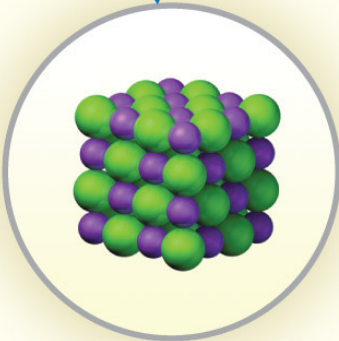
*When metals and nonmetals react, electrons are transferred from the metal atoms to the nonmetal atoms, forming ions. The principal reason that ionic compounds are stable is the attraction between ions of unlike charge, which draws them together, releasing energy and causing the ions to form a solid array or lattice.*



A container of chlorine gas and a container of sodium metal.



Formation of NaCl begins as sodium is added to the chlorine.



The reaction a few minutes later, strongly exothermic, giving off both heat and light.

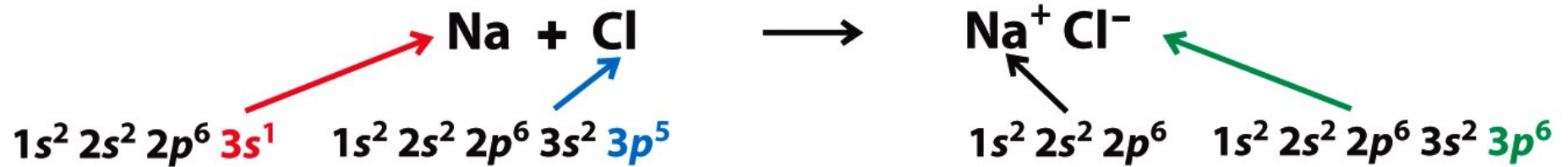
**Què ens diu la  
termodinàmica?**



$$\Delta G_f^\circ = -410.9 \text{ kJ}$$

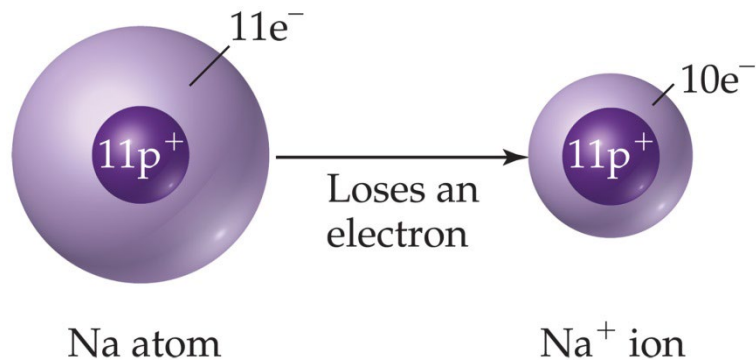
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Enllaç iònic

## Des del punt de vista de les configuracions electròniques

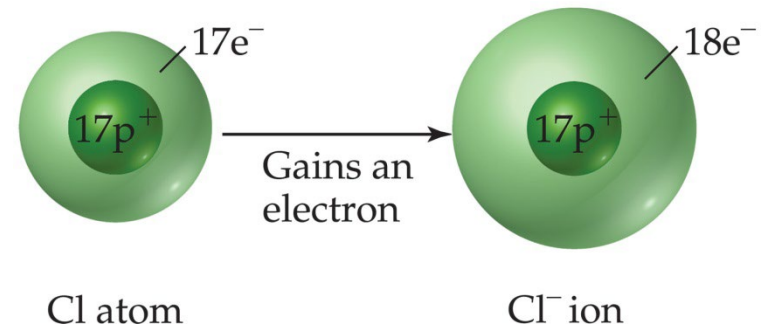


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Enllaç iònic

## Des del punt de vista energètic



$$I_1 = 495 \text{ kJ/mol}$$



$$Ae = -349 \text{ kJ/mol}$$



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Enllaç iònic. Aspectes energètics

## Ordenar-se te avantatges... energèticament parlant?

La raó principal perquè els compostos iònics són estables és **l'atracció entre els ions amb càrregues contràries**. Per tant, necessiten definir una nova variable que és **l'energia de xarxa**.

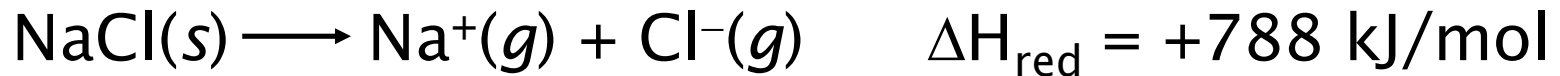
$$E_{el} = \kappa \frac{Q_1 Q_2}{d}$$

*Llei de Coulomb*

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Enllaç iònic. Aspectes energètics

## *Energia de xarxa*

*És l'energia requerida per a separar completament un mol d'un compost iònic sòlid en els seus ions gasosos.*



**El procés invers**, per tant, és altament exotèrmic.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Enllaç iònic. Aspectes energètics

**Alguns exemples**, fixeuvos en les tendències generals.

---

Compound	Lattice Energy (kJ/mol)	Compound	Lattice Energy (kJ/mol)
LiF	1030	MgCl <sub>2</sub>	2326
LiCl	834	SrCl <sub>2</sub>	2127
LiI	730		
NaF	910	MgO	3795
NaCl	788	CaO	3414
NaBr	732	SrO	3217
NaI	682		
KF	808	ScN	7547
KCl	701		
KBr	671		
CsCl	657		
CsI	600		

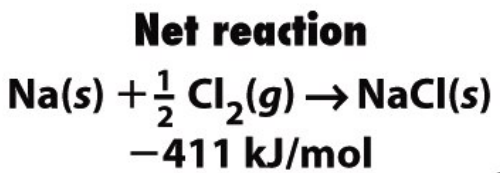
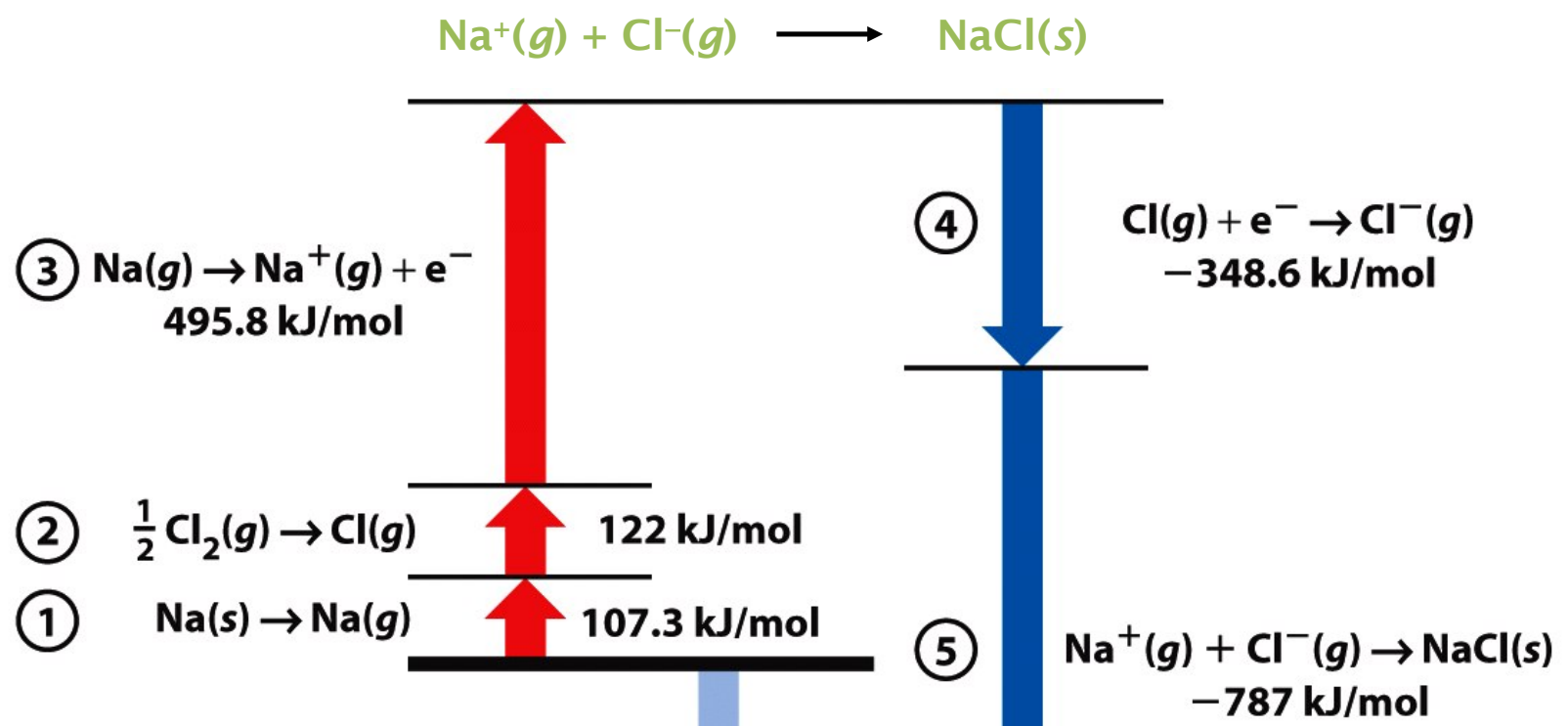
---

# Cicle de Born-Haber

Mostra les **relacions energètiques** en la formació de **sòlids iònics** a partir dels seus elements.

Es basa en la *lleï de Hess*.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Aspectes energètics



The sum of the energy changes for the five steps equals the net energy change for the overall reaction.

The most favorable step is the formation of solid NaCl from gaseous  $\text{Na}^+$  and  $\text{Cl}^-$  ions.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Aspectes energètics

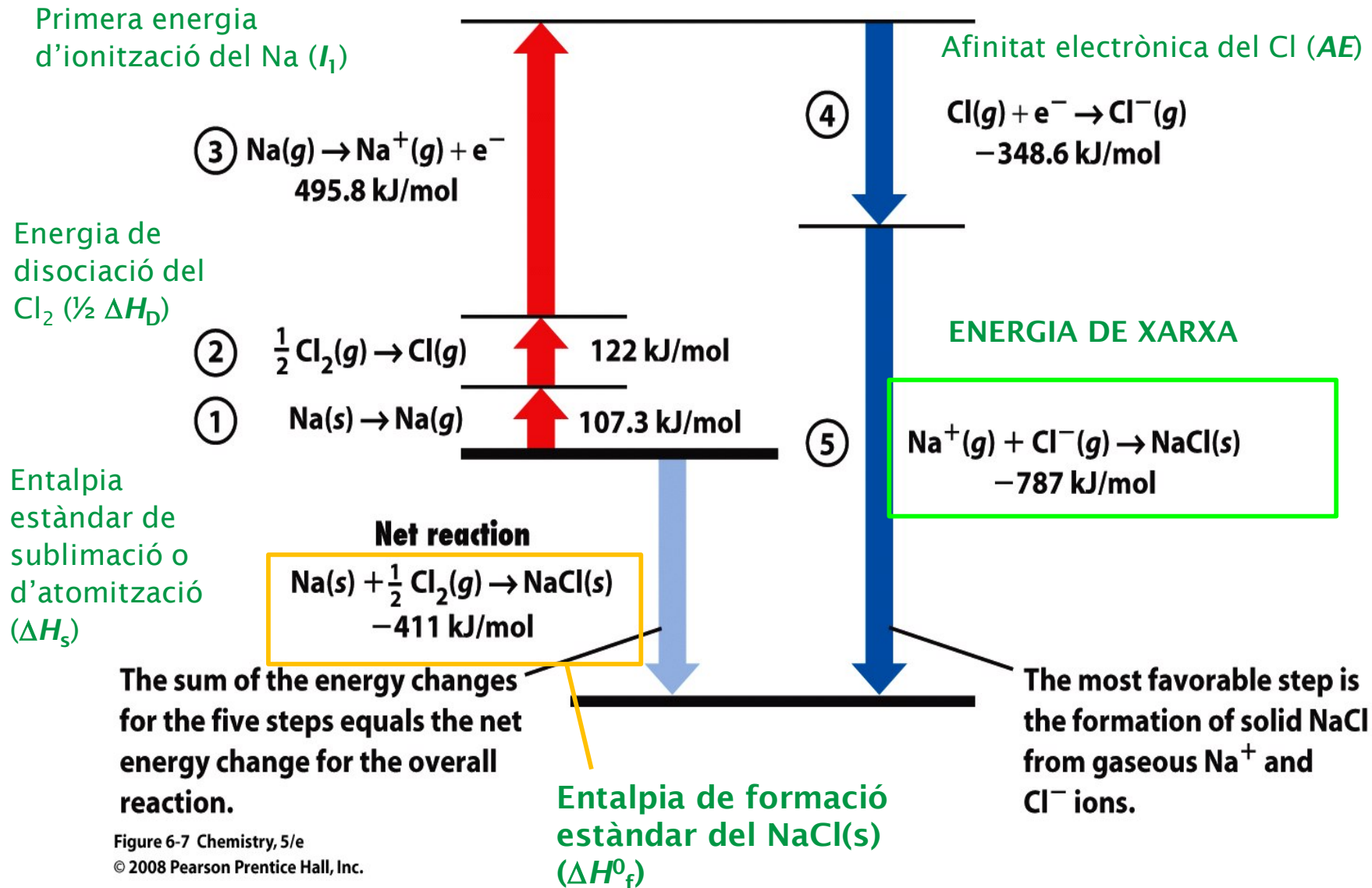
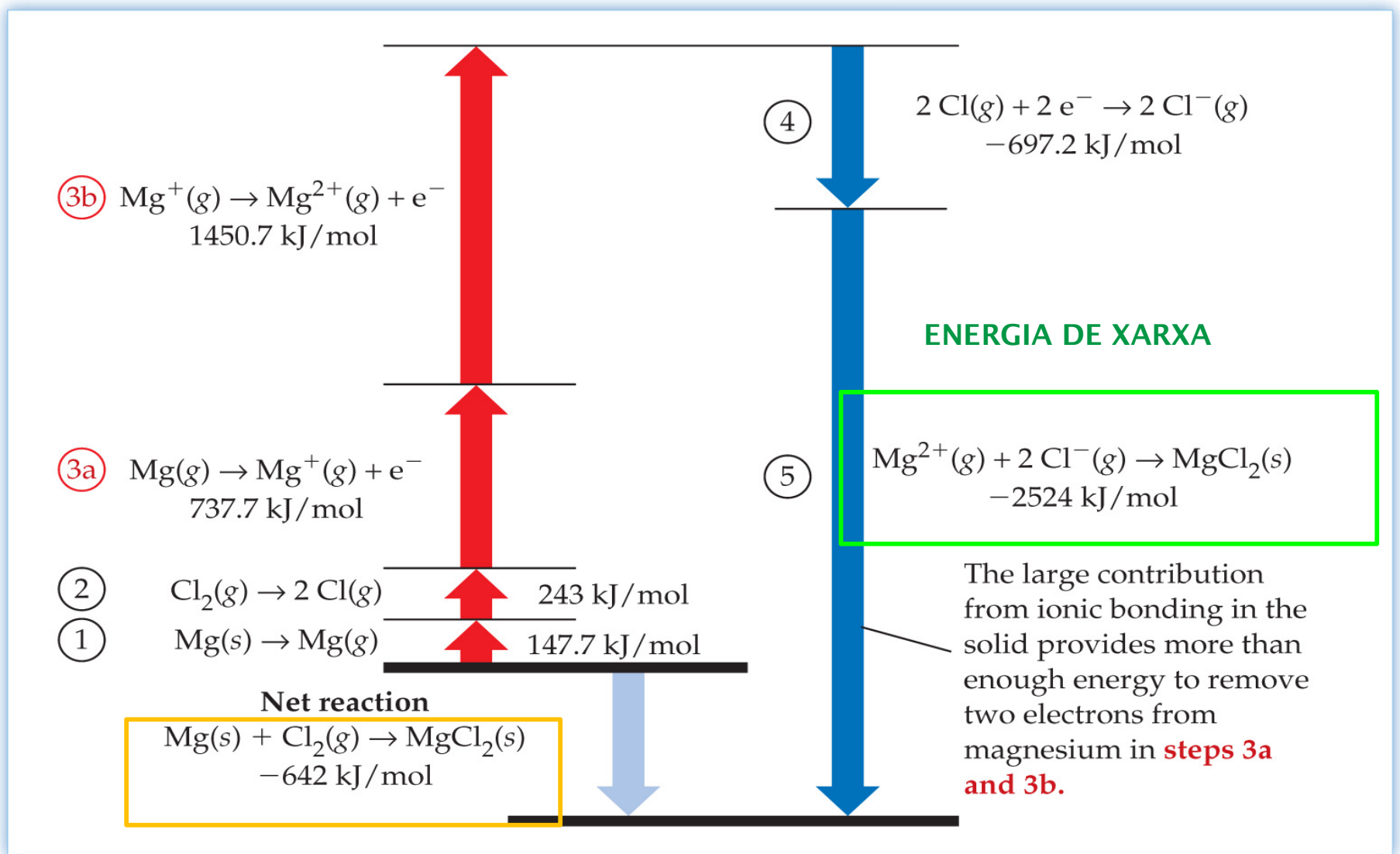


Figure 6-7 Chemistry, 5/e  
 © 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Aspectes energètics



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Sòlids iònics. Aspectes energètics

## Exercici

Determineu l'energia reticular o de xarxa del



Dades ( $\text{KJ mol}^{-1}$ ):

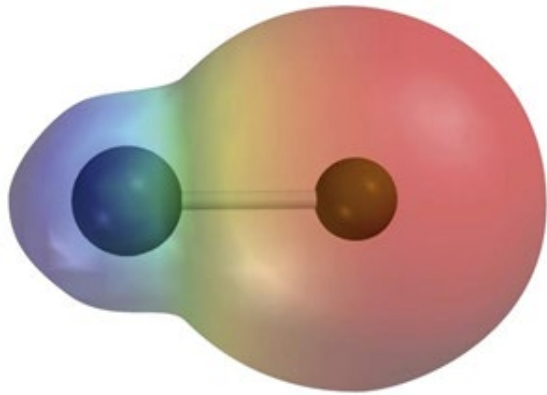
$$\Delta H_f = -1215; \Delta H_S = 178; \Delta H_D = 154; I_1 = 590; I_2 = 1146; AE_1 = -328$$



**Polaritat d'enllaç.**

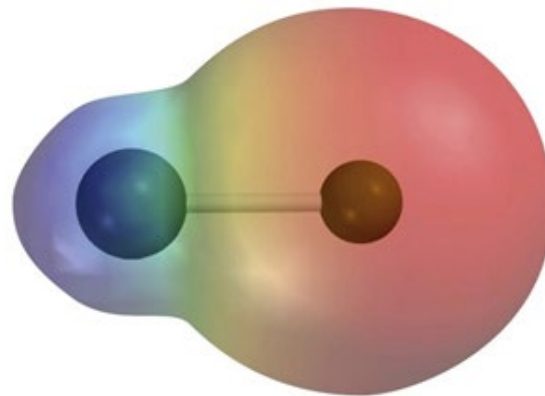
**Caràcter iònic vs covalent**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Polaritat d'enllaç



**NaCl**

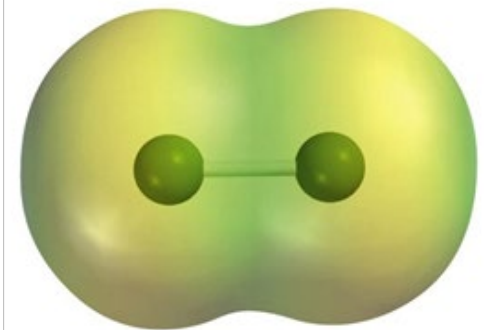
Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



**HCl**

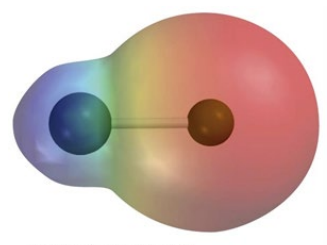
Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Cl<sub>2</sub>**



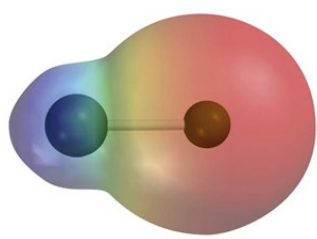
Unnumbered 7 p227c Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Polaritat d'enllaç



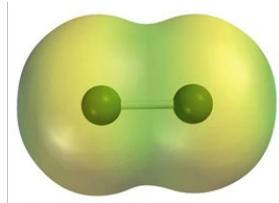
NaCl

Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



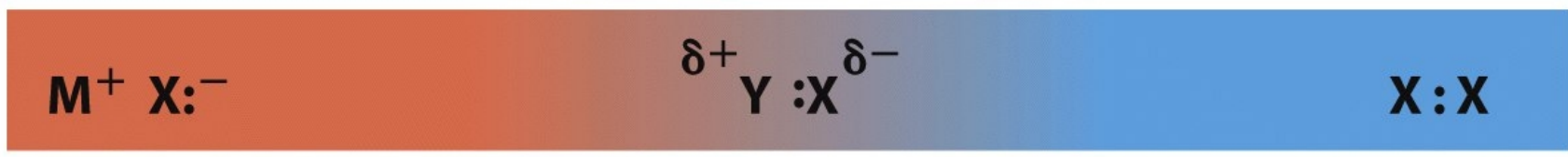
HCl

Unnumbered 7 p227a Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



Cl<sub>2</sub>

Unnumbered 7 p227c Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.



$M^+ X:^-$

$\delta^+ Y :X \delta^-$

$X:X$



**Ionic**

**Polar covalent**

**Nonpolar covalent**

**(full charges)**

**(partial charges)**

**(electronically symmetrical)**

Figure 7-3 Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Iònic**

$(\Delta EN > 2,0)$

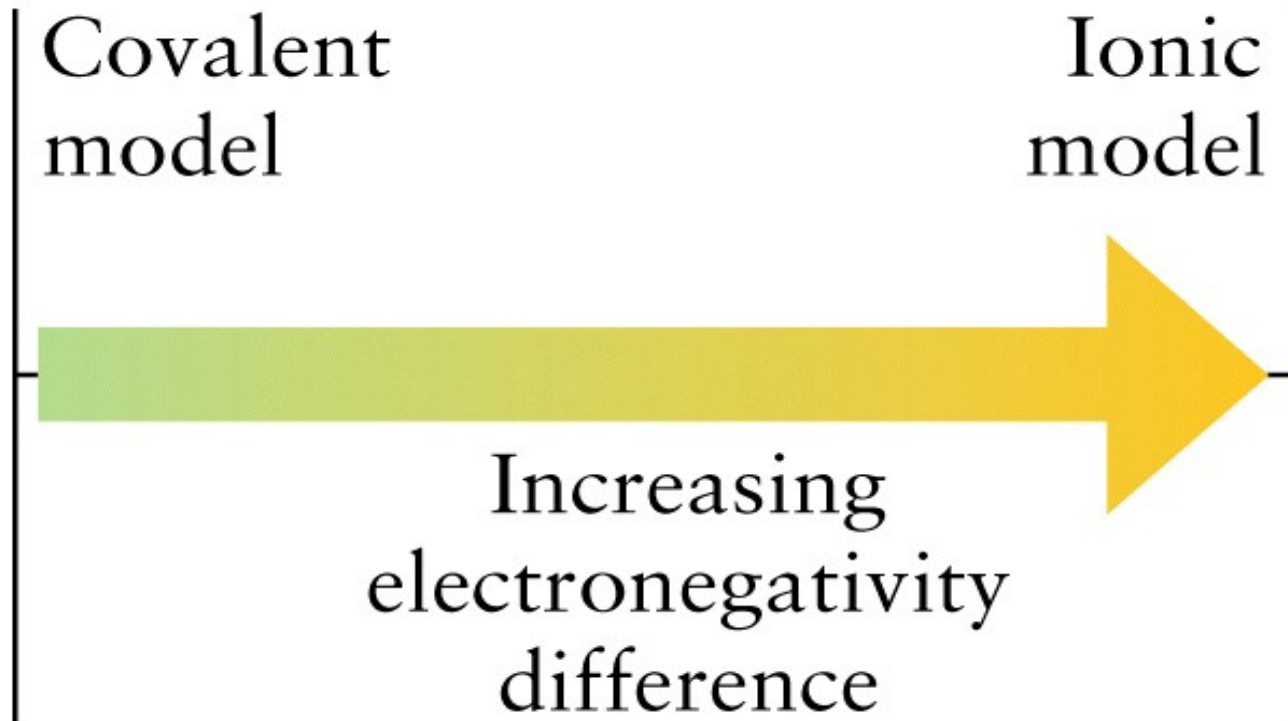
**Covalent polar**

$(\Delta EN = 0,3-2,0)$

**Covalent no polar**

$(\Delta EN < 0,3)$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Polaritat d'enllaç



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Polaritat d'enllaç. Caràcter iònic vs covalent.

---

Els termes *covalent* i *iònic* s'utilitzen per a descriure dues situacions **extremes** de l'enllaç químic.

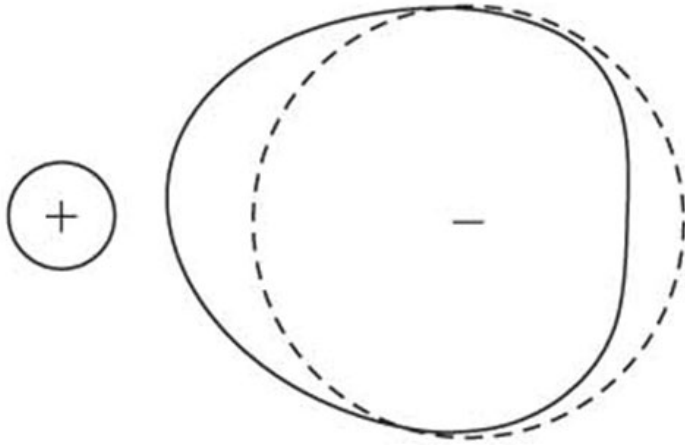
**El model covalent** és un bon model quan escrivim l'enllaç entre elements no metàl·lics **d'electronegativitat pareguda.**

---

**El model iònic** és un bon model quan tenim un metall i un no-metall (**gran diferència d'electronegativitat**).

---

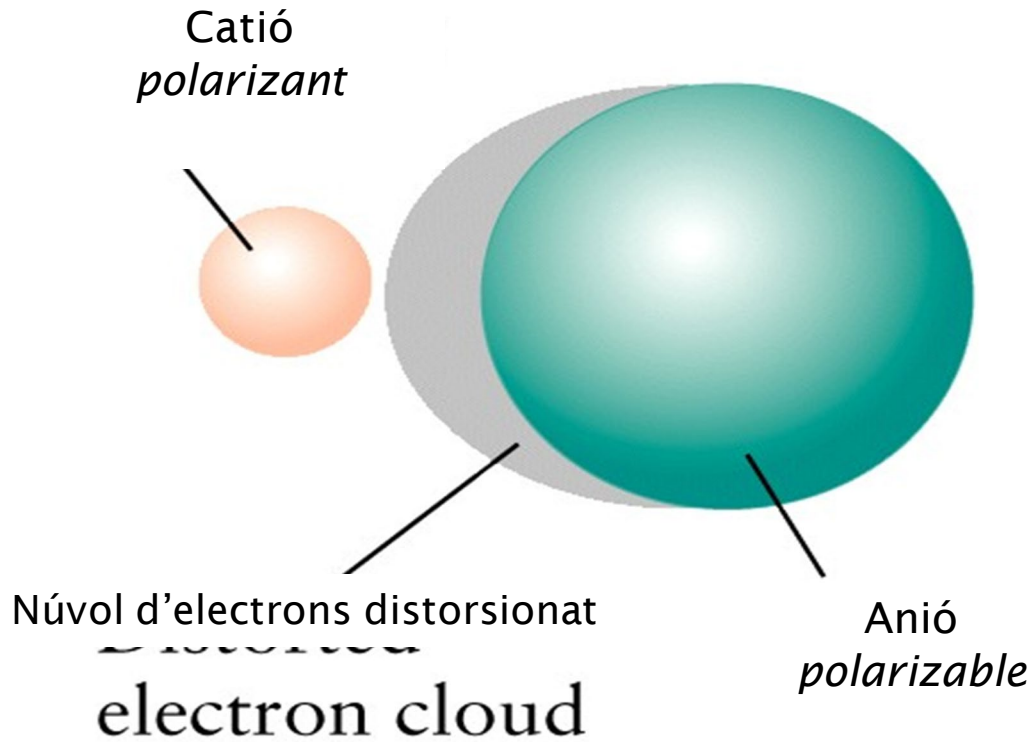
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Correccions al model iònic. Polarització



Tots els **enllaços iònics** en tenen algun de caràcter covalent.

**El catió** sempre deforma en cert grau la densitat electrònica de **l'anió**.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Correccions al model iònic. Polarització

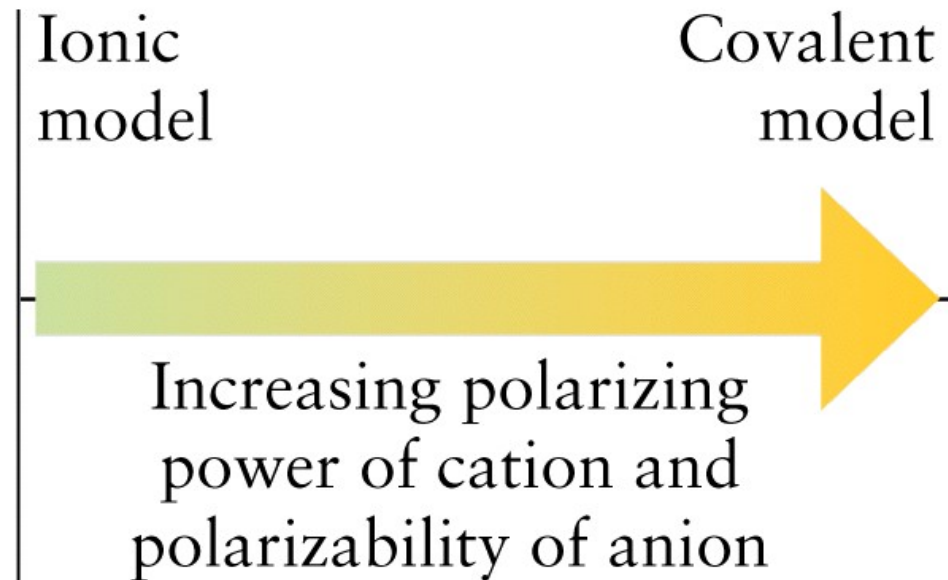


## POLARITZACIÓ

**Deformació** (de la distribució electrònica) respecte de **la forma esfèrica de l'anió ideal** per part d'un catió.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Correccions al model iònic. Polarització

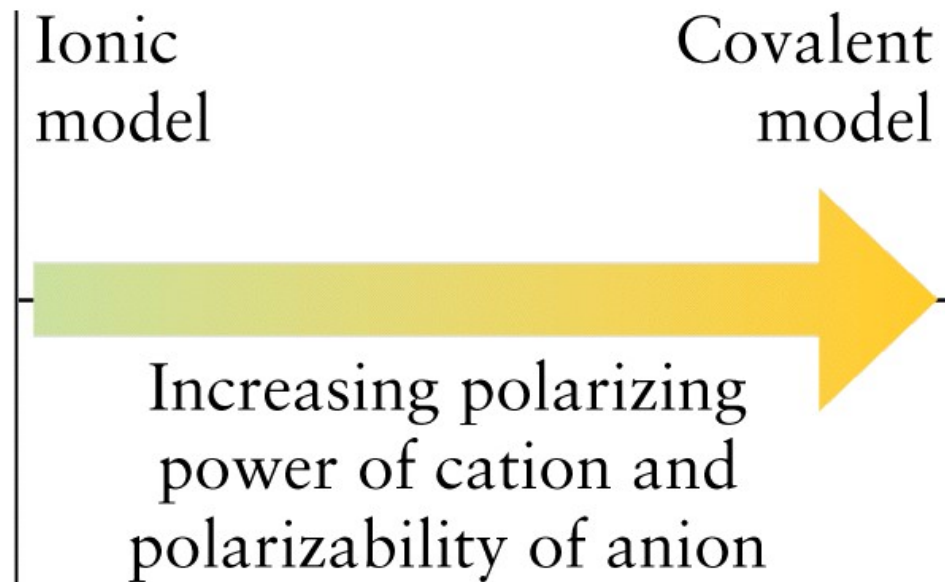
La **polarització** introdueix un **cert grau de covalència**, que serà major conforme augmente el ***poder polaritzant*** del catió i la ***polaritzabilitat*** de l'anió.





# SÒLIDS NO MOLECULARS. Correccions al model iònic. Polarització

Els compostos formats per **cations altament polaritzants** i **anions altament polaritzables** tenen un **caràcter covalent significatiu** en els enllaços.



**Com podem fer una  
estimació?**

# Regles de Fajans

**Variació** del caràcter  
**covalent** en compostos  
iònics en termes de  
**polarització.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Correccions al model iònic. Polarització

## Regles de Fajans

Un catió és més **polaritzant** com més xicotet en siga el radi i major la càrrega, és a dir, com més gran en siga la densitat de càrrega.

Un anió és més **polaritzable** com major en siga el radi i major la càrrega negativa:

$F^- < Cl^- < Br^- < I^-$  (iodur és el més polaritzable)

$O^{2-}$  és més polaritzable que  $F^-$

Els cations que no tenen configuració de gas noble afavoreixen la polarització:  $Ag^+$ ,  $Cu^+$ ,  $Hg^{2+}$ ,  $Cd^{2+}$ ,  $Tl^+$ ...

## Regles de Fajans

NaCl vs AlI<sub>3</sub>

---

**Podríeu classificar en iònic o amb caràcter covalent aquests dos compostos segons les regles de Fajans?**

## Regles de Fajans

### NaCl vs AlI<sub>3</sub>

El clorur sòdic té un catió (Na<sup>+</sup>) amb càrrega de (+1), una grandària relativament gran (aprox. 1 Å) i la configuració de gas noble. A més, té un anió (Cl<sup>-</sup>) relativament xicotet (per a ser anió) de 2 Å que no és molt polaritzable. **Per tant l'enllaç és iònic.**

Contràriament, el iodur d'alumini (AlI<sub>3</sub>) té un catió trivalent (+3) molt polaritzant i un anió molt gran (i per tant polaritzable), motiu pel qual el seu enllaç **té caràcter covalent.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats

## Els cristalls dels compostos iònics són:

Durs però fràgils. No són mal·leables.

Sòlids a temperatura ambient.

## Propietats físiques:

Solen tenir punts de fusió elevats.

Quan es fonen, condueixen l'electricitat (si no es descomponen).

## Propietats químiques

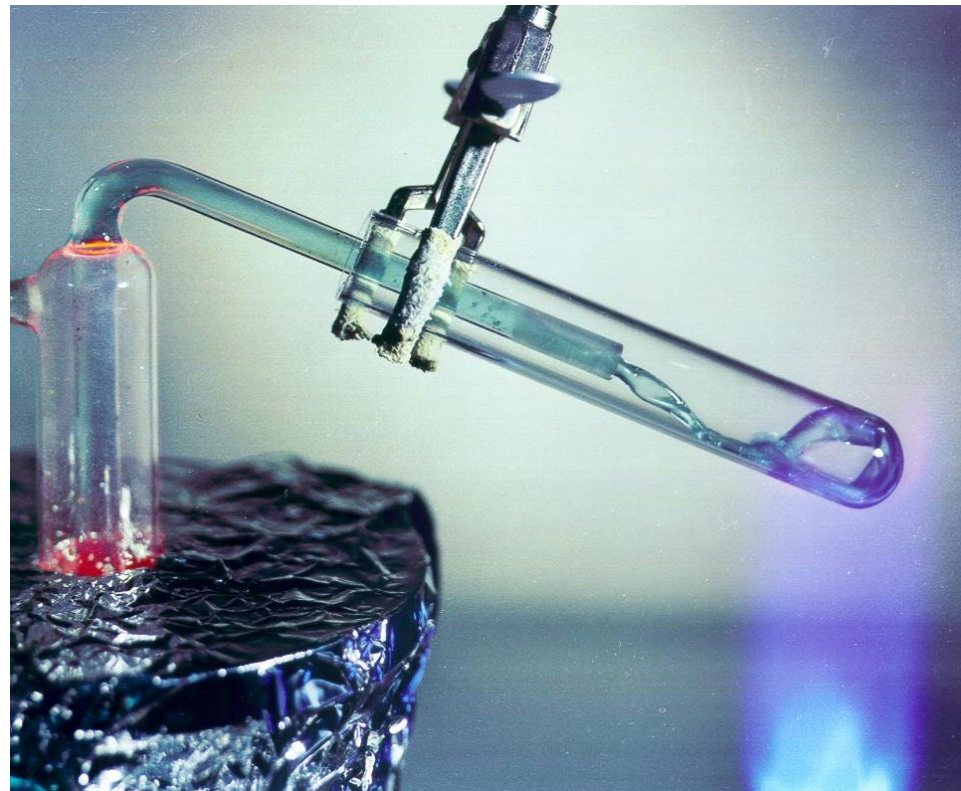
Són insolubles en dissolvents apolars.

Molts d'aquests són solubles en dissolvents polars ( $\text{H}_2\text{O}$ ) i, quan ho fan, la dissolució és conductora de l'electricitat.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Punts de fusió



El procés de fusió implica **vèncer parcialment** les atraccions electroestàtiques entre els ions i permetre'n el moviment lliure en fase líquida.





# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Punts de fusió

Els compostos iònics tenen punts de fusió alts, fet que indica que l'enllaç iònic és bastant fort. La força depèn en gran mesura de les càrregues dels ions (de l'energia de xarxa o energia reticular).

Compound	Melting point / °C
NaF	988
MgF <sub>2</sub>	1266
AlF <sub>3</sub>	1291 sublimes

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Punts de fusió

Segons un model purament electroestàtic, com més xicotet és un ió, més gran n'és la densitat de càrrega i més alt serà el punt de fusió.

ion	radio	Punto de fusión (KX, °C)
F <sup>-</sup>	167	857
Cl <sup>-</sup>	167	772
Br <sup>-</sup>	182	735
I <sup>-</sup>	206	685

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Fragilitat

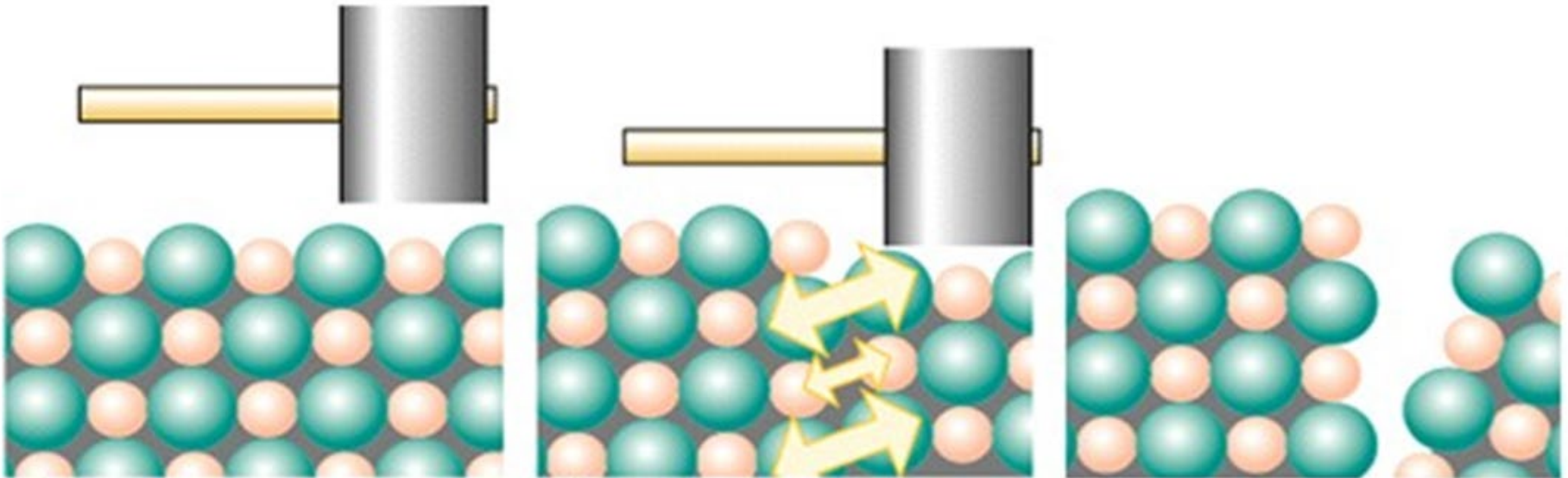
Significa que **no poden deformar-se** apreciablement sense trencar-se.



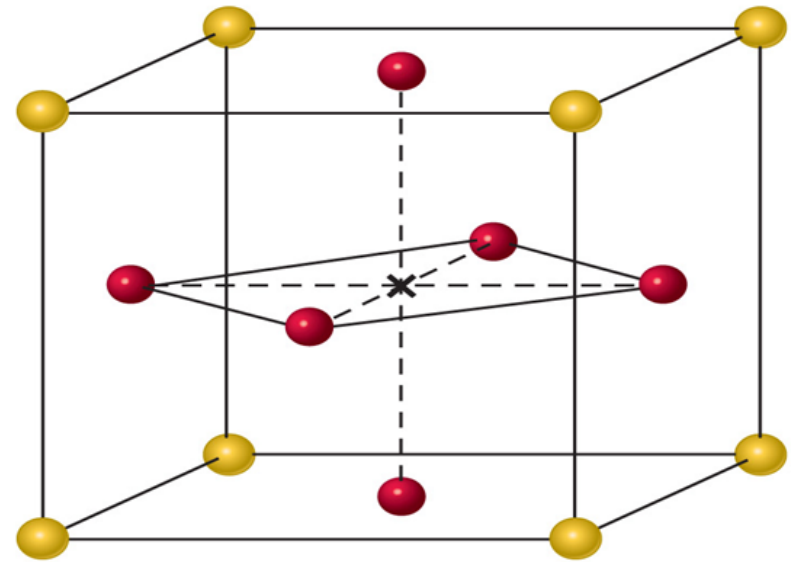
Escala Mohs	
Cristal	dureza
MgO	6,5
CaO	4,5
SrO	3,5
LiF	3,3
CaF <sub>2</sub>	6
SrF <sub>2</sub>	3,5
PbF <sub>2</sub>	3,2

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Fragilitat

A diferència de les estructures dels metalls, el desplaçament provoca aparició de fortes repulsions entre cations i anions i destrueix l'estructura ordenada.



# Estructures cristal·lines iòniques



Copyright © 2007 Pearson

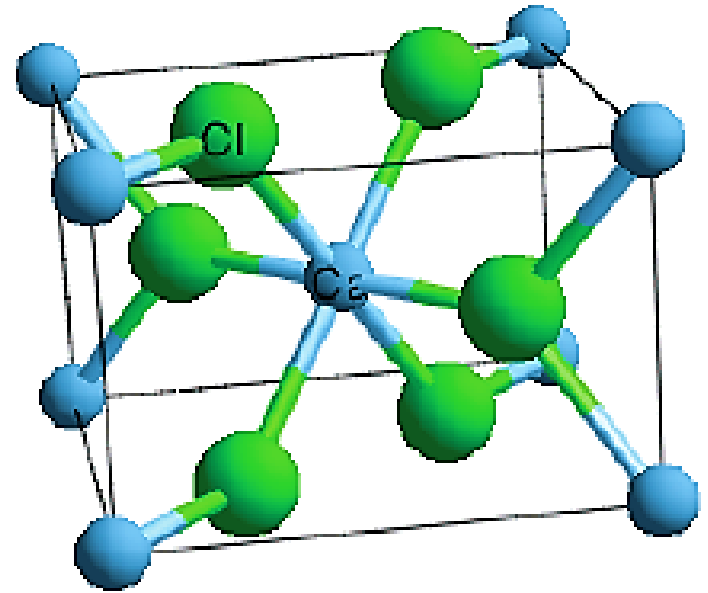
**Models d'empaquetament dels sòlids iònics**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques

Els ions se suposen *esferes* carregades, **incompressibles** i **no polaritzables**.

Els ions s'envolten del nombre **més gran de contraions** (ions de càrrega contrària) possible i de la manera més *compacta*.

La relació **catió/anió** en la *cel·la unitat* ha de reflectir la composició química del compost:



- Ca<sup>+2</sup>:  $1 + 8(1/8) = 2$
- Cl<sup>-</sup>:  $4(1/2) + 2 = 4$

## Factors que regulen les possibles geometries cristal·lines:

**Grandària relativa dels ions:**  
orienta el tipus d'empaquetament.

**Electroneutralitat macroscòpica del cristall:** la suma de les càrregues dels cations i dels anions que ocupen una cel·la unitat ha de ser zero.

En definir una cel·la unitat d'un cristall iònic ha de triar-se una cel·la que...

... per translació en tres dimensions genere el cristall complet.

... indique els nombres de coordinació dels ions.

... siga consistent amb la fórmula del compost.

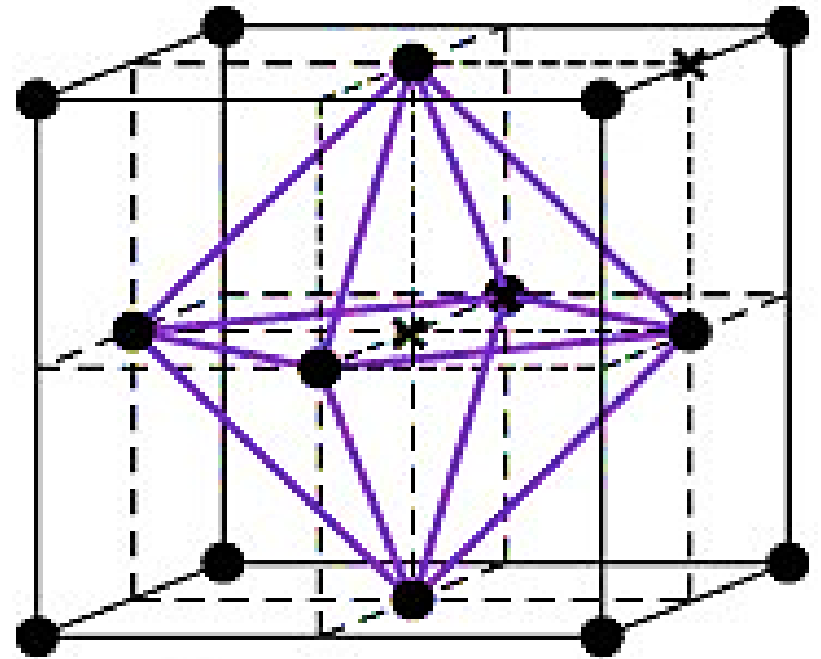




# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques

## NOMBRE DE COORDINACIÓ

Nombre d'ions veïns de càrrega oposada més pròxims a qualsevol ió en el cristall iònic.

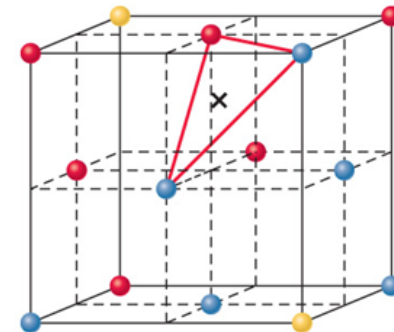


(c) Octahedral hole

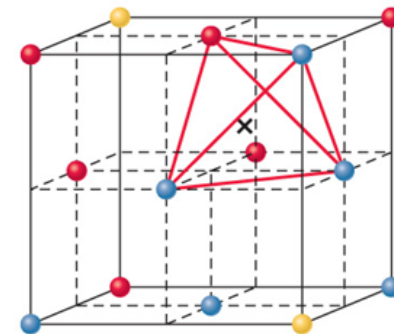


## Empaquetatge

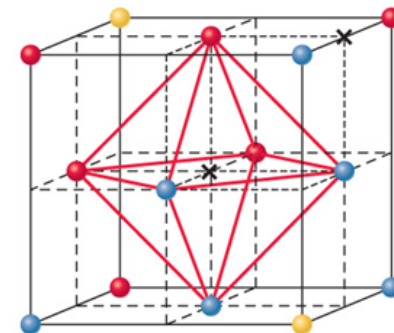
En general, les xarxes iòniques suposen l'empaquetatge compacte dels anions (**més grans**), amb els cations (**més xicotets**) que ocupen els buits formats pels primers.



(a) Trigonal hole



(b) Tetrahedral hole

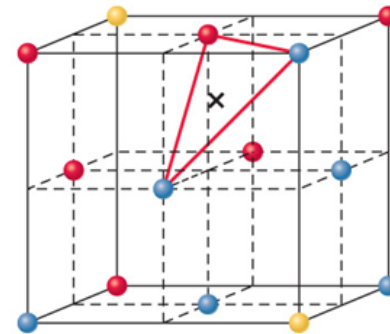


(c) Octahedral hole

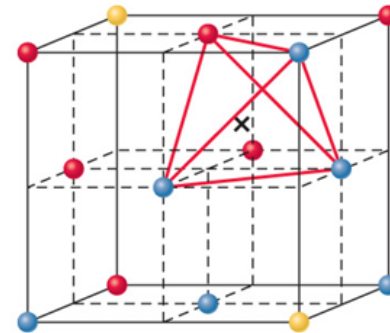
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques



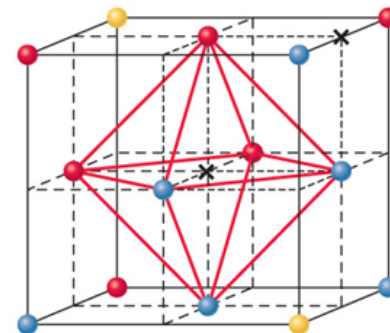
Com s'ocupen  
els buits que  
es generen en  
les xarxes  
iòniques?



(a) Trigonal hole



(b) Tetrahedral hole

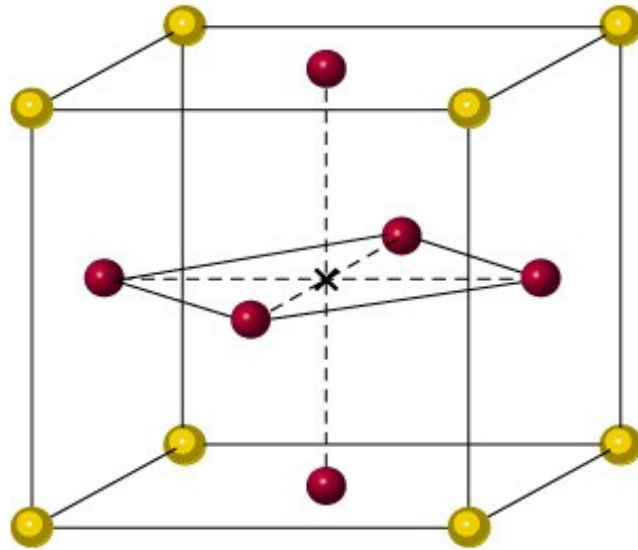


(c) Octahedral hole

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques. Cel·la fcc

Cel·la  
cúbica  
centrada  
en les  
cares

*fcc*

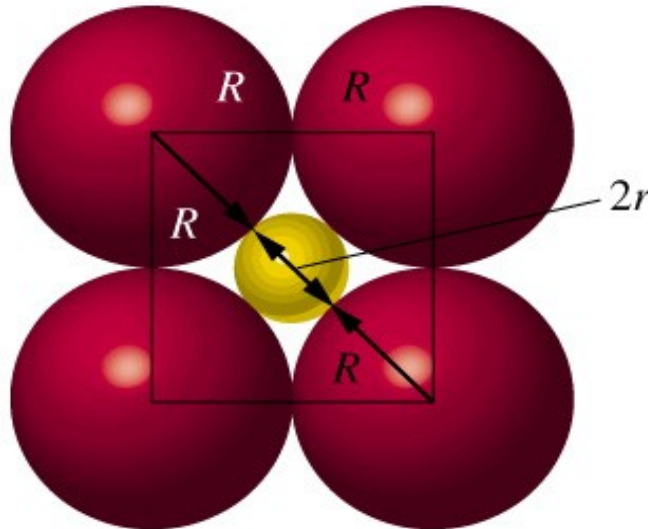


$$(2R)^2 + (2R)^2 = (2R + 2r)^2$$

$$8R^2 = (2R + 2r)^2 \longrightarrow 2\sqrt{2}R = 2R + 2r$$

$$(2\sqrt{2} - 2)R = 2r \longrightarrow (\sqrt{2} - 1)R = r$$

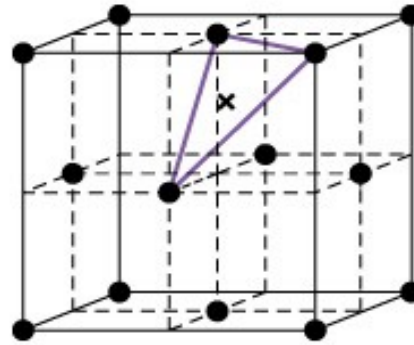
$$r = 0.414R$$



Tall d'un buit octaèdric

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques. Cel·la fcc

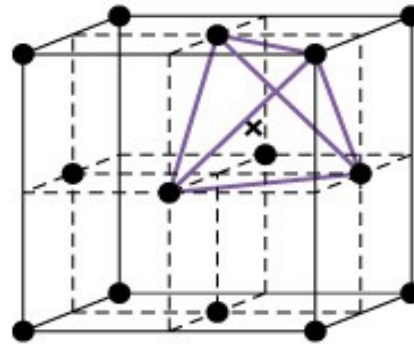
*Buit trigonal*



(a) Trigonal hole

$$r = 0.155 R$$

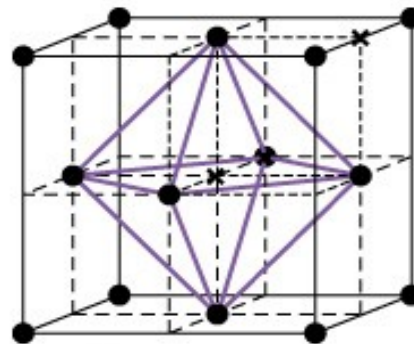
*Buit tetraèdric*



(b) Tetrahedral hole

$$r = 0.225 R$$

*Buit octaèdric*



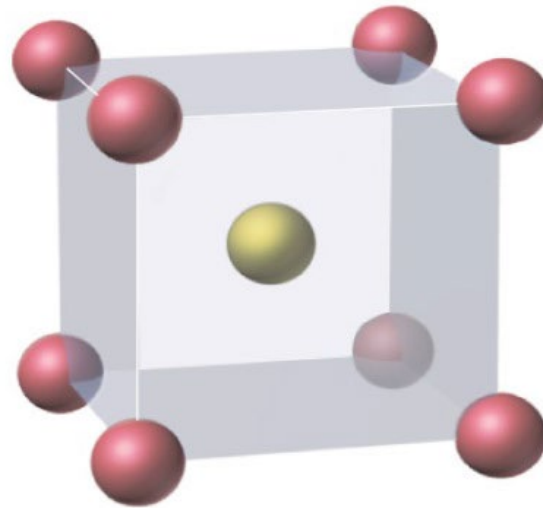
(c) Octahedral hole

$$r = 0.414 R$$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques. Cel·la CS

## Cel·la cúbica simple

*buit cúbic*



Body-centered cubic

$$r = 0.732 R$$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures cristal·lines iòniques

*Quin buit ocupa el catió en una ordenació donada d'anions?*

$$0.225 < (r_{\text{catió}}/R_{\text{anió}}) < 0.414$$

*buit tetraèdric* fcc d'anions

$$0.414 < (r_{\text{catió}}/R_{\text{anió}}) < 0.732$$

*buit octaèdric* fcc d'anions

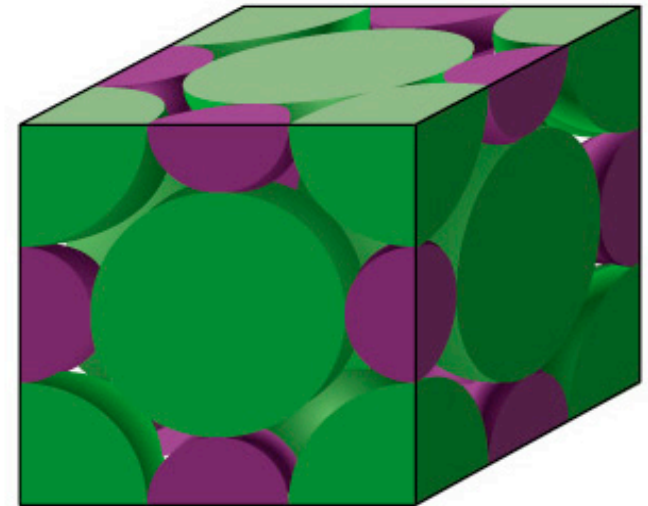
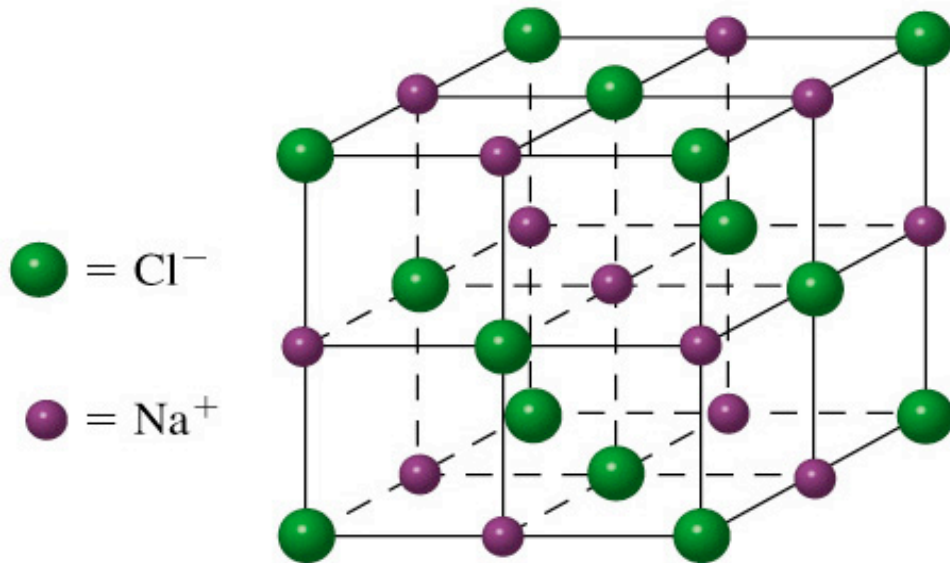
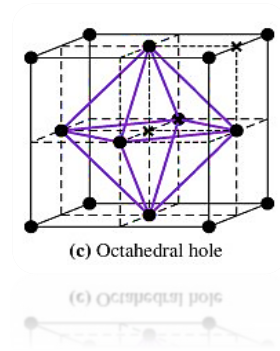
$$0.732 < (r_{\text{catió}}/R_{\text{anió}})$$

*buit cúbic* cel·la cúbica simple d'anions

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del NaCl

# NaCl

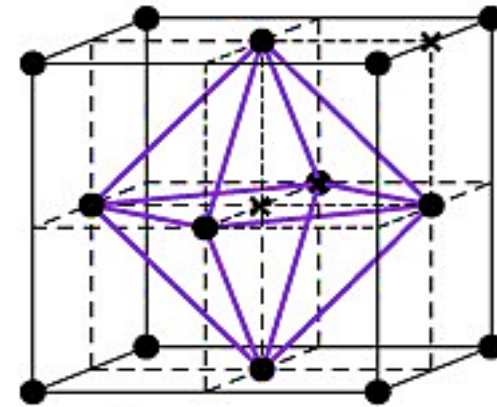
Xarxa fcc d'ions  $\text{Cl}^-$   
(*empaquetament cúbic compacte*),  
amb ions  $\text{Na}^+$   
omplint els *buits octaèdrics*.





# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del NaCl

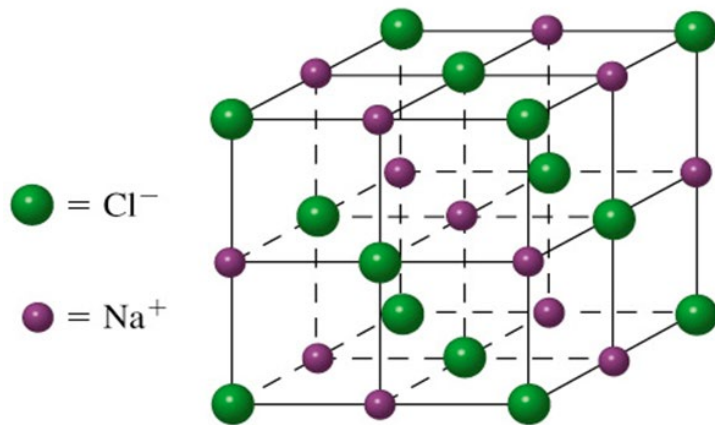
$$\frac{r_{\text{Na}^+}}{R_{\text{Cl}^-}} = \frac{99 \text{ pm}}{181 \text{ pm}} = 0.55$$



(c) Octahedral hole



(c) Octahedral hole



⇒  $(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2) = 4 \text{ ions Cl}^-$

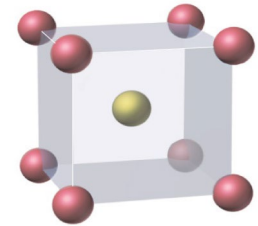
⇒  $(12 \times 1/4) + (1 \times 1) = 4 \text{ ions Na}^+$

$\text{NC (Cl}^-) = 6$     $\text{NC (Na}^+) = 6$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del NaCl

## CsCl

$$\frac{r_{\text{Cs}^+}}{R_{\text{Cl}^-}} = \frac{169 \text{ pm}}{181 \text{ pm}} = 0.934$$



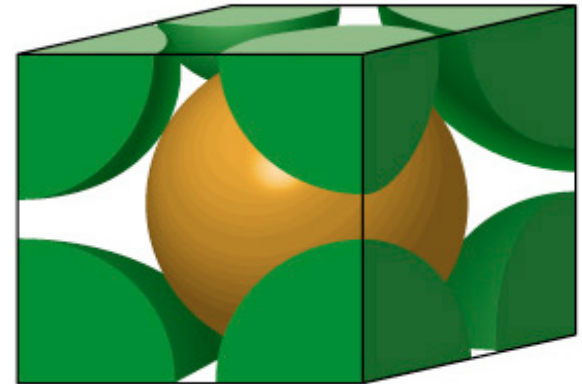
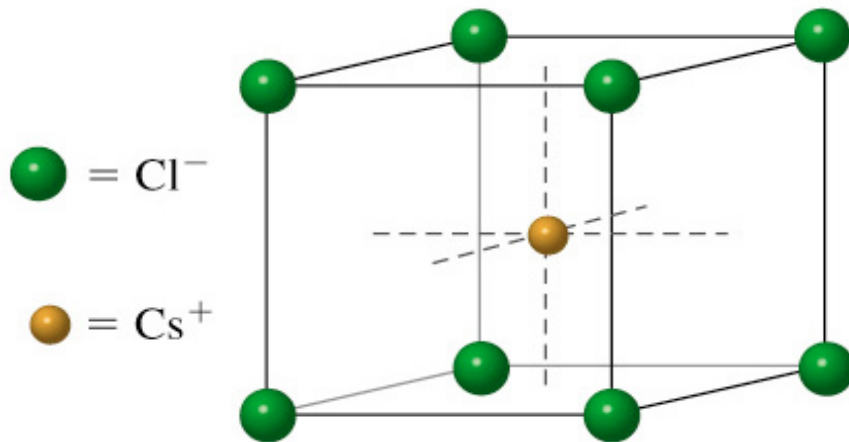
Body-centered cubic

Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Xarxa cúbica simple d'ions  $\text{Cl}^-$ , amb l'ió  $\text{Cs}^+$  en el centre del cub (una cel·la unitat alternativa té  $\text{Cl}^-$  en el centre i  $\text{Cs}^+$  en els vèrtexs).**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del NaCl

## CsCl



$$(8 \times 1/8) = 1 \text{ ió Cl}^-$$

$$1 \text{ ió Cs}^+$$

$$\text{NC (Cl}^-) = 8$$

$$\text{NC (Cs}^+) = 8$$

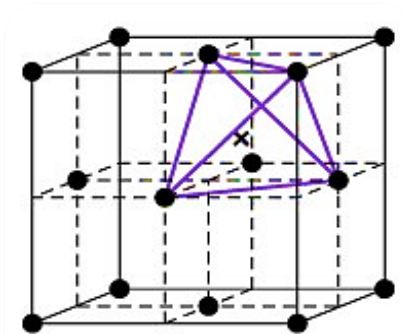


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del ZnS (“blenda de zinc”)

# ZnS

$$\frac{r_{\text{Zn}^{2+}}}{R_{\text{S}^{2-}}} = 0.35$$

Xarxa fcc d'ions  $\text{S}^{2-}$   
(empaquetament  
cúbic compacte),  
amb ions  $\text{Zn}^{2+}$   
omplint 4 dels 8  
buits tetraèdrics.



(b) Tetrahedral hole



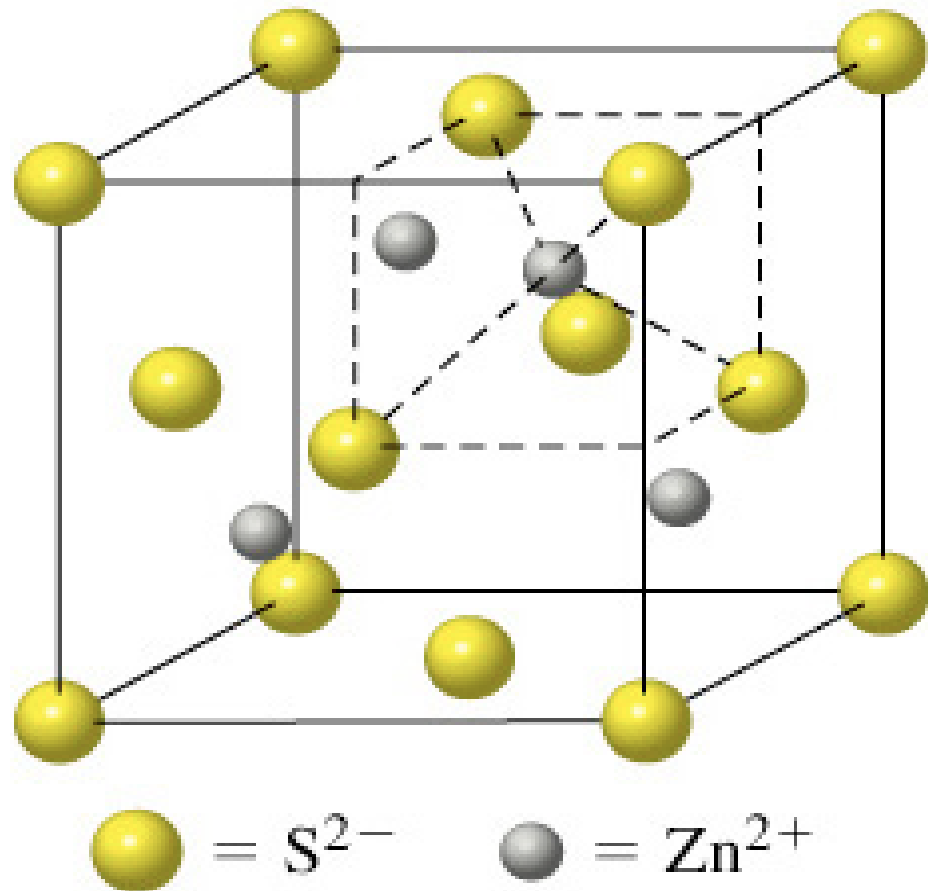
(d) Tetrahedral hole

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. Estructura del ZnS (“blenda de zinc”)

## ZnS

NC ( $S^{2-}$ ) = 4

NC ( $Zn^{2+}$ ) = 4

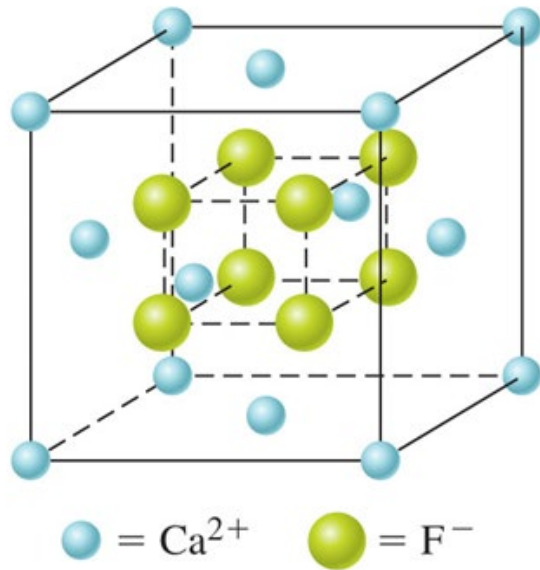


(a) Unit cell of ZnS,  
the zinc blend structure

$(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2) = 4$  ions  $S^{2-}$

4 ions  $Zn^{2+}$

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. $\text{CaF}_2$ ("Fluorita")



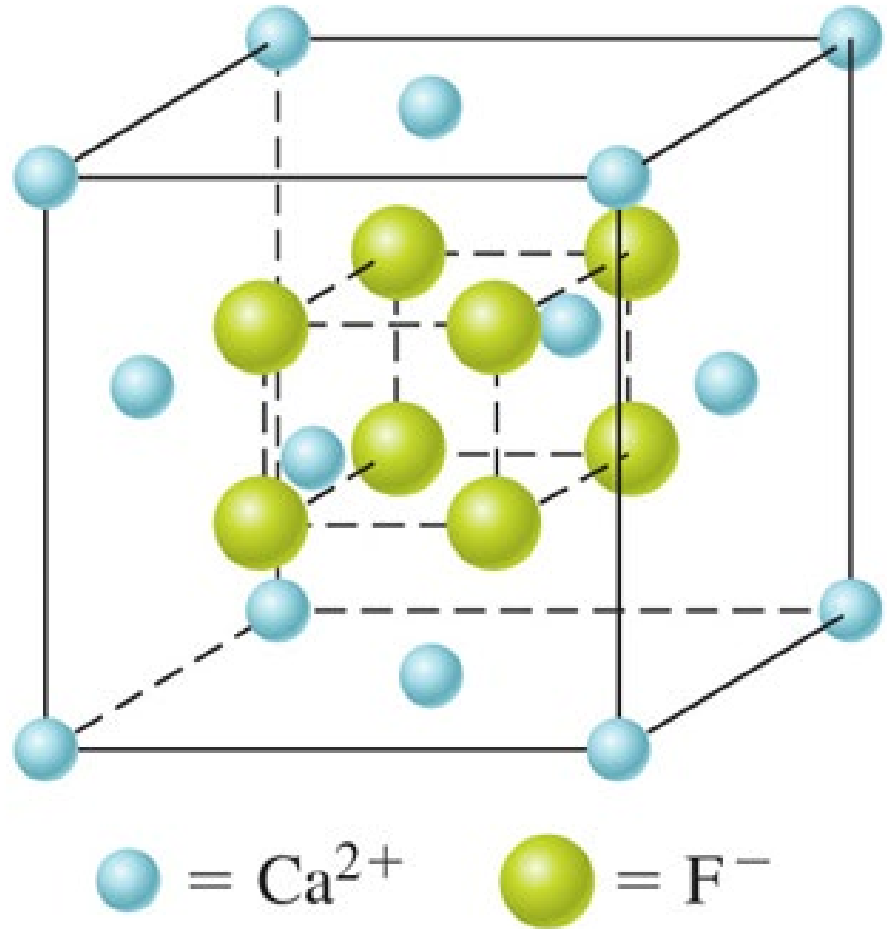
Xarxa **fcc** de cations  
 $\text{Ca}^{2+}$   
(empaquetament  
cúbic compacte), amb  
els anions  $\text{F}^-$  omplint  
tots els buits  
tetraèdrics.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Exemples. $\text{CaF}_2$ ("Fluorita")



$$\text{NC} (\text{F}^-) = 4$$

$$\text{NC} (\text{Ca}^{2+}) = 8$$



8 ions  $\text{F}^-$

$$(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2) = 4 \text{ ions } \text{Ca}^{2+}$$

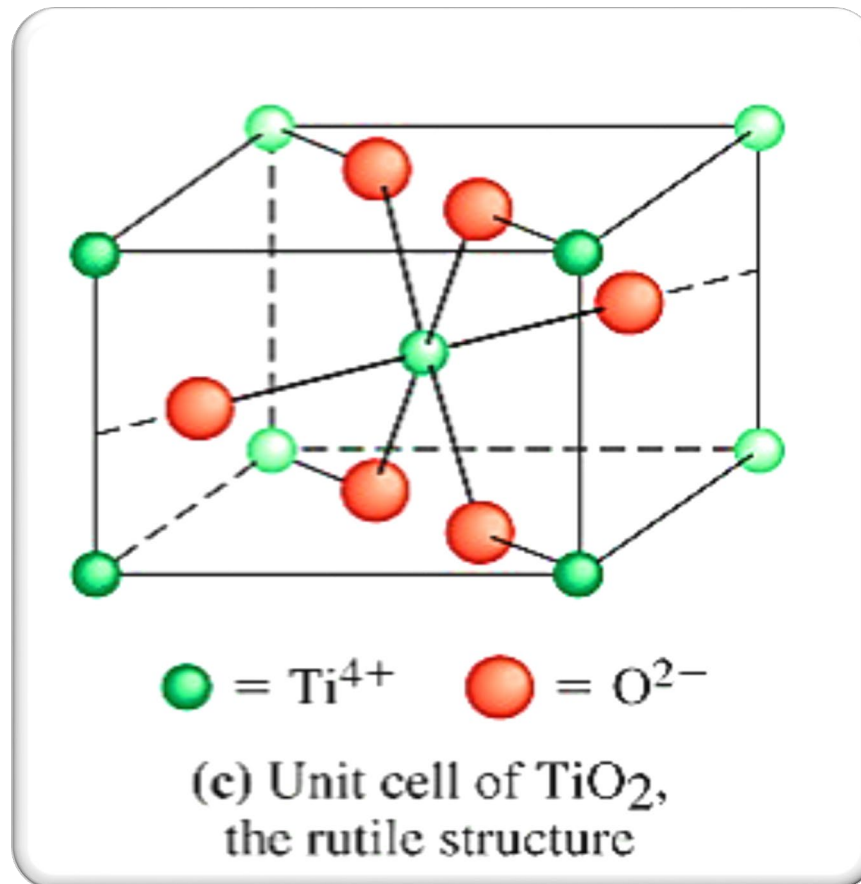


# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Exercici**

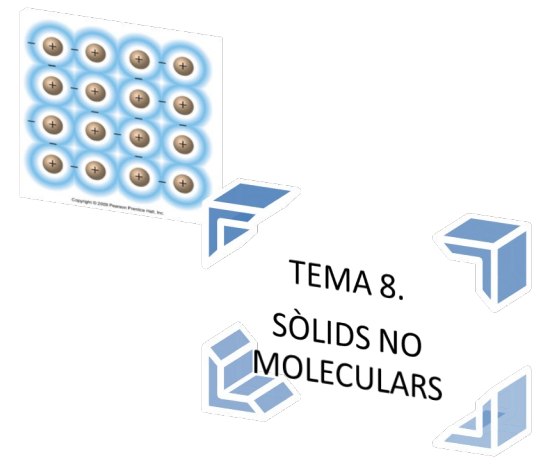
El rutil és un mineral compost per Ti i O. La seua cel·la unitària conté àtoms de Ti en cadascun dels cantons i un àtom de Ti en el centre de la cel·la. Quatre àtoms d'O estan en les cares oposades de la cel·la, i dos es troben completament dins de la cel·la.

(a) Quina és la fórmula química d'aquest mineral?

(b) Quin és el nombre de coordinació de cada àtom?







# Sòlids metà·lics



El model del mar d'electrons

Teoria de bandes

Semiconductors

# SOLIDS NO MOLECULARS. **Metals**

**TABLE 11.7** ■ Types of Crystalline Solids

Type of Solid	Form of Unit Particles	Forces Between Particles	Properties	Examples
Molecular	Atoms or molecules	London dispersion forces, dipole–dipole forces, hydrogen bonds	Fairly soft, low to moderately high melting point, poor thermal and electrical conduction	Argon, Ar; methane, CH <sub>4</sub> ; sucrose, C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> ; Dry Ice, CO <sub>2</sub>
Covalent-network	Atoms connected in a network of covalent bonds	Covalent bonds	Very hard, very high melting point, variable thermal and electrical conduction	Diamond, C; quartz, SiO <sub>2</sub>
Ionic	Positive and negative ions	Electrostatic attractions	Hard and brittle, high melting point, poor thermal and electrical conduction	Typical salts—for example, NaCl, Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
Metallic	Atoms	Metallic bonds	Soft to very hard, low to very high melting point, excellent thermal and electrical conduction, malleable and ductile	All metallic elements—for example, Cu, Fe, Al, Pt

# SÒLIDS NO MOLECULARS. **Metalls.** Model del mar d'electrons

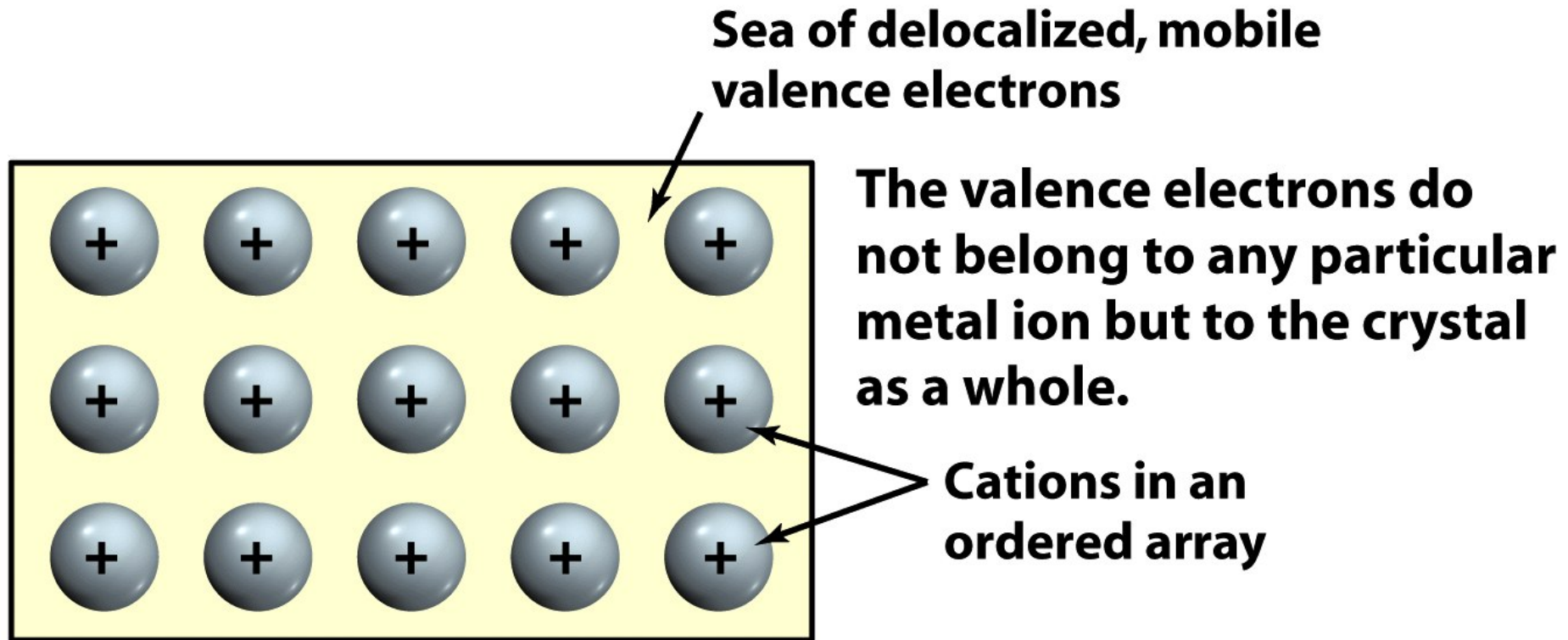
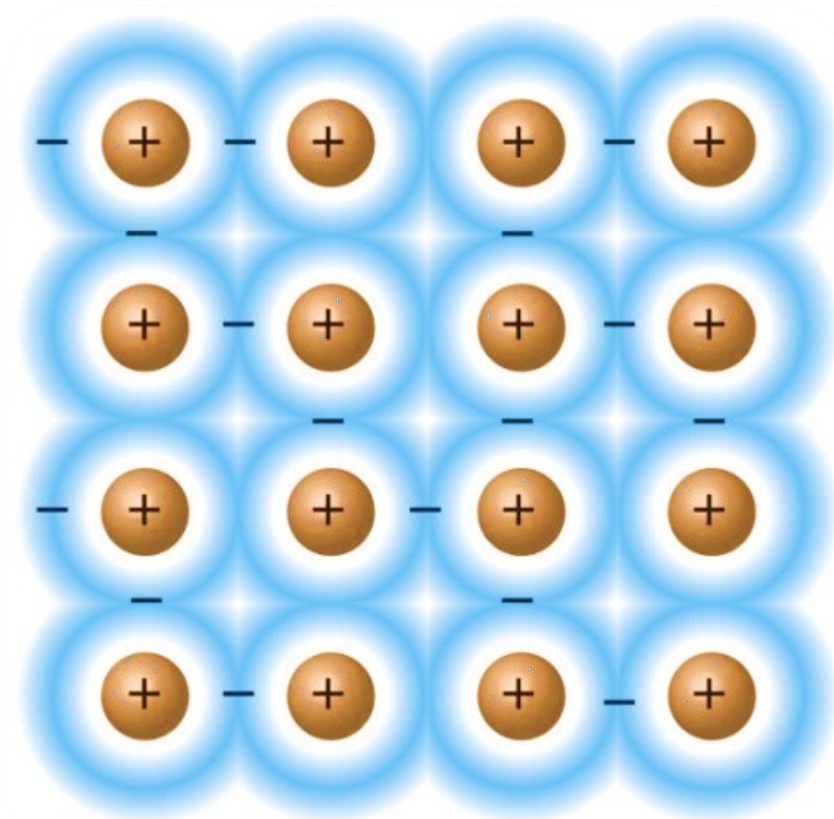


Figure 21-6 Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

## Model del mar d'electrons

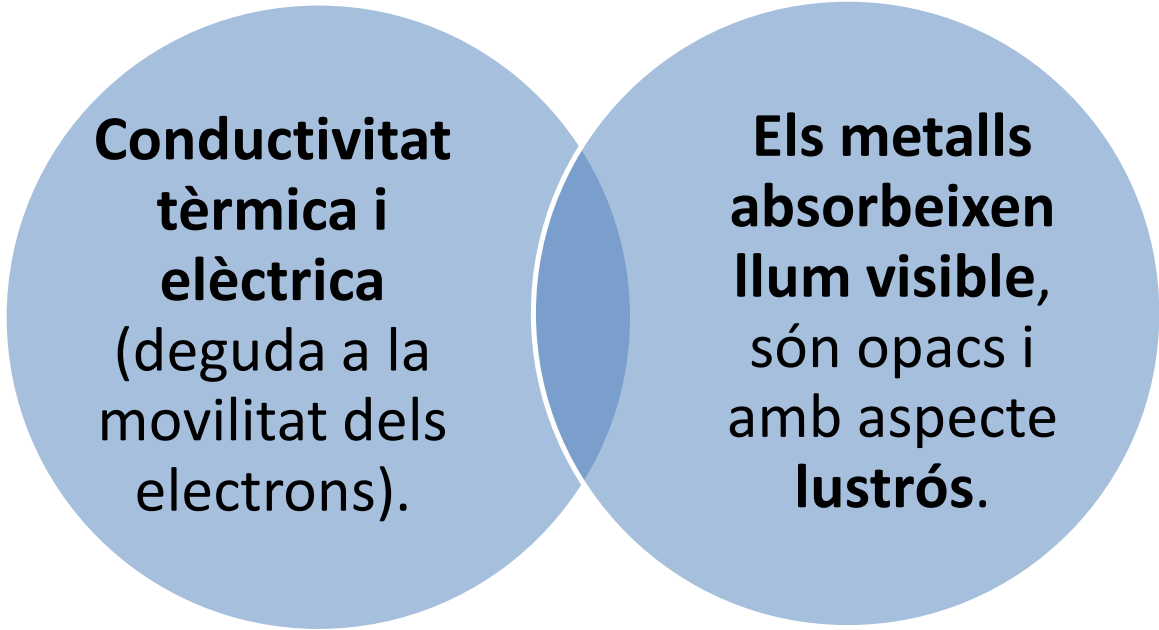
Teoria molt simplificada que descriu un metall sòlid com una **xarxa d'ions positius** immersa en un **“mar d'electrons”** de valència deslocalitzats al llarg de tot el sòlid.



Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.  
Copyright © 2009 Pearson Prentice Hall, Inc.



## **Propietats dels metalls**



**Conductivitat  
tèrmica i  
elèctrica**  
(deguda a la  
movilitat dels  
electrons).

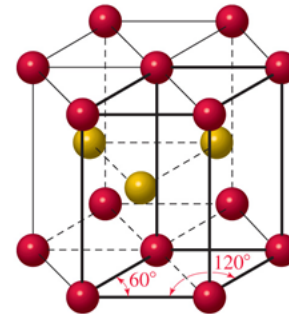
**Els metalls  
absorbeixen  
llum visible,  
són opacs i  
amb aspecte  
lustrós.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Estructures

## Solen tindre estructures

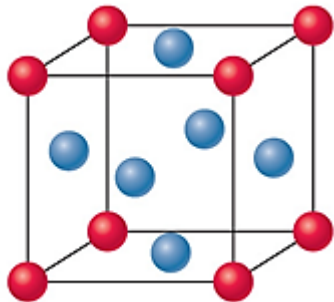
amb nombres de coordinacio de 8 o 12 àtoms

Empaquetament  
hexagonal compacte

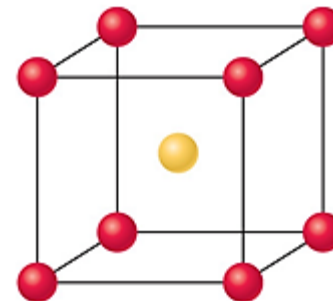


Ag, Cu

Cúbic compacte o cúbic centrat en el cos.



Fe, Na



Cd, Mg

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats

Tenen duresa i punts de fusió variables.



Cosa que està d'acord amb la força dels enllaços.

Que sol augmentar conforme augmenta la quantitat d'electrons disponibles per a formar els enllaços.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Obtenció

1																	18
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
		Metal			Metalloid				Nonmetal								
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu			
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr			







# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats. Obtenció

The s-block metals occur as chlorides, silicates, and carbonates.

The d- and p-block metals are found as oxides and sulfides, except for the group 3B metals, which occur as phosphates, and the platinum-group metals and gold, which occur in uncombined form.

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	8A	
Li	Be																	
Na	Mg	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	Al							
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga						
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn					
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi				

	
Chlorides	Silicates
	
Carbonates	Phosphates
	
Oxides	Free metals
	
Sulfides	

There is no mineral source of technetium, a radioactive element that is made in nuclear reactors.

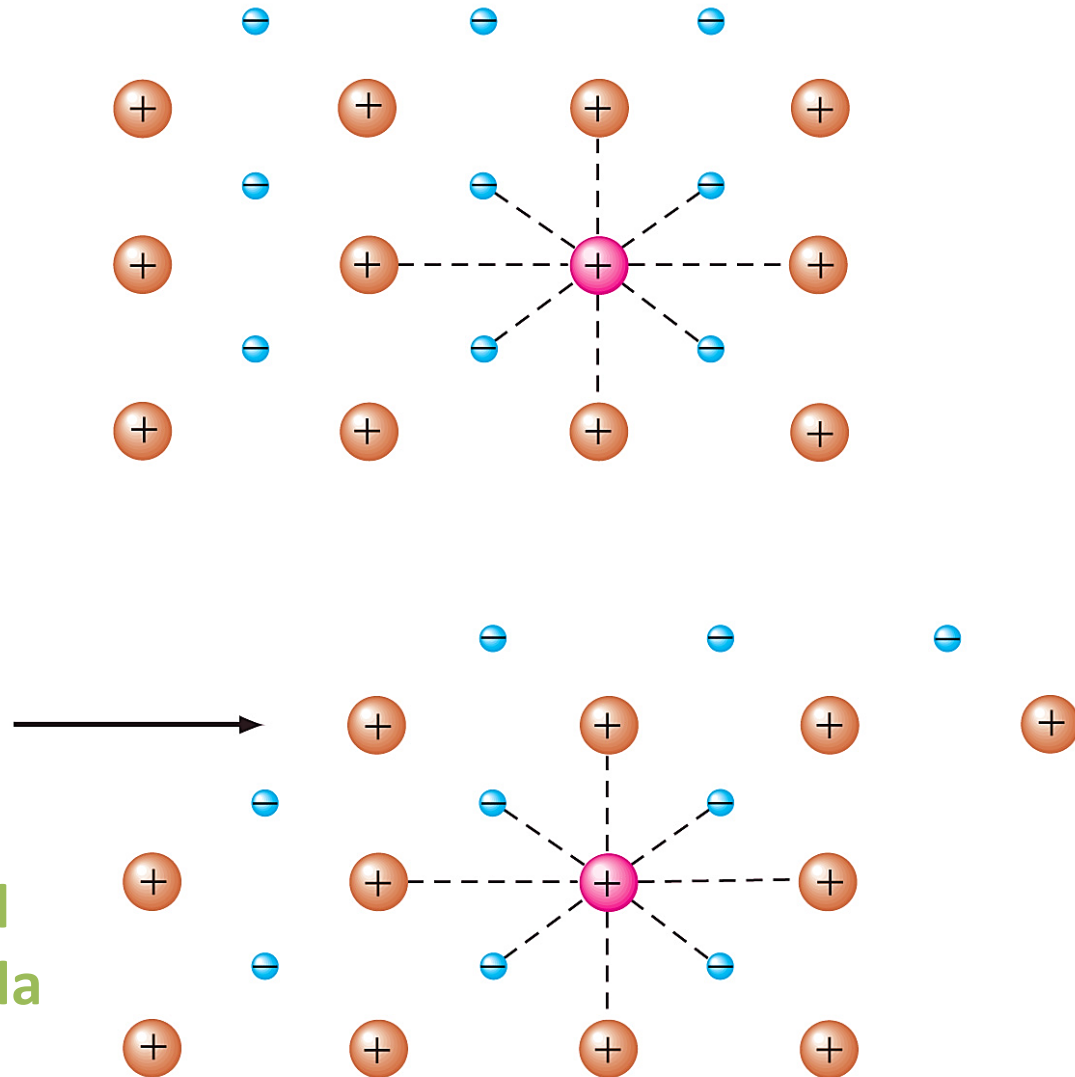
Figure 21-2 Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats

## Mal·leabilitat o facilitat de deformació

### Força aplicada

El metall es deforma, els enllaços no es trenquen i el mar d'electrons "s'ajusta" a la nova situació.



## Lluentor

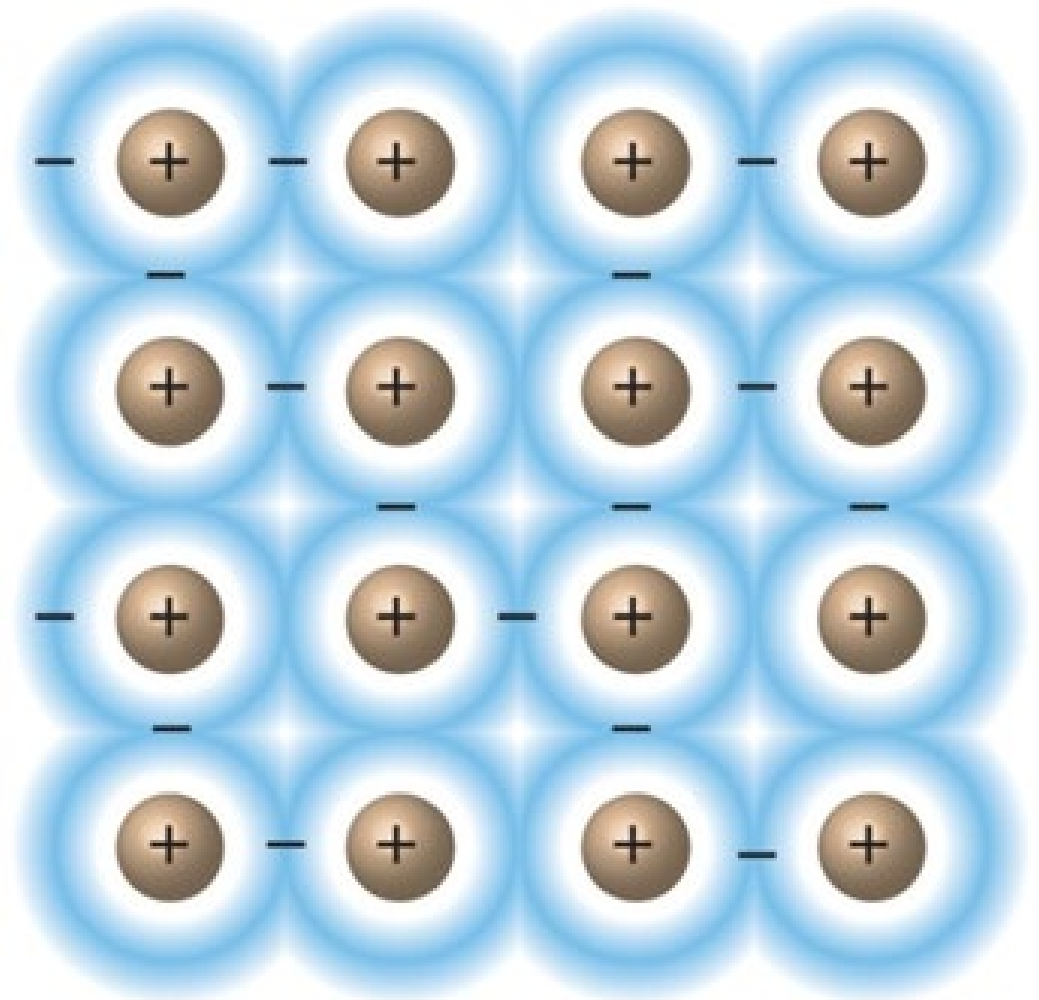
Els electrons lliures del mar poden absorbir llum i emetre'n la mateixa freqüència.



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Propietats

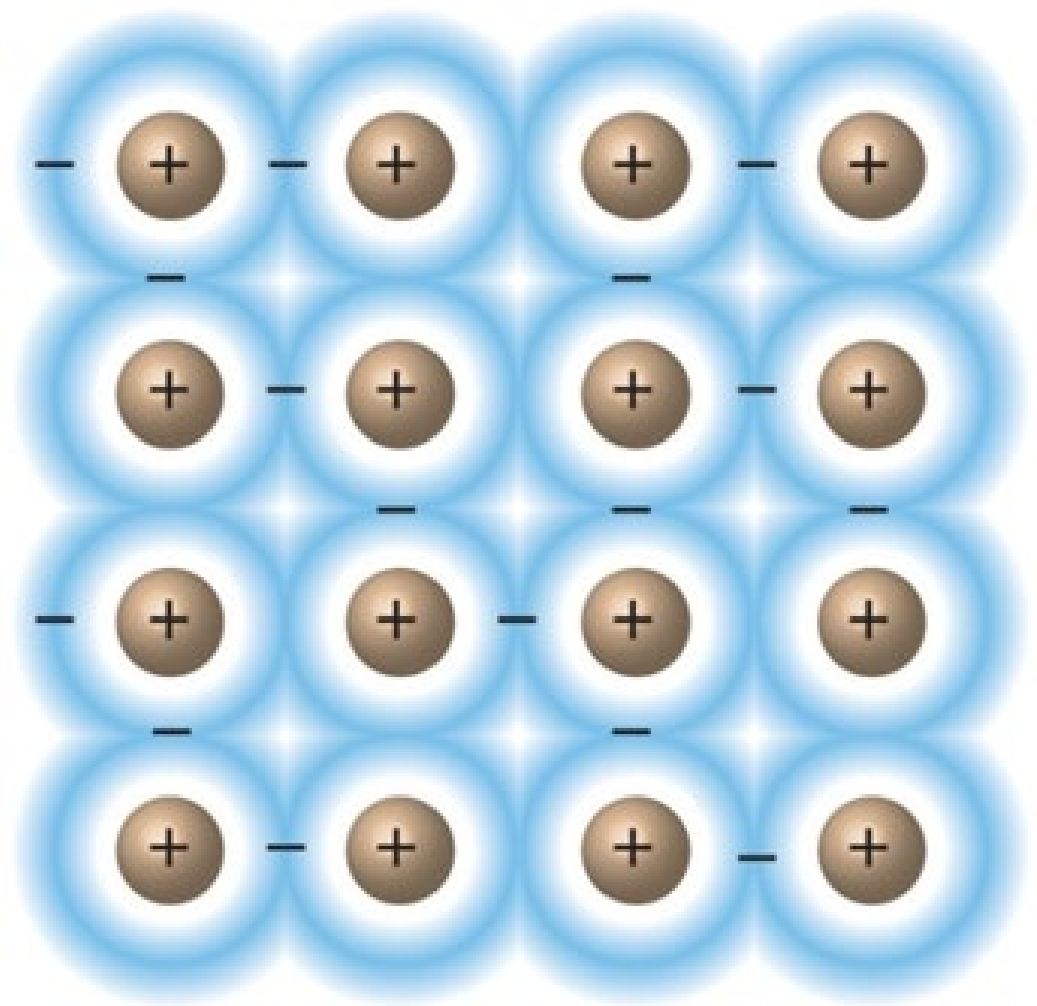
Conductivitat  
elèctrica

Teoria de  
bandes

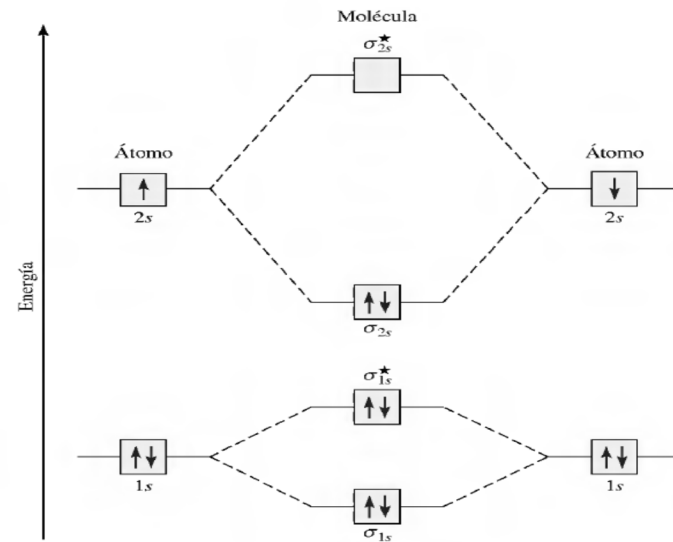
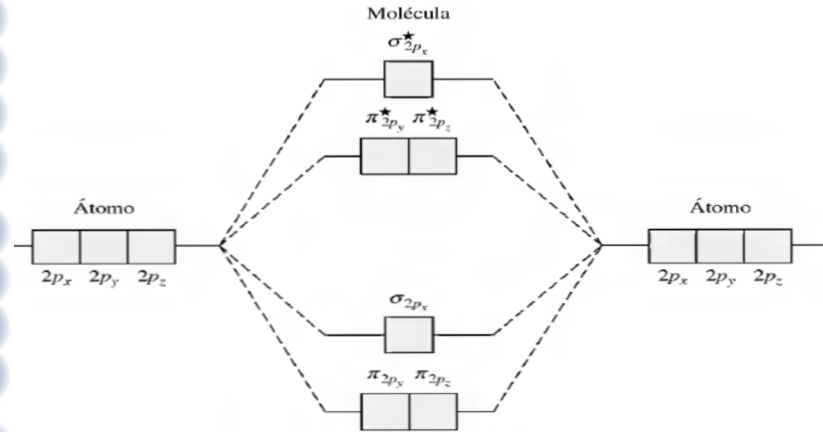
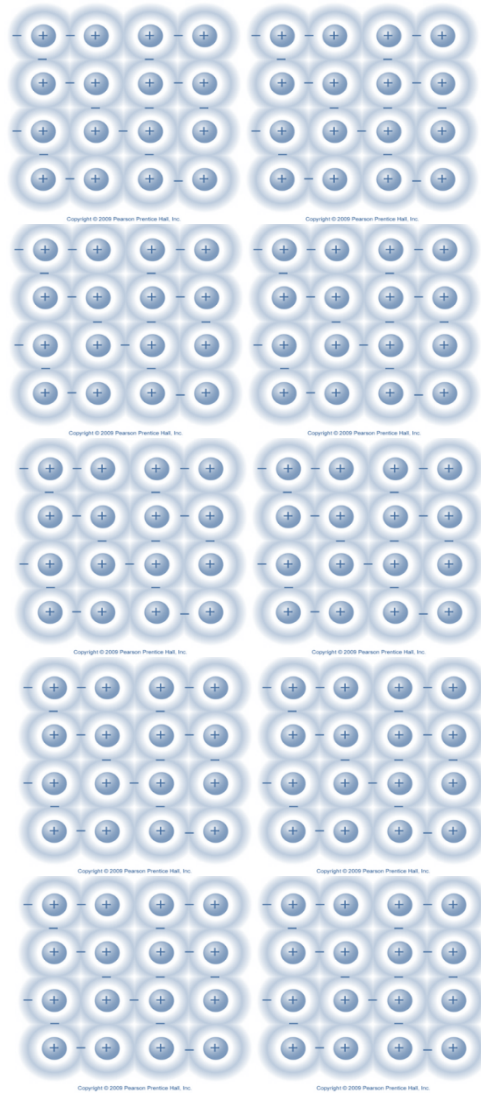


# Teoria de bandes

És un tipus de teoria d'orbitals moleculars que s'utilitza per a explicar l'enllaç metàl·lic.

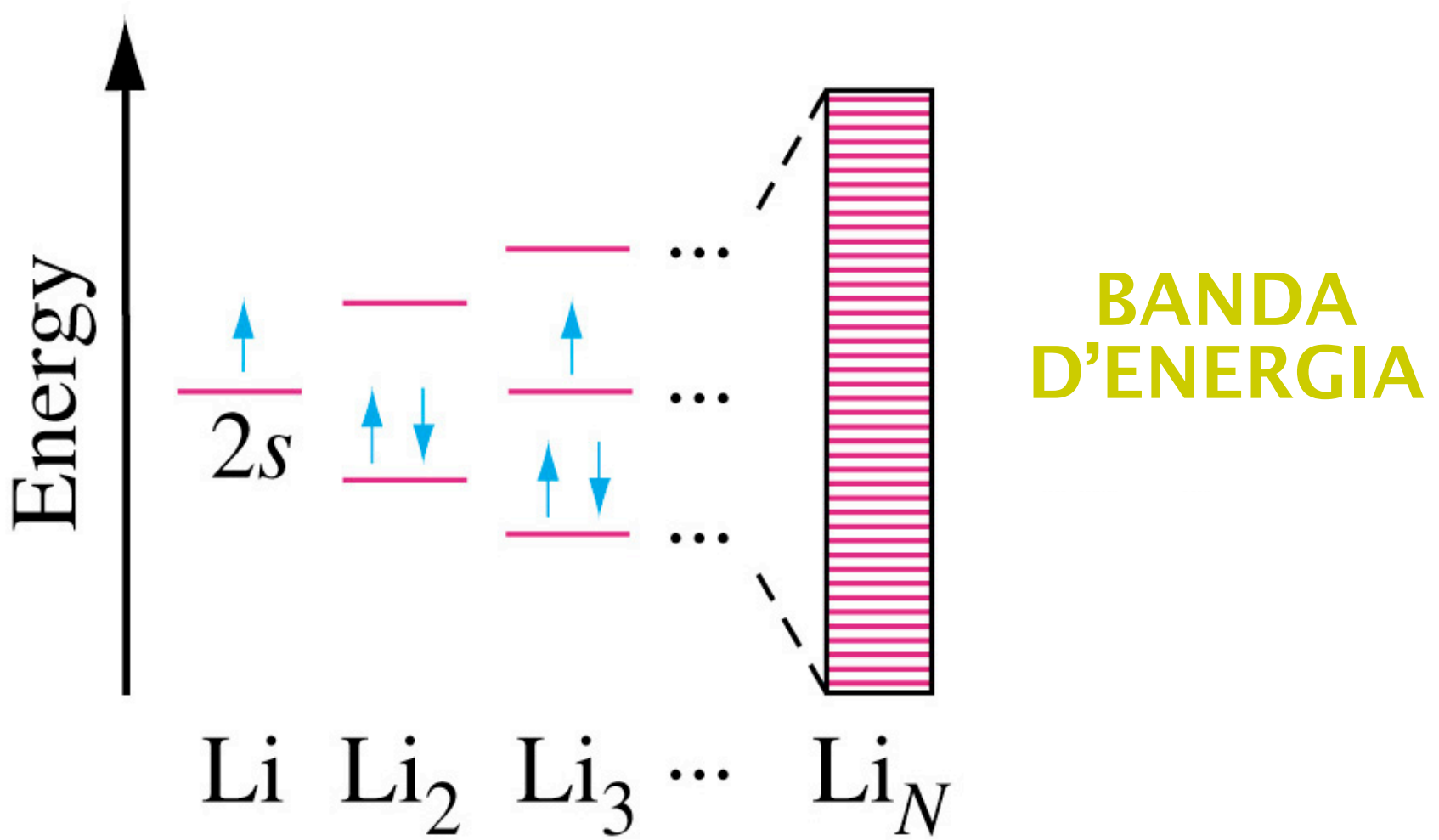


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes



Agrupem els àtoms dels metall (com si foren part d'una molècula) i construïm el que s'anomenen **bandes d'energia o conducció.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes



**Igual que ocorre amb els orbitals podem parlar de bandes d'enllaç o “plenes” i bandes d'antienllaç o “buides”.**



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes

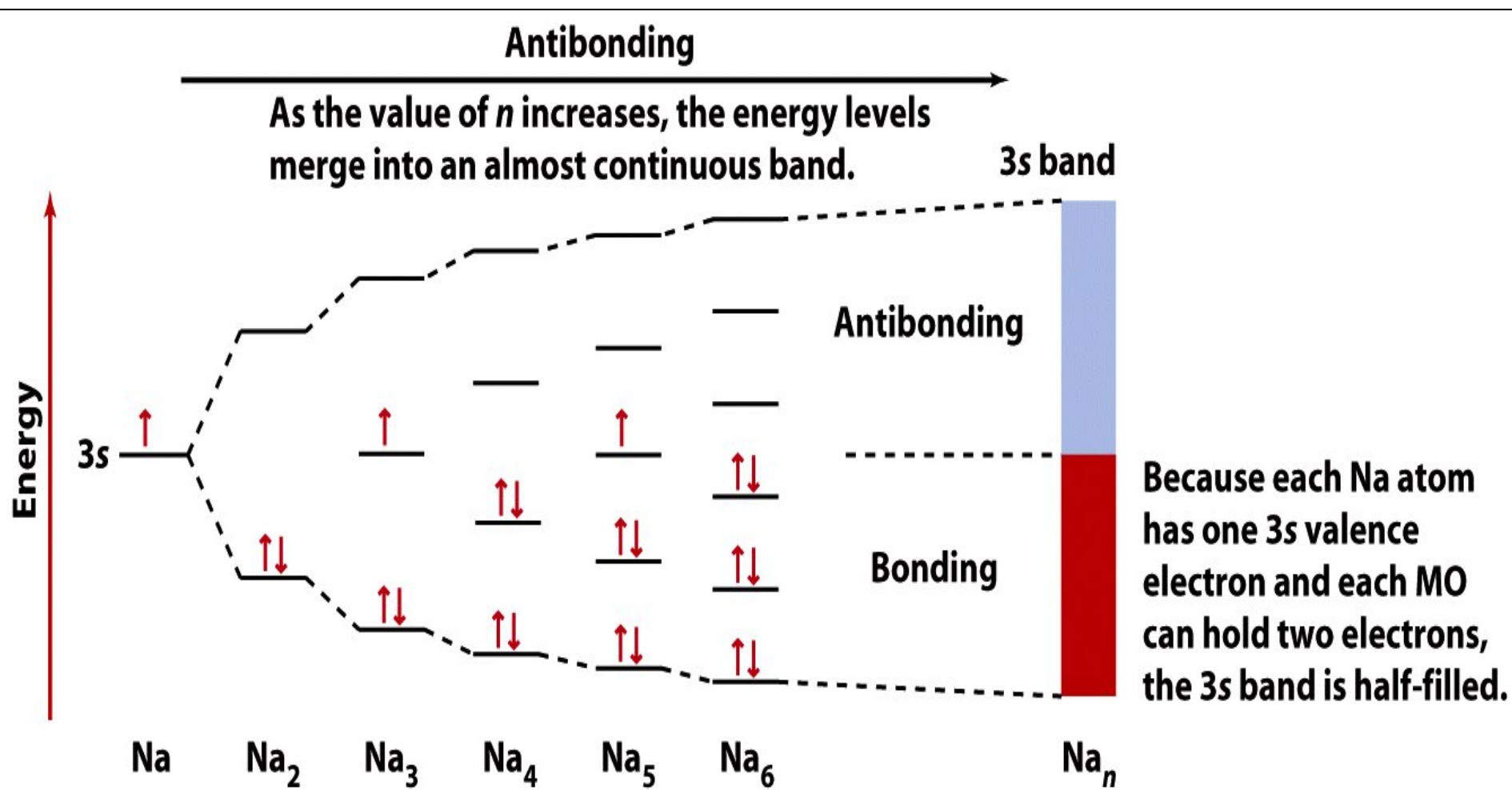


Figure 21-7 Chemistry, 5/e

**Com que els electrons han de moure's per les bandes per a "conduir" el corrent elèctric, les bandes també s'anomenen de valència (enllaç) o de conducció (antienllaç).**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes

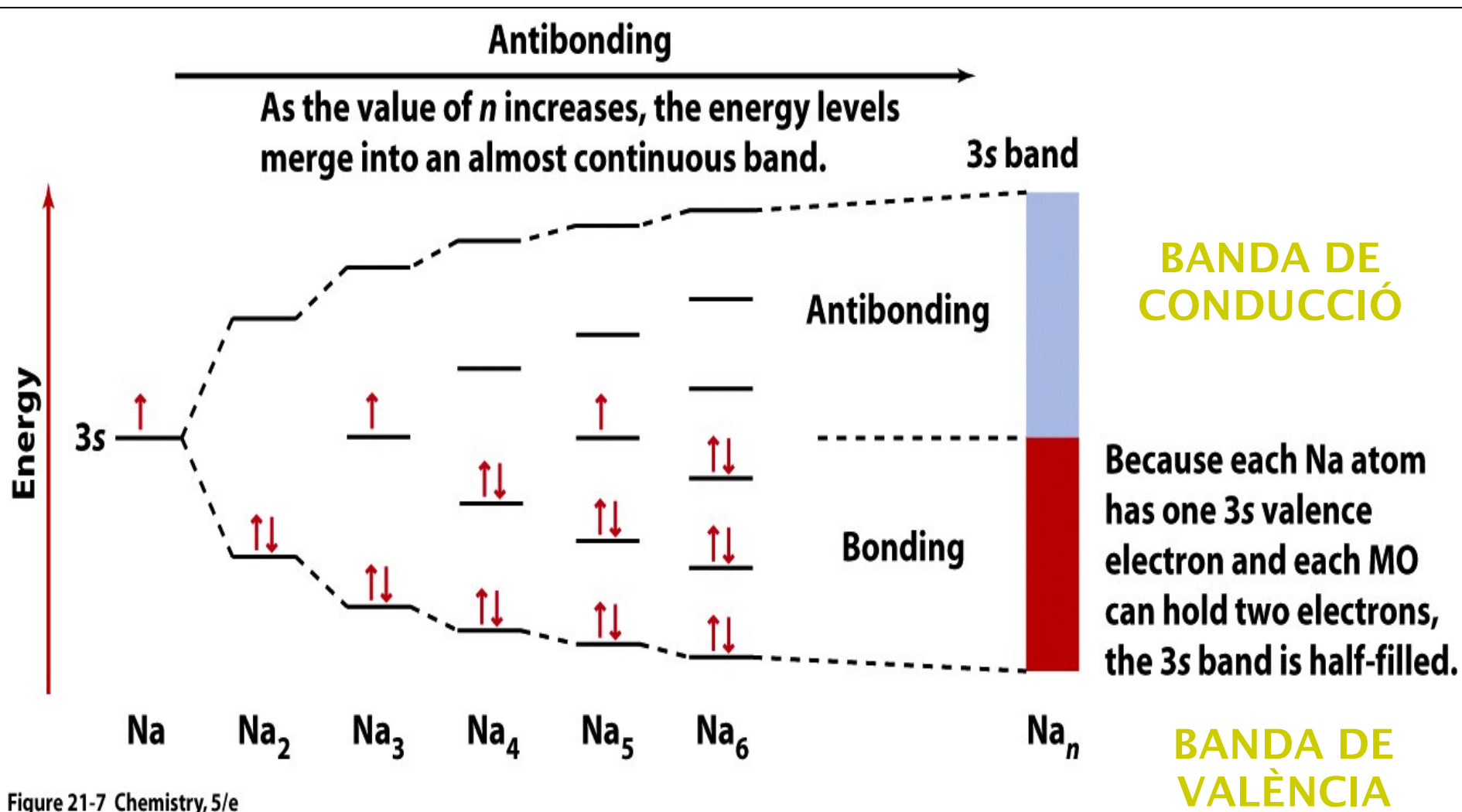
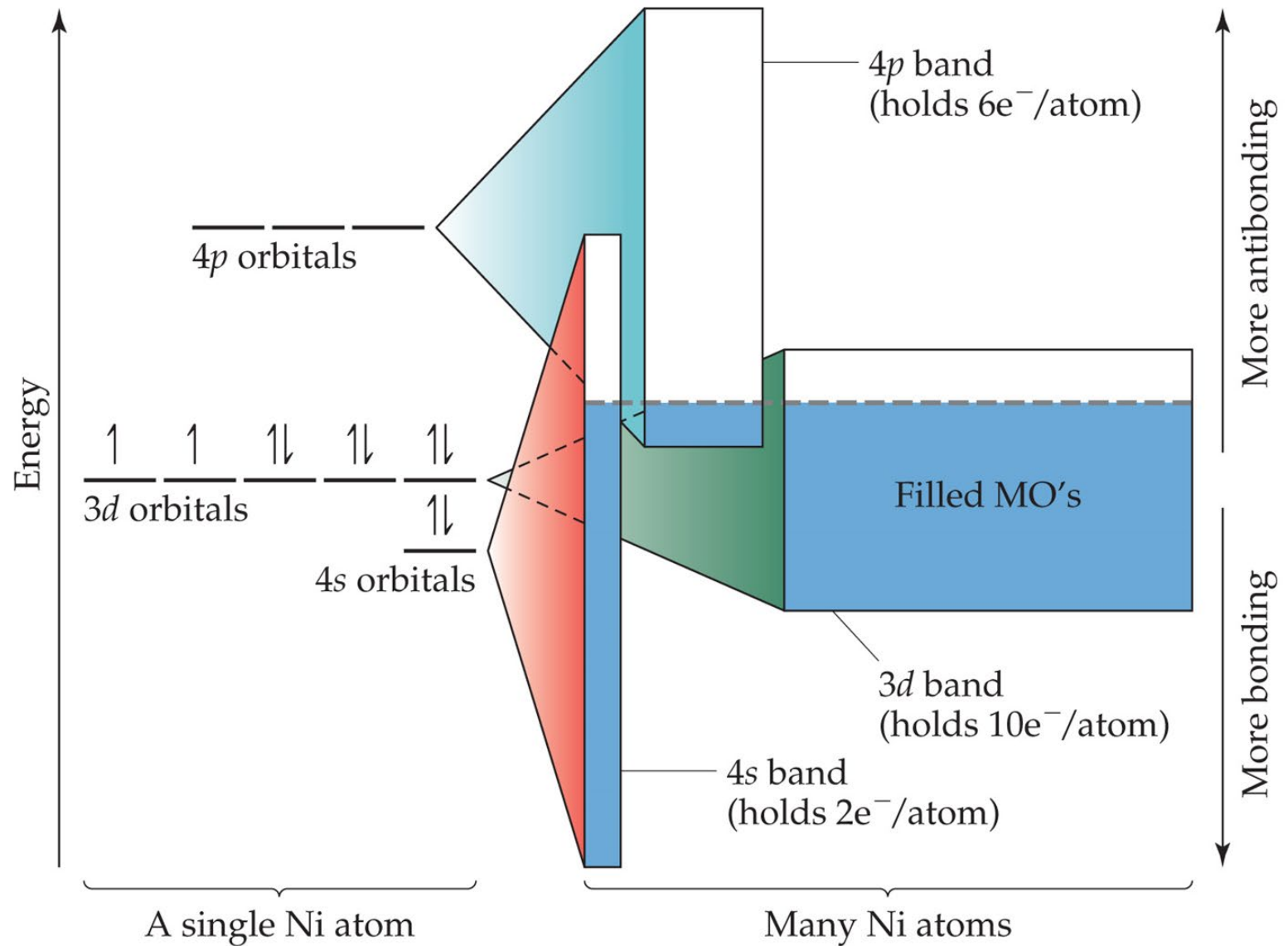


Figure 21-7 Chemistry, 5/e

**Per què, doncs, hi ha metalls o aliatges metàl·lics que són conductors, semiconductors o, fins i tot, aïllants com en el cas d'algunes xarxes covalents?**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes



**La resposta està en la  
influència  
(energèticament parlant)  
que té la distància  
entre les bandes de  
conducció i de valència.**

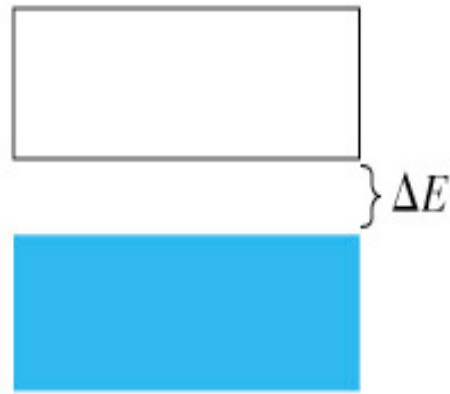
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



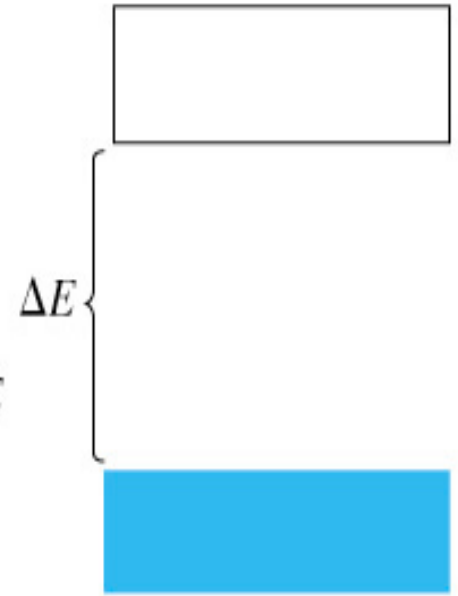
**Metall**



**Metall**



**Semiconductor**



**Aïllant**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes

La banda de valència (semiplena) serveix també com a banda de conducció.

Ex. Li, Na



Metall

La banda de valència està plena però una banda de conducció solapa amb ella.

Ex. Be



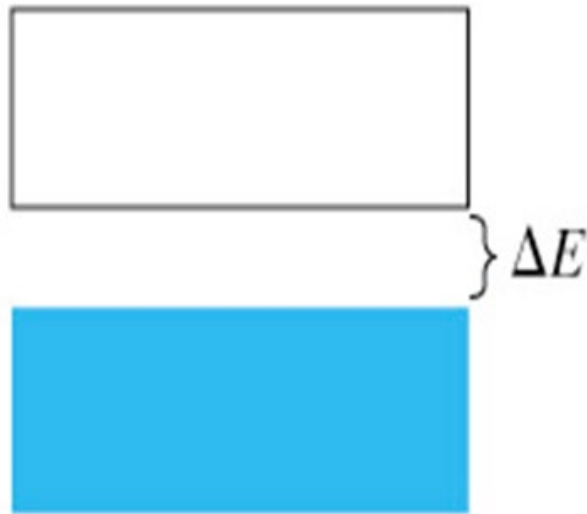
Metall

Conductors

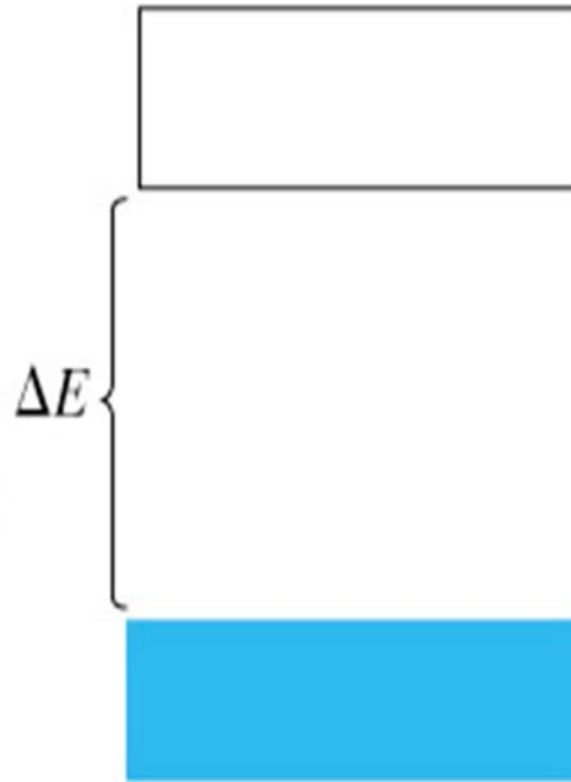


# SÒLIDS NO MOLECULARS. Conductivitat elèctrica. Teoria de bandes

La banda de valència està plena i la de conducció buida; però hi ha poca diferència d'energia, de manera **que alguns electrons poden passar d'una a l'altra** adquirint energia tèrmica.



**Semiconductor**



**Aïllant**

**Pocs electrons poden efectuar la transició a la banda de conducció i, per això, aquests compostos no condueixen l'electricitat.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes

**TABLE 21.3 Band Gaps for the Group 4A Elements**

<b>Element*</b>	<b>Band Gap (kJ/mol)</b>	<b>Type of Material</b>
<b>C (diamond)</b>	<b>520</b>	<b>Insulator</b>
<b>Si</b>	<b>107</b>	<b>Semiconductor</b>
<b>Ge</b>	<b>65</b>	<b>Semiconductor</b>
<b>Sn (gray tin)</b>	<b>8</b>	<b>Semiconductor</b>
<b>Sn (white tin)</b>	<b>0</b>	<b>Metal</b>
<b>Pb</b>	<b>0</b>	<b>Metal</b>

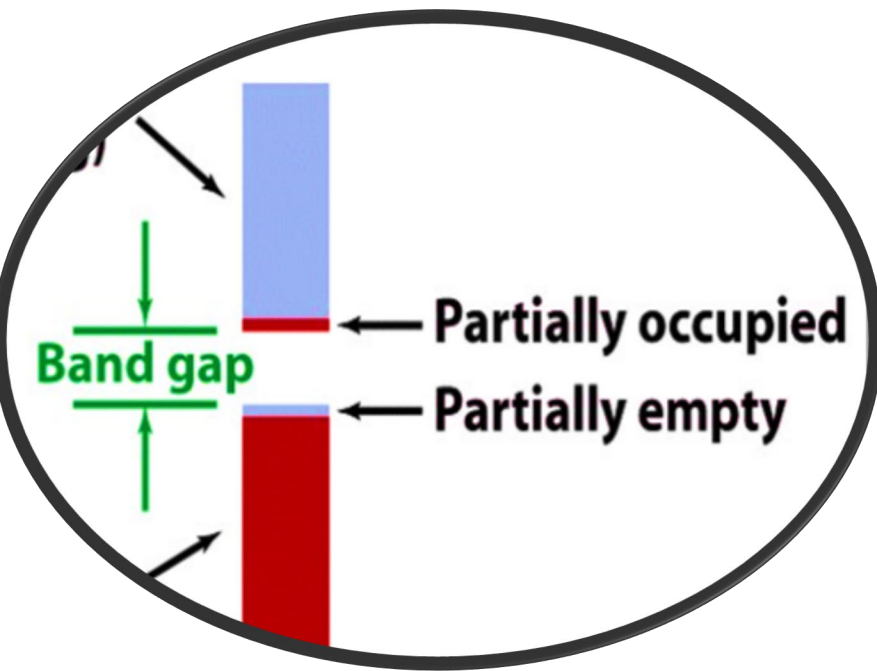
\*Si, Ge, and gray Sn have the same structure as diamond.

# **El cas particular dels semiconductors.**

## **Extrínsecs i intrínsecs.**

**Una posició intermèdia  
entre les bandes de conducció  
i de valència.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



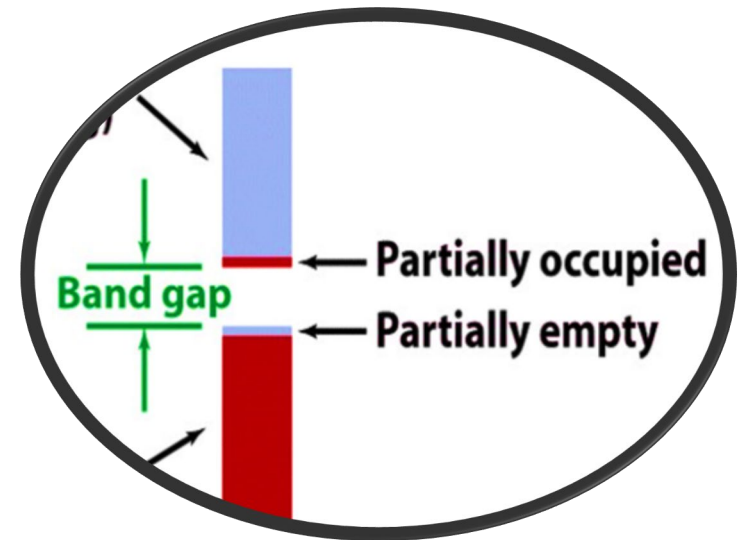
## Semiconductors intrínsecs

l'energia de separació entre la banda de valència i la de conducció és constant.

.

## Semiconductors intrínsecs

Els electrons d'aquests semiconductors poden absorbir certes longituds d'ona amb l'energia suficient per a conduir el corrent.



# Semiconductors intrínsecs purs

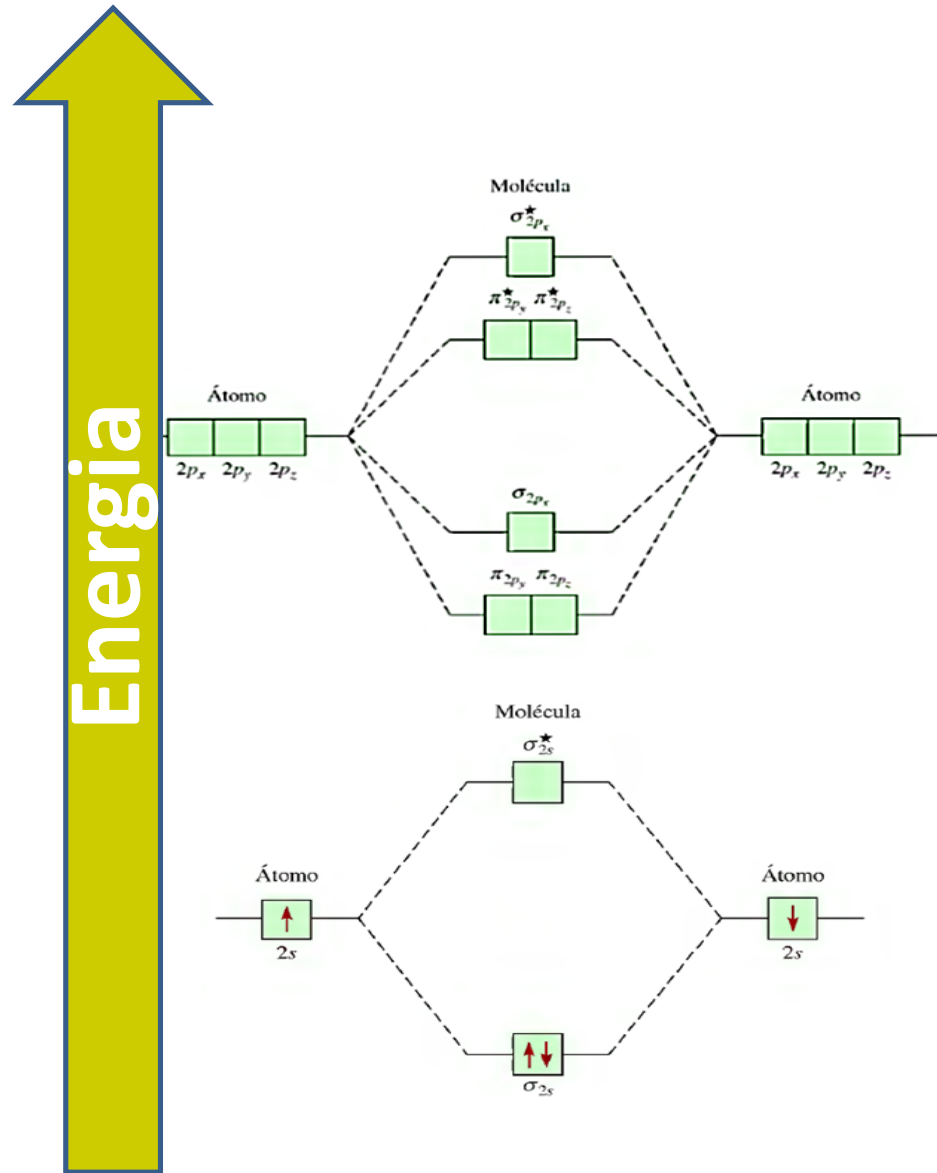
Formats per només un element.

**TABLE 21.3 Band Gaps for the Group 4A Elements**

<b>Element*</b>	<b>Band Gap (kJ/mol)</b>	<b>Type of Material</b>
C (diamond)	520	Insulator
Si	107	Semiconductor
Ge	65	Semiconductor
Sn (gray tin)	8	Semiconductor
Sn (white tin)	0	Metal
Pb	0	Metal

**\*Si, Ge, and gray Sn have the same structure as diamond.**

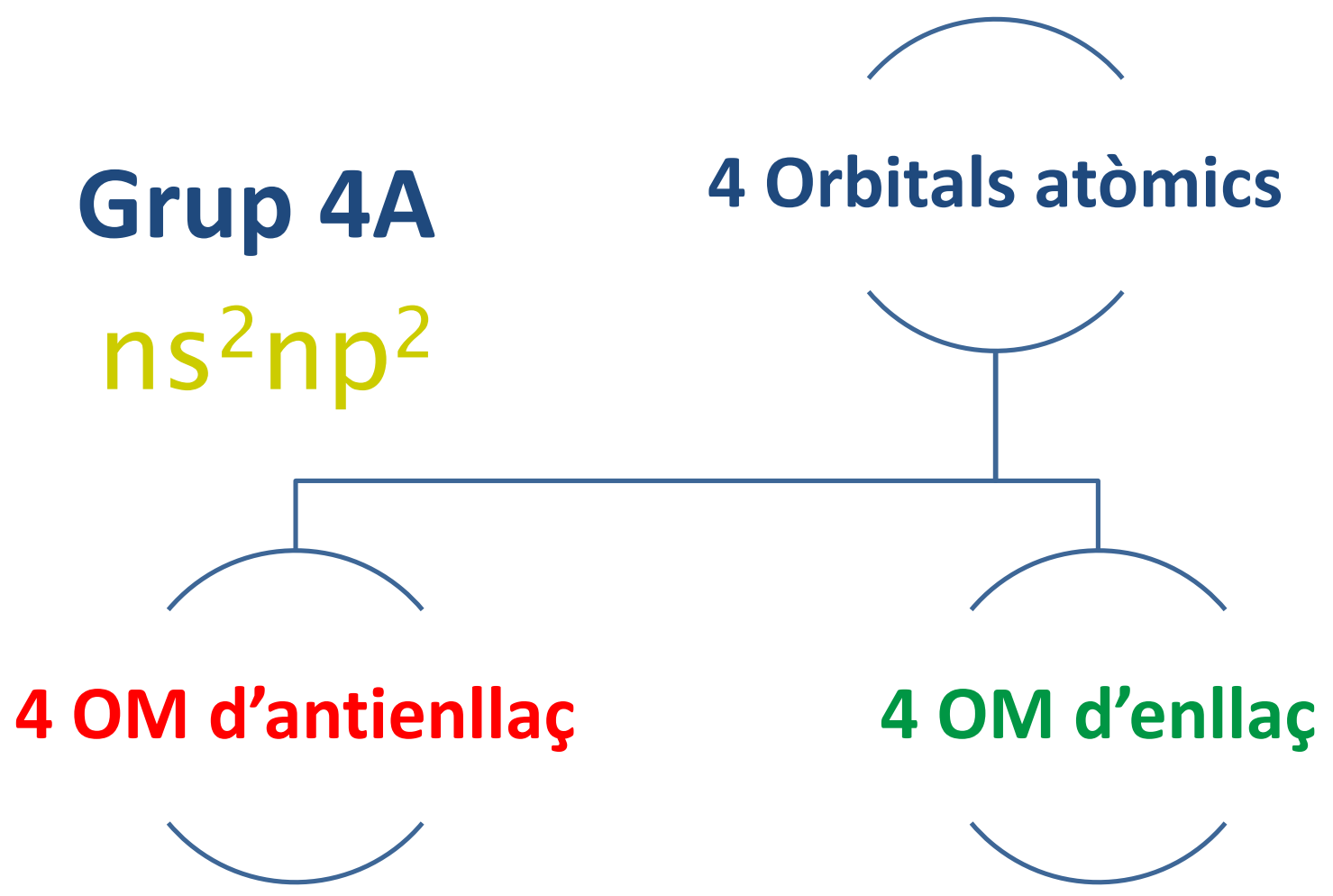
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



Grup 4A



# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes





# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes

La distància entre les bandes va apropant-se **segons anem incrementat** el radi atòmic.



radi atòmic

**TABLE 21.3 Band Gaps for the Group 4A Elements**

<b>Element*</b>	<b>Band Gap (kJ/mol)</b>	<b>Type of Material</b>
C (diamond)	520	Insulator
Si	107	Semiconductor
Ge	65	Semiconductor
Sn (gray tin)	8	Semiconductor
Sn (white tin)	0	Metal
Pb	0	Metal

\*Si, Ge, and gray Sn have the same structure as diamond.

**I si mesclem metalls de diferents grups?**

**InSb**

**GaAs**

**CdTe**

**Band gap (KJ)= 17**

**138**

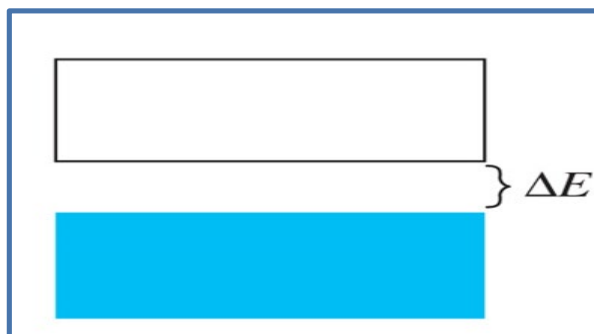
**145**

**Band gap (eV)= 0,18**

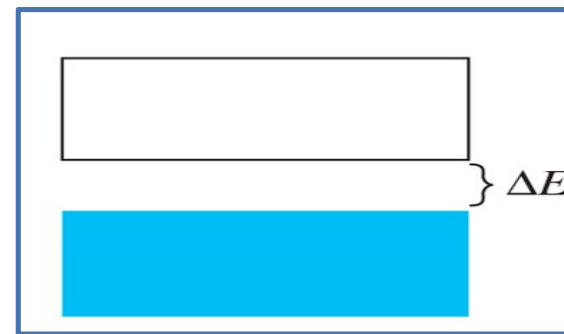
**1,43**

**1,50**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



L'espai de banda augmenta segons augmenta la **distància entre els grups**.



També augmenta segons augmenta la **diferència d'electronegativitat entre els elements**.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes

InSb

GaAs

CdTe

1																	18
1																	2
3	4											5	6	7	8	9	10
11	12											13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72
87	88	89-103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118

Grup 4A

$ns^2 np^2$

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Tendències generals

1

2

4

**InSb**

**GaAs**

**CdTe**

Band gap (KJ)= 17

138

145

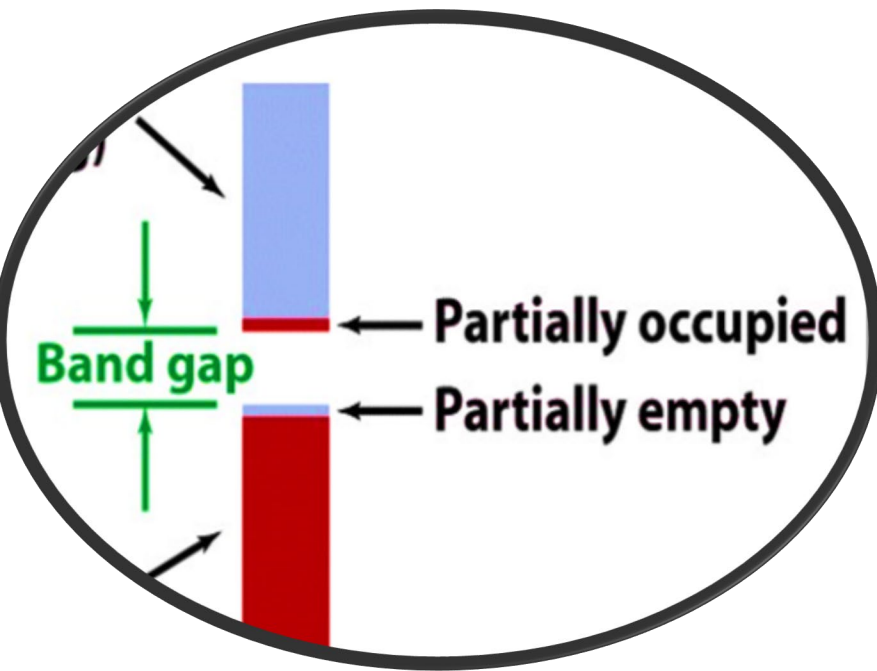
Band gap (eV)= 0,18

1,43

1,50

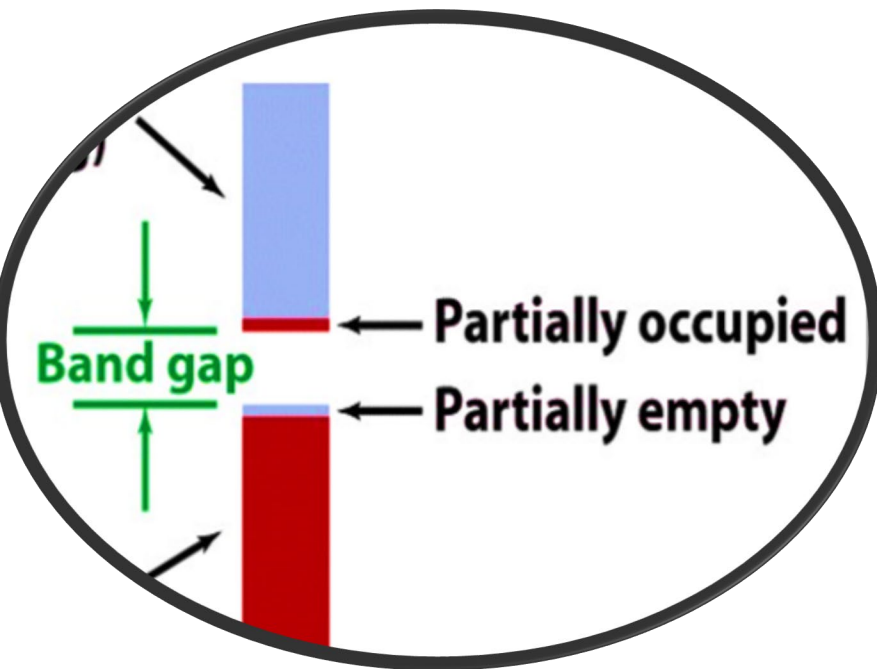
**Són més semiconductors.**

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



**Semiconductors extrínsecs: la magnitud de l'energia interbandes està controlada per l'addició d'impureses.**

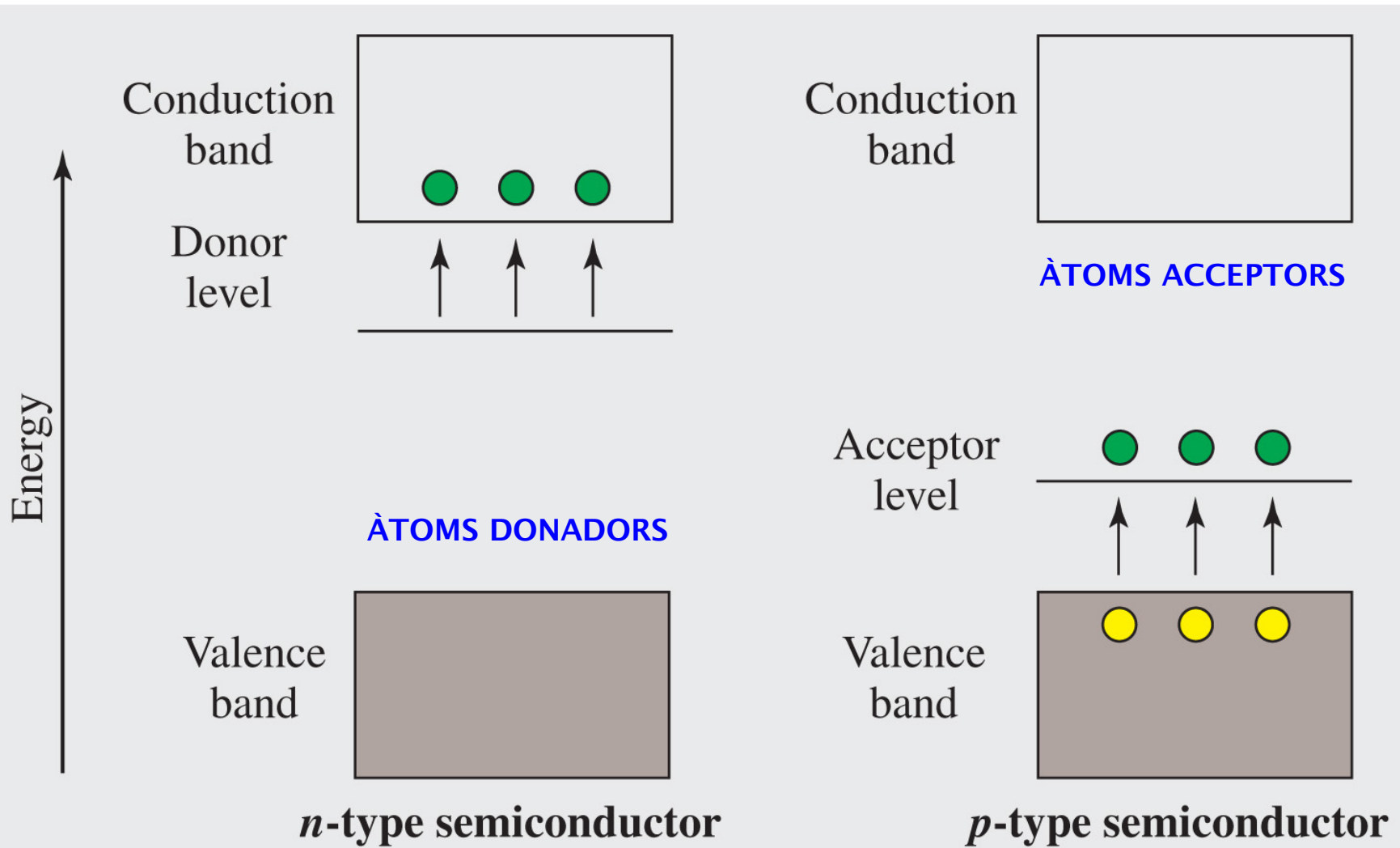
# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Teoria de bandes



És el fenomen  
conegut com a  
**DOPATGE**

que consisteix en l'addició  
d'una xicoteta quantitat d'un  
àtom diferent del metall  
principal per a facilitar-ne la  
conducció elèctrica.

# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Dopatge

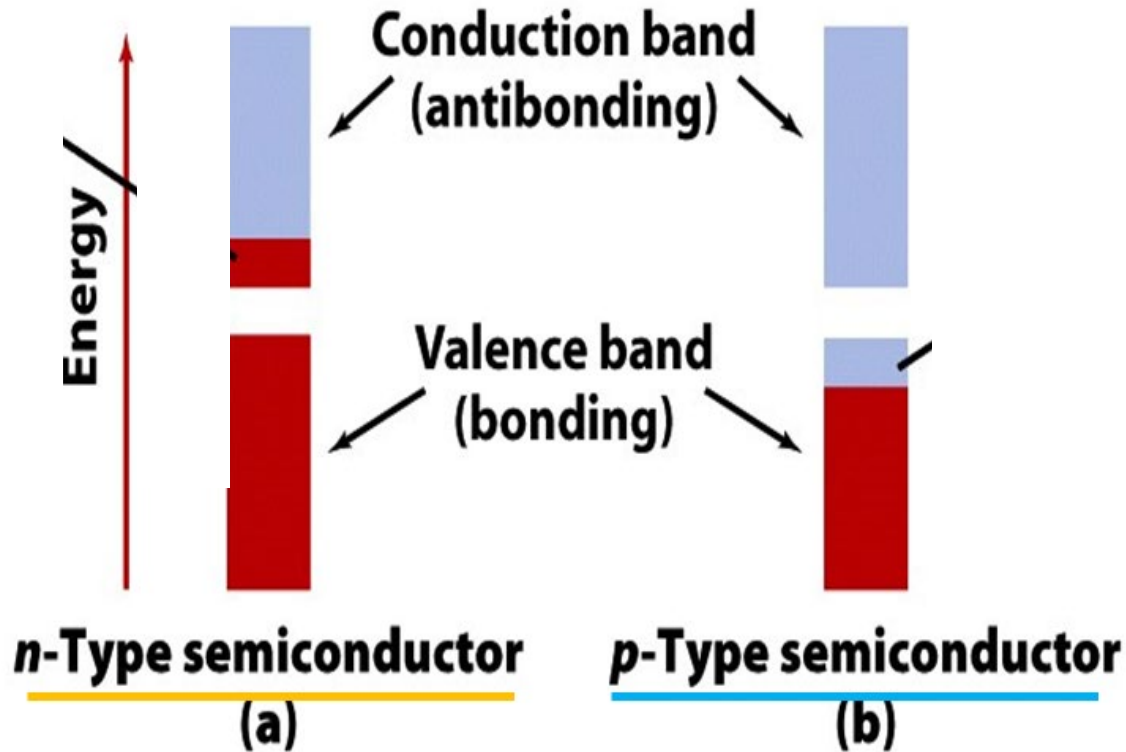




# SÒLIDS NO MOLECULARS. Semiconductors. Dopatge

SiP

Si ( $3s^23p^2$ )  
P ( $3s^23p^3$ )



SiAl

Si ( $3s^23p^2$ )  
Al ( $3s^23p^1$ )

Figure 21-11 Chemistry, 5/e  
© 2008 Pearson Prentice Hall, Inc.

Un semiconductor de tipus **n** s'ha dopat amb un element **que aporta més electrons** dels necessaris per a fer enllaç i passen a la banda de conducció.

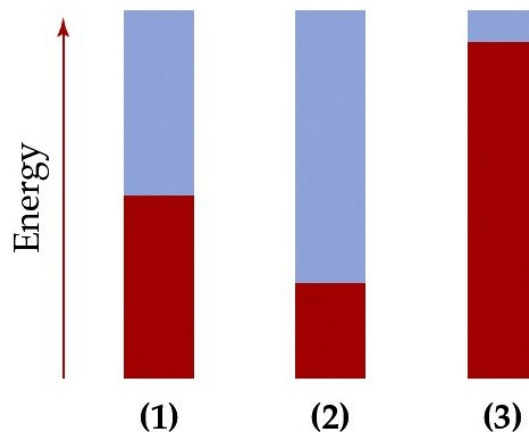
Un semiconductor de tipus **p** s'ha dopat amb un element **que té menys electrons dels necessaris** per a fer enllaç i passen a la banda de conducció.

## Apliquem els coneixements adquirits

**Activitat 1.** Penseu en un cristall de Ge que s'ha dopat amb una xicoteta quantitat d'alumini. El cristall dopat és un semiconductor de tipus n o p? Compareu la conductivitat del cristall dopat amb el de Ge.

**Activitat 2.** Els punts de fusió del crom i del zinc són  $1907\text{ }^{\circ}\text{C}$  i  $420\text{ }^{\circ}\text{C}$ , respectivament. Utilitzeu la teoria de bandes per a tenir-ne en compte la diferència.

**Activitat 3.** La figura següent representa l'ocupació de les bandes s i p per al Mo, la Ag i el Y. **a)** Quina banda associaries a quin metall? **b)** Podries ordenar els metalls per punt de fusió?



## ACTIVITAT 1. SOLUCIÓ

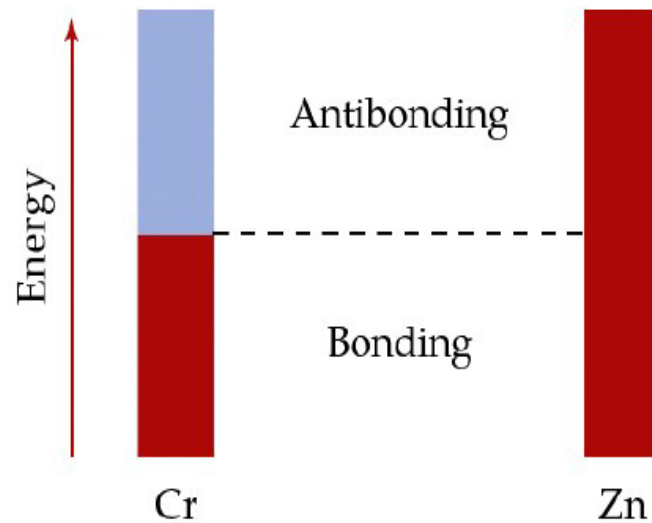
Tingueu en compte la ubicació del Ge i de l'alumini en la taula periòdica i el nombre de valència dels electrons en el cristall dopat en relació amb el nombre en Ge pur. Els semiconductors dopats amb més electrons que el semiconductor pur són de tipus n, i els que tenen menys electrons són de tipus p.

El Ge, igual que el silici, és un semiconductor del grup 4A i l'alumini, com el bor, pertany al grup 3A. Per tant, el Ge dopat és un semiconductor de tipus p perquè cada àtom d'Al té un electró menys en la capa de valència dels que calen per a unir-se als quatre àtoms Ge (com el silici, el Germani té l'estructura del diamant). La banda de valència es buida parcialment, cosa que dona compte de la conductivitat elèctrica. La conductivitat és més gran que la del Ge pur perquè el Ge dopat té molts més buits positius a la banda de valència. És a dir, han quedat més als MO vacants i disponibles per als electrons excitats per un potencial elèctric.

## ACTIVITAT 2. SOLUCIÓ

Les configuracions d'electrons són  $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$  per Cr i  $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2$  per Zn. Suposem que el 3d i les bandes 4s es solapen. La banda composta dels orbitals moleculars (OM) pot allotjar un total de 12 electrons de valència per un àtom de metall i per tant estarà a la meitat per a Cr i completament plena per al Zn. Els punts de fusió seran dependents dels OM enllaçants i antienllaçants ocupats.

S'hi preveu un enllaç fort i, per tant, un punt de fusió conseqüent més alt per a Cr perquè tots els OM enllaçants estan ocupats i els antienllaçants, buits. En el cas del Zn, l'enllaç serà més dèbil i s'hi obtindrà un punt de fusió més baix perquè tant els OM enllaçants com els antienllaçants estan ocupats. (El fet que Zn siga un metall suggereix que els orbitals 4p també contribueixen a la banda composta d'OM).



## ACTIVITAT 3. SOLUCIÓ

Com a metalls de transició de segona sèrie, Ag, Mo i Y tenen electrons de valència 5s i 4d. Tot els electrons de valència ocuparan una banda s-d composta, que pot allotjar 12 electrons per a cadascun dels àtoms del metall. Per a identificar cada metall, heu de comptar el nombre d'electrons de valència 5s i 4d i comparar-lo amb la població de bandes que es mostra en la imatge (1), (2) i (3) de l'enunciat de l'activitat. Tant el punt de fusió com la duresa d'un metall s'espera que augmenten a mesura que augmenta la diferència entre el nombre d'electrons enllaçants i antienllaçants.

**(a)** L'Ag del grup 1B té 11 electrons de valència. D'aquesta manera, la seua banda s-d estarà quasi completa, que correspon a la imatge (3). Mo del grup 6B té sis electrons de valència. La seua banda s-d està exactament mig plena i, per tant, correspon a la imatge (1). Y, en el grup 3B, té tres electrons de la capa de valència. La seua banda s-d és una quarta part, que correspon a la imatge (2).

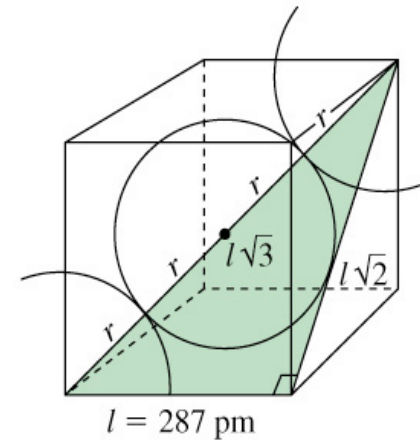
**(b)** El Mo té el punt de fusió més alt, ja que els seus OM s'enllacen completament i els OM antienllaçants queden completament vacants. Ag té el punt de fusió més baix perquè té sis enllaços electrons i cinc electrons antienllaçants per àtom d'Ag, un excés d'un sol electró d'enllaç per àtom d'Ag.

**(e)** El Mo és molt dur perquè té un excés de sis electrons d'enllaç per àtom de Mo. La Ag és molt blanda, ja que té un excés d'un sol electró d'enllaç per àtom de Ag. Tant la duresa com el punt de fusió augmenten a mesura que augmenta la força de l'enllaç metall-metall.

Ag ( $4d^{10}5s^1$ ) 961 °C; Mo ( $4d^55s^1$ ) 2623 °C; Y ( $4d^15s^2$ ) 824 °C

# Activitats. Estructures cristal·lines. Solucionari

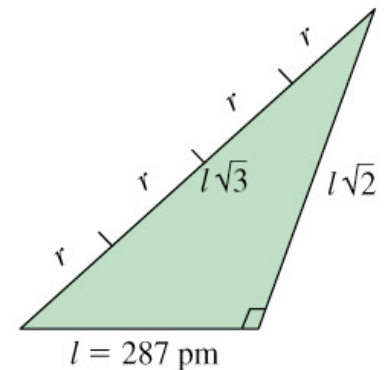
**Exercici 1.** A T ambient, el ferro cristal·litza en una estructura **bcc**. Mitjançant difracció de raigs X s'ha determinat que l'aresta de la cel·la cúbica és de 287 pm. Quin és el radi d'un àtom de ferro?



$$4r = l\sqrt{3}$$



Radi de l'àtom de Fe,  $r = 124 \text{ pm}$

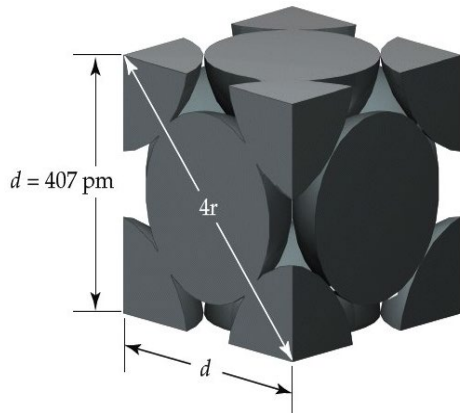


## Exercici 2. La plata cristal·litza en un empaquetament cúbic compacte amb una aresta de 407 pm. Quin és el radi de l'àtom de plata en pm?

L'empaquetament cúbic compacte utilitza una cel·la cúbica centrada en la cara. Mirant qualsevol cara del cub per davant es mostra que els àtoms de la cara toquen els àtoms de les cantonades al llarg de la diagonal de la cara, però això els àtoms de les cantonades no es toquen els uns als altres per la diagonal. Per tant, cada diagonal és igual a quatre radis atòmics,  $4r$ :

$$\text{fcc: } \boxed{l = \sqrt{8} \cdot r}$$

Com que la diagonal i les dues vores del cub formen un triangle rectangle, podem utilitzar el teorema de Pitagòres per a establir que la suma dels quadrats de les dues arestes és igual al quadrat de la diagonal,  $d^2 + d^2 = (4r)^2$  i, a continuació, aïllar  $r$ , el radi d'un àtom:



$$d^2 + d^2 = (4r)^2$$

$$2d^2 = 16r^2 \quad \text{and} \quad r^2 = \frac{d^2}{8}$$

$$\text{thus } r = \sqrt{\frac{d^2}{8}} = \sqrt{\frac{(407 \text{ pm})^2}{8}} = 144 \text{ pm}$$

**Exercici 3.** El níquel cristal·litza en un empaquetament cúbic centrat en les cares amb una aresta de 352,4 pm. Quina és la densitat del níquel?

La densitat es igual a massa dividit per volum. Es pot calcular la massa d'una sola cel·la unitat sabent el nombre d'àtoms que hi ha a la cel·la i multiplicant-ho per la massa d'un àtom de Ni. El volum d'una sola cel·la cúbica amb aresta  $d$  és  $d^3 = (3.524 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 4.376 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$ .

Cadascun dels vuit àtoms dels cantons d'una cel·la cúbica centrada en la cara està compartit per vuit cel·les unitat, per la qual cosa només  $1/8 \times 8 = 1$  àtom pertany a una cel·la unitat. A més, cadascun dels sis àtoms de les cares està compartit per dues cel·les d'unitat, de manera que  $1/2 \times 6 = 3$  àtoms pertanyen a una sola cel·la. Així, una cel·la té 1 àtom dels cantons i 3 àtoms de les cares, és a dir un total de 4, i cada àtom té una massa igual a la massa molar de níquel (58,69 g / mol) dividida pel nombre d'Avogadro ( $6,022 \times 10^{23}$  àtoms / mol). Ara podem calcular-ne la densitat:

$$\text{Density} = \frac{\text{Mass}}{\text{Volume}} = \frac{(4 \text{ atoms}) \left( \frac{58.69 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{6.022 \times 10^{23} \frac{\text{atoms}}{\text{mol}}} \right)}{4.376 \times 10^{-23} \text{ cm}^3} = 8.909 \text{ g/cm}^3$$

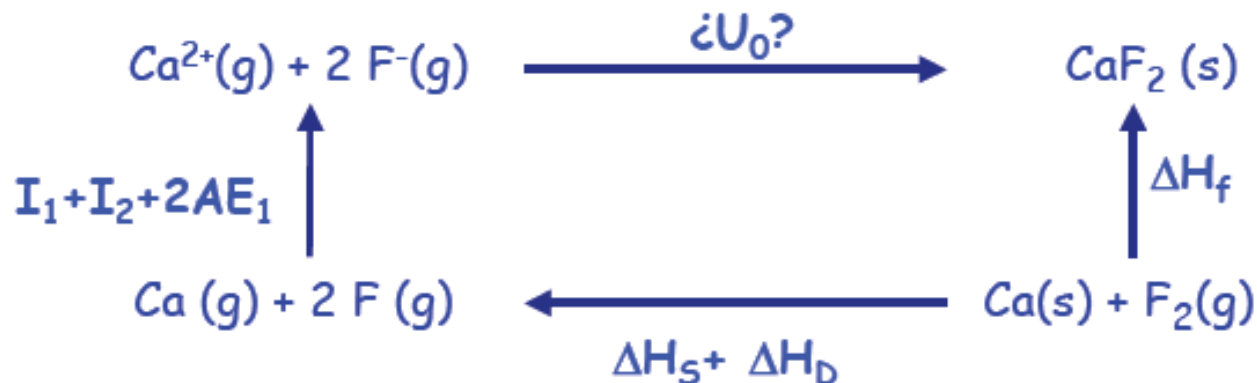


# Activitats. Sòlids iònics. Aspectes energètics. Solucionari

## Ejercicio

Determinar  $U_0$  del  $\text{CaF}_2(\text{s})$ .

Datos ( $\text{kJmol}^{-1}$ ):  $\Delta H_f = -1215$ ;  $\Delta H_S = 178$ ;  $\Delta H_D = 154$ ;  $I_1 = 590$ ;  
 $I_2 = 1146$ ;  $AE_1 = -328$



$$\Delta H_f = \Delta H_S + \Delta H_D + I_1 + I_2 + 2 AE_1 + U_0$$

$$U_0 = -1215 - 178 - 154 - 590 - 1146 + 2 \cdot 328 = -2627 \text{ kJ/mol}$$

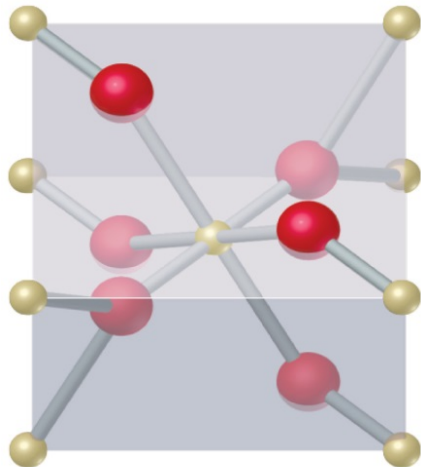
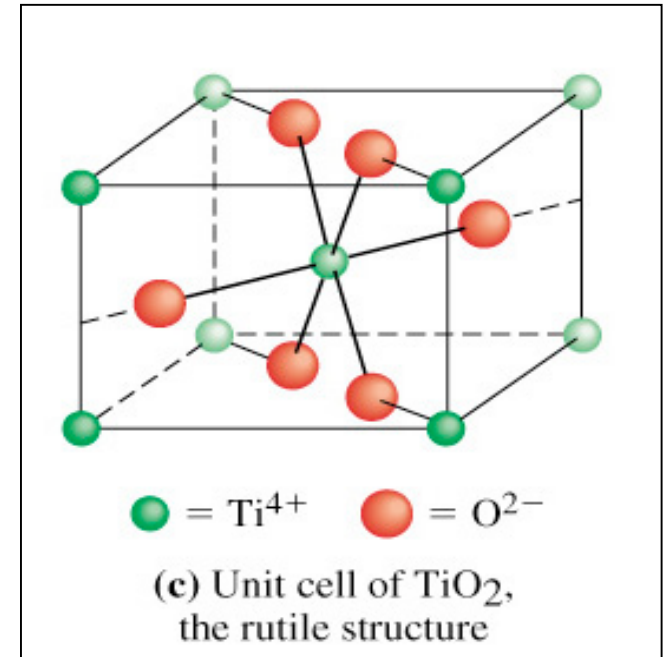
$$U_0 = -2627 \text{ kJ/mol}$$

# Activitats. Estructures iòniques cristal·lines. Solucionari

El rutil és un mineral compost per Ti i O. La seua cel·la unitària conté àtoms de Ti en cadascun dels cantons i un àtom de Ti al centre de la cel·la. Quatre àtoms d'O estan en les cares oposades de la cel·la, i dos es troben completament dins de la cel·la.

(a) Quina és la fórmula química d'aquest mineral?

(b) Quin és el nombre de coordinació de cada àtom?



● Oxygen  
● Titanium

$$(4 \times 1/2) + 2 = 4 \text{ ions } \text{O}^{2-}$$



$$(8 \times 1/8) + 1 = 2 \text{ ions } \text{Ti}^{4+}$$

$$\text{NC } (\text{O}^{2-}) = 3$$

$$\text{NC } (\text{Ti}^{4+}) = 6$$

# Algunes idees clau...

- 1. Sòlids de xarxa covalent i sòlids iònics.** En els sòlids de xarxa covalent, els enllaços químics s'estenen a través de l'estructura cristal·lina. Per a aquestes substàncies, els enllaços químics són, alhora, forces intermoleculars. L'energia de xarxa és l'energia despesa quan s'ajunten ions separats en estat gasós per a formar un mol d'un sòlid iònic.
- 2. Estructures cristal·lines.** Algunes estructures cristal·lines poden descriure's en termes d'empaquetament d'esferes. Depenent de la forma en què s'empaqueten les esferes, s'obtenen diferents cel·les unitat. La cel·la unitat hexagonal s'obté amb esferes amb empaquetament hexagonal compacte (hcp); una cel·la unitat cúbica centrada en les cares (fcc) s'obté amb esferes amb empaquetament compacte cúbic. Una cel·la unitat cúbica centrada en el cos (bcc) es forma en alguns casos quan les esferes no s'empaqueten de forma tan compacta com en les estructures hcp i fcc. Les dimensions de la cel·la unitat es poden determinar mitjançant difracció de raigs X i aquestes dimensions es poden utilitzar per a calcular radis i densitats. Una consideració important amb els cristalls iònics és que els ions no tenen la mateixa grandària ni la mateixa càrrega. Els cristalls iònics, amb freqüència, poden visualitzar-se com una ordenació d'anions amb els cations que s'ajusten en els buits dins de l'estructura dels anions.

- 3. Canvis d'energia en la formació de cristalls iònics.** Les energies de xarxa dels cristalls iònics poden relacionar-se amb algunes propietats atòmiques i termodinàmiques per mitjà del cicle de Born-Fajans-Haber.
  
- 4. L'enllaç en els metalls.** La teoria d'orbitals moleculars, en la forma anomenada *teoria de bandes*, pot aplicar-se a metalls, semiconductors i aïllants. La teoria de bandes explica la conductivitat tèrmica i elèctrica, la facilitat de deformació i el llustre característic dels metalls. També explica el color dels semiconductors i que les seues conductivitats elèctriques augmenten amb la temperatura.

# Formulació de química inorgànica

Revisió general\_Química general\_2019\_2020  
Grup D\_Ismael Navarro

## Recomanacions IUPAC 2005



# NOMBRE D'OXIDACIÓ DELS ELEMENTS

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H +1 -1																	He
Li +1	Be +2											B +3 -3	C +2+4 -4	N +1+2+3 +4+5 -3	O -2	F -1	Ne
Na +1	Mg +2											Al +3	Si +4 -4	P +3+5 -3	S +2+4 +6 -2	Cl +1+3 +5+7 -1	Ar
K +1	Ca +2				Cr +2+3 +6	Mn +2+3 +4+6 +7	Fe +2+3	Co +2+3	Ni +2+3	Cu +1+2	Zn +2			As +3+5 -3	Se +2+4 +6 -2	Br +1+3 +5+7 -1	Kr
Rb +1	Sr +2								Pd +2+4	Ag +1	Cd +2		Sn +2+4	Sb +3+5 -3	Te +2+4 +6 -2	I +1+3 +5+7 -1	Xe
Cs +1	Ba +2								Pt +2+4	Au +1+3	Hg +1+2		Pb +2+4	Bi +3+5			Rn

# Tres tipus de nomenclatura

## Nomenclatura de substitució

Oxoàcids i compostos de coordinació

## Nomenclatura d'addició

Compostos orgànics fonamentalment

## Nomenclatura de composició

Resta de compostos inorgànics



# Tres tipus de nomenclatura



**Nomenclatura de substitució**

# Nomenclatura de substitució

## Nom dels hidrurs progenitors

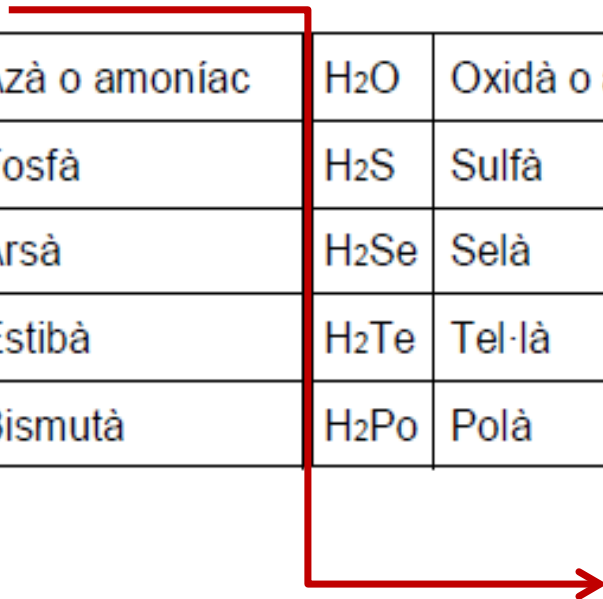
BH <sub>3</sub>	Borà	CH <sub>4</sub>	Metà	NH <sub>3</sub>	Azà o amoníac	H <sub>2</sub> O	Oxidà o aigua	HF	Fluorà
AlH <sub>3</sub>	Alumà	SiH <sub>4</sub>	Silà	PH <sub>3</sub>	Fosfà	H <sub>2</sub> S	Sulfà	HCl	Clorà
GaH <sub>3</sub>	Gal·là	GeH <sub>4</sub>	Germà	AsH <sub>3</sub>	Arsà	H <sub>2</sub> Se	Selà	HBr	Bromà
InH <sub>3</sub>	Indigà	SnH <sub>4</sub>	Estannà	SbH <sub>3</sub>	Estibà	H <sub>2</sub> Te	Tel·là	HI	Iodà
TlH <sub>3</sub>	Tal·là	PbH <sub>4</sub>	Plumbà	BiH <sub>3</sub>	Bismutà	H <sub>2</sub> Po	Polà	HAt	Astatà

# Nomenclatura de substitució

Nom dels hidrurs progenitors

**H<sup>-</sup> ó H<sup>+</sup> ??????**

BH <sub>3</sub>	Borà	CH <sub>4</sub>	Metà	NH <sub>3</sub>	Azà o amoníac	H <sub>2</sub> O	Oxidà o aigua	HF	Fluorà
AlH <sub>3</sub>	Alumà	SiH <sub>4</sub>	Silà	PH <sub>3</sub>	Fosfà	H <sub>2</sub> S	Sulfà	HCl	Clorà
GaH <sub>3</sub>	Gal·là	GeH <sub>4</sub>	Germà	AsH <sub>3</sub>	Arsà	H <sub>2</sub> Se	Selà	HBr	Bromà
InH <sub>3</sub>	Indigà	SnH <sub>4</sub>	Estannà	SbH <sub>3</sub>	Estibà	H <sub>2</sub> Te	Tel·là	HI	Iodà
TlH <sub>3</sub>	Tal·là	PbH <sub>4</sub>	Plumbà	BiH <sub>3</sub>	Bismutà	H <sub>2</sub> Po	Polà	HAt	Astatà





# Nomenclatura de substitució

## Nom dels hidrurs progenitors

### Hidrur d'alumini

Normalment utilitzem la nomenclatura de composició per als hidrurs metàl·lics.



### Metà

És la base de la nomenclatura orgànica.



### Amoni

També n'hi ha per a cations.



# Nomenclatura de substitució

## Cations dels hidrurs progenitors

Fòrmula	Substitució	Tradicional
$\text{H}_3\text{O}^+$	Oxidani	oxoni
$\text{NH}_4^+$	Azani	amoni

# Tres tipus de nomenclatura



**Nomenclatura  
d'addició**

**El nom es construeix al voltant de l'àtom central.**

**La resta d'àtoms es consideren lligands, amb prefixes simples o complexes.**

**Oxoàcids i complexos de coordinació.**



# Nomenclatura d'addició

## Prefixos simples i compostos

No.	Simple	Complicated	No.	Simple	Complicated
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis

# Nomenclatura d'addició

Exemple



Addició	Tradicional
Triòxidcarbonat(2-) de sodi	Carbonat de sodi

# Nomenclatura d'addició

Exemple



Addició	Tradicional
Tris(tetraoxidsulfat) de diferro	Sulfat fèrric

# Tres tipus de nomenclatura



**Nomenclatura  
de composició**

# Nomenclatura de composició

## Característiques generals

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
<b>H</b> +1 -1																	<b>He</b>
<b>Li</b> +1	<b>Be</b> +2											<b>B</b> +3 -3	<b>C</b> +2+4 -4	<b>N</b> +1+2+3 +4+5 -3	<b>O</b> -2	<b>F</b> -1	<b>Ne</b>
<b>Na</b> +1	<b>Mg</b> +2											<b>Al</b> +3	<b>Si</b> +4 -4	<b>P</b> +3+5 -3	<b>S</b> +2+4 +6 -2	<b>Cl</b> +1+3 +5+7 -1	<b>Ar</b>
<b>K</b> +1	<b>Ca</b> +2				<b>Cr</b> +2+3 +6	<b>Mn</b> +2+3 +4+6 +7	<b>Fe</b> +2+3	<b>Co</b> +2+3	<b>Ni</b> +2+3	<b>Cu</b> +1+2	<b>Zn</b> +2			<b>As</b> +3+5 -3	<b>Se</b> +2+4 +6 -2	<b>Br</b> +1+3 +5+7 -1	<b>Kr</b>
<b>Rb</b> +1	<b>Sr</b> +2								<b>Pd</b> +2+4	<b>Ag</b> +1	<b>Cd</b> +2		<b>Sn</b> +2+4	<b>Sb</b> +3+5 -3	<b>Te</b> +2+4 +6 -2	<b>I</b> +1+3 +5+7 -1	<b>Xe</b>
<b>Cs</b> +1	<b>Ba</b> +2								<b>Pt</b> +2+4	<b>Au</b> +1+3	<b>Hg</b> +1+2		<b>Pb</b> +2+4	<b>Bi</b> +3+5			<b>Rn</b>

Figura 2. Nombres d'oxidació dels elements més freqüents

Aquesta nomenclatura es basa en la proporció dels elements (no tant en l'estructura)

### Prefixos

mono-, di- i tri-

o

bis-, tris-, tetrakis-

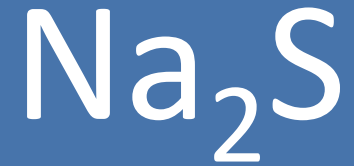
### N. oxidació

S'indiquen en nombres **romans** entre parèntesis i al costat del nom de l'element.

### N. càrrega

(Ewens-Basset)

S'indica **el signe i la càrrega en nombres aràbics** entre parèntesis i al costat del nom de l'element.



## Prefixos

Sulfat de  
disodi

## N. ox.

Sulfur de  
sodi (~~±~~)

## N. càrrega

Sulfur de sodi  
(~~+1~~)

# Elements i ions simples (Ewens-Basset)

Fòrmula	Nom sistemàtic	Nom acceptat
Ag	Plata	
Fe	Ferro	
N	Mononitrogen	
H <sub>2</sub>	Dihidrogen	
O <sub>2</sub>	Dioxigen	Oxigen
O <sub>3</sub>	Trioxigen	Ozó



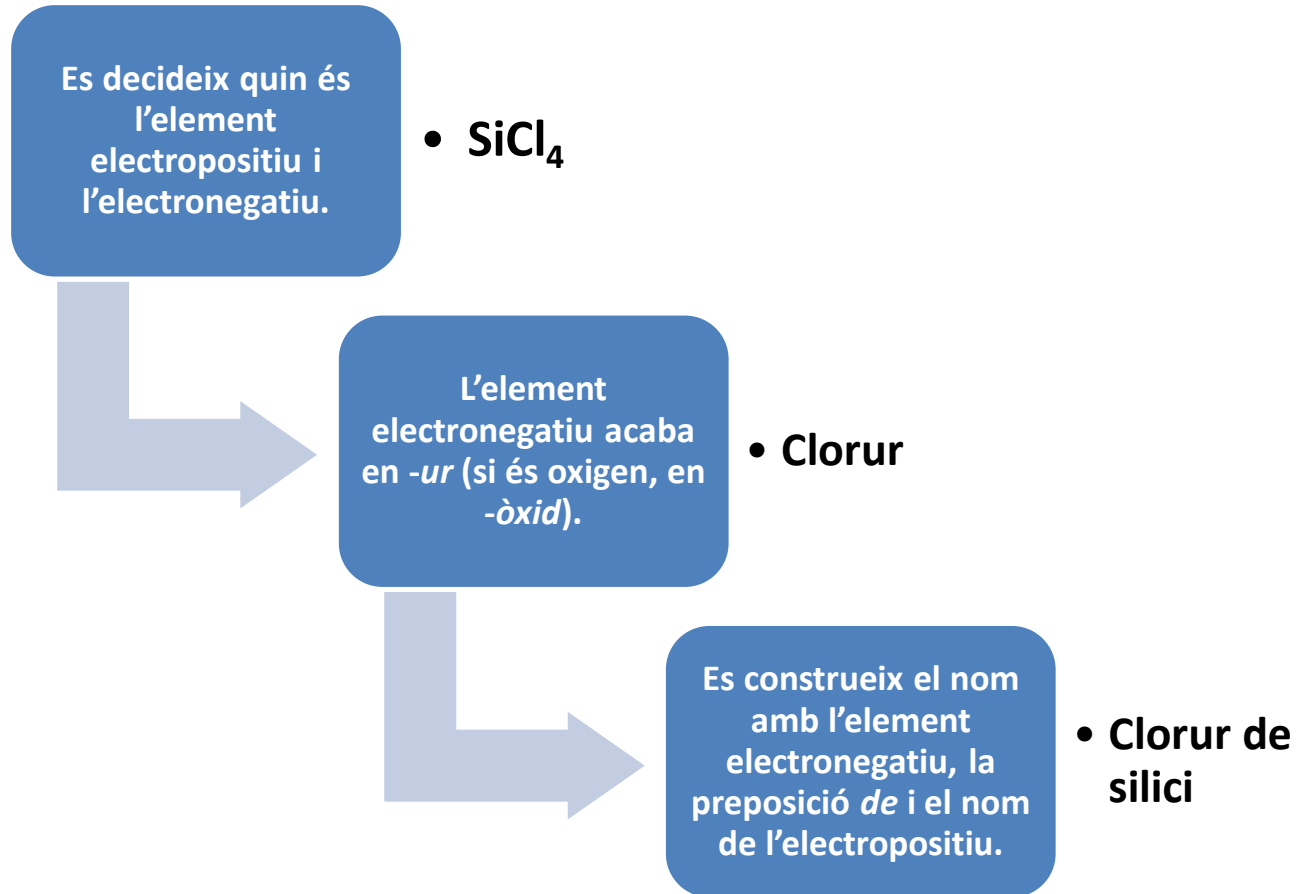
# Elements i ions simples (Ewens-Basset)

Fòrmula	Nombre de càrrega	Nom acceptat
$\text{Ag}^+$	Plata(1+)	
$\text{Fe}^{3+}$	Ferro(3+)	
$\text{H}^+$	Hidrogen(1+)	Hidró (protó)
$\text{Hg}_2^{2+}$	Dimercuri(2+)	

## Elements i ions simples (Ewens-Basset)

Fòrmula	Nombre de càrrega	Nom acceptat
$\text{Cl}^-$	Clorur(1-) o clorur	
$\text{S}^{2-}$	Sulfur (2-) o sulfur	
$\text{H}^-$	Hidrur(1-)	Hidrur
$\text{O}^{2-}$	Òxid(2-) o òxid	
$\text{O}_2^{2-}$	Diòxid(2-)	Peròxid
$\text{P}^{3-}$	Fosfur(3-)	
$\text{N}^{3-}$	Nitrur(3-)	
$\text{S}_2^{2-}$	Disulfur(2-)	

# Compostos BINARIS



N. de composició

**Caràcter NO iònic.**

a. S'hi afigen els prefixos multiplicadors adients.

**Tetraclorur de silici**

b. S'hi afig el nombre d'oxidació de l'element electropositiu.

**Clorur de silici (IV)**

**NO? NO<sub>2</sub>?**

# ORDRE DELS ELEMENTS SEGONS L'ELECTRONEGATIVITAT

The diagram illustrates the periodic table with blue arrows indicating the order of elements by electronegativity. The path starts at the top left (Helium) and moves right across each row, then down to the start of the next row. This path continues through the transition metals, the main groups, and the noble gases. A specific path is highlighted for the lanthanide and actinide series, showing the order from Lanthanum to Lutetium and Actinium to Lawrencium.

He	Li	Be												B	C	N	O	F
Ne	Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl
Ar	K	Ca	Sc		Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Kr	Rb	Sr	Y		Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
Xe	Cs	Ba	La	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At
Rn	Fr	Ra	Ac	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Fl			Lv	

# Compostos BINARIS

Es decideix quin és l'element electropositiu i l'electronegatiu.

• HgCl<sub>2</sub>

L'element electronegatiu acaba en *-ur* (si és oxigen, en *-òxid*).

• Clorur

Es construeix el nom amb l'element electronegatiu, la preposició *de* i el nom de l'electropositiu.

• Clorur de mercuri

N. de composició

**Caràcter iònic.**

a. S'hi afigen els prefixos multiplicadors adients.

**Diclorur de mercuri**

b. S'hi afig el nombre d'oxidació de l'element electropositiu.

**Clorur de mercuri (II)**

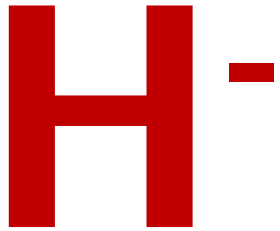
c. S'hi afig el nombre de càrrega de l'element electropositiu.

**Clorur de mercuri (+2)**

**AgBr? CaCl<sub>2</sub>?**

# Compostos BINARIS Amb hidrògen

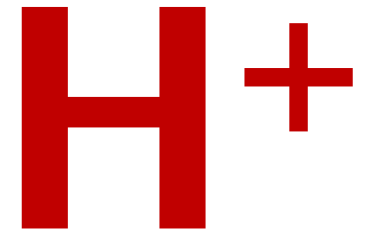
N. de composició



L'hidrogen pot actuar com un anió monocarregat en front d'elements més electropositius.

**S'anomena hidrur.**

L'hidrogen pot actuar com un catió monocarregat davant d'elements més electronegatiu.



# Compostos BINARIS Amb hidrògen

N. de composició

**H<sup>-</sup>**

Fórmula	Prefixos multiplicadors	Nombre d'oxidació	Nombre de càrrega	Nom acceptat
FeH <sub>2</sub>	Dihidrur de ferro	Hidrur de ferro (II)	Hidrur de ferro (2+)	
BeH <sub>2</sub>	Dihidrur de berili	Hidrur de berili	Hidrur de berili	
PH <sub>3</sub>	Trihidrur de fosfor	Hidrur de fosfor (III)	NO IÒNIC	
<b>H<sup>+</sup></b>				
H <sub>2</sub> S	Sulfur de dihidrogen	Sulfur d'hidrogen	NO IÒNIC	
HCl	Clorur d'hidrogen	Clorur d'hidrògen	NO IÒNIC	Àcid clorhídric
H <sub>2</sub> O	Monòxido de dihidrogen	Òxid de dihidrògen	NO IÒNIC	Aigua

# Compostos BINARIS Amb oxigen

N. de composició

# O<sup>-2</sup>

**Combinacions  
binàries  
d'oxigen (2-)  
amb un altre  
element més  
electropositiu.**

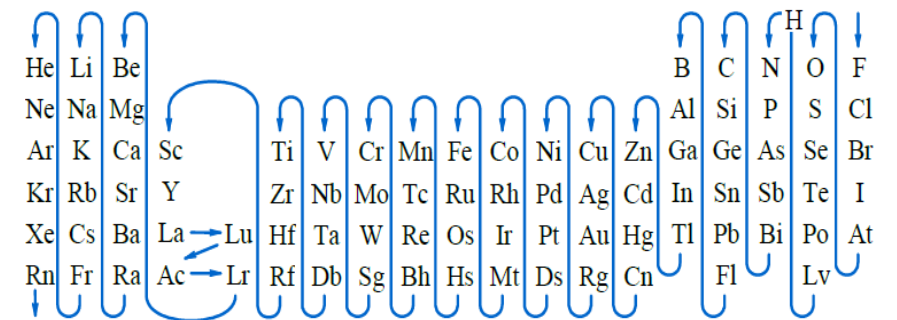


Figure 1: Element sequence



# Compostos BINARIS Amb oxigen

N. de composició

O<sup>-2</sup>

Fórmula	Prefixos multiplicadors	Nombre d'oxidació	Nombre de càrrega	Nom NO acceptat
OF <sub>2</sub>	Difluorur d'oxigen	Fluorur d'oxigen (-II)	NO IÒNIC	Òxid de difluor
CO <sub>2</sub>	Diòxid de carboni	Òxid de carboni (IV)	NO IÒNIC	
O <sub>5</sub> Cl <sub>2</sub>	Diclorur de pentaoxigen	Clorur de pentaoxigen (-II)	NO IÒNIC	
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Triòxid de diferro	Òxid de ferro( III)	Òxid de ferro(3+)	Òxid fèrric
CuO	Òxid de coure	Òxid de coure (II)	Òxid de coure(2+)	Òxid cúpric
K <sub>2</sub> O	Òxid de dipotassi	Òxid de potassi	Òxid de potassi	Òxid potàssic

# Compostos BINARIS Amb oxigen

N. de composició

O<sup>-2</sup>

Fórmula	Prefixos multiplicadors	Nombre d'oxidació	Nombre de càrrega	Nom NO acceptat
OF <sub>2</sub>	Difluorur d'oxigen			
CO <sub>2</sub>	Diòxid de carboni			
O <sub>5</sub> Cl <sub>2</sub>	Diclorur de pentaoxigen			
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		Òxid de ferro (III)		
CuO		Òxid de coure (II)		
K <sub>2</sub> O		Òxid de potassi		

# Compostos BINARIS Amb oxigen

N. de composició

Peròxids



Hidròxids

# Compostos BINARIS Amb oxigen

N. de composició

$(O_2)^{-2}$

Fórmula	Prefixos multiplicadors	Nombre d'oxidació	Nombre de càrrega	Nom NO acceptat
$CuO_2$	Diòxid de coure	Peròxid de coure (II)	Diòxid (2-) de coure (2+)	peròxid cúpric
$Na_2O_2$	Diòxid de disodi	peròxid de sodi	Diòxid (2-) de sodi	peròxid sòdic
$H_2O_2$	Diòxid de dihidrogen	peròxid de dihidrogen	NO IÒNIC	
$NaOH$	Hidròxid de sodi	Hidròxid de sodi	Hidròxid de sodi	Hidròxid sòdic
$Cu(OH)_2$	Hidròxid de dicoure	Hidròxid de coure (II)	Hidròxid de coure (2+)	Hidròxid cúpric
$Al(OH)_3$	?	?	?	

$(OH)^{-}$

# Compostos BINARIS

Altres combinacions

Metalls-NO metalls



Sals  
binàries

NO Metalls-NO metalls



# Compostos BINARIS

Altres combinacions

Fórmula	Prefixos multiplicadors	Nombre d'oxidació	Nombre de càrrega	Nom NO acceptat
$\text{Na}_2\text{S}$	Sulfur de disodi	Sulfur de sodi	Sulfur de sodi	
$\text{FeCl}_2$	Diclorur de ferro	Clorur de ferro (II)	Clorur de ferro (2+)	<del>Clorur ferrós</del>
$\text{Au}_3\text{N}$	Nitrur de trior	Nitrur d'or (I)	Nitrur d'or (1+)	<del>Nitrur aurós</del>
$\text{NH}_4\text{Br}$	Bromur d'amoni	Bromur d'amoni	Bromur d'amoni	Bromur amònic
$\text{SbCl}_3$	Triclorur d'antimoni	Clorur d'antimoni (III)	NO IÒNIC	
$\text{CBr}_4$	Tetrabromur de carboni	Bromur de carboni (IV)	NO IÒNIC	
$\text{SF}_6$	Hexafluorur de sofre	Fluorur de sofre (VI)	NO IÒNIC	

M-No M

No M-No M

# Compostos ternaris i quaternaris

## Oxoàcids

Compost format per la combinació d'àtoms **d'hidrogen, oxigen** i almenys un **tercer element** (l'hidrogen té caràcter àcid).

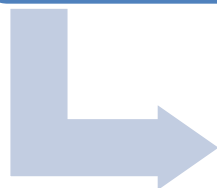
**La nomenclatura tradicional no canvia.**

# Compostos ternaris i quaternaris

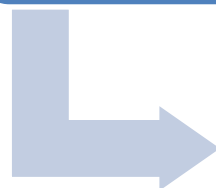
**Oxoàcids**  
**Nom. Tradicional**

Estat d'oxidació major

**Per-ic**



**-ic**



**-òs**



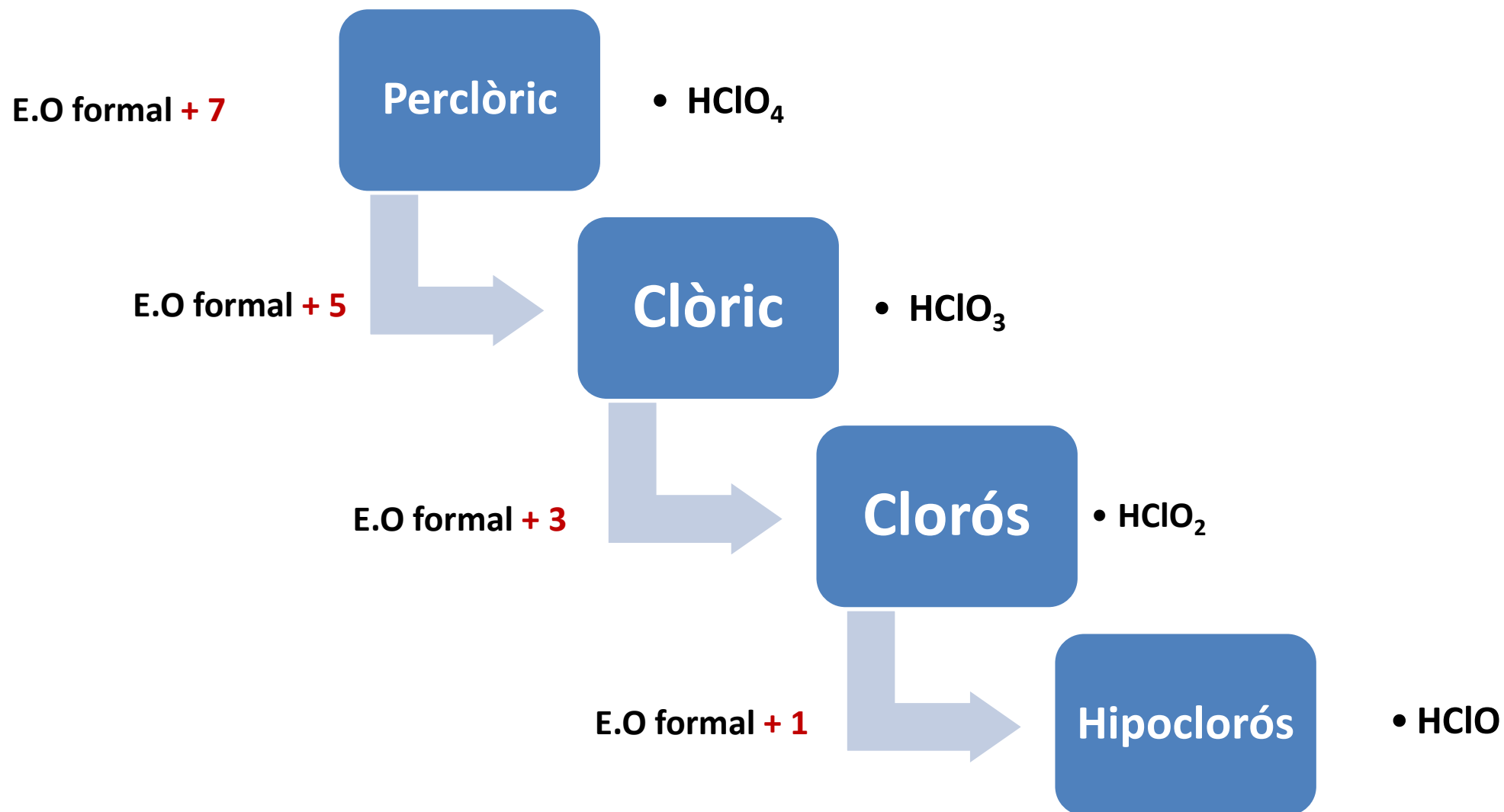
**Hipo-ós**

Estat d'oxidació menor



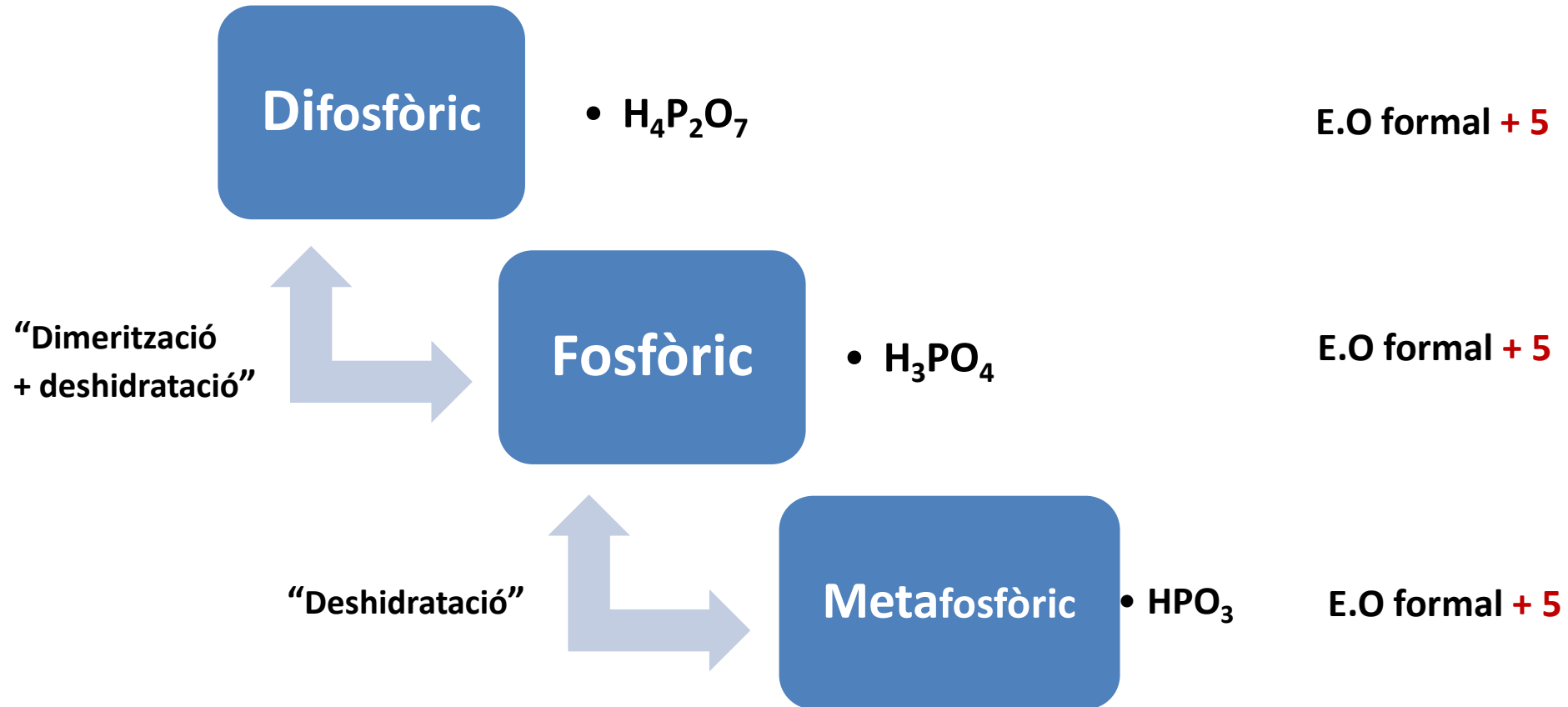
# Compostos ternaris i quaternaris

## Oxoàcids



# Compostos ternaris i quaternaris

## Oxoàcids Deshidratacions o dimeritzacions



# Compostos ternaris i auaternaris

**Oxoàcids**  
**Noves formes**  
**Addició i hidrogen**

Prefix-hidroxid-prefix-oxid-nom element

Nomenclatura d'addició

Prefix-hidrogen(prefix-oxid-nom element-at)

Nomenclatura d'hidrogen

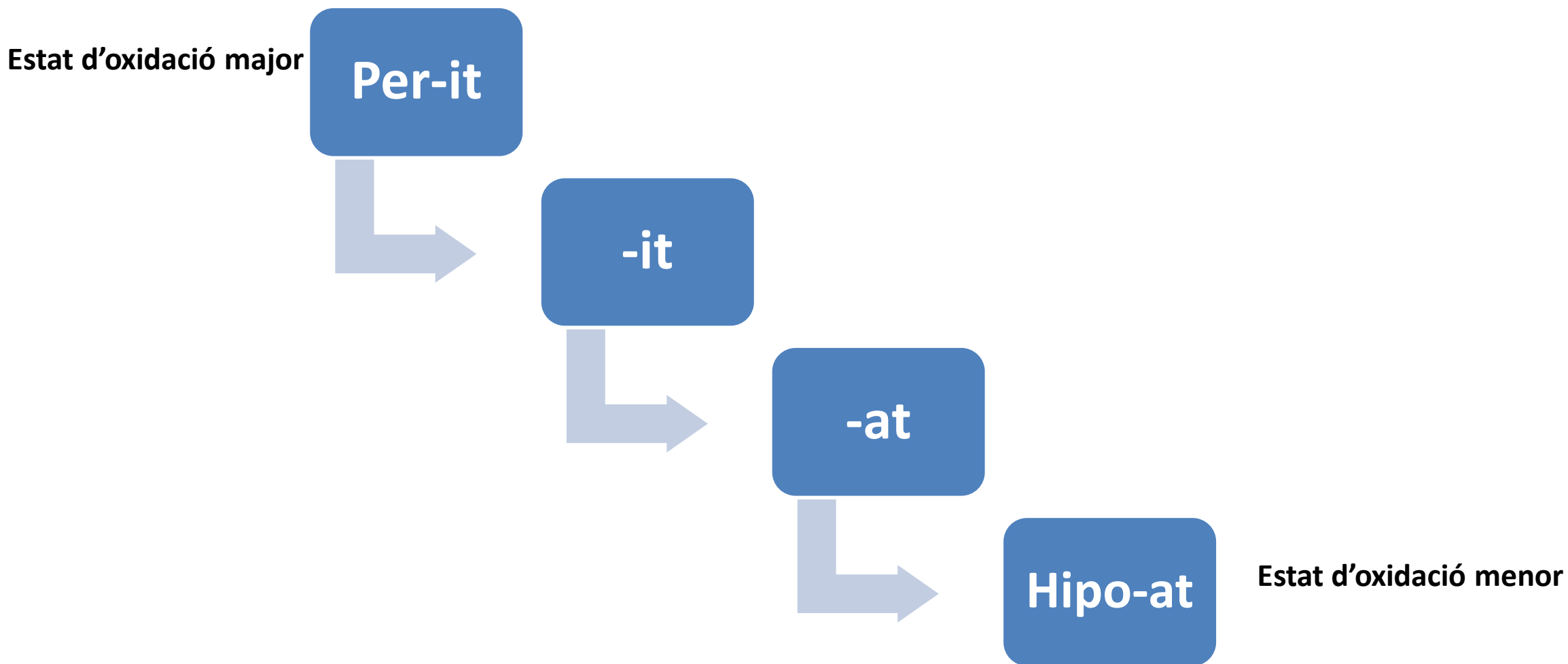
# Compostos ternaris i quaternaris

**Oxoàcids**  
**Noves formes**  
**Addició i hidrogen**

Fórmula	Nomenclatura d'hidrogen	F. estructural	Nomenclatura d'addició
$\text{H}_2\text{CO}_3$	Dihidrogen (trioxidcarbonat)	$\text{CO}(\text{OH})_2$	dihidroxiòxidcarboni
$\text{H}_2\text{SiO}_4$	Tetrahidroxid (tetraoxidsilicat)	$\text{Si}(\text{OH})_4$	tetrahidroxidsilici
$\text{HNO}_3$	Hidrogen (trioxidnitrat)	$\text{NO}_2(\text{OH})$	hidroxidioxidnitrogen
$\text{H}_3\text{PO}_4$	Trihidrogen (tetraoxidfosfat)	$\text{PO}(\text{OH})_3$	trihidroxiòxidfosfor
$\text{HBrO}$	Hidrogen (oxidbromat)	$\text{Br}(\text{OH})$	hidroxidbrom

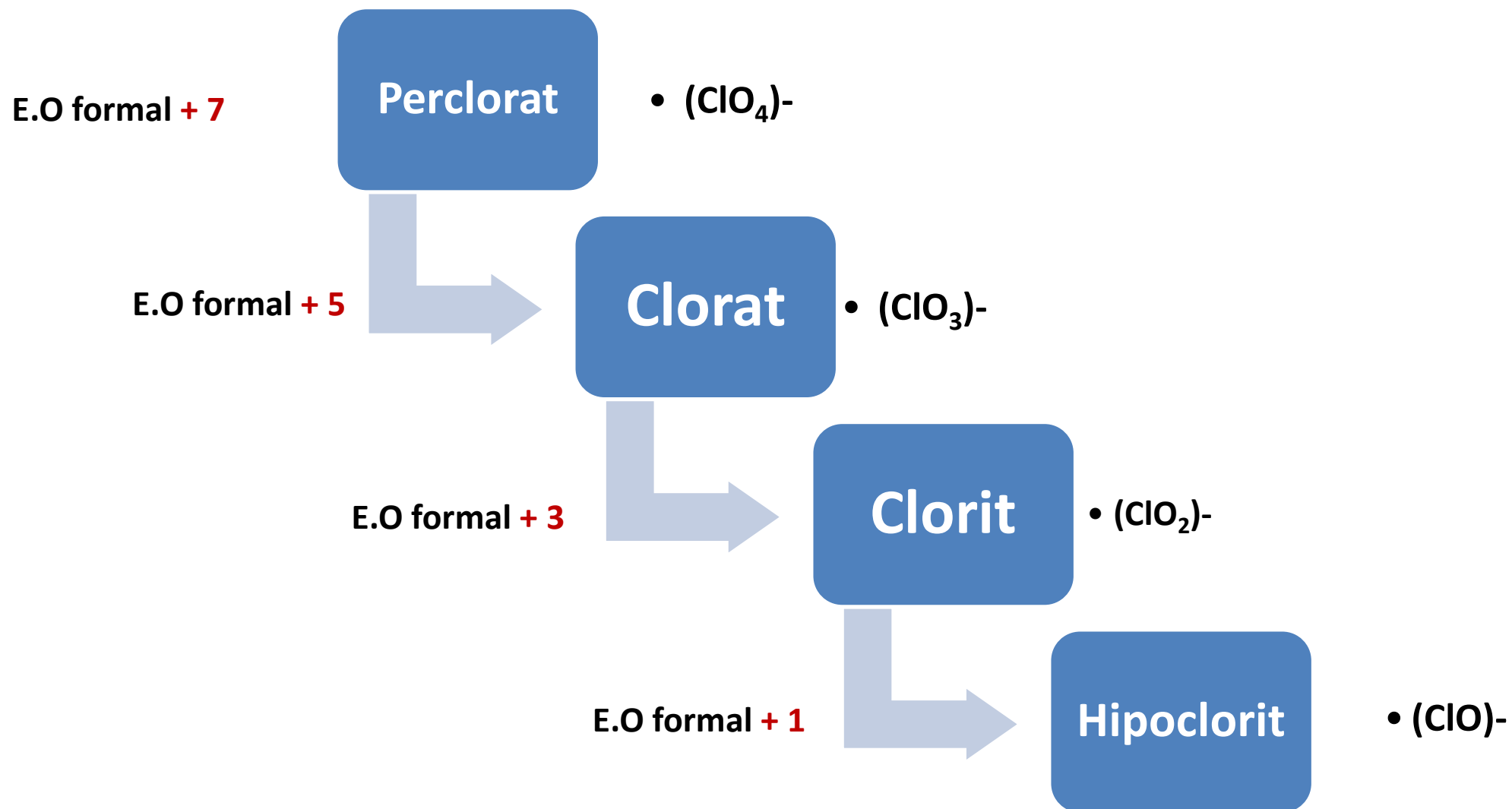
# Compostos ternaris i quaternaris

**Oxosals**  
**Nom. Tradicional**



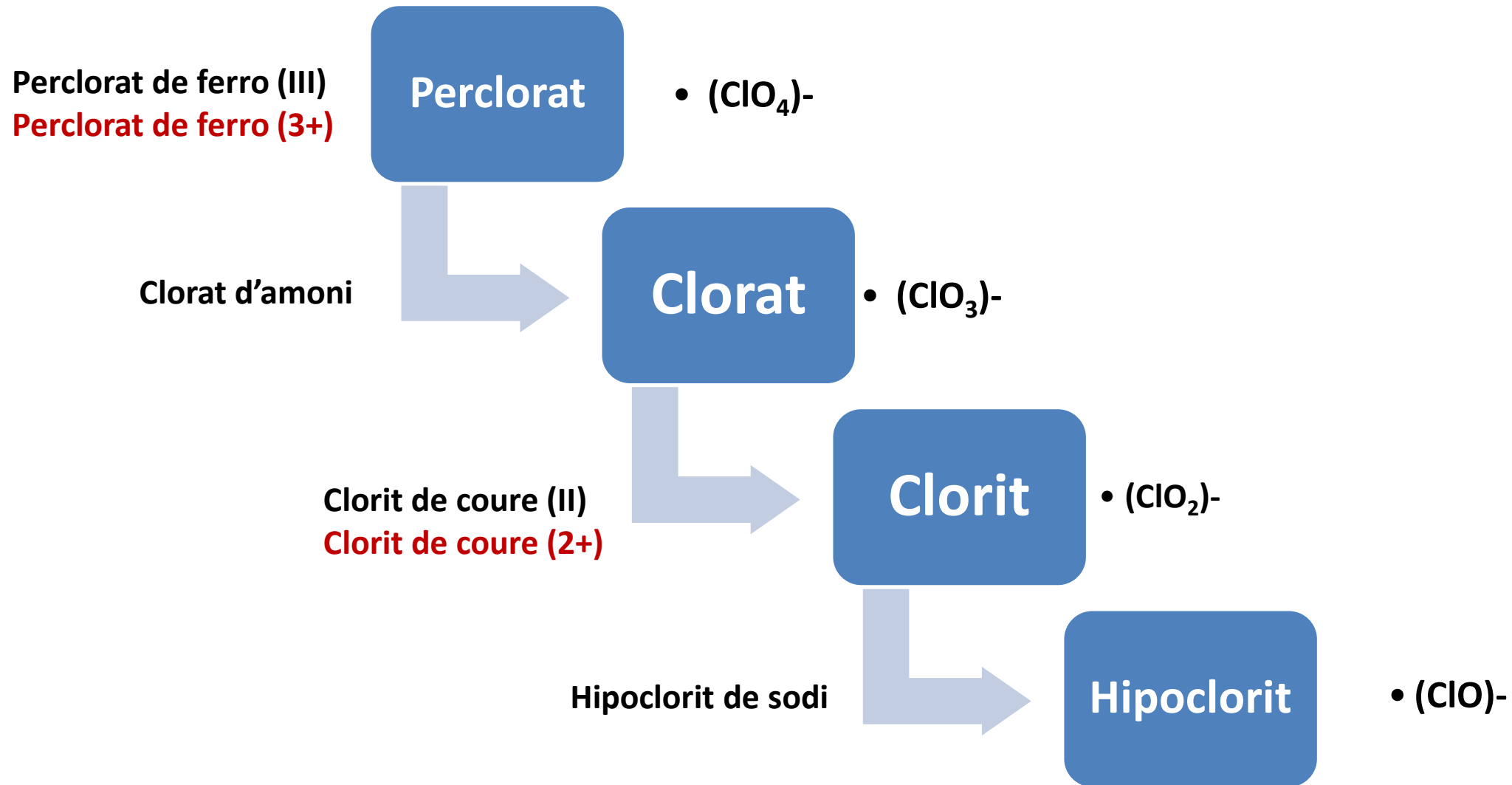
# Compostos ternaris i quaternaris

**Oxosals**  
**Nom. Tradicional**



# Compostos ternaris i uaternaris

**Oxosals**  
**Nom. Tradicional**



# Nomenclatura d'addició

## Oxoàcids Noves formes Addició i hidrogen

prefix-oxid-nom element-at-(carrega anió) de nom metall-(càrrega catió)

Nomenclatura d'addició

prefix-(prefix-oxid-nom element-at) de prefix-nom element

Nomenclatura de composició



# Compostos ternaris i quaternaris

**Oxosals**  
**Noves formes**  
**Composició**  
**i addició**

Fórmula	Nomenclatura de composició	Nomenclatura d'addició	NOM NO ACCEPTAT!
$\text{Na}_2\text{CO}_3$	Trioxidcarbonat de sodi	Triòxidcarbonat (2-) de sodi	Carbonat sòdic
$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$	Tris(tetraoxidsulfat) de diferro	Tetraoxidsulfat) (2-) de diferro (3+)	Sulfat fèrric
$\text{PbSO}_3$	Trioxidsulfat de plom	Triòxidsulfat (2-) de plom (2+)	Sulfit plumbós
$\text{Cu}(\text{NO}_2)_2$	Bis(dioxidnitrat) de coure	Dioxidnitrat (1-) de coure (2+)	Nitrat cupric
$\text{Ca}(\text{PO}_3)_2$	Bis(dioxidnitrat) de coure	Trioxidfosfat (1-) de calci	Fosfat càlcic

# Compostos ternaris i quaternaris

**Oxosals àcides**  
**Noves formes**  
**Composició**  
**i addició**

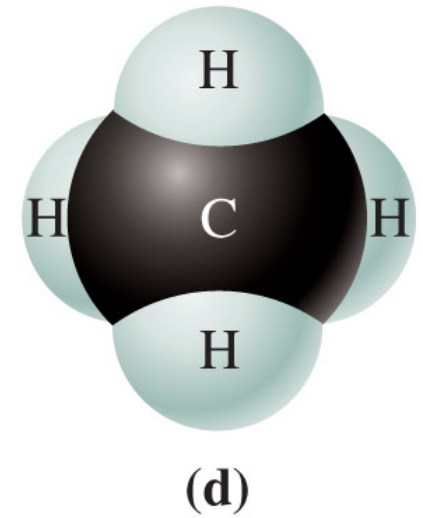
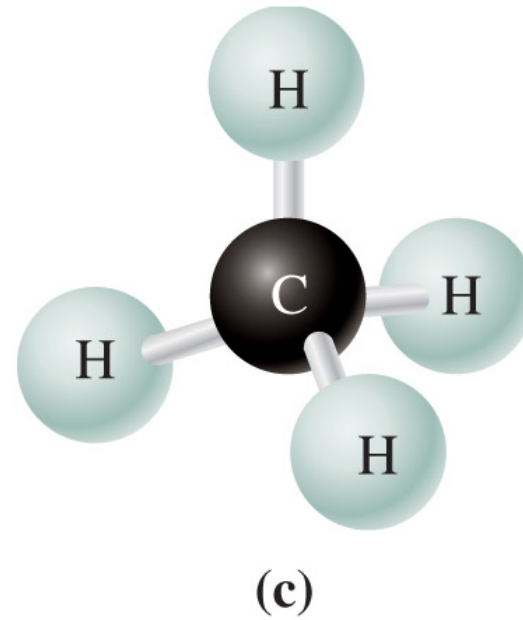
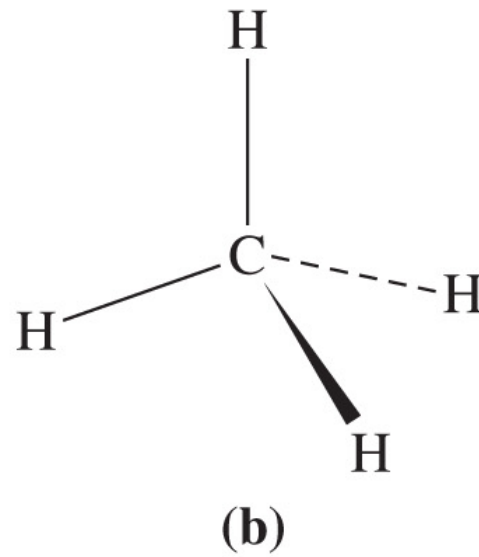
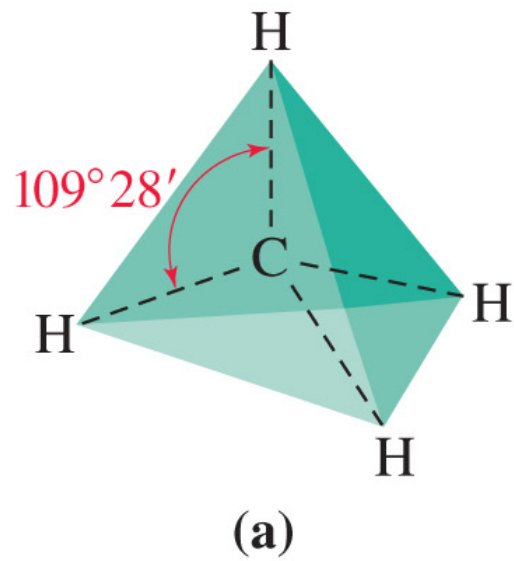
<b>Fórmula</b>	<b>Nomenclatura de composició</b>	<b>Nomenclatura tradicional</b>	<b>NOM NO ACCEPTAT!</b>
<b>NaHCO<sub>3</sub></b>	Hidrogen (trioxidcarbonat de sodi)	Hidrogencarbonat(2-) de sodi	Bicarbonat sòdic
<b>Zn(HSO<sub>4</sub>)<sub>2</sub></b>	Bis(hidrogen tetraoxidsulfat) de zinc	Hidrogensulfat de zinc	Bisulfat de zinc
<b>Na(H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)</b>	Dihidrogen tetraoxid fosfat de sodi	Dihidrogenfosfat de sodi	

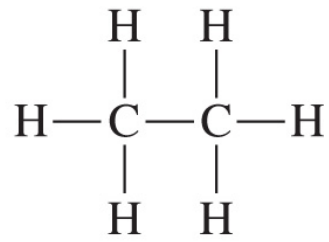


# Formulació de química orgànica

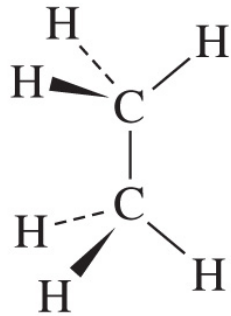
**Recomanacions IUPAC 1993**

Recordeu que els compostos orgànics deriven del carboni, que té una estructura tetraèdrica. Baix es mostra la forma de representació amb línies i tascons per a indicar la **tridimensionalitat dels enllaços**.

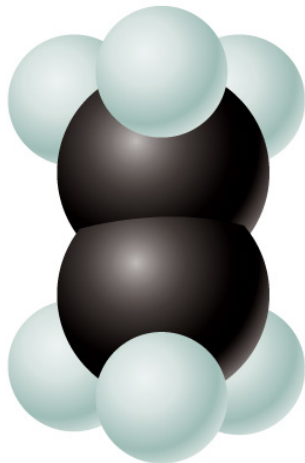




(a)



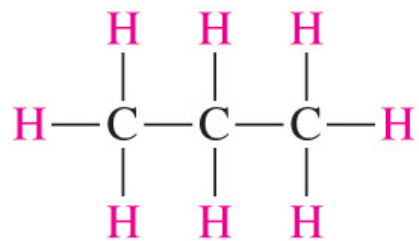
(b)



(c)

Al costat hem representat **l'età**, en el que es coneix com a **fórmula desenvolupada (a)** i notació de **línies i tascons (b)** (**tridimensionalitat dels enllaços**).

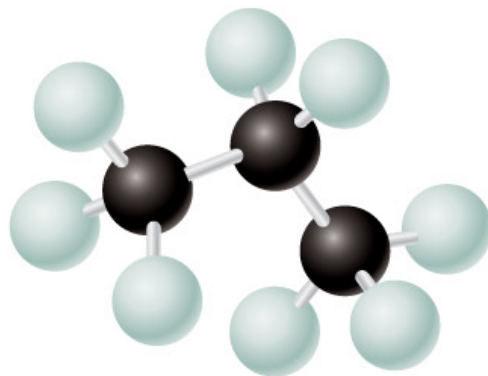
La figura de baix representa **el propà**, en el que es coneix com a **fórmula desenvolupada (a) i fórmula condensada**, a més de la notació de línies i tascons (e) (**tridimensionalitat dels enllaços**).



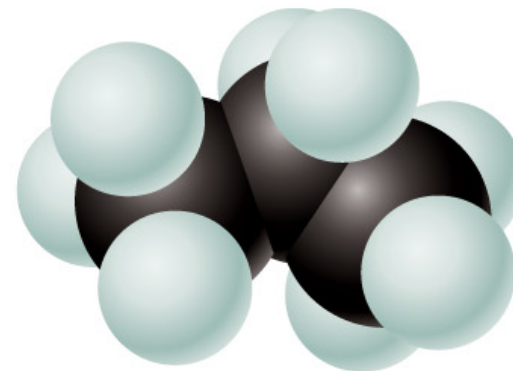
(a)



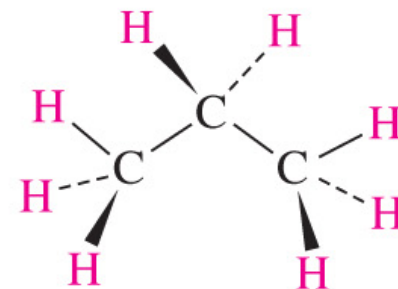
(b)



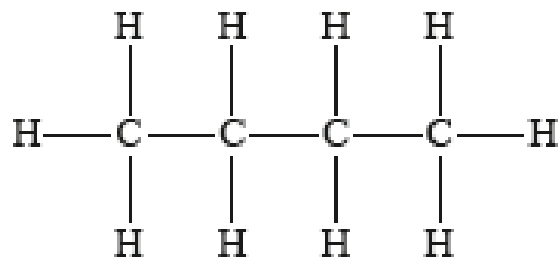
(c)



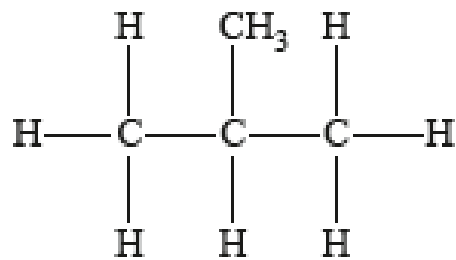
(d)



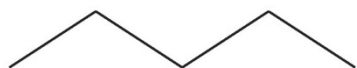
(e)



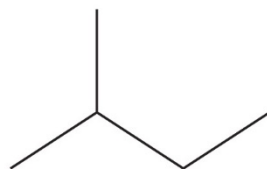
Butane



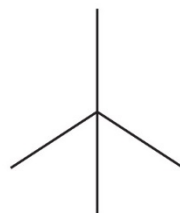
Methylpropane



(1)



(2)



(3)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

Per últim, representem el que es coneix com a **fórmules estructurals.**

En aquesta forma, els hidrògens **no es representen**, i els cantons corresponen a àtoms de carboni amb la seua geometria **tetraèdrica**. Només es representen **els heteroàtoms** que formen els grups funcionals.



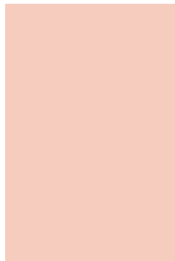
# Nomenclatura dels compostos orgànics

La "**nomenclatura sistemàtica**" és el sistema utilitzat per a anomenar actualment els compostos orgànics, conegut com a sistema IUPAC, es basa en una sèrie de regles senzilles que permeten anomenar qualsevol compost orgànic a partir de la fórmula desenvolupada, o viceversa.


A més hi ha la "**nomenclatura vulgar**", que és el nom pel qual es coneixien inicialment moltes molècules orgàniques (com p.e. àcid acètic, formaldehid, estiré, colesterol, etc.), i que avui dia està acceptada.

En general, el nom sistemàtic està format per un prefix, que indica el nombre d'àtoms de carboni que conté la molècula, i un sufix, que indica la classe de compost orgànic de què es tracta.


# Tipus de compostos



Hidrogenats



Halogenats



Oxigenats



Nitrogenats

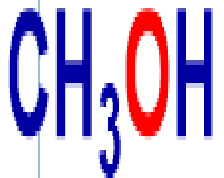
# Tipus de compostos



Molècules constituïdes per **C i H**.  
Son els hidrocarburs lineals,  
ramificats o cíclics amb enllaços  
simples, dobles o triples.



Les molècules només contenen  
**C, H i àtoms d'un o més**  
**halògens**, amb l'excepció de l'At.



Només existeixen **C, H i O en** la  
molècula. Són els alcohols,  
aldehids, cetones, àcids  
carboxílics i derivats.



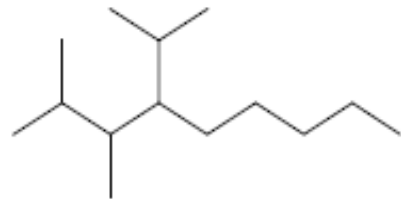
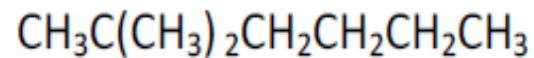
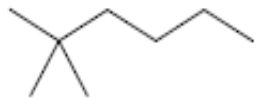
Molècules constituïdes per **C, H i**  
**N**. Son les amides, amines,  
nitroderivats i nitrils.

# Hidrocarburs

Són aquells compostos orgànics que contenen únicament C i H en la seua molècula. N'hi ha dos grups principals d'hidrocarburs, els alifàtics i els aromàtics, cada un dels quals se subdivideixen al seu torn en diverses classes de compostos.

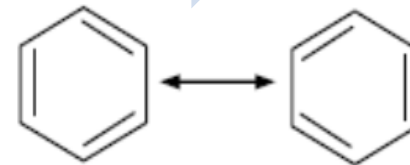
## Alifàtics

Dins d'aquest grup hi ha els alcans, alquens, alquins i cicloalcans.



## Aromàtics

Hi ha dues classes de compostos, els monocíclics o mononuclears, que contenen només un nucli benzènic, i els policíclics o polinuclears que contenen dos o més nuclis benzènics.



# ALCANOS/ALCANS

nº carbonos	nombre	fórmula	nº carbonos	nombre
1	metano	CH <sub>4</sub>	14	tetradecano
2	etano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>	15	pentadecano
3	propano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	16	hexadecano
4	butano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	17	heptadecano
5	pentano	CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	18	octadecano
6	hexano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -CH <sub>3</sub>	19	nonadecano
7	heptano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -CH <sub>3</sub>	20	eicosano
8	octano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> -CH <sub>3</sub>	21	heneicosano
9	nonano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> -CH <sub>3</sub>	22	docosano
10	decano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> -CH <sub>3</sub>	23	tricosano
11	undecano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> -CH <sub>3</sub>	24	tetracosano
12	dodecano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>10</sub> -CH <sub>3</sub>	30	triacontano
13	tridecano	CH <sub>3</sub> -(CH <sub>2</sub> ) <sub>11</sub> -CH <sub>3</sub>	40	tetracontano

# ALKANES

Responen a la fórmula general  $C_nH_{2n+2}$ . Són hidrocarburs acíclics (no tenen cicles en la seua cadena) saturats (tenen el màxim nombre d'hidrògens possible).

**Alcans de cadena lineal:** s'anomenen utilitzant un dels prefixos de la taula que teniu al costat

TABLE 26.1 Some Common Alkyl Groups

Common Name	IUPAC Name	Structural Formula
Methyl	Methyl	$\text{—CH}_3$
Ethyl	Ethyl	$\text{—CH}_2\text{CH}_3$
Propyl <sup>a</sup>	Propyl	$\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
Isopropyl	1-Methylethyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_3 \\   \end{array}$
Butyl <sup>a</sup>	Butyl	$\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
Isobutyl	2-Methylpropyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{—CH}_2\text{CHCH}_3 \end{array}$
<i>sec</i> -Butyl <sup>b</sup>	1-Methylpropyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \\   \end{array}$
<i>tert</i> -Butyl <sup>c</sup>	1,1-Dimethylethyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CCH}_3 \\   \end{array}$

<sup>a</sup>In the past, the prefix *normal* or *n*- was used for a straight-chain alkyl group, such as *n*-propyl or *n*-butyl.

<sup>b</sup>*sec* = secondary

<sup>c</sup>*tert* = tertiary

## Alcans de cadena ramificada

Per a anomenar aquests compostos cal seguir aquests passos:

1. Busca la **cadena hidrocarbonada més llarga**. Aquesta serà la cadena "principal". Si hi ha més d'una cadena amb la mateixa longitud, es tria com a principal la que té un nombre major de cadenes laterals.
2. Es **numeren els àtoms de carboni** de la cadena principal començant per l'extrem més pròxim a la ramificació, de manera que els carbonis amb ramificacions tinguin el nombre més baix possible.

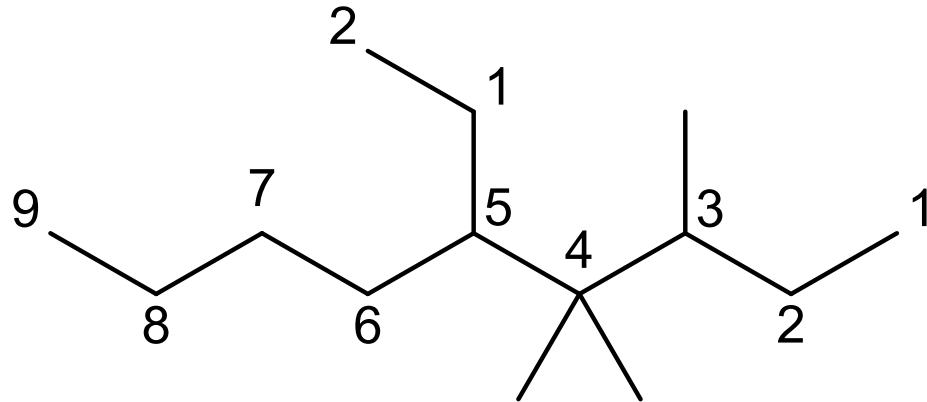
## Alcans de cadena ramificada

Per a anomenar aquests compostos cal seguir els passos següents:

3. **S'anomenen les cadenes laterals indicant la seua posició** en la cadena principal amb un nombre que precedeix al nom de la cadena lateral; aquest s'obté substituint el prefix **-à** per **-il**. Si hi ha dues o més cadenes iguals s'utilitzen els prefixos **di-, tri-, tetra-**. Tant els nombres com aquests prefixos se separen del nom mitjançant guions. Els nombres, per comes.
4. Finalment **s'anomena la cadena principal**.

Radical	Nombre
$\text{CH}_3-$	metil o metilo
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-$	etil o etilo
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	propil o propilo
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	isopropil o isopropilo (1-metiletíl)
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	butil ( <i>n</i> -butil) o butilo
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	<i>sec</i> -butil o <i>sec</i> -butilo (1-metilpropil)

# 5-etil-3,4,4-trimetilnonà

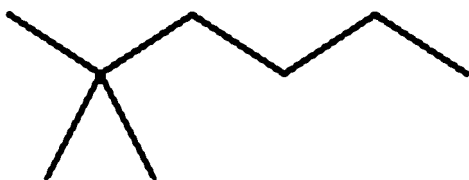


5-etil-3,4,4-trimetilnonano

5-ethyl-3,4,4-trimethylnonane

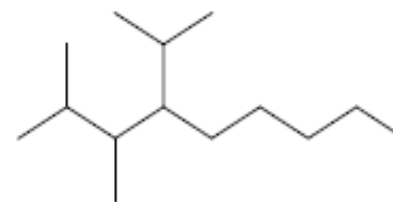


## 2,2-dimetilhexà



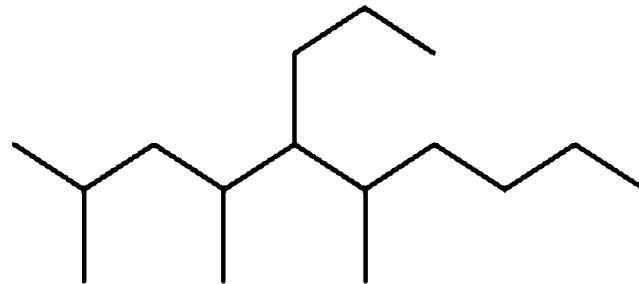
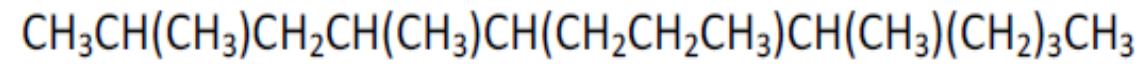
2,2-dimetilhexano

## 4-isopropil-2,3-dimetilnonà



4-isopropil-2,3-dimetilnonano

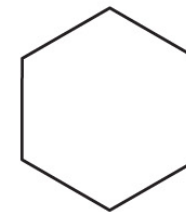
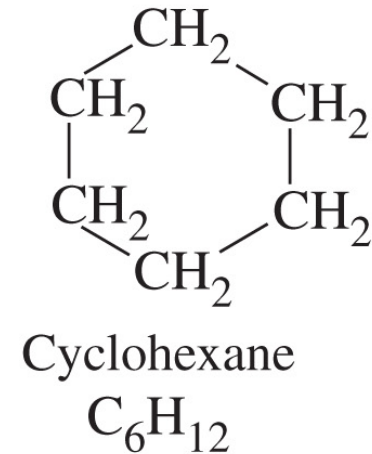
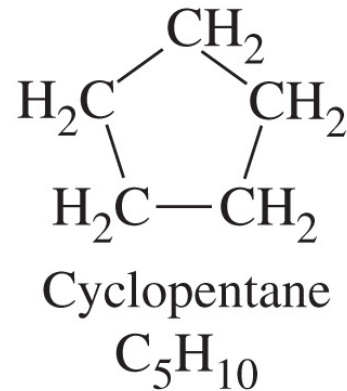
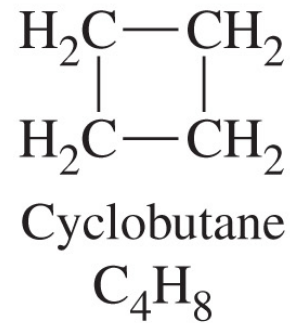
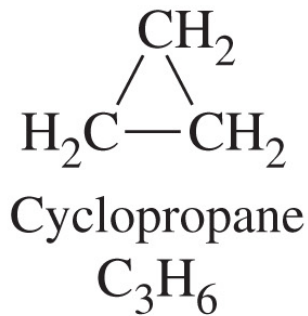
## 2,3,6-trimetil-5-propildecà



2,4,6-trimetil-5-propildecano

## Hidrocarburs alicíclics o **cicloalcan**s

Responen a la fórmula general  $C_nH_{2n}$ . S'anomenen anteposant el prefix cicle- al nom de l'alcà lineal d'igual nombre d'àtoms de carboni. En les figures geomètriques amb les quals es representa cada vèrtex correspon a un metilè -CH<sub>2</sub>-.



Quan actuen **com a radicals**, els cicloalcans s'anomenen substituint el sufix **-à** per **-il**: ex. ciclopropil o ciclobutil.

Quan hi ha ramificacions en el cicloalcà, es numeren els àtoms de carboni de tal manera que li corresponga el nombre més baix al carboni que té la cadena lateral.

En el cas que hi haja una sola ramificació, no cal indicar-ne la posició.

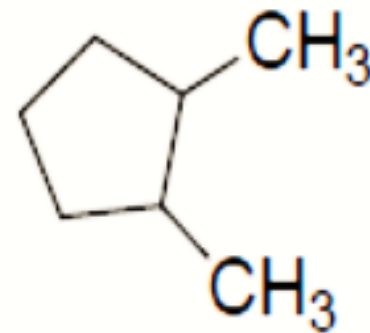
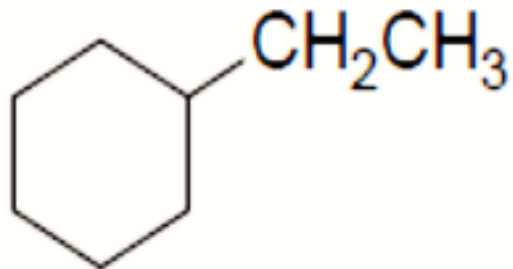
# ALCANS CÍCLICS

# CICLO

Quan actuen com a radicals, els cicloalcans s'anomenen substituint el sufix *-à* per *-il*: ex. ciclopropil o ciclobutil.

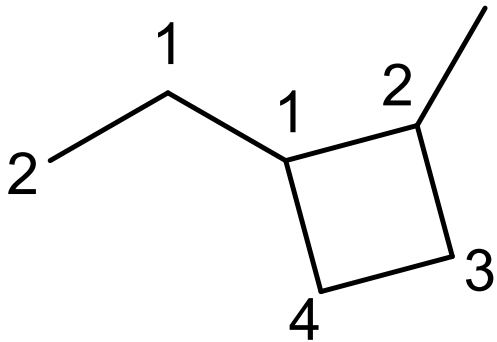
Quan hi ha ramificacions en el cicloalcà, es numeren els àtoms de carboni de tal manera que li corresponga el nombre més baix al carboni que té la cadena lateral.

En el cas que hi haja una sola ramificació, no cal indicar-ne la posició.

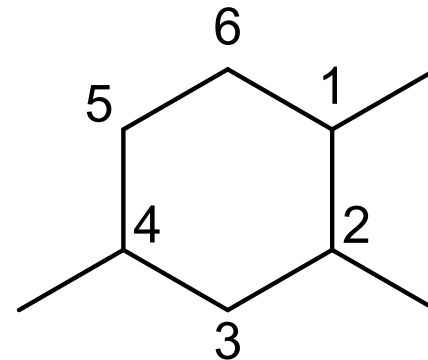


*Si hi ha més d'un  
substituent  
s'anomenen  
alfabèticament.*

*Sempre s'assignen els  
nombres de forma que  
els localitzadors siguin  
els més baixos.*



**1-etil-2-metilciclobutà**

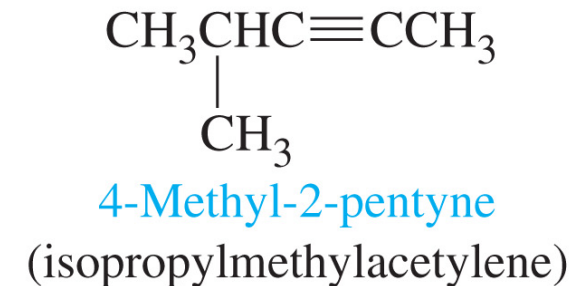
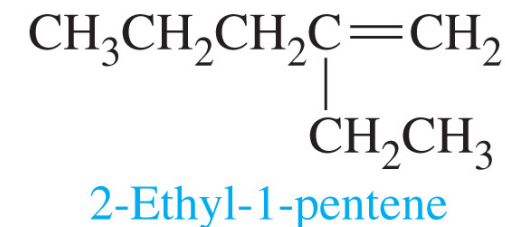
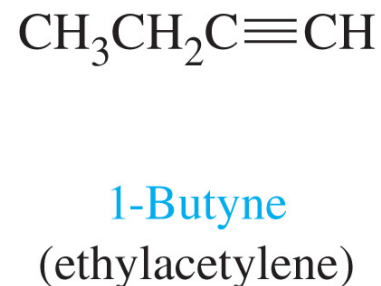
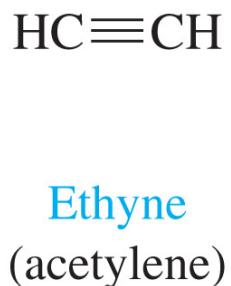
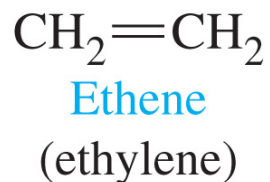


**1,2,4-trimetilciclohexà**

# Alquens i alquins

Són els **hidrocarburs insaturats** que tenen doble enllaç carboni - carboni (alquens) o triple enllaç carboni - carboni (alquins). Responen a les fórmules generals:  $C_nH_{2n}$  i  $C_nH_{2n-2}$

Les regles de la IUPAC per a anomenar alquens i alquins són semblants a les dels alcans, però s'hi han d'afegir algunes regles per a **anomenar i localitzar els enllaços múltiples**.



# ALQUENOS/ALQUENS ALQUINOS/ALQUINS

**1.** Per a designar un doble enllaç carboni-carboni, s'utilitza la terminació **-e**. Quan hi ha més d'un doble enllaç, la terminació canvia a **-dié**, **-trié** i així successivament.

**2.** Per a designar un triple enllaç s'utilitza la terminació **-i** (-dii per a dos triples enllaços i així successivament). Els compostos que tenen un doble i un triple enllaç s'anomenen **-enins**.

**3.** Se selecciona la cadena més llarga, **que incloga els carbonis del doble enllaç**. Si hi ha ramificacions es pren com a cadena principal la cadena més llarga de les que contenen el doble enllaç.

**4.** **Es numera la cadena** a partir de l'extrem més proper a l'enllaç múltiple, de manera que els àtoms de carboni d'aquest enllaç tinguin els nombres més baixos possibles. Si l'enllaç múltiple és equidistant als dos extrems de la cadena, la numeració comença a partir de l'extrem més proper a la primera ramificació.

**5.** **S'indica la posició de l'enllaç múltiple** mitjançant el nombre del primer carboni de l'enllaç.

**6.** **Si hi ha més d'un enllaç múltiple**, es numeren a partir de l'extrem més proper al primer enllaç múltiple. Si un doble i un triple enllaç es troben equidistants als extrems de la cadena, el doble enllaç rebrà el nombre més petit.

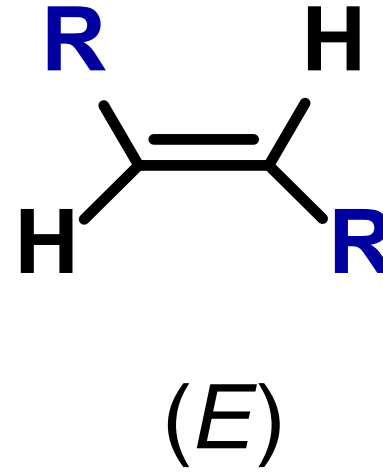
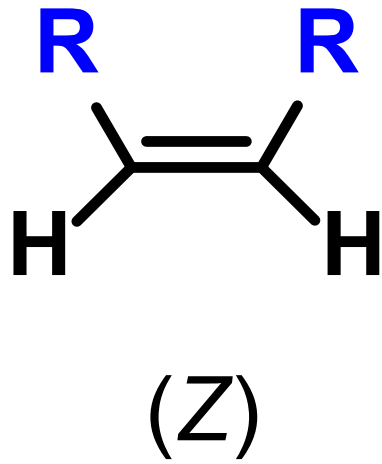


# ALQUENOS/ALQUENS ALQUINOS/ALQUINS

$\begin{array}{cccccc} & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ & \text{CH}_3 & -\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & =\text{CH}_2 \\ &   & & & & \\ & \text{CH}_3 & & & & \end{array}$	4-Metilpent-1-eno (4-Metil-1-penteno)
$\begin{array}{ccccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & \text{CH}_2 & =\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH}_3 \\ & & & &   &   & & \\ & & & & \text{CH}_3 & \text{CH}_3 & & \end{array}$	4,5-Dimetilhept-1-eno (4,5-Dimetil-1-hepteno)
$\begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ & \text{CH}_3 & -\text{CH} & -\text{CH} & =\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH}_3 \\ & &   & & & & \\ & & \text{CH}_3 & & & & \end{array}$	2-Metilhex-3-eno (2-Metil-3-hexeno)
$\begin{array}{cccccc} & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ & \text{CH}_3 & -\text{CH} & =\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & =\text{CH}_2 \end{array}$	Hexa-1,4-dieno (1,4-Hexadieno)
$\begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ & \text{CH}_2 & =\text{C} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & -\text{CH} & =\text{CH}_2 \\ & &   & &   & & \\ & & \text{CH}_3 & & \text{CH}_3 & & \end{array}$	2,4-Dimetilhexa-1,5-dieno (2,4-Dimetil-1,5-hexadieno)
$\begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ & \text{CH}_2 & =\text{C}(\text{CH}_3) & \text{CH}_2 & \text{CH}_2 & \text{CH}_2 & \text{CH}_3 \end{array}$	2-Metilhex-1-eno (2-Metil-1-hexeno)

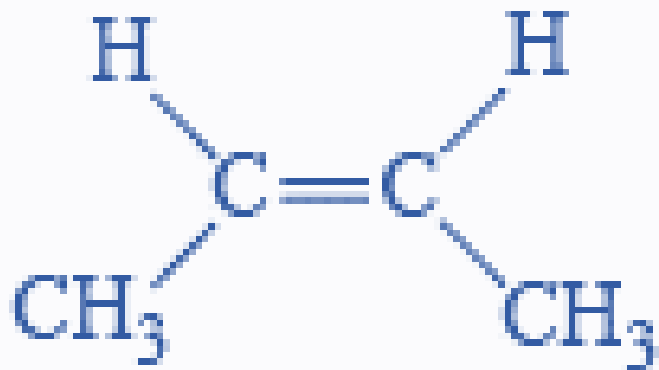
$\begin{array}{cccccc} & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ & \text{CH}_3 & -\text{CH}_2 & -\text{C} & \equiv\text{C} & -\text{CH}_3 \end{array}$	Pent-2-ino (2-Pentino)
$\begin{array}{ccccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & \text{HC} & \equiv\text{C} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & -\text{CH}_3 \\ & & & &   & &   & \\ & & & & \text{CH}_3 & & \text{CH}_3 & \end{array}$	4,6-Dimetilhept-1-ino (4,6-Dimetil-1-heptino)
$\begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ & \text{CH}_3 & -\text{CH} & -\text{C} & \equiv\text{C} & -\text{CH}_2 & -\text{CH}_3 \\ & &   & & & & \\ & & \text{CH}_3 & & & & \end{array}$	2-Metilhex-3-ino (2-Metil-3-hexino)
$\begin{array}{cccccc} & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ & \text{CH}_3 & -\text{C} & \equiv\text{C} & -\text{CH}_2 & -\text{C} & \equiv\text{CH} \end{array}$	Hexa-1,4-diino (1,4-Hexadiino)
$\begin{array}{cccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ & \text{CH} & \equiv\text{C} & -\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{CH} & -\text{CH}_2 & -\text{C} & \equiv\text{CH} \\ & & &   & &   & & & \\ & & & \text{CH}_3 & & \text{CH}_3 & & & \end{array}$	3,5-Dimetilocta-1,7-diino (3,5-Dimetil-1,7-octadiino)
$\begin{array}{ccccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & \text{CH} & \equiv\text{C} & \text{CH}_2 & \text{C} & \equiv\text{C} & \text{CH}(\text{CH}_3) & \text{CH}_3 \end{array}$	6-Metilhepta-1,4-diino (6-Metil-1,4-heptadiino)

## ISOMERIA GEOMÈTRICA en alquens

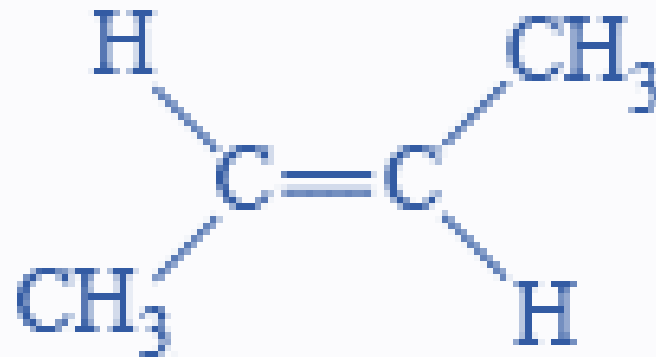


Ens indica  
l'orientació  
relativa dels  
substituents  
d'un doble  
enllaç.

## ISOMERIA GEOMÈTRICA en alquens



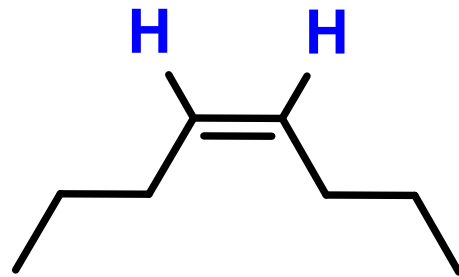
(a) *cis*-2-Butene



(b) *trans*-2-Butene

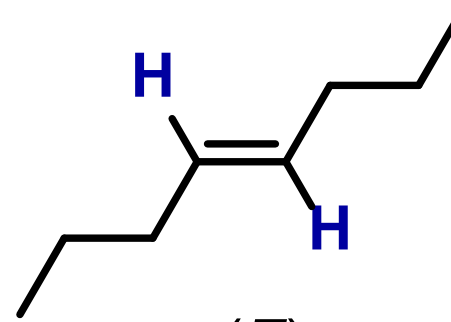
Ens indica  
l'orientació  
relativa dels  
substituents  
d'un doble  
enllaç.

# ISOMERIA GEOMÈTRICA en alquens



(Z)

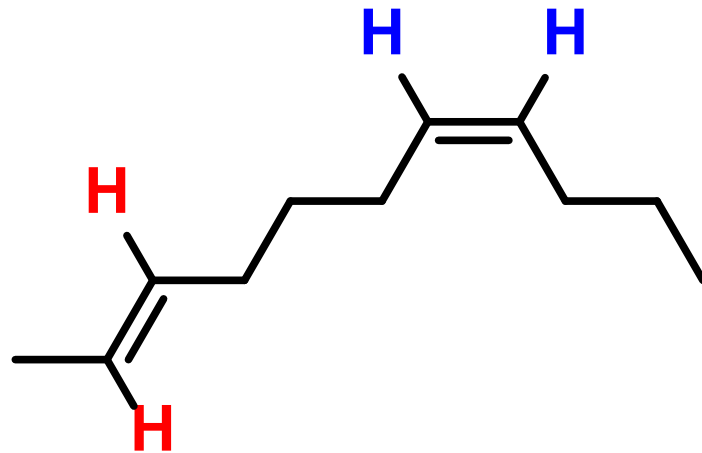
(Z)-oct-4-ene



(E)

(E)-oct-4-ene

# ISOMERIA GEOMÈTRICA en alquens

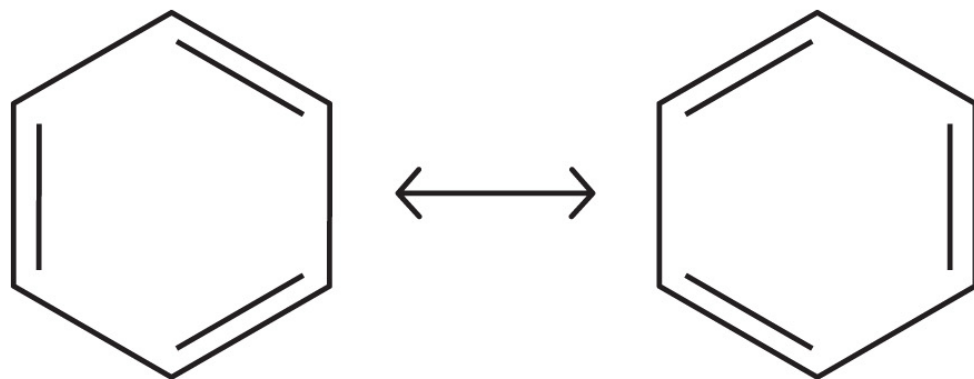


(2E,7Z)-undeca-2,7-diene

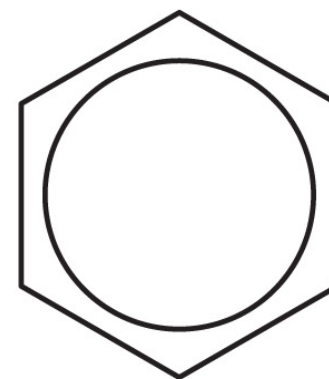
(2E,7Z)-undeca-2,7-dieno

(2E,7Z)-undeca-2,7-diè

# HIDROCARBURS AROMÀTICS



Kekulé structures



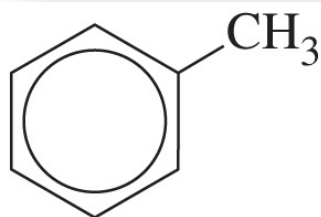
Simplified  
molecular orbital  
representation

# HIDROCARBURS AROMÀTICS

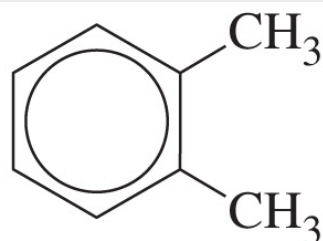
Se'ls coneix també amb el nom genèric d'**ARENS**.

Són el benzè i tots els seus derivats i, depenent del nombre de nuclis benzènics, poden ser

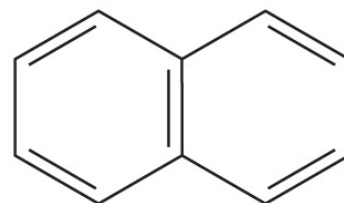
**monocíclics o policíclics.**



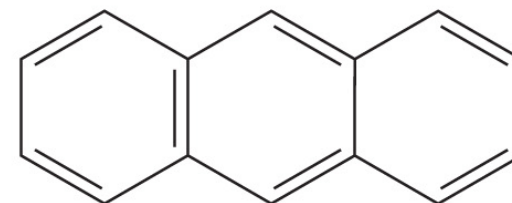
Toluene



*o*-Xylene



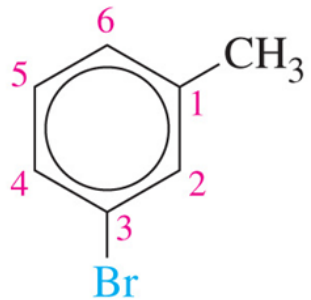
Naphthalene



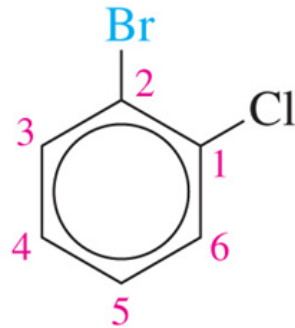
Anthracene

# HIDROCARBURS AROMÀTICS

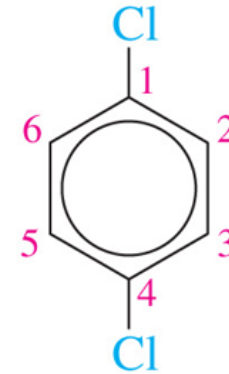
El més senzill és el benzè i tots els altres s'anomenen fent-los derivar d'aquest.



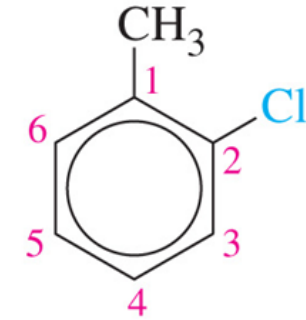
3-Bromotoluene  
(*m*-bromotoluene)



2-Bromochlorobenzene  
(*o*-bromochlorobenzene)



1,4-Dichlorobenzene  
(*p*-dichlorobenzene)



2-Chlorotoluene  
(*o*-chlorotoluene)

Si es tracta d'un derivat monosubstituit s'anomena el substituent com radical seguit de la paraula *benzè*.

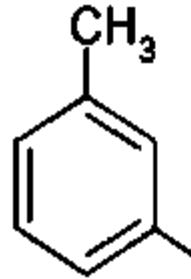
Si el derivat benzènic té dos o més substituents, es numeren els àtoms de carboni de manera que als que tenen substituent els corresponga el nombre més baix possible.

Quan només hi ha dos substituents, les posicions 1,2-, 1,3- i 1,4 es pot indicar per *orto*- (*o*-), *meta*- (*m*-) i *para*- (*p*-), respectivament. Alguns d'aquests compostos conserven el nom vulgar, com s'indica en els exemples següents.

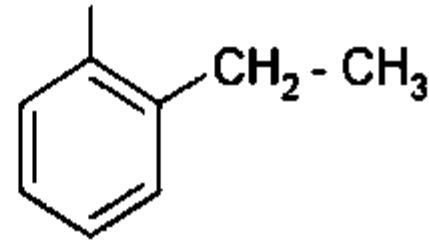


# HIDROCARBURS AROMÀTICS

## Radicals aromàtics



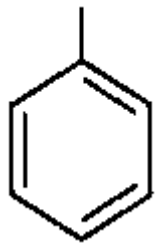
**Tolil**



**2-etilfenil**

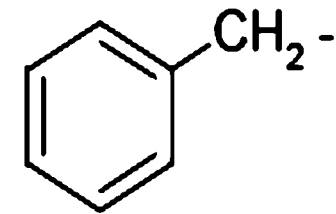
El nom genèric amb què es coneixen aquests compostos és **Aril (Ar-)**.

Per als radicals que tenen la valència lliure en la cadena lateral es manté el **nom vulgar**.



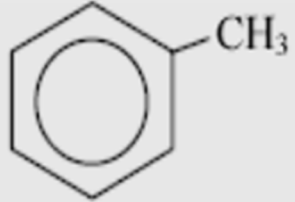
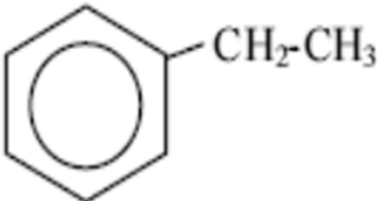
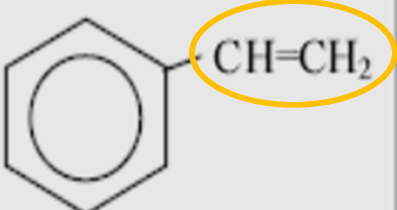
**Fenil**

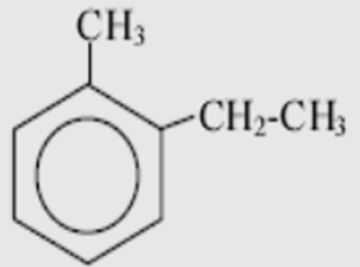
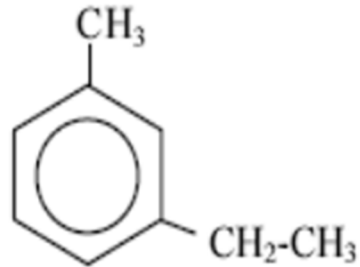
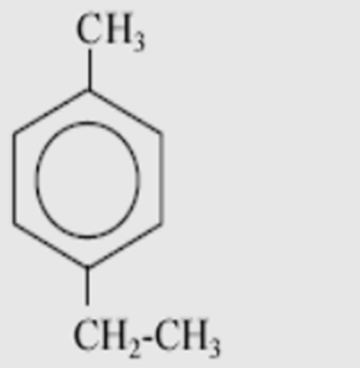
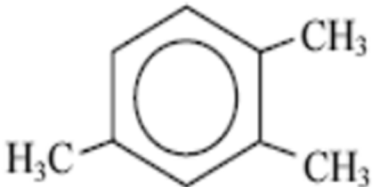
El radical obtingut en perdre el benzè un dels seus hidrògens ( $C_6H_5 -$ ) rep el nom de **fenil**. Tots els altres radicals aromàtics s'anomenen com a radicals *fenil* substituïts, assignant-hi el nombre 1 al carboni amb la valència lliure. Alguns radicals d'hidrocarburs aromàtics com el toluè, el xilè o el cumé s'anomenen el sufix *-il*.



**Bencil**

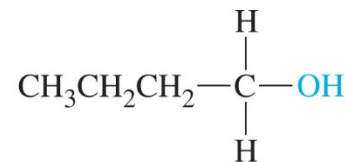
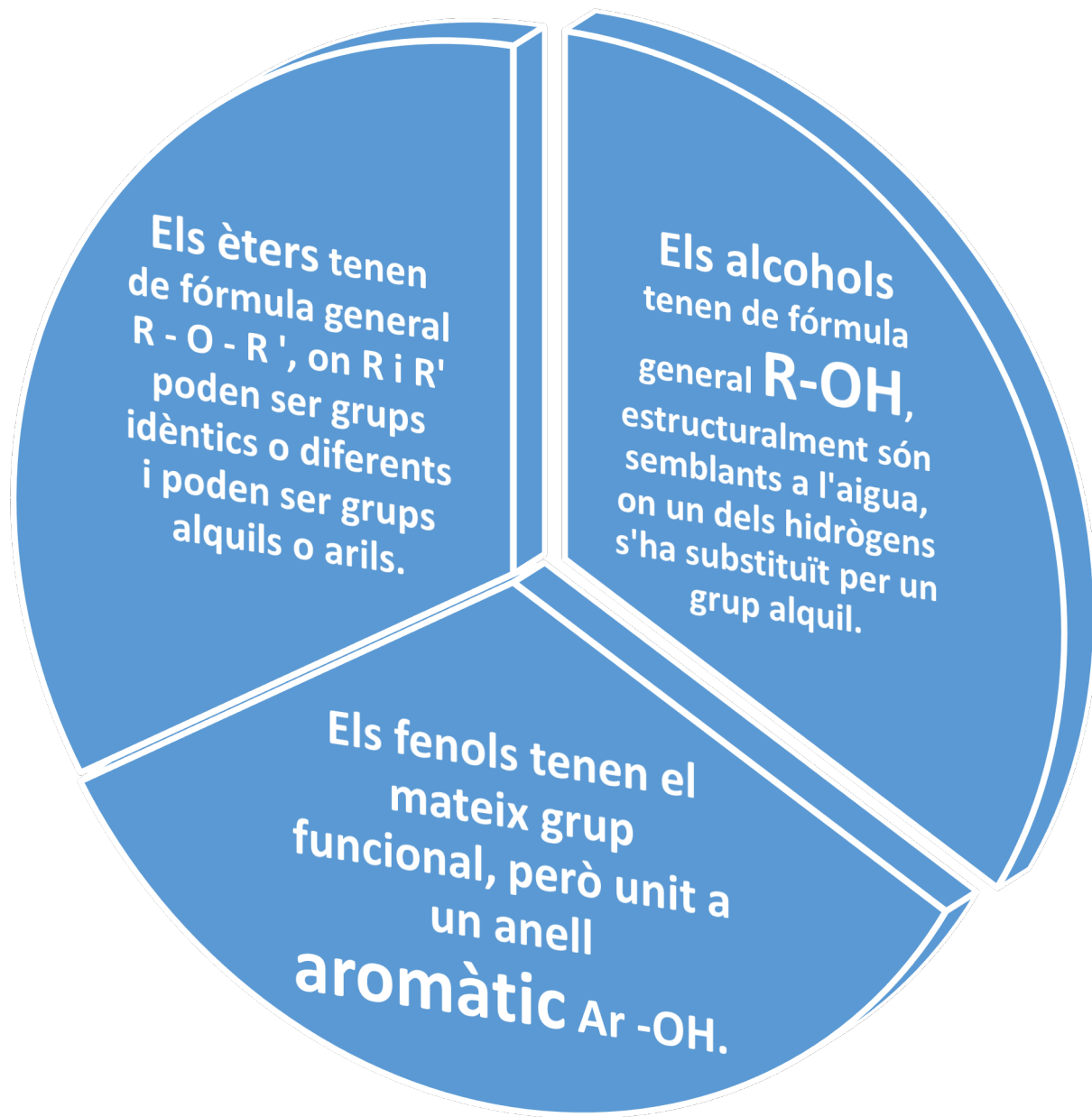
# EXEMPLES

 ( $C_6H_5-CH_3$ )	Metilbenceno (Tolueno)
 ( $C_6H_5-CH_2CH_3$ )	Etilbenceno
 ( $C_6H_5-CH=CH_2$ )	Vinilbenceno Etenilbenceno (Estireno)

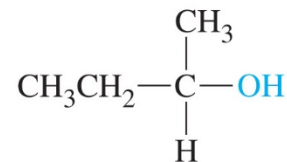
	1-Etil-2-metilbenceno <i>o</i> -Etilmetilbenceno
	1-Etil-3-metilbenceno <i>m</i> -Etilmetilbenceno
	1-Etil-4-metilbenceno <i>p</i> -Etilmetilbenceno
	1,2,4-Trimetilbenceno

# FUNCIONS OXIGENADES I

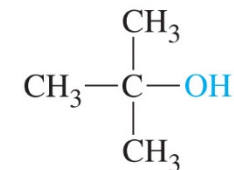
# ALCOHOLS, FENOLS i èters



1-Butanol  
(butyl alcohol)  
(a *primary* alcohol)



2-Butanol  
(*s*-butyl alcohol)  
(a *secondary* alcohol)

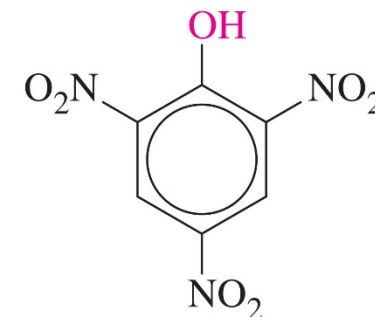


Methyl-2-propanol  
(*t*-butyl alcohol)  
(a *tertiary* alcohol)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



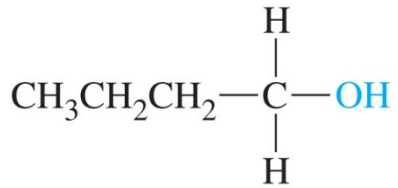
Phenol  
(carbolic acid)



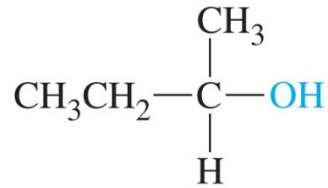
2,4,6-Trinitrophenol  
(picric acid)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

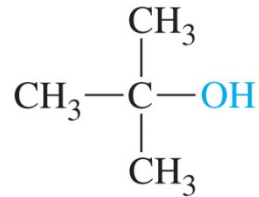
# FUNCIONS OXIGENADES I



1-Butanol  
(butyl alcohol)  
(a *primary* alcohol)

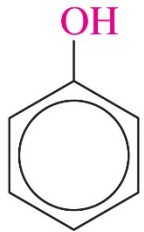


2-Butanol  
(*s*-butyl alcohol)  
(a *secondary* alcohol)

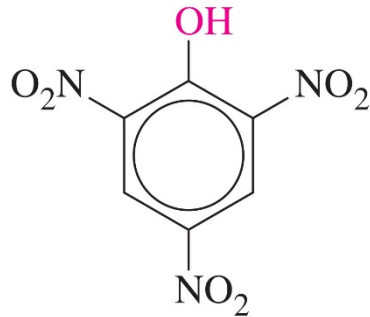


Methyl-2-propanol  
(*t*-butyl alcohol)  
(a *tertiary* alcohol)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



Phenol  
(carbolic acid)



2,4,6-Trinitrophenol  
(picric acid)

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

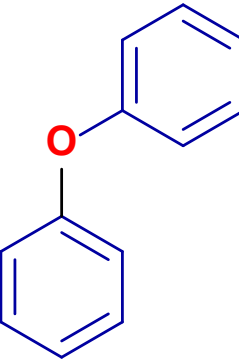
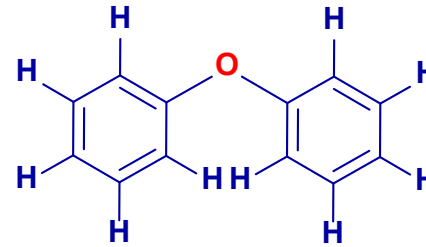
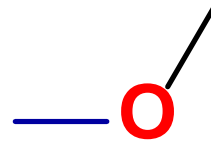
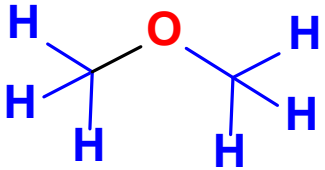
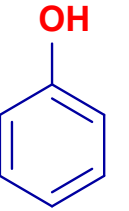
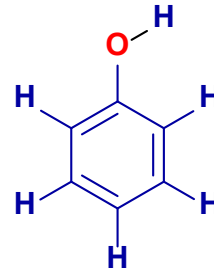
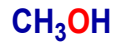
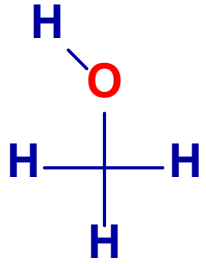
## ALCOHOLS, FENOLS i èters

Els alcohols, igual que els halogenurs d'alquil, es classifiquen o divideixen en **primaris, secundaris i terciaris**, segons el nombre de grups hidrocarbonats units a l'àtom de carboni a què va enllaçat el grup hidroxil.

En la nomenclatura d'alcohols se solen emprar noms vulgars per als compostos més senzills (C1 - C4). Aquests noms es formen amb la paraula *alcohol*.

# FUNCIONS OXIGENADES I

## ESTRUCTURES



# FUNCIONS OXIGENADES I

## Regles per a anomenar alcohols

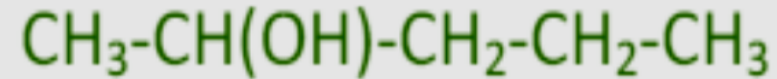
**1.** Es busca la cadena més llarga que incloga el grup hidroxil. La terminació o de l'hidrocarbur es canvia per *-ol*.

**2.** La cadena es numera de manera que al grup funcional li corresponga **el menor nombre possible**. Si hi ha més d'un grup hidroxil en la cadena, s'empren els prefixos *di-*, *tri-*, etc.

**3.** Quan l'alcohol no és el grup funcional principal s'anomena com ***hidroxi***, precedit del seu nombre localitzador.

# FUNCIONS OXIGENADES I **Exemples**

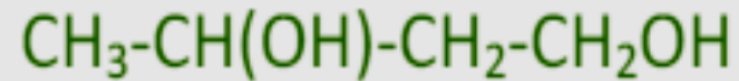
pentan-2-ol



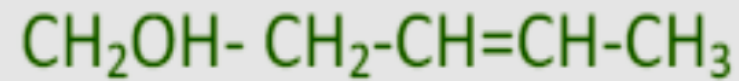
3-metilhexan-1-ol



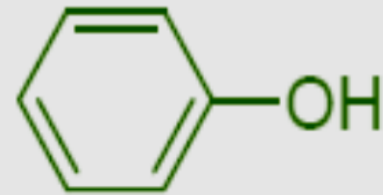
butano-1,3-diol



pent-3-en-1-ol



fenol (hidroxibenceno)



# FUNCIONS OXIGENADES | Exemples

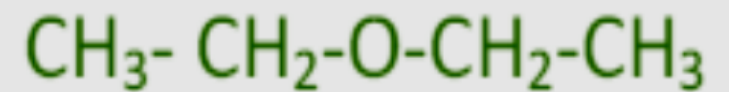
metoxietano

etil metil éter



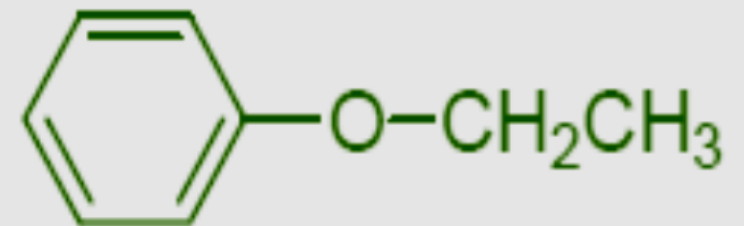
etoxietano

dietil éter



etoxibenceno

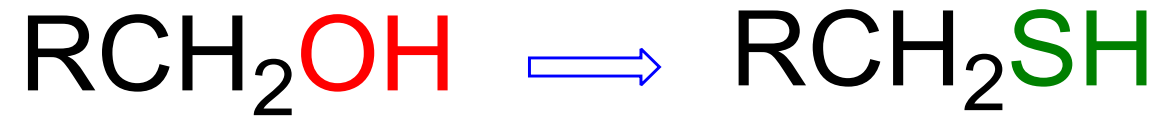
etil fenil éter





# FUNCIONS OXIGENADES I **Nomenclatura de tiols**

Els compostos que tenen **sofre** en comptes d'oxigen s'anomenen **tiols**. Les regles de nomenclatura són les mateixes que per als alcohols, només hi canvien les terminacions o les prefixes segons es mostra al costat.



Alcohols



Tiols

Éters

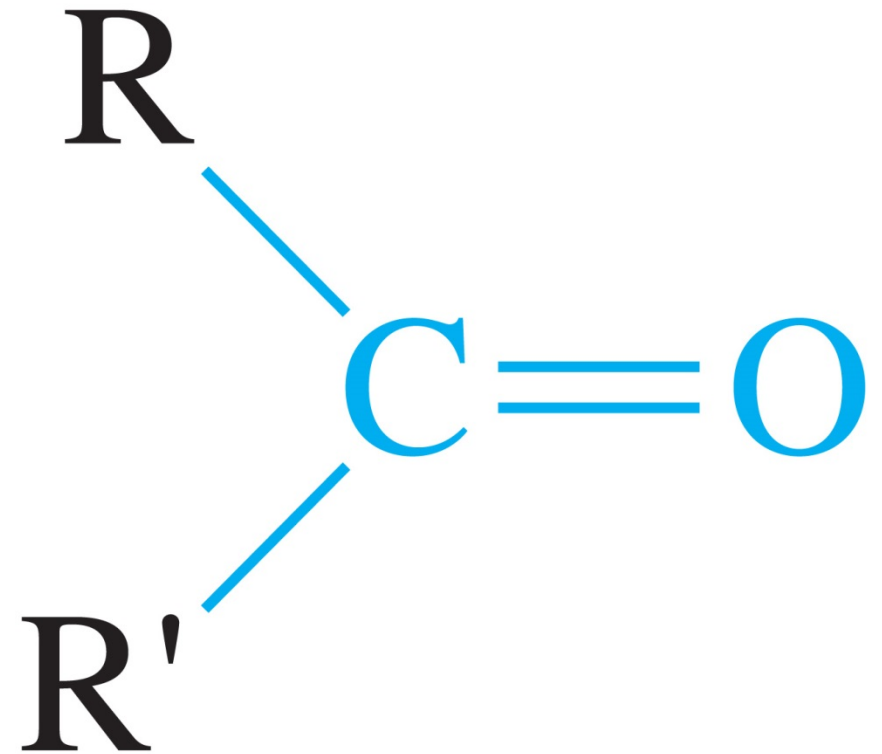


Tioèters

## FUNCIONS OXIGENADES II **ALDEHIDS I CETONES**

El grup funcional es coneix com a grup **carbonil**, i està format per un carboni i un oxigen units per enllaç doble.

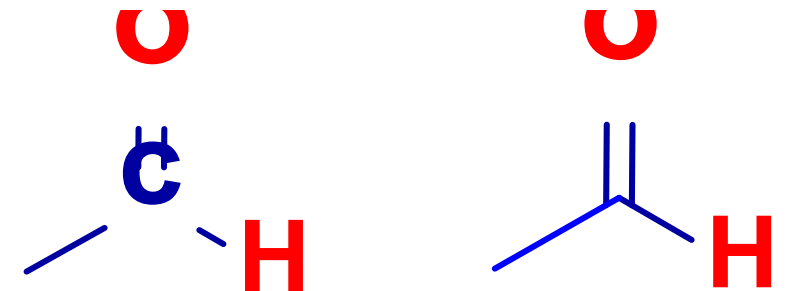
Quan el grup carbonil es troba en un **extrem de la cadena**, tenim els **aldehids** (en aquest cas, el carboni estarà unit a un àtom d'hidrogen i un grup alquil o aril). Quan el grup carbonil es troba dins de la **cadena tindrem les cetones** (per tant, el carboni estarà unit pels dos costats en grups alquil o arils).



## FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES

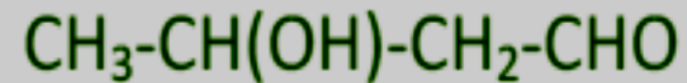
Per a anomenar els aldehids s'utilitza el nom de l'hidrocarbur amb un nombre igual d'àtoms de carboni i el sufix *-al*, (la posició del grup aldehyd no cal indicar-la per trobar-se sempre en un extrem).

Quan en un compost hi ha altres funcions que tenen prioritats sobre la funció aldehyd, s'utilitza el prefix *formil-* per a designar el grup CHO, que es considera aleshores com un substituent.

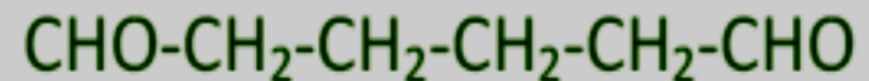


# FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES

3-hidroxiбутanal



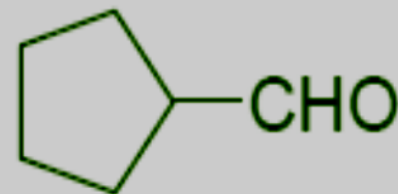
hexanodial



pent-2-enal



ciclopentanocarbaldehído



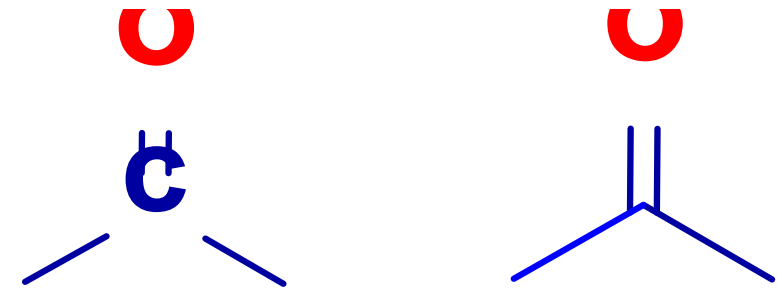
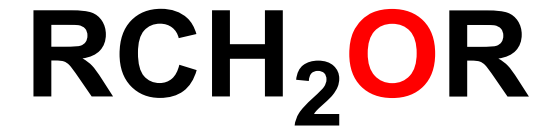


# FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES

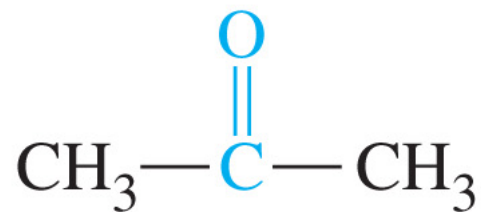
Per a anomenar les cetones s'utilitza el sufix **-ona**.

(Les més senzilles també es coneixen pel nom vulgar, que consisteix a anomenar els dos radicals units al grup carbonil seguits de la paraula *cetona*).

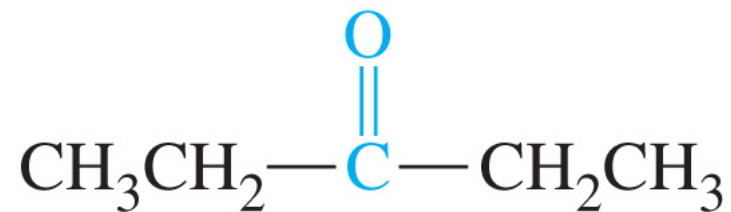
La **posició** del grup cetona es numera començant **pel carboni més pròxim** al de la cetona, de manera que en el grup carbonil li corresponga el nombre **més baix possible** (la cetona més senzilla, la propanona, conserva el nom vulgar *acetona*).



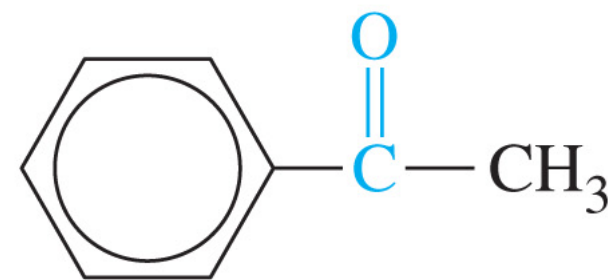
# FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES



Propanone  
(acetone)



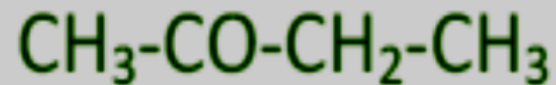
3-Pentanone  
(diethyl ketone)



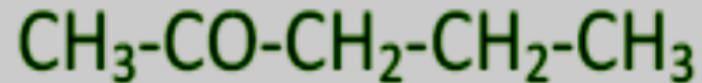
1-Phenylethanone  
(acetophenone)

# FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES

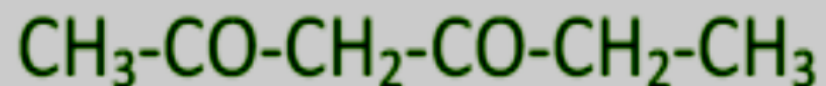
butanona <sup>(1)</sup>



pentan-2-ona



hexano-2,4-diona



4-oxoheptanal

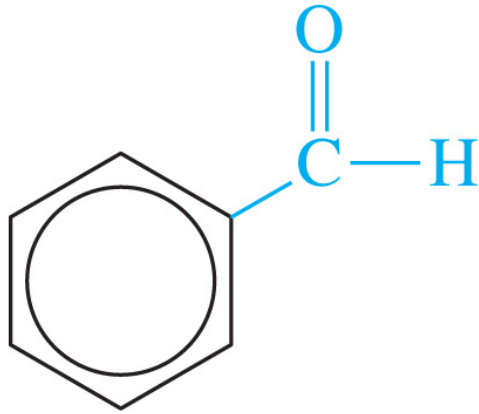


4-oxoheptanal

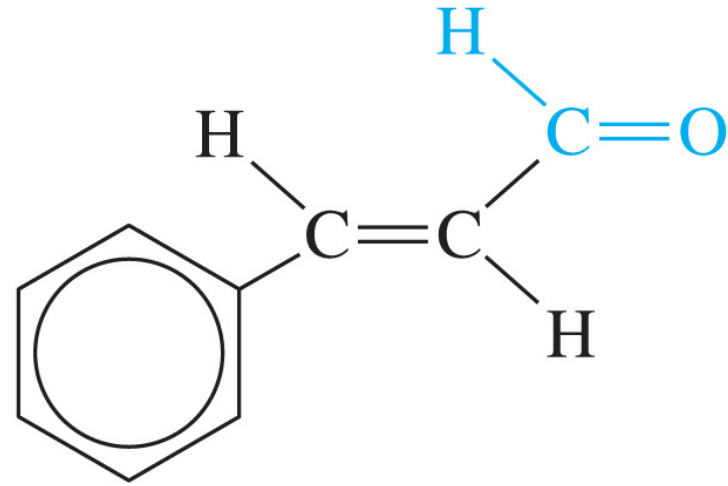




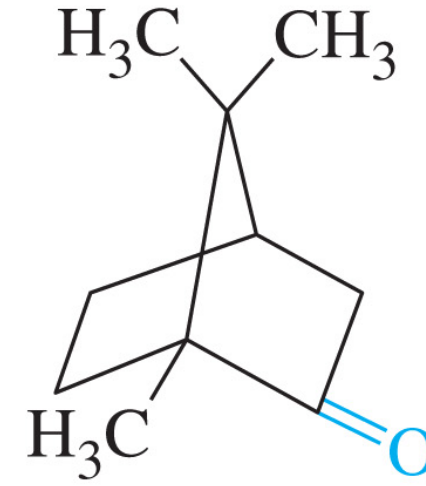
# FUNCIONS OXIGENADES II ALDEHIDS I CETONES



Benzaldehyde  
(almonds)



Cinnamaldehyde  
(cinnamon)

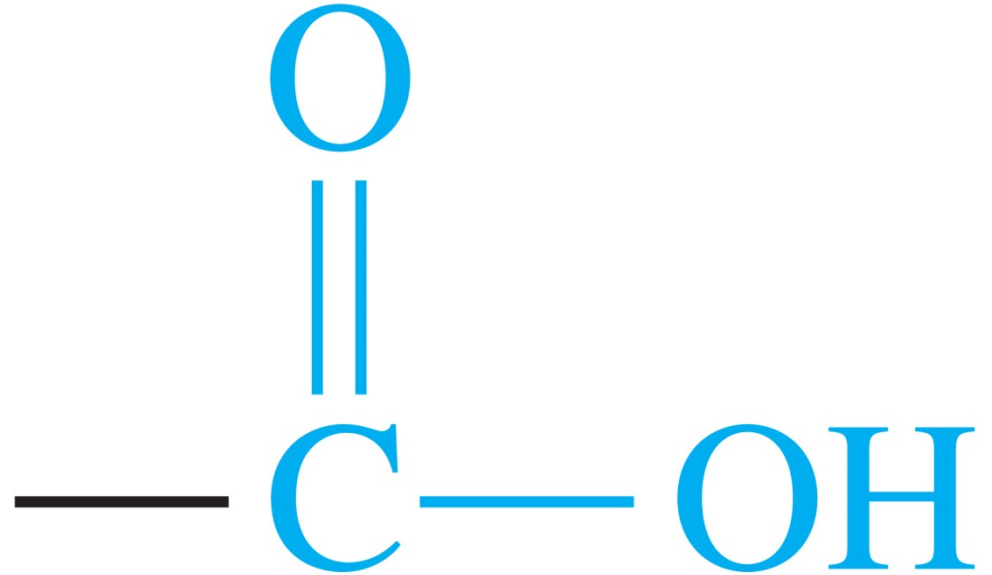


Camphor  
(obtained from  
camphor tree)

# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

Estan formats per carboni, hidrogen i oxigen, on un dels hidrogens presenta un enllaç doble i l'altre, senzill.

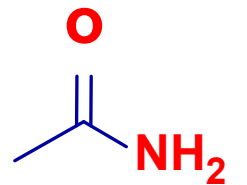
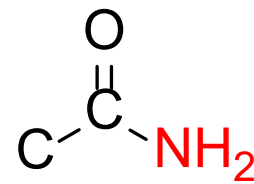
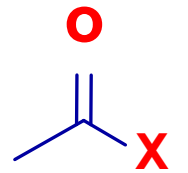
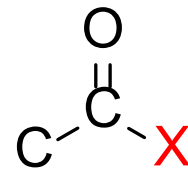
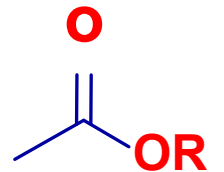
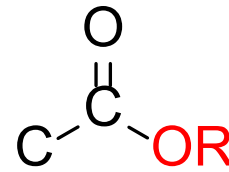
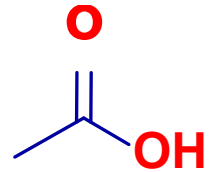
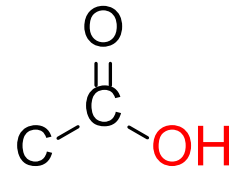
**És el grup funcional de més importància.**



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS

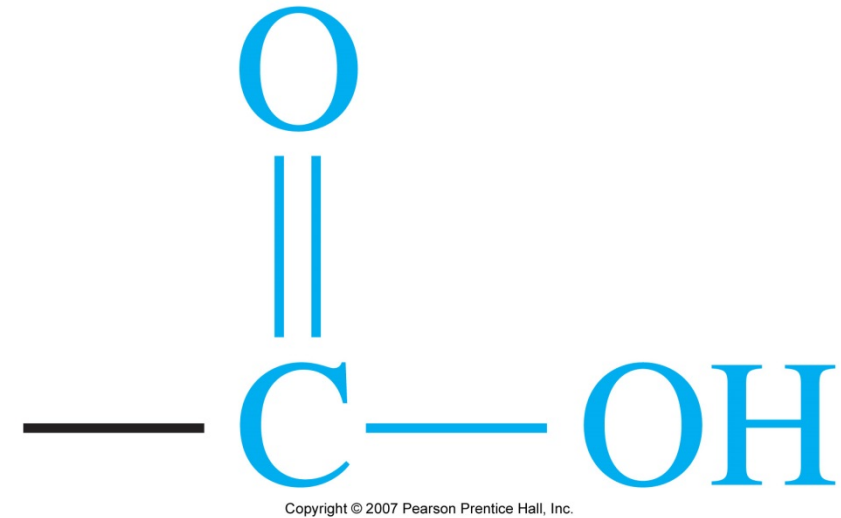
Es consideren “derivats” els èsters, halurs d'àcid i amines. Funcions on s'ha substituït el grup hidroxil per un grup alquil alcohol, un halogen o una amina o alquil amina.



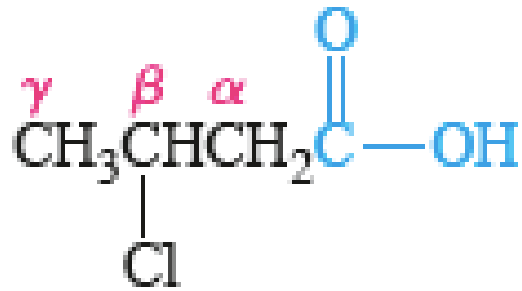
## FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS

Per a anomenar-los, es considera com a **cadena principal** la del nombre major d'àtoms de carboni que **continga el grup àcid**, i es numera començant pel carboni del grup carboxílic.

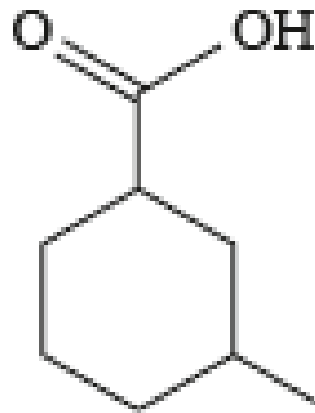
S'utilitza com a prefix el nom de l'hidrocarbur amb un nombre igual d'àtoms de carboni i, com a sufix, la terminació **-ic** o **-oico**, tot això precedit de la paraula *àcid*.



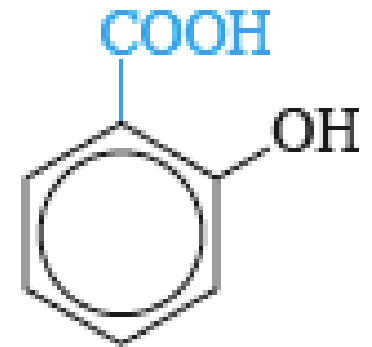
# FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS



3-Chlorobutanoic acid  
β-chlorobutyric acid



3-methylcyclohexanecarboxylic acid



2-Hydroxybenzoic acid  
o-hydroxybenzoic acid  
(also salicylic acid)

# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

Entre els àcids carboxílics, hi ha molts que es coneixen pel seu nom vulgar.

En aquells casos en què el nom sistemàtic **no siga còmode** (generalment quan hi ha radicals cíclics o en el cas que hi haja diversos grups àcids en la molècula) es considera **el grup carboxílic com a substituent** i s'anomena utilitzant el prefix **carboxi-** o el sufix **-carboxílic**.



**Àcid metanoic "fòrmic"**



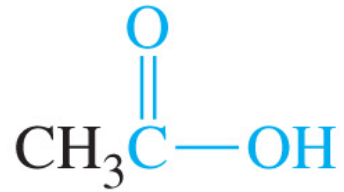
**Àcid etanoic "acètic"**



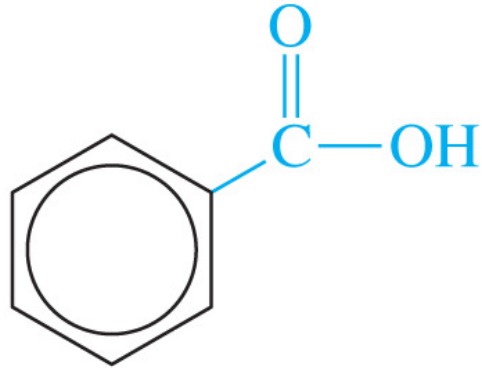
**Àcid "làctic"**

**(Àcid 2-hidroxipropanoic)**

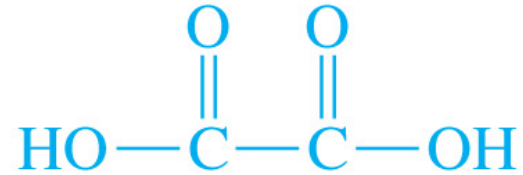
# FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS



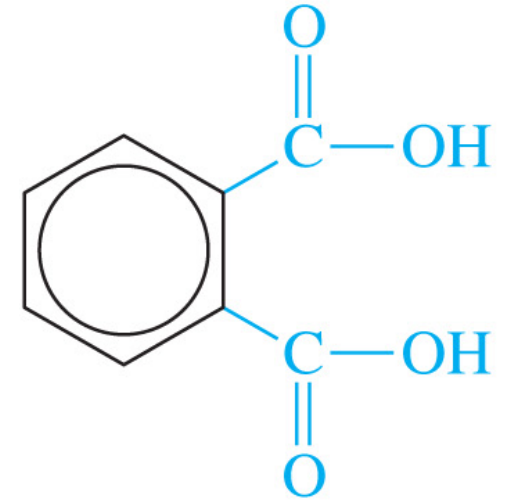
Acetic acid  
(an aliphatic acid)



Benzoic acid  
(an aromatic acid)



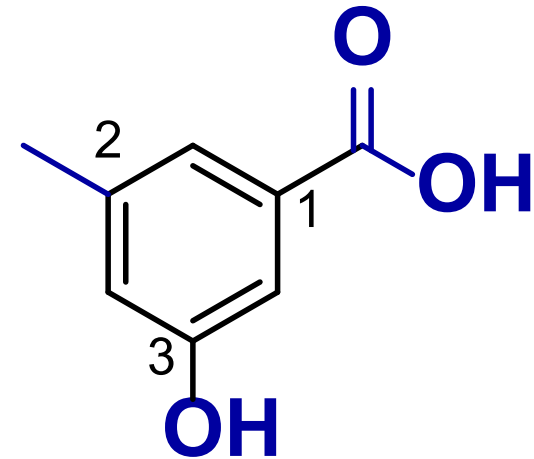
Oxalic acid  
(an aliphatic  
dicarboxylic acid)



*o*-Phthalic acid  
(an aromatic  
dicarboxylic acid)

Els àcids **carboxílics aromàtics** s'anomenen igual que els alifàtics.

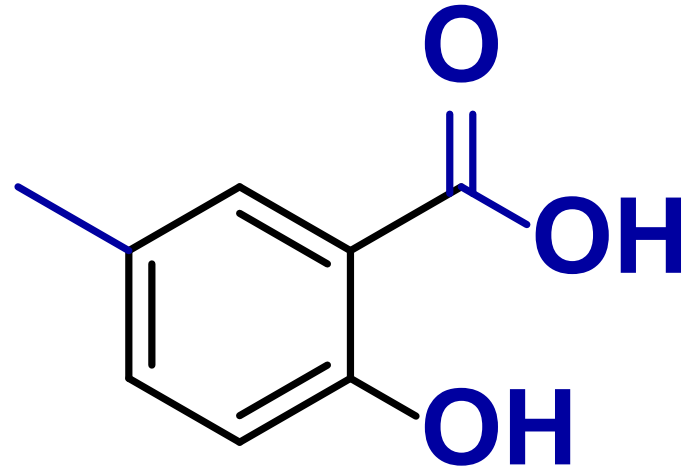
En cas que hi haja **substituents en l'anell aromàtic**, es numeren els àtoms de carboni donant **el nombre 1 al carboni que té grup carboxílic**. La resta es numera de manera que els substituents tinguen els **nombres més baixos possibles**.



**3-hidroxi-5-metilbenzoic àcid**



# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**



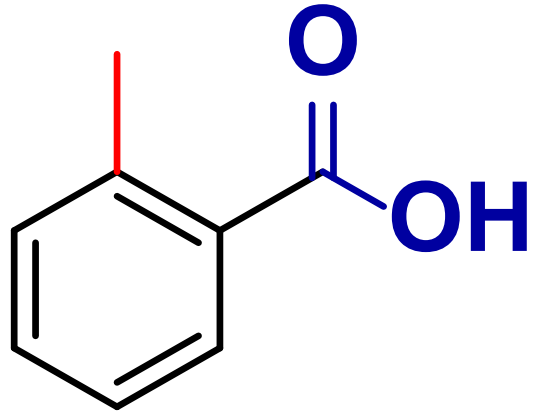
**2-hidroxi-5-metilbenzoic àcid**

**vs**

**6-hidroxi-3-metilbenzoic àcid**

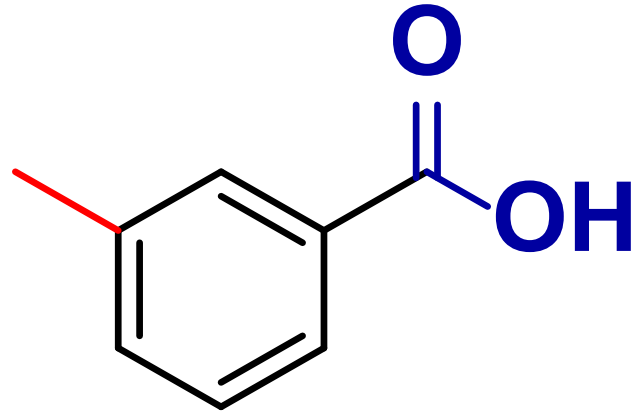
# FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS

Àcid 2-metilbenzoic



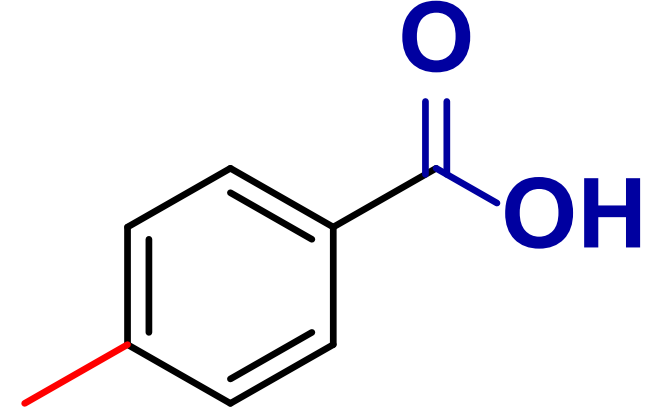
orto

Àcid 3-metilbenzoic



meta

Àcid 4-metilbenzoic



para

Àcid *o*-metilbenzoic

Àcid *m*-metilbenzoic

Àcid *p*-metilbenzoic

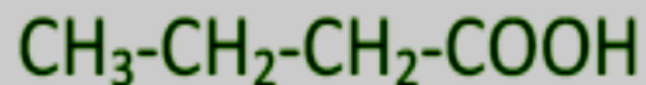
## FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

**Oxàlic, malònic,  
succínic, glutàric,  
adípic, pimèlic, subèric,  
azelaic, sebàcic.**

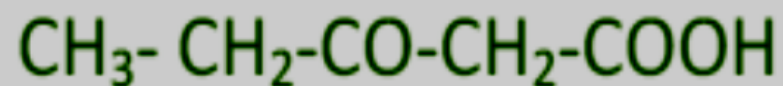


# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

ácido butanoico



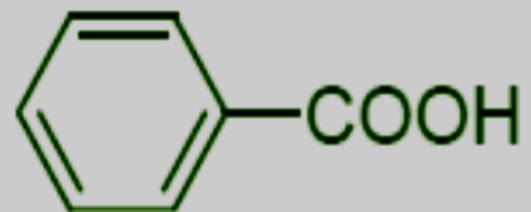
ácido 3-oxopentanoico



ácido 2-formilbutanodioico



ácido bencenocarboxílico  
(ácido benzoico)



(ácido benzoico)



## ESTERS

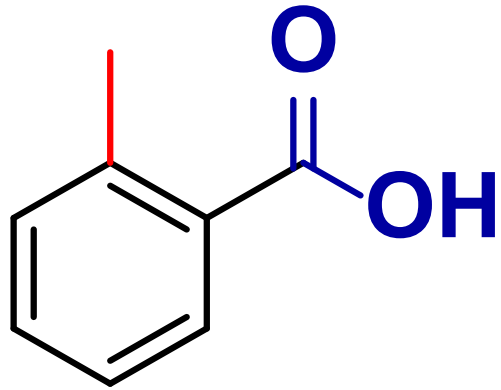


Resulten de substituir l'àtom d'hidrogen del grup àcid per un radical alquil o aril.

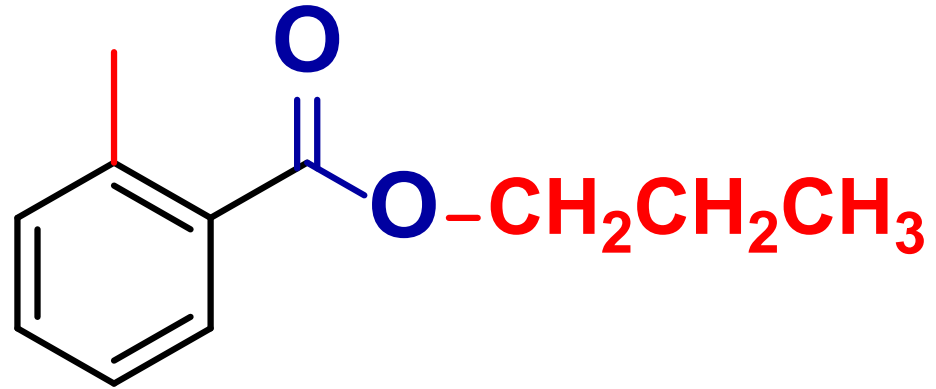
S'anomenen substituint el sufix **-ic** pel sufix **-at**, seguit del nom del radical que ha substituït l'hidrogen i **eliminant la paraula àcid**.



# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

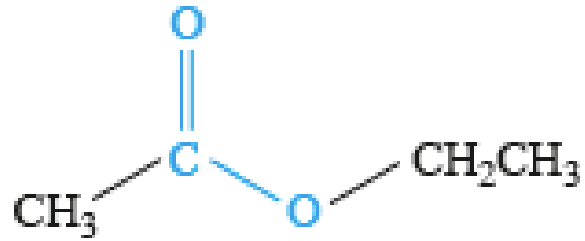


Àcid 2-metilbenz**oic**

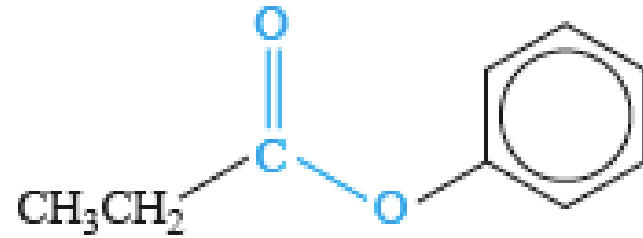


2-metilbenz**oat** *de propil*

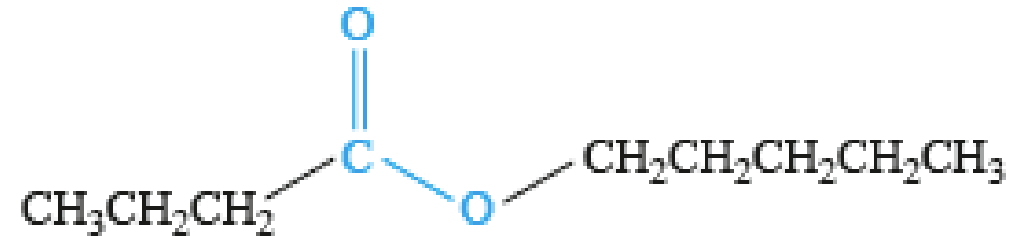
# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**



Ethyl ethanoate  
(ethyl acetate)



Phenyl propanoate  
(phenyl propionate)



Pentyl butanoate  
(pentyl butyrate)

# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

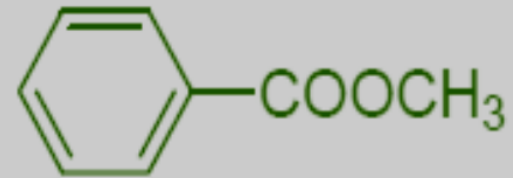
etanoato de propilo

(acetato de propilo)

propanoato de etenilo

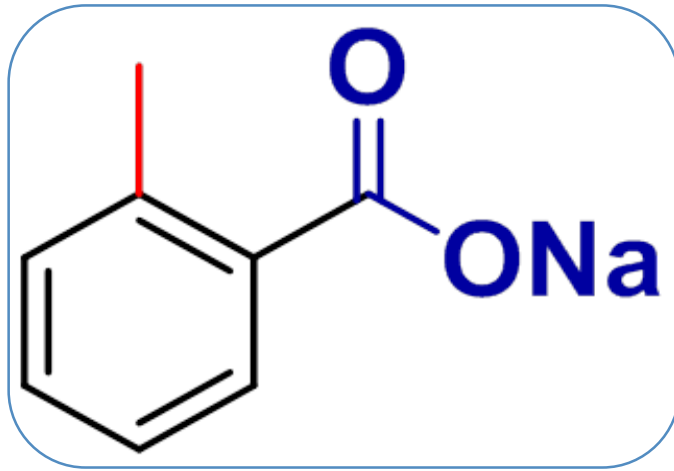
benzoato de metilo

butanoato de fenilo



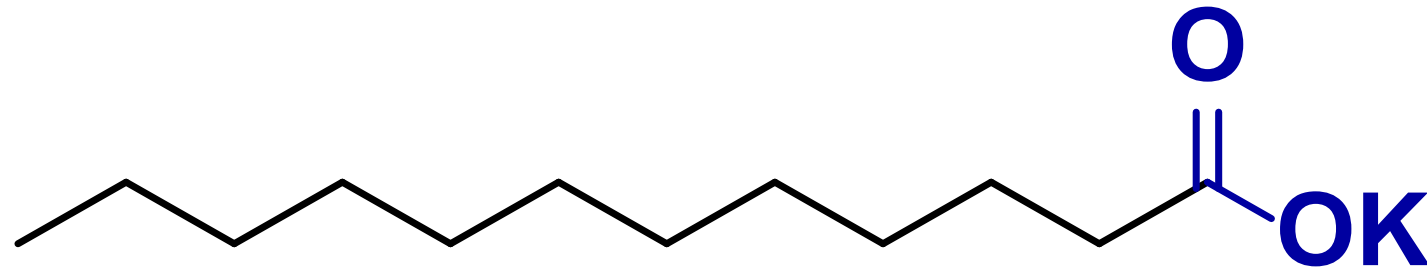


## FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS



2-metilbenz**oat** *de sodi*

**Les sals** dels àcids carboxílics també s'anomenen com a èsters!!!!

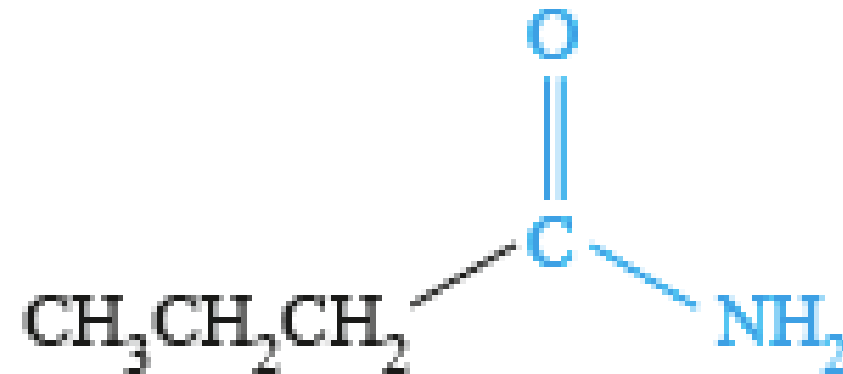


Dodecan**oat** *de potassi*

Resulten de la substitució del grup -OH pel grup -NH<sub>2</sub>.

Com a conseqüència de la substitució dels hidrògens per grups alquils o aril, podem distingir tres tipus d'amides. Les amides primàries s'anomenen canviant la terminació **-ic** pel sufix **-amida** i eliminant la paraula *àcid*.

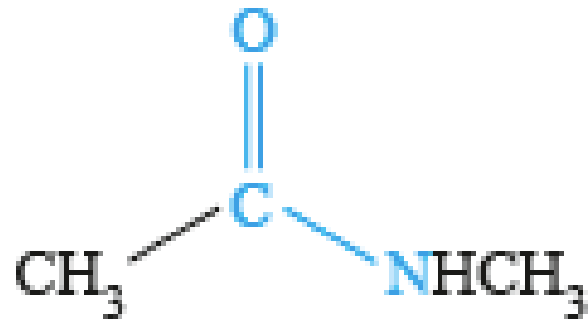
## **AMIDES**



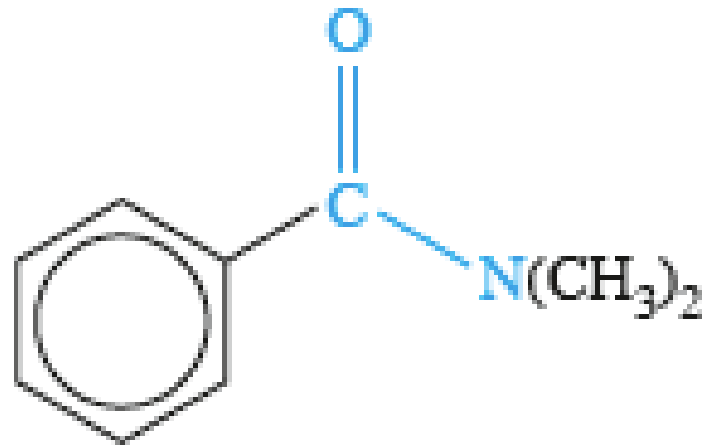
Butanamide

# FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS

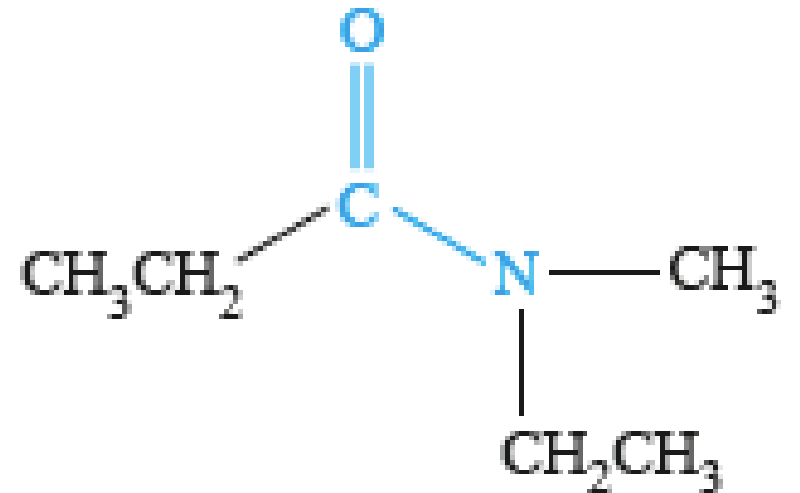
Les amides **secundàries i terciàries** s'anomenen com a derivats **N- o N,N- substituïts** de les amides primàries.



*N*-methylethanamide



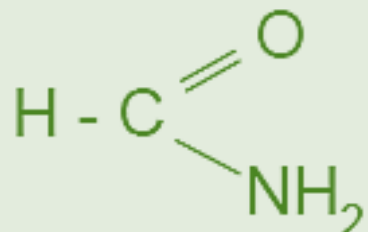
*N,N*-dimethylbenzamide



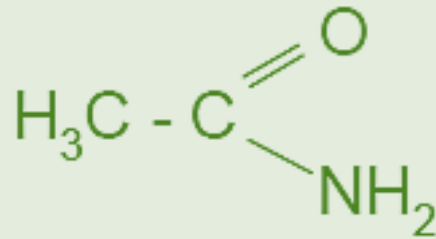
*N*-ethyl-*N*-methylpropanamide

# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS**

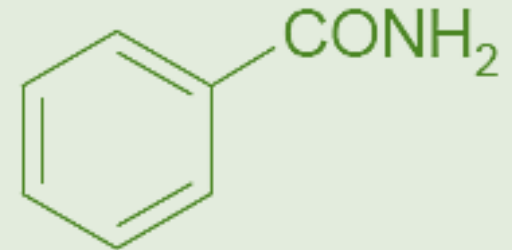
També estan acceptats per la IUPAC els noms vulgars d'aquests compostos.



*Metanamida*  
*formamida*



*Etanamida*  
*Acetamida*



*Benzamida*

# FUNCIONS OXIGENADES III **ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS. AMIDES**

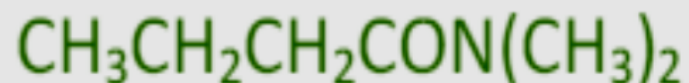
etanamida (acetamida)



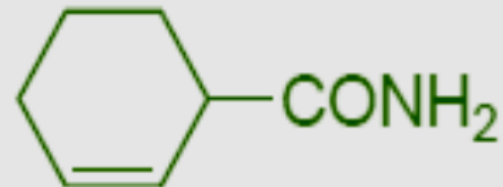
*N*-metilpropanamida



*N,N*-dimetilbutanamida



ciclohex-2-enocarboxamida



àcido 3-carbamoilbutanoico



àcido 3-carbamoilbutanoico

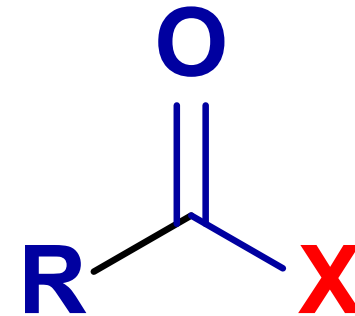


## FUNCIONS OXIGENADES III ACIDS CARBOXÍLICS I DERIVATS

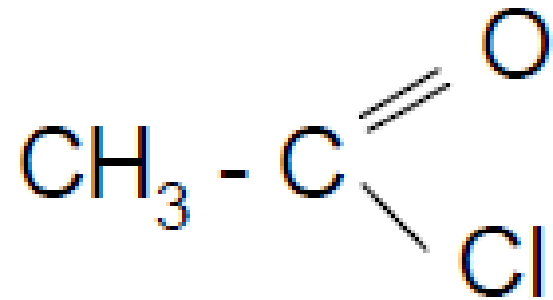
Són derivats dels àcids carboxílics  
on s'ha substituït  
el grup **-OH** de l'àcid per un  
àtom d'halogen.

Per a anomenar-los, se substitueix el  
sufix **-ic** per la terminació **-il**, i la  
paraula **àcid** pel nom de **l'halur**  
corresponent.

### HALURS D'ÀCID

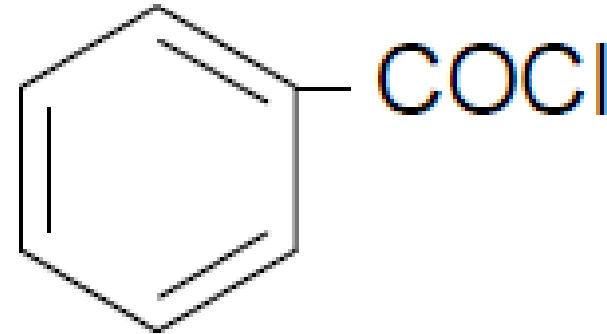


## HALURS D'ÀCID



**Clorur d'acetyl**

(Àcid acètic)

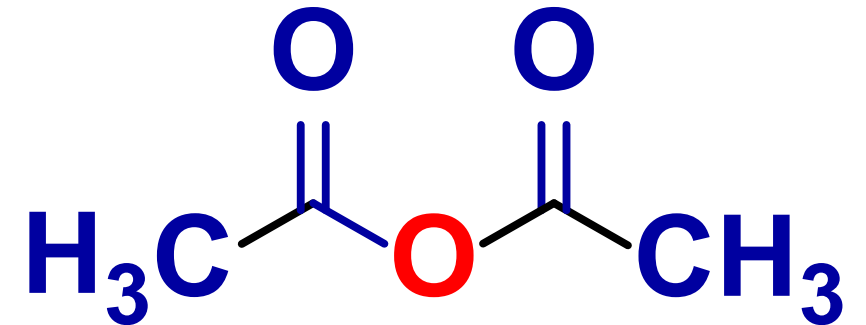


**Clorur de benzoil**

(Àcid benzoic)

## ANHÍDRIDS D'ÀCIDS

Deriven de la condensació dels àcids carboxílics. Per a anomenar-los, **si són simètrics**, se substitueix la paraula ***àcid*** per la paraula ***anhídrid*** i la resta es deixa igual.

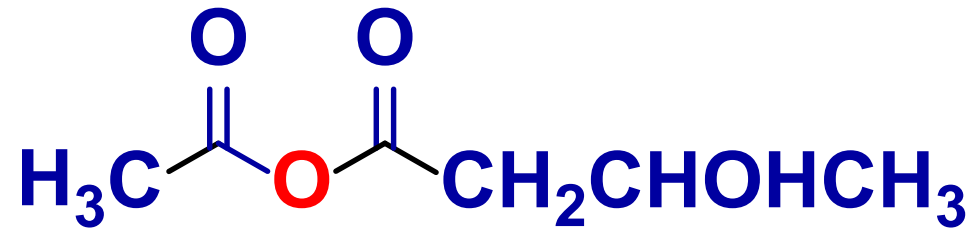


**Anhídrid acètic**



## ANHÍDRIDS D'ÀCIDS

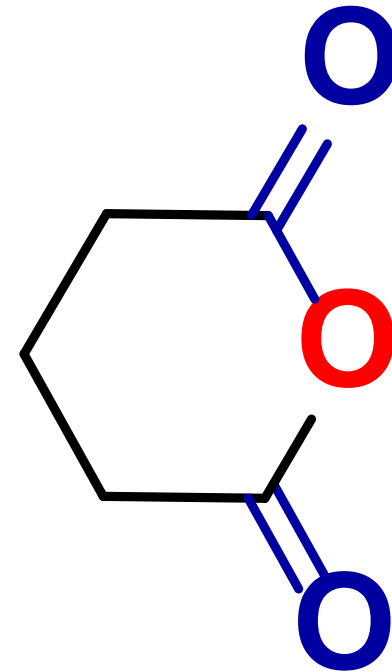
Si es tracta d'un  
**anhídrid mixt**,  
s'anomenen **els dos**  
**àcids dels quals**  
**deriva**  
anteposant la paraula  
*anhídrid*.



**Anhídrid acètic 3-hidroxipropanoic**

## ANHÍDRIDS D'ÀCIDS

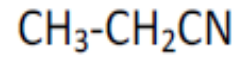
Si es tracta **d'un anhídrid cíclic**  
s'anomenen amb la terminació  
**-dioic**, anteposant la paraula  
***anhídrid***.



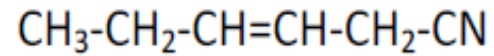
# FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

## NITRILS

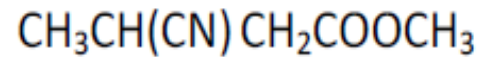
propanonitrilo



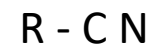
hex-3-enonitrilo



3-cianobutanoato de metilo



Són compostos formats per carboni, hidrogen i nitrogen de fórmula general:



Per a anomenar-los, se substitueix el sufix *-ic* de l'àcid corresponent per la terminació.

# FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

## **NITRILS**

Són compostos formats per carboni, hidrogen i nitrogen de fórmula general R - C N

Per a anomenar-los, se substitueix el sufix **-ic** de l'àcid corresponent per la terminació **-nitril**



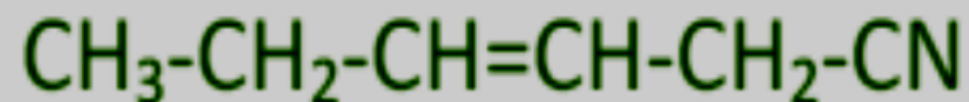
**Propanonitril**

## FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

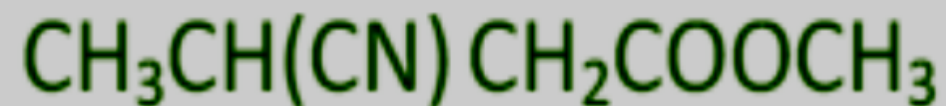
propanonitrilo



hex-3-enonitrilo



3-cianobutanoato de metilo



Quan actuen com a substituents, el prefix  
utilitzat és ***-cian***.

## **AMINES**

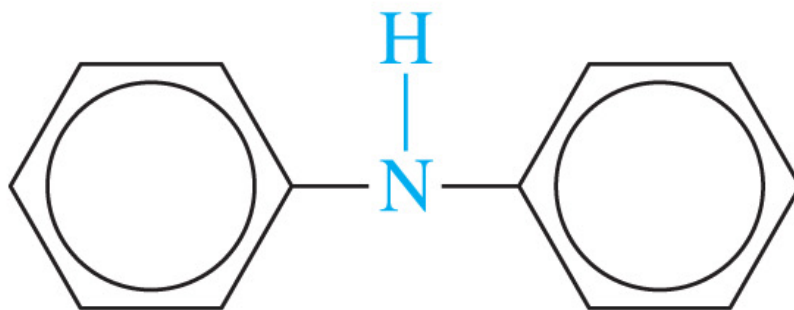
Les amines es poden considerar com a **derivats de l'amoniac** per substitució d'un, dos o tres dels seus hidrògens per radicals alquil o aril, obtenint així els tres tipus d'amines: **primàries, secundàries i terciàries.**

# FUNCIIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

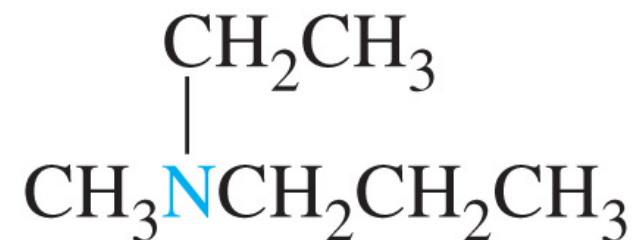
## **AMINES**



Ethylamine  
(a primary amine)



Diphenylamine  
(a secondary amine)



Ethylmethylpropylamine  
(a tertiary amine)

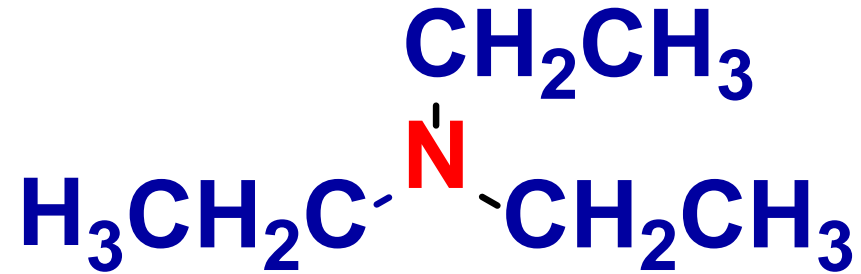
# FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

Per a les amines secundàries i terciàries, si els radicals alquil o aril són iguals s'anomenen de la mateixa manera que les primàries anteposant el prefix **di-**, **tri-**, depenent que siguin secundàries o terciàries.

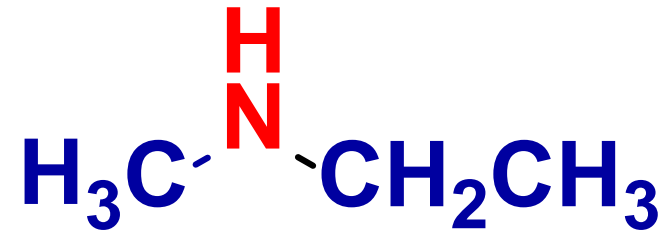
Si els radicals són diferents, es nomenen com derivats **N-** substituïts o **N, N-** **disubstituïts** de l'amina primària (considerada com a principal).



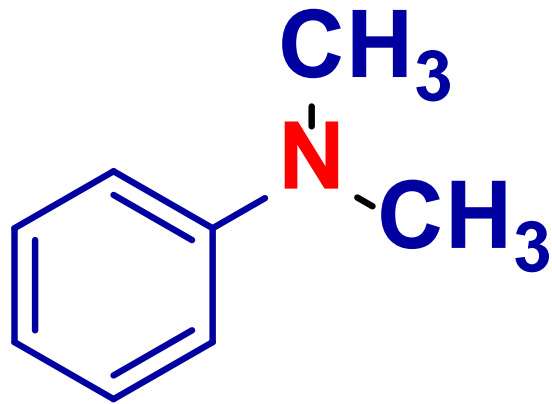
# FUNCIIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**



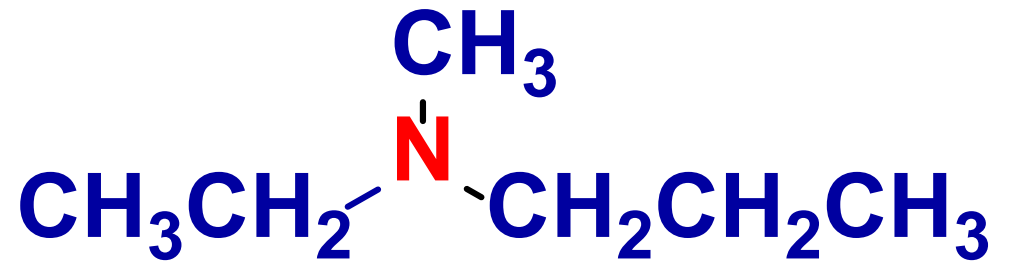
**Trietilamina**



**N-metiletilamina**



**N,N-dimetilfenilamina**



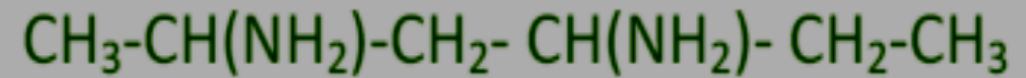
**N-etil-N-metilpropilamina**

# FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**

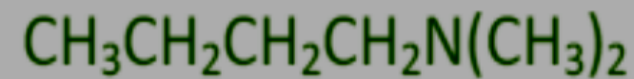
etanamina



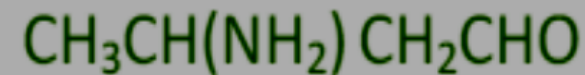
hexano-2,4-diamina



*N,N*-dimetilbutanamina



3-aminobutanal



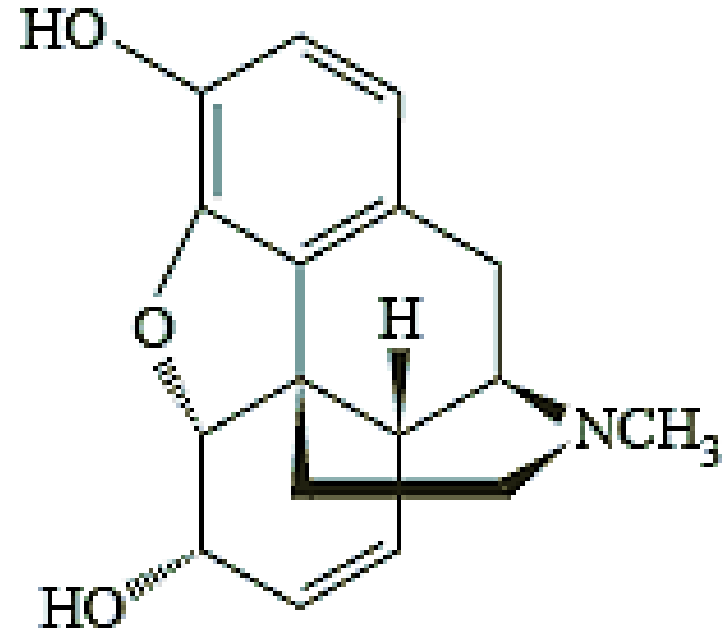
Quan la funció amina actua com a substituent en la cadena principal s'utilitza el prefix *-amino*.

# FUNCIONS NITROGENADES **NITRILS I AMINES**



La morfina, un analgèsic molt potent i addictiu, es pot aïllar de la rosella de l'opi

*(Papaver somniferum).*



Morphine

Morphine

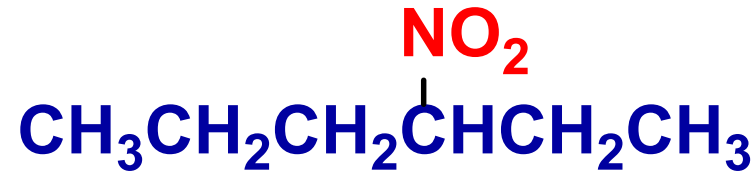


# FUNCIONS NITROGENADES

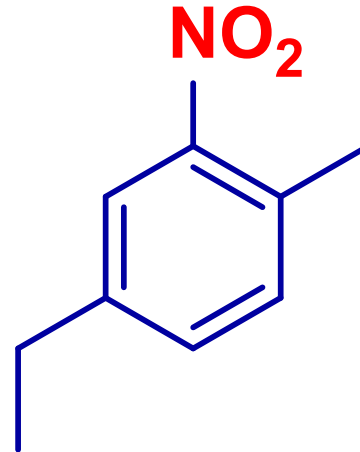
## Nitroderivats

Són els hidrocarburs o compostos aromàtics que contenen el grup **nitro** (-NO<sub>2</sub>).

Sempre actua com a radical o només poden ser primaris.



**3-nitrohexà**



**1,4-diethyl-2 nitrobenzé**

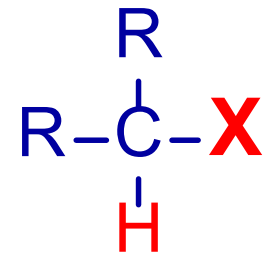
# COMPOSTOS HALOGENATS

## HALURS

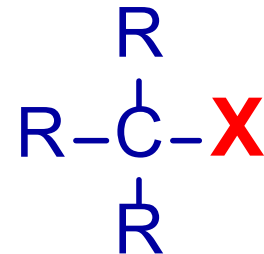
Són els hidrocarburs que contenen **àtoms d'halogen** que substitueixen hidrògens. Els halogenurs d'alquil poden classificar-se com **primaris secundaris o terciaris**, segons la naturalesa de l'àtom de carboni al qual va unit l'àtom d'halogen.



**Primari**



**Secundari**



**Terciari**



# COMPOSTOS HALOGENATS

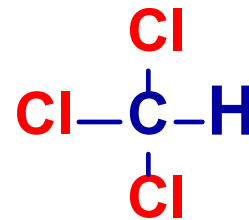
## HALURS

Els halogenurs d'alquil de **més de cinc àtoms de carboni** s'anomenen seguint les normes IUPAC com hidrocarburs substituïts.

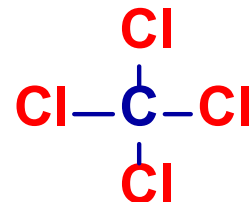


**3,3-dibromohexà**

S'hi utilitzen també els noms comuns per a alguns compostos polihalogenats senzills com ho són:

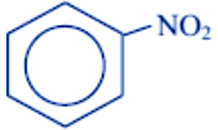
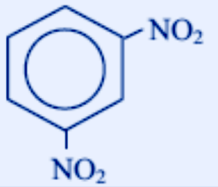
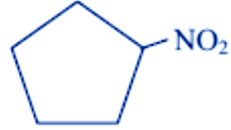
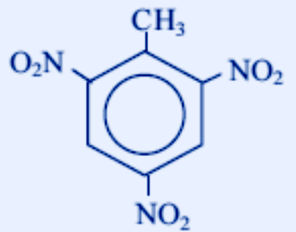


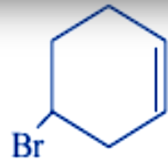
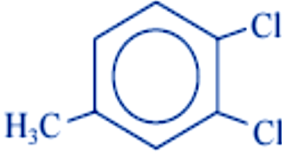
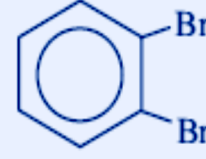
**Cloroform**



**Tetraclorur  
de carboni**

# HALOGENURS I NITRODERIVATS

$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-CH-CH}_2\text{-CH-CH}_3 \\   \quad \quad   \\ \text{NO}_2 \quad \text{NO}_2 \end{array}$	2,4-Dinitropentano
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH-CH-CH}_3 \\   \quad \quad   \\ \text{CH}_3 \quad \text{NO}_2 \end{array}$	3-Metil-2-nitropentano
 (C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -NO <sub>2</sub> )	Nitrobenceno
	1,3-Dinitrobenceno <i>m</i> -Dinitrobenceno
	Nitrociclopentano
	2,4,6-Trinitrotolueno (T.N.T.) 1-Metil-2,4,6-trinitrobenceno

$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH-CH}_2\text{-CH-CH}_3 \\   \quad \quad   \\ \text{Br} \quad \quad \text{CH}_3 \end{array}$	4-Bromo-2-metilhexano
$\text{CH}_2=\text{CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{Cl}$	4-Clorobut-1-eno (4-Cloro-1-buteno)
	4-Bromociclohexeno
$\begin{array}{c} \text{CHF}_3 \\ \text{CHCl}_3 \\ \text{CHBr}_3 \\ \text{CHI}_3 \end{array}$	Trifluorometano o <i>Fluoroformo</i> Triclorometano o <i>Cloroformo</i> Tribromometano o <i>Bromoformo</i> Triiodometano o <i>Yodoformo</i>
	1,2-Dicloro-4-metilbenceno
	1,2-Dibromobenceno <i>o</i> -Dibromobenceno

# Ordre de preferència dels grups funcionals

Segons la IUPAC, la regla de caràcter general per a a nomenar compostos orgànics és que la cadena principal és la més llarga que conté el grup funcional més important.



# Ordre de preferència dels grups funcionals

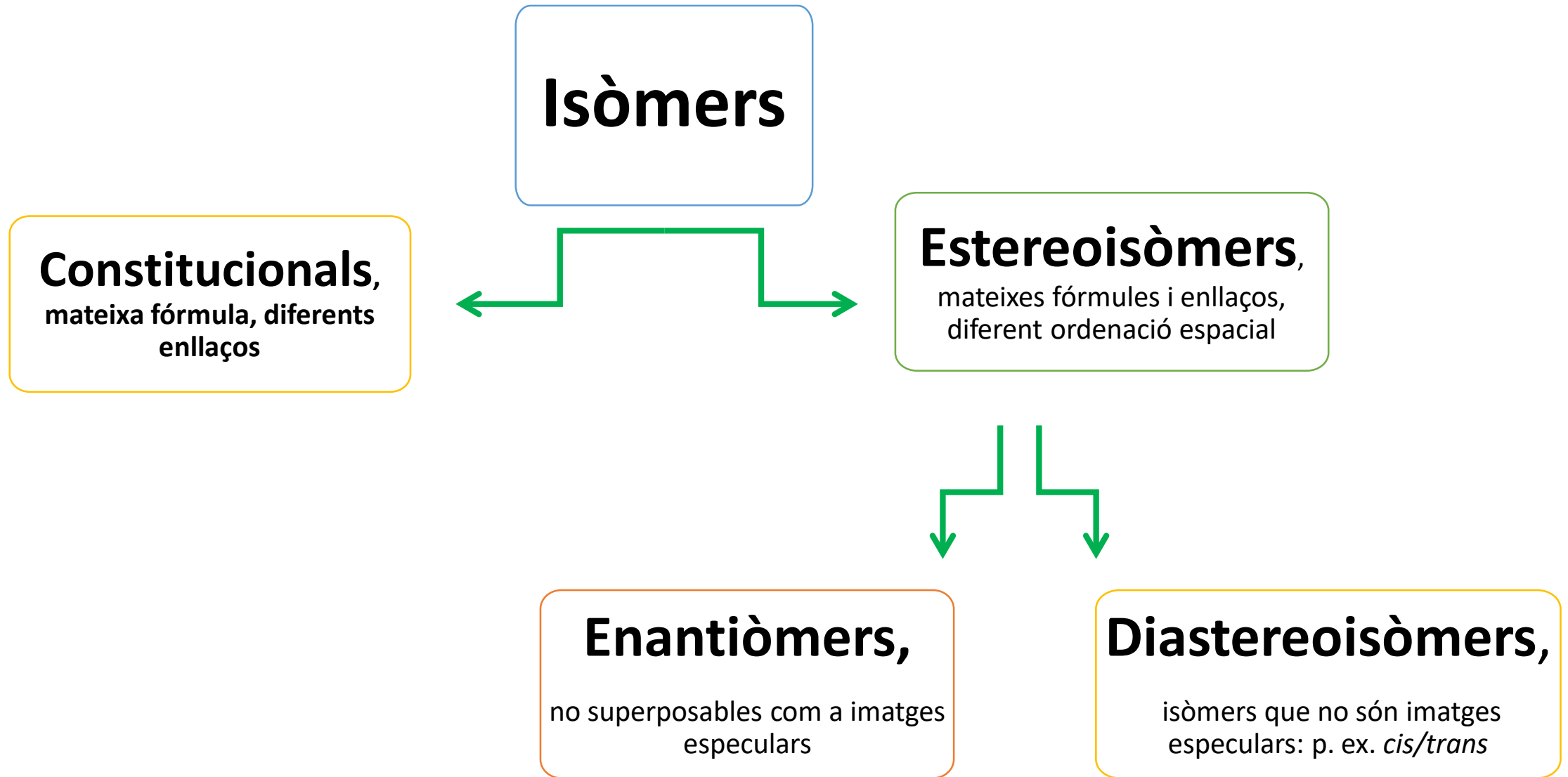
Orden de prioridad	Función	Grupo Funcional	Nombre como principal (sufijo)	Nombre como sustituyente (prefijo)
1º	Ácido	-COOH	Ácido ...-oico (-carboxílico)	carboxi-
2º	Éster (o sales)	-COOR -COOM	-oato de ...-ilo -oato de M	alcoxicarbonil-
3º	Haluro de acilo	-CO-X (X = halógeno)	Haluro de ...-ilo	haloformil-
4º	Amida	-CONH <sub>2</sub>	...-amida (-carboxamida)	carbamoil-
5º	Nitrilo	-C≡N	...-nitrilo (-carbonitrilo)	ciano-
6º	Aldehído	-CHO	...-al (-carbaldehído)	formil-
7º	Cetona	-CO-	...-ona	oxo-
8º	Alcohol (Fenol)	-OH	...-ol	hidroxi-
9º	Amina	-NH <sub>2</sub>	...-amina	amino-
10º	Éter	-O-R'	...-éter (R-oxi-R')	alcoxi-
11º	Insaturaciones	C=C C≡C	...-eno ...-ino	****

# Ordre de preferència dels grups funcionals

Formula	Función	Sufijo si es grupo principal	Prefijo si es sustituyente (grupo secundario)	Ejemplo
$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{R}-\text{C}-\text{OH} \end{array}$	Ácido	-oico	carboxi-	$\text{CH}_3-\text{COOH}$ ácido etanoico
$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{R}-\text{C}-\text{O}-\text{R}' \end{array}$	Éster	-oato de ... ilo	alcoxicarbonil-	$\text{CH}_3-\text{COO}-\text{CH}_3$ etanoato de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{R}-\text{C}-\text{NH}_2 \end{array}$	Amida	-amida	carbamoil-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CONH}_2$ Propanamida
$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N}$	Nitrilo	-nitrilo	ciano-	$\text{CH}_3-\text{CN}$ Etanonitrilo Cianuro de metilo
$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{R}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	Aldehído	-al	oxo-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CHO}$ Propanal
$\begin{array}{c} \text{O} \\    \\ \text{R}-\text{C}-\text{R}' \end{array}$	Cetona	-ona	oxo-	$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_3$ Propanona
$\text{R}-\text{OH}$	Alcohol	-ol	hidroxi-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{OH}$ Etanol
$\text{R}-\text{NH}_2$	Amina	-amina	amino-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ Etilamina Etanamina
$\text{R}-\text{O}-\text{R}'$	Éter	-oxi ... ano - il ... ileter	oxa-	$\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ Metoxietano Etilmetiléter
$\text{C}=\text{C}$	Doble enlace	-eno		$\text{CH}_3-\text{CH}=\text{CH}_2$ Propeno
$-\text{C}\equiv\text{C}-$	Triple enlace	-ino		$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{CH}$ Propino
$\text{R}-\text{NO}_2$	Nitro		nitro-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{NO}_2$ Nitroetano
$\text{R}-\text{X}$	Halógeno		fluoro-, cloro-, bromo-, yodo-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{Br}$ Bromoetano
$-\text{R}$	Radical		- il	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3 \end{array}$ Metilpropano

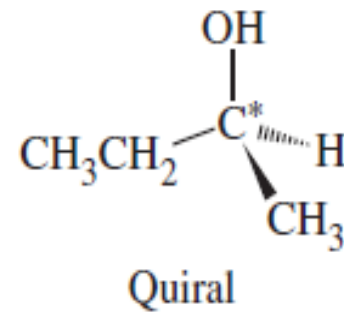
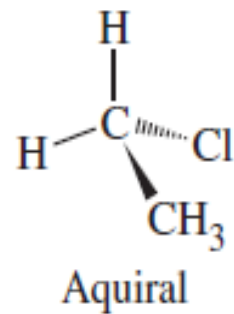
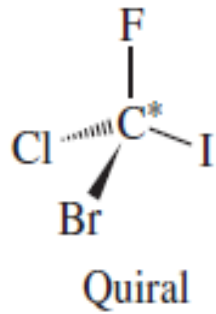
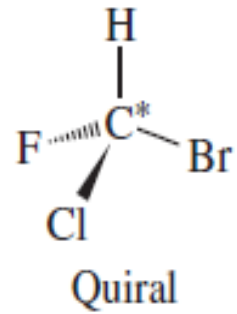
# ESTEREOISOMERIA

# ESTEREOISOMERIA



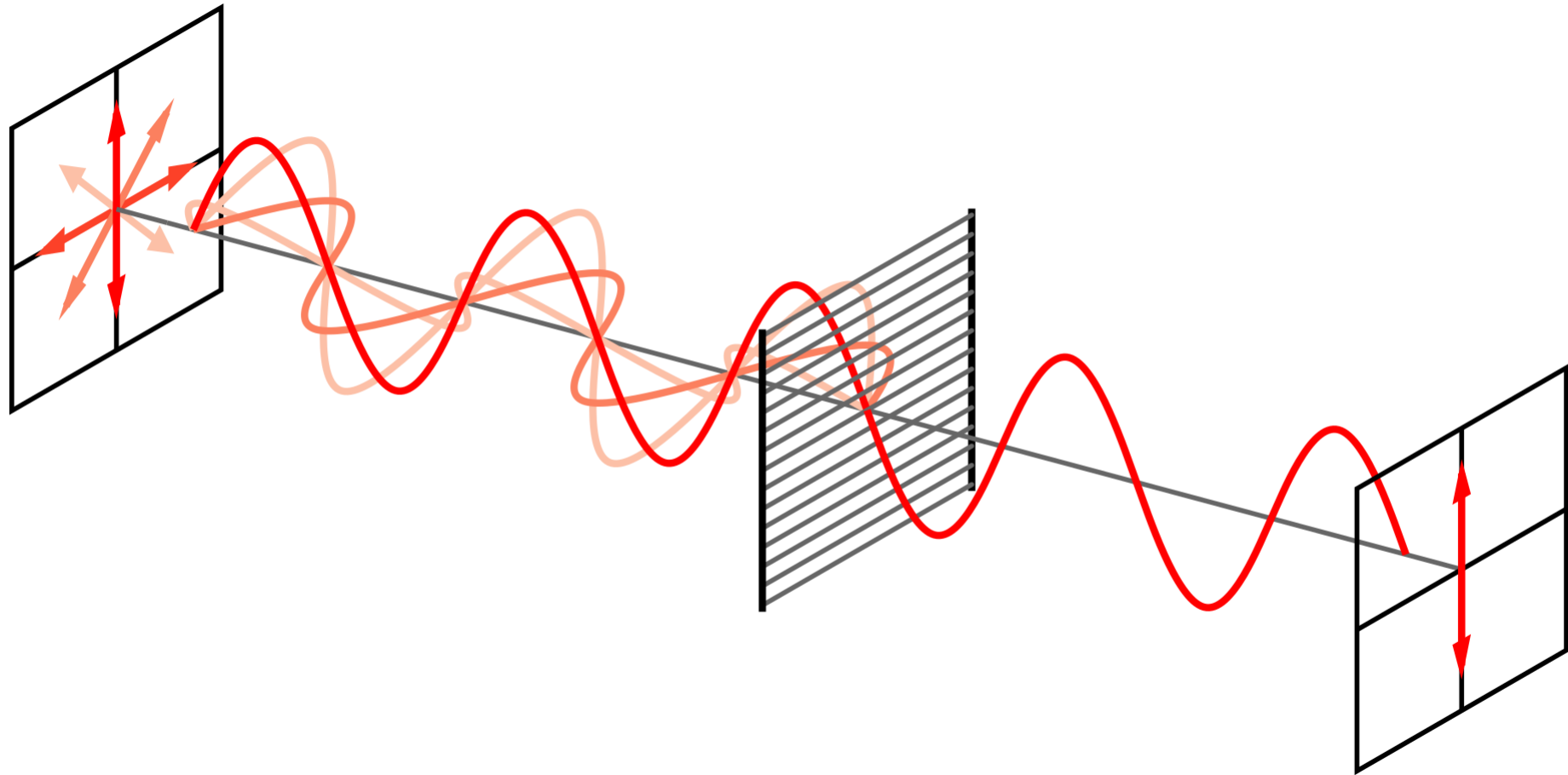
# ESTEREOISOMERIA

**Els compostos  
asimètrics roten el pla  
de la llum polaritzada.**



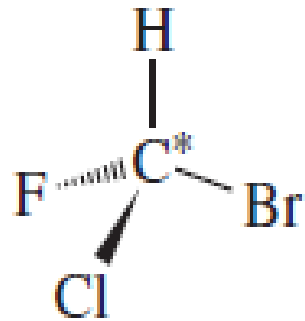
# ESTEREOISOMERIA

**Els compostos asimètrics roten el pla de la llum polaritzada.**

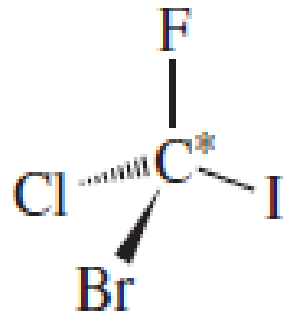


# ESTEREOISOMERIA

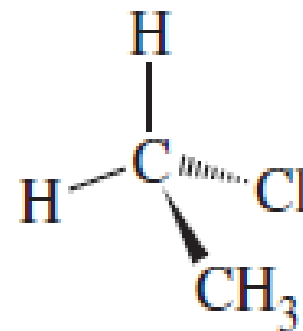
Un carboni asimètric és un carboni amb els quatre substituents diferents.



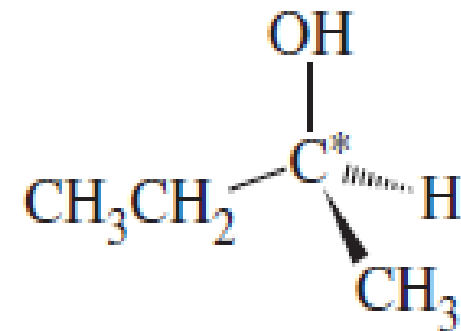
Quiral



Quiral

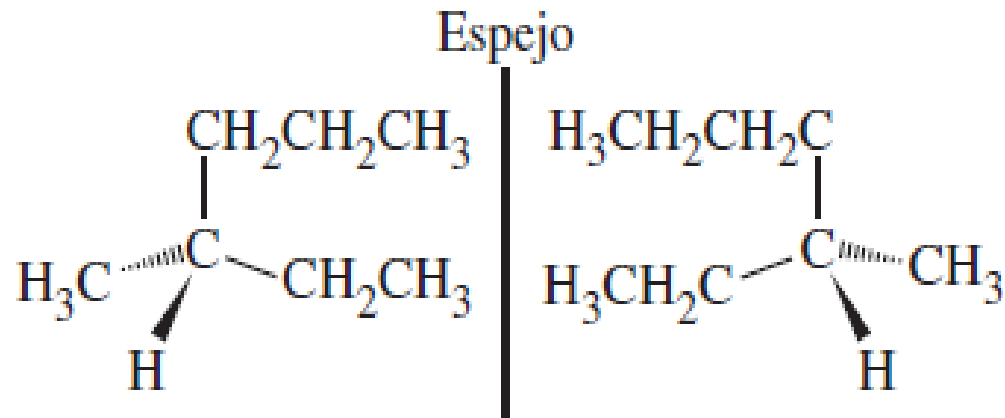
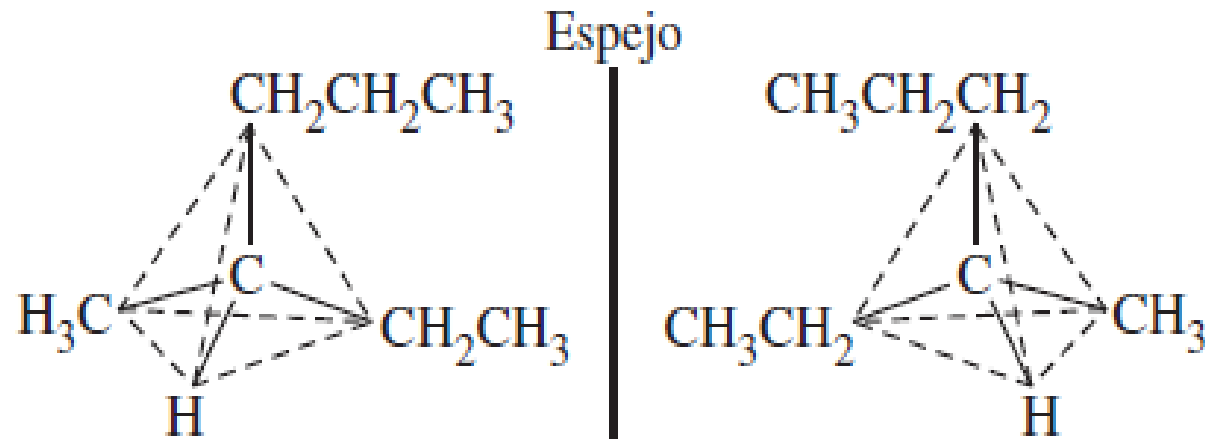


Aquiral



Quiral

# ESTEREOISOMERIA

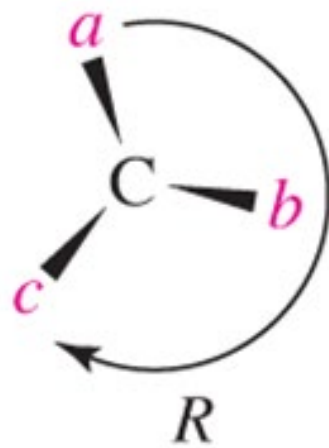
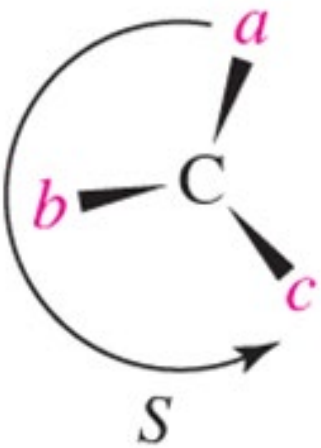
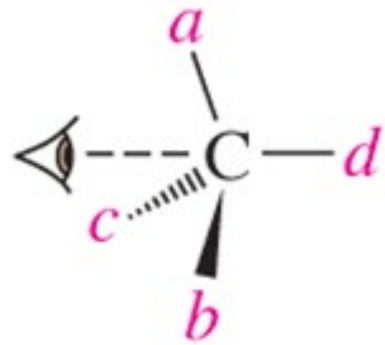
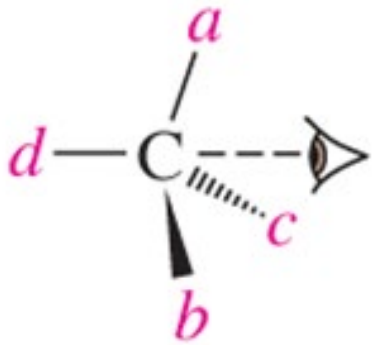
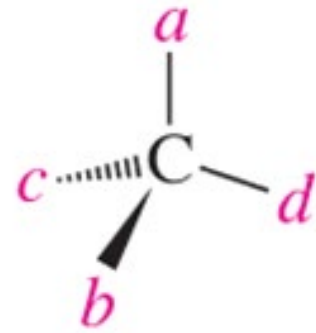
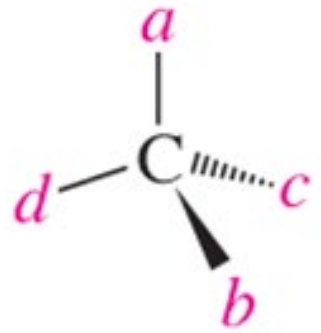


**Els tascons discontinus indiquen que el substituent va cap a dins del pla i els tascons discontinus cap a fora del pla del dibuix.**



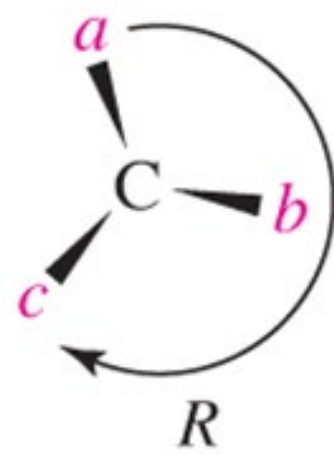
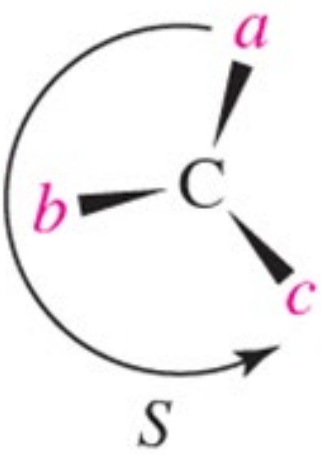
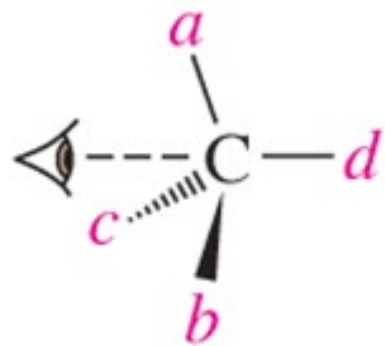
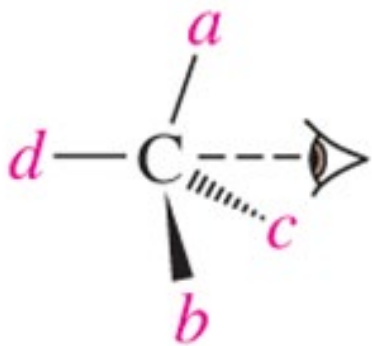
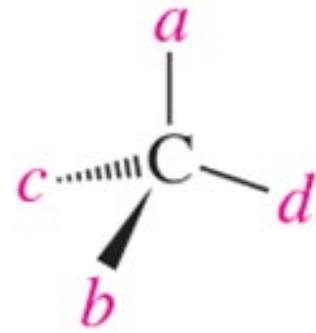
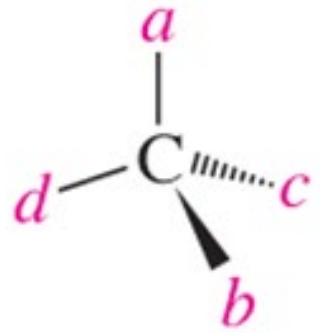
# ESTEREOISOMERIA

## Nomenclatura rectus vs sinister



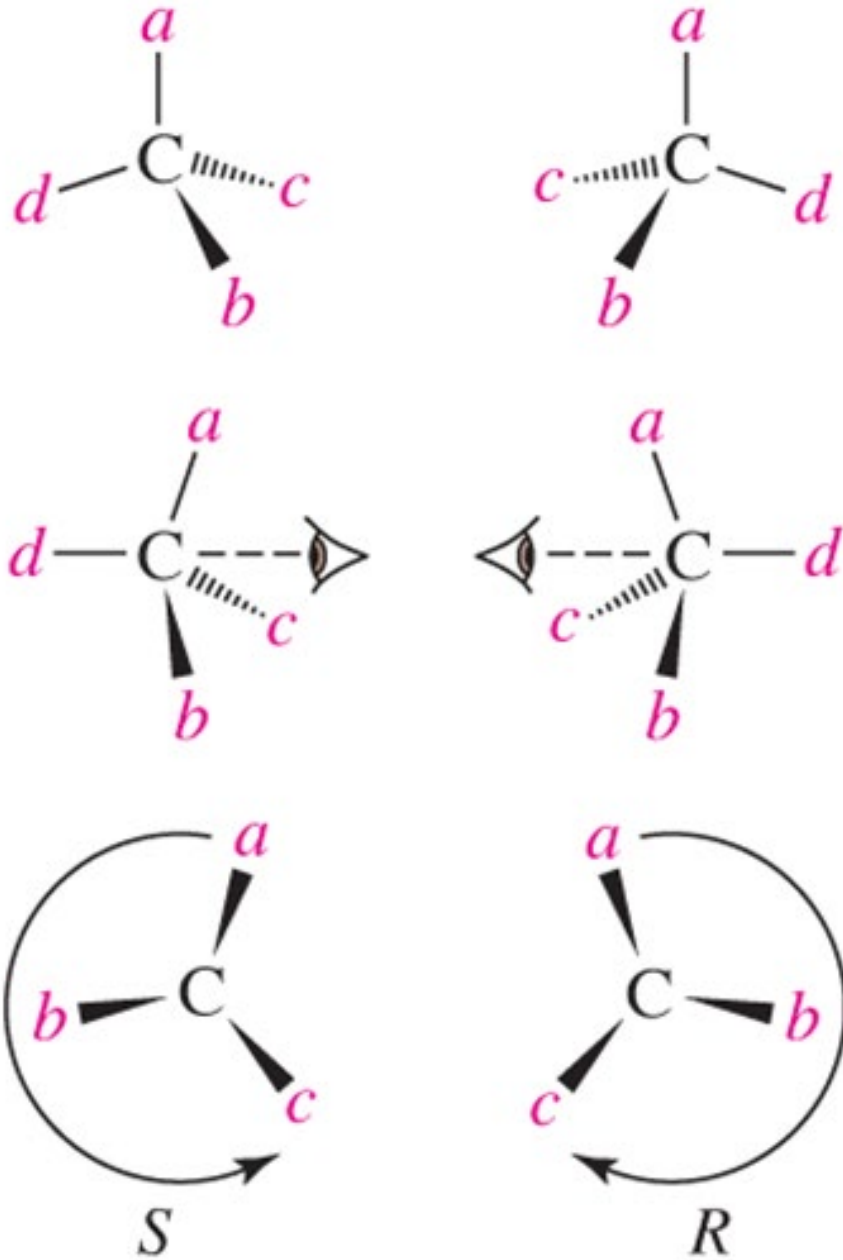
# ESTEREOISOMERIA

Els quatre substituents s'ordenen de forma per prioritats **a, b, c, d**.



# ESTEREOISOMERIA

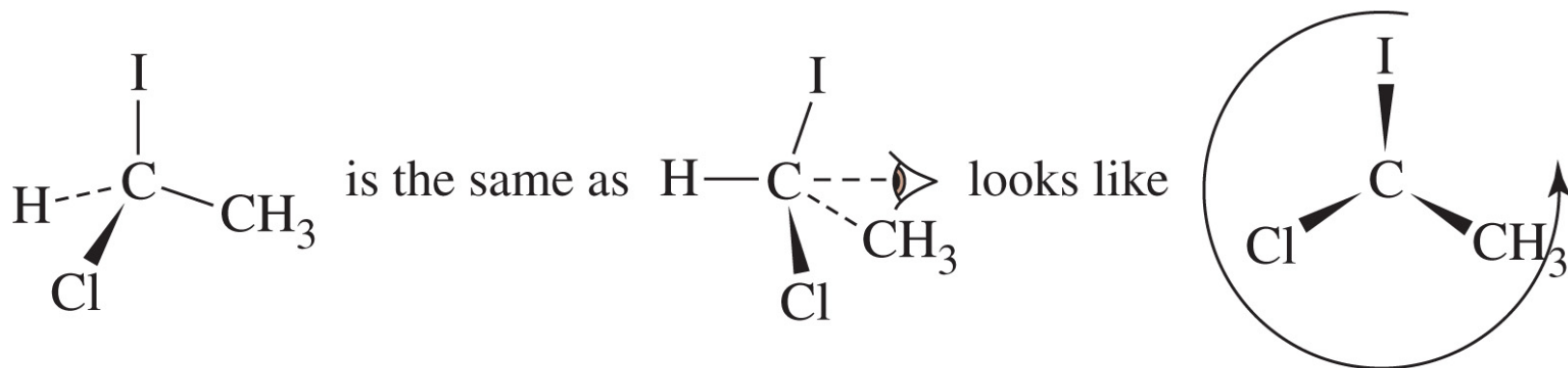
Orientem el substituent de menor prioritat (d) de forma que estiga enfrontat amb nosaltres i assignem una rotació cap a la dreta als altres (R) o cap a l'esquerra (S).



# ESTEREOISOMERIA **Ordre de prioritat dels substituents**

## Regles de Cahn Ingold i Prelog

**Regla 1:** La substància de nombre atòmic superior té prioritat per damunt d'una de nombre atòmic inferior.



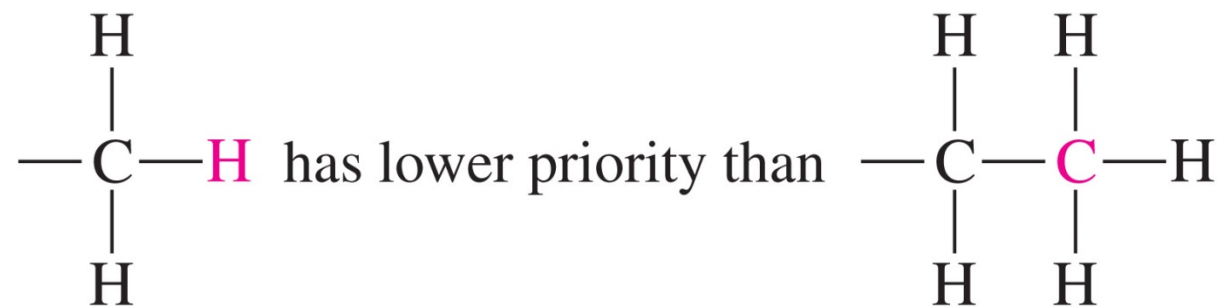
Priority I > Priority Cl > Priority C

(*S*)-1-chloro-1-iodoethane

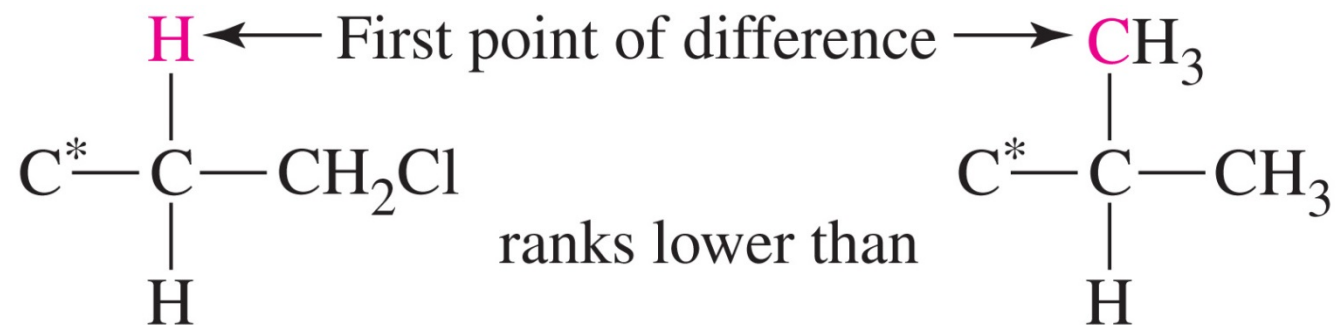
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

# ESTEREOISOMERIA

**Regla 2:** si dos substituents connectats a l'estereocentre tenen la mateixa prioritats, procediu per les cadenes fins al primer punt de diferència.



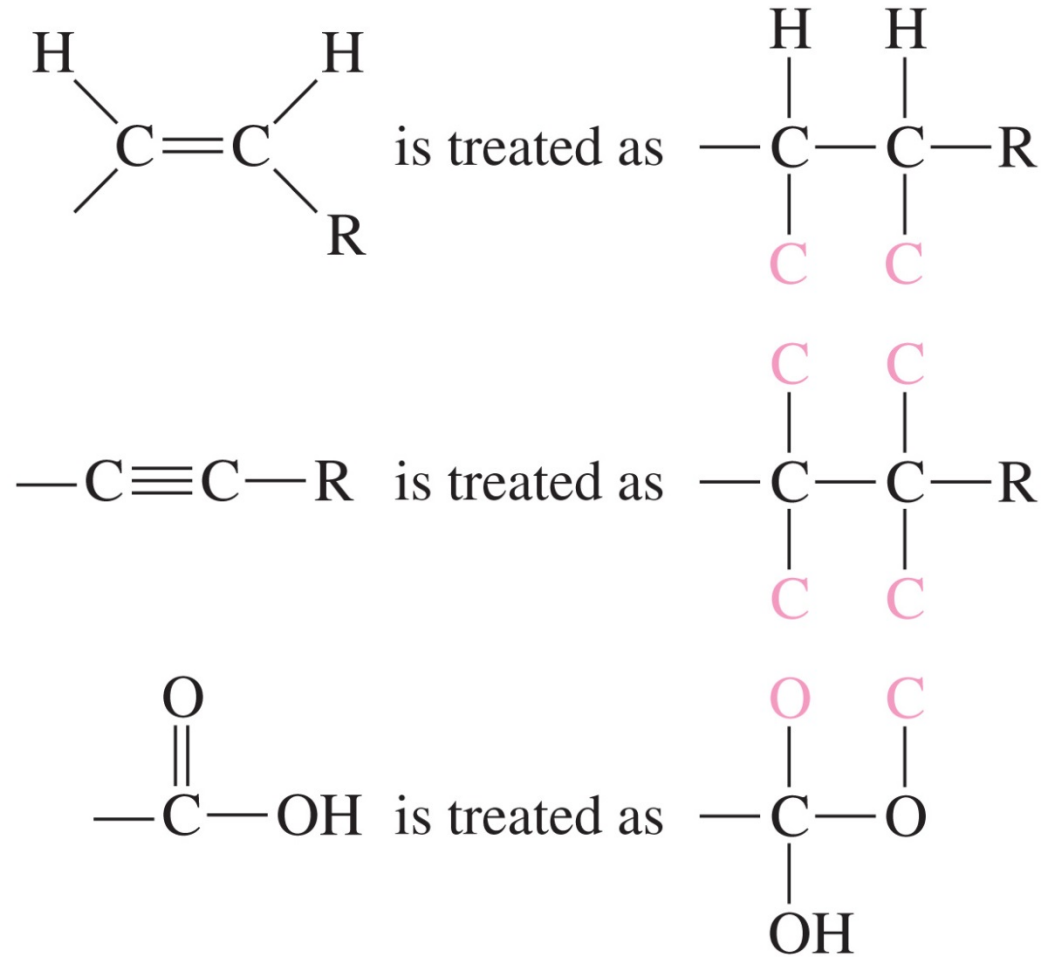
Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.



Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

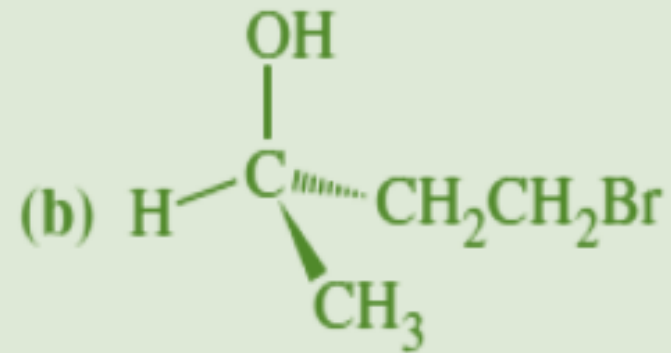
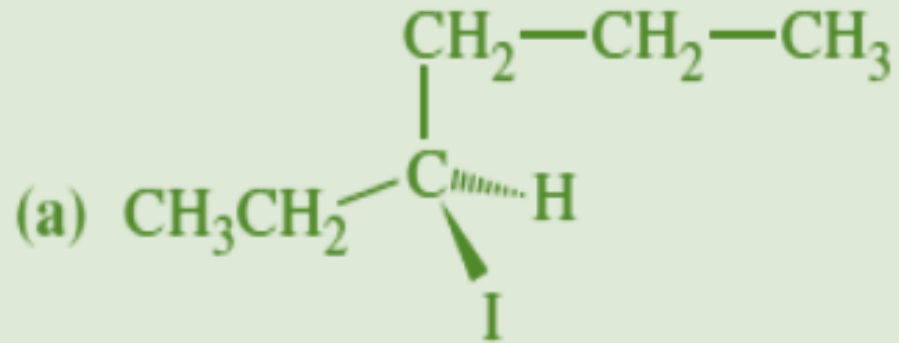
# ESTEREOISOMERIA

**Regla 3:** els enllaços dobles i triples compten com si foren simples i els àtoms es dupliquen o es tripliquen a l'altre extrem de l'enllaç doble o triple.

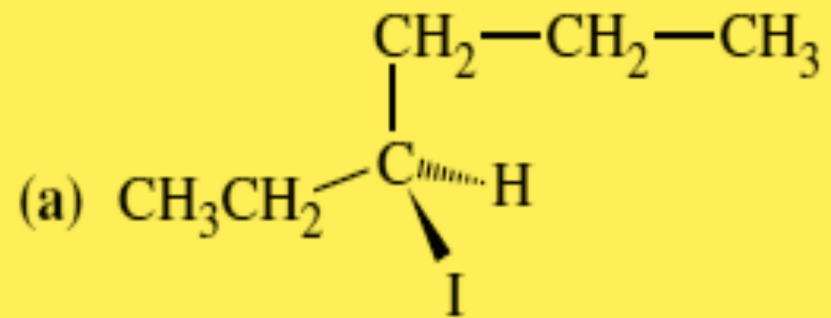


# ESTEREOISOMERIA

**EXEMPLE:** anomenau els compostos següents.

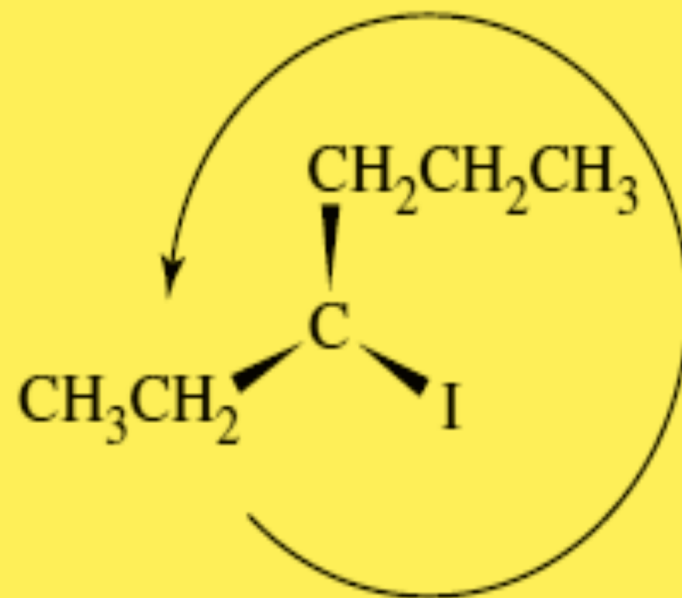
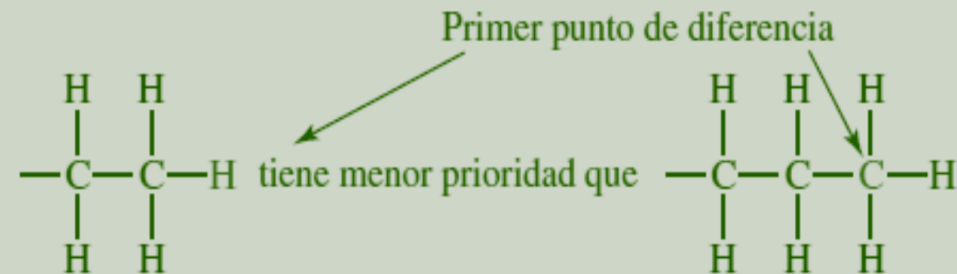


# ESTEREOISOMERIA



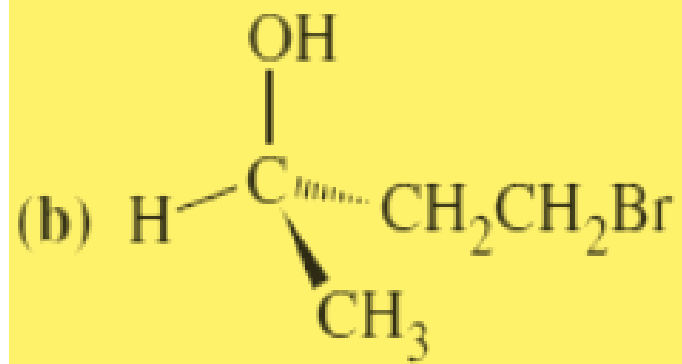
$I > C(\text{etilo}) = C(\text{propilo}) > H$

**Prioritat dels grups**





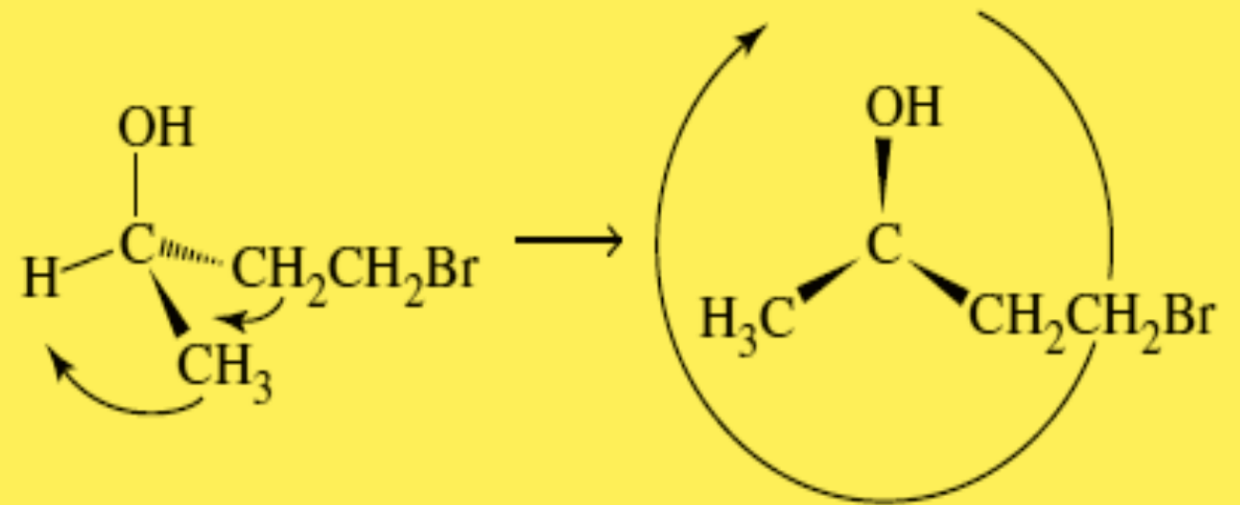
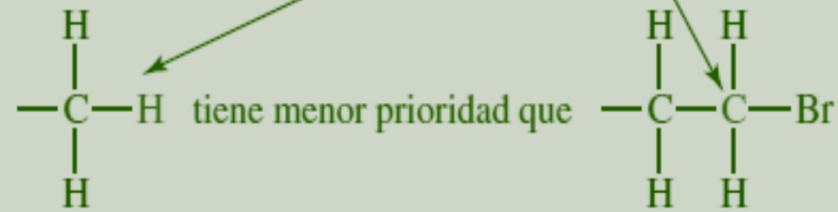
# ESTEREOISOMERIA



O > C (bromoetilo) = C (metilo) > H

**Prioritat dels grups**

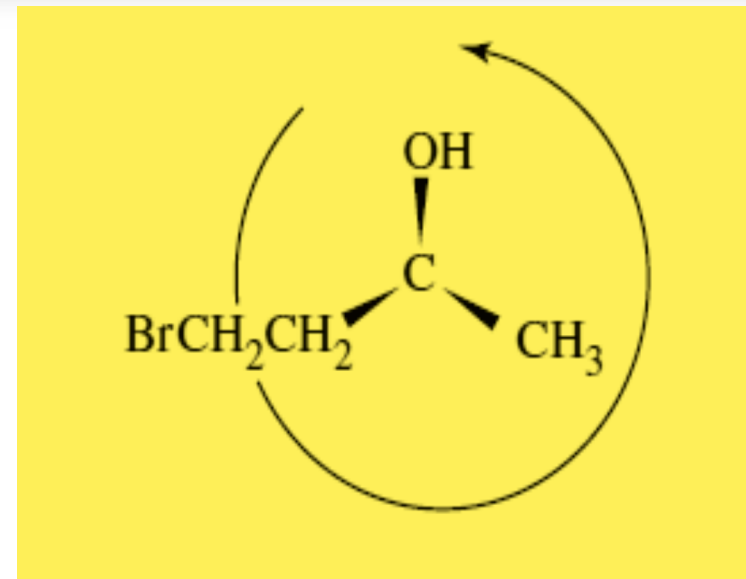
Primer punto de diferencia



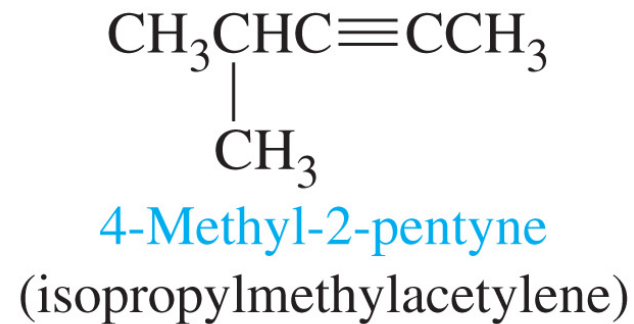
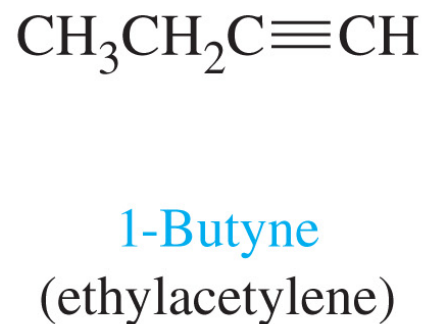
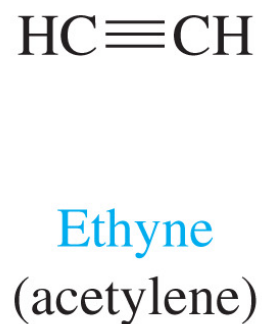
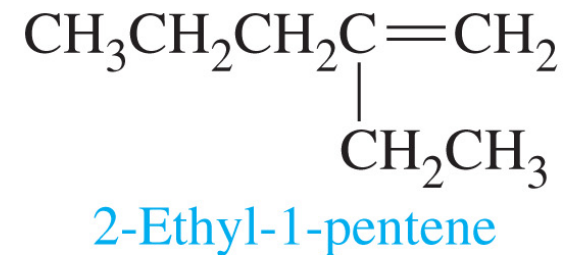
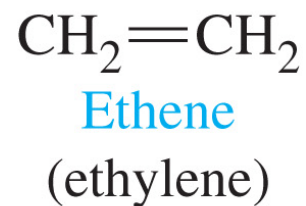
# ESTEREOISOMERIA



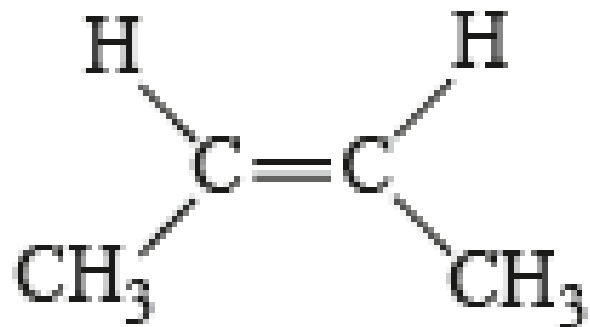
**(R)-4-brom-2-butanol**



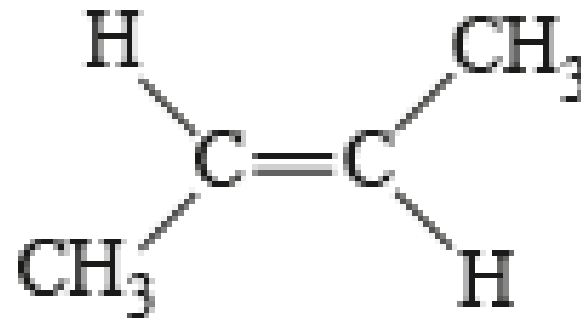
# ESTEREOISOMERIA EN ELS ALQUENS



# ESTEREOISOMERIA EN ELS ALQUENS

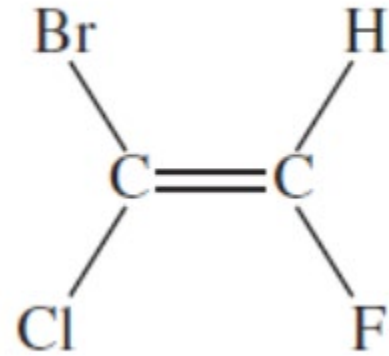
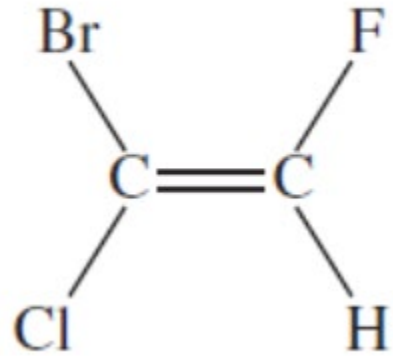


(a) *cis*-2-Butene

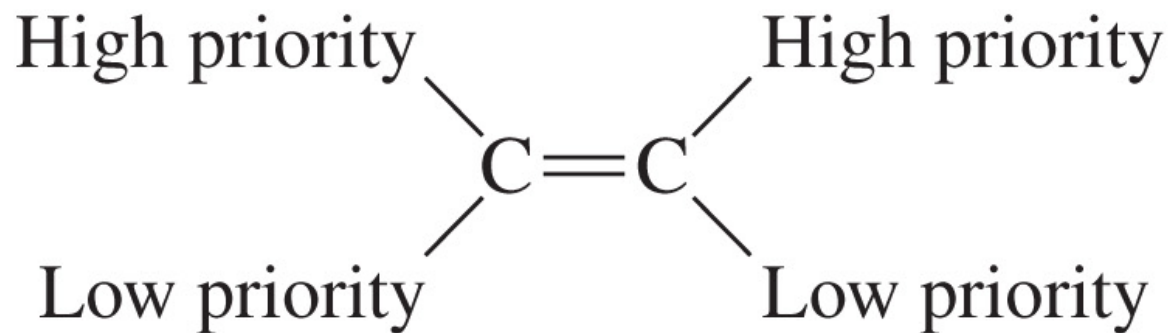


(b) *trans*-2-Butene

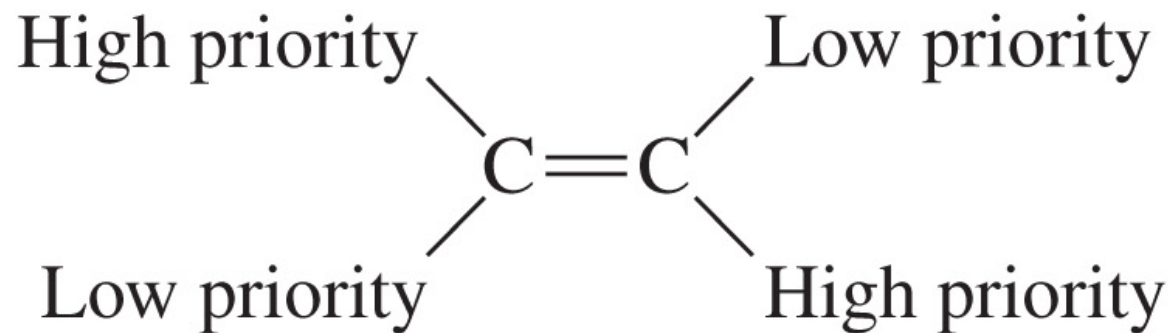
**I d'aquest parell... quin és el *cis* i quin és el *trans*?**



## Hem de tornar a assignar prioritats als substituents.



The *Z* isomer



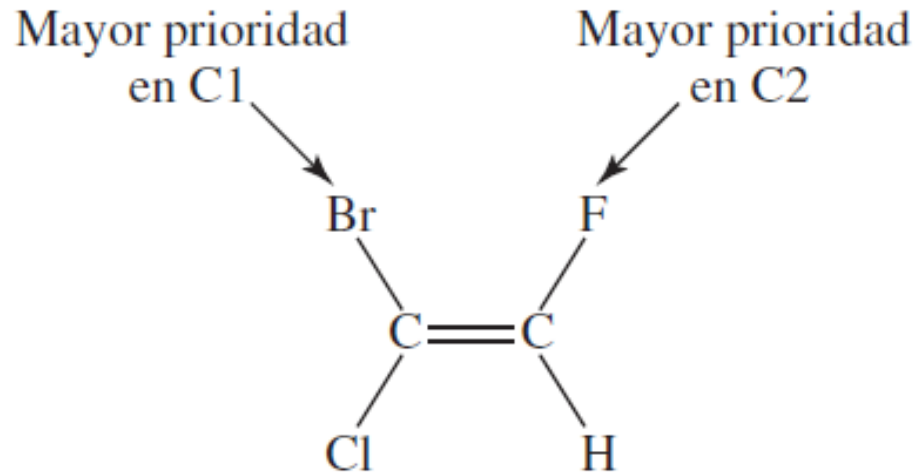
The *E* isomer

Copyright © 2007 Pearson Prentice Hall, Inc.

**Isòmer Z**

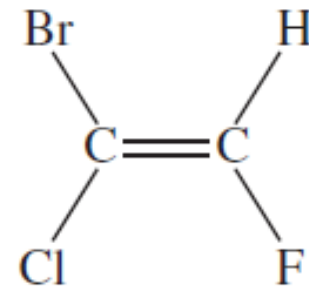
**Isòmer E**

## Recordeu la regla 1?



(Z)-1-bromo-1-cloro-  
2-fluoroetano

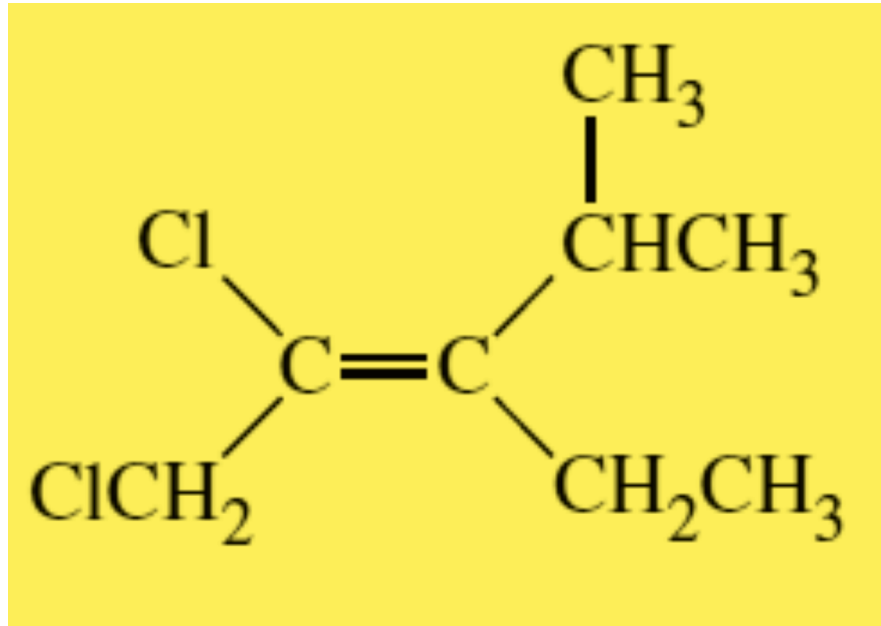
**Isòmer Z**



(E)-1-bromo-1-cloro-  
2-fluoroetano

**Isòmer E**

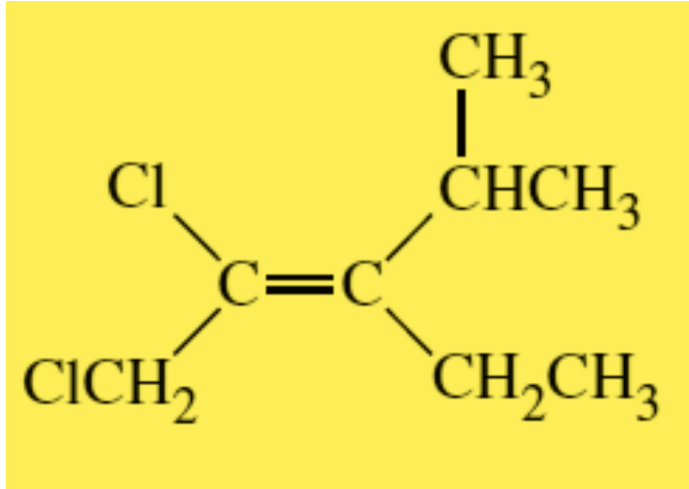
## ESTEREOISOMERIA en els ALQUENS



...?

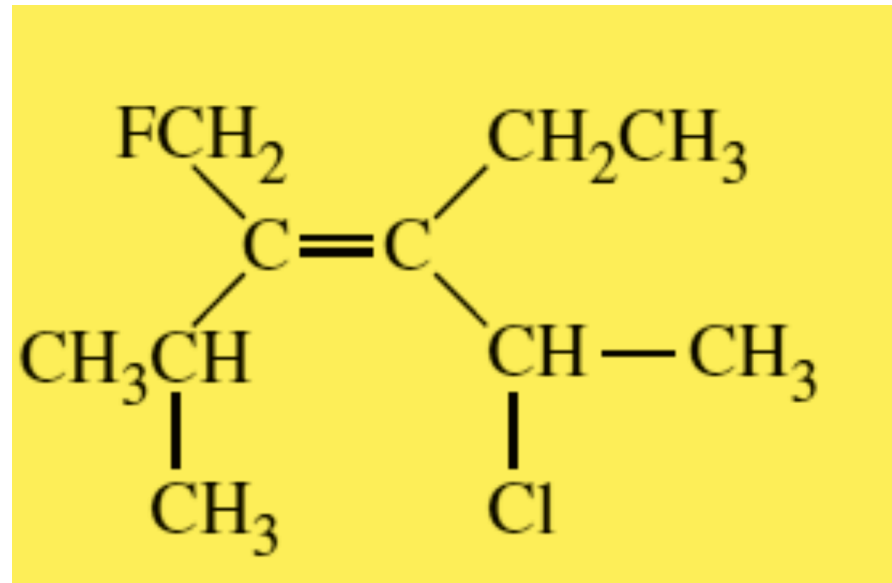


## ESTEREOISOMERIA en els ALQUENS



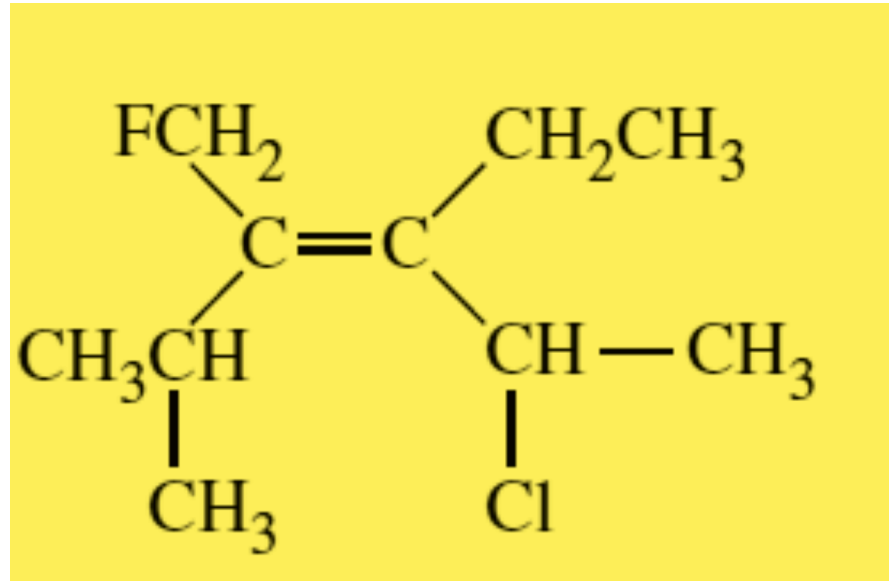
**(Z)-1,2-diclor-3-etil-4-metil-2-pentè**

## ESTEREOISOMERIA en els ALQUENS



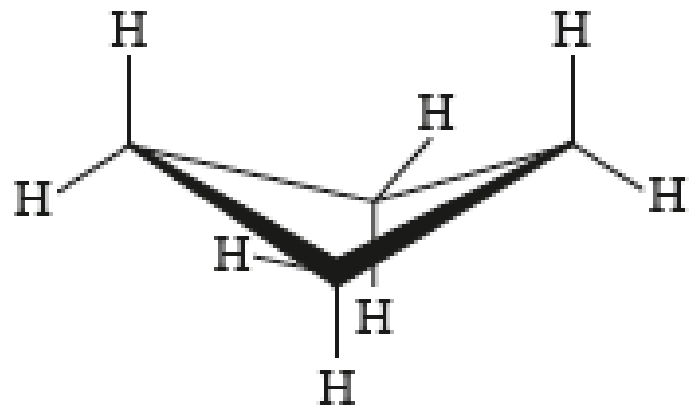
...?

## ESTEREOISOMERIA en els ALQUENS

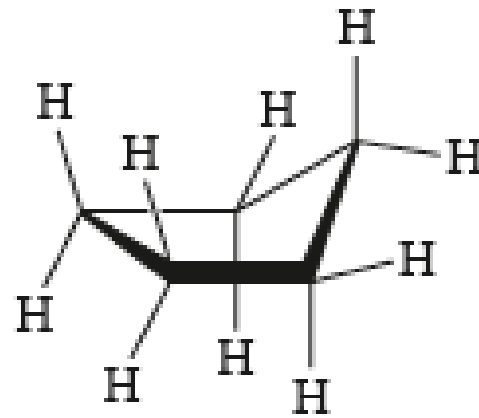


**(*E*)-2-clor-3-etil-4-fluorometil-5-metil-3-hexè**

# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS

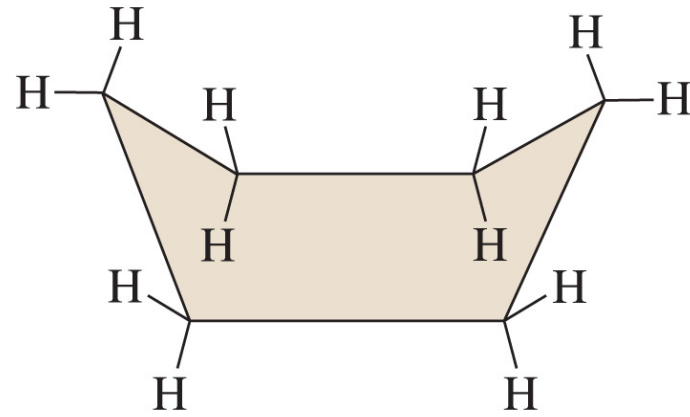


Cyclobutane

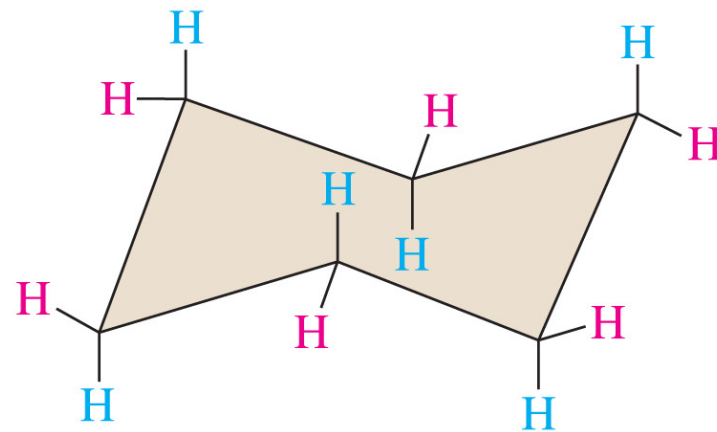
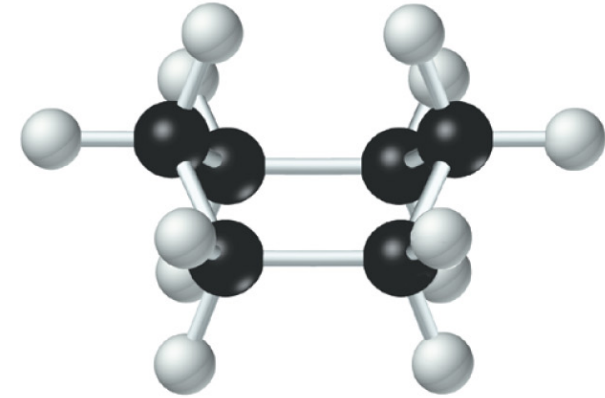


Cyclopentane

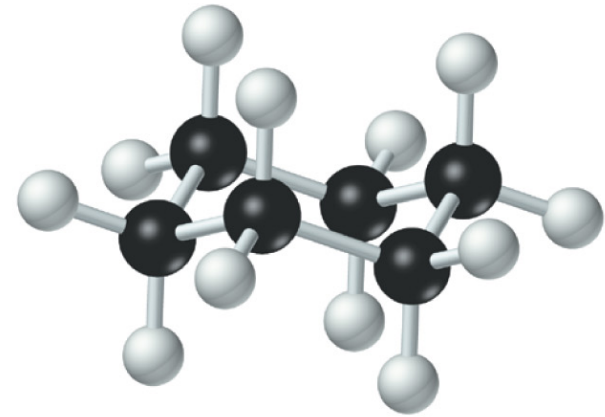
# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS



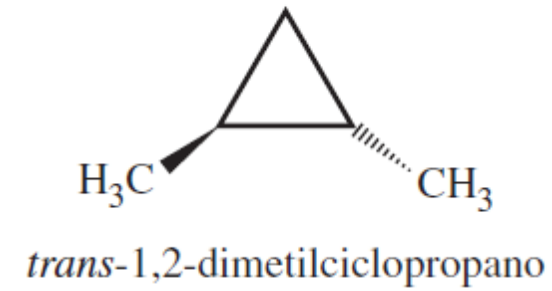
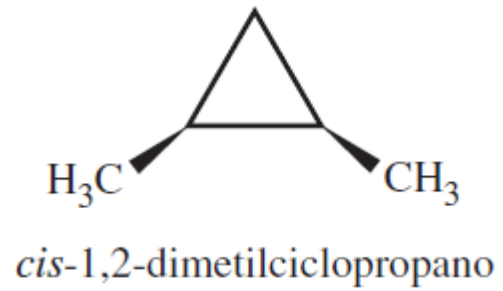
(a)



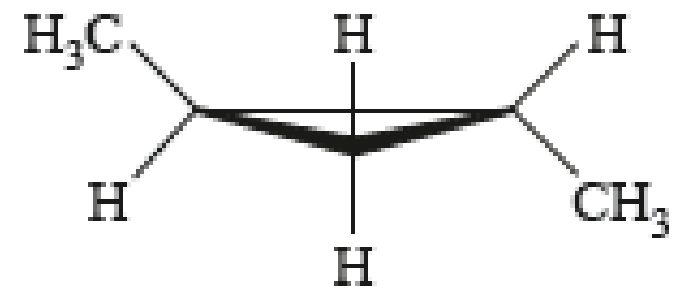
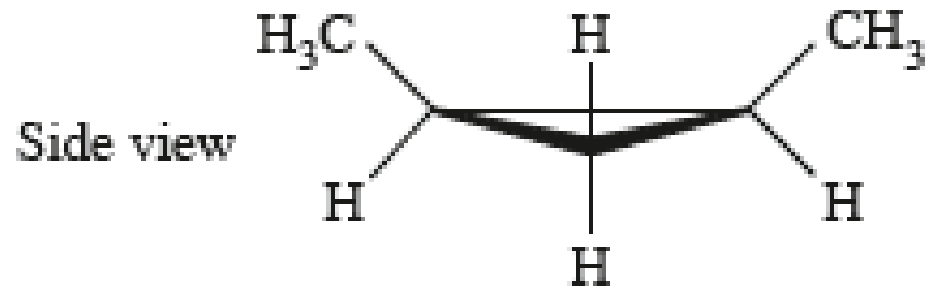
(b)



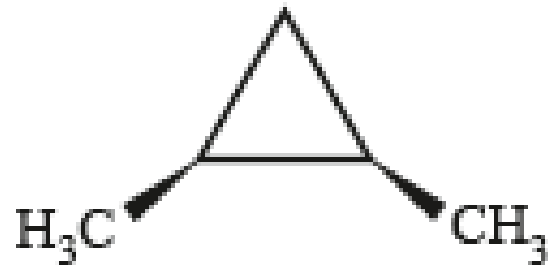
# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS



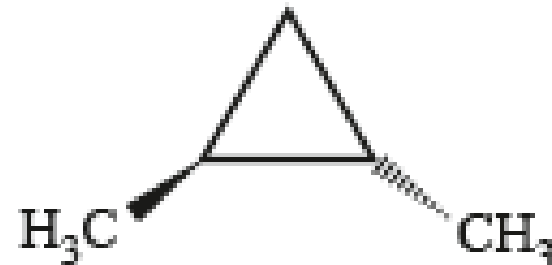
# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS



Top view

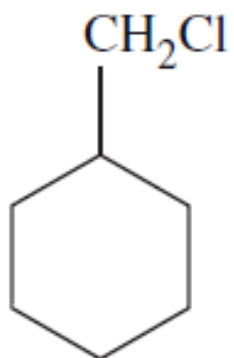


*cis*-1,2-dimethylcyclopropane

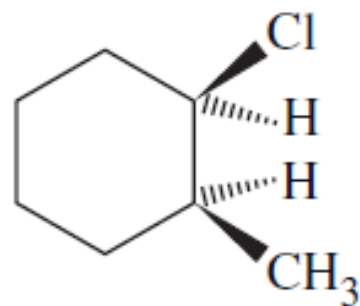


*trans*-1,2-dimethylcyclopropane

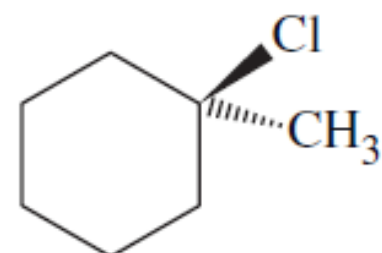
# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS



clorometilciclohexano



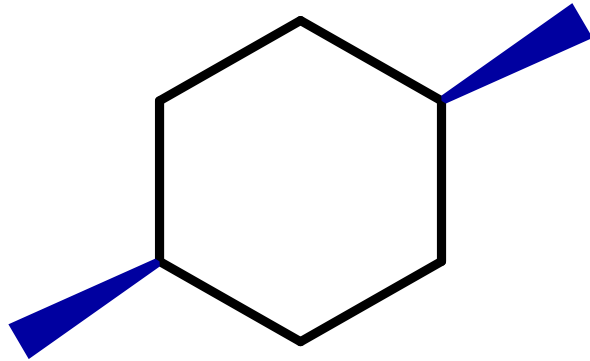
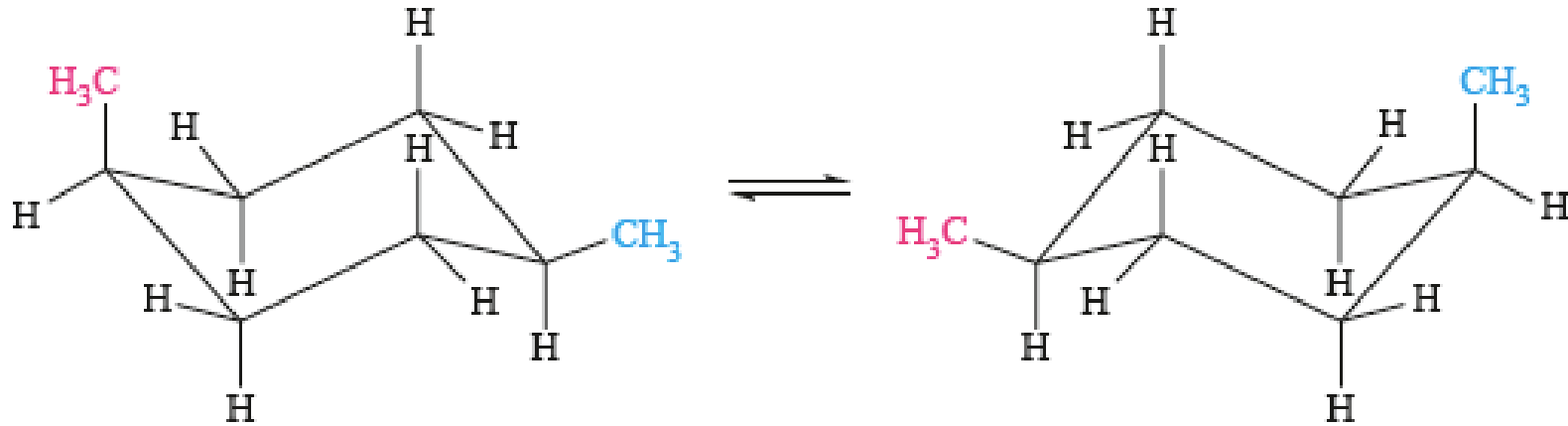
*cis*-1-cloro-2-  
metilciclohexano



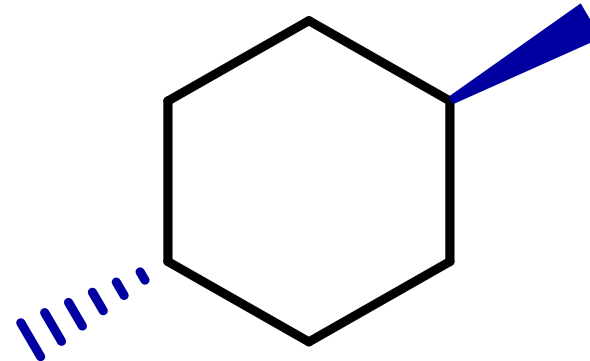
1-cloro-1-  
metilciclohexano



# ESTEREOISOMERIA EN ELS CICLOALCANS

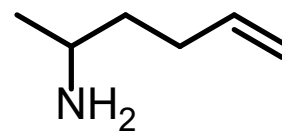
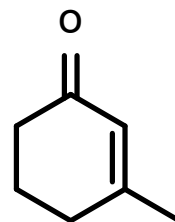
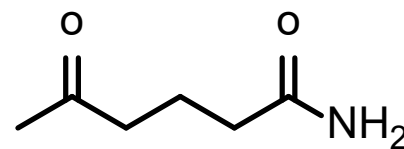
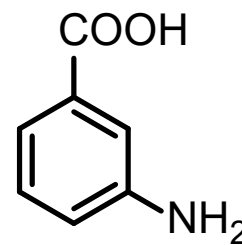
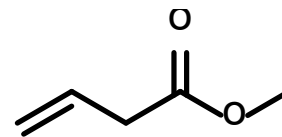


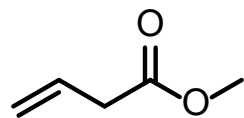
*cis*-1,4-dimetilciclohexà



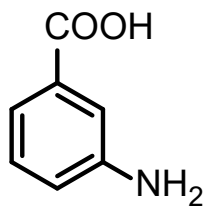
*trans*-1,4-dimetilciclohexà

# Practiquem...

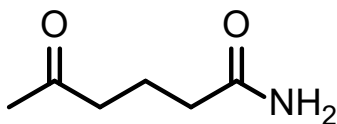




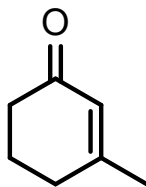
methyl but-3-enoate



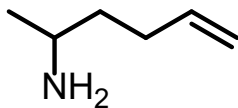
3-aminobenzoic acid



5-oxohexanamide



3-methylcyclohex-2-en-1-one



hex-5-en-2-amine

# Practiquem...

**1,2,3-propanotriol**

**Àcid metilbutanodioic**

**Ciclobutil metil èter**

**(*E*)-1-brom-1-cloropropè**

**3-(2-etilpentil)-5-metilciclohexanol**