

GEOMETRÍA MOLECULAR

Lic. Lidia Iñigo

Hemos dicho al estudiar uniones químicas que un enlace covalente es polar cuando existe cierta diferencia de electronegatividad entre los átomos que se unen. La magnitud que mide la polaridad de un enlace o de una molécula como un todo es el momento dipolar (μ) y la unidad en que se mide es el Debye (D). El momento dipolar es igual a la fracción de carga que se separa por la distancia de separación: $\mu = q \cdot d$; pero es una magnitud vectorial, o sea que es un vector que tiene módulo, dirección y sentido.

Si una molécula es diatómica y por lo tanto tiene un solo enlace, su polaridad es directamente la polaridad de dicho enlace.

Si el enlace es no polar como en el cloro la molécula es no polar:



Si el enlace es polar como en el caso del cloruro de hidrógeno la molécula es polar. Cuando existe esta polaridad hay una separación de una fracción de carga, y se forma un dipolo:



1

¿Cuál será la geometría de una molécula diatómica?



Cuando una molécula tiene más de una unión, el momento dipolar de la molécula es la suma de los momentos dipolares de todas las uniones. Pero esa suma no es una suma escalar, sino que es una suma vectorial.

2

¿Recordás como se suman vectores?



Cuando se suman vectores el módulo y la dirección del vector suma depende del ángulo que estén formando dichos vectores. Por lo tanto, el momento dipolar total de una molécula con más de una unión depende de la disposición en el espacio de dichas uniones. Para conocer dicha disposición espacial necesitamos conocer la geometría de la molécula.

Existen formas experimentales que permiten determinar la geometría de una molécula, y teorías que permiten predecirla. En este curso veremos una teoría muy sencilla que permite predecir la geometría tanto de moléculas como de iones poliatómicos. Es la **teoría de repulsión de pares de electrones de valencia (TRePEV)**. Esta teoría se basa en cuatro postulados:

1°) El factor más importante que determina la geometría de una molécula son los pares de electrones de valencia (de la CEE) de los átomos involucrados en las uniones.

Como veremos solamente casos en los que existe un átomo central, lo que determinará la geometría son los pares de electrones de valencia de ese átomo central, no los pares de electrones de valencia de los átomos que lo están rodeando.

2°) Dichos pares de electrones se distribuyen en el espacio de manera tal que la distancia entre ellos sea la máxima posible (lo más lejos posible) para que la repulsión entre ellos sea la mínima posible.

3°) Los pares de electrones no compartidos o libres (que no forman uniones) “ocupan” más espacio que los pares compartidos. Esto hace que el ángulo de enlace entre los pares compartidos se achique.

4°) A los efectos de determinar la geometría, las uniones múltiples (dobles o triples) se deben considerar como si fueran simples (como si se compartiera un solo par de electrones).

Teniendo en cuenta los postulados de TRPeV podemos predecir en general, no en todos los casos, y de una forma bastante satisfactoria la geometría de diversas moléculas.

Veamos primero los ejemplos en los que todos los pares de electrones del átomo central están compartidos.

Los electrones de valencia son precisamente los que se ponen en las fórmulas de Lewis, por eso debemos partir de la misma.

(Te proponemos en los ejemplos siguientes intentar escribir la fórmula de Lewis antes de ver su resolución)

Ejemplo 1: cloruro de berilio BeCl_2

3

Escribir la fórmula de Lewis del BeCl_2

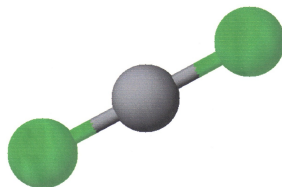


4

Hay dos cosas que deben llamarte la atención sobre esta fórmula de Lewis, ¿cuáles son?



El berilio, átomo central, posee dos pares de electrones compartidos. Según el segundo postulado lo más lejos que pueden disponerse en el espacio es en forma lineal, o sea formando un ángulo de 180° .



[Ver animación](#)

Su geometría, tanto la electrónica (GE) como la molecular (GM), es LINEAL. Podrás apreciar mejor la diferencia entre GE y GM cuando veamos los casos en que quedan pares de electrones sin compartir.

5

¿Qué podés decir con respecto a la polaridad de la molécula de BeCl_2 ?



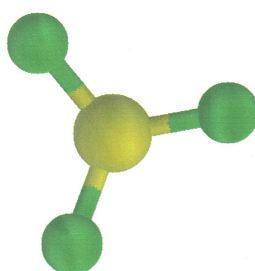
Ejemplo 2: trifluoruro de boro BF_3

6

Escribir la fórmula de Lewis del BF_3



Nuevamente estamos ante una excepción a la regla del octeto. El boro tiene 3 pares de electrones compartidos. La forma de disponer esos tres pares de electrones lo más lejos posible es hacia los vértices de un triángulo equilátero. Las tres uniones quedan en un plano. Esa geometría se denomina PLANA TRIANGULAR y los ángulos entre los enlaces son de 120° . Nuevamente GE y GM son iguales.



[Ver animación](#)

Los tres momentos dipolares de las uniones boro – flúor son iguales en módulo, pero al estar dispuestos en el espacio en forma simétrica (existe un centro de simetría), su suma es igual a cero. Es una molécula NO POLAR. Si no estás convencido, tomá un transportador y sumá tres vectores, de igual módulo con el mismo punto de aplicación y que formen entre sí ángulos de 120° , utilizando la regla del paralelogramo.

7 *¿Qué pasaría si en lugar de BF_3 tenemos BF_2Cl ?*



8 *Notá que podemos llegar a una molécula no polar teniendo uniones polares. Para esto deben cumplirse dos condiciones, ¿cuáles son?*



Ejemplo 3: metano CH_4

9 *Escribir la fórmula de Lewis del CH_4*

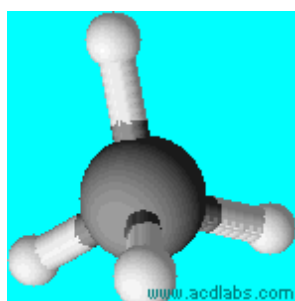


El carbono, átomo central, tiene cuatro pares de electrones compartidos. La máxima separación en el espacio de cuatro puntos respecto de uno central son los vértices de un tetraedro regular, con un ángulo de $109,5^\circ$. Notá que esta separación es mayor que si los cuatro puntos estuvieran en un plano, donde el ángulo sería de 90° .

10 *¿Qué es un tetraedro regular?*



Para el metano entonces GE = GM = tetraédrica y los ángulos entre las uniones son de $109,5^\circ$.



Ver animación

11 *¿Cómo será la polaridad de la molécula de metano?*



12 *Muchas veces en los ejercicios se pide la justificación de una geometría. ¿Cómo justificarías la geometría de los tres casos que vimos como ejemplo: $BeCl_2$, BF_3 y CH_4 ?*



También es habitual que en los ejercicios se solicite la justificación de la polaridad, y la tenés dada en las explicaciones y respuestas anteriores.

No veremos casos en los que hay más de cuatro átomos rodeando al átomo central. Veremos ahora los casos en que quedan pares de electrones sin compartir.

Ejemplo 4: cloruro plumboso PbCl_2

13

Escribir la fórmula de Lewis del PbCl_2



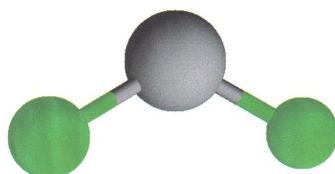
Existen tres pares de electrones sobre el átomo central, de los cuales dos están compartidos y uno libre. En este caso podemos apreciar la diferencia entre lo que denominamos geometría electrónica (GE) y geometría molecular (GM). La GE es la disposición espacial que adoptan **todos** los pares de electrones que rodean al átomo central, estén compartidos o libres. **Tené en cuenta que la GE no es la geometría real de la molécula, sino que es un instrumento para llegar a la GM.** El cloruro plumboso tendrá GE plana triangular. Pero uno de los tres pares de electrones no forma unión con otro átomo. La molécula está constituida por átomos que la componen y sus respectivas uniones. Experimentalmente se puede medir el ángulo entre un cloro, el plomo y el otro cloro. Este es el único ángulo que existe en la molécula ya que tiene solamente dos uniones. La GM será entonces ANGULAR.

14

¿Cuál es el valor del ángulo en la molécula de PbCl_2 ?



En el PbCl_2 tenemos entonces GE = plana triangular, GM = angular y un ángulo menor a 120° :



[Ver animación](#)

15

¿Cómo será la polaridad de la molécula de PbCl_2 ?



Ejemplo 5: amoníaco NH_3

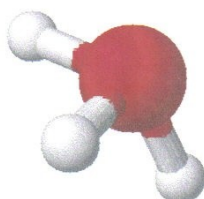
16

Escribir la fórmula de Lewis del NH_3



En el amoníaco existen sobre el nitrógeno 4 pares de electrones, de los cuales tres están compartidos y uno libre. Su GE = tetraédrica. Al quedar un par de electrones libres, quedan tres

uniones, que en este caso determinan entre los cuatro átomos una pirámide triangular achatada, su GM = PIRAMIDAL con ángulos menores a 109° . Es una molécula POLAR. Dejamos la justificación para que la puedas practicar.



[Ver animación](#)

17 *Hallá con el mismo procedimiento la geometría y polaridad del agua.*



Fijate que la GM angular puede provenir de una GE plana triangular con un par libre y en ese caso el ángulo es $< 120^\circ$, o puede provenir de una GE tetraédrica con dos pares libres y en ese caso el ángulo es $< 109,5^\circ$.

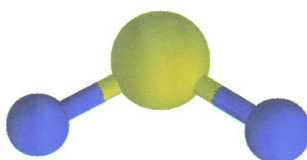
Además, siempre que existan pares de electrones sin compartir la molécula será polar, porque de las dos condiciones que se deben cumplir para llegar a una molécula no polar, no se cumple la disposición simétrica. Cuando existen pares de electrones sin compartir, son distintas GE y GM, pero en el caso de que todos los pares estén compartidos, coinciden.

Ejemplo 6: dióxido de azufre SO_2

18 *Escribir la fórmula de Lewis del SO_2*



Como existe una unión doble, por el cuarto postulado de TRePEV, debemos contarla como si fuera un solo par electrónico. Tenemos entonces tres pares de electrones, dos compartidos y uno libre. Eso determina GE = triangular plana y GM = angular con ángulo menor a 120° . Es una molécula POLAR.



De la misma manera que se puede determinar la geometría de una molécula, se puede determinar también la geometría de iones poliatómicos.

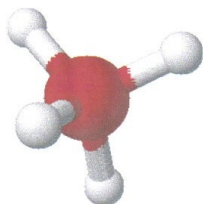
Ejemplo 7: ión amonio NH_4^+

19

Escribir la fórmula de Lewis del NH_4^+



Hay sobre el nitrógeno cuatro pares de electrones, todos compartidos, lo que determina que su GE sea tetraédrica. En el caso de iones no podemos hablar de GM, error frecuente en los alumnos. No es una molécula, por eso no podemos decir GM, es la **G del ión** o G del catión en este caso. La G del ión amonio es tetraédrica, con ángulos iguales a $109,5^\circ$.



Otra cosa importante, y que es un error muy común, es que en los iones no tiene sentido determinar polaridad, porque los iones ya tienen una carga eléctrica neta. No es la separación de una fracción de la carga de un electrón como en el caso de las moléculas, en las cuales determina la formación de un dipolo. Notá que si uno quisiera determinar la polaridad del ión amonio de la misma forma que lo hace para una molécula llegaría al absurdo de decir que es no polar, cuando tiene una carga eléctrica neta.

Respuestas

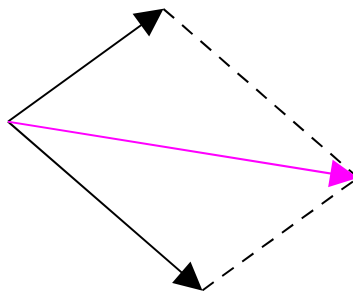
R 1

Al tener un único enlace, la molécula es lineal (la línea la determina el enlace), pero no se puede determinar ningún ángulo. Para determinar un ángulo se necesitan dos rectas (dos enlaces). Es común encontrar que los alumnos cometan el error de decir que una molécula diatómica tiene un ángulo de 180° .

[Volver](#)

R 2

La forma más sencilla es la gráfica, por la llamada regla del paralelogramo. Donde el vector suma (en color) se obtiene trazando las paralelas a las direcciones de los vectores que se están sumando, que pasan por sus vértices. Como verás, el módulo del vector suma no es igual a la suma de los módulos.



[Volver](#)

R 3



[Volver](#)

R 4

Primero; las uniones son covalentes, lo vimos como ejemplo en el tema Uniones Químicas. Segundo; es una excepción a la regla del octeto.

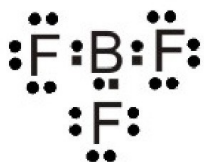
Volver

R 5

Cada unión entre el berilio y el cloro es polar, pero los momentos dipolares serán iguales en módulo, por ser entre átomos iguales. Por la disposición en el espacio, determinada por la geometría, los momentos dipolares tienen igual dirección y sentido contrario. Como tienen igual módulo, igual dirección y sentido contrario su suma dará cero. Es una molécula NO POLAR.

Volver

R 6



Volver

R 7

La fórmula de Lewis es similar porque F y Cl pertenecen al mismo grupo (VII_A). La geometría es la misma, plana triangular, pero ahora dos de los momentos dipolares son iguales en módulo y uno es distinto; por más que estén dispuestos en forma simétrica su suma es distinta de cero. Es una molécula POLAR.

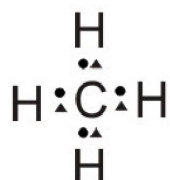
[Volver](#)

R 8

Todos los átomos que están rodeando al átomo central deben ser iguales, para que todos los momentos dipolares de todas las uniones sean iguales en módulo. Además, esas uniones deben estar dispuestas en el espacio en forma simétrica para que la suma se anule. Si se cumplen estas dos condiciones, tendremos una molécula no polar a pesar de tener uniones polares; si alguna de las dos no se cumple, la molécula será polar.

[Volver](#)

R 9



[Volver](#)

R 10

Un tetraedro regular es una pirámide triangular con todos sus lados y caras iguales, es totalmente simétrico, tiene un centro de simetría.

[Volver](#)

R 11

Los cuatro momentos dipolares de las cuatro uniones son iguales en módulo y están dispuestos en el espacio en forma simétrica por tener geometría tetraédrica. Por lo tanto, su suma será igual a cero y la molécula de metano es NO POLAR.

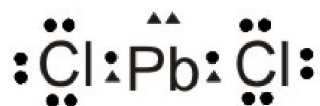
[Volver](#)

R 12

Para realizar la justificación de una geometría debés considerar los postulados de TRePEV, pero sólo los postulados que se utilizan en cada caso. No tiene sentido escribir los cuatro postulados si no se están utilizando, eso significa que no se entiende lo que se está haciendo. En estos tres casos se han utilizado solamente el primer y segundo postulados.

[Volver](#)

R 13



Volver

R 14

Se debe tener en cuenta el tercer Postulado de TRePEV, el par electrónico sin compartir achicará el ángulo y éste será menor al que presenta la geometría triangular plana, que es la GE. Por lo dicho el ángulo es menor a 120° .

Volver

R 15

Los dos momentos dipolares de las dos uniones Pb – Cl son iguales en módulo, pero ahora están formando un ángulo (no están dispuestos en forma simétrica) por lo tanto su suma será distinta de cero. Además existe un par electrónico sin compartir sobre el plomo, que también afecta la polaridad de la molécula. Por estas dos razones el PbCl_2 es una molécula POLAR.

Volver

R 16

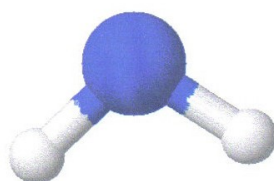


[Volver](#)

R 17



El oxígeno tiene 4 pares de electrones, dos compartidos y dos libres. Su GE = tetraédrica. De las cuatro direcciones hacia los vértices del tetraedro hay solo dos que son uniones con los hidrógenos, su GM = angular con ángulo $< 109,5^\circ$.



[Ver animación](#)

El agua es una molécula muy polar porque a pesar de que los dos momentos dipolares de las dos uniones son iguales en módulo al estar formando un ángulo, su suma da distinta de cero y además hay dos pares de electrones sin compartir sobre el oxígeno que, en este caso, aumentan la polaridad.

[Volver](#)

