

Problema369B: En base al modelo de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV), prediga razonadamente para la molécula de AlCl_3 su geometría electrónica sugiriendo el valor aproximado del ángulo de enlace, e indique el tipo de hibridación que emplearía el átomo de aluminio en la molécula para formar los enlaces correspondientes. ABAU-Jul-2023

AlCl_3

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

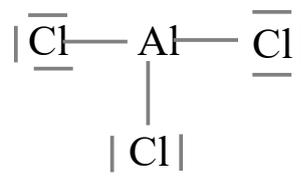
1º átomo central: Al

$$2^\circ \text{ EN} = 6e^- \cdot 1(\text{Al}) + 8e^- \cdot 3(\text{Cl}) = 30e^-$$

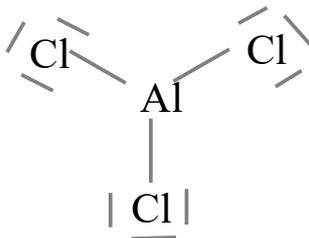
$$3^\circ \text{ ED} = 3e^- \cdot 1(\text{Al}) + 7e^- \cdot 3(\text{Cl}) = 24e^-$$

$$4^\circ \text{ PE} = \frac{\text{EN} - \text{ED}}{2} = \frac{30 - 24}{2} = 3 \text{ pares enlazantes}$$

$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{24 - 2 \cdot 3}{2} = 9 \text{ pares no enlazantes}$$



Según la TRPECV los tres pares electrónicos que están al rededor del Al deben disponerse en una estructura trigonal plana, con ángulos de 120° , para que las repulsiones sean mínimas.



La estructura trigonal plana, con ángulos de 120° , es compatible con los híbridos sp^2 , que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del Al:

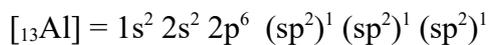
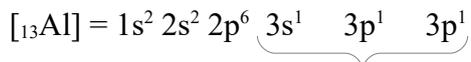
$$[_{13}\text{Al}] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$$

Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del Al solo tenemos un orbital con electrones desapareados, por tanto solo podrá dar lugar a un enlace.

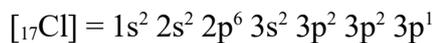
Para que pueda formar tres enlaces el Al debe promocionar un electrón del orbital 2s a un orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.

$$[_{13}\text{Al}] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^1 3p^1$$

Para justificar los ángulos de enlace de 120° , en una estructura trigonal plana, debemos formar tres orbitales híbridos sp^2 a partir de tres orbitales atómicos puros, un 2s y dos 2p.

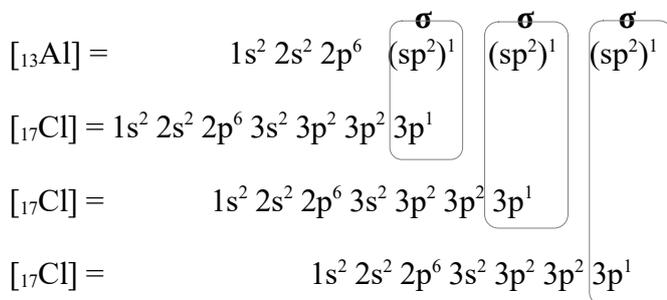


Los átomos de cloro tienen una configuración:



Por tanto el orbital 3p, que tiene un electrón, es el que puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:

