

## Structura Moleculară – Aplicații Practice

### Obiectiv:

- Calcularea electronegativității unei structuri moleculare.  
De ce? Electronegativitatea este acea proprietate moleculară care explică de ce o parte a moleculei este mai reactivă decât alta.

### Cerințe:

#### Problema 1

Calculați electronegativitatea următoarelor grupări folosind scala Pauling revizuită și

- Metoda de aproximare "super-atom"
- Metoda Diudea-Silaghi

Grup
-CH <sub>3</sub>
-CHO
-OH
-OCH <sub>3</sub>
-OF
-ONO
-OCl
-OCN
-OH
-NO <sub>2</sub>
>NH
-NCO
=NH
-NCS
-NH <sub>2</sub>
>S(=O) <sub>2</sub>
>S=O
-CF <sub>3</sub>
>C=O
-COOH
-CONH <sub>2</sub>
-COCl
-CN
-CHO
-CCl <sub>3</sub>
-SCN
-SH
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>
-CH <sub>3</sub>
>PH
-PH <sub>2</sub>
-BH <sub>2</sub>
>BH

## Problema 2

Comparați valorile obținute cu următoarele valori de referință:

Grup	Ref1	Ref2	Ref3	Ref4	Ref5	Ref6	Ref7
-CH <sub>3</sub>	2.40						
-CHO	2.75						
-OH	3.03						
-OCH <sub>3</sub>	3.09						
-OF	3.51		4.14				3.60
-ONO	3.44		4.43				
-OCl	3.42	3.23	3.73				3.58
-OCN	3.41	3.35	4.66				3.57
-OH	3.36	2.82	3.51	3.49	2.81	3.48	3.55
-NO <sub>2</sub>	3.29		4.83	3.42	3.29	3.63	
>NH	3.04					3.09	
-NCO	2.98	3.37		3.55			3.18
=NH	2.96					3.31	
-NCS	2.91	3.09	4.17	3.51	2.68	3.29	3.22
-NH <sub>2</sub>	2.88	2.47	2.61	2.99	2.49	3.05	3.12
>S(=O) <sub>2</sub>	2.83		4.40				
>S=O	2.75		4.00				
-CF <sub>3</sub>	2.71	3.47	3.46			3.18	2.71
>C=O	2.71		3.72				
-COOH	2.66	3.04	3.54	2.82	2.86	2.73	2.63
-CONH <sub>2</sub>	2.63			2.73		2.69	2.61
-COCl	2.63			2.73			2.66
-CN	2.60	3.32	3.84	3.21	2.68	3.10	2.69
-CHO	2.60	2.93		2.87	2.68	2.85	2.60
-CCl <sub>3</sub>	2.56	2.95	2.84	2.66		2.68	2.70
-SCN	2.54	3.10	3.91		2.68	2.89	2.70
-SH	2.51	2.50	2.32	2.62	2.48	2.56	2.65
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	2.50		2.29				
-CH <sub>3</sub>	2.47	2.31	2.27	2.47		2.47	2.55
>PH	2.27						
-PH <sub>2</sub>	2.24	2.27	2.13	2.19			2.17
-BH <sub>2</sub>	2.09		2.09	1.98			1.91
>BH	2.08						

### Care metodă de calcul a electronegativității este mai bună?

- Coeficientul de corelație – cu cât metoda este mai bună cu atât coeficientul de corelație are valoarea mai aproape de +1.
- Diferența cea mai mică dintre valoarea de referință și valoarea calculată.

### Instrucțiuni

÷ Program utilizat: Microsoft Excel. Salvați fișierul cu denumirea Electronegativitate. Calculele se vor face într-o foaie de calcul cu numele Metode.

÷ Formula de calcul:

○ *Metoda de aproximare "super-atom"*:  $E_G = \sum_A V_A E_A / \sum V_A$

○ *Metoda Diudea-Silaghi*:  $E_{v,k} = \sqrt[k + \sum_j b_{v,j}]{(E_A)_v^k \prod_j (E_A)_j^{b_{v,j}}}$ ,  $b_{v,j}$  este ordinul de legătură al lui v cu j, k - numărul de legături ale vârfului V al grupului G către alți atomi

N.B. Electronegativitatea prin metoda de aproximare „super-atom” se va calcula în coloana B iar metoda Diudea-Silaghi în coloana C a unei foi de calcul denumită Electronegativitate.

÷ Scala de electronegativitate a lui Pauling revizuită:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 2.90
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.60	Mo 2.16	Tc 1.90	Ru 2.20	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10	I 2.66	Xe
6	Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.27	Hf 1.30	Ta 1.50	W 2.36	Re 1.90	Os 2.20	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 2.04	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.00	At 2.20	Rn

÷ Comparațiile se fac într-o nouă foaie de calcul denumită *Comparații*:

- Pentru coeficientul de corelație utilizați funcția CORRELL (funcție predefinită) sau CORRELATION (Data Analysis)
- Realizați reprezentarea grafică a corelației (grafic de tip nor de puncte - scatter).
- Diferența dintre valoarea de referință și valoarea calculată. Puneți în evidență prin metoda care obține cele mai mici valori a sumei diferenței, respectiv cele mai multe valori minime.