

Problema363: Justifica el enlace en estas moléculas utilizando orbitales híbridos: a) $\text{BeCl}_{2(g)}$, b) BCl_3 , c) CH_4 , d) NH_3 , e) H_2O , f) HCN , g) CO_2

a) BeCl_2

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

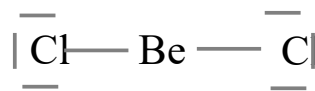
1° átomo central: Be

$$2^\circ \quad EN = 4e^- \cdot 1(\text{Be}) + 8e^- \cdot 2(\text{Cl}) = 20e^-$$

$$3^\circ \quad ED = 2e^- \cdot 1(\text{Be}) + 7e^- \cdot 2(\text{Cl}) = 16e^-$$

$$4^\circ \quad PE = \frac{EN - ED}{2} = \frac{20 - 16}{2} = 2 \text{ pares enlazantes}$$

$$5^\circ \quad PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{16 - 2 \cdot 2}{2} = 6 \text{ pares no enlazantes}$$



Según la TRPECV los dos pares electrónicos que están al rededor del Be deben disponerse en una estructura lineal, con ángulos de 180° , para que las repulsiones sean mínimas.

La estructura lineal, con ángulos de 180° , es compatible con los híbridos sp, que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del Be:

$$[{}_4\text{Be}] = 1s^2 2s^2$$

Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del Be no tenemos electrones desapareados, por tanto no podrá dar lugar a enlaces.

Para que pueda formar enlaces el Be debe promocionar un electrón del orbital 2s al orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.

$$[{}_4\text{Be}] = 1s^2 2s^1 2p^1$$

Para justificar los ángulos de enlace de 180° , en una estructura lineal, debemos formar dos orbitales híbridos sp a partir de dos orbitales atómicos puros, 2s y 2p.

$$[{}_4\text{Be}] = 1s^2 \underbrace{2s^1 2p^1}$$

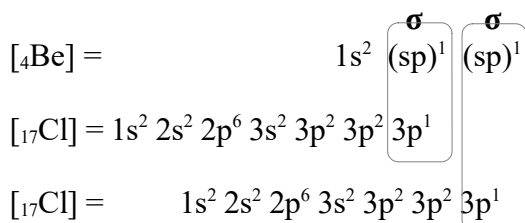
$$[{}_4\text{Be}] = 1s^2 (\text{sp})^1 (\text{sp})^1$$

Los átomos de cloro tienen una configuración:

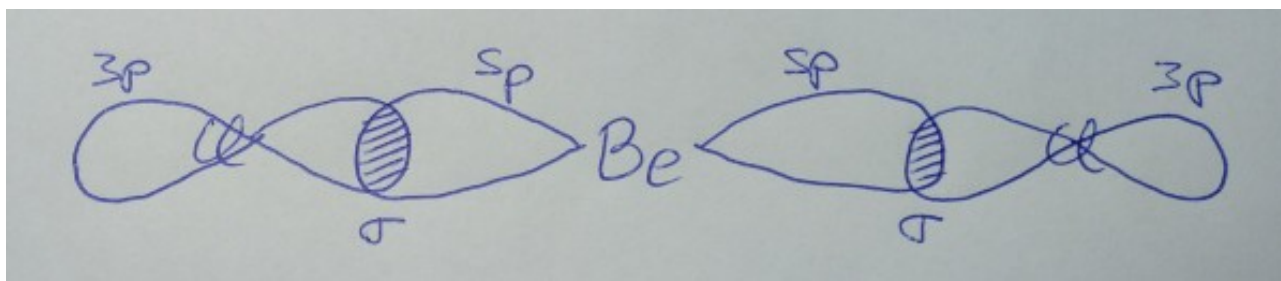
$$[{}_{17}\text{Cl}] = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 3p^2 3p^1$$

Por tanto el orbital 3p, que tiene un electrón, es el que puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



b) BCl_3

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

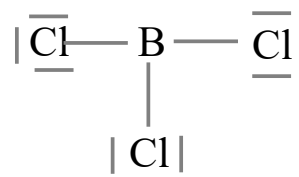
1º átomo central: B

2º $EN = 6e^- \cdot 1(\text{B}) + 8e^- \cdot 3(\text{Cl}) = 30e^-$

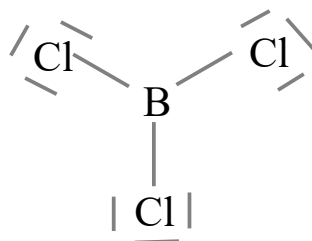
3º $ED = 3e^- \cdot 1(\text{B}) + 7e^- \cdot 3(\text{Cl}) = 24e^-$

4º $PE = \frac{EN - ED}{2} = \frac{30 - 24}{2} = 3 \text{ pares enlazantes}$

5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{24 - 2 \cdot 3}{2} = 9 \text{ pares no enlazantes}$

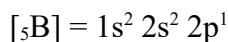


Según la TRPECV los tres pares electrónicos que están al rededor del B deben disponerse en una estructura trigonal plana, con ángulos de 120° , para que las repulsiones sean mínimas.



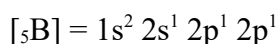
La estructura trigonal plana, con ángulos de 120° , es compatible con los híbridos sp^2 , que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del B:

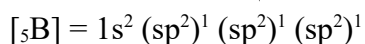
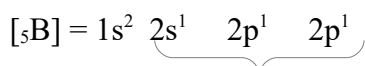


Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del B solo tenemos un orbital con electrones desapareados, por tanto solo podrá dar lugar a un enlace.

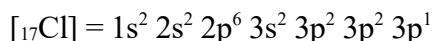
Para que pueda formar tres enlaces el B debe promocionar un electrón del orbital 2s a un orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.



Para justificar los ángulos de enlace de 120° , en una estructura trigonal plana, debemos formar tres orbitales híbridos sp^2 a partir de tres orbitales atómicos puros, un 2s y dos 2p.

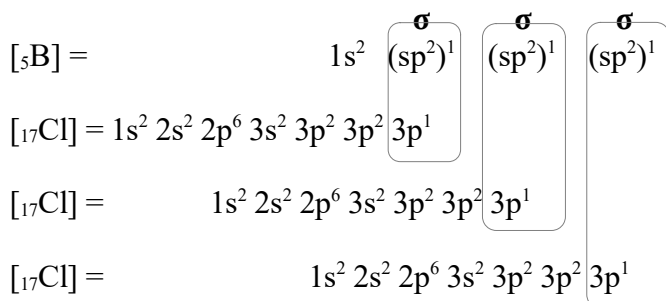


Los átomos de cloro tienen una configuración:

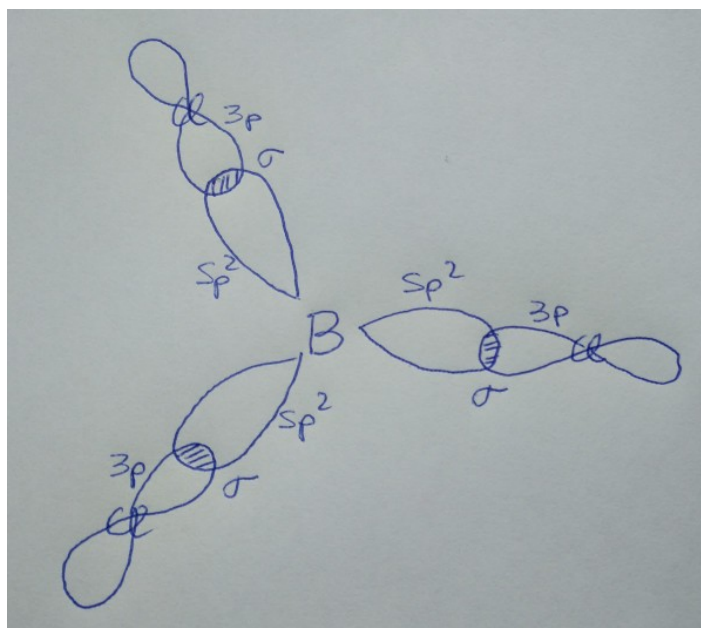


Por tanto el orbital 3p, que tiene un electrón, es el que puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



c) CH_4

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

CH_4

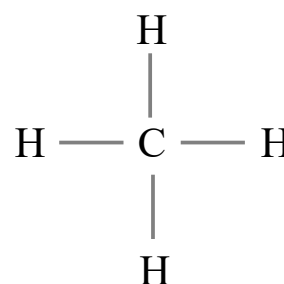
1º átomo central: C

2º $EN = 8e^- \cdot 1(\text{C}) + 2e^- \cdot 4(\text{H}) = 16e^-$

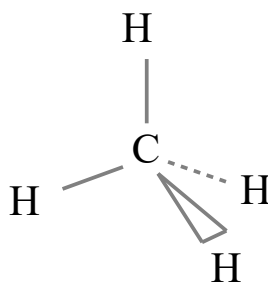
3º $ED = 4e^- \cdot 1(\text{C}) + 1e^- \cdot 4(\text{H}) = 8e^-$

4º $PE = \frac{EN - ED}{2} = \frac{16 - 8}{2} = 4 \text{ pares enlazantes}$

5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 4}{2} = 0 \text{ pares no enlazantes}$

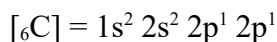


Según la TRPECV los cuatro pares electrónicos que están al rededor del C deben disponerse en una estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , para que las repulsiones sean mínimas.



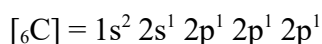
La estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , es compatible con los híbridos sp^3 , que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del C:

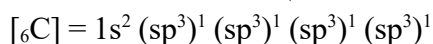
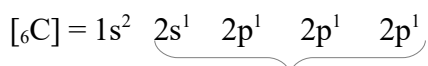


Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del C solo tenemos dos orbitales con electrones desapareados, por tanto solo podrá dar lugar a dos enlaces.

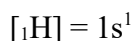
Para que pueda formar cuatro enlaces el C debe promocionar un electrón del orbital 2s a un orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.



Para justificar los ángulos de enlace de 109° , en una estructura tetraédrica, debemos formar cuatro orbitales híbridos sp^3 a partir de cuatro orbitales atómicos puros, un 2s y tres 2p.

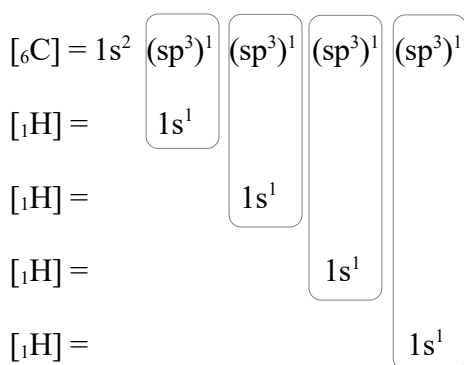


Los átomos de hidrógeno tienen una configuración:

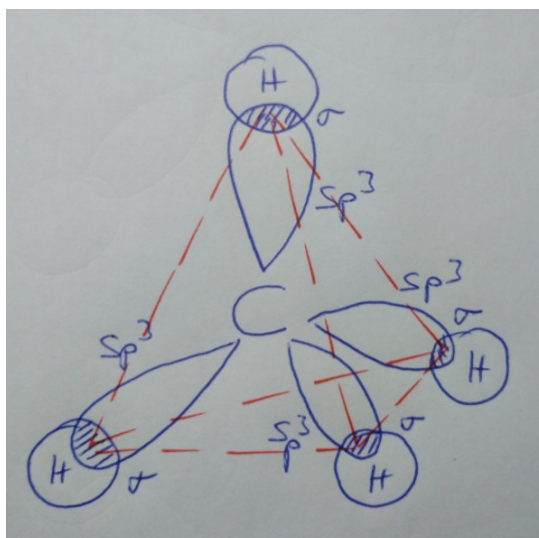


Por tanto el orbital 1s, que tiene un electrón, puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



d) NH_3

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

NH_3

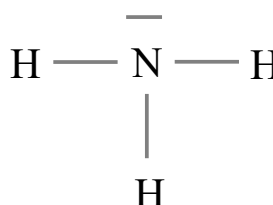
1º átomo central: N

$$2^\circ \text{ EN} = 8e^- \cdot 1(\text{N}) + 2e^- \cdot 3(\text{H}) = 14e^-$$

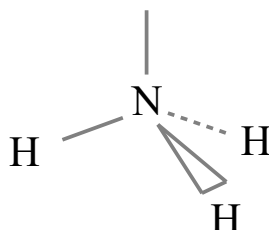
$$3^\circ \text{ ED} = 5e^- \cdot 1(\text{N}) + 1e^- \cdot 3(\text{H}) = 8e^-$$

$$4^\circ \text{ PE} = \frac{\text{EN} - \text{ED}}{2} = \frac{14 - 8}{2} = 3 \text{ pares enlazantes}$$

$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 3}{2} = 1 \text{ par no enlazante}$$



Según la TRPECV los cuatro pares electrónicos que están al rededor del N deben disponerse en una estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , para que las repulsiones sean mínimas.



La estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , es compatible con los híbridos sp^3 , que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del N:

$$[{}_{7}\text{N}] = 1s^2 2s^2 2p^1 2p^1 2p^1$$

Para justificar los ángulos de enlace de 109° , en una estructura tetraédrica, debemos formar cuatro orbitales híbridos sp^3 a partir de cuatro orbitales atómicos puros, un 2s y tres 2p.

$$[{}_{7}\text{N}] = 1s^2 \underbrace{2s^2 \ 2p^1 \ 2p^1 \ 2p^1}$$

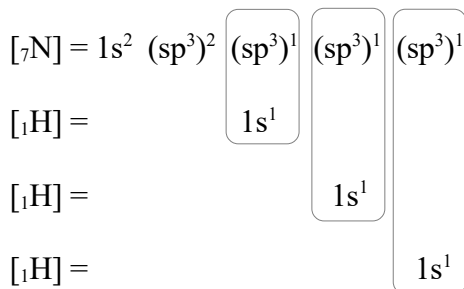
$$[{}_{7}\text{N}] = 1s^2 (sp^3)^2 (sp^3)^1 (sp^3)^1$$

Los átomos de hidrógeno tienen una configuración:

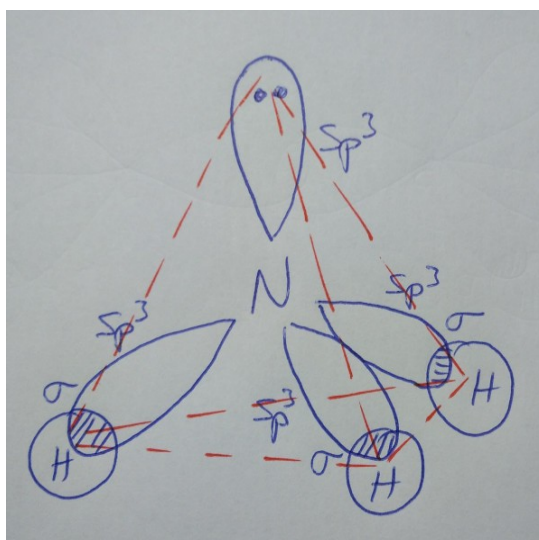
$$[{}_{1}\text{H}] = 1s^1$$

Por tanto el orbital 1s, que tiene un electrón, puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



e) H_2O

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

H_2O

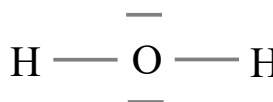
1º átomo central: O

$$2^\circ \text{ EN} = 8e^- \cdot 1(\text{O}) + 2e^- \cdot 2(\text{H}) = 12e^-$$

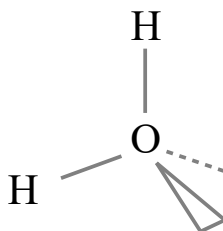
$$3^\circ \text{ ED} = 6e^- \cdot 1(\text{O}) + 1e^- \cdot 2(\text{H}) = 8e^-$$

$$4^\circ \text{ PE} = \frac{\text{EN} - \text{ED}}{2} = \frac{12 - 8}{2} = 2 \text{ pares enlazantes}$$

$$5^\circ \text{ PN} = \frac{\text{ED} - 2 \cdot \text{PE}}{2} = \frac{8 - 2 \cdot 2}{2} = 2 \text{ pares no enlazantes}$$



Según la TRPECV los cuatro pares electrónicos que están al rededor del O deben disponerse en una estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , para que las repulsiones sean mínimas.



La estructura tetraédrica, con ángulos de 109° , es compatible con los híbridos sp^3 , que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del O:

$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 2s^2 2p^2 2p^1 2p^1$$

Para justificar los ángulos de enlace de 109° , en una estructura tetraédrica, debemos formar cuatro orbitales híbridos sp^3 a partir de cuatro orbitales atómicos puros, un 2s y tres 2p.

$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 \underbrace{2s^2 \quad 2p^2 \quad 2p^1 \quad 2p^1}$$

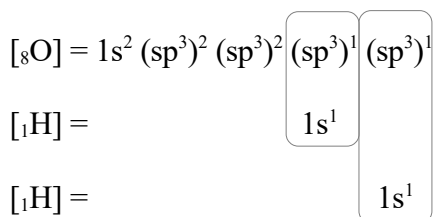
$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 (sp^3)^2 (sp^3)^2 (sp^3)^1 (sp^3)^1$$

Los átomos de hidrógeno tienen una configuración:

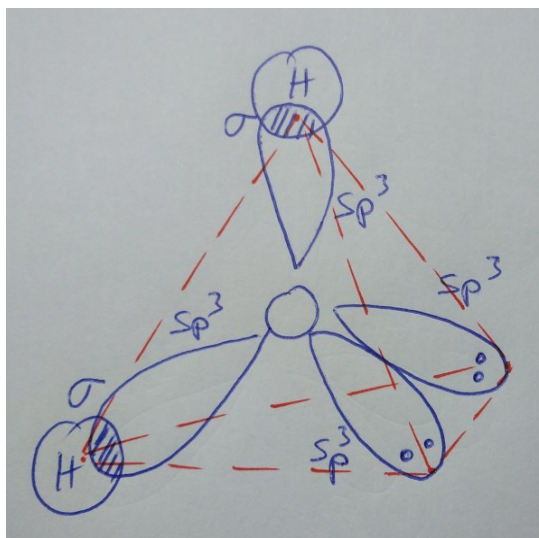
$$[{}_1\text{H}] = 1s^1$$

Por tanto el orbital 1s, que tiene un electrón, puede formar enlaces por solapamiento de orbitales.

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



f) **HCN**

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

HCN

1º átomo central: C

2º $EN = 8e^- \cdot 1(\text{C}) + 8e^- \cdot 1(\text{N}) + 2e^- \cdot 1(\text{H}) = 18e^-$

3º $ED = 4e^- \cdot 1(\text{C}) + 5e^- \cdot 1(\text{N}) + 1e^- \cdot 1(\text{H}) = 10e^-$

4º $PE = \frac{EN - ED}{2} = \frac{18 - 10}{2} = 4 \text{ pares enlazantes}$

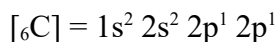


5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{10 - 2 \cdot 4}{2} = 1 \text{ par no enlazante}$

Según la TRPECV dos pares electrónicos al rededor del C, el enlace triple contribuye como uno para la TRPECV, deben disponerse en una estructura lineal, con ángulo de 180º, para que las repulsiones sean mínimas.

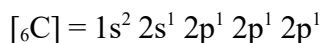
La estructura lineal, con ángulos de 180°, es compatible con los híbridos sp, que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del C:

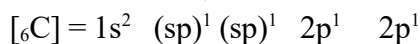
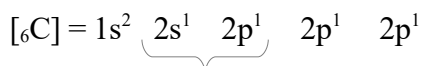


Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del C solo tenemos dos orbitales con electrones desapareados, por tanto solo podrá dar lugar a dos enlaces.

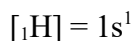
Para que pueda formar cuatro enlaces el C debe promocionar un electrón del orbital 2s a un orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.



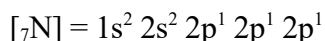
Para justificar los ángulos de enlace de 180°, en una estructura lineal, debemos formar dos orbitales híbridos sp a partir de dos orbitales atómicos puros, un 2s y un 2p.



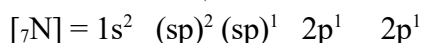
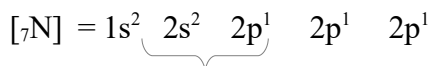
El átomo de hidrógeno tiene una configuración:



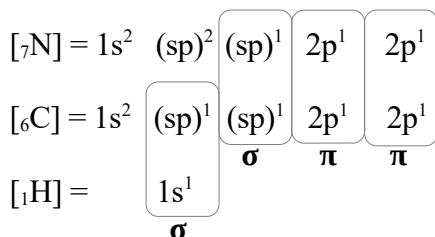
El átomo de nitrógeno tiene una configuración:



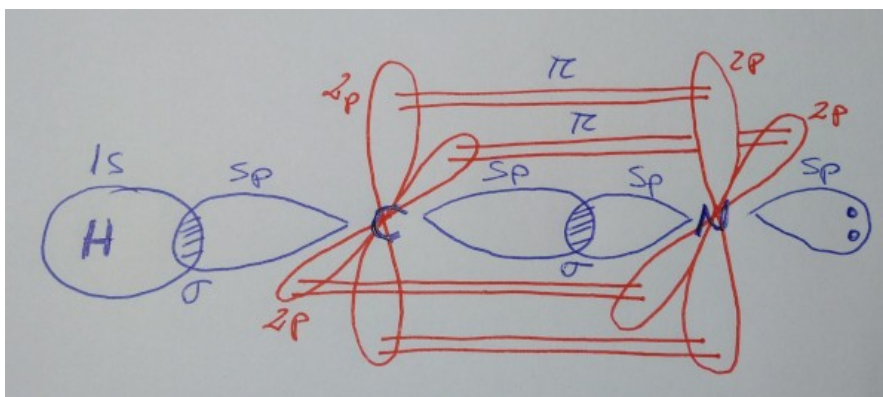
Sobre el nitrógeno hay un par no enlazante, que según la TRPECV debe estar lo más separado posible del triple enlace para que las repulsiones sean mínimas. Esto ocurre si la disposición del par no enlazante es lineal con el resto de la molécula, por tanto también podemos plantear híbridos sp para el nitrógeno



Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:



g) CO_2

Primero necesitamos conocer la geometría de esta molécula. Nos ayudamos de la estructura de Lewis y de la TRPECV.

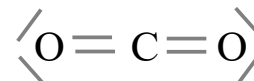
CO_2

1º átomo central: C

2º $EN = 8e^- \cdot 1(\text{C}) + 8e^- \cdot 2(\text{O}) = 24e^-$

3º $ED = 4e^- \cdot 1(\text{C}) + 6e^- \cdot 2(\text{O}) = 16e^-$

4º $PE = \frac{EN - ED}{2} = \frac{24 - 16}{2} = 4 \text{ pares enlazantes}$



5º $PN = \frac{ED - 2 \cdot PE}{2} = \frac{16 - 2 \cdot 4}{2} = 4 \text{ pares no enlazantes}$

Según la TRPECV dos pares electrónicos al rededor del C, el enlace doble contribuye como uno para la TRPECV, deben disponerse en una estructura lineal, con ángulo de 180° , para que las repulsiones sean mínimas.

La estructura lineal, con ángulos de 180° , es compatible con los híbridos sp, que también tienen esa geometría.

Estructura electrónica fundamental del C:

$$[{}_6\text{C}] = 1s^2 2s^2 2p^1 2p^1$$

Para que los orbitales solapen y puedan dar lugar a enlaces deben tener un solo electrón. En la estructura electrónica fundamental del C solo tenemos dos orbitales con electrones desapareados, por tanto solo podrá dar lugar a dos enlaces.

Para que pueda formar cuatro enlaces el C debe promocionar un electrón del orbital 2s a un orbital 2p, que tiene un poco más de energía, pero esta diferencia de energía se verá compensada con creces con la formación de enlaces.

$$[{}_6\text{C}] = 1s^2 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$$

Para justificar los ángulos de enlace de 180° , en una estructura lineal, debemos formar dos orbitales híbridos sp a partir de dos orbitales atómicos puros, un $2s$ y un $2p$.

$$[{}_6\text{C}] = 1s^2 \underbrace{2s^1 2p^1}_{sp} 2p^1 2p^1$$

$$[{}_6\text{C}] = 1s^2 (sp)^1 (sp)^1 2p^1 2p^1$$

El átomo de oxígeno tiene una configuración:

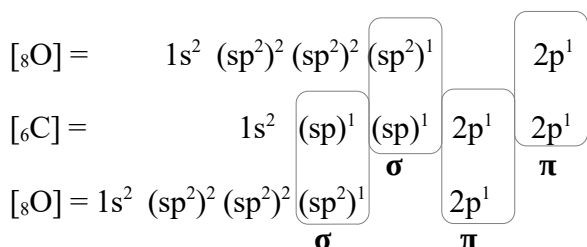
$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 2s^2 2p^2 2p^1 2p^1$$

Sobre el oxígeno hay dos pares no enlazantes, que según la TRPECV debe estar lo más separados posible del doble enlace para que las repulsiones sean mínimas. Esto ocurre si la disposición de los pares no enlazantes y el enlace doble es trigonal plana, con ángulos de 120° , por tanto también podemos plantear híbridos sp^2 para el oxígeno, que son compatibles con esa geometría

$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 \underbrace{2s^2 2p^2 2p^1}_{sp^2} 2p^1$$

$$[{}_8\text{O}] = 1s^2 (sp^2)^2 (sp^2)^2 (sp^2)^1 2p^1$$

Esquema de solapamientos:



Esquema de la molécula:

