

## ESTRUCTURA MOLECULAR

Teoría de Lewis (G. N. Lewis, 1915). Su modelo se denomina Enlace por pares de electrones.

### **El enlace entre dos átomos proviene de compartir electrones de valencia**

El ejemplo más sencillo es el del hidrógeno,  $H_2$ , formada por dos núcleos y dos electrones (estructura :  $1s^1$ ).

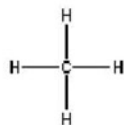


La formación de la molécula  $BeH_2$  ( Be:  $1s^2 2s^2$ ) se expresa :

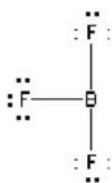


Fórmula de Lewis - Fórmula química en la cual se representan los electrones de valencia como pares de puntos o líneas entre dos átomos cuando éstos son compartidos y como pares de puntos cuando no son compartidos.

El C puede formar cuatro enlaces con el H :



Otros ejemplos :

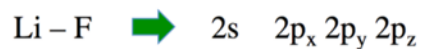


## Modelo de Lewis

- Modelo de enlace covalente, donde dos electrones se comparten para formar un enlace ( $e^-$  de valencia):



- Habr  un m ximo de ocho electrones en la capa de valencia (estructura del octeto de Lewis):



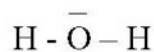
- Para elementos con menos de cuatro electrones de valencia, el octeto generalmente no est  lleno:



Se pueden formar **pares libres**, cuando un átomo tiene menos enlaces que los que les permiten sus electrones de valencia, como por ejemplo en el amoníaco, NH<sub>3</sub> :



Lo mismo ocurre H<sub>2</sub>O : el oxígeno tiene 6 electrones de valencia y solo comparte dos con los átomos de H, por tanto tiene dos pares libres :

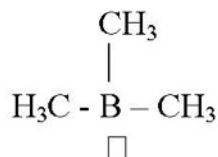


#### Lewis Structures of atoms

- The chemical symbol for the atom is surrounded by a number of dots corresponding to the number of valence electrons.

Number of Valence Electrons	1		2		3	4	5	6	7	8
Example	Hydrogen	Group I (Alkali metals)	Helium	Group II (alkali earth metals)	Group III	Group IV	Group V	Group VI	Group VII (Halogens)	Group VIII except Helium (Noble Gases)
Lewis Structure (electron dot diagram)	H <sup>•</sup>	Li <sup>•</sup>	He:••	Be:••	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•

Algunos compuestos como el trimetilborano, B(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> no cumplen con la regla del octeto : el B tiene tres electrones de valencia que forman enlace con el C pero le hace falta un par para que cumpla con la regla.



Es un compuesto **deficiente en electrones**.

Otros compuestos como el P en  $\text{PCl}_5$ , están rodeados de más de cuatro pares de electrones :

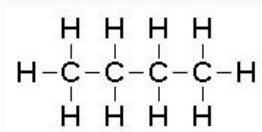


Son compuestos llamados **hipervalentes**.

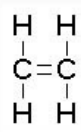
**Regla del Octeto** : La estabilidad máxima de una molécula se obtiene cuando cada átomo se rodea de cuatro pares de electrones (libres o ligados).

Esto es válido para átomos del 2do. Y 3er. período. En el caso del primer período (H, He) solo se rodean de un solo par de electrones.

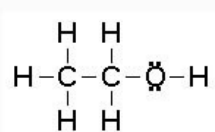
El número de enlaces covalentes puros,  $x$ , es función del número de los electrones de valencia en total,  $N_V$  :  $x = 8 - N_V$ .



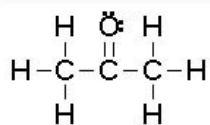
butano



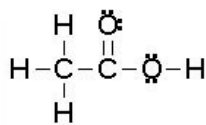
etileno



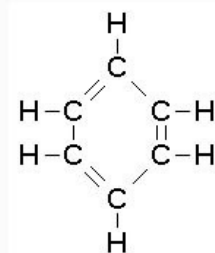
etanol



acetona



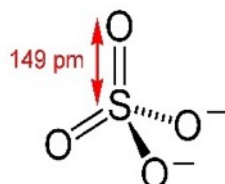
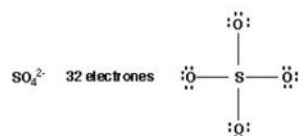
ácido acético

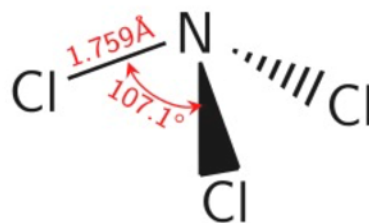
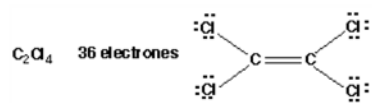
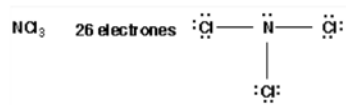


benceno

Para construir una estructura de Lewis se siguen los siguientes pasos:

1. Seleccionar el átomo central alrededor del cual se colocan los átomos más electronegativos.
2. Escribir el esqueleto conectando los átomos con pares de electrones o líneas.
3. Distribuir los electrones en los átomos que rodean al átomo central para satisfacer el octeto.
4. Colocar los electrones restantes alrededor del átomo central. Si le faltan electrones para completar su octeto al átomo central, se pueden formar enlaces dobles o triples.





## Tetracloroetileno

Una vez que se termina la distribución de los electrones de valencia se debe determinar y asignar carga formal a cada átomo. Para resaltar las transferencias electrónicas, se atribuye a cada átomo en la molécula un número de electrones calculado entre el número aparente en la estructura y el número real de electrones de valencia.

**La carga formal es la carga hipotética que se obtiene al asignar los electrones de valencia y los que tiene cada átomo en la estructura.**

La carga formal es igual al número de electrones de valencia menos los electrones asignados. Cuando la carga formal es cero no se escribe.

$$C_F = e(N_V - N_a)$$

La suma de las cargas formales de los átomos de una especie es igual a la carga de ésta.

Ejemplos:



$$\text{Carga Formal de H} = 1 - 1 = 0$$

$$\text{Carga Formal de O (enlace sencillo)} = 6 - (2 + 4) = 0$$

$$\text{Carga Formal de O (enlace doble)} = 6 - (2 + 4) = 0$$

$$\text{Carga Formal de N} = 5 - (3 + 2) = 0$$

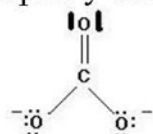
## Ácido nitroso

**Regla de los 18 electrones.** A partir del cuarto período ( $Z > 18$ ) los átomos tienden a formar pares covalentes en número tal que confieren 18 electrones a su capa de valencia.

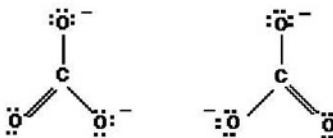
En este caso el número de enlaces covalentes puros es  $x = 18 - N_v$ .

### Resonancia y Mesómeros.

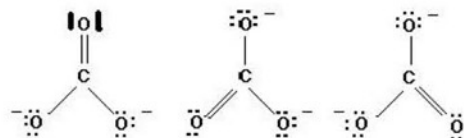
Existen moléculas en donde la descripción por una sola estructura de Lewis no es cualitativamente correcta. Es el caso del ión carbonato,  $\text{CO}_3^{2-}$ . En este ión el átomo de carbono puede formar cuatro enlaces con los átomos de oxígeno. Con ellos puede formar dos enlaces simples y uno doble :



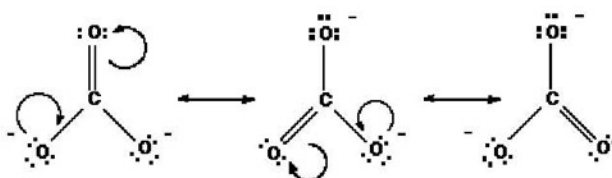
En esta estructura los oxígenos no son equivalentes. Pero los datos experimentales muestran que todos los enlaces C-O tienen la misma longitud (129 pm). Por lo tanto la descripción anterior no puede ser correcta. Una forma de describir el ión es por tres estructuras equivalentes que se construyen colocando el doble enlace sucesivamente con cada oxígeno.



Lo mismo que hemos discutido para la primera representación ocurrirá para estas dos. Veamos que pasa si comparamos las tres representaciones.



En realidad, difieren en la posición del doble enlace, es decir, en la posición de los electrones. Podríamos visualizar este movimiento de electrones de la siguiente manera:

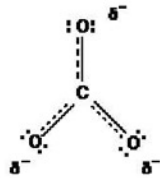


↷ Esta flecha implica el movimiento de un par electrones.

↔ Por otra parte, ésta implica que entre las estructuras existe una relación de estructuras de resonancia.

Es decir, la representación real no es ninguna de ellas sino todas. Por lo tanto, puede representarse como un híbrido de resonancia en donde los electrones están deslocalizados a través de los átomos del ión o de la molécula.

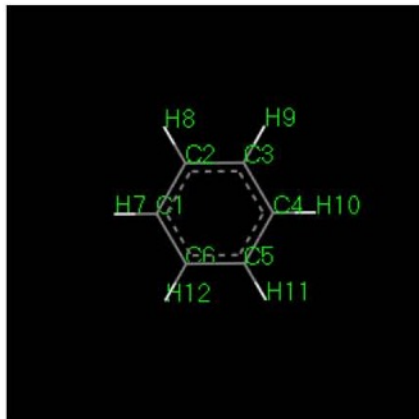




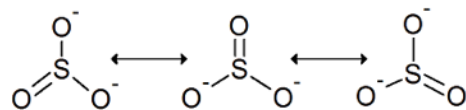
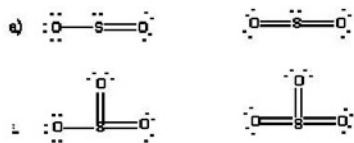
El híbrido de resonancia sirve para representar que la estructura real de cualquier molécula o ión es más estable que cualquier estructura de resonancia de la molécula o ión .

Lo mismo ocurre con el ión nitrato,  $\text{NO}_3^-$ .

Un ejemplo importante es la resonancia del benceno, las formas mesómeras son :  $\text{C}_6\text{H}_6$ .



otros ejemplos :  $\text{SO}_2$  y  $\text{SO}_3$ .



ion sulfito

Ejercicio. Las moléculas cloradas conocidas de los elementos del segundo período de la Tabla Periódica son : LiCl, BeCl<sub>2</sub>, BCl<sub>3</sub>, CCl<sub>4</sub>, NCl<sub>3</sub>, OCl<sub>2</sub>, FCl. Dar la representación de Lewis y precisar quienes cumplen la regla del octeto.

**Acido-base de Lewis.** Resulta de la transferencia electrónica entre dos especies. Un ácido es un aceptador de electrones y una base un donador de electrones.

### 3. Estructuras de Lewis

#### 3.5. Resumen de las reglas de Lewis

- Cuenta los electrones de valencia (no olvidar las cargas si se trata de un ión molecular).
- Número de pares de electrones: (electrones de valencia /2)
- Sitúa como átomo central el menos electronegativo. **iNunca H!**
- Une los átomos con pares de electrones enlazantes (**PE**)
- Completa los octetos agregando pares de electrones solitarios (**PS**) a los átomos.
- Establece enlaces múltiples con los átomos que queden con su octeto incompleto
- Asigna cargas formales: **CF=Z- (#PE/2) - (#PS)**
- Elige las estructuras con la menor separación de carga posible (recuerda que los átomos del 3<sup>er</sup> período en adelante admiten más de cuatro pares a su alrededor).
- Indica si hay estructuras equivalentes en resonancia.