

4. ENLACE QUÍMICO Y GEOMETRÍA MOLECULAR

Preuniversitario
Popular Eduardo
Galeano

1. GEOMETRÍA MOLECULAR

Básicamente en este apartado, se darán las instrucciones para dibujar una molécula e inferir propiedades a partir de este.

Ejemplo de molécula:

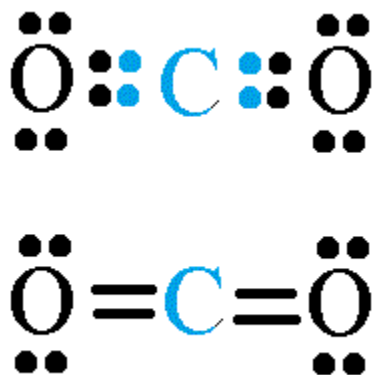
CO₂ (dióxido de carbono)

- A) Se suman todos los electrones de valencia (tienen relación con el grupo en el que está cada elemento). El carbono está en el grupo IVA, por lo que tiene 4 electrones de valencia, mientras que el O está en el grupo VIA, teniendo 6 electrones. Por lo tanto hay 4 (del carbono) + 2x6 (dos oxígenos) = 16 electrones a distribuir
- B) Esos 16 electrones, son 8 pares de electrones. Distribuirlos por el bosquejo. Se comienza con los enlaces (cada enlace es un par de electrones)



Falta distribuir 6 pares más, se dejan tres hacia cada oxígeno.

- C) Corroborar que cada átomo quede con 4 pares de electrones (8 electrones) para cumplir la regla del octeto. El hidrógeno debe cumplir la regla del dueto, esto significa, sólo hace un enlace (dos electrones). En nuestro bosquejo, el carbono no está cumpliendo el octeto, así que cada oxígeno “dona” un par de electrones haciendo dos dobles enlaces.



El dióxido de carbono tiene dos dobles enlaces y una geometría lineal.

Ejemplo número 2: anión carbonato CO₃⁻²

En este caso, se deben **sumar dos electrones** al total de los electrones de valencia:

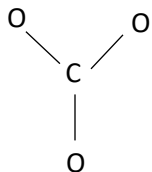
C= 4 electrones

O= 6 electrones X 3 (se multiplica por 3 porque hay 3 oxígenos en la molécula.

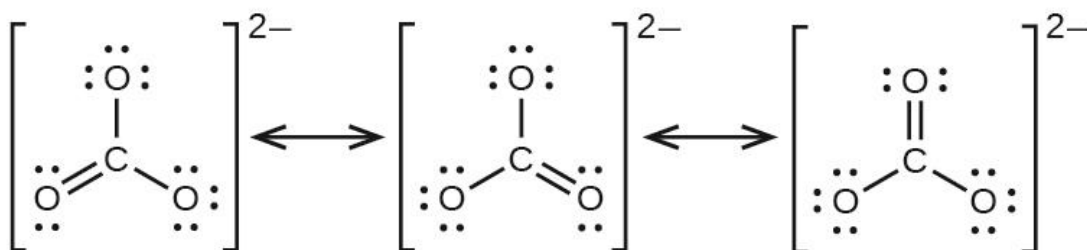
Carga -2: 2 electrones

Total: 24 electrones = 12 pares a distribuir.

El bosquejo sería el siguiente.



Ya ocupados tres pares (6 electrones) en los enlaces, quedan 9 por distribuir, así que se le agregan **tres pares a cada oxígeno**. Dado que el carbono **no cumple el octeto, hace un doble enlace con el oxígeno**, quedando dos oxígenos con carga negativa por hacer sólo un enlace (tiene un electrón de sobra que no ha compartido para hacer un enlace). El doble enlace puede ser en cualquiera de los tres enlaces, por lo tanto existen 3 estructuras distintas. Esto se denomina **resonancia**. Existen tres estructuras resonantes para el carbonato:



En todos estos casos se puede decir que el átomo central (carbono) no tiene pares de electrones libres. Los oxígenos sí. En el caso del carbonato, hay dos oxígenos con tres pares de electrones libres, y uno con dos pares libres (el que donó un par para hacer el doble enlace).

Los enlaces simples se denominan **sigma**, y los enlaces dobles tienen un enlace sigma y un enlace **pi** (π). El carbonato cuenta con tres enlaces sigma y un enlace pi. **Un triple enlace consta de un enlace sigma y dos pi.**

La geometría es trigonal plana

Ejemplo 3:

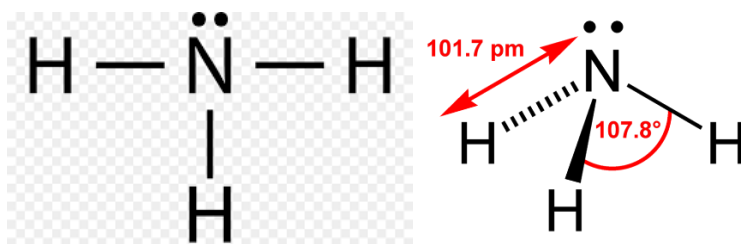
Amoníaco (NH_3)

N: 5 electrones de valencia

H: 1 electron de valencia (cumple regla del octeto)

$5 + 3 \times 1 = 8$ electrones = 4 pares

Hay tres enlaces por lo que se utilizan 3 pares para esto. El par que queda, se le da al átomo central en este caso el nitrógeno para que cumpla el octeto. Obviamente, el hidrógeno no puede tener electrones libres ya que hace sólo un enlace.

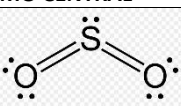
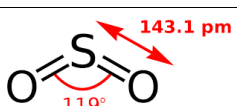
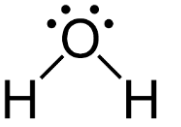
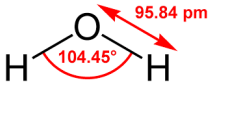
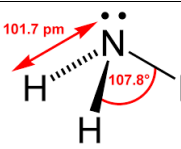


La imagen de la izquierda muestra el dibujo en un plano que se habría hecho en el bosquejo. Si se ocupan las tres dimensiones, se ve como en la derecha. El enlace más negro, se denomina cuña. Significa un enlace hacia adelante. El punteado va hacia atrás. Pero en este caso existe un par de electrones libres en el átomo central. Se debe considerar que **este par de electrones repele** con mayor fuerza a los enlaces (que son pares de electrones) terminando como la figura derecha. Esta **geometría es piramidal**, tiene $107,8^\circ$ entre los enlaces.

Esta tabla resume las geometrías de las moléculas que no cuentan con electrones libres en su átomo central (como el último caso, el del amoniaco). El átomo central se representa con una A y los demás con una X. Los electrones libres del átomo central son representados con una E.

La estructura lineal se representa como AX_2 (A: carbono, X los oxígenos) en este caso. AX_3 trigonal plana AX_4 tetraédrica, AX_5 bipirámide trigonal.

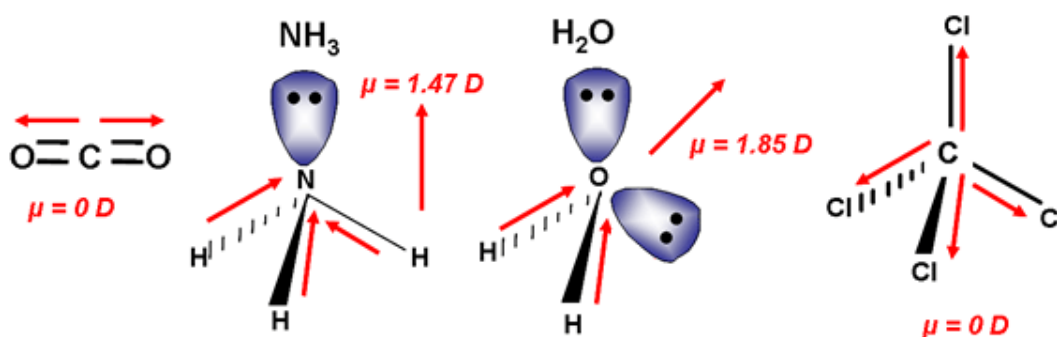
GEOMETRÍA	NOMBRE GEOMETRÍA	ÁNGULO	PAIRES ELECTRONES LIBRES ÁTOMO CENTRAL	MOLÉCULA DE EJEMPLO	EN TRES DIMENSIONES
AX ó AX_2	Lineal	180°	0		Tiene dos dimensiones
AX_3	Trigonal plana	120°	0	Formaldehído	Tiene dos dimensiones
AX_4	Tetraédrica	109.5°	0		Metano Tetraédrica
AX_5	Bipirámide trigonal	90° y 120°	0		Pentacloruro de fósforo Bipiramidal trigonal

GEOMETRÍAS CON PARES DE ELECTRONES LIBRES EN EL ÁTOMO CENTRAL					
AX ₂ E	Angular	Aprox. 120° similar a trigonal	1 par	 SO ₂ (Dióxido de azufre)	
AX ₂ E ₂	Angular	Aprox. 109° (menor a 109° entre los átomos X). Similar a tetraédrica	1 par	 H ₂ O (Agua)	
AX ₃ E	Piramidal	Similar a tetraédrica (menor a 109° entre los átomos X)		 NH ₃ (amoníaco)	

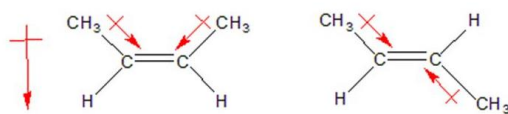
POLARIDAD EN MOLÉCULAS

La regla general es que entre mayor cantidad de enlaces C-H más apolar es, y por lo tanto más lipofílico (atracción por los lípidos) e hidrofóbico (repulsión al agua). Los esteroides y ácidos grasos, son básicamente solo este tipo de enlaces. La lipofilia, implica propiedades biológicas y farmacológicas. Por ejemplo fármacos y tóxicos se acumulan en la “grasa corporal” y no se eliminan rápidamente desde la sangre por la orina. Moléculas polares se eliminan por la orina.

Otra forma de observar si una molécula es polar o apolar es mediante el **momento dipolar**. Es un vector que en resumen, apunta hacia el átomo más electronegativo. Por ejemplo el CO₂ con su estructura lineal, tiene un momento dipolar con la **misma magnitud** hacia el oxígeno de la izquierda y a la derecha, pero con **diferente dirección/sentido**. Cuando ocurre esto, los momentos dipolares (μ) se anulan y la molécula de CO₂ es apolar.



Después de trazada la molécula, se dibujan los momentos dipolares. En la molécula 1, el dióxido de carbono, la suma de los momentos dipolares, uno hacia la izquierda y el otro hacia la derecha, es 0. Por ende es **molécula apolar**. En la segunda molécula se observa el amoníaco, en donde **no hay momentos dipolares que se anulen**, por lo que la suma de todos los momentos dipolares es distinta de 0, en este caso corresponde a 1,47 D (**molécula polar**). Lo mismo ocurre en el agua, la molécula 3, con un **momento dipolar diferente de cero** (molécula POLAR). La molécula 4, el tetraclorometano, tiene en todas las direcciones un cloro, por lo que todos los momentos dipolares se anulan, dando una suma de 0, y la molécula es apolar.

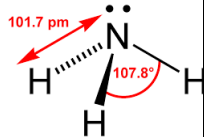
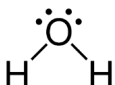
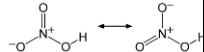
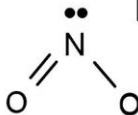
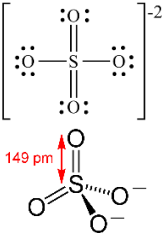


Observe lo que ocurre en los alquenos. El eje de simetría es horizontal ----- . En la primera molécula se ve que las sustituciones (cambiar el hidrógeno por otra molécula), en este caso los CH_3 están ambos arriba. Esta posición se denomina *cis*. En la molécula de la derecha, se ve que los CH_3 están arriba y uno abajo del eje de simetría, por lo que se denomina *trans*. Ambas moléculas se llaman 2-buteno, pero claramente son distintas. Por lo que el caso de la izquierda se denomina ***cis*-2-buteno**, y en la derecha ***trans*-2-buteno**. Volviendo a los momentos dipolares, en el caso *CIS*, los momentos dipolares no se anulan y la molécula es polar (el polo negativo) se indica hacia abajo con una flecha). En la molécula *TRANS* los momentos dipolares se anulan, y la molécula es 0.

EJERCICIOS

MOLÉCULA	DIBUJO	NOMBRE GEOMETRÍA	ÁNGULO	ELECTRONES LIBRES DEL ÁTOMO CENTRAL	SUMA MOMENTOS DIPOLARES ($\mu = 0$ versus $\mu \neq 0$)	POLARIDAD (polar o apolar)
Amoniaco NH_3						
Agua						
Ácido nítrico (HNO_3)						
NO_2 Dióxido de nitrógeno						
SO_4^{-2} Sulfato						
PO_4^{-3} Fosfato						
diclorometano						

RESOLUCIÓN

MOLÉCULA	DIBUJO	NOMBRE GEOMETRÍA	ÁNGULO	ELECTRONES LIBRES DEL ÁTOMO CENTRAL	SUMA MOMENTOS DIPOLARES ($\mu = 0$ versus $\mu \neq 0$)	POLARIDAD (polar o apolar)
Amoníaco NH_3		Piramidal (AX_2E_2)	Menor a 109° (exacto $107,8^\circ$)	2	$\mu \neq 0$ (suma de momentos dipolares distinta de cero)	POLAR
Agua		Angular (AX_2E_2)	Menos que $109,5^\circ$	4 (dos pares)	$\mu \neq 0$	POLAR
Ácido nítrico (HNO_3)	 (formas resonantes)	Trigonal plana (AX_3)	120°	0	$\mu \neq 0$	POLAR
NO_2 Dióxido de nitrógeno		Angular AX_2E	Menor a 120°	2	$\mu \neq 0$	POLAR
SO_4^{2-} Sulfato		Tetrah. AX_4	$109,5^\circ$	0	$\mu = 0$	FORMA POLAR, PERO LAS CARGAS LO HACEN POLAR (ES UN ANIÓN)
PO_4^{3-} Fosfato		Tetrah. AX_4	$109,5^\circ$	0	$\mu = 0$	Lo mismo que para el sulfato
Nitrógeno molecular N_2		Lineal	180°	2 cada nitrógeno	$\mu = 0$	Apolar

