

TEMA - 04

➤ Enlace Químico

➤ Teoría de Lewis

➤ **Geometría Molecular. Modelo RPECV.**

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia

MRPECV

La estructura de Lewis **en nada nos indica la forma de la molécula.**

Para ello recurrimos a un modelo muy sencillo y eficaz:

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

En inglés: **Valence Shell Electron Pair Repulsion theory (VSEPR)**

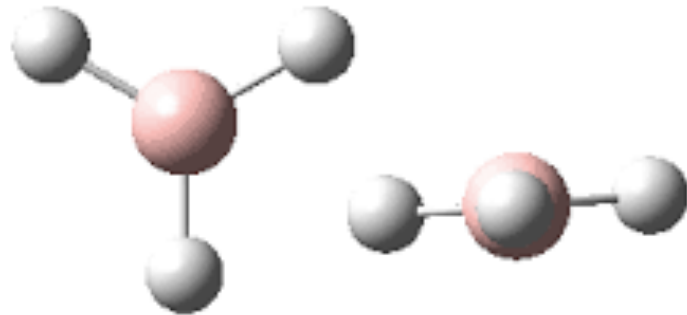
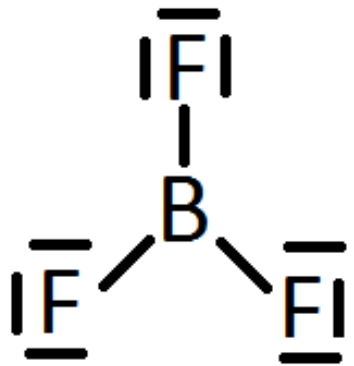
Modelo de buena capacidad de predicción y sencillo de aplicar

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia

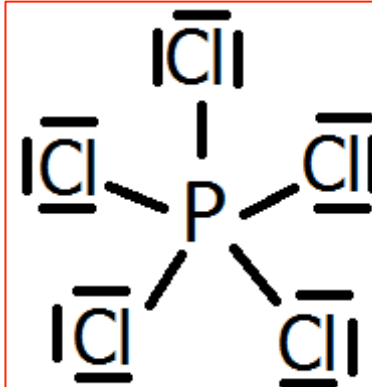
MRPECV

Estructura de Lewis vs Estructura Molecular



BF_3

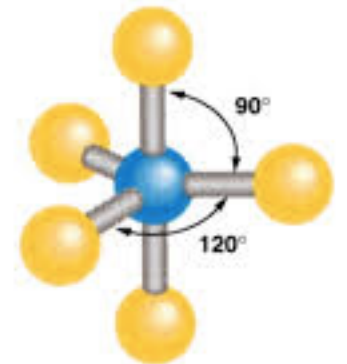
GEOMETRÍA TRIGONAL PLANA



Pentacloruro de fósforo



Bipiramidal
trigonal



Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

CONCEPTOS BASICOS

- 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**.

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

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 ELECTROSTATICO

1ª Regla:

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**.

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

GENERALIZACIÓN DEL PAR DE ELECTRONES

El modelo **RPECV** no se centra exclusivamente 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. $\text{O}=\text{C}=\text{O}$) o un **triple enlace** ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$)

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

REGLAS del MODELO RPECV

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

La repulsión entre pares de electrones disminuye según el orden:



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**.

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

REGLAS del MODELO RPECV

3ª Regla:

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

La repulsión disminuye según el orden:

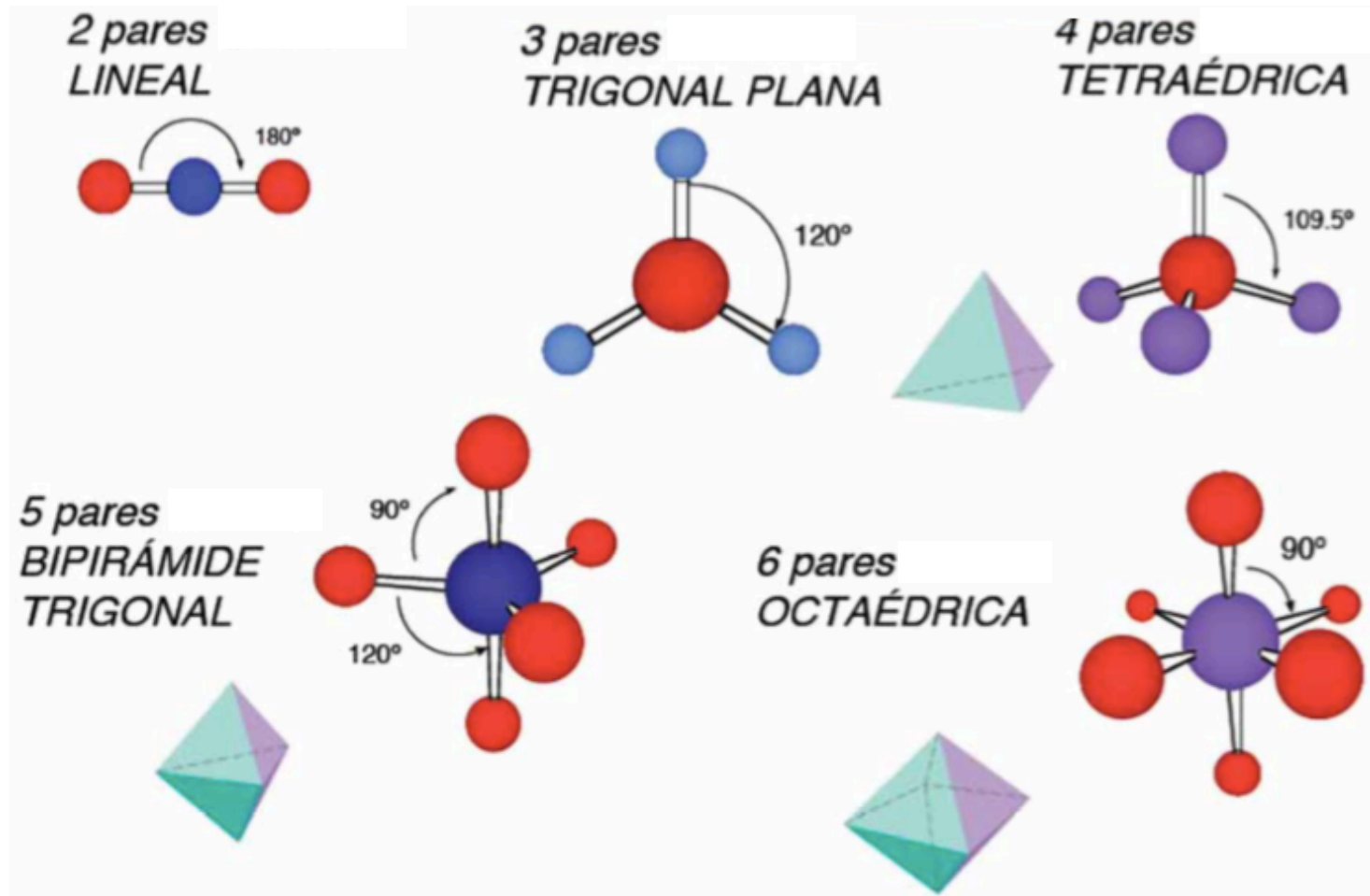
Enlace triple > Enlace doble > Enlace simple

Geometría Molecular

Modelo Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia (MRPECV)

GEOMETRÍAS DE PARES DE ELECTRONES

*Como pueden estar
lo más alejado
posible ?*

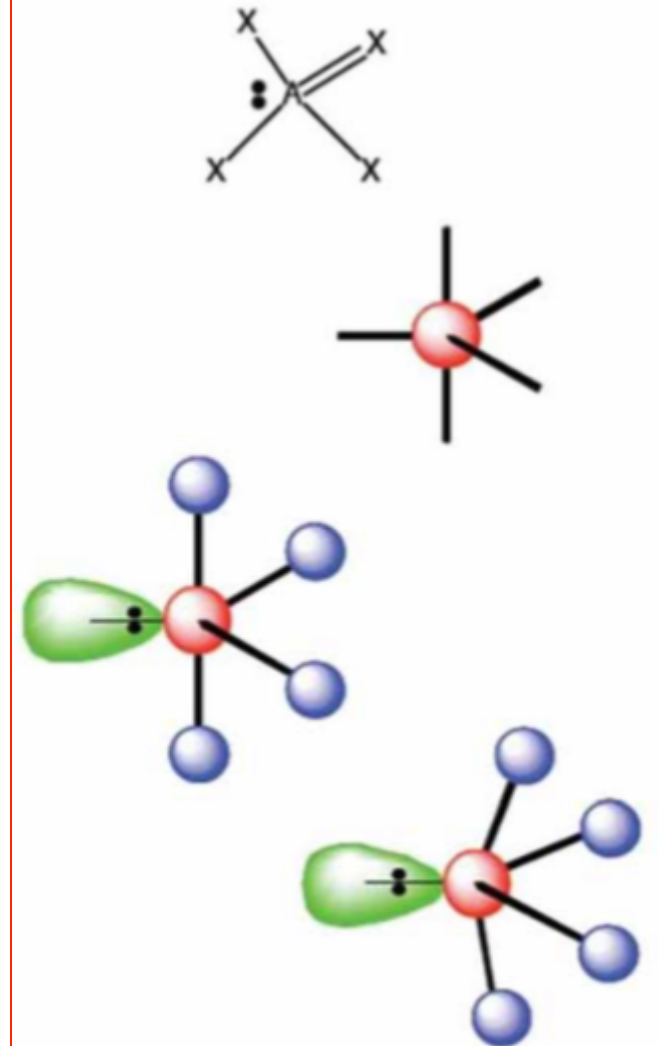


Geometría Molecular

Estrategia para el uso del MRPECV

- Dibujar la **estructura de Lewis**.
 - ¿Cuántos pares electrónicos?
 - Considerar el doble enlace como sencillo.
 - Distribuir los pares electrónicos de forma que **minimicen sus repulsiones: geometrías moleculares de pares de electrones**.
 - Decidir qué posiciones ocuparán los PS y cuales los PE.
- Cuando los PS puedan ocupar más de una posición no equivalente, situarlos allí donde **minimicen sus repulsiones**.
- Identificar la **geometría y forma molecular** a partir de las posiciones de los átomos periféricos
 - **Permitir las distorsiones** debido a las repulsiones entre PS y PE.

$$R(\text{PS-PS}) > R(\text{PS-PE}) > R(\text{PE-PE})$$



Estructuras de Lewis: reglas para determinarlas

1) **Determinar N_v :** numero pares de electrones de valencia.

2) **Determinar N_σ , N_π y N_D** $\left\{ \begin{array}{l} N_\sigma = q - 1 + h = N^0 \text{ enlaces sigma} \\ N_\pi = 3q - N_v + 1 = N^0 \text{ enlaces pi} \\ N_D = N_v - N_\sigma - N_\pi = N^0 \text{ pares de electrones solitarios} \end{array} \right.$

3) Dibujar el **esqueleto básico** de la estructura molecular: colocando **en el centro el elemento mas electropositivo** y conectando a este los otros elementos por medio de enlaces **sigma**.

4) **Proceder a la asignación de los enlaces múltiples y pares solitarios**, respetando la regla del octeto. Asignar los pares solitarios preferentemente a los átomos periféricos.

Estructuras de Lewis: reglas para determinarlas

5) Calcular las cargas formales.

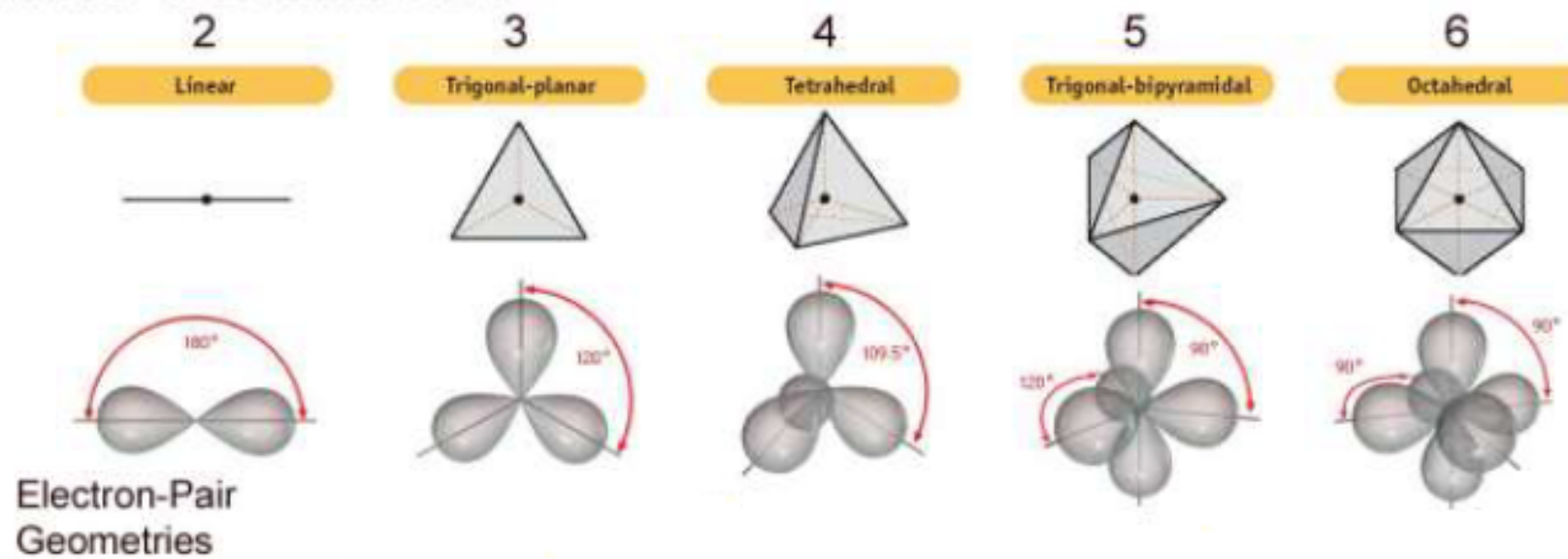
Deben ser razonables y lo más bajas posibles.

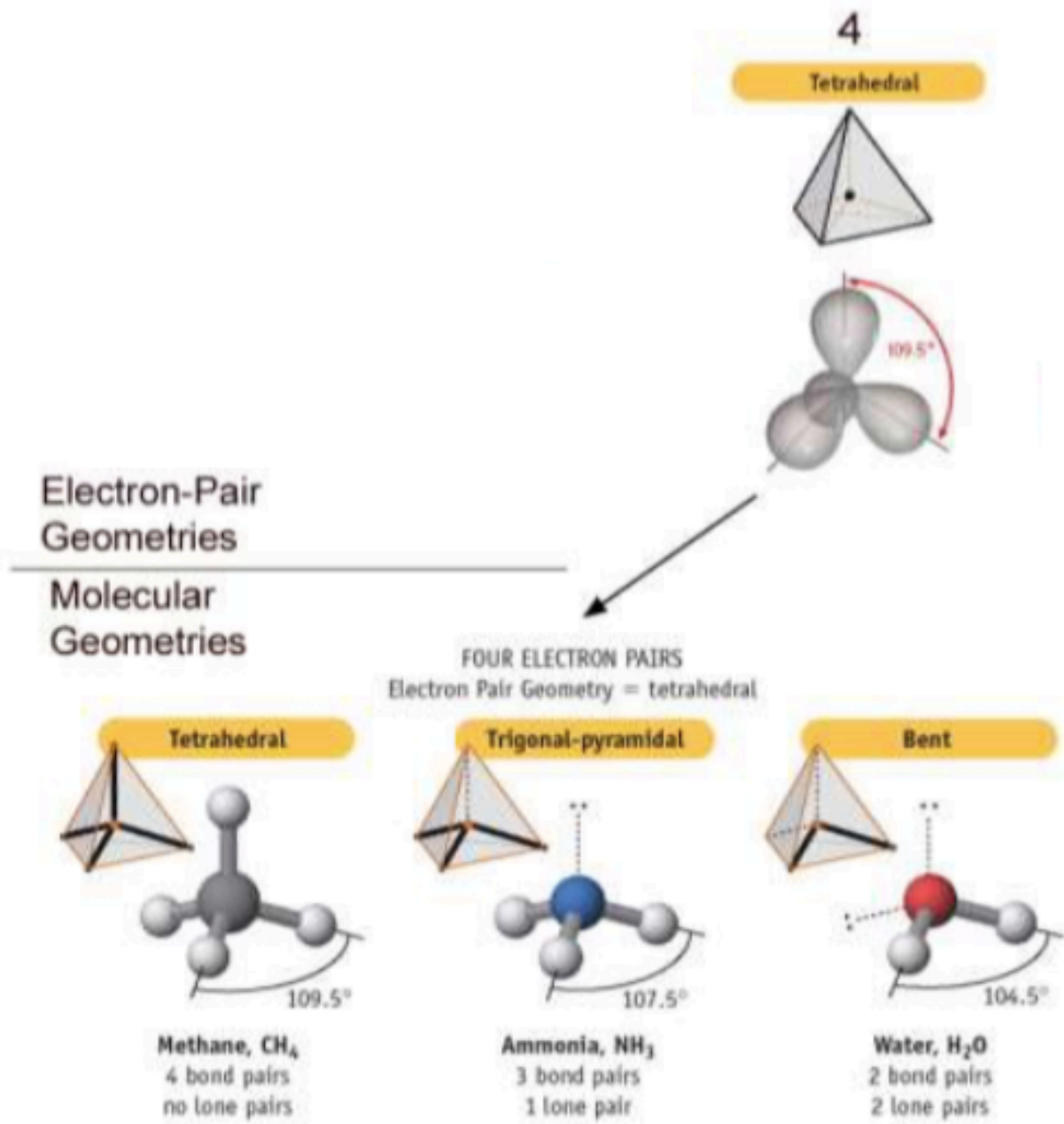
Las estructuras más razonables son las que tienen una menor separación de cargas formales.

6) Tener en cuenta la posibilidad de estructuras resonantes.

7) No violar nunca la regla del octeto para elementos del 2º periodo.

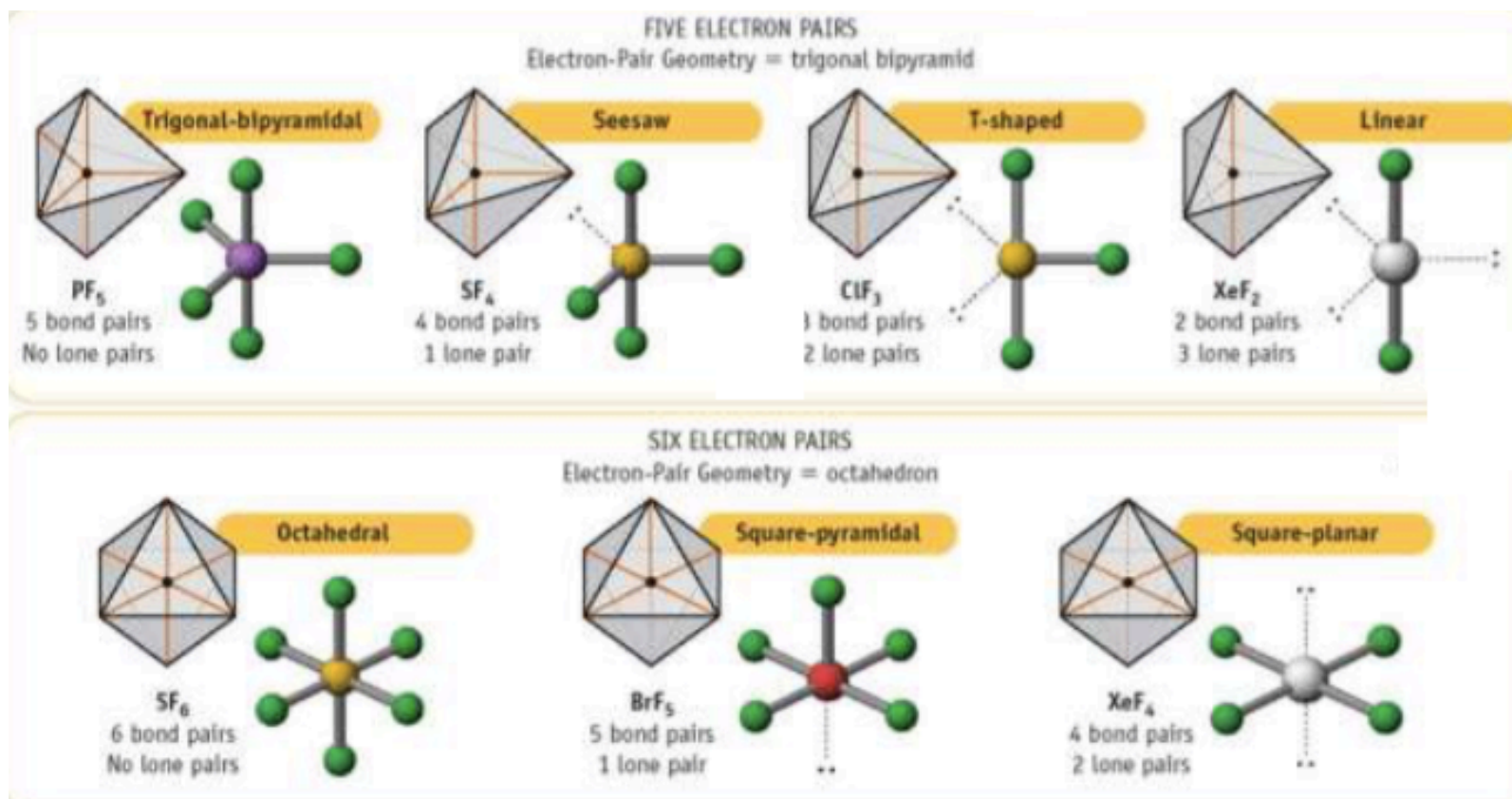
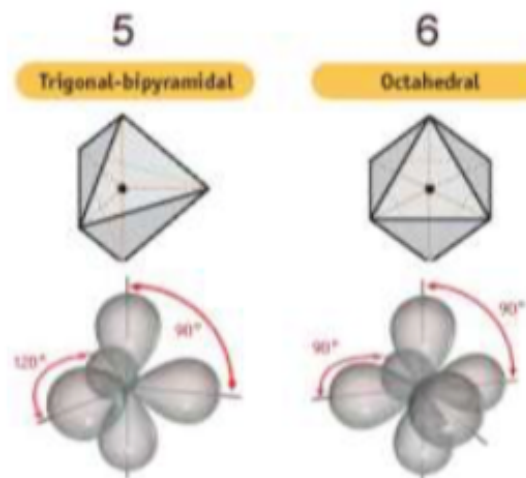
Number of Structural Pairs



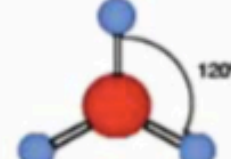
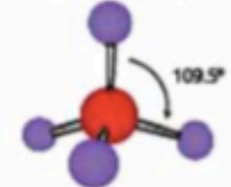
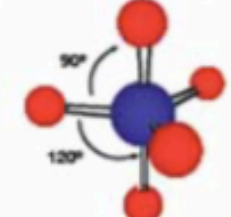
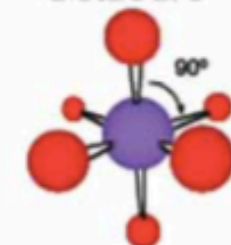


Electron-Pair Geometries

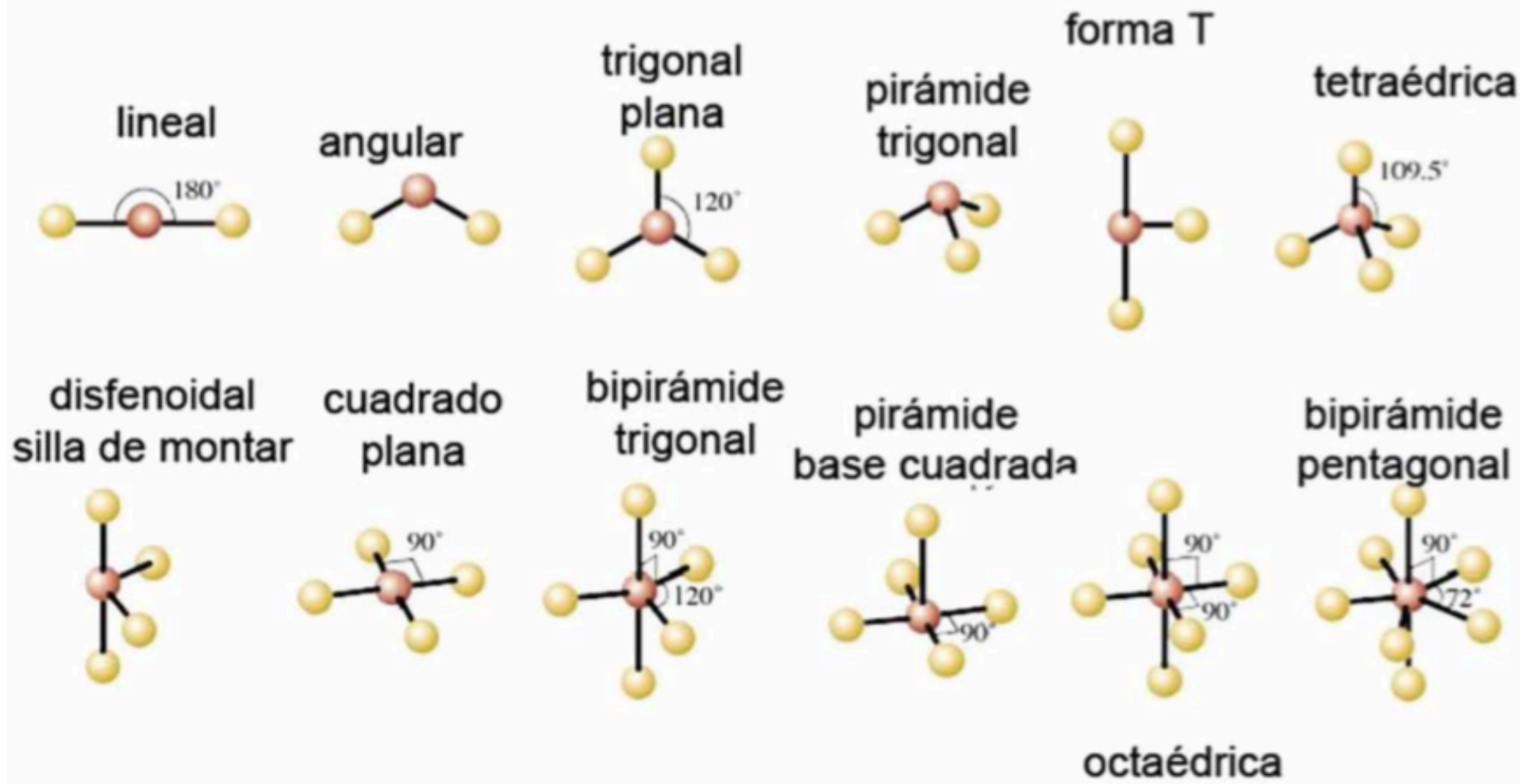
Molecular Geometries



Algunas geometrías comunes

PS+PE	Distribución	Notación RPECV	Geometría Molecular	Ejemplos
2	 Lineal Triángulo equilátero	AX ₂	Lineal	BeH ₂
3	 Tetraedro	AX ₃ AX ₂ E	Trigonal Plana Angular	BCl ₃ , AlCl ₃ SnCl ₂
4	 Bipirámide Trigonal	AX ₄ AX ₃ E AX ₂ E ₂ AXE ₃	Tetraédrica Pirámide Trigonal Angular Lineal	CH ₄ , SiCl ₄ NH ₃ , PCl ₃ H ₂ O, SCl ₂ HF
5	 Octaedro	AX ₅ AX ₄ E AX ₃ E ₂ AX ₂ E ₃	Bipirámide Trigonal Disfenoidal Forma de T Lineal	PCl ₅ , AsF ₅ SF ₄ ClF ₃ XeF ₂
6		AX ₆ AX ₅ E AX ₄ E ₂	Octaédrica Pirámide base cuadrada Cuadrada plana	SF ₆ BrF ₅ XeF ₄

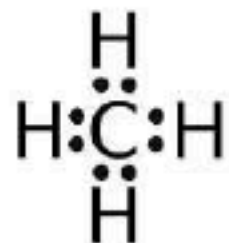
Denominación de las estructuras de moléculas sencillas



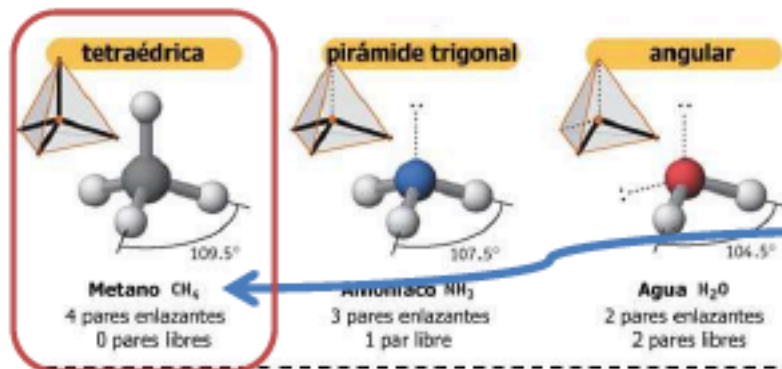
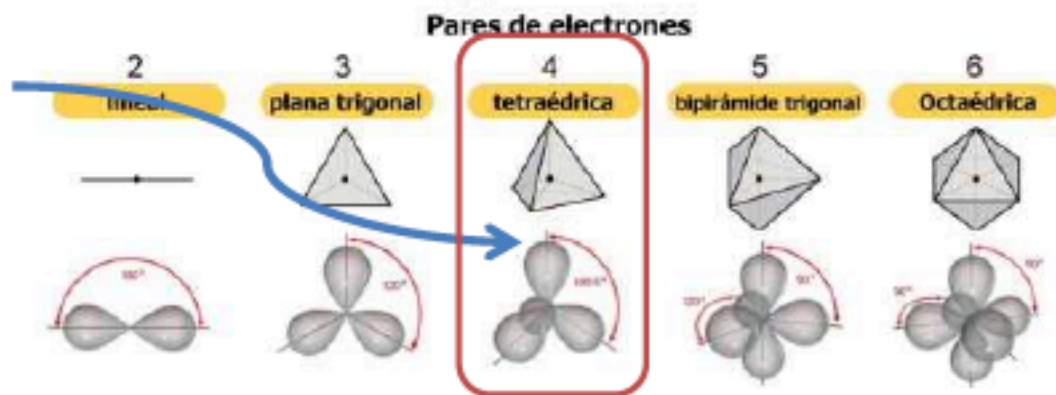
Ejemplos resueltos



1) estructura propuesta Lewis



2) Por MRPECV nos fijamos en los pares de electrones alrededor del átomo central, hay 4 pares, vemos que **sólo puede ser la tetraédrica**

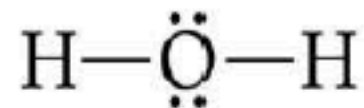


Estas son las 3 únicas geometrías de molécula posibles partiendo de estructura tetraédrica dependiendo de si tenemos 0, 1 o 2 pares de electrones desapareados/libres.

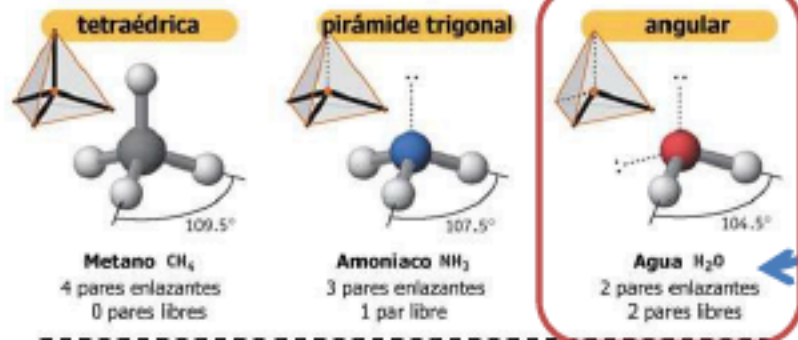
3) Para la geometría de la molécula nos fijamos en cuantos de esos 4 pares son enlazantes. En este caso son todos, por lo que la geometría también será **tetraédrica**



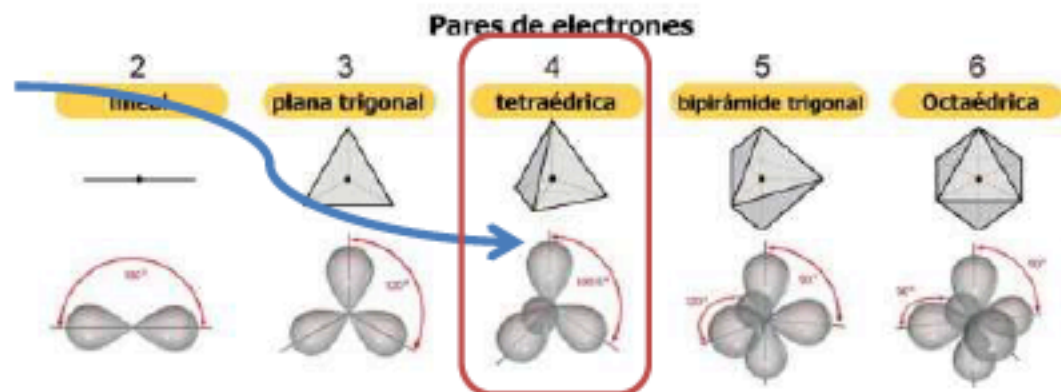
1) estructura propuesta Lewis



2) Por MRPECV nos fijamos en los pares de electrones alrededor del átomo central (O), hay 4 pares, vemos que **sólo puede ser la tetraédrica**



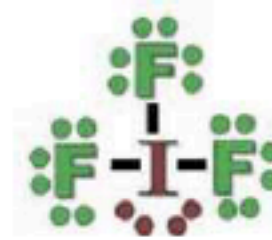
Estas son las 3 únicas geometrías de molécula posibles partiendo de estructura tetraédrica dependiendo de si tenemos 0, 1 o 2 pares de electrones desapareados/libres.



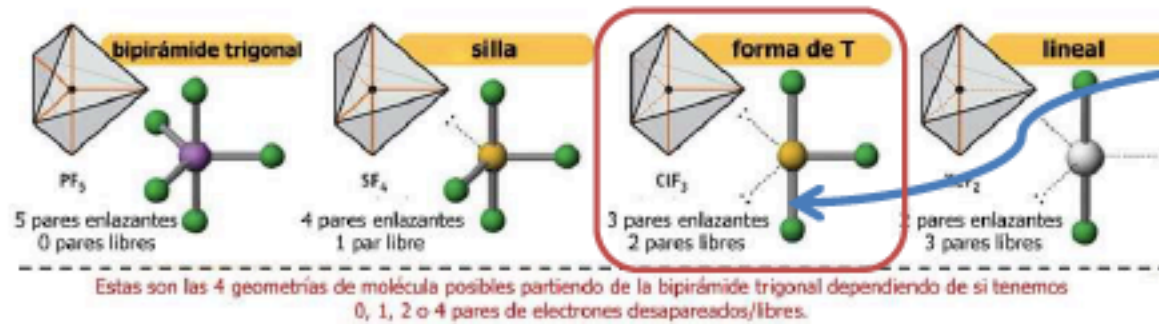
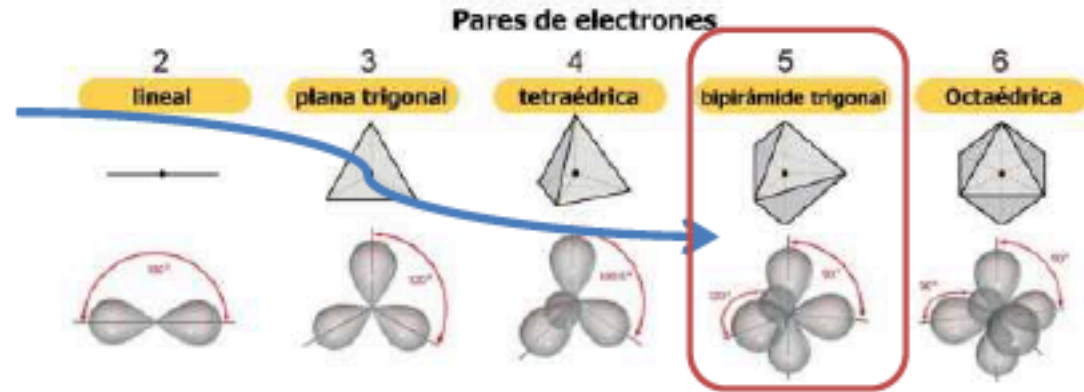
3) Para la geometría de la molécula nos fijamos en cuantos de esos 4 pares son enlazantes. En este caso hay 2 pares de electrones enlazantes, por lo que la geometría será **angular**.



1) estructura propuesta Lewis



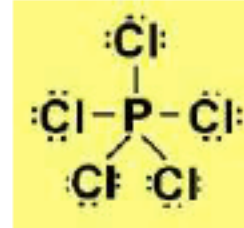
2) Por MRPECV nos fijamos en los pares de electrones alrededor del átomo central (I), hay 5 pares, vemos que **sólo puede ser la bipirámide trigonal**.



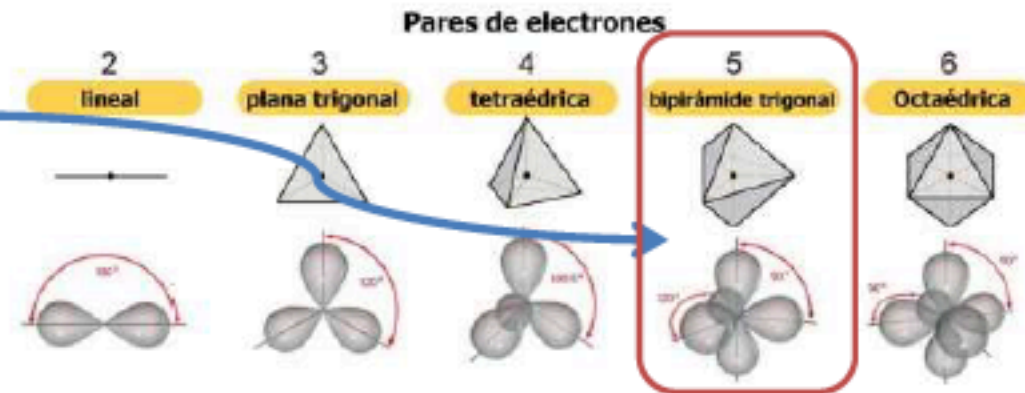
3) Para la geometría de la molécula nos fijamos en cuantos de esos 5 pares son enlazantes. En este caso hay 3 pares de electrones enlazantes, por lo que la geometría será **forma de T**.



1) estructura propuesta Lewis



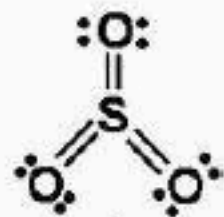
2) Por MRPECV nos fijamos en los pares de electrones alrededor del átomo central (P), hay 5 pares, vemos que **sólo puede ser la bipirámide trigonal**.



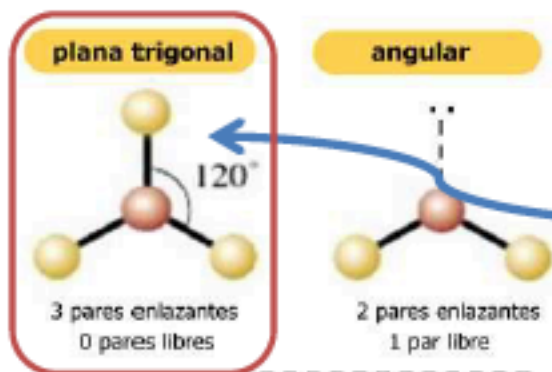
3) Para la geometría de la molécula nos fijamos en cuantos de esos 5 pares son enlazantes. En este caso hay 5 pares de electrones enlazantes, por lo que la geometría será **bipirámide trigonal**.



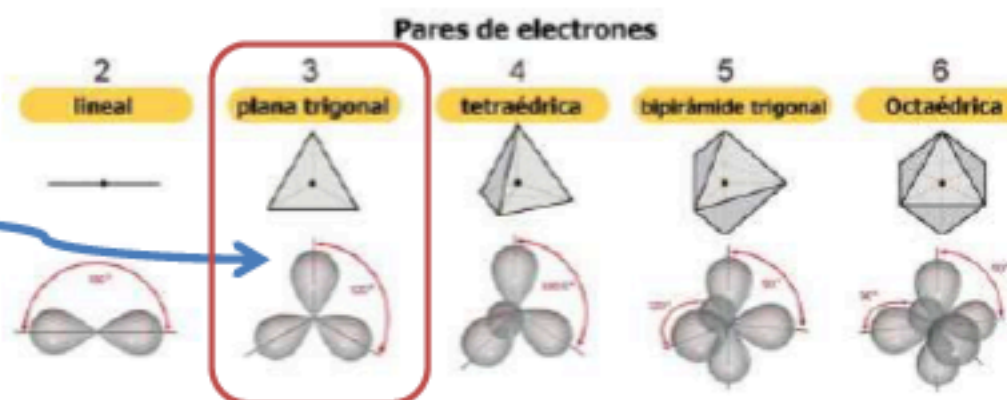
1) estructura propuesta Lewis



2) Por MRPECV nos fijamos en los pares de electrones alrededor del átomo central (S), los dobles enlaces se consideran sencillos (3 enlaces sigma), por tanto hay 3 pares, por lo que **sólo puede ser plana trigonal**.



Estas son las 2 únicas geometrías de molécula posibles partiendo de estructura plana-trigonal dependiendo de si tenemos 0 o 1 par de electrones desapareados/libres.



3) Para la geometría de la molécula nos fijamos en cuantos de esos 3 pares son enlazantes. Todos son enlazantes, por lo que **siempre coincidirá la geometría de la molécula con la predicha por MRPECV, es decir será también plana trigonal**.