

Enlace Covalente

Geometría Molecular y Iónica

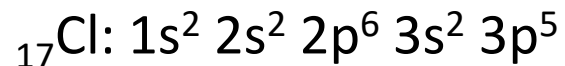
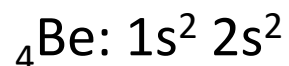
Química I - ITBA

Empecemos con un ejemplo: BeCl_2

Molecular, enlace covalente (Be está en el grupo 2).

Experimentalmente se sabe que la molécula es lineal, no polar y que los dos enlaces son iguales.

¿Cómo se unen los átomos? ¿Cuál es la forma de la molécula? No lo podemos saber de la fórmula de Lewis.



Be tiene todos los electrones apareados, así que no se pueden unir a los electrones del Cl. Se tienen que separar; si uno se queda en el 2s y el otro se ubica en uno de los orbitales 2p, habría una unión s-p y una p-p. serían uniones diferentes, o sea, no es lo que ocurre.

Hay teorías que intentan explicar cómo se forman estos enlaces en compuestos **covalentes** y nos sirven para saber cuál es la geometría de las moléculas:

Teoría de la Repulsión de los Pares de Electrones de Valencia (TRPEV)

Los electrones se distribuyen alrededor del átomo central de forma tal de que entre ellos se tenga la **mínima repulsión**.

Teoría del Enlace de Valencia (TEV)

Es una **teoría de orbitales atómicos**. Nos ayuda a entender cómo se unen los átomos al átomo central. Surge del modelo cuántico.

Teoría de Orbitales Moleculares

Surge del modelo cuántico. Se ve algo en Química II.

TRPEV y TEV se complementan y las vamos a ver juntas con varios ejemplos.

Vamos a ver moléculas con un **átomo central** unido a dos o más **átomos terminales** mediante pares de **electrones enlazantes**. En el átomo central pueden quedar **electrones libres** (que no forman unión con otro átomo).

Vamos a poder saber la **geometría de la molécula y si es polar o no**.

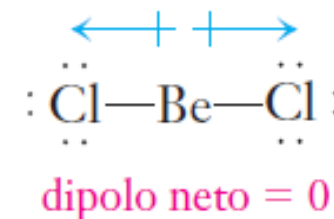
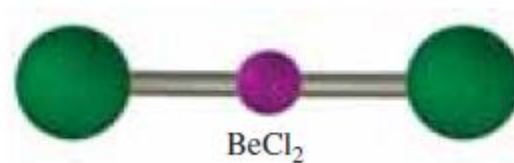
Tener en cuenta que unión simple, doble o triple es una zona de alta densidad electrónica.

Siempre primero hay que dibujar la fórmula de Lewis. Después contar cuántas zonas de alta densidad electrónica hay. Distinguir si hay o no algún par libre. Finalmente ver si los momentos dipolares se cancelan (suma vectorial en el espacio).

A: átomo central

B: átomo terminal

U: pares libres



2 pares de electrones enlazantes y ningún par libre, o sea **2 zonas de alta densidad electrónica**.

Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión, los pares de electrones se ubican a **180°**, con lo cual se tiene **geometría electrónica lineal**.

Como no hay pares libres, se tiene la misma **geometría molecular lineal**.

Los momentos dipolares tienen igual módulo y dirección, pero sentido opuesto, o sea que se cancelan y la molécula es **no polar**, la molécula es simétrica.

Pero cómo hicieron los electrones para formar cada par enlazante nos lo va a decir TEV.

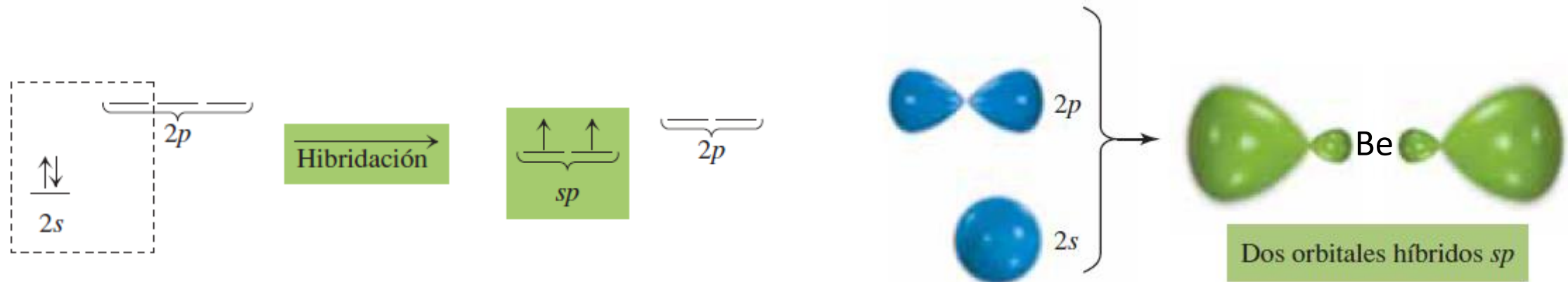
Los dos electrones del Be del orbital 2s se van a desaparecer y tendrán que quedar en dos orbitales de igual energía, para poder tener dos uniones iguales.

Estos nuevos orbitales que se forman para la unión son **orbitales híbridos**. Se van a formar usando el orbital 2s y uno de los orbitales 2p; los otros dos orbitales 2p quedarán sin hibridizar (recordar que un orbital es simplemente un lugar en el espacio).

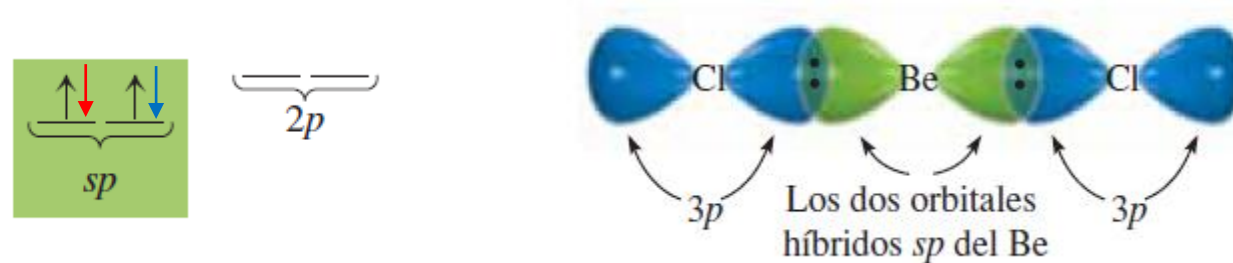
La energía de los orbitales híbridos será intermedia entre las energías de los orbitales atómicos puros que les dieron origen.

Siempre se necesitan tantos orbitales atómicos puros como orbitales híbridos se necesiten.

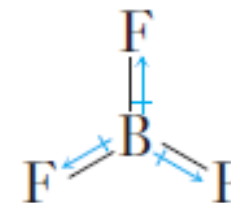
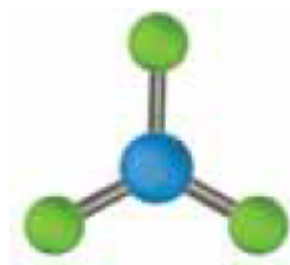
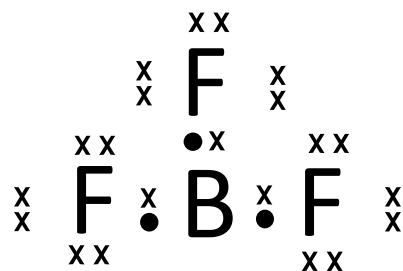
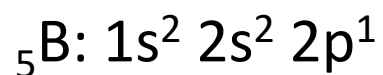
Se llamarán orbitales híbridos **sp** porque provienen de un orbital atómico puro s y de uno p.



La energía necesaria para la hibridación se compensa con la energía liberada al formar los nuevos enlaces.



La interacción entre un orbital sp del Be y un orbital p del Cl es **frontal**, se llama σ .

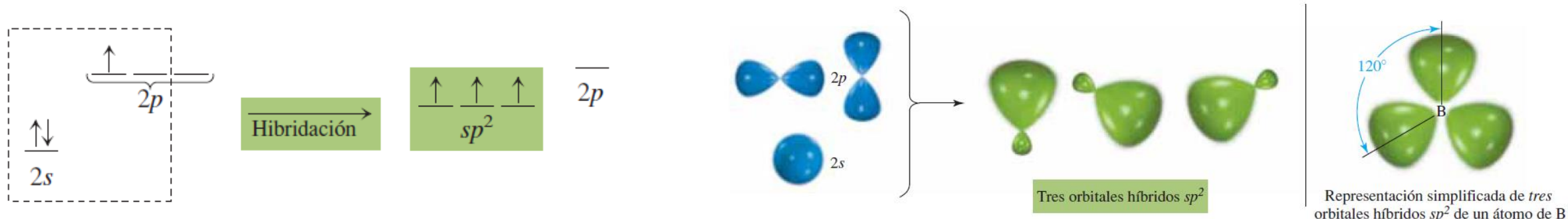


3 pares de electrones enlazantes y ningún par libre, o sea **3 zonas de alta densidad electrónica**.

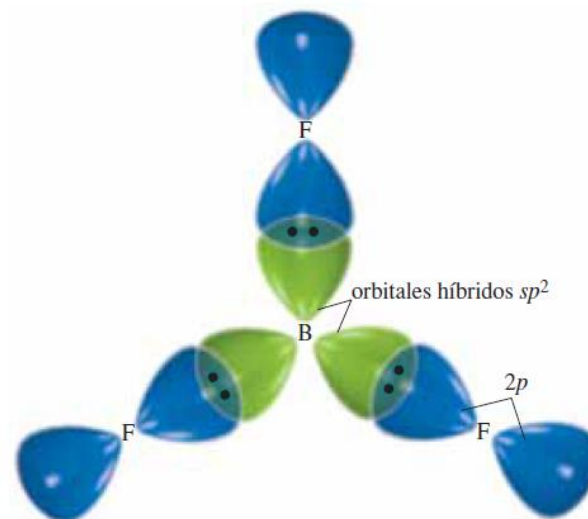
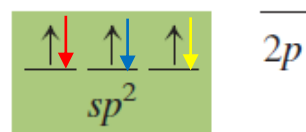
Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión, los pares de electrones se ubican a **120°**, con lo cual se tiene **geometría electrónica triangular**.

Como no hay pares libres, se tiene la misma **geometría molecular triangular**.

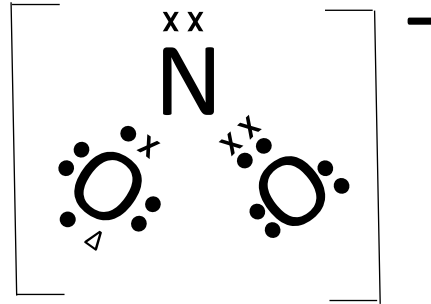
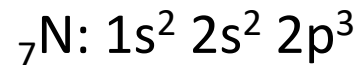
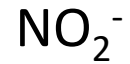
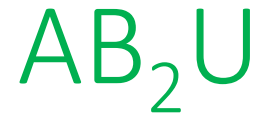
Los momentos dipolares tienen igual módulo, se encuentran formando ángulos de 120° entre sí y se dirigen hacia los átomos de F, o sea que se cancelan y la molécula es **no polar**, la molécula es simétrica.



Se llamarán orbitales híbridos **sp^2** porque provienen de un orbital atómico puro s y de dos p.



La interacción entre un orbital sp^2 del B y un orbital p del F es **frontal, σ** .



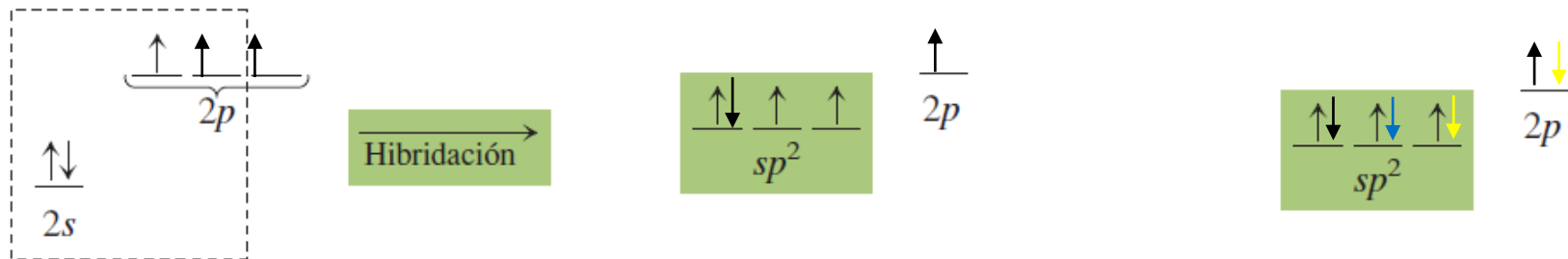
1 unión covalente simple, 1 unión covalente doble y 1 par libre, o sea **3 zonas de alta densidad electrónica**.

Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión, los pares de electrones se ubican teóricamente a **120°**, con lo cual se tiene **geometría electrónica triangular**.

Como hay pares libres, la **geometría iónica** es diferente, **angular**.

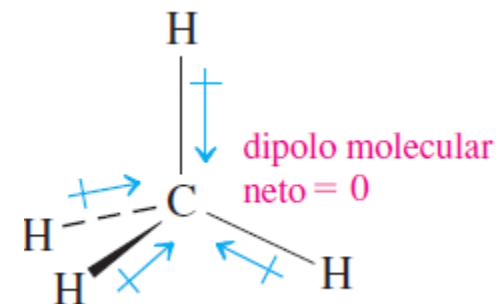
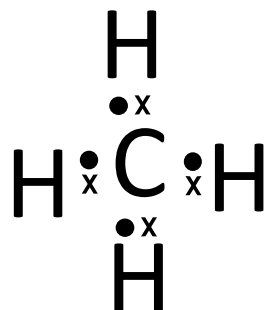
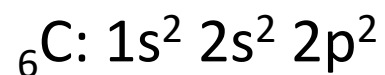
La repulsión entre un par libre y uno enlazante es mayor que entre dos pares enlazantes.

No se puede hablar de polaridad porque es un ión.



En un orbital sp^2 queda el par libre. En un segundo orbital sp^2 está el par de la unión covalente simple con un O. En el tercer orbital sp^2 está uno de los pares de la unión doble con el otro O. El otro par de la unión doble se da por medio del orbital p que no se hibridiza. Esta última unión no es frontal, sino **lateral** y se llama π .

Siempre que se tiene una unión doble o triple, la primera unión es frontal (σ) y la o las otras son laterales (π).

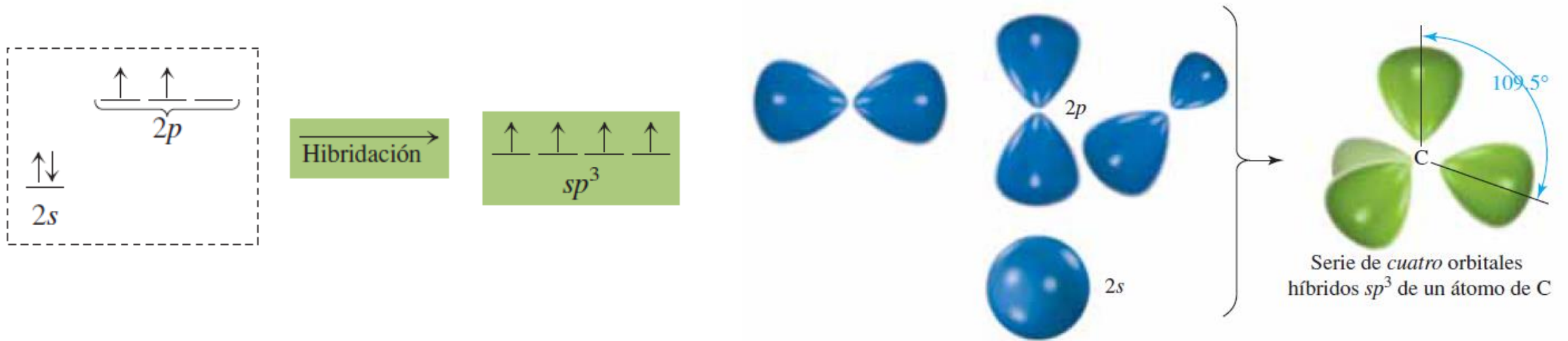


4 pares de electrones enlazantes y ningún par libre, o sea **4 zonas de alta densidad electrónica**.

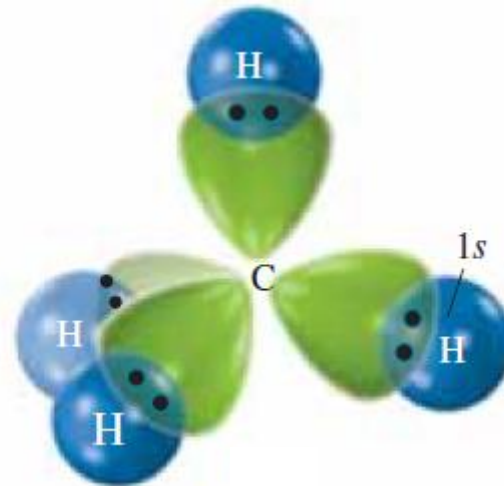
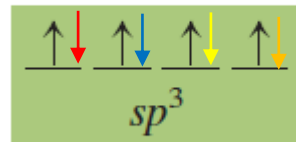
Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión, los pares de electrones se ubican a **109°28'**, con lo cual se tiene **geometría electrónica tetraédrica**.

Como no hay pares libres, se tiene la misma **geometría molecular tetraédrica**.

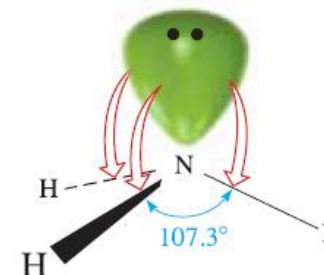
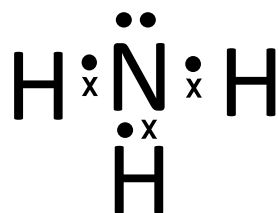
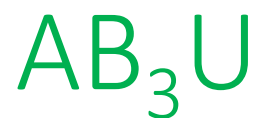
Los momentos dipolares tienen igual módulo y se encuentran formando ángulos de 109°28' entre sí y se dirigen hacia el átomo de C, o sea que se cancelan y la molécula es **no polar**, la molécula es simétrica.



Se llamarán orbitales híbridos **sp³** porque provienen de un orbital atómico puro s y de tres p.



La interacción entre un orbital sp^3 del C y el orbital s del H es **frontal, σ** .



3 pares de electrones enlazantes y 1 par libre, o sea **4 zonas de alta densidad electrónica**.

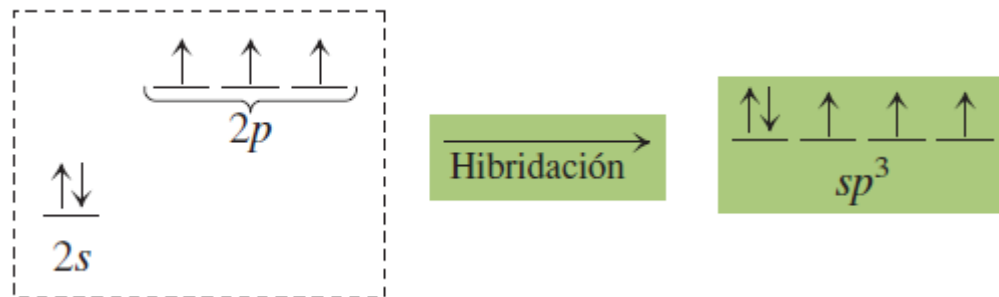
Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión se tiene **geometría electrónica tetraédrica**.

Como hay pares libres, la **geometría molecular** es diferente, **piramidal triangular**.

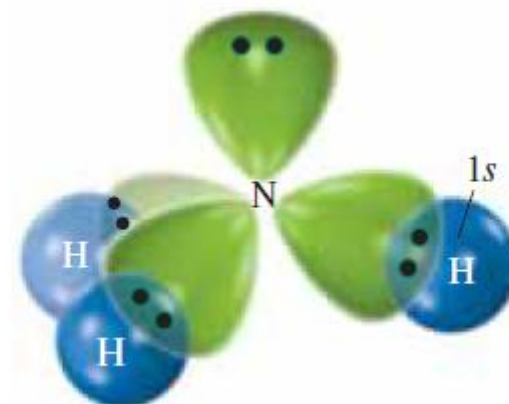
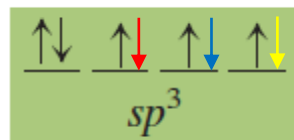
La repulsión entre un par libre y uno enlazante es mayor que entre dos pares enlazantes.

El ángulo de enlace en el NH_3 es de 107° .

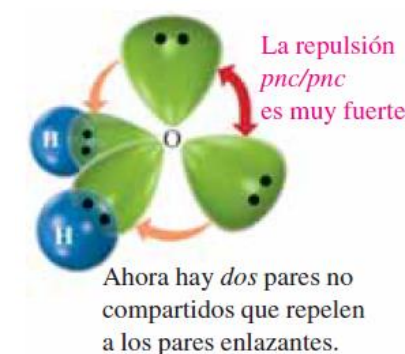
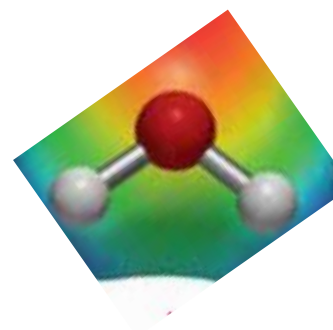
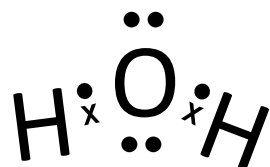
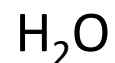
Como hay un único par libre, la molécula es asimétrica y los momentos dipolares no se cancelan, se tiene una molécula **polar**.



Orbitales híbridos sp^3 .



La interacción entre un orbital sp^3 del N y el orbital s del H es **frontal**, σ .



2 pares de electrones enlazantes y 2 pares libres, o sea **4 zonas de alta densidad electrónica**.

Usando TRPEV sabemos que, para tener la menor repulsión, se tiene **geometría electrónica tetraédrica**.

Como hay pares libres, la **geometría molecular** es diferente, **angular**.

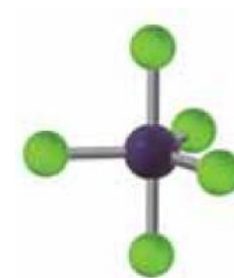
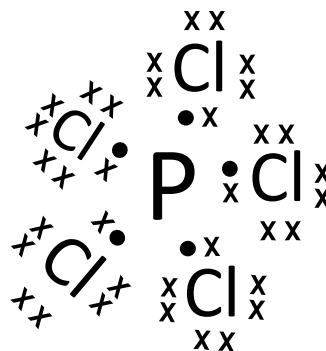
La repulsión entre dos pares libres es aún mayor que entre un par libre y uno enlazante.

El ángulo de enlace en el H_2O es de 104° .

La molécula es asimétrica y los momentos dipolares no se cancelan, se tiene una molécula **polar**.

Orbitales híbridos **sp^3** .

La interacción entre un orbital sp^3 del O y el orbital s del H es **frontal, σ** .

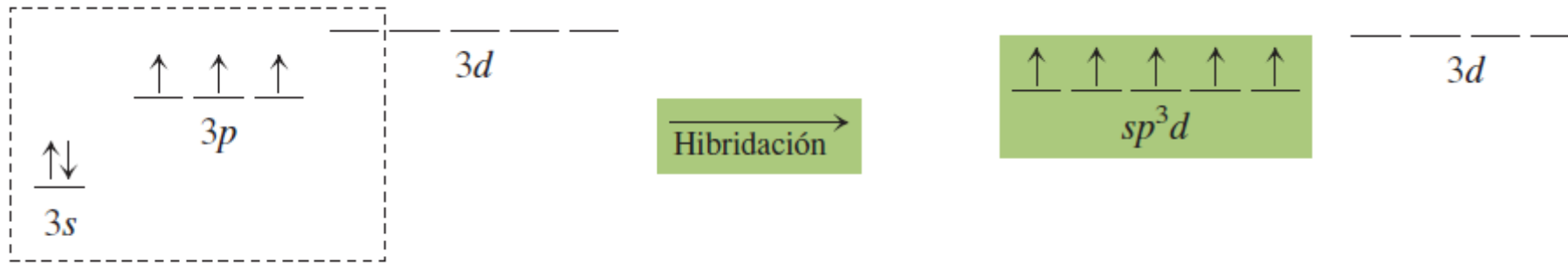


5 pares de electrones enlazantes y no hay pares libres, o sea **5 zonas de alta densidad electrónica**.

Los pares de electrones se ubican formando dos pirámides unidas por una base triangular. Se tiene **geometría electrónica y molecular bipiramidal trigonal**.

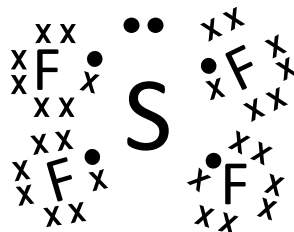
Las cinco posiciones no son iguales. Hay tres posiciones **ecuatoriales**, en la base de la pirámide, los tres átomos están a **120°** entre sí. Y hay dos posiciones **axiales**, a **180°** entre sí y a **90°** de los que están en la base.

Los momentos dipolares de la base se anulan entre sí y los de las posiciones axiales entre ellos, la molécula es simétrica y resulta **no polar**.



Se necesitan 5 orbitales híbridos, serán uno s, tres p y uno d. Se dará en átomos centrales que se encuentran a partir del período 3. Se tendrán orbitales híbridos **sp^3d** .

La interacción entre un orbital sp^3d del P y un orbital p del Cl es **frontal**, **σ** .



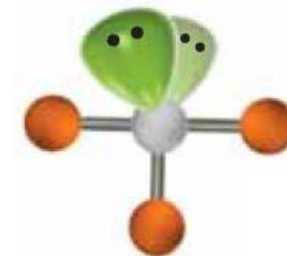
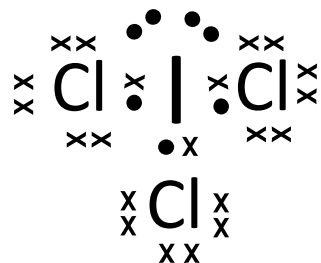
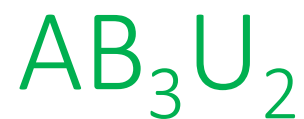
4 pares de electrones enlazantes y 1 par libre, o sea **5 zonas de alta densidad electrónica**. Se tiene **geometría electrónica bipiramidal trigonal**.

Las posiciones no son todas iguales. Si el par libre estuviera en una posición axial, estaría a 90° de tres pares y a 180° de un par más lejano. Si estuviera en una posición ecuatorial, estaría a 120° de dos pares y a 90° de los otros dos. Para tener una separación más grande, y que la repulsión sea mínima **el par libre está en posición ecuatorial**. Se tiene **geometría molecular sube y baja**, tetraédrica distorsionada, oscilante, zigzag o balancín.

Hay un único par de electrones libres, los momentos dipolares no pueden anularse entre sí, la molécula resulta **polar**.

Orbitales híbridos **sp^3d** .

La interacción entre un orbital sp^3d del S y un orbital p del F es **frontal, σ** .



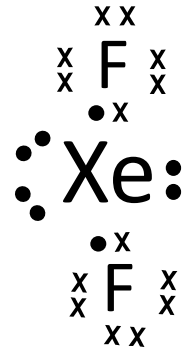
3 pares de electrones enlazantes y 2 pares libres, o sea **5 zonas de alta densidad electrónica**. Se tiene **geometría electrónica bipiramidal trigonal**.

La repulsión es mínima cuando **los pares libres están en posiciones ecuatoriales**. Se tiene **geometría molecular en forma de T**.

Los momentos dipolares no pueden anularse entre sí, la molécula resulta **polar**.

Orbitales híbridos **sp^3d** .

La interacción entre un orbital sp^3d del I y un orbital p del Cl es **frontal, σ** .



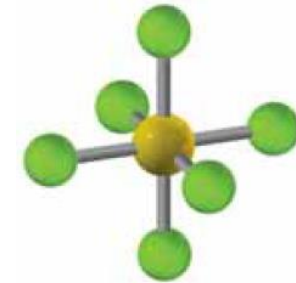
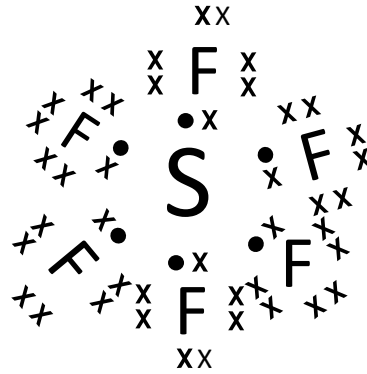
2 pares de electrones enlazantes y 3 pares libres, o sea **5 zonas de alta densidad electrónica**. Se tiene **geometría electrónica bipiramidal trigonal**.

La repulsión es mínima cuando **los pares libres están en posiciones ecuatoriales**. Se tiene **geometría molecular lineal**.

Los dipolos se cancelan entre sí y la molécula es **no polar**.

Orbitales híbridos **sp³d**.

La interacción entre un orbital sp³d del Xe y un orbital p del F es **frontal, σ**.

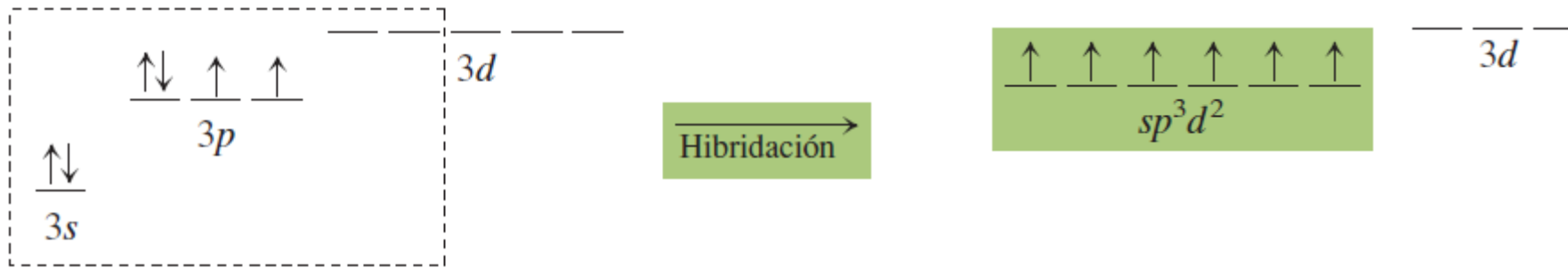


6 pares de electrones enlazantes y no hay pares libres, o sea **6 zonas de alta densidad electrónica**.

Los pares de electrones se ubican formando dos pirámides unidas por una base cuadrada. Se tiene **geometría electrónica y molecular octaédrica**.

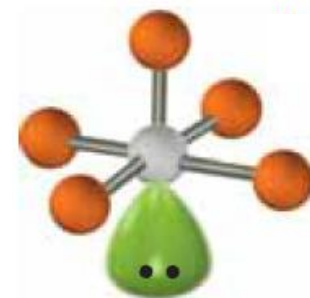
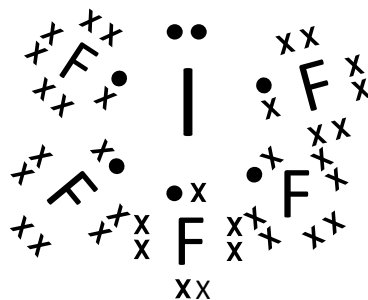
Las seis posiciones son iguales, con ángulo de enlace de **90°**.

Los momentos dipolares se anulan, la molécula es simétrica y resulta **no polar**.



Se necesitan 6 orbitales híbridos, serán uno s, tres p y dos d. Se dará en átomos centrales que se encuentran a partir del período 3. Se tendrán orbitales híbridos **sp^3d^2** .

La interacción entre un orbital sp^3d^2 del S y un orbital p del F es **frontal**, **σ** .



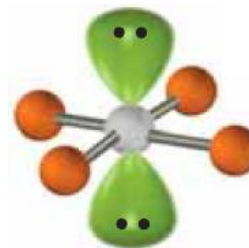
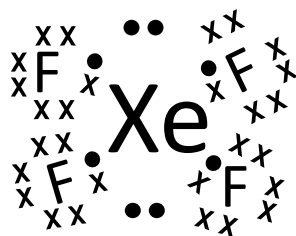
5 pares de electrones enlazantes y 1 par libre, o sea **6 zonas de alta densidad electrónica**. Se tiene **geometría electrónica octaédrica**.

Las seis posiciones son iguales, con ángulo de enlace de **90°**. Entonces, el par libre puede estar en cualquiera, **geometría molecular piramidal cuadrada**.

Hay un único par de electrones libre, la molécula no es simétrica y resulta **polar**.

Orbitales híbridos **sp³d²**.

La interacción entre un orbital sp³d² del I y un orbital p del F es **frontal, σ**.



4 pares de electrones enlazantes y 2 pares libres, o sea **6 zonas de alta densidad electrónica**. Se tiene **geometría electrónica octaédrica**.

Los dos pares libres tienen que estar enfrentados para que la repulsión sea mínima, **geometría molecular cuadrada**.

Ángulo de enlace de **90°**.

Esta molécula es **no polar** porque los dipolos se anulan.

Orbitales híbridos **sp³d²**.

La interacción entre un orbital sp³d² del Xe y un orbital p del F es **frontal, σ**.

Zonas	Molécula	Ejemplo	Geometría electrónica	Geometría molecular	Hibridación	Ángulo (en gm)	Unión	¿Polar o no polar?*
2	AB ₂	BeCl ₂	Lineal		sp	180°	σ	No polar
3	AB ₃	BF ₃	Plana trigonal	Plana trigonal	sp ²	120°	σ	No polar
	AB ₂ U	NO ₂ ⁻		Angular			σ π	-
4	AB ₄	CH ₄	Tetraédrica	Tetraédrica	sp ³	109°28'	σ	No polar
	AB ₃ U	NH ₃		Piramidal trigonal		<109°28'	σ	Polar
	AB ₂ U ₂	H ₂ O		Angular		<109°28'	σ	Polar
5	AB ₅	PCl ₅	Bipiramidal trigonal	Bipiramidal trigonal	sp ³ d	120°; 180°; 90°	σ	No polar
	AB ₄ U	SF ₄		Subibaja		<120°; 180°; 90°	σ	Polar
	AB ₃ U ₂	ICl ₃		T		180°; 90°	σ	Polar
	AB ₂ U ₃	XeF ₂		Lineal		90°	σ	No polar
6	AB ₆	SF ₆	Octaédrica	Octaédrica	sp ³ d ²	180°; 90°	σ	No polar
	AB ₅ U	ICl ₅		Piramidal cuadrada		90°	σ	Polar
	AB ₄ U ₂	XeF ₄		Cuadrada plana		90°	σ	No polar

* Cuando dice no polar, se refiere a la molécula de ejemplo. Según el caso puede resultar polar, por ejemplo, si los átomos terminales son diferentes. 26

Ahora...

¡A estudiar!

¡A hacer los ejercicios del libro de Whitten!