

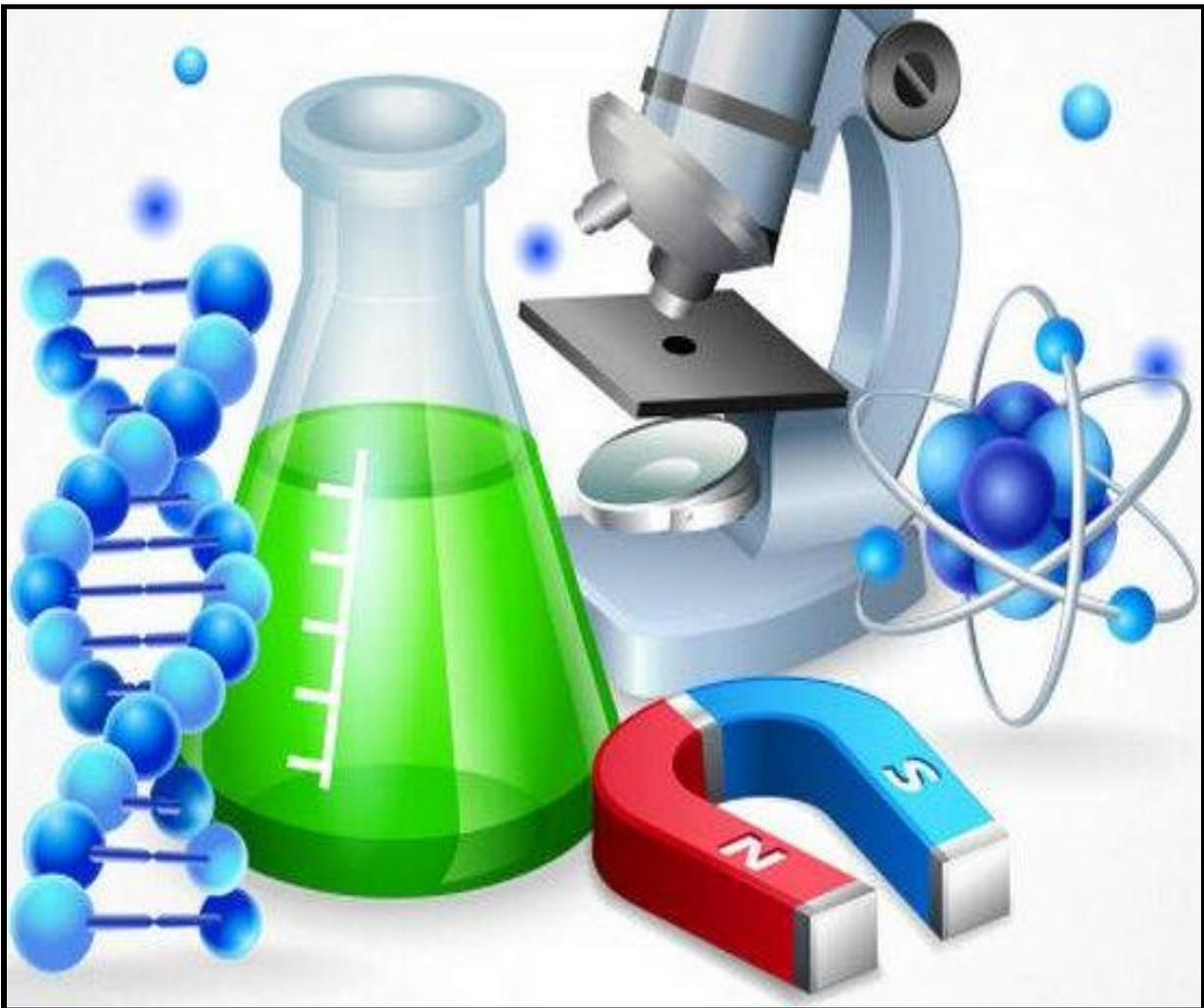


MATERIAL 2

GEOMETRÍA MOLECULAR

Alumno(a):

Curso:



GEOMETRÍA MOLECULAR

ESTRUCTURA DE LEWIS, REGLA DEL OCTETO

Lewis fue uno de los primeros en intentar proponer una teoría para explicar el enlace covalente, por ello creó notaciones abreviadas para una descripción más fácil de las uniones atómicas, que fueron denominadas las estructuras de Lewis.

**En la Tabla periódica
el número de grupo equivale a los
electrones de valencia**

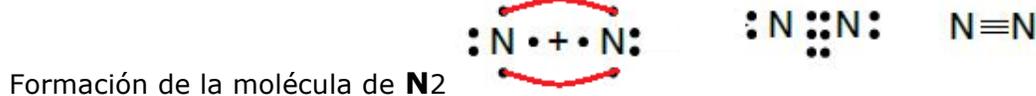
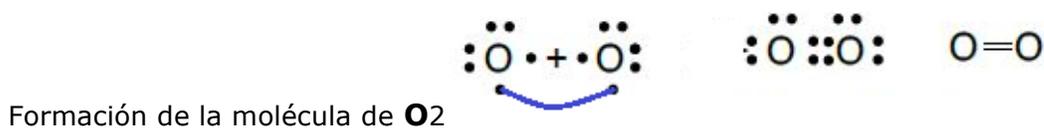
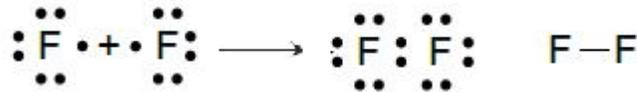
Grupos		1 (IA)	2 (IIA)	13 (IIIA)	14 (IVA)	15 (VA)	16 (VIA)	17 (VIIA)	18 (VIII)
1	Periodos	Hidrógeno 1 							Helio 2
2		Litio 3 	Berilio 4 	Boro 5 	Carbono 6 	Nitrógeno 7 	Oxígeno 8 	Flúor 9 	Neon 10
3		Sodio 11 	Magnesio 12 	Aluminio 13 	Silicio 14 	Fósforo 15 	Azúfre 16 	Cloro 17 	Argón 18

Lewis propuso representar los electrones de valencia de los átomos mediante puntos. Se debe considerar que a cada lado del átomo puedes colocar un máximo de dos electrones (2 puntos), es decir un máximo de ocho por cada átomo.

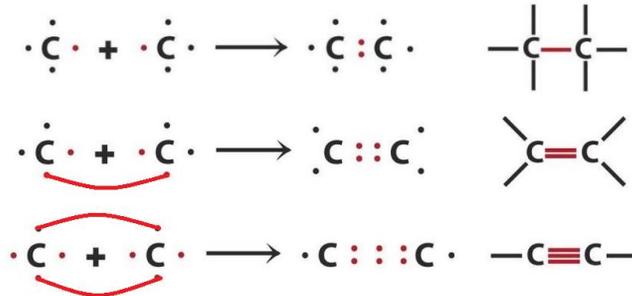
Estructuras de Lewis

1	2	3	4	5	6	7	8
H•							•He•
Li•	•Be•	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
K•	•Ca•	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
Rb•	•Sr•	•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
Cs•	•Ba•						

La estructura electrónica de moléculas en base a la configuración de octetos, necesariamente deja pares de electrones sin usar. Estos pares, ubicados alrededor de un átomo central, deben situarse de manera que la repulsión electrostática entre los pares, sea mínima. Así, lo primero, en base a la propuesta de Lewis, es representar los electrones como puntos, luego decidir cuál átomo se considera central para luego analizar qué pasa con los pares de electrones alrededor de éste.



Formación de alcanos, alquenos y alquinos:



La representación de enlaces con líneas fue propuesta por Kekulé.

Dado que la teoría de Lewis es insuficiente para explicar todas las características del enlace covalente se recurrió a la **Mecánica Cuántica**, para utilizar dos métodos que se aproximan: la **teoría del enlace de valencia** y la **teoría de orbitales moleculares**, ambos se utilizan en la actualidad por su carácter complementario.

Teoría del enlace de valencia y Teoría de orbitales moleculares

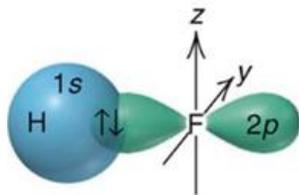
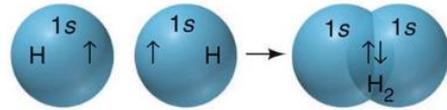
Esta teoría supone que cuando dos átomos aislados se aproximan, para formar un enlace covalente, se produce un solapamiento de sus orbitales atómicos generando un enlace molecular cuando se aparean los electrones de spines contrarios de cada orbital. Aparecen por lo tanto enlaces dirigidos en el espacio.

Si el solapamiento de los orbitales es grande el enlace será muy fuerte, y se le denomina enlace **sigma** (σ). Si el solapamiento es menor, el enlace será débil, dando lugar a un enlace de tipo **pi** (π). Se forman enlaces σ cuando solapan dos orbitales de tipo **s**, uno **s** y otro **p** o dos orbitales **p** siempre que estén orientados en el mismo eje; cuando se solapan dos orbitales **p** con ejes paralelos el enlace será π .

Orbitales moleculares sigma (σ): Los orbitales atómicos se solapan frontalmente y se produce un único solapamiento de las respectivas nubes electrónicas. Tiene un eje de simetría con respecto a la línea que une los dos núcleos. Una rotación con respecto a dicho eje no produce ningún cambio. La máxima probabilidad de encontrar a los electrones en este tipo de orbitales, se concentra entre los dos núcleos fundamentalmente.

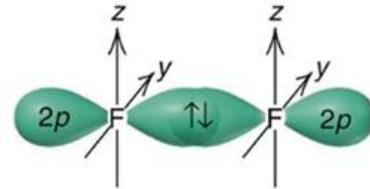
Por ejemplo:

Traslape de orbitales "s" del hidrógeno, en la molécula de H_2

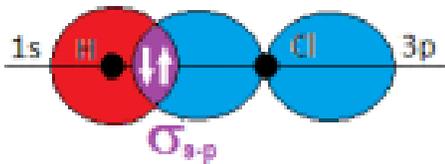
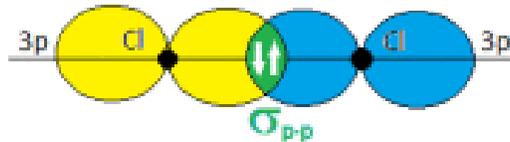


Traslape del orbital s del hidrógeno y el orbital p del flúor, en la molécula de HF

Traslape de los orbitales "p" del flúor, en la molécula F_2

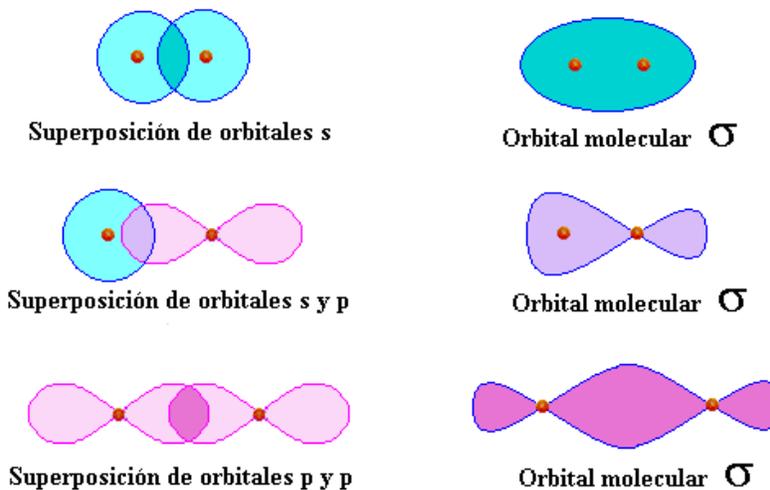


Molécula de Cl_2 , traslape de orbitales "p"



Traslape del orbital s del hidrógeno y el orbital p del cloro, en la molécula de HCl

Resumen del traslape en la formación de enlaces sigma



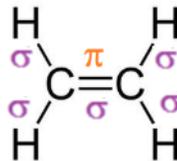
Orbitales moleculares pi (π): Los orbitales atómicos se solapan lateralmente y se produce dos o más solapamiento de las respectivas nubes electrónicas. Existe un **plano nodal de simetría** que incluye a los núcleos y la máxima probabilidad de encontrar a los electrones en el orbital molecular formado no se concentra entre los núcleos:



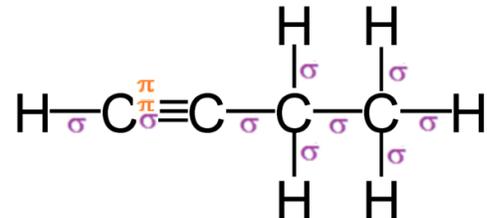
Un orbital molecular es tanto más estable cuanto mayor es el grado de solapamiento entre los orbitales atómicos que lo forman. Los orbitales moleculares σ son más estables que los π porque el grado de solapamiento de los orbitales "s" es mayor que el de los "p".

Por ejemplo, para la molécula de eteno

Presenta 5 enlaces σ y 1 enlace π



La molécula de propino, presenta 9 enlaces σ y 2 enlaces π



Características de la teoría del enlace de valencia:

- En esta teoría suponemos que los orbitales se solapan a lo largo de una determinada trayectoria, siendo **enlaces direccionales**.
- Los orbitales del átomo que no se enlazan no cambian su estructura.
- En cada átomo se pueden formar tantos enlaces como electrones desapareados tenga el átomo.
- Se llama **covalencia** de un elemento al número de enlaces covalentes que puede formar, es decir el número de electrones desapareados que tiene.

Enlaces Entre Orbitales Híbridos

Enlace σ	Enlace π
Formado por superposición frontal de orbitales atómicos sp^3	Formado por superposición lateral de orbitales p (u orbitales p y d)
Tiene simetría de carga cilíndrica alrededor del eje de enlace	Tiene una densidad de carga máxima en el plano transversal de los orbitales
Tiene rotación libre	No permite la rotación libre
Es un enlace de alta energía	Posee energía baja
Solamente puede existir un enlace entre dos átomos.	Pueden existir uno o dos enlaces entre dos átomos

Esta teoría explica la geometría de las moléculas basándose en el carácter direccional de los orbitales que solapan para formar el enlace covalente.

GEOMETRÍA MOLECULAR

La geometría alrededor de un átomo central de una molécula, es aquella que hace mínima la repulsión de los pares de electrones, los usados para formar enlaces y los pares solitarios no usados (E).

La estructura electrónica de moléculas en base a la configuración de octetos, necesariamente deja en libertad pares de electrones. Estos pares, ubicados alrededor de un átomo que se considere central, deben situarse de manera que la repulsión electrostática entre dos pares, sea mínima. Así, lo primero es hacer un balance electrónico de la molécula en base a octetos, luego decidir qué átomo se considera central para luego analizar lo que ocurre con los pares de electrones alrededor de éste.

Ejemplos

El Berilio pertenece al grupo II A ($1s^2 2s^2$), por lo tanto tiene dos electrones de valencia en su capa externa, de modo que para que estos se encuentren lo más alejados posibles, al enlazarse con otros elementos, por ejemplo el cloro, formarán un ángulo de 180° entre sí, generando la máxima separación entre los pares de electrones uniéndose en enlaces simples con el Cloro.



Esto nos genera la estructura lineal para BeCl_2 .

Para el CO_2 , no quedan electrones libres. Recordemos que la configuración electrónica del C es $1s^2 2s^2 2p^2$, tiene 4 e en su capa de valencia y al unirse con dos Oxígenos que tienen 2 e enlazantes cada uno, se forman enlaces de dos pares de e con cada oxígeno, se forman dos enlaces dobles y la molécula es lineal.

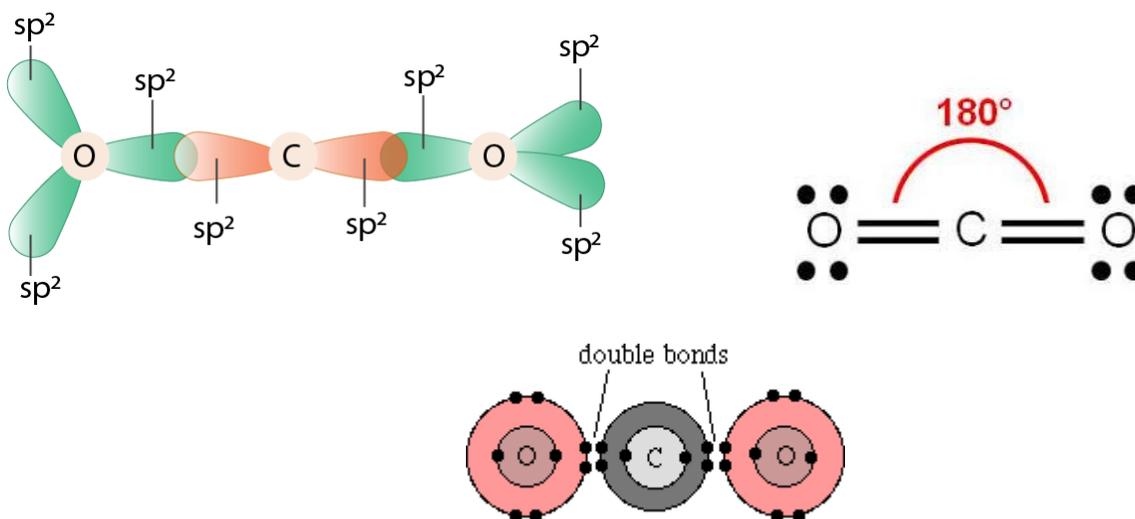
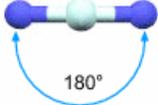
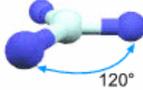
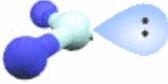
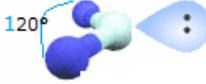
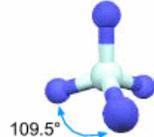
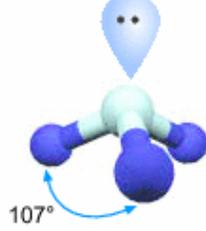
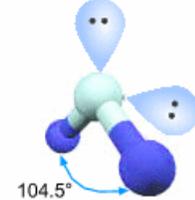
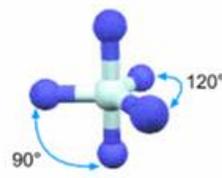
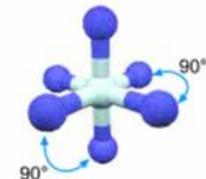


TABLA DE LAS FORMAS GEOMÉTRICAS DE LAS MOLÉCULAS

Expresión geométrica	Tipo de geometría	ángulo de enlace
AX_2	 Lineal	 180°
AX_3	 Trigonal plana	 120°
AX_3E	 Angular	 120°
AX_4	 Tetraédrica	 109.5°
AX_3E	 Piramidal	 107°
AX_2E_2	 Angular	 104.5°
AX_5	 Bipirámide de base triangular	 120° 90°
AX_6	 Bipirámide de base cuadrada	 90° 90°

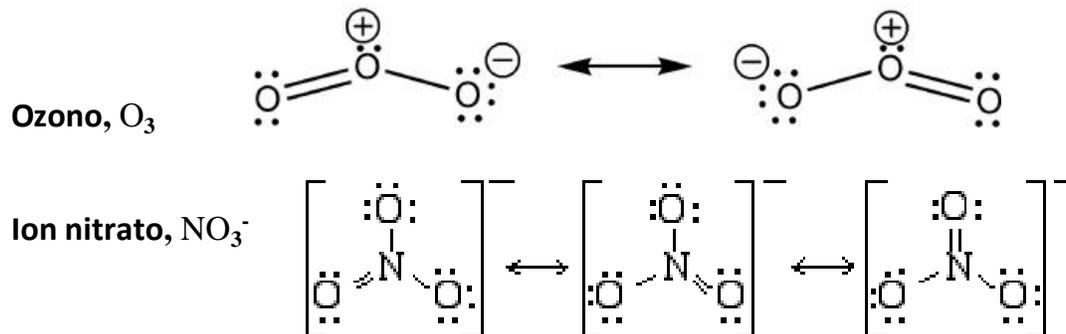
Para ésta tabla **A**, es el átomo central, **X**, los elementos que se enlazan directamente al átomo central y **E**, son los pares electrónicos no utilizados. Notar que los pares de electrones no enlazantes (E) ocupan un espacio que influye en la forma geométrica de la molécula.

Ejemplos: A partir de Lewis podemos predecir: expresión geométrica, tipo de geometría, ángulos de enlace, cantidad y tipo de enlaces, polaridad y estructura de la molécula.

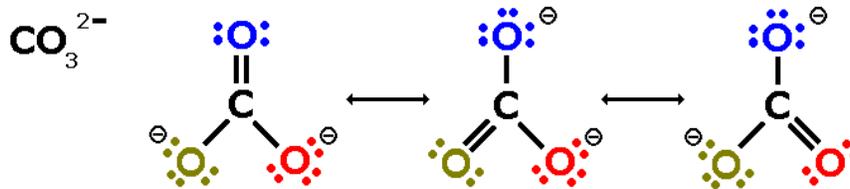
molécula	Representación de Lewis	Geometría esperada	Polaridad de la molec. Tipo de geometría
Acido Clorhídrico, HCl		$\delta^+ \quad \delta^-$ H—Cl	Polar, lineal AX
anhídrido carbónico, CO ₂		180° 	Apolar, lineal AX ₂
Agua, H ₂ O		95.84 pm 104.45° 	Polar, angular AX ₂ E ₂
Trifluoruro de boro, BF ₃		131.3 pm 	Apolar, triangular plana AX ₃
Metano, CH ₄		109.5° 	Apolar, tetraédrica AX ₄
Tricloruro de fósforo, PCl ₃		204 pm 100° 	Piramidal, AX ₃ E
Pentacloruro de fósforo, PCl ₅		202 pm 214 pm 90° 120° 	Apolar, bipirámide de base triangular AX ₅
Sulfuro de hexafluor, SF ₆		156.4 pm 90° 	Apolar, bipirámide de base cuadrada AX ₆

Enlaces múltiples

Para moléculas con enlaces dobles, enlaces triples, etc., tomemos la estructura del ion NO_3^- , para él se requiere escribir tres estructuras resonantes:



El ion carbonato:



Molécula de anhídrido sulfúrico:

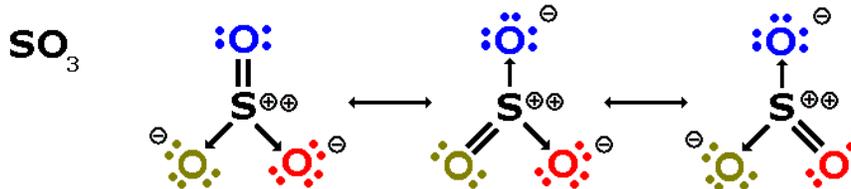


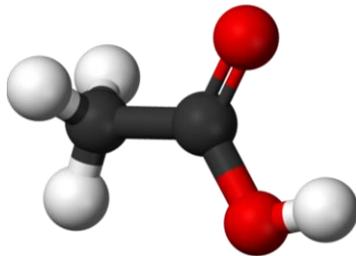
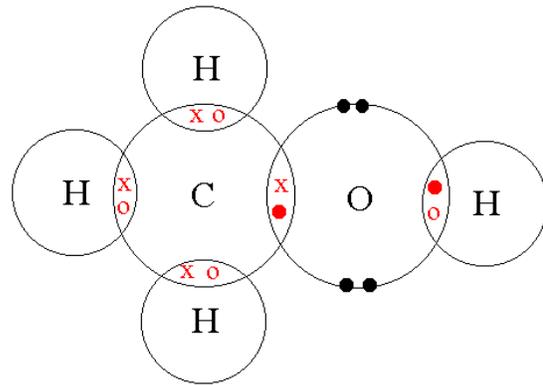
Tabla Resumen Geometría Molecular

Geometría electrónica	Representación	Ángulo	Hibridación	Ejemplo
Lineal	AX_2	180°	sp	BeH_2
Triangular plana	AX_3	120°	sp^2	BF_3
Angular	AX_2E	120°	Sp	SO_2
Tetraédrica	AX_4	109.5°	sp	SiH_4
Piramidal	AX_3E	109.5°	sp	NCl_3
Angular	AX_2E_2	109.5°	sp	H_2O
Bipirámide triangular	AX_5	$180^\circ, 120^\circ$ y 90°	sp^3d	AsCl_5
Octaédrica	AX_6	180° y 90°	sp^3d^2	SF_6

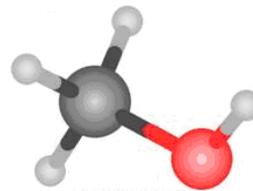
Moléculas que contienen más de un átomo central

Para ilustrar estos casos, usemos la molécula de Metanol (CH_3OH). La geometría se puede predecir investigando previamente como se ordenan los pares enlazantes alrededor de cada uno de los átomos participantes, que no son de los extremos, esto es, Carbono y Oxígeno.

Nótese que hay 4 pares solitarios de electrones alrededor del carbono, que lo obligan a adoptar una forma tetraédrica. Alrededor de éste, se ubican 3 átomos H y el átomo O que proviene del grupo OH, adopta geometría angular.



Ácido acético



Etanol

