

“GEOMETRÍA MOLECULAR Y ANÁLISIS DE MOMENTOS DIPOLO”

La geometría molecular hace referencia a la disposición espacial en la cual se encuentran los átomos de una molécula, dicha disposición influye notablemente en las propiedades físicas y químicas de las sustancias, por lo cual resulta de singular importancia conocerla; la geometría molecular de un compuesto se puede predecir con gran exactitud empleando las estructuras de Lewis y la teoría de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV). Esta teoría considera que la disposición espacial de los diferentes átomos que integran una molécula, depende de la cantidad de pares electrónicos (nubes electrónicas) que existen alrededor de cada átomo y de la repulsión que existe entre éstos. Para aplicar la teoría, primero se debe tener la estructura de Lewis del compuesto y posteriormente inspeccionar la estructura para determinar la cantidad de pares electrónicos que existen alrededor de cada átomo. Adicionalmente, se debe tener en cuenta que los pares electrónicos alrededor de un átomo forman nubes electrónicas; a este respecto, existen dos tipos de nubes electrónicas.

Nube electrónica de enlace: Formada por dos, cuatro o seis electrones compartidos por dos átomos, en cada uno de estos casos solo se cuenta como una sola nube electrónica, como se muestra a continuación.



Cuando dos átomos comparten dos electrones, se tiene un enlace sencillo; cuando comparten cuatro electrones, se tiene un enlace doble y cuando comparten seis electrones, se tiene un enlace triple.

Nube electrónica libre: Formada por dos electrones libres de un átomo en una molécula; en la estructura siguiente, se tiene un átomo **B** con tres nubes electrónicas libres.



Ya conociendo la cantidad de nubes electrónicas que existen alrededor de un átomo, se aplica la TRPECV, que consiste principalmente en considerar que las nubes electrónicas al estar formadas

por electrones, van a ejercer repulsión entre ellas; en otras palabras se dispondrán en el espacio, de tal forma que estarán lo más separadas posible. La cantidad máxima de nubes electrónicas que pueden estar alrededor de un átomo es de 6, pero como las nubes pueden ser de enlace o libres, se pueden tener diferentes combinaciones, como las que se describen a continuación:

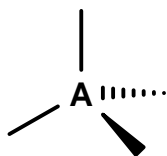
1) Cuando un átomo **A** solo presenta 2 nubes electrónicas y son de enlace, la geometría molecular con respecto al átomo es lineal, porque ambas nubes se repelen hasta estar lo más separadas posible, como se muestra en la figura siguiente:



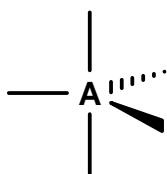
2) Cuando un átomo **A** solo presenta 3 nubes electrónicas de enlace, la geometría molecular con respecto al átomo es trigonal plana, ya que las nubes se disponen alrededor del átomo central formando tres ángulos de 120° , como se muestra en la figura siguiente:



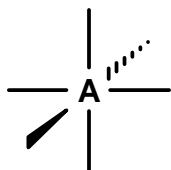
3) Cuando el átomo **A** solo presenta 4 nubes electrónicas de enlace, la geometría molecular con respecto al átomo es tetraédrica, ya que las nubes se disponen alrededor del átomo central formando ángulos entre sí de $109^\circ 28'$, como se muestra en la figura siguiente, donde las líneas delgadas denotan los enlaces que están en el plano del papel, la línea gruesa denota el enlace que queda fuera del plano del papel y la línea segmentada denota el enlace que está dentro del plano del papel.



4) Cuando el átomo **A** solo presenta 5 nubes electrónicas de enlace, la geometría molecular con respecto al átomo es bipiramidal trigonal, ya que las nubes se disponen de la forma como se muestra a continuación:

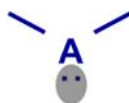


5) Cuando el átomo **A** solo presenta 6 nubes electrónicas de enlace, la geometría molecular con respecto al átomo es octaédrica (bipiramidal cuadrada), ya que las nubes se disponen de la forma como se muestra a continuación:



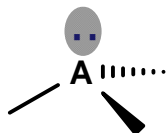
En los ejemplos anteriores solo se tienen nubes de enlace interaccionando entre sí; sin embargo, cuando se tiene una o más nubes de par electrónico libre, la geometría alrededor del átomo central se modifica sustancialmente; por una parte, debido a que una nube de par electrónico libre se encuentra más cerca del átomo central, que una de par electrónico de enlace, lo cual modifica los ángulos entre los enlaces; y por otro lado, para la geometría solo se toman en cuenta la disposición de las nubes de enlace, como se muestra en los casos siguientes:

Cuando el átomo **A** presenta 2 nubes electrónicas de enlace y una libre, la geometría molecular con respecto al átomo es angular, ya que tomando en cuenta solo las nubes de enlace, éstas forman un “ángulo”. En este caso su representación gráfica sería la siguiente:


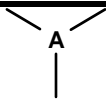
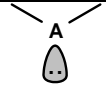

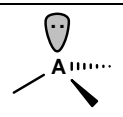
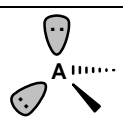
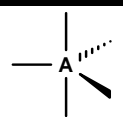
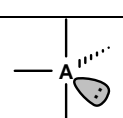
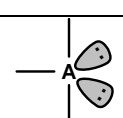
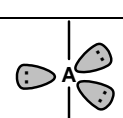
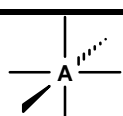
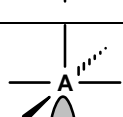
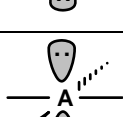


Cabe mencionar que una cosa es la distribución de las nubes y otra la geometría molecular; por ejemplo, en la figura anterior el átomo **A** tiene tres nubes en total, por lo cual la distribución de las nubes electrónicas es trigonal plana; sin embargo, como solo dos de las nubes son de enlace, su geometría es angular.

Cuando el átomo **A** presenta 3 nubes electrónicas de enlace y una libre, la geometría molecular con respecto al átomo es piramidal trigonal, pero la distribución de las nubes es tetraédrica, como se muestra en la figura siguiente:



Teniendo en cuenta las diferentes combinaciones, podemos llenar una tabla como la siguiente, la cual contiene los casos más comunes e interesantes.

Nubes Electrónicas	Nubes de Enlace	Nubes Libres	Distribución de las Nubes Electrónicas	Geometría Molecular:	Figura Representativa:
2	2	0	Lineal	<i>Lineal</i>	
3	3	0	Trigonal plana	<i>Trigonal plana</i>	
3	2	1	Trigonal plana	<i>Angular</i>	
4	4	0	Tetraédrica	<i>Tetraédrica</i>	
4	3	1	Tetraédrica	<i>Piramidal trigonal</i>	
4	2	2	Tetraédrica	<i>Angular</i>	
5	5	0	Bipiramidal Trigonal	<i>Bipiramidal Trigonal</i>	
5	4	1	Bipiramidal Trigonal	<i>Tetraedro distorsionado</i>	
5	3	2	Bipiramidal Trigonal	<i>Forma de T</i>	
5	2	3	Bipiramidal Trigonal	<i>Lineal</i>	
6	6	0	Octaédrica	<i>Octaédrica</i>	
6	5	1	Octaédrica	<i>Piramidal cuadrada</i>	
6	4	2	Octaédrica	<i>Cuadrada plana</i>	

Conociendo la geometría molecular, se puede hacer un análisis de los momentos dipolo para verificar si la molécula es polar o no polar. Dicho análisis es muy sencillo y se realiza siguiendo los pasos que se dan a continuación:

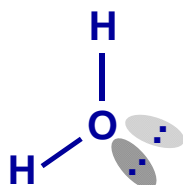
1. Se dibuja la estructura de Lewis de la molécula en cuestión.
2. Se dibuja su geometría molecular (con base en la tabla anterior).
3. Se localizan los enlaces que se tienen con el átomo central.
4. Para cada enlace se dibuja un vector que apunte hacia el átomo más electronegativo, este vector representará al momento dipolo de ese enlace; tal que, la parte negativa del dipolo está en el átomo más electronegativo (donde está la punta de la flecha) y la parte positiva del dipolo está en el átomo menos electronegativo (donde inicia la flecha).
5. Se realiza una suma cualitativa de todos los vectores involucrados (uno por cada enlace al átomo central) y si el vector resultante es el vector nulo, la molécula es no polar, pero si el vector resultante es diferente del vector nulo, la molécula será polar.

Si aplicamos estos pasos para la molécula de agua (H_2O), se tendría lo siguiente.

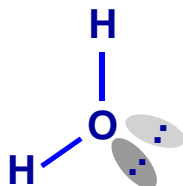
1. La estructura de Lewis de la molécula de H_2O sería:



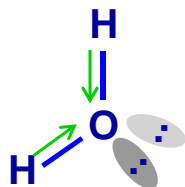
2. La geometría molecular es angular y le corresponde una figura como la siguiente:



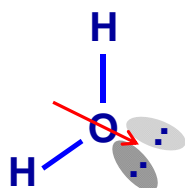
3. La molécula de agua tiene dos enlaces O-H como se indica en la figura siguiente:



4. En el enlace O-H, el átomo de oxígeno atrae con mayor fuerza el par electrónico; por lo tanto, dicha fuerza se puede representar con un vector que apunta hacia el átomo de oxígeno, como se muestra en la figura siguiente:



5. Al realizar la suma de los vectores involucrados el resultado es un vector diferente del vector nulo y que apunta hacia la zona donde se encuentran los pares electrónicos libres, como se muestra a continuación:



Se concluye que la molécula de agua es polar, ya que su momento dipolo resultante (**flecha roja**), es diferente del vector nulo. Este tipo de análisis se puede llevar a cabo en forma cualitativa como en el caso anterior; o bien, en forma cualitativa, pero esta última requiere de conocimientos más avanzados de Química y Álgebra Vectorial.

REVISORES:

M. A. Violeta Luz María Bravo Hernández; Q. Esther Flores Cruz; Q. Antonia del Carmen Pérez León; M. A. Ayesha Sagrario Román García.

BIBLIOGRAFÍA:

- Morrison, Robert T.; Boyd, Robert N. *Química Orgánica*, 5ª edición; Pearson Addison Wesley; México, 1998.
- Solomons, T. W. Graham; Fernández, E. Jack *Química Orgánica*, 2ª edición; Limusa Wiley: México, 1999.
- Brown, Theodore L.; LeMay, H. Eugene, Jr.; Bursten, Bruce E. *Química. La Ciencia Central*, 9ª edición; Pearson Prentice-Hall: México, 2004.
- Chang, Raymond *Química*, 7ª edición; McGraw-Hill: México, 2002.
- Brady, James E. *Química Básica. Principios y Estructura*, 2ª edición; Limusa Wiley; México, 2001.