

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

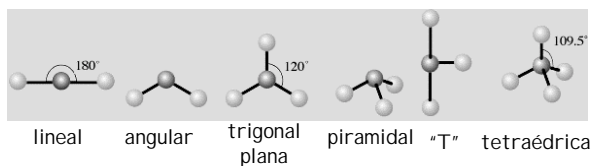
La estructura molecular tiene importancia en cuanto a que muchas de las propiedades de una sustancia dependen de dicha estructura

29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

2

Geometrías principales en moléculas poliatómicas

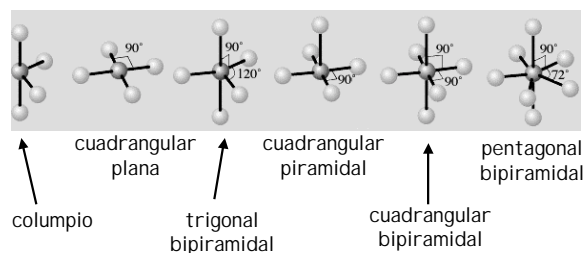


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

3

Geometrías principales en moléculas poliatómicas (II)

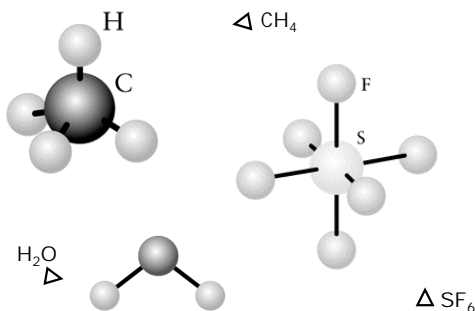


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

4

Ejemplos:



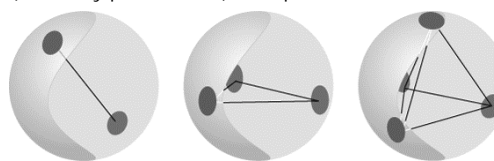
29/10/2004

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

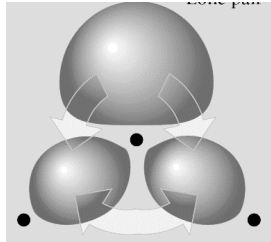
29/10/2004

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

ESCRIBIR LA ESTRUCTURA DE LEWIS DE LA MOLECULA

DETERMINAR CUANTOS PARES DE ELECTRONES ENLAZANTES Y CUANTOS PARES SOLITARIOS EXISTEN ALREDEDOR DEL ATOMO CENTRAL Y CUANTOS EN TOTAL

ESTABLECER LA GEOMETRÍA BÁSICA DE LOS PARES DE ELECTRONES ALREDEDOR DEL ATOMO CENTRAL

APLICAR LA PRELACIÓN DE FUERZAS DE REPULSIÓN PARA PROPONER LA ESTRUCTURA FINAL DE LA MOLECULA

29/10/2004

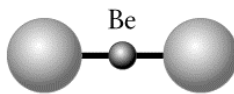
Fundamentos de Química.
Tema 7

8

Moléculas sin pares libres en el átomo central

AX_n

$AX_2 \rightarrow$ lineal



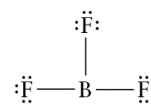
$BeCl_2$

29/10/2004

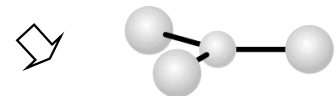
Fundamentos de Química.
Tema 7

9

$AX_3 \rightarrow$ plana
trigonal



BF_3

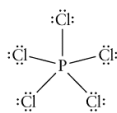


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

10

$AX_5 \rightarrow$ bipirámide trigonal



PCl_5

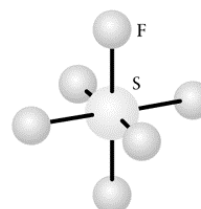


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

11

$AX_6 \rightarrow$ octaédrica

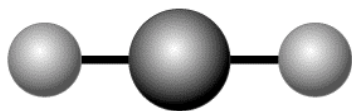
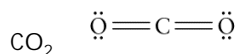


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

12

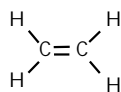
Los enlaces múltiples se tratan como los sencillos en VSEPR



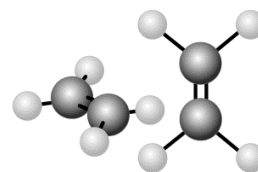
29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

13



Eteno
(etileno)



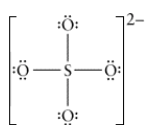
Ejercicio 7.1: ¿qué geometría tendría la molécula de acetileno?

29/10/2004

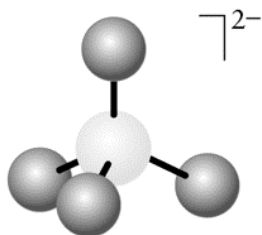
Fundamentos de Química.
Tema 7

14

Geometría de iones poliatómicos



Ión sulfato SO_4^{2-}



29/10/2004

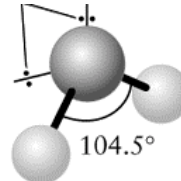
Fundamentos de Química.
Tema 7

15

Moléculas con pares libres en el átomo central

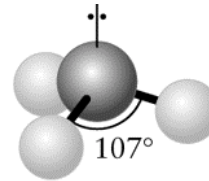
Si una molécula tiene pares libres en el átomo central, éstos modifican la forma de la molécula debido a la repulsión

Pares solitarios



H_2O

Par solitario



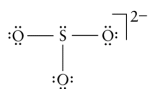
NH_3

29/10/2004

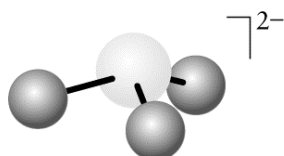
Fundamentos de Química.
Tema 7

16

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



Ión sulfito SO_3^{2-}

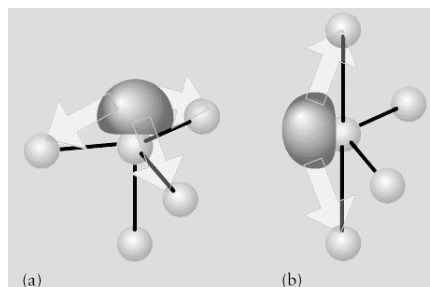


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

17

Moléculas AX_4E



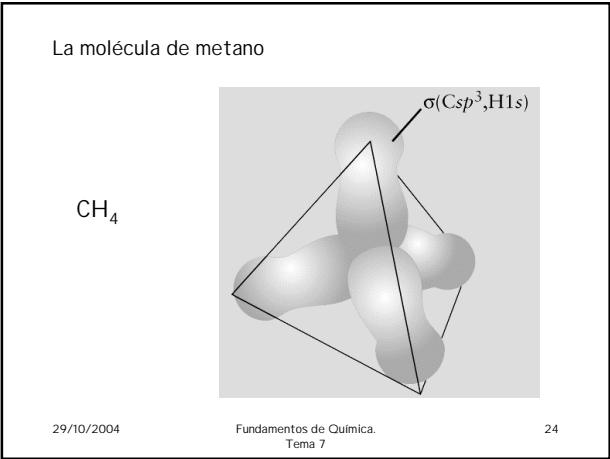
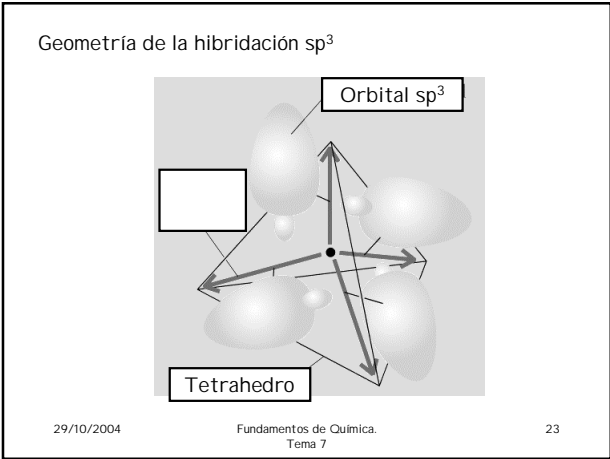
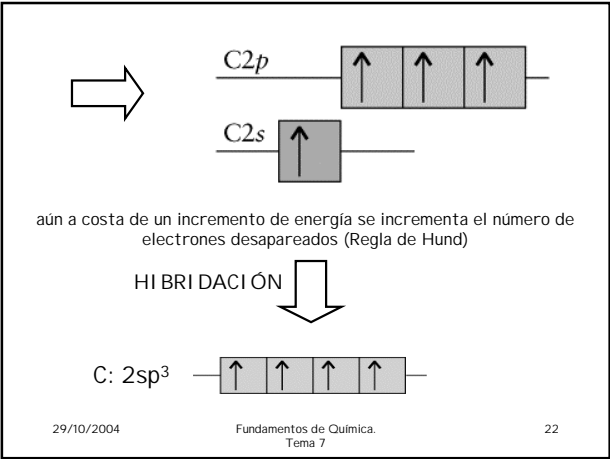
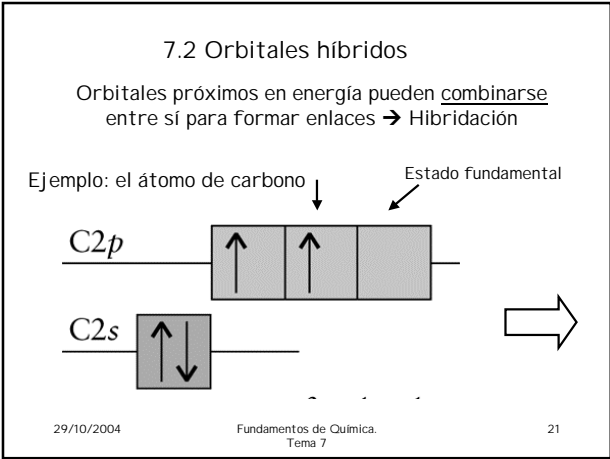
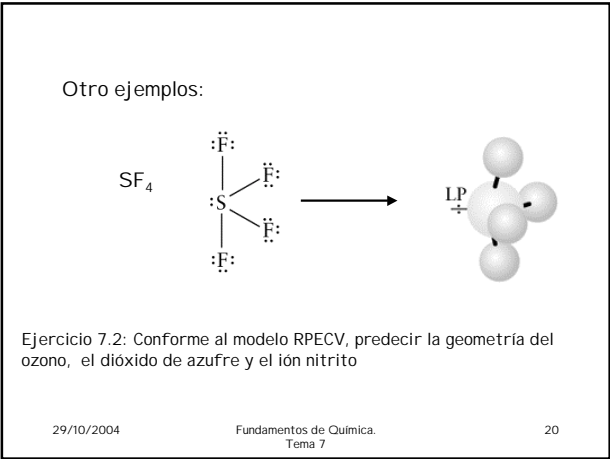
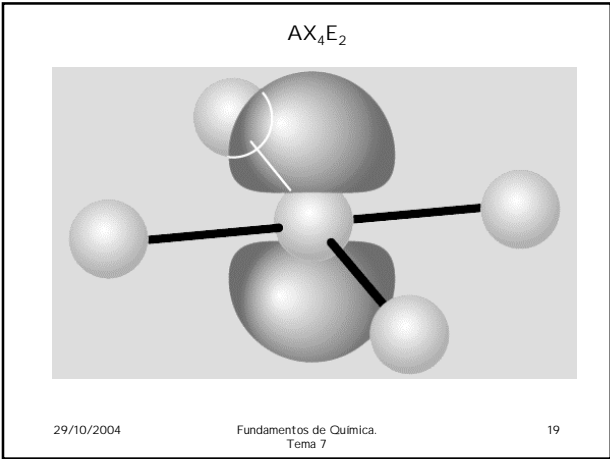
Menos favorable

Más favorable

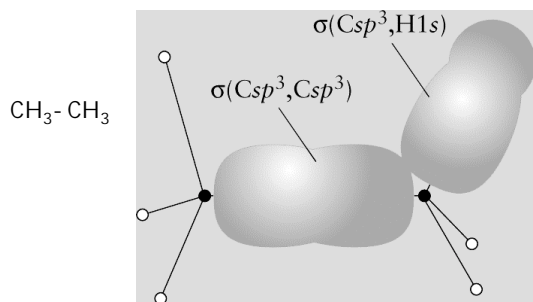
29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

18



La molécula de etano



29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

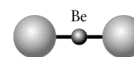
25

Hibridación sp y sp^2

$\text{BeH}_2 \rightarrow$ Combinación del orbital s y de 1 orbital p

2 orbitales sp

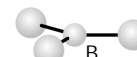
Geometría lineal



$\text{BH}_3 \rightarrow$ Combinación del orbital s y de 2 orbitales p

3 orbitales sp^2

Geometría trigonal plana



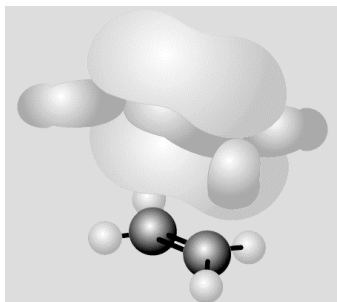
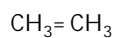
29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

26

Enlaces múltiples carbono-carbono: hibridación sp^2 y sp

La molécula de etileno

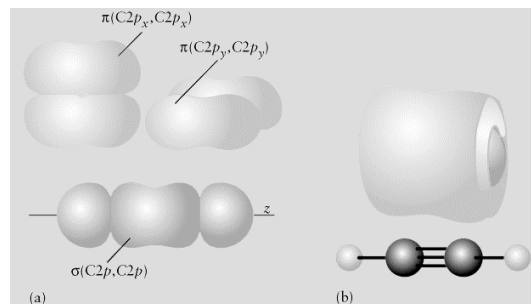


29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

27

La molécula de acetileno



29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

28

7.3 Orbitales moleculares deslocalizados: compuestos aromáticos

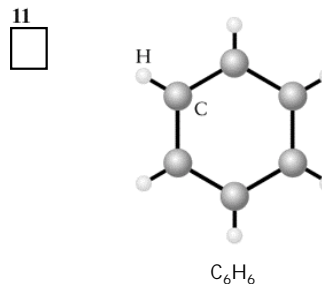
- ✓ La Teoría de Orbitales moleculares permite construir orbitales que no están asociados a un par de átomos en concreto, sino que pertenecen al conjunto de la molécula
- ✓ Un electrón situado en un orbital molecular deslocalizado puede encontrarse con una apreciable probabilidad en la cercanía de cualquiera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

29/10/2004

Fundamentos de Química.
Tema 7

29

El ejemplo más típico de orbitales deslocalizados es el que se presenta en el benceno:

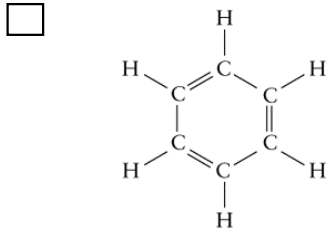


29/10/2004

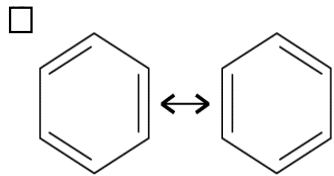
Fundamentos de Química.
Tema 7

30

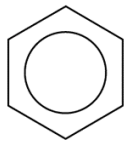
Friedrich Kekulé propuso en 1865 una estructura cíclica con enlaces dobles y sencillos alternados:



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

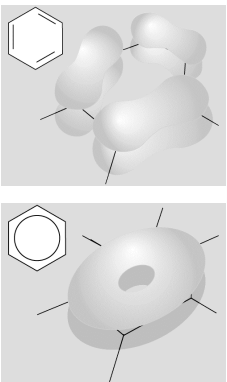
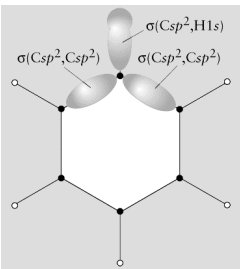


La estructura resonante del benceno se representa de forma más adecuada así:



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

La molécula de benceno



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

Formación de una banda

