

1. Para las siguientes moléculas/iones dibujar el diagrama de Lewis e indicar la geometría y polaridad de las mismas haciendo uso de la "Teoría de repulsión de pares de electrones de la capa de valencia" (TRéPEV):

ejercicio

a) HF (H: Z=1, F: Z=9)

b) HCN (C: Z=6, N: Z=7, H: Z=1).

c) COCl₂ (C: Z=6, O: Z=8, Cl: Z=17)

e) Cl₂ (Cl: Z=17).

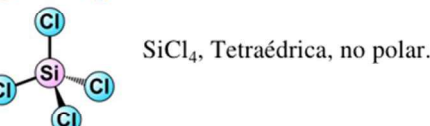
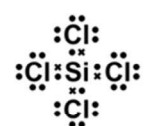
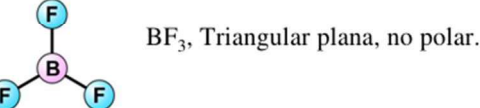
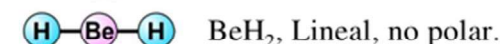
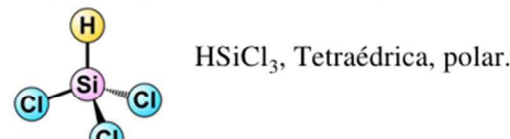
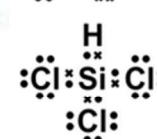
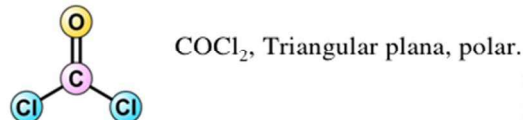
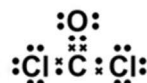
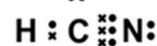
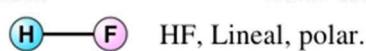
d) HSiCl₃ (Si: Z=14, H: Z=1, Cl: Z=17).

f) BeH₂ (Be: Z=4, H: Z=1).

g) BF₃ (B: Z=5, F: Z=9)

h) SiCl₄ (Si: Z=14, Cl: Z=17).

solución

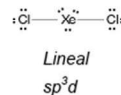
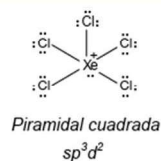


Para las moléculas XeCl₅⁺ y XeCl₂, determine: a) Estructura de Lewis con cargas formales. b) Geometría molecular c) La hibridación de los átomos centrales. Justifique su respuesta con diagrama de orbitales atómicos.

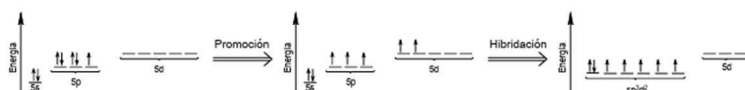
a) Las estructuras de Lewis son: ⇒

b) Las geometrías moleculares son: ⇒

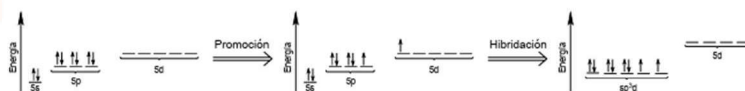
c) Las hibridaciones son: ⇒



La justificación de la hibridación para el átomo de xenón en el ion XeCl₅⁺ es:



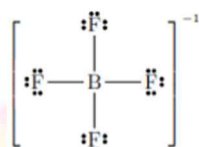
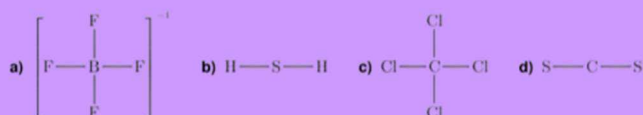
La justificación de la hibridación para el átomo de xenón en el compuesto XeCl₂ es:



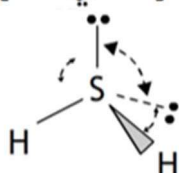
Complete la tabla siguiente, donde se muestran diferentes distribuciones de los electrones alrededor del átomo central A, considere que : denota un par electrónico libre y _ denota un enlace.

Distribución:	Enlaces π:	Geometría molecular:	Hibridación:
$\begin{array}{c} \\ -A- \\ \end{array}$	0	Plana trigonal	sp^2
$\begin{array}{c} \\ =A: \\ \end{array}$	1	Angular	sp^2
$\begin{array}{c} \\ -A- \\ \end{array}$	1	Tetraédrica	sp^3
$\begin{array}{c} \\ :A: \\ \end{array}$	0	Plana trigonal	sp^3d
$\begin{array}{c} \\ \times A \times \\ \end{array}$	1	Piramidal cuadrada	sp^3d^2
$\begin{array}{c} \\ =A= \\ \end{array}$	2	Piramidal trigonal	sp^3

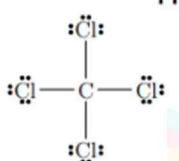
Representa las estructuras de Lewis de las siguientes especies e indique su geometría



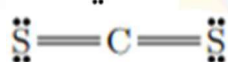
Cada flúor tiene tres pares no enlazantes y un electrón sin aparear. El boro tiene tres electrones en su última capa. Para formar los cuatro enlaces deberá de tener un electrón en exceso. De ahí la carga negativa del compuesto. Estructura tetraédrica con el B situado en el centro del tetraedro.



El azufre tiene dos pares no enlazantes, con los otros dos electrones de la última capa formará los enlaces covalentes con el H. La estructura será, en principio, tetraédrica, pero debido a la fuerte repulsión entre los dos pares no enlazantes, el ángulo entre los dos hidrógenos será menor que el tetraédrico (inferior a 109,50). La molécula, por tanto, se puede describir como angular con un ángulo inferior a 109,50.



Distribución similar a la del BF3-. Tres pares no enlazantes sobre cada cloro. El carbono central tiene cuatro electrones con los que forma los cuatro enlaces. Estructura tetraédrica con el carbono en el centro del tetraedro y los cuatro cloros ocupando los vértices

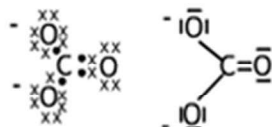


El átomo central (carbono), forma dos enlaces dobles y como no tiene ningún par no enlazante la estructura no se distorsionará. Será una molécula lineal (similar al CO2) con un ángulo de 180

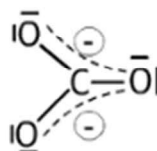
Para el anión carbonato, CO3²⁻, deduzca la estructura de Lewis. Indique y dibuje la geometría molecular del anión, según la TRPECV, y los ángulos de enlace aproximados. Datos: C (Z = 6), O (Z = 8).

- a) **El anión carbonato tendrá una estructura triangular (con ángulos de enlace de 120°)**, ya que el carbono se une a tres oxígenos y no hay pares no enlazantes que distorsionen la molécula.

Cada oxígeno tiene un electrón más (siete en total), debido a la carga eléctrica negativa (2-) del ion.

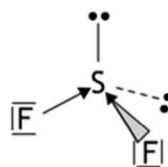


Una estructura más real de la molécula se obtiene si la consideramos como un **híbrido de resonancia** entre tres formas en las que el doble enlace alterna entre los tres enlaces C-O y las cargas eléctricas están deslocalizadas sobre los átomos. El híbrido, por tanto, podríamos describirlo como una molécula triangular (120°) con los tres enlaces iguales e intermedios entre sencillos y dobles y las cargas eléctricas negativas distribuidas sobre los oxígenos.

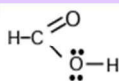


Deduzca y represente la estructura de Lewis de la molécula de SF2, e indique, justificándolo en base a su geometría molecular deducida según la TRPECV, si se trata de una molécula polar o apolar.

El difluoruro de azufre presenta geometría tetraédrica, en principio, pero debido a la **distorsión experimentada por la repulsión más intensa de los pares no enlazantes situados sobre el azufre, el ángulo entre los dos enlaces S-F será inferior al tetraédrico**. La estructura de la molécula será angular con un ángulo de enlace inferior a 109,5°. Esto lleva a que **el momento dipolar de la molécula no sea nulo. Será una molécula polar**.



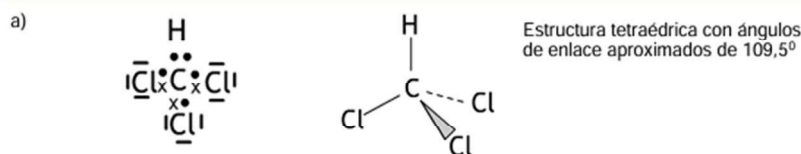
Para la molécula de ácido metanoico, HCOOH, deduzca la estructura de Lewis. Indique y dibuje la geometría molecular del compuesto alrededor del átomo de carbono y del átomo de oxígeno del grupo -OH, según la TRPECV. Datos: C (Z = 6); H (Z = 1); O (Z = 8).



Carbono: estructura triangular plana (120°).

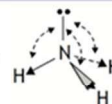
Oxígeno grupo hidroxilo: estructura tetraédrica distorsionada por la repulsión de los pares no enlazantes. Ángulo C-O-H inferior a 109,5°.

Deduzca la estructura de Lewis para la molécula de CHCl_3 . Indique y dibuje la geometría molecular del compuesto, según la TRPECV, y los ángulos de enlace aproximados. DATOS: C (Z = 6); H (Z = 1); Cl (Z = 17).



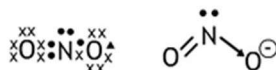
Los valores de electronegatividad en la escala de Pauling de los átomos H y N son 2,1 y 3,0, respectivamente. A partir de estos datos, deduzca el carácter polar o no polar de la molécula NH_3 , que presenta una geometría molecular de pirámide trigonal.

El amoníaco presenta geometría de pirámide trigonal debido a la **distorsión experimental en la configuración tetraédrica por la repulsión más intensa del par no enlazante**. Esto lleva a que **el momento dipolar de la molécula no sea nulo. Será una molécula polar y, por tanto, soluble en agua.**

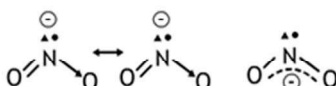


Para el anión nitrito, NO_2^- , deduzca la estructura de Lewis. Indique y dibuje la geometría molecular del compuesto, según la TRPECV, y los ángulos de enlace aproximados. Datos: N (Z = 7); O (Z = 8).

Para el ion nitrito se puede proponer la siguiente estructura de Lewis, lo que lleva a una **estructura angular**, aunque es de esperar que debido a las fuertes repulsiones del par no enlazante **los ángulos de enlace N-O medidos sean inferiores a 120°** :

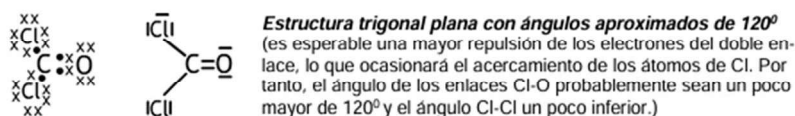


Una discusión más avanzada nos llevaría a proponer como estructura más cercana a la real un **hibrido de resonancia** con la carga negativa deslocalizada:



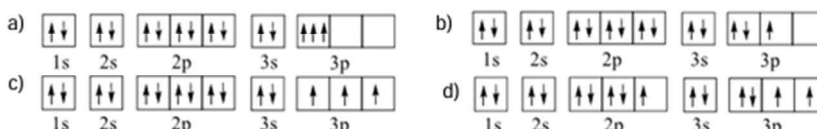
Para la molécula de Cl_2CO , deduzca la estructura de Lewis. Indique y dibuje la geometría molecular del compuesto, según la TRPECV, y los ángulos de enlace aproximados. Datos: C (Z = 6); O (Z = 8); Cl (Z = 17).

La estructura de Lewis propuesta es la siguiente:



14

Los siguientes diagramas de orbitales corresponden a especies químicas neutras. Indique los diagramas que son correctos, los que son incorrectos y los que corresponden a estados fundamentales o excitados del átomo neutro. Justifique todas las respuestas.



a) Incorrecto, los electrones situados en el nivel 3p tienen iguales los números cuánticos $n = 3$, $l = 1$ y $m_l = -1$ (por ejemplo), y los tres tienen $s = +1/2$ con lo cual tienen iguales los cuatro números cuánticos, lo cual viola el Principio de Exclusión de Pauli.

b) Correcto. No existe ningún electrón con los cuatro números cuánticos iguales, aunque esta configuración estaría desfavorecida frente a una configuración en la que los tres electrones 3p tuvieran el mismo spin. El hecho de tener dos electrones apareados implica un aporte de energía extra. Es un estado excitado.

c) Correcto. No existe ningún electrón con los tres números cuánticos iguales. Corresponde a un estado fundamental ya que los electrones están situados en los niveles que poseen la menor energía. Además, los electrones situados en estados con la misma energía (nivel 3p) tienen el mismo spin (regla de Hund).

d) Correcto. No existe ningún electrón con los tres números cuánticos iguales, pero se observa que existe un hueco en el orbital 2p, lo que implica que un electrón ha sido promocionado a un nivel 3p con el consiguiente aporte de energía. Es un estado excitado.

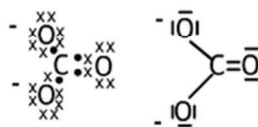
Deduzca, a partir de su estructura molecular, el carácter polar, o no polar, de la molécula CH_2O que presenta una geometría molecular triangular. Datos: Valores de electronegatividad (escala Pauling): H = 2,1; C = 2,5; O = 3,5

Estudiando los valores de las electronegatividades se observa que los enlaces C-H pueden considerarse apolares (un enlace covalente se puede considerar apolar si la diferencia en electronegatividades es inferior a 0,5), mientras que el enlace C-O será polar. Por tanto, hay solamente un momento dipolar, el correspondiente al enlace C-O. La molécula, en su conjunto, será polar.

Para el anión carbonato, CO_3^{2-} , deduzca la estructura de Lewis. Indique y dibuje la geometría molecular del anión, según la TRPECV, y los ángulos de enlace aproximados. Datos: C (Z = 6), O (Z = 8)

El anión carbonato tendrá una estructura triangular (con ángulos de enlace de 120°), ya que el carbono se une a tres oxígenos y no hay pares no enlazantes que distorsionen la molécula.

Cada oxígeno tiene un electrón más (siete en total), debido a la carga eléctrica negativa (2-) del ion.



Completa los siguientes cuadros

FORMULA	LEWIS	GE (pares de elctromnes)	GM Y ANGULO (pares de electrones compartidos sin variar disposición electronica)
CO2		Lineal 	Lineal 180°
HCN			
CS2			
COCL2		Plana triangular 	Plana triangular 120
SO3			
H2CO			
SO2		Plana triangular 	120
SeO2			
TeO2			
CH4		Tetraedrica 	109.5
CH3Cl			
CH2Br2			
NH3		Tetraedrica 	107.8
PH3			
NCI3			