

Tema 7: El Enlace Químico (III):
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

7.1 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

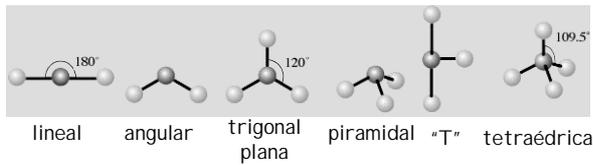
La estructura molecular tiene importancia en cuanto a que muchas de las propiedades de una sustancia dependen de dicha estructura

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

2

Geometrías principales en moléculas poliatómicas

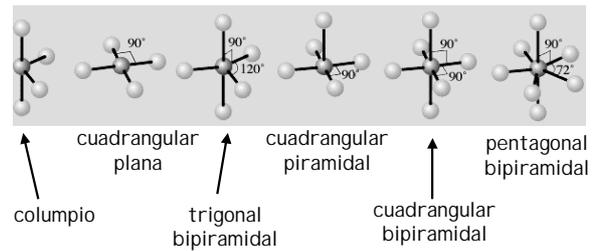


03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

3

Geometrías principales en moléculas poliatómicas (II)

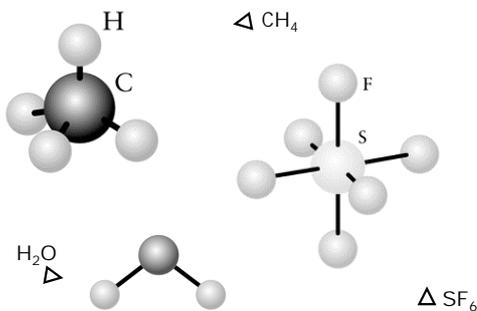


03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

4

Ejemplos:



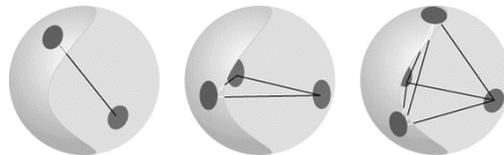
03/11/2005

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

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

6

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

03/11/2005 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 RELACION DE FUERZAS DE REPULSION PARA PROPONER LA ESTRUCTURA FINAL DE LA MOLECULA]
    
```

03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 8

Moléculas sin pares libres en el átomo central

AX_n

$AX_2 \rightarrow$ lineal

BeCl₂

03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 9

$AX_3 \rightarrow$ plana trigonal

BF₃

03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 10

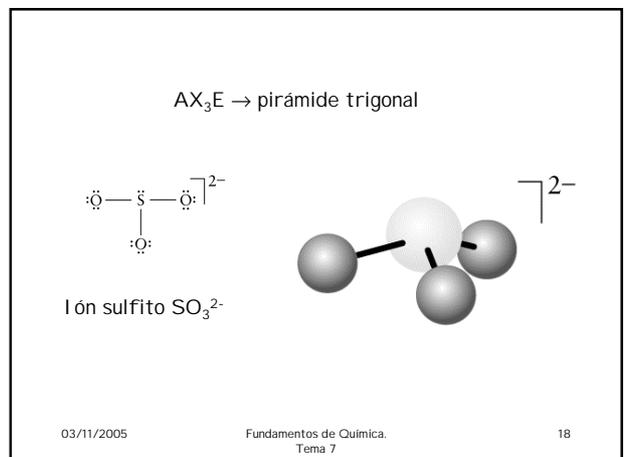
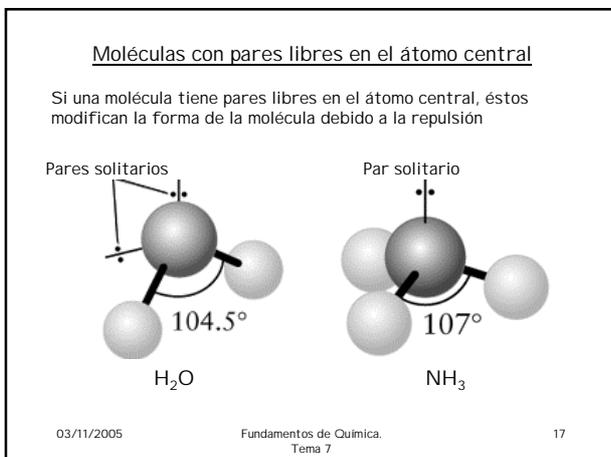
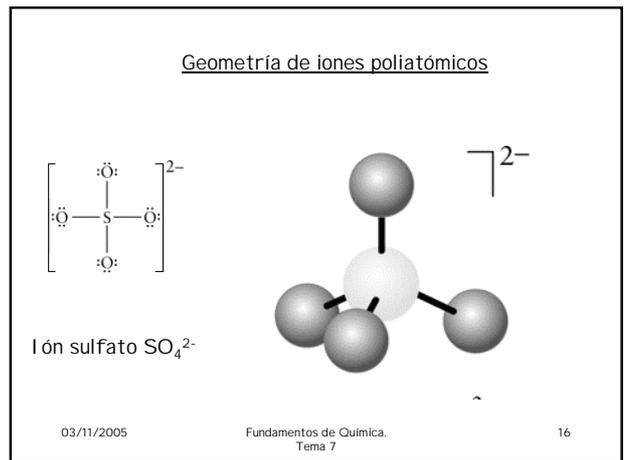
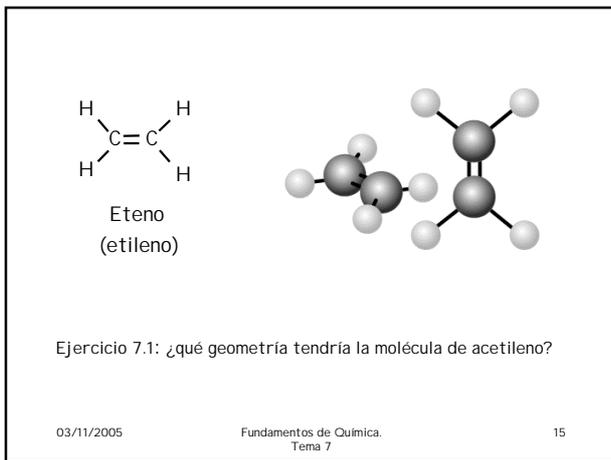
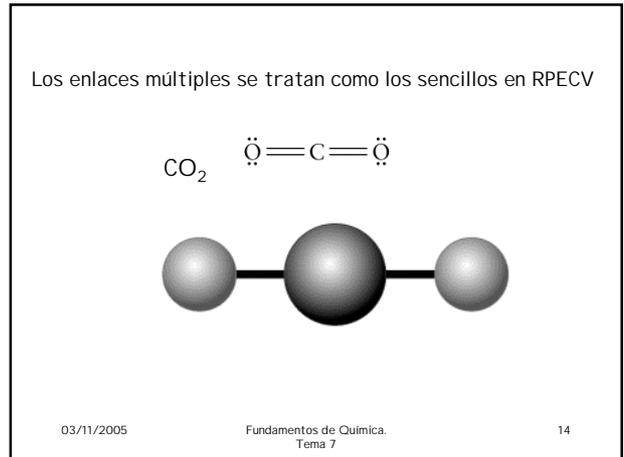
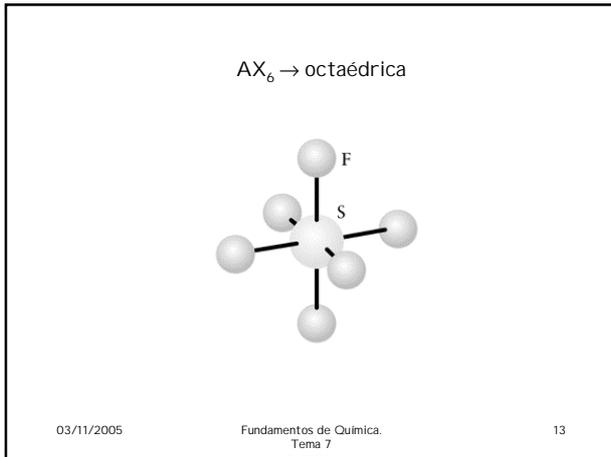
$AX_4 \rightarrow$ tetraédrica

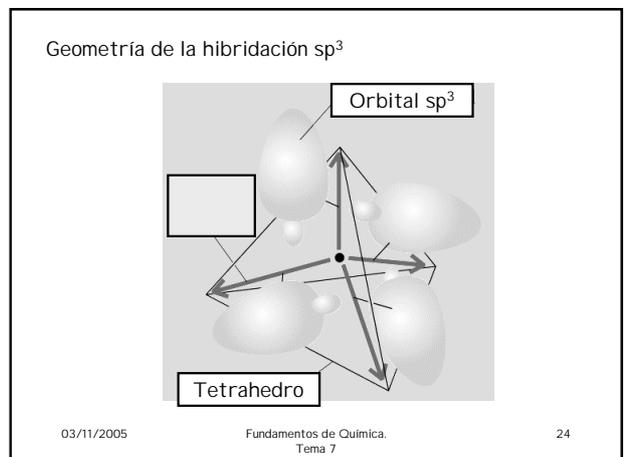
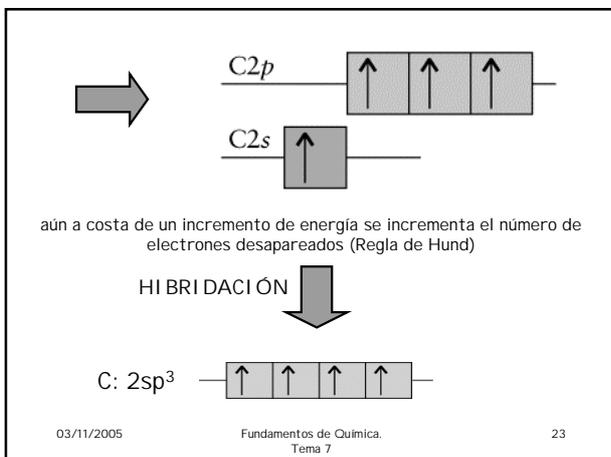
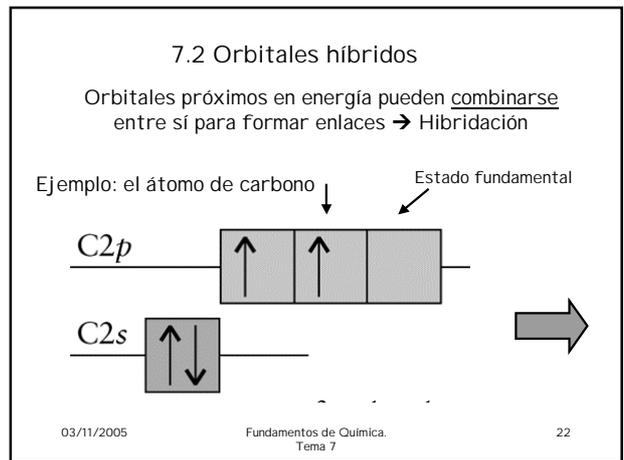
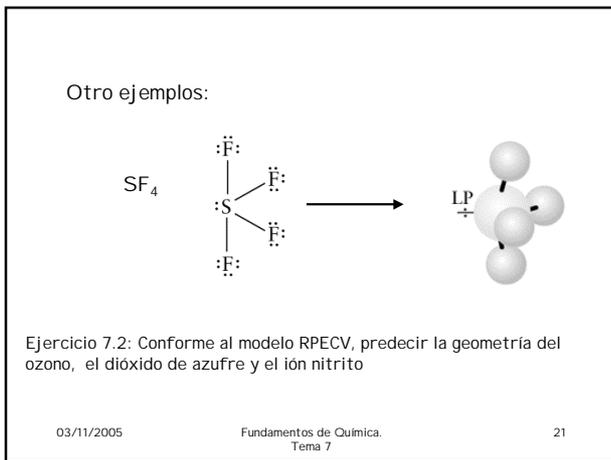
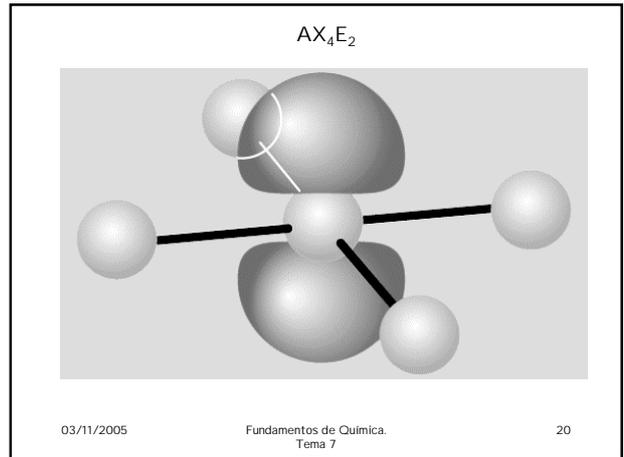
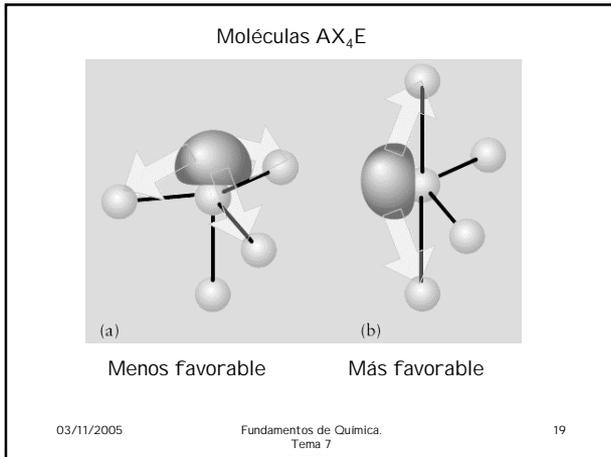
03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 11

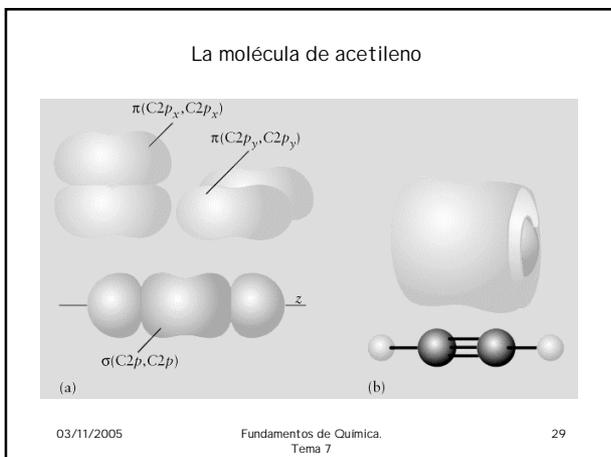
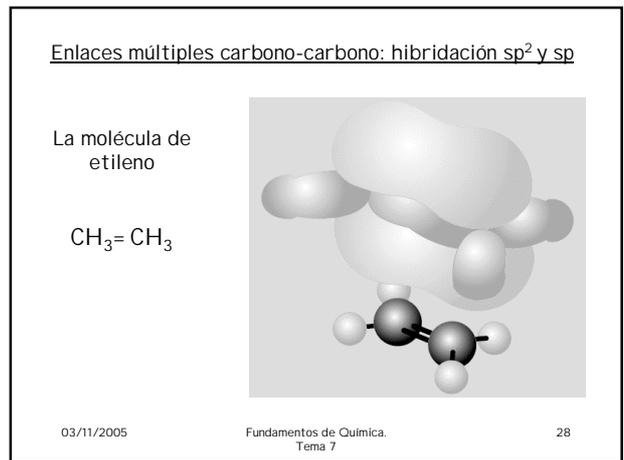
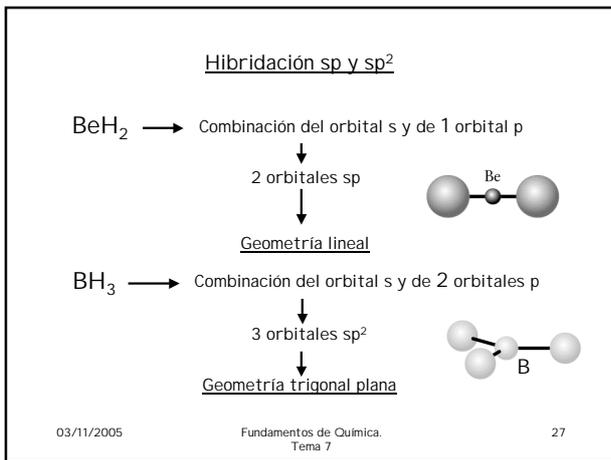
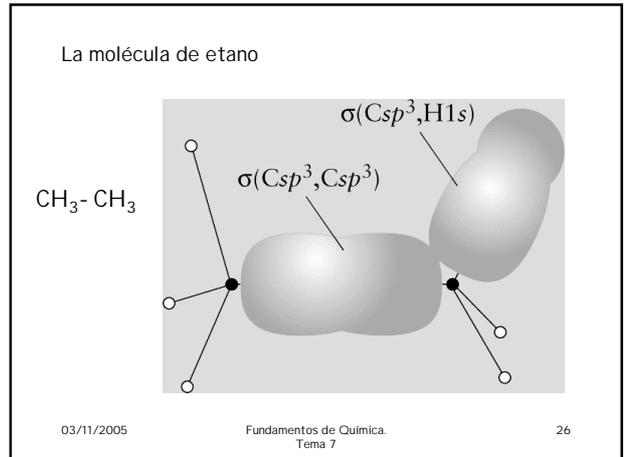
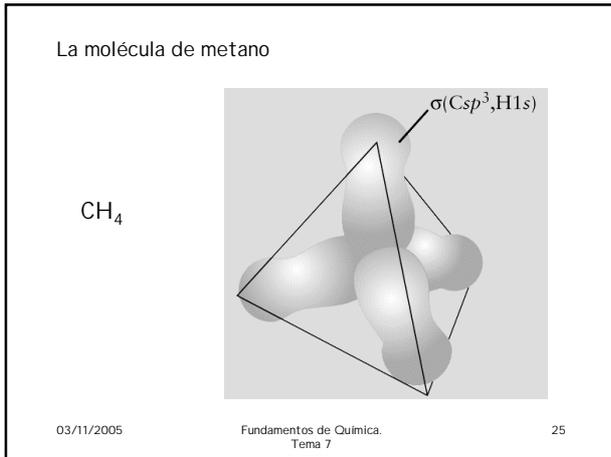
$AX_5 \rightarrow$ bipirámide trigonal

PCl₅

03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 12







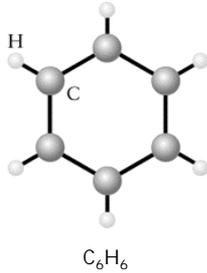
7.3 Orbitales moleculares deslocalizados: compuestos aromáticos

- ✓ 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

03/11/2005 Fundamentos de Química. Tema 7 30

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

11



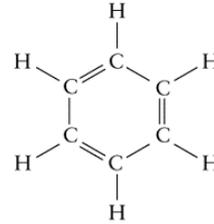
03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

31

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

□



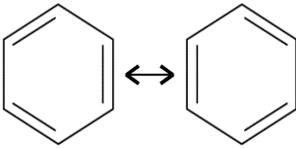
03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

32

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

□

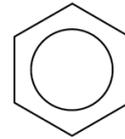


03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

33

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



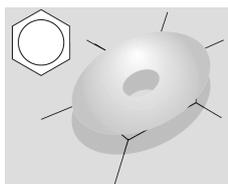
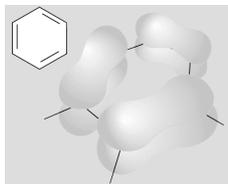
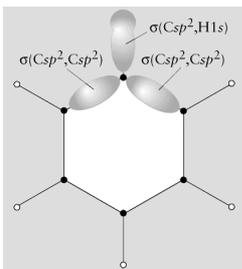
El anillo de 6 átomos de carbono del benceno es una estructura muy estable que da a esta sustancia y sus derivados propiedades características. A las sustancias que contienen en su estructura anillos bencénicos se las denomina compuestos aromáticos

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

34

La molécula de benceno

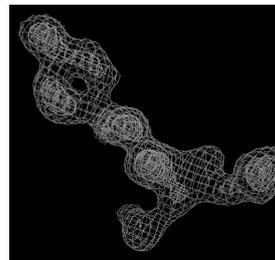


03/11/2005

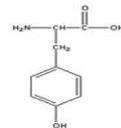
Fundamentos de Química.
Tema 7

35

"densidad" electrónica en un compuesto aromático



ácido tirosina "visto" por fracción de rayos-X



03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

36

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



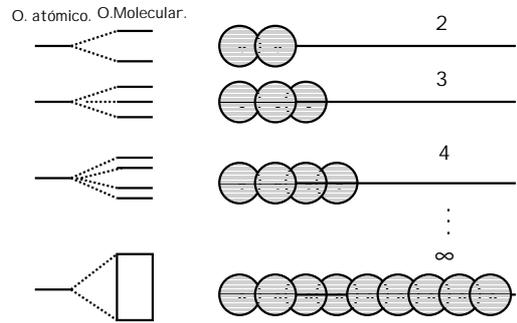
La Teoría de Bandas es la extensión de la teoría de orbitales moleculares al caso de los sólidos

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

37

Formación de una banda

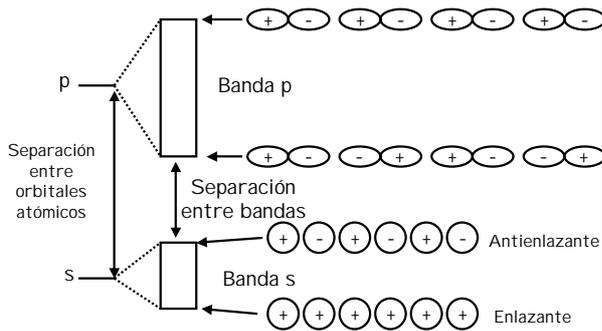


03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

38

Formación de una banda (II)

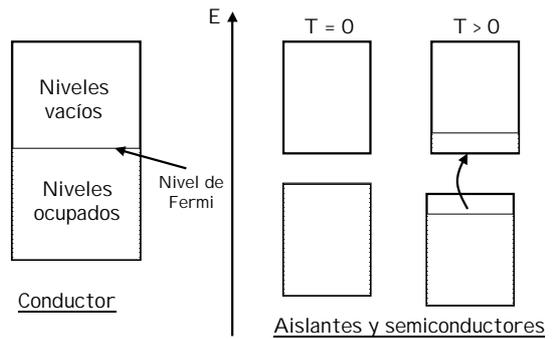


03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

39

Conductores, aislantes y semiconductores



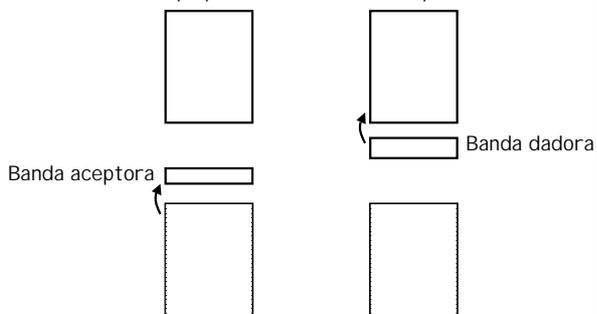
03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

40

Semiconductor tipo p

Semiconductor tipo n



03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

41

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

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

42

Conductividad y estructura electrónica

Niveles
vacíos

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

Niveles
ocupados

→ 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 por qué el He sólido no conduce la electricidad y el Li sí.

03/11/2005

Fundamentos de Química.
Tema 7

43