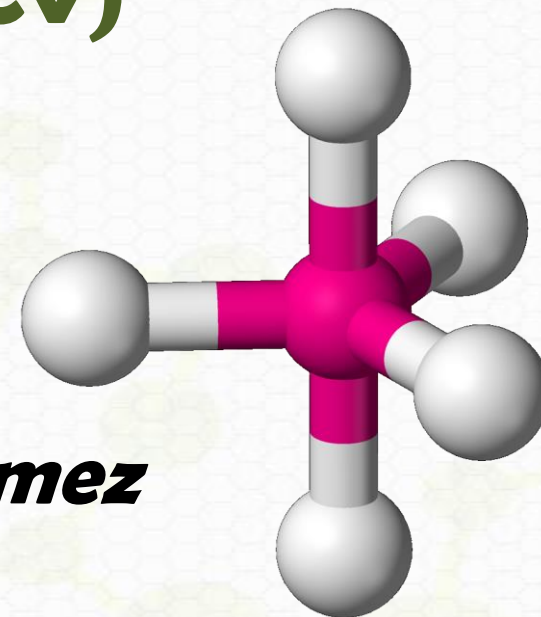


GEOMETRÍA MOLECULAR:

Teoría de **R**epulsión de los **P**ares de **E**lectrones de la **C**apa de **V**alencia (TRPECV)



Caterine Daza Gómez



Química Inorgánica

Estructura de Lewis

- 1) Determinar el número total de electrones de la capa de valencia.
- 2) Identificar el átomo o átomos centrales y los átomos terminales. El átomo central suele ser el de menor electronegatividad. El hidrógeno nunca es un átomo central.
- 3) Escribir el esqueleto y unir los átomos mediante enlaces simples.
- 4) Por cada enlace, descontar 2 electrones de valencia.
- 5) Con los electrones restantes, completar en primer lugar los octetos de los átomos terminales y, después, en la medida de lo posible, los octetos de los átomos centrales.
- 6) Si a algún átomo central le falla un octeto, formar enlaces covalentes múltiples transformando electrones de pares solitarios de los átomos adyacentes.

$$C = N - D$$

C = N° total de e⁻ compartidos de la molécula

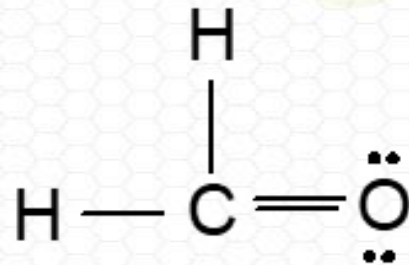
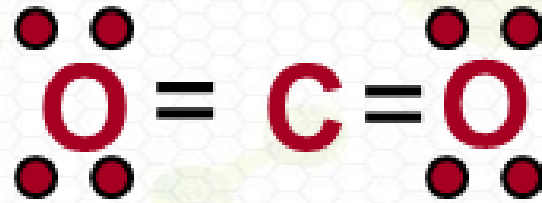
N = N° total de e⁻ de valencia necesarios para que todos los átomos de la molécula adquieran configuración de gas noble

D = N° de e⁻ disponibles de la capa de valencia de todos los átomos

Estructura de Lewis

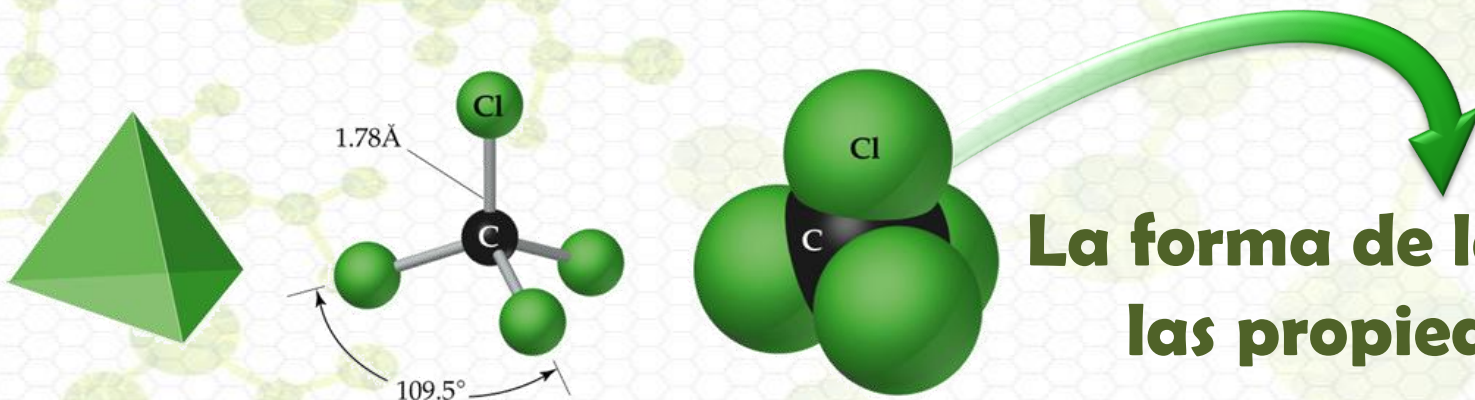


$$\text{C} = (8e^- \times 3) - 16e^- = 8e^- \text{ Compartidos}$$



Carga formal = (N° e⁻ de valencia) - 1/2(N° e⁻ compartidos) - (N° e⁻ no compartidos)

¿Por qué es importante la geometría?



La forma de las moléculas determina las propiedades de la sustancia

Simetría

**Determinar grupos puntuales
Orbitales moleculares
Resonancia Magnética Nuclear**

Momentos dipolares

Espectroscopia IR

Propiedades físicas

Recordando...



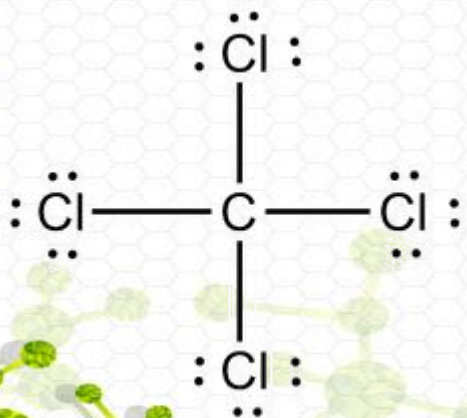
**Teoría Gillespie-Nyholm
(1940)**



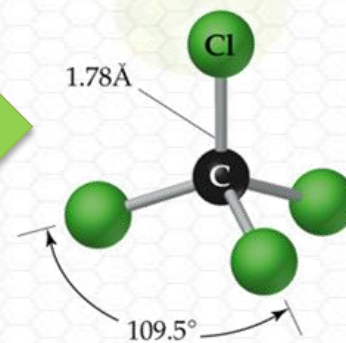
**La forma de las moléculas determina
las propiedades de la sustancia**

Limitaciones de las estructuras de Lewis

**Las estructuras de Lewis no dan información de la
forma de las moléculas. Tampoco sirven en general
para determinar si la especie química existe.**



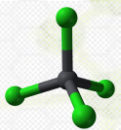
¿Puede ser plana la
molécula de CCl_4 ?



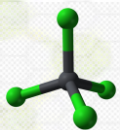
La molécula de CCl_4 ,
experimentalmente se
encuentra que los ángulos
de enlace Cl-C-Cl son
todos iguales y de $109,5^\circ$

5

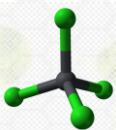
Conceptos básicos de la TREPECV



Los pares de electrones se repelen entre sí, tanto si se encuentran formando enlaces (**pares de enlace**) como cuando están sin compartir (**pares solitarios**).

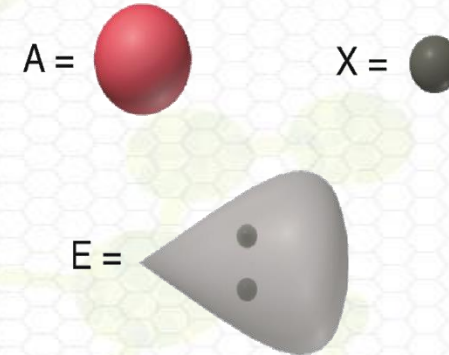


Los pares de electrones (tanto solitarios como de enlace) se distribuyen en torno al átomo central de modo que se **minimicen las repulsiones** entre ellos



La geometría molecular viene definida por **distribución espacial** de los átomos que integran la molécula.

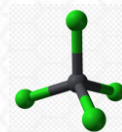
Descripción general



 Donde **A** es el átomo central

 **X** describe cualquier átomo alrededor de **A**

 **E** representa los pares de **electrones libres** sobre el átomo central

 **El número de coordinación**, número de posiciones ocupadas por átomo o pares electrónicos alrededor de **A**

Cálculo del número de coordinación

$$\mathbf{NC} = x + \frac{(n - 8x)}{2} = \left(\frac{n}{2} \right) - 3x$$

X = átomos no centrales (ligantes)

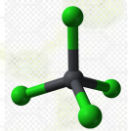
n = e⁻ de valencia de toda la molécula

Reglas

1 Magnitud de repulsión de pares electrónicos

Los pares electrónicos se distribuyen alrededor de un átomo central de manera que se minimicen las repulsiones entre ellos

PS-PS > PS – PC > PC-PC > PS-Rad > PC-Rad > Rad-Rad

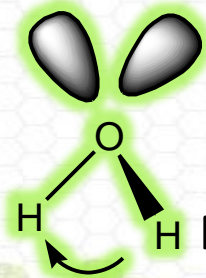


PS = Par Solitario

PC = Par enlazado

Rad = Radical libre

Interacciones entre pares con ángulos $\geq 120^\circ$ no son importantes

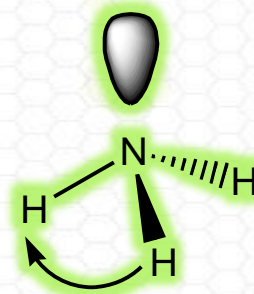


2 Pares solitarios

vs

Pares compartidos

104.5°



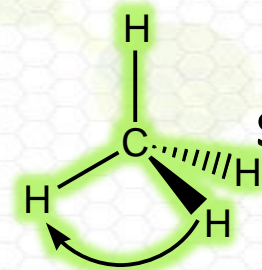
Pare solitario

vs.

Pares

compartidos

107.3°



Sin pares libres

109.4°

Efecto de la diferencia de electronegatividad

2 Efecto de la diferencia de la diferencia de electronegatividad entre el átomo central y los terminales (ligandos)



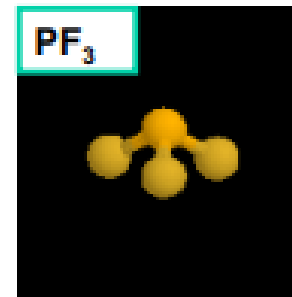
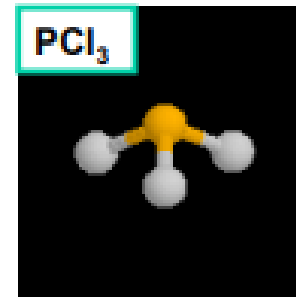
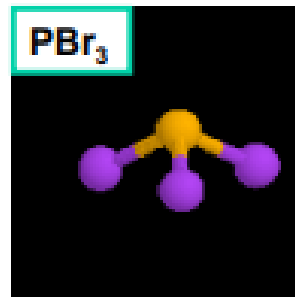
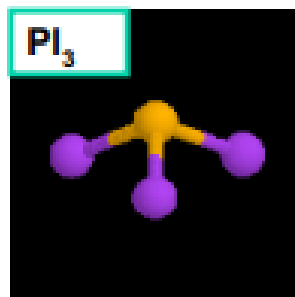
El volumen de un par electrónico de enlace disminuye al aumentar la electronegatividad del ligando

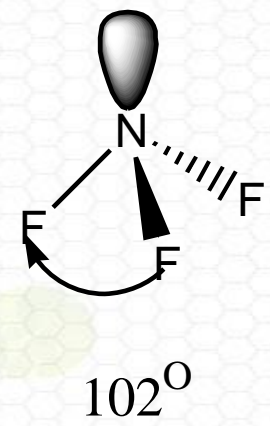
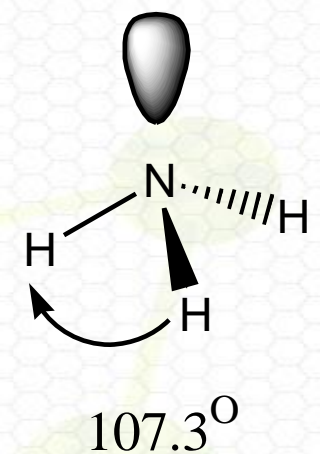
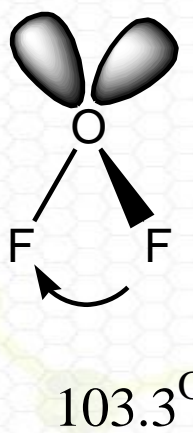
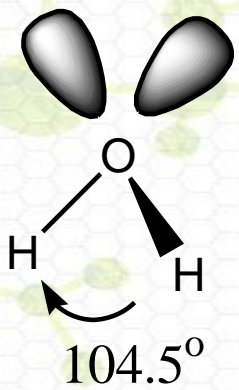


Trihaluros de fósforo PX_3

$\chi(P)=2.19$

	PI_3	PBr_3	PCl_3	PF_3
$\chi(x)$	2.66	2.96	3.16	3.98
Ángulo X-P-X	102°	101.5°	100.3°	97.8°





↕
Par de enlace

Más cerca átomo electronegativo

Átomo periférico más electronegativo

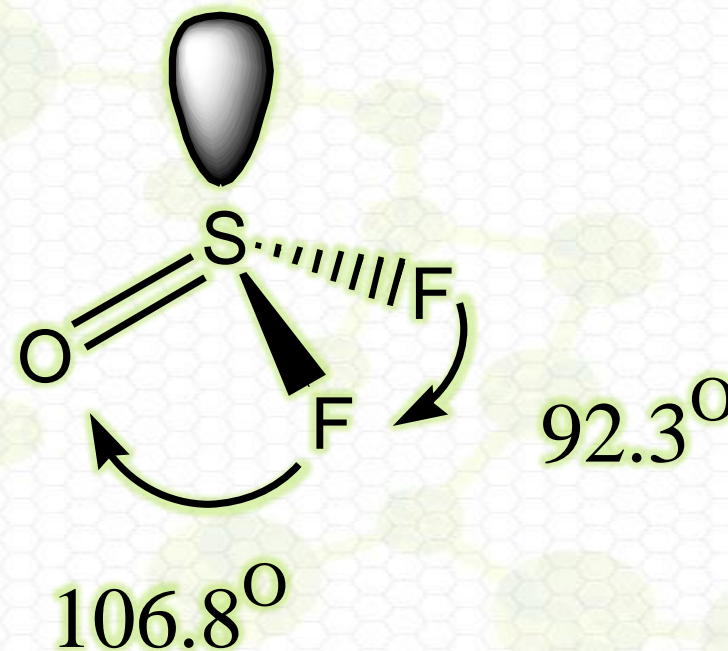
Menos interacción con pares átomo central

Átomo central más electronegativo

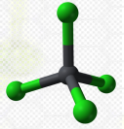
Mayor interacción repulsiva con pares electrónicos 11

3 La repulsión PC-PC aumenta si uno de los enlaces es múltiples, por lo tanto el ángulo en este caso aumenta

Un doble enlace tiene una mayor densidad electrónica comparado con un enlace simple, y repele los electrones del enlace simple mas de lo que se repelerian entre los enlaces simples.



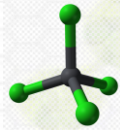
Estrategias para el uso del modelo TREPCV



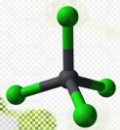
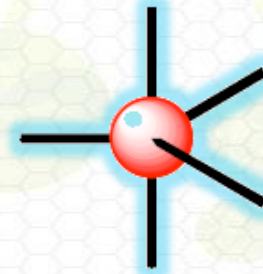
Dibujar la **estructura de Lewis**

¿Cuántos pares electrónicos?

Considerar el doble enlace como sencillo

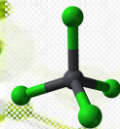
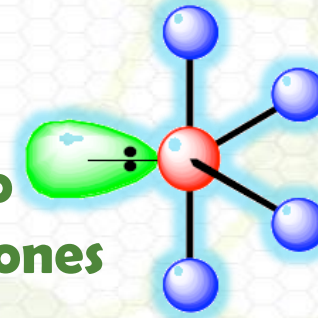


Distribuir los pares electrónicos de forma que **minimicen sus repulsiones**: geometrías ideales

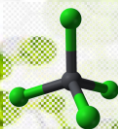


Decidir que **posiciones** ocuparán los PS y cuales los PC

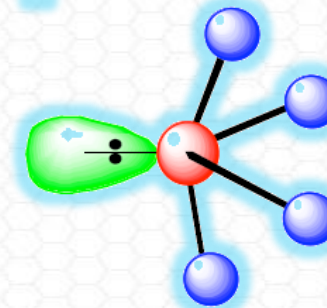
Cuando los PS puedan ocupar más de una posición no equivalente, situarlos allí donde se minimicen sus repulsiones



Identificar la **geometría molecular** a partir de las posiciones de los átomos periféricos

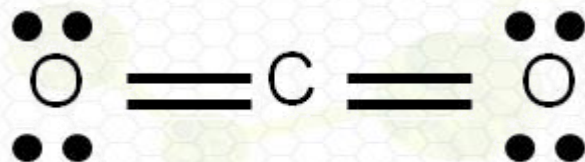


Permitir las **distorsiones** debido a las repulsiones entre PS y PE

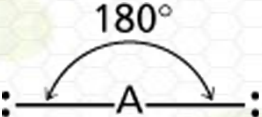
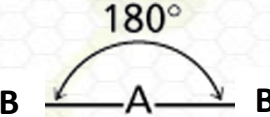


Número de coordinación= 2, Geometría lineal

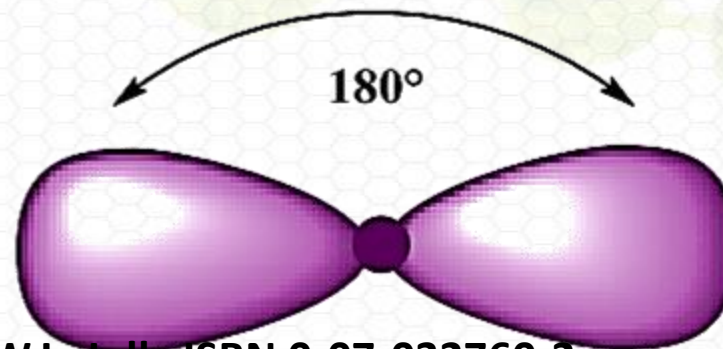
Estructura de Lewis



$$\text{NC} = \left(\frac{16}{2} \right) - 3(2) = 2$$

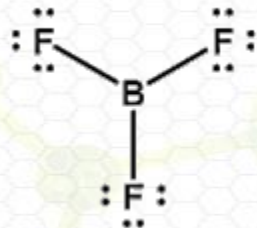
Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AX₂	2	0	lineal 	Lineal 

Ejemplos: CS₂, HCN, BeX₂ donde X puede ser F, Cl, Br, o I

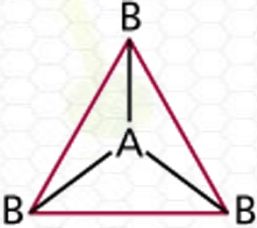
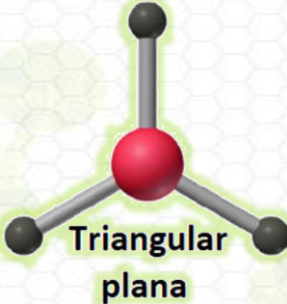
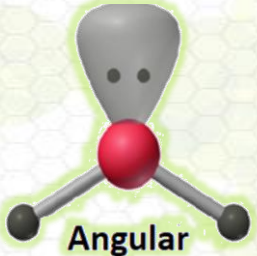


Número de coordinación= 3, Geometría trigonal


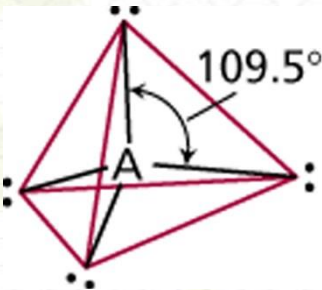
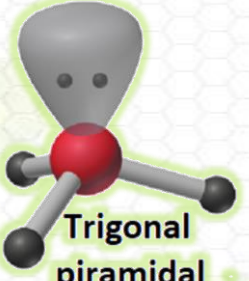
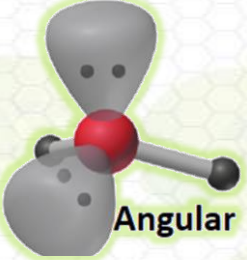
Estructura de Lewis



$$\text{NC} = \left(\frac{24}{2} \right) - 3(3) = 3$$

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular	
AX₃	3	0	Triangular plana 	Triangular plana	
AX₂E	2	1		Angular	

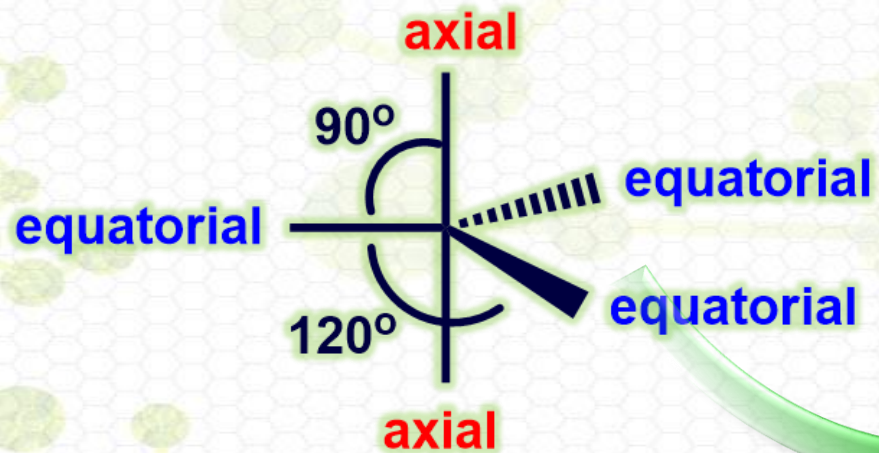
Número de coordinación= 4

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular	
AX₄	4	0		Tetraédrica	 <p>Tetraédrico</p>
AX₃E	3	1	 <p>Tetraédrica</p>	Trigonal piramidal	 <p>Trigonal piramidal</p>
AX₂E₂	2	2		Angular	 <p>Angular</p>

Posiciones axial y ecuatorial

A partir de sistemas de 5 átomos enlazados al átomo central, se encuentran dos diferentes posiciones para los enlaces, y dos ángulos de enlace (90° y 120°).

Axial (vertical) y Ecuatorial (horizontal)

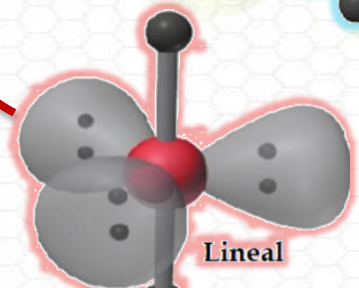
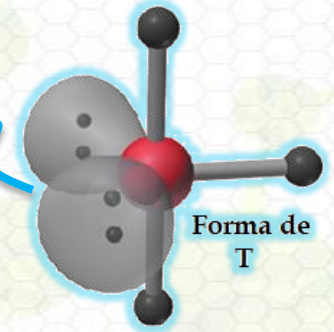
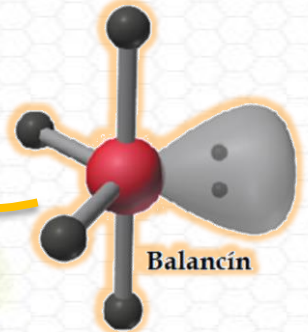
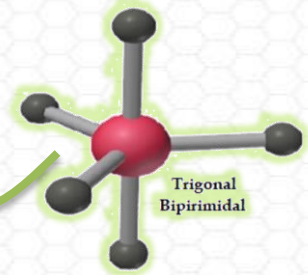


Las repulsiones equatorial-equatorial son más débiles que las repulsiones axial-equatorial

Cuando le sea posible, ubique los **pares solitarios** en estos sistemas de 5 átomos enlazados al átomo central, en **posiciones ecuatoriales**

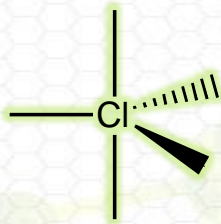
Número de coordinación= 5

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AX₅	5	0	Triangular bipiramidal	Triangular bipiramidal
AX₄E	4	1		Tetraedro deformado
AX₃E₂	3	2		Forma de T
AX₂E₃	2	3		Lineal

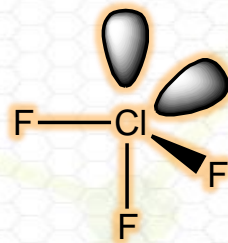




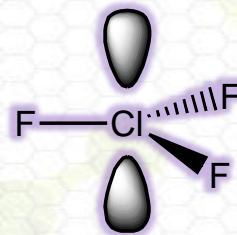
Disposición de bpirámide trigonal



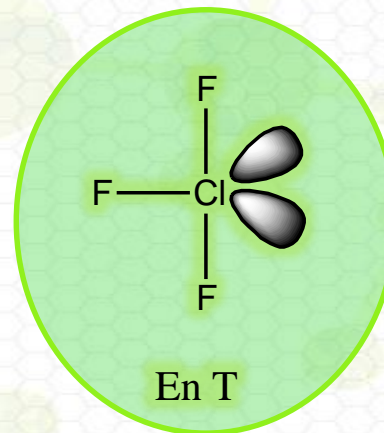
Geometría??



Piramidal



Trigonal

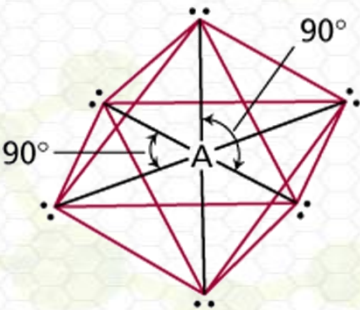


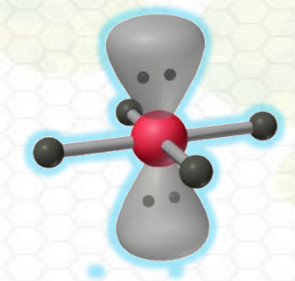
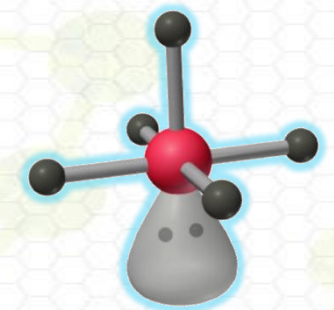
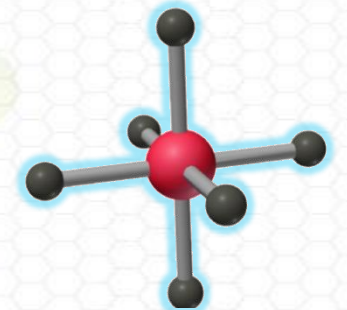
En T

Tabla de interacciones

Repulsiones	En T	Trigonal	Piramidal
PS-PS	0	0	1
PS-PC	4	6	3
PC-PC	2	0	2

Número de coordinación= 6

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
AX₆	6	0	Octaédrico	Octaédrico
AX₅E	5	1		Piramidal cuadrada
AX₄E₂	4	2		Cuadrada plana



Número de coordinación= 7

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
------	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------

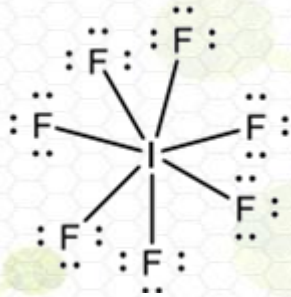
AX₇

7

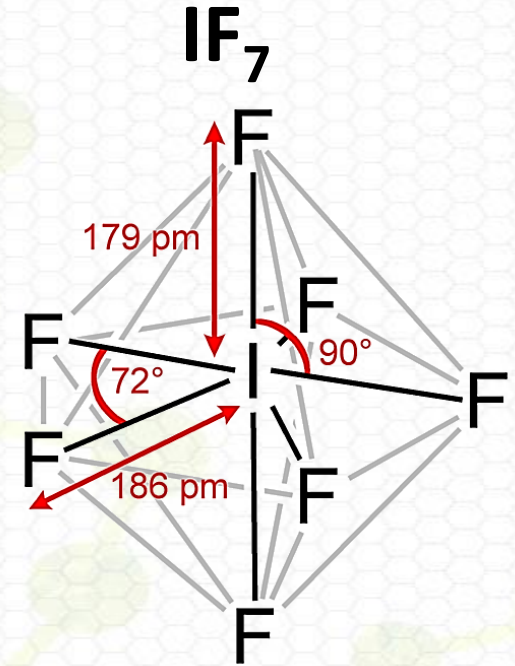
0

Bipirámide pentagonal

Bipirámide pentagonal



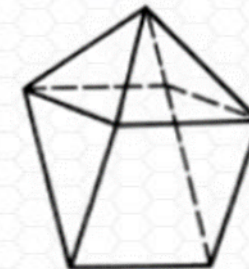
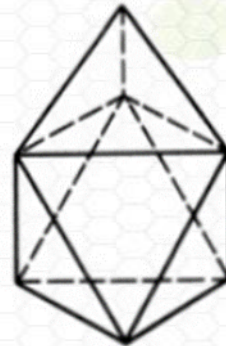
$$NC = \left(\frac{56}{2} \right) - 3(7) = 7$$



Bipirámide pentagonal



Octaedro monoapicado



Prismal trigonal, monoapicado en cara cuadrada

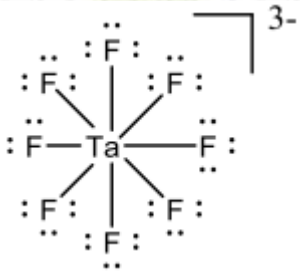
Número de coordinación= 8

Tipo	# átomos unidos al átomo central	# pares libres en el átomo central	Arreglo de los pares de electrones	Geometría molecular
------	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------

AX₈

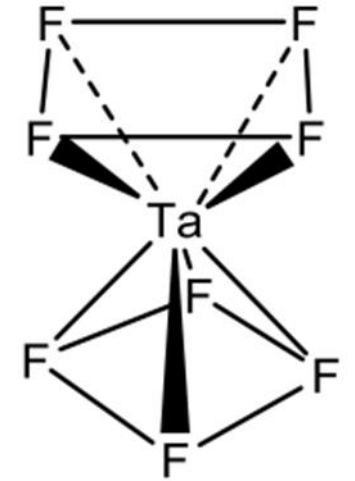
8

0

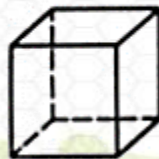


$$NC = \left(\frac{64}{2} \right) - 3(8) = 8$$

TaF₈³⁻



cubo



CU-8

antiprisma cuadrado



SAPR-8

dodecaedro

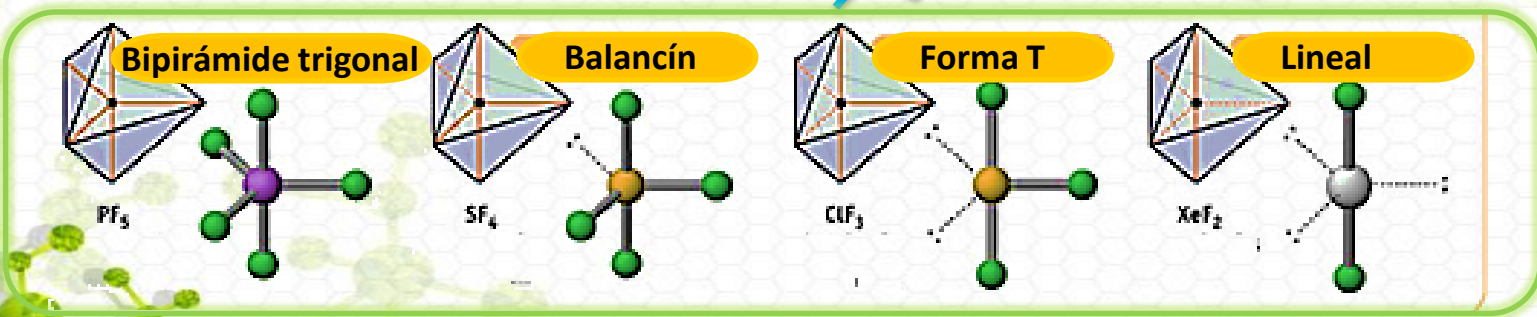
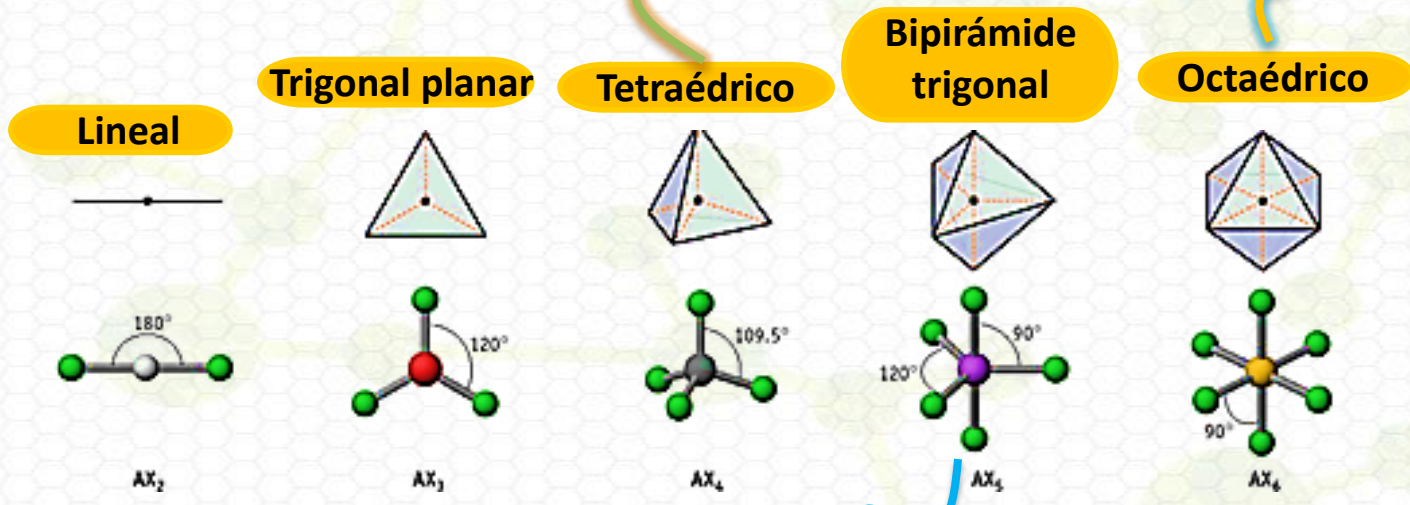
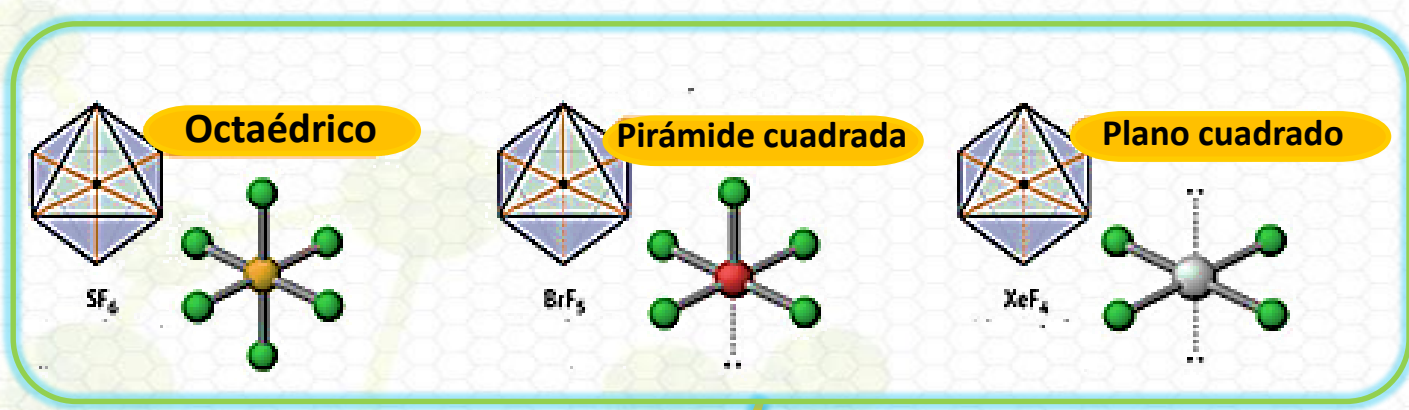
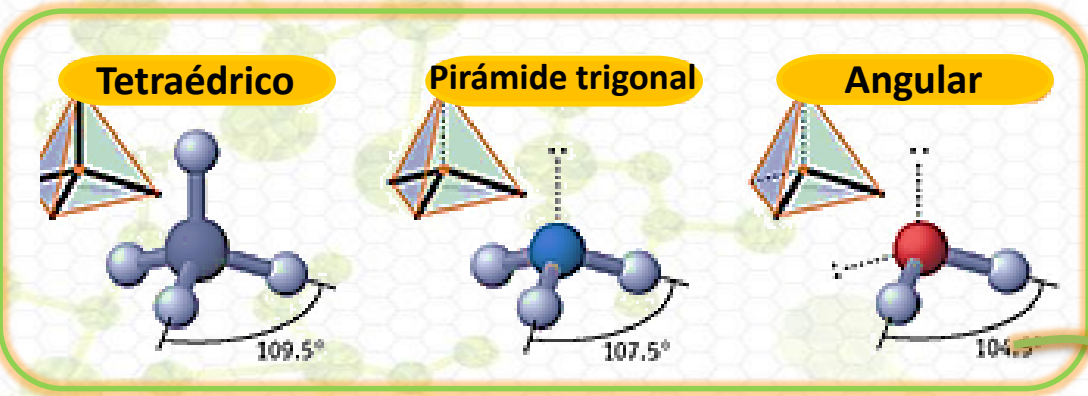


DD-8

bipirámide hexagonal



HBPY-8



Pares Totales	Disposición	PC	E	Geometría	Molécula	Ejemplo
2	LINEAL	2	0	LINEAL	AX ₂	BeCl ₂ , C O ₂
3	TRIGONAL	3	0	TRIGONAL	AX ₃	BCl ₃ , NO ₃ ⁻
		2	1	ANGULAR	AX ₂ E	SnCl ₂ , N O ₂ ⁻
4	TETRAÉDRICA	4	0	TETRAÉDRICA	AX ₄	CH ₄ , ClO ₄ ⁻
		3	1	PIRAMIDAL	AX ₃ E	NH ₃ , H ₃ O ⁺
		2	2	ANGULAR	AX ₂ E ₂	H ₂ O, ClO ₂ ⁻
5	BIPIRÁMIDE TRIGONAL	5	0	BIPIRÁMIDE TRIGONAL	AX ₅	PCl ₅
		4	1	BALANCÍN	AX ₄ E	SF ₄
		3	2	En T	AX ₃ E ₂	ClF ₃
		2	3	LINEAL	AX ₂ E ₃	I ₃ ⁻ , XeF ₂
6	OCTAÉDRICA	6	0	OCTAÉDRICA	AX ₆	SF ₆ , PCl ₆ ⁻
		5	1	PIRÁMIDE CUADRADA	AX ₅ E	XeOF ₄
		4	2	CUADRADA PLANA	AX ₄ E ₂	ICl ₄ , XeF ₄
		3	3	En T	AX ₃ E ₃	
		2	4	LINEAL	AX ₂ E ₄	

Excepciones

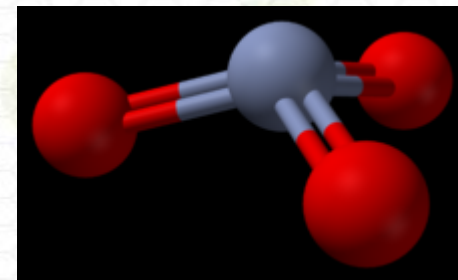
Algunas moléculas de AX_2E_0

Algunas moléculas de AX_2E_2

Algunas moléculas de AX_6E_1 y AX_8E_1

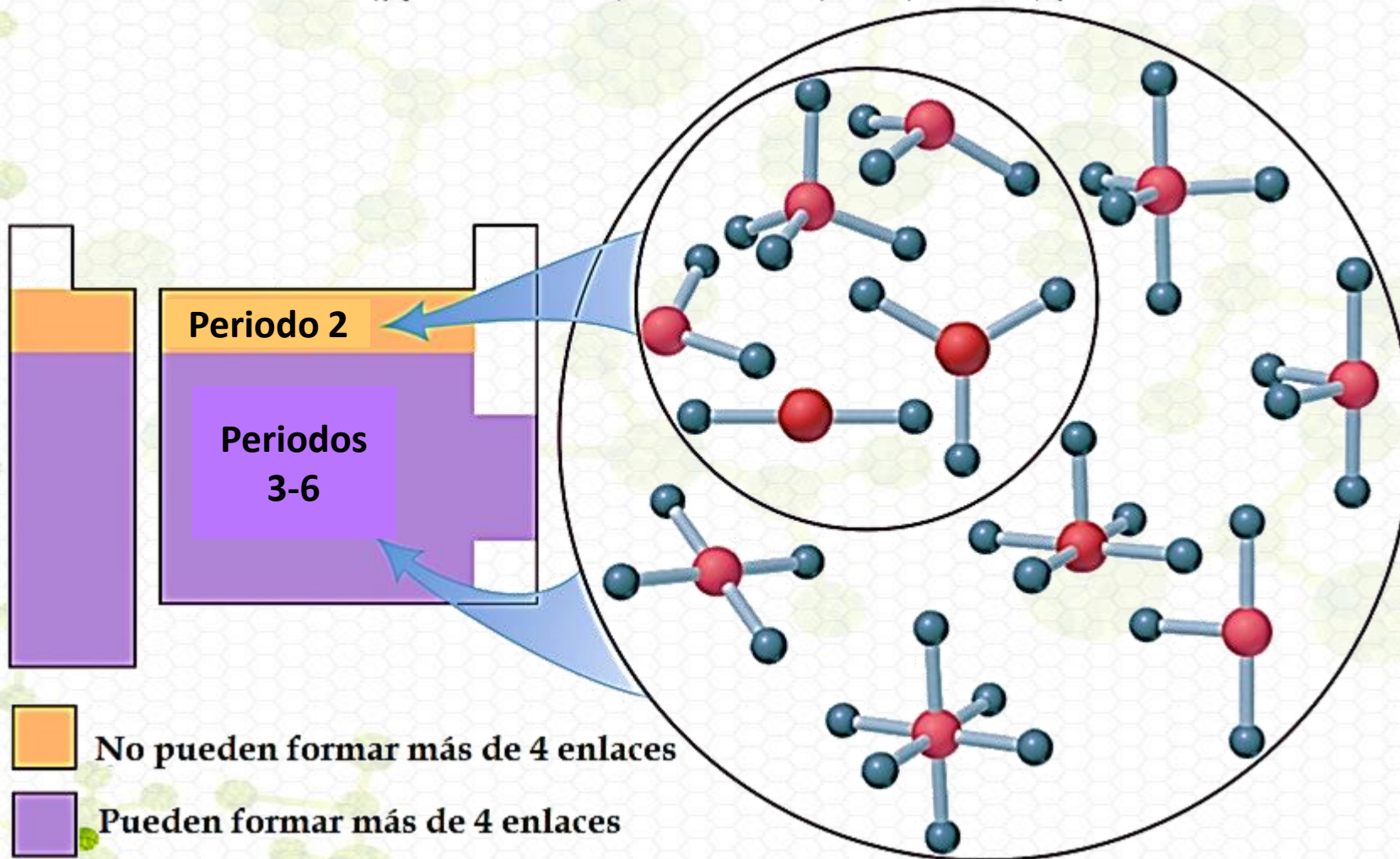
Compuestos de metales de transición

Tipo de molécula	Forma	Geometría	Ejemplos
AX_2	Angular		VO_2^+
AX_3	Piramidal trigonal		CrO_3



Formas de las moléculas para los átomos centrales del periodo 2 y en periodos superiores.

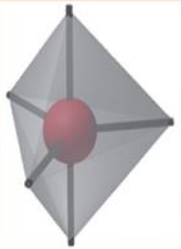
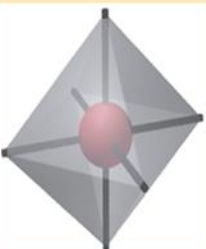

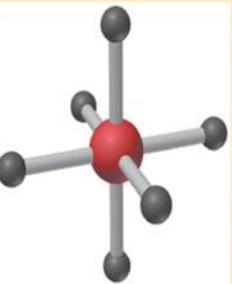
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Formas de las moléculas que poseen de 2 a 4 átomos enlazantes al átomo central

	Linear (2)		Trigonal planar (3)		Tetrahedral (4)		
e ⁻ Group arrangement (no. of groups)							
Molecular shape (class)	Linear (AX ₂)		Trigonal planar (AX ₃)	V shaped or bent (AX ₂ E)	Tetrahedral (AX ₄)	Trigonal pyramidal (AX ₃ E)	V shaped or bent (AX ₂ E ₂)
No. of bonding groups	2		3	2	4	3	2
Bond angle	180°		120°	<120°	109.5°	<109.5°	<109.5°

Formas de las moléculas que poseen de 5 y 6 átomos enlazantes al átomo central

e ⁻ Group arrangement (no. of groups)	Trigonal bipyramidal (5)				Octahedral (6)		
							
Molecular shape (class)							
	Trigonal bipyramidal (AX ₅)	Seesaw (AX ₄ E)	T shaped (AX ₃ E ₂)	Linear (AX ₂ E ₃)	Octahedral (AX ₆)	Square pyramidal (AX ₅ E)	Square planar (AX ₄ E ₂)
No. of bonding groups	5	4	3	2	6	5	4
Bond angle	90° (ax) 120° (eq)	<90° (ax) <120° (eq)	<90° (ax)	180°	90°	<90°	90°