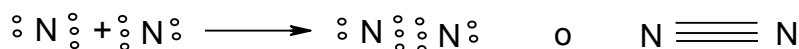


Estructuras de Lewis y la Carga Formal.

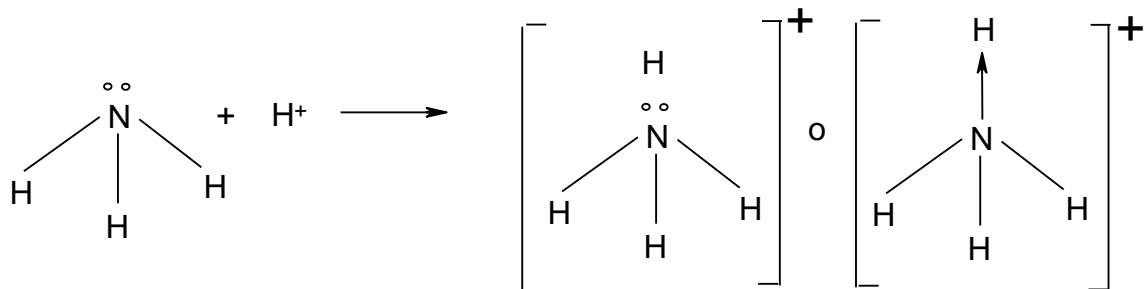
Cuando se forma un enlace entre dos no-metales, debido a que las electronegatividades de estos elementos son similares, el enlace formado no tiene carácter iónico, si bien puede ser polar. Los electrones son “**compartidos**”, normalmente apareados. A este enlace se le denomina **enlace covalente**. La naturaleza y características del enlace covalente están muy relacionadas con el orbital molecular visto anteriormente.

Consideremos la formación de dos moléculas diatómicas homonucleares, la molécula F_2 (Grupo VIIA) y la molécula N_2 (Grupo VA) (Note que el número de electrones de valencia que tiene un átomo de la familia **A** es igual al número del grupo). De la discusión del capítulo anterior sabemos que en F_2 hay formación de un enlace **simple** mientras que en N_2 se forma un enlace **triple**. Esta situación se puede representar de la siguiente manera:



Estas fórmulas de puntos se denominan **Estructuras de Lewis** (G.N. Lewis las propuso en 1916). En esta formulación se enfatiza el hecho que los átomos en moléculas covalentes tienden a alcanzar la configuración del gas noble más cercano, normalmente con un **octeto** de electrones.

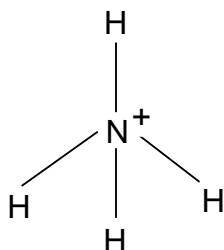
En algunos enlaces covalentes, los dos electrones del enlace son suministrados por sólo uno de los átomos, en estos casos el enlace se denomina **covalente coordinado o dativo**. Por ejemplo en la molécula NH_4^+



La estructura de NH_4^+ con 4 enlaces equivalentes es compatible con la de un átomo que tuviera 4 electrones de valencia. Para explicar esto introducimos el concepto de **carga formal**, que es una forma de contabilizar los electrones dentro de una molécula y asignarlos a ciertos átomos. La carga formal no corresponde a la descripción de las densidades electrónicas dentro de la molécula y por lo tanto es un concepto (al igual que número de oxidación) que debe manejarse con cuidado. La carga formal de un átomo en una estructura de Lewis se calcula de la siguiente manera:

$$\text{carga formal} = +(\text{N}^\circ \text{ del grupo}) - [(\text{N}^\circ \text{ de enlaces}) + (\text{N}^\circ \text{ de electrones sin compartir})]$$

Con esta expresión podemos calcular que para NH_4^+ la carga formal en el nitrógeno es **+1** mientras que para cada hidrógeno es **0**. La molécula la escribimos entonces de la siguiente manera:



En este ejercicio, un N^+ hipotético tendría cuatro electrones de valencia y podría formar 4 enlaces covalentes.

Además se debe tener presente que:

- En una molécula neutra la suma de las cargas formales debe ser cero, en un ión la suma de cargas formales es la carga neta del ión.
- Los átomos unidos entre sí en una molécula no deben tener cargas formales del mismo signo

Representación de las estructuras de Lewis:

Para representar una molécula por su estructura de Lewis se siguen varias etapas. Lo haremos utilizando como ejemplo la molécula de ácido nítrico HNO_3 , de la que sabemos que los oxígenos están enlazados al nitrógeno y el hidrógeno a uno de los oxígenos.

1) Hallar el número total de electrones de valencia en la molécula o ión.

En nuestro ejemplo:

Átomo	Nº electrones
1H	1
1N	5
3O	18
total 24	

2) Encontrar el número de electrones necesarios para suministrar 2 electrones a cada H y 8 a cada uno de los otros átomos.

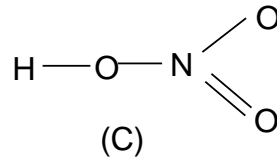
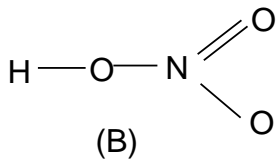
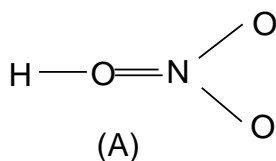
Ejemplo: $2 \times 1(\text{H}) + 8 \times 4(\text{otros átomos}) = \mathbf{34}$ electrones

3) La diferencia entre estos dos números es el número de electrones a ser compartido en la estructura final. Este número dividido por 2 es el número de enlaces.

Ejemplo: $(34 - 10)/2 = \mathbf{5}$ enlaces

4) Usando la conectividad de la estructura, unir los átomos con un enlace covalente simple entre cada par de átomos. Usar los enlaces restantes para hacer enlaces múltiples. Note que puede haber más de una posibilidad.

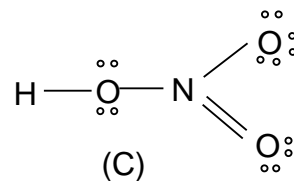
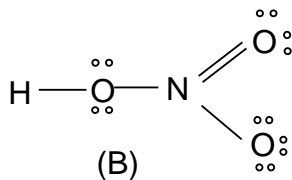
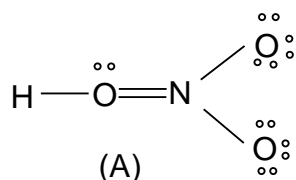
Ejemplo:



(el hidrógeno sólo puede tener enlaces simples)

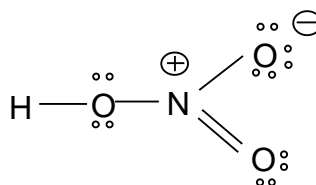
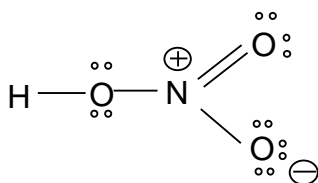
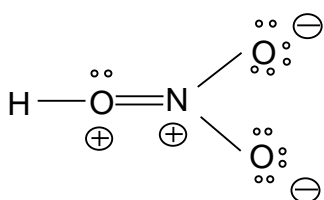
5) Hallar el número de electrones sin compartir. Este número es el total de electrones menos el número de electrones de enlace. Completar el octeto de electrones de cada átomo.

Ejemplo: $24 - 10 = \mathbf{14}$ electrones sin compartir



6) Indicar las cargas formales de los átomos apropiados en las estructuras resultantes y evaluar la estructura.

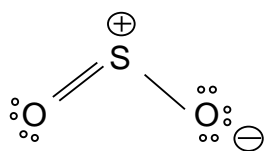
Ejemplo:



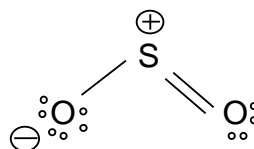
Debemos descartar la estructura (A) puesto que hay átomos adyacentes con la misma carga formal. Las estructuras (B) y (C) son equivalentes y se denominan **estructuras resonantes**

Resonancia

Como en el ejemplo anterior, algunas moléculas pueden ser representadas por más de una estructura de Lewis. Las propiedades de la molécula deben describirse entonces como una combinación de varias estructuras de enlace valencia. Por ejemplo, en la molécula de SO_2 se sabe que ambos enlaces S—O tienen la misma longitud y la densidad de carga sobre ambos oxígenos también es la misma. La molécula puede representarse por dos estructuras de Lewis, en ambas, los oxígenos están enlazados de forma diferente al azufre.



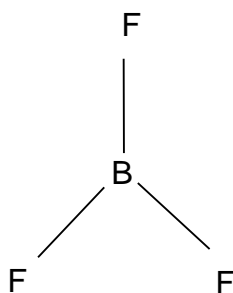
(A)



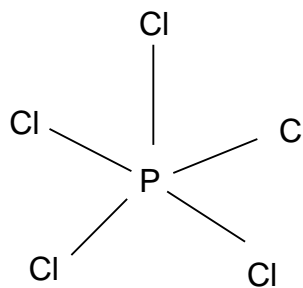
(B)

La molécula real no corresponde a ninguna de las dos estructuras sino que se la representa como un **híbrido** entre ambas. Se dice que la molécula **resuena** entre ambas estructuras y en promedio, lo que se observa es una simetría de carga y distancia de enlaces. En la teoría del orbital molecular, en la que los electrones no están en principio localizados sino que se distribuyen por toda la molécula, esta característica resulta como una consecuencia natural. En esta nomenclatura diríamos que el enlace S—O es de orden 1.5

La regla del octeto no siempre es obedecida, hay moléculas que tienen un número impar de electrones de valencia como por ejemplo la de NO_2 que tiene 17 electrones de valencia, en cuyo caso es imposible que todos los átomos puedan completar 8 electrones externos. Existen otros casos en que uno de los átomos queda deficiente en electrones, por ejemplo la molécula de BF_3 con 6 electrones (caso A en la figura siguiente) o bien en que uno de los átomos tiene exceso, como por ejemplo PCl_5 con 10 electrones (caso B en la figura siguiente). En este último caso estas estructuras son posibles debido a que hay más niveles accesibles para ése átomo y puede acomodar electrones extras.



(A)



(B)

Estos ejemplos ilustran que la obtención de un octeto no parece ser el criterio general y adecuado para analizar la estructura de una molécula sino más bien la posibilidad de formación de enlaces covalentes.