

# CAPÍTOL 6

## ENLLAÇ QUÍMIC.

## Cicle de Born-Haber:

En primer lloc definim P.I., Af.e<sup>-</sup>, e.n. i U<sub>0</sub>:

S'anomena **P.I.** a la E necessària per a portar un e<sup>-</sup> des del seu estat d'equilibri fins a l'infinit (concretament la E que separa els nivells n=1 i n=∞).

D'altra banda la **E potencial (o V)** és igual però en sentit contrari al treball; de n → ∞ fins a n propers.

La **Af.e<sup>-</sup>** és la E després quan un àtom capta un e<sup>-</sup>.

**e.n. (electronegativitat)** consisteix en l'atracció que un àtom exerceix sobre el parell d'e<sup>-</sup> d'un enllaç amb un altre àtom (cal comprendre que les e.n. elevades concorden amb les majors magnituds de P.I. i Af.e<sup>-</sup>).

La **U<sub>0</sub>** és la **E reticular** i mesura l'emissió d'E produïda per la fusió dels ions de l'enllaç iònic per a formar l'estructura reticular o empaquetament (al unir-se els 2 ions completen la força d'atracció i així desprenen energia; aleshores la U<sub>0</sub> sempre és negativa).

Per a aprofundir podem arribar a analitzar que al baixar per la **taula periòdica** (mostro una **TP** a la REPESCA) els elements creixen en volum (a més resulta que les integren elements amb la mateixa càrrega, tant si ens trobem en el primer grup com en el penúltim on el període és la fila mentre que el grup és la columna).

El grup final correspon als gasos ideals, que són tant estables que no reaccionen amb res i tots els elements voldrien assemblar-s'hi.

A més també podem incloure que **la força d'un enllaç** pot visualitzar-se conclouent que si la relació càrrega-volum és gran, com a conseqüència, l'enllaç perd força; mentre que si és petita no.

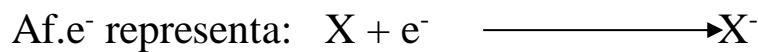
I com a avalador de tal previsió tenim la equació generada empíricament o a base d'equacions diferencials que mostro seguidament:

$$F = (K \cdot q \cdot q') / r^2$$

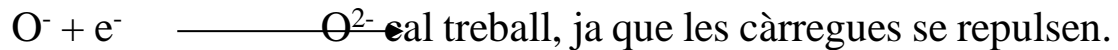
Per a acabar-ho d'adobar, les E funcionen a través de quantització (me refereixo a que se destina una quantitat d'E per a calcular, per exemple, el primer potencial d'ionització o la primera o segona afinitat electrònica, etc...); cosa que vol dir que no trobarem el seu valor fins que no s'acabin la quantitat de partícules a ionitzar i comenci la segona ionització.



On P.I. <0 en **alcalins i alcalinoterris**



On P.I.>0 i Af.e<sup>-</sup> <0 en **halogens i no metalls**.



Quan tenim 2 reactius o molècules i tenen una unió estable (és a dir que desprenen E (exotèrmic), ens trobem amb això:

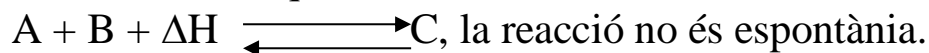


O dit d'una altra manera:

$$\Delta E = E_{A-B} - \frac{1}{2}(E_{A-A} + E_{B-B})$$

Si la E dels productes és menor que la dels reactius,  $\Delta H > 0$  (o **reacció endotèrmica**); en canvi si  $\Delta H < 0$  la reacció és **exotèrmica**.

És més: si  $A + B \xrightleftharpoons{\Delta H} C$  vol dir que la reacció funciona, mentre que si ens trobem amb:



Trencar el primer enllaç costa més que pas els altres en el cas de  $NH_3 \longrightarrow NH_2-H$  respecte a  $NH-H$



## TOM i TEV:

T.O.M.: teoria dels orbitals moleculars

T.E.V.: teoria de l'enllaç de valència.

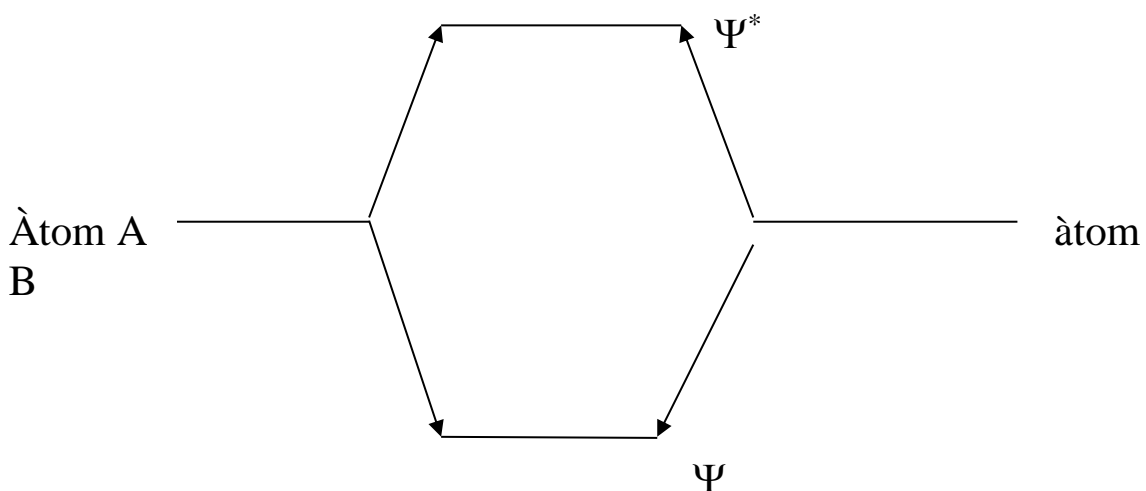
Hibridació: combinació de  $\Psi$  de l'àtom central.

Recordem que cada orbital està descrit per una funció d'ona o  $\Psi$ .

Definició d'orbital: la funció d'ona ( $\Psi$ ) defineix la probabilitat de trobar l'e<sup>-</sup> en una regió determinada de l'espai, mentre que l'orbital és la representació de cada punt de l'espai;  $\Psi$  pot representar-se en coordenades polars o cartesianes. Més informació la trobareu al capítol 9.

Parlem de **funcions d'ona aplicades a la teoria d'enllaços**; Com deueu saber ja, cada  $\Psi_{om}$  conté les  $\Psi$  de cada àtom o  $\Psi$  implicada en l'enllaç (TOM) en canvi en la TEV tot gira al voltant de l'àtom central i la seva hibridació (que ha de ser geomètrica, és a dir, lineal, trigonal, tetraèdrica, i altres combinacions que veurem en el VSEPR).

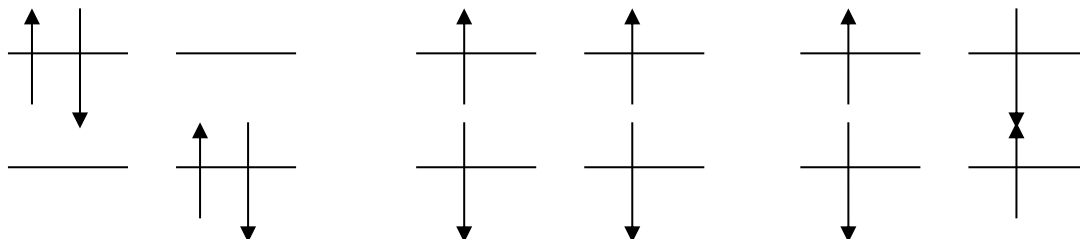
Trobem que en el cas d'un enllaç entre 2 àtoms (tant H<sub>2</sub>, com NO,...) tots 2 àtoms o orbitals que representen cada àtom (com veurem en  $\partial$ ) tenen igual importància, i tant la TEV com la TOM donen iguals expressions (A<sub>2</sub> o AB).



En la TOM existeix un coeficient anomenat **coeficient de mescla** ( $\lambda$ ) que dóna la idea de **polaritat** o on la densitat electrònica present

es troba en major probabilitat (resulta que si  $\lambda$  és 1, tots dos orbitals tenen igual majoria, en canvi si és  $>1$  representa que tal  $\Psi$  es troba en majoria.(fig.16).

Fig. 16:



$$\Psi_{xy} = N.(\Psi_x + \lambda.\Psi_y) \quad (\partial)$$

$$\Psi_{xy}^* = N^*.(\Psi_x - \lambda.\Psi_y).$$

On XY representa AB o A<sub>2</sub> i

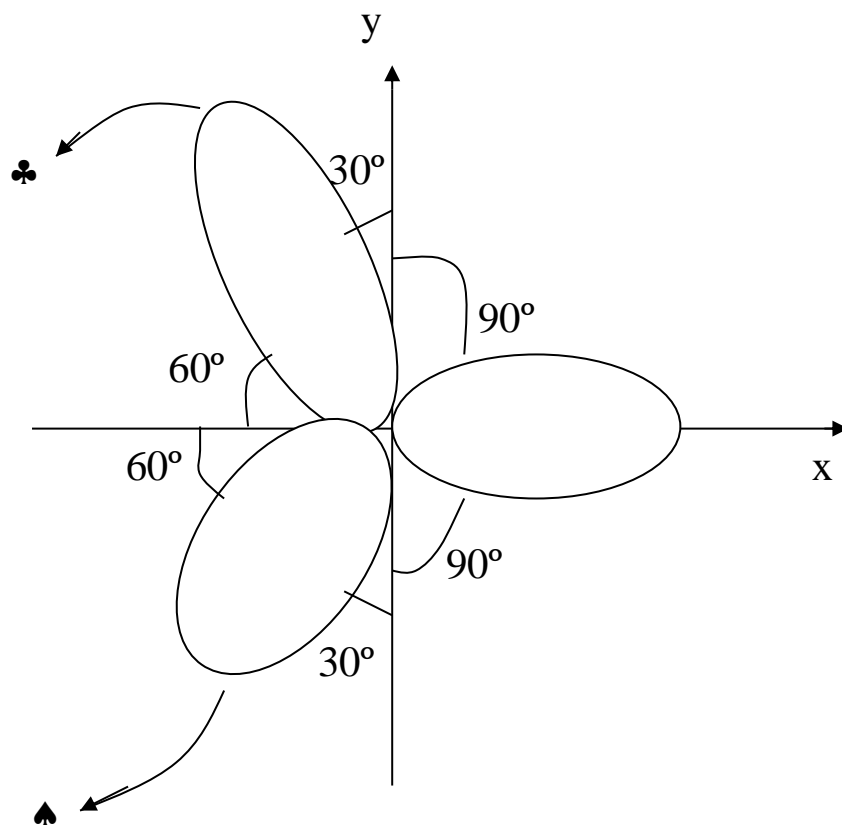
- Com que  $n^\circ \text{ OM} = n^\circ \text{ OA}$  cal visualitzar que hi ha dos maneres de veure una  $\Psi_{om}$ : **enllaçant i antienllaçant**, i en última instància se pot observar que els  $n^\circ$ 's concorden.
- Resulta que tenim *orbitals enllaçants i antienllaçants*, i primer s'emplenen els enllaçants.
- Cal que se formin O.M. a partir **d'igual simetria , iguals E's i solapament constructiu.**

|   |               |               |               |               |               |
|---|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| TEV   | TOM           |               |               |               |               |
| sp  | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$ |               |               |
| sp <sup>2</sup>   | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{6}$ | $\frac{1}{6}$ | $\frac{1}{6}$ |               |
| sp <sup>3</sup>   | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{8}$ | $\frac{1}{8}$ | $\frac{1}{8}$ | $\frac{1}{8}$ |
| que representa  | A             | B             | B'            | B''           | B'''          |
| $N_A^2 + N_B^2 + N_{B'}^2 + N_{B''}^2 + N_{B'''}^2 = 1$ |               |               |               |               |               |

On els signes dels **factors de normalització** no se tenen en compte perquè estan elevats al quadrat.

En el cas d'una *molècula trigonal* tenim la següent representació (fig.17).

Fig. 17:



i la part superior, que definim com a (♣) se pot deduir que per l'angle 30° hi ha 1/3 de proporció, mentre que pel de 60° n'hi ha 2/3, aleshores la contribució ja està trobada.

La part inferior (♠) també està trobada: 2/3 per x i 1/3 per y llavors 2/3 multiplicat per 2/3 dóna 0'4, i 2/3 multiplicat per 1/3 dóna 0'3; el que manca és 1/3, valor que està inclòs en l'orbital s, que contribueix en cadascun dels *híbrids* (TEV).

$$\Psi_{sp^2} = \sqrt{2/3} \cdot \varphi_{px} + \sqrt{1/3} \cdot \varphi_s$$

$$\Psi_{sp^2} = \sqrt{1/3} \cdot \varphi_s - \sqrt{1/2} \varphi_{px} + \sqrt{1/3} \varphi_{py}$$

$$\Psi_{sp^2} = \sqrt{1/3} \varphi_s - \sqrt{1/2} \varphi_{px} - \sqrt{1/3} \varphi_{py}$$

Atenció que en la *molècula tetraèdrica* no és tan fàcil deduir la contribució dels angles; ho tenim analitzat més avall a (∇).

En aquest cas l'orbital s present en cadascun dels 4 híbrids val sempre 1/4; en canvi *els components x,y,z de cada un dels 4 híbrids* és un càlcul dels 0'75 que manquen per a obtenir la normalització.

Recordem que la normalització és:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2 dx = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} (N_a \cdot \varphi_a + N_b \cdot \varphi_b + \dots + N_n \cdot \varphi_n) \cdot (N_a^* \cdot \varphi_a^* + \dots + N_n^* \cdot \varphi_n^*) dx =$$

$$= N_a^2 + N_b^2 + \dots + N_n^2 = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \cdot \Psi^* dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i \cdot \Psi_i^* dx = 1 \text{ ja que hi ha } \textit{solapament}. \text{ En canvi:}$$

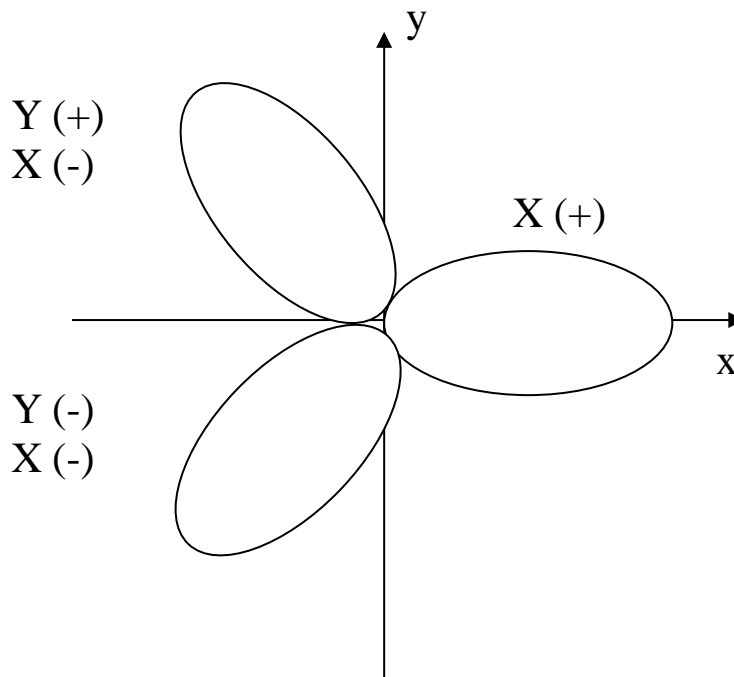
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i \cdot \Psi_j dx = 0 \text{ ja que no existeix } \textit{interpenetració}$$

Resulta que en aquest cas els signes no tenen importància. Només se fan imprescindibles quan no tractem de descobrir els factors de



normalització N's sinó dels signes de cada  $\varphi$  de l'híbrid  $\Psi_{sp^2}$ ,  $\Psi_{sp^2}$ ,  $\Psi_{sp^2}$ . Així. analitzarem l'híbrid trigonal, que és més fàcil.(fig.18).

Segons els quadrants, els signes de cada component de la  $\Psi$  híbrida ( s,  $p_x$ ,  $p_y$ ) varien de la següent manera:



S és sempre positiu.

( $\nabla$ ) si definim els angles que cada un dels 4 híbrids dibuixa respecte als eixos x,y,z` podem veure que:

$$80^\circ \longrightarrow y$$

$$40^\circ \longrightarrow x$$

$$20^\circ \longrightarrow z$$

Llavors els sumem i obtenim  $140^\circ$ . Sabent que fent el % obtenim que:

$$80/140 = 0'57$$

$$40/140 = 0'28$$

$$20/140 = 0'14$$

$$\frac{\quad}{1} + (!)$$



A partir d'aquí farem que els 0'75 siguin 100, i cada un dels valors aconseguits a dalt (!) serà el que doni la contribució de cada eix  $x$  o  $y$  o  $z$  a la  $\Psi_{sp^3}$ .

Així:

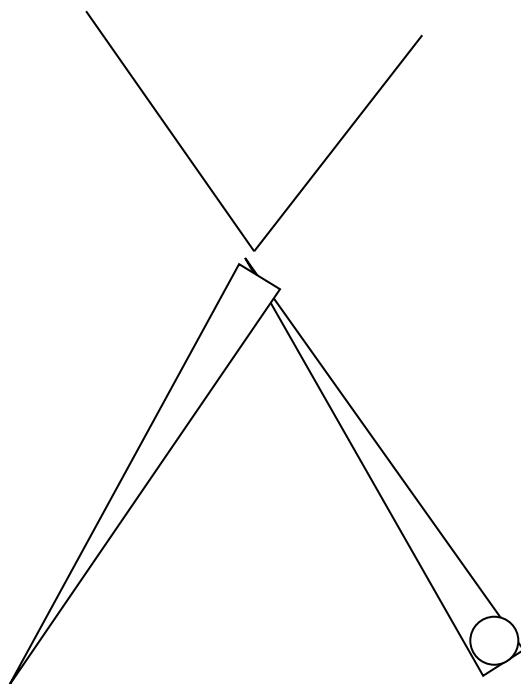
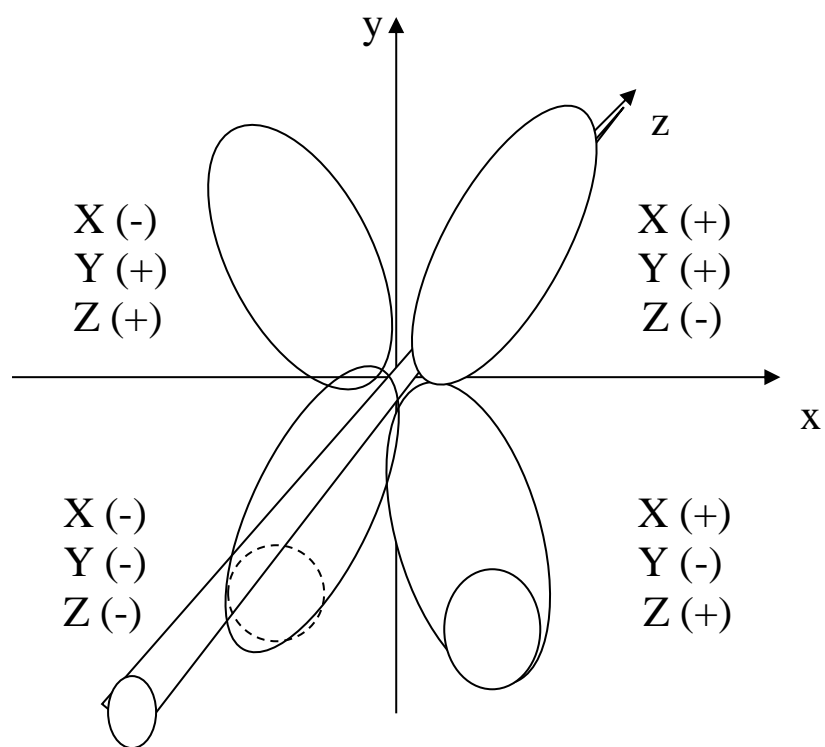
$$\begin{array}{l} 100 \longrightarrow 0'75 \\ 28 \longrightarrow x_y \quad \text{on } x_y = 0'21 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} 100 \longrightarrow 0'75 \\ 57 \longrightarrow x_x \quad \text{on } x_x = 0'42 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} 100 \longrightarrow 0'75 \\ 14 \longrightarrow x_z \quad \text{on } x_z = 0'15 \end{array}$$

i veiem que  $0'4 + 0'2 + 0'15 + 1/4$  és igual a 1, els factors de normalització d'un  $\Psi_{sp^3}$ . i cada  $\Psi_{sp^3}$  tindrà uns valors diferents depenent dels angles  $\alpha$  que dibuixa amb els eixos  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .(fig.19).

Fig. 19:



D'altra banda, per trobar les N de les  $\Psi$ 's TOM cal veure la contribució de cada funció d'ona atòmica (que no molecular) o dit d'una altra manera, en to d'exemple, si tractem amb  $AB_2$ , la N de  $\Psi_A$  serà el doble de cada  $\Psi_B$  (recordem **Aufbau**) o sigui:

$$\Psi = 1/2\Psi_A + 1/4\Psi_B + 1/4\Psi_B'$$

I en el cas de  $AB_3$  el triple:

$$\Psi = 1/2\Psi_A + 1/6\Psi_B + 1/6\Psi_B' + 1/6\Psi_B''$$

**VSEPR** és un mecanisme que permet dilucidar la geometria de l'àtom central a partir dels àtoms secundaris.

**E de canvi:** força addicional per trobar la estabilitat posterior en forma d'un  $e^-$  a cada espai (o àtom).

**Ordre d'enllaç** =  $(n^\circ \text{ orbitals enllaçants} - n^\circ \text{ d'orbitals antienllaçants})/2$ .

**Principi d'exclusió de Pauli**, que diu que mai dos electrons tindran igual  $n^\circ$ 's quàntics (per repulsió electrònica).

*L'àtom principal, A, se situa sempre al mig.*

Segons *el signe dels eixos* és obvi que hi ha d'haver el cas oposat per nassos:



S'orienten diferentment en l'espai:

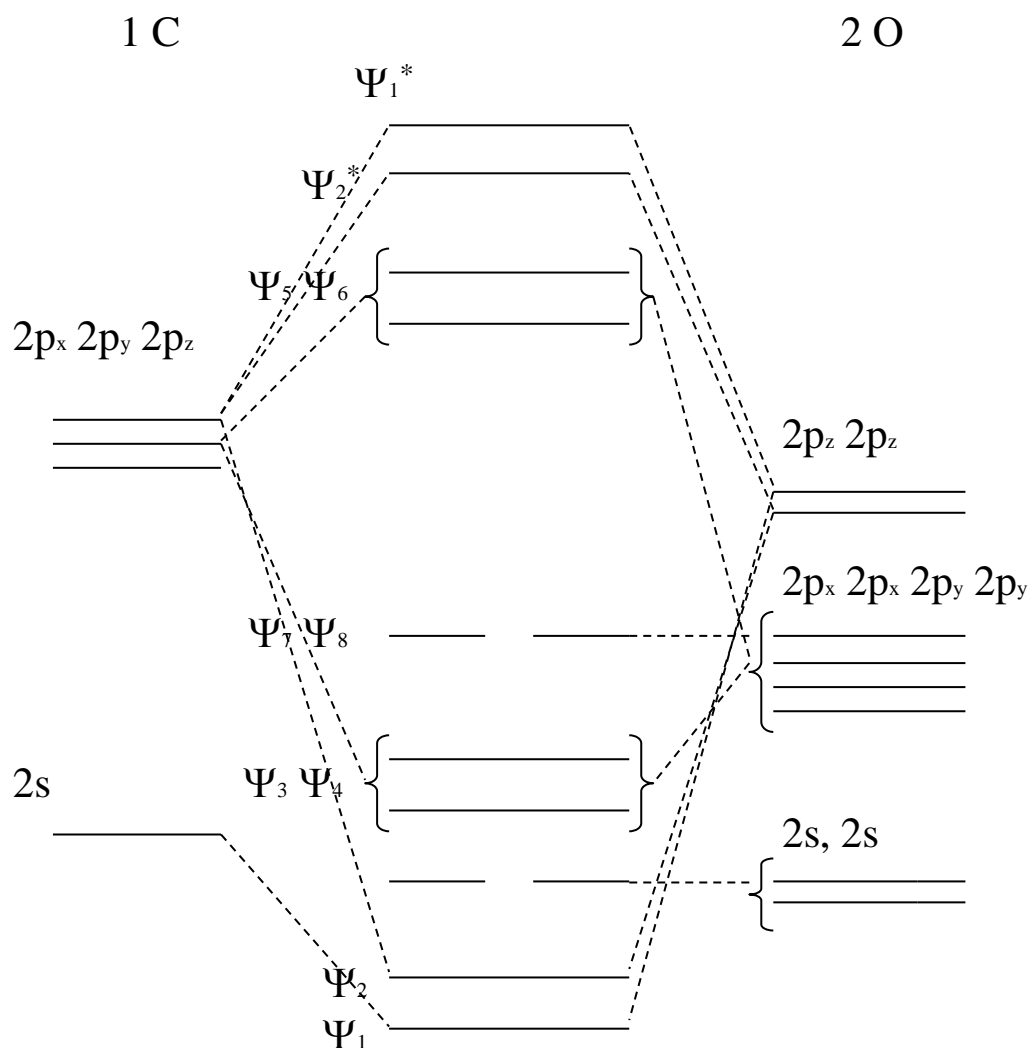


En termes de TOM:

En el cas d'AB, repetim, tenim la següent representació gràfica: (on els orbitals que manquen per a aconseguir que  $n^\circ \text{O.M} = n^\circ \text{O.A}$ . són els corresponents a l'orbital "s").

Mentre que en el cas de  $\text{AB}_2$ , (per exemple  $\text{CO}_2$ ), tenim la representació de la fig.20

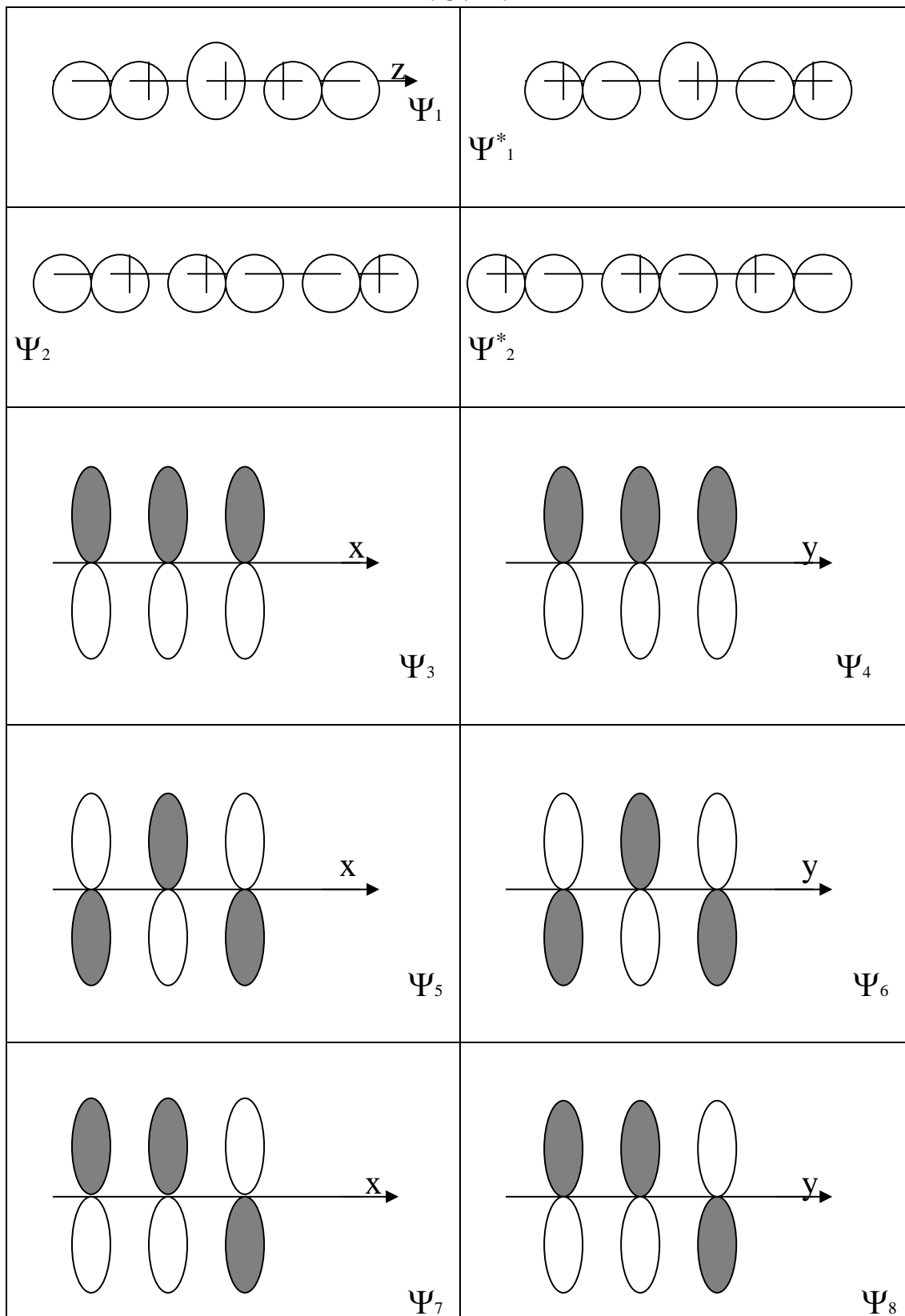
Fig. 20:



Adjuntaré les funcions d'ona, la representació gràfica de les quals està a la fig.21:

Fig. 21:

T.O.M.



|  |  |
|--|--|
|  |  |
|--|--|

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= N \cdot \varphi_{C2s} + N' \cdot \varphi_{O2pz} + N'' \cdot \varphi_{O2pz} \\ \Psi_1^* &= N \cdot \varphi_{C2s} - N' \cdot \varphi_{O2pz} - N'' \cdot \varphi_{O2pz} \\ \Psi_2 &= N \cdot \varphi_{C2pz} + N' \cdot \varphi_{O2pz} + N'' \cdot \varphi_{O2pz} \\ \Psi_2^* &= N \cdot \varphi_{C2pz} - N' \cdot \varphi_{O2pz} - N'' \cdot \varphi_{O2pz} \\ \Psi_3 &= N \cdot \varphi_{C2px} + N' \cdot \varphi_{O2px} + N'' \cdot \varphi_{O2px} \\ \Psi_4 & \text{ (el mateix però amb } 2py) \\ \Psi_5 &= N \cdot \varphi_{C2px} - N' \cdot \varphi_{O2px} - N'' \cdot \varphi_{O2px} \\ \Psi_6 & \text{ (el mateix però a l'eix } y) \\ \Psi_7 &= N \cdot \varphi_{C2px} + N' \cdot \varphi_{O2px} - N'' \cdot \varphi_{O2px} \\ \Psi_8 &= N \cdot \varphi_{C2py} + N' \cdot \varphi_{O2py} - N'' \cdot \varphi_{O2py} \end{aligned}$$

I les OM que queden per a completar la igualtat  $n^\circ OA = n^\circ OM$  s'extreu de les dues  $\Psi_{2s}$  de l'oxigen.

I, posats a fer, quan ens trobem amb  $AB_3$ , (per exemple  $BCl_3$ ) tenim la fig.22.

Fig. 22:

A partir de les expressions matemàtiques de les funcions d'ona ( $\Psi$ ) del cas  $AB_3$  (per exemple  $BCl_3$ ) que teniu a continuació, us deixo per vosaltres la representació gràfica en Orbitals Moleculars (T.O.M.); tingueu present les figures 7 (a), (b), (c), (d), (e), (f), i 8 per a tal exercici.

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= N \cdot \varphi_{B2s} + N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_1^* &= N \cdot \varphi_{B\ 2s} - N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} - N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} - N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_2 &= N \cdot \varphi_{B\ 2px} + N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + /-N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_2^* &= N \cdot \varphi_{B\ 2px} - N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} - N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + /-N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_3 &= N \cdot \varphi_{B\ 2py} + N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} + N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_3^* &= N \cdot \varphi_{B\ 2py} - N' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} - N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} - N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2px} \\ \Psi_4 &= N \cdot \varphi_{B\ 2s} + /-N' \cdot \varphi_{Cl\ 2py} + /-N'' \cdot \varphi_{Cl\ 2py} + /-N''' \cdot \varphi_{Cl\ 2py} \end{aligned}$$



$$\Psi_5 = N \cdot \phi_{B\ 2p_y} + / - N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y} + / - N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y} + / - N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y}$$

$$\Psi_6 = N \cdot \phi_{B\ 2p_x} + / - N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y} + / - N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y} + / - N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_y}$$

$$\Psi_7 = N \cdot \phi_{B\ 2p_z} + N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} + N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} + N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z}$$

$$\Psi_7^* = N \cdot \phi_{B\ 2p_z} - N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} - N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} - N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z}$$

$$\Psi_8 = N \cdot \phi_{B\ 2p_z} + N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} + N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} - N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z}$$

$$\Psi_9 = N \cdot \phi_{B\ 2p_z} + N' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} - N'' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z} - N''' \cdot \phi_{Cl\ 2p_z}$$

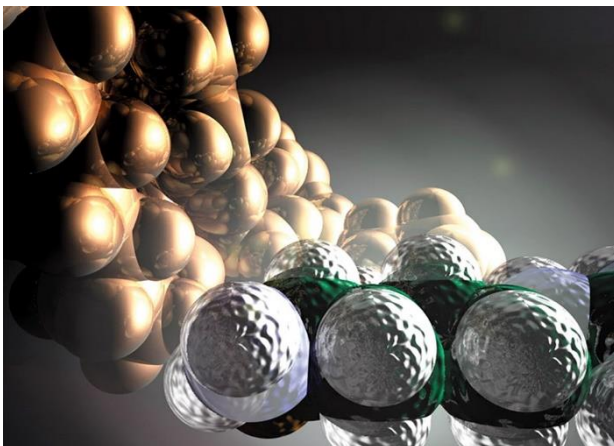
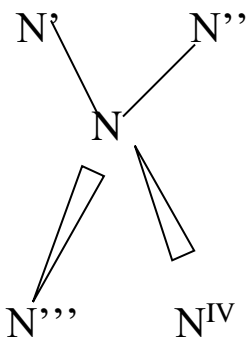
La força dels enllaços  $\sigma$  és superior a la dels enllaços  $\pi$ .

Veurem que existeixen totes les opcions en els enllaços  $\pi$ .

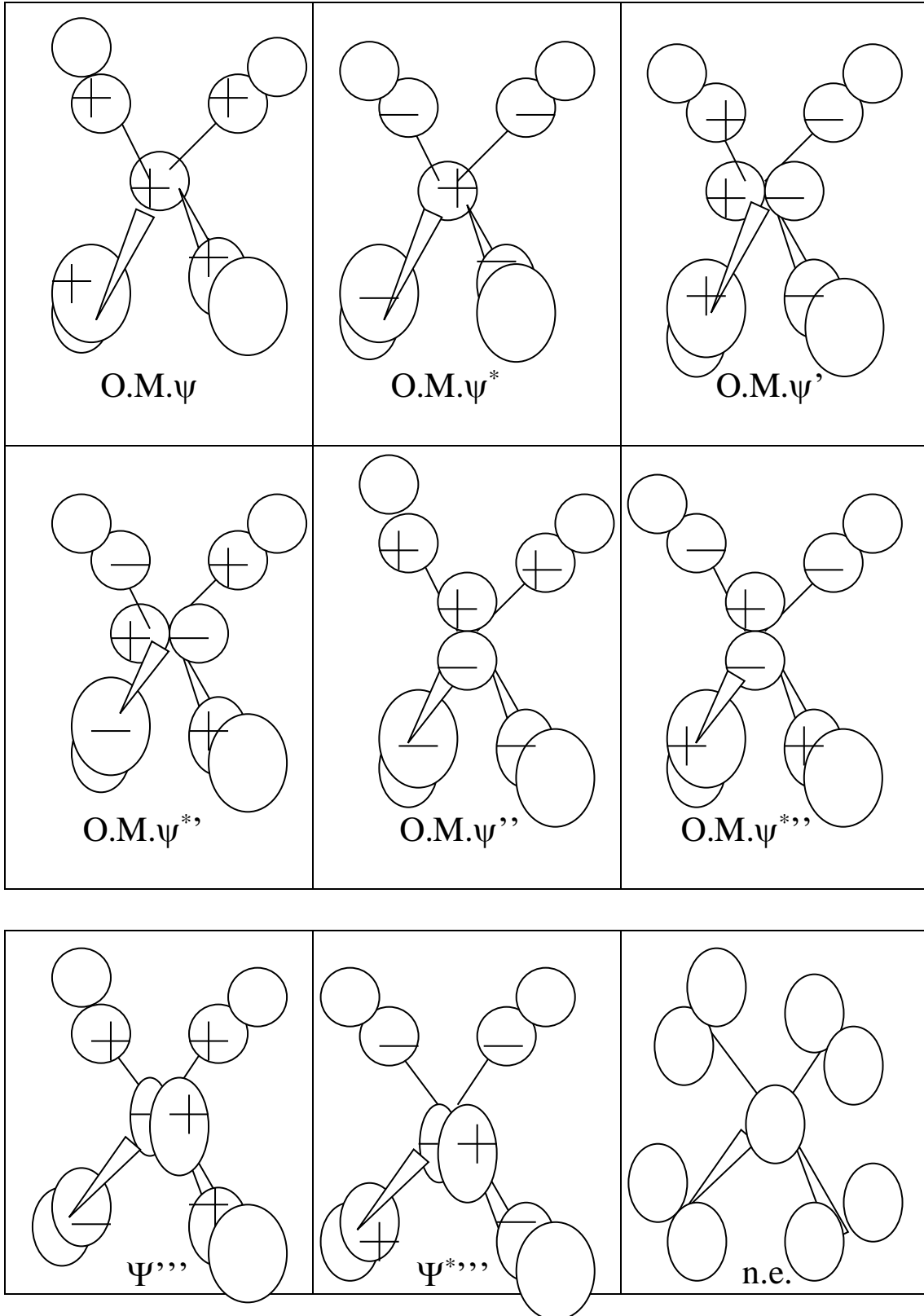
I, per últim, analitzarem les representacions dels orbitals de  $AB_4$ , situats a la fig.23.

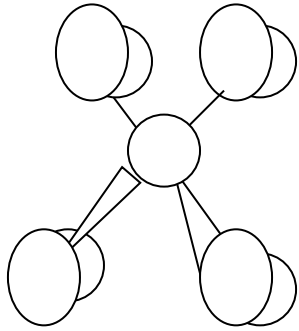
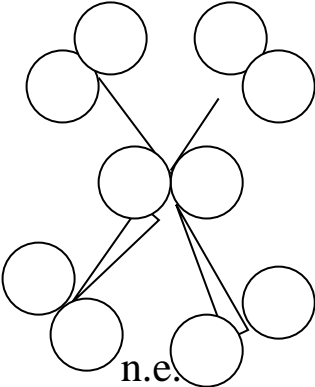
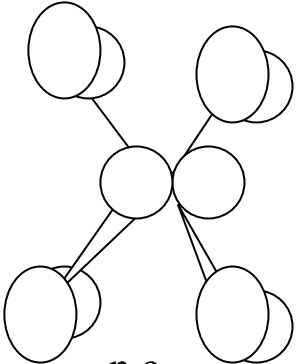
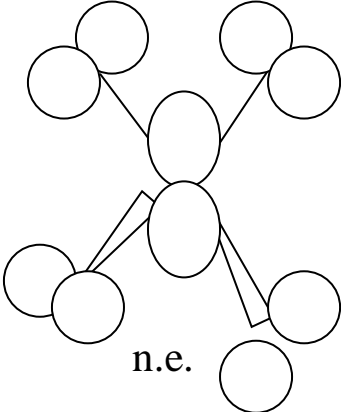
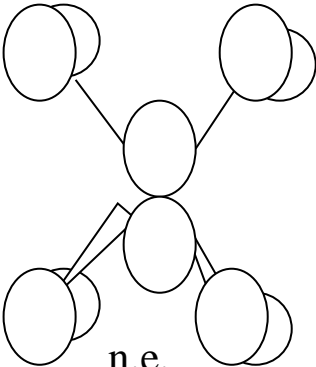
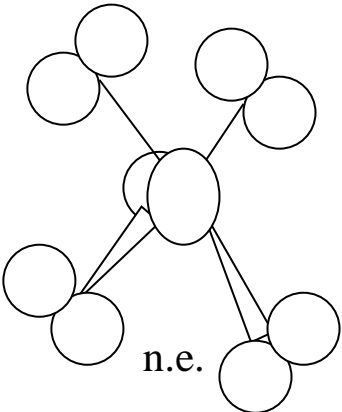
Fig. 23:

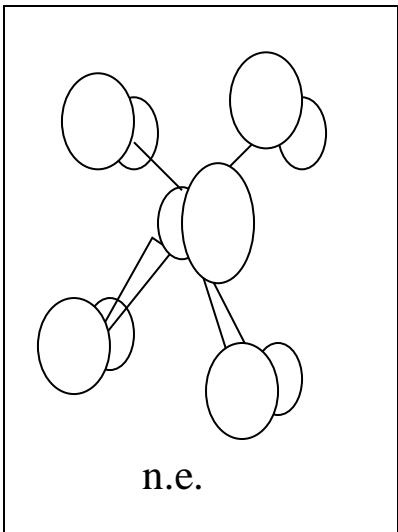
Tal i com hem vist a la fig.19, partim de la forma del tetraedre. També mostro l'ordre dels factors de normalització que he pres en tal tetraedre; recordem que la representació de les  $\Psi$  estan a la "repesca". I atenció que "n.e."  $\equiv$  no enllaçant.



T.O.M



|  |  |   |
|--|--|---|
|  |  |   |
|  <p>n.e.</p>  |  <p>n.e.</p>  |  <p>n.e.</p> |
|  <p>n.e.</p> |  <p>n.e.</p> |  <p>n.e.</p> |



Mentre que en termes de TEV, ja ho hem analitzat a l'inici, són híbrids. Ens hem deixat el cas AB que és fàcil de deduir:

$$\Psi_{sp} = \sqrt{1/2} \cdot \varphi_s + \sqrt{1/2} \cdot \varphi_{px}$$

$$\Psi_{sp} = \sqrt{1/2} \cdot \varphi_s - \sqrt{1/2} \cdot \varphi_{px}$$

## Referent a l'enllaç químic:

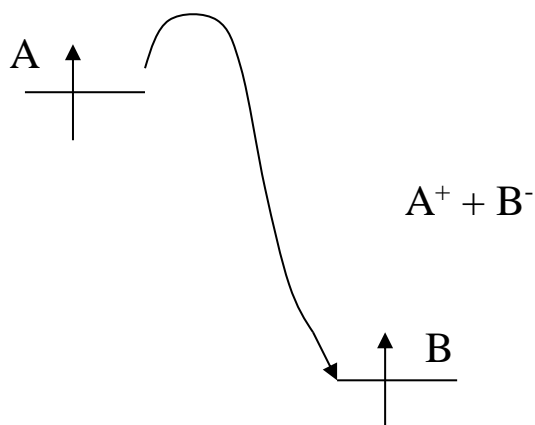
Les primeres nocions de representació d'enllaç covalent van ésser gràcies a les **Estructures de Lewis**:

Les lleis de les quals adjunto ara:

1. per formar un **enllaç covalent** és necessari aparellar  $2 e^-$ .  
Compartiran el mateix orbital, i segons *Pauli* han de tenir *spins contraris*. Han de tenir E semblants, si no mai arribarem a unir-los i ens trobarien amb un enllaç iònic i no covalent.
2. moltes molècules tenen un màxim de  $8 e^-$  a la seva **capa de valència** (imprescindible per a elements del 2<sup>on</sup> període ja que només tenen orbitals s i p).  
 $\exists$  elements que tenen menys  $e^-$  a la seva capa de valència i no arriben a **poder fer l'octet** (l'octet només s'acostuma a complir amb elements de no més avall del 2<sup>on</sup> període, és a dir, elements amb s o p als seus  $e^-$  de valència, però no d).  
És a dir, usen *e<sup>-</sup>s i p externs* (que s'anomena capa de valència)
3. si tenim orbitals d a disposició, la capa de valència es pot *expandir* més enllà de l'octet (elements del 3<sup>er</sup> període cap avall, anomenats elements de transició).  
Llavors se pren com a referència la forma geomètrica de la molécula com veurem en l'apartat de VSEPR.(fig.10).

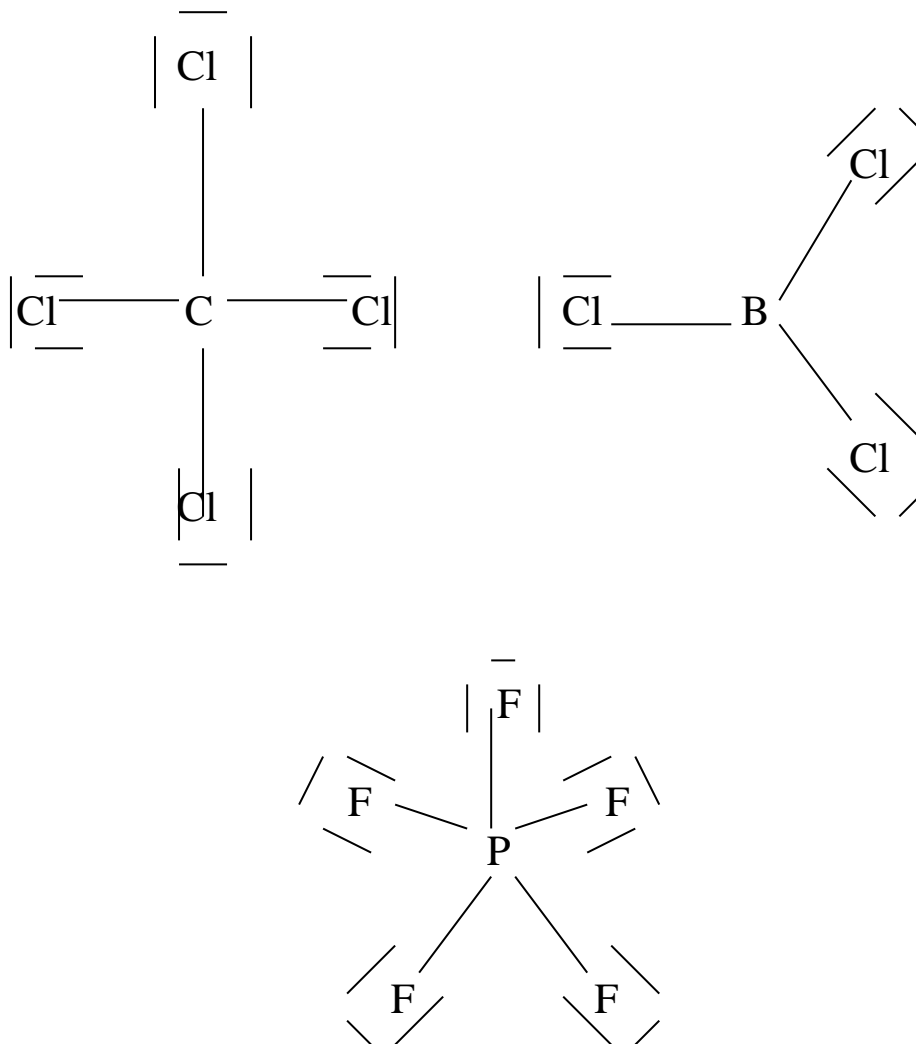
Fig. 10:

Quan les diferències entre els nivells és massa gran ja deixem de parlar d'enllaç covalent i ho fem d'enllaç iònic.



4. **q formal** d'un àtom:  $n^\circ$  d' $e^-$  de valència que té en l'estat atòmic menys  $n^\circ$  d' $e^-$  de valència que li correspon a la molécula. En estructures on apareixen q formals del mateix signe en *àtoms veïns* és que hem fallat, igual que si apareixen q formals que contradiguin les e.n. dels àtoms. Normalment els elements amb més  $\downarrow$  e.n. se situen en les posicions centrals.(fig.11).

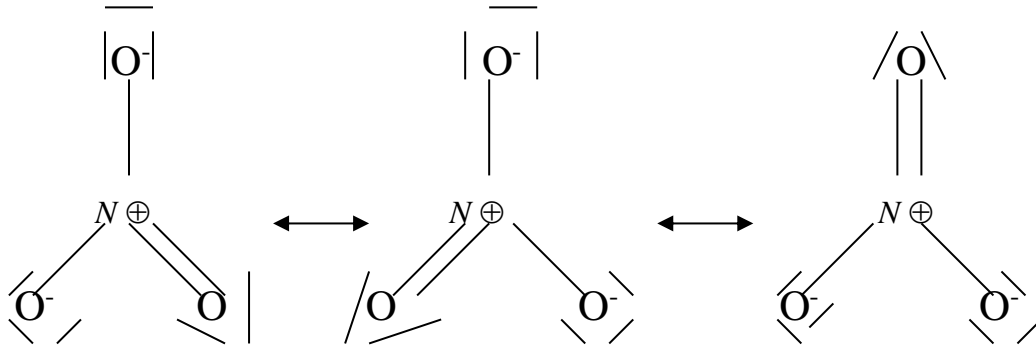
Fig. 11.



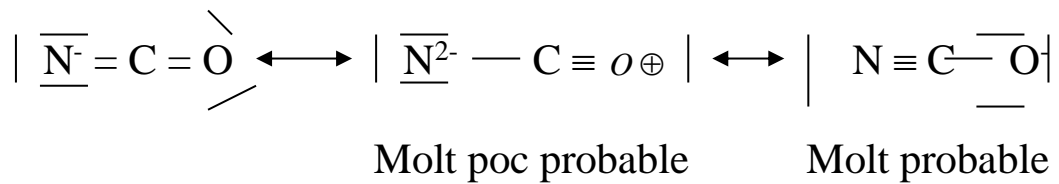
5. aconseguir una **estabilitat addicional** (la *E d'enllaç* sigui la més petita possible); *es minimitza la repulsió entre els àtoms* i lograr el n<sup>o</sup> d'enllaços més gran possible.
6. **ressonància**: situació que es produeix quan diferents estructures són possibles. Quan ens trobem amb què una molècula pot tenir *més d'una estructura*, guanya la que té estructures ressonants.(fig.12)

Fig. 12:

$\text{NO}_3^-$



$\text{CNO}^-$



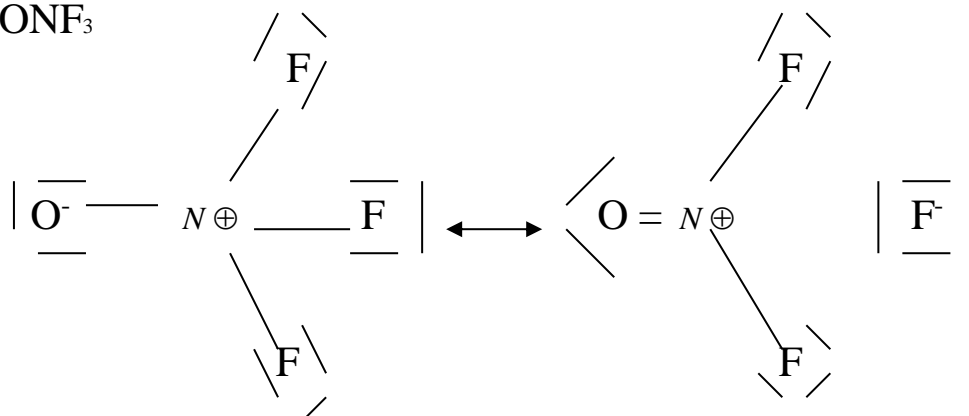
Recordem que la electronegativitat (en) de l'Oxígen és  $>$  en<sub>N</sub>.

7. **Hiperconjugació:** augmentar l'ordre d'enllaç d'un enllaç a costa d'un altre enllaç.(fig 13).



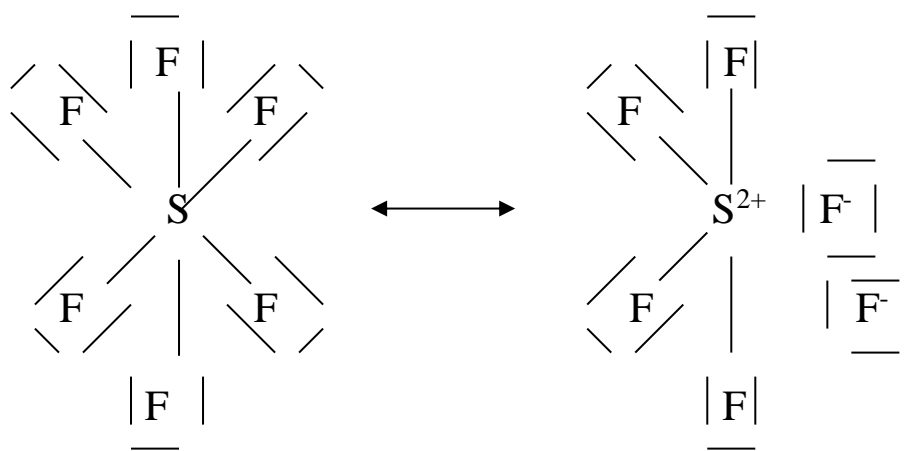
Fig. 13:

ONF<sub>3</sub>



$en_F > en_O$

SF<sub>6</sub> per a elements del 3<sup>er</sup> període.



### Passos per a dilucidar l'estructura de Lewis:

a): contar el n<sup>o</sup> d'e<sup>-</sup> de valència de cada àtom de la molècula i afegir-hi les q (+) o (-) si en tenen.

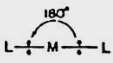
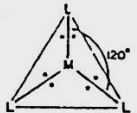
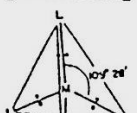




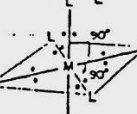














b): posar els àtoms en la seva *posició relativa*.

c): moure els e<sup>-</sup> dels enllaços no enllaçants en cas que no s'acabi de complir l'octet.

d): deduir la q formal.

### VSEPR:

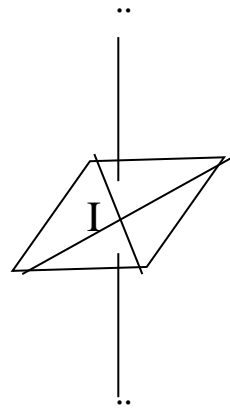
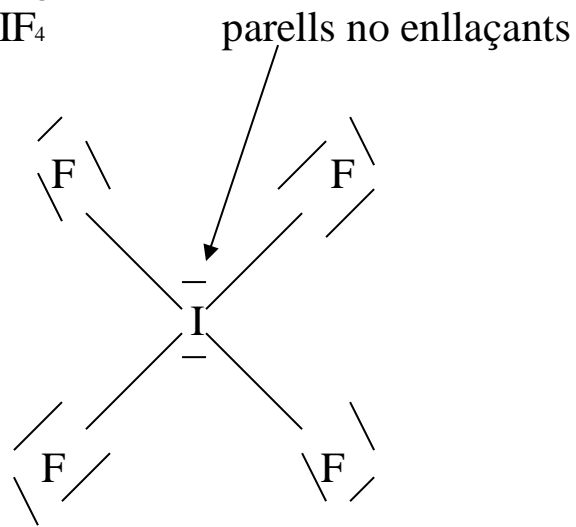
Per a dilucidar les geometries, tant en molècules que compleixen l'octet com en les que sofreixen expansió d'octet. (del 3<sup>er</sup> període cap avall). A la fig. 14.

| <u>Nº de parells d'electrons</u> | <u>Tipus de molècula</u>       | <u>Forma geomètrica</u> | <u>Representació gràfica</u>   | <u>Representació esquemàtica</u>  |
|----------------------------------|--------------------------------|-------------------------|--|---|
| 2                                | AB <sub>2</sub>                | LINEAL                  |    | - A -   |
| 3                                | AB <sub>3</sub>                | TRIANGULAR              |   | <br>A   |
|                                  | AB <sub>2</sub> S              | ANGULAR                 |  | — A —   |
| 4                                | AB <sub>4</sub>                | TETRAÈDRICA             |  |  |
|                                  | AB <sub>3</sub> S              | PIRÀMIDE TRIG.          |  |  |
|                                  | AB <sub>2</sub> S <sub>2</sub> | ANGULAR                 |  |  |
| 5                                | AB <sub>5</sub>                | BIPIRÀM. TRIG.          |  | <br>A   |
|                                  | AB <sub>4</sub> S              | TETR. DISTORS.          |  |  |
|                                  | AB <sub>3</sub> S <sub>2</sub> | FORMA DE T              |  |  |
| 6                                | AB <sub>6</sub>                | OCTAÈDRICA              |  | <br>A   |
|                                  | AB <sub>5</sub> S              | PIRAM. QUADR.           |  |  |
|                                  | AB <sub>4</sub> S <sub>2</sub> | QUADRADA                |  |  |
| 7                                | AB <sub>7</sub>                | BIPIRÀM. PENTAG.        |  | <br>A   |
|                                  | AB <sub>6</sub> S              | OCTAÈDRICA              |  |  |

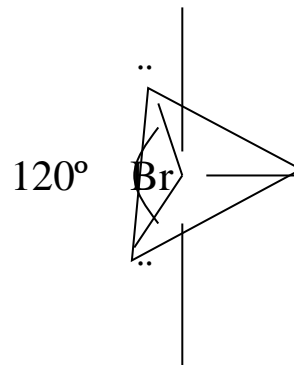
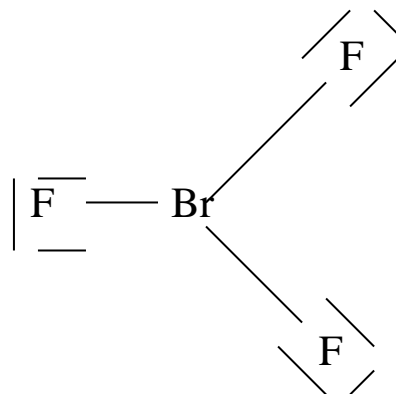
Els parells d'e<sup>-</sup> no enllaçants, com més lluny millor.(figs.15)

Fig. 15:

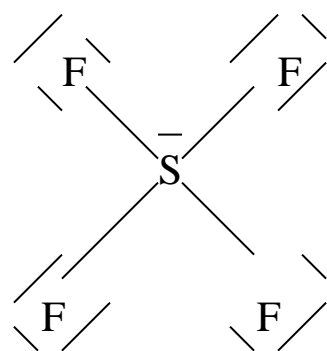
IF<sub>4</sub>



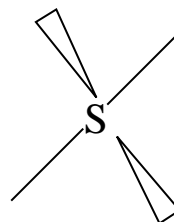
BrF<sub>3</sub>



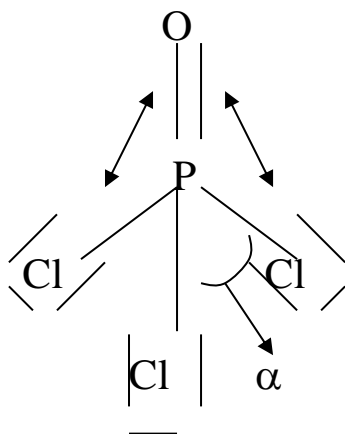
SF<sub>4</sub>



tetraedre distorsionat:



$\text{POCl}_3$  doble enllaç fa més repulsió:



no és tetraèdric ja que  $\alpha$  no és  $109,3^\circ$   
sinó  $103^\circ$ .

Tenint present que les repulsions segueixen aquest ordre (de més a menys): Parell no enllaçant- parell no enllaçant

∨

Parell no enllaçant- parell enllaçant

∨

Parell enllaçant- parell enllaçant