

Legături între atomi & formule chimice

Ştiinţe ale naturii - Compuşi chimici

www.enciclopul.ro

1 Valența

Valența este indicele chimic care arată capacitatea de combinare a unui anumit element. Stabilirea modului în care se formează substanțele din elemente se realizează în funcție de valență.

Metalele din grupele IA, IIA, IIIA (principale) au întotdeauna valența egală cu numărul grupei și se numește *electrovalență*. Spre exemplu:

Elementul	Grupa	Valența
Sodiu	IA	I
Magneziu	IIA	II
Aluminiu	IIIA	III
Potasiu	IA	I
Calciu	IIA	II

Pentru nemetale, hidrogenul și oxigenul sunt considerate de referință. Valența lor este fixă (I pentru hidrogen și II pentru oxigen). Există compuși numiți peroxizi în care valența oxigenului diferă! (vom discuta despre ei la *Oxizi*).

Astfel, nemetalele au valența 8 minus numărul grupei în raport cu hidrogenul și metalele (*electrovalență*). În raport cu oxigenul au multiple *covalente*, valența maximă fiind egală cu numărul grupei. Următoarele valențe scad din 2 în 2. Exemple de nemetale cu valențele lor:

Elementul	Grupa	Electrovalență	Covalențele
Carbon	IVA	IV	IV, II
Azot	VA	III	V, III
Fluor	VIIA	I	VII, V
Clor	VIIA	I	VII, V, III, I
Sulf	VIA	II	VI, IV
Fosfor	VA	III	V, III
Brom	VIIIA	I	VII, V

Elementele tranzitionale folosesc valențe diferite, având în vedere faptul că pot ceda electroni de pe ultimul sau de pe penultimul strat. Exemple:

Fier	II, III
Cupru	I, II
Nichel	II
Zinc	II
Argint	I
Aur	I, III
Platină	II, IV, VI
Mercur	I, II

Grupările de atomi au valență deductibilă din substanțele de referință – apă, acizi (vom discuta la *Acizi, Baze, Săruri*), prin aplicarea legii de echilibru, pe care o vom studia în cele ce urmează.

2 Ionii. Ionizarea

Ionii sunt particule atomice încărcate electric. Ele aparțin aceluiași element ca și atomul din care se formează, având în vedere că numărul lor atomic Z rămâne constant, dar se modifică numărul de electroni. Astfel, prin acceptare de electroni se formează particule încărcate negativ, iar prin cedare se formează particule electropozitive.

În general, ionii elementelor din grupele principale sunt ușor de format. Orice atom tinde să ajungă la stări stabile (dublet pe primul strat, octet pe următoarele), astfel metalele din primele trei grupe principale cedează toți electronii de pe ultimul strat, iar nemetalele acceptă până la completarea ultimului strat cu 2 electroni (stratul K), respectiv cu 8 electroni (straturile L, M, N etc.).

De exemplu $\text{Al} \xrightarrow{-3e^-} \text{Al}^{3+}$ reprezintă procesul de formare a ionului de aluminiu. El cedează 3 electroni pentru a se obține particula "ion de aluminiu", cu sarcina $3+$, conform convenției discutate în articolul *Structura atomului*.

Formarea $\text{Cl} \xrightarrow{+1e^-} \text{Cl}^-$ este ilustrarea procesului de ionizare negativă la clor. Este acceptat 1 electron, obținându-se un ion al clorului cu sarcina $1-$.

În ce privește formarea ionilor pozitivi ai metalelor tranzitionale avem posibilitatea de a forma mai multe tipuri de ioni, aspect observat și din faptul că aceste elemente au mai multe valențe. De exemplu formarea fierului divalent $\text{Fe} \xrightarrow{-3e^-} \text{Fe}^{2+}$ și a fierului trivalent $\text{Fe} \xrightarrow{-3e^-} \text{Fe}^{+3}$ sunt formările de ioni la fier.

3 Compușii ionici. Formulele lor chimice

După cum am văzut în secțiunea precedentă, ionii sunt încărcați electric și rezultă prin cedare/acceptare de electroni. Așadar, aceste procese trebuie să se realizeze concomitent între un metal și un nemetal, formându-se astfel un compus ionic.

Spre exemplu, după formările $\text{Al} \xrightarrow{-3e^-} \text{Al}^{3+}$ și $\text{Cl} \xrightarrow{-3e^-} \text{Cl}^-$ discutate mai sus, având în vedere proprietatea compușilor de a fi neutri din punct de vedere electric, trebuie găsite valorile minime m și n pentru care sunt m atomi de aluminiu și n de clor iar sarcina totală este nulă. Astfel avem ecuația:

$$3m - n = 0$$

Iar valorile minime sunt $m = 1$, $n = 3$. Această formulă se scrie AlCl_3 (indicele fiecărui element reprezintă numărul de atomi de un tip, indicele 1 nu se scrie). Generalizând, avem că într-un compus între un metal ionizat la $+a$ și un nemetal ionizat la $-b$, ecuația este:

$$am - bn = 0$$

Echivalent cu a spune că:

$$am = bn$$

Dacă notăm cu $d = (m,n)$, $m = dx$, $n = dy$, $(x, y) = 1$, folosind notațiile matematice cunoscute, ecuația se scrie:

$$adx = bdy$$

Echivalent cu:

$$ax = by$$

Obținem de aici relația:

$$y \mid ax$$

Dar cum $(x, y) = 1$ găsim că:

$$y \mid a$$

Folosind proprietatea relației de divizibilitate putem scrie:

$$a = yk, k \in \mathbb{N}$$

Înlocuind în relație rămâne că:

$$ykx = by$$

Și rezultă că

$$b = xk$$

Cum m, n trebuie să fie minime, x, y minime, adică k maxim. Ceea ce duce la:

$$k = (a, b)$$

Înseamnă că $m = \frac{db}{(a, b)}$ și $n = \frac{da}{(a, b)}$. Pentru ca m, n minime, alegem $m = x$ și $n = y$, adică $d = 1$ (le alegem prime între ele). Atunci soluția minimă a ecuației pe care o căutăm este:

$$\begin{cases} m = \frac{b}{(a,b)} \\ n = \frac{a}{(a,b)} \end{cases}$$

Un algoritm de determinare "mai puțin matematic" ar fi:

1. Stabilirea formării ionilor și a sarcinilor lor electrice. $+a$ și $-b$.
2. Găsirea celui mai mare număr m pentru care a și b se împart exact la m . De exemplu, între 4 și 6, acest număr ar fi 2. Între 1 și 3, 1. Între 2 și 4, 2. Matematic vorbind, $m = (a, b)$ și are un algoritm de calcul propriu.
3. Calculăm $\frac{a}{m}$ și $\frac{b}{m}$. Pentru 4 și 6, numerele acestea sunt 2 și 3; pentru 1 și 3, numerele sunt 1 și 3, iar pentru 2 și 4, 1 și 2.
4. Trecem primul număr în dreptul celui de-al doilea element, iar al doilea număr în dreptul primului element ca indice ($A_{\frac{b}{m}} B_{\frac{a}{m}}$). Am obținut formula compusului ionic.

Vom determina formula compusului ionic dintre Al și S:

1. Formarea ionului de aluminiu ($Al \xrightarrow{-3e^-} Al^{3+}$) și formarea ionului de sulf ($S \xrightarrow{+2e^-} S^{2-}$) sunt ilustrate de ecuații. Astfel, sarcina primului este $+a = +3$, iar a celui de-al doilea, $-b = -2$.
2. Observăm că cel mai mare număr m pentru care $m \mid 3$ și $m \mid 2$ este $m = 1$.
3. Calculăm $\frac{a}{m} = \frac{3}{1} = 3$ și $\frac{b}{m} = \frac{2}{1} = 2$.
4. Obținem formula Al_2S_3 .

Proprietățile fundamentale ale compușilor ionici sunt:

- Sunt în general solizi și duri, se întâlnesc sub formă cristalină;
- Au puncte de topire și de fierbere înalte;
- Sunt solubili în solvenți polari și insolubili în solvenți nepolari;
- Sunt slabi conductori termici și electrici în stare solidă, dar foarte buni conductori electrici în soluție și topitură, ca urmare a prezenței ionilor liberi în substanță.

4 Legătura covalentă și moleculă

La legătura între două nemetale, nu se poate vorbi de cedare/acceptare de electroni, având în vedere faptul că ambele elemente prezintă caracter elec-tronegativ. Astfel, elementele își pun în comun electronii pentru a forma octet sau dublet pe ultimul strat.

Vom modela formarea moleculei de dioxid de carbon CO₂.



Unde electronii sunt notați ·, iar legăturile cu –. Electronii care nu participă la legături sunt neparticipanți. Modelul restrâns este cel în care electronii sunt ignorati, trecute fiind doar legăturile O = C = O. Semnul = reprezintă o dublă legătură.

Există molecule realizate între elemente de același tip (ex. Cl – Cl, molecule de Cl₂, O = O, molecule de O₂, N ≡ N, molecule de N₂ etc.) sau între elemente diferite (ex. S = C = S, molecule de CS₂).

Compusul covalent se numește molecule. Molecule poate fi nepolară (fără polarizare +/–, în general între aceleasi tipuri de elemente) sau polară (între elemente diferite, unde o parte a moleculei pare a se polariza pozitiv, iar alta negativ).

5 Formulelor chimice pe baza valențelor

Între două elemente A și B se stabilește formulă chimică în funcție de valențe, dacă A și B nu sunt simultan metale. Astfel, considerăm că B este nemetal. Dacă A este metal, folosim electrovalențele celor două. Dacă A este nemetal, folosim covalențele celor două. Regula seamănă cu cea a stabilirii formulei în funcție de sarcinile ionilor. Dacă a, b sunt valențele, formula este A_(a,b)^b B_(a,b)^a.

Spre exemplu, între Fe și Cl, avem formulele posibile: FeCl₂ (pentru fier cu valență II) și FeCl₃ (pentru fier cu valență III). Între Cl și O avem formulele posibile Cl₂O (pentru clor I), Cl₂O₃ (pentru clor III), Cl₂O₅ (pentru clor V) și Cl₂O₇ (pentru clor VII).