



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO

Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Programa educativo:
Ingeniería en Plásticos

Unidad de Aprendizaje: **Química Inorgánica**

Unidad 1. Principios básicos de Química Inorgánica

Por:
M. en C. Isaias Alcalde Segundo

Febrero de 2016



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

UNIDAD 1.- PRINCIPIOS BÁSICOS DE QUÍMICA INORGÁNICA

- 1. 1.- Introducción a la química inorgánica
 - 1.2.- Estructura atómica
 - 1.3.- Perspectiva general de la tabla periódica
 - 1.4 Teorías de enlace y arreglo molecular



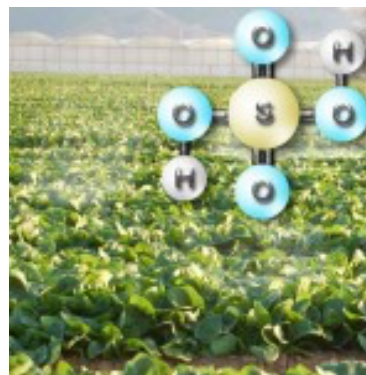
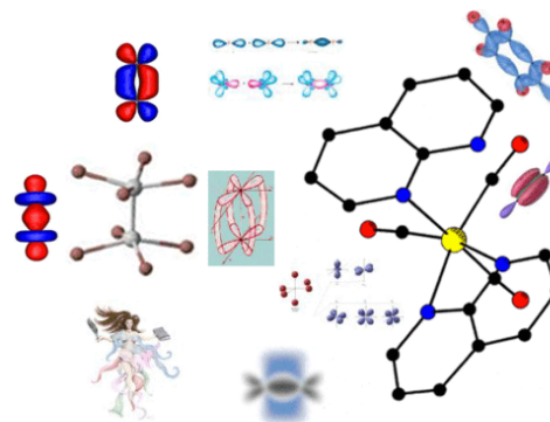
Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

1.1 Introducción a la Química Inorgánica



1. 1.- Introducción a la Química Inorgánica

La **química inorgánica** se encarga del estudio integrado de la formación, composición, estructura y reacciones químicas de los elementos y compuestos inorgánicos.





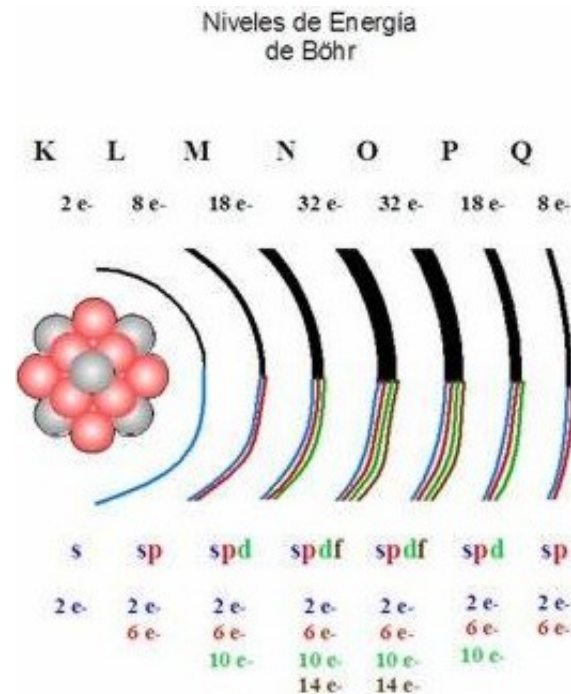
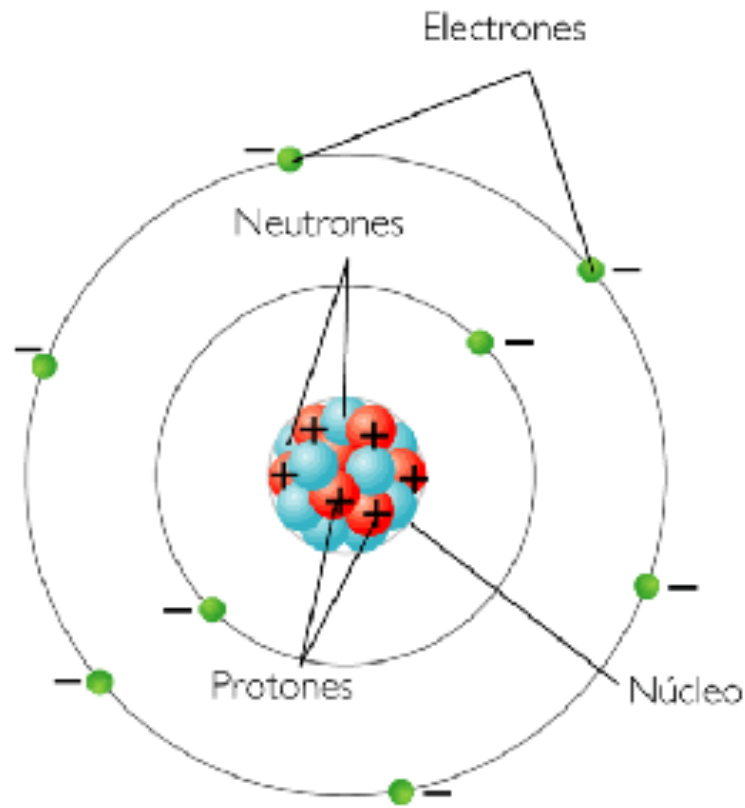
Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

1.2.- Estructura atómica y enlace

Las propiedades y el comportamiento de los materiales dependen de su estructura interna



Descripción de las partículas subatómicas. Estructura del átomo



Subniveles de Schrödinger

Creado por:
 H. V. C.



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

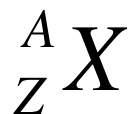
Partículas elementales

| Partícula | Masa (kg) | Carga (C) |
|-----------|-------------------------|---------------------------|
| Protón | 1.674×10^{-27} | $+ 1.602 \times 10^{-19}$ |
| Neutrón | 1.672×10^{-27} | 0 |
| Electrón | 9.11×10^{-31} | $- 1.602 \times 10^{-19}$ |



¿En que se diferencian los átomos de otros?

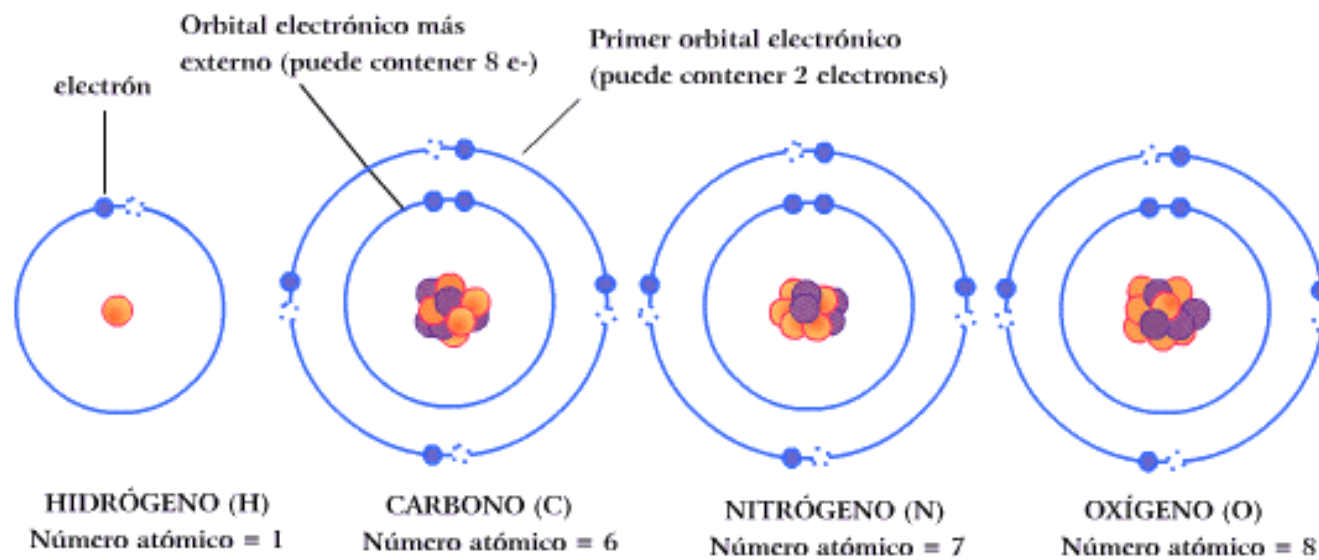
- Átomos diferentes tienen **distinto número de protones y de neutrones** en sus núcleos
- Para determinar cuántos protones y neutrones hay en un átomo, se debe conocer el **número atómico (Z)** y el **número másico (A)**.



Número de masa = número de protones + número de neutrones
número de atómico + número de neutrones

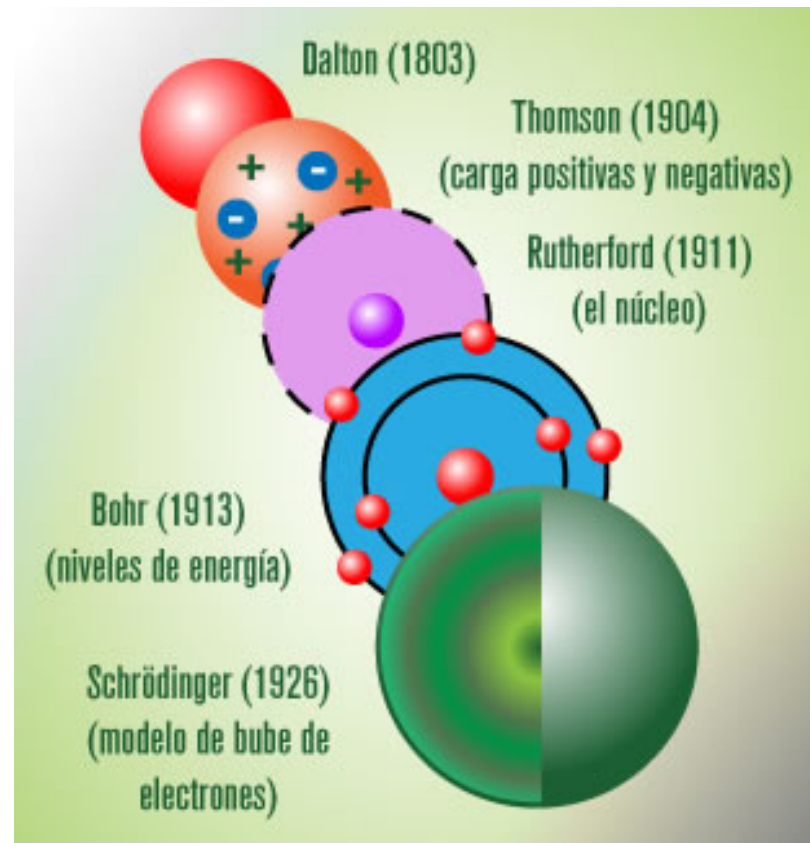


Estructura atómica





Teorías atómicas



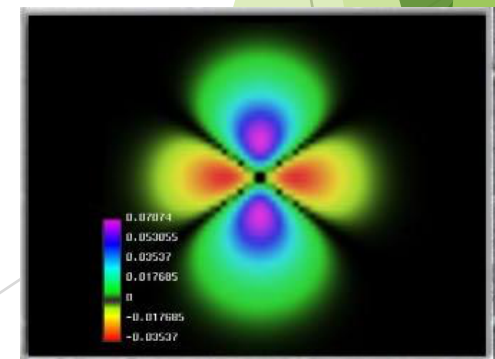


Teoría cuántica y la estructura de electrónica de los átomos

La cuantización de la energía y la dualidad onda-partícula fué desarrollado bajo el nombre de *Mecánica Cuántica* por Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Paul Dirac, y otros alrededor de 1925-1926.

Ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$





Números cuánticos

Los primeros tres números cuánticos se derivan de la solución matemática de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno y son:

- a) número cuántico principal (n),
- b) número cuántico del momento angular (l) y el
- c) número cuántico magnético (m_l).

El d) número cuántico de espín es un cuarto número cuántico que describe el comportamiento de determinado electrón y completa la descripción de los electrones en los átomos.



Números cuánticos

- a) Número cuántico principal (n) 1, 2, 3, ...,
expresa la mayor o menor probabilidad de encontrar al e^- cerca del núcleo. Indica el número de capa o nivel energético de la misma.
- b) Número cuántico secundario (l) 0, ..., $n-1$, para cada n ;
especifica el momento angular del electrón en su movimiento alrededor del núcleo y determina la forma espacial del orbital. Indica el número de subniveles energéticos que pueden existir en un nivel dado

| | | | | | | | |
|-------------------------------|---|---|---|---|---|---|-----|
| Valor del número cuántico l | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ... |
| Letra asignada | s | p | d | f | g | h | ... |

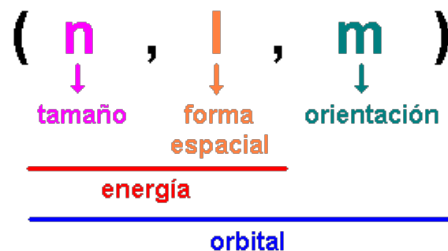


Números cuánticos

c) Número cuántico magnético (m) $-l, \dots, 0, \dots, +l$

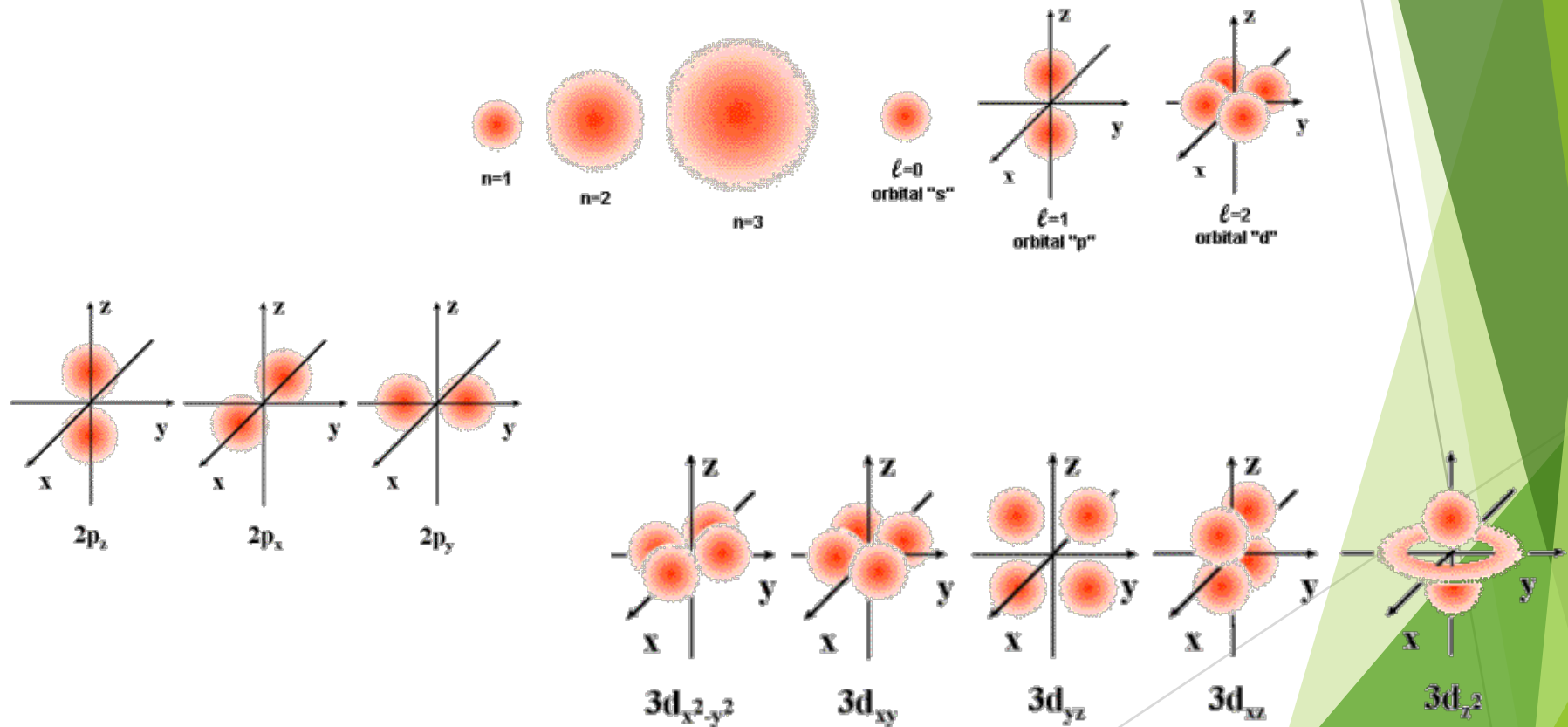
para cada " l "; representa la orientación de la forma espacial de cada orbital según un eje arbitrario de referencia que viene dado por un campo magnético externo.

Los tres números cuánticos, definen un orbital; su tamaño, su forma y su orientación, así como su energía:





Representación gráfica de algunos orbitales atómicos

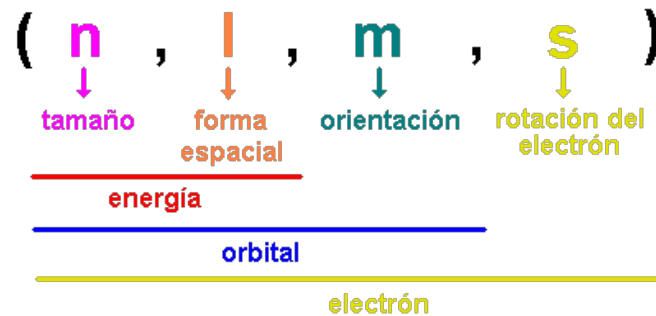




Números cuánticos

d) Número cuántico de spins $s +\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.

Representa el movimiento de rotación del electrón alrededor de sí mismo. Al poder tener sólo dos sentidos de giro sobre sí mismo, "s" sólo podrá tomar 2 valores $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$.





Inconvenientes de la mecánica cuántica

La mecánica cuántica se basa en asignar una función de onda a los electrones de los átomos para describir su movimiento y estado energético. Dicha función de ondas, se puede escribir para todos los átomos plurielectrónicos, pero sólo se ha podido resolver para el átomo de hidrógeno dada su sencillez (sólo un protón en el núcleo y un electrón en la corteza).

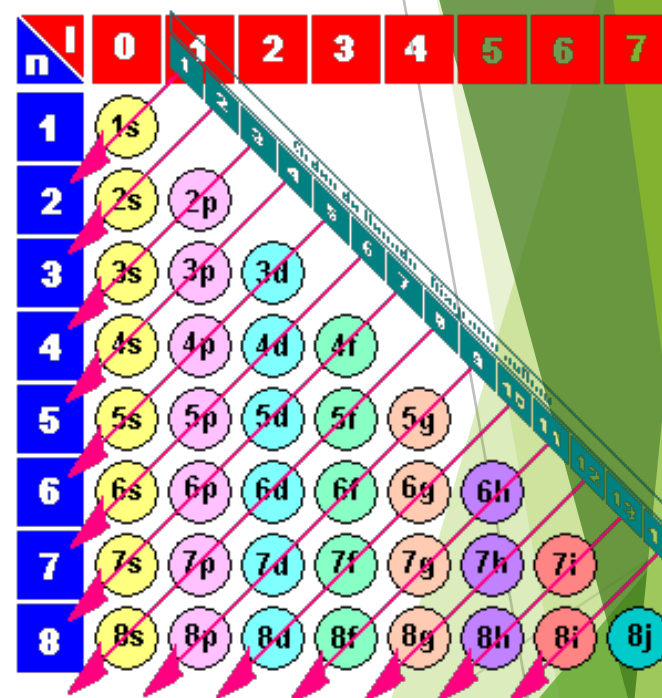
Esta imposibilidad en la resolución de la función de onda, surge de la gran complejidad matemática que resulta debido a la interacción de varios electrones y protones entre sí, por eso, se han tenido que resolver mediante aproximaciones.



Configuraciones electrónicas

Es la forma de saber cómo son ocupados los electrones en estado fundamental o de mínima energía. Tomando en cuenta lo siguiente:

- Cada orbital puede tener, como máximo, dos electrones con spines antiparalelos (principio de exclusión de Pauli).
- Los orbitales se llenan empezando por el de menor energía y siguiendo por los demás en orden creciente (principio de aufbau).
- Al ocupar los orbitales degenerados, cada uno de ellos ha de estar ocupado por un electrón antes de asignar un segundo electrón a cualquiera de ellos (regla de la máxima multiplicidad de Hund).





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

Principio de Exclusión de Pauli

- *Dos electrones en un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales*
- Si dos electrones tienen iguales n , l y m_l por tanto se encuentran en el mismo orbital
- Es necesario que un electrón tenga un $m_s = 1/2$ y el otro un $m_s = -1/2$





Orden de llenado de los orbitales. Regla de Hund

- La configuración más estable en los subniveles es aquella que tenga mayor multiplicidad.
- La multiplicidad se define como: $P = 2S+1$
Donde:

$$S = \sum m_z$$

Supongamos 2 electrones en los orbitales p, existen dos posibilidades



$$S = +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad P = 2 * 1 + 1 = 3$$



$$S = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad P = 2 * 0 + 1 = 1$$

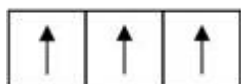
a es más estable que b



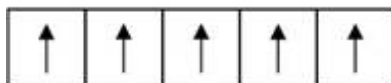
Excepciones a la regla de llenado

Excepciones a la regla de llenado.

Los orbitales semillenos presentan una estabilidad extra.

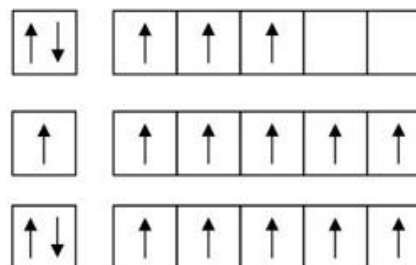
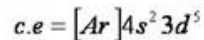
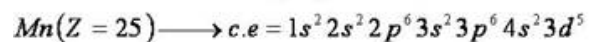
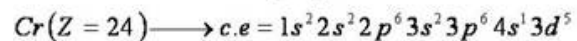
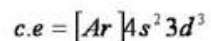
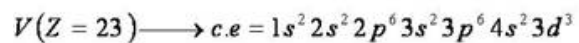


np^3 es muy estable



nd^5 es muy estable

Esto hace que en metales de transición, elementos como el Cromo llenen antes los orbitales 3d que se llene completamente el orbital 4s





La tabla periódica y configuraciones electrónicas

Bloque s

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1 H | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He |
| 3 Li | 4 Be | | | | | | | | | | | 5 B | 6 C | 7 N | 8 O | 9 F | 10 Ne |
| 11 Na | 12 Mg | | | | | | | | | | | 13 Al | 14 Si | 15 P | 16 S | 17 Cl | 18 Ar |
| 19 K | 20 Ca | 21 Sc | 22 Ti | 23 V | 24 Cr | 25 Mn | 26 Fe | 27 Co | 28 Ni | 29 Cu | 30 Zn | 31 Ga | 32 Ge | 33 As | 34 Se | 35 Br | 36 Kr |
| 37 Rb | 38 Sr | 39 Y | 40 Zr | 41 Nb | 42 Mo | 43 Tc | 44 Ru | 45 Rh | 46 Pd | 47 Ag | 48 Cd | 49 In | 50 Sn | 51 Sb | 52 Te | 53 I | 54 Xe |
| 55 Cs | 56 Ba | 57 La | 72 Hf | 73 Ta | 74 W | 75 Re | 76 Os | 77 Ir | 78 Pt | 79 Au | 80 Hg | 81 Tl | 82 Pb | 83 Bi | 84 Po | 85 At | 86 Rn |
| 87 Fr | 88 Ra | 89 Ac | 104 Rf | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs | 109 Mt | | | | | | | | | |

Bloque p

Bloque d

Bloque f

| | | | | | | | | | | | | | |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 58 Ce | 59 Pr | 60 Nd | 61 Pm | 62 Sm | 63 Eu | 64 Gd | 65 Tb | 66 Dy | 67 Ho | 68 Er | 69 Tm | 70 Yb | 71 Lu |
| 90 Th | 91 Pa | 92 U | 93 Np | 94 Pu | 95 Am | 96 Cm | 97 Bk | 98 Cf | 99 Es | 100 Fm | 101 Md | 102 No | 103 Lr |



Universidad Autónoma del Estado de México

Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

| Capacidad | Configuración electrónica | s ¹ | s ² | d ¹ | d ² | d ³ | d ⁴ | d ⁵ | d ⁶ | d ⁷ | d ⁸ | d ⁹ | d ¹⁰ | p ¹ | p ² | p ³ | p ⁴ | p ⁵ | p ⁶ | |
|-----------|---------------------------|---------------------------|-----------------------------|----------------------------|---------------------------------|----------------------------|------------------------------|-----------------------------|----------------------------|------------------------------|-------------------------------|------------------------------|------------------------------|----------------------------|----------------------------|------------------------------|---------------------------|----------------------------|---------------------------|------------------------|
| | | Orbitales | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 1 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| 2 | 1s | | | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He 4,003 Helio |
| 8 | 2s2p | 3 Li 6,94 Litio | 4 Be 9,01 Berilio | | | | | | | | | | | 5 B 10,81 Boro | 6 C 12,01 Carbono | 7 N 14,01 Nitrógeno | 8 O 16,00 Oxígeno | 9 F 18,99 Flúor | 10 Ne 20,18 Neón | |
| 8 | 3s3p | 11 Na 22,99 Sodio | 12 Mg 24,31 Magnesio | | | | | | | | | | | 13 Al 26,98 Aluminio | 14 Si 28,09 Silicio | 15 P 30,97 Fósforo | 16 S 32,07 Azufre | 17 Cl 34,45 Cloro | 18 Ar 39,95 Argón | |
| 18 | 4s3d4p | 19 K 39,10 Potasio | 20 Ca 40,08 Calcio | 21 Sc 44,96 Escandio | 22 Ti 47,90 Titanio | 23 V 50,94 Vanadio | 24 Cr 52,00 Cromo | 25 Mn 54,94 Manganeso | 26 Fe 55,85 Hierro | 27 Co 58,93 Cobalto | 28 Ni 58,70 Níquel | 29 Cu 63,55 Cobre | 30 Zn 65,38 Zinc | 31 Ga 69,72 Gallio | 32 Ge 72,59 Germanio | 33 As 74,92 Arsénico | 34 Se 78,96 Selenio | 35 Br 79,90 Bromo | 36 Kr 83,80 Criptón | |
| 18 | 5s4d5p | 37 Rb 85,47 Rubidio | 38 Sr 87,62 Estroncio | 39 Y 88,91 Itrio | 40 Zr 91,22 Zirconio | 41 Nb 92,91 Niobio | 42 Mo 95,94 Molibdeno | 43 Tc (97) Tecnecio | 44 Ru 101,07 Rutenio | 45 Rh 102,91 Rodio | 46 Pd 106,4 Paladio | 47 Ag 107,87 Plata | 48 Cd 112,40 Cadmio | 49 In 114,82 Indio | 50 Sn 118,69 Estaño | 51 Sb 121,75 Antimonio | 52 Te 127,60 Teluro | 53 I 126,90 Yodo | 54 Xe 131,30 Xenón | |
| 32 | 6s4f5d6p | 55 Cs 132,91 Cesio | 56 Ba 137,33 Bario | 57 La 138,91 Lantano | 72 Hf 178,49 Hafnio | 73 Ta 180,95 Tántalo | 74 W 183,85 Volframio | 75 Re 186,21 Renio | 76 Os 190,2 Osmio | 77 Ir 192,22 Iridio | 78 Pt 195,09 Platino | 79 Au 196,97 Oro | 80 Hg 200,59 Mercurio | 81 Tl 204,37 Talio | 82 Pb 207,19 Plomo | 83 Bi 208,98 Bismuto | 84 Po [209] Polonio | 85 At [210] Astatina | 86 Rn [222] Radón | |
| 32 | 7s5f6d7p | 7 Fr [223] Francio | 8 Ra [226] Rádium | 89 Ac [227] Actinio | 104 Rf [261] Rutherfordio | 105 Db [262] Dubnio | 106 Sg [263] Seaborgio | 107 Bh [264] Háberio | 108 Hs [265] Hassio | 109 Mt [268] Meitnerio | 110 Uun [269] Ununnilio | 111 Uuu [272] Unununio | 112 Uub [277] Ununbium | | | | | | | |

Número atómico → 1
 Masa atómica* → 1,008
 Nombre → Hidrógeno

* Un número entre paréntesis indica el número de masa atómica del isótopo conocido de vida media más larga.

Negro - sólido
 Azul - líquido
 Rojo - gas
 Violeta - artificial

Metales
 Semimetales
 No metales
 Gases nobles

← Metales ↔ No metales

| Configuración electrónica | f ¹ | f ² | f ³ | f ⁴ | f ⁵ | f ⁶ | f ⁷ | f ⁸ | f ⁹ | f ¹⁰ | f ¹¹ | f ¹² | f ¹³ | f ¹⁴ |
|---------------------------|--------------------------|--------------------------------|-----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|-----------------------------|---------------------------|-------------------------------|----------------------------|------------------------------|
| Lantni dos | 58 Ce 140,12 Cerio | 59 Pr 140,91 Praseodimio | 60 Nd 144,24 Neodimio | 61 Pm [145] Promecio | 62 Sm 150,35 Samario | 63 Eu 151,96 Europio | 64 Gd 157,25 Gadolinio | 65 Tb 158,93 Terbio | 66 Dy 162,50 Disprosio | 67 Ho 164,93 Holmio | 68 Er 167,26 Erbio | 69 Tm 168,93 Tulio | 70 Yb 173,04 Iterbio | 71 Lu 174,97 Lutecio |
| Actnidos 7 | 90 Th 232,04 Torio | 91 Pa [231] Protactinio | 92 U 238,03 Uranio | 93 Np [237] Neptunio | 94 Pu [244] Plutonio | 95 Am [243] Americio | 96 Cm [247] Curio | 97 Bk [247] Berquellio | 98 Cf [251] Californio | 99 Es [254] Einstenio | 100 Fm [257] Fermio | 101 Md [258] Mendelevio | 102 No [255] Nobelio | 103 Lr [260] Laurencio |



Tabla de Elementos Químicos

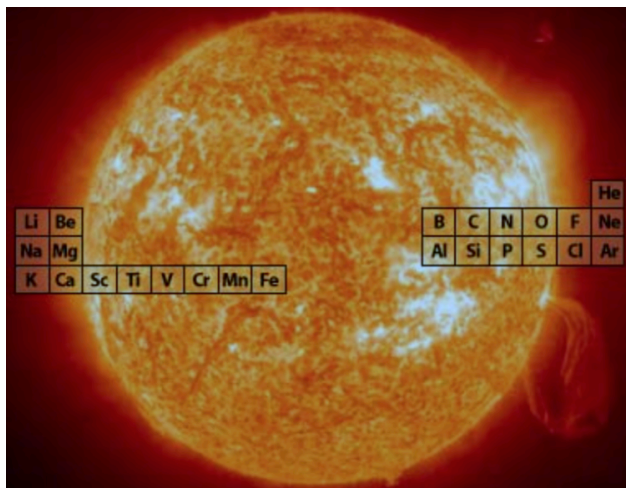
| # | sim. | nombre | periodo, bloque | grupo | estado a 20°C 1atm | peso atómico | estados de oxidación | conf. electrónica |
|----|------|-----------|--------------------|-------|-----------------------|-----------------|-------------------------|-------------------|
| 1 | H | Hidrógeno | 1, s | 1 | gas | 1.00794 | 1 | 1s1 |
| 2 | He | Helio | 1, s | 18 | gas | 4.002602 | | 1s2 |
| 3 | Li | Litio | 2, s | 1 | solido | 6.941 | 1 | 1s2 2s1 |
| 4 | Be | Berilio | 2, s | 18 | solido | 9.012182 | 2 | 1s2 2s2 |
| 5 | B | Boro | 2, p | 13 | solido | 10.811 | 3 | 1s2 2s2 p1 |
| 6 | C | Carbono | 2, p | 14 | solido | 12.0107 | ± 4,2 | 1s2 2s2 p2 |
| 7 | N | Nitrogeno | 2, p | 15 | gas | 14.0067 | ± 3,5,4,2 | 1s2 2s2 p3 |
| 8 | O | Oxígeno | 2, p | 16 | gas | 15.9994 | -2 | 1s2 2s2 p4 |
| 9 | F | Fluor | 2, p | 17 | gas | 18.9984032 | -1 | 1s2 2s2 p5 |
| 10 | Ne | Neón | 2, p | 18 | gas | 20.1797 | | 1s2 2s2 p6 |
| 11 | Na | Sodio | 3, s | 1 | solido | 22.98977 | 1 | [Ne] 3s1 |
| 12 | Mg | Magnesio | 3, s | 2 | solido | 24.305 | 2 | [Ne] 3s2 |
| 13 | Al | Aluminio | 3, p | 13 | solido | 26.981538 | 3 | [Ne] 3s2 p1 |
| 14 | Si | Silicio | 3, p | 14 | solido | 28.0855 | 4 | [Ne] 3s2 p2 |
| 15 | P | Fósforo | 3, p | 15 | solido | 30.973761 | ± 3,5,4 | [Ne] 3s2 p3 |
| 16 | S | Azufre | 3, p | 16 | solido | 32.065 | ± 2,4,6 | [Ne] 3s2 p4 |
| 17 | Cl | Cloro | 3, p | 17 | gas | 35.453 | ± 1,3,5,7 | [Ne] 3s2 p5 |
| 18 | Ar | Argón | 3, p | 18 | gas | 39.948 | | [Ne] 3s2 p6 |
| 19 | K | Potasio | 4, s | 1 | solido | 39.0983 | 1 | [Ar] 4s1 |
| 20 | Ca | Calcio | 4, s | 2 | solido | 40.078 | 2 | [Ar] 4s2 |

1.3 Perspectiva general de la tabla periódica

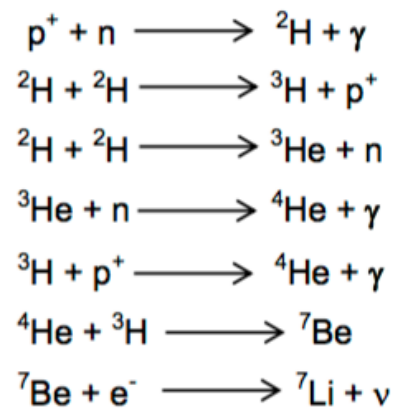
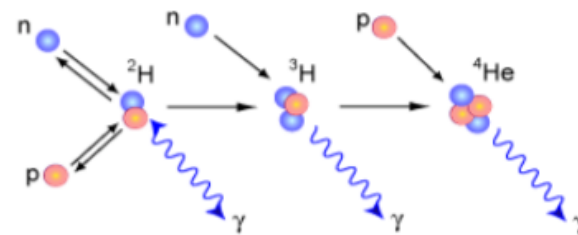
- 1.3.1 Origen estelar de los elementos
- 1.3.2 Clasificación de los elementos químicos
- 1.3.3 Propiedades periódicas de los elementos químicos
- 1.3.4 Numero atómico y masa atómica



Origen estelar de los elementos químicos



En la gran explosión que originó el Universo conocido, Big-Bang, se formaron el H y el He y poco más.





Clasificación de los elementos químicos

Tabla periódica de los elementos

| Grupo | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
|-------------------|----------|----------|-----------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| | I | II | | | | | | | | | | | III | IV | V | VI | VII | VIII |
| Periodo | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 H | | | | | | | | | | | | | | | | | 2 He |
| 2 | 3 Li | 4 Be | | | | | | | | | | | 5 B | 6 C | 7 N | 8 O | 9 F | 10 Ne |
| 3 | 11 Na | 12 Mg | | | | | | | | | | | 13 Al | 14 Si | 15 P | 16 S | 17 Cl | 18 Ar |
| 4 | 19 K | 20 Ca | 21 Sc | 22 Ti | 23 V | 24 Cr | 25 Mn | 26 Fe | 27 Co | 28 Ni | 29 Cu | 30 Zn | 31 Ga | 32 Ge | 33 As | 34 Se | 35 Br | 36 Kr |
| 5 | 37 Rb | 38 Sr | 39 Y | 40 Zr | 41 Nb | 42 Mo | 43 Tc | 44 Ru | 45 Rh | 46 Pd | 47 Ag | 48 Cd | 49 In | 50 Sn | 51 Sb | 52 Te | 53 I | 54 Xe |
| 6 | 55 Cs | 56 Ba | * 71 Lu | 72 Hf | 73 Ta | 74 W | 75 Re | 76 Os | 77 Ir | 78 Pt | 79 Au | 80 Hg | 81 Tl | 82 Pb | 83 Bi | 84 Po | 85 At | 86 Rn |
| 7 | 87 Fr | 88 Ra | ** 103 Lr | 104 Rf | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs | 109 Mt | 110 Ds | 111 Rg | 112 Uub | 113 Uut | 114 Uuq | 115 Uup | 116 Uuh | 117 Uus | 118 Uuo |
| Lantánidos | | * | 57 La | 58 Ce | 59 Pr | 60 Nd | 61 Pm | 62 Sm | 63 Eu | 64 Gd | 65 Tb | 66 Dy | 67 Ho | 68 Er | 69 Tm | 70 Yb | | |
| Actínidos | | ** | 89 Ac | 90 Th | 91 Pa | 92 U | 93 Np | 94 Pu | 95 Am | 96 Cm | 97 Bk | 98 Cf | 99 Es | 100 Fm | 101 Md | 102 No | | |

| | | | | |
|----------------------|-----------------|------------|-----------|-----------------------|
| Alcalinos | Alcalinotérreos | Lantánidos | Actínidos | Metales de transición |
| Metales del bloque p | Metaloides | No metales | Halógenos | Gases nobles |



Clasificación de los elementos químicos

| Bloque | Grupo | Nombres | Configuración electrónica |
|--------|----------|--|-------------------------------|
| s | 1 | Alcalinos | $n s^1$ |
| | 2 | Alcalino-térreos | $n s^2$ |
| p | 13 (III) | Térreos | $n s^2 p^1$ |
| | 14 (IV) | Carbonoideos | $n s^2 p^2$ |
| | 15 (V) | Nitrogenoideos | $n s^2 p^3$ |
| | 16 (VI) | Anfígenos (o calcógenos) | $n s^2 p^4$ |
| | 17 (VII) | Halógenos | $n s^2 p^5$ |
| | 18 | Gases nobles | $n s^2 p^6$ |
| d | 3-12 | Elementos de transición | $n s^2(n-1)d^{1-10}$ |
| f | | Elementos de transición interna (lantánidos y actínidos) | $n s^2 (n-1)d^1(n-2)f^{1-14}$ |



1.3.3 Periodicidad

Son aquellas propiedades que se repiten periódicamente tanto en los grupos como en los períodos y estas propiedades periódicas son:

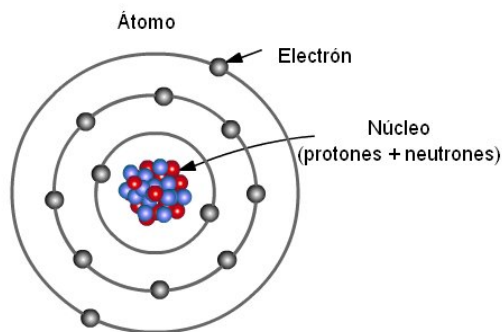
- Radio iónico y atómico
- Carácter metálico
- Energía de ionización
- Afinidad electrónica
- electronegatividad



Carga Nuclear Efectiva (Z_{efect})

- Es la fuerza con la que el núcleo positivo atrae los e^- de su último nivel de energía.
- Es la carga real que mantiene unido a cada e^- al núcleo.
- Depende de dos factores contrapuestos:
 - **Carga nuclear (Z).** A mayor " Z " mayor " Z_{ef} ", pues habrá mayor atracción por parte del núcleo al haber más protones.
 - **Apantallamiento o efecto pantalla (σ)** de e^- interiores o repulsión electrónica (es como si estos e^- interiores "tapasen", "cubriesen" al núcleo parcialmente). A mayor apantallamiento menor " Z_{ef} ".

Así consideraremos que:



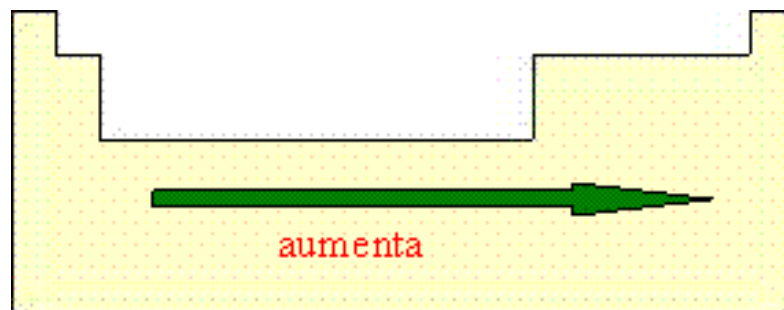
$$Z_{\text{efect}} = Z - \sigma$$

Los electrones interiores (dentro del círculo) "tapan" -apantallan- el efecto -la carga- del núcleo



Variación de Z_{efec} en la tabla periódica

- **En un mismo grupo la Z_{ef} en los e- de valencia varía poco.** (Al bajar en el grupo aumenta Z pero aunque hay una mayor carga nuclear también hay un mayor apantallamiento).
- **En un periodo la Z_{ef} aumenta al avanzar hacia la derecha.** (porque Z aumenta pero en cambio el apantallamiento casi no varía).



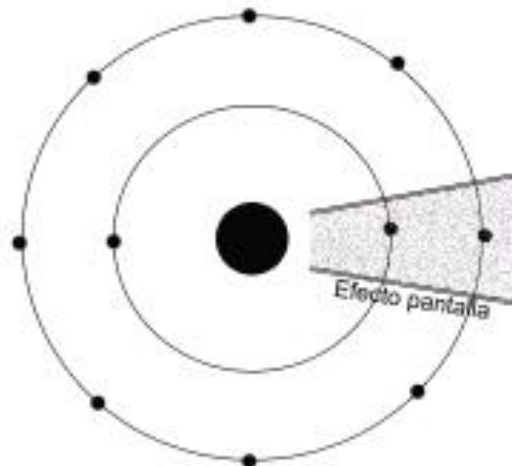
Carga nuclear efectiva



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Efecto Pantalla.

Es el efecto de interferencia que originan los electrones interiores entre la fuerza de atracción del núcleo y los electrones del último nivel de energía.



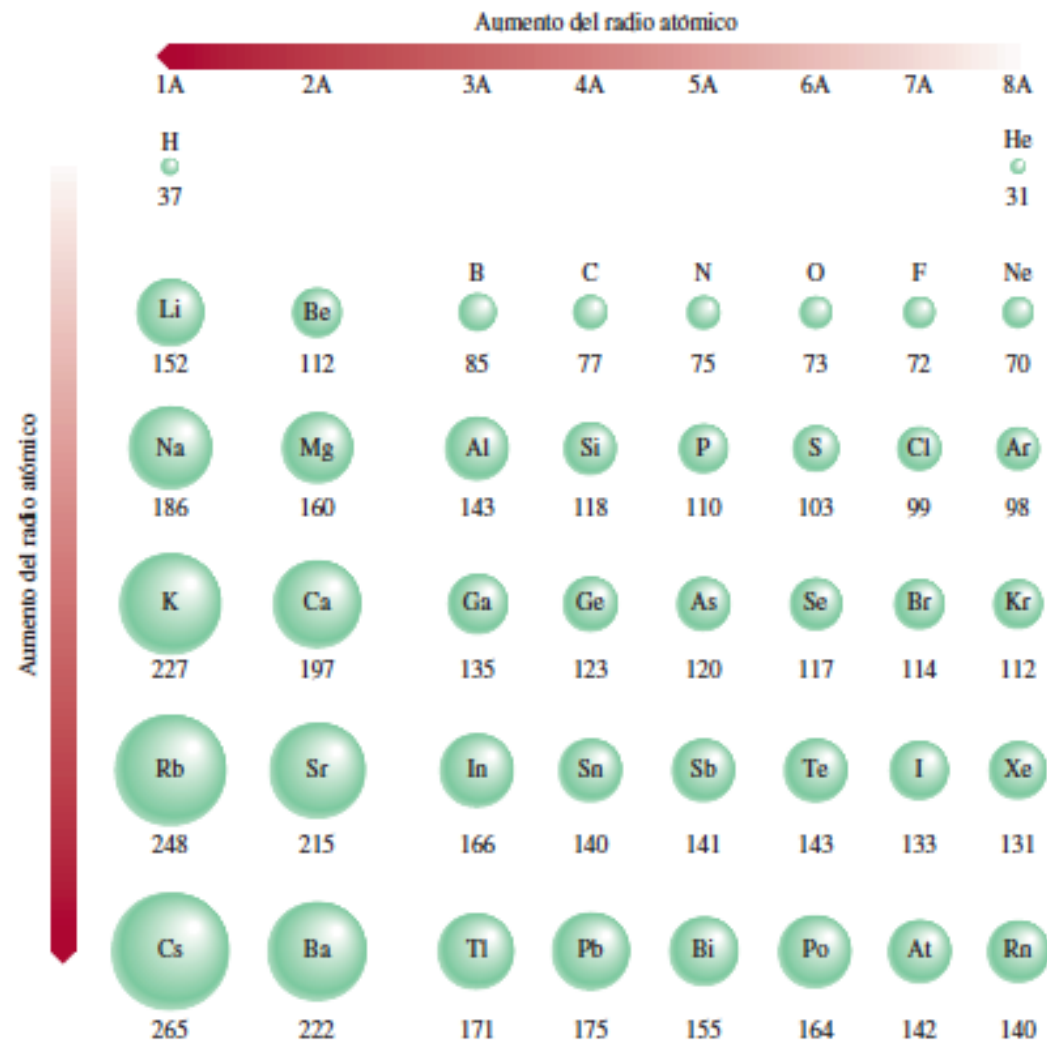
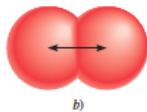
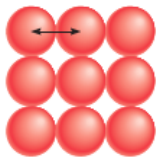


Radio Atómico

(en picómetros)

a) Es la mitad de la distancia entre los centros de dos átomos adyacentes o

b) la mitad de la distancia entre los centros de los átomos en la molécula.

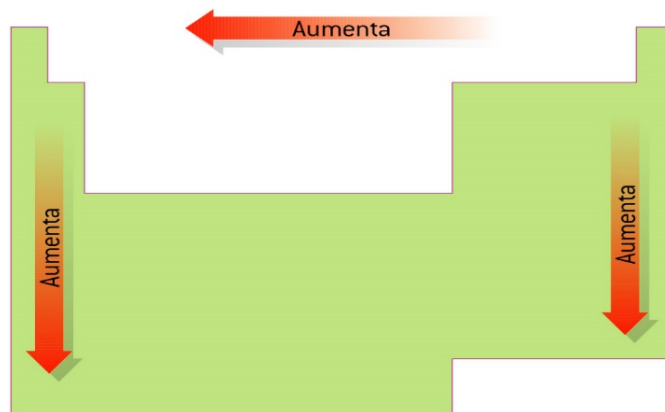




El tamaño atómico

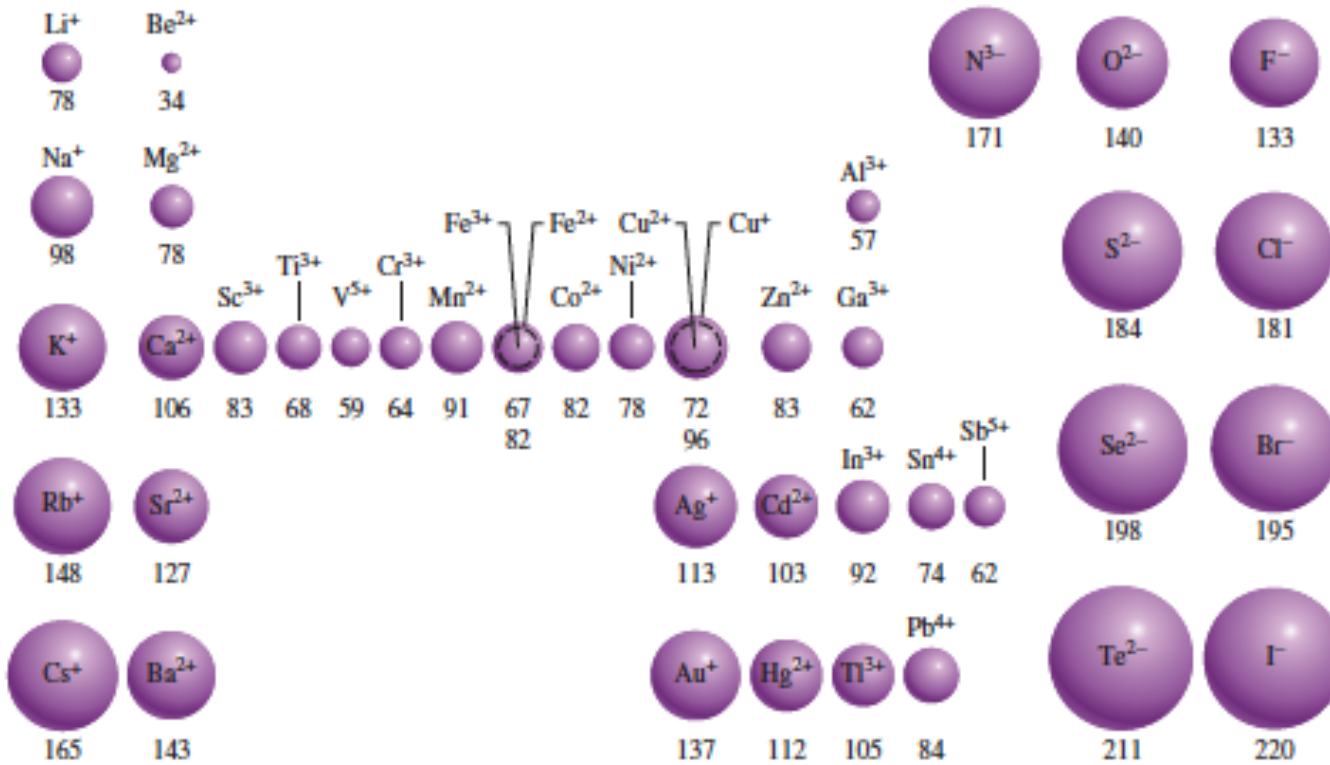
- El tamaño atómico **disminuye al avanzar en un período**
- Al aumentar el número de electrones en la misma capa (capa de valencia) el apantallamiento casi no cambia, en cambio al aumentar la carga nuclear aumenta la atracción (Z_{ef}) y los electrones se acercan más al núcleo

VARIACIÓN DEL TAMAÑO DE LOS ÁTOMOS EN EL SP





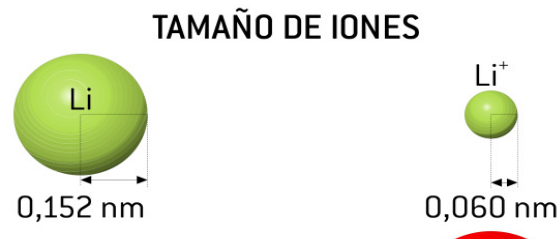
Radio iónico (en picómetros)



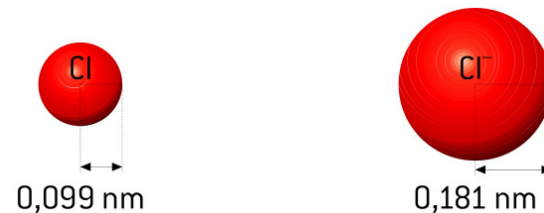


El tamaño iónico

- **En iones positivos:** el tamaño del catión es más pequeño que el del átomo neutro (al perder electrones de la capa más externa, los que quedan son atraídos por el núcleo con más fuerza por la carga positiva del núcleo)



- **En iones negativos:** el tamaño del anión es más grande que el del átomo neutro. Estos electrones aumentan las fuerzas de repulsión existentes entre ellos

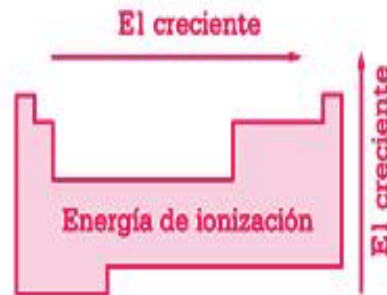
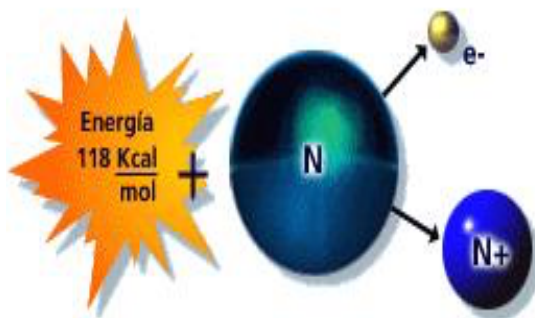




Energía de ionización o potencial de ionización

Es la energía que requiere un átomo gaseoso en estado basal, para perder totalmente un electrón.

Energía de Ionización
 Energía o trabajo necesario para sacar el electrón más débilmente unido del átomo aislado



| | |
|-----|-----|
| Li | Be |
| 520 | 900 |
| Na | Mg |
| 496 | 738 |
| K | Ca |
| 419 | 590 |
| Rb | Sr |
| 403 | 550 |
| Cs | Ba |
| 376 | 503 |

| | | | | | |
|-----|------|------|------|------|------|
| | | | | H | He |
| | | | | 1312 | 2372 |
| B | C | N | O | F | Ne |
| 801 | 1086 | 1402 | 1314 | 1681 | 2081 |
| Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 578 | 786 | 1012 | 1000 | 1251 | 1520 |
| Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 579 | 762 | 944 | 941 | 1140 | 1351 |
| In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 558 | 709 | 832 | 869 | 1009 | 1170 |
| Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 589 | 716 | 703 | 812 | | 1037 |



Energía de ionización o potencial de ionización



| | |
|-----------|-----------|
| Li | Be |
| 520 | 900 |
| Na | Mg |
| 496 | 738 |
| K | Ca |
| 419 | 590 |
| Rb | Sr |
| 403 | 550 |
| Cs | Ba |
| 376 | 503 |

| | | | | | |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| | | | | H | He |
| | | | | 1312 | 2372 |
| B | C | N | O | F | Ne |
| 801 | 1086 | 1402 | 1314 | 1681 | 2081 |
| Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 578 | 786 | 1012 | 1000 | 1251 | 1520 |
| Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 579 | 762 | 944 | 941 | 1140 | 1351 |
| In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 558 | 709 | 832 | 869 | 1009 | 1170 |
| Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 589 | 716 | 703 | 812 | | 1037 |



Energía de ionización o potencial de ionización

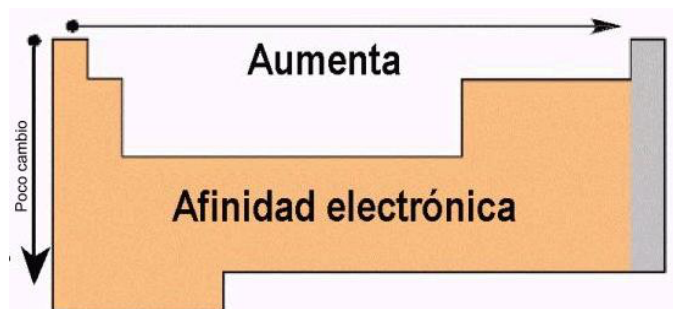
| Z | Elemento | Primera | Segunda | Tercera | Cuarta | Quinta | Sexta |
|----|----------|---------|---------|---------|--------|--------|--------|
| 1 | H | 1 312 | | | | | |
| 2 | He | 2 373 | 5 251 | | | | |
| 3 | Li | 520 | 7 300 | 11 815 | | | |
| 4 | Be | 899 | 1 757 | 14 850 | 21 005 | | |
| 5 | B | 801 | 2 430 | 3 660 | 25 000 | 32 820 | |
| 6 | C | 1 086 | 2 350 | 4 620 | 6 220 | 38 000 | 47 261 |
| 7 | N | 1 400 | 2 860 | 4 580 | 7 500 | 9 400 | 53 000 |
| 8 | O | 1 314 | 3 390 | 5 300 | 7 470 | 11 000 | 13 000 |
| 9 | F | 1 680 | 3 370 | 6 050 | 8 400 | 11 000 | 15 200 |
| 10 | Ne | 2 080 | 3 950 | 6 120 | 9 370 | 12 200 | 15 000 |
| 11 | Na | 495.9 | 4 560 | 6 900 | 9 540 | 13 400 | 16 600 |
| 12 | Mg | 738.1 | 1 450 | 7 730 | 10 500 | 13 600 | 18 000 |
| 13 | Al | 577.9 | 1 820 | 2 750 | 11 600 | 14 800 | 18 400 |
| 14 | Si | 786.3 | 1 580 | 3 230 | 4 360 | 16 000 | 20 000 |
| 15 | P | 1 012 | 1 904 | 2 910 | 4 960 | 6 240 | 21 000 |
| 16 | S | 999.5 | 2 250 | 3 360 | 4 660 | 6 990 | 8 500 |
| 17 | Cl | 1 251 | 2 297 | 3 820 | 5 160 | 6 540 | 9 300 |
| 18 | Ar | 1 521 | 2 666 | 3 900 | 5 770 | 7 240 | 8 800 |
| 19 | K | 418.7 | 3 052 | 4 410 | 5 900 | 8 000 | 9 600 |
| 20 | Ca | 589.5 | 1 145 | 4 900 | 6 500 | 8 100 | 11 000 |

Energías de ionización (kJ/mol) de los primeros 20 elementos



Afinidad Electrónica

Es la cantidad de energía que se desprende o absorbe por la adición de un electrón al tomo neutro gaseoso de un elemento, para producir un ion negativo.



| | |
|-----------|-----------|
| Li | Be |
| 60 | ≤ 0 |
| Na | Mg |
| 53 | ≤ 0 |
| K | Ca |
| 48 | 2.4 |
| Rb | Sr |
| 47 | 4.7 |
| Cs | Ba |
| 45 | 14 |

| | | | | | |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| | | | | H | He |
| | | | | 73 | < 0 |
| B | C | N | O | F | Ne |
| 27 | 122 | 0 | 141 | 328 | < 0 |
| Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 44 | 134 | 72 | 200 | 349 | < 0 |
| Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 29 | 118 | 77 | 195 | 325 | < 0 |
| In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 29 | 121 | 101 | 190 | 295 | < 0 |
| Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 30 | 110 | 110 | | | < 0 |



Afinidades electrónicas (kJ/mol) de algunos elementos representativos y de los gases nobles*

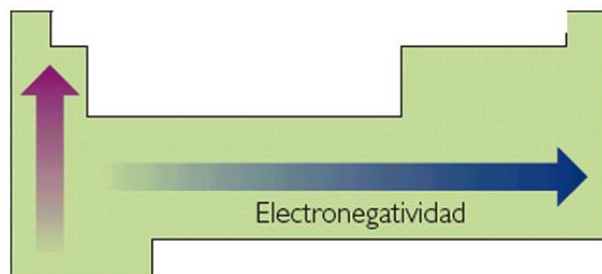
| 1A | 2A | 3A | 4A | 5A | 6A | 7A | 8A |
|----|-----|----|-----|-----|-----|-----|-----|
| H | | | | | | | He |
| 73 | | | | | | | < 0 |
| Li | Be | B | C | N | O | F | Ne |
| 60 | ≤ 0 | 27 | 122 | 0 | 141 | 328 | < 0 |
| Na | Mg | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 53 | ≤ 0 | 44 | 134 | 72 | 200 | 349 | < 0 |
| K | Ca | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 48 | 2.4 | 29 | 118 | 77 | 195 | 325 | < 0 |
| Rb | Sr | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| 47 | 4.7 | 29 | 121 | 101 | 190 | 295 | < 0 |
| Cs | Ba | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| 45 | 14 | 30 | 110 | 110 | ? | ? | < 0 |

* Las afinidades electrónicas en los gases nobles, del Be y del Mg no se han determinado experimentalmente, pero se cree que son cercanas a cero o negativas.



Electronegatividad

Es una medida relativa del poder de atracción de electrones que tiene un átomo cuando forma parte de un enlace químico. Su unidad es el pauling.



| | |
|-----|-----|
| Li | Be |
| 1.0 | 1.6 |
| Na | Mg |
| 0.9 | 1.3 |
| K | Ca |
| 0.8 | 1.0 |
| Rb | Sr |
| 0.8 | 0.9 |
| Cs | Ba |
| 0.8 | 0.9 |

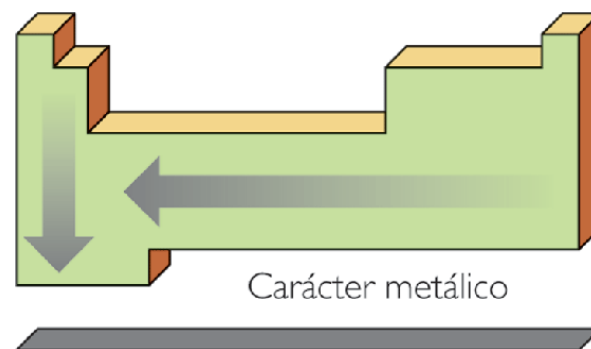
| | | | | | |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| | | | | H | He |
| | | | | 2.2 | --- |
| B | C | N | O | F | Ne |
| 2.0 | 2.5 | 3.0 | 3.5 | 4.0 | --- |
| Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| 1.6 | 1.9 | 2.2 | 2.6 | 3.2 | --- |
| Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| 1.4 | 2.0 | 2.2 | 2.5 | 3.0 | 3.3 |
| | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| | 1.9 | 2.0 | 2.1 | 2.7 | 3.0 |

- Al descender en un mismo grupo, los electrones están más alejados del núcleo por lo que las fuerzas de atracción son menores.
- Al desplazarnos a la derecha en un mismo periodo, los electrones están más cerca del núcleo y más atraídos por él



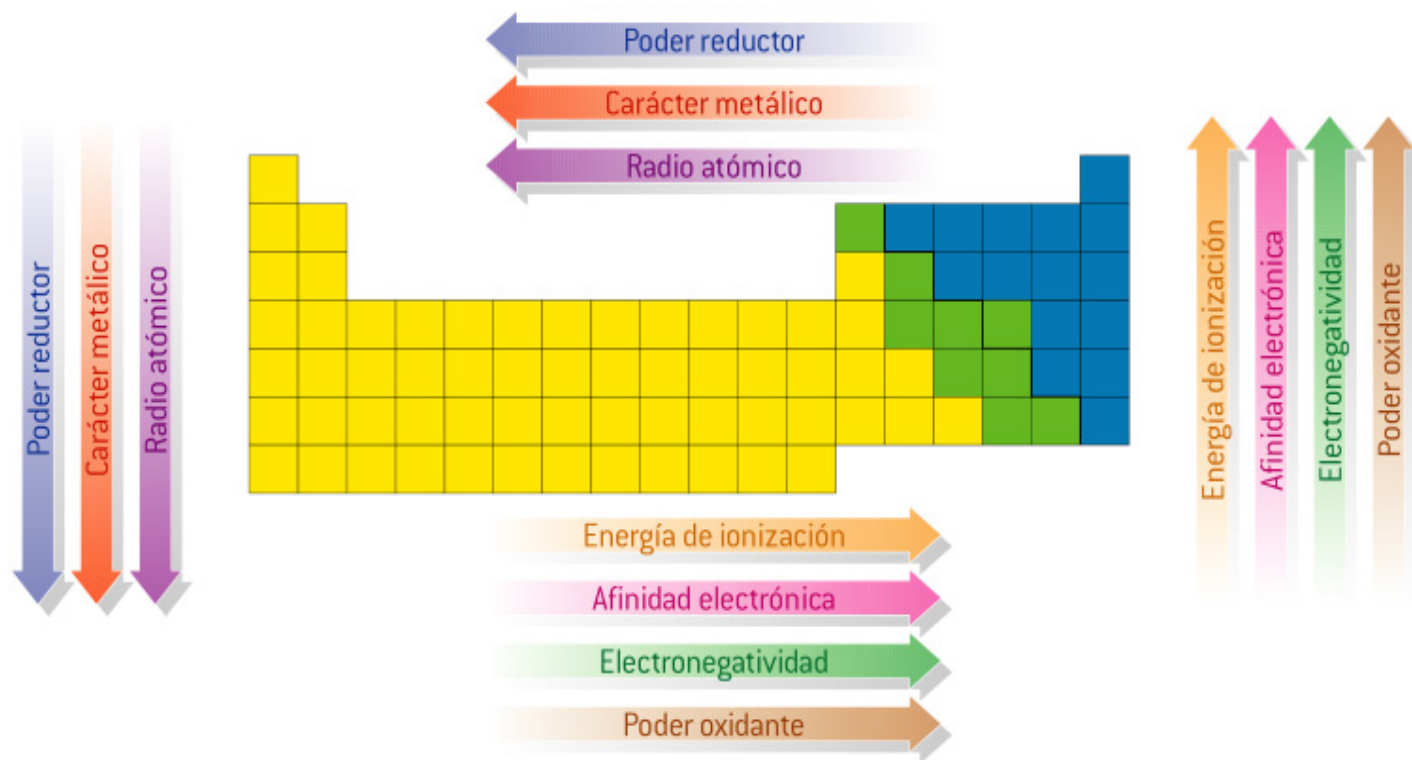
Carácter metálico

- Se considera metal desde un punto de vista electrónico cuando cede fácilmente electrones y no tiene tendencia a ganarlos.
- Un no-metal es todo elemento que difícilmente cede electrones y sí tiene tendencia a ganarlos.
- Los gases nobles no tienen ni carácter metálico ni no metálico.
- La línea quebrada que empieza en el boro (B) y termina en el astato (At) marca la separación entre los metales.
- Los semimetales son los elementos que no tienen muy definido su carácter metálico o no metálico.





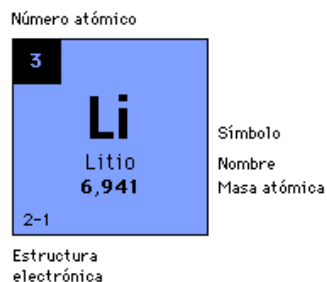
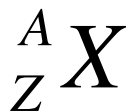
Variación de las propiedades periódicas





Número atómico y masa atómica

- Átomos diferentes tienen **distinto número de protones y de neutrones** en sus núcleos
- Para determinar cuántos protones y neutrones hay en un átomo, se debe conocer el **número atómico (Z)** y el **número másico (A)**.



Número de masa = número de protones + número de neutrones
número de atómico + número de neutrones

1.4 Teoría de enlace y arreglo molecular

1.4.1 Enlaces químicos primarios

1.4.2 Teoría de Lewis

1.4.3 La regla del octeto y la estructura de Lewis

1.4.4 Teoría de Enlace Valencia

1.4.5 Teoría de hibridación de Orbitales Moleculares

1.4.7 Teoría de la Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (TRPECV)



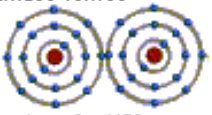
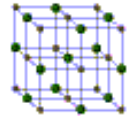



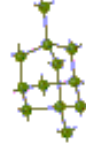
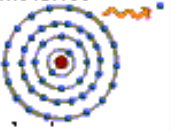
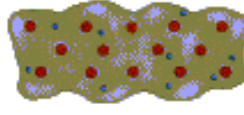
TIPOS DE ENLACE

- a) Enlaces primarios (materiales cerámicos y metálicos)
 - Enlace covalente
 - Enlace metálico
 - Enlace iónico

- b) Enlaces secundarios (polímeros)
 - Enlaces de Van der Waals
 - Enlaces de hidrogeno
 - Dipolo-dipolo



Enlaces químicos primarios: iónico, covalente y metálico

| TIPO DE ENLACE | TIPO DE ESTRUCTURA | EJEMPLO DE ESTRUCTURA | PROPIEDADES CARACTERÍSTICAS |
|--|--------------------|---|--|
| <p>Enlace iónico</p>  <p>▲ ejemplo: KCl</p> | Red iónica |  <p>▲ Cloruro de potasio, KCl</p> | <p>Sólidos cristalinos Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados Solubles en agua Conducen la electricidad fundidos o en disolución No conducen la electricidad en estado sólido</p> |
| <p>Enlace covalente</p>  <p>▲ ejemplo: CH₄</p> | Moléculas simples |  <p>▲ Metano, CH₄</p> | <p>Fundamentalmente líquidos y gases Puntos de fusión bajos Puntos de ebullición bajos Insolubles en agua No conducen la electricidad</p> |
|  <p>▲ ejemplo: C</p> | Moléculas gigantes |  <p>▲ Diamante, C</p> | <p>Sólidos Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados La solubilidad y conductividad varían de una sustancia a otra</p> |
| <p>Enlace metálico</p>  <p>Tabla de Microsoft</p> | Red metálica |  <p>▲ Plata, Ag</p> | <p>Sólidos cristalinos Dúctiles y maleables Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados Insolubles en agua</p> |



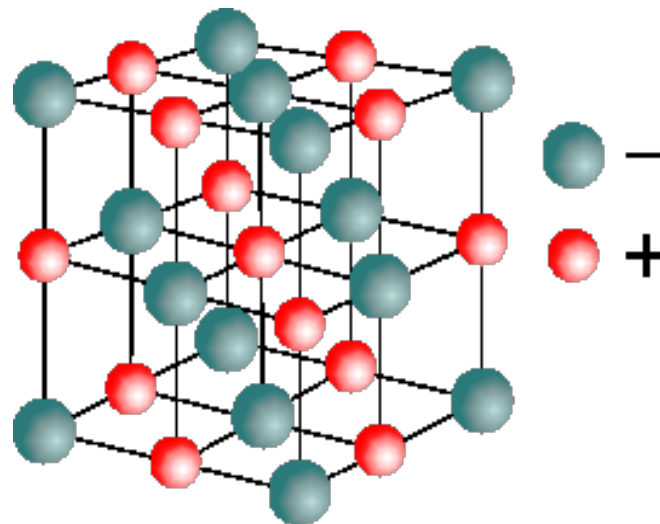
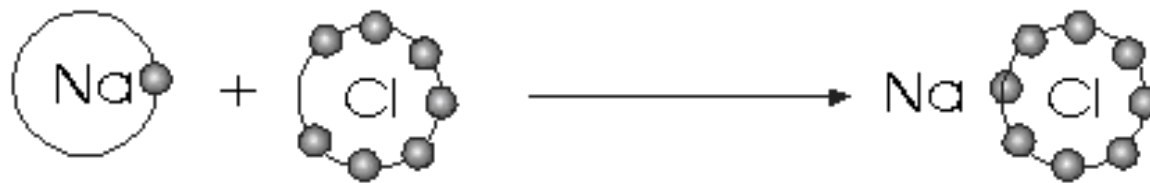
Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Las bases para explicar la formación de los enlaces iónico y covalente fueron expuestas en 1916 por Walter Kossel (1888-1956) y Gilbert Lewis (1875-1946), respectivamente.

Ambos autores atribuían la falta de reactividad mostrada por los átomos de los gases nobles a la estructura electrónica de la última capa llena que presentaban, lo que les confería gran estabilidad.



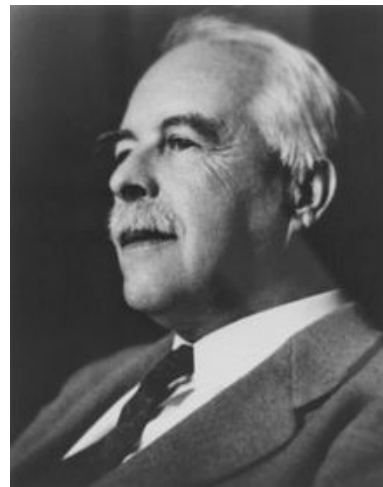
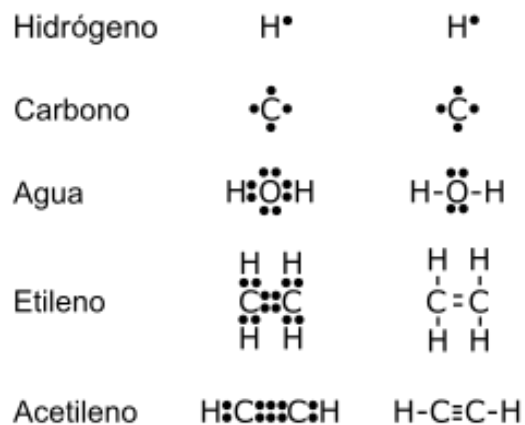
Enlace iónico





Teoría de Lewis

La **estructura de Lewis**, es una representación gráfica que muestra los pares de electrones de enlaces entre los átomos de una molécula y los pares de electrones solitarios que pueden existir.

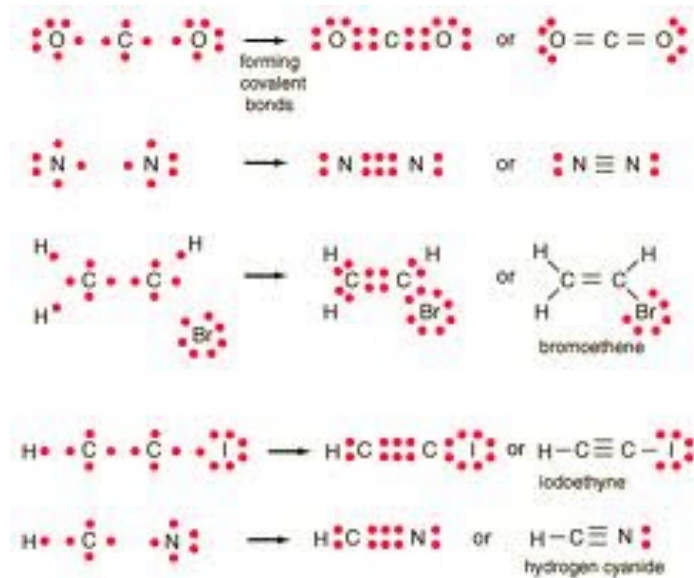
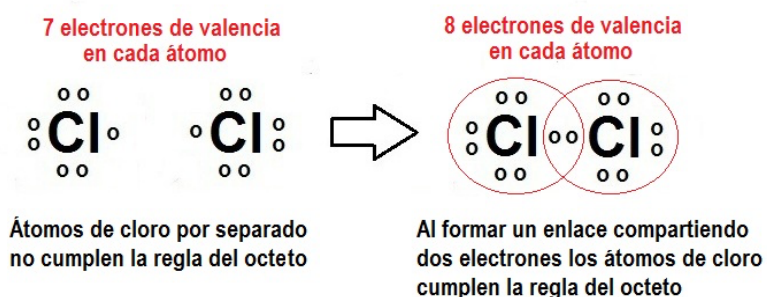


Gilbert N. Lewis
(1875-1946)



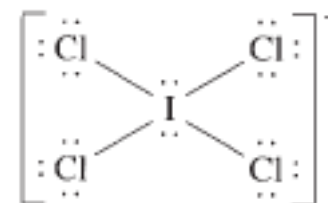
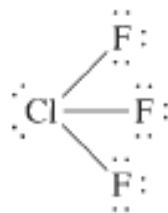
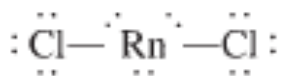
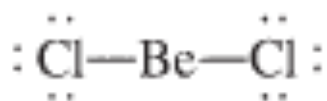
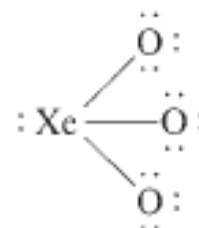
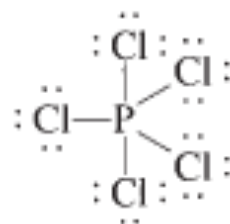
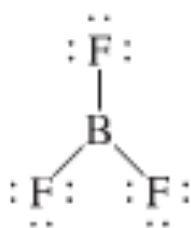
La regla del octeto y estructuras de Lewis

La regla del octeto, enunciada en 1916 por Gilbert Newton Lewis dice que la tendencia de los iones de los elementos del sistema periódico es completar sus últimos niveles de energía con una cantidad de 8 electrones, de tal forma que adquiere una configuración muy estable.



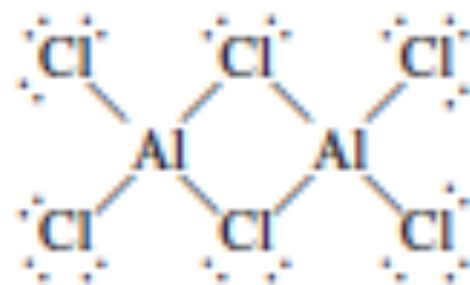
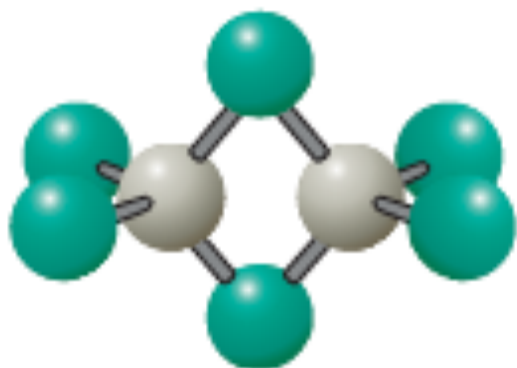
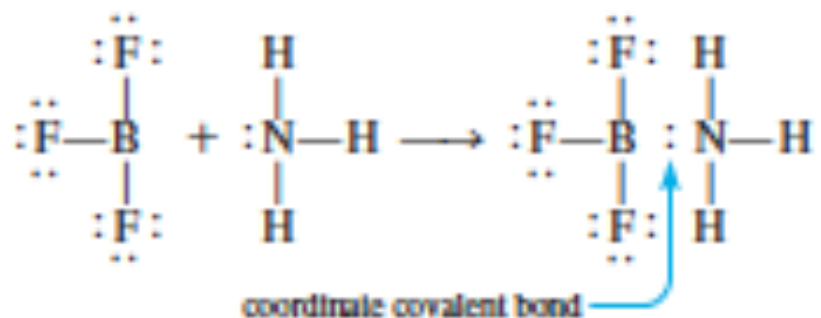


Excepciones de la regla del octeto





Excepciones de la regla del octeto





Explicación del enlace químico, desde la mecánica cuántica

Dentro de la mecánica cuántica hay dos modelos para explicar el enlace:

a) el modelo de enlace valencia de W. Heitler y Fritz W. London, posteriormente complementado por John C. Slater y Linus Pauling. El **modelo de enlace valencia** asume que los electrones en la molécula ocupan orbitales atómicos de los átomos individuales, y

b) el modelo de orbitales moleculares, de Fritz Hund y Robert S. Mulliken. En el **modelo de orbitales moleculares**, se considera que se forman orbitales moleculares a partir de los orbitales atómicos.



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Enlace valencia para otras moléculas

El modelo de enlace valencia también es capaz de explicar la geometría de las moléculas con más de dos átomos, con base en el concepto de “traslape de orbitales atómicos”.



Universidad Autónoma del Estado de México

Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

Orbitales híbridos.



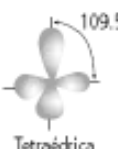
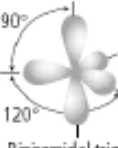


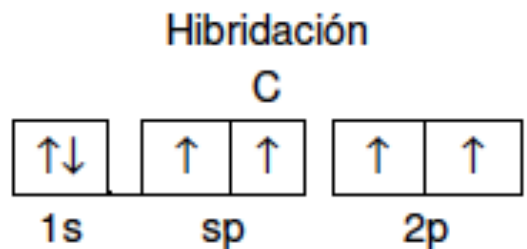
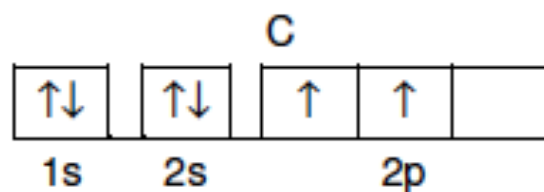
| Orbitales atómicos puros del átomo central | Hibridación del átomo central | Número de orbitales híbridos | Forma de los orbitales híbridos | Ejemplos |
|--|-------------------------------|------------------------------|---|------------------------------|
| s, p | sp | 2 |  180° Lineal | BeCl_2 |
| s, p, p | sp^2 | 3 |  120° Plana | BF_3 |
| s, p, p, p | sp^3 | 4 |  109.5° Tetraédrica | $\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$ |
| s, p, p, p, d | sp^3d | 5 |  90° 120° Bipiramidal trigonal | PCl_5 |
| s, p, p, p, d, d | sp^3d^2 | 6 |  90° 90° Octaédrica | SF_6 |
| s, p, p, d | sp^2d | 4 |  | |

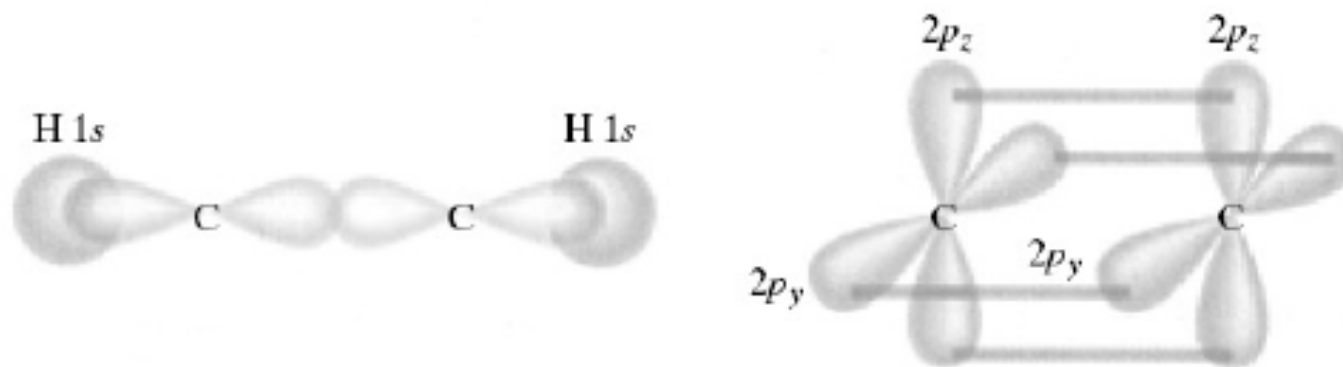


Diagrama de caja de orbitales moleculares del carbono



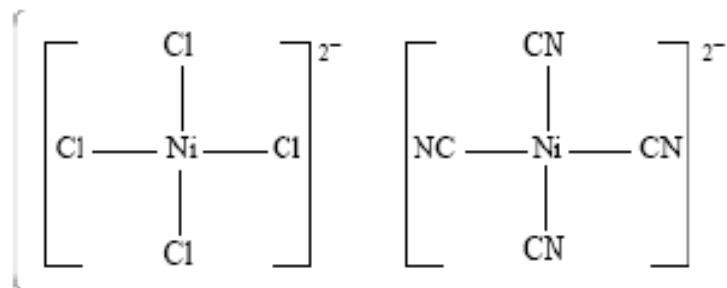


Traslape de orbitales





Enlace covalente coordinado por la vía del modelo de enlace-valencia. $K_2[NiCl_4]$ y el $K_2[Ni(CN)_4]$



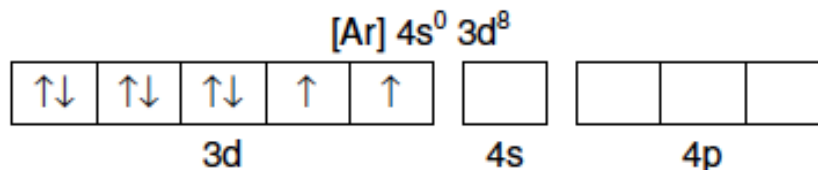
El $K_2[NiCl_4]$ es una sustancia paramagnética, de color verde y experimentalmente, mediante difracción de rayos X, se sabe que el anión tiene geometría tetraédrica.

El $K_2[Ni(CN)_4]$ es una sustancia diamagnética, de color amarillo en la cual los aniones tienen geometría cuadrada.

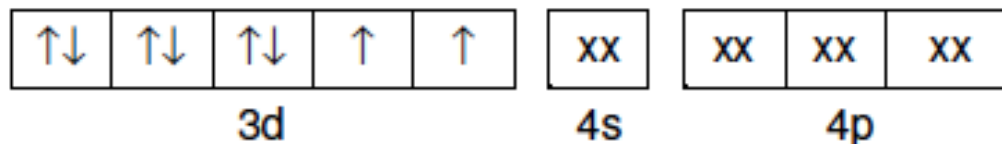
¿Cómo explicar estas diferencias?



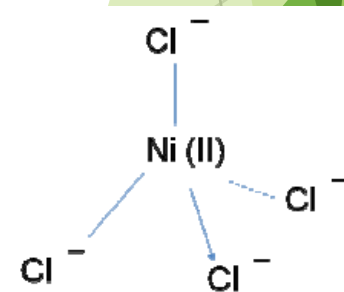
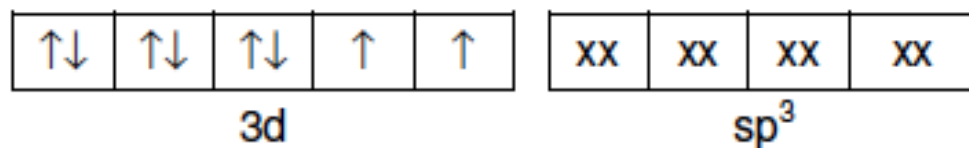
La configuración electrónica para el ion Ni^{2+} es $[\text{Ar}] 4s^0 3d^8$,



Representando a los electrones de los cloruros como “x”:



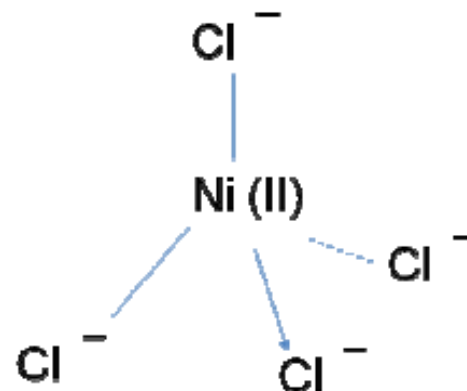
La hibridación que hay que postular dada la existencia de una geometría tetraédrica en este complejo es la sp^3 .





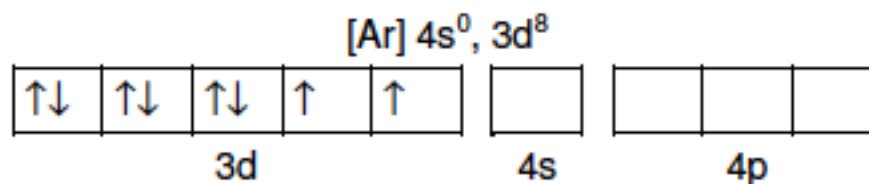
Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

La aplicación de la TEV permite explicar tanto la geometría de esta especie química, como su paramagnetismo, ya que se observa que en los orbitales d existen dos electrones desapareados.

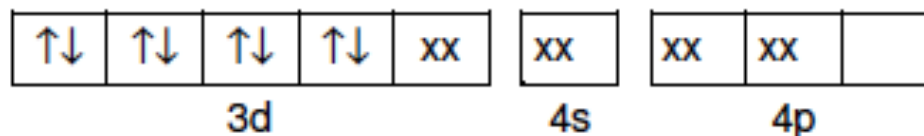




Para explicar las propiedades del $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$, en el Níquel(II) se tiene la configuración: $[\text{Ar}] 4s^0, 3d^8$



Este acomodo de los electrones del ion metálico no nos permite explicar el comportamiento diamagnético de esta sustancia. Si se promueve al ion Ni^{2+} a un estado en el que los ocho electrones “d” se encuentren apareados, obtenemos una configuración en la que hay un orbital “d” vacío, disponible para participar en el enlace con los ligantes.

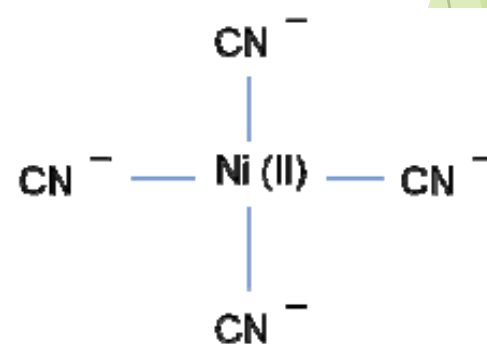


Para poder explicar la geometría cuadrada del ion $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$, será necesario construir orbitales híbridos que tengan esta geometría. Éstos son los orbitales s, p_x , p_y y $d_{x^2-y^2}$.



Los cuatro orbitales híbridos que se generan se llaman dsp^2 , pues están contruidos a partir de un orbital “d”, un orbital “s” y dos orbitales “p”, y cada uno está dirigido a uno de los vértices de un cuadrado.

Cada uno puede alojar un par de electrones provenientes del CN^- .





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES ELECTRÓNICOS EN LA CAPA DE VALENCIA (RPECV)



Teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)

La teoría de RPECV predice las formas de las moléculas e iones suponiendo que el par de electrones de valencia-shell están dispuestas sobre cada átomo de modo que par de electrones se mantienen tan alejados entre sí como sea posible, minimizando así de pares de electrones repulsiones.

Existen tres tipos de interacciones repulsivas entre los pares de electrones de una molécula cada una con un determinado valor de intensidad. Ordenadas de mayor a menor repulsión las interacciones posibles son:

- La repulsión par no enlazante - par no enlazante (PNE-PNE).
- La repulsión par no enlazante - par enlazante (PNE-PE).
- La repulsión par enlazante - par enlazante (PE-PE).



Geometría de moléculas

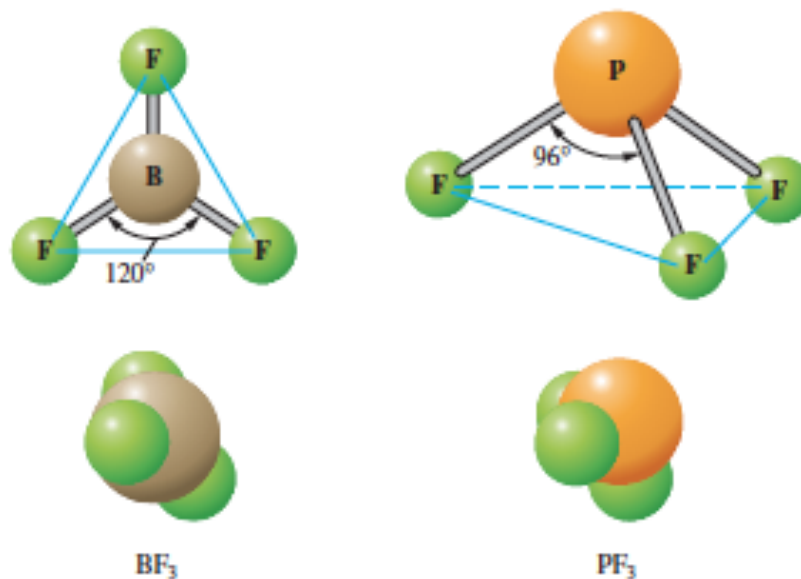


FIGURE 10.1 ▲

Molecular models of BF_3 and PF_3

Although both molecules have the general formula AX_3 , boron trifluoride is planar (flat), whereas phosphorus trifluoride is pyramidal (pyramid shaped).

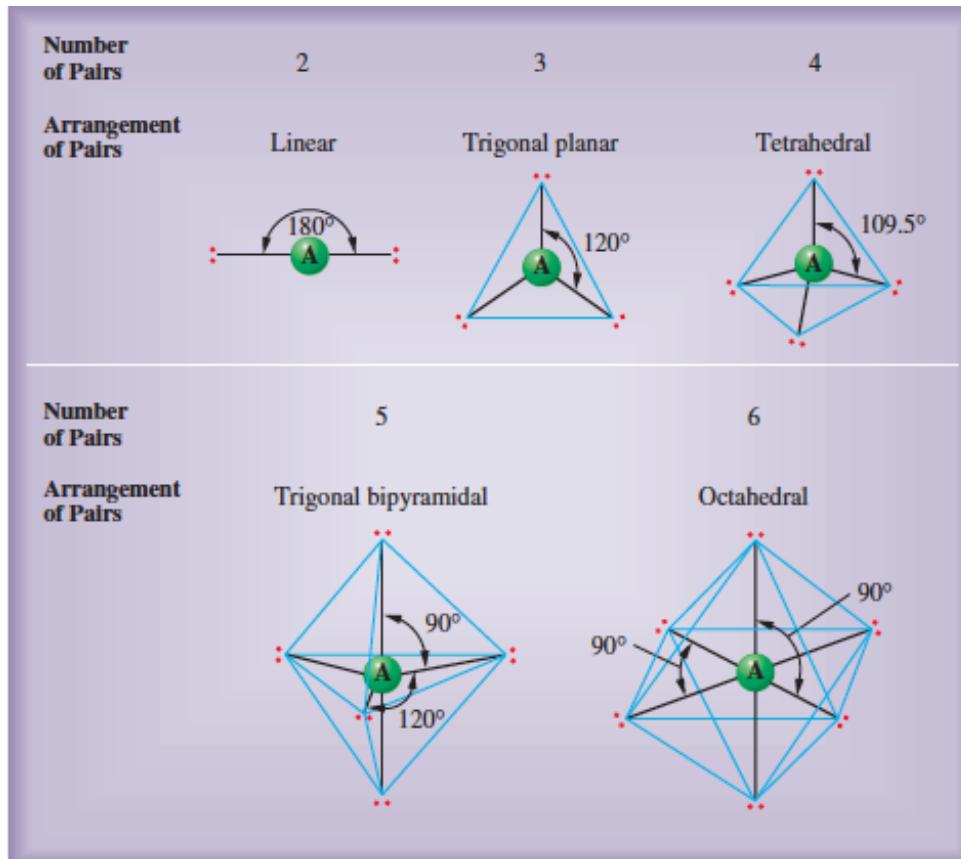


Las repulsiones ejercidas por los pares de enlace disminuyen al aumentar la electronegatividad de los átomos periféricos.

La repulsión entre pares de electrones no enlazantes de átomos con capas llenas es mayor que la repulsión entre pares de electrones pertenecientes a átomos con capas de valencia incompleta.

Como se puede observar en la progresiva disminución de los ángulos de la secuencia de moléculas

| | |
|----------|---------------|
| H_2O | 104.5° |
| $H_2S,$ | 92.2° |
| $H_2Se,$ | 91° |
| $H_2Te,$ | 89.5° |

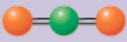
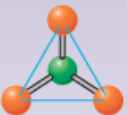
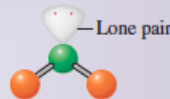
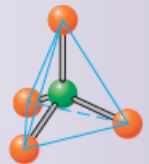
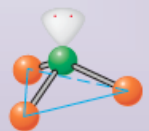
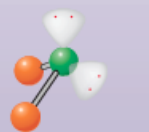


Arreglo de los pares de electrones alrededor de un átomo

- Líneas negras dan las direcciones de pares de electrones alrededor de un átomo A.
- Las líneas azules representan meramente ayudan a la disposición geométrica de los pares de electrones

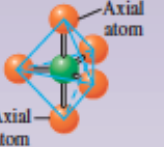
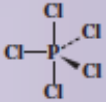
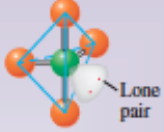
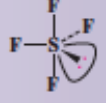
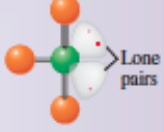
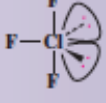
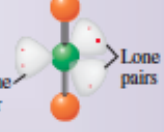


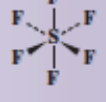
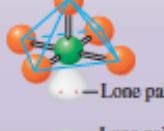

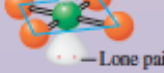



Átomo central con dos, tres o cuatro pares de electrones en la capa de valencia

| Electron Pairs | | | Arrangement of Pairs | Molecular Geometry | Example |
|----------------|---------|------|----------------------|------------------------------|--|
| Total | Bonding | Lone | | | |
| 2 | 2 | 0 | Linear | Linear AX_2 |  BeF_2 $F-Be-F$ |
| 3 | 3 | 0 | Trigonal planar | Trigonal planar AX_3 |  BF_3 $F-B-F$ |
| | 2 | 1 | | Bent (or angular) AX_2 |  SO_2 $O-S-O$ |
| 4 | 4 | 0 | Tetrahedral | Tetrahedral AX_4 |  CH_4 $H-C-H$ |
| | 3 | 1 | | Trigonal pyramidal AX_3 |  NH_3 $H-N-H$ |
| | 2 | 2 | | Bent (or angular) AX_2 |  H_2O $H-O-H$ |



Universidad Autónoma del Estado de México
 Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

| Electron Pairs | | | Arrangement of Pairs | Molecular Geometry | Example |
|----------------|---------|------|----------------------|---|--|
| Total | Bonding | Lone | | | |
| 5 | 5 | 0 | Trigonal bipyramidal | Trigonal bipyramidal AX_5  | PCl_5  |
| | 4 | 1 | | Seesaw (or distorted tetrahedron) AX_4  | SF_4  |
| | 3 | 2 | | T-shaped AX_3  | ClF_3  |
| | 2 | 3 | | Linear AX_2  | XeF_2  |
| 6 | 6 | 0 | Octahedral | Octahedral AX_6  | SF_6  |
| | 5 | 1 | | Square pyramidal AX_5  | IF_5  |
| | 4 | 2 | | Square planar AX_4  | XeF_4  |



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

TEORÍA DE ORBITALES MOLECULARES

Se construyen *orbitales moleculares* a partir de los *orbitales atómicos* de los átomos que forman el enlace, y los electrones se sitúan en ellos. Los *orbitales moleculares* se forman por una combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA).

Para construir un orbital molecular se considera que los orbitales atómicos se pueden sumar o restar. Con esto se obtienen **orbitales moleculares de enlace** y **orbitales moleculares de antienlace**.

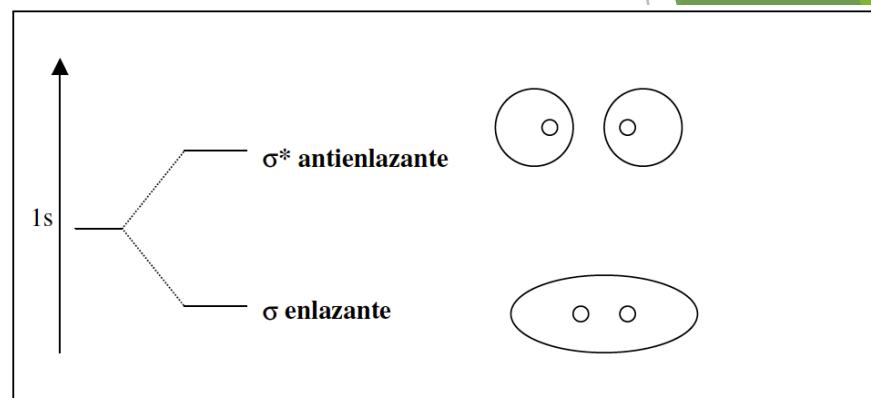
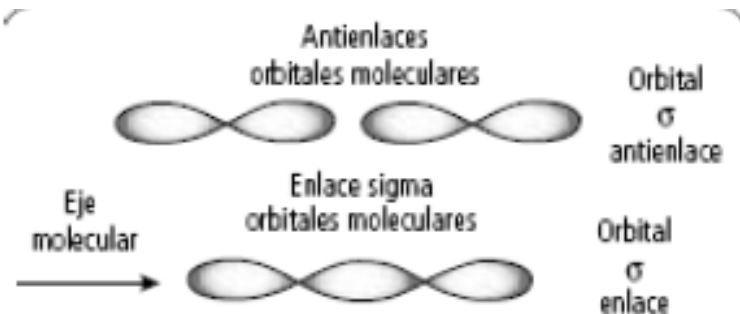
- En el orbital molecular de **enlace**, la densidad electrónica entre los núcleos que forman el enlace es mayor.
- En el orbital molecular de **antienlace**, la densidad electrónica entre los núcleos de los átomos que forman el enlace es cero.

Un enlace se forma cuando un orbital enlazante está lleno y su antienlazante correspondiente está vacío.

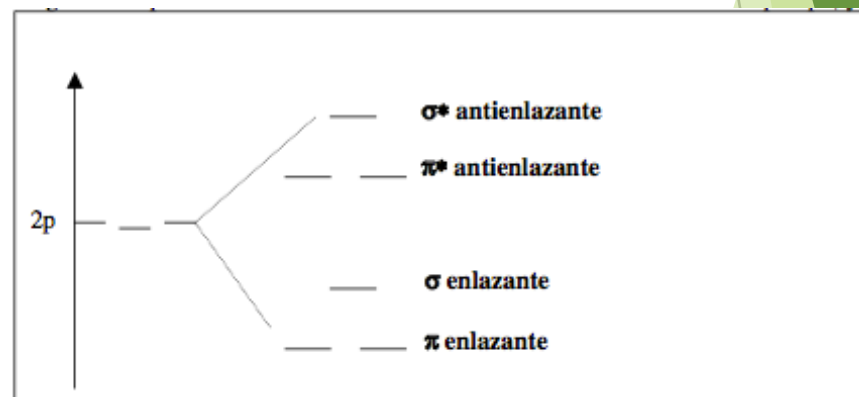
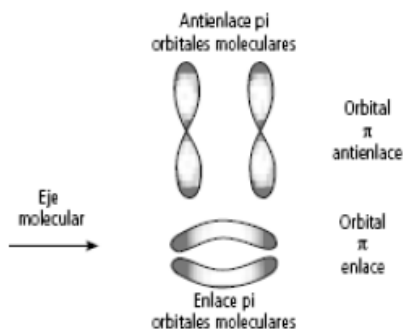
La combinación de ciertos orbitales atómicos dará origen a diferentes tipos de orbitales moleculares (sigma y pi).



Orbitales tipo σ Se generan a partir de una combinación lineal de dos orbitales atómicos tipo s.



Orbitales tipo π , σ Se generan a partir de una combinación lineal de dos orbitales atómicos tipo np_x y np



Nota: Después del Nitrógeno ($Z=7$) el orden entre orbitales enlazantes se invierte (primero viene el sigma y después el pi).

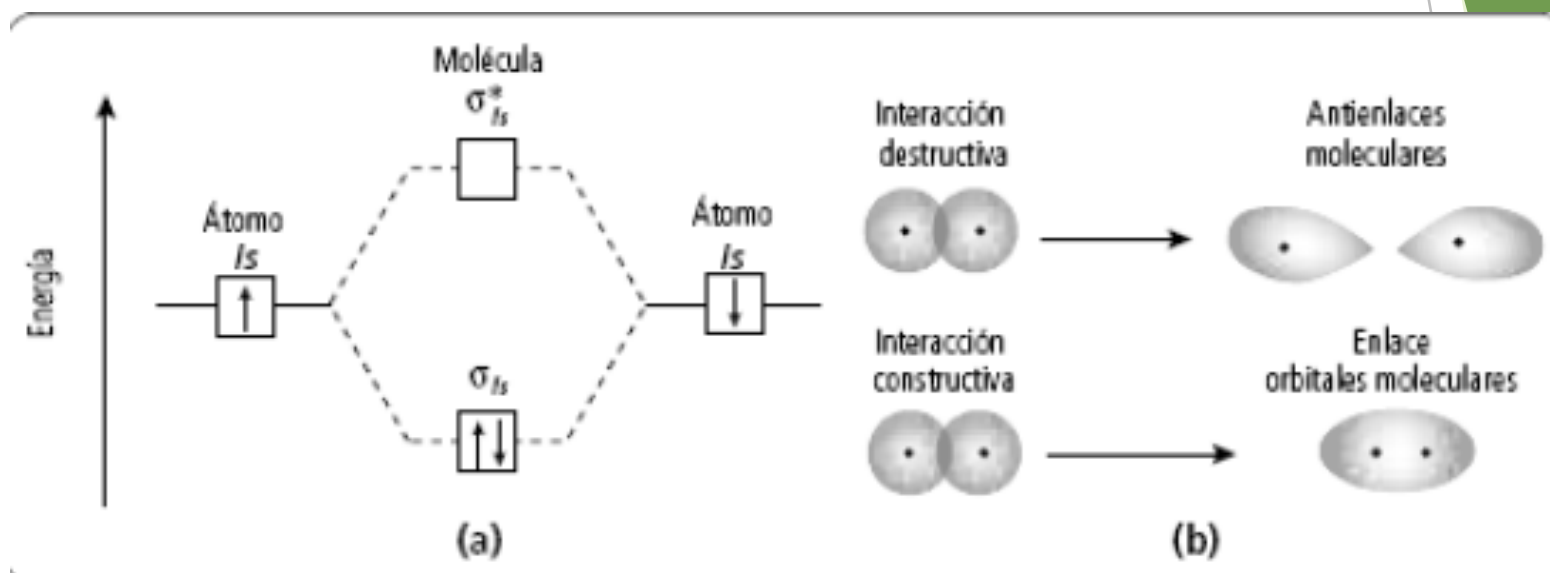
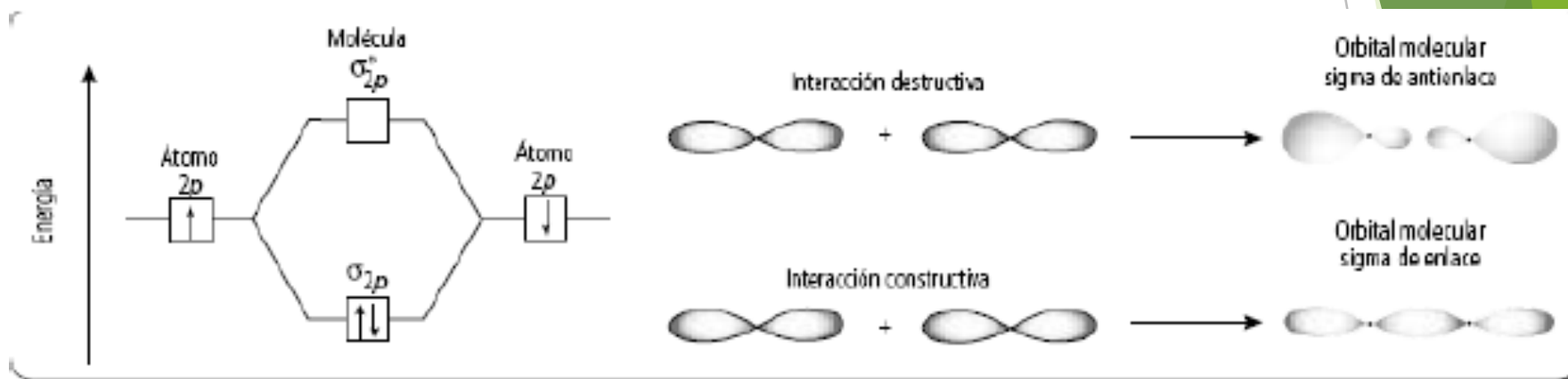


Diagrama energético de orbitales tipo s, que forman orbitales moleculares tipo sigma.



Interacción tipo sigma entre dos orbitales tipo p

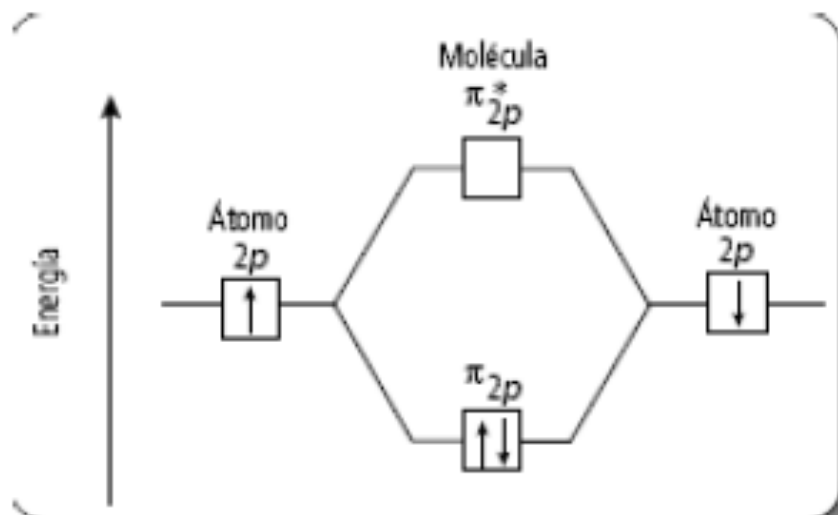
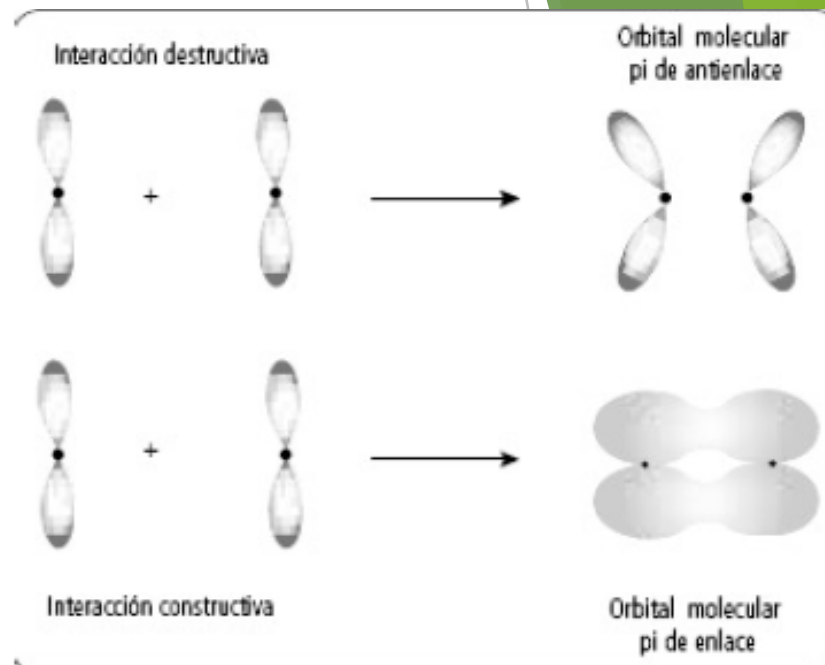
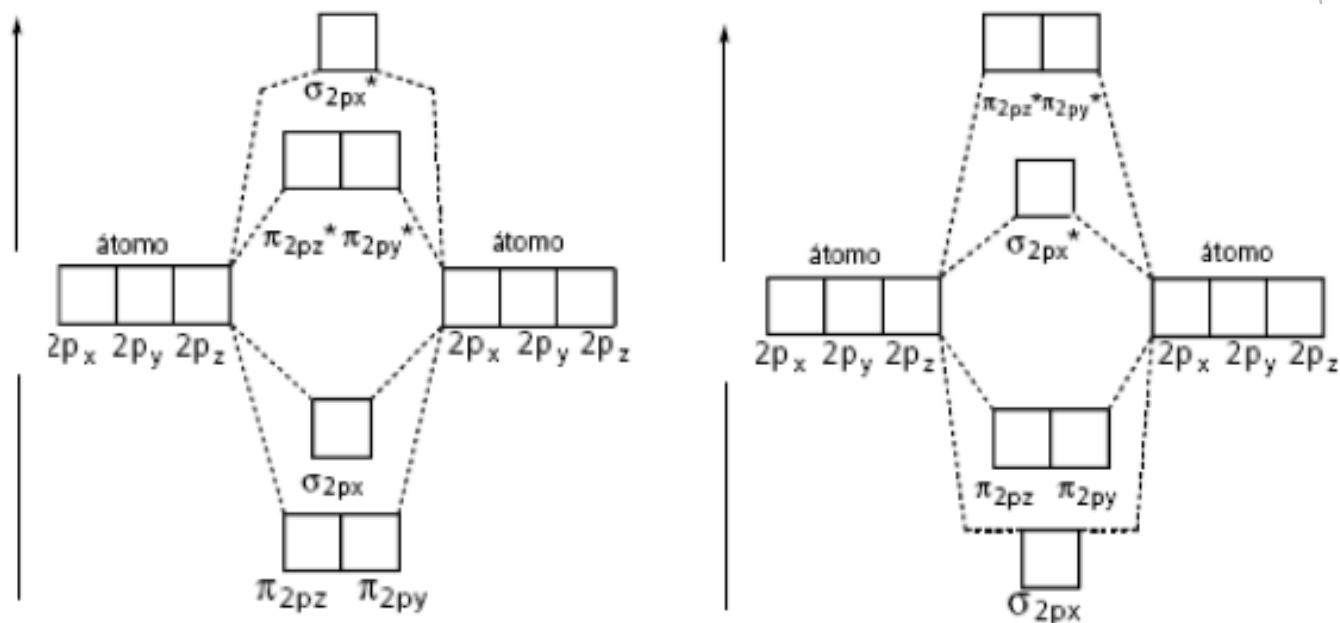


Diagrama energético de orbitales tipo p, que forman orbitales moleculares tipo pi.



Interacción tipo pi entre dos orbitales tipo p.



Diagramas de orbitales moleculares que involucran orbitales p.

El orden en el que aparecerán los orbitales sigma y pi provenientes de orbitales tipo p depende de la molécula. En el primero, los orbitales moleculares tipo pi son más estables (menor energía) que los tipos sigma. En el segundo son los orbitales tipo sigma los más estables.



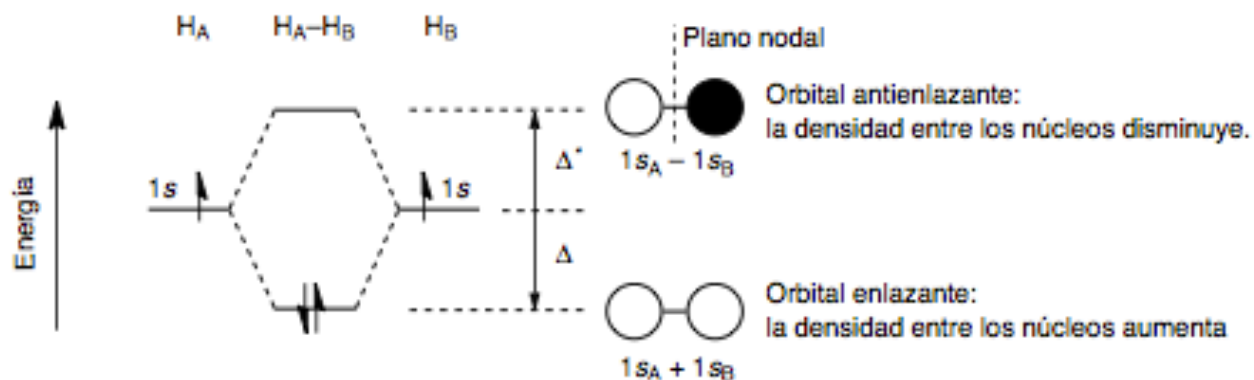
Propiedades para las que las descripciones localizada y deslocalizadas son adecuadas.

| <i>Descripción localizada apropiada para</i> | <i>Descripción deslocalizada apropiada para</i> |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none">• Fuerzas de enlace• Constantes de fuerza• Longitudes de enlace• Acidez de Brönsted• Descripción VSEPR de la geometría molecular | <ul style="list-style-type: none">• Espectro electrónico• Fotoionización• Energías de sujeción de los electrones• Magnetismo• Descripción de Walsh de la geometría molecular• Potenciales normales |



Formación de Orbitales Moleculares:

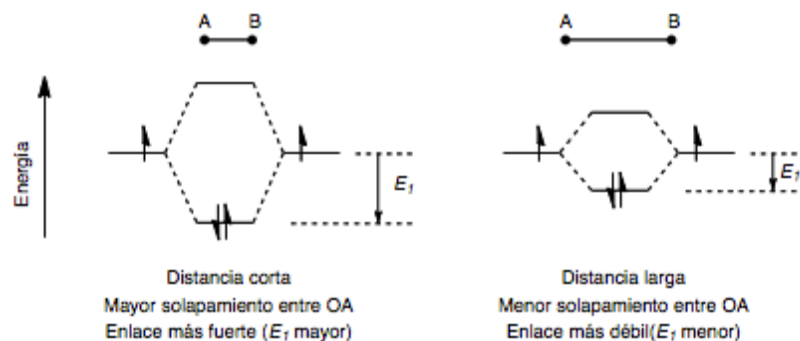
1. N orbitales atómicos forman N orbitales moleculares, que pueden ser enlazantes (si aportan enlace), antienlazantes (si quitan enlace) o no enlazantes (si no aportan ni quitan enlace).
2. Un orbital enlazante es aquél que aumenta la densidad electrónica entre los átomos enlazados y, por tanto, su energía es menor que la de los OA de partida.



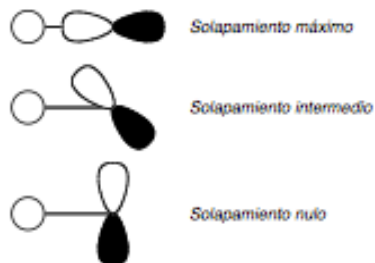


- La interacción entre dos orbitales atómicos con dos electrones estabiliza la molécula mientras que la desestabiliza con cuatro electrones.
- La interacción entre dos orbitales atómicos es tanto mayor cuanto mayor es su solapamiento y menor su diferencia de energía.

a) Solapamiento y distancia.



b) Solapamiento, orientación y simetría.

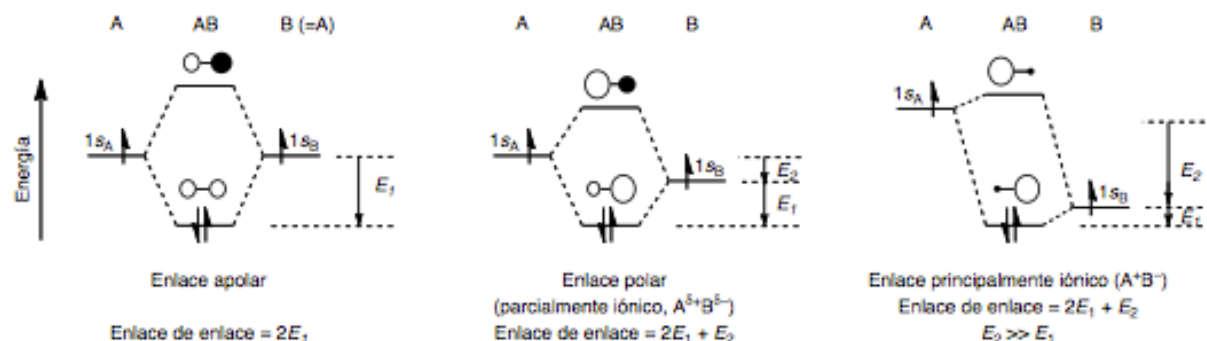


Solapamiento =

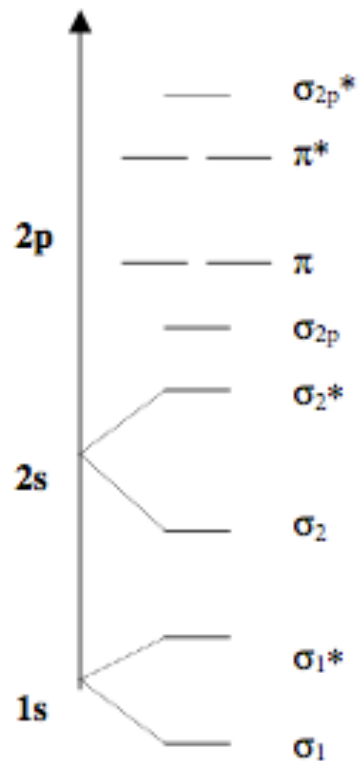
$$\int_{\text{todo el espacio}} \Psi_A \cdot \Psi_B \cdot dV$$



5. Cuando se combinan orbitales atómicos de distinta energía, participa en mayor proporción en la formación de un orbital molecular dado aquél OA de energía más parecida.



6. Los orbitales moleculares se llenan por orden de energía, respetando el principio de exclusión de Pauli y aplicando la regla de Hund.
7. Se define orden de enlace como la diferencia entre el número de orbitales enlazantes y antienlazantes llenos.



Regla para llenar las moléculas



Moléculas diatómicas

La interacción entre los dos orbitales atómicos de tipo π de cada átomo (p_x y p_y) genera dos conjuntos de orbitales moleculares (π y π^*) que están degenerados (= tienen la misma energía) por razones de simetría.

La interacción entre los orbitales de simetría σ es más compleja, ya que ambos orbitales σ de un átomo (ns y np_z) solapan con **ambos** orbitales σ (ns y np_z) del otro.

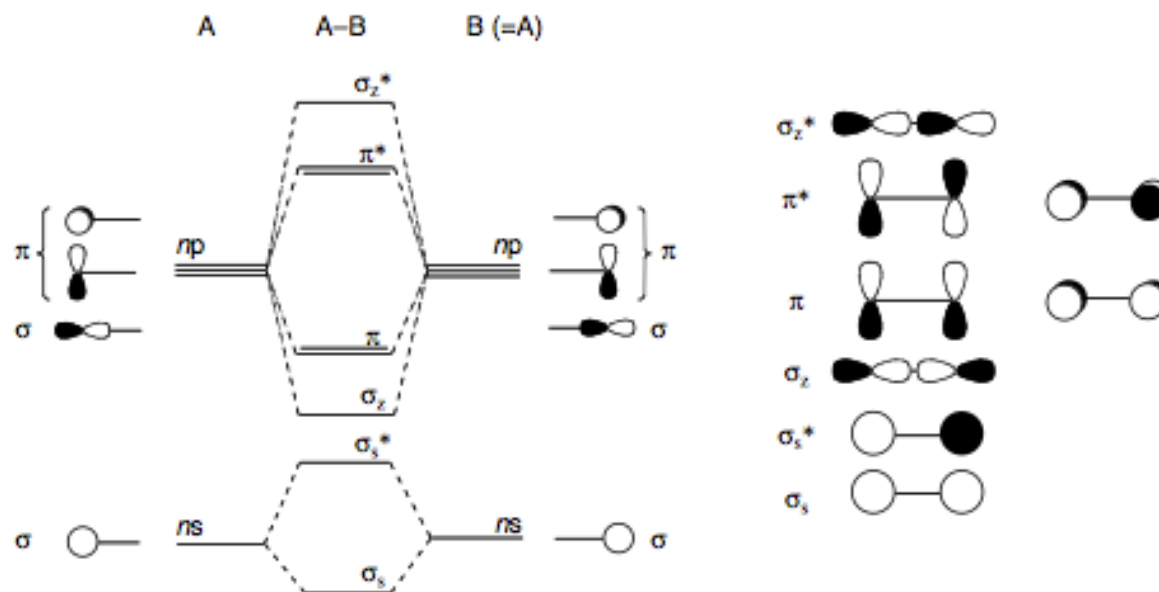


Diagrama de interacción cualitativa para moléculas homodiatómicas de los grupos principales en las que la interacción entre el orbital ns de un átomo con el np_z del otro es pequeña.

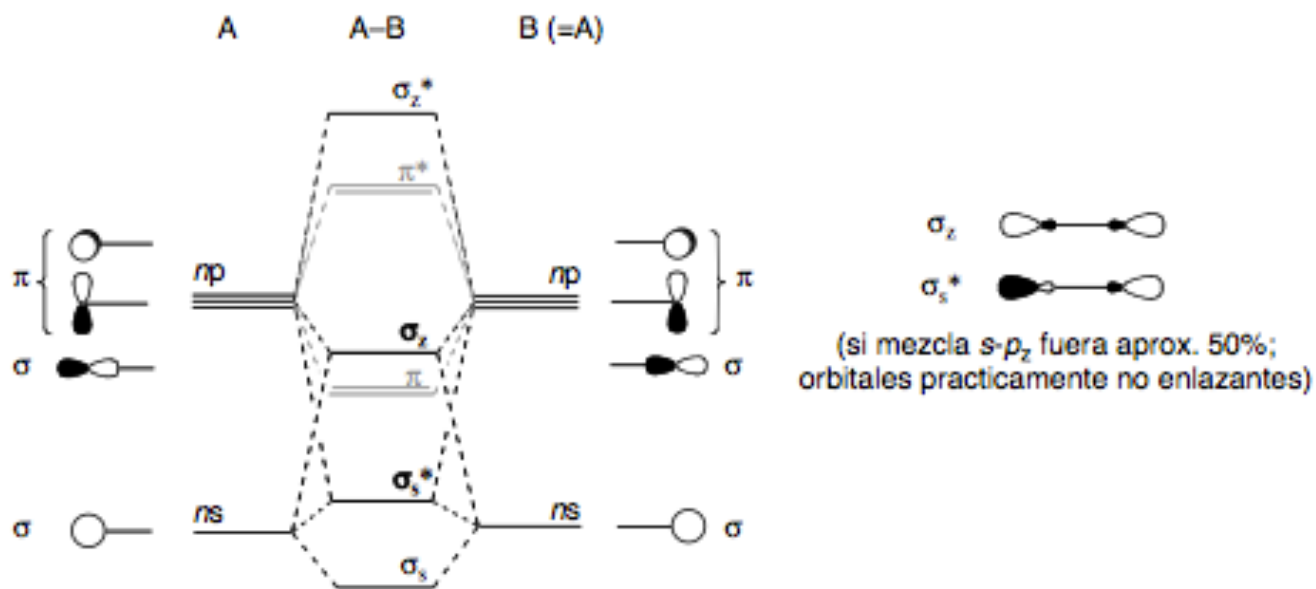


Diagrama de interacción cualitativo para moléculas homodiatómicas de los grupos principales en las que la interacción entre el orbital ns de un átomo con el npz del otro es grande.

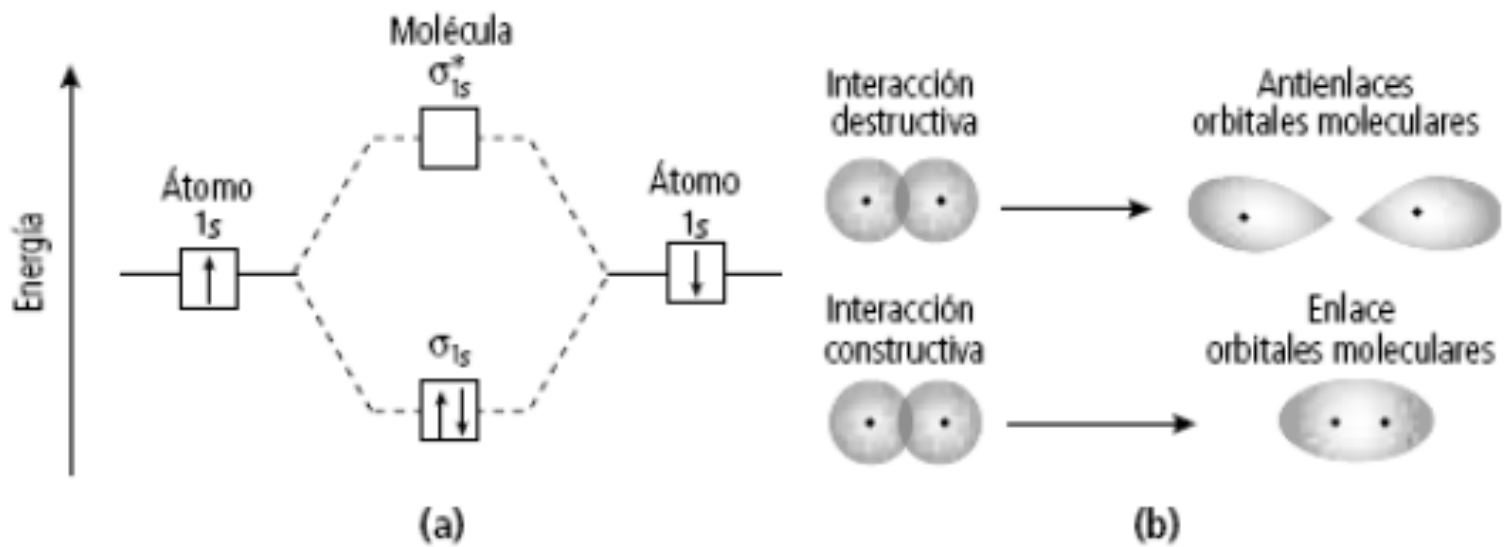
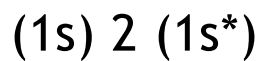


Diagrama de orbitales moleculares para H₂.

La configuración electrónica molecular del H₂ es





$$\text{Orden de enlace} = \frac{1}{2} (n - n^*)$$

donde n es el número de electrones que ocupan orbitales moleculares enlazantes y n^* el número de electrones que ocupan orbitales moleculares antienlazantes.

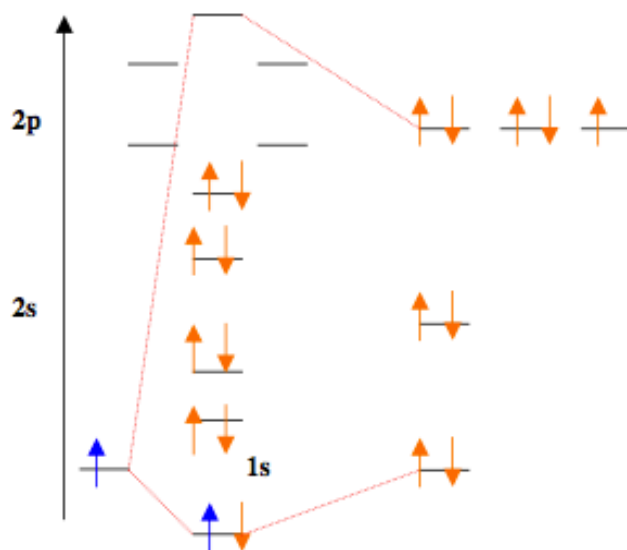
| | |
|---|------------------------|
| Li_2 : KK $1\sigma_g^2$; | o.e. = 1 enlace simple |
| Be_2 : KK $1\sigma_g^2 1\sigma_u^{*2}$ | o.e. = 0 |
| B_2 : KK $1\sigma_g^2 1\sigma_u^{*2} 1\pi_u^2$ | o.e. = 1 enlace simple |
| C_2 : KK $1\sigma_g^2 1\sigma_u^{*2} 1\pi_u^4$ | o.e. = 2 enlace doble |
| N_2 : KK $1\sigma_g^2 1\sigma_u^{*2} 1\pi_u^4 2\sigma_g^2$ | o.e. = 3 enlace triple |

Siendo KK las dos capas 1s de los respectivos átomos.

Un orden de enlace de 1 representa un enlace simple, un orden de enlace de 2 representa un doble enlace y un orden de enlace de 3 representa un triple enlace.



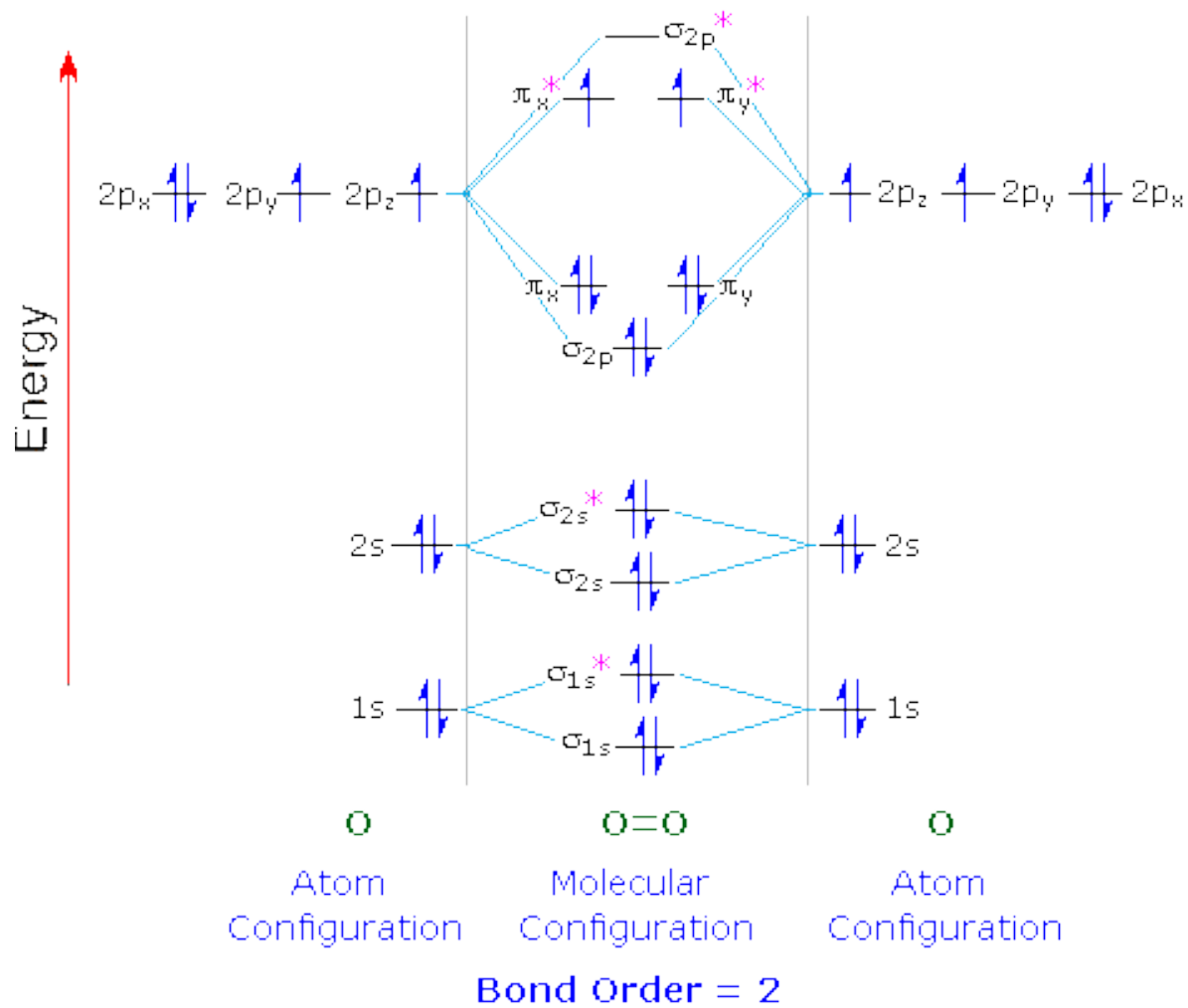
HF (Ácido Fluorhídrico): El Flúor otorga 9 electrones y el Hidrógeno 1. Debemos llenar los OM con 10 electrones.



OE: $0.5 \cdot (6-4)=1$, Diamagnética y Momento dipolar distinto de cero.

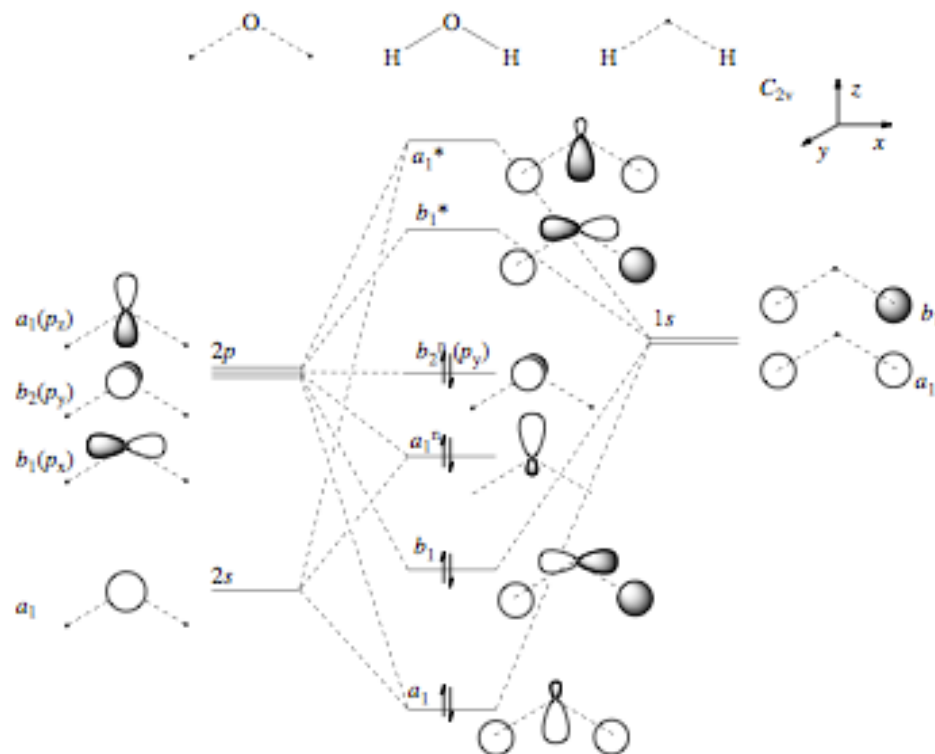


Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tlanguistenco





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tlanguistenco



El diagrama de OM de la molécula angular de agua.



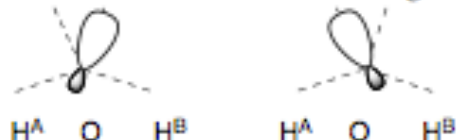
Tabla 2.3. La molécula de agua

Descripción en teoría de enlace de valencia

Dos enlaces σ : $[O(2sp^3)-H^A(1s)] [O(2sp^3)-H^B(1s)]$ (*)



Dos orbitales de valencia llenos en el oxígeno: $O(2sp^3)$



La VSEPR predice la angularidad de la molécula

Descripción en teoría de orbitales moleculares

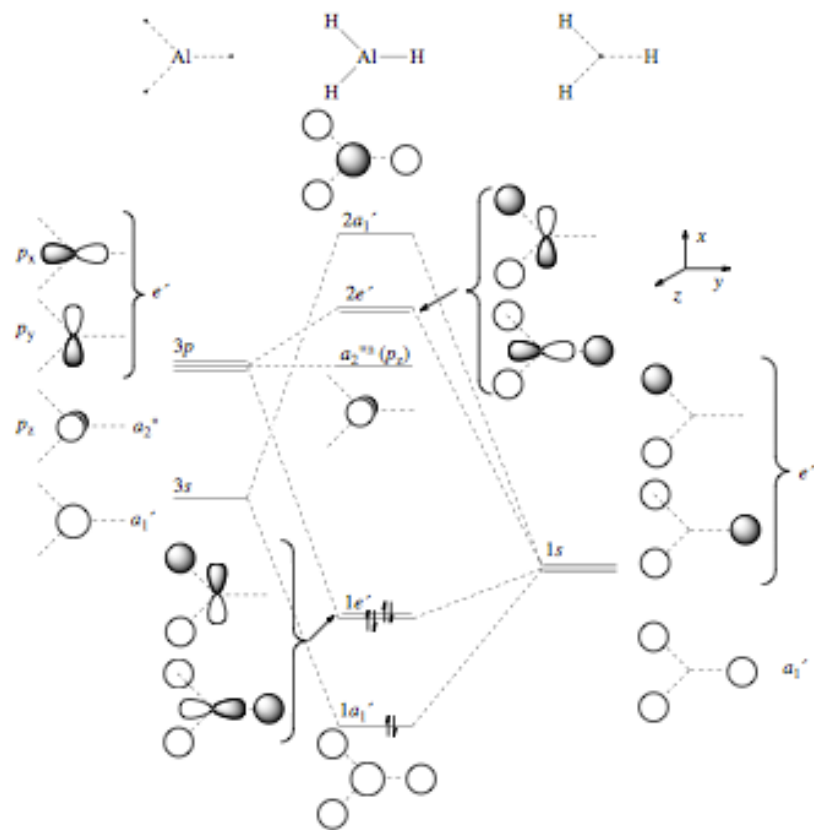
Orden de enlace: 2 (simetría local σ) (*)

Orb. enlazantes: $a_1 [O(2s, 2p_z) + H^A(1s) + H^B(1s)]$
 $b_1 [O(2p_x) + H^A(1s) - H^B(1s)]$

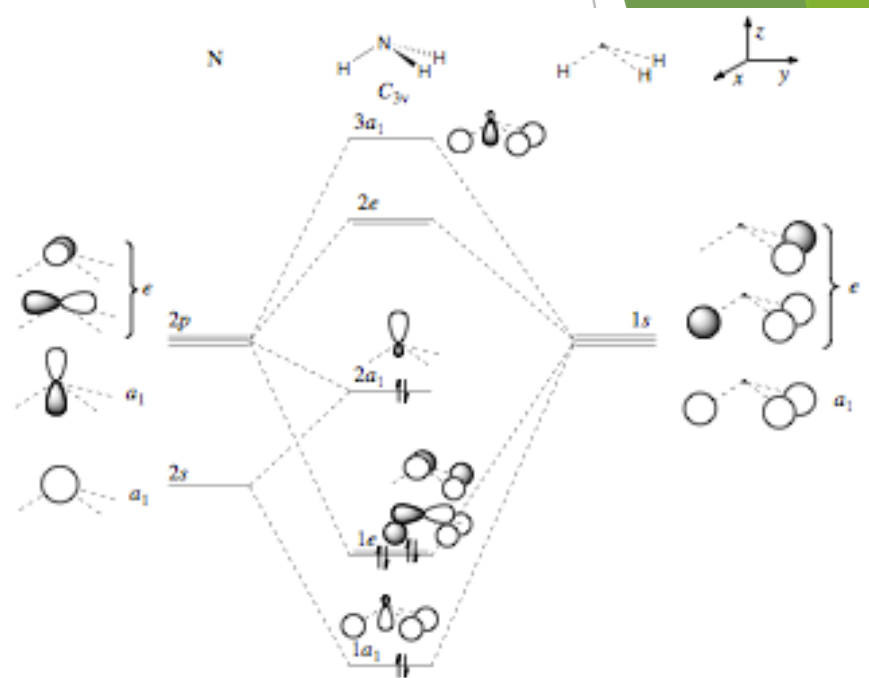
Dos orbitales no enlazantes llenos:

$b_2^n [O(p_y)], a_1^n [O(2s, 2p_z)]$

El diagrama de Walsh de la figura 2.8 predice la angularidad de la molécula. Propiedades como los valores de energías de ionización de la molécula se interpretan más sencillamente a partir del modelo de OM.



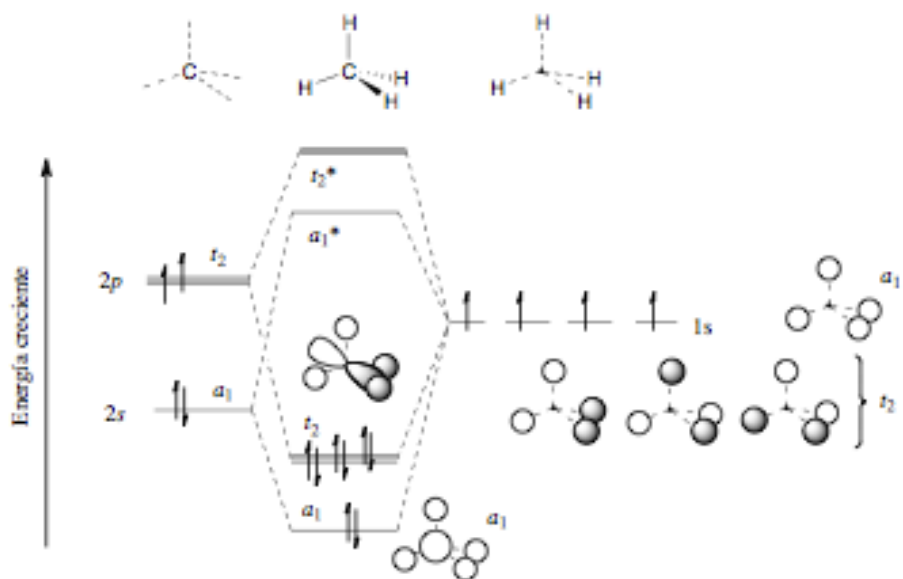
El diagrama de OM de la molécula plana de AlH_3 .



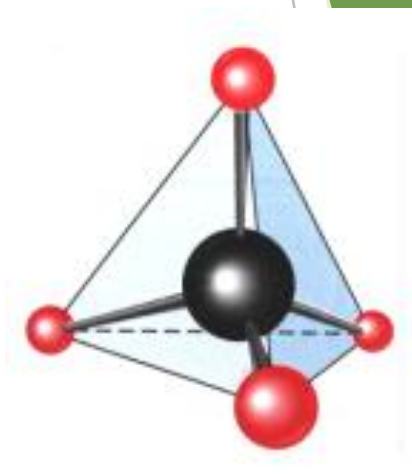
El diagrama de OM de la molécula angular de NH_3 .



La molécula de metano



El diagrama de OM de la molécula tetraédrica de metano.



La existencia de dos niveles electrónicos de energía (a_1 y t_2) está de acuerdo con los datos experimentales disponibles.



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Bibliografía

- Huheey, J. (2007). Química inorgánica. Editorial Alfaomega. Mexico
- Casabó J. (2007). Estructura atómica y enlace químico. Editorial Reverte. España.
- Guitierrez, R. E. (2010). Química inorgánica. Editorial Reverte. España.
- Atkins, P. (2010). Química inorgánica. Editorial McGraw Hill. Mexico