

Material complementario - PRÁCTICO 3

Las **estructuras o fórmulas de Lewis** (1916) de una molécula son representaciones bidimensionales sencillas de la conectividad de los átomos en las diversas moléculas.

- ✓ Un *símbolo de Lewis* está formado por el símbolo del elemento (que representa el núcleo y a los electrones internos), rodeado de puntos que representan cada uno de ellos los electrones de valencia del elemento. Se coloca un punto a la vez en los cuatro lados del símbolo, hasta formar un máximo de 4 pares de electrones.
- ✓ Los átomos se combinarán para alcanzar la configuración electrónica de gas noble, es decir que tienden a ganar, perder o compartir electrones hasta quedar rodeados por 8 electrones de valencia (*regla del octeto*).
- ✓ Excepciones a la regla del octeto: En algunas moléculas estables el número de electrones que rodea al átomo central es menor a ocho (H, He). Elementos del 3er periodo en adelante, se dice que expanden el octeto porque se pueden rodear por más de 8 electrones. En algunas moléculas con número impar de electrones de valencia, la regla del octeto no podrá cumplirse para todos sus átomos.
- ✓ En moléculas permite representar enlaces covalentes donde el par de electrones compartidos serán representados por una línea, dichos electrones serán *enlazantes*, mientras que el resto de los electrones de valencia distribuidos en la molécula será electrones o *pares de electrones no enlazantes*.
- ✓ Recordar que cada átomo en un enlace covalente cuenta a los electrones compartidos como si fueran propios.
- ✓ Existen distintos tipos de enlace covalentes
 - Enlace simple: dos átomos se unen compartiendo un par de electrones.
 - Enlace doble: dos átomos comparten dos pares de electrones.
 - Enlace triple: dos átomos comparten tres pares de electrones.
- ✓ Tipo de enlace y orden de enlace, el orden de enlace es el número de pares de electrones compartidos entre dos átomos enlazados. Por lo tanto un enlace simple tiene un orden de enlace igual a uno, un doble enlace tiene un orden de enlace igual a dos y un triple tiene un orden de enlace igual a tres.
- ✓ Orden de enlace y longitud de enlace: para un par de átomos dado, un orden de enlace más alto produce una longitud de enlace más corta y una mayor energía de enlace.

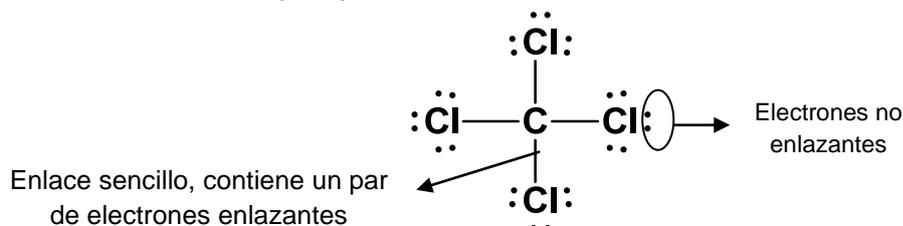
Reglas para formular Estructuras de Lewis:

- 1) Escribir los símbolos de los elementos. En moléculas poliatómicas el átomo menos electronegativo se escribe en la posición central de la molécula.
- 2) Asignar los electrones de valencia a cada átomo y se cuenta cuantos son en el total de la molécula (considerando si la molécula presenta carga).
- 3) Unir el átomo central con cada uno de los átomos que lo rodean a través de líneas rectas para representar el enlace covalente, simples en primera instancia.
- 4) Distribuir los electrones de valencia de la molécula, en forma de puntos, comenzando por los átomos exteriores hasta completar el octeto y teniendo en cuenta que cada enlace (cada línea) representado en el punto (3) contiene dos electrones.

**Curso de Química I, Química General y Química
Estructuras de Lewis y la forma de las moléculas**

- 5) Si no se llegara a completar el octeto para el átomo central, comenzar a agregar dobles enlaces o triples si es necesario hasta completar el octeto.
- 6) Finalmente si existen más de una estructura de Lewis adecuada es necesario recurrir al concepto de Carga Formal (CF) para predecir la estructura más probable.
- 7) Escribir las estructuras resonantes si las hay.
- 8) Representar la carga de la molécula (si es que es cargada).

Representación de una molécula utilizando la representación de Lewis,
Tetracloruro de carbono (CCl₄)



Reglas de la Carga Formal (CF):

La **CF** es la carga que le asignamos a los elementos con el fin de asignar la distribución de electrones más probable, y por ende determinar la estructura más probable de la molécula.

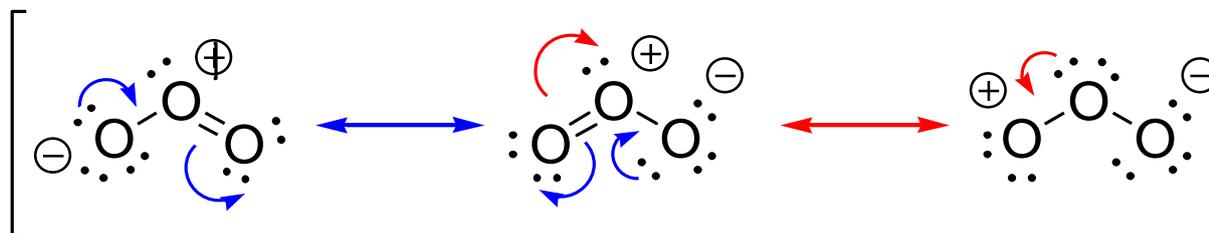
La CF está definida por: $n^\circ \text{ e- de valencia} - n^\circ \text{ de enlaces} - n^\circ \text{ de e- no enlazantes}$

- 1) La estructura más probable (o más estable) es la que tiene cargas formales igual a cero o, en su defecto, la más cercana a cero
- 2) Las CF negativas tienden a estar en los átomos más electronegativos
- 3) Las CF de átomos adyacentes no pueden tener el mismo signo
- 4) La sumatoria de las CF es igual a la carga total de la molécula o ion

Resonancia

A menudo es posible escribir más de una estructura de Lewis, cada una con la misma posición relativa de los átomos sin embargo diferente posición de los electrones. En este caso estamos frente a **ESTRUCTURAS RESONANTES**

Ozono (O₃)



Criterios de estabilidad de las formas resonantes:

- a) Las estructuras de Lewis neutras son más estables que las estructuras de Lewis con cargas formales.
- b) Las estructuras de Lewis con cargas formales altas (+2, +3,...,-2, -3) son menos probables que aquellas con cargas formales pequeñas.
- c) No tenga cargas formales iguales en átomos vecinos.
- d) Son preferibles las estructuras con cargas formales negativas en los átomos más electronegativos.

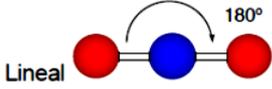
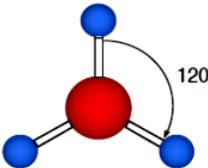
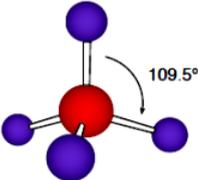
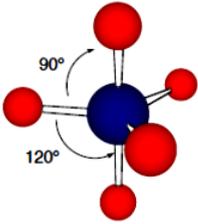
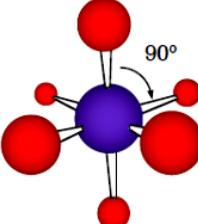
Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (RPECV)

La **geometría molecular** se refiere a la disposición tridimensional de los átomos que constituyen una molécula y determina muchas de las propiedades de las moléculas. Uno de los modelos para predecir la geometría de la molécula es la teoría RPECV, la cual dice que cada grupo de electrones de valencia alrededor del átomo central está lo más lejos posible de los otros buscando minimizar repulsiones.

Recuerde que para RPECV se define un "grupo" de electrones, como cualquier número de electrones alrededor de un átomo. Por lo tanto un grupo de electrones puede consistir en un enlace simple, múltiple, par de electrones no enlazantes o un único electrón.

Reglas para predecir la geometría molecular (GM) (Tablas siguientes):

- 1) Escribir la **Estructura de Lewis de la Molécula**.
- 2) Determinar la cantidad de **grupos de electrones**.
- 3) Definir la geometría de pares de electrones (**GPE**).
- 4) Determinar la cantidad de pares de **electrones enlazantes** y los pares de **electrones no enlazantes**.
- 5) Definir según el punto anterior la GM.

PS+PE	Distribución	Fórmula Molecular	Geometría Molecular	Ejemplos
2	 <p>Lineal</p>	AX ₂	Lineal	BeH ₂
3	 <p>Triángulo equilátero (*)</p>	AX ₃ AX ₂ E	Trigonal Plana Angular	BCl ₃ , AlCl ₃ SnCl ₂
4	 <p>Tetraedro</p>	AX ₄ AX ₃ E AX ₂ E ₂ AXE ₃	Tetraédrica Pirámide Trigonal Angular Angular	CH ₄ , SiCl ₄ NH ₃ , PCl ₃ H ₂ O, SCl ₂ HF
5	 <p>Bipirámide Trigonal</p>	AX ₅ AX ₄ E AX ₃ E ₂ AX ₂ E ₃	Bipirámide Trigonal Disferoidal Forma de T Lineal	PCl ₅ , AsF ₅ SF ₄ ClF ₃ XeF ₂
6	 <p>Octaédro</p>	AX ₆ AX ₅ E AX ₄ E ₂	Octaédrica Pirámide base cuadrada Cuadrada plana	SF ₆ BrF ₅ XeF ₂

PS: pares de electrones solitarios, PE: pares de electrones enlazados. (*) trigonal.

Tipos de pares de electrones del átomo central		Forma molecular	Fórmula	Configuración más estable	Esquema de moléculas en el espacio	Ejemplos
2PE		lineal	AX_2	lineal		Hg, C_{12}, Cd, I_2
3PE		triangular	AX_3	triángulo equilátero		BF_3, BI_3, AlI_3
2PE	1PS		AX_2	forma de V		$SnCl_2, PbCl_2$
4PE		tetraédrica	AX_4	tetraédrica		$CH_4, [BF_4]^{-1}$
3PE	1PS		AX_3	piramidal trigonal		NH_3, H_3O^{+1}
2PE	2PS		AX_2	forma de V		H_2O, H_2S
5PE		bipiramidal trigonal	AX_5	bipiramidal trigonal		$PCl_5, SbCl_5, VO_3^{-1}$
4PE	1PS		AX_4	tetraedro irregular		$SF_4, TeCl_4, SeCl_2$
3PE	2PS		AX_3	en forma de T		ClF_3, BrF_3
2PE	3PS	octaédrica	AX_2	lineal		$[ICl_2]^{-1}, I_3^{-1}$
6PE			AX_6	octaédrica		$SF_6, [SiF_6]^{-2}, [PbCl_6]^{-2}$
5PE	1PS		AX_5	piramidal cuadrada		BrF_5, IF_5
4PE	2PS		AX_4	planar cuadrada		$[ICl_4]^{-1}, [BrF_4]^{-1}$