

# SOLUCIÓN AUXILIAR 5

Aux: Braulio Brunsud S.

## PARTES ESTRUCTURAS DE LEWIS

OK

Estrategia general para determinar estructuras de Lewis:

- 1- Determinar el n° total de electrones de valencia en la molécula para ello se deben escribir configuraciones de electrones y determinar el número de electrones de valencia por átomo.
- 2- Escribir las conectividades posibles
- 3- Enlazar los átomos contiguos con pares de e-
- 4- Completar octetos (dueto en el caso de H)
- 5- Para decidir la estructura más probable se calculan cargas formales para cada átomo, la CF debe cumplir las siguientes reglas:
  - la suma de las CF es igual a la carga de la molécula
  - CF de átomos contiguos deben tener signo opuesto
  - Será deseable que las cargas formales de los átomos sean cercanas a cero
  - La carga formal más negativa la tendrá el átomo más electronegativo

### P1) a) HCN



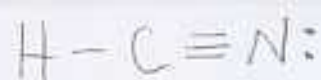
$$e_{\text{val}} = 10$$

$$n^{\circ} \text{ de electrones de valencia} = 2 \cdot n_H + 4 \cdot n_C + 5 \cdot n_N = 2 \cdot 1 + 4 \cdot 1 + 5 \cdot 1 = 12 \quad \left( \begin{array}{l} \text{C, N forman octeto} \\ \text{H forma dueto} \end{array} \right)$$

$$e_{\text{enl}} = 12 - 10 = 2$$

$$n^{\circ} \text{ de enlaces} = \frac{2}{2} = 1$$

$$n^{\circ} e^- \text{ sin compartir} = 12 - 2 = 10$$



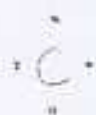
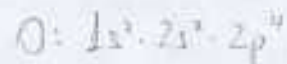
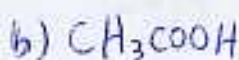
$$\begin{aligned} CF: H &= 1-1-0 = 0 \\ C &= 4-4-0 = 0 \\ N &= 5-3-2 = 0 \end{aligned}$$

$$(CF = e_{val} - n_{enlace} - e_{libres})$$



$$\begin{aligned} CF: H &= 1-1-0 = 0 \\ C &= 4-3-2 = -1 \\ N &= 5-4-0 = +1 \end{aligned}$$

Luego como es más estable que tenga cargas formales cercanas a cero, la estructura es  $H-C \equiv N:$



$$e_{val} = 2 \cdot 4 + 2 \cdot 6 + 4 = 24$$

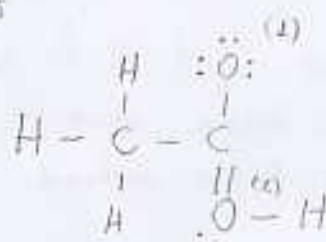
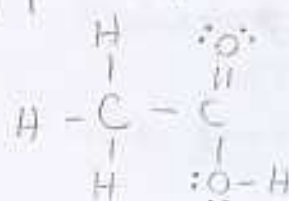
$$n^{\circ} \text{ octetos y duetos} = 2 \cdot 4 + 8 \cdot 4 = 40$$

$$e_{enl} = 40 - 24 = 16$$

$$n^{\circ} \text{ enlaces} = 16/2 = 8$$

$$n^{\circ} e^- \text{ sin enlazar} = 24 - 16 = 8$$

proponiendo 2 estructuras



$$CF = 0 \quad \text{para ambas estructuras}$$

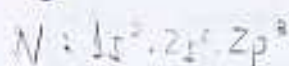
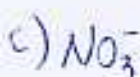
$$CF_{O_1} = 6 - 1 - 6 = -1$$

$$CF_{O_2} = 6 - 3 - 2 = +1$$

(A)

(B)

Luego (A) es la estructura más probable



$$e_{val} = 1 \cdot 5 + 3 \cdot 6 + 1 = 24$$

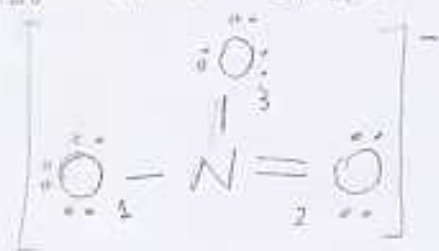
$$n^{\circ} \text{ octetos y duetos} = 8 \cdot 4 = 32$$

$$e_{enl} = 32 - 24 = 8$$

$$n^{\circ} \text{ enlaces} = 4$$

$$n^{\circ} e^- \text{ sin enlazar} = 24 - 8 = 16$$

usando estos cálculos la estructura obtenida es:



CF:

$$N = 5 - 4 - 0 = +1$$

$$O_1 = O_3 = 6 - 1 - 6 = -1$$

$$O_2 = 6 - 2 - 4 = 0$$

Esta molécula tiene estructuras resonantes, pues el doble enlace se puede formar con cualquiera de los 3 átomos de oxígeno

## P2] CO<sub>2</sub>

$$\text{C: } 1s^2 \cdot 2s^2 \cdot 2p^2$$

$$\text{O: } 1s^2 \cdot 2s^2 \cdot 2p^4$$

$$E_{\text{val}} = 1 \cdot 4 + 2 \cdot 6 = 16$$

$$n^{\circ} \text{ de electrones de valencia} = 3 \cdot 8 = 24$$

$$R_{\text{ent}} = 24 - 16 = 8$$

$$n^{\circ} \text{ de enlaces} = 4$$

$$n^{\circ} e^- \text{ sin enlace} = 8$$

estructuras posibles



$$C = 4 - 2 - 4 = -2$$

$$O_1 = 6 - 4 - 0 = +2$$

$$O_2 = 6 - 2 - 4 = 0$$



$$C = 4 - 3 - 2 = -1$$

$$O_1 = 6 - 4 - 0 = +2$$

$$O_2 = 6 - 1 - 6 = -1$$

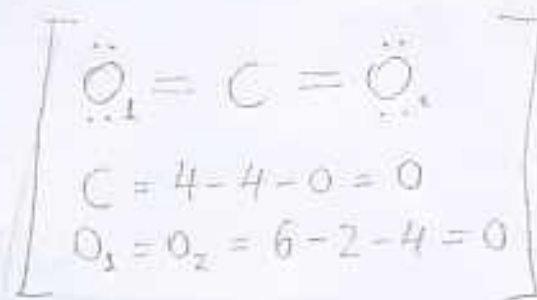


$$C = 4 - 1 - 6 = -3$$

$$O_1 = 6 - 4 - 0 = +2$$

$$O_2 = 6 - 3 - 2 = +1$$

X (átomos negativos = carga)



← La más probable

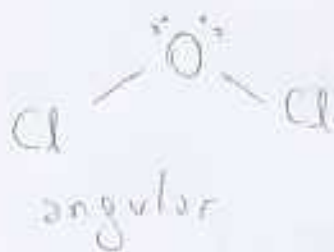


$$C = 4 - 4 - 0 = 0$$

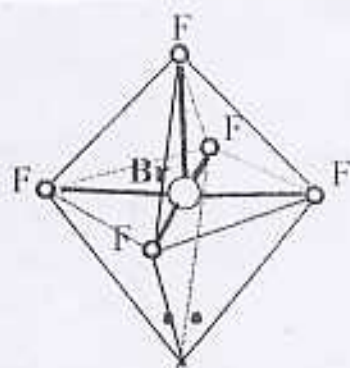
$$O_1 = 6 - 1 - 6 = -1$$

$$O_2 = 6 - 3 - 2 = +1$$

P3)  $\text{Cl}_2\text{O}$

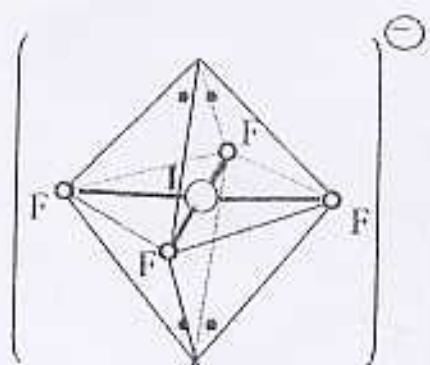


$\text{BrF}_5$



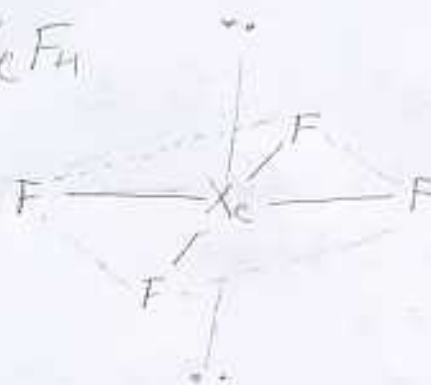
pirâmide de base quadrada

$\text{IF}_4^-$



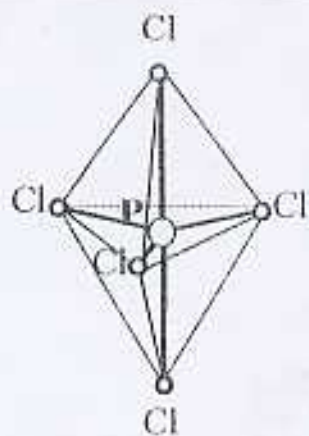
Quadrado plana

$\text{XeF}_4$



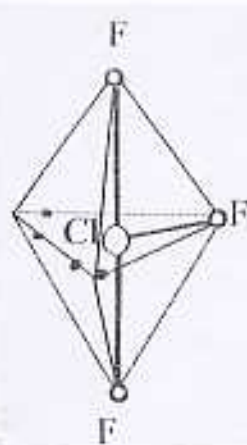
Quadrado plana

$\text{PCl}_5$



bipirâmide de base triangular

$\text{ClF}_3$   
(mol de bromado)



Forma de T