



1. Deducir razonadamente, usando la Teoría de Enlace-valencia y Orbitales Híbridos (TEV-OH), y la Teoría de la repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (TRPECV), las estructuras espaciales y órdenes de enlace de las siguientes moléculas: NH_3 , SiF_4 , O_3 , CO_2 , NO_2 .

Referencias: 2015 Extremadura problema 4 también razonar estructuras.

Para describir las estructuras realizamos inicialmente los diagrama de Lewis, para lo que identificamos los electrones de valencia, con grupo o usando las configuraciones electrónicas:

H: $1s^1$, 1 electrón de valencia

C: $1s^2 2s^2 2p^2$, 4 electrones de valencia

N: $1s^2 2s^2 2p^3$, 5 electrones de valencia

O: $1s^2 2s^2 2p^4$, 6 electrones de valencia.

Si: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 2p^2$, 4 electrones de valencia

Podemos calcular el número de enlaces a representar asumiendo que todos los átomos consiguen el octeto (pareja en caso de ser H) y no se trata de excepciones:

$(n^\circ \text{ átomos}) \cdot (8 \text{ ó } 2) = (n^\circ \text{ de átomos de cada tipo}) \cdot (e^- \text{ de valencia de cada tipo}) + \text{carga} + (n^\circ \text{ enlaces}) \cdot 2$

NH_3 : $1 \cdot 8 + 3 \cdot 2 = 1 \cdot 5 + 3 \cdot 1 + N \cdot 2 \rightarrow N = 3$ enlaces

SiF_4 : $5 \cdot 8 = 1 \cdot 4 + 4 \cdot 7 + N \cdot 2 \rightarrow N = 4$ enlaces

O_3 : $3 \cdot 8 = 3 \cdot 6 + N \cdot 2 \rightarrow N = 3$ enlaces

CO_2 : $3 \cdot 8 = 1 \cdot 4 + 2 \cdot 6 + N \cdot 2 \rightarrow N = 4$ enlaces

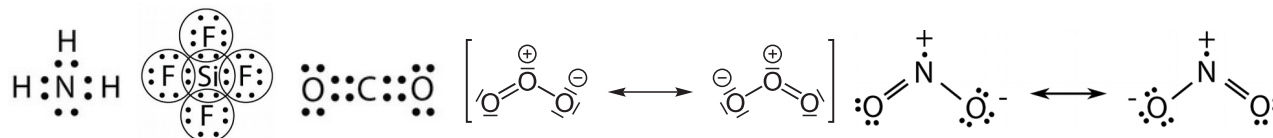
NO_2 : $3 \cdot 8 = 1 \cdot 3 + 2 \cdot 6 + N \cdot 2 \rightarrow N = 1,5$ enlaces

Realizamos diagramas (se incluyen tomados de

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Ozon_Mesomerie.svg (O_3)

<http://www.peoi.org/Courses/Coursesch/chemintro/contents/frame9c.html> cc-by-nc-sa (NH_3 , SiF_4 ,

CO_2) y de <http://www.ck12.org/user:Robert%20Brown/book/Pacific-High-School-Chemistry/section/9.1/> cc-by-nc (NO_2)



En el caso de NH_3 , SiF_4 y CO_2 no hay estructuras resonantes, pero sí hay dos opciones para O_3 dos opciones para NO_2 ambas carga formal (suele indicarse encerrada en un círculo junto a cada átomo como se representa par aozono).

La carga formal también se puede asociar a enlaces covalentes dativos, ya que la situación en la que en el diagrama de Lewis la carga formal no es nula está asociada a que uno de los dos átomos está aportando ambos electrones del enlace. La carga formal se calcula contando con un círculo “que parte por la mitad los enlaces” los electrones asociables formalmente a cada átomo (no es un círculo para conseguir el octeto, que todos consiguen ya que no hay excepciones)

Para O_3 , en la primera estructura representada:

-en el O izquierdo hay 6 electrones y su carga formal es 0

-en el O superior hay 5 electrones y su carga formal es 1+

-en el O derecho hay 7 electrones y su carga formal es 1-

En la otra estructura se intercambian las cargas formales entre los dos oxígenos.

Para NO_2 , en la primera estructura representada:

-en el O izquierdo hay 6 electrones y su carga formal es 0

-en el O derecho hay 7 electrones y su carga formal es 1-

-en el N hay 4 electrones y su carga formal es 1+.

En la otra estructura se intercambian las cargas formales entre los dos oxígenos.



Se incluyen diagramas de Lewis asociados al híbrido de resonancia (se incluyen junto con la geometría), representación que resume en un único diagrama una mezcla de las diferentes estructuras de resonancia, por lo que aparecen líneas discontinuas simbolizando “enlaces parciales” (es un promedio de dos estructuras en las que hay un enlace doble en una de ellas y un enlace simple en el resto). En O_3 aparecen cargas formales promedio pero sin valor, que serían $\frac{1}{2}-$ para oxígenos (el promedio de cada oxígeno para 0,1- es igual a $\frac{1}{2}-$) y $1+$ para oxígeno superior. En NO_2 no aparecen cargas formales promedio, que serían $\frac{1}{2}-$ para oxígenos (el promedio de cada oxígeno para 0,1- es igual a $\frac{1}{2}-$) y $1+$ para nitrógeno.

Mediante los diagramas de Lewis anteriores y la **Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de la Capa de Valencia (TRPECV)** se puede razonar geometría:

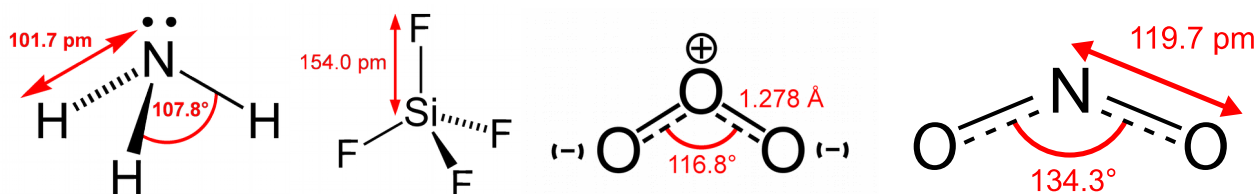
NH_3 : tiene 4 nubes electrónicas rodeando el átomo central de N y se disponen en los vértices de un tetraedro que supone teóricamente $109,5^\circ$, pero como no son iguales porque un par es no enlazante y repele a los demás, reduce el ángulo H-N-H. La geometría es piramidal triangular.

SiF_4 : tiene 4 nubes electrónicas rodeando el átomo central de Si y se disponen en los vértices de un tetraedro que supone $109,5^\circ$ ya que son idénticas las 4, por lo que la geometría es tetraédrica.

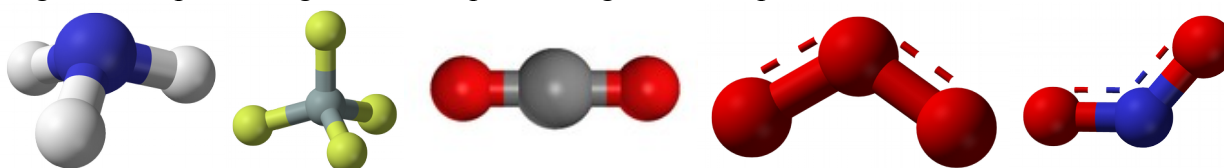
O_3 : tiene 3 nubes electrónicas rodeando el átomo central de O y se disponen en los vértices de un triángulo que supone teóricamente 120° , pero como no son iguales porque un par es no enlazante y repele a los demás, reduce el ángulo ligeramente. La geometría es angular.

CO_2 : tiene 2 nubes electrónicas rodeando el átomo central de C y se disponen en posiciones opuestas, haciendo que el ángulo O-C-O sea de 180° . La geometría es lineal.

NO_2 : tiene 3 nubes electrónicas rodeando el átomo central de N y se disponen en los vértices de un triángulo que supone teóricamente 120° , pero como no son iguales porque en los enlaces con los oxígenos hay mayor densidad electrónica, el ángulo O-N-O se agranda ligeramente. La geometría es angular.



Se incluye una representación tridimensional de las moléculas, utilizando la asignación típica de colores según el esquema de colores CPK (Robert Corey, Linus Pauling y Walter Koltun): rojo para oxígeno, azul para nitrógeno, blanco para hidrógeno, verde para flúor.



La línea discontinua simboliza “enlaces parciales” como se ha comentado al hablar de hidruros de resonancia.

Mediante la **Teoría de Enlace-valencia y Orbitales Híbridos (TEV-OH)** razonamos geometría en cada caso:

NH_3 : molécula que tiene hibridación sp^3 en el átomo central de N en el que se combinan 3 orbitales p y 1 orbital s para dar cuatro orbitales híbridos sp^3 que se disponen orientados a los vértices de un tetraedro que supone teóricamente $109,5^\circ$. Tres de ellos forman un enlace σ con cada átomo de hidrógeno, y queda un orbital sp^3 con dos electrones que no forman enlace y repele a los demás, reduce el ángulo H-N-H. La geometría es piramidal triangular.

SiF_4 : molécula que tiene hibridación sp^3 en el átomo central de Si en el que se combinan 3 orbitales p y 1 orbital s para dar cuatro orbitales híbridos sp^3 que se disponen orientados a los vértices de un



tetraedro que suponen $109,5^\circ$. Los cuatro forman un enlace σ con cada átomo de flúor. La geometría es tetraédrica.

O₃: molécula que tiene hibridación sp^2 en el átomo central de O, en el que se combinan 2 orbitales p y 1 orbital s para dar tres orbitales híbridos sp^2 que se disponen orientados a los vértices de un triángulo y suponen teóricamente 120° . Dos de ellos forman un enlace σ con cada uno de los otros dos átomos de oxígeno. El tercer orbital sp^2 alberga un par de electrones no enlazantes, queda un orbital p sin hibridar que forma un enlace π con uno de los oxígenos. Las estructuras resonantes/mesómeros se pueden ver en la hibridación como variantes en función de con cual de los dos oxígenos se forma ese enlace π y el doble enlace. La geometría mediante hibridación también lleva a que el ángulo O-O-O es algo mayor de 120° .

CO₂: molécula que tiene hibridación sp en el átomo central de C, en el que se combina 1 orbital p y 1 orbital s para dar dos orbitales híbridos sp que se disponen orientados en direcciones opuestas formando 180° . Los orbitales sp forman un enlace σ con cada átomo de los átomos de oxígeno, y quedan dos orbitales p sin hibridar que forman un enlace π con cada uno de los oxígenos. La geometría es lineal.

NO₂: molécula que tiene hibridación sp^2 en el átomo central de N, en el que se combinan 2 orbitales p y 1 orbital s para dar tres orbitales híbridos sp^2 que se disponen orientados a los vértices de un triángulo y suponen teóricamente 120° . Dos de ellos forman un enlace σ con cada átomo de oxígeno. El tercer orbital sp^2 alberga un electrón no enlazantes, queda un orbital p sin hibridar que forma un enlace π con uno de los oxígenos. Las estructuras resonantes/mesómeros se pueden ver en la hibridación como variantes en función de con cual de los dos oxígenos se forma ese enlace π y el doble enlace. La geometría mediante hibridación también lleva a que el ángulo O-N-O es algo menor de 120° .

Respecto a los órdenes de enlace, como no se pide razonar con teoría de orbitales moleculares, no usamos la definición asociada a electrones en orbitales enlazantes frente a no enlazantes, sino más cualitativamente el número de parejas de electrones que hay entre cada pareja de átomos enlazados.

Mirando los diagramas de Lewis:

NH₃: orden de enlace 1 en todos los enlaces N-H

SiF₄: orden de enlace 1 en todos los enlaces Si-F

O₃: orden de enlace 1,5 en los enlaces O-O (promedio de las estructuras de resonancia, valor asociado al híbrido de resonancia)

CO₂: orden de enlace 2 en los enlaces C=O

NO₂: orden de enlace 1,5 en los enlaces N-O (promedio de las estructuras de resonancia, valor asociado al híbrido de resonancia)