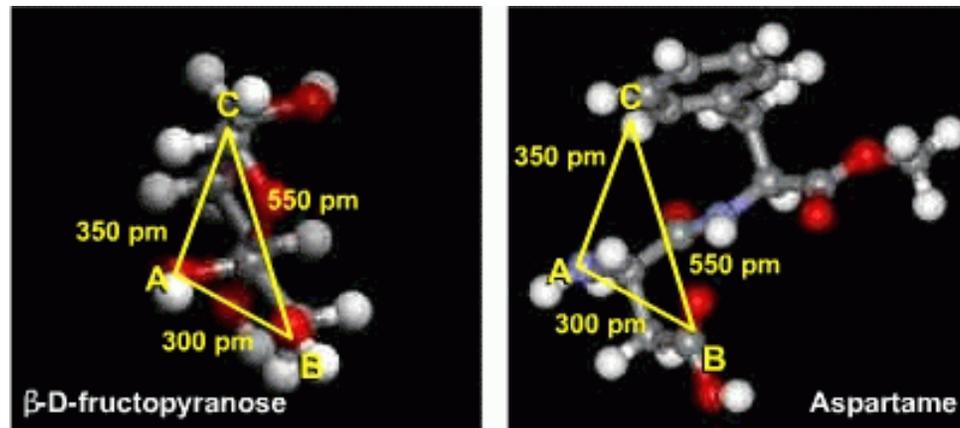


# Geometría molecular: Teoría de Repulsión de los Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

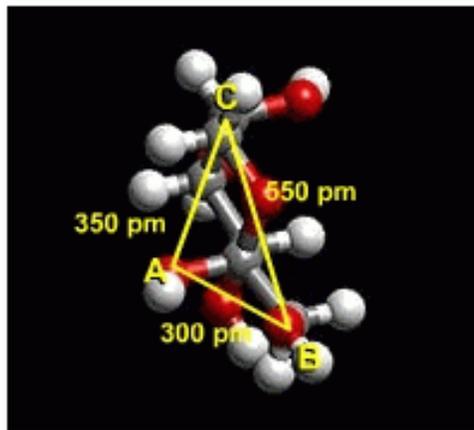
Terminología:

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

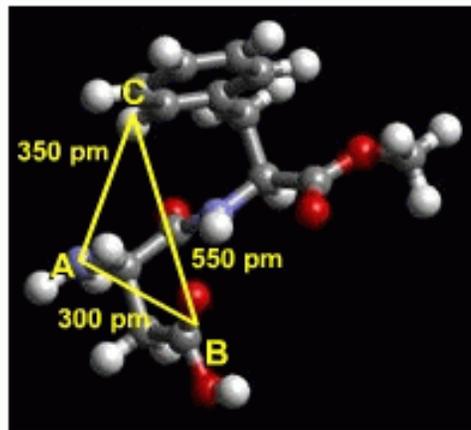
*Muchas propiedades físicas, químicas y bioquímicas dependen de la geometría molecular. Ej: EL TRIANGULO DULCE*



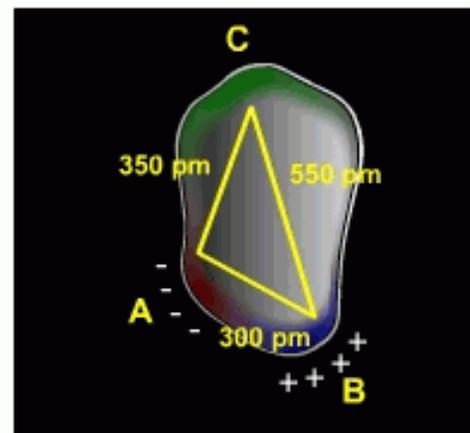
Moléculas distintas pero con una **parte geoméricamente equivalente** tienen comportamiento **bioquímico similar** (sabor dulce en este caso).



$\beta$ -D-fructopyranose



Aspartame



Active site  
in receptor

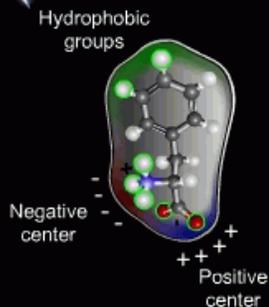
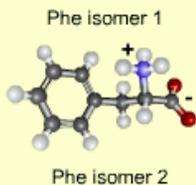
## Isómeros de una misma sustancia tienen propiedades diferentes

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

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

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.

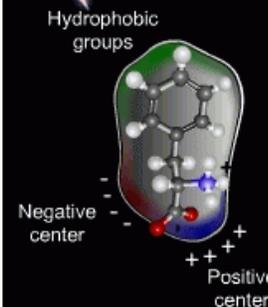
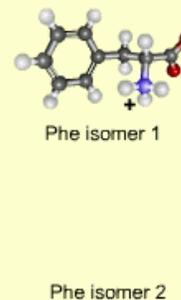


The protein receptor binding site can distinguish between the two mirror-image isomers of phenylalanine.

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

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.

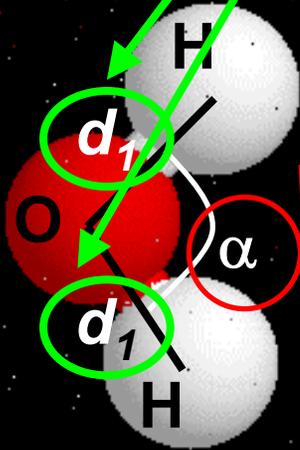


Los parámetros que definen la geometría molecular son:

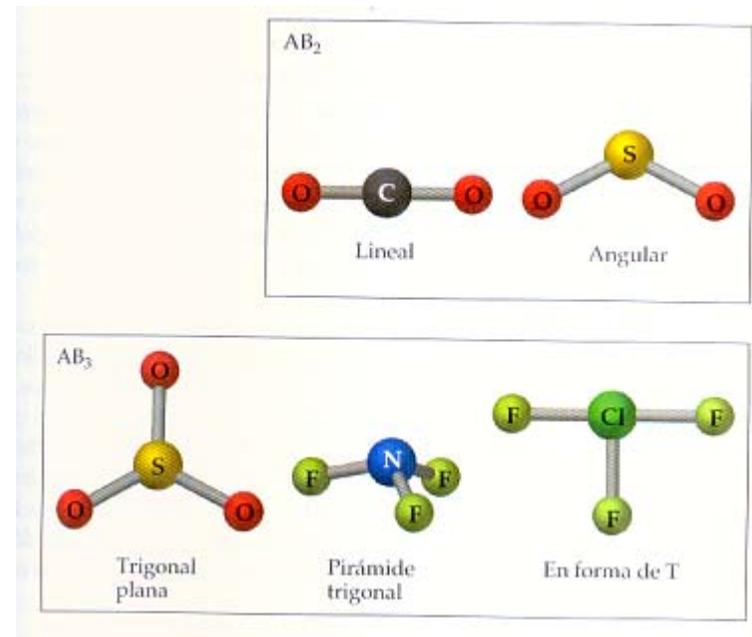
## Distancias y ángulos de enlace

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

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



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



## Algunas geometrías frecuentes:

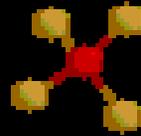
Lineal



Triangular plana



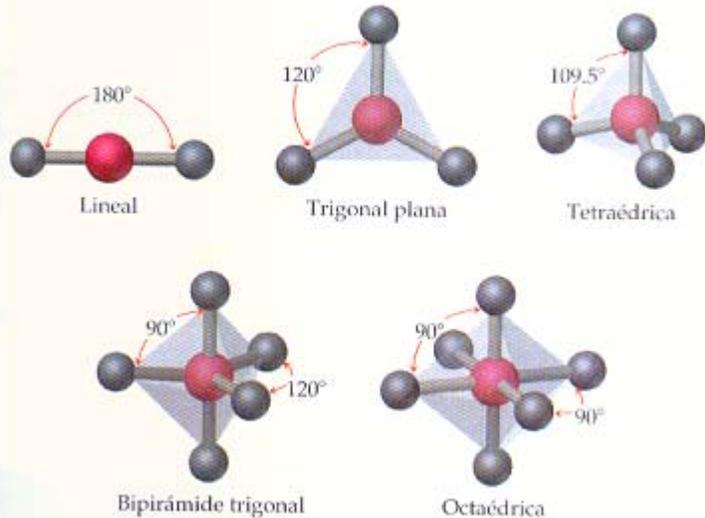
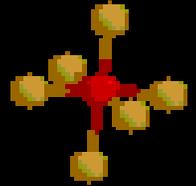
Tetraédrica



Bipirámide trigonal



Octaédrica



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)

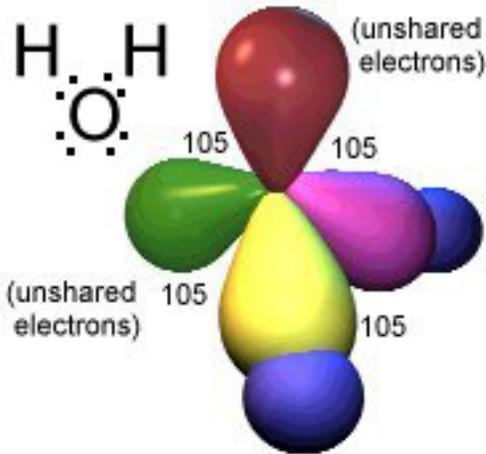
1. Los pares de electrones de la capa de valencia de un átomo se repelen entre sí, tanto si están en enlaces químicos (pares enlazantes) como si no están compartidos (pares solitarios).
2. Los pares de electrones se disponen alrededor de un átomo con orientaciones (*direcciones estereoactivas*) que minimicen las repulsiones.

## **Consideraciones adicionales:**

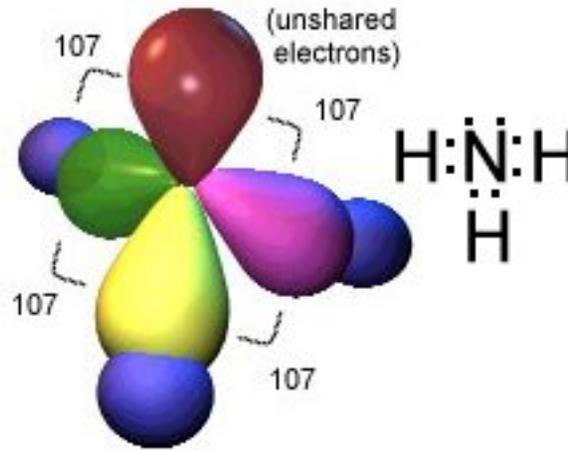
- a) Los enlaces dobles y triples se tratan como si fueran enlaces sencillos***
- b) Cada átomo central se puede manejar individualmente.***
- c) Si para una determinada molécula se pueden construir dos o más estructuras resonantes, el modelo RPECV se puede aplicar a cualquiera de ellas***
- d) La geometría de los pares estereoactivos y de la molécula pueden ser diferentes***

# Geometría de los pares estereosactivos y geometría molecular

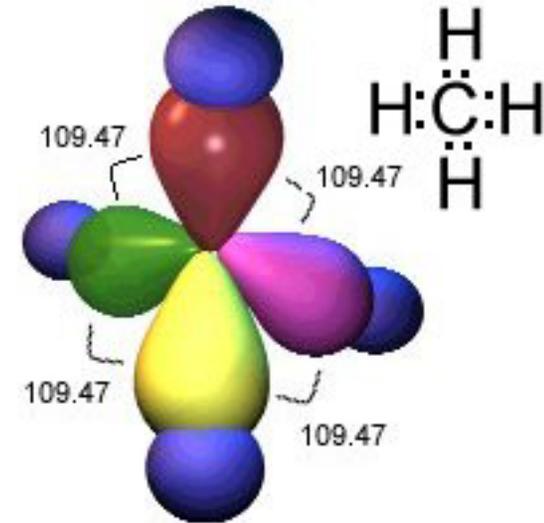
En todos los casos la **geometría** de los **pares estereosactivos es TETRAÉDRICA**



**ANGULAR**



**PIRÁMIDE TRIGONAL**



**TETRAÉDRICA**

**GEOMETRÍA MOLECULAR**

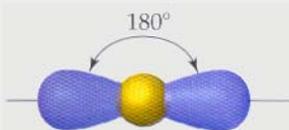
# Geometría de los Pares Estereoactivos

Número de pares estereoactivos

Geometría

Ángulos

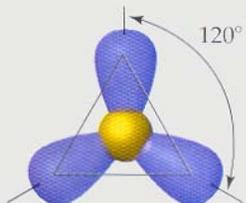
2



Lineal

180°

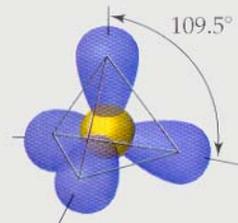
3



Trigonal plana

120°

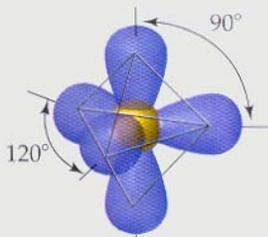
4



Tetraédrica

109.5°

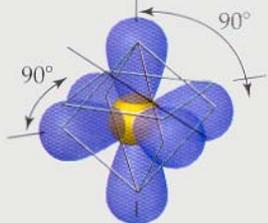
5



Bipirámide trigonal

120°  
90°

6



Octaédrica

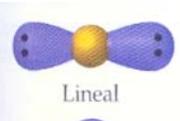
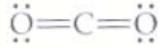
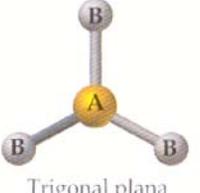
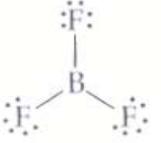
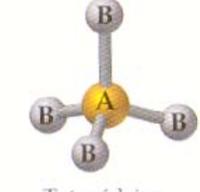
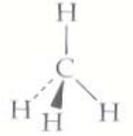
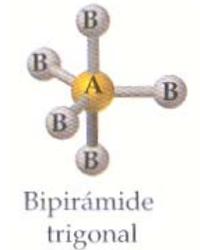
90°



# Geometría Molecular

Aplicación del modelo RPECV a moléculas cuyo **átomo central no tiene pares libres**

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

Número de pares estereoactivos	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	

## Aplicación del modelo RPECV a moléculas cuyo **átomo central tiene uno o más pares libres**

Hay que considerar **tres tipos de interacciones repulsivas**:

Par enlazante - Par enlazante	$(P_E-P_E)$
Par libre - Par libre	$(P_L-P_L)$
Par enlazante - Par libre	$(P_E-P_L)$

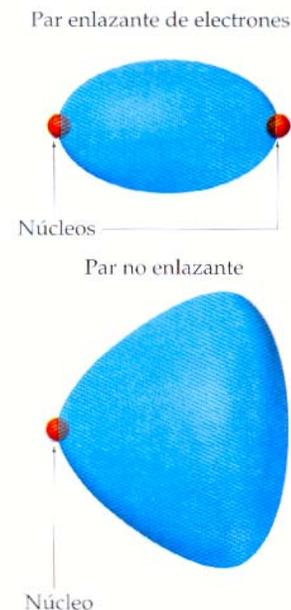
En general, las fuerzas de repulsión disminuyen:

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

*Los electrones enlazantes están atraídos por dos núcleos, luego ocupan menos espacio y originan menor repulsión.*

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

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



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

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

Número de pares estereoactivos

Geometría de pares estereoactivos

Pares enlazantes

Pares libres

Geometría molecular

Ejemplo

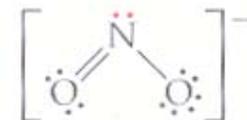
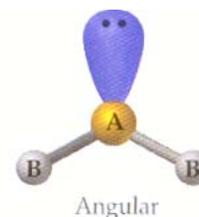
3



2



1



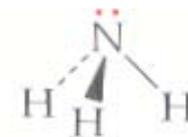
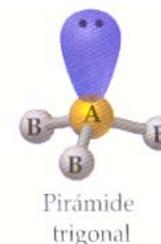
4



3



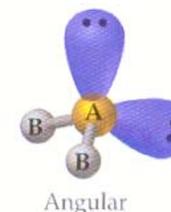
1



2



2



Número de pares estereoaactivos

Geometría de pares estereoaactivos

Pares enlazantes

Pares libres

Geometría molecular

Ejemplo

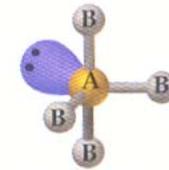
5



Bipirámide trigonal

4

1

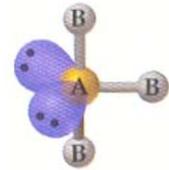


Balancín



3

2



Forma de T



2

3



Lineal



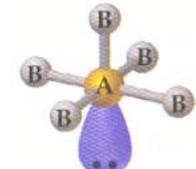
6



Octaédrica

5

1

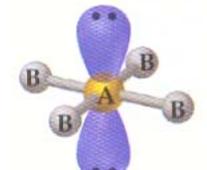


pirámide cuadrada



4

2



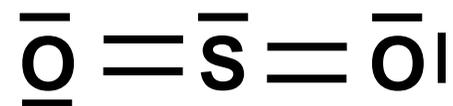
Cuadrada plana



Ejemplos:



Estructura de Lewis



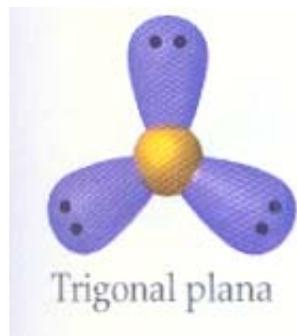
**Los dobles enlaces se consideran como sencillos.**

**Existen 3 direcciones estereoactivas en torno al átomo de S**

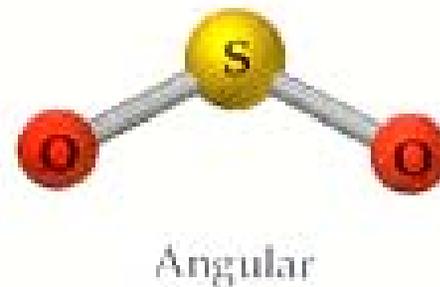
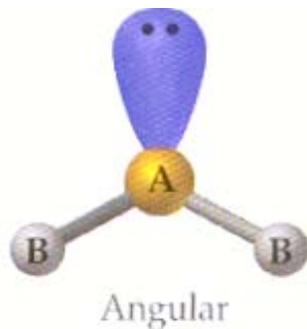
**(2 pares enlazantes + 1 par libre)**



**Geometría de pares estereoactivos**



**Geometría molecular**



Repulsión P<sub>L</sub>-P<sub>E</sub> > Repulsión P<sub>E</sub>-P<sub>E</sub>

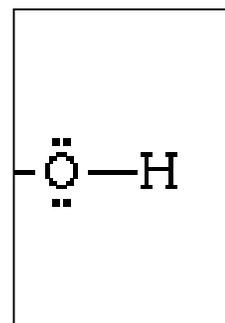
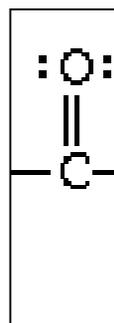
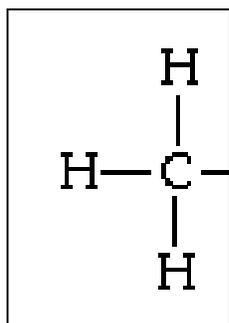
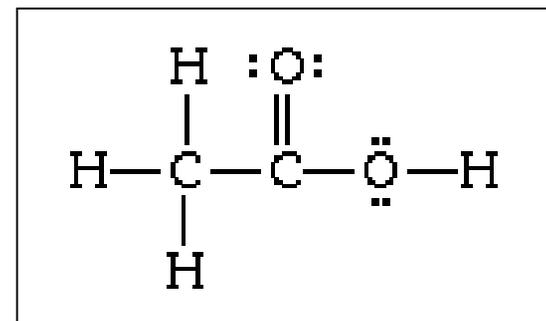


(O-S-O)<sub>exp</sub> ≈ 119.5°

Ácido acético:  $C_2O_2H_4$

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

## Estructura de Lewis



Número de pares estereoactivos

4

3

4

Geometría de pares estereoactivos

**Tetraédrica**

**Trigonal plana**

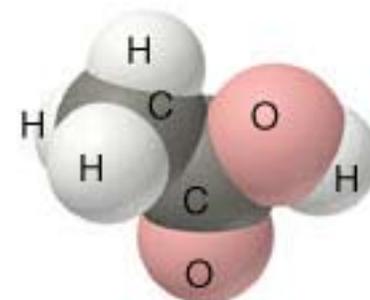
**Tetraédrica**

Ángulos de enlace previstos

**109.5°**

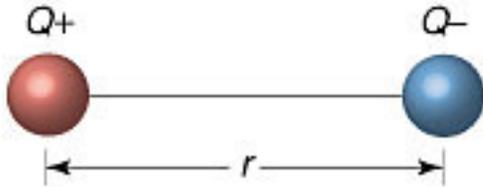
**120°**

**109.5°**



## Geometría y Polaridad molecular

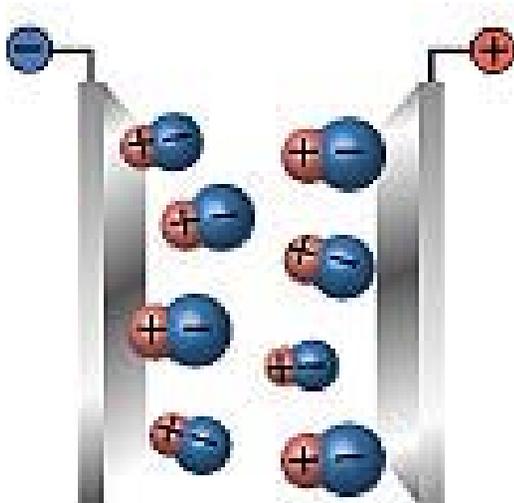
Existen moléculas con una diferente distribución de la carga eléctrica negativa (electrones) y positiva (núcleos) que origina una separación de cargas y la formación de un **DIPOLO ELÉCTRICO** o **MOMENTO DIPOLAR** ( $\mu_D$ ).



$$\mu = Qr$$

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

Orientación de moléculas polares en un campo eléctrico



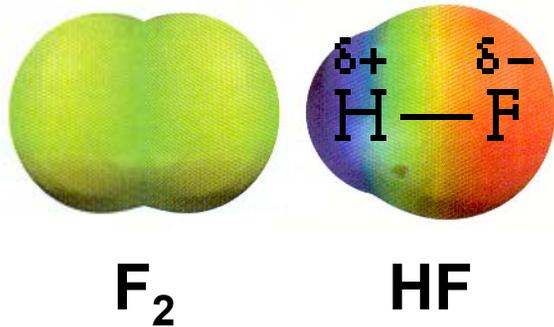
La existencia de momento dipolar molecular depende de:

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

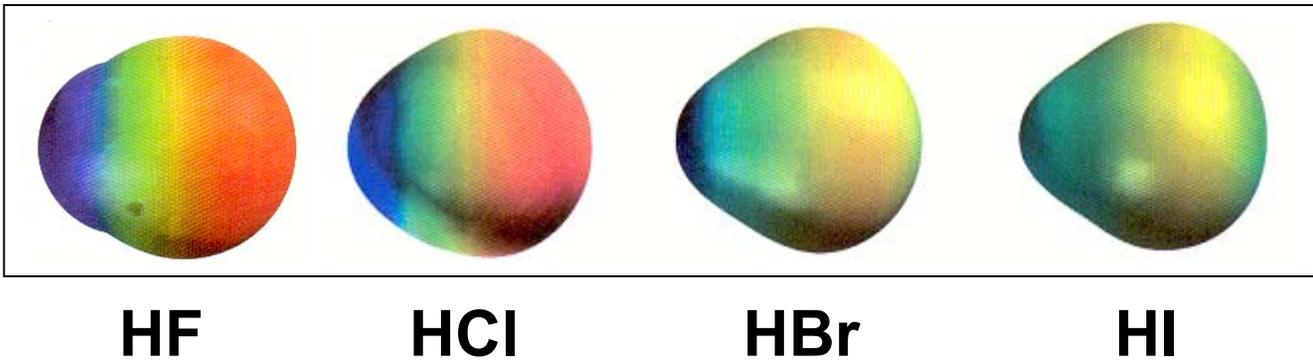
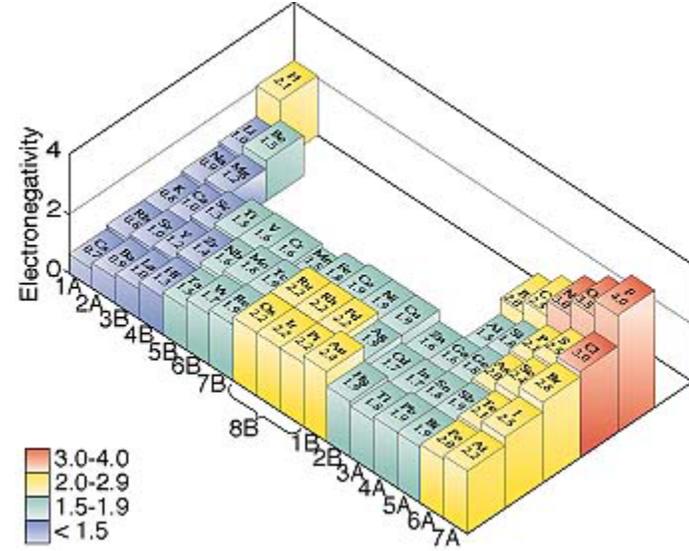
# 1. Polarización de enlaces.

Debido a las **diferencias de electronegatividad** entre átomos enlazados **los electrones de enlace NO SE COMPARTEN SIMÉTRICAMENTE.**

## SEPARACION de CARGA



Aparece **momento dipolar de enlace**

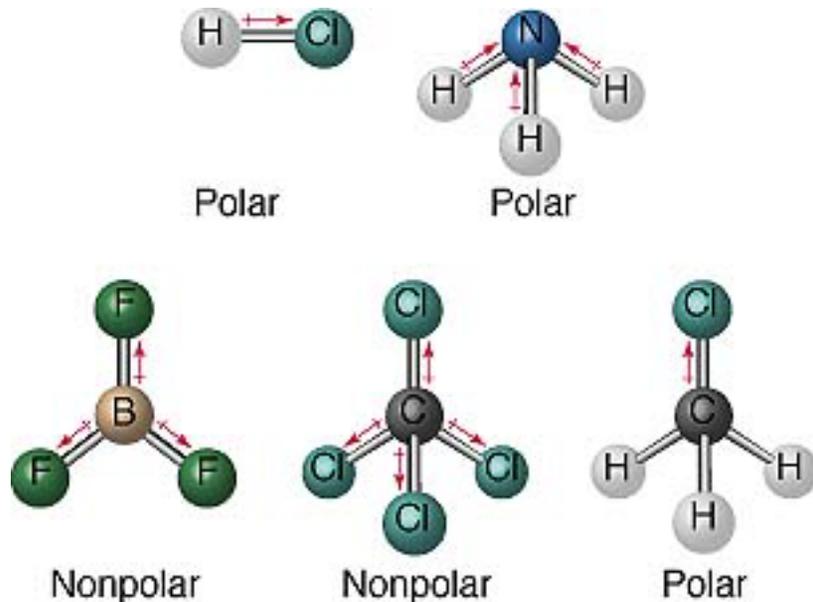
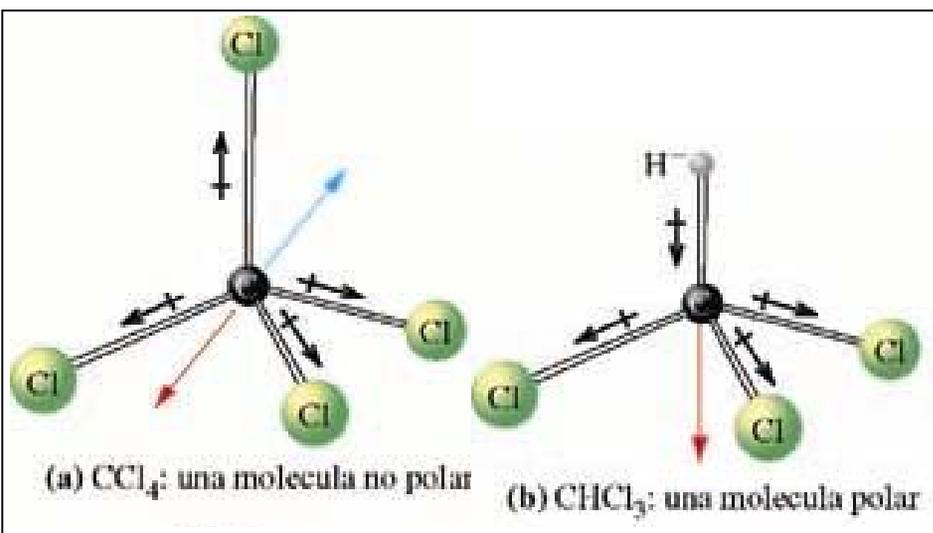
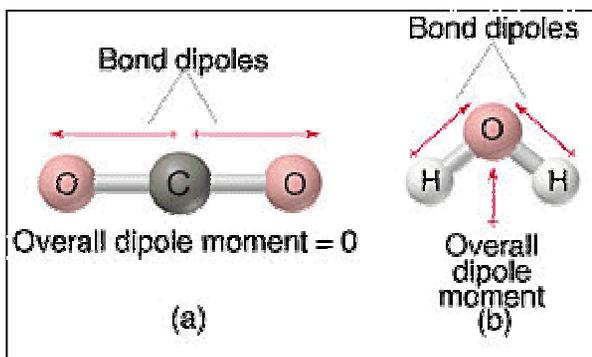


## 2. Geometría (simetría) molecular.

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

$$\mu_D = \sum Q r$$

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



### 3. Los pares de electrones sin compartir.

Los **pares de electrones** sin compartir son zonas negativas con respecto al núcleo que los soporta; esto **contribuye al momento dipolar molecular reforzándolo o debilitándolo**.

