Irakaslearen gida: lotura kimikoen simulazioa

Laburpena

Simulazioak lotura ionikoak eta kobalenteak atomoz atomo sortzen ditu geruzen ereduarekin, eta metalen eta kristalen propietateak esperimentuen bidez azaltzen ditu. Euskadin DBHko 4. mailako Fisika eta Kimikan erabiltzen da batez ere, eta DBHko 3. mailan eta Batxilergoko 1. mailan ere badu aplikaziorik.

Datua	Xehetasuna
Esteka	simulaciencia.es/eu/simulazioak/enlaces-quimicos/
Mailak	DBHko 4. maila (erabilera nagusia), DBHko 3. maila, Batxilergoko 1. maila; noizbehinkako errepasoa Batxilergoko 2. mailako Kimikan
Irakasgaia	Fisika eta Kimika; Kimika Batxilergoko 2. mailan
Gutxi gorabeherako iraupena	15-20 minutu lotura mota bakoitzeko, simulazioa proiektatuta
Materiala	Proiektorea edo arbel digitala; nabigatzailean dabil, baita mugikorrean eta tabletan ere, ezer instalatu gabe. Pantaila estuetan oihala goian geratzen da eta kontrolak behean; mugikorrean atomoak txiki ikusten dira, beraz, azaltzeko hobe da pantaila handi bat
Aurretiko ezagutzak	Zenbaki atomikoa, elektroien banaketa geruzetan, metalak eta ez-metalak, karga elektrikoa
Irisgarritasuna	Modu iluna baino ez du, gaia edo kontrastea aukeratu gabe. «Pausatu» botoia animazioa izozteko

Nola dabil simulazioa

Alboko barrako goiko zabalgarriak modua aukeratzen du: «Lotura ionikoa», «Lotura kobalentea» edo «Lotura metalikoa». Lehen bietan hiru zirrikitu daude, «A atomoa», «B atomoa» eta «C atomoa», hautatzaile batekin eta oihalaren azpian egoera-panel batekin. Bi modu horietatik kristalen ikuspegi batera sartzen da dagokion botoiarekin, eta «← Itzuli loturara» botoiarekin itzultzen da.

Modua	Irakasleak zer kontrolatzen duen	Zer erakusten duen
Lotura ionikoa	Zirrikitu bakoitzeko elementua (H, C, N, O, F, Li, Na, Mg, S, Cl, K, Ca edo «— Hutsik —») eta «Eman elektroi bat B-ri», «Eman elektroi bat A-ri» eta «Eman elektroi bat C-ri» botoiak	Atomoak beren geruzekin, bakoitzaren karga, «Balentzia-e⁻: 7 / 8», oktetoa edo duetoa lortzen duen eta ondokoarekin erakarpenik dagoen. Lotura sortzean, «Lotura sortuta» txartelak formula eta ioiak ematen ditu
Kristal-sare ionikoa («Ikusi kristal-sarea →»)	«3D gelaxka» edo «2D geruza» ikuspegia. Geruzan: «Aplikatu tentsioa», «Aplikatutako alboko indarra» erresistentziaren % 0tik % 150era, «Berreraiki kristala» eta «Bi blokeen arteko indarrak» eta «Ikusi elektroiak» laukiak	Konposatuaren benetako sarea, ioien proportzioa, ioi bakoitzaren ingurunea, solidoan ez duela eroaten eta nola hausten den
Lotura kobalentea	Ez-metalak baino ez (H, C, N, O, F, S, Cl). Ondoko zirrikituen artean, «Partekatu», «Datiboa» eta «Desegin» botoiak	«e⁻ eraginkorrak: 2 / 2», «Sortutako loturak» eta geruzak gainjartzen diren zonan biraka dabilen bikote partekatua

Modua	Irakasleak zer kontrolatzen duen	Zer erakusten duen
Kristal kobalenteak («Ikusi kristal kobalenteak»)	Kristala: «Diamantea», «Grafitoa», «Silizea» edo «Izotz lehorra». «Aplikatu tentsioa» eta «Tenperatura» −200 °C-tik 4000 °C-ra	3D sarea, kristal mota, propietateak, partikulen bibrazioa, egoera-aldaketa eta eroapena (grafitoak bakarrik)
Lotura metalikoa	«Metala»: Na, K, Mg, Ca edo Al. «Aplikatu tentsioa» eta «Deformatu sarea»	20, 40 edo 60 elektroiko itsaso batean dauden 20 katioiko sarea, urtze-tenperatura, eroapena eta xaflakortasuna

Lau elementuk eusten diote azalpenari:

- **Elektroi-kontagailuak.** Zirrikitu bakoitzak karga eta kanpoko geruzaren zenbaketa erakusten ditu, adibidez «Balentzia-e^-: 8 / 8» eta «Oktetoa lortuta». Kobalentean partekatutako elektroiak ere zenbatzen ditu.
- **Erakarpen-seinalea.** Ondoko zirrikituen artean «Erakarpen elektrostatikoa» agertzen da kargak aurkakoak badira, eta «Ez dago erakarpen elektrostatikorik» bestela. Elektroien transferentzia eta lotura bera bereizten ditu.
- **3D ingurunea.** 3D gelaxketan arrastatuz biratzen da, eta ioi edo atomo batean klik eginez gero haren ondokoak nabarmentzen dira. Gelaxkatik kanpo geratzen diren ondokoak gardenkara marrazten dira; horrela, koordinazio-indize osoa ikusten da.
- **Mezudun esperimentuak.** Tentsioak, alboko indarrak, deformazioak eta tenperaturak sarearen azpian idazten dute zer gertatzen den, adibidez «Haustura! — kristal ionikoa hauskorra da».

«Deskribapena» txartel zabalgarriak modu bakoitza laburbiltzen du eta muntatzeko konposatuak proposatzen ditu: NaCl, $MgCl_2$ eta Na_2O ionikoan; H_2, Cl_2, HCl, H_2O eta SO_2 kobalentean.

Maila bakoitzean nola erabili

DBHko 3. mailan, simulazioak ioien eta lehen konposatuen eraketa aurkezteko balio du; DBHko 4. mailan, hiru loturak eta haien propietateak konparatzeko; Batxilergoko 1. mailan, kristalak, koordinazioa eta lotura datiboa lantzeko. DBHko 1. eta 2. mailetan ez da sartzen: Natura Zientziek materiaren eredu zinetikoa lantzen dute, egitura atomikorik gabe. Aipatutako oinarrizko jakintzak eta ebaluazio-irizpideak Euskadiko curriculumekoak dira (77/2023 Dekretua DBHrako eta 76/2023 Dekretua Batxilergorako, EHAA, 2023ko ekainaren 9a), testu ofizialaren euskarazko bertsioan. Izartxoak (*) ezinbesteko jakintza dela adierazten du, dekretuan bezala. Kontuan izan DBHko 4. mailako Fisika eta Kimika aukerakoa dela.

DBHko 3. maila (Fisika eta Kimika): ioiak eta lehen konposatuak

14-15 urte · 9th grade AEBn · Year 10 Erresuma Batuan

Oinarrizko jakintzak. B multzoa: «Egitura atomikoa: eredu atomikoen garapen historikoa, isotopoen existentzia, eraketa eta propietateak, eta elementuen antolamendua taula periodikoan.*», «Konposatu kimiko nagusiak: euren eraketa, propietate fisikoak eta kimikoak, euren aplikazioen balorazioa. Masa atomikoa eta masa molekularra.*» eta «Nomenklatura: hizkuntza zientifiko komun eta unibertsal baten erabilera, substantzia sinpleak, ioi monoatomikoak eta konposatu bitarrak formulatuz eta izendatuz, IUPACen nomenklatura-arauen bidez.*». A multzoa: «Ikaskuntza zientifikorako hainbat ingurune eta baliabide, hala nola laborategia edo ingurune birtualak [...].*».

Ebaluazio-irizpideak. 1.1 (eguneroko fenomeno fisiko-kimiko garrantzitsuenak identifikatzea, ulertzea eta azaltzea) eta 3.2 (fisikaren eta kimikaren oinarrizko arauak behar bezala erabiltzea, nomenklatura-arauak barne).

Euskadiko curriculumak ez ditu lotura kimikoa eta ioien eraketa 3. mailako jakintza berezi gisa aipatzen; «konposatu kimiko nagusien eraketa»n eta nomenklaturako ioi monoatomikoetan sartzen dira.

Helburuak. Katioi bat eta anioi bat nola sortzen diren azaltzea. Ioi baten karga irabazitako edo emandako elektroiekin erlazionatzea. Elektroiak ematea eta partekatzea bereiztea. Konposatu bitar errazen formula idaztea.

Azalpen-sekuentzia (15-20 min).

1. «Lotura ionikoa» modua hasierako konfigurazioarekin: A = Na, B = Cl. Irakurri panelak: Na-k «Balentzia-e^-: 1 / 8» du eta Cl-k «7 / 8». Galdetu zer den errazagoa bakoitzarentzat.
2. Sakatu «Eman elektroi bat B-ri». Na «Karga: +» izatera pasatzen da eta Cl «Karga: −» izatera, biak 8 / 8rekin. «Erakarpen elektrostatikoa» agertzen da eta txartelak NaCl ematen du. Definitu katioia eta anioia.
3. Muntatu A = Cl, B = Mg, C = Cl. Mg-ren panelak «Oraindik eman behar: 2 e^-» adierazten du. Sakatu «Eman elektroi bat A-ri» eta «Eman elektroi bat C-ri». Mg^{2+} ateratzen da bi Cl^--rekin eta $MgCl_2$ formularekin: 12 protoik eta 10 elektroik 2+ karga ematen dute.
4. Aldatu «Lotura kobalentea»ra: hasierako konfigurazioa H eta H da, bakoitza «e^- eraginkorrak: 1 / 2»rekin. Sakatu «Partekatu»: biak 2 / 2ra iristen dira eta txartelak H_2 ematen du.
5. Muntatu A = H, B = O, C = H. O 6 / 8an hasten da. Sakatu «Partekatu» A eta B artean eta B eta C artean: O 8 / 8ra iristen da eta H_2O ateratzen da. Azpimarratu atomo bat ere ez dela kargarekin geratzen.

DBHko 4. maila (Fisika eta Kimika): hiru loturak eta haien propietateak

15-16 urte · 10th grade AEBn · Year 11 Erresuma Batuan

Oinarrizko jakintzak. B multzoa: «Atomoen egitura elektronikoa: atomo baten konfigurazio elektronikoa eta horrek taula periodikoan duen posizioarekin eta bere propietate fisiko-kimikoekin duen erlazioa.*» eta «Konposatu kimikoak: euren prestakuntza, propietate fisiko eta kimikoak, eta ingeniaritza edo kirola bezalako beste arlo batzuetan duten erabilgarritasunaren eta garrantziaren balorazioa.*». A multzoa: «Ikaskuntza zientifikoko hainbat ingurune eta baliabide, hala nola laborategia edo ingurune birtualak [...].*».

Ebaluazio-irizpideak. 1.1 (eguneroko fenomeno fisiko-kimikoak ulertzea eta printzipio, teoria eta lege egokien arabera zorrotz azaltzea), 2.2 (modu esperimentalean edo deduktiboan egiazta daitezkeen erantzunak aurreikustea) eta 2.3 (hipotesiak baliozkotzeko lege eta teoria zientifiko garrantzitsuenak aplikatzea).

Euskadiko curriculumak ez ditu hiru lotura motak izenez aipatzen 4. mailan; lotura ionikoa, kobalentea eta metalikoa «konposatu kimikoen» prestakuntzan eta propietateetan sartzen dira.

Helburuak. Lotura ionikoa, kobalentea eta metalikoa geruzen ereduarekin azaltzea. Konposatu ionikoek sareak osatzen dituztela ohartzea, ez molekulak. Eroankortasuna, hauskortasuna eta xaflakortasuna egiturarekin arrazoitzea. Sare kobalenteak eta substantzia molekularrak bereiztea.

Azalpen-sekuentzia (15-20 min).

1. «Lotura ionikoa» Na eta Cl-rekin, sakatu «Eman elektroi bat B-ri» eta gero «Ikusi kristal-sarea →». «3D gelaxka»n txartelak «Sodio kloruro motakoa» adierazten du. Egin klik Na^+ batean: haren 6 Cl^- nabarmentzen dira. Ez dago NaCl molekularik.
2. Pasatu «2D geruza»ra eta sakatu «Aplikatu tentsioa»: «Solido egoeran ez du eroaten — ioiak sarean finko daude». Kendu tentsioa eta eraman «Aplikatutako alboko indarra» % 80ra: «Deformazio

elastikoa». Igo % 120ra: geruzak irristatu egiten dira eta «Haustura! — kristal ionikoa hauskorra da» iristen da.

3. Itzuli «Berreraiki kristala» botoiarekin, markatu «Bi blokeen arteko indarrak» eta mugitu indarra berriro. Irristatzean, karga bereko ioien arteko aldarapen-gezi gorriak agertzen dira.
4. «Lotura metalikoa» modua Na-rekin: «Itsasoko e^-: 20». Sakatu «Aplikatu tentsioa»: elektroiak + polorantz aurreratzen dira eta «Eroankortasun elektrikoa» ateratzen da. Sakatu «Deformatu sarea»: «Lotura ez da hausten — xaflakortasuna». Konparatu 2. urratseko hausturarekin.
5. «Lotura kobalentea» modua, «Ikusi kristal kobalenteak» botoia. «Diamantea»n, igo tenperatura 2000 °C ingurura: solido jarraitzen du, 3550 °C-an urtzen delako. «Izotz lehorra»n, igo −100 °C-tik −75 °C-ra: «−78 °C-an sublimatzen da! Molekulak osorik bereizten dira».
6. Sakatu «Aplikatu tentsioa» «Diamantea»n eta «Grafitoa»n. Diamanteak ez du eroaten; grafitoak bai, C bakoitzaren laugarren elektroia xaflan zehar mugitzen delako.

Batxilergoko 1. maila: kristalak, koordinazioa eta lotura datiboa

16-17 urte · 11th grade AEBn · Year 12 Erresuma Batuan

Oinarrizko jakintzak. B multzoa, «Lotura kimikoa eta materiaren egitura»: «Atomoen eta ioien egonkortasunari buruzko teoriak: elementuen arteko loturen sorrera aurreikustea, horiek irudikatzea eta sustantzia kimikoen propietateak ondorioztatzea. Behaketaren eta esperimentazioaren bidez egiaztatzea.» eta «Sustantzia sinpleen, ioien eta konposatu kimiko organikoen nomenklatura [...]».

Ebaluazio-irizpideak. 1.1 (eguneroko gertakari fisiko-kimikoen analisian lege eta teoria zientifikoak aplikatzea) eta 3.3 (prozesu fisiko-kimiko bati buruzko informazioa interpretatu eta adierazteko hainbat formatu erabiltzea).

Euskadiko curriculumak ez ditu Lewis-en egiturak, kristalak edo molekulen arteko indarrak xehatzen 1. mailan; loturak «irudikatzea»n eta propietateak «ondorioztatzea»n sartzen dira. Izen propioarekin Batxilergoko 2. mailako Kimikan agertzen dira.

Helburuak. Ioien proportzioa egiturarekin eta koordinazio-indizearekin erlazionatzea. Lotura sinpleak, bikoitzak, hirukoitzak eta datiboak eraikitzea Lewis-en irizpidearekin. Sare kobalenteak, kristal molekularrak eta sare metalikoak konparatzea.

Azalpen-sekuentzia (15-20 min).

1. «Lotura ionikoa»n, muntatu A = Na, B = O, C = Na eta eman Na bakoitzaren elektroi bat O-ri. Sarean, txartelak hau dio: «Antifluorita motakoa», «2 Na^+, O^{2-} bakoitzeko» eta «2·(+1) + 1·(−2) = 0 → kristal neutroa». Na^+ bakoitzak 4 O^{2-} ditu eta O^{2-} bakoitzak 8 Na^+.
2. Errepikatu A = F, B = Ca, C = F-rekin: «Fluorita motakoa», 8ko koordinazioarekin Ca^{2+}-rentzat eta 4koarekin F^--rentzat. Konparatu NaCl-ren 6:6rekin eta galdetu zergatik aldatzen den.
3. Muntatu $MgCl_2$ (A = Cl, B = Mg, C = Cl): «Kadmio kloruro motakoa (xafla-egitura)». «2D geruza»n, indarra % 120an dela, xaflak irristatu egiten dira hautsi gabe. Konparatu MgO-rekin (A = Mg, B = O, bi aldiz «Eman elektroi bat B-ri»), hautsi egiten baita.
4. «Lotura kobalentea»n, muntatu A = N, B = N eta sakatu «Partekatu» hiru aldiz: 8 / 8 eta «Sortutako loturak: 3». Erlazionatu N_2-ren Lewis-en egiturarekin.
5. Muntatu SO_2 (A = O, B = S, C = O): bi aldiz «Partekatu» A eta B artean eta behin «Datiboa» B eta C artean. Lotura datiboaren lentea S-ren kolorez tindatzen da eta S→O gezi bat darama.
6. «Ikusi kristal kobalenteak»n, aukeratu «Silizea»: «Si bakoitza 4 O-ri lotuta dago» eta «SiO_2 formulak atomoen proportzioa adierazten du». Igo 1713 °C-tik gora: «Lotura kobalenteak hausten dira».

Kontrastatu izotz lehorrarekin, non molekulen arteko indarrak baino ez diren galtzen.

Batxilergoko 2. maila (Kimika): noizbehinkako errepasoa

17-18 urte · 12th grade AEBn · Year 13 Erresuma Batuan

B multzoan, «Lotura kimikoa eta materiaren egitura», simulazioak ez ditu energiak kalkulatzen, beraz, ez du balio «Born-Haber zikloa» lantzeko. Lau kristal kobalenteekin «solidoen ezaugarria» ikusmen bidez errepasatzeko balio dezake. Metalaren «Hodei elektronikoaren ereduak» ere irudikatzen ditu, baina ez banden teoria. Komeni da BGE-PAT teoriarekin batera erabiltzea, molekula guztiak lerroan marrazten baititu.

Zuzentzen laguntzen dituen ideia okerrak

Simulazioak bi ideiari egiten die aurre batez ere: lotura transferitutako elektroia dela eta dena molekulak direla. Errenkada bakoitzak ohiko aurretiazko ideia bat eta simulazioarekin nola desegin adierazten du.

Ikasleen ideia	Ideia zuzena	Nola erakutsi
«Lotura ionikoa metaletik ez-metalera igarotzen den elektroia da»	Transferentziak ioiak sortzen ditu; lotura haien arteko erakarpen elektrostatikoa da	Na eta Cl eman aurretik: «Ez dago erakarpen elektrostatikorik». «Eman elektroi bat B-ri» sakatu ondoren: «Erakarpen elektrostatikoa» eta «Lotura ionikoa · Coulomb-en erakarpena»
«Gatza NaCl molekulez osatuta dago»	Molekularik gabeko ioi-sare bat da; formulak proportzioa ematen du	«Ikusi kristal-sarea →», «3D gelaxka», klik Na^+ batean: 6 Cl^- ondoko ditu, denak distantzia berean
«Na^+ bakoitza bere elektroia hartu zuen Cl^--ari bakarrik dago lotuta»	Ioi bakoitzak aurkako kargako ondoko guztiak erakartzen ditu	Gelaxka berean, klik Cl^- batean: hark ere 6 Na^+ ditu. 2D geruzan «Ikusi elektroiak» aktibatuta, Cl^- guztiak berdinak dira
«Konposatu ionikoek eroaten dute ioiak dituztelako»	Solidoan ez dute eroaten: ioiak ezin dira mugitu	«2D geruza», «Aplikatu tentsioa»: «Solido egoeran ez du eroaten — ioiak sarean finko daude»
«Substantzia kobalente guztiak tenperatura baxuetan urtzen dira»	Sare kobalenteek urtze-puntu oso altuak dituzte	«Diamantea» 2000 °C inguruan solido dago oraindik; «Izotz lehorra» −78 °C-an sublimatzen da
«Izotz lehorra sublimatzean CO_2 molekulak hausten dira»	Molekula osoak bereizten dira; molekulen arteko indarrak baino ez dira gainditzen	«Izotz lehorra» −100 °C-tik −75 °C-ra: «Ez da lotura kobalenterik hausten: molekulen arteko indar ahulak baino ez»
«Metal batean elektroiak korrontea dagoenean bakarrik mugitzen dira»	Beti mugitzen dira ausaz; tentsioak + polorantz aurrerapen garbi bat gehitzen du	«Lotura metalikoa» «Normala (oreka)» egoeran: elektroiak norabide guztietan. «Aplikatu tentsioa» sakatuta, + polorantz aurreratzen dira batera
«Karbonoa bada, grafitoak eta diamanteak berdin jokatzen dute»	Egiturak erabakitzen ditu propietateak	«Aplikatu tentsioa» «Diamantea»n («Ez du elektrizitatea eroaten») eta «Grafitoa»n («Eroale da: elektroiak xaflen luzeran mugitzen dira»)

Ezagutzea komeni diren sinplifikazioak

Simulazioak lehentasuna ematen dio elektroiak zenbatzeari eta egitura propietateekin erlazionatzeari. Horretarako, atomoak, geometriak eta energiak sinplifikatzen ditu. Komeni da lizentzia horiek ezagutzea, nahi gabe ideia okerrak ez indartzeko.

1. **Geruza finkoko Bohrren atomoak.** Geruzek beti 36, 60, 84 eta 108 pixeleko erradioak dituzte, eta nukleoak tamaina bera du elementu guztietan. Tamainak ez du erradio atomikoa islatzen. K 2, 8, 8, 1 gisa marrazten da, azpimailarik gabe. Batxilergoko 1. mailan komeni da gogoraraztea orbitalek ordezten dituztela orbita horiek.
2. **Oktetoak dena erabakitzen du.** Atomo bat egonkorra da kanpoko geruzak 8 elektroi baditu, edo 2 H-n eta Li-n. Ez dago ionizazio-energiarik, afinitate elektronikorik edo sare-energiarik. Gainera, irakasleak edozein norabidetan eman ditzake elektroiak eta oktetoaren ondoren ematen jarraitu: orduan panelak «1 e^- soberan» erakusten du ez-metalean edo, metal batek gehiegi eman badu (Na^{2+}), «Gehiegi eman du: 1 e^- berreskuratu behar». Batxilergoko 2. mailan azaldu behar da kristala sare-energiari esker dela egonkorra.
3. **Gehienez hiru atomo lerroan.** Zirrikituek ondokoarekin bakarrik ematen edo partekatzen dute; beraz, MX, M_2X edo MX_2 konposatuak sortzen dira. Ezin dira Li_3N, CH_4 edo NH_3 muntatu, eta Al modu metalikoan bakarrik dago. «Lotura ionikoa sortu da!» laukizuzen berdeak ioiak molekula bat balira bezala biltzen ditu: ñabartu sarera pasatu aurretik.
4. **Molekula guztiak linealak dira.** H_2O eta SO_2 hiru atomoak lerrokatuta agertzen dira, angeluarrak direnean. «Sortutako loturak» bikoteak zenbatzen ditu: lotura bikoitz batek 2 gehitzen ditu. Lotura datibo bat duen SO_2 Lewis-en eredu klasikoa da; gaur egun erresonantziarekin deskribatzen da.
5. **Bola eta makilen sare ionikoak.** Distantziak Shannonen erradio ionikoetatik ateratzen dira: NaCl-rentzat, ertza 2·(1,02 + 1,81) = 5,66 Å da, benetako 5,64 Å-en aldean. Esferak erradio ionikoaren % 55ean marrazten dira barrualdea ikusteko; beraz, sareak hutsa dirudi. CaH_2 fluorita gisa erakusten da hurbilketaz, eta $CaCl_2$-ren 2D geruza deformatu gabeko errutilo gisa.
6. **Alboko indarra ehunekotan.** Graduatzaileak ez ditu newtonak ematen: % 100 interfaze horrek ereduaren arabera jasaten duen indar maximoa da (Coulomb, 9 berretzaileko Born-en aldarapena eta van der Waals). Bat-batean ia % 100era salto eginez gero, sare batzuk, hala nola Na_2O edo CaF_2, inertziaz hausten dira jada. $MgCl_2$-n, xaflen artean van der Waalsen indarrak eta aldarapena baino ez dira kalkulatzen.
7. **Jostailuzko metal bat.** Sareak 5 × 4 = 20 katioi ditu, eta bakoitzak bere balentzia ematen dio itsasoari: 20 elektroi Na edo K-rekin, 40 Mg edo Ca-rekin eta 60 Al-rekin. Elektroiek ez dute ioiekin talka egiten, eta tentsioarekin duten aurrerapena izugarri puztuta dago. Deformatzean, goiko bi errenkadak sarearen periodo oso bat irristatzen dira, elektroi-itsasoaren beren zatia arrastatuz, bat-batean eta dislokaziorik gabe: benetako metal batean irristatzea pixkanaka aurreratzen da.
8. **Tenperatura irizpide erraz batekin.** Bibrazioak Lindemannen irizpidea jarraitzen du: anplitudea ondokoen arteko distantziaren % 10 da, √(T / aldaketa-T) bider, kelvinetan. Egoera-aldaketa bat-batean gertatzen da tenperatura finko batean: 3550 °C diamantea, 3650 °C grafitoa, 1713 °C silizea eta −78 °C izotz lehorra. Ez dago presiorik ez bero sorrik.
9. **Silize idealizatua.** Kristobalita erakusten da, Si–O–Si lotura zuzenekin eta 1,55 Å-eko Si–O distantziarekin, benetakoa baino zertxobait txikiagoa. Txartelak berak ohartarazten du kuartzoak, ohikoagoak, SiO_4 tetraedro berberak dituela.

Ikasleen jarduera-fitxa

Jarduera-fitxak iragarri, behatu eta azaldu eskema jarraitzen du. Jarduera bakoitzak simulazioa prestatuta irekitzen duen esteka du; beraz, informatika-gelan, tabletekin edo etxeko lan gisa erabil daiteke. Word eta LibreOffice formatuetan deskargatzen da, egokitu ahal izateko.

Maila	Jarduerak	Gutxi gorabeherako iraupena
DBHko 3. maila	Hasi aurretik (a, b eta c), 1., 2. eta 4. jarduerak, Aplikatu ikasitakoaren 1., 2. eta 4. problemak eta Autoebaluazioa	50-55 minutuko saio bat
DBHko 4. maila	Fitxa osoa, Gehiago jakiteko izan ezik	Bi saio, edo bat 1. eta 2. jarduerak etxeko lan gisa egiten badira
Batxilergoko 1. maila	3., 5. eta 6. jarduerak, Gehiago jakiteko eta Aplikatu ikasitakoaren 3. problema	Saio bat

«Hasi aurretik» taulak loturari buruzko sei aurretiazko ideia biltzen ditu. Hobe da hasieran ez zuzentzea: ikasleak «Berrikusi zure ideiak» atalean itzultzen dira hara. 4. jardueran simulazioak molekula guztiak lerroan marrazten ditu; geometria lantzen bada, H_2O angeluarra dela ohartarazi behar da.

Soluzioak

Atala	Soluzioa
Hasi aurretik	Denak gezurrak. a) Transferentziak ioiak sortzen ditu; lotura haien arteko erakarpen elektrostatikoa da (1. jarduera). b) Ioi-sare bat da; formulak proportzioa ematen du (3. jarduera). c) Solidoan ioiak finko daude eta ez dute eroaten (3. jarduera). d) Sare kobalenteak, diamantea adibidez, tenperatura oso altuetan urtzen dira (6. jarduera). e) Beti mugitzen dira ausaz; tentsioak + polorantz aurrerapen bat gehitzen du (5. jarduera). f) Egiturak erabakitzen ditu propietateak: grafitoak eroaten du eta diamanteak ez (6. jarduera)
1. jarduera	Aurretik: Na 0 kargarekin eta «Balentzia-e^-: 1 / 8»; Cl 0 kargarekin eta «7 / 8»; «Ez dago erakarpen elektrostatikorik». Ondoren: Na + kargarekin eta 8 / 8; Cl – kargarekin eta 8 / 8; «⚡ Erakarpen elektrostatikoa». Na-rentzat errazagoa da elektroi 1 galtzea 7 irabaztea baino. Na^+ katioia da (ioi positiboa) eta Cl^- anioia (ioi negatiboa). Aurkako kargen arteko erakarpenak lotzen ditu, ez transferitutako elektroiak
2. jarduera	Cl, Mg, Cl: Mg-k 2 e^- ematen ditu, bana Cl bakoitzari; Mg^{2+} eta 2 Cl^- ioiak; $MgCl_2$. Na, O, Na: Na bakoitzak 1 e^- ematen dio O-ri; 2 Na^+ eta O^{2-} ioiak; Na_2O. Ca, O: Ca-k 2 e^- ematen dizkio O-ri; Ca^{2+} eta O^{2-} ioiak; CaO. Cl bakoitzak elektroi 1 baino ez du onartzen eta Mg-k 2 eman behar ditu; O-k 2 behar ditu eta Na bakoitzak 1 baino ez du ematen. Kargen batura beti da 0: konposatua neutroa da
3. jarduera	Na^+ bakoitzak 6 Cl^- ondoko ditu eta Cl^- bakoitzak 6 Na^+. Tentsioa: «Solido egoeran ez du eroaten — ioiak sarean finko daude». % 80: «Deformazio elastikoa». % 120: geruzak irristatu egiten dira eta «Haustura! — kristal ionikoa hauskorra da» iristen da. Ez dago molekularik: NaCl formulak Cl^- bakoitzeko Na^+ bat dagoela adierazten du. Ez du eroaten ioiak ezin direlako mugitu. Geruza bat irristatzean, karga bereko ioiak aurrez aurre geratzen dira, elkar aldaratzen dute (gezi gorriak) eta kristala hautsi egiten da
4. jarduera	Bi ez-metalek elektroiak irabazteko joera dute; batak ere ez ditu ematen, beraz, partekatu egiten dituzte. H, H: 1 / 2 bakoitza, sakatze 1, lotura 1, H_2. H, O, H: H 1 / 2 eta O 6 / 8, 2 sakatze (A–B eta B–C), O «Sortutako loturak: 2»rekin, H_2O. N, N: 5 / 8 bakoitza, 3 sakatze, 3 lotura, N_2. Atomo bat ere ez da kargarekin geratzen: elektroiak partekatu egiten dira, batetik bestera igaro beharrean. N-k 5 balentzia-elektroi ditu eta 3 falta zaizkio: lotura hirukoitza sortzen du
5. jarduera	Na: balentzia-e^- 1, itsasoan 20 e^-, 98 °C. Mg: 2, 40, 650 °C. Al: 3, 60, 660 °C. Tentsiorik gabe, elektroiak ausaz mugitzen dira norabide guztietan; tentsioarekin + polorantz aurreratzen dira («Eroankortasun elektrikoa»); deformatzean, geruzak irristatu egiten dira eta lotura ez da hausten («xaflakortasuna»). Metalek eroaten dute haien elektroiak sarean zehar aske mugitzen direlako. Irristatzean, katioiak elektroi-itsasoak inguratuta jarraitzen dute; kristal ionikoan karga berdinak aurrez aurre geratzen dira. Zenbat eta elektroi gehiago itsasoan, orduan eta lotura sendoagoa, eta urtze-tenperatura altuagoa izan ohi da (Al da taulako salbuespena: 660 °C-an urtzen da, Mg-ren ia berdin)
6. jarduera	Diamantea: kristal kobalentea, C atomoak, 3550 °C-an urtzen da, ez du eroaten. Grafitoa: xafla-egiturako kristal kobalentea, C atomoak xafletan, 3650 °C-an sublimatzen da, xaflen luzeran eroaten du. Izotz lehorra: kristal molekularra, CO_2 molekulak, −78 °C-an sublimatzen da, ez du eroaten. Sublimatzean ez da C=O loturarik hausten: molekulen arteko indar ahulak baino ez dira gainditzen. Diamantea lotura kobalenteen sare bat da: urtzeko asko hautsi behar dira. Grafitoan C bakoitzak 3 elektroi erabiltzen ditu loturetan, eta laugarrena aske geratzen da xaflan zehar mugitzeko

Atala	Soluzioa
Aplikatu ikasitakoa	1) K: 2, 8, 8, 1 → K^+. S: 2, 8, 6 → S^{2-}. K_2S. 2) KCl ionikoa; Cl_2 kobalentea; Cu metalikoa; CO_2 kobalentea (molekularra); CaO ionikoa. 3) Ionikoa (NaCl da): disolbatuta, ioiak aske geratzen dira mugitzeko. 4) H–Cl, bikote partekatu bat; O=O, bi bikote partekatu (lotura bikoitza)
Gehiago jakiteko	1) Antifluorita motako egitura: Na^+ bakoitzak 4 O^{2-} ditu eta O^{2-} bakoitzak 8 Na^+; O^{2-} baino bi aldiz Na^+ gehiago daudenez, O^{2-}-ren koordinazioa bikoitza da. 2) Lotura datiboan bikotearen bi elektroiak atomo bakar batek ematen ditu, hemen S-k (S→O gezia). 3) Silizea sare kobalente bat da: 1713 °C-tik gora Si–O lotura kobalenteak hausten dira; izotz lehorrean molekulen arteko indarrak baino ez ziren gainditzen

Juan Ramón Grijota · SimulaCiencia. CC BY-SA 4.0 lizentziapean argitaratutako gida: egokitu eta partekatu dezakezu, egilea aipatuz eta lizentzia bera erabiliz. Bertsio eguneratua eta simulazioa: simulaciencia.es/eu/gidak/enlaces-quimicos/.