

Profesor de cátedra: Sr. Ricardo Letelier

Profesor Auxiliar: Magín Torres

## Estructuras de Lewis

1. Dados los Z de los elementos, escribir la configuración electrónica de todos los elementos presentes en la fórmula.
2. Identificar el grupo de los elementos, para determinar el número de electrones de valencia.
3. Escribo la suma de los electrones de valencia + la carga del ion (se suma la carga para aniones y se resta para cationes).
4. Escribo la suma de electrones de octeto, los elementos del primer período aportan 2 (forman duetos) y los demás 8 (forman octetos).
5. Realizo la diferencia entre (4) y (3). (Ojo éste número siempre es par)
6. El número de enlaces viene dado por  $(5)/2$ .  
¿Me alcanzan?
  - SI: Verifico caso especial de octeto incompleto (vuelvo a paso (4) y resto 2 a la suma de electrones de octeto). En caso que no sea octeto incompleto sigo adelante.
  - NO: Expando el Octeto (vuelvo al paso (4) y sumo 2 a la suma de electrones de octeto). Recuerden que el octeto se puede expandir máximo 2 veces.
7. Calculo el número de electrones libres con la diferencia entre (3) y (5).
8. Verifico cargas formales de cada elemento. La suma de las cargas formales es igual a la carga de la molécula. La molécula más probable es la que tiene sus cargas formales (en módulo) cercanas a cero, que dos átomos vecinos no tengan la misma carga formal (distinta de cero) y que las cargas formales negativas traten de quedar siempre en los elementos más electronegativos.  
¿Están Bien?
  - SI: sigo adelante
  - NO: vuelvo al paso (4) y expando o contraigo el octeto hasta que tenga la molécula más probable.
9. Identifico geometría (AXE) y estructuras resonantes.
10. Calculo el momento dipolar. Es decir si existe un vector entre dos átomos que tiene como magnitud la diferencia entre sus electronegatividades, como dirección la recta que

une ambos átomos y como sentido desde el átomo menos electronegativo al más electronegativo. El momento dipolar será la suma vectorial de todos estos contribuyentes.

Una última cosa y no menos importante es que por lo general sólo expanden su octeto los elementos que se encuentran desde el tercer período en adelante.

Código	Hibridación	Forma	Angulos	Dibujo
AX <sub>2</sub>	sp	Lineal	180°	
AX <sub>3</sub>	sp <sup>2</sup>	Triangular Plana	120°	
AX <sub>4</sub>	sp <sup>3</sup>	Tetraédrica	109°	
AX <sub>2</sub> E	sp <sup>3</sup>	Angular	≈120°	
AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub>	sp <sup>3</sup>	Angular	105°	
AX <sub>3</sub> E	sp <sup>3</sup>	Pirámide Trigonal	107°	
AX <sub>5</sub>	dsp <sup>3</sup>	Bipirámide Trigonal	120° c/r horizontal 90° c/r vertical	
AX <sub>4</sub> E	dsp <sup>3</sup>	Balancín	≈120° horiz 90° c/r al plano	

$AX_3E_2$	$dsp^3$	Forma T	$90^\circ$	
$AX_2E_3$	$d^2sp^3$	Lineal	$180^\circ$	
$AX_6$	$d^2sp^3$	Octaédrica	$90^\circ$	
$AX_5E$	$d^2sp^3$	Pirámide Tetragonal	$90^\circ$	
$AX_4E_2$	$d^2sp^3$	Cuadrada Plana	$90^\circ$	

### Ejemplos

Si

$C = 1s^2 2s^2 2p^2$  (grupo 4)  $\chi = 2.5$

$O = 1s^2 2s^2 2p^4$  (grupo 6)  $\chi = 3.5$

$Al = [Ne] 3s^2 3p^1$  (grupo 3)  $\chi = 1.5$

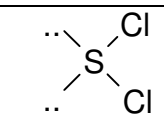
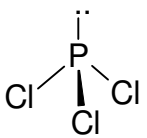
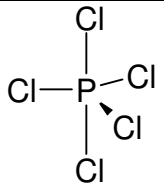
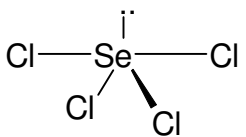
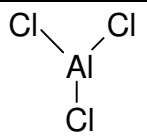
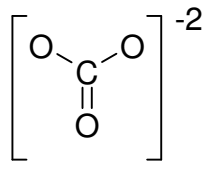
$P = [Ne] 3s^2 3p^3$  (grupo 5)  $\chi = 2.1$

$S = [Ne] 3s^2 3p^4$  (grupo 6)  $\chi = 2.5$

$Cl = [Ne] 3s^2 3p^5$  (grupo 7)  $\chi = 3.0$

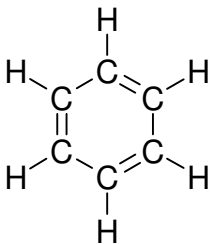
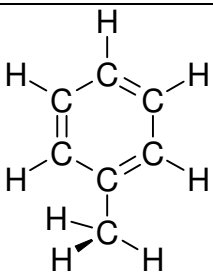
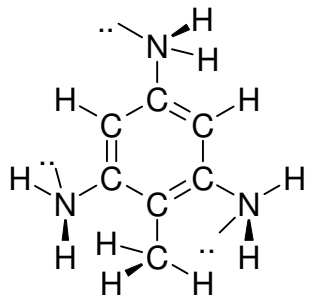
$Se = [Ar] 3s^2 3p^3$  (grupo 6)  $\chi = 2.4$

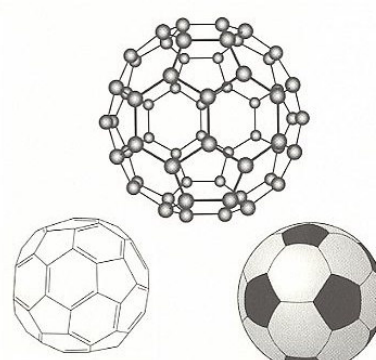
Entonces, veamos qué sucede para las siguientes moléculas:

Molécula y Cálculos	Geometría	Momento Dipolar
<b>SCl<sub>2</sub></b> EV: $6 \times 1 + 7 \times 2 = 20$ EO: $3 \times 2 = 24$ 4 2 enlaces 16 electrones libres.	 angular AX <sub>2</sub> E <sub>2</sub> ángulo = 105°	$\Delta\chi = 3.0 - 2.5 = 0.5$ $\mu = 2 \times 0.5 \times \cos(105/2) = 0.61$
<b>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></b> EV: $2 \times 4 + 2 \times 1 = 10$ EO: $2 \times 8 + 2 \times 2 = 20$ 10 5 enlaces 0 electrones libres.	HC≡CH ángulo = 180°	$\mu = 0$
<b>PCl<sub>3</sub></b> EV: $1 \times 5 + 3 \times 7 = 26$ EO: $4 \times 8 = 32$ 6 3 enlaces 20 electrones libres.	 pirámide trigonal AX <sub>3</sub> E ángulo = 107°	$\Delta\chi = 3.0 - 2.1 = 0.9$ $\mu = 3 \times 0.9 \times \cos(180-107) = 0.79$
<b>PCl<sub>5</sub></b> EV: $1 \times 5 + 5 \times 7 = 40$ EO: $6 \times 8 + 2 = 50$ 10 5 enlaces 30 electrones libres,	 bipirámide trigonal AX <sub>5</sub>	$\mu = 0$
<b>SeCl<sub>4</sub></b> EV: $1 \times 6 + 4 \times 7 = 34$ EO: $5 \times 8 + 2 = 42$ 8 4 enlaces 26 electrones libres.	 balancín AX <sub>4</sub> E ángulo = 120°	$\Delta\chi = 3.0 - 2.4 = 0.6$ $\mu = 2 \times 0.5 \times \cos(120/2) = 0.60$
<b>AlCl<sub>3</sub></b> EV: $1 \times 3 + 3 \times 7 = 24$ EO: $4 \times 8 - 2 = 30$ 6 3 enlaces 18 electrones libres.	 triangular plana AX <sub>3</sub>	$\mu = 0$
<b>(CO<sub>3</sub>)<sup>-2</sup></b> EV: $1 \times 4 + 3 \times 6 + 2 = 24$ EO: $4 \times 8 = 32$ 8 4 enlaces 16 electrones libres.	 triangular plana AX <sub>3</sub>	$\mu = 0$ (y además es resonante)

## Moléculas Cíclicas

La naturaleza siempre trata de buscar el estado de mínima energía, sólo en muy pocos casos intenten construir moléculas cíclicas. No existe una regla general, pero las moléculas orgánicas (contienen Carbono) y algunos silicatos forman a veces ciclos o anillos. Éstos ciclos o anillos son por lo general hexagonales o pentagonales (lo más parecido a una circunferencia ¿Porqué?). Por supuesto, para efectos didácticos, se inventan problemas en los cuales existen anillos triangulares y cuadrados...

<p><b>C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> (Benceno)</b></p> <p>EV = 6×4 + 6×1 = 30</p> <p>EO = 6×8 + 6×2 = 60</p> <p>30</p> <p>15 enlaces</p> <p>0 electrones libres</p>	 <p>Cada carbono es un AX<sub>3</sub> y además es resonante.</p>
<p><b>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>(CH<sub>3</sub>) (Tolueno)</b></p> <p>EV = 7×4 + 8×1 = 36</p> <p>EO = 7×8 + 8×2 = 72</p> <p>36</p> <p>18 enlaces</p> <p>0 electrones libres</p>	 <p>Cada carbono del anillo es un AX<sub>3</sub>, el que no está en el anillo es un AX<sub>4</sub>, además la molec. es resonante.</p>
<p><b>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>(NH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>(CH<sub>3</sub>)</b></p> <p><b>Trinitrotolueno (TNT)</b></p> <p>EV = 7×4 + 3×5 + 11×1 = 54</p> <p>EO = 10×8 + 11×2 = 102</p> <p>48</p> <p>24 enlaces</p> <p>6 electrones libres</p>	

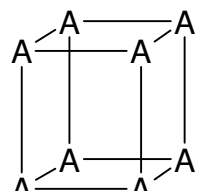
<b>C<sub>60</sub> (BuckminsterFullerene o BuckyBall)</b> $EV = 60 \times 4 = 240$ $EO = 60 \times 8 = 480$ 240 120 enlaces 0 electrones libres	 <p>Son 20 hexágonos y 12 pentágonos. Todos los Carbonos son AX<sub>3</sub></p>
---	---

**Identifique el grupo de elementos que forma una molécula cúbica. ¿Cuál es la fórmula de la molécula?. ¿Es la molécula estable?. ¿Existen macromoléculas estables así en la naturaleza?.**

Solución:

El cubo tiene 12 aristas (12 enlaces) y 8 vértices (Átomos), si intentamos formar un cubo con enlaces triples, nos daremos cuenta que excede la regla del octeto de expandirse más de dos veces... Por lo tanto el cubo está formado de enlaces dobles o simples. Entonces, tenemos los siguientes datos

	Cubo enlace simple	Cubo enlace doble
n° de átomos	8	8
¿Forma Octetos?	SI	NO (octeto expandido 2 veces)
n° de enlaces	12	24
n° de electrones libres	1 par p/c arista ( $8 \times 2 = 16$ )	0

<b>Cubo simple</b> $EV = 8 \times n$ $EO = 8 \times 8 = 64$ $64 - 8 \times n = 12 \times 2$ 12 enlaces 16 electrones libres y además $8 \times n - 24 = 16$ es decir $n=5$	 <p>Grupo 5, es decir <math>ns^2 np^3</math> (N,P,As,Sb,Bi)            todos los átomos son del tipo AX<sub>3</sub>E</p>
---	---

**Cubo doble**

$$EV = 8 \times n$$

$$EO = 8 \times 8 = 64$$

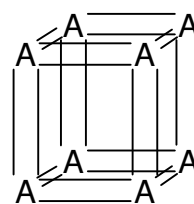
$$64 - 8 \times n = 24 \times 2$$

24 enlaces

0 electrones libres

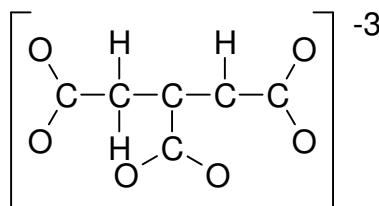
y también se tiene  $8 \times n - 48 = 0$

es decir  $n=2$  y  $n = 6$  (no existe)



La fórmula del elemento es  $A_8$ , puesto que las moléculas con geometría  $AX_3E$  poseen ángulos en  $107^\circ$ , acá están forzados a estar en  $90^\circ$  por lo que la molécula es inestable. Los fullerenos son macromoléculas estables que poseen geometría  $AX_3$ .

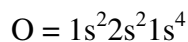
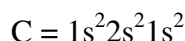
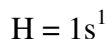
**El aconitato, tiene la siguiente estructura**



**Escriba la estructura de lewis más estable, con todos los enlaces y pares solitarios.**

**¿Existen estructuras resonantes? Indíquelas si existen. Indique la geometría de cada Carbono.**

Respuesta:



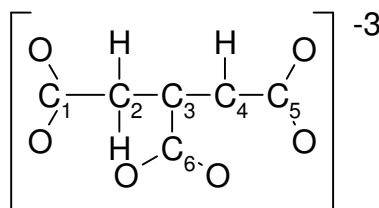
$$EV: 6 \times 4 + 6 \times 6 + 3 \times 1 + 3 = 66$$

$$EO: 12 \times 8 + 3 \times 2 = 102$$

$$102 - 66 = 36$$

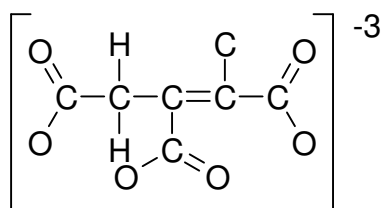
18 enlaces

30 electrones libres.



Sólo existen 14 enlaces, por lo que debemos completar los otros 4. No podemos poner ninguno más en el  $C_2$ , no es una regla general pero al ser una molécula orgánica los oxígenos siempre poseen enlaces dobles... Ponemos un enlace al  $C_1$ ,  $C_6$  y  $C_5$ , el que nos

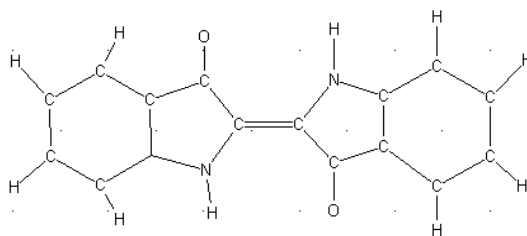
falta lo ponemos o en el C<sub>5</sub> o en el C<sub>3</sub>. Puesto que el C<sub>5</sub> tiene su octeto, lo ponemos en el C<sub>4</sub>.



Las estructuras resonantes, corresponden a las combinaciones entre enlaces O-C=O.

Los Carbonos 1,3,4,5,6 poseen geometría triangular plana y los ángulos son de 120°. El Carbono 2 es un AX<sub>4</sub>, por lo que sería tetraédric (109°).

**La estructura del Indigo es:**



**Complete los enlaces y electrones libres que faltan en la molécula. Indique las otras estructuras resonantes. ¿Es una molécula plana?**

Solución:

Contamos 10 Hidrógenos, 16 Carbonos, 2 Nitrógenos y 2 Oxígenos. Lo que nos indica...

$$\text{EO: } 10 \cdot 2 + (16 + 2 + 2) \cdot 8 = 180$$

$$\text{EV: } 10 \cdot 1 + 16 \cdot 4 + 2 \cdot 5 + 2 \cdot 6 = 96$$

$$180 - 96 = 84$$

$$\text{n}^\circ \text{ enlaces} = 42$$

$$\text{n}^\circ \text{ e.libres} = 12$$

Entonces... Según el dibujo, tenemos 34 enlaces... Por lo que tendremos que completar 8 enlaces y poner 12 electrones libres.



Primero vemos dónde podemos poner más enlaces... Esto lo pueden saber de dos formas...

Si conocen un poco de química orgánica, ven que parte de la molécula tiene una estructura parecida al benceno (mol. resonante)... de ahí todo sale fácil, ponen los enlaces que les faltan en los oxígenos y listo...

Ahora, por el camino más largo... Primero, no podemos poner más enlaces en los Carbonos que tienen enlaces dobles, ni tampoco en las moléculas vecinas a ellas porque el octeto no se cumpliría... colocamos 6 enlaces en las estructuras hexagonales extremas, de tal forma que se cumpla el octeto... los dos que nos faltan se los ponemos a los oxígenos (¿Por qué no al Nitrógeno?: Porque el Hidrógeno que está unido al Nitrógeno forma duetos).

Ponemos electrones libres en los oxígenos (8) y los 4 restantes un par a cada Nitrógeno...

Si jugamos con los enlaces, nos damos cuenta que podemos formar hasta 4 estructuras resonantes...

Ahora separamos cada átomo como si estuviera solo... y vemos nuestra tabla AXE.

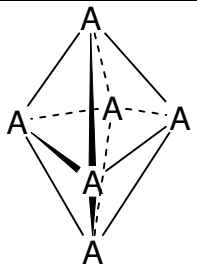
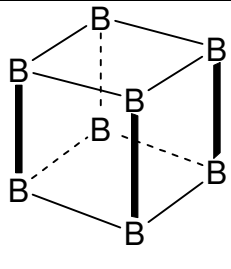
Las estructuras corresponden a moléculas angulares y angulares planas... O sea es plana...

---

**Suponga que tiene dos moléculas  $A_6$  y  $B_8$ , las cuales están formadas sólo por enlaces simples.**

**Si los átomos en  $A_6$  están dispuestos como los vértices de una dipirámide trigonal y los átomos de  $B_8$  están dispuestos como los vértices de un cubo, encuentre la configuración electrónica de A y B.**

Por el número de átomos, enlaces y electrones libres; y siguiendo el algoritmo de cálculo para las estructuras de Lewis, es posible identificar la familia de los elementos A y B

Molécula A <sub>6</sub>	Molécula B <sub>8</sub>
	
6 átomos 12 enlaces	8 átomos 12 enlaces
EV = 6 · n EO = 8 · 6 = 48 48 - 6 · n 24 - 3 · n enlaces	EV = 8 · n EO = 8 · 8 = 64 64 - 8 · n 32 - 4 · n enlaces
24 - 3 · n = 12 n = 4	32 - 4 · n = 12 n = 5
(ns) <sup>2</sup> (np) <sup>2</sup>	(ns) <sup>2</sup> (np) <sup>3</sup>