



Asignatura 33119-Química I
Responsable: Juan José Borrás
Aula AI-17
Curso 2024-2025

Tema 1

Geometría Molecular y Enlace Químico

Curso 2024-2025

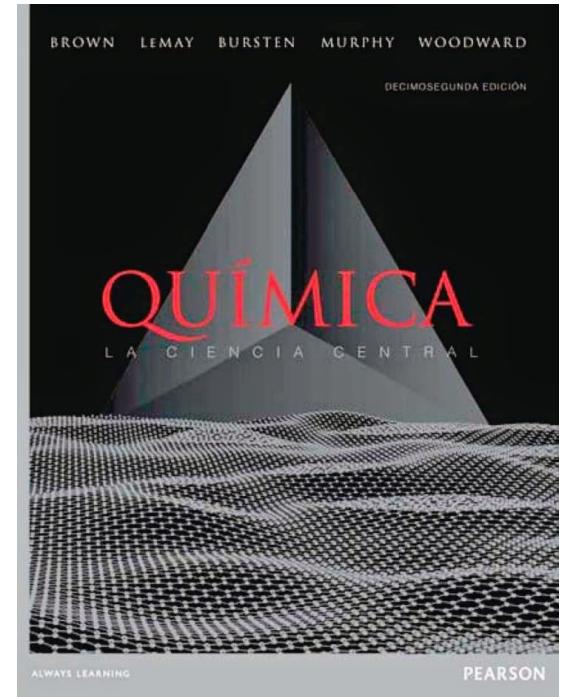
Parte I: Enlace Covalente y Estructuras de Lewis

Parte II: Geometría Molecular y Orbitales Híbridos

Parte III: Orbitales Moleculares

Parte IV: Fuerzas Intermoleculares

Texto de Brown



Tema 8: Conceptos básicos de los enlaces
químicos

Tema 9: Geometría molecular y teorías de enlace



Asignatura 33119-Química I
Responsable: Juan José Borrás
Aula AI-17
Curso 2024-2025

Tema 1 (I)

Geometría Molecular y Enlace Químico

Curso 2024-2025

Parte I.

Enlace covalente

Polaridad molecular

Estructuras de Lewis

Carga formal

Resonancia

Excepciones regla del octeto

Relación orden de enlace-energía-distancia

Objetivos

- Recordar los principales “modelos de enlace”
- Utilizar la tabla de electronegatividades para identificar enlaces **covalentes apolares, polares** y “mayoritariamente” iónicos
- Dibujar las **estructuras de Lewis** con el fin de racionalizar cómo se distribuyen los electrones de valencia en moléculas sencillas y en las moléculas orgánicas
- Utilizar el concepto de **carga formal** para identificar las estructuras de Lewis mas favorables
- Reconocer las moléculas donde se “necesitan” estructuras de **resonancia** para describir adecuadamente los enlaces
- Reconocer las **excepciones a la regla del octeto** y representar las estructuras de Lewis en estos casos
- Comprender la relación entre **orden de enlace, fuerza de enlace y longitud de enlace**

I believe the chemical bond is not so simple as some people seem to think

Robert S. Mulliken
(1896-1986)

Enlace Químico



Vamos a abordar una revisión de los tipos de enlace especialmente del enlace covalente

El enlace químico

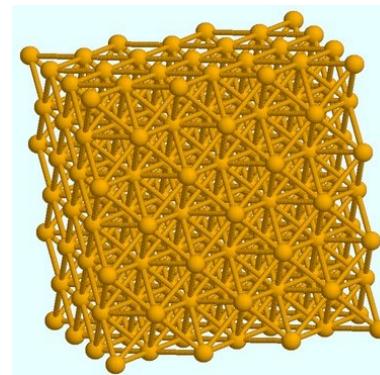
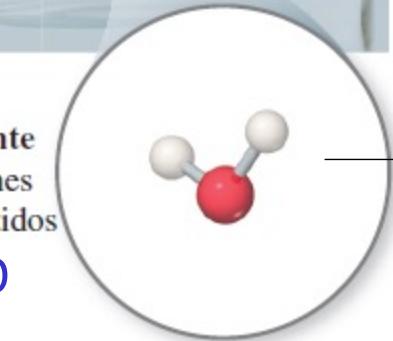
Dos átomos forman un enlace químico si la energía total del sistema unido es inferior a la que tenían los átomos por separado

- Al aproximarse dos átomos, sus electrones se **redistribuyen** de acuerdo con la presencia de **dos núcleos** cargados positivamente y de **todos los electrones**
- Los tres casos extremos de redistribución de electrones se corresponden con los modelos de enlace tradicionales: **iónico, covalente y metálico**,
 - ◆ **Enlace covalente:** considera que los electrones de enlace están **esencialmente compartidos entre los dos átomos**
 - ◆ **Enlace iónico:** considera que uno de los dos átomos ha cedido, total o parcialmente, sus electrones al otro, estableciéndose una atracción electrostática entre las entidades catiónica y aniónica formadas
 - ◆ **Enlace metálico:** Asume que los electrones de valencia están deslocalizados en la red cristalina, permitiendo un enlace entre los átomos metálicos a larga distancia.

Salvo en el caso de moléculas homonucleares, la mayoría de las situaciones de enlace reales se describen mejor considerando situaciones intermedias: iónica-covalente-metálica.



Molécula H_2O



Red metálica del $\text{Fe}(\text{s})$

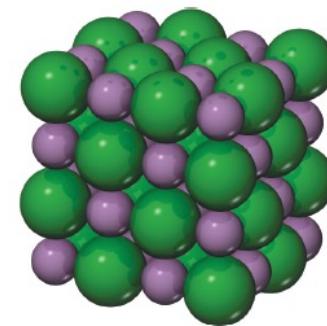
Estructura del $\text{NaCl}(\text{s})$



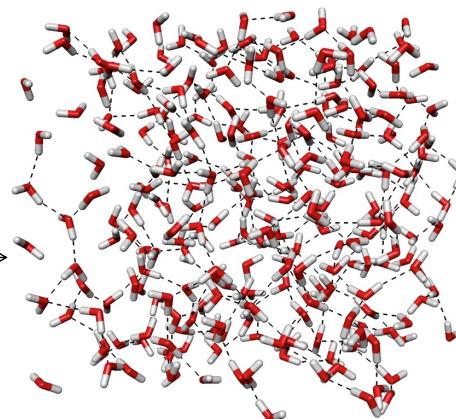
Cada ion Na^+
está rodeado por
seis iones Cl^-



Cada ion Cl^-
está rodeado por
seis iones Na^+



Estructura
“desordenada” del
agua líquida



El comportamiento químico de las sustancias se debe, entre otras cosas, a la manera en la que sus partículas (átomos, iones, moléculas, agregados....) están interconectados mediante enlaces químicos o fuerzas intermoleculares

El enlace químico

Algunas ideas previas

Los átomos se unen entre sí **sólo** si, al hacerlo, se libera energía (**energía de enlace**)

La reducción en energía se debe a la interacción electrostática:

- bien entre iones de cargas opuestas (enlace iónico)
- o bien entre los núcleos y los (pares de) electrones de enlace (enlace covalente)

¿Por qué es importante entender el enlace?

La Química se ocupa del estudio de los compuestos químicos y de sus propiedades

El conocimiento de cómo se unen los átomos es fundamental para entender las propiedades del compuesto (reactividad química) y para obtener otros nuevos con propiedades de interés

¿Qué electrones están implicados en el enlace?

Se suele aceptar que únicamente participan en el enlace los denominados **electrones de valencia**: aquellos que se encuentran en la “capa más externa”

■ Para los elementos de los grupos principales, es relativamente fácil saber de “qué estamos hablando”:

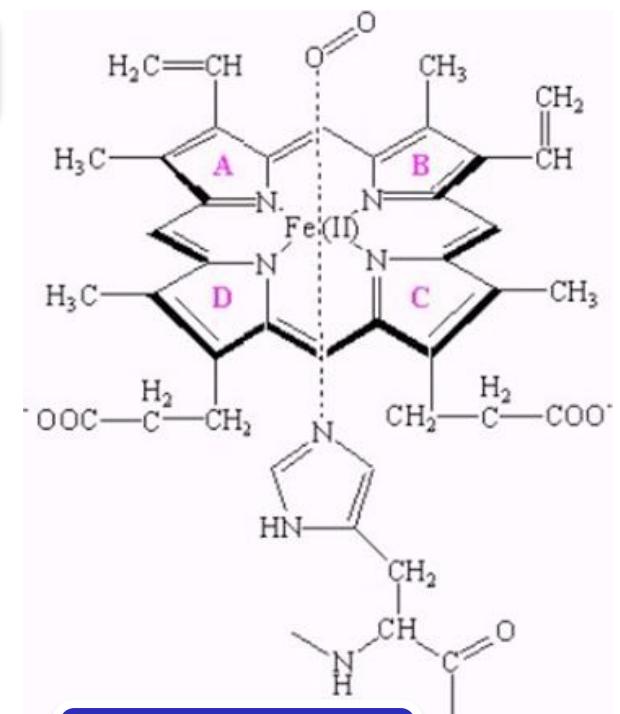
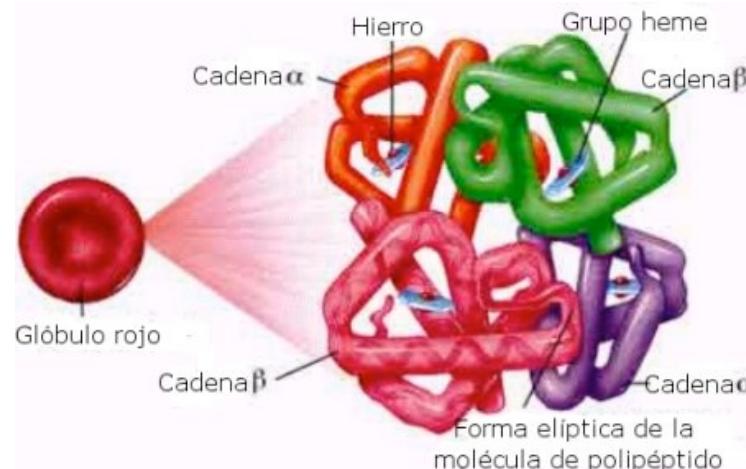
- ◆ Na: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$
- ◆ Cl: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$

Son los que pertenecen al “n”superior

■ ¿Y para los de transición?

- ◆ Fe: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1\ 3p^6\ 3d^6\ 4s^2$

n y (n-1)



Grupo hemo

En este curso nos vamos a centrar en el...

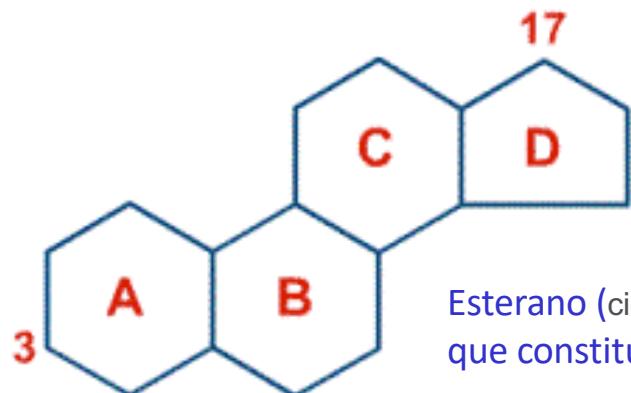
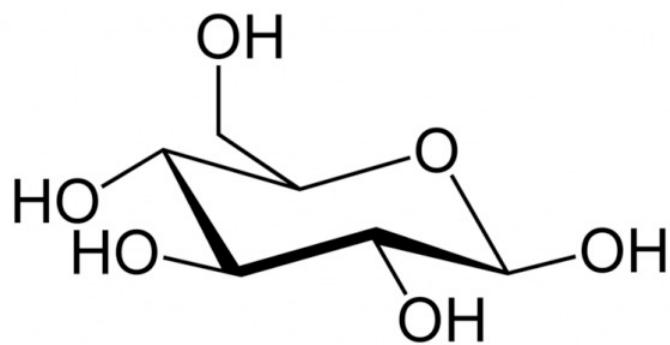
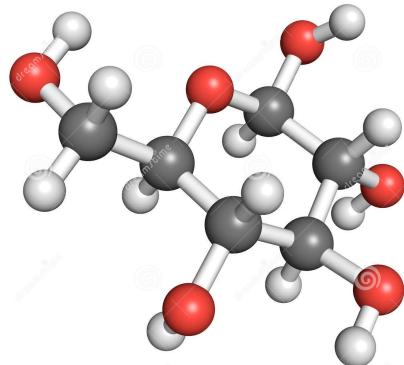
ENLACE COVALENTE

Enlace covalente

Un enlace químico formado por “la compartición de electrones”

Fíjate que no decimos “la compartición de pares de electrones”. No siempre es así, aunque es la situación más habitual

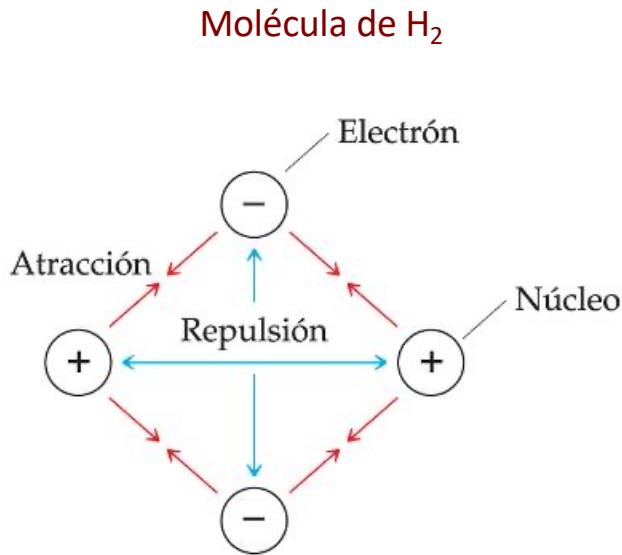
Enlace covalente



Esterano (ciclopentanoperhidrofenantreno): conjunto de 4 heterociclos que constituye el núcleo común a los esteroides

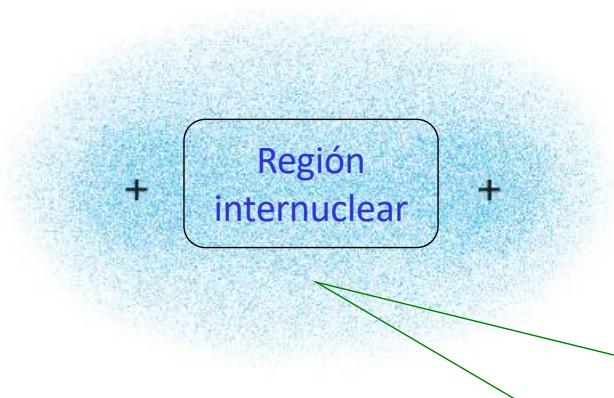
- En los compuestos de interés biológico: aminoácidos, ácidos nucleicos, ácidos grasos, esteroles, proteínas, lípidos, etc.: **el tipo de enlace dominante es el covalente**
- En estos enlaces covalentes típicos, los átomos **comparten pares de electrones**.
- Suele establecerse en moléculas formadas por átomos de elementos no metálicos y de parecida o igual electronegatividad: **H, C, N, O, S, P...**

Enlace covalente en el dihidrógeno



■ Una de las moléculas mas sencillas: H_2

- ◆ Dos átomos de H: configuración electrónica, $1s^1$
... que aportan dos electrones
- ◆ Cuando los dos átomos de H se acercan surgen interacciones electrostáticas de diversa naturaleza que **compiten** entre sí:
 - Atracciones entre electrones y núcleos
 - Repulsiones entre electrones
 - Repulsiones entre núcleos atómicos

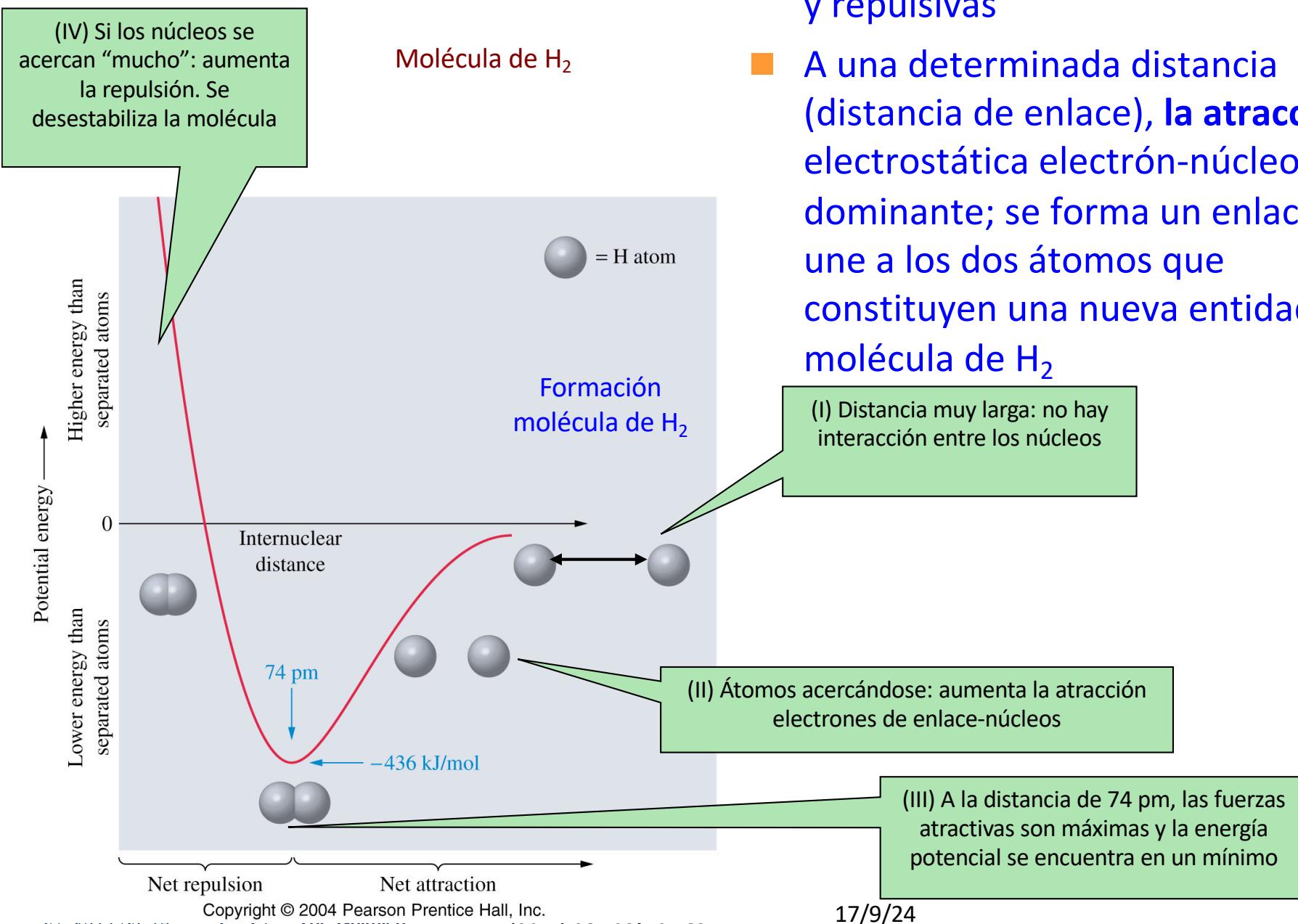


El par de electrones compartidos actúa como “pegamento”, capaz de mantener unidos a núcleos atómicos, cuando se sitúa en la región internuclear

Es la densidad electrónica en la zona internuclear la que origina la fuerza atractiva neta que mantiene unidos a los núcleos

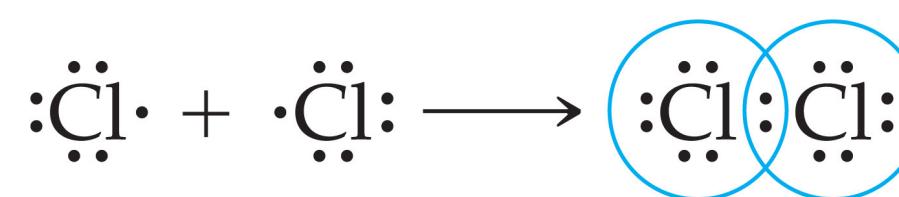
Enlace covalente

- En la formación del enlace hay una competencia entre fuerzas atractivas y repulsivas
- A una determinada distancia (distancia de enlace), **la atracción electrostática electrón-núcleo es la dominante**; se forma un enlace que une a los dos átomos que constituyen una nueva entidad: la molécula de H_2



Compartición de electrones; enlace sencillo

- ▶ El químico G.N. Lewis (1875-1946) postuló (modelo de enlace de Lewis) que “los átomos, al formar moléculas, podían adquirir una configuración electrónica de gas noble si compartían electrones”
- ▶ La formación de enlaces covalentes puede representarse con los denominados símbolos de Lewis
- ▶ Al dibujar las estructuras electrónicas de Lewis, se representa:
 - ▶ cada par de electrones compartidos como una línea (enlace), y
 - ▶ los pares de electrones no compartidos como puntos
- ▶ Cuando se comparte un par de electrones se forma un **“enlace sencillo o de orden uno”**



Enlaces múltiples

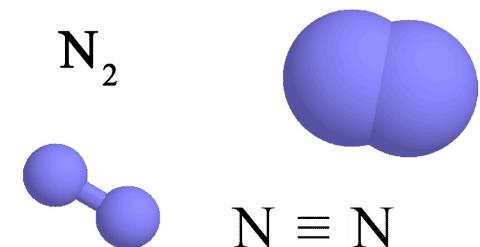
■ En muchas situaciones de enlace, se comparten mas de un par de electrones:

- ◆ Cuando se comparten dos pares de electrones: enlace **doble (orden de enlace = 2)**
- ◆ Cuando se comparten tres pares de electrones: enlace **triple (orden de enlace = 3)**



Distancias de enlace

$\text{N}-\text{N}$	$\text{N}=\text{N}$	$\text{N}\equiv\text{N}$
1.47 Å	1.24 Å	1.10 Å



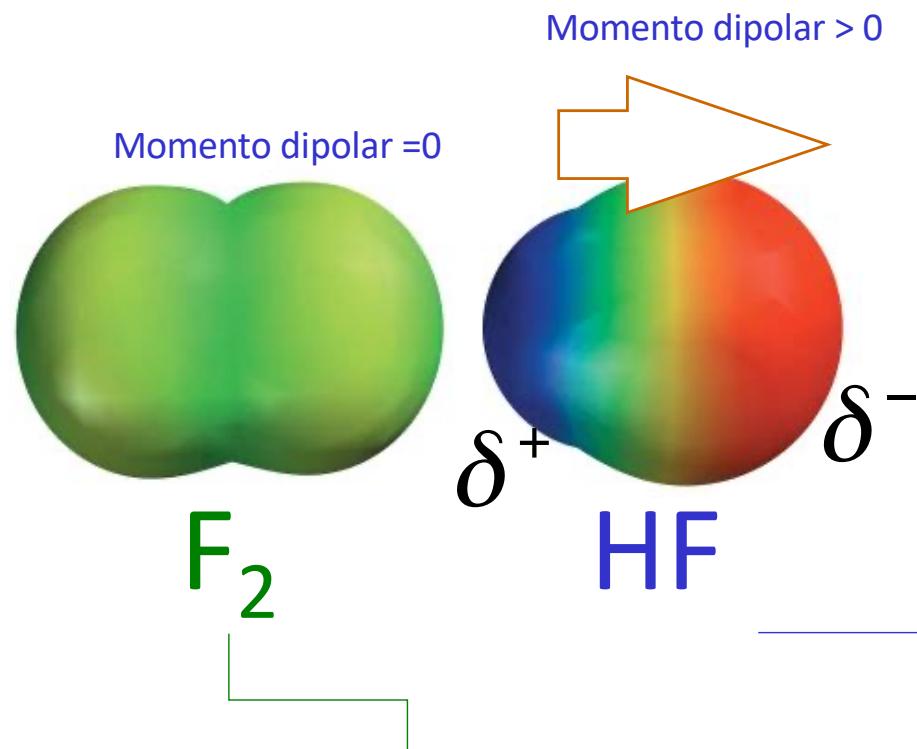
Conforme aumenta la densidad electrónica internuclear, disminuye la distancia de enlace

POLARIDAD DE ENLACE

Polaridad de enlace

- La polaridad de un enlace es una medida de cómo de equitativamente se comparten los electrones de enlace covalente
- La partición electrónica puede ser estrictamente equitativa sólo en los casos de moléculas ***homonucleares*** X_n : N_2 , O_2 , Cl_2 ... **Enlace covalente apolar.**
 - ◆ Sólo en estos casos se puede hablar de un enlace covalente “puro”
 - ◆ En las entidades heteronucleares $X-Y$, los enlaces **siempre presentan una cierta polaridad**, puesto que **no hay dos átomos que tengan estrictamente la misma electronegatividad** (a pesar de que en alguna tabla de electronegatividades tengan asignados los mismos valores).

Enlace covalente polar



Molécula de F_2 : una molécula apolar

Los dos átomos de flúor, idénticos y por tanto con la misma electronegatividad, atraen de igual modo a los electrones que forman el enlace covalente. Por tanto, los electrones de enlace se distribuyen de manera perfectamente simétrica. No hay ninguna descompensación de cargas (al menos permanente...). El enlace F–F es un enlace covalente apolar. La molécula presenta un momento dipolar nulo.

- Cuando un enlace es heteronuclear, los electrones que lo forman se distribuyen, necesariamente, de manera asimétrica.

Enlace covalente polar

- Cuanto mayor diferencia en electronegatividad, más polar es el enlace.

- En el caso extremo de dos átomos con muy diferente electronegatividad, la compartición puede ser despreciable.

Enlace iónico

Molécula de HF: una molécula polar

El flúor atrae más fuertemente a los electrones de enlace de lo que lo hace el hidrógeno. Por lo tanto, en las proximidades del núcleo encontramos una mayor densidad electrónica que en las inmediaciones del hidrógeno. La asimetría en la distribución de electrones provoca una separación de cargas. El enlace H-F es polar. La molécula presenta un momento dipolar no nulo (permanente)

Electronegatividad

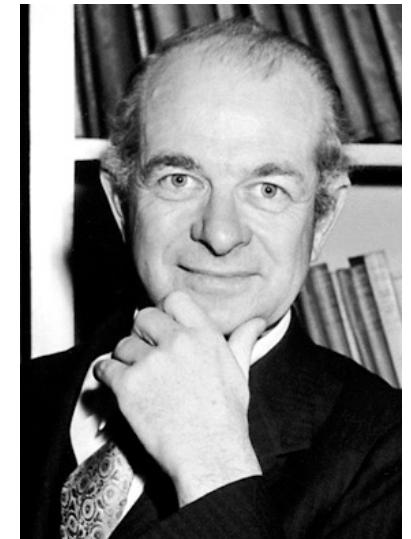
- *La electronegatividad se define como la capacidad de un átomo en un molécula de atraer a los electrones compartidos hacia sí.*
- La electronegatividad está relacionada con propiedades atómicas como la energía de ionización y la afinidad electrónica
- En general, en la tabla periódica, la electronegatividad aumenta a medida que nos desplazamos...
 - ◆ ...de izquierda a derecha en un periodo.
 - ◆ ...de la parte inferior a la superior de un grupo.

Es una propiedad asociada a las moléculas. No es una propiedad atómica

<http://www.webelements.com/>

The screenshot shows the homepage of the WebElements website. At the top, there's a navigation bar with links to 'WebElements', 'Chemistry', 'Periodic Table', 'essential data and description'. Below this is a large logo for 'WebElements' with the tagline 'the periodic table on the web'. To the right, there are buttons for 'Mugs', 'Education', 'T-shirts', and 'Posters'. At the bottom, there's a banner with the text 'Home of the periodic table'. The footer contains links for 'Elements', 'Compounds', 'Periodicity', 'Chemistry Books (USA)', 'Chemistry Books (UK)', 'News', 'Shop', 'Chemdex', and some other small icons.

Escala de Pauling



- En 1932, Pauling propuso una fórmula para calcular **la diferencia de electronegatividad**, utilizando para ello únicamente datos de energía de enlace:
 - ◆ D_{AB} : energía de disociación de la molécula AB
 - ◆ D_{A_2} : energía de disociación de la molécula A_2
 - ◆ D_{B_2} : energía de disociación de la molécula B_2
- Dado que, mediante esta fórmula sólo se establecen diferencias de electronegatividades, hay que establecer un valor arbitrario para algún elemento:
 - ◆ Pauling asignó al flúor, de manera arbitraria, el valor 4,0

$$|\chi_A - \chi_B| = \sqrt{D_{AB} - (D_{A_2} D_{B_2})^{1/2}}$$

Con esta fórmula, se obtiene un valor arbitrario a la diferencia de electronegatividad y que carece de unidades

Recuerda que la escala de Pauling se establece a partir de los datos de energía de enlace, medidos experimentalmente en moléculas

Escala de Pauling

Aumento de electronegatividad																	
1A																	
H	2																
2.1	2A																
Li	Be																
1.0	1.5																
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	
0.9	1.2	3B	4B	5B	6B	7B	8B		1B	2B	1.5	1.8	2.1	2.5	3.0		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	
0.8	1.0	1.3	1.5	1.6	1.6	1.5	1.8	1.9	1.9	1.9	1.6	1.6	1.8	2.0	2.4	2.8	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	1.9	2.2	2.2	2.2	1.9	1.7	1.7	1.8	1.9	2.1	2.5	
Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	An	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	
0.7	0.9	1.0-1.2	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9	1.8	1.9	1.9	2.0	2.2	
Fr	Ra																
0.7	0.9																

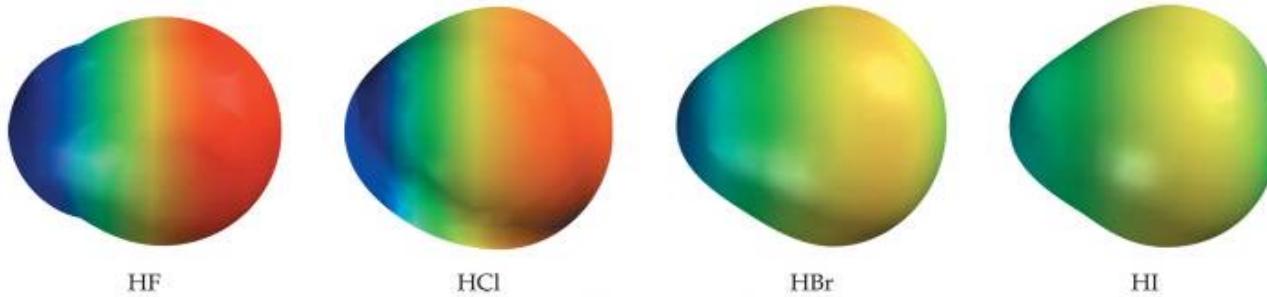
Hay otras escalas de electronegatividades pero la establecida por Pauling sigue siendo la más utilizada en los manuales

Los enlaces P–H (PH_3) o N–Cl (NCl_3), ¿son polares?

Electronegatividad y polaridad de enlace

- Cuanto mayor es la diferencia de electronegatividad entre los átomos unidos covalentemente, mayor es la polaridad en el enlace:

Compuesto	Longitud de enlace (Å)	Diferencia de electronegatividad	Momento dipolar (D)
HF	0.92	1.9	1.82
HCl	1.27	0.9	1.08
HBr	1.41	0.7	0.82
HI	1.61	0.4	0.44

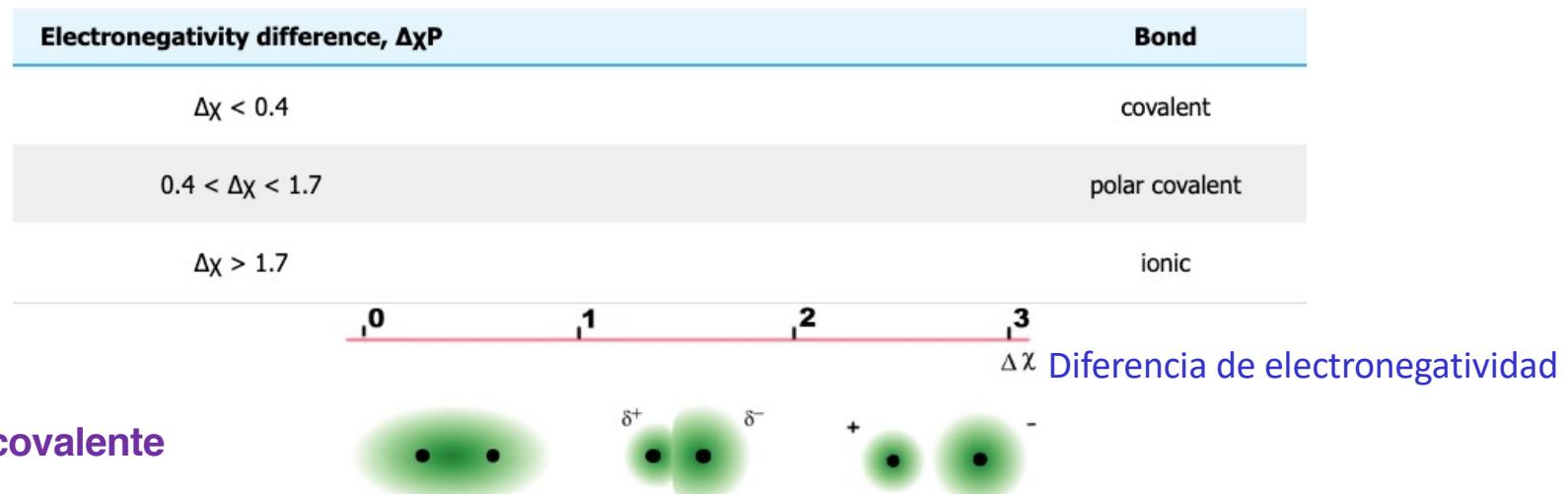


- Si la diferencia de electronegatividad es muy grande, el enlace se describe mejor como iónico puesto que, de hecho, hay una transferencia casi total de los electrones de enlace desde el átomo menos electronegativo al más electronegativo

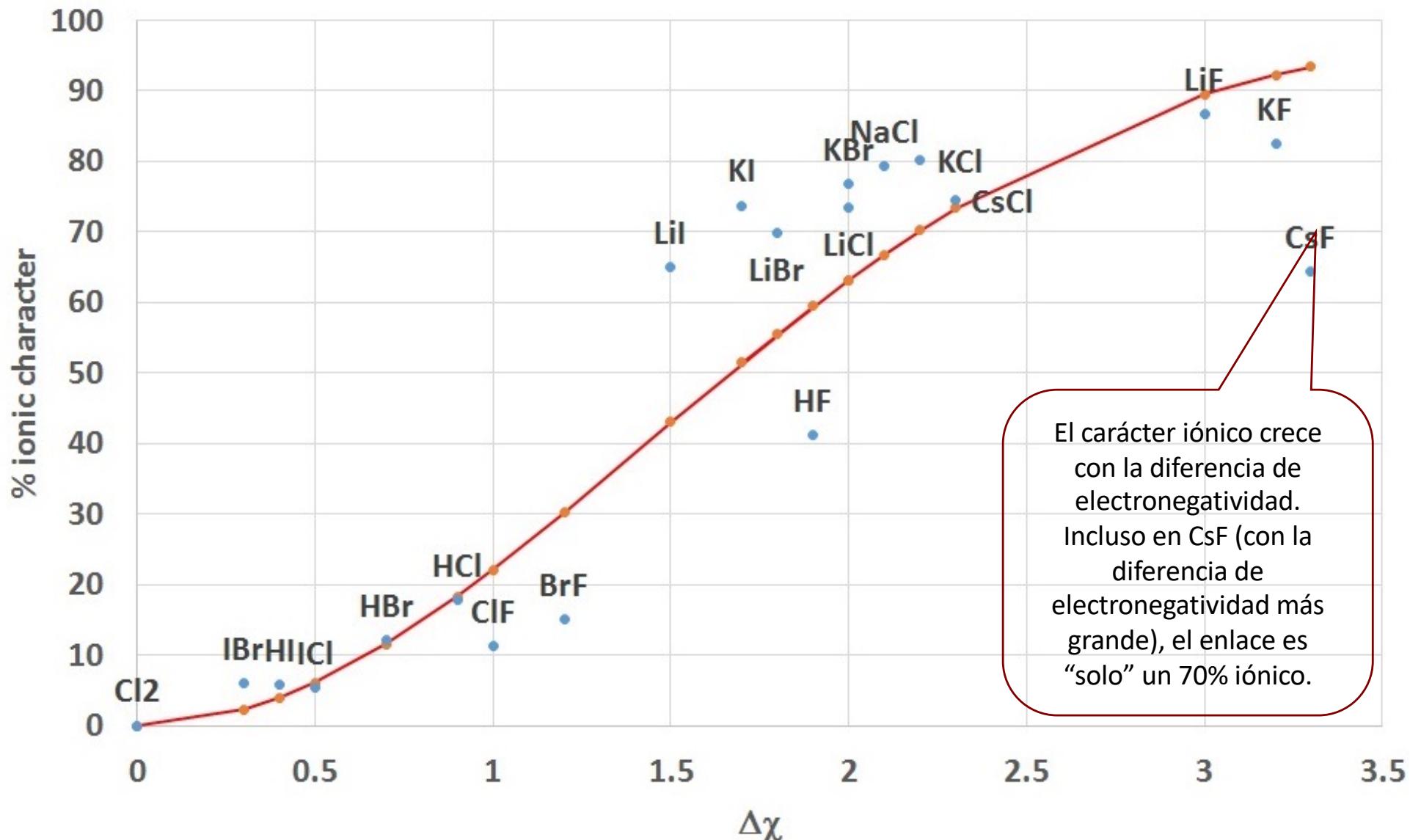
Consecuencias respecto del enlace covalente

- Todos los enlaces covalentes heteronucleares tendrán una distribución asimétrica de la densidad electrónica. Serán, por tanto, enlaces covalentes **POLARES**
- Todos los enlaces covalentes heteronucleares tendrán un cierto **carácter iónico**, mayor cuanto mayor es la diferencia de electronegatividad $\Delta\chi$ entre los elementos enlazados
 - ◆ Si $\Delta\chi < 0,4$ el enlace se considera esencialmente covalente
 - ◆ Si $0,4 < \Delta\chi < 1,7$ el enlace se considera covalente polar
 - ◆ Si $\Delta\chi > 1,7$, el enlace se considera principalmente iónico
 - ◆ Hay que tener en cuenta otros factores como el estado de oxidación del metal.
 - El MnO es un compuesto esencialmente iónico pero el Mn₂O₇ es un compuesto que se considera covalente

Estos valores frontera son totalmente arbitrarios

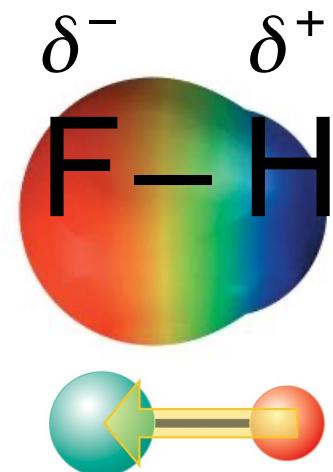


% ionic character versus Electronegativity difference



Momento dipolar

- Molécula de HF:
 - ◆ Presenta un enlace covalente polar
 - ◆ Hay una región con una densidad de carga negativa (F) y otra con una densidad de carga positiva (H)
- Esta distribución asimétrica de cargas constituye un dipolo eléctrico y genera un momento dipolar



Cuantificación de la polaridad molecular

- Un dipolo eléctrico está constituido por dos cargas opuestas ($+q$ y $-q$) separadas por una distancia, r .
- El momento dipolar, μ , asociado a un dipolo eléctrico es una magnitud vectorial.
- El momento dipolar de una molécula se determina experimentalmente. **Su unidad es el Debye; símbolo: D**
- El Debye no pertenece al sistema internacional de unidades, SI: $1D = 3,34 \cdot 10^{-30} C \cdot m$

Molécula polar: una molécula con un momento dipolar no nulo

El momento dipolar si es una magnitud física que podemos medir experimentalmente

$$\begin{aligned}\vec{\mu} &= q \cdot \vec{r} = \\ &= 1,602 \cdot 10^{-19} C \cdot 10^{-10} m = 4,8 D\end{aligned}$$

q : es la carga en el sitio positivo (SI: Coulombio, C)
 r es la distancia entre las cargas (SI: metro, m)

$$1D = 3,34 \cdot 10^{-30} C \cdot m$$

Polaridad molecular

En algunas moléculas, la suma vectorial de los momentos dipolares de los enlaces puede ser cero. Son moléculas apolares

Table 9.1 Dipole moments of selected molecules

Molecule	Dipole moment, D	Molecule	Dipole moment, D
HF	1.91	PH ₃	0.58
HCl	1.08	AsH ₃	0.20
HBr	0.80	SbH ₃	0.12
HI	0.42	O ₃	0.53
CO	0.12	CO ₂	0
ClF	0.88	BF ₃	0
NaCl*	9.00	CH ₄	0
CsCl*	10.42	cis-CHCl=CHCl	1.90
H ₂ O	1.85	trans-CHCl=CHCl	0
NH ₃	1.47		

*These two species consist of pairs of ions in the gas phase.

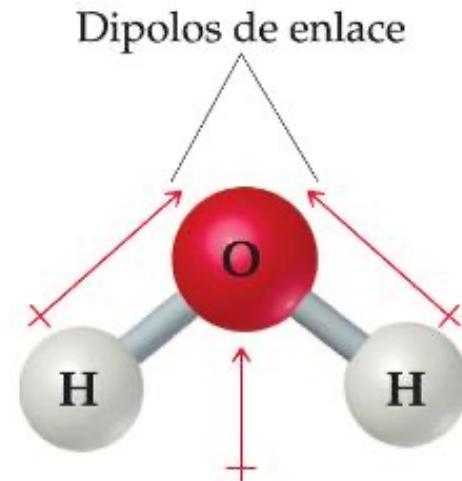
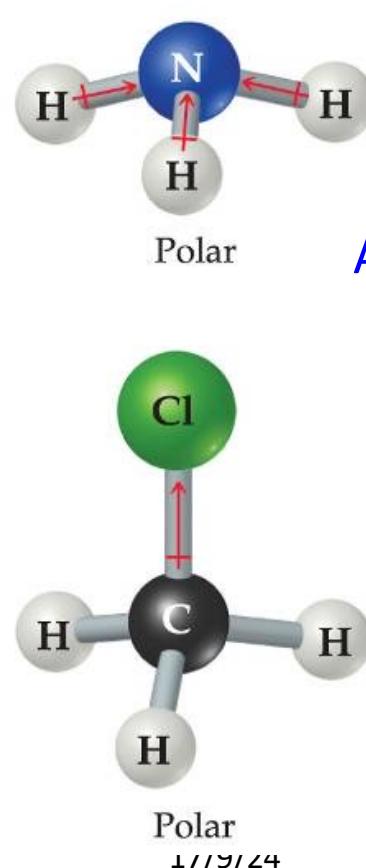
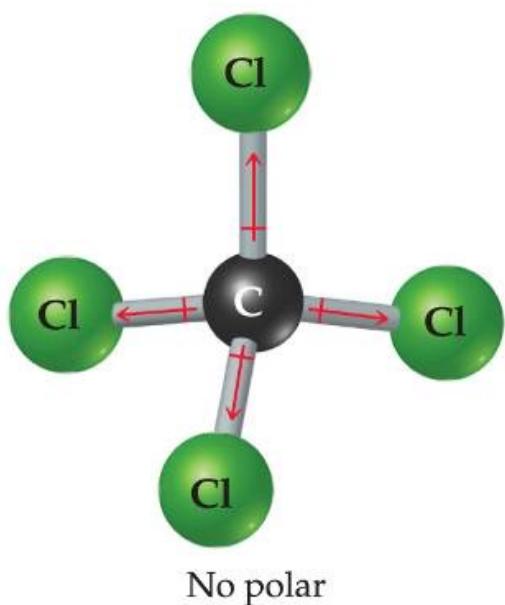
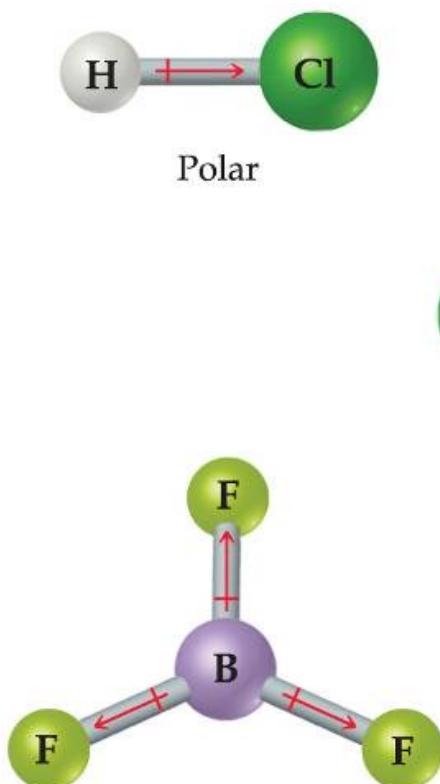
Fijate en el ozono

Para que una molécula sea polar es necesario (aunque no suficiente) que los momentos dipolares asociados a cada enlace no se anulen

Polaridad molecular

Para decidir si una molécula es polar debemos considerar:

- 1.- la polaridad asociada a los enlaces
- 2.- la geometría molecular
- 3.- eventualmente tambien la presencia de pares solitarios asociados al átomo central (O_3 , PH_3 , etc.)

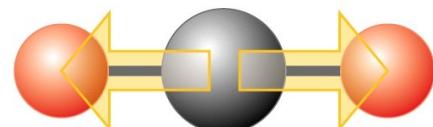


Momento dipolar general

Al sumar vectorialmente los dipolos de enlace individuales, puede estimarse el momento dipolar total para la molécula.

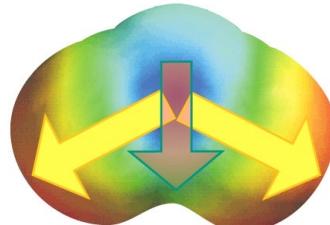
Polaridad molecular

CO_2 : molécula apolar. Los momentos dipolares se cancelan
 $\delta-$ $\delta+$ $\delta-$



23 Carbon dioxide, CO_2

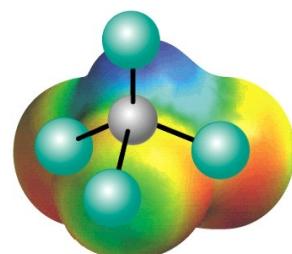
O_3 : molécula polar. Los momentos dipolares no se cancelan



Cuidado con esta representación. Los enlaces O–O son apolares

29 Ozone, O_3

CH_4 : molécula apolar

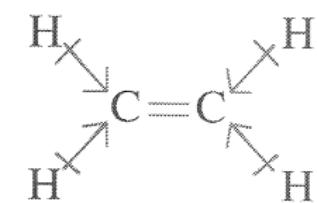
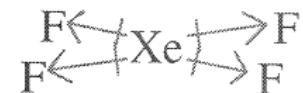
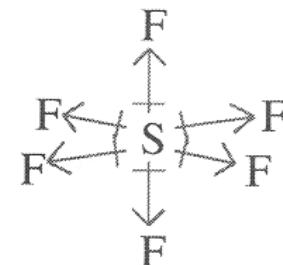
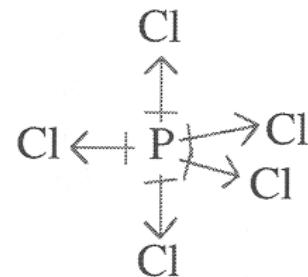
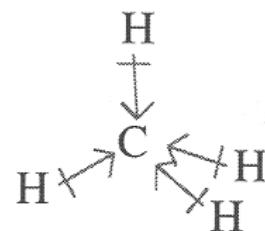
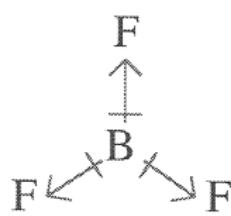


VSEPR type	Nonpolar	Polar	VSEPR type	Nonpolar	Polar
AX_2	CO_2	N_2O	AX_4	CH_4	CH_3Cl
AX_2E		SO_2, O_3	AX_4E		SF_4
AX_2E_2		H_2O	AX_4E_2		XeF_4
AX_2E_3	$\text{I}_3^-, \text{XeF}_2$	BrIF^-	AX_3	BF_3	COCl_2
AX_3E			AX_3E_2	NH_3	ClF_3
AX_4E_3			AX_5	PCl_5	PCl_4F
AX_5E			AX_5E_2		IF_5
AX_6			AX_6	SF_6	

Polaridad molecular

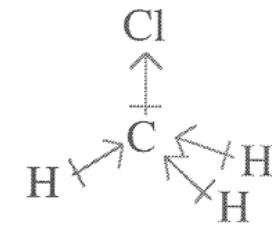
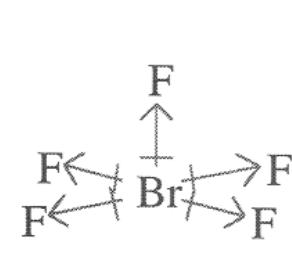
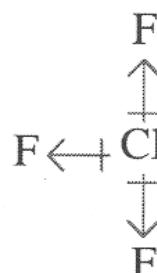
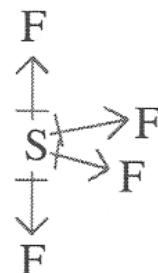
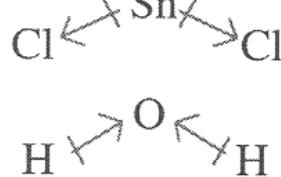
Molécula apolares: los momentos dipolares asociados a los enlaces se cancelan

Algunas moléculas apolares



Molécula polares: los momentos dipolares asociados a los enlaces no se cancelan

Algunas moléculas polares



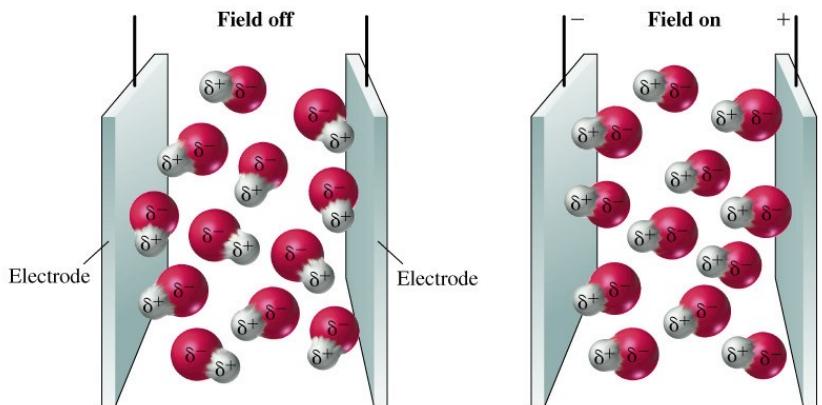
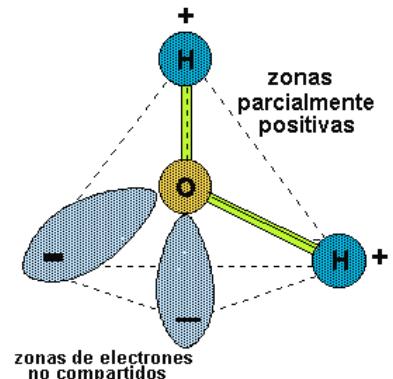
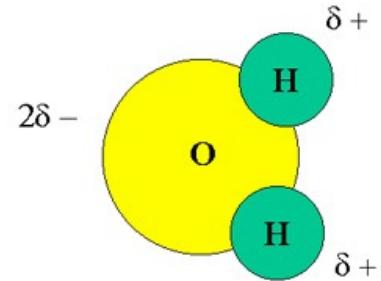
La polaridad molecular condiciona muchas de las propiedades de la sustancia y también su reactividad.

Esto es especialmente relevante en las biomoléculas (que disponen de muchos grupos polares).

Normalmente disueltas en el disolvente más relevante (y que también es polar): **el agua**

El agua es una sustancia polar

- El agua es una sustancia polar al estar formada por moléculas con una polaridad muy elevada
 - ◆ $\mu = 1,85$ (el más alto entre sustancias comunes)
- Este hecho permite que sea un buen disolvente de sustancias iónicas y polares
- Propiedad clave en muchos procesos celulares



Las moléculas se orientan cuando se someten a un campo eléctrico

manifestación del momento dipolar del agua:
el agua experimenta una atracción hacia el bolígrafo cargado positivamente

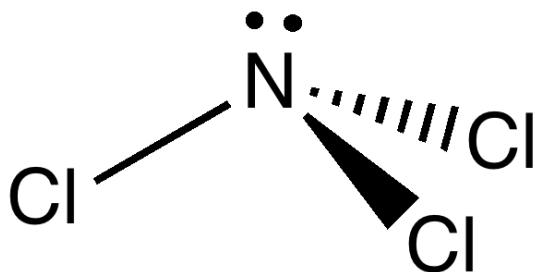


¿Es polar el anión CN⁻?

- A pesar de que el enlace C–N es un enlace covalente polar, **no tiene sentido hablar de polaridad de moléculas con carga eléctrica no nula.**
- No son dipolos eléctricos; por el contrario, se trata de entidades cargadas eléctricamente
 - ◆ Sólo se puede hablar propiamente de dipolo eléctrico en entidades eléctricamente neutras
- Por tanto, no tiene sentido plantear esta cuestión

La molécula de NCl₃, ¿es polar?

- ¿Geometría?: pirámide trigonal
- ¿Los enlaces N–Cl son polares?
 - ◆ Electronegatividad de Pauling del N: 3,0
 - ◆ Electronegatividad de Pauling del Cl: 3,0
 - ◆ A pesar de esto, debemos considerar que los enlaces son polares (aunque la intensidad del momento dipolar sea pequeña)
 - ◆ Por tanto, la previsión es que **la molécula sea ligeramente polar**



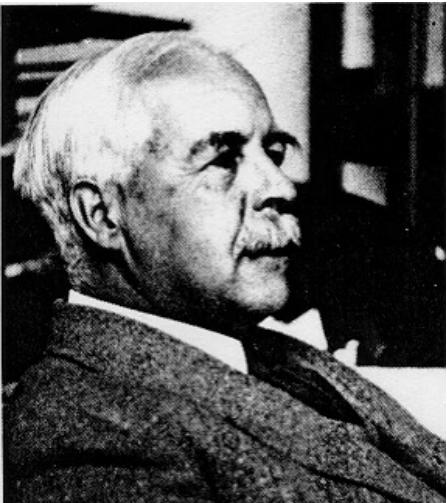
Electronegatividad de Allred-Rochow N = 3,07; Cl= 2,87

Debemos considerar, además, la contribución del par solitario asociado al N

Representación de las “estructuras electrónicas” de Lewis

Son unas representaciones de cómo se distribuyen los electrones de valencia en moléculas sencillas. Se trata de un modelo de enlace localizado

La Teoría de Enlace de Lewis



G. N. Lewis (1875-1946)

Teoría de la compartición de electrones.

Estructuras electrónicas de Lewis

Teoría ácido-base de Lewis

Los químicos empezamos a entender cómo y por qué se forman las moléculas a partir de la primera mitad del siglo XX.

Las primeras contribuciones las hizo G.N. Lewis en 1916 (hace mas de 100 años). Lewis introdujo la idea de que **el enlace químico se forma por compartición de electrones**

La Teoría de Enlace de Lewis

Ideas principales

- En el enlace químico, sólo intervienen los electrones de las capas más externas (electrones **de valencia**).
- El enlace **covalente** se establece por **compartición de pares de electrones**.
 - ◆ En algunos casos, se transfieren electrones de un átomo al otro (**iónico**).
- El número de pares de electrones compartidos define el **orden o multiplicidad de enlace**

Regla del octeto

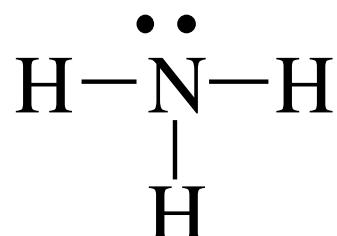
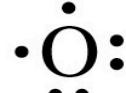
Los electrones se transfieren o se comparten de modo que los átomos adquieran una configuración electrónica especialmente estable. Generalmente de gas noble. Octeto. En sentido estricto sólo es aplicable a los elementos del segundo periodo

Símbolos de Lewis

- La notación de Lewis, utiliza el símbolo del elemento rodeado de una serie de puntos
- Los puntos alrededor del símbolo representan a los electrones de valencia: son los **electrones que residen en el nivel más externo de los átomos**
- **El enlace covalente sencillo (formado por un par de electrones) se representa por una raya**
- **Si el enlace es de orden 2 (enlace doble) se dibujan dos rayas**



Si: [Ne] 3s² 3p²



Estructura de Lewis del NH₃

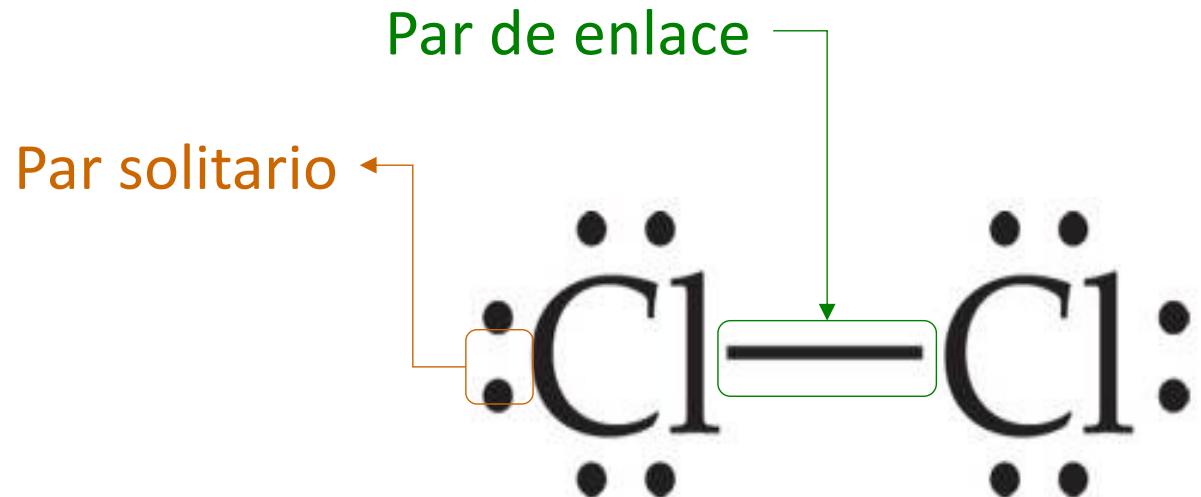
Símbolos de Lewis

TABLE 8.1 • Lewis Symbols

Group	Element	Electron Configuration	Lewis Symbol	Element	Electron Configuration	Lewis Symbol
1A	Li	[He] $2s^1$	Li·	Na	[Ne] $3s^1$	Na·
2A	Be	[He] $2s^2$	·Be·	Mg	[Ne] $3s^2$	·Mg·
3A	B	[He] $2s^2 2p^1$	·B·	Al	[Ne] $3s^2 3p^1$	·Al·
4A	C	[He] $2s^2 2p^2$	·C·	Si	[Ne] $3s^2 3p^2$	·Si·
5A	N	[He] $2s^2 2p^3$	·N·	P	[Ne] $3s^2 3p^3$	·P·
6A	O	[He] $2s^2 2p^4$:O:	S	[Ne] $3s^2 3p^4$:S:
7A	F	[He] $2s^2 2p^5$	·F·	Cl	[Ne] $3s^2 3p^5$	·Cl·
8A	Ne	[He] $2s^2 2p^6$:Ne:	Ar	[Ne] $3s^2 3p^6$:Ar:

© 2012 Pearson Education, Inc.

Estructuras de Lewis



Las estructuras de Lewis son representaciones que intentan mostrar cómo se distribuyen los electrones de valencia en la molécula. Distinguen entre **pares de electrones de enlace** y los pares de electrones *no enlazantes* (*tambien denominados pares solitarios*). Es una distribución de electrones poco realista al considerar a los electrones localizados en determinadas regiones.

Estructuras de Lewis

- La molécula de dicloro (Cl_2):



- **Par electrónico de enlace:** aquel que es compartido por dos átomos y que, por tanto, contribuye de modo eficaz al enlace
- **Par solitario:** aquel que pertenece “exclusivamente” a un átomo. No contribuye al enlace pero aquellos pares solitarios asociados al átomo central son cruciales a la hora de determinar las estructuras moleculares

dos tipos de pares electrónicos

Compartición de electrones. Regla del octeto

- El enlace químico entre dos átomos se origina mediante la **compartición de electrones**
- Los *electrones* son compartidos para facilitar que cada átomo adquiera una **configuración de gas noble** (capa cerrada)

Regla del octeto

En las moléculas, los átomos se unen entre sí compartiendo pares de electrones para adquirir cada átomo la configuración de gas noble (para los elementos del 2º periodo: $8e^-$).

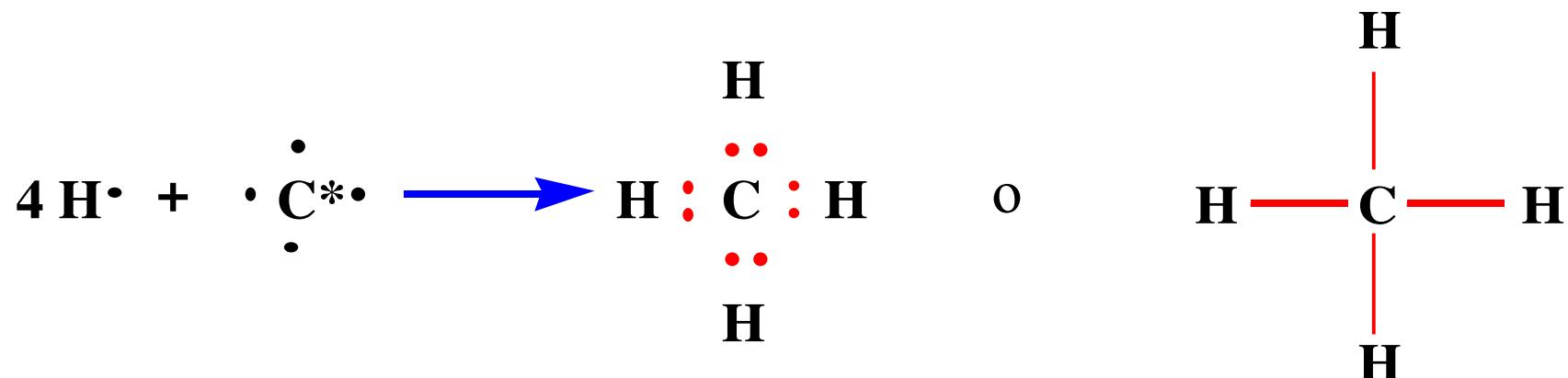
Esta regla funciona bien con átomos del 2º periodo pero en los del 3º y siguientes se presentan bastantes casos de incumplimiento

Puntualizaciones sobre las estructuras de Lewis

- Las estructuras de Lewis son representaciones en las que se indica, mediante puntos y rayas, la **distribución de los electrones de valencia** (en pares solitarios y pares de enlace) entre los átomos que constituyen un compuesto
- Las estructuras electrónicas de Lewis **no indican nada acerca de la geometría de la molécula**
- Tampoco informan acerca de los orbitales de donde proceden los electrones a compartir ni el tipo de orbitales que ocupan. Basta contar los electrones de valencia y distribuirlos “de forma correcta” alrededor de los átomos
- A pesar de ello, constituyen una **herramienta (un modelo) muy simple y eficaz** para describir como se distribuyen los electrones de valencia en moléculas sencillas (la denominada **estructura electrónica**)
 - ◆ Las moléculas bioquímicas suelen pertenecer a este tipo de moléculas sencillas
- El **modelo de Lewis** es anterior a la **teoría del orbital molecular** que es el modelo que nos da una mejor descripción del enlace. Sin embargo, la TOM necesita a menudo de complejos cálculos por ordenador y por esto presenta dificultades para su aplicación práctica en un curso de química general

Enlace covalente según Lewis

- La molécula de metano (CH_4):
 - ◆ H → aporta 1 electron de valencia: $1s^1$
 - ◆ C → aporta 4 electrones de valencia: [He] $2s^2 2p^2$

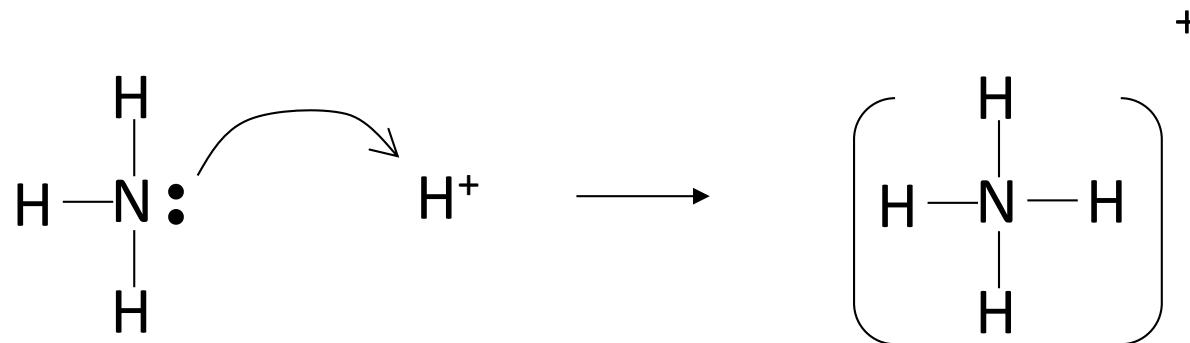


- ¿Qué configuración adquiere el átomo de C?
 - configuración del gas noble de su periodo Ne: [He] $2s^2 2p^6$
 - ¿Qué configuración adquiere cada átomo de H?
 - configuración del gas noble He: $1s^2$

Enlace covalente “dativo”

- En el denominado enlace covalente coordinado (o dativo): los electrones compartidos los aporta un solo átomo
- Una vez formado el enlace, no se diferencia en nada de un enlace covalente “estándar”. Mejor no hablar en estos términos....

Formación del ión amonio NH_4^+

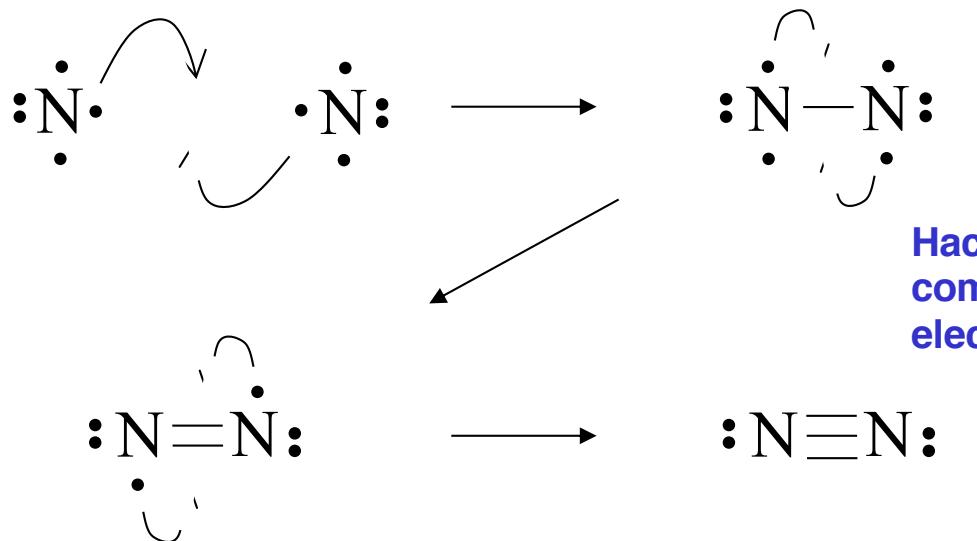


El origen de los electrones compartidos no implica por sí mismo
nada sobre el carácter del enlace formado

Enlaces covalentes múltiples

■ Enlaces covalentes múltiples:

◆ Molécula N₂



Orden de enlace

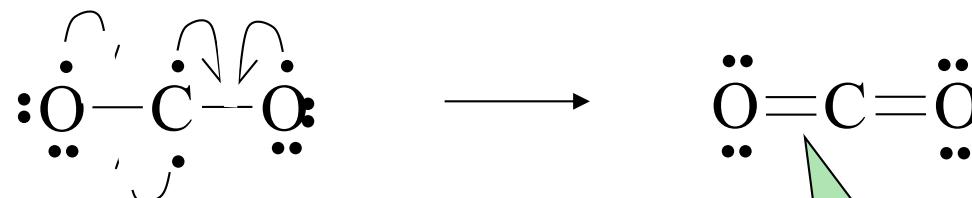
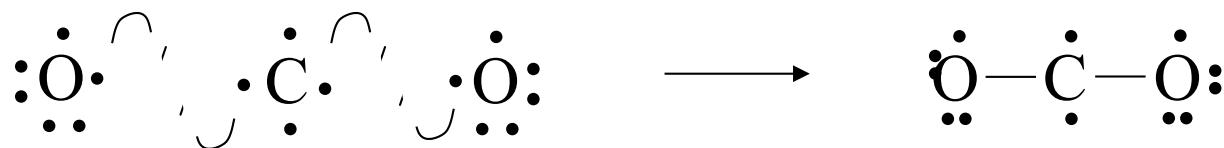
número de pares de e⁻ que contribuyen al enlace entre dos átomos.

¿O.E. N₂?

Enlaces covalentes múltiples

■ Enlaces covalentes múltiples:

◆ Molécula CO₂



En un doble enlace se
comparten 2 pares de
electrones

Carga formal

Vamos a avanzar un poco en el análisis de las estructuras electrónicas de Lewis con este concepto de carga formal

Carga formal. Definición

- La carga formal de un átomo en una molécula es la carga que tendría el átomo en el supuesto de que todos los átomos tuvieran la misma electronegatividad.
 - ◆ En ese caso, los electrones de enlace se compartirían equitativamente entre los dos átomos implicados en ese enlace
 - ◆ una definición más operativa: la diferencia entre el número de electrones de valencia en el átomo aislado y el número de electrones asignado en la estructura de Lewis.

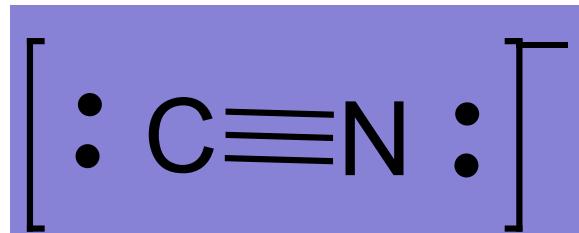
¿Cómo se calcula?

- Todos los electrones no compartidos se asignan al átomo en el que se encuentran
- En cualquier enlace (sencillo, doble o triple) se asigna la mitad de los electrones de enlace a cada átomo del enlace
- La carga formal se calcula restando el número de electrones asignado al átomo del número de electrones de valencia del átomo neutro

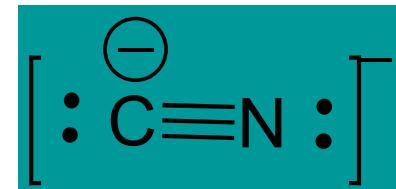
Carga formal. Definición

¿Cómo se calcula?

$CF = \text{nº e}^- \text{ de valencia} - \text{nº e}^- \text{ en par solitario} - (1/2)\text{nº e}^- \text{ en par enlazante (compartido)}$



CF(C)	$4-2-(6/2)=-1$
CF(N)	$5-2-3=0$



La carga formal se dibuja encerrada en un círculo para diferenciarla de la carga real

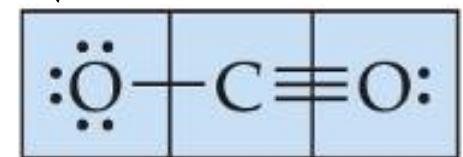
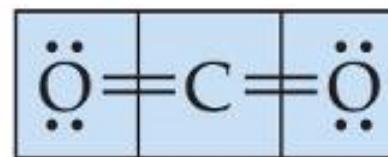
Carga formal. Reglas operativas

- En una molécula neutra, la suma de las CFs será 0.
- En una especie iónica, la suma de las CFs será igual a la carga del ión.
- Las CFs deben ser tan pequeñas como sea posible.
- Las CFs negativas deben estar, a ser posible, sobre los elementos más electronegativos
- Estructuras de Lewis con CFs del mismo signo sobre átomos adyacentes son poco probables.

Carga formal. Reglas operativas

El análisis de las cargas formales ayudan a detectar las estructuras de Lewis más “razonables”

¿Cuál de las dos es más razonable?



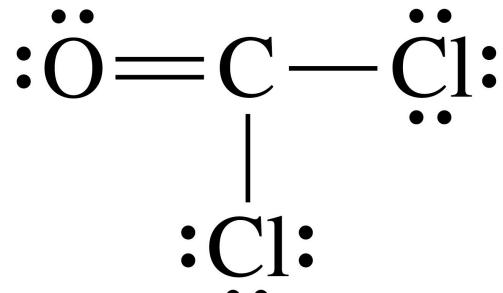
Electrones de valencia:	6	4	6	6	4	6
-(Electrones asignados al átomo):	6	4	6	7	4	5
<hr/>						Carga formal:
	0	0	0	-1	0	+1

La carga formal que soporta cada átomo, no tiene por qué representar la distribución real de la carga en la molécula. Es sólo una herramienta de trabajo que permite dilucidar qué distribuciones electrónicas no son adecuadas o cuál es la más probable

El análisis de las cargas formales asignadas a los átomos, nos ayuda a escoger las estructuras electrónicas de Lewis más razonables.

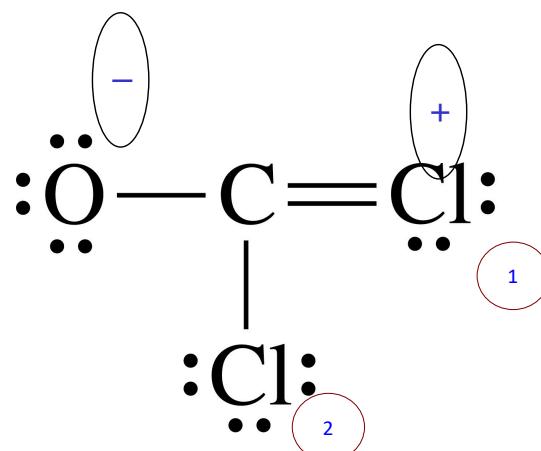
Ejercicio

■ ¿Cuál de las tres estructuras de Lewis propuestas para la molécula de COCl_2 es más probable?



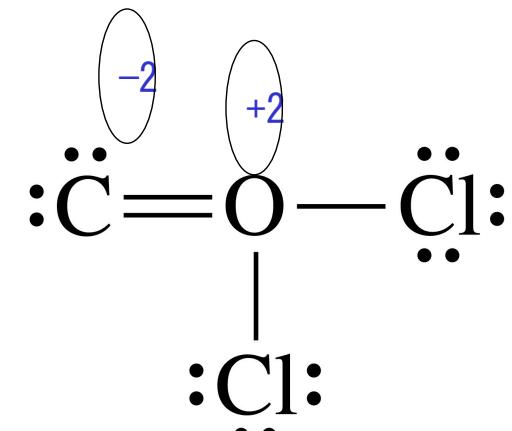
(a)

Copyright © 2004 Pearson Prentice Hall, Inc.



(b)

Copyright © 2004 Pearson Prentice Hall, Inc.



(c)

Copyright © 2004 Pearson Prentice Hall, Inc.

$$\begin{aligned} \text{CF(O)} &= 0 \\ \text{CF(C)} &= 0 \\ \text{CF(Cl)} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{CF(O)} &= -1 \\ \text{CF(C)} &= 0 \\ \text{CF(Cl}_1\text{)} &= +1 \\ \text{CF(Cl}_2\text{)} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{CF(O)} &= +2 \\ \text{CF(C)} &= -2 \\ \text{CF(Cl)} &= 0 \end{aligned}$$

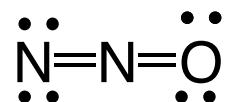
Hemos elegido la estructura electrónica mas probable a pesar de que todas ellas cumplen la regla del octeto

Cargas formales en el N₂O

Gas de la risa, utilizado como anestésico y también como propelente en helados



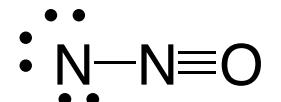
- Es una molécula lineal asimétrica con un N como átomo central. Tenemos 3 posibles diagramas de Lewis que cumplen la regla del octeto:



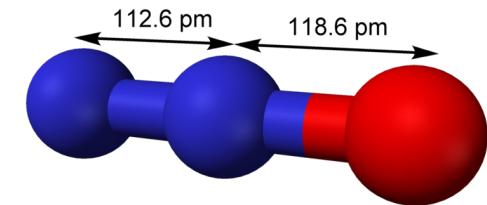
(I)



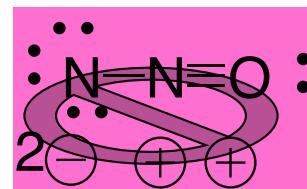
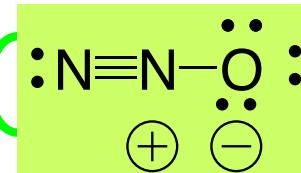
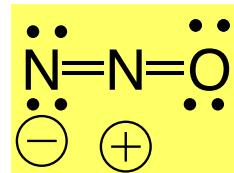
(II)



(III)



asignación de cargas formales



la estructura de menor energía será: (1) la que tenga menores cargas formales sobre los átomos y (2) distribuidas de acuerdo con su electronegatividad

		e ⁻ valencia	e ⁻ solitarios	1/2 e ⁻ comp	CF
estructura (I)	N(t)	5	4	2	-1
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	4	2	0
estructura (II)	N(t)	5	2	3	0
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	6	2	-1
estructura (III)	N(t)	5	6	1	-2
	N(c)	5	0	4	+1
	O	6	2	3	+1

¿Qué es el gas de la risa, la droga que se inhala en un globo en las zonas de marcha?



Agentes de la Guardia Civil con 'gas de la risa' incautado. / SUR

Fuengirola ha sido protagonista en la última semana de varias detenciones a personas que lo comercializaban o transportaban óxido nitroso

En Nueva York se prohíbe la venta de cartuchos de N₂O a los menores (2022)



JON SEDANO Málaga

Lunes, 6 agosto 2018, 17:39



El óxido nitroso (N₂O), lo mismo que utilizan en sus coches los personajes de la saga 'A todo gas', lleva años siendo protagonista de fiestas y eventos en discotecas. Conocido popularmente como 'gas de la risa', esta droga fue descubierta a finales del siglo XVIII por el químico Joseph Priestley, y es una de las más frecuentes en Reino Unido, donde ya se ha cobrado **17 vidas** en la última década.

Al inhalarlo, que normalmente se hace a través de globos, el usuario **siente una sensación de euforia**, similar a la de una borrachera, durante aproximadamente un minuto. Pero aunque las risas están aseguradas, también lo están sus efectos nocivos. Según apunta la Asociación del Gobierno Local de Reino Unido (LGA), el gas **puede causar mareos, pérdida de conocimiento** y si se consume de forma reiterada, una **disminución de la vitamina B12**, lo que derivaría en una patología bastante grave.

Aunque su venta es legal porque tiene otros usos, como hacer nata montada o utilizarlo de anestesia dental, está proliferando desde hace años en locales de marcha de la costa como droga. Es relativamente barato, **entre 4 y 5 euros**, y es muy fácil de transportar. Pero su **venta orientada a este tipo de uso es ilegal**, como apuntan desde la Policía Nacional, ya que se considera delito contra la salud pública. Fuengirola ha sido noticia varias veces en la última semana por tener locales donde se vendía como droga o por transportarla en vehículos.



JON SEDANO Málaga

Lunes, 6 agosto 2018, 17:39



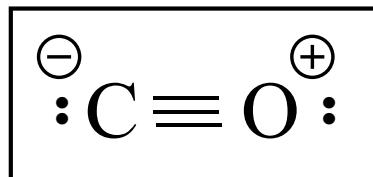
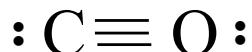
9/24

T-57

Carga formal en el CO

■ Molécula CO (gas tóxico):

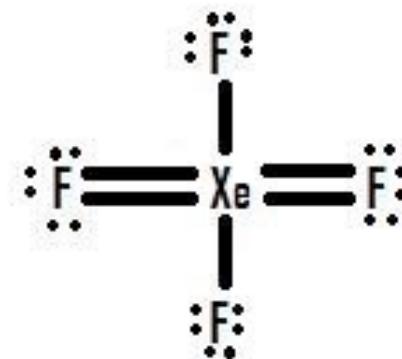
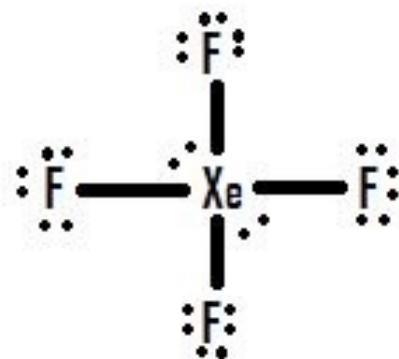
- ◆ Podemos proponer una estructura de Lewis satisfactoria (cumple la regla del octeto)
 - ◆ Las cargas formales sobre cada átomo son las siguientes:
 - CF(C): $4-2-3 = -1$ electronegatividad C = 2,55
 - CF(O): $6-2-3 = +1$ electronegatividad O = 3,40
 - ◆ Esta distribución de cargas formales no parece muy congruente porque asigna una carga formal negativa sobre el átomo menos electronegativo (sin embargo, es la que suele escribirse por ser la única que cumple la regla del octeto)



este es un ejemplo de cómo este modelo de enlaces localizados tan sencillo tiene notables incongruencias.

¿Qué estructura de Lewis es mas “razonable” para el XeF₄?

Aquella que minimice las cargas formales.
¿Cuál es?



Esta estructura, además viola una de las reglas del modelo de Lewis: el F no puede rodearse de mas de 8 electrones

Estructuras electrónicas de Lewis

Un modelo para su obtención

¿Podrías proponer la estructura de Lewis de las siguientes entidades moleculares?

NH_3 , NH_4^+ , HF , H_2O , CH_4 , NF_3 , NO_3^- , ClO_4^- , PCl_3 , ICl_4^- , ClF_3 , IF_4^- ,
 XeOF_4 , XeO_3 , ICl_2^+

Estructuras de Lewis. Reglas(I)

- El H sólo puede adquirir 2e. Los elementos del 2º período: 8e y los del 3ª y sig. pueden ampliar el octeto: 12, 14,...
- Escribe una fórmula esqueleto con el elemento más voluminoso (o el menos electronegativo) en el centro, enlazado por enlaces sigma a los átomos periféricos. El H siempre es periférico
- **Nv:** suma de electrones de valencia. Si la molécula es iónica sumar o restar su carga.
- **No:** número de electrones necesarios para que cada átomo cumpla la regla del octeto
No = 8n (n= número átomos). Excepto H que solo puede rodearse de 2 e.
- **Nc:** elec. a compartir para que se cumpla la R.O. **Nc = No-Nv**
- **Nσ:** Número de electrones que participan en enlaces sigma.
 - ◆ **Nσ = 2(n-1)**
- **Nπ:** Número de electrones que participan en enlaces pi.
- **Nπ = Nc-Nσ**
 - ◆ Nπ=0: la molécula sólo tiene enlaces sencillos
 - ◆ Nπ>0: Nπ electrones implicados en enlaces múltiples
 - ◆ Nπ<0: el átomo central amplía su octeto en Nπ electrones. En este caso, recalcular No, Nc, Nσ y Nπ

Estructuras de Lewis. Reglas(II)

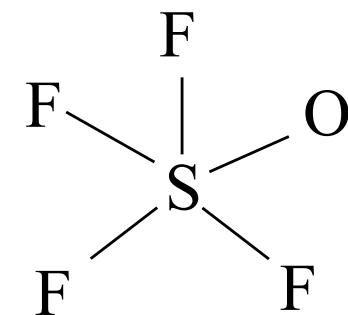
- **Nps:** Número de electrones en pares solitarios.
 - ◆ $\text{Nps} = \text{Nv-Nc}$ (o $\text{N}\sigma$ si se ha ampliado el octeto)
- Proceder a la asignación de los enlaces y pares solitarios respetando la regla del octeto
 - ◆ asignar pares solitarios comenzando por los átomos periféricos
- Carga formal $\text{CF} = \text{Nv} - \text{Nps} - \text{Nc}/2$
 - ◆ las cargas formales han de ser razonables y lo más bajas posibles
 - ◆ estructuras más razonables son las que tienen una menor separación de cargas formales
- Tener en cuenta la posibilidad de estructuras resonantes.
- No violar nunca la regla del octeto para elementos del 2º período.

Contando electrones

- **N_v**: suma de electrones de valencia.
- **No = 8n** (n = número átomos)
- **Nc = No-Nv**
- **N_σ = 2(n-1)**
- **N_π = Nc-N_σ**
 - ◆ N_π=0: la molécula sólo tiene enlaces sencillos
 - ◆ N_π>0: N_π electrones implicados en enlaces múltiples
 - ◆ N_π<0: el átomo central amplía su octeto en N_π electrones. En este caso, recalcular No, Nc, N_σ y N_π
- **N_{ps} = N_v-N_c (o N_σ si se ha ampliado el octeto)**
- **CF = N_v - N_{ps} - N_c/2**

Estructura de Lewis del SOF_4

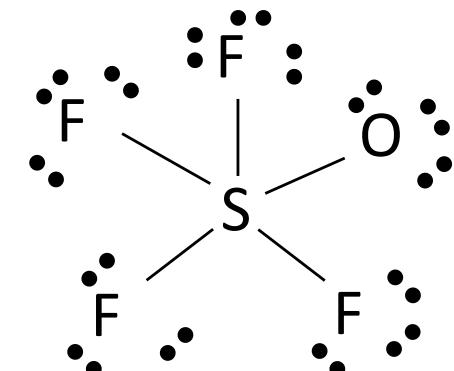
- 1) Átomo central:
 - el menos electronegativo: S
- 2) $Nv = 6 + 6 + 4 \times 7 = 40$
- 3) $No = 8 \times (n) = 8 \times 6 = 48$
- 4) $Nc = No - Nv = 48 - 40 = 8$
- 5) $N\sigma = 2(n-1) = 2 \times 5 = 10$
- 6) $N\pi = Nc - N\sigma = 8 - 10 = -2$ amplía octeto



esqueleto de la molécula SOF_4

Recalculamos las variables necesarias

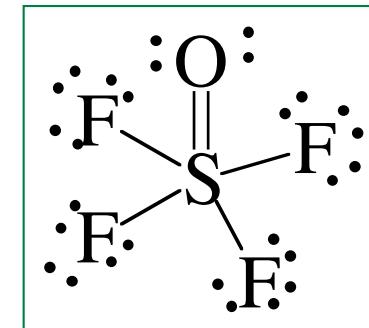
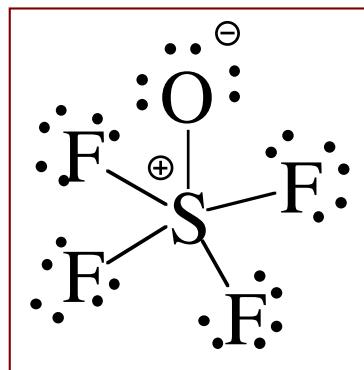
- 3) $No = 48 + 2 = 50$
- 4) $Nc = No - Nv = 50 - 40 = 10$
- 5) $N\sigma = 2(n-1) = 2 \times 5 = 10$ se forman 5 enlaces sigma
- 6) $N\pi = Nc - N\sigma = 10 - 10 = 0$ no hay enlaces pi
- 7) $Nps = (Nv - Nc) = (40 - 10) = 30$ 15 pares solitarios



Refinando la estructura de Lewis del SOF_4

análisis de cargas formales

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



Estructura más probable al minimizar las cargas formales

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

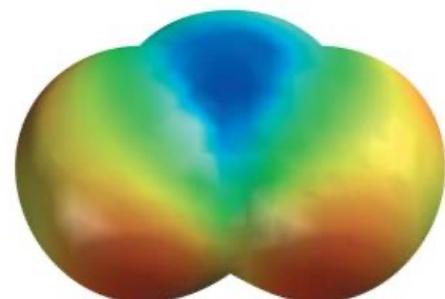
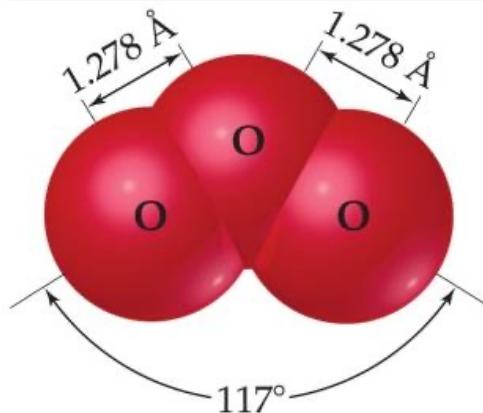
Estructuras de resonancia

Son un artefacto que nos ayuda a racionalizar las estructuras electrónicas que no pueden ser descritas adecuadamente según un modelo de enlaces puramente localizados

Resonancia. Molécula de ozono

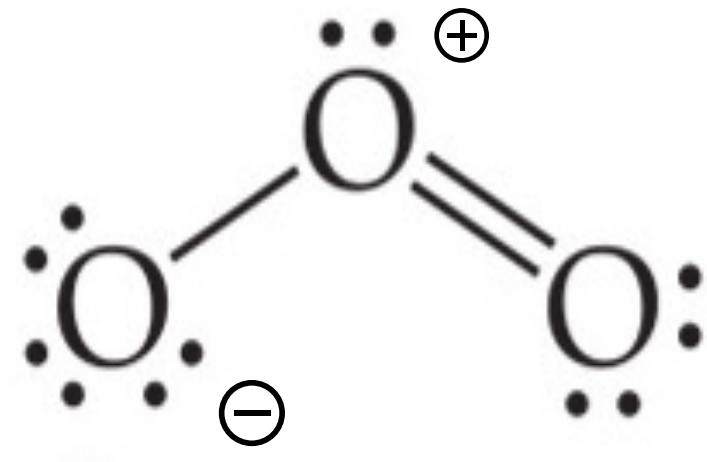
Propiedades moleculares

- 1) ambos enlaces O-O tienen la misma longitud.
- 2) ambos oxígenos periféricos presentan una carga idéntica, experimentalmente medida, de $-1/2 e^-$.



Datos experimentales

Longitud de enlace en el O_3 : 128 pm
 $d(O-O)$: 148 pm
 $d(O=O)$: 121 pm



Es la estructura de Lewis propuesta para el ozono, O_3 .

Sin embargo, no describe correctamente las propiedades moleculares

Resonancia

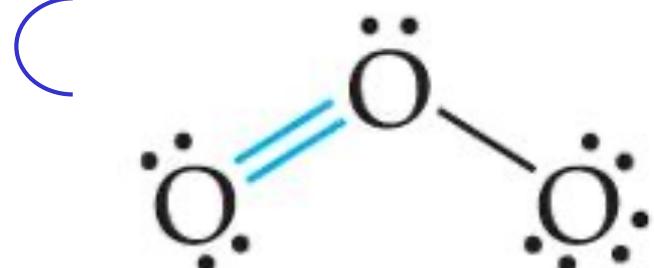
- Una sola estructura de Lewis no puede representar fielmente las propiedades moleculares del ozono
- Podemos proponer varias estructuras (**estructuras de resonancia**) para describir la estructura electrónica de la molécula.
- Se denomina **Híbrido de Resonancia** a este conjunto de estructuras electrónicas que contribuyen a una descripción razonable de la distribución electrónica

En este caso, las estructuras resonantes tienen idéntica energía. No siempre es así

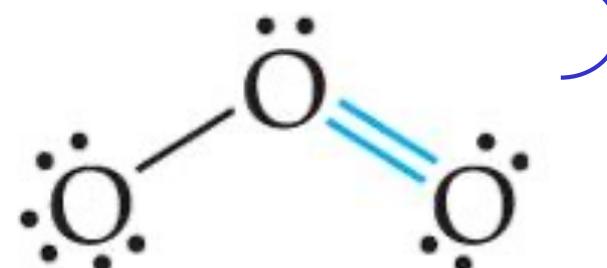
¿Cuál es el orden de enlace O–O?

Híbrido de resonancia

Estructuras de resonancia

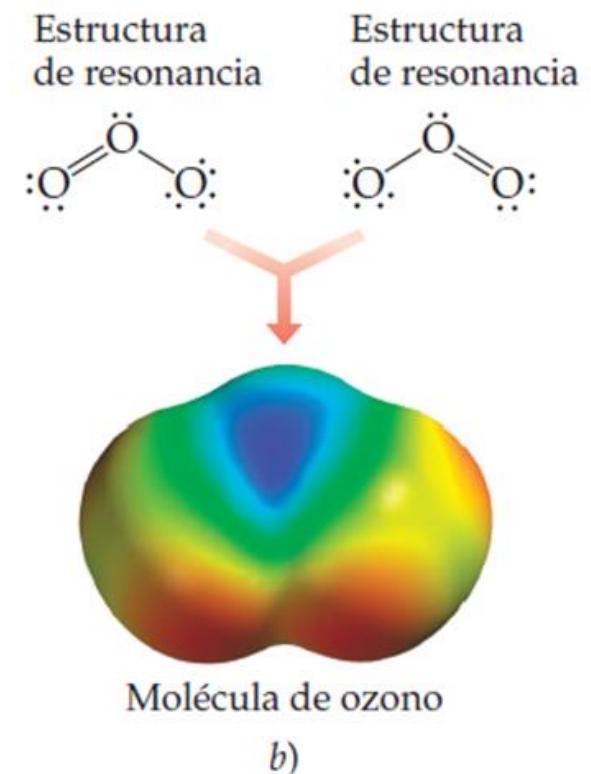


Estructuras de resonancia

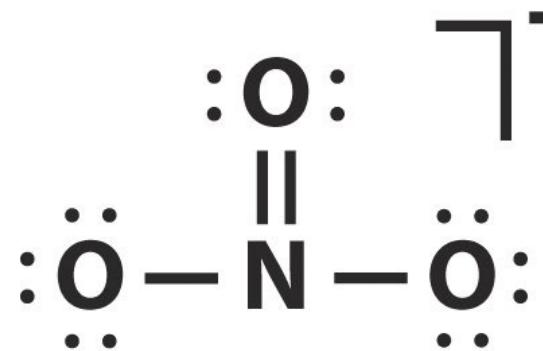


Híbrido de resonancia. Energía de resonancia

- En ocasiones, las propiedades de una molécula se interpretan mejor suponiendo que su distribución electrónica es intermedia entre varias estructuras de Lewis:
 - ◆ Ninguna de ellas describe de modo correcto, por sí sola, las propiedades moleculares (distancias y ángulos de enlace, polaridad...).
 - ◆ En estas moléculas es posible proponer, a menudo, más de una estructura resonante de la misma energía. Son **estructuras equivalentes**.
- En estos casos, la descripción de la estructura electrónica de la molécula se hace en base al denominado **híbrido de resonancia (mezcla de todas las formas resonantes)**
- El híbrido de resonancia tiene una energía menor que cada una de las formas resonantes. A la diferencia de energía se denomina **Energía de Resonancia**



Resonancia: $[\text{NO}_3]^-$



Datos experimentales

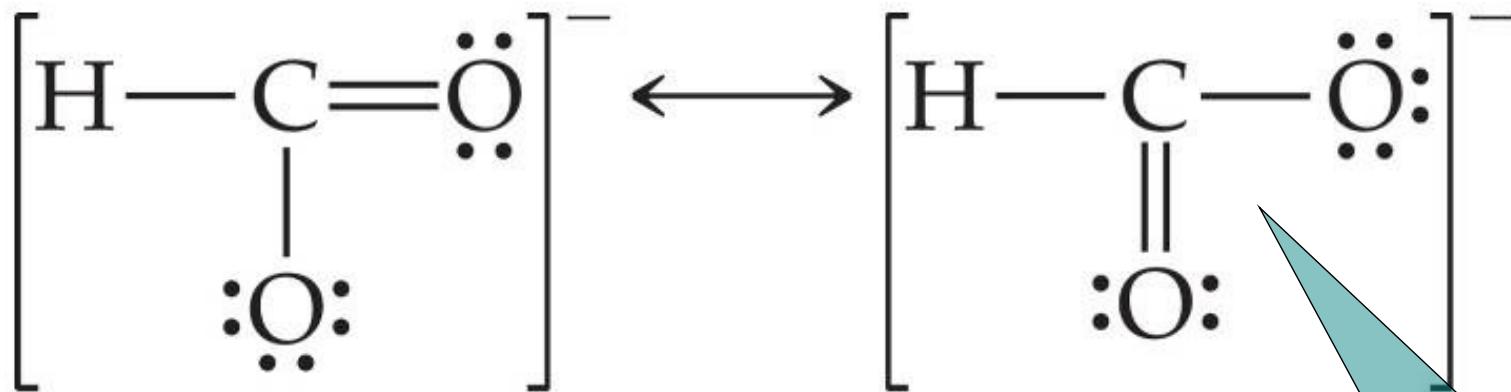
Longitud de enlace N–O en el NO_3^- : 124 pm
d(N–O): 140 pm
d(N=O): 120 pm

El orden de enlace es una medida del número de pares de electrones que forman un enlace entre dos átomos de una molécula

Orden de enlace: 4/3

Cada enlace N–O tiene por término medio 4/3 pares de electrones

Resonancia: anión acetato



Datos experimentales

Longitud de enlace C–O en el HCO_2^- : ¿? pm

$d(\text{C–O})$: 143 pm

$d(\text{C=O})$: 123 pm

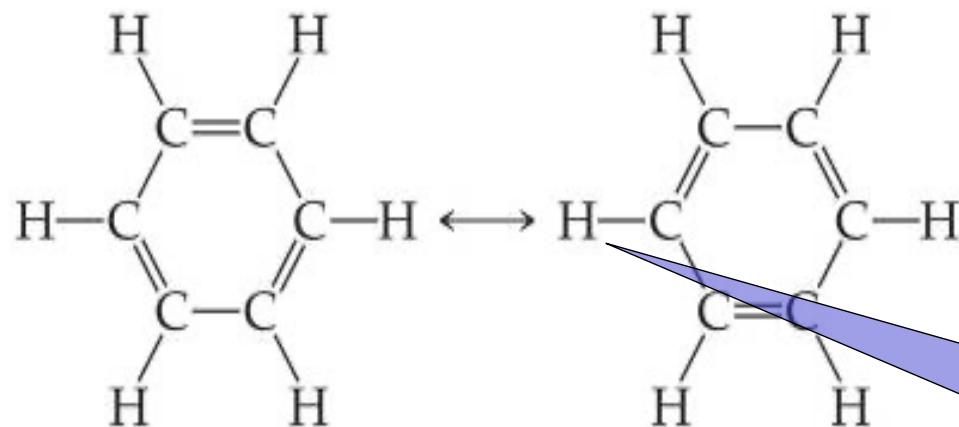
¿cuál es el orden de enlace C–O?

- El concepto de resonancia permite explicar coherentemente que los enlaces C–O tengan la misma longitud y que haya un par de electrones que están continuamente intercambiándose...
- Esos electrones están deslocalizados entre las dos posiciones
Hay evidencias experimentales de que ambos oxígenos son químicamente equivalentes.

La deslocalización
electrónica contribuye a
estabilizar
energéticamente a la
molécula

Resonancia

La deslocalización electrónica explica la inesperada estabilidad química del benceno



- El benceno, C_6H_6 , tiene dos estructuras de resonancia.
- Comúnmente se representa como un hexágono con un círculo interior para señalizar los electrones deslocalizados en el anillo.

¿Cuál es el orden de enlace C-C?



Datos experimentales

Longitud de enlace en el C_6H_6 : 140 pm
 $d(C-C)$: 154 pm
 $d(C=C)$: 134 pm
 $d(C\equiv C)$: 120 pm

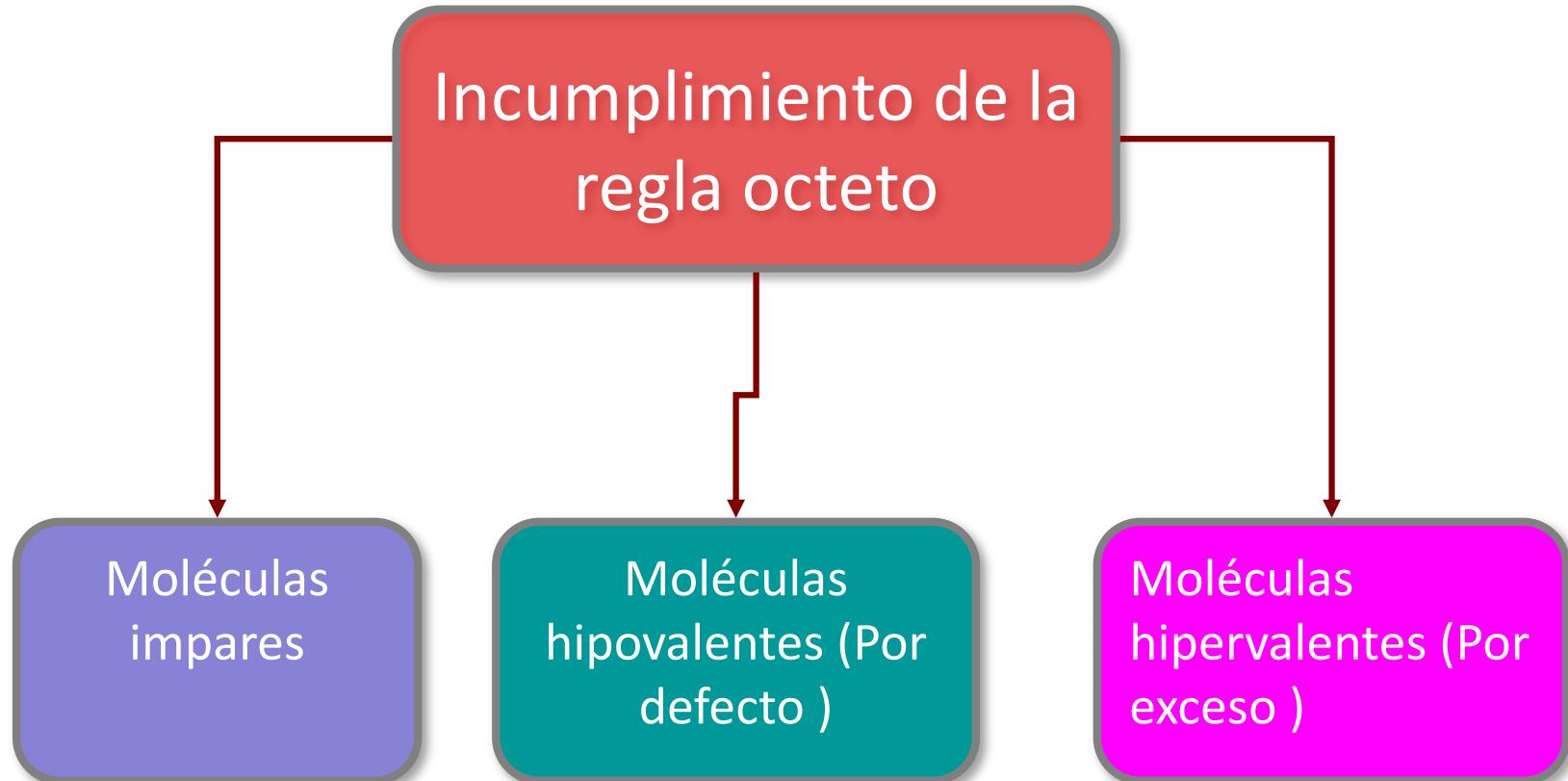
Una reflexión final sobre la resonancia

- El concepto de resonancia y las representaciones de los híbridos de resonancia son artefactos sencillos que nos ayudan mejorar la comprensión de las propiedades electrónicas de algunas moléculas.
- Son adaptaciones de las sencillas ideas de Lewis de compartición de pares de electrones localizados a entidades moleculares un poco mas complejas.
- El modelo de orbitales moleculares, permite superar esta visión del enlace localizado y permite cuantificar por ejemplo la energía de estabilización que logra una molécula cuando existe la posibilidad de que sus electrones se deslocalicen en la entidad molecular.

Excepciones a la Regla del Octeto

Estas excepciones no afectan a las moléculas orgánicas típicas (que muestran un cumplimiento estricto del octeto)

Excepciones a la regla del octeto



Regla del Octeto:

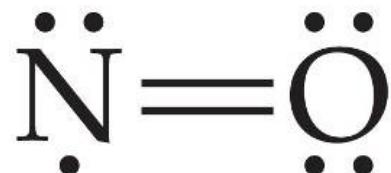
Suelen cumplirla los átomos del 2º período

Los átomos del 3º período y superiores presentan bastantes casos de incumplimiento

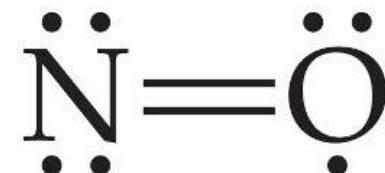
Número impar de electrones

Aunque relativamente raros y por lo regular bastante inestables y reactivos, existen iones y moléculas con un número impar de electrones: ClO₂, NO₂, NO...

En Biología se les suele denominar “radicales libres”



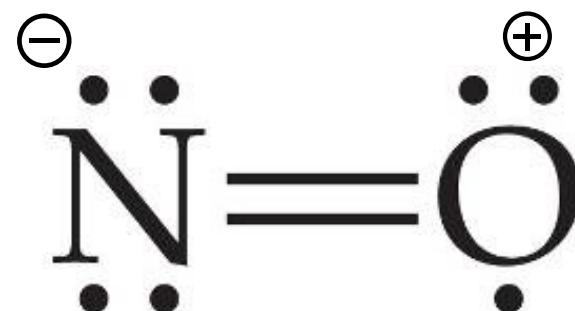
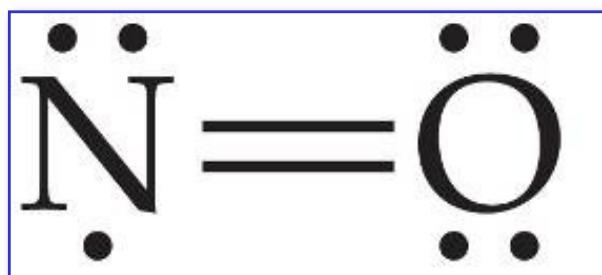
y



¿Cúal de las dos distribuciones es preferible?

Análisis de cargas formales

Se prefiere colocar el electron impar sobre el átomo menos electronegativo



Estructura de Lewis del O₂

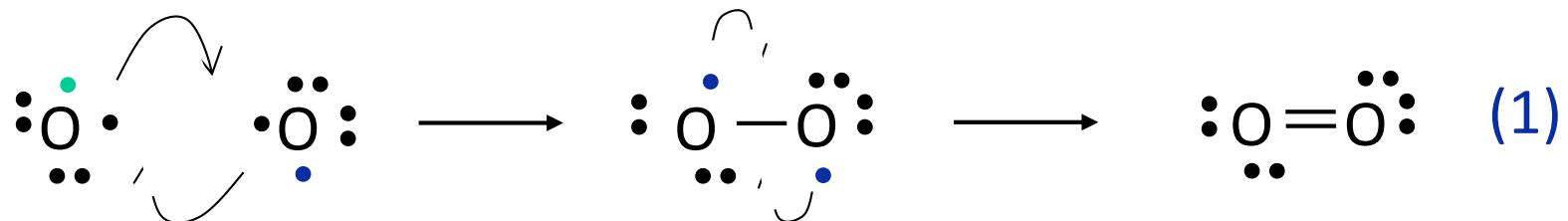
Datos experimentales

La distancia de enlace compatible con un orden de enlace 2

Es una molécula paramagnética (presenta electrones desapareados)

El oxígeno líquido presenta un color azul pálido (también consecuencia de tener electrones desapareados)

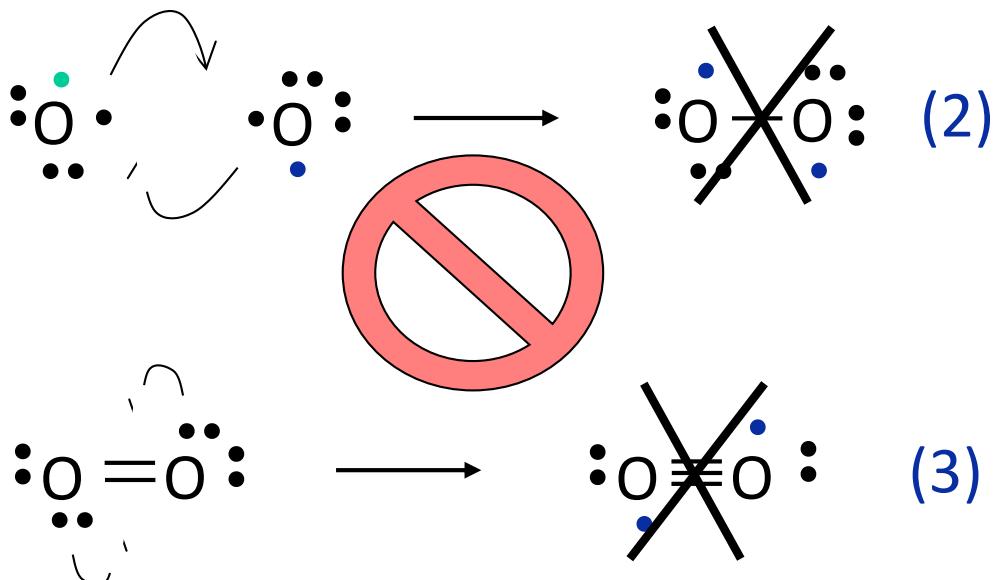
¿Qué estructura de Lewis podemos proponer?



- Estructura (1): distribución de Lewis más “racional”
 - compatible con la energía y longitud de enlace experimentales
 - el problema es que es incompatible con el paramagnetismo (no deja electrones desapareados)

Estructura de Lewis del O₂

Otras alternativas para O₂ que no cumplen la regla del octeto pero que “dejan” electrones despareados (son paramagnéticas)



No podemos proponer ninguna estructura de Lewis que sea compatible con los datos experimentales

• Estructuras (2) y (3):

- compatibles con paramagnetismo
- incompatibles con la energía y longitud de enlace experimentales

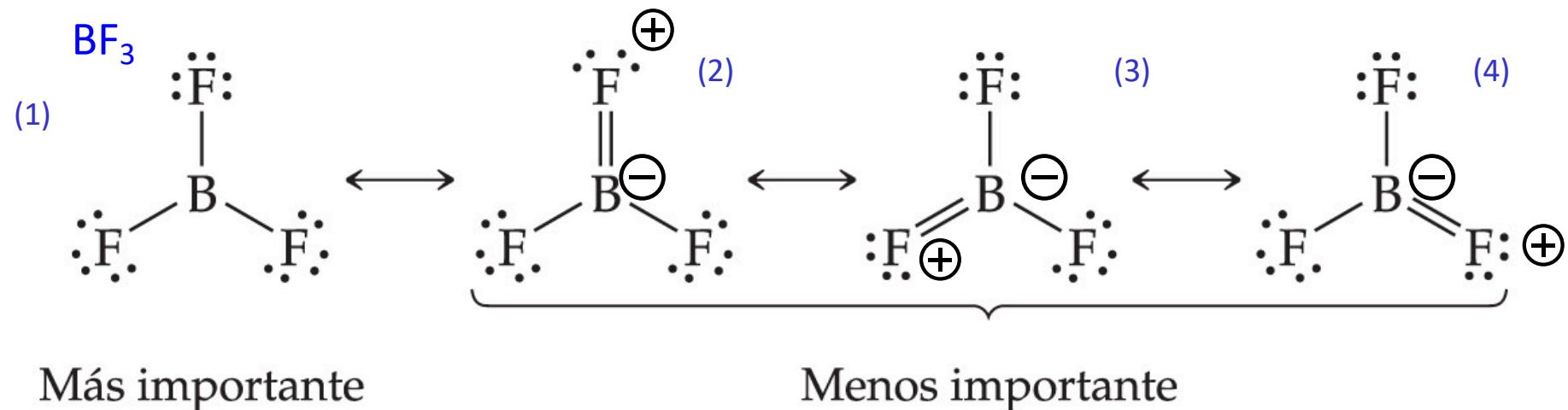
• Estructura (3):

- además no es viable porque.....
 - El átomo de O se rodea de 9 electrones (pero no dispone de 5 orbitales en la capa de valencia para alojarlos)

La TOM sí es capaz de explicar tanto el orden de enlace como el paramagnetismo de la molécula de O₂

Moléculas hipovalentes

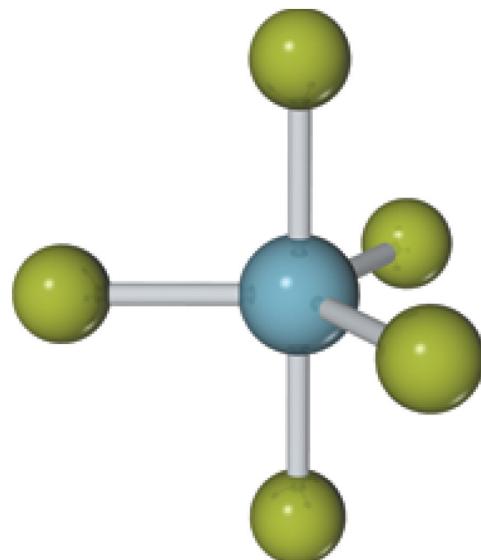
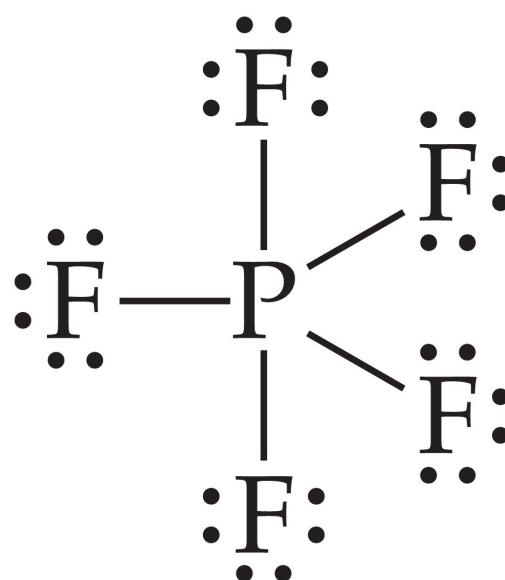
Cargas formales



- ◆ La estructura (1) es la más importante
- ◆ Pero podemos plantear otras formas de distribuir los electrones...
- ◆ Las estructuras (2)-(4) son el resultado de tratar de completar el octeto:
 - El dar al boro un octeto completo implica asignar una carga *negativa* en el boro y una carga *positiva* en el flúor. Pero eso implica la asignación de unas cargas formales diferentes a cero.

Por asignar CFs diferentes a 0, las estructuras que colocan un enlace doble entre el boro y el flúor (2, 3 y 4) son mucho menos importantes que la que deja al boro con únicamente 6 electrones de valencia (1). Sus contribuciones al híbrido de resonancia son menores

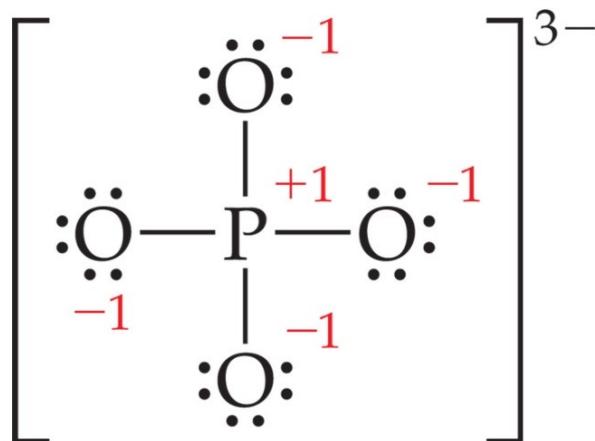
Moléculas hipervalentes



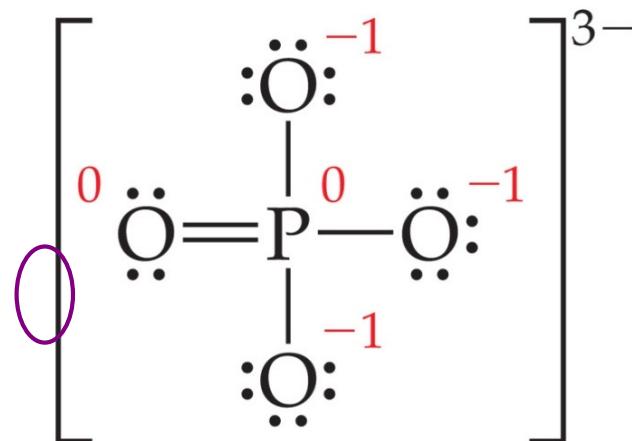
- La única forma en la que el PF_5 puede formar los 5 enlaces P-F es asumiendo que pueda rodearse de 10 electrones.
- En estos casos, se argumenta el concepto de expansión del octeto.
- Se permite expandir el octeto a los átomos en el 3er periodo en adelante
 - ◆ ¿Es probable que los orbitales d en estos átomos participen en el enlace?
 - ◆ Está demostrado que este argumento es incorrecto... pero seguimos utilizándolo y seguimos utilizando el recurso a la hibridación sp^3d y sp^3d^2 de manera incorrecta...
- SF_4 , AsF_6^- , ICl_4^- ...
- Una molécula análoga al NCl_5 no se conoce: ¿por qué?

Moléculas hipervalentes

- Aun cuando podemos dibujar una estructura de Lewis para el ión fosfato que únicamente tiene 8 electrones alrededor del fósforo central, la mejor estructura coloca un enlace doble entre el fósforo y uno de los oxígenos.
- Esto elimina la carga en el fósforo y la carga en uno de los oxígenos.
- El mensaje es ... **cuando el átomo central pertenezca al 3er periodo o siguientes puede expandir su octeto, sobre todo si de esta manera permite minimizar las cargas formales**



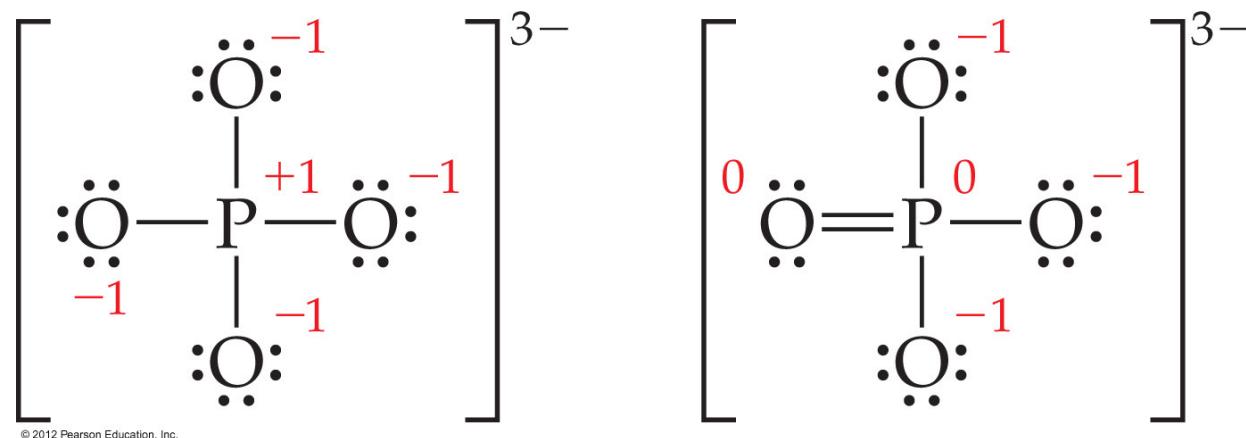
Estructura de Lewis con un cumplimiento estricto del octeto



Estructura de Lewis que minimiza las cargas formales. Debería ser la preferida...

¿Qué estructura es la realmente predominante?

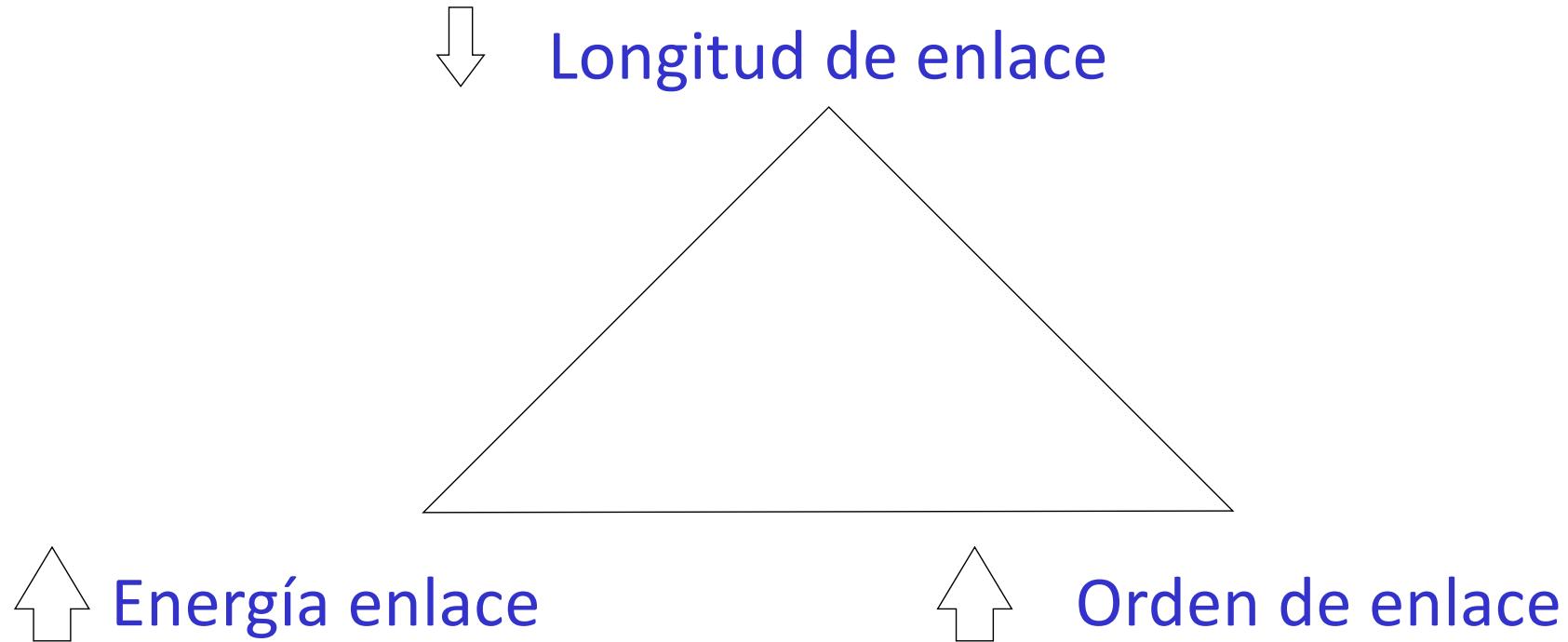
- En el Brown puedes leer: “recientes cálculos mecanico-cuánticos sugieren que la estructura dominante es la de la izquierda”. Otros investigadores afirman que las longitudes de enlace son mas consistentes con la estructura de la derecha
- Lo importante es recordar que diversas estructuras de Lewis pueden contribuir a describir la distribución electrónica real **y que las sencillas ideas que hemos elaborado en este modelo de Lewis pueden no ser las que expliquen todos los casos**



© 2012 Pearson Education, Inc.

Journal of Chemical Education • Vol. 78 No. 7 July 2001 • JChemEd.chem.wisc.edu

Energía, longitud y orden de enlace



Energía de enlace

- Es la energía necesaria para romper el enlace
- La energía necesaria para romper el enlace Cl-Cl en la molécula de Cl₂ es 242 kJ/mol
- Los químicos disponemos de información sobre la **energía media** de los diferentes enlaces
 - ◆ La energía de un enlace C-H en CH₄ puede diferir ligeramente de la energía de ese mismo enlace en CH₃Cl (cloroformo)



Entalpías de enlace medias

TABLA 8.4 • Entalpías de enlace promedio (kJ/mol)

Enlaces sencillos

C—H	413	N—H	391	O—H	463	F—F	155
C—C	348	N—N	163	O—O	146		
C—N	293	N—O	201	O—F	190	Cl—F	253
C—O	358	N—F	272	O—Cl	203	Cl—Cl	242
C—F	485	N—Cl	200	O—I	234		
C—Cl	328	N—Br	243			Br—F	237
C—Br	276			S—H	339	Br—Cl	218
C—I	240	H—H	436	S—F	327	Br—Br	193
C—S	259	H—F	567	S—Cl	253		
		H—Cl	431	S—Br	218	I—Cl	208
Si—H	323	H—Br	366	S—S	266	I—Br	175
Si—Si	226	H—I	299			I—I	151
Si—C	301						
Si—O	368						
Si—Cl	464						

Enlaces múltiples

C=C	614	N=N	418	O ₂	495
C≡C	839	N≡N	941		
C=N	615	N=O	607	S=O	523
C≡N	891			S=S	418
C=O	799				
C≡O	1072				

Energía, longitud y orden de enlace

Al aumentar el orden de enlace (y con él, el número de electrones implicados) aumenta la energía de ese enlace y disminuye la longitud de enlace

Enlace	Longitud del enlace (Å)	Enlace	Longitud del enlace (Å)
C—C	1.54	N—N	1.47
C=C	1.34	N=N	1.24
C≡C	1.20	N≡N	1.10
C—N	1.43	N—O	1.36
C=N	1.38	N=O	1.22
C≡N	1.16	O—O	1.48
		O=O	1.21
C—O	1.43		
C=O	1.23		
C≡O	1.13		