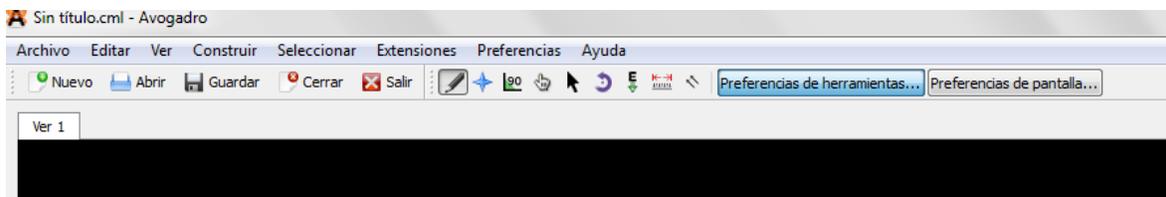


Estudio de la geometría molecular usando Avogadro.

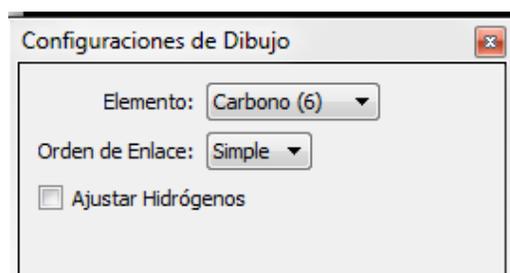
En este trabajo, vamos a dibujar tres moléculas triatómicas, analizaremos sus geometrías (CO_2 , H_2O y SO_2) y veremos si concuerdan con los postulados de la Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de Valencia (TRPEV)

1) Estudio de la geometría que presenta la molécula de dióxido de carbono (CO_2):

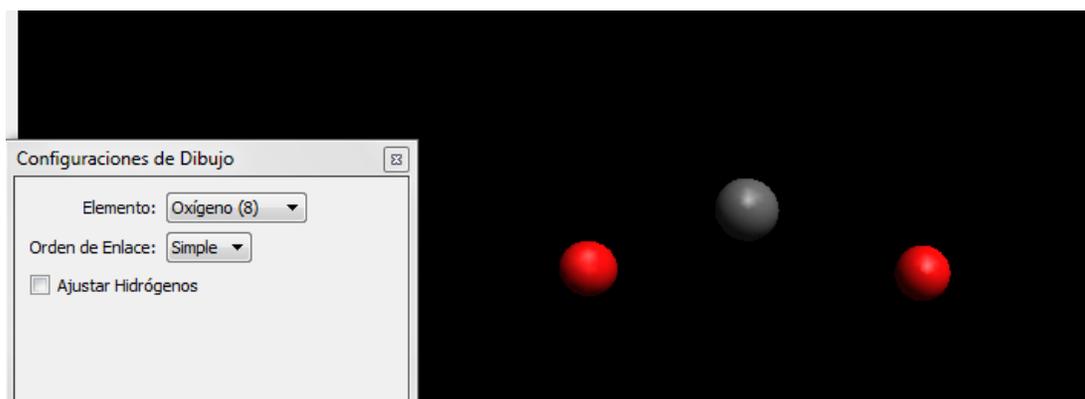
En la barra de herramientas:



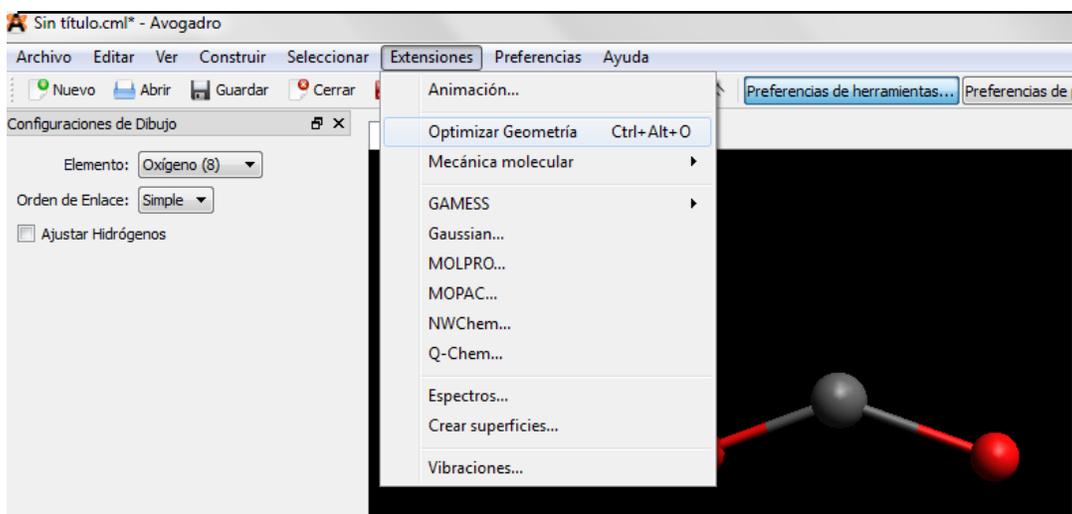
Seleccionar la herramienta de dibujo  y luego ir a **Preferencias de herramientas** y clickear, entonces se desplegará un cuadro de diálogo en el que usted deberá seleccionar qué átomo desea insertar:



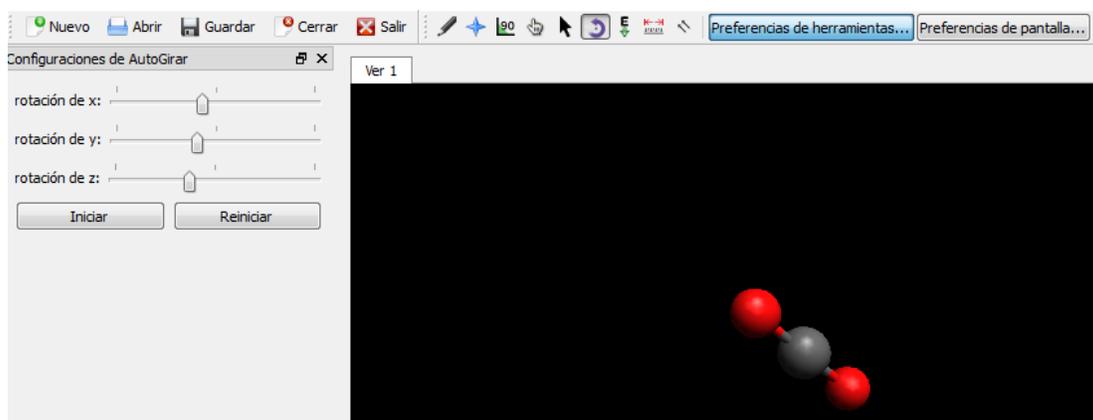
Inserte el átomo de carbono y luego los dos oxígenos:



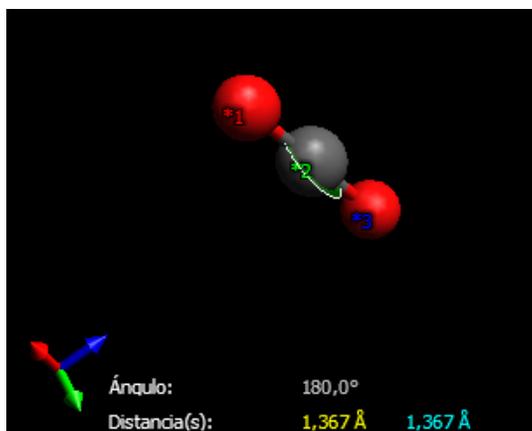
y crear los enlaces (manteniendo apretado el mouse desde un átomo al siguiente). Tener la precaución de que no esté seleccionada la opción **Ajustar Hidrógenos**, y de que el Enlace sea **Simple**. Luego, ir al Menú **Extensiones** y seleccionar la opción **Optimizar Geometría**:



Luego, en la barra de herramientas, utilizar la **Herramienta de Rotación Automática** () y mediante la misma setear los parámetros de **x**, **y** y **z** con los que se desea que rote la molécula y presione **Iniciar** y la molécula comenzará a moverse.



Además, usted puede medir el ángulo que forman los tres átomos, para eso, usted deberá seleccionarlos () y cuando lo haga, el programa automáticamente le informará tanto los ángulos, como las distancias interatómicas:

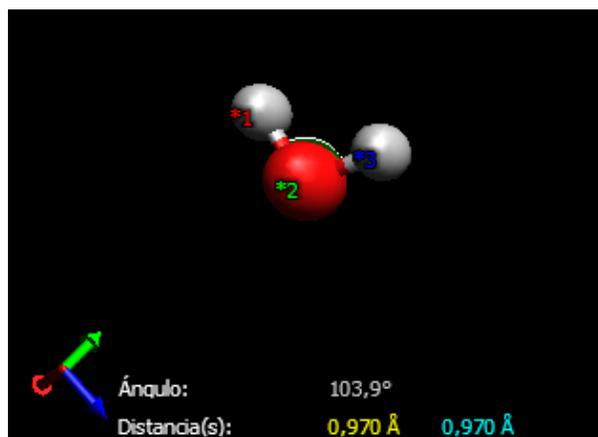


Los resultados hallados, concuerdan con lo esperado para la molécula de CO₂ que tiene geometría lineal, con ángulo de 180°.

2) Estudio de la geometría que presenta la molécula de agua (H₂O):

Repetir el mismo procedimiento que para el dióxido de carbono, pero con los respectivos átomos.

En este caso los resultados esperados también son los esperados, dado que es un molécula con geometría angular, con ángulos de aproximadamente 109°.



3) Estudio de la geometría que presenta la molécula de dióxido de azufre (S₂O):

Tener en cuenta que para esta molécula los enlaces deben ser dobles.

Tal como predice el modelo, esta molécula también muestra geometría angular pero con ángulos de aproximadamente 120°.

