



ANUAL SAN MARCOS



www.aduni.edu.pe



QUÍMICA

GEOMETRÍA MOLECULAR Semana 12

www.aduni.edu.pe

ACADEMIA
ADUNI
ANUAL
SAN MARCOS

I. OBJETIVOS

Los estudiantes, al término de la sesión de clase serán capaces de:

1. **Realizar** las estructuras moleculares más estables usando la teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (**TRPECV**).
2. **Reconocer** si una molécula es polar o apolar.
3. **Predecir** si dos líquidos son miscibles (solubles entre si); ó tal vez inmiscibles (insolubles).



II. INTRODUCCIÓN



Todos hemos interactuado con un balón de futbol o de vóley:

¿Qué forma tienen? **forma esférica**
(geometría esférica)

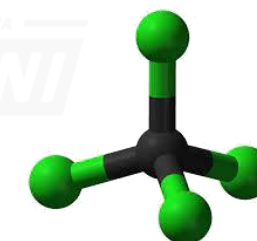
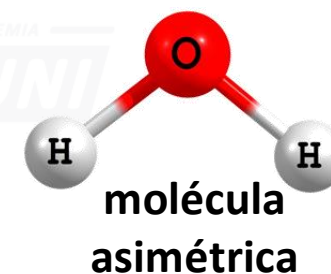
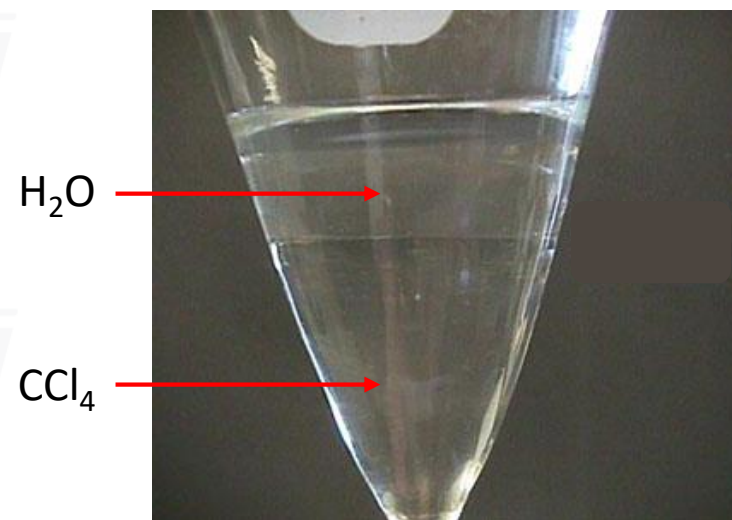


¿O son planas como un disco?..... **no**

¿La forma que tienen le permite rodar? **si**

Quiere decir que su geometría influye en su comportamiento y propiedades.

El agua es conocido como solvente universal por su capacidad de disolver muchas sustancias, por qué el agua (H_2O) y el tetracloruro de carbono (CCl_4) son líquidos inmiscibles?



molécula con simétrica

¿La geometría diferente de sus moléculas tendrá algo que ver?

MOLÉCULA

Es la **partícula más pequeña** que conserva la identidad de una **sustancia covalente**. En general las moléculas se encuentran formadas por dos o más átomos covalentemente unidos, los átomos que forman las moléculas pueden ser iguales o distintos. A una sustancia compuesta de moléculas se le llama sustancia molecular.

EJEMPLOS

He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, H₂, O₂, O₃, N₂, CO, CO₂, H₂O, H₂O₂, NH₃, C₃H₈, SO₃, CCl₄, AlCl₃, BH₃, CH₄

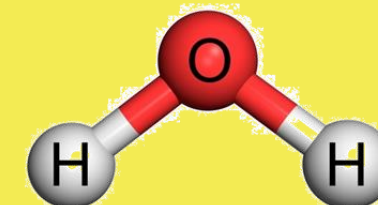
moléculas
monoatómicas

moléculas
poliatómicas

Moléculas eléctricamente neutras



molécula
monoatómica



molécula
triatómica

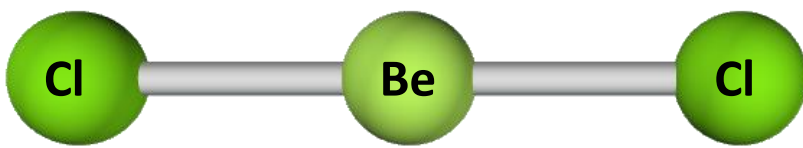
III.GEOMETRÍA MOLECULAR (GM)

- ✓ Se refiere al arreglo o disposición espacial (tridimensional) que adoptan los átomos entorno a un átomo central de una molécula (sustancia covalente).
- ✓ La GM influye en sus propiedades físicas (solubilidad, actividad óptica, etc) y químicas (reactividad, velocidad de reacción, etc).

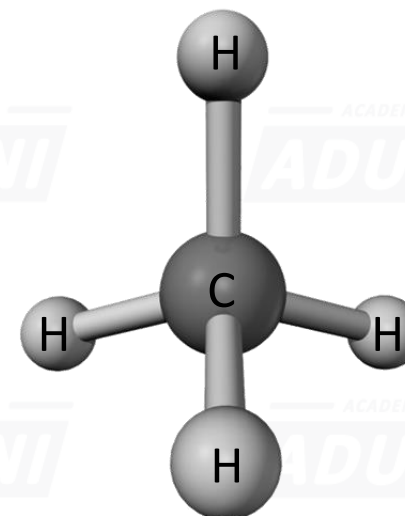
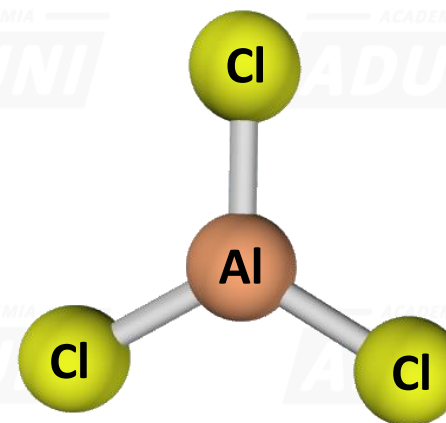
Para predecir la geometría molecular (GM) se utiliza la **teoría** de las **repulsiones** entre **pares** de **electrones** de la **capa de valencia** del átomo central (TRPECV) y, de forma específica, establece que la geometría de una molécula adopta la forma que minimiza la repulsión eléctrica entre los pares de electrones de la capa de valencia.

La mínima repulsión se establece cuando los pares de electrones están separados entre si lo más posible.

BeCl_2 (lineal)



AlCl_3 (trigonal)



CH_4 (tetraédrico)

IV. TEORÍA DE REPULSIÓN DE PARES ELECTRÓNICOS DE LA CAPA DE VALENCIA (TRPECV)

- Fue desarrollado en 1957 por Ronald Gillespie y Ronald Nyholm, es un modelo práctico y eficiente, el cual establece que la disposición espacial de los átomos es generar una estructura molecular de mínima energía, lo cual se alcanzará cuando se genere la mínima repulsión eléctrica entre los pares de electrones.

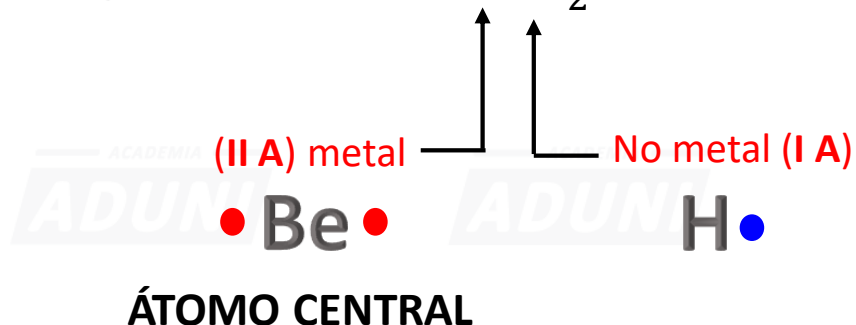
La TRPECV es importante en la comprensión de cómo interactúan las moléculas.

- La TRPECV toma en cuenta dos reglas generales:**

REGLA 1

Máxima separación entre los pares electrónicos del átomo central (ya sea pares enlazantes y/o pares no enlazantes), de tal forma que la repulsión eléctrica entre ellos sea mínima.

EJEMPLO: Analicemos el BeH_2

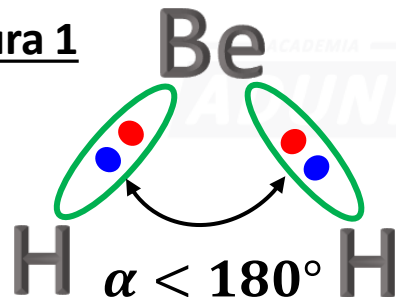


TENER EN CUENTA

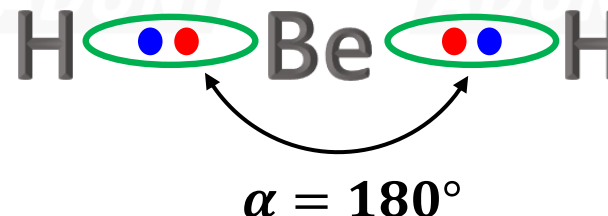
El berilio es estable (con 4 e_{val}^-) y el hidrógeno es estable (con 2 e_{val}^-).

Estudiantes, podríamos proponer 2 posibles estructuras:

Estructura 1

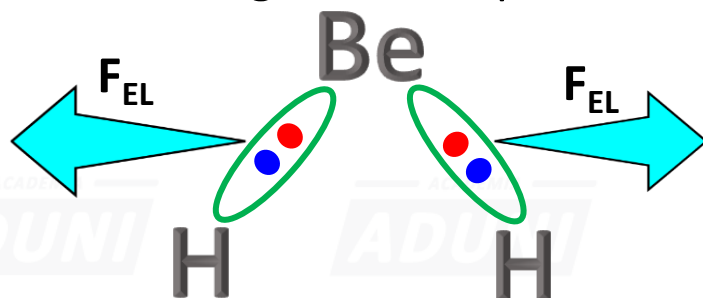


Estructura 2



Ángulo (α) de separación entre los pares electrónicos enlazantes

¿En que estructura habrá mayor repulsión eléctrica entre los 2 pares enlazantes? Recuerda: negativo con negativo se repelen



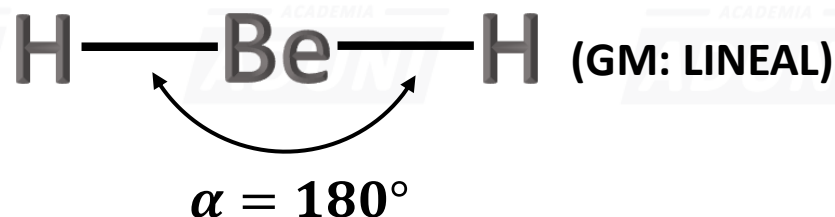
Mayor repulsión eléctrica



Menor repulsión eléctrica

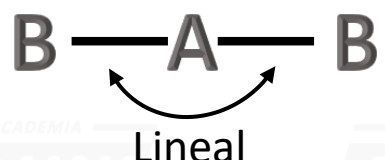


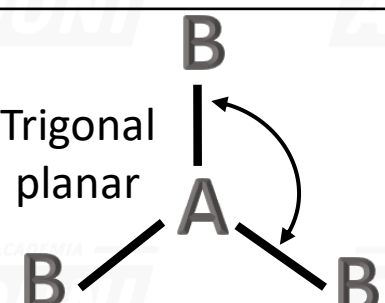
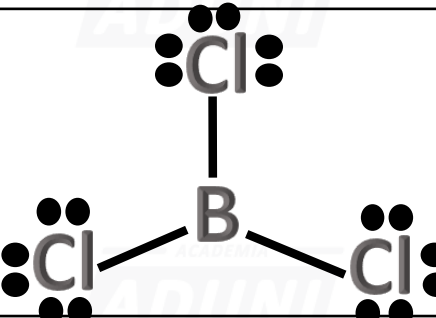
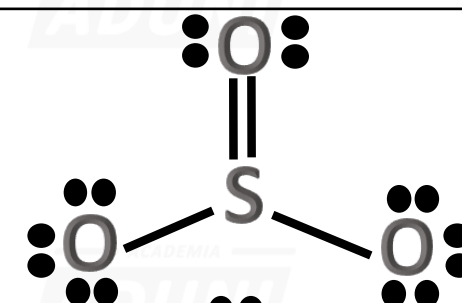
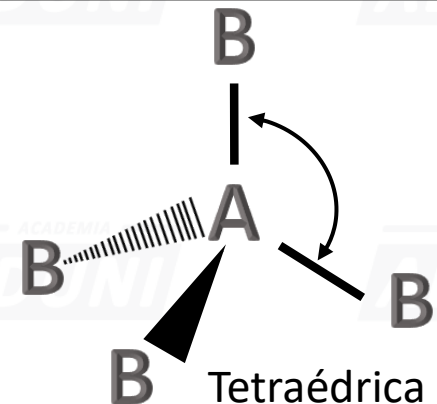
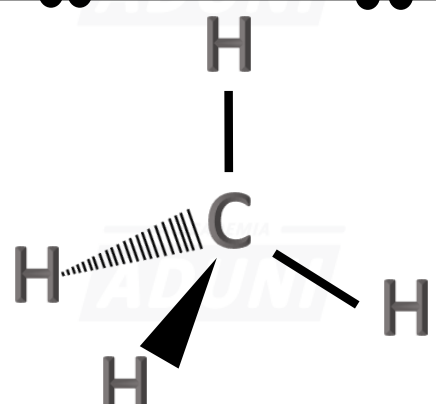
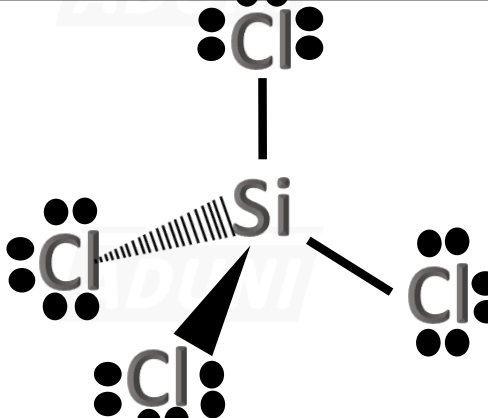
Repulsión eléctrica entre pares electrónicos enlazantes

Luego, la geometría molecular (GM) más estable para el BeH_2 será:



Por fines prácticos, de los enlaces doble (=) y triple (\equiv) se consideran solo el enlace sigma (σ).

Geometría molecular (GM) considerando el átomo central sin pares electrónicos solitarios o libres

N° de pares de electrones del átomo central	Geometría molecular (GM)	Ángulo de enlace	Ejemplos
2	 <p>Lineal</p>	180°	 
3	 <p>Trigonal planar</p>	120°	 
4	 <p>Tetraédrica</p>	109,5°	 

REGLA 2

La intensidad de la fuerza eléctrica de repulsión entre pares electrónicos.

La repulsión
par solitario (PS)
par solitario (PS)

>

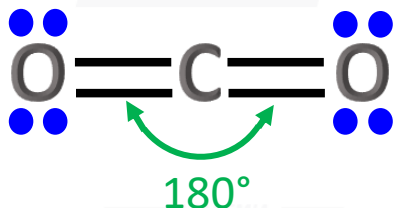
La repulsión
par solitario (PS)
par enlazante (PE)

>

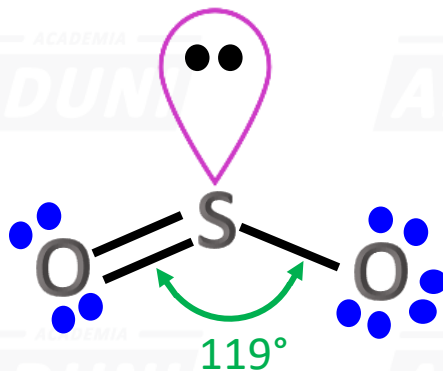
La repulsión
par enlazante (PE)
par enlazante (PE)

Conclusión: la repulsión entre orbitales con pares no enlazantes (o pares solitarios) ocupan mayor espacio.

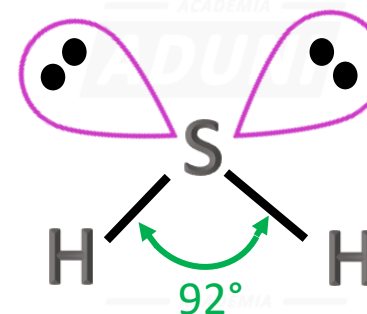
EJEMPLO: Interpretemos la formación de los ángulos de enlace en el CO_2 , SO_2 , H_2S .



- Solo hay repulsión PE-PE




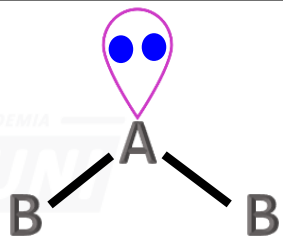
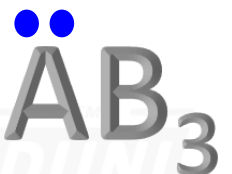
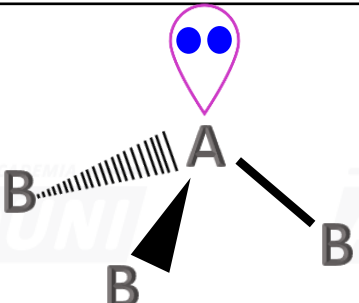

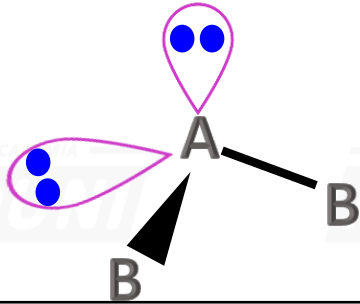
- Hay repulsión PE-PE
- Hay repulsión PS-PE (**predomina**)



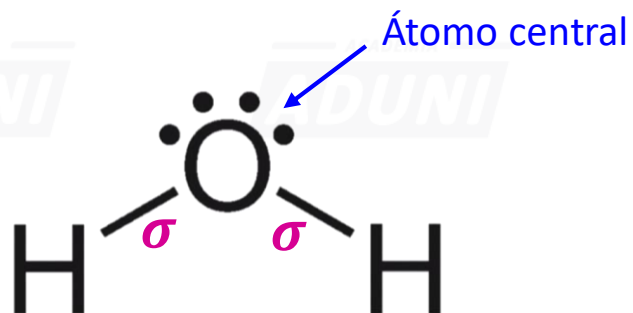
- Hay repulsión PE-PE
- Hay repulsión PS-PE
- Hay repulsión PS-PS (**predomina**)

En ángulo de enlace disminuye por la mayor repulsión con los pares no enlazantes.

Geometría molecular considerando que el átomo central presente uno o más pares solitarios.

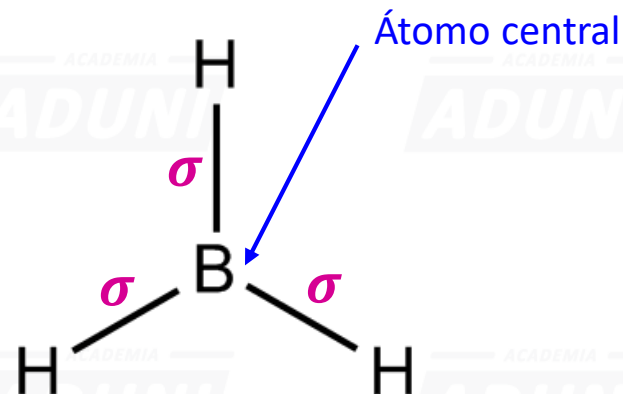
Fórmula molecular	N° total de pares de electrones	N° de pares enlazantes	N° de pares solitarios	Geometría molecular (GM)
	3	2	1	Angular 
	4	3	1	Piramidal 
	4	2	2	Angular 

EJEMPLOS



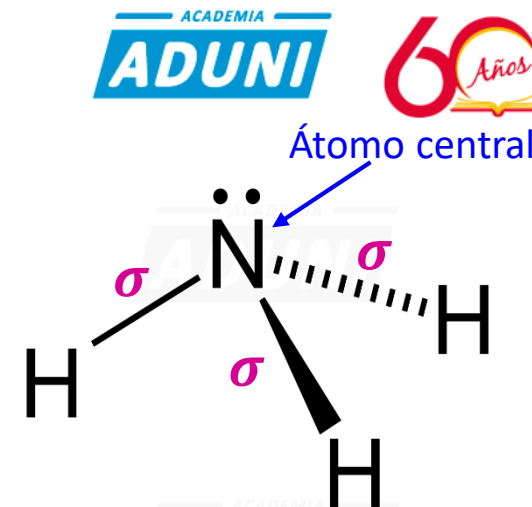
- Tiene 4 pares de electrones (2 pares enlazantes σ y 2 pares solitarios)

GM: ANGULAR



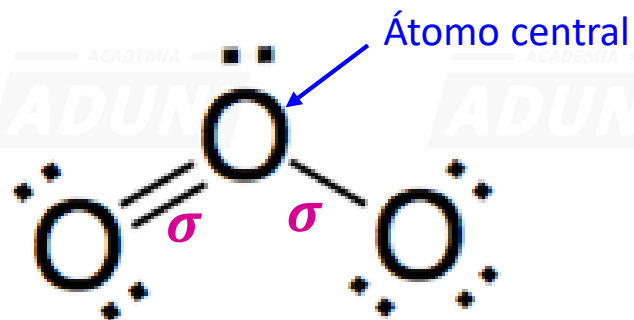
- Tiene 3 pares enlazantes σ

GM: TRIGONAL PLANAR



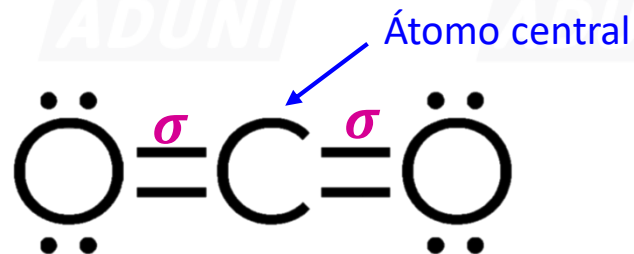
- Tiene 4 pares de electrones (3 pares enlazantes σ y 1 par solitario)

GM: PIRAMIDAL



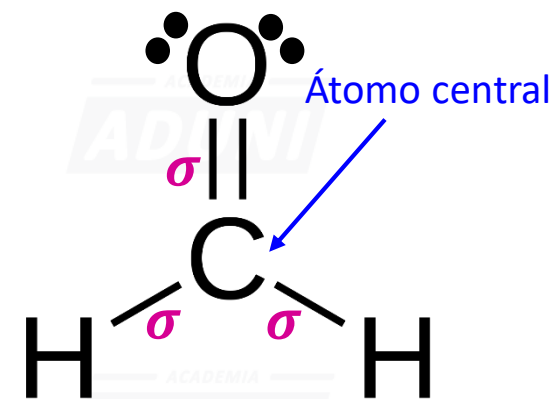
- Presenta 2 pares enlazantes σ y 1 par solitario

GM: ANGULAR



- Presenta 2 pares enlazantes σ

GM: LINEAL



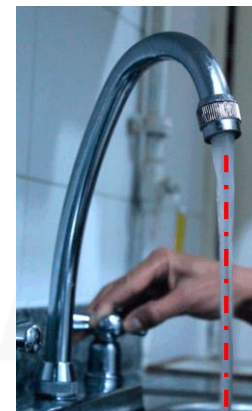
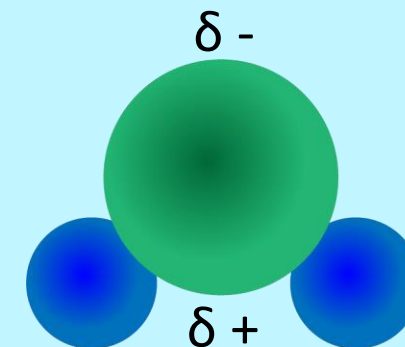
- Presenta 3 pares enlazantes σ

GM: TRIGONAL PLANAR

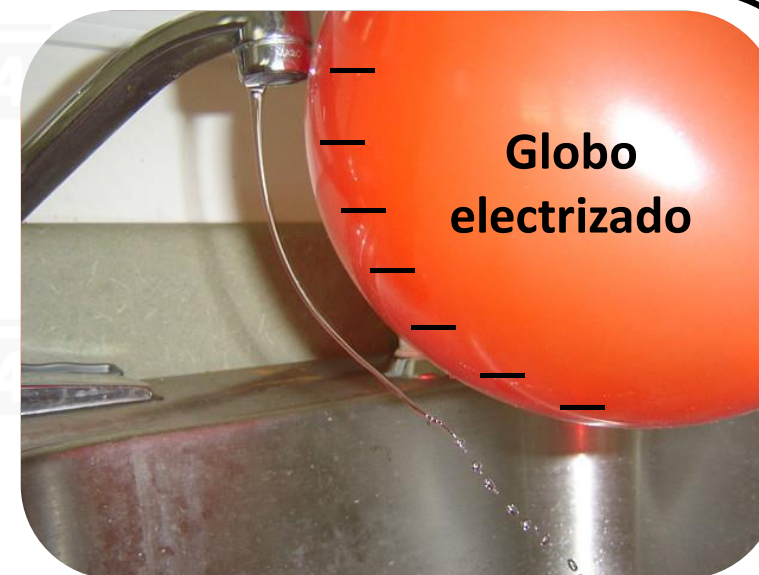
V. POLARIDAD MOLECULAR

EXPERIMENTO

Al abrir un poco la llave del caño, el agua (eléctricamente neutra) se desplazará en trayectoria vertical hacia abajo por la fuerza de gravedad.

Molécula de agua (H_2O)

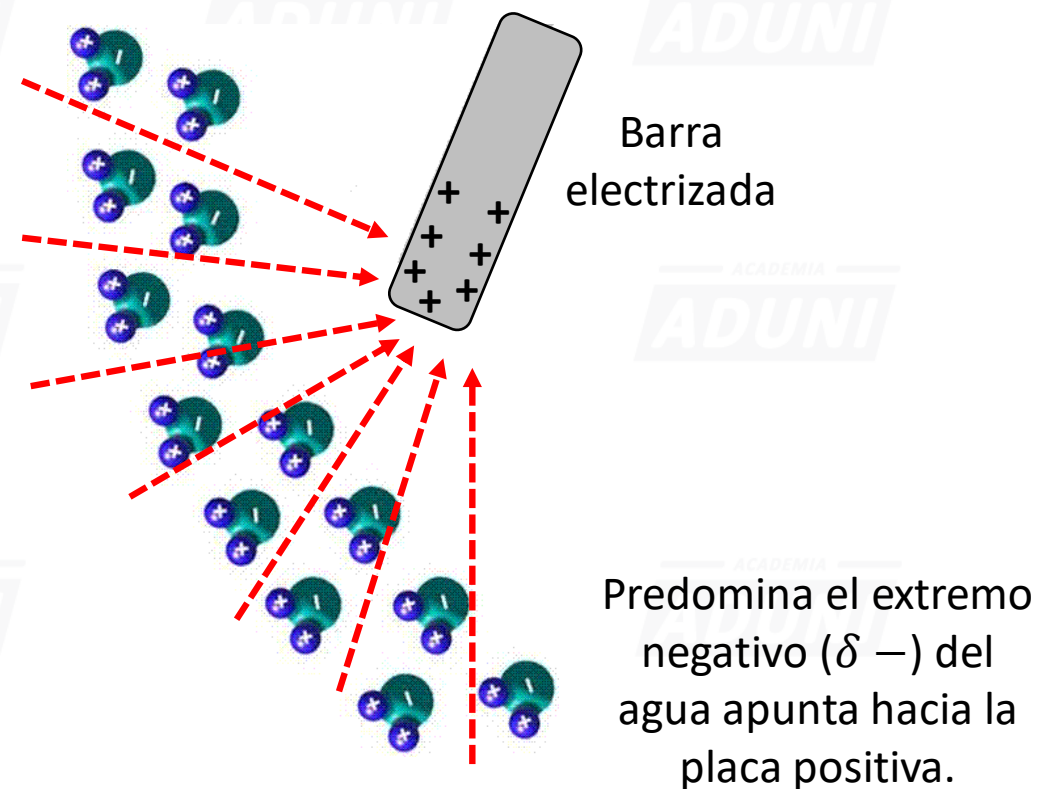
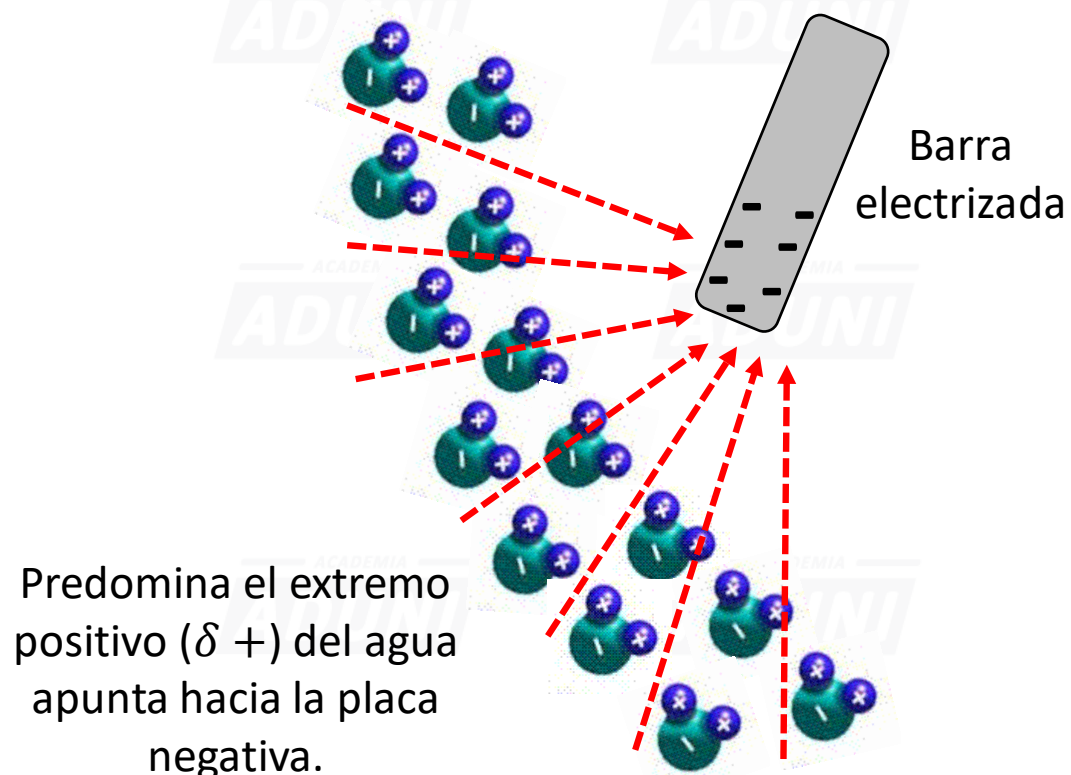
¿qué le sucede si le aproximamos un cuerpo electrizado?



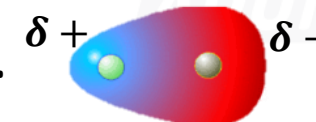
CONCLUSION

Si la molécula de agua es desviada da por cargas eléctricas, ello se debe necesariamente a que el agua debe tener naturaleza **polar**.

La explicación de la desviación del chorro de agua se debe a un principio físico: **cargas eléctricas opuestas se atraen**.



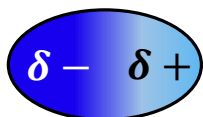
CONCLUSION: La molécula de agua es polar, es decir presenta un **pequeño dipolo**.



MOLÉCULA POLAR

- La **molécula polar** no tiene simetría (asimétrica) respecto del átomo central, razón por la cual el centro de cargas positiva ($\delta +$) y el centro de cargas negativas ($\delta -$) están separados, generando así un **dipolo eléctrico permanente**.
- Las **moléculas polares se orientan** o alinean dentro de un campo eléctrico externo.

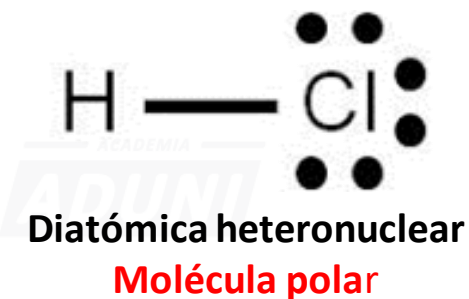
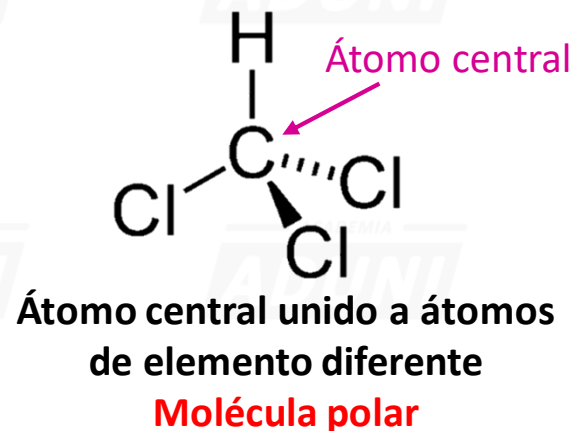
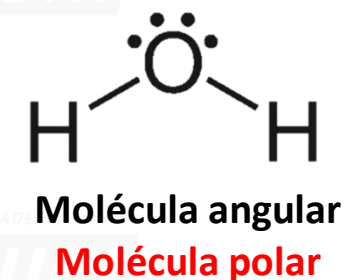
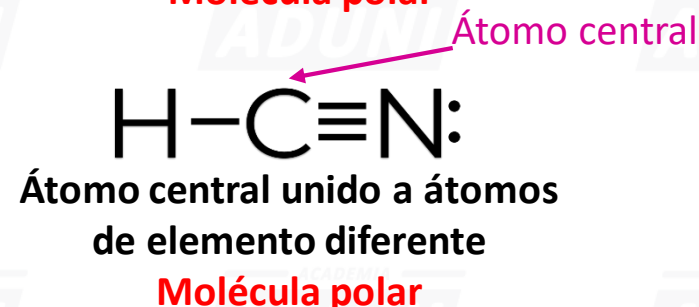
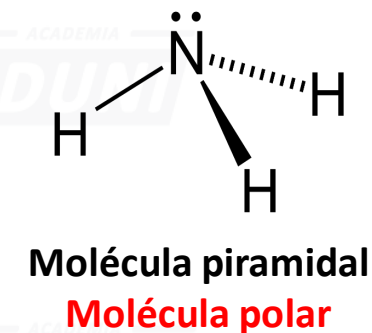
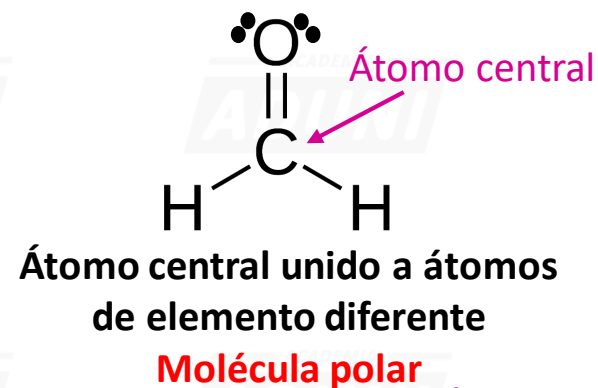
Regla práctica para reconocer una molécula polar



Dipolo eléctrico permanente

- ✓ Molécula con átomo central que tiene uno o más pares electrónicos solitarios.
- ✓ Angular y piramidal.
- ✓ Diatómica heteronuclear.
- ✓ Cuando el átomo central no tiene pares solitarios pero está unido a átomos de elemento diferente.

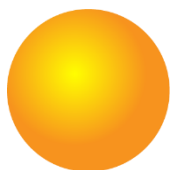
EJEMPLOS



MOLÉCULA NO POLAR (APOLAR)

- La **molécula apolar** presenta **simetría** respecto del átomo central, por tal razón el centro de cargas positiva ($\delta +$) y el centro de cargas negativas ($\delta -$) coinciden en un mismo punto y se anulan mutuamente.
- Las **moléculas apolares no se orientan** o alinean dentro de un campo eléctrico externo (no forman dipolos eléctricos).

Regla práctica para reconocer una molécula apolar

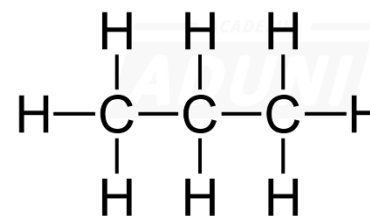


Es simétrico

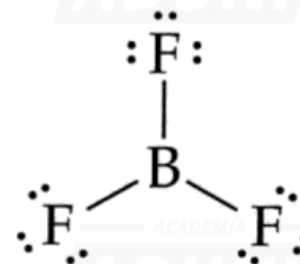
- Cuando el átomo central no tiene pares solitarios y está unido a átomos del mismo elemento. (lineal, trigonal planar y tetraédrica).
- Diatómica homonuclear
- Hidrocarburos
- Gas noble



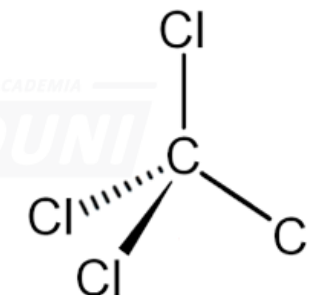
Diatómica homonuclear
Molécula apolar



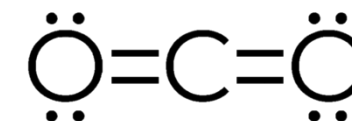
Hidrocarburo
Molécula apolar



Molécula trigonal planar
Molécula apolar



Molécula tetraédrica
Molécula apolar

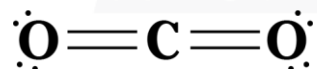


Molécula lineal
Molécula apolar



Gas noble
Molécula apolar

Una molécula apolar puede tener enlaces polares o apolares:

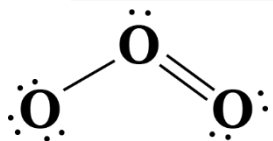


Molécula apolar
de enlaces
polares

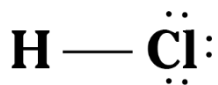


Molécula apolar
de enlace apolar

Una molécula polar puede tener enlaces polares o apolares:



Molécula polar
de enlaces
apolares

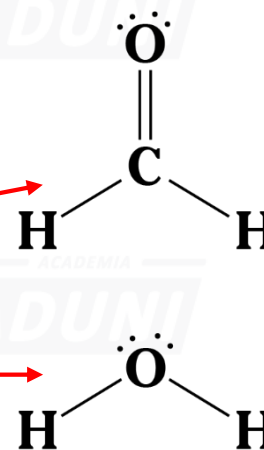


Molécula polar
de enlace
polares

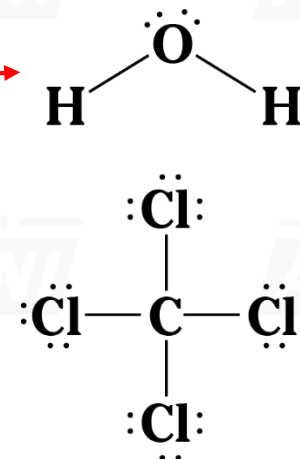
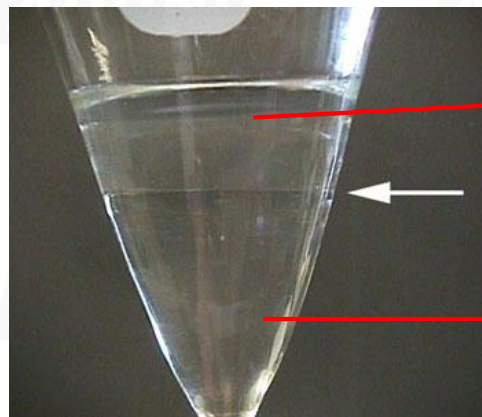
“Lo semejante disuelve a lo semejante”



Formol



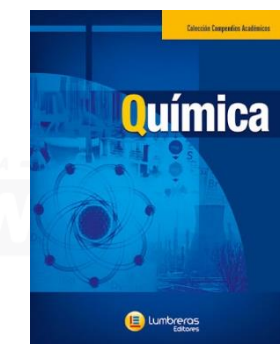
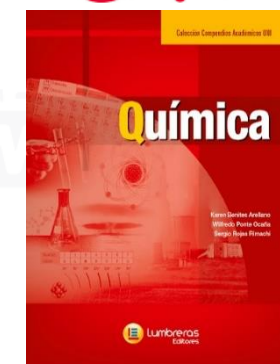
El formaldehído (HCHO) es soluble en agua (H₂O) porque ambos son de naturaleza polar.

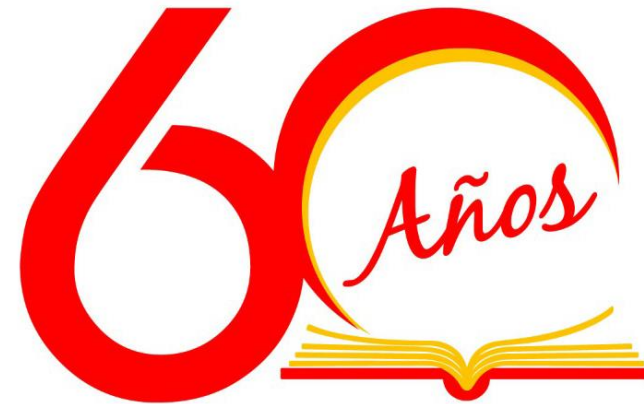
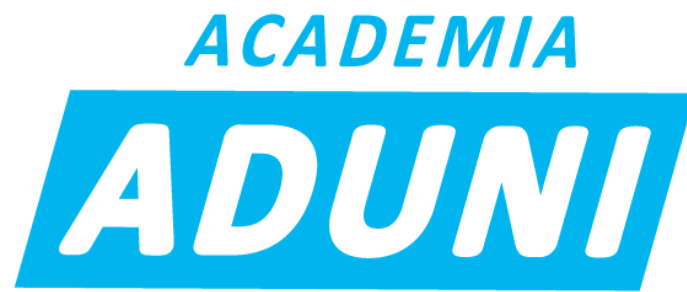


El tetracloruro de carbono (CCl₄) es insoluble en agua (H₂O) porque el tetracloruro de carbono es **apolar** y el agua es de naturaleza **polar**.

VI. BIBLIOGRAFÍA

- **Química, colección compendios académicos UNI; Lumbreras editores**
- **Química, fundamentos teóricos y aplicaciones; 2019 Lumbreras editores.**
- **Química, fundamentos teóricos y aplicaciones.**
- **Química esencial; Lumbreras editores.**
- **Fundamentos de química, Ralph A. Burns; 2003; PEARSON**
- **Química, segunda edición Timberlake; 2008, PEARSON**
- **Química un proyecto de la ACS; Editorial Reverte; 2005**
- **Química general, Mc Murry-Fay quinta edición**





www.aduni.edu.pe

