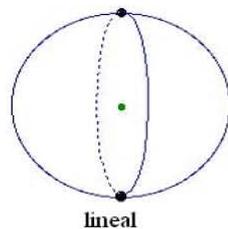
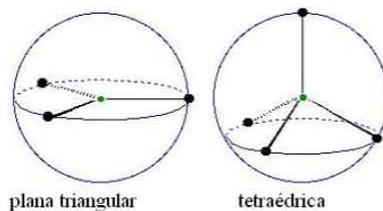


GEOMETRÍA DE LAS MOLÉCULAS – METODO VSEPR

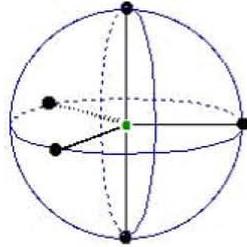
VSEPR: Valence Shell Electron Pair Repulsion. Gillespie desarrolló las ideas de Sydguik y Powell. Para dos pares de electrones el arreglo es simple y la energía mínima es cuando los pares de electrones forman un arreglo lineal con el núcleo:



Tres pares de electrones se pueden arreglar “trigonalmente” (i.e. con ángulos de 120° entre ellos). Esta es una estructura llamada plana triangular. Para cuatro pares la estructura tetraédrica (con ángulos de 109.28°) es la conveniente. Para propósitos de ilustración, los pares de electrones se pintan como puntos.

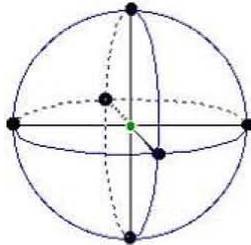


El caso de coordinación 5 es más complicado. La mayoría de las moléculas tienen estructura *bipiramidal con base triangular*



bipiramidal con base triangular

Para sistemas con coordinación seis, la geometría *octaédrica es la más importante*.



< octaedro

Una molécula se representa por la fórmula **AX_mEn**: A es el átomo central, X representa a los átomos o moléculas ligados a A y m es el número de ellos, E representa a los n pares libres.

Ejemplo: H₂O tiene la representación AX₂E₂ en el método VSEPR.

La geometría básica de la molécula estará dada por la suma m+n.

m+n	geometría básica fórmula derivada	fórmula	
2	lineal	AX ₂ E ₀	
3	plana triangular	AX ₃ E ₀	AX ₂ E ₁
4	tetraedro AX ₂ E ₂	AX ₄ E ₀	AX ₃ E ₁
5	bipirámide con base triangular AX ₃ E ₂ AX ₂ E ₃	AX ₅ E ₀	AX ₄ E ₁
6	octaedro	AX ₆ E ₀	AX ₅ E ₁ AX ₄ E ₂

Ejemplos.

AX₂E₀ : BeCl₂, CO₂

AX₃E₀: BF₃, AlCl₃

AX₄E₀: CH₄, POCl₃

AX₅E₀: PCl₅, PF₅

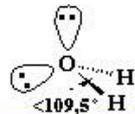
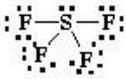
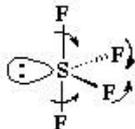
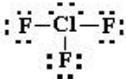
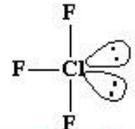
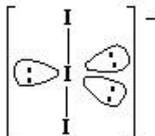
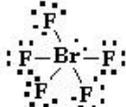
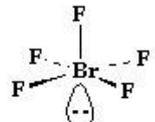
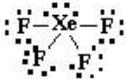
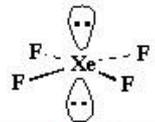
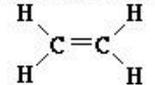
La Tabla siguiente nos da algunos ejemplos de AX_mE_n

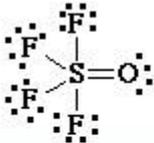
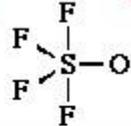
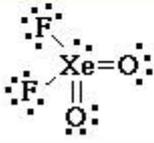
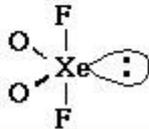
A = átomo central

X = átomos vecinos

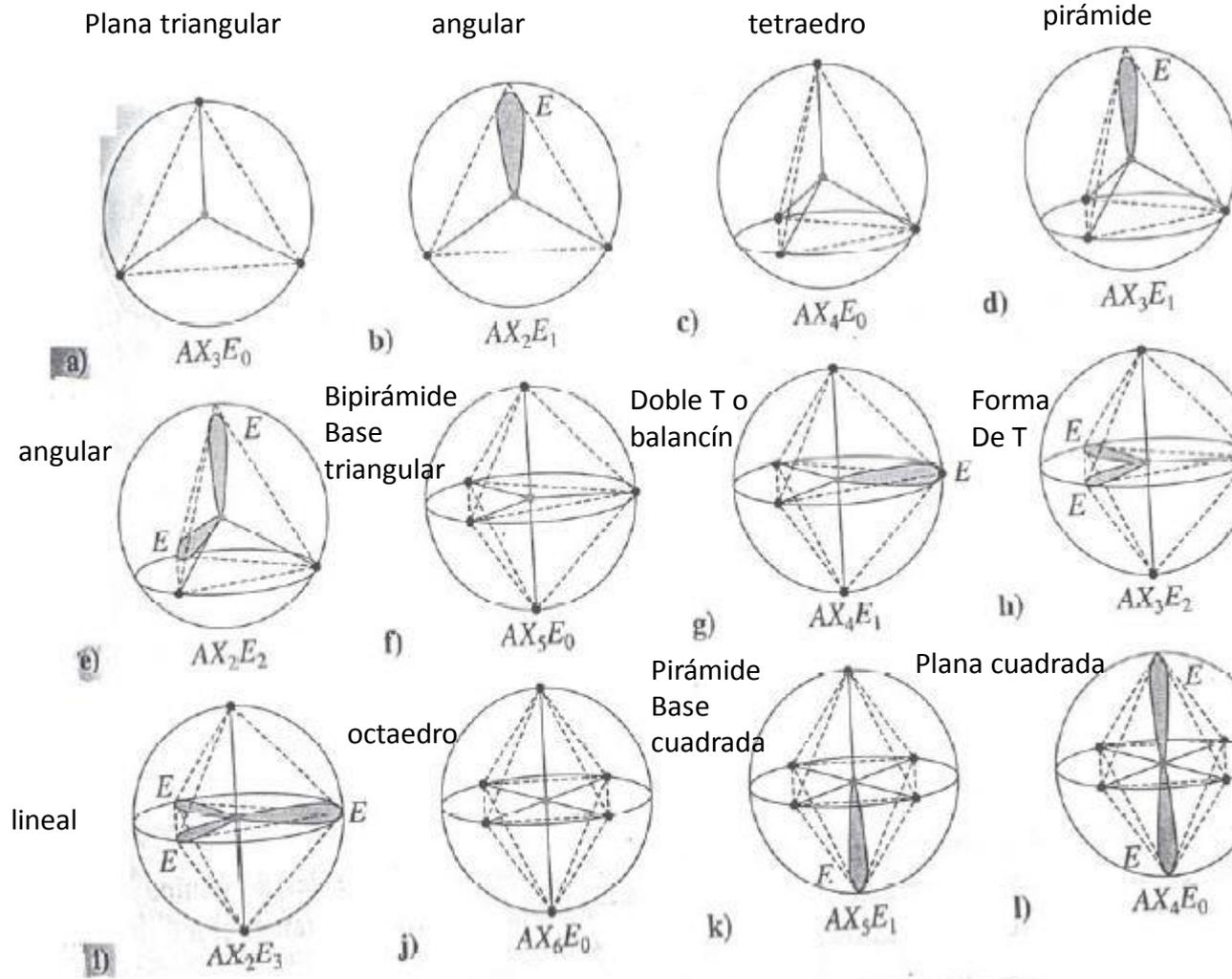
E = pares libres alrededor del átomo central

Molécula	Estructura de Lewis	Enlaces	Pares solitarios	Geometría molecular
BeCl ₂		2	0	lineal Cl—Be—Cl
BF ₃		3	0	triangular plana
CH ₄		4	0	tetraédrica
PCl ₅		5	0	bipirámide trigonal
SF ₆		6	0	octaédrica
SnCl ₂		2	1	angular
NH ₃		3	1	pirámide trigonal

H_2O	$\text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{H}$	2	2	angular 
SF_4		4	1	tetraedro deformado o balancín 
ClF_3		3	2	forma de T 
I_3^-	$[\text{:I}-\ddot{\text{I}}-\text{:I:}]^-$	2	3	lineal 
BrF_5		5	1	pirámide cuadrada 
XeF_4		4	2	plano-cuadrada 
CO_2	$\text{:O}=\text{C}=\text{O:}$	2	0	lineal $\text{O}=\text{C}=\text{O}$
C_2H_4	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}=\text{C}-\text{H} \end{array}$	3 (cada carbono)	0	triangular plana (en torno de cada carbono) 

SOF_4		<p style="text-align: center;">5</p>	<p style="text-align: center;">0</p>	<p style="text-align: center;">bipirámide trigonal</p> 
XeO_2F_2		<p style="text-align: center;">4</p>	<p style="text-align: center;">1</p>	<p style="text-align: center;">balancín</p> 

Las siguientes figuras resumen entonces las diferentes geometrías que se pueden formar (en sombreado aparece el par libre)



$$AX_mE_n (S = m + n \geq 3).$$