

## Resolución de la Tarea 5.

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

Química Inorgánica I

Química Inorgánica I

Paulino Guillermo Zerón Espinosa | Miroslava Arronte Morales

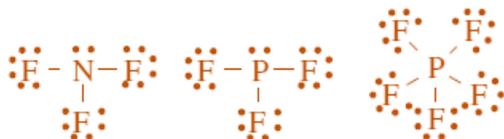
## 1. Enlace covalente

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

- 1.1.1. EX<sub>2</sub> - Hidruro de berilio BeH<sub>2</sub> - sp
- 1.1.2. EX<sub>3</sub> - Fluoruro de aluminio AlF<sub>3</sub> - sp<sup>2</sup>
- 1.1.3. EX<sub>4</sub> - Silano SiH<sub>4</sub> - sp<sup>3</sup>
- 1.1.4. EX<sub>5</sub> - Pentafluoruro de fósforo PF<sub>5</sub> - sp<sup>3</sup>d
- 1.1.5. EX<sub>6</sub> - Hexafluoruro de azufre SF<sub>6</sub> - sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup>

1.2. El fósforo puede formar las moléculas PF<sub>3</sub> y PF<sub>5</sub>, mientras que el nitrógeno solo puede formar la molécula de NF<sub>3</sub> mientras que NF<sub>5</sub> no existe:

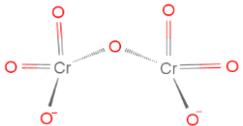
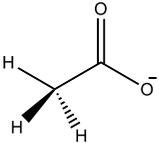
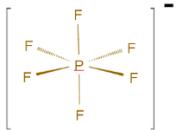
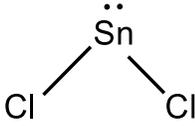
- a) Escribe las estructuras de Lewis de NF<sub>3</sub>, PF<sub>3</sub> y PF<sub>5</sub>
- b) Da una explicación al hecho de que PF<sub>5</sub> sea estable mientras que NF<sub>5</sub> no lo es.

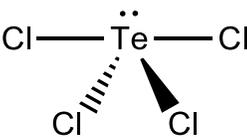
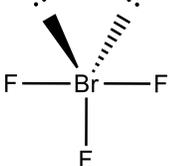
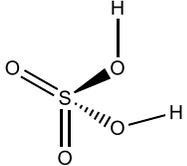
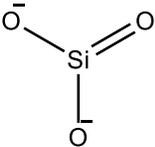


- a)
- b) Tanto en el N como en el P hay 10 electrones a su alrededor. Nitrógeno pertenece al segundo periodo de la tabla periódica, por lo que únicamente puede albergar 8 electrones de valencia (cumple el octeto) ya que ocupar los orbitales 3s para albergar los otros dos electrones sería energéticamente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

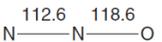
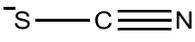
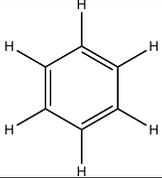
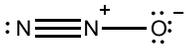
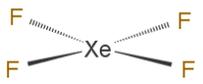
| Nombre de la especie                           | Ejemplo: dicromato                           | 1. acetato   | 2.- Hexafluorofosfato                | 3.- Cloruro de estaño (II)             |
|--|--|--|--------------------------------------|--|
| Fórmula  | Cr <sub>2</sub> O <sub>7</sub> <sup>2-</sup> | CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>                       | PF <sub>6</sub> <sup>-</sup>         | SnCl <sub>2</sub>                      |
| Número de electrones de valencia de cada átomo | Cr = 6 electrones<br>O = 6 electrones        | C = 4 electrones<br>H = 1 electrón<br>O = 6 electrones | P = 5 electrones<br>F = 7 electrones | Sn = 4 electrones<br>Cl = 7 electrones |

|   |   |   |  |   |
|---|---|---|--|---|
| Número total de electrones en la especie                | 56  | 24  | 48   | 18  |
| Disposición de los electrones en la especie             | <b>Tetraédrica</b><br>(Es igual para los dos átomos de cromo)                     | C (metilo) →<br>Tetraédrico<br>C (carboxilo) →<br>trigonal                        | Octaédrica   | Trigonal  |
| Geometría de la especie                                 | <b>Tetraédrica</b><br>(Es igual para los dos átomos de cromo)                     | C (metilo) →<br>Tetraédrico<br>C (carboxilo) →<br>triangular                      | Octaédrica   | Angular   |
| Carga de la especie                                     | 2-  | 1-  | 1-   | 0   |
| Estructura de la especie (Lewis = representación en 2D) |  |  |  |  |

|   |   |   |  |   |
|---|---|---|--|---|
| Nombre de la especie                                    | 4.- <b>Tetracloruro de telurio (IV)</b>   | 5.- <b>Fluoruro de bromo (III)</b>  | 6.- <b>Ácido sulfúrico</b>   | 7.- <b>Silicato</b>   |
| Fórmula   | TeCl <sub>4</sub>   | BrF <sub>3</sub>  | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>   | SiO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>  |
| Número de electrones de valencia de cada átomo          | Te = 6 electrones<br>Cl = 7 electrones  | Br = 7 electrones<br>F = 7 electrones   | H = 1 electrón<br>S = 6 electrones<br>O = 6 electrones                               | Si = 4 electrones<br>O = 6 electrones   |
| Número total de electrones en la especie                | 34  | 28  | 32   | 26  |
| Disposición de los electrones en la especie             | Bipirámide trigonal   | Bipirámide trigonal   | Tetraedro  | Trigonal (tetraedro en polímeros)   |
| Geometría de la especie                                 | Balancín / silla de montar  | "T"   | Tetraedro  | Trigonal (tetraedro en polímeros)   |
| Carga de la especie                                     | 0   | 0   | 0  | 2-  |
| Estructura de la especie (Lewis = representación en 2D) |  |  |  |  |

### BONUS

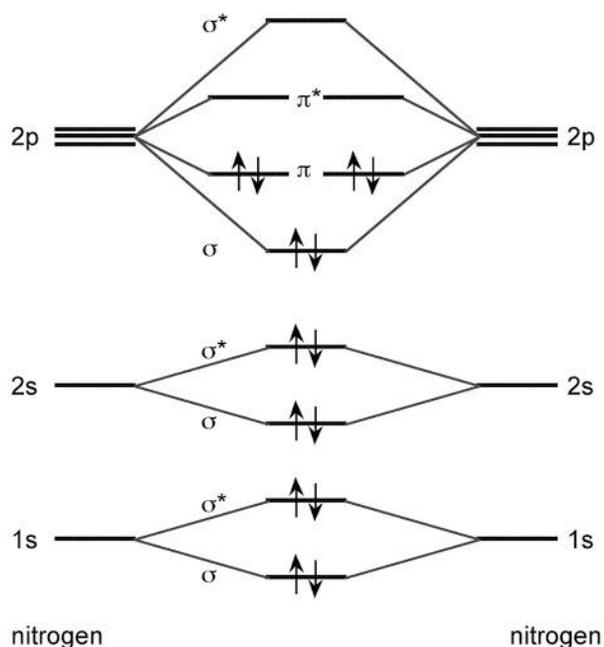
|                      |                       |                               |                           |                                    |
|----------------------|-----------------------|-------------------------------|---------------------------|------------------------------------|
| Nombre de la especie | 8.- <b>Tiocianato</b> | 9.- <b>Benceno</b>            | 10.- <b>óxido nitroso</b> | 11.- <b>Tetrafluoruro de xenon</b> |
| 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<br>C = 4 electrones<br>N = 5 electrones                          | C = 4 electrones<br>H = 1 electrón  | N = 5 electrones<br>O = 6 electrones   | Xe = 8 electrones<br>F = 7 electrones   |
| Número total de electrones en la especie                | 16  | 30  | 16   | 36  |
| Disposición de los electrones en la especie             | Lineal  | C = trigonal<br>(los 6 carbonos<br>→ hexágono)                                    | Lineal   | Octaédrico  |
| Geometría de la especie                                 | Lineal  | C = trigonal<br>(los 6 carbonos<br>→ hexágono)                                    | Lineal<br> | 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 ( $N_2$ ).



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  $N_2$  es de 14.

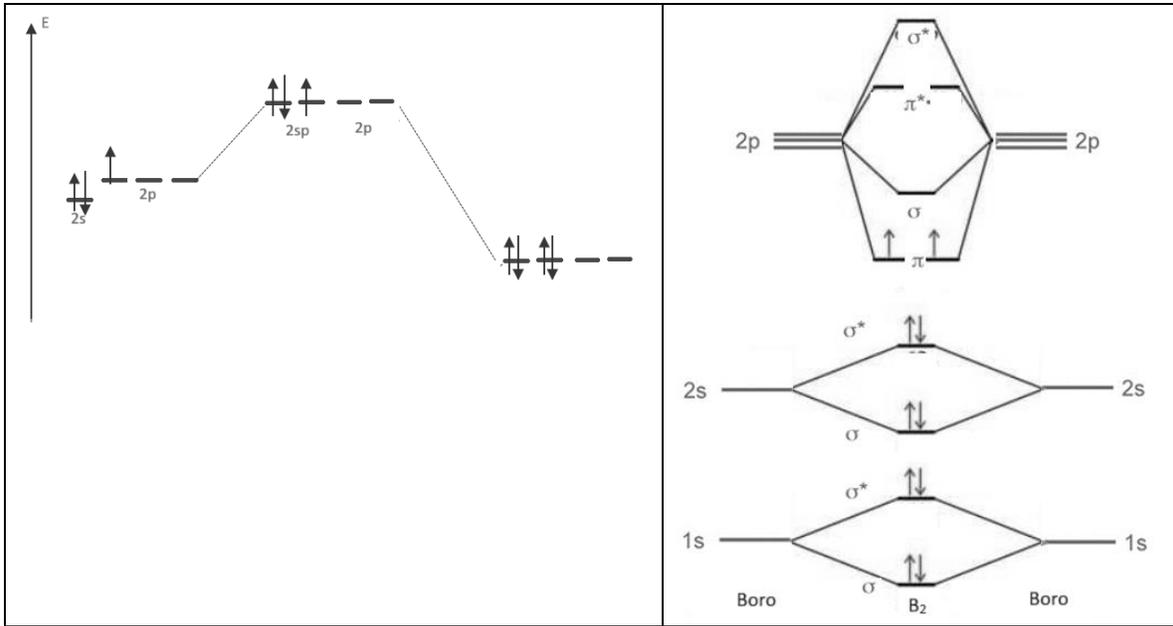
b. Trata de explicar brevemente, la existencia de un triple enlace en la molécula con el diagrama de orbitales de la molécula. El triple enlace se explica con la interacción de los orbitales atómicos para formar los moleculares, los orbitales “ $p_x$ ” tienen una interacción frontal que termina en un enlace “sigma” y la interacción de los orbitales “ $p_y$ ” y “ $p_z$ ” 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  $N_2$  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  $O_2$  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?

|             |             |
|-------------|-------------|
| Diagrama EV | Diagrama OM |
|-------------|-------------|

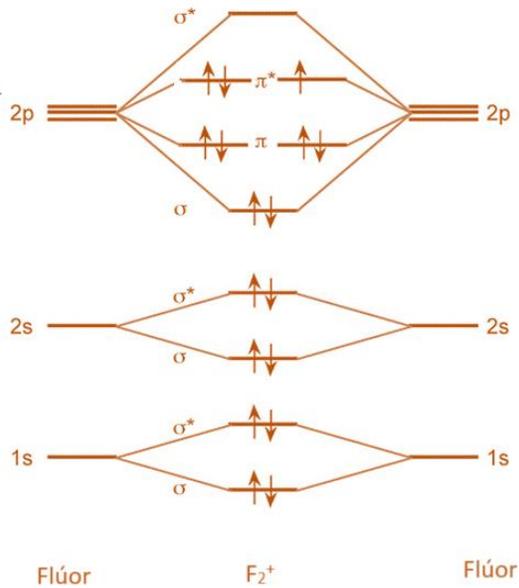


Enlace valencia nos da información sobre la geometría de la molécula, así como su hibridación, la cual, nos indica que tiene una hibridación sp con geometría lineal. De acuerdo con EV, la molécula sería diamagnética.

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.