

Objetivos

Los objetivos de esta práctica son:

- explorar las formas moleculares mediante la construcción de moléculas en 3D empleando el modelo de repulsión de pares de electrones de la capa valencia (RPECV).
- ver cómo cambia la forma molecular con diferentes números de enlaces y pares de electrones.
- comparar las simulaciones de moléculas ficticias con moléculas reales.

Pantalla de modelado

En esta pantalla los estudiantes pueden construir modelos moleculares añadiendo al átomo central átomos con enlace simple, doble o triple, o pares de electrones no compartidos.

The screenshot shows the PhET Molecule Shapes simulation interface. In the center, a 3D model of a trigonal pyramidal molecule is displayed with bond angles of 109.5°. The interface includes a control panel on the right with sections for Bonding (single, double, triple bonds), Lone Pair (lone pair), and Options (Show Lone Pairs, Show Bond Angles). At the bottom, there are checkboxes for Molecule Geometry (Trigonal Pyramidal) and Electron Geometry (Tetrahedral). Callouts point to various features: 'MOVER átomos o rotar molécula para ver el efecto en la geometría molecular' points to the 3D model; 'MOSTRAR u ocultar geometría molecular o electrónica' points to the checkboxes at the bottom; 'AGREGAR o quitar átomos enlazados para ver el efecto en la geometría' points to the Bonding section; 'AGREGAR o quitar pares de electrones no compartidos' points to the Lone Pair section; and 'MOSTRAR u ocultar pares de electrones no compartidos y ángulos de enlace' points to the Options section.

MOVER átomos o rotar molécula para ver el efecto en la geometría molecular

MOSTRAR u ocultar geometría molecular o electrónica

AGREGAR o quitar átomos enlazados para ver el efecto en la geometría

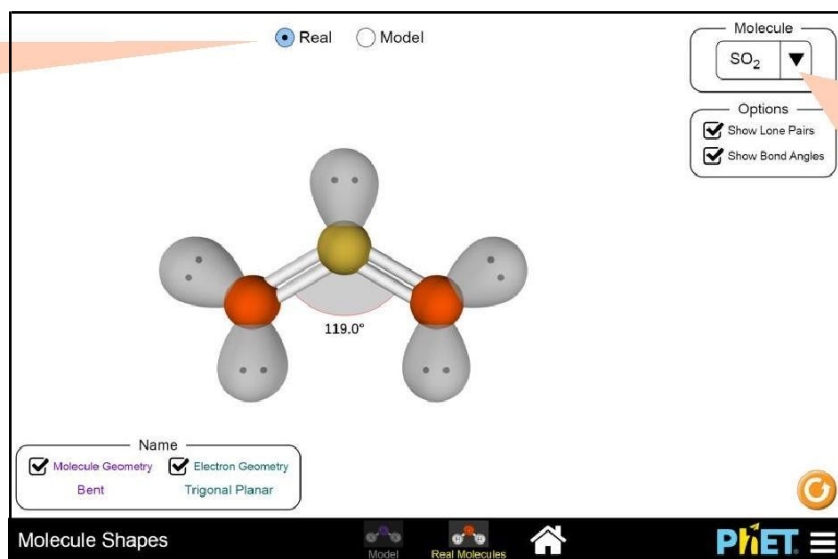
AGREGAR o quitar pares de electrones no compartidos

MOSTRAR u ocultar pares de electrones no compartidos y ángulos de enlace

Pantalla de Moléculas Reales

Comparar la forma y los ángulos de enlace en moléculas reales con los valores pronosticados empleando la teoría RPECV.

VER molécula real o modelo RPECV

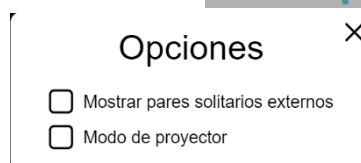
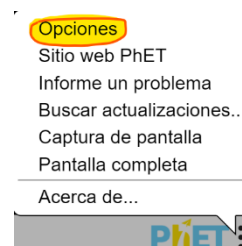


SELECCIONAR que molécula ver

H₂O
CO₂
SO₂
XeF₂
BF₃
ClF₃
NH₃
CH₄
SF₄
XeF₄
BrF₃
PCl₅
SF₆

Otros controles

- Se puede cambiar el fondo de la pantalla de visualización a color blanco para facilitar la proyección de la simulación. Para acceder a esta función, en el menú de la barra de herramientas PhET en la parte inferior, seleccione Opciones, y marque *Modo de proyector*.
- En la pantalla de Moléculas Reales se pueden mostrar los pares de electrones no compartidos en el exterior de los átomos. También se puede acceder a esta función en las Opciones del menú de la barra de herramientas PhET, marcando *Mostrar pares solitarios externos*.



Modelado mediante RPECV

- Este programa utiliza el modelo de repulsión de pares de electrones de la capa valencia (RPECV) para determinar la forma molecular para un número dado de dominios de electrones, tal y como se describe en el manual de la asignatura en la unidad, 4 en la página 10 y siguientes.
- En la pantalla de modelado, los ángulos de enlace que se muestran se obtienen a partir de la geometría básica, usando el modelo RPECV. Con esta pantalla se pretende brindar un conocimiento básico en geometría electrónica y molecular.

- Aunque la simulación no permite agregar más de seis dominios de electrones al átomo central, es posible tener números de coordinación mayores a seis.
- Se pueden construir estructuras no-físicas en la pantalla de modelamiento, ya que el objetivo de la simulación es ayudar a dar sentido a las tendencias en geometría molecular y electrónica, se permite construir estructuras no-físicas.

Desarrollo de la práctica y preguntas



Una vez que hayáis probado varias geometrías dentro de la ventana de *Modelo* **Modelo**, así como de la



de *Moléculas reales* **Moléculas reales** usando las opciones de mostrar o no los pares solitarios para ver la geometría de la molécula y la electrónica se trata de que respondáis las siguientes preguntas:

- Explique por qué el ángulo de enlace en una molécula de agua es de $104,5^\circ$ y no $109,5^\circ$ como se muestra en la pantalla de modelado.
- Explique por qué los ángulos de enlace en algunas moléculas reales no coinciden con el ángulo proyectado por la teoría RPECV – por ejemplo, H_2O , SO_2 , ClF_3 , NH_3 , SF_4 , BrF_5 . (Fíjate en la ventana moléculas reales la diferencia entre real y modelo).
- Construya una molécula que tenga una geometría electrónica octaédrica y una geometría molecular cuadrado planar.
- Describa la diferencia entre la geometría molecular y la geometría electrónica.

En caso de haber usado bibliografía para realizar las prácticas debes indicar todas las fuentes consultas (tanto web, como libros)