

3 La forma de las moléculas

- 3.1 La teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (VSEPR)
- 3.2 Las moléculas polares
- 3.3 La descripción mecano-cuántica del enlace químico
- 3.4 La teoría del enlace de valencia (TEV)
- 3.5 La teoría de los orbitales moleculares (TOM)

3.1 La teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (VSEPR)

A diferencia del enlace iónico, el enlace covalente es *direccional*. La forma de una molécula explica una parte esencial de sus propiedades. La teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (VSEPR) hace una simple adición a las ideas de Lewis que permite prever la forma de una molécula dada: “Los pares electrónicos se repelen unos a otros, por lo que se sitúan lo más alejados posible entre sí”.

Moléculas sin pares solitarios. La VSEPR predice las siguientes formas de moléculas:

Molécula	Estructura de Lewis	Pares electrónicos	Geometría molecular
BeCl ₂		2	lineal
BF ₃		3	120° triangular plana
CH ₄		4	109,5° tetraédrica
PCl ₅		5	90° 120° bipirámide trigonal
SF ₆		6	90° octaédrica

Moléculas con pares solitarios. Para los pares solitarios se sigue el mismo esquema que para los pares de enlace. Ahora bien, la forma de una molécula viene dada por la disposición de los átomos alrededor del átomo central, por lo que los pares solitarios son, desde ese punto de vista, transparentes. Por otra parte, los pares solitarios provocan mayores repulsiones que los pares de enlace debido a su mayor extensión espacial (los pares solitarios son atraídos sólo por un núcleo mientras que los de enlace son atraídos por dos). La VSEPR supone que las repulsiones entre pares decrecen en el orden (PS,PS) > (PS,PE) > (PE,PE). Por eso, el ángulo H–N–H es de 107° en NH₃ y el H–O–H es de 105° en H₂O, frente a los 109.5° de un tetraedro perfecto. Por lo mismo, los pares solitarios se sitúan en el plano ecuatorial en las bipirámides trigonales. (PE = pares de enlace, PS = pares solitarios, P = pares electrónicos totales).

<i>Mol.</i>	<i>Est. de Lewis</i>	<i>PE</i>	<i>PS</i>	<i>P</i>	<i>Geom. electrónica</i>	<i>Geom. Mol.</i>
SnCl ₂		2	1	3	triangular plana	angular
NH ₃		3	1	4	tetraédrica	pirámide trigonal
H ₂ O		2	2	4	tetraédrica	angular
SF ₄		4	1	5	bipirámide trigonal	tetraedro deformado o balancín
ClF ₃		3	2	5	bipirámide trigonal	forma de T
I ₃ ⁻		2	3	5	bipirámide trigonal	lineal
BrF ₅		5	1	6	octaédrica	pirámide cuadrada
XeF ₄		4	2	6	octaédrica	plano-cuadrada

Moléculas con enlaces múltiples. La VSEPR supone que un enlace múltiple ocupa la misma dirección y aproximadamente el mismo sitio que uno simple. A la hora de contar los pares electrónicos, un enlace múltiple se cuenta como uno sencillo.

<i>Molécula</i>	<i>Estructura de Lewis</i>	<i>Pares electrónicos</i>	<i>Geometría molecular</i>
CO ₂		2	O=C=O lineal
C ₂ H ₄		3	triangular plana