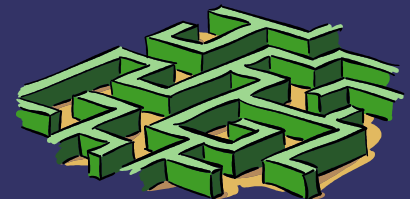


Paràmetres moleculars

Actualment som capaços de determinar experimentalment els valors de les propietats que caracteritzen els enllaços, i d'obtenir informació important a l'hora d'identificar les molècules covalents i conèixer-ne les propietats.

Farem servir els següents paràmetres:

- A. Energia d'enllaç
 - B. Longitud d'enllaç
 - C. Angle d'enllaç
- Título



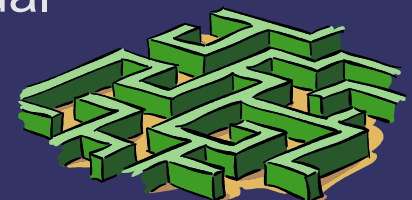
A. Energia d'enllaç

- L'energia d'enllaç, és l'energia que es desprèn quan es forma un enllaç entre dos àtoms en estat gasós.
- Aquesta energia s'allibera a causa de l'estabilitat que adquireixen els àtoms en formar un enllaç. El valor d'aquesta energia ens indica la força amb què els àtoms es mantenen units.
- L'energia d'enllaç dels enllaços múltiples és més gran que la d'un enllaç senzill. Així, un enllaç doble té més energia que un enllaç senzill, però no el doble. Succeeix el mateix en un enllaç triple.



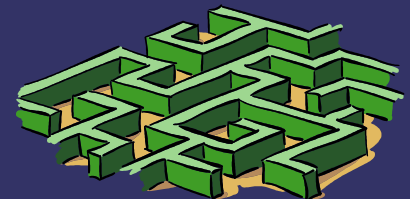
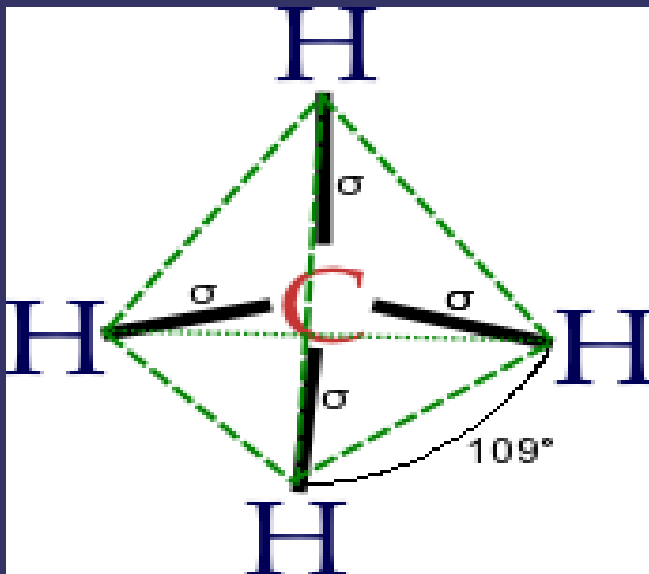
B. Longitud d'enllaç

- ➔ La longitud d'enllaç és la distància mitjana entre els nuclis atòmics, tenint en compte els moviments de vibració i gir que realitzen els àtoms.
- ➔ La longitud d'enllaç coincideix amb la suma de radis atòmics quan es tracta d'enllaços entre àtoms iguals.
- ➔ Si els àtoms són diferents, la longitud d'enllaç sol ser més petita que la suma dels dos radis dels àtoms sense enllaçar, perquè l'atracció entre els àtoms s'intensifica i la distància s'escurça.
- ➔ Per exemple, el radi atòmic del clor és de 0,099 nm i la distància d'enllaç Cl-Cl és 0,198 nm
- ➔ En el cas del H-Cl, la longitud d'enllaç és de 0,128 nm, inferior a la suma dels radis atòmics:
(H) 0,037 nm + (Cl) 0,099 nm = 0,137 nm
- ➔ En el cas d'enllaços múltiples, la distància d'enllaç es redueix. Per exemple, la longitud d'enllaç del C-C és de 0,154 nm, el doble del radi atòmic del C (0,077 nm). En canvi, la longitud de l'enllaç C=C és de 0,133 nm, i la el triple enllaç és de 0,120 nm. Aquest fenomen és conseqüència de la concentració d'electrons d'enllaç, la qual fa augmentar l'atracció entre els àtoms.



C. Angle d'enllaç

- L'angle d'enllaç és l'angle mitjà i hipotètic entre el nucli de l'àtom central de la molècula i el nucli de l'àtom enllaçat.
- L'angle d'enllaç depèn de la geometria de la molècula i, per tant, conèixer-lo ens proporciona informació sobre la forma espacial. Per exemple, els enllaços H-O de l'aigua formen un angle H-O-H de 104° i, en canvi, en el clorur de beril·li, Cl-Be-Cl, és de 180° .
- La difracció de raigs X, la difracció d'electrons o l'espectroscopia permeten conèixer la geometria molecular, les longituds i els angles d'enllaç amb molta precisió.



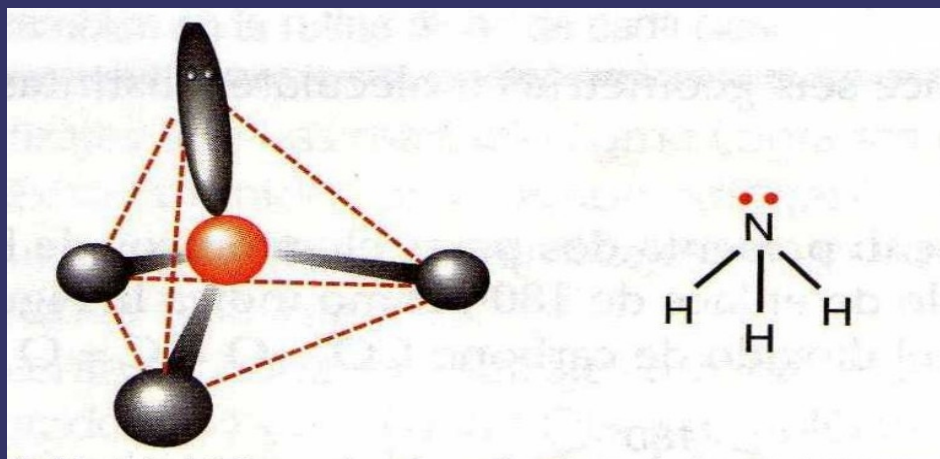
Teoria de repulsió entre els parells d'electrons de la capa de valència (RPECV)

- Les estructures de Lewis són simples esquemes. Tenen l'avantatge de la seva simplicitat, però no ens proporcionen cap informació sobre la geometria real de les molècules.
- A partir d'aquestes estructures, Gillespie va idear aquest model que permet abordar aquesta qüestió.
- Aquest model parteix de la idea següent: la geometria de les molècules està determinada per les repulsions que exerceixen entre ells els parells d'electrons de la capa de valència de l'àtom central, tant si són parells compartits com si no ho són.
- Primer hem de dibuixar l'estructura de Lewis de cada molècula i veure quants parells d'electrons hi ha al voltant de l'àtom central.
- Els parells d'electrons compartits s'anomenen també parells enllaçants i els no compartits parells no enllaçants.
- Els parells d'electrons no enllaçants sempre es col.loquen de manera que es minimitzin les repulsions electrostàtiques entre ells. Per aconseguir-ho, l'angle format per qualsevol dels parells d'electrons ha de ser com més gran millors

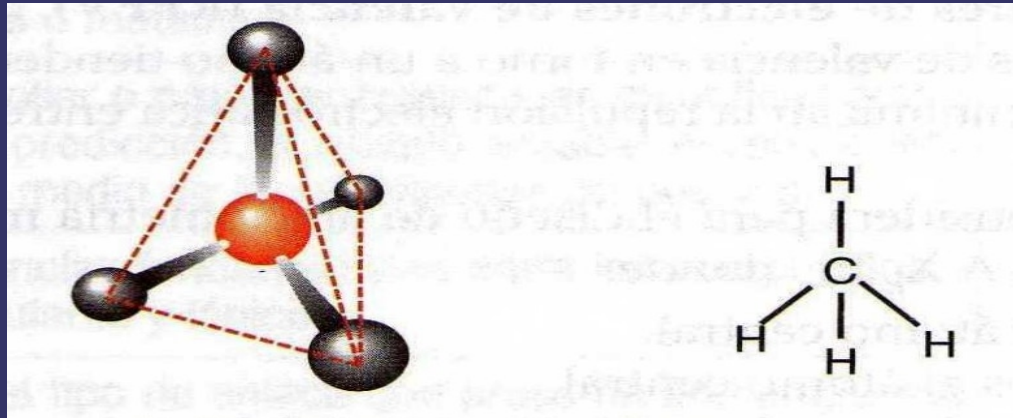


Exemples

- Considerem la molècula d'amoníac.
- L'estructura de Lewis ens permet observar que al voltant de l'àtom central -el nitrogen- hi ha quatre parells d'electrons: tres d'enllaçants (PE) i un de no enllaçant. (PNE).
- La disposició geomètrica que minimitza les repulsions entre els quatre parells d'electrons és la tetraèdrica. Per tant, tres dels quatre vèrtexs del tetraedre estan ocupats per àtoms d'hidrogen, i el quart, pel parell d'electrons no compartits.
- La geometria de la molècula d'amoníac està determinada per les posicions ocupades pels seus àtoms. Es tracta d'una molècula que té forma de piràmide amb base triangular, que s'anomena piràmide trigonal. Els dos electrons no compartits els podem imaginar ubicats cap al vèrtex superior del tetraedre hipotètic del qual el N seria el centre.
- L'angle d'enllaç H-N-H seria de $109,5^\circ$, si formessin un tetraedre regular. Les mesures experimentals donen per l'amoníac un angle d'enllaç de $107,5^\circ$. L'explicació d'aquest fet es troba en la naturalesa dels parells no enllaçants. A diferència dels parells enllaçants, que només són atrets pel nucli d'un àtom, els no enllaçants ocupen més espai. Per contrarrestar aquest efecte, i evitar al màxim les repulsions, els parells enllaçants es redistribueixen de manera que s'allunyen dels parells no enllaçants i fan més petit l'angle d'enllaç.



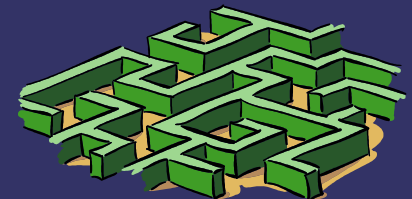
- ➔ Un altre cas seria el del metà, on l'àtom central, el carboni, té quatre parells d'electrons, tots enllaçants (PE).
- ➔ Els àtoms d'hidrogen ocupen els vèrtexs d'un tetraedre regular on la polaritat de tots els enllaços és idèntica.
- ➔ L'angle d'enllaç entre els àtoms H-C-H és de $109,5^\circ$.
- ➔ La suma de tots els moments dipolars és zero, per tant és una molècula apolar.





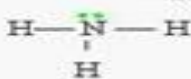

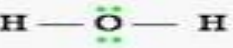

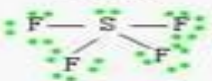
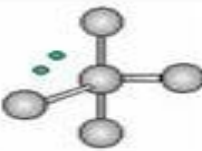
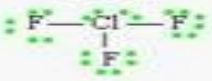
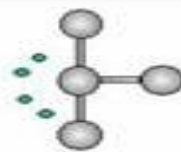
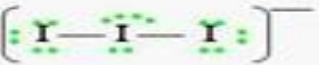
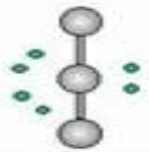
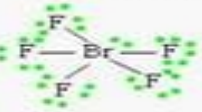
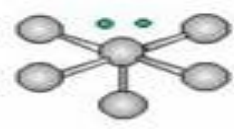
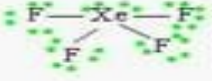
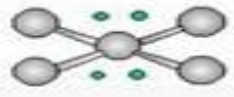
Finalment, considerem de quina manera la presència d'enllaços múltiples al voltant de l'àtom central afecta la geometria de les molècules. Per exemple, la molècula de cianur d'hidrogen és:



Al voltant de l'àtom central de carboni, hi ha quatre parells d'electrons, tots enllaçants. Ara bé, a efectes de geometria molecular, només n'hem de comptabilitzar dos, el de l'enllaç C-H i el de l'enllaç $\text{C}\equiv\text{N}$, ja que considerem que els tres parells d'electrons de l'enllaç $\text{C}\equiv\text{N}$ se situen en la mateixa direcció.



Quadre resum

| | | | | |
|---|--|---------------------------------------|---|---|
| <p>SnCl₂</p>  | <p>PE = 2 PL = 1</p> | <p>Triangular plana</p> |  | <p>Angular < 120°</p> |
| <p>NH₃</p>  | <p>PE = 3 PL = 1</p> | <p>Tetraédrica</p> |  | <p>Pirámide Trigonal 107°</p> |
| <p>H₂O</p>  | <p>PE = 2 PL = 2</p> | <p>Tetraédrica</p> |  | <p>Pirámide Trigonal 105°</p> |
| <p>SF₄</p>  | <p>PE = 4 PL = 1</p> | <p>Bipirámide trigonal</p> |  | <p>Balanzín</p> |
| <p>ClF₃</p>  | <p>PE = 3 PL = 2</p> | <p>Bipirámide trigonal</p> |  | <p>Forma de T</p> |
| <p>I₃⁻</p>  | <p>PE = 2 PL = 3</p> | <p>Bipirámide trigonal</p> |  | <p>Lineal</p> |
| <p>BrF₅</p>  | <p>PE = 5 PL = 1</p> | <p>Octaédrica</p> |  | <p>Pirámide cuadrada</p> |
| <p>XeF₄</p>  | <p>PE = 4 PL = 2</p> | <p>Octaédrica</p> |  | <p>Plana cuadrada</p> |

Introducció als mètodes espectroscòpics en la determinació de l'estructura de les molècules

A mesura que la ciència ha anat avançant, ha anat assumint un paper important la instrumentació, és a dir, la caracterització de les propietats d'una substància o barreja a partir de la informació que ens dóna un instrument analític.

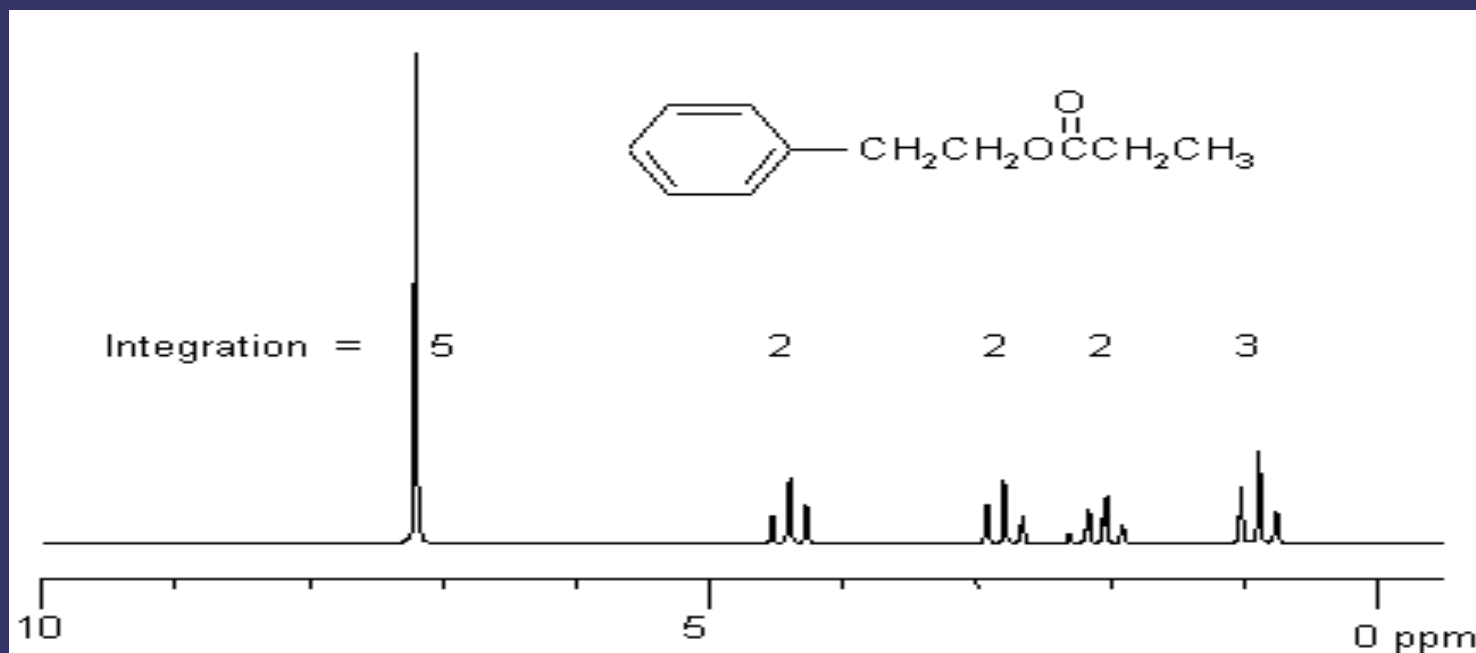
Tant la química moderna com la medicina són un gran exemple de la utilització d'aparells de realització d'anàlisis o detecció de malalties. Avui dia moltes especialitzacions dins del món químic necessiten equips electrònics complexos.

En el camp de l'anàlisi i la identificació de compostos desconeguts, aquests mètodes són imprescindibles, tot seguit esmentarem alguns dels més importants.



Analitzador d'espectre de ressonància magnètica nuclear (RMN)

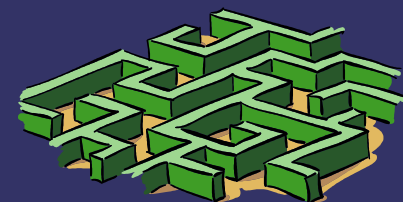
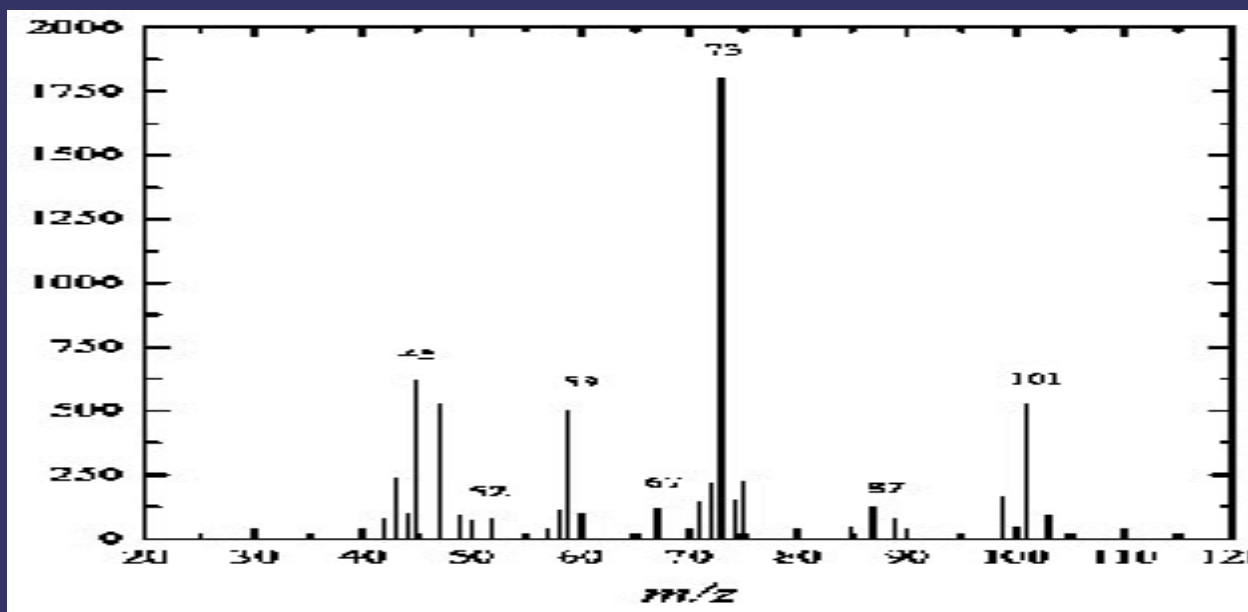
Determina amb molta precisió la situació, la disposició i la forma dels hidrògens que envolten una molècula. A partir d'aquesta informació es pot deduir l'esquelet de l'estructura molecular de la substància que s'estudia. S'utilitza molt en els camps de la química orgànica i de la bioquímica, a causa de la presència abundant d'hidrògens en la composició de les seves molècules. Aquesta tècnica també té una gran aplicació mèdica.



Espectroscopia de masses (MS)

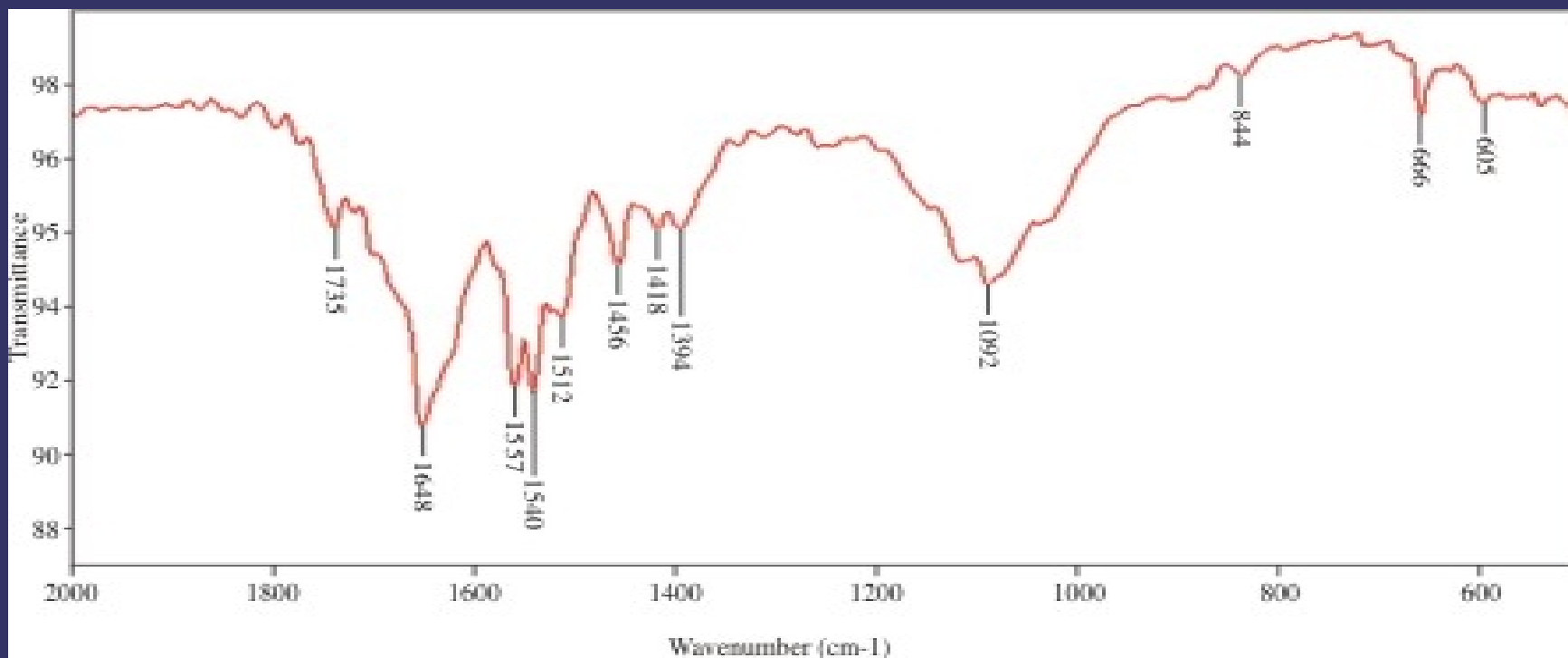
Aporta dades sobre la massa molecular, la fórmula i la disposició dels diferents components dins d'una molècula.

Aquesta tècnica analítica instrumental d'alta sensibilitat es basa en ionitzar els compostos, trencant-ne les estructures moleculars, i tot seguit, analitzar les masses dels ions produïts, aplicar-hi un detector o comptador d'ions i, finalment, un sistema de processament de dades que reproduïx l'espectre de masses, és a dir, la proporció d'ions de cada massa.



Analitzador d'espectre infraroig (IR)

Aporta informació sobre la presència o absència de grups funcionals orgànics, com el grup alcohol -OH, el grup aldehyd- CHO, el grup àcid -COOH, etc.



Analitzador d'espectre ultraviolat (UV)

Reflecteix les excitacions electròniques dels àtoms d'una molècula, i és especialment útil en la detecció d'enllaços múltiples.

