

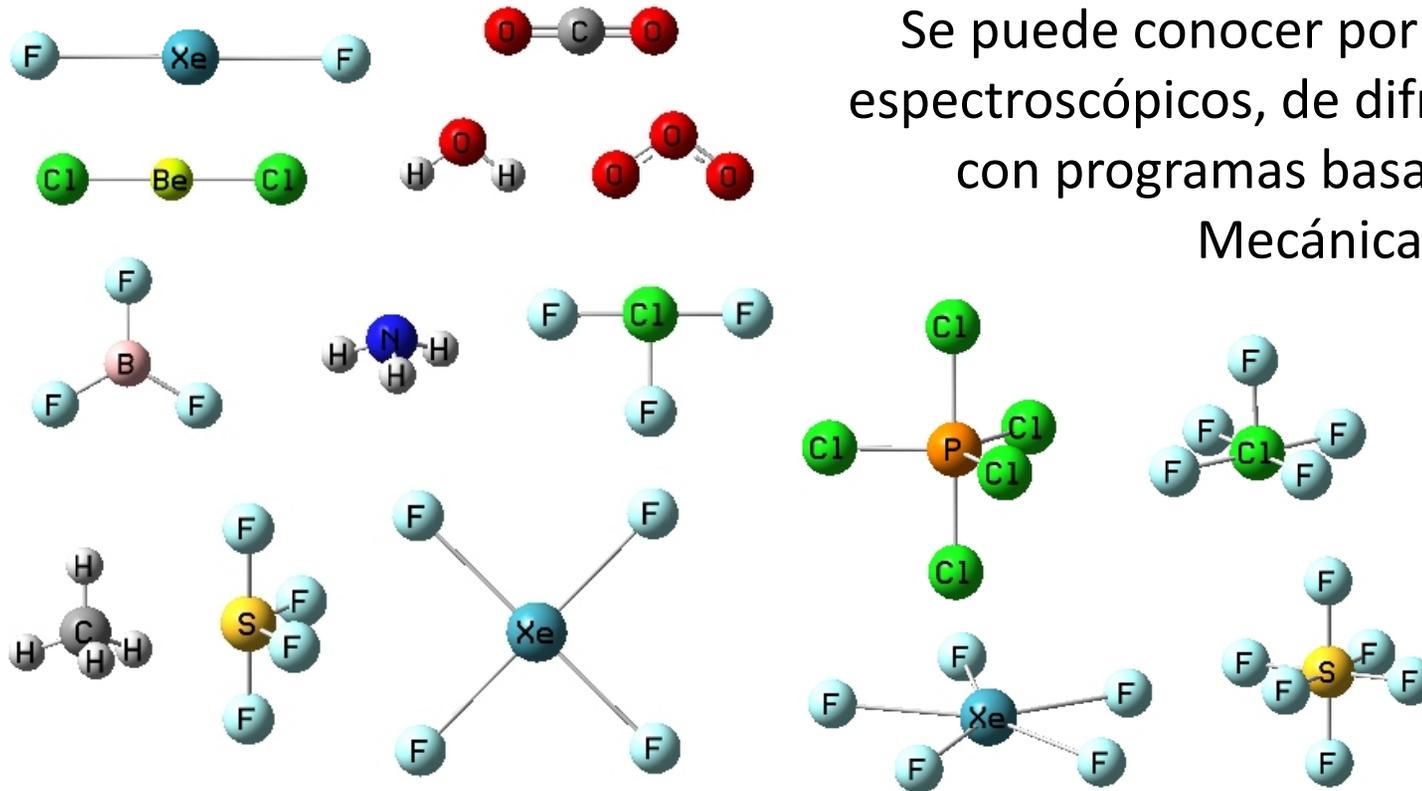
## GEOMETRÍA MOLECULAR Y TEORÍA DE ENLACE

- Modelo de repulsión de pares de electrones en la capa de valencia
- Forma molecular y polaridad molecular
- Teoría de enlace de valencia
- Hibridación de orbitales y enlaces múltiples

Geometría molecular:

Es el arreglo, en tres dimensiones, de los átomos que constituyen a una molécula.

Determina las propiedades de un compuesto como reactividad, polaridad, estado, color, magnetismo, actividad biológica...



Se puede conocer por métodos espectroscópicos, de difracción, y con programas basados en la Mecánica Cuántica

*En el marco de la teoría RPECV se asume que:*

- Los átomos en los sistemas moleculares se mantienen enlazados mediante pares electrónicos.
- El enlace puede formarse por más de un par electrónico (enlaces múltiples).
- Algunos átomos pueden tener asociados pares de electrones que no están involucrados en ningún enlace (pares libres).
- Los pares de electrones enlazantes y los pares libres adoptan posiciones en las cuales sus interacciones sean mínimas.
- Los pares de electrones libres ocupan más espacio que los pares de electrones enlazantes.
- Los enlaces dobles ocupan más espacio que los enlaces simples.

*Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)*

Explica la distribución geométrica basándose en la repulsión que ocurre entre los pares electrónicos alrededor del átomo central .

El par de electrones del enlace o del par solitario se toma como un todo electrostático.

La disposición espacial de mínima energía es aquella que minimiza las interacciones electrostáticas repulsivas, de manera que determina la mayor separación física entre las cargas eléctricas del mismo signo.

Considera tres tipos de interacciones entre los pares electrónicos de una molécula:

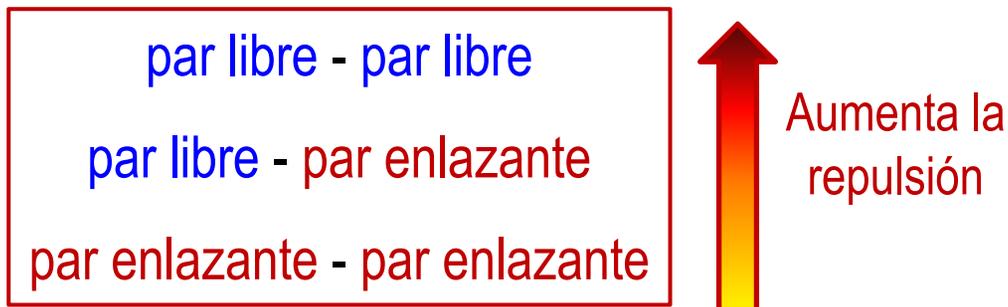
Repulsión **par libre** - **par libre**

Repulsión **par libre** - **par enlazante**

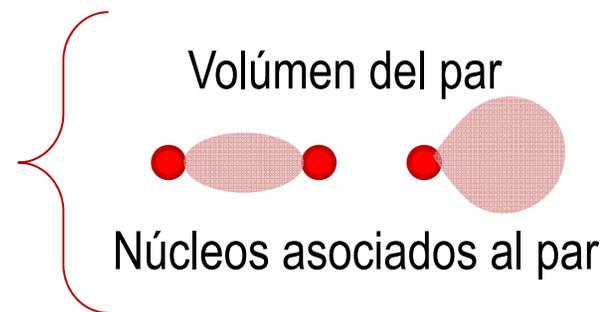
Repulsión **par enlazante** - **par enlazante**

Reglas para la aplicación de la RPECV:

(I) Los pares de electrones libres repelen a otros pares electrónicos más fuertemente que los pares enlazantes.

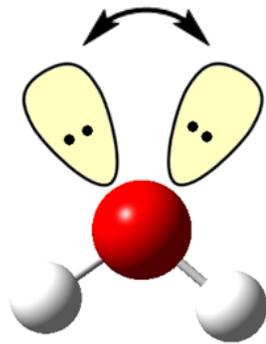


Un par libre se encuentra atraído unido a un solo núcleo, por lo que puede expandirse más que un par enlazante que se encuentra unido a dos núcleos.



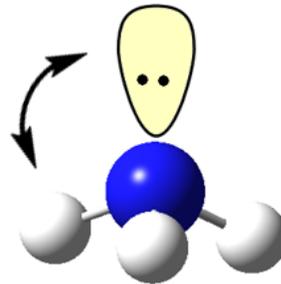
**Reglas para la aplicación de la RPECV:**

(I) Los pares de electrones libres repelen a otros pares electrónicos más fuertemente que los pares enlazantes.



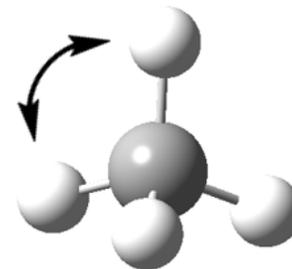
**H<sub>2</sub>O** 104.5°

par libre  
par libre



**NH<sub>3</sub>** 106.7°

par libre  
par enlazante



**CH<sub>4</sub>** 109.5°

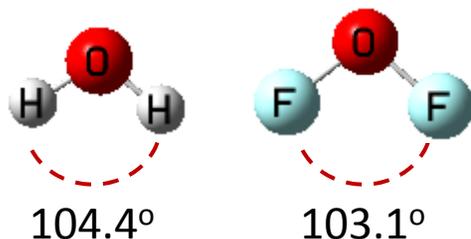
par enlazante  
par enlazante

Los ángulos de enlace disminuyen a medida que aumentan el número de pares de electrones no enlazantes. Los pares de electrones no enlazantes ejercen fuerzas de repulsión sobre los pares de electrones adyacentes y tienden a comprimir los ángulos de enlace entre los pares de electrones enlazantes.

Reglas para la aplicación de la RPECV:

(II) La repulsión entre pares de e- compartidos disminuye con el aumento de la electronegatividad del ligante, X.

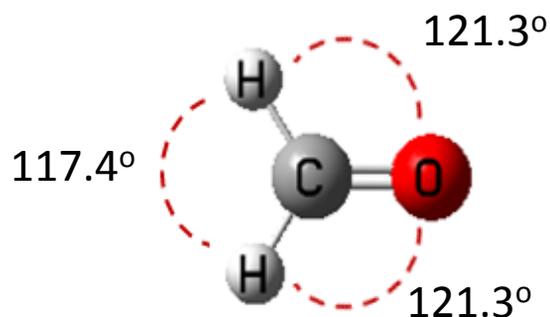
En la medida que aumenta la diferencia de electronegatividad entre el átomo central y el ligante X, el par de electrones enlazante será más fuertemente atraído hacia el ligante quedando más cercano a este último. Esto hace que mientras mayor sea la electronegatividad de X menor será el volumen de la densidad electrónica alrededor del átomo central.



La diferente polarización de los enlaces OH y OF hace que los pares enlazantes estén más lejos del átomo central en el  $\text{OF}_2$  lo que disminuye las repulsiones y permite un ángulo de enlace más cerrado.

**Reglas para la aplicación de la RPECV:**

(III) La repulsión de pares de electrones compartidos en un enlace múltiple es mayor que la de pares de electrones compartidos en enlaces simples.

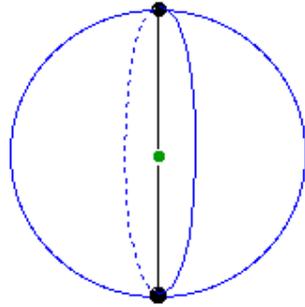


La densidad electrónica de los enlaces múltiples (dobles o triples) ocupa mayor volumen que la de los enlaces sencillos. Por tanto la repulsión entre un enlace múltiple y uno sencillo es siempre mayor que la que hay entre dos enlaces sencillos.

Es necesario conocer cuales son los arreglos geométricos más probables para cada número de pares de electrones asociados a un átomo.

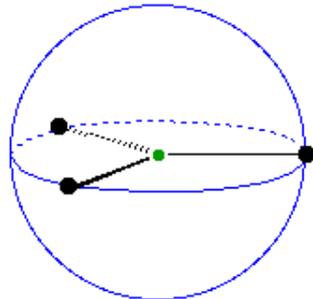
Para esto nos imaginamos al núcleo del átomo en el centro de una esfera y ubicamos los pares de electrones sobre la superficie de esta esfera de modo que queden lo más alejados posible entre sí.

Si tenemos solamente 2 pares de electrones:



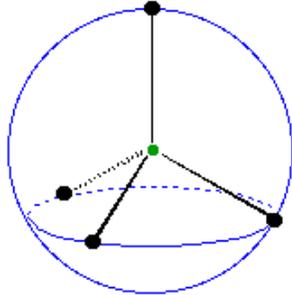
El ángulo entre los pares electrónicos sería de  $180^\circ$  y la geometría de coordinación del átomo central sería lineal

Para 3 pares de electrones:



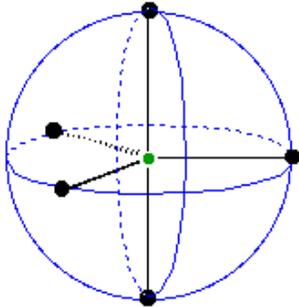
El ángulo entre los pares electrónicos sería de  $120^\circ$  y la geometría de coordinación del átomo central sería trigonal plana

Para 4 pares de electrones:



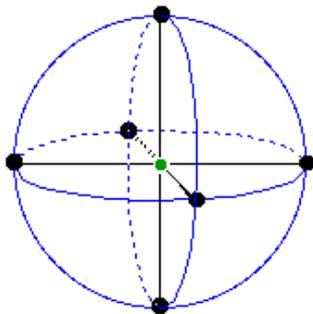
El ángulo entre los pares electrónicos sería de  $109^\circ$  y la geometría de coordinación del átomo central sería tetrahédrica.

Para 5 pares de electrones:



El ángulo entre los pares electrónicos sería de  $90^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$  y la geometría de coordinación del átomo central sería bipirámide trigonal.

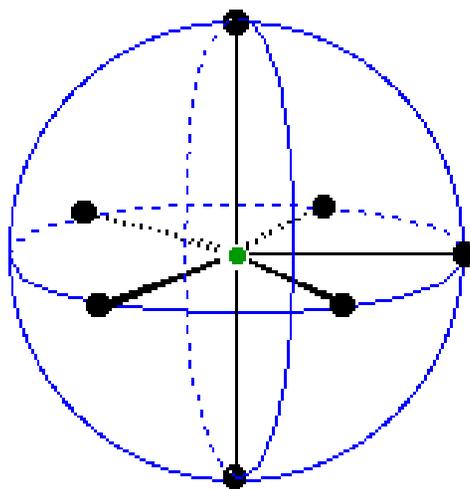
Para 6 pares de electrones:



El ángulo entre los pares electrónicos sería de  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ , y la geometría de coordinación del átomo central sería octahédrica.

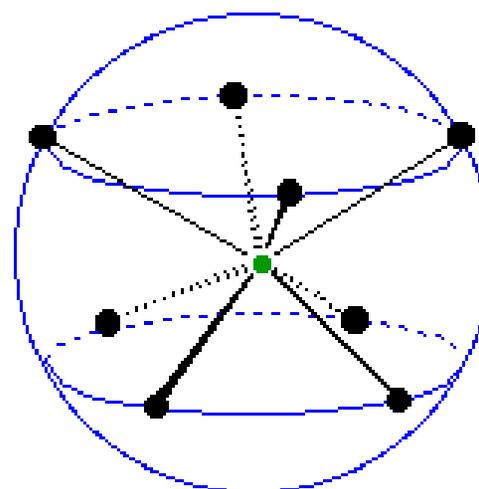
Cuando el número de pares electrónicos asociados al átomo central es mayor que seis, las conformaciones son mucho más complicadas, sin embargo el mismo tratamiento funciona para predecir geometrías

7 pares



Pirámide pentagonal

8 pares

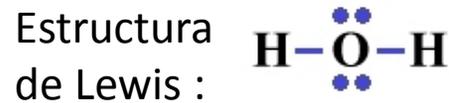


Prisma cuadrado

## Clasificación AXE:

1. Escribir la estructura de Lewis de la molécula.
2. Contar el número de átomos enlazados (**X**) al átomo central (**A**)
3. Contar el número de pares libres (**E**) sobre el átomo.
4. Calcular el número estérico (**X+E**)
4. Usar el modelo RPECV para predecir la distribución espacial de todos los pares electrónicos (según X+E) y la geometría de la molécula (según X).

Ejemplo: (H<sub>2</sub>O)



X+E = número estérico

## Análisis:

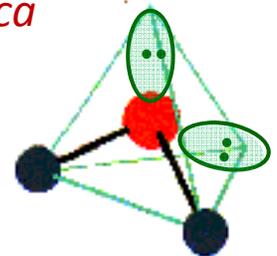
Número de átomos enlazados (o pares enlazantes): **X=2**

Número de pares libres: **E=2**      **AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>**

X=2, E=2, X+E=4

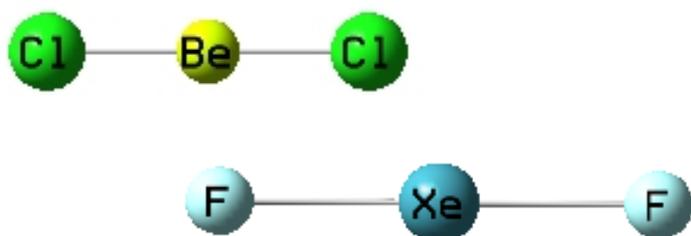
4 objetos a distribuir en el espacio alrededor del átomo central.

También conocida como *geometría electrónica* → *distribución espacial de pares e<sup>-</sup> (X+E=4): tetrahédrica*  
*geometría molecular (X=2): angular*

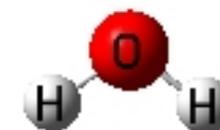
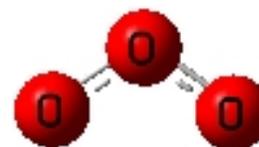


Geometrías moleculares:

Átomo central unido a **dos** átomos:



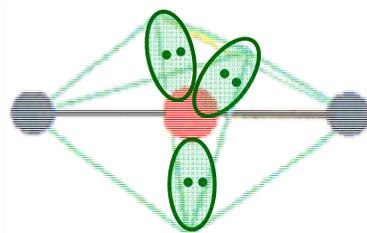
Lineal



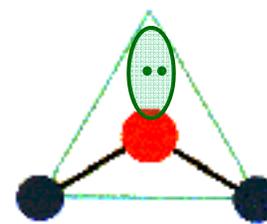
Angular



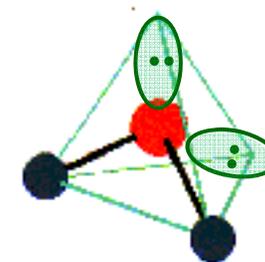
AX<sub>2</sub>



AX<sub>2</sub>E<sub>3</sub>



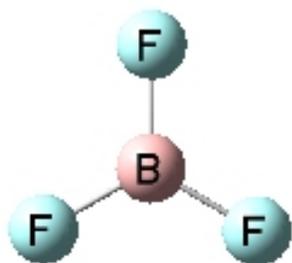
AX<sub>2</sub>E



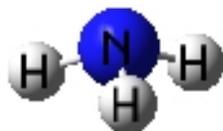
AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>

Geometrías moleculares:

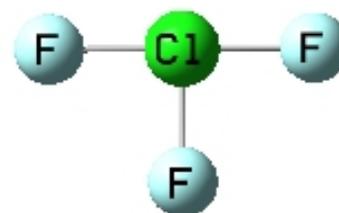
Átomo central unido a **tres** átomos:



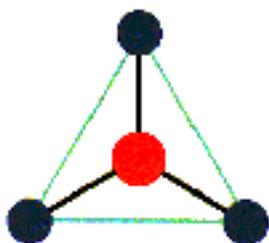
*Trigonal plana*



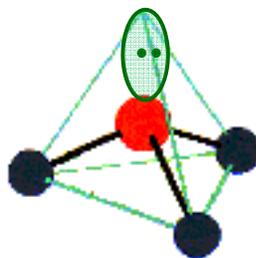
*Pirámide trigonal*



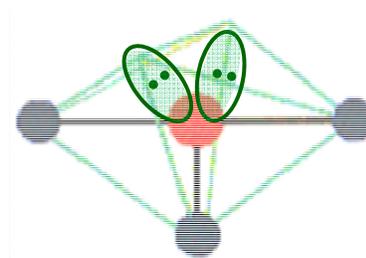
*Forma T*



**AX<sub>3</sub>**



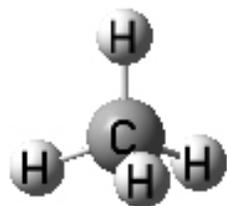
**AX<sub>3</sub>E**



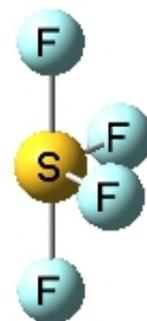
**AX<sub>3</sub>E<sub>2</sub>**

Geometrías moleculares:

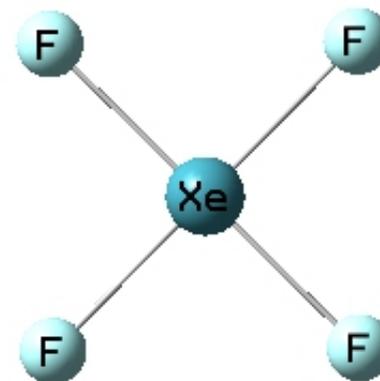
Átomo central unido a **cuatro** átomos:



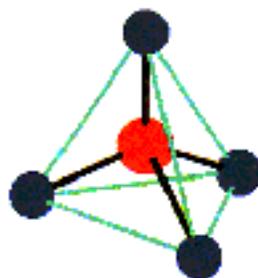
*Tetraédrica*



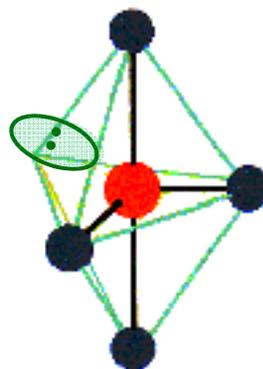
*Balancín  
(Tetraedro distorsionado)*



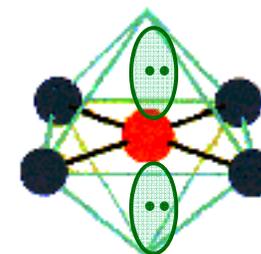
*Tetraogonal plana*



$AX_4$



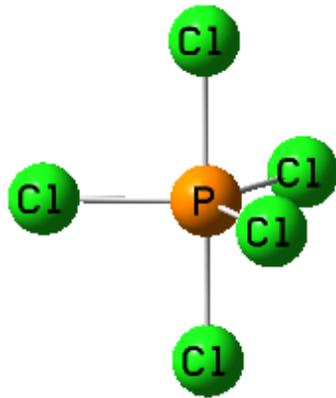
$AX_4E$



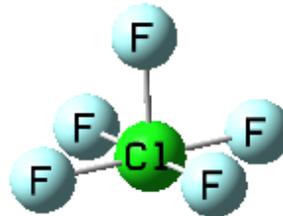
$AX_4E_2$

Geometrías moleculares:

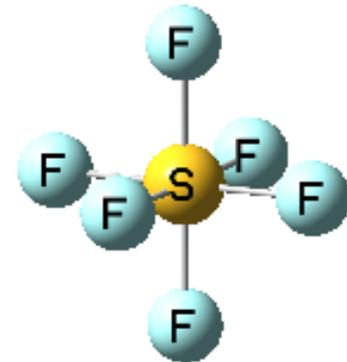
Átomo central unido a **cinco** átomos:



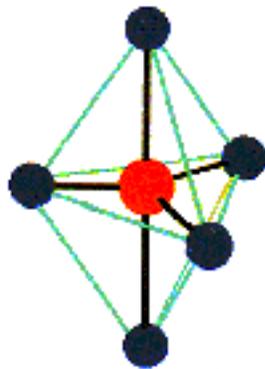
*Bipirámide trigonal*



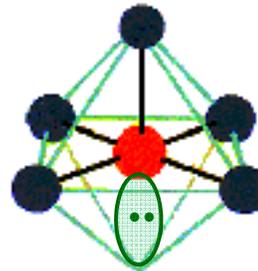
*Pirámide tetragonal*



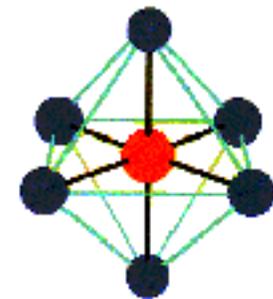
*Octaédrica*



**AX<sub>5</sub>**



**AX<sub>5</sub>E**



**AX<sub>6</sub>**

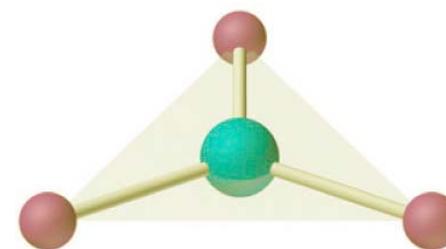
*Geometrías moleculares más comunes (fundamentales):*



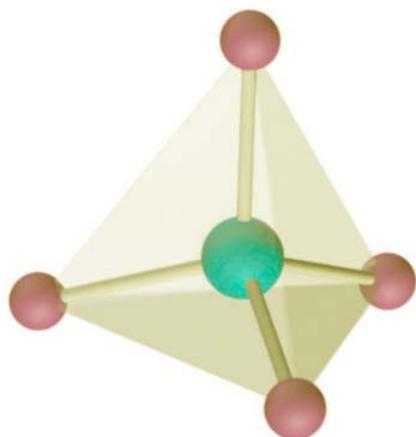
*Lineal*



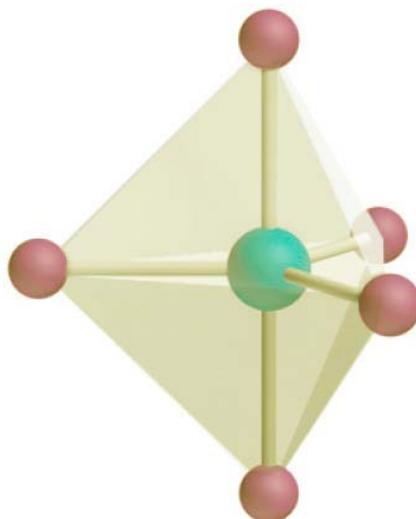
*Angular*



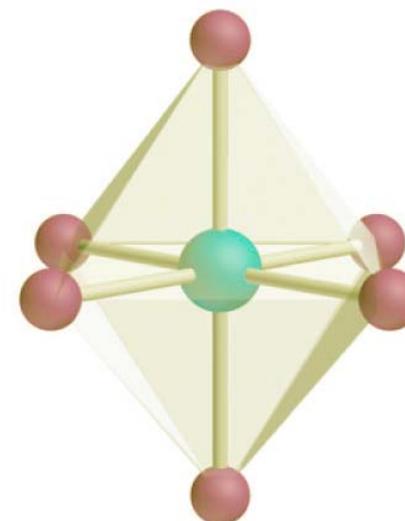
*Trigonal plana*



*Tetraédrica*



*Bipirámide trigonal*



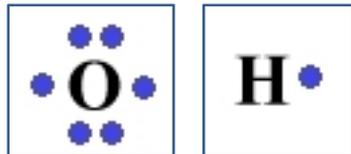
*Octaédrica*

*Modelo de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (RPECV)*

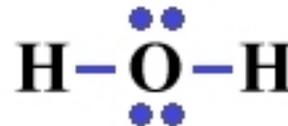
1. Escribir la estructura de Lewis de la molécula.
2. Contar el número de pares de electrones que rodean al átomo central (pares enlazantes y pares libres).
3. Usar el modelo RPECV para predecir la geometría de la molécula.

Ejemplo:

Átomos libres:



Molécula:

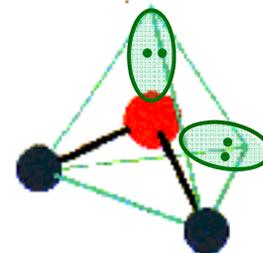


Análisis:

Número de pares enlazantes: **2**

Número de pares libres: **2**

**AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>**



*Angular*



## PROBLEMARIO

### UNIDAD 4

#### MODELO DE REPULSIÓN DE PARES

- 4.- Qué geometría molecular esperarías si en la capa de valencia del átomo central se encuentran:
- 3 enlaces y un par libre.
  - 4 enlaces y dos pares libres.
  - 2 enlaces y dos pares libres.
- 5.- Con los criterios de T.R.P.E.C.V. indica la geometría molecular para:
- |                           |                       |                      |                      |
|---------------------------|-----------------------|----------------------|----------------------|
| a) $\text{GaI}_3$ .       | f) $\text{CF}_4$ .    | k) $\text{BF}_4^-$ . |                      |
| b) $\text{SbCl}_5$ .      | g) $\text{NH}_4^+$ .  | l) $\text{TeCl}_4$ . | o) $\text{SO}_3$ .   |
| c) $\text{TeCl}_6$ .      | h) $\text{IF}_5$ .    | m) $\text{I}_3^-$ .  | p) $\text{CHCl}_3$ . |
| d) $\text{H}_2\text{S}$ . | i) $\text{ICl}_4^-$ . | n) $\text{PF}_6^-$ . |                      |
| e) $\text{NH}_3$ .        | j) $\text{SiF}_4$ .   |                      |                      |
- 6.- Considera las moléculas  $\text{CS}_2$ ,  $\text{ClO}_2^-$  y  $\text{S}_3^{2-}$ . ¿Cuál presenta una geometría lineal y a cuál corresponde una geometría angular?
- 7.- Utilizando la teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia, determina la estructura de las moléculas siguientes:
- $\text{CH}_4$ .
  - $\text{NH}_3$ .
  - $\text{H}_2\text{O}$ .
- Compara los valores de los ángulos de enlace y discute la tendencia observada.

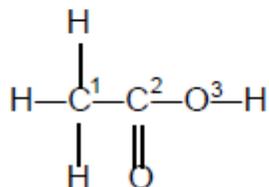


## PROBLEMARIO

### UNIDAD 4

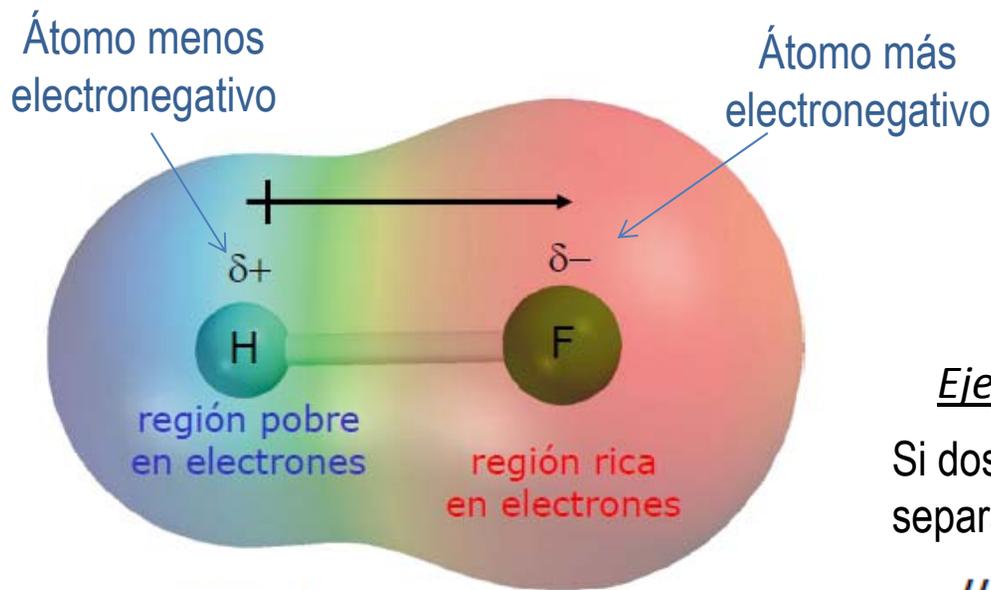
#### MODELO DE REPULSIÓN DE PARES

- 8.- El ángulo de enlace observado para los hidruros  $\text{PH}_3$ ,  $\text{AsH}_3$  y  $\text{SbH}_3$  tiene un valor de  $94^\circ$ ,  $92^\circ$  y  $91^\circ$ , respectivamente. ¿A qué atribuyes que los ángulos de enlace tengan valores diferentes?
- 9.- Describe la geometría molecular alrededor de cada uno de los tres átomos centrales (marcados con los números 1, 2 y 3) en la molécula



Momento dipolar y moléculas polares:

La polaridad de una molécula puede cuantificarse por el valor del dipolo. La medida cualitativa de la magnitud de un dipolo se conoce como momento dipolar  $\mu$ .



$$\mu = Q \times r$$

$Q$  es la carga

$r$  es la distancia entre las cargas

Los momentos dipolares se reportan de debyes (D).

$$1D = 3.36 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

Para moléculas medimos  $Q$  en unidades de carga electrónica  $e$ ,

$$1.60 \times 10^{-19} \text{ C},$$

y la distancia en angstroms (Å)

$$1\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$$

Ejemplo:

Si dos cargas,  $1+$  y  $1-$  (en unidades de  $e$ ) están separadas por  $1.00\text{Å}$ , el momento dipolar producido es:

$$\begin{aligned} \mu &= Qr \\ &= (1.60 \times 10^{-19} \text{ C}) \left( 1.00 \overset{\circ}{\text{Å}} \right) \left( \frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{Å}}} \right) \left( \frac{1D}{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}} \right) \\ &= 4.79D \end{aligned}$$

Momento dipolar y moléculas polares:

Ejemplos:

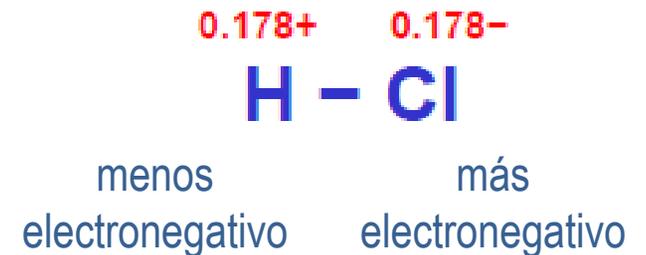
1.-La longitud de enlace de la molécula HCl es 1.27Å. Calcula el momento dipolar resultante si las cargas de los átomos fuesen +1 y -1.

$$\mu = Qr = (1.60 \times 10^{-19} \text{ C}) \left( 1.27 \overset{\circ}{\text{Å}} \right) \left( \frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{Å}}} \right) \left( \frac{1 \text{ D}}{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}} \right) = 6.08 \text{ D}$$

2.-El momento dipolar del HCl(g) experimental es de 1.08D. ¿qué carga tienen los átomos?

$$Q = \frac{\mu}{r} = \frac{(1.08 \text{ D}) \left( \frac{3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}}{1 \text{ D}} \right)}{\left( 1.27 \overset{\circ}{\text{Å}} \right) \left( \frac{10^{-10} \text{ m}}{1 \overset{\circ}{\text{Å}}} \right)} = 2.84 \times 10^{-20} \text{ C}$$

$$\text{carga en } e = \left( 2.84 \times 10^{-20} \text{ C} \right) \left( \frac{1e}{1.60 \times 10^{-19} \text{ C}} \right) = 0.178e$$



*Polaridad de enlace y polaridad molecular:*

Es una medida de cuan equitativamente se comparten los electrones del enlace entre los átomos que lo forman.

En la medida en que aumenta la diferencia de electronegatividad entre los átomos también aumenta la polaridad del enlace.

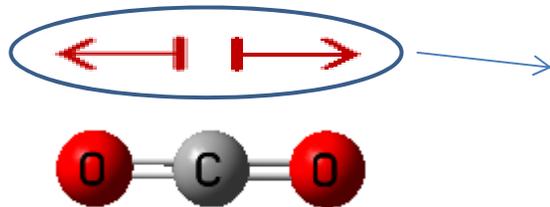
Para cada enlace polar el momento dipolar es un vector que apunta hacia el átomo más electronegativo.

Mientras más polar sea el enlace mayor será el momento dipolar asociado al enlace (mayor la magnitud del vector  $\mu$ )

El momento dipolar de las moléculas depende de la polaridad de todos sus enlaces individuales y de la geometría de la molécula.

Ejemplo:

CO<sub>2</sub>



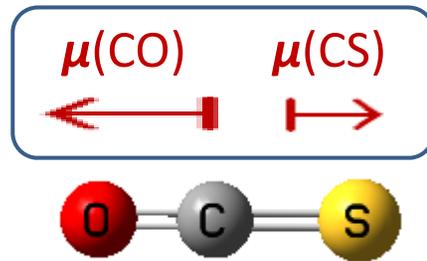
Dipolos de enlace de igual magnitud y dirección opuesta (se cancelan entre sí)

Momento dipolar de la molécula = 0

Molécula no polar

Polaridad de enlace y polaridad molecular:

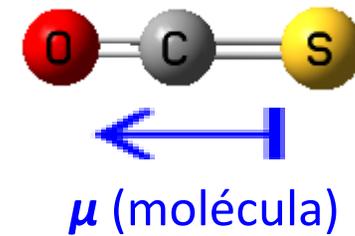
La molécula  $O=C=S$ , tiene una estructura de Lewis análoga a al del  $CO_2$  y es una molécula lineal. ¿Tendrá un momento dipolar igual a cero como el  $CO_2$ ?



Dirección opuesta pero dipolos de enlace de diferente magnitud (NO se cancelan entre sí)

Mayor diferencia de electronegatividad entre C y O  
Dipolo de mayor magnitud

Menor diferencia de electronegatividad entre C y S  
Dipolo de menor magnitud



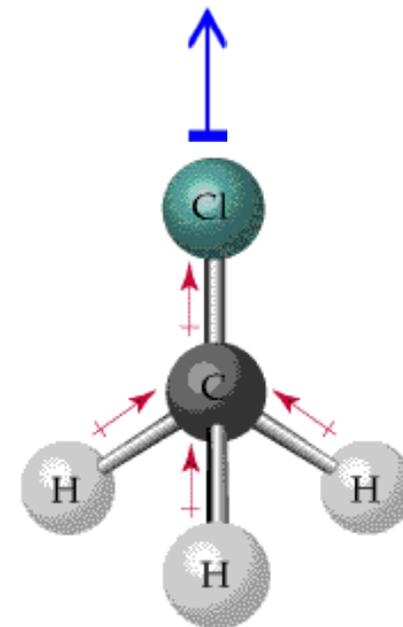
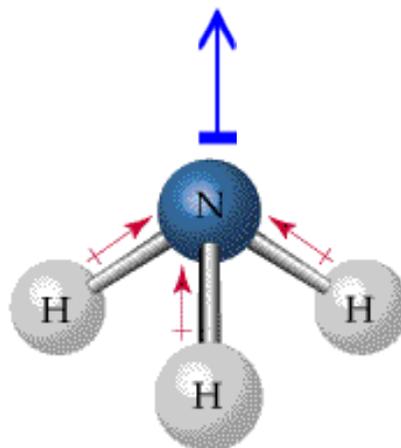
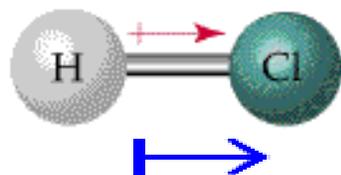
Resultado de la suma de los vectores  $\mu$  de todos los dipolos de enlace

Momento dipolar de la molécula  $\neq 0$

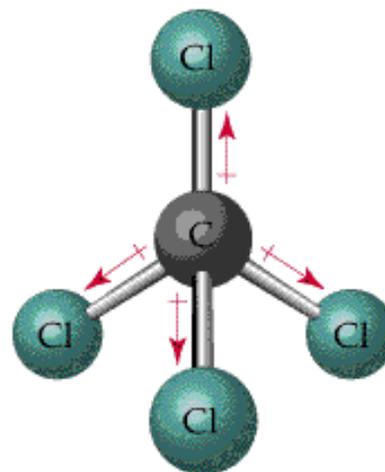
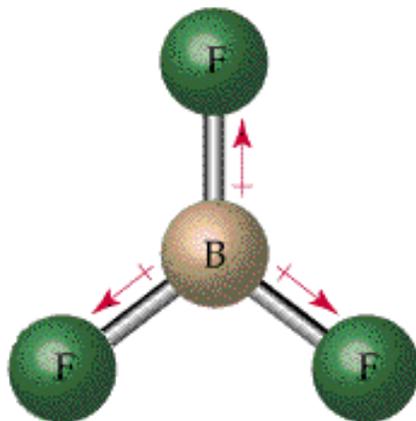
**Molécula polar**

*Polaridad de enlace y polaridad molecular:*

Moléculas polares:

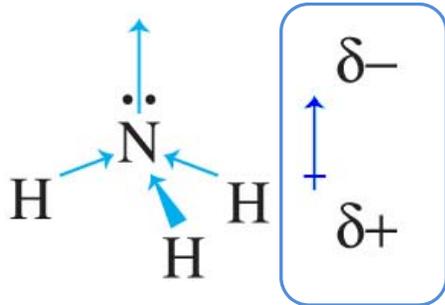


Moléculas no polares:

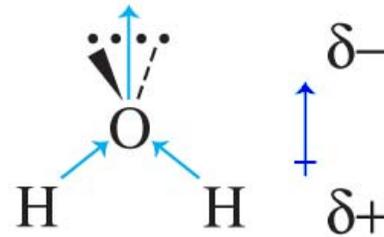


Polaridad de enlace y polaridad molecular:

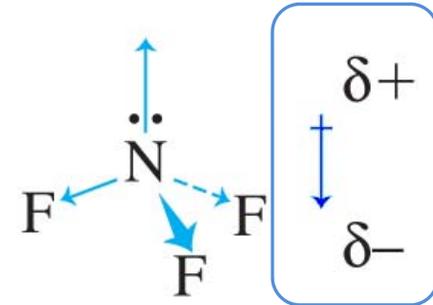
Moléculas polares:



Net dipole, 1.47 D



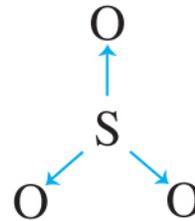
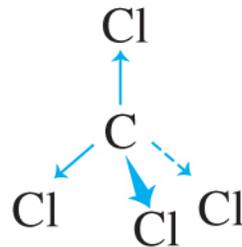
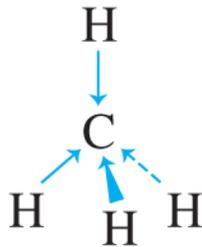
Net dipole, 1.85 D



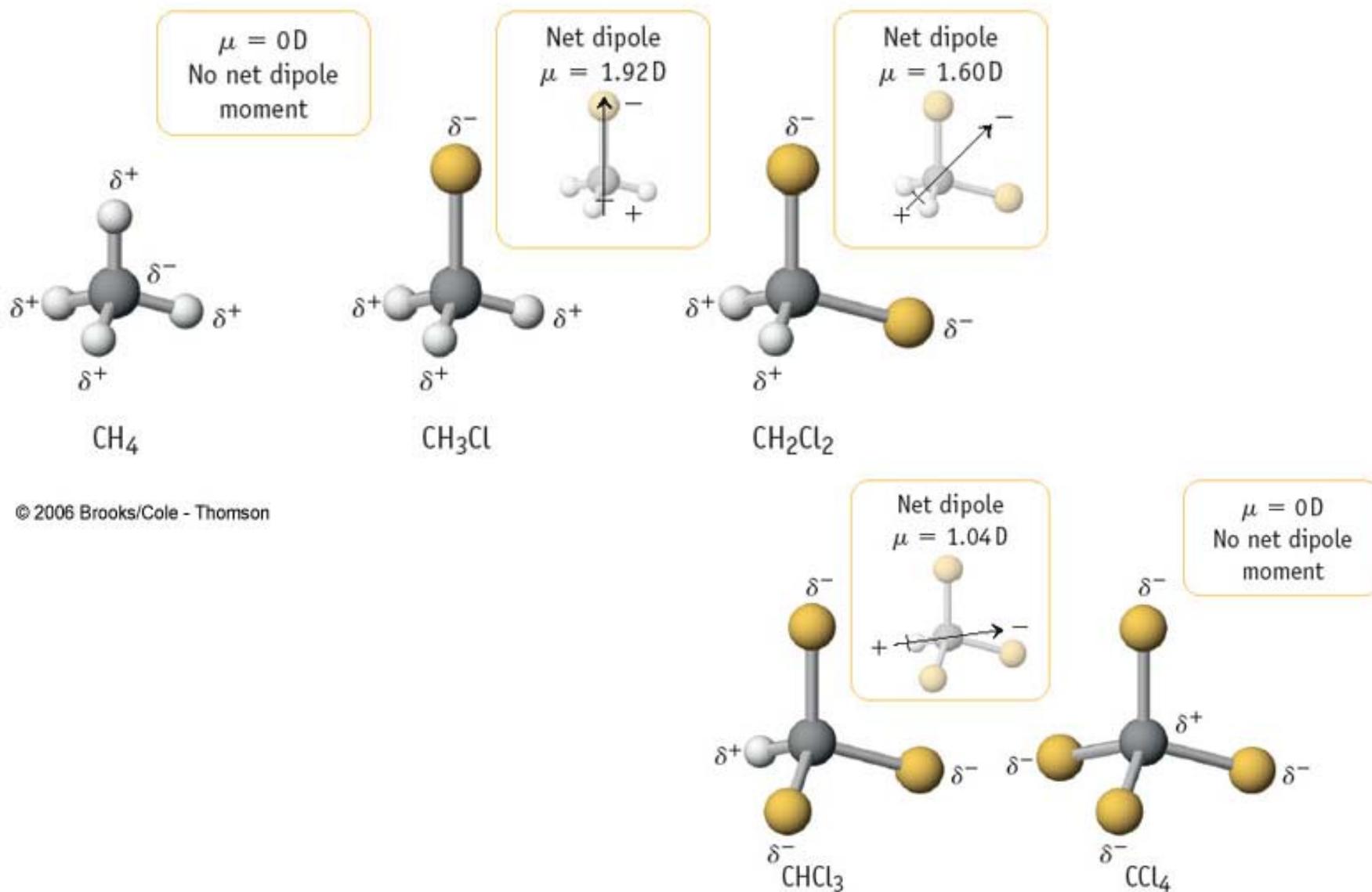
Net dipole, 0.23 D

© 2011 Pearson Education, Inc.

Moléculas no polares:

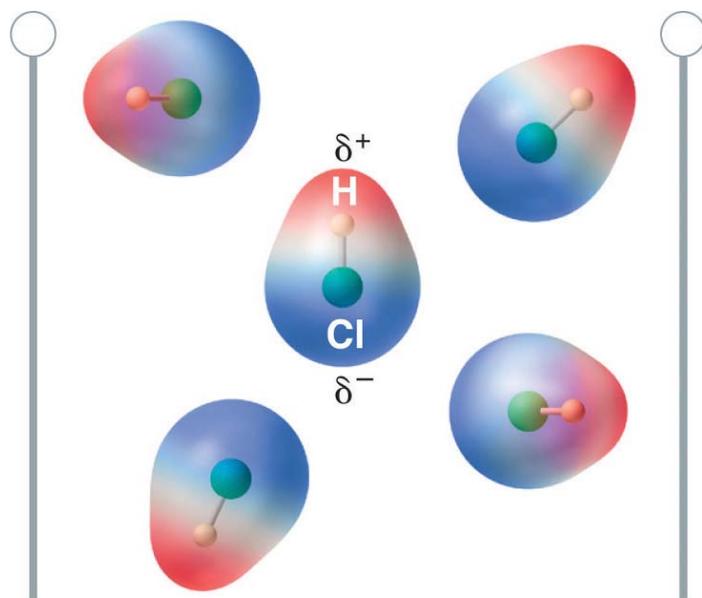


*Polaridad de enlace y polaridad molecular:*

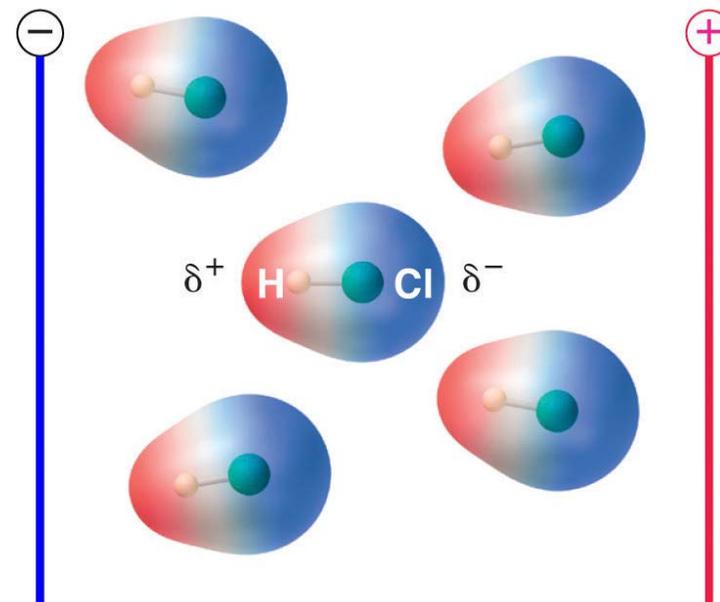


Moléculas Polares:

Ausencia de campo  
eléctrico externo

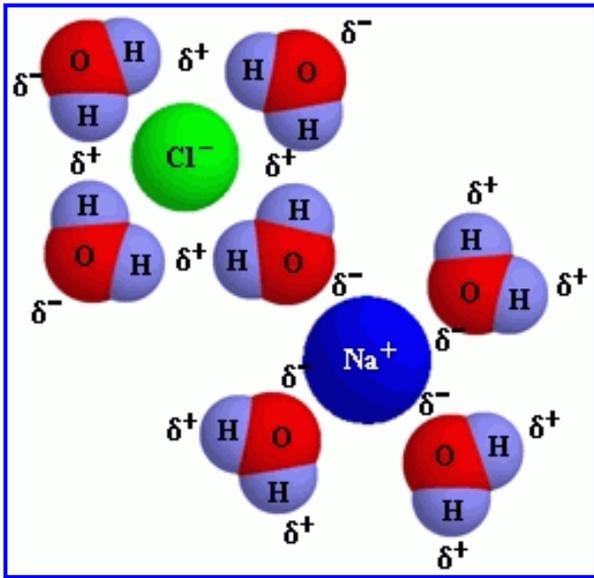
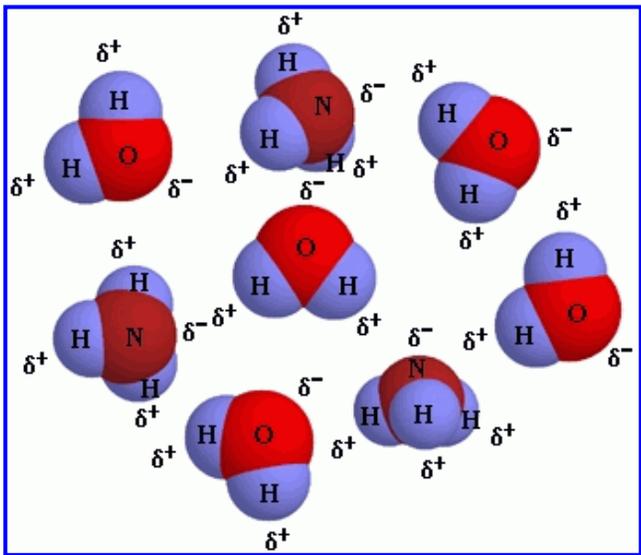
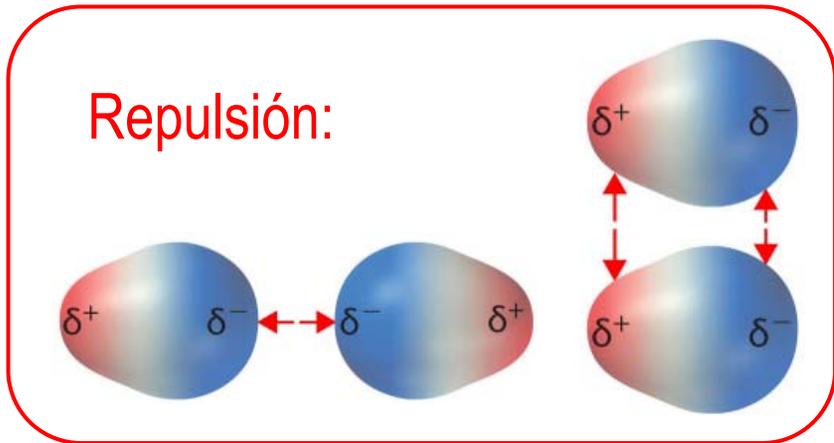
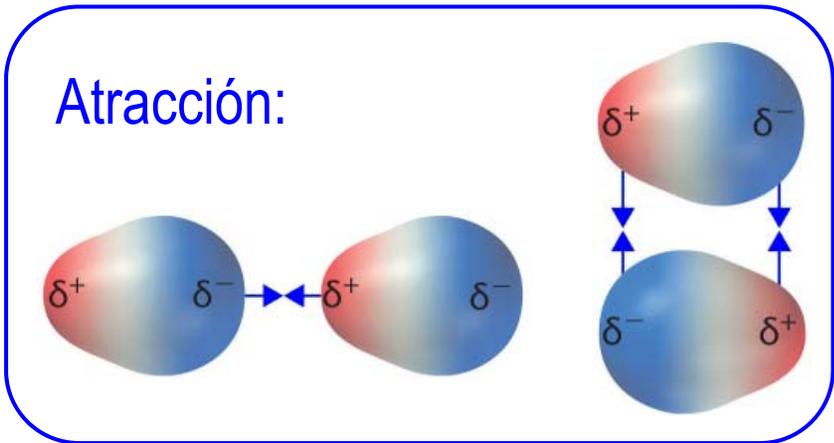


Presencia de campo  
eléctrico externo



Orientación

Moléculas Polares:







## PROBLEMARIO

### UNIDAD 4

#### FORMA MOLECULAR Y POLARIDAD

12.-

- ¿Qué diferencia hay entre una molécula polar y una no polar?
- Ciertos átomos X y Y tienen diferente electronegatividad. Indica si la molécula diatómica X-Y es necesariamente polar. Justifica tu respuesta
- ¿qué factores afectan la magnitud del momento dipolar de una molécula diatómica?

13.- Indica si las siguientes moléculas son polares o no polares:

- $\text{CCl}_4$ .
- $\text{CS}_2$ .
- $\text{SO}_3$ .
- $\text{SF}_4$ .
- $\text{NF}_3$ .
- $\text{PF}_5$ .

14.- La molécula de  $\text{PF}_3$  tiene un momento dipolar de 1.03 Debyes, pero  $\text{BF}_3$  tiene un momento dipolar de cero. ¿Cómo podrías explicar esta diferencia?

15.- Ordena las siguientes moléculas en orden creciente de momento dipolar:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CBr}_4$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , y  $\text{CO}_2$

Teoría de Enlace de Valencia

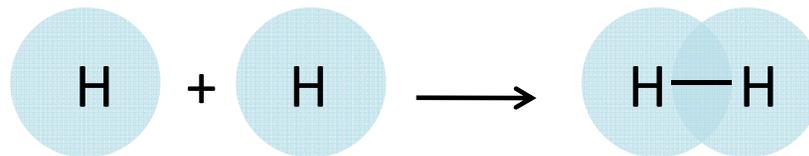
Teoría de Lewis:

El enlace covalente se forma cuando dos átomos comparten pares de electrones.

Teoría de enlace de valencia: el enlace covalente se forma cuando un orbital de valencia de un átomo se traslapa (comparte una región del espacio) con un orbital de valencia del otro átomo.

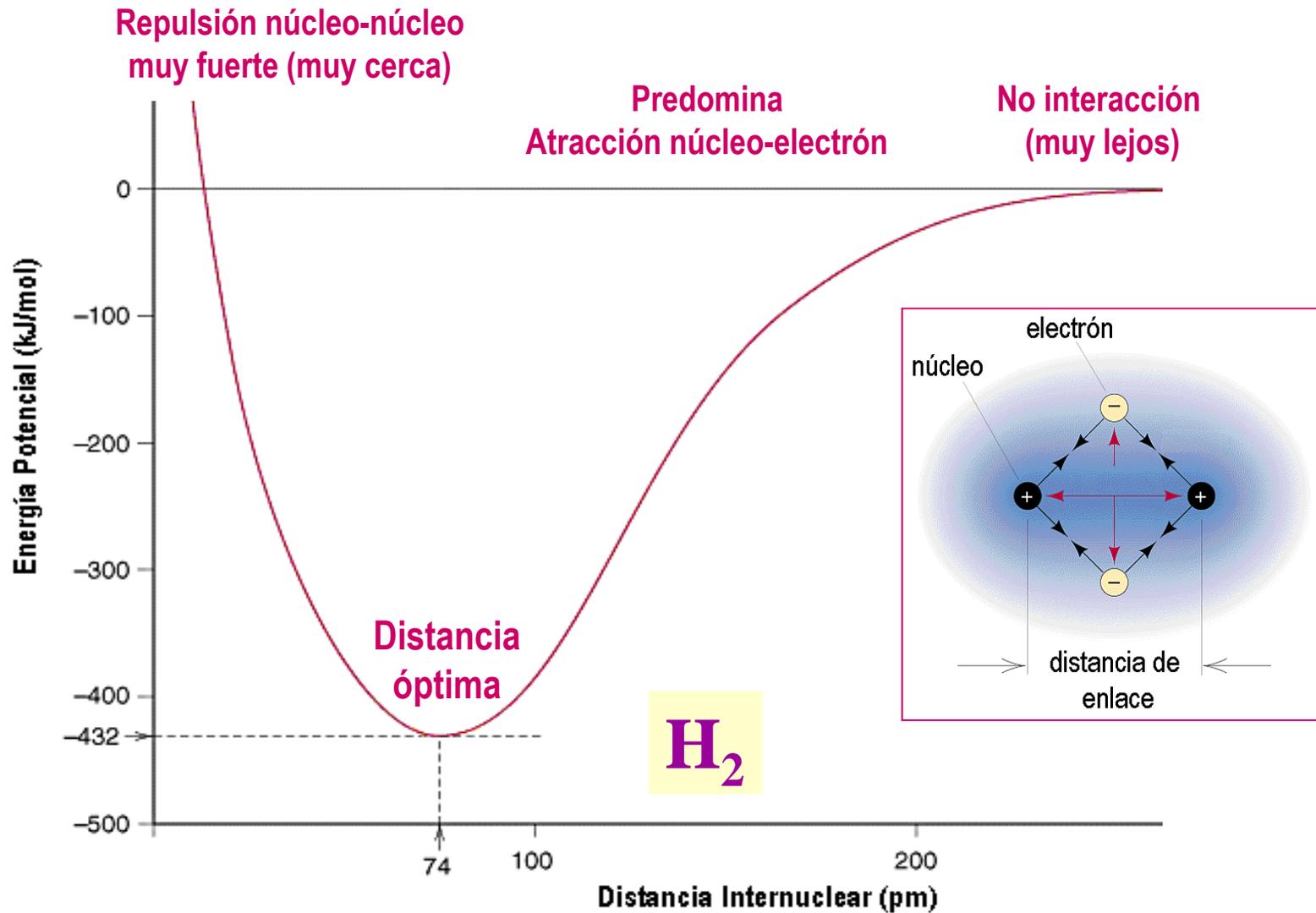
Ejemplo:

H<sub>2</sub>



En ambos casos la densidad electrónica entre los núcleos enlazados aumenta con respecto a la densidad electrónica que había en la misma región del espacio relativa a los núcleos de los átomos aislados.

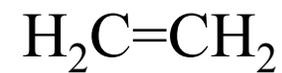
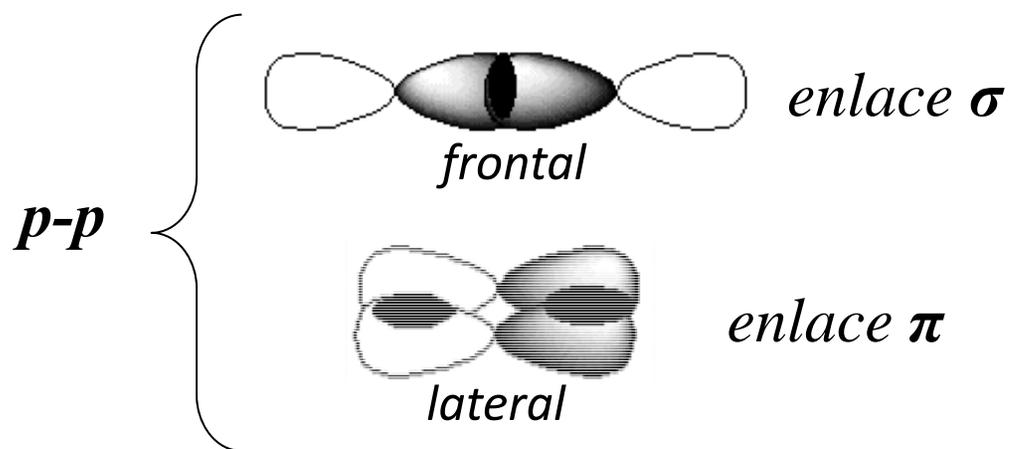
Teoría de Enlace de Valencia



Teoría de Enlace de Valencia

Tipos de solapamiento

Ejemplos



Teoría de Enlace de Valencia

Aspectos esenciales :

- El enlace químico se forma mediante pares de electrones, pertenecientes a dos átomos diferentes y que tienen componentes de espín antiparalelas.
- El enlace estará en la dirección en la cual la superposición de los orbitales atómicos de los átomos que forman el enlace sea mayor.
- Si un átomo tiene dos o más orbitales energéticamente equivalentes (degenerados) el enlace más fuerte lo formará el que tenga una mayor superposición con el orbital del otro átomo.

*Según esta teoría la valencia de un elemento viene dada por el número de electrones con espín desapareado que hay en un átomo y este podrá formar tantos enlaces como electrones desapareados tenga*

Otro ejemplo de aplicación:

- Explica por qué no existe la molécula de He<sub>2</sub>



## Teoría de Enlace de Valencia

### Consideraciones generales:

Es un método sencillo e intuitivo de ver el enlace covalente

Ofrece explicaciones e interpretaciones adecuadas a diferentes aspectos de la estructura molecular

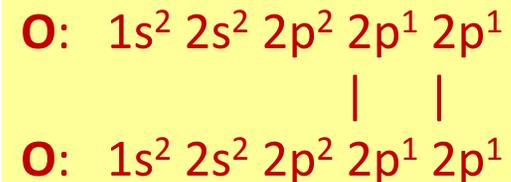
Falla al explicar algunos hechos experimentales:

El ión molécula de hidrógeno ( $H_2^+$ ), energía de enlace = 2.65 eV

*No puede ser explicado en términos del enlace de valencia ya que en este caso el enlace es monoelectrónico*

La molécula de oxígeno es paramagnética

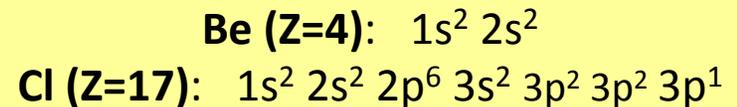
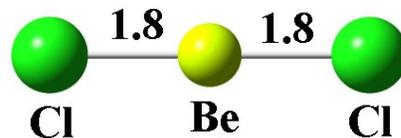
Esta propiedad se asocia a la existencia de electrones con espines desapareados



*Según la TEV a molécula de  $O_2$  tendría todos sus electrones apareados*

## Teoría de Enlace de Valencia

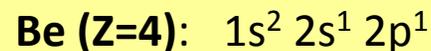
La molécula de cloruro de Berilio es estable y presenta una geometría molecular donde los 3 átomos se encuentran en una línea recta y sus dos enlaces Be-Cl son equivalentes:



*Según la TEV, el Be no puede formar enlaces*

Sin embargo este átomo tiene estados excitados de baja energía que corresponden a la promoción de un electrón de un OA 2s a los OA vacíos 2p.

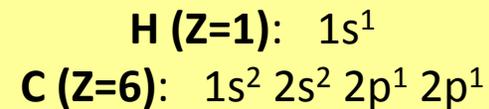
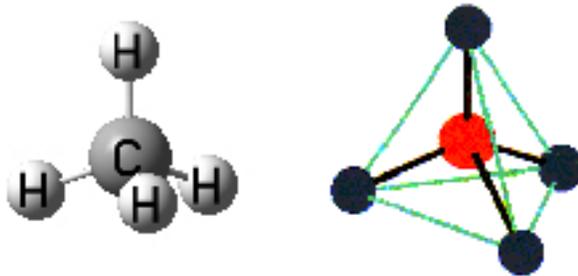
Como la energía involucrada en la formación de enlaces moleculares de Be es del orden de la energía necesaria para promover un e- del OA 2s al 2p, se asume la formación de enlaces a partir del estado excitado del Be:



*Esto permite explicar la formación de 2 enlaces pero no que sean equivalentes*

Teoría de Enlace de Valencia

La molécula de Metano ( $\text{CH}_4$ ) se sabe que es una molécula tetraédrica, con sus cuatro enlaces equivalentes y ángulos de enlaces de  $109^\circ$ :



Según la TEV, el C sólo puede formar 2 enlaces

Sin embargo se sabe que el C tiende a formar 4 enlaces.

Además incluso si consideramos el estado excitado: C (Z=6):  $1s^2 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$

Los cuatro enlaces no serían iguales (1 enlaces por solapamiento  $ss$  y 3 enlaces por solapamiento  $sp$ ).

Además no se justificaría la geometría (ángulos de enlace= $109.5^\circ$ ) ya que los orbitales  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$  son ortogonales entre sí ( $90^\circ$ ).

Y entonces ????



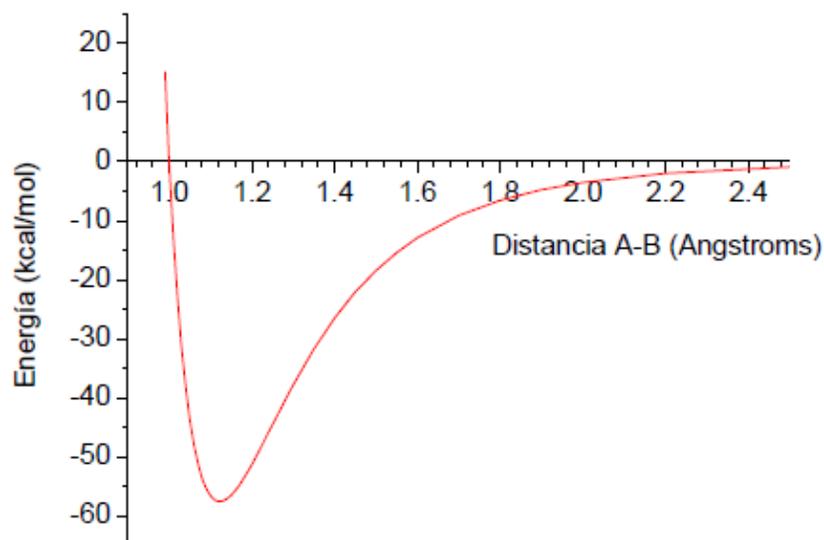


## PROBLEMARIO

## UNIDAD 4

## TEORÍA DE ENLACES DE VALENCIA

- 18.- En la teoría de Lewis se forman enlaces covalentes cuando los átomos comparten electrones. ¿En la teoría del enlace de valencia como se explica la formación de enlaces covalentes?
- 19.- ¿Que entiende por traslape de orbitales? Dibuje el traslape entre un orbital tipo s y un orbital tipo p.
- 20.- El cambio en la energía potencial durante la formación de la molécula A-B está se muestra en la siguiente gráfica:



- a) ¿Cuál es la longitud de enlace óptima en la molécula A-B?
- b) ¿Por qué para valores de la longitud de enlace menores a la óptima la energía crece rápidamente?

## *Orbitales Híbridos:*

### Hibridación:

Combinación de al menos dos orbitales atómicos no equivalentes, por ejemplo un orbital  $s$  y un orbital  $p$ , correspondientes al mismo átomo (por lo general al átomo central) para formar nuevos orbitales llamados orbitales híbridos.

Esta “mezcla de orbitales” es un procedimiento matemático que se llama combinación lineal de funciones (en este caso monocéntricas).

El número de orbitales híbridos obtenidos es igual al número de orbitales atómicos puros que se combinan en el proceso de hibridación.

Los enlaces covalentes se forman entonces por el traslape de:

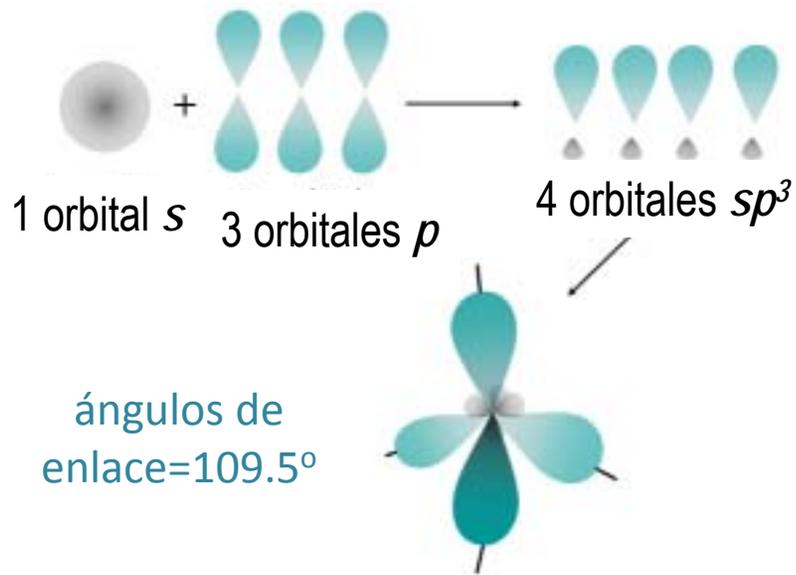
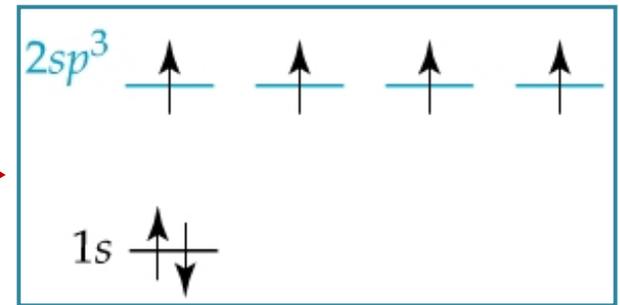
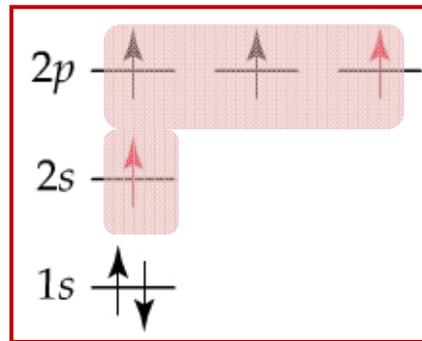
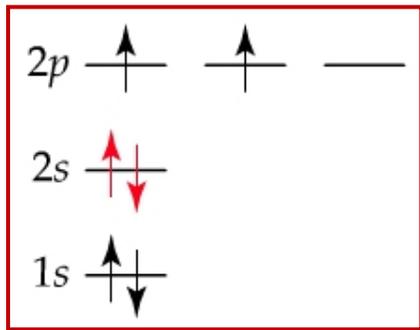
- Orbitales híbridos con orbitales atómicos puros.
- Orbitales híbridos con otros orbitales híbridos.

Orbitales Híbridos:

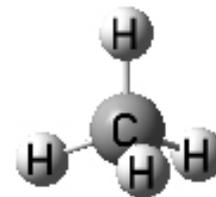
Ejemplo: C



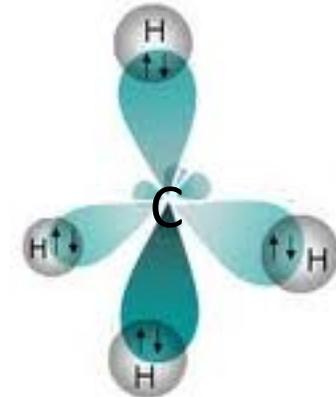
$sp^3$



Ejemplo: CH<sub>4</sub>



Todos son enlaces idénticos:  $\sigma$  ( $s-sp^3$ )

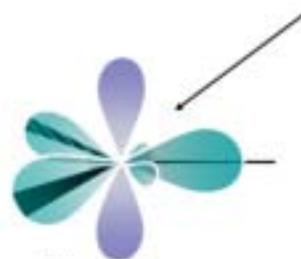
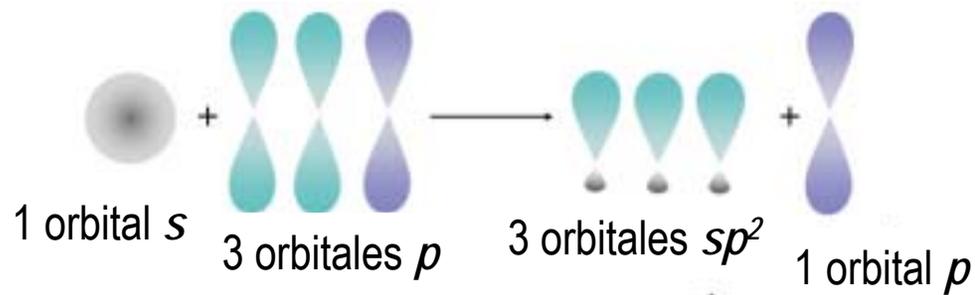
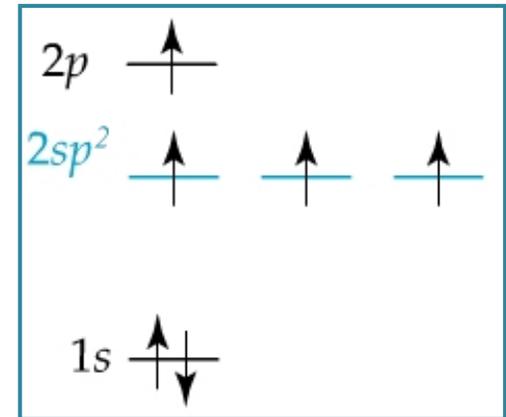
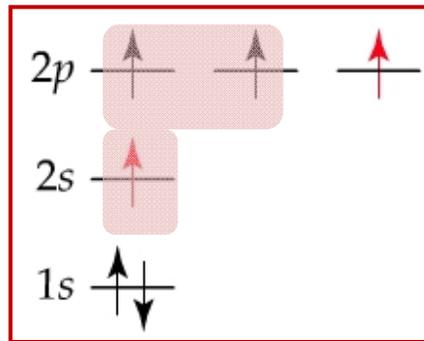
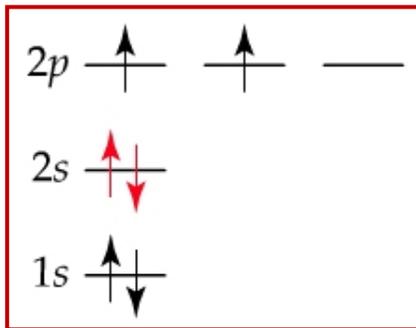


Orbitales Híbridos:

Ejemplo: C



$sp^2$

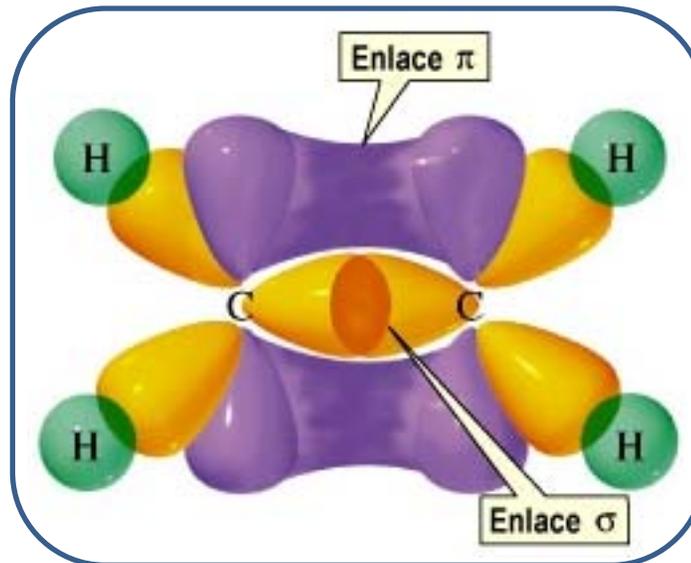
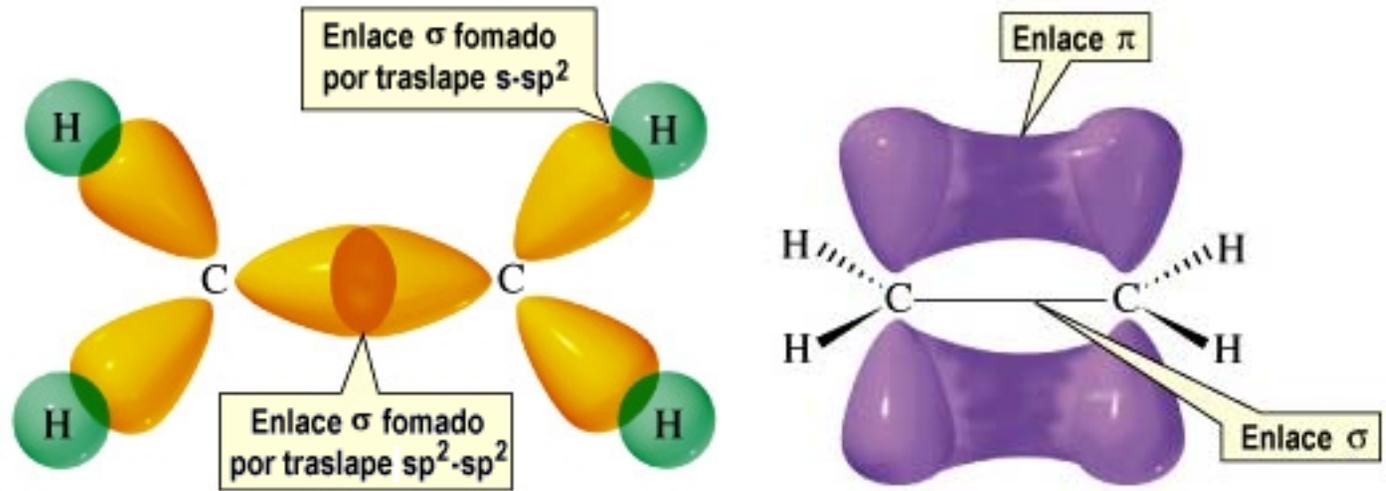
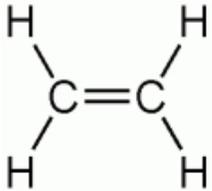


ángulos de enlace =  $120^\circ$

Orbitales Híbridos:

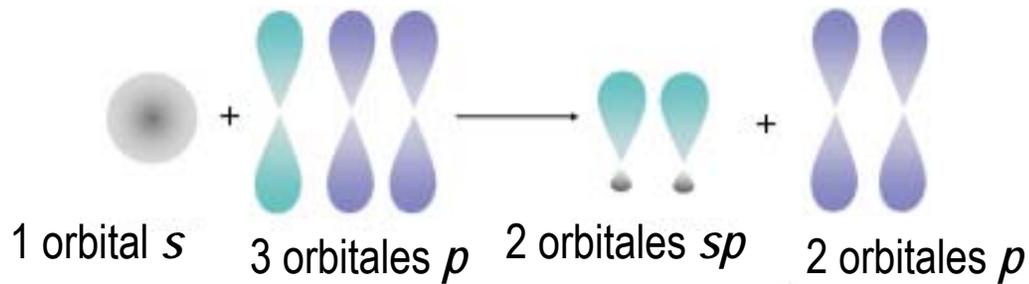
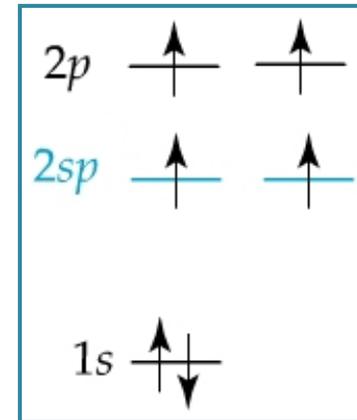
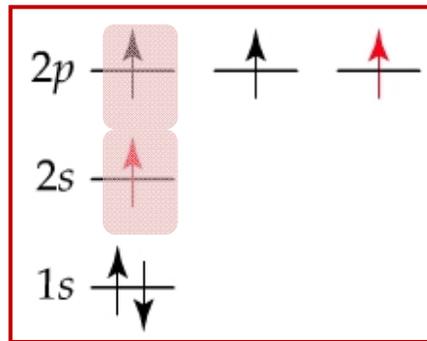
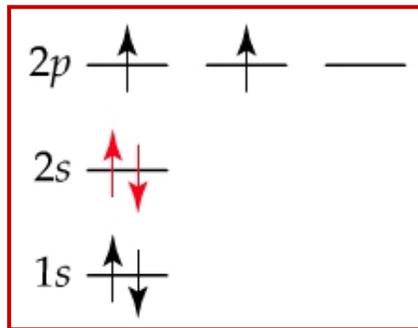
Ejemplo: C  $sp^2$

Eteno ( $C_2H_4$ )



Orbitales Híbridos:

Ejemplo: C

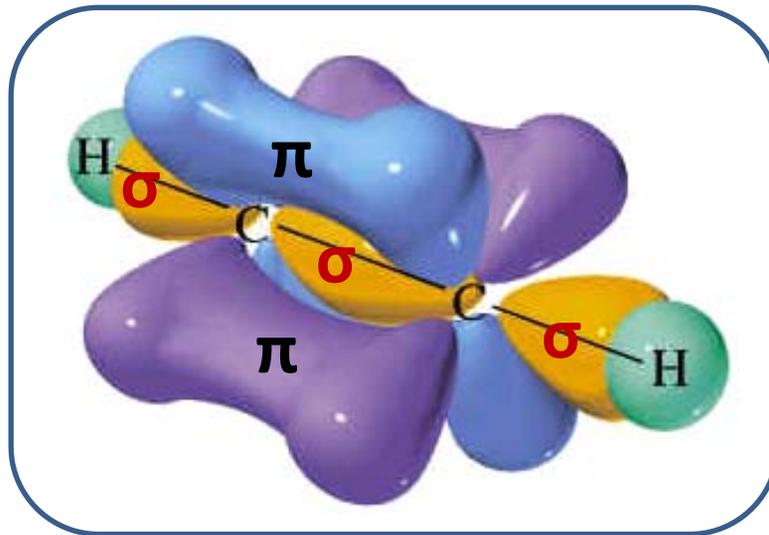
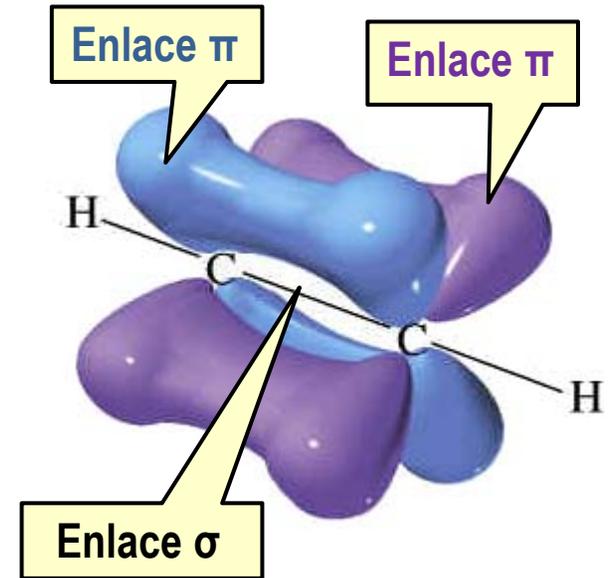
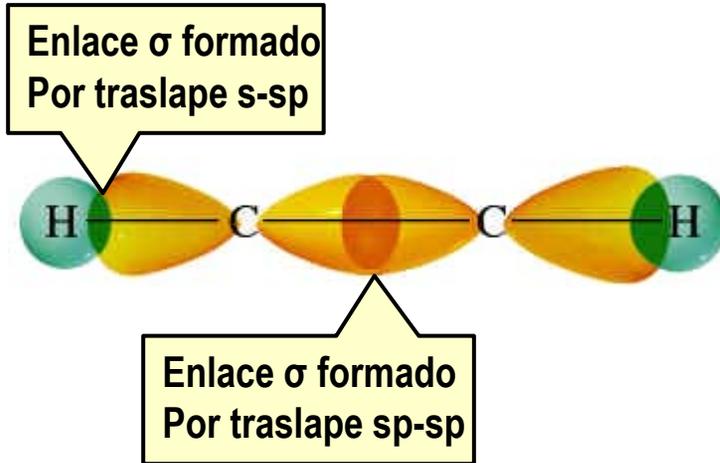


ángulo de enlace =  $180^\circ$

Orbitales Híbridos:

Ejemplo: C  $sp$

Eteno ( $C_2H_2$ )

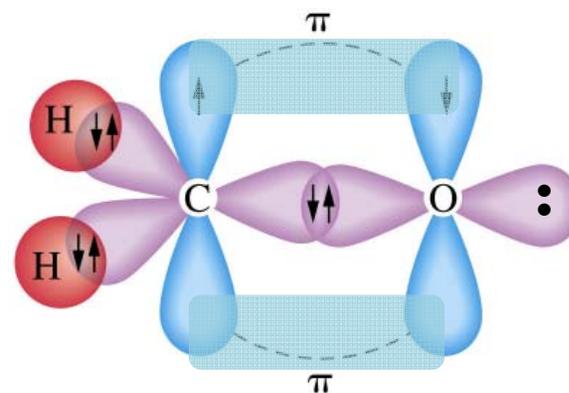
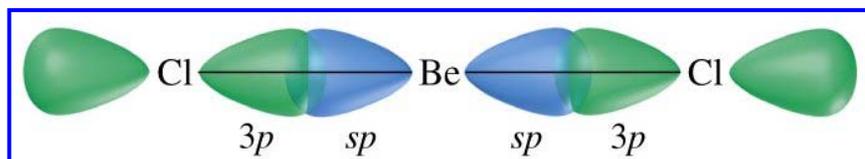


Orbitales Híbridos:

Orbitales híbridos más importantes y algunas propiedades estructurales:

<i>Orb Híbrido</i>	<i>% s</i>	<i>Geometría</i>	<i>Angulo interno</i>
<b>sp</b>	50	digonal	180°
<b>sp<sup>2</sup></b>	33.3	trigonal	120°
<b>sp<sup>3</sup></b>	25	tetraédrica	109.5°

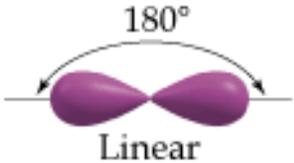
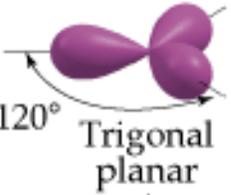
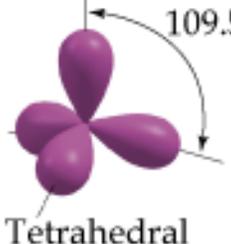
Otros ejemplos:



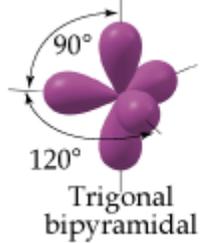
Orbitales  
Híbridos:

Resumen

**TABLE 9.4 Geometrical Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets**

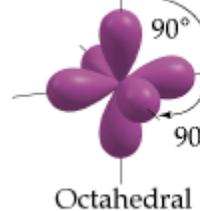
Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
$s, p$	Two $sp$	 Linear	$\text{BeF}_2, \text{HgCl}_2$
$s, p, p$	Three $sp^2$	 Trigonal planar	$\text{BF}_3, \text{SO}_3$
$s, p, p, p$	Four $sp^3$	 Tetrahedral	$\text{CH}_4, \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_4^+$

Five  $sp^3d$



$\text{PF}_5, \text{SF}_4, \text{BrF}_3$

Six  $sp^3d^2$



$\text{SF}_6, \text{ClF}_5, \text{XeF}_4, \text{PF}_6^-$

*Orbitales Híbridos:*

Para predecir el tipo de hibridación correspondiente a un átomo en una molécula (o ión) contamos el número de átomos a los que se encuentra unido y le sumamos el número de pares libres.

<u># de pares libres</u> + <u># de átomos enlazados</u>	<u>Hibridación</u>	<u>Ejemplos</u>
2	sp	BeCl <sub>2</sub>
3	sp <sup>2</sup>	BF <sub>3</sub>
4	sp <sup>3</sup>	CH <sub>4</sub> , NH <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> O
5	sp <sup>3</sup> d	PCl <sub>5</sub>
6	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>	SF <sub>6</sub>

Elaborado por RV y MV

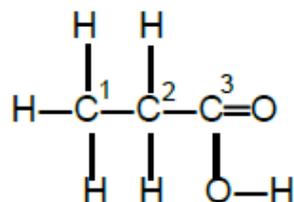


## PROBLEMARIO

### UNIDAD 4

#### HIBRIDACIÓN DE ORBITALES Y ENLACES MÚLTIPLES

- 21.- ¿Qué es la hibridación de orbitales atómicos? ¿Un átomo aislado puede existir en estado de hibridación? Justifica tu respuesta.
- 22.- ¿Cuál es el ángulo entre dos orbitales híbridos del mismo átomo en cada uno de los siguientes casos?
- Orbitales híbridos  $sp$ .
  - Orbitales híbridos  $sp^2$ .
  - Orbitales híbridos  $sp^3$ .
- 25.- La estructura siguiente corresponde al ácido propílico. Los átomos de carbono se han etiquetado con los números 1, 2 y 3 para su identificación dentro de la estructura molecular. ¿Qué hibridación presenta cada uno de los átomos de carbono? ¿Cuál es la geometría alrededor de cada átomo de carbono?





## PROBLEMARIO

## UNIDAD 4

---

**HIBRIDACIÓN DE ORBITALES Y ENLACES MÚLTIPLES**

---

26.- Determina la hibridación que presenta el átomo central en las moléculas siguientes:

- a)  $\text{BF}_3$ .
- b)  $\text{PF}_3$ .
- c)  $\text{PF}_6^-$ .
- d)  $\text{TeCl}_4$ .
- e)  $\text{BH}_3$ .
- f)  $\text{PF}_2\text{Br}_3$  (todos los F y todos los Br están enlazados a P).
- g)  $\text{NFO}$  (tanto el F como el O están enlazados a N).
- h)  $(\text{BiCl}_5)^{2-}$ .
- i)  $(\text{InCl}_2)^-$ .
- j)  $(\text{AsH}_4)^-$ .

27.- Escribe la configuración electrónica del Xe ( $Z=54$ ). Ahora, considera que un electrón es promovido a un orbital desocupado tipo d:

- a) ¿Cuántos enlaces podría formar este átomo?
- b) ¿Cuál de los elementos siguientes Li, Na, Br, Cl o F, esperarías que tenga mayor probabilidad de “forzar” al Xe a compartir electrones?
- c) ¿Cuál sería una posible fórmula para el compuesto formado por Xe y F?
- d) si fuese posible preparar el compuesto  $\text{XeF}_2$ , ¿qué geometría molecular presentaría?
- e) ¿Qué tipo de hibridación presentarían los orbitales del átomo central en la molécula de  $\text{XeF}_2$ ?



## PROBLEMARIO

### UNIDAD 4

---

### HIBRIDACIÓN DE ORBITALES Y ENLACES MÚLTIPLES

---

28.- Determine, para los siguientes compuestos,  $\text{NO}_3^{-1}$  y  $\text{CINO}$ , lo siguiente:

- a) Número de enlaces sigma.
- b) Número de enlaces pi.
- c) Número de pares libres

29.- Del siguiente conjunto de moléculas o iones elija los que exhibirán enlaces deslocalizados:  $\text{SO}_3$ ,  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{NH}_4^+$ .