

Revisión de la teoría de Lewis

¿Cómo se combinan los átomos para formar las moléculas?

- El enlace químico entre átomos se origina mediante la **compartición de electrones**.
- Los electrones son compartidos para dar a cada átomo una **configuración de gas noble**.

Idea clave

Los electrones se transfieren o se comparten de modo que los átomos adquieran una configuración electrónica especialmente estable. Generalmente de gas noble. Octeto. En sentido estricto sólo es aplicable a los elementos del segundo periodo



G. N. Lewis (1875-1946)

Teoría de la compartición de electrones

Estructuras de Lewis

Determinar la estructura de Lewis mas plausible

- Enlaces simples y múltiples. Orden de enlace.
 - Cargas formales.
 - Resonancia.
- Excepciones para la regla del octeto.

Consideraciones sobre las estructuras de Lewis

- Los átomos de **hidrógeno** son siempre **terminales**.
- Los **átomos centrales** de la estructura son los que tienen la **electronegatividad más baja**.
- Los átomos de **carbono** suelen ser átomos **centrales**.
- Las **estructuras** generalmente son **compactas y simétricas**.

Estructuras de Lewis: reglas para determinarlas

- El **hidrogeno** solo puede adquirir **máximo 2 electrones**.
- Los **elementos del segundo periodo** pueden adquirir **máximo 8 electrones**.
- Los **elementos a partir del tercer periodo** pueden **expandir su octeto**.
- Representar el **esqueleto básico** de la estructura molecular: colocando **en el centro el elemento mas electropositivo** y conectando a este los otros elementos por medio de enlaces **sigma** (el H siempre periférico).

1^{er} paso → Determinar N_v : numero pares de electrones de valencia

=

$\frac{1}{2}$ Suma de todos los electrones de la capa de valencia de todos los átomos que componen la molécula

Estructuras de Lewis: reglas para determinarlas

1) Determinar N_v : numero pares de electrones de valencia

2) Determinar N_σ , N_π y N_D

N_σ : numero enlaces sigma (frontales)

N_π : numero enlaces pi (laterales/múltiples)

N_D : numero de pares de electrones solitarios

$$N_v = \frac{1}{2} (N_\sigma + N_\pi + N_D)$$

2) Determinar N_σ , N_π y N_D

	No cíclica	Cíclica
$n_\sigma =$	$q - 1 + h$	$q + h$
$n_\pi =$	$3q - n_V + 1$	$3q - n_V$
$n_D =$	$n_V - n_\sigma - n_\pi$	

h : numero de átomos de H

q : numero de átomos diferentes al H

Si $N_\pi = 0$ la molécula **solo contiene enlaces sencillos**

Si N_π es NEGATIVO indica que el elemento central ampliará su octeto

3) Dibujar el esqueleto básico de la estructura molecular: colocando **en el centro el elemento mas electropositivo** y conectando a este los otros elementos por medio de enlaces **sigma**.

4) Proceder a la asignación de enlaces y pares solitarios, respetando la regla del octeto.

Asignar los pares solitarios **preferentemente a los átomos periféricos**.

5) Calcular las cargas formales. Deben ser razonables y lo más bajas posibles. Las estructuras más razonables son las que tienen una menor separación de cargas formales.

6) Tener en cuenta la posibilidad de estructuras resonantes.

7) No violar nunca la regla del octeto para elementos del 2º periodo.

Ejemplo: *Dibujar la estructura de Lewis para la molécula de SOF_4*

1) Determinar N_v : numero pares de electrones de valencia.

S $\rightarrow$ 6 electrones de valencia

O $\rightarrow$ 6 electrones de valencia

F $\rightarrow$ 7 electrones de valencia

$$N_v = \frac{1}{2} (6+6+7 \times 4) = 20 \text{ pares.}$$

2) Determinar N_σ , N_π y N_D

$$N_\sigma = q - 1 + h = 6 - 1 + 0 = 5 \text{ enlaces sigma}$$

$$N_\pi = 3q - N_v + 1 = 3 \times 6 - 20 + 1 = -1$$

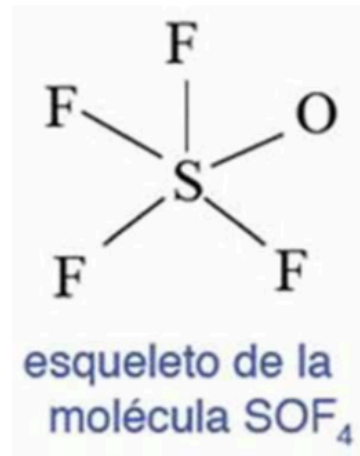
$$N_D = N_v - N_\sigma - N_\pi = 20 - 5 - 0 = 15 \text{ pares de electrones solitarios}$$

N_π **NEGATIVO**: indica que el elemento central ampliará su octeto.

Ponemos $N_\pi = 0$

Ejemplo: ***Dibujar la estructura de Lewis para la molécula de SOF_4***

3) Dibujar el **esqueleto básico** de la estructura molecular: colocando **en el centro el elemento mas electropositivo** y conectando a este los otros elementos por medio de enlaces **sigma**.



4) **Proceder a la asignación de enlaces y pares solitarios**, respetando la regla del octeto.

Asignar los pares solitarios preferentemente a los átomos periféricos.

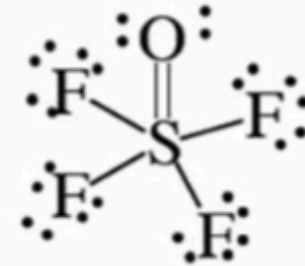
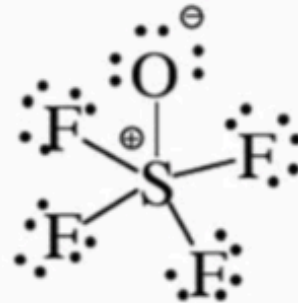


Ejemplo: *Dibujar la estructura de Lewis para la molécula de SOF_4*

5) Calcular las cargas formales.

Deben ser razonables y lo más bajas posibles. Las estructuras más razonables son las que tienen una menor separación de cargas formales.

$$\begin{aligned}\text{CF}(\text{O}) &= 6 - 6 - 2/2 = -1 \\ \text{CF}(\text{S}) &= 6 - 0 - 10/2 = 1 \\ \text{CF}(\text{F}) &= 7 - 6 - 2/2 = 0\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\text{CF}(\text{O}) &= 6 - 4 - 4/2 = 0 \\ \text{CF}(\text{S}) &= 6 - 0 - 12/2 = 0 \\ \text{CF}(\text{F}) &= 7 - 6 - 2/2 = 0\end{aligned}$$

Estructura más probable al
minimizar las cargas
formales

6) Tener en cuenta la posibilidad de estructuras resonantes.

7) No violar nunca la regla del octeto para elementos del 2º periodo.

4^º TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.



$$q = 1; h = 4$$

Electrones de valencia

$$\text{C}(Z=6) 1s^2 2s^2 2p^2 = 4 \text{ elect.}$$

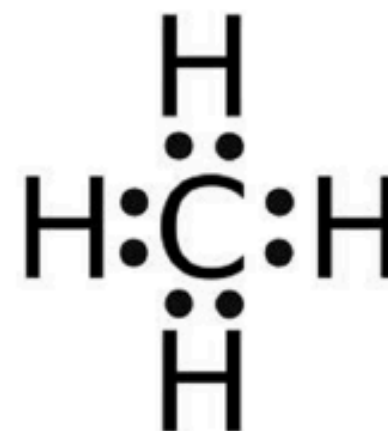
$$\text{H}(Z=1) 1s^1 = 1 \text{ elect.}$$

$$nv = \frac{1}{2} (4 + 4 \times 1) = 4$$

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$1 - 1 + 4 = 4$
$n_{\pi} = 3q - n_v + 1$	$3 \times 1 - 4 + 1 = 0$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$4 - 4 - 0 = 0$



estructura
propuesta



las cargas formales da
cero en todos los
casos

TEMA 4 Ejercicios de estructuras de Lewis.



$q = 3; h = 0$

Electrones SÓLO de valencia

C(Z=6) $2s^2 2p^2$ = 4 elect.

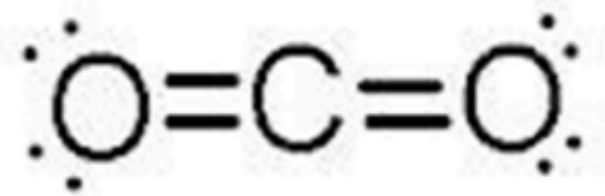
O(Z=8) $2s^2 2p^4$ = 6 elect.

$nv = \frac{1}{2} (4 + 2 \times 6) = 8$

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$3 - 1 + 0 = 2$
$n_{\pi} = 3q + 1 - n_v$	$3 \times 3 + 1 - 8 = 2$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$8 - 2 - 2 = 4$



estructura
propuesta



las cargas formales da
cero en todos los casos.

$CF(O) = 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$

$CF(C) = 4 - 0 - \frac{1}{2}(8) = 0$

4 TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.



$q = 1; h = 3$

Electrones SÓLO de valencia

N(Z=5) $2s^2 2p^3$

= 5 elect.

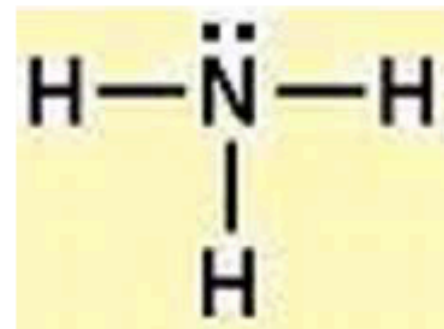
H(Z=1) $1s^1$

= 1 elect.

$n_v = \frac{1}{2} (5 + 3 \times 1) = 4$

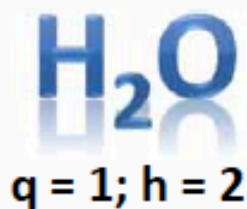
fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$1 - 1 + 3 = 3$
$n_{\pi} = 3q - n_v + 1$	$3 \times 1 - 4 + 1 = 0$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$4 - 3 - 0 = 1$

estructura
propuesta



las cargas formales da
cero en todos los casos

4^º TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.



Electrones SÓLO de valencia

O(Z=8) **2s²2p⁴** = 6 elect.

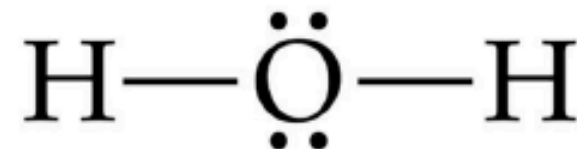
H(Z=1) **1s¹** = 1 elect.

$$nv = \frac{1}{2} (6 + 2 \times 1) = 4$$

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$1 - 1 + 2 = 2$
$n_{\pi} = 3q - n_v + 1$	$3 \times 1 - 4 + 1 = 0$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$4 - 2 - 0 = 2$



estructura
propuesta



las cargas formales da
cero en todos los casos

4^º TEMA

Ejercicios de estructuras de Lewis.

CO

$$q = 2; h = 0$$

Electrones SÓLO de valencia

C(Z=6) $2s^2 2p^2$

= 4 elect.

O(Z=8) $2s^2 2p^4$

= 6 elect.

$$nv = \frac{1}{2} (4 + 6) = 5$$

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$2 - 1 + 0 = 1$
$n_{\pi} = 3q + 1 - n_v$	$3 \times 2 + 1 - 5 = 2$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$5 - 1 - 2 = 2$

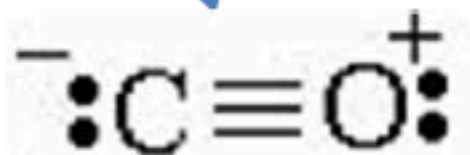
las cargas formales son.

$$CF(O) = 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$$

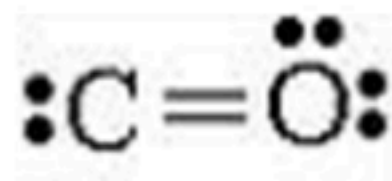
$$CF(C) = 4 - 2 - \frac{1}{2}(6) = -1$$

carga negativa sobre elemento
electropositivo es **poco probable**

estructura
propuesta



estructura resonante



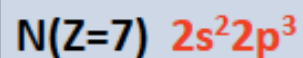
las cargas formales cero

TEMA 4 Ejercicios de estructuras de Lewis.

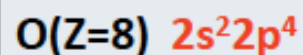


$q = 3; h = 0$

Electrones SÓLO de valencia



= 5 elect.



= 6 elect.

$nv = \frac{1}{2} (5 + 2 \times 6) = 8 + 1$ electrón
suelto

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$3 - 1 + 0 = 2$
$n_{\pi} = 3q + 1 - n_v$	$3 \times 3 + 1 - 8 = 2$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$8 - 2 - 2 = 4$ (más 1 electrón suelto)

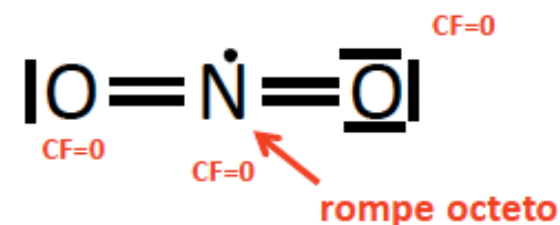
el electrón suelto se coloca en el elemento más electropositivo

rompe octeto

posibilidades

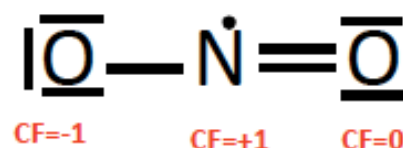


posibilidades

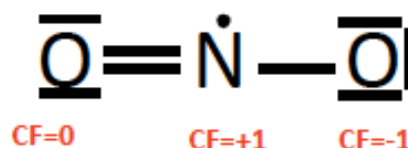


posibilidades

CORRECTAS



estructuras resonantes



4^º TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.

NO

$$q = 2; h = 0$$

Electrones SÓLO de valencia

$$\text{N}(Z=7) \ 2s^2 2p^3 \quad = 5 \text{ elect.}$$

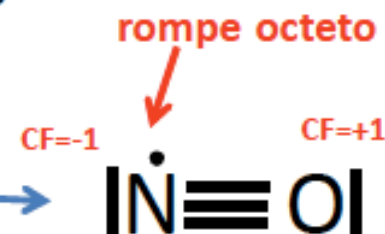
$$\text{O}(Z=8) \ 2s^2 2p^4 \quad = 6 \text{ elect.}$$

$$nv = \frac{1}{2} (5+6) = 5 + 1 \text{ electrón suelto}$$

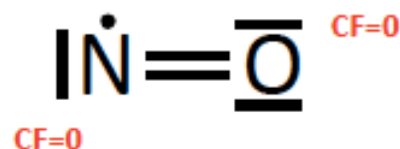
el electrón suelto se coloca en el elemento más electropositivo

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$2 - 1 + 0 = 1$
$n_{\pi} = 3q + 1 - n_v$	$3 \times 2 + 1 - 5 = 2$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$5 - 2 - 1 = 2$ (más 1 electrón suelto)

posibilidades



posibilidades



CORRECTA

4^º TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.



$$q = 4; h = 0$$

Electrones SÓLO de valencia

F(Z=9) $2s^2 2p^5$

= 7 elect.

I(Z=53) $5s^2 5p^5$

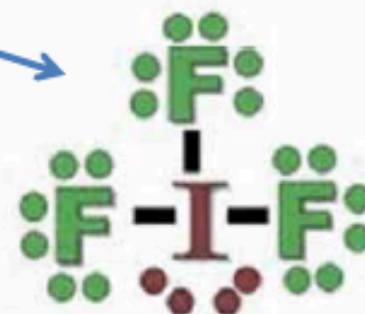
= 7 elect.

$$nv = \frac{1}{2} (3 \times 7 + 7) = 14$$

fórmula	resultado
$n_\sigma = q - 1 + h$	$4 - 1 + 0 = 3$
$n_\pi = 3q - n_v + 1$	$3 \times 4 - 14 + 1 = -1$
$n_D = n_v - n_\sigma - n_\pi$	$14 - 3 - 0 = 11$

significa que amplia el octeto, ponemos $n_\pi = 0$

estructura propuesta



las cargas formales da
cero en todos los casos

4^º TEMA Ejercicios de estructuras de Lewis.



$q = 4; h = 0$

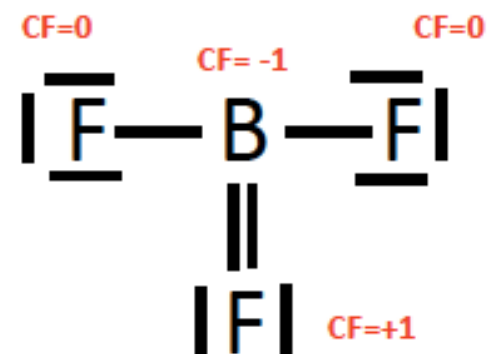
Electrones SÓLO de valencia

F(Z=9) $2s^2 2p^5$ = 7 elect.

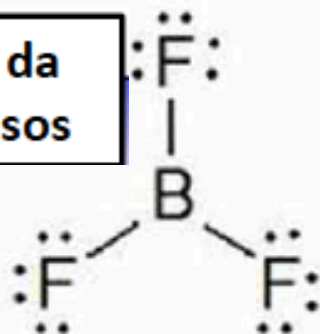
B(Z=5) $2s^2 2p^1$ = 3 elect.

$nv = \frac{1}{2} (3 \times 7 + 3) = 12$

fórmula	resultado
$n_{\sigma} = q - 1 + h$	$4 - 1 + 0 = 3$
$n_{\pi} = 3q - n_v + 1$	$3 \times 4 - 12 + 1 = 1$
$n_D = n_v - n_{\sigma} - n_{\pi}$	$12 - 3 - 1 = 8$



las cargas formales da
cero en todos los casos



estructura
propuesta

la carga formal negativa está sobre el
elemento más electropositivo asique
esta estructura no es probable. Un par
de electrones del doble enlace se mueve
para neutralizar la CF positiva del fluor

