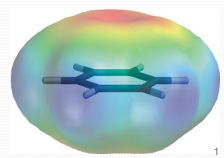


Continuación Tema 2

Prof(a): María Angélica Sánchez Palacios



TEMA 2. CONTENIDO



- Introducción a la forma y características de la tabla periódica.
- Introducción a los modelos atómicos. El Método Científico.
- Introducción a la teoría cuántica. Concepto de orbital. Números cuánticos y llenado de la tabla periódica.
- Propiedades periódicas: radio, potencial de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad.
- Enlace químico. Tipos de enlace según relación a la tabla periódica. Enlace iónico, enlace metálico.
- Enlace covalente. Energía de enlace y orden de enlace. Enlace covalente polar.
- Orbitales híbridos.
- Repulsión entre pares de electrones y forma de las moléculas.
- Polaridad de las moléculas.
- Propiedades de los estados agregados y su relación con el tipo de enlaces: iónicos, metálicos, Van Der Waals, ion dipolo y puente de hidrógeno.

Modelo de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (RPECV):

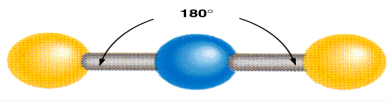
Distribución de los pares electrónicos que rodean el átomo central

Predicción de la geometría de las moléculas, mediante la repulsión electrostática de pares de electrones compartidos y libres.

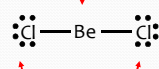
Átomo central sin pares de e⁻ libres

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB ₂	2	0	lineal 180° 	lineal 180° 

Beryllium Chloride





0 pares de electrones libres en el átomo central



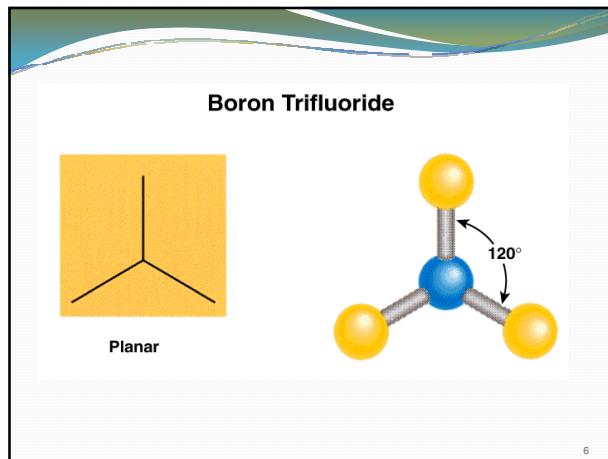
2 átomos enlazados al átomo central

RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana






5

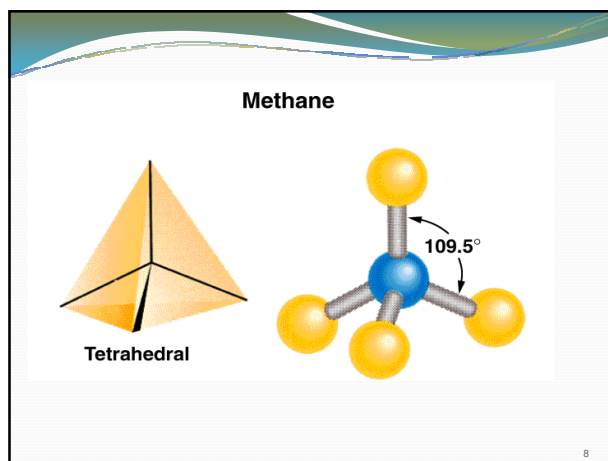


RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular planar	triangular planar
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica

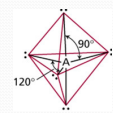




7

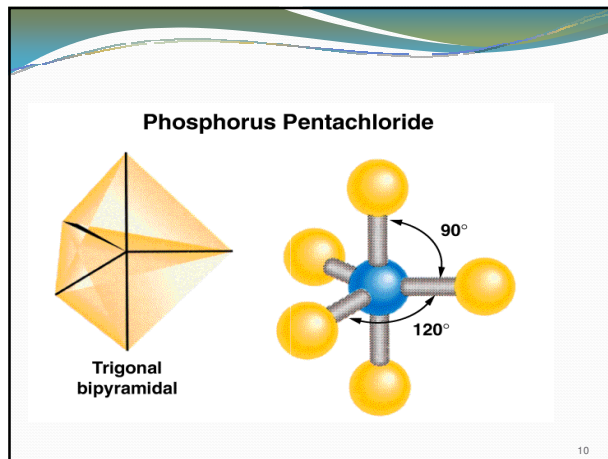


RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
AB_4	4	0	tetraédrico	tetraédrico
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal

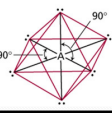
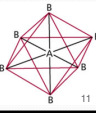



9



RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_2	2	0	lineal	lineal
AB_3	3	0	triangular plano	triangular plano
AB_4	4	0	tetraédrico	tetraédrico
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal
AB_6	6	0	octaédrico	octaédrico

11

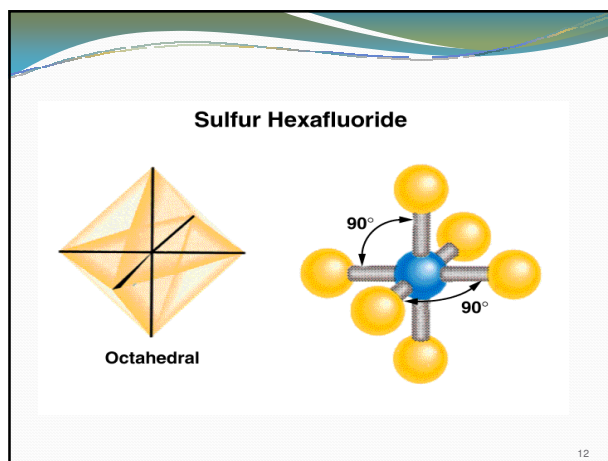


TABLE 10.1 Arrangement of Electron Pairs About a Central Atom (A) in a Molecule and Geometry of Some Simple Molecules and Ions in Which the Central Atom Has No Lone Pairs

Number of Electron Pairs	Arrangement of Electron Pairs*	Molecular Geometry*	Examples
2	180° Linear	B—A—B Linear	BeCl_2 , HgCl_2
3	120° Trigonal planar	Trigonal planar	BF_3
4	109.5° Tetrahedral	Tetrahedral	CH_4 , NH_4^+
5	120° and 90° Trigonal bipyramidal	Trigonal bipyramidal	PCl_5
6	90° Octahedral	Octahedral	SF_6

Geometría Molecular determina
Propiedades Físicas y Químicas
Punto fusión y ebullición
Densidad
Tipo de reacción en que puede participar

Comparación de fuerzas de repulsión entre pares de electrones
 pares compartidos, pares libres y entre un par compartido y uno libre

Fuerzas de Repulsión disminuyen:
 pares libres vs. pares libres > pares libres vs. pares compartidos > pares compartidos vs. pares compartidos

RPECV

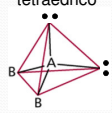

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_3	3	0	triangular plana	triangular plana
AB_2E	2	1	triangular plana	doblada

RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_4	4	0	tetraédrica	tetraédrica
AB_3E	3	1	tetraédrica	triangular piramidal

RPECV

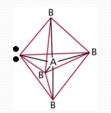
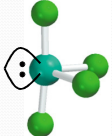
Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_4	4	0	tetraédrico	tetraédrico
AB_3E	3	1	tetraédrico	triangular piramidal
AB_2E_2	2	2	tetraédrico	doblada

17

RPECV

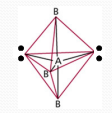
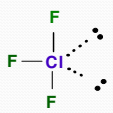
Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal
AB_3E	4	1	triangular bipiramidal	tetraedro deformado

18

RPECV

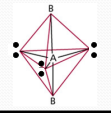
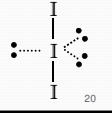
Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal
AB_4E	4	1	triangular bipiramidal	tetraedro deformado
AB_3E_2	3	2	triangular bipiramidal	Forma de T

19

RPECV

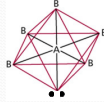
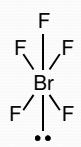
Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_5	5	0	triangular bipiramidal	triangular bipiramidal
AB_4E	4	1	triangular bipiramidal	tetraedro deformado
AB_3E_2	3	2	triangular bipiramidal	en forma de T
AB_2E_3	2	3	triangular bipiramidal	lineal

20

RPECV

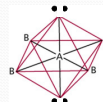

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_6	6	0	octaédrico	octaédrico
AB_5E	5	1	octaédrico	piramidal cuadrada

21

RPECV

Clase	# de átomos unidos al átomo central	# de pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AB_6	6	0	octaédrico	octaédrico
AB_5E	5	1	octaédrico	piramidal cuadrada
AB_4E_2	4	2	octaédrico	cuadrada plana

22

TABLE 10.2 Geometry of Simple Molecules and Ions in Which the Central Atom Has One or More Lone Pairs

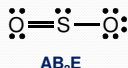
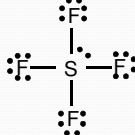
Class of Molecule	Total Number of Electron Pairs	Number of Bonding Pairs	Number of Lone Pairs	Arrangement of Electron Pairs*	Geometry of Molecule or Ion	Examples
AB_2	3	2	1	Trigonal planar	Bent	SO_2
AB_3	4	3	1	Tetrahedral	Trigonal pyramidal	NO_2^-
AB_2E_2	4	2	2	Tetrahedral	Bent	H_2O
AB_3E	5	4	1	Trigonal bipyramidal	Trigonal bipyramidal (or seesaw)	ClF_3
AB_3E_2	5	3	2	Trigonal bipyramidal	T-shaped	ClF_2^-
AB_2E_3	5	2	3	Trigonal bipyramidal	Linear	I_3^-
AB_4E	6	5	1	Octahedral	Square pyramidal	BrF_5
AB_4E_2	6	4	2	Octahedral	Square planar	XeF_4

23

Predicción de la geometría molecular

- Escribir la estructura de Lewis para una molécula.
- Contar el número de pares de electrones en el átomo central y el número de átomos unidos al átomo central.
- Usar el RPECV para predecir la geometría de la molécula.
- En cuanto al ángulo (depende de los pares de e⁻ libres)

¿Cuál es la geometría molecular del SO_2 y del SF_4 ?

AB_2E

AB_4E

tetraedro deformado

24

Momentos dipolares y moléculas polares

Región de baja densidad electrónica (H, δ^+)

Región de alta densidad electrónica (F, δ^-)

Desplazamiento de densidad electrónica
separación de carga resultante

Momento dipolar $\mu = Q \times r$

Q es el producto de la carga
r es la distancia entre dos cargas

1 D (Debye) = 3.36×10^{-30} C m C = Coulomb, m = metro $\therefore \delta$ positiva

25

Efecto de un campo eléctrico externo en moléculas polares

Behavior of Polar Molecules

En ausencia En presencia

26

¿Cómo se determina el momento dipolar de una molécula?

- 1- ΔElectronegatividad
- 2- Geometría de la molécula

Resultant dipole moment = 1.46 D

Densidad electrónica hacia el Nitrógeno

Resultant dipole moment = 0.24 D

Densidad electrónica se aleja del Nitrógeno

27

¿Cuáles de las siguientes moléculas tienen un momento dipolar?

H₂O, CO₂, SO₂, y CH₄

momento dipolar (molécula polar)

momento dipolar (molécula polar)

momento no dipolar (molécula no polar)

momento no dipolar (molécula no polar)

28

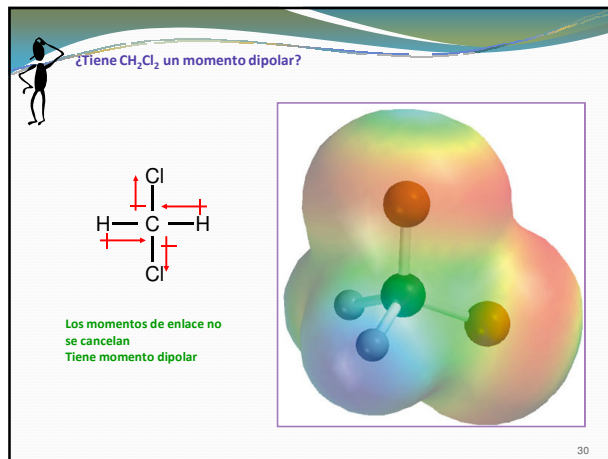
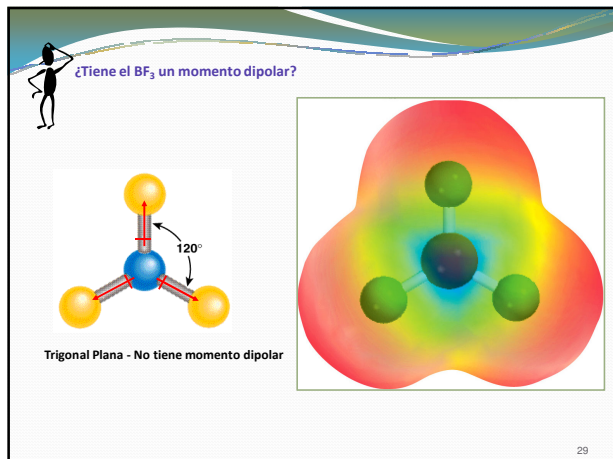
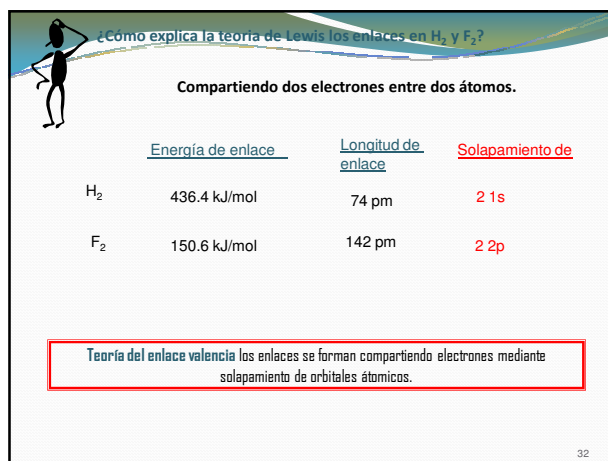
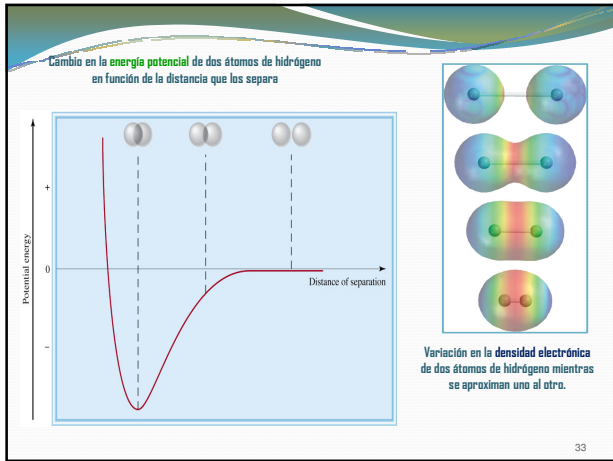


TABLE 10.3 Dipole Moments of Some Polar Molecules

Molecule	Geometry	Dipole Moment (D)
HF	Linear	1.92
HCl	Linear	1.08
HBr	Linear	0.78
HI	Linear	0.38
H_2O	Bent	1.87
H_2S	Bent	1.10
NH_3	Trigonal pyramidal	1.46
SO_2	Bent	1.60

31

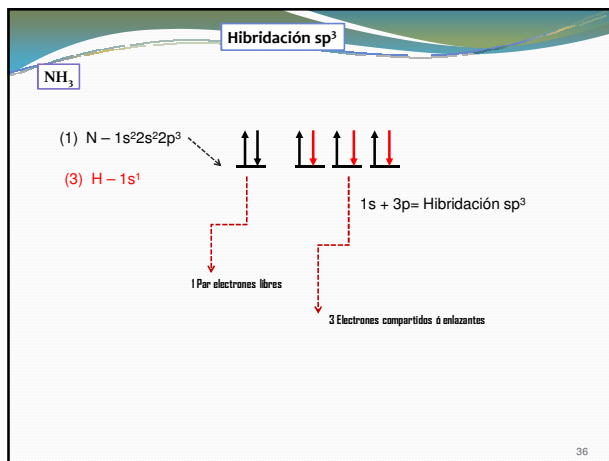
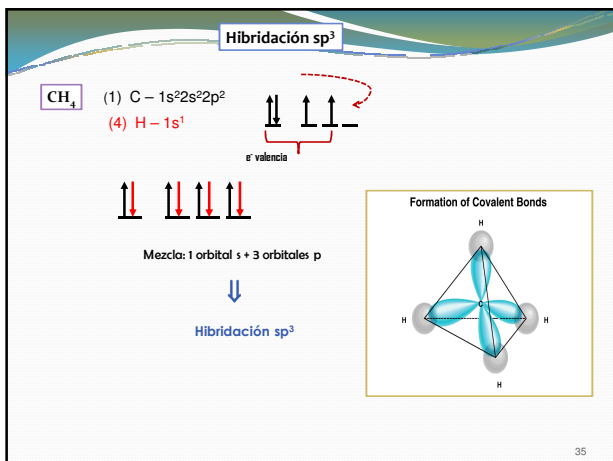




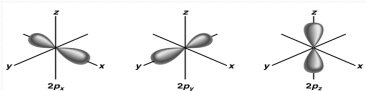
Hibridación - Combinación de 2 o más orbitales atómicos no equivalentes, del mismo átomo (en general, el átomo central) para formar un conjunto de orbitales híbridos

- Al mezclar al menos 2 orbitales diferentes, se forman los orbitales híbridos, los cuales tienen una forma distinta a los originales.
- El número de orbitales híbridos es igual al número de orbitales puros, usados en la hibridación.
- Los enlaces covalentes están formados por:
 - La superposición de orbitales híbridos con orbitales atómicos.
 - La superposición de orbitales híbridos con orbitales híbridos.

34



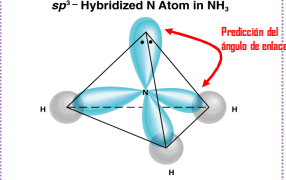
Si los enlaces se forman a partir de un solapamiento de 3 orbitales (2p del nitrógeno y 1s en cada átomo de hidrógeno), ¿cuál sería la geometría de la molécula del NH_3 ?



Con 3 orbitales 2p el ángulo sería de 90°

El ángulo de enlace del H-N-H es 107.3° ?

sp^3 -Hybridized N Atom in NH_3

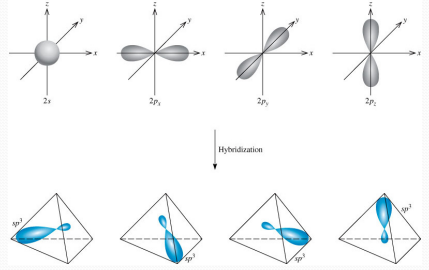


Predicción del ángulo de enlace

Tetraédrica explica el ángulo de enlace

37

Forma de orbitales híbridos sp^3 ($1s + 3p$)



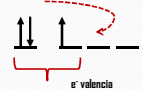
38

Hibridación sp^2

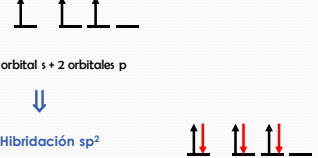
BF_3

(1) B - $1s^2 2s^2 2p^1$

(3) F - $1s^2 2s^2 2p^5$



e⁻ valencia




Mezcla: 1 orbital s + 2 orbitales p

Hibridación sp^2


39

sp^2 Hybridization of a Carbon Atom


Ground state



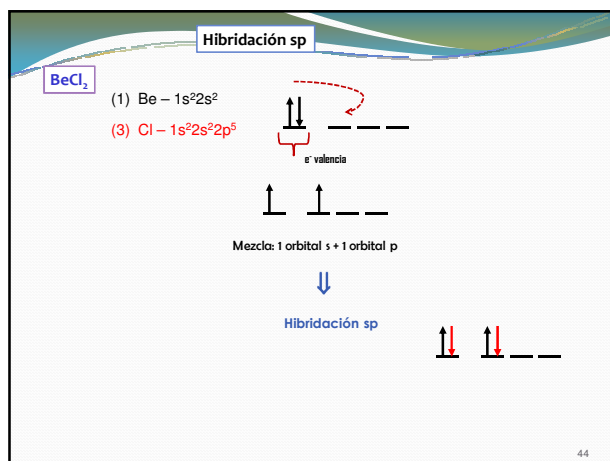
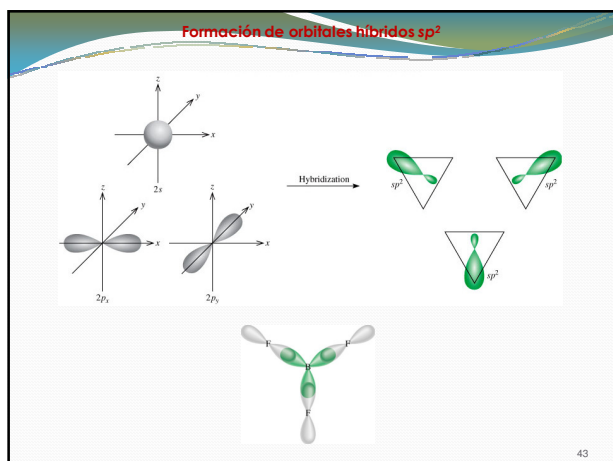
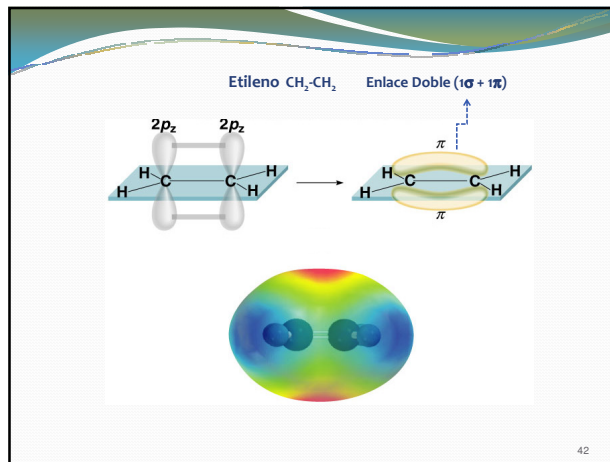
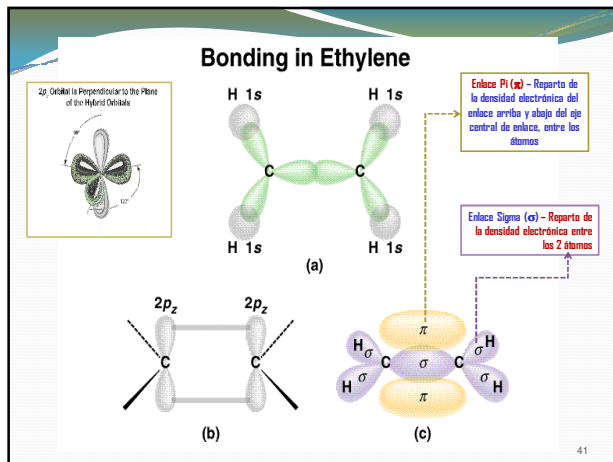
Promotion of electron

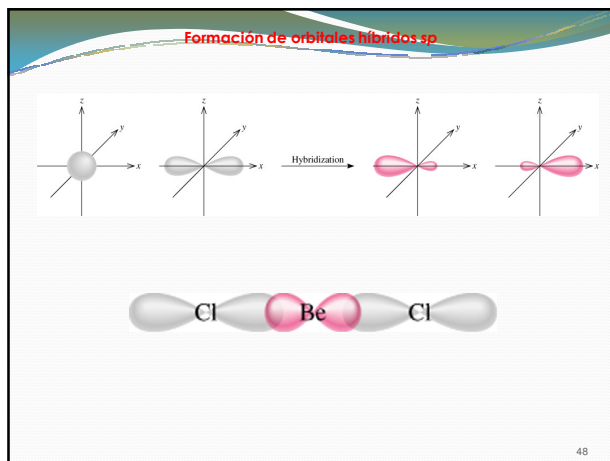
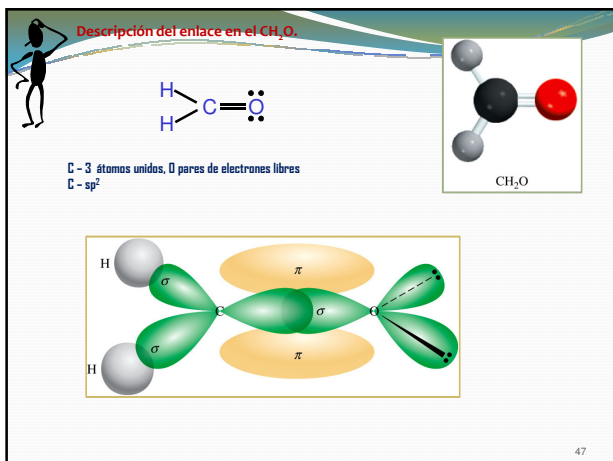
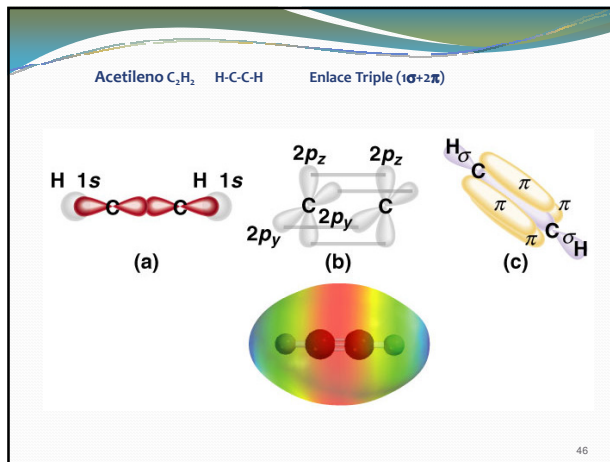
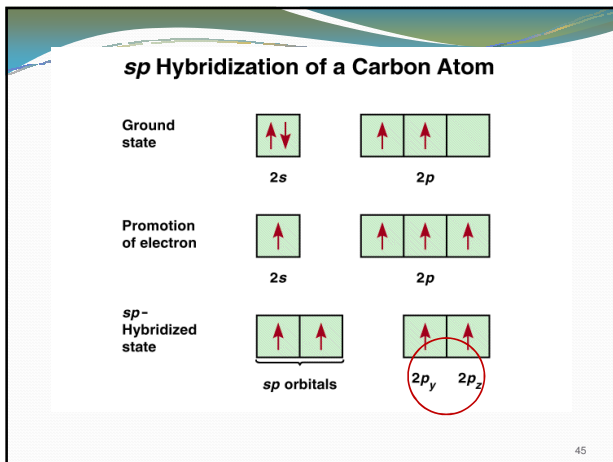


sp^2 -Hybridized state



40





Hibridación sp^3d^2

SF₆

(1) S - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

6 e- valencia

3s 3p 3d

Mezcla: 1 orbital s + 3 orbitales p + 2 orbitales d

Hibridación sp^3d^2

49

¿Cómo predecir la hibridación del átomo central?

1. Escriba la estructura de Lewis de la molécula.
2. Cuente el número de pares de electrones libres y el de átomos unidos al átomo central.

# de pares de electrones libres + # átomos unidos	Hibridación	Ejemplos
2	sp	BeCl ₂
3	sp ²	BF ₃
4	sp ³	CH ₄ , NH ₃ , H ₂ O
5	sp ³ d	PCl ₅
6	sp ³ d ²	SF ₆

50

TABLE 10.4 Important Hybrid Orbitals and Their Shapes

Pure Atomic Orbitals of the Central Atom	Hybridization of the Central Atom	Number of Hybrid Orbitals	Shape of Hybrid Orbitals	Examples
s, p	sp	2	Linear 180°	BeCl ₂
s, p, p	sp ²	3	Trigonal planar 120°	BF ₃
s, p, p, p	sp ³	4	Tetrahedral 109.5°	CH ₄ , NH ₃
s, p, p, p, d	sp ³ d	5	Trigonal bipyramidal 90°, 120°	PCl ₅
s, p, p, p, d, d	sp ³ d ²	6	Octahedral 90°	SF ₆

51

Enlaces Sigma (σ) y Pi (π)

- Enlace simple → 1 enlace sigma
- Enlace doble → 1 enlace sigma y 1 enlace pi
- Enlace triple → 1 enlace sigma y 2 enlaces pi

¿Cuántos enlaces σ y π hay en la molécula del ácido acético (vinagre) CH₃COOH?

enlaces σ = 6 +1 = 7 = σ

π = 1


52

Experimentalmente se observa que el O_2 es paramagnético

O=O

No hay e^- libres en el centro

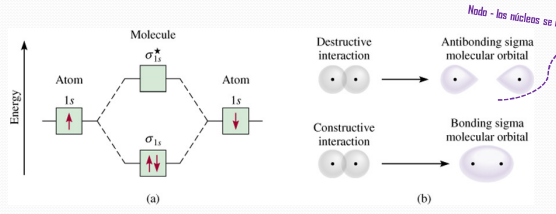
Debería ser diamagnético



Teoría del orbital molecular (OM): los enlaces covalentes se forman a partir de la interacción de los orbitales atómicos de los átomos que se enlazan y están relacionados en la molécula total.

53

Niveles de energía de enlace y de antienlace en el OM del hidrógeno (H_2).

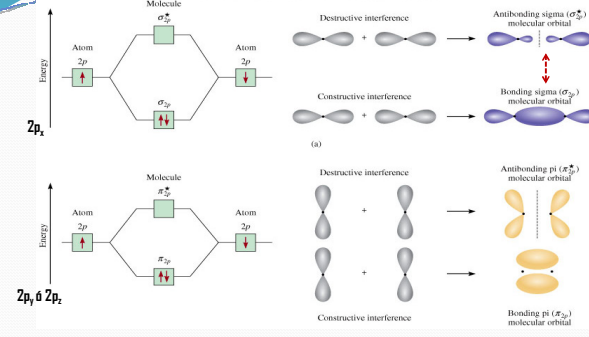


Un *orbital molecular* tiene menos energía y mayor estabilidad que los orbitales atómicos que lo formaron.

Un *antienlace molecular orbital* tiene más energía y menor estabilidad que los orbitales atómicos que lo formaron.

54

Dos interacciones posibles entre dos orbitales equivalentes p

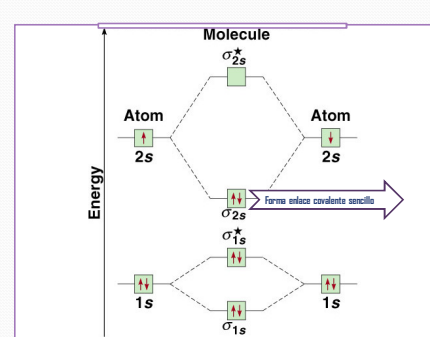


En general, un orbital molecular σ de enlace es más estable que orbital molecular π de enlace

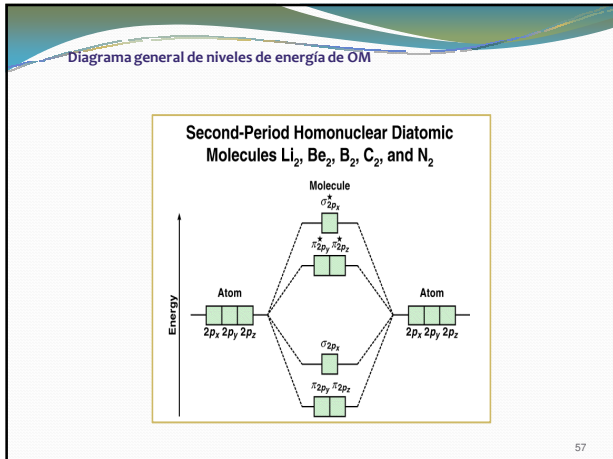
55

Niveles de energía caso: Li_2

Configuración electrónica $1s^2 2s^1$ (2 átomos Li) \Rightarrow total 6 e^-



56



- Configuraciones de orbitales moleculares (OM)
1. El número de orbitales moleculares (OM) siempre es igual al número de orbitales atómicos combinados.
 2. Entre más estable es el enlace OM, menos estable es el antienlace correspondiente.
 3. Los OM se llenan de acuerdo con su nivel de energía.
 4. Cada OM puede tener hasta dos electrones.
 5. Se utiliza la regla de Hund cuando se añaden electrones, a los OM del mismo nivel de energía.
 6. El número de electrones en los OM es igual a la suma de todos los electrones en los átomos unidos.
- 58

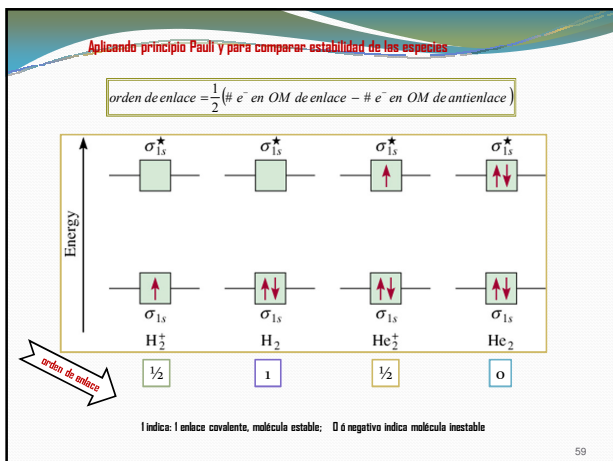


TABLE 10.5 Properties of Homonuclear Diatomic Molecules of the Second-Period Elements*

	Li_2	B_2	C_2	N_2	O_2	F_2
σ_{2p}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
π_{2p}^*, π_{2p}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
σ_{2p}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
π_{2p}, π_{2p}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
σ_{2s}^*	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
σ_{2s}	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Bond order	1	1	2	3	2	1
Bond length (pm)	267	159	131	110	121	142
Bond enthalpy (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9
Magnetic properties	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic	Diamagnetic	Paramagnetic	Diamagnetic

For simplicity the σ_{1s} and σ_{1s}^ orbitals are omitted. These two orbitals hold a total of four electrons. Remember that for O_2 and F_2 , σ_{2s} is lower in energy than π_{2p} and π_{2p}^* .

e^- totales molécula $2e^-$ $10e^-$

O_2 Diamagnético

60

