

ESTEREOQUÍMICA

INTRODUCCIÓN

La estereoquímica estudia la geometría espacial de las moléculas. A partir de datos empíricos se trata de ofrecer un modelo que explique satisfactoriamente lo que estos indican. La teoría del enlace covalente y las estructuras de Lewis son una primera aproximación a esto.

En este curso se presentan los ejemplos más conocidos como una breve reseña sobre este tema. Además nos basaremos en la teoría del enlace de valencia para explicar la geometría de esas moléculas.

Para una exposición más clara, llamaremos A al átomo central, X a cada átomo unido al átomo central (ligante) y E a cada par de electrones de valencia no compartidos del átomo central.

TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA

Para explicar el enlace covalente se han propuesto diversas teorías, una de ellas es la teoría del enlace de valencia (TEV), en ella se describe el enlace como el resultado del apareamiento de electrones de valencia. Los átomos conservan su identidad en la molécula. A esta teoría contribuyeron W. Heitler y F. London quienes afirmaron que los electrones desapareados de un átomo forman enlaces con los electrones desapareados de otros átomos de la molécula. La teoría de Heitler y London no estuvo de acuerdo con muchos resultados experimentales, por ejemplo predice que el ángulo que forman las líneas de unión de los núcleos de hidrógeno con el núcleo de oxígeno en la molécula de agua es de 90° , pero en realidad es de $104,5^\circ$. L. Pauling y J. Slater solucionaron estos problemas postulando que se forman orbitales híbridos por combinación lineal de orbitales atómicos, respetando lo siguiente:

- 1.- Se hibridan orbitales de un mismo átomo.
- 2.- La disposición de los orbitales híbridos en el espacio es de la forma en que la repulsión eléctrica sea mínima.
- 3.- El número de orbitales híbridos es igual a la suma de orbitales atómicos puros que intervienen.
- 4.- Se hibridan orbitales de energías parecidas.

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_2$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_2$ (un átomo central, dos ligantes y ningún par de electrones sin compartir) es la molécula de dicloruro de berilio, $Be Cl_2$, la cual es lineal (el ángulo $Cl - Be - Cl$ mide 180°) , sus enlaces $Be - Cl$ son de igual longitud y su momento dipolar es nulo ($\mu = 0$) . Lo que nos lleva a postular que el orbital 2s y un orbital 2p del Be se hibridan formándose dos orbitales sp dispuestos linealmente y creando dos enlaces σ con los dos átomos de Cl .

Hibridación sp :



[Vea la molécula de cloruro de berilio](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_3$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_3$ (un átomo central, tres ligantes y ningún par de electrones sin compartir) es la molécula de trifluoruro de boro, $B F_3$, la cual es plana trigonal (cada ángulo $F - B - F$ mide 120°), sus enlaces $B - F$ son de igual longitud y su momento dipolar es nulo ($\mu = 0$). Lo que nos lleva a postular que los orbitales 2s y dos orbitales 2p del B se hibridan formándose tres orbitales sp^2 orientados hacia los vértices de un triángulo equilátero y creando tres enlaces σ con los 3 átomos de F .

Hibridación sp^2 :



[Vea la molécula de trifluoruro de boro](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_4$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_4$ (un átomo central, cuatro ligantes y ningún par de electrones sin compartir) es la molécula de metano, $C H_4$, la cual es tetraédrica (cada ángulo $H - C - H$ mide aproximadamente $109,5^\circ$), sus enlaces $C - H$ son de igual longitud y su momento dipolar es nulo ($\mu = 0$). Lo que nos lleva a postular que el orbital 2s y los tres orbitales 2p del C se hibridan formándose cuatro orbitales sp^3 orientados hacia los 4 vértices de un tetraedro regular y creando cuatro enlaces σ con los cuatro átomos de H .

Hibridación sp^3 :



[Vea la molécula de metano](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_3 E$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_3 E$ (un átomo central, tres ligantes y un par de electrones sin compartir) es la molécula de amoníaco, $N H_3$, la cual tiene una estructura piramidal trigonal (cada ángulo $H - N - H$ mide aproximadamente $107,3^\circ$), sus enlaces $N - H$ son de igual longitud y su momento dipolar es igual a $1,47 D$ ($\mu = 1,47 D$). Lo que nos lleva a postular que el orbital 2s y los tres orbitales 2p del N se hibridan formándose cuatro orbitales sp^3 orientados hacia los 4 vértices de un tetraedro no regular y creando tres enlaces σ con los tres átomos de H. El cuarto orbital contiene al par de electrones sin compartir . Este orbital, por repulsión eléctrica, hace que el ángulo $H - N - H$ sea menor que $109,5^\circ$ como sucede en la estructura tetraédrica.

Hibridación sp^3 :



[Vea la molécula de amoníaco](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_2 E_2$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_2 E_2$ (un átomo central, dos ligantes y dos pares de electrones sin compartir) es la molécula de agua, $H_2 O$, la cual tiene una estructura angular (el ángulo $H - O - H$ mide aproximadamente $104,5^\circ$) , sus enlaces $O - H$ son de igual longitud y su momento dipolar es igual a $1,88 D$ ($\mu = 1,88 D$) . Lo que nos lleva a postular que el orbital $2s$ y los tres orbitales $2p$ del O se hibridan formándose cuatro orbitales sp^3 orientados hacia los 4 vértices de un tetraedro no regular y creando dos enlaces σ con los dos átomos de H . Los otros dos orbitales contienen un par de electrones sin compartir, cada uno . Estos últimos orbitales, por repulsión eléctrica, hacen que el ángulo $H - O - H$ sea menor que $109,5^\circ$ como sucede en la estructura tetraédrica.

Hibridación sp^3 :

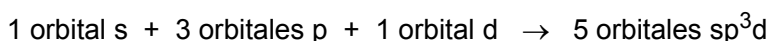


[Vea la molécula de agua](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_5$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_5$ (un átomo central, cinco ligantes y ningún par de electrones sin compartir) es la molécula de pentacloruro de fósforo, $P Cl_5$, que tiene una estructura de bipirámide trigonal (cada ángulo $Cl - P - Cl$ ecuatorial mide 120° y los ángulos $Cl - P - Cl$ donde un átomo de Cl está en posición axial y el otro átomo de Cl está en posición ecuatorial mide 90°) y su momento dipolar es nulo ($\mu = 0$) . Las longitudes de los enlaces $P - Cl$ no son de igual longitud, los átomos de Cl en posición axial están a mayor distancia del átomo de P que sus similares en posiciones ecuatoriales. Esto se debe a factores de repulsión eléctrica. Lo que nos lleva a postular que el orbital $3s$, los tres orbitales $3p$ y un orbital $3d$ del átomo de P se hibridan formándose cinco orbitales sp^3d orientados hacia los 5 vértices de una bipirámide trigonal y creando cinco enlaces σ con los cinco átomos de Cl .

Hibridación sp^3d :



[Vea la molécula de pentacloruro de fósforo](#)

MOLÉCULAS DEL TIPO $A X_6$

Un ejemplo de molécula del tipo $A X_6$ (un átomo central, seis ligantes y ningún par de electrones sin compartir) es la molécula del hexafluoruro de azufre, $S F_6$, que presenta una estructura octaédrica (cada ángulo $F - S - F$ mide 90°) , sus enlaces $S - F$ son de igual longitud y su momento dipolar es nulo ($\mu = 0$) . Lo que nos lleva a postular que el orbital $3s$, los tres orbitales $3p$ y dos orbitales $3d$ del S se hibridan formándose seis orbitales sp^3d^2 dispuestos hacia los 6 vértices de un octaedro regular y creando seis enlaces σ con los seis átomos de F .

Hibridación sp^3d^2 :

1 orbital s + 3 orbitales p + 2 orbitales d \rightarrow 6 orbitales sp^3d^2

[Vea la molécula de hexafluoruro de azufre](#)

BIBLIOGRAFÍA

[Estereoquímica \(curso en línea \)](#)