



RICARDO DE JESUS MAURICIO GORDOLLO

MATERIA QUIMICA II

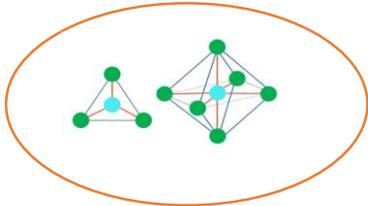
TEMA Geometría molecular de las moléculas

MAPA CONCEPTUAL

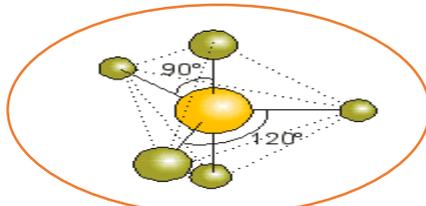
TEC EN. NFERMERIA GENERAL

Geometría molecular de las moléculas

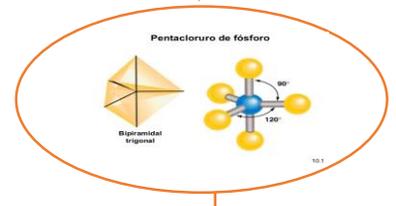
La geometría molecular o estructura molecular se refiere a la disposición tridimensional de los átomos que constituyen una molécula. Determina muchas de las propiedades de las moléculas, reactividad, polaridad, fase, color, magnetismo, actividad biológica, etc. Actualmente, el principal modelo es la teoría de repulsión de pares de electrones de valencia (TRPEV), empleada internacionalmente por su gran predictibilidad.



Las geometrías moleculares se determinan mejor cuando las muestras están próximas al cero absoluto porque a temperaturas más altas las moléculas presentarán un movimiento rotacional considerable. En el estado sólido la geometría molecular puede ser medida por difracción de rayos X. Las geometrías se pueden calcular por procedimientos mecánico cuánticos ab initio o por métodos semiempíricos de modelamiento molecular.



Dado que el movimiento de los átomos en una molécula está determinado por la mecánica cuántica, uno debe definir el "movimiento" de una manera cuántica. Los movimientos cuánticos (externos) de traslación y rotación cambian fuertemente la geometría molecular. (En algún grado la rotación influye en la geometría por medio de la fuerza de Coriolis y la distorsión centrífuga, pero son despreciables en la presente discusión).



Una sustancia "pura" está compuesta de sólo un tipo de isómero de una molécula (todas tienen la misma estructura geométrica).

Los isómeros estructurales tienen la misma fórmula química, pero diferente ordenamiento físico, frecuentemente formando geometrías moleculares alternas con propiedades muy diferentes. Los átomos no están enlazados (conectados) en el mismo orden.

Los isómeros funcionales son una clase especial de isómeros estructurales, donde ciertos grupos de átomos exhiben un tipo especial de comportamiento, como es un éter o un alcohol.

La geometría molecular es la disposición tridimensional de los átomos que conforman una molécula. Es muy importante conocer correctamente la geometría de una molécula, ya que está relacionada directamente con la mayoría de propiedades físicas y químicas, como por ejemplo, punto de ebullición, densidad, solubilidad, etc.

La posición de cada átomo se determina por la naturaleza de los enlaces químicos con los que se conecta a sus átomos vecinos. La geometría molecular puede describirse por las posiciones de estos átomos en el espacio, mencionando la longitud de enlace de dos átomos unidos, ángulo de enlace de tres átomos conectados y ángulo de torsión de tres enlaces .

