

Continguts i Pautes

Sessió de teoria del 26/05/2021

Contingut

De: 6.2.1 La teoria àcid-base de *Lewis*
Fins: 6.2.2 Els elements de transició i de
transició interna (àcids de *Lewis*)

Pautes

De: exercici 6.10
Fins: exercici 6.11

Alfonso Polo Ortiz
Departament de Química (Química Inorgànica)
Universitat de Girona

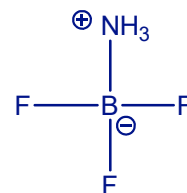
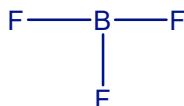


© Alfonso Polo Ortiz [Nom del titular dels drets d'explotació], 2021
Els continguts d'aquest document (excepte textos i imatges no creats per l'autor)
estan subjectes a la llicència de Creative Commons: [Reconeixement-
NoComercial-CompartirIgual 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

Exercici 6.10. L'ordre d'enllaç de les interaccions que forma el bor al BF_3 i al seu adducte àcid base de Lewis amb l'amoniàc és 4. Raona perquè la distància B-F al BF_3 augmenta de 1.31 Å a 1.37 Å en formar l'adducte àcid-base de Lewis.

Resposta: Pèrdua d'ordre d'enllaç a l'enllaç B-F

Si fem les estructures e Lewis tant del BF_3 com del seu adducte àcid base de Lewis amb l'amoniàc:



Al BF_3 , el bor amb un ordre d'enllaç total de 4, forma tres enllaços B-F, llavors l'ordre d'enllaç per cada enllaç B-F serà: $\frac{4}{3} = 1 + \frac{1}{3}$

A l'adducte àcid base, el bor amb el mateix ordre d'enllaç total, forma tres enllaços B-F i un enllaç B-N, llavors l'ordre d'enllaç per cada enllaç B-F ó B-N serà: $\frac{4}{4} = 1$

En formar l'adducte àcid base de Lewis, l'ordre d'enllaç als enllaços B-F disminueix, provocant l'elongació de l'enllaç

Si esteu interessats en saber per què els dos compostos tenen el mateix ordre de enllaç en les interaccions que forma el bor, aneu al final d'aquestes pautes

Exercici 6.11. A partir de la seva estructura de Lewis, raona la característica base de Lewis de les següents espècies. En el cas de les espècies poliatòmiques, per quin àtom s'uniran a l'àcid de Lewis?

Espècies: H_2O , Cl^- , CN^- , CO , PPh_3

Resposta: O, C, C, P

Les estructures de *Lewis* són:



Totes les espècies contenen àtoms amb parells d'electrons no enllaçants que poden cedir a un àcid de *Lewis* formant un adducte àcid-base de *Lewis*

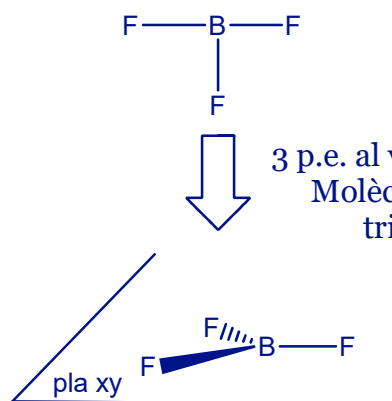
Per l'aigua i la trifenilfosfina sembla clar que els àtoms donadors seran:
l'oxigen i el fòsfor respectivament

El cianur i el carbonil (substàncies isoelectròniques) tenen dos parells d'electrons no enllaçants en dos àtoms diferents. L'àtom donador serà aquell que suporta la càrrega formal negativa*

* És l'àtom que suporta el parell d'electrons no enllaçants menys estable

Si esteu interessats en conèixer l'estructura electrònica del CO (i del CN^- , són isoelectrònics), aneu al final d'aquestes pautes

Estructura electrònica del BF_3

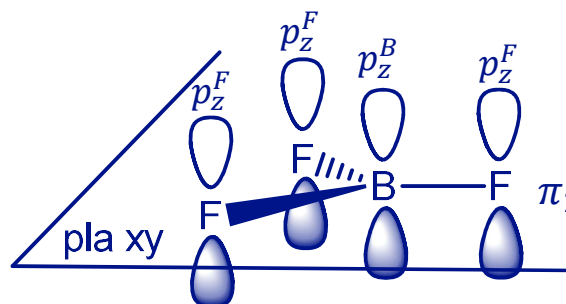
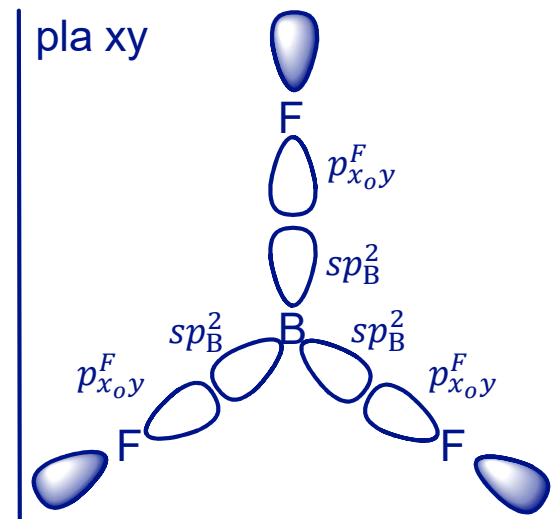


⇒ hibridació sp^2 al B

Cada interacció

$sp_B^2 - p_{xoy}^F$
genera

$\sigma_{sp_B^2 p_{xoy}^F}$ i $\sigma_{sp_B^2 p_{xoy}^F}^*$



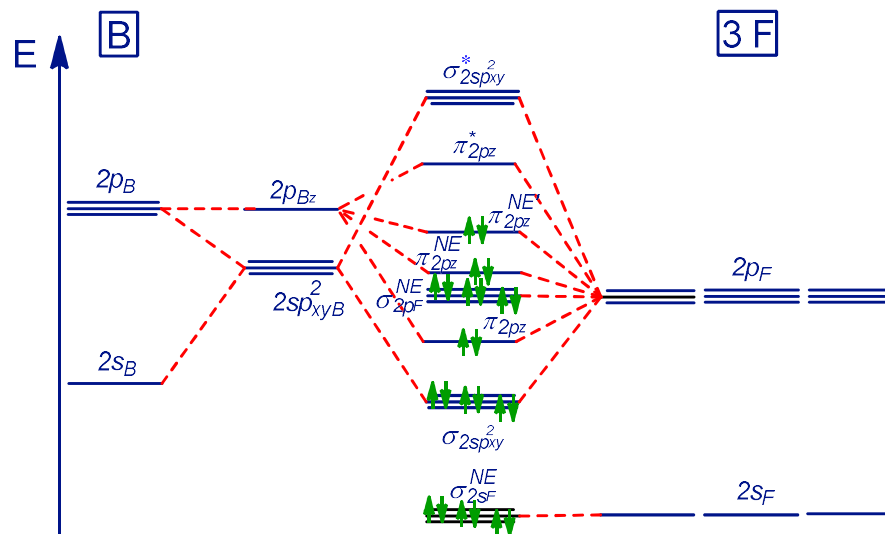
La interacció

$p_z^B - 3 \cdot p_z^F$
genera

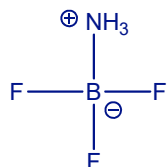
$\pi_{2p_z}, \pi_{2p_z}^{NE}, \pi_{2p_z}^{NE'}$ i $\pi_{2p_z}^*$

$$OE = \frac{8 - 0}{2} = 4 \Rightarrow OE_{B-F} = 1 + \frac{1}{3}$$

La interacció π fa que el bor compleixi l'octet i l'enllaç B-F presenti certa multiplicitat



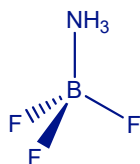
Estructura electrònica del $\text{H}_3\text{N}^+ \rightarrow \text{BF}_3$



4 p.e. al voltant del B
Molècula tetraèdrica



hibridació sp^3 al B



Cada interacció

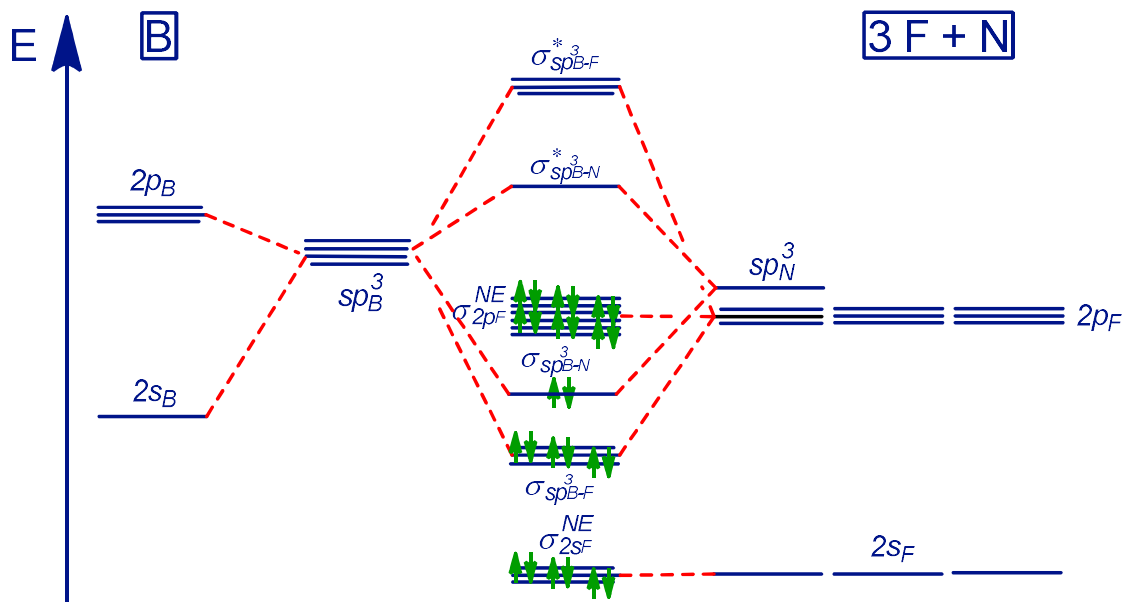
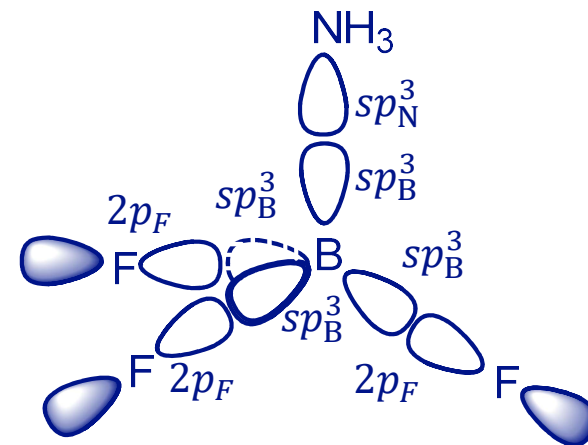
$sp_B^3 - 2p_F$
genera

$\sigma_{sp_B^3-F}$ i $\sigma_{sp_B^3-F}^*$

La interacció

$sp_B^3 - sp_N^3$
genera

$\sigma_{sp_B^3-N}$ i $\sigma_{sp_B^3-N}^*$



$$OE = \frac{8 - 0}{2} = 4$$

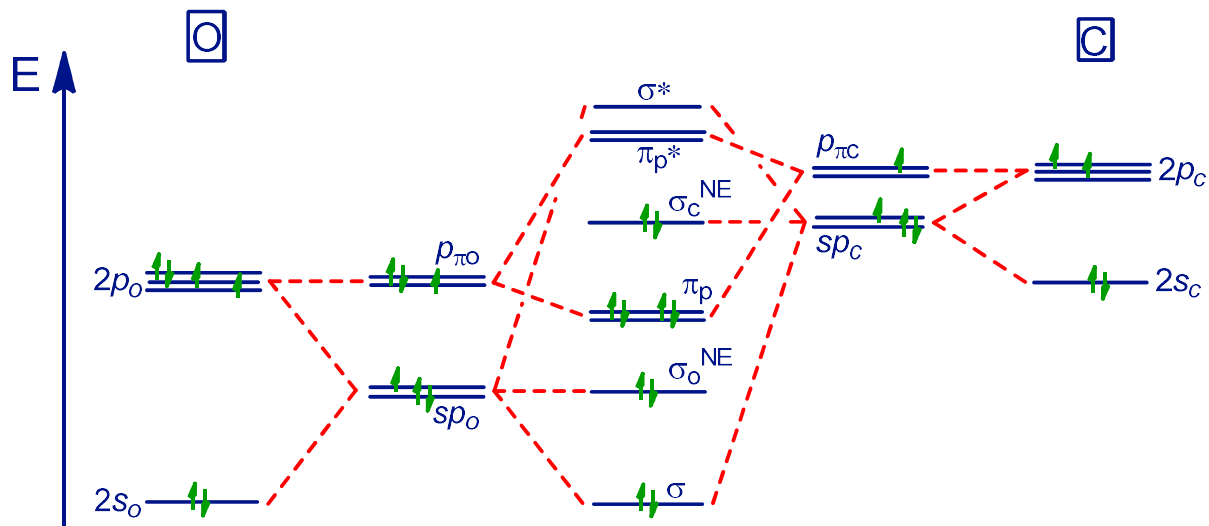


$$OE_{B-F} = 1$$

$$OE_{B-N} = 1$$

En coordinar-se l'enllaç B-F perd 1/3
d'ordre d'enllaç (perd la multiplicitat)

Estructura electrònica del CO



Segons això el parell d'electrons no enllaçants menys estable és el del C i el lligand s'unirà per aquest àtom

Existeix també la possibilitat que electrons del metall, no gaire estables puguin passar al lligand (als orbitals π_p^* generant un ordre d'enllaç superior a 1.

