

El Enlace Químico:
moléculas poliatómicas

- 7.1 Geometría molecular: teoría RPECV
- 7.2 Orbitales híbridos
- 7.3 Orbitales moleculares deslocalizados: compuestos aromáticos
- 7.4 Orbitales deslocalizados en sólidos. Teoría de bandas. conductores, aislantes y semiconductores
- 7.5 Metales: estructuras y propiedades

Geometría molecular: teoría RPECV

Teoría RPECV: *Teoría de la repulsión de los pares de electrones de la capa de valencia*

- Permite deducir a partir de la estructura de Lewis de una molécula la geometría espacial que adopta
- Se aplica principalmente a moléculas con un átomo central y varios periféricos

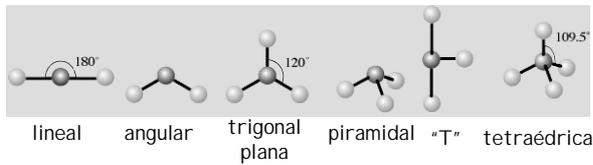
La estructura molecular tiene importancia en cuanto a que muchas de las propiedades de una sustancia dependen de dicha estructura

29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

2

Geometrías principales en moléculas poliatómicas

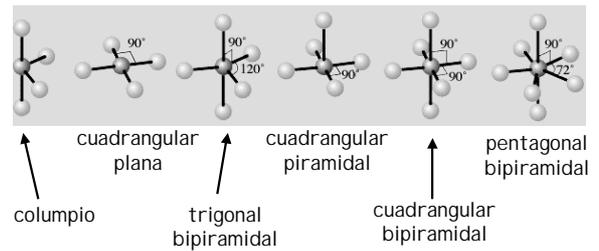


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

3

Geometrías principales en moléculas poliatómicas (II)

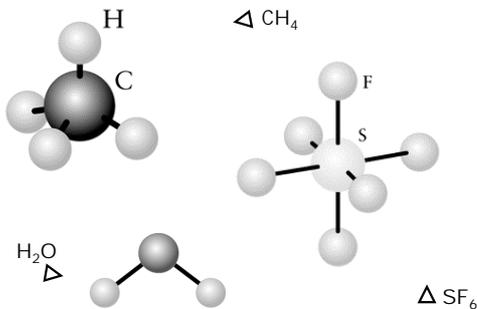


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

4

Ejemplos:



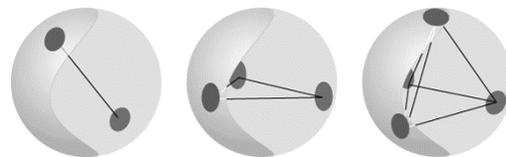
29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

5

La hipótesis principal del modelo RPECV

Las regiones de alta concentración de electrones (enlaces y pares libres) se repelen entre sí



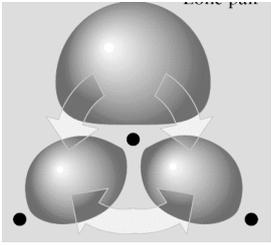
Los enlaces y los pares se sitúan de forma que estén lo más alejados posible entre sí

29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

6

Prelación de Fuerzas de repulsión:
 par libre-par libre > par libre-par de enlace > par de enlace-par de enlace



29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 7

Uso de la teoría RPECV

```

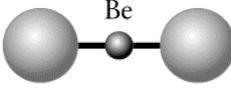
    graph TD
      A[ESCRIBIR LA ESTRUCTURA DE LEWIS DE LA MOLECULA] --> B[DETERMINAR CUANTOS PARES DE ELECTRONES ENLAZANTES Y CUANTOS PARES SOLITARIOS EXISTEN ALREDEDOR DEL ATOMO CENTRAL Y CUANTOS EN TOTAL]
      B --> C[ESTABLECER LA GEOMETRIA BASICA DE LOS PARES DE ELECTRONES ALREDEDOR DEL ATOMO CENTRAL]
      C --> D[APLICAR LA PRELACION DE FUERZAS DE REPULSION PARA PROPONER LA ESTRUCTURA FINAL DE LA MOLECULA]
    
```

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 8

Moléculas sin pares libres en el átomo central

AX_n

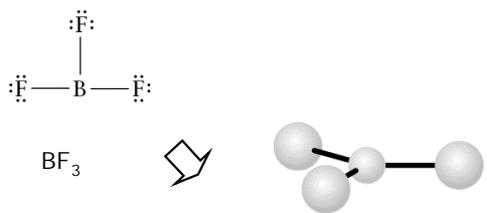
$AX_2 \rightarrow$ lineal



Be
BeCl₂

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 9

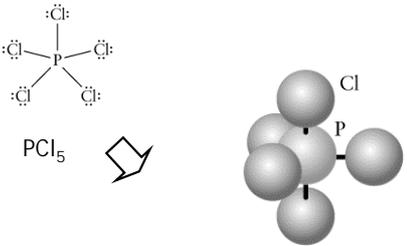
$AX_3 \rightarrow$ plana trigonal



BF₃

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 10

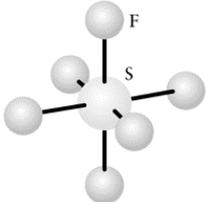
$AX_5 \rightarrow$ bipirámide trigonal



PCl₅

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 11

$AX_6 \rightarrow$ octaédrica

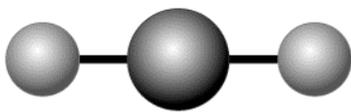


SF₆

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 12

Los enlaces múltiples se tratan como los sencillos en VSEPR

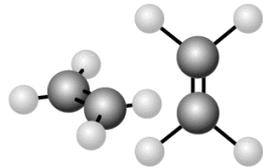
CO_2 $\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$



29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 13

$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} & \\ & / & \diagdown \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$

Eteno (etileno)

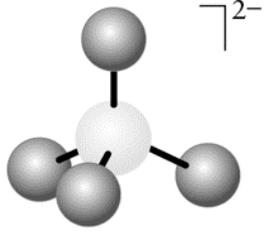


Ejercicio 7.1: ¿qué geometría tendría la molécula de acetileno?

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 14

Geometría de iones poliatómicos

$\left[\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ | \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{---S---}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ | \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array} \right]^{2-}$



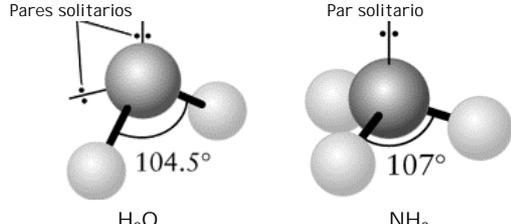
Ión sulfato SO_4^{2-}

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 15

Moléculas con pares libres en el átomo central

Si una molécula tiene pares libres en el átomo central, éstos modifican la forma de la molécula debido a la repulsión

Pares solitarios Par solitario



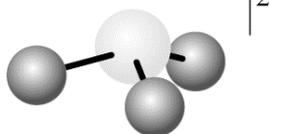
104.5° 107°

H_2O NH_3

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 16

$\text{AX}_3\text{E} \rightarrow$ pirámide trigonal

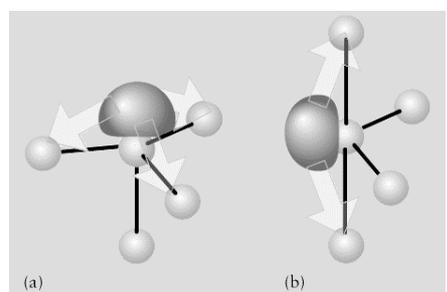
$\left[\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{---S---}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ | \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array} \right]^{2-}$



Ión sulfito SO_3^{2-}

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 17

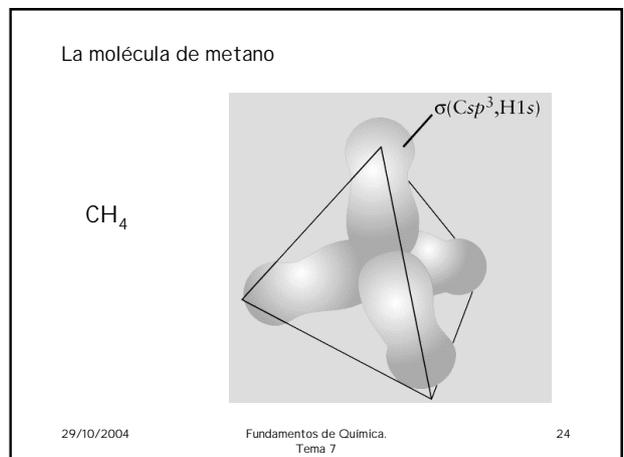
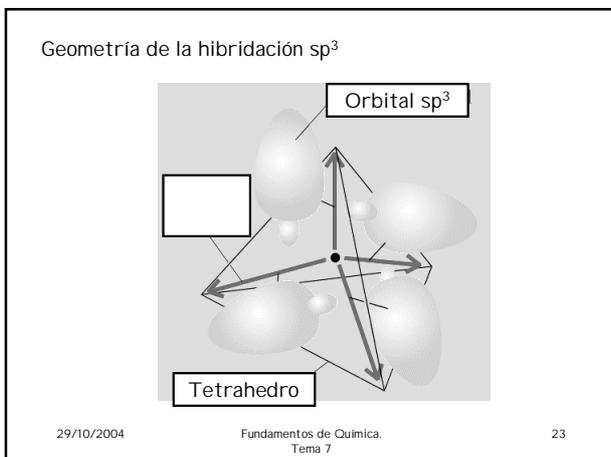
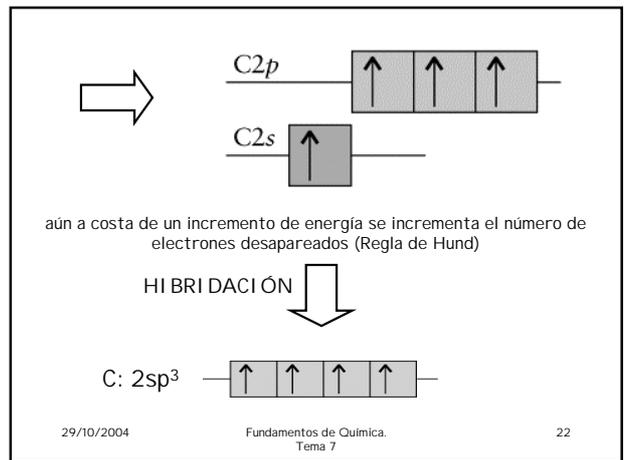
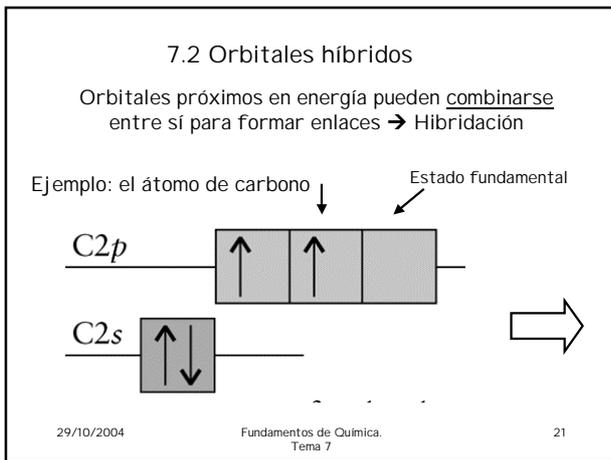
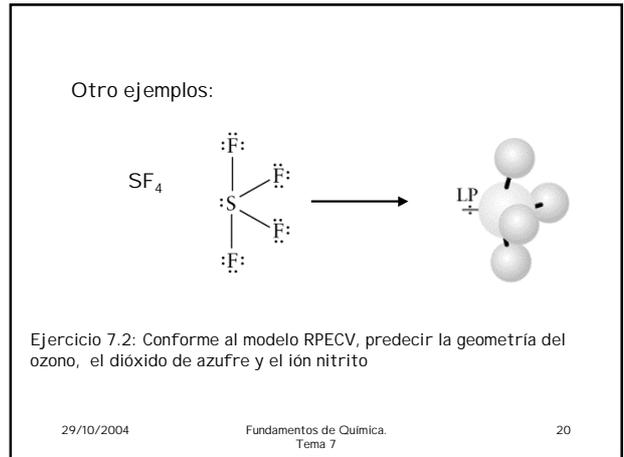
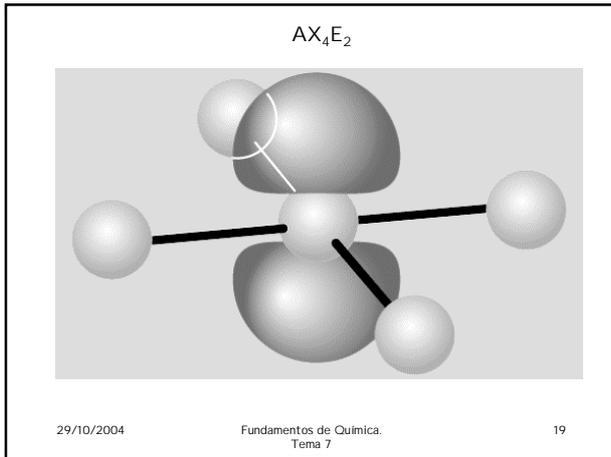
Moléculas AX_4E

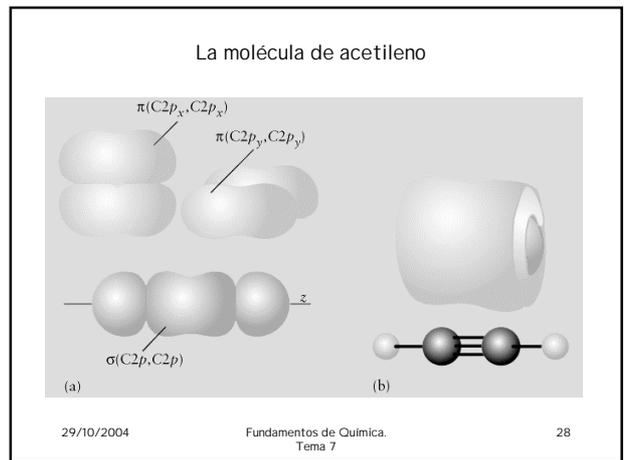
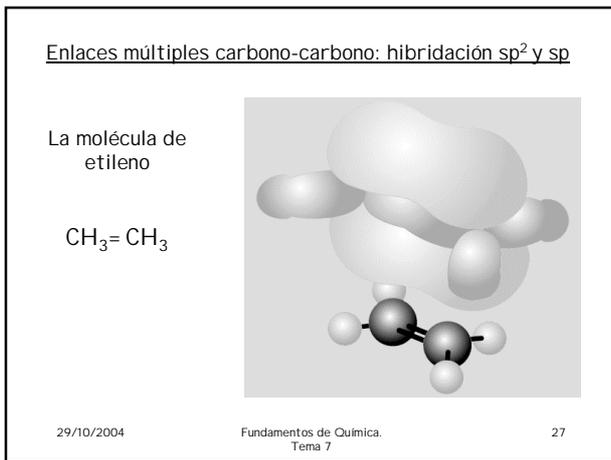
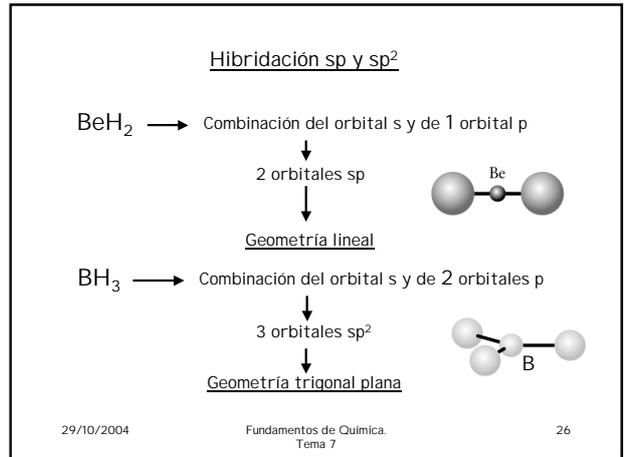
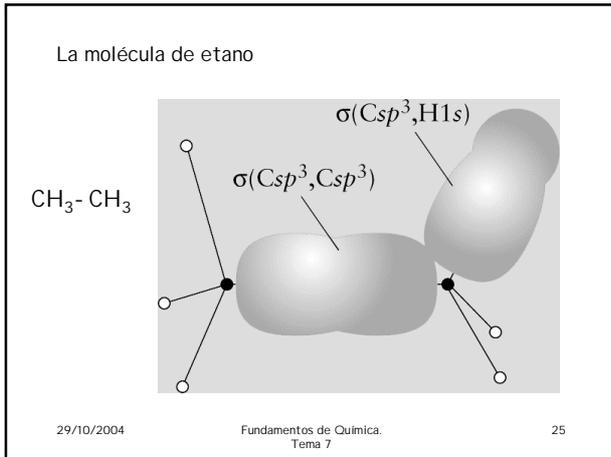


(a) (b)

Menos favorable Más favorable

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 18

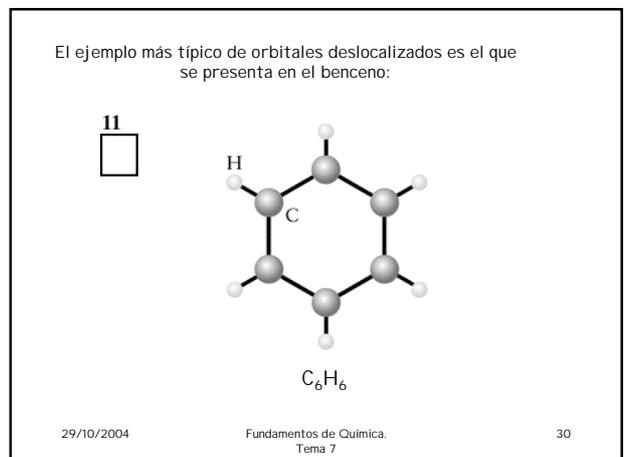




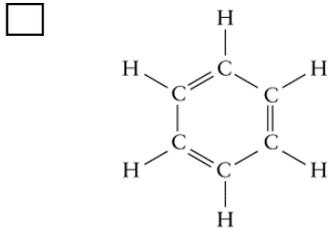
7.3 Orbitales moleculares deslocalizados: compuestos aromáticos

- ✓ La Teoría de Orbitales moleculares permite construir orbitales que no están asociados a un par de átomos en concreto, sino que pertenecen al conjunto de la molécula
- ✓ Un electrón situado en un orbital molecular deslocalizado puede encontrarse con una apreciable probabilidad en la cercanía de cualquiera de los átomos que han intervenido en la formación del orbital deslocalizado

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 29



Friedrich Kekulé propuso en 1865 una estructura cíclica con enlaces dobles y sencillos alternados:

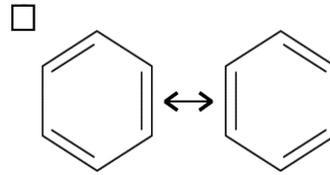


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

31

Sin embargo se comprueba que todos los enlaces del benceno son equivalentes. El benceno se comporta como si su estructura fuera consecuencia de la resonancia entre dos estructuras equivalentes



29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

32

La estructura resonante del benceno se representa de forma más adecuada así:



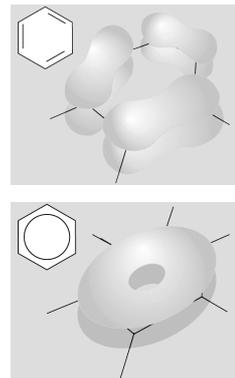
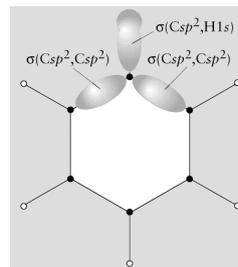
El anillo de 6 átomos de carbono del benceno es una estructura muy estable que da a esta sustancia y sus derivados propiedades características. A las sustancias que contienen en su estructura anillos bencénicos se las denomina compuestos aromáticos

29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

33

La molécula de benceno



29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

34

7.4 Orbitales deslocalizados en sólidos: Teoría de bandas

➤ Muchos sólidos (metales, sólidos iónicos y covalentes) pueden considerarse como una gran molécula en la que todos sus átomos se encuentran unidos por fuerzas de enlace químico



La Teoría de Bandas es la extensión de la teoría de orbitales moleculares al caso de los sólidos

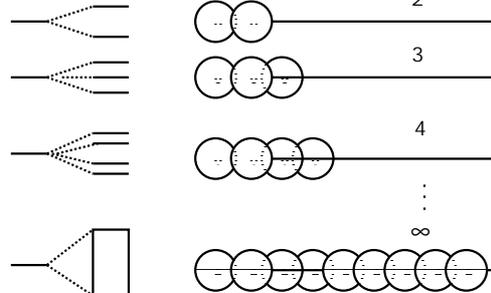
29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

35

Formación de una banda

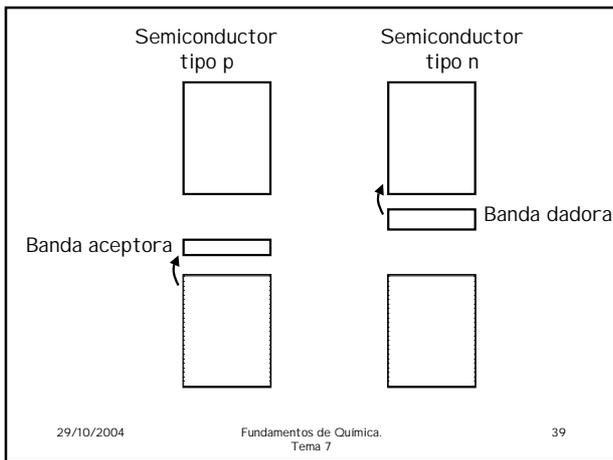
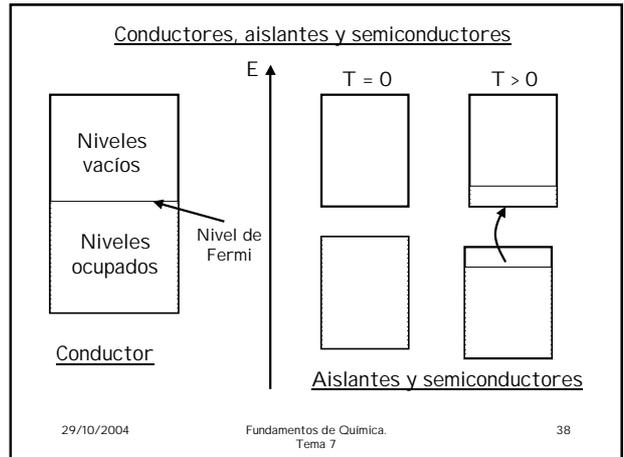
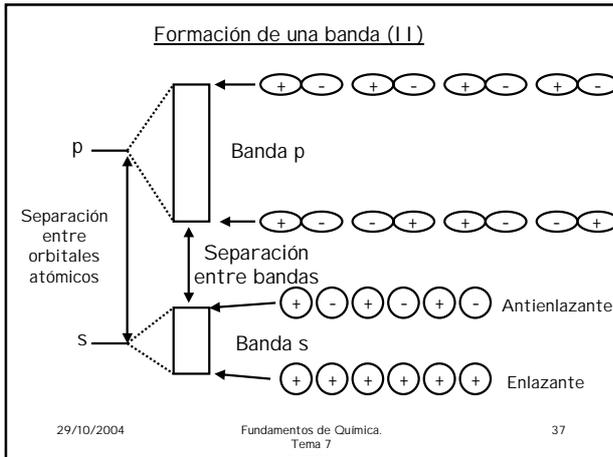
O. atómico. O. Molecular.



29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

36



7.5 Metales: estructuras y propiedades

PROPIEDADES PRINCIPALES

- La mayoría de los metales son sólidos cristalinos a temperatura ambiente
- Son dúctiles y maleables aunque resistentes a la rotura
- Brillantes
- Conductores del calor y la electricidad

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 40

Conductividad y estructura electrónica

Niveles vacíos

Niveles ocupados

➔ La conductividad es una consecuencia de la estructura electrónica de los metales

➔ Los niveles vacíos corresponden a orbitales próximos en energía y débilmente atraídos por los núcleos. Los electrones de los metales se comportan como **electrones libres** que pueden responder a un campo eléctrico o un gradiente de temperatura.

Ejercicio 7.3: Explica a partir de su estructura electrónica porqué el He sólido no conduce la electricidad y el Be sí.

29/10/2004 Fundamentos de Química. Tema 7 41

