



## TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR Y CRISTALOQUÍMICA

- Q. Gerardo Barón Sánchez  
División de Ciencias Básicas  
Facultad de Ingeniería, U.N.A.M.

Abril 21, 2016

# T.O.M. y Cristaloquímica

## ■ QUÍMICA (1123)

## Química de Ciencias de la Tierra (1125)

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO FACULTAD DE INGENIERÍA		PROGRAMA DE ESTUDIO	
QUÍMICA		1	10
Asignatura	Clave	Semestre	Créditos
CIENCIAS BÁSICAS	COORDINACIÓN DE FÍSICA Y QUÍMICA	INGENIERÍA EN TELECOMUNICACIONES	
División	Departamento	Licenciatura	
<b>Asignatura:</b>	<b>Horas/semana:</b>	<b>Horas/semestre:</b>	
Obligatoria <input checked="" type="checkbox"/>	Teóricas <input type="text" value="4.0"/>	Teóricas <input type="text" value="64.0"/>	
Optativa <input type="checkbox"/>	Prácticas <input type="text" value="2.0"/>	Prácticas <input type="text" value="32.0"/>	
	Total <input type="text" value="6.0"/>	Total <input type="text" value="96.0"/>	
<b>Modalidad:</b> Curso teórico-práctico			
<b>Seriación obligatoria antecedente:</b> Ninguna			
<b>Seriación obligatoria consecuente:</b> Ninguna			
<b>Objetivo(s) del curso:</b> El alumno aplicará los conceptos básicos para relacionar las propiedades de las sustancias en la resolución de ejercicios; desarrollará sus capacidades de observación y de manejo de instrumentos.			
<b>Temario</b>			
NÚM.	NOMBRE	HORAS	
1.	Estructura atómica	16.0	
2.	Periodicidad química	4.0	
3.	Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares	12.0	
4.	Teoría del orbital molecular y cristaloquímica	6.0	
5.	Estequiometría	10.0	
6.	Termoquímica y equilibrio químico	6.0	
7.	Electroquímica	10.0	
		64.0	
	Actividades prácticas	32.0	
	Total	96.0	

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO FACULTAD DE INGENIERÍA		PROGRAMA DE ESTUDIO	
QUÍMICA DE CIENCIAS DE LA TIERRA		1	10
Asignatura	Clave	Semestre	Créditos
CIENCIAS BÁSICAS	COORDINACIÓN DE FÍSICA Y QUÍMICA	INGENIERÍA GEOLOGICA	
División	Departamento	Licenciatura	
<b>Asignatura:</b>	<b>Horas/semana:</b>	<b>Horas/semestre:</b>	
Obligatoria <input checked="" type="checkbox"/>	Teóricas <input type="text" value="4.0"/>	Teóricas <input type="text" value="64.0"/>	
Optativa <input type="checkbox"/>	Prácticas <input type="text" value="2.0"/>	Prácticas <input type="text" value="32.0"/>	
	Total <input type="text" value="6.0"/>	Total <input type="text" value="96.0"/>	
<b>Modalidad:</b> Curso teórico-práctico			
<b>Seriación obligatoria antecedente:</b> Ninguna			
<b>Seriación obligatoria consecuente:</b> Ninguna			
<b>Objetivo(s) del curso:</b> El alumno aplicará los conceptos básicos para relacionar las propiedades de las sustancias en la resolución de ejercicios; desarrollará sus capacidades de observación y de manejo de instrumentos.			
<b>Temario</b>			
NÚM.	NOMBRE	HORAS	
1.	Estructura atómica	8.0	
2.	Periodicidad química	2.0	
3.	Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares	8.0	
4.	Teoría del orbital molecular y cristaloquímica	6.0	
5.	Estequiometría	10.0	
6.	Termoquímica y equilibrio químico	6.0	
7.	Electroquímica	8.0	
8.	Química orgánica	10.0	
9.	Tópicos selectos de química en las ingenierías de ciencias de la tierra	6.0	
		64.0	
	Actividades prácticas	32.0	
	Total	96.0	

# T.O.M. y Cristaloquímica

## PRESENTES EN PROGRAMAS:

- Química y Estructura de Materiales (1109)
- Química General (1210)

## NO APARECEN:

Química para Ingenieros Civiles (1688)

Química para Ingenieros Petroleros (1426)

Química (1216)

# Nuevos programas

- En ambos cursos:

## Química y Química de Ciencias de la Tierra

### 4 Teoría del orbital molecular y cristalografía

**Objetivo:** El alumno aplicará la teoría de las bandas para explicar la diferencia en el comportamiento eléctrico de los materiales, así como la estructura cristalina.

**Contenido:**

- 4.1 Teoría del orbital molecular para moléculas diatómicas.
- 4.2 Teoría de las bandas.
- 4.3 Enlace metálico.
- 4.4 Aislantes, semiconductores, conductores y superconductores. Aplicaciones.
- 4.5 Cristales: celdas unitarias, tipos de cristales.

# Conocimientos antecedentes

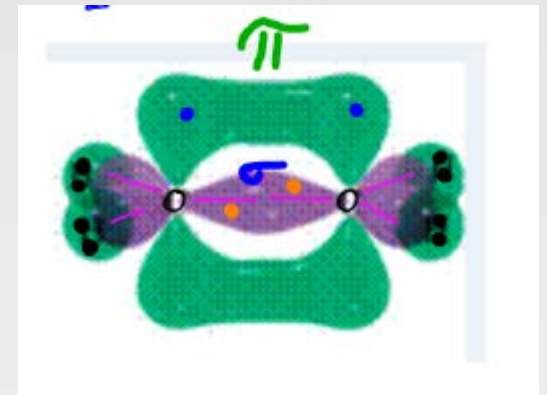
- Modelo cuántico del átomo (orbitales atómicos)
- Principio de conservación de la energía
- Enlace químico
- Estructuras de Lewis
- Carácter magnético de la materia

# Teoría del Orbital Molecular

- Modelo mecánico-cuántico.
- Enlace .- combinación de Orbitales Atómicos.
- Combinaciones “constructivas” y “destructivas”.
- Orbitales Moleculares de enlace y de anti-enlace.
- Conservación de la energía.
- Información que provee:
  - Estabilidad de la molécula (orden de enlace)
  - Carácter magnético (apareamiento de electrones)

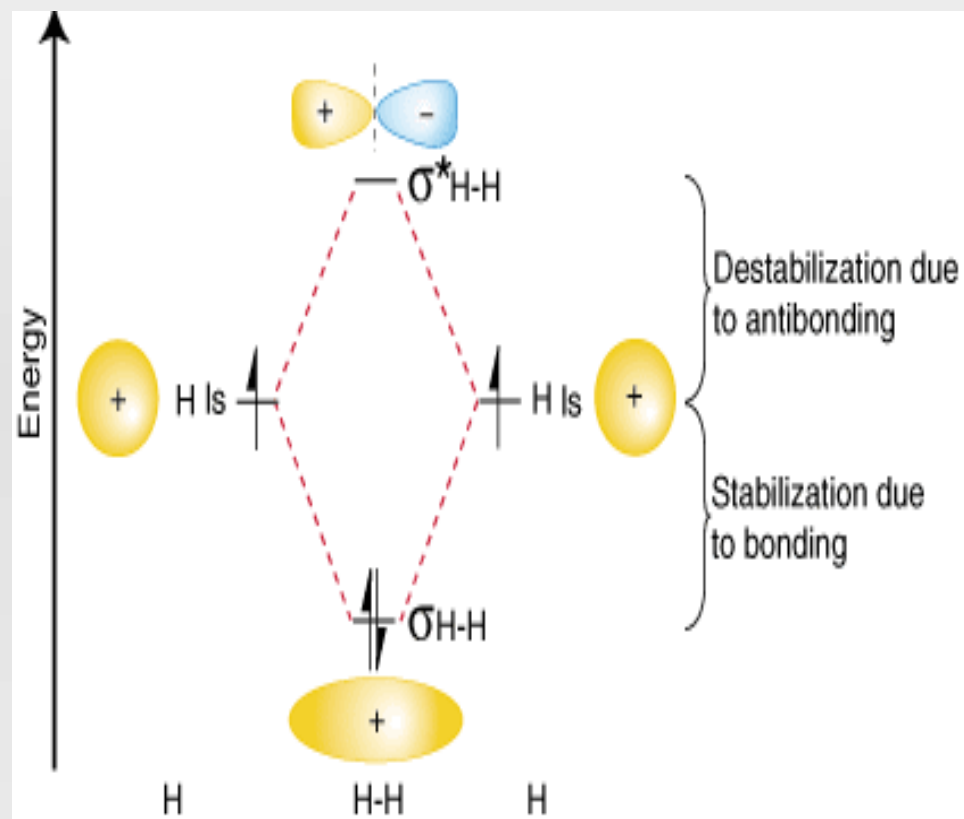
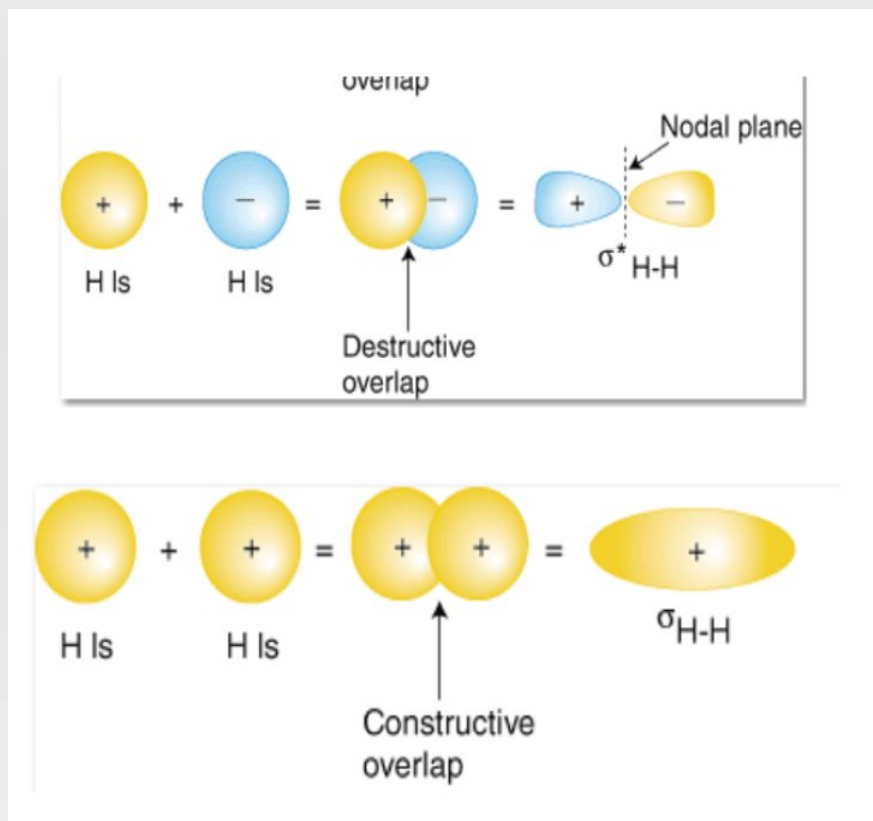
# CASO: molécula de O<sub>2</sub>

- Diferencia electronegatividades ---> Tipo de enlace
- Estructura de Lewis ---> Enlace entre átomos
- T.R.P.E.C.V. ---> Geometría de la molécula
- Teoría Unión-Valencia e Hibridación ---> Traslapo de orbitales atómicos
- Electrones apareados = DIAMAGNÉTICA
- Experimentalmente: PARAMAGNÉTICA



# Teoría del Orbital Molecular

## ■ Caso molécula $H_2$



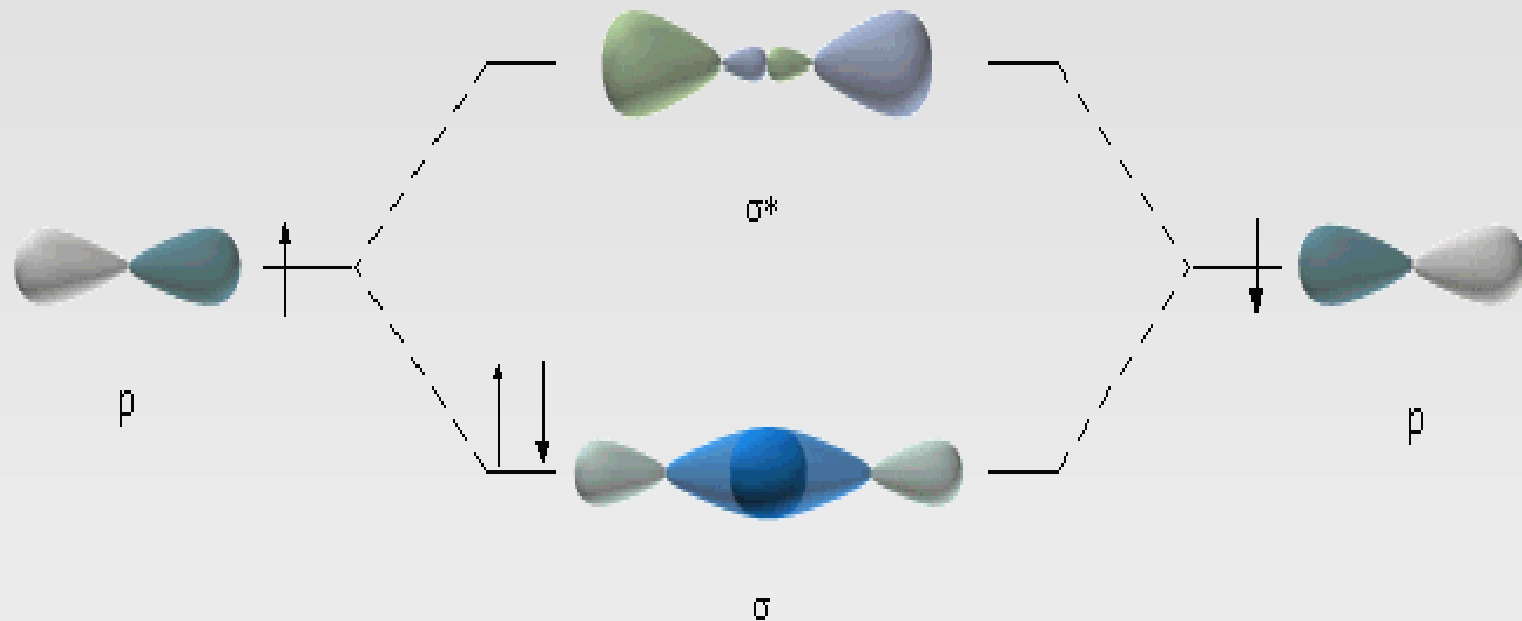
- Orden de Enlace
- Carácter magnético



# Teoría del Orbital Molecular

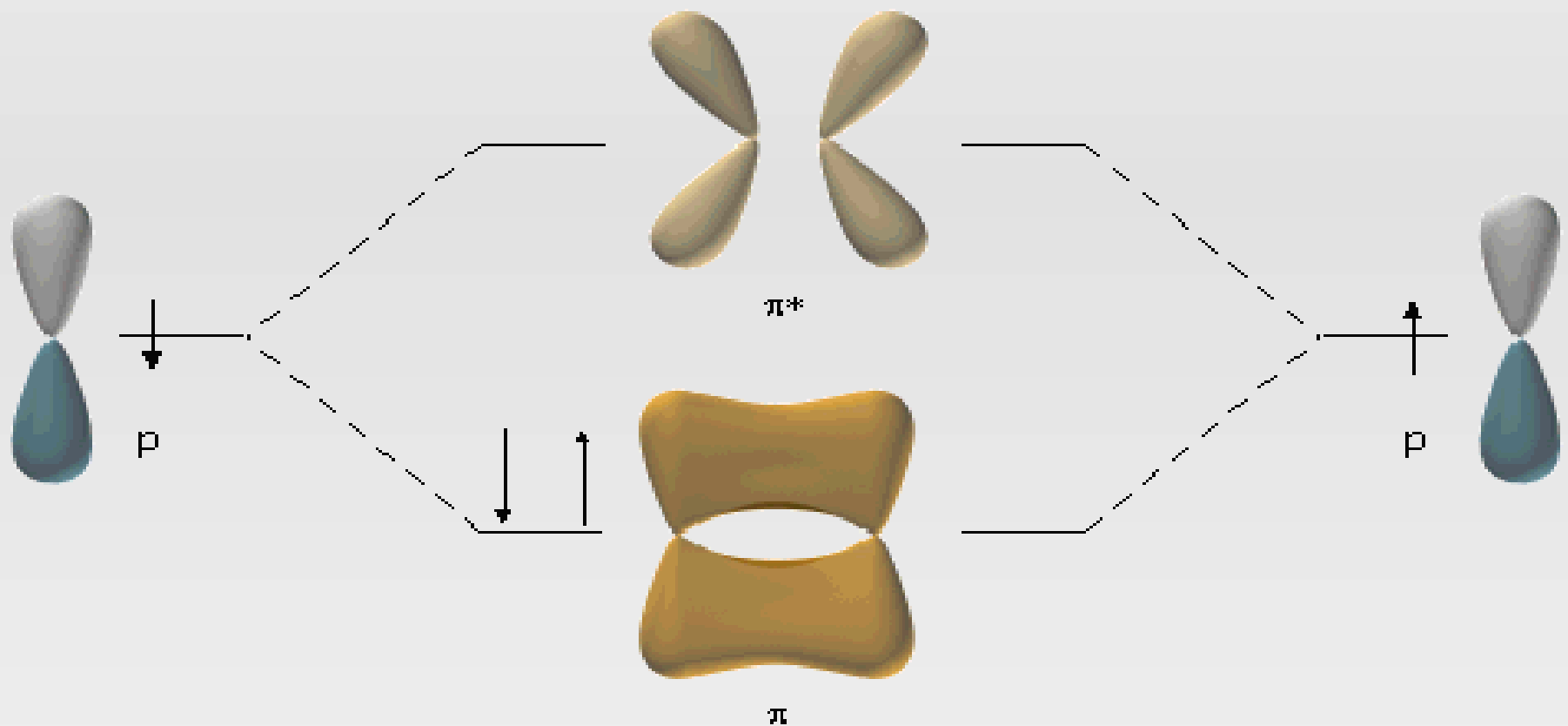
- Orbitales tipo “p”

Según su geometría, interacción  $\sigma$



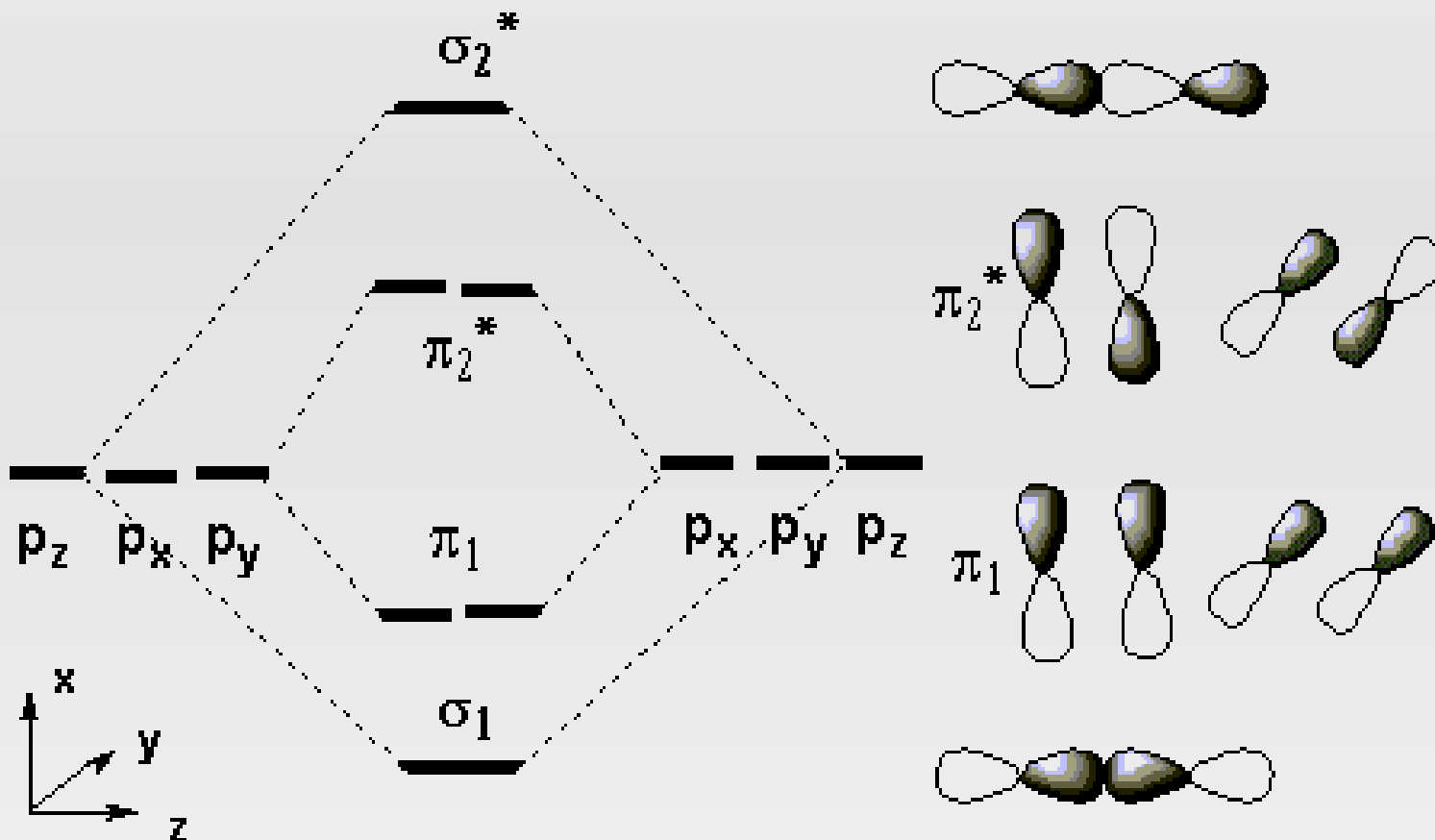
# Teoría del Orbital Molecular

- Interacción  $\pi$



# Teoría del Orbital Molecular

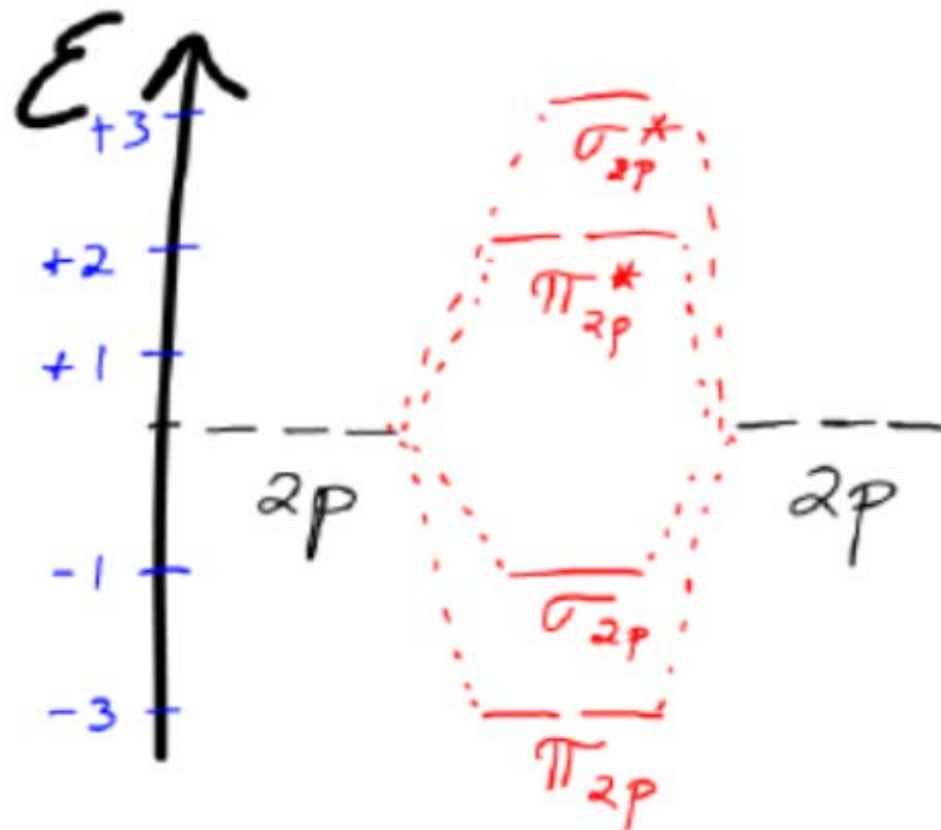
- Desdoblamiento orbitales “p”



Moléculas  
con  $> 14 e^-$

# Teoría del Orbital Molecular

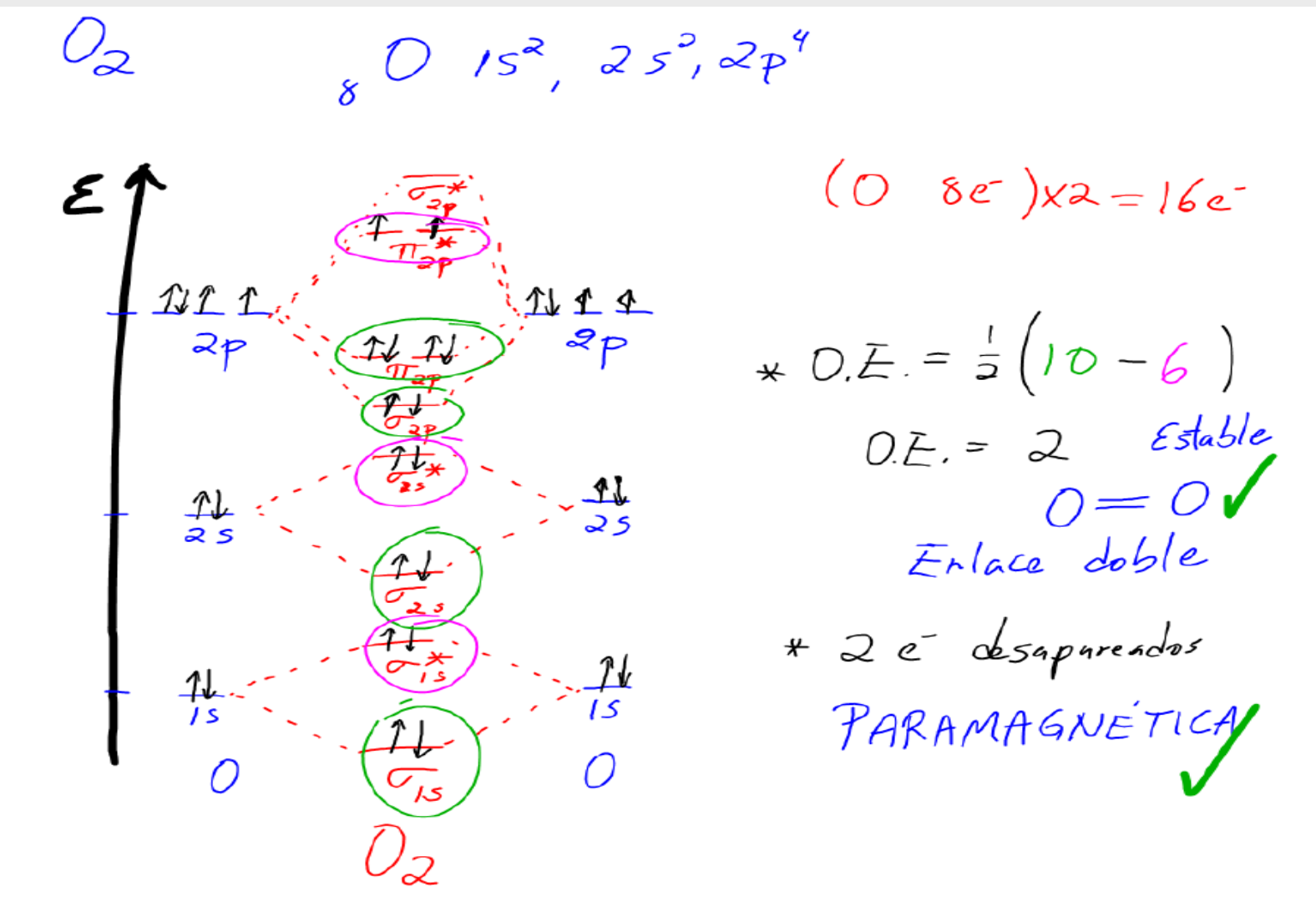
- Desdoblamiento orbitales “p”



Moléculas  
con  $\leq 14$

# Teoría del Orbital Molecular

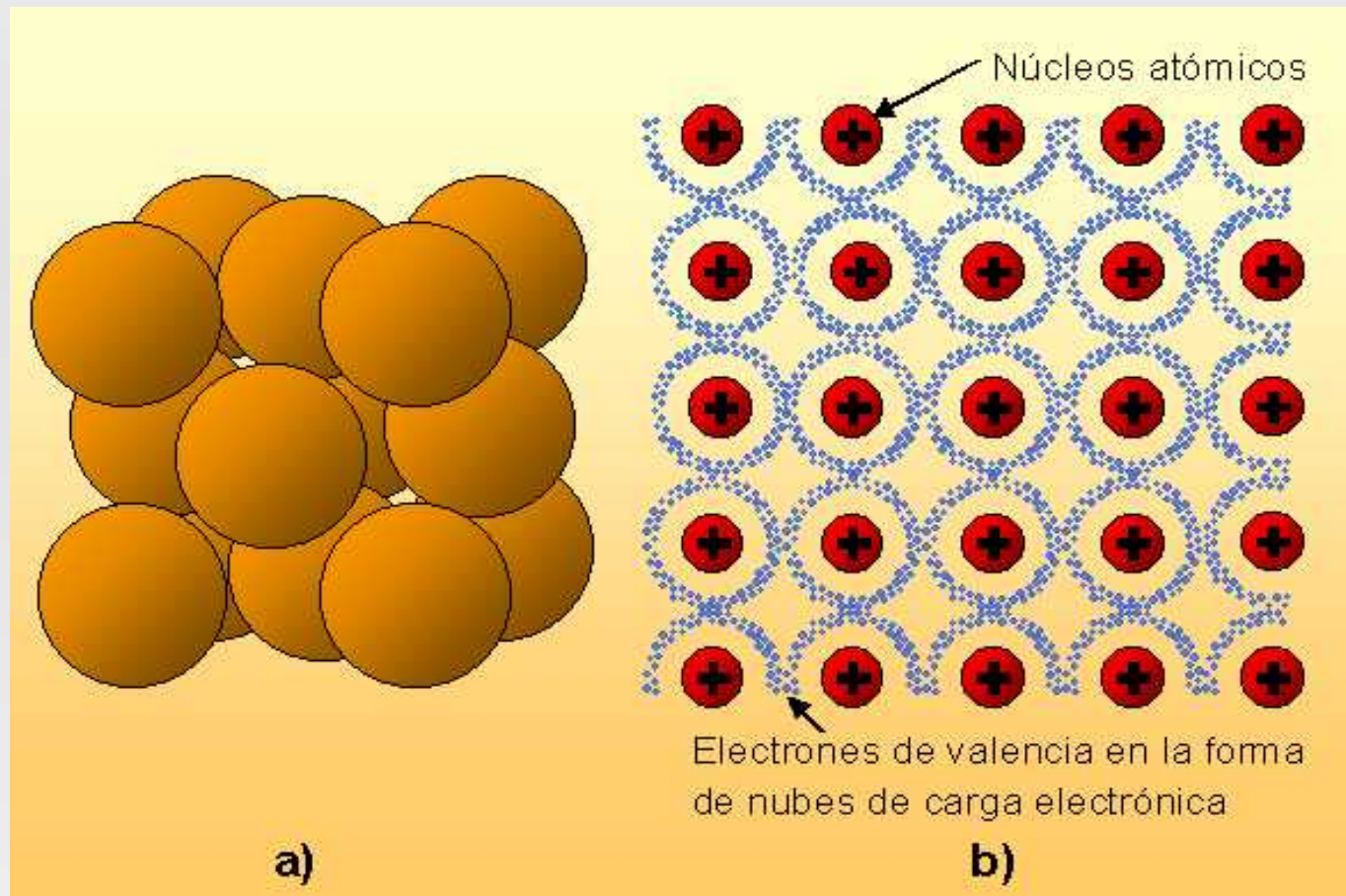
- Moléculas homonucleares





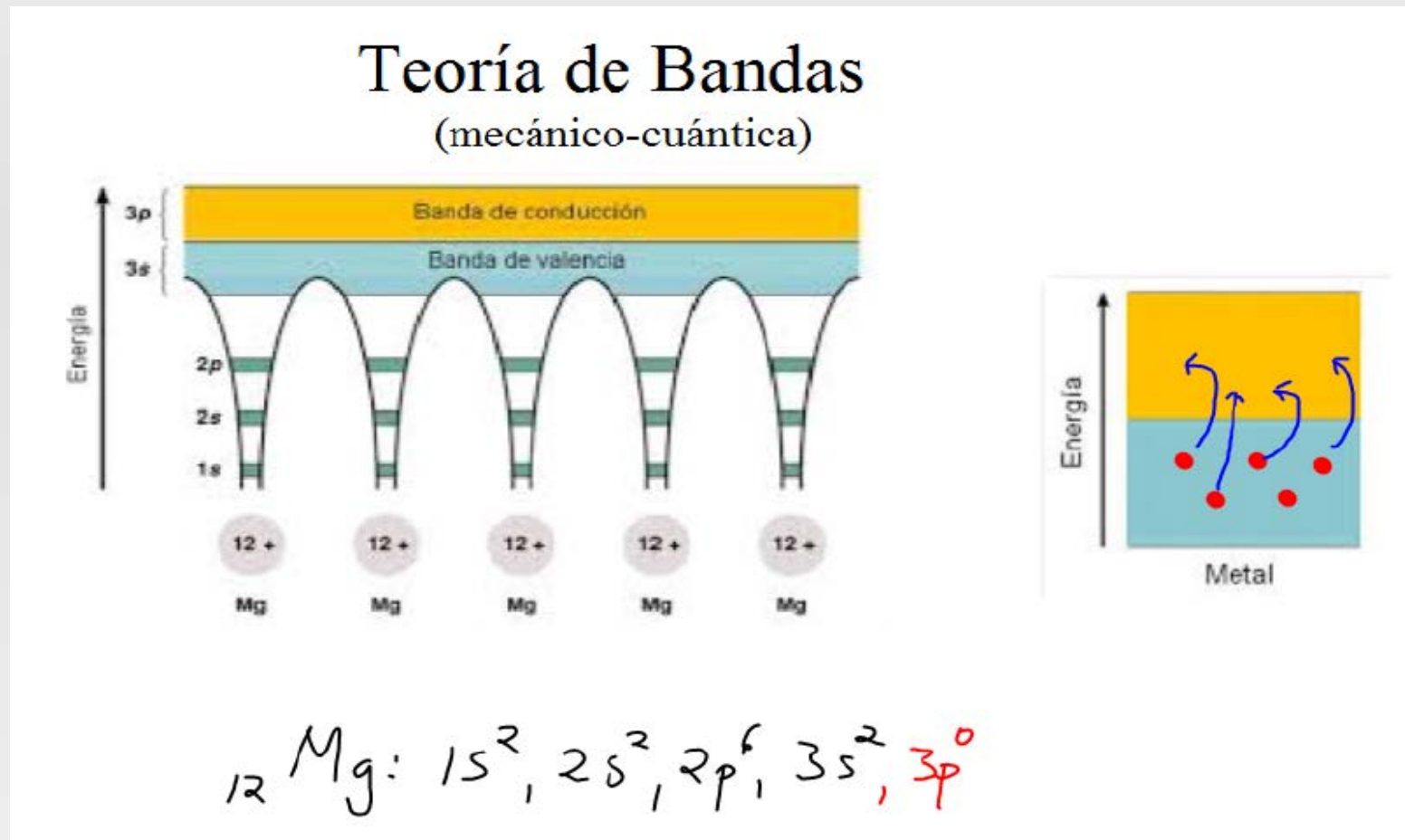
# Enlace metálico

- Empaquetamiento compacto:



# Teoría de bandas

- Banda = traslape de orbitales atómicos

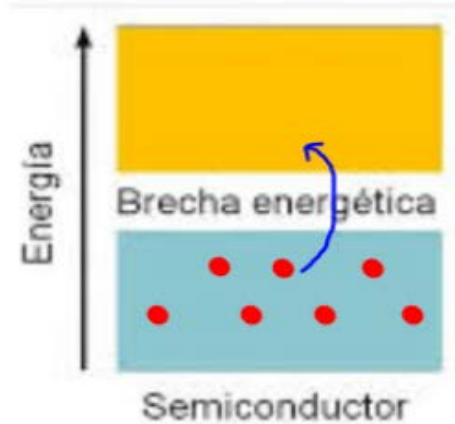
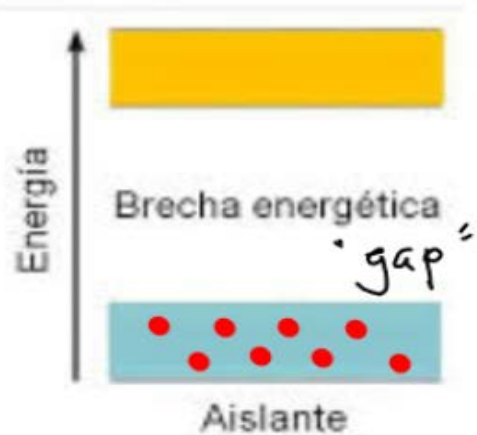




# Teoría de bandas

- Aislante

- Semiconductor

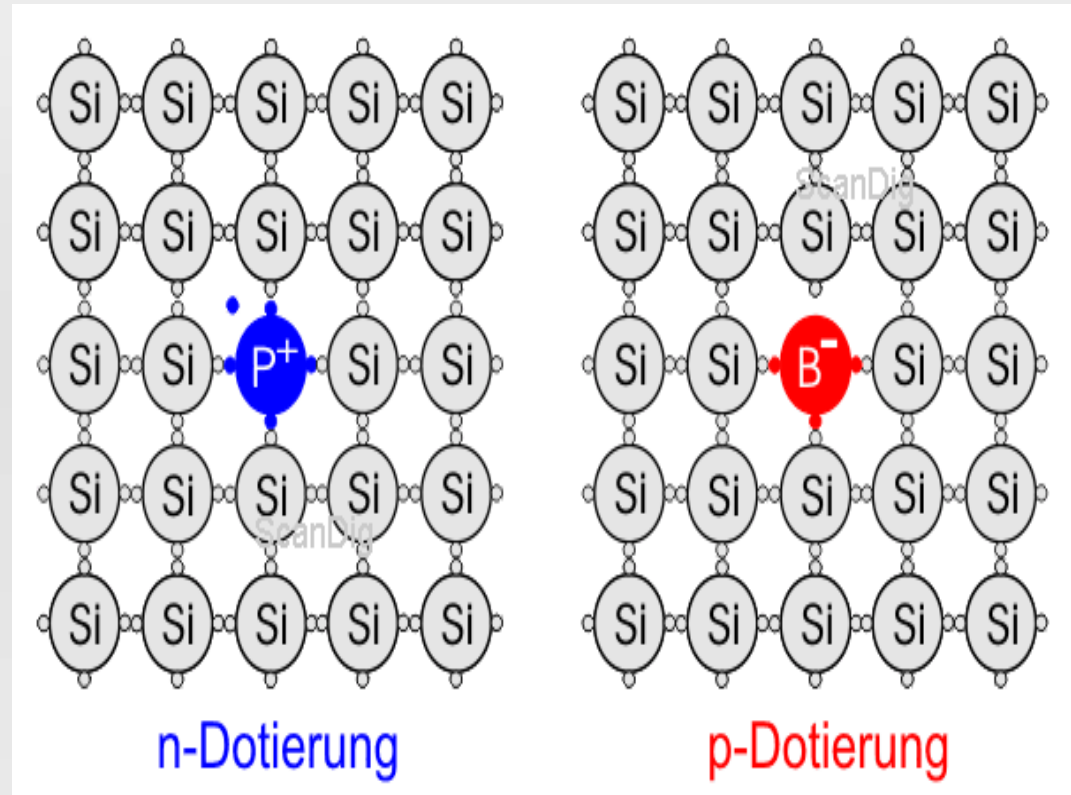
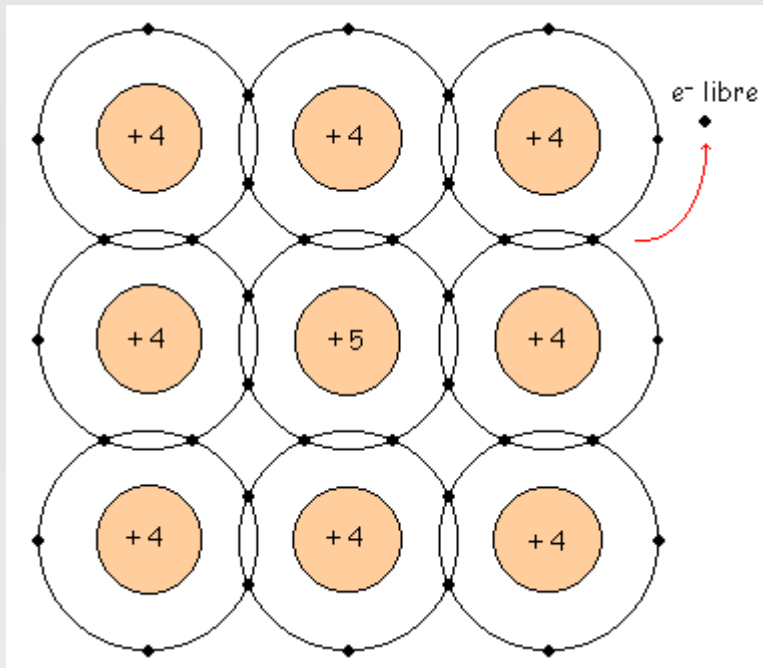


- Intrínsecos
- Extrínsecos

Semiconductor tipo  $\begin{cases} n \\ p \end{cases}$

# Teoría de bandas

- Dopaje de semiconductores

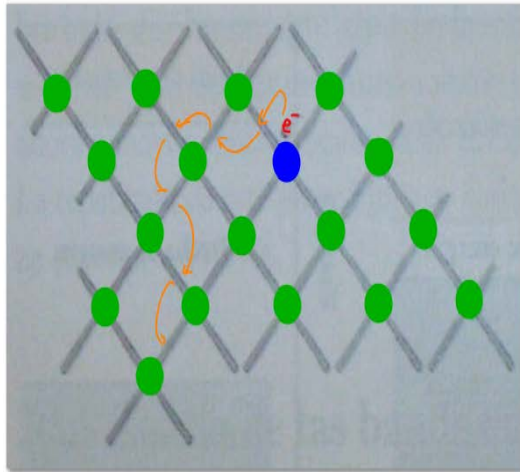


□ Tipo "n"

□ Tipo "p"

# Teoría de bandas

- Semiconductores extrínsecos



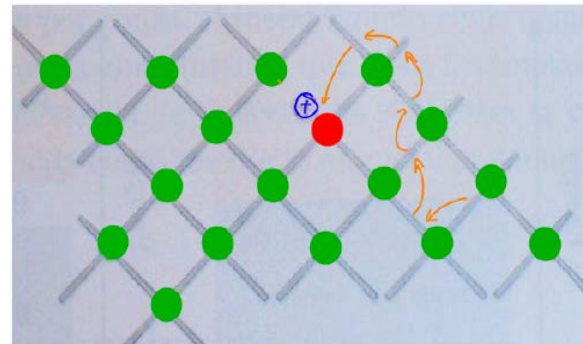
● Silicio ( $4e^-$  valencia)

● Fósforo ( $5e^-$  valencia)

TIPO "N"

Flujo de  $e^- \Rightarrow$  corriente eléctrica

TIPO "P"



● Silicio ( $4e^-$  valencia)

● Aluminio ( $3e^-$  valencia)  
Galio

"hueco"  $\Rightarrow$  carencia de  $e^-$   
para formar enlace

desplazamiento de  $e^- \Rightarrow$  corriente eléctrica

# Cristaloquímica

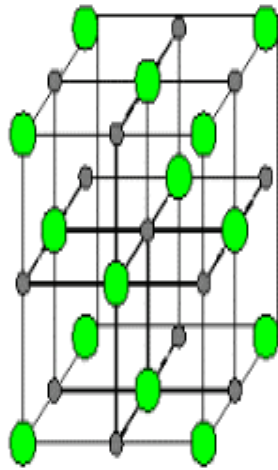
- Sólidos cristalinos



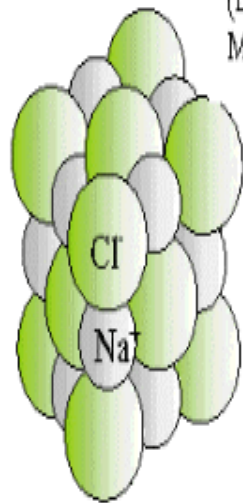
# Cristaloquímica

- Celda unitaria

● Cl<sup>-</sup>  
● Na<sup>+</sup>

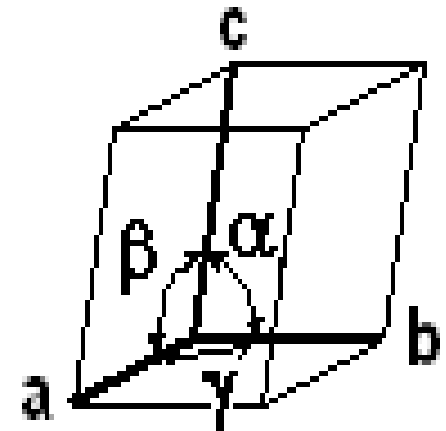
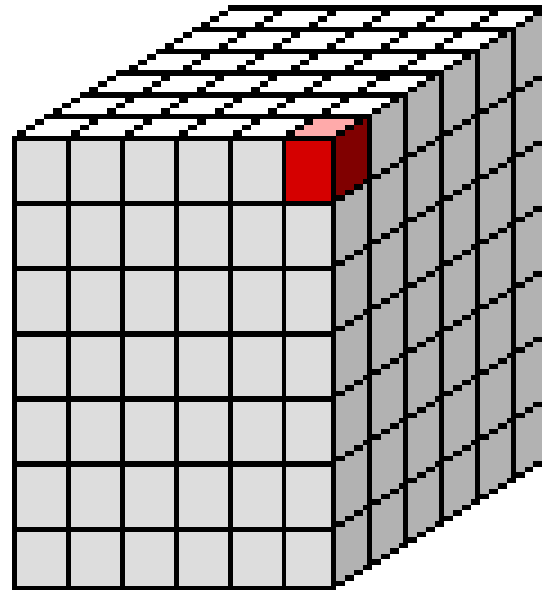


(A) Cristal de NaCl.  
Modelo de puntos



(B) Cristal de NaCl.  
Modelo de esferas.

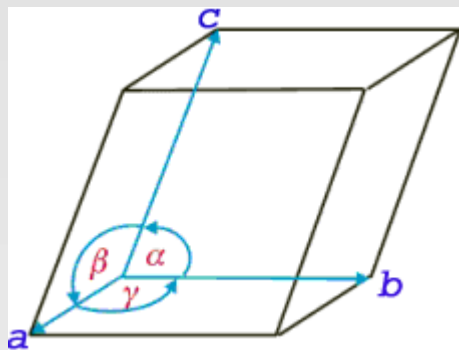
- Lados:  $a, b, c$
- Ángulos:  $\alpha, \beta, \gamma$



**Celda unitaria**

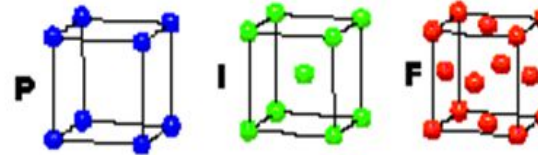
# Cristaloquímica

- Redes de Bravais

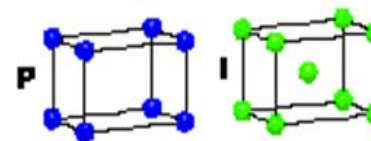


## Redes de Bravais

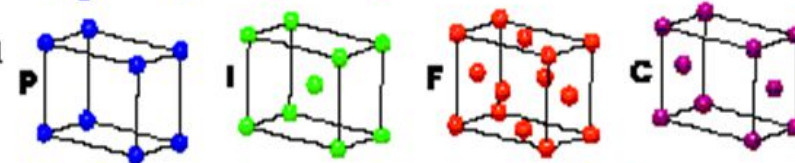
cúbica  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



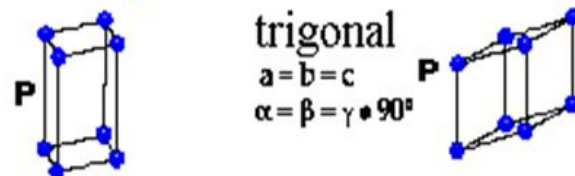
tetragonal  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



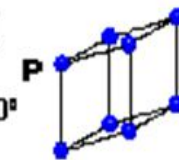
ortorrómbica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



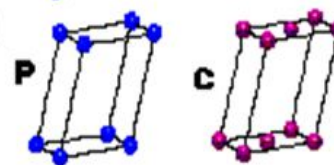
hexagonal  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ$   
 $\gamma = 120^\circ$



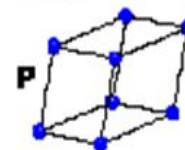
trigonal  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



monoclínica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$   
 $\beta \neq 120^\circ$



triclínica  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



4 tipos de celda unidad

- P = primitiva
- I = centrada en el cuerpo
- F = centrada en las caras
- C = centrada en un lado

+

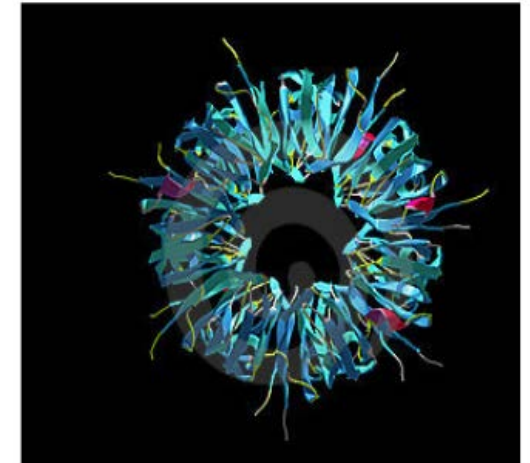
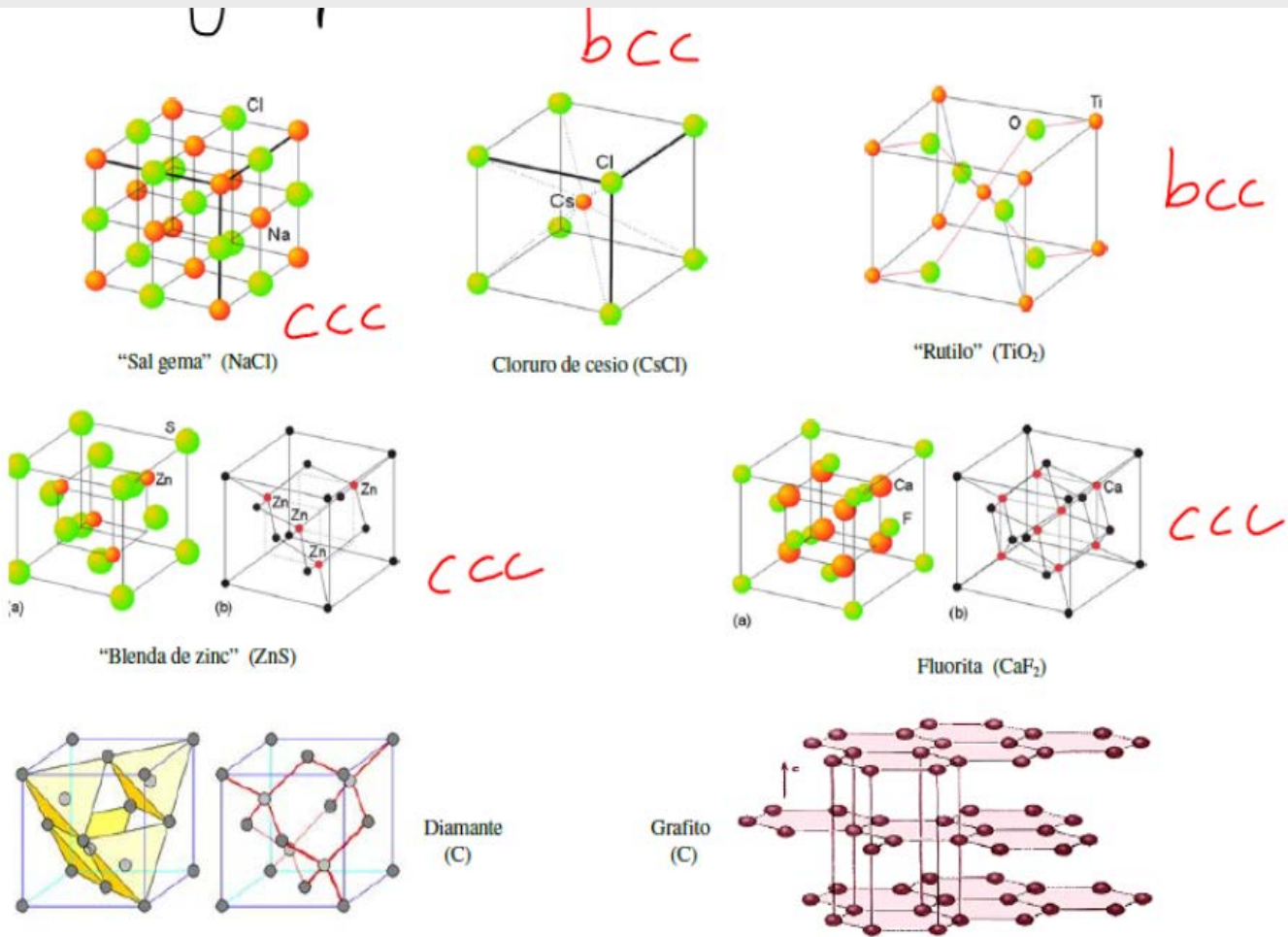
7 sistemas cristalinos



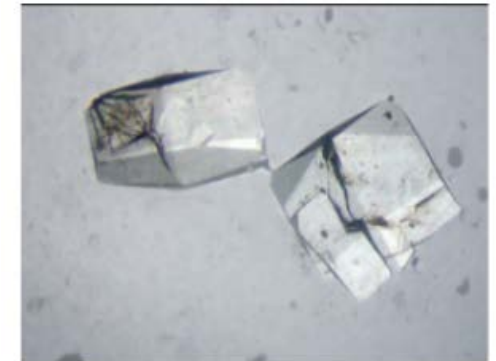
14 Redes de Bravais

# Cristaloquímica

- Sustancias cristalinas comunes

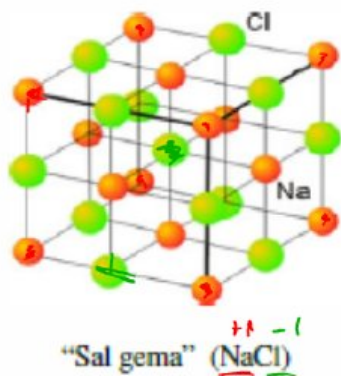


Proteínas

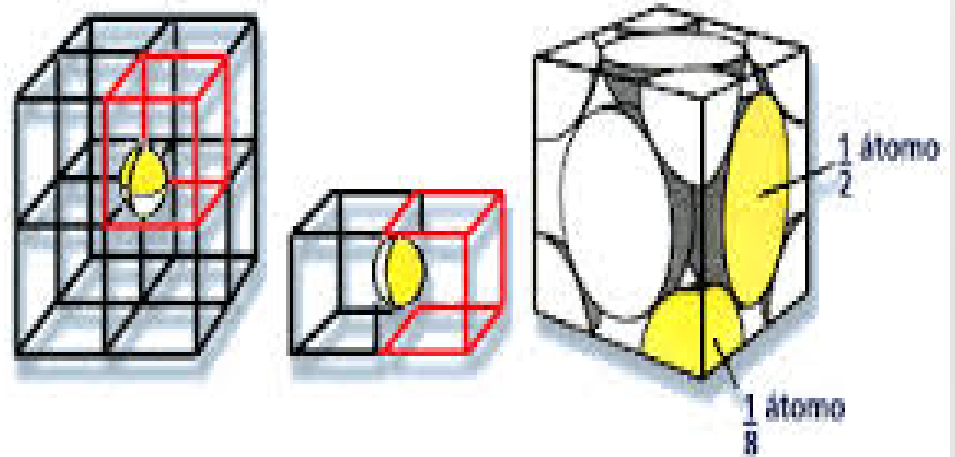


# Cristaloquímica

- Determinación de composición



Cúbica  
centrada  
en las caras  
(fcc)



átomos Na

$$\frac{1}{8}(8) + \left(\frac{1}{2}\right)6 = 1 + 3 = 4$$

átomos Cl

$$\frac{1}{4}(12) + 1 = 3 + 1 = 4$$

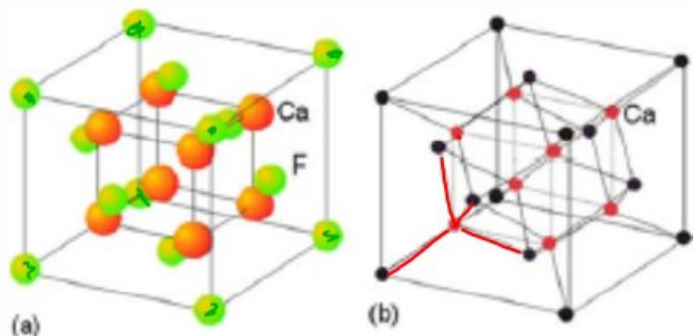


posición átomos	aporte
esquina	$\frac{1}{8}$
mitad lado	$\frac{1}{4}$
cara	$\frac{1}{2}$
cuerpo	1



# Cristaloquímica

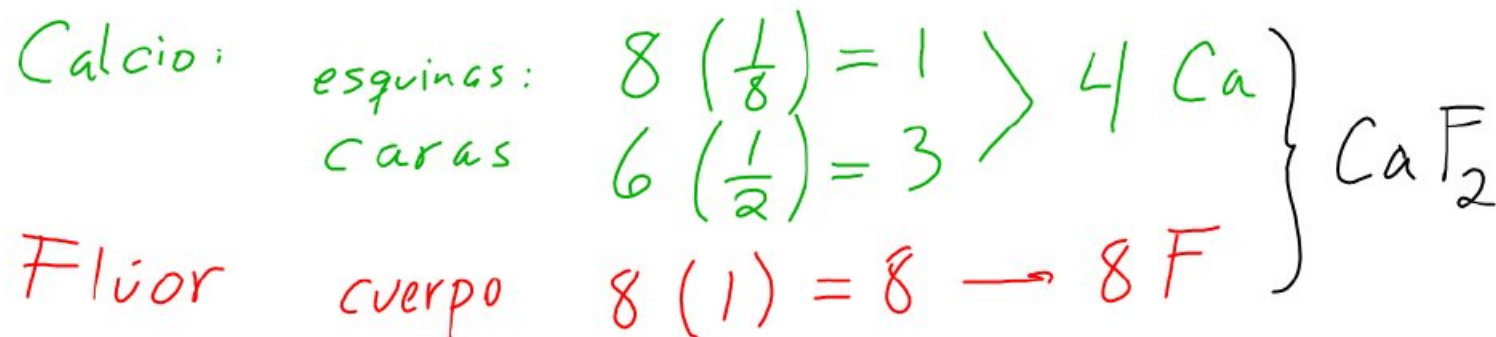
- Determinación de composición



Cúbica centrada  
en las caras

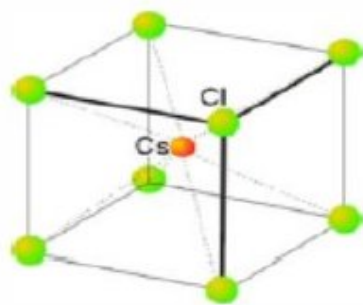
Fluorita ( $\text{CaF}_2$ )

↑ huecos tetrahédricos

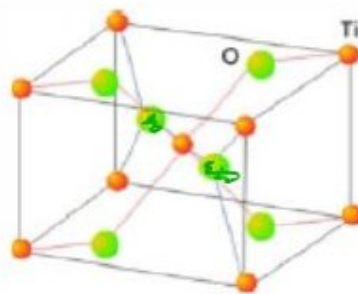
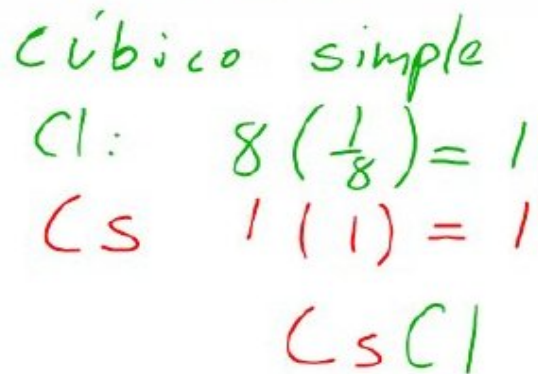


# Cristaloquímica

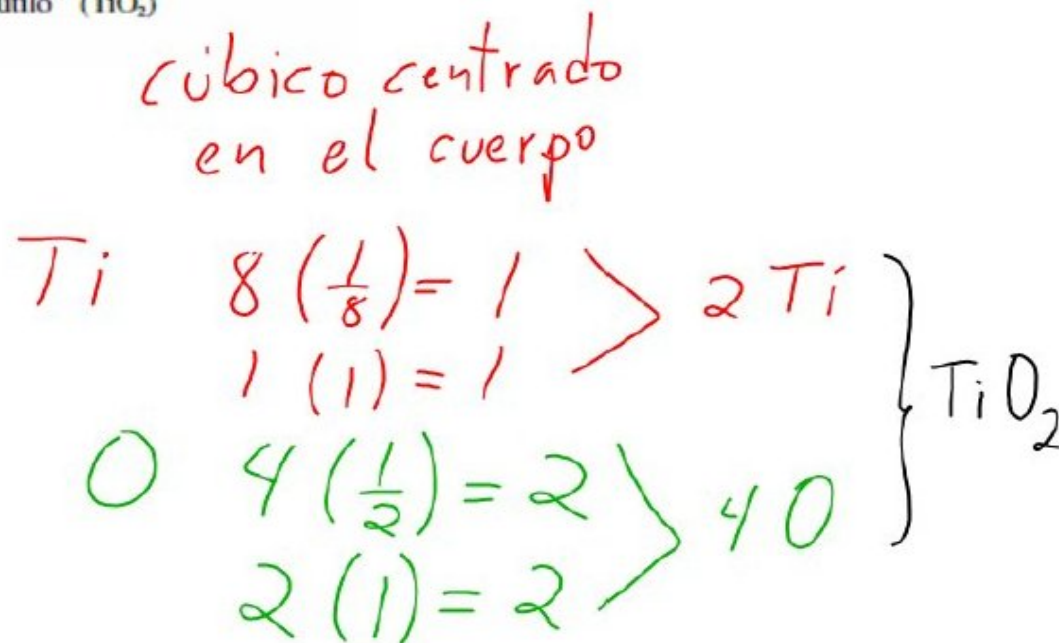
- Determinación de composición



Cloruro de cesio (CsCl)



"Rutilo" (TiO<sub>2</sub>)



# T.O.M. y Cristaloquímica



¡ GRACIAS POR SU  
ATENCIÓN !

Gerardo Barón Sánchez  
gerardobaron@yahoo.com