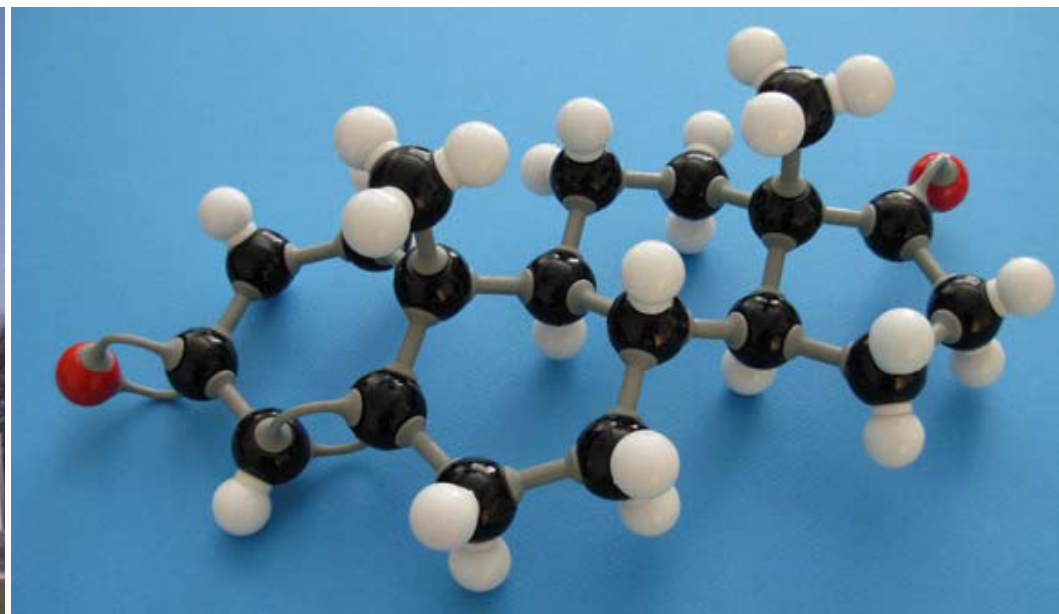


# Moléculas poliatómicas (1)



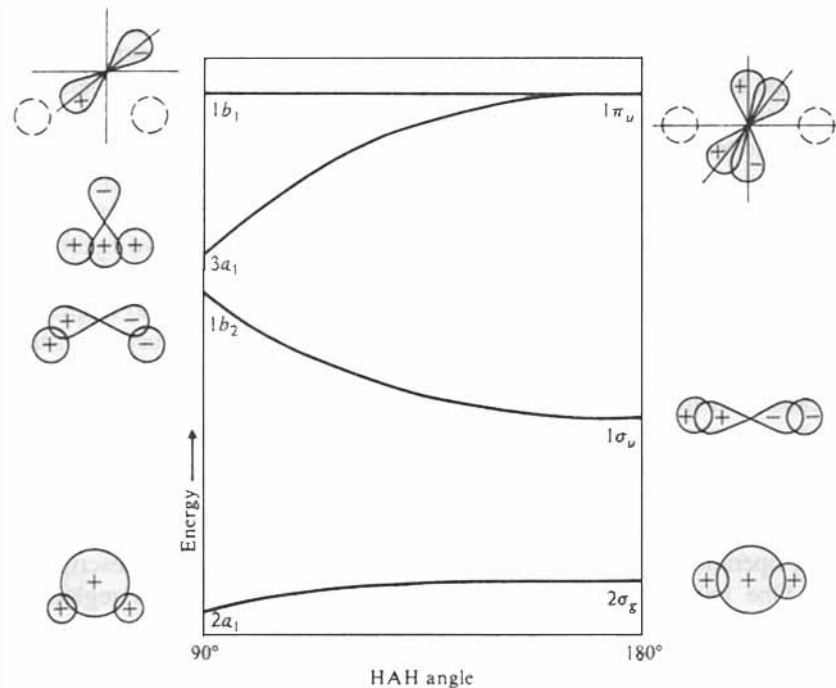
- \* Gillespie, R. J., "The Electron-Pair Repulsión Model for Molecular Geometry", *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.
- \* Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.
- \* Gillespie, R. J., "Electron Domains and the VSEPR Model of Molecular Geometry", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1996**, 35, 495-514. (**Apartados 1 y 2**)

- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001. **Capítulo 4.**
- \* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990. **Capítulo 8.**
- \* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999. **Capítulo 5 y 6.**
- \* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008. **Capítulo 2.** Traducción española de la 2ª Ed. "Química Inorgánica", Pearson Prentice Hall, 2006. **Capítulo 1.**
- \* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003. **Capítulo 7.**

- \* Jolly, W. L., “*Modern Inorganic Chemistry*”, 2<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill, 1991. **Capítulo 3.**
- \* Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (Shriver-Atkins) “*Inorganic Chemistry*”, 4<sup>a</sup> Ed., Oxford University Press, 2006. Traducción española de la 4<sup>a</sup> Ed. “*Química Inorgánica*”, McGraw-Hill Interamericana, 2008. **Capítulo 2.**
- \* Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., “*Química general*”, 8<sup>a</sup> Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006. **Capítulo 11.**
- \* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999. **Capítulo 8.**
- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 2.**
- \* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 2.**
- \* DeKock, R. L.; Gray, H. B., “*Chemical Structure and Bonding*”, University Science Books, 1989. **Capítulo 2.**
- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., “*Chemical Bonding and Molecular Geometry*”, Oxford University Press, 2001. **Capítulo 2.**
- \* Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4<sup>a</sup> Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 6.**

### T.O.M.: Diagramas de correlación. Diagramas de Walsh

Estudio similar a las moléculas diatómicas, pero con más átomos, más orbitales.  
Diatómicas, energía y distancia de enlace.



Diagramas de Walsh para moléculas AH<sub>2</sub> permiten hacer una mera “estimación” de la geometría.

BeH<sub>2</sub>: 4 electrones (1+2+1) lineal

CH<sub>2</sub>: 6 electrones (1+4+1) angular

H<sub>2</sub>O: 8 electrones (1+6+1) angular

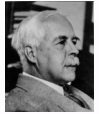
FIGURE 4.22  
Walsh diagram for AH<sub>2</sub> molecule, with diagrams of the valence MOs.

Fig - 40

Jolly, W. L., “Modern Inorganic Chemistry”, 2<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill, 1991, pp 126.

\* Casabó i Gispert, J, “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 234.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander. J., “Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry”, 3<sup>a</sup> Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 174.

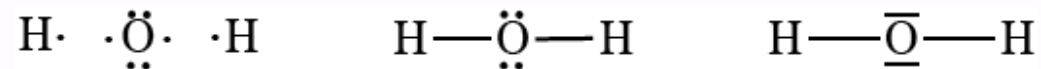


## Estructuras de Lewis

Molécula H<sub>2</sub>, los átomos comparten sus 2 electrones (1+1) con lo que cada uno de ellos adquiere la configuración del He.

Lewis formula la “Regla del Octeto”. Gases nobles tienen configuración ns<sup>2</sup> np<sup>6</sup>, particularmente estable (He “excepción”).

Así, O<sub>2</sub>, el O (2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup>) tiende a compartir 2 e<sup>-</sup> para completar el octeto. Se une a 2 H dando H<sub>2</sub>O.



Es la estructura de Lewis de la molécula de agua

*Una representación de la distribución de los electrones alrededor de cada uno de los átomos de la molécula, y su disposición como pares de enlace (PE) o como pares solitarios (PS).*

Una herramienta muy simple y muy eficaz para el estudio de la geometría y topología molecular, pero sin ninguna implicación directa en la geometría (el agua no es lineal, ni mucho menos).

$$\text{N}^\circ \text{ Pares} = \text{PE} + \text{PS} = \frac{\sum e^- (\text{capa de valencia}) - q (\text{con su signo})}{2}$$

\* Casabó i Gispert, J., “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, pp 359.

<http://www.uhu.es/quimiorg/covalente1.html>



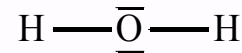
### Estructuras de Lewis

### Enlaces simples



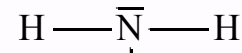
4 Pe

1 PE + 3 PS



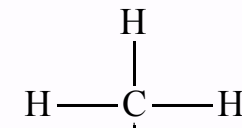
4 Pe

2 PE + 2 PS



H 4 Pe

3 PE + 1 PS



4 Pe

4 PE + 0 PS

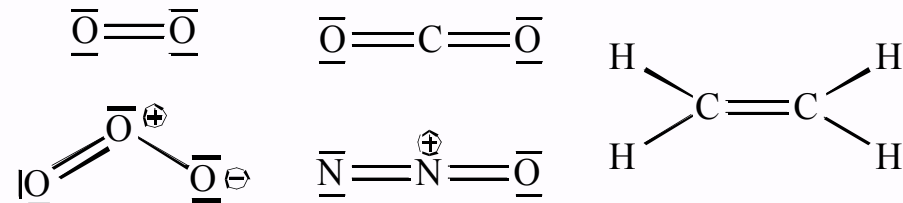
Ninguna información relativa a la posible geometría.

Posteriormente hablaremos de una misma “*estereoquímica*” tetraédrica.

No nos preocupa ni los orbitales atómicos de procedencia de los electrones, ni los posibles orbitales moleculares en que se puedan alojar. **Únicamente** el número y disposición de los pares electrónicos.

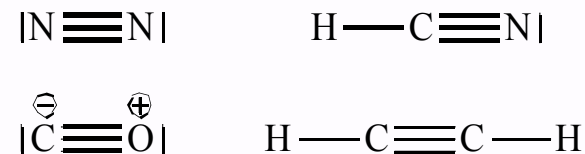
### Enlaces dobles

Algunas moléculas comparten dos pares de electrones como 2 PE, **dobles enlace**



### Enlaces triples

Algunas moléculas comparten tres pares de electrones como 3 PE, **triple enlace**



\* Casabó i Gispert, J, “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, pp 359.

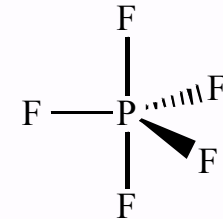
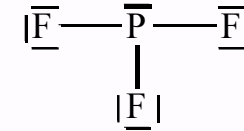
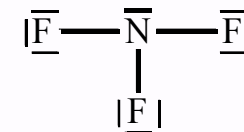
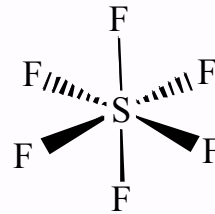


Estructuras de Lewis

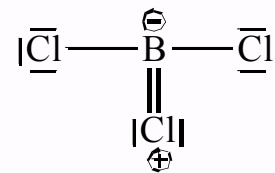
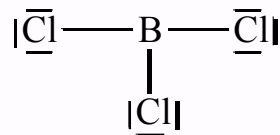
Moléculas hipervalentes

Elementos fuera del 2º periodo, disponen de orbitales “d”, disponen de más de 4 orbitales, pueden alojar mas de 4 pares electrónicos.

Isoelectrónicos



Átomos con octetos incompletos



Enlace sencillo < d(B-Cl) < Enlace doble

\* Casabó i Gispert, J, “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

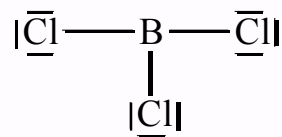
\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, pp 359.



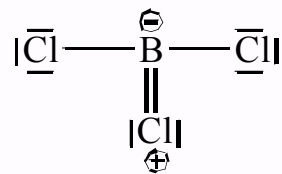
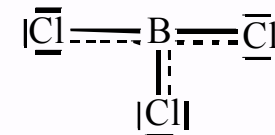
## Estructuras de Lewis

## Unicidad de las estructuras de Lewis

Moléculas descritas por varias estructuras de Lewis distintas, todas con el mismo número de pares y el mismo número de electrones. Decidir cual o cuales son las más fiables para predecir las propiedades.



Resonancia



Para casa

Estructuras de Lewis para  
el anión "Nitrato"  
 $\text{NO}_3^-$

\* Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

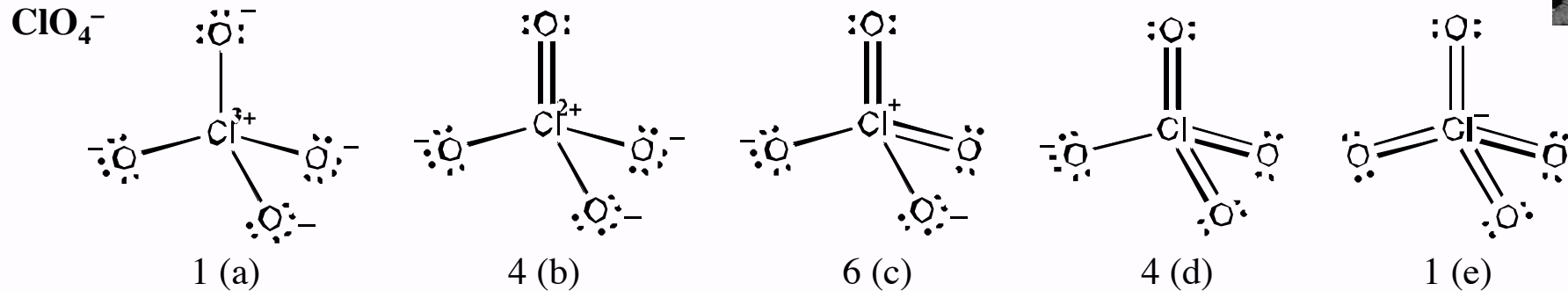
\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 359.





Estructuras de Lewis

Reglas para escribir estructuras de Lewis



1º) Determinar la fórmula estequiométrica, el átomo central (suele ser el más electropositivo) y la conectividad.

2º) Determinar el número total de electrones de la molécula.

$$\text{N}^\circ \text{Pe} = \frac{\sum e^- (\text{capas de valencia}) - q (\text{con su signo})}{2} = \frac{1 \cdot 7 + 4 \cdot 6 - (-1)}{2} = 16$$

3º) Establecer 1 PE entre el átomo central y cada uno de los periféricos: conectividad mínima.

4º) Completar los octetos de los átomos periféricos con PS. Si sobran pares, se le colocan al central. Colocar la carga formal caso de aparecer.

5º) Escribir formas alternativas moviendo PS y PE, generando dobles enlaces y cargas formales (formas resonantes).

\* Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

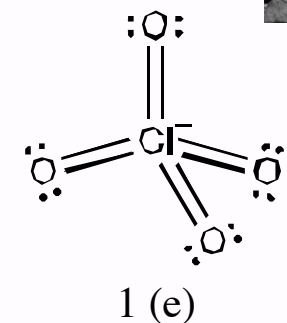
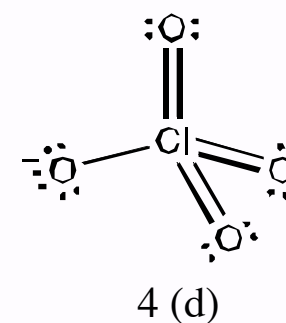
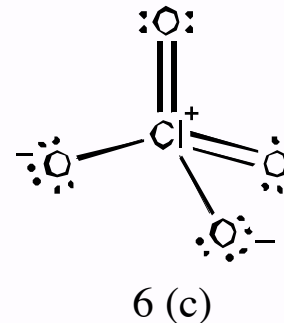
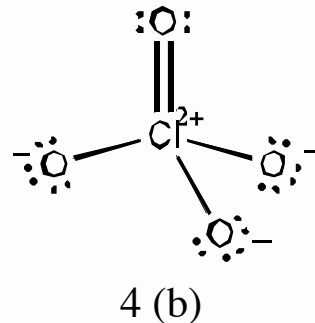
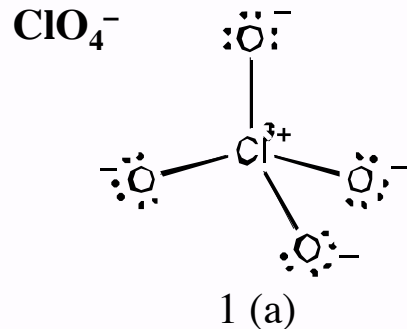
\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 359.



### Estructuras de Lewis

### Reglas para escribir estructuras de Lewis



### Concepto de carga formal

PS, los dos electrones le corresponden al átomo  
PE, sólo le corresponde uno de los dos electrones

$$q = e^- \text{ de la capa de valencia} - (\text{PE}/2 + \text{PS})$$

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

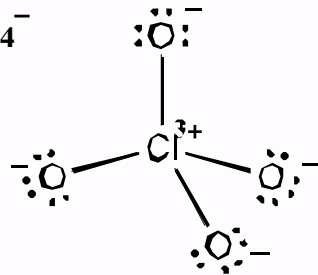
\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 359.

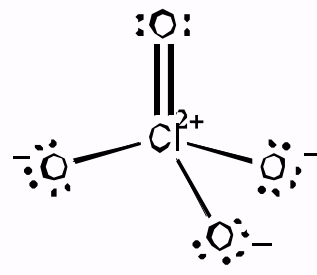


### Estructuras de Lewis

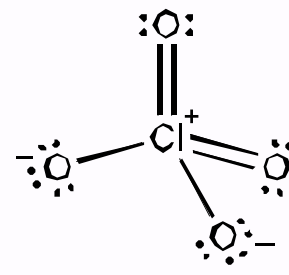
### Reglas para escribir estructuras de Lewis



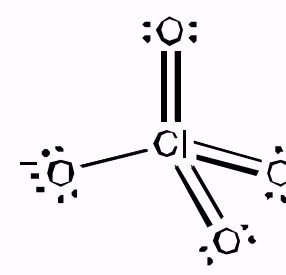
1 (a)



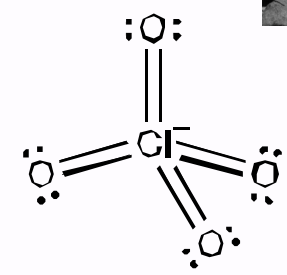
4 (b)



6 (c)



4 (d)



1 (e)

### Consideraciones / selección

Cargas acorde a la EN de los átomos:

Carga “+” al más electropositivo y carga “-” al más electronegativo.

(a) (b) y (c) descartadas, (d) mejor que (e).

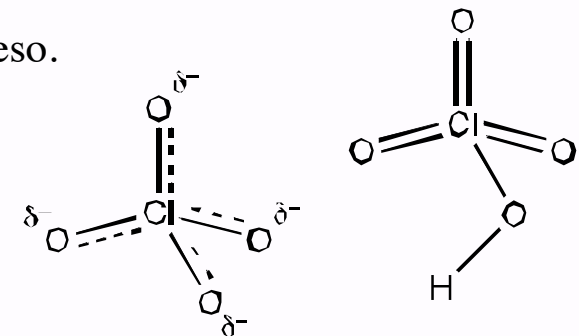
Cargas formales elevadas, concentración de cargas, tienen poco peso.

(a) y (b) descartadas.

En general se prefieren estructuras con cargas formales 0, ±1.

En un sólido la carga eléctrica se concentra en la superficie.

(d) mejor que (c) o (e)



(d) Resonancia de cuatro estructuras de Lewis para dar el Híbrido de Resonancia.

\* Casabó i Gispert, J., “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 100.

\* Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 55.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, pp 359.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

### Valence Shell Electron Pair Repulsion theory

Presentada en el 154<sup>th</sup> Meeting of the American Chemical Society, en Chicago, Illinois, 1967.

Desarrollada:

Gillespie, R. J., "The Electron-Pair Repulsion Model for Molecular Geometry", *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.

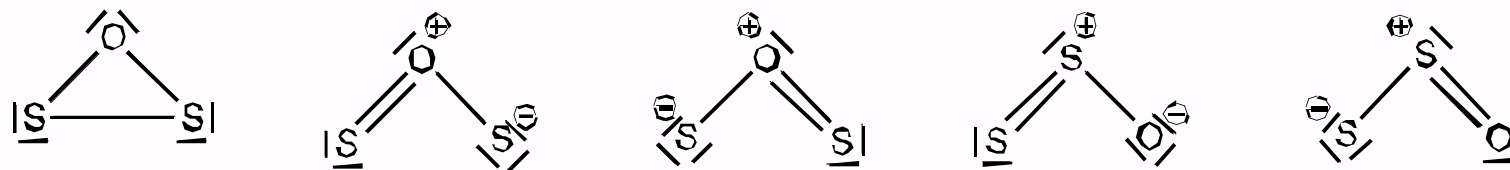
Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.

Gillespie, R. J., "Electron Domains and the VSEPR Model of Molecular Geometry", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1996**, 35, 495-514.



### Predicción de la Topología Molecular

S<sub>2</sub>O



Descripción de una estructura molecular, dos etapas:

- 1) Establecer que átomos están unidos y con cuales (establecer la conectividad).
- 2) Especificar distancias y ángulos de enlace, así como disposición espacial.

### Procedimiento

- 1) Escribir las estructuras de Lewis posibles.
- 2) Descartar aquellas que sean menos probables según las reglas de selección hasta que sólo quede una.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 111.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3<sup>a</sup> Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 48.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4<sup>a</sup> Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 186

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 339.

\* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001, pp 84.

\* Jolly, W. L., "Modern Inorganic Chemistry", 2<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill, 1991, pp 77.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

### Valence Shell Electron Pair Repulsion theory

Presentada en el 154<sup>th</sup> Meeting of the American Chemical Society, en Chicago, Illinois, 1967.

Desarrollada:

Gillespie, R. J., "The Electron-Pair Repulsion Model for Molecular Geometry", *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.

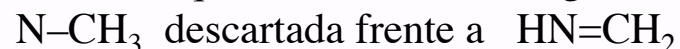
Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.

Gillespie, R. J., "Electron Domains and the VSEPR Model of Molecular Geometry", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1996**, 35, 495-514.



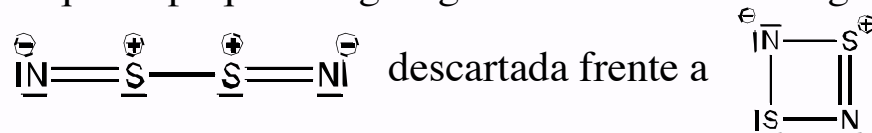
### Reglas

1) Descartar las estructuras que no satisfacen la regla del octeto.



2) Descartar estructuras con anillos de tres eslabones (salvo excepciones).

3) Descartar aquellas que impliquen cargas iguales en átomos contiguos (incluida concentración).



4) Descartar aquellas que coloquen cargas contrarias a la electronegatividad.

\* Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 111.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3<sup>a</sup> Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 48.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4<sup>a</sup> Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 186

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 339.

\* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001, pp 84.

\* Jolly, W. L., "Modern Inorganic Chemistry", 2<sup>a</sup> Ed., McGraw-Hill, 1991, pp 77.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Esquema simple, pero remarcadamente preciso para predecir estructuras moleculares de los elementos representativos.

El ordenamiento espacial de los enlaces de un átomo está fuertemente relacionado con lo que llamaremos “*número total de coordinación*” del átomo central (NC)

$$NC = \frac{N^{\circ} e^{-} \text{ (capa de valencia)} + N^{\circ} \text{ ligandos} - q \text{ (con su signo)}}{2} = PS + PE$$

$$H_2O \longrightarrow (6+2)/2 = 8/2 = 4 = 2 PE + 2 PS$$

$$NH_3 \longrightarrow (5+3)/2 = 8/2 = 4 = 3 PE + 1 PS$$

El total de PE + PS se coloca en los vértices de un poliedro regular (tridimensional) con tantos vértices como pares electrónicos tengamos que alojar. Ordenamiento energéticamente favorecido por minimizar las *repulsiones entre pares de electrones de la capa de valencia*.

$$PS/PS > PS/PE > PE/PE$$

Preferentemente a 90°

- \* Casabó i Gispert, J., “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, **pp 111**.
- \* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 48**.
- \* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “*Principios y Reacciones*”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, **pp 186**.
- \* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “*Química*”, Vol I, Reverté, 1990, **pp 339**.
- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., “*Chemical Bonding and Molecular Geometry*”, Oxford University Press, 2001, **pp 84**.
- \* Jolly, W. L., “*Modern Inorganic Chemistry*”, 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991, **pp 77**.

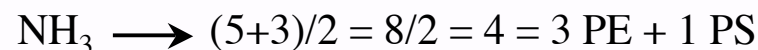
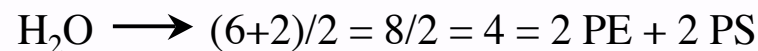
## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

Esquema simple, pero remarcadamente preciso para predecir estructuras moleculares de los elementos representativos.



El ordenamiento espacial de los enlaces de un átomo está fuertemente relacionado con lo que llamaremos “*número total de coordinación*” del átomo central (NC)

$$NC = \frac{N^{\circ} e^{-} \text{ (capa de valencia)} + N^{\circ} \text{ ligandos} - q \text{ (con su signo)}}{2} = PS + PE$$



NC	Disposición espacial	Angulo	Hibridación
2	lineal	180°	sp
3	plano trigonal	120°	sp <sup>2</sup>
4	tetraédrica	109,5°	sp <sup>3</sup>
5	bipirámide trigonal	90, 120, 180	sp <sup>3</sup> d
6	octaédrica	90, 180	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>

**Fig - 41**  
**Fig - 31-32**

\* Casabó i Gispert, J., “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, **pp 111**.

\* Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “Inorganic Chemistry”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **pp 48**.

\* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, **pp 186**

\* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, **pp 339**.

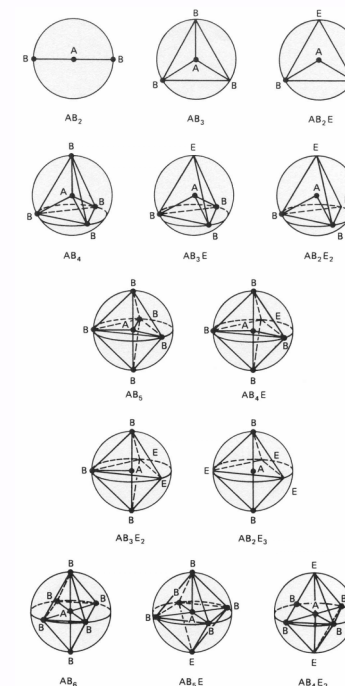
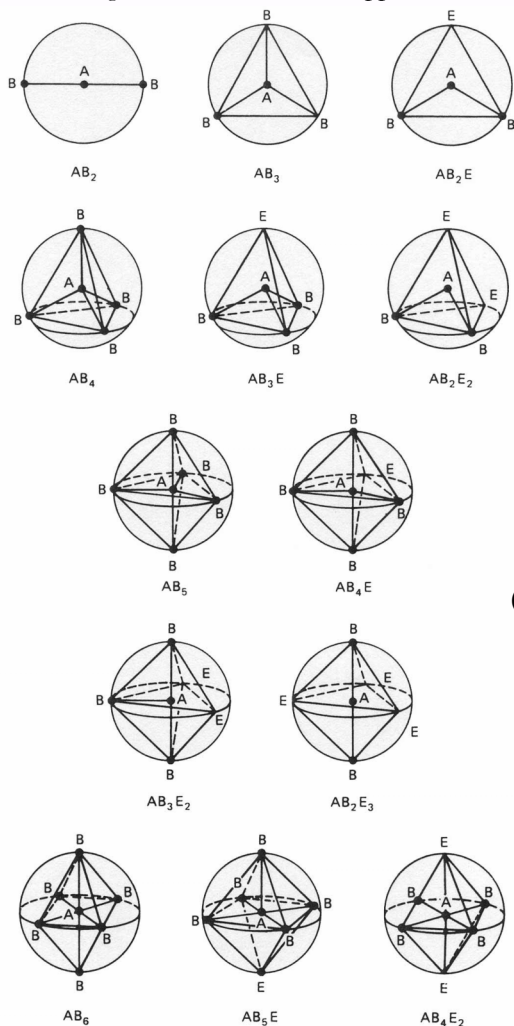
\* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., “Chemical Bonding and Molecular Geometry”, Oxford University Press, 2001, **pp 84**.

\* Jolly, W. L., “Modern Inorganic Chemistry”, 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991, **pp 77**.



## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

Moeller, T., "Inorganic Chemistry. A Modern Introduction", John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: "Química Inorgánica", Reverté, 1994, pp 306.



Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001, pp 95.

Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 340, 350.

Gillespie, R. J., "The Electron-Pair Repulsion Model for Molecular Geometry", *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.

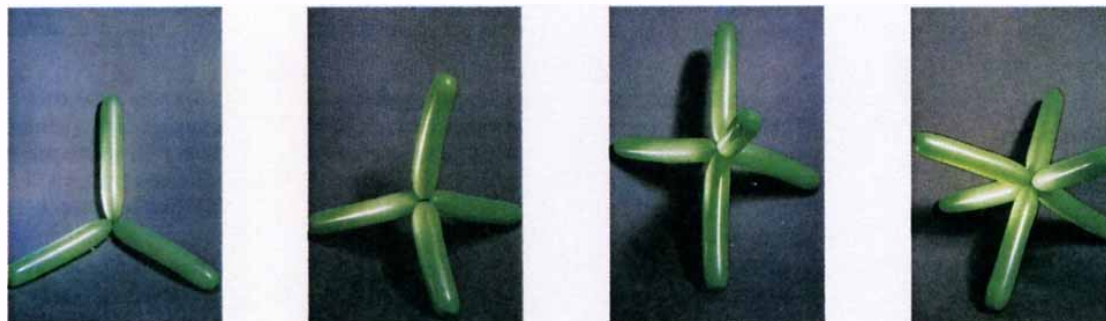
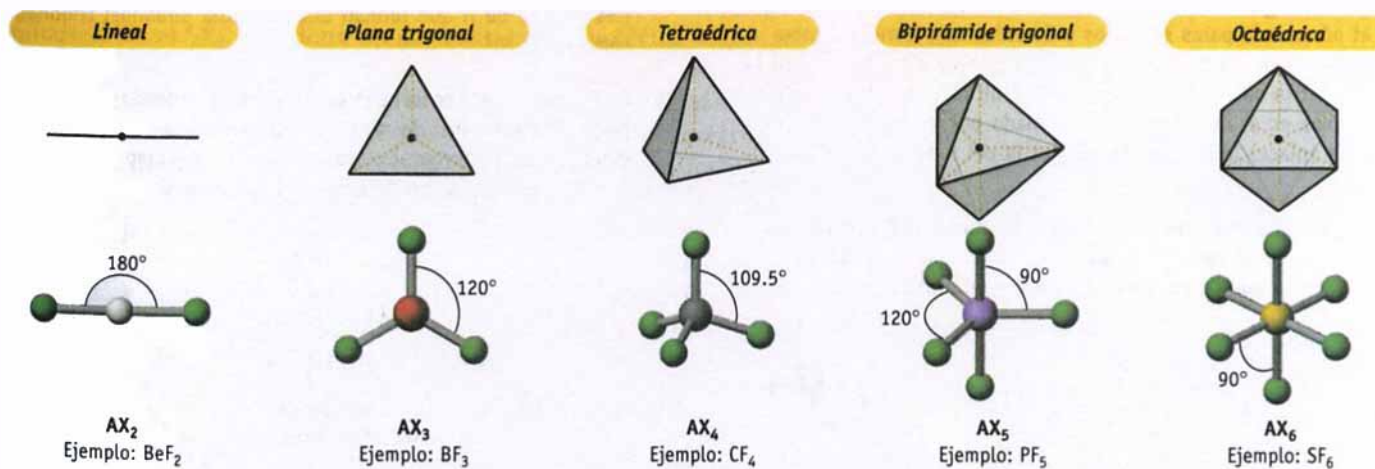
Figura 6-5 Geometrías idealizadas predichas para distribuciones de dos hasta seis pares de electrones alrededor de un átomo central A (E = par de electrones solitario). [R. J. Gillespie, *J. Chem. Educ.*, **47**, 18 (1970), Fig. 1.]



## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 359.

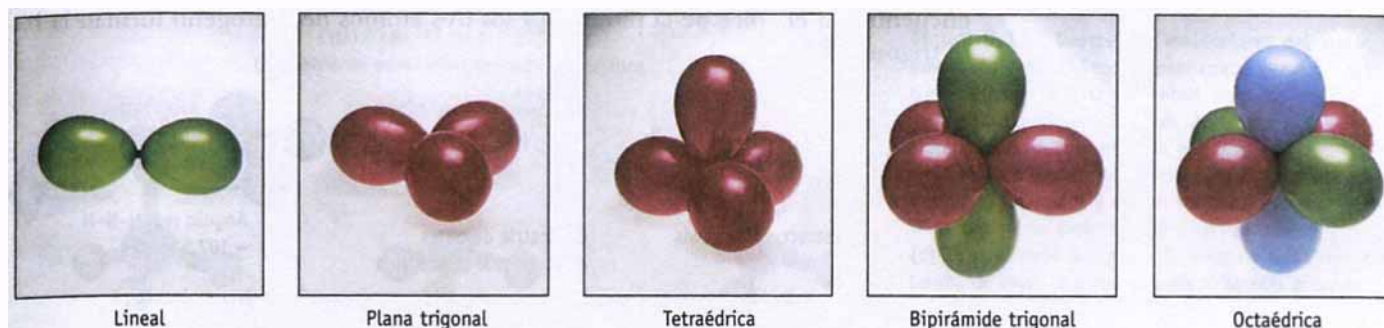
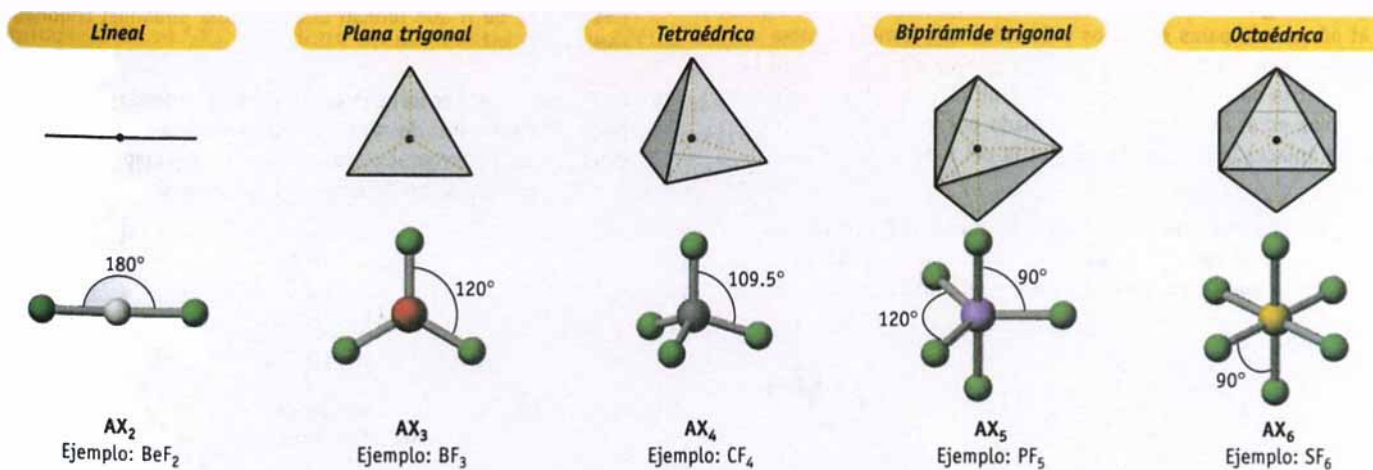


Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 348.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 359.



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 342.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Tipo de especie	Orientación de los pares de electrones	Ángulos de enlace predichos	Ejemplo	Modelo de bolas y barras
$AX_2$	Lineal	$180^\circ$	$BeF_2$	
$AX_3$	Trigonal plana	$120^\circ$	$BF_3$	
$AX_4$	Tetraédrica	$109,5^\circ$	$CH_4$	
$AX_5$	Bipiramidal trigonal	$90^\circ$ $120^\circ$ $180^\circ$	$PF_5$	
$AX_6$	Octaédrica	$90^\circ$ $180^\circ$	$SF_6$	

$AX_2$   
Lineal

$AX_3 / AX_2E$   
Plano trigonal / Angular



Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "Química general", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 413.

Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 189.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Dos esferas tienen una disposición lineal



Tres esferas adoptan una ordenación trigonal



Cuatro esferas se disponen tetraédricamente



Cinco esferas adoptan disposición bipiramidal trigonal  
Seis esferas adoptan una disposición octaédrica

- \* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 342.
- \* Gillespie, R. J.; Popelier, P. L. A., "Chemical Bonding and Molecular Geometry", Oxford University Press, 2001, pp 90.
- \* Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.
- \* Gillespie, R. J., "Electron Domains and the VSEPR Model of Molecular Geometry", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1996**, 35, 495-514

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

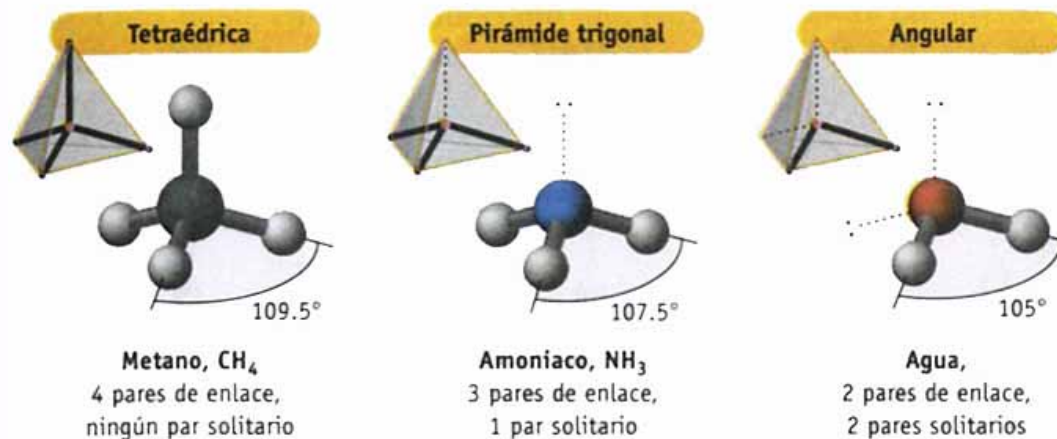


Tetraédrica / Pirámide trigonal / Angular

Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 361.



CUATRO PARES DE ELECTRONES  
Geometría de pares electrónicos = tetraédrica



Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 346.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

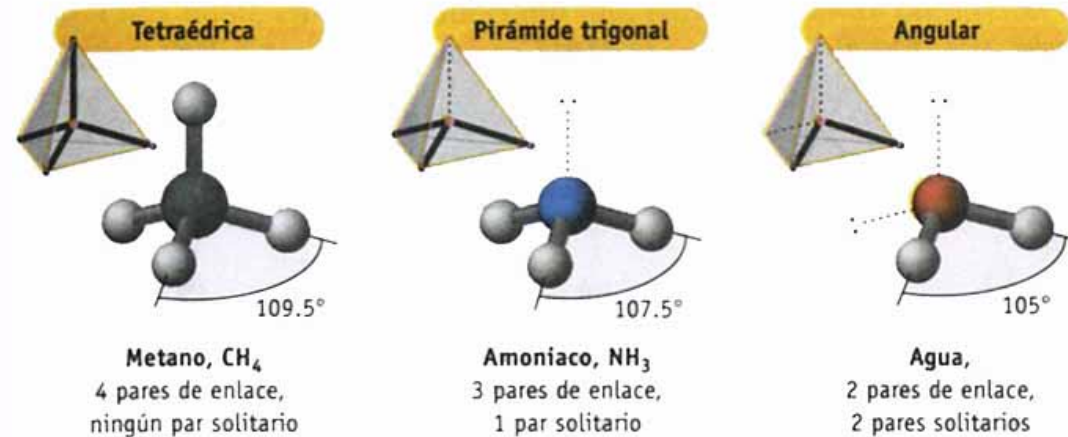


Tetraédrica / Pirámide trigonal / Angular

Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 361.



CUATRO PARES DE ELECTRONES  
Geometría de pares electrónicos = tetraédrica



Molécula	Angulo	Molécula	Angulo
$NH_3$	107°	$H_2O$	104,5°
$PH_3$	93,3°	$H_2S$	92,2°
$AsH_3$	91,5°	$H_2Se$	91,0°
$SbH_3$	91,3	$H_2Te$	89,5

Molécula	Angulo	Molécula	Angulo
$NH_3$	107°	$H_2O$	104,5°
$NF_3$	102°	$OF_2$	102,0°

**Para casa**

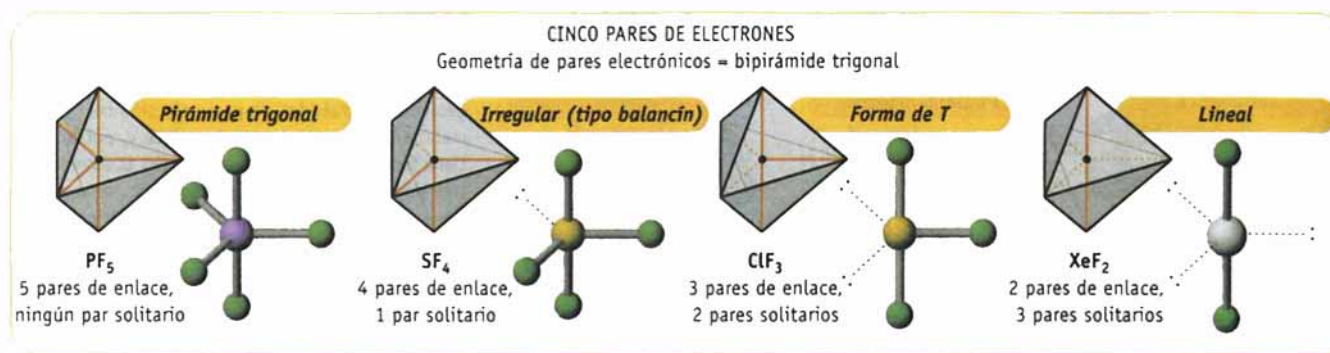
**Justificar las variaciones de ángulos indicados en estas tablas**

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Bipirámide trigonal / disfenoidal / en T / lineal

Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 362.



Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 193.

Tipo de molécula	Estructura	Descripción
$AX_5$		Bipirámide triangular
$AX_4E$		Tetraedro deformado (balancín)

PS/PS	0	0
PS/PE	2	3
PE/PE	4	3

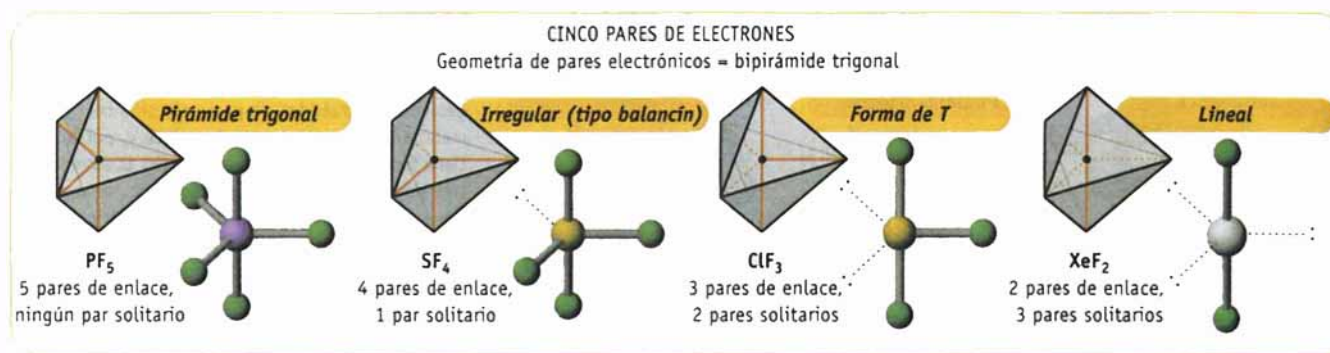
## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



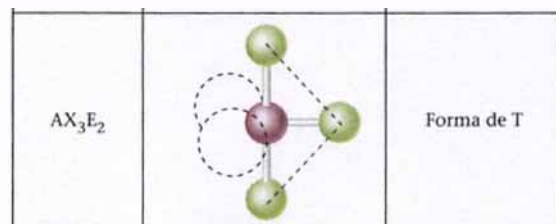
Bipirámide trigonal / disfenoidal / en T / lineal



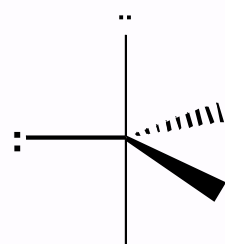
Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 362.



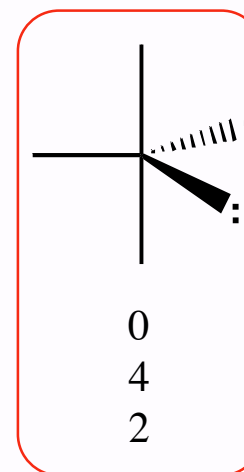
Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 193.



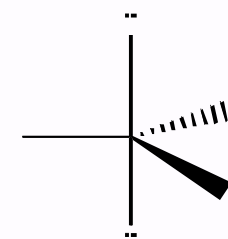
PS/PS  
PS/PE  
PE/PE



1  
3  
2



0  
4  
2



0  
6  
0



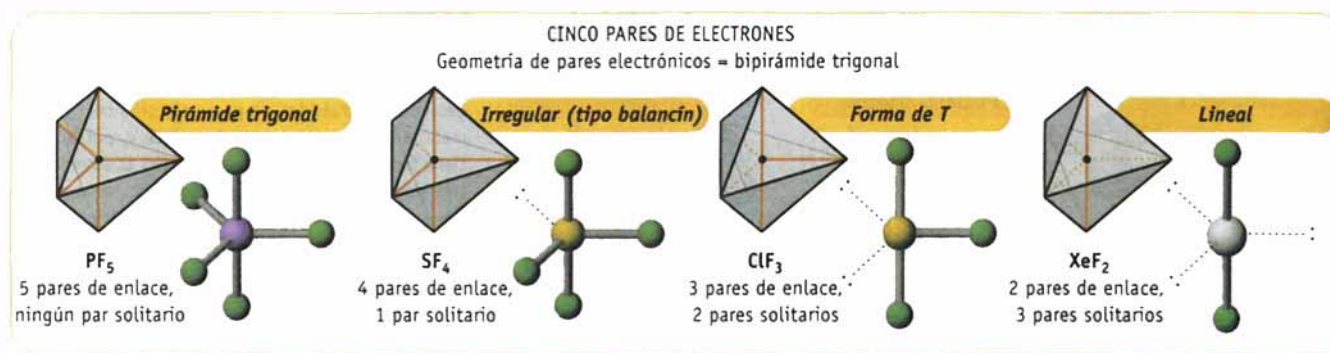
## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



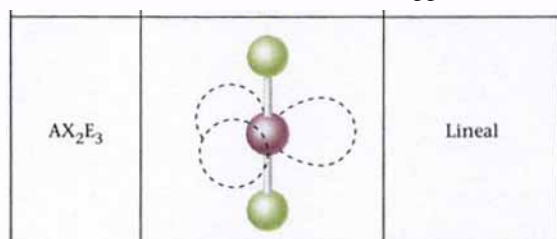
Bipirámide trigonal / disfenoidal / en T / lineal



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 362.



Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 193.



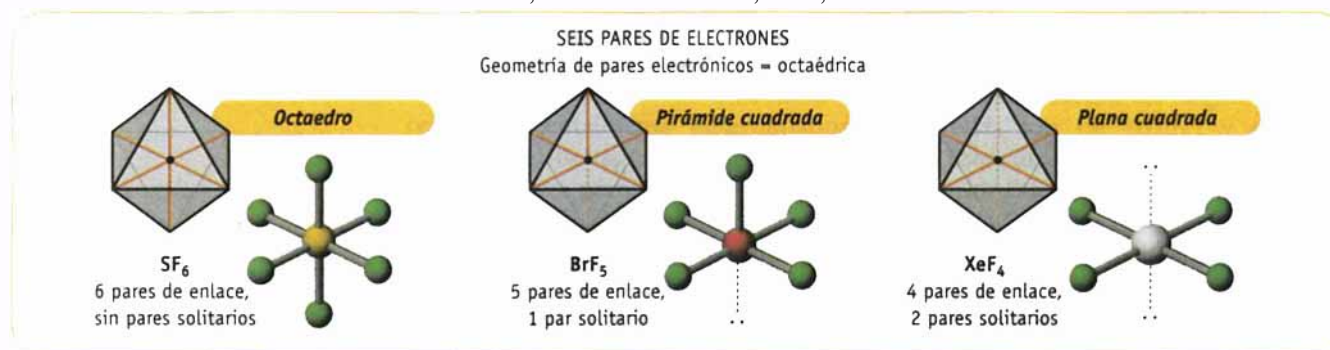
PS/PS	2	2	0
PS/PE	3	4	6
PE/PE	1	0	0

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Octaédrica / pirámide tetragonal / plano cuadrada

Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, 362.



$AX_6$		Octaédrica
$AX_5E$		Pirámide cuadrada
$AX_4E_2$		Plana cuadrada

**Para casa**

Las repulsiones entre pares que dan lugar a las geometrías resultantes, lo pensáis vosotros en casa, y me lo contáis.

Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 193.

## Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR



Unicamente enlaces sencillos:

$$NC = \frac{N^{\circ} e^{-} (\text{capa de valencia}) + N^{\circ} \text{ ligandos} - q (\text{con su signo})}{2} = PS + PE$$

Si existen enlaces dobles hay que calcularlo por separado:

$$PS = \frac{N^{\circ} e^{-} (\text{capa de valencia}) - \text{Estado de Oxidación}}{2} = PS$$

N° de ligandos = N° enlaces  $\sigma$  = PE

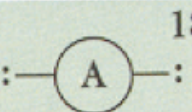
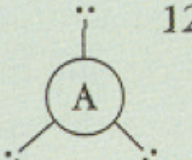
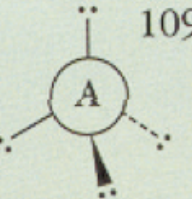
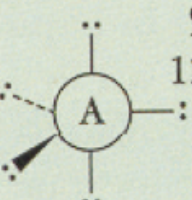
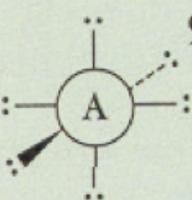
} N° OH = Hibrid. = Estereoquímica

Aplicar Resonancia / Híbrido de Resonancia

**Para casa**

**Cuestionarios y actividades programadas.  
Consulta en la plataforma.**



Pares de $e^-$ de A	Distribución de los pares	Tipo de molécula	Geometría molecular	Ejemplos
2	 $180^\circ$	$AX_2$	Lineal	$BeH_2$ , $BeF_2$
3	 $120^\circ$	$AX_3$	Triangular	$BF_3$
4	 $109,5^\circ$	$AX_4$ $AX_3E$ $AX_2E_2$ $AXE_3$	Tetraédrica Piramidal Angular Lineal	$CH_4$ , $NH_4^+$ , $SiF_4$ , $CCl_4$ $NH_3$ , $H_3O^+$ , $PCl_3$ , $AsCl_3$ $H_2O$ , $F_2O$ , $SCl_2$ $HF$ , $F_2$ , $HCl$ , $Cl_2$
5	 $90^\circ$ $120^\circ$	$AX_5$	Bipirámide triangular	$PCl_5$
6	 $90^\circ$	$AX_6$	Octaédrica	$SF_6$