

## Resolución de la Tarea 3.

### Disposición electrónica y geometría/Hibridación /Orbitales moleculares

Química Inorgánica I

Química Inorgánica I

Paulino Guillermo Zerón Espinosa | Miroslava Arronte Morales

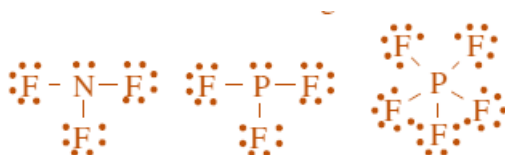
## 1. Enlace covalente

1.1. Propón un compuesto y una hibridación adecuada para compuestos del tipo:

- 1.1.1.  $EX_2$  - Hidruro de berilio  $BeH_2$  -  $sp$
- 1.1.2.  $EX_3$  - Fluoruro de aluminio  $AlF_3$  -  $sp^2$
- 1.1.3.  $EX_4$  - Silano  $SiH_4$  -  $sp^3$
- 1.1.4.  $EX_5$  - Pentafluoruro de fósforo  $PF_5$  -  $sp^3d$
- 1.1.5.  $EX_6$  - Hexafluoruro de azufre  $SF_6$  -  $sp^3d^2$

1.2. El fósforo puede formar las moléculas  $PF_3$  y  $PF_5$ , mientras que el nitrógeno solo puede formar la molécula de  $NF_3$  mientras que  $NF_5$  no existe:

- a) Escribe las estructuras de Lewis de  $NF_3$ ,  $PF_3$  y  $PF_5$
- b) Da una explicación al hecho de que  $PF_5$  sea estable mientras que  $NF_5$  no lo es.



- a)
- b) Tanto en el N como en el P hay 10 electrones a su alrededor. Nitrógeno pertenece al segundo periodo de la tabla periódica, por lo que únicamente puede albergar 8 electrones de valencia (cumple el octeto) ya que ocupar los orbitales 3s para albergar los otros dos electrones sería energéticamente desfavorable. El fósforo tiene los orbitales 3s, 3p y 3d disponibles para albergar los 10 electrones y hacer octeto expandido.

1.3. Según la teoría de repulsión de pares electrónicos de valencia (RPECV) llena la siguiente tabla.

Nombre de la especie	Ejemplo: dicromato	1. acetato	2.- Hexafluorofosfato	3.- Cloruro de estaño (II)
Fórmula	$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$	$\text{CH}_3\text{COO}^-$	$\text{PF}_6^-$	$\text{SnCl}_2$
Número de electrones de valencia de cada átomo	Cr = 6 electrones O = 6 electrones	C = 4 electrones H = 1 electrón O = 6 electrones	P = 5 electrones F = 7 electrones	Sn = 4 electrones Cl = 7 electrones
Número total de electrones en la especie	56	24	48	18
Disposición de los electrones en la especie	<b>Tetraédrica</b> (Es igual para los dos átomos de cromo)	C (metilo) → Tetraédrico C (carboxilo) → trigonal	<b>Octaédrica</b>	Trigonal
Geometría de la especie	<b>Tetraédrica</b> (Es igual para los dos átomos de cromo)	C (metilo) → Tetraédrico C (carboxilo) → triangular	<b>Octaédrica</b>	Angular
Carga de la especie	<b>2-</b>	<b>1-</b>	<b>1-</b>	0
Estructura de la especie (Lewis = representación en 2D)				

Nombre de la especie	4.- Tetracloruro de telurio (IV)	5.- Fluoruro de bromo (III)	6.- Ácido sulfúrico	7.- Silicato
Fórmula	$\text{TeCl}_4$	$\text{BrF}_3$	$\text{H}_2\text{SO}_4$	$\text{SiO}_3^{2-}$
Número de electrones de valencia de cada átomo	Te = 6 electrones Cl = 7 electrones	Br = 7 electrones F = 7 electrones	H = 1 electrón S = 6 electrones O = 6 electrones	Si = 4 electrones O = 6 electrones
Número total de electrones en la especie	34	28	32	26
Disposición de los electrones en la especie	<b>Bipirámide trigonal</b>	<b>Bipirámide trigonal</b>	<b>Tetraedro</b>	<b>Trigonal (tetraedro en polímeros)</b>
Geometría de la especie	<b>Balancín / silla de montar</b>	<b>"T"</b>	<b>Tetraedro</b>	<b>Trigonal (tetraedro en polímeros)</b>
Carga de la especie	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>2-</b>
Estructura de la especie (Lewis = representación en 2D)				

## BONUS

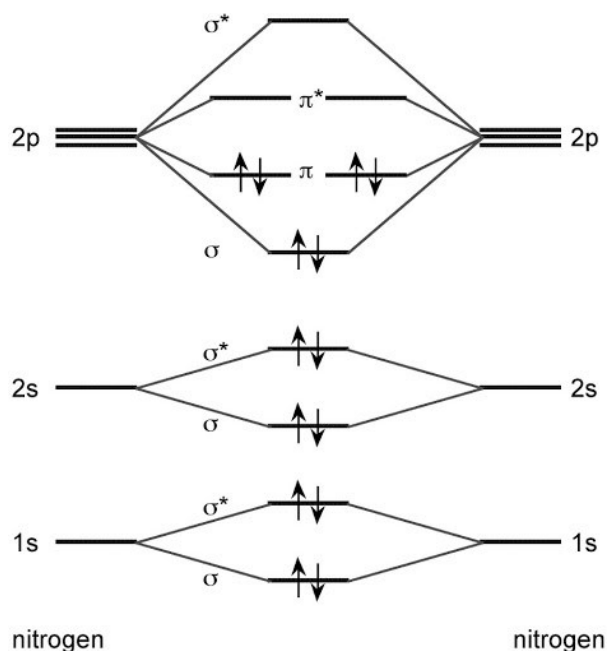
Nombre de la especie	8.- Tiocianato	9.- Benceno	10.- óxido nitroso	11.- Tetrafluoruro de xenon
Fórmula	SCN <sup>-</sup>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	N <sub>2</sub> O	XeF <sub>4</sub>
Número de electrones de valencia de cada átomo	S = 6 electrones C = 4 electrones N = 5 electrones	C = 4 electrones H = 1 electrón	N = 5 electrones O = 6 electrones	Xe = 8 electrones F = 7 electrones
Número total de electrones en la especie	16	30	16	36
Disposición de los electrones en la especie	Lineal	C = trigonal (los 6 carbonos → hexágono)	Lineal	Octaédrico
Geometría de la especie	Lineal	C = trigonal (los 6 carbonos → hexágono)	Lineal 	Cuadrada
Carga de la especie	-1	0	0	0
Estructura de la especie (Lewis = representación en 2D)				

3. Para las siguientes moléculas propón la hibridación del átomo central para cumplir con la geometría observada.

- Carbono en el trifluoruro de metilo. Geometría: Tetraedro –  $sp^3$
- Fósforo en el pentacloruro de fósforo. Geometría: Bipiramide trigonal –  $sp^3d$
- Carbono en el dióxido de carbono. Geometría: Lineal –  $sp$
- Fósforo en el anión hexafluorofosfato. Geometría: Octaedro –  $sp^3d^2$
- Xenón en el tetrafluoruro de xenón. Geometría: Cuadrado –  $spd^2$
- Boro en el trifluoruro de boro. Geometría: Trigonal –  $sp^2$

BONUS. Cloro en el anión perclorato. Geometría: Tetraedro –  $sd^3$ ?... Es en estos casos donde el modelo utilizado no es suficiente para explicar ciertas moléculas

4. Investiga el diagrama de orbitales moleculares del nitrógeno molecular (N<sub>2</sub>).



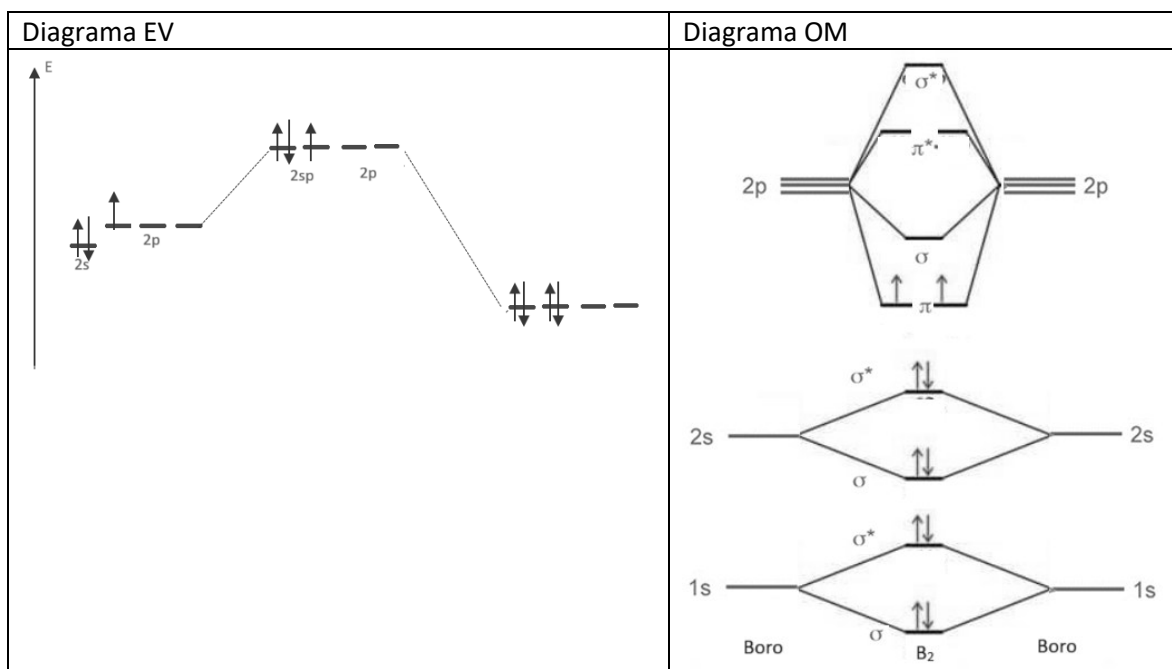
a. Identifica los electrones de valencia en el diagrama energético de los átomos y en la molécula. Los átomos de nitrógeno tienen 5 electrones de valencia. En el diagrama se muestran todos los electrones del nitrógeno (7) por lo que el número de electrones para la molécula N<sub>2</sub> es de 14.

b. Trata de explicar brevemente, la existencia de un triple enlace en la molécula con el diagrama de orbitales de la molécula. El triple enlace se explica con la interacción de los orbitales atómicos para formar los moleculares, los orbitales "p<sub>x</sub>" tienen una interacción frontal que termina en un enlace "sigma" y la interacción de los orbitales "p<sub>y</sub>" y "p<sub>z</sub>" es lateral. Formando así tres enlaces que conviven en los tres ejes de manera distinta.

c. Con las herramientas obtenidas, explica porque el nitrógeno es menos reactivo que la molécula de oxígeno.

El N<sub>2</sub> es una molécula diamagnética que ha alcanzado su estabilidad máxima, es decir, si gana un electrón éste se colocará en orbitales de antienlace, que tendrán como consecuencia la ruptura de la molécula. En cambio, el O<sub>2</sub> es una molécula paramagnética que aún puede aceptar un par de electrones en orbitales enlazantes.

5. Utilice los diagramas correspondientes a la molécula diatómica de boro para contestar la siguiente pregunta: ¿Qué diferencias existen entre la teoría enlace valencia y teoría de orbitales moleculares al estudiar la molécula diatómica de boro?

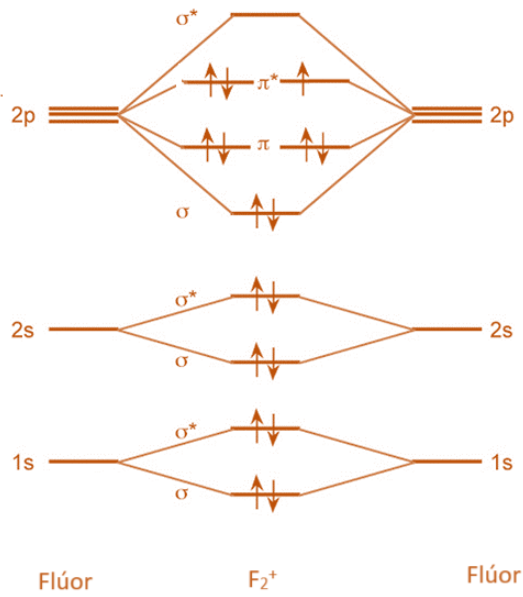


Enlace valencia nos da información sobre la geometría de la molécula, así como su hibridación, la cual, nos indica que tiene una hibridación  $sp$  con geometría lineal. De acuerdo con EV, la molécula sería diamagnética.

Por otro lado, orbitales moleculares nos indica el carácter magnético de molécula, la cual, es paramagnética. Así como el orden de enlace que es igual a 1. Estos datos, concuerdan con lo observado experimentalmente.

**BONUS**

6. Considere al catión  $F_2^+$ , Desarrolle/investigue el diagrama de orbitales moleculares y conteste ¿Cuál sería su orden de enlace? ¿Presentaría un carácter paramagnético o diamagnético?



$$OE = \frac{e^-_{\text{enlace}} - e^-_{\text{antienlace}}}{2}$$

$$OE_{F_2^+} = \frac{10 - 7}{2} = \frac{3}{2}$$

El orden de enlace sería de 1.5

Presenta un carácter paramagnético.