

4. Determinación de la geometría molecular mediante la TRPECV

Geometría molecular

Se entiende por geometría de una molécula la disposición espacial de los átomos de la misma

- Moléculas diatómicas . No presentan mas que una disposición . Dos puntos determinan una recta 
- Moléculas poliatómicas (3 o mas átomos) pueden adoptar distintas disposiciones, tantas mas cuanto mayor sea el numero de átomos
 - Triatómicas

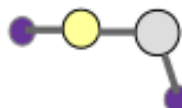
3 átomos en línea recta



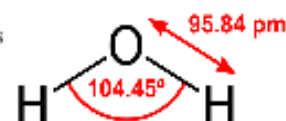
3 átomos en otra disposición (angular)



- Tetraatómicas: 4 átomos (son posibles mas formas, y además no tienen porque estar todos los átomos en un mismo plano) Ejemplos:



ángulo de enlace , α : es el que forman las rectas imaginarias que pasan por los núcleos de los átomos unidos mediante enlace, y es un parámetro que se puede determinar experimentalmente. Por ejemplo



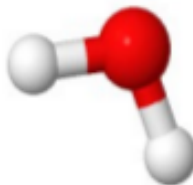
Para moléculas pequeñas (de hasta 4 átomos unidos al átomo central) las geometrías mas frecuentes son las siguientes (o pequeñas variaciones con ángulos ligeramente distintos)

lineal



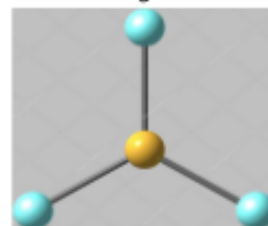
$$\alpha = 180^\circ$$

angular



$$\alpha < 180^\circ$$

triangular



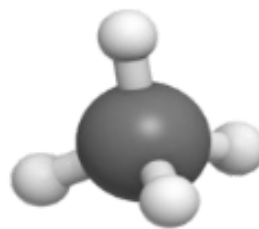
$$\alpha = 120^\circ$$

piramidal



$$\alpha < 109,5^\circ$$

tetraédrica



$$\alpha = 109,5^\circ$$

Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia: TRPECV

Permite predecir de forma sencilla la geometría de una molécula. Se basa en que los pares de electrones de un átomo **se repelen entre si, y por tanto van a situarse en el espacio lo mas alejados posibles.**

Pautas para determinar la geometría:

1. Se escribe la estructura de Lewis
2. Se determina el numero de pares de electrones del átomo central, tanto los **pares compartidos (o enlazantes, E)**, como los **pares no compartidos (no enlazantes o solitarios, S)**, cada par se sitúa de forma que esté lo mas separado posible de los demás, es decir si el atomo central tiene:
 - 2 pares se disponen **opuestos, en línea** ($\alpha = 180^\circ$)
 - 3 pares se disponen formando un **triángulo equilátero** ($\alpha = 120^\circ$)
 - 4 pares se disponen formando un **tetraedro** ($\alpha = 109,5^\circ$)
 - 5 pares se sitúan formando una **bipirámide trigonal** ($\alpha = 120^\circ$ y 90°)

- 6 pares en forma de **octaedro** ($\alpha = 90^\circ$)

3. La forma de la molécula viene determinada por la distribución de pares señalada y por el número de átomos unidos al central:

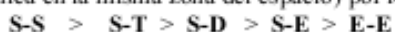
- Si éste tiene todos sus pares compartidos (o enlazantes, E) la geometría (forma) de la molécula coincide con la geometría de los pares (caso de BeCl_2 , BF_3 , CH_4 , PCl_5 y SF_6 en el cuadro)
- Si hay pares no compartidos, no enlazantes, S, dichos pares no se “ven”, forman parte del átomo central, la geometría de la molécula no coincide con la de los pares : *por ejemplo el oxígeno del agua tiene 4 pares que se disponen tetraédricamente pero solo está unido a 2 átomos de H luego es una molécula angular, no tetraédrica (al tetraedro le faltan dos vértices)*

Molécula	Estructura de Lewis	Pares electrónicos	Geometría molecular	Representación 3D (haz clic sobre la figura para más)
BeCl_2		2	lineal 	
BF_3		3	triangular plana 	
CH_4		4	tetraédrica 	
PCl_5		5	bipirámide trigonal 	
SF_6		6	octaédrica 	

Molécula	Estructura de Lewis	Pares enlace	Pares solitarios	Geometría molecular	Representación 3D (haz clic sobre la figura para más)
NH_3		3	1	pirámide trigonal 	
H_2O		2	2	angular 	

4. Si el átomo central presenta enlaces dobles (D) o triples (T) estos cuentan como un solo par en cuanto a la distribución geométrica ya que los e- de un enlace doble o triple están localizados entre los dos átomos enlazados y comparten la misma región del espacio (no pueden apuntar en direcciones distintas). Así en CO_2 , $\text{O}=\text{C}=\text{O}$, el carbono tiene 4 pares enlazantes pero agrupados en **dos** pares dobles que se disponen opuestos, la molécula es lineal.

5. No todos los pares se repelen por igual: los pares no compartidos, S, ocupan un espacio mayor que los compartidos, E, ya que estos están atraídos por dos átomos y ocupan menos volumen. Los pares dobles y triples ocupan aun un volumen mayor (mayor densidad electrónica en la misma zona del espacio) por lo que el orden de repulsiones es el siguiente:



Esto explica porque el ángulo en la molécula de NH_3 es 107° y no $109,5^\circ$ (ángulo tetraédrico) ya que el par solitario del N repele a los pares de enlace con mas intensidad que estos entre sí por lo que el ángulo se cierra ligeramente. Lo mismo pero mas acusado pasa en el agua pues hay dos pares solitarios sobre el oxígeno

La teoría de Lewis y la de TRPECV explican el enlace químico desde un punto de vista simple y cualitativo pero ninguno de ellos proporciona información sobre la energía o sobre la distancia de enlace. Tras la publicación de la ecuación de Schrödinger se aplicó ésta a los electrones implicados en la formación de enlaces covalentes para buscar las estructuras electrónicas de energía mínima. Como dicha ecuación no puede resolverse exactamente para sistemas de más de un electrón, surgieron dos métodos aproximados generales para tratar el enlace químico:

- TEV: la teoría de enlace de valencia (Hückel, London, Slater y Pauling, 1927)