



## Introducción

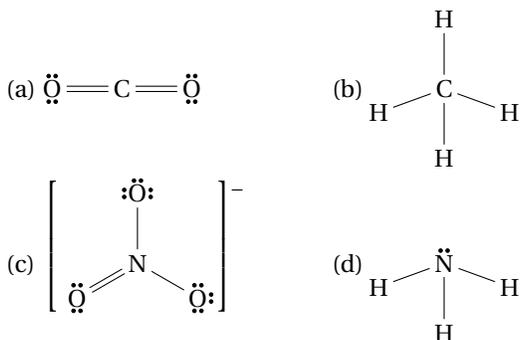
La teoría de la repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV) predice la disposición espacial de los átomos en una molécula o ion poliatómico. Nos muestra en dónde se forman los enlaces y hacia dónde se dirigen los pares de electrones libres de la capa de valencia.

La idea básica de la TRPECV es que cada región de alta densidad de electrones en la capa de valencia de un átomo central es significativa. Estas regiones se conocen como dominios de electrones, los cuales están dispuestos alrededor del átomo central de forma que las repulsiones entre ellos sean lo más pequeñas posible, dando como resultado una separación máxima entre ellos.

Por otro lado, la teoría del enlace de valencia describe cómo se forma un enlace en términos de orbitales atómicos superpuestos. En esta teoría, los orbitales atómicos a menudo se hibridan para formar nuevos orbitales con diferentes orientaciones espaciales.

## Problemas

1. Indica cuántos dominios de electrones hay alrededor del átomo central de las moléculas e iones siguientes. ¿Cuáles de ellos son dominios de no enlace?



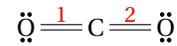
### ➤ Solución

El número de dominios de electrones determina su disposición alrededor del átomo central. Por ello, es fundamental que aprendamos a identificarlos y clasificarlos como dominios de enlace y de no enlace. Todo esto a partir de la estructura de Lewis de la molécula o ion poliatómico.

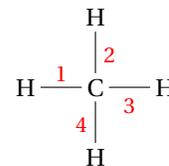
Los dominios de electrones de enlace son los enlaces sencillos, dobles y triples, mientras que los dominios de electrones de no enlace son las pares de electrones libres. Cada tipo de enlace y cada par libre alrededor del átomo central cuenta como un dominio de electrones.

El C es el átomo central en la molécula de  $\text{CO}_2$ . Tiene 2 enlaces dobles a su alrededor, por tanto, cuenta con 2 dominios

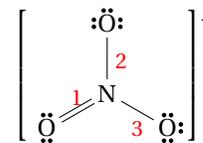
de electrones de enlace.



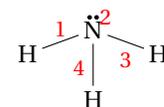
La molécula de  $\text{CH}_4$  tiene un C como átomo central. A su alrededor, el C cuenta con 4 enlaces sencillos, por tanto, tiene 4 dominios de electrones de enlace.



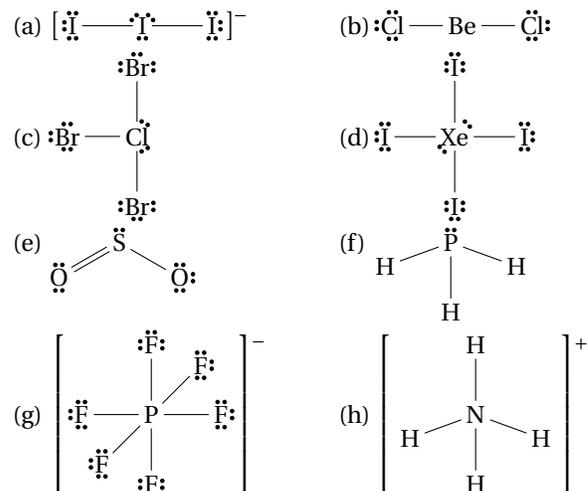
El N es el átomo central del ion  $\text{NO}_3^-$ . Tiene 2 enlaces sencillos y 1 enlace doble a su alrededor, por tanto, cuenta con 3 dominios de electrones de enlace.



La molécula de  $\text{NH}_3$  tiene un N como átomo central. A su alrededor, el N cuenta con 3 enlaces sencillos y un par libre, por tanto, tiene 3 dominios de electrones de enlace y 1 dominio de electrones de no enlace.



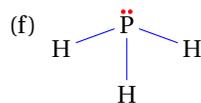
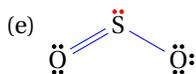
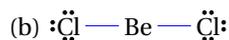
2. Determina la geometría (de dominios y molecular) de las moléculas e iones que se muestran a continuación.



## ➤ Solución

De acuerdo con la TRPECV, el número de dominios de electrones, sin importar si son de enlace o de no enlace, determina la disposición alrededor del átomo central. Este arreglo se conoce como geometría de dominios; para determinarla, nos apoyaremos en la tabla 1.

Tras identificar la geometría de dominios, clasificaremos los dominios de electrones como de enlace y de no enlace. De esta manera y con ayuda de la tabla 2, deduciremos la disposición de los átomos alrededor del átomo central. Este arreglo se conoce como geometría molecular.



### Paso 2. Determinación de la geometría de dominios.

Identifiquemos los dominios de electrones de enlace y de no enlace, y a partir de la tabla 1 descifremos la geometría de dominios que corresponde.

(a) El ion  $\text{I}_3^-$  cuenta con 5 dominios de electrones alrededor de su átomo central (2 enlaces sencillos y 3 pares de electrones libres). Por tanto, tiene una geometría de dominios bipiramidal trigonal.

(b) El  $\text{BeCl}_2$  cuenta con 2 dominios de electrones alrededor de su átomo central (2 enlaces sencillos). Por tanto, tiene una geometría de dominios lineal.

(c) El  $\text{ClBr}_3$  cuenta con 5 dominios de electrones alrededor de su átomo central (3 enlaces sencillos y 2 pares de electrones libres). Por tanto, tiene una geometría de dominios bipiramidal trigonal.

(d) El  $\text{XeI}_4$  cuenta con 6 dominios de electrones alrededor de su átomo central (4 enlaces sencillos y 2 pares de electrones libres). Por tanto, tiene una geometría de dominios octaédrica.

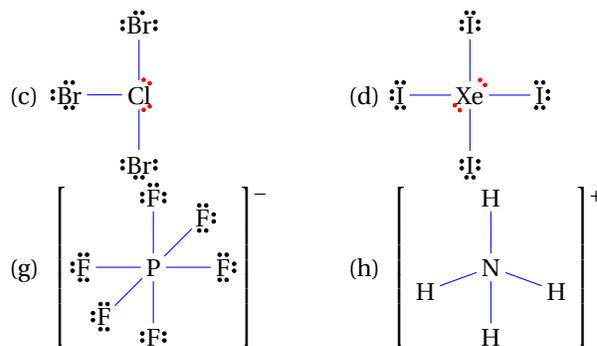
(e) El  $\text{SO}_2$  cuenta con 3 dominios de electrones alrededor de su átomo central (1 enlace doble, 1 enlace sencillo y 1 par de electrones libres). Por tanto, tiene una geometría de dominios trigonal plana.

(f) El  $\text{PH}_3$  cuenta con 4 dominios de electrones alrededor de

### Paso 1. Construcción de la estructura de Lewis.

Para determinar la geometría de una molécula o ion poliatómico es necesario conocer su estructura de Lewis, de lo contrario será imposible.

El problema muestra las estructuras de Lewis, por lo que no será necesario trazarlas paso por paso, como aprendimos en el taller de «Estructuras de Lewis». Solo marcaremos a los dominios de electrones de enlace con color azul y a los dominios de electrones de no enlace con rojo, para que sea fácil identificarlos y así determinar la geometría de las moléculas y iones poliatómicos.



su átomo central (3 enlaces sencillos y 1 par de electrones libres). Por tanto, tiene una geometría de dominios tetraédrica.

(g) El ion  $\text{PF}_6^-$  cuenta con 6 dominios de electrones alrededor de su átomo central (6 enlaces sencillos). Por tanto, tiene una geometría de dominios octaédrica.

(h) El ion  $\text{NH}_4^+$  cuenta con 4 dominios de electrones alrededor de su átomo central (4 enlaces sencillos). Por tanto, tiene una geometría de dominios tetraédrica.

### Paso 3. Determinación de la geometría molecular.

Para establecer la geometría molecular de forma correcta, nos apoyaremos de los dominios de electrones de enlace y de no enlace, por separado, y de la tabla 2.

(a) El ion  $\text{I}_3^-$  cuenta con 5 dominios de electrones de enlace (2 enlaces sencillos) y 3 dominios de electrones de no enlace (3 pares de electrones libres) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular lineal.

(b) El  $\text{BeCl}_2$  cuenta con 2 dominios de electrones de enlace (2 enlaces sencillos) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular lineal.

(c) El  $\text{ClBr}_3$  cuenta con 3 dominios de electrones de enlace (3 enlaces sencillos) y 2 dominios de electrones de no enlace (2 pares de electrones libres) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular con forma de T.

(d) El  $\text{XeI}_4$  cuenta con 4 dominios de electrones de enlace (4 enlaces sencillos) y 2 dominios de electrones de no enlace (2 pares de electrones libres) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular cuadrada plana.

(e) El  $\text{SO}_2$  cuenta con 2 dominios de electrones de enlace (1 enlace doble y 1 enlace sencillo) y 1 dominio de electrones de no enlace (1 par de electrones libres) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular angular.

(f) El  $\text{PH}_3$  cuenta con 3 dominios de electrones de enlace (3 enlaces sencillos) y 1 dominio de electrones de no enlace (1 par de electrones libres) alrededor de su átomo central. Por tanto, tiene una geometría molecular piramidal trigonal.

(g) El ion  $\text{PF}_6^-$  cuenta con 6 dominios de electrones de enlace (6 enlaces sencillos). Por tanto, tiene una geometría molecular octaédrica.

(h) El ion  $\text{NH}_4^+$  cuenta con 4 dominios de electrones de enlace (4 enlaces sencillos). Por tanto, tiene una geometría molecular tetraédrica.

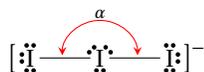
3. Responde. ¿Cuánto miden los ángulos de enlace de las moléculas e iones del problema 2?

#### ➤ Solución

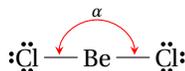
Los ángulos de enlace se forman entre tres átomos de una molécula o ion poliatómico. Los determina la geometría de dominios, por lo que nos apoyaremos en la tabla 1, aunque también necesitaremos de la tabla 2, para conocer cuántos ángulos de enlace tiene una molécula o ion, y cuál es su valor aproximado<sup>1</sup>.

(a) El ion  $\text{I}_3^-$  tiene una geometría de dominios bipiramidal trigonal. De acuerdo con la TRPECV (tabla 1), las moléculas e iones con esta geometría pueden tener tres ángulos de enlace:  $90^\circ$ ,  $120^\circ$  y  $180^\circ$ . Por ello, usaremos la tabla 2 para determinar si la disposición del ion  $\text{I}_3^-$  presenta solo algunos o todos los ángulos de enlace.

Como muestra el esquema de la tabla 2, en una geometría molecular lineal como la del ion  $\text{I}_3^-$ , el arreglo de los átomos forma un ángulo de enlace  $\alpha = 180^\circ$ .

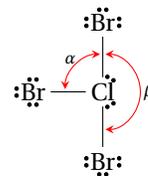


(b) El  $\text{BeCl}_2$  tiene una geometría de dominios lineal, por lo que la disposición de los átomos muestra un ángulo de enlace  $\alpha = 180^\circ$ .

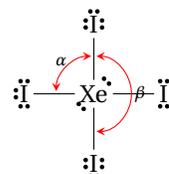


(c) El  $\text{ClBr}_3$  tiene una geometría de dominios bipiramidal trigonal, por tanto, puede tener tres ángulos de enlace; sin

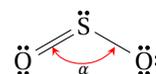
embargo, como indica su geometría molecular con forma de T, solo presenta ángulos de enlace  $\alpha = 90^\circ$  y  $\beta = 180^\circ$ .



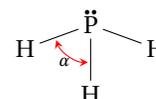
(d) El  $\text{XeI}_4$  tiene una geometría de dominios octaédrica, por lo que puede tener dos ángulos de enlace. De acuerdo con su geometría molecular cuadrada plana, los átomos del  $\text{XeI}_4$  forman ángulos de enlace  $\alpha = 90^\circ$  y  $\beta = 180^\circ$ .



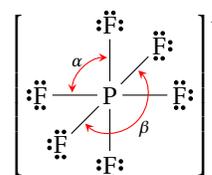
(e) El  $\text{SO}_2$  tiene una geometría de dominios trigonal plana, por lo que el arreglo de sus átomos presenta un ángulo de enlace  $\alpha = 180^\circ$ .



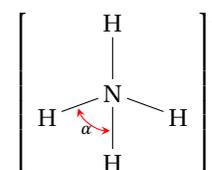
(f) El  $\text{PH}_3$  tiene una geometría de dominios tetraédrica, por lo que la disposición de sus átomos muestra ángulos de enlace  $\alpha = 109.5^\circ$ .



(g) El ion  $\text{PF}_6^-$  tiene una geometría de dominios y una geometría molecular octaédrica. Por ello, el arreglo de sus átomos presenta ángulos de enlace  $\alpha = 90^\circ$  y  $\beta = 180^\circ$ .



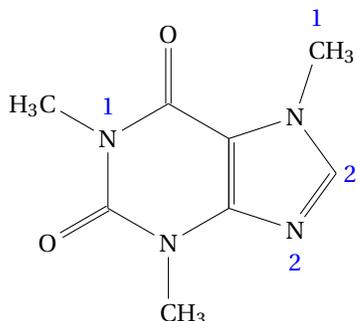
(h) El ion  $\text{NH}_4^+$  tiene una geometría de dominios tetraédrica, por lo que la disposición de sus átomos muestra ángulos de enlace  $\alpha = 109.5^\circ$ .



<sup>1</sup>La TRPECV nos ofrece una buena aproximación del ángulo de enlace real de una molécula o ion poliatómico.

NOTA: para apreciar la geometría de cada molécula y ion poliatómico en 3D, además de identificar cada ángulo de enlace, usa el simulador de [www.edutics.mx/GxM](http://www.edutics.mx/GxM).

4. Indica cuál es la geometría molecular y cuánto mide el ángulo de enlace alrededor de los átomos marcados con un número azul.

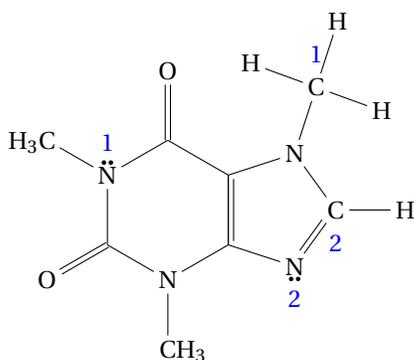


#### ➤ Solución

Cuando una molécula o ion poliatómico tiene más de un átomo central, lo mejor es determinar la geometría alrededor de cada átomo central para conocer la disposición de todos sus átomos.

En este caso, la estructura del problema corresponde con la 1,3,7-trimetilxantina, mejor conocida como cafeína. Para determinar la geometría molecular y el ángulo de enlace alrededor de cada átomo marcado, transcribiremos esta estructura con los enlaces, pares de electrones libres y átomos que no se muestran en los puntos de interés, de manera que se cumpla con la regla del octeto. De lo contrario, nuestro análisis no será el adecuado.

En cada N (1 y 2) añadiremos un par de electrones libres para cumplir con la regla del octeto; en el C<sup>1</sup>, trazaremos los enlaces que lo unen a los tres H; y en el C<sup>2</sup> (sí, ese vértice es un átomo de C) escribiremos su símbolo enlazado a un átomo de H (por lo general, los átomos de C representados como vértices están unidos a átomos de H).



Alrededor del N<sup>1</sup> hay 4 dominios de electrones, por tanto, se presentan una geometría de dominios tetraédrica y ángulos de enlace de 109.5° entre el N<sup>1</sup> y los átomos a su alrededor. De los 4 dominios de electrones, 3 de ellos son de enlace y 1 de no enlace, por lo que el N<sup>1</sup> y los átomos a su alrededor se

organizan en una geometría molecular piramidal trigonal.

Alrededor del N<sup>2</sup> hay 3 dominios de electrones, por tanto, se presentan una geometría de dominios trigonal plana y ángulos de enlace de 120° entre el N<sup>2</sup> y los átomos a su alrededor. De los 3 dominios de electrones, 2 de ellos son de enlace y 1 de no enlace, por lo que el N<sup>2</sup> y los átomos a su alrededor se organizan en una geometría molecular angular.

Alrededor del C<sup>1</sup> hay 4 dominios de electrones, por tanto, se presentan una geometría de dominios tetraédrica y ángulos de enlace de 109.5° entre el C<sup>1</sup> y los átomos a su alrededor. Los 4 dominios de electrones son de enlace, por lo que el O<sup>1</sup> y los átomos a su alrededor se organizan en una geometría molecular tetraédrica.

Alrededor del C<sup>2</sup> hay 3 dominios de electrones, por tanto, se presentan una geometría de dominios trigonal plana y ángulos de enlace de 120° entre el C<sup>2</sup> y los átomos a su alrededor. Los 3 dominios de electrones son de enlace, por lo que el O<sup>2</sup> y los átomos a su alrededor se organizan en una geometría molecular trigonal plana.

5. Responde. ¿Cuál es la hibridación alrededor del átomo central de las moléculas e iones del problema 2?

#### ➤ Solución

El enlace covalente se describe como el intercambio de pares de electrones que resulta de la superposición de orbitales de dos átomos. Ésta es la idea básica de la teoría del enlace de valencia: explica cómo se forma el enlace.

Para conocer la hibridación alrededor del átomo central, primero usaremos la TRPECV para describir las orientaciones de los dominios de electrones (geometría de dominios). Luego aplicaremos la teoría del enlace de valencia para describir los orbitales atómicos que se superponen y producen el enlace con esa geometría. También asumiremos que cada par de electrones libres ocupa un orbital separado.

**Paso 1.** Identificación de los dominios de electrones o de la geometría de dominios.

Dominios de electrones (Geometría de dominios)	Moléculas o iones poliatómicos
2 (lineal)	BeCl <sub>2</sub>
3 (trigonal plana)	SO <sub>2</sub>
4 (tetraédrica)	PH <sub>3</sub> NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>
5 (bipiramidal trigonal)	IF <sub>3</sub> <sup>-</sup> ClBr <sub>3</sub>
6 (octaédrica)	XeI <sub>4</sub> PF <sub>6</sub>

La hibridación de una molécula o ion poliatómico, respecto a su átomo central, la determina el número de dominios de electrones que lo rodean o la geometría de dominios. Ya conocemos esta información de las moléculas e iones que estudiaremos, la obtuvimos en el problema 2 y solo la reportaremos en una tabla para facilitar el análisis.

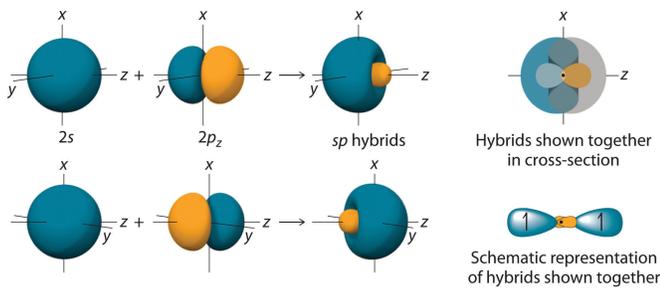
**Paso 2.** Determinación de la hibridación alrededor del átomo central.

En talleres anteriores aprendimos que un átomo aislado tiene sus electrones dispuestos en orbitales que conducen a la energía más baja para el átomo. Sin embargo, por lo general, no tienen las energías u orientaciones correctas para describir dónde están los electrones cuando un átomo está unido a otros átomos.

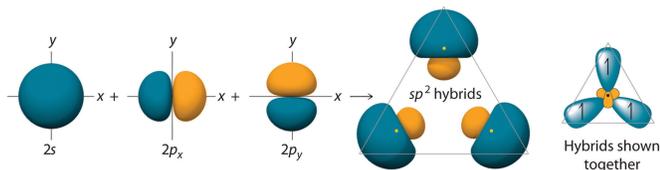
Cuando otros átomos están cerca, como en una molécula o ion, un átomo puede combinar sus orbitales de capa de valencia para formar un nuevo conjunto de orbitales que tiene una energía total más baja. Este proceso se llama hibridación y los nuevos orbitales que se forman se denominan orbitales híbridos, los cuales se superponen con los orbitales de otros átomos para compartir electrones y formar enlaces.

Es fácil determinar la hibridación alrededor del átomo central de una molécula o ion poliatómico a partir de la tabla 3.

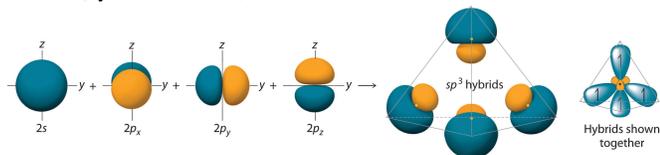
**Hibridación  $sp$ .** Cuando hay dos dominios de electrones alrededor del átomo central, se hibrida  $sp$ . Es el caso del  $BeCl_2$ .



**Hibridación  $sp^2$ .** Cuando hay tres dominios de electrones alrededor del átomo central, se hibrida  $sp^2$ . Es el caso del  $SO_2$ .

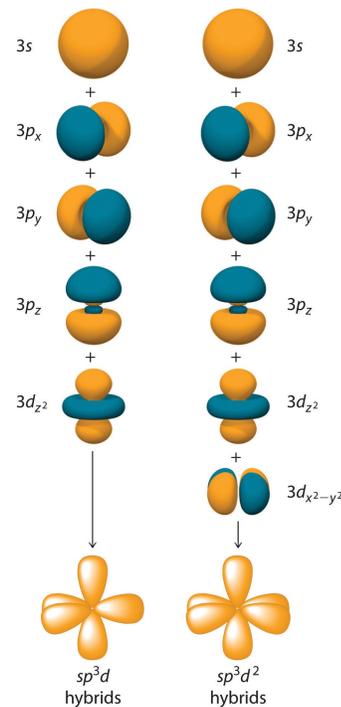


**Hibridación  $sp^3$ .** Cuando hay cuatro dominios de electrones alrededor del átomo central, se hibrida  $sp^3$ . Es el caso del  $PH_3$  y del ion  $NH_4^+$ .



**Hibridación  $sp^3d$ .** Cuando hay cinco dominios de electrones alrededor del átomo central, se hibrida  $sp^3d$ . Es el caso del ion  $IF_3^-$  y del  $ClBr_3$ .

**Hibridación  $sp^3d^2$ .** Cuando hay cinco dominios de electrones alrededor del átomo central, se hibrida  $sp^3d^2$ . Es el caso del  $XeI_4$  y del  $PF_6$ .



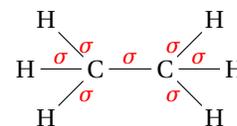
**6.** Identifica los enlaces  $\sigma$  y  $\pi$  presentes en el etano, el eteno (etileno) y el etino (acetileno).

**Solución**

Según la teoría del enlace de valencia, un enlace consiste en compartir la densidad electrónica entre dos átomos como resultado de la interferencia constructiva de sus orbitales.

Consideremos un enlace sencillo  $X - Y$ . Su densidad electrónica se encuentra a lo largo y de forma cilíndrica alrededor del eje internuclear que conecta los átomos enlazados<sup>2</sup>. Este tipo de enlace se denomina enlace  $\sigma$ , un enlace covalente que resulta de la superposición frontal de orbitales atómicos. **Todos los enlaces sencillos son enlaces  $\sigma$ .**

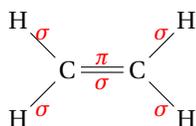
De acuerdo con lo anterior, el etano tiene 7 enlaces  $\sigma$ , o bien, 14 electrones  $\sigma$  (2 electrones por cada enlace).



Ahora, contemplemos un enlace doble  $X = Y$ , el cual resulta del traslape entre dos orbitales  $p$  orientados de forma perpendicular al eje internuclear. Este traslape lateral de los orbitales  $p$  produce un enlace  $\pi$ , un enlace covalente en el que las regiones de traslape se encuentran arriba y abajo del eje internuclear.

<sup>2</sup>En otras palabras, el eje internuclear (la línea que une a los dos núcleos) pasa a través del centro de la región de traslape.

Un doble enlace consta de un enlace  $\sigma$  y un enlace  $\pi$ . Por ello, el etileno tiene 5 enlaces  $\sigma$  y 1 enlace  $\pi$ , o bien, 10 electrones  $\sigma$  y 2 electrones  $\pi$ .



Por último, analicemos un enlace triple  $X \equiv Y$ , donde cada átomo enlazado tiene dos orbitales p no hibridados con ángulos rectos entre sí y entre el eje del conjunto de orbitales híbridos sp. Estos orbitales p se traslapan para formar un par de enlaces  $\pi$ . Por tanto, un enlace triple consiste en un enlace  $\sigma$  y dos enlaces  $\pi$ .

Lo anterior implica que el acetileno tiene 3 enlaces  $\sigma$  y 2 enlaces  $\pi$ , o bien, 6 electrones  $\sigma$  y 4 electrones  $\pi$ .



### Recursos adicionales

1. LibreTexts. (octubre, 2020). Las estructura molecular y la polaridad [Web]. Disponible en [www.edutics.mx/Gxh](http://www.edutics.mx/Gxh).
2. Profe en casa. (septiembre, 2013). Geometría molecular [Video]. Disponible en [www.edutics.mx/GxX](http://www.edutics.mx/GxX).
3. Professor Dave Explains. (octubre, 2015). VSEPR Theory and Molecular Geometry [Video]. Disponible en [www.edutics.mx/Gx7](http://www.edutics.mx/Gx7).
4. Universidad Nacional Autónoma de México. (s.f.). Estructuras moleculares: modelo VSEPR (RPECV) [PDF]. Disponible en [www.edutics.mx/GxB](http://www.edutics.mx/GxB).
5. Velásquez M., A. (s.f.). Hibridación [PDF]. Disponible en [www.edutics.mx/Gx8](http://www.edutics.mx/Gx8).

**Tablas: Teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia (TRPECV)**

Tabla 1. Geometría de dominios de electrones de moléculas e iones poliatómicos

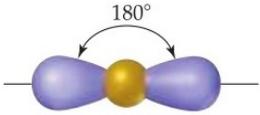
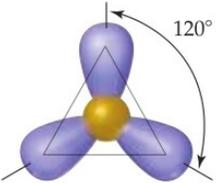
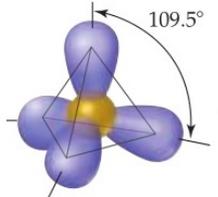
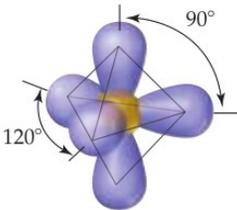
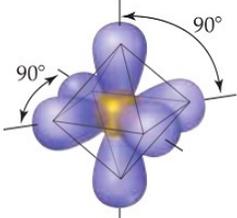
No. de dominios de electrones	Arreglo de dominios de electrones	Geometría de dominios de electrones	Ángulos aproximados de enlace
2		Lineal	180°
3		Trigonal plana	120°
4		Tetraédrica	109.5°
5		Bipiramidal trigonal	180°, 120° y 90°
6		Octaédrica	90° y 180°

Tabla 2. Geometría molecular de moléculas e iones poliatómicos

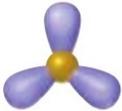
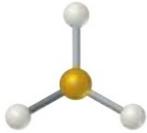
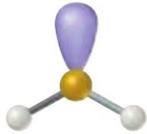
Fórmula general	Dominios de electrones	Geometría de dominios	Dominios de enlace	Dominios de no enlace	Geometría molecular
AB <sub>2</sub>	2	 Lineal	2	0	 Lineal
AB <sub>3</sub>	3	 Trigonal plana	3	0	 Trigonal plana
AB <sub>2</sub> U			2	1	 Angular

Tabla 2. Geometría molecular de moléculas y iones poliatómicos

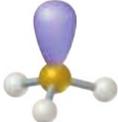
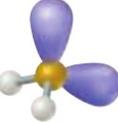
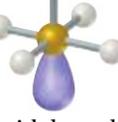
Fórmula general	Dominios de electrones	Geometría de dominios	Dominios de enlace	Dominios de no enlace	Geometría molecular
$AB_4$	4	 Tetraédrica	4	0	 Tetraédrica
$AB_3U_1$			3	1	 Piramidal trigonal
$AB_2U_2$			2	2	 Angular
$AB_5$	5	 Bipiramidal trigonal	5	0	 Bipiramidal trigonal
$AB_4U$			4	1	 Balancín
$AB_3U_2$			3	2	 Forma de T
$AB_2U_3$			2	3	 Lineal
$AB_6$	6	 Octaédrica	6	0	 Octaédrica
$AB_5U$			5	1	 Piramidal cuadrada

Tabla 2. Geometría molecular de moléculas y iones poliatómicos

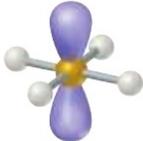
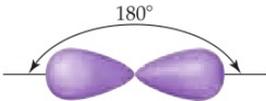
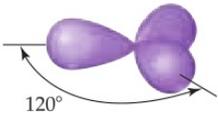
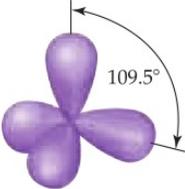
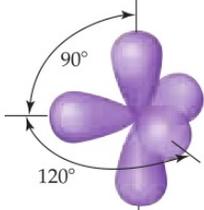
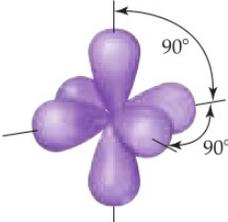
Fórmula general	Dominios de electrones	Geometría de dominios	Dominios de enlace	Dominios de no enlace	Geometría molecular
$AB_4U_2$			4	2	 Cuadrada plana

Tabla 3. Hibridación en el átomo central de moléculas y iones poliatómicos

No. de dominios de electrones	Hibridación en el átomo central	Orientación	Ejemplos	Geometría molecular
2	$sp$		$CO_2$ $HgBr_2$ $CdI_2$ $BeCl_2$	Lineal ( $AB_2$ ) Lineal ( $AB_2$ ) Lineal ( $AB_2$ ) Lineal ( $AB_2$ )
3	$sp^2$		$NO_3^-$ $BF_3$ $SO_2$ $NO_2^-$	Trigonal plana Trigonal plana Angular ( $AB_2U$ ) Angular ( $AB_2U$ )
4	$sp^3$		$NH_4^+$ $CCl_4$ $H_3O^+$ $NH_3$ $H_2O$	Tetraédrica Tetraédrica Piramidal trigonal Piramidal trigonal Angular ( $AB_2U_2$ )
5	$sp^3d$		$PF_5$ $SF_4$ $ClF_3$ $I_3^-$	Bipiramidal trigonal Balancín Forma de T Lineal ( $AB_2U_3$ )
6	$sp^3d^2$		$PF_6^-$ $SF_6$ $BrF_5$ $XeF_4$	Octaédrica Octaédrica Piramidal cuadrada Cuadrada plana