

## Estructura Molecular y Teorias de Enlaces Covalentes

Los electrones que intervienen en los enlaces quimicos son los de la capa exterior o capa de valencia. Son los que estan en exceso con respecto al gas noble inmediatamente anterior al elemento en cuestion. Hay dos teorias en lo que respecta las uniones covalentes. Una de ellas es la *Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory (VSEPR)*. Esta apunta a predecir la disposicion espacial de atomos en moleculas poliatomicas. Muestra donde es que ocurren las uniones y donde se encuentran los pares electronicos libres, pero no explica como es que ocurren los enlaces. Otra teoria es la *Valence Bond Theory (VB)*. Esta describe como es que se dan los enlaces covalentes en terminos de superposicion de orbitales. En esta teoria los orbitales son a menudo combinados o *hibridados* para formar nuevos orbitales con disposiciones espaciales diferentes. Para entender los enlaces quimicos nos valdremos de ambas teorias.


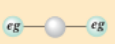
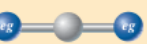

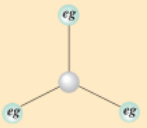
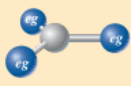




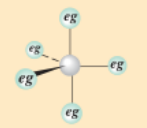
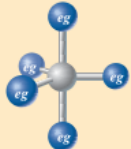

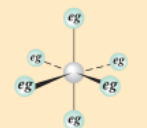
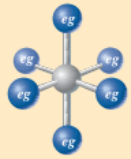
### Estrategia para analizar cualquier compuesto

1. Escribir la formula de Lewis para la molecula e identificar el atomo central de la misma.
2. Contar el numero de centros de alta densidad electronica en el atomo central.
3. Aplicar la teoria de VSEPR para determinar la geometria electronica.
4. Usando la formula de Lewis, determinar la disposicion de los atomos en la union asi como la de los pares electronicos libres.
5. Si hay pares electronicos libres, considerar como su presencia puede modificar la geometria molecular ideal deducida en el paso 4.
6. Usar la teoria de VB para determinar los orbitales hibridos utilizados por el atomo central. describir la superposicion de estos atomos para formar uniones. Describir los orbitales que contienen pares electronicos libres en la capa de valencia del atomo central.
7. Si mas de un atomo puede ser identificado como central repetir los pasos 2 a 6 para cada uno.
8. Cuando todos los atomos centrales de la molecula han sido cubiertos, se puede comenzar a hablar de la polaridad de la misma.

## Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory

La idea basica de la teoria VSEPR es ver que se generan fuerzas repulsivas entre cada centro de alta densidad electronica. Estos se disponen alrededor del atomo central de tal manera que las repulsiones o fuerzas repulsivas son minimizadas, esto resulta en la maxima separacion de los centros de alta densidad electronica en torno al atomo central. La molecula o ion en cuestion sera mas estable cuando estos centros de alta densidad electronica esten lo mas alejados posible. Esta distribucion de centros se conoce como la **geometria electronica**. A

continuacion adjunto una tabla que resume las distintas geometrias electronicas segun la cantidad de centros de alta densidad electronica en torno al atomo central.

Electron Groups on Central Atom	Electronic Geometry*			Ball-and-Stick Model
	Orientation of Electron Groups	Description; Angles <sup>†</sup>	Line Drawing <sup>‡</sup>	
2		linear; 180°		
3		trigonal planar; 120°		
4		tetrahedral; 109.5°		
5		trigonal bipyramidal; 90°, 120°, 180°		
6		octahedral; 90°, 180°		

## Moléculas Polares: Geometría Molecular

Cuando una molécula consiste de más de dos átomos unidos por uniones polares, debemos considerar, también, la disposición de los dipolos para determinar si la molécula en sí es polar. Para esto vamos a usar primero la VSEPR para deducir la geometría molecular y luego determinar la polaridad. Para no gastar demasiados bytes en esta sección, lo resumo: se tiene que efectuar la suma vectorial de los momentos de los dipolos eléctricos para determinar el dipolo neto de la molécula. Aun así, para moléculas más complejas, no alcanza con esto ya que entran en juego otros efectos, por lo que el análisis de la polaridad en lo que respecta a esta asignatura, será primitivo.

## Valence Bond Theory

Hasta ahora venimos hablando de uniones covalentes como dos átomos que *comparten electrones* y ya. Ahora vamos a discutir como es que sucede eso. Cuando los átomos están tan cerca como se encuentran en una molécula pueden combinar sus orbitales en la capa de valencia para formar un nuevo conjunto de orbitales a menor energía. Este proceso se conoce como **hybridization** (hibridación) y los nuevos orbitales se llaman orbitales híbridos. Estos se generan a través de la superposición de orbitales de otros átomos para compartir electrones y formar enlaces. Mas adelante, con los ejemplos y diferentes casos de moléculas, vamos a entrar mas en detalle sobre la hibridación y los distintos tipos de enlaces que se pueden formar.

A continuación, una tabla que detalla la hibridación para las distintas cantidades de centros de alta densidad electrónica en torno del átomo central de la molécula.

Electron Groups on Central Atom	Electronic Geometry	Atomic Orbitals Mixed from Valence Shell of Central Atom	Hybridization
2	linear	one <i>s</i> , one <i>p</i>	<i>sp</i>
3	trigonal planar	one <i>s</i> , two <i>p</i> 's	<i>sp</i> <sup>2</sup>
4	tetrahedral	one <i>s</i> , three <i>p</i> 's	<i>sp</i> <sup>3</sup>
5	trigonal bipyramidal	one <i>s</i> , three <i>p</i> 's, one <i>d</i>	<i>sp</i> <sup>3</sup> <i>d</i>
6	octahedral	one <i>s</i> , three <i>p</i> 's, two <i>d</i> 's	<i>sp</i> <sup>3</sup> <i>d</i> <sup>2</sup>


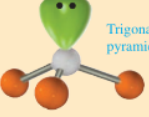


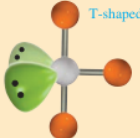
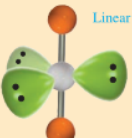
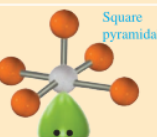
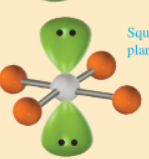
## Geometrias Electronicas



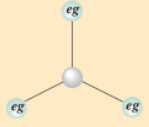

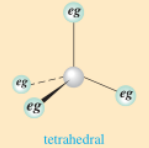

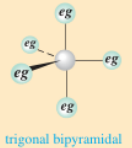

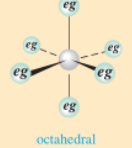

### Lineal: especies AB<sub>2</sub>

Para este caso en particular no hay mucho que decir. Es el clásico. Un ejemplo de este tipo de geometría es el de BeCl<sub>2</sub>. En cuanto a la fórmula de Lewis de estos compuestos, es bastante directa así que no voy a entrar en detalle. Lo importante es que el ángulo formado por las direcciones de las fuerzas de repulsión en este tipo de geometría es de 180°. Moléculas con esta geometría son no polares. Al tener dos centros de alta densidad electrónica, voy a usar el orbital *s* y un orbital *p*. Entonces la hibridación para estos compuestos es de tipo *sp*.

### Trigonal Planar: especies AB<sub>3</sub>

... a partir de acá dejo de resumir porque es todo lo mismo y es mas rápido mirar una tabla o buscarlo en el Whitten.

General Formula	Electron Groups <sup>a</sup>	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom	Lone Pairs	Molecular Geometry	Examples
AB <sub>3</sub> U	3	trigonal planar	$sp^2$	1	Angular 	O <sub>3</sub> , NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> , SO <sub>2</sub>
AB <sub>3</sub> U	4	tetrahedral	$sp^3$	1	Trigonal pyramidal 	NH <sub>3</sub> , SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
AB <sub>2</sub> U <sub>2</sub>	4	tetrahedral	$sp^3$	2	Angular 	H <sub>2</sub> O, NH <sub>2</sub> <sup>-</sup>
AB <sub>4</sub> U	5	trigonal bipyramidal	$sp^3d$	1	Seesaw 	SF <sub>4</sub>
AB <sub>3</sub> U <sub>2</sub>	5	trigonal bipyramidal	$sp^3d$	2	T-shaped 	ICl <sub>3</sub> , ClF <sub>3</sub>
AB <sub>2</sub> U <sub>3</sub>	5	trigonal bipyramidal	$sp^3d$	3	Linear 	XeF <sub>2</sub> , I <sub>3</sub> <sup>-</sup>
AB <sub>5</sub> U	6	octahedral	$sp^3d^2$	1	Square pyramidal 	IF <sub>5</sub> , BrF <sub>5</sub>
AB <sub>4</sub> U <sub>2</sub>	6	octahedral	$sp^3d^2$	2	Square planar 	XeF <sub>4</sub> , IF <sub>4</sub> <sup>-</sup>

Electron Groups (eg) <sup>a</sup>	Electronic Geometry	Hybridization at Central Atom (Angles)	Hybridized Orbital Orientation	Examples	Molecular Geometry
2	 linear	$sp$ (180°)		BeCl <sub>2</sub> HgBr <sub>2</sub> CdI <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> <sup>b</sup> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> <sup>c</sup>	linear linear linear linear linear
3	 trigonal planar	$sp^2$ (120°)		BF <sub>3</sub> BCl <sub>3</sub> NO <sub>3</sub> <sup>-e</sup> SO <sub>2</sub> <sup>d,e</sup> NO <sub>2</sub> <sup>-d,e</sup> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> <sup>f</sup>	trigonal planar trigonal planar trigonal planar angular (AB <sub>2</sub> U) angular (AB <sub>2</sub> U) planar (trig. planar at each C)
4	 tetrahedral	$sp^3$ (109.5°)		CH <sub>4</sub> CCl <sub>4</sub> NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> SO <sub>4</sub> <sup>2--</sup> CHCl <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> <sup>d</sup> SO <sub>3</sub> <sup>2--d</sup> H <sub>2</sub> O <sup>+d</sup> H <sub>2</sub> O <sup>d</sup>	tetrahedral tetrahedral tetrahedral tetrahedral distorted tetrahedral pyramidal (AB <sub>3</sub> U) pyramidal (AB <sub>3</sub> U) pyramidal (AB <sub>3</sub> U) angular (AB <sub>2</sub> U <sub>2</sub> )
5	 trigonal bipyramidal	$sp^3d$ (90°, 120°, 180°)		PF <sub>5</sub> SbCl <sub>5</sub> SF <sub>4</sub> <sup>d</sup> ClF <sub>3</sub> <sup>d</sup> XeF <sub>2</sub> <sup>d</sup> I <sub>3</sub> <sup>-d</sup>	trigonal bipyramidal trigonal bipyramidal seesaw (AB <sub>4</sub> U) T-shaped (AB <sub>3</sub> U <sub>2</sub> ) linear (AB <sub>2</sub> U <sub>3</sub> ) linear (AB <sub>2</sub> U <sub>3</sub> )
6	 octahedral	$sp^3d^2$ (90°, 180°)		SF <sub>6</sub> SeF <sub>6</sub> PF <sub>6</sub> <sup>-</sup> BrF <sub>5</sub> <sup>d</sup> XeF <sub>4</sub> <sup>d</sup>	octahedral octahedral octahedral square pyramidal (AB <sub>5</sub> U) square planar (AB <sub>4</sub> U <sub>2</sub> )