

Anexo III (Tema 1)

Ejemplos adicionales de Geometría Molecular

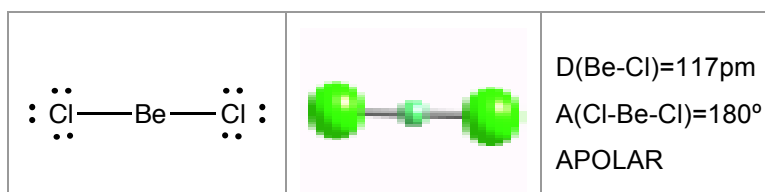
1. MOLÉCULAS CON 2 GRUPOS ELECTRÓNICOS EN TORNO AL ÁTOMO CENTRAL



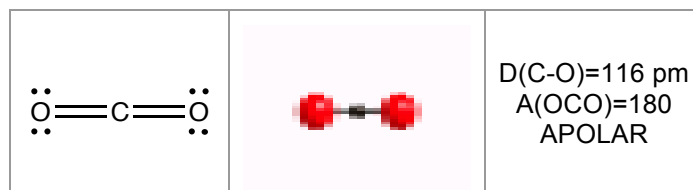
1.1. Moléculas que adoptan una geometría lineal: AX_2

AX_2 : $BeCl_2$, CO_2 , CS_2 , COS , C_2H_2 , HCN

1.- $BeCl_2$



2.- CO_2



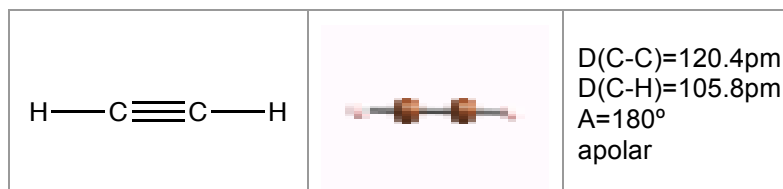
3.- CS_2



4.- HCN



5.- C_2H_2



2. MOLÉCULAS CON 3 GRUPOS ELECTRÓNICOS EN TORNO AL ÁTOMO CENTRAL

Moléculas con geometría triangular regular o irregular; **AX₃**: BF₃, BCl₃, SO₃, H₂CO, COCl₂, C₂H₄, C₂H₂F₂, [CO₃]²⁻

Moléculas con geometría angular; **AX₂E**: SnCl₂, SO₂, O₃, NSF

Moléculas lineales; **AXE₃**: HF

2.1. Moléculas con geometría triangular regular o irregular

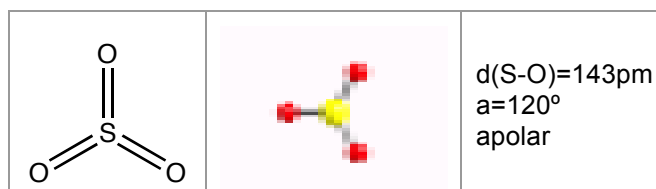
AX₃: BF₃, BCl₃, SO₃, H₂CO, COCl₂, C₂H₄, C₂H₂F₂, [CO₃]²⁻

1.- BF₃

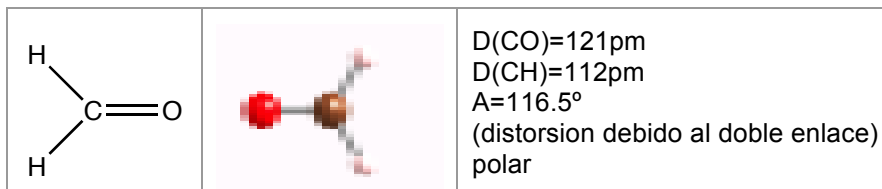


BCl₃ es isoestructural con el BF₃. Idéntica geometría. D(B-Cl)=176pm, a=120°

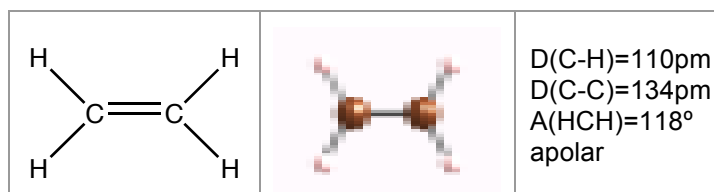
3.- SO₃



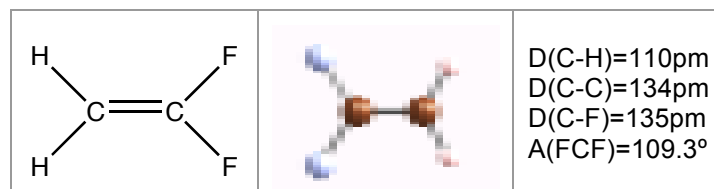
4.- H₂CO



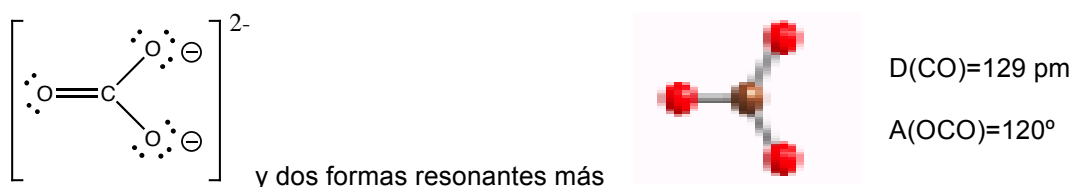
5.- C₂H₄



5.- C₂H₂F₂



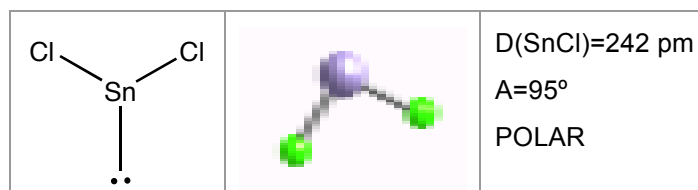
6.- [CO₃]²⁻



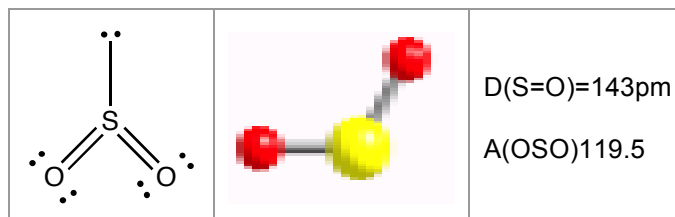
2.2. Moléculas con geometría angular

AX₂E: SnCl₂, SO₂, O₃, NSF

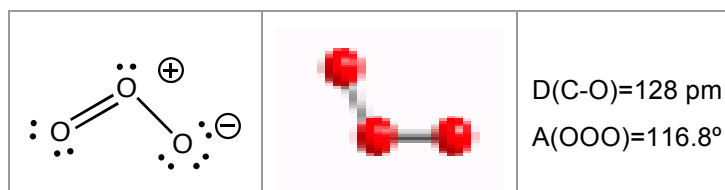
1.- SnCl₂



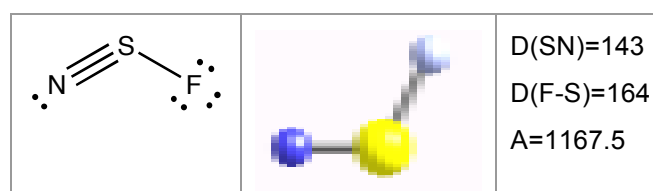
2.- SO₂



3.- O₃



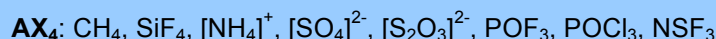
4.- NSF



3. MOLÉCULAS CON 4 GRUPOS ELECTRÓNICOS EN TORNO AL ÁTOMO CENTRAL



Moléculas que adoptan una geometría tetraédrica regular o distorsionada



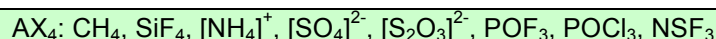
Moléculas que adoptan una geometría de pirámide de base trigonal



Moléculas que adoptan geometría angular:



3.1. Moléculas que adoptan una geometría tetraédrica regular o distorsionada



1.- CH₄:

$N_v = 4 + 4 \cdot 1 = 8$ $N_o = 8 + 4 \cdot 2 = 16$ $N_c = N_o - N_v = 8$, 4 pares de enlace $N_s = 2(n-1) = 2 \cdot (5-1) = 8$, 4 enlaces s $N_p = N_c - N_s = 0$ $N_{ps} = N_v - N_c = 8$, 0 PS $CF(C) = 0$ $CF(H) = 0$		<p>Geometría Tetraédrica ángulo(HCH)=109,5° D(C-H)= 109,4pm APOLAR</p>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	----------------------------------------------------------------------------------------------

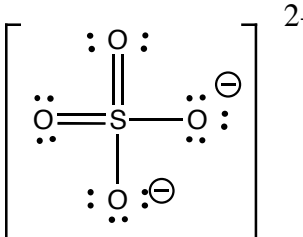
2.- SiF₄. Molécula isoelectrónica con la anterior (posee el mismo número de electrones y el mismo número de átomos). La estructura de Lewis es idéntica y la geometría también. Es una molécula apolar.

Geometría tetraédrica. D(Si-H)=154 pm. A(F-Si-F)=109.5°

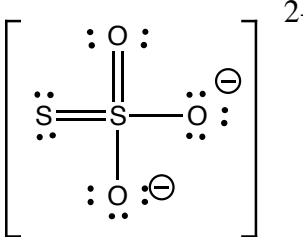
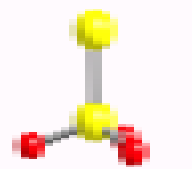
3.- [NH₄]⁺

$N_v = 5 + 4 \cdot 1 - 1 = 8$ $N_o = 8 + 4 \cdot 2 = 16$ $N_c = N_o - N_v = 8$, 4 pares de enlace $N_\sigma = 2(n-1) = 2 \cdot (5-1) = 8$, 4 enlaces σ $N_\pi = N_c - N_\sigma = 0$ $N_{ps} = N_v - N_c = 0$	<p> $CF(N) = N_v(N) - N_{ps}(N) - N_c/2 = 5 - 0 - 8/2 = +1$ $CF(H) = N_v(H) - N_{ps}(H) - N_c/2 = 1 - 0 - 2/2 = 0$ </p>	<p>Geometría tetraédrica regular ángulo(HCH)=109,5° D(N-H)= 103pm En iones no tiene sentido hablar de polaridad porque hay una carga real</p>
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

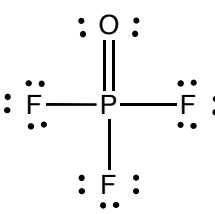

4.- $[\text{SO}_4]^{2-}$

	<p>y otras 5 formas resonantes. El resultado es un híbrido de resonancia con los cuatro enlaces S-O equivalentes. OE=3/2.</p>	<p>Geometría tetraédrica con los ángulos ideales. D(S-O)= 150 pm</p>
-----------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------

5.- $[\text{S}_2\text{O}_3]^{2-}$

	<p>Molécula isoelectrónica con la anterior.</p> 	<p>Geometría tetraédrica pero los ángulos ya no tienen por qué ser idénticos al tener un S terminal D(S-S)=201 pm D(S-O)= 150 pm</p>
-----------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

6.- POF_3

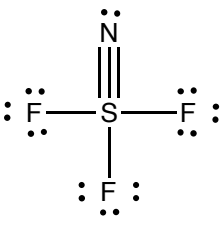
	<p>Tetraédro distorsionado. Los átomos periféricos no son idénticos. Efecto fuertemente distorsionador del doble enlace Polar</p>	 <p>D(P-O)=145 pm D(P-F)=154 pm A(FPF)=102°</p>
-------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

6.- POCl_3

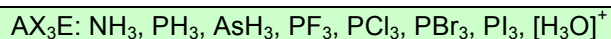
Isoestructural con la anterior. Geometría tetraédrica distorsionada.

D(PO)=145pm, d(PCI)=198 pm, a(CIPCI)= 103.5. El ángulo es ligeramente mayor que en el caso anterior por que la menor electronegatividad del Cl, retira menos densidad de carga en las proximidades del átomo central y por tanto, disminuye la distorsión que genera el doble enlace.

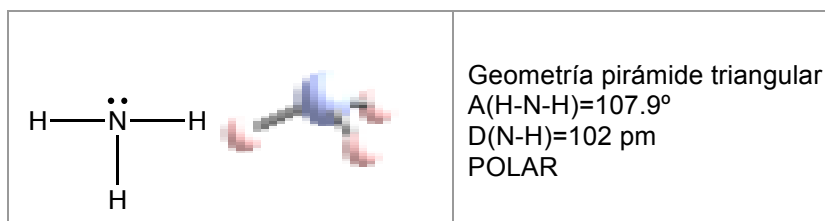
7.- NSF_3

 <p>Isoelectrónica con la anterior ($N_V=32$)</p>	<p>Geometría tetraédrica distorsionada. El efecto distorsionador del triple enlace es mayor que el del doble (casos anteriores) D(SN)=140 pm D(SF)=160 p,m A(F-S-F)= 98° POLAR</p>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

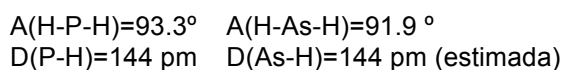
3.2. Moléculas que adoptan una geometría de pirámide de base trigonal



1.- NH_3

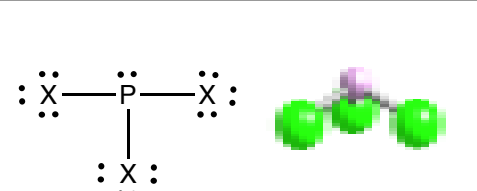


2.- PH_3 y AsH_3 Especies isoelectrónicas con el NH_3 . Geometría pirámide triangular

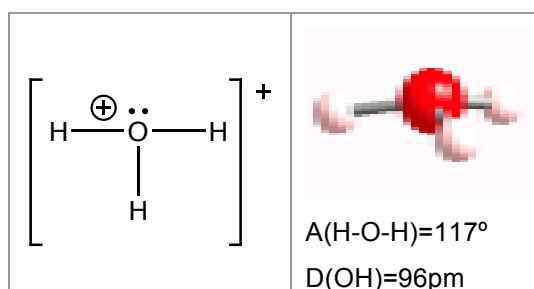


Conforme el tamaño del átomo central aumenta, el orbital que aloja el átomo central aumenta de volumen y se cierra el ángulo de enlace. Las dos moléculas son polares

4.- Serie de los trihaluros de P. Todos ellos son polares

		PF_3	PCl_3	PBr_3	PI_3
	$D(P-X)$	157 pm	204	218	243
	$A(X-P-X)$	97.8°	101.1°	101.5°	102°

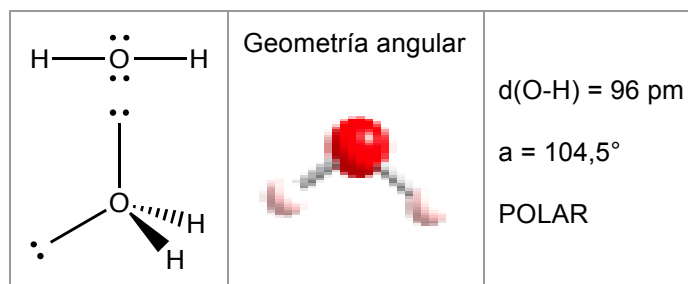
8.- $[H_3O]^+$



3.3. Moléculas que adoptan geometría angular:

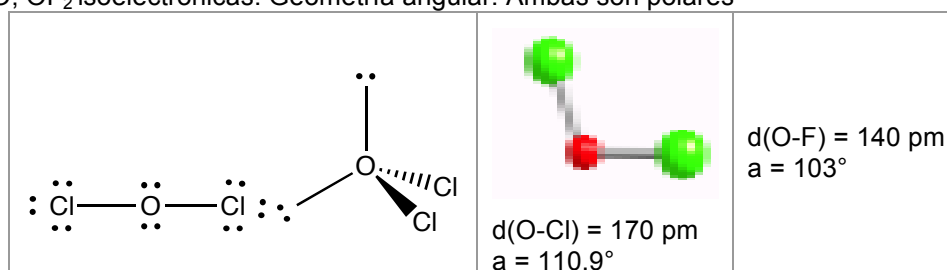
AX_2E_2 : H_2O , H_2S , Cl_2O , OF_2 , $[NH_2]^-$

1.- H_2O

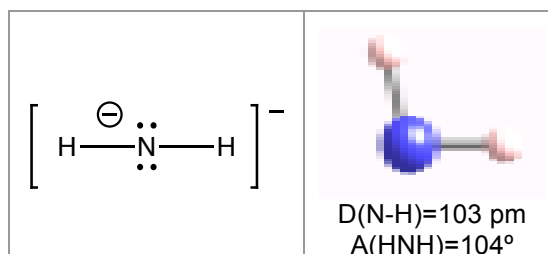


2.- H_2S . Isoelectrónica con el H_2O . Geometría angular. $D(S-H)=135 \text{ pm}$, $a=93.5^\circ$

3.- Cl_2O , OF_2 isoelectrónicas. Geometría angular. Ambas son polares

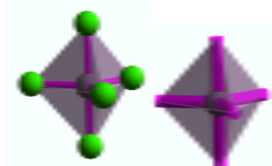


5.- $[NH_2]^-$.



4. MOLÉCULAS CON 5 PARES ELECTRÓNICOS EN TORNO AL ÁTOMO CENTRAL.

Poliedro de coordinación regular: bipirámide trigonal



Moléculas que adoptan una estructura en bipirámide regular o distorsionada: PCl_5 , PF_3Cl_2 , XeO_3F_2 , PF_3Cl_2 , SOF_4 , $(\text{IO}_5)^{3-}$

Moléculas que adoptan una estructura disfenoidal o balancín: SF_4 , $[\text{IO}_2\text{F}_2]^-$, XeO_2F_2

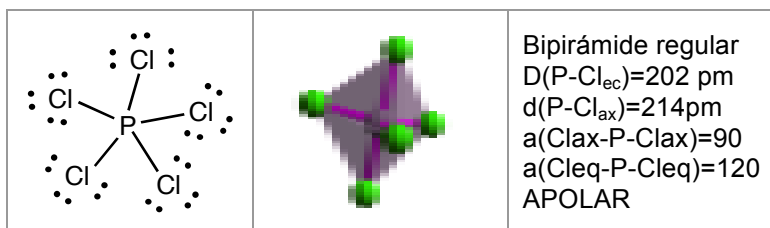
Moléculas que adoptan una estructura en punta de flecha o T: ClF_3

Moléculas que adoptan una estructura lineal: I_3^- , XeF_2

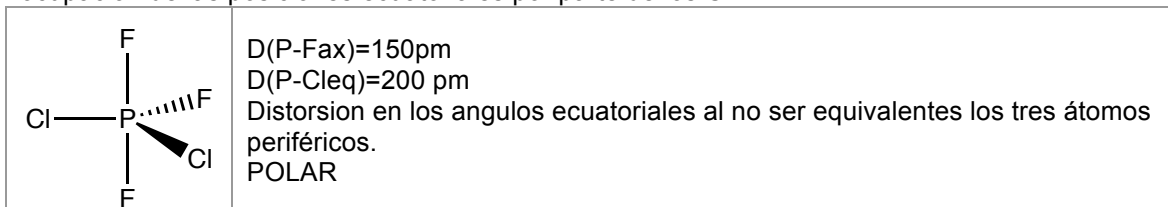
4.1. Moléculas que adoptan una estructura en bipirámide regular o distorsionada.

PCl_5 , PF_3Cl_2 , XeO_3F_2 , PF_3Cl_2 , SOF_4 , $(\text{IO}_5)^{3-}$

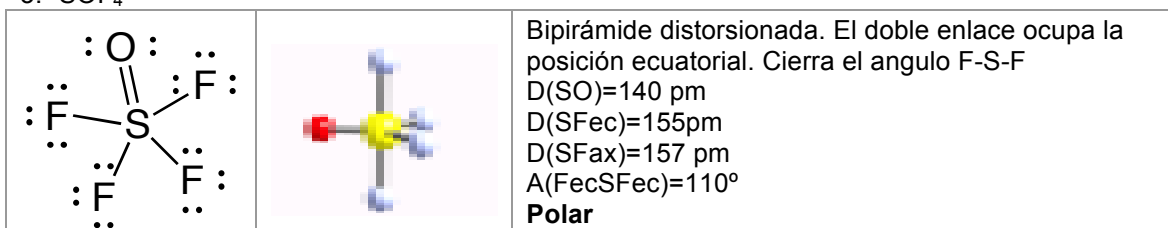
1.- PCl_5



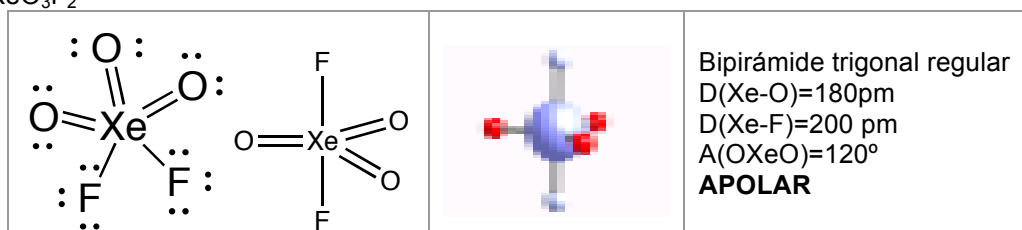
2.- PF_3Cl_2 . Isoelectrónica con la anterior. La geometría de la molécula está condicionada por la ocupación de las posiciones ecuatoriales por parte de los Cl



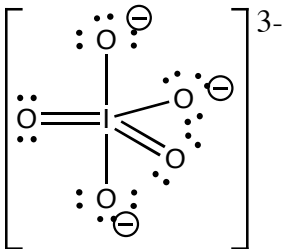
3.- SOF_4



4.- XeO_3F_2



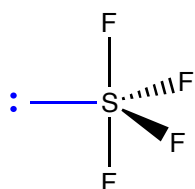
5.- $[\text{IO}_5]^{3-}$

	<p>No hay posiciones privilegiadas. Hay 10 formas resonantes que deslocalizan los dos dobles enlaces entre las 5 posiciones. Bipirámide regular $D(\text{IO})=180 \text{ pm}$ APOLAR</p>
-----------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

4.2. Moléculas que adoptan una estructura disfenoidal o balancín

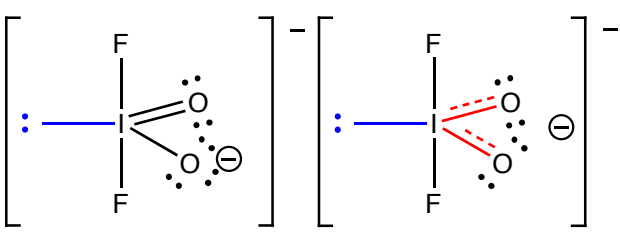
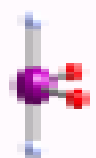
SF_4 , $[\text{IO}_2\text{F}_2]^-$, XeO_2F_2

1.- SF_4

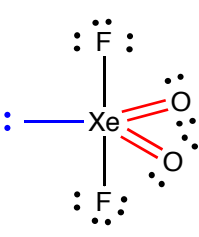
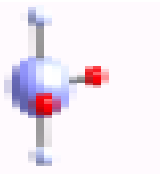


Balancín. Efecto distorsionador del par solitario
 $D(\text{S}_{\text{ec}}\text{F}_{\text{ec}})=154\text{pm}$
 $D(\text{S}_{\text{ax}}\text{F}_{\text{ax}})=164 \text{ pm}$
 $A(\text{F}_{\text{ec}}\text{SF}_{\text{ec}})=101.6^\circ$
 $A(\text{F}_{\text{ax}}\text{SF}_{\text{ax}})=173.6^\circ$
POLAR

2.- $[\text{IO}_2\text{F}_2]^-$

		<p>Balancín distorsionado $D(\text{I-O})=193\text{pm}$ $D(\text{IF})=200\text{pm}$ $A(\text{OIO})<120^\circ$ POLAR</p>
con dos estructuras resonantes		

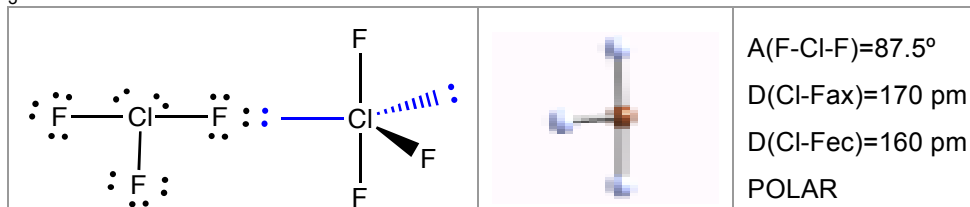
3.- XeO_2F_2

		<p>Las posiciones axiales para los pares solitarios y los dobles enlaces $A(\text{O-Xe-O})=120^\circ$ $D(\text{Xe-O})=180\text{pm}$ $D(\text{Xe-F})=200\text{pm}$ POLAR</p>
-------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

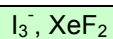
4.3. Moléculas que adoptan una estructura en punta de flecha o T:



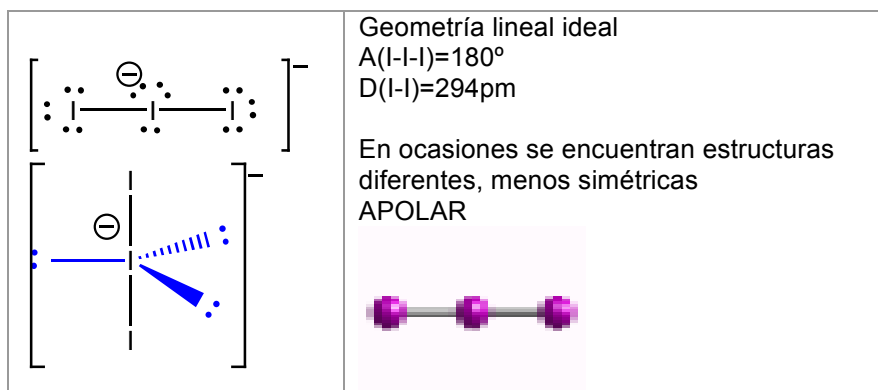
1.- ClF_3



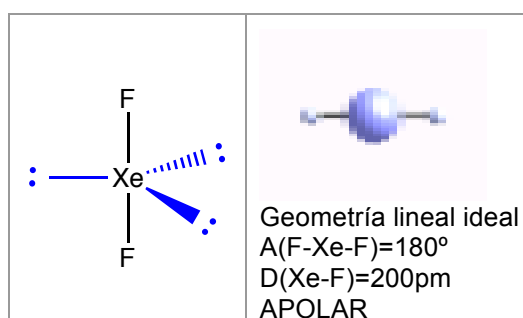
4.4. Moléculas que adoptan una estructura lineal



1.- I_3^-

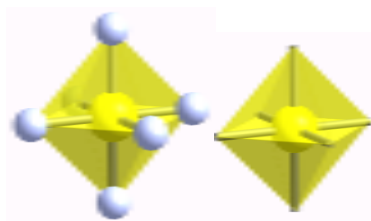


2.- XeF_2



5. MOLÉCULAS CON 6 PARES ELECTRÓNICOS EN TORNO AL ÁTOMO CENTRAL.

Poliedro de coordinación regular: octaedro



Moléculas que adoptan una estructura en octaedro regular o distorsionado: SF_6 , IOF_5

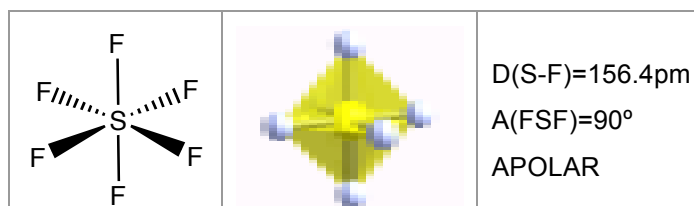
Moléculas que adoptan una estructura pirámide de base cuadrada: XeOF_4 , BrF_5

Moléculas cuadrado-planas: $[\text{ICl}_4]^-$, XeF_4

5.1. Moléculas que adoptan una estructura en octaedro regular o distorsionado.

SF_6 , IOF_5

1.- SF_6



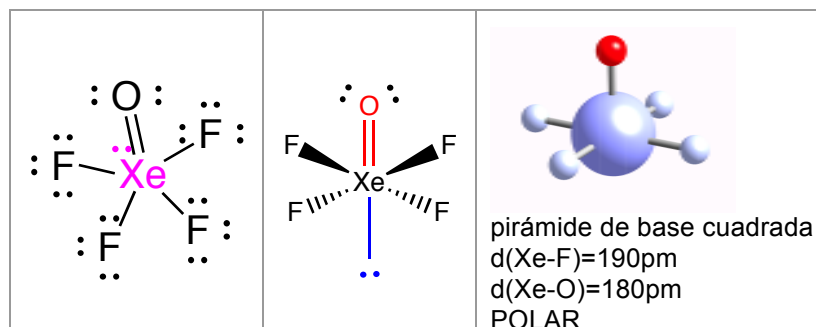
2.- IOF_5



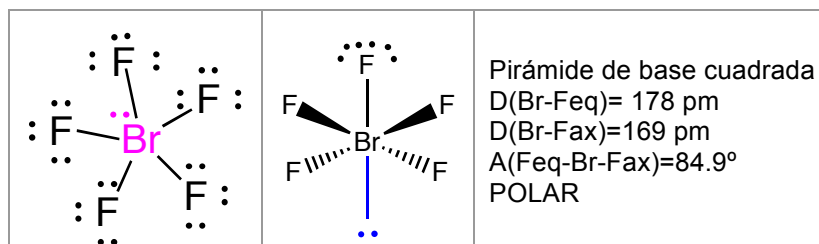
5.2. Moléculas que adoptan una estructura pirámide de base cuadrada

XeOF_4 , BrF_5

1.- XeOF_4



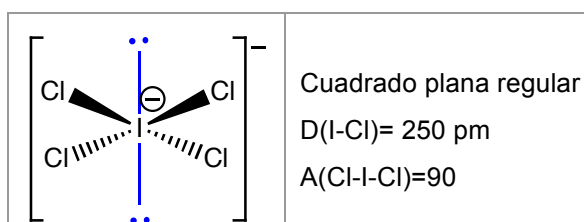
2.- BrF_5



5.3. Moléculas cuadrado-planas

$[\text{ICl}_4]^-$, XeF_4

1.- $[\text{ICl}_4]^-$,



2.- XeF_4

