

Geometría de las moléculas

La geometría de las moléculas puede justificarse mediante el modelo de Repulsión de los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (RPECV). Según este modelo, los pares electrónicos de la capa de valencia del átomo central (tanto pares de enlace como pares solitarios) tenderán a estar lo más alejado posible entre sí. Una vez conocida la disposición de todos los pares electrónicos, o sea la estructura de Lewis, la forma de la molécula depende de la situación de sus átomos, sin tener en cuenta la ubicación de los pares de electrones solitarios que pudiera haber.

En el estudio de una molécula cobran especial importancia dos magnitudes:

- **Distancia de enlace** (o longitud de enlace): Distancia entre los núcleos de los átomos que enlazan. Esta distancia depende de los elementos que se unan, y de si el enlace es simple, doble o triple (la distancia en un enlace triple es menor que en uno doble, y esta es menor que en uno simple)

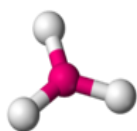
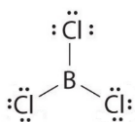
- **Ángulo de enlace**: Ángulo que forman las líneas que unen el átomo central con el resto de los átomos. Los estudiaremos más adelante.

Tanto las distancias como los ángulos de enlace se miden experimentalmente mediante técnicas espectroscópicas, de difracción de rayos X, y otras.

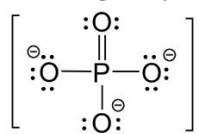
Método para hallar la geometría de una molécula:

Se parte siempre de la estructura de Lewis. Teniendo en cuenta todos los pares de enlace y pares no enlazantes (electrones solitarios), se busca la figura geométrica más simétrica, de forma que todos los pares estén lo más alejados entre sí, para que las repulsiones sean mínimas.

Por ejemplo, BCl_3 (igual que BF_3 , CO_3^{2-} , NO_3^- , SO_3), al átomo central lo rodean tres enlaces, tres pares de enlace y ningún par solitario. ¿Cómo distribuiríamos 3 “cosas” para que estén lo más lejos posible, unas de otras. Evidentemente, en forma de triángulo. Luego su estructura es triangular plana.

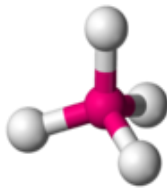
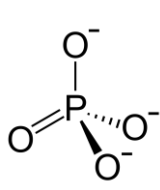
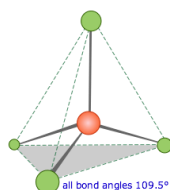


PO_4^{3-} (Igual que el CH_4 , SO_4^{2-} , ClO_4^- , CHCl_3)



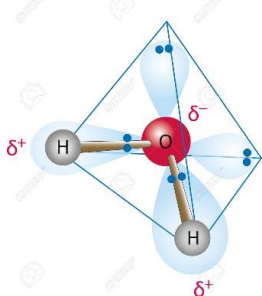
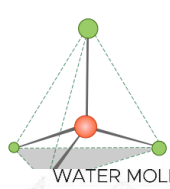
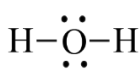
3- Los dobles enlaces, al ser paralelos, se cuentan como una única “cosa” que rodea al átomo central (lo mismo con los triples enlaces)

Luego al P lo rodean 4 “cosas”, la forma en que se distribuirían para que estuvieran lo más alejadas entre sí, no es un cuadrado, sino un tetraedro, cuyos ángulos son de $109,5^\circ$



H_2O , (igual que el OF_2)

Estructura de Lewis H_2O Agua



Cuando hay pares no enlazantes (o solitarios) hay que distinguir entre disposición electrónica y geometría final o real.

Disposición electrónica:

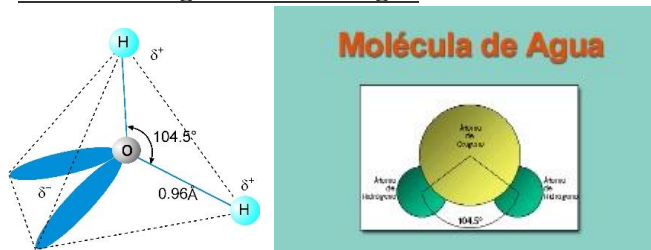
Al O le rodean cuatro “cosas” (2 pares enlazantes y 2 pares solitarios), luego la disposición electrónica inicial es tetraédrica (y no lineal)

En el tetraedro inicial colocamos los 4 pares de e-, da igual en qué posiciones porque es totalmente regular. En dos vértices habrá 2 pares de enlace y en otros dos habrá 2 pares solitarios. Pero los pares solitarios son del O y están sobre él, sin que haya línea de enlace, es decir no hay átomos con los que enlazarse. Así, si mentalmente olvidamos estas líneas de los pares solitarios, podemos deducir su geometría real

Geometría:

Vemos que forma un ángulo. **Geometría angular**

Sobre el el ángulo H-O-H del agua



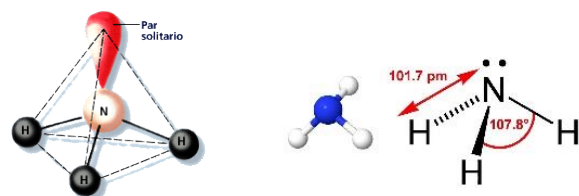
Como la disposición “inicial” es tetraédrica, podríamos pensar que el ángulo es el del tetraedro (109,5°), pero los pares de electrones solitarios se repelen entre sí y a su vez ejercen una repulsión electrostática sobre los electrones de los enlaces O-H, haciendo que el ángulo se haga un poco más agudo; exactamente **104,5°**.

Trascendencia de la geometría del agua

El hecho de que la molécula de agua sea angular y no lineal tiene una trascendencia vital para nuestro mundo, como veremos en las fuerzas intermoleculares.

NH₃, (igual que el PCl₃)

Ocurre algo parecido a lo del agua.
 4 “cosas” (3 pares enlazantes y 1 par solitario) Disposición electrónica inicial tetraédrica
 El par solitario se coloca sobre un vértice del tetraedro y los tres H en los otros vértices

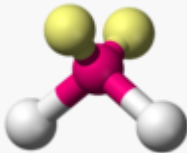

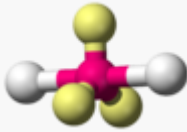

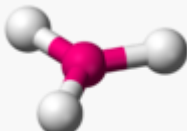
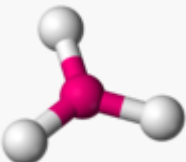
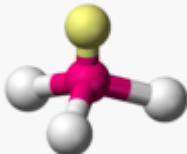
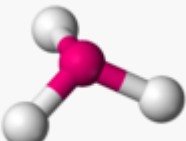
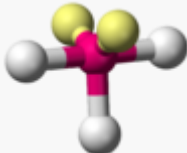
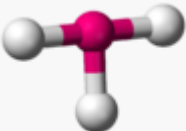
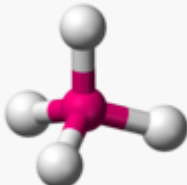
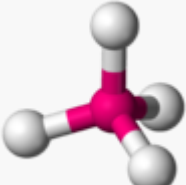




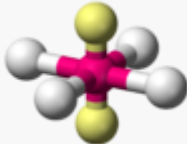
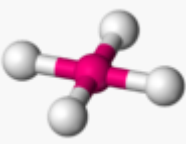
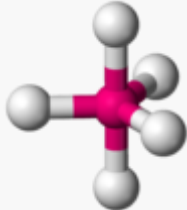
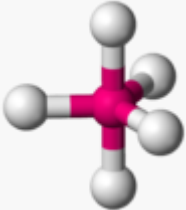
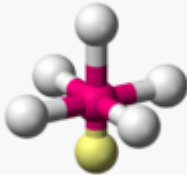
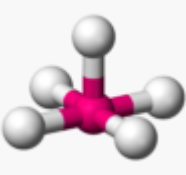

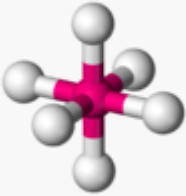
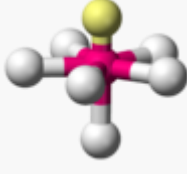
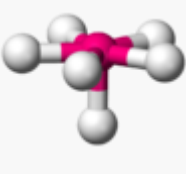

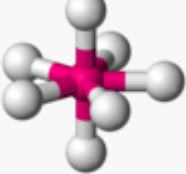
El par solitario está en realidad sobre el N, olvidamos esa falsa línea que los podría unir, pero que no existe porque no hay átomo para enlazarse. Entonces, el N que inicialmente estaba en el centro del tetraedro, ahora queda en el vértice superior de una pirámide trigonal (pirámide base triangular), luego tiene una **geometría de pirámide trigonal**.

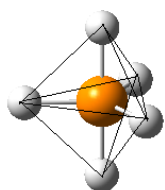
Si hubiese sido un tetraedro, el ángulo H-N-H sería de 109,5°. El par solitario del vértice superior (pegado al N) ejerce una repulsión sobre los pares de enlace cerrándolo un poco. En el caso del agua había 2 pares solitarios y el ángulo se cierra hasta los 104,5°. Como aquí sólo hay un par solitario, no se cierra tanto, 107,8°.

Es como si fuera un efecto “paraguas”

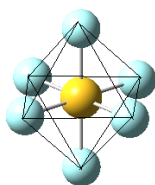
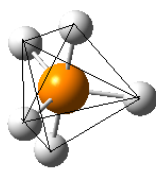
Tipo de molécula	Forma	Disposición electrónica [†]	Geometría [‡]	Ejemplos
AB ₁ E _n	Molécula diatómica			HF, O ₂
AB ₂ E ₀	Lineal			BeCl ₂ , HgCl ₂ , CO ₂
AB ₂ E ₁	Angular			NO ₂ ⁻ , SO ₂ , O ₃

AB_2E_2	Angular			H_2O, OF_2
AB_2E_3	Lineal			XeF_2, I_3^-
AB_3E_0	Triangular plana			$BCl_3, BF_3, CO_3^{2-}, NO_3^-; SO_3$
AB_3E_1	Pirámide trigonal			NH_3, PCl_3
AB_3E_2	Forma de T			ClF_3, BrF_3
AB_4E_0	Tetraédrica			$CH_4, PO_4^{3-}, SO_4^{2-}, ClO_4^- CHCl_3$
AB_4E_1	Balancín			SF_4

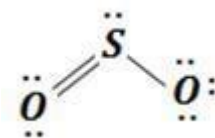
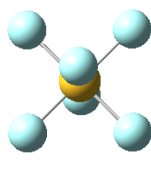
AB_4E_2	Cuadrada plana			XeF ₄
AB_5E_0	Bipirámide trigonal			PCl ₅
AB_5E_1	Pirámide cuadrada			ClF ₅ , BrF ₅
AB_6E_0	Octaédrica			SF ₆
AB_6E_1	Pirámide pentagonal			XeOF ₅ , IOF ₂ ⁻
AB_7E_0	Bipirámide pentagonal			IF ₇



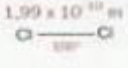


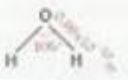


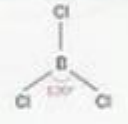





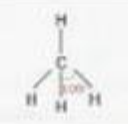


PCl₅ GEOMETRÍA BIPIRÁMIDE TRIGONAL
5 PARES ELECTRÓNICOS DE VALENCIA



SF₆ GEOMETRÍA OCTAÉDRICA
6 PARES ELECTRÓNICOS DE VALENCIA



Nome e fórmula da substância	Modelo molecular	Nuvem electrónica	Fórmula de estrutura	Geometria molecular
Cloro Cl_2			$1,99 \times 10^{-10} \text{ m}$ 	linear
Água H_2O				angular
Tricloreto de boro BCl_3				triangular plana
Amoniaco NH_3				piramidal
Metano CH_4				tetraédica

Moléculas que han salido en las PAU Valencia

Molécula	Nº de veces	Forma	Polaridad
CO_2	1	Lineal	Apolar
BeH_2	1	Lineal	Apolar
BF_3	1	Triangular plana	Apolar
BCl_3	1	Triangular plana	Apolar
BI_3	1	Triangular plana	Apolar
CCl_4	3	Tetraédrica	Apolar
NH_4^+	1	Tetraédrica	Polar
NH_3	1	Pirámide trigonal	Polar
NF_3	1	Pirámide trigonal	Polar
NCl_3	4	Pirámide trigonal	Polar
PCl_3	1	Pirámide trigonal	Polar
PI_3	1	Pirámide trigonal	Polar
H_2O	1	Angular	Polar
F_2O	1	Angular	Polar
Cl_2O	4	Angular	Polar
BF_4^-	1	Tetraédrica	Polar
F_2CO	1	Triangular plana	Polar