

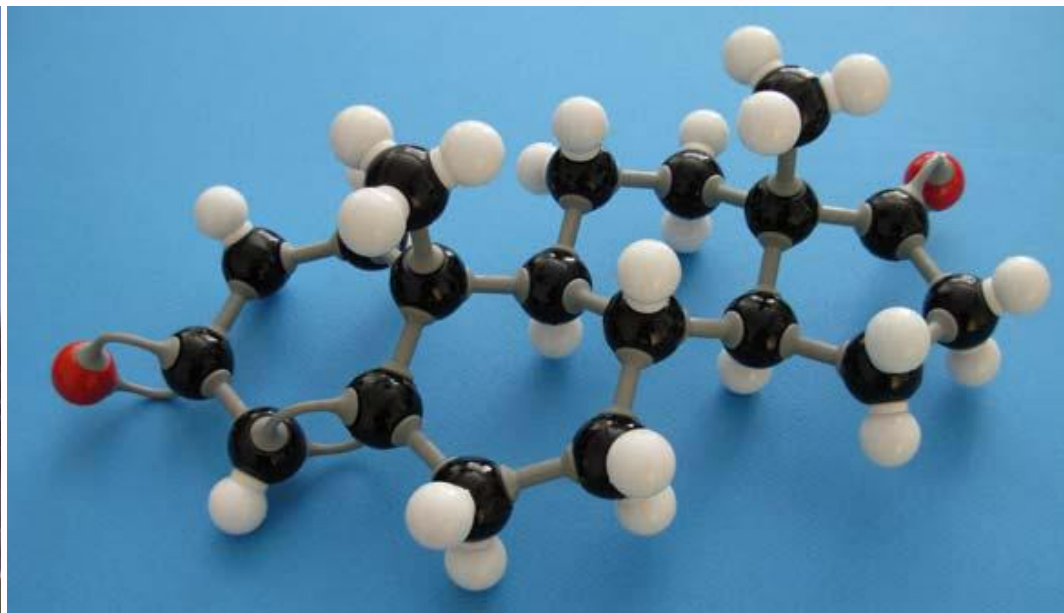
Esta obra está licenciada bajo una Licencia Creative Commons



Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 España
Attribution-NonCommercial-NoDerivs 3.0 Unported
CC BY-NC-ND 3.0

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/>

Moléculas poliatómicas (1)



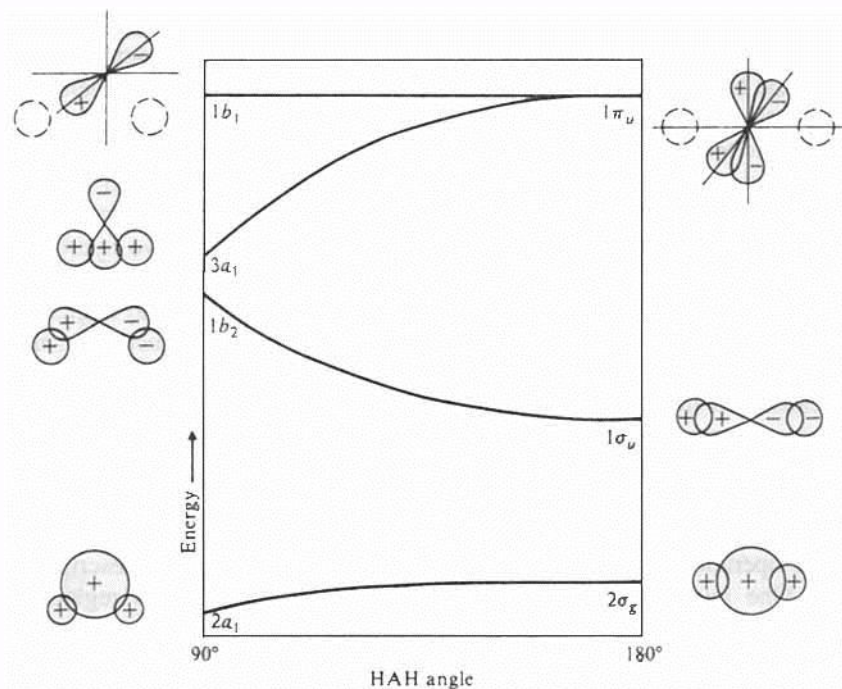
- * Gillespie, R. J., “*The Electron-Pair Repulsión Model for Molecular Geometry*”, *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.
- * Gillespie, R. J., “*The VSEPR Model Revisited*”, *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.
- * Gillespie, R. J., “*Electron Domains and the VSEPR Model of Molecular Geometry*”, *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*”, 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991. **Capítulo 3.**
- * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (Shriver-Atkins) “*Inorganic Chemistry*”, 4ª Ed., Oxford University Press, 2006. Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”, McGraw-Hill Interamericana, 2008. **Capítulo 2.**
- * Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., “*Química general*”, 8ª 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*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 2.**
- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª 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*”, 4ª 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 AH₂ permiten hacer una mera “estimación” de la geometría.

BeH₂: 4 electrones (1+2+1) lineal

CH₂: 6 electrones (1+4+1) angular

H₂O: 8 electrones (1+6+1) angular

FIGURE 4.22
Walsh diagram for AH₂ molecule, with diagrams of the valence MOs.

Fig - 40

Jolly, W. L., “Modern Inorganic Chemistry”,
2ª 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”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 174.

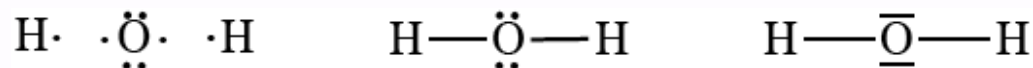


Estructuras de Lewis

Molécula H_2 , 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 $ns^2 np^6$, particularmente estable (He “excepción”).

Así, O_2 , el O ($2s^2 2p^4$) tiende a compartir 2 e^- para completar el octeto. Se une a 2 H dando H_2O .



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).

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

* 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.

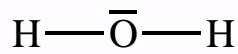
Estructuras de Lewis

Enlaces simples



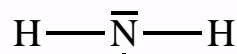
4 Pe

1 PE + 3 PS



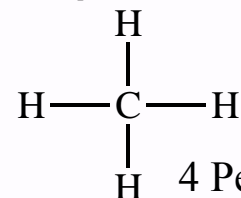
4 Pe

2 PE + 2 PS



4 Pe

3 PE + 1 PS



4 Pe

4 PE + 0 PS

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



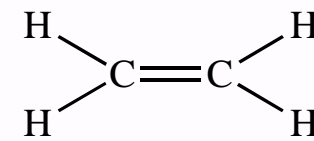
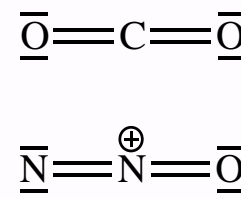
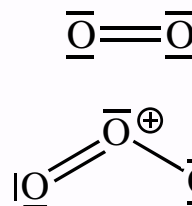
Ninguna información relativa a la posible geometría.

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.

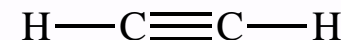
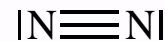
Enlaces dobles

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.

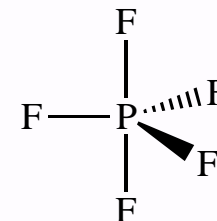
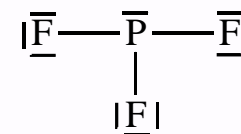
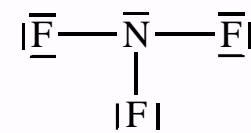
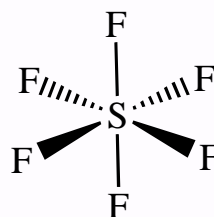


Estructuras de Lewis

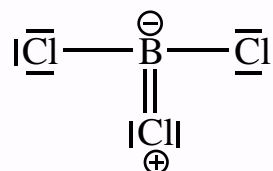
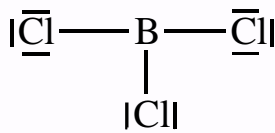
Moléculas hipervalentes

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

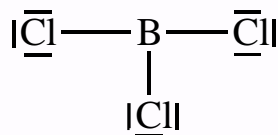
* Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., “Química”, Vol I, Reverté, 1990, pp 359.



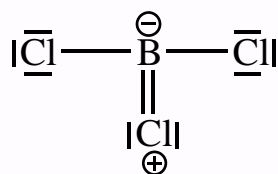
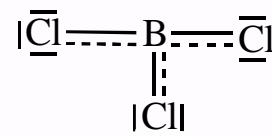
Estructuras de Lewis

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"
 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.

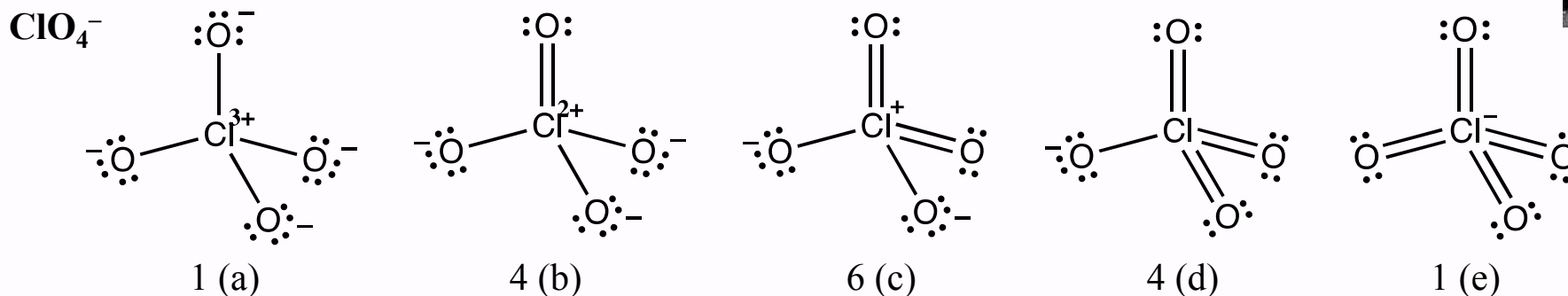
* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

* 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.

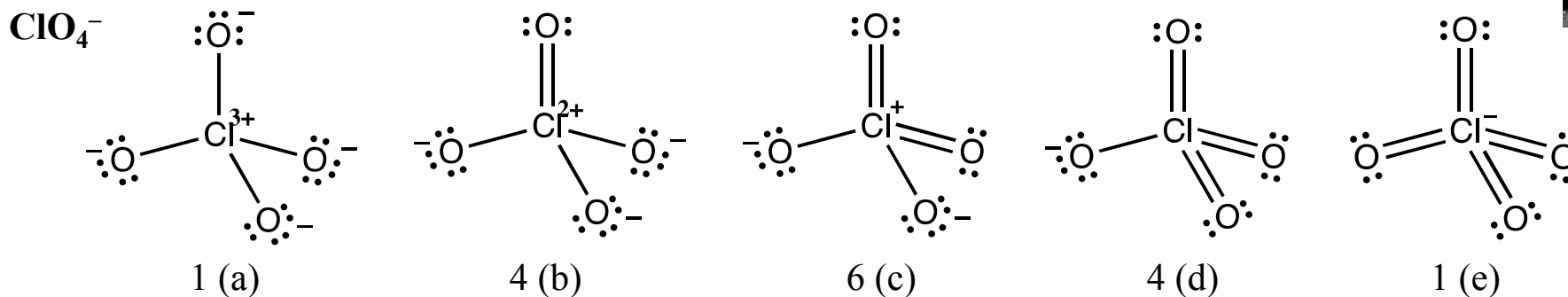
* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

* 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.

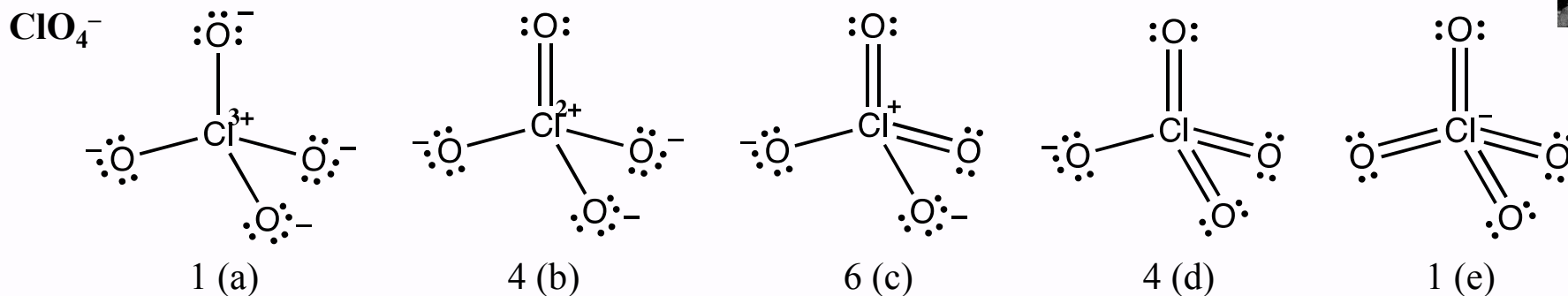
* Masterton, W. L.; Hurley, C. N., “Principios y Reacciones”, 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 177

* 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



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).

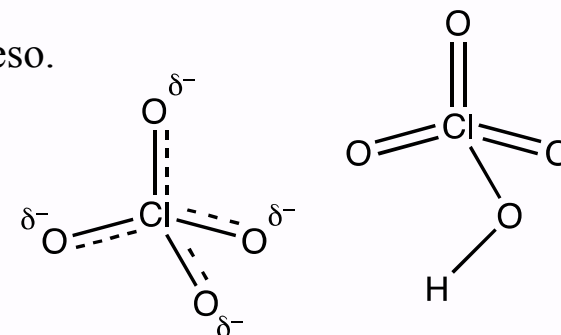
Cargas formales elevadas, concentración de cargas, tienen poco peso.

(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 154th 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.

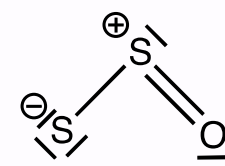
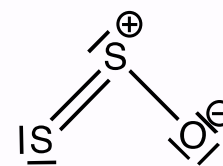
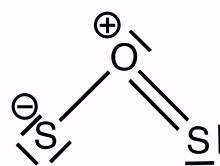
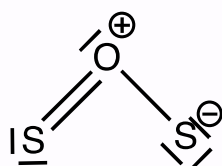
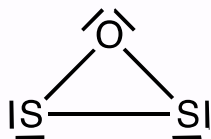
Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.

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

S₂O



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", 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

Valence *Shell* Electron *Pair* Repulsion theory

Presentada en el 154th 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.

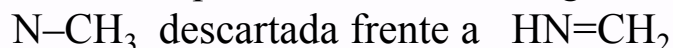
Gillespie, R. J., "The VSEPR Model Revisited", *Chem. Soc. Rev.*, **1992**, 21, 59-69.

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



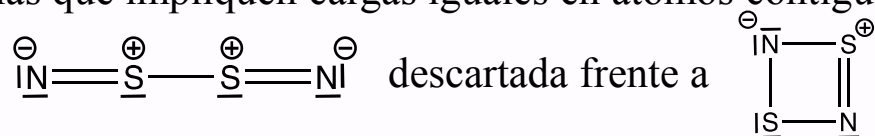
Reglas

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", 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.

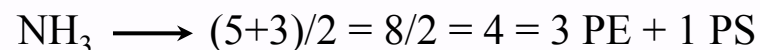
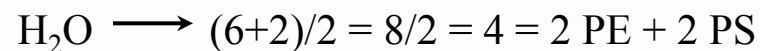
* Jolly, W. L., "Modern Inorganic Chemistry", 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991, pp 77.

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)

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



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**.

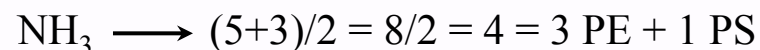
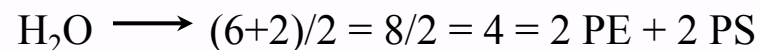
* Jolly, W. L., “*Modern Inorganic Chemistry*”, 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991, **pp 77**.

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 ²
4	tetraédrica	109,5°	sp ³
5	bipirámide trigonal	90, 120, 180	sp ³ d
6	octaédrica	90, 180	sp ³ d ²

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.

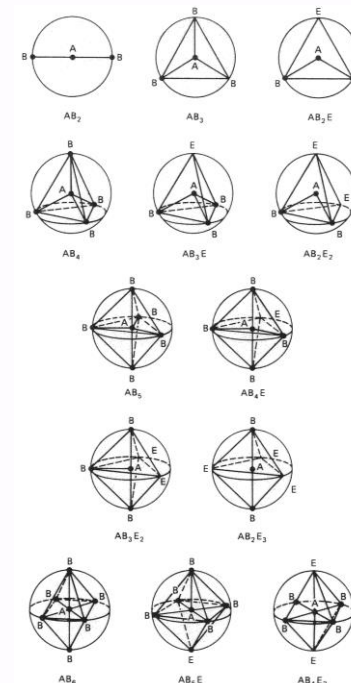
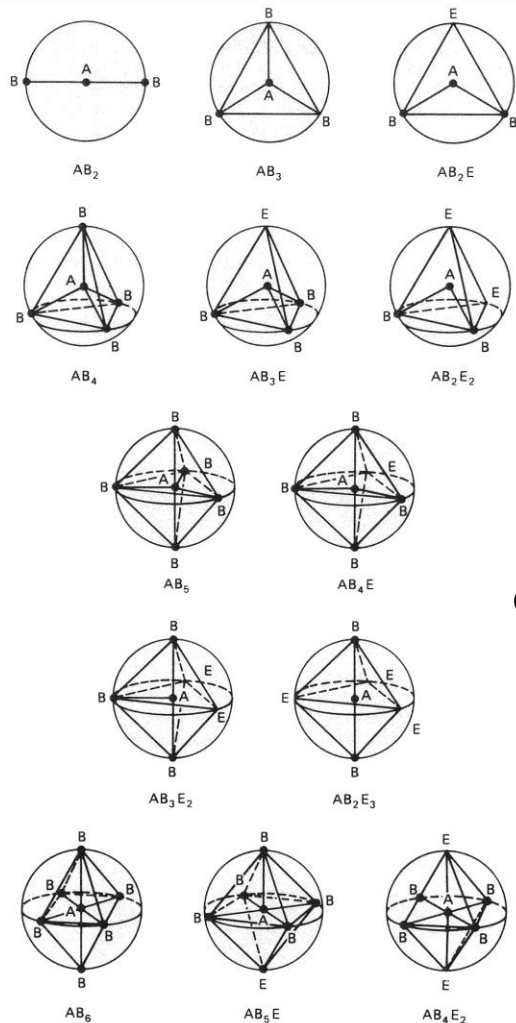
* Jolly, W. L., “Modern Inorganic Chemistry”, 2ª Ed., McGraw-Hill, 1991, pp 77.





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.

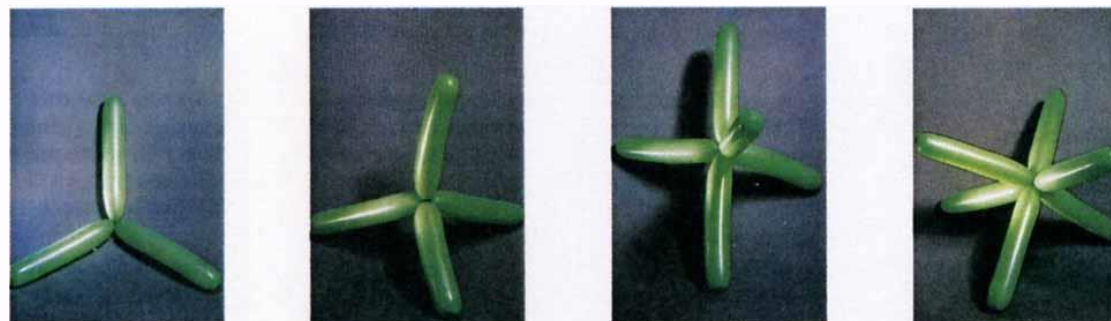
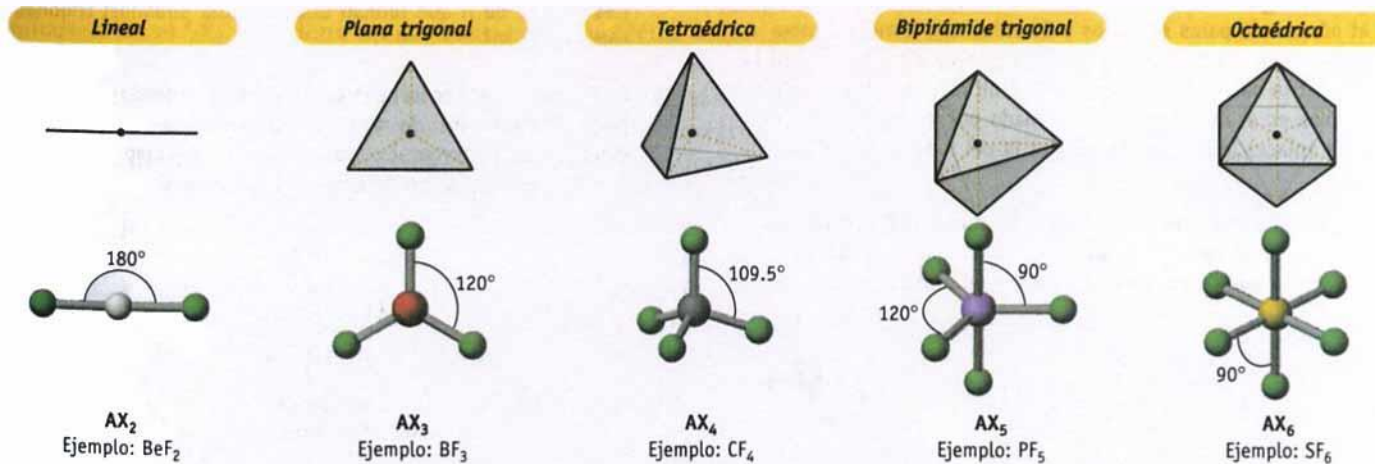
Gillespie, R. J., "The Electron-Pair Repulsión Model for
Molecular Geometry", *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47/1, 18-23.

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.

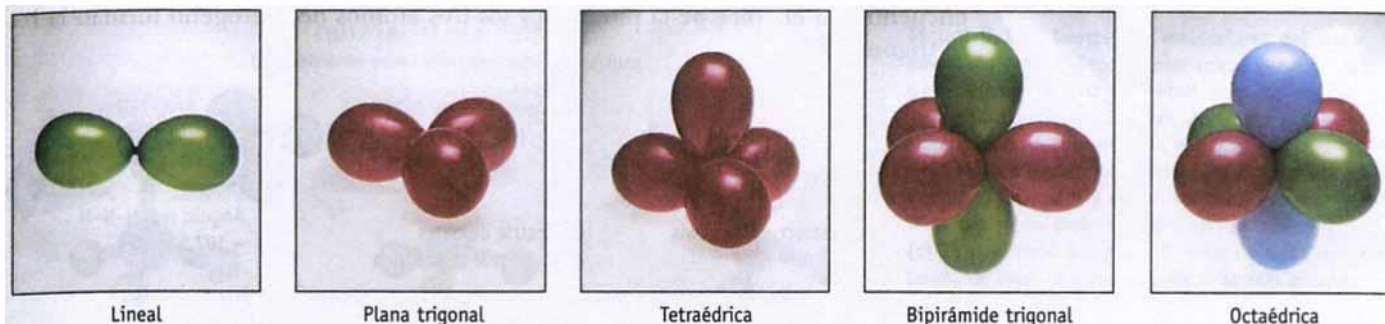
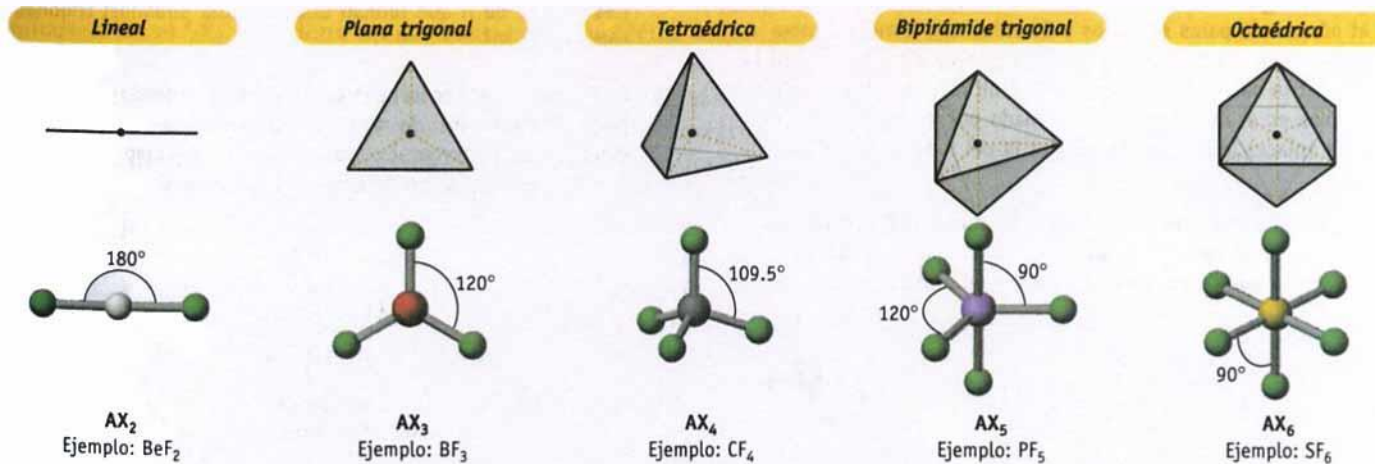


Gillespie, R. J.; Humphreys, D. A.; Baird, N. C.; Robinson, E. A., "Química", Vol I, Reverté, 1990, pp 348.

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°	BeF ₂	
AX ₃	Trigonal plana	120°	BF ₃	
AX ₄	Tetraédrica	109,5°	CH ₄	
AX ₅	Bipiramidal trigonal	90° 120° 180°	PF ₅	
AX ₆	Octaédrica	90° 180°	SF ₆	

AX₂
Lineal

AX₃ / AX₂E
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

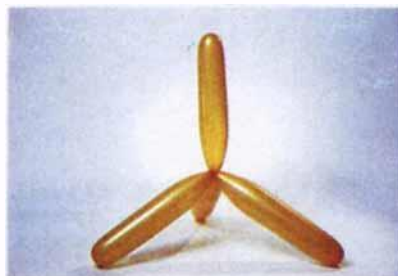
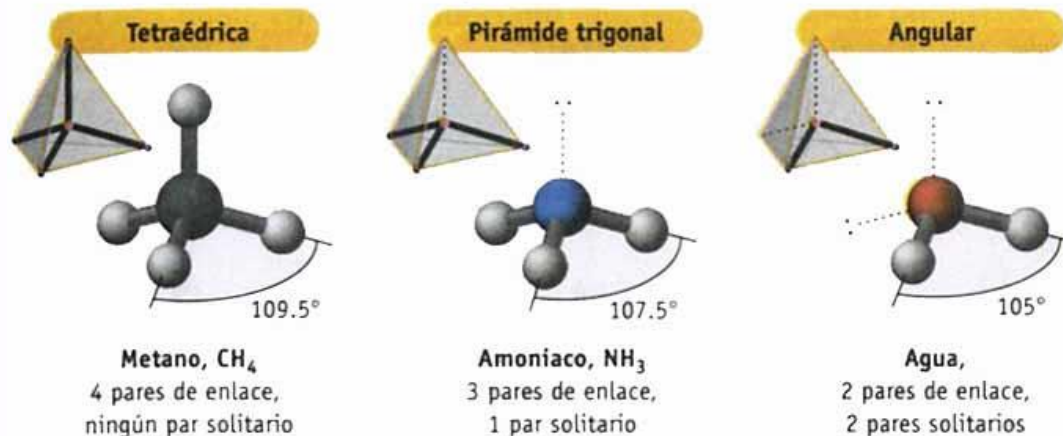


Tetraédrica / Pirámide trigonal / Angular

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

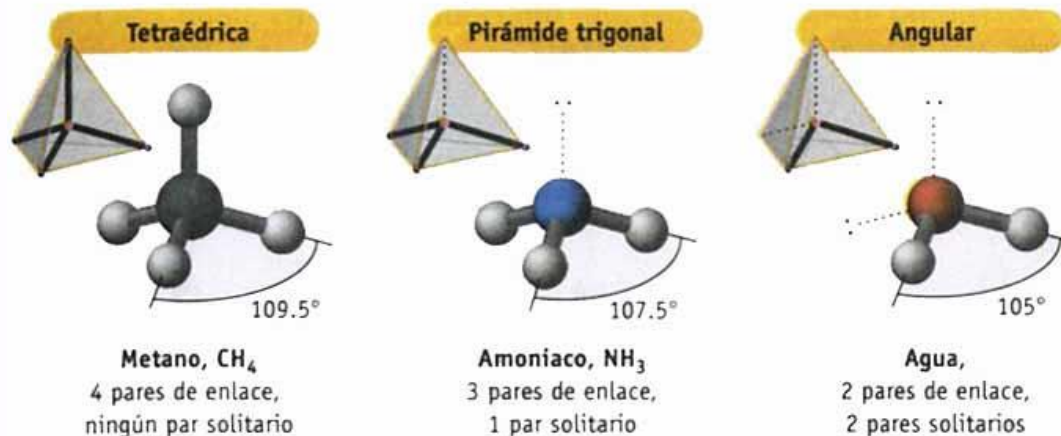


Tetraédrica / Pirámide trigonal / Angular

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
NH_3	107°
PH_3	93,3°
AsH_3	91,5°
SbH_3	91,3°

Molécula	Angulo
H_2O	104,5°
H_2S	92,2°
H_2Se	91,0°
H_2Te	89,5°

Molécula	Angulo
NH_3	107°
NF_3	102°

Molécula	Angulo
H_2O	104,5°
OF_2	102,0°

Para casa

Justificar las variaciones de ángulos indicados en estas tablas

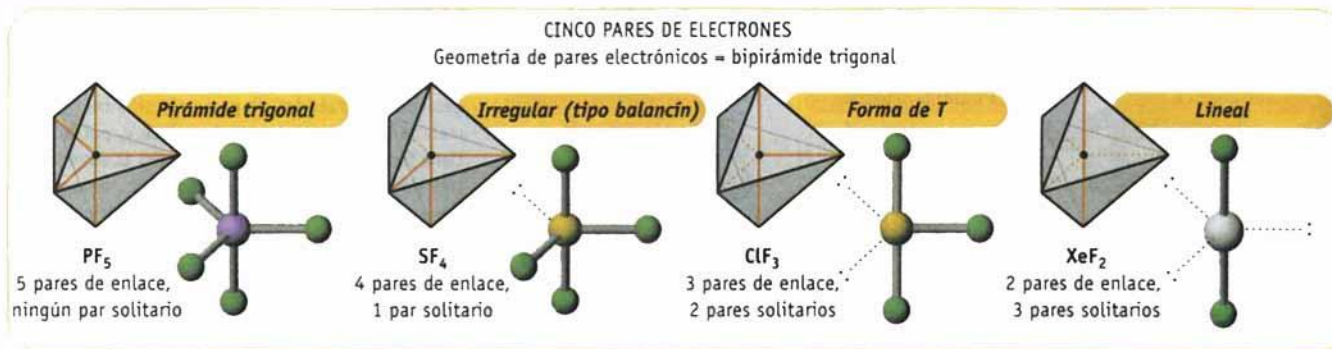
Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

AX₅ / AX₄E / AX₃E₂ / AX₂E₃

Bipirámide trigonal / disfenoidal / en T / lineal



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



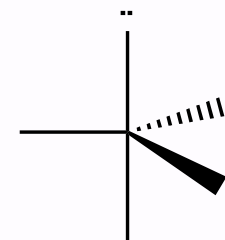
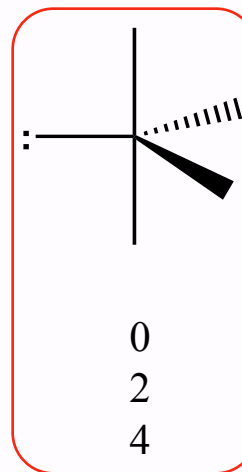
Masterton, W. L.; Hurley, C. N., "Principios y Reacciones", 4ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 193.

Tipo de molécula	Estructura	Descripción
AX ₅		Bipirámide triangular
AX ₄ E		Tetraedro deformado (balancín)

PS/PS
PS/PE
PE/PE

0
2
4

0
3
3



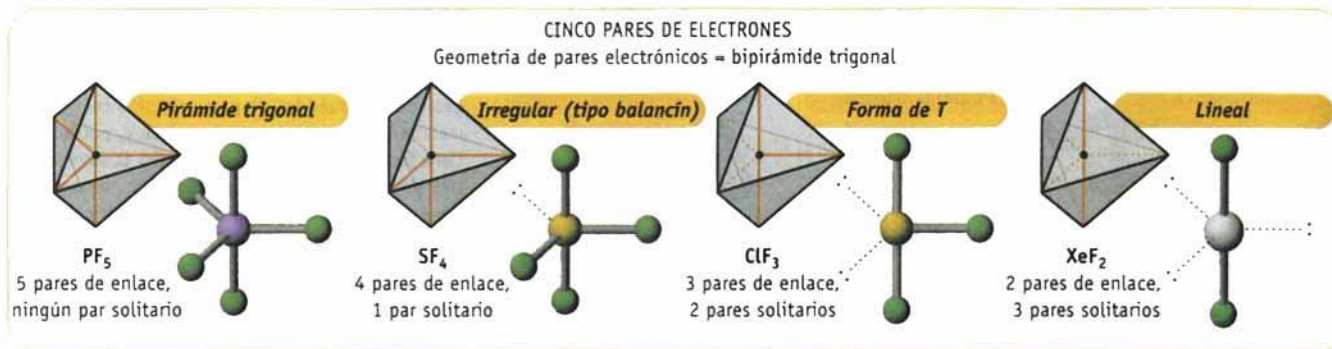
Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

AX₅ / AX₄E / AX₃E₂ / AX₂E₃

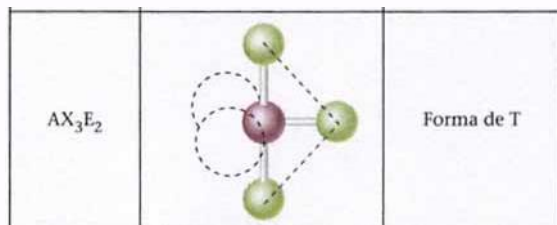
Bipirámide trigonal / disfenoidal / en T / lineal



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.



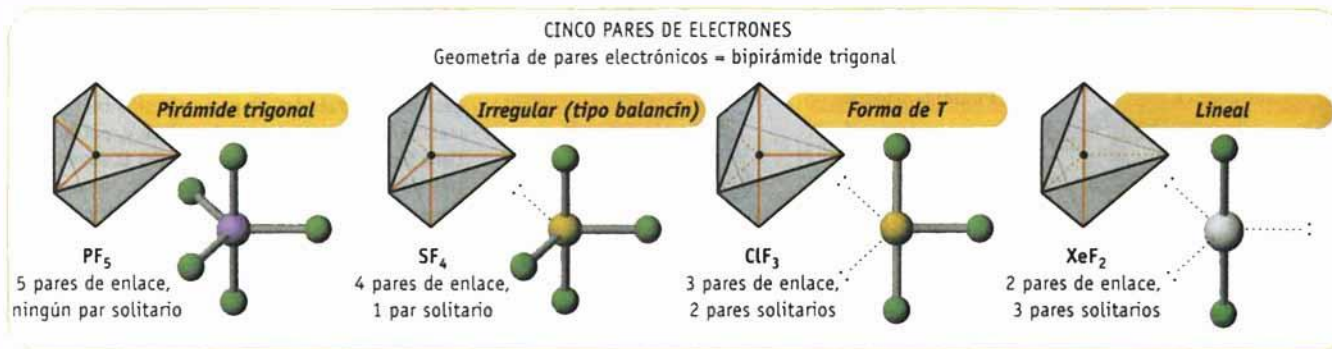
PS/PS	1	0	0
PS/PE	3	4	6
PE/PE	2	2	0

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

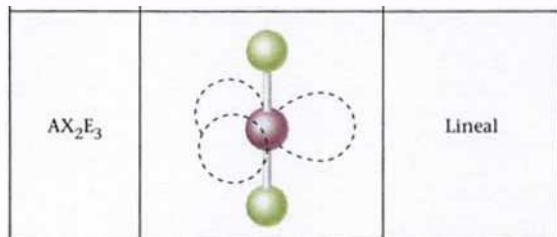
AX_5 / AX_4E / AX_3E_2 / AX_2E_3

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

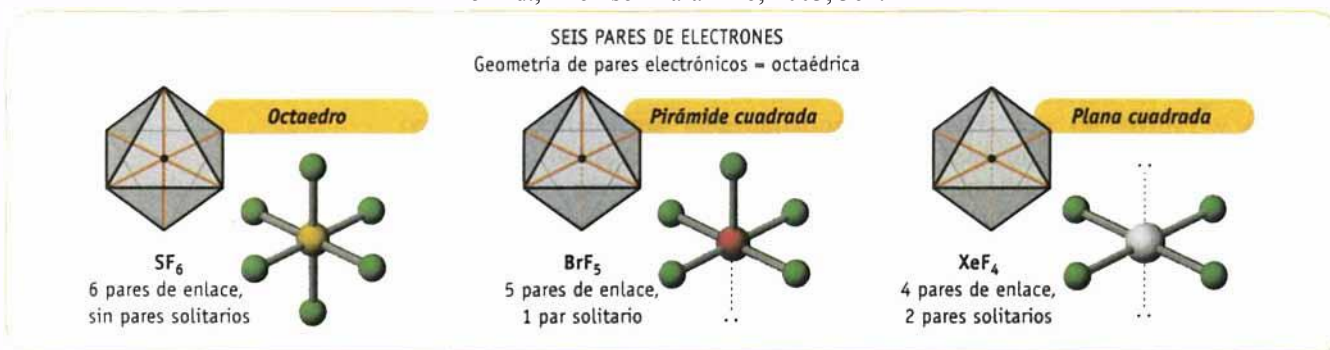
Modelo de Repulsión entre Pares de Electrones de la Capa de Valencia VSEPR

AX_6 / AX_5E / AX_4E_2

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.

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 σ = PE

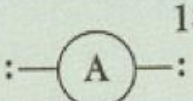
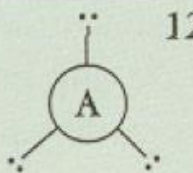
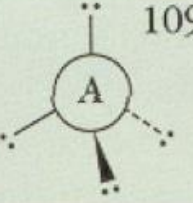
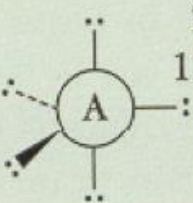
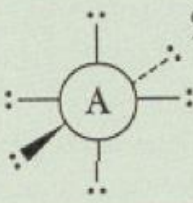
} N° OH = Hibrid. = Estereoquímica

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		AX_2	Lineal	BeH_2, BeF_2
3		AX_3	Triangular	BF_3
4		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		AX_5	Bipirámide triangular	PCl_5
6		AX_6	Octaédrica	SF_6