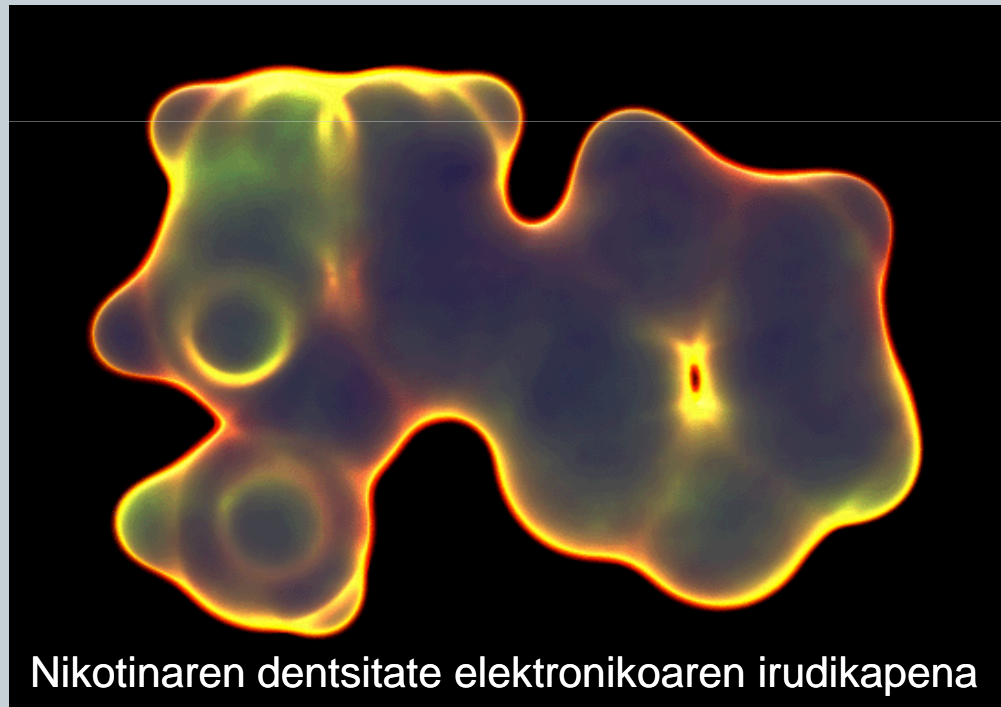


5. Gaia: Lotura Kimikoa

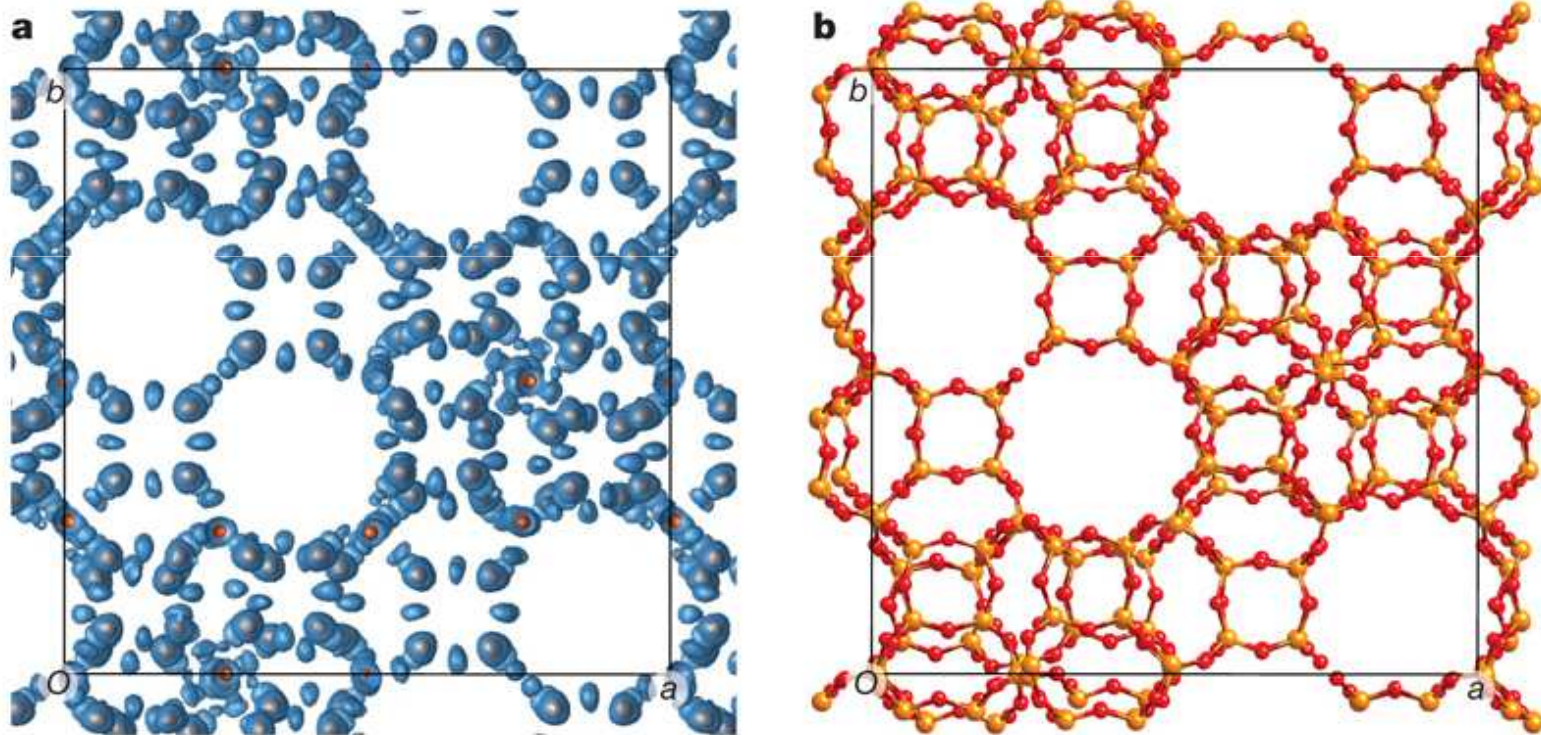
- Sarrera
- Lotura ionikoa
- Lotura kobalentea
- Lotura metalikoa
- Lotura metalikoa
- Lotura intermolekularrak



5.1. SARRERA

Zergatik materia edo sustatziak dira diren modukoak?

Zeolita baten bi irudikapen: (a) dentsitate elektroniko eta (b) atomoek osatzen



•JL Sun *et al. Nature* **458**, 1154-1157 (2009) doi:10.1038/nature07957

“Atomoen eta molekulen arteko lotura”

- *Lotura motak:*

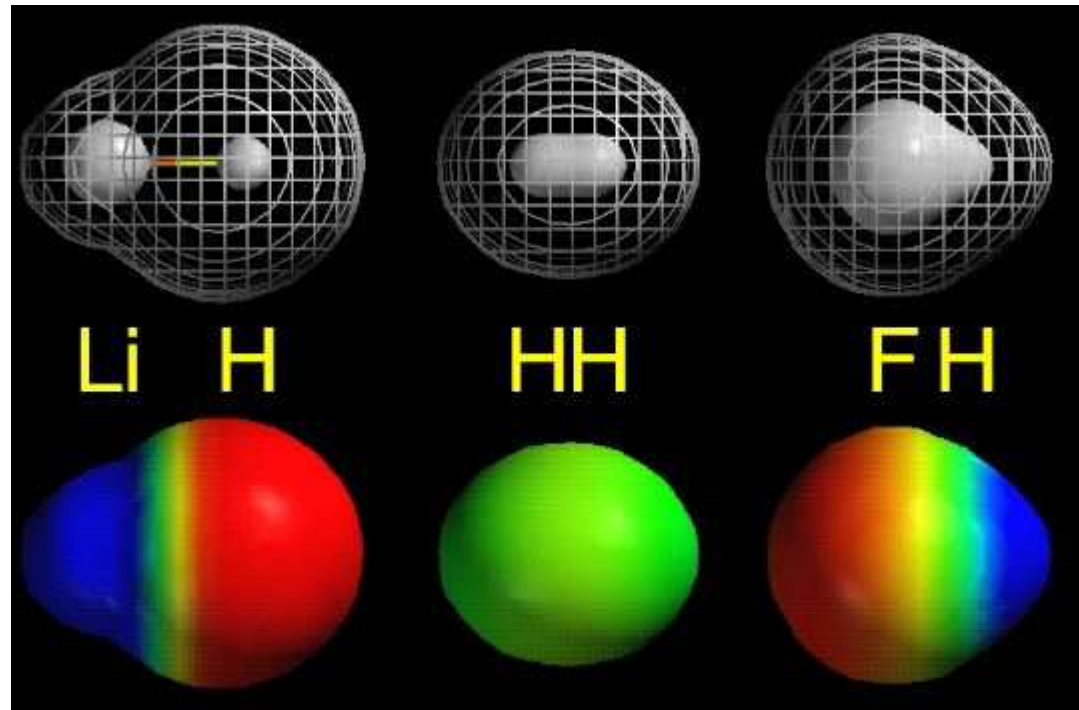
- Lotura ionikoa
- Lotura metalikoa
- Lotura kobalentea

- *Lotura kobalentea:*

- Zortzikotearen araua
- Balentzi geruzako elektroi bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)
- Balentzi loturaren teoria
- Hibridazioa, lotura anizkoitzak, erresonantzia

- *Molekulen arteko loturak:*

- Van der Waals-en indarrak
- Ioi-dipolo indarrak
- Hidrogeno loturak
- Elkarrekintza hidrofobikoak



5.2. LOTURA IONIKOA

5.2.1 EZAUGARRI OROKORRAK ETA PROPIETATEAK

5.2.2 EGITURAK

5.2.3 SARE ENERGIA

- Born-Lande Ekuazioa

- Born-Haber Zikloa

5.2.4 EREDU IONIKOAREKIKO DESBIDERAPENAK: POLARIZAZIOA

- Izaera Ioniko vs Kovalente

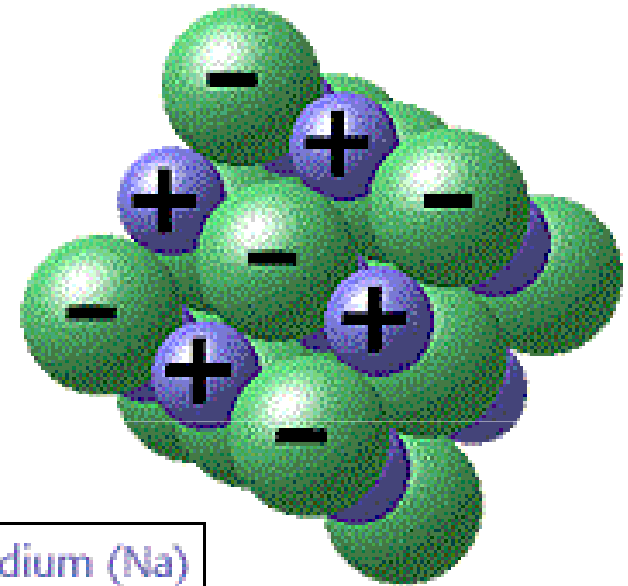
5.2.1 EZAUGARRI OROKORRAK ETA PROPIETATEAK

EZAUGARRI OROKORRAK

Lotura ionikoa \implies Konposatu ionikoetan

Ad.: Halita, NaCl

- *Ez-metalak* (Anioia) + *Metalak* (Katioia)
- Metalek katioi bihurtzeko joera dute
(ionizazio energia baxuak, elektropositiboak)
- Ez-metalek anioi bihurtzeko joera dute
(afinitate elektroniko altuak, elektronegatiboak)
- Lotura ionikoa ioi positibo eta negatiboen arteko indar elektrostatikoen bitartez gertatzen da.
- **Indar elektrostatiokoek simetria erradiala dute**, hortaz, sare kristalino ioniko tridimentsional bat eratuko da.
- Lotura ez-zunzendua



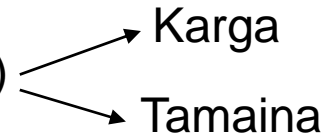
sodium (Na)
chlorine (Cl)

PROPIETATE FISIKOAK

➤ Oro har, egoera solidoan eroankortasun txikia.

- Urturik edo disoluzioan eroale bihurtzen dira

Eroankortasuna $\equiv f(\text{ioien higikortasuna})$



Karga
Tamaina

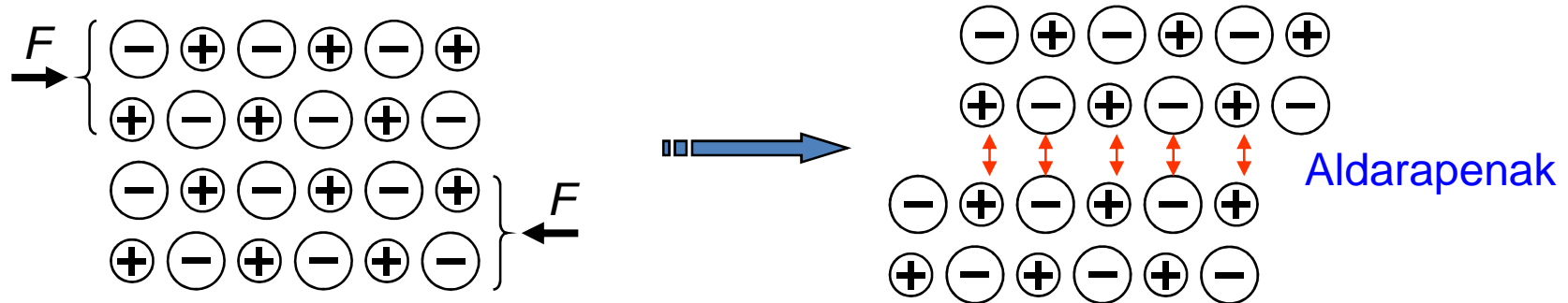
- Akatsek edota ez-purutasunek eragindako hutsune eta zirrikituak solido ionikoaren eroankortasuna handitu dezakete.

- Elektrolito solidoetan, eroankortasun ionikoa egituraren ezaugarriak ahalbidetzen dute.

➤ Urtze- eta irakite-puntu altuak, indar elektrostatikoak sare osoan zehar hedatzen baitira.

Salbuespenak: NH_4NO_3 $T_f = 170^\circ\text{C}$, etab...

➤ Konposatu **gogorrak**, baina **hauskorrak**



➤ **Disolbagarriak disolbatzaile polarretan.** Salbuespenak: MgO ez uretan solugarria. Faktore eraginkorrak:

- ϵ : disolbatzaia learen kte dielektrikoa

- Solbatazioa

5.2.2 EGITURAK

loiak modu ezberdinetan paketa daitezke, egitura ezberdinak aurkeztuz. Edozein kasutan, betebeharreko baldintzak:

- Katioien arteko aldarapenak murrizteko ahalik eta anioi gehien inguruan izatea komeni da. Gauza bera anioientzat.
- **Paketatzea maximoa** izango da, hutsune kopurua murriztuz, bolumena minimoa izan dadin. (PKT, PHT eta beste batzuk).
- Sare kristalinoa **elektrikoki neutroa** izango da, elektroneutralitatea.

loien karga eta erradioa egitura baldintzatzen duten bi faktore nagusietarikoak dira.

ERRADIO IONIKOA

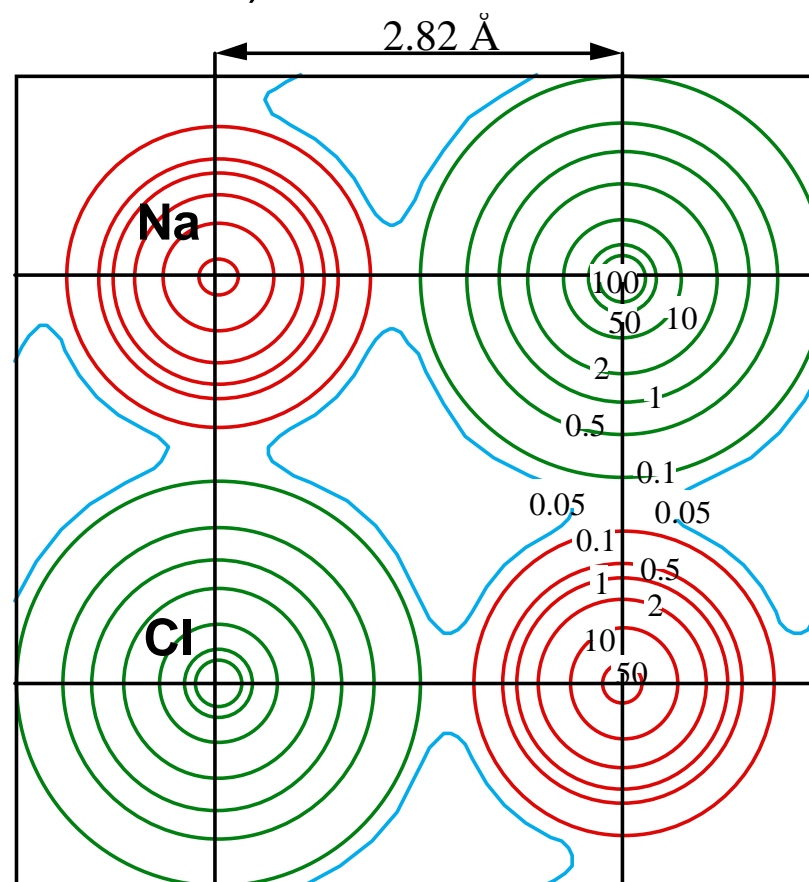
Bi ioien arteko distantzia metodo kristalografikoen bitartez erraz neur daiteke. Neurturiko distantzia horretatik habiatuz, zailtasuna erradio ionikoen esleipenean datza. Bi bide nagusi:

Zeharkako metodoak

Hurbilketa teorikoak (Pauling-en metodoa, Lande-ren metodoa...)

Metodo zuzenak

X-izpien difrakzio bidez lorturiko dentsitate elektronikoaren mapak aztertuz.



Joera orokorrak:

- KZ ↑ → r ↑
- Oxidazio egoera ↑ → r ↓
- Periodoan →
- Taldean ↑ → r ↓

ERRADIOEN ZATIDURA

Termodinamikoki egiturarik egonkorrena, ahalik eta kontrako kargadun ioi gehienen arteko kontaktua baimentzen duena izaten da.

Hortaz, karga ionikoaz gain, erradioen arteko zatidura erabakigarria izango da egituren. Ioi baten erradioa handiagoa den heinean, inguruan izan ditzakeen kontrako kargadun ioien kopurua handiago izango da. Honen arabera, katioi / anioi erradioen arteko erlazioak zehazten du koordinazio zbkia.

r⁺/r⁻	K.Z.	Koordinazio Poliedroa	
<0.155	2	Lineala	
0.155 – 0.225	3	Triangeluarra	
0.225 – 0.414	4	Tetraedroa	Adez. SiO ₄
0.414 – 0.732	6	Oktaedroa	Adez. NaCl
0.732 – 1	8	Kubikoa	Adez. CsCl

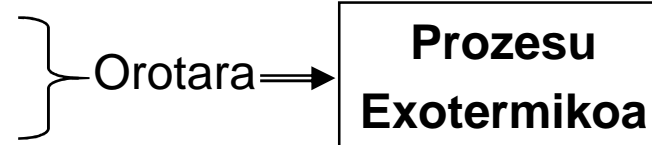
Halere, karga eta erradio ionikoaz gain, bestelako faktore batzuk ere erabakigarriak izan daitezke egitura ionikoan.

5.2.3 SARE-ENERGIA

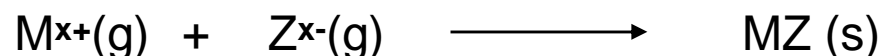
Lotura ionikoa eratzean bi prozesu eduki behar dira kontutan:

1. **Ioien formazioa** : Endotermikoa

2. **Elkarrekintza elektrostatisak** : Exotermikoa

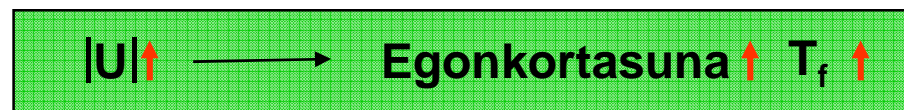


Sare-Energia (U): Konposatu baten mol bat disoziatzeko (ioiak gas egoerara eramanez) behar den energia.



$\Delta H = U < 0$
Beti exotermikoa!

$U \longleftrightarrow$ Egonkortasuna, $T_f, \dots \Rightarrow$



Sare-Energia (U) kalkulatzeko bi modu:

a) BORN-LANDE-ren Ekuazioa (teorikoa)

b) BORN-HABER Zikloa (enpirikoa)

Born-Lande-ren Ekuazioa

Eredu honetan solido ionikoa osatzen duten ioiak karga eta tamaina definitua duten partikula esferikoak eta zurrunkak dira. Ioien karga dela eta, beraien artean erakarpen zein aldarapen indarrak egongo dira, bestelako elkarrekintzen eragina (e- hodeien aldarapenak, VDW indarrak,...) arbuiautuko direlarik.

Modu honetan **E**-ren hurrengo adierazpenera ailega gaitezke:

$$U = \frac{A N Z^+ Z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

A: Madelung-Ktea; sarearen geometriaren araberakoa

N = Avogadro-ren zenbakia

Z^+ eta Z^- = ioien karga.

ϵ_0 = inguruaren konstante dielektrikoa.

r_0 : Distantzia interionikoa

n: Landé-faktorea / Uzokurdura-faktorea; ioien tamaina eta konf. elektronikoaren menpe

	[He]	[Ne]	[Ar]	besteak
n	5	7	9	12

Solido	U (kJ/mol)	T _F (K)
LiF	-1012	845
LiCl	-828	610
Na ₂ O	-2570	1275
MgO	-3890	2800

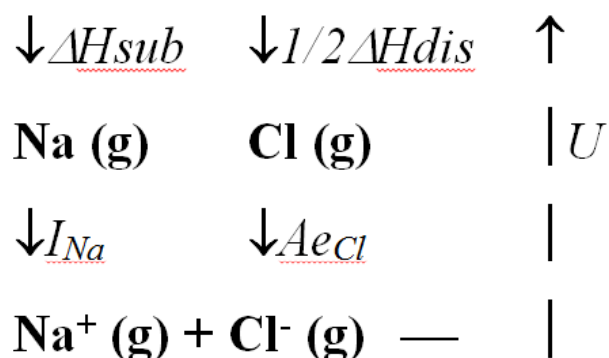
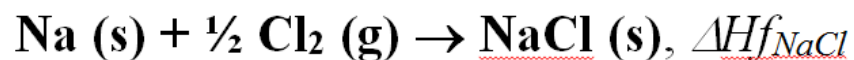
$$U \propto \frac{Z^+ Z^-}{r_+ + r_-}$$

loien karga: Z^+ eta $Z^- \uparrow \Rightarrow |U| \uparrow$

loien tamainua: r_+ eta $r_- \downarrow \Rightarrow |U| \uparrow$

Born-Haber-ren Zikloa

Ezin da Sare-**E** (U) zuzenean neurtu, baina ziklo termodinamikoek baimentzen duten zeharbidea erabiliz kalkula daiteke. Hala, **Born-Haber-en zikloa** (enpirikoa) Hess-en legean oinarritzen da. *Adibidea: NaCl (s)-ren zikloa.*



$$\Delta H_{f\text{NaCl}} = \Delta H_{\text{subNa}} + 1/2 \Delta H_{\text{disCl}_2} + I_{\text{Na}} + A_{\text{eCl}} + U$$

$$-398 \text{ kJ/mol} = 109 \text{ kJ/mol} + 121 \text{ kJ/mol} + 493.7 \text{ kJ/mol} - 356 \text{ kJ/mol} + U$$

$$U = -765.7 \text{ kJ/mol}$$

Born-Lande ekuaziotik (eredu ioniko purua) eta Born-Haber ziklotik (esperimentala) lortutako emaitzen erkaketak, solido ionikoaren izaera kobalentea neurtzea ahalbidetzen du. Bien arteko ezberdintasuna handia bada ekarpen kobalente nabariaren seinale izango da.

5.3. LOTURA KOBALENTEA

5.3.1 LOTURAREN INTERPRETAZIOA ELEKTROI BIKOTEAK PARTEKATUZ

- Lewis-en Eredua
- Geometria Molekularra (BGEBA)

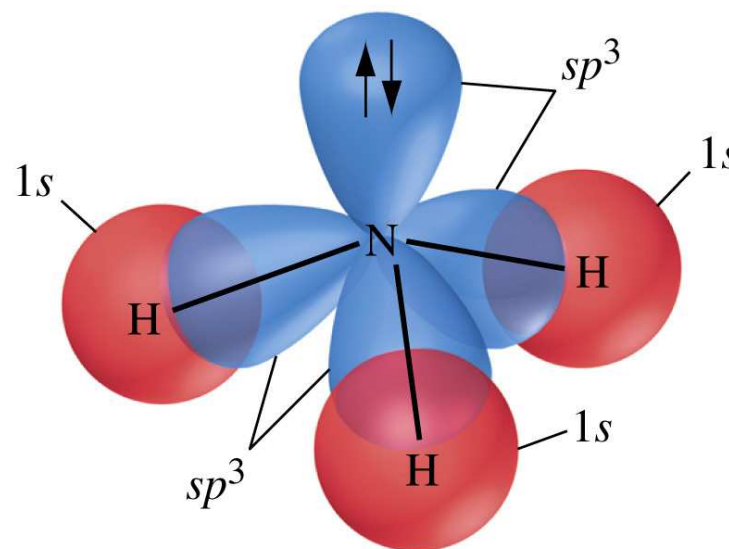
5.3.2. LOTURAREN INTERPRETAZIOA ORBITAL ATOMIKOEN BIDEZ. HIBRIDAZIOA

- Balentzia Loturaren Eredua. Orbital Hibridoak.

5.3.3 EREDU IONIKO ETA KOBALENTEAREN DESBIDAZIOAK. POLARIZAZIOA

5.3.4 ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

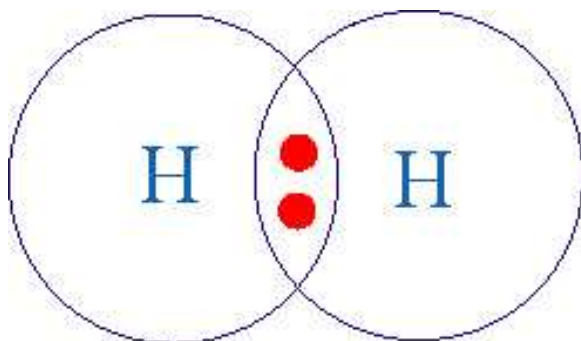
- H₂ molekula
- Beste molekula diatomiko batzuk
- Zenbait molekula poliatomiko



5.3.1 LOTURAREN INTERPRETAZIOA ELEKTROI BIKOTEAK PARTEKATUZ

LOTURA KOBALENTEA

- *Ez-metalak* (elektronegatiboa) + *Ez-metalak* (elektronegatiboa)
- **Lotura eratzen da elektroiak konpartitzean.**



Zortzikotearen araua:

“Atomoek, hidrogenoak izan ezik, lotura eratzean, elektroiak emateko, hartzeko edo banatzeko joera aurkezten dute, bere balentzia-mailako elektroien kopurua 8 izan arte”

Balentzia mailan zortzi elektroik?

=> Gas nobleen egitura elektronikoa (energi maila betea)

Hidrogenoa izan ezik?

=> Energi maila betea: 2 e⁻ (He)

LEWIS EGITURAK

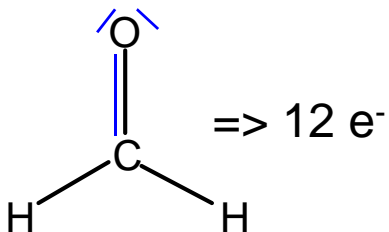
Lewis-en egiturak irudikatzeko urratsak:

1. Atomo bakoitzaren balentzia-elektroi kopurua atera.
2. Balentzia-elektroien batura kalkulatu, karga ionikoa ere kontutan hartu.
3. Molekularen egitura idatzi, atomoak lotura bakunen bidez lotuz.
4. Gainerako balentzia-elektroiak banatu, zortzikotearen araua kontutan hartuz.

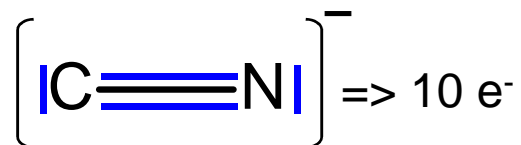


Balentzia-elektroien batura

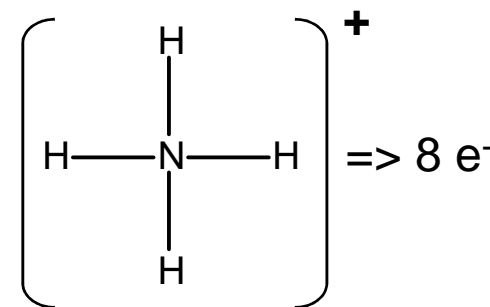
$$\text{BE: } 1+1+4+6 = 12 \text{ e}^-$$



$$\text{BE: } 4+5+1 = 10 \text{ e}^-$$



$$\text{BE: } 5+1+1+1+1-1 = 8 \text{ e}^-$$



Oharra: marra bakoitza => 2 e⁻

Atomo bakoitzaren **karga formala (KF)**:

“elektroiak banatuz atomoak izango lukeen karga”

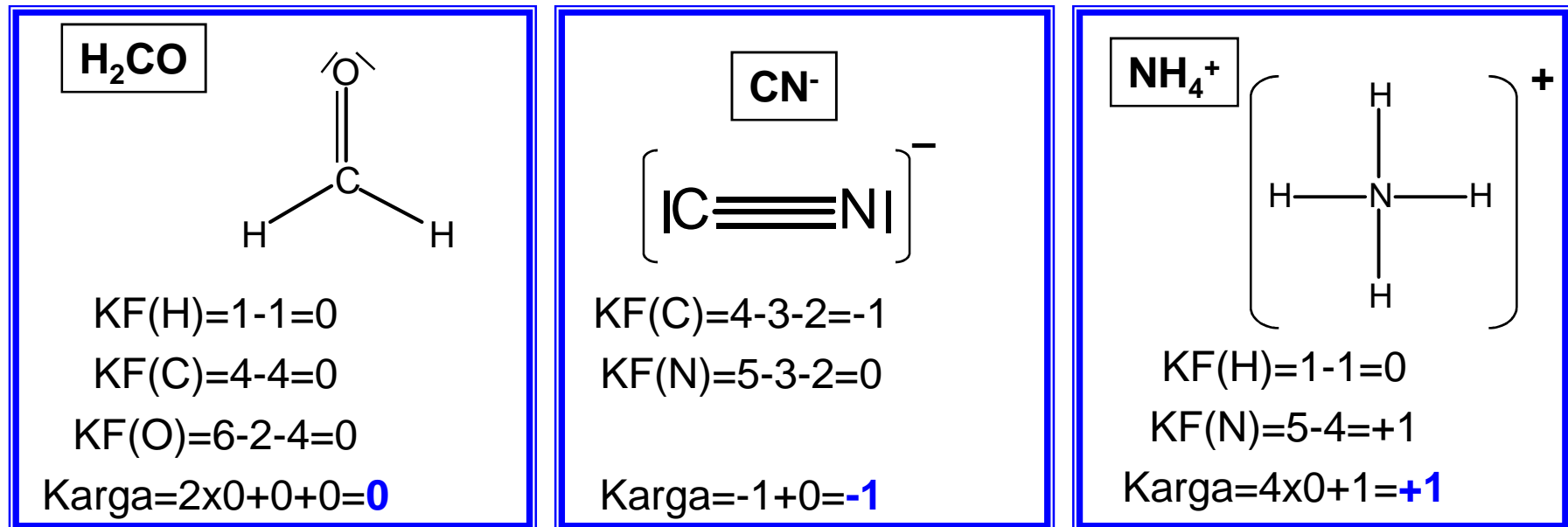
Oharra: Loturak osatzen duten elektroiak bi atomoen artean banatzen dira eta elektroi bikote bakartiak (loturak eratzen ez dutenak) dauden atomoari dagozkio guztiz.

$$KF = (\text{balentzia elektroiak}) - (\text{atomoari dagozkion elektroiak})$$

edo

$$KF = (\text{balentzia elektroiak}) - (\text{lotura kopurua}) - 2 \cdot (\text{bikote bakartiak})$$

“Atomo guztien karga formalen baturak eman behar du espeziearen karga”

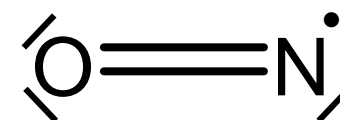
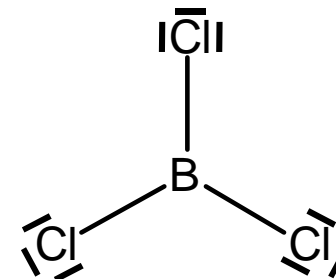
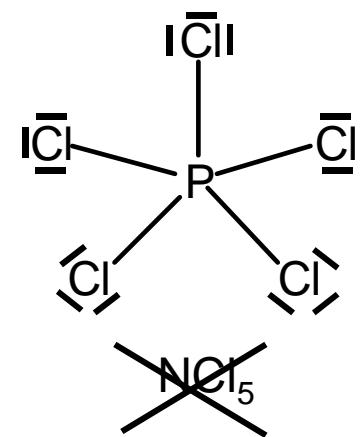


Zortzikotearen arauari egin beharreko **salbuespenak:**

- **3. eta hurrengo periodo**etako elementuek hutzik dituzten **d orbitalak** erabil ditzakete. Beraz, zortzi elektro baido gehiagor izan ditzakete (**Zortzikote-arauaren hedapena**). 2. periodoko elementuak d orbital eskuragarririk ez dutenez (2s 2p soilik) derrigorrez bete beharko dute zortzikotearen araua. *Kanpoko atomoek zortzikotearen araua beteko dute eta erdiko atomoa izango da zortzikote arauaren hedapena izan dezakeena.*

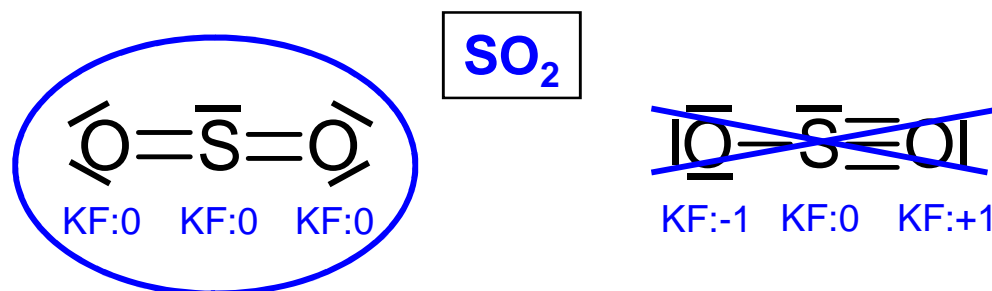
- **Be, B** eta **Al**-zko konposatuak zortzi elektro baido gutxiagor izan ditzakete.

- Balentzi-elektroi kopuru osoa **bakoitia** denean (atomo elektroposiboena geratzen da elektro baido kopuru bakoitiarekin). Erradikalak => oso erreaktiboak

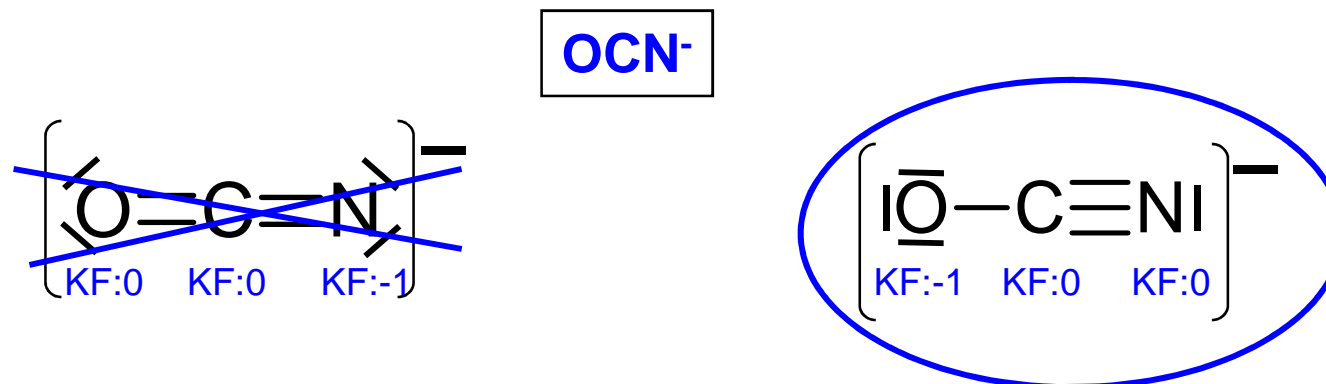


Batzutan, molekula batentzako zenbait egitura desberdin proposa daitezke, hauetatik egonkorrena zein den jakiteko ondoko irizpideak jarraitzen dira:

- Karga formal txikienak dituen egitura da faboratua dagoena.

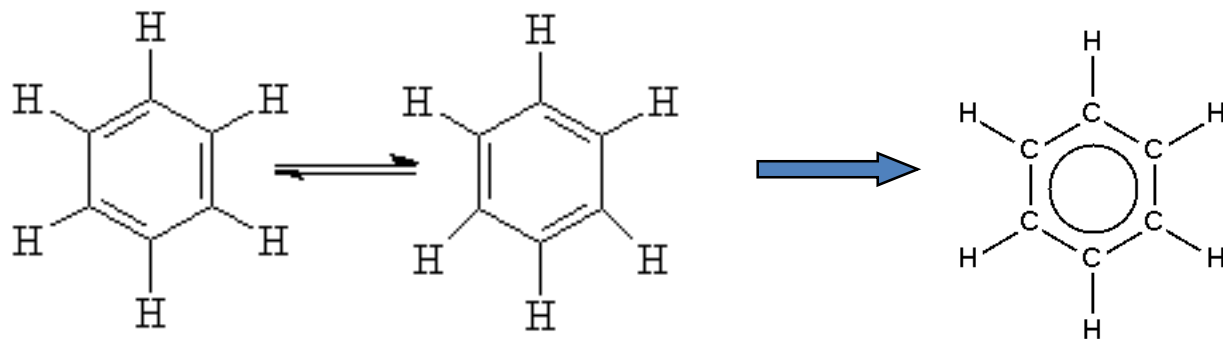
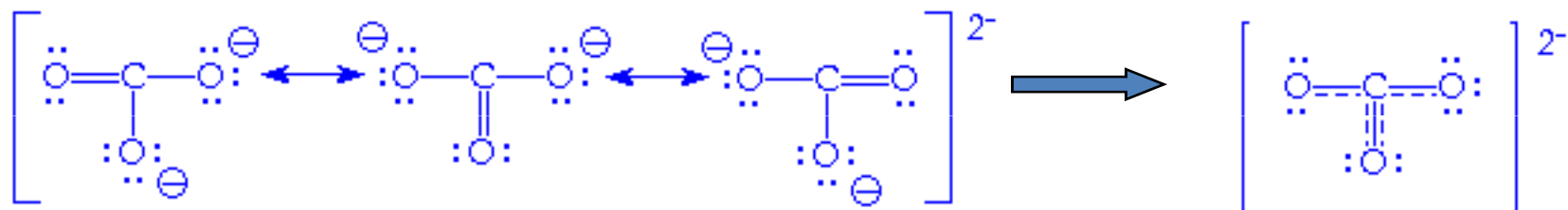


- Karga formal berdinak dituzten bi egituretatik, karga formal negatiboak atomo elektronegatiboenetan dituen da faboratua dena.



Erresonantzia

Beste zenbait kasutan energia berdineko hainbat egitura posible ditugu. Kasu hauetan, **benetako egitura: egonkorragoa** den eta **aurrekoak nahastuz** lortzen den egitura da:



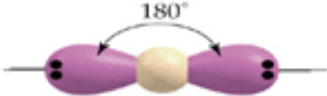
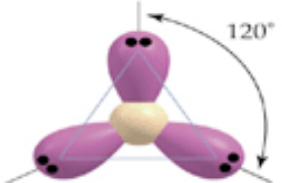
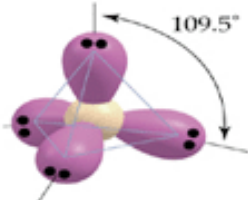
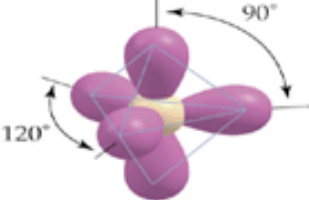
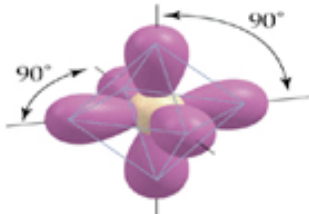
MOLEKULEN GEOMETRIA (BGEBA)

Balentzi geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)

- Elektroi bikoteak (loturak osatzen duten elektroi bikoteak eta elektroi bikote bakartiak) antolatzen dira beraien arteko aldarapen elektrostatikoak minimizatzen diren eran (ahalik eta aldenduen).

- Lotura anitzkoitzetako elektroi bikoteak multzo bakarra osatzen dute, beraz lotura bakunak izango balira bezala kontsideratzen dira.




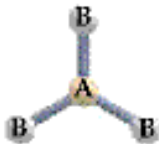
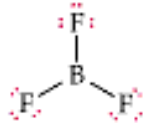
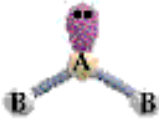
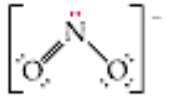
TABLA 9.1 Geometrías de los pares electrónicos en función del número de pares de electrones

Número de pares electrónicos	Acomodo de pares electrónicos	Geometría de pares electrónicos	Ángulos de enlaces predichos
2		Lineal	180°
3		Plana trigonal	120°
4		Tetraédrica	109.5°
5		Bipiramidal trigonal	120° 90°
6		Octaédrica	90° 180°

Balentzi geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)



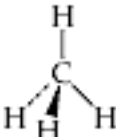
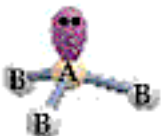
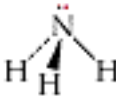


- Molekularen geometria ematen denean bakarrik izaten da kontutan atomoen kokapen erlatiboa, beraz elektroi-bikote bakartiak ez dira kontutan hartzen.

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH TWO, THREE, AND FOUR ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example	Angelua
2 pairs	 Linear	2	0	 Linear	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$ lineala	→ 180°
3 pairs	 Trigonal planar	3	0		 triangeluar laua	→ 120°
		2	1	 Bent	 angeluarra	

Balentzi geruzako elektro-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH TWO, THREE, AND FOUR ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Total Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example	Angelua
4 pairs	 Tetrahedral	4	0	 Tetrahedral	 → 109.5° tetraedrikoa	
		3	1	 Trigonal pyramid	 piramide trigonala	
		2	2	 Bent	 angeluarra	

Balentzi geruzako elektro-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)

TABLA 9.3 Geometrias de pares de electrones y formas moleculares para moléculas con cinco y seis pares de electrones alrededor del átomo central

Número de pares de electrones	Geometría de pares de electrones	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Geometría molecular	Ejemplo
-------------------------------	----------------------------------	------------------	---------------------	---------------------	---------

Angelua

5 pares



5

0



PCl5
bipiramide trigonal

→ 120°
90°

4

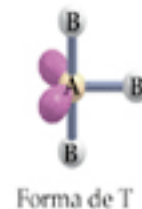
1



SF4
kulunka

3

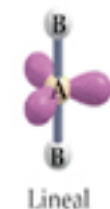
2



ClF3
T forma

2

3



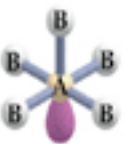



XeF2
lineala

Oharra: elektro-bikote bakartiak beti kokatzen dira posizio ekuatorialetan, aldarapen indarrak minimizatzeke.

Balentzi geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)

TABLA 9.3 Geometrías de pares de electrones y formas moleculares para moléculas con cinco y seis pares de electrones alrededor del átomo central

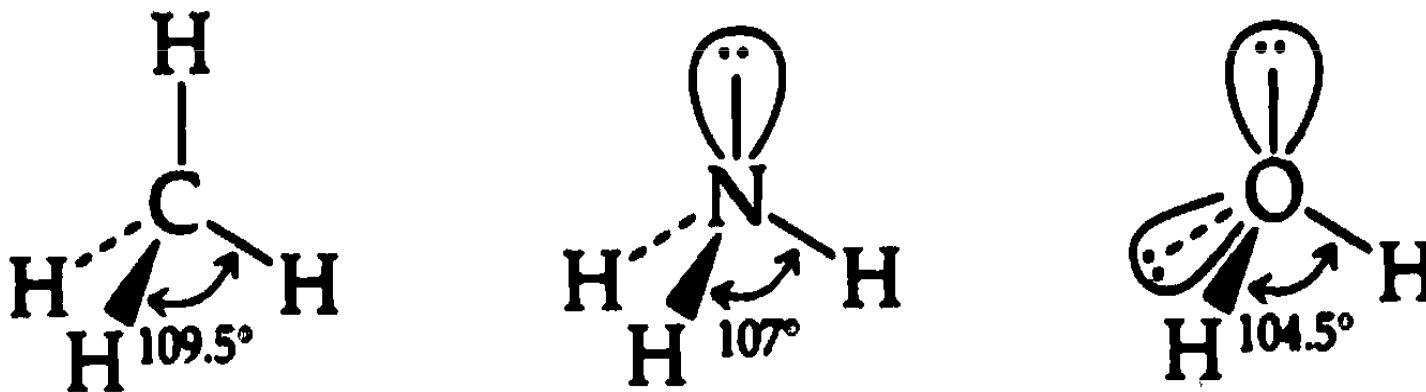
Número de pares de electrones	Geometría de pares de electrones	Pares enlazantes	Pares no enlazantes	Geometría molecular	Ejemplo
6 pares	 Octaédrica	6	0	 Octaédrica	SF_6 \longrightarrow 90° oktaedrikoa
		5	1	 Piramidal cuadrada	BrF_5 piramide karratua
		4	2	 Cuadrada plana	XeF_4 Karratu laua

Angelua

Balentzi geruzako elektroi-bikoteen arteko aldarapen metodoa (BGEBA)

Elektroi bikote bakartiak nukleo zentraletik hurbilago daudenez, bolumen handiago hartuko dute atomoaren inguruan loturetako elektroi bikoteak baino.

“Elektroi bikote bakartiek, loturetako elektroi bikoteek baino aldarapen handiagoak eragiten dituzte”



Antzeko gauza gertatzen da lotura anitzkoitzekin, lotura bakunetan baino elektroi gehiago pilatuta daudenez, eragiten dituzten aldarapenak handiagoak dira baita.

5.3.2 LOTURAREN INTERPRETAZIOA ORBITAL ATOMIKOEN BIDEZ. HIBRIDAZIOA

BALENTZI LOTURAREN TEORIA

Oinarriak

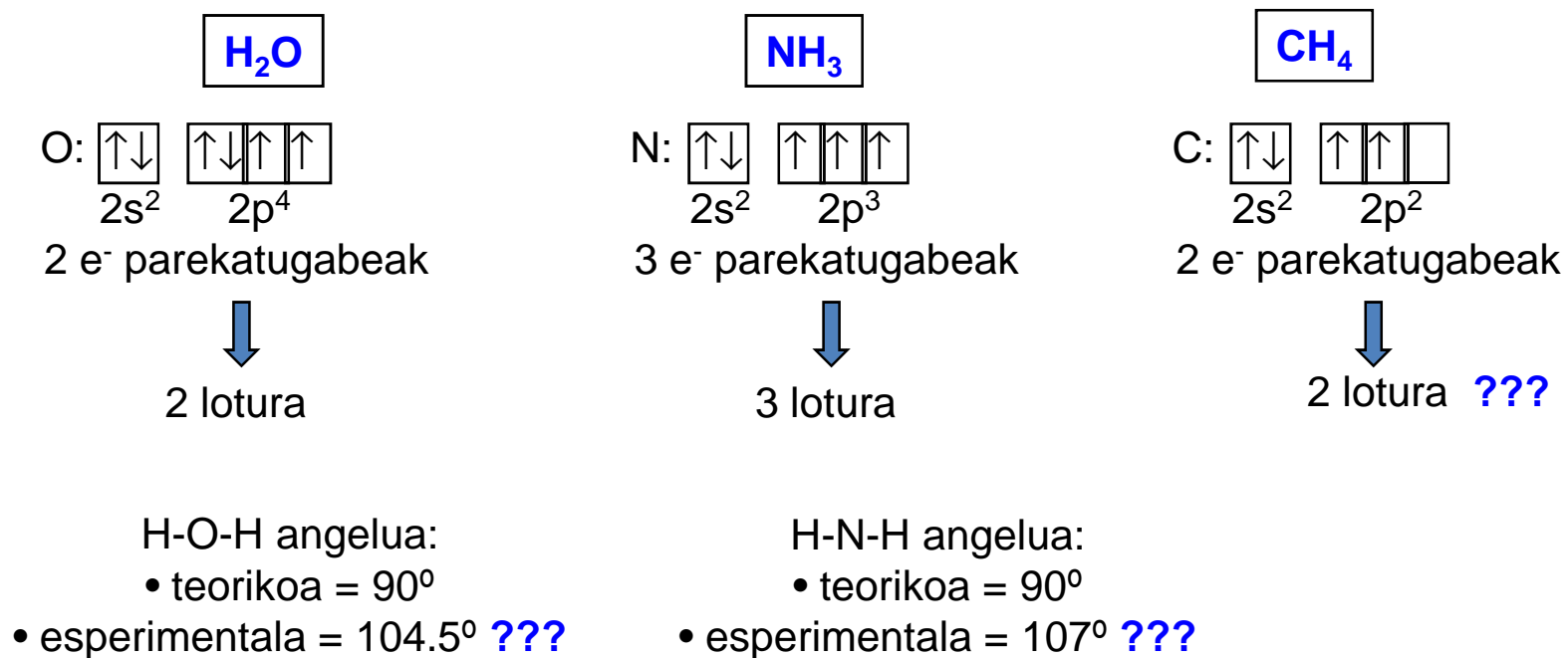
“Molekula osatzen duten atomoak aldagabe diraute eta balentzi elektroiek soilik hartzen dute parte loturetan”

LOTURA: Bi atomoetan erdiokupatuta dauden orbitalak gainjartzean, elektrioak parekatzen dira lotura eratuz.

Lotura eratzean bi nukleoen arteko espazioan dentsitate elektronikoa handitzen da, eta beraz beraien arteko aldarapen-indarra txikitu.

Loturak, gainjartzen diren orbitalen lehentasunezko norabidetan eratuko dira.

Adibideak:



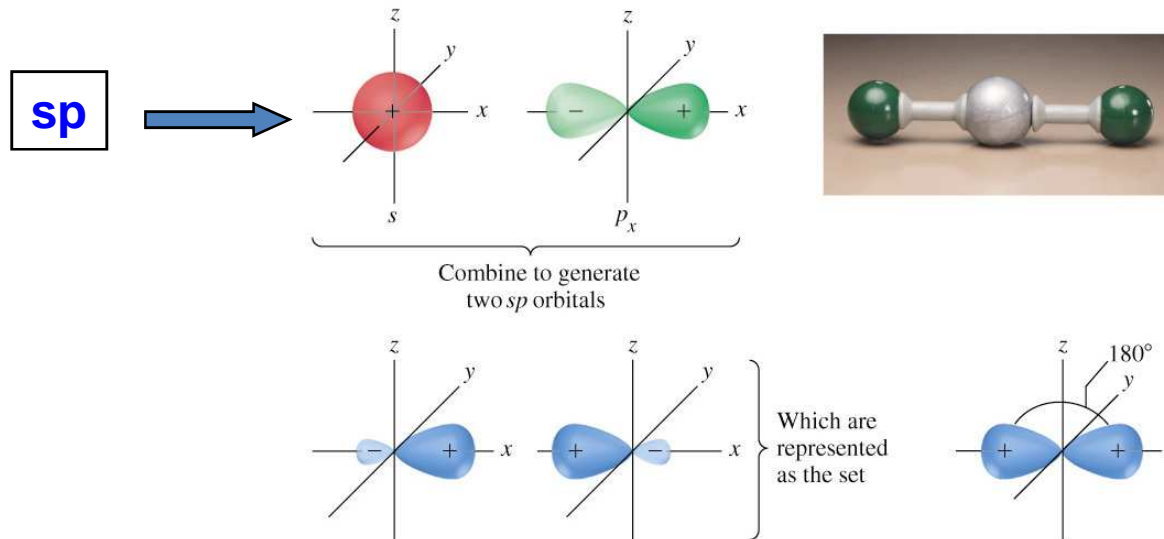
HIBRIDAZIOA

Balentzi loturaren teoriaren kontraesanei aurre egiteko hibridazioaren kontzeptua garatzen da.

Orbital hibridoa: orbital puruen konbinaketa

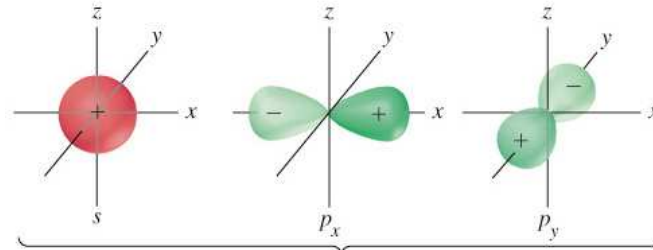
Hibridazioaren bitartez BGEBA metodoan agertzen diren geometria desberdinak lortu ditzakegu

- Hibridazioa energia antzekoa duten orbitalen artean gertatzen da: maila bera edo elkarren ondoan dauden orbitalen artean.
- Orbital hibridoen kopurua, konbinatutako orbital puruen kopuru berbera da.
- Izendapena: **sp** (1 s eta 1 p), **sp²** (1 s eta 2 p), **sp³** (1 s eta 3 p konbinatuz), **sp³d** (1 s, 3 p eta 1 d), etab.

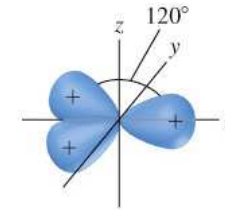
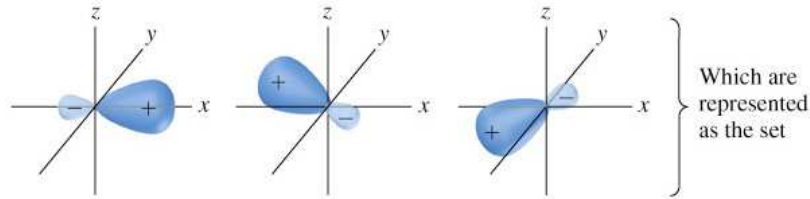


Oharra: gogoratu hibridatu gabeko bi p orbital ditugula.

sp^2

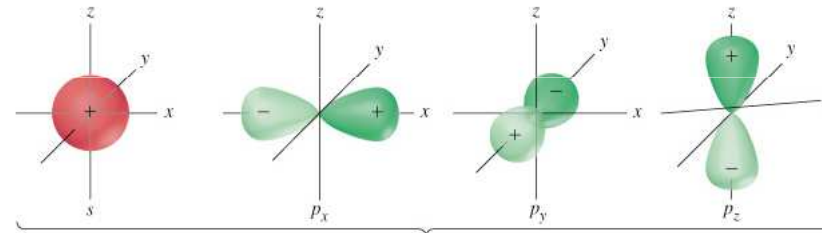


Combine to generate
three sp^2 orbitals

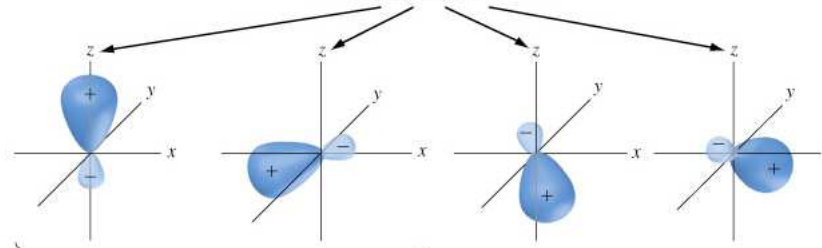


Oharra: hibridatu
gabeko p orbital
bat.

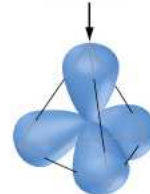
sp^3



Combine to generate
four sp^3 orbitals

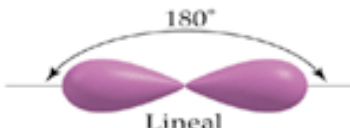
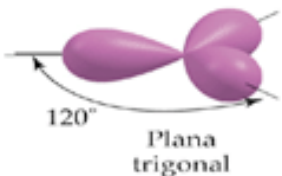
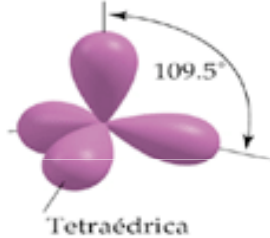
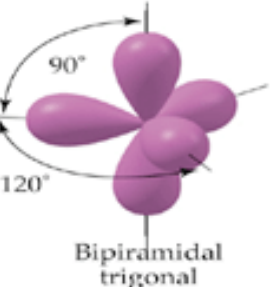
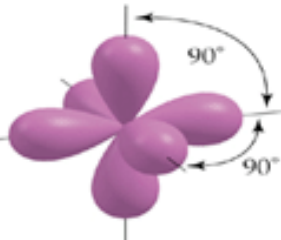


Which are represented
as the set



Hibridazioaren bitartez BGEBA metodoan agertzen diren geometria desberdinak lortu ditzakegu

TABLA 9.5 Acomodos geométricos característicos de los conjuntos de orbitales híbridos

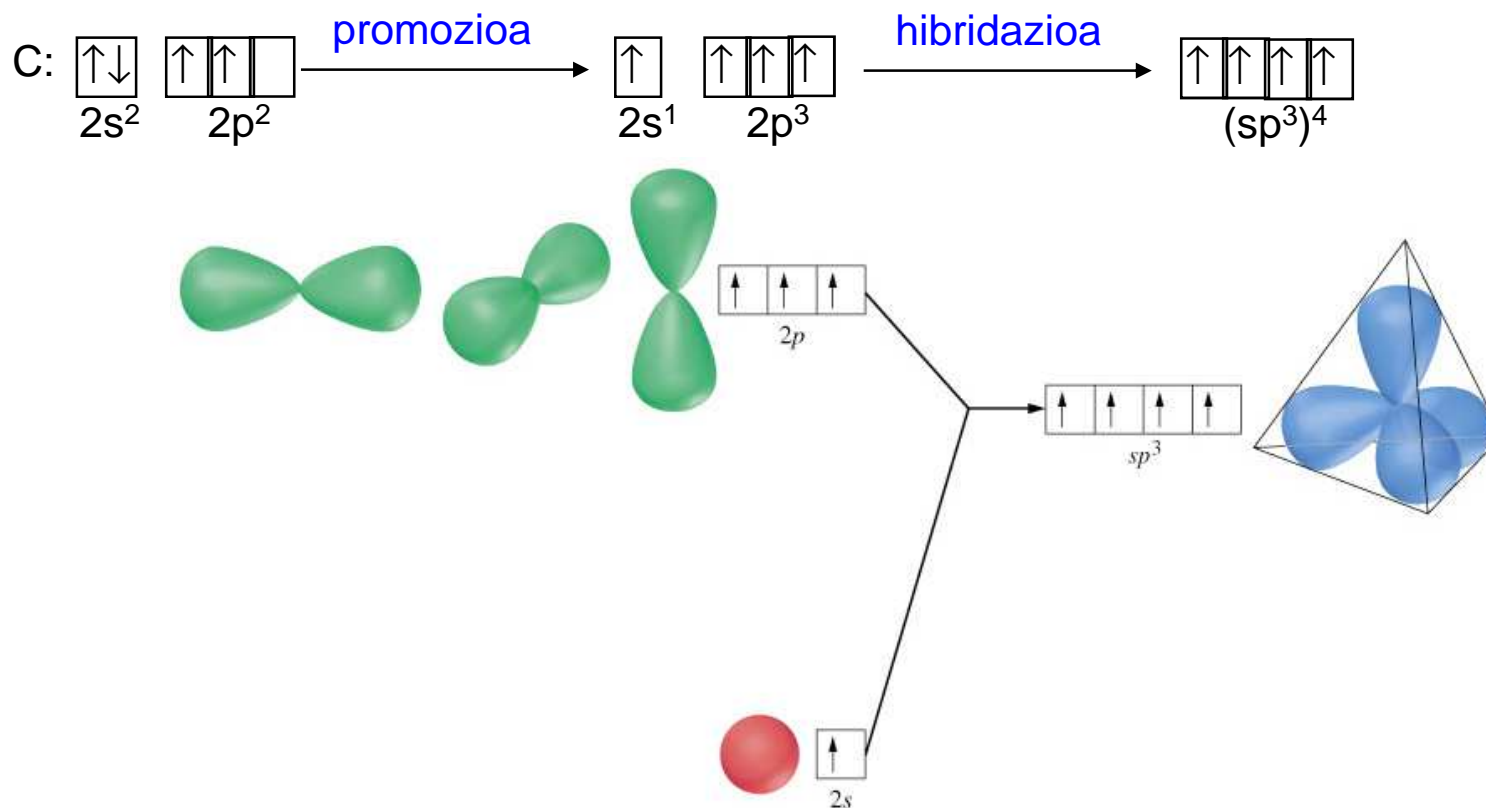
Conjunto de orbitales atómicos	Conjunto de orbitales híbridos	Geometría	Ejemplo
s, p	Dos sp	 <p>Lineal</p>	BeF_2 , HgCl_2
s, p, p	Tres sp^2	 <p>Plana trigonal</p>	BF_3 , SO_3
s, p, p, p	Cuatro sp^3	 <p>Tetraédrica</p>	CH_4 , NH_3 , H_2O , NH_4^+
s, p, p, p, d	Cinco sp^3d	 <p>Bipiramidal trigonal</p>	PF_5 , SF_4 , BrF_3 , SbCl_5^{2-}
s, p, p, p, d, d	Seis sp^3d^2	 <p>Octaédrica</p>	SF_6 , ClF_3 , XeF_4 , PF_6^-

Karbonoaren kasua:

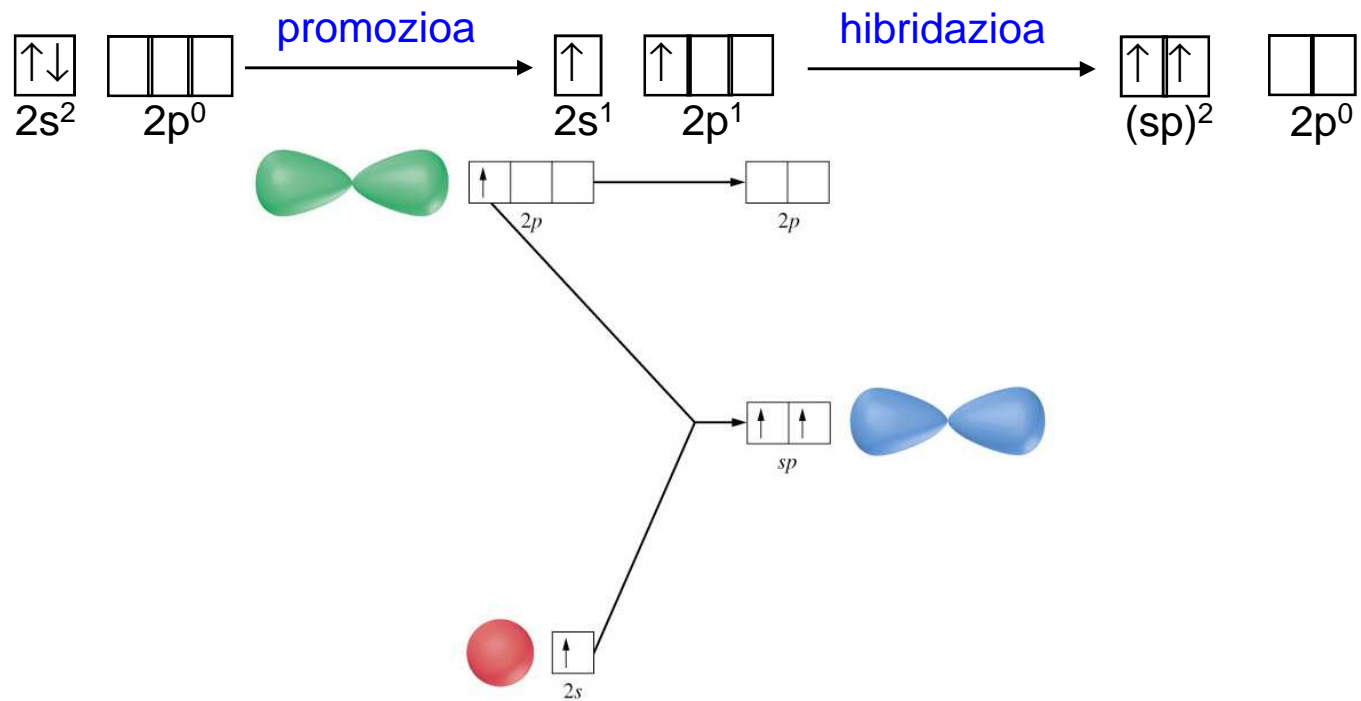
C: $1s^2 2s^2 2p^2 \Rightarrow$ Teorikoki: 2 lotura, CX_2 konposatuak, 90° angeluak.
Errealitatea: 4 lotura, CX_4 konposatuak, 109.5° angeluak.

Azalpena:

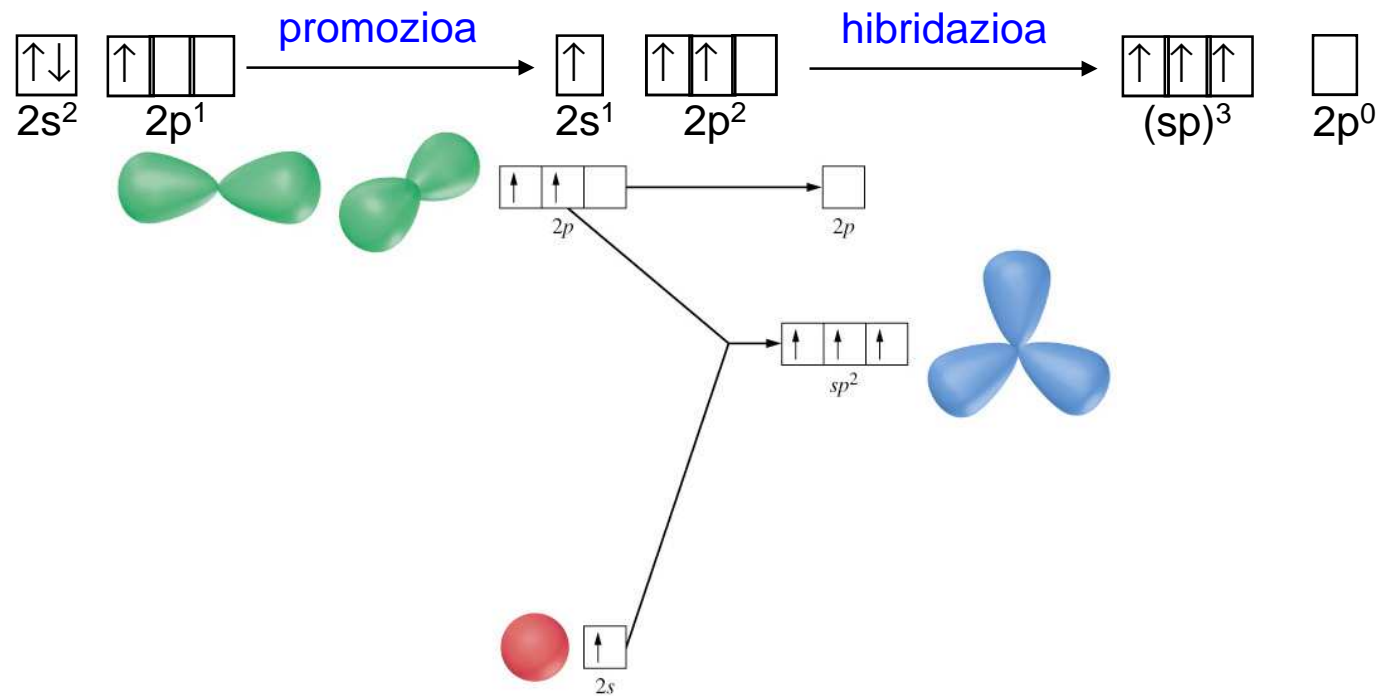
1. $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 \Rightarrow 1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ **Promozioa**
2. $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1 \Rightarrow 1s^2 (sp^3)^1 (sp^3)^1 (sp^3)^1 (sp^3)^1$ **Hibridazioa**



Berilioa:



Boroa:



LOTURA ANIZKOITZAK

Dagoeneko esan dugu loturak eratzeko orbitalak gainezarri behar dira. Gainezarmena bi motakoa izan daiteke:

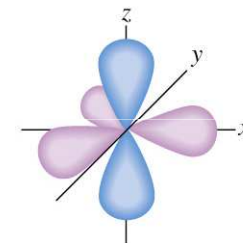
- **Aurrez aurreko gainezarmena:** σ -motako lotura (hibridatutako orbitalak, normalean). => **Eraginkorragoa**
- **Alboko gainezarmena:** π -motako lotura (hibridatu gabeko orbitalak).

Oharra: Lotura guztietan egon behar da σ -lotura bat

- Lotura bakuna: σ -lotura
- Lotura bikoitza: σ -lotura + π -lotura.

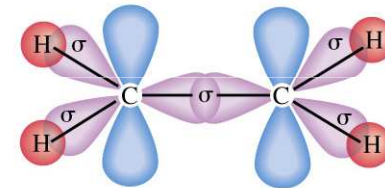
Lotura bikoitzaren inguruko biraketa ezinduta da, biratzeak π -lotura apurtzea suposatuko luke.

- Lotura hirukoitza: σ -lotura + 2 π -lotura.

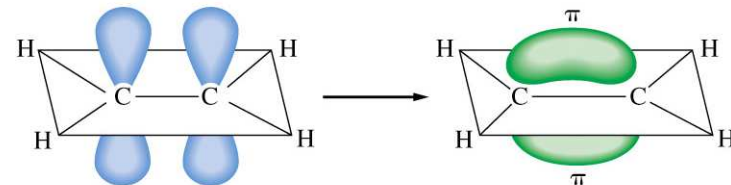


The set of orbitals $sp^2 + p$

eteno

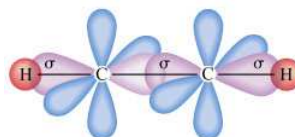


Sigma (σ) bonds

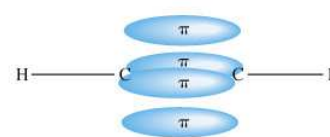


Overlap of p orbitals leading to pi (π) bond

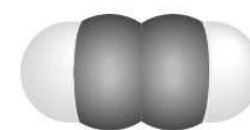
etino



Formation of σ bonds



Formation of π bonds



Space-filling model

Nola jakin atomo baten hibridazioa?

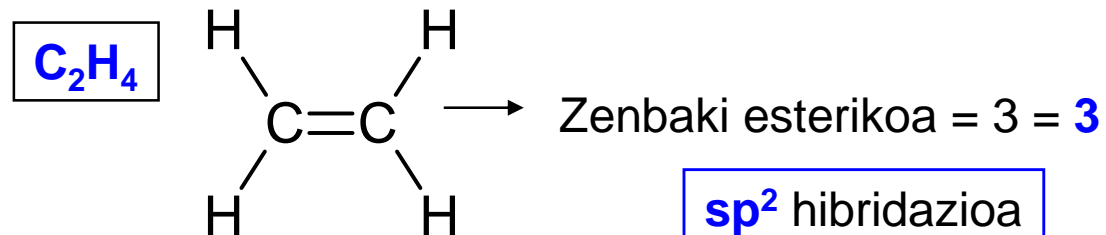
Honako urratsak jarraitu behar dira:

1. Lewis-en egitura irudikatu.
2. Zenbatu eratzen dituen s-loturak gehi atomo horren elektroikote bakartien kopurua (Zenbaki esterikoa).
3. Lortutako emaitza izango da beharriko orbital hibridoen kopurua.

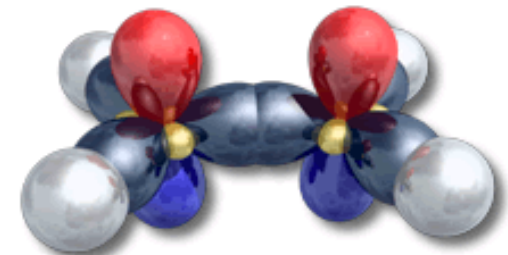
Adibideak:



$\boxed{\text{sp}^3 \text{ hibridazioa}}$



$\boxed{\text{sp}^2 \text{ hibridazioa}}$



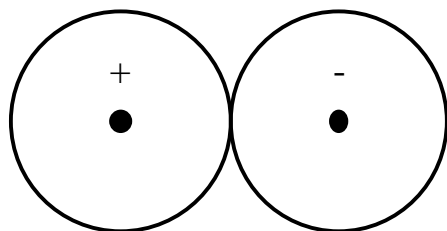
5.3.3 EREDU IONIKO ETA KOBALENTEAREN DESBIDAZIOAK. POLARIZAZIOA

Lehen hurbilketa batean, konposatuak kobalente edo ioniko bezala sailka ditzakegu. Halere, konposatu gehienek muturreko kasu bi hauen bitarteko izaera dute.

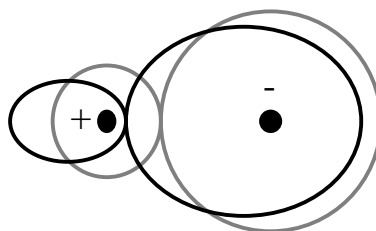
Hortaz, lotura ionikoak nolabaiteko izaera kobalentea azaltzen duela kontsideratu behar da.

Fajans-en Arauak

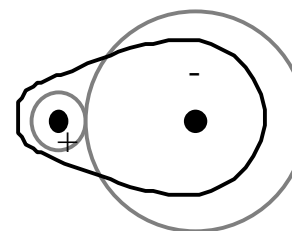
Fajans-en arabera, katioi txiki batek anioi handi baten hodei elektronikoa nabarmenki polariza dezake, eta ondorioz, hodei elektronikoan barreiatu lotura kobalentea eratuz.



ioi idealak



ioi polarizatuak



lotura kobalentea

Katioi txikia eta karga altua }
 Anioi handia eta karga altua } Polarizaioa ↑ \rightleftharpoons Izaera kobalentea ↑

Polarizazioaren ondorioak

Solido ionikoaren izaera kobalentearen ekarpenak hainbat propietatetan eragin dezake, solugarritasuna eta fusio-tenperatura, besteak beste.

U handitzen den heinean T_f handitzen dela ikusi dugu. Beraz, Born-Lande ekuazioaren arabera, ioien karga handitzean edota erradioa txikitzean, **U** eta T_f handituko dira.

Osterantzean, ekarpen kobalentea dela medio, joera hau beti betetzen ez dela erakusten dute emaitza esperimentalek.

Bestetik, izaera kobalentea agertzean erradio esperimentalak ere txikitzen dira.

$$r^+ + r^- > r_{\text{exp}}$$

Nola jakin molekula bat polarra den edo ez

“Orokorrean, konposatuek ez dute lotura pururik”

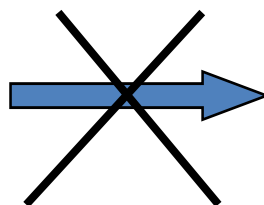
Lotura kobalentea izaera ionikoarekin nahastuta izaten ohi da eta lotura ionikoak izaera kobalente partziala du.

Polartasuna: karga banaketa asimetrikoa, atomoen arteko **elektronegatibitate-diferentzia**ren ondorioz.

Lotura apolarrak: Cl-Cl

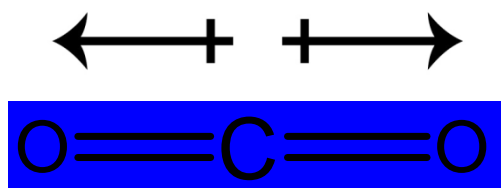
Lotura polarrak: H-F

LOTURA POLARRA



MOLEKULA POLARRA

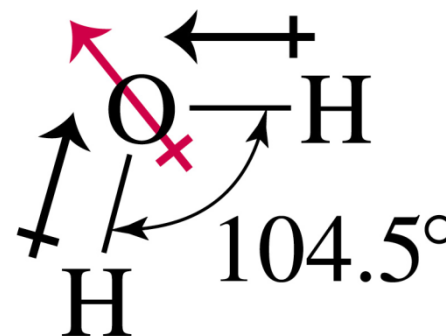
CO2



$$\mu = 0$$

molekula apolarra

H2O



molekula polarra

Oharra: *Triangeluar laua, tetraedro, bipiramide trigonala, karratu laua edo oktaedro*aren geometria ideala (ordezkatzaille guztiak berdinak) duten molekulak apolarrak dira.

5.3.4 ORBITAL MOLEKULARREN TEORIA

- R. S. **Mulliken**, 1932
 - *Balentzia-loturaren* (B.L.) ereduan lotura kobalentea O.A.-en gainezarmenaren bidez azaltzen da, lotura elektroiak bi O.A.-ren artean elkarbanatuz. Horrez gain, hibridazioak hein handi batean azal dezake geometria molekularra. Halere, molekula askoren propietate anitz ezingo dira B.L.-ren eredua erabilita ulertu, hala nola, propietate magnetikoak:

O2 paramagnetikoa?

- Haatik, *Orbital Molekularren Teoriaren* (O.M.) bitartez lotura kobalentea, geometria molekularra, energia eta bestelako propietate fisiko-kimiko batzuk neurri zuzenago batean azaltzea lortzen da.

B. L. ereduan ez bezala, **O.M. ereduan** elektroiak molekula osoan zehar hedatzen diren orbital molekularretan kokatuko dira.

Molekularen Uhin-Funtzioa

- n elektroidun molekula baten uhin-funtzioa, **elektroi-bakarreko n uhin-funtzioen biderkadura** gisa idatz daiteke, elektroi-bakarreko uhin-funtzio bakoitzak O.M. bat deskribatzen duelarik.

$$\Psi = \psi(1) \psi(2) \dots \psi(n)$$

$\psi(n)$: n . e⁻-aren uhin-funtzioa (O.M.)

- O.M. bakoitzari dagokion ψ -a O.A. ezberdinen konbinazio lineala izango da:

Orbital Atomikoen Konbinazio Linealaren eredua (OAKL)

$$\psi(1) = c_a \Phi_a + c_b \Phi_b + c_c \Phi_c + \dots + c_i \Phi_i$$

$\psi(1)$: 1 e⁻-a kokatzen de O.M.-aren uhin-funtzioa

Φ_i : i . O.A.-a

c_i : i . O.A.-aren ekarpena.

- Definituriko O.M.-ak, beraz, *gune-anitzdunak* izango dira.

O.M. teorian erabilitako kontzeptu ugari O.A.-entzat erabilitakoetatik erator daitezke.

O.M. baten energia kalkulatzeko:

$$H\psi = E\psi$$

Hala, **O.M.-en E-diagrama** eraikiko dugu O.A.-entzat egiten den modu berean.

Konfigurazio elektronikoa idazteko *Aufbau Printzipioa* (eraikuntza printzipioa), *Pauliren esklusio printzipioa* eta *Hund-en araua* gogoan eduki.

Hortaz, molekularen konfigurazio elektronikoa ezagutuko dugu.

**O.M.-ak
kalkulatu
E-diagrama.**



*molekularen
konfigurazio
elektronikoa*

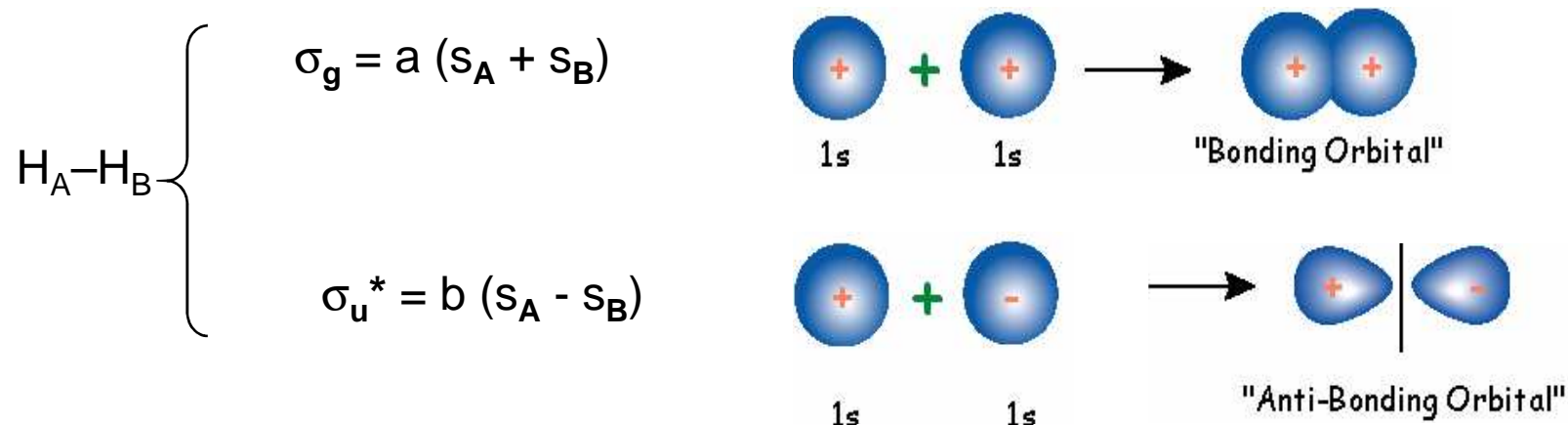


Propietate molekularren azalpena:

- Erreaktibitatea
- Lotura-**E**
- Lotura-luzera eta angeluak
- Propietate magnetikoak
- Propietate elektrikoak
- etab.

H₂ molekula

Hidrogeno atomoen **1s** O.A.-en konbinaketa linealak **bi O.M.** eratuko ditu:



Hidrogeno atomoen **1s** O.A.-en konbinaketa linealak **bi O.M.** eratuko ditu:

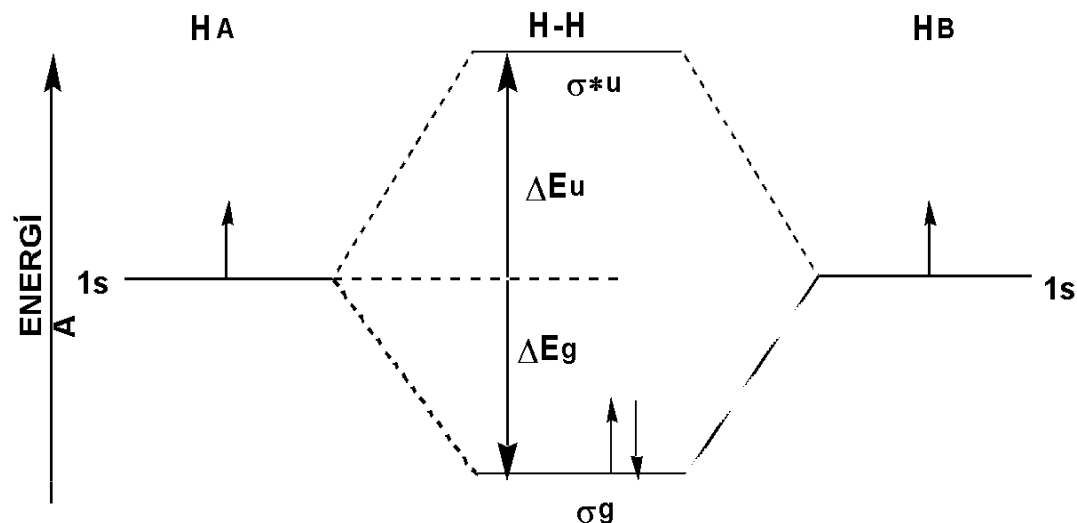
σ_g : O.M. lotzailea (loturaren eraketaren alde). Dentsitate elektronikoa bi nukleoen arteko gunean bilduko da.

g: gerade

σ_u^* : O.M. antilotzailea (loturaren eraketaren aurka). Dentsitate elektronikoa kontrako zonaldeetan biltzen da, bi nukleoen arteko gunean plano nodal bat dagoelarik.

u: ungerade

O.M.-en uhin-funtzioak eta itxura ezagututa, eraiki dezagun **O.M.-en diagrama E-mailak** adierazita:



Beraz, O.M.-en bitarteko loturaren eraketa egonkortzea dakar, σ_g orbitalaren E baxuago baita.

Konfigurazio elektronikoa: $(\sigma_g)^2$ orbitalaren E baxuago baita.

Lotura Ordena (L.O.):

$$\text{L.O.} = \frac{\text{e- lotzaileen kop.} - \text{e- antilotzaileen kop.}}{2} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

...hots, **H–H lotura bakuna.**

Beste Molekula Diatomiko Batzuk

Sinplifikazio helburuak direla medio, bakarrik balentzia geruzako O.A.-ak kontutan edukiko ditugu, eredu zuzenago batean guztiak kontutan hartu behar diren arren.

H₂ eta He₂ molekulen kasuak salbu, gainontzeko kasuetan **s** orbitaletaz gain, **p** moduko O.A.-ak ere agertuko dira. **p** orbitalak, elkarrekin konbina daitezke geometria bateragarria izanik: $p_x - p_x$, $p_y - p_y$, $p_z - p_z$.

A₂ molekula diatomikoak

- O₂, F₂, Ne₂ diagrama arrunta

Elkarrekintza zuzenak: σ_{s-s} , σ_{p-p} , π_{p-p}

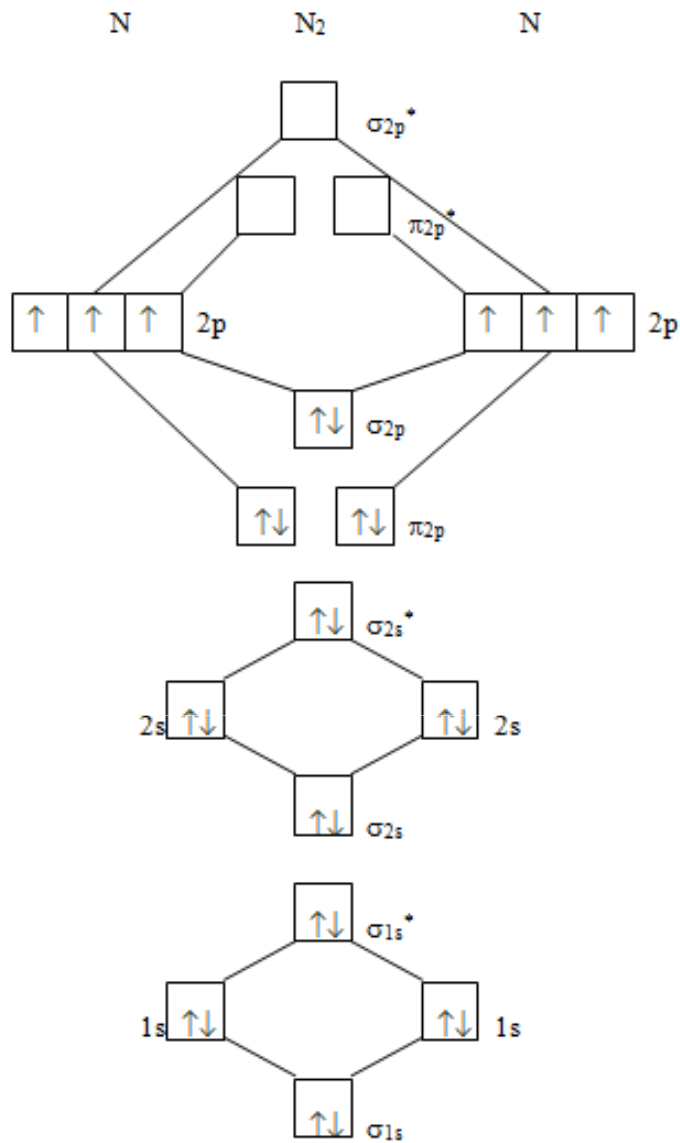
- Beste A₂ molekula batzuk

Elkarrekintza zuzenak: σ_{s-s} , σ_{p-p} , π_{p-p}

Elkarrekintza gurutzatuak: σ_{s-p}

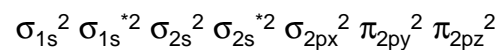
AX molekula diatomikoak

- HF, CO...

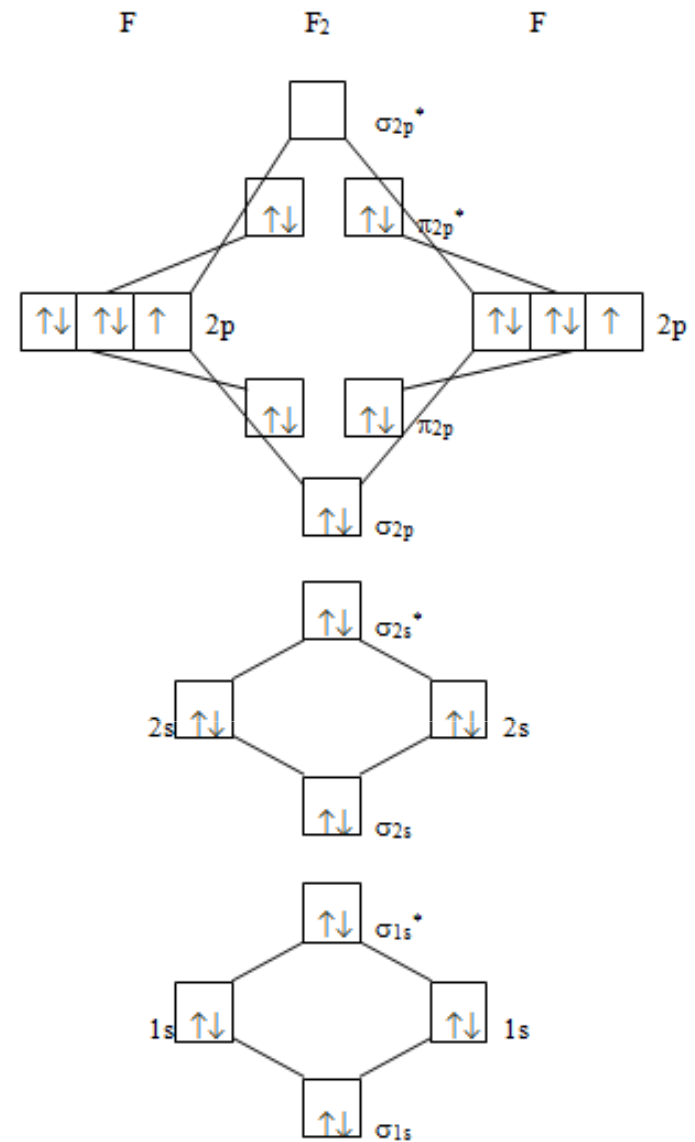


$$L.O. = \frac{10 - 4}{2} = 3 \Rightarrow N \equiv N$$

N₂ molekularen egitura elektronikoa

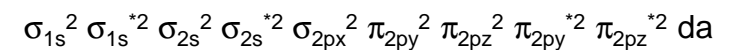


Diamagnetikoak!!

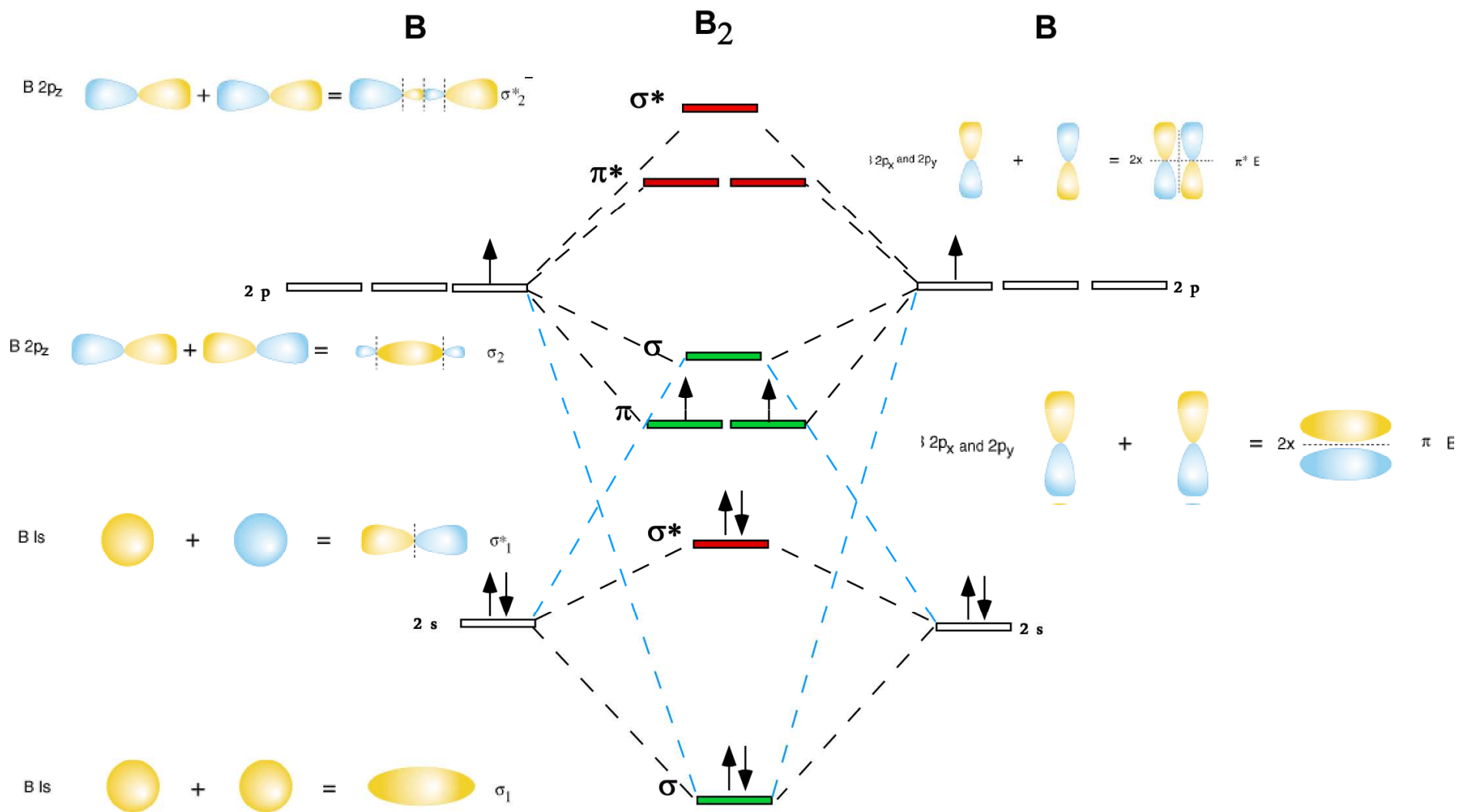


$$L.O. = \frac{10 - 8}{2} = 1 \quad \sigma \text{ lotura bat} \Rightarrow F-F$$

F₂ molekularen egitura elektronikoa

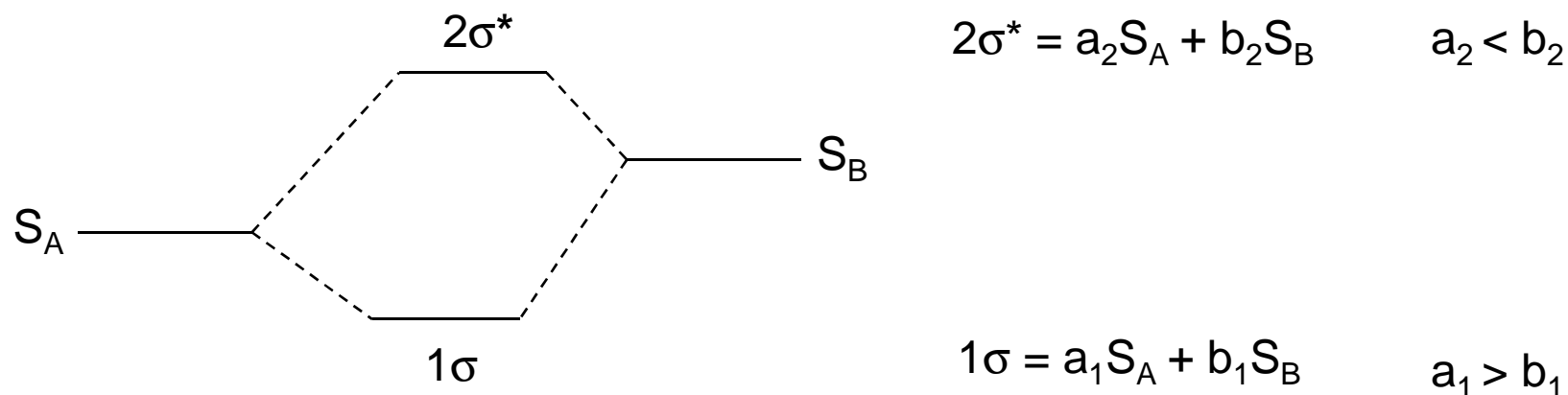


Adibidea: B₂



AX molekula diatomikoak

Elkarrekingo duten O.A.-en energiak ezberdinak izango dira, espezie atomiko ezberdinak sorburu baitute. Gogoan eduki, soilik ***antzeko energia eta geometria bateragarria*** duten O.A.-ek elkarrekin dezaketela.



Energia gutxieneko O.A.-ren (S_A) ekarpena handiago izango da 1σ O.M. lotzailean, eta alderantziz $2\sigma^*$ O.M. antilotzailearen kasuan.

5.4. LOTURA METALIKOA

5.4.1 METALEN PROPIETATEAK

5.4.2 METALEN EGITURAK

5.4.3 LOTURA METALIKOA

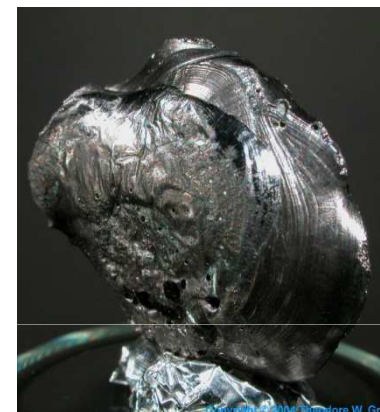
- Balentzia Loturaren Eredua
- e⁻ Askearen Teoria
- O.M.-en Teoria / Banden Teoria

5.4.4 EROANKORTASUN ELEKTRIKOA

- Eroale
- Isolatzaile
- Erdieroale
- Supereroale



1. Dentsitate altuak (nagusiki PKT, PHT, GZS)
2. T_f-ren tarte zabala (Hg 234K, Ga 303K Fe 1808K....W 3695K)

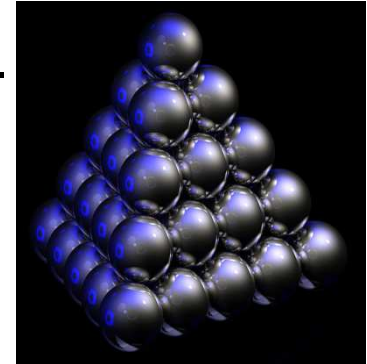


3. Distira Metalikoa. Metal gehienek kolore grisaxka (Salbuespenak: Au, Ag)
4. 3D-tan deformagarriak
Harikorak
Xaflakorak
5. Eroankortasun elektriko eta termiko handia
6. Disolbatzaile arruntetan disolbagaitzak. Ingurune azidoan aldiz,...

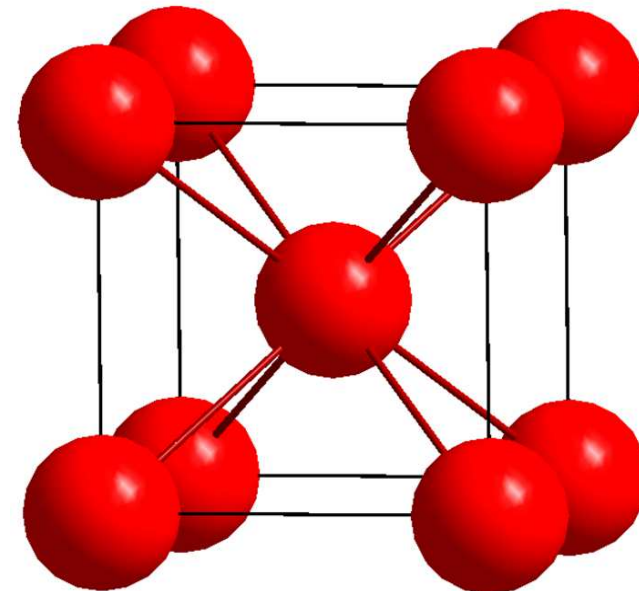
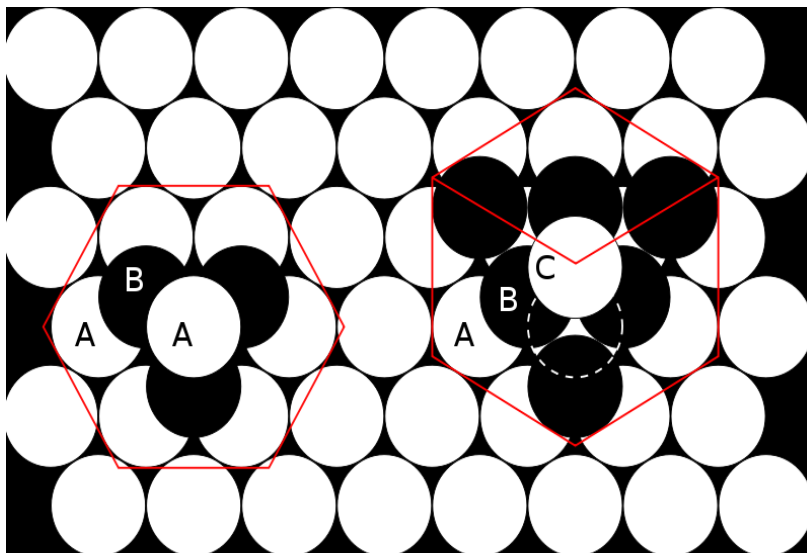
5.4.2 METALEN EGITURAK

Egiturak *esferen paketatzearen ereduaren* bidez azaltzen dira.

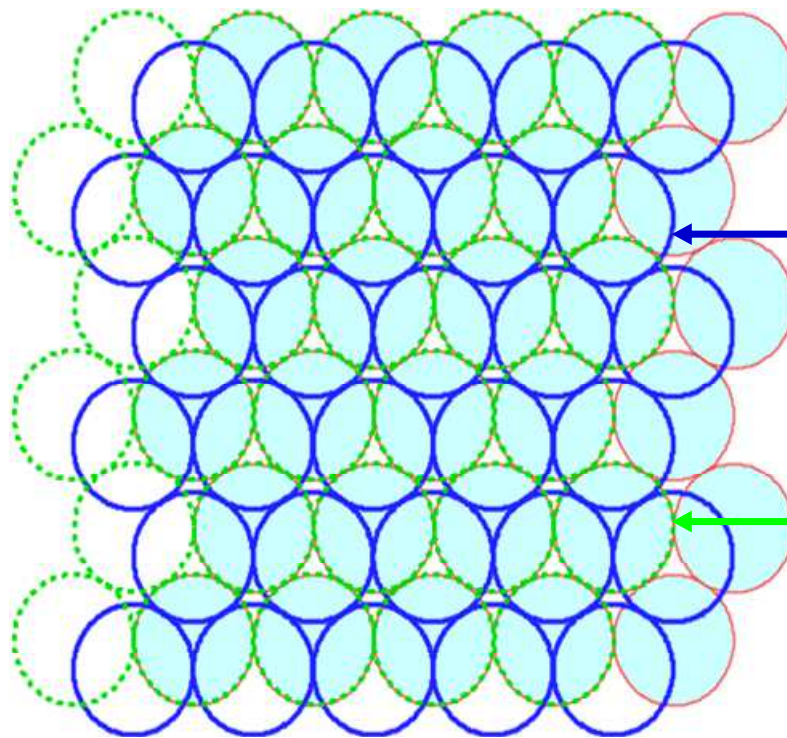
Egiturak metalikoen {
 %60 PKT / PHT (KZ = 12)
 %20 GZS (KZ = 8)
 Gainontzekoak, K.S. eta bestelakoak



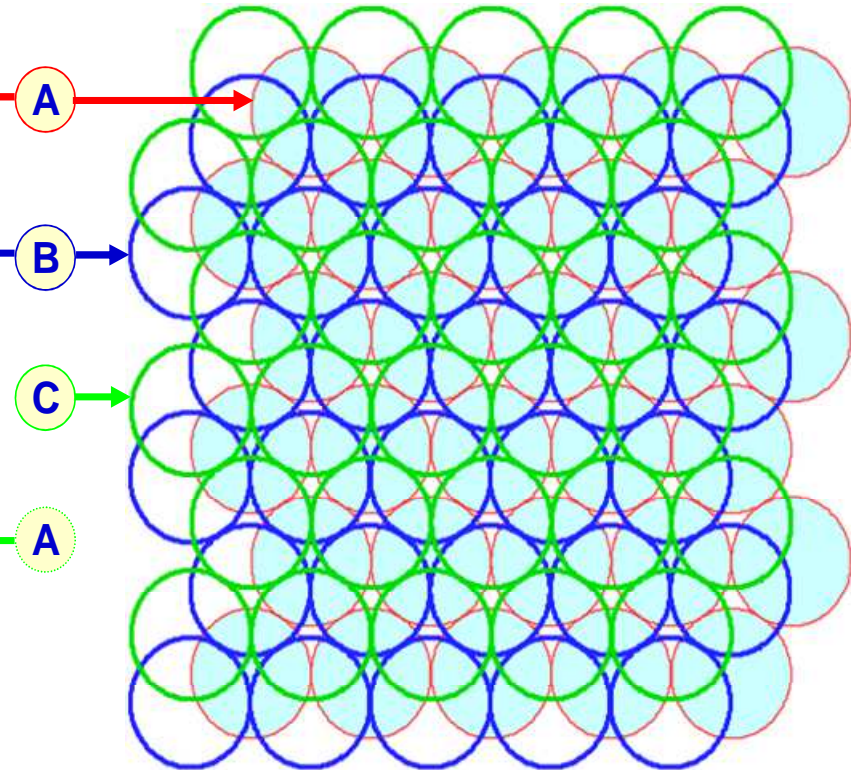
Paketatze trinkoetan atomoek espazioaren %74-a hartzen dute. GZS % 68.

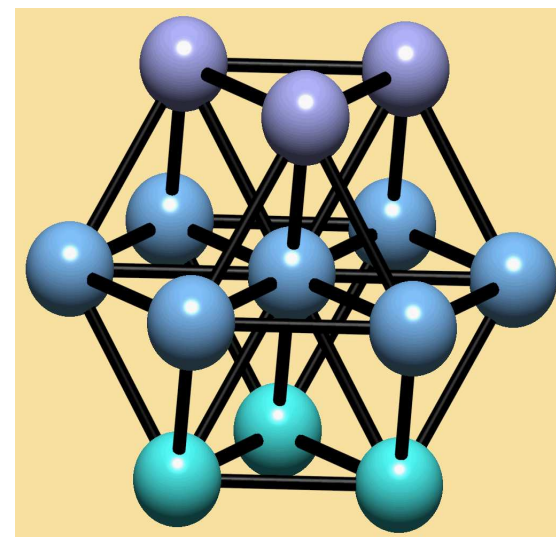
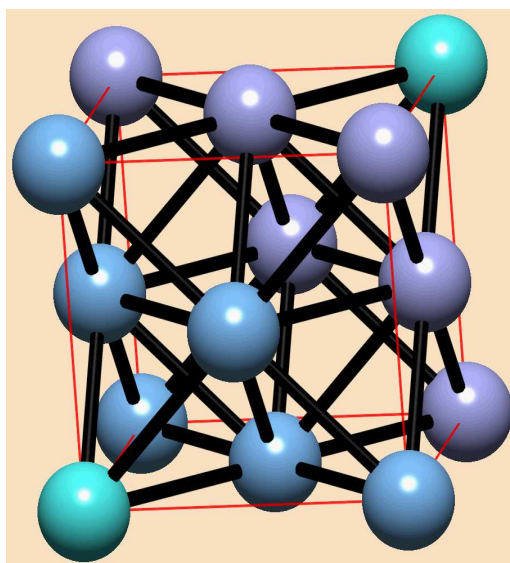
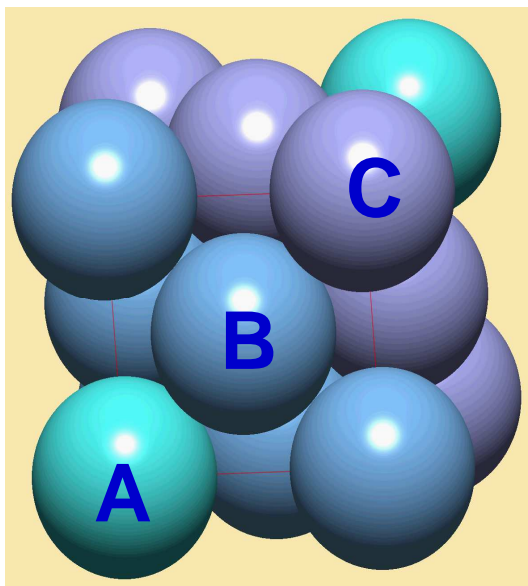
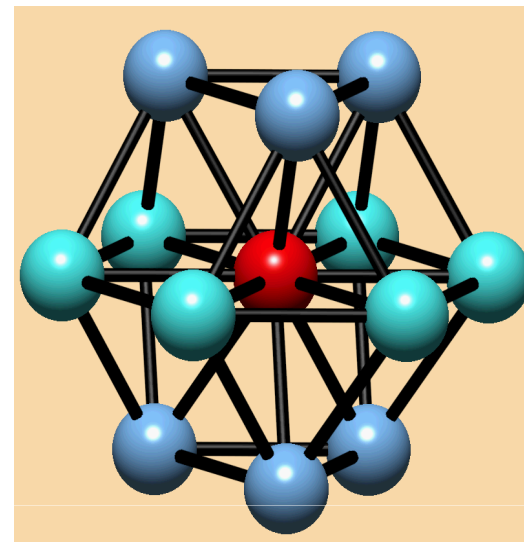
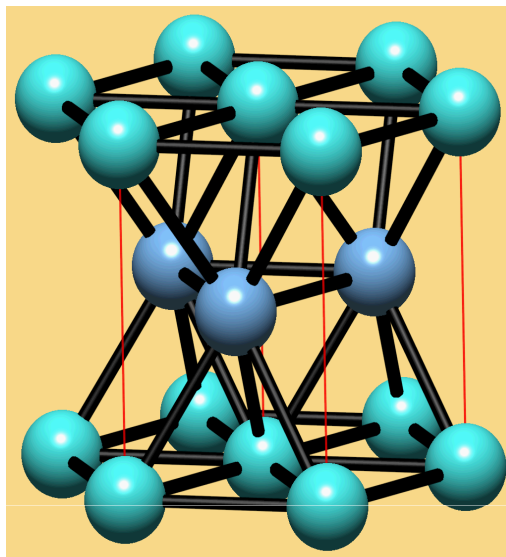
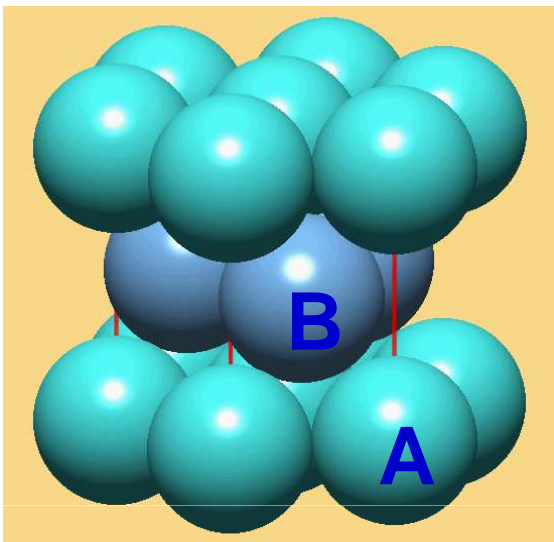


HCP: AB AB AB AB



CCP: ABC ABC ABC





5.4.3 LOTURA METALIKOA

Lotura metalikoa azaltzeko ereduak metalen propietate ezberdinak modu onargarri batean azaldu beharko ditu.

- Eroankortasun Elektrikoa \longrightarrow e^- -en higidura sare metalikoan
(e^- deslektuak)
- Zuzendutako loturaren eza, egoera likidoan propietate metalikoak mantentzen baitira.
(Lotura ez-direkzionala)
- Atomo berdin eta ezberdinen artean lotura metalikoa posible da. Aleazioak.

BALENTZI – LOTURAREN EREDUA

Eredu honek zailtasun bat aurkezten du. Elementu baten atomoaren balentzia e^- -en bidez ezingo dira inguruko atomoekin ezarritako lotura guztiak ase e^- bikoteak elkarbanatuz.

Ondorioz, e^- -ak deslekturik egongo dira, lotura-bikoteak etengabe mugituz (erresonantzia).

Adibidez: Na: $[\text{Ne}]3s^1$ Balentzia e^- bakarra

Egitura: G.Z.S. beraz, K.Z. = 8

ELEKTROI ASKERAREN edo HODEI ELEKTRONIKOAREN TEORIA

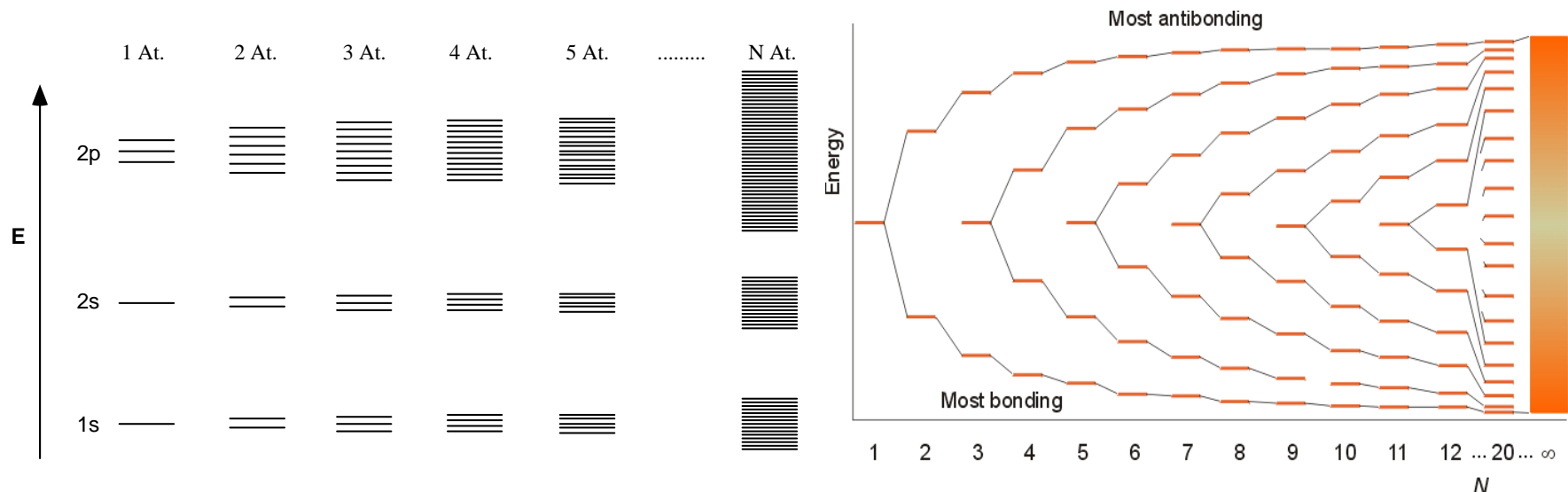
Sare metalikoan balentzia e^- -ak *askatasunez* mugitzeko aukera izango dute.

ORBITAL MOLEKULARREN BANDEN TEORIA

Lotura kobalentea azaltzeko oinarri bera erabiltzen du eredu honek:

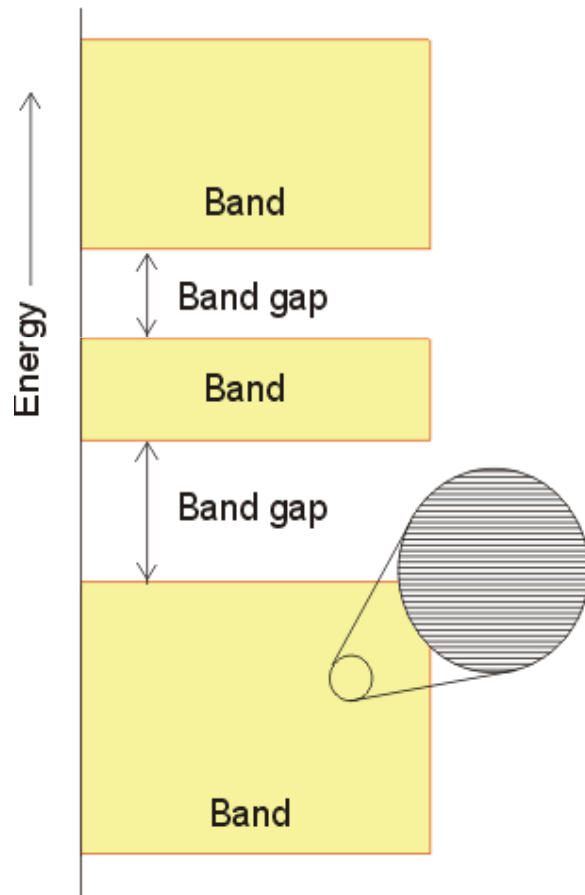
- Antzeko **E** eta geometria bateragarria duten O.A.-ak nahastuko dira
- Eraturiko O.M.-en kopurua = Nahasturiko O.A.-en kopurua
- Orbitalen arteko elkarrekintza sare metaliko osoa hartzen du (hau da, ez dago atomo kopuru txiki bati mugatua, molekuletan bezala)

Beraz, n atomo eta m O.A. \longrightarrow $n \times m$ O.M.

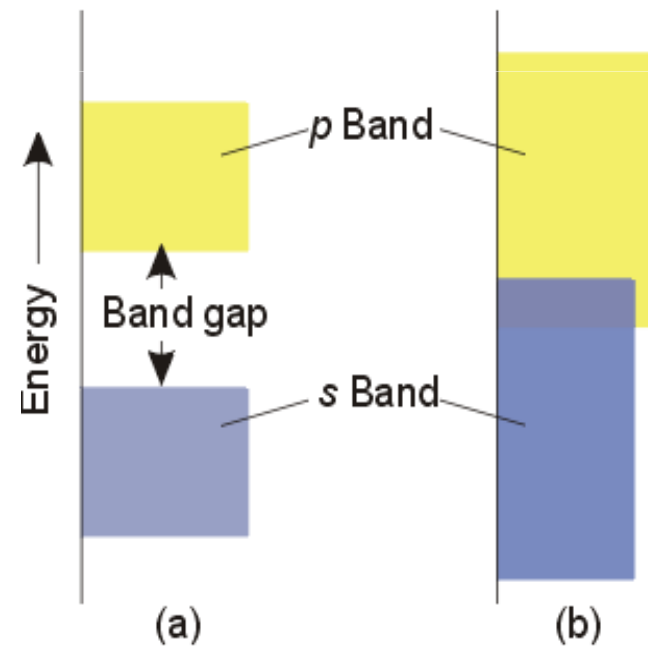


Mota bereko O.A. atomikoetatik datozen O.M.-en multzoari banda deritze, hala **energia bandak** izango ditugu *banden teoriaren* oinarri.

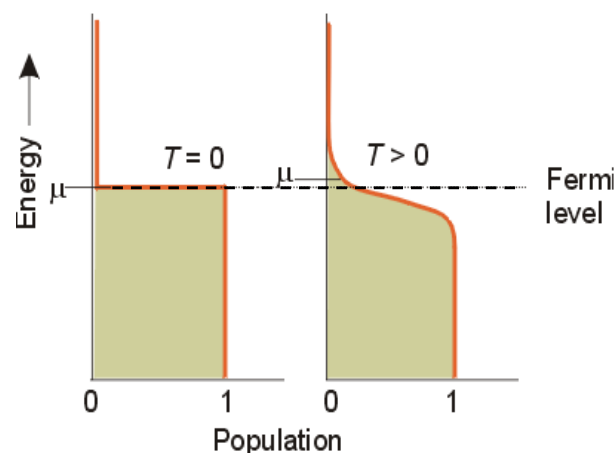
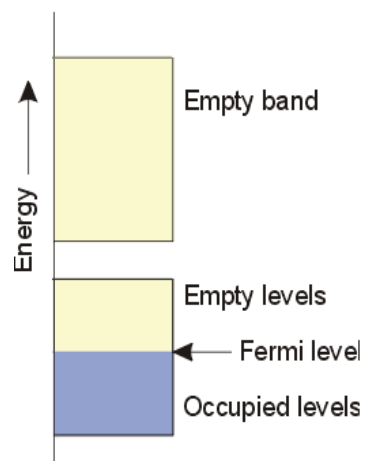
Konbinaturiko O.A. moten arabera \longrightarrow banda mota $\left\{ \begin{array}{l} \text{s-banda} \\ \text{p-banda...} \end{array} \right.$



Banden artean **E**-etenak izango ditugu. Zenbait kasutan bandak gainezarri daitezke.

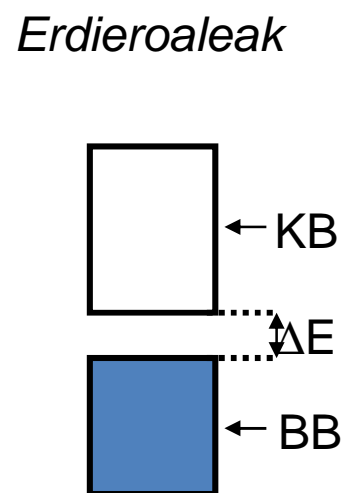
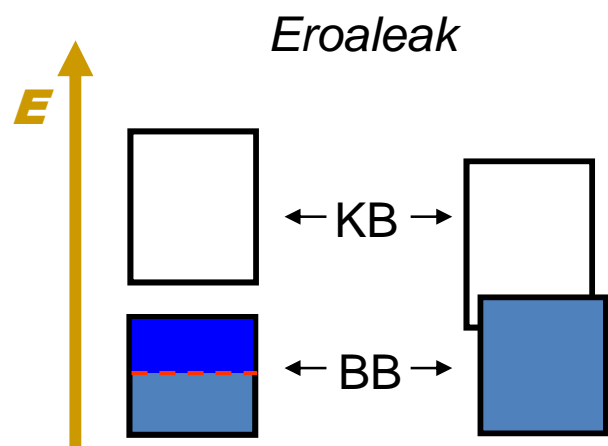


Fermi-maila: 0 k-eko tenperaturan beteriko energia gehieneko azken maila.

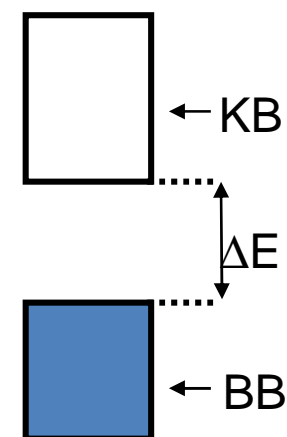


Balentzi-banda (BB): Beteta / erdibeteta dagoen azken banda

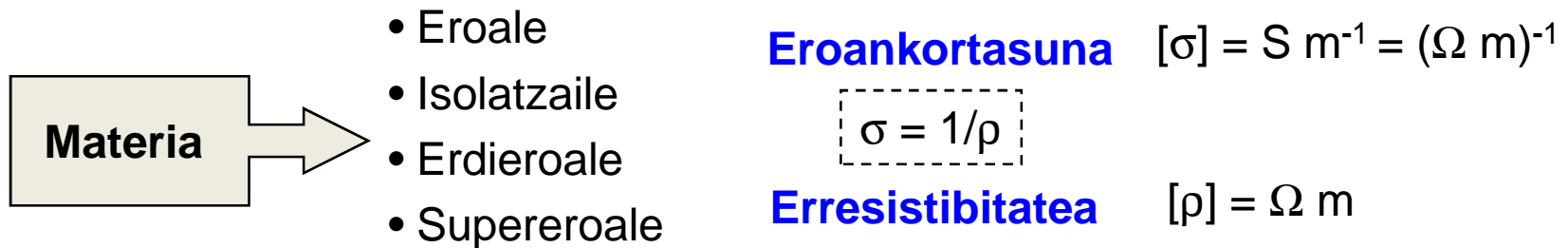
Kondukzio-banda (KB): Hutsik dagoen lehen banda



Isolatzaileak



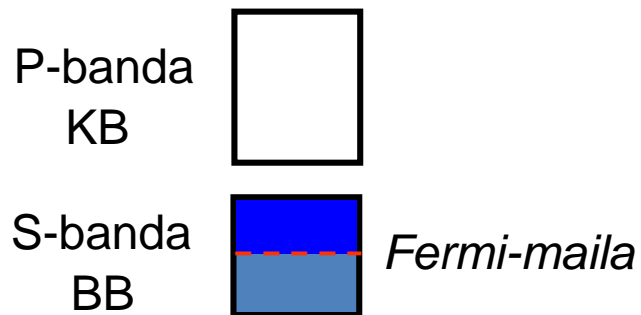
5.4.4 EROANKORTASUN ELEKTRIKOA



Eroaleak

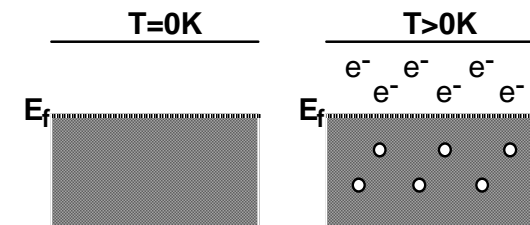
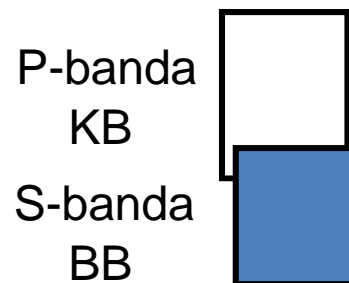
Eroaletan balentzi-banda ez da erabat beterik egongo edota kondukzio bandarekin gainezarrita egongo da. Hortaz, Fermi-mailatik hurbil dauden e^- ek goiko mailetara jauzi egin dezakete eta hortik hig daitezke.

Na: $[\text{Ne}]3s^1$

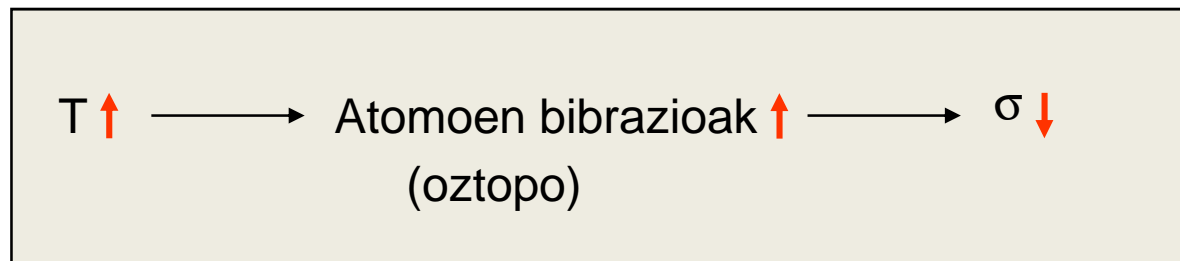


S-banda erdibeterik

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

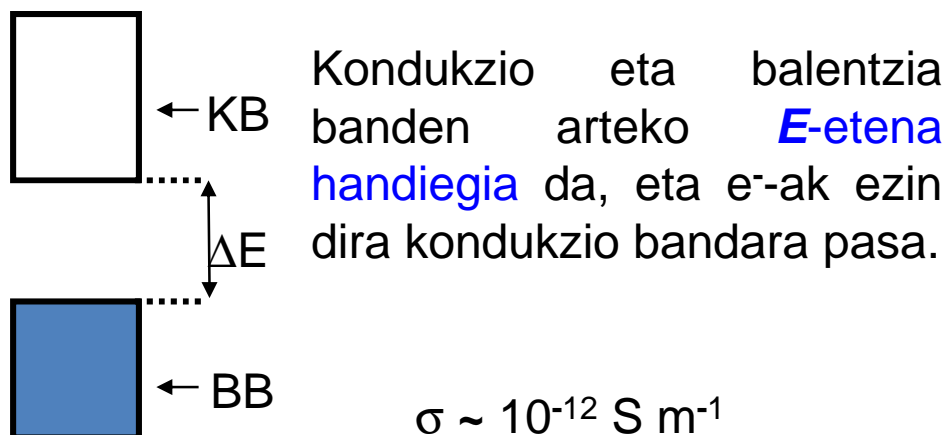


Eroaleetan:



$\sigma \sim 10^7 \text{ S m}^{-1}$ magnitude orden ingurukoa

Isolatzaileak

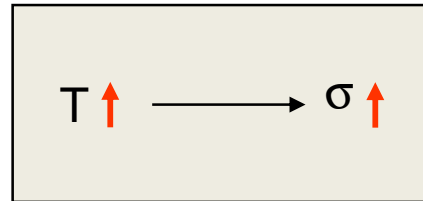


14. Taldean zeharreko eroankortasunaren aldaketa

	$\sigma (\Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1})$	$E_g \text{ (eV)}$
C (diam.)	$< 10^{-16}$	5.4
Si	5×10^{-4}	1.11
Ge	2.2	0.67
Sn	9×10^6	0.8

Erdieroaleak

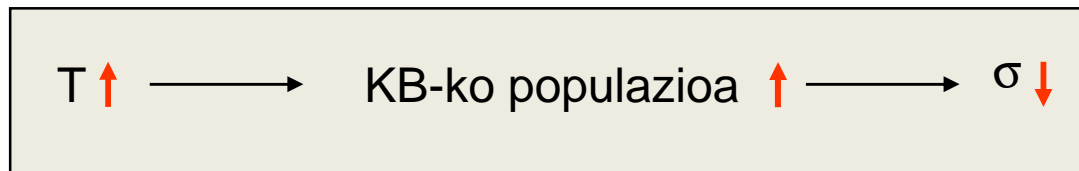
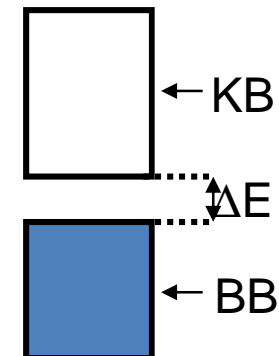
Orokorki:



Bi erdieroale mota:

Erdieroale Intrintsekoa:

Kondukzio eta balentzia banden arteko **E-etena** nahiko **txikia** da, eta ondorioz, **E-termikoa nahikoa** da e-ek KB-ra jauzi egin ahal izateko.

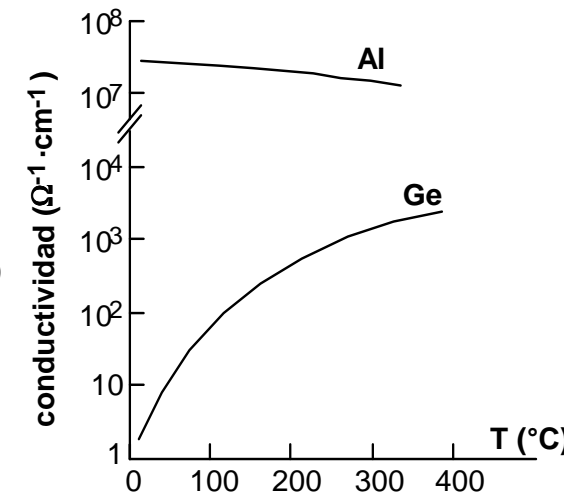


Hortaz, konduktibitateak Arrhenius-en legea jarraituko du:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot e^{-E_g / 2KT}$$

Giro T^a -an

Isolatzaile eta eroaleen bitarteko balioak
 $\sigma \sim [10^{-5} - 10^3] \text{ S m}^{-1}$



Erdieroale Estrintsekoa:

Printzipioz, isolatzaile den material bat erdieroale bilakatu daiteke, ezpurutasunak gehituz (*doping-a*). Adibidez,

Si purua \Rightarrow erdieroale oso ahula

Si + ezpurutasunak \Rightarrow Erdieroale ona

- Bi mota:

n-motakoak

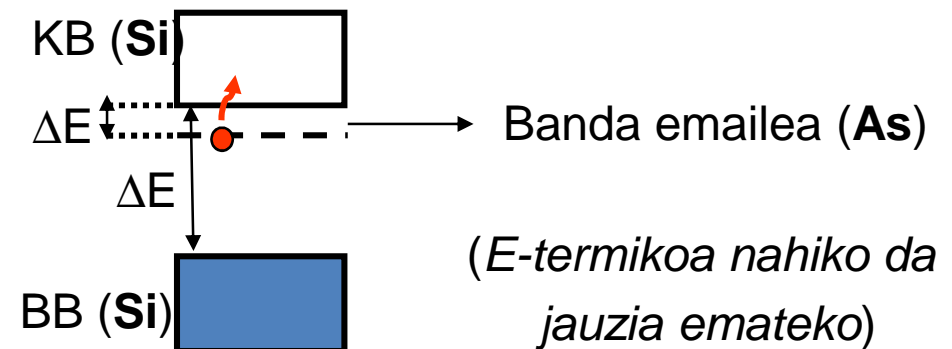
Adibidez: $\left. \begin{array}{l} \text{Si} \Rightarrow \text{P edo As-z dopatua} \\ \text{Ge} \Rightarrow \text{As edo Sb-z dopatua} \end{array} \right\} (10^9:1)$

Si As-z dopaturik

Si: [Ne]3s²3p²

As: [Ar]4s²4p³

Balentzia e- bat gehiago



p-motakoak

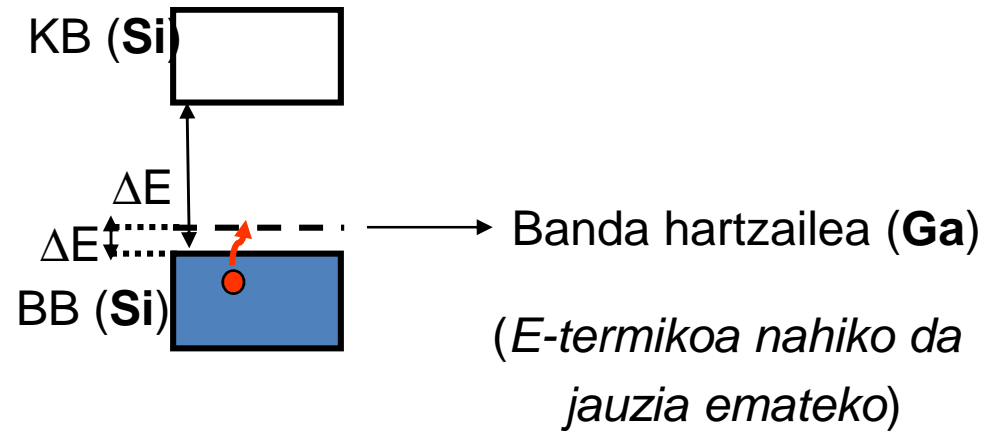
Adibidez: $\text{Si} \Rightarrow \text{B}, \text{Al}$ edo Ga -z dopatua
 $\text{Ge} \Rightarrow \text{Al}, \text{Ga}$ edo In -z dopatua

Si Ga-z dopaturik

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

Ga : $[\text{Ar}]4s^24p^1$

Balentzia e- bat gutxiago

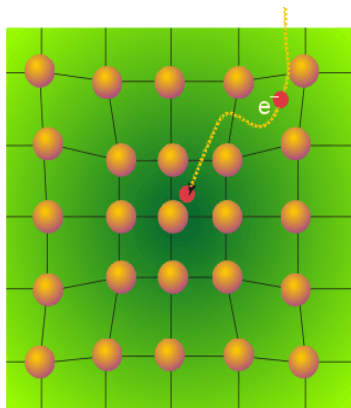


Supereroaleak

- 1911 H. Kammerlingh Onnes
- Material **supereroaleak** T^a kritiko baten azpitik korronea **erresistentzia barik** garraiatzen dute. Erresistibitatea(ρ) = 0 Ω m
- Arazoa: supereroale gisa jokatzeko behar diren T^a -k oso baxuak dira.
- 1986. urtera, arte $T < 20$ k
- 1986. urtean \longrightarrow Temperatura Kritiko Altuko Supereroaleak
 $T \sim 120$ k

➤ BSC Teoria

Cooper-Bikoteak



➤ Meissner Efektua

Bideoa: Lebitazioa posible al da?



5.4. MOLEKULEN ARTEKO ELKARREKINTZAK

- Van Der Waals indarrak
- Hidrogeno-Lotura
- Konposatu Molekularrak



VAN DER WAALS INDARRAK

- Izaera elektrostatikoa
- Ez dira asetzen
- Zuzendutako indarrak

a) Dipolo–dipolo elkarrekintzak

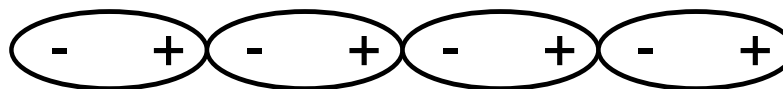
Keesom Indarrak

- VDW indarren artean sendoenak
- Izaera polarreko molekulen artean

Molekularen polaritatea ↑

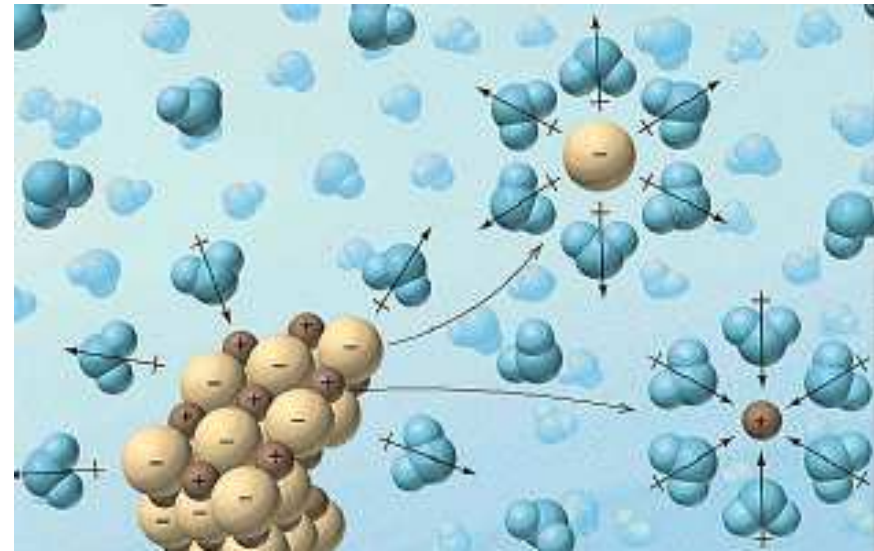
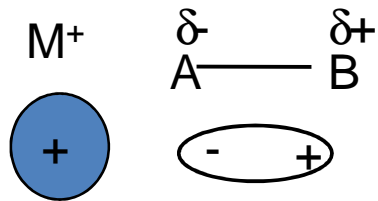
Atomoen tamaina / e- kopurua ↑

} Indarraren sendotasuna ↑



b) loi-dipolo elkarrekintzak

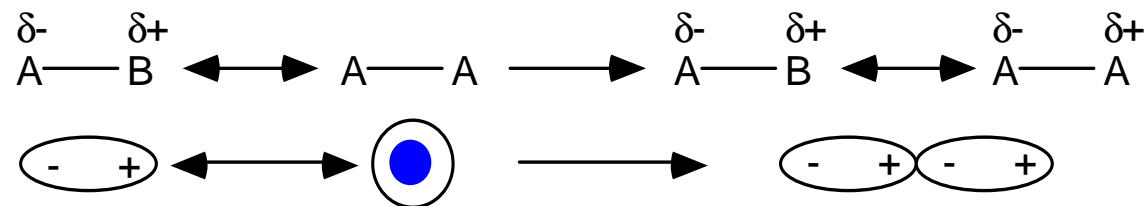
- Solido ionikoen disolbatze-prozesuan funtsezkoak (solbatazioa)



c) Dipolo-dipolo induzitu elkarrekintzak

Debye Indarrak

- Molekula polar eta apolarren artean
- Dipoloak alboko hodei elektronikoa polarizatu

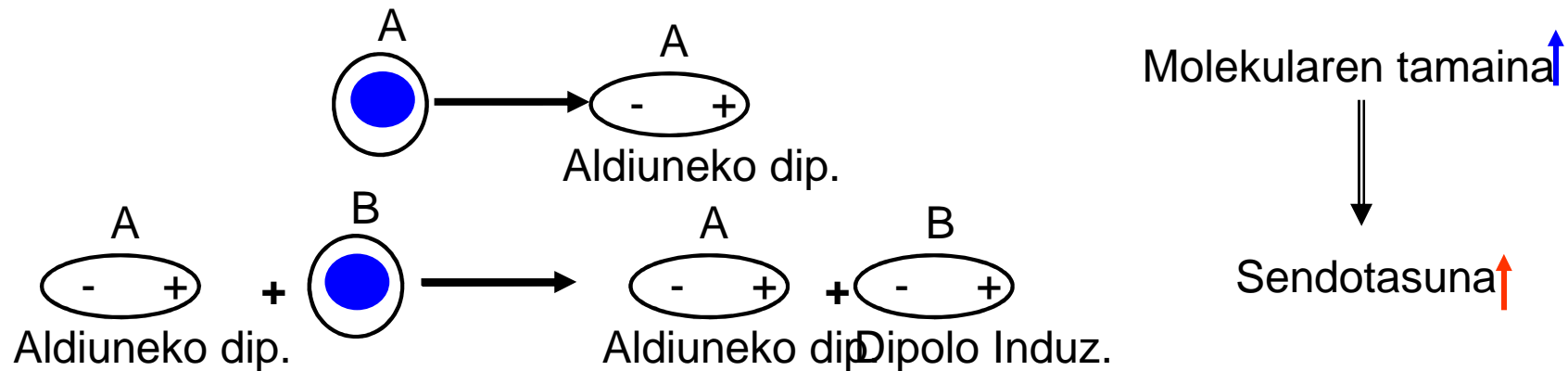


- loi-dipolo induzitu elkarrekintza ere posible da.

d) Aldiuneko dipolo-dipolo induzitu elkarrekintzak

London Indarrak

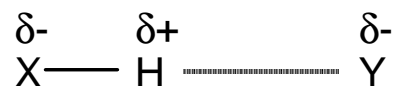
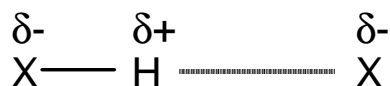
- Sendotasun gutxieneko indarrak
- Molekula apolarren kohesiorako ezinbestekoak
- t aldiune jakin batean karga-dentsitate banaketak homogeneo izateari utzi diezaioke, behin-behineko dipolo bat eratuz. Jarraian, alboan duen molekula batean dipolo bat induzituko du.



VDW indarren sendotasuna: ioi-dip > dip-dip > dip-dip. ind. > al. dip-dip. ind.

HIDROGENO-LOTURA

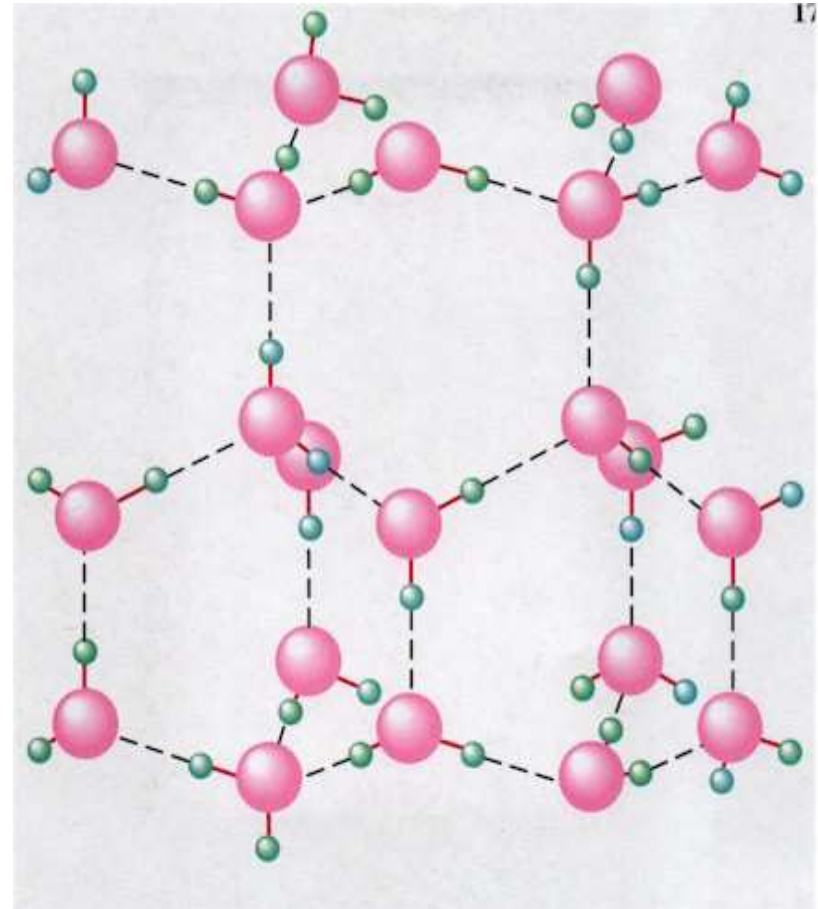
- Van der Waals-en indarrak baino askoz sendoagoa.
- F, O, N atomoak H atomoarekin lotzen direneko konposatuetan (Cl –rekin ahulago)
- Atomo berdinen artean gerta daiteke, $X-H\cdots X$ edo desberdinen artean $X-H\cdots Y$, sendoago bihurtzen delarik atomoen elektronegatibitatea igo ahala.
- Izaera konplexua:
Dipoloen arteko indarra + lotura kobalentea + atomoen arteko aldarapena.



H-loturen propietate batzuk:

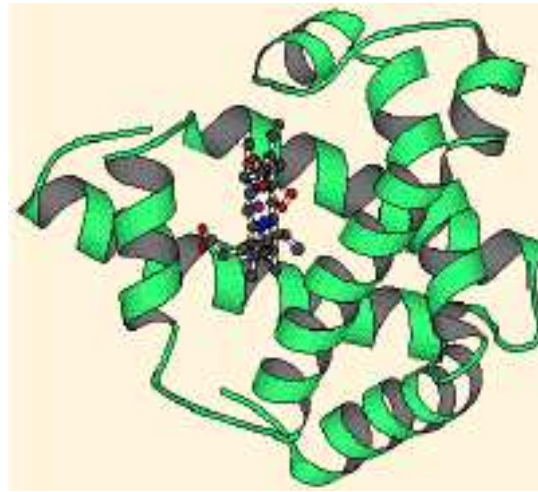
- T_f , T_i altuak
- H-loturak urak dituen propietate berezi gehienak erantzule dira:
 - T_f , T_i altuak
 - Bero-ahalmen altua
 - Gainazal-tentsio altua
 - Prozesu biologikoetan funtsezko habea
 - Dentsitatea: likido > solido

Arrazoia \Rightarrow izotzaren egitura
sarean hutsuneak
KZ: 4

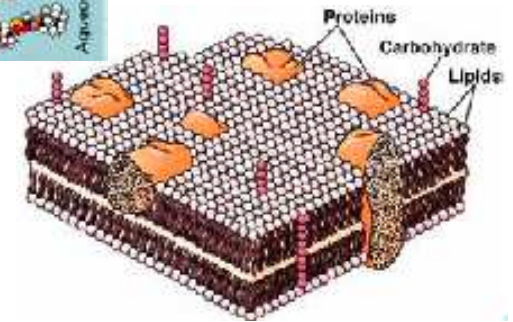
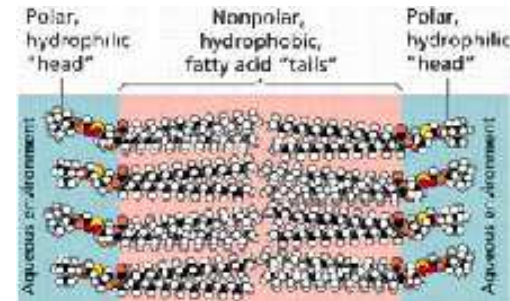


Indar intermolekularren garrantzia

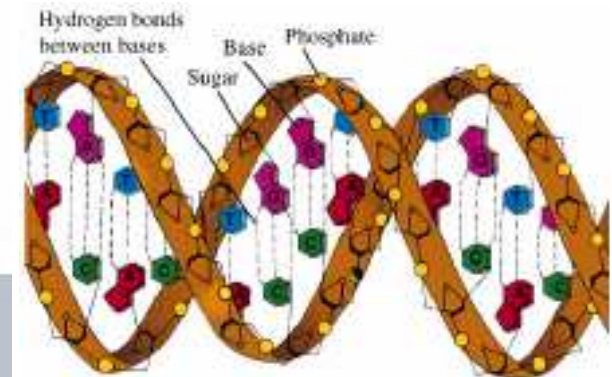
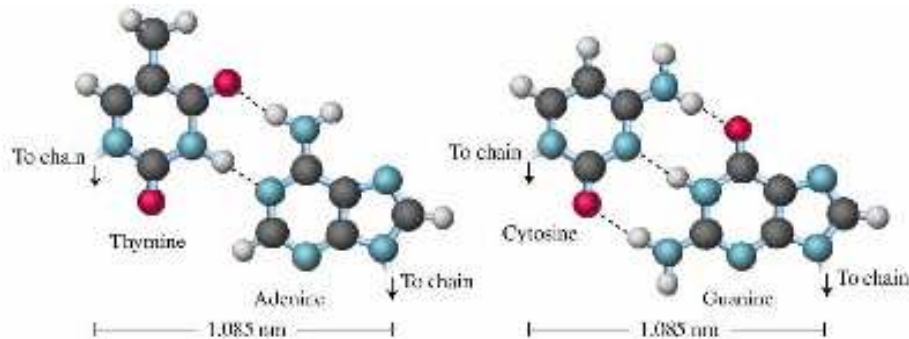
Proteinen egitura



mintza zelularrak



DNA egitura



KONPOSATU MOLEKULARRAK

- Molekula / entitate **finito eta neutroak** solido egoeran egitura ordenatuak
- Molekulen arteko **itsasgarria**: VDW indarrak / H-loturak
- Hauen artean:
 - Elementu oso elektronegatiboen molekulak (F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2)
 - Gas geldoak
 - Ionikoak ez diren beste molekulak: H_2SO_4 , HCl , H_2O , NH_3 , CH_4 ,...
- **Indar intermolekularrak** nahiko **ahulak** dira, ondorioz:
 - Konposatu molekular gehienak giro T^a -n gas / likido
 - Nahiko bigunak, deformagarriak

