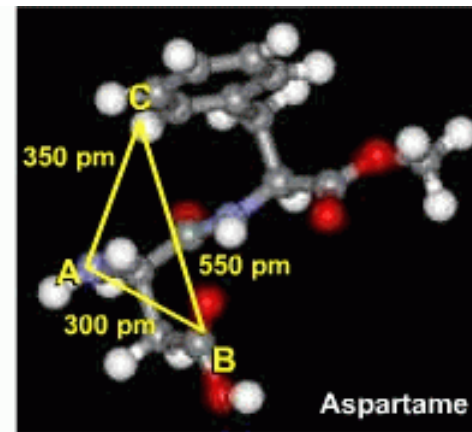
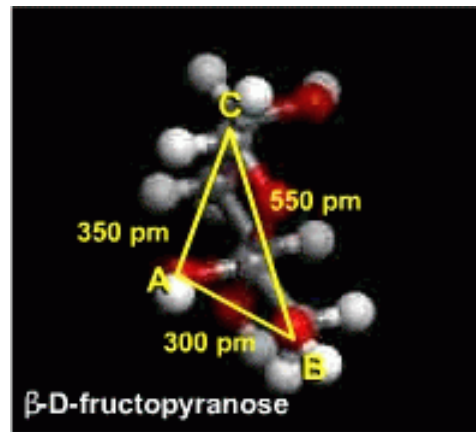


Geometría molecular: Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

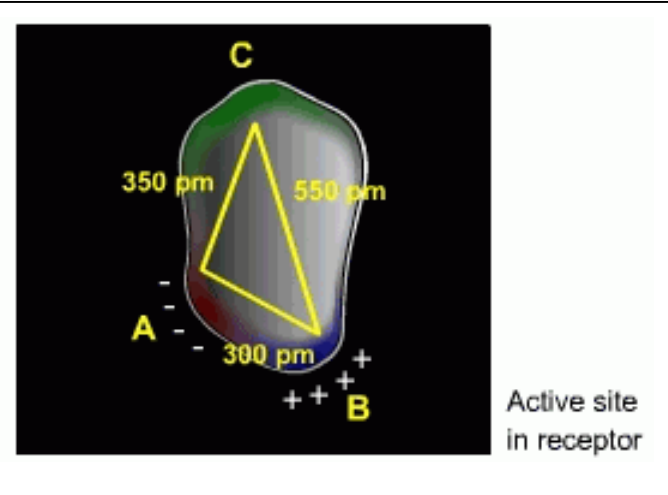
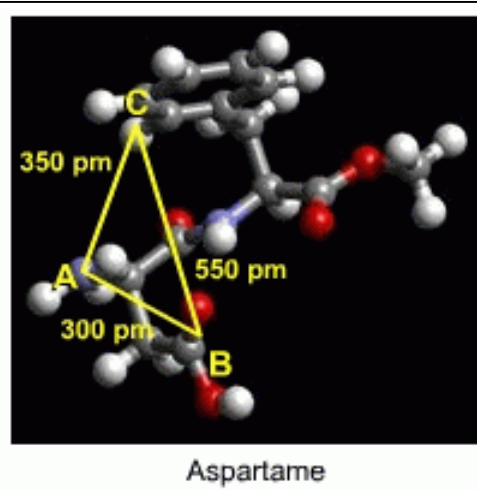
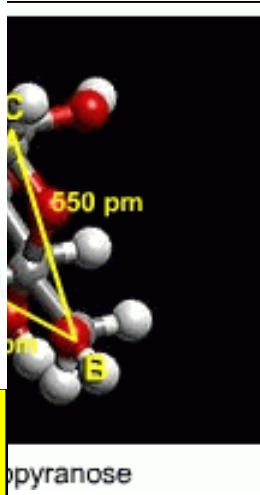
logía:

Geometría molecular: distribución tridimensional de los núcleos
de los átomos en una molécula.

Propiedades físicas, químicas y bioquímicas dependen de la
geometría molecular. **Ej: EL TRIANGULO DULCE**



Las moléculas son distintas pero con una parte geoméricamente equivalente
que confiere un comportamiento bioquímico similar (sabor dulce en este caso).



Isómeros de una misma sustancia tienen propiedades diferentes

... can distinguish isomers of

Correct. The spatial orientation of the groups on this isomer matches the arrangement of compatible groups in the receptor site.

Hydrophobic groups
Negative center
Positive center

The protein receptor binding site can distinguish between the two mirror-image isomers of phenylalanine.

Select the isomer you think will bind, and drag it to the receptor site.

Now click on the isomer in the site and rotate it by dragging so that the isomer functional groups are compatible with the active site groups.

Phe isomer 1

Phe isomer 2

Incorrect. The spatial orientation of the groups on this isomer does not match the arrangement of compatible groups in the receptor site.

Hydrophobic groups
Negative center
Positive center

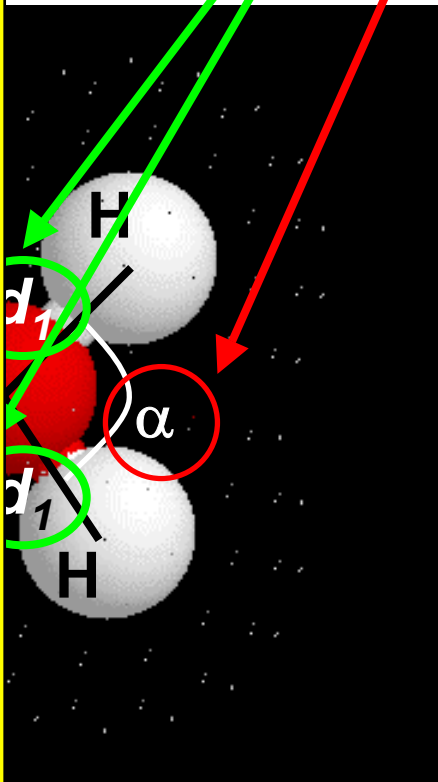
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

factores que definen la geometría molecular son:

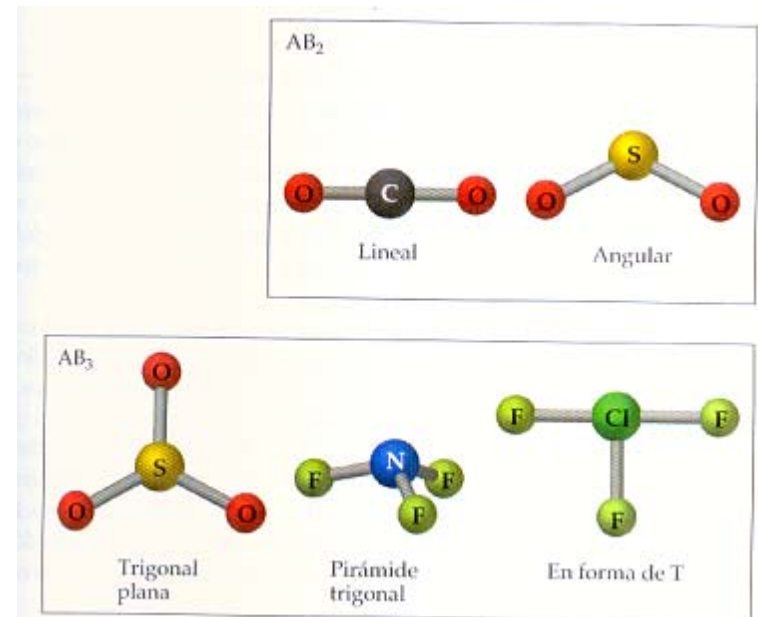
Distancias y ángulos de enlace

Longitud de enlace: **distancias entre los núcleos.**

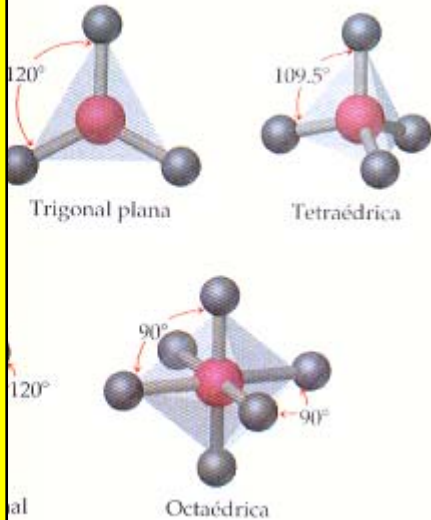
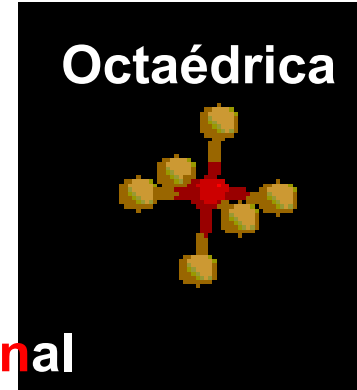
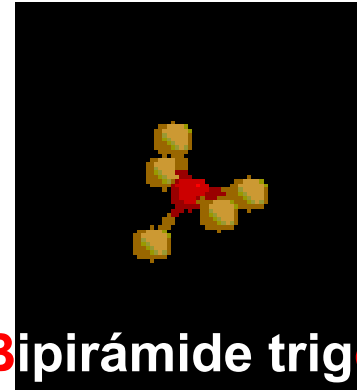
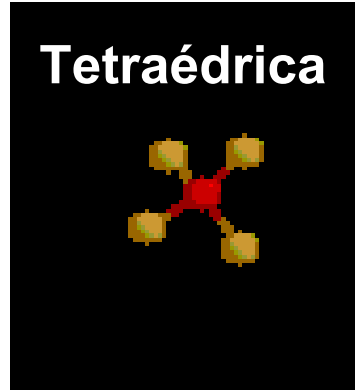
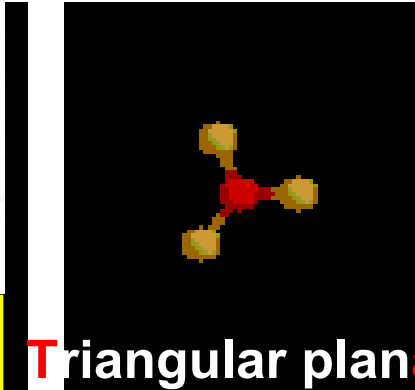
Ángulo de enlace: **ángulos entre líneas adyacentes que representan los enlaces.**



Moléculas con la **misma estequiometría** pueden tener **diferentes geometrías**



Geometrías frecuentes:



La geometría de una molécula se describe por un **término específico** y por los **ángulos de enlace**.

Se puede predecir la geometría de una molécula conociendo el número de electrones (de pares) que rodean a los átomos centrales.

Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

los pares de electrones de la capa de valencia de un átomo se repelen entre sí, tanto si están en enlaces químicos (**pares enlazantes**) como si no están compartidos (**pares solitarios**).

los pares de electrones se disponen alrededor de un átomo con direcciones (**direcciones estereoactivas**) que minimicen las repulsiones.

Reglas adicionales:

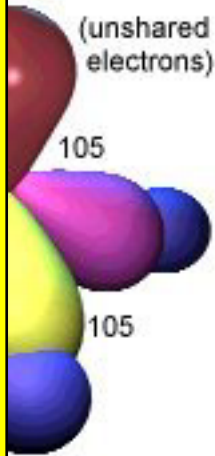
Los enlaces dobles y triples se tratan como si fueran enlaces sencillos y el átomo central se puede manejar individualmente.

Para una determinada molécula se pueden construir dos o más estructuras de Lewis, el modelo RPECV se puede aplicar a cualquiera de ellas y la geometría de los pares estereoactivos y de la molécula pueden ser diferentes.

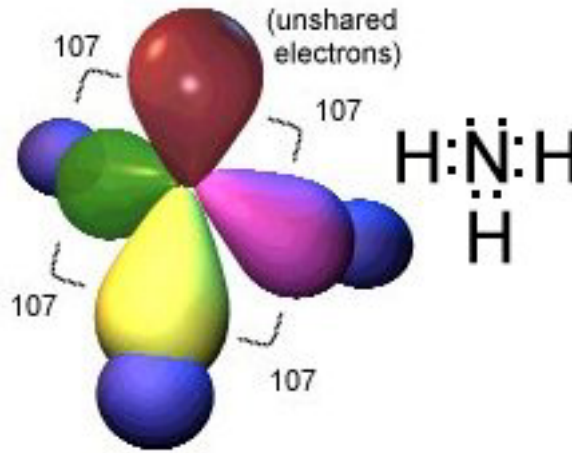
de los pares estereosactivos y geometría molecular

os casos la **geometría** de los

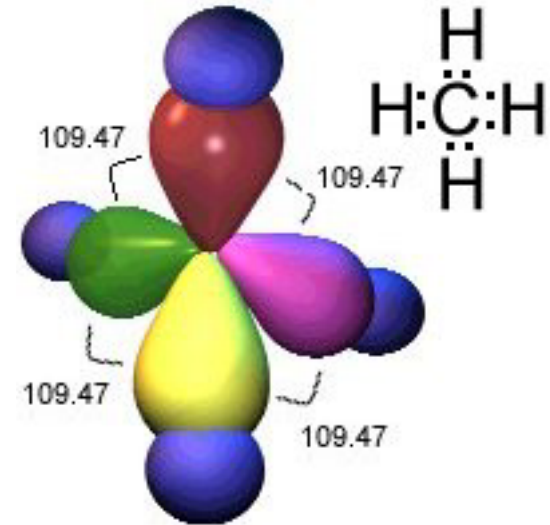
pares estereosactivos es TETRAÉDRICA



LAR



PIRÁMIDE TRIGONAL



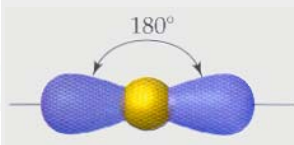
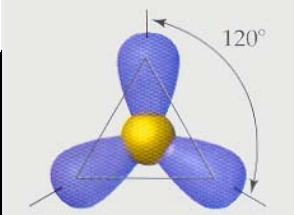
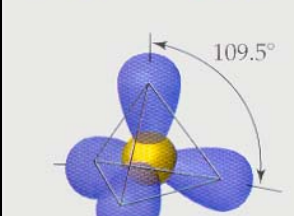
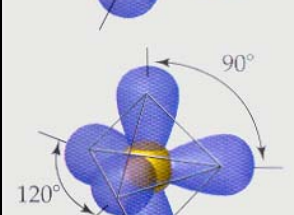
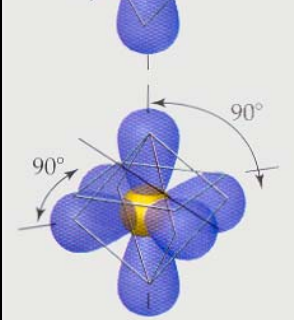
TETRAÉDRICA

GEOMETRÍA MOLECULAR

Geometría de los Pares Estereoactivos

Geometría

Ángulos

	Lineal	180°
	Trigonal plana	120°
	Tetraédrica	109.5°
	Bipirámide trigonal	120° 90°
	Octaédrica	90°



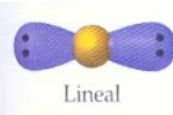

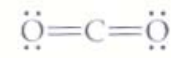

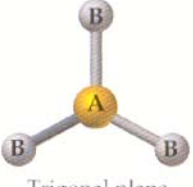
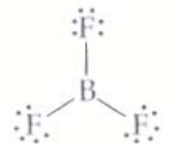

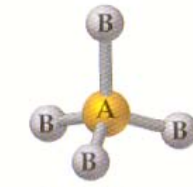
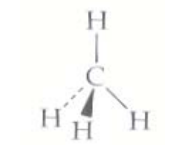

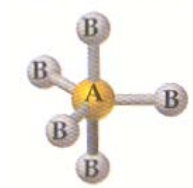


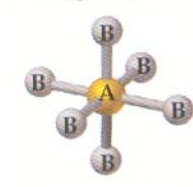
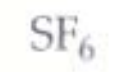
Cartagena99
 CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Geometría Molecular

del modelo RPECV a moléculas cuyo
tral no tiene pares libres

Casos AB_n ($n=2..6$)

	Geometría de pares estereoactivos	Pares enlazantes	Pares libres	Geometría molecular	Ejemplo
2	 Lineal	2	0	 Lineal	
3	 Trigonal plana	3	0	 Trigonal plana	
4	 Tetraédrica	4	0	 Tetraédrica	
5	 Bipirámide trigonal	5	0	 Bipirámide trigonal	
6	 Octaédrica	6	0	 Octaédrica	

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
...
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

del modelo RPECV a moléculas cuyo **trazado tiene uno o más pares libres**

considerar **tres tipos de interacciones repulsivas**:

Electrone - Par enlazante

$$(P_E - P_E)$$

Par libre

$$(P_L - P_L)$$

Electrone - Par libre

$$(P_E - P_L)$$

Por lo tanto, las fuerzas de repulsión disminuyen:

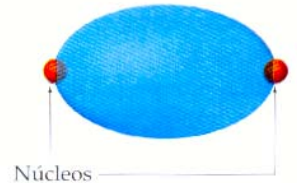
$$P_L - P_L > P_E - P_L > P_E - P_E$$

Los pares enlazantes están atraídos por dos núcleos, luego ocupan menos espacio y experimentan menor repulsión.

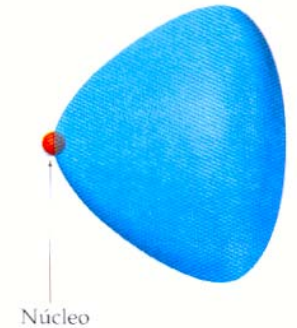
Los pares libres están atraídos por un único núcleo, luego ocupan mayor espacio y experimentan mayores repulsiones.

Los pares de electrones se orientan en el espacio de modo que minimicen las repulsiones entre pares de electrones

Par enlazante de electrones


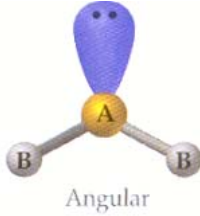
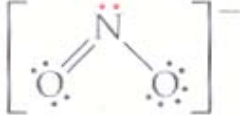



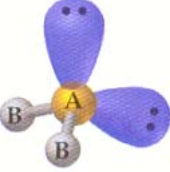



Par no enlazante



del modelo RPECV a moléculas cuyo
central tiene uno o más pares libres

Casos **$AB_{n-m}E_m$** ($n=2..6$)

Geometría de pares estereoactivos	Pares enlazantes	Pares libres	Geometría molecular	Ejemplo
 <p>Trigonal plana</p>	2	1	 <p>Angular</p>	
 <p>Tetraédrica</p>	3	1	 <p>Pirámide trigonal</p>	
	2	2	 <p>Angular</p>	
			<p>AB_2E_2</p>	

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ...
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Geometría de pares estereoaactivos



Bipirámide trigonal

Pares enlazantes

4



3



2



5



4



Pares libres

1

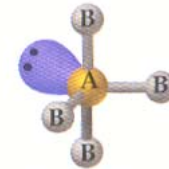
2

3

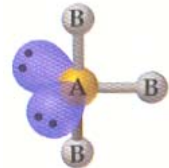
1

2

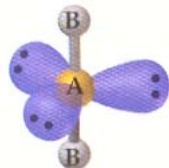
Geometría molecular



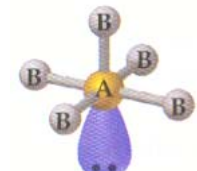
Balancín



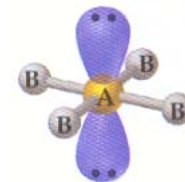
Forma de T



Lineal



Pirámide cuadrada

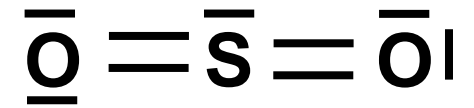


Cuadrada plana

Ejemplo



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ...
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



los enlaces se consideran como sencillos.

direcciones estereoactivas en torno al átomo de S

(lazantes + 1 par libre)

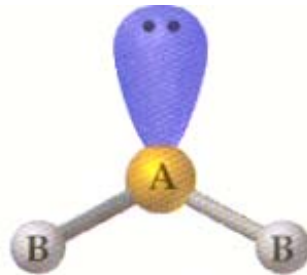


de pares
activos

Geometría
molecular



lana



Angular



Angular

Repulsión $\text{P}_L\text{-P}_E > \text{Repulsión } \text{P}_E\text{-P}_E$



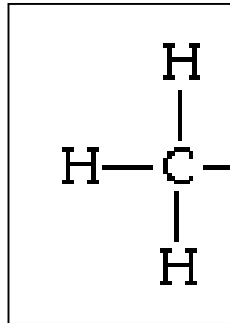
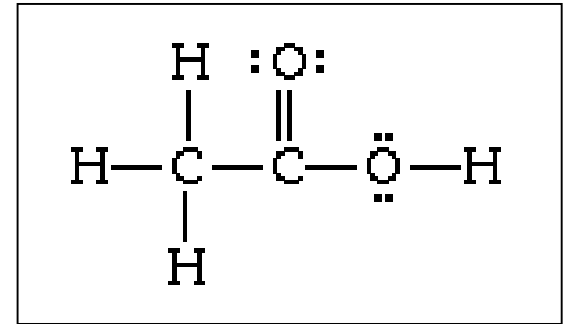
$(\text{O-S-O})_{\text{exp}} \approx 119.5^\circ$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Formula: $C_2O_2H_4$

Aplicando la RPECV a cada átomo central de la estructura de Lewis se puede determinar la geometría de moléculas complejas.

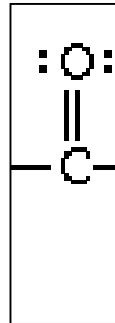
Estructura de Lewis



4

Tetraédrica

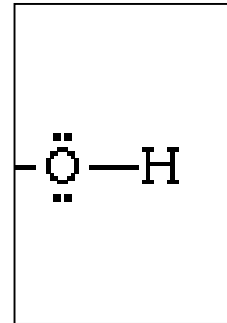
109.5°



3

Trigonal plana

120°



4

Tetraédrica

109.5°



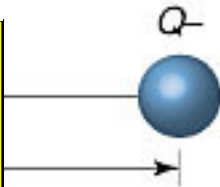
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Geometría y Polaridad molecular

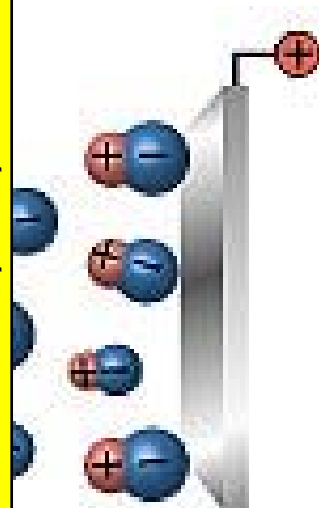
Moléculas con una diferente distribución de la carga eléctrica negativa y positiva (núcleos) que origina una separación de cargas y la da un **DIPOLO ELÉCTRICO** o **MOMENTO DIPOLAR** (μ_D).

$$\mu = Qr$$

$$1 \text{ Debye} = Q \text{ (coulombios)} r \text{ (m)} / 3.355 \times 10^{-30}$$



En presencia de un campo eléctrico

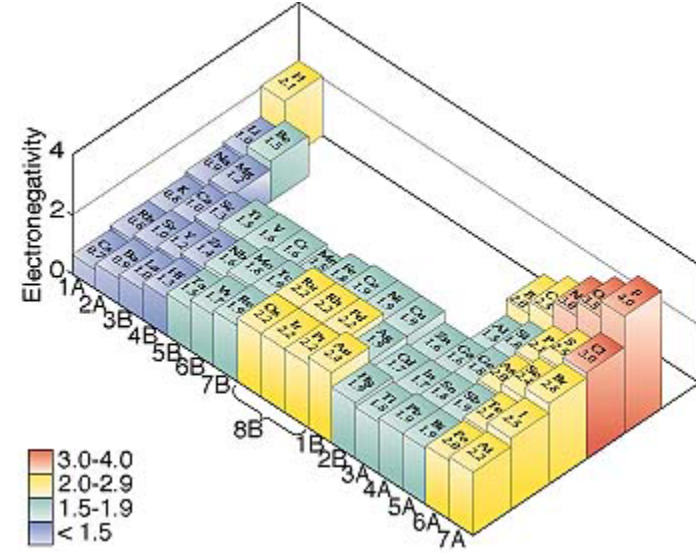


La existencia de momento dipolar molecular depende de:

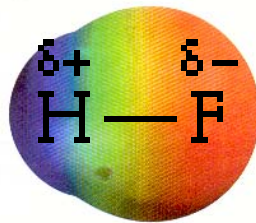
1. **Polarización de enlaces.**
2. **Geometría (simetría) molecular.**
3. **Los pares de electrones sin compartir.**

ación de enlaces.

diferencias de electronegatividad
enlazados los electrones de enlace
PARTEN SIMÉTRICAMENTE.

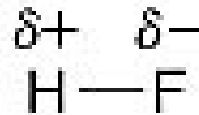


PARACION de CARGA

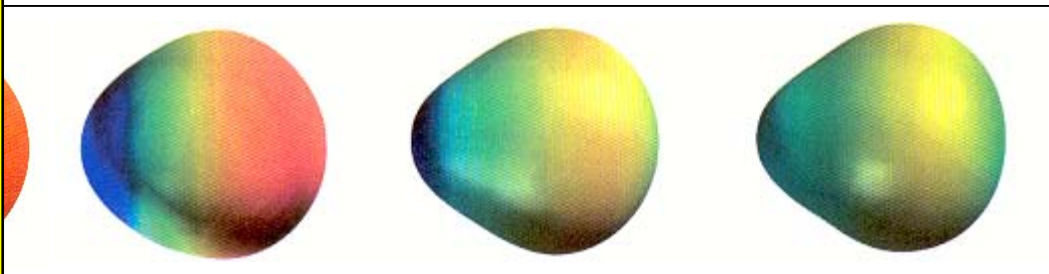


HF

Aparece **momento dipolar de enlace**



or



HCl

HBr

HI

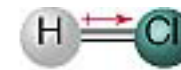
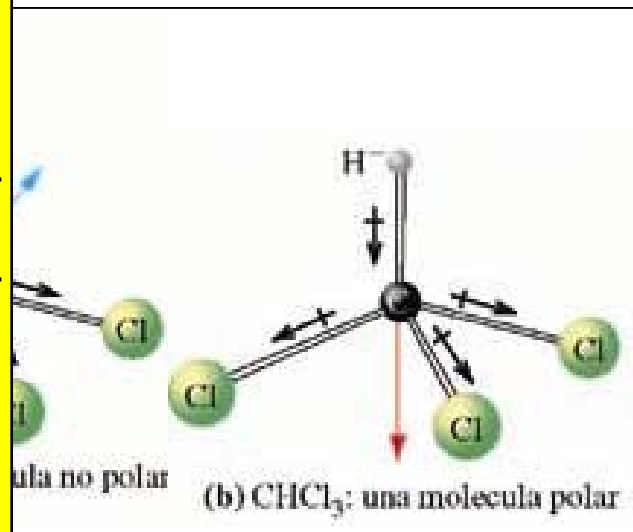
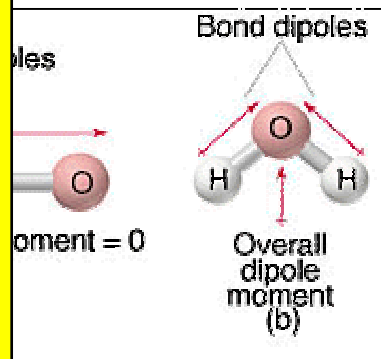
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Simetría (simetría) molecular.

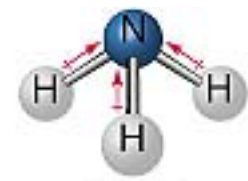
El momento dipolar eléctrico de una molécula es la suma de los momentos dipolares de los enlaces:

$$\mu = \sum Q r$$

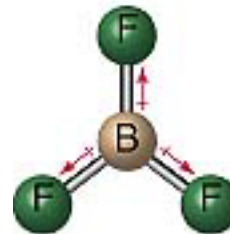
Para **algunas geometrías moleculares** esta **SUMA es NULA** aunque los enlaces estén polarizados: **lineal, tetraédrica, octaédrica, bipirámide trigonal, plana simétrica** (triangular, cuadrada, etc..)



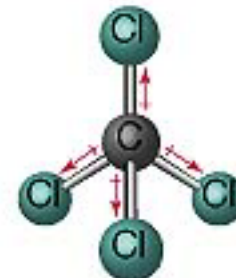
Polar



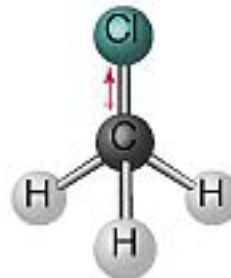
Polar



Nonpolar



Nonpolar



Polar

res de electrones sin compartir.

electrones sin compartir son zonas negativas con respecto al núcleo; esto contribuye al momento dipolar molecular reforzándolo o no.

