La forma de las moléculas

En los dos capítulos anteriores vimos cómo se combinan los átomos para formar moléculas. A partir de conocer los átomos involucrados en una determinada molécula podemos proponer una posible estructura con el sistema propuesto por Gilbert Lewis (la regla del octeto de electrones externos).

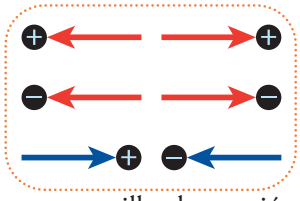
Por otro lado, el estudio de los gases condujo a conocer las dimensiones atómicas, descriptas por el radio de Van der Waals y conocer la distancia entre átomos que forman una moléculas, descriptos estos por los radios covalentes.

Resumiendo, tenemos la forma de conectar los átomos y la distancia que se separan unos de otros. Resta conocer la forma en que estos átomos se distribuyen en el espacio.

Teoría de repulsión de pares electrónicos de valencia (TRePEV) o cómo estar lo más lejos posible

¿De qué están hechos los enlaces químicos?

El sistema de Lewis nos dice, claramente, que están hechos de electrones compartidos, o mejor dicho, en vez de compartidos sería más acertado decir que se encuentran bajo la influencia de las cargas positivas de los núcleos que están en los extremos del enlace. Es un hecho conocido por todos y desde hace milenios que cargas de igual signo se repelen y de signo contrario se atraen:



Esto también le sucede a los electrones, que forman parte de la capa externa del átomo. A pesar de que las dimensiones de las cercanías de los átomos son, sumamente, pequeñas y que, con esta sencilla observación de interacción de cargas no podamos dar cuenta del porqué hay capas de electrones y la capa externa tiene 8 electrones y no 7, 6 ó 9, podemos sí aplicarla a la geometría molecular.

¿De qué forma?

Dado que los enlaces químicos están formados por electrones, estos se repelerán tanto como les sea posible. Así los enlaces se ubicarán de forma tal que los ángulos que forman sean los máximos posibles.

En 1957 dos investigadores, Ronald Gillespie y Ronald Nyholm, propusieron una teoría para explicar y predecir la forma molecular que tenía a la repulsión electrónica como concepto central, se trataba de la Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia (TRePEV), que establece:

1)Los pares electrónicos se ubican en el espacio de forma tal de maximizar la distancia entre ellos.
2)Los pares electrónicos no compartidos se repelen entre sí más que los pares electrónicos compartidos.
3)Los enlaces dobles o triples son geométricamente equivalentes a los enlaces simples.

Esta teoría fue ampliamente corroborada y es uno de los pilares del modelado molecular.

Análisis geométrico[1]

Teniendo en cuenta la Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia (TRePEV) podemos hallar las geometrías moleculares típicas. Una forma equivalente de entender el punto 1) es plantear que para un átomo dado, los elementos unidos a él deben estar lo más alejados posible de él y estos, a su vez, deben estar lo más alejados posible entre sí.

A continuación veremos algunos casos sencillos.

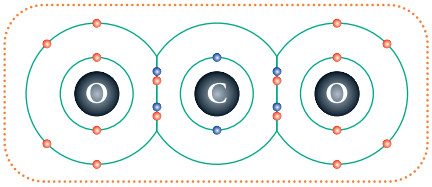
Geometría lineal

Dióxido de carbono (CO_2)

Seguramente han oído hablar de esta molécula, se la indica como responsable del incremento del efecto invernadero. Consiste en dos átomos de oxígeno unidos a un carbono central.

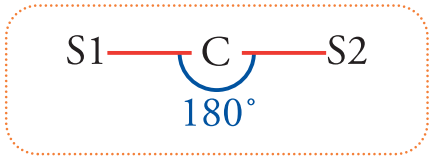
La unión de cada oxígeno al carbono es un doble enlace que podemos escribir así: **O=C=O**

Corresponde a la estructura de Lewis:



El carbono comparte sus cuatro electrones externos, dos con cada átomo de oxígeno. Para la TRePEV no existen diferencias entre enlaces simples, dobles o triples.

La forma en que estos tres átomos pueden disponerse en el espacio lo más distanciados posible, unos de otros, es que se encuentren sobre la misma recta. Señalamos con S1 y S2 a las posiciones de los sustituyentes del carbono para presentar una estructura general:



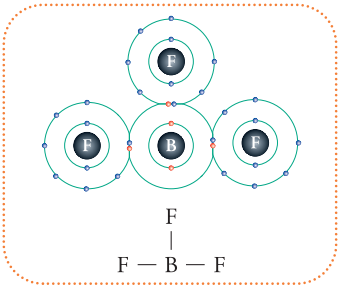
Esta disposición espacial recibe el nombre de geometría linear. El valor de 180° no se modifica en los casos en los cuales los sustituyentes sean distintos. Lo que sí se modifica es la distancia entre los núcleos de los sustituyentes y el carbono, ya que al cambiar de elemento, cambia el radio covalente, por ejemplo, como se ve en la siguiente tabla, en el caso del HCN (cianuro de hidrógeno).

	S1	C	S2	Longitud enlace S1-C (pm)	Longitud enlace C-S2 (pm)
CO_2	O	C	O		
Radio covalente	73	77	73	150	150
HNC	H	C	N		
Radio covalente	37	77	75	114	152

[1] Al final del libro se pueden encontrar los apéndices que explican los conceptos geométricos necesarios para comprender el desarrollo de este apartado.

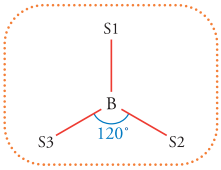
Geometría trigonal planar

Pasemos ahora a la siguiente geometría. Supongamos que ahora tengo un átomo central que se vincula, no a dos, sino a tres sustituyentes, como por ejemplo el trifluoruro de boro (BF_3). Corresponde a la estructura de Lewis:



¿Cuál será el ángulo que formen los enlaces entre sí?

Veamos, primero podemos asegurar que los tres sustituyentes van a definir un plano, el cual incluirá al átomo central ya que esto maximiza la distancia entre los tres sustituyentes y, entonces, el ángulo entre los enlaces será 360° / 3 = 120°. Cualquier ángulo mayor ubicaría a cada sustituyente a una distancia menor a la que se encuentran cuando el ángulo entre los enlaces es de 120°. En este caso, si los sustituyentes fueran distintos se modificarían las distancias y los ángulos se desviarían del valor ideal de 120°.

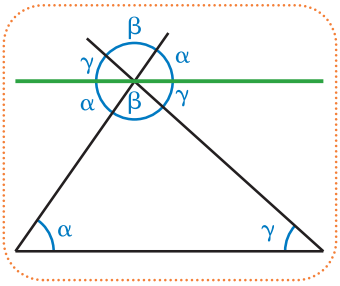


Esta geometría se llama trigonal planar (es decir tres líneas – enlaces – en un plano). El ejemplo que presentamos es el del trifluoruro de boro (BF_3) que es un gas corrosivo que se utiliza para sintetizar compuestos borados más complejos.

Es fácil deducir que el ángulo entre dos enlaces es de 120°.

Primero podemos observar que, si sumamos los ángulos internos de cualquier triángulo, podemos formar un ángulo de 180°.

Siempre es posible dibujar cualquier triángulo, sea este equilátero (los tres lados iguales), isósceles (dos lados iguales y uno distinto) o escaleno (todos sus lados distintos) con el lado mayor horizontal y trazar una paralela a éste que pase por el vértice opuesto (en verde) y prolongar los lados menores de forma tal que formamos la siguiente figura:

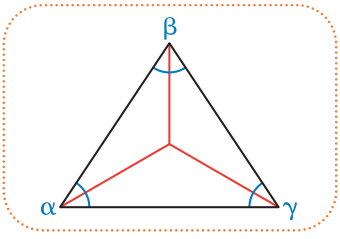


Es posible plantear la siguiente ecuación: $2 * (\alpha + \beta + \gamma) = 360°$

De aquí es inmediato obtener que la suma de los ángulos internos de cualquier triángulo sea 180°:

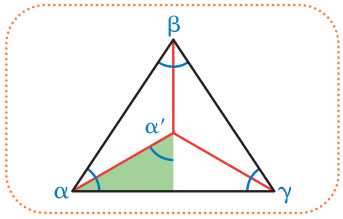
$$\alpha + \beta + \gamma = \frac{360°}{2} = 180°$$

A continuación, en una representación de una molécula de geometría trigonal planar, podemos plantear el siguiente esquema ya que de la igualdad de sustituyentes resultan enlaces de igual longitud y, por lo tanto, el triángulo que definen es equilátero:

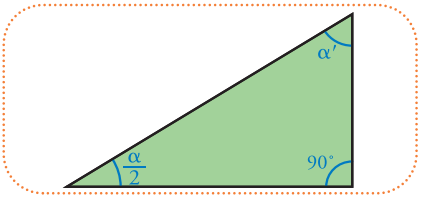


De la igualdad de ángulos obtenemos su amplitud: $\alpha = \beta = \gamma = 180° / 3 = 60°$

Podemos definir el siguiente triángulo (en verde):



Si lo analizamos por separado:



Nuevamente vale el resultado general de la sumatoria de ángulos internos igual a 180º, y entonces despejamos α´:

$\alpha / 2 + \alpha' + 90° = 180°$
$60° / 2 + \alpha' + 90° = 180°$
$30° + \alpha' + 90° = 180°$
$\alpha' + 120° = 180°$
$\alpha' = 180° - 120°$
$\alpha' = 60°$

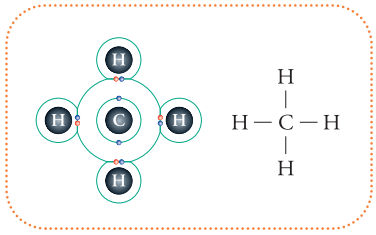
Como el ángulo entre los enlaces es el doble de α´, tenemos entonces que: **$2 * \alpha' = 120°$**

Es importante notar que este resultado se obtiene sabiendo que la longitud de los tres enlaces es la misma, sin necesidad de especificar qué valor tienen, y que se encuentran lo más separados posible unos de otros.

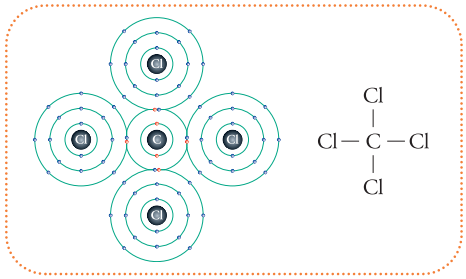
Geometría tetraédrica

La geometría tetraédrica está caracterizada por un único ángulo pero éste es un poco más difícil de deducir, aunque vale la pena hacerlo ya que su resultado es un valor ampliamente utilizado y citado a lo largo de toda la literatura química.

Ejemplos de moléculas con esta geometría es el metano (CH_4) que es un gas y es el principal componente del gas natural. Su estructura de Lewis es:

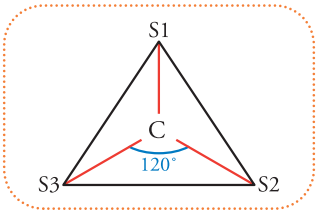


El tetracloruro de carbono (CCl_4), también tiene esta estructura espacial. Es un líquido incoloro que fue utilizado como extintor de incendios y que, debido a su toxicidad comprobada posteriormente, su uso ha quedado reducido a servir como solvente o reactivo en síntesis orgánica.
Su estructura de Lewis es:

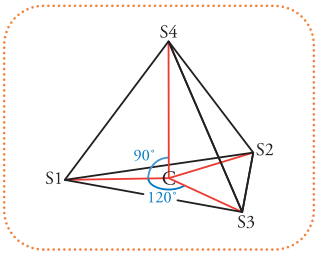


A continuación seguiremos la deducción del ángulo característico de la geometría tetraédrica.

Supongamos que partimos de una geometría trigonal planar:



Al carbono central le agregamos un sustituyente más, que se eleva del plano tanto como sea necesario para que la distancia **entre los cuatro sustituyentes** sea la misma, queda así formado un tetraedro (poliedro perfecto más pequeño, de cuatro caras triangulares equiláteras):

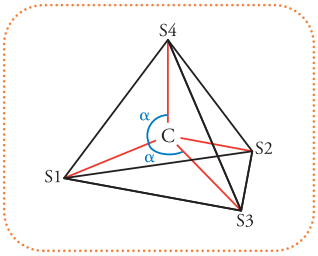


Esta distribución espacial de los cinco átomos no es aceptable, ya que aparecen claras asimetrías en la longitud de los enlaces y a igualdad de átomos que intervienen en un enlace igualdad de distancias porque los radios covalentes son constantes.

Los enlaces que unen al carbono con los sustituyentes S1, S2 y S3 forman ángulos de 120°, mientras que con el enlace carbono-S4 forman ángulos de 90°.

Esta configuración no es estable. La forma de estabilizarla, es decir, de hacerla más simétrica, más equilibrada, sin variar la distancia entre los sustituyentes, es elevar el carbono. Esto producirá un incremento de los ángulos de 90° y una disminución de la amplitud de los ángulos de 120°.

La elevación que produzca que todos los ángulos tengan la misma amplitud será la posición de equilibrio:

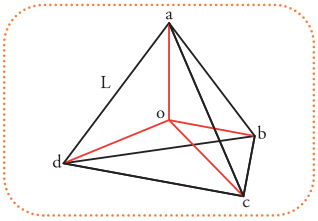


Se puede ver que: $120° > \alpha > 90°$

Hasta aquí hemos planteado el problema.

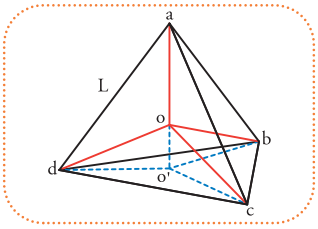
Ahora debemos intentar una solución.

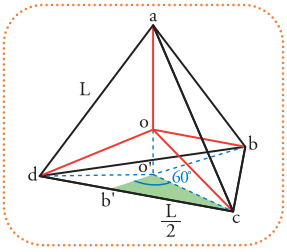
Planteemos un esquema geométrico de la situación:



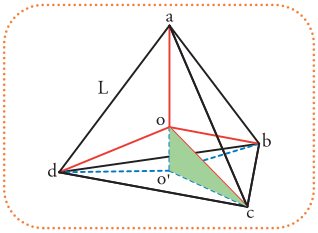
Las letras a, b, c, d y o representan vértices y L representa la longitud de los lados ad, ab, ac, bd, bc y cd.

Proyectemos los enlaces ob, oc y od sobre la cara inferior[2], definida por los vértices b, c, d:





Podemos definir el triángulo rectángulo con cateto menor oo', cateto mayor o'c e hipotenusa oc:



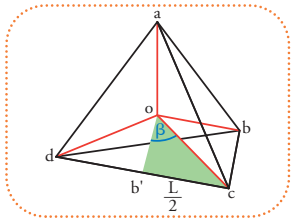
Hay otros triángulos que podemos definir a partir del vértice c:

El punto b' representa el punto medio entre c y d. La amplitud del ángulo b'o'c es la mitad del ángulo obtenido en el análisis de la geometría trigonal planar, por lo tanto,

[2] Recordemos que como se trata de un poliedro perfecto todas la caras son equivalentes, por lo tanto elegir cara inferior nos dará un resultado general.

podemos asegurar, inmediatamente, que vale 60°.

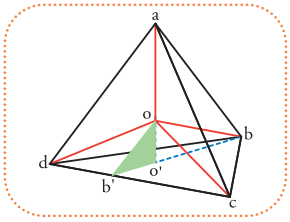
Otro triángulo que podemos definir es:



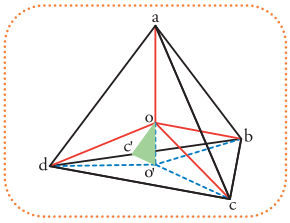
Aquí señalamos β ya que su amplitud es la mitad de la amplitud que estamos buscando (α), por lo tanto: $\alpha = 2 * \beta$

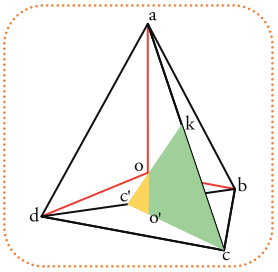
De este triángulo sabemos que el cateto mayor b'c vale L/2 o sea la mitad del lado L. Si supiéramos qué fracción de L corresponde a ob' podríamos plantear la función trigonométrica tangente para el ángulo β y despejar su amplitud.

También podemos definir el siguiente triángulo:



El triángulo b'o'o es equivalente al triángulo c'o'o ya que se obtiene, simplemente, rebatiendo el triángulo b'o'o sobre la recta que definen o'c:



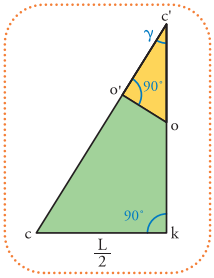


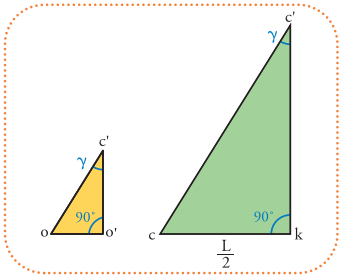
A partir del triángulo c'o'o podemos prolongar el lado c'o hasta que se interseque con el lado ac.

Es sencillo de ver que la distancia ak es igual que ck ya que el lado prolongado no es ni más ni menos que la bisectriz del ángulo $\widehat{ac'c}$.

Así la longitud de los lados ak y ck es L/2.

Podemos analizar la relación entre estos dos triángulos:



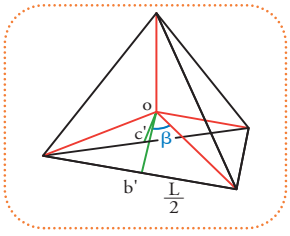


Los triángulos c'o'o y c'kc son equivalentes ya que tienen los tres ángulos iguales. Esto es sumamente útil ya que las funciones trigonométricas tienen los mismos resultados en ambas figuras.

A partir de este punto comenzaremos a utilizar funciones trigonométricas en todos los triángulos que hemos presentado con el objetivo de obtener β. Si el lector quisiera recordar las definiciones de las funciones trigonométricas puede consultar el apéndice dedicado a ellas al final del libro.

El objetivo de las ecuaciones que escribiremos hasta el final del apartado apuntarán a describir las relaciones geométricas entre ángulos y segmentos expresados en función de la longitud L.

Recordemos que para obtener β nos bastaría saber la longitud b'o, esta longitud es igual a c'o:



Podemos plantear las siguientes ecuaciones para γ.

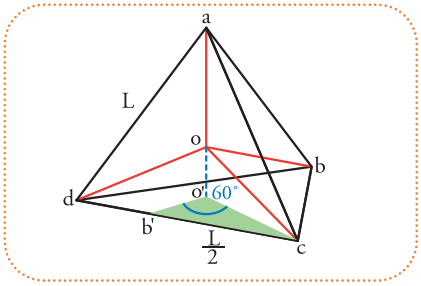
Si observamos el triángulo c'o'o (en amarillo):

$$\cos\gamma = \frac{\text{cateto adyacente a } \gamma}{\text{hipotenusa}} = \frac{c'o'}{oc'}$$

Si observamos el triángulo c'ck (en verde):

$$\text{sen}\,\gamma = \frac{\text{cateto opuesto a } \gamma}{\text{hipotenusa}} = \frac{ck}{cc'} = \frac{ck}{co' + o'c'}$$

Hasta ahora hemos involucrado tres segmentos que debemos expresar en función de la longitud L (son los segmentos c'o', c'o, ck).



$$\text{sen } 60^o = \frac{\text{cateto opuesto a } 60^o}{\text{hipotenusa}} = \frac{cb'}{co'}$$

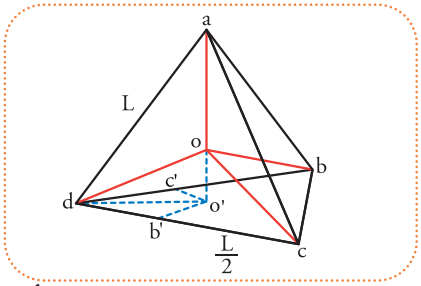
$$co' = \frac{cb'}{\text{sen } 60^o} = \frac{L/2}{\text{sen } 60^o}$$

Bien, ahora podemos expresar co' a partir del triángulo o'b'c

Sabemos que c'o' es igual a b'o' ya que proviene del rebatimiento de este segmento sobre la recta que definen co', por lo tanto para el mismo triángulo podemos plantear:

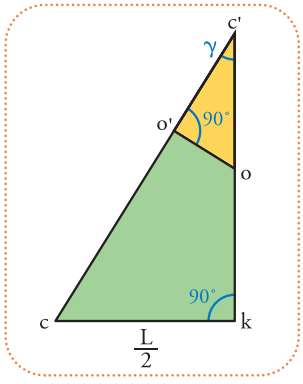
$$\text{tg } 60^o = \frac{\text{cateto opuesto a } 60^o}{\text{cateto adyacente}} = \frac{cb'}{o'b'} \quad \text{entonces} \quad o'b' = \frac{cb'}{\text{tg } 60^o} = \frac{L/2}{\text{tg } 60^o}$$

Recordamos que:



$$c'o' = o'b' = \frac{cb'}{\text{tg } 60^o} = \frac{L/2}{\text{tg } 60^o}$$

Éste es un resultado importante que nos permitirá encontrar la longitud del segmento oc' a partir de poder definir γ en función de L ya que si observamos los triángulos c'o'o (en amarillo) y c'kc (en verde):



La hipotenusa cc' es la suma de co' + o'c' y ambos segmentos los hemos expresado en función de L, para encontrar una expresión de γ en función de L debemos utilizar la inversa de la función seno, el arcoseno:

sen γ = cateto opuesto / hipotenusa

sen γ = ck / c'c

sen γ = ck / (c'o' + o'c)

$$\gamma = \operatorname{arcsen}\left(\frac{ck}{co' + c'o'}\right)$$

$$= \operatorname{arcsen}\left(\frac{L/2}{\frac{L/2}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{L/2}{\operatorname{tg} 60^o}}\right)$$

$$= \operatorname{arcsen}\left[\frac{\cancel{L/2}}{\cancel{L/2}\left(\frac{1}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{1}{\operatorname{tg} 60^o}\right)}\right]$$

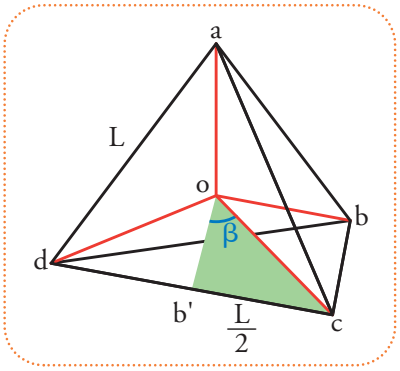
$$= \operatorname{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{1}{\operatorname{tg} 60^o}}\right)$$

Ahora que tenemos una expresión para γ y c'o' podemos plantear una expresión para oc', lo cual es nuestro objetivo ya que es igual a ob':

$$ob' = oc' = \frac{c'o'}{\cos\gamma} = \frac{\frac{L/2}{\operatorname{tg} 60^o}}{\cos\left[\operatorname{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{1}{\operatorname{tg} 60^o}}\right)\right]}$$

$$= \frac{L}{2 \operatorname{tg} 60^o \cos\left[\operatorname{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{1}{\operatorname{tg} 60^o}}\right)\right]}$$

Si observamos la ubicación de β:



Podemos plantear la ecuación de la función tangente de β y despejarlo, utilizando la función trigonométrica inversa, la función arcotangente (arctg):

$$\operatorname{tg}\beta = \frac{\text{cateto opuesto a } \beta}{\text{cateto adyacente a } \beta} = \frac{cb'}{ob'}$$

Los valores de las funciones trigonométricas se encuentran precalculados en las memorias de cualquier calculadora científica o, como en épocas anteriores a la computación, en tablas impresas.

Entonces sí, podemos calcular β planteando la inversa de la función tangente:

$$\beta = \operatorname{arctg} = \left(\frac{cb'}{ob'}\right) = \operatorname{arctg}\left\{\frac{\frac{L/2}{L}}{2 \operatorname{tg} 60^o \cos\left[\operatorname{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{\operatorname{sen} 60^o} + \frac{1}{\operatorname{tg} 60^o}}\right)\right]}\right\}$$

Simplificamos L/2 ya que aparece multiplicando y dividiendo (arriba y debajo de la línea de fracción) y tenemos:

$$\beta = \text{arctg}\left\{\text{tg } 60^\circ \cos\left[\text{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{\text{sen } 60^\circ}+\frac{1}{\text{tg } 60^\circ}}\right)\right]\right\}$$

Resolvemos las funciones trigonométricas seno y tangente para el ángulo de 60°:

$$\beta = \text{arctg}\left\{1{,}7321 \cos\left[\text{arcsen}\left(\frac{1}{\frac{1}{0{,}8660}+\frac{1}{1{,}7321}}\right)\right]\right\}$$

$$= \text{arctg}\left\{1{,}7321 \cos\left[\text{arcsen}\left(\frac{1{,}5}{2{,}5981}\right)\right]\right\}$$

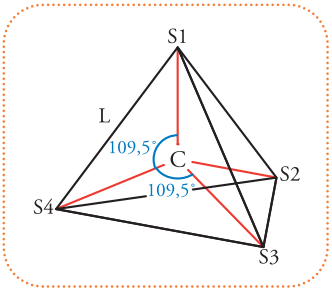
$$= \text{arctg}\,[1{,}7321 \cos(35{,}264^\circ)] = \text{arctg}\,(1{,}4143) = 54{,}74^\circ$$

Como habíamos planteado al principio:

$$\alpha = 2 * \beta$$
$$= 2 * 54{,}74^\circ$$
$$= 109{,}48^\circ$$

Este valor se suele informar como redondeado a la primera cifra decimal, o sea 109,5°.

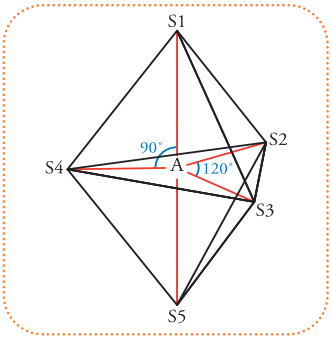
Éste es un resultado muy importante ya que establece un valor de referencia respecto del cual se pueden medir desviaciones ya sean medidas experimentalmente o sobre un modelo propuesto.



Otras geometrías

Las tres formas geométricas presentadas son las más importantes en la química orgánica, aunque hay otras estructuras que se presentan en compuestos inorgánicos.

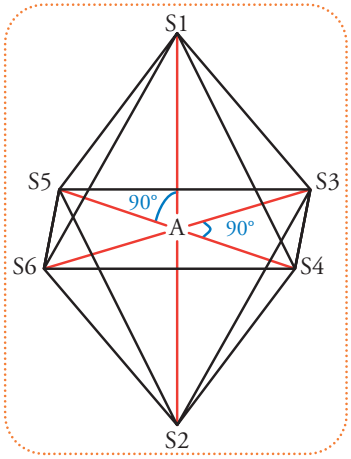
Existen compuestos con un átomo central con 5 sustituyentes, el sólido que describe la distribución es la bipirámide triangular.



Dos ángulos son necesarios para describir esta geometría, 90° forma el eje central con el plano de los sustituyentes ecuatoriales y los enlaces de estos con el átomo central están determinando un ángulo de 120°.

Compuestos que presentan esta forma son: el pentafloruro de fósforo (PF_5), el pentacloruro de fósforo (PCl_5) y el pentafluoruro de astato (AsF_5).

Seis sustituyentes alrededor de un átomo central se disponen en una geometría llamada octaédrica.



Con un único ángulo de 90° podemos describir esta geometría.

Un compuesto que presenta esta forma es el hexafloruro de azufre (SF_6).

Por último hay evidencia de la existencia de la geometría piramidal pentagonal que puede ubicar seis sustituyentes en una pirámide de base pentagonal, corresponde a la geometría del compuesto hexafluoruro de xenón (XeF_6).

La geometría bipiramidal pentagonal, que permite organizar siete sustituyentes vinculados a un átomo central, se conoce para el compuesto heptafluoruro de yodo (IF_7).

Efecto de los electrones no compartidos

Como establece la Teoría de Repulsión de Pares Electrónicos de Valencia (TRePEV), los pares electrónicos que no intervienen en enlaces se repelen entre sí, más que los pares electrónico compartidos. Por lo tanto, la geometría que resulte de ubicar en el espacio a todos los pares electrónicos, se verá deformada cuando existan pares electrónicos desapareados.

El efecto de tal deformación lo veremos en las tres geometrías que vimos en detalle: la lineal, la trigonal planar y la tetraédrica.

Efecto de un par electrónico no compartido central en moléculas de tres átomos

Predeciremos la geometría de una molécula con tres átomos.

Para analizar las situaciones que veremos a continuación conviene que el lector tenga totalmente claro el sistema de Lewis y que pueda distinguir correctamente el concepto de electrón compartido y no compartido.

Observemos el átomo central.

Si hay un par electrónico no compartido en este átomo quiere decir que el octeto se formó compartiendo la mitad de los electrones que restan, pero ¿cuántos son?

Es decir, si:

Octeto = pares no compartidos + pares compartidos

Expresamos esto en número de electrones:

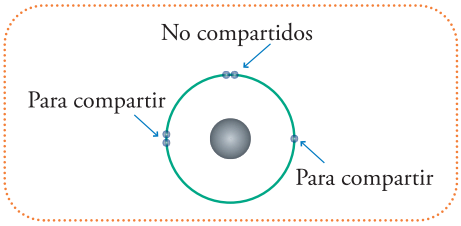
Octeto = pares no compartidos + pares compartidos

8 electrones = (2 * pares no compartidos) son los electrones no compartidos + (2 * pares compartidos) son los electrones compartidos
8 electrones = (2 * 1) son los electrones no compartidos + (2* 3) son los electrones compartidos
8 electrones = 2 electrones no compartidos + 6 electrones compartidos

Los pares compartidos se forman con el aporte de un electrón de cada núcleo que forma el enlace, por lo tanto, el átomo central aportó 3 electrones (6 electrones compartidos / 2)

Estos tres electrones tienen que intervenir en la unión a dos átomos, es decir, que se formarán necesariamente un enlace doble y uno simple.

Así, la capa externa de los elementos que puedan ocupar la posición central deberá tener 5 electrones. Los elementos que tienen esta característica son los que pertenecen al grupo 15 de la tabla periódica, son el nitrógeno (N), fósforo (P), arsénico (As), antimonio (Sb), bismuto (Bi) y el ununpentium (Uup)[3].
Representamos, sólo, la capa externa de electrones.



Los elementos a los que se une este átomo central deben cumplir su octeto compartiendo dos electrones uno y un electrón el otro.

Quiere decir que, el elemento que estableció dos enlaces con el átomo central completará su octeto con dos electrones que comparta, o sea, que su capa externa antes de formar la unión contiene 6 electrones (8 electrones del octeto formado – 2 electrones que le compartió el átomo central). Los elementos que tienen esta característica son los que pertenecen al grupo 16 de la tabla periódica, son el oxígeno (O), el azufre (S), el selenio (Se), el telurio (Te), el polonio (Po) y el ununhexium (Uuh).

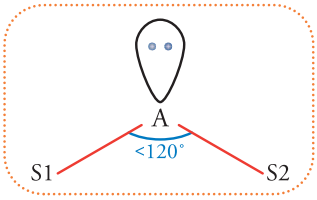
Por otro lado, el otro elemento debe compartir un electrón para completar su octeto (o dueto en el caso del grupo 1), por lo tanto, o bien pertenece al grupo 1 (hidrógeno (H), litio (Li), sodio (Na), potasio (K), rubidio (Rb), cesio (Cs) o francio (Fr)), o bien, pertenece al grupo 17 (flúor (F), cloro (Cl), bromo (Br), yodo (I), astato (At) y ununseptium (Uus)[4].

Es posible armar 468 moléculas distintas[5] siguiendo las reglas de Lewis (considerando solamente enlaces covalentes) y utilizando todos los elementos de cada grupo.

Se ha verificado la existencia de:

el nitroxilo:	O = N – H
el fluoruro de nitrosilo:	O = N – F
el cloruro de nitrosilo:	O = N – Cl
el bromuro de nitrosilo:	O = N – Br

Como establece la TRePEV la repulsión de los pares electrónicos involucrados en enlaces es menor que la repulsión entre pares electrónicos no compartidos (o desapareados), por lo tanto el ángulo que forman los enlaces es menor que 120°.

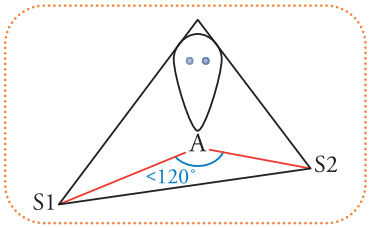


[3] Los elementos de más de 100 protones en su núcleo descubiertos en los últimos años se encuentran sólo en tablas periódicas modernas como en http://www.webelements.com/.

[4] A diferencia de todos los elementos comprendidos entre ununbium (Z = 112) al ununoctium (Z = 118), el ununseptium (Z = 117) es el único elemento que representa una verdadera vacancia, a la fecha no existen reportes aún de su existencia.

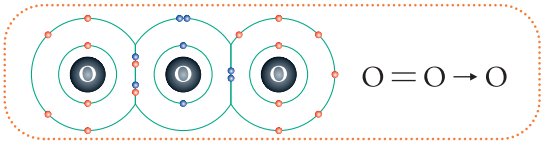
[5] El número total de moléculas distintas se halla multiplicando la cantidad de elementos que pueden ocupar cada posición. Para la posición central hay 6 elementos del grupo 15, para la posición que forma un enlace doble hay 6 elementos del grupo 16 y para la posición que forma un enlace simple hay 7 elementos del grupo 1 más 6 elementos del grupo 17. Por lo tanto: 6 * 6 * (6 + 7) = 468.

Como en el caso de las moléculas listadas los sustituyentes son distintos y, por lo tanto, las longitudes de sus enlaces diferirán, el resultado es que la forma molecular es un triángulo escaleno.

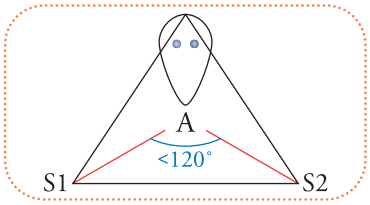


Esta geometría se puede verificar en los casos donde, además de haber enlaces covalentes simples o dobles, intervienen enlaces covalentes dativos.

Una molécula muy conocida que tiene esta geometría es la molécula de ozono (O_3).



Su forma molecular es la de un triángulo isósceles.



Efecto de dos pares electrónicos no compartidos centrales en moléculas de tres átomos

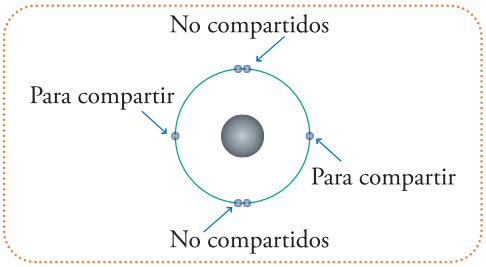
Nuevamente haremos un análisis como en el caso anterior para deducir cuáles moléculas pueden tener esta geometría.

Si hay dos pares electrónicos no compartidos en el átomo central quiere decir que el octeto se formó compartiendo la mitad de los electrones que restan, o sea:

Octeto = pares no compartidos + pares compartidos
8 electrones = (2 * pares no compartidos) son los electrones no compartidos + (2 * pares compartidos) son los electrones compartidos
8 electrones = (2 * 2) son los electrones no compartidos + (2* 2) son los electrones compartidos
8 electrones = 4 electrones no compartidos + 4 electrones compartidos

Como los pares de electrones compartidos se forman con un electrón de cada núcleo los electrones que comparte el átomo central son 2 (4 electrones compartidos / 2).

La capa externa del átomo central tiene entonces 6 electrones, lo cual sucede en elementos del grupo 16 (oxígeno (O), etc.).



Los elementos a los que se une este átomo central deben cumplir su octeto compartiendo un electrón cada uno.

Los elementos deben compartir un electrón para completar su octeto (o dueto en el caso del grupo 1) o bien pertenecen al grupo 1 (hidrógeno (H), etc.) o bien pertenecen al grupo 17 (flúor (F), etc.).

Es posible armar 1.014 moléculas distintas[6] siguiendo las reglas de Lewis (considerando solamente enlaces covalentes) y utilizando todos los elementos de cada grupo. Desde luego que no todas las moléculas que es posible armar han sido observadas.

Efecto de un par electrónico desapareado central en moléculas de cuatro átomos

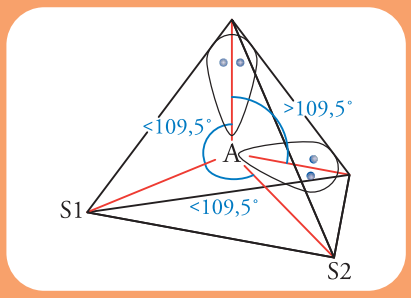
Si hay un par electrónico no compartidos en el átomo central quiere decir que el octeto se formó compartiendo la mitad de los electrones que restan. El caso es, exactamente, igual al primero que analizamos, o sea que la capa externa debe tener 5 electrones. Los elementos con esta característica son los que pertenecen al grupo 15 de la tabla periódica, (nitrógeno (N), etc.).

Como el átomo central está unido a tres sustituyentes la única opción es que cada electrón compartido se encuentre formando parte de un enlace simple.

Como en el segundo caso, los elementos deben compartir un electrón para completar su octeto (o dueto en el caso del grupo 1), o bien pertenecen al grupo 1 (hidrógeno (H), etc.), o bien, pertenecen al grupo 17 (flúor (F), etc.). Por lo tanto, hay 13.182 moléculas distintas[7] que podemos armar siguiendo las reglas de Lewis.

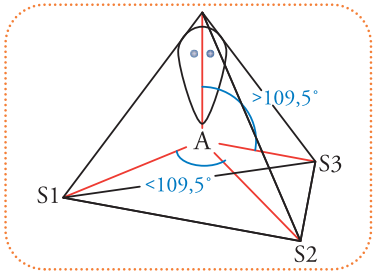
Un caso muy importante son los compuestos de nitrógeno, por ejemplo, el amoníaco (NH_3), también se pueden mencionar la trifluoruro de fósforo (PF_3), el tricloruro de fósforo (PCl_3) y al trihidruro de fósforo (conocido también como fosfina) (PH_3).

Ejemplos de este tipo son:
el agua (H_2O), el sulfuro de hidrógeno (H_2S) y el cloruro de azufre (SCl_2) cuya geometría es un tetraedro deformado al considerar que los orbitales ocupan dos vértices:



El resultado de la interacción con los pares electrónicos no compartidos es que los enlaces forman un ángulo menor a 109,5° (valor que dedujimos de suponer que el tetraedro era perfectamente simétrico).

Los dos casos que describimos son llamados casos de geometría angular ya que sólo se tienen en cuenta los núcleos de los elementos enlazados.



El tetraedro se deforma y los sustituyentes se acercan. Los enlaces forman un ángulo menor a 109,5° entre sí, pero mayor a ese valor con respecto al eje del par electrónico no compartido.

Este caso es llamado de geometría piramidal (considerando sólo los núcleos de los elementos unidos).

Las geometrías que puede ofrecernos el carbono

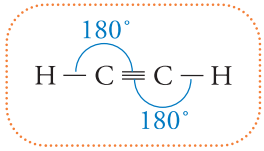
Recordemos que, de los elementos más abundantes en la química orgánica, es el carbono el que ofrece la mayor plasticidad en cuanto a la formación de distintas geometrías. Esto lo convierte en el elemento básico de cualquier molécula orgánica.

[6] El número total de moléculas distintas se halla multiplicando la cantidad de elementos que pueden ocupar cada posición. Para la posición central hay 6 elementos del grupo 16, para la posición que forma un enlace simple hay 7 elementos del grupo 1 más 6 elementos del grupo 17 y para la otra posición se repiten los mismos elementos. Por lo tanto: 6 * (6 + 7) * (6 + 7) = 1.014.

[7] Para la posición central hay 6 elementos del grupo 15, para cada posición que forma un enlace simple hay 7 elementos del grupo 1 más 6 elementos del grupo 17. Por lo tanto: 6 * (6 + 7) * (6 + 7) * (6 + 7) = 13.182.

Puede presentar una geometría lineal, llamada ***sp¹***. Este nombre proviene del ámbito de la mecánica cuántica e indica que esta conformación se obtiene de la hibridación de un orbital llamado "***s***" con un orbital llamado "***p***".

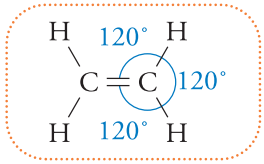
Esto es lo que sucede en la molécula de etino.



Cada carbono presenta una hibridación de orbitales de tipo ***sp¹*** que hace que la geometría de cada uno sea lineal.

También pueden hibridarse un orbital ***s*** con dos orbitales ***p*** dando lugar a la hibridación de orbitales de tipo ***sp²***.

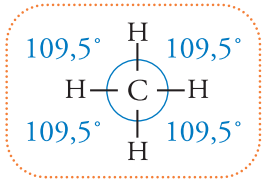
Esto es lo que sucede en la molécula de eteno.



Cada carbono da lugar a una geometría trigonal planar.

Finalmente, es posible que se hibriden un orbital ***s*** con tres orbitales ***p***, para formar la hibridación ***sp³***, como en el caso del metano.

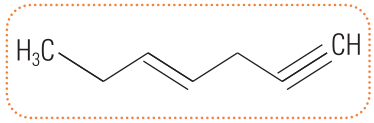
En este caso la geometría resultante es la tetraédrica.



Combinaciones

Todas estas formas geométricas se pueden combinar para explicar la forma molecular de una entidad cuya cantidad de átomos sea arbitraria.

Por ejemplo, la siguiente molécula dibujada con el ACD/ChemSketch (Freeware) consta de siete carbonos cada uno con su hibridación correspondiente.

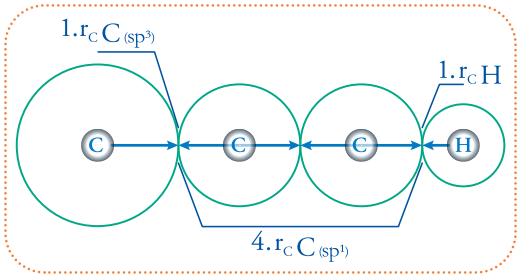


De izquierda a derecha podemos ir mencionando los tipos de hibridación del carbono, cada una cumplirá la distribución geométrica que indica la TRePEV.

Los carbonos 1 y 2 tienen hibridación ***sp³***, los carbonos 3 y 4 tienen hibridación ***sp²***, el carbono 5 es ***sp³*** y los carbonos 6 y 7 son ***sp¹***.

Dado que la geometría de los carbonos 6 y 7 es lineal, podemos calcular la distancia entre el hidrógeno del carbono 7 y el núcleo del carbono 5. Simplemente, tenemos que sumar los radios covalentes que separan a los núcleos de hidrógeno del núcleo del carbono 5.

Comencemos por el carbono 5, como está hibridado en ***sp³***, le corresponde el radio covalente de 76 picómetros ($76 * 10^{-12}$ m), luego cuatro veces el radio covalente de un carbono hibridado como ***sp¹***, o sea 4 * 69 pm = 276 pm, finalmente debemos sumarle el radio covalente del hidrógeno que es de 37 pm.



La distancia total es:

76 pm + 276 pm + 37 pm = 389 pm.

Si bien no sabemos la distancia en una molécula real, podemos estar seguros de que va a estar muy cerca de este valor.