

UNIDAD IV

LECTURAS COMPLEMENTARIAS

Enlaces químicos. Uniones que construyen

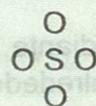
LC 4.1 Reglas para escribir las fórmulas de Lewis

1. Elija un "esqueleto" razonable (simétrico) para la molécula o ion poliatómico.

a) El elemento menos electronegativo suele ser el elemento central, con excepción del H. El elemento menos electronegativo suele ser el que necesita más electrones para llenar su octeto. Ejemplo CS_2 tiene el esqueleto S C S.

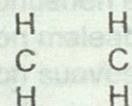
b) Los átomos de oxígeno no se enlazan entre sí, con excepción de: i) moléculas de O_2 y O_3 , ii) Los peróxidos que contienen el grupo O_2^{2-} .

El ion sulfato SO_4^{2-} tiene el esqueleto:

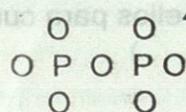


c) En los ácidos ternarios (oxiácidos) el hidrógeno suele enlazarse al átomo de oxígeno no al átomo central. Ejemplo: el ácido nitroso HNO_2 el esqueleto H O N O. Sin embargo, existen algunas excepciones a la regla, por ejemplo H_3PO_3 y H_3PO_2 .

Para iones o moléculas que tienen más de un átomo central, el esqueleto más simétrico posible. Por ejemplo, C_2H_4 y $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ los siguientes esqueletos:



y



2. Se calcula "N", el número de electrones en la capa externa (de valencia). Se requieren todos los átomos de la molécula o ion para adquirir configuraciones de gas noble.
Por ejemplo:

Para H_2SO_4 ,

$$\text{H} = 8 \times 1 \text{ (átomo de S)} + 8 \times 4 \text{ (átomos de O)} + 2 \times 2 \text{ (átomos de H)} = 8 + 32 + 4 = 44 \text{ e}^- \text{ necesarios}$$

Para SO_4^{2-}

$$\text{N} = 8 + 32 = 40 \text{ e}^- \text{ necesarios}$$

3. Se calcula "A", el número de electrones disponibles en las capas externas (de valencia) de todos los átomos. Para iones con carga negativa, se suma el total del número de electrones igual a la carga del anión y para iones con carga positiva, se resta el número de electrones igual a la carga de catión. Por ejemplo:

Para H_2SO_4

$$\text{A} = 2 \times 1 \text{ (átomos de H)} + 1 \times 6 \text{ (átomos de S)} + 4 \times 6 \text{ (átomos de O)} = 2 + 6 + 24 = 32 \text{ e}^- \text{ disponibles}$$

Para SO_4^{2-}

$$\text{A} = 1 \times 6 \text{ (átomos de S)} + 4 \times 6 \text{ (átomos de O)} + 2 \text{ (para carga } 2^-) = 6 + 24 + 2 = 32 \text{ e}^- \text{ disponibles}$$

4. Se calcula "S" el número total de electrones compartidos en la molécula o ion usando la relación $\text{S} = \text{N} - \text{A}$. Por ejemplo:

Para H_2SO_4

$$\text{S} = \text{N} - \text{A} = 44 - 32 = 12 \text{ electrones compartidos (6 pares de e}^- \text{ compartidos)}$$

Para SO_4^{2-}

$$S = N - A = 40 - 32$$

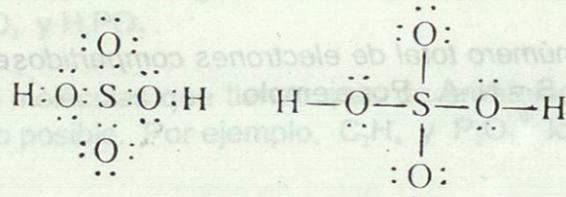
$$= 8 \text{ electrones compartidos (4 pares de } e^- \text{ compartidos)}$$

5. Se colocan los electrones S en el esqueleto como pares compartidos, usando dobles y triples enlaces, en caso necesario. Las estructuras pueden representarse mediante las fórmulas puntuales de Lewis o mediante guiones donde cada guión representa un par de electrones compartidos.

fórmula	Esqueleto	Fórmula puntual (Los "enlaces" se encuentran en su sitio pero están incompletos)	Fórmula de guión (Los "enlaces" se encuentran en su sitio pero están incompletos)
H_2SO_4	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H} - \text{O} - \text{S} - \text{O} - \text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H} : \text{O} : \text{S} : \text{O} : \text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H} - \text{O} - \text{S} - \text{O} - \text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$
SO_4^{2-}	$\begin{array}{c} \text{O}^{2-} \\ \\ \text{O} - \text{S} - \text{O} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O}^{2-} \\ \\ \text{O} : \text{S} : \text{O} \\ \\ \text{O} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O}^{2-} \\ \\ \text{O} - \text{S} - \text{O} \\ \\ \text{O} \end{array}$

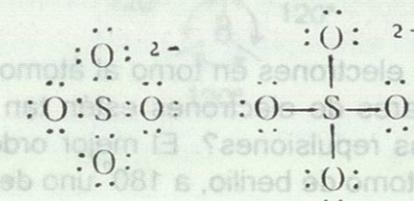
6. Se colocan los electrones adicionales en el esqueleto como pares no compartidos (solitarios) para llenar el octeto de cada elemento del grupo A (con excepción del H que sólo puede compartir $2 e^-$). Se comprueba que el número total de electrones sea igual a A, desde el paso tres. Por ejemplo:

Para H_2SO_4



Comprobación: se han usado 16 pares de e^- , $2 \times 16 = 32 e^-$ disponibles

Para SO_4^{2-}



Comprobación: se han usado 16 pares de electrones $2 \times 16 = 32 e^-$ disponibles.

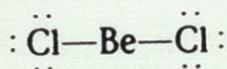
Whitten K.W., et al., "Química General", McGraw Hill, pág. 157, 1992.

LC. 4.2 Estructura molecular. Modelo de repulsión de pares de electrones de valencia

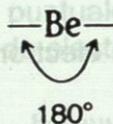
Las estructuras de las moléculas desempeñan un papel muy importante en determinar sus propiedades químicas. Esto es especialmente cierto para moléculas biológicas; un leve cambio de la estructura de una biomolécula de gran tamaño destruye en su totalidad su utilidad para la célula e inclusive hace que, en ocasiones, se transforme de normal a cancerosa.

En la actualidad existen diversos métodos experimentales para determinar la estructura molecular, es decir, el ordenamiento tridimensional de los átomos, es preciso emplearlos cuando se requiere información exacta acerca de la estructura. Sin embargo también es útil poder predecir la estructura molecular aproximada. En la presente sección se considerará un modelo sencillo que permite hacer lo anterior. Recibe el nombre de **modelo de repulsión del par electrónico en la capa de valencia (RPECV)** y permite predecir las estructuras moleculares cuando la molécula está formada por no metales. La principal idea del modelo es que la estructura en torno a un átomo dado está determinada por la minimización de repulsiones entre los pares electrónicos. Esto significa que los pares de enlace y de no enlace (no compartidos) en torno a un átomo dado se colocan tan alejados como sea posible. Para ver cómo funciona el modelo se considerará primero la molé-

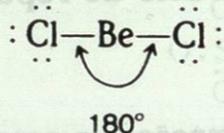
cula de BeCl_2 que tiene la siguiente estructura de Lewis (es una excepción a la regla del octeto).



Obsérvese que hay dos pares de electrones en torno al átomo de berilio; ¿qué ordenamiento permite que estos pares de electrones estén tan alejados como sea posible para reducir al mínimo las repulsiones? El mejor ordenamiento coloca a los pares en lados opuestos del átomo de berilio, a 180° uno del otro.

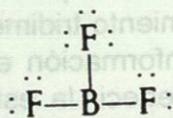


Esta es la separación máxima posible para dos pares de electrones. Una vez determinado el ordenamiento óptimo de los pares de electrones en torno al átomo central se especifica la estructura molecular de BeCl_2 ; es decir, las posiciones de los átomos. Como cada par de electrones de berilio se comparte con un átomo de cloro, la molécula tiene estructura lineal con ángulo de enlace de 180° .

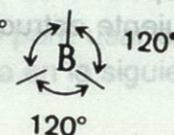


Siempre que hay dos pares de electrones en torno a un átomo se colocan en ángulo de 180° para obtener un ordenamiento lineal.

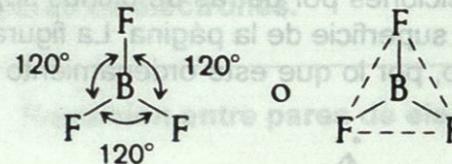
A continuación se considerará al BF_3 que tiene la siguiente estructura de Lewis (es otra excepción a la regla del octeto).



En este caso el átomo de boro está rodeado por tres pares de electrones; ¿qué ordenamiento reduce al mínimo las repulsiones entre tres pares de electrones? En este caso la mayor distancia entre los pares se logra mediante ángulos de 120° .

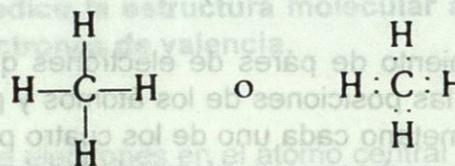


Como cada par de electrones se comparte con el átomo de flúor la estructura molecular es:



Esta es una molécula planar (plana) con ordenamiento triangular de átomos de F, que se describe comúnmente como estructura plana trigonal. Siempre que hay tres pares de electrones presentes en torno a un átomo se colocan en los extremos de un triángulo (en un plano, con un ángulo de 120° entre sí).

A continuación se considerará la molécula de metano que tiene la siguiente estructura de Lewis



Hay cuatro pares de electrones en torno al átomo de carbono central; ¿qué ordenamiento de estos pares de electrones reduce al mínimo las repulsiones? Primero se prueba un ordenamiento cuadrado plano:

