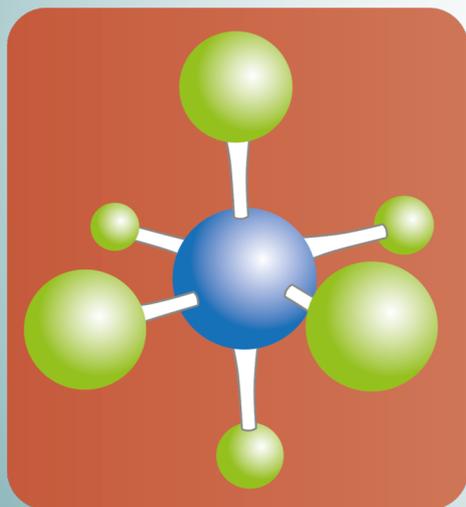


Química

BLOQUE I: ESTRUCTURA DE LA MATERIA. ENLACE QUÍMICO

TEMA 2: INTRODUCCIÓN AL ENLACE QUÍMICO. EL ENLACE COVALENTE



Ana Carmen Perdigón Aller
Marina González Barriuso
Miguel García Iglesias

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E INGENIERÍA
DE PROCESOS Y RECURSOS

Este material se publica bajo la siguiente licencia:

[Creative Commons BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)



TEMA 2. INTRODUCCIÓN AL ENLACE QUÍMICO. EL ENLACE COVALENTE

1. Introducción al enlace químico.
2. Visión general de la teoría de Lewis.
3. Introducción al enlace covalente
4. Resonancia
5. Excepciones a la regla del octeto
6. Geometría molecular

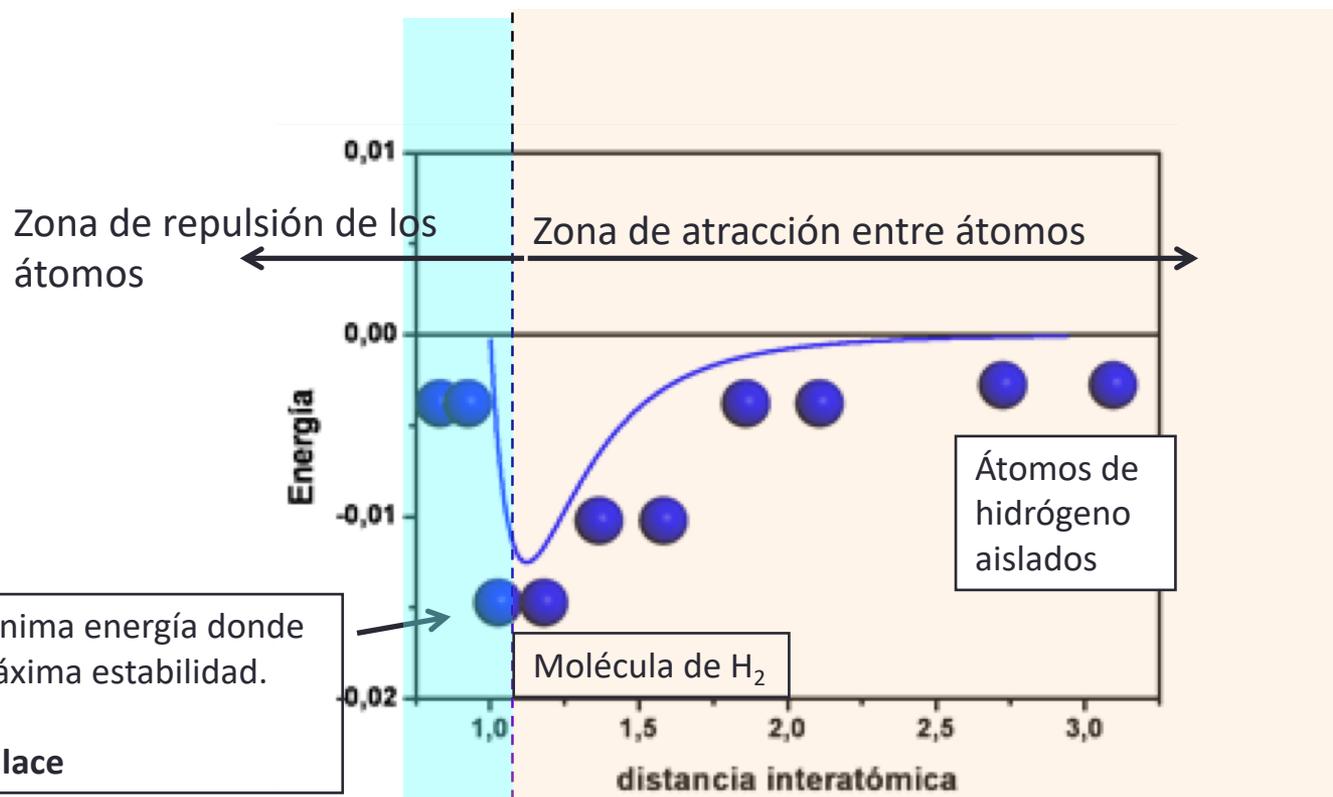
1. Introducción al enlace químico

PROPIEDADES DE LOS ELEMENTOS DE LOS ÓXIDOS A LO LARGO DE UN PERIODO

Propiedades de los óxidos de los elementos del tercer periodo							
	Na ₂ O	MgO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	P ₄ O ₁₀	SO ₃	Cl ₂ O ₇
Tipo de compuesto	Iónico			Covalente			
Estructura	Tridimensional extensa				Unidades		
Punto de fusión (°C)	1275	2800	2045	1610	580	16,8	-91,5
Punto de ebullición (°C)	?	3600	2980	2230	?	44,8	82
Naturaleza ácido-base	Básico	Básico	anfótero	Ácido			

1. Introducción al enlace químico

Enlace. Fuerzas que mantienen unidos los átomos o iones en las sustancias químicas.



Situación de mínima energía donde se alcanza la máxima estabilidad.

E. Enlace

Distancia de enlace

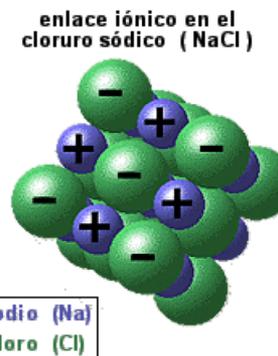
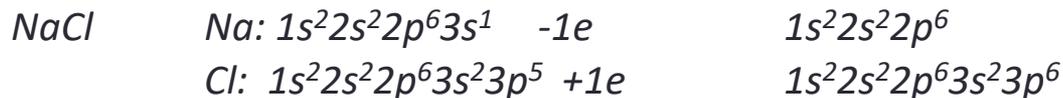
- Cuando los elementos químicos se combinan hay una reorganización de los electrones **de las capas más externas de cada átomo.**

1. Introducción al enlace químico

¿Qué tipos de enlace existen?

1) **Enlace iónico.** (Metal-No metal)

- Entre elementos de muy diferente electronegatividad.
- El enlace se establece por atracción electrostática entre iones de signo opuesto.
- **Cesión de un electrón por el metal al elemento no metálico**
- Enlace no direccional
- Redes cristalinas infinitas: sólidos iónicos.



2) **Enlace covalente** (No metal-No metal) (No metal-H)

- Entre elementos no metálicos de semejante electronegatividad.
- El enlace se establece por compartición de electrones.
- Enlace direccional.
- Formación de moléculas discretas (excepcionalmente redes).



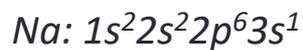
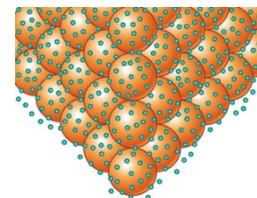
1. Introducción al enlace químico

En los enlaces covalentes entre átomos polielectrónicos sólo participan los electrones de valencia. Electrones de baja energía próximos al núcleo



3) Enlace metálico

- *Entre elementos electropositivos (metales)*
- *Compartición de electrones, extendida a todo el sólido: bandas electrónicas*
- *Sólidos con propiedades metálicas*



Octeto electrónico

Para **G. Lewis**, **I. Langmuir** y **W. Kössel** (1916) los átomos se combinan para alcanzar una configuración electrónica más estable.

- *La estabilidad máxima se logra cuando un átomo es isoelectrónico con un gas noble. ($ns^2 np^6$)*

2. Visión general de la teoría de Lewis

Revisión de la Teoría de Lewis del enlace



G. N. Lewis (1875-1946)

Teoría de la compartición de electrones

Estructuras de Lewis

Teoría ácido-base de Lewis

Enlace según Lewis. Ideas principales:

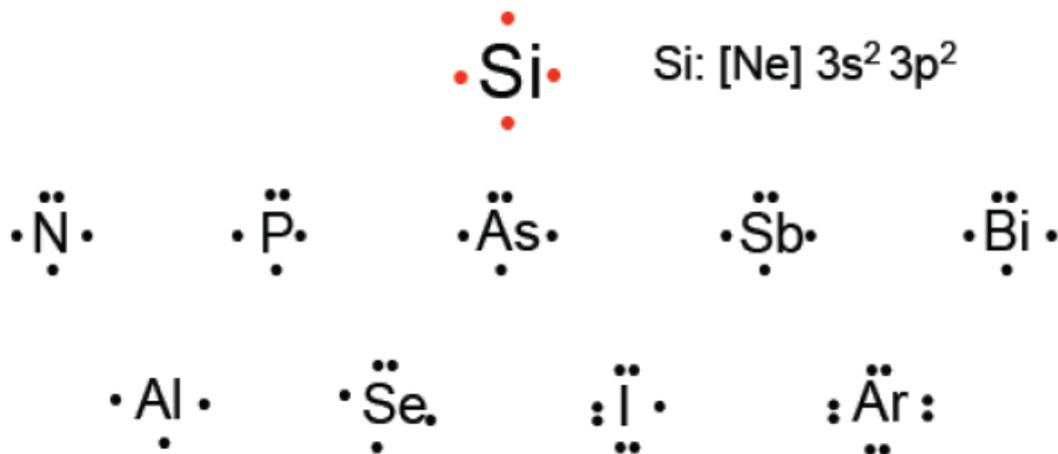
- Los electrones, especialmente los de la capa más externa (**de valencia**), juegan un papel fundamental en el enlace.
- Los enlaces se establecen por compartición de dos electrones.
- En algunos casos se transfieren electrones de un átomo al otro (**iónico**).
- En otros se comparten uno o más pares de electrones (**covalente**).
- **Idea clave:** Los electrones se transfieren o se comparten de modo que los átomos adquieran una configuración electrónica especialmente estable. **Generalmente de gas noble. Octeto.** En sentido estricto sólo es aplicable a los elementos del segundo periodo

2. Visión general de la teoría de Lewis

PUNTUALIZACIONES SOBRE LAS ESTRUCTURAS DE LEWIS

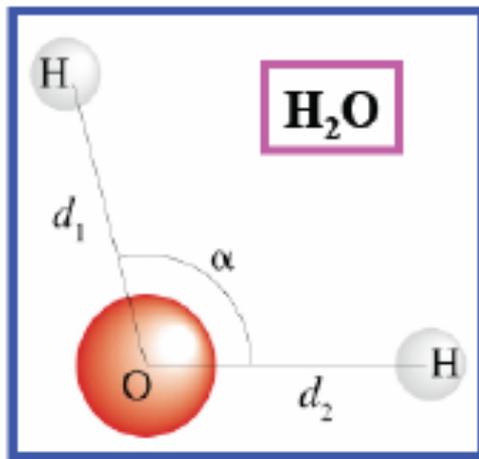
- Las estructuras de Lewis no indican nada acerca de la forma o de la geometría de una molécula.
 - Tampoco informan acerca de los orbitales de donde proceden los electrones a compartir ni dónde se alojan definitivamente éstos. Basta contar los electrones de valencia de forma correcta alrededor de los átomos.
 - A pesar de ello constituyen una herramienta muy simple y eficaz para el estudio de la distribución electrónica de moléculas sencillas (**estructura electrónica**).
 - El modelo de Lewis es anterior a la teoría del orbital molecular, mucho menos sofisticado y potente.
-
- Un símbolo de Lewis representa el núcleo y los electrones internos de un átomo.
 - Los puntos alrededor del símbolo representan a los electrones de valencia (situados en la capa más externa), *de n más alto*.

2. Visión general de la teoría de Lewis



- Regla del octeto:
 - En las moléculas covalentes, los átomos se unen entre sí compartiendo pares de electrones para adquirir cada átomo la configuración de gas noble (para los elementos del 2º periodo: 8 electrones)
 - Esta regla funciona bien con **átomos del segundo periodo** pero en los del 3^{er} periodo se presentan bastantes casos de incumplimiento.

3. Introducción al enlace covalente



• **Molécula** → conjunto finito de átomos unidos entre sí mediante enlaces covalentes

- **Longitud de enlace** → distancia entre dos núcleos unidos.
- **Ángulo de enlace** → ángulo entre enlaces adyacentes.
- **Fuerza de enlace** → Es la energía necesaria para romper un enlace

- enlace fuerte: $> 800 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
- enlace intermedio: $\sim 500 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
- enlace débil: $< 200 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Longitudes y energías de enlace

Tipo de enlace	Longitud de enlace (pm)	E. Enlace (KJ/mol)
C-H	107	
C-O	143	358
C=O	121	799
C-C	154	348
C=C	133	614
C≡C	120	839

• **Enlaces sencillos.**

• **Enlaces múltiples, dobles, triples.** El enlace doble tiene lugar cuando los átomos comparten dos pares de electrones y el enlace triple cuando comparten tres pares de electrones.

• Los enlaces triples son más fuertes que los enlaces dobles y éstos que los enlaces sencillos.

• La distancia disminuye con la multiplicidad de enlace.

3. Introducción al enlace covalente

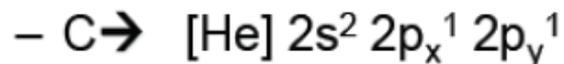
- La molécula de Cloro (Cl_2):



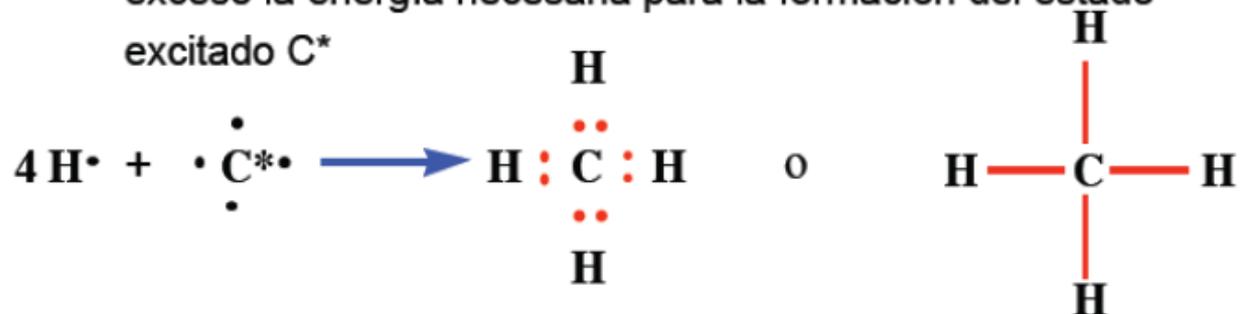
- **Par electrónico de enlace:** aquel que es compartido por dos átomos y que por tanto **contribuye de modo eficaz al enlace**
- **Par solitario:** aquel que pertenece exclusivamente a un átomo. No contribuye al enlace pero **es crucial a la hora de determinar las estructuras moleculares**

3. Introducción al enlace covalente

- La molécula de Metano (CH_4):



- la energía liberada al formar 4 enlaces C-H compensa con exceso la energía necesaria para la formación del estado excitado C^*



- ¿Qué configuración adquiere el átomo de C?

- configuración del gas noble que le sigue Ne ($[\text{He}] 2s^2 2p^6$)

- ¿Qué configuración adquiere cada átomo de H?

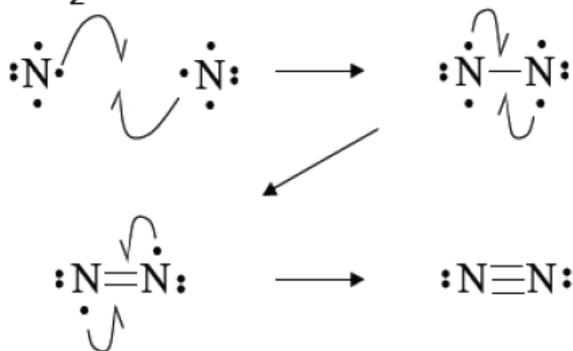
- configuración del gas noble He ($1s^2$)

3. Introducción al enlace covalente

Enlaces covalentes múltiples

- Enlaces covalentes múltiples:

– Molécula N₂

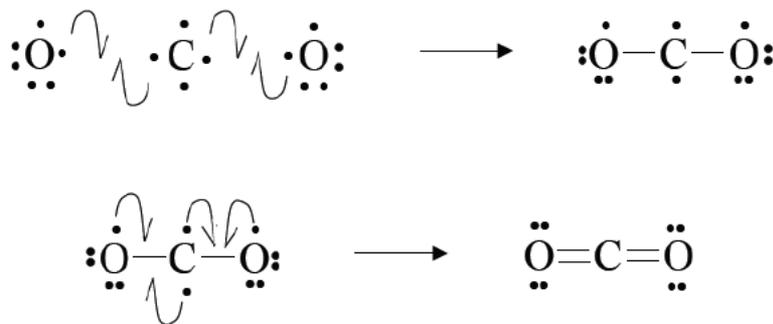


¿A qué se denomina orden de enlace?

Al número de pares de electrones que contribuyen al enlace entre dos átomos

¿O.E. N₂?

– Molécula CO₂

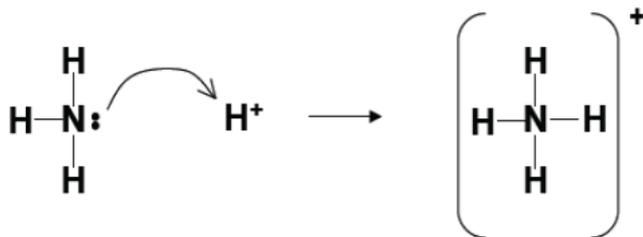


¿O.E.?

3. Introducción al enlace covalente

Enlace covalente dativo

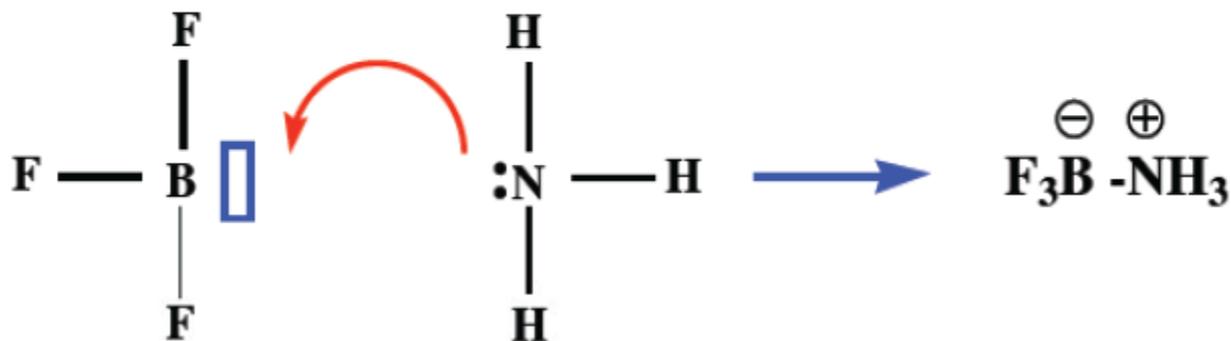
- Enlace covalente coordinado (o dativo):
 - Se establece cuando uno de los dos átomos que forman el enlace aporta ambos electrones del par compartido
 - Al_2Cl_6
 - Formación del ión amonio NH_4^+



- Origen de la teoría ácido-base de Lewis.
 - El protón es un ácido de Lewis (acepta un par de electrones).
 - El NH_3 es una base de Lewis (dona un par de electrones).

3. Introducción al enlace covalente

- El BF_3 es un ácido de Lewis. El NH_3 es una base de Lewis



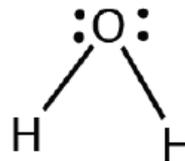
*reacción ácido-base
de Lewis*

3. Introducción al enlace covalente

Carga formal. Definición

$$CF = n^{\circ} e^{-} \text{ de valencia} - n^{\circ} e^{-} \text{ en par solitario} - (1/2)n^{\circ} e^{-} \text{ en par enlazante}$$

- La CF no representa la distribución real de la carga en la molécula. Es sólo una herramienta de trabajo que permite dilucidar qué distribuciones electrónicas no son adecuadas.



$$CF(O) = 6 - 4 - (4/2) = 0$$

$$CF(H) = 1 - (2/2) = 0$$

- Ejemplo: Molécula CO (gas tóxico):

– Estructura de Lewis satisfactoria



– Las cargas formales sobre cada átomo son las siguientes:

• C: $4 - 2 - 3 = -1$ electronegatividad=2,55

• O: $6 - 2 - 3 = +1$ electronegatividad=3,40



– Esta distribución de cargas no es adecuada porque **asigna una carga formal negativa sobre el átomo menos electronegativo**

3. Introducción al enlace covalente

Carga formal. Reglas

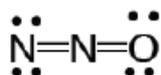
- En una molécula neutra la suma de las CF será 0.
- En una especie iónica la suma de las CF será igual a la carga del ión.
- Las CF deben ser tan pequeñas como sea posible.
- Las CF negativas deben estar sobre los elementos más electronegativos a ser posible .
- Estructuras de Lewis con CF del mismo signo sobre átomos adyacentes son poco probables.

✓ Según la distribución de las cargas formales elegiremos la estructura de Lewis más probable.

3. Introducción al enlace covalente

Cargas formales en el N₂O

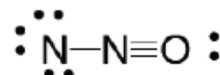
- Es una molécula lineal asimétrica con un N como átomo central. Tenemos 3 posibles diagramas de Lewis que cumplen la regla del octeto:



(I)

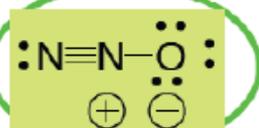
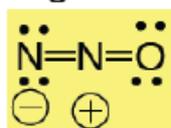


(II)



(III)

asignación de cargas formales



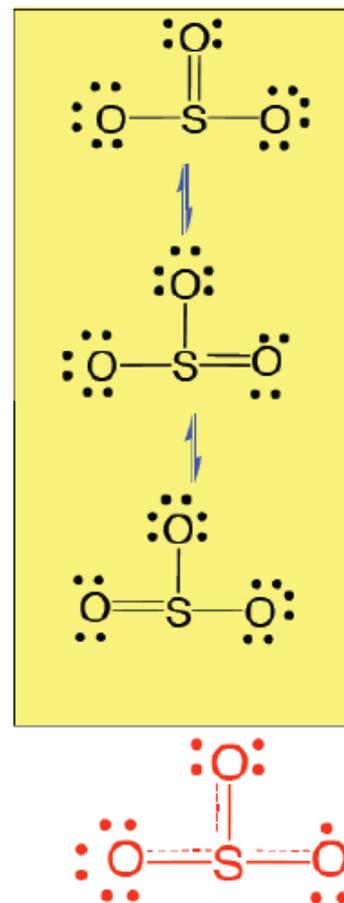
la estructura de menor energía será: (1) la que tenga menores cargas formales sobre los átomos y (2) distribuidas de acuerdo con su electronegatividad

		e valencia	e solitarios	1/2 e ⁻ comp	CF
estructura (I)	N(t)	5	4	2	-1
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	4	2	0
estructura (II)	N(t)	5	2	3	0
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	6	2	-1
estructura (III)	N(t)	5	6	1	-2
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	2	3	+1

4. Resonancia

Resonancia

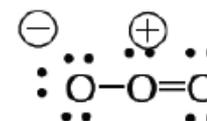
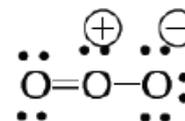
- Hay especies que no pueden expresarse correctamente con un diagrama de Lewis sencillo
- Por ejemplo, moléculas en las que son posibles más de dos estructuras resonantes de la misma energía de modo que no hay manera de decidir cuál es la estructura correcta. Son **estructuras equivalentes**.
- Cuando hay varias estructuras equivalentes, ninguna de ellas describe de modo correcto las propiedades moleculares.
 - ◆ Las estructuras de Lewis del SO_3 predicen que la molécula tendría 1 enlace doble y 2 sencillos.
 - ◆ Los datos estructurales confirman que las tres distancias de enlace S–O son idénticas.
- La fusión de las tres estructuras se denomina **resonancia** y a la estructura de Lewis resultante **híbrido de resonancia**



4. Resonancia

Resonancia. Molécula de ozono

- Hay 2 posibles estructuras de Lewis. Ninguna de ellas es satisfactoria
- ¿Porqué estas estructuras de Lewis no son satisfactorias?
 - ◆ Las estructuras de Lewis presenta dos enlaces diferentes (doble y sencillo). Sin embargo, los datos experimentales indican que ambos enlaces son idénticos (1,28 Å) e intermedios entre enlace simple O-O y doble O=O.
- La estructura electrónica es una combinación de ambas o *híbrido de resonancia*.



	d(pm)
O-O	147
O=O	121
O-O (ozono)	128

¿Qué concepto subyace?

Deslocalización electrónica

5. Excepciones a la regla del octeto

Excepciones a la Regla del Octeto



Regla del Octeto:

Suelen cumplirla los átomos del 2º período
Los átomos del 3º período y superiores
presentan bastantes casos de incumplimiento

5. Excepciones a la regla del octeto

Moléculas impares

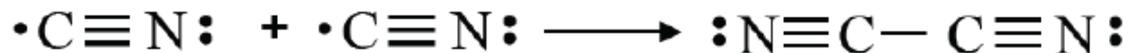
■ Molécula de NO (11 e⁻):

- ◆ Con un número impar de electrones es imposible cumplir la regla del octeto.
Se prefiere colocar el electron impar sobre el átomo menos electronegativo



■ Molécula de CN (9 e⁻)

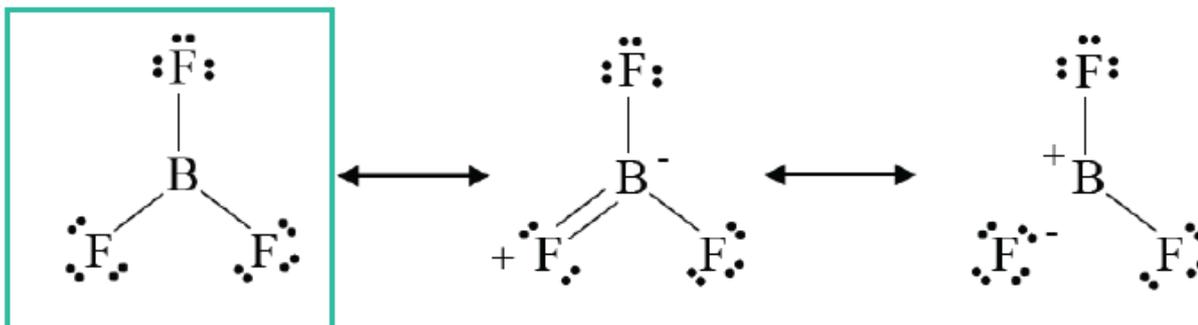
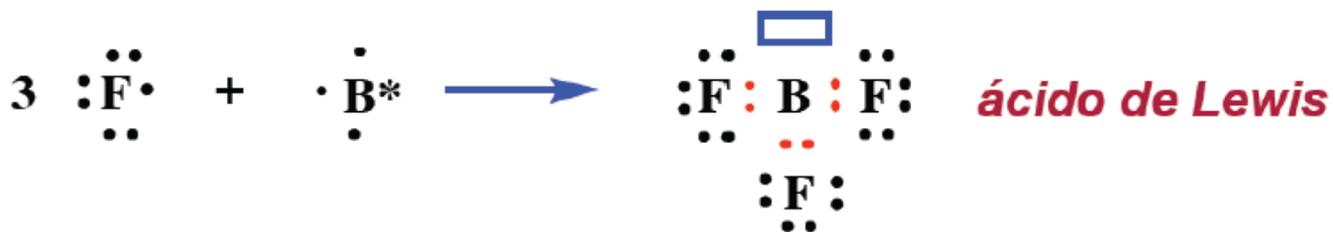
- ◆ La estructura de Lewis no cumple la regla del octeto
- ◆ Explica la gran tendencia a la dimerización



5. Excepciones a la regla del octeto

Moléculas hipovalentes, BF_3

- Octeto incompleto (moléculas hipovalentes): BF_3



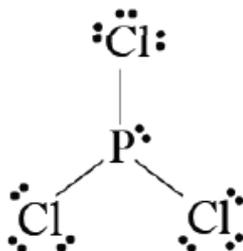
¿Cuál contribuye más ?

5. Excepciones a la regla del octeto

Moléculas hipervalentes, PCl_5

■ Molécula PCl_5 (10 e⁻ alrededor del P)

- ◆ P → $[\text{Ne}] 3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1 3d^0$
- ◆ El P dispone de 3 e⁻ para formar 3 enlaces simples con 3 átomos de cloro:



PCl_3 cumple regla del octeto

– ¿Qué configuración adquiere el átomo de P en PCl_3 ?

- configuración del gas noble que le sigue Ar ($[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$)

■ ¿Cómo puede formar 5 enlaces el P ?

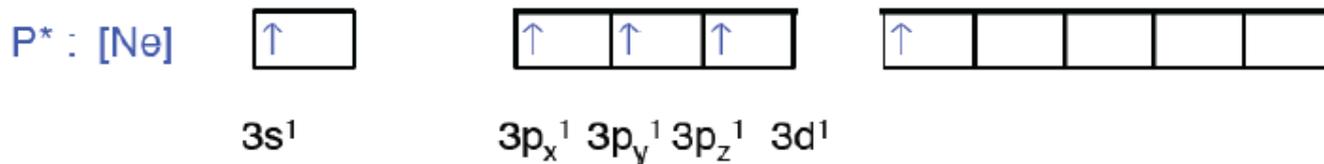
- ◆ Se requiere excitar 1e⁻ del orbital 3s al orbital vacío 3d

5. Excepciones a la regla del octeto

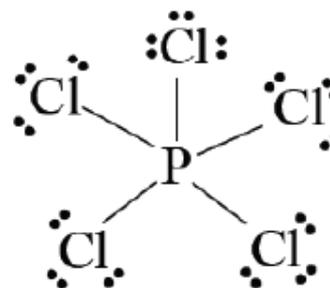
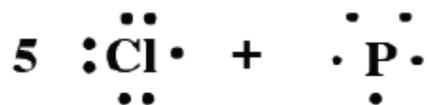
Moléculas hipervalentes, PCl_5

◆ ¿Cómo puede formar 5 enlaces el P ?

● Se requiere excitar $1e^-$ del orbital $3s$ al orbital vacío $3d$



hibridación sp^3d



PCl_5 no cumple la regla del octeto

- la energía liberada al formar 5 enlaces P-Cl compensa con exceso la energía necesaria para la formación del estado excitado P^*

5. Excepciones a la regla del octeto

Estructuras de Lewis. Reglas(I)

- El H sólo puede adquirir 2e. Los elementos del 2º período: 8e y los del 3ª y sig. pueden ampliar el octeto: 12, 14,...
- Escribir una fórmula esqueleto con el elemento más voluminoso (o el menos electronegativo) en el centro, enlazado por enlaces sigma a los átomos periféricos. El H siempre es periférico
- **Nv**: suma de electrones de valencia. Si la molécula es iónica sumar o restar su carga.
- **No**: número de electrones necesarios para que cada átomo cumpla la regla del octeto **No=8n** (n= número átomos). Excepto H que solo puede rodearse de 2 e.
- **Nc**: elec. a compartir para que se cumpla la R.O. **Nc=No-Nv**
- **Nσ**: Número de electrones que participan en enlaces sigma.
 - ◆ **Ns=2(n-1)**
- **Nπ**: Número de electrones que participan en enlaces pi.
- **Nπ=Nc-Nσ**
 - ◆ **Nπ=0**: la molécula sólo tiene enlaces sencillos
 - ◆ **Nπ>0**: Nπ electrones implicados en enlaces múltiples
 - ◆ **Nπ<0**: el átomo central amplía su octeto en Nπ electrones. En este caso, recalculamos No, Nc, Nσ y Nπ

5. Excepciones a la regla del octeto

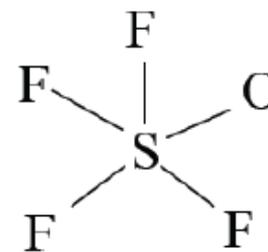
Estructuras de Lewis. Reglas(II)

- **Nps**: Número de electrones en pares solitarios.
 - ◆ **$Nps = Nv - Nc$ (o $N\sigma$ si se ha ampliado el octeto)**
- Proceder a la asignación de los enlaces y pares solitarios respetando la regla del octeto
 - ◆ asignar pares solitarios preferentemente a los átomos periféricos
- Carga formal **$CF = Nv - Nps - Nc/2$**
 - ◆ las cargas formales han de ser razonables y lo más bajas posibles
 - ◆ estructuras más razonables son las que tienen una menor separación de cargas formales
- Tener en cuenta la posibilidad de estructuras resonantes.
- No violar nunca la regla del octeto para elementos del 2º período.

5. Excepciones a la regla del octeto

Resumen reglas de Lewis

- N_v : suma de electrones de valencia.
- $N_o = 8n$ (n = número átomos)
- $N_c = N_o - N_v$
- $N_\sigma = 2(n-1)$
- $N_\pi = N_c - N_\sigma$
 - ◆ $N_\pi = 0$: la molécula sólo tiene enlaces sencillos
 - ◆ $N_\pi > 0$: N_π electrones implicados en enlaces múltiples
 - ◆ $N_\pi < 0$: el átomo central amplía su octeto en N_π electrones. En este caso, recalcular N_o , N_c , N_σ y N_π
- $N_{ps} = N_v - N_c$ (o N_σ si se ha ampliado el octeto)
- $CF = N_v - N_{ps} - N_c/2$

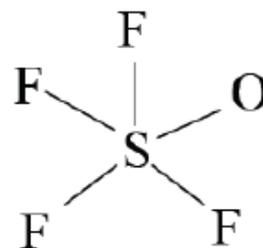


esqueleto de la
molécula SOF₄

5. Excepciones a la regla del octeto

Estructura de Lewis del SOF_4

- 1) Atomo central:
 - el menos electronegativo: S
- 2) $N_v = 6 + 6 + 4 \times 7 = 40$
- 3) $N_o = 8 \times (n) = 8 \times 6 = 48$
- 4) $N_c = N_o - N_v = 48 - 40 = 8$
- 5) $N_\sigma = 2(n-1) = 2 \times 5 = 10$
- 6) $N_\pi = N_c - N_\sigma = 8 - 10 = -2$ amplía octeto



esqueleto de la
molécula SOF_4

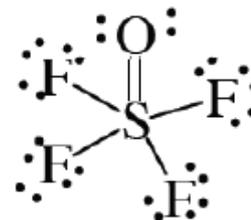
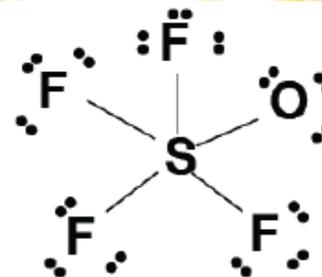
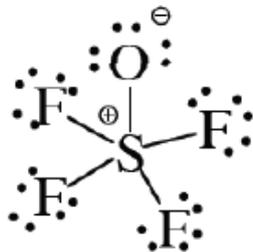
- 3) $N_o = 48 + 2 = 50$
- 4) $N_c = N_o - N_v = 50 - 40 = 10$
- 5) $N_\sigma = 2(n-1) = 2 \times 5 = 10$ se forman 5 enlaces sigma
- 6) $N_\pi = N_c - N_\sigma = 10 - 10 = 0$ no hay enlaces pi
- 7) $N_{ps} = (N_v - N_c) = (40 - 10) = 30$ 15 pares solitarios

5. Excepciones a la regla del octeto

Refinando la estructura de Lewis del SOF_4

análisis de cargas formales :

$$\begin{aligned} \text{CF}(\text{O}) &= 6 - 6 - 2/2 = -1 \\ \text{CF}(\text{S}) &= 6 - 0 - 10/2 = 1 \\ \text{CF}(\text{F}) &= 7 - 6 - 2/2 = 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \text{CF}(\text{O}) &= 6 - 4 - 4/2 = 0 \\ \text{CF}(\text{S}) &= 6 - 0 - 12/2 = 0 \\ \text{CF}(\text{F}) &= 7 - 6 - 2/2 = 0 \end{aligned}$$

Estructura más probable al
minimizar las cargas
formales

6. Geometría molecular

Geometría molecular

Las estructuras de Lewis en nada nos indican la forma de la molécula. Para ello recurrimos a un **modelo** muy sencillo pero eficaz: Repulsión entre los Pares Electrónicos de la Capa de Valencia (RPECV o VSPR, en inglés)

- Desarrollado por N.V. Sidgwick y H.E. Powell (1940) refinado por R.J. Gillespie y R.S. Nyholm
- Buena capacidad de predicción y sencillo de aplicar

6. Geometría molecular

TEORÍA DE REPULSIÓN DE PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA (TRPECV)

MODELO ELECTROSTÁTICO (N.V. Sidwick, H.E. Powell, 1940, refinado por R.J. Gillespie y R.S. Nyholm). Los pares de electrones se repelen entre sí.

Conceptos básicos del modelo RPECV

- Los pares de electrones se repelen entre sí, tanto si se encuentran formando enlaces (**pares de enlace**) como cuando están sin compartir (**pares solitarios**).
- Los pares de electrones (tanto solitarios como de enlace) se distribuyen en torno al átomo central de modo que se **minimicen las repulsiones** entre ellos
- La geometría molecular viene definida por **distribución espacial de los átomos** que integran la molécula.

6. Geometría molecular

Reglas del modelo RPECV

idea principal

Los pares de electrones se repelen entre sí, tanto si se encuentran formando enlaces (pares de enlace) como cuando están sin compartir (pares solitarios). **MODELO ELECTROSTÁTICO**

1ª Regla (N.V. Sidgwick y H.E. Powell, 1940)

Los pares electrónicos se distribuyen alrededor de un átomo central de manera que se minimicen las repulsiones entre ellos.

Generalización del par de electrones

El modelo RPECV no se centra en pares de electrones sino en **agrupamientos de electrones**.

Un agrupamiento de electrones puede ser:

- un par de electrones, ya sea enlazante o solitario,
- un único electrón desapareado sobre el átomo central (p.e. NO)
- un doble (p.e. O=C=O) o un triple enlace (H-C≡N)

6. Geometría molecular

Reglas del modelo RPECV

2ª Regla: no equivalencia entre par solitario (PS) y par de enlace (PE)

La repulsión entre los pares electrónicos disminuye según el orden: PS-PS > PS-PE > PE-PE

Justificación

Un par electrónico solitario se encuentra bajo la acción de un único núcleo por lo que ocupa un mayor espacio que un par de enlace

Consecuencia

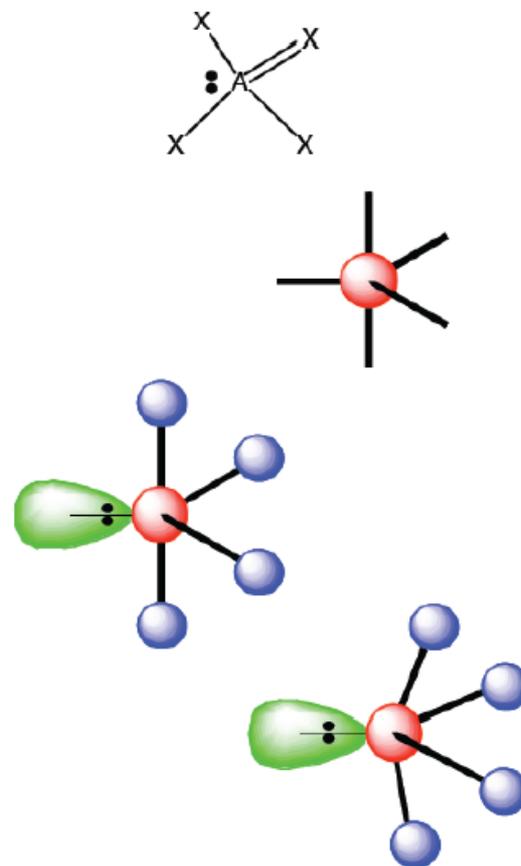
Cuando existan dos o más pares solitarios, éstos tienden a estar lo más separados posible

los enlaces múltiples concentran mayores densidades de carga y por tanto generan mayores repulsiones que los sencillos.

6. Geometría molecular

Estrategía para el uso del modelo RPECV

- Dibujar la estructura de Lewis
 - ¿Cuántos pares electrónicos?
 - Considerar el doble enlace como el sencillo
- Distribuir los pares electrónicos de forma que minimicen sus repulsiones: geometrías ideales
- Decidir qué posiciones ocuparán los PS y cuáles los PE
 - Cuando los PS puedan ocupar más de una posición no equivalente, situarlos allí donde minimicen sus repulsiones
- Identificar la geometría molecular a partir de las posiciones de los átomos periféricos
- Permitir las distorsiones debido a las repulsiones entre PS y PE
$$R(\text{PS-PS}) > R(\text{PS-PE}) > R(\text{PE-PE})$$

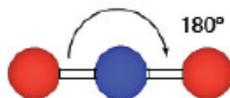


6. Geometría molecular

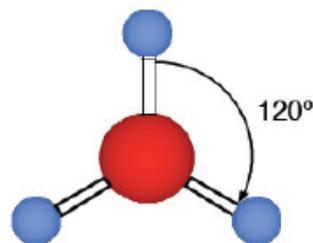
Geometrías ideales



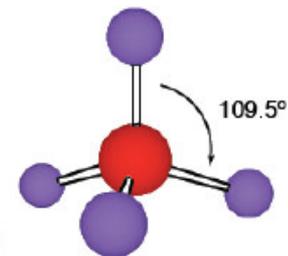
2 pares enlace
LINEAL



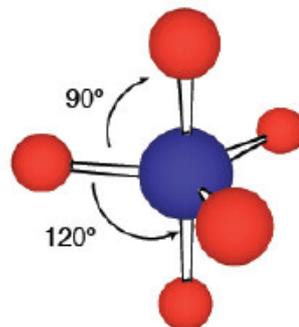
3 pares enlace
TRIGONAL PLANA



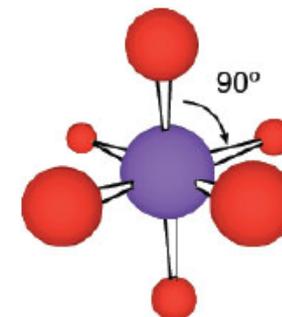
4 pares enlace
TETRAÉDRICA



5 pares enlace
BIPIRÁMIDE TRIGONAL

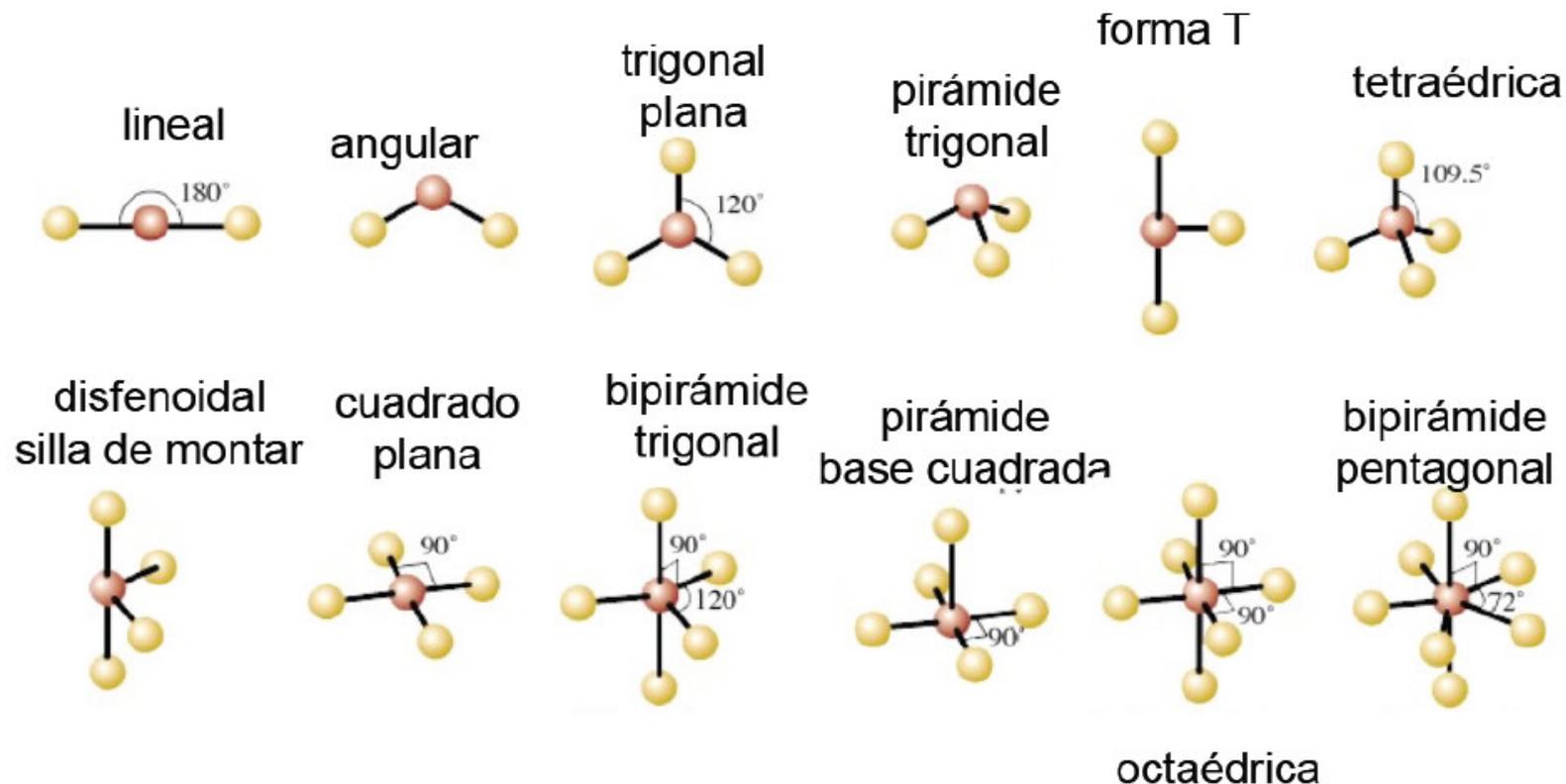


6 pares enlace
OCTAÉDRICA



6. Geometría molecular

Denominación de las estructuras de moléculas



6. Geometría molecular

Notación en el modelo RPECV

Notación

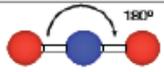
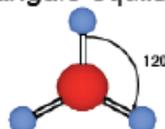
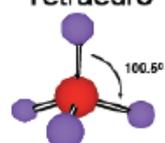
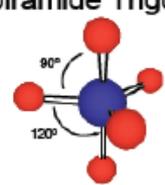
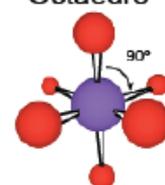
AX_nE_m

A: átomo central

X: átomos periféricos

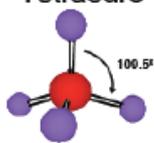
E: pares solitarios asociados al átomo central

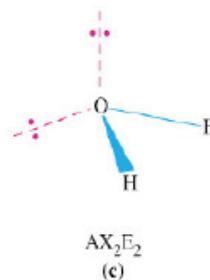
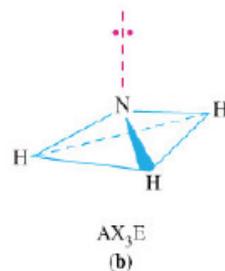
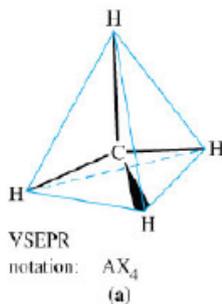
Algunas geometrías comunes

PS+PE	Distribución	Notación RPECV	Geometría Molecular	Ejemplos
2	 Lineal Triángulo equilátero	AX2	Lineal	BeH2
3	 Tetraedro	AX3 AX2E	Trigonal Plana Angular	BCl3, AlCl3 SnCl2
4	 Bipirámide Trigonal	AX4 AX3E AX2E2 AXE3	Tetraédrica Pirámide Trigonal Angular Lineal	CH4, SiCl4 NH3, PCl3 H2O, SCl2 HF
5	 Octaédro	AX5 AX4E AX3E2 AX2E3	Bipirámide Trigonal Disfenoidal Forma de T Lineal	PCl5, AsF5 SF4 ClF3 XeF2
6		AX6 AX5E AX4E2	Octaédrica Pirámide base cuadrada Cuadrada plana	SF6 BrF5 XeF4

6. Geometría molecular

Moléculas derivadas del tetraedro: AX_nE_{4-n}

PS+PE	Distribución	Notación RPECV	Geometría Molecular	Ejemplos
4	<p>Tetraedro</p> 	<p>AX4 AX3E AX2E2 AXE3</p>	<p>Tetraédrica Pirámide Trigonal Angular Lineal</p>	<p>CH4, SiCl4 NH3, PCI3 H2O, SCI2 HF</p>



ángulos:

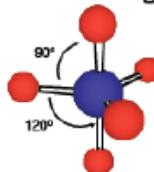
Metano: HCH = 109,5°

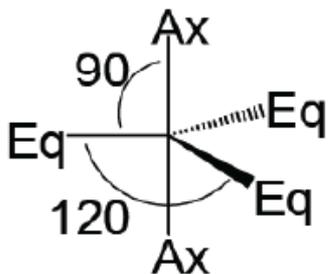
Amoníaco: HNH = 106,6°

Agua: HOH = 104,5°

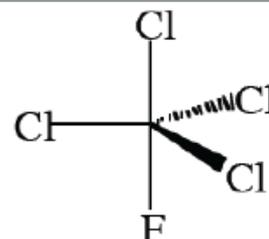
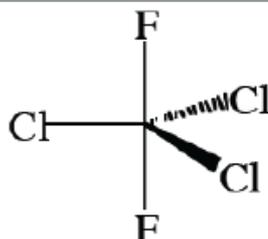
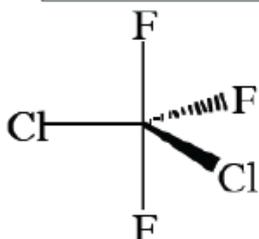
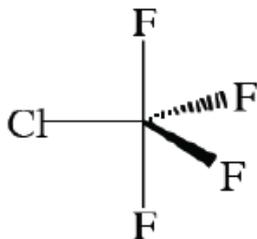
6. Geometría molecular

Moléculas derivadas de la bpt: AX_nE_{5-n}

PS+PE	Distribución	Notación RPECV	Geometría Molecular	Ejemplos
5	Bipirámide Trigonal 	AX5 AX4E AX3E2 AX2E3	Bipirámide Trigonal Disfenoidal Forma de T Lineal	PCl5, AsF5 SF4 ClF3 XeF2 disfenoidal=balancín



- Las posiciones axial (Ax) y ecuatorial (Eq) no son equivalentes
- La repulsión PS-PS es muy fuerte a 90°
- Los pares solitarios E tienden a situarse en las posiciones Ecuatoriales donde la separación es de 120°



6. Geometría molecular

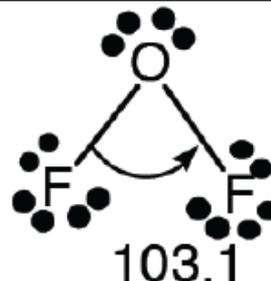
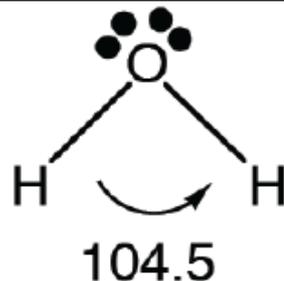
Efecto de la diferencia de electronegatividad

3ª Regla: efecto de la diferencia de electronegatividad (χ) entre el átomo central y los terminales (ligandos)

El volumen de un par electrónico de enlace disminuye al aumentar la electronegatividad del ligando

Justificación

Cuanto mayor sea la χ del átomo terminal, más desplazado estará hacia él el par electrónico de enlace (y más lejos del átomo central), por lo tanto, menos interaccionará repulsivamente con los demás pares de electrones localizados alrededor del átomo central (produciendo una disminución del ángulo)



6. Geometría molecular

Efecto de la diferente electronegatividad

Trihaluros de Fósforo PX_3

$\chi(P)=2,19$

AX_3E

	PI_3	PBr_3	PCl_3	PF_3
$\chi(X)$	2,66	2,96	3,16	3,98
Angulos X-P-X	102°	$101,5^\circ$	$100,3^\circ$	$97,8^\circ$

